

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2022年12月29日(29.12.2022)



(10) 国際公開番号

WO 2022/270113 A1

(51) 国際特許分類:

C07F 5/02 (2006.01) C07D 519/00 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07D 209/86 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2022/015888

(22) 国際出願日: 2022年3月30日(30.03.2022)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:

特願 2021-103702 2021年6月23日(23.06.2021) JP
特願 2021-151805 2021年9月17日(17.09.2021) JP
特願 2021-188860 2021年11月19日(19.11.2021) JP
特願 2021-204983 2021年12月17日(17.12.2021) JP

(71) 出願人: 株式会社 K y u l u x (KYULUX, INC.) [JP/JP]; 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 Fukuoka (JP).

(72) 発明者: 吉 ▲ 崎 ▼ 誠 (YOSHIZAKI Makoto); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 森本京(MORIMOTO Kei); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). ファン ソンヘ(HWANG Songhye); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 小澤 寛晃(OZAWA Hiroaki); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 垣添 勇人

(KAKIZOE Hayato); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 児玉 タ佳(KODAMA Yuka); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP).

(74) 代理人: 特許業務法人特許事務所サイクス(SIKS & CO.); 〒1040031 東京都中央区京橋一丁目8番7号 京橋日殖ビル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, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS,

(54) Title: ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT

(54) 発明の名称: 有機エレクトロルミネッセンス素子

(57) Abstract: Provided is an organic electroluminescent element by which high light-emission efficiency can be obtained even in a case in which the LUMO level of a fluorescent material is lower than the LUMO level of a delayed fluorescent material. The organic electroluminescent element contains, in a light-emitting layer, a first organic compound, a second organic compound that is a delayed fluorescent material, and a third organic compound that emits fluorescent light. The LUMO energy of the second organic compound is higher than that of the third organic compound. The largest component of emitted light from the element is fluorescent light from the third organic compound, and the orientation value of the third organic compound in the light-emitting layer is -0.3 or less.

(57) 要約: 遅延蛍光材料のLUMO準位よりも蛍光材料のLUMO準位が低い場合でも高い発光効率が得られる有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること。発光層に、第1有機化合物、遅延蛍光材料である第2有機化合物および蛍光を放射する第3有機化合物を含んでいて、第2有機化合物が第3有機化合物よりもLUMOのエネルギーが高く、素子からの発光の最大成分が第3有機化合物からの蛍光であり、発光層における第3有機化合物の配向値が-0.3以下である有機エレクトロルミネッセンス素子。

SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM,
GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類：

一 国際調査報告（条約第21条(3)）

明 細 書

発明の名称：有機エレクトロルミネッセンス素子

技術分野

[0001] 本発明は、発光効率が高い有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。

背景技術

[0002] 有機エレクトロルミネッセンス素子（有機EL素子）の発光効率を高める研究が盛んに進められている。特に、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層の材料組成を新たに開発することにより、室温では無輻射失活してしまう励起三重項状態のエネルギーを、励起一重項エネルギーへ変換して発光に利用する工夫が種々なされてきている。

例えば、特許文献1には、ホスト材料と遅延蛍光材料と蛍光材料で発光層を構成した3成分系の有機エレクトロルミネッセンス素子が提案されている。この発光層では、ホスト材料から遅延蛍光材料に移動してきた励起三重項エネルギー、および、遅延蛍光材料で生じた励起三重項エネルギーが、遅延蛍光材料での三重項から一重項への逆項間交差により励起一重項エネルギーに変換され、蛍光材料に移動して蛍光として放射される。これにより、発光層で生じた励起三重項エネルギーが蛍光材料の発光に有効利用されて高い発光効率を得られるとされている。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：特開2015-179809号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] ところで、蛍光材料の発光波長は、HOMO-LUMO間のエネルギーギャップとストークスシフトに依存し、これらのエネルギー値が異なる様々な蛍光材料が開発されている。そのため、上記の3成分系の発光層では、用いる蛍光材料によって、蛍光材料のLUMOのエネルギーが遅延蛍光材料のL

UMOのエネルギーよりも高くなる場合もあれば、それよりも低くなる（深くなる）場合もある。こうした状況において、本発明者らが、様々な遅延蛍光材料および蛍光材料をホスト材料と組み合わせて発光層を構成したところ、遅延蛍光材料のLUMOのエネルギーよりも蛍光材料のLUMOのエネルギーが低い場合に蛍光材料の濃度を上げると、発光効率が低下する現象が見られ、発光効率を十分に向上させることができないことが判明した。

[0005] そこで、本発明者らは、ホスト材料と遅延蛍光材料と蛍光材料を発光層に含む有機エレクトロルミネッセンス素子であって、遅延蛍光材料のLUMOのエネルギーよりも蛍光材料のLUMOのエネルギーが低い場合でも高い発光効率を得られる有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することを目的として鋭意検討を進めた。

課題を解決するための手段

[0006] 鋭意検討を進めた結果、本発明者らは、遅延蛍光材料のLUMOのエネルギーよりも蛍光材料のLUMOのエネルギーが低い場合であっても、蛍光材料として用いる有機化合物分子の配向値Sが -0.3 以下であれば、蛍光材料の濃度を上げて発光効率を向上させることができることを見出した。

本発明はこうした知見に基づいて提案されたものであり、具体的に、以下の構成を有する。

[0007] [1] 陽極、陰極、および前記陽極と前記陰極の間に発光層を含む少なくとも一層の有機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、

前記発光層は、第1有機化合物、第2有機化合物および第3有機化合物を含み、下記(a)および下記式(b)を満たしており、

前記第2有機化合物は遅延蛍光材料であり、

前記素子からの発光の最大成分は前記第3有機化合物からの蛍光である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[数1]

$$E_{\text{LUMO}}(2) > E_{\text{LUMO}}(3)$$

式(a)

$$S \leq -0.3$$

式(b)

[ここで、

E_{LUMO} (2) は、前記第2有機化合物のLUMOのエネルギー

E_{LUMO} (3) は、前記第3有機化合物のLUMOのエネルギー

Sは、前記発光層における前記第3有機化合物の配向値を表す。]

[2] 前記発光層における前記第3有機化合物の濃度が0.3重量%より大きい、[1]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

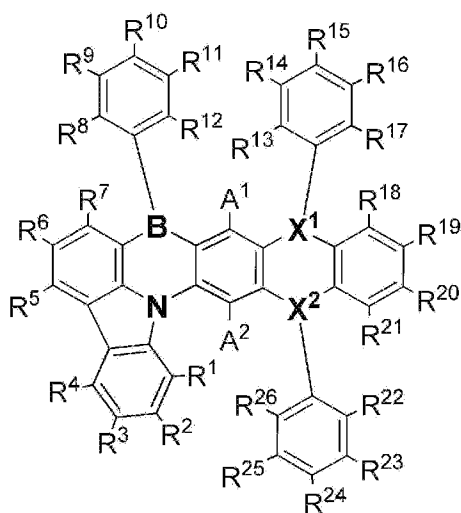
[3] 前記第3有機化合物は、多重共鳴効果を示すホウ素原子と窒素原子を含み、構成環数が4つ以上である縮合環構造を有する化合物である、[1]または[2]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[4] 前記第3有機化合物は、ホウ素原子と窒素原子を含む複素6員環に、窒素原子を共有するピロール環および2つのベンゼン環が縮合した構造を有する化合物である、[1]～[3]のいずれか1つに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[5] 前記第3有機化合物は、下記一般式(16)で表される化合物である、[1]～[4]のいずれか1つに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

一般式(16)

[化1]



[一般式(16)において、 X^1 および X^2 は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。 $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素

原子または置換基を表す。R¹とR²、R²とR³、R³とR⁴、R⁴とR⁵、R⁵とR⁶、R⁶とR⁷、R⁷とR⁸、R⁸とR⁹、R⁹とR¹⁰、R¹⁰とR¹¹、R¹¹とR¹²、R¹³とR¹⁴、R¹⁴とR¹⁵、R¹⁵とR¹⁶、R¹⁶とR¹⁷、R¹⁷とR¹⁸、R¹⁸とR¹⁹、R¹⁹とR²⁰、R²⁰とR²¹、R²¹とR²²、R²²とR²³、R²³とR²⁴、R²⁴とR²⁵、R²⁵とR²⁶は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ただし、X¹が窒素原子であるとき、R¹⁷とR¹⁸は互いに結合して単結合となりピロール環を形成し、X²が窒素原子であるとき、R²¹とR²²は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。ただし、X¹が窒素原子であって、R⁷とR⁸およびR²¹とR²²が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、R¹⁷とR¹⁸が互いに結合して単結合を形成しているとき、R¹～R⁶の少なくとも1つは置換もしくは無置換のアリール基であるか、R¹とR²、R²とR³、R³とR⁴、R⁴とR⁵、R⁵とR⁶のいずれかが互いに結合して芳香環または複素芳香環を形成している。]

[6] 前記発光層における前記第2有機化合物の濃度が25重量%以上である、[1]～[5]のいずれか1つに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[7] 前記第2有機化合物が、ベンゼン環に1～2つのシアノ基と少なくとも1つのドナー性基が結合した構造を有する、[1]～[6]のいずれか1つに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[8] 前記ドナー性基が、カルバゾール-9-イル基を構成するベンゼン環に置換もしくは無置換のベンゾフラン環が縮合した構造を有する、[7]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[9] 前記ドナー性基が、置換もしくは無置換の5H-ベンゾフロ[3,2-c]カルバゾール-5-イル基である、[8]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[10] 前記ベンゼン環に前記ドナー性基が3つ以上結合している、[7]～[9]のいずれか1つに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[11] 前記第1有機化合物、前記第2有機化合物および前記第3有機化

化合物が下記 (a 1) を満たしている、[1] ~ [10] のいずれか 1 つに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$E_{\text{LUMO}}(1) > E_{\text{LUMO}}(2) > E_{\text{LUMO}}(3) \quad \text{式 (a 1)}$$

[ここで、

$E_{\text{LUMO}}(1)$ は、前記第 1 有機化合物の LUMO のエネルギー

$E_{\text{LUMO}}(2)$ は、前記第 2 有機化合物の LUMO のエネルギー

$E_{\text{LUMO}}(3)$ は、前記第 3 有機化合物の LUMO のエネルギー

S は、前記発光層における前記第 3 有機化合物の配向値を表す。]

発明の効果

[0008] 本発明によれば、第 1 有機化合物と、遅延蛍光材料である第 2 有機化合物と、蛍光を放射する第 3 有機化合物を発光層に含む有機エレクトロルミネッセンス素子において、第 2 有機化合物の LUMO のエネルギーよりも第 3 有機化合物の LUMO のエネルギーが低い場合でも、第 3 有機化合物の濃度を上げて発光効率を向上させることができる。

発明を実施するための形態

[0009] 以下において、本発明の内容について詳細に説明する。以下に記載する構成要件の説明は、本発明の代表的な実施態様や具体例に基づいてなされることがあるが、本発明はそのような実施態様や具体例に限定されるものではない。なお、本願において「～」を用いて表される数値範囲は、「～」の前後に記載される数値を下限値および上限値として含む範囲を意味する。また、本願において「からなる」とは、「からなる」の前に記載されるもののみからなり、それ以外のものを含まないことを意味する。また、本発明に用いられる化合物の分子内に存在する水素原子の一部または全部は重水素原子 (^2H 、デューテリウム D) に置換することができる。本明細書の化学構造式では、水素原子は H と表示しているか、その表示を省略している。例えばベンゼン環の環骨格構成炭素原子に結合する原子の表示が省略されているとき、表示が省略されている箇所では H が環骨格構成炭素原子に結合しているものとする。本明細書にて「置換基」という用語は、水素原子および重水素原子以

外の原子または原子団を意味する。一方、「置換もしくは無置換の」「置換されていてもよい」という表現は、水素原子が重水素原子または置換基で置換されていてもよいことを意味する。また、本発明における「透明」とは、可視光の透過率が50%以上であることをいい、好ましくは80%以上、より好ましくは90%以上、さらに好ましくは99%以上である。可視光の透過率は紫外・可視分光光度計により測定することができる。

[0010] 本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、陽極、陰極、および、陽極と陰極の間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子である。有機層は、発光層のみから構成されていてもよいし、発光層以外の有機層を含んでいてもよい。例えば、陽極と発光層、発光層と陰極の間には、それぞれ有機層が介在していてもよいし、介在していなくてもよい。言い換えれば、陽極と発光層は直接接するように積層されていてもよいし、直接接触しないように積層されていてもよい。また、発光層と陰極は直接接するように積層されていてもよいし、直接接触しないように積層されていてもよい。発光層は、陽極と陰極の間に位置しており、陽極と陰極の間の領域に発光層全体がはみ出すことなく配置されていることが好ましい。

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、陽極、陰極、および、発光層を含む少なくとも1層の有機層を支持する基板を有していてもよい。この場合、基板は、陽極の発光層と反対側に配置していてもよいし、陰極の発光層と反対側に配置していてもよい。また、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、大半の光が基板と反対側から放出されるトップエミッション方式の素子であってもよいし、大半の光が基板側から放出されるボトムエミッション方式の素子であってもよい。ここで、「大半の光」とは、素子から放出される光の量の60%以上の光であることを意味する。

[0011] 本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、発光層に第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物を含む。ここで、第2有機化合物は遅延蛍光材料である。また、第3有機化合物は蛍光を放射する化合物である。そ

して、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子では、素子からの発光の最大成分は第3有機化合物からの蛍光である。

[0012] 発光層に含まれる第2有機化合物と第3有機化合物は下記の式(a)および式(b)を満たす。

$$E_{\text{LUMO}}(2) > E_{\text{LUMO}}(3) \quad \text{式(a)}$$

$$S \leq -0.3 \quad \text{式(b)}$$

本発明の一態様では、発光層に含まれる第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物は下記の式(a1)および式(b)を満たす。

$$E_{\text{LUMO}}(1) > E_{\text{LUMO}}(2) > E_{\text{LUMO}}(3) \quad \text{式(a1)}$$

$$S \leq -0.3 \quad \text{式(b)}$$

[0013] 式(a)および式(a1)における $E_{\text{LUMO}}(1)$ は第1有機化合物のLUMOのエネルギーを表し、 $E_{\text{LUMO}}(2)$ は第2有機化合物のLUMOのエネルギーを表し、 $E_{\text{LUMO}}(3)$ は第3有機化合物のLUMOのエネルギーを表す。LUMOはLowest Unoccupied Molecular Orbitalの略称であり、大気中光電子分光法(理研計器社製AC-3等)により求めることができる。

本発明は式(a)の関係を満たすものであることから、発光層に含まれる第2有機化合物のLUMOのエネルギーは第3有機化合物のLUMOのエネルギーよりも高い。式(a1)の関係を満たす場合は、発光層に含まれる第1有機化合物、第2有機化合物、第3有機化合物の中では、第1有機化合物のLUMOのエネルギーが最も高く、第2有機化合物が次に高く、そして第3有機化合物が最も低い。LUMOのエネルギー差 $[E_{\text{LUMO}}(1) - E_{\text{LUMO}}(2)]$ は、例えば0.1 eV以上の範囲内にしたり、0.5 eV以上の範囲内にしたり、0.8 eV以上の範囲内にしたり、1.0 eV以上の範囲内にしたりすることができ、また、2.0 eV以下の範囲内にしたり、1.5 eV以下の範囲内にしたり、1.3 eV以下の範囲内にしたり、1.1 eV以下の範囲内にしたりすることができる。LUMOのエネルギー差 $[E_{\text{LUMO}}(2) - E_{\text{LUMO}}(3)]$ は、例えば0.01 eV以上の範囲内にしたり、0.05 eV以上の範囲内にしたり、0.1 eV以上の範囲内にしたり、0.15 eV

以上の範囲内にしたり、 0.2 eV 以上の範囲にしたりすることができ、また、 0.7 eV 以下の範囲内にしたり、 0.5 eV 以下の範囲内にしたり、 0.4 eV 以下の範囲内にしたり、 0.3 eV 以下の範囲内にしたりすることができる。本発明の一態様では、第1有機化合物としてLUMOのエネルギーが $-2.0\sim-5.0\text{ eV}$ の範囲内の化合物や、 $-2.5\sim-4.0\text{ eV}$ の範囲内の化合物を採用したりすることができる。本発明の一態様では、第2有機化合物としてLUMOのエネルギーが $-2.0\sim-5.0\text{ eV}$ の範囲内の化合物や、 $-2.5\sim-4.0\text{ eV}$ の範囲内の化合物を採用したりすることができる。また、本発明の一態様では、第3有機化合物としてLUMOのエネルギーが $-2.0\sim-5.0\text{ eV}$ の範囲内の化合物や、 $-2.5\sim-4.0\text{ eV}$ の範囲内の化合物を採用したりすることができる。

[0014] 第1有機化合物、第2有機化合物および第3有機化合物のHOMOエネルギーの関係は特に制限されない。例えば、第2有機化合物のHOMOのエネルギーは、第1有機化合物のHOMOのエネルギーよりも小さくても大きくてもよく、第1有機化合物のHOMOのエネルギーと同じであってもよい。また、第3有機化合物のHOMOのエネルギーは、第2有機化合物のHOMOのエネルギーよりも小さくても大きくてもよく、第2有機化合物のHOMOのエネルギーと同じであってもよい。HOMOはHighest occupied Molecular Orbitalの略称であり、大気中光電子分光法（理研計器社製AC-3等）により求めることができる。本発明の一態様では、第1有機化合物としてHOMOのエネルギーが $-4.0\sim-6.5\text{ eV}$ の範囲内の化合物や、 $-5.5\sim-6.2\text{ eV}$ の範囲内の化合物を採用したりすることができる。本発明の一態様では、第2有機化合物としてHOMOのエネルギーが $-4.0\sim-6.5\text{ eV}$ の範囲内の化合物や、 $-5.5\sim-6.2\text{ eV}$ の範囲内の化合物を採用したりすることができる。また、本発明の一態様では、第3有機化合物としてHOMOのエネルギーが $-4.0\sim-6.5\text{ eV}$ の範囲内の化合物や、 $-5.0\sim-6.0\text{ eV}$ の範囲内の化合物を採用したりすることができる。

[0015] 式（b）におけるSは、発光層における第3有機化合物の配向値を表す。

本発明は式（b）を満たすものであるから、発光層における第3有機化合物の配向値は -0.3 以下である。配向値はS値とも呼ばれ、発光層内における第3有機化合物の配向の程度を示す指標である。負の値が大きいほど（数値が小さいほど）配向性が高いことを意味する。配向値（S値）は、Scientific Reports 2017, 7, 8405に記載される方法により決定することができる。本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子では、第3有機化合物の配向値が -0.3 以下であることにより、式（a）のLUMOエネルギーの関係を満たすものでありながら、高い外部量子収率を実現することができる。すなわち、蛍光材料の配向値を考慮していない従来の有機エレクトロルミネッセンス素子では、遅延蛍光材料のLUMOのエネルギーよりも蛍光材料のLUMOのエネルギーが低い場合に、蛍光材料の濃度を高くすると発光効率が低くなる問題が生じた。これに対して、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子では、遅延蛍光材料である第2有機化合物のLUMOのエネルギーよりも、蛍光を放射する第3有機化合物のLUMOのエネルギーを低く設定しているが、発光層における第3有機化合物の配向値を -0.3 以下に規定していることにより、第3有機化合物の濃度を上げながら発光効率の向上を図ることができる。また、配向値が -0.3 以下である第3有機化合物は安定性が高く、これを発光材料として用いることにより素子寿命が改善されるという効果も得られる。発光層における第3有機化合物の配向値は -0.38 以下であることが好ましく、 -0.40 以下であることがより好ましく、 -0.41 以下であることがさらに好ましく、 -0.42 以下であることがさらに好ましい。

[0016] 発光層に含まれる第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物は下記の式（c）を満たすことが好ましい。

$$E_{s1}(1) > E_{s1}(2) > E_{s1}(3) \quad \text{式（c）}$$

[0017] 式（c）における $E_{s1}(1)$ は第1有機化合物の最低励起一重項エネルギーを表し、 $E_{s1}(2)$ は第2有機化合物の最低励起一重項エネルギーを表し

、 $E_{s1}(3)$ は第3有機化合物の最低励起一重項エネルギーを表す。本明細書では単位として eV を採用する。最低励起一重項エネルギーは、測定対象化合物の薄膜もしくはトルエン溶液（濃度 10^{-5} mol/L ）を調製し、常温（300 K）で蛍光スペクトルを測定することにより求めることができる（詳細は第2有機化合物の説明欄における最低励起一重項エネルギーの測定法を参照）。

[0018] 式 (c) に示すように、発光層に含まれる第1有機化合物、第2有機化合物、第3有機化合物の中では、第1有機化合物の最低励起一重項エネルギーが最も大きく、第2有機化合物が次に大きく、そして第3有機化合物が最も小さいことが好ましい。 $E_{s1}(1) - E_{s1}(2)$ は、例えば 0.20 eV 以上の範囲内にしたり、0.40 eV 以上の範囲内にしたり、0.60 eV 以上の範囲内にしたりすることができ、また、1.50 eV 以下の範囲内にしたり、1.20 eV 以下の範囲内にしたり、0.80 eV 以下の範囲内にしたりすることができる。 $E_{s1}(2) - E_{s1}(3)$ は、例えば 0.05 eV 以上の範囲内にしたり、0.10 eV 以上の範囲内にしたり、0.15 eV 以上の範囲内にしたりすることができ、また、0.50 eV 以下の範囲内にしたり、0.30 eV 以下の範囲内にしたり、0.20 eV 以下の範囲内にしたりすることができる。 $E_{s1}(1) - E_{s1}(3)$ は、例えば 0.25 eV 以上の範囲内にしたり、0.45 eV 以上の範囲内にしたり、0.65 eV 以上の範囲内にしたりすることができ、また、2.00 eV 以下の範囲内にしたり、1.70 eV 以下の範囲内にしたり、1.30 eV 以下の範囲内にしたりすることができる。

[0019] 本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子において、素子からの発光の最大成分は第3有機化合物からの蛍光である。本発明における「素子からの発光」は、20℃で素子を駆動したときに素子から放出される光を意味する。本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子からの発光は、素子からの発光の最大成分が第3有機化合物からの蛍光である限り、第3有機化合物からの燐光、第1有機化合物や第2有機化合物からの発光を含んでいてもよいが

、これらの発光は第3有機化合物からの蛍光に比べて僅かであることが好ましい。本発明では、素子からの発光の70%以上が第3有機化合物からの蛍光であってもよく、90%以上が第3有機化合物からの蛍光であってもよく、99%以上が第3有機化合物からの蛍光であってもよい。

[0020] 本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層における第3有機化合物の濃度は0.3重量%よりも大きいことが好ましい。発光層における第3有機化合物の濃度は0.35重量%以上の範囲にしたり、0.5重量%以上の範囲にしたり、1重量%以上の範囲にしたり、2重量%以上の範囲にしたりすることができる。発光層における第3有機化合物の濃度は、10重量%以下の範囲にしたり、5重量%以下の範囲にしたり、3重量%以下の範囲にしたりすることができる。

また、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層における第1有機化合物、第2有機化合物、第3有機化合物の濃度をそれぞれConc(1)、Conc(2)、Conc(3)としたとき、下記式(d)の関係を満たすことが好ましい。

$$\text{Conc}(1) > \text{Conc}(2) > \text{Conc}(3) \quad \text{式(d)}$$

Conc(1)は30重量%以上であることが好ましく、50重量%以上の範囲内にしたり、60重量%以上の範囲内にしたりすることができ、また、99重量%以下の範囲内にしたり、85重量%以下の範囲内にしたり、70重量%以下の範囲内にしたりすることができる。

Conc(2)は5重量%以上であることが好ましく、15重量%以上の範囲内にしたり、25重量%以上の範囲内にしたり、30重量%以上の範囲内にしたりすることができ、また、45重量%以下の範囲内にしたり、40重量%以下の範囲内にしたり、35重量%以下の範囲内にしたりすることができる。本発明の好ましい態様では、Conc(2)は25～45重量%である。

Conc(3)の好ましい範囲については、上記の発光層における第3有機化合物の濃度についての記載を参照することができる。

Conc(1)／Conc(3)は10以上の範囲内にしたり、50以上の範囲

内にしたり、90以上の範囲内にしたりすることができ、また、10000以下の範囲内にしたり、1000以下の範囲内にしたり、200以下の範囲内にしたりすることができる。

$\text{Conc}(2) / \text{Conc}(3)$ は10以上の範囲内にしたり、50以上の範囲内にしたり、90以上の範囲内にしたりすることができ、また、10000以下の範囲内にしたり、1000以下の範囲内にしたり、200以下の範囲内にしたりすることができる。

[0021] 本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層は、ホウ素以外の金属元素を含まないことが好ましい。また、ホウ素を含む金属元素を含まない発光層を採用することもできる。例えば、発光層は、炭素原子、水素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、フッ素原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物だけで構成することができる。例えば、発光層は、炭素原子、水素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、フッ素原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物だけで構成することができる。例えば、発光層は、炭素原子、水素原子、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子からなる化合物だけで構成することができる。例えば、発光層は、炭素原子、水素原子、窒素原子および酸素原子からなる群より選択される原子からなる化合物だけで構成することができる。

