

(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
2016 年 11 月 17 日(17.11.2016)



(10) 国際公開番号
WO 2016/181846 A1

(51) 国際特許分類:

C07D 209/86 (2006.01) C07D 417/10 (2006.01)
C07C 255/51 (2006.01) C07D 471/14 (2006.01)
C07D 241/24 (2006.01) C07D 491/048 (2006.01)
C07D 251/24 (2006.01) C07D 519/00 (2006.01)
C07D 265/38 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 401/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07D 403/14 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2016/063242

(22) 国際出願日: 2016 年 4 月 27 日(27.04.2016)

(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 2015-095804 2015 年 5 月 8 日(08.05.2015) JP
特願 2015-203876 2015 年 10 月 15 日(15.10.2015) JP
特願 2015-203878 2015 年 10 月 15 日(15.10.2015) JP

(71) 出願人: コニカミノルタ株式会社(KONICA MIN-
OLTA, INC.) [JP/JP]; 〒1007015 東京都千代田区丸
の内二丁目 7 番 2 号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 宮田 康生(MIYATA, Yasuo). 並川 威人
(NAMIKAWA, Taketo). 飯島 貴之(IIJIMA, Takay-

uki). 菅原 隆太郎(SUGAWARA, Ryutaro). 山田
哲也(YAMADA, Tetsuya). 鈴木 隆嗣(SUZUKI,
Takatugu).

(74) 代理人: 鷺田 公一(WASHIDA, Kimihito); 〒
1600023 東京都新宿区西新宿 1-2 3-7 新
宿ファーストウエスト 8 階 Tokyo (JP).

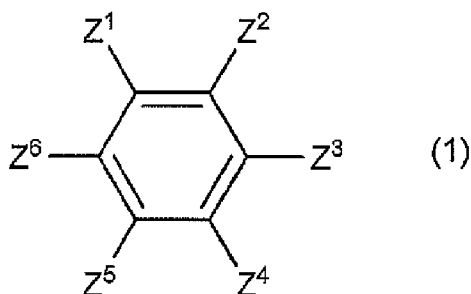
(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保
護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA,
BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN,
CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES,
FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN,
IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR,
LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, 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,

[続葉有]

(54) Title: π -CONJUGATED COMPOUND, ORGANIC ELECTROLUMINESCENCE ELEMENT MATERIAL, LIGHT-EMITTING MATERI-
AL, LIGHT-EMITTING THIN FILM, ORGANIC ELECTROLUMINESCENCE ELEMENT, DISPLAY DEVICE, AND ILLUMINATION DEVICE

(54) 発明の名称: π 共役系化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子材料、発光材料、発光性薄膜、有機エレクトロルミ
ネッセンス素子、表示装置及び照明装置



(57) Abstract: In order to provide a novel π -conjugated compound capable of increasing the light-emission efficiency of an organic electroluminescence element, for example, this π -conjugated compound has a structure indicated by general formula (1). (In general formula (1): Z^1 - Z^6 each independently indicate a hydrogen atom, a deuterium atom, an electron-donating group D, or an electron-withdrawing group A; at least out of two among Z^1 - Z^6 is an electron-donating group D and the other is an electron-withdrawing group A; and at least one ortho position combination Z^1 and Z^2 , Z^2 and Z^3 , Z^3 and Z^4 , Z^4 and Z^5 , Z^5 and Z^6 , or Z^6 and Z^1 among Z^1 - Z^6 is one combination out of an electron-donating group D and an electron-donating group D, an electron-withdrawing group A and an electron-withdrawing group A, or an electron-donating group D and an electron-withdrawing group A.)

(57) 要約:

[続葉有]



WO 2016/181846 A1



MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, 添付公開書類:
TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, — 国際調査報告 (条約第 21 条(3))
KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

例えば有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を改良しうる新たな π 共役系化合物を提供することを課題とする。当該課題を解決するため、下記一般式 (1) で表される構造を有する、 π 共役系化合物とする。(一般式 (1) 中、 $Z^1 \sim Z^6$ は、それぞれ水素原子、重水素原子、電子供与性基 D 又は電子吸引性基 A を表し、 $Z^1 \sim Z^6$ のうち少なくとも二つの一方が前記電子供与性基 D であり、他方が前記電子吸引性基 A であり、かつ $Z^1 \sim Z^6$ のうちオルト位の組み合わせ Z^1 と Z^2 、 Z^2 と Z^3 、 Z^3 と Z^4 、 Z^4 と Z^5 、 Z^5 と Z^6 、及び Z^6 と Z^1 の少なくとも一つが、前記電子供与性基 D と前記電子供与性基 D、前記電子吸引性基 A と前記電子吸引性基 A、又は前記電子供与性基 D と前記電子吸引性基 A の組み合わせのいずれかである)

明 細 書

発明の名称：

π 共役系化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子材料、発光材料、発光性薄膜、有機エレクトロルミネッセンス素子、表示装置及び照明装置

技術分野

[0001] 本発明は、 π 共役系化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子材料、発光材料、発光性薄膜、有機エレクトロルミネッセンス素子、表示装置及び照明装置に関する。

背景技術

[0002] 有機材料のエレクトロルミネッセンス (Electro Luminescence : 以下「EL」と略記する。) を利用した有機エレクトロルミネッセンス素子 (「有機電界発光素子」、「有機EL素子」ともいう。) は、平面発光を可能とする新しい発光システムとして既に実用化されている技術である。有機EL素子は、電子ディスプレイはもとより、最近では照明機器にも適用され、その発展が期待されている。

[0003] 有機EL素子の発光方式としては、三重項励起状態から基底状態に戻る際に光を発する「リン光発光」と、一重項励起状態から基底状態に戻る際に光を発する「蛍光発光」の二通りがある。

[0004] 有機EL素子に電界をかけると、陽極と陰極からそれぞれ正孔と電子が注入され、発光層において再結合し励起子を生じる。このとき一重項励起子と三重項励起子とが25% : 75%の割合で生成するため、三重項励起子を利用するリン光発光の方が、蛍光発光に比べ、理論的に高い内部量子効率を得られることが知られている。しかしながら、リン光発光方式において実際に高い量子効率を得るためには、中心金属にイリジウムや白金等の希少金属を用いた錯体を用いる必要があり、将来的に希少金属の埋蔵量や金属自体の値段が産業上大きな問題となることが懸念される。

[0005] 一方で、蛍光発光型においても発光効率を向上させるために様々な開発が

なされており、近年新しい動きが出てきた。例えば、特許文献1には、二つの三重項励起子の衝突により一重項励起子が生成する現象（Triplet-Triplet Annihilation：以下、適宜「TTA」と略記する。また、Triplet-Triplet Fusion：「TTF」ともいう。）に着目し、TTAを効率的に起こして蛍光素子の高効率化を図る技術が開示されている。この技術により蛍光発光材料の発光効率は従来の蛍光発光材料の2～3倍まで向上しているが、TTAにおける理論的な一重項励起子生成効率は40％程度にとどまるため、依然としてリン光発光に比べ高発光効率化の問題を有している。

[0006] さらに近年では、三重項励起子から一重項励起子への逆項間交差（Reverse Intersystem Crossing：以下、適宜「RISC」と略記する。）が生じる現象を利用した現象（熱活性型遅延蛍光（「熱励起型遅延蛍光」ともいう：Thermally Activated Delayed Fluorescence：以下、適宜「TADF」と略記する。）を利用した蛍光発光材料と、有機EL素子への利用の可能性が報告されている（例えば、特許文献2、非特許文献1、非特許文献2参照）。このTADF機構による遅延蛍光を利用すると、電界励起による蛍光発光においても、理論的にはリン光発光と同等の100％の内部量子効率が可能となる。

[0007] TADF現象を発現させるためには、室温又は発光素子中の発光層温度で電界励起により生じた75％の三重項励起子から一重項励起子への逆項間交差が起こる必要がある。さらに、逆項間交差により生じた一重項励起子が、直接励起により生じた25％の一重項励起子と同様に蛍光発光することにより、100％の内部量子効率が理論上可能となる。この逆項間交差が起こるためには、最低励起一重項エネルギー準位（S1）と最低三重項励起エネルギー準位（T1）の差の絶対値（ ΔE_{ST} ）が小さいことが求められる。

[0008] 例えばTADF現象を発現させるためには、有機化合物の ΔE_{ST} を小さくすることが有効であり、 ΔE_{ST} を小さくするためには、分子内の最高被占分

子軌道（HOMO）と最低空分子軌道（LUMO）を混在させずに局在化させること（明確に分離すること）が有効である。

[0009] さらに、ホスト材料と発光材料からなる発光層に、TADF性を示す材料を第三成分（アシストドーパント材料）として含めると、高発光効率の発現に有効であることが知られている（非特許文献3参照）。アシストドーパント材料上に25%の一重項励起子と75%の三重項励起子を電界励起により発生させることによって、三重項励起子は逆項間交差（RISC）を伴って一重項励起子を生成することができる。一重項励起子のエネルギーは、発光材料へ蛍光共鳴エネルギー移動（Fluorescence resonance energy transfer: 以下、適宜、「FRET」と略記する。）し、発光材料が移動してきたエネルギーにより発光することが可能となる。従って、理論上100%の励起子エネルギーを利用して、発光材料を発光させることが可能となり、高発光効率が発現する。

[0010] 図1及び図2は、TADF現象を発現する化合物（TADF化合物）と一般的な蛍光発光材料のエネルギーダイアグラムを示した模式図である。例えば、図1に示す構造を有する2CzPNでは、ベンゼン環上の1位と2位のカルbazolリル基にHOMOが局在し、4位と5位のシアノ基にLUMOが局在している。そのため、2CzPNのHOMOとLUMOを分離することができ、 ΔE_{ST} が極めて小さくなってTADF現象を発現する。一方、2CzPNの4位と5位のシアノ基をメチル基に置き換えた2CzXy（図2）では、構造は類似しているが、2CzPNでみられるHOMOとLUMOの明確な分離ができないために、 ΔE_{ST} を小さくすることはできず、TADF現象を発現させるには至らない。

[0011] 従来技術では、HOMOとLUMOを明確に分離するには、強力な電子供与性基又は電子吸引性基を用いる手法が知られている。しかしながら、強力な電子供与性基又は電子吸引性基を用いることは、強い分子内電荷移動（CT）性の励起状態を形成するため、吸収スペクトルや発光スペクトルが長波長化する要因となり、発光波長の制御が困難であるという課題が生じている

。逆に、発光波長の制御するために電子供与性又は電子吸引性を弱めると、TADF現象の発現に支障をきたすことになる。そのため、発光波長の制御しながら、TADF現象を発現させる新たな手法が望まれている。

[0012] ところで、近年、有機EL素子の生産安定性や品質安定性（信頼性）を向上させることも求められている。

有機EL素子は、通常、陰極と、陽極と、それらの間に配置される複数の有機層とを有する。具体的には、有機EL素子は、陰極／電子注入層／電子輸送層／発光層／正孔輸送層／正孔注入層／陽極をこの順に有する。有機層の数が多いと、その分、製造工程数も多くなるため、生産安定性が損なわれやすい。従って、有機EL素子の生産安定性を向上させる観点では、陰極と陽極の間の有機層の数を少なくすること、好ましくは発光層のみとすることが求められている。

また、発光層は、通常、発光性化合物とホスト化合物の2種類以上を含む。発光層の構成成分の種類が多いと、これらの構成成分の濃度を調整しながら同時蒸着する必要があり、生産安定性や品質安定性が損なわれやすい。従って、有機ELデバイスの生産安定性や品質安定性（信頼性）を向上させる観点では、発光層の構成成分の種類をできるだけ少なくすること、好ましくはホスト化合物を含まずに、発光性化合物のみで構成できることも求められている。

つまり、有機EL素子の生産安定性や品質安定性（信頼性）を向上させる観点から、1）陰極と陽極の間の有機層の層数を少なくするか、2）発光層の構成成分の種類を少なくして有機EL素子の構成をできるだけ簡易化することが求められている。

[0013] これに対して、発光層中に蛍光発光性化合物又はリン光発光性化合物を高濃度に含有させる方法が検討されている。しかしながら、蛍光発光性化合物又はリン光発光性化合物を発光層に高濃度に含有させると、素子の発光効率が低下するという問題があった。そのため、発光層をこれらの化合物単独で構成することはできず、ホスト化合物をさらに含有させる必要があった。

[0014] 発光層中にホスト化合物を含有させずに、発光するTADF化合物を高濃度に含有させる方法も提案されている（例えば非特許文献4参照）。

先行技術文献

特許文献

[0015] 特許文献1：国際公開第2010／134350号

特許文献2：特開2013－116975号公報

非特許文献

[0016] 非特許文献1：H. Uoyama, et al., Nature, 2012, 492, 234－238

非特許文献2：Q. Zhang et al., Nature, Photonics, 2014, 8, 326－332

非特許文献3：H. Nakanotani, et al., Nature Communication, 2014, 5, 4016－4022.

非特許文献4：Advanced MaterialsDOI:10.1002/adma.201405474

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0017] しかしながら、非特許文献4に示される発光するTADF化合物単独で構成された発光層を有する有機EL素子は、いずれも連続駆動時の耐久性が低く、実用上十分な機能を有していなかった。劣化が早い要因としては、TADF化合物中のジフェニルスルホニル基の分解が考えられる（Journal of Physical chemistry C 2014, 118, 7569-7578参照）。

[0018] 一方、非特許文献1や3に示される4CzIPNや2CzPN等のTADF化合物単独で構成しても発光させることができず、ホスト化合物をさらに含有させる必要があった。そのため、有機EL素子の構成を十分に簡易にできるものではなかった。

[0019] 本発明は、上記問題・状況に鑑みてなされたものであり、その解決課題は

、例えば有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を改良しうる新たな π 共役系化合物を提供することである。また、当該 π 共役系化合物を用いた、有機エレクトロルミネッセンス素子材料、発光材料、発光性薄膜等を提供することである。また、発光効率と耐久性を低下させることなく、有機エレクトロルミネッセンス素子の構成を簡易にすることができ、生産性安定性及び信頼性の高い有機エレクトロルミネッセンス素子、及び当該有機エレクトロルミネッセンス素子を備えた表示装置及び照明装置を提供することでもある。

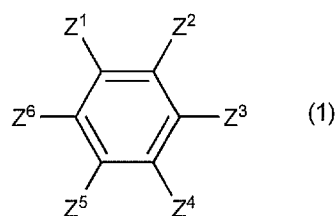
課題を解決するための手段

[0020] 本発明者は、上記課題を解決すべく、上記問題の原因等について検討した結果、ベンゼン環のオルト位の少なくとも一つの組み合わせを、電子供与部同士、電子吸引部同士、又は電子供与部と電子吸引部のいずれかの組み合わせで置換した π 共役系化合物を含有することを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子を新たに想到し、発光効率を向上できることを見出して本発明に至った。

すなわち、本発明に係る上記課題は、以下の手段により解決される。

[0021] [1] 下記一般式(1)で表される構造を有する、 π 共役系化合物。

[化1]



(一般式(1)中、

$Z^1 \sim Z^6$ は、それぞれ水素原子、重水素原子、電子供与性基D又は電子吸引性基Aを表し、

$Z^1 \sim Z^6$ のうち少なくとも二つの一方が前記電子供与性基Dであり、他方が前記電子吸引性基Aであり、かつ

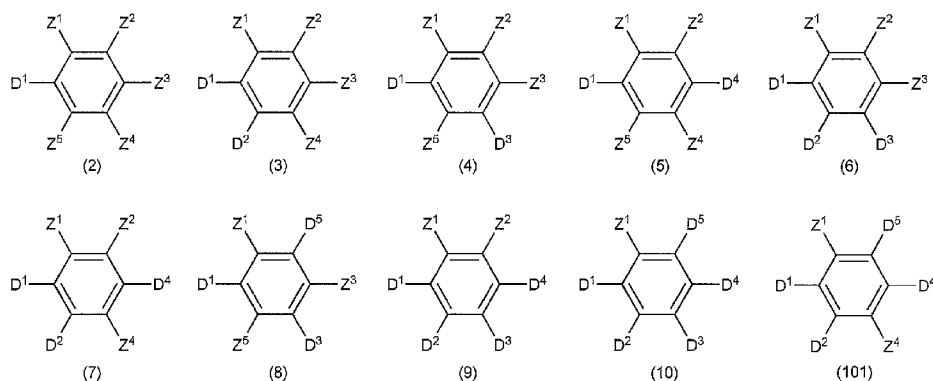
$Z^1 \sim Z^6$ のうちオルト位の組み合わせ Z^1 と Z^2 、 Z^2 と Z^3 、 Z^3 と Z^4 、 Z^4 と Z^5 、 Z^5 と Z^6 及び Z^6 と Z^1 の少なくとも一つが、前記電子供与性基Dと前記電子供与性基D、前記電子吸引性基Aと前記電子吸引性基A、又は前記電子供与性基Dと前記電子吸引性基Aの組み合わせのいずれかであり、

前記電子供与性基Dは、電子供与性基で置換されたアリール基、置換されていてもよい電子供与性の複素環基、置換されていてもよいアミノ基、及びアルキル基からなる群より選ばれる基であり、

前記電子吸引性基Aは、フッ素原子、フッ素原子で置換されたアルキル基、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいスルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、置換されていてもよいボリル基、電子吸引性基で置換されていてもよいアリール基、及び置換されていてもよい電子吸引性の複素環基からなる群より選ばれる基である)

[0022] [2] 下記一般式(2)～(10)または(101)のいずれかで表される、[1]に記載の π 共役系化合物。

[化2]



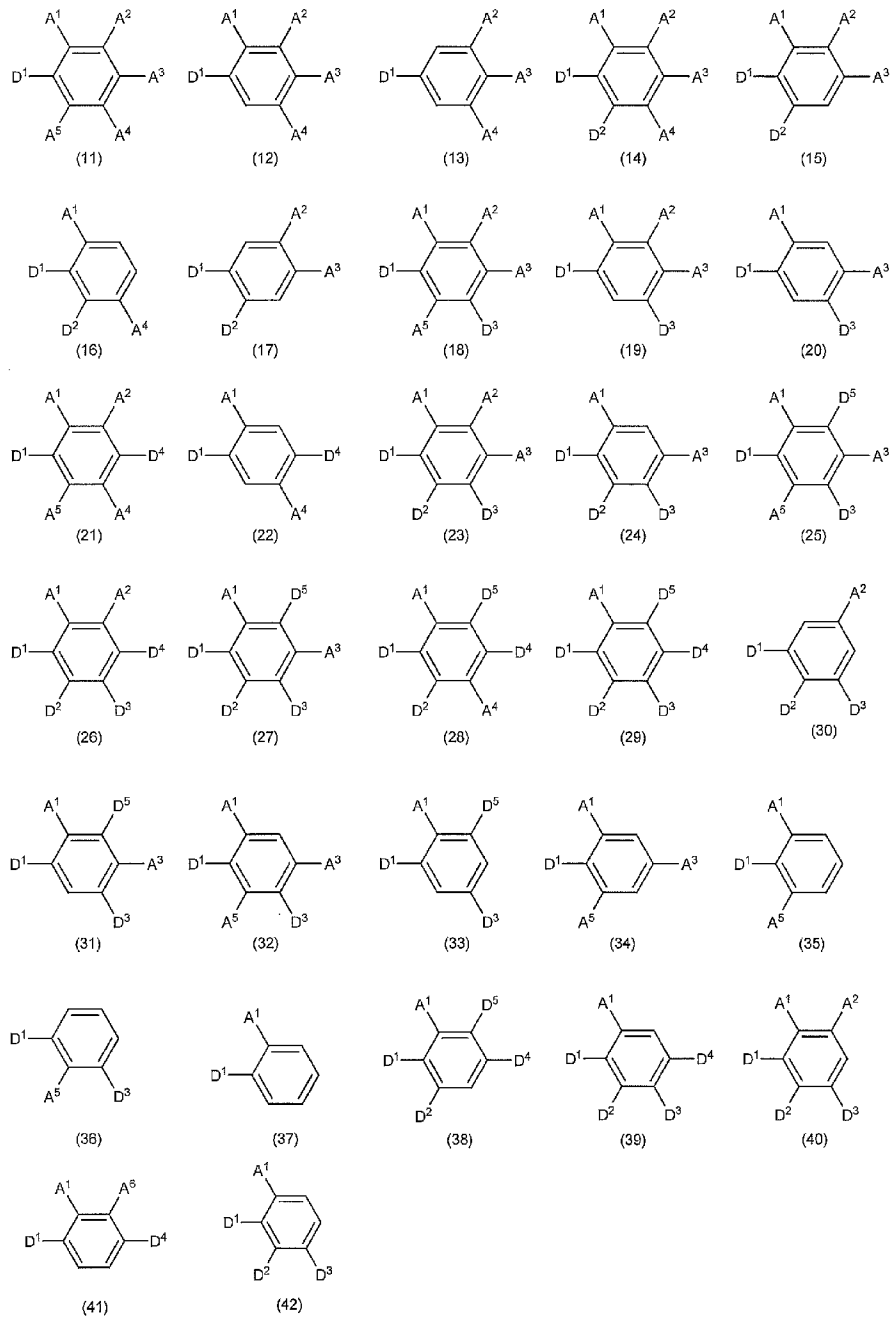
(一般式(2)～(10)または(101)中、

$D^1 \sim D^5$ は、それぞれ独立して前記電子供与性基Dを表し；

$Z^1 \sim Z^5$ は、それぞれ独立して水素原子、重水素原子又は前記電子吸引性基Aを表す。)

[3] 下記一般式(11)～(42)のいずれかで表される、[1]又は[2]に記載の π 共役系化合物。

[化3]



(一般式 (11) ~ (42) 中、

D¹ ~ D⁵は、それぞれ独立して前記電子供与性基Dを表し；

A¹ ~ A⁵は、それぞれ独立して前記電子吸引性基Aを表す。)

[0023] [4] 前記一般式 (11) ~ (42) において、D¹ ~ D⁵が、それぞれ独立に、電子供与性基で置換されたフェニル基、置換されていてもよいカルbazリル基、置換されていてもよいアザカルbazリル基、置換されていても

よいジアザカルbazリル基、置換されていてもよい9, 10-ジヒドロアクリジル基、置換されていてもよいフェノキサジル基、置換されていてもよいフェノチアジル基、置換されていてもよい5, 10-ジヒドロフェナジル基、置換されていてもよいジフェニルアミノ基、置換されていてもよいジアルキルアミノ基から選ばれる基からなり、かつ $A^1 \sim A^5$ がそれぞれ独立に、シアノ基で置換されているアリール基、無置換の含窒素芳香族6員環基、フッ素原子で置換されている含窒素芳香族6員環基、シアノ基で置換されている含窒素芳香族6員環基、フッ素置換アルキル基で置換されている含窒素芳香族6員環基、置換されていてもよいアリール基で置換されている含窒素芳香族6員環基から選ばれる基からなる、[3]に記載の π 共役系化合物。

[5] 前記一般式(11)～(15)、(18)、(19)、(23)、(24)、(26)、(27)、(29)、(30)、(39)、(40)又は(42)で表される、[3]又は[4]に記載の π 共役系化合物。

[6] 前記一般式(13)、(15)、(18)、(19)、(23)、(24)、(27)、(30)、(40)、又は(42)で表される、[3]～[5]のいずれかに記載の π 共役系化合物。

[0024] [7] 前記一般式(11)～(42)において、 $D^1 = D^2 = D^3 = D^4 = D^5$ と $A^1 = A^2 = A^3 = A^4 = A^5$ のうち少なくとも一方を満たす、[3]～[6]のいずれかに記載の π 共役系化合物。

[8] 最低励起一重項準位と最低励起三重項準位とのエネルギー差の絶対値 ΔE_{ST} が0.50 eV以下である、[1]～[7]のいずれかに記載の π 共役系化合物。

[9] [1]～[8]のいずれかに記載の π 共役系化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0025] [10] [1]～[8]のいずれかに記載の π 共役系化合物を含み、前記 π 共役系化合物が蛍光を放射する、発光材料。

[11] 前記 π 共役系化合物が、遅延蛍光を放射する、[10]に記載の発光材料。

[12] [1]～[8]のいずれかに記載の π 共役系化合物を含む、発光性薄膜。

[13] 前記 π 共役系化合物が、遅延蛍光を放射する、[12]に記載の発光性薄膜。

[0026] [14] 陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に設けられた発光層とを含み、前記発光層の少なくとも一層が、[1]～[8]のいずれかに記載の π 共役系化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[15] 前記 π 共役系化合物が、励起子を生成する、[14]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[16] 前記 π 共役系化合物が、蛍光を放射する、[14]又は[15]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[17] 前記 π 共役系化合物が、遅延蛍光を放射する、[16]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[18] 前記発光層が、前記 π 共役系化合物と、ホスト化合物と、を含む、[14]～[17]のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

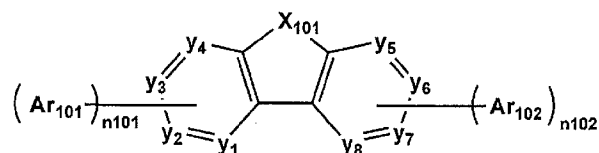
[0027] [19] 前記発光層は、前記 π 共役系化合物と、蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物の少なくとも一方とを含む、[14]～[17]のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[20] 前記発光層は、前記 π 共役系化合物と、蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物の少なくとも一方と、ホスト化合物とを含む、[14]～[17]のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0028] [21] 前記ホスト化合物が、下記一般式(1)で表される構造を有する、[18]又は[20]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化4]

一般式(I)



(一般式 (I) 中、

X_{101} は、 NR_{101} 、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、 $CR_{102}R_{103}$ 又は $SiR_{104}R_{105}$ を表し、

$y_1 \sim y_8$ は、それぞれ独立に、 CR_{106} 又は窒素原子を表し、

$R_{101} \sim R_{106}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよく、

Ar_{101} 及び Ar_{102} は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、

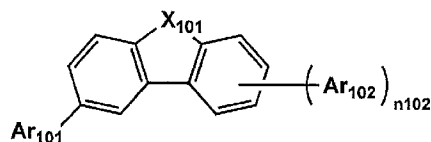
n_{101} 及び n_{102} は、各々 0～4 の整数を表す。

ただし、 R_{101} が水素原子の場合は、 n_{101} は 1～4 の整数を表す。)

[22] 前記一般式 (I) で表される構造を有するホスト化合物が、下記一般式 (II) で表される構造を有する、[21] に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化5]

一般式(II)



(一般式 (II) 中、

X_{101} は、 NR_{101} 、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、 $CR_{102}R_{103}$ 又は $SiR_{104}R_{105}$ を表し、

$R_{101} \sim R_{105}$ は、各々水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよく、

Ar_{101} 及び Ar_{102} は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、

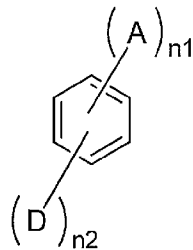
n_{102} は 0～4 の整数を表す。)

[0029] [23] [14]～[22] のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、表示装置。

[24] [14] ~ [22] のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、照明装置。

[0030] [25] 陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に配置された有機層とを含み、前記有機層は、実質的に下記一般式(201)で表される π 共役系化合物からなる、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化6]



一般式(201)

(一般式(201)中、

Aは、電子吸引性基であって、置換されていてもよい含窒素芳香族6員環基を表し、

n1は、1~3の整数を表し、n1が2以上である場合、2以上の前記Aは、互いに同じであっても異なってもよく、

Dは、電子供与性基であって、電子供与性基で置換されたアリール基、置換されていてもよいアミノ基又はアルキル基を表し、

n2は、2又は3を表し、2以上の前記Dは、互いに同じであっても異なってもよく、且つ

2以上の前記Dは、互いにオルト位に配置されている)

[26] 前記有機層は、発光層である、[25]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[27] 前記発光層と前記陽極との間に配置された正孔輸送層と、前記発光層と前記陰極との間に配置された電子輸送層の少なくとも一方をさらに含む、[26]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

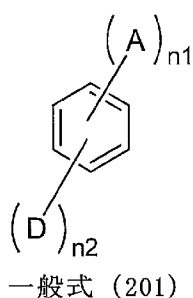
[28] 前記発光層と前記陽極との間に配置された正孔注入層と、前記

発光層と前記陰極との間に配置された電子注入層の少なくとも一方をさらに含む、〔26〕又は〔27〕に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

〔29〕 前記有機層の一方の面は前記陽極と接しており、且つ前記有機層の他方の面は前記陰極と接している、〔25〕又は〔26〕に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

〔30〕 陽極と、陰極と、一方の面が前記陽極と接し、且つ他方の面が前記陰極と接する有機層とを含み、前記有機層は、実質的に下記一般式（201）で表される π 共役系化合物とゲスト化合物とからなる、有機エレクトロルミネッセンス素子。

〔化7〕



（一般式（201）中、

Aは、電子吸引性基であって、置換されていてもよい含窒素芳香族6員環基を表し、

n1は、1～3の整数を表し、n1が2以上である場合、2以上の前記Aは、互いに同じであっても異なってもよく、

Dは、電子供与性基であって、電子供与性基で置換されたアリール基、置換されていてもよいアミノ基又はアルキル基を表し、

n2は、2又は3を表し、2以上の前記Dは、互いに同じであっても異なってもよく、且つ

2以上の前記Dは、互いにオルト位に配置されている）

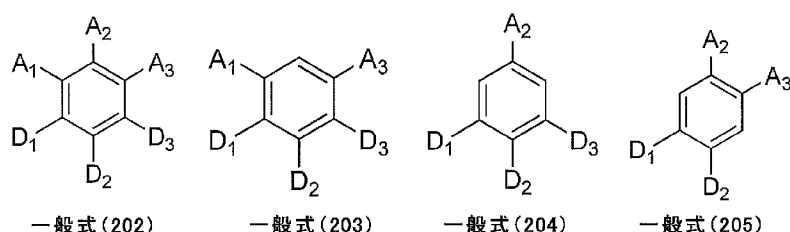
〔31〕 前記ゲスト化合物は、蛍光発光性化合物（但し、前記一般式（201）で表される π 共役系化合物を除く）又はリン光発光性化合物である

、〔３０〕に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

〔３２〕 前記ゲスト化合物は、蛍光発光性化合物であり、前記蛍光発光性化合物の含有量が、前記有機層の２０体積％以下である、〔３０〕又は〔３１〕に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

〔３３〕 前記一般式（２０１）で表される π 共役系化合物は、下記一般式（２０２）～（２０５）のいずれかで表される、〔２５〕～〔３２〕のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

〔化８〕



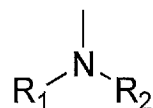
（一般式（２０２）～（２０５）中、

$A_1 \sim A_3$ は、それぞれ前記一般式（２０１）の A と同義であり、

$D_1 \sim D_3$ は、それぞれ前記一般式（２０１）の D と同義である）

〔３４〕 前記一般式（２０１）における D は、下記一般式（ $D-1$ ）で表される基である、〔２５〕～〔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。

〔化９〕



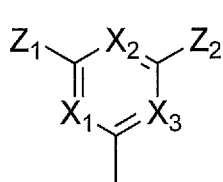
一般式(D-1)

（一般式（ $D-1$ ）中、

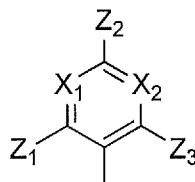
R_1 及び R_2 は、それぞれ置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、且つ R_1 及び R_2 は、互いに結合して環を形成してもよい）

[35] 前記一般式(201)におけるAは、下記一般式(A-1)又は(A-2)で表される基である、[25]～[34]のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化10]



一般式(A-1)



一般式(A-2)

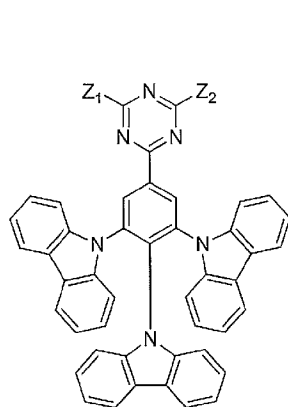
(一般式(A-1)又は(A-2)中、

$X_1 \sim X_3$ は、それぞれ $-CH$ 又は窒素原子であり、且つ少なくとも一つは窒素原子であり、

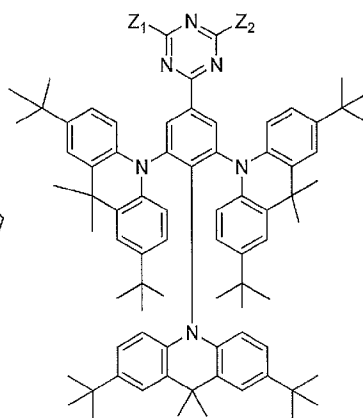
$Z_1 \sim Z_3$ は、それぞれ水素原子、シアノ基、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表す)

[36] 前記一般式(201)で表される π 共役系化合物は、下記一般式(206)又は(207)で表される、[25]～[35]のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化11]



一般式(206)



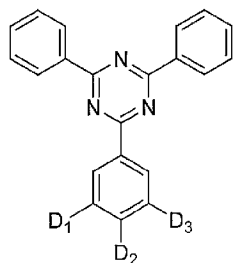
一般式(207)

(一般式(206)又は(207)中、

Z_1 及び Z_2 は、それぞれ置換されていてもよいアリール基である)

〔37〕 前記一般式（201）で表される π 共役系化合物は、下記一般式（208）で表される、〔25〕～〔35〕のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

〔化12〕



一般式(208)

（一般式（208）中、 $D_1 \sim D_3$ は、それぞれ置換されていてもよいアミノ基である）

〔38〕 前記 π 共役系化合物の、最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位とのエネルギー差の絶対値 $\Delta E_{s,t}$ が、 0.5 eV 以下である、〔25〕～〔37〕のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

〔39〕 〔25〕～〔38〕のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、表示装置。

〔40〕 〔25〕～〔38〕のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、照明装置。

発明の効果

〔0031〕 本発明の上記手段により、例えば有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を改良しうる新たな π 共役系化合物を提供することができる。さらに、本発明の上記手段により、発光効率の改良を実現した新たな有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することができる。また、当該 π 共役系化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子材料、発光性薄膜、発光材料、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子が具備された表示装置及び照明装置を提供することができる。

[0032] さらに本発明によれば、発光効率と耐久性を低下させることなく、有機EL素子の構成を簡易にすることができ、生産性安定性及び信頼性の高い有機EL素子、及び当該有機EL素子を備えた表示装置及び照明装置を提供することもできる。

図面の簡単な説明

[0033] [図1] TADF化合物のエネルギーダイアグラムを示した模式図である。

[図2] 一般的な蛍光発光性化合物のエネルギーダイアグラムを示した模式図である。

[図3] π 共役系化合物がアシストドーパント材料として機能する場合のエネルギーダイアグラムを示した模式図である。

[図4] π 共役系化合物がホスト材料として機能する場合のエネルギーダイアグラムを示した模式図である。

[図5A] 特定の π 共役系化合物を用いた第1の状態の有機EL素子の構成例を示す図である。

[図5B] 特定の π 共役系化合物を用いた第1の状態の有機EL素子の構成例を示す図である。

[図5C] 特定の π 共役系化合物を用いた第1の状態の有機EL素子の構成例を示す図である。

[図6] 特定の π 共役系化合物を用いた第2の状態の有機EL素子の構成例を示す図である。

[図7] 有機EL素子から構成される表示装置の一例を示した模式図である。

[図8] アクティブマトリクス方式による表示装置の模式図である。

[図9] 画素の回路を示した概略図である。

[図10] パッシブマトリクス方式による表示装置の模式図である。

[図11] 照明装置の概略図である。

[図12] 照明装置の模式図である。

[図13] 実施例で作製した本発明の π 共役系化合物を用いた共蒸着膜6-1について、蛍光減衰測定を行った際の励起光照射からの時間と光子数との関係

を示すグラフである。

[図14]実施例で作製した本発明の π 共役系化合物を用いた共蒸着膜6-2について、蛍光減衰測定を行った際の励起光照射からの時間と光子数との関係を示すグラフである。

[図15]実施例で作製した本発明の π 共役系化合物を用いた共蒸着膜6-3について、蛍光減衰測定を行った際の励起光照射からの時間と光子数との関係を示すグラフである。

[図16]実施例で作製した本発明の π 共役系化合物を用いた共蒸着膜6-4について、蛍光減衰測定を行った際の励起光照射からの時間と光子数との関係を示すグラフである。

発明を実施するための形態

[0034] 以下、本発明とその構成要素、及び本発明を実施するための形態・態様について詳細な説明をする。なお、本願において、「～」は、その前後に記載される数値を下限値及び上限値として含む意味で使用する。

[0035] 本発明者らは、ベンゼン環と、それに置換する電子吸引性基Aと、電子供与性基Dとを含む π 共役系化合物において、ベンゼン環に置換するオルト位の組み合わせの少なくとも一つを、「電子供与性基Dと電子供与性基D」、「電子吸引性基Aと電子吸引性基A」、「電子吸引性基Aと電子供与性基D」のいずれかにすることで、例えば有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を高めることができることを見出した。その理由は必ずしも明らかではないが、以下のように推測される。

[0036] (同種同士の組み合わせ)

ベンゼン環に置換する電子供与性基D（又は電子供与性基A）が2以上あることで、ベンゼン環に置換する電子供与性基D（又は電子吸引性基A）が1つであるよりも、高い電子供与性又は高い電子吸引性が得られやすい。

[0037] さらに、2以上の電子供与性基（又は2以上の電子吸引性基A）が、ベンゼン環のオルト位で置換している；即ち、「空間上で隣接」しているので、励起状態で電子供与性部が帯びる正電荷（又は電子吸引性部が帯びる負電荷

）を複数の電子供与性基（又は電子吸引性基）が空間的に共鳴して安定化することができるため、励起状態が安定化して無輻射失活が抑制され、発光効率を高めることができると考えられる。

[0038] （異種同士の組み合わせ）

電子吸引性基Aと電子供与性基Dがベンゼン環のオルト位に配置されると、電子供与性基Dと電子吸引性基Aとが「空間的に隣接」する。それにより、C T性の励起状態を電子供与性基Dから電子吸引性基Aへ結合を介して形成するのではなく、ごく近傍に位置する電子供与性基Dと電子吸引性基Aの間でC T性の励起状態を形成でき、C T性の励起状態が安定化するため、発光効率が高まると考えられる。

[0039] また、いずれの態様においても、電子吸引性基Aや電子供与性基Dがスループوندでの連結ではなく、スルースペースで相互作用しているため、吸収スペクトルや発光スペクトルの長波長化も抑制できると考えられる。

[0040] （特定の π 共役系化合物について）

また、前述の通り、従来知られている蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物は、有機EL素子の発光層に高濃度で存在させた場合、無輻射失活が促進され発光効率が低下する。そのため、蛍光発光性化合物又はリン光発光性化合物単独で発光層を構成しても、低い発光効率しか得られなかった。これは、蛍光発光性化合物及びりん光発光性化合物が高濃度に存在すると、励起状態で分子間相互作用により複数分子間で安定構造をとり、無輻射失活が促進されることが原因と考えられる。そのため、発光効率を高めるためには、ホスト化合物がさらに必要であった。

[0041] また、従来知られているTADF化合物である4CzIPNや2CzPNは、発光層中に単独で含有させても、前述の蛍光発光性化合物やリン光発光性化合物の場合と同様に高濃度下では無輻射失活が促進され、高い発光効率を得ることができなかった。

[0042] これに対して、特定の π 共役系化合物（一般式（201）で表される π 共役系化合物）は、発光層中に高濃度で存在しても、高い発光効率を有しうる

。その理由は以下のように推測される。

[0043] 即ち、ベンゼン環と、それに置換する電子吸引性基（一般式（201）のA）と複数の電子供与性基（一般式（201）のD）とを含む特定の π 共役系化合物において、ベンゼン環に置換する複数の電子供与性基（D）の置換位置をオルト位とすることで、上述のように、分子内でそれらが空間的に近接した配置を採り、励起状態で電子供与性基（D）が帯びる正電荷を複数の電子供与性基（D）が空間的に共鳴して安定化することができる。その結果、分子間での相互作用が起これにくくなり、無輻射失活が抑制され、発光効率を高めることができる。このように、特定の π 共役系化合物は、発光層中に単独で存在しても高い発光効率を有することから、従来必要とされていたホスト化合物が不要となる。

[0044] また、特定の π 共役系化合物のベンゼン環に置換する電子吸引性基（A）を「含窒素芳香族6員環」とすることで、高い電子輸送性を得ることができる。

[0045] このように、特定の π 共役系化合物は、ベンゼン環のオルト位に複数置換した電子供与性基（D）が分子間の正孔輸送を担い、ベンゼン環に置換した、含窒素芳香族6員環で構成された電子吸引性基（A）が分子間の電子輸送を担うことができる。それにより、陽極と陰極の間に配置される有機層を、実質的に特定の π 共役系化合物のみで構成しても、正孔及び電子が、有機層中で良好に輸送され、再結合して発光することができる。

[0046] また、従来知られているTADF化合物であるDMAC-DPSは、発光層に単独で含有させても発光しうるが、スルホニル基が分解しやすく、素子の耐久性が低かった。

[0047] これに対して、一般式（201）で表される特定の π 共役系化合物を用いた素子は、耐久性にも優れている。一般式（201）で表される π 共役系化合物に含まれる電子吸引性基（A）である「含窒素芳香族6員環基」が、分解されにくい安定な構造を有し、且つ分子内の複数の電子供与性基（D）は励起状態で共鳴して安定な構造をとるため、分解しにくいと考えられる。

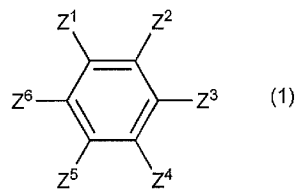
[0048] このように、一般式（２０１）で表される特定の π 共役系化合物を発光層に用いることで、有機エレクトロルミネッセンス素子の構成を簡易にすることができ、且つ耐久性を高めうる。それにより、有機ＥＬ素子の生産安定性及び信頼性を高めることができる。

[0049] さらに、一般式（２０１）で表される特定の π 共役系化合物では、複数の電子供与性基（Ｄ）が近接して存在するので、分子鎖を介した相互作用ではなく、空間を介した相互作用が生じやすい。それにより、吸収スペクトルや発光スペクトルの長波長化も抑制できると考えられる。

[0050] １． π 共役系化合物

本発明の π 共役系化合物は、下記一般式（１）で表される構造を有することが好ましい。

[化13]



[0051] 一般式（１）の $Z^1 \sim Z^6$ は、それぞれ水素原子、重水素原子、電子供与性基Ｄ又は電子吸引性基Ａを表す。但し、 $Z^1 \sim Z^6$ は、互いに結合して環を形成しないものとする。

[0052] 高い発光効率を得る観点から、 $Z^1 \sim Z^6$ のうち少なくとも二つの一方が電子供与性基Ｄであり、他方が電子吸引性基Ａであることが好ましい。

[0053] $Z^1 \sim Z^6$ のうちオルト位の組み合わせ Z^1 と Z^2 、 Z^2 と Z^3 、 Z^3 と Z^4 、 Z^4 と Z^5 、 Z^5 と Z^6 及び Z^6 と Z^1 の少なくとも一つが、電子供与性基Ｄと電子供与性基Ｄ、電子吸引性基Ａと電子吸引性基Ａ、又は電子供与性基Ｄと電子吸引性基Ａの組み合わせのいずれかであることが好ましい。電子供与性又は電子吸引性を増強する観点、或いは電子供与性基と電子吸引性基の間でＣＴ性の励起状態を生成しやすくなる観点から、 $Z^1 \sim Z^6$ のうちオルト位の２以上、好ましくは３以上が、電子供与性基Ｄ又は電子吸引性基Ａであることが

好ましい。

[0054] また、3つ以上の電子供与性基Dが連続してオルト位（隣り合う位置）に配置されている、もしくは3つ以上の電子吸引性基Aが連続してオルト位に配置されていることがより好ましい。3つ以上の電子供与性基D（又は3つ以上の電子吸引性基A）が連続してオルト位に配置されていると、2つの電子供与性基D（又は2つの電子吸引性基A）に挟まれた電子供与性基D（又は電子吸引性基A）の回転運動が抑制され、励起状態が安定化される。

[0055] さらに、電子供与性基Dと電子吸引性基Aとのバランスが良好となり、C-T性の励起状態が生成されやすくなるとの観点から、3つの電子供与性基Dが連続してオルト位に配置されている、及び／又は3つの電子吸引性基Aが連続してオルト位に配置されていることが特に好ましい。

[0056] （電子供与性基D）

電子供与性基Dは、「電子供与性基で置換されたアリール基」、「置換されていてもよい電子供与性の複素環基」、「置換されていてもよいアミノ基」、又は「アルキル基」でありうる。

[0057] Dで表される「電子供与性基で置換されたアリール基」におけるアリール基は、炭素原子数6～24の芳香族炭化水素環から誘導される基であることが好ましい。そのような芳香族炭化水素環の例には、ベンゼン環、インデン環、ナフタレン環、アズレン環、フルオレン環、フェナントレン環、アントラセン環、アセナフチレン環、ビフェニレン環、ナфтаセン環、ピレン環、ペントレン環、アセアントリレン環、ヘプタレン環、トリフェニレン環、a-s-インダセン環、クリセン環、s-インダセン環、プレイアデン環、フェナレン環、フルオランテン環、ペリレン環、アセフェナントリレン環、ビフェニル環、ターフェニル環、及びテトラフェニル環等が含まれる。中でも、ベンゼン環、ナフタレン環、フルオレン環、フェナントレン環、アントラセン環、ビフェニレン環、クリセン環、ピレン環、トリフェニレン環、クリセン環、フルオランテン環、ペリレン環、ビフェニル環、及びターフェニル環が好ましい。

- [0058] 当該アリール基が有する電子供与性基の例には、アルキル基、アルコキシ基、置換されていてもよいアミノ基、及び置換されていてもよい電子供与性の複素環基等が含まれる。中でも、置換されていてもよいアミノ基、及び置換されていてもよい電子供与性の複素環基が好ましい。
- [0059] アルキル基は、直鎖、分岐又は環状のいずれであってもよく、例えば炭素原子数1～20の直鎖又は分岐のアルキル基、或いは炭素原子数5～20の環状のアルキル基でありうる。アルキル基の例には、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、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、ネオペンチル基、*n*-ヘキシル基、シクロヘキシル基、2-エチルヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、2-ヘキシルオクチル基、*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、*n*-ノナデシル基、及び*n*-イコシル基等が含まれ；好ましくはメチル基、エチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、シクロヘキシル基、2-エチルヘキシル基及び2-ヘキシルオクチル基である。
- [0060] アルコキシ基は、直鎖、分岐又は環状のいずれであってもよく、例えば炭素原子数1～20の直鎖又は分岐のアルコキシ基、或いは炭素原子数6～20の環状のアルコキシ基でありうる。アルコキシ基の例には、メトキシ基、エトキシ基、*n*-プロポキシ基、イソプロポキシ基、*n*-ブトキシ基、イソブトキシ基、*t*-ブトキシ基、*n*-ペンチルオキシ基、ネオペンチルオキシ基、*n*-ヘキシルオキシ基、シクロヘキシルオキシ基、*n*-ヘプチルオキシ基、*n*-オクチルオキシ基、2-エチルヘキシルオキシ基、ノニルオキシ基、デシルオキシ基、3,7-ジメチルオクチルオキシ基、*n*-ウンデシルオキシ基、*n*-ドデシルオキシ基、*n*-トリデシルオキシ基、*n*-テトラデシルオキシ基、2-*n*-ヘキシル-*n*-オクチルオキシ基、*n*-ペンタデシルオキシ基、*n*-ヘキサデシルオキシ基、*n*-ヘプタデシルオキシ基、*n*-オクタデシルオキシ基、*n*-ノナデシルオキシ基、*n*-イコシルオキシ基等が

含まれ、好ましくはメトキシ基、エトキシ基、イソプロポキシ基、*t*-ブトキシ基、シクロヘキシルオキシ基、2-エチルヘキシルオキシ基、2-ヘキシルオクチルオキシ基である。

[0061] 置換されていてもよいアミノ基における置換基の例には、アルキル基、及びアルキル基で置換されていてもよいアリール基が含まれる。アルキル基及びアリール基は、前述のアルキル基、及び（電子供与性基で置換されたアリール基における）アリール基とそれぞれ同義である。

[0062] 置換されていてもよい電子供与性の複素環基の例には、後述の電子供与性の複素環基と同様のものが含まれる。

[0063] Dで表される「置換されていてもよい電子供与性の複素環基」における「電子供与性の複素環基」は、炭素原子数4～24の電子供与性の複素環から誘導される基であることが好ましい。そのような複素環の例には、ピロール環、インドール環、カルバゾール環、インドロインドール環、9,10-ジヒドロアクリジン環、5,10-ジヒドロフェナジン環、5,10-ジヒドロジベンゾアザシリン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、ジベンゾチオフェン環、ベンゾフリルインドール環、ベンゾチエノインドール環、インドロカルバゾール環、ベンゾフリルカルバゾール環、ベンゾチエノカルバゾール環、ベンゾチエノベンゾチオフェン環、ベンゾカルバゾール環、ジベンゾカルバゾール環、アザカルバゾール環、及びジアザカルバゾール環等が含まれる。中でも、カルバゾール環、アザカルバゾール環、ジアザカルバゾール環、インドロインドール環、9,10-ジヒドロアクリジン環、5,10-ジヒドロフェナジン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、ジベンゾチオフェン環、及びベンゾフリルインドール環が好ましい。さらに好ましくは、置換されていてもよいカルバゾール環、置換されていてもよいアザカルバゾール環、置換されていてもよいジアザカルバゾール環、置換されていてもよい9,10-ジヒドロアクリジン環、置換されていてもよいフェノキサジン環、置換されていてもよいフェノチアジン環、置換されていてもよい5,10-ジヒドロフェナジン環が挙げられる。電子供与性の複素環基は、

同一の又は異なる 2 以上の上記複素環が単結合を介して結合したものであってもよい。

[0064] 当該複素環基が有しうる置換基の例には、アルキル基、及びアルキル基で置換されていてもよいアリール基が含まれる。アルキル基及びアリール基は、それぞれ前述のアルキル基及びアリール基と同義である。

[0065] Dで表される「置換されていてもよいアミノ基」における置換基の例には、アルキル基、アルキル基で置換されていてもよいアリール基が含まれる。アルキル基及びアリール基は、それぞれ前述のアルキル基及びアリール基と同様でありうる。

[0066] Dで表される「アルキル基」は、前述のアルキル基と同義である。

[0067] これらの中でも、電子供与性の高い電子供与性基Dの例としては、「電子供与性基で置換されたアリール基」、「置換されていてもよい電子供与性の複素環基」、又は「置換されていてもよいアミノ基」であることが好ましい。電子供与性基Dは、具体的には、電子供与性基で置換されたフェニル基、置換されていてもよいカルバゾリル基、置換されていてもよいアザカルバゾリル基、置換されていてもよいジアザカルバゾリル基、置換されていてもよい9, 10-ジヒドロアクリジル基、置換されていてもよいフェノキサジル基、置換されていてもよいフェノチアジル基、置換されていてもよい5, 10-ジヒドロフェナジル基、置換されていてもよいジフェニルアミノ基、又は置換されていてもよいジアルキルアミノ基であることが好ましい。さらに好ましくは、置換されていてもよいカルバゾリル基、置換されていてもよいアザカルバゾリル基、置換されていてもよいジアザカルバゾリル基、置換されていてもよい9, 10-ジヒドロアクリジル基、置換されていてもよいジフェニルアミノ基である。

[0068] (電子吸引性基A)

電子吸引性基Aは、「フッ素原子」、「フッ素原子で置換されたアルキル基」、「置換されていてもよいカルボニル基」、「置換されていてもよいスルホニル基」、「置換されていてもよいホスフィンオキサイド基」、「置換

されていてもよいボリル基」、「置換されていてもよいアリール基（好ましくは電子吸引性基で置換されていてもよいアリール基）」、又は「置換されていてもよい電子吸引性の複素環基」でありうる。

[0069] Aで表される「フッ素原子で置換されたアルキル基」におけるアルキル基は、前述のアルキル基と同義である。フッ素で置換されたアルキル基の例には、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{H}$ 、 $-\text{CH}_2\text{F}$ 、 $-\text{CF}_2\text{CF}_3$ 等が含まれる。

[0070] Aで表される「置換されていてもよいカルボニル基」、「置換されていてもよいスルホニル基」、「置換されていてもよいホスフィンオキサイド基」及び「置換されていてもよいボリル基」における置換基の例には、重水素原子、フッ素原子、シアノ基、フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよい電子吸引性の複素環基が含まれる。

[0071] Aで表される「置換されていてもよいアリール基」におけるアリール基は、前述のアリール基と同義である。

[0072] 当該アリール基が有しうる置換基の例には、重水素原子、フッ素原子、シアノ基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいスルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、置換されていてもよいボリル基、置換されていてもよい電子吸引性の複素環基、置換されていてもよいアミノ基が含まれる。

中でも、当該アリール基が有しうる置換基は、電子吸引性基であることが好ましく、フッ素原子、シアノ基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいスルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、置換されていてもよいボリル基、及び置換されていてもよい電子吸引性の複素環基が好ましく；フッ素原子、シアノ基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基、及び置換されていてもよい電子吸引性の複素環基がより好ましい。

[0073] Aで表される「置換されていてもよい電子吸引性の複素環基」は、炭素原子数3～24の電子吸引性の複素環から誘導される基であることが好ましい

。そのような複素環基の例には、ジベンゾチオフェンオキシド環、ジベンゾチオフェンジオキシド環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キナゾリン環、シンノリン環、キノキサリン環、フタラジン環、プテリジン環、フェナントリジン環、フェナントロリン環、ジベンゾフラン環、ジベンゾシロール環、ジベンゾボロール環、ジベンゾホスホールオキシド環等が含まれる。中でも、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キナゾリン環、キノキサリン環、フェナントリジン環、フェナントロリン環、ジベンゾフラン環、ジベンゾボロール環、ジベンゾホスホールオキシド環が好ましく、特に含窒素芳香族6員環であることが好ましい。なお、電子吸引性の複素環基は、同一の又は異なる2以上の上記複素環を連結したものであってもよい。

[0074] 当該電子吸引性の複素環基が有しうる置換基の例には、重水素原子、フッ素原子、シアノ基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基で置換されていてもよいアリール基、フッ素で置換されていてもよいアリール基が含まれ、好ましくはフッ素原子、シアノ基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基、及びフッ素で置換されていてもよいアリール基である。

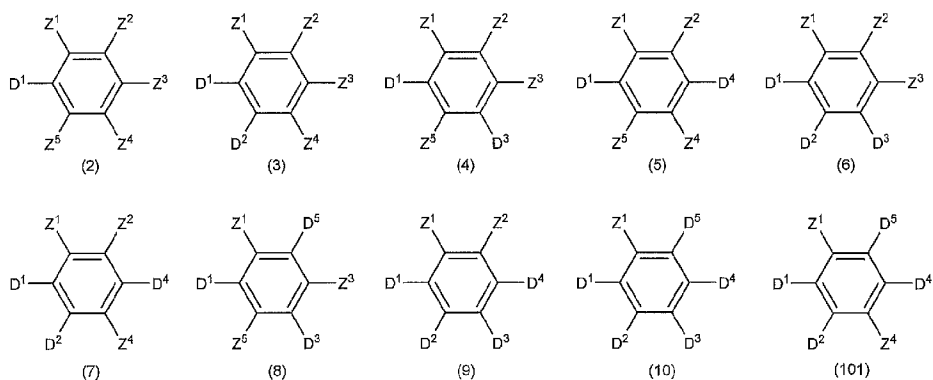
[0075] 電子吸引性の高い電子吸引性基Aの例としては、シアノ基で置換されているアリール基、無置換の含窒素芳香族6員環基、フッ素原子で置換されている含窒素芳香族6員環基、シアノ基で置換されている含窒素芳香族6員環基、フッ素置換アルキル基で置換されている含窒素芳香族6員環基、又は置換されていてもよいアリール基で置換されている含窒素芳香族6員環基であることが特に好ましい。含窒素芳香族6員環の例には、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キナゾリン環、シンノリン環、キノキサリン環、フタラジン環、プテリジン環、フェナントリジン環、フェナントロリン環が含まれる。中でも、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環が好ましい。含窒素

芳香族 6 員環は、同一の又は異なる 2 以上の上記含窒素芳香族 6 員環を連結したものであってもよい。

[0076] より好ましい電子吸引性基 A としては、シアノ基で置換されているフェニル基、シアノ基で置換されているピリジル基、置換されてもよいピラジル基、置換されていてもよいピリミジル基、置換されていてもよいトリアジル基が挙げられ、さらに好ましくは、p-シアノフェニル基、m-シアノフェニル基、o-シアノフェニル基、m-ジシアノフェニル基、2-シアノピリジル基、3-シアノピリジル基、2, 6-ジシアノピリジル基、2-シアノピラジル基、2-シアノピリミジル基、5-シアノピリミジル基、置換されていてもよい 2, 4-ジフェニルピリミジル基、又は置換されていてもよいジフェニルトリアジル基である。

[0077] π 共役系化合物は、下記一般式 (2) ~ (10)、または (101) のいずれかで表されることが好ましい。

[化14]



[0078] 一般式 (2) ~ (10) または (101) の D¹ ~ D⁵ は、それぞれ独立して電子供与性基 D を表す。電子供与性基 D は、一般式 (1) の電子供与性基 D と同義である。

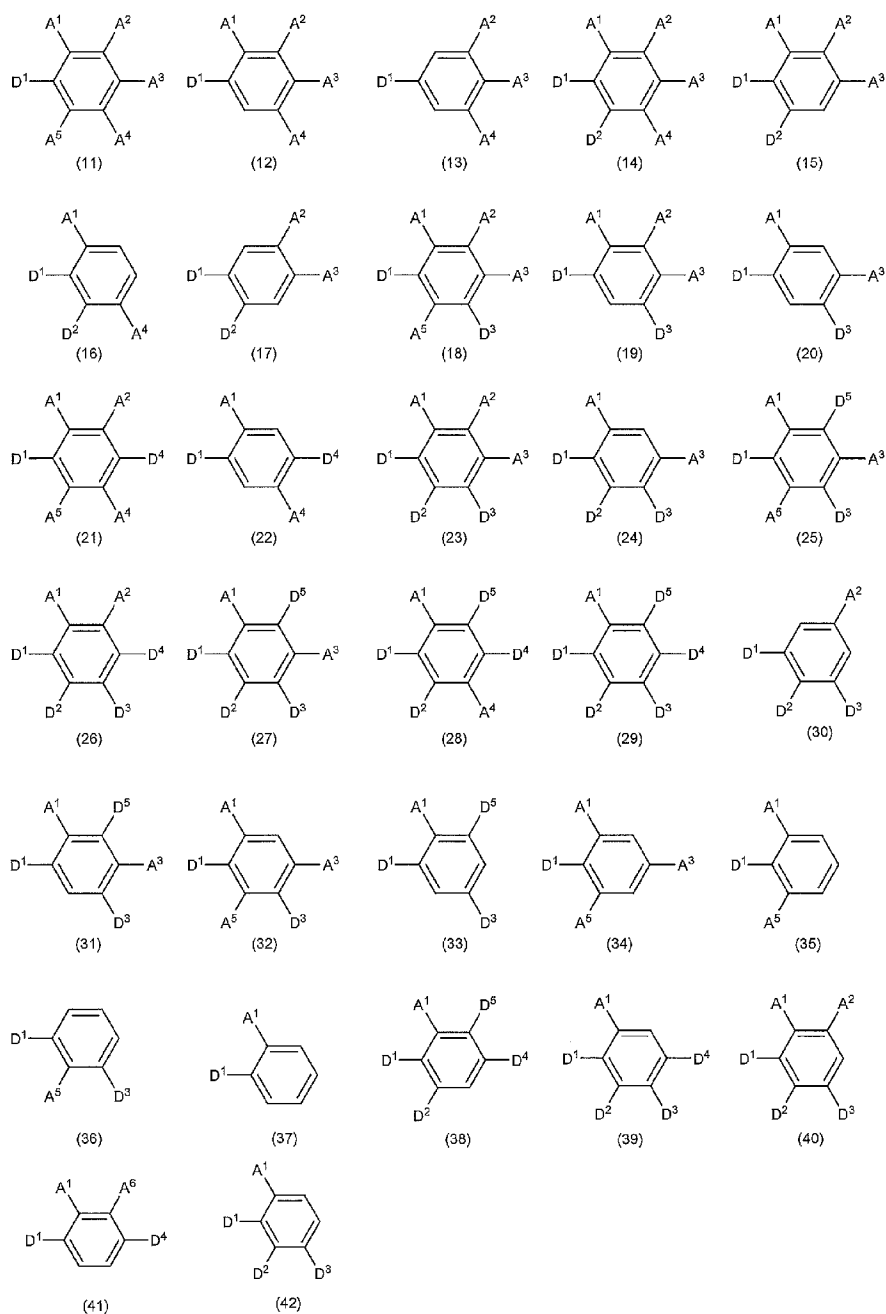
[0079] 一般式 (2) ~ (10) または (101) の Z¹ ~ Z⁵ は、それぞれ独立して水素原子、重水素原子又は電子吸引性基 A を表す。電子吸引性基 A は、一般式 (1) の電子吸引性基 A と同義である。

[0080] 一般式 (2) ~ (10) または (101) において、D¹ = D² = D³ = D⁴

$=D^5$ と $Z^1=Z^2=Z^3=Z^4=Z^5$ の少なくとも一方を満たすことが好ましい。
合成が比較的容易であるだけでなく、良好な発光効率が得られやすいからである。

[0081] π 共役系化合物は、下記一般式 (11) ~ (42) のいずれかで表されることがより好ましい。

[化15]



[0082] 一般式 (11) ~ (42) の $D^1 \sim D^5$ は、それぞれ独立して電子供与性基

Dを表す。電子供与性基Dは、一般式(1)の電子供与性基Dと同義である。

[0083] 一般式(11)～(42)の $A^1 \sim A^5$ は、それぞれ独立して電子吸引性基Aを表す。電子吸引性基Aは、一般式(1)の電子吸引性基Aと同義である。

[0084] 一般式(11)～(42)において、 $D^1 = D^2 = D^3 = D^4 = D^5$ と $A^1 = A^2 = A^3 = A^4 = A^5$ の少なくとも一方を満たすことが好ましい。

[0085] また、一般式(11)～(42)で表される化合物の中でも、3以上の電子供与性基Dが連続してオルト位に配置されている、もしくは3以上の電子吸引性基Aが連続してオルト位に配置されている化合物が、励起状態の安定性の観点から好ましい。具体的には、(11)～(15)、(18)、(19)、(23)、(24)、(26)、(27)、(29)、(30)、(39)、(40)、又は(42)化合物がより好ましい。

[0086] さらに、3つの電子供与性基Dが連続してオルト位に配置されている、及び／又は3つの電子吸引性基Aが連続してオルト位に配置されていることが特に好ましく、一般式(13)、(15)、(18)(19)、(23)、(24)、(27)、(30)、(40)、又は(42)で表される化合物が特に好ましい。

[0087] 前記一般式(1)で表される構造を有する π 共役系化合物は、該 π 共役系化合物を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子材料、及び該 π 共役系化合物を含有する発光性薄膜、及び該 π 共役系化合物を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子として用いることができる。

[0088] 前記一般式(1)で表される構造を有する π 共役系化合物は、電界励起によって励起状態となり、励起子を生成することができる。したがって、前記一般式(1)で表される構造を有する π 共役系化合物は、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層に好ましく含まれる。即ち、発光層は、高発光性の観点から、前記一般式(1)で表される構造を有する π 共役系化合物を単独で用いるか；前記一般式(1)で表される構造を有する π 共役系化合物と

後述のホスト化合物とを含有するか；前記一般式（１）で表される構造を有する π 共役系化合物と、後述の蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物のうち少なくとも１種とを含有するか；或いは前記一般式（１）で表される構造を有する π 共役系化合物と、後述の蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物のうち少なくとも１種と、後述のホスト化合物とを含有することが好ましい。

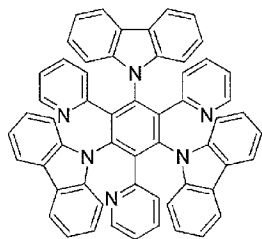
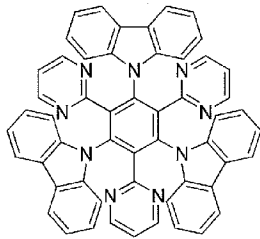
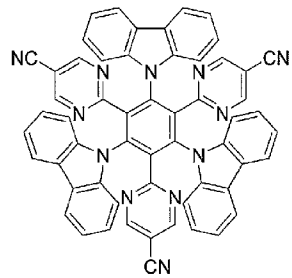
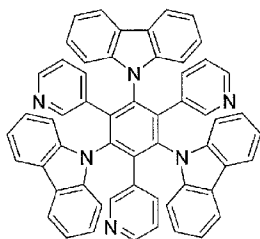
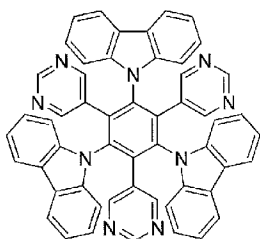
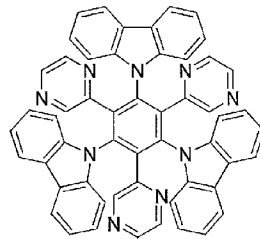
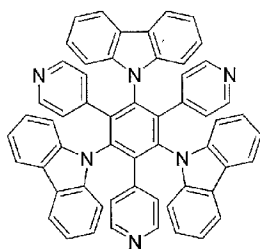
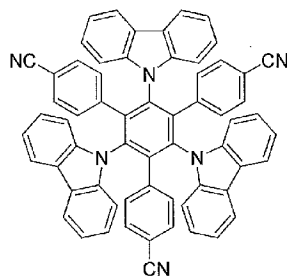
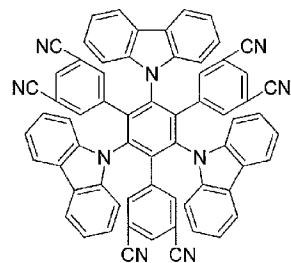
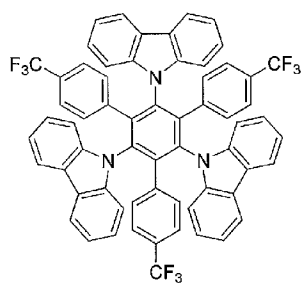
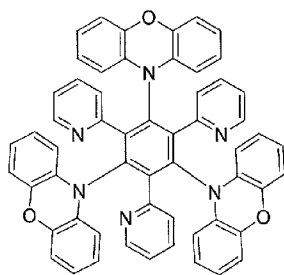
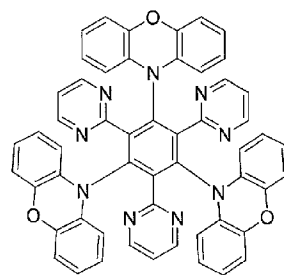
[0089] 前記一般式（１）で表される構造を有する π 共役系化合物において、該 π 共役系化合物の最低励起一重項準位と最低励起三重項準位とのエネルギー差の絶対値（ ΔE_{ST} ）が0.50 eV以下であることが好ましく、前記有機エレクトロルミネッセンス素子、前記素子材料、又は前記発光性薄膜に含有されることが好ましい。

[0090] 本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、照明装置及び表示装置に好適に具備され得る。

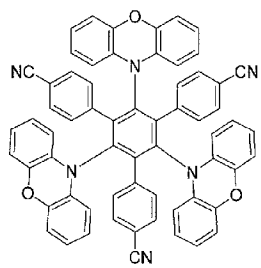
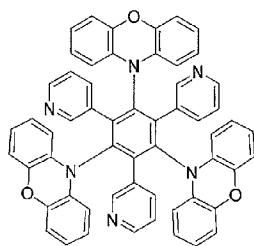
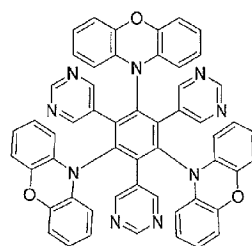
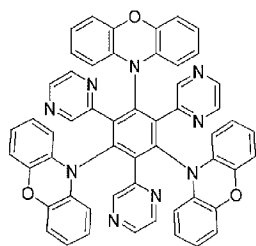
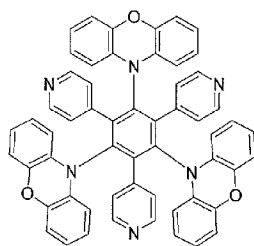
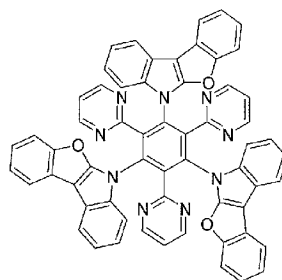
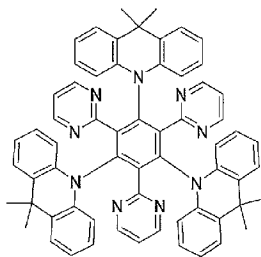
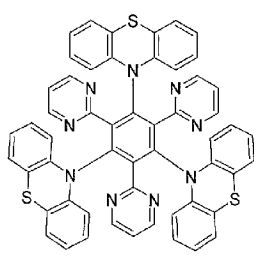
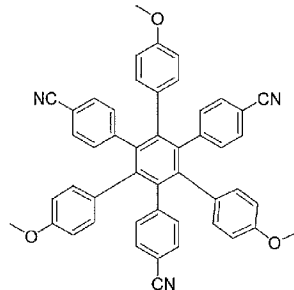
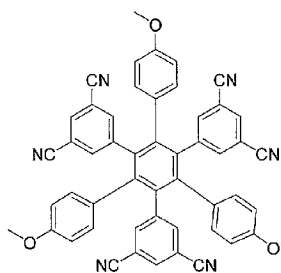
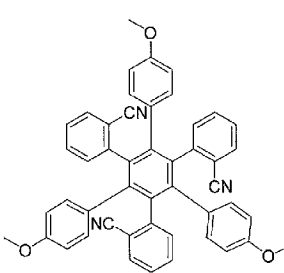
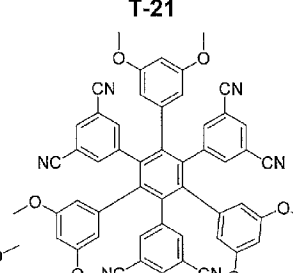
[0091] 以下に、本発明に係る π 共役系化合物の好ましい具体例を挙げるが、これらの化合物はさらに置換基を有していたり、構造異性体などが存在していたりする場合もあり、本記述に限定されない。

