

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2018年4月12日(12.04.2018)



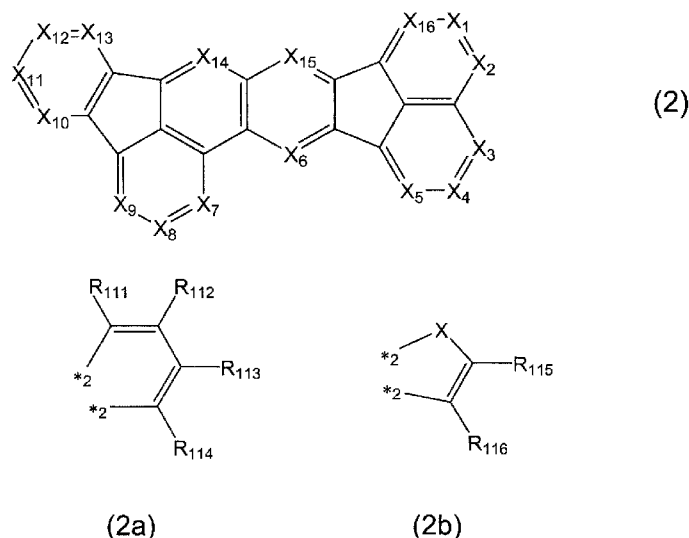
(10) 国際公開番号

WO 2018/066536 A1

- (51) 国際特許分類:
C07C 13/62 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 209/94 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2017/035914
- (22) 国際出願日: 2017年10月3日(03.10.2017)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2016-196044 2016年10月3日(03.10.2016) JP
特願 2017-033745 2017年2月24日(24.02.2017) JP
特願 2017-160666 2017年8月23日(23.08.2017) JP
- (71) 出願人: 出光興産株式会社(IDEMITSU KOSAN CO.,LTD.) [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区丸の内三丁目1番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 齊藤 雅俊 (SAITO Masatoshi); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 吉田 圭 (YOSHIDA Kei); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 河村 祐一郎 (KAWAMURA Yuichiro); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 荻原 俊成 (OGIWARA Toshinari); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 吉崎 圭 (YOSHIZAKI Kei); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).
- (74) 代理人: 特許業務法人樹之下知の財産事務所 (KINOSHITA & ASSOCIATES); 〒1670051 東京都杉並区荻窪五丁目26番13号3階 Tokyo (JP).

(54) Title: COMPOUND, COMPOSITION, ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT AND ELECTRONIC DEVICE

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



(57) Abstract: A compound which is represented by general formula (2). (In general formula (2), at least one pair among a pair of X₁ and X₂, a pair of X₂ and X₃, a pair of X₃ and X₄, a pair of X₄ and X₅, a pair of X₇ and X₈, a pair of X₈ and X₉, a pair of X₁₀ and X₁₁, a pair of X₁₁ and X₁₂, a pair of X₁₂ and X₁₃ and a pair of X₁₆ and X₁ is composed of carbon atoms that are bonded to a structure represented by general formula (2a) or (2b).)



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

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

添付公開書類:

一 国際調査報告(条約第21条(3))

(57) 要約: 下記一般式(2)で表される化合物。(下記一般式(2)において、 X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組の少なくともいずれかの組は、下記一般式(2a)または(2b)で表される構造と結合する炭素原子である。)

明 細 書

発明の名称：

化合物、組成物、有機エレクトロルミネッセンス素子、及び電子機器
技術分野

[0001] 本発明は、化合物、組成物、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、また陰極から電子が、それぞれ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、携帯電話や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。一重項励起子に加えて三重項励起子を利用し、有機EL素子をさらに効率的に発光させることが期待されている。

[0003] このような背景から、遅延蛍光を利用した高効率の蛍光型の有機EL素子が提案され、研究がなされている。

例えば、TADF (Thermally Activated Delayed Fluorescence、熱活性化遅延蛍光) 機構が研究されている。このTADF機構は、一重項準位と三重項準位とのエネルギー差 ($\Delta S T$) の小さな材料を用いた場合に、三重項励起子から一重項励起子への逆項間交差が熱的に生じる現象を利用する機構である。熱活性化遅延蛍光については、例えば、『安達千波矢編、「有機半導体のデバイス物性」、講談社、2012年4月1日発行、261-262ページ』に記載されている。このTADF機構を利用した有機EL素子が、例えば、非特許文献1に開示さ

れている。

[0004] 非特許文献1に開示された有機EL素子は、アシストドーパントとしてのTADF化合物、発光材料としてのペリレン誘導体(TBPe; 2,5,8,11-tetra-tert-butylperylene)、及びホスト材料としてのDPEPO(bis-(2-(diphenylphosphino)phenyl)ether oxide)を含んだ発光層を備える。この発光層は、青色に発光する。

[0005] また、従来の蛍光型の有機EL素子においても、青色発光素子用の発光材料の研究がなされている。特許文献1、特許文献2、特許文献3、及び特許文献4には、青色発光素子に用いる有機化合物として、アセナフト[1, 2-k]ベンゾ[e]アセフェナンスレン誘導体が記載されている。

また、特許文献5においては、従来の蛍光型の有機EL素子における、緑色発光素子用の発光材料の研究がなされている。特許文献5には、緑色発光素子に用いる有機化合物として、アセナフト[1, 2-k]ベンゾ[e]アセフェナンスレン誘導体が記載されている。

特許文献1、特許文献2、特許文献3、特許文献4、及び特許文献5に記載された有機化合物は、従来の蛍光型の有機EL素子における発光材料として用いられている。特許文献1、特許文献2、特許文献3、特許文献4、及び特許文献5における有機EL素子は、TADF機構を利用していない。

先行技術文献

特許文献

- [0006] 特許文献1：特開2012-246258号公報
特許文献2：特開2010-270103号公報
特許文献3：特開2010-254610号公報
特許文献4：特開2011-231086号公報
特許文献5：特開2011-207829号公報

非特許文献

- [0007] 非特許文献1：Hajime Nakanotani et al, "High-efficiency organic light-emitting diodes with fluorescent emitters", NATURE COMMUNICATIONS,

5, 4016, 2014

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0008] 非特許文献 1 に記載された有機エレクトロルミネッセンス素子は、ホスト材料として TADF 化合物を用い、発光材料としてペリレン誘導体（化合物 TBP e）を用いたことで青色発光するが、発光効率が十分ではない。

また、特許文献 1～5 においても、アセナフト [1, 2-k] ベンゾ [e] アセフェナンスレン誘導体を用いた発光素子の発光効率が十分ではない。

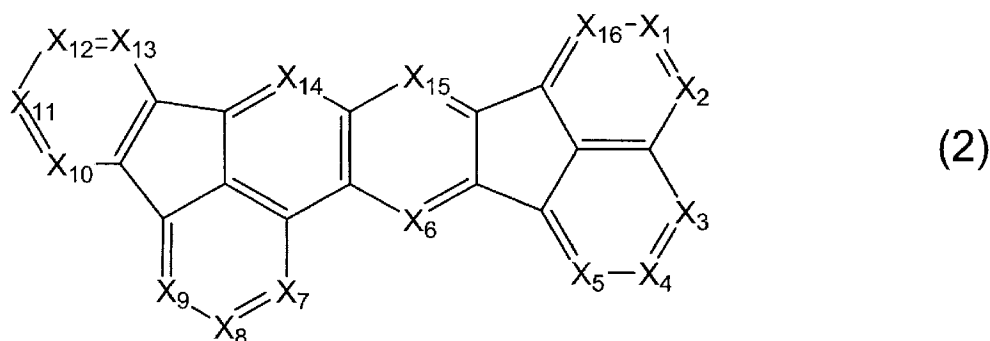
そのため、高効率で発光する有機エレクトロルミネッセンス素子が要望されている。

[0009] 本発明の目的は、有機 EL 素子の発光効率を向上させることができる化合物及び組成物を提供すること、当該化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器を提供することである。

課題を解決するための手段

[0010] 本発明の一態様によれば、下記一般式（2）で表される化合物が提供される。

[0011] [化1]



[0012] （前記一般式（2）において、

X_1 乃至 X_5 、 X_7 乃至 X_{13} 、及び X_{16} は、それぞれ独立に、 CR_x 、または下記一般式（2a）もしくは（2b）で表される構造と結合する炭素原子であり、

X_6 、 X_{14} 、及び X_{15} は、それぞれ独立に、 CR_x であり、
 R_x 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_x は、それぞれ独立に、

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

からなる群から選択され、

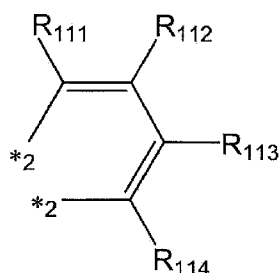
複数の R_x は、互いに同一であるかまたは異なり、

X_1 乃至 X_{16} のうち、複数の R_x であって、 R_x が置換基である場合、置換基としての複数の R_x 同士が互いに結合して環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

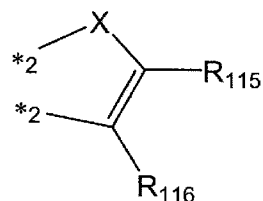
ただし、 X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組の少なくともいずれかの

組は、下記一般式（2 a）または（2 b）で表される構造と結合する炭素原子である。）

[0013] [化2]



(2a)



(2b)

[0014] （前記一般式（2 a）において、それぞれの*2は、前記一般式（2）のX₁及びX₂の組、X₃及びX₄の組、X₄及びX₅の組、X₇及びX₈の組、X₈及びX₉の組、X₁₀及びX₁₁の組、X₁₁及びX₁₂の組、X₁₂及びX₁₃の組、並びにX₁₆及びX₁の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R₁₁₁乃至R₁₁₄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R₁₁₁乃至R₁₁₄は、それぞれ独立に

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

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

からなる群から選択される。

ただし、 R_{111} 及び R_{112} の組、 R_{112} 及び R_{113} の組、並びに R_{113} 及び R_{114} の組のうち少なくともいずれかの組は、互いに置換基であり、当該置換基同士が結合して環を形成する。

前記一般式 (2b) において、それぞれの * 2 は、前記一般式 (2) の X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{115} 及び R_{116} 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_{115} 及び R_{116} は、それぞれ独立に、

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

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

からなる群から選択され、

置換基としての R_{115} 及び R_{116} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

X は、

酸素原子、
硫黄原子、
 $CR_{117}R_{118}$ 、
 $SiR_{119}R_{120}$ 、及び
 NR_{121}

からなる群から選択され、

R_{117} 乃至 R_{121} 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_{117} 乃至 R_{121} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、
置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、
置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、
置換または無置換のアミノ基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、
置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、
置換または無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルケニル基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基、
置換または無置換のホスファニル基、
置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

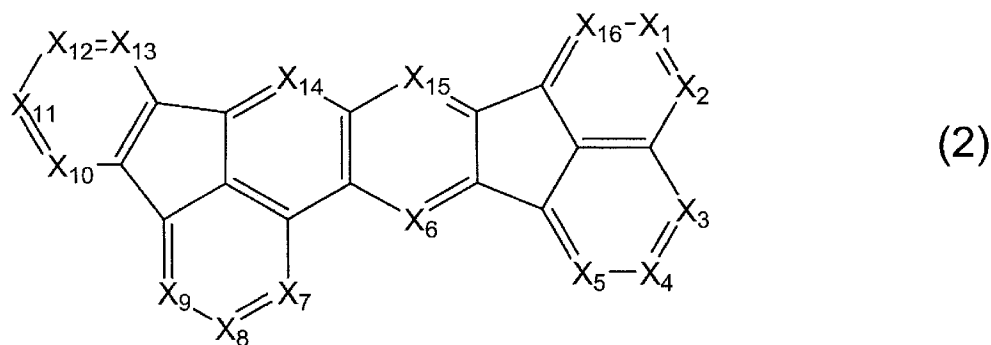
からなる群から選択され、

置換基としての R_{117} 及び R_{118} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

置換基としての R_{119} 及び R_{120} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。))

[0015] 本発明の一態様によれば、下記一般式 (2) で表される化合物を複数種含有する、組成物が提供される。

[0016] [化3]



[0017] (前記一般式 (2) において、

X_1 乃至 X_5 、 X_7 乃至 X_{13} 、及び X_{16} は、それぞれ独立に、 CR_x 、または下記一般式 (2a) もしくは (2b) で表される構造と結合する炭素原子であり、

X_6 、 X_{14} 、及び X_{15} は、それぞれ独立に、 CR_x であり、

R_x 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_x は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

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

からなる群から選択され、

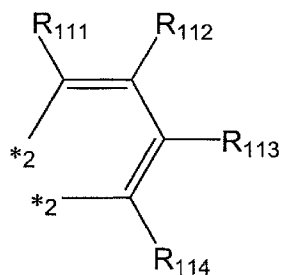
複数の R_x は、互いに同一であるかまたは異なり、

X_1 乃至 X_{16} のうち、複数の R_x であって、 R_x が置換基である場合、置換基としての複数の R_x 同士が互いに結合して環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

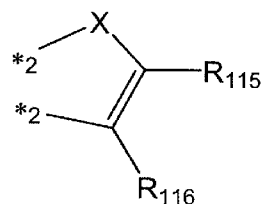
ただし、 X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組の少なくともいずれかの組は、下記一般式 (2 a) または (2 b) で表される構造と結合する炭素原子である。)

[0018]

[化4]



(2a)



(2b)

[0019] (前記一般式(2a)において、それぞれの*2は、前記一般式(2)の X_1 及び X_2 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{111} 乃至 R_{114} 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_{111} 乃至 R_{114} は、それぞれ独立に

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子

からなる群から選択される。

ただし、 R_{111} 及び R_{112} の組、 R_{112} 及び R_{113} の組、並びに R_{113} 及び R_{114} の組のうち少なくともいずれかの組は、互いに置換基であり、当該置換基同士が結合して環を形成する。

前記一般式(2b)において、それぞれの*2は、前記一般式(2)の X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{115} 及び R_{116} 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_{115} 及び R_{116} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

置換基としての R_{115} 及び R_{116} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

Xは、

酸素原子、

硫黄原子、

$CR_{117}R_{118}$ 、

$SiR_{119}R_{120}$ 、及び

NR_{121}

からなる群から選択され、

R_{117} 乃至 R_{121} 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_{117} 乃至 R_{121} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、
ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子

からなる群から選択され、

置換基としての R_{117} 及び R_{118} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

置換基としての R_{119} 及び R_{120} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。)

[0020] 本発明の一態様によれば、陽極と、発光層と、陰極と、を有し、前記発光層は、第一の化合物及び第二の化合物を含み、前記第二の化合物は、前述の本発明の一態様に係る化合物である、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

[0021] 本発明の一態様によれば、前述の本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器が提供される。

[0022] 本発明によれば、有機EL素子の発光効率を向上させることができる化合物及び組成物を提供すること、当該化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器を提供することができる。

図面の簡単な説明

[0023] [図1]本発明の第一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の概略構成を示す図である。

[図2]過渡PLを測定する装置の概略図である。

[図3]過渡PLの減衰曲線の一例を示す図である。

[図4]本発明の第一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の発光層における第一の化合物、及び第二の化合物の、エネルギー準位、及びエネルギー移動の関係を示す図である。

[図5]本発明の第二実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例

の発光層における第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物の、エネルギー準位、及びエネルギー移動の関係を示す図である。

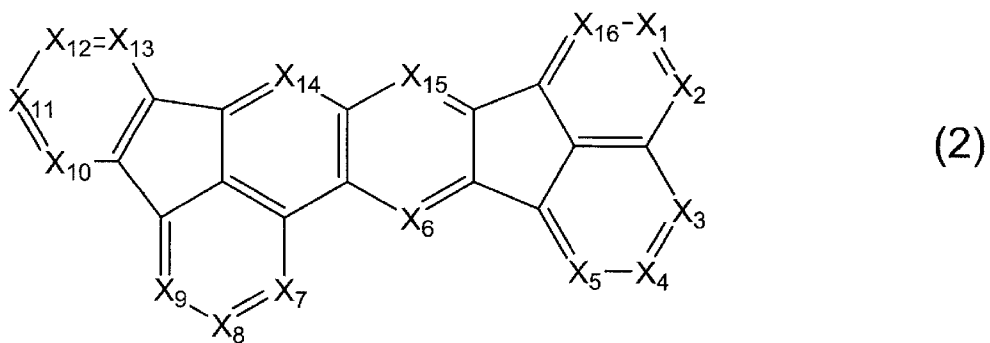
発明を実施するための形態

[0024] [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（２）で表される。

[0025] [化5]



[0026] 前記一般式（２）において、

X_1 乃至 X_5 、 X_7 乃至 X_{13} 、及び X_{16} は、それぞれ独立に、 CR_x 、または下記一般式（２a）もしくは（２b）で表される構造と結合する炭素原子であり、

X_6 、 X_{14} 、及び X_{15} は、それぞれ独立に、 CR_x であり、 R_x 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_x は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数１～３０のアルキル基、

置換または無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数１～３０のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数２～３０のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数６～３０のアリールオキシ基、

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

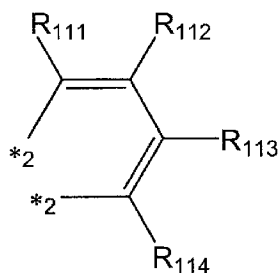
からなる群から選択され、

複数の R_x は、互いに同一であるかまたは異なり、

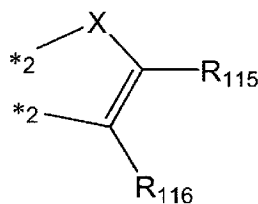
X_1 乃至 X_{16} のうち、複数の R_x であって、 R_x が置換基である場合、置換基としての複数の R_x 同士が互いに結合して環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

ただし、 X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組の少なくともいずれかの組は、下記一般式 (2 a) または (2 b) で表される構造と結合する炭素原子である。

[0027] [化6]



(2a)



(2b)

[0028] 前記一般式 (2 a) において、それぞれの *2 は、前記一般式 (2) の X_1

及び X_2 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{111} 乃至 R_{114} 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_{111} 乃至 R_{114} は、それぞれ独立に

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択される。

ただし、 R_{111} 及び R_{112} の組、 R_{112} 及び R_{113} の組、並びに R_{113} 及び R_{114} の組のうち少なくともいずれかの組は、互いに置換基であり、当該置換基同士が結合して環を形成する。

前記一般式(2b)において、それぞれの*2は、前記一般式(2)の X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び

X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_{17} の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{115} 及び R_{116} 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_{115} 及び R_{116} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

置換基としての R_{115} 及び R_{116} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

Xは、

酸素原子、

硫黄原子、

$\text{C R}_{117} \text{R}_{118}$ 、

$\text{S i R}_{119} \text{R}_{120}$ 、及び

N R_{121}

からなる群から選択され、

R_{117} 乃至 R_{121} 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_{117} 乃至 R_{121} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

置換基としての R_{117} 及び R_{118} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

置換基としての R_{119} 及び R_{120} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0029] 本実施形態において、前記一般式（２）における R_x は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数６～３０のアリール基、環形成原子数５～３０のヘテロアリール基、炭素数１～３０のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

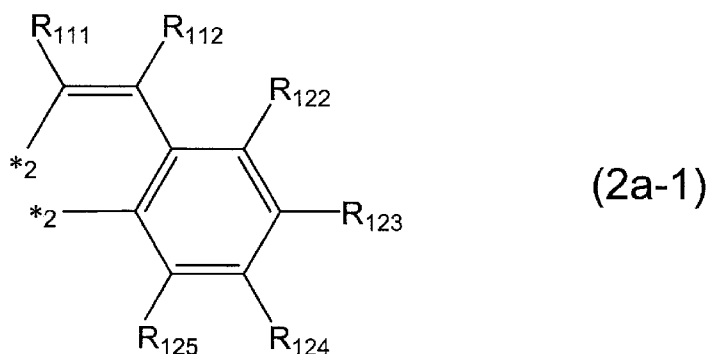
[0030] 本実施形態において、前記一般式（２ａ）における R_{111} 乃至 R_{114} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数６～３０のアリール基、環形成原子数５～３０のヘテロアリール基、炭素数１～３０のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0031] 本実施形態において、前記一般式（２ｂ）における R_{115} 乃至 R_{121} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数６～３０のアリール基、環形成原子数５～３０のヘテロアリール基、炭素数１～３０のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0032] 本実施形態の化合物において、前記一般式（２）における X_1 及び X_2 の組、並びに X_3 及び X_4 の組の少なくともいずれかの組が、前記一般式（２ａ）で表される構造と結合する炭素原子であることが好ましい。

[0033] 本実施形態の化合物において、前記一般式（２ａ）で表される構造が、下記一般式（２ａ－１）で表される構造であることが好ましい。

[0034] [化７]



[0035] 前記一般式（２ａ－１）において、

* 2 は、前記一般式 (2 a) における * 2 と同義であり、

R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} 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_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

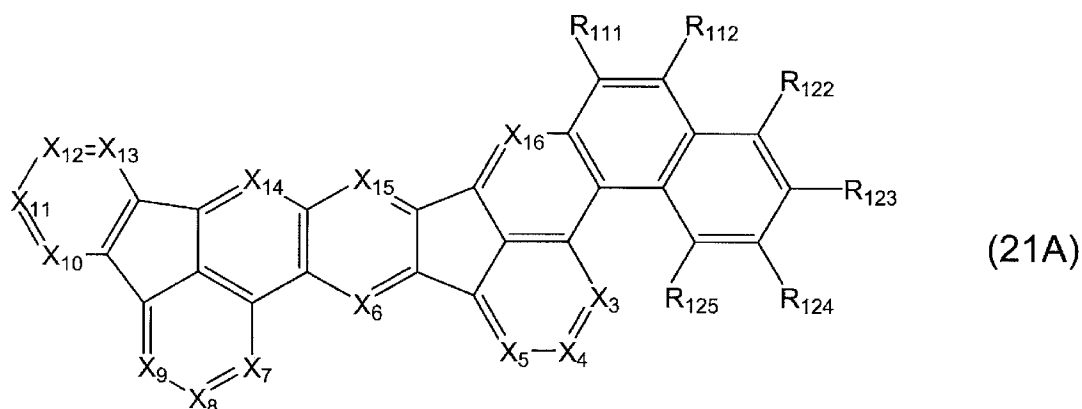
置換基としての R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0036] 本実施形態において、前記一般式 (2 a - 1) における R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環

形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0037] 本実施形態において、前記一般式（2）で表される化合物は、下記一般式（21A）で表されることが好ましい。

[0038] [化8]



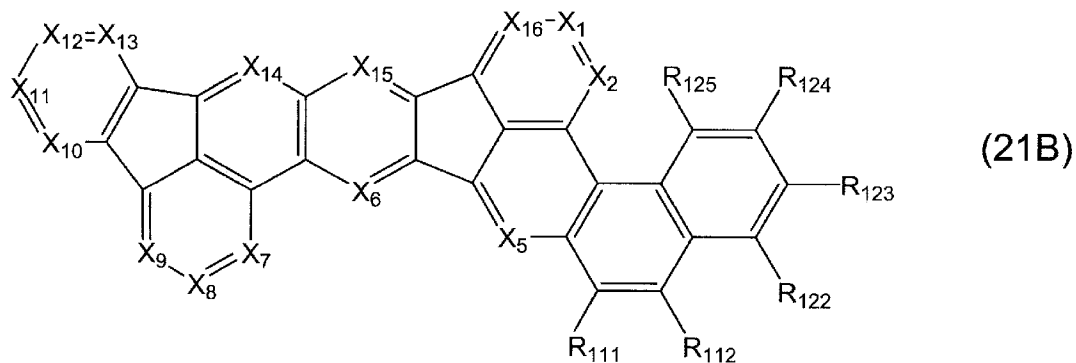
[0039] 前記一般式（21A）において、X₃乃至X₁₆、及びR_xは、前記一般式（2）におけるX₃乃至X₁₆、及びR_xとそれぞれ同義であり、R₁₁₁及びR₁₁₂、並びにR₁₂₂乃至R₁₂₅は、前記一般式（2a-1）におけるR₁₁₁及びR₁₁₂、並びにR₁₂₂乃至R₁₂₅とそれぞれ同義である。

[0040] 本実施形態において、前記一般式（21A）中のR₁₁₁及びR₁₁₂、並びにR₁₂₂乃至R₁₂₅のうち、互いに隣り合う置換基同士が結合してさらに環を形成する場合には、R₁₁₁とR₁₁₂の組、またはR₁₂₂とR₁₂₃の組が、互いに結合してさらに環を形成することが好ましい。

[0041] 本実施形態において、前記一般式（2）で表される化合物は、下記一般式（21B）で表されることも好ましい。

[0042]

[化9]

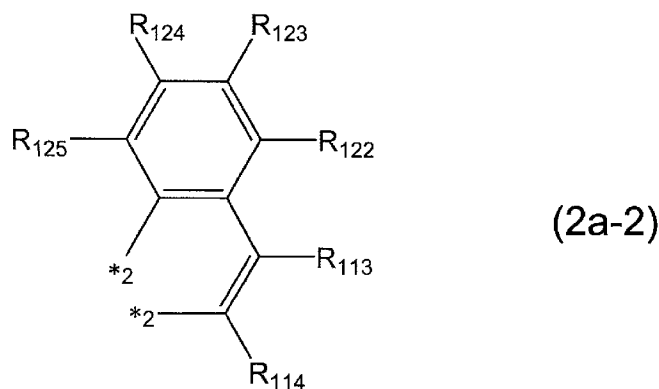


[0043] 前記一般式(21B)において、X₁、X₂、X₅乃至X₁₆、及びR_xは、前記一般式(2)におけるX₁、X₂、X₅乃至X₁₆、及びR_xとそれぞれ同義であり、R₁₁₁及びR₁₁₂、並びにR₁₂₂乃至R₁₂₅は、前記一般式(2a-1)におけるR₁₁₁及びR₁₁₂、並びにR₁₂₂乃至R₁₂₅とそれぞれ同義である。

[0044] 本実施形態において、前記一般式(21B)中のR₁₁₁及びR₁₁₂、並びにR₁₂₂乃至R₁₂₅のうち、互いに隣り合う置換基同士が結合してさらに環を形成する場合には、R₁₁₁とR₁₁₂の組、またはR₁₂₂とR₁₂₃の組が、互いに結合してさらに環を形成することが好ましい。

[0045] 本実施形態の化合物において、前記一般式(2a)で表される構造は、下記一般式(2a-2)で表される構造であることも好ましい。

[0046] [化10]



[0047] 前記一般式(2a-2)において、
*2は、前記一般式(2a)における*2とそれぞれ同義であり、

R_{113} 及び R_{114} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} 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_{113} 及び R_{114} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、それぞれ独立に、

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

からなる群から選択され、

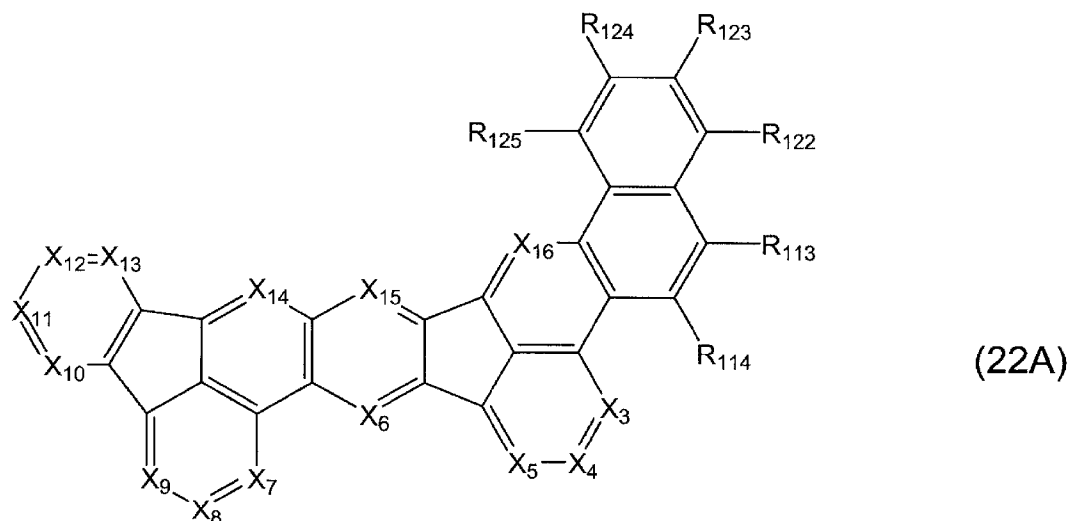
置換基としての R_{113} 及び R_{114} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0048] 本実施形態において、前記一般式 (2 a - 2) における R_{113} 及び R_{114} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール

基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0049] 本実施形態において、前記一般式(2)で表される化合物は、下記一般式(22A)で表されることも好ましい。

[0050] [化11]



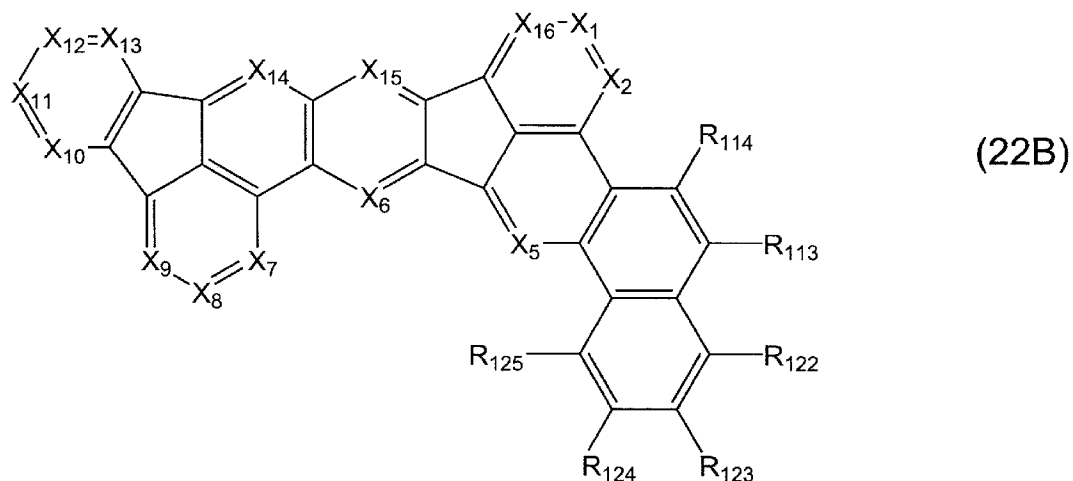
[0051] 前記一般式(22A)において、 X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 R_{113} 及び R_{114} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、前記一般式(2a-2)における R_{113} 及び R_{114} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} とそれぞれ同義である。

[0052] 本実施形態において、前記一般式(22A)中の R_{113} 及び R_{114} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} のうち、互いに隣り合う置換基同士が結合してさらに環を形成する場合には、 R_{113} と R_{114} の組、または R_{122} と R_{123} の組が、互いに結合してさらに環を形成することが好ましい。

[0053] 本実施形態において、前記一般式(2)で表される化合物は、下記一般式(22B)で表されることも好ましい。

[0054]

[化12]



[0055] 前記一般式(22B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 R_{113} 及び R_{114} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、前記一般式(2a-2)における R_{113} 及び R_{114} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} とそれぞれ同義である。

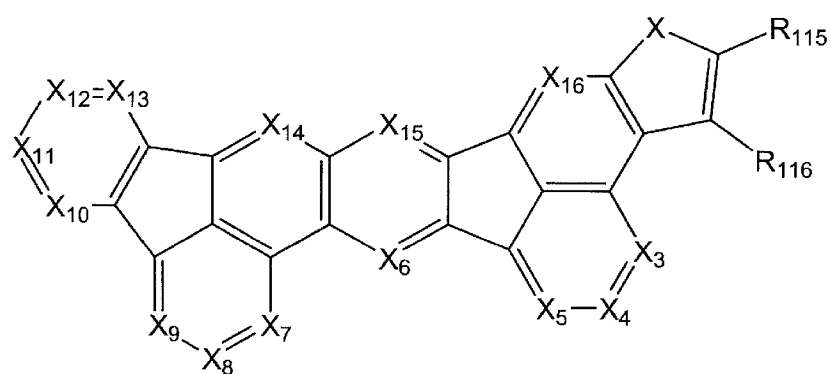
[0056] 本実施形態において、前記一般式(22B)中の R_{113} 及び R_{114} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} のうち、互いに隣り合う置換基同士が結合してさらに環を形成する場合には、 R_{113} と R_{114} の組、または R_{122} と R_{123} の組が、互いに結合してさらに環を形成することが好ましい。

[0057] 本実施形態において、前記一般式(2)における X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、並びに X_3 及び X_4 の組の少なくともいずれかの組が、前記一般式(2b)で表される構造と結合する炭素原子であることも好ましい。

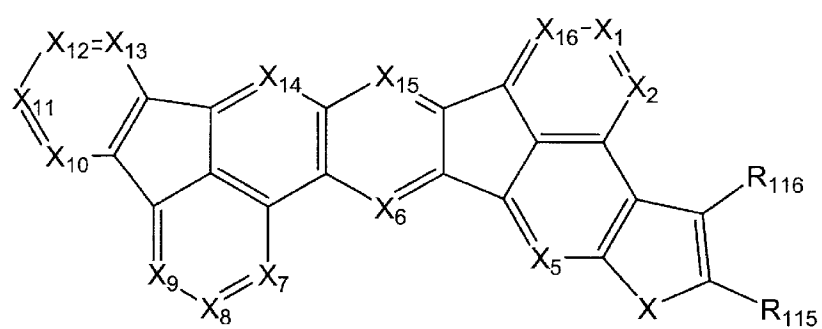
[0058] 本実施形態において、前記一般式(2)における X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、並びに X_3 及び X_4 の組の少なくともいずれかの組が、前記一般式(2b)で表される構造と結合する炭素原子である化合物として、例えば、下記一般式(23A)で表される化合物、下記一般式(23B)で表される化合物、下記一般式(24A)で表される化合物、及び下記一般式(24B)で表される化合物が挙げられる。

[0059]

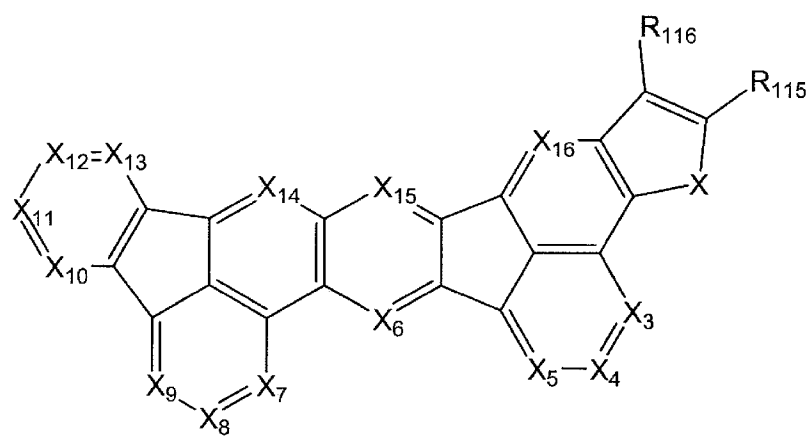
[化13]



[0060] [化14]

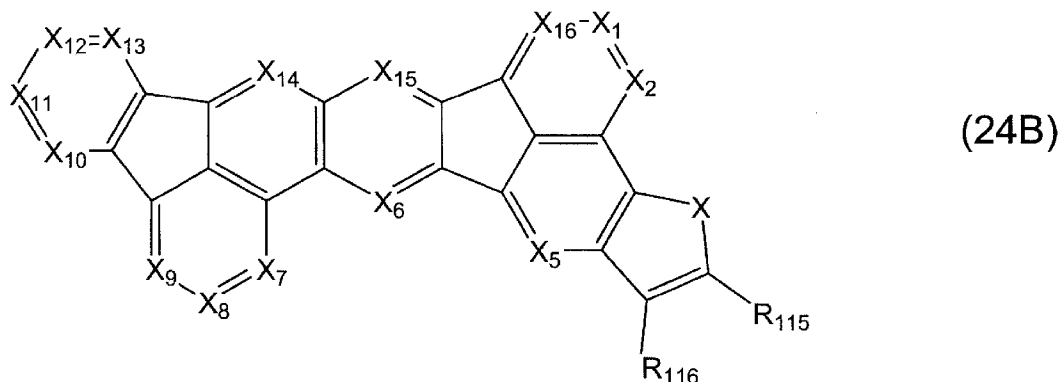


[0061] [化15]



[0062]

[化16]



[0063] 前記一般式(23A)において、X₃乃至X₁₆、及びR_xは、前記一般式(2)におけるX₃乃至X₁₆、及びR_xとそれぞれ同義である。

前記一般式(23B)において、X₁、X₂、X₅乃至X₁₆、及びR_xは、前記一般式(2)におけるX₁、X₂、X₅乃至X₁₆、及びR_xとそれぞれ同義である。

前記一般式(24A)において、X₃乃至X₁₆、及びR_xは、前記一般式(2)におけるX₃乃至X₁₆、及びR_xとそれぞれ同義である。

前記一般式(24B)において、X₁、X₂、X₅乃至X₁₆、及びR_xは、前記一般式(2)におけるX₁、X₂、X₅乃至X₁₆、及びR_xとそれぞれ同義である。

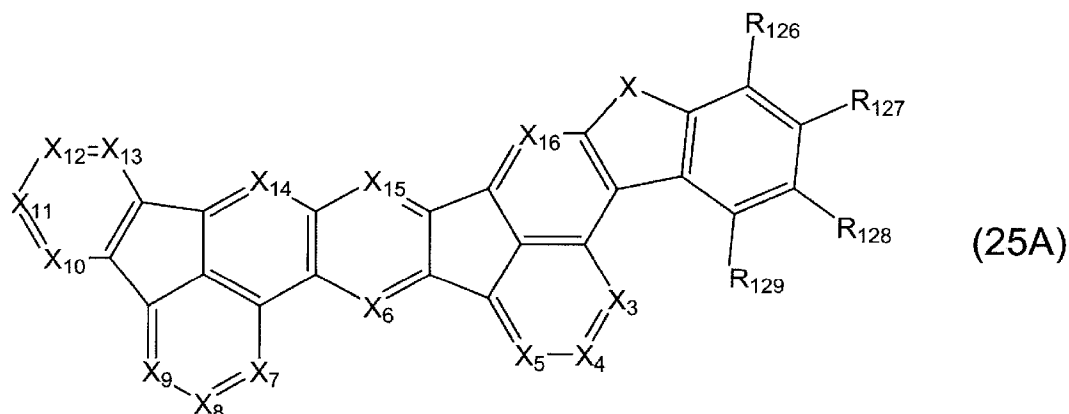
前記一般式(23A)、(23B)、(24A)、及び(24B)において、R₁₁₅、R₁₁₆、及びXは、前記一般式(2b)におけるR₁₁₅、R₁₁₆、及びXとそれぞれ同義である。

[0064] 前記一般式(23A)、(23B)、(24A)、及び(24B)において、R₁₁₅及びR₁₁₆がいずれも置換基であり、置換基としてのR₁₁₅及びR₁₁₆が、互いに結合してさらに環を形成することが好ましい。

[0065] 本実施形態において、前記一般式(2)で表される化合物は、下記一般式(25A)で表されることも好ましい。

[0066]

[化17]



[0067] 前記一般式(25A)において、X₃乃至X₁₆、及びR_xは、前記一般式(2)におけるX₃乃至X₁₆、及びR_xとそれぞれ同義であり、Xは、前記一般式(2b)におけるXとそれぞれ同義であり、

R₁₂₆乃至R₁₂₉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R₁₂₆乃至R₁₂₉は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

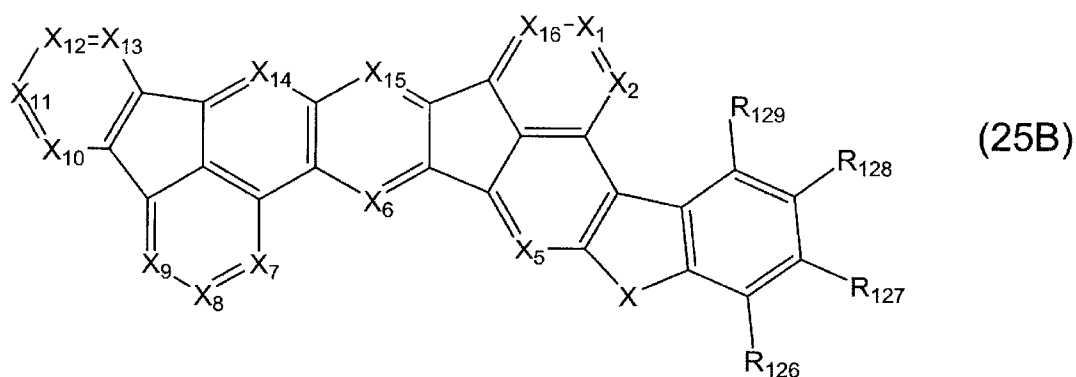
からなる群から選択され、

置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0068] 本実施形態において、前記一般式(25A)における R_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基(直鎖または分岐鎖のアルキル基)、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0069] 本実施形態において、前記一般式(2)で表される化合物は、下記一般式(25B)で表されることも好ましい。

[0070] [化18]



[0071] 前記一般式(25B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 X は、前記一般式(2b)における X とそれぞれ同義であり、

R_{126} 乃至 R_{129} 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_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

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

からなる群から選択され、

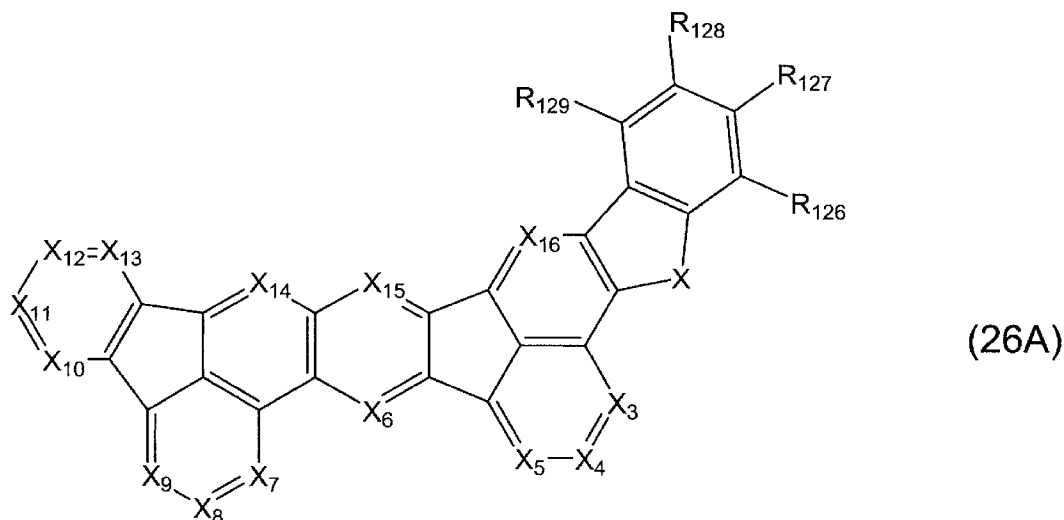
置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0072] 本実施形態において、前記一般式 (25B) における R_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0073] 本実施形態において、前記一般式 (2) で表される化合物は、下記一般式 (26A) で表されることも好ましい。

[0074]

[化19]



[0075] 前記一般式（26A）において、X₃乃至X₁₆、及びR_xは、前記一般式（2）におけるX₃乃至X₁₆、及びR_xとそれぞれ同義であり、Xは、前記一般式（2b）におけるXとそれぞれ同義であり、

R₁₂₆乃至R₁₂₉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R₁₂₆乃至R₁₂₉は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、
 ニトロ基、
 カルボキシ基、及び
 ハロゲン原子

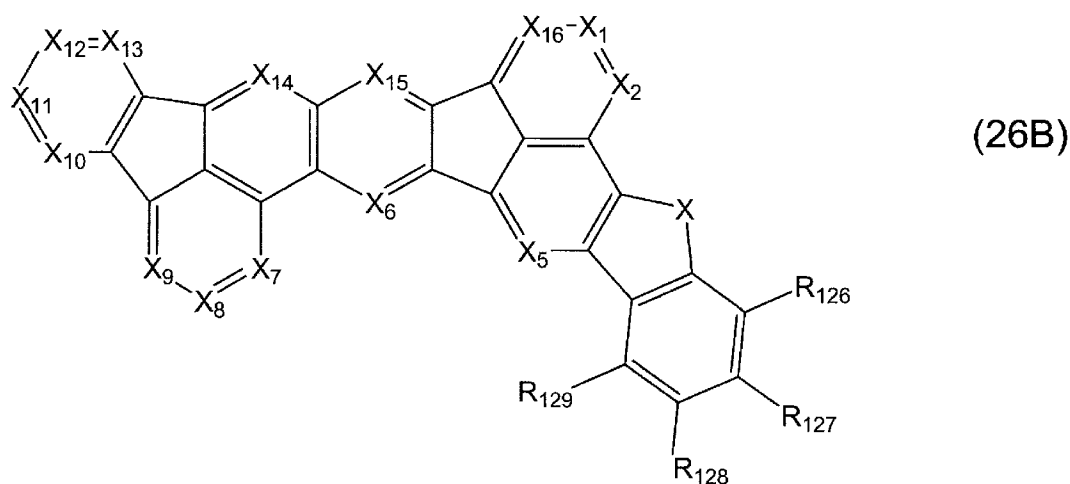
からなる群から選択され、

置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0076] 本実施形態において、前記一般式(26A)における R_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基(直鎖または分岐鎖のアルキル基)、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0077] 本実施形態において、前記一般式(2)で表される化合物は、下記一般式(26B)で表されることも好ましい。

[0078] [化20]



[0079] 前記一般式(26B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 X は、前記一般式(2b)における X とそれぞれ同義であり、

R_{126} 乃至 R_{129} 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_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、
置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、
置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、
置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、
置換または無置換のアミノ基、
置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、
置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、
置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、
置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、
置換または無置換のホスファニル基、
置換または無置換のホスホリル基、
置換または無置換のシリル基、
置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、
シアノ基、
ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子

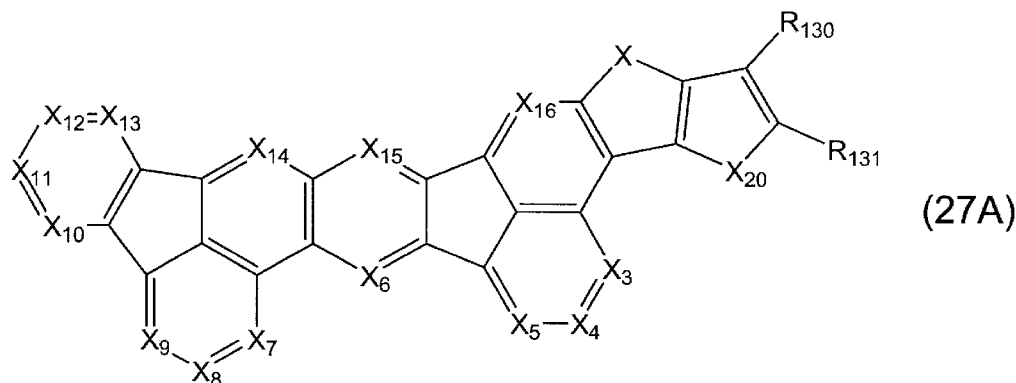
からなる群から選択され、

置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0080] 本実施形態において、前記一般式(26B)における R_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基(直鎖または分岐鎖のアルキル基)、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0081] 本実施形態において、前記一般式(2)で表される化合物は、下記一般式(27A)で表されることも好ましい。

[0082] [化21]



[0083] 前記一般式（27A）において、 X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式（2）における X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 X は、前記一般式（2b）における X とそれぞれ同義であり、

R_{130} 及び R_{131} 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_{130} 及び R_{131} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び
ハロゲン原子
からなる群から選択され、
 X_{20} は

酸素原子、
硫黄原子、
 $CR_{132}R_{133}$ 、
 $SiR_{134}R_{135}$ 、及び
 NR_{136}

からなる群から選択され、

R_{132} 乃至 R_{136} 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_{132} 乃至 R_{136} は、それぞれ独立に、

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

ハロゲン原子

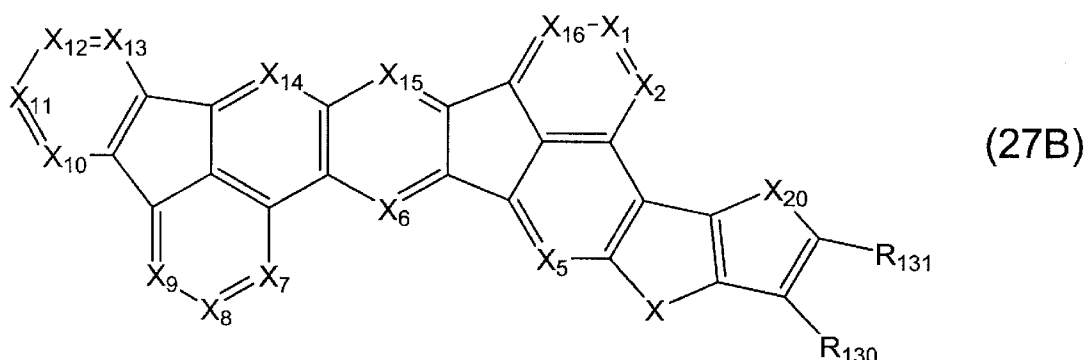
からなる群から選択され、

置換基としての R_{130} 乃至 R_{136} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0084] 本実施形態において、前記一般式(27A)における R_{130} 乃至 R_{136} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基(直鎖または分岐鎖のアルキル基)、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0085] 本実施形態において、前記一般式(2)で表される化合物は、下記一般式(27B)で表されることも好ましい。

[0086] [化22]



[0087] 前記一般式(27B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 X は、前記一般式(2b)における X とそれぞれ同義であり、

R_{130} 及び R_{131} 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_{130} 及び R_{131} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

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

からなる群から選択され、

X_{20} は

酸素原子、

硫黄原子、

$C R_{132} R_{133}$ 、

$S i R_{134} R_{135}$ 、及び

$N R_{136}$

からなる群から選択され、

R_{132} 乃至 R_{136} 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_{132} 乃至 R_{136} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、

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

からなる群から選択され、

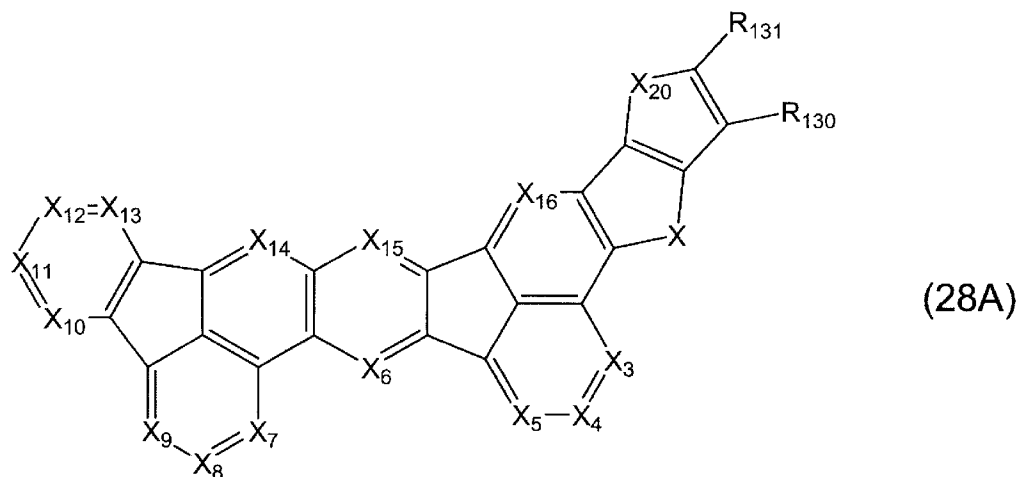
置換基としての R_{130} 乃至 R_{136} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0088] 本実施形態において、前記一般式 (27B) における R_{130} 乃至 R_{136} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0089] 本実施形態において、前記一般式 (2) で表される化合物は、下記一般式 (28A) で表されることも好ましい。

[0090]

[化23]



[0091] 前記一般式(28A)において、X₃乃至X₁₆、及びR_xは、前記一般式(2)におけるX₃乃至X₁₆、及びR_xとそれぞれ同義であり、Xは、前記一般式(2b)におけるXとそれぞれ同義であり、

R₁₃₀及びR₁₃₁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R₁₃₀乃至R₁₃₁は、それぞれ独立に、
 置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、
 置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、
 置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、
 置換または無置換のアミノ基、
 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
 置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、
 置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、
 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、
 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、
 置換または無置換のホスファニル基、
 置換または無置換のホスホリル基、
 置換または無置換のシリル基、
 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、
 シアノ基、

ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子
からなる群から選択され、
 X_{20} は

酸素原子、
硫黄原子、
 $CR_{132}R_{133}$ 、
 $SiR_{134}R_{135}$ 、及び
 NR_{136}

からなる群から選択され、

R_{132} 乃至 R_{136} 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_{132} 乃至 R_{136} は、それぞれ独立に、

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

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

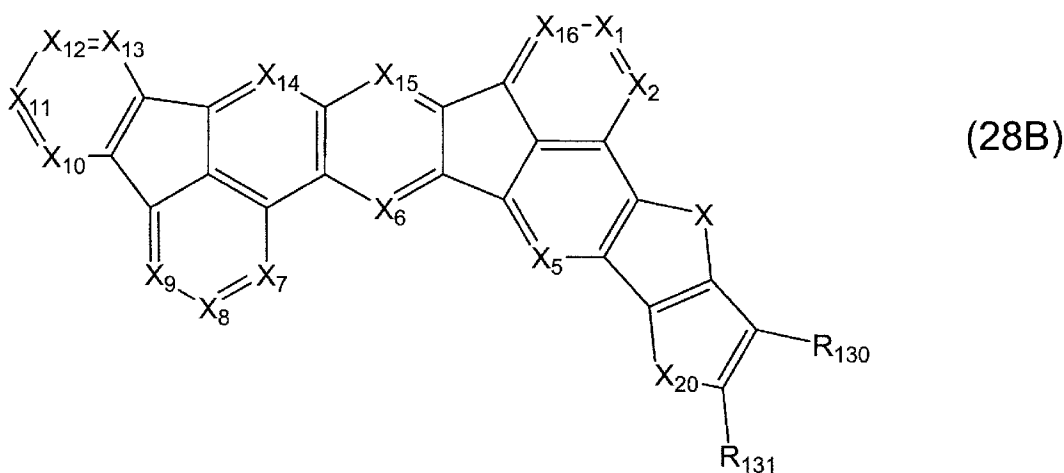
からなる群から選択され、

置換基としての R_{130} 乃至 R_{136} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0092] 本実施形態において、前記一般式(28A)における R_{130} 乃至 R_{136} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基(直鎖または分岐鎖のアルキル基)、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0093] 本実施形態において、前記一般式(2)で表される化合物は、下記一般式(28B)で表されることも好ましい。

[0094] [化24]



[0095] 前記一般式(28B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 X は、前記一般式(2b)における X とそれぞれ同義であり、

R_{130} 及び R_{131} 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_{130} 及び R_{131} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、
置換または無置換のアミノ基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、
置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、
置換または無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルケニル基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基、
置換または無置換のホスファニル基、
置換または無置換のホスホリル基、
置換または無置換のシリル基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールカルボニル基、
シアノ基、
ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子
からなる群から選択され、
 X_{20} は
酸素原子、
硫黄原子、
 $CR_{132}R_{133}$ 、
 $SiR_{134}R_{135}$ 、及び
 NR_{136}
からなる群から選択され、
 R_{132} 乃至 R_{136} 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_{132} 乃至 R_{136} は、それぞれ独立に、
置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、
置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、
置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、

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

からなる群から選択され、

置換基としての R_{130} 乃至 R_{136} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0096] 本実施形態において、前記一般式 (28B) における R_{130} 乃至 R_{136} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基 (直鎖または分岐鎖のアルキル基)、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0097] 本実施形態の化合物において、前記一般式 (2) における X_6 が CR_6 、 X_{15} が CR_{15} であり、 R_6 及び R_{15} が、それぞれ独立に、環形成炭素数 6 ～ 30 の置換または無置換のアリール基であることが好ましく、置換または無置換のフェニル基であることがより好ましい。

[0098] 本実施形態の化合物において、前記一般式 (2) における X_5 が CR_5 、 X_6 が CR_6 、 X_7 が CR_7 、 X_8 が CR_8 、 X_9 が CR_9 、 X_{10} が CR_{10} 、 X_{11} が C

R_{11} 、 X_{12} が CR_{12} 、 X_{13} が CR_{13} 、 X_{14} が CR_{14} 、 X_{15} が CR_{15} 、 X_{16} が CR_{16} であり、 R_6 及び R_{15} が、それぞれ独立に、置換または無置換のフェニル基であり、 R_5 、 R_7 乃至 R_{14} 、及び R_{16} が水素原子であることが好ましい。

[0099] 本実施形態の化合物によれば、有機EL素子の発光効率を向上させることができる。

これは、本実施形態の化合物が前述の特定の構造を有しているためと考えられる。前記一般式(2)には、前記一般式(2a)及び(2b)の少なくともいずれかの構造が結合している。このように、アセナフト[1, 2-k]ベンゾ[e]アセフェナンスレン骨格に対して共役を伸ばすことでモル吸光係数を高めストークスシフトを小さくすることができるため、本実施形態の化合物を有機EL素子の発光材料(ドーパント)として用いることで、ホストからドーパントへと移動するエネルギーを十分に吸収することができ、発光効率を向上させることができると考えられる。

青色の波長領域の発光効率を向上させるという観点においては、アセナフト[1, 2-k]ベンゾ[e]アセフェナンスレン骨格に対して、前記一般式(2a-1)で示すような構造で縮合環を増環しながら共役を伸ばすか、前記一般式(25A)、(25B)、(26A)、または(26B)に示すような構造となるように縮合環を増環しながら共役を伸ばすことが好ましい。このうち、前記一般式(21A)、(21B)、(25A)、または(25B)に示すような構造となるように縮合環を増環しながら共役を伸ばすことがより好ましい。このような縮合環の増環により共役を伸ばすことで、一重項エネルギーが小さくなりすぎることがなく、発光ピークが長波長化することもないため、発光ピークを青色領域に維持したまま、発光効率を向上させることができると考えられる。

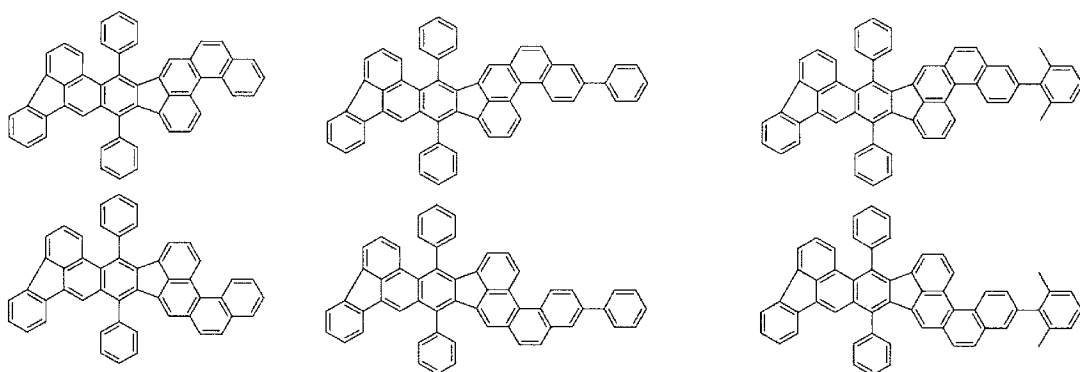
[0100] (化合物の製造方法)

本実施形態に係る化合物は、例えば、後述する実施例に記載の方法により製造することができる。また、本実施形態に係る化合物は、後述する実施例

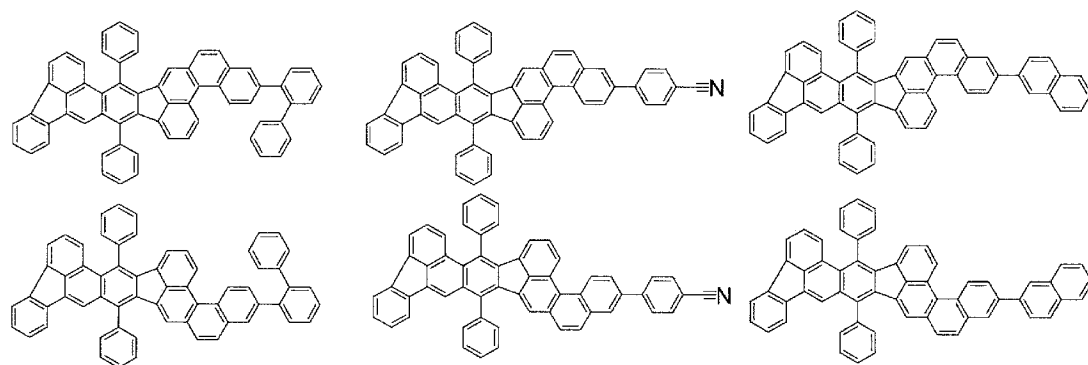
で説明する反応に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応や原料を用いることで、製造することができる。

[0101] 本実施形態に係る化合物の具体例を以下に示す。本発明の化合物は、これらの具体例に限定されない。

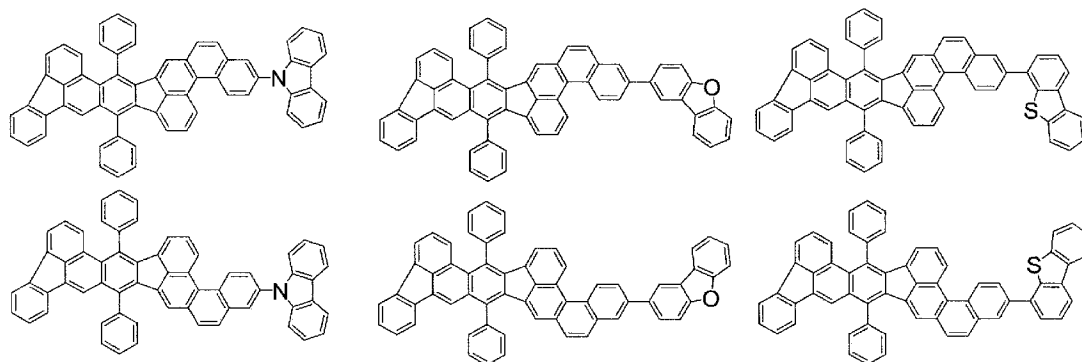
[0102] [化25]



[0103] [化26]

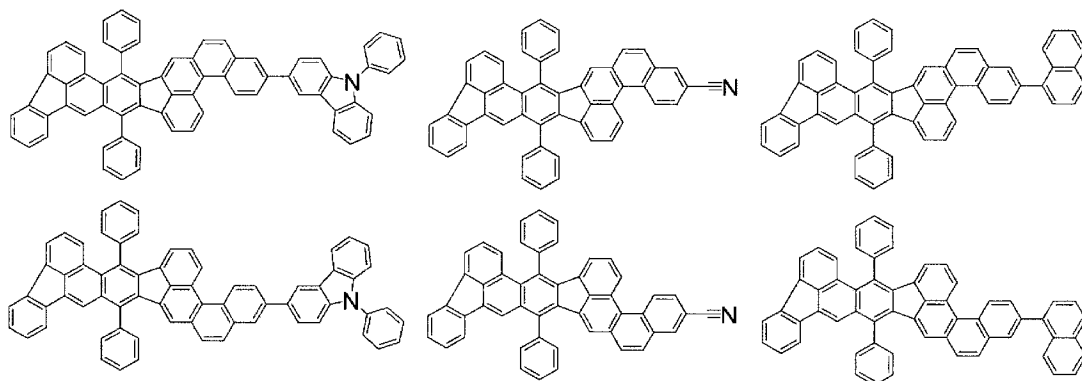


[0104] [化27]