[0022] (第1有機化合物)

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層に用いる第1有機化合物は、第2有機化合物や第3有機化合物よりもLUMOのエネルギーが高い化合物の中から選択する。第1有機化合物は、第2有機化合物や第3有機化合物よりもLUMOのエネルギーが高くて、なおかつ、第2有機化合物や第3有機化合物よりも大きな最低励起一重項エネルギーを有する化合物の中から選択することが好ましい。第1有機化合物は、キャリアの輸送を担うホスト材料としての機能を有することが好ましい。また第1有機化合物は、第3有機化合物のエネルギーを該化合物中に閉じ込める機能を有することが好

ましい。これにより、第3有機化合物は、分子内でホールと電子とが再結合することによって生じたエネルギー、および、第1有機化合物および第2有機化合物から受け取ったエネルギーを効率よく発光に変換することができる。

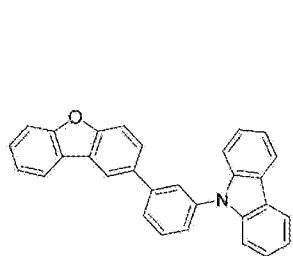
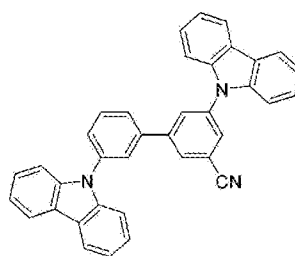
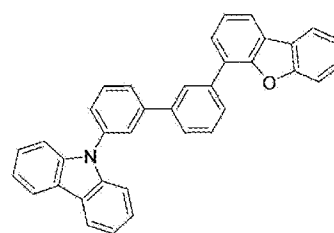
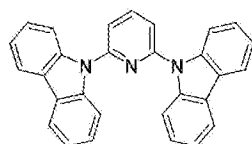
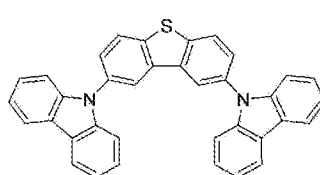
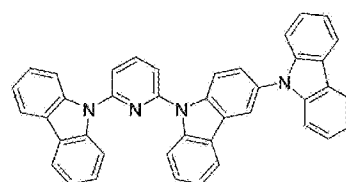
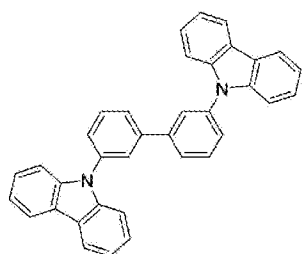
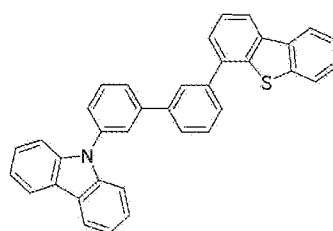
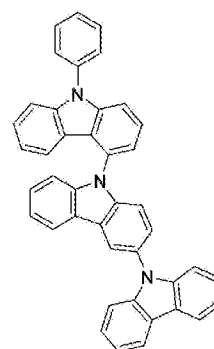
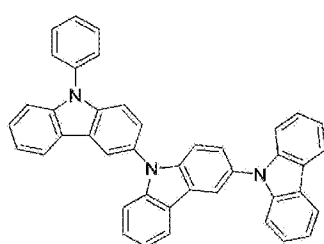
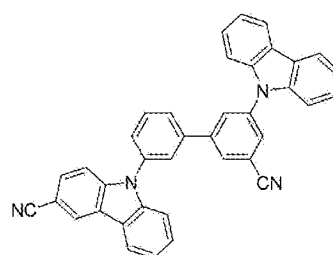
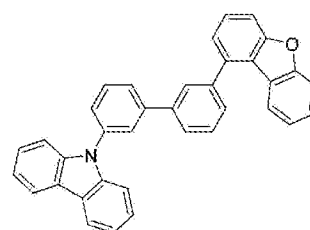
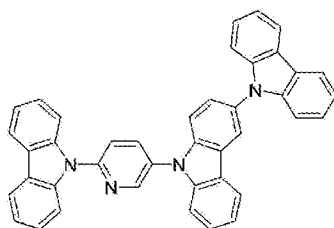
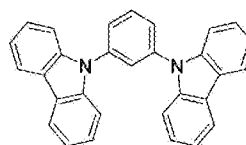
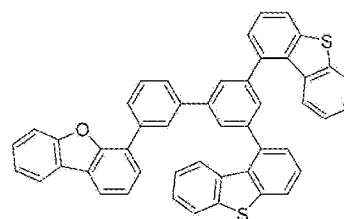
第1有機化合物としては、正孔輸送能、電子輸送能を有し、かつ発光の長波長化を防ぎ、なおかつ高いガラス転移温度を有する有機化合物であることが好ましい。また、本発明の好ましい一態様では、第1有機化合物は遅延蛍光を放射しない化合物の中から選択する。第1有機化合物からの発光は、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子からの発光の1%未満であることが好ましく、0.1%未満であることがより好ましく、例えば0.01%未満、検出限界以下であってもよい。

第1有機化合物は金属原子を含まないことが好ましい。例えば、第1有機化合物として、炭素原子、水素原子、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、第1有機化合物として、炭素原子、水素原子、窒素原子および酸素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、第1有機化合物として、炭素原子、水素原子および窒素原子からなる化合物を選択することができる。

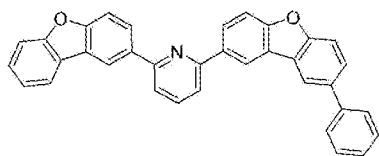
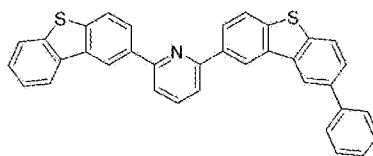
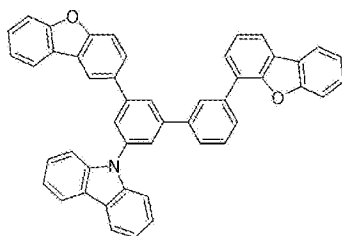
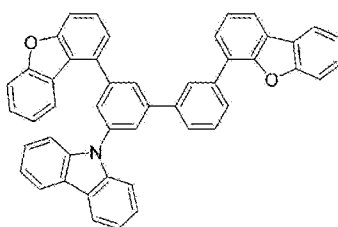
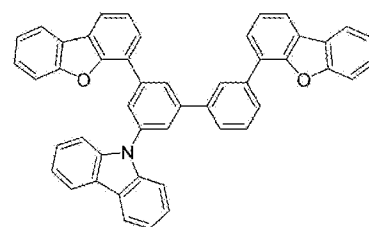
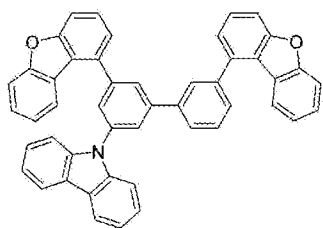
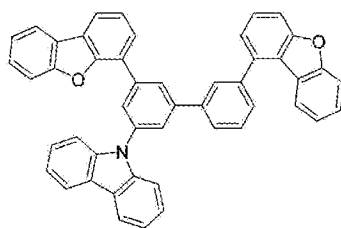
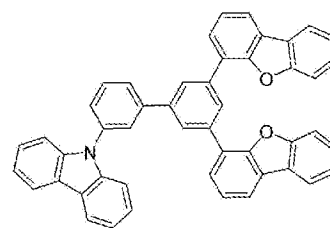
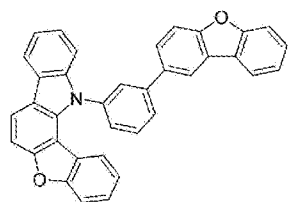
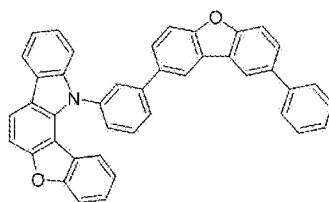
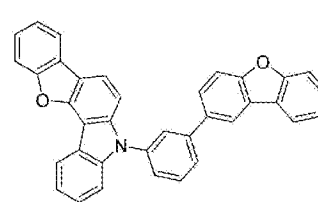
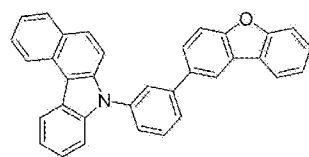
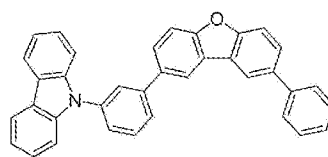
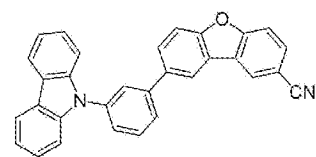
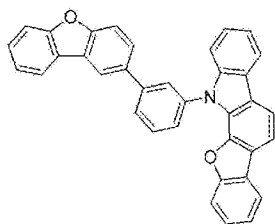
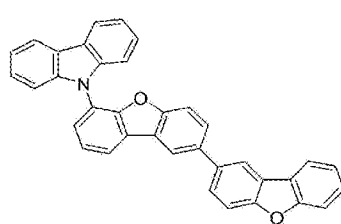
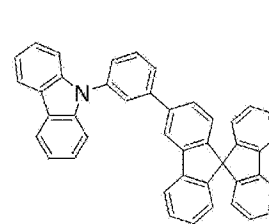
以下に、第1有機化合物として用いることができる好ましい化合物を挙げる。

[0023]

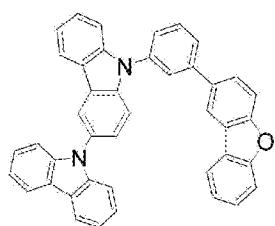
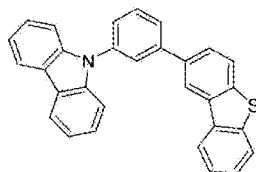
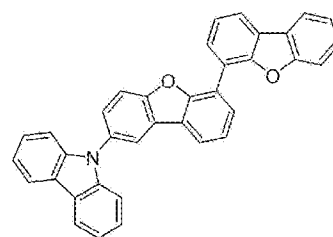
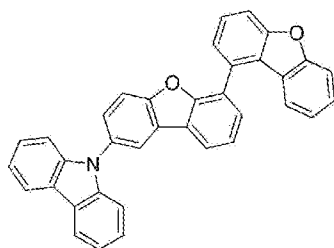
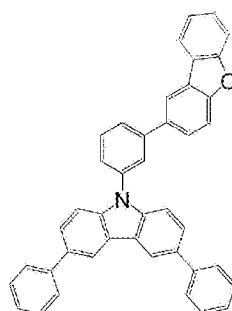
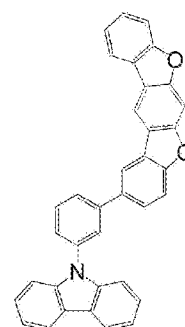
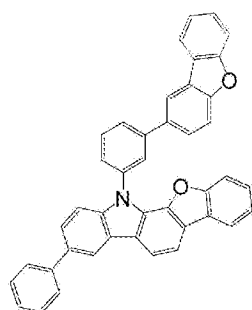
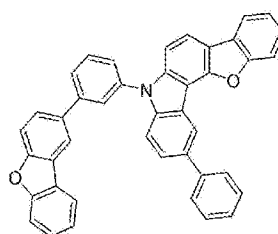
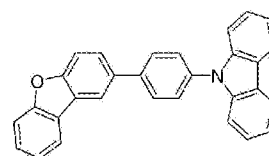
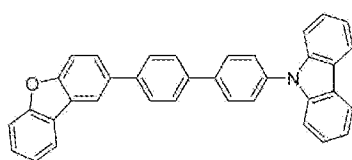
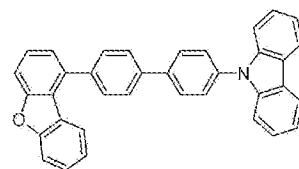
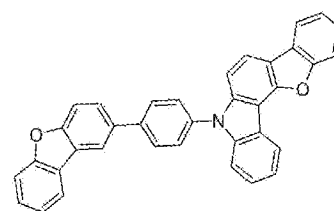
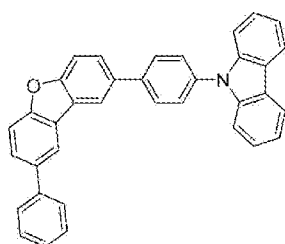
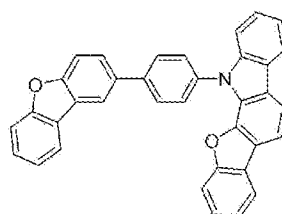
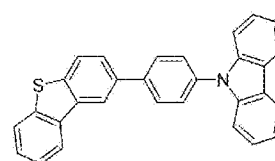
[化2-1]

H 1H 2H 3H 4H 5H 6H 7H 8H 9H 10H 11H 12H 13H 14H 15

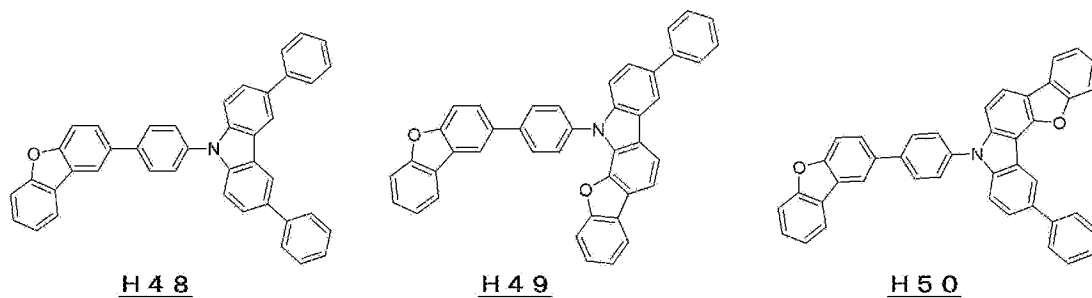
[化2-2]

H 1 6H 1 7H 1 8H 1 9H 2 0H 2 1H 2 2H 2 3H 2 4H 2 5H 2 6H 2 7H 2 8H 2 9H 3 0H 3 1H 3 2

[化2-3]

H 3 3H 3 4H 3 5H 3 6H 3 7H 3 8H 3 9H 4 0H 4 1H 4 2H 4 3H 4 4H 4 5H 4 6H 4 7

[化2-4]



[0024] (第2有機化合物)

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層に用いる第2有機化合物は、第1有機化合物よりもLUMOのエネルギーが低くて、第3有機化合物よりもLUMOのエネルギーが高い遅延蛍光材料である。第2有機化合物は、第1有機化合物よりもLUMOのエネルギーが低くて、第3有機化合物よりもLUMOのエネルギーが高く、なおかつ、第1有機化合物よりも小さくて、第3有機化合物よりも大きな最低励起一重項エネルギーを有する遅延蛍光材料であることが好ましい。本発明における「遅延蛍光材料」とは、励起状態において、励起三重項状態から励起一重項状態への逆項間交差を生じ、その励起一重項状態から基底状態へ戻る際に蛍光（遅延蛍光）を放射する有機化合物である。本発明では、蛍光寿命測定システム（浜松ホトニクス社製ストリークカメラシステム等）により発光寿命を測定したとき、発光寿命が100 ns（ナノ秒）以上の蛍光が観測されるものを遅延蛍光材料と言う。第2有機化合物は遅延蛍光を放射しうる材料であるが、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子に用いたときに第2有機化合物に由来する遅延蛍光を放射することは必須とされない。第2有機化合物からの発光は、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子からの発光の10%未満であることが好ましく、例えば1%未満、0.1%未満、0.01%未満、検出限界以下であってもよい。

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子において、第2有機化合物は、励起一重項状態の第1有機化合物からエネルギーを受け取って励起一重項状態に遷移する。また、第2有機化合物は、励起三重項状態の第1有機化合物

物からエネルギーを受け取って励起三重項状態に遷移してもよい。第2有機化合物は励起一重項エネルギーと励起三重項エネルギーの差 (ΔE_{ST}) が小さいことから、励起三重項状態の第2有機化合物は励起一重項状態の第2有機化合物へ逆項間交差しやすい。これらの経路により生じた励起一重項状態の第2有機化合物は、第3有機化合物へエネルギーを与えて第3有機化合物を励起一重項状態に遷移させる。

[0025] 第2有機化合物は、最低励起一重項エネルギーと77 Kの最低励起三重項エネルギーの差 ΔE_{ST} が0.3 eV以下であることが好ましく、0.25 eV以下であることがより好ましく、0.2 eV以下であることがより好ましく、0.15 eV以下であることがより好ましく、0.1 eV以下であることがさらに好ましく、0.07 eV以下であることがさらに好ましく、0.05 eV以下であることがさらに好ましく、0.03 eV以下であることがさらに好ましく、0.01 eV以下であることが特に好ましい。

ΔE_{ST} が小さければ、熱エネルギーの吸収によって励起一重項状態から励起三重項状態に逆項間交差しやすいため、第2有機化合物は熱活性化型の遅延蛍光材料として機能する。熱活性化型の遅延蛍光材料は、デバイスが発する熱を吸収して励起三重項状態から励起一重項へ比較的容易に逆項間交差し、その励起三重項エネルギーを効率よく発光に寄与させることができる。

[0026] 本発明における、化合物の最低励起一重項エネルギー (E_{S1}) と最低励起三重項エネルギー (E_{T1}) は、下記の手順により求めた値である。 ΔE_{ST} は $E_{S1} - E_{T1}$ を計算することにより求めた値である。

(1) 最低励起一重項エネルギー (E_{S1})

測定対象化合物の薄膜もしくはトルエン溶液 (濃度 10^{-5} mol/L) を調製して試料とする。常温 (300 K) でこの試料の蛍光スペクトルを測定する。蛍光スペクトルは、縦軸を発光、横軸を波長とする。この発光スペクトルの短波側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 λ_{edge} [nm] を求める。この波長値を次に示す換算式でエネルギー

値に換算した値を E_{s1} とする。

$$\text{換算式： } E_{s1} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

後述の実施例における発光スペクトルの測定は、励起光源にLED光源（Thorlabs社製、M300L4）を用いて検出器（浜松ホトニクス社製、PMA-12マルチチャンネル分光器 C10027-01）により行った。

（2）最低励起三重項エネルギー（ E_{T1} ）

最低励起一重項エネルギー（ E_{s1} ）の測定で用いたのと同じ試料を、液体窒素によって77 [K] に冷却し、励起光（300 nm）を燐光測定用試料に照射し、検出器を用いて燐光を測定する。励起光照射後から100ミリ秒以降の発光を燐光スペクトルとする。この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 λ_{edge} [nm] を求める。この波長値を次に示す換算式でエネルギー値に換算した値を E_{T1} とする。

$$\text{換算式： } E_{T1} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

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

なお、スペクトルの最大ピーク強度の10%以下のピーク強度をもつ極大点は、上述の最も短波長側の極大値には含めず、最も短波長側の極大値に最も近い、傾きの値が極大値をとる点において引いた接線を当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

[0027] 第2有機化合物は金属原子を含まないことが好ましい。例えば、第2有機化合物として、炭素原子、水素原子、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例え

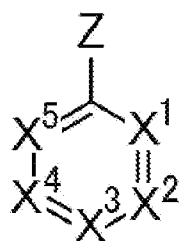
ば、第2有機化合物として、炭素原子、水素原子、窒素原子および酸素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、第2有機化合物として、炭素原子、水素原子および窒素原子からなる化合物を選択することができる。

[0028] 典型的な第2有機化合物として、ベンゼン環に1～2つのシアノ基と少なくとも1つのドナー性基が結合した構造を有する化合物を挙げることができる。ドナー性基として、例えば置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を好ましく例示することができる。例えば、前記ベンゼン環には置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基が3つ以上結合している化合物や、カルバゾール-9-イル基を構成する2つのベンゼン環の少なくとも一方に、置換もしくは無置換のベンゾフラン環、置換もしくは無置換のベンゾチオフェン環、置換もしくは無置換のインドール環、置換もしくは無置換のインデン環、置換もしくは無置換のシラインデン環の各5員環部分が縮合した化合物などを例示することができる。カルバゾール-9-イル基を構成するベンゼン環に、置換もしくは無置換のベンゾフラン環が縮合した構造を有する基の具体例として、置換もしくは無置換の5H-ベンゾフロ[3,2-c]カルバゾール-5-イル基を挙げることができる。

[0029] 第2有機化合物として、下記一般式(1)で表され、遅延蛍光を放射する化合物を好ましく用いることができる。

一般式(1)

[化3]



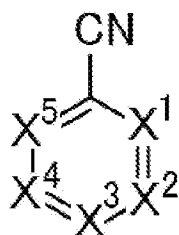
[0030] 一般式(1)において、 $X^1 \sim X^5$ はNまたはC-Rを表す。Rは水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $X^1 \sim X^5$ のうちの2つ以上がC-Rを表すとき、それらのC-Rは互いに同一であっても異なってもよい。ただ

し、 $X^1 \sim X^5$ のうちの少なくとも1つはC-D（ここでいうDはドナー性基を表す）である。 $X^1 \sim X^5$ のすべてがC-Rであるとき、Zはアクセプター性基を表す。

一般式（1）で表される化合物の中で特に好ましい化合物は、下記一般式（2）で表される化合物である。

一般式（2）

[化4]



[0031] 一般式（2）において、 $X^1 \sim X^5$ はNまたはC-Rを表す。Rは水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $X^1 \sim X^5$ のうちの2つ以上がC-Rを表すとき、それらのC-Rは互いに同一であっても異なってもよい。ただし、 $X^1 \sim X^5$ のうちの少なくとも1つはC-D（ここでいうDはドナー性基を表す）である。

本発明の好ましい一態様では、 $X^1 \sim X^5$ はいずれもC-CNではない。すなわち、ベンゼン環に1～2つのシアノ基と少なくとも1つのドナー性基が結合した構造を有する化合物である。本発明の別の好ましい一態様では、 X^2 だけがC-CNを表し、 X^1 、 $X^3 \sim X^5$ はC-CNではない。すなわち、イソフタロニトリルのベンゼン環に少なくとも1つのドナー性基が結合した構造を有する化合物である。本発明の別の態様では、 X^3 だけがC-CNを表し、 X^1 、 X^2 、 X^4 、 X^5 はC-CNではない。すなわち、テレフタロニトリルのベンゼン環に少なくとも1つのドナー性基が結合した構造を有する化合物である。

[0032] 一般式（1）のZが表すアクセプター性基は、Zが結合している環に対して電子を供与する性質を有する基であり、例えばハメットの σ_p 値が正の基の中から選択することができる。一般式（1）および一般式（2）のDが表

すドナー性基は、Dが結合している環に対して電子を吸引する性質を有する基であり、例えばハメットの σ_p 値が負の基の中から選択することができる。以下において、アクセプター性基をAと称することがある。

ここで、「ハメットの σ_p 値」は、L. P. ハメットにより提唱されたものであり、パラ置換ベンゼン誘導体の反応速度または平衡に及ぼす置換基の影響を定量化したものである。具体的には、パラ置換ベンゼン誘導体における置換基と反応速度定数または平衡定数の間に成立する下記式：

$$\log(k/k_0) = \rho \sigma_p$$

または

$$\log(K/K_0) = \rho \sigma_p$$

における置換基に特有な定数(σ_p)である。上式において、 k は置換基を持たないベンゼン誘導体の速度定数、 k_0 は置換基で置換されたベンゼン誘導体の速度定数、 K は置換基を持たないベンゼン誘導体の平衡定数、 K_0 は置換基で置換されたベンゼン誘導体の平衡定数、 ρ は反応の種類と条件によって決まる反応定数を表す。本発明における「ハメットの σ_p 値」に関する説明と各置換基の数値については、Hansch, C. et. al., Chem. Rev., 91, 165-195(1991)の σ_p 値に関する記載を参照することができる。

アクセプター性基の具体例として、シアノ基や、後述する一般式(12)～(14)におけるAとして好ましいアクセプター性基を参照することができる。また、ドナー性基の具体例として、後述する一般式(12)～(14)におけるDとして好ましいドナー性基を参照することができる。

[0033] 一般式(1)および一般式(2)において、 $X^1 \sim X^5$ はNまたはC-Rを表すが、少なくとも1つはC-Dである。 $X^1 \sim X^5$ のうちNの数は、0～4つであり、例えば、 X^1 と X^3 と X^5 、 X^1 と X^3 、 X^1 と X^4 、 X^2 と X^3 、 X^1 と X^5 、 X^2 と X^4 、 X^1 だけ、 X^2 だけ、 X^3 だけがNである場合を例示することができる。 $X^1 \sim X^5$ のうちC-Dの数は1～5つであり、2～5つであることが好ましい。例えば、 X^1 と X^2 と X^3 と X^4 と X^5 、 X^1 と X^2 と X^4 と X^5 、 X^1 と X^2 と X^3 と X^4 、 X^1 と X^3 と X^4 と X^5 、 X^1 と X^3 と X^5 、 X^1 と X^2 と X