[0092]

[化16]

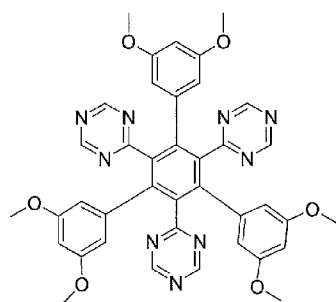
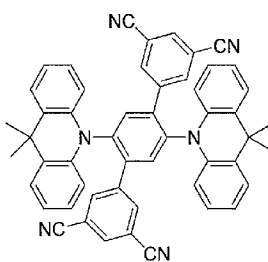
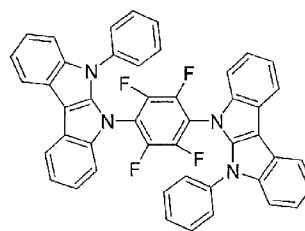
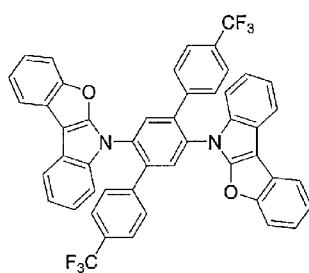
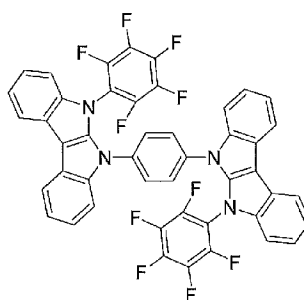
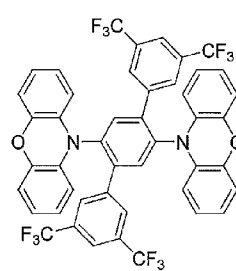
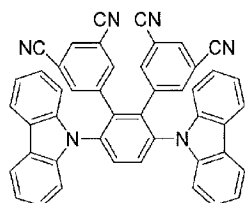
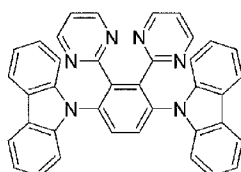
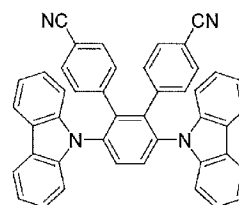
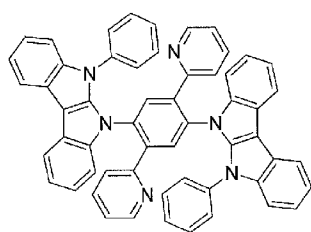
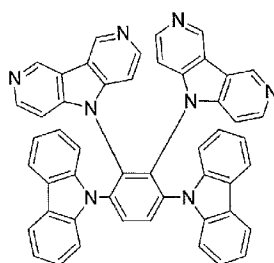
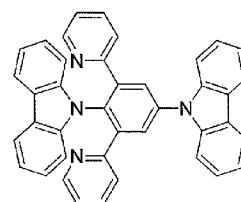
**T-1****T-2****T-3****T-4****T-5****T-6****T-7****T-8****T-9****T-10****T-11****T-12**

[化17]

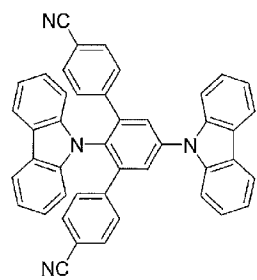
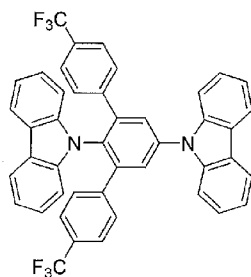
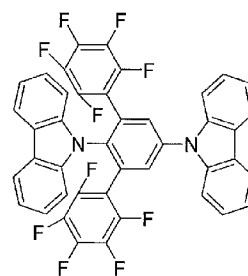
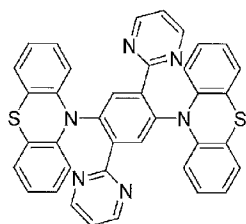
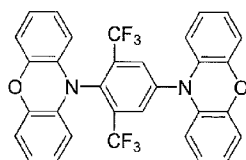
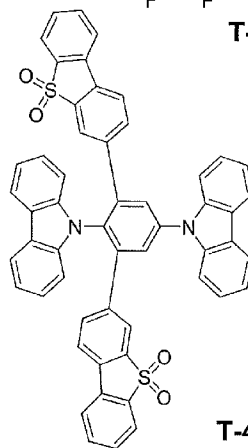
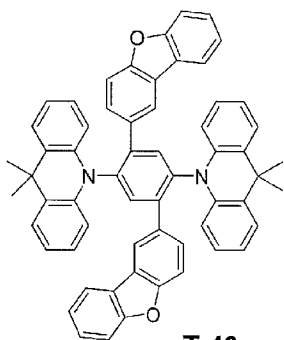
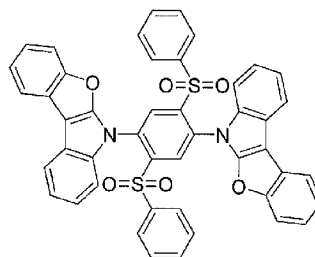
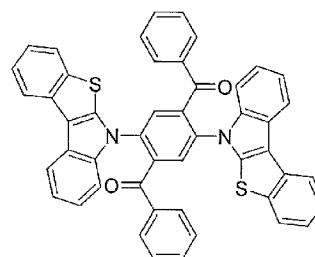
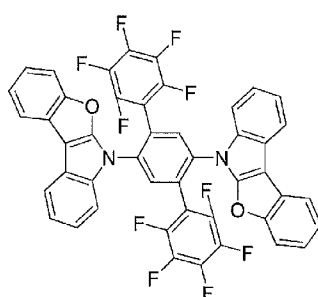
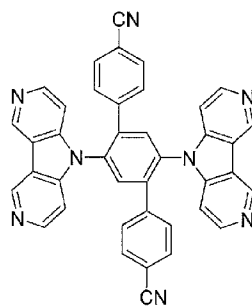
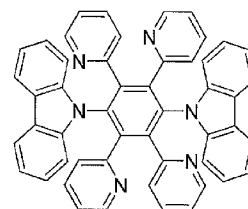
**T-13****T-14****T-15****T-16****T-17****T-18****T-19****T-20****T-21****T-22****T-23****T-24**

[0093]

[化18]

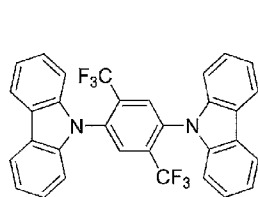
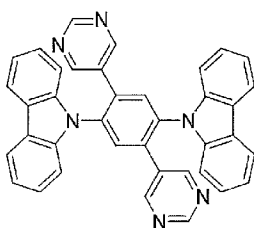
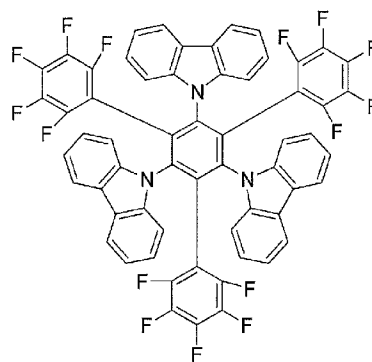
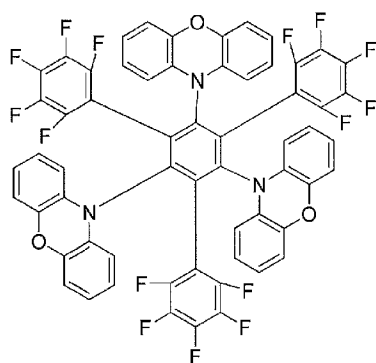
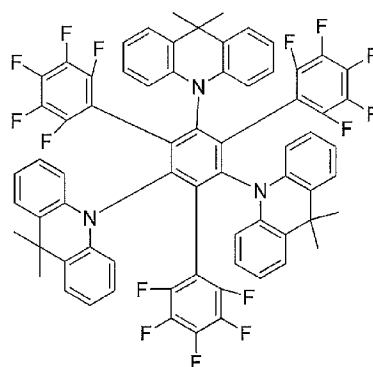
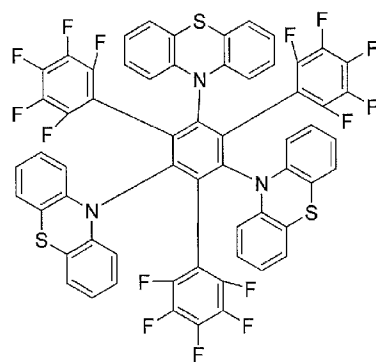
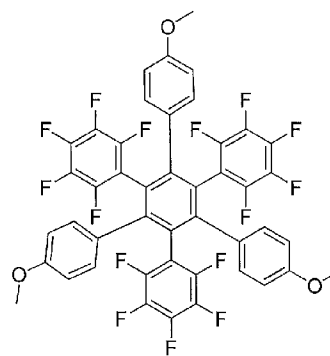
**T-25****T-26****T-27****T-28****T-29****T-30****T-31****T-32****T-33****T-34****T-35****T-36**

[化19]

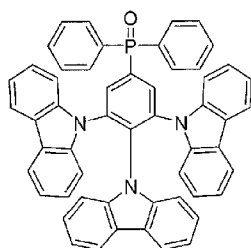
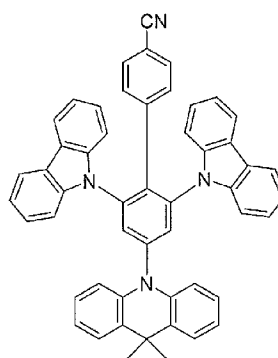
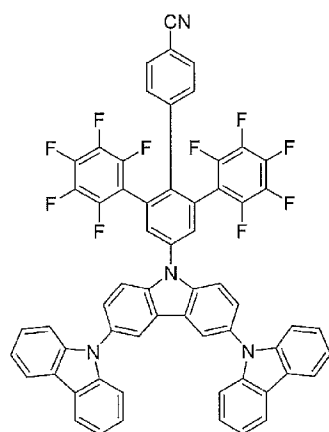
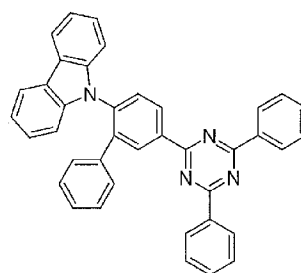
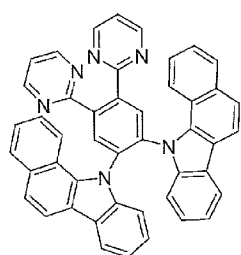
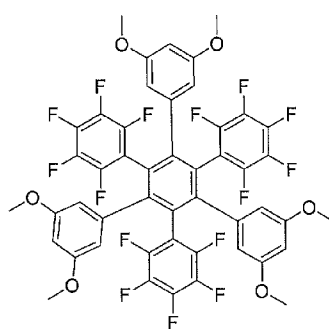
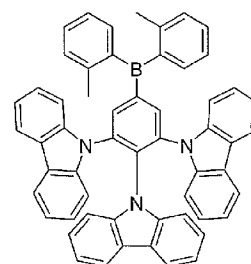
**T-37****T-38****T-39****T-40****T-41****T-42****T-43****T-44****T-45****T-46****T-47****T-48**

[0094]

[化20]

**T-49****T-50****T-51****T-52****T-53****T-54****T-55**

[化21]

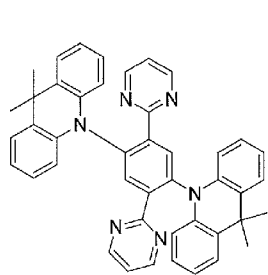
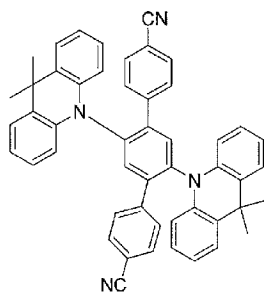
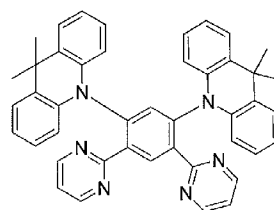
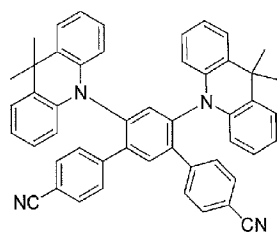
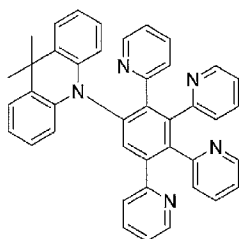
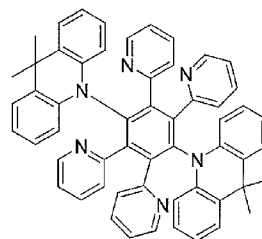
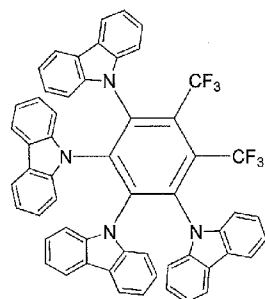
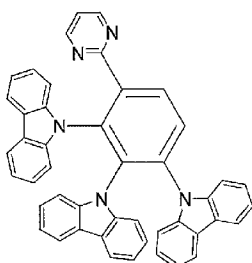
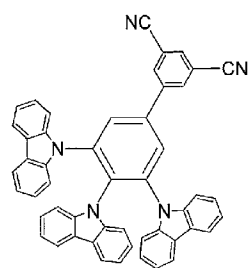
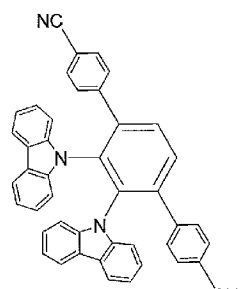
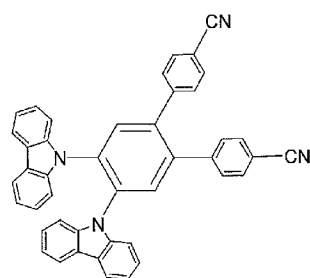
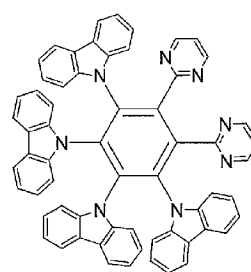
**T-56****T-57****T-58****T-59****T-60****T-61****T-62**

[0095]

[化22]

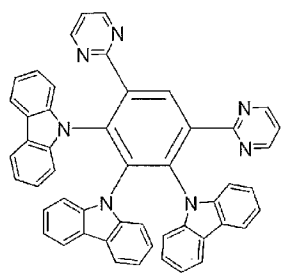


[化23]

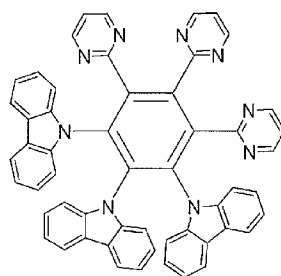
**T-70****T-71****T-72****T-73****T-74****T-75****T-76****T-77****T-78****T-79****T-80****T-81**

[0096]

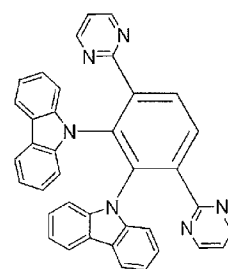
[化24]



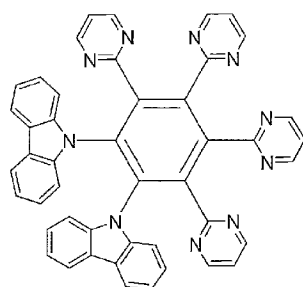
T-82



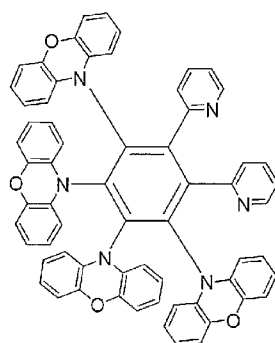
T-83



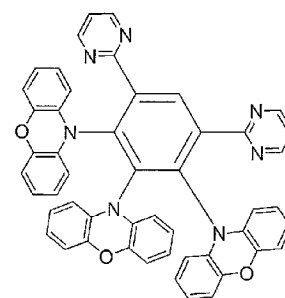
T-84



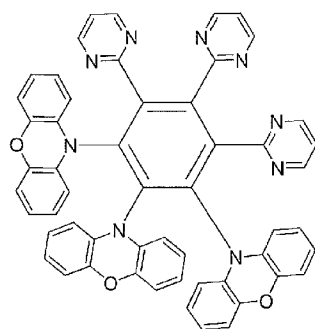
T-85



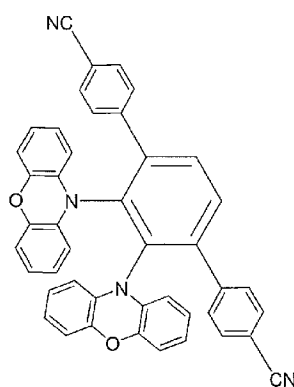
T-86



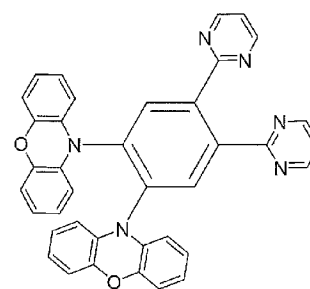
T-87



T-88

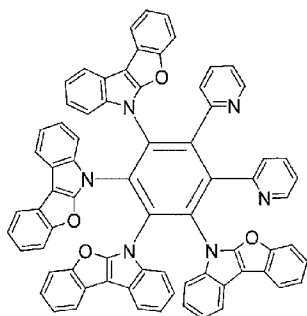
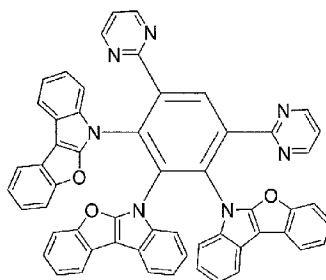
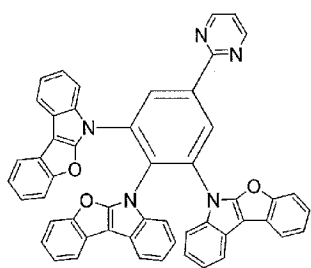
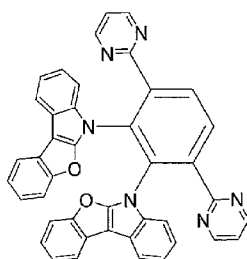
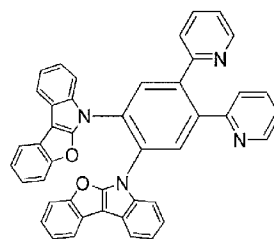
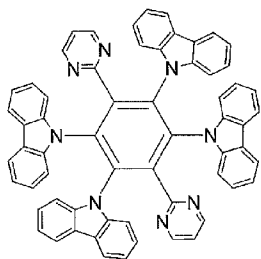
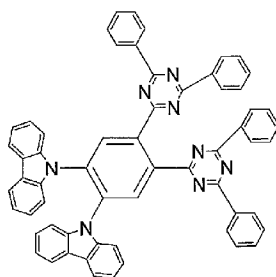
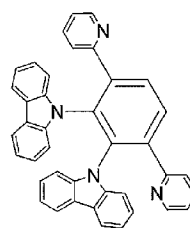
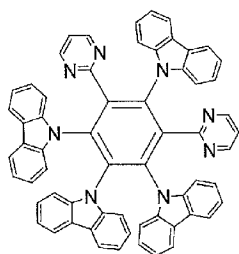
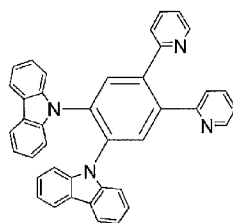
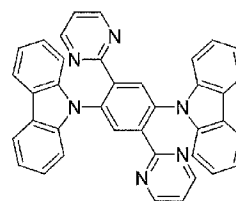


T-89



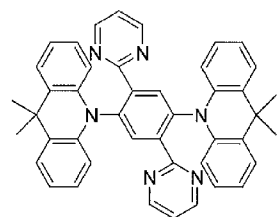
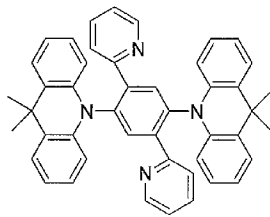
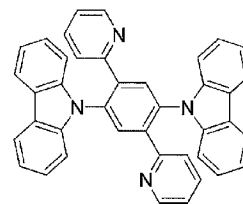
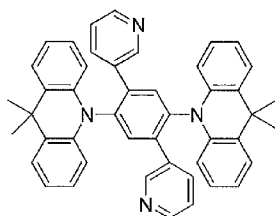
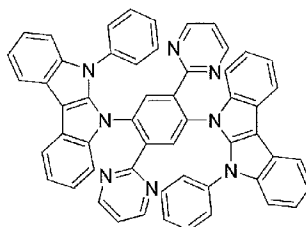
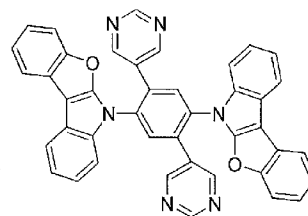
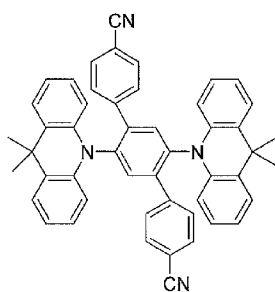
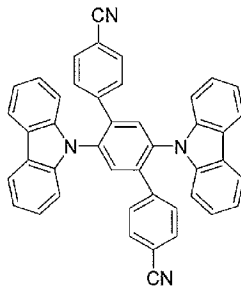
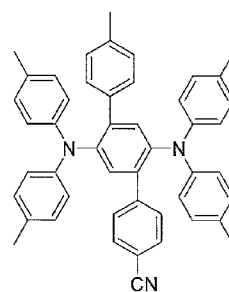
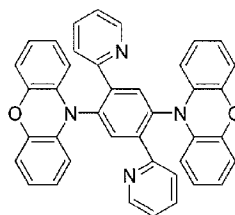
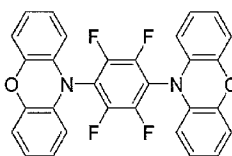
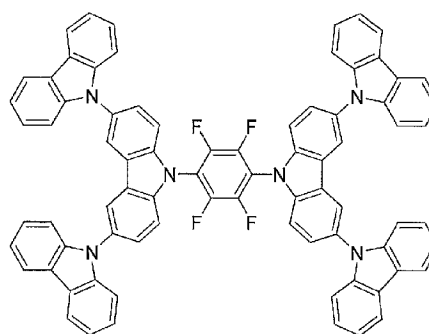
T-90

[化25]

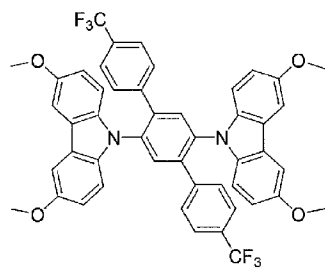
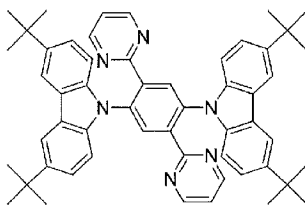
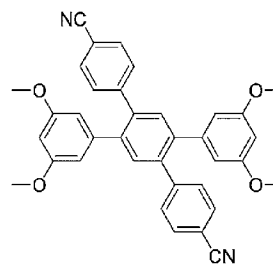
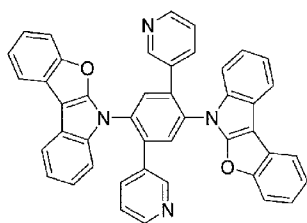
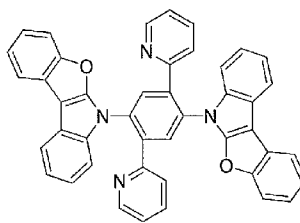
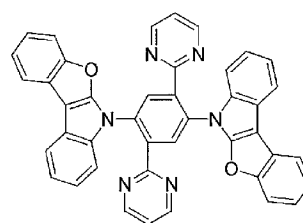
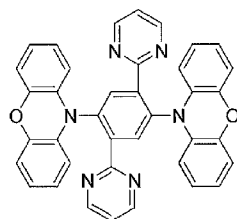
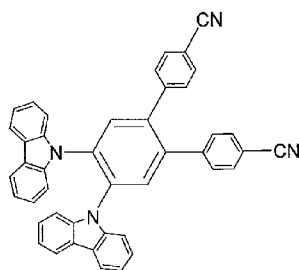
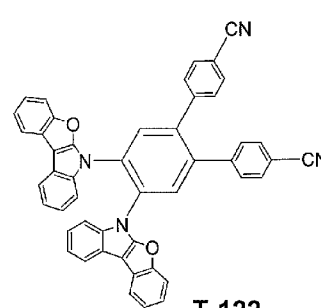
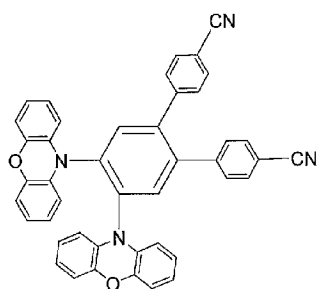
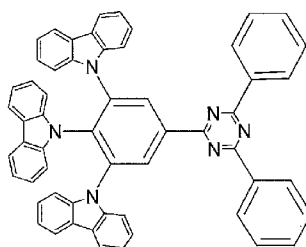
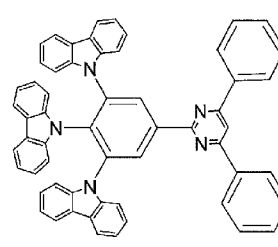
**T-91****T-92****T-93****T-94****T-95****T-96****T-97****T-98****T-99****T-100****T-101**

[0097]

[化26]

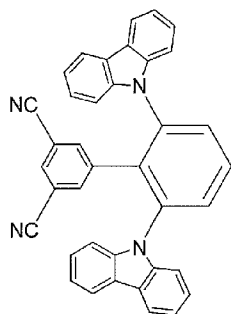
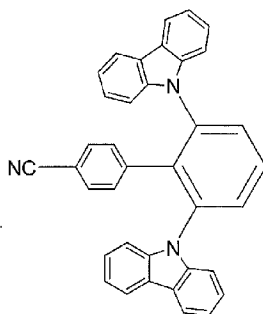
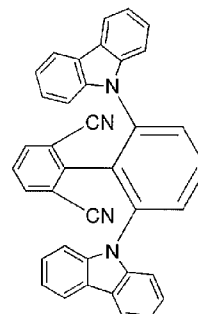
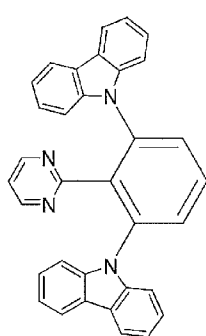
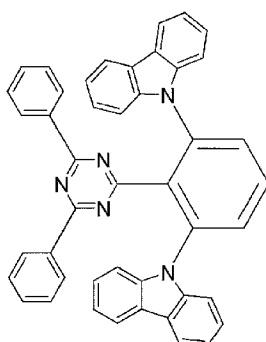
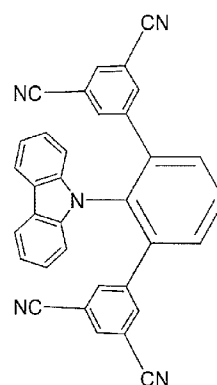
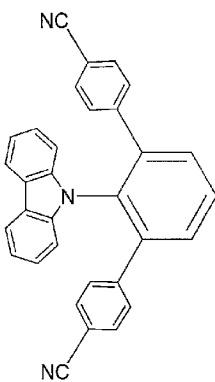
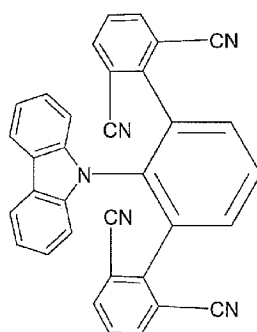
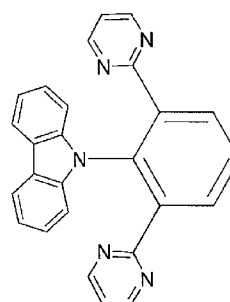
**T-102****T-103****T-104****T-105****T-106****T-107****T-108****T-109****T-110****T-111****T-112****T-113**

[化27]

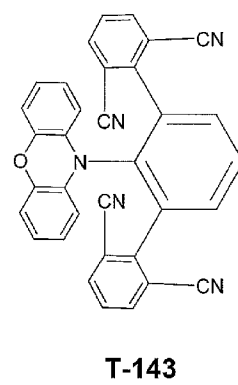
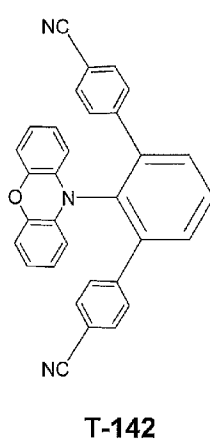
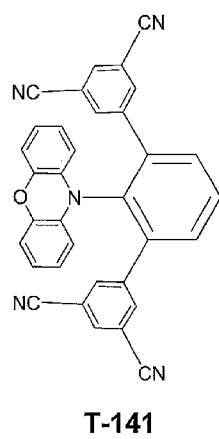
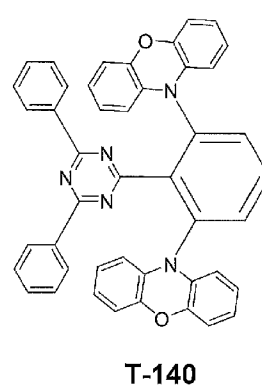
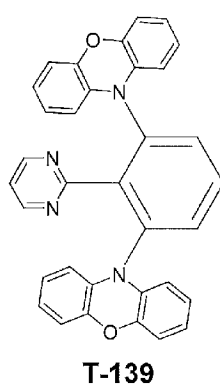
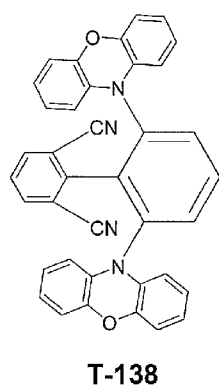
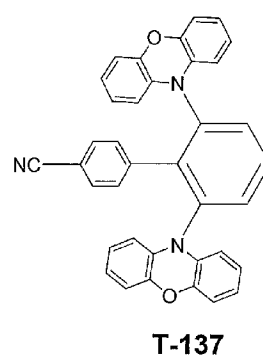
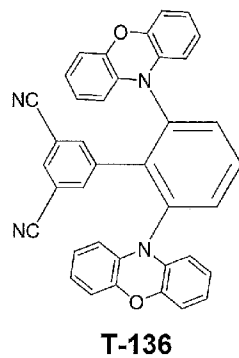
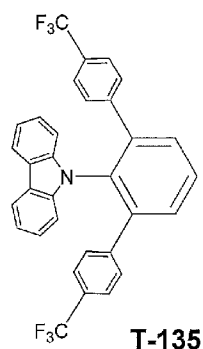
**T-114****T-115****T-116****T-117****T-118****T-119****T-120****T-121****T-122****T-123****T-124****T-125**

[0098]

[化28]

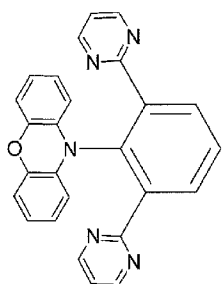
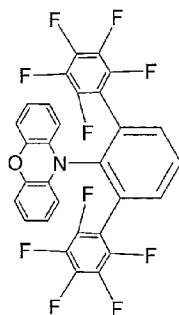
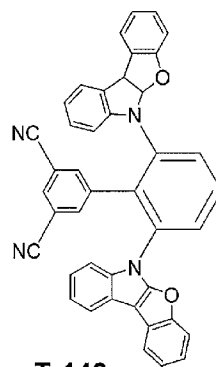
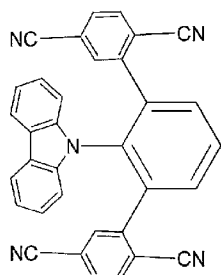
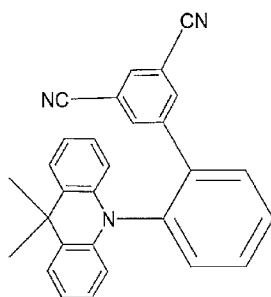
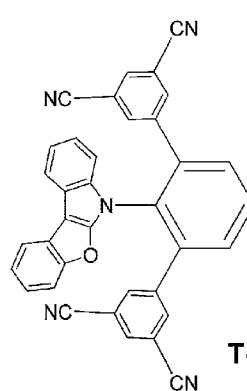
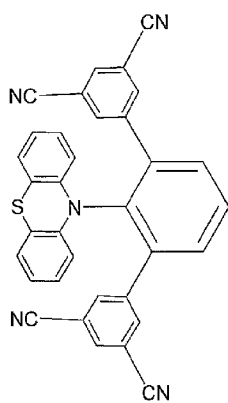
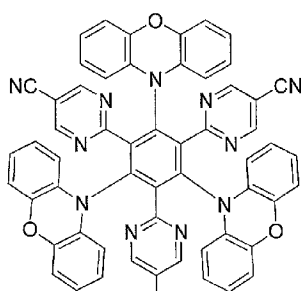
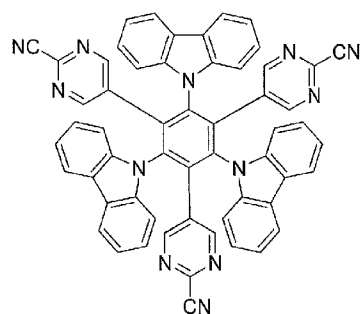
**T-126****T-127****T-128****T-129****T-130****T-131****T-132****T-133****T-134**

[化29]

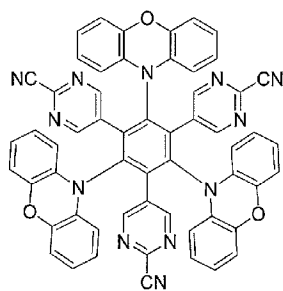
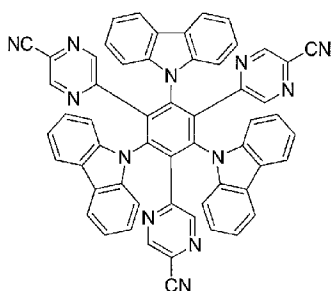
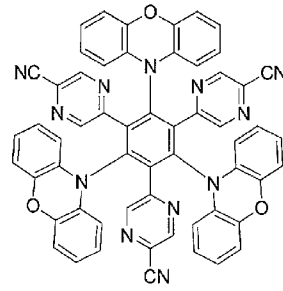
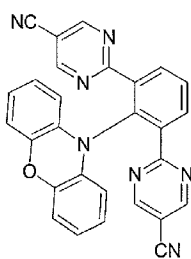
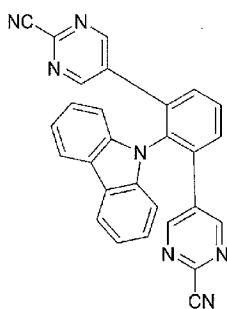
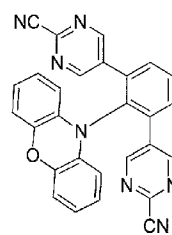
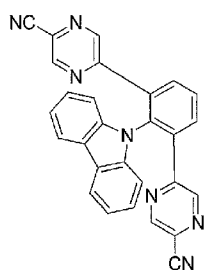
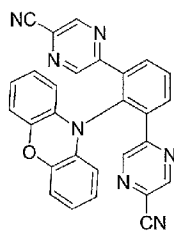
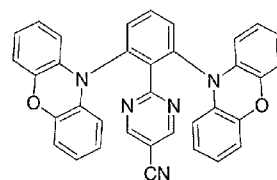
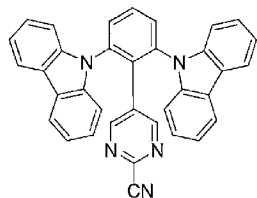
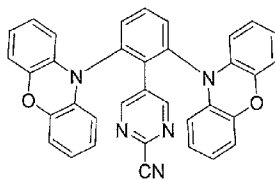
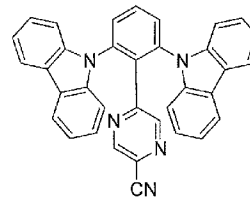


[0099]

[化30]

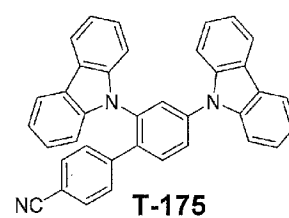
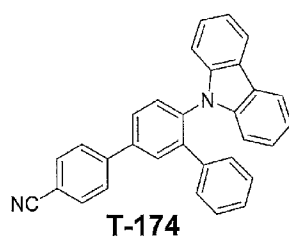
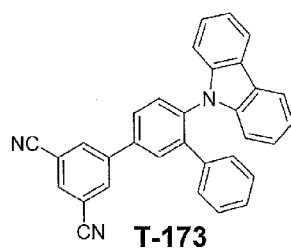
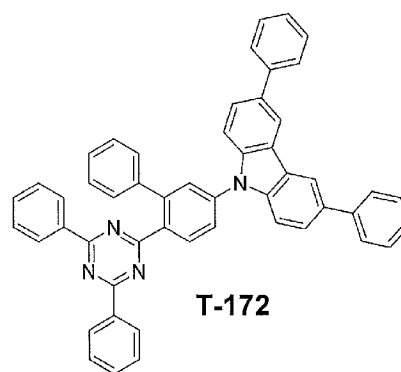
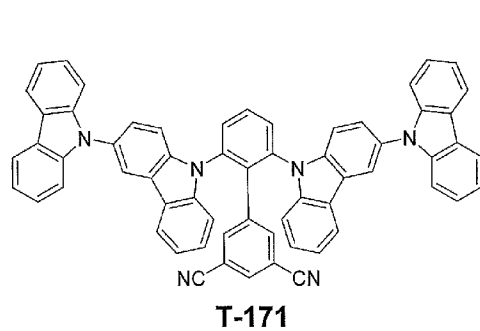
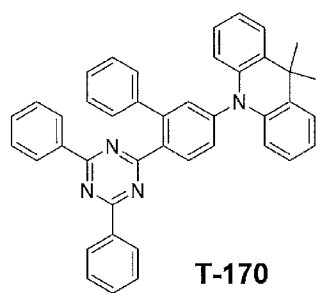
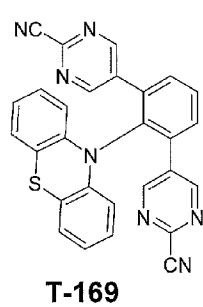
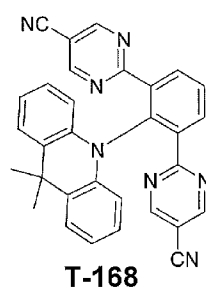
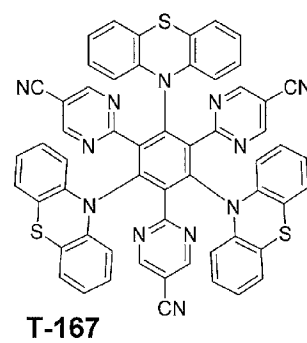
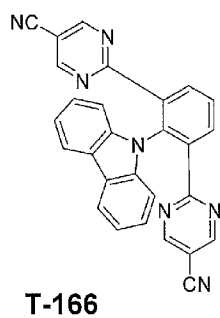
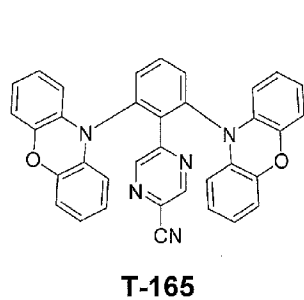
**T-144****T-145****T-146****T-147****T-148****T-149****T-150****T-151****T-152**

[化31]

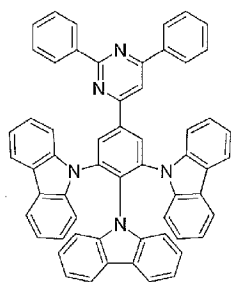
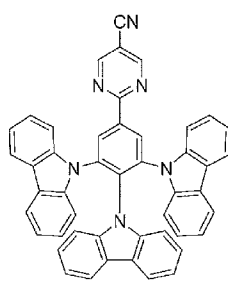
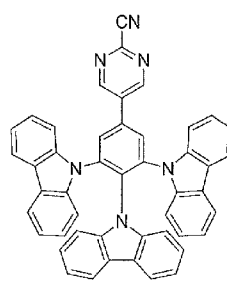
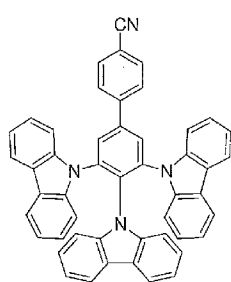
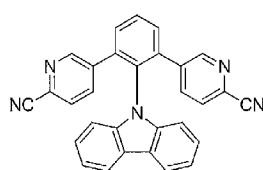
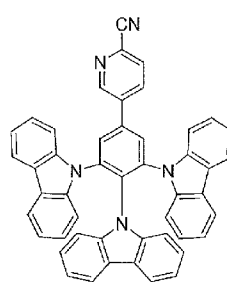
**T-153****T-154****T-155****T-156****T-157****T-158****T-159****T-160****T-161****T-162****T-163****T-164**

[0100]

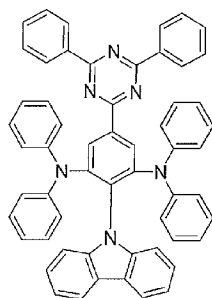
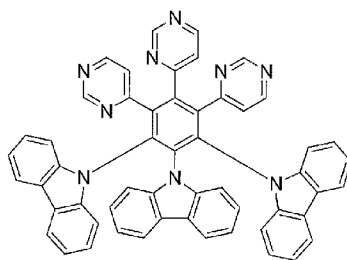
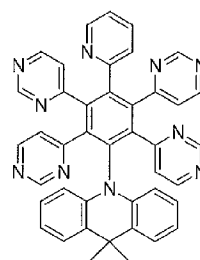
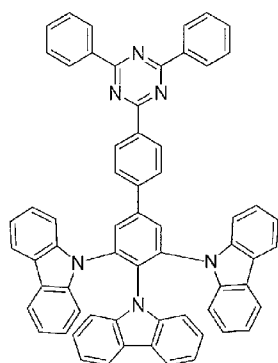
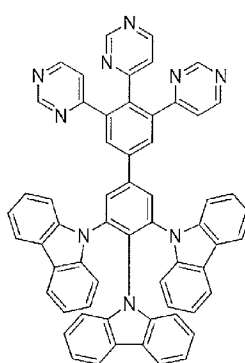
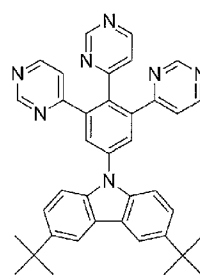
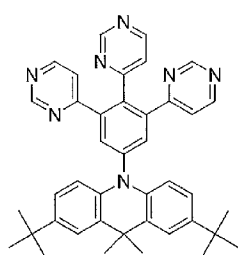
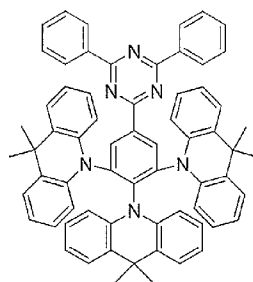
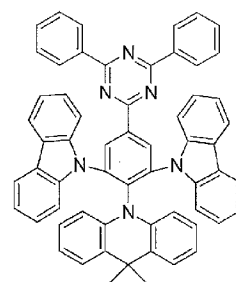
[化32]



[化33]

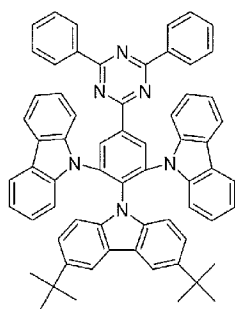
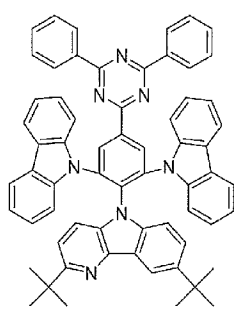
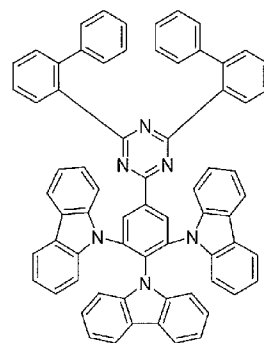
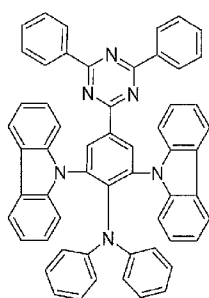
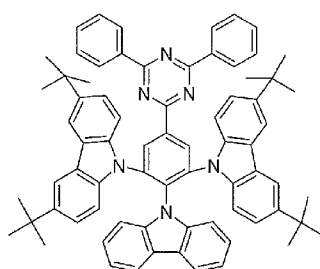
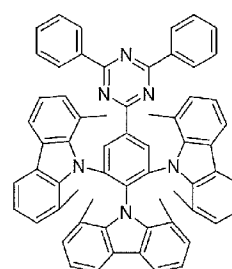
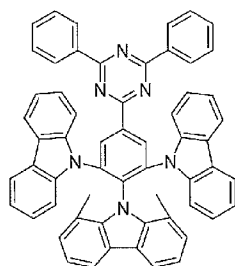
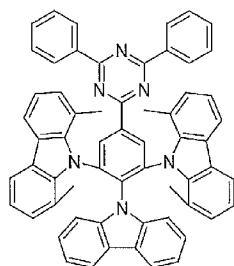
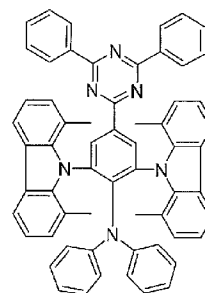
**T-176****T-177****T-178****T-179****T-180****T-181**

[化34]

**T-182****T-183****T-184****T-185****T-186****T-187****T-188****T-189****T-190**

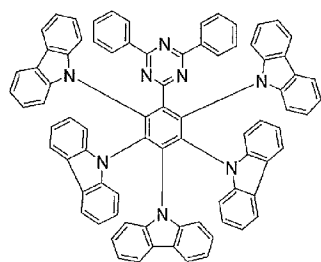
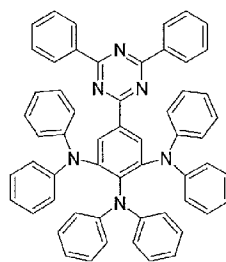
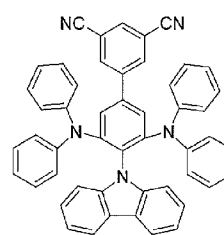
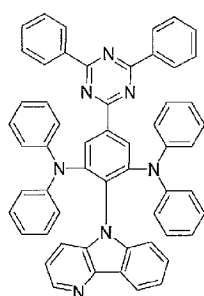
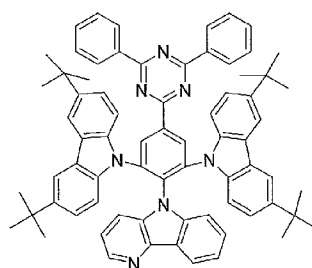
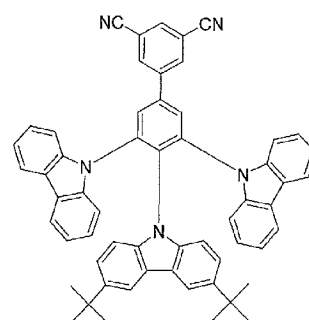
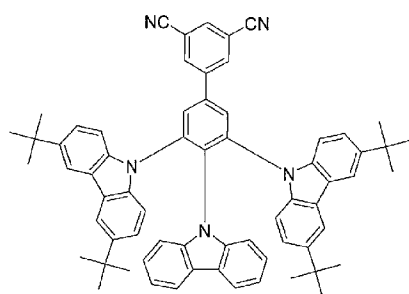
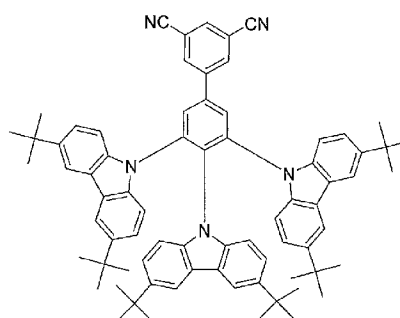
[0101]

[化35]

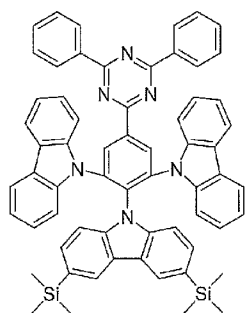
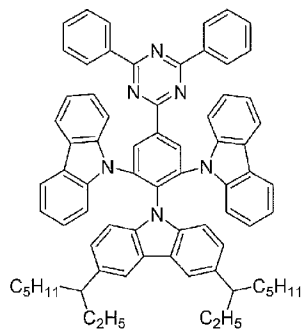
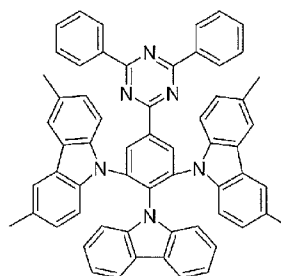
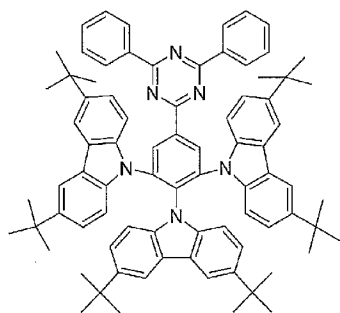
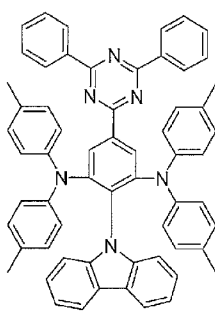
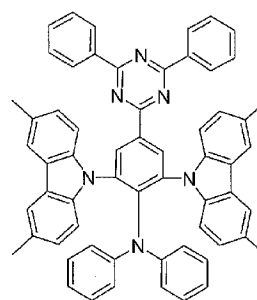
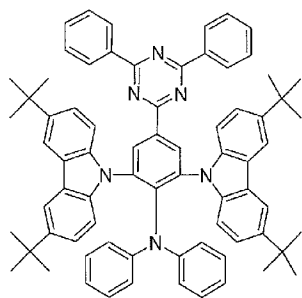
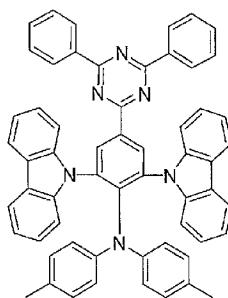
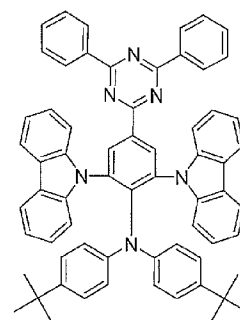
**T-191****T-192****T-193****T-194****T-195****T-196****T-197****T-198****T-199**

[0102]

[化36]

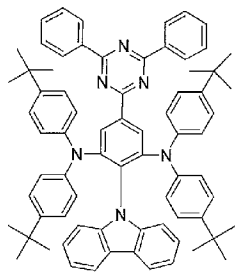
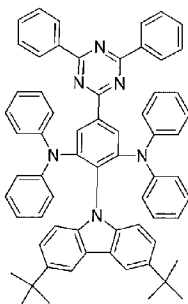
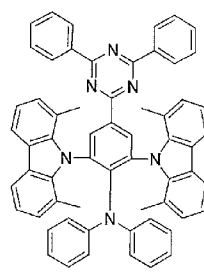
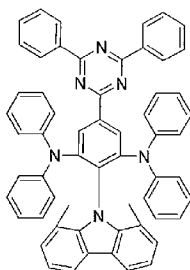
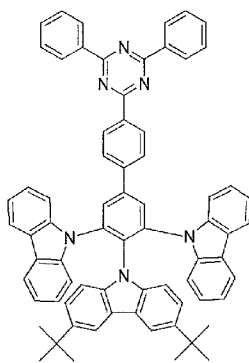
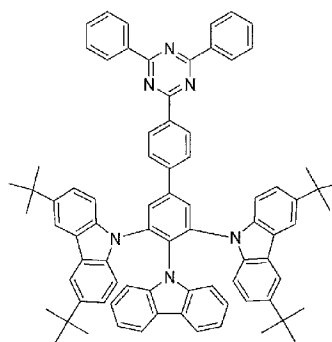
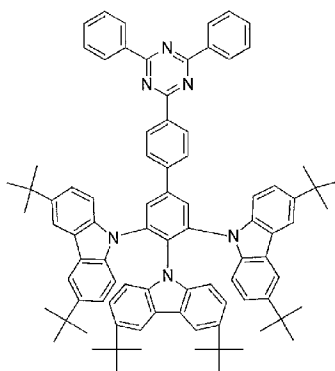
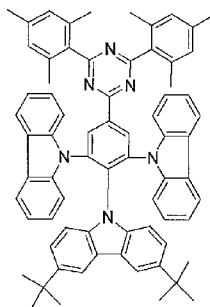
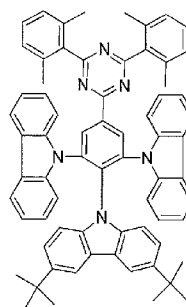
**T-200****T-201****T-202****T-203****T-204****T-205****T-206****T-207**

[化37]

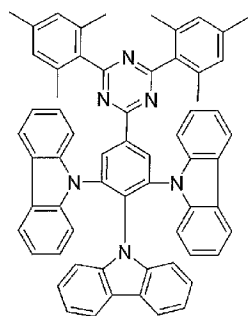
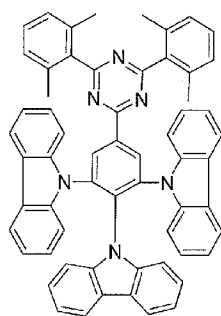
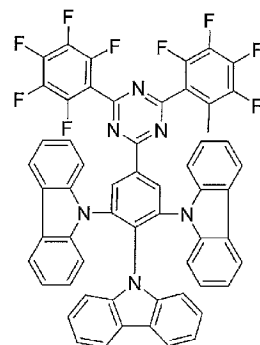
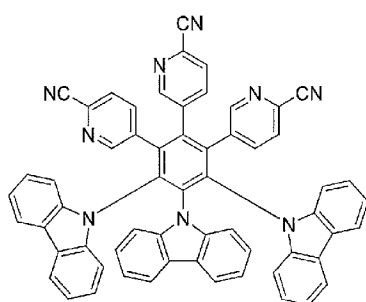
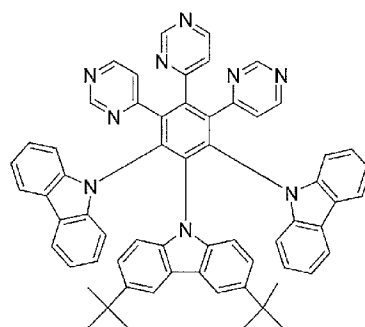
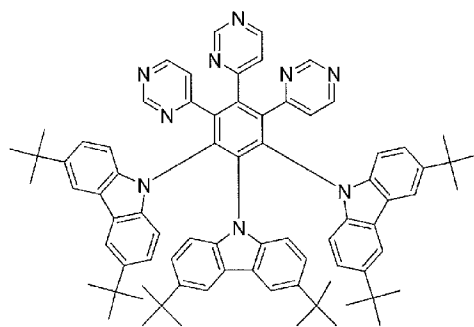
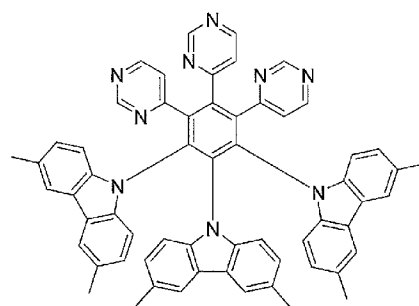
**T-208****T-209****T-210****T-211****T-212****T-213****T-214****T-215****T-216**

[0103]

[化38]

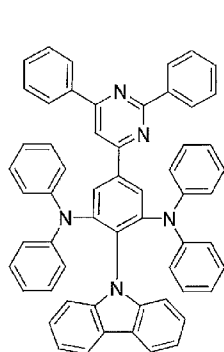
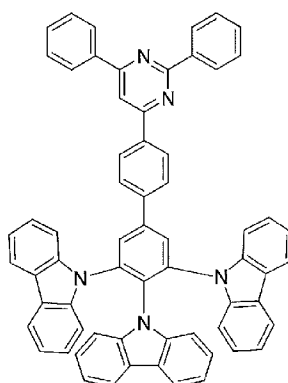
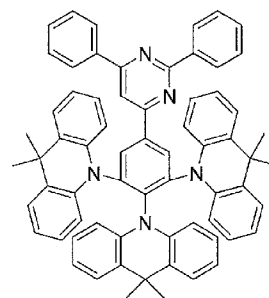
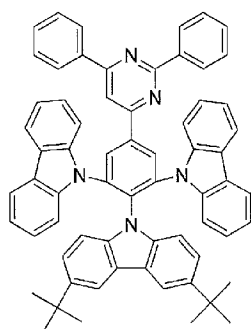
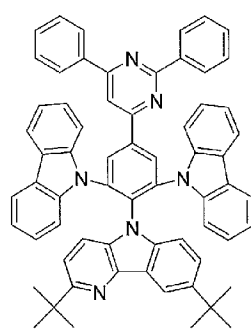
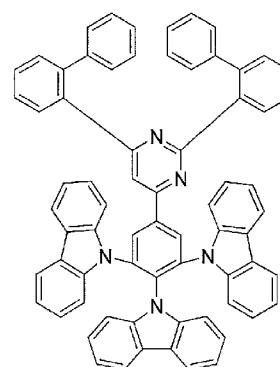
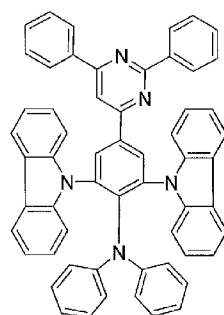
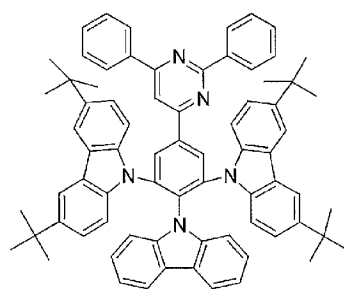
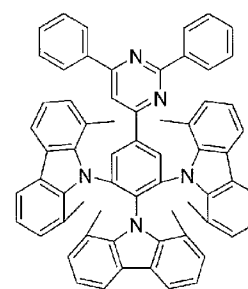
**T-217****T-218****T-219****T-220****T-221****T-222****T-223****T-224****T-225**

[化39]

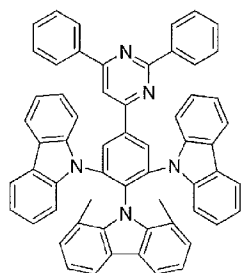
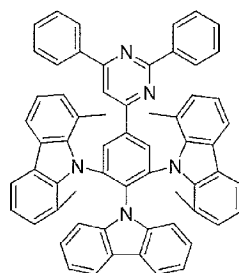
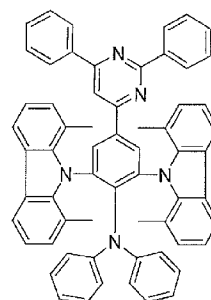
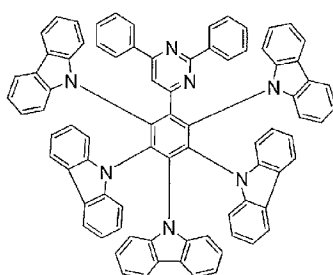
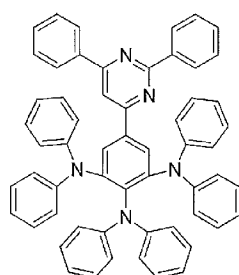
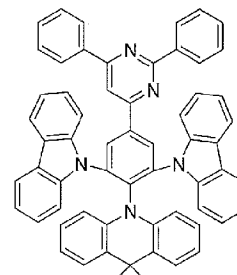
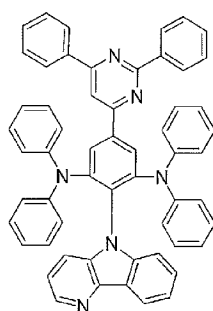
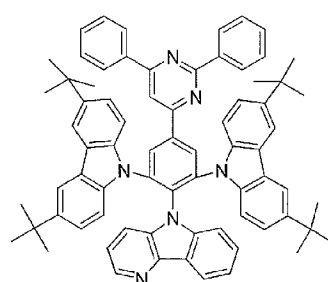
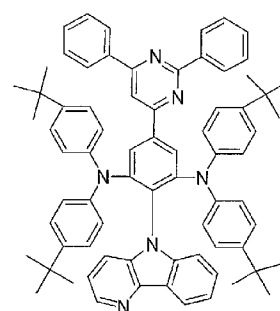
**T-226****T-227****T-228****T-229****T-230****T-231****T-232**

[0104]

[化40]

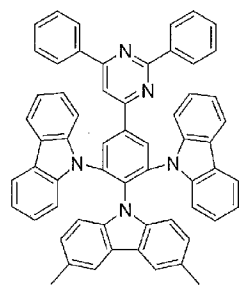
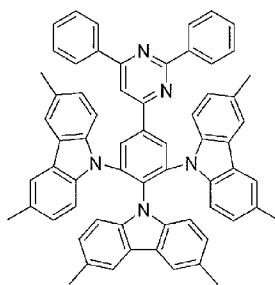
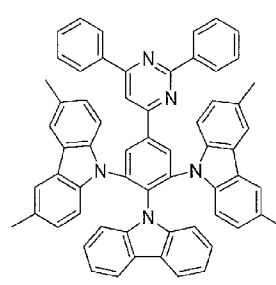
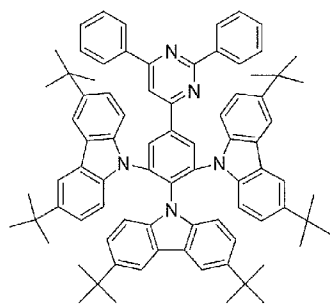
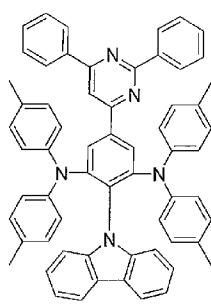
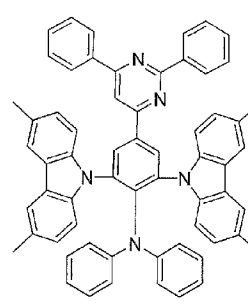
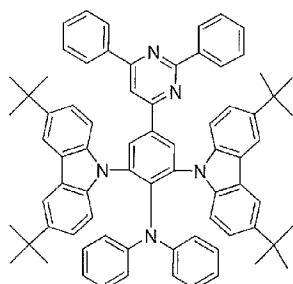
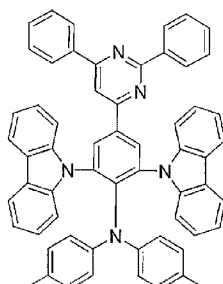
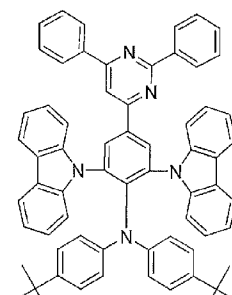
**T-233****T-234****T-235****T-236****T-237****T-238****T-239****T-240****T-241**

[化41]

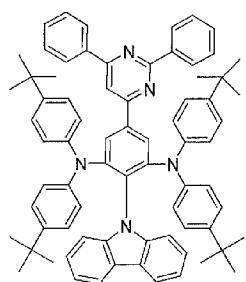
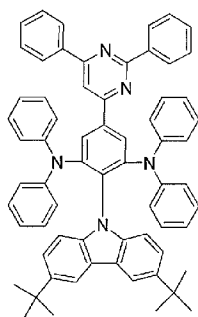
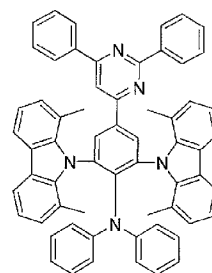
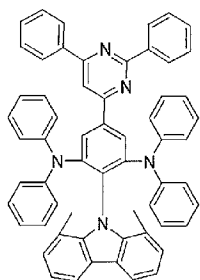
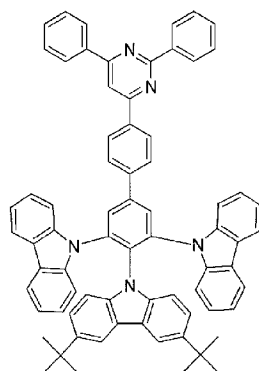
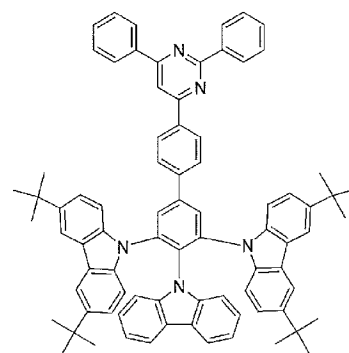
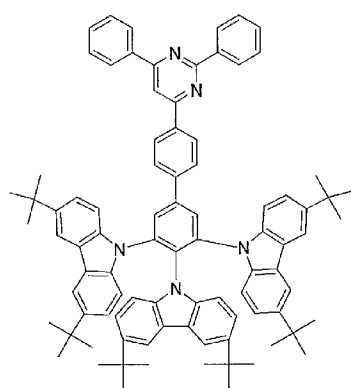
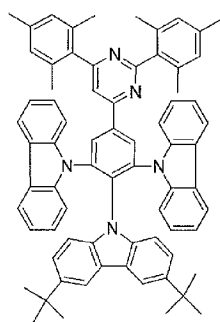
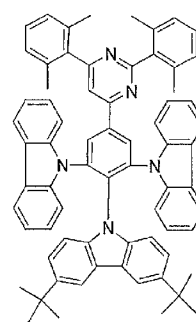
**T-242****T-243****T-244****T-245****T-246****T-247****T-248****T-249****T-250**

[0105]

[化42]

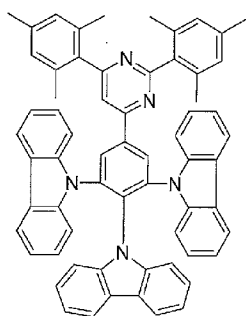
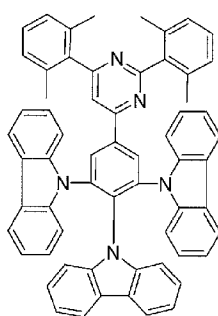
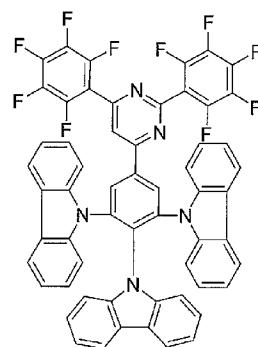
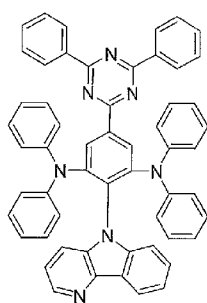
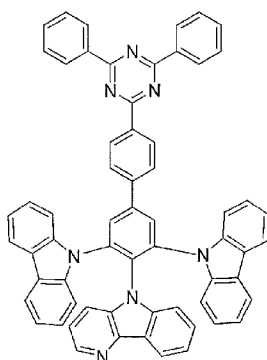
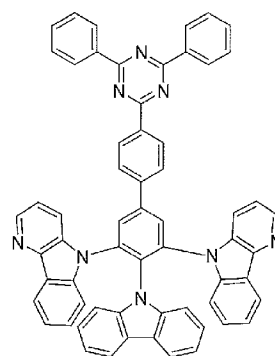
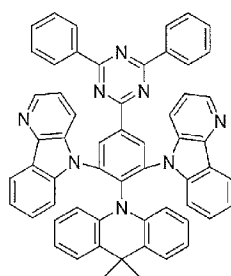
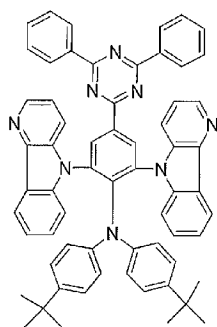
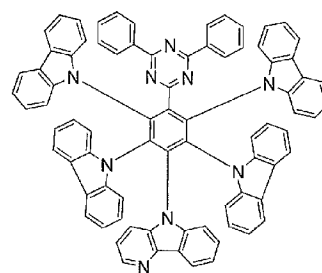
**T-251****T-252****T-253****T-254****T-255****T-256****T-257****T-258****T-259**