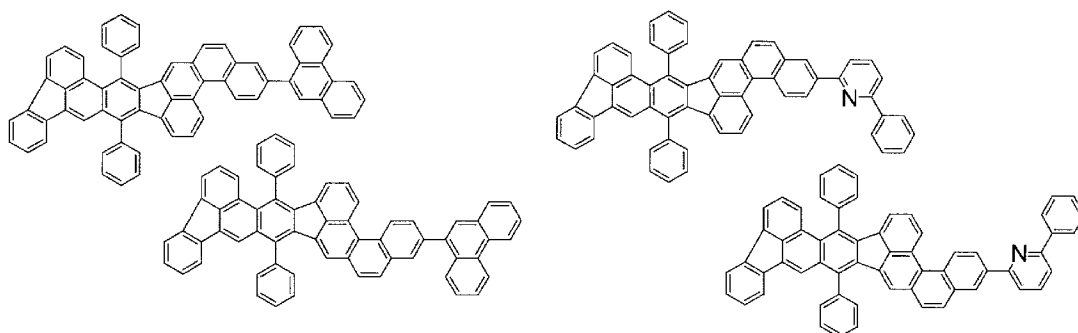


[0105]

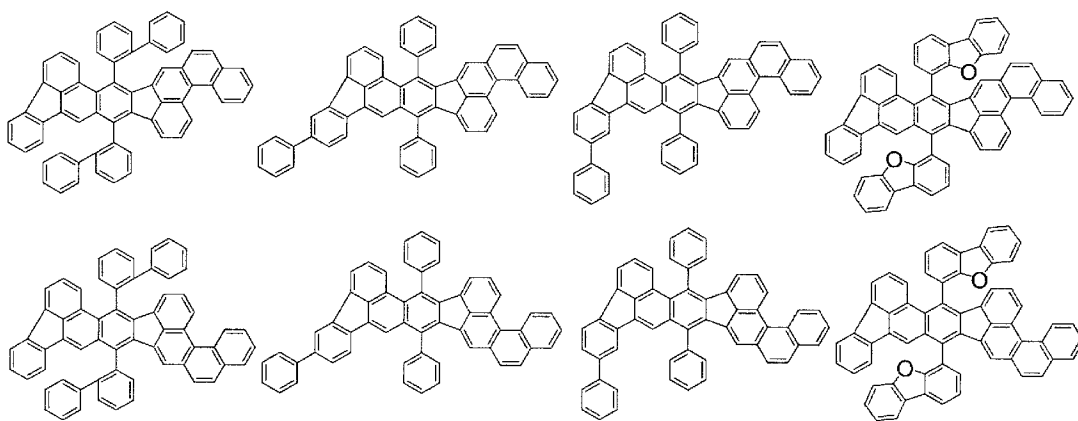
[化28]



[0106] [化29]

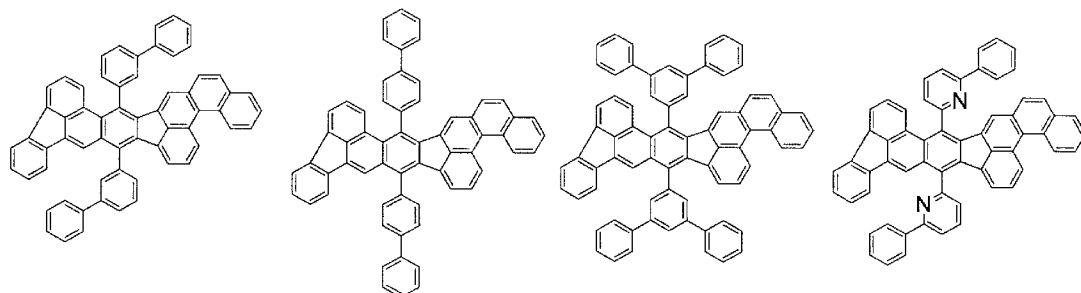


[0107] [化30]

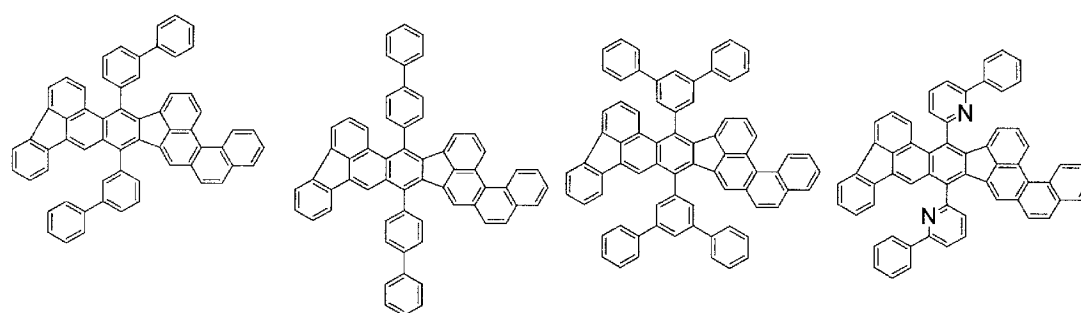


[0108]

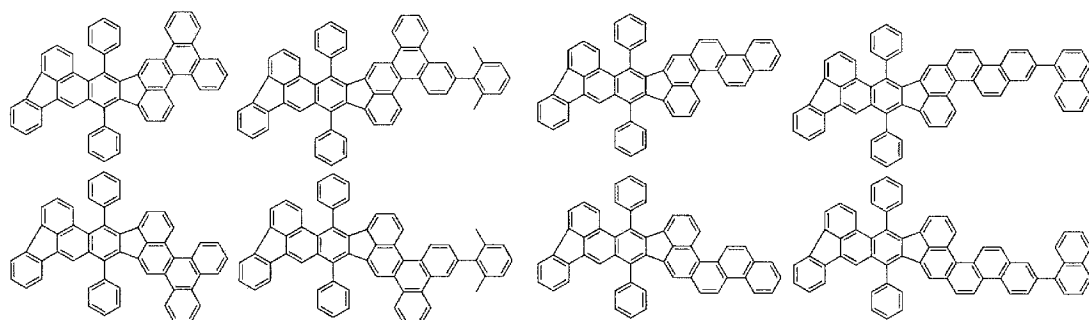
[化31]



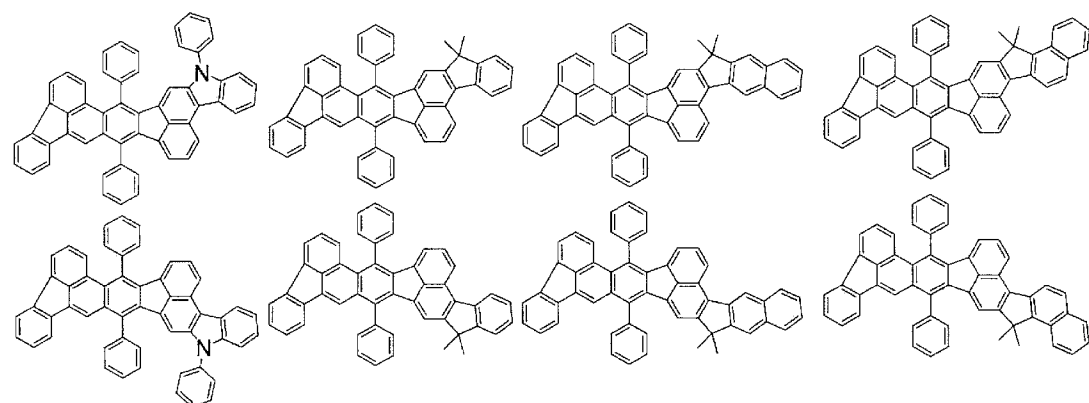
[0109] [化32]



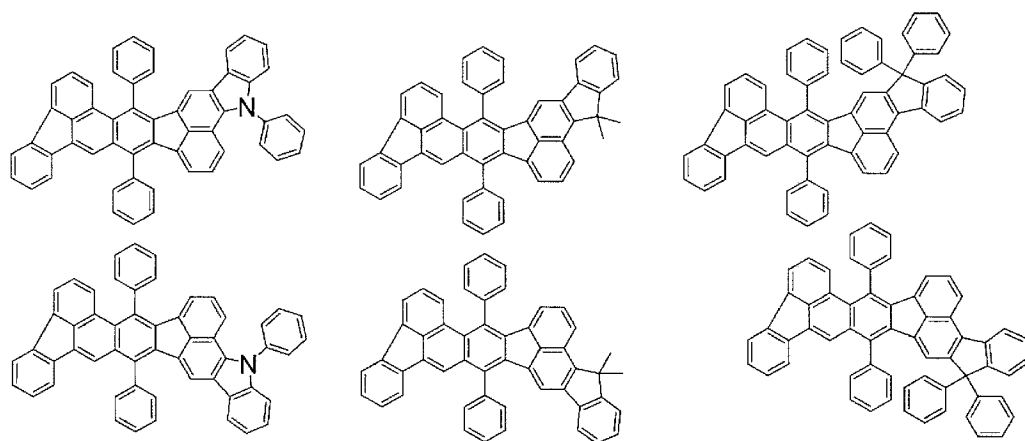
[0110] [化33]



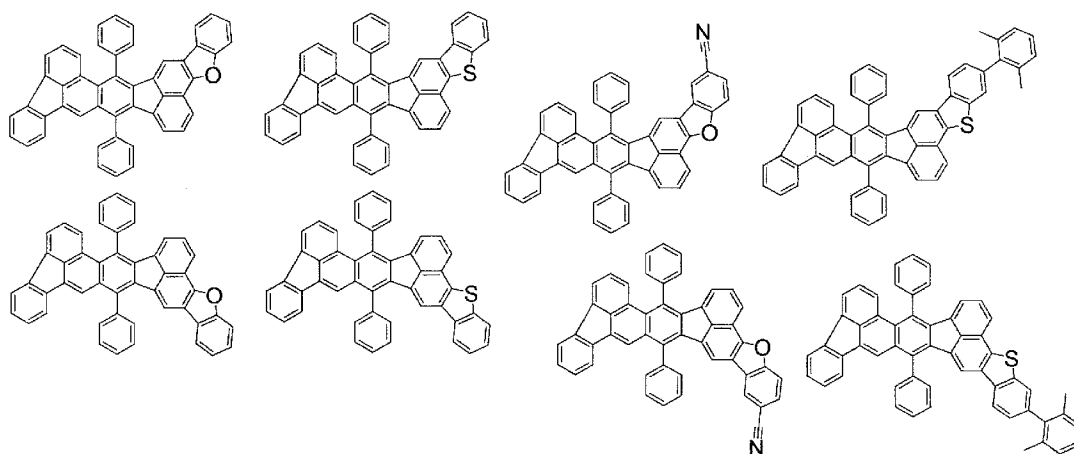
[0111] [化34]



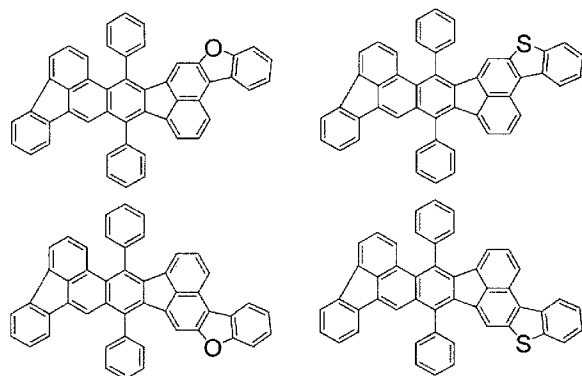
[0112] [化35]



[0113] [化36]

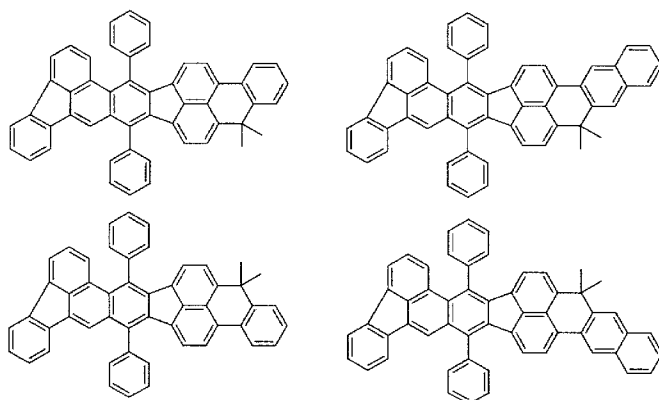


[0114] [化37]

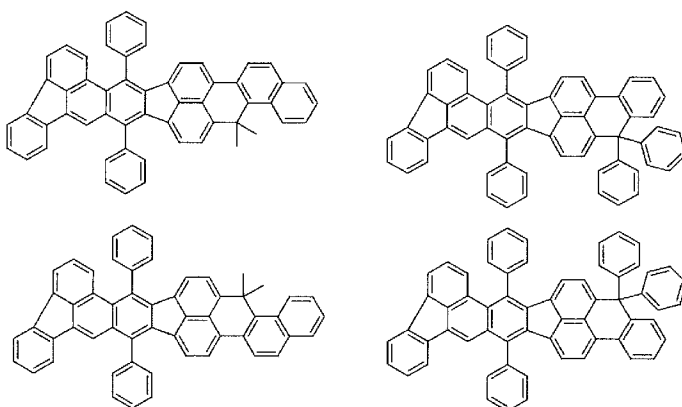


[0115]

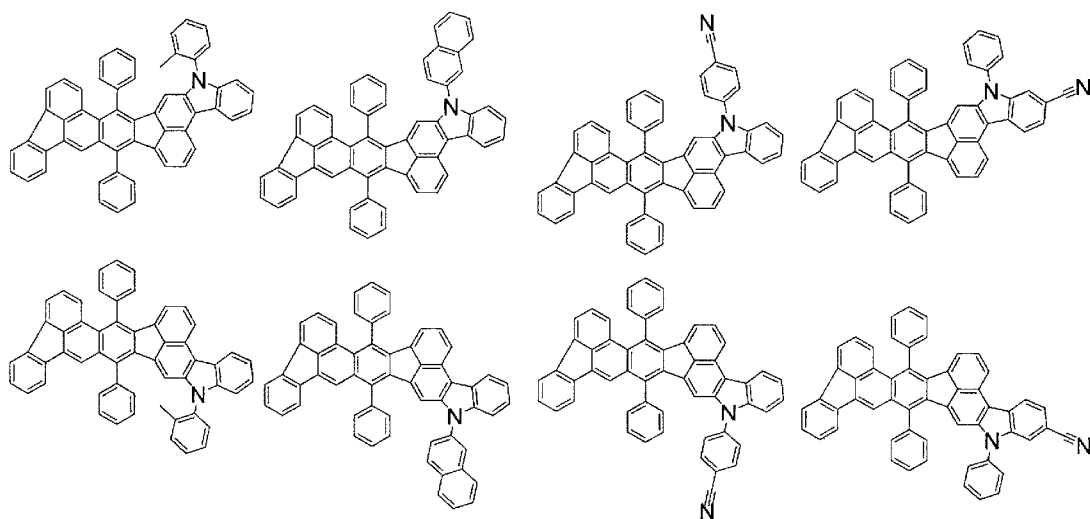
[化38]



[0116] [化39]

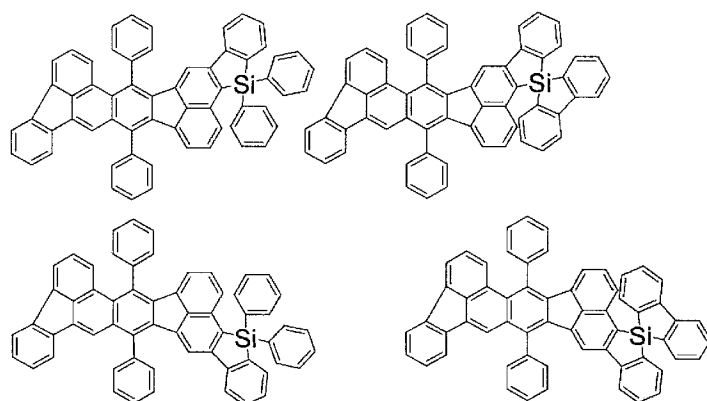


[0117] [化40]

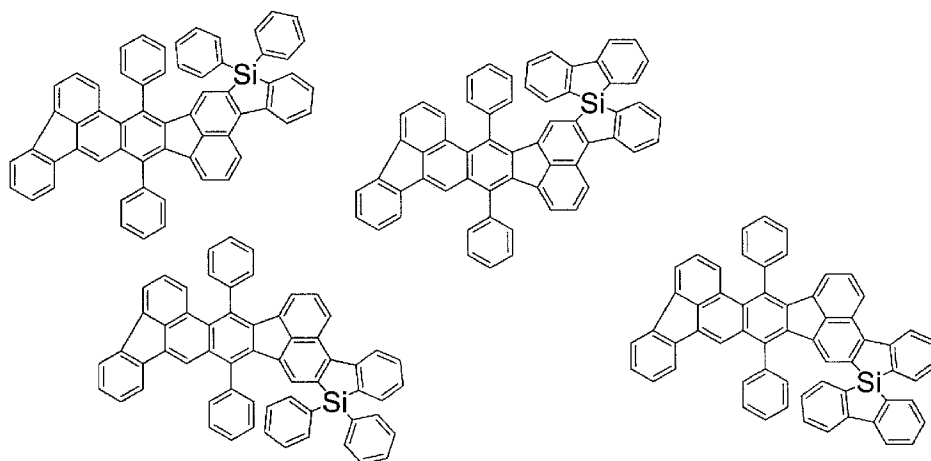


[0118]

[化41]



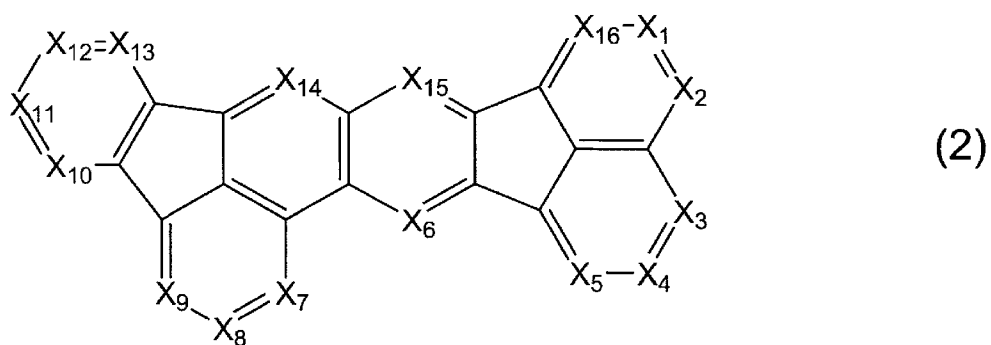
[0119] [化42]



[0120] [組成物]

本実施形態の組成物は、下記一般式（2）で表される化合物を複数種含有する。

[0121] [化43]



[0122] 前記一般式（2）において、

X_1 乃至 X_5 、 X_7 乃至 X_{13} 、及び X_{16} は、それぞれ独立に、 CR_x 、または下記一般式(2a)もしくは(2b)で表される構造と結合する炭素原子であり、

X_6 、 X_{14} 、及び X_{15} は、それぞれ独立に、 CR_x であり、 R_x 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_x は、それぞれ独立に、

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

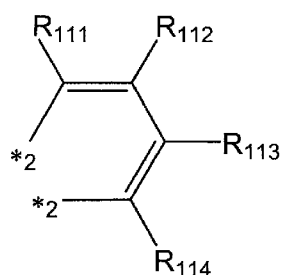
からなる群から選択され、

複数の R_x は、互いに同一であるかまたは異なり、

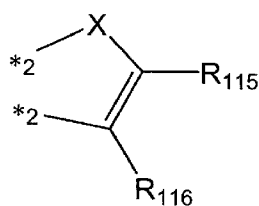
X_1 乃至 X_{16} のうち、複数の R_x であって、 R_x が置換基である場合、置換基としての複数の R_x 同士が互いに結合して環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

ただし、 X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組の少なくともいずれかの組は、下記一般式(2a)または(2b)で表される構造と結合する炭素原子である。

[0123] [化44]



(2a)



(2b)

[0124] 前記一般式(2a)において、それぞれの*2は、前記一般式(2)の X_1 及び X_2 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{111} 乃至 R_{114} 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_{111} 乃至 R_{114} は、それぞれ独立に

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

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

からなる群から選択される。

ただし、 R_{111} 及び R_{112} の組、 R_{112} 及び R_{113} の組、並びに R_{113} 及び R_{114} の組のうち少なくともいずれかの組は、互いに置換基であり、当該置換基同士が結合して環を形成する。

前記一般式 (2b) において、それぞれの *2 は、前記一般式 (2) の X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{115} 及び R_{116} 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_{115} 及び R_{116} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、
置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、
置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、
置換または無置換のアミノ基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、
置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、
置換または無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルケニル基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基、

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

からなる群から選択され、

置換基としての R_{115} 及び R_{116} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

X は、

酸素原子、
硫黄原子、
 $CR_{117}R_{118}$ 、
 $SiR_{119}R_{120}$ 、及び
 NR_{121}

からなる群から選択され、

R_{117} 乃至 R_{121} 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_{117} 乃至 R_{121} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、
置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、
置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、
置換または無置換のアミノ基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、
置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、
置換または無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルケニル基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、

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

からなる群から選択され、

置換基としての R_{117} 及び R_{118} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

置換基としての R_{119} 及び R_{120} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0125] 本実施形態において、前記一般式 (2) における R_x は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基 (直鎖または分岐鎖のアルキル基)、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0126] 本実施形態において、前記一般式 (2a) における R_{111} 乃至 R_{114} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基 (直鎖または分岐鎖のアルキル基)、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

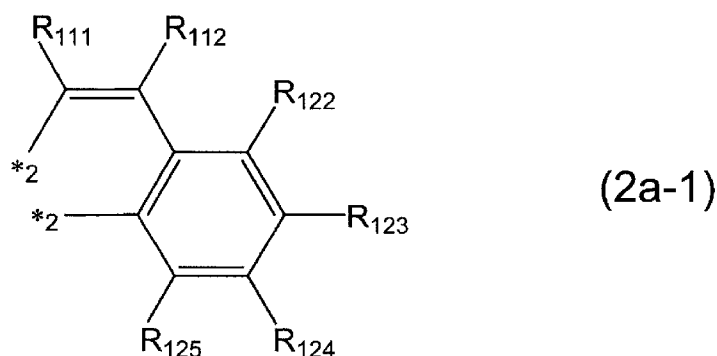
[0127] 本実施形態において、前記一般式 (2b) における R_{115} 乃至 R_{121} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基 (直鎖または分岐鎖のアルキル基)、ハロゲン原子、及びシアノ基から

なる群から選択される基であることが好ましい。

[0128] 本実施形態の組成物において、前記一般式（２）における X_1 及び X_2 の組、並びに X_3 及び X_4 の組の少なくともいずれかの組が、前記一般式（２a）で表される構造と結合する炭素原子であることが好ましい。

[0129] 本実施形態の組成物において、前記一般式（２a）で表される構造が、下記一般式（２a-1）で表される構造であることが好ましい。

[0130] [化45]



[0131] 前記一般式（２a-1）において、

*2は、前記一般式（２a）における*2とそれぞれ同義であり、

R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} 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_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

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

からなる群から選択され、

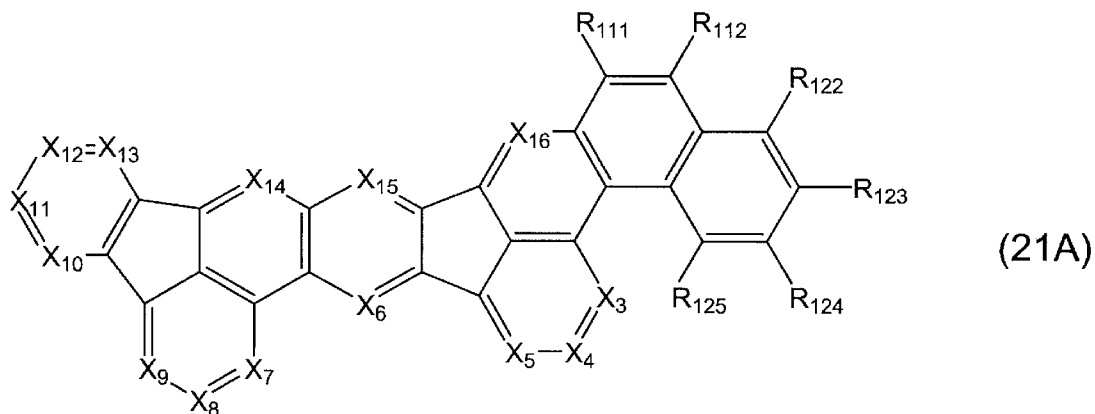
置換基としての R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0132] 本実施形態において、前記一般式 (2 a - 1) における R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

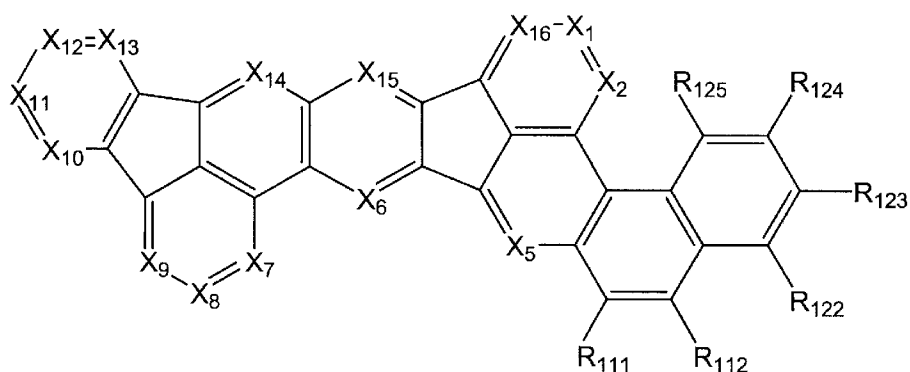
[0133] 本実施形態の組成物は、前記一般式 (2) で表される化合物として、下記一般式 (2 1 A) で表される化合物及び下記一般式 (2 1 B) で表される化合物を含むことが好ましい。

[0134]

[化46]



(21A)



(21B)

[0135] 前記一般式(21A)において、 X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式(21B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式(21A)及び(21B)において、 R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、前記一般式(2a-1)における R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} とそれぞれ同義である。

[0136] 本実施形態において、前記一般式(21A)中の R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} のうち、互いに隣り合う置換基同士が結合してさらに環を形成する場合には、 R_{111} と R_{112} の組、または R_{122} と R_{123} の組が、互いに結合してさらに環を形成することが好ましい。

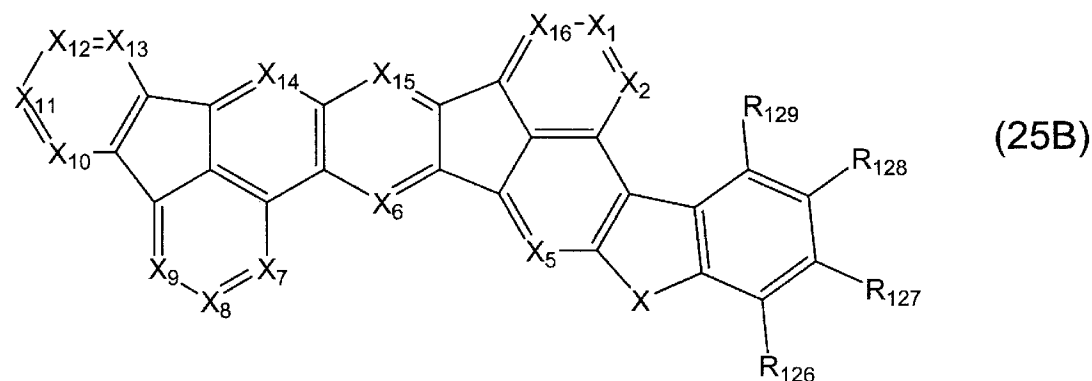
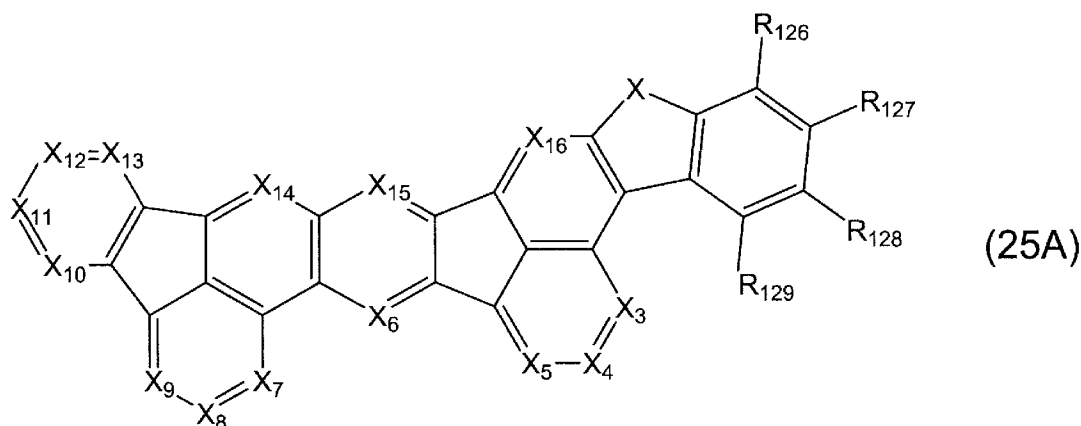
また、本実施形態において、前記一般式(21B)中の R_{111} 及び R_{112} 、

並びに R_{122} 乃至 R_{125} のうち、互いに隣り合う置換基同士が結合してさらに環を形成する場合には、 R_{111} と R_{112} の組、または R_{122} と R_{123} の組が、互いに結合してさらに環を形成することが好ましい。

[0137] 本実施形態の組成物において、前記一般式(2)における X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、並びに X_3 及び X_4 の組の少なくともいずれかの組が、前記一般式(2b)で表される構造と結合する炭素原子であることも好ましい。

[0138] 本実施形態の組成物は、前記一般式(2)で表される化合物として、下記一般式(25A)で表される化合物及び下記一般式(25B)で表される化合物を含むことも好ましい。

[0139] [化47]



[0140] 前記一般式(25A)において、 X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式(25B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前

記一般式 (2) における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式 (25A) 及び (25B) において、 X は、前記一般式 (2b) における X とそれぞれ同義であり、

R_{126} 乃至 R_{129} 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_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0141] 本実施形態において、前記一般式 (25A) における R_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリ

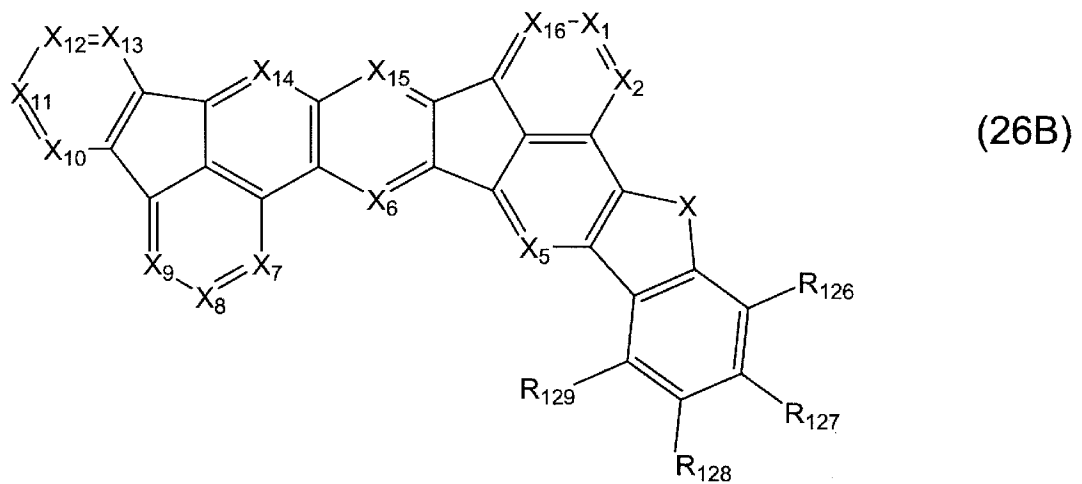
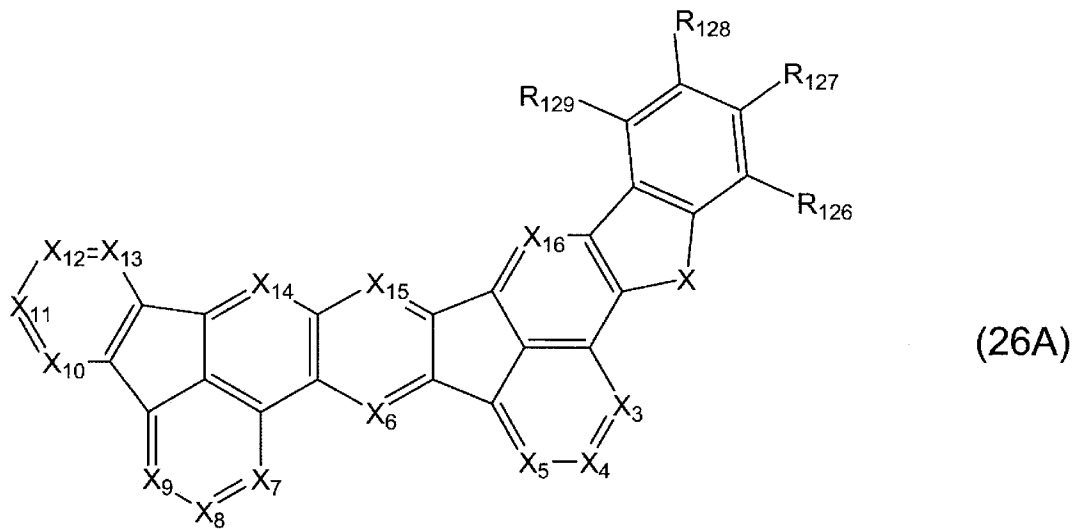
ール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

また、本実施形態において、前記一般式（25B）における R_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0142] 本実施形態の組成物は、前記一般式（2）で表される化合物として、下記一般式（26A）で表される化合物及び下記一般式（26B）で表される化合物を含むことも好ましい。

[0143]

[化48]



[0144] 前記一般式(26A)において、 X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式(26B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式(26A)及び(26B)において、 X は、前記一般式(2b)における X とそれぞれ同義であり、

R_{126} 乃至 R_{129} 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_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、

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

からなる群から選択され、

置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

[0145] 本実施形態において、前記一般式 (26A) における R_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基 (直鎖または分岐鎖のアルキル基)、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

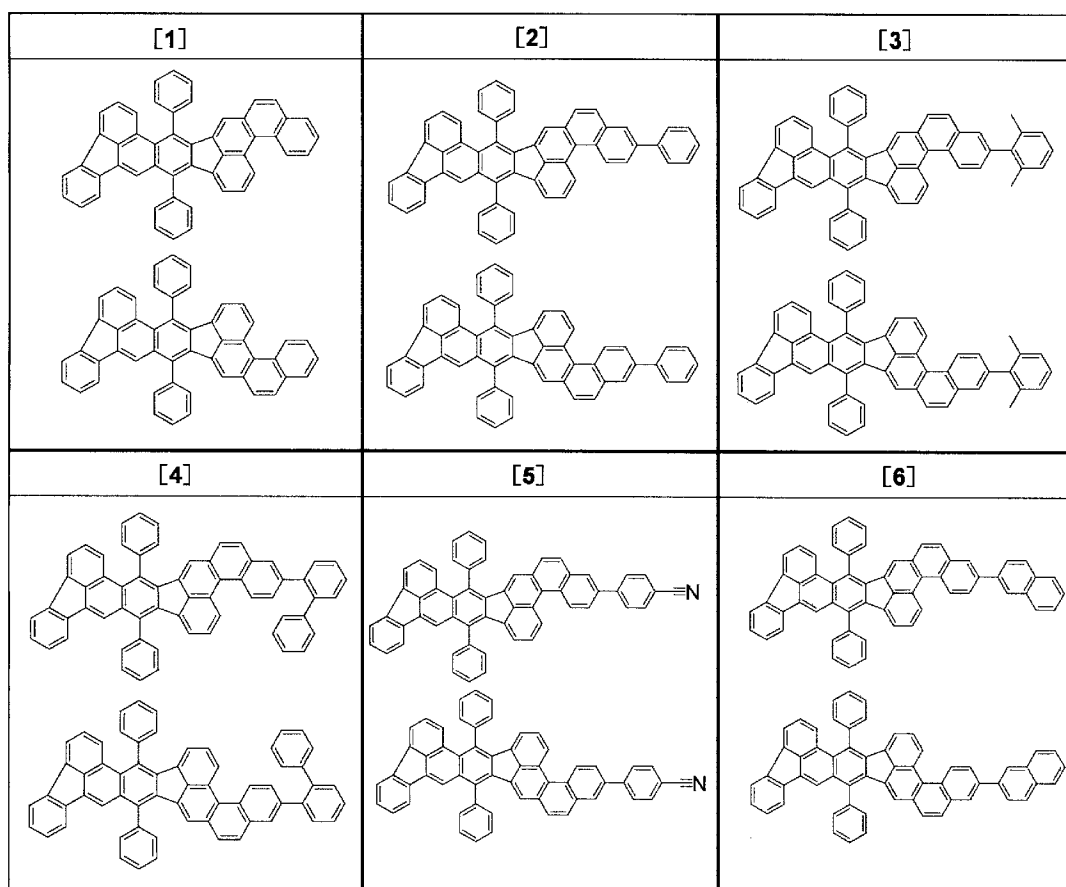
また、本実施形態において、前記一般式 (26B) における R_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、水素原子であるか、あるいは環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 の

アルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0146] 本実施形態の組成物における、前記一般式（２）で表される化合物の具体的な構造および好ましい態様としては、本実施形態において、一般式で示した構造等の他に、上述の本実施形態の化合物の説明において、一般式で示した構造および好ましい態様が挙げられる。

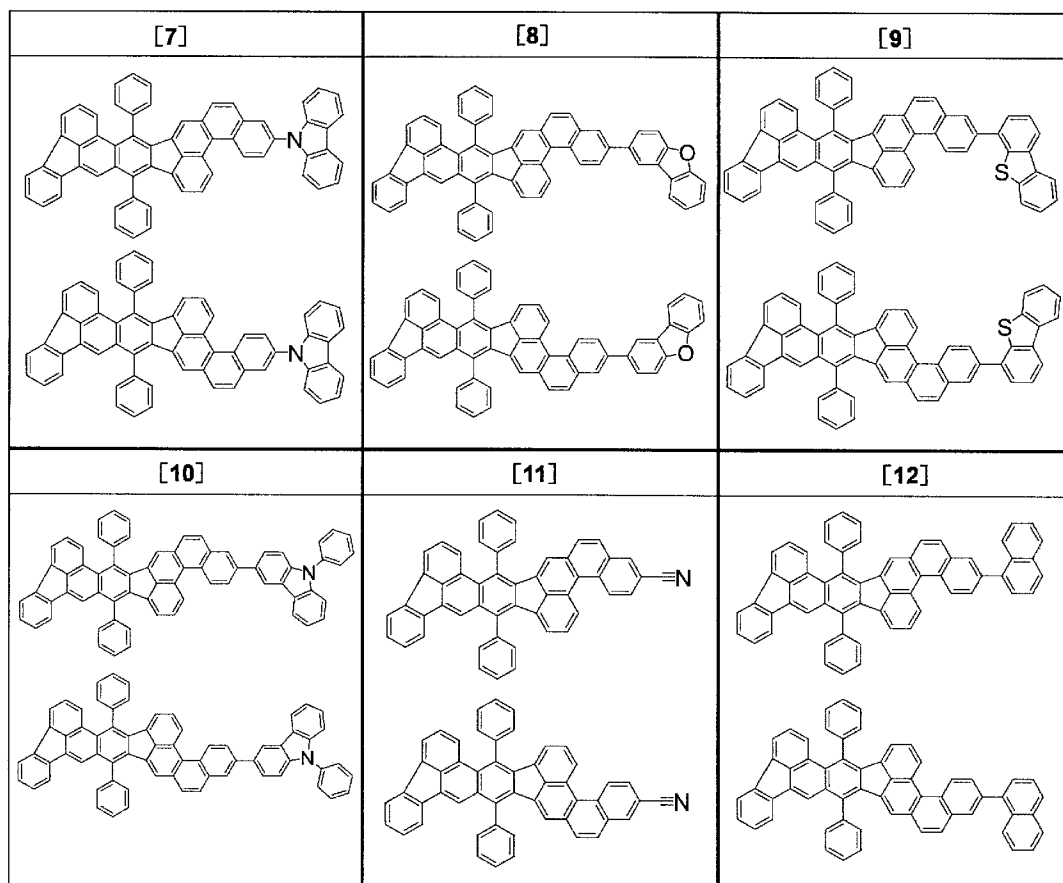
[0147] 本実施形態に係る組成物に含まれる化合物の組み合わせについて、具体例（〔１〕～〔５１〕）を以下に示す。本発明の組成物は、これらの具体例に限定されない。

[0148] [化49]



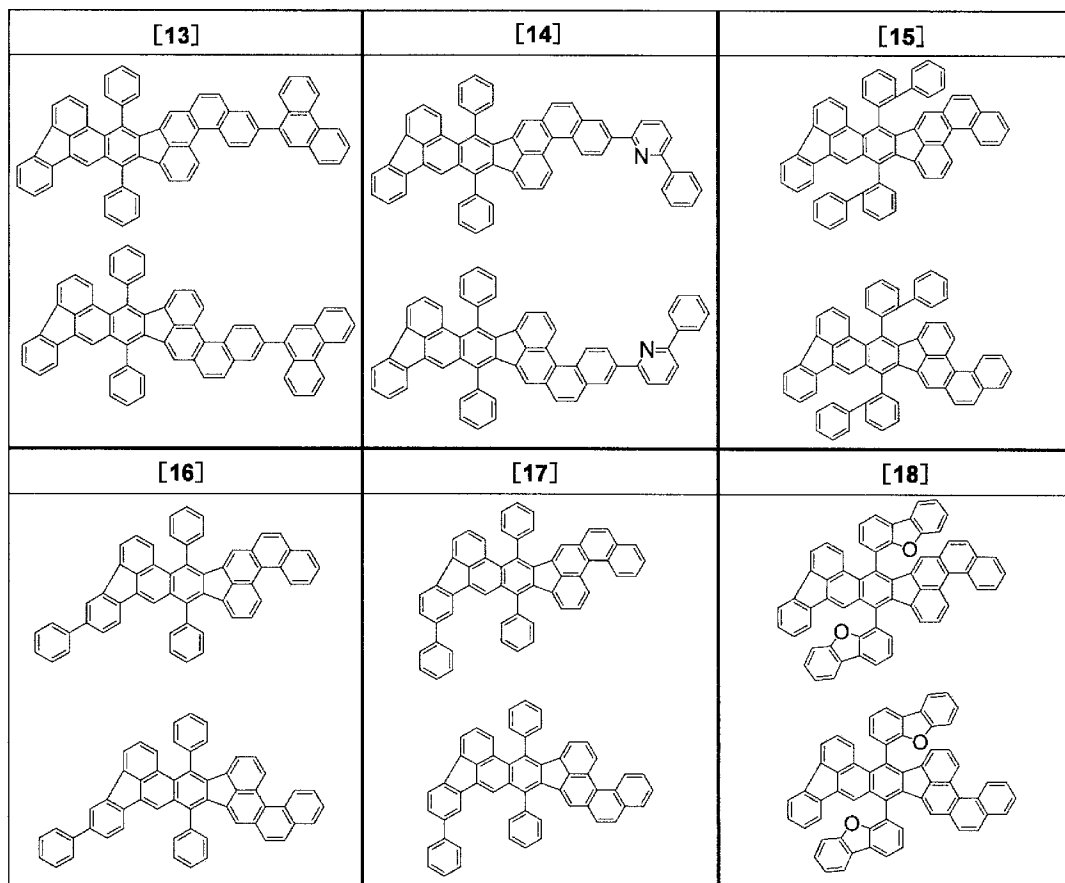
[0149]

[化50]



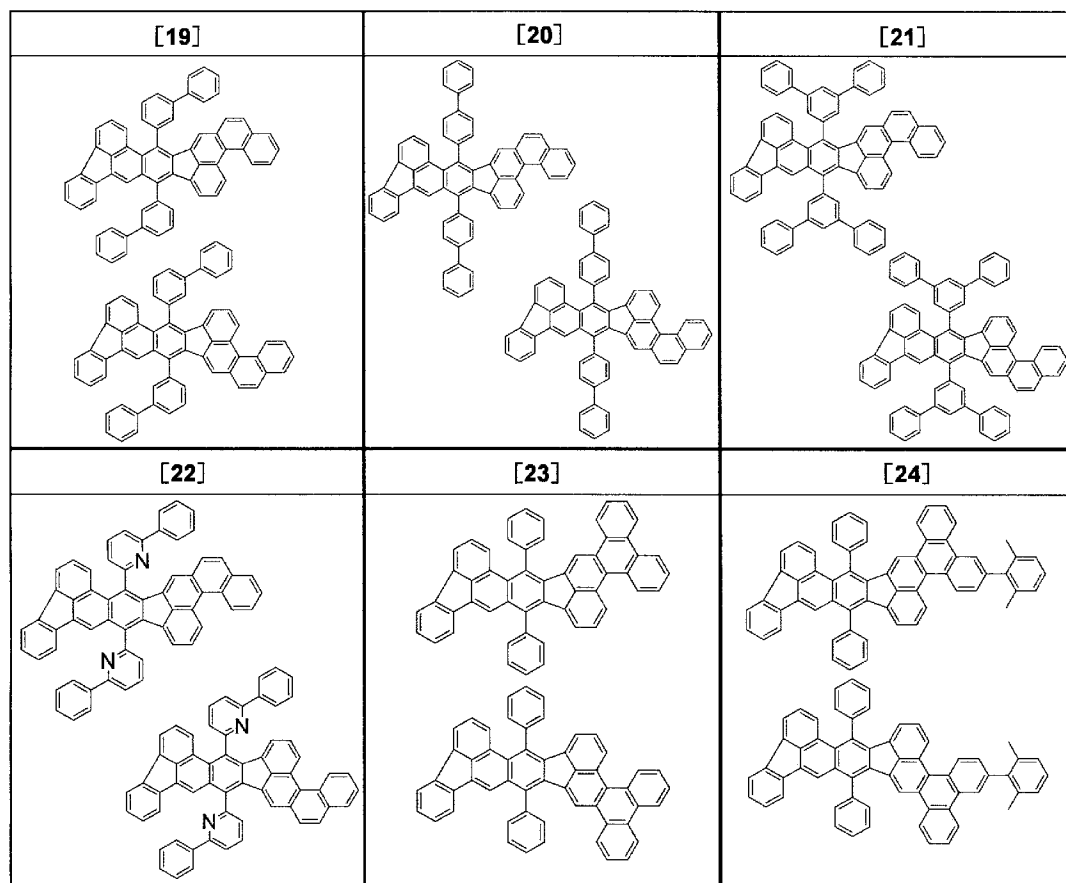
[0150]

[化51]



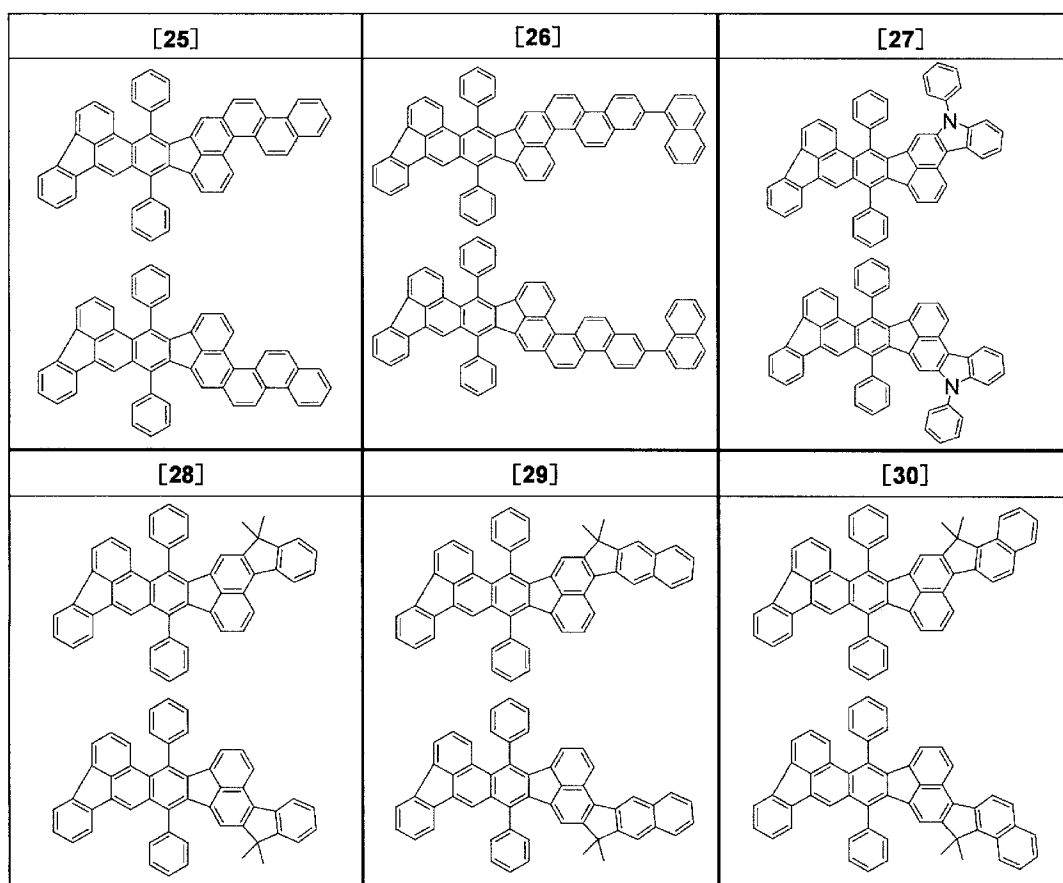
[0151]

[化52]



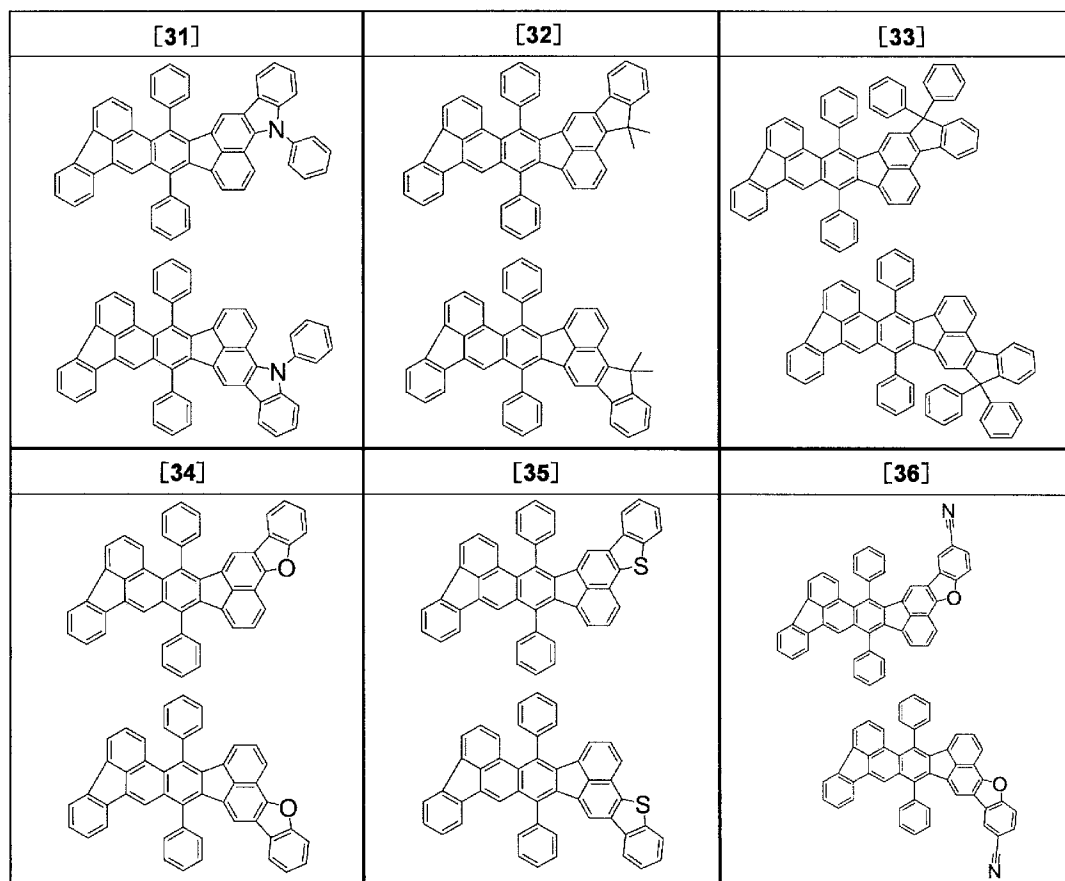
[0152]

[化53]

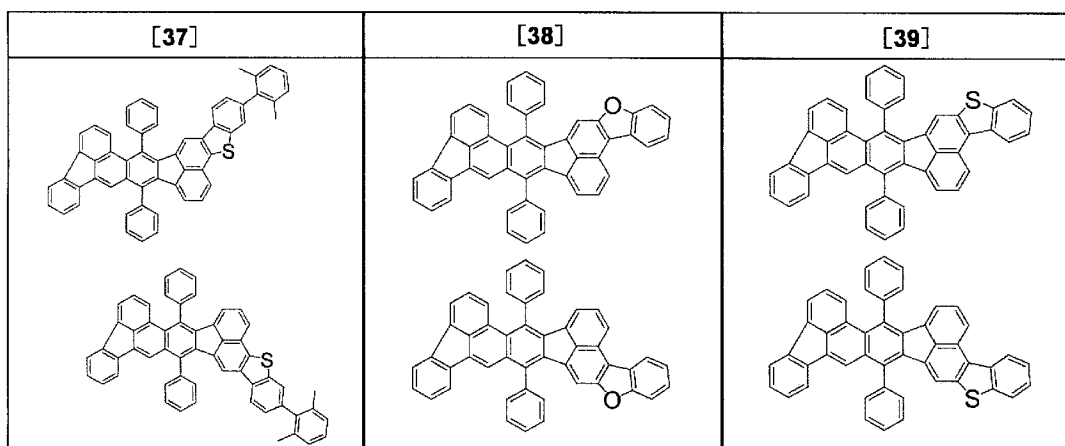


[0153]

[化54]

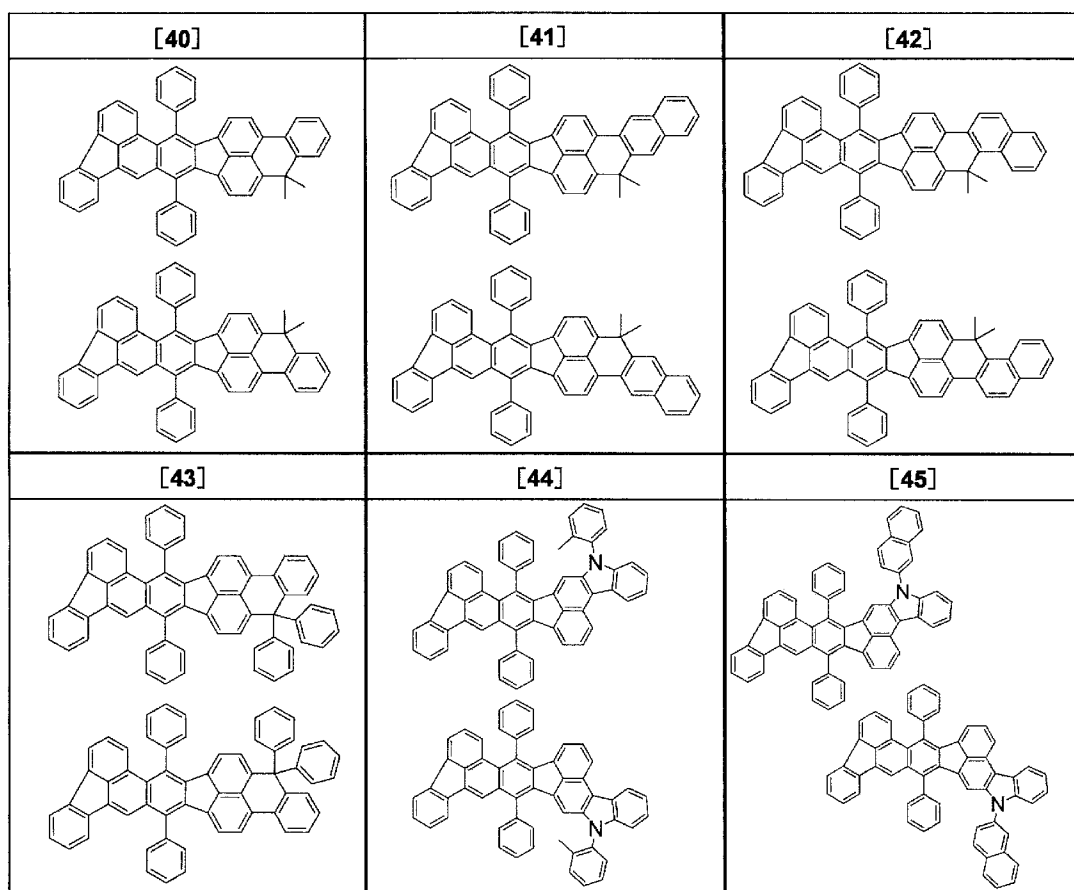


[0154] [化55]



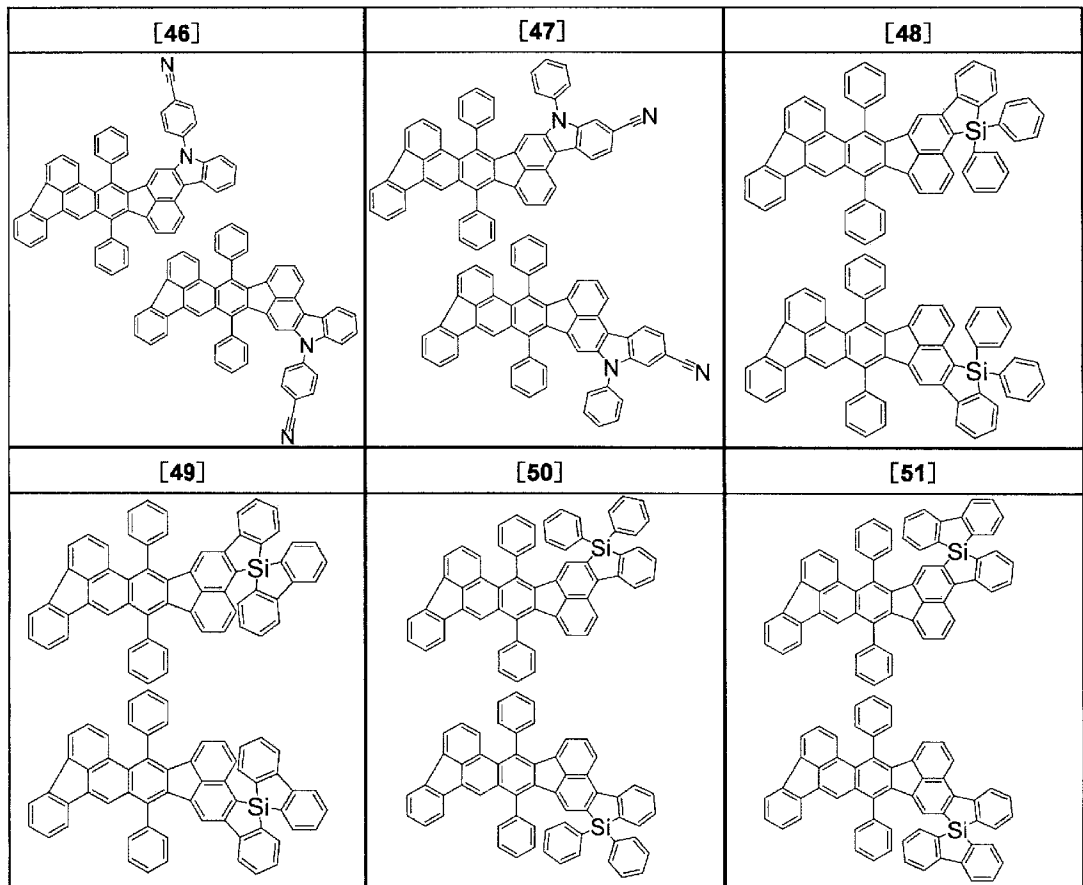
[0155]

[化56]



[0156]

[化57]



[0157] 本実施形態の組成物によれば、有機ＥＬ素子の発光効率を向上させることができる。

また、本実施形態の組成物によれば、特に、青色の波長領域において、有機ＥＬ素子の発光効率を向上させることができる。

[0158] [有機ＥＬ素子]

(有機ＥＬ素子の素子構成)

以下、本実施形態に係る有機ＥＬ素子の素子構成について説明する。

本実施形態に係る有機素子は、一対の電極間に有機層を備える。この有機層は、有機化合物で構成される層を少なくとも一つ含む。あるいは、この有機層は、有機化合物で構成される複数の層が積層されてなる。有機層は、無機化合物をさらに含んでいてもよい。本実施形態の有機ＥＬ素子において、有機層のうち少なくとも一層は、発光層である。ゆえに、有機層は、例えば

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

[0159] 有機EL素子の代表的な素子構成としては、例えば、次の(a)～(f)等の構成を挙げることができる。

(a) 陽極／発光層／陰極

(b) 陽極／正孔注入・輸送層／発光層／陰極

(c) 陽極／発光層／電子注入・輸送層／陰極

(d) 陽極／正孔注入・輸送層／発光層／電子注入・輸送層／陰極

(e) 陽極／正孔注入・輸送層／発光層／障壁層／電子注入・輸送層／陰極

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

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

[0160] 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、を有する。有機層10は、正孔注入

層 6、正孔輸送層 7、発光層 5、電子輸送層 8、及び電子注入層 9 を含む。
有機層 10 は、陽極 3 側から順に、正孔注入層 6、正孔輸送層 7、発光層 5、電子輸送層 8、及び電子注入層 9 が、この順番で積層されている。

[0161] (発光層)

有機 EL 素子 1 の発光層 5 は、第一の化合物、及び第二の化合物を含む。
発光層 5 は、金属錯体を含んでもよい。発光層 5 は、燐光発光性の金属錯体を含まないことが好ましい。

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

本実施形態において、発光層 5 は、複数種の第二の化合物を含んでいてもよい。

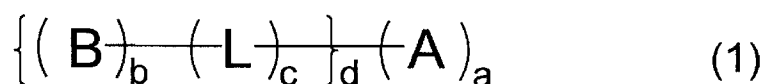
なお、本実施形態において、「発光層 5 が複数種の第二の化合物を含む」場合には、例えば、発光層 5 が上述の本実施形態の組成物を含む場合も含まれる。

[0162] <第一の化合物>

第一の化合物は、遅延蛍光性の化合物であってもよいし、遅延蛍光性を示さない化合物であってもよい。第一の化合物は、遅延蛍光性の化合物であることが好ましい。

第一の化合物が遅延蛍光性の化合物である場合は、第一の化合物は、下記一般式（1）で表される化合物であることが好ましい。

[0163] [化58]