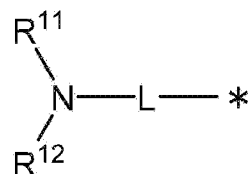
5、 X^1 と X^2 と X^4 、 X^1 と X^3 と X^4 、 X^1 と X^3 、 X^1 と X^4 、 X^2 と X^3 、 X^1 と X^5 、 X^2 と X^4 、 X^1 だけ、 X^2 だけ、 X^3 だけがC-Dである場合を例示することができる。 $X^1 \sim X^5$ のうちの少なくとも1つはC-Aであってもよい。ここでいうAはアクセプター性基を表す。 $X^1 \sim X^5$ のうちC-Aの数は0~2であることが好ましく、0または1であることがより好ましい。C-AのAとして好ましくはシアノ基および不飽和の窒素原子を有する複素環式芳香族基を挙げることができる。また、 $X^1 \sim X^5$ は各々独立にC-DまたはC-Aであってもよい。

$X^1 \sim X^5$ のうちの隣り合う2つがC-Rを表すとき、2つのRは互いに結合して環状構造を形成していてもよい。互いに結合して形成する環状構造は芳香環であっても脂肪環であってもよく、またヘテロ原子を含むものであってもよく、さらに環状構造は2環以上の縮合環であってもよい。ここでいうヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択されるものであることが好ましい。形成される環状構造の例として、ベンゼン環、ナフタレン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピロール環、イミダゾール環、ピラゾール環、イミダゾリン環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、シクロヘキサジエン環、シクロヘキセン環、シクロペンタエン環、シクロヘプタトリエン環、シクロヘプタジエン環、シクロヘプタエン環、フラン環、チオフェン環、ナフチリジン環、キノキサリン環、キノリン環などを挙げることができる。例えばフェナントレン環やトリフェニレン環のように多数の環が縮合した環を形成してもよい。

[0034] 一般式(1)および一般式(2)におけるドナー性基Dは、例えば下記の一般式(3)で表される基であることが好ましい。

一般式(3)

[化5]



[0035] 一般式(3)において、 R^{11} と R^{12} は、各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルケニル基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^{11} と R^{12} は互いに結合して環状構造を形成してもよい。 L は単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、または置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基を表す。 L のアリーレン基またはヘテロアリーレン基に導入しうる置換基は、一般式(1)や一般式(2)で表される基であってもよいし、後述する一般式(3)～(6)で表される基であってもよい。これらの(1)～(6)で表される基は L に導入可能な置換基の最大数まで導入されていてもよい。また、一般式(1)～(6)で表される基が複数個導入されている場合は、それらの置換基は互いに同一であっても異なってもよい。 $*$ は、一般式(1)または一般式(2)における環の環骨格を構成する炭素原子(C)への結合位置を表す。

本明細書において「アルキル基」は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよい。また、直鎖部分と環状部分と分枝部分のうちの2種以上が混在していてもよい。アルキル基の炭素数は、例えば1以上、2以上、4以上とすることができる。また、炭素数は30以下、20以下、10以下、6以下、4以下とすることができる。アルキル基の具体例として、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*tert*-ブチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、*n*-ヘキシル基、イソヘキシル基、2-エチルヘキシル基、*n*-ヘプチル基、イソヘプチル基、*n*-オクチル基、イソオクチル基、*n*-ノニル基、イソノニル基、*n*-デカニル基、イソデカニル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基を挙げることができる。置換基たるアルキル基は、さらにアリール基で置

換されていてもよい。

「アルケニル基」は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよい。また、直鎖部分と環状部分と分枝部分のうちの2種以上が混在していてもよい。アルケニル基の炭素数は、例えば2以上、4以上とすることができる。また、炭素数は30以下、20以下、10以下、6以下、4以下とすることができる。アルケニル基の具体例として、エテニル基、*n*-プロペニル基、イソプロペニル基、*n*-ブテニル基、イソブテニル基、*n*-ペンテニル基、イソペンテニル基、*n*-ヘキセニル基、イソヘキセニル基、2-エチルヘキセニル基を挙げることができる。置換基たるアルケニル基は、さらに置換基で置換されていてもよい。

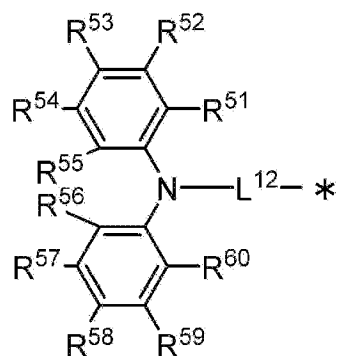
「アリール基」および「ヘテロアリール基」は、単環であってもよいし、2つ以上の環が縮合した縮合環であってもよい。縮合環である場合、縮合している環の数は2～6であることが好ましく、例えば2～4の中から選択することができる。環の具体例として、ベンゼン環、ピリジン環、ピリミジン環、トリアジン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、トリフェニレン環、キノリン環、ピラジン環、キノキサリン環、ナフチリジン環を挙げることができる。アリール基またはヘテロアリール基の具体例として、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、9-アントラセニル基、2-ピリジル基、3-ピリジル基、4-ピリジル基を挙げることができる。「アリーレン基」および「ヘテロアリーレン基」は、アリール基およびヘテロアリール基の説明における価数を1から2へ読み替えたものとすることができる。

置換基は、水素原子に置換しうる1価の基を意味しており、縮合するものを含む概念ではない。置換基の説明と好ましい範囲については、後述の一般式(7)の置換基の説明と好ましい範囲を参照することができる。

[0036] 一般式(3)で表される化合物は、下記一般式(4)～(6)のいずれかで表される化合物であることが好ましい。

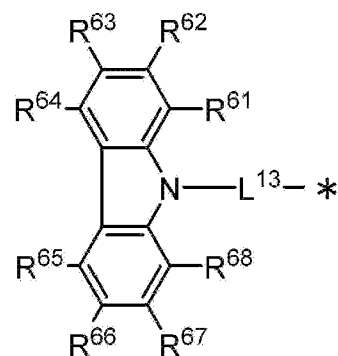
一般式(4)

[化6]



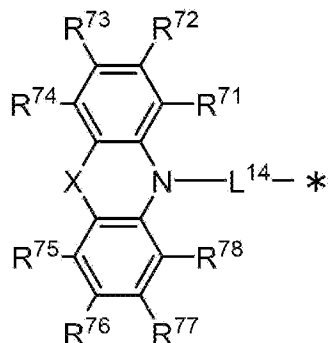
一般式 (5)

[化7]



一般式 (6)

[化8]



[0037] 一般式 (4) ~ (6) において、 $R^{51} \sim R^{60}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{78}$ は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。ここでいう置換基の説明と好ましい範囲については、後述の一般式 (7) における置換基の説明と好ましい範囲を参照することができる。 $R^{51} \sim R^{60}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{78}$ は、各々独立に上記一般式 (4) ~ (6) のいずれかで表される基

であることも好ましい。一般式(4)～(6)における置換基の数は特に制限されない。すべてが無置換(すなわち水素原子または重水素原子)である場合も好ましい。また、一般式(4)～(6)のそれぞれにおいて置換基が2つ以上ある場合、それらの置換基は同一であっても異なってもよい。一般式(4)～(6)に置換基が存在している場合、その置換基は一般式(4)であれば $R^{52} \sim R^{59}$ のいずれかであることが好ましく、一般式(5)であれば $R^{62} \sim R^{67}$ のいずれかであることが好ましく、一般式(6)であれば $R^{72} \sim R^{77}$ のいずれかであることが好ましい。

[0038] 一般式(6)においてXは連結鎖長が1原子である2価の酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子、置換もしくは無置換のケイ素原子、カルボニル基、あるいは、結合鎖長が2原子である2価の置換もしくは無置換のエチレン基、置換もしくは無置換のビニレン基、置換もしくは無置換の α -アリーレン基、または置換もしくは無置換の α -ヘテロアリーレン基を表す。置換基の具体例と好ましい範囲については、上記の一般式(1)および一般式(2)における置換基の記載を参照することができる。

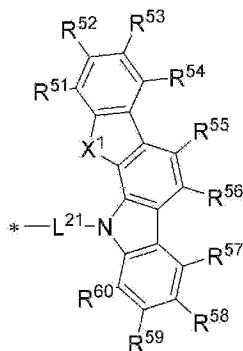
[0039] 一般式(4)～(6)において、 $L^{12} \sim L^{14}$ は、単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、または置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基を表す。 $L^{12} \sim L^{14}$ が表すアリーレン基またはヘテロアリーレン基の説明と好ましい範囲については、Lが表すアリーレン基またはヘテロアリーレン基の説明と好ましい範囲を参照することができる。 $L^{12} \sim L^{14}$ は、単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基であることが好ましい。ここでいうアリーレン基やヘテロアリーレン基の置換基は、一般式(1)～(6)で表される基であってもよい。一般式(1)～(6)で表される基は $L^{11} \sim L^{14}$ に導入可能な置換基の最大数まで導入されていてもよい。また、一般式(1)～(6)で表される基が複数個導入されている場合は、それらの置換基は互いに同一であっても異なってもよい。＊は、一般式(1)または一般式(2)における環の環骨格を構成する炭素原子(C)への結合位置を表す。

[0040] 一般式(4)～(6)において、 R^{51} と R^{52} 、 R^{52} と R^{53} 、 R^{53} と R^{54} 、 R^{54} と R^{55} 、 R^{55} と R^{56} 、 R^{56} と R^{57} 、 R^{57} と R^{58} 、 R^{58} と R^{59} 、 R^{59} と R^{60} 、 R^{61} と R^{62} 、 R^{62} と R^{63} 、 R^{63} と R^{64} 、 R^{65} と R^{66} 、 R^{66} と R^{67} 、 R^{67} と R^{68} 、 R^{71} と R^{72} 、 R^{72} と R^{73} 、 R^{73} と R^{74} 、 R^{75} と R^{76} 、 R^{76} と R^{77} 、 R^{77} と R^{78} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。環状構造の説明と好ましい例については、上記の一般式(1)および一般式(2)の $X^1 \sim X^5$ における環状構造の説明と好ましい例を参照することができる。

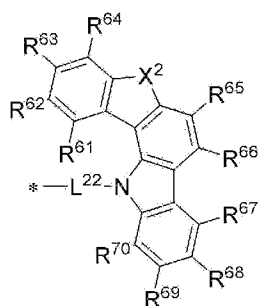
[0041] 環状構造の中でも好ましいのは、置換もしくは無置換のベンゾフラン環、置換もしくは無置換のベンゾチオフェン環、置換もしくは無置換のインドール環、置換もしくは無置換のインデン環、置換もしくは無置換のシラインデン環が、一般式(4)～(6)の少なくとも一方のベンゼン環に縮合した構造である。より好ましくは、一般式(5)に縮合した下記一般式(5a)～(5f)で表される基である。

[化9]

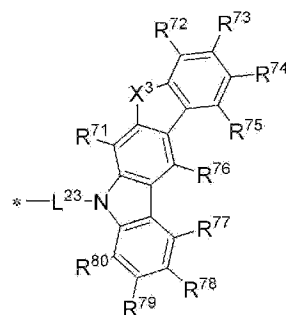
一般式(5a)



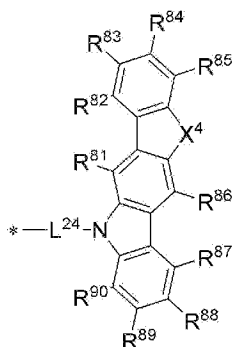
一般式(5b)



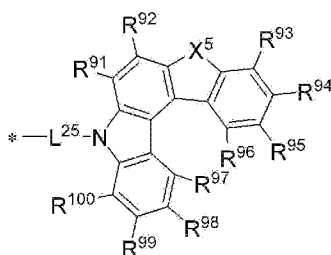
一般式(5c)



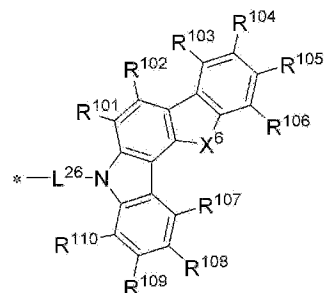
一般式(5d)



一般式(5e)



一般式(5f)



[0042] 一般式 (5 a) ~ (5 f) において、 L^{11} および $L^{21} \sim L^{26}$ は単結合もしくは2価の連結基を表す。 L^{11} および $L^{21} \sim L^{26}$ の説明と好ましい範囲については、上記の L^2 の説明と好ましい範囲を参照することができる。

一般式 (5 a) ~ (5 f) において、 $R^{41} \sim R^{110}$ は各々独立に水素原子または置換基を表す。 R^{41} と R^{42} 、 R^{42} と R^{43} 、 R^{43} と R^{44} 、 R^{44} と R^{45} 、 R^{45} と R^{46} 、 R^{46} と R^{47} 、 R^{47} と R^{48} 、 R^{51} と R^{52} 、 R^{52} と R^{53} 、 R^{53} と R^{54} 、 R^{54} と R^{55} 、 R^{55} と R^{56} 、 R^{56} と R^{57} 、 R^{57} と R^{58} 、 R^{58} と R^{59} 、 R^{59} と R^{60} 、 R^{61} と R^{62} 、 R^{62} と R^{63} 、 R^{63} と R^{64} 、 R^{65} と R^{66} 、 R^{66} と R^{67} 、 R^{67} と R^{68} 、 R^{68} と R^{69} 、 R^{69} と R^{70} 、 R^{72} と R^{73} 、 R^{73} と R^{74} 、 R^{74} と R^{75} 、 R^{75} と R^{76} 、 R^{76} と R^{77} 、 R^{77} と R^{78} 、 R^{78} と R^{79} 、 R^{79} と R^{80} 、 R^{81} と R^{82} 、 R^{82} と R^{83} 、 R^{83} と R^{84} 、 R^{84} と R^{85} 、 R^{86} と R^{87} 、 R^{87} と R^{88} 、 R^{88} と R^{89} 、 R^{89} と R^{90} 、 R^{91} と R^{92} 、 R^{93} と R^{94} 、 R^{94} と R^{95} 、 R^{95} と R^{96} 、 R^{96} と R^{97} 、 R^{97} と R^{98} 、 R^{99} と R^{100} 、 R^{101} と R^{102} 、 R^{102} と R^{103} 、 R^{103} と R^{104} 、 R^{104} と R^{105} 、 R^{105} と R^{106} 、 R^{107} と R^{108} 、 R^{108} と R^{109} 、 R^{109} と R^{110} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。互いに結合して形成する環状構造は芳香環であっても脂肪環であってもよく、またヘテロ原子を含むものであってもよく、さらに環状構造は2環以上の縮合環であってもよい。ここでいうヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択されるものであることが好ましい。形成される環状構造の例として、ベンゼン環、ナフタレン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピロール環、イミダゾール環、ピラゾール環、イミダゾリン環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、シクロヘキサジエン環、シクロヘキセン環、シクロペンタエン環、シクロヘプタトリエン環、シクロヘプタジエン環、シクロヘプタエン環、フラン環、チオフェン環、ナフチリジン環、キノキサリン環、キノリン環などを挙げることができる。例えばフェナントレン環やトリフェニレン環のように多数の環が縮合した環を形成してもよい。一般式 (6) で表される基に含まれる環の数は3~5の範囲内から

選択してもよく、5～7の範囲内から選択してもよい。一般式(5a)～(5f)で表される基に含まれる環の数は5～7の範囲内から選択してもよく、5であってもよい。

$R^{41} \sim R^{110}$ が採りうる置換基として、上記の置換基群Bの基を挙げることができ、好ましくは炭素数1～10の無置換のアルキル基、または炭素数1～10の無置換のアルキル基で置換されていてもよい炭素数6～10のアリール基である。本発明の好ましい一態様では、 $R^{41} \sim R^{110}$ は水素原子または炭素数1～10の無置換のアルキル基である。本発明の好ましい一態様では、 $R^{41} \sim R^{110}$ は水素原子または炭素数6～10の無置換のアリール基である。本発明の好ましい一態様では、 $R^{41} \sim R^{110}$ はすべてが水素原子である。

一般式(5a)～(5f)における $R^{41} \sim R^{110}$ が結合している炭素原子(環骨格構成炭素原子)は、各々独立に窒素原子に置換されていてもよい。すなわち、一般式(5a)～(5f)における $C-R^{41} \sim C-R^{110}$ は、各々独立にNに置換されていてもよい。窒素原子に置換されている数は、一般式(5a)～(5f)で表される基の中で0～4つであることが好ましく、1～2つであることがより好ましい。本発明の一態様では、窒素原子に置換されている数は0である。また、2つ以上が窒素原子に置換されている場合は、1つの環中に置換されている窒素原子の数は1つであることが好ましい。

一般式(5a)～(5f)において、 $X^1 \sim X^6$ は、酸素原子、硫黄原子またはN-Rを表す。本発明の一態様では、 $X^1 \sim X^6$ は酸素原子である。本発明の一態様では、 $X^1 \sim X^6$ は硫黄原子である。本発明の一態様では、 $X^1 \sim X^6$ はN-Rである。Rは水素原子または置換基を表し、置換基であることが好ましい。置換基としては、上記置換基群Aから選択される置換基を例示することができる。例えば、無置換のフェニル基や、アルキル基やアリール基からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせた基で置換されているフェニル基を好ましく採用することができる。

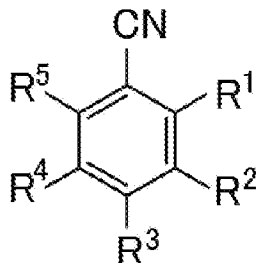
一般式(5a)～(5f)において、*は結合位置を表す。

[0043] 本発明では、下記一般式(7)で表され、遅延蛍光を放射する化合物を、

遅延蛍光材料として特に好ましく用いることができる。本発明の好ましい実施態様では、第2有機化合物として、一般式（7）で表される化合物を採用することができる。

一般式（7）

[化10]



[0044] 一般式（7）において、 $R^1 \sim R^5$ の0～4つはシアノ基を表し、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも1つは置換アミノ基を表し、残りの $R^1 \sim R^5$ は水素原子、重水素原子、またはシアノ基と置換アミノ基以外の置換基を表す。

ここでいう置換アミノ基は、置換もしくは無置換のジアリールアミノ基であることが好ましく、置換もしくは無置換のジアリールアミノ基を構成する2つのアリール基は互いに連結していてもよい。連結は、単結合でなされていてよい（その場合はカルバゾール環が形成される）、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^6)-$ 、 $-C(R^7)(R^8)-$ 、 $-Si(R^9)(R^{10})-$ などの連結基でなされていてよい。ここで、 $R^6 \sim R^{10}$ は水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^7 と R^8 、 R^9 と R^{10} は、それぞれ互いに連結して環状構造を形成してもよい。

置換アミノ基は $R^1 \sim R^5$ のいずれであってもよく、例えば R^1 と R^2 、 R^1 と R^3 、 R^1 と R^4 、 R^1 と R^5 、 R^2 と R^3 、 R^2 と R^4 、 R^1 と R^2 と R^3 、 R^1 と R^2 と R^4 、 R^1 と R^2 と R^5 、 R^1 と R^3 と R^4 、 R^1 と R^3 と R^5 、 R^2 と R^3 と R^4 、 R^1 と R^2 と R^3 と R^4 、 R^1 と R^2 と R^3 と R^5 、 R^1 と R^2 と R^4 と R^5 、 R^1 と R^2 と R^3 と R^4 と R^5 を置換アミノ基とすること等ができる。シアノ基も $R^1 \sim R^5$ のいずれであってもよく、例えば R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^1 と R^2 、 R^1 と R^3 、 R^1 と R^4 、 R^1 と R^5 、 R^2 と R^3 、 R^2 と R^4 、 R^1 と R^2 と R^3 、 R^1 と R^2 と R

4、 R^1 と R^2 と R^5 、 R^1 と R^3 と R^4 、 R^1 と R^3 と R^5 、 R^2 と R^3 と R^4 をシアノ基とすること等ができる。

シアノ基でも置換アミノ基でもない $R^1 \sim R^5$ は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。ここでいう置換基の例として、ヒドロキシル基、ハロゲン原子（例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子）、アルキル基（例えば炭素数1～40）、アルコキシ基（例えば炭素数1～40）、アルキルチオ基（例えば炭素数1～40）、アリール基（例えば炭素数6～30）、アリールオキシ基（例えば炭素数6～30）、アリールチオ基（例えば炭素数6～30）、ヘテロアリール基（例えば環骨格構成原子数5～30）、ヘテロアリールオキシ基（例えば環骨格構成原子数5～30）、ヘテロアリールチオ基（例えば環骨格構成原子数5～30）、アシル基（例えば炭素数1～40）、アルケニル基（例えば炭素数1～40）、アルキニル基（例えば炭素数1～40）、アルコキシカルボニル基（例えば炭素数1～40）、アリールオキシカルボニル基（例えば炭素数1～40）、ヘテロアリールオキシカルボニル基（例えば炭素数1～40）、シリル基（例えば炭素数1～40のトリアルキルシリル基）、ニトロ基、ここに列挙した基がさらにここに列挙した1以上の基で置換された基からなる置換基群Aを挙げることができる。上記ジアリールアミノ基のアリール基が置換されているときの置換基の好ましい例としても、上記の置換基群Aの置換基を挙げることができる、さらにシアノ基と置換アミノ基も挙げることができる。

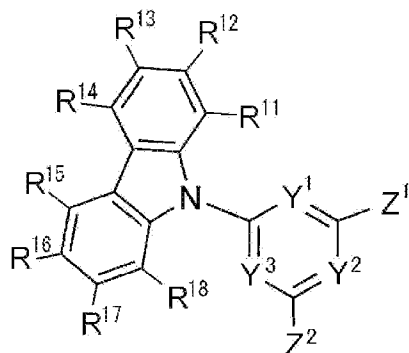
一般式（7）に包含される化合物群と化合物の具体例については、本明細書の一部としてここに引用するWO2013/154064号公報の段落0008～0048、WO2015/080183号公報の段落0009～0030、WO2015/129715号公報の段落0006～0019、特開2017-119663号公報の段落0013～0025、特開2017-119664号公報の段落0013～0026を参照することができる。

[0045] また、下記一般式（8）で表され、遅延蛍光を放射する化合物も、本発明の遅延蛍光材料として特に好ましく用いることができる。本発明の好ましい

実施態様では、第2有機化合物として、一般式（8）で表される化合物を採用することができる。

一般式（8）

[化11]

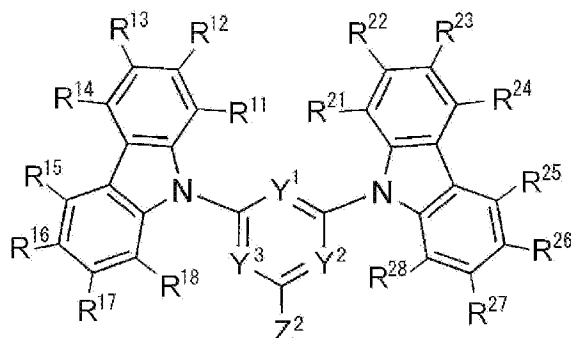


[0046] 一般式（8）において、 Y^1 、 Y^2 および Y^3 は、いずれか2つが窒素原子で残りの1つがメチン基を表すか、または、 Y^1 、 Y^2 および Y^3 のすべてが窒素原子を表す。 Z^1 および Z^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $R^{11} \sim R^{18}$ は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表し、 $R^{11} \sim R^{18}$ の少なくとも1つは、置換もしくは無置換のアリールアミノ基、または置換もしくは無置換のカルバゾリル基であることが好ましい。前記アリールアミノ基を構成するベンゼン環、前記カルバゾリル基を構成するベンゼン環は、それぞれ $R^{11} \sim R^{18}$ と一緒に単結合または連結基を形成してもよい。また、一般式（8）で表される化合物は分子中にカルバゾール構造を少なくとも2つ含む。 Z^1 、 Z^2 が採りうる置換基の例としては、上記の置換基群Aの置換基を挙げることができる。また、 $R^{11} \sim R^{18}$ 、上記アリールアミノ基、カルバゾリル基が採りうる置換基の具体例については、上記の置換基群Aの置換基、シアノ基、置換アリールアミノ基、置換アルキルアミノ基を挙げることができる。なお、 R^{11} と R^{12} 、 R^{12} と R^{13} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

一般式（8）で表される化合物の中でも、特に一般式（9）で表される化合物が有用である。

一般式（９）

[化12]