[化43]

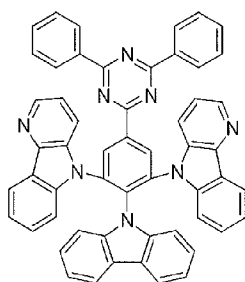
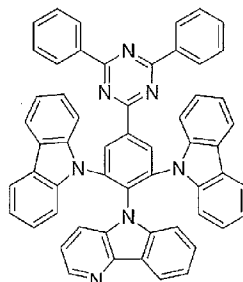
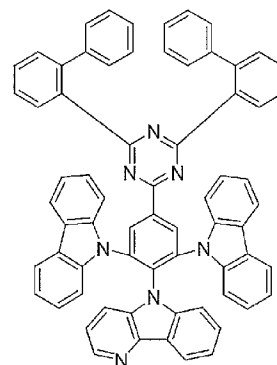
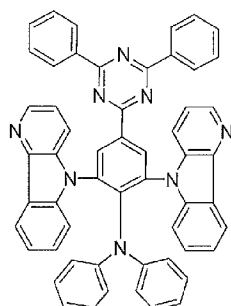
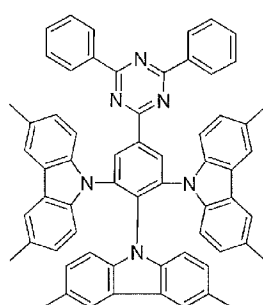
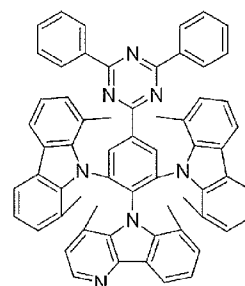
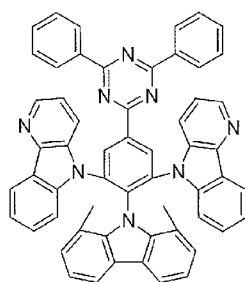
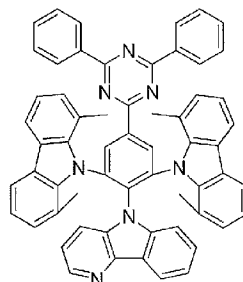
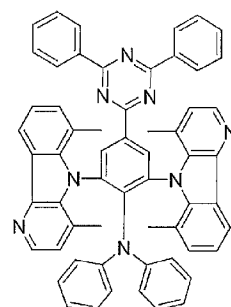
**T-260****T-261****T-262****T-263****T-264****T-265****T-266****T-267****T-268**

[0106]

[化44]

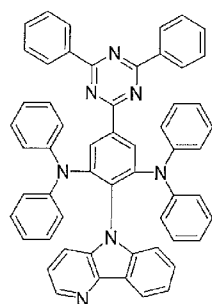
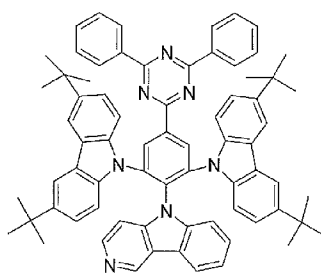
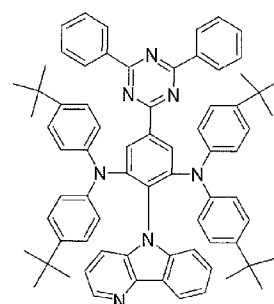
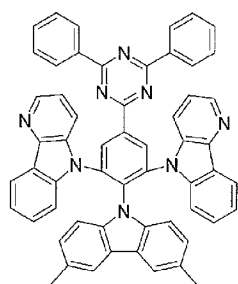
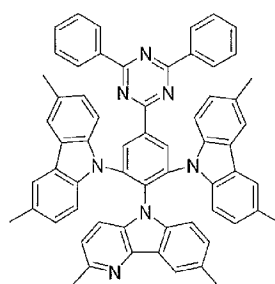
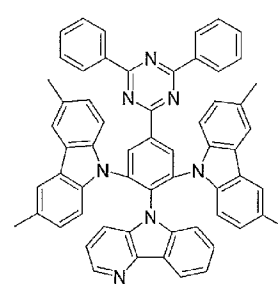
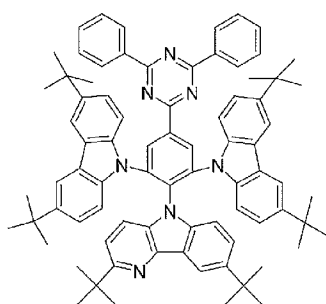
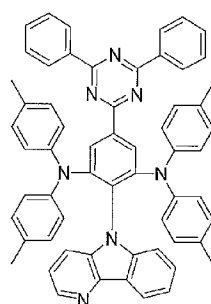
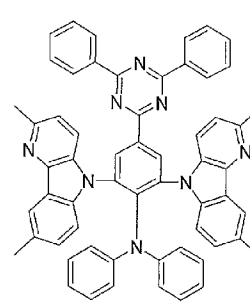
**T-269****T-270****T-271****T-272****T-273****T-274****T-275****T-276****T-277**

[化45]

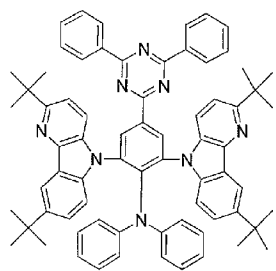
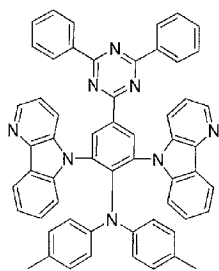
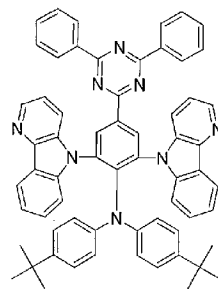
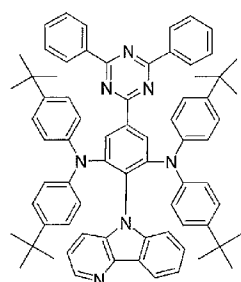
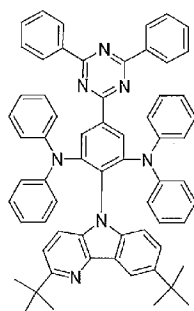
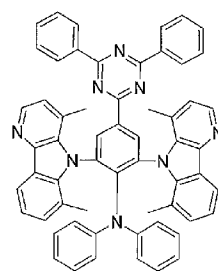
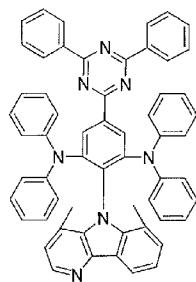
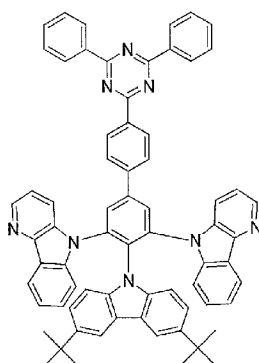
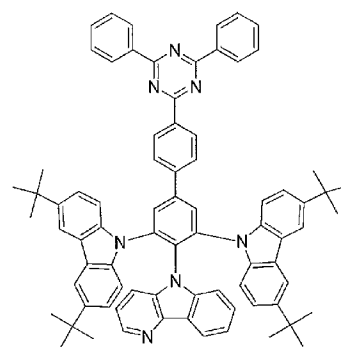
**T-278****T-279****T-280****T-281****T-282****T-283****T-284****T-285****T-286**

[0107]

[化46]

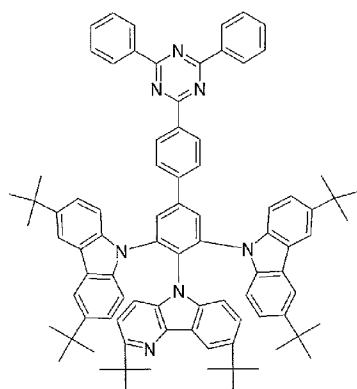
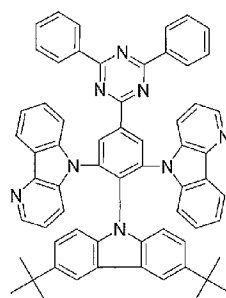
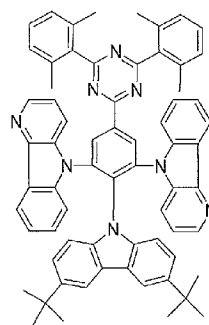
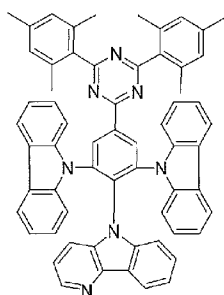
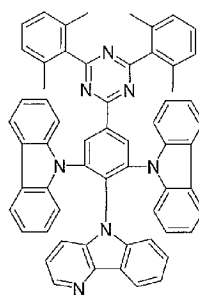
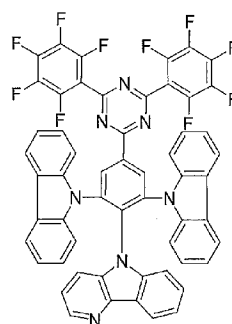
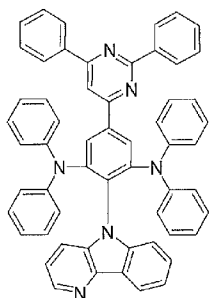
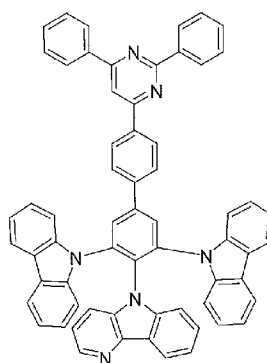
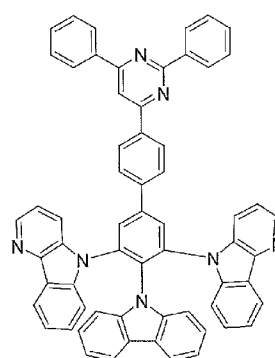
**T-287****T-288****T-289****T-290****T-291****T-292****T-293****T-294****T-295**

[化47]

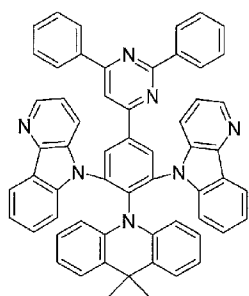
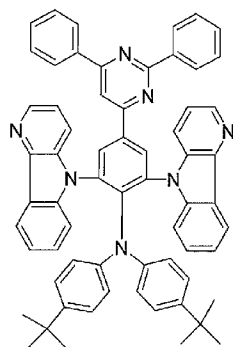
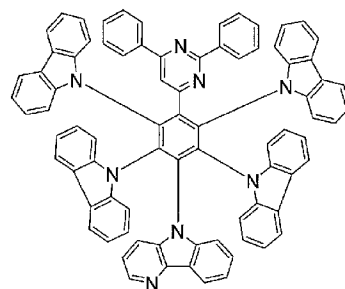
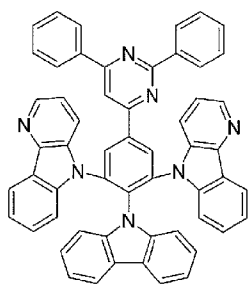
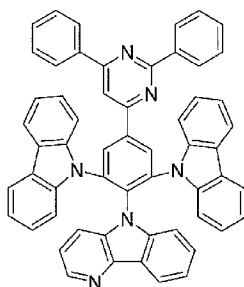
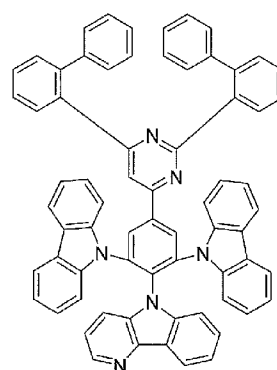
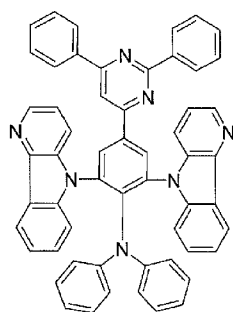
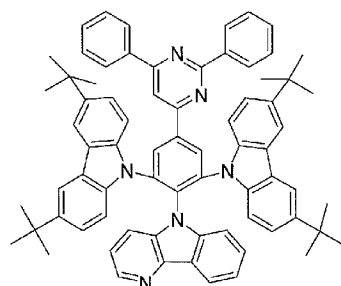
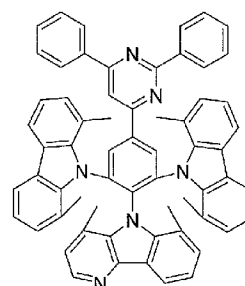
**T-296****T-297****T-298****T-299****T-300****T-301****T-302****T-303****T-304**

[0108]

[化48]

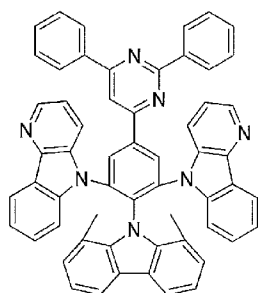
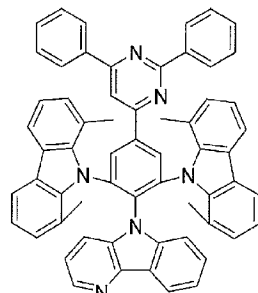
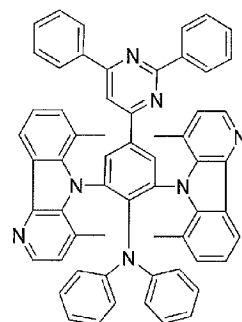
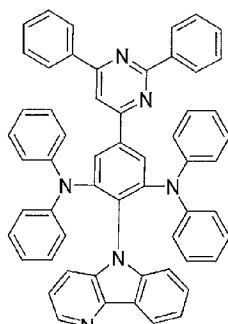
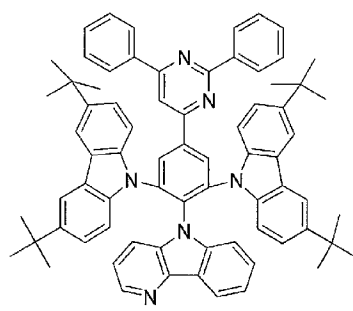
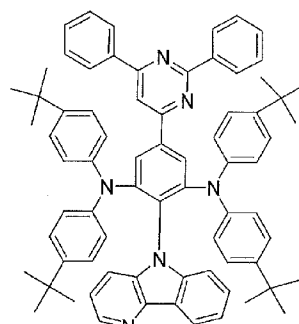
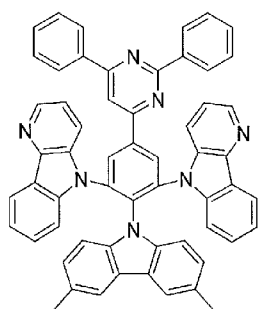
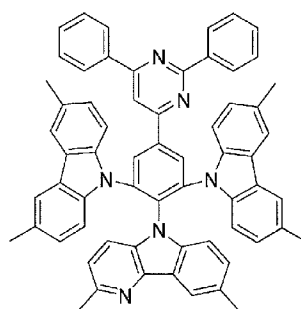
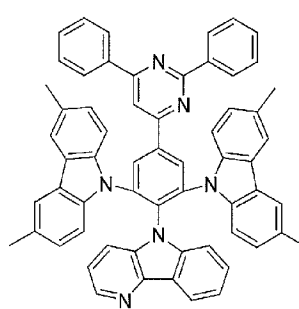
**T-305****T-306****T-307****T-308****T-309****T-310****T-311****T-312****T-313**

[化49]

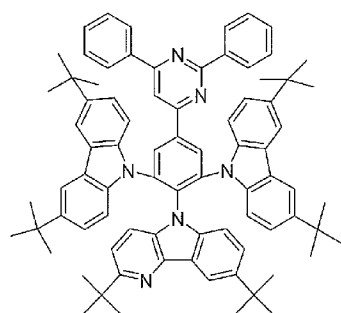
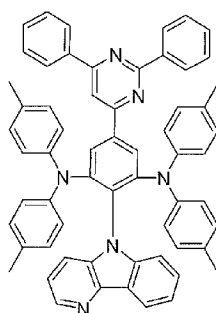
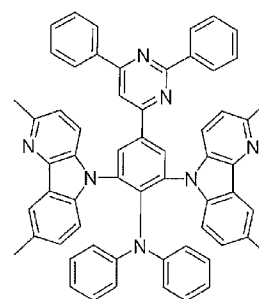
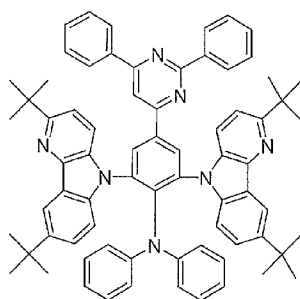
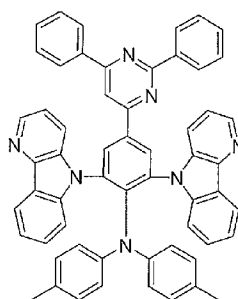
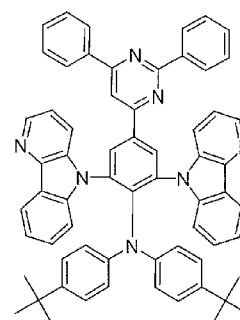
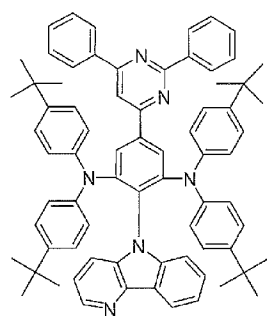
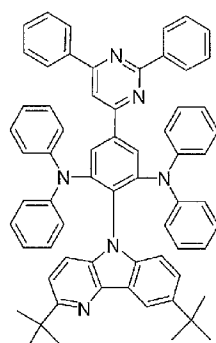
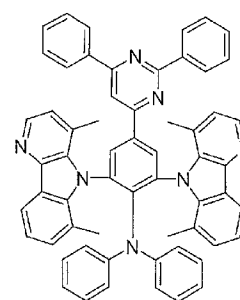
**T-314****T-315****T-316****T-317****T-318****T-319****T-320****T-321****T-322**

[0109]

[化50]

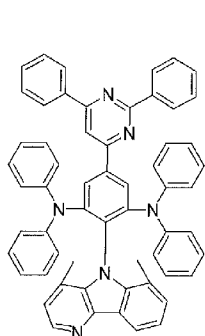
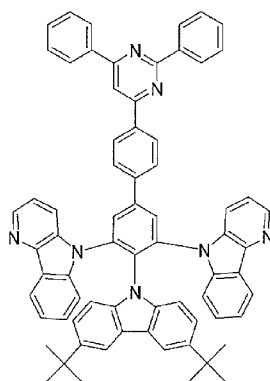
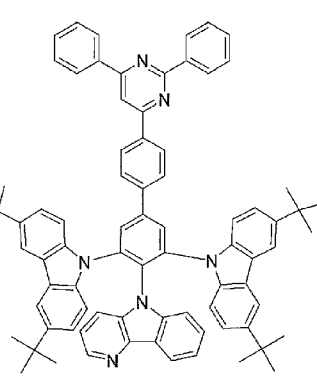
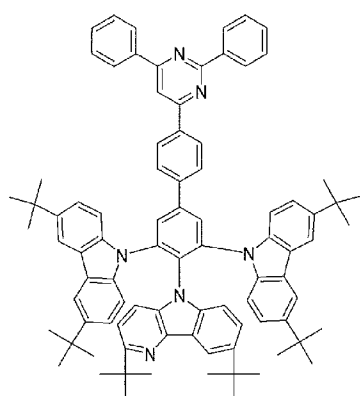
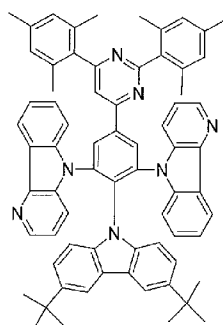
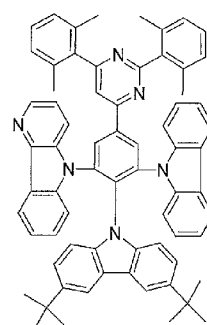
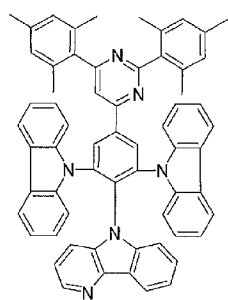
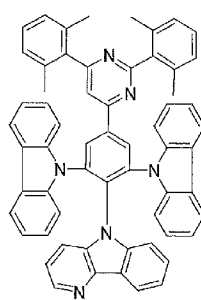
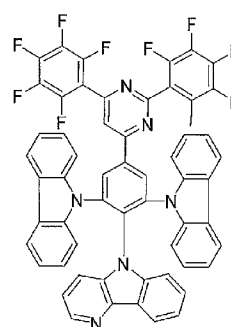
**T-323****T-324****T-325****T-326****T-327****T-328****T-329****T-330****T-331**

[化51]

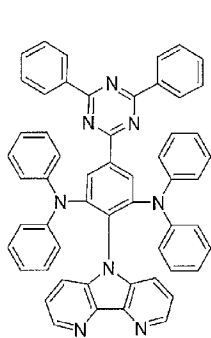
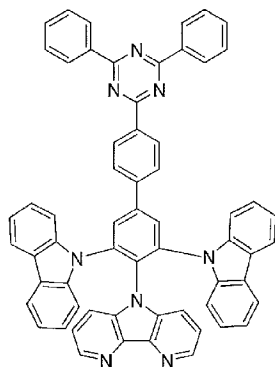
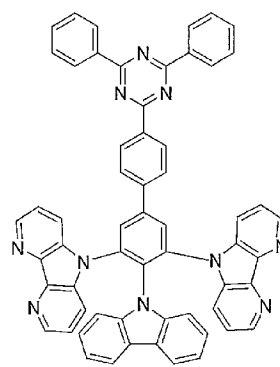
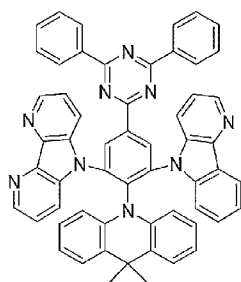
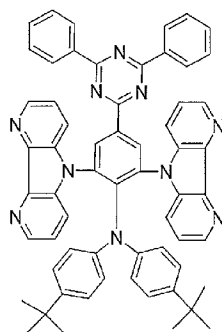
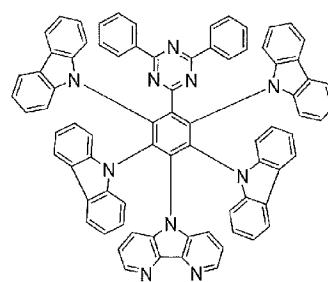
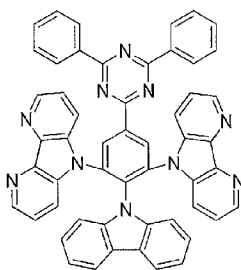
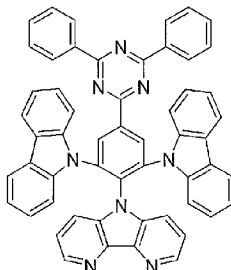
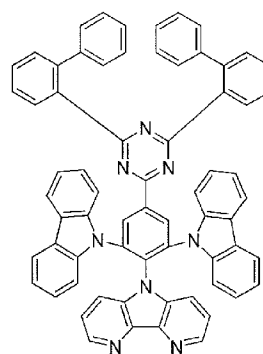
**T-332****T-333****T-334****T-335****T-336****T-337****T-338****T-339****T-340**

[0110]

[化52]

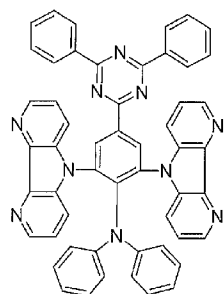
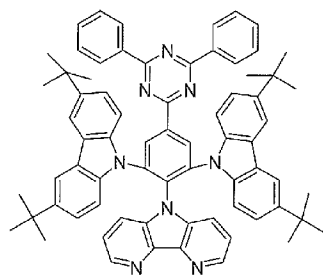
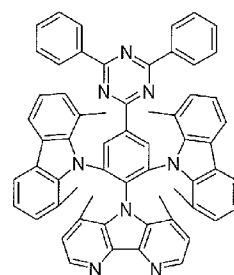
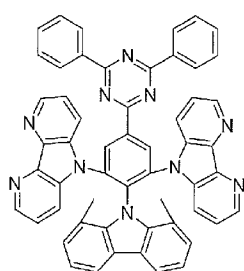
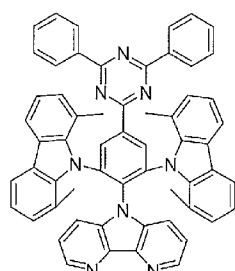
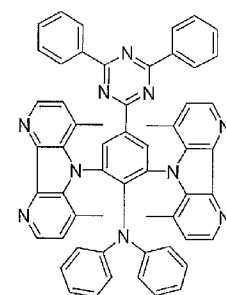
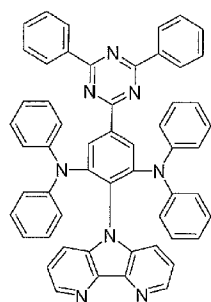
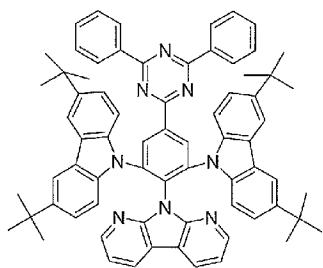
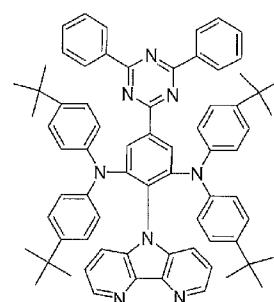
**T-341****T-342****T-343****T-344****T-345****T-346****T-347****T-348****T-349**

[化53]

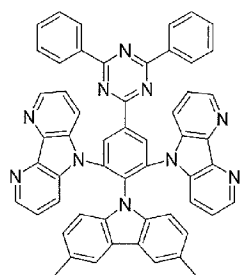
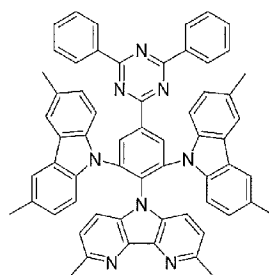
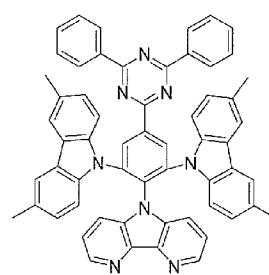
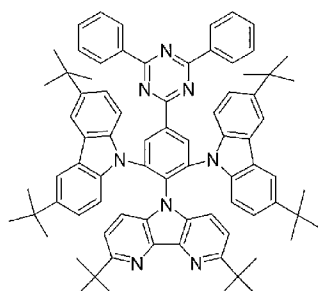
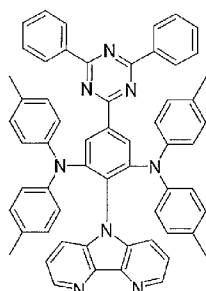
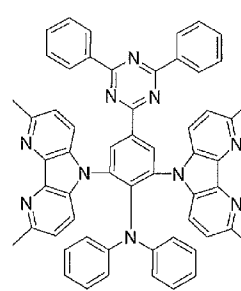
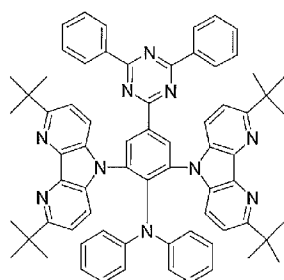
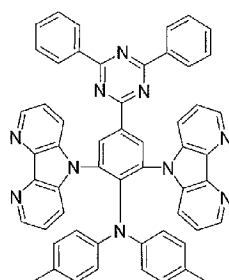
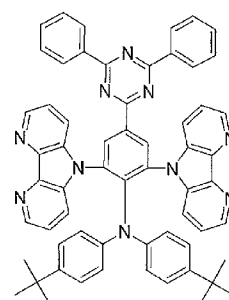
**T-350****T-351****T-352****T-353****T-354****T-355****T-356****T-357****T-358**

[0111]

[化54]

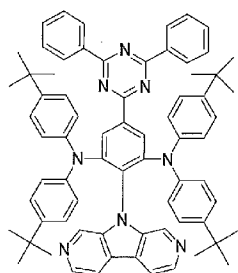
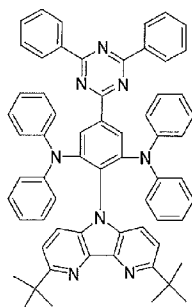
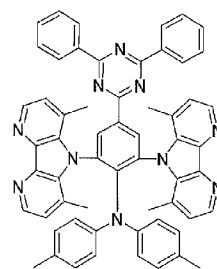
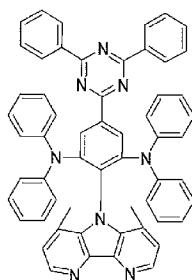
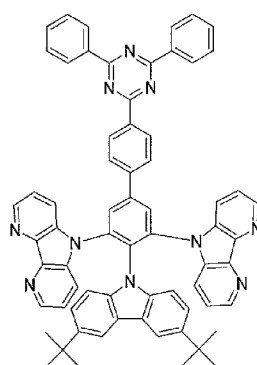
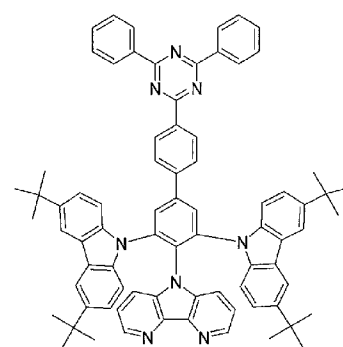
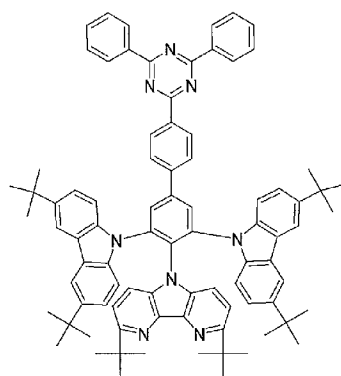
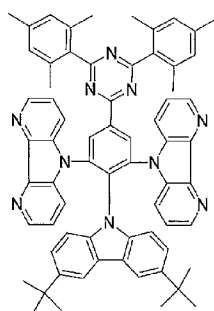
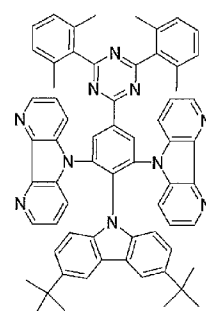
**T-359****T-360****T-361****T-362****T-363****T-364****T-365****T-366****T-367**

[化55]

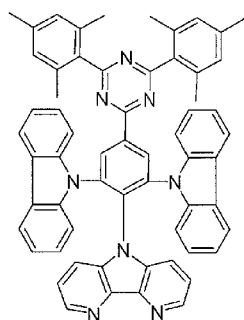
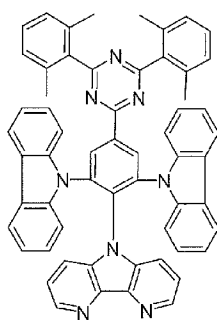
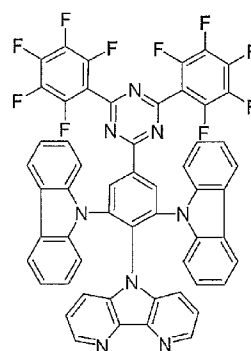
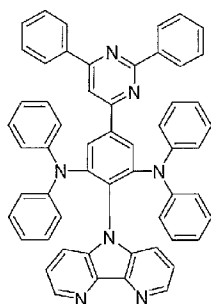
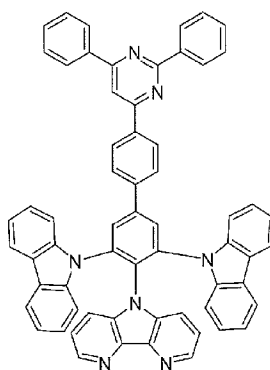
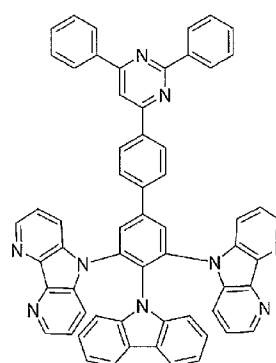
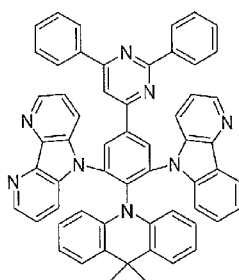
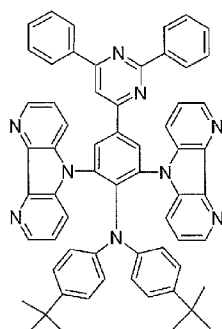
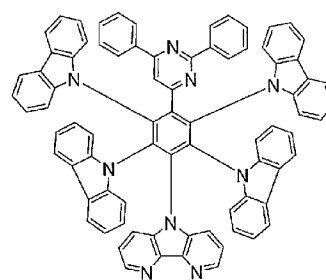
**T-368****T-369****T-370****T-371****T-372****T-373****T-374****T-375****T-376**

[0112]

[化56]

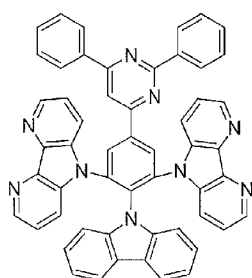
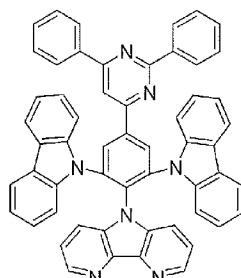
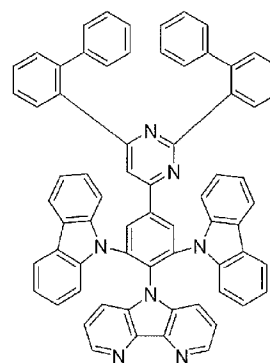
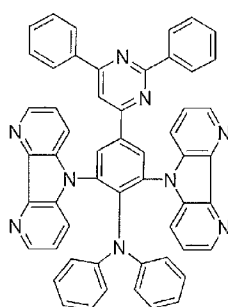
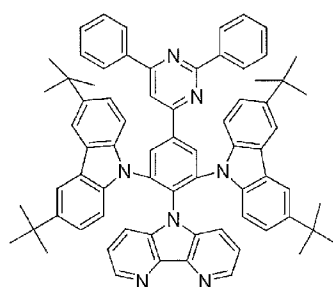
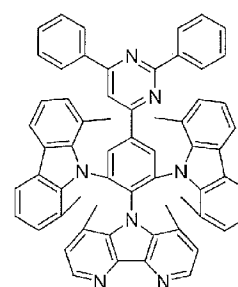
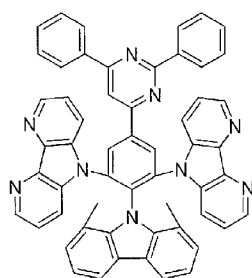
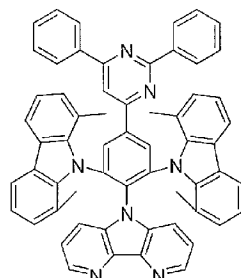
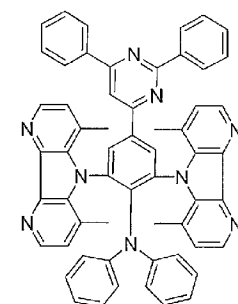
**T-377****T-378****T-379****T-380****T-381****T-382****T-383****T-384****T-385**

[化57]

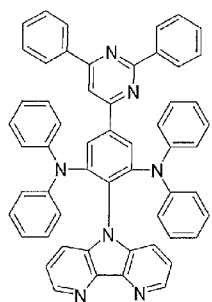
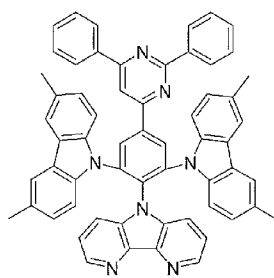
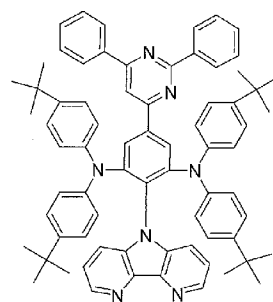
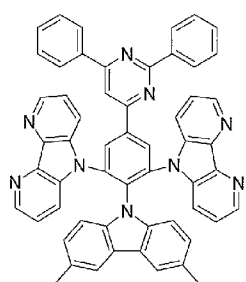
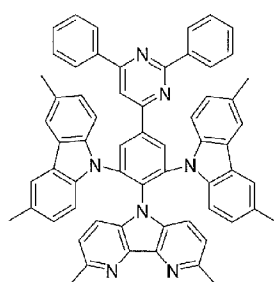
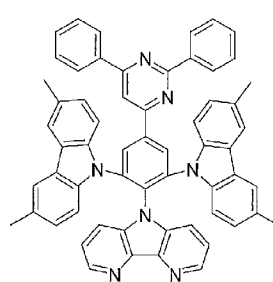
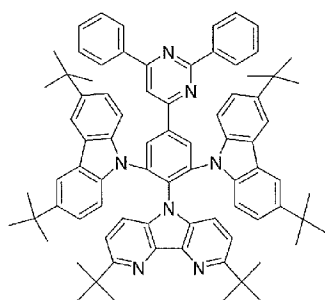
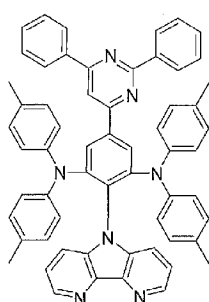
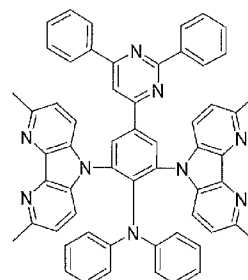
**T-386****T-387****T-388****T-389****T-390****T-391****T-392****T-393****T-394**

[0113]

[化58]

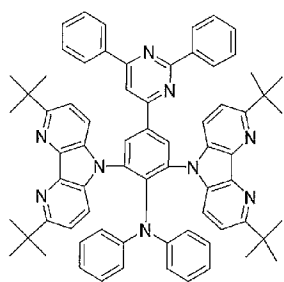
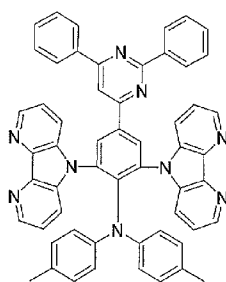
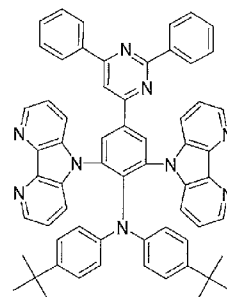
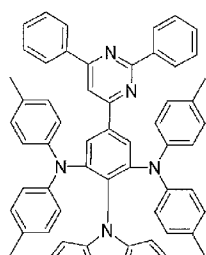
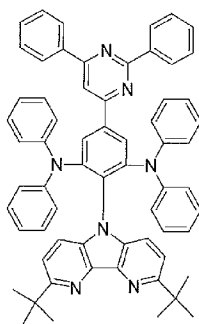
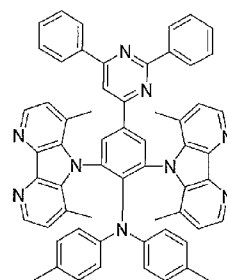
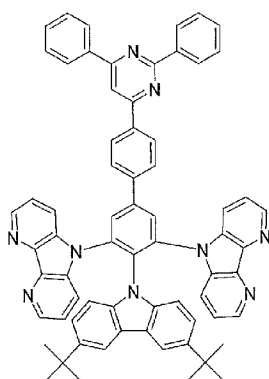
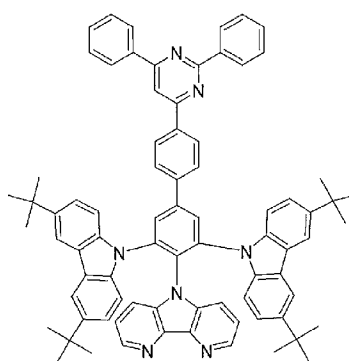
**T-395****T-396****T-397****T-398****T-399****T-400****T-401****T-402****T-403**

[化59]

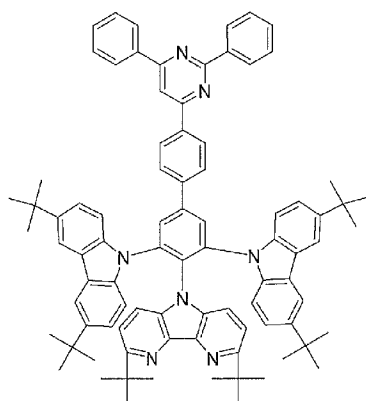
**T-404****T-405****T-406****T-407****T-408****T-409****T-410****T-411****T-412**

[0114]

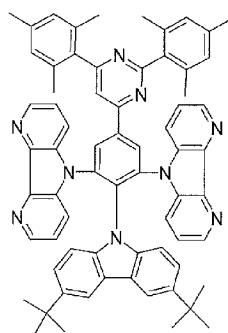
[化60]

**T-413****T-414****T-415****T-416****T-417****T-418****T-419****T-420**

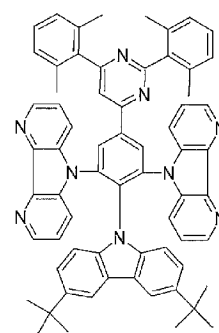
[化61]



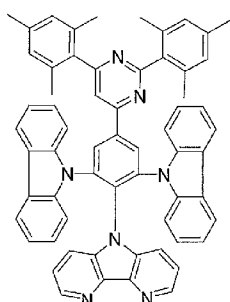
T-421



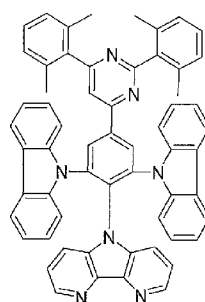
T-422



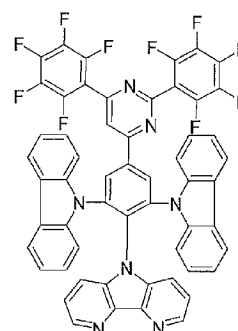
T-423



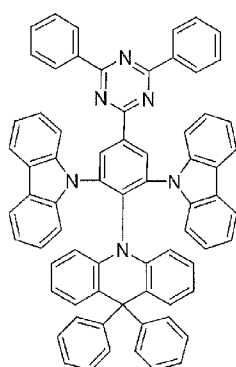
T-424



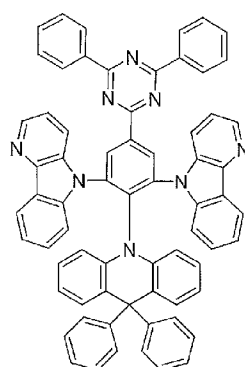
T-425



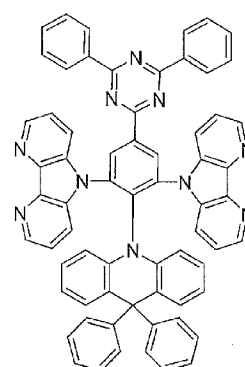
T-426



T-427



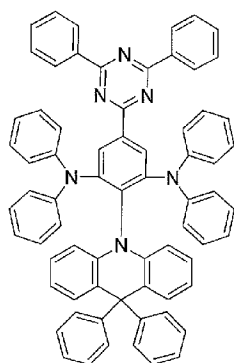
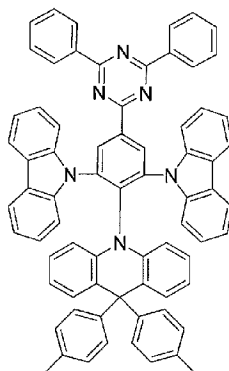
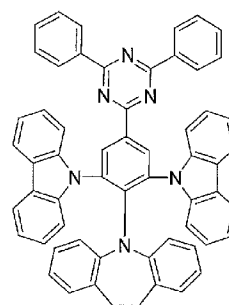
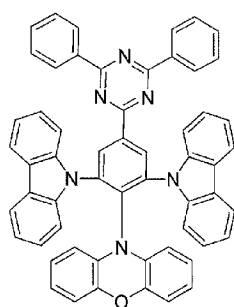
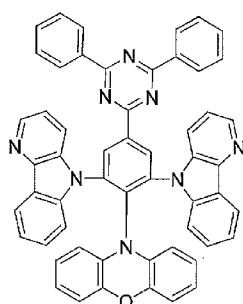
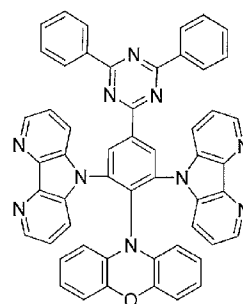
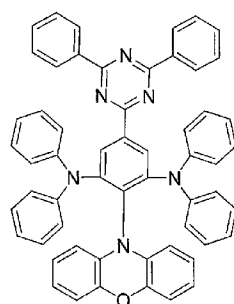
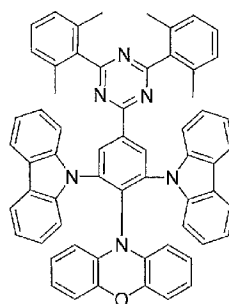
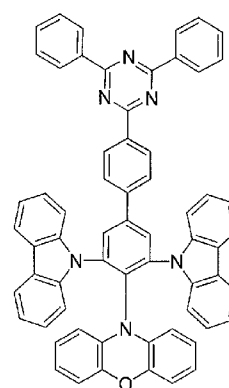
T-428



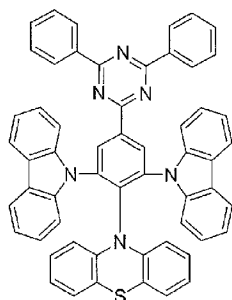
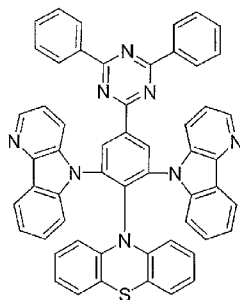
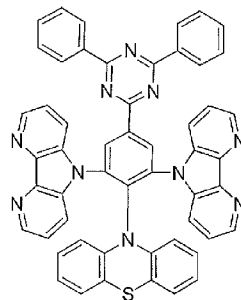
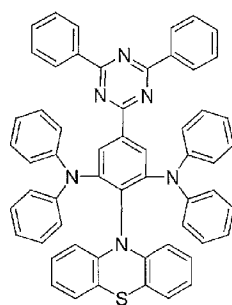
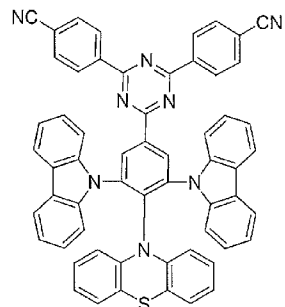
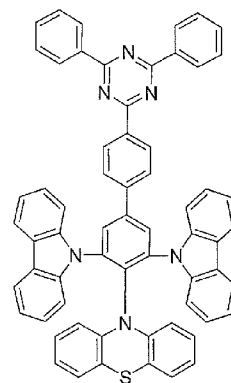
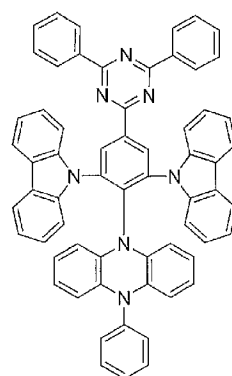
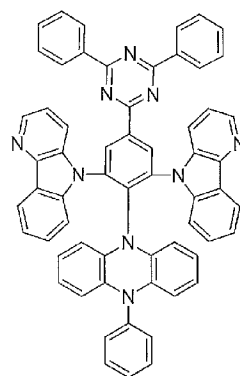
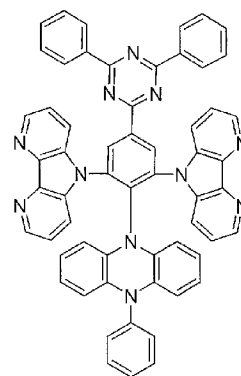
T-429

[0115]

[化62]

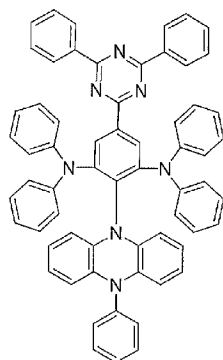
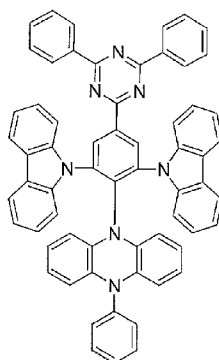
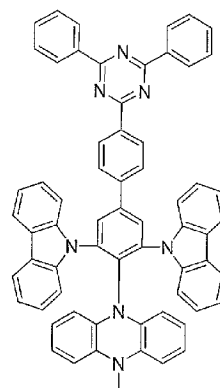
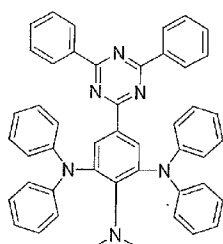
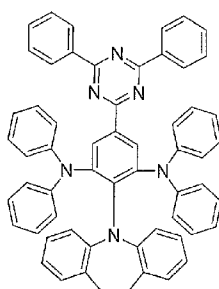
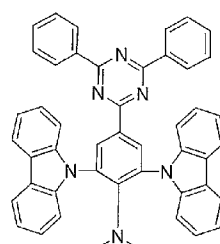
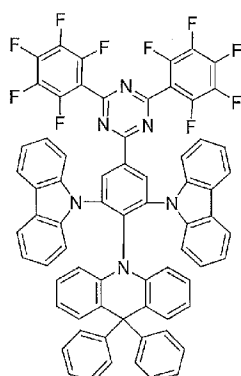
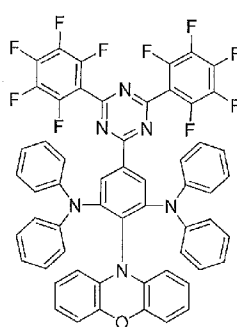
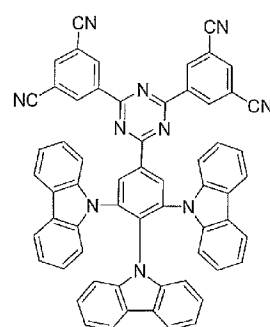
**T-430****T-431****T-432****T-433****T-434****T-435****T-436****T-437****T-438**

[化63]

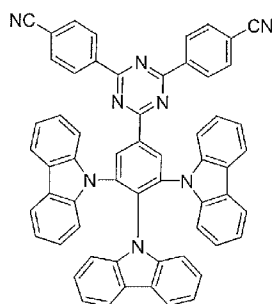
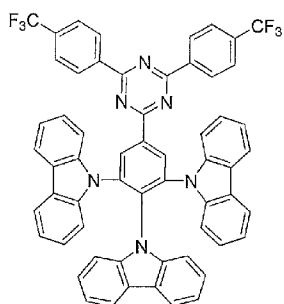
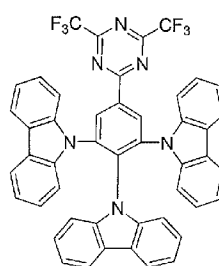
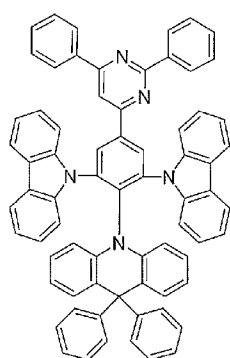
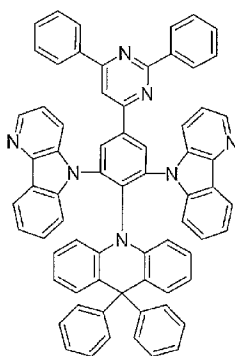
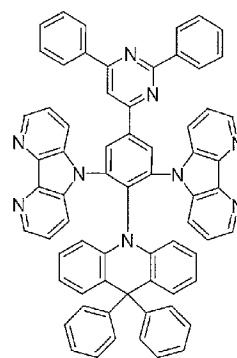
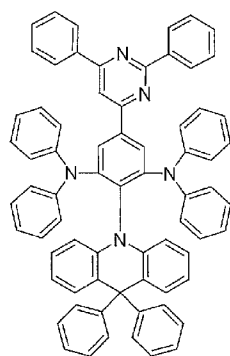
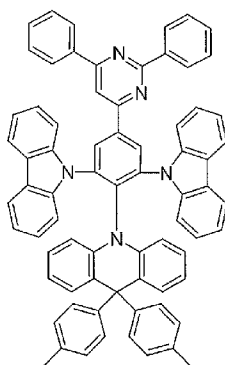
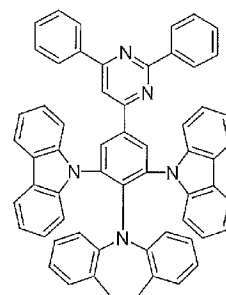
**T-439****T-440****T-441****T-442****T-443****T-444****T-445****T-446****T-447**

[0116]

[化64]

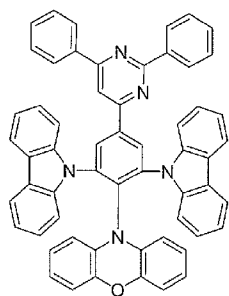
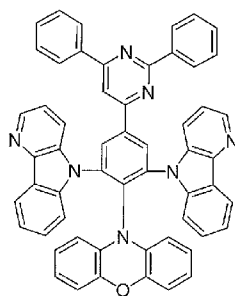
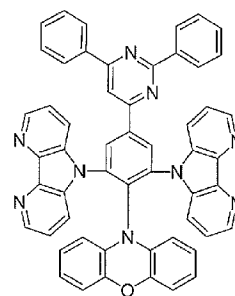
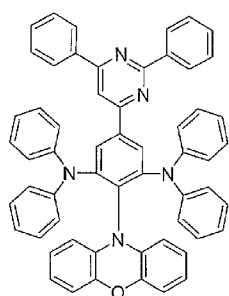
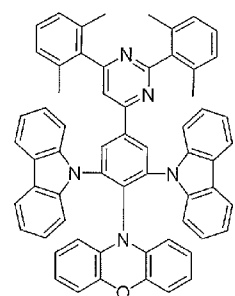
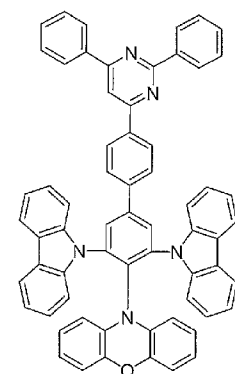
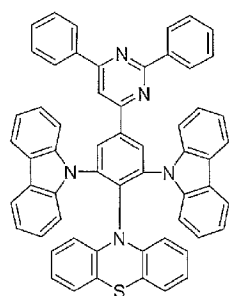
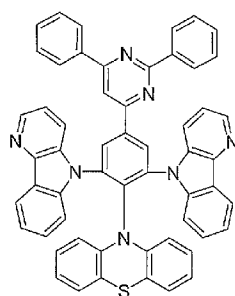
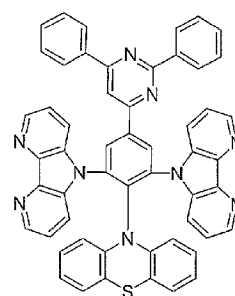
**T-448****T-449****T-450****T-451****T-452****T-453****T-454****T-455****T-456**

[化65]

**T-457****T-458****T-459****T-460****T-461****T-462****T-463****T-464****T-465**

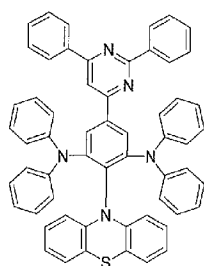
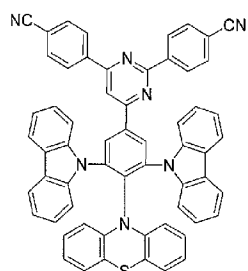
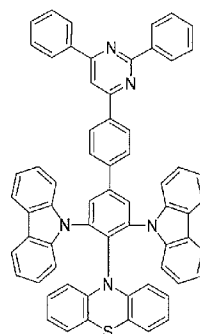
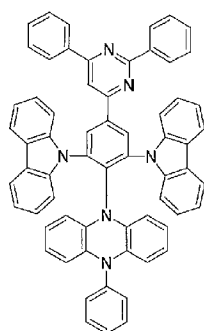
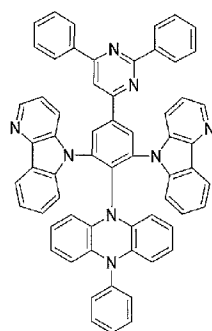
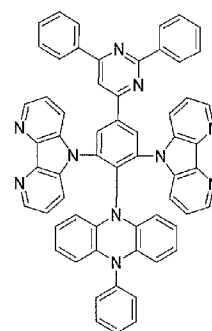
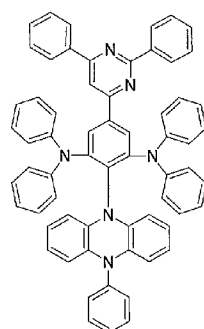
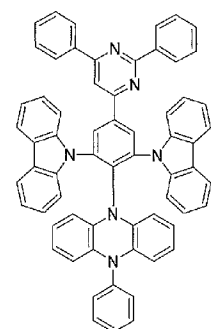
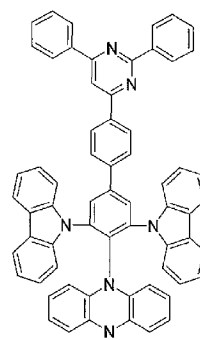
[0117]

[化66]

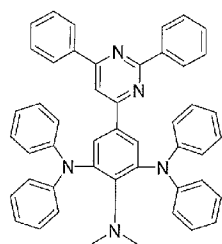
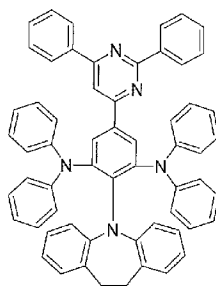
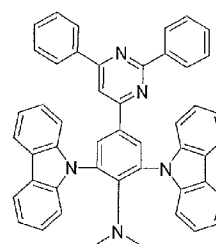
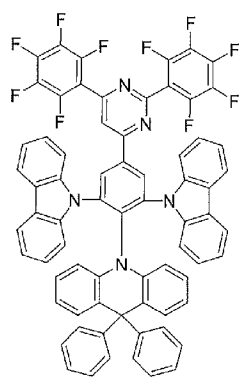
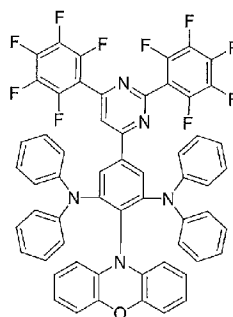
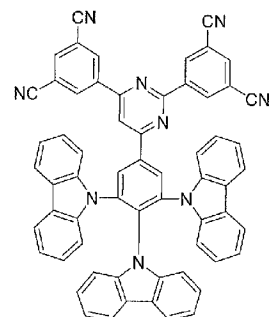
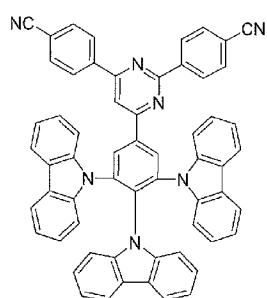
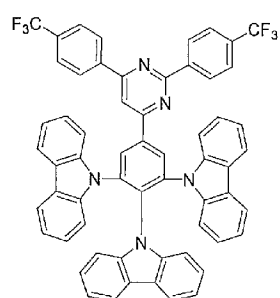
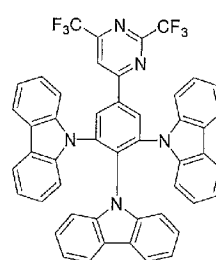
**T-466****T-467****T-468****T-469****T-470****T-471****T-472****T-473****T-474**

[0118]

[化67]

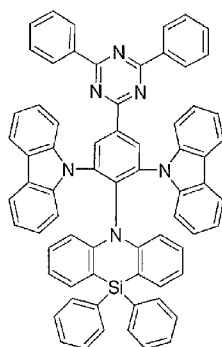
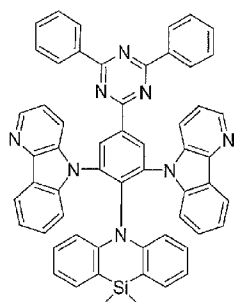
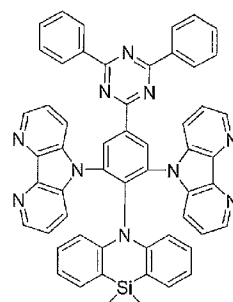
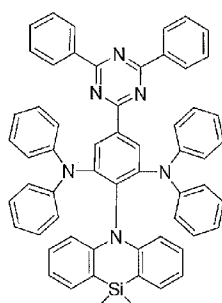
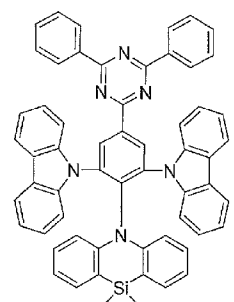
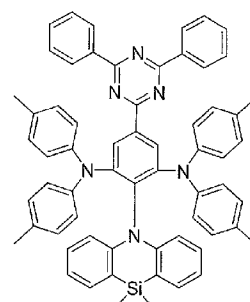
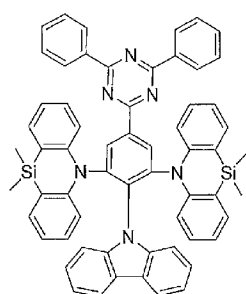
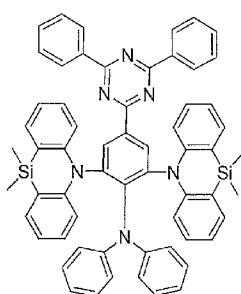
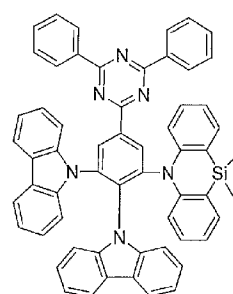
**T-475****T-476****T-477****T-478****T-479****T-480****T-481****T-482****T-483**

[化68]

**T-484****T-485****T-486****T-487****T-488****T-489****T-490****T-491****T-492**

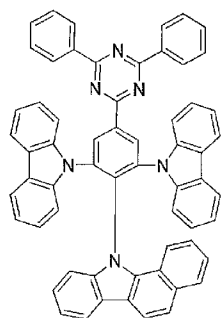
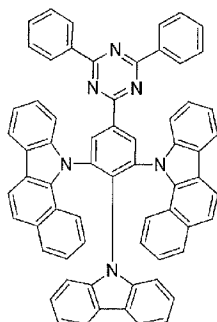
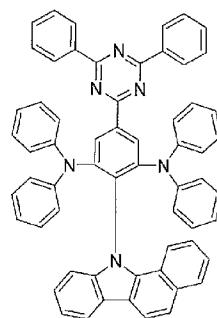
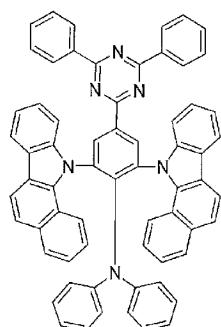
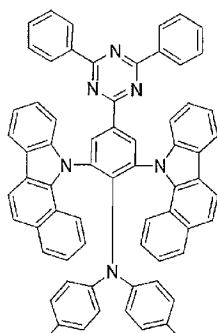
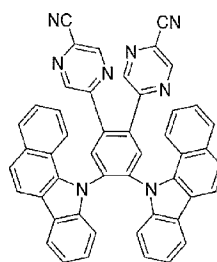
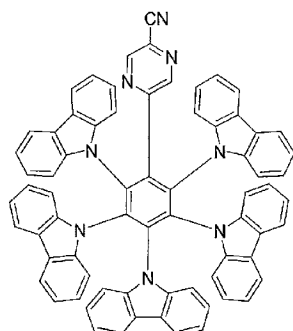
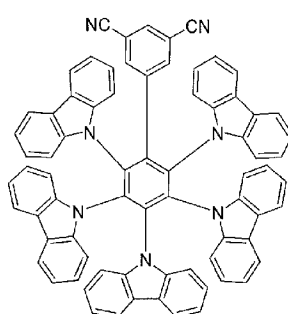
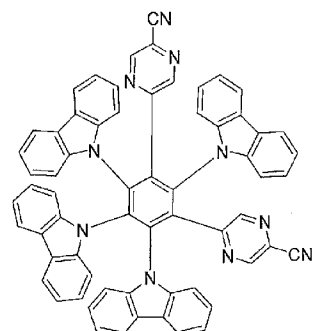
[0119]

[化69]

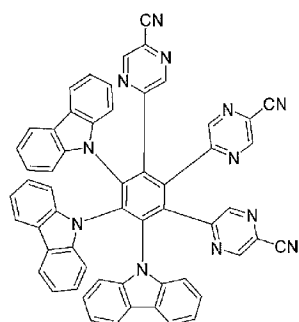
**T-493****T-494****T-495****T-496****T-497****T-498****T-499****T-500****T-501**

[0120]

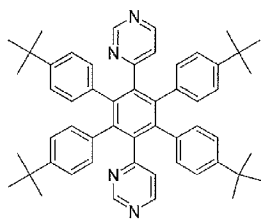
[化70]

**T-502****T-503****T-504****T-505****T-506****T-507****T-508****T-509****T-510**

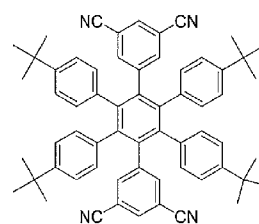
[化71]



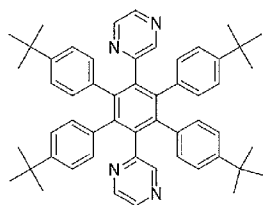
T-511



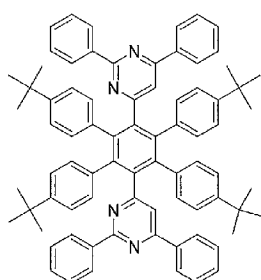
T-512



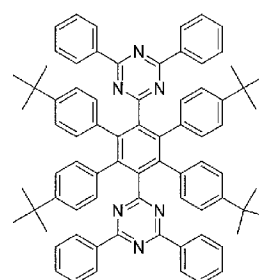
T-513



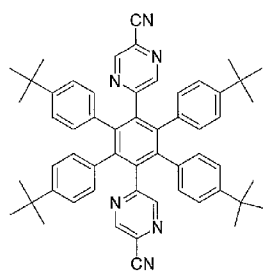
T-514



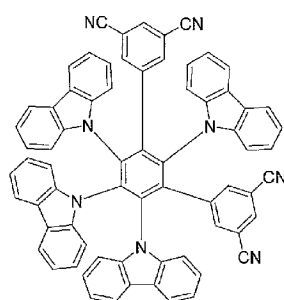
T-515



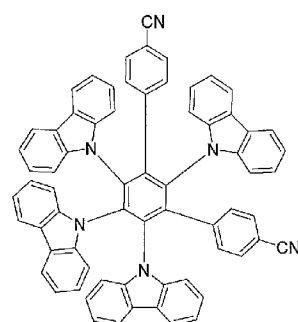
T-516



T-517



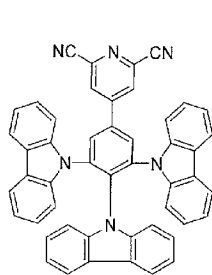
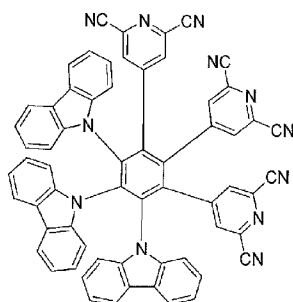
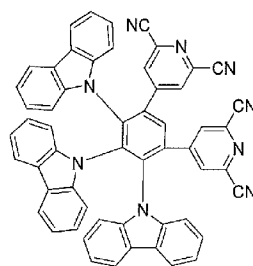
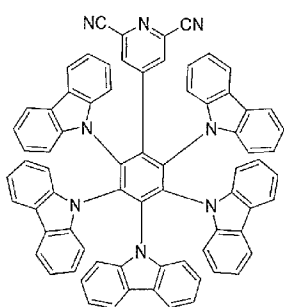
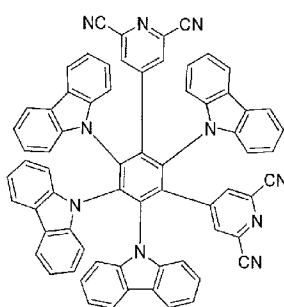
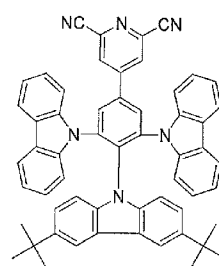
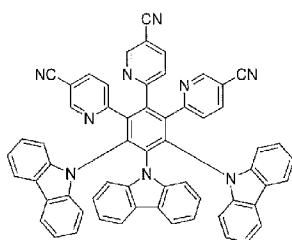
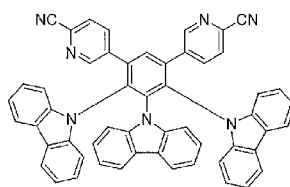
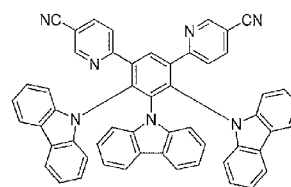
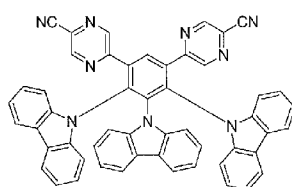
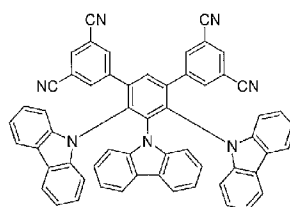
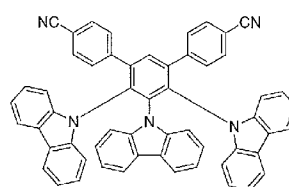
T-518