[0164] 前記一般式（1）において、

A は、下記一般式（a-1）～（a-7）からなる群から選ばれる部分構造を有する基であり、

複数の A は、互いに同一であるかまたは異なり、

A同士が結合して飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成せず、

Bは、下記一般式（b-1）～（b-6）からなる群から選ばれる部分構造を有する基であり、

複数のBは、互いに同一であるかまたは異なり、

B同士が結合して飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成せず、

a、b、及びdは、それぞれ独立に、1～5の整数であり、

cは、0～5の整数であり、

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1～5の整数のとき、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、及び

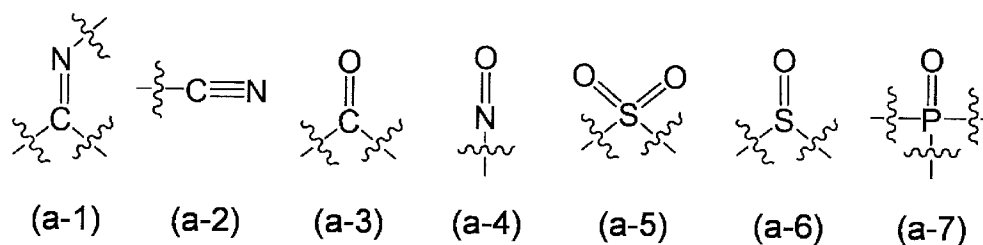
置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基

からなる群から選択される連結基であり、

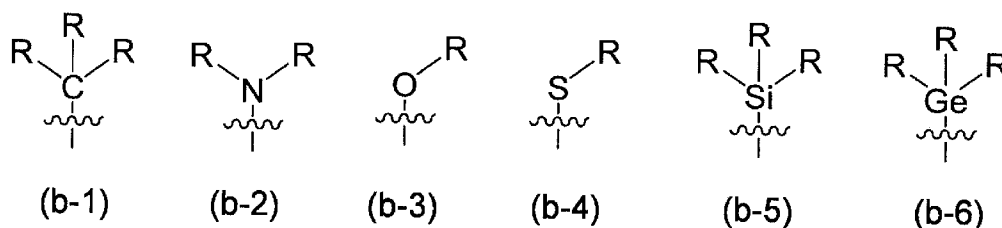
cが2～5の整数のとき、複数のLは、互いに同一であるかまたは異なり、

複数のL同士が結合して飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成しない。

[0165] [化59]



[0166] [化60]



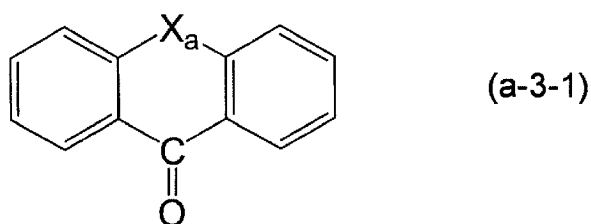
[0167] 前記一般式 (b-1) ~ (b-6) において、
 R は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、
 置換基としての R は、それぞれ独立に、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
 置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、及び
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基
 からなる群から選択される基であり、
 複数の R は、互いに同一であるかまたは異なり、
 R 同士が結合して飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成しない。

[0168] 前記一般式 (1) において、A は、アクセプター性 (電子受容性) 部位であり、B は、ドナー性 (電子供与性) 部位である。

[0169] 前記一般式 (a-1) ~ (a-7) からなる群から選ばれる部分構造を有する基について、例を次に示す。

例えば、前記一般式 (a-3) の部分構造を有する基として、下記一般式 (a-3-1) で表される基が挙げられる。

[0170] [化61]

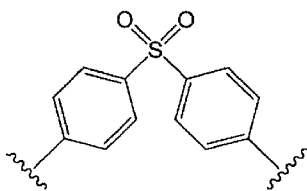


[0171] 前記一般式 (a-3-1) において、X_a は、単結合、酸素原子、硫黄原子、または前記一般式 (1) 中の L もしくは B と結合する炭素原子である。

[0172] 前記一般式 (a-5) の部分構造を有する基として、例えば、下記一般式 (a-5-1) で表される基が挙げられる。

[0173]

[化62]

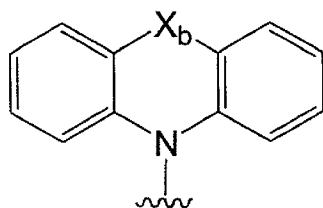


(a-5-1)

[0174] 前記一般式 (b-1) ~ (b-6) からなる群から選ばれる部分構造を有する基について、例を次に示す。

例えば、前記一般式 (b-2) の部分構造を有する基として、下記一般式 (b-2-1) で表される基が挙げられる。

[0175] [化63]

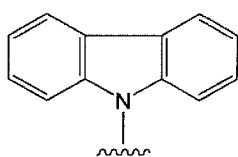


(b-2-1)

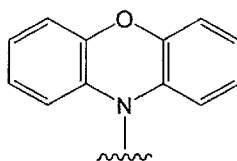
[0176] 前記一般式 (b-2-1) において、 X_b は、単結合、酸素原子、硫黄原子、 $CR_{b1}R_{b2}$ 、または前記一般式 (1) 中の L もしくは A と結合する炭素原子である。

[0177] 前記一般式 (b-2-1) は、 X_b が単結合のとき、下記一般式 (b-2-2) で表される基であり、 X_b が酸素原子のとき、下記一般式 (b-2-3) で表される基であり、 X_b が硫黄原子のとき、下記一般式 (b-2-4) で表される基であり、 X_b が $CR_{b1}R_{b2}$ のとき、下記一般式 (b-2-5) で表される基である。

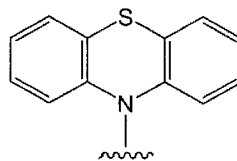
[0178] [化64]



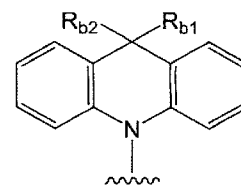
(b-2-2)



(b-2-3)



(b-2-4)



(b-2-5)

[0179] R_{b1} 及び R_{b2} 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_{b1} 及び置換基としての R_{b2} は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、及び置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基からなる群から選択されるいずれかの置換基である。

R_{b1} 及び R_{b2} は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、及び置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましく、置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることがより好ましい。

[0180] 本実施形態の有機エレクトロルミネッセンス素子において、A は、前記一般式 (a-1)、(a-2)、(a-3) 及び (a-5) からなる群から選ばれる部分構造を有する基であることが好ましい。

[0181] 本実施形態の有機エレクトロルミネッセンス素子において、B は、前記一般式 (b-2)、(b-3) 及び (b-4) からなる群から選ばれる部分構造を有する基であることが好ましい。

[0182] 前記一般式 (1) 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。

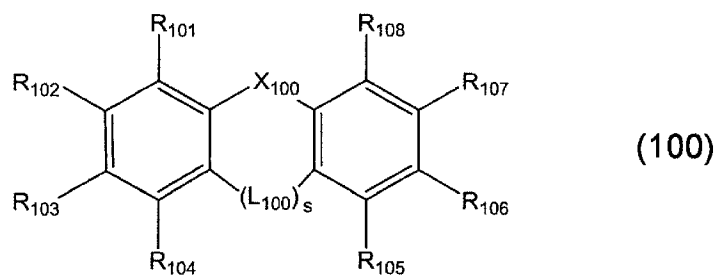
[0183]

[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 , $\begin{array}{c} B \diagup \diagdown \\ B \end{array} A$
(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 , $\begin{array}{c} B \diagup \diagdown \\ B \end{array} L-A$
(1G)	1	1	2	1	B—L—L—A
(1H)	1	1	1	2	$\begin{array}{c} B-L \diagup \diagdown \\ B-L \end{array} A$, B—L—B—L—A

[0184] 前記一般式(1)におけるBは、下記一般式(100)で表されることも好ましい。

[0185] [化65]



[0186] 前記一般式(100)において、

$R_{101} \sim R_{108}$ 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 $R_{101} \sim R_{108}$ 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、
 置換シリル基、
 置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、
 置換または無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルキルアミノ基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 60 のアリールアミノ基、
 置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、及び
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基

からなる群から選択され、

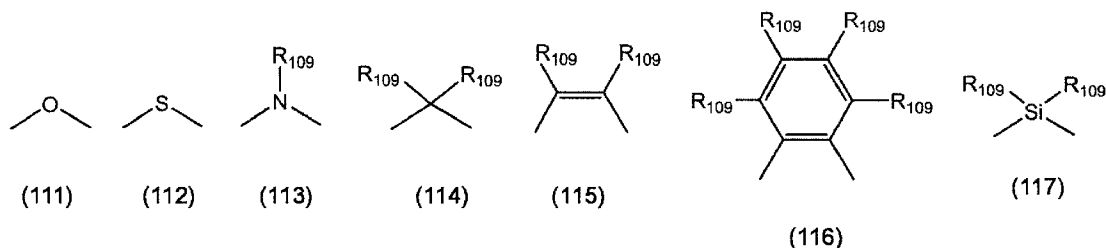
ただし、 R_{101} 及び R_{102} の組、 R_{102} 及び R_{103} の組、 R_{103} 及び R_{104} の組、 R_{105} 及び R_{106} の組、 R_{106} 及び R_{107} の組、並びに R_{107} と及び R_{108} の組からなる群から選択されるいずれかの組み合わせにおいて、置換基同士が飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成せず、

L_{100} は、下記一般式 (111) ～ (117) からなる群から選ばれる連結基であり、

s は、0 ～ 3 の整数であり、複数の L_{100} は、互いに同一であるかまたは異なり、

X_{100} は、下記一般式 (121) ～ (125) からなる群から選ばれる連結基である。

[0187] [化66]



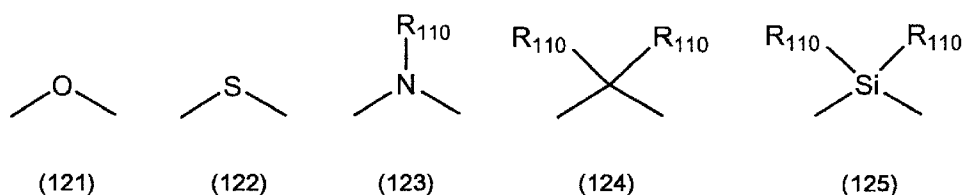
[0188] 前記一般式 (113) ～ (117) において、 R_{109} は、それぞれ独立に、前記一般式 (100) における $R_{101} \sim R_{108}$ と同義である。

ただし、前記一般式(100)において、 $R_{101} \sim R_{108}$ のうち一つまたは R_{109} のうち一つは、前記一般式(1)中のLまたはAに対して結合する単結合である。

R_{109} と前記一般式(100)中の R_{104} との組合せ、または R_{109} と前記一般式(100)中の R_{105} との組合せにおいて、置換基同士が飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成せず、

複数の R_{109} は、互いに同一であるかまたは異なる。

[0189] [化67]



[0190] 前記一般式(123)～(125)において、

R_{110} 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_{110} 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、及び

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基

からなる群から選択される基であり、

複数の R_{110} は、互いに同一であるかまたは異なる。

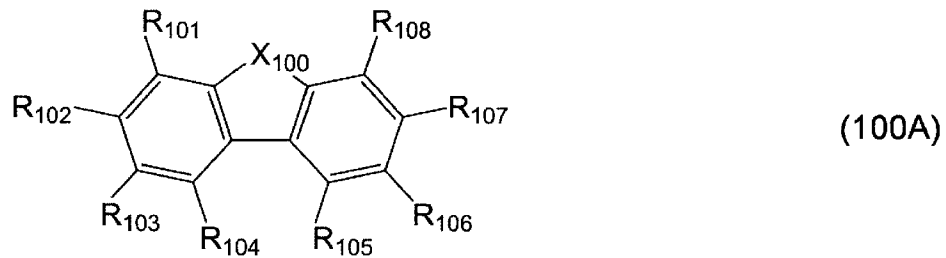
R_{110} と前記一般式(100)中の R_{101} との組み合わせ、または R_{110} と前記一般式(100)中の R_{108} との組み合わせにおいて、置換基同士が飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成しない。

[0191] 前記一般式(100)におけるsは、0または1であることが好ましい。

[0192] 前記一般式(100)におけるsが0である場合、前記一般式(1)におけるBは、下記一般式(100A)で表される。

[0193]

[化68]



[0194] 前記一般式(100A)における X_{100} 、 $R_{101} \sim R_{108}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_{100} 、 $R_{101} \sim R_{108}$ と同義である。

[0195] L_{100} は、前記一般式(111)～(114)のいずれかで表されることが好ましく、前記一般式(113)または(114)で表されることがより好ましい。

[0196] X_{100} は、前記一般式(121)～(124)のいずれかで表されることが好ましく、前記一般式(123)または(124)で表されることがより好ましい。

[0197] 本実施形態の有機エレクトロルミネッセンス素子において、第一の化合物は、下記一般式(11)で表される化合物であることも好ましい。

[0198] [化69]



[0199] 前記一般式(11)において、

Az は、

置換または無置換のピリジン環、

置換または無置換のピリミジン環、

置換または無置換のトリアジン環、及び

置換または無置換のピラジン環

からなる群から選択される環構造であり、

c は0～5の整数であり、

c が0のとき、 Cz と Az とが単結合で結合し、

c が 1 ～ 5 の整数のとき、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、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連結基であり、

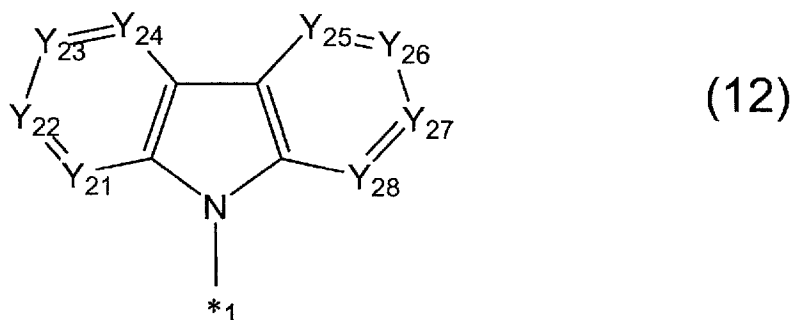
c が 2 ～ 5 の整数のとき、複数の L は、互いに同一であるかまたは異なり

、

複数の L 同士が結合して環を形成するかまたは環を形成せず、

C_z は、下記一般式 (12) で表される。

[0200] [化70]



[0201] 前記一般式 (12) において、

Y₂₁ 乃至 Y₂₈ は、それぞれ独立に、窒素原子または C R_y であり、

R_y 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_y は、それぞれ独立に、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数 3 ～ 30 のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数 7 ～ 30 のアラルキル基、

置換ホスホリル基、

置換シリル基、

シアノ基、

ニトロ基、及び

カルボキシ基

からなる群から選択される基であり、

複数の R_y は、互いに同一であるかまたは異なり、

Y_{21} 乃至 Y_{28} のうち、複数の CR_y であって、 R_y が置換基である場合、置換基としての複数の R_y 同士が結合して環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

* 1 は、L で表される連結基の構造中の炭素原子との結合部位、または A_z で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。

[0202] Y_{21} 乃至 X_{28} は、 CR_y であることも好ましい。

[0203] 前記一般式 (11) における c は、0 または 1 であることが好ましい。

[0204] 前記一般式 (11) で表される化合物は、下記一般式 (11A) で表される化合物であることも好ましい。

[0205] [化71]



[0206] 前記一般式 (11A) における、 A_z 、 C_z 、及び L は、前記一般式 (11) における A_z 、 C_z 、及び L と同義である。

[0207] 前記一般式 (11A) における L は、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基からなる群から選択される連結基であることが好ましい。

[0208] 前記一般式 (11A) で表される化合物は、下記一般式 (11B) で表される化合物であることも好ましい。

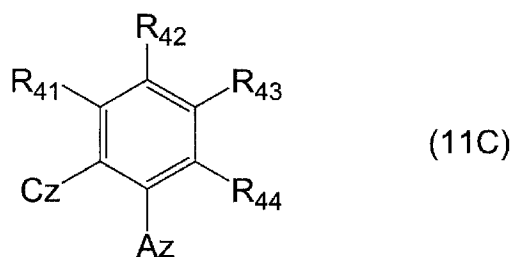
[0209] [化72]



[0210] 前記一般式 (11B) における、 A_z 、及び C_z は、前記一般式 (11) における A_z 、及び C_z と同義であり、 c_3 は、4 であり、 R_{10} は、水素原子または置換基であり、置換基としての R_{10} は、置換または無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、置換または無置換の環形成原子数 5～30 のヘテロアリール基、置換または無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換または無置換の炭素数 1～30 のフルオロアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数 3～30 のシクロアルキル基、置換または無置換の炭素数 7～30 のアラルキル基、置換ホスホリル基、置換シリル基、シアノ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択されるいずれかの置換基であり、複数の R_{10} は、同一であるかまたは異なる。

[0211] 前記一般式 (11A) で表される化合物は、下記一般式 (11C) で表される化合物であることも好ましい。

[0212] [化73]



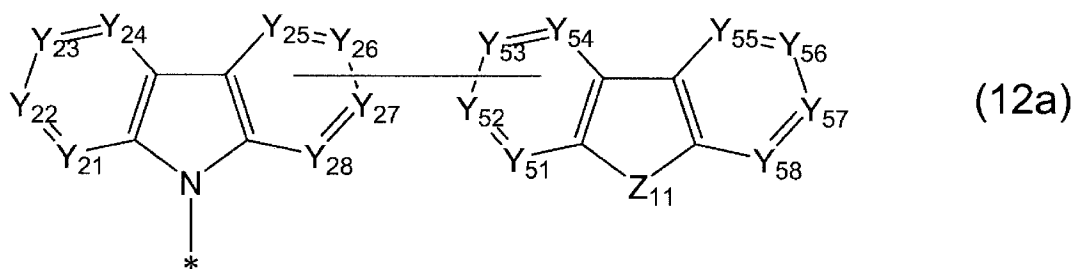
[0213] 前記一般式 (11C) において、
 A_z 、及び C_z は、前記一般式 (11) における A_z 、及び C_z と同義であり、
 R_{41} 乃至 R_{44} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、
置換基としての $R_{41} \sim R_{44}$ は、それぞれ独立に、
置換または無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、
置換または無置換の環形成原子数 5～30 のヘテロアリール基、
置換または無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、
置換または無置換の炭素数 1～30 のフルオロアルキル基、
置換または無置換の環形成炭素数 3～30 のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数 7 ～ 30 のアラルキル基、
 置換ホスホリル基、
 置換シリル基、
 シアノ基、
 ニトロ基、及び
 カルボキシ基

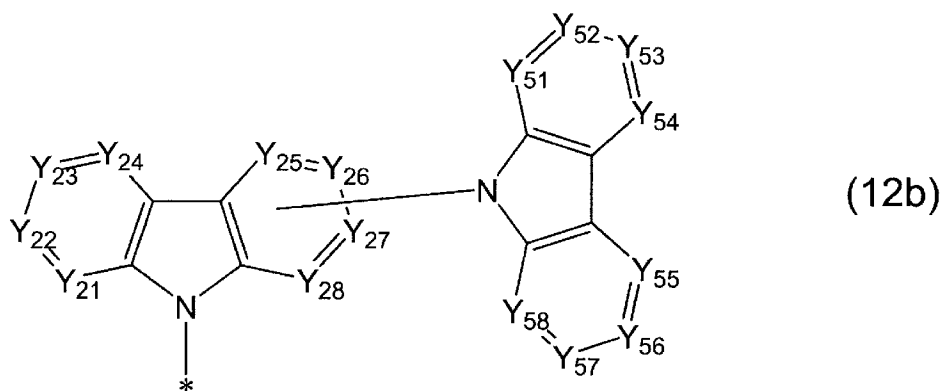
からなる群から選択されるいずれかの置換基である。

[0214] 前記 C z は、下記一般式 (12a)、一般式 (12b) または一般式 (12c) で表されることも好ましい。

[0215] [化74]

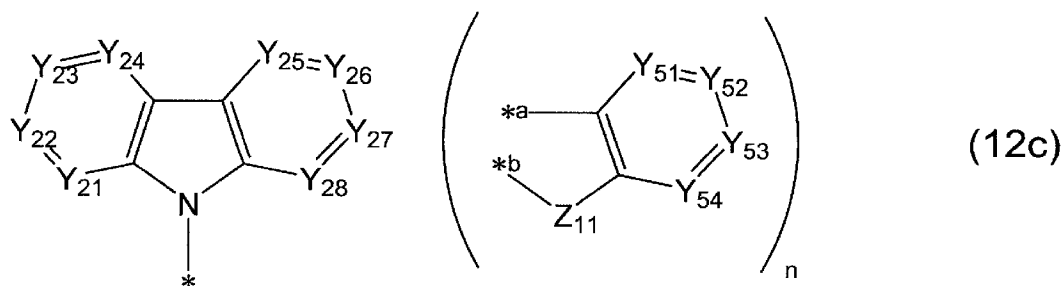


[0216] [化75]



[0217]

[化76]



[0218] 前記一般式 (1 2 a)、一般式 (1 2 b) 及び一般式 (1 2 c) において、 Y_{21} 乃至 Y_{28} 、及び Y_{51} 乃至 Y_{58} は、それぞれ独立に、窒素原子または C R_y であり、

ただし、前記一般式 (1 2 a) 中、 Y_{25} 乃至 Y_{28} のうち、少なくとも一つは、 Y_{51} 乃至 Y_{54} のいずれかと結合する炭素原子であり、 Y_{51} 乃至 Y_{54} のうち、少なくとも一つは、 Y_{25} 乃至 Y_{28} のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式 (1 2 b) 中、 Y_{25} 乃至 Y_{28} のうち、少なくとも一つは、 Y_{51} 乃至 Y_{58} を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子であり、

前記一般式 (1 2 c) 中、*a 及び *b は、それぞれ、 Y_{21} 乃至 Y_{28} のうちのいずれかとの結合部位を表し、 Y_{25} 乃至 Y_{28} のうち、少なくとも一つは、*a で表される結合部位であり、 Y_{25} 乃至 Y_{28} のうち、少なくとも一つは、*b で表される結合部位であり、

n は、1 以上 4 以下の整数であり、

R_y 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_y は、それぞれ独立に、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数 3 ～ 30 のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数 7 ～ 30 のアラルキル基、

置換ホスホリル基、

置換シリル基、

シアノ基、

ニトロ基、及び

カルボキシ基

からなる群から選択されるいずれかの置換基であり、

複数の R_y は、互いに同一であるかまたは異なり、

Y_{21} 乃至 Y_{28} のうち、複数が CR_y であって、 R_y が置換基である場合、 R_y 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

Y_{51} 乃至 Y_{58} のうち、複数が CR_y であって、 R_y が置換基である場合、 R_y 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

Z_{11} は、酸素原子、硫黄原子、 NR_{45} 、及び $CR_{46}R_{47}$ からなる群から選択されるいずれか一種であり、

R_{45} 乃至 R_{47} 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_{45} 乃至 R_{47} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数 3 ～ 30 のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数 7 ～ 30 のアラルキル基、

置換ホスホリル基、

置換シリル基、

シアノ基、

ニトロ基、及び

カルボキシ基

からなる群から選択されるいずれかの置換基であり、

複数の R_{45} は、互いに同一であるかまたは異なり、

複数の R_{46} は、互いに同一であるかまたは異なり、

複数の R_{47} は、互いに同一であるかまたは異なり、

R_{46} 及び R_{47} が互いに置換基である場合、当該置換基同士が結合して環を形成するかまたは環を形成せず、

* は、A z で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。

[0219] Z_{11} は、 NR_{45} であることが好ましい。

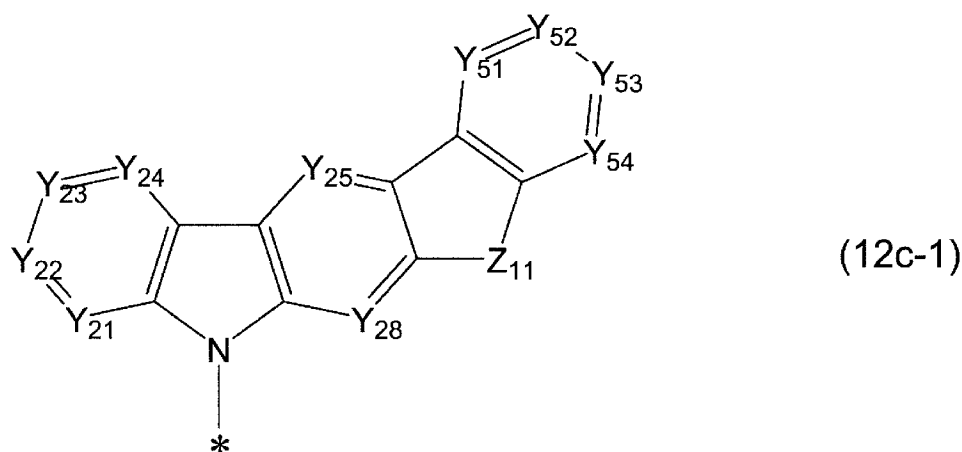
Z_{11} が NR_{45} である場合、 R_{45} は、置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基であることが好ましい。

[0220] Y_{51} 乃至 Y_{58} は、 CR_y であることが好ましく、ただし、この場合、 Y_{51} 乃至 Y_{58} のうち、少なくともいずれかが、前記一般式 (12) で表される環構造と結合する炭素原子である。

[0221] Cz は、前記一般式 (12c) で表され、 n は、1 であることも好ましい。

[0222] Cz は、下記一般式 (12c-1) で表されることも好ましい。下記一般式 (12c-1) で表される基は、前記一般式 (12c) 中の Y_{26} が * a で表される結合部位であり、 Y_{27} が * b で表される結合部位である場合を例示した基である。

[0223] [化77]



[0224] 前記一般式 (12c-1) において、

Y_{21} 乃至 Y_{25} 、 Y_{28} 、及び Y_{51} 乃至 Y_{54} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_y であり、

R_y 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_y は、それぞれ独立に、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数 3 ～ 30 のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数 7 ～ 30 のアラルキル基、

置換ホスホリル基、

置換シリル基、

シアノ基、

ニトロ基、及び

カルボキシ基

からなる群から選択されるいずれかの置換基であり、

複数の R_y は、互いに同一であるかまたは異なり、

Y_{21} 乃至 Y_{25} 、及び Y_{28} のうち、複数の CR_y であって、 R_y が置換基である場合、 R_y 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

Y_{51} 乃至 Y_{54} のうち、複数の CR_y であって、 R_y が置換基である場合、 R_y 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

Z_{11} は、酸素原子、硫黄原子、 NR_{45} 、及び $CR_{46}R_{47}$ からなる群から選択されるいずれか一種であり、

R_{45} 乃至 R_{47} 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_{45} 乃至 R_{47} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

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

からなる群から選択されるいずれかの置換基であり、
 複数の R_{45} は、互いに同一であるかまたは異なり、
 複数の R_{46} は、互いに同一であるかまたは異なり、
 複数の R_{47} は、互いに同一であるかまたは異なり、

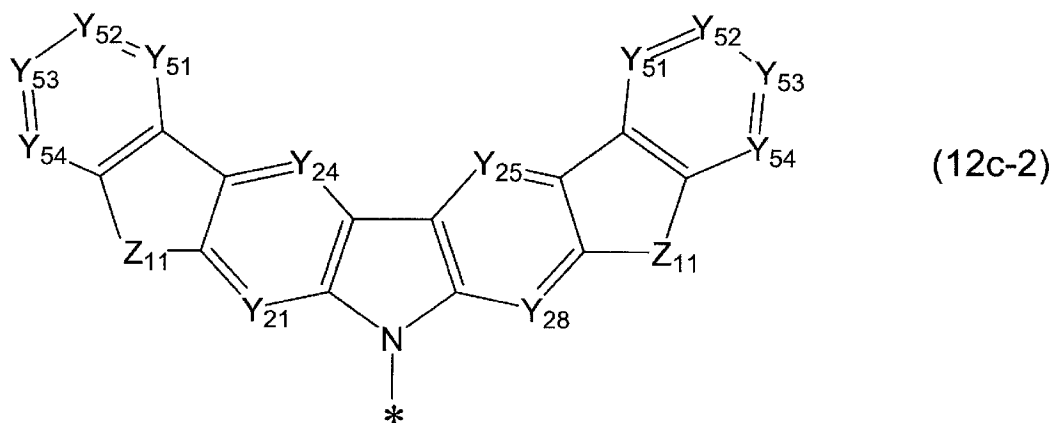
R_{46} 及び R_{47} が互いに置換基である場合、当該置換基同士が結合して環を形成するかまたは環を形成せず、

*は、A z で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。

- [0225] 前記一般式 (12c) における n が 2 である場合、C z は、例えば、下記一般式 (12c-2) で表される。n が 2 である場合、添え字 n が付された括弧内の構造が、2 つ、前記一般式 (12) で表される環構造に縮合する。下記一般式 (12c-2) で表される C z は、前記一般式 (12c) 中の Y_{22} が *b で表される結合部位であり、 Y_{23} が *a で表される結合部位であり、 Y_{26} が *a で表される結合部位であり、 Y_{27} が *b で表される結合部位である場合の例示である。

[0226]

[化78]



[0227] 前記一般式(12c-2)において、 Y_{21} 、 Y_{24} 、 Y_{25} 、 Y_{28} 、 Y_{51} 乃至 Y_{54} 、 Z_{11} 、及び*は、それぞれ、前記一般式(12c-1)中の Y_{21} 、 Y_{24} 、 Y_{25} 、 Y_{28} 、 Y_{51} 乃至 Y_{54} 、 Z_{11} 、及び*と同義である。複数の Y_{51} は、互いに同一であるかまたは異なり、複数の Y_{52} は、互いに同一であるかまたは異なり、複数の Y_{53} は、互いに同一であるかまたは異なり、複数の Y_{54} は、互いに同一であるかまたは異なる。複数の Z_{11} は、互いに同一であるかまたは異なる。

[0228] A_z は、置換または無置換のピリミジン環、及び置換または無置換のトリアジン環からなる群から選択される環構造であることが好ましい。

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

[0229] A_z としてのピリミジン環及びトリアジン環が、置換または無置換のアリール基を置換基として有する場合、当該アリール基の環形成炭素数は、6～20であることが好ましく、6～14であることがより好ましく、6～12であることがさらに好ましい。

[0230] A_z が、置換または無置換のアリール基を置換基として有する場合、当該置換基は、置換または無置換のフェニル基、置換または無置換のビフェニル基、置換または無置換のナフチル基、置換または無置換のフェナントリル基、置換または無置換のターフェニル基、及び置換または無置換のフルオレニル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましく、置換または無置換のフェニル基、置換または無置換のビフェニル基、及び置換または無置換のナフチル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることがより好ましい。

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

[0231] R_y 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_y は、置換または無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、及び置換または無置換の環形成原子数 5～30 のヘテロアリール基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましい。

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

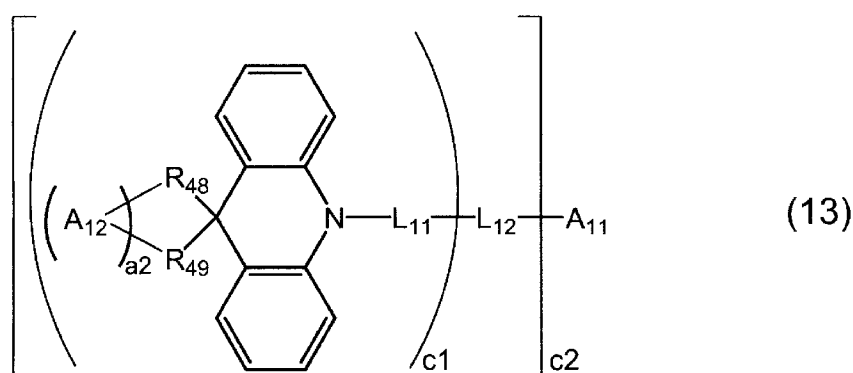
置換基としての R_y が置換または無置換の環形成原子数 5～30 のヘテロアリール基である場合、置換基としての R_y は、置換または無置換のカルバゾリル基、置換または無置換のジベンゾフラニル基、及び置換または無置換のジベンゾチオフェニル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であるこ

とが好ましい。

[0232] 置換基としての R_{45} 乃至 R_{47} は、それぞれ独立に、置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、及び置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましい。

[0233] 第一の化合物は、下記一般式 (13) で表される化合物であることも好ましい。

[0234] [化79]



[0235] (前記一般式 (13) において、

c_2 は、2 であり、

a_2 は、0 または 1 であり、複数の a_2 は、互いに同一であるかまたは異なり、

c_1 は、1 ～ 5 の整数であり、複数の c_1 は、互いに同一であるかまたは異なり、

a_2 が 0 のとき、 R_{48} 及び R_{49} は、それぞれ独立に、水素原子または 1 価の置換基であり、

置換基としての R_{48} 及び R_{49} 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 のアルコキシ基、

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環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、及び
置換シリル基

からなる群から選択される基であり、

$a \geq 1$ のとき、 R_{48} 及び R_{49} 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 のアルコキシ基、

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環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、及び
置換シリル基

からなる群から選択される連結基であり、

複数の R_{48} は、互いに同一であるかまたは異なり、

複数の R_{49} は、互いに同一であるかまたは異なり、

A_{11} 及び A_{12} は、それぞれ独立に、前記一般式 (a-1) ～ (a-7) から選ばれる部分構造を有する基であり、

複数の A_{12} は、互いに同一であるかまたは異なり、

L_{12} は、単結合または連結基であり、

連結基としての L_{12} は、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、及び

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基

からなる群から選択される連結基であり、

複数の L_{12} は、互いに同一であるかまたは異なり、

L_{11} は、単結合または連結基であり、

連結基としての L_{11} は、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、及び

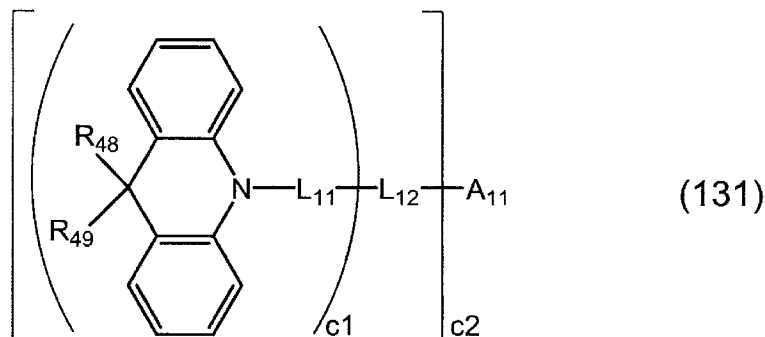
置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基

からなる群から選択される連結基であり、

複数の L_{11} は、互いに同一であるかまたは異なる。)

[0236] 前記一般式(13)における a_2 が0のとき、第一の化合物は、下記一般式(131)で表される。下記一般式(131)における c_1 、 c_2 、 A_{11} 、 L_{11} 、 L_{12} 、 R_{48} 及び R_{49} は、前述と同義である。

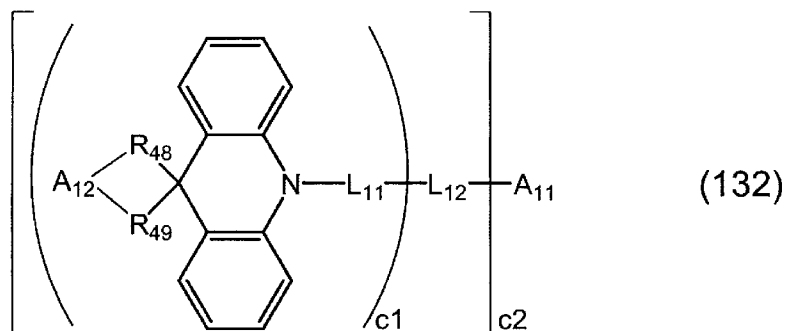
[0237] [化80]



[0238] 前記一般式(131)において、 R_{48} 及び R_{49} 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、及び置換シリル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましく、置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、及び置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることがより好ましい。

[0239] 前記一般式(13)における a_2 が1のとき、第一の化合物は、下記一般式(132)で表される。下記一般式(132)における c_1 、 c_2 、 A_{11} 、 A_{12} 、 L_{11} 、 L_{12} 、 R_{48} 及び R_{49} は、前述と同義である。

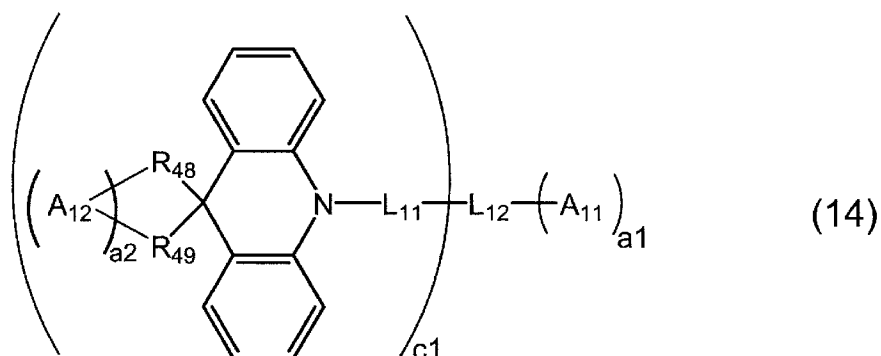
[0240] [化81]



[0241] 前記一般式（１３２）において、 R_{48} 及び R_{49} 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、及び置換シリル基からなる群から選択される連結基であることが好ましく、置換または無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、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連結基であることがより好ましい。

[0242] 第一の化合物は、例えば、下記一般式（１４）で表される化合物であることも好ましい

[0243] [化82]



[0244] 前記一般式（１４）において、

a_1 は０または１であり、

a_2 は０または１であり、

ただし、 $a_1 + a_2 \geq 1$ であり、

c_1 は、１～５の整数であり、

a_2 が０のとき、 R_{48} 及び R_{49} は、それぞれ独立に、水素原子または１価の置換基であり、

置換基としての R_{48} 及び R_{49} 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のアルコキシ基、

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環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、及び
置換シリル基

からなる群から選択される基であり、

a_2 が 1 のとき、 R_{48} 及び R_{49} 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 のアルコキシ基、
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環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、及び
置換シリル基

からなる群から選択される連結基であり、

複数の R_{48} は、互いに同一であるかまたは異なり、

複数の R_{49} は、互いに同一であるかまたは異なり、

A_{11} 及び A_{12} は、それぞれ独立に、前記一般式 (a-1) ～ (a-7) から選ばれる部分構造を有する基であり、

複数の A_{12} は互いに同一であるかまたは異なり、

a_1 が 0 のとき、 L_{12} は、水素原子、または 1 価の置換基であり、
1 価の置換基としての L_{12} は、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、及び
置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基
からなる群から選択される基であり、

a_1 が 1 のとき、 L_{12} は単結合、または連結基であり、
連結基としての L_{12} は、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、及び
置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基
からなる群から選択される連結基であり、

L_{11} は、単結合、または連結基であり、

連結基としての L_{11} は、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、及び

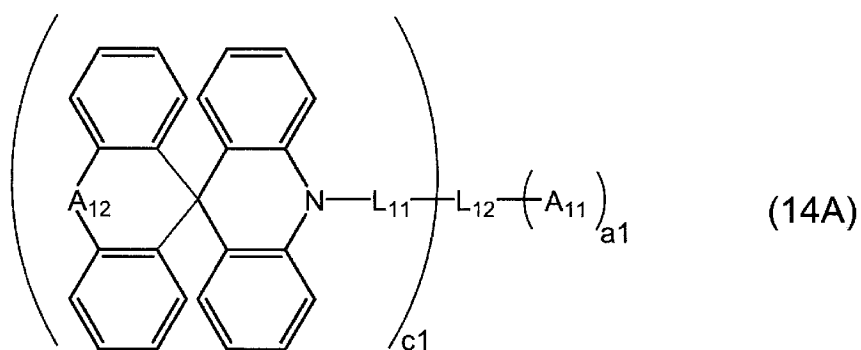
置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基

からなる群から選択される連結基であり、

複数の L_{11} は、互いに同一、または異なる。

[0245] 前記一般式(14)で表される化合物としては、例えば、下記一般式(14A)で表される化合物が挙げられる。

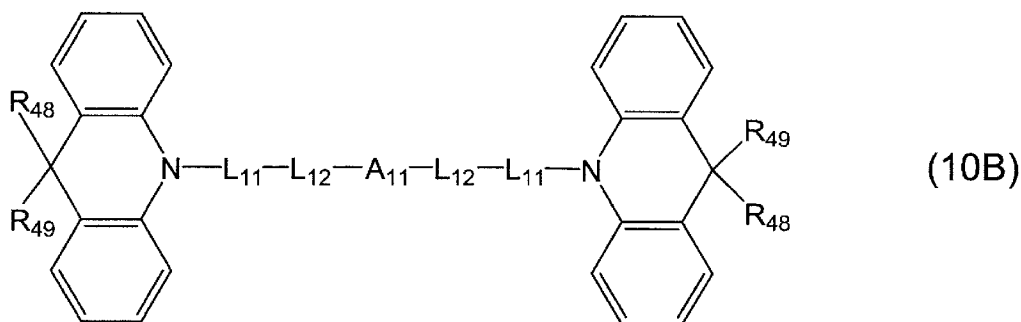
[0246] [化83]



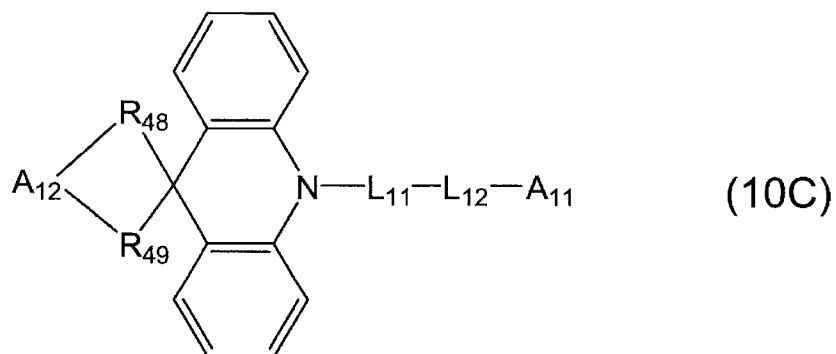
[0247] 前記一般式(14A)において、 $a1$ 、 $c1$ 、 A_{11} 、 A_{12} 、 L_{11} 、及び L_{12} は、それぞれ、前記一般式(14)における $a1$ 、 $c1$ 、 A_{11} 、 A_{12} 、 L_{11} 、及び L_{12} と同義である。

[0248] 前記一般式(13)、または前記一般式(14)で表される化合物としては、例えば、下記一般式(10B)～(10E)で表される化合物が挙げられる。

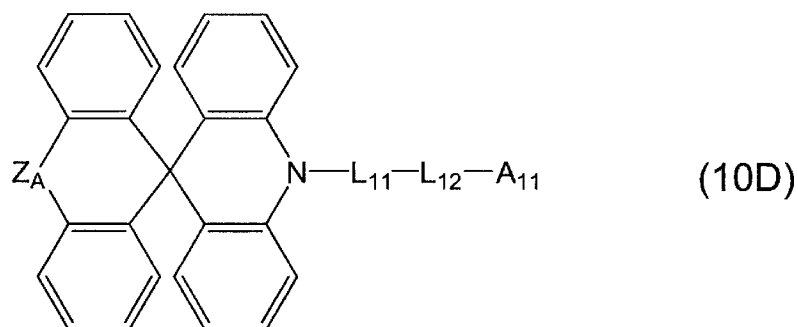
[0249] [化84]



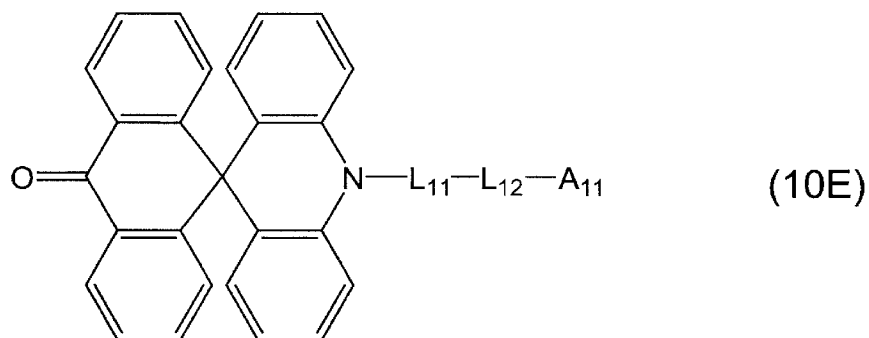
[0250] [化85]



[0251] [化86]



[0252] [化87]



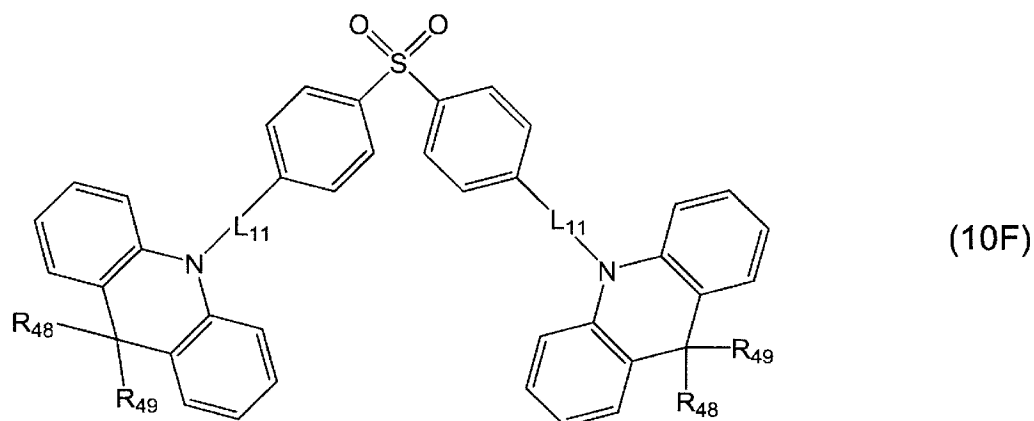
[0253] 前記一般式(10D)において、 Z_A は、 $=N-L_{11}-L_{12}-A_{11}$ 、酸素原子、硫黄原子、及びセレン原子からなる群から選択される。

前記一般式(10B)、(10C)、(10D)、及び(10E)において、 R_{48} 、 R_{49} 、 A_{11} 、 A_{12} 、 L_{11} 、及び L_{12} は、前記一般式(14)における R_{48} 、 R_{49} 、 A_{11} 、 A_{12} 、 L_{11} 、及び L_{12} と、それぞれ同義である。

[0254] 前記一般式(131)で表される化合物は、下記一般式(10F)で表さ

れる化合物であることも好ましい。

[0255] [化88]



[0256] 前記一般式(10F)において、 R_{48} 、 R_{49} 、及び L_{11} は、前記一般式(13)における R_{48} 、 R_{49} 、及び L_{11} と、それぞれ同義であり、複数の R_{48} は、互いに同一であるかまたは異なり、複数の R_{49} は、互いに同一であるかまたは異なり、複数の L_{11} は、互いに同一であるかまたは異なる。

[0257] ・遅延蛍光性

遅延蛍光(熱活性化遅延蛍光)については、「有機半導体のデバイス物性」(安達千波矢編、講談社発行)の261~268ページで解説されている。その文献の中で、蛍光発光材料の励起一重項状態と励起三重項状態のエネルギー差 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第一の化合物は、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。

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

[0258] 過渡PL測定から得た減衰曲線に基づいて遅延蛍光の挙動を解析することもできる。過渡PL測定とは、試料にパルスレーザーを照射して励起させ、

照射を止めた後のPL発光の減衰挙動（過渡特性）を測定する手法である。

TADF材料におけるPL発光は、最初のPL励起で生成する一重項励起子からの発光成分と、三重項励起子を経由して生成する一重項励起子からの発光成分に分類される。最初のPL励起で生成する一重項励起子の寿命は、ナノ秒オーダーであり、非常に短い。そのため、当該一重項励起子からの発光は、パルスレーザーを照射後、速やかに減衰する。

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

[0259] 図2には、過渡PLを測定するための例示的装置の概略図が示されている。

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

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

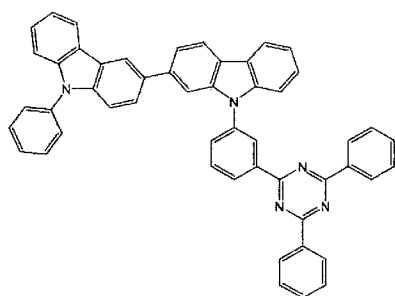
試料室102に収容された薄膜試料に対し、パルスレーザー部101からパルスレーザーを照射して、ドーピング材料を励起させる。励起光の照射方向に対して90度の方向へ発光を取り出し、取り出した光を分光器103で分光し、ストリークカメラ104内で2次元像を結像する。その結果、縦軸が時間に対応し、横軸が波長に対応し、輝点が発光強度に対応する2次元画像を得ることができる。この2次元画像を所定の時間軸で切り出すと、縦軸

が発光強度であり、横軸が波長である発光スペクトルを得ることができる。

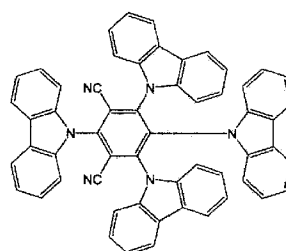
また、当該２次元画像を波長軸で切り出すと、縦軸が発光強度の対数であり、横軸が時間である減衰曲線（過渡ＰＬ）を得ることができる。

[0260] 例えば、マトリックス材料として、下記参考化合物Ｈ１を用い、ドーピング材料として下記参考化合物Ｄ１を用いて上述のようにして薄膜試料Ａを作製し、過渡ＰＬ測定を行った。

[0261] [化89]



(参考化合物 H1)

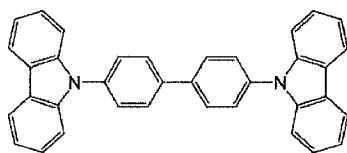


(参考化合物 D1)

[0262] ここでは、前述の薄膜試料Ａ、及び薄膜試料Ｂを用いて減衰曲線を解析した。薄膜試料Ｂは、マトリックス材料として下記参考化合物Ｈ２を用い、ドーピング材料として前記参考化合物Ｄ１を用いて、上述のようにして薄膜試料を作製した。

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

[0263] [化90]



(参考化合物 H2)

[0264] 上記したように過渡ＰＬ測定によって、縦軸を発光強度とし、横軸を時間とする発光減衰曲線を得ることができる。この発光減衰曲線に基づいて、光励起により生成した一重項励起状態から発光する蛍光と、三重項励起状態を

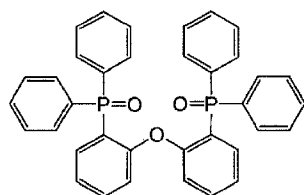
經由し、逆エネルギー移動により生成する一重項励起状態から発光する遅延蛍光との、蛍光強度比を見積もることができる。遅延蛍光性の材料では、素早く減衰する蛍光の強度に対し、緩やかに減衰する遅延蛍光の強度の割合が、ある程度大きい。

本実施形態における遅延蛍光発光量は、図2の装置を用いて求めることができる。前記第一の化合物は、当該第一の化合物が吸収する波長のパルス光（パルスレーザーから照射される光）で励起された後、当該励起状態から即座に観察されるP r o m p t 発光（即時発光）と、当該励起後、即座には観察されず、その後観察されるD e l a y 発光（遅延発光）とが存在する。本実施形態においては、D e l a y 発光（遅延発光）の量がP r o m p t 発光（即時発光）の量に対して5%以上であることが好ましい。具体的には、P r o m p t 発光（即時発光）の量を X_P とし、D e l a y 発光（遅延発光）の量を X_D としたときに、 X_D/X_P の値が0.05以上であることが好ましい。

P r o m p t 発光とD e l a y 発光の量は、“Nature 492, 234–238, 2012”に記載された方法と同様の方法により求めることができる。なお、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、前記の文献に記載の装置に限定されない。

また、遅延蛍光性の測定に用いられる試料は、例えば、第一の化合物と下記化合物TH-2とを、第一の化合物の割合が12質量%となるように石英基板上に共蒸着し、膜厚100nmの薄膜を形成した試料を使用することができる。

[0265] [化91]



TH-2

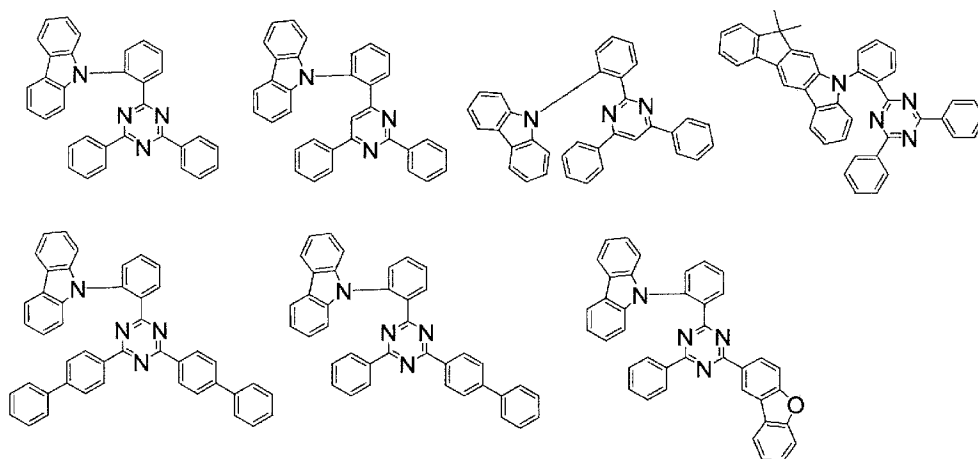
[0266] ・第一の化合物の製造方法

第一の化合物は、例えば、Chemical Communicatio

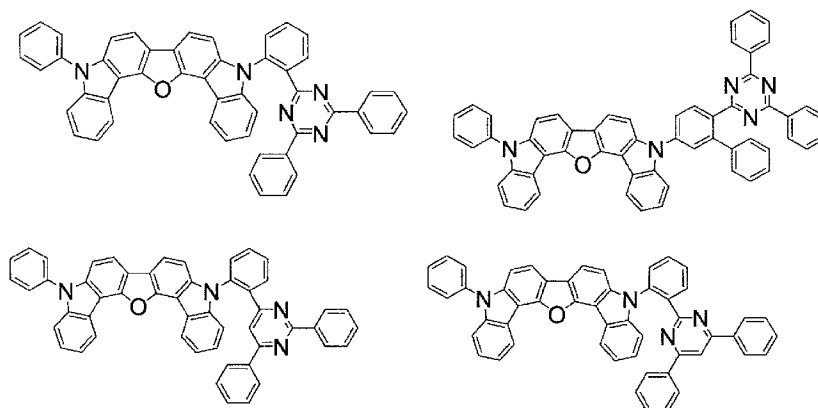
ns, p. 10385–10387 (2013) 及び NATURE Photonics, p. 326–332 (2014) に記載された方法により製造できる。また、例えば、国際公開第2013/180241号、国際公開第2014/092083号、及び国際公開第2014/104346号等に記載された方法により製造できる。また、例えば、後述する実施例で説明する反応に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応や原料を用いることで、第一の化合物を製造できる。

[0267] 本実施形態に係る第一の化合物の具体例を以下に示す。本発明における第一の化合物は、これらの具体例に限定されない。

[0268] [化92]

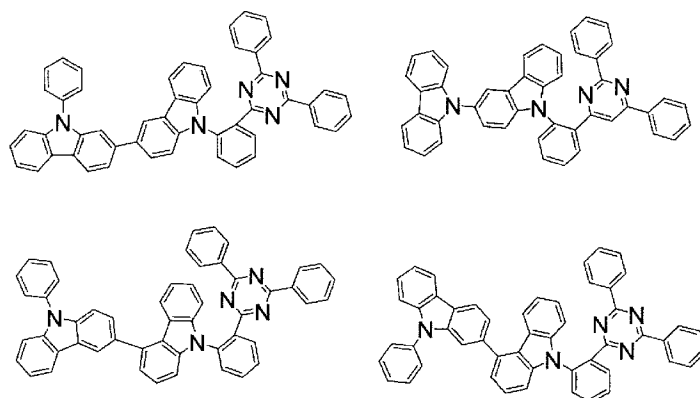


[0269] [化93]

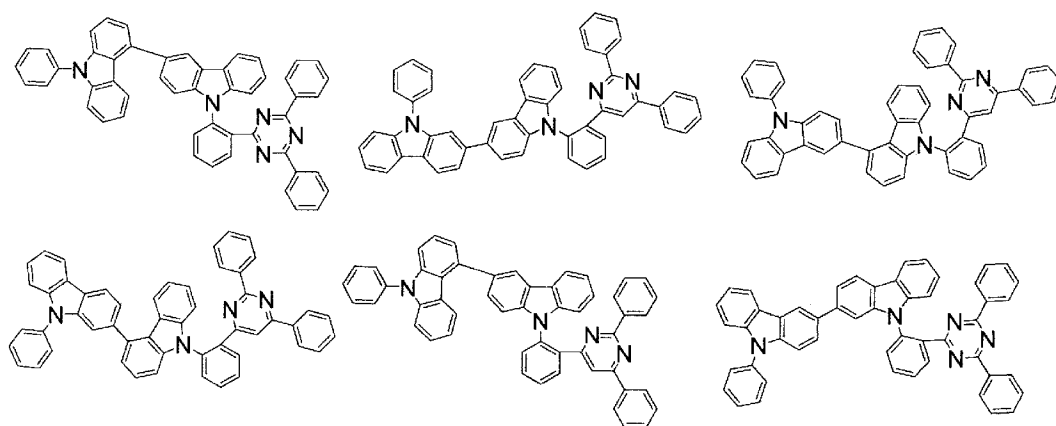


[0270]

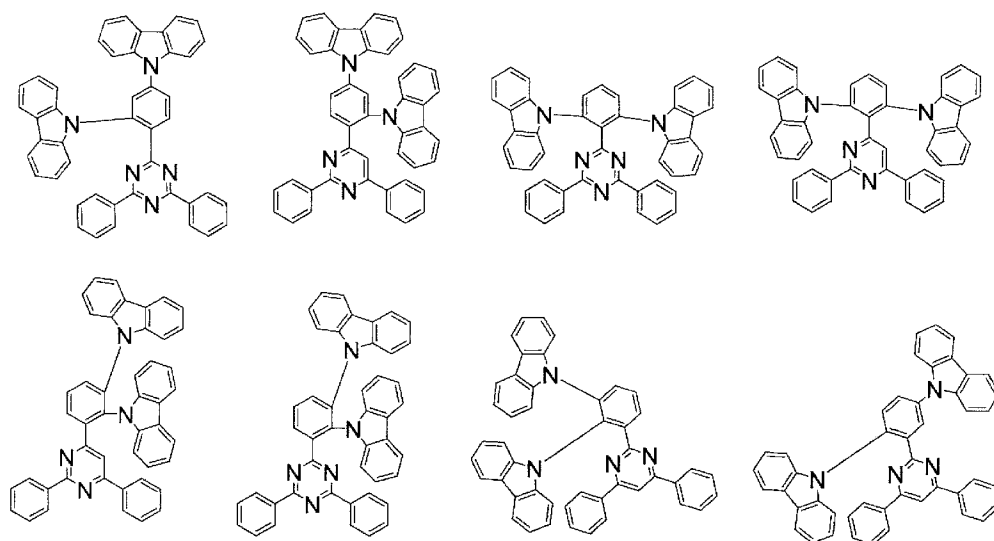
[化94]



[0271] [化95]

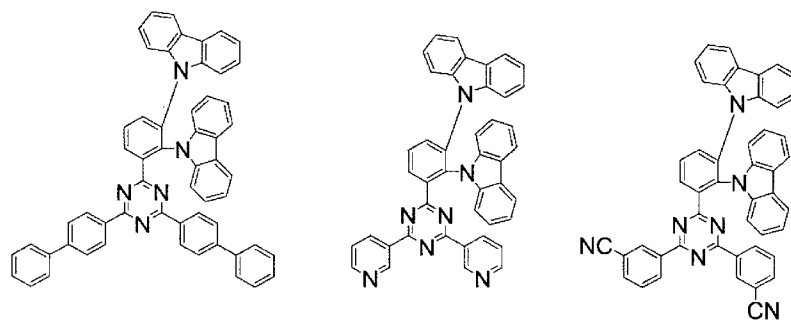


[0272] [化96]

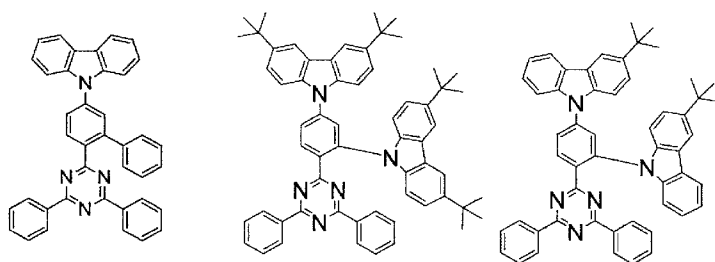


[0273]

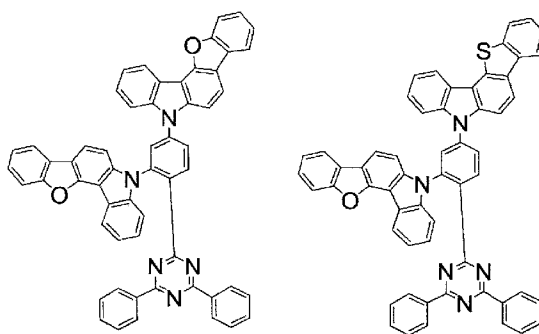
[化97]



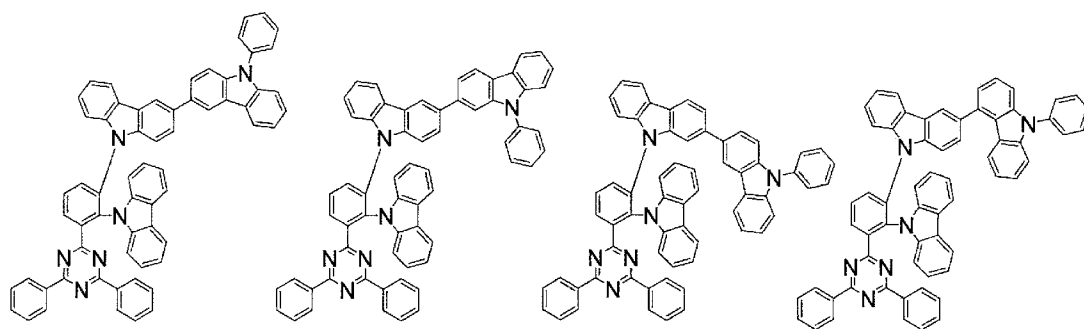
[0274] [化98]



[0275] [化99]

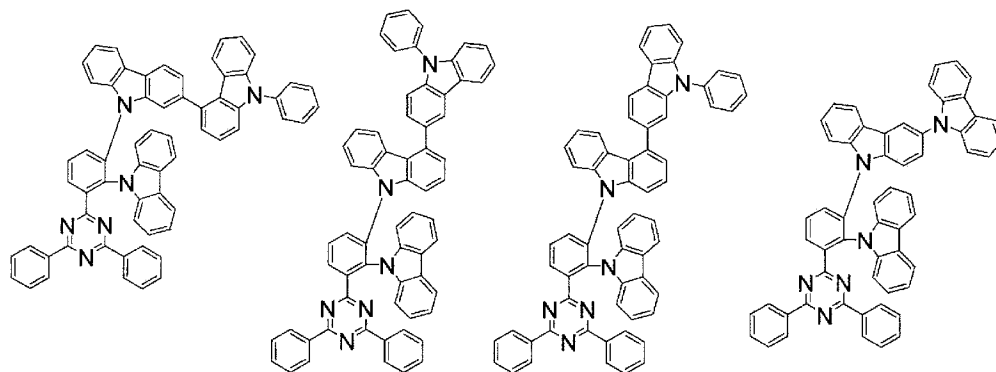


[0276] [化100]