[0047] 一般式（９）において、 Y^1 、 Y^2 および Y^3 は、いずれか２つが窒素原子で残りの１つがメチン基を表すか、または、 Y^1 、 Y^2 および Y^3 のすべてが窒素原子を表す。 Z^2 は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $R^{11} \sim R^{18}$ および $R^{21} \sim R^{28}$ は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $R^{11} \sim R^{18}$ の少なくとも１つ、および／または、 $R^{21} \sim R^{28}$ の少なくとも１つは、置換もしくは無置換のアリールアミノ基、または置換もしくは無置換のカルバゾリル基を表すことが好ましい。前記アリールアミノ基を構成するベンゼン環、前記カルバゾリル基を構成するベンゼン環は、それぞれ $R^{11} \sim R^{18}$ または $R^{21} \sim R^{28}$ と一緒に単結合または連結基を形成してもよい。 Z^2 が採りうる置換基の例としては、上記の置換基群Aの置換基を挙げることができる。また、 $R^{11} \sim R^{18}$ 、 $R^{21} \sim R^{28}$ 、上記アリールアミノ基、カルバゾリル基が採りうる置換基の具体例については、上記の置換基群Aの置換基、シアノ基、置換アリールアミノ基、置換アルキルアミノ基を挙げることができる。なお、 R^{11} と R^{12} 、 R^{12} と R^{13} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{25} と R^{26} 、 R^{26} と R^{27} 、 R^{27} と R^{28} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

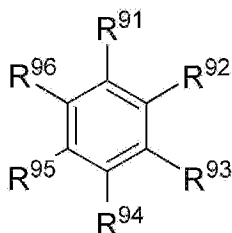
一般式（９）に包含される化合物群と化合物の具体例については、本明細書の一部としてここに引用するWO2013/081088号公報の段落0020～0062や、Appl. Phys. Lett., 98, 083302（

2011)に記載の化合物を参照することができる。

[0048] また、下記一般式(10)で表され、遅延蛍光を放射する化合物も、本発明の遅延蛍光材料として特に好ましく用いることができる。

一般式(10)

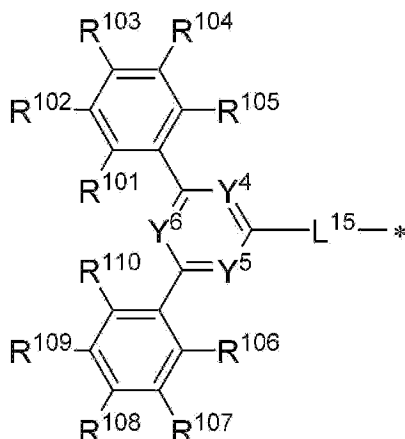
[化13]



[0049] 一般式(10)において、 $R^{91} \sim R^{96}$ は各々独立に水素原子、重水素原子、ドナー性基、もしくはアクセプター性基を表し、そのうちの少なくとも1つは、前記ドナー性基であり、少なくとも2つは、前記アクセプター性基である。少なくとも2つのアクセプター性基の置換位置は特に制限されないが、互いにメタ位の関係にある2つのアクセプター性基を含むことが好ましい。例えば、 R^{91} がドナー性基である場合、少なくとも R^{92} と R^{94} がアクセプター性基である構造や、少なくとも R^{92} と R^{96} がアクセプター性基である構造を好ましく例示することができる。分子内に存在するアクセプター性基は、すべて同一であっても互いに異なってもよいが、例えばすべて同一である構造を選択することが可能である。アクセプター性基の数は2～3であることが好ましく、例えば2を選択することができる。また、ドナー性基は2つ以上存在していてもよく、その場合のドナー性基もすべて同一であっても互いに異なってもよい。ドナー性基の数は1～3つであることが好ましく、例えば1つだけでも、2つでもよい。なお、ドナー性基とアクセプター性基の説明と好ましい範囲については、一般式(1)のDとZの説明と好ましい範囲を参照することができる。特に、一般式(10)においてドナー性基は一般式(3)で表されることが好ましく、アクセプター性基はシアノ基もしくは下記一般式(11)で表されることが好ましい。

一般式(11)

[化14]

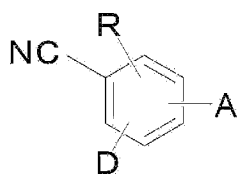


[0050] 一般式（１１）において、 $Y^4 \sim Y^6$ は、窒素原子を表すかメチン基を表すが、少なくとも一つは窒素原子であり、好ましくはすべてが窒素原子を表す。 $R^{101} \sim R^{110}$ は各々独立に水素原子、重水素原子、もしくは置換基を表すが少なくとも一つはアルキル基であることが好ましい。ここでいう置換基の説明と好ましい範囲については、前述の一般式（７）における置換基の説明と好ましい範囲を参照することができる。 L^{15} は単結合または連結基を表し、前述の一般式（３）における L の説明と好ましい範囲を参照することができる。本発明の好ましい一態様では、一般式（１１）における L^{15} は単結合である。 $*$ は、一般式（１０）における環の環骨格を構成する炭素原子（ C ）への結合位置を表す。

[0051] 本発明の他の好ましい実施態様では、第２有機化合物として、一般式（１２）で表される化合物を採用することができる。一般式（１２）で表される化合物の中には、一般式（１２ａ）で表される化合物が含まれる。

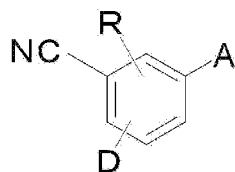
一般式（１２）

[化15]



一般式（１２ａ）

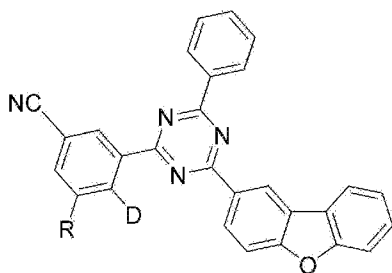
[化16]



[0052] 一般式（１２）で表される化合物の中で特に好ましい化合物は、下記一般式（１３）で表される化合物や一般式（１４）で表される化合物である。

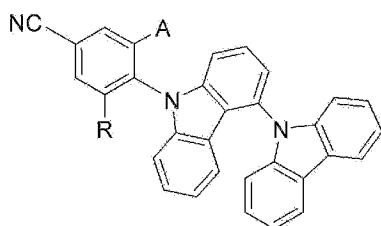
一般式（１３）

[化17]



一般式（１４）

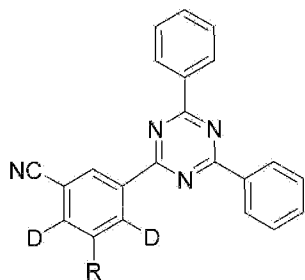
[化18]



[0053] 本発明の他の好ましい実施態様では、第２有機化合物として、一般式（１５）で表される化合物を採用することができる。

[化19]

一般式（１５）

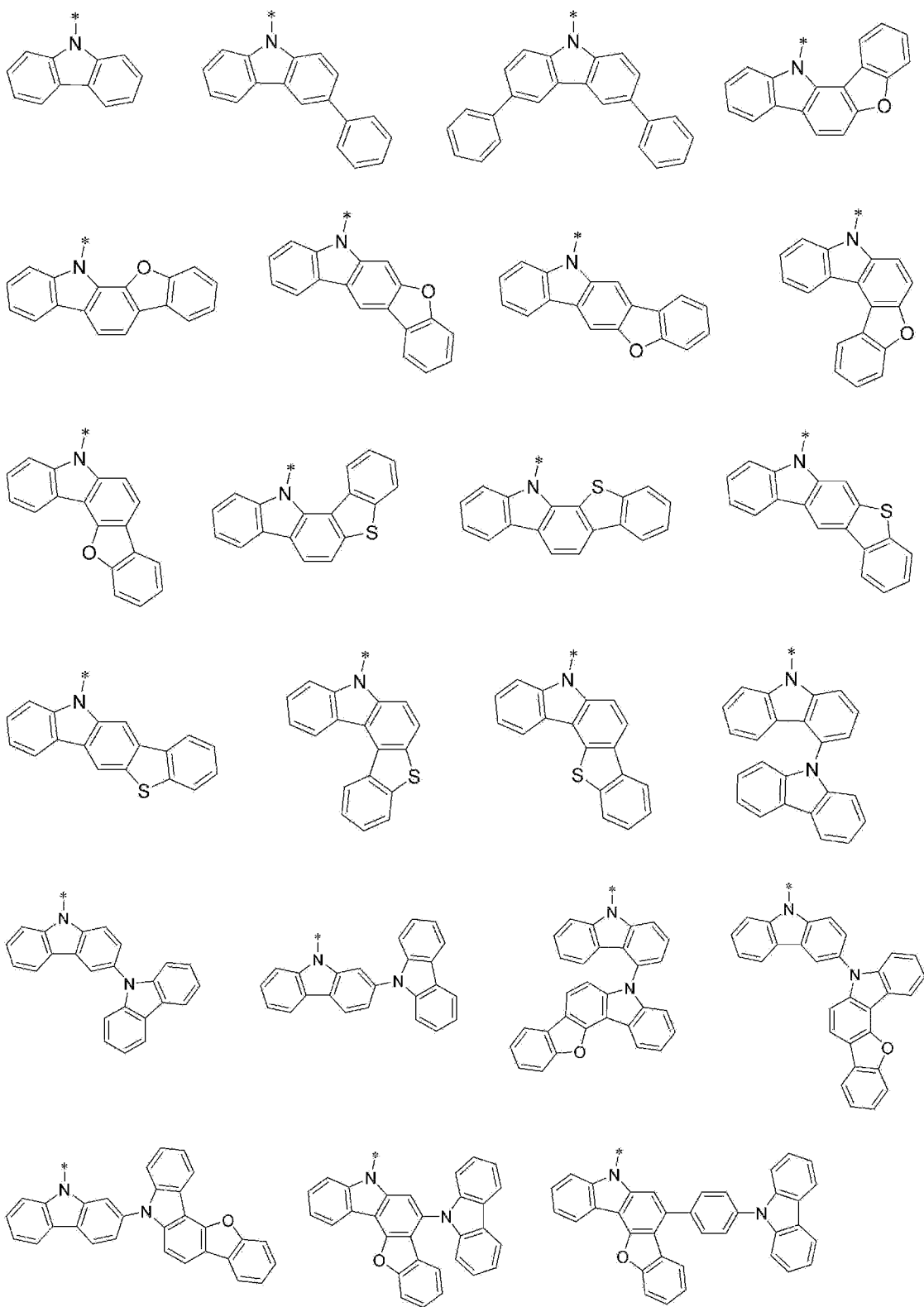


[0054] 一般式（１２）～（１５）において、Dはドナー性基を表し、Aはアクセ

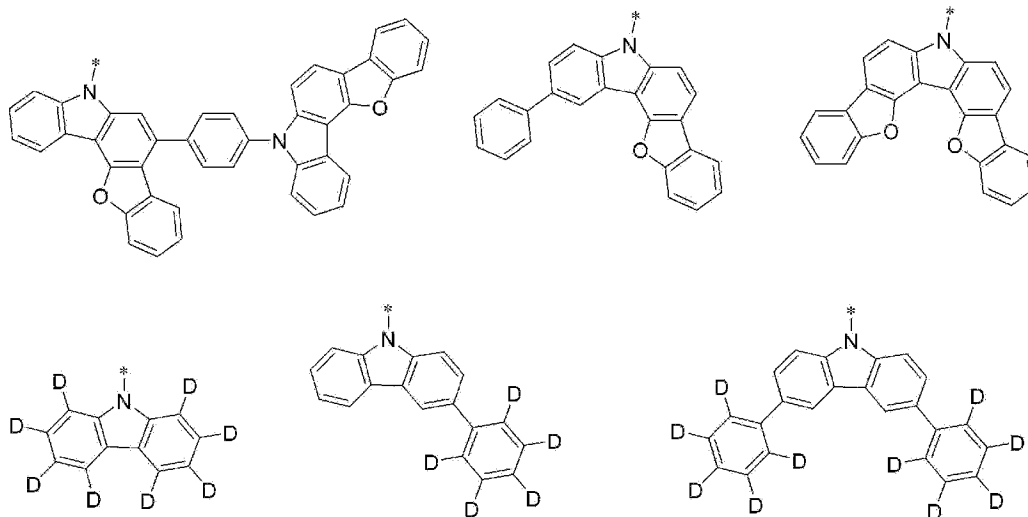
プター性基を表し、Rは水素原子、重水素原子または置換基を表す。一般式(15)の2つのDは、同一であっても異なってもよい。ドナー性基およびアクセプター性基の説明と好ましい範囲については、前述の一般式(1)の対応する説明と好ましい範囲を参照することができる。Rの置換基としては、アルキル基や、アルキル基およびアリール基からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせた基で置換されていてもよいアリール基を例示することができる。

一般式(12)～(15)におけるDとして好ましいドナー性基の具体例を以下に挙げる。以下の具体例において、*は結合位置を表し、「D」は重水素原子を表す。以下の具体例において、水素原子は例えばアルキル基で置換されていてもよい。また、置換もしくは無置換のベンゼン環がさらに縮合していてもよい。

[化20-1]

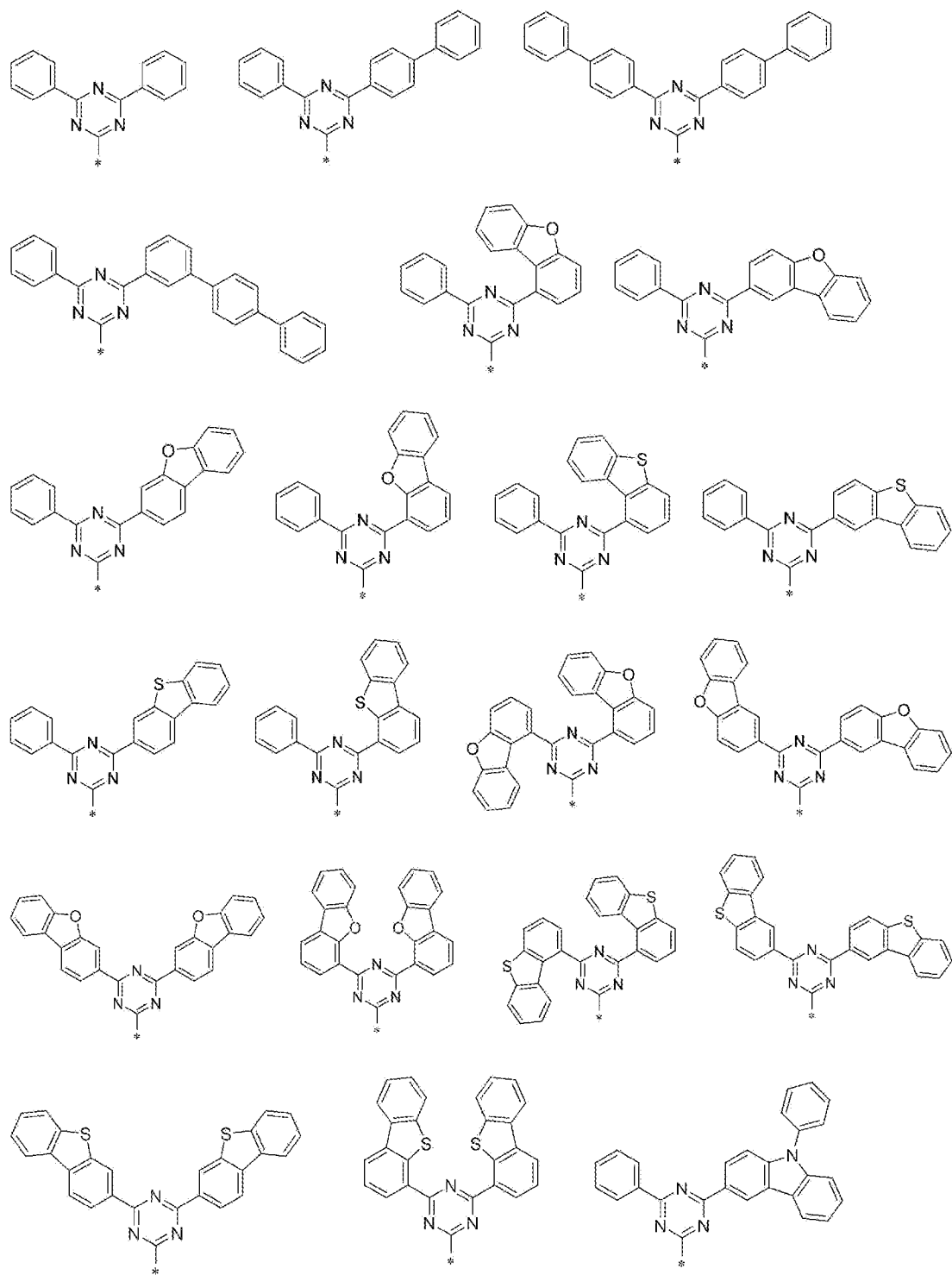


[化20-2]

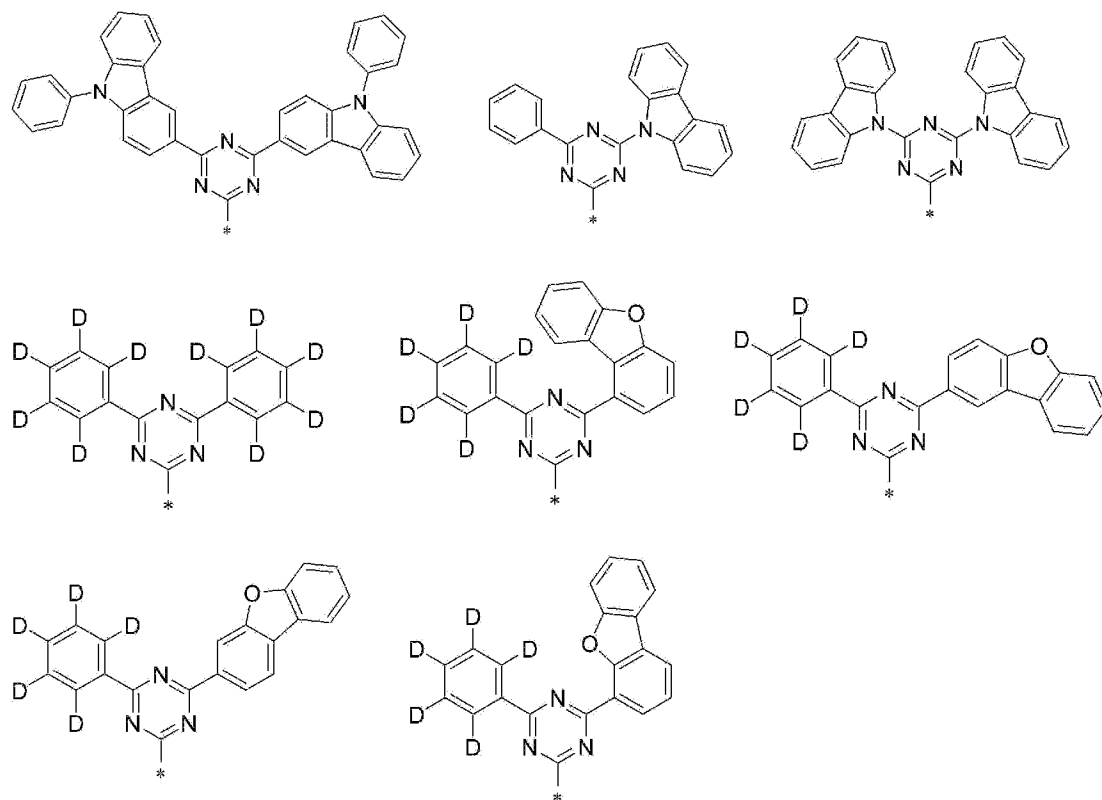


[0055] 一般式（１２）～（１４）におけるＡとして好ましいアクセプター性基の具体例を以下に挙げる。以下の具体例において、＊は結合位置を表し、「Ｄ」はデューテリウムを表す。

[化21-1]

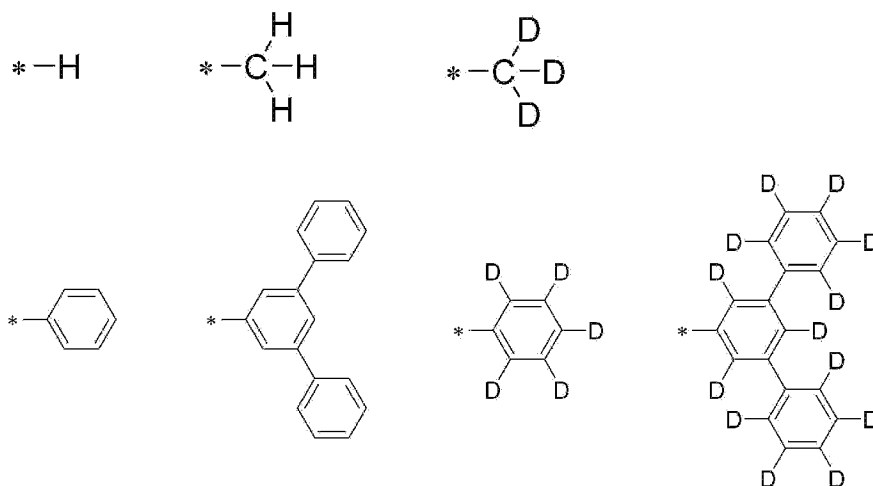


[化21-2]



[0056] 一般式(12)～(15)におけるRとして好ましい例を以下に挙げる。
 以下の具体例において、*は結合位置を表し、「D」はデューテリウムを表す。

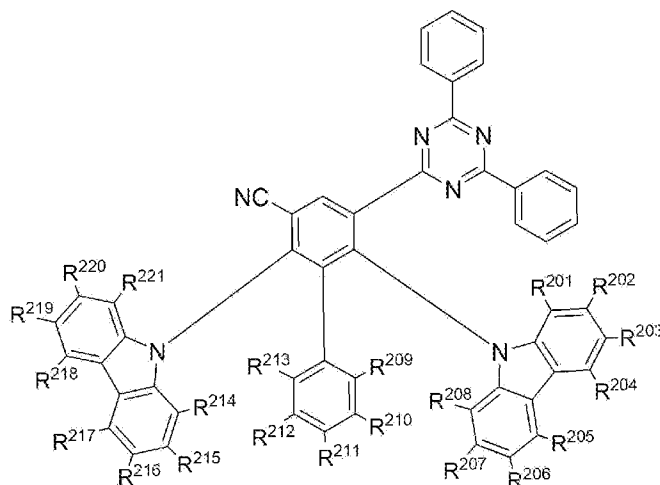
[化22]



[0057] 一般式(15)で表される化合物の中で特に好ましい化合物は、下記一般式(15a)で表される化合物である。

一般式 (15a)

[化23]

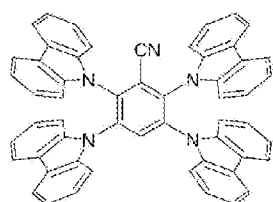
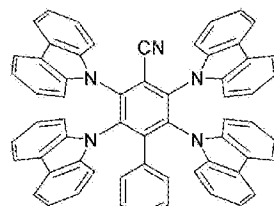
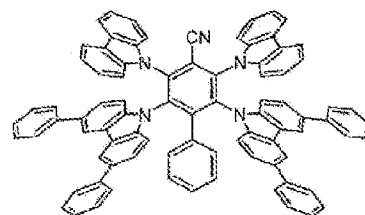
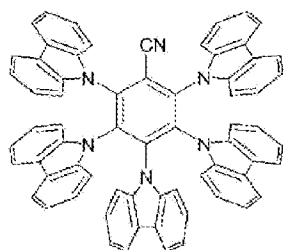
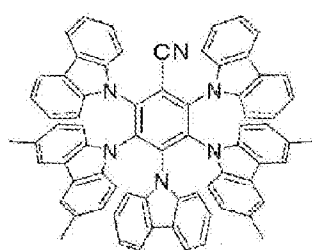
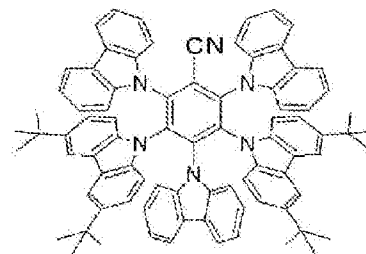
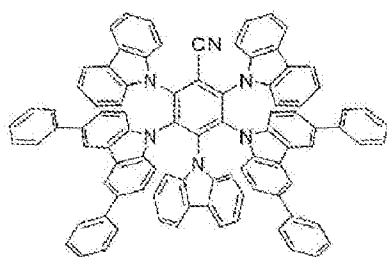
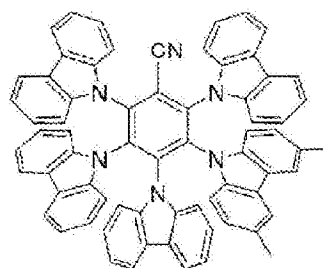
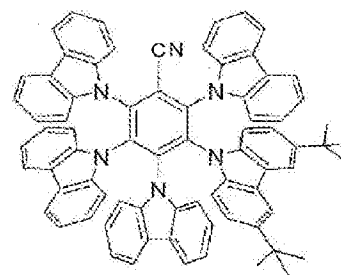
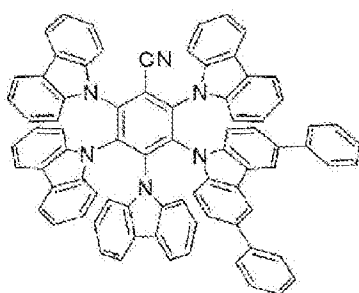
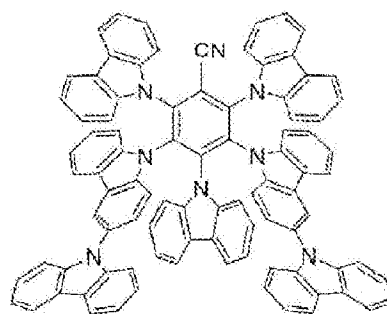
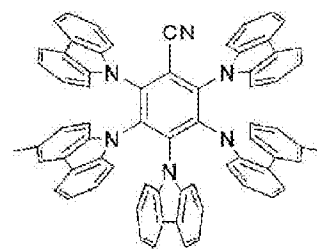
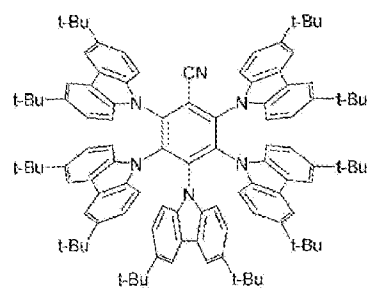
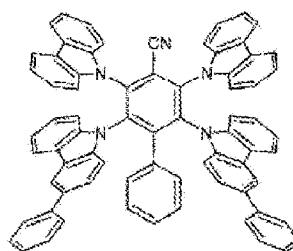