T-519

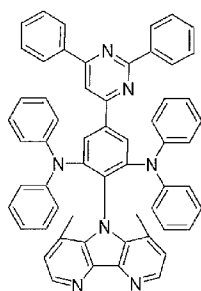
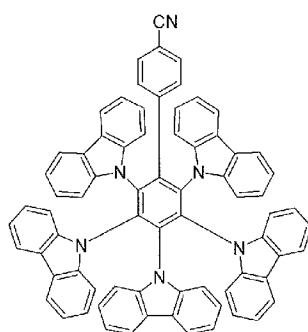
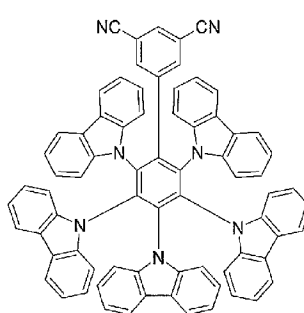
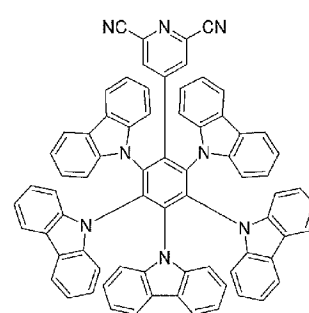
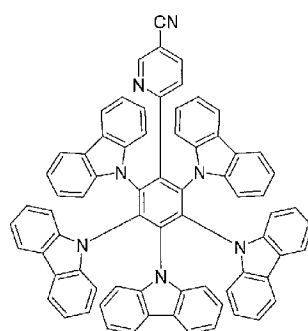
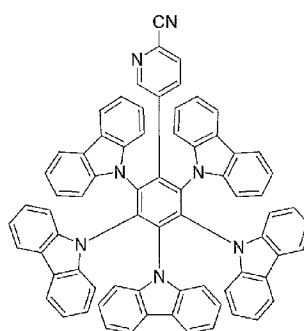
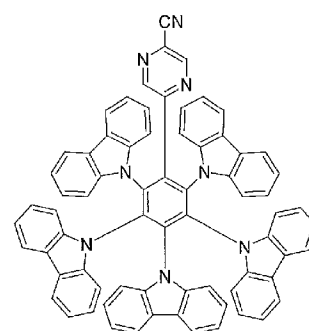
[0121]

[化72]

**T-520****T-521****T-522****T-523****T-524****T-525****T-526****T-527****T-528****T-529****T-530****T-531**

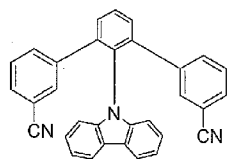
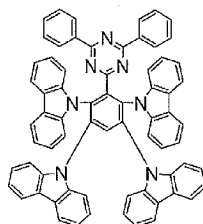
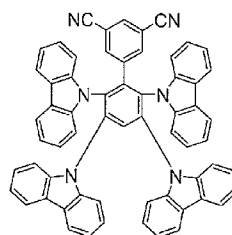
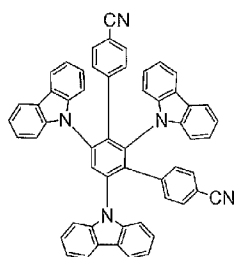
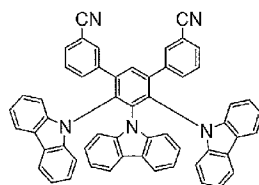
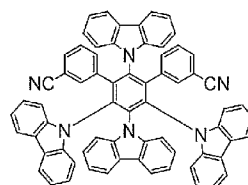
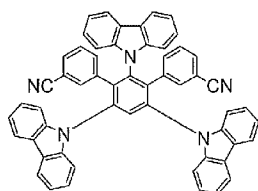
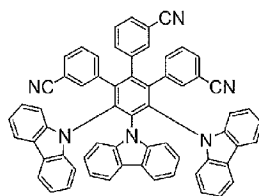
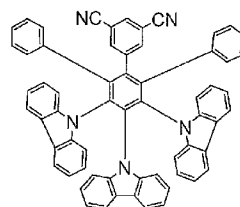
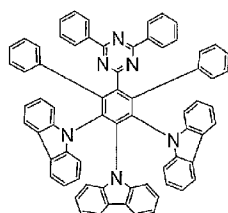
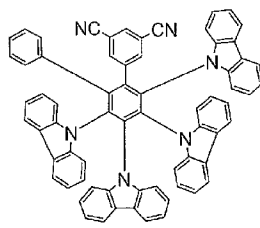
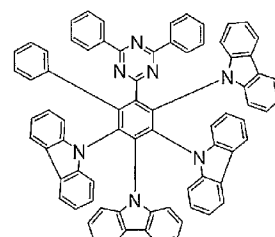
[0122]

[化73]

**T-532****T-533****T-534****T-535****T-536****T-537****T-538**

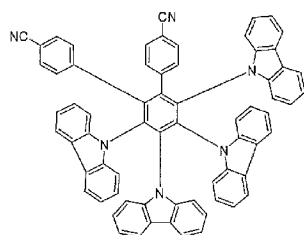
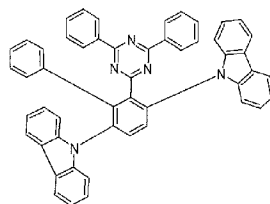
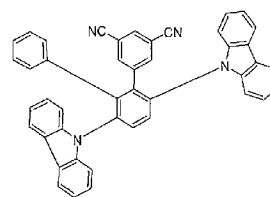
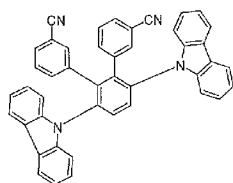
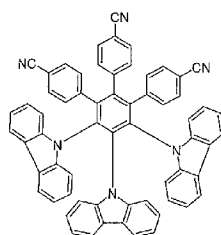
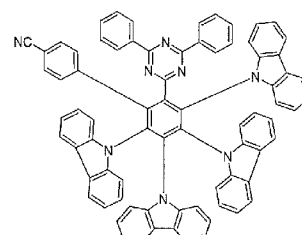
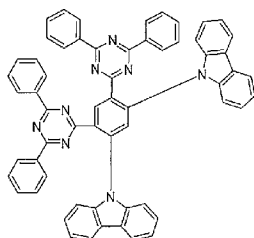
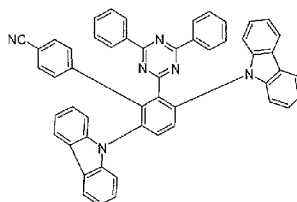
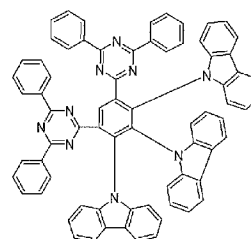
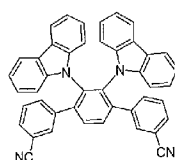
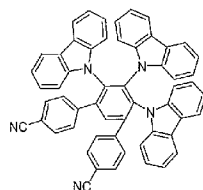
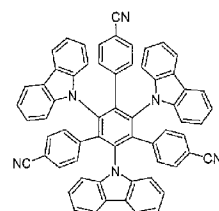
[0123]

[化74]

**T-539****T-540****T-541****T-542****T-543****T-544****T-545****T-546****T-547****T-548****T-549****T-550**

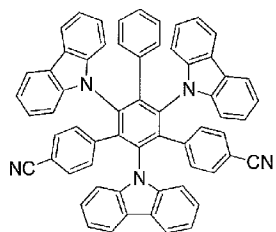
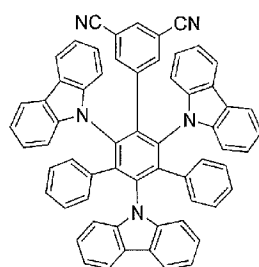
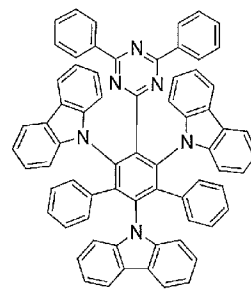
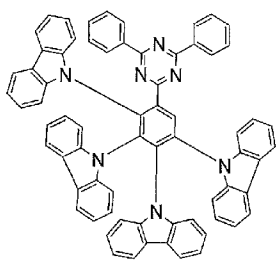
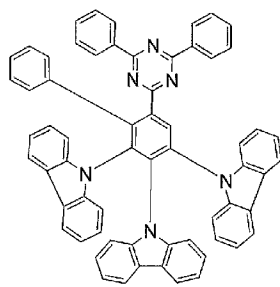
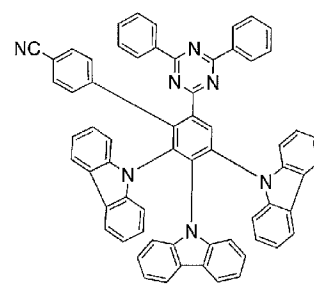
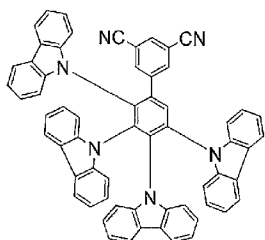
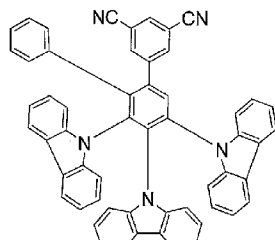
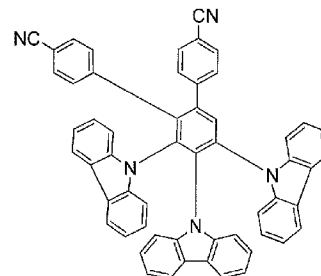
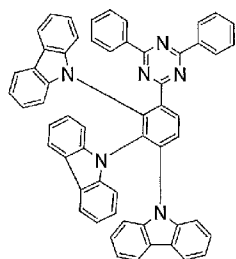
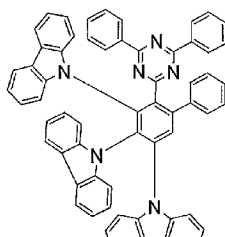
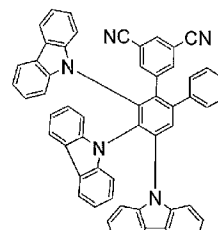
[0124]

[化75]

**T-551****T-552****T-553****T-554****T-555****T-556****T-557****T-558****T-559****T-560****T-561****T-562**

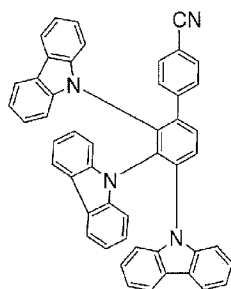
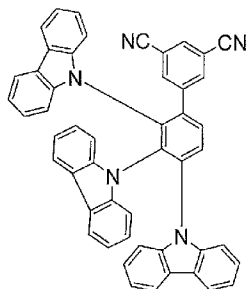
[0125]

[化76]

**T-563****T-564****T-565****T-566****T-567****T-568****T-569****T-570****T-571****T-572****T-573****T-574**

[0126]

[化77]

**T-575****T-576**

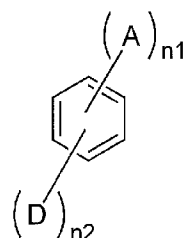
[0127] これらの化合物のうち ΔE_{ST} の絶対値が0.50 eV以下の材料については、TADF性（遅延蛍光性）を示す、つまり遅延蛍光を放射してもよい。ここで、遅延蛍光性を示すとは、蛍光減衰測定を行った時に、放射される蛍光の減衰速度の異なる成分が2種類以上あることをいう。なお、減衰が遅い成分は一般的には減衰時間がサブマイクロ秒以上であることが多いが、材料によって減衰時間が異なるため、減衰時間は限定されない。蛍光減衰測定は、一般的には以下のように行うことができる。 π 共役系化合物（発光性化合物）の溶液又は薄膜、又は π 共役系化合物と第二成分との共蒸着膜に、窒素雰囲気下で励起光を照射し、ある発光波長の光子数を計測する。そしてこのとき、放射される蛍光の減衰速度の異なる成分が2種類以上ある場合に、 π 共役系化合物が遅延蛍光性を示すものとする。

[0128] なお、これらの化合物は、バイポーラー性を有し、様々なエネルギー準位に対応できることから、発光ホストとしても使用できるのみならず、正孔輸送、電子輸送にも適した化合物として使用することができるため、発光層での使用に限定されず、上述の正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、中間層などに用いてもよい。

[0129] <特定の π 共役系化合物>

本発明の π 共役系化合物の中でも、有機EL素子の発光層に高濃度で存在しても高い発光効率を有する特定の π 共役系化合物として、下記一般式（201）で表される化合物が挙げられる。

[化78]



一般式 (201)

[0130] 一般式 (201) のAは、電子吸引性基であって、置換されていてもよい含窒素芳香族6員環基を表す。「置換されていてもよい含窒素芳香族6員環基」における含窒素芳香族6員環は、炭素原子数が3～13、好ましくは3～5の電子吸引性の含窒素芳香族6員環である。含窒素芳香族6員環は、単環化合物であってもよいし、縮合環化合物であってもよい。含窒素芳香族6員環が縮合環化合物である場合、その結合手は、縮合環を構成する環のうち、窒素原子を含む6員環から出ているものとする。

[0131] 含窒素芳香族6員環の例には、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キナゾリン環、シンノリン環、キノキサリン環、フタラジン環、プテリジン環、フェナントリジン環、フェナントロリン環が含まれる。中でも、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環が好ましい。含窒素芳香族6員環は、同一の又は異なる2以上の上記含窒素芳香族6員環を連結したものであってもよい。

[0132] 含窒素芳香族6員環基が有しうる置換基の例には、フッ素原子、シアノ基、フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいアリール基、及び置換されていてもよいヘテロアリール基が含まれる。含窒素芳香族6員環基が有しうる置換基の炭素原子数の上限値は、例えば30、好ましくは15でありうる。

[0133] 「フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基」におけるアルキル基は、直鎖、分岐又は環状のいずれであってもよく、例えば炭素原子数1～20の直鎖又は分岐のアルキル基、或いは炭素原子数5～20の環状のアルキル

基でありうる。アルキル基の例には、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、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、ネオペンチル基、*n*-ヘキシル基、シクロヘキシル基、2-エチルヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、2-ヘキシルオクチル基、*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、*n*-ノナデシル基、及び*n*-イコシル基等が含まれ；好ましくはメチル基、エチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、シクロヘキシル基、2-エチルヘキシル基及び2-ヘキシルオクチル基である。

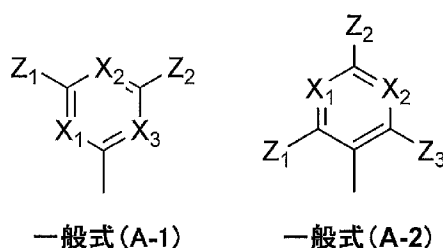
[0134] 「置換されていてもよいアリール基」におけるアリール基は、炭素原子数6～24の芳香族炭化水素環から誘導される基であることが好ましい。そのような芳香族炭化水素環の例には、ベンゼン環、インデン環、ナフタレン環、アズレン環、フルオレン環、フェナントレン環、アントラセン環、アセナフチレン環、ビフェニレン環、ナфтаセン環、ピレン環、ペンタレン環、アセアントリレン環、ヘプタレン環、トリフェニレン環、*a s*-インダセン環、クリセン環、*s*-インダセン環、プレイアデン環、フェナレン環、フルオランテン環、ペリレン環、アセフェナントリレン環、ビフェニル環、ターフェニル環、及びテトラフェニル環等が含まれる。中でも、ベンゼン環、ナフタレン環、フルオレン環、フェナントレン環、アントラセン環、ビフェニレン環、クリセン環、ピレン環、トリフェニレン環、クリセン環、フルオランテン環、ペリレン環、ビフェニル環、及びターフェニル環が好ましい。アリール基が有しうる置換基の例には、フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基、アルコキシ基、シアノ基、ヘテロアリール基、アリールオキシ基、フッ素原子、アルキルスルホニル基等が含まれる。

[0135] 「置換されていてもよいヘテロアリール基」におけるヘテロアリール基は、炭素原子数3～13、好ましくは3～5のヘテロアリール基であり、その例には、前述の含窒素芳香族6員環基として挙げた基やトリアゾール基等が

含まれる。ヘテロアリール基が有しうる置換基の例には、フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基、アルコキシ基、シアノ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールカルボニル基等が含まれる。

[0136] 置換されていてもよい含窒素芳香族6員環基は、一般式(A-1)又は(A-2)で表されることが好ましい。

[化79]



[0137] 一般式(A-1)又は(A-2)の $X_1 \sim X_3$ は、独立して $-CH$ 又は窒素原子であり、少なくとも一つは窒素原子を表す。良好な電子吸引性を得る観点では、 $X_1 \sim X_3$ の2以上が窒素原子であることが好ましい。

[0138] 一般式(A-1)又は(A-2)の $Z_1 \sim Z_3$ は、水素原子であるか、又は一般式(201)の含窒素芳香族6員環基が有しうる置換基と同義である。中でも、 $Z_1 \sim Z_3$ は、独立して水素原子、シアノ基、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基であることが好ましく、置換されていてもよいアリール基であることがより好ましい。 $Z_1 \sim Z_3$ は、互いに同じであっても異なってもよい。

[0139] 一般式(201)の n_1 は、1～3の整数を表す。 n_1 が2以上である場合、2以上のAは、互いに同じであっても異なってもよい。

[0140] 一般式(201)のDは、電子供与性基であって、「置換されていてもよいアミノ基」、「アルキル基」又は「電子供与性基で置換されたアリール基」を表す。

[0141] 「置換されていてもよいアミノ基」における置換基の例には、置換されていてもよいアリール基、及び置換されていてもよいヘテロアリール基が含まれる。「置換されていてもよいアミノ基」における置換基の炭素原子数の上

限値は、例えば30、好ましくは20でありうる。これらの置換基は、互いに結合して環を形成していてもよいし、環を形成していなくてもよいが、良好な電子供与性が得られやすい観点から、環を形成していることが好ましい。環は、5員環、6員環及び7員環のいずれであってもよく、5員環又は6員環であることが好ましい。環を構成する原子は、窒素原子以外のヘテロ原子（例えば酸素原子、硫黄原子又は珪素原子）をさらに含んでいてもよい。

[0142] 「アルキル基」は、前述の含窒素芳香族6員環基が有しうる置換基として挙げた「フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基」におけるアルキル基と同義である。

[0143] 「電子供与性基で置換されたアリール基」におけるアリール基は、前述の含窒素芳香族6員環基が有しうる置換基として挙げた「置換されていてもよいアリール基」におけるアリール基と同様である。当該アリール基が有しうる電子供与性基の例には、アルキル基、アルコキシ基、及び置換されていてもよいアミノ基が含まれ、好ましくは置換されていてもよいアミノ基である。

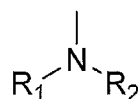
[0144] 電子供与性基としてのアルキル基及び置換されていてもよいアミノ基は、前述のアルキル基及び置換されていてもよいアミノ基とそれぞれ同義である。

[0145] 電子供与性基としてのアルコキシ基は、直鎖、分岐又は環状のいずれであってもよく、例えば炭素原子数1～20の直鎖又は分岐のアルコキシ基、或いは炭素原子数6～20の環状のアルコキシ基でありうる。アルコキシ基の例には、メトキシ基、エトキシ基、n-プロポキシ基、イソプロポキシ基、n-ブトキシ基、イソブトキシ基、t-ブトキシ基、n-ペンチルオキシ基、ネオペンチルオキシ基、n-ヘキシルオキシ基、シクロヘキシルオキシ基、n-ヘプチルオキシ基、n-オクチルオキシ基、2-エチルヘキシルオキシ基、ノニルオキシ基、デシルオキシ基、3,7-ジメチルオクチルオキシ基、n-ウンデシルオキシ基、n-ドデシルオキシ基、n-トリデシルオキシ基、n-テトラデシルオキシ基、2-n-ヘキシル-n-オクチルオキシ

基、*n*－ペンタデシルオキシ基、*n*－ヘキサデシルオキシ基、*n*－ヘプタデシルオキシ基、*n*－オクタデシルオキシ基、*n*－ノナデシルオキシ基、*n*－イコシルオキシ基等が含まれ、好ましくはメトキシ基、エトキシ基、イソプロポキシ基、*t*－ブトキシ基、シクロヘキシルオキシ基、2－エチルヘキシルオキシ基、2－ヘキシルオクチルオキシ基である。

[0146] 中でも、一般式(201)におけるDは、電子供与性が高いことから、置換されていてもよいアミノ基であることが好ましく、一般式(D-1)で表される基であることが好ましい。

[化80]



一般式(D-1)

[0147] 一般式(D-1)の R_1 及び R_2 は、それぞれ置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表す。

[0148] 置換されていてもよいアリール基は、前述の「電子供与性基で置換されたアリール基」と同義である。

[0149] 置換されていてもよいヘテロアリール基における「ヘテロアリール基」は、炭素原子数3～8のヘテロアリール基であり、その例には、ベンゾチエノ基、ベンゾフリル基、ピリジニル基等が含まれる。ヘテロアリール基が有する置換基の例には、アルキル基、置換されていてもよいアミノ基等が含まれる。

[0150] R_1 及び R_2 は、互いに結合して環を形成していてもよいし、環を形成してなくてもよいが、良好な電子供与性が得られやすい観点から、環を形成していることが好ましい。 R_1 及び R_2 が互いに結合して形成する環は、前述のDで表される「置換されていてもよいアミノ基」において、置換基が互いに結合して形成する環と同義である。

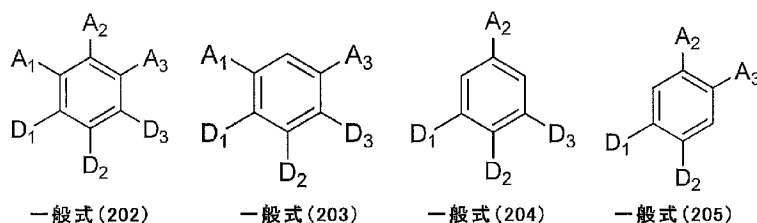
[0151] 一般式(D-1)で表される基の例には、ジフェニルアミノ基、ジピリジ

ルアミノ基、インドール環、カルバゾール環、インドロインドール環、9,10-ジヒドロアクリジン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、インドロカルバゾール環、ベンゾフリルカルバゾール環、ベンゾチエノカルバゾール環、ベンゾカルバゾール環、ジベンゾカルバゾール環、アザカルバゾール環、及びジアザカルバゾール環、ベンゾフリルインドール環、ベンゾチエノインドール環から誘導される基が含まれる。

[0152] 一般式(201)の n_2 は、2又は3を表す。但し、少なくとも2つのDは、互いにオルト位に配置されている。それにより、ベンゼン環に置換する複数の電子供与性基Dが空間的に近接するため、励起状態で電子供与性部が帯びる正電荷を複数の電子供与性基が空間的に共鳴して安定化することができる。少なくとも2つのDは、互いに同じであっても異なってもよい。

[0153] 一般式(201)で表される π 共役系化合物は、下記一般式(202)～(205)のいずれかで表されることが好ましい。

[化81]



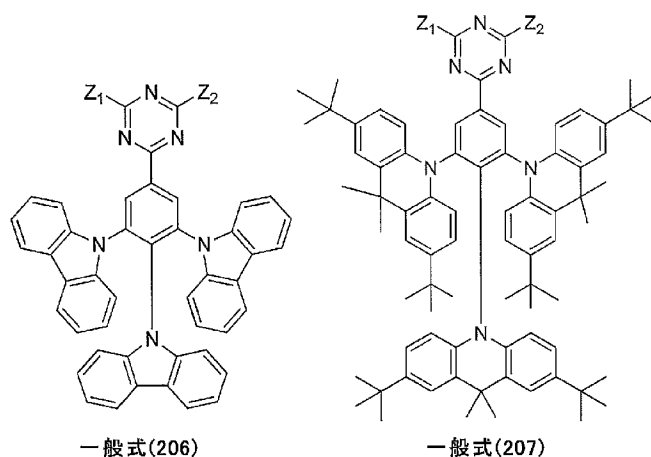
[0154] 一般式(202)～(205)の $A_1 \sim A_3$ は、それぞれ一般式(201)のAと同義であり、一般式(202)～(205)の $D_1 \sim D_3$ は、それぞれ一般式(201)のDと同義である。

[0155] $A_1 \sim A_3$ は、互いに同一であっても異なってもよい。一般式(202)、(203)及び(205)において、励起状態で共鳴安定化を図りやすい観点から、 $A_1 \sim A_3$ のうち2つ以上は同じであることが好ましい。 $D_1 \sim D_3$ は、互いに同一であっても異なってもよい。励起状態で共鳴安定化を図りやすい観点から、 $D_1 \sim D_3$ のうち2つ以上は同じであることが好ましい。

[0156] 中でも、HOMOとLUMOを分離局在させてTADF性を得られやすくする観点から、一般式(204)で表される化合物が好ましい。

[0157] 一般式(201)で表される π 共役系化合物は、下記一般式(206)～(208)のいずれかで表されることがより好ましい。

[化82]



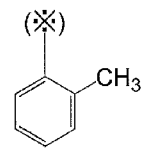
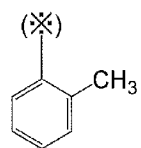
[0158] 一般式(206)及び(207)のZ₁及びZ₂は、それぞれ一般式(A-1)又は(A-2)のZ₁～Z₃とそれぞれ同義であり、好ましくは置換されていてもよいアリール基である。Z₁及びZ₂の組み合わせの例には、以下のものが含まれる。

[化83]

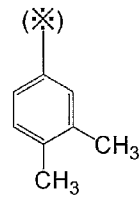
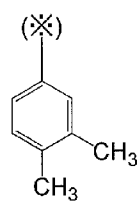
例示化合物番号

(※)-Z₁(※)-Z₂

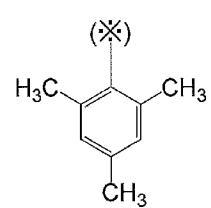
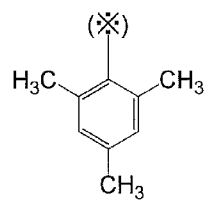
C-1



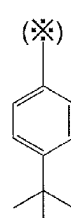
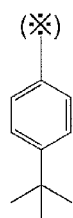
C-2



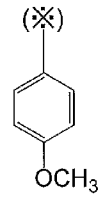
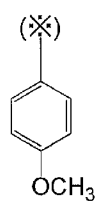
C-3



C-4



C-5

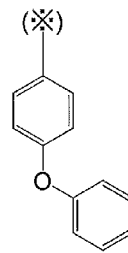
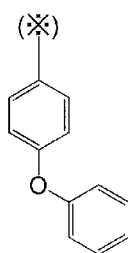


[化84]

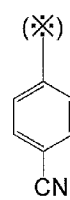
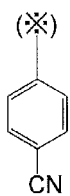
例示化合物番号

 $(*)-Z_1$ $(*)-Z_2$

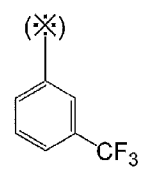
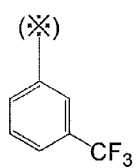
C-6



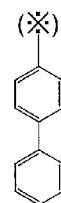
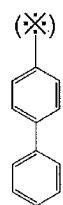
C-7



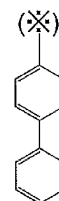
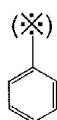
C-8



C-9



C-10

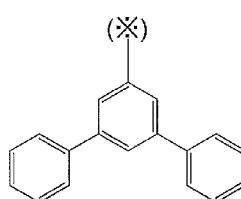
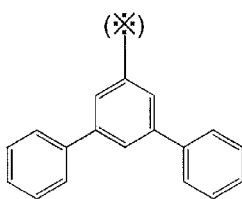


[化85]

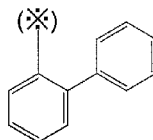
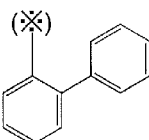
例示化合物番号

(※)-Z₁(※)-Z₂

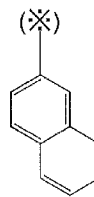
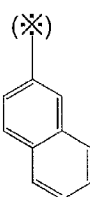
C-11



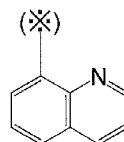
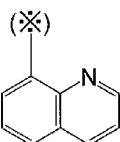
C-12



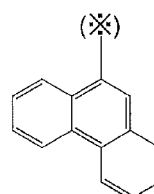
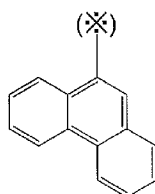
C-13



C-14



C-15

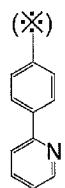
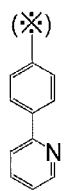


[化86]

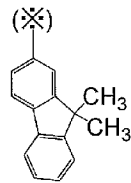
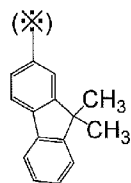
例示化合物番号

(※)-Z₁(※)-Z₂

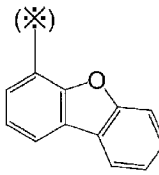
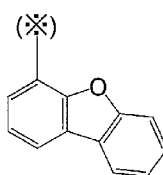
C-16



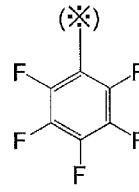
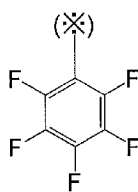
C-17



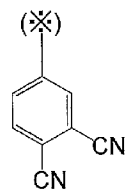
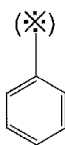
C-18



C-19



C-20

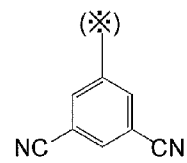
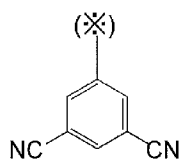


[化87]

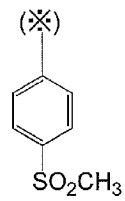
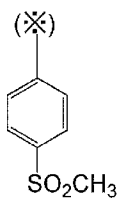
例示化合物番号

 $(*)-Z_1$ $(*)-Z_2$

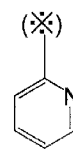
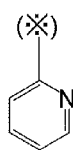
C-21



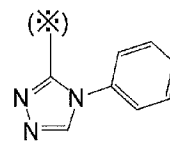
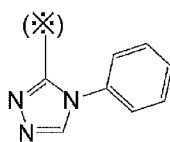
C-22



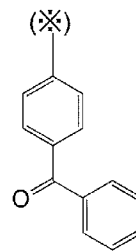
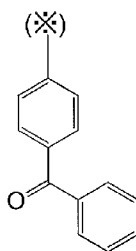
C-23



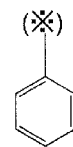
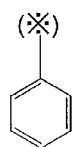
C-24



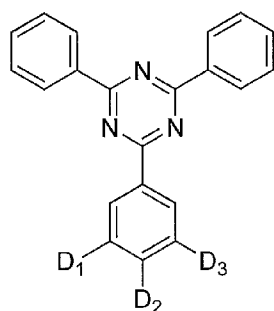
C-25



C-26



[化88]



一般式(208)

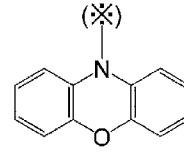
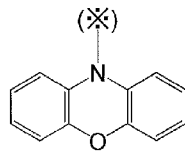
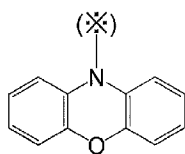
[0159] 一般式(208)の $D_1 \sim D_3$ は、置換されていてもよいアミノ基であることが好ましい。置換されていてもよいアミノ基は、一般式(201)のDで表される「置換されていてもよいアミノ基」と同義である。 $D_1 \sim D_3$ の組み合わせの例には、以下のものが含まれる。

[化89]

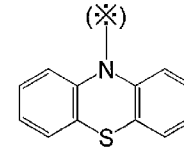
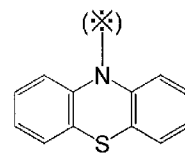
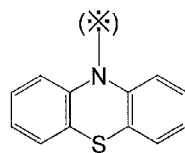
例示化合物番号

(※)-D₁(※)-D₂(※)-D₃

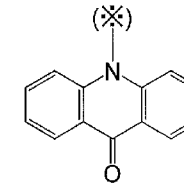
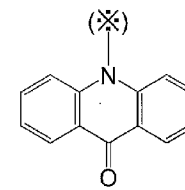
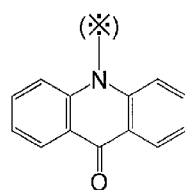
B-1



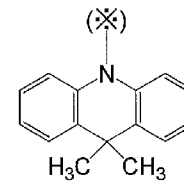
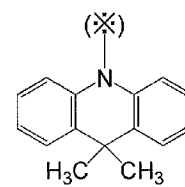
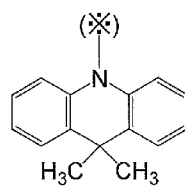
B-2



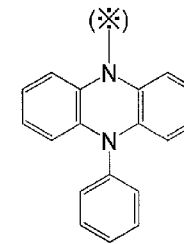
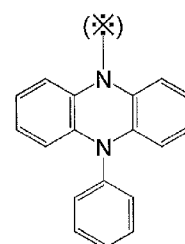
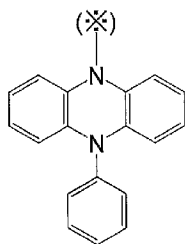
B-3



B-4



B-5

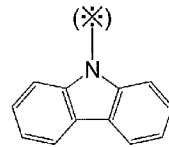
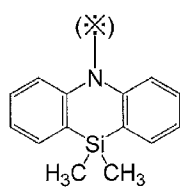
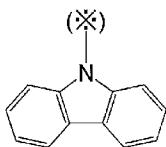


[化90]

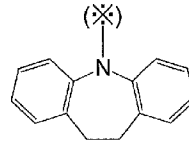
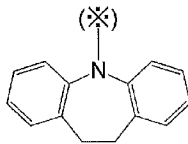
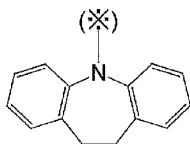
例示化合物番号

(※)-D₁(※)-D₂(※)-D₃

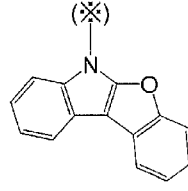
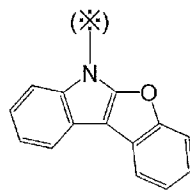
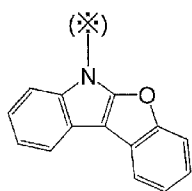
B-6



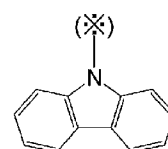
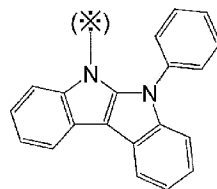
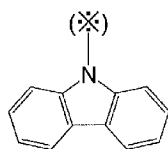
B-7



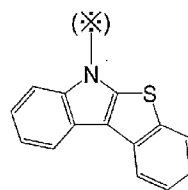
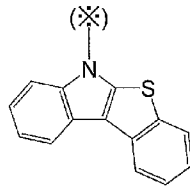
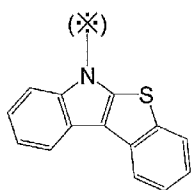
B-8



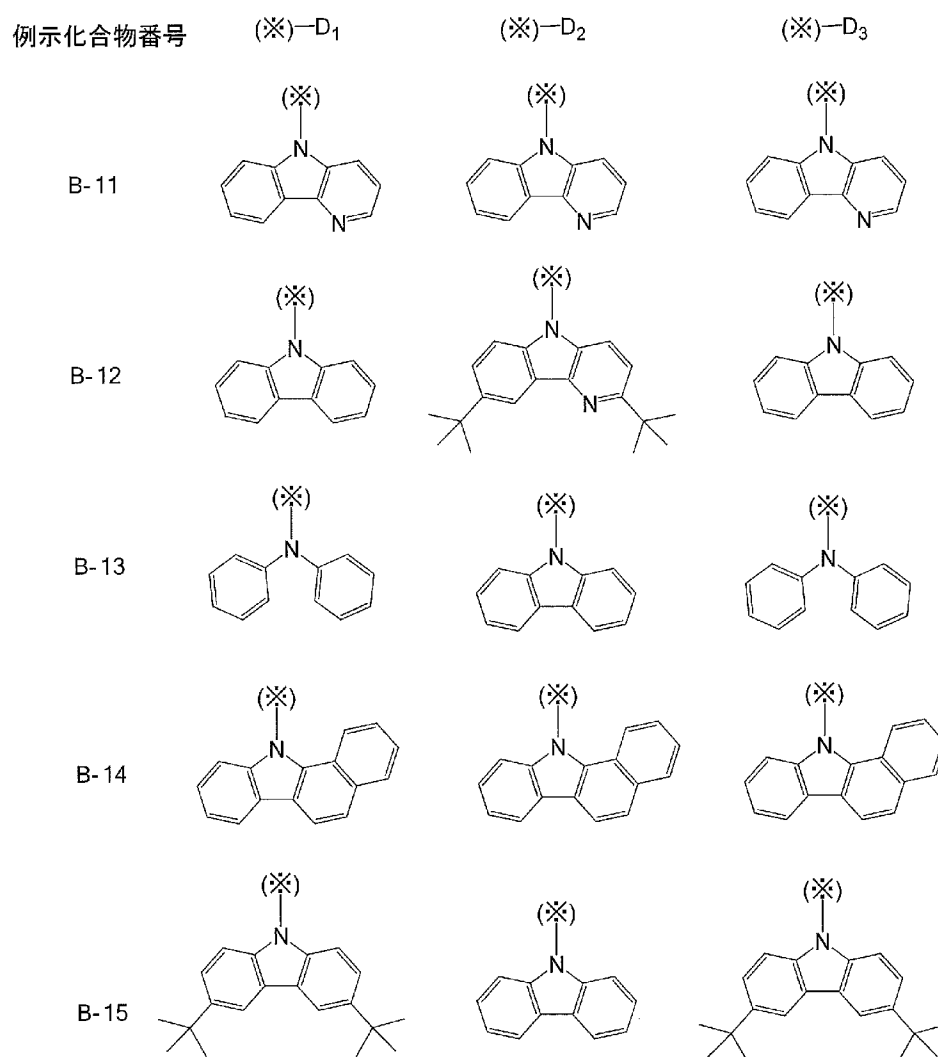
B-9



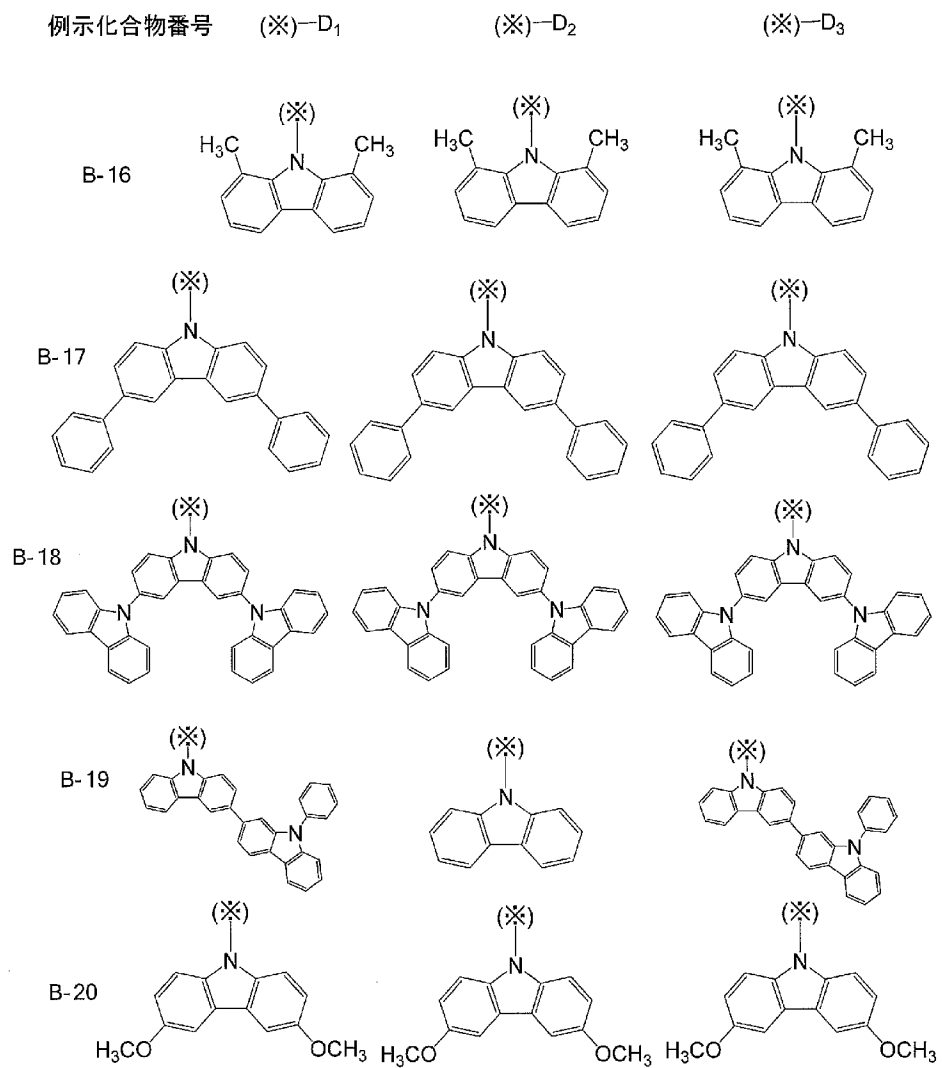
B-10



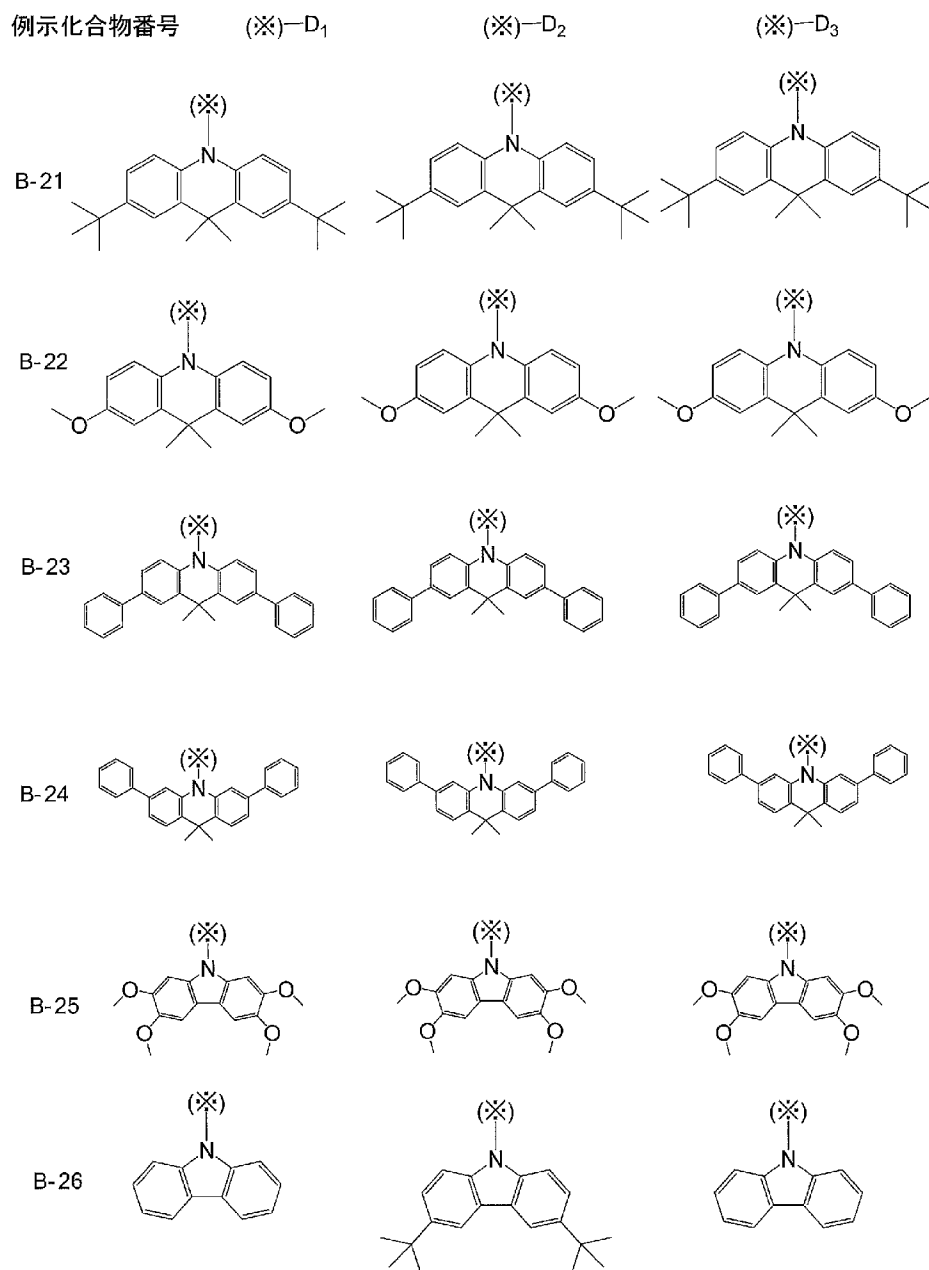
[化91]



[化92]

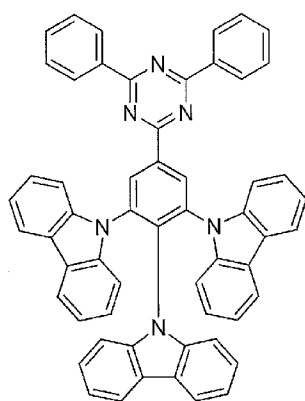


[化93]

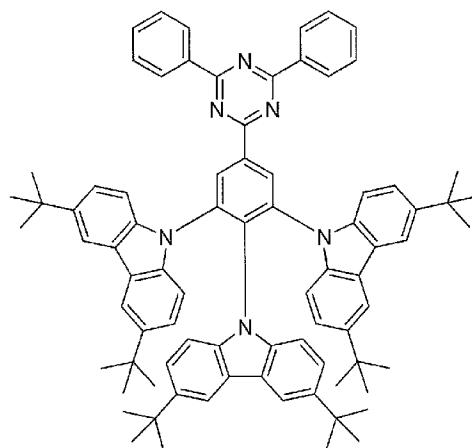


[0160] 一般式(201)で表される π 共役系化合物の例には、以下のものが含まれる。

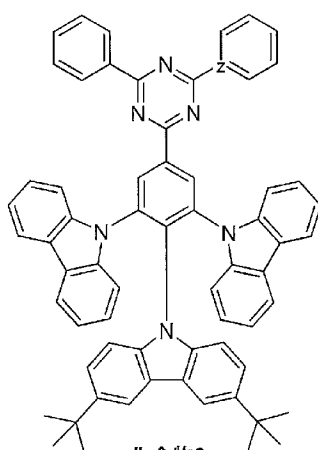
[化94]



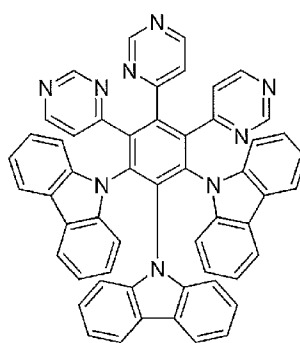
化合物1



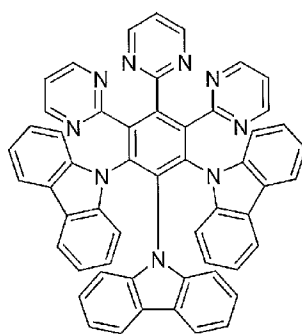
化合物2



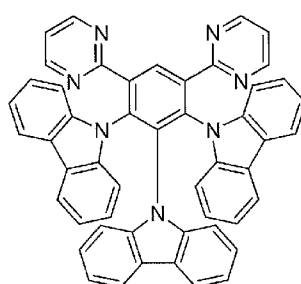
化合物3



化合物4

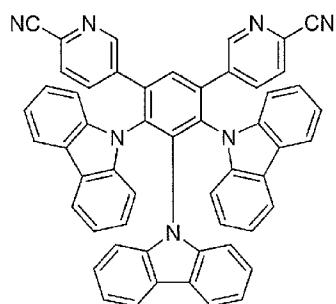


化合物5

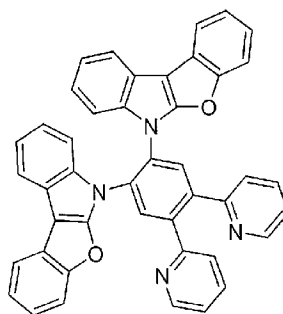


化合物6

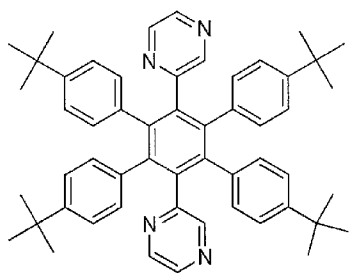
[化95]



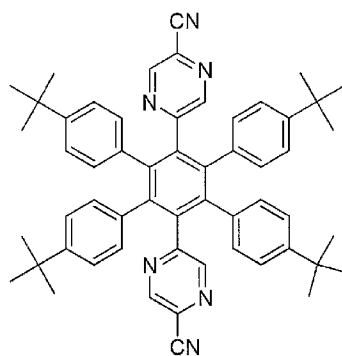
化合物7



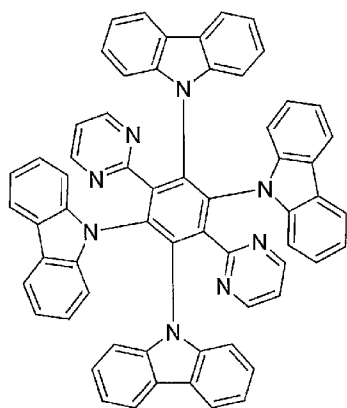
化合物8



化合物9



化合物10



化合物11

[0161] 一般式(201)で表される π 共役系化合物の、最低励起一重項準位と最低励起三重項準位とのエネルギー差の絶対値(ΔE_{ST})は、0.50 eV以下であることが好ましい。そのような π 共役系化合物は、良好なTADF性を示しうる。

[0162] 一般式(201)で表される π 共役系化合物は、有機エレクトロルミネッ

センス素子、前記素子材料、又は前記発光性薄膜に含有されることが好ましい。

[0163] 一般式(201)で表される π 共役系化合物は、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層に好ましく含まれる。即ち、発光層は、高発光性の観点から、実質的に一般式(201)で表される π 共役系化合物で構成されるか、又は実質的に一般式(201)で表される π 共役系化合物とゲスト化合物とで構成されることが好ましい。

[0164] 一般式(201)で表される π 共役系化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子も、照明装置及び表示装置に好適に具備され得る。

[0165] さらに、一般式(201)で表される π 共役系化合物は、バイポーラー性を有し、様々なエネルギー準位に対応できることから、ホスト化合物としても使用できるのみならず、正孔輸送、電子輸送にも適した化合物として使用することができるため、発光層での使用に限定されず、上述の正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、中間層などに用いてもよい。

[0166] <合成方法>

上記一般式(1)で表される π 共役系化合物(一般式(201)で表される化合物も含む)は、例えば、国際公開第2010/113755号、Organic Letters, 2002, 4, 1783-1785.、Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 2014-2017.に記載の方法、又は、これらの文献に記載の参照文献に記載の方法を参照することにより合成することができる。

[0167] 次に、本発明の技術思想と関連する、有機ELの発光方式及び発光材料について述べる。

[0168] <有機ELの発光方式>

有機ELの発光方式としては三重項励起状態から基底状態に戻る際に光を発する「リン光発光」と、一重項励起状態から基底状態に戻る際に光を発する「蛍光発光」の二通りがある。

有機ELのような電界で励起する場合には、三重項励起子が75%の確率で、一重項励起子が25%の確率で生成するため、リン光発光の方が蛍光発光に比べ発光効率を高くすることが可能で、低消費電力化を実現するには優れた方式である。

一方、蛍光発光においても、75%の確率で生成してしまう、通常では、励起子のエネルギーが、無輻射失活により、熱にしかならない三重項励起子を、高密度で存在させることによって、二つの三重項励起子から一つの一重項励起子を発生させて発光効率を向上させるTTA (Triplet-Triplet Annihilation、また、Triplet-Triplet Fusion:「TTF」と略記する。)機構を利用した方式が見つかっている。

[0169] さらに、近年では、安達らの発見により一重項励起状態と三重項励起状態のエネルギーギャップを小さくすることで、発光中のジュール熱及び／又は発光素子が置かれる環境温度によりエネルギー準位の低い三重項励起状態から一重項励起状態に逆項間交差がおり、結果としてほぼ100%に近い蛍光発光を可能とする現象（熱励起型遅延蛍光又は熱励起型遅延蛍光ともいう：「TADF」）とそれを可能にする蛍光物質が見いだされている（例えば、非特許文献1等参照。）。

[0170] <リン光発光性化合物>

前述のとおり、リン光発光は発光効率的には蛍光発光よりも理論的には3倍有利であるが、三重項励起状態から一重項基底状態へのエネルギー失活（＝リン光発光）は禁制遷移であり、また同様に一重項励起状態から三重項励起状態への項間交差も禁制遷移であるため、通常その速度定数は小さい。すなわち、遷移が起こりにくいため、励起子寿命はミリ秒から秒オーダーと長くなり、所望の発光を得ることが困難である。

ただし、イリジウムや白金などの重金属を用いた錯体が発光する場合には、中心金属の重原子効果によって、前記の禁制遷移の速度定数が3桁以上増大し、配位子の選択によっては、100%のリン光量子収率を得ることも可

能となる。

しかしながら、このような理想的な発光を得るためには、希少金属であるイリジウムやパラジウム、白金などのいわゆる白金属と呼ばれる貴金属を用いる必要があり、大量に使用されることになるとその埋蔵量や金属自体の値段が産業上大きな問題となってくる。

[0171] <蛍光発光性化合物>

一般的な蛍光発光性化合物は、リン光発光性化合物のような重金属錯体である必要性は特になく、炭素、酸素、窒素及び水素などの一般的な元素の組み合わせから構成される、いわゆる有機化合物が適用でき、さらに、リンや硫黄、ケイ素などその他の非金属元素を用いることも可能で、また、アルミニウムや亜鉛などの典型金属の錯体も活用できるなど、その多様性はほぼ無限と言える。

ただし、従来の蛍光化合物では前記のように励起子の25%しか発光に適用できないために、リン光発光のような高効率発光は望めない。

[0172] <遅延蛍光化合物>

[励起三重項－三重項消滅（TTA）遅延蛍光化合物]

蛍光発光性化合物の問題点を解決すべく登場したのが遅延蛍光を利用した発光方式である。三重項励起子同士の衝突を起源とするTTA方式は、下記のような一般式で記述できる。すなわち、従来、励起子のエネルギーが、無輻射失活により、熱にしか変換されなかった三重項励起子の一部が、発光に寄与しうる一重項励起子に逆項間交差できるメリットがあり、実際の有機EL素子においても従来の蛍光発光素子の約2倍の外部取り出し量子効率を得ることができている。

一般式： $T^* + T^* \rightarrow S^* + S$ （式中、 T^* は三重項励起子、 S^* は一重項励起子、 S は基底状態分子を表す。）

しかしながら、上式からもわかるように、二つの三重項励起子から発光に利用できる一重項励起子は一つしか生成しないため、この方式で100%の内部量子効率を得ることは原理上できない。

[0173] [熱活性型遅延蛍光 (TADF) 化合物]

もう一つの高効率蛍光発光である TADF 方式は、TTA の問題点を解決できる方式である。

蛍光発光性化合物は前記のごとく無限に分子設計できる利点を持っている。すなわち、分子設計された化合物の中で、特異的に三重項励起状態と一重項励起状態のエネルギー準位差が極めて近接する化合物が存在する。

このような化合物は、分子内に重原子を持っていないにもかかわらず、 ΔE_{ST} が小さいために通常では起こりえない三重項励起状態から一重項励起状態への逆項間交差が起こる。さらに、一重項励起状態から基底状態への失活 (= 蛍光発光) の速度定数が極めて大きいことから、三重項励起状態はそれ自体が基底状態に熱的に失活 (無輻射失活) するよりも、一重項励起状態経由で蛍光を発しながら基底状態に戻る方が速度論的に有利である。そのため、TADF では理論的には 100% の蛍光発光が可能となる。

[0174] < ΔE_{ST} に関する分子設計思想>

上記 ΔE_{ST} を小さくするための分子設計について説明する。

ΔE_{ST} を小さくするためには、原理上分子内の最高被占軌道 (Highest Occupied Molecular Orbital: HOMO) と最低空軌道 (Lowest Unoccupied Molecular Orbital: LUMO) の空間的な重なりを小さくすることが最も効果的である。

一般に分子の電子軌道において、HOMO は電子供与性部位に、LUMO は電子吸引性部位に分布することが知られており、分子内に電子供与性と電子吸引性の骨格を導入することによって、HOMO と LUMO が存在する位置を遠ざけることが可能である。

[0175] 例えば、「実用化ステージを迎えた有機光エレクトロニクス」応用物理第 82 巻、第 6 号、2013 年においては、シアノ基やトリアジンなどの電子吸引性の骨格と、カルバゾールやジフェニルアミノ基等の電子供与性の骨格とを導入することで、LUMO と HOMO とをそれぞれ局在化させている

。

また、化合物の基底状態と三重項励起状態との分子構造変化を小さくすることも効果的である。構造変化を小さくする方法としては、例えば、化合物を剛直にすることなどが効果的である。ここで述べる剛直とは、例えば、分子内の環と環との結合における自由回転を抑制することや、 π 共役面の大きい縮合環を導入するなど、分子内において自由に動ける部位が少ないことを意味する。特に、発光に関与する部位を剛直にすることによって、励起状態における構造変化を小さくすることが可能である。

[0176] <TADF化合物が抱える一般的な問題>

TADF化合物は、その発光機構及び分子構造の面から種々の問題を抱えている。以下に、一般的にTADF化合物が抱える問題の一部について記載する。

TADF化合物においては、 ΔE_{ST} を小さくするためにHOMOとLUMOの存在する部位をできるだけ離すことが必要であるが、このため、分子の電子状態はHOMO部位とLUMO部位が分離したドナー／アクセプター型の分子内CT（分子内電荷移動状態）に近い状態となってしまう。

[0177] このような分子は、複数存在すると一方の分子のドナー部分と他方の分子のアクセプター部分とを近接させると安定化が図られる。そのような安定化状態は2分子間での形成に限らず、3分子間若しくは5分子間など、複数の分子間でも形成が可能であり、結果、広い分布を持った種々の安定化状態が存在することになり、吸収スペクトル及び発光スペクトルの形状はブロードとなる。また、2分子を超える多分子集合体を形成しない場合であっても、二つの分子の相互作用する方向や角度などの違いによって様々な存在状態を取り得るため、基本的にはやはり吸収スペクトル及び発光スペクトルの形状はブロードになる。

[0178] 発光スペクトルがブロードになることは二つの大きな問題を発生する。一つは、発光色の色純度が低くなってしまう問題である。照明用途に適用する場合にはそれほど大きな問題にはならないが、電子ディスプレイ用途に用い

る場合には色再現域が小さくなり、また、純色の色再現性が低くなることから、実際に商品として適用するのは困難になる。

[0179] もう一つの問題は、発光スペクトルの短波長側の立ち上がり波長（「蛍光 0-0 バンド」と呼ぶ。）が短波長化、すなわち高 S_1 化（最低励起一重項エネルギー準位の高エネルギー化）してしまうことである。

当然、蛍光 0-0 バンドが短波長化すると、 S_1 よりもエネルギーの低い T_1 に由来するリン光 0-0 バンドも短波長化（ T_1 準位の上昇）してしまう。そのため、ホスト化合物に用いる化合物はドーパントからの逆エネルギー移動を起こさないようにするために、高い S_1 準位かつ高い T_1 準位を有する必要がある。生じてくる。

これは非常に大きな問題である。基本的に有機化合物からなるホスト化合物は、有機 EL 素子中で、カチオンラジカル状態、アニオンラジカル状態及び励起状態という、複数の活性かつ不安定な化学種の状態を取るが、それら化学種は分子内の π 共役系を拡大することで比較的安定に存在させることができる。

[0180] しかしながら、高い S_1 準位かつ高い T_1 準位を分子に付与するには、分子内の π 共役系を縮小するか若しくは断ち切ることが必要となり、安定性と両立させることが困難になって、結果的には発光素子の寿命を短くしてしまうことになる。

また、重金属を含まない TADF 化合物においては、三重項励起状態から基底状態に失活する遷移は禁制遷移であるため、三重項励起状態での存在時間（励起子寿命）は数百 μ 秒からミリ秒オーダーと極めて長い。そのため、仮にホスト化合物の T_1 エネルギー準位が蛍光発光性化合物のそれよりも高いエネルギーレベルであったとしても、その存在時間の長さから蛍光発光性化合物の三重項励起状態からホスト化合物へと逆エネルギー移動を起こす確率が増大してしまう。その結果、本来意図する TADF 化合物の三重項励起状態から一重項励起状態への逆項間交差が十分に起こらずに、ホスト化合物への好ましくない逆エネルギー移動が主流となって、十分な発光効率が得られ

ないという不具合が生じてしまう。

[0181] 上記のような問題を解決するためには、TADF化合物の発光スペクトル形状をシャープ化し、発光極大波長と発光スペクトルの立ち上がり波長の差を小さくすることが必要となる。そのためには、基本的には一重項励起状態及び三重項励起状態の分子構造の変化を小さくすることにより達成することが可能である。

また、ホスト化合物への逆エネルギー移動を抑制するためには、TADF化合物の三重項励起状態の存在時間（励起子寿命）を短くすることが効果的である。それを実現するには、基底状態と三重項励起状態との分子構造変化を小さくすること及び禁制遷移をほどくのに好適な置換基や元素を導入することなどの対策を講じることで、問題点を解決することが可能である。

[0182] 本発明の π 共役系化合物（一般式（1）で表される化合物）では、ベンゼン環と、それに置換する電子吸引性基Aと、電子供与性基Dとを有し、ベンゼン環に置換するオルト位の組み合わせの少なくとも一つを、「電子供与性基Dと電子供与性基D」、「電子吸引性基Aと電子吸引性基A」、「電子吸引性基Aと電子供与性基D」のいずれかにする。

[0183] 2以上の電子供与性基（又は2以上の電子吸引性基A）が、ベンゼン環のオルト位で置換している；即ち、「空間上で隣接」しているので、励起状態で電子供与性部が帯びる正電荷（又は電子吸引性部が帯びる負電荷）を複数の電子供与性基（又は電子吸引性基）が空間的に共鳴して安定化することができるため、励起状態が安定化して無輻射失活が抑制され、発光効率を高めることができると考えられる。

[0184] 電子吸引性基Aと電子供与性基Dをベンゼン環のオルト位に配置することで、電子供与性基Dと電子吸引性基Aとが「空間的に隣接」する。それにより、CT性の励起状態を電子供与性基Dから電子吸引性基Aへ結合を介して形成するのではなく、ごく近傍に位置する電子供与性基Dと電子吸引性基Aの間でCT性の励起状態を形成でき、CT性の励起状態が安定化するため、発光効率が高まると考えられる。

[0185] さらに、いずれの態様においても、電子吸引性基Aや電子供与性基DがスループONDでの連結ではなく、スルースペースで相互作用していることから、吸収スペクトルや発光スペクトルの長波長化も抑制できると考えられる。

[0186] また特に、ベンゼン環と、それに置換する電子吸引性基(A)と複数の電子供与性基(D)とを含む上述の特定の π 共役系化合物(一般式(201))で表される化合物)では、ベンゼン環に置換する複数の電子供与性基(D)の置換位置をオルト位とすることで、分子間での相互作用が起こりにくくなり、無輻射失活が抑制され、発光効率を高めることができる。このように、特定の π 共役系化合物は、発光層中に単独で存在しても高い発光効率を有することから、従来必要とされていたホスト化合物が不要となる。

[0187] また、当該特定の π 共役系化合物では、ベンゼン環に置換する電子吸引性基(A)を「含窒素芳香族6員環」とすることで、高い電子輸送性を得ることができる。

[0188] さらに、一般式(201)で表される特定の π 共役系化合物では、複数の電子供与性基(D)が近接して存在するので、分子鎖を介した相互作用ではなく、空間を介した相互作用が生じやすい。それにより、吸収スペクトルや発光スペクトルの長波長化も抑制できると考えられる。

[0189] 以下に、本発明に係る π 共役系化合物に関する種々の測定方法について記載する。

[0190] [電子密度分布]

本発明に係る π 共役系化合物は、 ΔE_{ST} を小さくするという観点から、分子内においてHOMOとLUMOが実質的に分離していることが好ましい。これらHOMO及びLUMOの分布状態については、分子軌道計算により得られる構造最適化した際の電子密度分布から求めることができる。

本発明における π 共役系化合物の分子軌道計算による構造最適化及び電子密度分布の算出は、計算手法として、汎関数としてB3LYP、基底関数として6-31G(d)を用いた分子軌道計算用ソフトウェアを用いて算出することができ、ソフトウェアに特に限定はなく、いずれを用いても同様に求

めることができる。

本発明においては、分子軌道計算用ソフトウェアとして、米国 Gaussian 社製の Gaussian09 (Revision C.01, M. J. Frisch, et al, Gaussian, Inc., 2010.) を用いた。

[0191] また、「HOMOとLUMOが実質的に分離している」とは、上記分子計算により算出されたHOMO軌道分布及びLUMO軌道分布の中心部位が離れており、より好ましくはHOMO軌道の分布とLUMO軌道の分布がほぼ重なっていないことを意味する。

また、HOMOとLUMOの分離状態については、前述の汎関数としてB3LYP、基底関数として6-31G(d)を用いた構造最適化計算から、さらに時間依存密度汎関数法 (Time-Dependent DFT) による励起状態計算を実施して S_1 、 T_1 のエネルギー準位 (それぞれ $E(S_1)$ 、 $E(T_1)$) を求めて $\Delta E_{ST} = |E(S_1) - E(T_1)|$ として算出することも可能である。算出された ΔE_{ST} が小さいほど、HOMOとLUMOがより分離していることを示す。本発明においては、前述と同様の計算手法を用いて算出された ΔE_{ST} が0.50 eV以下であることが好ましく、より好ましくは0.30 eV以下であり、さらに好ましくは0.10 eV以下である。

[0192] [最低励起一重項エネルギー準位 S_1]

本発明における π 共役系化合物の最低励起一重項エネルギー準位 S_1 については、本発明においても通常の手法と同様にして算出されるもので定義される。すなわち、測定対象となる化合物を石英基板上に蒸着して試料を作製し、常温 (300 K) でこの試料の吸収スペクトル (縦軸: 吸光度、横軸: 波長とする。) を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値に基づいて、所定の換算式から算出される。

ただし、本発明において使用する π 共役系化合物の分子自体の凝集性が比

較的高い場合、薄膜の測定においては凝集による誤差を生じる可能性がある。本発明における π 共役系化合物はストークスシフトが比較的小さいこと、さらに励起状態と基底状態の構造変化が小さいことを考慮し、本発明における最低励起一重項エネルギー準位 S_1 は、室温（25℃）における π 共役系化合物の溶液状態の最大発光波長のピーク値を近似値として用いた。

ここで、使用する溶媒は、 π 共役系化合物の凝集状態に影響を与えない、すなわち溶媒効果の影響が小さい溶媒、例えばシクロヘキサンやトルエン等の非極性溶媒等を用いることができる。

[0193] [最低励起三重項エネルギー準位 T_1]

本発明で用いられる π 共役系化合物の最低励起三重項エネルギー準位（ T_1 ）については、溶液若しくは薄膜のフォトルミネッセンス（PL）特性により算出した。例えば、薄膜における算出方法としては、希薄状態の π 共役系化合物の分散物を薄膜にした後に、ストリークカメラを用い、過渡PL特性を測定することで、蛍光成分とリン光成分の分離を行い、そのエネルギー差の絶対値を ΔE_{ST} として最低励起一重項エネルギー準位から最低励起三重項エネルギー準位を求めることができる。