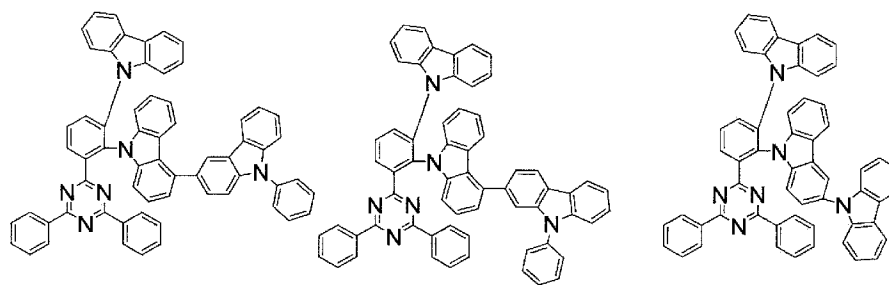


[0277]

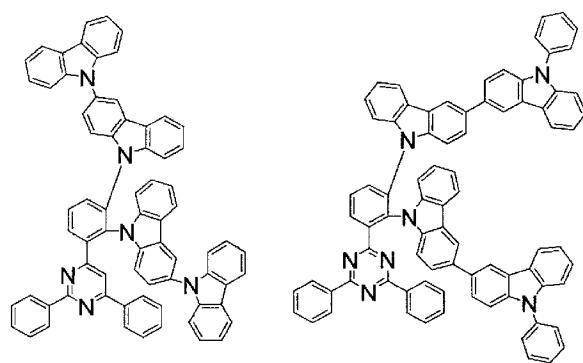
[化101]



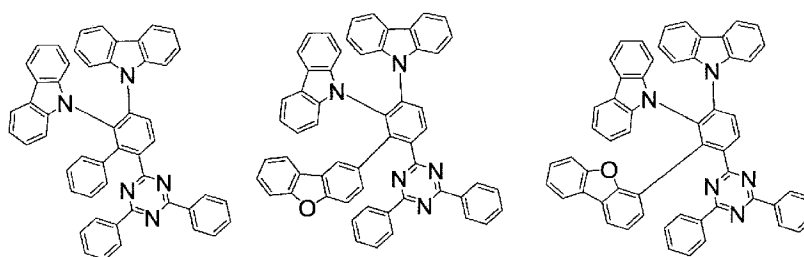
[0278] [化102]



[0279] [化103]

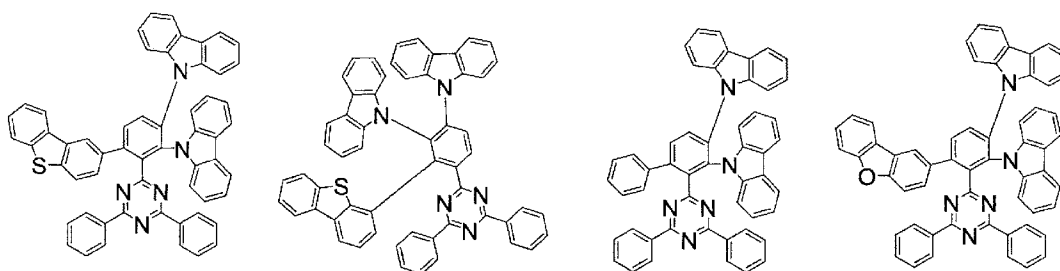


[0280] [化104]

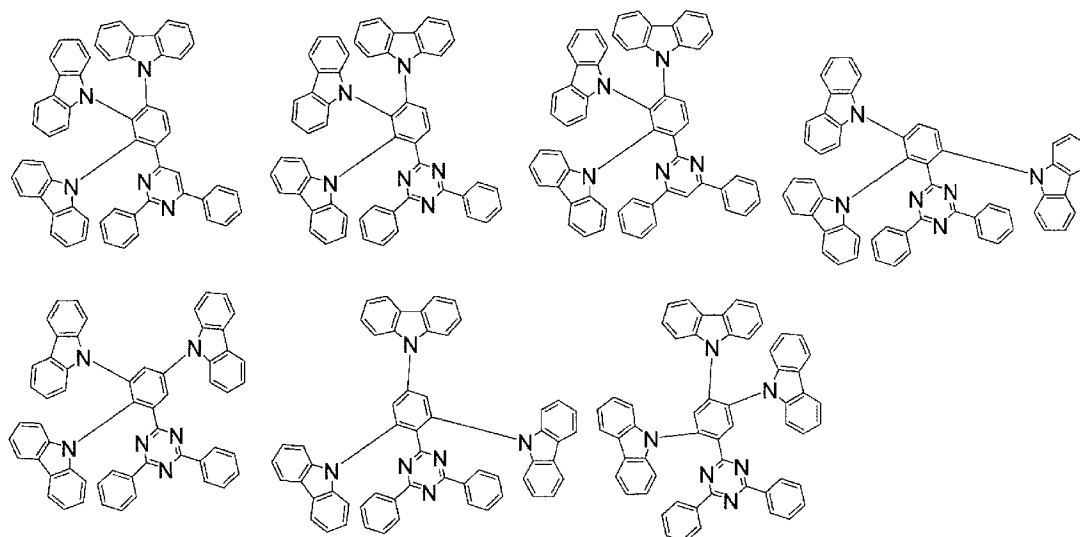


[0281]

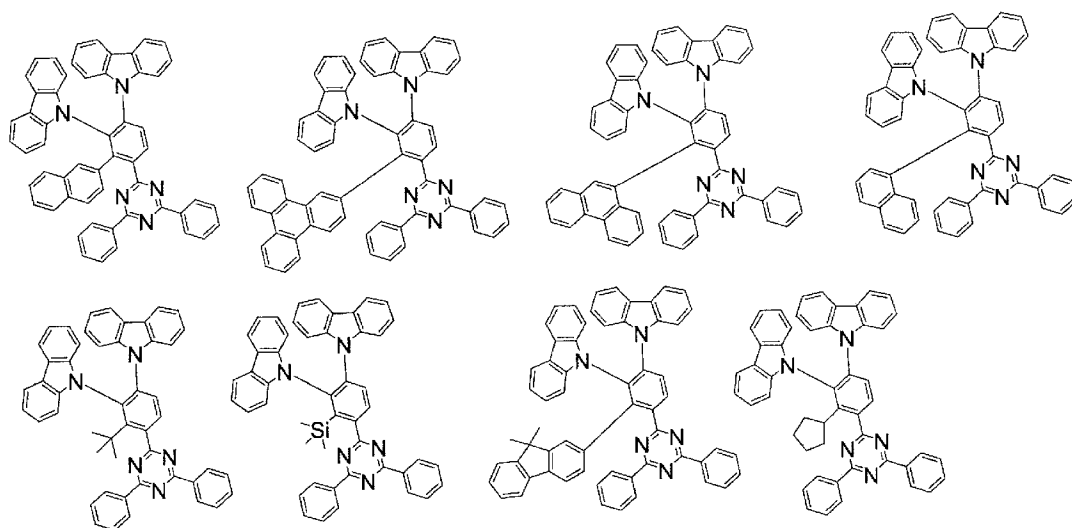
[化105]



[0282] [化106]

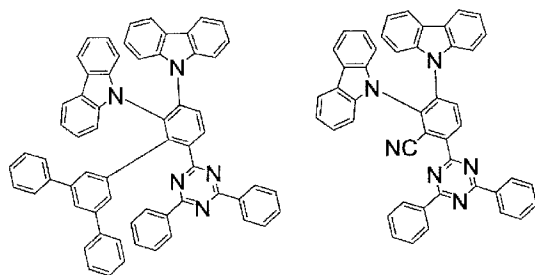


[0283] [化107]

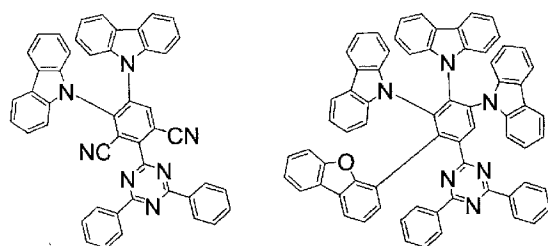


[0284]

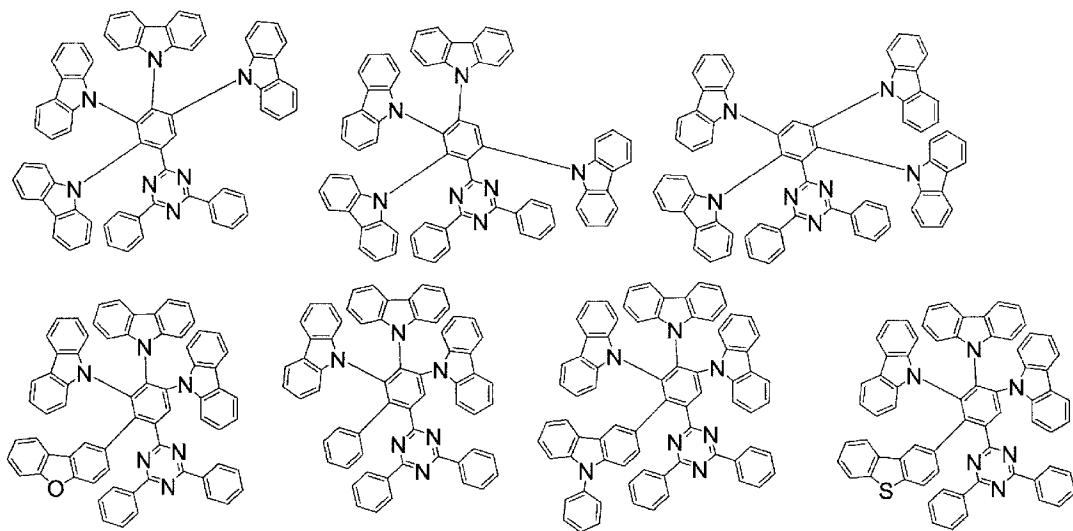
[化108]



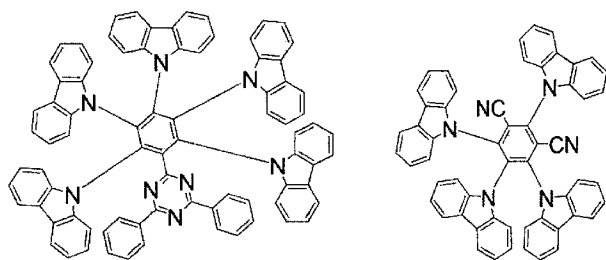
[0285] [化109]



[0286] [化110]

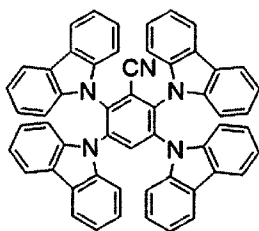


[0287] [化111]

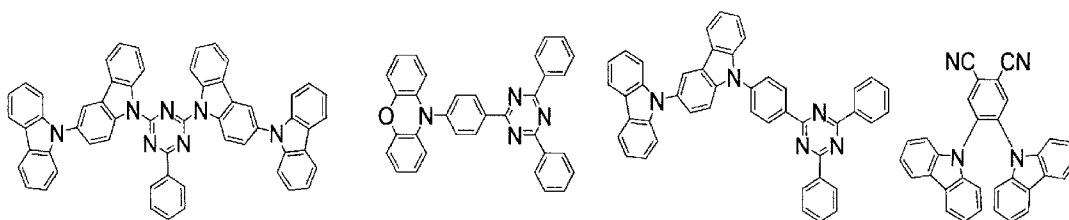


[0288]

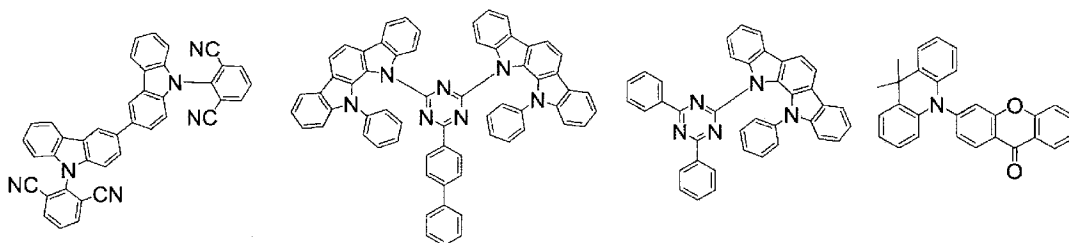
[化112]



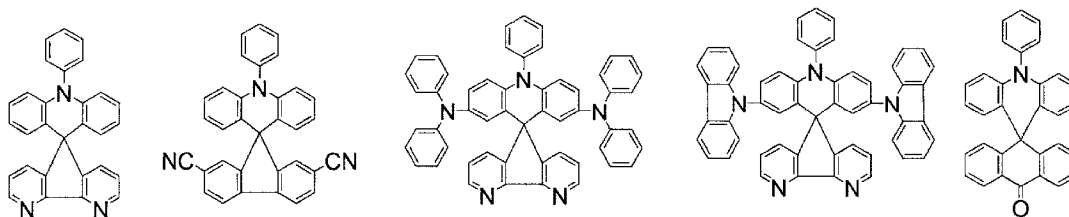
[0289] [化113]



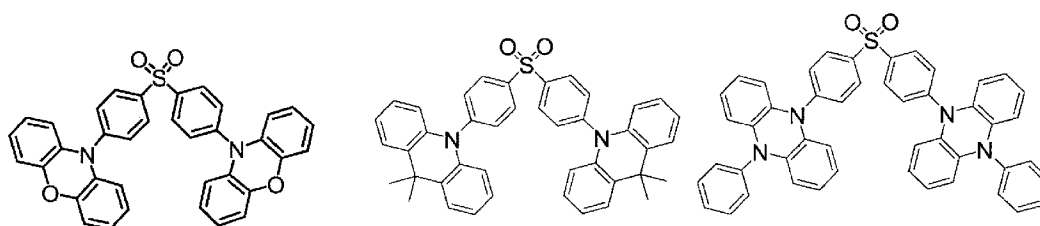
[0290] [化114]



[0291] [化115]

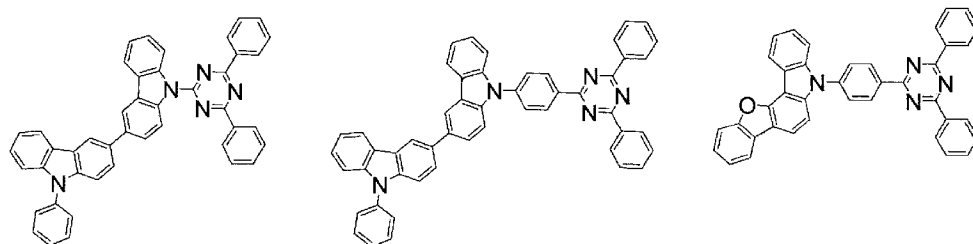


[0292] [化116]

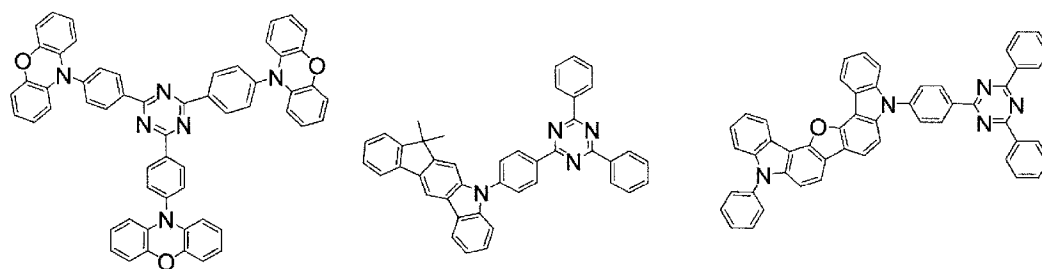


[0293]

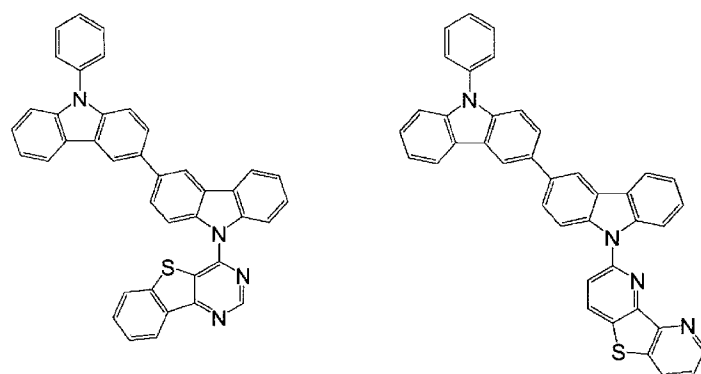
[化117]



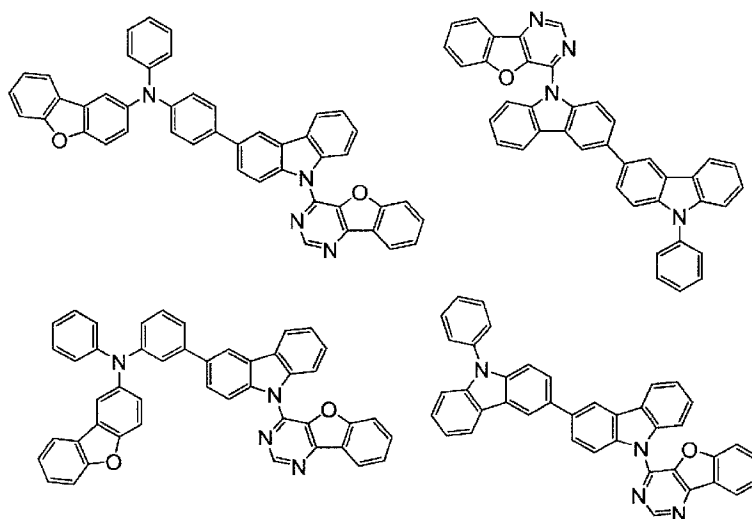
[0294] [化118]



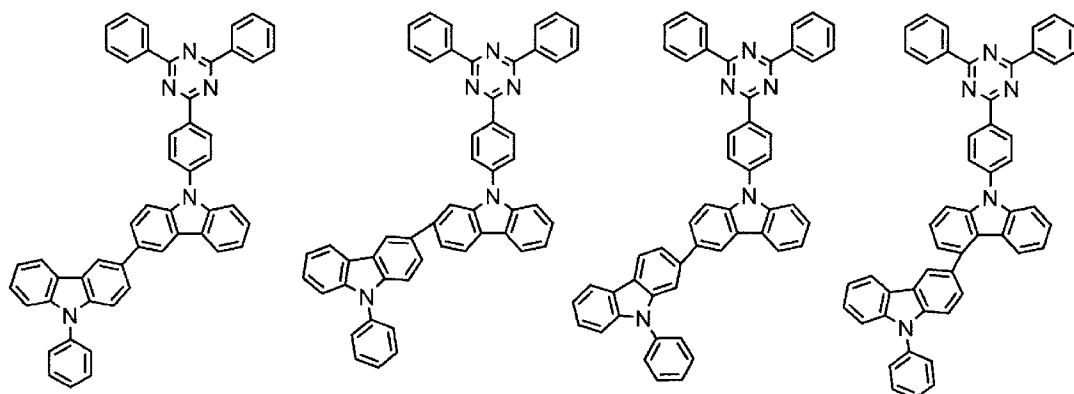
[0295] [化119]



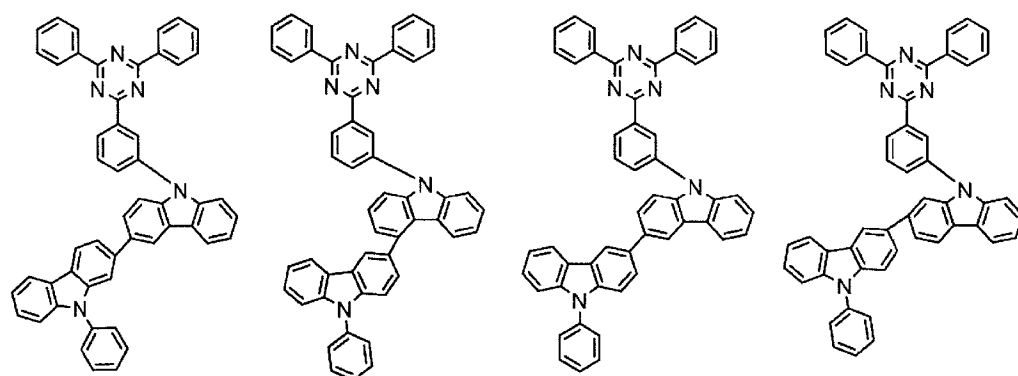
[0296] [化120]



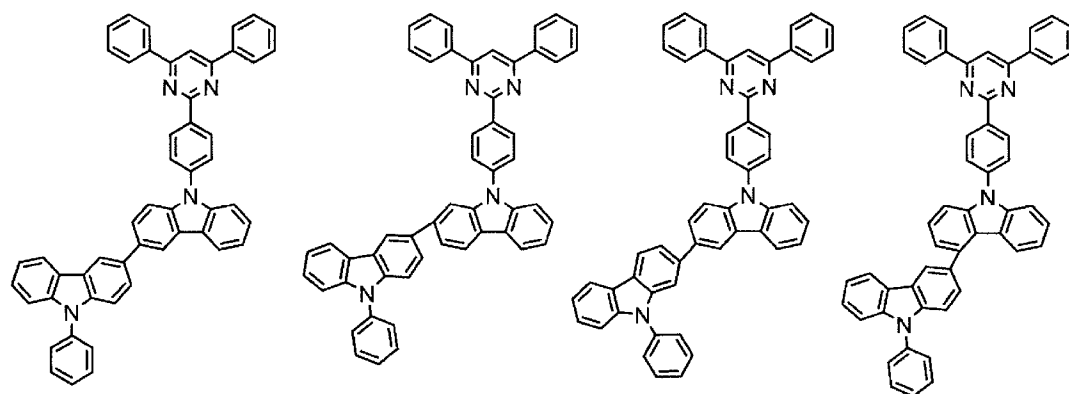
[0297] [化121]



[0298] [化122]

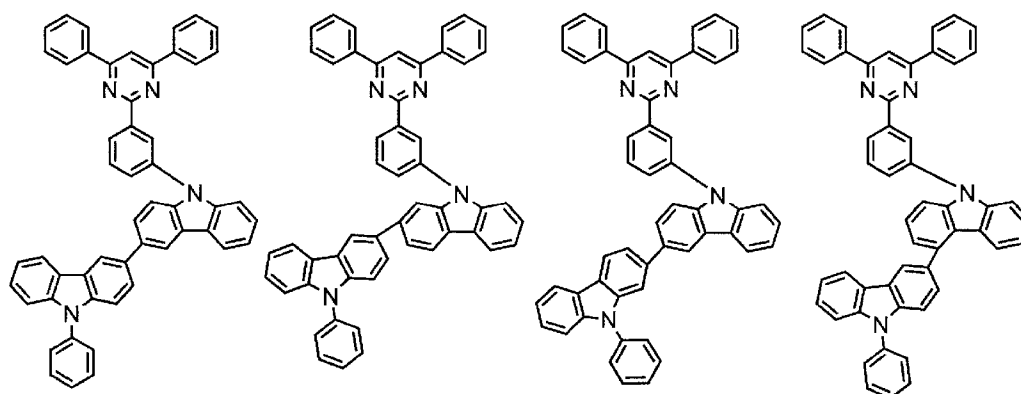


[0299] [化123]

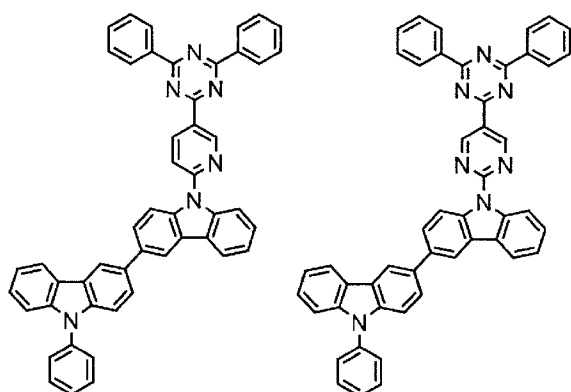


[0300]

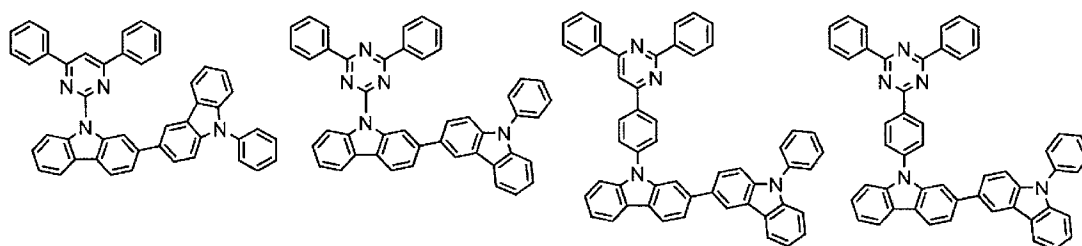
[化124]



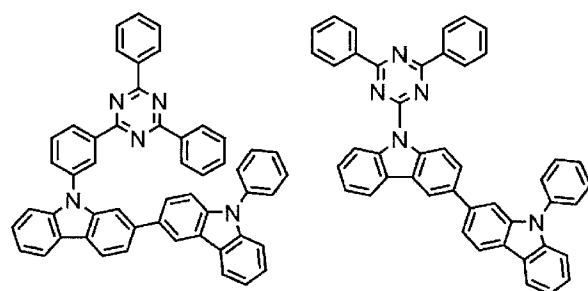
[0301] [化125]



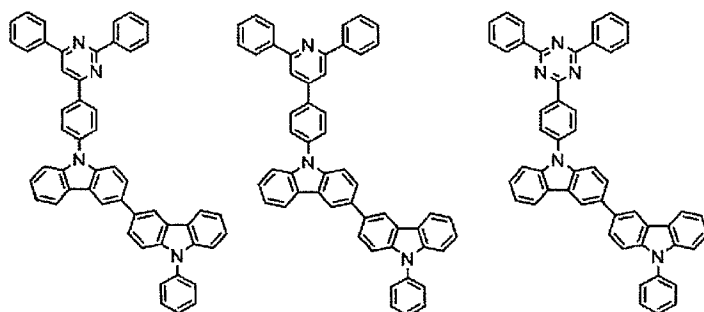
[0302] [化126]



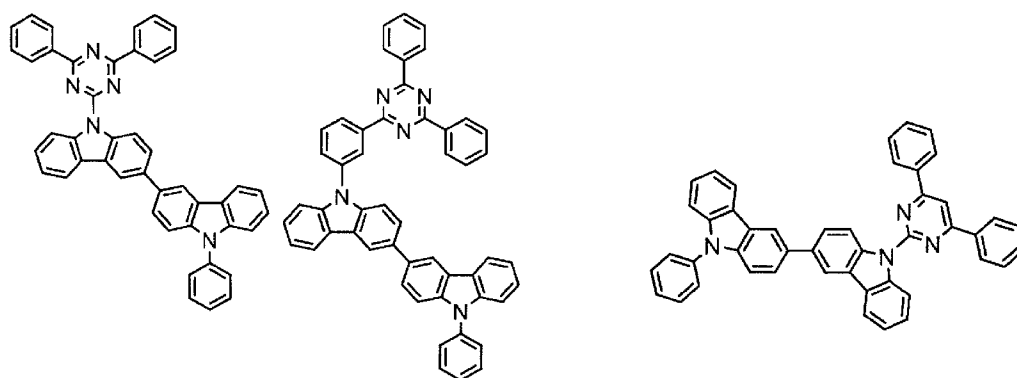
[0303] [化127]



[0304] [化128]



[0305] [化129]



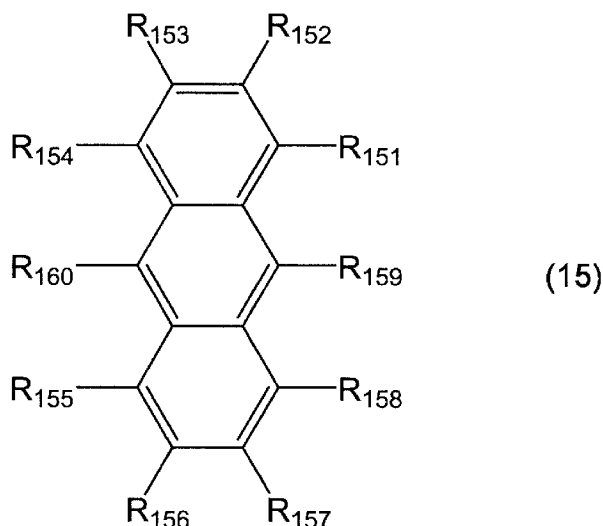
[0306] 本実施形態に係る有機EL素子において、発光層は、第一の化合物として下記一般式（15）で表される化合物と、前記第二の化合物とを含む態様であることも好ましい。

この態様においても、有機EL素子の発光効率を向上させることができる

。

[0307]

[化130]



[0308] 一般式(15)において、 $R_{151} \sim R_{160}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数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1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{121})(R_{122})(R_{123})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{124}$ 、 $-\text{COOR}_{125}$ 、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、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基、又は $-\text{L}_{101}-\text{Ar}_{101}$ で表される基である。

一般式(15)において、 $R_{121} \sim R_{125}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

ただし、 $R_{151} \sim R_{160}$ の少なくとも1つは、 $-\text{L}_{101}-\text{Ar}_{101}$ で表される基である。 L_{101} は、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30

のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、 $A_{r_{101}}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

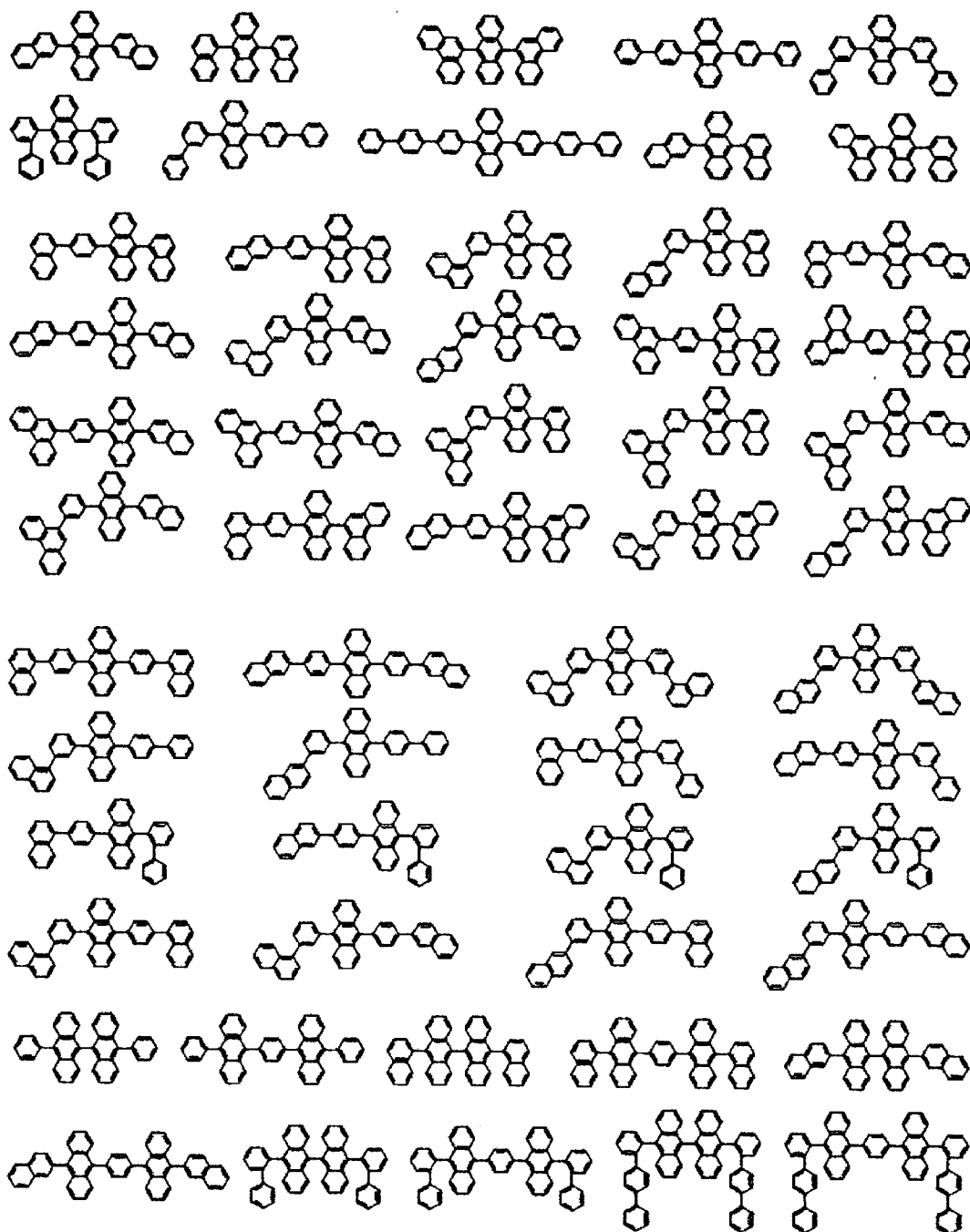
L_{101} が2以上存在する場合、2以上の L_{101} は同一でもよく、異なってもよい。 $A_{r_{101}}$ が2以上存在する場合、2以上の $A_{r_{101}}$ は同一でもよく、異なってもよい。

一般式(15)において、 $R_{151} \sim R_{160}$ のうち、 R_{159} 及び R_{160} は、それぞれ独立に、 $-L_{101}-A_{r_{101}}$ で表される基であることが好ましく、 R_{159} 及び R_{160} の少なくとも1つは、 $-L_{101}-A_{r_{101}}$ で表される基であることが好ましい。

[0309] 一般式(15)で表される化合物の具体例としては、例えば、以下に示す化合物が挙げられる。

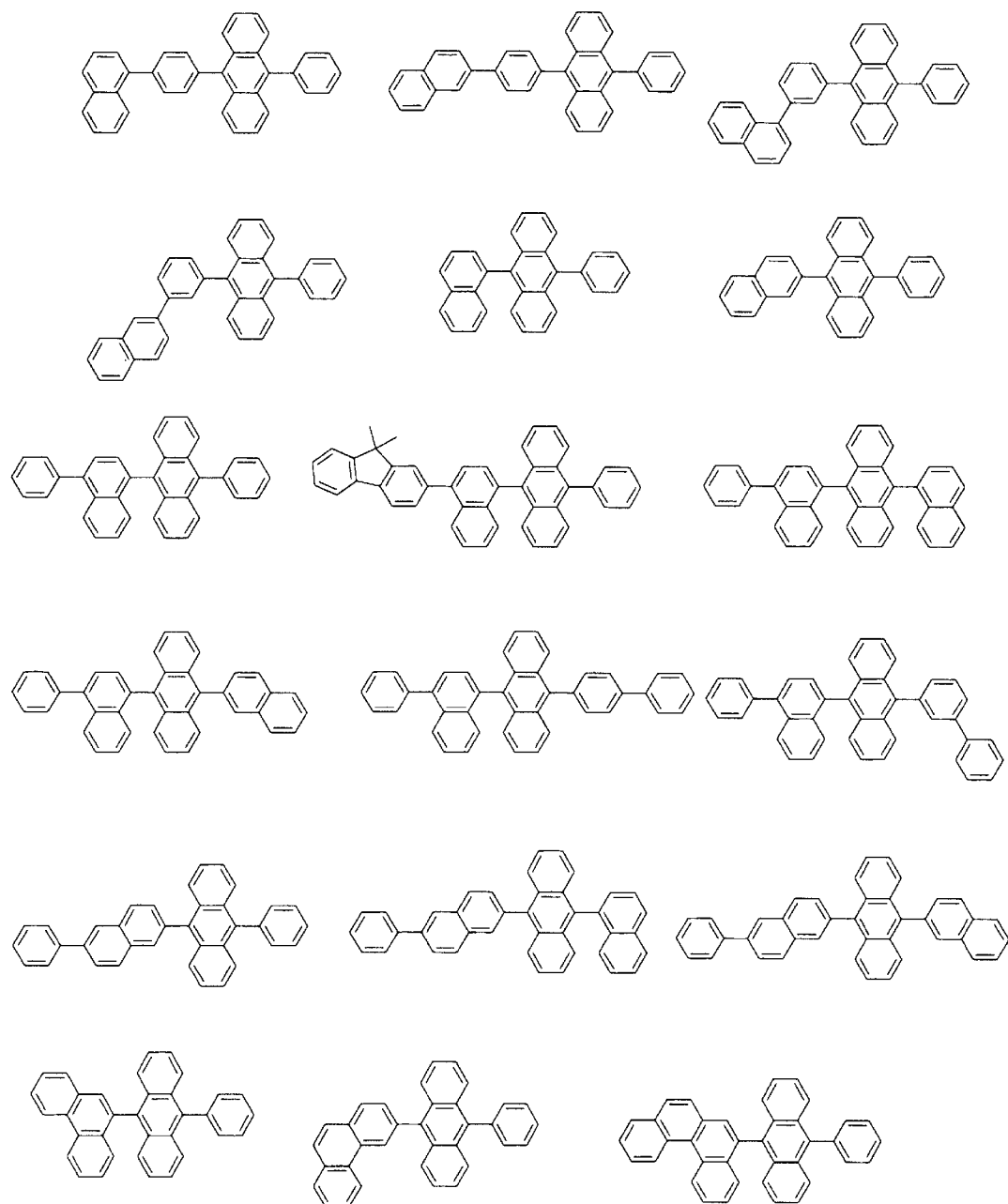
[0310]

[化131]



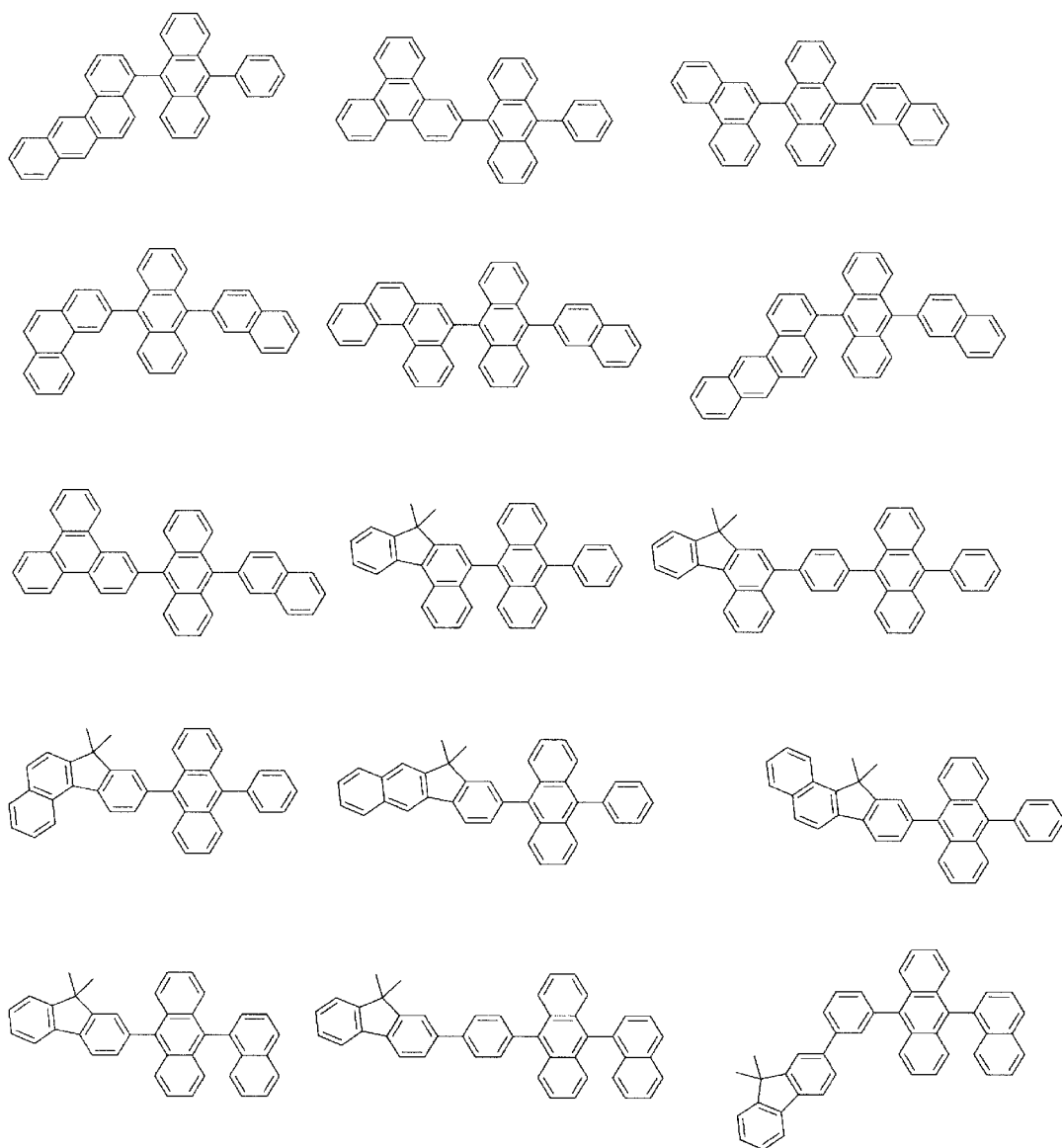
[0311]

[化132]



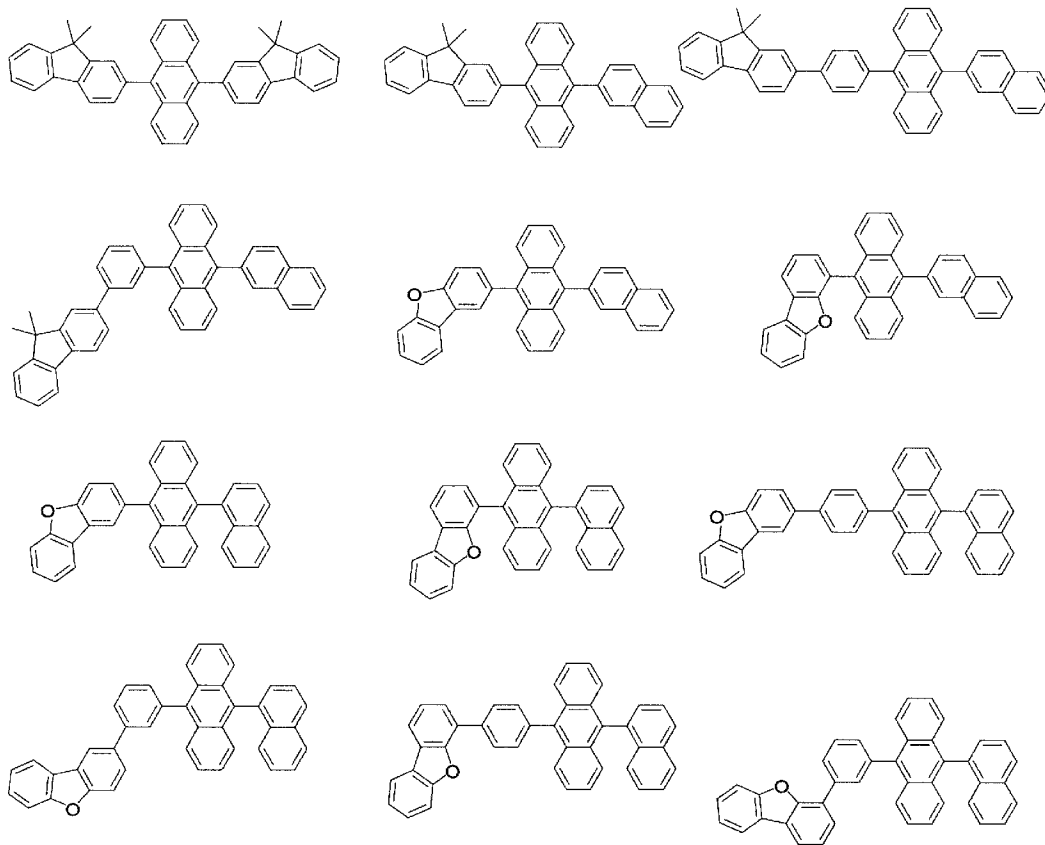
[0312]

[化133]



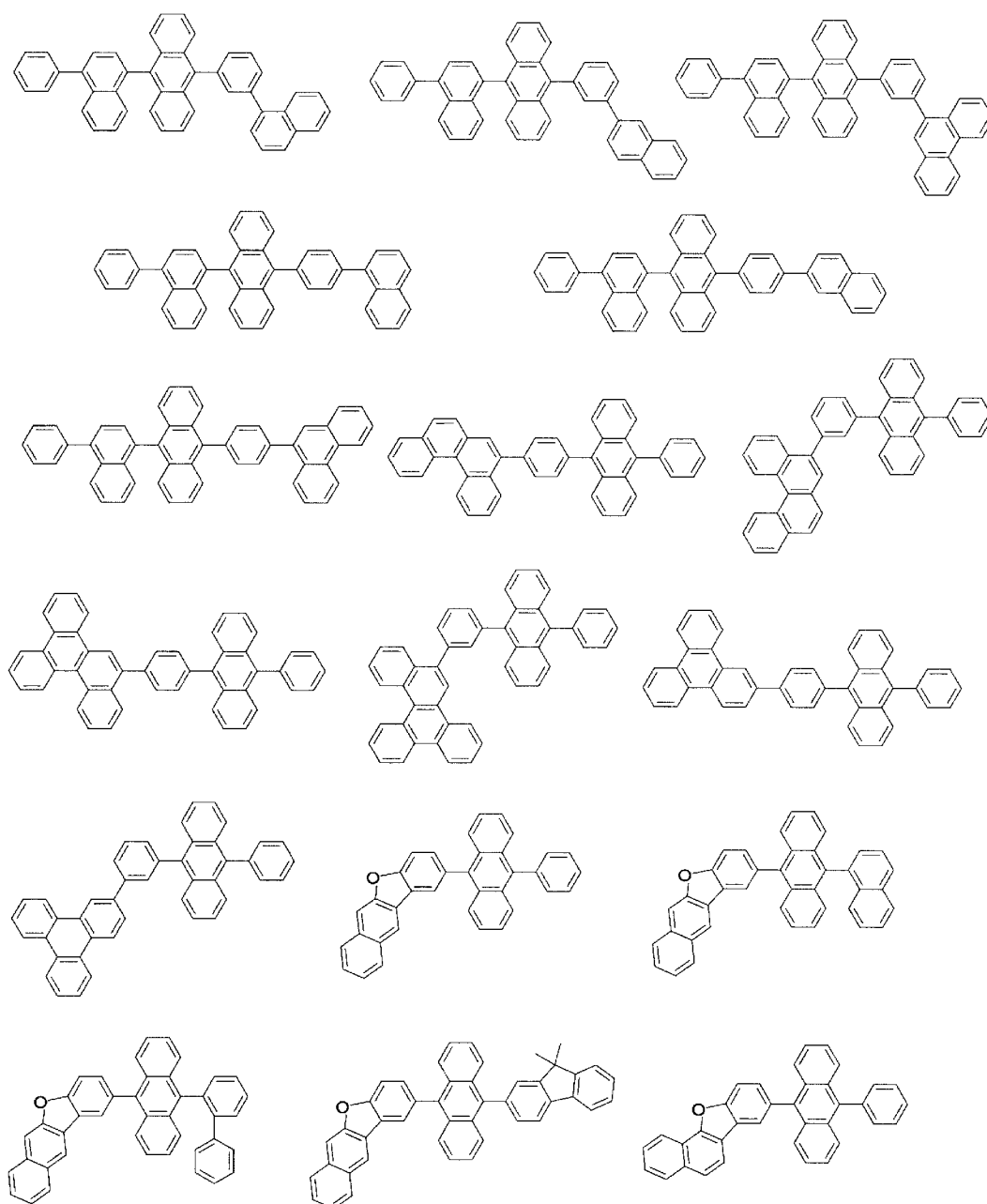
[0313]

[化134]



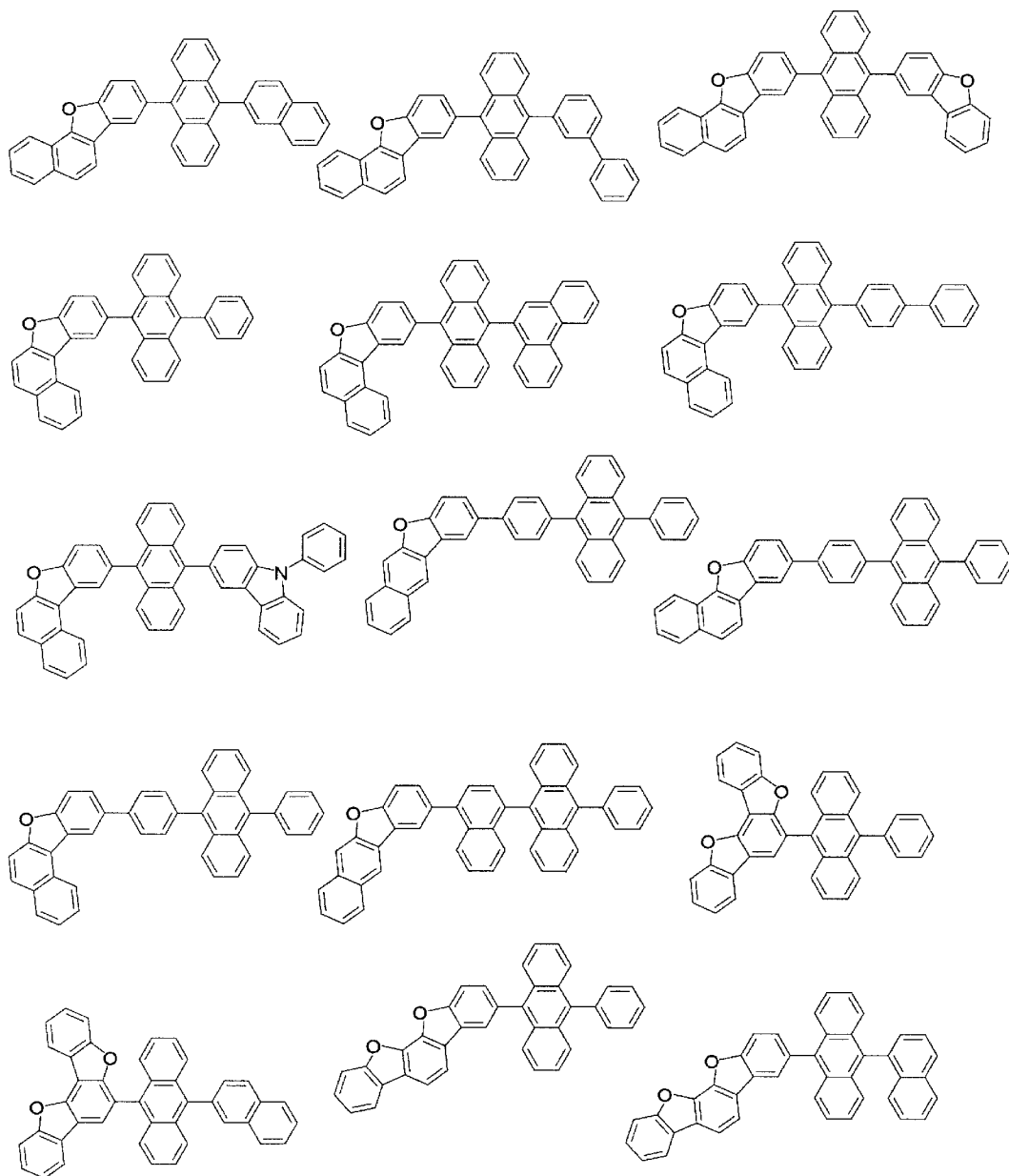
[0314]

[化135]



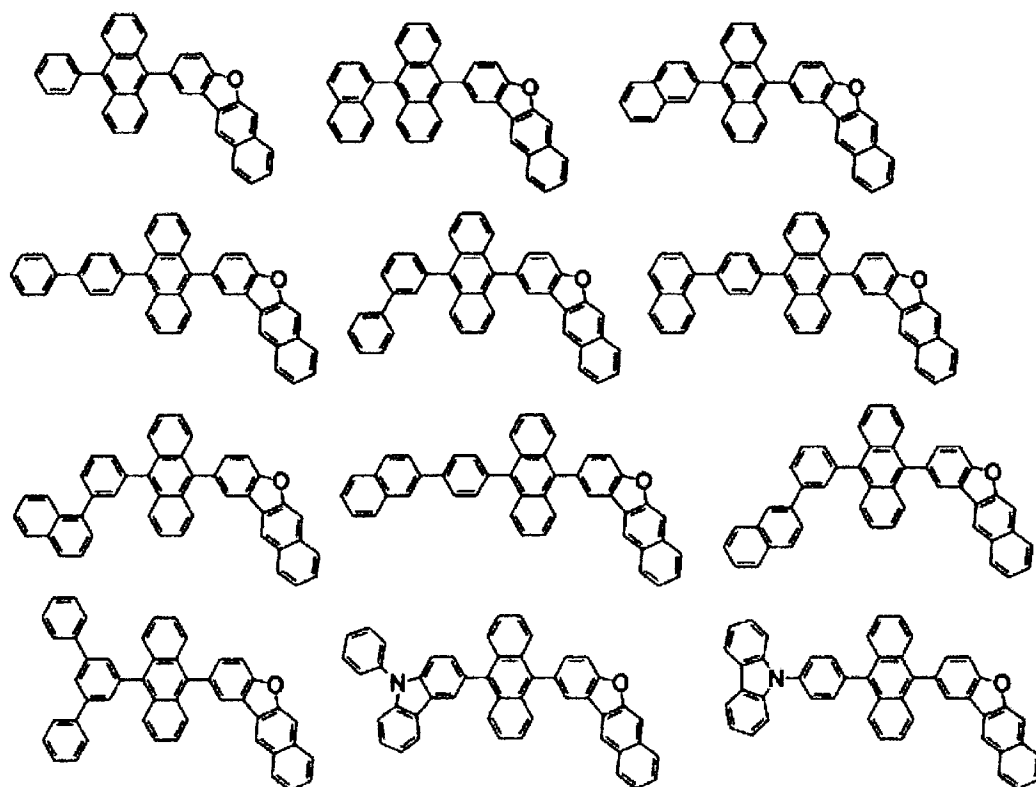
[0315]

[化136]

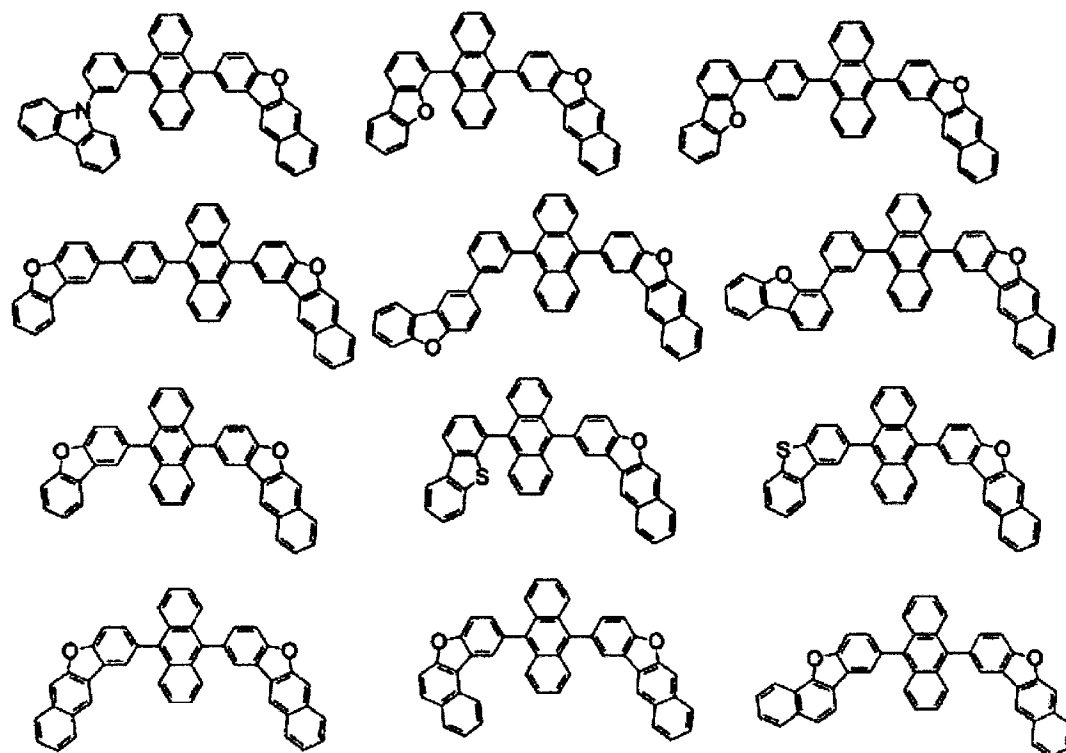


[0316]

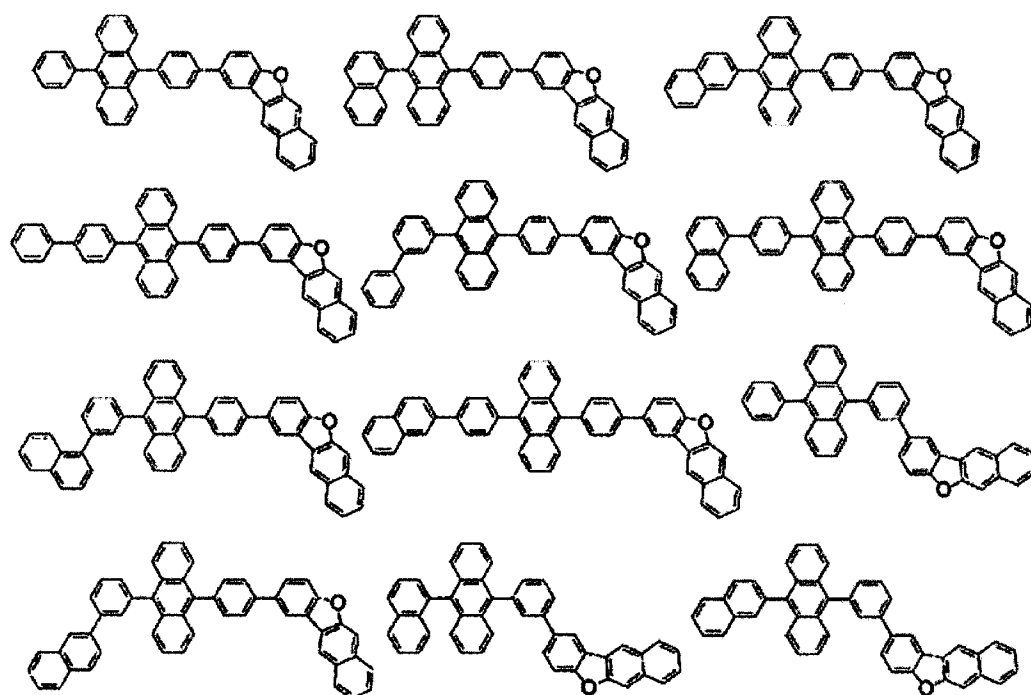
[化137]



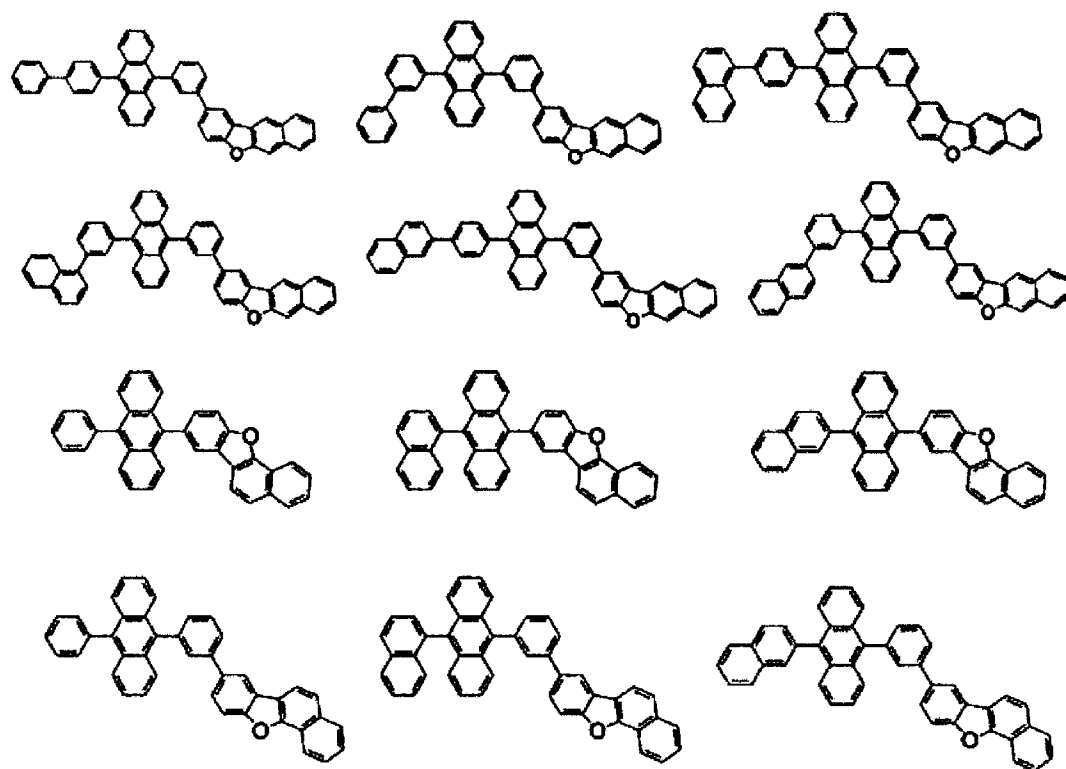
[0317] [化138]



[0318] [化139]

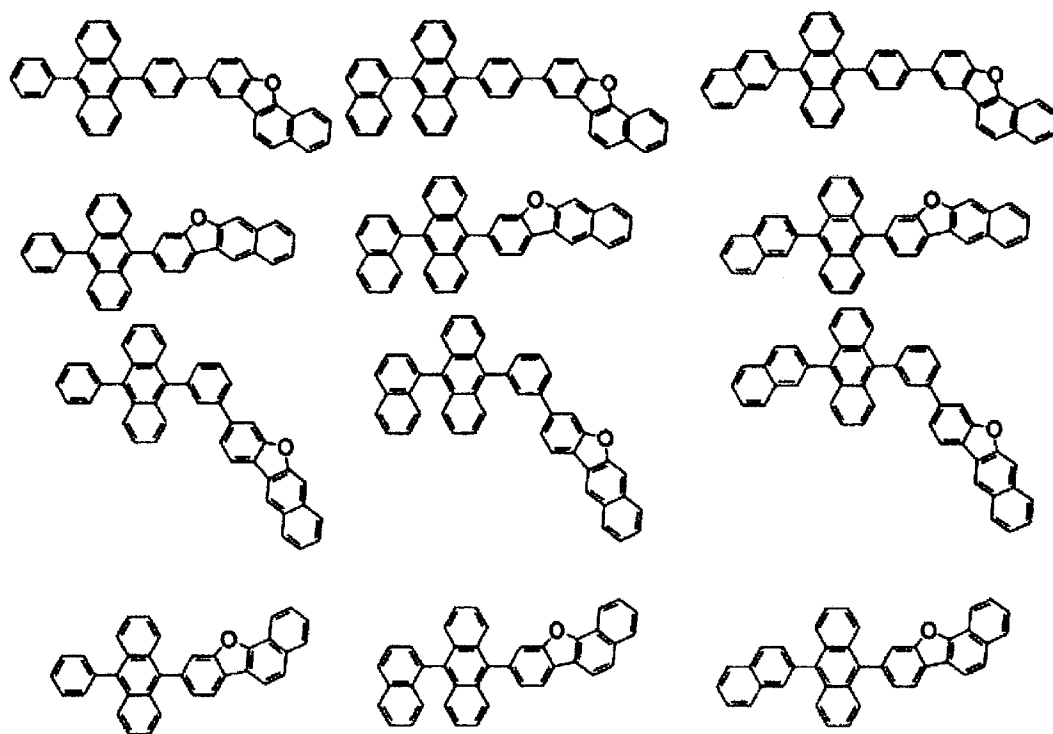


[0319] [化140]