[0058] 一般式 (15a) において、 $R^{201} \sim R^{221}$ は各々独立に水素原子または置換基を表し、好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、またはアルキル基とアリール基が結合した基を表す。 R^{201} と R^{202} 、 R^{202} と R^{203} 、 R^{203} と R^{204} 、 R^{205} と R^{206} 、 R^{206} と R^{207} 、 R^{207} と R^{208} 、 R^{214} と R^{215} 、 R^{215} と R^{216} 、 R^{216} と R^{217} 、 R^{218} と R^{219} 、 R^{219} と R^{220} 、 R^{220} と R^{221} のうちの少なくとも1組は、互いに結合してベンゾフロ構造またはベンゾチエノ構造を形成している。好ましくは、 R^{201} と R^{202} 、 R^{202} と R^{203} 、 R^{203} と R^{204} 、 R^{205} と R^{206} 、 R^{206} と R^{207} 、 R^{207} と R^{208} のうちの1組または2組と、 R^{214} と R^{215} 、 R^{215} と R^{216} 、 R^{216} と R^{217} 、 R^{218} と R^{219} 、 R^{219} と R^{220} 、 R^{220} と R^{221} のうちの1組または2組が、互いに結合してベンゾフロ構造またはベンゾチエノ構造を形成している。さらに好ましくは、 R^{203} と R^{204} が互いに結合してベンゾフロ構造またはベンゾチエノ構造を形成して、さらにより好ましくは R^{203} と R^{204} 、 R^{216} と R^{217} が互いに結合してベンゾフロ構造またはベンゾチエノ構造を形成している。特に好ましくは、 R^{203} と R^{204} 、 R^{216} と R^{217} が互いに結合してベンゾフロ構造またはベンゾチエノ構造を形成していて、 R^{206} と R^{219} が置換もしくは無置換のアリール基（好ましくは置換もしくは無置換のフェニル基、より好ましくは無置換のフェニル基）である。

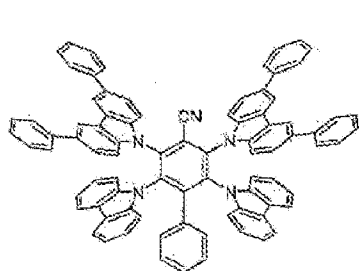
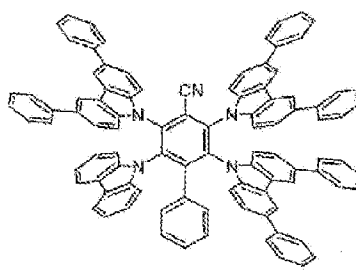
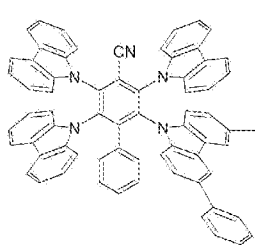
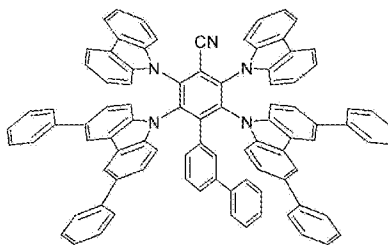
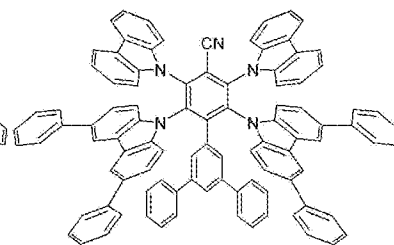
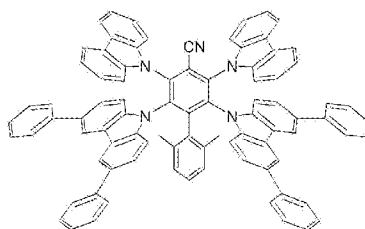
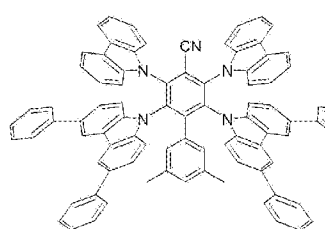
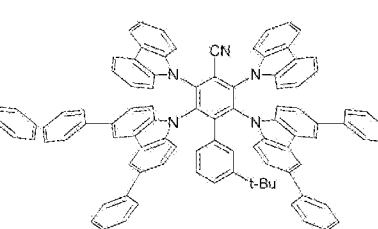
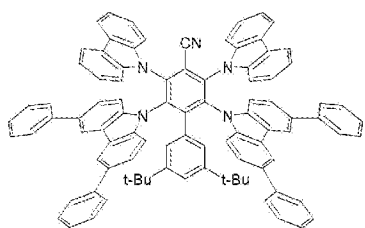
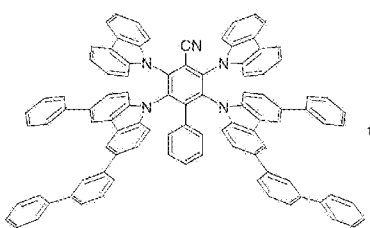
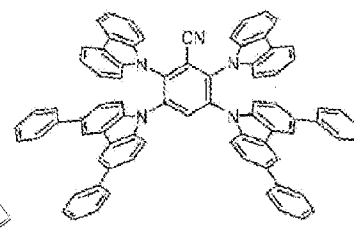
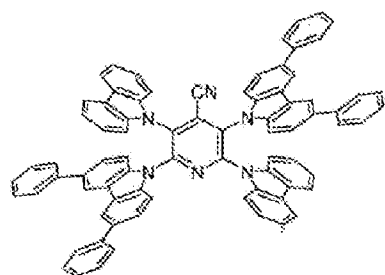
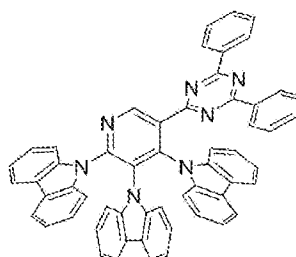
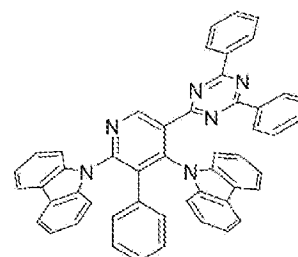
一般式 (15a) の水素原子の一部または全部は重水素原子で置換されていてもよい。例えば、トリアジニル基に結合している2つのフェニル基の水素原子の一部または全部が重水素原子で置換されていてもよい。また、2つのカルバゾリル基に結合している水素原子の一部または全部が重水素原子で置換されていてもよい。また、 $R^{209} \sim R^{213}$ が重水素原子であってもよい。

[0059] 以下に、第2有機化合物として用いることができる好ましい化合物を挙げる。以下の例示化合物の構造式において、 $t-Bu$ はターシャリーブチル基を表す。

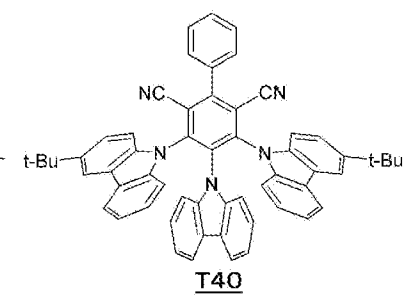
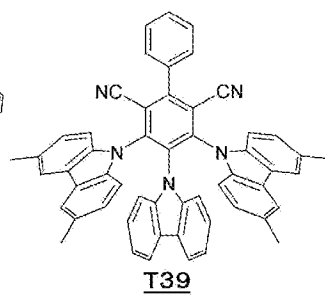
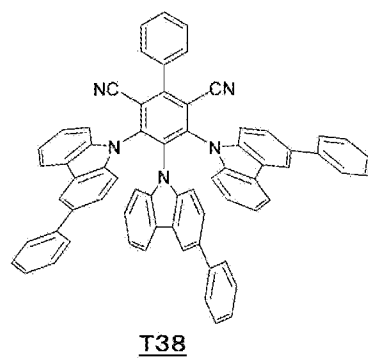
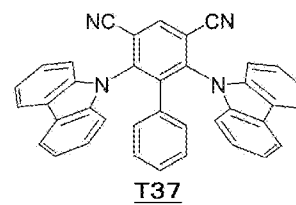
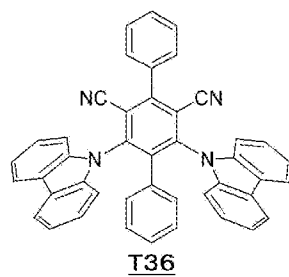
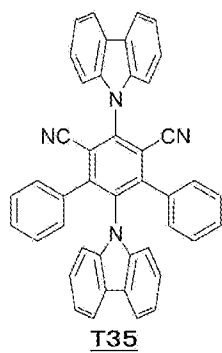
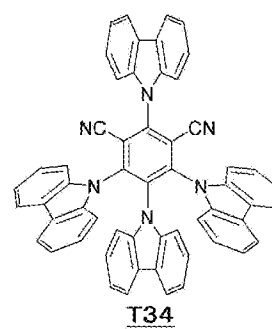
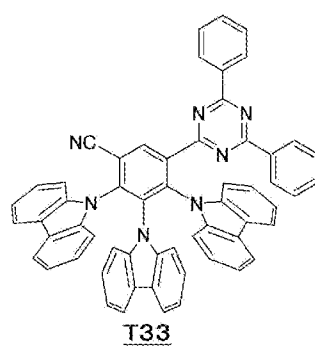
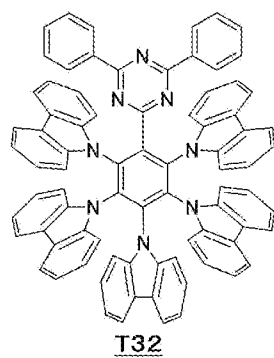
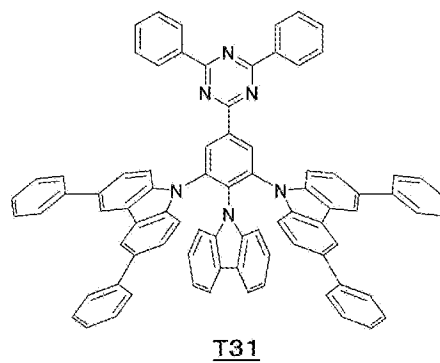
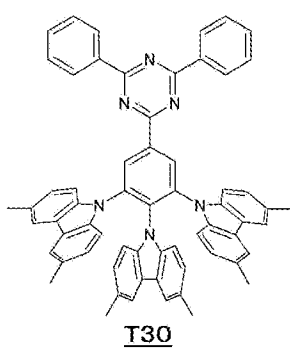
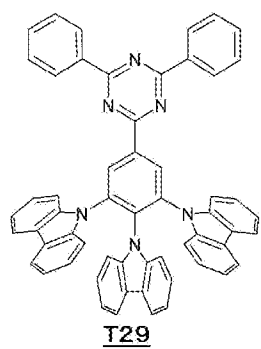
[化24-1]

T1T2T3T4T5T6T7T8T9T10T11T12T13T14

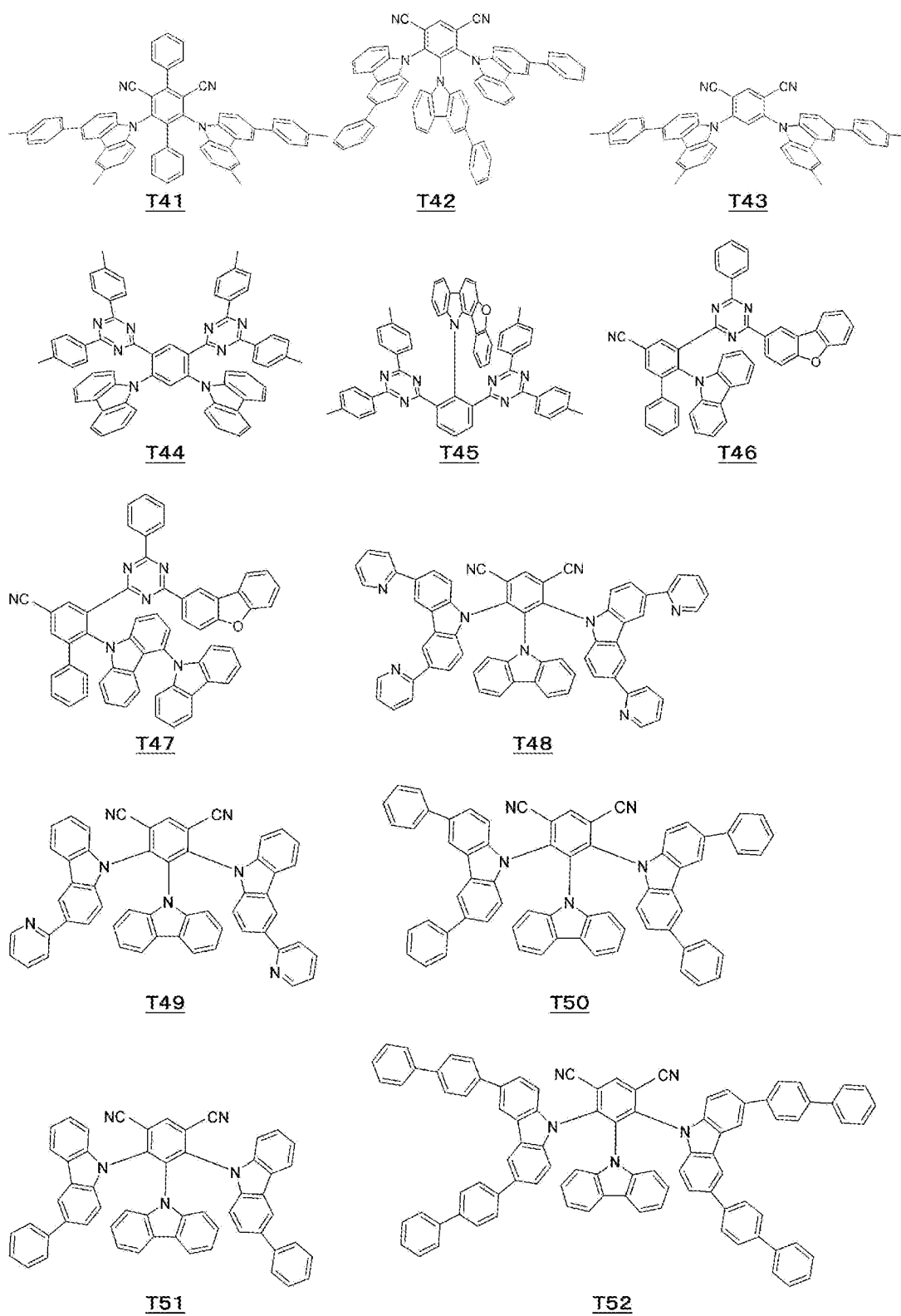
[化24-2]

T15T16T17T18T19T20T21T22T23T24T25T26T27T28

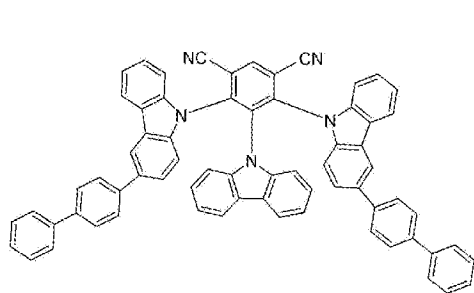
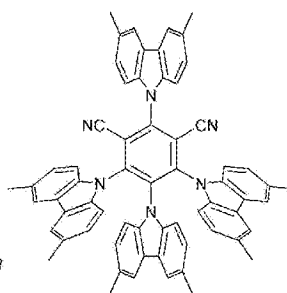
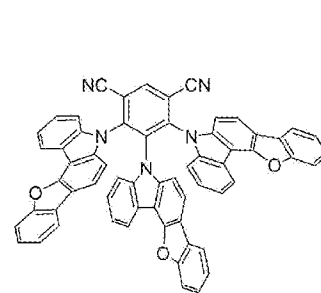
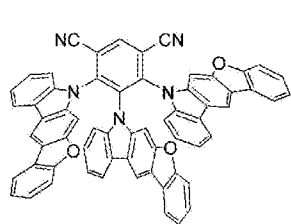
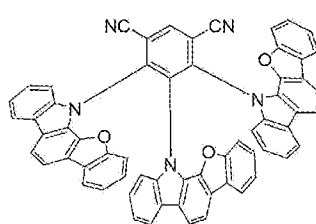
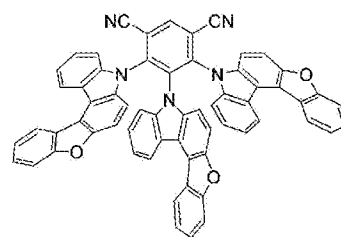
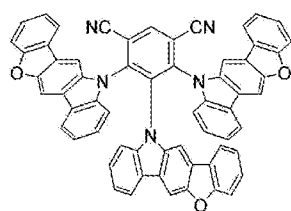
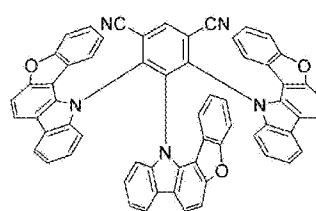
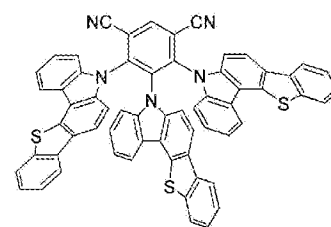
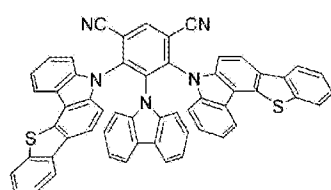
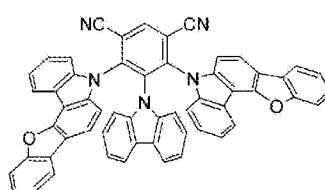
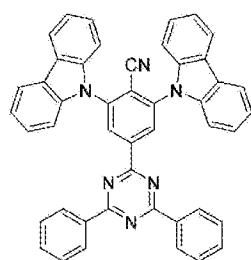
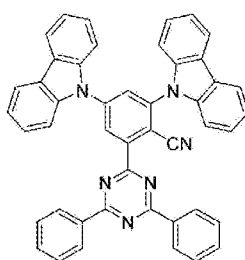
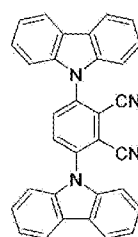
[化24-3]



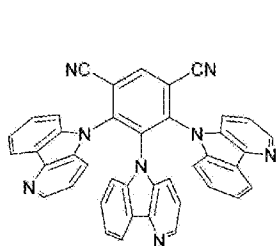
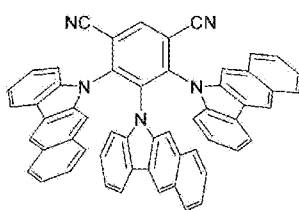
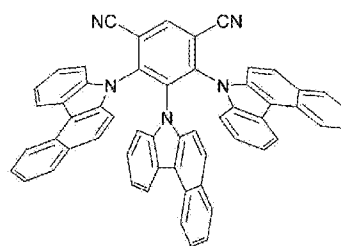
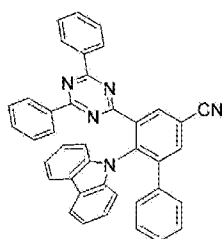
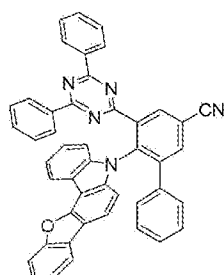
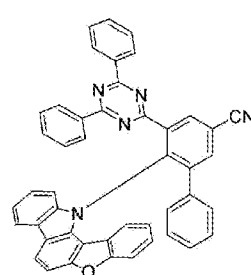
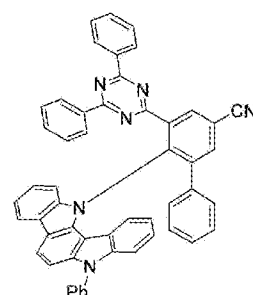
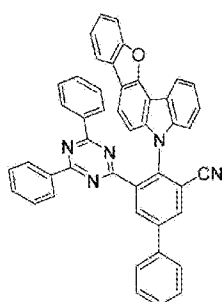
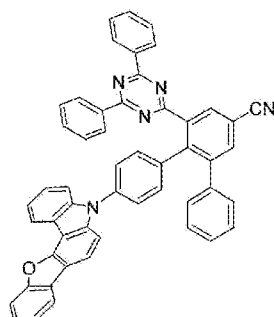
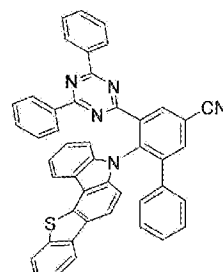
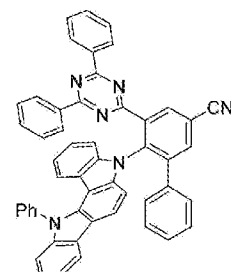
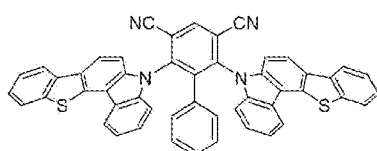
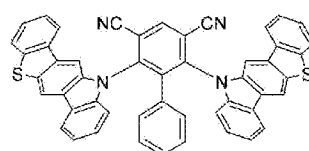
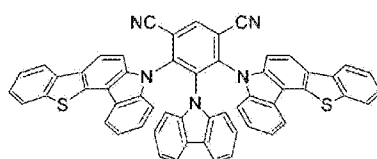
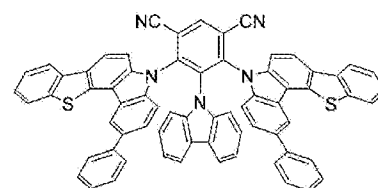
[化24-4]



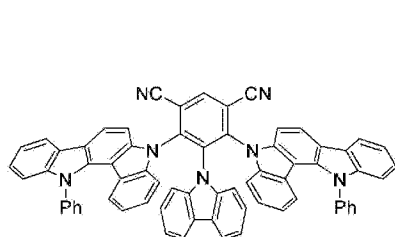
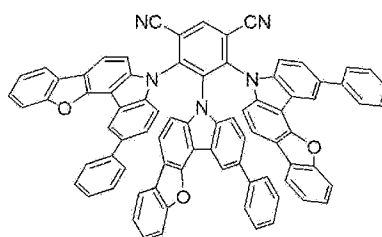
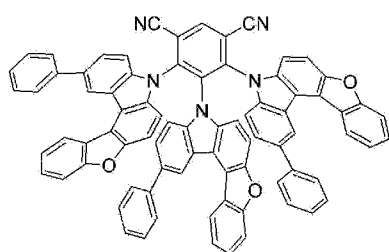
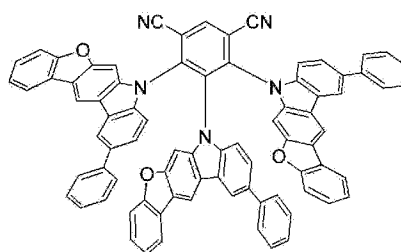
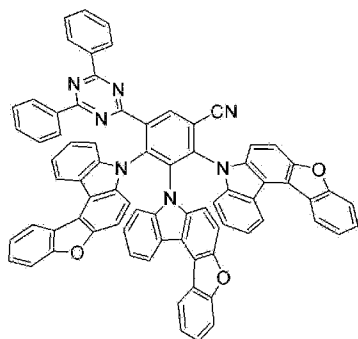
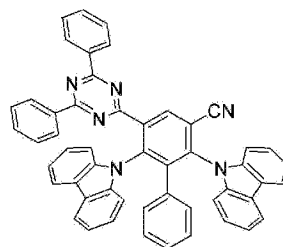
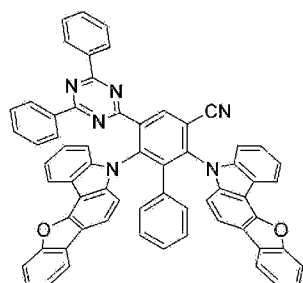
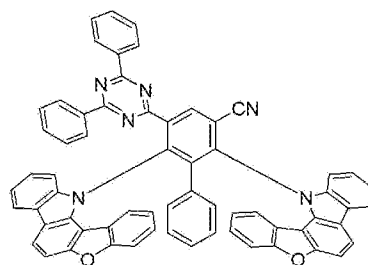
[化24-5]