測定・評価にあたって、絶対PL量子収率の測定については、絶対PL量子収率測定装置C9920-02（浜松ホトニクス社製）を用いた。発光寿命は、ストリークカメラC4334（浜松ホトニクス社製）を用いて、サンプルをレーザー光で励起させながら測定した。

[0194] 《有機EL素子の構成層》

本発明の有機EL素子は、陽極と陰極の間に少なくとも発光層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該発光層の少なくとも1層が、前記一般式（1）で表される構造を有する π 共役系化合物を含有することを特徴とする。

本発明の有機EL素子における代表的な素子構成としては、以下の構成を挙げることができるが、これらに限定されるものではない。

（1）陽極／発光層／陰極

- (2) 陽極／発光層／電子輸送層／陰極
- (3) 陽極／正孔輸送層／発光層／陰極
- (4) 陽極／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／陰極
- (5) 陽極／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極
- (6) 陽極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／陰極
- (7) 陽極／正孔注入層／正孔輸送層／（電子阻止層／）発光層／（正孔阻止層／）電子輸送層／電子注入層／陰極

上記の中で（7）の構成が好ましく用いられるが、これに限定されるものではない。

本発明に用いられる発光層は、単層又は複数層で構成されており、発光層が複数の場合は各発光層の間に非発光性の中間層を設けてもよい。

[0195] 必要に応じて、発光層と陰極との間に正孔阻止層（正孔障壁層ともいう）や電子注入層（陰極バッファ層ともいう）を設けてもよく、また、発光層と陽極との間に電子阻止層（電子障壁層ともいう）や正孔注入層（陽極バッファ層ともいう）を設けてもよい。

本発明に用いられる電子輸送層とは、電子を輸送する機能を有する層であり、広い意味で電子注入層、正孔阻止層も電子輸送層に含まれる。また、複数層で構成されていてもよい。

本発明に用いられる正孔輸送層とは、正孔を輸送する機能を有する層であり、広い意味で正孔注入層、電子阻止層も正孔輸送層に含まれる。また、複数層で構成されていてもよい。

[0196] （タンデム構造）

また、本発明の有機EL素子は、少なくとも1層の発光層を含む発光ユニットを複数積層した、いわゆるタンデム構造の素子であってもよい。

タンデム構造の代表的な素子構成としては、例えば以下の構成を挙げることができる。

陽極／第1発光ユニット／中間層／第2発光ユニット／中間層／第3発光ユニット／陰極

ここで、上記第1発光ユニット、第2発光ユニット及び第3発光ユニットは全て同じであっても、異なってもよい。また二つの発光ユニットが同じであり、残る一つが異なってもよい。

複数の発光ユニットは直接積層されていても、中間層を介して積層されていてもよく、中間層は、一般的に中間電極、中間導電層、電荷発生層、電子引抜層、接続層、中間絶縁層とも呼ばれ、陽極側の隣接層に電子を、陰極側の隣接層に正孔を供給する機能を持った層であれば、公知の材料構成を用いることができる。

[0197] 中間層に用いられる材料としては、例えば、ITO（インジウムスズ酸化物）、IZO（インジウム・亜鉛酸化物）、 ZnO_2 、TiN、ZrN、HfN、 TiO_x 、 VO_x 、CuI、InN、GaN、 $CuAlO_2$ 、 $CuGaO_2$ 、 $SrCu_2O_2$ 、 LaB_6 、 RuO_2 、Al等の導電性無機化合物層や、Au/Bi₂O₃等の2層膜や、 $SnO_2/Ag/SnO_2$ 、 $ZnO/Ag/ZnO$ 、 $Bi_2O_3/Au/Bi_2O_3$ 、 $TiO_2/TiN/TiO_2$ 、 $TiO_2/ZrN/TiO_2$ 等の多層膜、またC₆₀等のフラーレン類、オリゴチオフェン等の導電性有機物層、金属フタロシアニン類、無金属フタロシアニン類、金属ポルフィリン類、無金属ポルフィリン類等の導電性有機化合物層等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

発光ユニット内の好ましい構成としては、例えば、上記の代表的な素子構成で挙げた(1)～(7)の構成から、陽極と陰極を除いたもの等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

[0198] タンデム型有機EL素子の具体例としては、例えば、米国特許第6337492号明細書、米国特許第7420203号明細書、米国特許第7473923号明細書、米国特許第6872472号明細書、米国特許第6107734号明細書、米国特許第6337492号明細書、国際公開第2005/009087号、特開2006-228712号公報、特開2006-24791号公報、特開2006-49393号公報、特開2006-49394号公報、特開2006-49396号公報、特開2011-96679

号公報、特開2005-340187号公報、特許第4711424号公報、特許第3496681号公報、特許第3884564号公報、特許第4213169号公報、特開2010-192719号公報、特開2009-076929号公報、特開2008-078414号公報、特開2007-059848号公報、特開2003-272860号公報、特開2003-045676号公報、国際公開第2005/094130号等に記載の素子構成や構成材料等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

[0199] 以下、本発明の有機EL素子を構成する各層について説明する。

[0200] 《発光層》

本発明に用いられる発光層は、電極又は隣接層から注入されてくる電子及び正孔が再結合し、励起子を経由して発光する場を提供する層であり、発光する部分は発光層の層内であっても、発光層と隣接層との界面であってもよい。本発明に用いられる発光層は、本発明で規定する要件を満たしていれば、その構成に特に制限はない。

発光層の層厚の総和は、特に制限はないが、形成する膜の均質性や、発光時に不必要な高電圧を印加するのを防止し、かつ、駆動電流に対する発光色の安定性向上の観点から、2 nm～5 μ mの範囲に調整することが好ましく、より好ましくは2～500 nmの範囲に調整され、更に好ましくは5～200 nmの範囲に調整される。

また、本発明に用いられる個々の発光層の層厚としては、2 nm～1 μ mの範囲に調整することが好ましく、より好ましくは2～200 nmの範囲に調整され、更に好ましくは3～150 nmの範囲に調整される。

本発明に用いられる発光層は一層でもよいし、複数の層から構成されてもよい。本発明に係る π 共役系化合物を発光層に用いる場合、単独で用いてもよいし、後述のホスト材料、蛍光発光材料、リン光発光材料などと混合して用いてもよい。例えば、発光層の少なくとも一層を、発光ドーパント（発光性化合物、発光性ドーパント、単にドーパントともいう。）を含有し、さらにホスト化合物（マトリックス材料、発光ホスト化合物、単にホストともい

う。)を含有する層とすることができる。発光層の少なくとも一層が、本発明に係る π 共役系化合物と、ホスト化合物とを含有すると、発光効率が向上するため好ましい。また、発光層の少なくとも一層が、本発明に係る π 共役系化合物と、蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物のうち少なくとも1種類とを含有すると、発光効率が向上するため好ましい。発光層の少なくとも一層が、本発明に係る π 共役系化合物と、蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物のうち少なくとも1種類と、ホスト化合物とを含有すると、発光効率が向上するため好ましい。

[0201] (1) 発光ドーパント

発光ドーパントとしては、蛍光発光性ドーパント（蛍光発光性化合物、蛍光ドーパントともいう。）と、リン光発光性ドーパント（リン光発光性化合物、リン光ドーパントともいう。）が好ましく用いられる。本発明においては、発光層が、本発明に係る π 共役系化合物を蛍光発光性化合物又はアシストドーパントとして、0.1～50質量%の範囲内で含有し、特に、1～30質量%の範囲内で含有することが好ましい。

[0202] 本発明においては、発光層が発光性化合物を0.1～50質量%の範囲内で含有し、特に、1～30質量%の範囲内で含有することが好ましい。

発光層中の発光性化合物の濃度については、使用される特定の発光性化合物及びデバイスの必要条件に基づいて、任意に決定することができ、発光層の層厚方向に対し、均一な濃度で含有されていてもよく、また任意の濃度分布を有していてもよい。

また、本発明で用いられる発光性化合物は、複数種を併用して用いてもよく、構造の異なる蛍光発光性化合物同士の組み合わせや、蛍光発光性化合物とリン光発光性化合物とを組み合わせ用いてもよい。これにより、任意の発光色を得ることができる。

[0203] 最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位の差の絶対値 (ΔE_{ST}) が、0.50 eV以下である本発明に係る π 共役系化合物と、発光性化合物と、ホスト化合物を発光層に含有する場合、本発明に係る π

共役系化合物はアシストドーパントとして作用する。一方、発光層が、本発明に係る π 共役系化合物と発光性化合物を含有し、ホスト化合物を含有しない場合、本発明に係る π 共役系化合物はホスト化合物として作用する。発光層が、本発明に係る π 共役系化合物のみを含有する場合、本発明に係る π 共役系化合物はホスト化合物兼発光性化合物として作用する。

効果が発現する機構としては、いずれの場合も同様であり、本発明に係る π 共役系化合物上に生成した三重項励起子を逆項間交差（RISC）で一重項励起子へと変換する点にある。

これにより、本発明に係る π 共役系化合物上に生成した理論上すべての励起子エネルギーを発光性化合物に蛍光共鳴エネルギー移動（FRET）することができ、高発光効率の発現を可能にする。

したがって、発光層が、本発明に係る π 共役系化合物、発光性化合物及びホスト化合物の3成分を含有する場合は、 π 共役系化合物の S_1 と T_1 のエネルギー準位は、ホスト化合物の S_1 と T_1 のエネルギー準位よりも低く、発光性化合物の S_1 と T_1 のエネルギー準位よりも高い方が好ましい。

同様に、発光層が、本発明に係る π 共役系化合物と発光性化合物の2成分を含有する場合は、 π 共役系化合物の S_1 と T_1 のエネルギー準位は、発光性化合物の S_1 と T_1 のエネルギー準位よりも高い方が好ましい。

[0204] 図3及び図4に、本発明の π 共役系化合物がそれぞれアシストドーパント及びホスト化合物として作用する場合の模式図を示す。図3及び図4は一例であって、本発明に係る π 共役系化合物上に生成する三重項励起子の生成過程は電界励起のみに限定されず、発光層内又は周辺層界面からのエネルギー移動や電子移動等も含まれる。

さらに、図3及び図4では、発光材料として蛍光発光性化合物を用いて示しているが、これに限定されず、リン光発光性化合物を用いてもよいし、蛍光発光性化合物とリン光発光性化合物の両者を用いてもよい。

[0205] 本発明に係る π 共役系化合物をアシストドーパントとして用いる場合、発光層は、 π 共役系化合物に対し質量比で100%以上のホスト化合物を含有

し、蛍光発光性化合物及び／又はリン光発光性化合物が π 共役系化合物に対して質量比0.1～50%の範囲内で含有していることが好ましい。

[0206] 本発明に係る π 共役系化合物をホスト化合物として用いる場合、発光層は、蛍光発光性化合物及び／又はリン光発光性化合物を π 共役系化合物に対して質量比0.1～50%の範囲内で含有することが好ましい。

[0207] 本発明に係る π 共役系化合物をアシストドーパント又はホスト化合物として用いる場合、本発明に係る π 共役系化合物の発光スペクトルと発光性化合物の吸収スペクトルが重なることが好ましい。

[0208] 本発明の有機EL素子や本発明に用いられる化合物の発光する色は、「新編色彩科学ハンドブック」（日本色彩学会編、東京大学出版会、1985）の108頁の図3.16において、分光放射輝度計CS-1000（コニカミノルタ（株）製）で測定した結果をCIE色度座標に当てはめたときの色で決定される。

本発明においては、1層又は複数層の発光層が、発光色の異なる複数の発光ドーパントを含有し、白色発光を示すことも好ましい。

白色を示す発光ドーパントの組み合わせについては特に限定はないが、例えば青と橙や、青と緑と赤の組み合わせ等が挙げられる。

本発明の有機EL素子における白色とは、2度視野角正面輝度を前述の方法により測定した際に、1000cd/m²でのCIE1931表色系における色度が $x=0.39\pm0.09$ 、 $y=0.38\pm0.08$ の領域内にあることが好ましい。

[0209] (1.1) 蛍光発光性ドーパント

蛍光発光性ドーパント（蛍光ドーパント）は、本発明の π 共役系化合物を用いてもよいし、有機EL素子の発光層に使用される公知の蛍光ドーパントや遅延蛍光性ドーパントの中から適宜選択して用いてもよい。

[0210] 本発明に使用できる公知の蛍光ドーパントの具体例としては、例えば、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、ペリレン誘導体、フルオレン誘導体、アリーールアセチレン誘導体、スチリ

ルアリーレン誘導体、スチリルアミン誘導体、アリールアミン誘導体、ホウ素錯体、クマリン誘導体、ピラン誘導体、シアニン誘導体、クロコニウム誘導体、スクアリウム誘導体、オキソベンツアントラセン誘導体、フルオレsein誘導体、ローダミン誘導体、ピリリウム誘導体、ペリレン誘導体、ポリチオフェン誘導体、又は希土類錯体系化合物等が挙げられる。また、近年では遅延蛍光を利用した発光ドーパントも開発されており、これらを用いてもよい。遅延蛍光を利用した発光ドーパントの具体例としては、例えば、国際公開第2011/156793号、特開2011-213643号公報、特開2010-93181号公報、特許5366106号公報等に記載の化合物が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

[0211] (1. 2) リン光発光性ドーパント

本発明に用いられるリン光発光性ドーパントについて説明する。

本発明に用いられるリン光発光性ドーパントは、励起三重項からの発光が観測される化合物であり、具体的には、室温（25℃）にてリン光発光する化合物であり、リン光量子収率が、25℃において0.01以上の化合物であると定義されるが、好ましいリン光量子収率は0.1以上である。

上記リン光量子収率は、第4版実験化学講座7の分光11の398頁（1992年版、丸善）に記載の方法により測定できる。溶液中でのリン光量子収率は種々の溶媒を用いて測定できるが、本発明に用いられるリン光ドーパントは、任意の溶媒のいずれかにおいて上記リン光量子収率（0.01以上）が達成できればよい。

[0212] リン光ドーパントは、有機EL素子の発光層に使用される公知のものの中から適宜選択して用いることができる。本発明に使用できる公知のリン光ドーパントの具体例としては、以下の文献に記載されている化合物等が挙げられる。

Nature 395, 151 (1998)、Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)、Adv. Mater. 19, 739 (2007)、Chem. Mater. 17, 3532 (2005)、Adv

. Mater. 17, 1059 (2005)、国際公開第2009/100991号、国際公開第2008/101842号、国際公開第2003/040257号、米国特許出願公開第2006/835469号明細書、米国特許出願公開第2006/0202194号明細書、米国特許出願公開第2007/0087321号明細書、米国特許出願公開第2005/0244673号明細書、Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)、Chem. Mater. 16, 2480 (2004)、Adv. Mater. 16, 2003 (2004)、Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800、Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)、Chem. Lett. 34, 592 (2005)、Chem. Commun. 2906 (2005)、Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)、国際公開第2009/050290号、国際公開第2002/015645号、国際公開第2009/000673号、米国特許出願公開第2002/0034656号明細書、米国特許第7332232号明細書、米国特許出願公開第2009/0108737号明細書、米国特許出願公開第2009/0039776号明細書、米国特許第6921915号明細書、米国特許第6687266号明細書、米国特許出願公開第2007/0190359号明細書、米国特許出願公開第2006/0008670号明細書、米国特許出願公開第2009/0165846号明細書、米国特許出願公開第2008/0015355号明細書、米国特許第7250226号明細書、米国特許第7396598号明細書、米国特許出願公開第2006/0263635号明細書、米国特許出願公開第2003/0138657号明細書、米国特許出願公開第2003/0152802号明細書、米国特許第7090928号明細書、Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)、Chem. Mater. 18, 5119 (2006)、Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)、Organometallics 23, 3745 (2004)、Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)、国際公開第2002/002

714号、国際公開第2006/009024号、国際公開第2006/056418号、国際公開第2005/019373号、国際公開第2005/123873号、国際公開第2005/123873号、国際公開第2007/004380号、国際公開第2006/082742号、米国特許出願公開第2006/0251923号明細書、米国特許出願公開第2005/0260441号明細書、米国特許第7393599号明細書、米国特許第7534505号明細書、米国特許第7445855号明細書、米国特許出願公開第2007/0190359号明細書、米国特許出願公開第2008/0297033号明細書、米国特許第7338722号明細書、米国特許出願公開第2002/0134984号明細書、米国特許第7279704号明細書、米国特許出願公開第2006/098120号明細書、米国特許出願公開第2006/103874号明細書、国際公開第2005/076380号、国際公開第2010/032663号、国際公開第2008/140115号、国際公開第2007/052431号、国際公開第2011/134013号、国際公開第2011/157339号、国際公開第2010/086089号、国際公開第2009/113646号、国際公開第2012/020327号、国際公開第2011/051404号、国際公開第2011/004639号、国際公開第2011/073149号、米国特許出願公開第2012/228583号明細書、米国特許出願公開第2012/212126号明細書、特開2012-069737号公報、特願2011-181303号公報、特開2009-114086号公報、特開2003-81988号公報、特開2002-302671号公報、特開2002-363552号公報等である。

中でも、好ましいリン光ドーパントとしてはIrを中心金属に有する有機金属錯体が挙げられる。さらに好ましくは、金属-炭素結合、金属-窒素結合、金属-酸素結合、金属-硫黄結合の少なくとも一つの配位様式を含む錯体が好ましい。

[0213] (2) ホスト化合物

本発明に用いられるホスト化合物は、発光層において主に電荷の注入及び輸送を担う化合物であり、有機EL素子においてそれ自体の発光は実質的に観測されない。

ホスト化合物は、発光層に含有される化合物の中で、その層中での質量比が20%以上であることが好ましい。

ホスト化合物は、単独で用いてもよく、又は複数種併用して用いてもよい。ホスト化合物を複数種用いることで、電荷の移動を調整することが可能であり、有機エレクトロルミネッセンス素子を高効率化することができる。

以下に、本発明において好ましく用いられるホスト化合物について述べる。

[0214] ホスト化合物としては、上述のように本発明で用いられる π 共役系化合物を用いてもよいが、特に制限はない。逆エネルギー移動の観点から、ドープアントの励起一重項エネルギーより大きな励起エネルギーをもつものが好ましく、さらにドープアントの励起三重項エネルギーより大きな励起三重項エネルギーをもつものがより好ましい。

ホスト化合物は、発光層内においてキャリアの輸送及び励起子の生成を担う。そのため、カチオンラジカル状態、アニオンラジカル状態、及び励起状態の全ての活性種の状態において安定に存在でき、分解や付加反応などの化学変化を起こさないこと、さらに、層中において通電経時でホスト分子がオングストロームレベルで移動しないことが好ましい。

[0215] また、特に併用する発光ドープアントがTADF発光を示す場合には、TADF化合物の三重項励起状態の存在時間が長いことから、ホスト化合物自体の T_1 エネルギー準位が高いこと、さらにホスト化合物同士が会合した状態で低 T_1 状態を作らないこと、TADF化合物とホスト化合物とがエキサイプレックスを形成しないこと、ホスト化合物が電界によりエレクトロマーを形成しないことなど、ホスト化合物が低 T_1 化しないような分子構造の適切な設計が必要となる。

このような要件を満たすためには、ホスト化合物自体が電子のホッピング

移動性が高いこと、かつ、正孔のホッピング移動が高いこと、三重項励起状態となったときの構造変化が小さいことが必要である。このような要件を満たすホスト化合物の代表格としてカルバゾール骨格、アザカルバゾール骨格、ジベンゾフラン骨格、ジベンゾチオフェン骨格又はアザジベンゾフラン骨格などの、高 T_1 エネルギー準位を有するものが好ましく挙げられる。

[0216] また、ホスト化合物は、正孔輸送能又は電子輸送能を有しつつ、かつ、発光の長波長化を防ぎ、さらに、有機エレクトロルミネッセンス素子を高温駆動時や素子駆動中の発熱に対して安定して動作させる観点から、高いガラス転移温度（ T_g ）を有することが好ましい。好ましくは T_g が 90°C 以上であり、より好ましくは 120°C 以上である。

ここで、ガラス転移点（ T_g ）とは、DSC（Differential Scanning Calorimetry：示差走査熱量法）を用いて、JIS K 7121-2012に準拠した方法により求められる値である。

[0217] また、本発明に用いられるホスト化合物としては、上述のように本発明に係る π 共役系化合物を用いることも好適である。本発明に係る π 共役系化合物は、高い T_1 を有しており、発光波長の短い（すなわち T_1 及び S_1 のエネルギー準位が高い）発光材料に対しても好適に用いることができるためである。

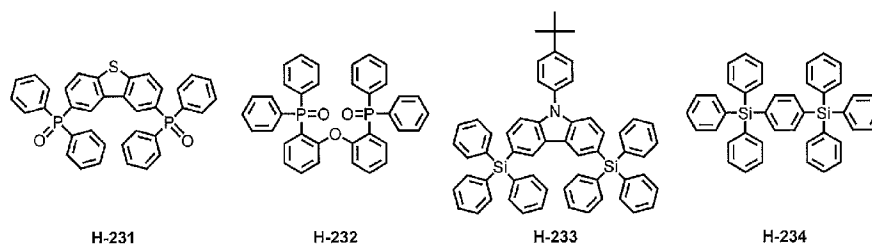
[0218] 本発明の有機EL素子に公知のホスト化合物を用いる場合、その具体例としては、以下の文献に記載の化合物等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

特開2001-257076号公報、同2002-308855号公報、同2001-313179号公報、同2002-319491号公報、同2001-357977号公報、同2002-334786号公報、同2002-8860号公報、同2002-334787号公報、同2002-15871号公報、同2002-334788号公報、同2002-43056号公報、同2002-334789号公報、同2002-75645号公報

、同2002-338579号公報、同2002-105445号公報、同2002-343568号公報、同2002-141173号公報、同2002-352957号公報、同2002-203683号公報、同2002-363227号公報、同2002-231453号公報、同2003-3165号公報、同2002-234888号公報、同2003-27048号公報、同2002-255934号公報、同2002-260861号公報、同2002-280183号公報、同2002-299060号公報、同2002-302516号公報、同2002-305083号公報、同2002-305084号公報、同2002-308837号公報、米国特許出願公開第2003/0175553号明細書、米国特許出願公開第2006/0280965号明細書、米国特許出願公開第2005/0112407号明細書、米国特許出願公開第2009/0017330号明細書、米国特許出願公開第2009/0030202号明細書、米国特許出願公開第2005/0238919号明細書、国際公開第2001/039234号、国際公開第2009/021126号、国際公開第2008/056746号、国際公開第2004/093207号、国際公開第2005/089025号、国際公開第2007/063796号、国際公開第2007/063754号、国際公開第2004/107822号、国際公開第2005/030900号、国際公開第2006/114966号、国際公開第2009/086028号、国際公開第2009/003898号、国際公開第2012/023947号、特開2008-074939号公報、特開2007-254297号公報、欧州特許第2034538号明細書、国際公開第2011/055933号、国際公開第2012/035853号、特開2015-38941号公報等である。特開2015-38941号公報に記載のホスト化合物の例には、明細書の[0255]～[0293]に記載の化合物H-1～H-230が含まれる。

[0219] 以下に、本発明に用いられるホスト化合物として、具体的な化合物例を示すが、これらに限定されるものではない。

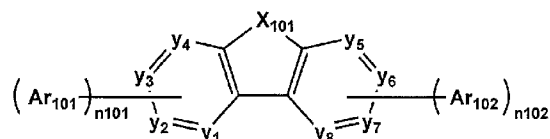
[化96]



[0220] さらに、本発明に用いられるホスト化合物は、下記一般式（I）で表される化合物であることが好ましい。下記一般式（I）で表される化合物はバイポーラ性を有し、かつ非常に安定である。したがってホスト化合物が下記一般式（I）で表される化合物であると、有機EL素子の寿命が長くなりやすい。

[化97]

一般式(I)



上記一般式（I）中、 X_{101} は、 NR_{101} 、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、 $CR_{102}R_{103}$ 又は $SiR_{104}R_{105}$ を表す。また、 $y_1 \sim y_8$ は、それぞれ独立に、 CR_{106} 、又は窒素原子を表す。ここで、 $R_{101} \sim R_{106}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよい。 $R_{101} \sim R_{106}$ でありうる置換基の例には、以下の基が含まれる。

[0221] 直鎖状又は分岐状のアルキル基（例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、ドデシル基、トリデシル基、テトラデシル基、ペンタデシル基等）；
 アルケニル基（例えば、ビニル基、アリル基等）；
 アルキニル基（例えば、エチニル基、プロパルギル基等）；
 芳香族炭化水素環基（芳香族炭素環基やアリール基等とも称される。例え

ば、ベンゼン環、ビフェニル、ナフタレン環、アズレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ピレン環、クリセン環、ナフタセン環、トリフェニレン環、o-ターフェニル環、m-ターフェニル環、p-ターフェニル環、アセナフテン環、コロネン環、インデン環、フルオレン環、フルオラントレン環、ナフタセン環、ペンタセン環、ペリレン環、ペンタフェン環、ピセン環、ピレン環、ピラントレン環、アンスラアントレン環、テトラリン等から導出される基)；

芳香族複素環基（例えば、フラン環、ジベンゾフラン環、チオフェン環、ジベンゾチオフェン環、オキサゾール環、ピロール環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、ベンゾイミダゾール環、オキサジアゾール環、トリアゾール環、イミダゾール環、ピラゾール環、チアゾール環、インドール環、インダゾール環、ベンゾイミダゾール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾオキサゾール環、キノキサリン環、キナゾリン環、シンノリン環、キノリン環、イソキノリン環、フタラジン環、ナフチリジン環、カルバゾール環、カルボリン環、ジアザカルバゾール環（カルボリン環を構成する炭化水素環の炭素原子の一つが更に窒素原子で置換されている環等から導出される基。また、カルボリン環とジアザカルバゾール環を合わせて「アザカルバゾール環」と称される場合もある。））；

非芳香族炭化水素環基（例えば、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等）；

非芳香族複素環基（例えば、ピロリジル基、イミダゾリジル基、モルホリル基、オキサゾリジル基等）；

アルコキシ基（例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロピルオキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、オクチルオキシ基、ドデシルオキシ基等）；

シクロアルコキシ基（例えば、シクロペンチルオキシ基、シクロヘキシルオキシ基等）；

アリールオキシ基（例えば、フェノキシ基、ナフチルオキシ基等）；

アルキルチオ基（例えば、メチルチオ基、エチルチオ基、プロピルチオ基、ペンチルチオ基、ヘキシルチオ基、オクチルチオ基、ドデシルチオ基等）；

シクロアルキルチオ基（例えば、シクロペンチルチオ基、シクロヘキシルチオ基等）；

アリールチオ基（例えば、フェニルチオ基、ナフチルチオ基等）；

アルコキシカルボニル基（例えば、メチルオキシカルボニル基、エチルオキシカルボニル基、ブチルオキシカルボニル基、オクチルオキシカルボニル基、ドデシルオキシカルボニル基等）；

アリールオキシカルボニル基（例えば、フェニルオキシカルボニル基、ナフチルオキシカルボニル基等）；

スルファモイル基（例えば、アミノスルホニル基、メチルアミノスルホニル基、ジメチルアミノスルホニル基、ブチルアミノスルホニル基、ヘキシルアミノスルホニル基、シクロヘキシルアミノスルホニル基、オクチルアミノスルホニル基、ドデシルアミノスルホニル基、フェニルアミノスルホニル基、ナフチルアミノスルホニル基、2-ピリジルアミノスルホニル基等）；

アシル基（例えば、アセチル基、エチルカルボニル基、プロピルカルボニル基、ペンチルカルボニル基、シクロヘキシルカルボニル基、オクチルカルボニル基、2-エチルヘキシルカルボニル基、ドデシルカルボニル基、フェニルカルボニル基、ナフチルカルボニル基、ピリジルカルボニル基等）；

アシロキシ基（例えば、アセチロキシ基、エチルカルボニロキシ基、ブチルカルボニロキシ基、オクチルカルボニロキシ基、ドデシルカルボニロキシ基、フェニルカルボニロキシ基等）；

アミド基（例えば、メチルカルボニルアミノ基、エチルカルボニルアミノ基、ジメチルカルボニルアミノ基、プロピルカルボニルアミノ基、ペンチルカルボニルアミノ基、シクロヘキシルカルボニルアミノ基、2-エチルヘキシルカルボニルアミノ基、オクチルカルボニルアミノ基、ドデシルカルボニルアミノ基、フェニルカルボニルアミノ基、ナフチルカルボニルアミノ基等

) ;

カルバモイル基（例えば、アミノカルボニル基、メチルアミノカルボニル基、ジメチルアミノカルボニル基、プロピルアミノカルボニル基、ペンチルアミノカルボニル基、シクロヘキシルアミノカルボニル基、オクチルアミノカルボニル基、2-エチルヘキシルアミノカルボニル基、ドデシルアミノカルボニル基、フェニルアミノカルボニル基、ナフチルアミノカルボニル基、2-ピリジルアミノカルボニル基等）；

ウレイド基（例えば、メチルウレイド基、エチルウレイド基、ペンチルウレイド基、シクロヘキシルウレイド基、オクチルウレイド基、ドデシルウレイド基、フェニルウレイド基ナフチルウレイド基、2-ピリジルアミノウレイド基等）；

スルフィニル基（例えば、メチルスルフィニル基、エチルスルフィニル基、ブチルスルフィニル基、シクロヘキシルスルフィニル基、2-エチルヘキシルスルフィニル基、ドデシルスルフィニル基、フェニルスルフィニル基、ナフチルスルフィニル基、2-ピリジルスルフィニル基等）；

アルキルスルホニル基（例えば、メチルスルホニル基、エチルスルホニル基、ブチルスルホニル基、シクロヘキシルスルホニル基、2-エチルヘキシルスルホニル基、ドデシルスルホニル基等）；

アリールスルホニル基又はヘテロアリールスルホニル基（例えば、フェニルスルホニル基、ナフチルスルホニル基、2-ピリジルスルホニル基等）；

アミノ基（例えば、アミノ基、エチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ブチルアミノ基、シクロペンチルアミノ基、2-エチルヘキシルアミノ基、ドデシルアミノ基、アニリノ基、ナフチルアミノ基、2-ピリジルアミノ基、ジフェニルアミノ基等）；

ハロゲン原子（例えば、フッ素原子、塩素原子、臭素原子等）；

フッ化炭化水素基（例えば、フルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、ペンタフルオロフェニル基等）；

シアノ基；

ニトロ基；

ヒドロキシ基；

チオール基；

シリル基（例えば、トリメチルシリル基、トリイソプロピルシリル基、トリフェニルシリル基、フェニルジエチルシリル基等）；

重水素原子

[0222] 上記の中でも好ましい基として、直鎖又は分岐アルキル基、芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基、アミノ基、フッ素原子、フッ化炭化水素基、シアノ基、及びシリル基が挙げられる。

[0223] また、 A_{r101} 及び A_{r102} は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表す。「置換されていてもよいアリール基」におけるアリール基は、炭素原子数6～24の芳香族炭化水素環から誘導される基であることが好ましい。そのような芳香族炭化水素環の例には、ベンゼン環、インデン環、ナフタレン環、アズレン環、フルオレン環、フェナントレン環、アントラセン環、アセナフチレン環、ビフェニレン環、ナフタセン環、ピレン環、ペントレン環、アセアントリレン環、ヘプタレン環、トリフェニレン環、*a*s-インダセン環、クリセン環、*s*-インダセン環、プレイアデン環、フェナレン環、フルオランテン環、ペリレン環、アセフェナントリレン環、ビフェニル環、ターフェニル環、及びテトラフェニル環等が含まれる。好ましくは、ベンゼン環、ビフェニル環、ターフェニル環である。

[0224] また、「置換されていてもよいヘテロアリール基」におけるヘテロアリール基は、各種芳香族複素環から誘導される基であることが好ましい。そのような芳香族複素環の例にはピロール環、インドール環、カルバゾール環、インドロインドール環、9,10-ジヒドロアクリジン環、5,10-ジヒドロフェナジン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、ジベンゾチオフェン環、ベンゾフリルインドール環、ベンゾチエノインドール環、インドロカルバゾール環、ベンゾフリルカルバゾール環、ベンゾチエノカルバゾール環

、ベンゾチエノベンゾチオフェン環、ベンゾカルバゾール環、ジベンゾカルバゾール環、アザカルバゾール環、アザジベンゾフラン環、ジアザカルバゾール環、ジアザジベンゾフラン環、ジベンゾチオフェンオキシド環、ジベンゾチオフェンジオキシド環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キナゾリン環、シンノリン環、キノキサリン環、フタラジン環、プテリジン環、フェナントリジン環、フェナントロリン環、ジベンゾフラン環、ジベンゾシロール環、ジベンゾボロール環、ジベンゾホスホールオキシド環等が含まれる。好ましくは、カルバゾール環、ベンゾカルバゾール環、アザカルバゾール環、アザジベンゾフラン環、ジアザカルバゾール環、ジアザジベンゾフラン環、ピリジン環、ピリミジン環、トリアジン環である。

[0225] アリール基やヘテロアリール基が有しうる置換基の例には、アルキル基で置換されていてもよいアリール基、フッ素原子、シアノ基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいスルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、置換されていてもよいボリル基、置換されていてもよい複素環基、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよいシリル基等が含まれる。

上記「アルキル基」は、直鎖、分岐又は環状のいずれであってもよく、例えば炭素原子数1～20の直鎖又は分岐のアルキル基、或いは炭素原子数5～20の環状のアルキル基でありうる。アルキル基の例には、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、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、ネオペンチル基、*n*-ヘキシル基、シクロヘキシル基、2-エチルヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、2-ヘキシルオクチル基、*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、*n*-ノナデシル基、及び*n*-イコシル基等が含まれる。また、「アリール基」及び「複素環基」は、 Ar_{101} 及び Ar_{102} で表されるアリール基やヘテロア

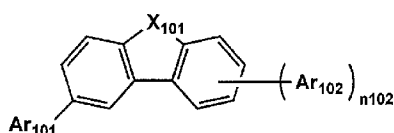
リール基と同様でありうる。

[0226] また、上記一般式 (I) において、 n_{101} 及び n_{102} は、各々 0～4 の整数を表すが、 R_{101} が水素原子の場合は、 n_{101} は 1～4 の整数を表す。

[0227] 上記一般式 (I) で表される構造を有するホスト化合物は、下記一般式 (I) で表される構造を有することがより好ましい。

[化98]

一般式(II)



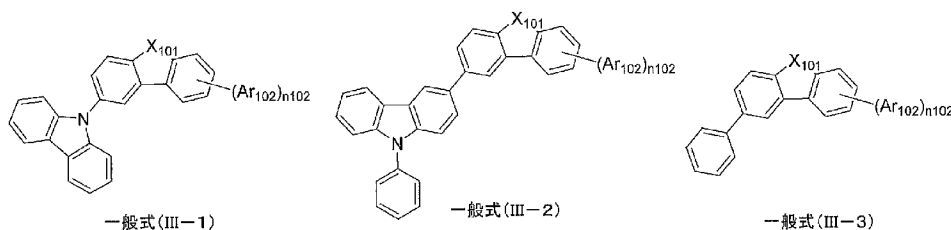
一般式 (II) において、 X_{101} は、 NR_{101} 、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、 $CR_{102}R_{103}$ 又は $SiR_{104}R_{105}$ を表す。 $R_{101} \sim R_{105}$ は、それぞれ独立して水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよい。なお、 $R_{101} \sim R_{105}$ は、一般式 (I) の $R_{101} \sim R_{105}$ と同義である。

[0228] Ar_{101} 及び Ar_{102} は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、 Ar_{101} 及び Ar_{102} は、一般式 (I) の Ar_{101} 及び Ar_{102} と同義である。

[0229] また、 n_{102} は 0～4 の整数を表す。

[0230] さらに、一般式 (II) で表される化合物は、下記一般式 (III-1)、(III-2) 又は (III-3) で表される化合物であることが好ましい。

[0231] [化99]



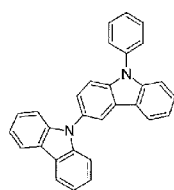
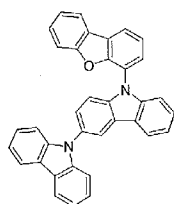
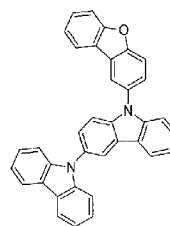
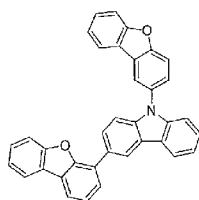
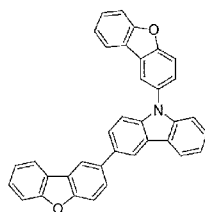
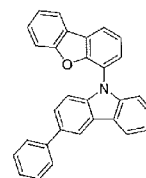
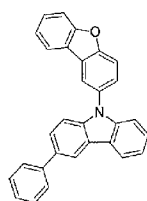
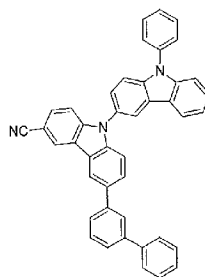
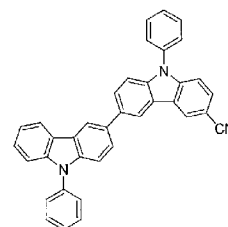
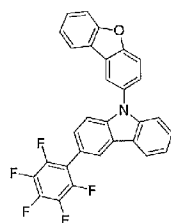
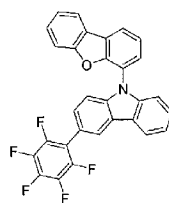
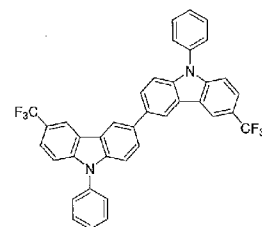
[0232] 一般式 (III-1) ~ (III-3) において、 X_{101} 、 Ar_{102} 、 $n102$ は、前記一般式 (II) における X_{101} 、 Ar_{102} 、 $n102$ と同義である。また、一般式 (III-2) において、 R_{104} は、前記一般式 (I) における R_{104} と同義である。

一般式 (III-1) ~ (III-3) において、 X_{101} を含んで形成される縮合環、カルバゾール環及びベンゼン環は、ホスト化合物の機能を阻害しない範囲でさらに置換基を有してもよい。

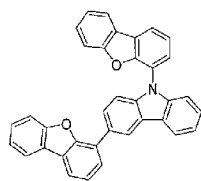
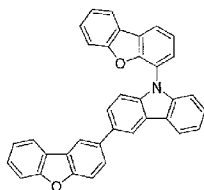
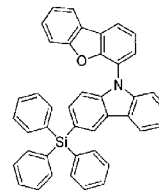
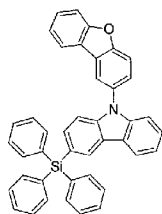
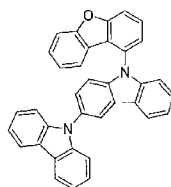
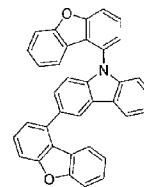
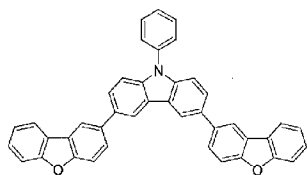
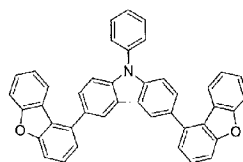
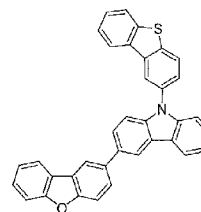
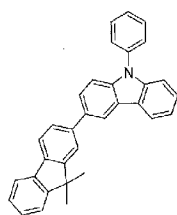
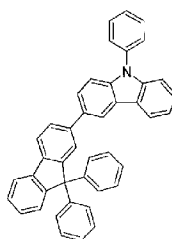
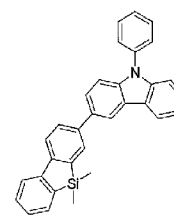
[0233] 上記一般式 (I)、(II)、又は (III-1) ~ (III-3) で表されるホスト化合物の好ましい具体例を挙げるが、これらの化合物はさらに置換基を有していたり、構造異性体などが存在していたりする場合もあり、本記述に限定されない。

[0234]

[化100]

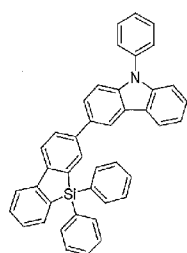
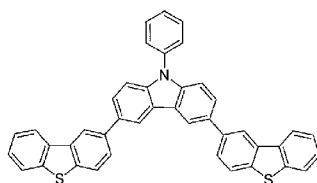
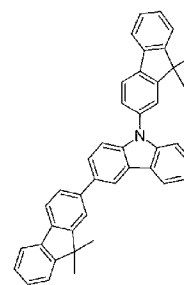
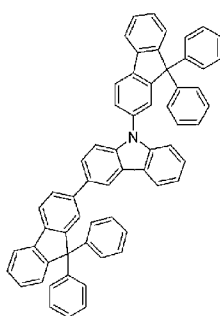
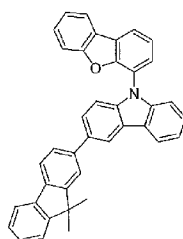
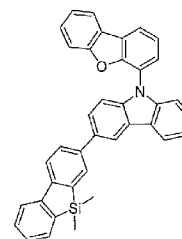
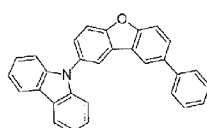
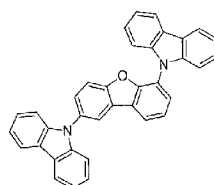
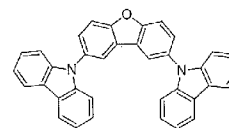
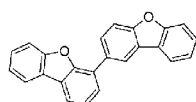
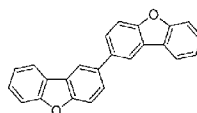
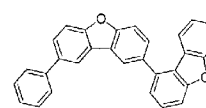
**J-1****J-2****J-3****J-4****J-5****J-6****J-7****J-8****J-9****J-10****J-11****J-12**

[化101]

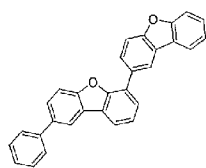
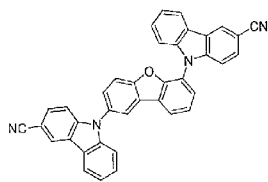
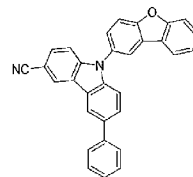
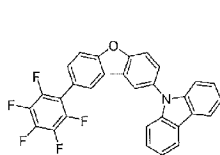
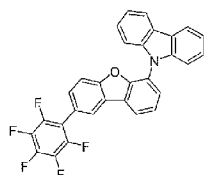
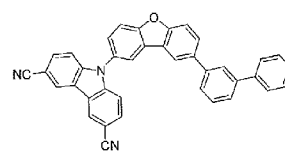
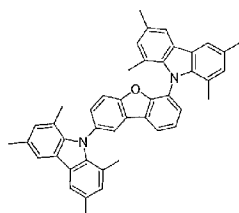
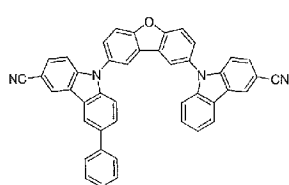
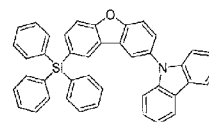
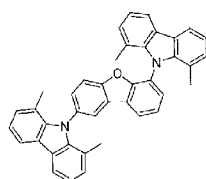
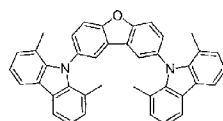
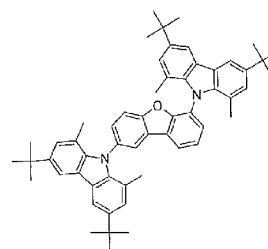
**J-13****J-14****J-15****J-16****J-17****J-18****J-19****J-20****J-21****J-22****J-23****J-24**

[0235]

[化102]

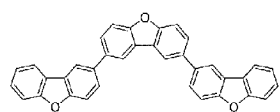
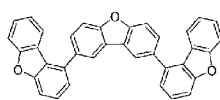
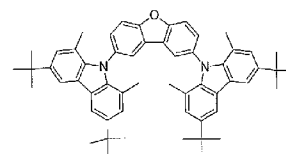
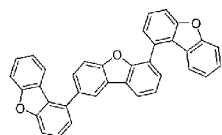
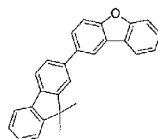
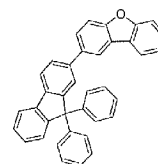
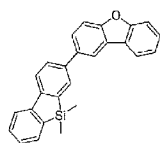
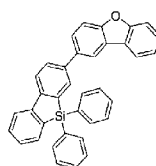
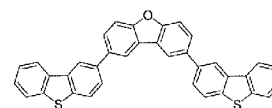
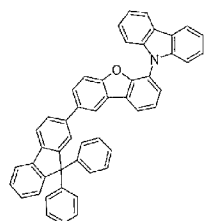
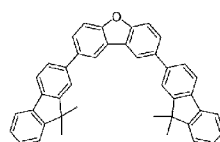
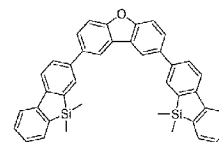
**J-25****J-26****J-27****J-28****J-29****J-30****J-31****J-32****J-33****J-34****J-35****J-36**

[化103]

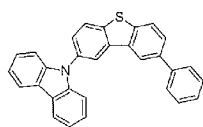
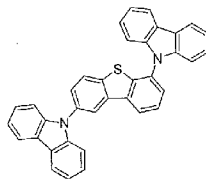
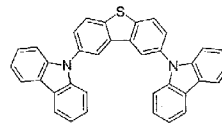
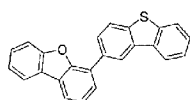
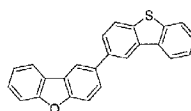
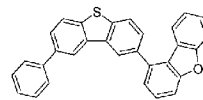
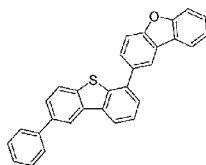
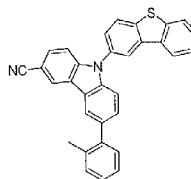
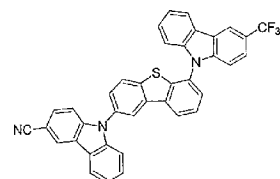
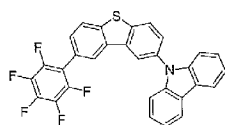
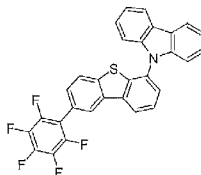
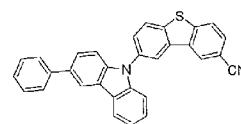
**J-37****J-38****J-39****J-40****J-41****J-42****J-43****J-44****J-45****J-46****J-47****J-48**

[0236]

[化104]

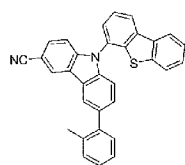
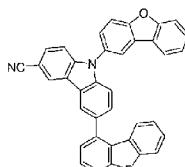
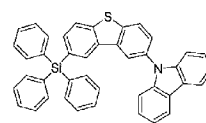
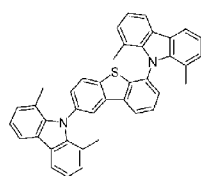
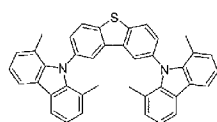
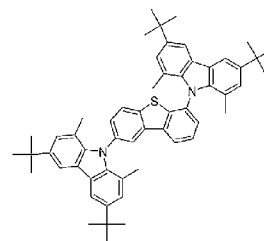
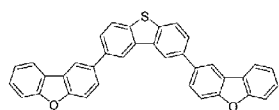
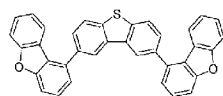
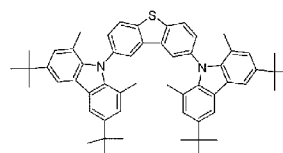
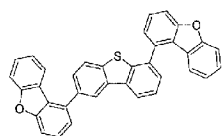
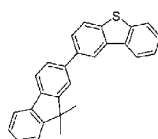
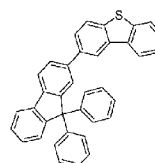
**J-49****J-50****J-51****J-52****J-53****J-54****J-55****J-56****J-57****J-58****J-59****J-60**

[化105]

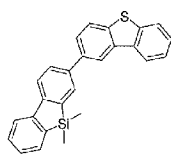
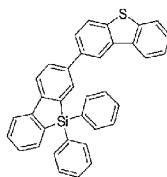
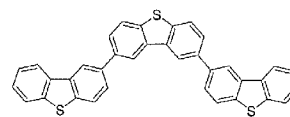
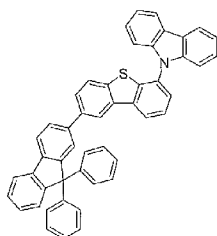
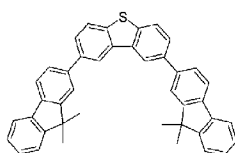
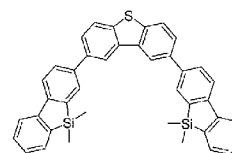
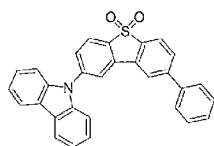
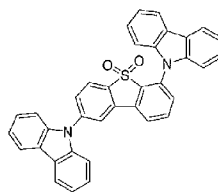
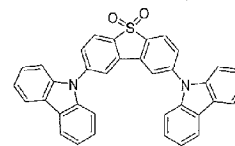
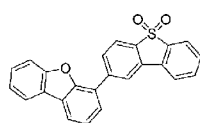
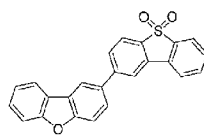
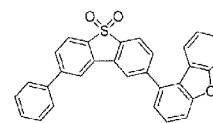
**J-61****J-62****J-63****J-64****J-65****J-66****J-67****J-68****J-69****J-70****J-71****J-72**

[0237]

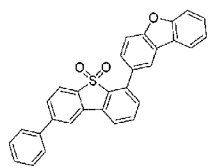
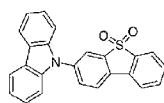
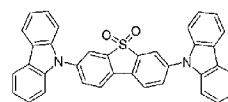
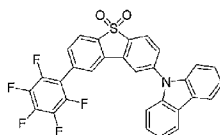
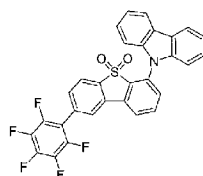
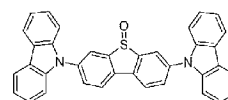
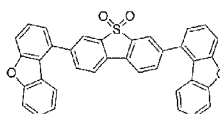
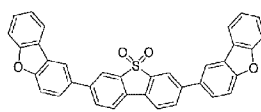
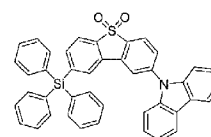
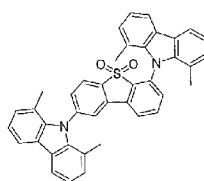
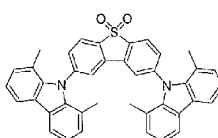
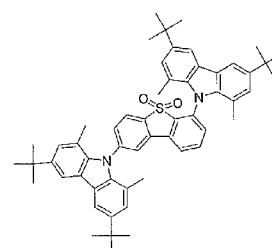
[化106]

**J-73****J-74****J-75****J-76****J-77****J-78****J-79****J-80****J-81****J-82****J-83****J-84**

[化107]

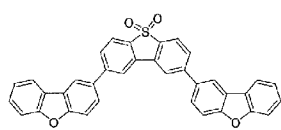
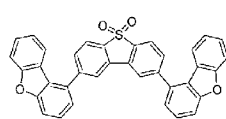
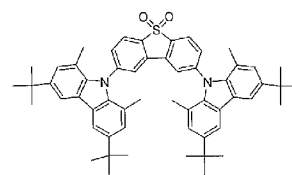
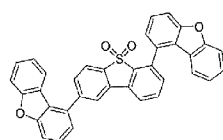
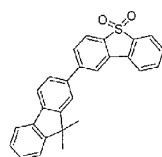
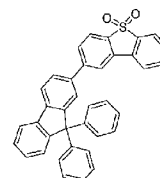
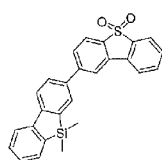
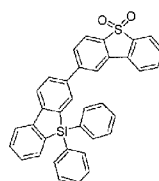
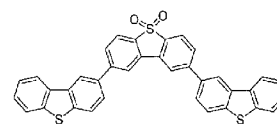
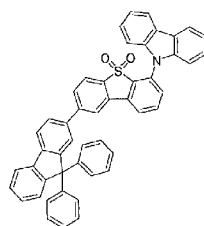
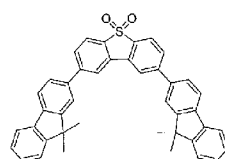
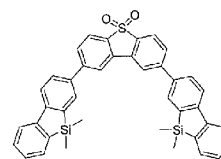
**J-85****J-86****J-87****J-88****J-89****J-90****J-91****J-92****J-93****J-94****J-95****J-96**

[化108]

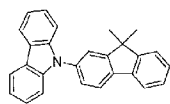
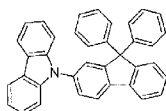
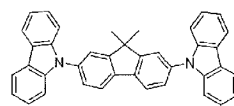
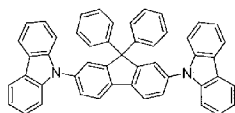
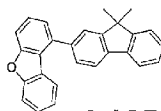
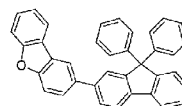
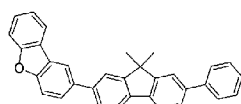
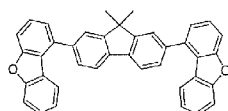
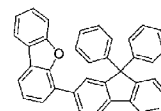
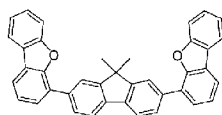
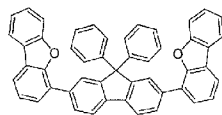
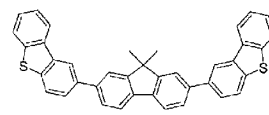
**J-97****J-98****J-99****J-100****J-101****J-102****J-103****J-104****J-105****J-106****J-107****J-108**

[0238]

[化109]

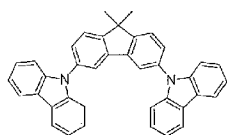
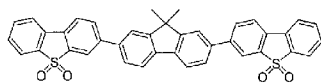
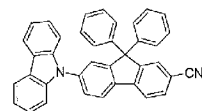
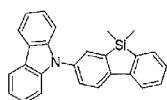
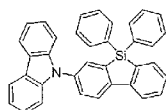
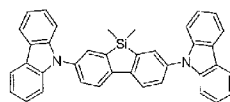
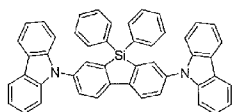
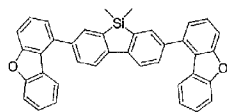
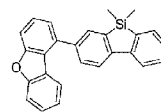
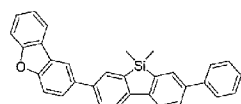
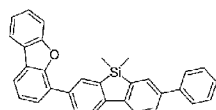
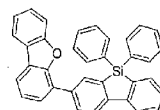
**J-109****J-110****J-111****J-112****J-113****J-114****J-115****J-116****J-117****J-118****J-119****J-120**

[化110]

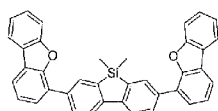
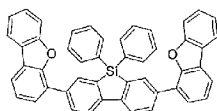
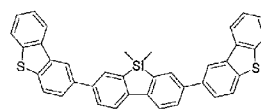
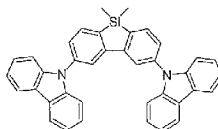
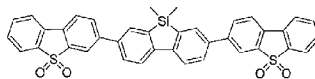
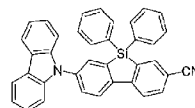
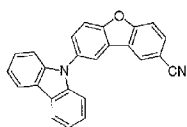
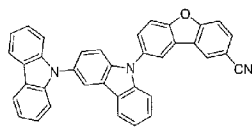
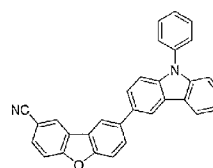
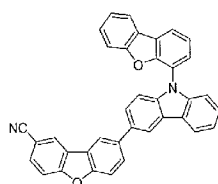
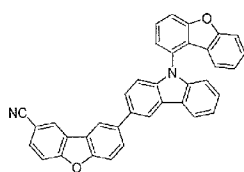
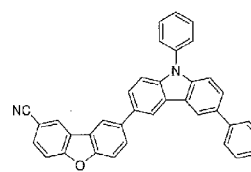
**J-121****J-122****J-123****J-124****J-125****J-126****J-127****J-128****J-129****J-130****J-131****J-132**

[0239]

[化111]

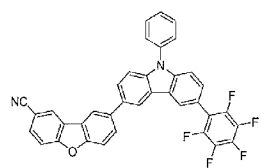
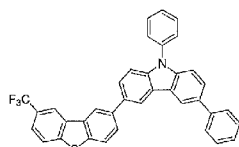
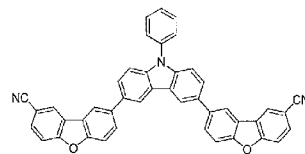
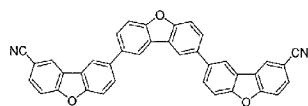
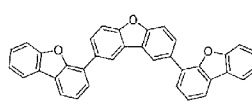
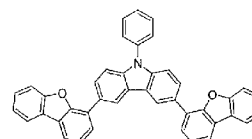
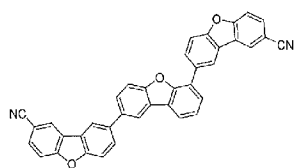
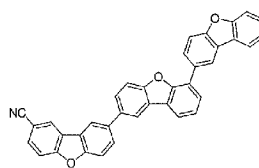
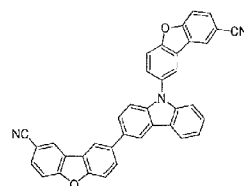
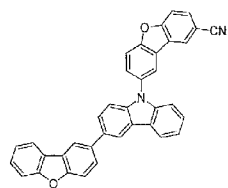
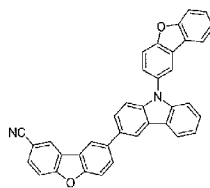
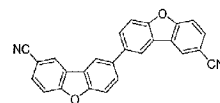
**J-133****J-134****J-135****J-136****J-137****J-138****J-139****J-140****J-141****J-142****J-143****J-144**

[化112]

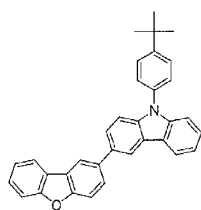
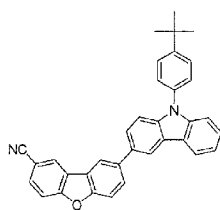
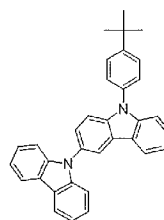
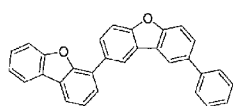
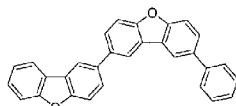
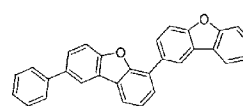
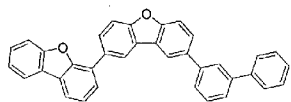
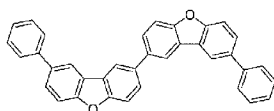
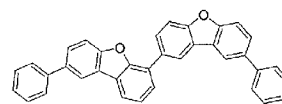
**J-145****J-146****J-147****J-148****J-149****J-150****J-151****J-152****J-153****J-154****J-155****J-156**

[0240]

[化113]

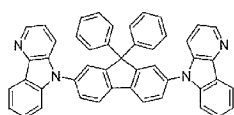
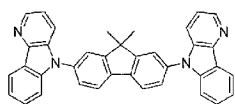
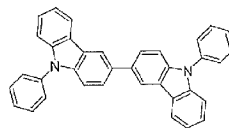
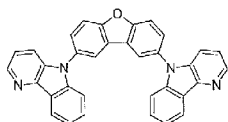
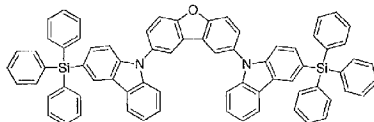
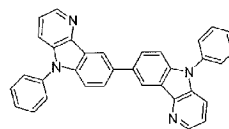
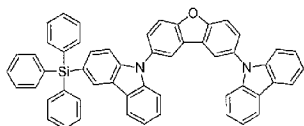
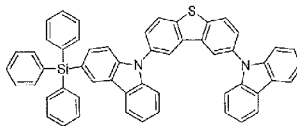
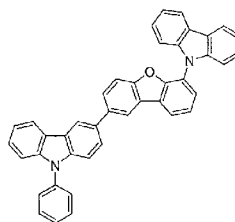
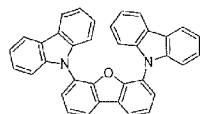
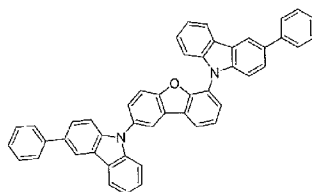
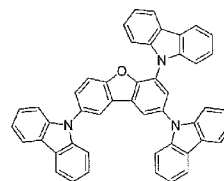
**J-157****J-158****J-159****J-160****J-161****J-162****J-163****J-164****J-165****J-166****J-167****J-168**

[化114]

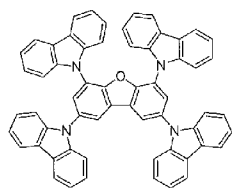
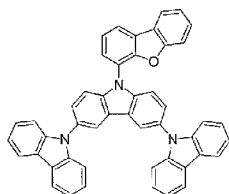
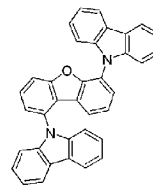
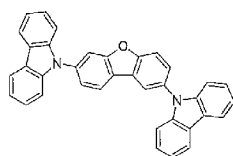
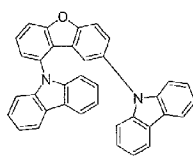
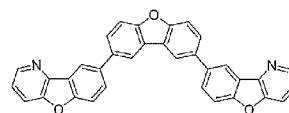
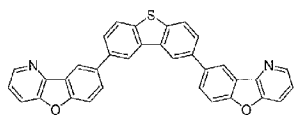
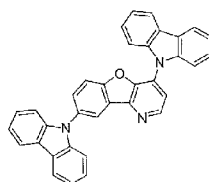
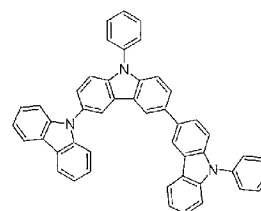
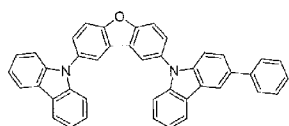
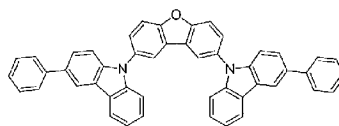
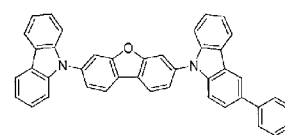
**J-169****J-170****J-171****J-172****J-173****J-174****J-175****J-176****J-177**

[0241]

[化115]

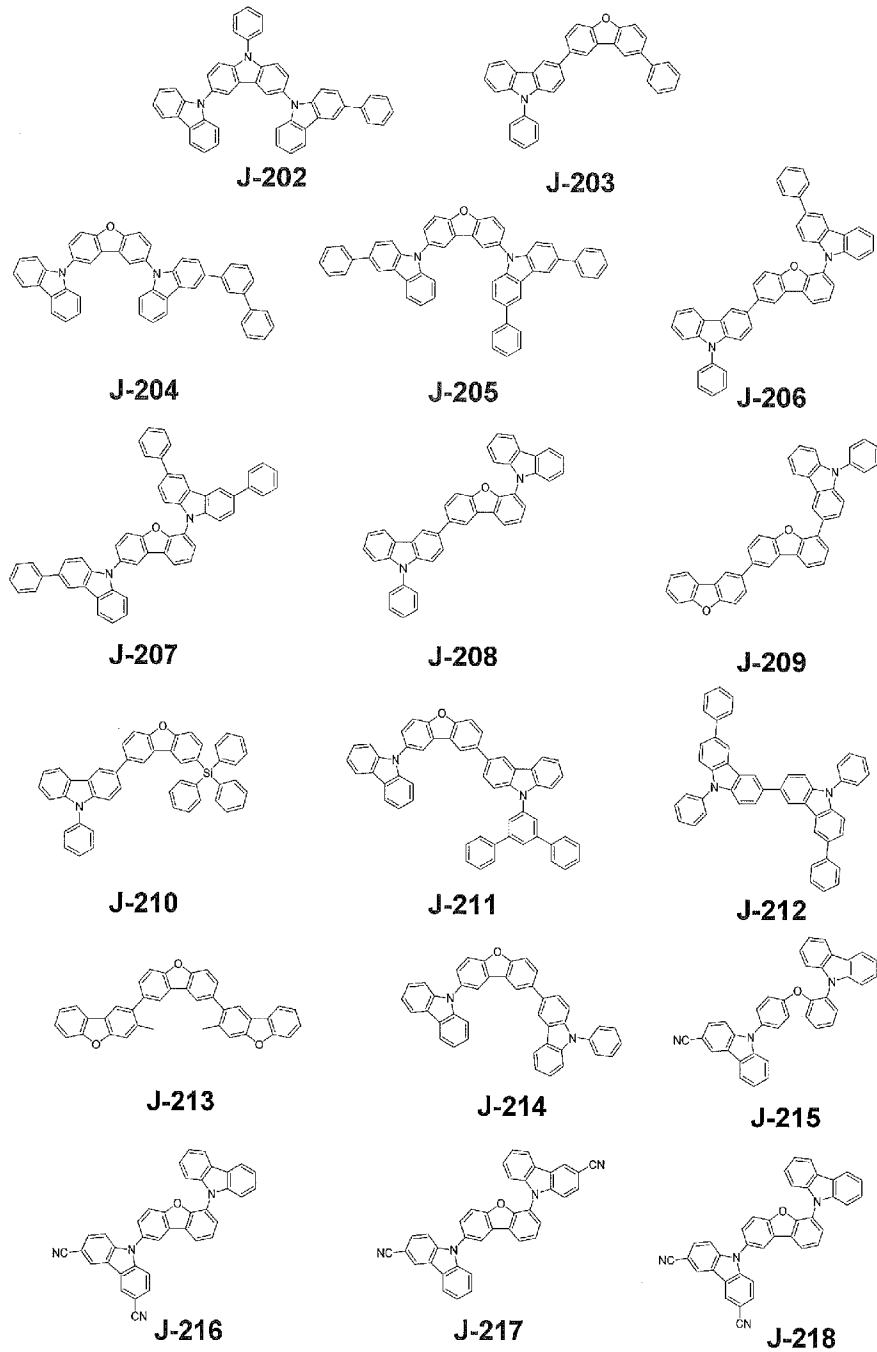
**J-178****J-179****J-180****J-181****J-182****J-183****J-184****J-185****J-186****J-187****J-188****J-189**

[化116]

**J-190****J-191****J-192****J-193****J-194****J-195****J-196****J-197****J-198****J-199****J-200****J-201**

[0242]

[化117]



[0243] 《電子輸送層》

本発明において電子輸送層とは、電子を輸送する機能を有する材料からなり、陰極より注入された電子を発光層に伝達する機能を有していればよい。

本発明に係る電子輸送層の総層厚については特に制限はないが、通常は2 nm～5 μmの範囲であり、より好ましくは2～500 nmであり、さらに

好ましくは5～200nmである。

また、有機EL素子においては発光層で生じた光を電極から取り出す際、発光層から直接取り出される光と、光を取り出す電極と対極に位置する電極によって反射されてから取り出される光とが干渉を起こすことが知られている。光が陰極で反射される場合は、電子輸送層の総層厚を数nm～数μmの間で適宜調整することにより、この干渉効果を効率的に利用することが可能である。

一方で、電子輸送層の層厚を厚くすると電圧が上昇しやすくなるため、特に層厚が厚い場合においては、電子輸送層の電子移動度は $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上であることが好ましい。

電子輸送層に用いられる材料（以下、電子輸送材料という）としては、電子の注入性又は輸送性、正孔の障壁性のいずれかを有していればよく、従来公知の化合物の中から任意のものを選択して用いることができる。

[0244] 例えば、含窒素芳香族複素環誘導体（カルバゾール誘導体、アザカルバゾール誘導体（カルバゾール環を構成する炭素原子の一つ以上が窒素原子に置換されたもの）、ピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、ピラジン誘導体、ピリダジン誘導体、トリアジン誘導体、キノリン誘導体、キノキサリン誘導体、フェナントロリン誘導体、アザトリフェニレン誘導体、オキサゾール誘導体、チアゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、チアジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、ベンズイミダゾール誘導体、ベンズオキサゾール誘導体、ベンズチアゾール誘導体等）、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフェン誘導体、シロール誘導体、芳香族炭化水素環誘導体（ナフタレン誘導体、アントラセン誘導体、トリフェニレン誘導体等）等が挙げられる。