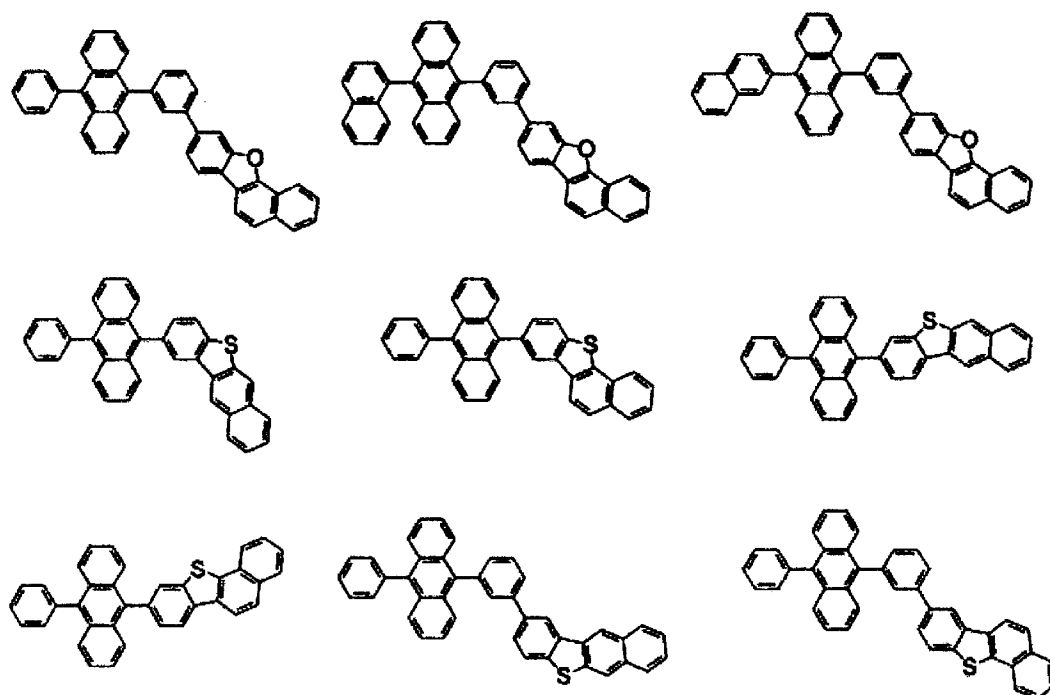


[0320]

[化141]

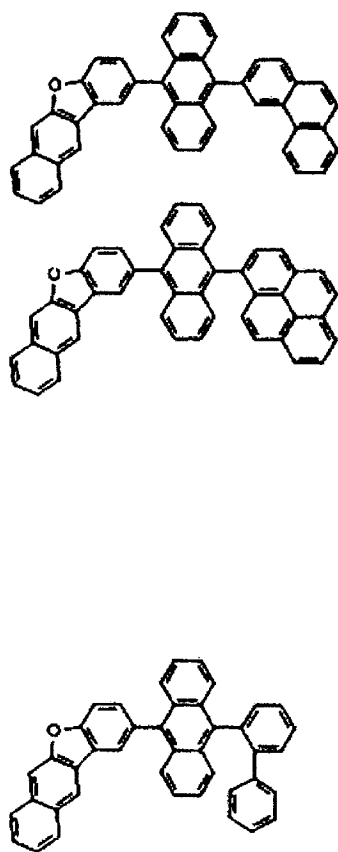


[0321] [化142]

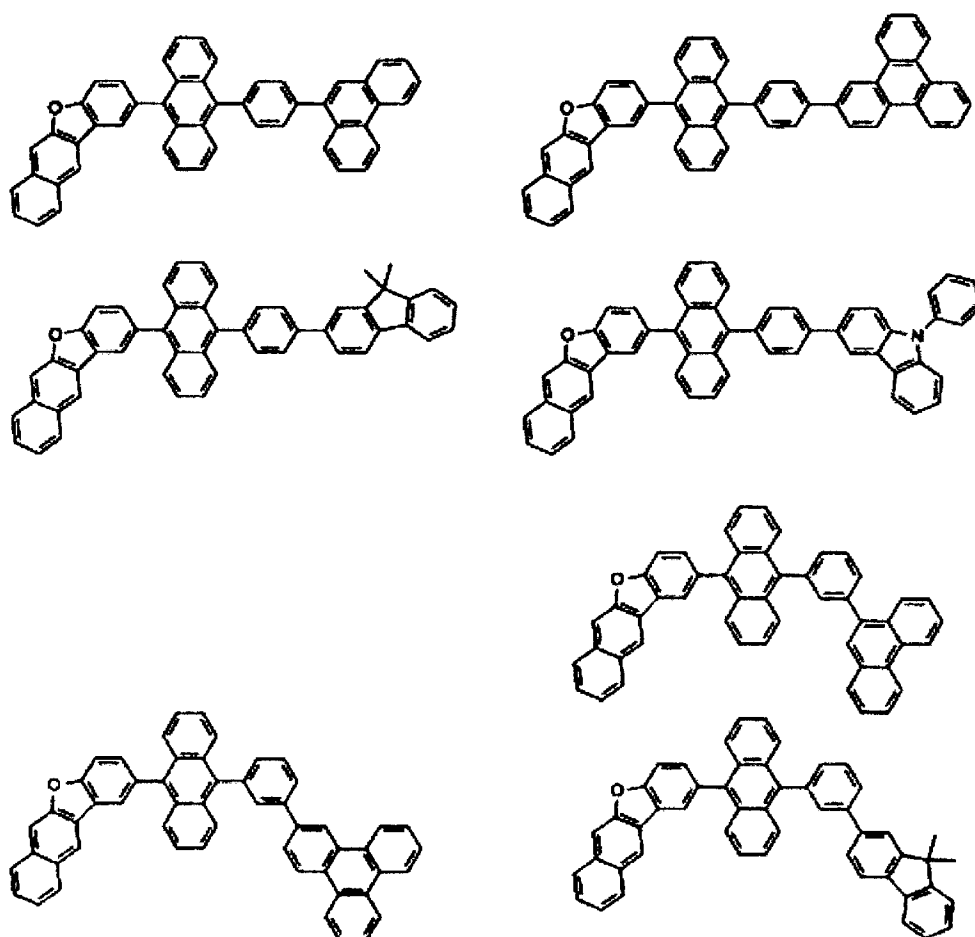


[0322]

[化143]

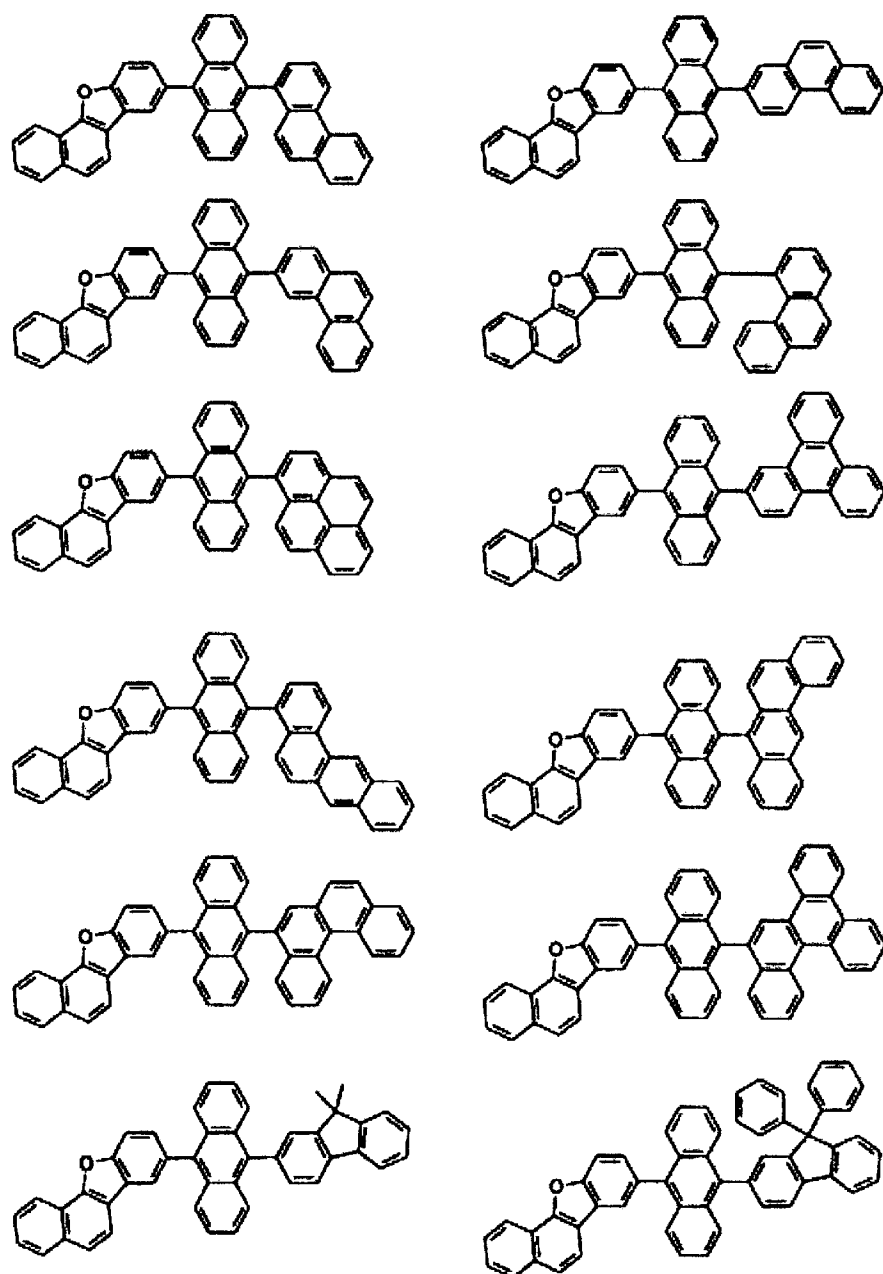


[化144]



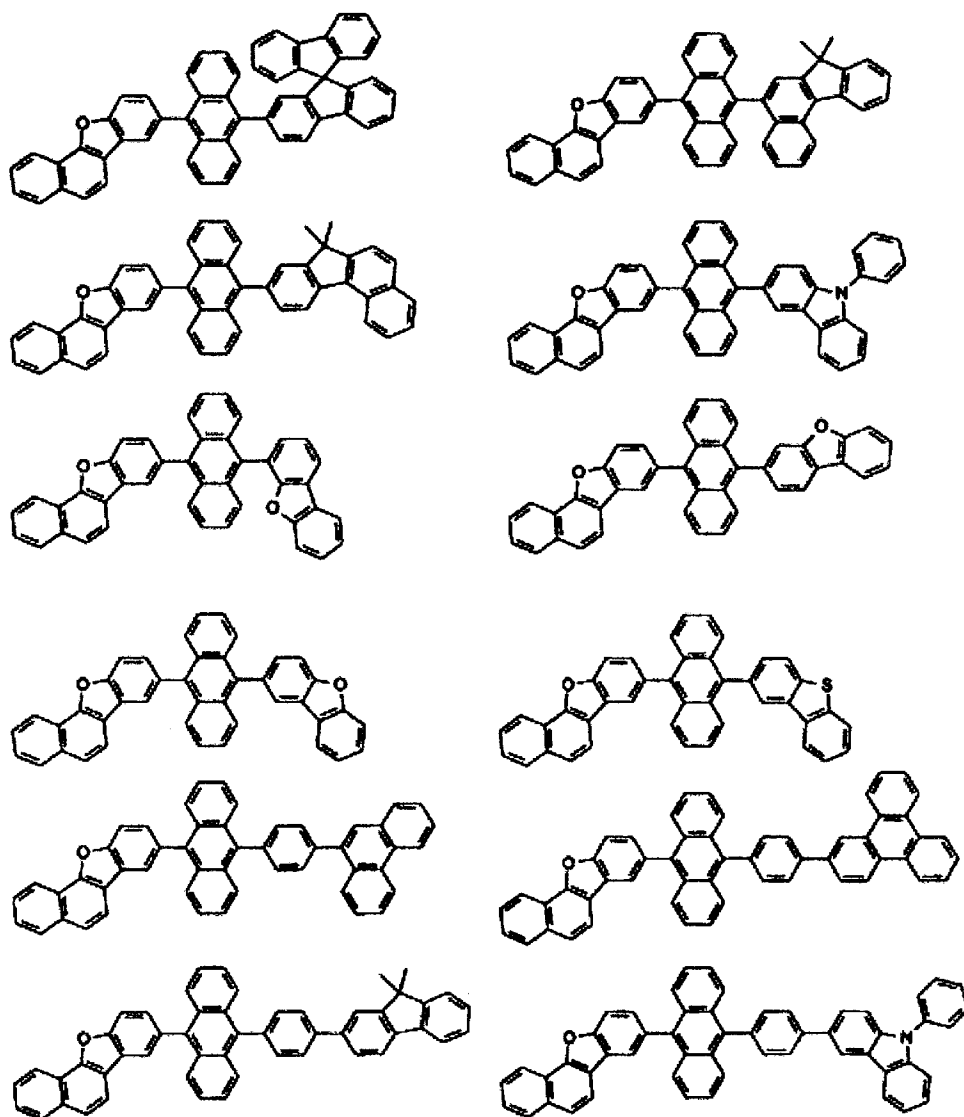
[0324]

[化145]



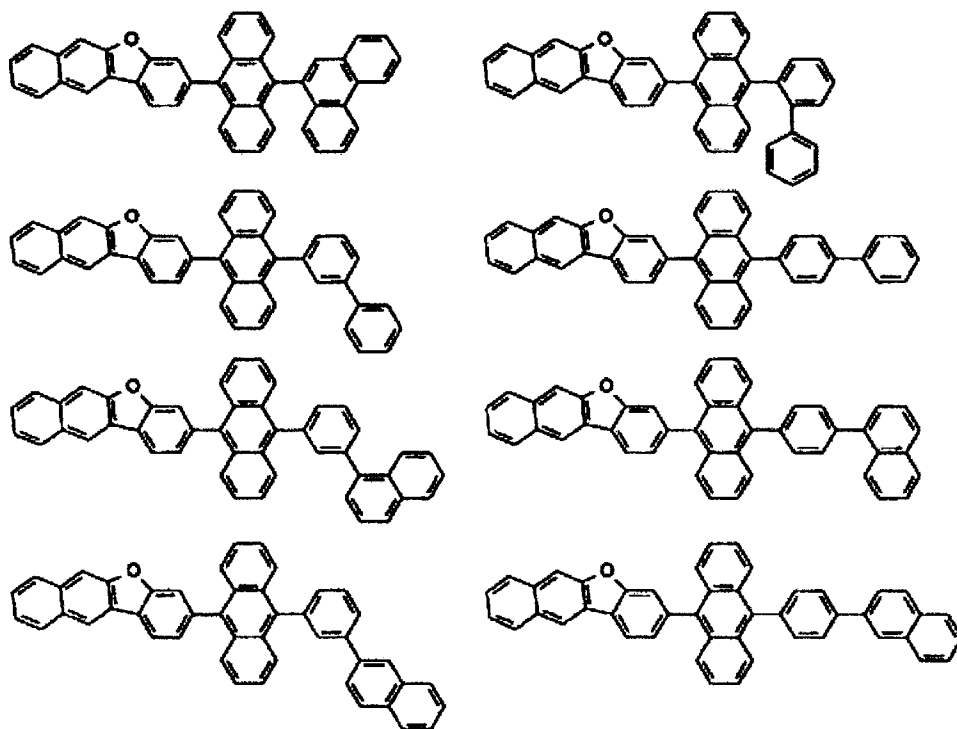
[0325]

[化146]

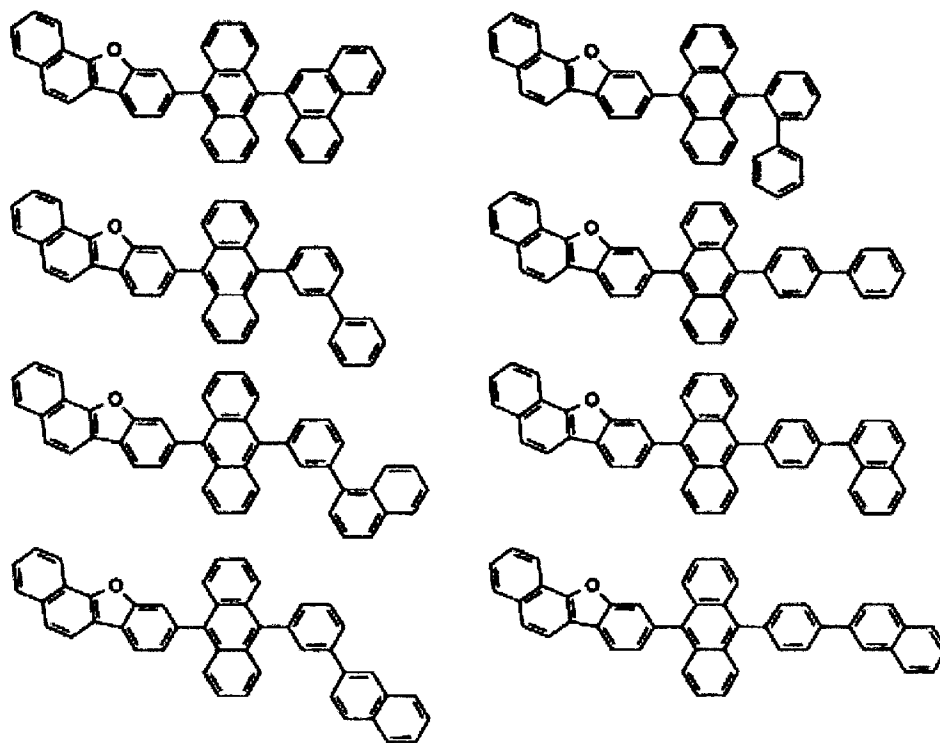


[0326]

[化147]

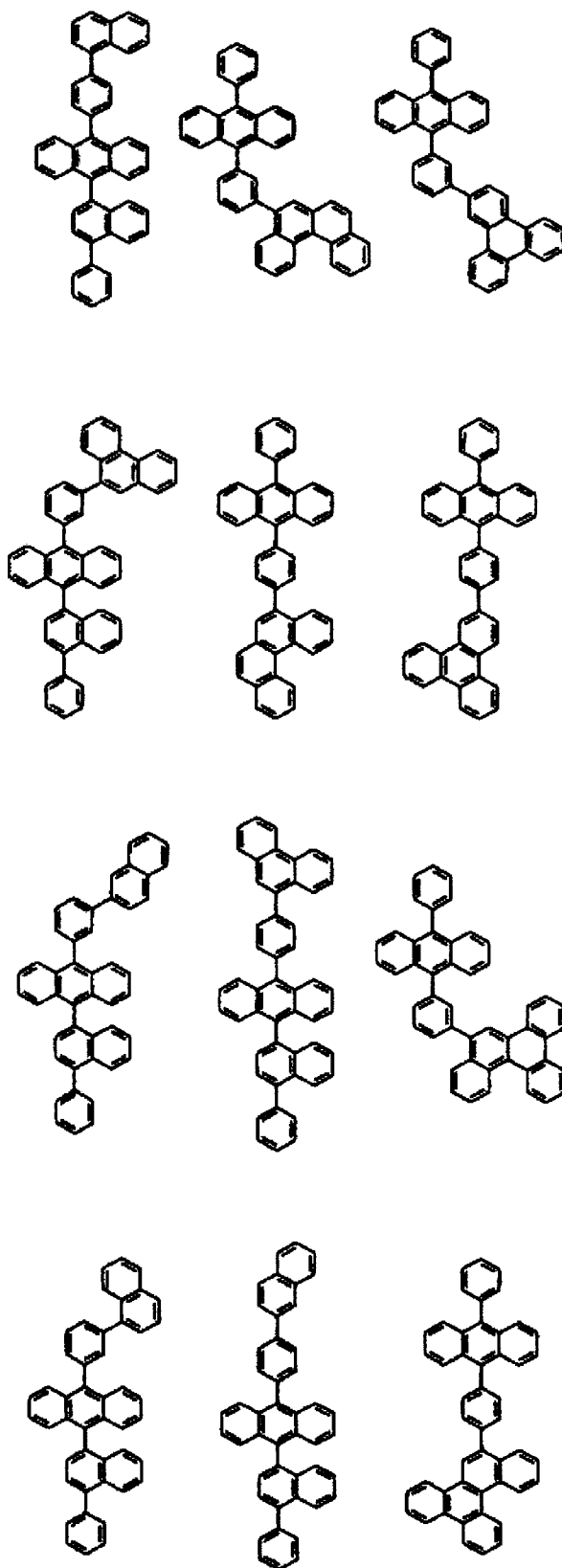


[0327] [化148]

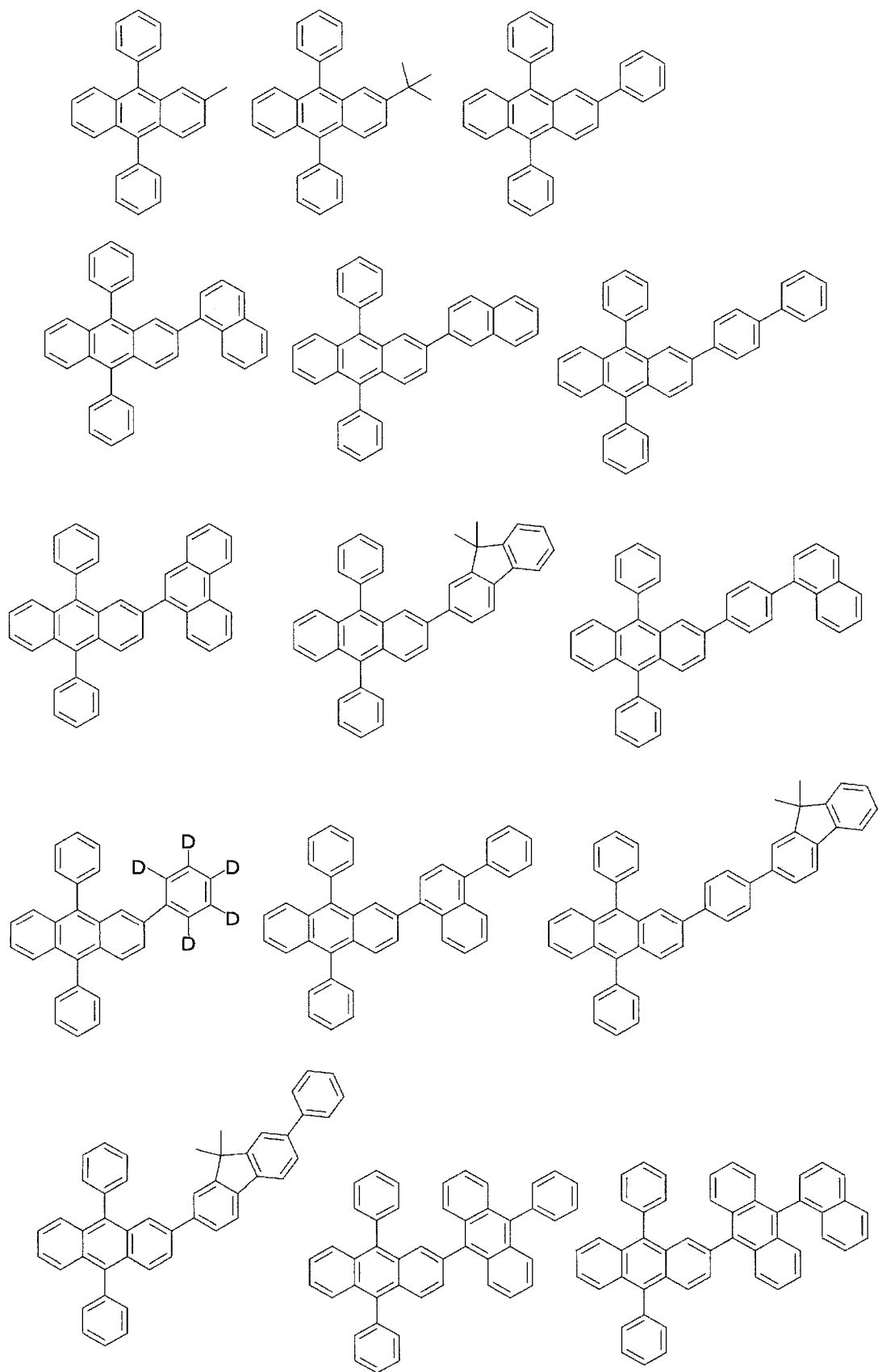


[0328]

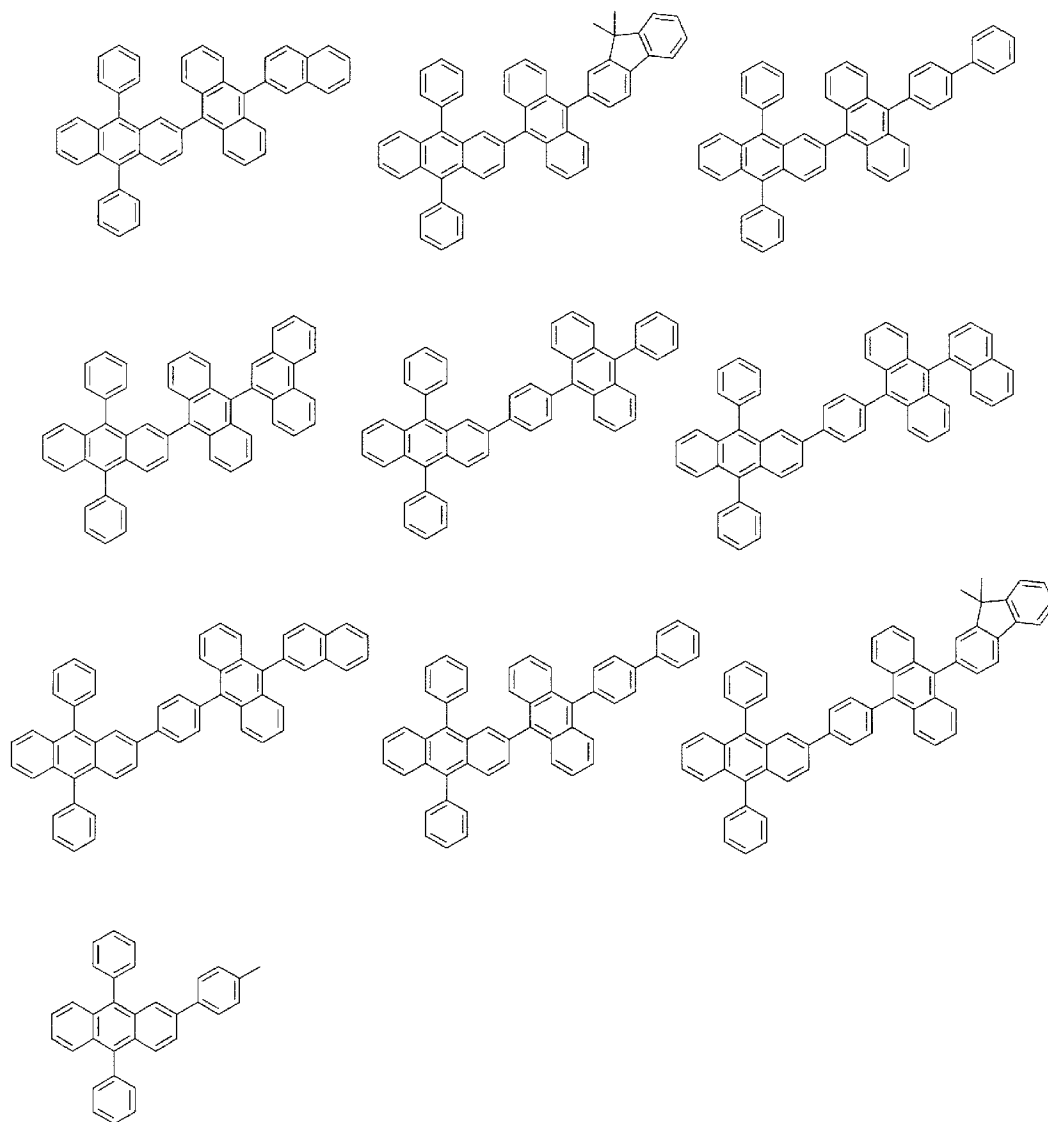
[化149]



[0329] [化150]

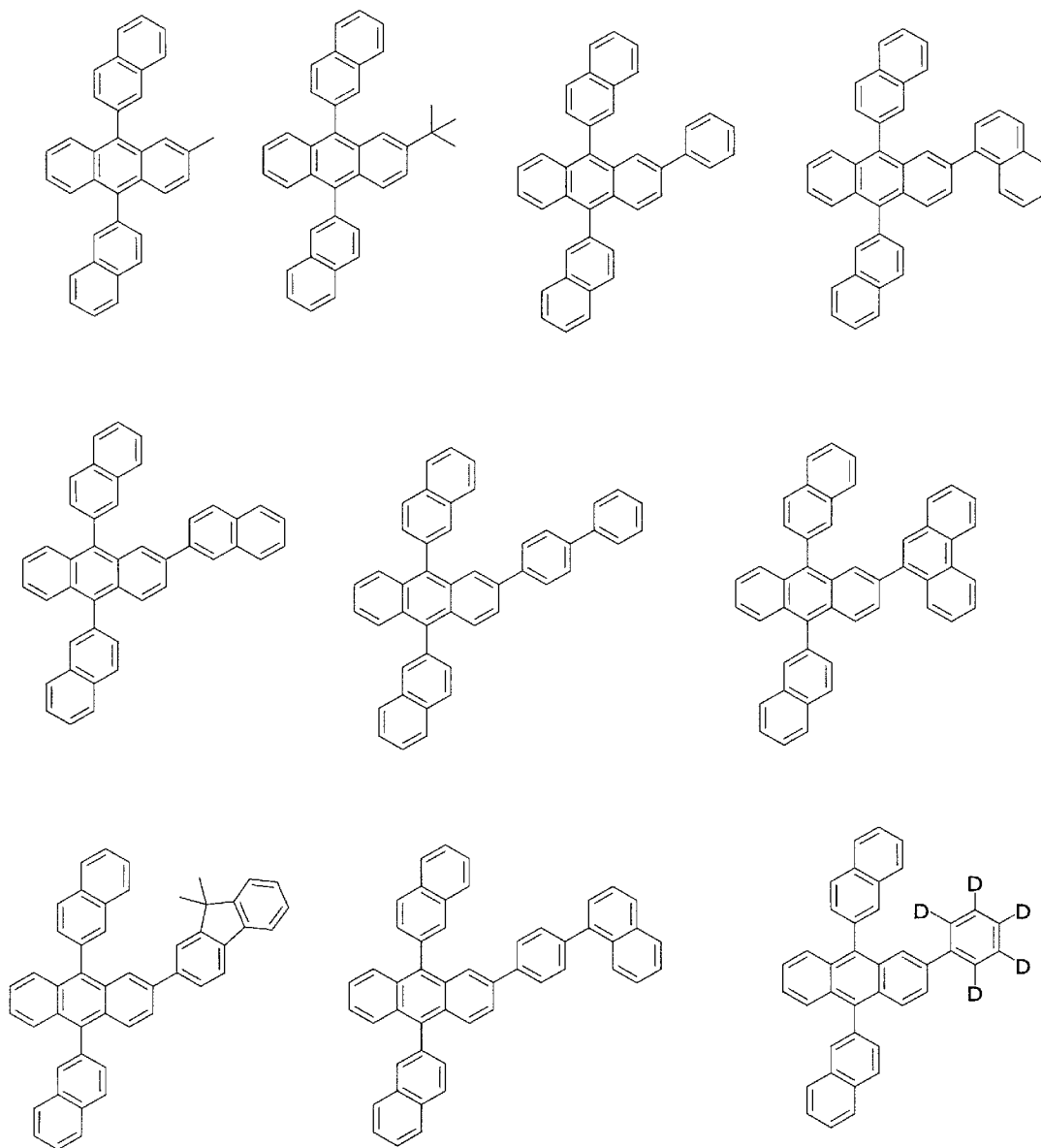


[0330] [化151]



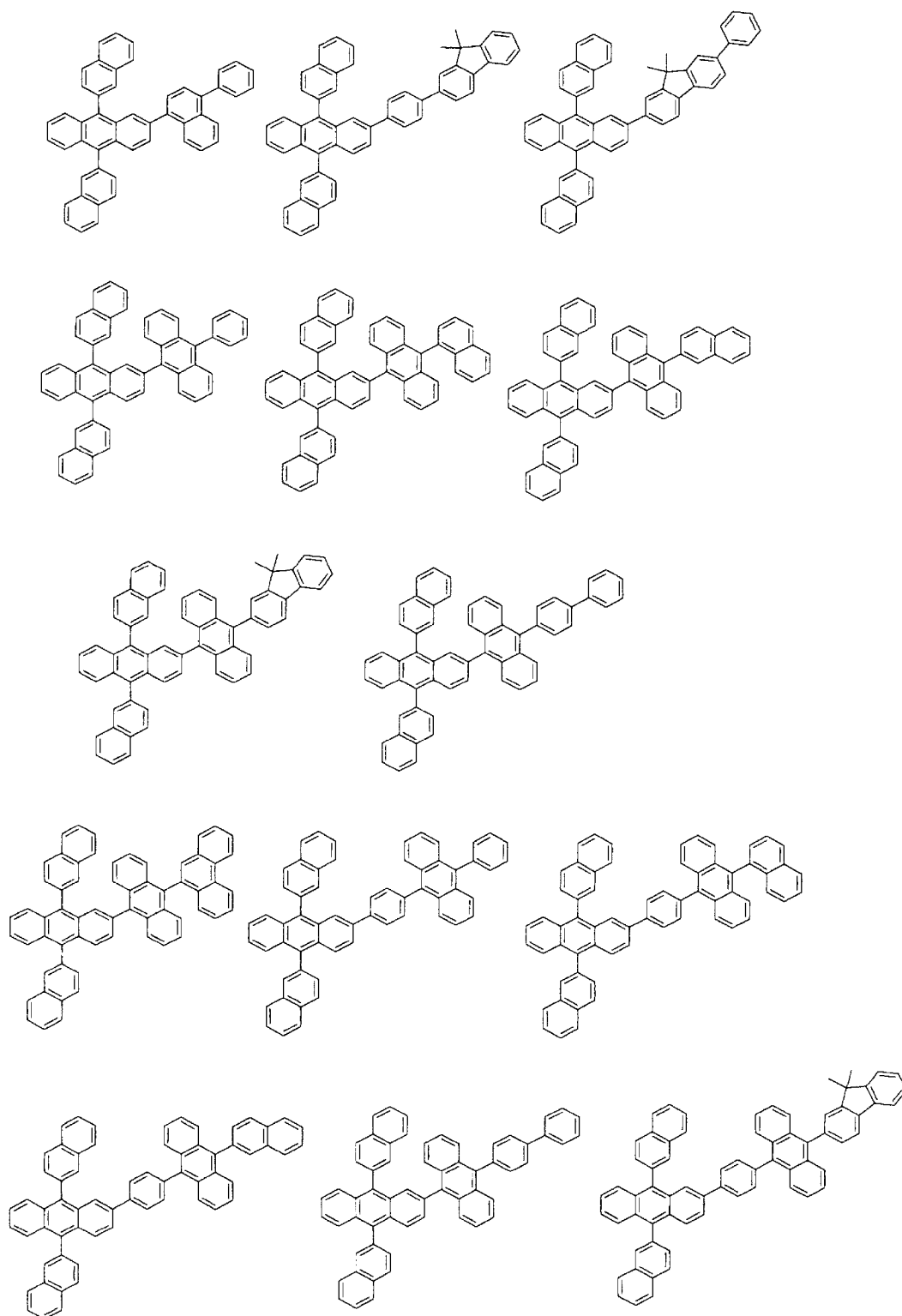
[0331]

[化152]



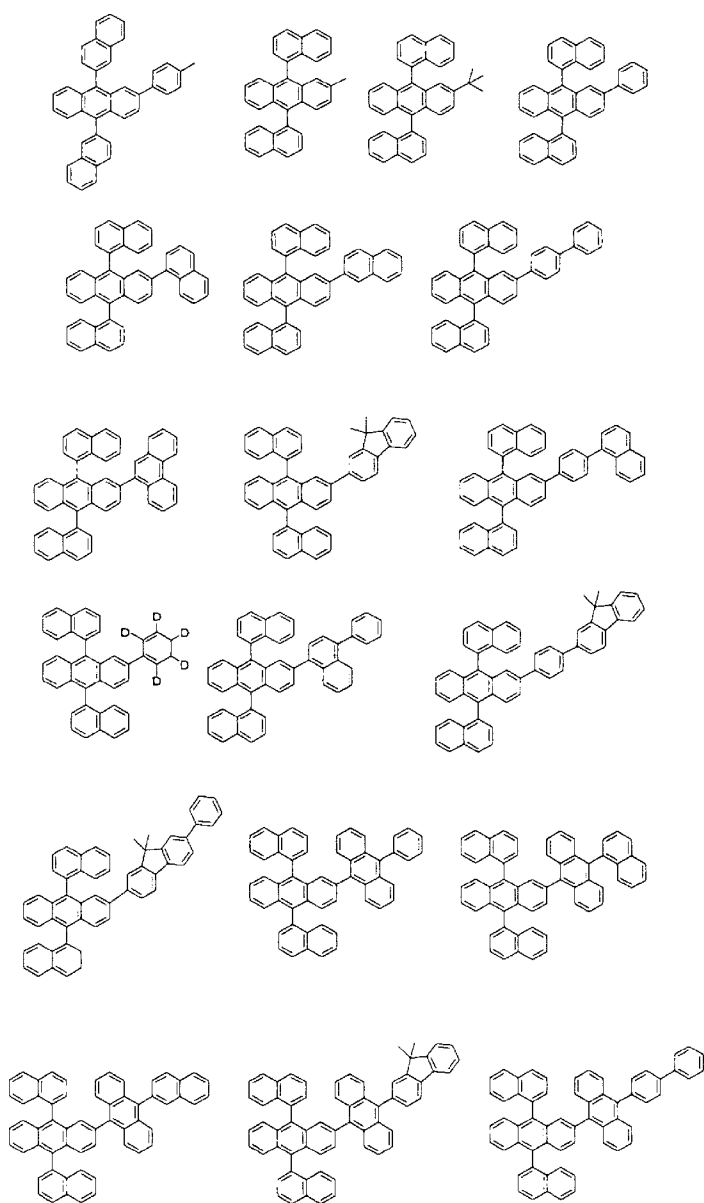
[0332]

[化153]



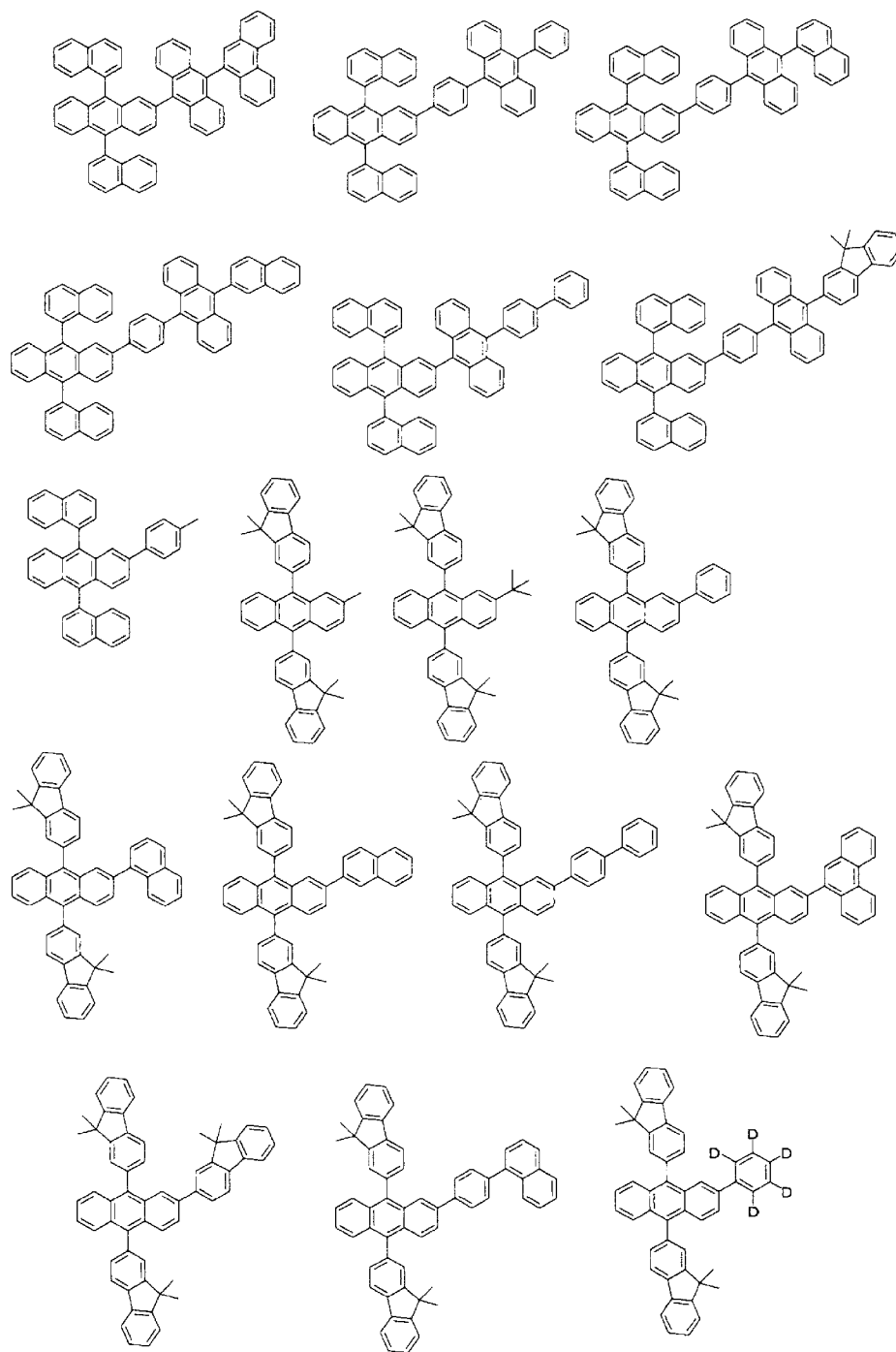
[0333]

[化154]



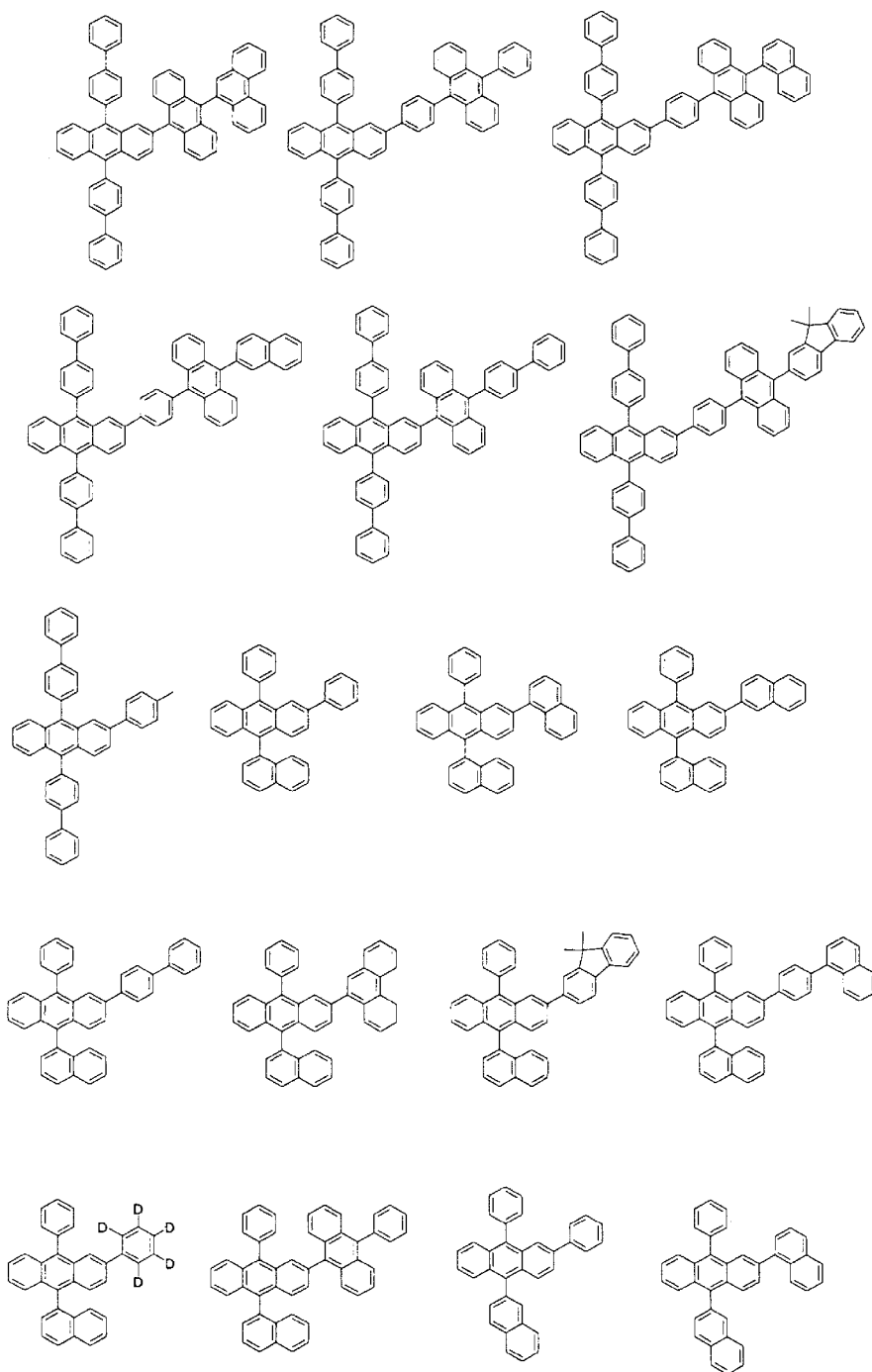
[0334]

[化155]



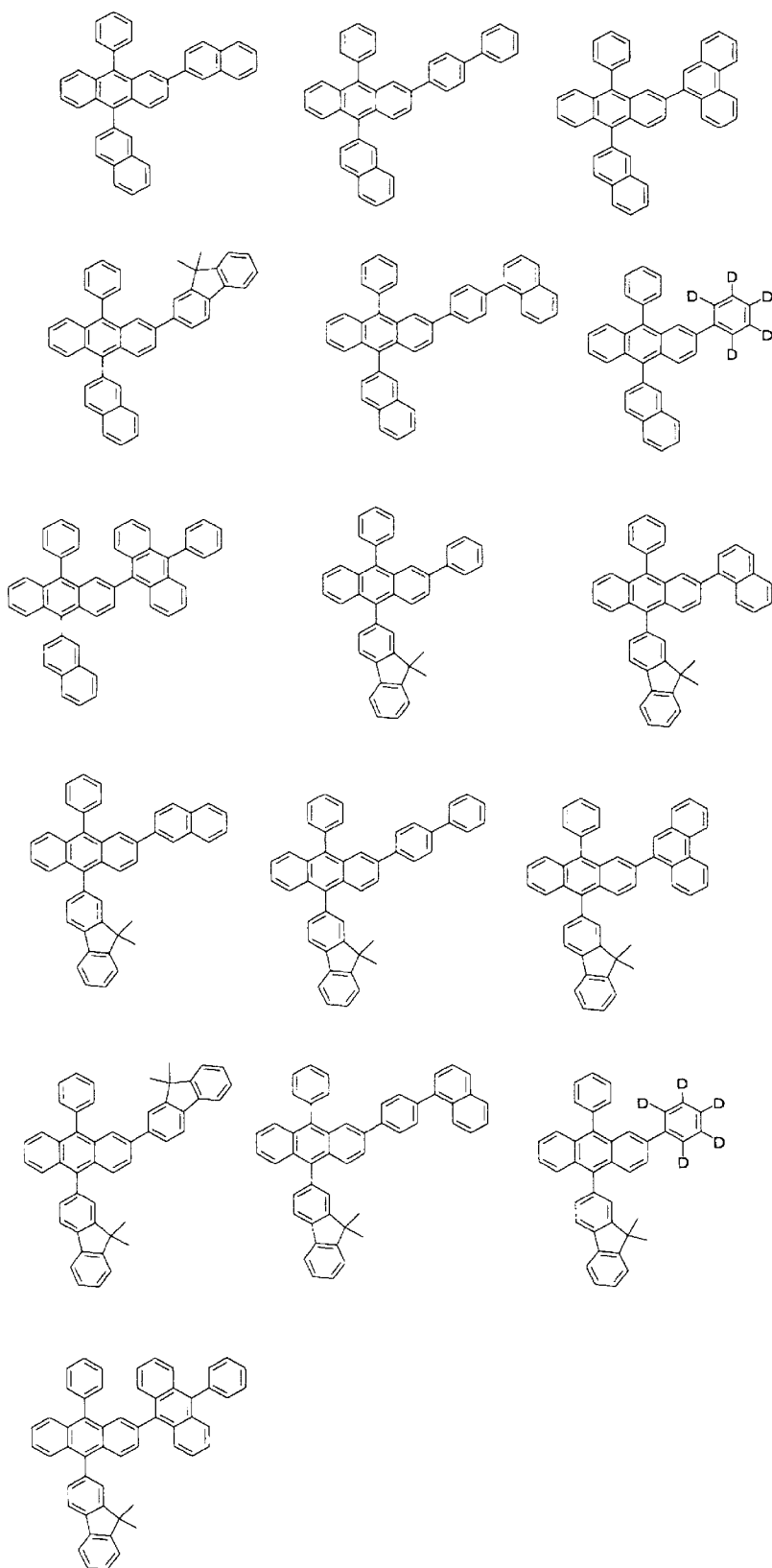
[0335]

[化156]



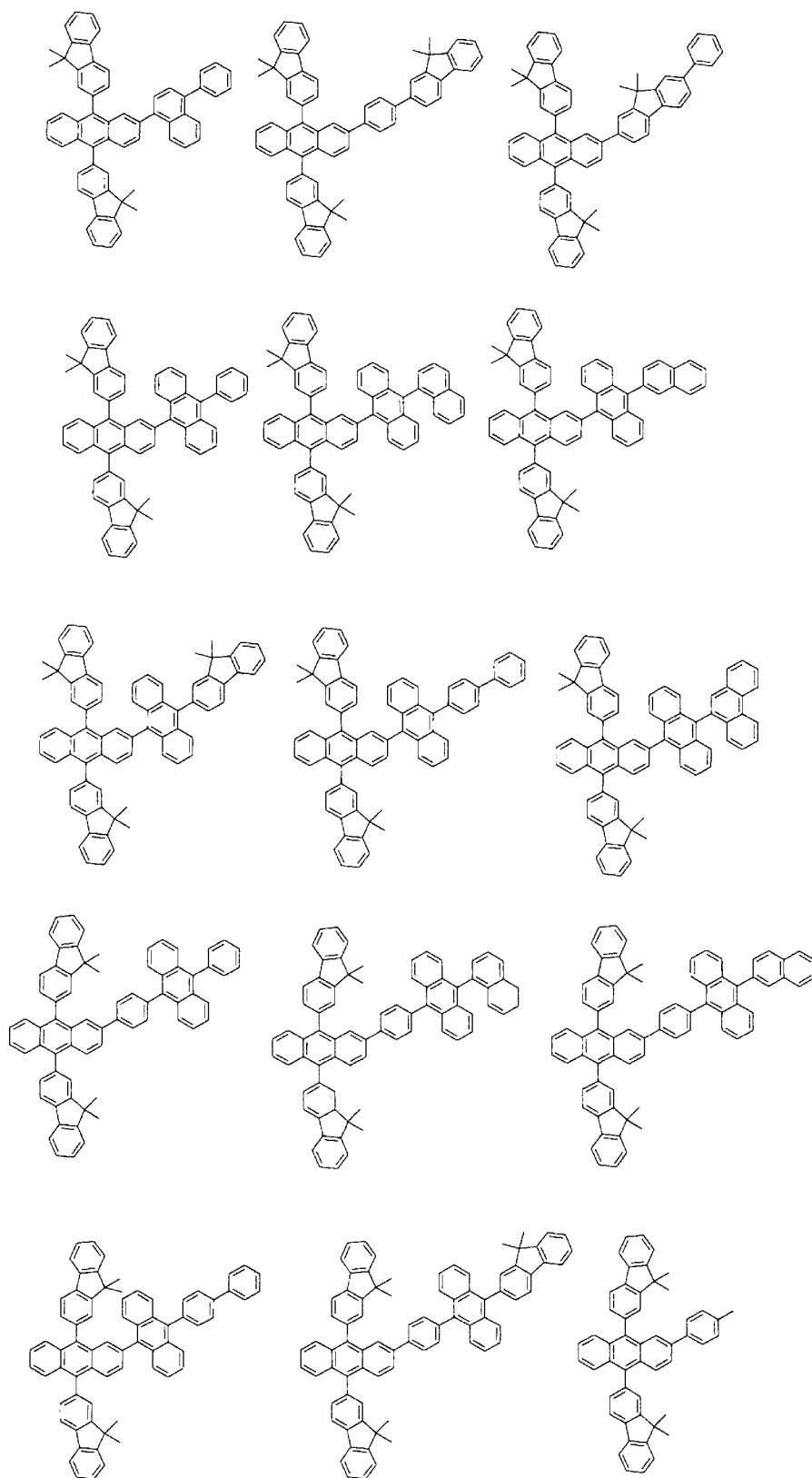
[0336]

[化157]



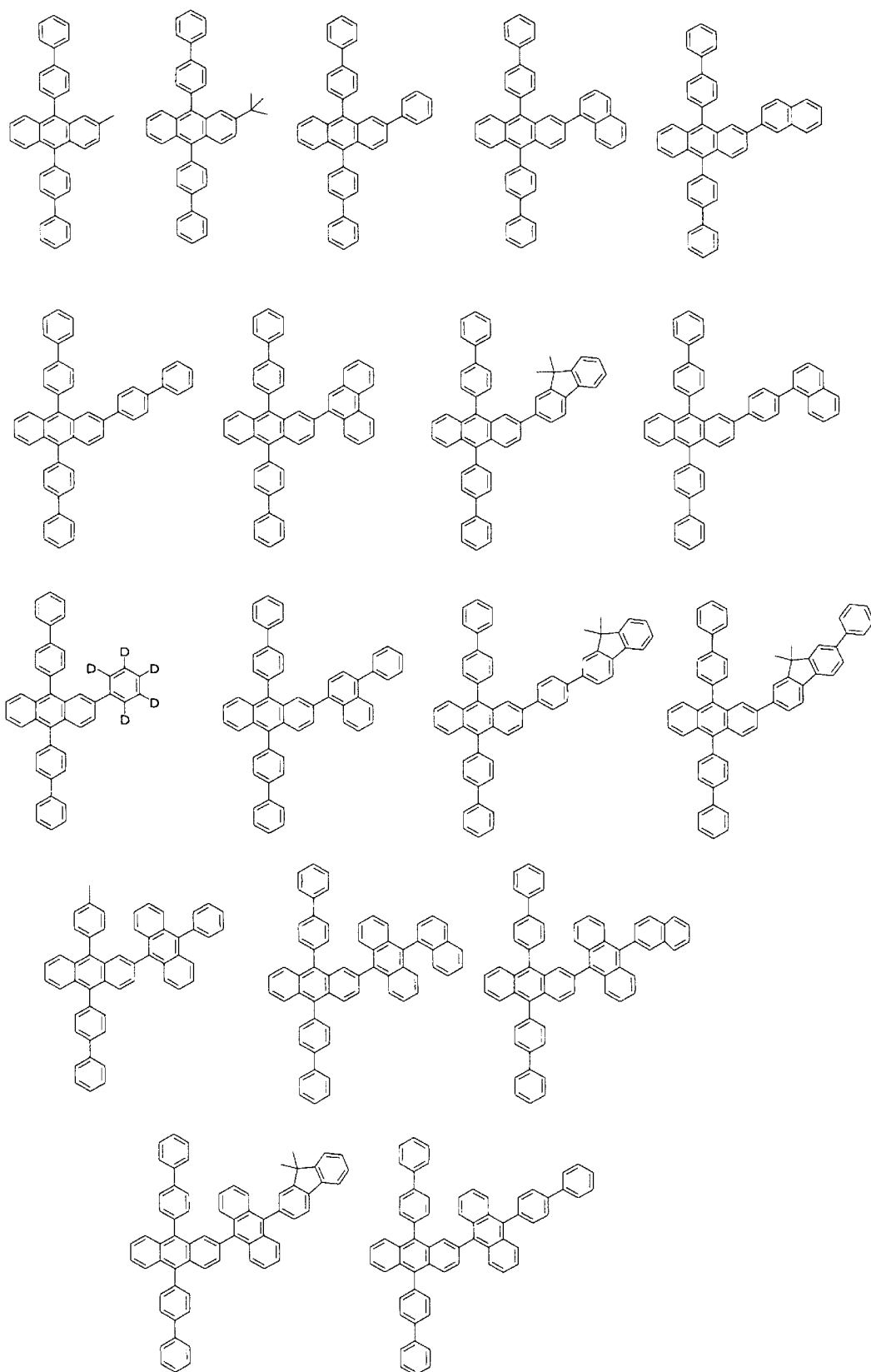
[0337]

[化158]



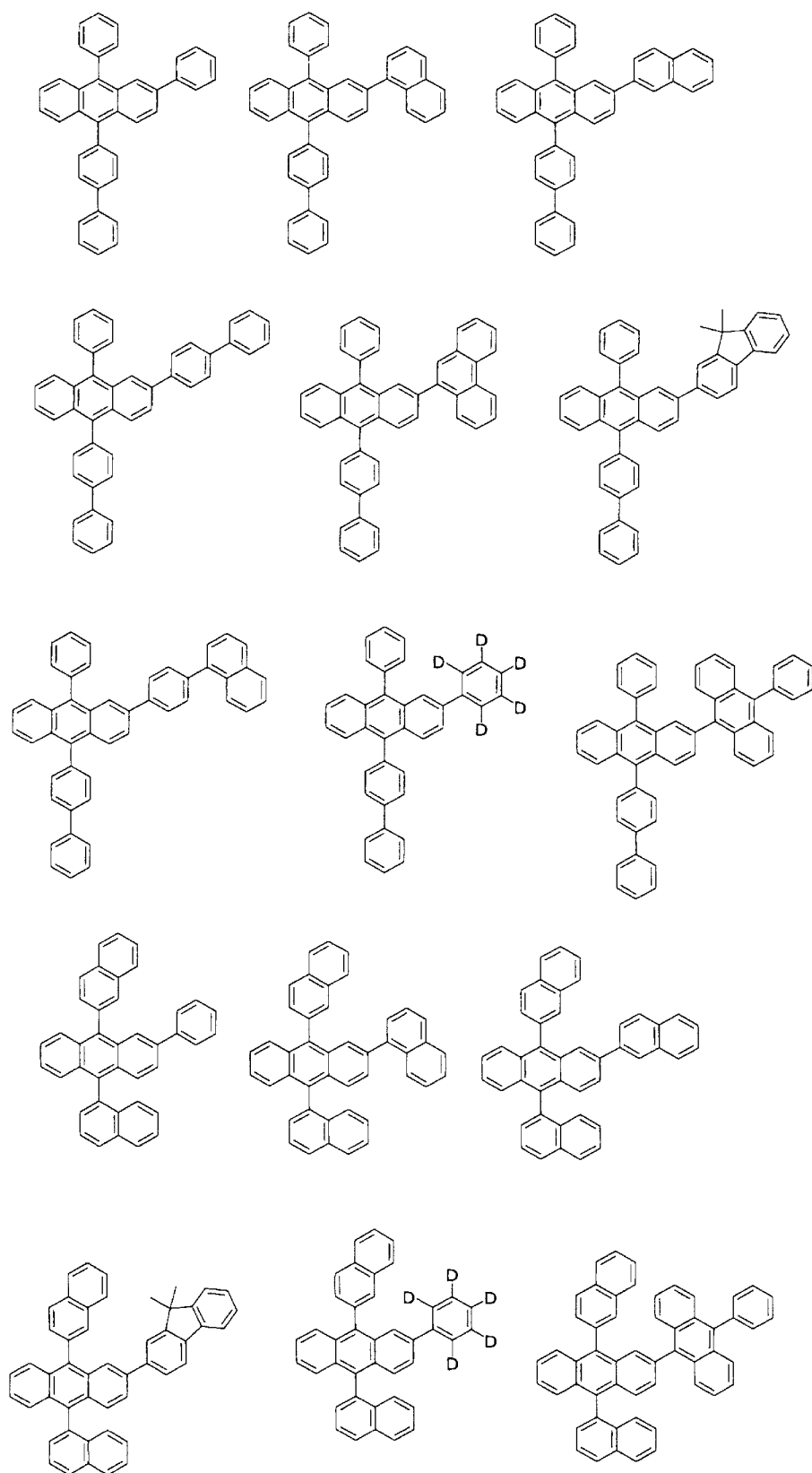
[0338]

[化159]



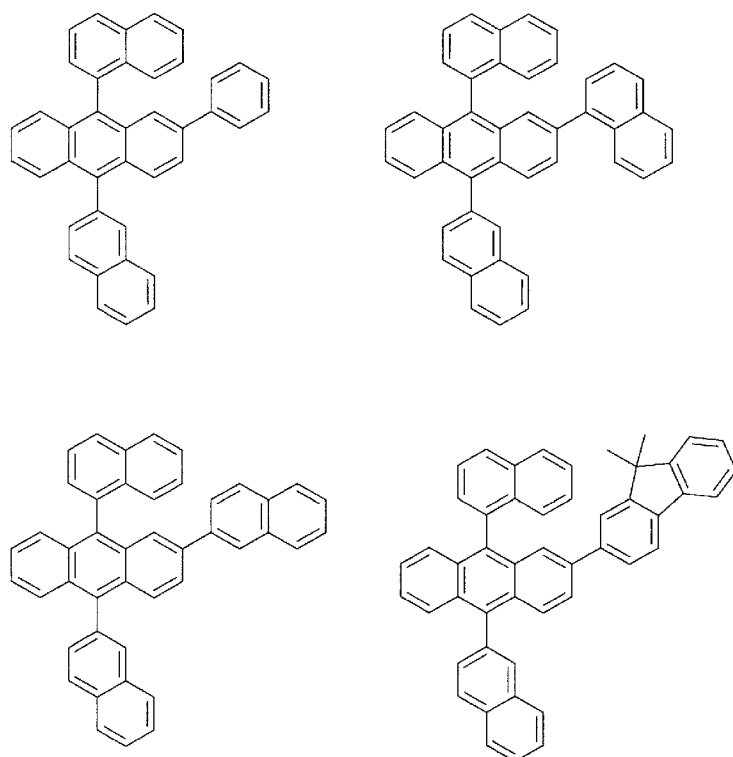
[0339]