T53T54T55T56T57T58T59T60T61T62T63T64T65T66

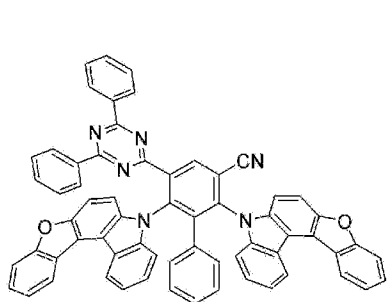
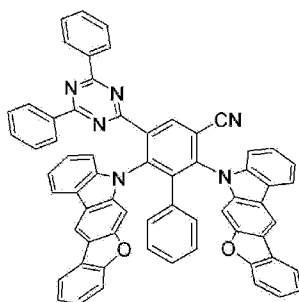
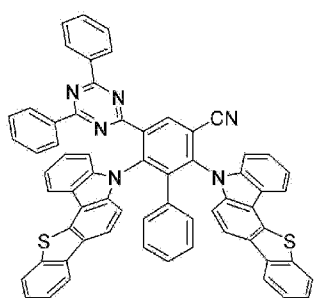
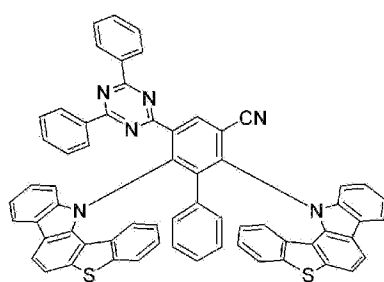
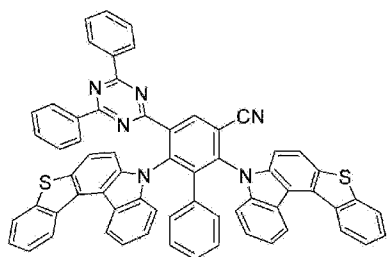
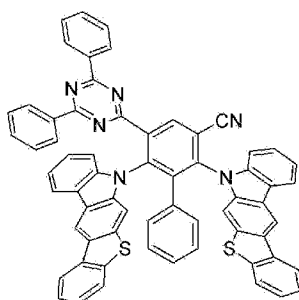
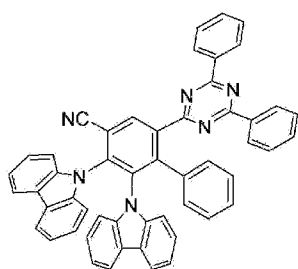
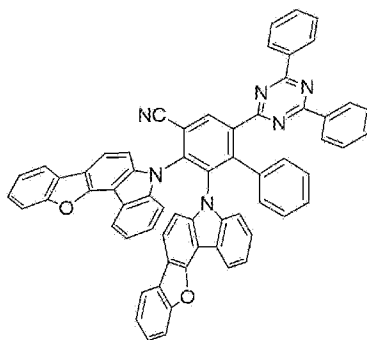
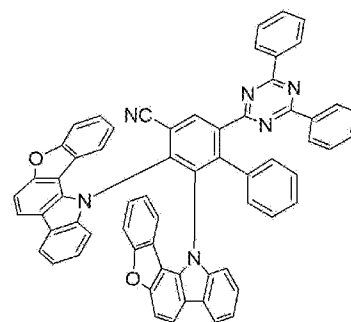
[化24-6]

T67T68T69T70T71T72T73T74T75T76T77T78T79T80T81

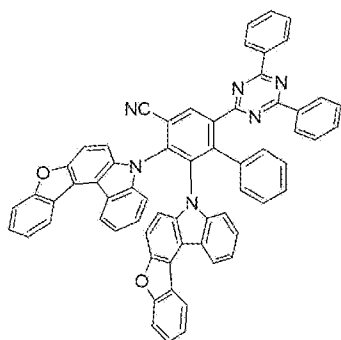
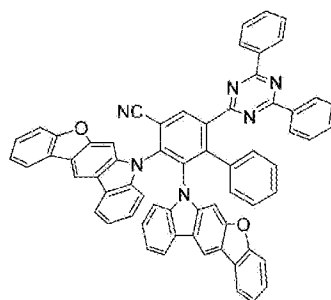
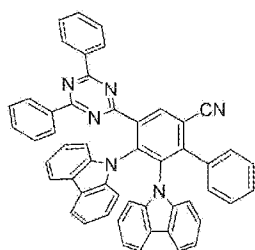
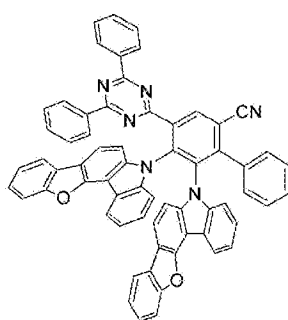
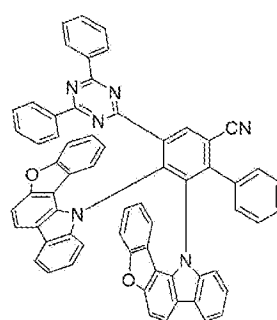
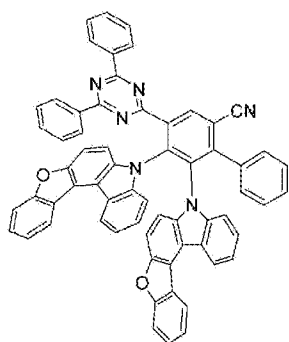
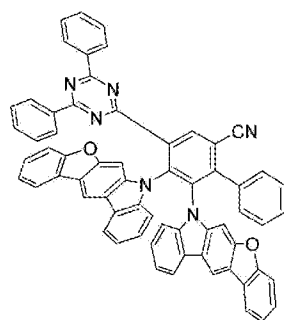
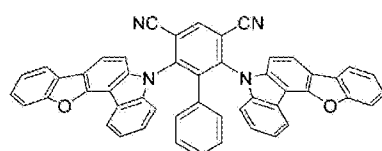
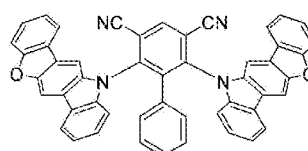
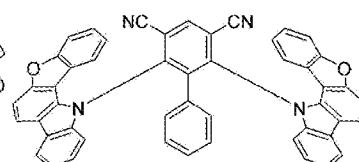
[化24-7]

T82T83T84T85T86T87T88T89

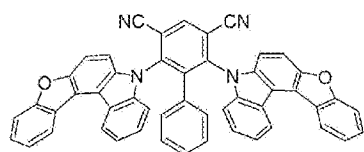
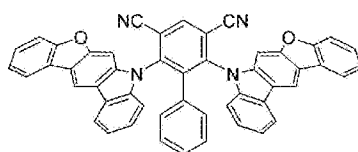
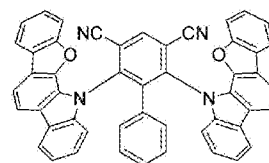
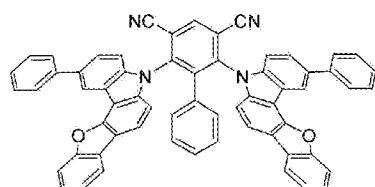
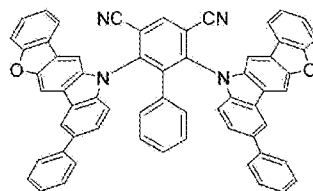
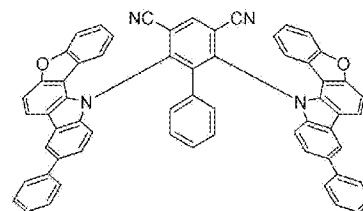
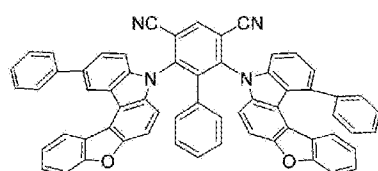
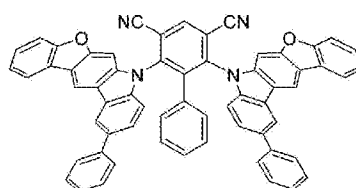
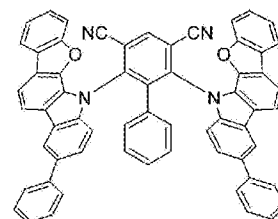
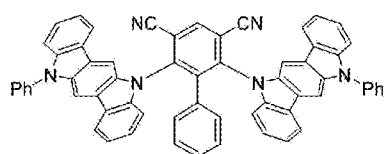
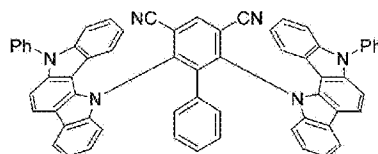
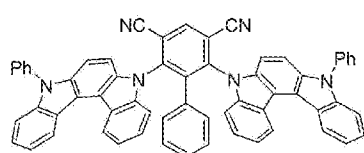
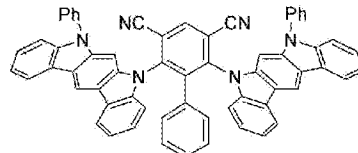
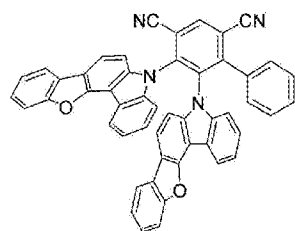
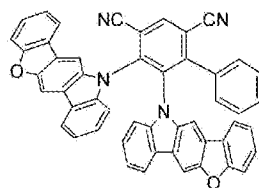
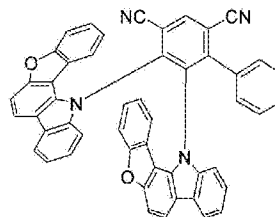
[化24-8]

T90T91T92T93T94T95T96T97T98

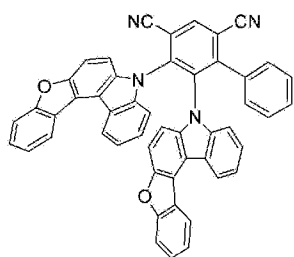
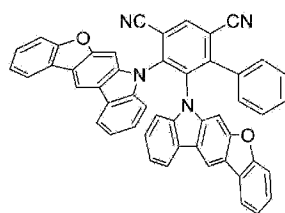
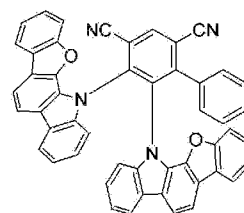
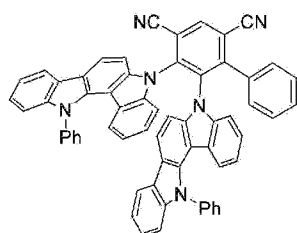
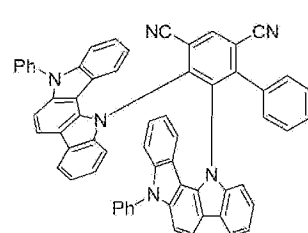
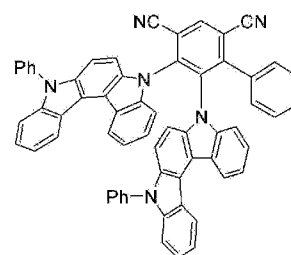
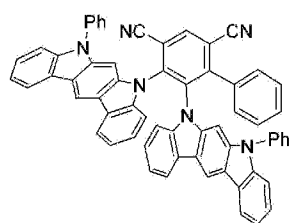
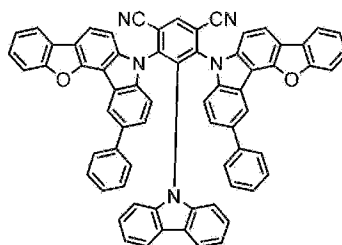
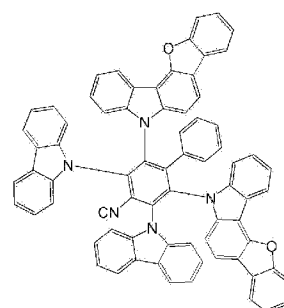
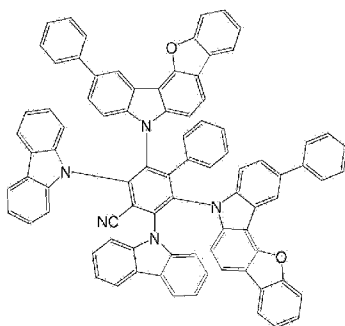
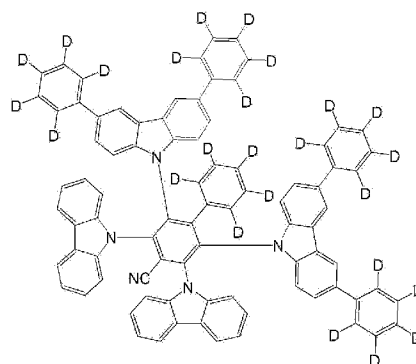
[化24-9]

T99T100T101T102T103T104T105T106T107T108

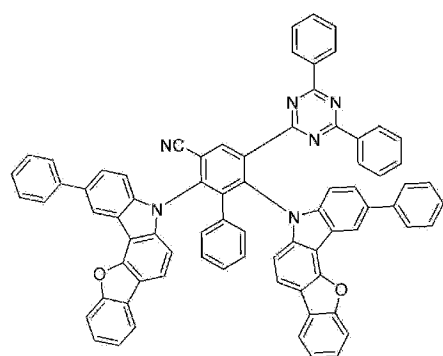
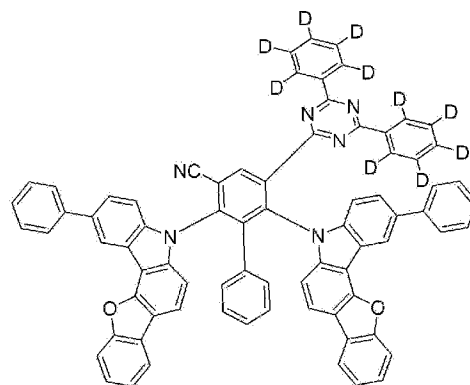
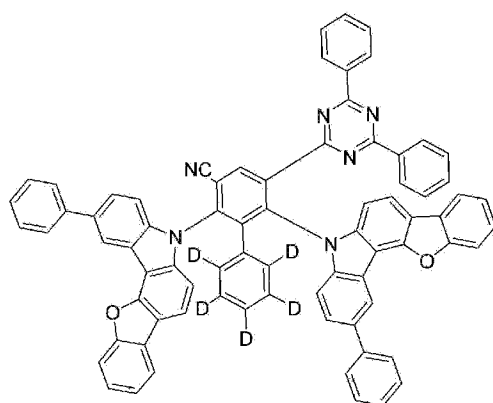
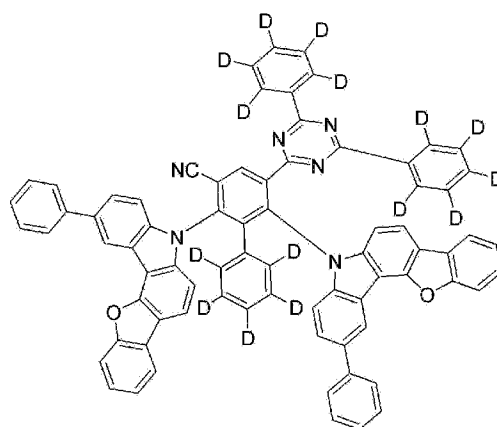
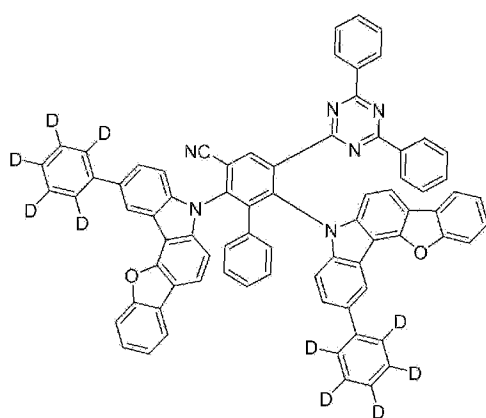
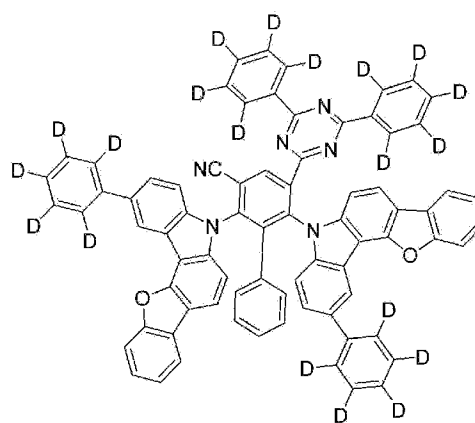
[化24-10]

T109T110T111T112T113T114T115T116T117T118T119T120T121T122T123T124

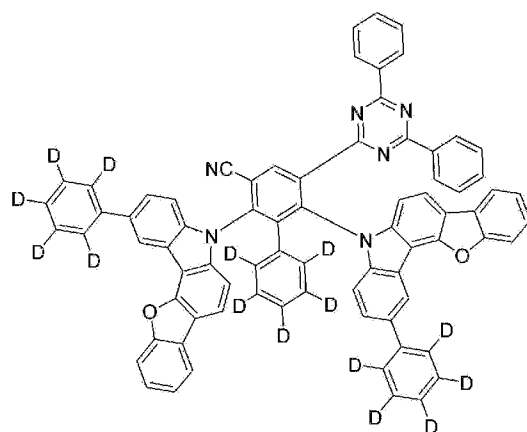
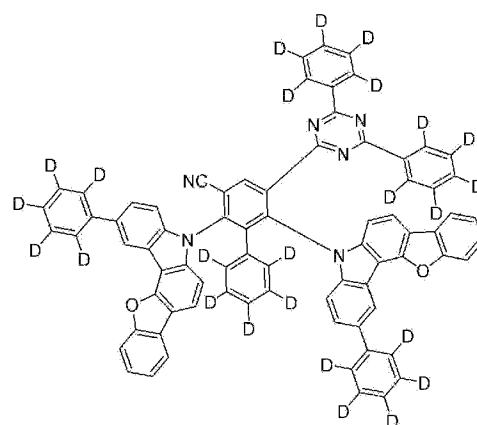
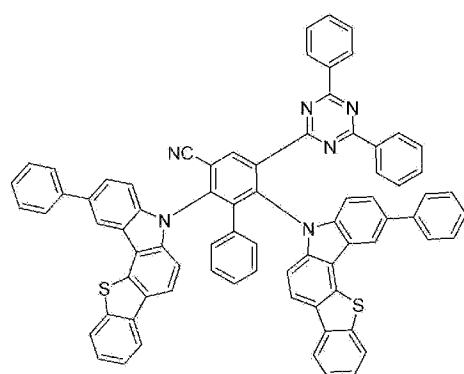
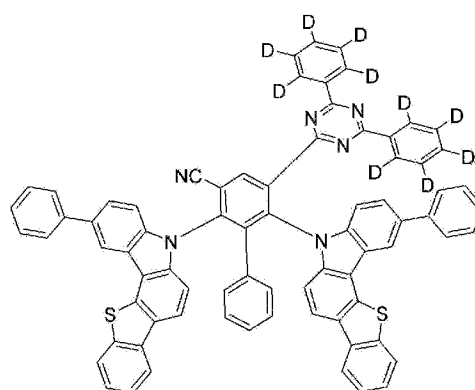
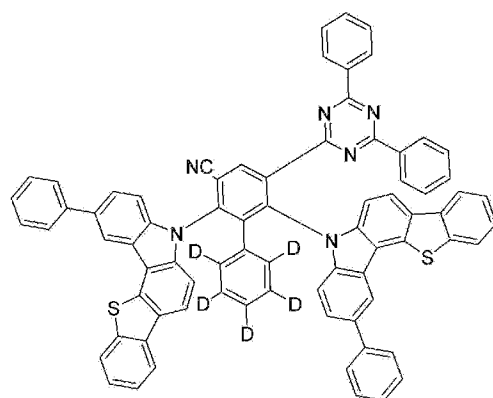
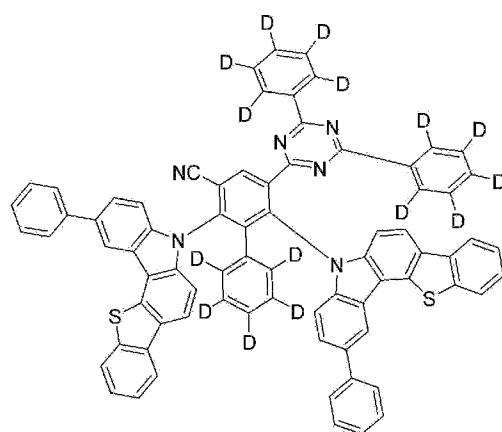
[化24-11]

T125T126T127T128T129T130T131T132T133T134T135

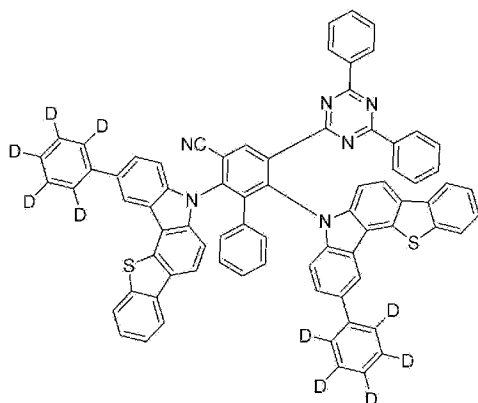
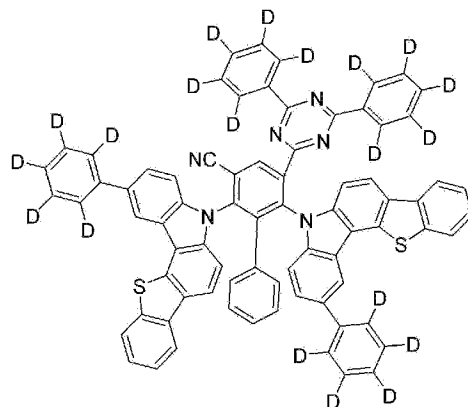
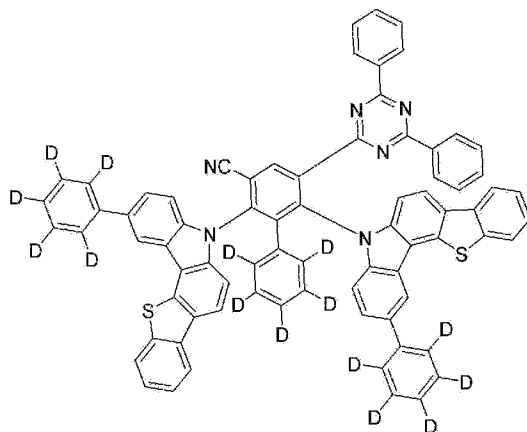
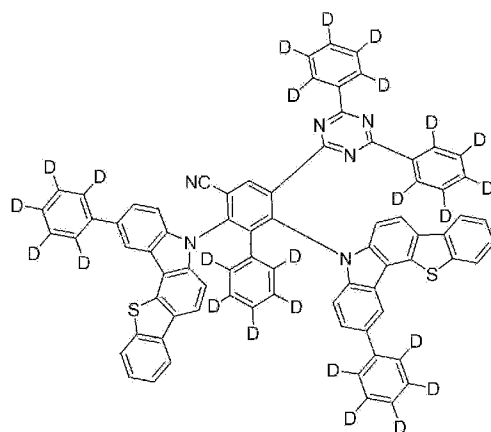
[化24-12]

T136T137T138T139T140T141

[化24-13]

T142T143T144T145T146T147

[化24-14]

T148T149T150T151

[0060] 第2有機化合物には、上記以外にも公知の遅延蛍光材料を適宜組み合わせ用いることができる。また、知られていない遅延蛍光材料であっても、用いることが可能である。特に、本明細書の一部としてここに引用する特願2021-188860号明細書の段落0013～0042に記載される一般式(1)で表される化合物、特に段落0043～0048に記載される化合物を好ましく用いることができる。

遅延蛍光材料として、WO2013/154064号公報の段落0008～0048および0095～0133、WO2013/011954号公報の段落0007～0047および0073～0085、WO2013/011955号公報の段落0007～0033および0059～0066、WO