[0245] また、配位子にキノリノール骨格やジベンゾキノリノール骨格を有する金属錯体、例えば、トリス（8-キノリノール）アルミニウム（Alq）、トリス（5,7-ジクロロ-8-キノリノール）アルミニウム、トリス（5,7-ジブromo-8-キノリノール）アルミニウム、トリス（2-メチル-8-キノリノール）アルミニウム、トリス（5-メチル-8-キノリノール）

アルミニウム、ビス（８－キノリノール）亜鉛（Znq）等、及びこれらの金属錯体の中心金属がIn、Mg、Cu、Ca、Sn、Ga又はPbに置き替わった金属錯体も、電子輸送材料として用いることができる。

その他、メタルフリー若しくはメタルフタロシアニン、又はそれらの末端がアルキル基やスルホン酸基等で置換されているものも、電子輸送材料として好ましく用いることができる。また、発光層の材料として例示したジスチリルピラジン誘導体も、電子輸送材料として用いることができるし、正孔注入層、正孔輸送層と同様にn型-Si、n型-SiC等の無機半導体も電子輸送材料として用いることができる。

また、これらの材料を高分子鎖に導入した、又はこれらの材料を高分子の主鎖とした高分子材料を用いることもできる。

[0246] 本発明に係る電子輸送層においては、電子輸送層にドーパ材をゲスト材料としてドーピングして、n性の高い（電子リッチ）電子輸送層を形成してもよい。ドーパ材としては、金属錯体やハロゲン化金属など金属化合物等のn型ドーパントが挙げられる。このような構成の電子輸送層の具体例としては、例えば、特開平4-297076号公報、同10-270172号公報、特開2000-196140号公報、同2001-102175号公報、J. Appl. Phys., 95, 5773 (2004)等の文献に記載されたものが挙げられる。

[0247] 本発明の有機EL素子に用いられる、公知の好ましい電子輸送材料の具体例としては、以下の文献に記載の化合物等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

米国特許第6528187号明細書、米国特許第7230107号明細書、米国特許出願公開第2005/0025993号明細書、米国特許出願公開第2004/0036077号明細書、米国特許出願公開第2009/0115316号明細書、米国特許出願公開第2009/0101870号明細書、米国特許出願公開第2009/0179554号明細書、国際公開第2003/060956号、国際公開第2008/132085号、App

l. Phys. Lett. 75, 4 (1999)、Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)、Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)、Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)、Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)、米国特許第7964293号明細書、米国特許出願公開第2009/030202号明細書、国際公開第2004/080975号、国際公開第2004/063159号、国際公開第2005/085387号、国際公開第2006/067931号、国際公開第2007/086552号、国際公開第2008/114690号、国際公開第2009/069442号、国際公開第2009/066779号、国際公開第2009/054253号、国際公開第2011/086935号、国際公開第2010/150593号、国際公開第2010/047707号、欧州特許第2311826号明細書、特開2010-251675号公報、特開2009-209133号公報、特開2009-124114号公報、特開2008-277810号公報、特開2006-156445号公報、特開2005-340122号公報、特開2003-45662号公報、特開2003-31367号公報、特開2003-282270号公報、国際公開第2012/115034号等である。

[0248] 本発明におけるより好ましい公知の電子輸送材料としては、少なくとも一つの窒素原子を含む芳香族複素環化合物や、リン原子を含む化合物が挙げられ、例えばピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、ピラジン誘導体、トリアジン誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフエン誘導体、アザジベンゾフラン誘導体、アザジベンゾチオフエン誘導体、カルバゾール誘導体、アザカルバゾール誘導体、ベンズイミダゾール誘導体、アリールホスフィンオキサイド誘導体などが挙げられる。

電子輸送材料は単独で用いてもよく、また複数種を併用して用いてもよい。

[0249] 《正孔阻止層》

正孔阻止層とは広い意味では電子輸送層の機能を有する層であり、好ましくは電子を輸送する機能を有しつつ正孔を輸送する能力が小さい材料からなり、電子を輸送しつつ正孔を阻止することで電子と正孔の再結合確率を向上させることができる。

また、前述する電子輸送層の構成を必要に応じて、本発明に係る正孔阻止層として用いることができる。

本発明の有機EL素子に設ける正孔阻止層は、発光層の陰極側に隣接して設けられることが好ましい。

本発明に係る正孔阻止層の層厚としては、好ましくは3～100nmの範囲であり、更に好ましくは5～30nmの範囲である。

正孔阻止層に用いられる材料としては、前述の電子輸送層に用いられる材料が好ましく用いられ、また、前述のホスト化合物として用いられる材料も正孔阻止層に好ましく用いられる。

[0250] 《電子注入層》

本発明に係る電子注入層（「陰極バッファ層」ともいう）とは、駆動電圧低下や発光輝度向上のために陰極と発光層との間に設けられる層のことで、「有機EL素子とその工業化最前線（1998年11月30日エヌ・ティー・エス社発行）」の第2編第2章「電極材料」（123～166頁）に詳細に記載されている。

本発明において電子注入層は必要に応じて設け、上記のごとく陰極と発光層との間、又は陰極と電子輸送層との間に存在させてもよい。

電子注入層はごく薄い膜であることが好ましく、素材にもよるがその層厚は0.1～5nmの範囲が好ましい。また構成材料が断続的に存在する不均一な層（膜）であってもよい。

[0251] 電子注入層は、特開平6-325871号公報、同9-17574号公報、同10-74586号公報等にもその詳細が記載されており、電子注入層に好ましく用いられる材料の具体例としては、ストロンチウムやアルミニウム等に代表される金属、フッ化リチウム、フッ化ナトリウム、フッ化カリウ

ム等に代表されるアルカリ金属化合物、フッ化マグネシウム、フッ化カルシウム等に代表されるアルカリ土類金属化合物、酸化アルミニウムに代表される金属酸化物、8-ヒドロキシキノリネートリチウム(Liq)等に代表される金属錯体等が挙げられる。また、前述の電子輸送材料を用いることも可能である。

また、上記の電子注入層に用いられる材料は単独で用いてもよく、複数種を併用して用いてもよい。

[0252] 《正孔輸送層》

本発明において正孔輸送層とは、正孔を輸送する機能を有する材料からなり、陽極より注入された正孔を発光層に伝達する機能を有していればよい。

本発明に係る正孔輸送層の総層厚については特に制限はないが、通常は5 nm～5 μmの範囲であり、より好ましくは2～500 nmであり、さらに好ましくは5～200 nmである。

正孔輸送層に用いられる材料（以下、正孔輸送材料という）としては、正孔の注入性又は輸送性、電子の障壁性のいずれかを有していればよく、従来公知の化合物の中から任意のものを選択して用いることができる。

例えば、ポルフィリン誘導体、フタロシアニン誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、ピラゾリン誘導体、ピラゾロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、ポリアリーールアルカン誘導体、トリアリーールアミン誘導体、カルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、イソインドール誘導体、アントラセンやナフタレン等のアセン系誘導体、フルオレン誘導体、フルオレノン誘導体、及びポリビニルカルバゾール、芳香族アミンを主鎖又は側鎖に導入した高分子材料又はオリゴマー、ポリシラン、導電性ポリマー又はオリゴマー（例えばPEDOT/PSS、アニリン系共重合体、ポリアニリン、ポリチオフェン等）等が挙げられる。

[0253] トリアリーールアミン誘導体としては、 α -NPD（4,4'-ビス〔N-（1-ナフチル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル）に代表されるベンジ

ジン型や、MTDATAに代表されるスターバースト型、トリアリールアミン連結コア部にフルオレンやアントラセンを有する化合物等が挙げられる。

また、特表2003-519432号公報や特開2006-135145号公報等に記載されているようなヘキサアザトリフェニレン誘導体も同様に正孔輸送材料として用いることができる。

さらに不純物をドーブしたp性の高い正孔輸送層を用いることもできる。その例としては、特開平4-297076号公報、特開2000-196140号公報、同2001-102175号公報の各公報、J. Appl. Phys., 95, 5773 (2004)等に記載されたものが挙げられる。

[0254] また、特開平11-251067号公報、J. Huang et. al. 著文献 (Applied Physics Letters 80 (2002), p. 139) に記載されているような、いわゆるp型正孔輸送材料やp型-Si、p型-SiC等の無機化合物を用いることもできる。さらにIr(ppy)₃に代表されるような中心金属にIrやPtを有するオルトメタル化有機金属錯体も好ましく用いられる。

正孔輸送材料としては、上記のものを使用することができるが、トリアリールアミン誘導体、カルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、アザトリフェニレン誘導体、有機金属錯体、芳香族アミンを主鎖又は側鎖に導入した高分子材料又はオリゴマー等が好ましく用いられる。

[0255] 本発明の有機EL素子に用いられる、公知の好ましい正孔輸送材料の具体例としては、上記で挙げた文献の他、以下の文献に記載の化合物等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

例えば、Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)、J. Lumin. 72-74, 985 (1997)、Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)、Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)、Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)、Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)、Synth. Met. 87, 171 (1997)、Synth

. Met. 91, 209 (1997)、Synth. Met. 111, 421 (2000)、SID Symposium Digest, 37, 923 (2006)、J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)、Adv. Mater. 6, 677 (1994)、Chem. Mater. 15, 3148 (2003)、米国特許出願公開第2003/0162053号明細書、米国特許出願公開第2002/0158242号明細書、米国特許出願公開第2006/0240279号明細書、米国特許出願公開第2008/0220265号明細書、米国特許第5061569号、国際公開第2007/002683号、国際公開第2009/018009号、EP650955、米国特許出願公開第2008/0124572号明細書、米国特許出願公開第2007/0278938号明細書、米国特許出願公開第2008/0106190号明細書、米国特許出願公開第2008/0018221号明細書、国際公開第2012/115034号、特表2003-519432号公報、特開2006-135145号公報、米国特許出願番号13/585981号等である。

正孔輸送材料は単独で用いてもよく、また複数種を併用して用いてもよい。

[0256] 《電子阻止層》

電子阻止層とは、広い意味では正孔輸送層の機能を有する層であり、好ましくは正孔を輸送する機能を有しつつ電子を輸送する能力が小さい材料からなり、正孔を輸送しつつ電子を阻止することで電子と正孔の再結合確率を向上させることができる。

また、前述する正孔輸送層の構成を必要に応じて、本発明に係る電子阻止層として用いることができる。

本発明の有機EL素子に設ける電子阻止層は、発光層の陽極側に隣接して設けられることが好ましい。

本発明に係る電子阻止層の層厚としては、好ましくは3～100nmの範囲内であり、更に好ましくは5～30nmの範囲内である。

電子阻止層に用いられる材料としては、前述の正孔輸送層に用いられる材料が好ましく用いられ、また、前述のホスト化合物も電子阻止層に好ましく用いられる。

[0257] 《正孔注入層》

本発明に係る正孔注入層（「陽極バッファ層」ともいう）とは、駆動電圧低下や発光輝度向上のために陽極と発光層との間に設けられる層のことで、「有機EL素子とその工業化最前線（1998年11月30日エヌ・ティー・エス社発行）」の第2編第2章「電極材料」（123～166頁）に詳細に記載されている。

本発明において正孔注入層は必要に応じて設け、上記のごとく陽極と発光層又は陽極と正孔輸送層との間に存在させてもよい。

正孔注入層は、特開平9-45479号公報、同9-260062号公報、同8-288069号公報等にもその詳細が記載されており、正孔注入層に用いられる材料としては、例えば前述の正孔輸送層に用いられる材料等が挙げられる。

中でも銅フタロシアニンに代表されるフタロシアニン誘導体、特表2003-519432号公報や特開2006-135145号公報等に記載されているようなヘキサアザトリフェニレン誘導体、酸化バナジウムに代表される金属酸化物、アモルファスカーボン、ポリアニリン（エメラルディン）やポリチオフェン等の導電性高分子、トリス（2-フェニルピリジン）イリジウム錯体等に代表されるオルトメタル化錯体、トリアリールアミン誘導体等が好ましい。

前述の正孔注入層に用いられる材料は単独で用いてもよく、また複数種を併用して用いてもよい。

[0258] 《添加物》

上述した各層には、更に他の添加物が含まれていてもよい。

添加物としては、例えば臭素、ヨウ素及び塩素等のハロゲン元素やハロゲン化合物、Pd、Ca、Na等のアルカリ金属やアルカリ土類金属、遷移

金属の化合物や錯体、塩等が挙げられる。

添加物の含有量は、任意に決定することができるが、含有される層の全質量%に対して1000ppm以下であることが好ましく、より好ましくは500ppm以下であり、さらに好ましくは50ppm以下である。

ただし、電子や正孔の輸送性を向上させる目的や、励起子のエネルギー移動を有利にするための目的などによってはこの範囲内ではない。

[0259] 《各層の形成方法》

上述の各層（正孔注入層、正孔輸送層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、中間層等）の形成方法について説明する。

上述の各層の形成方法は、特に制限はなく、従来公知の例えば真空蒸着法、湿式法（ウェットプロセスともいう）等による形成方法を用いることができる。

湿式法としては、スピコート法、キャスト法、インクジェット法、印刷法、ダイコート法、ブレードコート法、ロールコート法、スプレーコート法、カーテンコート法、LB法（ラングミュア・ブロッジェット法）等があるが、均質な薄膜が得られやすく、かつ高生産性の点から、ダイコート法、ロールコート法、インクジェット法、スプレーコート法などのロール・ツー・ロール方式適性の高い方法が好ましい。

[0260] 本発明に用いられる有機EL材料を溶解又は分散する液媒体としては、例えば、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン等のケトン類、酢酸エチル等の脂肪酸エステル類、ジクロロベンゼン等のハロゲン化炭化水素類、トルエン、キシレン、メシチレン、シクロヘキシルベンゼン等の芳香族炭化水素類、シクロヘキサン、デカリン、ドデカン等の脂肪族炭化水素類、DMF、DMSO等の有機溶媒を用いることができる。

また、分散方法としては、超音波、高剪断力分散やメディア分散等の分散方法により分散することができる。

更に層ごとに異なる成膜法を適用してもよい。成膜に蒸着法を採用する場合、その蒸着条件は使用する化合物の種類等により異なるが、一般にボート

加熱温度 $50 \sim 450^{\circ}\text{C}$ 、真空度 $10^{-6} \sim 10^{-2} \text{ Pa}$ 、蒸着速度 $0.01 \sim 50 \text{ nm/秒}$ 、基板温度 $-50 \sim 300^{\circ}\text{C}$ 、層（膜）厚 $0.1 \text{ nm} \sim 5 \mu\text{m}$ 、好ましくは $5 \sim 200 \text{ nm}$ の範囲内で適宜選ぶことが望ましい。

上述の各層の形成は、一回の真空引きで一貫して正孔注入層から陰極まで作製するのが好ましいが、途中で取り出して異なる成膜法を施しても構わない。その際は作業を乾燥不活性ガス雰囲気下で行うことが好ましい。

[0261] 《陽極》

有機EL素子における陽極としては、仕事関数の大きい（ 4 eV 以上、好ましくは 4.5 eV 以上）金属、合金、電気伝導性化合物及びこれらの混合物を電極物質とするものが好ましく用いられる。このような電極物質の具体例としては、Au等の金属、CuI、インジウムスズ酸化物（ITO）、 SnO_2 、ZnO等の導電性透明材料が挙げられる。また、 $\text{In}_2\text{O}_3-\text{ZnO}$ （ $\text{In}_2\text{O}_3-\text{ZnO}$ ）等非晶質で透明導電膜を作製可能な材料を用いてもよい。

陽極はこれらの電極物質を蒸着やスパッタリング等の方法により薄膜を形成させ、フォトリソグラフィー法で所望の形状のパターンを形成してもよく、あるいはパターン精度を余り必要としない場合は（ $100 \mu\text{m}$ 以上程度）、上記電極物質の蒸着やスパッタリング時に所望の形状のマスクを介してパターンを形成してもよい。

あるいは、有機導電性化合物のように塗布可能な物質を用いる場合には、印刷方式、コーティング方式等湿式成膜法を用いることもできる。この陽極より発光を取り出す場合には、透過率を10%より大きくすることが望ましく、また陽極としてのシート抵抗は数百 $\Omega/\square$ 以下が好ましい。

陽極の膜厚は材料にもよるが、通常 $10 \text{ nm} \sim 1 \mu\text{m}$ 、好ましくは $10 \sim 200 \text{ nm}$ の範囲内で選ばれる。

[0262] 《陰極》

陰極としては、仕事関数の小さい（ 4 eV 以下）金属（電子注入性金属と称する）、合金、電気伝導性化合物及びこれらの混合物を電極物質とするものが用いられる。このような電極物質の具体例としては、ナトリウム、ナト

リウム－カリウム合金、マグネシウム、リチウム、マグネシウム／銅混合物、マグネシウム／銀混合物、マグネシウム／アルミニウム混合物、マグネシウム／インジウム混合物、アルミニウム／酸化アルミニウム (Al_2O_3) 混合物、インジウム、リチウム／アルミニウム混合物、アルミニウム、希土類金属等が挙げられる。これらの中で、電子注入性及び酸化等に対する耐久性の点から、電子注入性金属とこれより仕事関数の値が大きく安定な金属である第二金属との混合物、例えば、マグネシウム／銀混合物、マグネシウム／アルミニウム混合物、マグネシウム／インジウム混合物、アルミニウム／酸化アルミニウム (Al_2O_3) 混合物、リチウム／アルミニウム混合物、アルミニウム等が好適である。

[0263] 陰極はこれらの電極物質を蒸着やスパッタリング等の方法により、薄膜を形成させることで作製することができる。また、陰極としてのシート抵抗は数百 $\Omega/\square$ 以下が好ましく、膜厚は通常 10 nm ～ 5 μm 、好ましくは 50 ～ 200 nm の範囲で選ばれる。

なお、発光した光を透過させるため、有機 EL 素子の陽極又は陰極のいずれか一方が透明又は半透明であれば発光輝度が向上し好都合である。

また、陰極に上記金属を 1 ～ 20 nm の膜厚で作製した後に、陽極の説明で挙げる導電性透明材料をその上に作製することで、透明又は半透明の陰極を作製することができ、これを応用することで陽極と陰極の両方が透過性を有する素子を作製することができる。

[0264] 《特定の π 共役系化合物を用いた有機 EL 素子》

本発明の π 共役系化合物の中でも、上述の一般式 (201) で表される特定の π 共役系化合物は、発光層中に単独で存在しても高い発光効率を有することから、従来必要とされていたホスト化合物が不要となる。したがって、当該特定の π 共役系化合物によれば、発光効率と耐久性を低下させることなく、有機 EL 素子の構成を簡易にすることができる。以下、特定の π 共役系化合物を用いた有機 EL 素子について説明する。

[0265] 特定の π 共役系化合物を用いた有機 EL 素子は、陽極と、陰極と、それら

の間に配置される有機層とを含む。有機層は、実質的に一般式（201）で表される π 共役系化合物以外のホスト化合物を含まない。即ち、有機層は、実質的に一般式（201）で表される π 共役系化合物からなるか（第1の態様）、実質的に一般式（201）で表される π 共役系化合物とゲスト化合物からなること（第2の態様）が好ましい。第1の有機EL素子では、一般式（201）で表される π 共役系化合物がホスト化合物兼発光性化合物として機能し、第2の有機EL素子では、一般式（201）で表される π 共役系化合物がホスト化合物として機能しうる。

[0266] 「有機層が、実質的に一般式（201）で表される π 共役系化合物からなる」とは、有機層が、発光性能や耐久性能に影響しない程度の不純物を含んでいてもよいことをいい、具体的には、有機層における一般式（201）で表される π 共役系化合物の含有量が95体積%以上、好ましくは99体積%以上、特に好ましくは100体積%であることをいう。同様に、「実質的に一般式（201）で表される π 共役系化合物とゲスト化合物からなる」とは、有機層における一般式（201）で表される π 共役系化合物とゲスト化合物の含有量の合計が95体積%以上、好ましくは99体積%以上、特に好ましくは100体積%であることをいう。

[0267] 有機層は、発光層であることが好ましい。発光層は、単層で構成されてもよいし、複数層で構成されてもよい。そのような発光層は、従来のホスト化合物を含まなくても高効率で発光しうる。従って、有機EL素子の構成を簡易にすることができるので、生産性や信頼性を高めることができる。以下、それぞれの態様について説明する。

[0268] （第1の態様の有機EL素子について）

図5A～5Cは、特定の π 共役系化合物を用いた第1の態様の有機EL素子の構成例を示す図である。図5A～5Cに示されるように、第1の態様の有機EL素子1は、支持基板2上に設けられた陽極3と、陰極4と、それらの間に配置される発光層5とを含む。

[0269] 発光層5は、実質的に一般式（201）で表される π 共役系化合物で構成

される。発光層5は、前述の有機EL素子と同様に、電極（有機EL素子が他の層を含む場合は隣接する層）から注入される電子及び正孔が再結合し、励起子を経由して発光する場を提供する層である。発光する部分は、発光層の層内であってもよいし、有機EL素子が他の層を含む場合は発光層と隣接する層との界面であってもよい。

[0270] 発光層5は、単層で構成されてもよいし、複数の層で構成されてもよい。発光層5の層厚の総和や、発光層5の1層当たりの層厚は、前述の有機EL素子と同様にすることができる。

[0271] ここで、発光層5に含まれる一般式(201)で表される π 共役系化合物は、TADF性を有していることが好ましい。電界励起で生成した75%の T_1 エネルギーが S_1 へ項間交差して蛍光発光するので、生成した励起エネルギーをロスなく使うことができ、高い外部量子収率が得られやすいからである。有機EL素子が他の層を含む場合は、隣接する層に含まれる化合物と、発光層5に含まれる一般式(201)で表される π 共役系化合物とが励起錯体を形成して発光してもよい。

[0272] 第1の態様の有機EL素子1は、必要に応じて発光層5と陽極3との間に配置された正孔輸送層6と、発光層5と陰極4との間に配置された電子輸送層7の少なくとも一方をさらに含んでもよい（図5B参照）。正孔輸送層6や電子輸送層7は、それぞれ正孔又は電子の移動度を調整する層として機能し、再結合確率を高めて発光効率を向上させたり、駆動電圧を低下させたりし得る。

[0273] 第1の態様の有機EL素子1は、必要に応じて発光層5と陽極3との間に配置された正孔注入層8と、発光層5と陰極4との間に配置された電子注入層9の少なくとも一方をさらに含んでもよい（図5C参照）。正孔注入層8や電子注入層9は、発光層5と、無機物で構成される陽極3や陰極4との接合性を高めることができ、電子や正孔を有機層に注入しやすくしうる。

[0274] 第1の態様の有機EL素子1は、必要に応じて発光層5と陰極4との間に配置された正孔阻止層（不図示）と、発光層5と陽極3との間に配置された

電子阻止層（不図示）の少なくとも一方をさらに含んでもよい。

[0275] 中でも、有機EL素子を構成する層の数を少なくし、生産性や信頼性を高めやすくする観点から、第1の態様の有機EL素子は、発光層5と陽極3との間、及び発光層5と陰極4との間に他の層を含まないことが好ましい（図5A参照）。つまり、発光層5の一方の面が陽極3と接し、且つ発光層5の他方の面が陰極4と接していることが好ましい。

[0276] 第1の態様の有機EL素子における代表的な素子構成としては、前述の有機EL素子の構成と同様とすることができるが、上記の構成に限定されるものではない。当該有機EL素子に含まれる、電子輸送層、正孔阻止層、電子注入層、正孔輸送層、電子阻止層、正孔注入層や、これらに含まれる添加物、各層の形成方法は、前述の有機EL素子と同様とすることができる。

[0277] （第2の態様の有機EL素子について）

図6は、特定の π 共役系化合物を用いた第2の態様の有機EL素子の構成例を示す図である。図6に示されるように、第2の態様の有機EL素子1'は、支持基板2上に設けられた陽極3と、陰極4と、一方の面が陽極3と接し、且つ他方の面が陰極4と接する発光層5'を含む。

[0278] 発光層5'は、実質的に一般式(201)で表される π 共役系化合物とゲスト化合物とで構成される。発光層5'は、第1の態様の有機EL素子における発光層5と同様に、単層で構成されてもよいし、複数の層で構成されてもよい。発光層5'の層厚の総和及び1層当たりの層厚は、第1の態様の有機EL素子における発光層5の層厚の総和及び1層当たりの層厚と同様とする。

[0279] 発光層5'に含まれるゲスト化合物は、一般式(201)で表される π 共役系化合物以外の蛍光発光性化合物（蛍光発光性ドーパント、又は蛍光ドーパントともいう）或いはリン光発光性化合物（リン光発光性ドーパント、又はリン光ドーパントともいう）でありうる。ゲスト化合物は、複数種を併用して用いてもよく、構造の異なる蛍光発光性化合物同士の組み合わせや、蛍光発光性化合物とリン光発光性化合物とを組み合わせてもよい。それにより

、任意の発光色を得ることができる。

[0280] 発光層5'中のゲスト化合物の含有量は、発光層5'の0.1~20体積%であることが好ましく、0.1~5体積%であることがより好ましく、0.1~1体積%であることがさらに好ましい。ゲスト化合物の含有量が20体積%を超えると、発光層5'中の電子と正孔の再結合が、ゲスト化合物上で発生しやすくなり、ゲスト化合物で再結合して75%の確率で生成する T_1 エネルギーは発光することなく熱失活し、外部量子効率を下げる要因となるからである。ゲスト化合物は、発光層5'の層厚方向に対して均一な濃度で含有されていてもよいし、任意の濃度分布を有していてもよい。

[0281] 発光層5'に含まれる一般式(201)で表される π 共役系化合物は、TADF性を有することが好ましい。一般式(201)で表される π 共役系化合物がTADF性を有していると、該 π 共役系化合物上で生成した T_1 エネルギーは、 S_1 へと逆項間交差される。そして、更にゲスト化合物上にエネルギー移動(蛍光共鳴エネルギー移動(FRET))し、ゲスト化合物が発光するので、高い量子収率を得ることができる。したがって、一般式(201)で表される π 共役系化合物とゲスト化合物の2成分からなる発光層5'では、当該 π 共役系化合物の S_1 と T_1 のエネルギー準位は、ゲスト化合物の S_1 と T_1 のエネルギー準位よりも高いことが好ましい。

[0282] 図4に、一般式(201)で表される π 共役系化合物がホスト化合物として作用する場合の模式図を示す。図4は一例であって、一般式(201)で表される π 共役系化合物上に生成する三重項励起子の生成過程は電界励起のみに限定されず、発光層内又は周辺層界面からのエネルギー移動や電子移動等も含まれる。さらに、図4では、ゲスト化合物(発光性化合物)として蛍光発光性化合物を用いて示しているが、これに限定されず、リン光発光性化合物を用いてもよいし、蛍光発光性化合物とリン光発光性化合物の両者を用いてもよい。

[0283] 一般式(201)で表される π 共役系化合物がホスト化合物として機能する場合、一般式(201)で表される π 共役系化合物の発光スペクトルとゲ

スト化合物の吸収スペクトルが重なることが好ましい。

[0284] 発光層5'では、一般式(201)で表される π 共役系化合物とゲスト化合物とが励起状態で錯体を形成(エキサイプレックスを形成)して発光してもよい。

[0285] 本発明の有機EL素子や本発明に用いられる化合物の発光する色は、前述の有機EL素子と同様とすることができる。

[0286] 第2の態様の発光層に使用可能な発光性ドーパントやリン光発光性ドーパントは、前述の前述の有機EL素子に使用できる蛍光発光性ドーパントやリン光性ドーパントと同様とすることができる。なお、蛍光発光性ドーパントとして、遅延蛍光性ドーパントを選択して用いてもよい。遅延蛍光性ドーパントは、一般式(201)で表される π 共役系化合物以外の、 ΔE_{ST} が0.5 eV以下の化合物である。発光層5'は、前述の有機EL素子の各層の形成方法と同様の方法で形成されうる。

[0287] [支持基板]

本発明の有機EL素子に用いることのできる支持基板(以下、基板、基材等ともいう。)としては、ガラス、プラスチック等の種類には特に限定はなく、また透明であっても不透明であってもよい。支持基板側から光を取り出す場合には、支持基板は透明であることが好ましい。好ましく用いられる透明な支持基板としては、ガラス、石英、透明樹脂フィルムを挙げることができる。特に好ましい支持基板は、有機EL素子にフレキシブル性を与えることが可能な樹脂フィルムである。

[0288] 樹脂フィルムとしては、例えば、ポリエチレンテレフタレート(PET)、ポリエチレンナフタレート(PEN)等のポリエステル、ポリエチレン、ポリプロピレン、セロファン、セルロースジアセテート、セルローストリアセテート(TAC)、セルロースアセテートブチレート、セルロースアセテートプロピオネート(CAP)、セルロースアセテートフタレート、セルロースナイトレート等のセルロースエステル類又はそれらの誘導体、ポリ塩化ビニリデン、ポリビニルアルコール、ポリエチレンビニルアルコール、シン

ジオタクティックポリスチレン、ポリカーボネート、ノルボルネン樹脂、ポリメチルペンテン、ポリエーテルケトン、ポリイミド、ポリエーテルスルホン（PES）、ポリフェニレンスルフィド、ポリスルホン類、ポリエーテルイミド、ポリエーテルケトンイミド、ポリアミド、フッ素樹脂、ナイロン、ポリメチルメタクリレート、アクリルあるいはポリアリレート類、アートン（商品名J S R社製）あるいはアペル（商品名三井化学社製）といったシクロオレフィン系樹脂等を挙げられる。

[0289] 樹脂フィルムの表面には、無機物、有機物の被膜又はその両者のハイブリッド被膜が形成されていてもよく、J I S K 7 1 2 9 - 1 9 9 2 に準拠した方法で測定された、水蒸気透過度（ $25 \pm 0.5^{\circ}\text{C}$ 、相対湿度（ 90 ± 2 ）%RH）が $0.01 \text{ g/m}^2 \cdot 24 \text{ h}$ 以下のバリア性フィルムであることが好ましく、更には、J I S K 7 1 2 6 - 1 9 8 7 に準拠した方法で測定された酸素透過度が、 $1 \times 10^{-3} \text{ ml/m}^2 \cdot 24 \text{ h} \cdot \text{atm}$ 以下、水蒸気透過度が、 $1 \times 10^{-5} \text{ g/m}^2 \cdot 24 \text{ h}$ 以下の高バリア性フィルムであることが好ましい。

[0290] バリア膜を形成する材料としては、水分や酸素等素子の劣化をもたらすものの浸入を抑制する機能を有する材料であればよく、例えば、酸化ケイ素、二酸化ケイ素、窒化ケイ素等を用いることができる。更に該膜の脆弱性を改良するために、これら無機層と有機材料からなる層の積層構造を持たせることがより好ましい。無機層と有機材料からなる層の積層順については特に制限はないが、両者を交互に複数回積層させることが好ましい。

バリア膜の形成方法については特に限定はなく、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、反応性スパッタリング法、分子線エピタキシー法、クラスターイオンビーム法、イオンプレーティング法、プラズマ重合法、大気圧プラズマ重合法、プラズマCVD法、レーザーCVD法、熱CVD法、コーティング法等を用いることができるが、特開2004-68143号公報に記載されているような大気圧プラズマ重合法によるものが特に好ましい。

[0291] 不透明な支持基板としては、例えば、アルミ、ステンレス等の金属板、フ

ィルムや不透明樹脂基板、セラミック製の基板等が挙げられる。

本発明の有機EL素子の発光の室温（25℃）における外部取り出し量子効率、1%以上であることが好ましく、5%以上であるとより好ましい。

ここで、外部取り出し量子効率（%）＝有機EL素子外部に発光した光子数／有機EL素子に流した電子数×100である。

また、カラーフィルター等の色相改良フィルター等を併用しても、有機EL素子からの発光色を、蛍光体を用いて多色へ変換する色変換フィルターを併用してもよい。

[0292] [封止]

本発明の有機EL素子の封止に用いられる封止手段としては、例えば、封止部材と、電極、支持基板とを接着剤で接着する方法を挙げることができる。封止部材としては、有機EL素子の表示領域を覆うように配置されていればよく、凹板状でも、平板状でもよい。また、透明性、電気絶縁性は特に限定されない。

具体的には、ガラス板、ポリマー板・フィルム、金属板・フィルム等が挙げられる。ガラス板としては、特にソーダ石灰ガラス、バリウム・ストロンチウム含有ガラス、鉛ガラス、アルミノケイ酸ガラス、ホウケイ酸ガラス、バリウムホウケイ酸ガラス、石英等を挙げることができる。また、ポリマー板としては、ポリカーボネート、アクリル、ポリエチレンテレフタレート、ポリエーテルサルファイド、ポリサルフォン等を挙げることができる。金属板としては、ステンレス、鉄、銅、アルミニウム、マグネシウム、ニッケル、亜鉛、クロム、チタン、モリブテン、シリコン、ゲルマニウム及びタンタルからなる群から選ばれる1種以上の金属又は合金からなるものが挙げられる。

[0293] 本発明においては、有機EL素子を薄膜化できるということからポリマーフィルム、金属フィルムを好ましく使用することができる。さらには、ポリマーフィルムはJIS K 7126-1987に準拠した方法で測定された酸素透過度が $1 \times 10^{-3} \text{ ml/m}^2 \cdot 24 \text{ h}$ 以下、JIS K 7129-

1992に準拠した方法で測定された、水蒸気透過度 ($25 \pm 0.5^\circ\text{C}$ 、相対湿度 $90 \pm 2\%$) が、 $1 \times 10^{-3} \text{ g/m}^2 \cdot 24 \text{ h}$ 以下のものであることが好ましい。

封止部材を凹状に加工するのは、サンドブラスト加工、化学エッチング加工等が使われる。

[0294] 接着剤として具体的には、アクリル酸系オリゴマー、メタクリル酸系オリゴマーの反応性ビニル基を有する光硬化及び熱硬化型接着剤、2-シアノアクリル酸エステル等の湿気硬化型等の接着剤を挙げることができる。また、エポキシ系等の熱及び化学硬化型（二液混合）を挙げることができる。また、ホットメルト型のポリアミド、ポリエステル、ポリオレフィンを挙げることができる。また、カチオン硬化タイプの紫外線硬化型エポキシ樹脂接着剤を挙げることができる。

なお、有機EL素子が熱処理により劣化する場合があるので、室温から 80°C までに接着硬化できるものが好ましい。また、前記接着剤中に乾燥剤を分散させておいてもよい。封止部分への接着剤の塗布は市販のディスペンサーを使ってもよいし、スクリーン印刷のように印刷してもよい。

[0295] また、有機EL素子の構成層（例えば発光層）を挟み支持基板と対向する側の電極の外側に該電極と上記構成層とを被覆し、支持基板と接する形で無機物、有機物の層を形成し封止膜とすることも好適にできる。この場合、該膜を形成する材料としては、水分や酸素等素子の劣化をもたらすものの浸入を抑制する機能を有する材料であればよく、例えば、酸化ケイ素、二酸化ケイ素、窒化ケイ素等を用いることができる。

さらに該膜の脆弱性を改良するために、これら無機層と有機材料からなる層の積層構造を持たせることが好ましい。これらの膜の形成方法については特に限定はなく、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、反応性スパッタリング法、分子線エピタキシー法、クラスターイオンビーム法、イオンプレーティング法、プラズマ重合法、大気圧プラズマ重合法、プラズマCVD法、レーザーCVD法、熱CVD法、コーティング法等を用いることができる。

。

[0296] 封止部材と有機EL素子の表示領域との間隙には、気相及び液相では、窒素、アルゴン等の不活性気体やフッ化炭化水素、シリコンオイルのような不活性液体を注入することが好ましい。また、真空とすることも可能である。また、内部に吸湿性化合物を封入することもできる。

吸湿性化合物としては、例えば、金属酸化物（例えば、酸化ナトリウム、酸化カリウム、酸化カルシウム、酸化バリウム、酸化マグネシウム、酸化アルミニウム等）、硫酸塩（例えば、硫酸ナトリウム、硫酸カルシウム、硫酸マグネシウム、硫酸コバルト等）、金属ハロゲン化物（例えば、塩化カルシウム、塩化マグネシウム、フッ化セシウム、フッ化タンタル、臭化セリウム、臭化マグネシウム、ヨウ化バリウム、ヨウ化マグネシウム等）、過塩素酸類（例えば、過塩素酸バリウム、過塩素酸マグネシウム等）等が挙げられ、硫酸塩、金属ハロゲン化物及び過塩素酸類においては無水塩が好適に用いられる。

[0297] [保護膜、保護板]

有機EL素子の構成層を挟み支持基板と対向する側の前記封止膜あるいは前記封止用フィルムの外側に、素子の機械的強度を高めるために、保護膜あるいは保護板を設けてもよい。特に、封止が前記封止膜により行われている場合には、その機械的強度は必ずしも高くないため、このような保護膜、保護板を設けることが好ましい。これに使用することができる材料としては、前記封止に用いたのと同様なガラス板、ポリマー板・フィルム、金属板・フィルム等を用いることができるが、軽量かつ薄膜化ということからポリマーフィルムを用いることが好ましい。

[0298] [光取り出し向上技術]

有機EL素子は、空気よりも屈折率の高い（屈折率1.6～2.1程度の範囲内）層の内部で発光し、発光層で発生した光のうち15%から20%程度の光しか取り出せないことが一般的に言われている。これは、臨界角以上の角度 θ で界面（透明基板と空気との界面）に入射する光は、全反射を起こ

し素子外部に取り出すことができないことや、透明電極ないし発光層と透明基板との間で光が全反射を起こし、光が透明電極ないし発光層を導波し、結果として、光が素子側面方向に逃げるためである。

[0299] この光の取り出しの効率を向上させる手法としては、例えば、透明基板表面に凹凸を形成し、透明基板と空気界面での全反射を防ぐ方法（例えば、米国特許第4 7 7 4 4 3 5号明細書）、基板に集光性を持たせることにより効率を向上させる方法（例えば、特開昭63-314795号公報）、素子の側面等に反射面を形成する方法（例えば、特開平1-220394号公報）、基板と発光体の間に中間の屈折率を持つ平坦層を導入し、反射防止膜を形成する方法（例えば、特開昭62-172691号公報）、基板と発光体の間に基板よりも低屈折率を持つ平坦層を導入する方法（例えば、特開2001-202827号公報）、基板、透明電極層や発光層のいずれかの層間（含む、基板と外界間）に回折格子を形成する方法（特開平11-283751号公報）などが挙げられる。

[0300] 本発明においては、これらの方法を本発明の有機EL素子と組み合わせて用いることができるが、基板と発光体の間に基板よりも低屈折率を持つ平坦層を導入する方法、あるいは基板、透明電極層や発光層のいずれかの層間（含む、基板と外界間）に回折格子を形成する方法を好適に用いることができる。

本発明は、これらの手段を組み合わせることにより、更に高輝度あるいは耐久性に優れた素子を得ることができる。

[0301] 透明電極と透明基板の間に低屈折率の媒質を光の波長よりも長い厚さで形成すると、透明電極から出てきた光は、媒質の屈折率が低いほど、外部への取り出し効率が高くなる。

低屈折率層としては、例えば、エアロゲル、多孔質シリカ、フッ化マグネシウム、フッ素系ポリマーなどが挙げられる。透明基板の屈折率は一般に1.5～1.7程度の範囲内であるので、低屈折率層は、屈折率がおよそ1.5以下であることが好ましい。またさらに1.35以下であることが好まし

い。

また、低屈折率媒質の厚さは、媒質中の波長の2倍以上となるのが望ましい。これは、低屈折率媒質の厚さが、光の波長程度になってエバネッセントで染み出した電磁波が基板内に入り込む膜厚になると、低屈折率層の効果が薄れるからである。

[0302] 全反射を起こす界面又は、いずれかの媒質中に回折格子を導入する方法は、光取り出し効率の向上効果が高いという特徴がある。この方法は、回折格子が1次の回折や、2次の回折といった、いわゆるブラッグ回折により、光の向きを屈折とは異なる特定の向きに変えることができる性質を利用して、発光層から発生した光のうち、層間での全反射等により外に出ることができない光を、いずれかの層間若しくは、媒質中（透明基板内や透明電極内）に回折格子を導入することで光を回折させ、光を外に取り出そうとするものである。

[0303] 導入する回折格子は、二次元的な周期屈折率を持っていることが望ましい。これは、発光層で発光する光はあらゆる方向にランダムに発生するので、ある方向にのみ周期的な屈折率分布を持っている一般的な一次元回折格子では、特定の方向に進む光しか回折されず、光の取り出し効率がさほど上がらない。

しかしながら、屈折率分布を二次元的な分布にすることにより、あらゆる方向に進む光が回折され、光の取り出し効率が上がる。

回折格子を導入する位置としては、いずれかの層間、若しくは媒質中（透明基板内や透明電極内）でもよいが、光が発生する場所である有機発光層の近傍が望ましい。このとき、回折格子の周期は、媒質中の光の波長の約1/2～3倍程度の範囲内が好ましい。回折格子の配列は、正方形のラチス状、三角形のラチス状、ハニカムラチス状など、二次元的に配列が繰り返されることが好ましい。

[0304] [集光シート]

本発明の有機EL素子は、支持基板（基板）の光取り出し側に、例えばマイ

クロレンズアレイ上の構造を設ける加工や、いわゆる集光シートと組み合わせることにより、特定方向、例えば素子発光面に対し正面方向に集光することにより、特定方向上の輝度を高めることができる。

マイクロレンズアレイの例としては、基板の光取り出し側に一辺が $30\mu\text{m}$ でその頂角が 90° となるような四角錐を二次元に配列する。一辺は $10\sim 100\mu\text{m}$ の範囲内が好ましい。これより小さくなると回折の効果が発生して色付く、大きすぎると厚さが厚くなり好ましくない。

集光シートとしては、例えば液晶表示装置のLEDバックライトで実用化されているものを用いることが可能である。このようなシートとして例えば、住友スリーエム社製輝度上昇フィルム（BEF）などを用いることができる。プリズムシートの形状としては、例えば、基材に頂角 90° 、ピッチ $50\mu\text{m}$ の△状のストライプが形成されたものであってもよいし、頂角が丸みを帯びた形状、ピッチをランダムに変化させた形状、その他の形状であってもよい。

また、有機EL素子からの光放射角を制御するために光拡散板・フィルムを、集光シートと併用してもよい。例えば、（株）きもと製拡散フィルム（ライトアップ）などを用いることができる。

[0305] [用途]

本発明の有機EL素子は、電子機器、例えば、表示装置、ディスプレイ、各種発光装置として用いることができる。

発光装置として、例えば、照明装置（家庭用照明、車内照明）、時計や液晶用バックライト、看板広告、信号機、光記憶媒体の光源、電子写真複写機の光源、光通信処理機の光源、光センサーの光源等が挙げられるがこれに限定するものではないが、特に液晶表示装置のバックライト、照明用光源としての用途に有効に用いることができる。

本発明の有機EL素子においては、必要に応じ成膜時にメタルマスクやインクジェットプリンティング法等でパターンニングを施してもよい。パターンニングする場合は、電極のみをパターンニングしてもよいし、電極と発光層をパ

ターニングしてもよいし、素子全層をパターニングしてもよく、素子の作製においては、従来公知の方法を用いることができる。

[0306] <表示装置>

本発明の有機EL素子を具備する表示装置は単色でも多色でもよいが、ここでは多色表示装置について説明する。

[0307] 多色表示装置の場合は発光層形成時のみシャドーマスクを設け、一面に蒸着法、キャスト法、スピンコート法、インクジェット法又は印刷法等で膜を形成できる。

発光層のみパターニングを行う場合、その方法に限定はないが、好ましくは蒸着法、インクジェット法、スピンコート法及び印刷法である。

[0308] 表示装置に具備される有機EL素子の構成は、必要に応じて上記の有機EL素子の構成例の中から選択される。

[0309] また、有機EL素子の製造方法は、上記の本発明の有機EL素子の製造の一態様に示したとおりである。

[0310] このようにして得られた多色表示装置に直流電圧を印加する場合には、陽極を＋、陰極を－の極性として電圧2～40V程度を印加すると発光が観測できる。また、逆の極性で電圧を印加しても電流は流れずに発光は全く生じない。更に交流電圧を印加する場合には、陽極が＋、陰極が－の状態になったときのみ発光する。なお、印加する交流の波形は任意でよい。

[0311] 多色表示装置は、表示デバイス、ディスプレイ又は各種発光光源として用いることができる。表示デバイス又はディスプレイにおいて、青、赤及び緑発光の3種の有機EL素子を用いることによりフルカラーの表示が可能となる。

[0312] 表示デバイス又はディスプレイとしては、テレビ、パソコン、モバイル機器、AV機器、文字放送表示及び自動車内の情報表示等が挙げられる。特に静止画像や動画像を再生する表示装置として使用してもよく、動画再生用の表示装置として使用する場合は駆動方式は単純マトリクス（パッシブマトリクス）方式でもアクティブマトリクス方式でもどちらでもよい。

[0313] 発光装置としては、家庭用照明、車内照明、時計や液晶用のバックライト、看板広告、信号機、光記憶媒体の光源、電子写真複写機的光源、光通信処理機的光源、光センサーの光源等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

[0314] 以下、本発明の有機EL素子を有する表示装置の一例を図面に基づいて説明する。

図7は有機EL素子から構成される表示装置の一例を示した模式図である。有機EL素子の発光により画像情報の表示を行う、例えば、携帯電話等のディスプレイの模式図である。

[0315] ディスプレイ10は複数の画素を有する表示部A、画像情報に基づいて表示部Aの画像走査を行う制御部B、表示部Aと制御部Bとを電氣的に接続する配線部C等を有する。

制御部Bは表示部Aと配線部Cを介して電氣的に接続され、複数の画素それぞれに外部からの画像情報に基づいて走査信号と画像データ信号を送り、走査信号により走査線ごとの画素が画像データ信号に応じて順次発光して画像走査を行って画像情報を表示部Aに表示する。

[0316] 図8はアクティブマトリクス方式による表示装置の模式図である。

表示部Aは基板上に、複数の走査線15及びデータ線16を含む配線部Cと複数の画素13等とを有する。表示部Aの主要な部材の説明を以下に行う。

図8においては、画素3の発光した光が白矢印方向（下方向）へ取り出される場合を示している。

[0317] 配線部の走査線15及び複数のデータ線16はそれぞれ導電材料からなり、走査線15とデータ線16は格子状に直交して、直交する位置で画素13に接続している（詳細は図示していない）。

画素13は走査線15から走査信号が印加されると、データ線16から画像データ信号を受け取り、受け取った画像データに応じて発光する。

発光の色が赤領域の画素、緑領域の画素、青領域の画素を適宜同一基板上

に並置することによって、フルカラー表示が可能となる。

[0318] 次に、画素の発光プロセスを説明する。図9は画素の回路を示した概略図である。

画素は、有機EL素子20、スイッチングトランジスタ21、駆動トランジスタ22、コンデンサー23等を備えている。複数の画素に有機EL素子20として、赤色、緑色及び青色発光の有機EL素子を用い、これらを同一基板上に並置することでフルカラー表示を行うことができる。

[0319] 図9において、制御部Bからデータ線16を介してスイッチングトランジスタ21のドレインに画像データ信号が印加される。そして、制御部Bから走査線15を介してスイッチングトランジスタ21のゲートに走査信号が印加されると、スイッチングトランジスタ21の駆動がオンし、ドレインに印加された画像データ信号がコンデンサー23と駆動トランジスタ22のゲートに伝達される。

[0320] 画像データ信号の伝達により、コンデンサー23が画像データ信号の電位に応じて充電されるとともに、駆動トランジスタ22の駆動がオンする。駆動トランジスタ22は、ドレインが電源ライン17に接続され、ソースが有機EL素子20の電極に接続されており、ゲートに印加された画像データ信号の電位に応じて電源ライン17から有機EL素子20に電流が供給される。

[0321] 制御部Bの順次走査により走査信号が次の走査線15に移ると、スイッチングトランジスタ21の駆動がオフする。しかし、スイッチングトランジスタ21の駆動がオフしてもコンデンサー23は充電された画像データ信号の電位を保持するので、駆動トランジスタ22の駆動はオン状態が保たれて、次の走査信号の印加が行われるまで有機EL素子20の発光が継続する。順次走査により次に走査信号が印加されたとき、走査信号に同期した次の画像データ信号の電位に応じて駆動トランジスタ22が駆動して有機EL素子20が発光する。

すなわち、有機EL素子20の発光は、複数の画素それぞれの有機EL素

子20に対して、アクティブ素子であるスイッチングトランジスタ21と駆動トランジスタ22を設けて、複数の画素13それぞれの有機EL素子20の発光を行っている。このような発光方法をアクティブマトリクス方式と呼んでいる。

[0322] ここで、有機EL素子20の発光は複数の階調電位を持つ多値の画像データ信号による複数の階調の発光でもよいし、2値の画像データ信号による所定の発光量のオン、オフでもよい。また、コンデンサ23の電位の保持は次の走査信号の印加まで継続して保持してもよいし、次の走査信号が印加される直前に放電させてもよい。

本発明においては、上述したアクティブマトリクス方式に限らず、走査信号が走査されたときのみデータ信号に応じて有機EL素子を発光させるパッシブマトリクス方式の発光駆動でもよい。

[0323] 図10は、パッシブマトリクス方式による表示装置の模式図である。図10において、複数の走査線15と複数の画像データ線16が画素13を挟んで対向して格子状に設けられている。

順次走査により走査線15の走査信号が印加されたとき、印加された走査線15に接続している画素13が画像データ信号に応じて発光する。

パッシブマトリクス方式では画素13にアクティブ素子が無く、製造コストの低減が計れる。

本発明の有機EL素子を用いることにより、発光効率が向上した表示装置が得られた。

[0324] <照明装置>

本発明の有機EL素子は、照明装置に用いることもできる。

本発明の有機EL素子は、共振器構造を持たせた有機EL素子として用いてもよい。このような共振器構造を有した有機EL素子の使用目的としては、光記憶媒体の光源、電子写真複写機の光源、光通信処理機の光源、光センサーの光源等が挙げられるが、これらに限定されない。また、レーザー発振をさせることにより上記用途に使用してもよい。

また、本発明の有機EL素子は、照明用や露光光源のような一種のランプとして使用してもよいし、画像を投影するタイプのプロジェクション装置や、静止画像や動画像を直接視認するタイプの表示装置（ディスプレイ）として使用してもよい。

動画再生用の表示装置として使用する場合は、パッシブマトリクス方式でもアクティブマトリクス方式でもどちらでもよい。又は、異なる発光色を有する本発明の有機EL素子を2種以上使用することにより、フルカラー表示装置を作製することが可能である。

[0325] また、本発明に用いられる π 共役系化合物は、実質的に白色の発光を生じる有機EL素子を具備する照明装置に適用できる。例えば、複数の発光材料を用いる場合、複数の発光色を同時に発光させて、混色することで白色発光を得ることができる。複数の発光色の組み合わせとしては、赤色、緑色及び青色の3原色の三つの発光極大波長を含有させたものでもよいし、青色と黄色、青緑と橙色等の補色の関係を利用した二つの発光極大波長を含有したものでもよい。

[0326] また、本発明の有機EL素子の形成方法は、発光層、正孔輸送層あるいは電子輸送層等の形成時のみマスクを設け、マスクにより塗り分ける等単純に配置するだけでよい。他層は共通であるのでマスク等のパターニングは不要であり、一面に蒸着法、キャスト法、スピンコート法、インクジェット法及び印刷法等で、例えば、電極膜を形成でき、生産性も向上する。

この方法によれば、複数色の発光素子をアレー状に並列配置した白色有機EL装置と異なり、素子自体が白色発光である。

[0327] [本発明の照明装置の一態様]

本発明の有機EL素子を具備した、本発明の照明装置の一態様について説明する。

本発明の有機EL素子の非発光面をガラスケースで覆い、厚さ300 μ mのガラス基板を封止用基板として用いて、周囲にシール材として、エポキシ系光硬化型接着剤（東亜合成社製ラックストラックLC0629B）を適用

し、これを陰極上に重ねて透明支持基板と密着させ、ガラス基板側からUV光を照射して、硬化させて、封止し、図11及び図12に示すような照明装置を形成することができる。

図11は、照明装置の概略図を示し、本発明の有機EL素子（照明装置内の有機EL素子101）はガラスカバー102で覆われている（なお、ガラスカバーでの封止作業は、照明装置内の有機EL素子101を大気に接触させることなく窒素雰囲気下のグローブボックス（純度99.999%以上の高純度窒素ガスの雰囲気下）で行った。）。

図12は、照明装置の断面図を示し、105は陰極、106は有機EL素子の構成層（例えば発光層）、107は透明電極付きガラス基板を示す。なお、ガラスカバー102内には窒素ガス108が充填され、捕水剤109が設けられている。

本発明の有機EL素子を用いることにより、発光効率が向上した照明装置が得られる。

[0328] <発光材料>

本発明の π 共役系化合物は、電界励起等により、蛍光を放射することができる。したがって、各種発光材料として使用することができる。発光材料には、 π 共役系化合物以外に、必要に応じて他の成分が含まれてもよい。また、発光材料は、粉体状で用いられてもよく、所望の形状に加工されて用いられてもよい。発光材料は、例えば後述の発光性薄膜を形成するための材料や、蛍光塗料、バイオイメージング蛍光色素に適用することができる。

[0329] また、 π 共役系化合物の ΔE_{ST} の絶対値が0.50 eV以下である場合、 π 共役系化合物が、遅延蛍光を放射することがあり、このような化合物は、バイオイメージング蛍光色素に適用することができる。さらに遅延蛍光は、酸素により消光されることが知られているため、酸素センシング材料にも適用することができる。

[0330] <発光性薄膜>

本発明に係る発光性薄膜は、上述の本発明に係る π 共役系化合物を含有す

ることを特徴とし、前記有機EL素子を構成する各層の形成方法と同様に作製することができる。

本発明の発光性薄膜及は、前記有機EL素子を構成する各層の形成方法と同様に作製することができる。

[0331] 本発明の発光性薄膜の形成方法は、特に制限はなく、従来公知の例えば真空蒸着法、湿式法（ウェットプロセスともいう）等による形成方法を用いることができる。

湿式法としては、スピコート法、キャスト法、インクジェット法、印刷法、ダイコート法、ブレードコート法、ロールコート法、スプレーコート法、カーテンコート法、LB法（ラングミュア・プロジェクト法）等があるが、均質な薄膜が得られやすく、かつ高生産性の点から、ダイコート法、ロールコート法、インクジェット法、スプレーコート法などのロール・ツー・ロール方式適性の高い方法が好ましい。

[0332] 本発明に用いられる発光材料を溶解又は分散する液媒体としては、例えば、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン等のケトン類、酢酸エチル等の脂肪酸エステル類、ジクロロベンゼン等のハロゲン化炭化水素類、トルエン、キシレン、メシチレン、シクロヘキシルベンゼン等の芳香族炭化水素類、シクロヘキサン、デカリン、ドデカン等の脂肪族炭化水素類、DMF、DMSO等の有機溶媒を用いることができる。

[0333] また、分散方法としては、超音波、高剪断力分散やメディア分散等の分散方法により分散することができる。

更に層毎に異なる成膜法を適用してもよい。成膜に蒸着法を採用する場合、その蒸着条件は使用する化合物の種類等により異なるが、一般にボート加熱温度を50～450℃の範囲内、真空度を 10^{-6} ～ 10^{-2} Paの範囲内、蒸着速度0.01～50nm/秒の範囲内、基板温度－50～300℃の範囲内、層厚0.1nm～5μmの範囲内、好ましくは5～200nmの範囲内で適宜選ぶことが望ましい。

また、成膜にスピコート法を採用する場合、スピコーターを100～

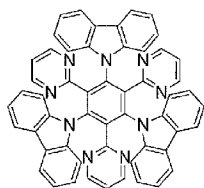
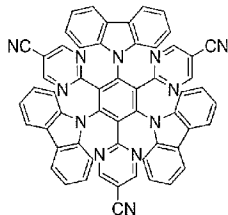
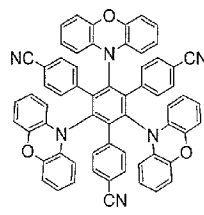
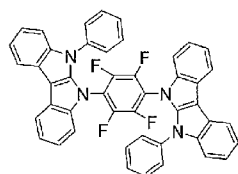
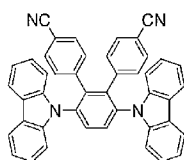
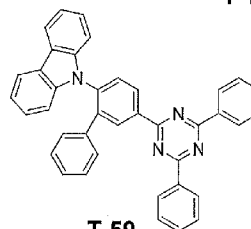
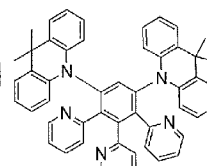
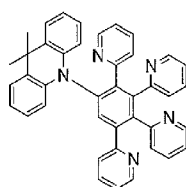
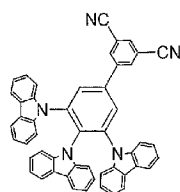
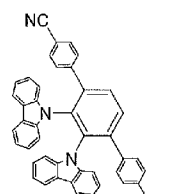
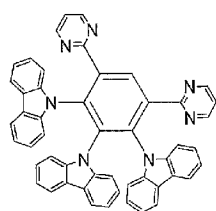
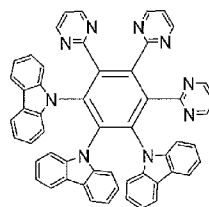
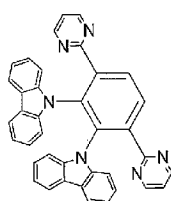
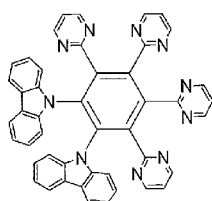
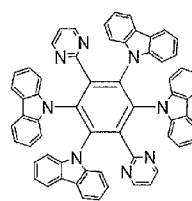
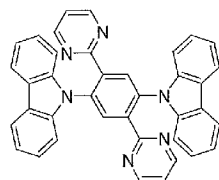
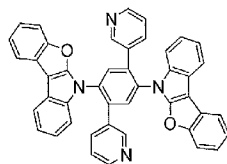
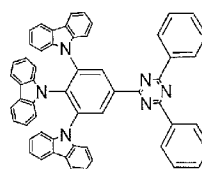
1000 rpmの範囲内、10～120秒の範囲内で、乾燥不活性ガス雰囲気下で行うことが好ましい。

実施例

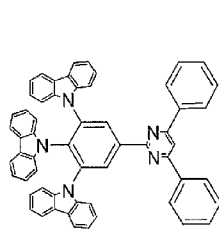
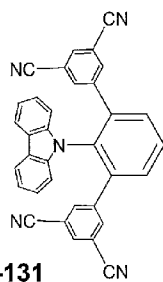
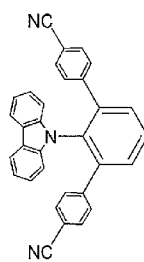
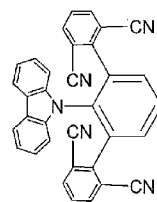
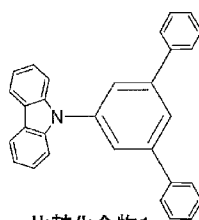
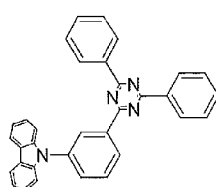
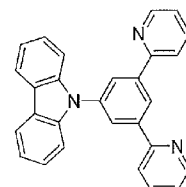
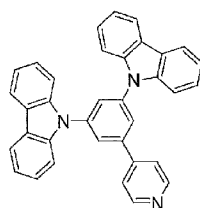
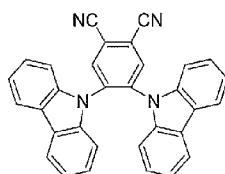
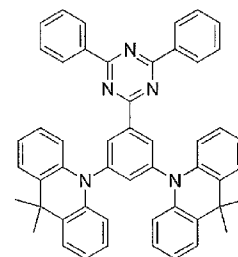
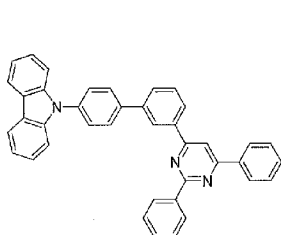
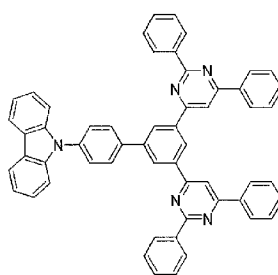
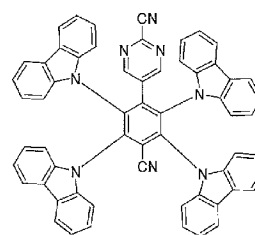
[0334] 以下、実施例により本発明を具体的に説明するが、本発明はこれにより限定されるものではない。なお、実施例において「%」の表示を用いるが、特に断りがない限り「質量%」を表す。

[0335] 実施例及び比較例で用いた化合物を以下に示す。

[化118]

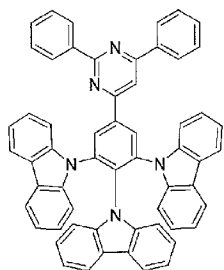
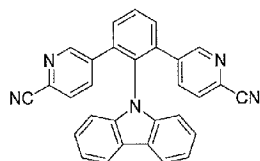
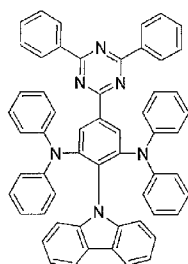
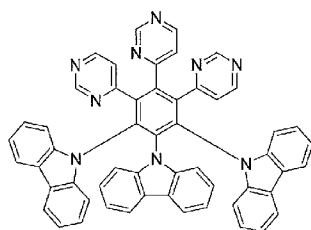
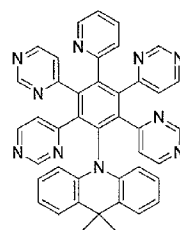
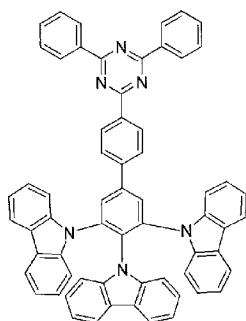
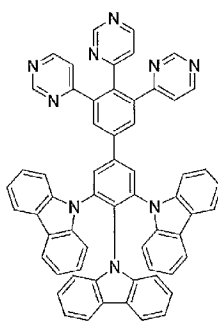
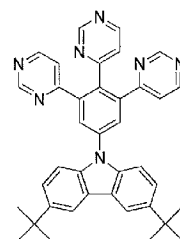
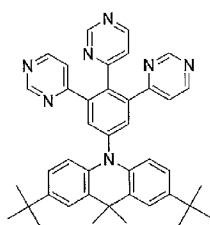
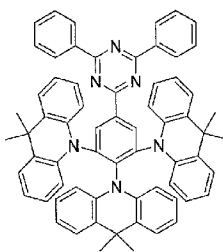
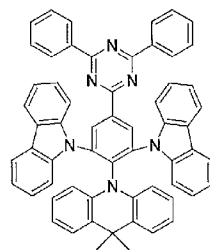
**T-2****T-3****T-13****T-27****T-33****T-59****T-66****T-74****T-78****T-79****T-82****T-83****T-84****T-85****T-96****T-101****T-117****T-124**

[化119]

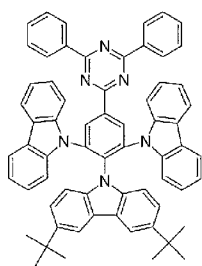
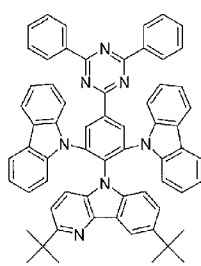
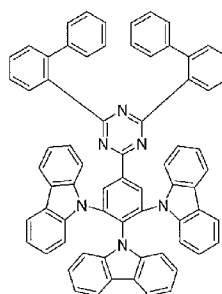
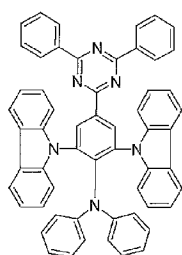
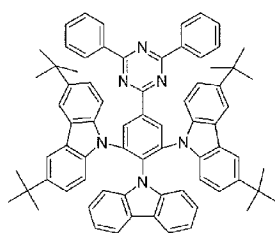
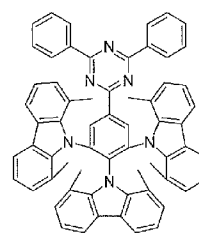
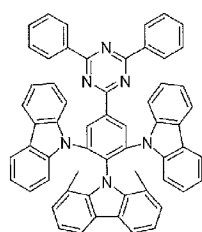
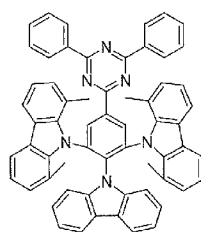
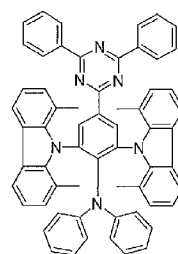
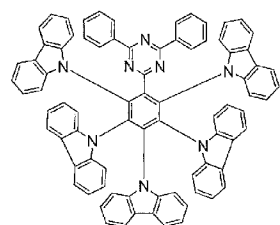
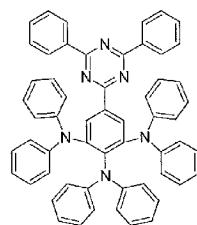
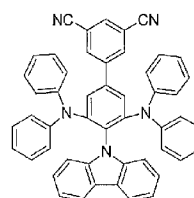
**T-125****T-131****T-132****T-133****比較化合物1****比較化合物2****比較化合物3****比較化合物4****比較例化合物5****比較例化合物6****比較例化合物7****比較例化合物8****比較例化合物9**

[0336]

[化120]

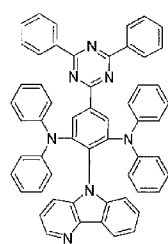
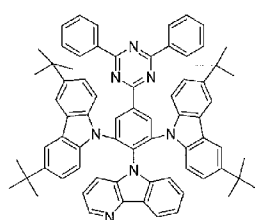
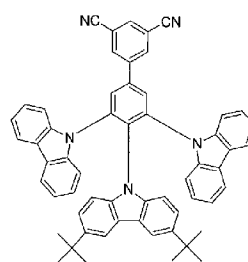
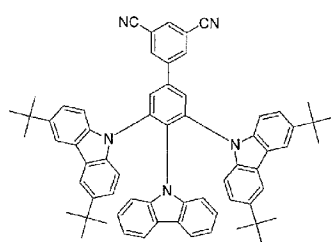
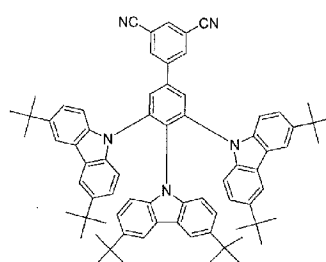
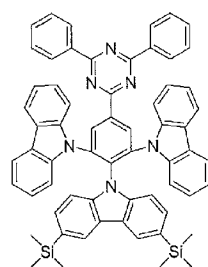
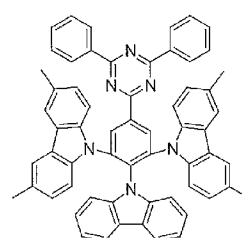
**T-176****T-180****T-182****T-183****T-184****T-185****T-186****T-187****T-188****T-189****T-190**

[化121]

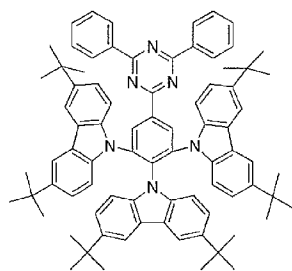
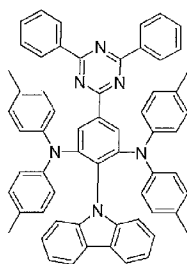
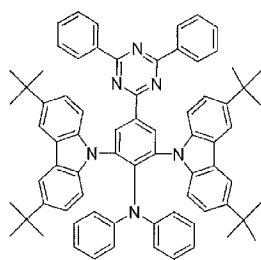
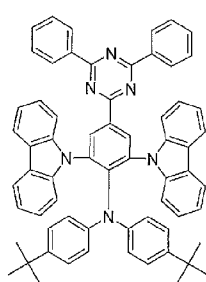
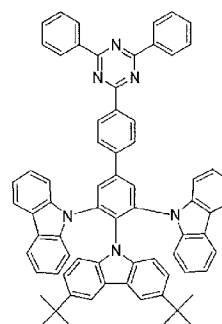
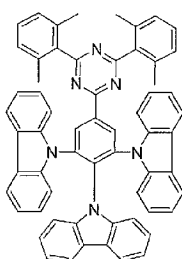
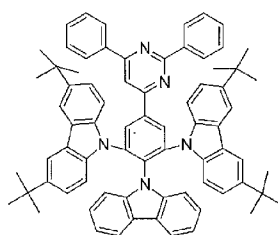
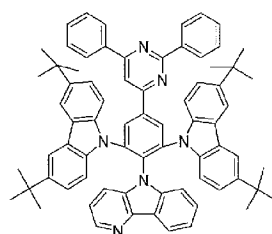
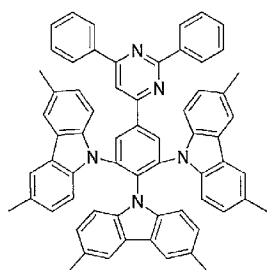
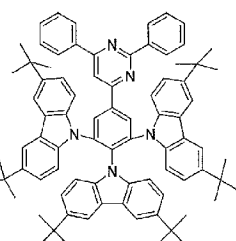
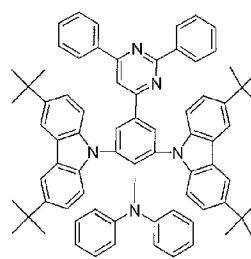
**T-191****T-192****T-193****T-194****T-195****T-196****T-197****T-198****T-199****T-200****T-201****T-202**