[化160]



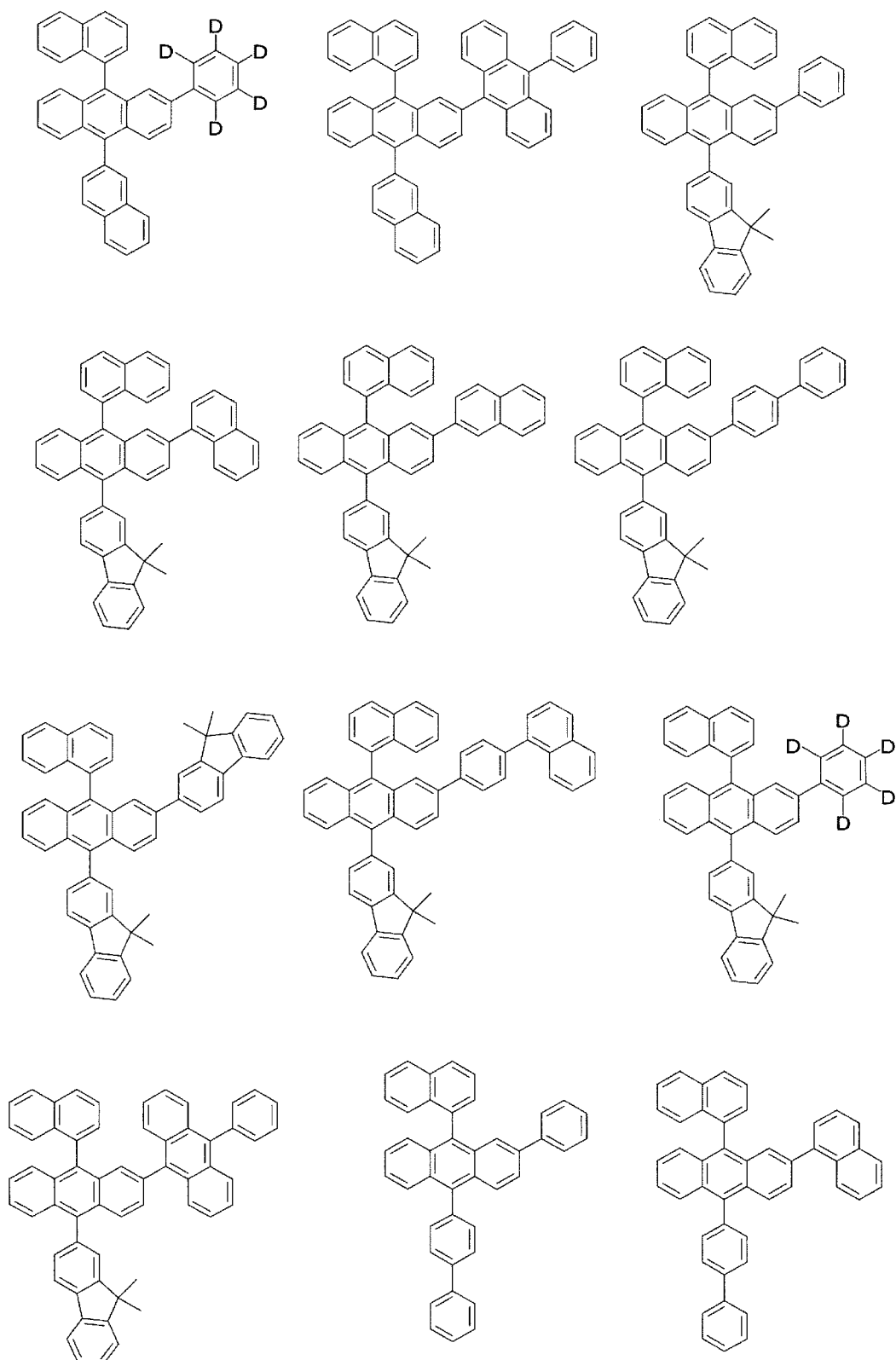
[0340]

[化161]

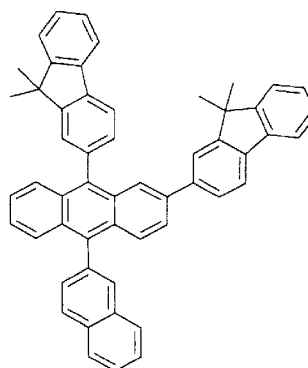
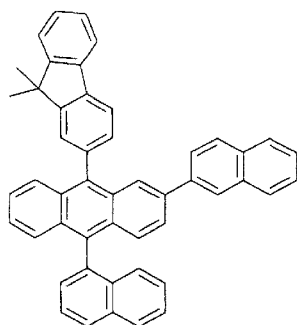
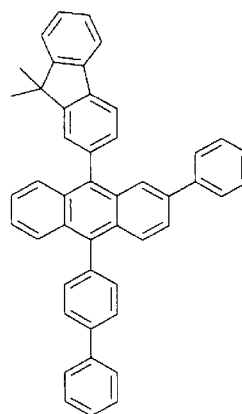
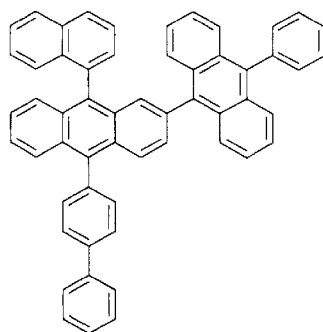
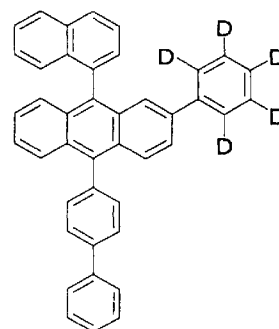
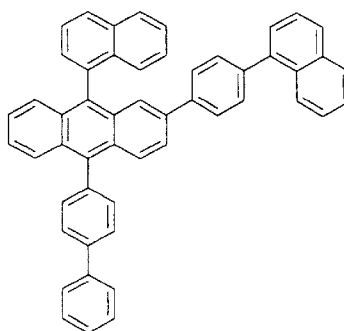
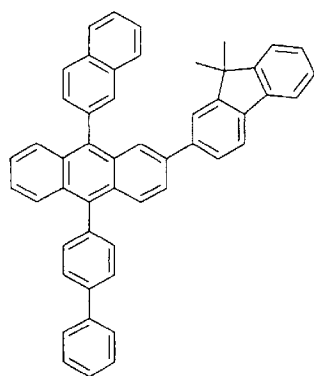
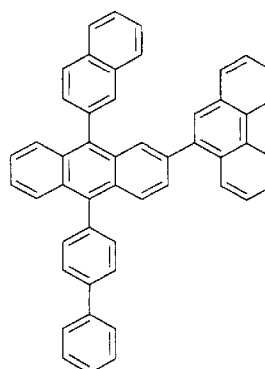
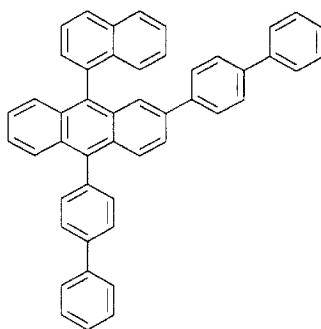
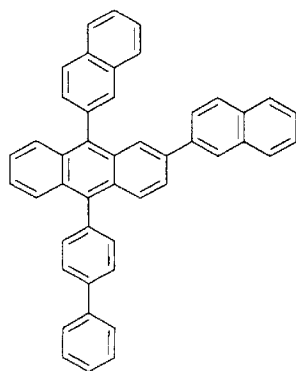


[0341]

[化162]

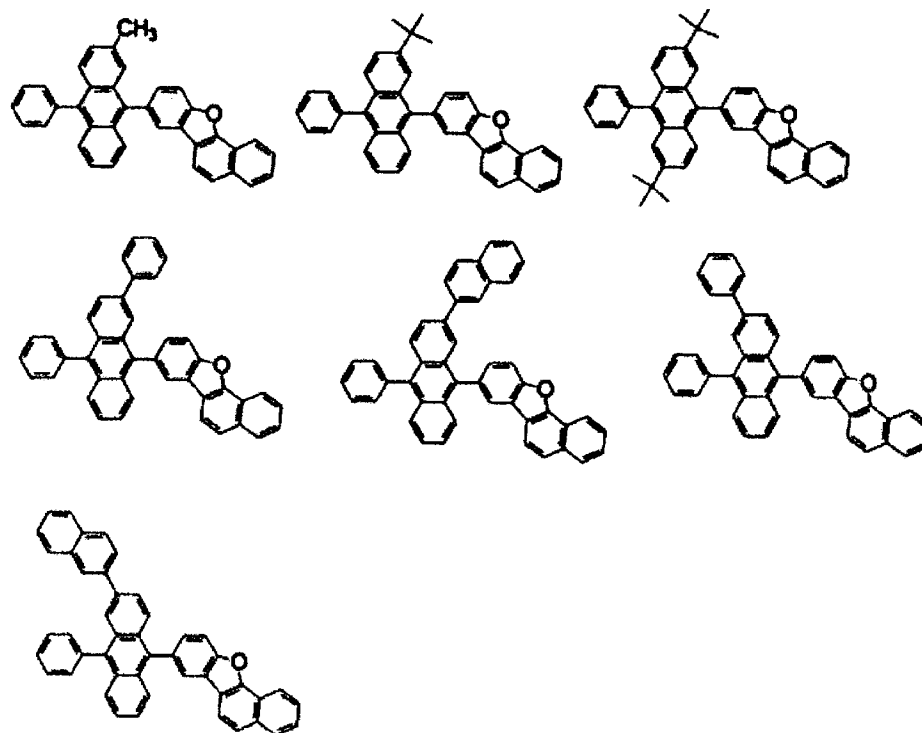


[化163]

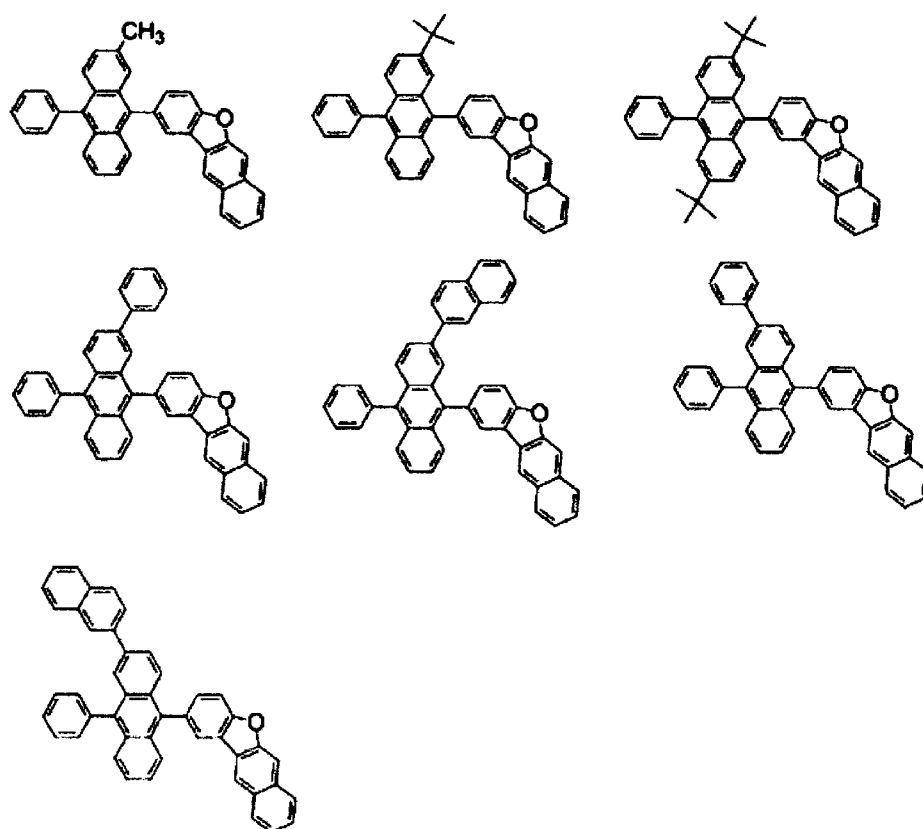


[0343]

[化164]



[0344] [化165]



[0345] <第二の化合物>

第二の化合物は、前記一般式（２）で表される化合物である。

[0346] 第二の化合物の主ピーク波長の範囲は、４３０ｎｍ以上４８０ｎｍ以下であることが好ましく、４４５ｎｍ以上４８０ｎｍ以下であることがより好ましい。

本明細書において、主ピーク波長とは、測定対象化合物が 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、測定した発光スペクトルにおける発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長をいう。

第二の化合物は、青色の蛍光発光を示すことが好ましい。

第二の化合物は、発光量子収率の高い材料であることが好ましい。

[0347] ・モル吸光係数

第二の化合物の最も長波長側に位置する吸収ピークにおけるモル吸光係数は、 $29,000\text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$ 以上 $1,000,000\text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$ 以下であることが好ましく、 $30,000\text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$ 以上 $250,000\text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$ 以下であることがより好ましく、 $40,000\text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$ 以上 $150,000\text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$ 以下であることがさらに好ましい。

[0348] ・ストークスシフト

第二の化合物のストークスシフトは、４ｎｍ以上１８ｎｍ以下であることが好ましく、５ｎｍ以上１７ｎｍ以下であることがより好ましい。

[0349] <発光層における第一の化合物、及び第二の化合物の関係>

第一の化合物が遅延蛍光性を示す化合物である場合、第一の化合物の一重項エネルギー $S_1(M1)$ と、第二の化合物の一重項エネルギー $S_1(M2)$ とが、下記数式（数１）の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(M1) > S_1(M2) \quad \dots (\text{数}1)$$

[0350] 第一の化合物の $77[\text{K}]$ におけるエネルギーギャップ $T_{77\text{K}}(M1)$ は、第二の化合物の $77[\text{K}]$ におけるエネルギーギャップ $T_{77\text{K}}(M2)$ よりも

大きいことが好ましい。すなわち、下記数式（数４）の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(M1) > T_{77K}(M2) \quad \dots (\text{数}4)$$

[0351] 本実施形態の有機ＥＬ素子１を発光させたときに、発光層５において、主に第二の化合物が発光していることが好ましい。

[0352] ・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、本実施形態に用いる遅延蛍光性化合物としては、 $\Delta S T$ が小さい化合物であることが好ましい。 $\Delta S T$ が小さいと、低温（７７［Ｋ］）状態でも、項間交差、及び逆項間交差が起こりやすく、励起一重項状態と励起三重項状態とが混在する。その結果、上記と同様にして測定されるスペクトルは、励起一重項状態及び励起三重項状態の両者からの発光を含んでおり、いずれの状態から発光したのかについて峻別することは困難であるが、基本的には三重項エネルギーの値が支配的と考えられる。

そのため、本実施形態では、通常の三重項エネルギーＴと測定手法は同じであるが、その厳密な意味において異なることを区別するため、次のようにして測定される値をエネルギーギャップ T_{77K} と称する。測定対象となる化合物をＥＰＡ（ジエチルエーテル：イソペンタン：エタノール＝５：５：２（容積比））中に、濃度が $10 \mu\text{mol/L}$ となるように溶解し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とする。この測定試料について、低温（７７［

K]) で燐光スペクトル（縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。）を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $\lambda_{\text{edge}} [\text{nm}]$ に基づいて、次の換算式（F 1）から算出されるエネルギー量を 77 [K] におけるエネルギーギャップ $T_{77\text{K}}$ とする。

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

[0353] 燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ（つまり縦軸が増加するにつれ）、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線（すなわち変曲点における接線）が、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

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

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

[0354] ・一重項エネルギー S_1

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

測定対象となる化合物の $10 \mu\text{mol} / \text{L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（300 K）でこの試料の吸収スペクトル（縦軸：発光強度、横軸：波長とする。）を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち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 $\lambda_{\text{edge}} [$

n m] を次に示す換算式 (F 2) に代入して一重項エネルギーを算出する。

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

吸収スペクトル測定装置としては、例えば、日立社製の分光光度計 (装置名: U 3 3 1 0) が挙げられるが、これに限定されない。

[0355] 吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ (つまり縦軸の値が減少するにつれ)、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側 (ただし、吸光度が 0.1 以下となる場合は除く) で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

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

[0356] ・発光層における化合物の含有率

発光層 5 に含まれている第一の化合物、及び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、90 質量%以上 99.9 質量%以下であることが好ましく、95 質量%以上 99.9 質量%以下であることがより好ましく、99 質量%以上 99.9 質量%以下であることがさらに好ましい。

第二の化合物の含有率は、0.01 質量%以上 10 質量%以下であることが好ましく、0.01 質量%以上 5 質量%以下であることがより好ましく、0.01 質量%以上 1 質量%以下であることがさらに好ましい。

なお、本実施形態は、発光層 5 に、第一の化合物、及び第二の化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

[0357] ・発光層の膜厚

発光層 5 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、さらに好ましくは 10 nm 以上 50 nm 以下であ

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

[0358] ・ T A D F 機構

図 4 は、発光層における第一の化合物、及び第二の化合物のエネルギー準位の関係の一例を示す図である。図 4 において、S 0 は、基底状態を表す。S 1 (M 1) は、第一の化合物の最低励起一重項状態を表す。T 1 (M 1) は、第一の化合物の最低励起三重項状態を表す。S 1 (M 2) は、第二の化合物の最低励起一重項状態を表す。T 1 (M 2) は、第二の化合物の最低励起三重項状態を表す。

図 4 中の S 1 (M 1) から S 1 (M 2) へ向かう破線の矢印は、第一の化合物の最低励起一重項状態から第二の化合物へのフェルスター型エネルギー移動を表す。

図 4 に示すように、第一の化合物として $\Delta S T$ (M 1) の小さな化合物を用いると、最低励起三重項状態 T 1 (M 1) は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態 S 1 (M 1) に逆項間交差が可能である。そして、第一の化合物の最低励起一重項状態 S 1 (M 1) から第二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 S 1 (M 2) が生成する。この結果、第二の化合物の最低励起一重項状態 S 1 (M 2) からの蛍光発光を観測することができる。この T A D F 機構による遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部効率を 100% まで高めることができると考えられている。

[0359] (基板)

基板 2 は、有機 E L 素子 1 の支持体として用いられる。基板 2 としては、例えば、ガラス、石英、及びプラスチック等を用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブル）基板のことであり、例えば、プラスチック基板等が挙げられる。プラスチック基板を形成する材料としては、例えば、ポリカーボネート、

ポリアリレート、ポリエーテルスルホン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニル、ポリイミド、及びポリエチレンナフタレート等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。

[0360] (陽極)

基板2上に形成される陽極3には、仕事関数の大きい(具体的には4.0 eV以上)金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物等を用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム-酸化スズ(ITO: Indium Tin Oxide)、珪素または酸化珪素を含有した酸化インジウム-酸化スズ、酸化インジウム-酸化亜鉛、酸化タングステン及び酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、並びにグラフェン等が挙げられる。この他、金(Au)、白金(Pt)、ニッケル(Ni)、タングステン(W)、クロム(Cr)、モリブデン(Mo)、鉄(Fe)、コバルト(Co)、銅(Cu)、パラジウム(Pd)、チタン(Ti)、及びこれら金属材料の窒化物(例えば、窒化チタン)等が挙げられる。

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

陽極3上に形成される有機層のうち、陽極3に接して形成される正孔注入層6は、陽極3の仕事関数に関係なく正孔(ホール)注入が容易である複合材料を用いて形成される。そのため、その他電極材料として使用可能な材料(例えば、金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物、その他、元素周期表の第1族または第2族に属する元素も含む)を陽極3として用い

ることもできる。

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

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

[0361] (正孔注入層)

正孔注入層6は、正孔注入性の高い物質を含む層である。正孔注入性の高い物質としては、例えば、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、及びマンガン酸化物等を用いることができる。

また、正孔注入性の高い物質としては、例えば、低分子の有機化合物である4, 4', 4''-トリス (N, N-ジフェニルアミノ) トリフェニルアミン (略称: TDATA)、4, 4', 4''-トリス [N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ] トリフェニルアミン (略称: MTDATA)、4, 4'-ビス [N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-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

ーフェニルアミノ) ビフェニル (略称: D N T P D)、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: D P A 3 B)、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: P C z P C A 1)、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: P C z P C A 2)、及び3- [N- (1-ナフチル) -N- (9-フェニルカルバゾール-3-イル) アミノ] -9-フェニルカルバゾール (略称: P C z P C N 1) 等の芳香族アミン化合物等、並びにジピラジノ [2, 3-f : 20, 30-h] キノキサリン-2, 3, 6, 7, 10, 11-ヘキサカルボニトリル (H A T-C N) 等も挙げられる。

また、正孔注入性の高い物質としては、高分子化合物を用いることもできる。高分子化合物としては、例えば、オリゴマー、デンドリマー、及びポリマー等が挙げられる。具体的には、ポリ (N-ビニルカルバゾール) (略称: P V K)、ポリ (4-ビニルトリフェニルアミン) (略称: P V T P A)、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: P T P D M A)、及びポリ [N, N' -ビス (4-ブチルフェニル) -N, N' -ビス (フェニル) ベンジジン] (略称: P o l y-T P D) 等の高分子化合物が挙げられる。また、ポリ (3, 4-エチレンジオキシチオフェン) /ポリ (スチレンスルホン酸) (P E D O T / P S S)、及びポリアニリン /ポリ (スチレンスルホン酸) (P A n i / P S S) 等の酸を添加した高分子化合物を用いることもできる。

[0362] (正孔輸送層)

正孔輸送層 7 は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層 7 には、例えば、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、及びアントラセン誘導体等を使用することができる。具体的には、4, 4' -ビス [N- (1-ナフチル) -N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: N P B)、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）、及び4，4’-ビス〔N-（スピロ-9，9’-ビフルオレン-2-イル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル（略称：BSPB）等の芳香族アミン化合物等を用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の正孔移動度を有する物質である。

正孔輸送層7には、CBP、9-〔4-（N-カルバゾリル）〕フェニル-10-フェニルアントラセン（CzPA）、及び9-フェニル-3-〔4-（10-フェニル-9-アントリル）フェニル〕-9H-カルバゾール（PCzPA）のようなカルバゾール誘導体、並びにt-BuDNA、DNA、及びDPAnthのようなアントラセン誘導体等を用いてもよい。ポリ（N-ビニルカルバゾール）（略称：PVK）、及びポリ（4-ビニルトリフェニルアミン）（略称：PVTPA）等の高分子化合物を用いることもできる。

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

正孔輸送層を二層以上配置する場合、エネルギーギャップのより大きい材料を含む層を、発光層5に近い側に配置することが好ましい。

[0363] （電子輸送層）

電子輸送層8は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層8には、（1）アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、及び亜鉛錯体等の金属錯体

、（２）イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、及びフェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、並びに（３）高分子化合物を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、 Alq_3 、トリス（４－メチル－８－キノリノラト）アルミニウム（略称： $Almq_3$ ）、ビス（１０－ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト）ベリリウム（略称： $BeBq_2$ ）、 $BAlq_3$ 、 Znq 、 $ZnPBO$ 、及び $ZnBTZ$ 等の金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、２－（４－ビフェニル）－５－（４－tert－ブチルフェニル）－１，３，４－オキサジアゾール（略称： PBD ）、１，３－ビス〔５－（ptert－ブチルフェニル）－１，３，４－オキサジアゾール－２－イル〕ベンゼン（略称： $OXD-7$ ）、３－（４－tert－ブチルフェニル）－４－フェニル－５－（４－ビフェニル）－１，２，４－トリアゾール（略称： TAZ ）、３－（４－tert－ブチルフェニル）－４－（４－エチルフェニル）－５－（４－ビフェニル）－１，２，４－トリアゾール（略称： $p-EtTAZ$ ）、バソフェナントロリン（略称： $BPhen$ ）、バソキュプロイン（略称： BCP ）、及び４，４’－ビス（５－メチルベンゾオキサゾール－２－イル）スチルベン（略称： $BzOs$ ）等の複素芳香族化合物も用いることができる。本実施形態においては、ベンゾイミダゾール化合物を好適に用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層８として用いてもよい。また、電子輸送層８は、単層だけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層した層としてもよい。

また、電子輸送層８には、高分子化合物を用いることもできる。例えば、ポリ〔（９，９－ジヘキシルフルオレン－２，７－ジイル）－co－（ピリジン－３，５－ジイル）〕（略称： $PF-Py$ ）、及びポリ〔（９，９－ジオクチルフルオレン－２，７－ジイル）－co－（２，２’－ビピリジン－６，６’－ジイル）〕（略称： $PF-BPy$ ）等を用いることができる。

[0364] (電子注入層)

電子注入層 9 は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層 9 には、リチウム (Li)、セシウム (Cs)、カルシウム (Ca)、フッ化リチウム (LiF)、フッ化セシウム (CsF)、フッ化カルシウム (CaF₂)、及びリチウム酸化物 (LiO_x) 等のような、アルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができる。その他、電子輸送性を有する物質にアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を含有させた物質、具体的には Alq 中にマグネシウム (Mg) を含有させた物質等を用いてもよい。なお、この場合には、陰極 4 からの電子注入をより効率よく行うことができる。

あるいは、電子注入層 9 に、有機化合物と電子供与体 (ドナー) とを混合してなる複合材料を用いてもよい。このような複合材料は、電子供与体によって有機化合物に電子が発生するため、電子注入性、及び電子輸送性に優れている。この場合、有機化合物としては、発生した電子の輸送に優れた材料であることが好ましく、具体的には、例えば上述した電子輸送層 8 を構成する物質 (金属錯体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、アルカリ土類金属、または希土類金属が好ましく、例えば、リチウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、エルビウム、及びイッテルビウム等が挙げられる。また、アルカリ金属酸化物、またはアルカリ土類金属酸化物を電子供与体として用いることも好ましく、例えば、リチウム酸化物、カルシウム酸化物、及びバリウム酸化物等が挙げられる。また、酸化マグネシウムのようなルイス塩基を用いることもできる。また、テトラシアフルバレン (略称: TTF) 等の有機化合物を用いることもできる。

[0365] (陰極)

陰極 4 には、仕事関数の小さい (具体的には 3.8 eV 以下) 金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物等を用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第 1 族に属する元素、元素

周期表の第2族に属する元素、希土類金属、及びこれらを含む合金等が挙げられる。元素周期表の第1族に属する元素としては、アルカリ金属が挙げられる。元素周期表の第2族に属する元素としては、アルカリ土類金属が挙げられる。アルカリ金属としては、例えば、リチウム（L i）、及びセシウム（C s）等が挙げられる。アルカリ土類金属としては、例えば、マグネシウム（M g）、カルシウム（C a）、及びストロンチウム（S r）等が挙げられる。希土類金属としては、例えば、ユーロピウム（E u）、及びイッテルビウム（Y b）等が挙げられる。これらの金属を含む合金としては、例えば、M g A g、及びA l L i等が挙げられる。

なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、及びこれらを含む合金を用いて陰極4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、銀ペースト等を用いる場合には、塗布法やインクジェット法等を用いることができる。

なお、電子注入層9を設けることにより、仕事関数の大小に関わらず、A l、A g、I T O、グラフェン、及び珪素または酸化珪素を含有した酸化インジウム－酸化スズ等、様々な導電性材料を用いて陰極4を形成することができる。これらの導電性材料は、スパッタリング法、インクジェット法、及びスピコート法等を用いて成膜することができる。

[0366]（層形成方法）

本実施形態の有機E L素子1の各層の形成方法としては、上記で特に言及した以外には制限されず、乾式成膜法、及び湿式成膜法等の公知の方法を採用できる。乾式成膜法としては、真空蒸着法、スパッタリング法、プラズマ法、イオンプレーティング法等が挙げられる。湿式成膜法としては、スピコーティング法、ディッピング法、フローコーティング法、インクジェット法等が挙げられる。

[0367]（膜厚）

本実施形態の有機E L素子1の各有機層の膜厚は、上記で特に言及した以外には制限されない。一般に、ピンホール等の欠陥を生じ難くするため、か

つ高い印加電圧が必要となることによる効率の悪化を防止するため、通常、膜厚は、数 nm から 1 μ m の範囲が好ましい。

[0368] 本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が 6 であり、ナフタレン環は環形成炭素数が 10 であり、ピリジニル基は環形成炭素数 5 であり、フラニル基は環形成炭素数 4 である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

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

次に前記一般式に記載の各置換基について説明する。

[0369] 本明細書における環形成炭素数6～30のアリール基（芳香族炭化水素基と称する場合がある。）、又は環形成炭素数6～50のアリール基としては、例えば、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、フルオレニル基、ピレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾ[a]アントリル基、ベンゾ[c]フェナントリル基、トリフェニレニル基、ベンゾ[k]フルオランテニル基、ベンゾ[g]クリセニル基、ベンゾ[b]トリフェニレニル基、ピセニル基、及びペリレニル基等が挙げられる。

本明細書におけるアリール基としては、環形成炭素数が6～20であることが好ましく、6～14であることがより好ましく、6～12であることがさらに好ましい。上記アリール基の中でもフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、ターフェニル基、フルオレニル基がさらにより好ましい。1-フルオレニル基、2-フルオレニル基、3-フルオレニル基及び4-フルオレニル基については、9位の炭素原子に、後述する本明細書における置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基や、置換または無置換の環形成炭素数6～18のアリール基が置換されていることが好ましい。

[0370] 本明細書における環形成原子数5～30のヘテロアリール基（複素環基、ヘテロ芳香族環基、または芳香族複素環基と称する場合がある。）、又は環形成原子数5～50の複素環基は、ヘテロ原子として、窒素、硫黄、酸素、ケイ素、セレン原子、及びゲルマニウム原子からなる群から選択される少なくともいずれかの原子を含むことが好ましく、窒素、硫黄、及び酸素からなる群から選択される少なくともいずれかの原子を含むことがより好ましい。

本明細書における環形成原子数5～30の複素環基、又は環形成原子数5～50の複素環基としては、例えば、ピリジル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリニル基、ナフチリジニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、ピロリ

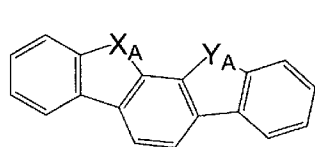
ル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾピリジニル基、ベンズトリアゾリル基、カルバゾリル基、フリル基、チエニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサジアゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ピペリジニル基、ピロリジニル基、ピペラジニル基、モルホリル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、及びフェノキサジニル基等が挙げられる。

本明細書における複素環基の環形成原子数は、5～20であることが好ましく、5～14であることがさらに好ましい。上記複素環基の中でも1-ジベンゾフラニル基、2-ジベンゾフラニル基、3-ジベンゾフラニル基、4-ジベンゾフラニル基、1-ジベンゾチオフェニル基、2-ジベンゾチオフェニル基、3-ジベンゾチオフェニル基、4-ジベンゾチオフェニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、及び9-カルバゾリル基がさらに好ましい。1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基及び4-カルバゾリル基については、9位の窒素原子に、本明細書における置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基や、置換または無置換の環形成原子数5～30の複素環基が置換していることが好ましい。

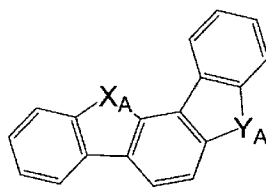
[0371] また、本明細書において、複素環基は、例えば、下記一般式(XY-1)～(XY-18)で表される部分構造から誘導される基であってもよい。

[0372]

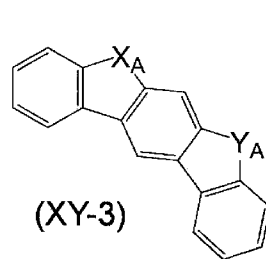
[化166]



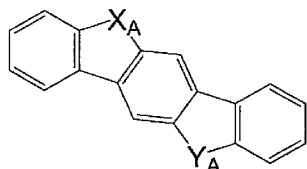
(XY-1)



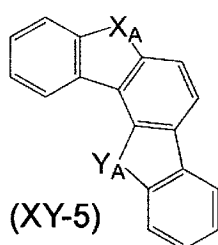
(XY-2)



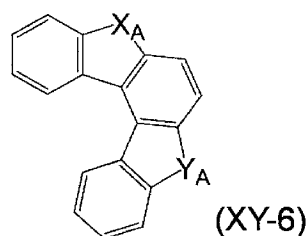
(XY-3)



(XY-4)

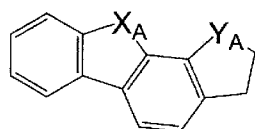


(XY-5)

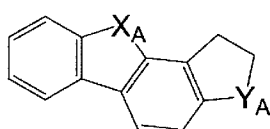


(XY-6)

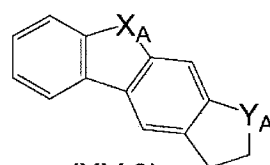
[0373] [化167]



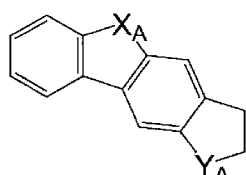
(XY-7)



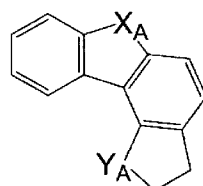
(XY-8)



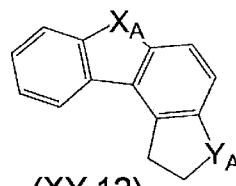
(XY-9)



(XY-10)

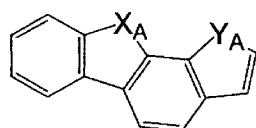


(XY-11)

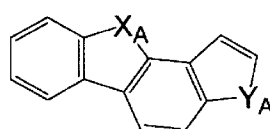


(XY-12)

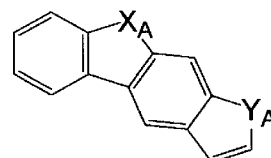
[0374] [化168]



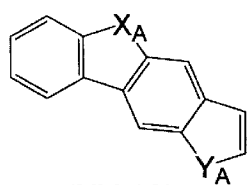
(XY-13)



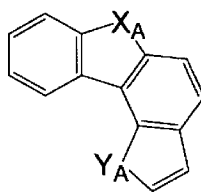
(XY-14)



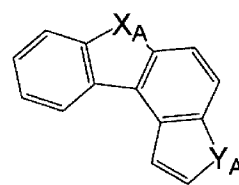
(XY-15)



(XY-16)



(XY-17)

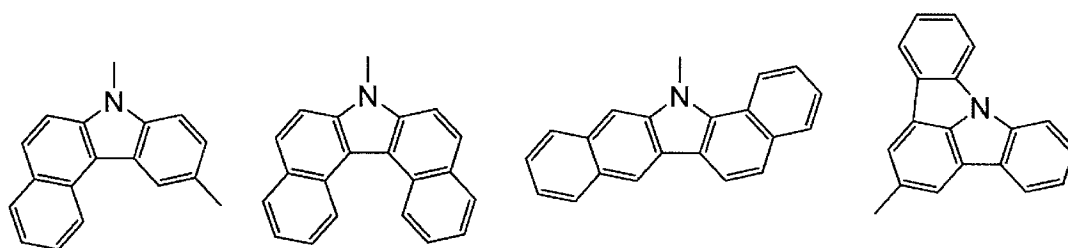


(XY-18)

[0375] 前記一般式 (XY-1) ~ (XY-18) において、 X_A 及び Y_A は、それぞれ独立に、ヘテロ原子であり、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、ケイ素原子、またはゲルマニウム原子であることが好ましい。前記一般式 (XY-1) ~ (XY-18) で表される部分構造は、任意の位置で結合手を有して複素環基となり、この複素環基は、置換基を有していてもよい。

[0376] また、本明細書において、置換または無置換のカルバゾリル基としては、例えば、下記式で表されるような、カルバゾール環に対してさらに環が縮合した基も含み得る。このような基も置換基を有していてもよい。また、結合手の位置も適宜変更され得る。

[0377] [化169]



[0378] 本明細書における炭素数 1 ~ 30 のアルキル基又は炭素数 1 ~ 50 のアルキル基としては、直鎖、分岐鎖または環状のいずれであってもよい。また、ハロゲン化アルキル基であってもよい。

直鎖または分岐鎖のアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、*n*-ノニル基、*n*-デシル基、*n*-ウンデシル基、*n*-ドデシル基、*n*-トリデシル基、*n*-テトラデシル基、*n*-ペンタデシル基、*n*-ヘキサデシル基、*n*-ヘプタデシル基、*n*-オクタデシル基、ネオペンチル基、アミル基、イソアミル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、及び 3-メチルペンチル基等が挙げられる。

本明細書における直鎖または分岐鎖のアルキル基の炭素数は、1 ~ 10 で

あることが好ましく、1～6であることがさらに好ましい。上記直鎖または分岐鎖のアルキル基の中でもメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、アミル基、イソアミル基、及びネオペンチル基がさらに好ましい。

[0379] 本明細書における環状のアルキル基としては、例えば、環形成炭素数3～30のシクロアルキル基又は環形成炭素数3～50のシクロアルキル基が挙げられる。

本明細書における環形成炭素数3～30のシクロアルキル基又は環形成炭素数3～50のシクロアルキル基としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、4-メチルシクロヘキシル基、アダマンチル基、及びノルボルニル基等が挙げられる。シクロアルキル基の環形成炭素数は、3～10であることが好ましく、5～8であることがさらに好ましい。上記シクロアルキル基の中でも、シクロペンチル基やシクロヘキシル基がさらに好ましい。

[0380] 本明細書におけるアルキル基がハロゲン原子で置換されたハロゲン化アルキル基としては、例えば、上記炭素数1～30のアルキル基が1以上のハロゲン原子、好ましくはフッ素原子で置換された基が挙げられる。

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

[0381] 本明細書における置換シリル基としては、例えば、炭素数3～30のアルキルシリル基、及び環形成炭素数6～30のアリールシリル基が挙げられる。

本明細書における炭素数3～30のアルキルシリル基としては、上記炭素数1～30のアルキル基で例示したアルキル基を有するトリアルキルシリル基が挙げられ、具体的にはトリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリ

ー n ーブチルシリル基、トリー n ーオクチルシリル基、トリイソブチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルイソプロピルシリル基、ジメチルー n ープロピルシリル基、ジメチルー n ーブチルシリル基、ジメチルー t ーブチルシリル基、ジエチルイソプロピルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、及びトリイソプロピルシリル基等が挙げられる。トリアルキルシリル基における3つのアルキル基は、互いに同一でも異なっているもよい。

[0382] 本明細書における環形成炭素数6～30のアリールシリル基としては、例えば、ジアルキルアリールシリル基、アルキルジアリールシリル基、及びトリアリールシリル基が挙げられる。

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

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

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

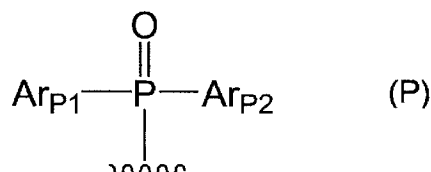
[0383] 本明細書において、アラルキル基（アリールアルキル基と称する場合がある）におけるアリール基は、芳香族炭化水素基、または複素環基である。

本明細書における炭素数7～30のアラルキル基としては、環形成炭素数6～30のアリール基を有する基であることが好ましく、又、本明細書における炭素数7～50のアラルキル基としては、環形成炭素数6～50のアリール基を有する基であることが好ましく、それぞれ、 $-Z_3-Z_4$ と表される。この Z_3 の例として、上記炭素数1～30のアルキル基又は炭素数1～50

のアルキル基に対応するアルキレン基等が挙げられる。この Z_4 の例として、例えば、上記環形成炭素数6～30のアリール基又は環形成炭素数6～50のアリール基の例が挙げられる。このアラルキル基は、アリール部分が炭素数6～30（好ましくは6～20、より好ましくは6～12）、アルキル部分が炭素数1～30（好ましくは1～20、より好ましくは1～10、さらに好ましくは1～6）であることが好ましい。このアラルキル基としては、例えば、ベンジル基、2-フェニルプロパン-2-イル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-*t*-ブチル基、 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。

[0384] 本明細書における置換ホスホリル基は、下記一般式（P）で表される。

[0385] [化170]



[0386] 前記一般式（P）において、 $\text{Ar}_{\text{P}1}$ 及び $\text{Ar}_{\text{P}2}$ は、それぞれ独立に、置換基であり、炭素数1～30のアルキル基、及び環形成炭素数6～30のアリール基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましく、炭素数1～10のアルキル基、及び環形成炭素数6～20のアリール基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることがより好ましく、炭素数1～6のアルキル基、及び環形成炭素数6～14のアリール基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることがさらに好ましい。

[0387] 本明細書における炭素数1～30のアルコキシ基又は炭素数1～50のアルコキシ基は、 $-\text{OZ}_1$ と表される。この Z_1 の例として、上記炭素数1～30のアルキル基又は炭素数1～50のアルキル基が挙げられる。アルコキシ

基は、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペンチルオキシ基、及びヘキシルオキシ基等が挙げられる。アルコキシ基の炭素数は、1～20であることが好ましい。

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

[0388] 本明細書において、アリールオキシ基（アリールアルコキシ基と称する場合がある）におけるアリール基は、ヘテロアリール基も含む。

本明細書における環形成炭素数6～30のアリールアルコキシ基又は環形成炭素数6～50のアリールオキシ基は、 $-OZ_2$ と表される。この Z_2 の例として、例えば、上記環形成炭素数6～30のアリール基又は環形成炭素数6～50のアリール基等が挙げられる。アリールアルコキシ基の環形成炭素数は、6～20であることが好ましい。このアリールアルコキシ基としては、例えば、フェノキシ基が挙げられる。

[0389] 本明細書における置換アミノ基は、 $-NHR_v$ 、または $-N(R_v)_2$ と表される。この R_v の例として、例えば、上記炭素数1～30のアルキル基、及び上記環形成炭素数6～30のアリール基等が挙げられる。

[0390] 本明細書における炭素数2～30のアルケニル基又は炭素数2～50のアルケニル基としては、直鎖または分岐鎖のいずれかであり、例えば、ビニル基、プロペニル基、ブテニル基、オレイル基、エイコサペンタエニル基、ドコサヘキサエニル基、スチリル基、2,2-ジフェニルビニル基、1,2,2-トリフェニルビニル基、及び2-フェニル-2-プロペニル基等が挙げられる。

[0391] 本明細書における炭素数2～30のアルキニル基又は炭素数2～50のアルキニル基としては、直鎖または分岐鎖のいずれであってもよく、例えば、エチニル、プロピニル、および2-フェニルエチニル等が挙げられる。

[0392] 本明細書における置換ホスファニル基としては、例えば、フェニルホスファニル基等が挙げられる。

[0393] 本明細書における環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基は、 $-COOY'$ と表される。この Y' の例として、上記アリール基が挙げられる。

本明細書における環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基としては、例えば、フェニルカルボニル基、ジフェニルカルボニル基、ナフチルカルボニル基、及びトリフェニルカルボニル基等が挙げられる。

[0394] 本明細書における炭素数1～30のアルキルチオ基、炭素数1～50のアルキルチオ基、環形成炭素数6～30のアリールチオ基、及び環形成炭素数6～50のアリールチオ基は、それぞれ、 $-SR_v$ と表される。この R_v の例として、上記炭素数1～30のアルキル基、上記炭素数1～50のアルキル基、上記環形成炭素数6～30のアリール基、及び上記環形成炭素数6～50のアリール基が挙げられる。アルキルチオ基の炭素数は、1～20であることが好ましく、アリールチオ基の環形成炭素数は、6～20であることが好ましい。

[0395] 本明細書におけるハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、及びヨウ素原子等が挙げられ、フッ素原子が好ましい。

[0396] 本明細書において、「環形成炭素」とは飽和環、不飽和環、または芳香環を構成する炭素原子を意味する。「環形成原子」とはヘテロ環（飽和環、不飽和環、及び芳香環を含む）を構成する炭素原子及びヘテロ原子を意味する。

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

[0397] 本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基としては、環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、環形成炭素数3～30のシクロアルキル基、炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、炭素数3～30のアルキルシリル基、環形成炭素数6～30のアリールシリル基、炭素数1～30のアルコキシ基、炭素数6～30の

アリールオキシ基、置換アミノ基、炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基、炭素数 7 ～ 30 のアラルキル基、炭素数 2 ～ 30 のアルケニル基、ハロゲン原子の他に、炭素数 2 ～ 30 のアルキニル基、シアノ基、ヒドロキシル基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択される少なくとも一種の基が挙げられる。

[0398] 本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基としては、環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される少なくとも一種の基が好ましく、さらには、各置換基の説明において好ましいとした具体的な置換基が好ましい。

[0399] 本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基は、環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、環形成炭素数 3 ～ 30 のシクロアルキル基、炭素数 1 ～ 30 のハロゲン化アルキル基、炭素数 3 ～ 30 のアルキルシリル基、環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールシリル基、炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、置換アミノ基、炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基、炭素数 7 ～ 30 のアラルキル基、炭素数 2 ～ 30 のアルケニル基、炭素数 2 ～ 30 のアルキニル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択される少なくとも一種の基によってさらに置換されてもよい。また、これらの置換基は複数が互いに結合して環を形成してもよい。

[0400] 本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基に、さらに置換する置換基としては、環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ～ 30 のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される少なくとも一種の基であることが好ましく、各置換基の説明に

において好ましいとした具体的な置換基から選択される少なくとも一種の基であることがさらに好ましい。

[0401] 「置換または無置換の」という場合における「無置換」とは前記置換基で置換されておらず、水素原子が結合していることを意味する。

なお、本明細書において、「置換または無置換の炭素数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の炭素数を表し、置換されている場合の置換基の炭素数は含めない。ここで、「 YY 」は「 XX 」よりも大きく、「 XX 」と「 YY 」はそれぞれ1以上の整数を意味する。

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

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

[0402] 本明細書において、置換基同士が互いに結合して環が構築される場合、当該環の構造は、飽和環、不飽和環、芳香族炭化水素環、または複素環である。

[0403] 本明細書において、連結基における芳香族炭化水素基や複素環基等としては、上述した一価の基から、1つ以上の原子を除いて得られる二価以上の基が挙げられる。

[0404] 本実施形態に係る有機EL素子によれば、高効率で発光する。

また、本実施形態に係る有機EL素子によれば、特に、青色の波長領域において、有機EL素子の発光効率を向上させることができる。

[0405] (電子機器)

本発明の一実施形態に係る有機EL素子1は、表示装置や発光装置等の電子機器に使用できる。表示装置としては、例えば、表示部品(有機ELパネ

ルモジュール等)、テレビ、携帯電話、タブレット、及びパーソナルコンピュータ等が挙げられる。発光装置としては、例えば、照明、及び車両用灯具等が挙げられる。

[0406] [第二実施形態]

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

[0407] 第二実施形態に係る有機EL素子は、発光層が、第三の化合物をさらに含んでいる点で、第一実施形態に係る有機EL素子と異なる。その他の点については第一実施形態と同様である。

[0408] <第三の化合物>

前記第三の化合物の一重項エネルギー $S_1(M3)$ と、前記第一の化合物の一重項エネルギー $S_1(M1)$ とが、下記数式(数2)の関係を満たすことが好ましい。

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

[0409] 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。

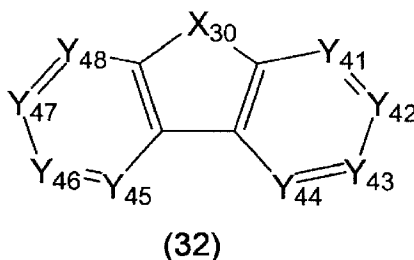
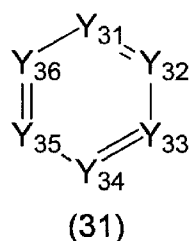
[0410] 第三の化合物は、ホスト材料(マトリックス材料と称する場合もある。)であることも好ましい。第一の化合物及び第三の化合物がホスト材料である場合、例えば、一方を第一のホスト材料と称し、他方を第二のホスト材料と称する場合もある。

[0411] 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。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。

[0412] 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

、及び下記一般式（３２）で表される部分構造のうち少なくともいずれかを
含む化合物であることも好ましい。

[0413] [化171]



[0414] 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、

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、

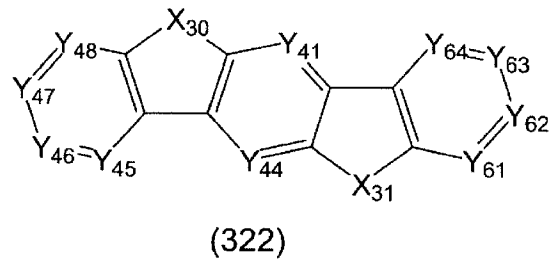
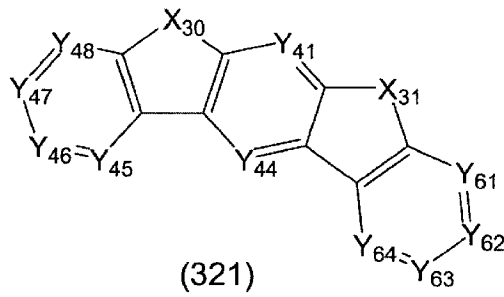
X_{30} は、窒素原子、酸素原子、または硫黄原子である。

[0415] 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。

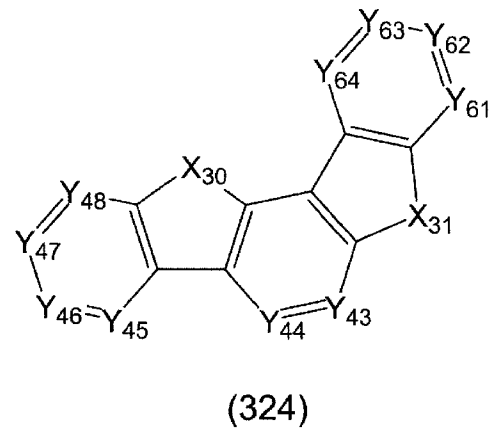
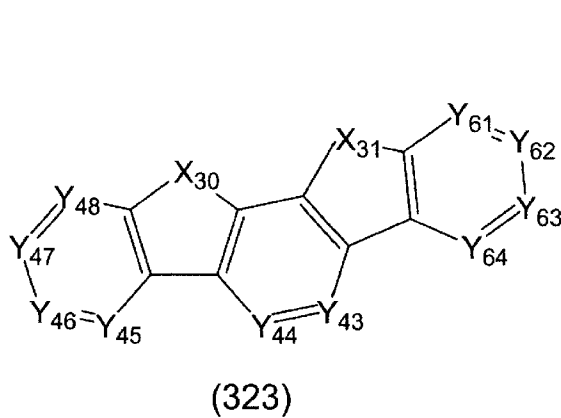
例えば、前記一般式（３２）で表される部分構造が、下記一般式（３２１）
、一般式（３２２）、一般式（３２３）、一般式（３２４）、一般式（３
２５）、及び一般式（３２６）で表される部分構造からなる群から選択され
るいずれかの部分構造であることが好ましい。

[0416]

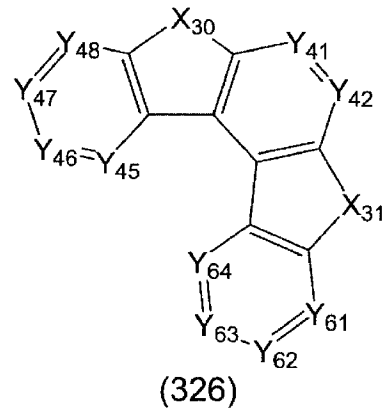
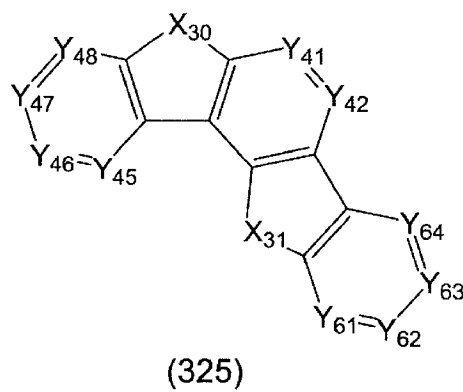
[化172]



[0417] [化173]



[0418] [化174]



[0419] 前記一般式(321)～(326)において、

 X_{30} は、それぞれ独立に、窒素原子、酸素原子、または硫黄原子であり、 $Y_{41} \sim Y_{48}$ 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、 X_{31} は、それぞれ独立に、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、または炭素原

子であり、

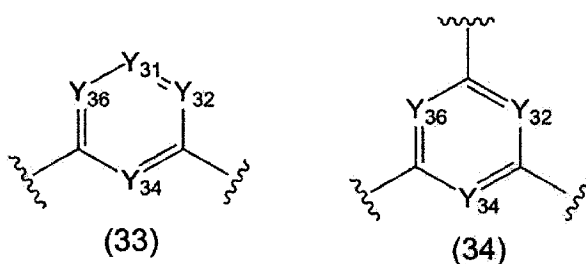
$Y_{61} \sim Y_{64}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子である。

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。

[0420] 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。

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} (M 3) を高く保つことができる。

[0421] [化175]



[0422] 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 (33) 及び前記一般式 (34) において、波線部分は、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。

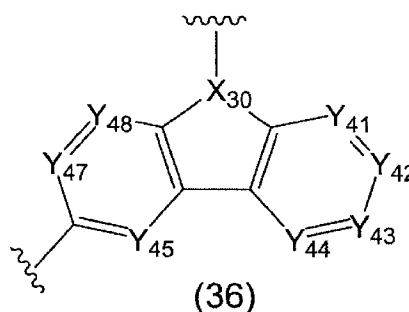
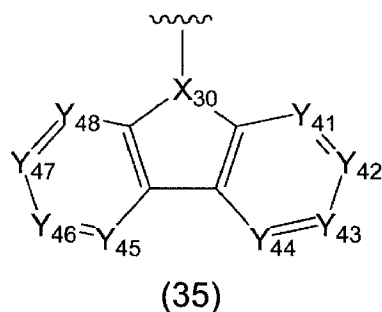
[0423] 前記一般式 (33) において、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{34} 及び Y_{36} は、それぞれ独立に、 CR_{31} であることが好ましく、複数の R_{31} は、互いに同一であるか、または異なる。

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

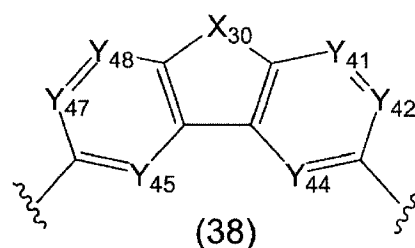
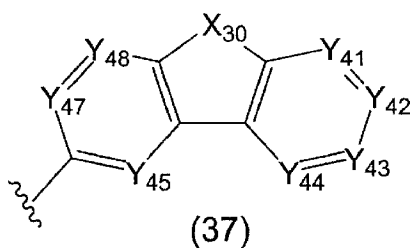
[0424] 置換ゲルマニウム基は、 $-Ge(R_{301})_3$ で表されることが好ましい。 R_{301} は、それぞれ独立に、置換基である。置換基 R_{301} は、置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、または置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基であることが好ましい。複数の R_{301} は、互いに同一であるかまたは異なる。

[0425] 前記一般式(32)で表される部分構造は、下記一般式(35)～(39)及び下記一般式(30a)で表される基からなる群から選択される少なくともいずれかの基として第三の化合物に含まれることが好ましい。

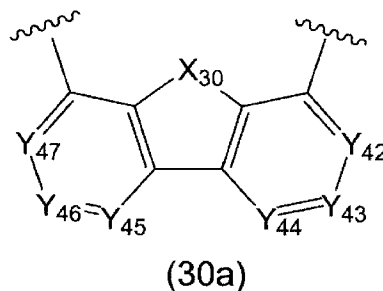
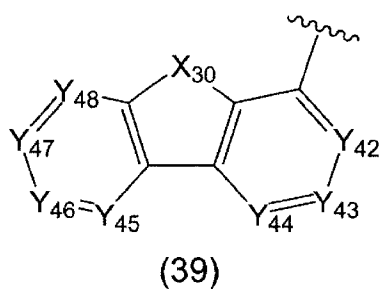
[0426] [化176]



[0427] [化177]



[0428] [化178]



[0429] 前記一般式(35)において、 Y_{41} 乃至 Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{32} である。

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

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

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

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

前記一般式 (35) ~ (39), 及び (30a) において、

R_{32} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、

置換基としての R_{32} は、

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 (35) 及び (36) において、 X_{30} は、窒素原子である。

前記一般式 (37) ~ (39), 及び (30a) において、

X_{30} は、 NR_{33} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

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), (30a) において、波線部分は、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。

[0430] 前記一般式 (35) において、 $Y_{41} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式 (36) 及び前記一般式 (37) において、 $Y_{41} \sim Y_{45}$, Y_{47} 及び Y_{48} は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式 (38) において、 Y_{41} , Y_{42} , Y_{44} , Y_{45} , Y_{47} 及び Y_{48} は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式 (39) において、 $Y_{42} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式 (30a) において、 $Y_{42} \sim Y_{47}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、複数の R_{32} は、互いに同一であるかまたは異なる。

[0431] 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。

[0432] 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。

[0433] 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。また、第三の化合物は、分子中に縮合芳香族炭化水素環を有していないことが好ましい。

[0434] ・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や原料を用いることで、第三の化合物を製造できる。

[0435] 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。

[0436] 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。

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、及びフルオレニル基が好ましい。

[0437] 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、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、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、ジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、アザジベンゾフラニル基、及びアザジベンゾチオフェ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、ジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、アザジベンゾフラニル基、アザジベンゾチオフェニル基が好ましく、ジベンゾフ

ラニル基、ジベンゾチオフェニル基、アザジベンゾフラニル基、及びアザジベンゾチオフェニル基がさらに好ましい。

[0438] 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。

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。

[0439] 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。

[0440] 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。

[0441] <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>

発光層における第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物は、前記数式（数1）及び前記数式（数2）の関係を満たすことが好ましい。すなわち、下記数式（数3）の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(M3) > S_1(M1) > S_1(M2) \quad \dots \text{ (数3)}$$

[0442] 第三の化合物の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M3)$ は、第一の化合物の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M1)$ よりも大きいことが好ましい。すなわち、下記数式（数5）の関係を満たすことが

好ましい。

$$T_{77K}(M3) > T_{77K}(M1) \quad \dots (\text{数}5)$$

[0443] 第三の化合物の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M3)$ は、第二の化合物の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M2)$ よりも大きいことが好ましい。すなわち、下記数式(数6)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(M3) > T_{77K}(M2) \quad \dots (\text{数}6)$$

[0444] 発光層における第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物は、前記数式(数4)及び前記数式(数5)の関係を満たすことが好ましい。すなわち、下記数式(数7)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(M3) > T_{77K}(M1) > T_{77K}(M2) \quad \dots (\text{数}7)$$

[0445] 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、主に第二の化合物が発光していることが好ましい。

[0446] ・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、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、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。

第二の化合物の含有率は、0.01質量%以上10質量%以下であることが好ましく、0.01質量%以上5質量%以下であることがより好ましく、0.01質量%以上1質量%以下であることがさらに好ましい。

第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。

[0447] 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(M1)からS1(M2)へ向かう破線の矢印は、第一の化合物の最低励起一重項状態から第二の化合物の最低励起一重項状態へのフェルスター型エネルギー移動を表す。

図5に示すように、第一の化合物として $\Delta ST(M1)$ の小さな化合物を用いると、最低励起三重項状態T1(M1)は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態S1(M1)に逆項間交差が可能である。そして、第一の化合物の最低励起一重項状態S1(M1)から第二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(M2)が生成する。この結果、第二の化合物の最低励起一重項状態S1(M2)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。

[0448] 第二実施形態に係る有機EL素子によれば、高効率で発光する。

また、第二実施形態に係る有機EL素子によれば、特に、青色の波長領域において、有機EL素子の発光効率を向上させることができる。

[0449] 第二実施形態の有機EL素子は、発光層に、遅延蛍光性の第一の化合物と、蛍光発光性の第二の化合物と、第一の化合物よりも大きな一重項エネルギーを有する第三の化合物と、を含んでおり、発光効率が向上する。発光効率が向上する理由としては、第三の化合物が含まれていることによって発光層のキャリアバランスが改善されるためと考えられる。

[0450] 第二実施形態に係る有機EL素子は、第一の実施形態に係る有機EL素子

と同様に、表示装置や発光装置等の電子機器に使用できる。

[0451] 〔実施形態の変形〕

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

[0452] 例えば、発光層は、1層に限られず、複数の発光層が積層されていてもよい。有機EL素子が複数の発光層を有する場合、少なくとも1つの発光層が上記実施形態で説明した条件を満たしていればよい。例えば、その他の発光層が、蛍光発光型の発光層であっても、三重項励起状態から直接基底状態への電子遷移による発光を利用した燐光発光型の発光層であってもよい。

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

[0453] また、例えば、発光層の陽極側、及び陰極側の少なくとも一方に障壁層を隣接させて設けてもよい。障壁層は、発光層に接して配置され、正孔、電子、及び励起子の少なくともいずれかを阻止することが好ましい。

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

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

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

[0454] 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。

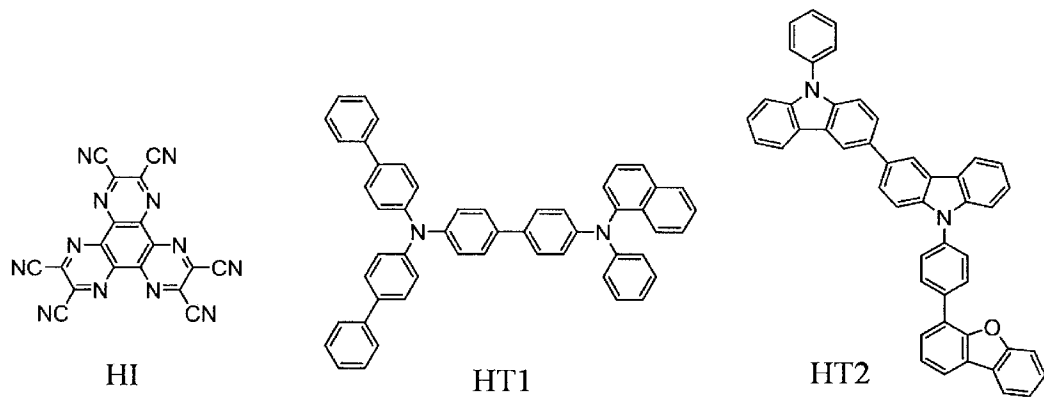
実施例

[0455] 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。

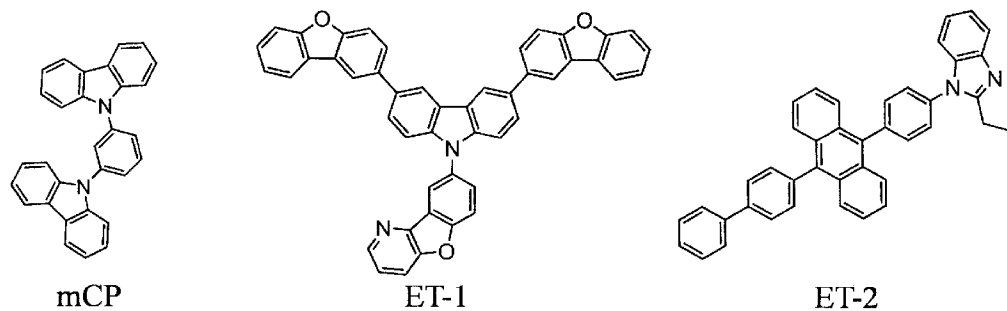
[0456] <化合物>

有機EL素子の製造に用いた化合物を以下に示す。

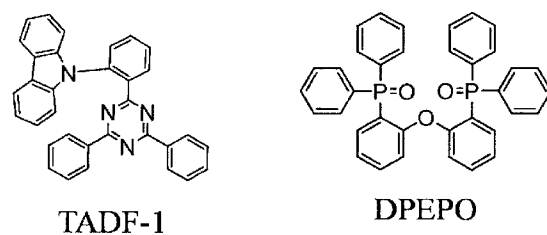
[0457] [化179]