2013/081088号公報の段落0008~0071および0118~0133、特開2013-256490号公報の段落0009~0046および0093~0134、特開2013-116975号公報の段落0008~0020および0038~0040、WO2013/133359号公報の段落0007~0032および0079~0084、WO2013/161437号公報の段落0008~0054および0101~0121、特開2014-9352号公報の段落0007~0041および0060~0069、特開2014-9224号公報の段落0008~0048および0067~0076、特開2017-119663号公報の段落0013~0025、特開2017-119664号公報の段落0013~0026、特開2017-222623号公報の段落0012~0025、特開2017-226838号公報の段落0010~0050、特開2018-100411号公報の段落0012~0043、WO2018/047853号公報の段落0016~0044に記載される一般式に包含される化合物、特に例示化合物であって、遅延蛍光を放射するものを挙げることができる。また、特開2013-253121号公報、WO2013/133359号公報、WO2014/034535号公報、WO2014/115743号公報、WO2014/122895号公報、WO2014/126200号公報、WO2014/136758号公報、WO2014/133121号公報、WO2014/136860号公報、WO2014/196585号公報、WO2014/189122号公報、WO2014/168101号公報、WO2015/008580号公報、WO2014/203840号公報、WO2015/002213号公報、WO2015/016200号公報、WO2015/019725号公報、WO2015/072470号公報、WO2015/108049号公報、WO2015/080182号公報、WO2015/072537号公報、WO2015/080183号公報、特開2015-129240号公報、WO2015/129714号公報、WO2015/129715号公報、WO2015/133501号公報、

WO 2015/136880号公報、WO 2015/137244号公報、WO 2015/137202号公報、WO 2015/137136号公報、WO 2015/146541号公報、WO 2015/159541号公報に記載される発光材料であって、遅延蛍光を放射するものを採用することもできる。なお、この段落に記載される上記の公報は、本明細書の一部としてここに引用している。

[0061] (第3有機化合物)

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層に用いる第3有機化合物は、蛍光を放射する化合物であって、第1有機化合物や第2有機化合物よりもLUMOのエネルギーが低い化合物である。第3有機化合物は、蛍光を放射する化合物であって、第1有機化合物や第2有機化合物よりもLUMOのエネルギーが低く、なおかつ、第1有機化合物や第2有機化合物よりも小さな最低励起一重項エネルギーを有する化合物であることが好ましい。本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子では、発光層における第3有機化合物の配向値が -0.3 以下である。そして、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子では、第3有機化合物に由来する蛍光を放射する。第3有機化合物からの発光は通常は遅延蛍光を含む。素子からの発光の最大成分は第3有機化合物からの蛍光である。すなわち、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子からの発光のうち、第3有機化合物からの蛍光の発光量が最大である。

本発明の好ましい態様では、第3有機化合物は、励起一重項状態の第1有機化合物、励起一重項状態の第2有機化合物、励起三重項状態から逆項間交差して励起一重項状態になった第2有機化合物からエネルギーを受け取って励起一重項状態に遷移する。また本発明のより好ましい態様では、第3有機化合物は、励起一重項状態の第2有機化合物と、励起三重項状態から逆項間交差して励起一重項状態になった第2有機化合物からエネルギーを受け取って励起一重項状態に遷移する。生じた第3有機化合物の励起一重項状態は、その後基底状態に戻るときに蛍光を放射する。

第3有機化合物としては、所定の条件を満たす蛍光材料（蛍光発光性の化合物）であれば特に制限なく用いることができる。ここで、「蛍光材料」とは、蛍光寿命測定システム（浜松ホトニクス社製ストリークカメラシステム等）により発光寿命を測定したとき、発光寿命が100 ns（ナノ秒）未満の蛍光が観測されるものを言う。第3有機化合物からの発光には遅延蛍光や燐光が含まれていても構わないが、第3有機化合物からの発光の最大成分は蛍光である。本発明の一態様では、有機エレクトロルミネッセンス素子は燐光を放射しないか、燐光の放射量は蛍光の1%以下である。

[0062] 第3有機化合物は、本発明の条件を満たすものであれば2種以上を用いてもよい。例えば、発光色が異なる2種以上の第3有機化合物を併用することにより、所望の色を発光させることが可能になる。また、1種類の第3有機化合物を用いて第3有機化合物から単色発光させてもよい。

本発明では、第3有機化合物として用いることができる化合物の最大発光波長は特に制限されない。このため、可視領域（380～780 nm）に最大発光波長を有する発光材料や赤外領域（780 nm～1 mm）に最大発光波長を有する発光材料や紫外領域（例えば280～380 nm）に最大発光波長を有する化合物などを適宜選択して使用することが可能である。好ましいのは、可視領域に最大発光波長を有する蛍光材料である。例えば、380～780 nmの領域内における最大発光波長が380～570 nmの範囲内にある発光材料を選択して用いたり、最大発光波長が570～650 nmの範囲内にある発光材料を選択して用いたり、最大発光波長が650～700 nmの範囲内にある発光材料を選択して用いたり、最大発光波長が700～780 nmの範囲内にある発光材料を選択して用いたりしてもよい。

本発明の好ましい態様では、第2有機化合物の発光波長領域と第3有機化合物の吸収波長領域との間に重なりがあるように、各化合物を選択して組み合わせる。特に、第2有機化合物の発光スペクトルの短波長側のエッジと、第3有機化合物の吸収スペクトルの長波側のエッジが重なっていることが好ましい。

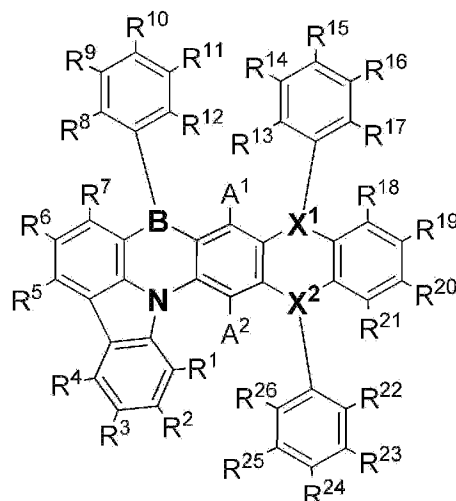
第3有機化合物はホウ素原子以外の金属原子を含まないことが好ましい。例えば、第3有機化合物はホウ素原子とフッ素原子をともに含む化合物であってもよい。また、ホウ素原子を含むがフッ素原子を含まない化合物であってもよい。また、金属原子をまったく含まないものであってもよい。例えば、第3有機化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、フッ素原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、第3有機化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子、フッ素原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、第3有機化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、第3有機化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、第3有機化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、第3有機化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子および酸素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、第3有機化合物として、炭素原子および水素原子からなる化合物を選択することができる。

[0063] 第3有機化合物としては、ホウ素原子と窒素原子の多重共鳴効果を有する化合物や、アントラセン、ピレン、ペリレン等の縮合芳香族環構造を含む化合物を例示することができる。また、第3有機化合物としては、多重共鳴効果を示すホウ素原子と窒素原子を含み、構成環数が4つ以上である縮合環構造を有する化合物を例示することができる。さらに、第3有機化合物としては、ホウ素原子と窒素原子を含む複素6員環に、窒素原子を共有するピロール環と2つのベンゼン環が縮合した構造を有する化合物も例示することができる。

本発明の好ましい一態様では、第3有機化合物として下記一般式（16）で表される化合物を用いる。

一般式（16）

[化25]



[0064] 一般式（16）において、 X^1 および X^2 は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。本発明の一態様では、 X^1 が窒素原子であり、 X^2 がホウ素原子である。このとき、 R^{17} と R^{18} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。本発明の別の態様では、 X^1 がホウ素原子であり、 X^2 が窒素原子である。このとき、 R^{21} と R^{22} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。

[0065] 一般式（16）において、 $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

R^7 と R^8 が結合して形成する環状構造は、環骨格構成原子としてホウ素原子と4つの炭素原子を含む。 R^{17} と R^{18} が結合して形成する環状構造は、 X^1 がホウ素原子であるとき、環骨格構成原子としてホウ素原子と4つの炭素原

子を含む。X¹が窒素原子であるとき、環状構造はピロール環に限定される。R²¹とR²²が結合して形成する環状構造は、X²がホウ素原子であるとき、環骨格構成原子としてホウ素原子と4つの炭素原子を含む。X²が窒素原子であるとき、環状構造はピロール環に限定される。R⁷とR⁸、R¹⁷とR¹⁸、R²¹とR²²が互いに結合してホウ素原子を含む環状構造を形成するとき、その環状構造は5～7員環であることが好ましく、5または6員環であることがより好ましく、6員環であることがさらに好ましい。R⁷とR⁸、R¹⁷とR¹⁸、R²¹とR²²が互いに結合するときは、互いに結合して単結合、—O—、—S—、—N(R²⁷)—、—C(R²⁸)(R²⁹)—、—Si(R³⁰)(R³¹)—、—B(R³²)—、—CO—、—CS—、を形成することが好ましく、—O—、—S—または—N(R²⁷)—を形成することがより好ましく、—N(R²⁷)—を形成することがさらに好ましい。ここで、R²⁷～R³²は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。置換基としては、後述の置換基群A～Eのいずれかから選択される基を採用してもよいが、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基であることが好ましく、特にR²⁷は置換もしくは無置換のアリール基であることが好ましい。R²⁷～R³²が置換基であるとき、R⁷とR⁸が互いに結合して形成する環におけるR²⁷～R³²はR⁶およびR⁹の少なくとも一方と結合してさらに環状構造を形成してもよく、R¹⁷とR¹⁸が互いに結合して形成する環におけるR²⁷～R³²はR¹⁶およびR¹⁹の少なくとも一方と結合してさらに環状構造を形成してもよく、R²¹とR²²が互いに結合して形成する環におけるR²⁷～R³²はR²⁰およびR²³の少なくとも一方と結合してさらに環状構造を形成してもよい。本発明の一態様では、R⁷とR⁸、R¹⁷とR¹⁸、R²¹とR²²のうちの1組だけが互いに結合している。本発明の一態様では、R⁷とR⁸、R¹⁷とR¹⁸、R²¹とR²²のうちの2組だけが互いに結合している。本発明の一態様では、R⁷とR⁸、R¹⁷とR¹⁸、R²¹とR²²のすべてが互いに結合している。

[0066] R¹とR²、R²とR³、R³とR⁴、R⁴とR⁵、R⁵とR⁶、R⁶とR⁷、R⁸と

R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} が互いに結合して形成する環状構造は、芳香環であっても脂肪環であってもよく、またヘテロ原子を含むものであってもよく、さらに他の環が1環以上縮合していてもよい。ここでいうヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択されるものであることが好ましい。形成される環状構造の例として、ベンゼン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピロール環、イミダゾール環、ピラゾール環、トリアゾール環、イミダゾリン環、フラン環、チオフェン環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、シクロヘキサジエン環、シクロヘキセン環、シクロペンテン環、シクロヘプタトリエン環、シクロヘプタジエン環、シクロヘプテン環、およびこれらの環からなる群より選択される1つ以上の環がさらに縮合した環を挙げることができる。本発明の好ましい一態様では、環状構造は置換もしくは無置換のベンゼン環（さらに環が縮合していてもよい）であり、例えば、アルキル基またはアリール基で置換されていてもよいベンゼン環である。本発明の好ましい一態様では、環状構造は置換もしくは無置換の複素芳香環であり、好ましくはベンゾフランのフラン環、ベンゾチオフェンのチオフェン環である。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} のうち、互いに結合して環状構造を形成している組み合わせの数は0であってもよいし、例えば1～6のいずれかであってもよい。例えば1～4のいずれかであってもよく、1を選択したり、2を選択したり、3または4を選択したりすることができる。本発明の一態様では、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 から選択される1組が互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態様では、 R^5 と R^6 が互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態

様では、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} から選択される1組が互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態様では、 R^1 と R^2 、 R^{13} と R^{14} がいずれも互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態様では、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 から選択される1組が互いに結合して環状構造を形成しており、なおかつ、 R^5 と R^6 が互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態様では、 R^5 と R^6 、 R^{19} と R^{20} がいずれも互いに結合して環状構造を形成している。

[0067] 隣接する R^n ($n = 1 \sim 26$) と互いに結合していない $R^1 \sim R^{26}$ は、水素原子、重水素原子または置換基である。置換基としては、後述の置換基群A～Eのいずれかから選択される基を採用することができる。

$R^1 \sim R^{26}$ が採りうる好ましい置換基は、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基であり、例えば置換基は置換もしくは無置換のアリール基であってもよいし、例えば置換基は置換もしくは無置換のアルキル基であってもよい。ここでいうアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基の置換基も置換基群A～Eのいずれかから選択される基を採用することができるが、好ましくはアルキル基、アリール基およびヘテロアリール基からなる群より選択される1以上の基であり、より好ましくは置換基群Eの基であり、無置換であってもよい。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。例えば $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つが置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。例えば、 R^5 および R^6 の少なくとも1つが置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。本発明の好ましい一態様では、 R^3 および R^6 の少なくとも一方が置換基であり、より好ましくは両方が置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。本発明の好ましい一態様では、 X^1 が窒素原子であるとき、 R^{15} および R^{20} の少なくとも一方が置換基であり、より好ましくは両方が置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。このとき、 R^{16} と R^{17} は互いに結合して単結合を形成している。本発明の好ましい一態様では、 X^2 が窒素原子であるとき、 R

¹⁹およびR²⁴の少なくとも一方が置換基であり、より好ましくは両方が置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。このとき、R²¹とR²²は互いに結合して単結合を形成している。本発明の一態様では、R⁸およびR¹²の少なくとも一方が置換基であり、好ましくは両方が置換基である。本発明の一態様では、R⁸、R¹⁰およびR¹²が置換基である。R⁸～R¹²の置換基としては、無置換のアルキル基が好ましい。X¹がホウ素原子であるとき、R¹³およびR¹⁷の少なくとも一方が置換基であり、好ましくは両方が置換基である。本発明の一態様では、X¹がホウ素原子であるとき、R¹³、R¹⁵およびR¹⁷が置換基である。X¹がホウ素原子であるとき、R¹³～R¹⁷の置換基としては、無置換のアルキル基が好ましい。X²がホウ素原子であるとき、R²²およびR²⁶の少なくとも一方が置換基であり、好ましくは両方が置換基である。本発明の一態様では、X²がホウ素原子であるとき、R²²、R²⁴およびR²⁶が置換基である。X²がホウ素原子であるとき、R²²～R²⁶の置換基としては、無置換のアルキル基が好ましい。

[0068] A¹およびA²は、水素原子、重水素原子または置換基である。置換基としては、後述の置換基群A～Eのいずれかから選択される基を採用することができる。

A¹およびA²が採りうる好ましい置換基は、アクセプター性基である。アクセプター性基は、ハメットのσ_p値が正の基である。ここで、「ハメットのσ_p値」は、L. P. ハメットにより提唱されたものであり、パラ置換ベンゼン誘導体の反応速度または平衡に及ぼす置換基の影響を定量化したものである。具体的には、パラ置換ベンゼン誘導体における置換基と反応速度定数または平衡定数の間に成立する下記式：

$$\log (k / k_0) = \rho \sigma_p$$

または

$$\log (K / K_0) = \rho \sigma_p$$

における置換基に特有な定数(σ_p)である。上式において、k₀は置換基を持たないベンゼン誘導体の速度定数、kは置換基で置換されたベンゼン誘導

体の速度定数、 K_0 は置換基を持たないベンゼン誘導体の平衡定数、 K は置換基で置換されたベンゼン誘導体の平衡定数、 ρ は反応の種類と条件によって決まる反応定数を表す。本発明における「ハメットの σ_p 値」に関する説明と各置換基の数値については、Hansch, C. et. al., Chem. Rev., 91, 165-195 (1991)の σ_p 値に関する記載を参照することができる。

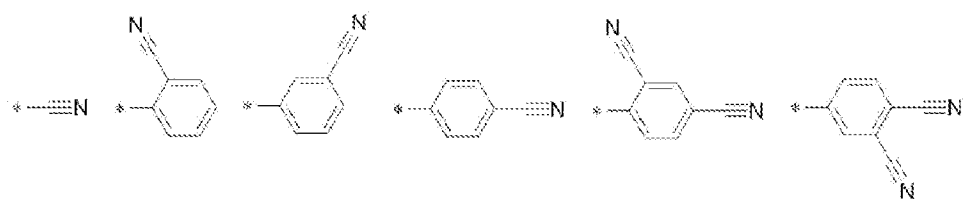
A^1 および A^2 が採りうるアクセプター性基は、ハメットの σ_p 値が0.2より大きい基であることがより好ましい。ハメットの σ_p 値が0.2より大きい基として、シアノ基、少なくともシアノ基で置換されているアリール基、フッ素原子を含む基、環骨格構成原子として窒素原子を含む置換もしくは無置換のヘテロアリール基を挙げることができる。ここでいう少なくともシアノ基で置換されているアリール基は、シアノ基以外の置換基（例えばアルキル基やアリール基）で置換されていてもよいが、シアノ基だけで置換されているアリール基であってもよい。少なくともシアノ基で置換されているアリール基は、少なくともシアノ基で置換されているフェニル基であることが好ましい。シアノ基の置換数は1または2であることが好ましく、例えば1であってもよく、2であってもよい。フッ素原子を含む基は、フッ素原子、フッ化アルキル基、フッ素原子またはフッ化アルキル基で少なくとも置換されたアリール基を挙げることができる。フッ化アルキル基は、パーフルオロアルキル基であることが好ましく、炭素原子数は1～6であることが好ましく、1～3であることがより好ましい。また、環骨格構成原子として窒素原子を含むヘテロアリール基は、単環であってもよいし、2つ以上の環が縮合した縮合環であってもよい。縮合環である場合、縮合した後の環の数は2～6であることが好ましく、例えば2～4の中から選択したり、2としたりすることができる。ヘテロアリール基を構成する環の具体例として、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、キナゾリン環やキノキサリン環以外のナフチリジン環を挙げることができる。ヘテロアリール基を構成する環は、重水素原子や置換基で置換されていてもよく、置換基としては例えば、アル

キル基、アリール基およびヘテロアリール基からなる群より選択される1つの基または2つ以上で構成される基を挙げることができる。A¹およびA²が採りうるアクセプター性基として特に好ましいのはシアノ基である。

本発明の一態様では、A¹およびA²は、各々独立に水素原子または重水素原子である。本発明の一態様では、A¹およびA²の少なくとも一方はアクセプター性基である。本発明の一態様では、A¹およびA²の少なくとも一方はアクセプター性基である。本発明の一態様では、A¹およびA²の両方がアクセプター性基である。本発明の一態様では、A¹およびA²の両方がアクセプター性基である。本発明の一態様では、A¹およびA²がシアノ基である。本発明の一態様では、A¹およびA²がハロゲン原子であり、例えば臭素原子である。

[0069] 以下において、本発明で採用することができるアクセプター性基の具体例を示す。ただし、本発明において用いることができるアクセプター性基は以下の具体例によって限定的に解釈されることはない。本明細書中ではメチル基は表示を省略している。このため、例えばA 1 5であれば、4-メチルフェニル基が2つ含まれる基を示している。また「D」は重水素原子を表す。
＊は結合位置を表す。

[化26-1]



A1

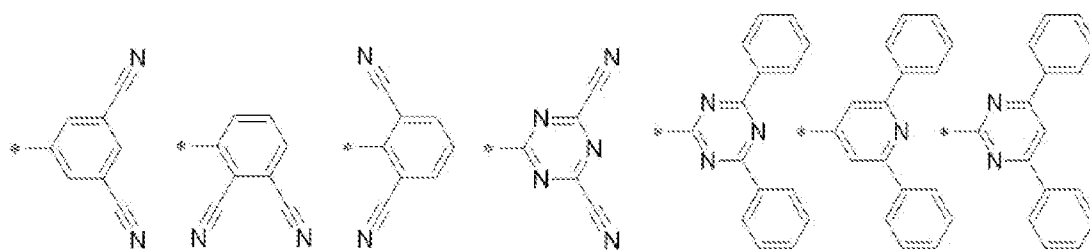
A2

A3

A4

A5

A6



A7

A8

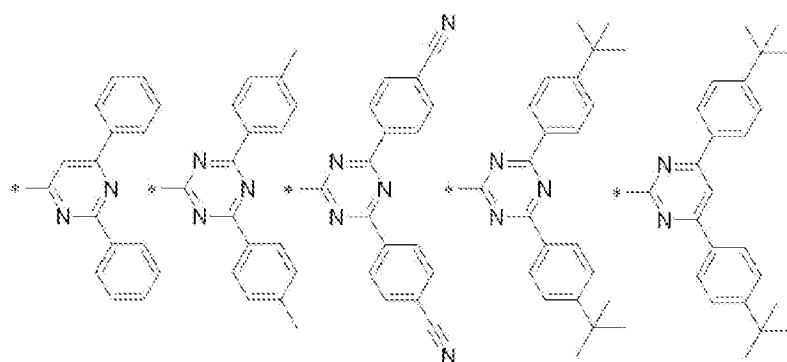
A9

A10

A11

A12

A13



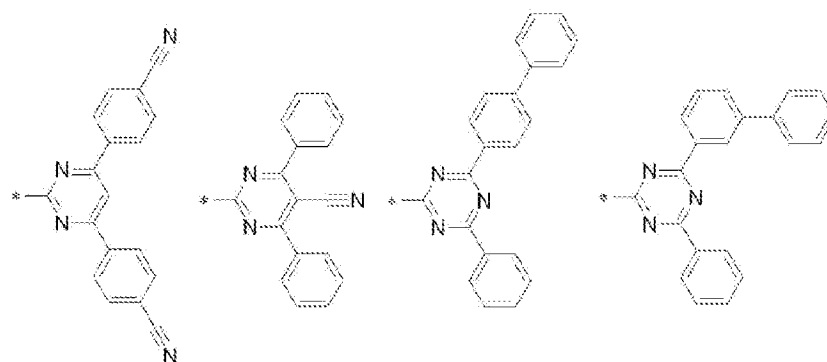
A14

A15

A16

A17

A18



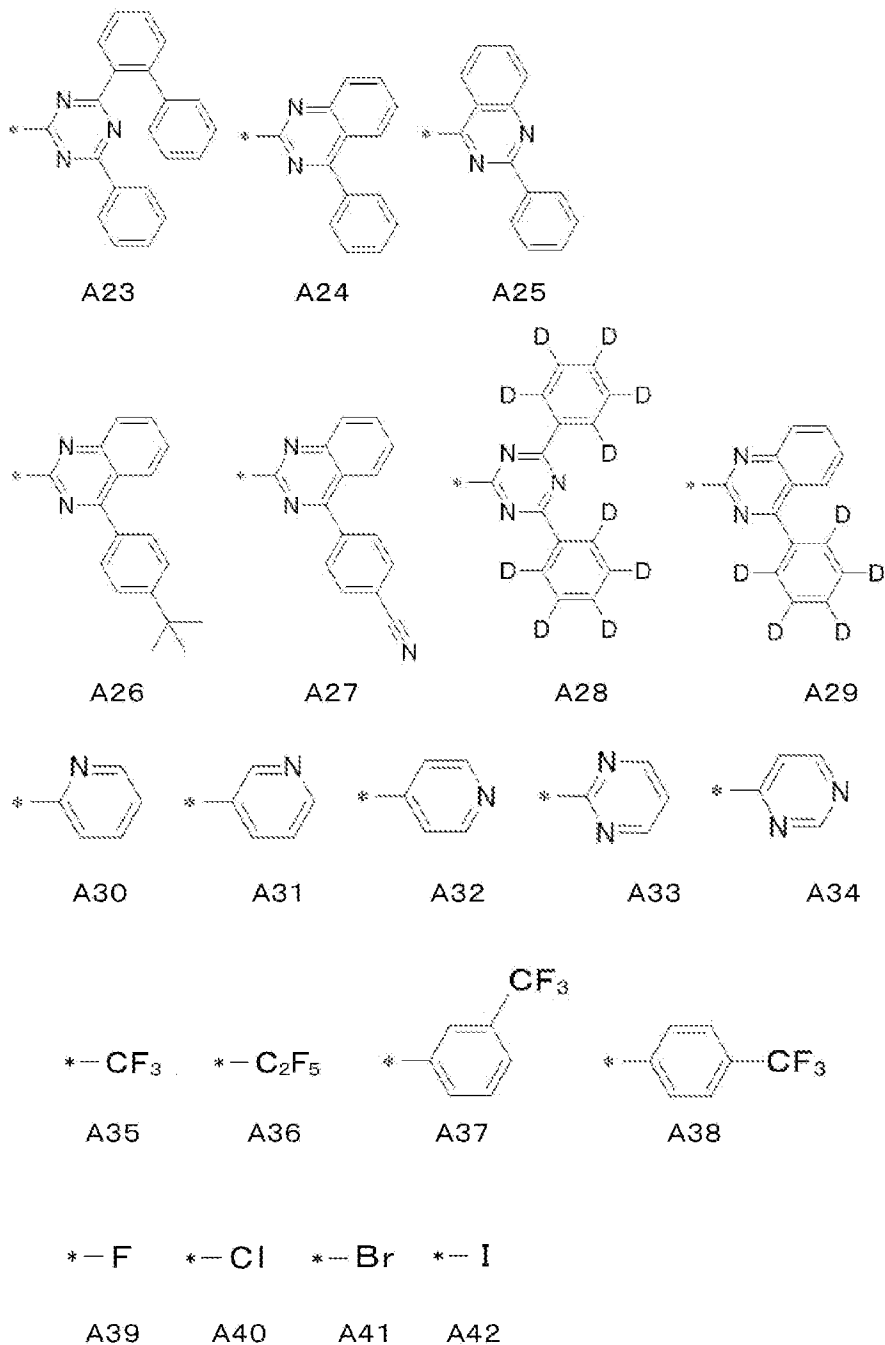
A19

A20

A21

A22

[化26-2]