[0337]

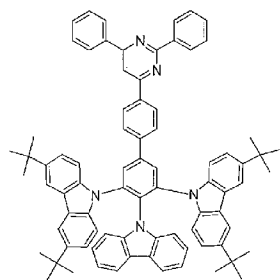
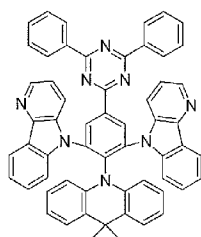
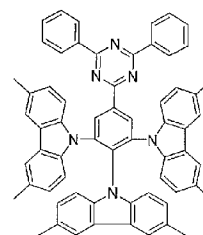
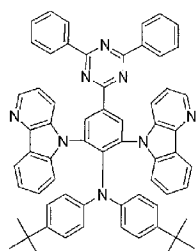
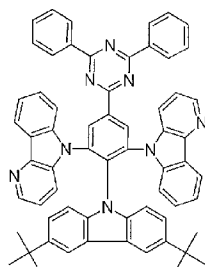
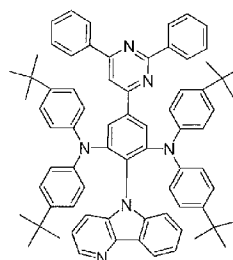
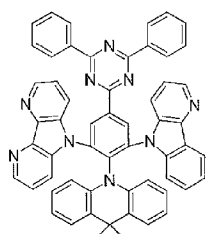
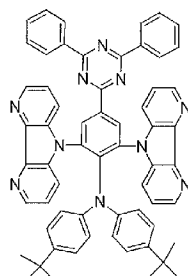
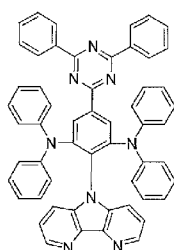
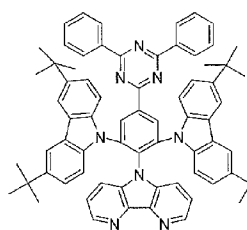
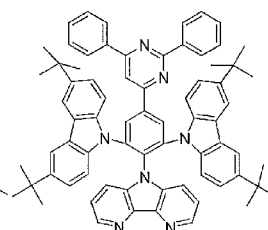
[化122]

**T-203****T-204****T-205****T-206****T-207****T-208****T-210**

[化123]

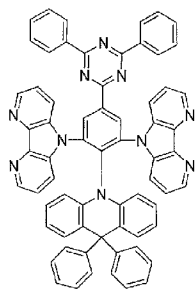
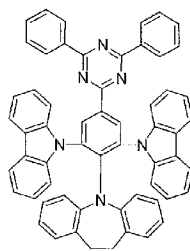
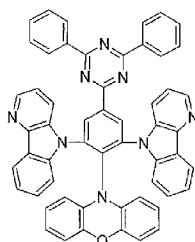
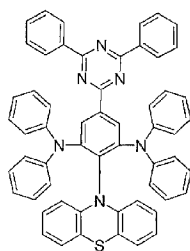
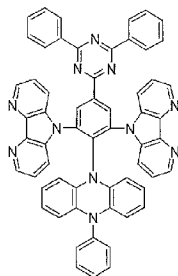
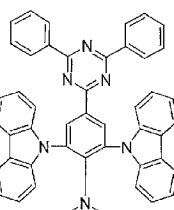
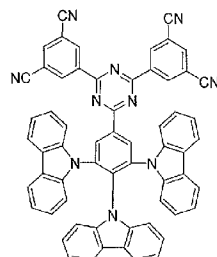
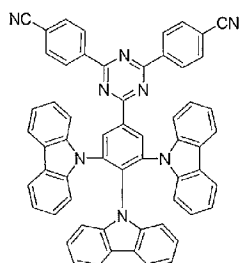
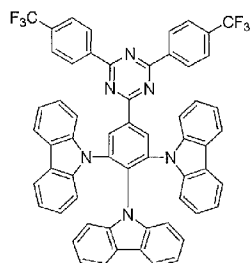
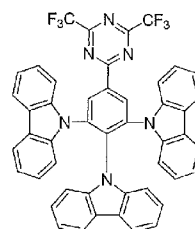
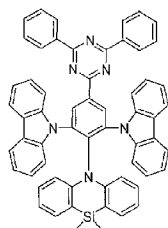
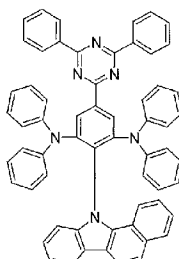
**T-211****T-212****T-214****T-216****T-221****T-227****T-240****T-249****T-252****T-254****T-257**

[化124]

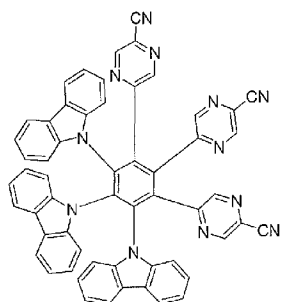
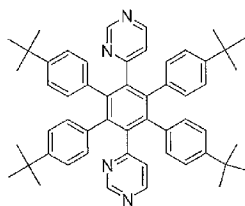
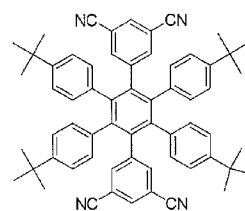
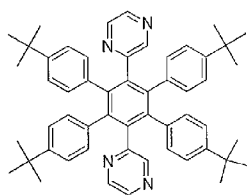
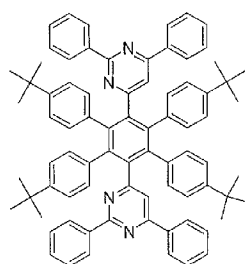
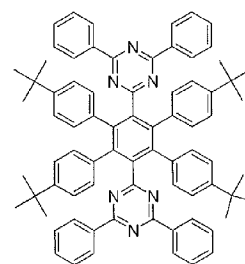
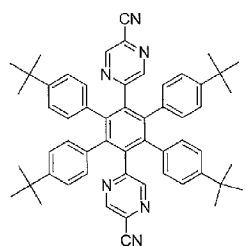
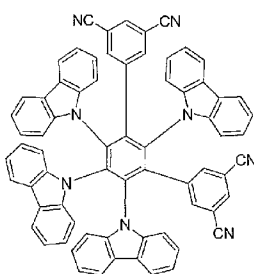
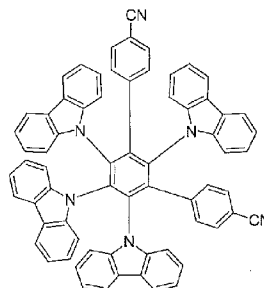
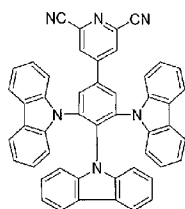
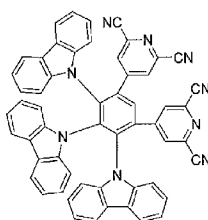
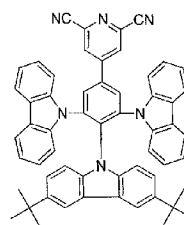
**T-265****T-275****T-282****T-298****T-306****T-328****T-353****T-354****T-365****T-366****T-399**

[0338]

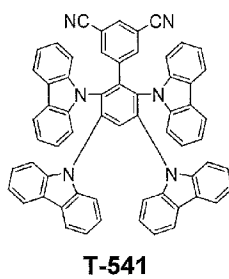
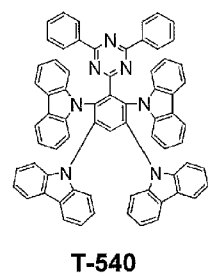
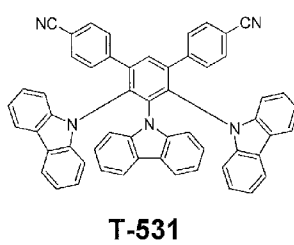
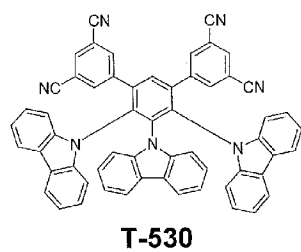
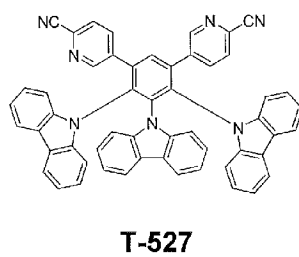
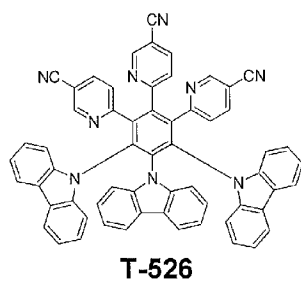
[化125]

**T-429****T-432****T-434****T-442****T-447****T-453****T-456****T-457****T-458****T-459****T-497****T-504**

[化126]

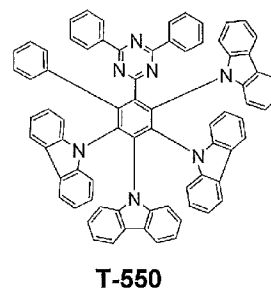
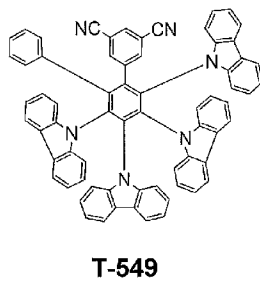
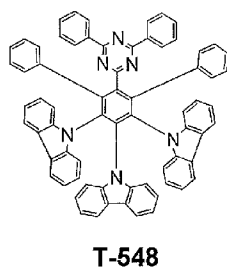
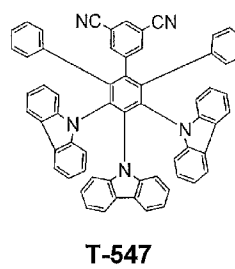
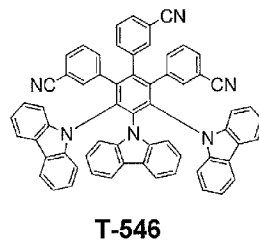
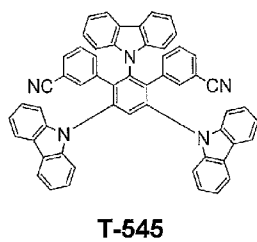
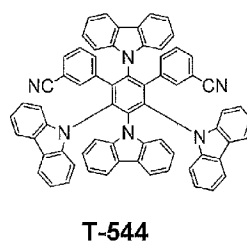
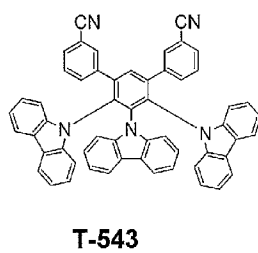
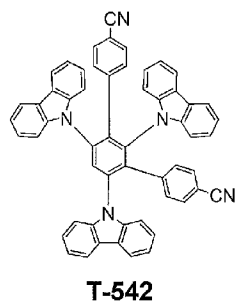
**T-511****T-512****T-513****T-514****T-515****T-516****T-517****T-518****T-519****T-520****T-522****T-525**

[化127]



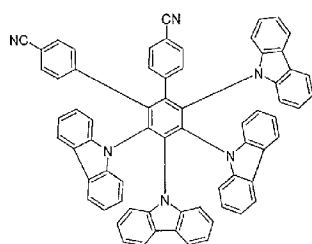
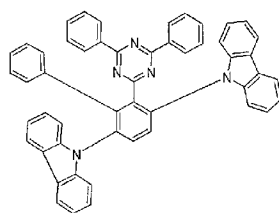
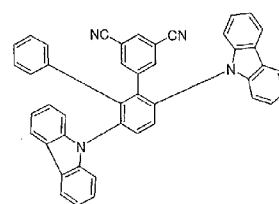
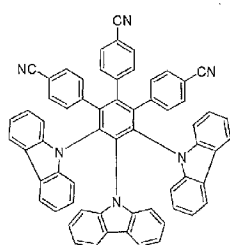
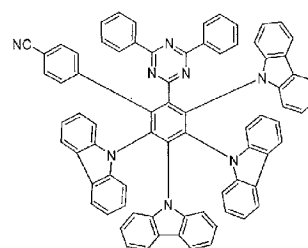
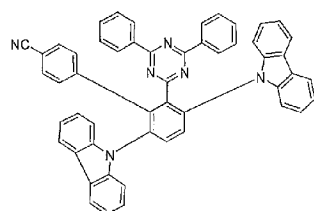
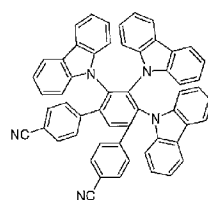
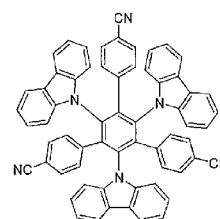
[0339]

[化128]



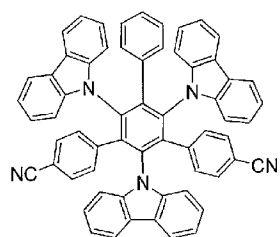
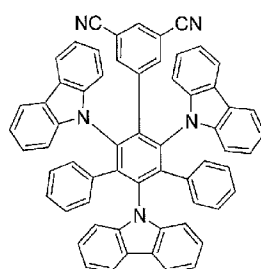
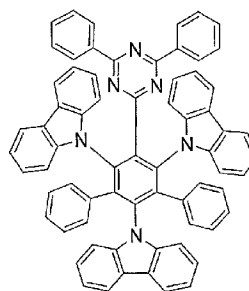
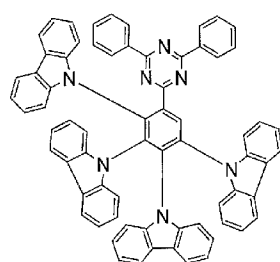
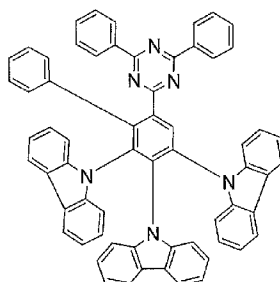
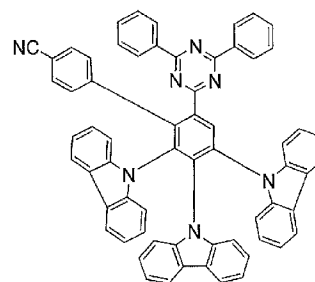
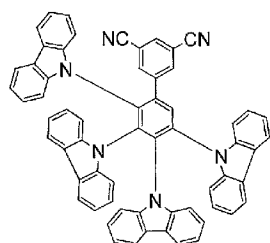
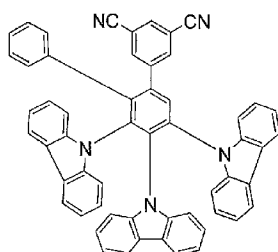
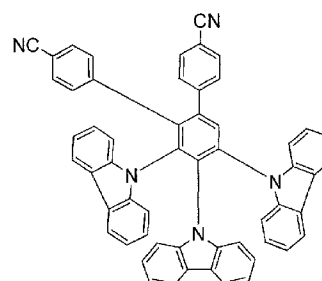
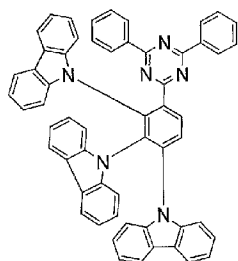
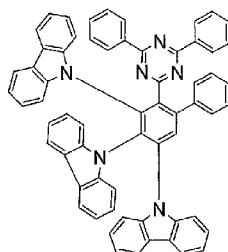
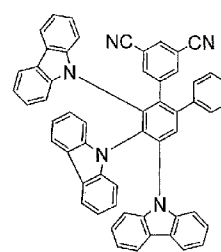
[0340]

[化129]

**T-551****T-552****T-553****T-555****T-556****T-558****T-561****T-562**

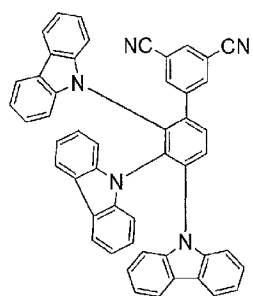
[0341]

[化130]

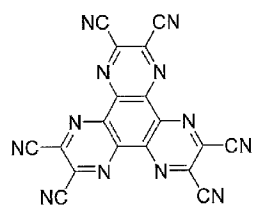
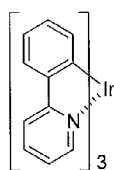
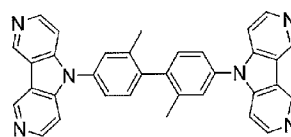
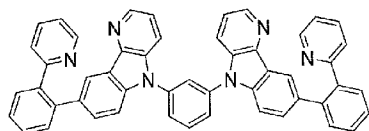
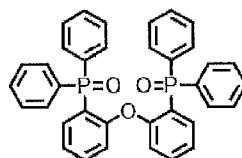
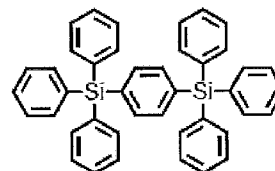
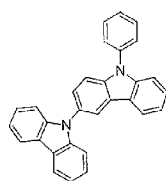
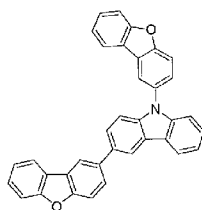
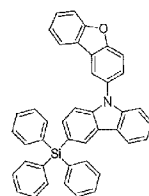
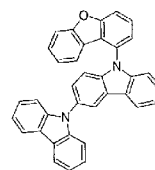
**T-563****T-564****T-565****T-566****T-567****T-568****T-569****T-570****T-571****T-572****T-573****T-574**

[0342]

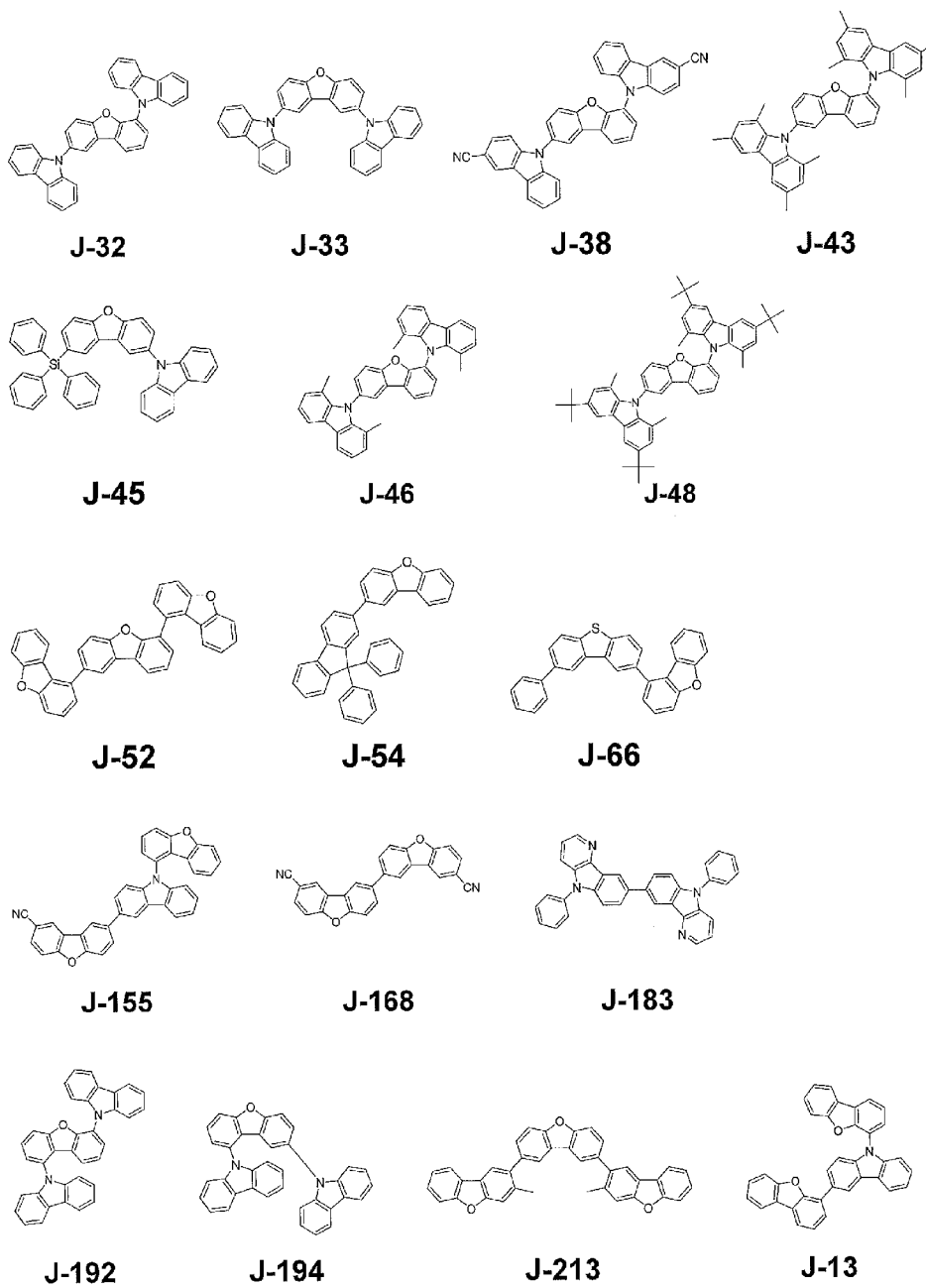
[化131]

**T-576**

[0343] [化132]

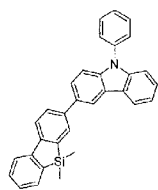
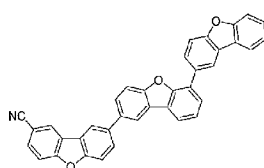
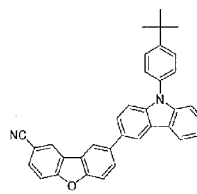
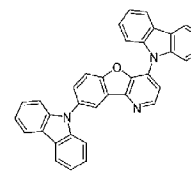
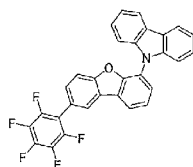
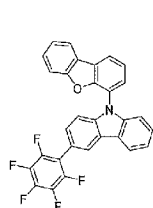
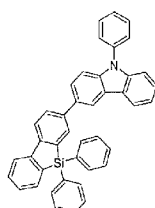
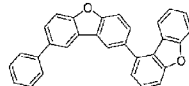
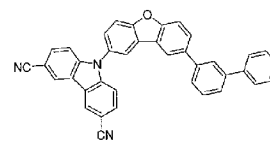
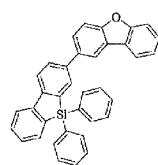
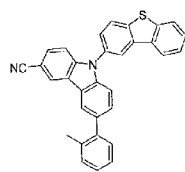
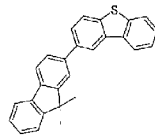
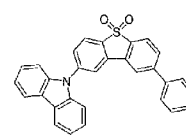
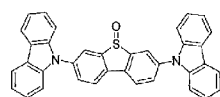
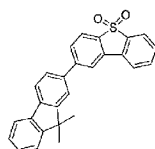
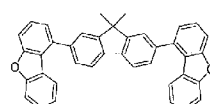
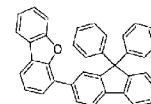
**HAT-CN****GD-1****HB-1****ET-1****H-232****H-234****J-1****J-5****J-16****J-17**

[化133]

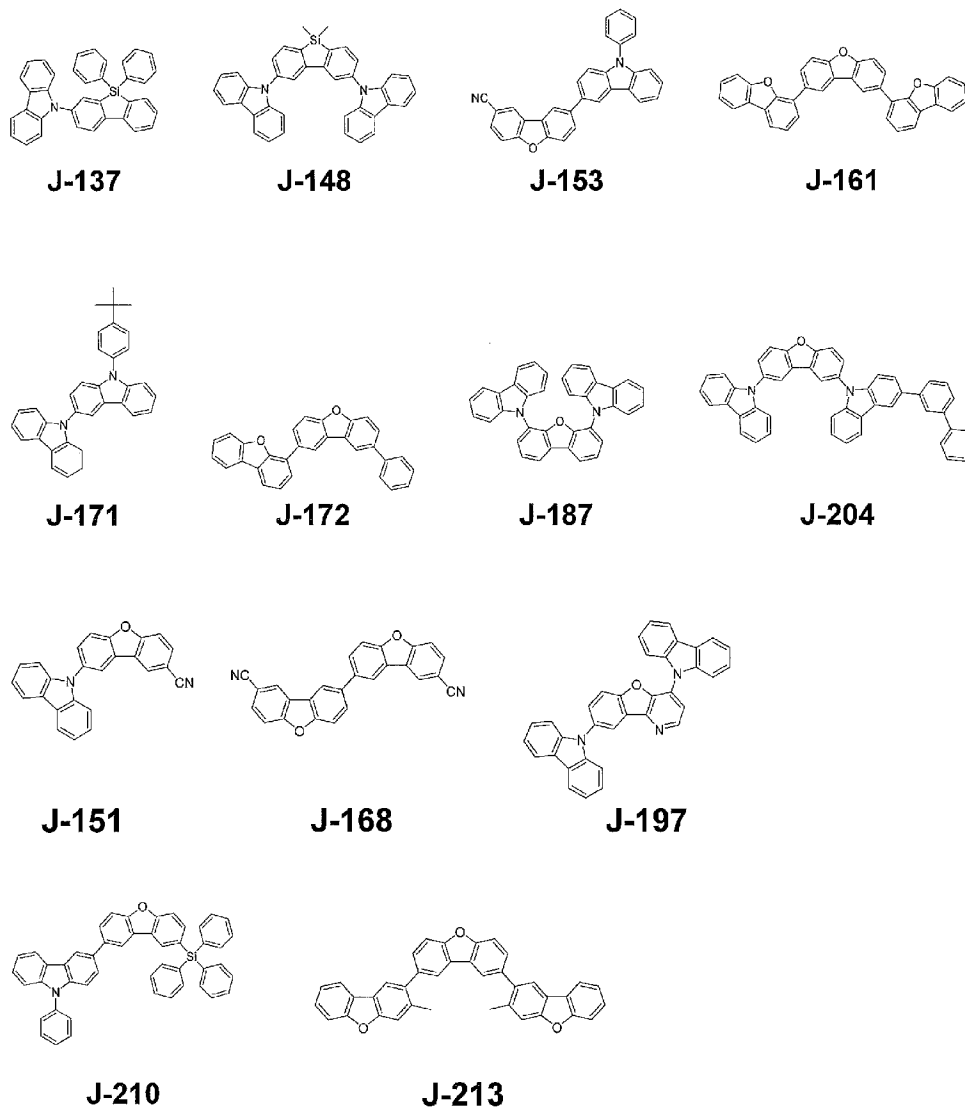


[0344]

[化134]

**J-24****J-164****J-170****J-197****J-41****J-11****J-25****J-36****J-42****J-56****J-68****J-83****J-91****J-102****J-113****J-128****J-129**

[化135]



[0345] (化合物T-83の合成)

国際公開第2010/113755号、Organic Letters, 2002, 4, 1783-1785.、Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 2014-2017.に記載された方法を用いて、化合物T-83を合成した。具体的には、1-ブromo-3,4,5-トリフルオロベンゼンとピリミジン誘導体とのクロスカップリング反応を行い、1-ピリミジル-3,4,5-トリフルオロベンゼン中間体を得た。1-ピリミジル-3,4,5-トリフルオロベンゼン中間体とブromopirimidineをルテニウム触媒存在下で反応させることにより、1,2,3-ターピリミジル-4

， 5， 6 -トリフルオロベンゼン中間体を得た。塩基性条件下のカルバゾールと1， 2， 3 -ターピリミジル-4， 5， 6 -トリフルオロベンゼン中間体とを反応させることによって、化合物T-83の粗精製物を得た。その後、カラムクロマトグラフィー、再結晶、昇華精製を行って、化合物T-83の高純度品を取得した。

[0346] (その他の化合物の合成)

前述と同様にして、化合物T-2、T-3、T-13、T-27、T-33、T-59、T-66、T-74、T-78、T-79、T-82、T-83、T-84、T-85、T-96、T-101、T-117、T-124、T-125、T-131~T-133、T-176、T-180、T-182~T-208、T-210~T-212、T-214、T-216、T-221、T-227、T-240、T-249、T-252、T-254、T-257、T-265、T-275、T-282、T-298、T-306、T-328、T-353、T-354、T-365、T-366、T-399、T-429、T-432、T-434、T-442、T-447、T-453、T-456~T-459、T-497、T-504、T-511~T-520、T-522、T-525~T-527、T-530、T-531、T-540~T-553、T-555、T-556、T-558、T-561~T-574、及びT-576を合成した。

[0347] 得られた化合物及び比較化合物1及び2の ΔE_{ST} を、以下の方法で計算して求めた。

[0348] (ΔE_{ST} の算出)

化合物の分子軌道計算による構造最適化及び電子密度分布の算出は、計算手法として、汎関数としてB3LYP、基底関数として6-31G(d)を用いた分子軌道計算用ソフトウェアを用いて算出した。分子軌道計算用ソフトウェアとして、米国Gaussian社製のGaussian09(Revision C.01, M. J. Frisch, et al, Gaussian, Inc., 2010.)を用いた。

この汎関数としてB3LYP、基底関数として6-31G(d)を用いた構造最適化計算から、さらに時間依存密度汎関数法(Time-Dependent DFT)による励起状態計算を実施して S_1 、 T_1 のエネルギー準位(それぞれ $E(S_1)$ 、 $E(T_1)$)を求めて $\Delta E_{ST} = |E(S_1) - E(T_1)|$ として算出した。

[0349] [実施例1]

(有機EL素子1-1の作製)

50mm×50mm、厚さ0.7mmのガラス基板上に、陽極としてITO(インジウム・スズ酸化物)を150nmの厚さで成膜し、パターニングを行った後、このITO透明電極を付けた透明基板をイソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、UVオゾン洗浄を5分間行った後、この透明基板を市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。

真空蒸着装置内の蒸着用るつぼの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適の量を充填した。蒸着用るつぼはモリブデン製またはタングステン製の抵抗加熱用材料で作製されたものを用いた。

[0350] 真空度 1×10^{-4} Paまで減圧した後、HAT-CN(1, 4, 5, 8, 9, 12-ヘキサアザトリフェニレンヘキサカルボニトリル)の入った蒸着用るつぼに通電して加熱し、蒸着速度0.1nm/秒でITO透明電極上に蒸着し、層厚10nmの正孔注入輸送層を形成した。

次いで、 α -NPD(4, 4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル)を蒸着速度0.1nm/秒で前記正孔注入層上に蒸着し、層厚40nmの正孔輸送層を形成した。ホスト化合物H-232、比較化合物1を、それぞれ94%、6%の体積%になるように蒸着速度0.1nm/秒で共蒸着し、層厚30nmの発光層を形成した。

その後、BCP(2, 9-ジメチル-4, 7-ジフェニル-1, 10-フェナントロリン)を蒸着速度0.1nm/秒で蒸着し、層厚30nmの電子輸送層を形成した。

さらに、フッ化リチウムを膜厚0.5nmで形成した後に、アルミニウム

100nmを蒸着して陰極を形成した。

上記素子の非発光面側を、純度99.999%以上の高純度窒素ガスの雰囲気下で、缶状ガラスケースで覆い、電極取り出し配線を設置して、有機EL素子1-1を作製した。

[0351] (有機EL素子1-2～1-141の作製)

発光性化合物を比較化合物1から表1～4に示すように変えた以外は有機EL素子1-1と同様の方法で有機EL素子1-2から1-141を作製した。

[0352]

[表1]

有機EL素子	発光性化合物	ΔE_{ST}	相对発光効率	備考
		(eV)	(%)	
1-1	比較化合物1	0.55	100	比較例
1-2	比較化合物2	0.16	110	比較例
1-3	比較化合物3	0.26	107	比較例
1-4	比較化合物4	0.31	105	比較例
1-5	T-2	0.05	145	本発明
1-6	T-3	0.03	155	本発明
1-7	T-13	0.04	160	本発明
1-8	T-27	0.22	120	本発明
1-9	T-59	0.19	122	本発明
1-10	T-66	0.04	150	本発明
1-11	T-74	0.04	143	本発明
1-12	T-82	0.10	140	本発明
1-13	T-83	0.14	137	本発明
1-14	T-84	0.06	143	本発明
1-15	T-85	0.08	141	本発明
1-16	T-96	0.13	136	本発明
1-17	T-101	0.11	137	本発明
1-18	T-117	0.16	127	本発明
1-19	T-124	0.18	125	本発明
1-20	T-125	0.28	119	本発明
1-21	T-131	0.04	162	本発明
1-22	T-133	0.05	159	本発明
1-23	比較化合物5	0.34	112	比較例
1-24	比較化合物6	0.01	113	比較例
1-25	比較化合物9	0.08	111	比較例
1-26	T-78	0.22	147	本発明
1-27	T-176	0.22	142	本発明
1-28	T-182	0.24	163	本発明
1-29	T-183	0.09	182	本発明
1-30	T-184	0.03	172	本発明
1-31	T-185	0.23	123	本発明
1-32	T-186	0.23	155	本発明
1-33	T-187	0.18	119	本発明
1-34	T-188	0.02	132	本発明
1-35	T-189	0.04	161	本発明
1-36	T-190	0.14	154	本発明
1-37	T-191	0.19	146	本発明
1-38	T-192	0.18	121	本発明
1-39	T-193	0.20	122	本発明
1-40	T-194	0.45	151	本発明
1-41	T-195	0.01	182	本発明
1-42	T-196	0.01	151	本発明
1-43	T-197	0.15	150	本発明

[表2]

有機EL素子	発光性化合物	Δ EST	相対発光効率	備考
		(eV)	(%)	
1-44	T-198	0.02	149	本発明
1-45	T-199	0.30	154	本発明
1-46	T-200	0.15	160	本発明
1-47	T-201	0.35	133	本発明
1-48	T-202	0.10	155	本発明
1-49	T-203	0.24	125	本発明
1-50	T-204	0.10	138	本発明
1-51	T-205	0.19	151	本発明
1-52	T-206	0.11	155	本発明
1-53	T-207	0.17	161	本発明
1-54	T-208	0.18	134	本発明
1-55	T-210	0.10	150	本発明
1-56	T-211	0.16	174	本発明
1-57	T-212	0.23	124	本発明
1-58	T-214	0.36	129	本発明
1-59	T-216	0.47	118	本発明
1-60	T-221	0.18	120	本発明
1-61	T-227	0.19	138	本発明
1-62	T-240	0.12	140	本発明
1-63	T-249	0.11	131	本発明
1-64	T-252	0.18	135	本発明
1-65	T-254	0.18	140	本発明
1-66	T-257	0.39	121	本発明
1-67	T-265	0.21	133	本発明
1-68	T-275	0.14	150	本発明
1-69	T-282	0.10	123	本発明
1-70	T-298	0.19	125	本発明
1-71	T-306	0.19	119	本発明
1-72	T-328	0.21	120	本発明
1-73	T-353	0.14	125	本発明
1-74	T-354	0.47	124	本発明
1-75	T-365	0.24	149	本発明
1-76	T-366	0.10	145	本発明
1-77	T-399	0.11	128	本発明
1-78	T-429	0.11	131	本発明
1-79	T-432	0.25	121	本発明
1-80	T-434	0.15	141	本発明
1-81	T-442	0.06	157	本発明
1-82	T-447	0.14	123	本発明
1-83	T-453	0.54	117	本発明
1-84	T-456	0.07	167	本発明
1-85	T-457	0.11	161	本発明

[表3]

有機EL素子	発光性化合物	ΔE_{ST}	相対発光効率	備考
		(eV)	(%)	
1-86	T-458	0.14	141	本発明
1-87	T-459	0.11	131	本発明
1-88	T-180	0.08	116	本発明
1-89	T-497	0.13	155	本発明
1-90	T-504	0.26	141	本発明
1-91	T-511	0.04	168	本発明
1-92	T-517	0.29	128	本発明
1-93	T-518	0.07	167	本発明
1-94	T-519	0.09	157	本発明
1-95	T-520	0.14	132	本発明
1-96	T-522	0.05	164	本発明
1-97	T-525	0.16	134	本発明
1-98	T-526	0.04	169	本発明
1-99	T-527	0.05	171	本発明
1-100	T-530	0.05	173	本発明
1-101	T-531	0.07	169	本発明
1-102	T-512	0.73	115	本発明
1-103	T-513	0.62	115	本発明
1-104	T-514	0.36	116	本発明
1-105	T-515	0.54	116	本発明
1-106	T-516	0.43	116	本発明

[表4]

有機EL素子	発光性化合物	ΔE_{ST}	相対発光効率	備考
		(eV)	(%)	
1-107	T-132	0.22	145	本発明
1-108	T-540	0.10	157	本発明
1-109	T-541	0.18	150	本発明
1-110	T-542	0.09	160	本発明
1-111	T-543	0.11	158	本発明
1-112	T-544	0.17	153	本発明
1-113	T-545	0.14	155	本発明
1-114	T-546	0.11	157	本発明
1-115	T-547	0.27	142	本発明
1-116	T-548	0.01	173	本発明
1-117	T-549	0.15	153	本発明
1-118	T-550	0.07	168	本発明
1-119	T-551	0.17	152	本発明
1-120	T-552	0.05	172	本発明
1-121	T-553	0.05	173	本発明
1-122	T-33	0.10	155	本発明
1-123	T-555	0.09	156	本発明
1-124	T-556	0.09	157	本発明
1-125	T-558	0.05	167	本発明
1-126	T-79	0.05	168	本発明
1-127	T-561	0.06	161	本発明
1-128	T-562	0.08	160	本発明
1-129	T-563	0.06	162	本発明
1-130	T-564	0.03	170	本発明
1-131	T-565	0.04	169	本発明
1-132	T-566	0.09	155	本発明
1-133	T-567	0.13	150	本発明
1-134	T-568	0.14	147	本発明
1-135	T-569	0.15	145	本発明
1-136	T-570	0.12	152	本発明
1-137	T-571	0.18	149	本発明
1-138	T-572	0.07	160	本発明
1-139	T-573	0.04	169	本発明
1-140	T-574	0.08	158	本発明
1-141	T-576	0.09	156	本発明

[0353] [実施例2]

(有機EL素子2-1の作製)

陽極として100mm×100mm×1.1mmのガラス基板上にITO(インジウムチンオキシド)を100nm成膜した基板(NHテクノグラス社製NA45)にパターニングを行った後、このITO透明電極を設けた透明支持基板をイソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、UVオゾン洗浄を5分間行った。

この透明支持基板上に、ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフエン)-

ポリスチレンスルホネート（PEDOT/PSS、Bayer社製、Baytron P AI 4083）を純水で70%に希釈した溶液を用いて3000rpm、30秒の条件下、スピコート法により薄膜を形成した後、200℃にて1時間乾燥し、層厚20nmの正孔注入層を設けた。この透明支持基板を市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定し、真空蒸着装置内の蒸着用るつぼの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適の量を充填した。蒸着用るつぼはモリブデン製またはタングステン製の抵抗加熱用材料で作製されたものを用いた。

[0354] 真空度 1×10^{-4} Paまで減圧した後、 α -NPDを蒸着速度0.1nm/秒で前記正孔注入層上に蒸着し、層厚40nmの正孔輸送層を形成した。H-234、2, 5, 8, 11-テトラ-*t*-ブチルペリレンが、それぞれ97%、3%の体積%になるように蒸着速度0.1nm/秒で共蒸着し、層厚30nmの発光層を形成した。

その後、TPBi（1, 3, 5-トリス（*N*-フェニルベンゾイミダゾール-2-イル）を蒸着速度0.1nm/秒で蒸着し、層厚30nmの電子輸送層を形成した。

さらに、フッ化ナトリウムを膜厚1nmで形成した後に、アルミニウム100nmを蒸着して陰極を形成した。

上記素子の非発光面側を、純度99.999%以上の高純度窒素ガスの雰囲気下で、缶状ガラスケースで覆い、電極取り出し配線を設置して、有機EL素子2-1を作製した。

[0355] （有機EL素子2-2の作製）

ホスト化合物としてH-234、発光性化合物として2, 5, 8, 11-テトラ-*t*-ブチルペリレン、第三成分として比較化合物1を用い、それぞれの比率が82%、3%、15%の体積%となるように発光層を形成した以外は有機EL素子2-1の作製と同様にして、有機EL素子2-2を作製した。

[0356] （有機EL素子2-3～2-40の作製）

表5及び6に示すように、第三成分を変えた以外は有機EL素子2-2と同様の方法で有機EL素子2-3から2-40を作製した。

[0357] [表5]

有機EL素子	第三成分	ΔE_{ST}	相対発光効率	備考
		(eV)	(%)	
2-1	なし	—	100	比較例
2-2	比較化合物1	0.55	87	比較例
2-3	比較化合物2	0.16	113	比較例
2-4	比較化合物3	0.26	108	比較例
2-5	比較化合物4	0.31	103	比較例
2-6	T-2	0.05	148	本発明
2-7	T-27	0.22	128	本発明
2-8	T-74	0.04	150	本発明
2-9	T-83	0.14	134	本発明
2-10	T-85	0.08	142	本発明
2-11	T-96	0.13	138	本発明
2-12	T-101	0.11	140	本発明
2-13	比較化合物5	0.34	113	比較例
2-14	比較化合物6	0.01	116	比較例
2-15	比較化合物7	0.35	106	比較例
2-16	比較化合物8	0.31	104	比較例
2-17	比較化合物9	0.08	103	比較例
2-18	T-78	0.22	160	本発明
2-19	T-124	0.18	175	本発明
2-20	T-191	0.19	177	本発明
2-21	T-195	0.01	181	本発明
2-22	T-197	0.15	141	本発明
2-23	T-204	0.10	144	本発明
2-24	T-207	0.17	171	本発明
2-25	T-211	0.16	178	本発明
2-26	T-249	0.11	143	本発明
2-27	T-282	0.10	141	本発明
2-28	T-306	0.19	135	本発明
2-29	T-366	0.10	146	本発明
2-30	T-399	0.11	125	本発明
2-31	T-457	0.11	167	本発明
2-32	T-497	0.13	155	本発明
2-33	T-530	0.05	169	本発明

[0358] [表6]

有機EL素子	第三成分	ΔE_{ST}	相対発光効率	備考
		(eV)	(%)	
2-34	T-79	0.10	140	本発明
2-35	T-544	0.17	135	本発明
2-36	T-551	0.17	136	本発明
2-37	T-555	0.09	143	本発明
2-38	T-562	0.08	146	本発明
2-39	T-563	0.06	150	本発明
2-40	T-564	0.03	152	本発明

[0359] [実施例3]

(有機EL素子3-1の作製)

50mm×50mm、厚さ0.7mmのガラス基板上に、陽極としてITO（インジウム・スズ酸化物）を150nmの厚さで製膜し、パターニングを行った後、このITO透明電極を付けた透明基板をイソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、UVオゾン洗浄を5分間行った後、この透明基板を市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。

[0360] 真空蒸着装置内の蒸着用の抵抗加熱ボートの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適の量を充填した。前記抵抗加熱ボートはモリブデン製又はタングステン製を用いた。

[0361] 真空度 1×10^{-4} Paまで減圧した後、HAT-CNの入った抵抗加熱ボートに通電して加熱し、蒸着速度0.1nm/秒でITO透明電極上に蒸着し、層厚15nmの正孔注入層を形成した。

[0362] 次いで、 α -NPD（4,4'-ビス〔N-（1-ナフチル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル）を蒸着速度0.1nm/秒で蒸着し、層厚30nmの正孔輸送層を形成した。

[0363] 次いで、比較のホスト化合物である比較化合物1とGD-1の入った抵抗加熱ボートに通電して加熱し、それぞれ蒸着速度0.1nm/秒、0.010nm/秒で前記正孔輸送層上に共蒸着し、層厚40nmの発光層を形成した。

[0364] 次いで、HB-1を蒸着速度0.1nm/秒で蒸着し、層厚5nmの第一電子輸送層を形成した。

[0365] さらにその上に、ET-1を蒸着速度0.1nm/秒で蒸着し、層厚45nmの第二電子輸送層を形成した。

[0366] その後、フッ化リチウムを厚さ0.5nmになるよう蒸着した後に、アルミニウム100nmを蒸着して陰極を形成し、有機EL素子3-1を作製した。

[0367] (有機EL素子3-2～3-43の作製)

ホスト化合物を比較化合物1から表7及び8に示すように変えた以外は有

機EL素子3-1と同様の方法で有機EL素子3-2から3-43を作製した。

[0368] [表7]

有機EL素子	ホスト化合物	ΔE_{ST}	相対発光効率	備考
		(eV)	(%)	
3-1	比較化合物1	0.55	100	比較例
3-2	比較化合物2	0.16	109	比較例
3-3	比較化合物3	0.26	105	比較例
3-4	比較化合物4	0.31	101	比較例
3-5	T-2	0.05	145	本発明
3-6	T-27	0.22	118	本発明
3-7	T-66	0.04	148	本発明
3-8	T-74	0.04	149	本発明
3-9	T-83	0.14	138	本発明
3-10	T-96	0.13	135	本発明
3-11	T-131	0.04	152	本発明
3-12	T-133	0.05	143	本発明
3-13	比較化合物5	0.34	95	比較例
3-14	比較化合物6	0.01	90	比較例
3-15	比較化合物7	0.35	108	比較例
3-16	比較化合物8	0.31	104	比較例
3-17	比較化合物9	0.08	87	比較例
3-18	T-78	0.22	161	本発明
3-19	T-124	0.18	155	本発明
3-20	T-191	0.19	143	本発明
3-21	T-193	0.20	141	本発明
3-22	T-205	0.19	165	本発明
3-23	T-206	0.11	166	本発明
3-24	T-211	0.16	141	本発明
3-25	T-227	0.19	124	本発明
3-26	T-240	0.12	121	本発明
3-27	T-252	0.18	123	本発明
3-28	T-282	0.10	118	本発明
3-29	T-306	0.19	121	本発明
3-30	T-366	0.10	134	本発明
3-31	T-399	0.11	132	本発明
3-32	T-456	0.07	140	本発明
3-33	T-467	0.11	141	本発明
3-34	T-468	0.14	138	本発明
3-35	T-527	0.05	135	本発明
3-36	T-531	0.07	165	本発明

[0369] [表8]

有機EL素子	ホスト化合物	ΔE_{ST}	相対発光効率	備考
		(eV)	(%)	
3-37	T-540	0.10	165	本発明
3-38	T-541	0.18	160	本発明
3-39	T-552	0.05	170	本発明
3-40	T-33	0.10	164	本発明
3-41	T-563	0.06	167	本発明
3-42	T-566	0.09	166	本発明
3-43	T-567	0.13	162	本発明

[0370] (発光効率の測定)

有機EL素子駆動時の各サンプルの発光効率は下記測定を行うことにより評価した。

[0371] (相対発光効率の測定)

上記作製した各有機EL素子を、室温（約25℃）で、 2.5 mA/cm^2 の定電流条件下で発光させ、発光開始直後の発光輝度を、分光放射輝度計CS-2000（コニカミノルタ社製）を用いて測定した。

表1～8に、得られた発光輝度の相対値（実施例1では有機EL素子1-1の発光輝度に対する相対値、実施例2では有機EL素子2-1の発光輝度に対する相対値、実施例3では有機EL素子3-1の発光輝度に対する相対値）を示した。

[0372] 素子1～8において、いずれの場合も、比較例化合物より本発明の化合物の方が高い発光効率を示した。

[0373] [実施例4]

(有機EL素子4-1の作製)

50mm×50mm、厚さ0.7mmのガラス基板上に、陽極としてITO（インジウム・スズ酸化物）を150nmの厚さで製膜し、パターニングを行った後、このITO透明電極を付けた透明基板をイソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、UVオゾン洗浄を5分間行った後、この透明基板を市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。

[0374] 真空蒸着装置内の蒸着用の抵抗加熱ボートの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適の量を充填した。前記抵抗加熱ボートはモリブデン製又はタングステン製を用いた。

[0375] 真空度 $1 \times 10^{-4}\text{ Pa}$ まで減圧した後、 α -NPD（4,4'-ビス〔N-（1-ナフチル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル）の入った抵抗加熱ボートに通電して加熱し、蒸着速度 0.1 nm/秒 でITO透明電極上に蒸着し、層厚30nmの正孔注入層を形成した。

[0376] 次に、TC TA（トリス（4-カルバゾイル-9-イルフェニル）アミ

ン)を蒸着速度0.1nm/秒で蒸着し、層厚20nmの第一正孔輸送層を形成した。

[0377] さらに、H-233を蒸着速度0.1nm/秒で蒸着し、層厚10nmの第二正孔輸送層を形成した。

[0378] 次いで、比較のホスト化合物である比較化合物1とTBPe(2, 5, 8, 11-テトラ-tert-ブチルペリレン)の入った抵抗加熱ボートに通電して加熱し、それぞれ蒸着速度0.1nm/秒、0.010nm/秒で前記正孔輸送層上に共蒸着し、層厚20nmの発光層を形成した。

[0379] 次いで、H-232を蒸着速度0.1nm/秒で蒸着し、層厚10nmの第一電子輸送層を形成した。

[0380] さらにその上に、TBPI(1, 3, 5-トリス(1-フェニル-1H-ベンズイミダゾール-2-イル)ベンゼン)を蒸着速度0.1nm/秒で蒸着し、層厚30nmの第二電子輸送層を形成した。

[0381] その後、フッ化リチウムを厚さ0.5nmになるよう蒸着した後に、アルミニウム100nmを蒸着して陰極を形成し、有機EL素子4-1を作製した。

[0382] (有機EL素子4-2~4-49の作製)

ホスト化合物を比較化合物1から表9及び10に示すように変えた以外は有機EL素子4-1と同様の方法で有機EL素子4-2から4-49を作製した。

[0383] (相対発光効率の測定)

上記で作製した各有機EL素子を、室温(約25℃)で、2.5mA/cm²の定電流条件下で発光させ、発光開始直後の発光輝度を、分光放射輝度計CS-2000(コニカミノルタ社製)を用いて測定した。

表6に、得られた発光輝度の相対値(実施例4では有機EL素子4-1の発光輝度に対する相対値)を示した。

[0384]

[表9]

有機EL素子	ホスト化合物	ΔE_{ST}	相対発光効率	備考
		(eV)	(%)	
4-1	比較化合物1	0.55	100	比較例
4-2	比較化合物2	0.16	110	比較例
4-3	比較化合物3	0.26	85	比較例
4-4	比較化合物4	0.31	90	比較例
4-5	比較化合物5	0.34	96	比較例
4-6	比較化合物6	0.01	89	比較例
4-7	比較化合物7	0.35	101	比較例
4-8	比較化合物8	0.31	88	比較例
4-9	比較化合物9	0.08	85	比較例
4-10	T-78	0.22	165	本発明
4-11	T-124	0.18	170	本発明
4-12	T-183	0.09	145	本発明
4-13	T-191	0.19	174	本発明
4-14	T-192	0.18	141	本発明
4-15	T-193	0.20	135	本発明
4-16	T-195	0.01	176	本発明
4-17	T-197	0.15	169	本発明
4-18	T-204	0.10	138	本発明
4-19	T-205	0.19	171	本発明
4-20	T-206	0.11	175	本発明
4-21	T-207	0.17	176	本発明
4-22	T-208	0.18	147	本発明
4-23	T-210	0.10	179	本発明
4-24	T-211	0.16	180	本発明
4-25	T-221	0.18	153	本発明
4-26	T-227	0.19	147	本発明
4-27	T-240	0.12	129	本発明
4-28	T-249	0.11	134	本発明
4-29	T-252	0.18	136	本発明
4-30	T-254	0.18	135	本発明
4-31	T-265	0.21	128	本発明
4-32	T-282	0.10	125	本発明
4-33	T-298	0.19	134	本発明
4-34	T-306	0.19	142	本発明
4-35	T-366	0.10	133	本発明
4-36	T-399	0.10	123	本発明
4-37	T-459	0.11	120	本発明
4-38	T-527	0.05	161	本発明
4-39	T-531	0.07	167	本発明
4-40	T-27	0.22	115	本発明
4-41	T-101	0.11	118	本発明
4-42	T-117	0.16	117	本発明
4-43	T-131	0.04	119	本発明

[0385] [表10]

有機EL素子	ホスト化合物	ΔE_{ST}	相対発光効率	備考
		(eV)	(%)	
4-44	T-542	0.09	164	本発明
4-45	T-549	0.15	154	本発明
4-46	T-553	0.05	169	本発明
4-47	T-565	0.04	170	本発明
4-48	T-572	0.07	167	本発明
4-49	T-576	0.09	163	本発明

[0386] 有機EL素子4において、いずれの場合も、比較例化合物より本発明の化合物の方が高い発光効率を示した。

[0387] [実施例5]

実施例5の素子1-19の初期輝度300cd/m²で点灯した時の輝度半減時間を測定した。

[0388] (有機EL素子5-1～5-47の作製)

実施例1の素子1-19から、ホスト化合物および発光性化合物を表11及び表12に示すように変えた以外は有機EL素子1-19と同様の方法で有機EL素子5-1から5-47を作製した。

[表11]

有機EL素子	発光性化合物	ホスト化合物	相対輝度半減時間(倍率)	備考
1-19	T-124	H-232	50	本発明
5-1	T-124	J-1	4200	本発明
5-2	T-124	J-32	8000	本発明
5-3	T-124	J-46	7500	本発明
5-4	T-124	J-183	5000	本発明
1-26	T-78	H-232	42	本発明
5-5	T-78	J-52	5000	本発明
5-6	T-78	J-192	6000	本発明
5-7	T-78	J-155	4900	本発明
1-28	T-182	H-232	45	本発明
5-8	T-182	J-41	4300	本発明
5-9	T-182	J-168	5000	本発明
5-10	T-182	J-194	7500	本発明
1-37	T-191	H-232	38	本発明
5-11	T-191	J-33	5000	本発明
5-12	T-191	J-38	3500	本発明
5-13	T-191	J-43	4600	本発明
1-50	T-204	H-232	31	本発明
5-14	T-204	J-16	1300	本発明
5-15	T-204	J-48	1500	本発明
5-16	T-204	J-213	2500	本発明
1-56	T-211	H-232	33	本発明
5-17	T-211	J-5	4300	本発明
5-18	T-211	J-45	3200	本発明
5-19	T-211	J-54	2100	本発明
5-20	T-211	J-66	1000	本発明
1-62	T-240	H-232	36	本発明
5-21	T-240	J-17	4800	本発明

[0389]

[表12]

有機EL素子	発光性化合物	ホスト化合物	相対輝度半減時間(倍率)	備考
5-22	T-240	J-42	3400	本発明
5-23	T-240	J-56	1600	本発明
1-68	T-275	H-232	27	本発明
5-24	T-275	J-11	1500	本発明
5-25	T-275	J-68	900	本発明
5-26	T-275	J-91	750	本発明
5-27	T-275	J-129	2500	本発明
1-73	T-353	H-232	25	本発明
5-28	T-353	J-171	700	本発明
5-29	T-353	J-137	1000	本発明
5-30	T-353	J-161	2500	本発明
1-76	T-366	H-232	29	本発明
5-31	T-366	J-187	3000	本発明
5-32	T-366	J-153	2100	本発明
5-33	T-366	J-204	5400	本発明
5-34	T-366	J-210	1000	本発明
1-85	T-457	H-232	47	本発明
5-35	T-457	J-128	5000	本発明
5-36	T-457	J-148	3700	本発明
5-37	T-457	J-172	6500	本発明
1-99	T-530	H-232	40	本発明
5-38	T-530	J-25	4200	本発明
5-39	T-530	J-36	5500	本発明
5-40	T-530	J-83	3100	本発明
5-41	T-530	J-102	2200	本発明
5-42	T-530	J-113	250	本発明
1-8	T-27	H-232	1	本発明
5-43	T-27	J-13	45	本発明
1-11	T-74	H-232	26	本発明
5-44	T-74	J-24	350	本発明
1-14	T-84	H-232	8	本発明
5-45	T-84	J-164	50	本発明
1-18	T-117	H-232	3	本発明
5-46	T-117	J-170	18	本発明
1-88	T-180	H-232	5	本発明
5-47	T-180	J-197	30	本発明

[0390] 有機EL素子5において、ホスト化合物が、前述の一般式(I)で表される化合物である場合に、特に長い相対輝度半減時間を有していた。また、発光性化合物において、電子供与性基または電子吸引性基が、3つ以上連続してオルト位に配置されている場合には、長い相対輝度半減時間を有していた。

[0391] [実施例6]

(共蒸着膜6-1の作製)

50mm×50mm、厚さ0.7mmの石英基板をイソプロピルアルコー

ルで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、UVオゾン洗浄を5分間行った後、この透明基板を市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。

真空蒸着装置内の蒸着用つぼの各々に、1, 3-ビス(N-カルバゾリル)ベンゼン(mCP)および発光性化合物T-124を充填した。蒸着用つぼはモリブデン製またはタングステン製の抵抗加熱用材料で作製されたものを用いた。

[0392] 真空度 1×10^{-4} Paまで減圧した後、1, 3-ビス(N-カルバゾリル)ベンゼン(mCP)、発光性化合物T-124を、それぞれ94%、6%の体積%になるように蒸着速度0.1 nm/秒で共蒸着し、層厚40 nmの共蒸着膜を形成した。

[0393] (共蒸着膜6-2~4の作製)

発光性化合物をT-124から表13に示すように変えた以外は共蒸着膜6-1と同様の方法で蒸着膜6-2~6-4を作製した。

[表13]

共蒸着膜	発光材料
6-1	T-124
6-2	T-180
6-3	T-211
6-4	T-527

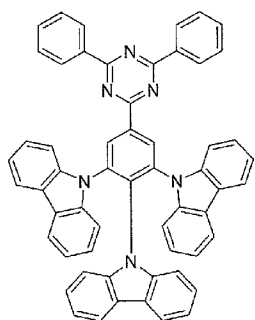
[0394] (共蒸着膜6-1~4の遅延蛍光の測定)

窒素雰囲気下で、共蒸着膜6-1~4に355 nmの励起光を照射し、各々の極大発光波長での蛍光減衰測定を行った。各共蒸着膜6-1~6-4について、時間と光子数との関係を示すグラフを図13~16に示す。図13~16に示すように、本発明の π 共有化合物(T-124、T-180、T-211、及びT-527)は、いずれも蛍光の減衰速度の異なる成分が2種以上確認され、遅延蛍光を放射することが確認された。

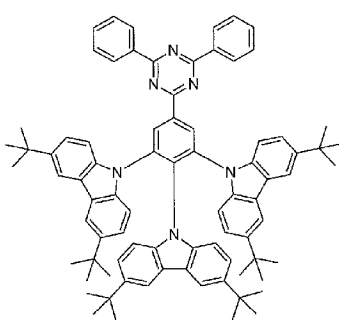
[0395] 以下、特定の π 共役系化合物を用いた実施例及び比較例を示す。以下の実施例及び比較例で用いた化合物を以下に示す。

[0396] <一般式(201)で表される π 共役系化合物>

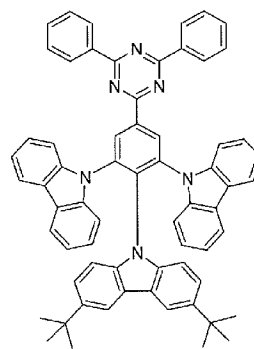
[化136]



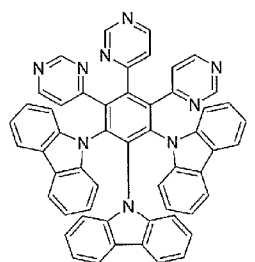
化合物 1



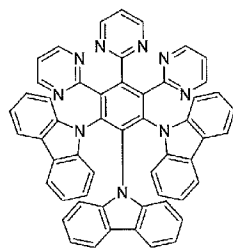
化合物 2



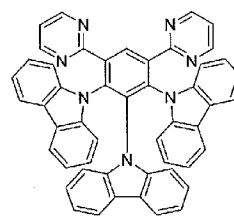
化合物 3



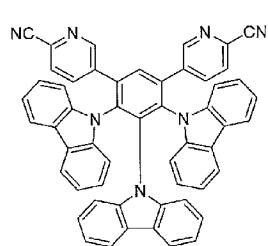
化合物 4



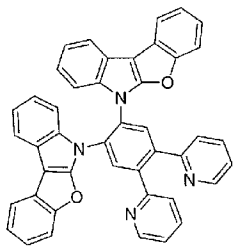
化合物 5



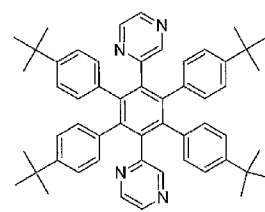
化合物 6



化合物 7

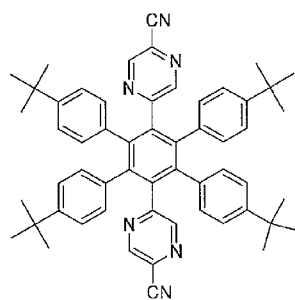


化合物 8

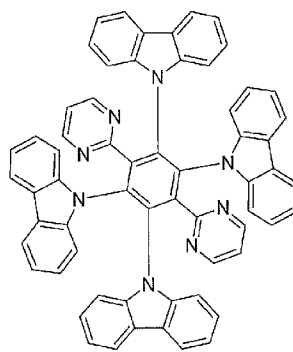


化合物 9

[化137]



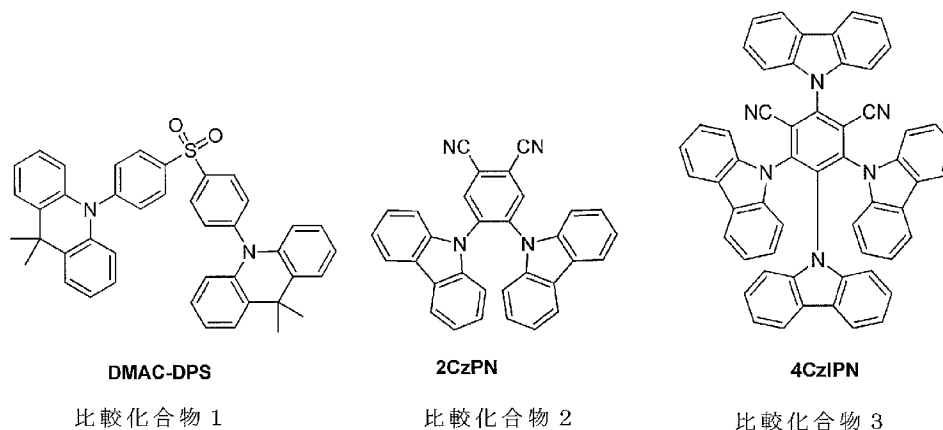
化合物 10



化合物 11

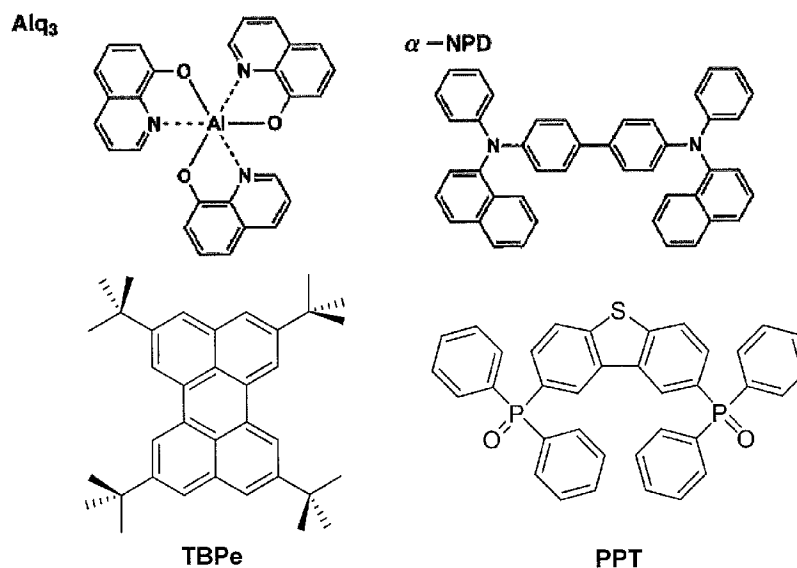
[0397] <比較化合物>

[化138]



[0398] <その他の化合物>

[化139]



[0399] 上記化合物 1 ～ 11 及び比較化合物 1 ～ 3 の ΔE_{ST} を、以下の方法で計算して求めた。その結果を表 14 に示す。

[0400] (ΔE_{ST} の算出)

化合物の分子軌道計算による構造最適化及び電子密度分布の算出は、計算手法として、汎関数として B3LYP、基底関数として 6-31G(d) を用いた分子軌道計算用ソフトウェアを用いて算出した。分子軌道計算用ソフ

トウェアとして、米国 Gaussian 社製の Gaussian 09 (Revision C. 01, M. J. Frisch, et al, Gaussian, Inc., 2010.) を用いた。

この汎関数として B3LYP、基底関数として 6-31G(d) を用いた構造最適化計算から、さらに時間依存密度汎関数法 (Time-Dependent DFT) による励起状態計算を実施して S_1 、 T_1 のエネルギー準位 (それぞれ $E(S_1)$ 、 $E(T_1)$) を求めて $\Delta E_{ST} = |E(S_1) - E(T_1)|$ として算出した。

[表14]

	ΔE_{ST} (eV)
化合物 1	0.18
化合物 2	0.16
化合物 3	0.19
化合物 4	0.09
化合物 5	0.14
化合物 7	0.05
化合物 6	0.10
化合物 8	0.16
化合物 9	0.36
化合物 10	0.29
化合物 11	0.13
比較化合物 1	0.01
比較化合物 2	0.34
比較化合物 3	0.12

[0401] 一般式 (201) で表される π 共役系化合物である化合物 1 ~ 11 の ΔE_{ST} は、比較化合物 1 (DMAC-DPS)、比較化合物 2 (2CzPN) 及び比較化合物 3 (4CzIPN) の ΔE_{ST} よりも十分に低く、TADF 性を発現するのに十分な小さい値であることを確認できた。

[0402] [実施例 7]

(有機 EL 素子 7-1 の作製)

50mm×50mm、厚さ 0.7mm のガラス基板上に、陽極として ITO (インジウム・スズ酸化物) を 150nm の厚さで成膜し、パターニングを行った。この ITO 透明電極を付けた透明基板を、イソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、UV オゾン洗浄を 5 分間行った。

- 。
- [0403] この透明支持基板上に、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ネート（PEDOT/PSS、Bayer社製、Baytron PAI 4083）を純水で７０％に希釈した溶液を用いて、３０００rpm、３０秒の条件下、スピコート法により薄膜を形成した後、２００℃にて１時間乾燥し、膜厚２０nmの正孔注入層を設けた。
- [0404] この透明基板を、市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。真空蒸着装置内の蒸着用るつぼの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適の量を充填した。蒸着用るつぼは、モリブデン製又はタングステン製の抵抗加熱用材料で作製されたものを用いた。
- [0405] 真空度 1×10^{-4} Paまで減圧した後、 α -NPDの入った蒸着用るつぼに通電して加熱し、蒸着速度 0.1 nm/秒 でITO透明電極上に蒸着し、層厚３０nmの正孔輸送層を形成した。
- [0406] 次に、発光性化合物としてDMAC-DPS（比較化合物１）を、蒸着速度 0.1 nm/秒 で蒸着し、層厚３０nmの発光層を形成した。
- [0407] その後、PPTを蒸着速度 0.1 nm/秒 で蒸着し、層厚１０nmの正孔阻止層を形成した。更にその上に化合物Alq₃を蒸着速度 0.1 nm/秒 で蒸着し、層厚３０nmの電子輸送層を形成した。
- [0408] さらに、フッ化リチウムを膜厚 0.5 nm で蒸着して電子注入層を形成した後、アルミニウム１００nmを蒸着して陰極を形成した。
- [0409] 上記素子の非発光面側を、純度９９．９９９％以上の高純度窒素ガスの雰囲気下で、缶状ガラスケースで覆い、電極取り出し配線を設置して、有機EL素子７－１を作製した。
- [0410] （有機EL素子７－２～７－９の作製）
発光性化合物を表２に示される化合物に変更した以外は有機EL素子７－１と同様の方法で有機EL素子７－２～７－９を作製した。
- [0411] 上記作製した各有機EL素子の外部量子収率（EQE）及び半減寿命（連続駆動安定性）を、以下の方法で測定した。評価結果を表２に示す。

[0412] (外部量子収率 (EQE) の評価)

上記作製した各有機EL素子を、室温 (約 25℃) で、 2.5 mA/cm^2 の定電流条件下で発光させ、発光開始直後の発光輝度を、分光放射輝度計 CS-2000 (コニカミノルタ社製) を用いて測定した。有機EL素子 1-1 の輝度を 100 とし、各有機EL素子の輝度の相対値を求めた。