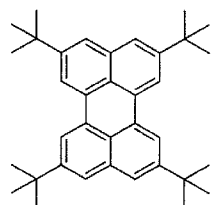
[0458] [化180]



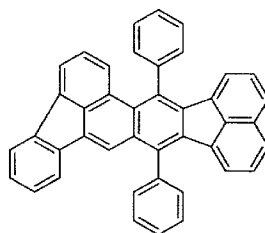
[0459] [化181]



[0460] [化182]

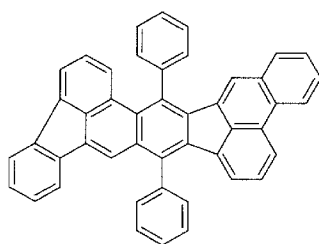


TBPc



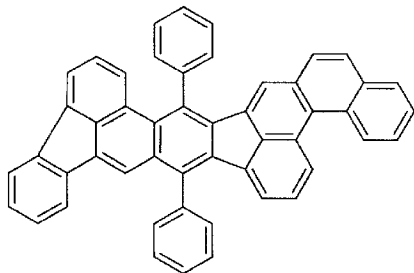
ref-1

[0461] [化183]

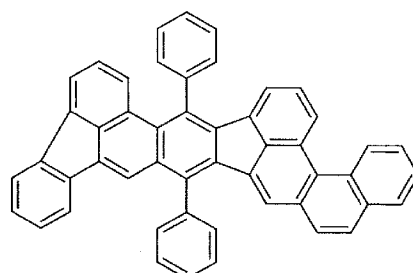


Ref-2

[0462] [化184]

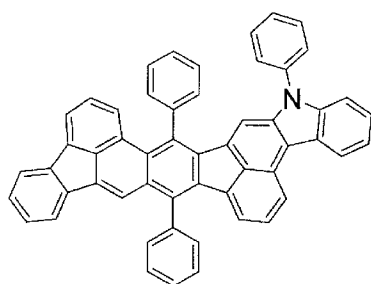


BD-1a

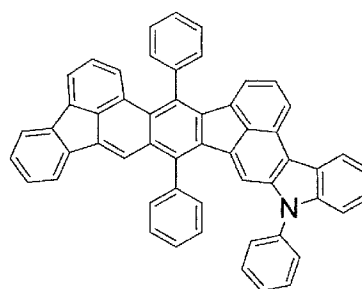


BD-1b

[0463] [化185]



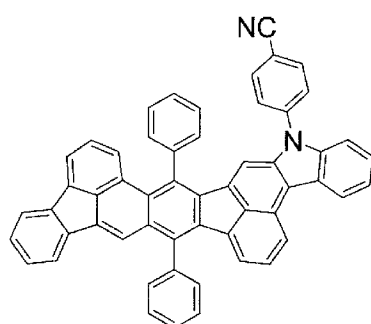
BD-2a



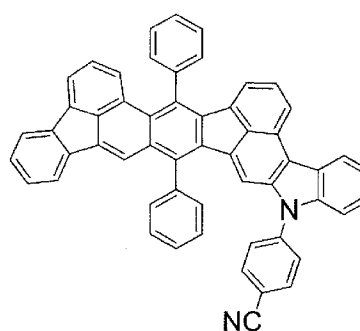
BD-2b

[0464]

[化186]

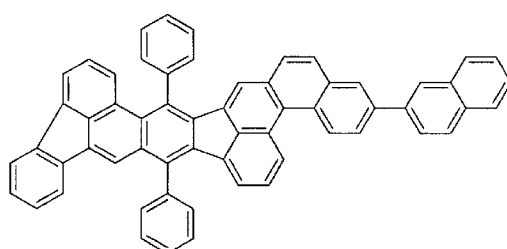


BD-3a

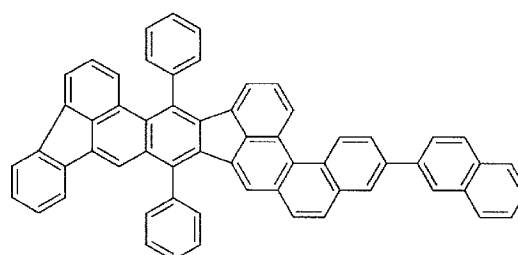


BD-3b

[0465] [化187]

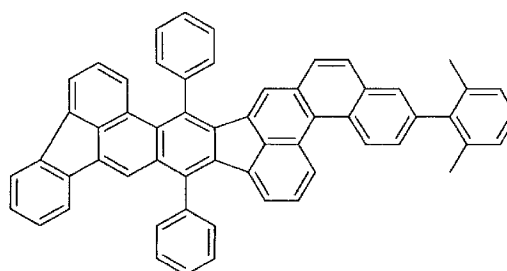


BD-4a

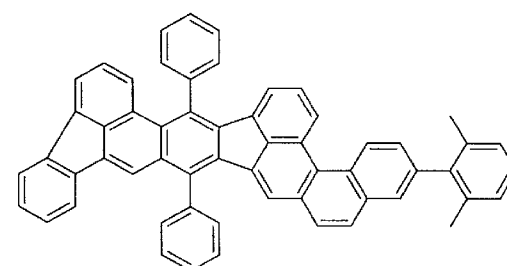


BD-4b

[0466] [化188]

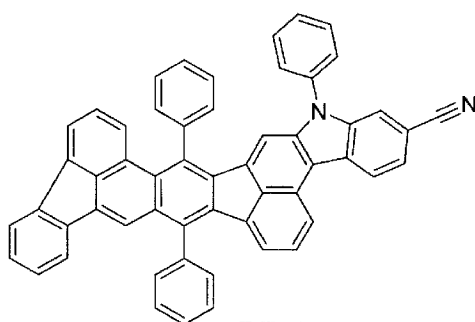


BD-5a

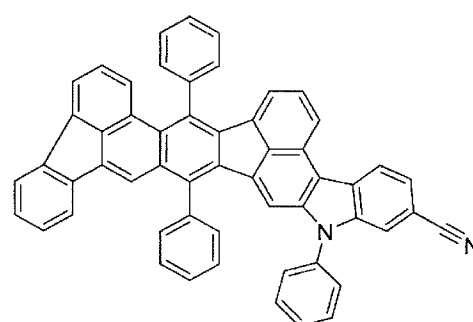


BD-5b

[0467] [化189]

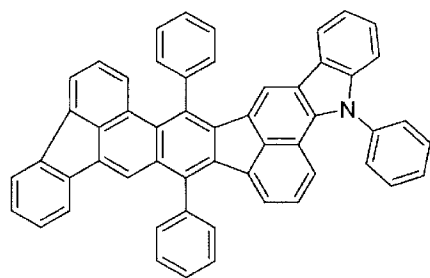


BD-6a

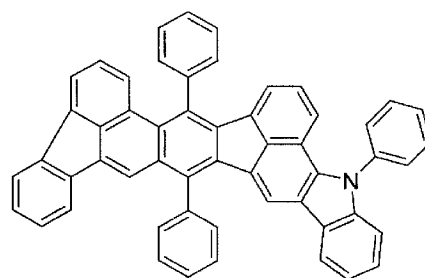


BD-6b

[0468] [化190]

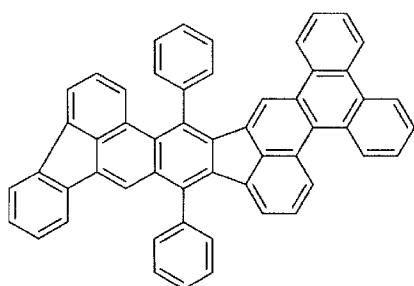


BD-7a

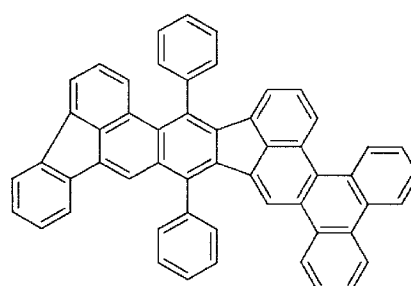


BD-7b

[0469] [化191]

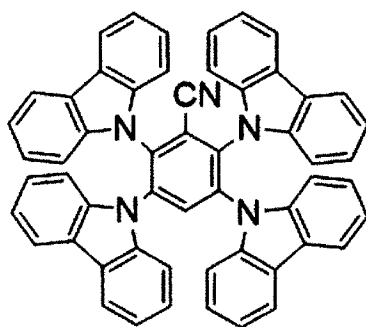


BD-8a

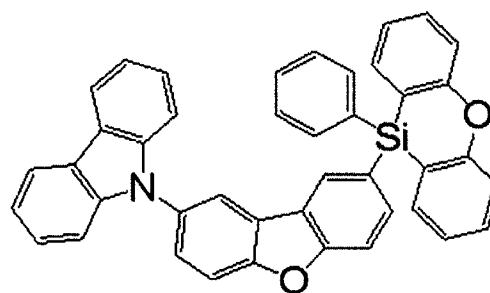


BD-8b

[0470] [化192]



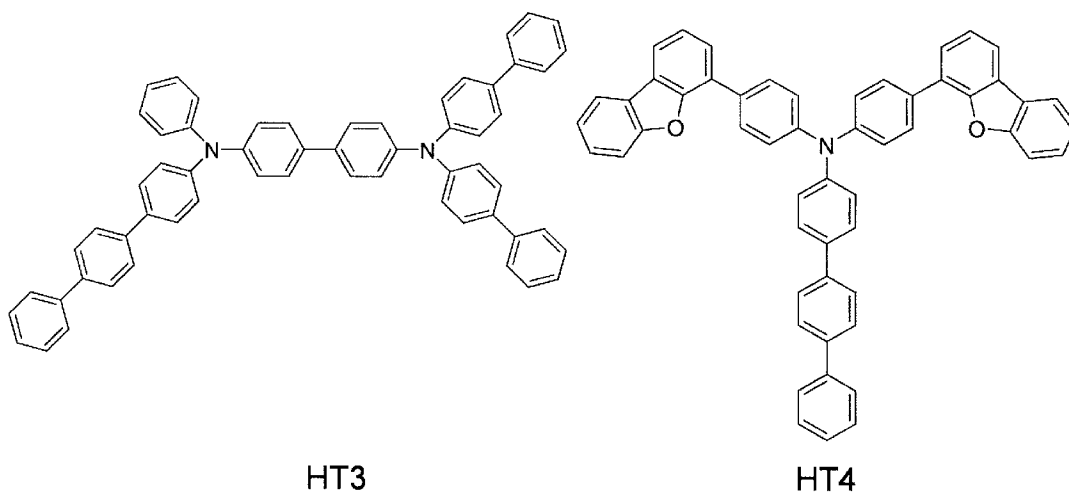
TADF-2



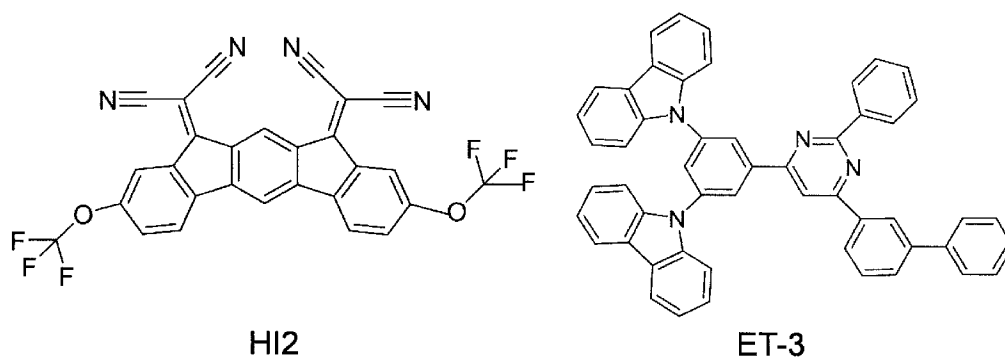
A-1

[0471]

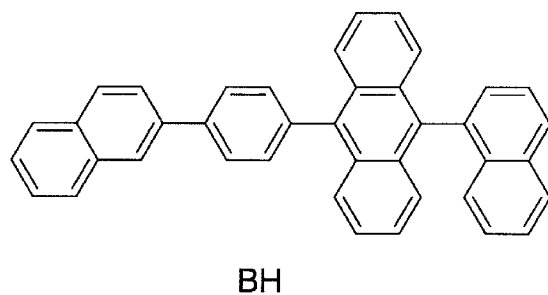
[化193]



[0472] [化194]



[0473] [化195]



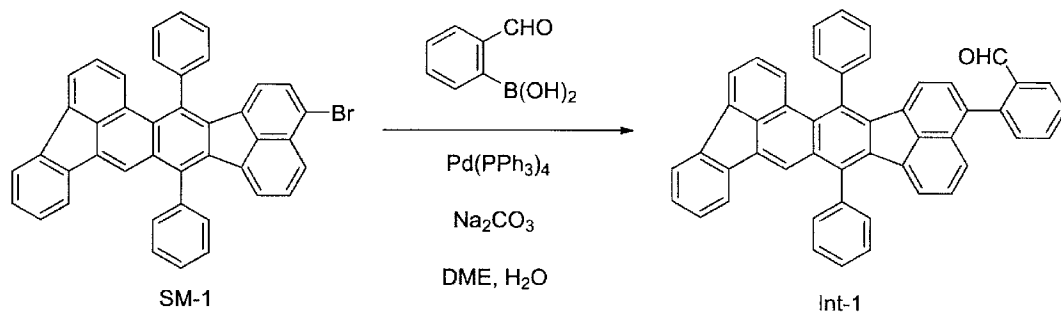
[0474] <化合物の合成>

[0475] ・合成実施例 1 : 化合物 BD-1 の合成

(1-1) 中間体 (Int-1) の合成

[0476]

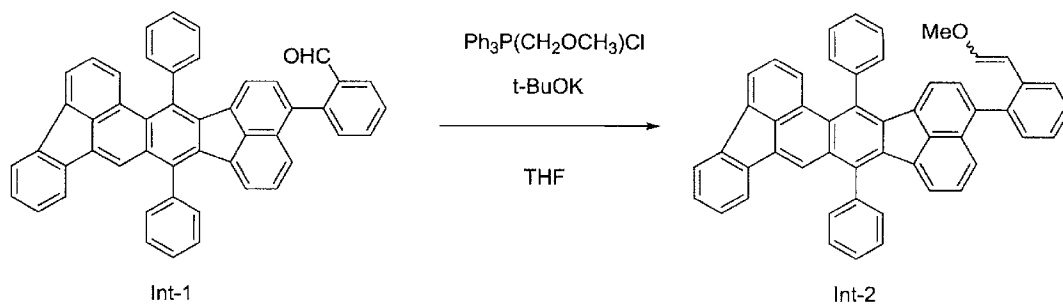
[化196]



[0477]三口フラスコに、原料（SM-1：異性体混合物）2.0 g（3.29 mmol）、2-ホルミルフェニルボロン酸0.59 g（3.95 mmol）、炭酸ナトリウム0.87 g（8.23 mmol）、1,2-ジメトキシエタン（DME）10 mL、及び水10 mLを加え、次いで、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム0.19 g（0.17 mmol）をさらに加えて、アルゴン雰囲気下にて8時間、加熱還流撹拌した。加熱還流撹拌の後、有機層を分取した。分取した有機層を減圧下で濃縮し、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より精製した。展開溶媒としてジクロロメタンとn-ヘキサンとの混合溶媒を用いた。精製後、得られた固体をメタノールで懸濁洗浄することにより、中間体（Int-1）を得た。収量は2.1 g、収率は100%であった。

[0478]（1-2）中間体（Int-2）の合成

[0479] [化197]

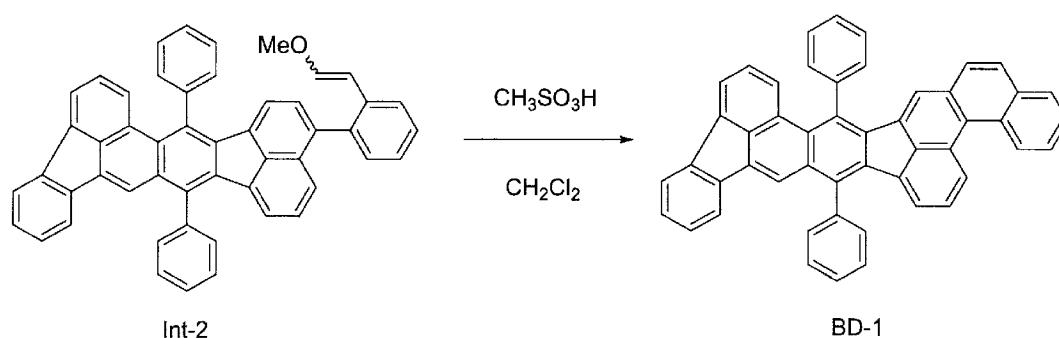


[0480]三口フラスコに、（メトキシメチル）トリフェニルホスホニウムクロリド1.7 g（4.98 mmol）、テトラヒドロフラン（THF）3.5 mLを加え、次いで、カリウムt-ブトキシド0.61 g（5.48 mmol）

を加え、赤色のイリド溶液を調製した。更に中間体 (Int-1) 2.1 g (3.29 mmol) の THF 溶液 (5 mL) を加えて、アルゴン雰囲気下にて 2 時間、攪拌した。水を加え反応を停止した後、ジクロロメタンにて抽出した。抽出した有機層を減圧下で濃縮し、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より精製した。展開溶媒としてジクロロメタンと *n*-ヘキサンの混合溶媒を用いた。精製後、得られた固体をメタノールで懸濁洗浄することにより、中間体 (Int-2) を得た。収量は 1.8 g、収率は 82% であった。

[0481] (1-3) 化合物 BD-1 の合成

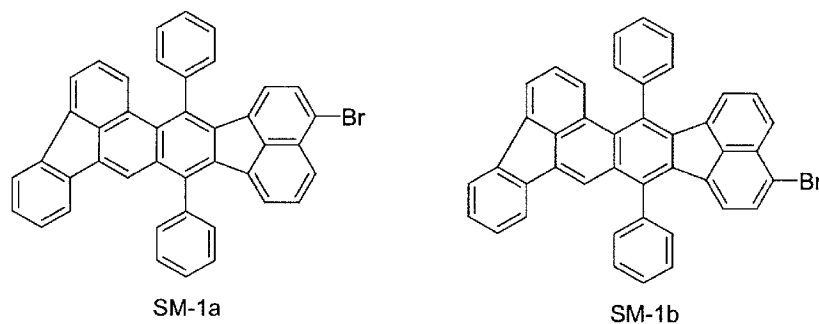
[0482] [化198]



[0483]三口フラスコに、中間体 (Int-2) 1.8 g (2.72 mmol)、ジクロロメタン 25 mL を加え、次いで、メタンスルホン酸 0.26 g (2.72 mmol) を滴下し、0.5 時間、攪拌した。炭酸水素ナトリウム水溶液を加え反応を停止した後、ジクロロメタンにて抽出した。抽出した有機層を減圧下で濃縮し、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より精製した。展開溶媒としてジクロロメタンと *n*-ヘキサンの混合溶媒を用いた。精製後、得られた固体をメタノールで懸濁洗浄することにより、目的物 (化合物 BD-1) を黄色固体として得た。収量は 0.84 g、収率は 49% であった。FD-MS (Field Desorption Mass Spectrometry) 分析の結果、分子量 628 に対して $m/e = 628$ であった。なお、出発原料 (SM-1) が異性体混合物 (SM-1 a と SM-1 b との混合物) であることに由来し、BD-1 は BD-1 a

とBD-1bの混合物であった。ただし、本合成実施例1の反応式中では、「SM-1」としてはSM-1aの構造のみを、また「BD-1」としてはBD-1aの構造のみを代表として示した。中間体Int-1及びInt-2も、SM-1aから得られる中間体のみを代表として示したものである。

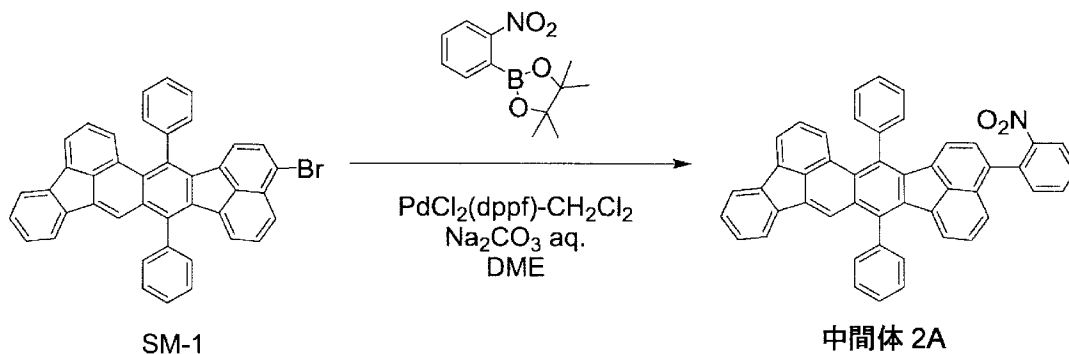
[0484] [化199]



[0485] ・合成実施例2：化合物BD-2の合成

[0486] (2-1) 中間体2Aの合成

[0487] [化200]

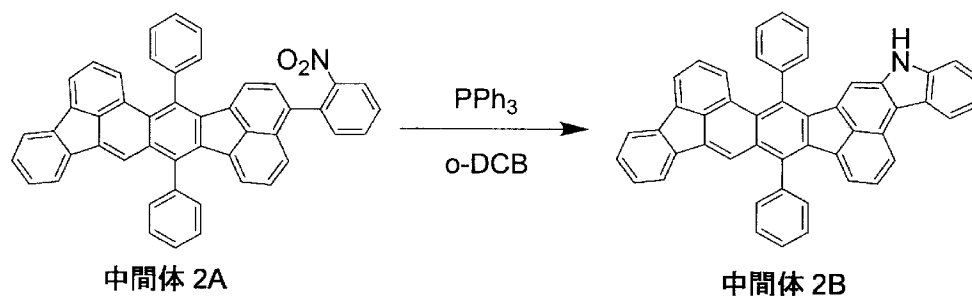


[0488]三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、原料（SM-1：異性体混合物）3.0g（4.94mmol）、2-ニトロフェニルボロン酸ピナコールエステル2.5g（9.88mmol）、及び1,2-ジメトキシエタン（DME）30mLを加え、次いで、 $\text{PdCl}_2(\text{dppf})/\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 0.16g（0.2mmol）を加えた後、2M炭酸ナトリウム水溶液7.4mLを加えてから、80℃で6時間加熱攪拌した。加熱攪拌の後、室温に戻して析出した固体を濾集した。得られた固体をトルエンに溶解し、シリカゲルを加えて攪拌した後、濾過、濃縮して、中間体2Aを得た。収量は2.74

g、収率は85%であった。

[0489] (2-2) 中間体2Bの合成

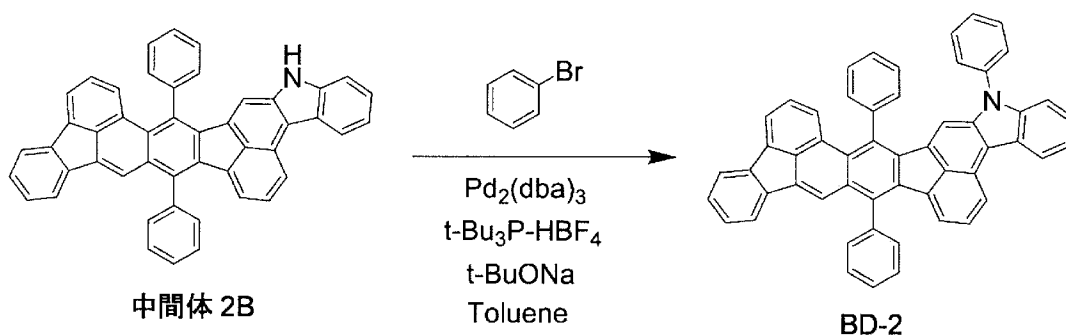
[0490] [化201]



[0491]三口フラスコに、中間体2A 2.1g (3.23mmol)、トリフェニルホスフィン (PPh₃) 2.12g (8.08mmol)、及びオルトジクロロベンゼン (o-DCB) 20mLを加えて、アルゴン雰囲気下にて、140℃で24時間加熱攪拌した。反応途中で、トリフェニルホスフィン 2.11gを追加装入した。溶媒を減圧下で留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (移動相;ヘキサン:トルエン=2:1 (体積比))で精製することにより、中間体2Bを得た。収量は1.59g、収率は75%であった。

[0492] (2-3) 化合物BD-2の合成

[0493] [化202]

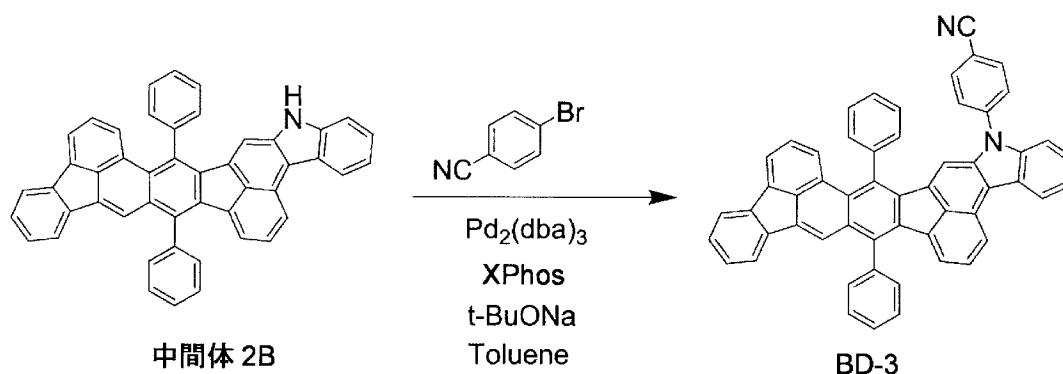


[0494]三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、中間体2B 1.57g (2.54mmol)、ブロモベンゼン 0.6g (3.81mmol)、Pd₂(dba)₃ 47mg (0.051mmol)、t-Bu₃P-HBF₄ 0.13g (0.20mmol)、及びt-BuONa 0.34g (3.56mmol)

）を加えた後、トルエン 20 mL を加えて、105℃で7時間加熱攪拌した。加熱攪拌の後、室温に戻して析出した固体を濾集した。得られた固体をクロロベンゼンに溶解し、シリカゲルを加えて攪拌した後、濾過、濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（移動相；ヘキサン：トルエン＝2：1（体積比））で精製した。さらに、酢酸エチルで懸濁洗浄することにより、BD-2を得た。収量は0.78 g、収率は44%であった。FD-MS分析の結果、分子量693に対して $m/e = 693$ であった。なお、出発原料（SM-1）が異性体混合物（SM-1 aとSM-1 bとの混合物）であることに由来し、BD-2はBD-2 aとBD-2 bとの混合物であった。ただし、本合成実施例2の反応式中では、「SM-1」としてはSM-1 aの構造のみを代表として示し、また「BD-2」としてはBD-2 aの構造のみを代表として示し、中間体2 A及び中間体2 Bも、SM-1 aから得られる中間体のみを代表として示した。

[0495] ・合成実施例3：化合物BD-3の合成

[0496] [化203]



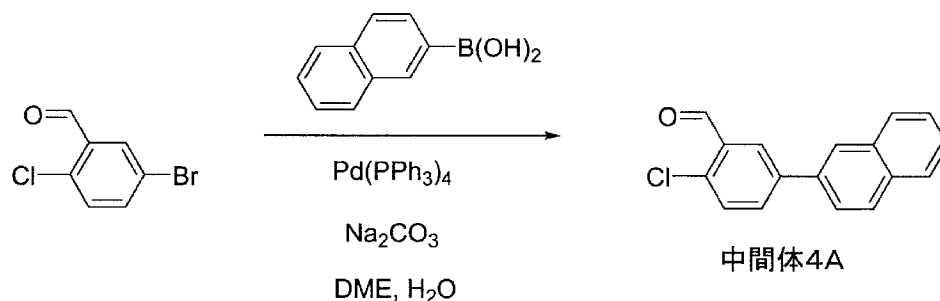
[0497]三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、中間体2 B 2.33 g (3.77 mmol)、4-ブロモベンゾニトリル 1.37 g (7.53 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.14 g (0.15 mmol)、XPhos 0.29 g (0.61 mmol)、及び $t\text{-BuONa}$ 0.51 g (5.27 mmol) を加えた後、トルエン 20 mL を加えて、100℃で15時間加熱攪拌した。加熱攪拌の後、室温に戻して析出した固体を濾集した。得られた固体をクロロベンゼンに溶解し、シリカゲルを加えて攪拌した後、濾過、濃縮し

、得られた固体をメタノールで懸濁洗浄することにより、BD-3を得た。収量は2.19 g、収率は81%であった。FD-MS分析の結果、分子量718に対して $m/e = 718$ であった。なお、出発原料(SM-1)が異性体混合物(SM-1aとSM-1bとの混合物)であることに由来し、BD-3はBD-3aとBD-3bとの混合物であった。ただし、本合成実施例3の反応式中では、「BD-3」としてはBD-3aの構造のみを代表として示し、中間体2Bも、SM-1aから得られる中間体の構造のみを代表として示した。

[0498] ・合成実施例4：化合物BD-4の合成

(4-1) 中間体4Aの合成

[0499] [化204]

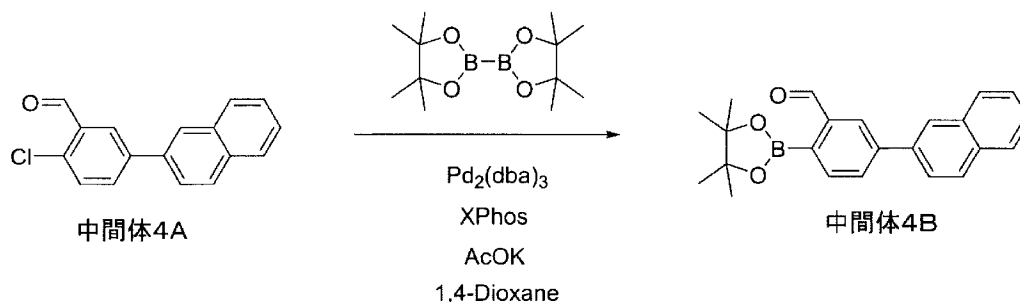


[0500]三口フラスコに、5-ブロモ-2-クロロベンズアルデヒド41.5 g (189 mmol)、ナフタレン-2-イルボロン酸39.0 g (227 mmol)、2M炭酸ナトリウム水溶液189 mL (378 mmol)、及び1,2-ジメトキシエタン(DME)378 mLを加え、次いで、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム4.37 g (3.78 mmol)をさらに加えて、アルゴン雰囲気下にて8時間、加熱還流撹拌した。加熱還流撹拌の後、有機層をトルエンにて分取した。分取した有機層を減圧下で濃縮し、得られた残渣をメタノールで懸濁洗浄することにより、中間体4Aを得た。収量は49.4 g、収率は98%であった。

[0501] (4-2) 中間体4Bの合成

[0502]

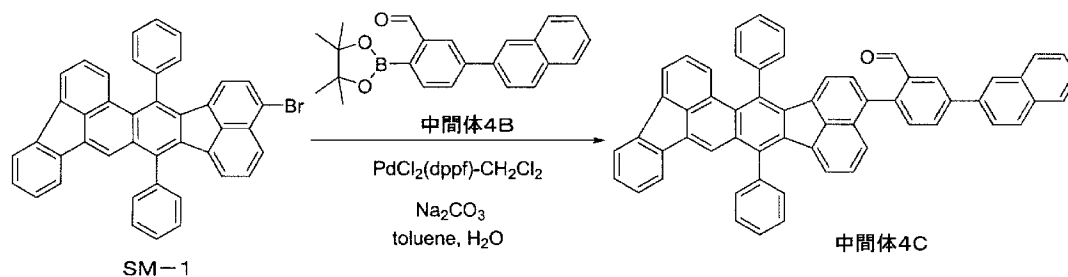
[化205]



[0503] 三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、中間体4 A 3 0. 0 g (1 1 2 mmol)、ビス(ピナコラト)ジボロン3 4. 3 g (1 3 5 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 2. 0 6 g (2. 2 5 mmol)、XPhos 4. 2 9 g (9. 0 0 mmol)、及び酢酸カリウム2 2. 1 g (2 2 5 mmol)を加えた後、1, 4-ジオキサン3 7 5 mLを加えて、8 0℃で4時間加熱攪拌した。室温に戻した後、三口フラスコに水を加え、酢酸エチルを用いて有機層を抽出した。抽出した有機層から溶媒を減圧下で留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(移動相; ヘキサン: ジクロロメタン)で精製することにより、中間体4 Bを得た。収量は4 0. 3 g、収率は1 0 0%であった。

[0504] (4-3) 中間体4 Cの合成

[0505] [化,206]

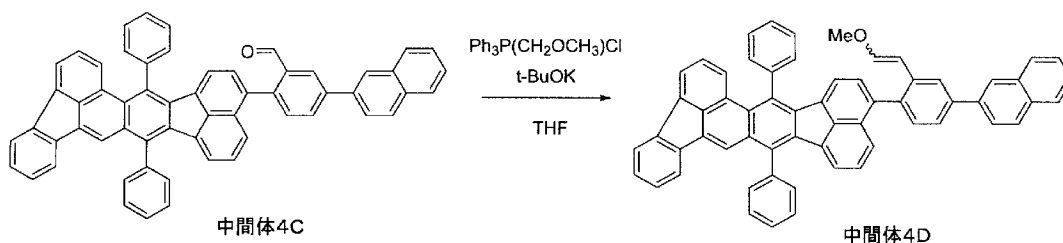


[0506]三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、原料（SM-1：異性体混合物）5.0 g（8.23 mmol）、中間体4B4.42 g（12.3 mmol）、及びトルエン82 mLを加え、次いで、 $\text{PdCl}_2(\text{dppf})/\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 0.13 g（0.16 mmol）を加えた後、2M炭酸ナトリウム水溶液8.2 mLを加えてから、90℃で22時間加熱攪拌した。加熱攪拌の

後、室温に戻して水層を除去し、シリカゲルを有機層に加えて攪拌した後、濾過、濃縮した。得られた残渣を酢酸エチルにて洗浄、濾過して、中間体4Cを得た。収量は4.71g、収率は75%であった。

[0507] (4-4) 中間体4Dの合成

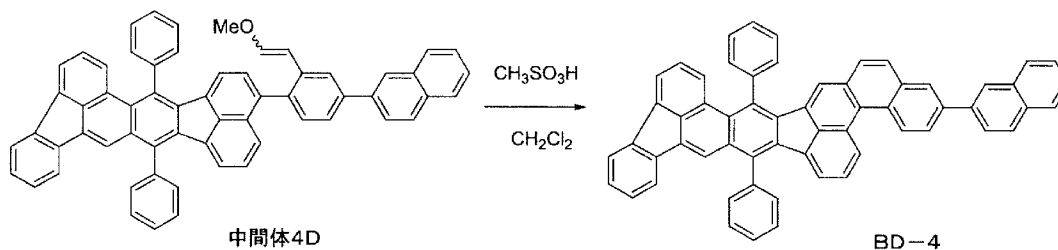
[0508] [化207]



[0509]三口フラスコに、(メトキシメチル)トリフェニルホスホニウムクロリド6.03g(17.6mmol)、及びテトラヒドロフラン(THF)60mLを加え、次いで、*t*-BuOK 2.17g(19.4mmol)を加え、赤色のイリド溶液を調製した。更に中間体4C 8.90g(11.7mmol)のTHF溶液(60mL)を加えて、アルゴン雰囲気下にて2時間、攪拌した。水を加えて反応を停止した後、ジクロロメタンにて抽出した。抽出した有機層を減圧下で濃縮し、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より精製した。展開溶媒としてジクロロメタンと*n*-ヘキサンの混合溶媒を用いた。精製後、得られた固体をメタノールで懸濁洗浄することにより、中間体4Dを得た。収量は7.98g、収率は86%であった。

[0510] (4-5) 化合物BD-4の合成

[0511] [化208]



[0512]三口フラスコに、中間体4D 7.98g(10.1mmol)、及びジクロロメタン100mLを加え、次いで、メタンスルホン酸0.97g(10

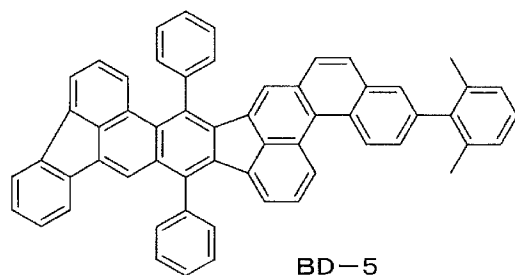
・ 1 mmol) を滴下し、0.5 時間、攪拌した。炭酸水素ナトリウム水溶液を加えて反応を停止した後、ジクロロメタンにて抽出した。抽出した有機層を減圧下で濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。精製後、得られた固体をメタノールで懸濁洗浄することにより、目的物 (化合物 BD-4) を黄色固体として得た。収量は 4.0 g、収率は 52% であった。FD-MS (Field Desorption Mass Spectrometry) 分析の結果、分子量 754 に対して $m/e = 754$ であった。なお、出発原料 (SM-1) が異性体混合物 (SM-1a と SM-1b との混合物) であることに由来し、BD-4 は BD-4a と BD-4b の混合物であった。ただし、本合成実施例 4 の反応式中では、「SM-1」としては SM-1a の構造のみを、また「BD-4」としては BD-4a の構造のみを代表として示した。中間体 4A、中間体 4B、中間体 4C 及び中間体 4D も、SM-1a から得られる中間体のみを代表として示したものである。

[0513] ・合成実施例 5：化合物 BD-5 の合成

合成実施例 4：化合物 BD-4 の合成における、(4-1) 中間体 4A の合成において用いたナフタレン-2-イルボロン酸に替えて、2,6-ジメチルフェニルボロン酸を用いた以外は、合成実施例 4 と同様にして、化合物 BD-5 を得た。FD-MS (Field Desorption Mass Spectrometry) 分析の結果、分子量 732 に対して $m/e = 732$ であった。なお、出発原料 (SM-1) が異性体混合物 (SM-1a と SM-1b との混合物) であることに由来し、BD-5 は BD-5a と BD-5b の混合物であった。

[0514]

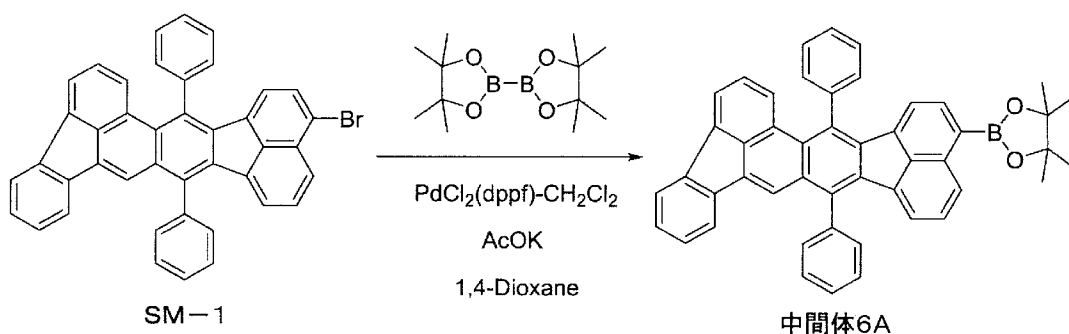
[化209]



[0515] ・合成実施例6：化合物BD-6の合成

(6-1) 中間体6Aの合成

[0516] [化210]

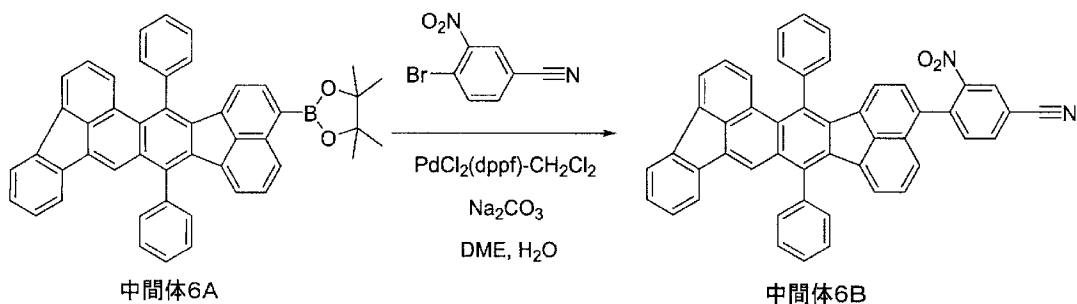


[0517]三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、原料（SM-1：異性体混合物）5.00g（8.23mmol）、ビス（ピナコラト）ジボロン4.18g（16.5mmol）、 $\text{PdCl}_2(\text{dppf})/\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 0.20g（0.247mmol）、及び酢酸カリウム1.62g（16.5mmol）を加えた後、1,4-ジオキサン50mLを加えて、100℃で4時間加熱攪拌した。室温に戻した後、シリカゲルを加え濾過、トルエンで洗浄した。溶媒を減圧下で留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（移動相；ヘキサン：トルエン）で精製することにより、中間体6Aを得た。収量は3.66g、収率は63%であった。

[0518] (6-2) 中間体6Bの合成

[0519]

[化211]



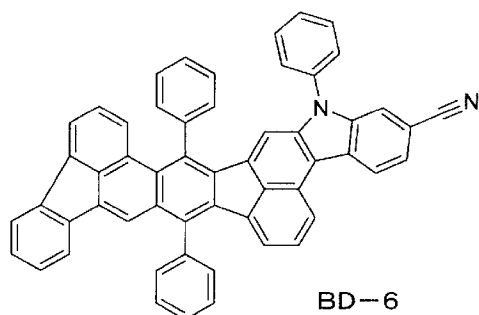
[0520]三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、4-ブロモ-3-ニトロベンゾニトリル1.37 g (6.05 mmol)、中間体6A3.60 g (5.50 mmol)、及びDME 40 mLを加え、次いで、PdCl₂(dppf)/CH₂Cl₂ 0.090 g (0.11 mmol)を加えた後、2 M炭酸ナトリウム水溶液3.85 mLを加えてから、80℃で14時間加熱攪拌した。室温に戻した後、濾過、トルエンで洗浄した。溶媒を減圧下で留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（移動相；ヘキサン：トルエン）で精製することにより、中間体6Bを得た。収量は1.64 g、収率は44%であった。

[0521] (6-3) 化合物BD-6の合成

合成実施例 2 : 化合物 BD-2 の合成における、(2-2) 中間体 2 B の合成において用いた中間体 2 A に替えて、中間体 6 B を用いた以外は、合成実施例 2 と同様にして、化合物 BD-6 を得た。FD-MS (Field Description Mass Spectrometry) 分析の結果、分子量 718 に対して $m/e = 718$ であった。なお、出発原料 (SM-1) が異性体混合物 (SM-1 a と SM-1 b との混合物) であることに由来し、BD-6 は BD-6 a と BD-6 b の混合物であった。

[0522]

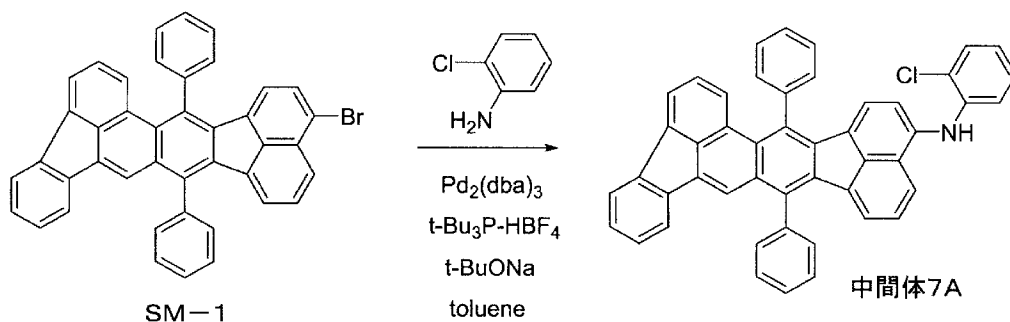
[化212]



[0523] ・合成実施例 7：化合物 BD-7 の合成

(7-1) 中間体 7A の合成

[0524] [化213]

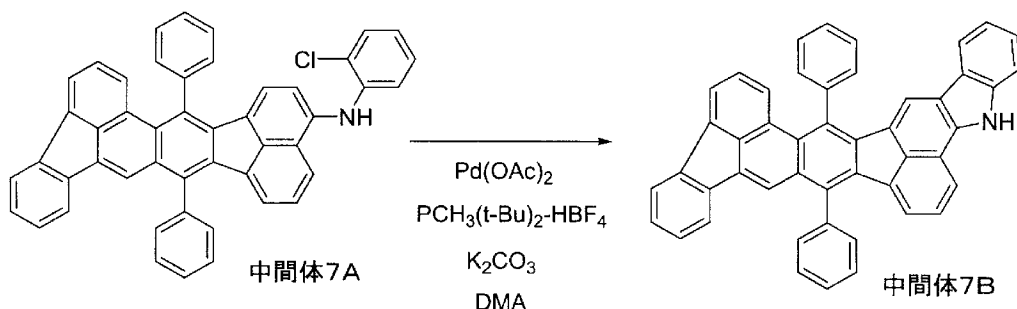


[0525]三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、原料（SM-1：異性体混合物）3.00 g（4.94 mmol）、2-クロロアニリン0.63 g（4.94 mmol）、Pd₂(dba)₃0.090 g（0.099 mmol）、t-Bu₃P-HBF₄0.12 g（0.395 mmol）、及びt-BuONa0.66 g（0.41 mmol）を加えた後、トルエン30 mLを加えて、110℃で6時間加熱攪拌した。室温に戻した後、シリカゲルを加え濾過、トルエンで洗浄した。溶媒を減圧下で留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（移動相；ヘキサン：トルエン）で精製することにより、中間体7Aを得た。収量は1.34 g、収率は97%であった。

[0526] (7-2) 中間体 7B の合成

[0527]

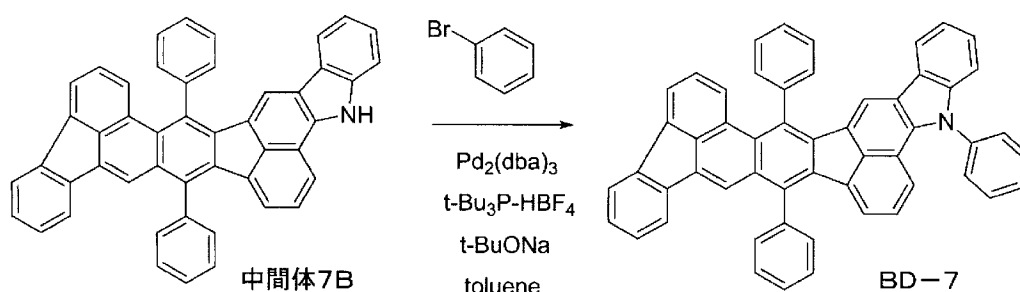
[化214]



[0528] 三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、中間体7A 0.30g (0.46mmol)、酢酸パラジウム10mg (0.046mmol)、 $\text{PCH}_3(\text{t-Bu})_2\text{-HBF}_4$ 0.034mg (0.14mmol)、及び炭酸カリウム0.095g (0.69mmol)を加えた後、ジメチルアセトアミド(DMA)10mLを加えて、160℃で11時間加熱攪拌した。室温に戻した後、水を加え、トルエンとヘキサンの混合溶液で抽出した。溶媒を減圧下で留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(移動相;ヘキサン:トルエン)で精製することにより、中間体7Bを得た。収量は0.18g、収率は64%であった。

[0529] (7-3) 化合物BD-7の合成

[0530] [化215]

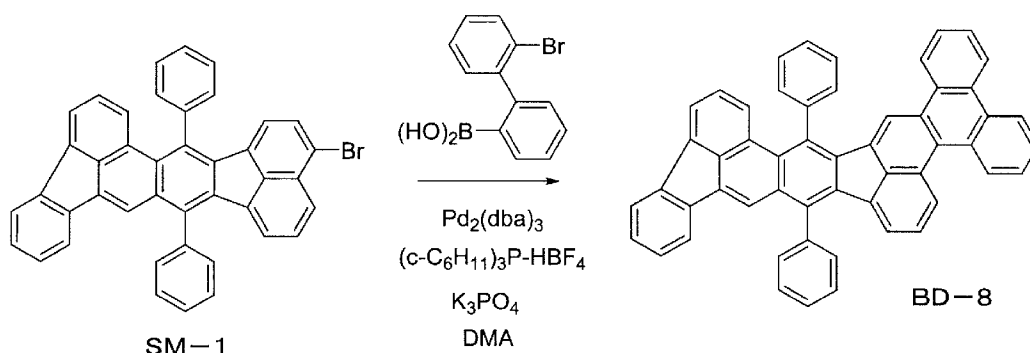


[0531] 三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、中間体7B0.18g(0.29mmol)、ブロモベンゼン0.091g(0.58mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 5.3mg(5.8 μmol)、 $t\text{-Bu}_3\text{P-HBF}_4$ 6.8mg(0.023mmol)、及び $t\text{-BuONa}$ 0.039g(0.41mmol)を加えた後、トルエン30mLを加えて、110℃で15時間加熱攪拌した。室温に戻した後、シリカゲルを加え濾過、トルエンで洗浄した。溶

媒を減圧下で留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（移動相；ヘキサン：トルエン）で精製することにより、目的物（化合物BD-7）を黄色固体として得た。収量は0.18g、収率は86%であった。FD-MS（Field Desorption Mass Spectrometry）分析の結果、分子量693に対して $m/e = 693$ であった。なお、出発原料（SM-1）が異性体混合物（SM-1aとSM-1bとの混合物）であることに由来し、BD-7はBD-7aとBD-7bの混合物であった。ただし、本合成実施例7の反応式中では、「SM-1」としてはSM-1aの構造のみを、また「BD-7」としてはBD-7aの構造のみを代表として示した。中間体7A及び中間体7Bも、SM-1aから得られる中間体のみを代表として示したものである。

[0532] ・合成実施例8：化合物BD-8の合成

[0533] [化216]



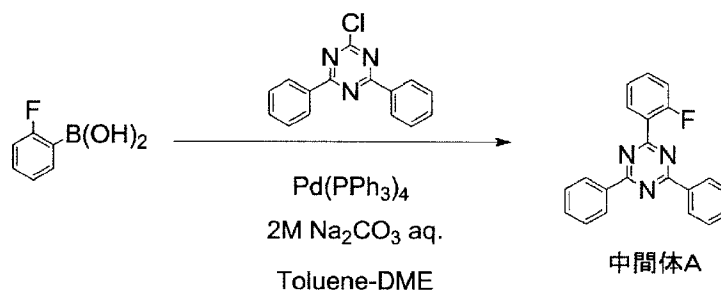
[0534]三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、原料（SM-1：異性体混合物）1.00g（1.65mmol）、2-（2-ブロモフェニル）フェニルボロン酸0.46g（1.65mmol）、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 30mg（0.033mmol）、トリシクロヘキシルホスフィンテトラフルオロオロホウ酸塩49mg（0.13mmol）、及び磷酸カリウム0.70g（3.30mmol）を加えた後、ジメチルアセトアミド（DMA）15mLを加えて、150℃で3時間加熱攪拌した。室温に戻した後、シリカゲルを加え、濾過、トルエンで洗浄した。溶媒を減圧下で留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（移動相；ヘキサン：トルエン）で精製す

ることにより、目的物（化合物BD-8）を黄色固体として得た。収量は0.22 g、収率は20%であった。FD-MS（Field Desorption Mass Spectrometry）分析の結果、分子量678に対して $m/e = 678$ であった。なお、出発原料（SM-1）が異性体混合物（SM-1aとSM-1bとの混合物）であることに由来し、BD-8はBD-8aとBD-8bの混合物であった。ただし、本合成実施例8の反応式中では、「SM-1」としてはSM-1aの構造のみを、また「BD-8」としてはBD-8aの構造のみを代表として示した。

[0535] ・合成実施例9：化合物TADF-1の合成

（9-1）中間体Aの合成

[0536] [化217]

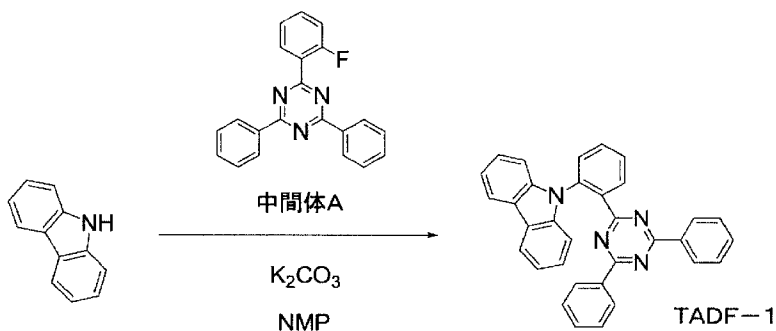


[0537]三口フラスコに、2-フルオロフェニルボロン酸 7.0 g (50 mmol)、2-ク

ロロ-4, 6-ジフェニルトリアジン 13.4 g (50 mmol)、2M炭酸ナトリウム水溶液 62.5 mL、1, 2-ジメトキシエタン (DME) 100 mL、及びトルエン 100 mLを加えた。次いで、この三口フラスコに、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 1.73 g (1.5 mmol)をさらに加えて、アルゴン雰囲気下にて8時間、加熱還流攪拌した。加熱還流攪拌の後、有機層を分取した。分取した有機層を減圧下で濃縮し、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より精製した。展開溶媒としてトルエン溶媒を用いた。精製後、得られた固体をメタノールを用いて懸濁洗浄し、中間体Aを白色固体として得た。収量は11.6 g、収率は71%であった。

[0538] (9-2) 化合物TADF-1の合成

〔0539〕〔化,218〕



[0540] 三口フラスコに、カルバゾール 7.3 g (43.6 mmol)、中間体 A 8.0 g (24.4 mmol)、炭酸カリウム 7.4 g (53.5 mmol)、及び N-メチル-2-ピロリドン (NMP) 50 mL を加えて、アルゴン雰囲気下にて 20 時間、150℃ で加熱攪拌した。加熱攪拌の後、反応溶液を水 200 mL に注ぎ、析出した固体を濾集した。次いで、この固体をエタノールを用いて繰り返し懸濁洗浄し、目的物 (化合物 TADF-1) を白色固体として得た。収量は 6.3 g、収率は 54% であった。FD-MS 分析の結果、分子量 474 に対して $m/e = 474$ であった。

[0541] <化合物の評価>

化合物の性質を測定する方法を以下に示す。

[0542] · 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と前記化合物TH-2とを、化合物TADF-1の割合が12質量%となるように石英基板上に共蒸着し、膜厚100nmの薄膜を形成して試料を作製した。前記化合物TADF-1が吸収する波長のパルス光（パルスレーザーから照射される光）で励起された後、当該励起状態から即座に観察されるPrompt発光（即時発光）と、当該励起後、即座には観察されず、その後観察されるDelay発光（遅延発光）とが存在する。本実施例における遅延蛍光発光とは、Delay発光（遅延発光）の量がPrompt発光（即時発光）の量に対して5%以上を意味する。

。具体的には、P r o m p t 発光（即時発光）の量を X_P とし、D e l a y 発光（遅延発光）の量を X_D としたときに、 X_D/X_P の値が 0.05 以上であることを意味する。

化合物 T A D F - 1 について、D e l a y 発光（遅延発光）の量が P r o m p t 発光（即時発光）の量に対して 5 % 以上あることが確認された。具体的には、化合物 T A D F - 1 について、 X_D/X_P の値が 0.05 以上であることが確認された。

化合物 T A D F - 2 についても、 X_D/X_P の値が 0.05 以上であることが確認された。

P r o m p t 発光と D e l a y 発光の量は、“N a t u r e 492, 234-238, 2012” に記載された方法と同様の方法により求めることができる。なお、P r o m p t 発光と D e l a y 発光の量の算出に使用される装置は、図 2 の装置や文献に記載された装置に限定されない。

[0543] ・一重項エネルギー S_1

化合物 T A D F - 1、化合物 T A D F - 2、化合物 A - 1、化合物 B D - 1、化合物 B D - 2、化合物 B D - 3、化合物 B D - 4、化合物 B D - 5、化合物 B D - 6、化合物 B D - 7、及び化合物 B D - 8 の一重項エネルギー S_1 は、前述の溶液法により測定した。

化合物 T A D F - 1 の一重項エネルギー S_1 は、2.90 eV であった。

化合物 T A D F - 2 の一重項エネルギー S_1 は、2.90 eV であった。

化合物 A - 1 の一重項エネルギー S_1 は、3.53 eV であった。

化合物 B D - 1 の一重項エネルギー S_1 は、2.75 eV であった。

化合物 B D - 2 の一重項エネルギー S_1 は、2.64 eV であった。

化合物 B D - 3 の一重項エネルギー S_1 は、2.64 eV であった。

化合物 B D - 4 の一重項エネルギー S_1 は、2.70 eV であった。

化合物 B D - 5 の一重項エネルギー S_1 は、2.74 eV であった。

化合物 B D - 6 の一重項エネルギー S_1 は、2.66 eV であった。

化合物 B D - 7 の一重項エネルギー S_1 は、2.59 eV であった。

化合物BD-8の一重項エネルギー S_1 は、2.74 eVであった。

[0544] 化合物DPEPOの一重項エネルギーは、文献（APPLIED PHYSICS LETTERS 101, 093306 (2012)）に記載されているように、4.0 eVである。

[0545] ・化合物の主ピーク波長

測定対象の化合物が 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を調製し、このトルエン溶液について発光スペクトルを測定した。発光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を主ピーク波長とした。

化合物BD-1の主ピーク波長は448 nmであった。

化合物BD-2の主ピーク波長は462 nmであった。

化合物BD-3の主ピーク波長は460 nmであった。

化合物BD-4の主ピーク波長は457 nmであった。

化合物BD-5の主ピーク波長は451 nmであった。

化合物BD-6の主ピーク波長は461 nmであった。

化合物BD-7の主ピーク波長は475 nmであった。

化合物BD-8の主ピーク波長は450 nmであった。

[0546] また、吸収スペクトルを測定し、この測定結果に基づいて、モル吸光係数 ϵ 及びストークスシフト s_s を算出した。

[0547] [モル吸光係数 ϵ]

モル吸光係数 ϵ は、吸収スペクトルの最も長波長側に位置する吸収ピークの吸収強度を溶液濃度で除して算出した。モル吸光係数 ϵ の単位は、 $L / (mol \cdot cm)$ とした。最も長波長側に位置する吸収ピークは、350 nm以上500 nm以下の波長範囲に出現する最大吸収ピークの10分の1以上の吸収強度を持つピークのうち、最も長波長側に出現するピークとした。

[0548] (吸収スペクトル)

吸収スペクトルは、次の方法で測定した。

測定対象となる化合物の $20 \mu mol / L$ 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。）を測定した。本実施例では、吸収スペクトルを日立社製の分光光度計（装置名：U3310）で測定した。なお、吸収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。

[0549] [ストークスシフト s_s]

ストークスシフト s_s は、発光スペクトルの主ピーク波長から、吸収スペクトルのモル吸光係数を求めた吸収ピーク波長を減じて算出した。ストークスシフト s_s の単位は、nmとした。

表2に各化合物のモル吸光係数、発光スペクトルの主ピーク波長、吸収ピーク波長、及びストークスシフトを示す。

[0550] [表2]

化合物	モル吸光係数 [L/(mol·cm)]	発光スペクトルの 主ピーク波長 [nm]	吸収ピーク波長 [nm]	ストークスシフト [nm]
BD-1	69400	448	442	6
BD-2	53500	462	454	8
BD-3	59600	460	454	6
BD-4	88600	457	448	9
BD-5	69500	451	444	7
BD-6	71600	461	455	6
BD-7	69500	475	462	13
BD-8	42500	450	441	9

[0551] <有機EL素子の作製1>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

[0552] (実施例1-1)

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック社製）を、イソプロピルアルコール中で5分間超音波洗浄を行った後、UVオゾン洗浄を30分間行った。ITOの膜厚は、130

nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HIを蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層を形成した。

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

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

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

第一の化合物としての化合物TADF-1と、第二の化合物としての化合物BD-1と、第三の化合物としての化合物DPEPOを共蒸着し、膜厚25nmの発光層を形成した。発光層における化合物TADF-1の濃度を24質量%とし、化合物BD-1の濃度を1質量%とし、化合物DPEPOの濃度を75質量%とした。

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

次に、この第一電子輸送層上に、化合物ET-2を蒸着し、膜厚20nmの第二電子輸送層を形成した。

次に、この第二電子輸送層上に、フッ化リチウム(LiF)を蒸着し、膜厚1nmの電子注入性電極(陰極)を形成した。

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

実施例1-1の有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HI (5) / HT1 (80) / HT2 (10) / mCP (5) / DPEPO : TADF-1 : BD-1 (25, 75%:24%:1%) / ET-1 (5) / ET-2 (20) / LiF (1) / Al (80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。また、同じく括弧内において、パーセント表示された数字は、発光層における第一の化合物、第二の化合物及び第三の化合物の割合（質量%）を示す。

[0553] （実施例 1－2）

実施例 1－2 の有機 EL 素子は、実施例 1－1 の発光層における化合物 BD－1 に代えて、化合物 BD－2 を用いたこと以外、実施例 1－1 と同様にして作製した。

実施例 1－2 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /DPEP0:TADF-1:BD-2 (25, 75%:24%:1%) /ET-1 (5) /ET-2 (20) /LiF (1) /Al (80)

[0554] （実施例 1－3）

実施例 1－3 の有機 EL 素子は、実施例 1－1 の発光層における化合物 BD－1 に代えて、化合物 BD－3 を用いたこと以外、実施例 1－1 と同様にして作製した。

実施例 1－3 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /DPEP0:TADF-1:BD-3 (25, 75%:24%:1%) /ET-1 (5) /ET-2 (20) /LiF (1) /Al (80)

[0555] （実施例 1－4）

実施例 1－4 の有機 EL 素子は、実施例 1－1 の発光層における化合物 BD－1 に代えて、化合物 BD－4 を用いたこと以外、実施例 1－1 と同様にして作製した。

実施例 1－4 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /DPEP0:TADF-1:BD-4 (25, 75%:24%:1%) /ET-1 (5) /ET-2 (20) /LiF (1) /Al (80)

[0556] （実施例 1－5）

実施例 1-5 の有機 EL 素子は、実施例 1-1 の発光層における化合物 BD-1 に代えて、化合物 BD-6 を用いたこと以外、実施例 1-1 と同様にして作製した。

実施例 1-5 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /DPEP0:TADF-1:BD-6 (25, 75%:24%:1%) /ET-1 (5) /ET-2 (20) /LiF (1) /Al (80)

[0557] (比較例 1-1)

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

比較例 1-1 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /DPEP0:TADF-1:TBP e (25, 75%:24%:1%) /ET-1 (5) /ET-2 (20) /LiF (1) /Al (80)

[0558] (比較例 1-2)

比較例 1-2 の有機 EL 素子は、実施例 1-1 の発光層における化合物 BD-1 に代えて、化合物 ref-1 を用いたこと以外、実施例 1-1 と同様にして作製した。

比較例 1-2 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /DPEP0:TADF-1:ref-1 (25, 75%:24%:1%) /ET-1 (5) /ET-2 (20) /LiF (1) /Al (80)

[0559] (比較例 1-3)

比較例 1-3 の有機 EL 素子は、実施例 1-1 の発光層における化合物 BD-1 に代えて、化合物 ref-2 を用いたこと以外、実施例 1-1 と同様にして作製した。

比較例 1-3 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりで

ある。

ITO (130) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /DPEP0:TADF-1:ref-2
(25, 75%:24%:1%) /ET-1 (5) /ET-2 (20) /LiF (1) /Al (80)

[0560] <有機EL素子の評価1>

実施例1-1～1-5並びに比較例1-1～1-3において作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。評価結果を表3に示す。

[0561] ・外部量子効率EQE及び主ピーク波長 λ_p

電流密度が0.1 mA/cm²となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計CS-1000（コニカミノルタ社製）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。

また、得られた分光放射輝度スペクトルから、主ピーク波長 λ_p （単位：nm）を求めた。

[0562] [表3]

	第二の化合物	EQE [%]	λ_p [nm]
	化合物名		
実施例1-1	BD-1	12.9	454
実施例1-2	BD-2	11.6	474
実施例1-3	BD-3	11.1	472
実施例1-4	BD-4	13.7	463
実施例1-5	BD-6	12.2	468
比較例1-1	TBPe	8.7	464
比較例1-2	ref-1	9.5	446
比較例1-3	ref-2	9.5	446

[0563] 遅延蛍光性の第一の化合物及び前記一般式（2）で表される第二の化合物を発光層に含む実施例1-1～1-5の有機EL素子によれば、比較例1-1～1-3の有機EL素子に比べて、高効率で青色の波長領域の光を発した。

[0564] <有機EL素子の作製2>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

[0565] (実施例2-1)

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）を、イソプロピルアルコール中で5分間超音波洗浄を行った後、UVオゾン洗浄を30分間行った。ITOの膜厚は、130nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HIを蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層を形成した。

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

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

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

次に、この第三正孔輸送層上に、第一の化合物としての化合物TADF-2と、第二の化合物としての化合物BD-2と、第三の化合物としての化合物A-1とを共蒸着し、膜厚25nmの発光層を形成した。発光層における化合物TADF-2の濃度を24質量%とし、化合物BD-2の濃度を1質量%とし、化合物A-1の濃度を75質量%とした。

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

次に、この第一電子輸送層上に、化合物ET-2を蒸着し、膜厚20nmの第二電子輸送層を形成した。

次に、この第二電子輸送層上に、フッ化リチウム（LiF）を蒸着し、膜厚1nmの電子注入性電極（陰極）を形成した。

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

実施例 2-1 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HI (5) / HT1 (80) / HT2 (10) / mCP (5) / A-1 : TADF-2 : BD-2 (25, 75%:24%:1%) / ET-1 (5) / ET-2 (20) / LiF (1) / Al (80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。また、同じく括弧内において、パーセント表示された数字は、発光層における第一の化合物、第二の化合物及び第三の化合物の割合（質量%）を示す。

[0566] （実施例 2-2）

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

実施例 2-2 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HI (5) / HT1 (80) / HT2 (10) / mCP (5) / A-1 : TADF-2 : BD-3 (25, 75%:24%:1%) / ET-1 (5) / ET-2 (20) / LiF (1) / Al (80)

[0567] （実施例 2-3）

実施例 2-3 の有機 EL 素子は、実施例 2-1 の発光層における化合物 BD-2 に代えて、化合物 BD-4 を用いたこと以外、実施例 2-1 と同様にして作製した。

実施例 2-3 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HI (5) / HT1 (80) / HT2 (10) / mCP (5) / A-1 : TADF-2 : BD-4 (25, 75%:24%:1%) / ET-1 (5) / ET-2 (20) / LiF (1) / Al (80)

[0568] （実施例 2-4）

実施例 2-4 の有機 EL 素子は、実施例 2-1 の発光層における化合物 B

D-2に代えて、化合物BD-6を用いたこと以外、実施例2-1と同様にして作製した。

実施例2-4の有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HI (5) / HT1 (80) / HT2 (10) / mCP (5) / A-1 : TADF-2 : BD-6 (25, 75%:24%:1%) / ET-1 (5) / ET-2 (20) / LiF (1) / Al (80)

[0569] <有機EL素子の評価2>

実施例2-1～2-4において作製した有機EL素子を用いて、実施例1-1と同様の評価を行った。評価結果を表4に示す。

[0570] [表4]

	第二の化合物	EQE [%]	λ_p [nm]
	化合物名		
実施例2-1	BD-2	15.5	470
実施例2-2	BD-3	15.2	470
実施例2-3	BD-4	16.4	462
実施例2-4	BD-6	12.2	468

[0571] 遅延蛍光性の第一の化合物及び前記一般式(20)で表される第二の化合物を発光層に含む実施例2-1～2-4の有機EL素子は、上述の実施例1-1～1-5の有機EL素子と同様に、高効率で青色の波長領域の光を発した。

[0572] <有機EL素子の作製3>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

[0573] (実施例3-1)

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極(陽極)付きガラス基板(ジオマテック社製)をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。ITOの膜厚は、130nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダ

ーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物H I 2を蒸着し、膜厚5 n mの正孔注入層を形成した。

次に、この正孔注入層の上に、化合物H T 3を蒸着し、H I 2膜上に膜厚80 n mの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層の上に、化合物H T 4を蒸着し、膜厚10 n mの第二正孔輸送層を形成した。

さらに、この第二正孔輸送層の上に、化合物B Hと、合成実施例4で得られた化合物B D - 4（ドーパント材料）とを共蒸着し、膜厚25 n mの発光層を形成した。発光層における化合物B D - 4（ドーパント材料）の濃度を1質量%とし、化合物B Hの濃度を99質量%とした。

次に、この発光層の上に、化合物E T - 3を蒸着し、膜厚10 n mの第一電子輸送層を形成した。

次に、この第一電子輸送層の上に、化合物E T - 2を蒸着し、膜厚15 n mの第二電子輸送層を形成した。

次に、この第二電子輸送層の上に、フッ化リチウム（L i F）を蒸着し、膜厚1 n mの電子注入性電極（陰極）を形成した。

そして、この電子注入性電極の上に、金属アルミニウム（A l）を蒸着し、膜厚80 n mの金属A l陰極を形成した。

実施例3 - 1の有機E L素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HI2 (5) / HT3 (80) / HT4 (10) / BH : BD-4 (25, 99% : 1%) / ET-3 (10) / ET-2 (15) / LiF (1) / Al (80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：n m）を示す。また、同じく括弧内において、パーセント表示された数字は、発光層における化合物B H及び化合物B D - 4の割合（質量%）を示す。

[0574]（比較例3 - 1）

比較例3 - 1の有機E L素子は、実施例3 - 1の発光層における化合物B D - 4に代えて、化合物T B P eを用いたこと以外、実施例3 - 1と同様に

して作製した。

比較例 3-1 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HI2 (5) / HT3 (80) / HT4 (10) / BH : TBP_e (25, 99% : 1%) / ET-3 (10) / ET-2 (15) / LiF (1) / Al (80)

[0575] <有機 EL 素子の評価 3>

実施例 3-1 及び比較例 3-1 において作製した有機 EL 素子を用いて、実施例 1-1 と同様の評価を行った。評価結果を表 5 に示す。

[0576] [表5]

	第二の化合物	EQE [%]	λ_p [nm]
	化合物名		
実施例3-1	BD-4	6.9	463
比較例3-1	TBP _e	5.4	463

[0577] 前記一般式 (15) で表される化合物 BH 及び前記一般式 (20) で表される化合物 BD-4 を発光層に含む実施例 3-1 の有機 EL 素子によれば、比較例 3-1 の有機 EL 素子に比べて、高効率で青色の波長領域の光を発した。

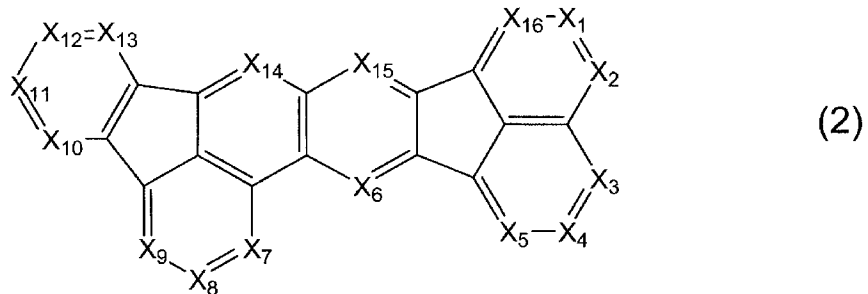
符号の説明

[0578] 1…有機 EL 素子、3…陽極、4…陰極、5…発光層、7…正孔輸送層、8…電子輸送層。

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（２）で表される化合物。

[化1]



（前記一般式（２）において、

X_1 乃至 X_5 、 X_7 乃至 X_{13} 、及び X_{16} は、それぞれ独立に、 CR_x 、または下記一般式（２a）もしくは（２b）で表される構造と結合する炭素原子であり、

X_6 、 X_{14} 、及び X_{15} は、それぞれ独立に、 CR_x であり、

R_x 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_x は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数１～３０のアルキル基、

置換または無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数１～３０のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数２～３０のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数６～３０のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数６～３０のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

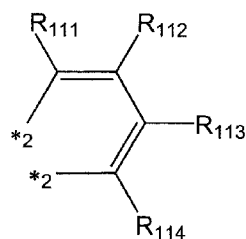
からなる群から選択され、

複数の R_x は、互いに同一であるかまたは異なり、

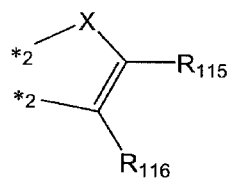
X_1 乃至 X_{16} のうち、複数の R_x であって、 R_x が置換基である場合、置換基としての複数の R_x 同士が互いに結合して環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

ただし、 X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組の少なくともいずれかの組は、下記一般式 (2a) または (2b) で表される構造と結合する炭素原子である。)

[化2]



(2a)



(2b)

(前記一般式 (2a) において、それぞれの *2 は、前記一般式 (2) の X_1 及び X_2 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{111} 乃至 R_{114} 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_{111} 乃至 R_{114} は、それぞれ独立に

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択される。

ただし、 R_{111} 及び R_{112} の組、 R_{112} 及び R_{113} の組、並びに R_{113} 及び R_{114} の組のうち少なくともいずれかの組は、互いに置換基であり、当該置換基同士が結合して環を形成する。

前記一般式(2b)において、それぞれの*2は、前記一般式(2)の X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11}

及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{115} 及び R_{116} 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_{115} 及び R_{116} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

置換基としての R_{115} 及び R_{116} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

Xは、

酸素原子、

硫黄原子、

$\text{C R}_{117} \text{R}_{118}$ 、

$\text{S i R}_{119} \text{R}_{120}$ 、及び

N R_{121}

からなる群から選択され、

R_{117} 乃至 R_{121} 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_{117} 乃至 R_{121} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

置換基としての R_{117} 及び R_{118} は、互いに結合してさらに環を形

成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

置換基としての R_{119} 及び R_{120} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。)

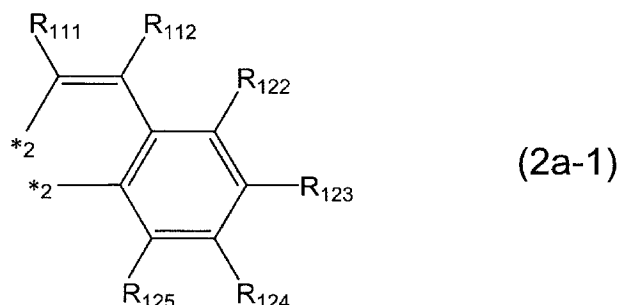
[請求項2] 請求項1に記載の化合物において、

前記一般式(2)における X_1 及び X_2 の組、並びに X_3 及び X_4 の組の少なくともいずれかの組が、前記一般式(2a)で表される構造と結合する炭素原子である、化合物。

[請求項3] 請求項1または請求項2に記載の化合物において、

前記一般式(2a)で表される構造が、下記一般式(2a-1)で表される構造である、化合物。

[化3]



(前記一般式(2a-1)において、

*2は、前記一般式(2a)における*2と同義であり、

R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} 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_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

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

基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

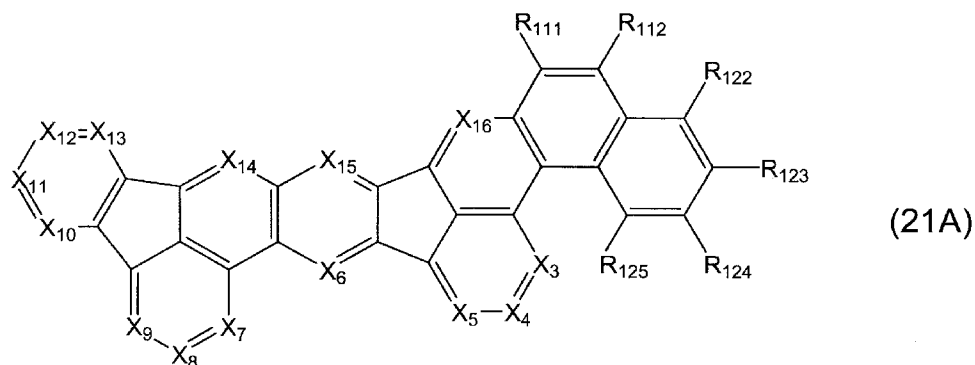
置換基としての R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} のうち、
 互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成し
 ない場合とがある。)

[請求項4]

請求項 3 に記載の化合物において、

前記一般式 (2) で表される化合物が、下記一般式 (21A) で表
 される、化合物。

[化4]



(前記一般式 (21A) において、 X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記

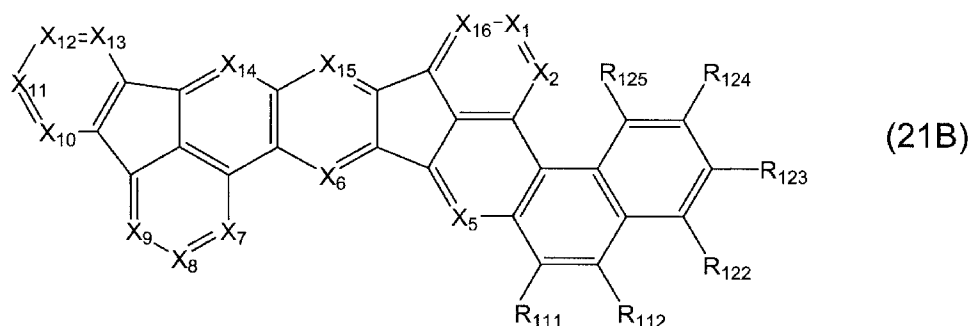
一般式（２）における X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、前記一般式（２ a－１）における R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} とそれぞれ同義である。）

[請求項5]

請求項３に記載の化合物において、

前記一般式（２）で表される化合物が、下記一般式（２ １ B）で表される、化合物。

[化5]



（前記一般式（２ １ B）において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式（２）における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、前記一般式（２ a－１）における R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} とそれぞれ同義である。）

[請求項6]

請求項１に記載の化合物において、

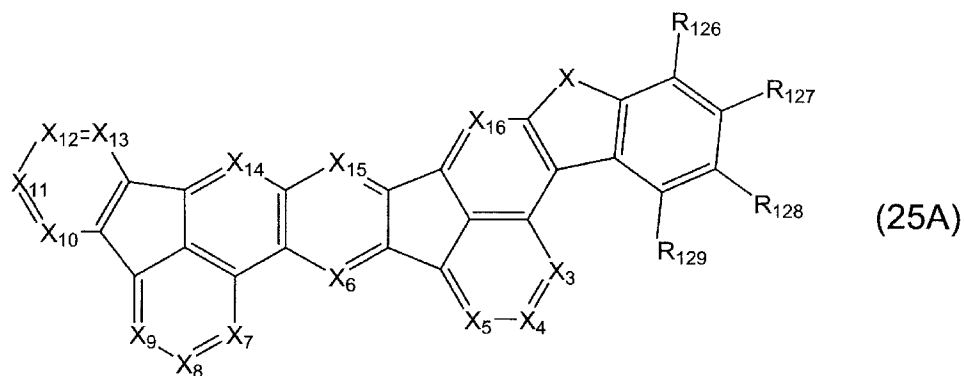
前記一般式（２）における X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、並びに X_3 及び X_4 の組の少なくともいずれかの組が、前記一般式（２ b）で表される構造と結合する炭素原子である、化合物。

[請求項7]

請求項６に記載の化合物において、

前記一般式（２）で表される化合物が、下記一般式（２ ５ A）で表される、化合物。

[化6]



(前記一般式 (25A) において、X₃乃至X₁₆、及びR_xは、前記一般式 (2) におけるX₃乃至X₁₆、及びR_xとそれぞれ同義であり、Xは、前記一般式 (2b) におけるXとそれぞれ同義であり、

R₁₂₆乃至R₁₂₉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R₁₂₆乃至R₁₂₉は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、
 ニトロ基、
 カルボキシ基、及び
 ハロゲン原子

からなる群から選択され、

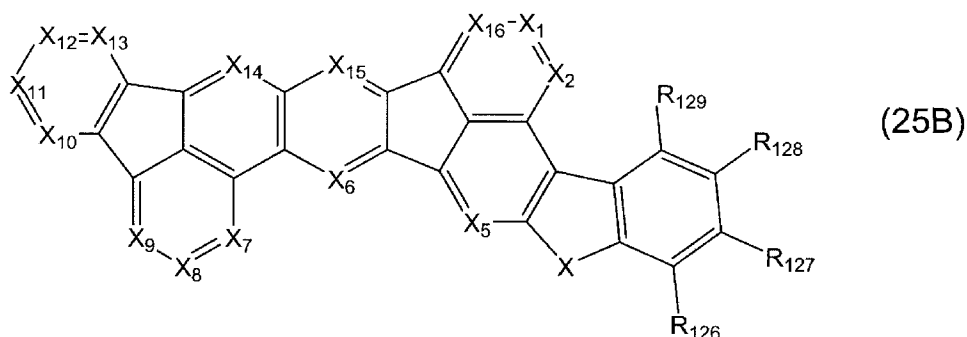
置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。)

[請求項8]

請求項6に記載の化合物において、

前記一般式(2)で表される化合物が、下記一般式(25B)で表される、化合物。

[化7]



(前記一般式(25B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 X は、前記一般式(2b)における X とそれぞれ同義であり、

R_{126} 乃至 R_{129} 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_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

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

シアノ基、
ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子

からなる群から選択され、

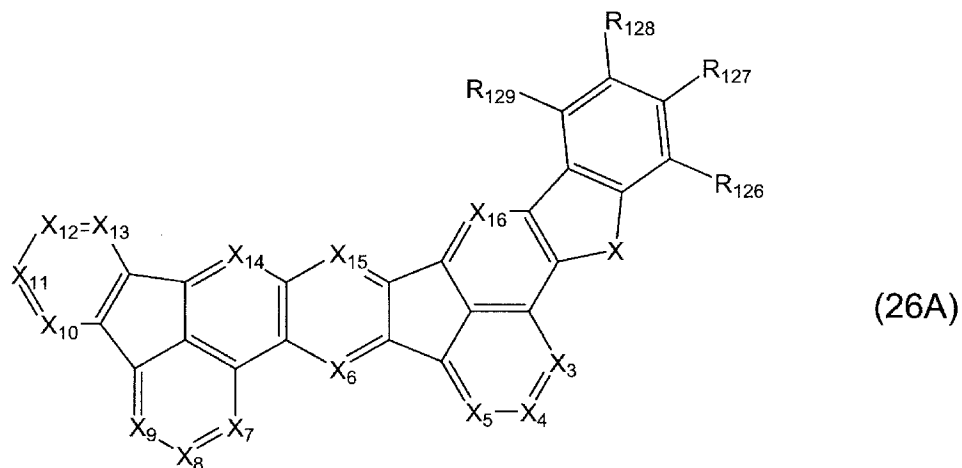
置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。）

[請求項9]

請求項 6 に記載の化合物において、

前記一般式 (2) で表される化合物が、下記一般式 (26A) で表される、化合物。

[化8]



(前記一般式 (26A) において、 X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式 (2) における X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 X は、前記一般式 (2b) における X とそれぞれ同義であり、

R_{126} 乃至 R_{129} 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_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールカルボニル

基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

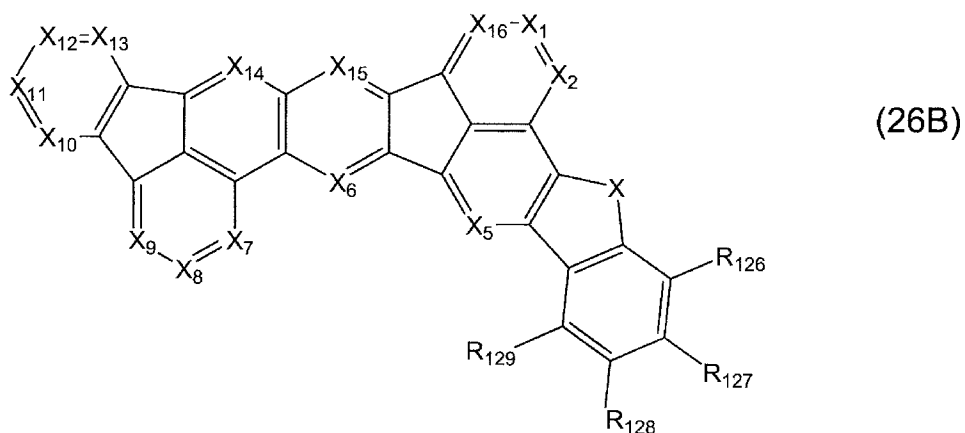
置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。）

[請求項10]

請求項6に記載の化合物において、

前記一般式(2)で表される化合物が、下記一般式(26B)で表される、化合物。

[化9]



(前記一般式(26B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義であり、 X は、前記一般式(2b)における X とそれぞれ同義であり、

R_{126} 乃至 R_{129} 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_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

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

シアノ基、
ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子

からなる群から選択され、

置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。)

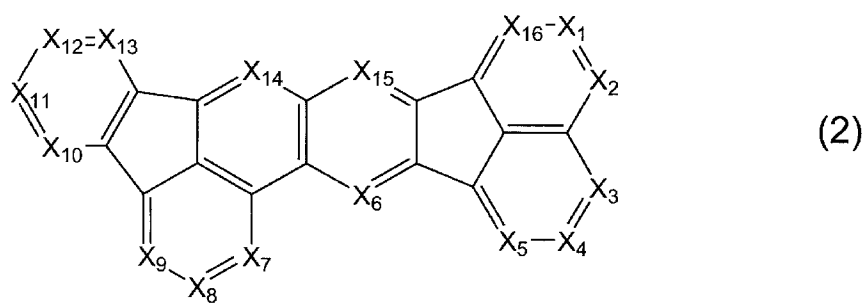
[請求項11] 請求項 1 から請求項 10 のいずれか一項に記載の化合物において、前記一般式 (2) における X_6 が CR_6 、 X_{15} が CR_{15} であり、 R_6 及び R_{15} が、それぞれ独立に、置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基である、化合物。

[請求項12] 請求項 1 から請求項 11 のいずれか一項に記載の化合物において、前記一般式 (2) における X_6 が CR_6 、 X_{15} が CR_{15} であり、 R_6 及び R_{15} が、それぞれ独立に、置換または無置換のフェニル基である、化合物。

[請求項13] 請求項1から請求項12のいずれか一項に記載の化合物において、
前記一般式(2)における X_5 が CR_5 、 X_6 が CR_6 、 X_7 が CR_7 、 X_8 が CR_8 、 X_9 が CR_9 、 X_{10} が CR_{10} 、 X_{11} が CR_{11} 、 X_{12} が CR_{12} 、 X_{13} が CR_{13} 、 X_{14} が CR_{14} 、 X_{15} が CR_{15} 、 X_{16} が CR_{16} であり、 R_6 及び R_{15} が、それぞれ独立に、置換または無置換のフェニル基であり、 R_5 、 R_7 乃至 R_{14} 、及び R_{16} が水素原子である、化合物。

[請求項14] 下記一般式(2)で表される化合物を複数種含有する、組成物。

[化10]



(前記一般式(2)において、

X_1 乃至 X_5 、 X_7 乃至 X_{13} 、及び X_{16} は、それぞれ独立に、 CR_x 、または下記一般式(2a)もしくは(2b)で表される構造と結合する炭素原子であり、

X_6 、 X_{14} 、及び X_{15} は、それぞれ独立に、 CR_x であり、
 R_x 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_x は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基、
 置換または無置換のホスファニル基、
 置換または無置換のホスホリル基、
 置換または無置換のシリル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールカルボニル
 基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

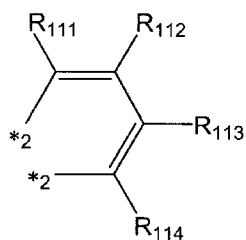
からなる群から選択され、

複数の R_x は、互いに同一であるかまたは異なり、

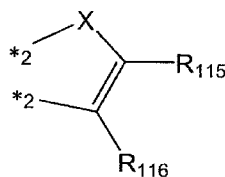
X_1 乃至 X_{16} のうち、複数の R_x であって、 R_x が置換基である場合、置換基としての複数の R_x 同士が互いに結合して環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。

ただし、 X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組の少なくともいずれかの組は、下記一般式 (2a) または (2b) で表される構造と結合する炭素原子である。)

[化11]



(2a)



(2b)

(前記一般式 (2 a) において、それぞれの * 2 は、前記一般式 (2) の X_1 及び X_2 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{111} 乃至 R_{114} 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_{111} 乃至 R_{114} は、それぞれ独立に

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択される。

ただし、 R_{111} 及び R_{112} の組、 R_{112} 及び R_{113} の組、並びに R_1

X_{13} 及び R_{114} の組のうち少なくともいずれかの組は、互いに置換基であり、当該置換基同士が結合して環を形成する。

前記一般式 (2 b) において、それぞれの * 2 は、前記一般式 (2) の X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、並びに X_{16} 及び X_1 の組のいずれかの組における炭素原子との結合部位を表し、

R_{115} 及び R_{116} 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_{115} 及び R_{116} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

置換基としての R_{115} 及び R_{116} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

Xは、

酸素原子、

硫黄原子、

$CR_{117}R_{118}$ 、

$SiR_{119}R_{120}$ 、及び

NR_{121}

からなる群から選択され、

R_{117} 乃至 R_{121} 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_{117} 乃至 R_{121} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

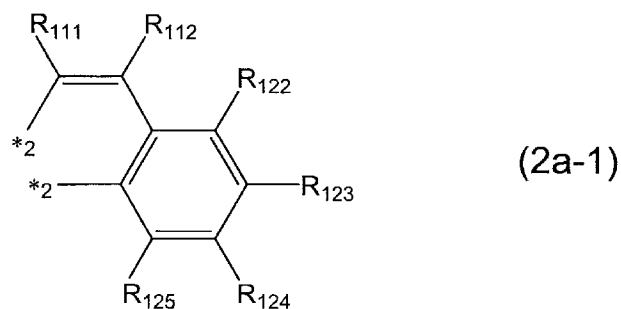
シアノ基、

ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子
からなる群から選択され、
置換基としての R_{117} 及び R_{118} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、
置換基としての R_{119} 及び R_{120} は、互いに結合してさらに環を形成する場合と、
環を形成しない場合とがある。)

[請求項15] 請求項14に記載の組成物において、
前記一般式(2)における X_1 及び X_2 の組、並びに X_3 及び X_4 の組の少なくともいずれかの組が、前記一般式(2a)で表される構造と結合する炭素原子である、組成物。

[請求項16] 請求項14または請求項15に記載の組成物において、
前記一般式(2a)で表される構造が、下記一般式(2a-1)で表される構造である、組成物。

[化12]



(前記一般式(2a-1)において、
*2は、前記一般式(2a)における*2と同義であり、
 R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} 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_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、それぞれ独立に、

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

からなる群から選択され、

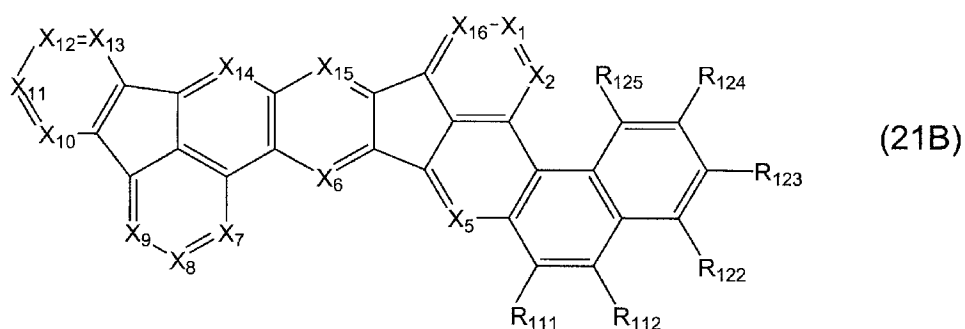
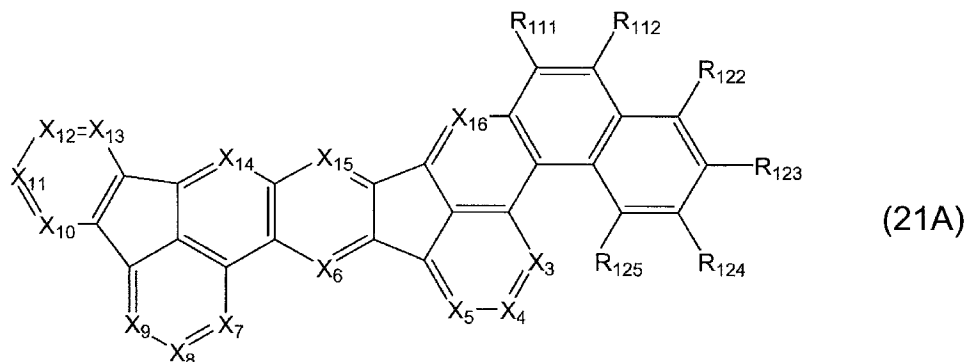
置換基としての R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} のうち、
互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成し
ない場合とがある。)

[請求項17]

請求項 16 に記載の組成物であって、

前記一般式 (2) で表される化合物として、下記一般式 (21A)
で表される化合物及び下記一般式 (21B) で表される化合物を含む
、組成物。

[化13]



(前記一般式(21A)において、 X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式(21B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式(21A)及び(21B)において、 R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} は、前記一般式(2a-1)における R_{111} 及び R_{112} 、並びに R_{122} 乃至 R_{125} とそれぞれ同義である。)

[請求項18]

請求項14に記載の組成物において、

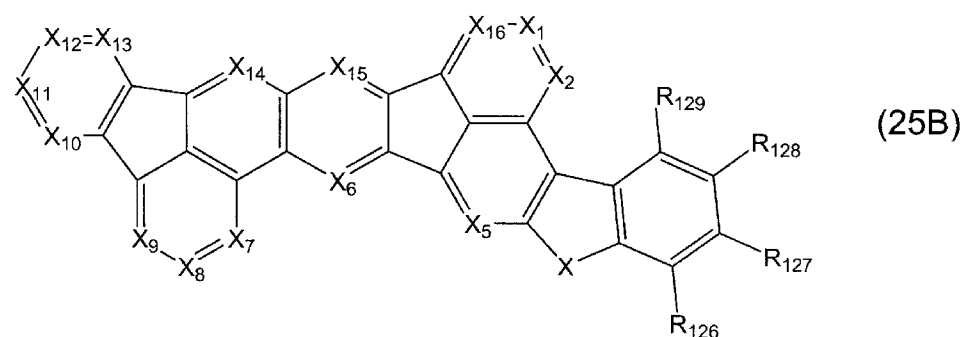
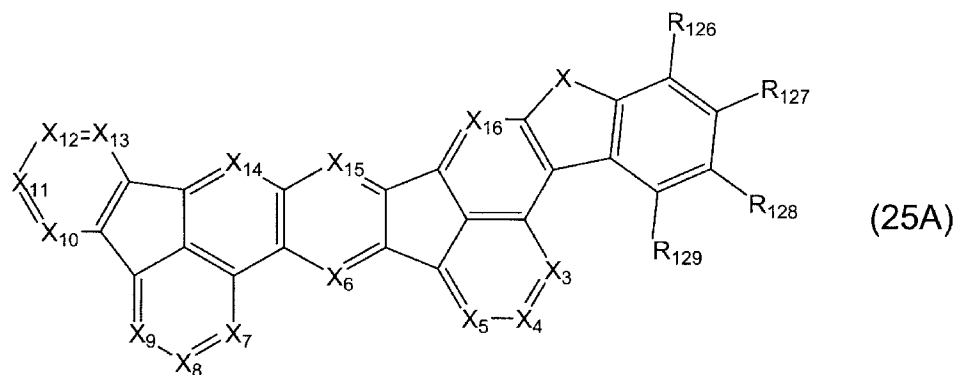
前記一般式(2)における X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、並びに X_3 及び X_4 の組の少なくともいずれかの組が、前記一般式(2b)で表される構造と結合する炭素原子である、組成物。

[請求項19]

請求項18に記載の組成物において、

前記一般式（２）で表される化合物として、下記一般式（２５Ａ）で表される化合物及び下記一般式（２５Ｂ）で表される化合物を含む、組成物。

[化14]



（前記一般式（２５Ａ）において、 X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式（２）における X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式（２５Ｂ）において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式（２）における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式（２５Ａ）及び（２５Ｂ）において、 X は、前記一般式（２ｂ）における X とそれぞれ同義であり、

R_{126} 乃至 R_{129} 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_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数１～３０のアルキル基、

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

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

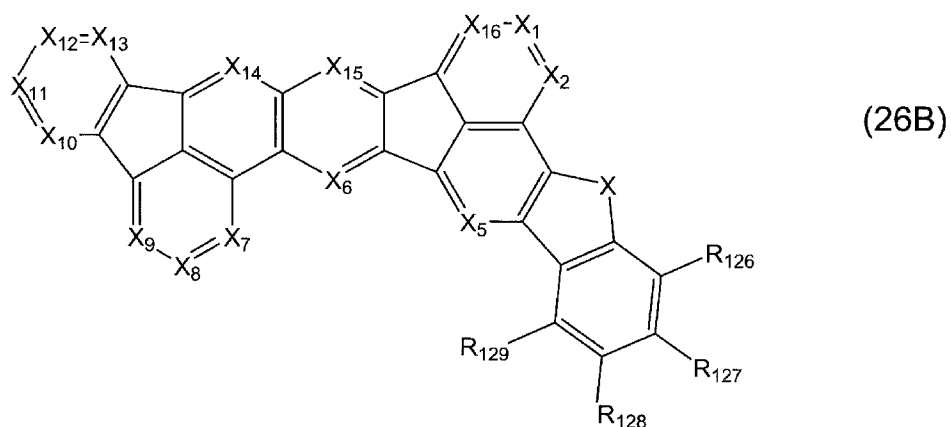
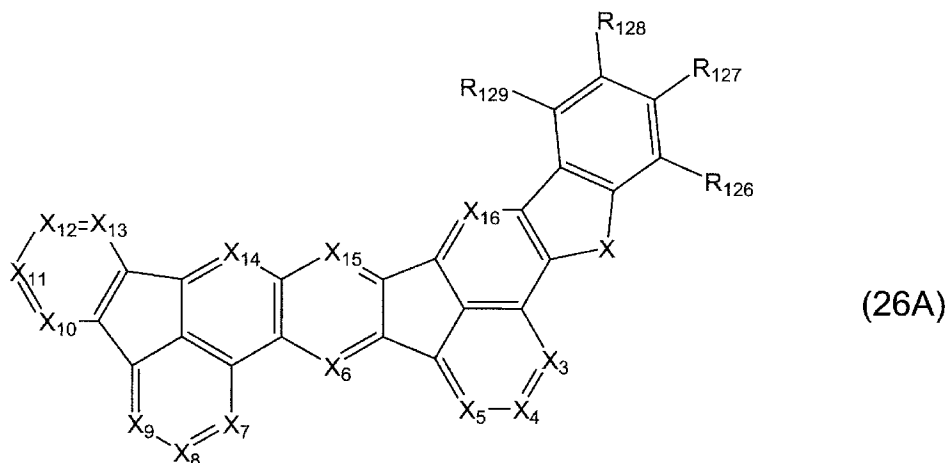
置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。）

[請求項20]

請求項 18 に記載の組成物において、

前記一般式 (2) で表される化合物として、下記一般式 (26A) で表される化合物及び下記一般式 (26B) で表される化合物を含む、組成物。

[化15]



(前記一般式(26A)において、 X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_3 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式(26B)において、 X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x は、前記一般式(2)における X_1 、 X_2 、 X_5 乃至 X_{16} 、及び R_x とそれぞれ同義である。

前記一般式(26A)及び(26B)において、 X は、前記一般式(2b)における X とそれぞれ同義であり、

R_{126} 乃至 R_{129} 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_{126} 乃至 R_{129} は、それぞれ独立に、

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

シアノ基、
ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子

からなる群から選択され、

置換基としての R_{126} 乃至 R_{129} のうち、互いに隣り合う基が結合してさらに環を形成する場合と、環を形成しない場合とがある。)

[請求項21]

陽極と、

発光層と、

陰極と、を有し、

前記発光層は、第一の化合物及び第二の化合物を含み、

前記第二の化合物は、請求項 1 から請求項 13 のいずれか一項に記載の化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項22] 請求項21に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第一の化合物は、遅延蛍光性の化合物であり、
前記第一の化合物の一重項エネルギー $S_1(M1)$ と、前記第二の化合物の一重項エネルギー $S_1(M2)$ とが、下記数式(数1)の関係を満たす、有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$S_1(M1) > S_1(M2) \quad \dots (数1)$$

[請求項23] 請求項22に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第二の化合物の主ピーク波長の範囲は、430nm以上480nm以下である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

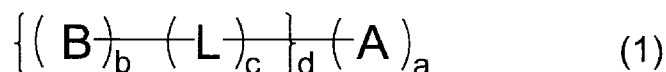
[請求項24] 請求項22または請求項23に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第二の化合物の主ピーク波長の範囲は、445nm以上480nm以下である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項25] 請求項22から請求項24のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の化合物は、下記一般式(1)で表される化合物である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化16]



(前記一般式(1)において、

Aは、下記一般式(a-1)～(a-7)からなる群から選ばれる部分構造を有する基であり、

複数のAは、互いに同一であるかまたは異なり、

A同士が結合して飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成せず、

Bは、下記一般式(b-1)～(b-6)からなる群から選ばれる部分構造を有する基であり、

複数のBは、互いに同一であるかまたは異なり、

B同士が結合して飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成せず、

a、b、及びdは、それぞれ独立に、1～5の整数であり、

cは、0～5の整数であり、

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1～5の整数のとき、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、及び

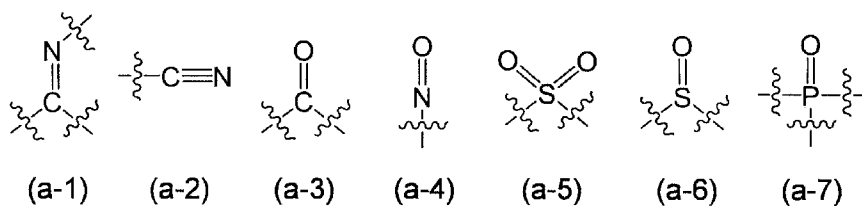
置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基

からなる群から選択される連結基であり、

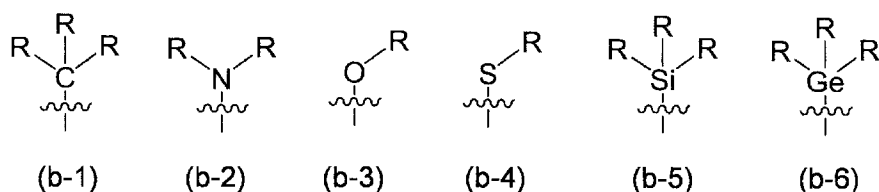
cが2～5の整数のとき、複数のLは、互いに同一であるかまたは異なり、

複数のL同士が結合して飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成しない。)

[化17]



[化18]



(前記一般式 (b-1) ～ (b-6) において、

R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は、それぞれ独立に、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、及び

置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基

からなる群から選択される基であり、

複数の R は、互いに同一であるかまたは異なり、

R 同士が結合して飽和もしくは不飽和の環を形成するかまたは環を形成しない。)

[請求項26] 請求項 25 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
A は、前記一般式 (a-1)、(a-2)、(a-3) 及び (a-5) からなる群から選ばれる部分構造を有する基である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

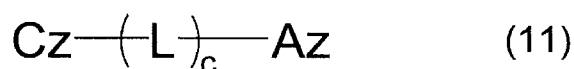
[請求項27] 請求項 25 または請求項 26 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

B は、前記一般式 (b-2)、(b-3) 及び (b-4) からなる群から選ばれる部分構造を有する基である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項28] 請求項 22 から請求項 27 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の化合物は、下記一般式 (11) で表される化合物である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化19]



(前記一般式 (11) において、

Az は、

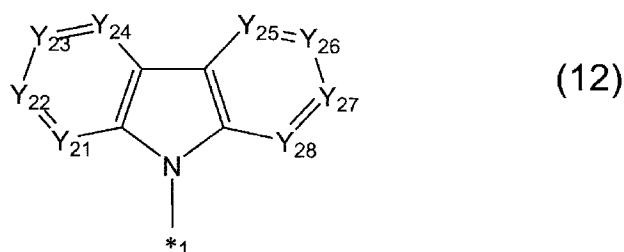
置換または無置換のピリジン環、

置換または無置換のピリミジン環、

置換または無置換のトリアジン環、及び

置換または無置換のピラジン環
 からなる群から選択される環構造であり、
 c は 0 ～ 5 の整数であり、
 c が 0 のとき、 C_z と A_z とが単結合で結合し、
 c が 1 ～ 5 の整数のとき、 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、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連結基であり、
 c が 2 ～ 5 の整数のとき、複数の L は、互いに同一であるかまたは
 異なり、
 複数の L 同士が結合して環を形成するかまたは環を形成せず、
 C_z は、下記一般式 (12) で表される。)

[化20]



(前記一般式 (12) において、
 Y_{21} 乃至 Y_{28} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_y であり、
 R_y 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_y は、それぞれ独立に、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基、
 置換または無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基、
 置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、
 置換または無置換の炭素数 1 ～ 30 のフルオロアルキル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 3 ～ 30 のシクロアルキル基、
 置換または無置換の炭素数 7 ～ 30 のアラルキル基、

置換ホスホリル基、

置換シリル基、

シアノ基、

ニトロ基、及び

カルボキシ基

からなる群から選択される基であり、

複数の R_y は、互いに同一であるかまたは異なり、

Y_{21} 乃至 Y_{28} のうち、複数が $C R_y$ であって、 R_y が置換基である場合、置換基としての複数の R_y 同士が結合して環を形成する場合と、環を形成しない場合とがあり、

* 1 は、L で表される連結基の構造中の炭素原子との結合部位、または A z で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。)

[請求項29] 請求項22から請求項28のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記発光層は、さらに第三の化合物を含み、

前記第一の化合物の一重項エネルギー $S_1(M1)$ と、前記第三の化合物の一重項エネルギー $S_1(M3)$ とが、下記数式(数2)の関係を満たす、有機エレクトロルミネッセンス素子。

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

[請求項30] 請求項29に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記発光層における前記第一の化合物の含有率が、10質量%以上80質量%以下である有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項31] 請求項21から請求項30のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記発光層には、複数種の前記第二の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項32] 請求項21から請求項31のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

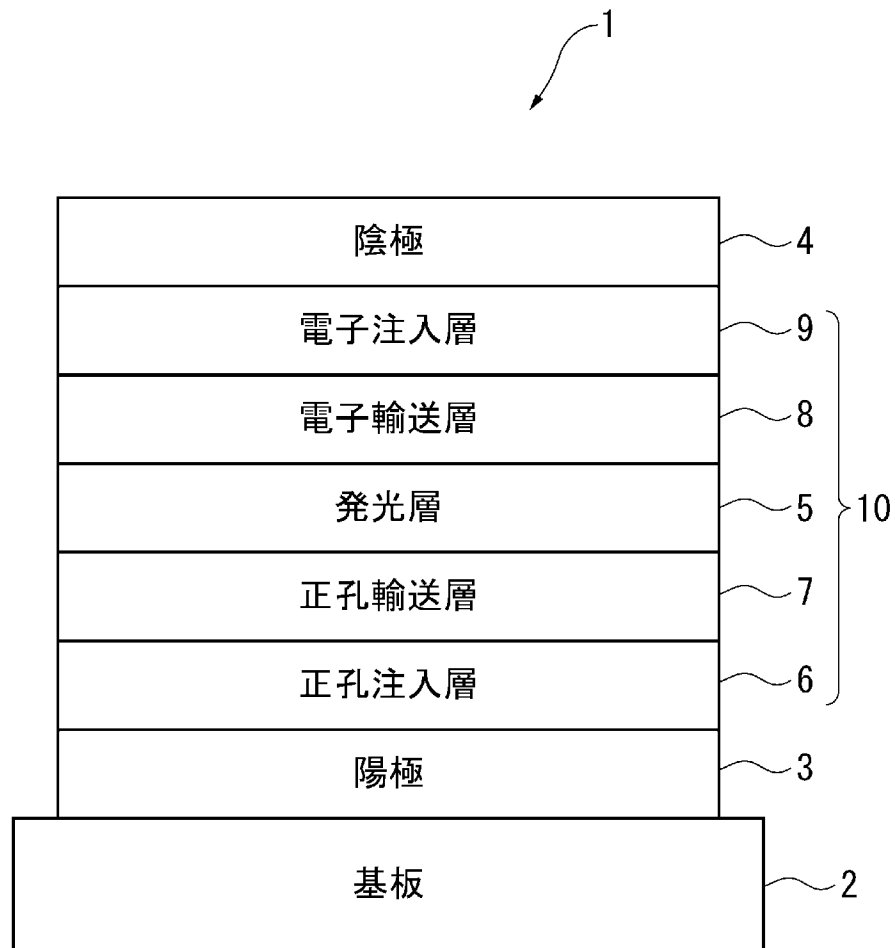
前記陽極と前記発光層との間に正孔輸送層を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項33] 請求項21から請求項32のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

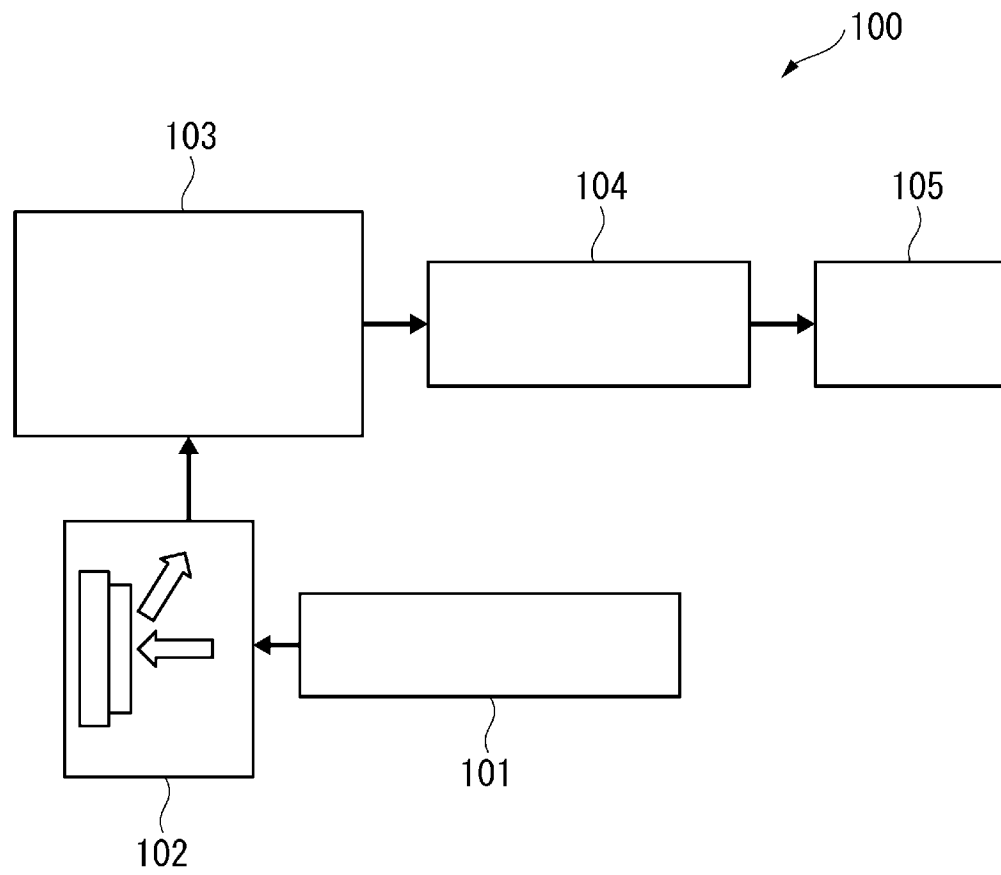
前記陰極と前記発光層との間に電子輸送層を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項34] 請求項21から請求項33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備える電子機器。

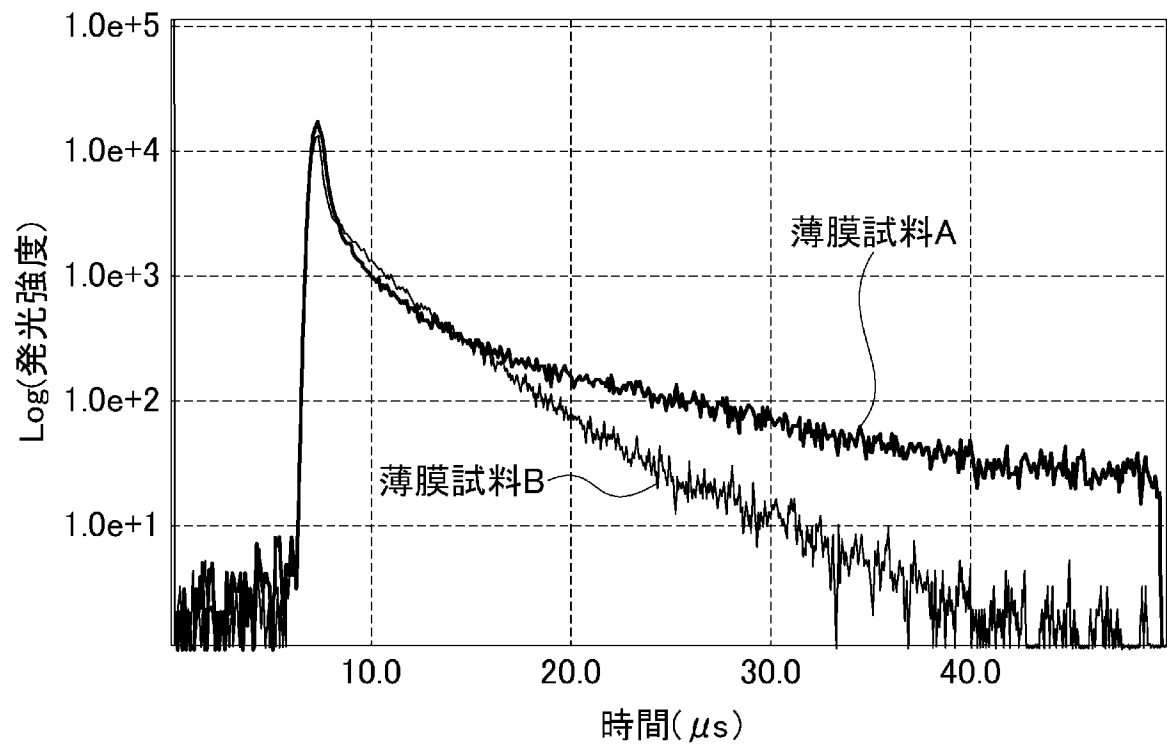
[図1]



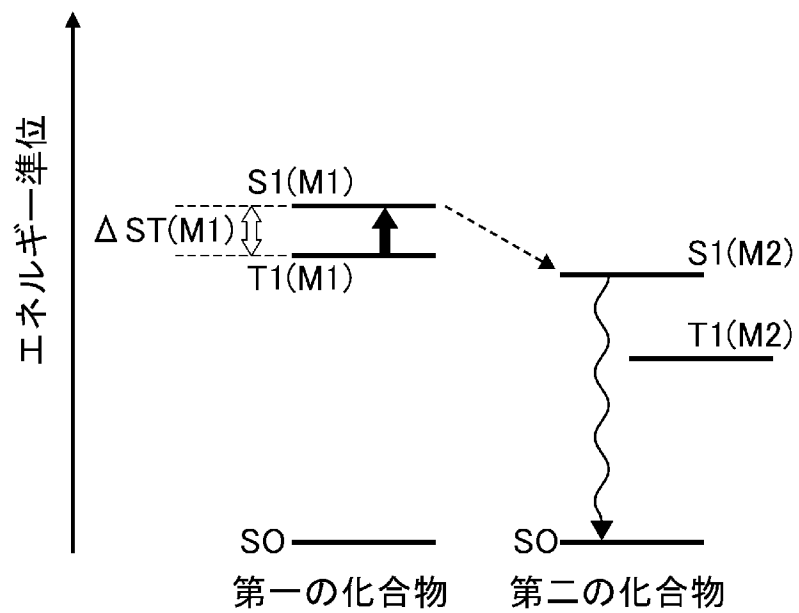
[図2]



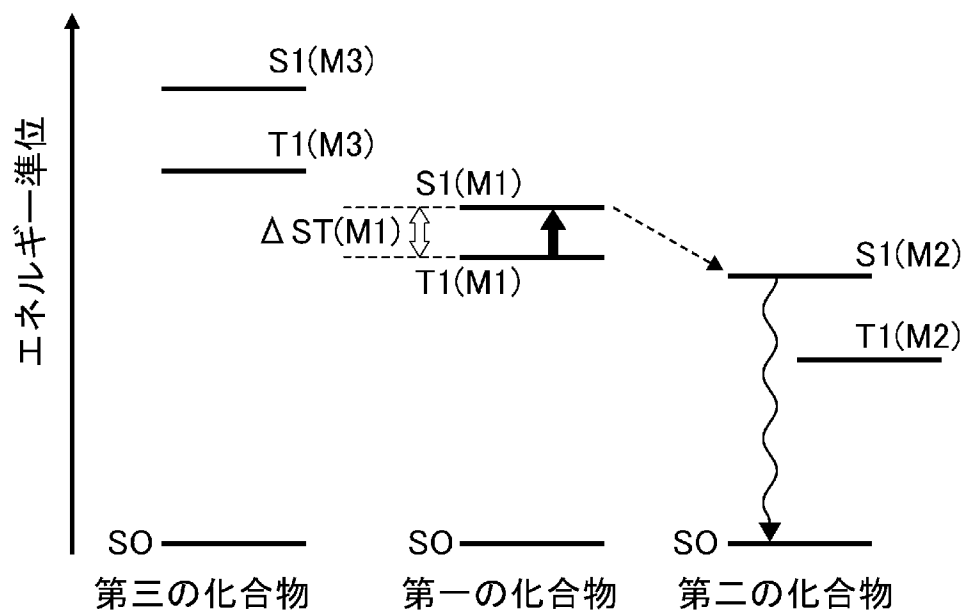
[図3]



[図4]



[図5]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/035914

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int.Cl. C07C13/62 (2006.01) i, C07D209/94 (2006.01) i, C09K11/06 (2006.01) i,
H01L51/50 (2006.01) i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int.Cl. C07C13/62, C07D209/94, C09K11/06, H01L51/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan	1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan	1971-2017
Registered utility model specifications of Japan	1996-2017
Published registered utility model specifications of Japan	1994-2017

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CAPLUS/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2011-231086 A (CANON INC.) 17 November 2011, & WO 2011/136155 A1 & US 2013/0038515 A1 & EP 2569268 A1 & CN 102869636 A & KR 10-2013-0024917 A	1-34
A	JP 2016-094373 A (CANON INC.) 26 May 2016, & US 2016/0141506 A1	1-34

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
15 November 2017 (15.11.2017)

Date of mailing of the international search report
26 December 2017 (26.12.2017)

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/035914

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2010-254610 A (CANON INC.) 11 November 2010, & US 2010/0270914 A1 & EP 2243761 A1 & CN 101870705 A & KR 10-2010-0117024 A	1-34
A	WO 2010/018842 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 18 February 2010, & US 2011/0147732 A1 & EP 2314558 A1 & KR 10-2011-0043658 A	1-34
A	JP 2015-007011 A (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 15 January 2015, (Family: none)	1-34

<Subject of examination>

Claim 1 includes a compound in which a structure represented by general formula (2a) or (2b) is bonded to any one of the following pairs: X_1 and X_2 , X_2 and X_3 , X_3 and X_4 , X_4 and X_5 , X_7 and X_8 , X_8 and X_9 , X_{10} and X_{11} , X_{11} and X_{12} , X_{12} and X_{13} , and X_{16} and X_1 . In addition, claim 1 includes a compound in which R_x 's are bonded to each other to form a ring.

Meanwhile, the description of the present application indicates that a compound, in which a structure represented by general formula (2a) or (2b) is bonded to the pair X_1 and X_2 , or the pair X_3 and X_4 , and in which, with respect to X_5 - X_{16} , R_x 's do not form rings with each other, has been specifically produced, and indicates that external quantum efficiency and the like have been measured for the case in which the compound is used as an organic EL element.

Here, in light of common technical knowledge, i.e., a change in the structure of a fused ring of a compound used for an organic EL leads to a change in the physical properties of the compound, a compound in which a structure represented by general formula (2a) or (2b) is bonded to a location other than the pair X_1 and X_2 and the pair X_3 and X_4 differs in the chemical structure of a fused ring from the compound specifically set forth in the description of the present application. Thus, various physical properties such as external quantum efficiency may differ between the two compounds, and it is also unclear whether the compound can be used as an organic EL.

In addition, when R_x 's form rings, various chemical structures are possible, and for example, compounds, such as a fullerene compound, having completely different chemical structures and physical properties are possible.

Thus, the content disclosed in the description cannot be extended or generalized to cover the scope of the invention as in claim 1 including a compound in which a structure represented by general formula (2a) or (2b) is bonded to a location other than the pair X_1 and X_2 and the pair X_3 and X_4 , and in which, with respect to X_5 - X_{16} , R_x 's form rings.

Therefore, the invention as in claim 1 is beyond the scope of the text of the description, and does not meet the requirements for support defined in PCT Article 6.

In addition, as mentioned above, claim 1 includes a compound which significantly differs from the compound specifically disclosed in the description of the present application. Thus, given the common technical knowledge that compounds having different chemical structures are generally different in terms of production method, it cannot be said that the description of the present application is written in a manner that makes it possible to produce all of the compounds as in claim 1.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/035914

Therefore, the description is not written clearly and sufficiently enough for a person skilled in the art to carry out the invention as in claim 1, and does not meet the requirements defined in PCT Article 5.

Therefore, compounds other than the "compounds in which the remaining R_x 's in formula (21A) in claim 4, formula (21B) in claim 5, formula (25A) in claim 7, formula (25B) in claim 8, formula (26A) in claim 9, and formula (26B) in claim 10 do not form rings" were not searched (examined), as meaningful searches (examinations) could not be carried out.

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. C07C13/62(2006.01)i, C07D209/94(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. C07C13/62, C07D209/94, C09K11/06, H01L51/50

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2017年
日本国実用新案登録公報	1996-2017年
日本国登録実用新案公報	1994-2017年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

CAplus/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2011-231086 A（キヤノン株式会社） 2011.11.17, & WO 2011/136155 A1 & US 2013/0038515 A1 & EP 2569268 A1 & CN 102869636 A & KR 10-2013-0024917 A	1-34
A	JP 2016-094373 A（キヤノン株式会社） 2016.05.26, & US 2016/0141506 A1	1-34

☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

15.11.2017

国際調査報告の発送日

26.12.2017

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁（ISA/J P）

郵便番号100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官（権限のある職員）

福山 則明

4H

4870

電話番号 03-3581-1101 内線 3443

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2010-254610 A (キヤノン株式会社) 2010.11.11, & US 2010/0270914 A1 & EP 2243761 A1 & CN 101870705 A & KR 10-2010-0117024 A	1-34
A	WO 2010/018842 A1 (出光興産株式会社) 2010.02.18, & US 2011/0147732 A1 & EP 2314558 A1 & KR 10-2011-0043658 A	1-34
A	JP 2015-007011 A (出光興産株式会社) 2015.01.15, (ファミリーなし)	1-34

<調査の対象について>

請求項1は、一般式(2a)又は(2b)で表される構造が、 X_1 及び X_2 の組、 X_2 及び X_3 の組、 X_3 及び X_4 の組、 X_4 及び X_5 の組、 X_7 及び X_8 の組、 X_8 及び X_9 の組、 X_{10} 及び X_{11} の組、 X_{11} 及び X_{12} の組、 X_{12} 及び X_{13} の組、 X_{16} 及び X_1 の組のいずれかに結合する化合物を包含している。また、請求項1は、 R_x 同士が互いに結合して環を形成する化合物を包含している。

一方、本願明細書においては、一般式(2a)又は(2b)で表される構造を、 X_1 及び X_2 の組又は X_3 及び X_4 の組に有する化合物であって、 $X_5 \sim X_{16}$ に関して、 R_x 同士が環を形成しない化合物が、具体的に製造され、有機EL素子として用いた際の外部量子効率等が測定されていることが記載されている。

ここで、有機ELに用いられる化合物の縮合環の構造が変化すれば、その物性が変化するという技術常識に照らせば、一般式(2a)又は(2b)で表される構造が X_1 及び X_2 の組又は X_3 及び X_4 の組以外の場所に結合している化合物は、縮合環の化学構造が本願明細書に具体的に開示された化合物とは異なるものであるから、外部量子効率等の諸物性は異なり得るものであるし、そもそも、有機ELとして使用できるか否かも不明である。

さらに、 R_x 同士が環を形成する場合に、様々な化学構造が該当することになり、例えば、フラーレン化合物のような全く化学構造及び物性が異なる化合物も該当することになる。

そうすると、一般式(2a)又は(2b)で表される構造が X_1 及び X_2 の組又は X_3 及び X_4 の組以外の場所に結合している化合物、 $X_5 \sim X_{16}$ に関して、 R_x 同士が環を形成する化合物を包含する請求項1に係る発明の範囲まで、明細書に開示された内容を拡張ないし一般化することはできない。

したがって、請求項1に係る発明は、明細書に記載した範囲を超えるものであり、PCT第6条に規定される裏付けに関する要件を満たしていない。

また、上記のとおり、請求項1には、本願明細書に具体的に開示された化合物とは大きく異なる化合物が包含されるところ、一般的に化学構造が異なれば、その製造方法も変化するという技術常識に鑑みれば、本願明細書は、請求項1に係るあらゆる化合物を製造できるように記載されているとはいえない。

したがって、明細書は、請求項1に係る発明を当業者が実施できる程度に明確かつ十分に記載されておらず、PCT第5条に規定される要件を満たしていない。

よって、「請求項4の式(21A)、請求項5の式(21B)、請求項7の式(25A)、請求項8の式(25B)、請求項9の式(26A)、請求項10の式(26B)のうち、残りの R_x 同士が環を形成していない化合物」以外については、有意義な調査[審査]を行うことができないため、調査[審査]を行わなかった。