[0413] (半減寿命 (連続駆動安定性) の評価)

各サンプルを初期輝度 1000 cd/m^2 で連続駆動させながら、上記分光放射輝度計 CS-2000 を用いて輝度を測定し、測定した輝度が半減する時間 (LT50) を求めた。有機EL素子 7-1 の LT50 を 100 とし、各有機EL素子の LT50 の相対値を求め、これを連続駆動安定性の尺度とした。

[0414] 評価結果を表 15 に示す。表 15 中、EQE の数値が大きいほど外部量子収率が高いことを表し、半減寿命の数値が大きいほど連続駆動安定性に優れている (長寿命である) ことを表す。

[表15]

有機 EL 素子	発光層の 発光性化合物	EQE (相対値)	半減寿命 (相対値)	備考
7-1	比較化合物 1	100	100	比較
7-2	比較化合物 2	20.5	12.5	比較
7-3	比較化合物 3	35.5	25	比較
7-4	化合物 1	110	212500	本発明
7-5	化合物 3	95	150000	本発明
7-6	化合物 7	75	162500	本発明
7-7	化合物 8	65	118750	本発明
7-8	化合物 9	56	108750	本発明
7-9	化合物 11	60	111250	本発明

[0415] 表 15 に示されるように、一般式 (201) で表される π 共役系化合物を用いた有機EL素子 7-4 ~ 7-9 は、比較化合物 1 を用いた有機EL素子 7-1 と比べて遜色ない EQE を有しつつ、半減寿命が大幅に改善されることが示される。また、一般式 (201) で表される π 共役系化合物を用いた有機EL素子 7-4 ~ 7-9 は、比較化合物 2 及び 3 を用いた有機EL素子 7-2 及び 7-3 と比べて EQE と半減寿命 (特に半減寿命) が大幅に改善されることが示される。

[0416] [実施例 8]

(有機 EL 素子 8-1 の作製)

50 mm × 50 mm、厚さ 0.7 mm のガラス基板上に、陽極として ITO (インジウム・スズ酸化物) を 150 nm の厚さで成膜し、パターニングを行った。この ITO 透明電極を付けた透明基板を、イソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、UV オゾン洗浄を 5 分間行った。

[0417] この透明基板を、市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。真空蒸着装置内の蒸着用るつぼの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適な量を充填した。蒸着用るつぼは、モリブデン製又はタングステン製の抵抗加熱用材料で作製されたものを用いた。

[0418] 真空度 1×10^{-4} Pa まで減圧した後、発光性化合物として DMAC-DPS (比較化合物 1) の入った蒸着用るつぼに通電して加熱し、蒸着速度 0.1 nm/秒で ITO 透明電極上に蒸着し、層厚 120 nm の発光層を形成した。

[0419] 得られた発光層上に、アルミニウム 100 nm を蒸着して陰極を形成した。

[0420] 上記素子の非発光面側を、純度 99.999% 以上の高純度窒素ガスの雰囲気下で、缶状ガラスケースで覆い、電極取り出し配線を設置して、有機 EL 素子 8-1 を作製した。

[0421] (有機 EL 素子 8-2 ~ 8-9 の作製)

発光性化合物を表 16 に示される化合物に変更した以外は有機 EL 素子 8-1 と同様の方法で有機 EL 素子 8-2 ~ 8-9 を作製した。

[0422] 上記作製した各有機 EL 素子の外部量子収率 (EQE) 及び半減寿命 (連続駆動安定性) を、前述と同様の方法で測定した。そして、有機 EL 素子 8-1 の EQE 及び半減寿命を 100 としたときの、各有機 EL 素子の相対値を求めた。評価結果を表 16 に示す。

[表16]

有機 EL 素子	発光層の 発光性化合物	EQE (相対値)	半減寿命 (相対値)	備考
8-1	比較化合物 1	100	100	比較
8-2	比較化合物 2	5	30	比較
8-3	比較化合物 3	10	65	比較
8-4	化合物 1	3000	50000	本発明
8-5	化合物 2	3000	45000	本発明
8-6	化合物 5	1750	20000	本発明
8-7	化合物 6	1250	25000	本発明
8-8	化合物 10	1100	17500	本発明
8-9	化合物 11	1200	19000	本発明

[0423] 表 16 に示されるように、一般式 (201) で表される π 共役系化合物を用いた有機 EL 素子 8-4 ~ 8-9 は、比較化合物を用いた有機 EL 素子 8-1 ~ 8-3 よりも EQE と半減寿命、特に半減寿命が大幅に改善できることが示される。

[0424] [実施例 9]

(有機 EL 素子 9-1 の作製)

50 mm × 50 mm、厚さ 0.7 mm のガラス基板上に、陽極として ITO (インジウム・スズ酸化物) を 150 nm の厚さで成膜し、パターニングを行った。この ITO 透明電極を付けた透明基板を、イソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、UV オゾン洗浄を 5 分間行った。

[0425] この透明基板を、市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。真空蒸着装置内の蒸着用るつぼの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適な量を充填した。蒸着用るつぼは、モリブデン製又はタングステン製の抵抗加熱用材料で作製されたものを用いた。

[0426] 真空度 1×10^{-4} Pa まで減圧した後、蒸着する化合物の入った蒸着用るつぼに通電して加熱し、発光層のホスト化合物とゲスト化合物が表 4 に記載の割合となるように蒸着速度 0.1 nm/秒で共蒸着し、層厚 120 nm の発光層を形成した。

[0427] 得られた発光層上に、アルミニウム 100 nm を蒸着して陰極を形成した。

上記素子の非発光面側を、純度 99.999% 以上の高純度窒素ガスの雰囲気下で、缶状ガラスケースで覆い、電極取り出し配線を設置して、有機 EL 素子 9-1 を作製した。

[0428] (有機 EL 素子 9-2 の作製)

発光性化合物を表 17 に示される化合物に変更した以外は有機 EL 素子 9-1 と同様の方法で有機 EL 素子 9-2 を作製した。

[0429] 上記作製した各有機 EL 素子の半減寿命（連続駆動安定性）を、前述と同様の方法で測定した。そして、有機 EL 素子 9-1 の半減寿命を 100 として、有機 EL 素子 9-2 の半減期の相対値を求めた。評価結果を表 4 に示す。

[表17]

有機 EL 素子	発光層			半減寿命 (相対値)	備考
	ホスト化合物	ゲスト化合物 (発光性化合物)	ドーピング濃度 (体積%)		
9-1	化合物 1	—	0	100	本発明
9-2	化合物 1	TBPe	1	12000	本発明

[0430] 表 17 に示されるように、一般式 (201) で表される π 共役系化合物とゲスト化合物とを組み合わせた有機 EL 素子 9-2 は、ゲスト化合物を組み合わせなかった有機 EL 素子 9-1 よりも半減寿命がさらに改善されることが示される。

[0431] (有機 EL 素子 9-3 の作製)

50mm×50mm、厚さ 0.7mm のガラス基板上に、陽極として ITO（インジウム・スズ酸化物）を 150nm の厚さで成膜し、パターニングを行った。この ITO 透明電極を付けた透明基板を、イソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、UV オゾン洗浄を 5 分間行った。

[0432] この透明基板を、市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。真空蒸着装置内の蒸着用るつぼの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適の量を充填した。蒸着用るつぼは、モリブデン製又はタングステン製の抵抗

加熱用材料で作製されたものを用いた。

[0433] 真空度 1×10^{-4} Pa まで減圧した後、蒸着する化合物の入った蒸着用るつぼに通電して加熱し、発光層のホスト化合物とゲスト化合物が表 18 に記載の割合となるように、蒸着速度 0.1 nm/秒 で共蒸着し、層厚 110 nm の発光層を形成した。

[0434] 得られた発光層上に、アルミニウム 100 nm を蒸着して陰極を形成した。

上記素子の非発光面側を、純度 99.999% 以上の高純度窒素ガスの雰囲気下で、缶状ガラスケースで覆い、電極取り出し配線を設置して、有機 EL 素子 9-3 を作製した。

[0435] (有機 EL 素子 9-4 ~ 9-5 の作製)

発光性化合物を表 5 に示される化合物に変更した以外は有機 EL 素子 9-3 と同様の方法で有機 EL 素子 9-4 ~ 9-5 を作製した。

[0436] 上記作製した各有機 EL 素子の外部量子収率 (EQE) を、前述と同様の方法で測定した。そして、有機 EL 素子 3-3 の EQE の値を 100 とし、有機 EL 素子 9-4 及び 5 の EQE の相対値を求めた。評価結果を表 18 に示す。

[表18]

有機 EL 素子	発光層			EQE (相対値)	備考
	化合物	ゲスト化合物 (発光性化合物)	ドーピング濃度 (体積%)		
9-3	化合物 1	TBP	21	100	本発明
9-4	化合物 1	TBP	6	197	本発明
9-5	化合物 1	TBP	0.8	330	本発明

[0437] 表 18 に示されるように、発光層中のゲスト化合物のドーピング濃度が 20 体積%よりも少ない有機 EL 素子 9-4 ~ 9-5 は、発光層中のゲスト化合物のドーピング濃度が 20 体積%を超える有機 EL 素子 9-3 よりも EQE がさらに改善されることが示される。

[0438] 本出願は、2015 年 5 月 8 日出願の特願 2015-095804 号、2015 年 10 月 15 日出願の特願 2015-203876 号、及び 2015

年 10 月 15 日出願の特願 2015-203878 号に基づく優先権を主張する。これらの出願明細書および図面に記載された内容は、すべて本願明細書に援用される。

産業上の利用可能性

[0439] 本発明によれば、例えば有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を改良しうる新たな π 共役系化合物を提供することができる。また、当該 π 共役系化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子材料、発光性薄膜、発光材料、有機エレクトロルミネッセンス素子、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子が具備された表示装置及び照明装置を提供することができる。

符号の説明

- [0440] 10 ディスプレイ
 13 画素
 15 走査線
 16 データ線
 17 電源ライン
 20 有機 EL 素子
 21 スイッチングトランジスタ
 22 駆動トランジスタ
 23 コンデンサー
 101 照明装置内の有機 EL 素子
 102 ガラスカバー
 105 陰極
 106 有機 EL 素子の構成層
 107 透明電極付きガラス基板
 108 窒素ガス
 109 捕水剤
 A 表示部

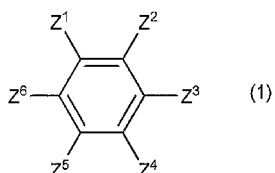
B 制御部

C 配線部

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（１）で表される構造を有する、 π 共役系化合物。

[化1]



（一般式（１）中、

$Z^1 \sim Z^6$ は、それぞれ水素原子、重水素原子、電子供与性基D又は電子吸引性基Aを表し、

$Z^1 \sim Z^6$ のうち少なくとも二つの一方が前記電子供与性基Dであり、他方が前記電子吸引性基Aであり、かつ

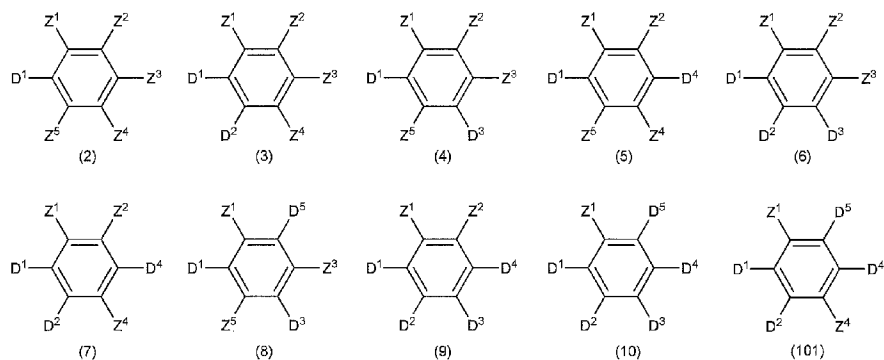
$Z^1 \sim Z^6$ のうちオルト位の組み合わせ Z^1 と Z^2 、 Z^2 と Z^3 、 Z^3 と Z^4 、 Z^4 と Z^5 、 Z^5 と Z^6 及び Z^6 と Z^1 の少なくとも一つが、前記電子供与性基Dと前記電子供与性基D、前記電子吸引性基Aと前記電子吸引性基A、又は前記電子供与性基Dと前記電子吸引性基Aの組み合わせのいずれかであり、

前記電子供与性基Dは、電子供与性基で置換されたアリール基、置換されていてもよい電子供与性の複素環基、置換されていてもよいアミノ基、及びアルキル基からなる群より選ばれる基であり、

前記電子吸引性基Aは、フッ素原子、フッ素原子で置換されたアルキル基、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいスルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、置換されていてもよいボリル基、電子吸引性基で置換されていてもよいアリール基、及び置換されていてもよい電子吸引性の複素環基からなる群より選ばれる基である）

[請求項2] 下記一般式（２）～（１０）または（１０１）のいずれかで表される、請求項１に記載の π 共役系化合物。

[化2]



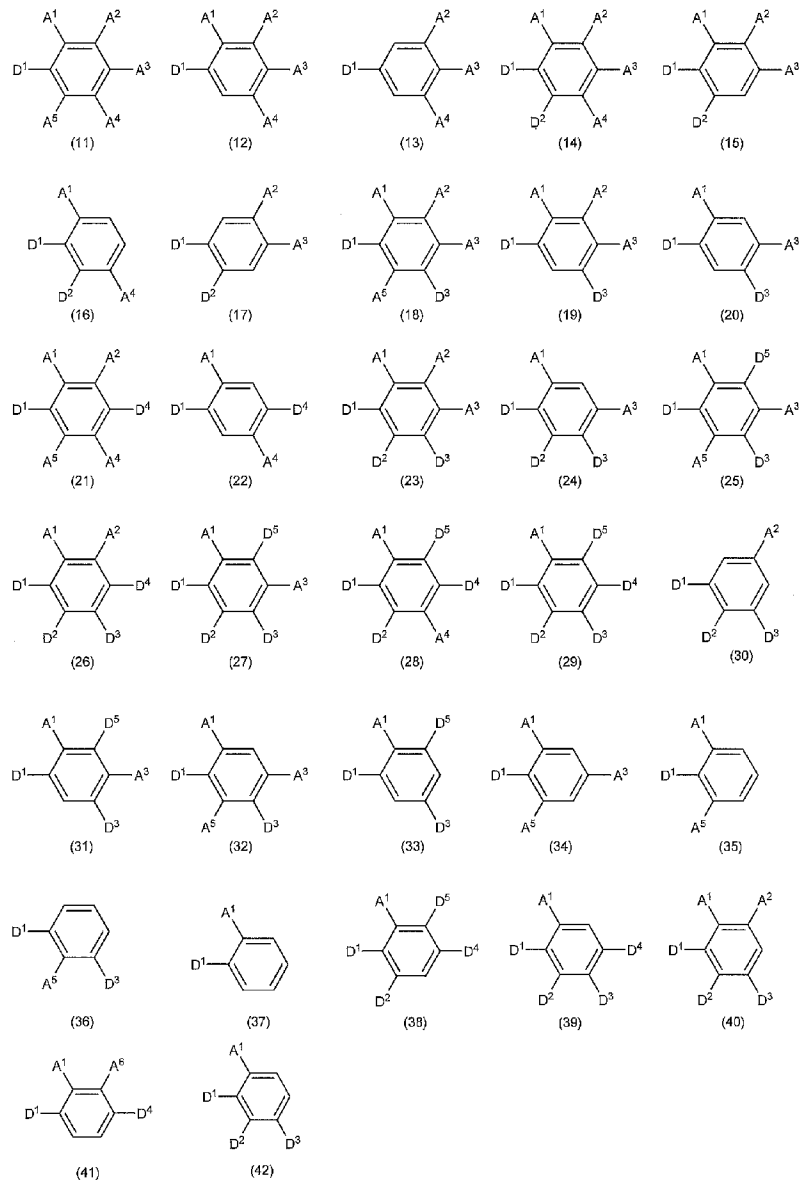
(一般式 (2) ~ (10) または (101) 中、

D¹ ~ D⁵ は、それぞれ独立して前記電子供与性基 D を表し；

Z¹ ~ Z⁵ は、それぞれ独立して水素原子、重水素原子又は前記電子吸引性基 A を表す。)

[請求項3] 下記一般式 (11) ~ (42) のいずれかで表される、請求項1に記載の π 共役系化合物。

[化3]



(一般式 (11) ~ (42) 中、

$D^1 \sim D^5$ は、それぞれ独立して前記電子供与性基 D を表し；

$A^1 \sim A^5$ は、それぞれ独立して前記電子吸引性基 A を表す。)

[請求項4]

前記一般式 (11) ~ (42) において、

$D^1 \sim D^5$ が、それぞれ独立に、電子供与性基で置換されたフェニル基、置換されていてもよいカルbazリル基、置換されていてもよいアザカルbazリル基、置換されていてもよいジアザカルbazリル基、置換されていてもよい9, 10-ジヒドロアクリジル基、置換されて

いてもよいフェノキサジル基、置換されていてもよいフェノチアジル基、置換されていてもよい5, 10-ジヒドロフェナジル基、置換されていてもよいジフェニルアミノ基、置換されていてもよいジアルキルアミノ基から選ばれる基からなり、かつ

$A^1 \sim A^5$ がそれぞれ独立に、シアノ基で置換されているアリール基、無置換の含窒素芳香族6員環基、フッ素原子で置換されている含窒素芳香族6員環基、シアノ基で置換されている含窒素芳香族6員環基、フッ素置換アルキル基で置換されている含窒素芳香族6員環基、置換されていてもよいアリール基で置換されている含窒素芳香族6員環基から選ばれる基からなる、請求項3に記載の π 共役系化合物。

[請求項5] 前記一般式(11)～(15)、(18)、(19)、(23)、(24)、(26)、(27)、(29)、(30)、(39)、(40)、又は(42)で表される、請求項3に記載の π 共役系化合物。

[請求項6] 前記一般式(13)、(15)、(18)、(19)、(23)、(24)、(27)、(30)、(40)、又は(42)で表される、請求項3に記載の π 共役系化合物。

[請求項7] 前記一般式(11)～(42)において、 $D^1 = D^2 = D^3 = D^4 = D^5$ と $A^1 = A^2 = A^3 = A^4 = A^5$ のうち少なくとも一方を満たす、請求項3に記載の π 共役系化合物。

[請求項8] 最低励起一重項準位と最低励起三重項準位とのエネルギー差の絶対値 ΔE_{ST} が0.50 eV以下である、請求項1に記載の π 共役系化合物。

[請求項9] 請求項1に記載の π 共役系化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[請求項10] 請求項1に記載の π 共役系化合物を含み、前記 π 共役系化合物が蛍光を放射する、発光材料。

[請求項11] 前記 π 共役系化合物が、遅延蛍光を放射する、請求項10に記載の

発光材料。

[請求項12] 請求項1に記載の π 共役系化合物を含む、発光性薄膜。

[請求項13] 前記 π 共役系化合物が、遅延蛍光を放射する、請求項12に記載の発光性薄膜。

[請求項14] 陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に設けられた発光層とを含む、

前記発光層の少なくとも一層が、請求項1に記載の π 共役系化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項15] 前記 π 共役系化合物が、励起子を生成する、請求項14に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項16] 前記 π 共役系化合物が、蛍光を放射する、請求項14に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項17] 前記 π 共役系化合物が、遅延蛍光を放射する、請求項16に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項18] 前記発光層が、前記 π 共役系化合物と、ホスト化合物と、を含む、請求項14に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

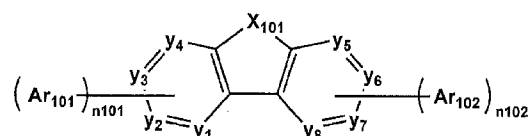
[請求項19] 前記発光層は、前記 π 共役系化合物と、蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物の少なくとも一方とを含む、請求項14に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項20] 前記発光層は、前記 π 共役系化合物と、蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物の少なくとも一方と、ホスト化合物とを含む、請求項14に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項21] 前記ホスト化合物が、下記一般式(I)で表される構造を有する、請求項18に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化4]

一般式(I)



(一般式 (I) 中、

X_{101} は、 NR_{101} 、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、 $CR_{102}R_{103}$ 又は $SiR_{104}R_{105}$ を表し、

$y_1 \sim y_8$ は、それぞれ独立に、 CR_{106} 又は窒素原子を表し、

$R_{101} \sim R_{106}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよく、

Ar_{101} 及び Ar_{102} は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、

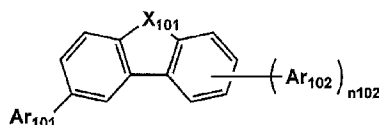
n_{101} 及び n_{102} は、各々0～4の整数を表す。

ただし、 R_{101} が水素原子の場合は、 n_{101} は1～4の整数を表す。)

[請求項22] 前記一般式 (I) で表される構造を有するホスト化合物が、下記一般式 (II) で表される構造を有する、請求項21に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化5]

一般式(II)



(一般式 (II) 中、

X_{101} は、 NR_{101} 、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、 $CR_{102}R_{103}$ 又は $SiR_{104}R_{105}$ を表し、

$R_{101} \sim R_{105}$ は、各々水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよく、

Ar_{101} 及び Ar_{102} は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、

n_{102} は0～4の整数を表す。)

[請求項23] 請求項14に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、表

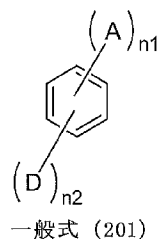
示装置。

[請求項24] 請求項14に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、照明装置。

[請求項25] 陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に配置された有機層とを含み、

前記有機層は、実質的に下記一般式(201)で表される π 共役系化合物からなる、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化6]



(一般式(201)中、

Aは、電子吸引性基であって、置換されていてもよい含窒素芳香族6員環基を表し、

$n1$ は、1～3の整数を表し、 $n1$ が2以上である場合、2以上の前記Aは、互いに同じであっても異なってもよく、

Dは、電子供与性基であって、電子供与性基で置換されたアリール基、置換されていてもよいアミノ基又はアルキル基を表し、

$n2$ は、2又は3を表し、2以上の前記Dは、互いに同じであっても異なってもよく、且つ

2以上の前記Dは、互いにオルト位に配置されている)

[請求項26] 前記有機層は、発光層である、請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項27] 前記発光層と前記陽極との間に配置された正孔輸送層と、前記発光層と前記陰極との間に配置された電子輸送層の少なくとも一方をさらに含む、請求項26に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項28] 前記発光層と前記陽極との間に配置された正孔注入層と、前記発光

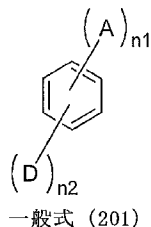
層と前記陰極との間に配置された電子注入層の少なくとも一方をさらに含む、請求項 26 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項29] 前記有機層の一方の面は前記陽極と接しており、且つ前記有機層の他方の面は前記陰極と接している、請求項 25 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項30] 陽極と、陰極と、一方の面が前記陽極と接し、且つ他方の面が前記陰極と接する有機層とを含み、

前記有機層は、実質的に下記一般式（201）で表される π 共役系化合物とゲスト化合物とからなる、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化7]



（一般式（201）中、

A は、電子吸引性基であって、置換されていてもよい含窒素芳香族 6 員環基を表し、

$n1$ は、1～3 の整数を表し、 $n1$ が 2 以上である場合、2 以上の前記 A は、互いに同じであっても異なってもよく、

D は、電子供与性基であって、電子供与性基で置換されたアリール基、置換されていてもよいアミノ基又はアルキル基を表し、

$n2$ は、2 又は 3 を表し、2 以上の前記 D は、互いに同じであっても異なってもよく、且つ

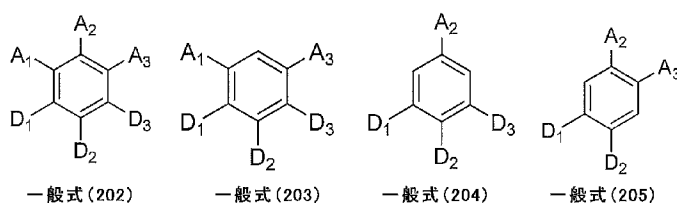
2 以上の前記 D は、互いにオルト位に配置されている）

[請求項31] 前記ゲスト化合物は、蛍光発光性化合物（但し、前記一般式（201）で表される π 共役系化合物を除く）又はリン光発光性化合物である、請求項 30 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項32] 前記ゲスト化合物は、蛍光発光性化合物であり、
前記蛍光発光性化合物の含有量が、前記有機層の20体積%以下である、請求項30に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項33] 前記一般式(201)で表される π 共役系化合物は、下記一般式(202)～(205)のいずれかで表される、請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化8]



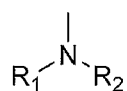
(一般式(202)～(205)中、

$A_1 \sim A_3$ は、それぞれ前記一般式(201)のAと同義であり、

$D_1 \sim D_3$ は、それぞれ前記一般式(201)のDと同義である)

[請求項34] 前記一般式(201)におけるDは、下記一般式(D-1)で表される基である、請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化9]



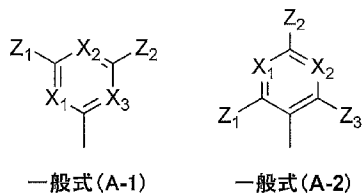
一般式(D-1)

(一般式(D-1)中、

R_1 及び R_2 は、それぞれ置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、且つ R_1 及び R_2 は、互いに結合して環を形成してもよい)

[請求項35] 前記一般式(201)におけるAは、下記一般式(A-1)又は(A-2)で表される基である、請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化10]



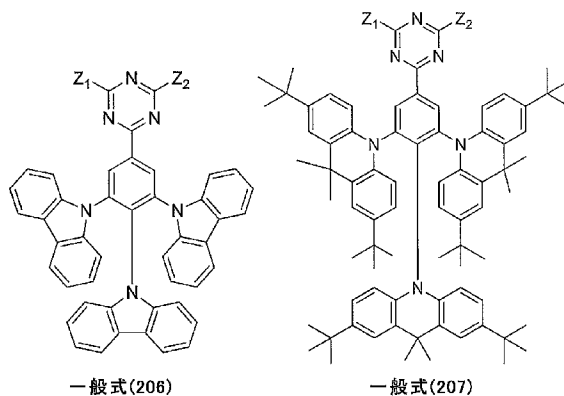
(一般式 (A-1) 又は (A-2) 中、

X₁～X₃は、それぞれ—CH又は窒素原子であり、且つ少なくとも一つは窒素原子であり、

Z₁～Z₃は、それぞれ水素原子、シアノ基、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表す)

[請求項36] 前記一般式(201)で表されるπ共役系化合物は、下記一般式(206)又は(207)で表される、請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化11]

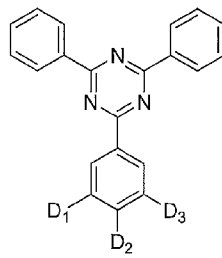


(一般式 (206) 又は (207) 中、

Z₁及びZ₂は、それぞれ置換されていてもよいアリール基である)

[請求項37] 前記一般式(201)で表されるπ共役系化合物は、下記一般式(208)で表される、請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化12]



一般式(208)

(一般式(208)中、

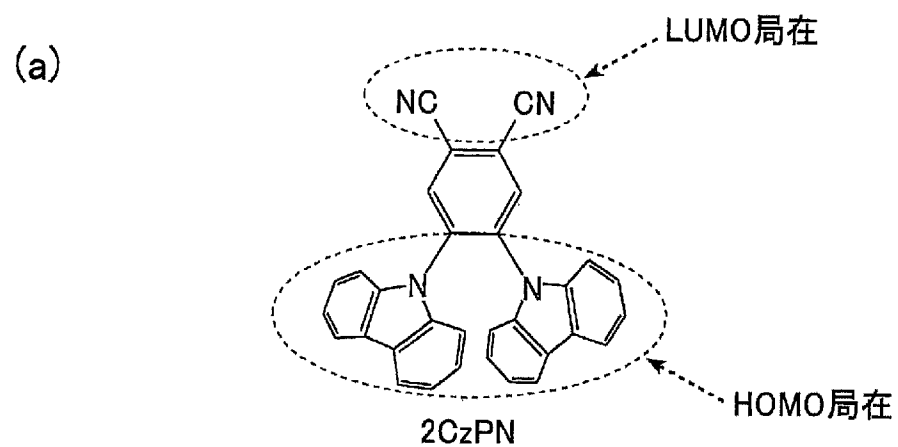
$D_1 \sim D_3$ は、それぞれ置換されていてもよいアミノ基である)

[請求項38] 前記 π 共役系化合物の、最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位とのエネルギー差の絶対値 ΔE_{s-t} が、0.5 eV以下である、請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

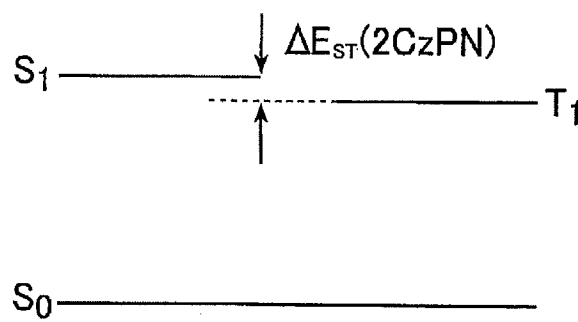
[請求項39] 請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、表示装置。

[請求項40] 請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、照明装置。

[図1]

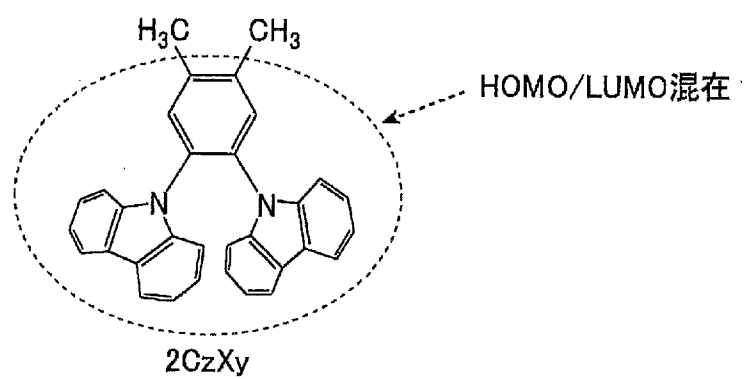


(b)

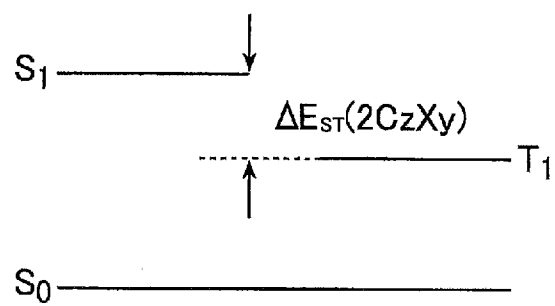


[図2]

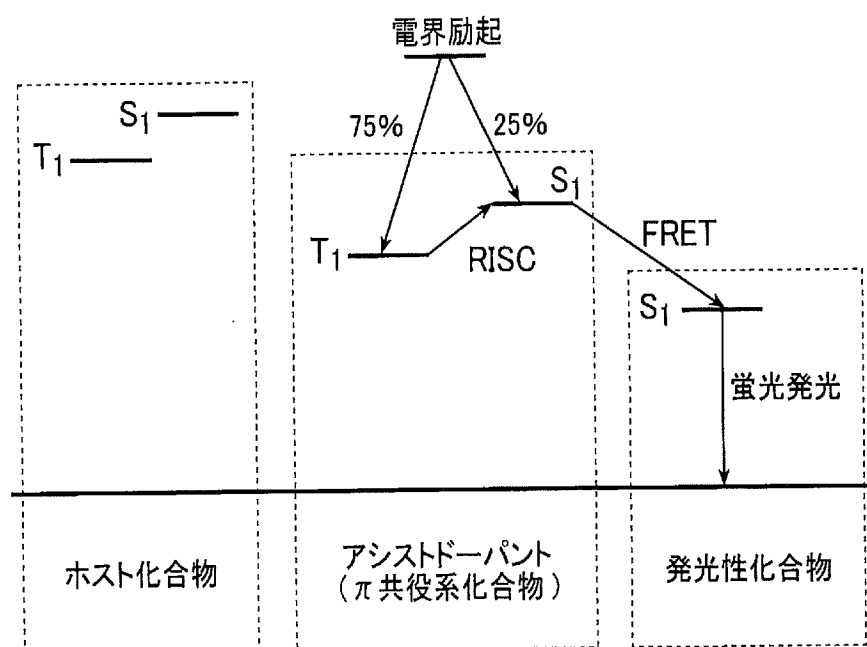
(a)



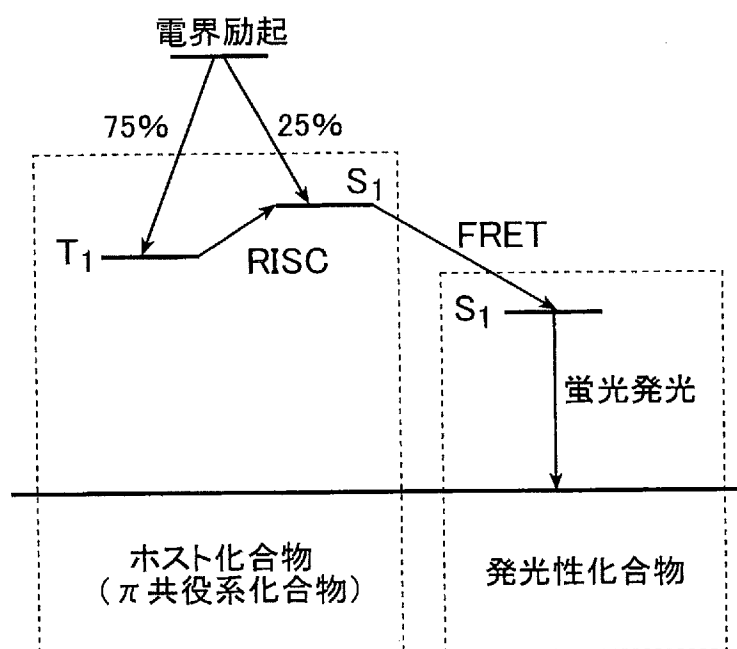
(b)



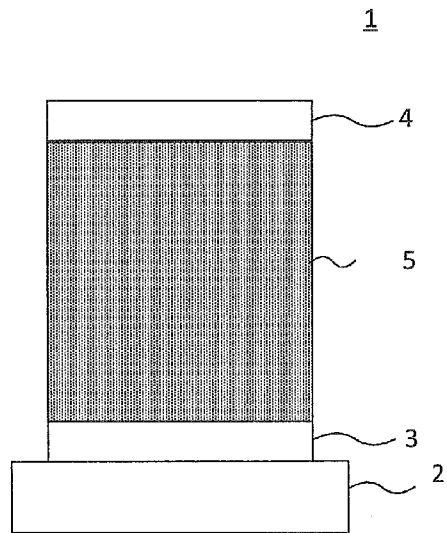
[図3]



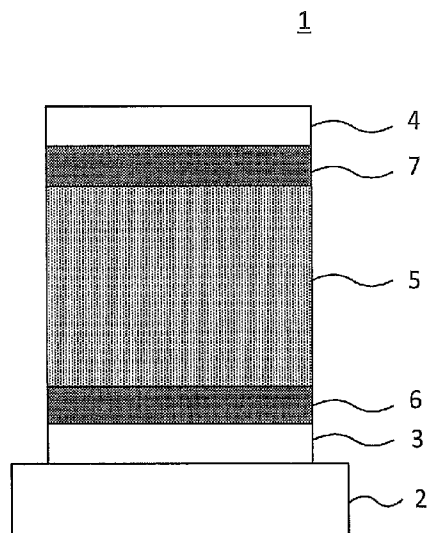
[図4]



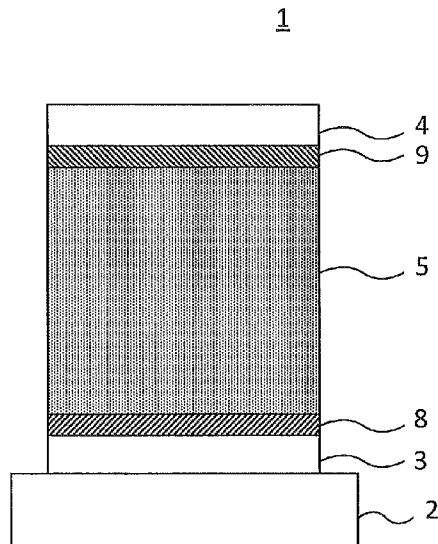
[図5A]



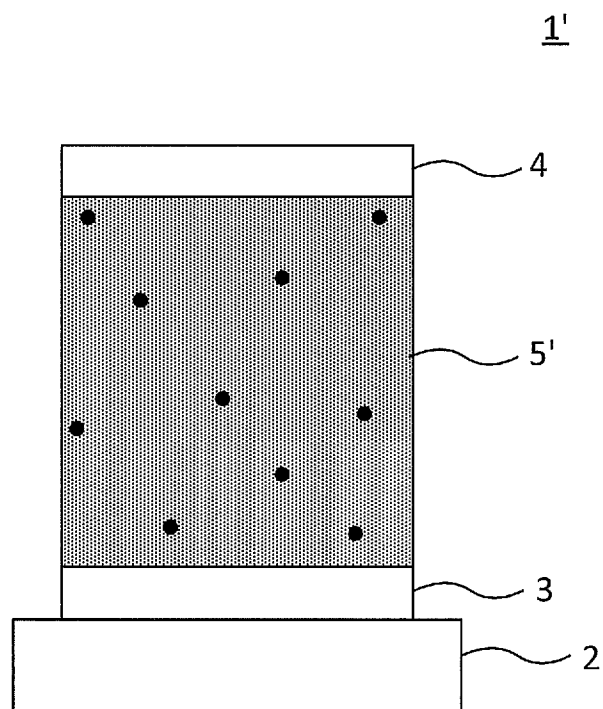
[図5B]



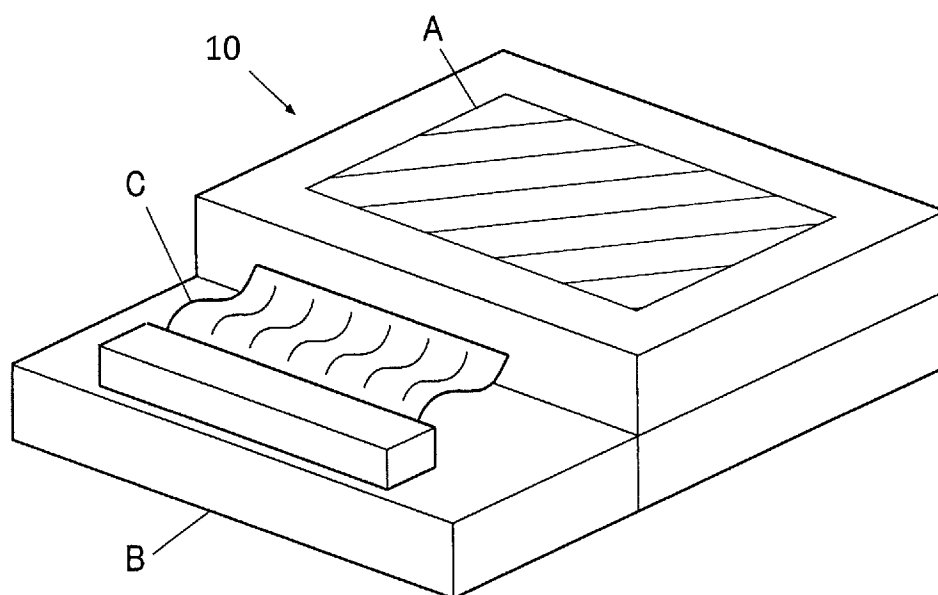
[図5C]



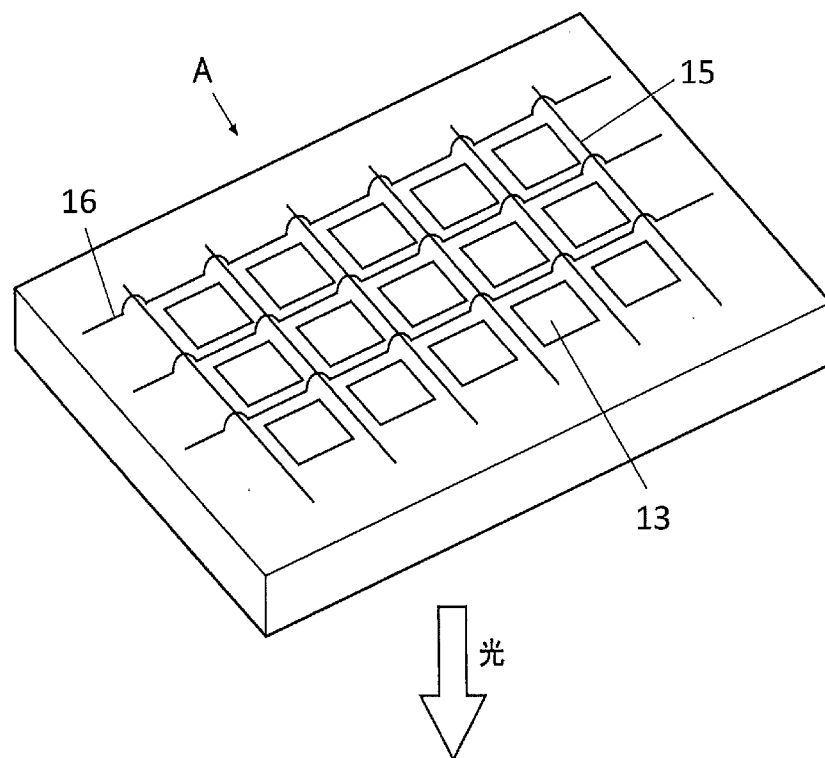
[図6]



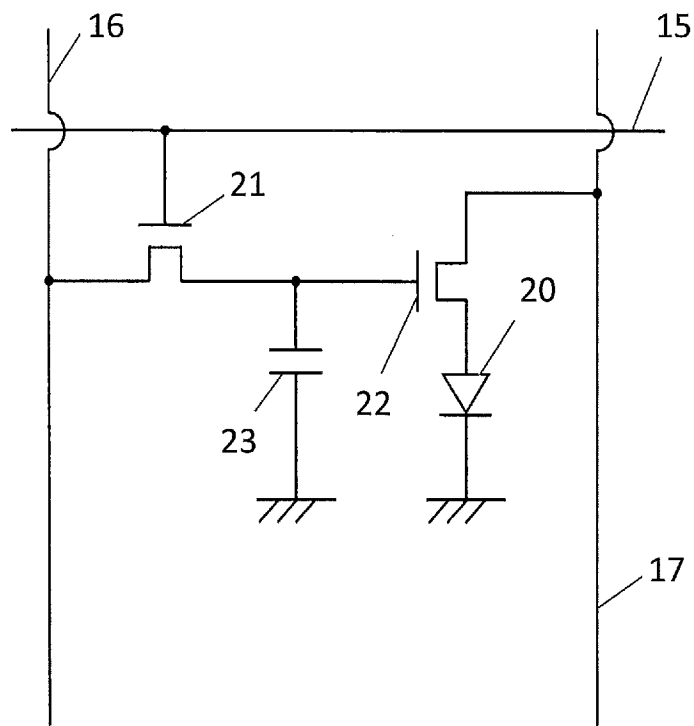
[図7]



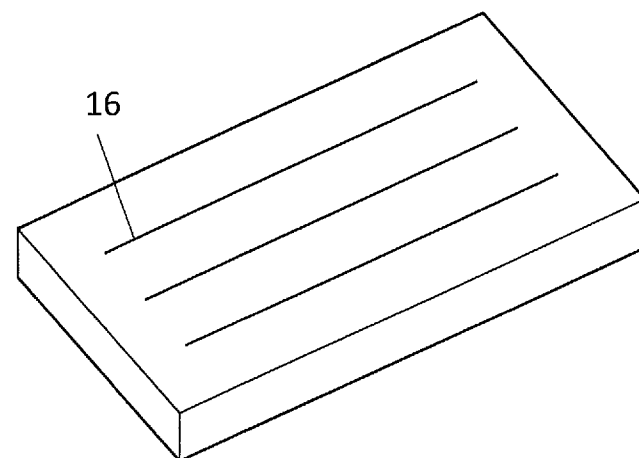
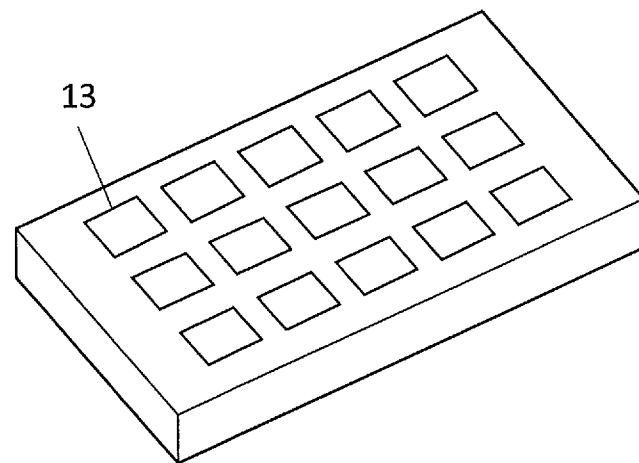
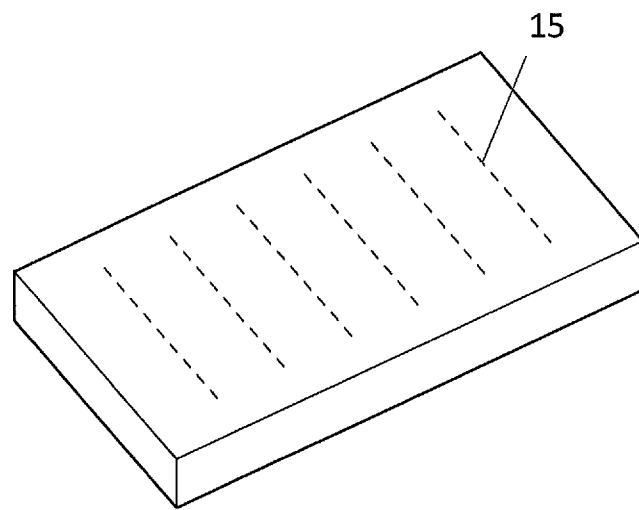
[図8]



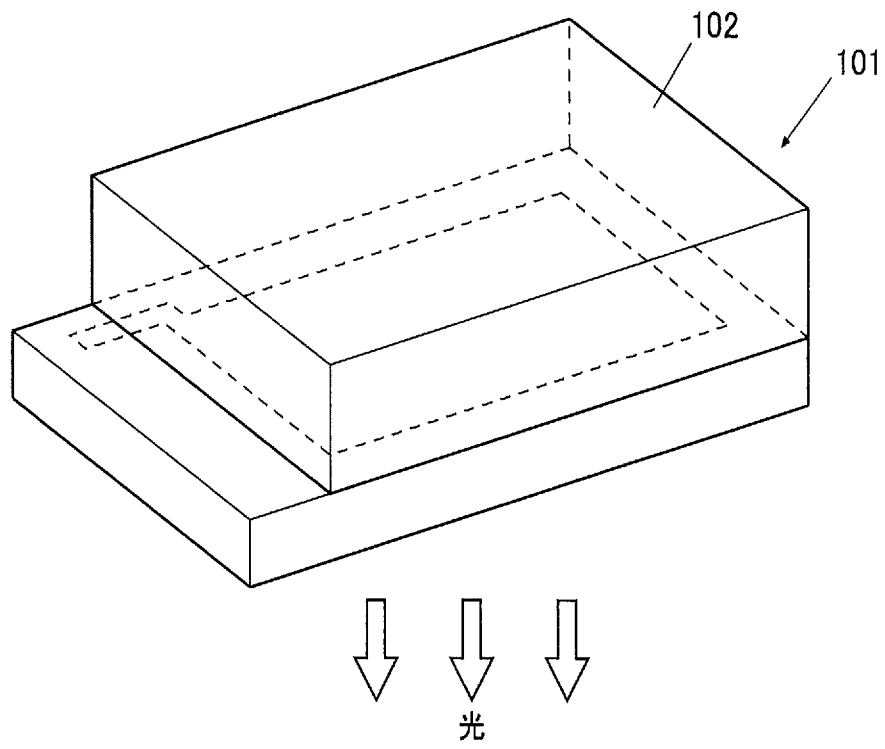
[図9]



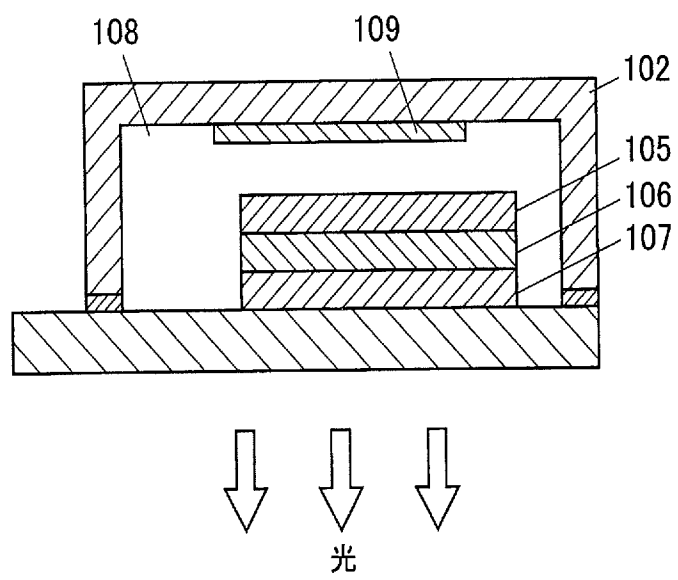
[図10]



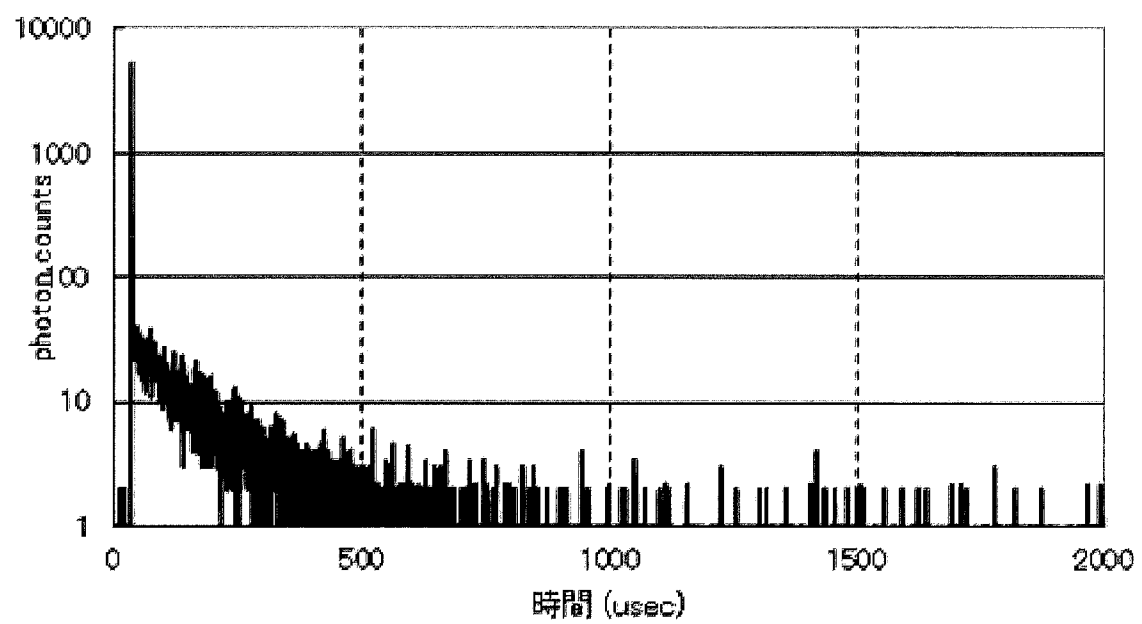
[図11]



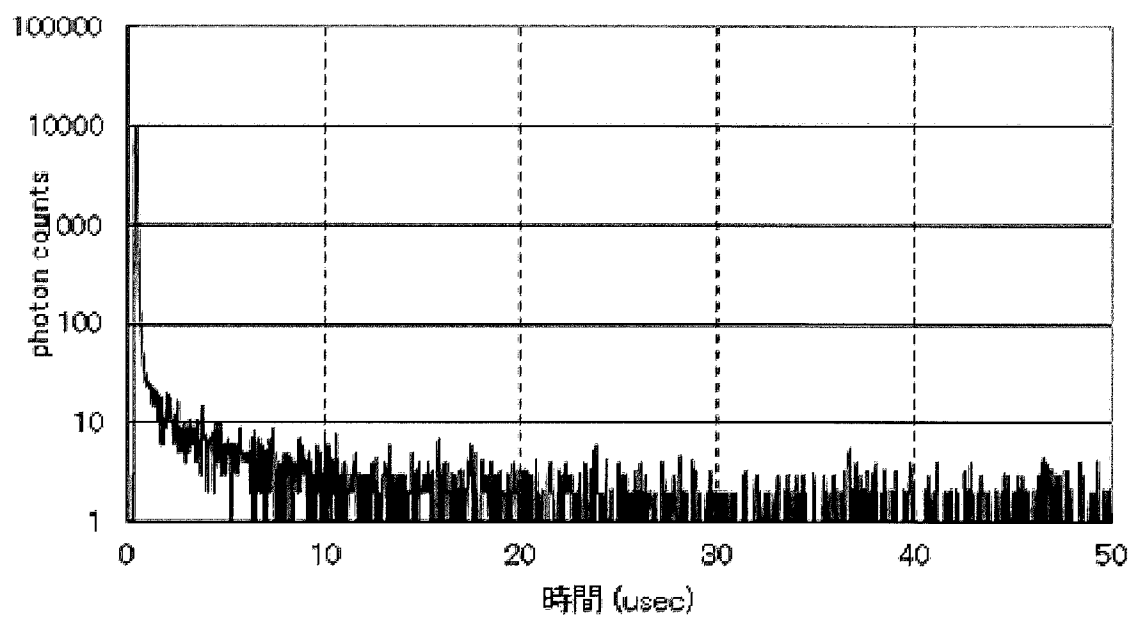
[図12]



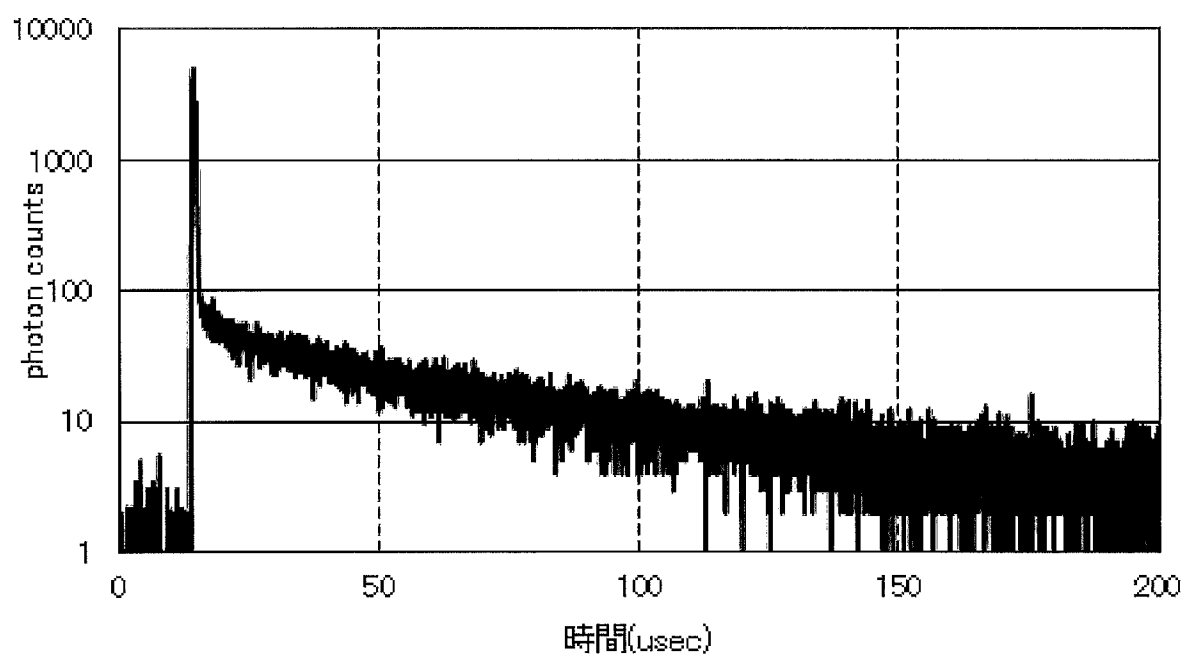
[図13]



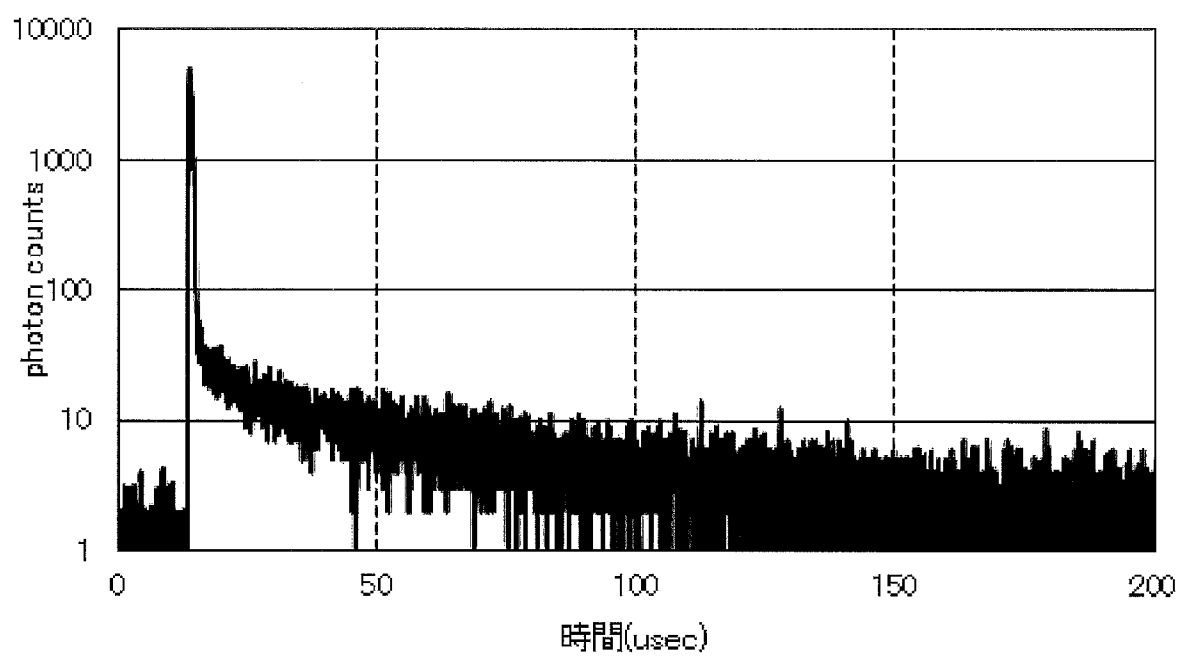
[図14]



[図15]



[図16]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/063242

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

See extra sheet.

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)

C07D209/86, C07C255/51, C07D241/24, C07D251/24, C07D265/38, C07D401/14, C07D403/14, C07D417/10, C07D471/14, C07D491/048, C07D519/00, C09K11/06, H01L51/50

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

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2016
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2016	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2016

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.
X Y	WO 2015/022835 A1 (Konica Minolta, Inc.), 19 February 2015 (19.02.2015), claims; paragraphs [0205] to [0208]; examples; table 4; compounds 2-1 to 16, 19, 24 to 26, 28 to 30; paragraphs [0275] to [0302] (Family: none)	1-35, 38-40 36, 37
X Y	WO 2015/029964 A1 (Konica Minolta, Inc.), 05 March 2015 (05.03.2015), claims; paragraphs [0101] to [0177]; examples; compounds 2-1 to 16, 19, 24 to 26, 28 to 30; claims 3, 4 (Family: none)	1-35, 38-40 36, 37

☒ 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

"I" 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 July 2016 (15.07.16)

Date of mailing of the international search report
02 August 2016 (02.08.16)

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/JP2016/063242

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	WO 2014/092083 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 19 June 2014 (19.06.2014), claims; paragraphs [0212] to [0221]; examples, measurement compound 14; paragraphs [0157] to [0159]; table 2 (Family: none)	1-24 36,37
X	WO 2014/146752 A1 (MERCK PATENT GMBH), 25 September 2014 (25.09.2014), claims; page 3, lines 8 to 21; compounds 34, 37, 40, 43, 70, 71, 73, 74, S79, S93, S95 to S100, S102, S104, S110, S112 to S119 & US 2016/0072076 A1 claims; paragraphs [0013] to [0014]; compounds 34, 37, 40, 43, 70, 71, 73, 74, S79, S93, S95 to S100, S102, S104, S110, S112 to S119 & JP 2016-516085 A & EP 2976329 A1 & CN 105051014 A & KR 10-2015-0132872 A	1-24
X	JP 2006-199679 A (Pioneer Corp.), 03 August 2006 (03.08.2006), claims; examples 1 to 4, 7 to 10, 13, 14 & EP 1829871 A1 claims; examples 1 to 4, 7 to 10, 13, 14 & US 2008/0145699 A1 & US 2009/0191426 A1 & WO 2006/067976 A1 & KR 10-2007-0090952 A & CN 101087776 A & KR 10-2012-0082938 A	1-24
A	WO 2013/154064 A1 (Kyushu University), 17 October 2013 (17.10.2013), claims; examples & EP 2851408 A1 claims; examples & JP 2014-43541 A & JP 2014-135466 A & US 2015/0105564 A1 & CN 104204132 A & KR 10-2015-0005583 A & TW 201402776 A	1-40
P,X	LEE, Dong Ryun et al., Advanced Materials, 2015.10.21, Vol.27, No.39, p.5861-5867, particularly, TCzTrz, TmCzTrz, DCzmCzTrz	1-40
P,X	CN 104693185 A (NANJING TECH UNIVERSITY), 10 June 2015 (10.06.2015), claims; examples 2 to 5 (Family: none)	1-32,34, 38-40
P,X	WO 2015/129714 A1 (Kyushu University), 03 September 2015 (03.09.2015), claims; synthesis examples 1 to 2; comparative synthesis examples 1 to 2; examples 1 to 3; comparative examples 1 to 2 (Family: none)	1-24

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/063242

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
E,X	JP 2016-115940 A (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 23 June 2016 (23.06.2016), claims; examples; compounds H-2, 3 (Family: none)	1-32, 34, 35, 38-40

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/063242

Continuation of A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

(International Patent Classification (IPC))

*C07D209/86(2006.01)i, C07C255/51(2006.01)i, C07D241/24(2006.01)i,
C07D251/24(2006.01)i, C07D265/38(2006.01)i, C07D401/14(2006.01)i,
C07D403/14(2006.01)i, C07D417/10(2006.01)i, C07D471/14(2006.01)i,
C07D491/048(2006.01)i, C07D519/00(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)

Object to be covered by this search:

With respect to compounds represented by general formula (1) recited in claim 1, only a benzene ring is a common structure and the structures of substituents on the benzene ring and the positions of the substitutions are variable, and therefore wide variety of compounds are included within the scope of the general formula. For example, a compound having a simple structure, such as benzene in which a methyl group and a fluorine atom are ortho-substituted is also included within the scope of the general formula. Therefore, great many compounds are included within the scope of the compound represented by the general formula.

However, among compounds represented by the above-mentioned general formula (1), those compounds which are disclosed in the description of the present application in the meaning within PCT Article 5 are only compounds which have specific structures, including compounds mentioned in the section "examples" which are shown in [0035] to [0342] and tables 1 to 4 and of which the synthesis examples, luminous efficiency values and the like are described specifically. Furthermore, even though the common technical knowledge at the time of filing the present application is taken into consideration, it cannot be considered that all of compounds represented by the above-mentioned general formula (1) are supported satisfactorily in the meaning within PCT Article 6.

Consequently, this search has been carried out with respect to the part disclosed in and supported by the description, that is, the compounds which are represented by general formula (201) set forth in claim 25, and the above-said compounds in the examples.

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. 特別ページ参照

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. C07D209/86, C07C255/51, C07D241/24, C07D251/24, C07D265/38, C07D401/14, C07D403/14, C07D417/10, C07D471/14, C07D491/048, C07D519/00, 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	1971-2016年
日本国実用新案登録公報	1996-2016年
日本国登録実用新案公報	1994-2016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
X Y	W0 2015/022835 A1（コニカミノルタ株式会社）2015.02.19, 特許請求の範囲, [0205] ~ [0208], 実施例, 表4, 化合物2-1~16, 19, 24~26, 28~30, [0275] ~ [0302] (ファミリーなし)	1-35, 38-40 36, 37
X Y	W0 2015/029964 A1（コニカミノルタ株式会社）2015.03.05, 特許請求の範囲, [0101] ~ [0177], 実施例, 化合物2-1~16, 19, 24~26, 28~30, 請求項3, 4 (ファミリーなし)	1-35, 38-40 36, 37

☑ 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

15.07.2016

国際調査報告の発送日

02.08.2016

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）

榎本 佳予子

4 P

9638

電話番号 03-3581-1101 内線 3492

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
X Y	WO 2014/092083 A1 (出光興産株式会社) 2014.06.19, 特許請求の範囲, [0212] ~ [0221], 実施例の測定化合物 14, [0157] ~ [0159], 表 2 (ファミリーなし)	1-24 36, 37
X	WO 2014/146752 A1 (MERCK PATENT GMBH) 2014.09.25, 特許請求の範囲, 3 頁 8~21 行, 化合物 34, 37, 40, 43, 70, 71, 73, 74, S79, S93, S95~S100, S102, S104, S110, S112~S119 等 & US 2016/0072076 A1, 特許請求の範囲, [0013] ~ [0014], 化合物 34, 37, 40, 43, 70, 71, 73, 74, S79, S93, S95~S100, S102, S104, S110, S112~S119 等 & JP 2016-516085 A & EP 2976329 A1 & CN 105051014 A & KR 10-2015-0132872 A	1-24
X	JP 2006-199679 A (パイオニア株式会社) 2006.08.03, 特許請求の範囲, 実施例 1~4, 7~10, 13, 14 & EP 1829871 A1, 特許請求の範囲, 実施例 1~4, 7~10, 13, 14 & US 2008/0145699 A1 & US 2009/0191426 A1 & WO 2006/067976 A1 & KR 10-2007-0090952 A & CN 101087776 A & KR 10-2012-0082938 A	1-24
A	WO 2013/154064 A1 (国立大学法人九州大学) 2013.10.17, 特許請求の範囲, 実施例 & EP 2851408 A1, 特許請求の範囲, 実施例 & JP 2014-43541 A & JP 2014-135466 A & US 2015/0105564 A1 & CN 104204132 A & KR 10-2015-0005583 A & TW 201402776 A	1-40
PX	LEE, Dong Ryun et al., Advanced Materials, 2015.10.21, Vol.27, No. 39, p.5861-5867, 特に, TCzTrz, TmCzTrz, DCzmCzTrz	1-40
PX	CN 104693185 A (NANJING TECH UNIVERSITY) 2015.06.10, 特許請求の範囲, 実施例(2)~(5) (ファミリーなし)	1-32, 34, 38-40
PX	WO 2015/129714 A1 (国立大学法人九州大学) 2015.09.03, 特許請求の範囲, 合成例 1~2, 比較合成例 1~2, 実施例 1~3, 比較例 1~2 (ファミリーなし)	1-24
EX	JP 2016-115940 A (出光興産株式会社) 2016.06.23, 特許請求の範囲, 実施例, 化合物 H-2, 3 (ファミリーなし)	1-32, 34, 35, 38-40

発明の属する分野の分類

C07D209/86(2006.01)i, C07C255/51(2006.01)i, C07D241/24(2006.01)i,
C07D251/24(2006.01)i, C07D265/38(2006.01)i, C07D401/14(2006.01)i,
C07D403/14(2006.01)i, C07D417/10(2006.01)i, C07D471/14(2006.01)i,
C07D491/048(2006.01)i, C07D519/00(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i,
H01L51/50(2006.01)i

＜調査の対象について＞

請求項1に記載の一般式(1)は、ベンゼン環のみを共通構造とし、ベンゼン環上の置換基の構造も置換位置も可変で多岐にわたるものであり、たとえば、メチルとフッ素がオルト位に置換されたベンゼンのような単純な化合物まで含む、非常に広範なものとなっている。

しかしながら、上記一般式(1)で表される化合物のうち、PCT第5条の意味において本願明細書に開示されているのは、合成例や発光効率等が具体的に示される、[0035]～[0342]及び表1～4に記載の実施例化合物のような特定の構造を有する化合物にとどまり、出願時の技術常識を参酌しても、上記一般式(1)で表される化合物のすべてにわたってPCT第6条の意味で十分に裏付けられているとはいえない。

よって、調査は、明細書に開示され、裏付けられている部分、すなわち、請求項25に記載の一般式(201)で表される化合物及び上記実施例化合物について行った。