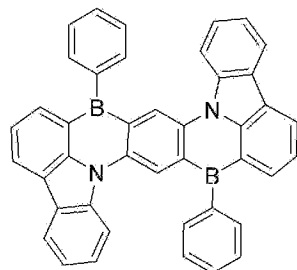
[0070] なお、 X^1 が窒素原子であって、 R^7 と R^8 が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{21} と R^{22} が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して単結合を形成しているとき、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換もしくは無置換のアリール基であるか、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 のいずれかが互いに結合して芳香環（縮合していてもよい置換もしくは無置換のベンゼン環）または複素芳香環（好ましくは

縮合していてもよい置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環、縮合していてもよい置換もしくは無置換のベンゾチオフェンのチオフェン環）を形成している。

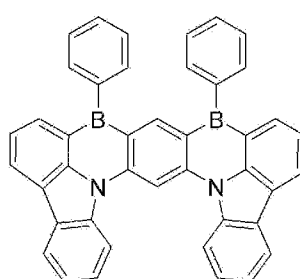
[0071] 一般式（16）の X^1 が窒素原子であるとき、本発明の化合物は下記の骨格（16a）を有する。一般式（16）の X^2 が窒素原子であるとき、本発明の化合物は下記の骨格（16b）を有する。

[化27]

骨格（16a）



骨格（16b）

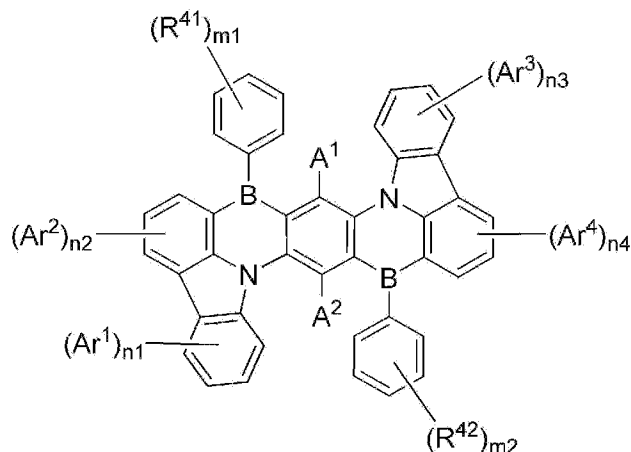


[0072] 骨格（16a）および（16b）における各水素原子は、重水素原子または置換基に置換されていてもよい。また、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していてもよい。詳細については、一般式（16）の対応する $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。骨格（16a）および（16b）においてホウ素原子に結合しているフェニル基がいずれもメシチル基、2，6-ジイソプロピルフェニル基または2，4，6-トリイソプロピルフェニル基に置換されている化合物などを例示することができる。本発明の一態様では、骨格（16a）および（16b）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0073] 骨格（16a）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（16a）で表される化合物を例示することができる。

一般式（16a）

[化28]



[0074] 一般式(16a)において、 $Ar^1 \sim Ar^4$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^{41} および R^{42} は、各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 $m1$ および $m2$ は各々独立に0～5の整数を表し、 $n1$ および $n3$ は各々独立に0～4の整数を表し、 $n2$ および $n4$ は各々独立に0～3の整数を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

本発明の一態様では、 $n1 \sim n4$ は各々独立に0～2の整数を表す。本発明の好ましい一態様では、 $n1 \sim n4$ の少なくとも1つは1以上であり、好ましくは $n1$ および $n2$ の少なくとも1つは1以上であり、 $n3$ および $n4$ の少なくとも1つは1以上である。本発明の一態様では、 $n1$ および $n3$ が各々独立に1または2であり、 $n2$ および $n4$ が0である。本発明の一態様では $n2$ および $n4$ が各々独立に1または2であり、 $n1$ および $n3$ が0である。本発明の一態様では、 $n1 \sim n4$ は各々独立に1または2である。本発明の一態様では、 $n1$ と $n3$ は等しく、 $n2$ と $n4$ は等しい。本発明の一態様では、 $n1$ と $n3$ は1であり、 $n2$ と $n4$ は0である。本発明の一態様では、 $n1$ と $n3$ は0であり、 $n2$ と $n4$ は1である。本発明の一態様では、 $n1 \sim n4$ はいずれも1である。 $Ar^1 \sim Ar^4$ の結合位置は、カルバゾール環の3, 6位の少なくとも一つであってもよいし、2, 7位の少なくとも一つであってもよいし、1, 8位の少なくとも一つであってもよいし、4,

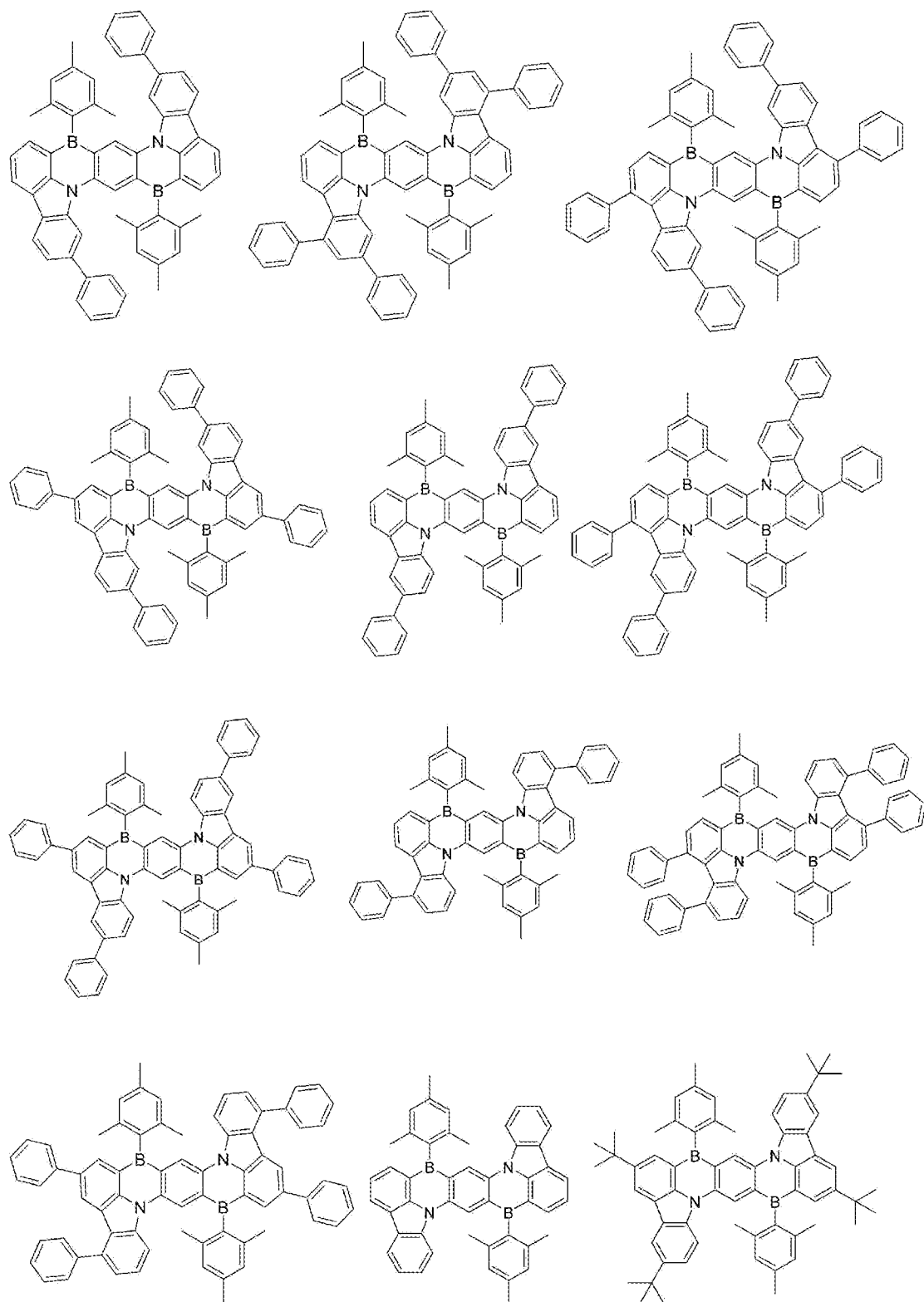
5位の少なくとも一つであってもよい。 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ の結合位置は、カルバゾール環の3, 6位の両方であってもよいし、2, 7位の両方であってもよいし、1, 8位の両方であってもよいし、4, 5位の両方であってもよい。例えば、3, 6位の少なくとも一つを好ましく選択することができ、あるいは、3, 6位の両方をさらに好ましく選択することができる。本発明の好ましい一態様では、 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ はすべて同一の基である。本発明の好ましい一態様では、 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基であり、より好ましくは置換もしくは無置換のフェニル基またはナフチル基であり、さらに好ましくは置換もしくは無置換のフェニル基である。置換基としては後述の置換基群A～Eのいずれかから選択される基を挙げることができるが、無置換のフェニル基も好ましい。 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ の好ましい具体例として、フェニル基、*o*-ビフェニル基、*m*-ビフェニル基、*p*-ビフェニル基、ターフェニル基を挙げることができる。

本発明の一態様では、 m_1 および m_2 は各々独立に0である。本発明の一態様では、 m_1 および m_2 は各々独立に1～5のいずれかの整数である。本発明の一態様では、 m_1 と m_2 は等しい。本発明の一態様では、 R^{4^1} および R^{4^2} は炭素数1～6のアルキル基であり、例えば炭素数1～3のアルキル基の中から選択したり、メチル基を選択したりすることができる。アルキル基の置換位置は、ホウ素原子に結合している炭素原子を1位として、2位のみ、3位のみ、4位のみ、3位と5位、2位と4位、2位と6位、2位と4位と6位などを例示することができ、少なくとも2位であることが好ましく、少なくとも2位と6位であることがより好ましい。

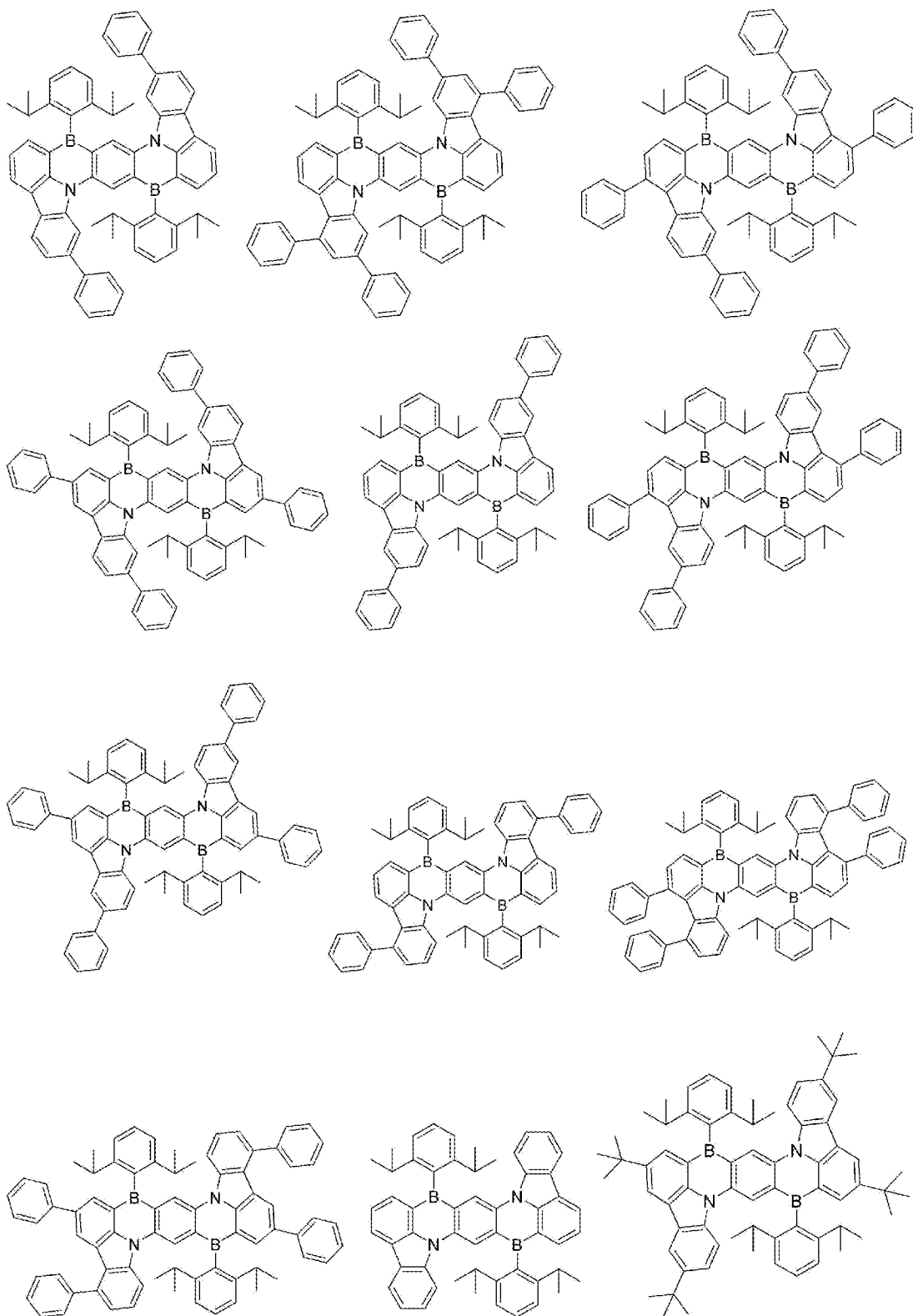
A^1 および A^2 の説明と好ましい範囲については、一般式(16)の対応する記載を参照することができる。

[0075] 以下において、一般式(16a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(16a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

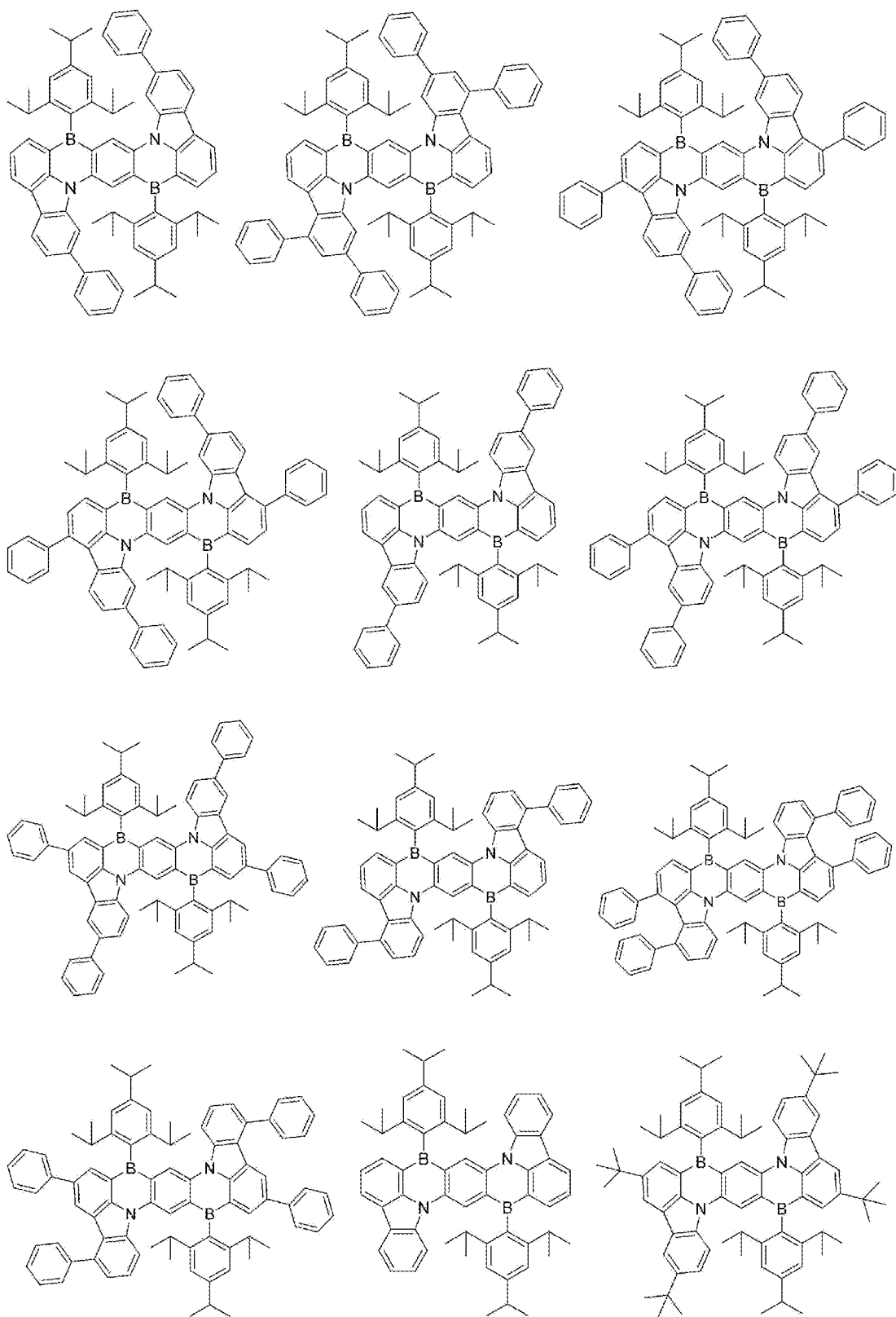
[化29-1]



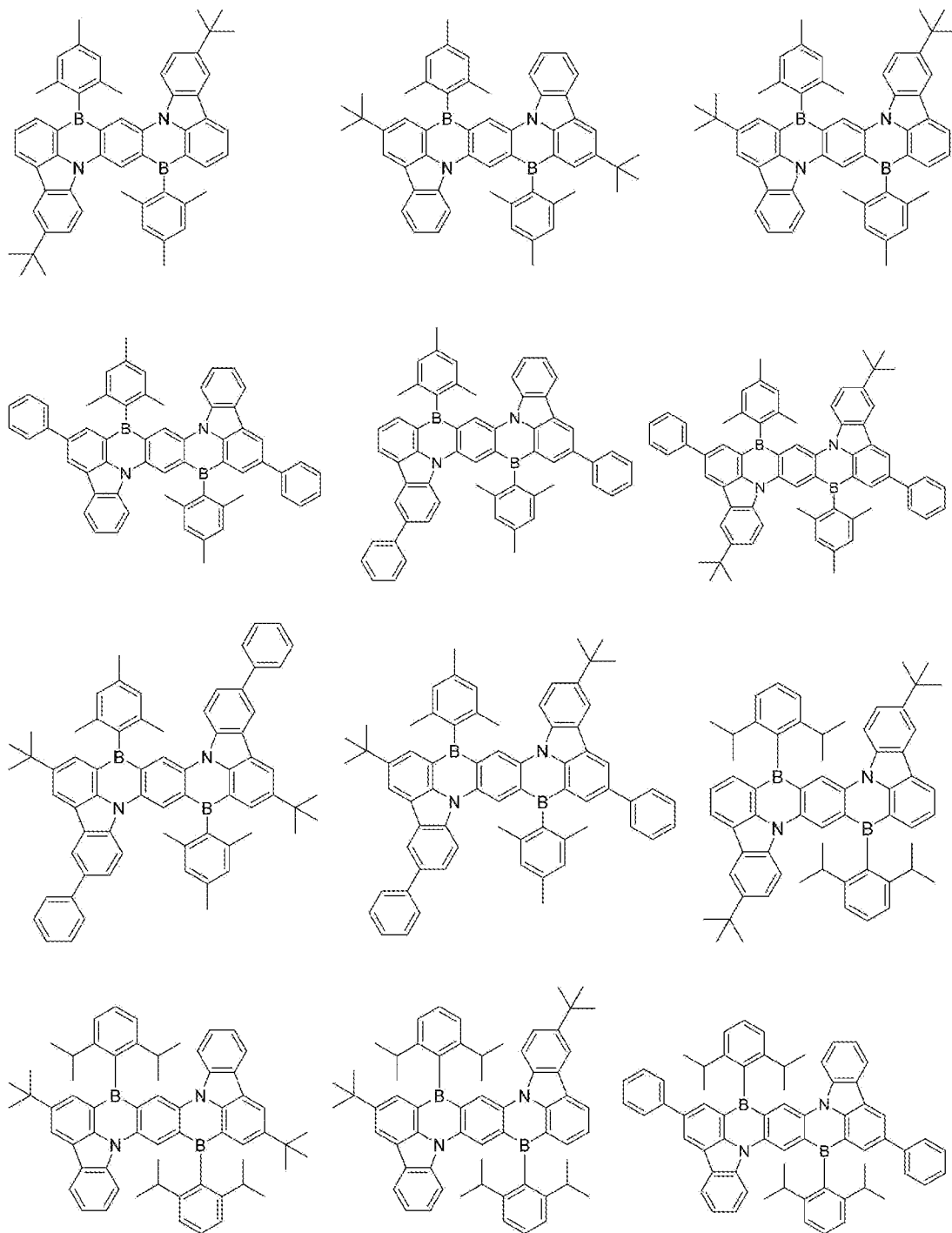
[化29-2]



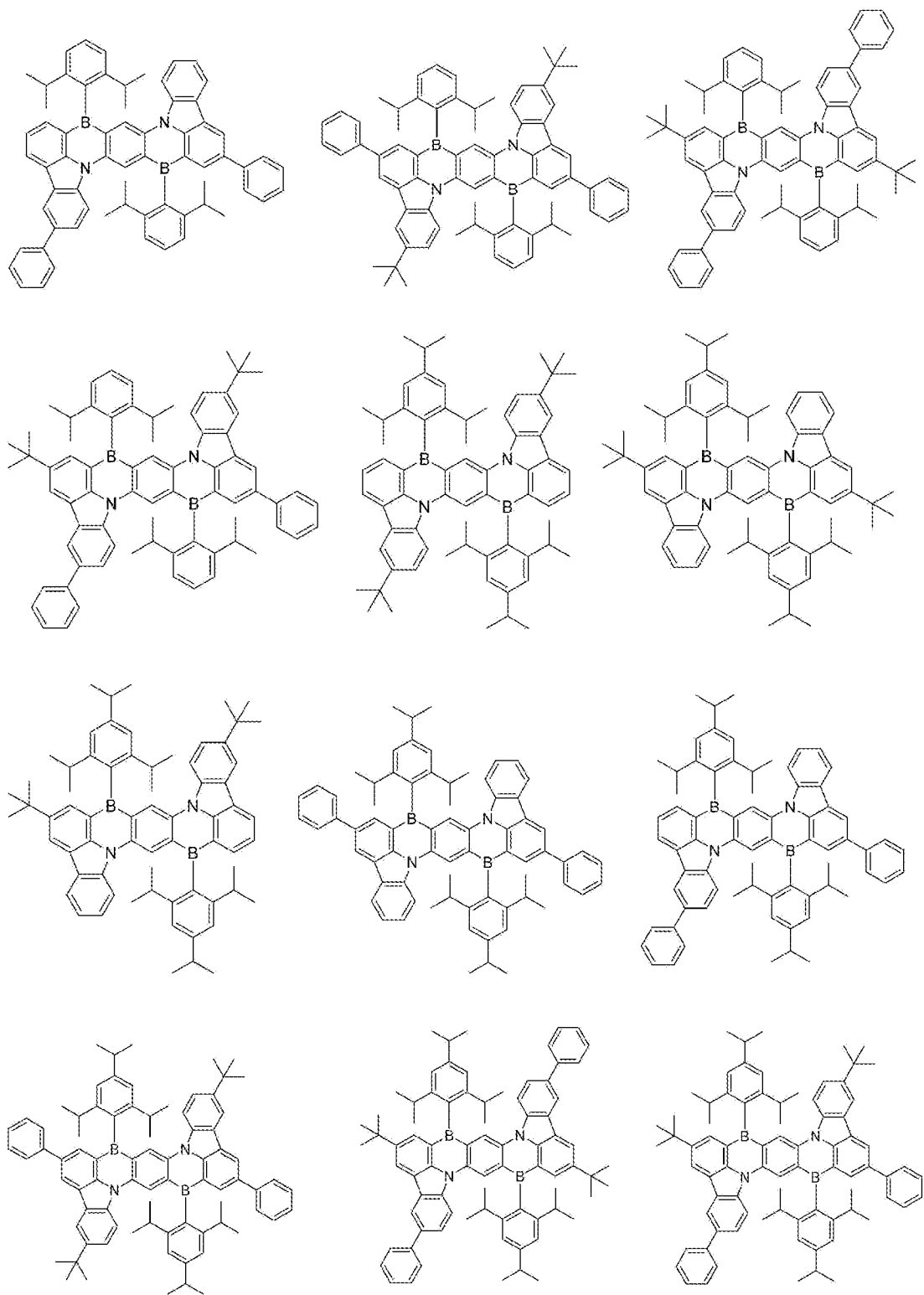
[化29-3]



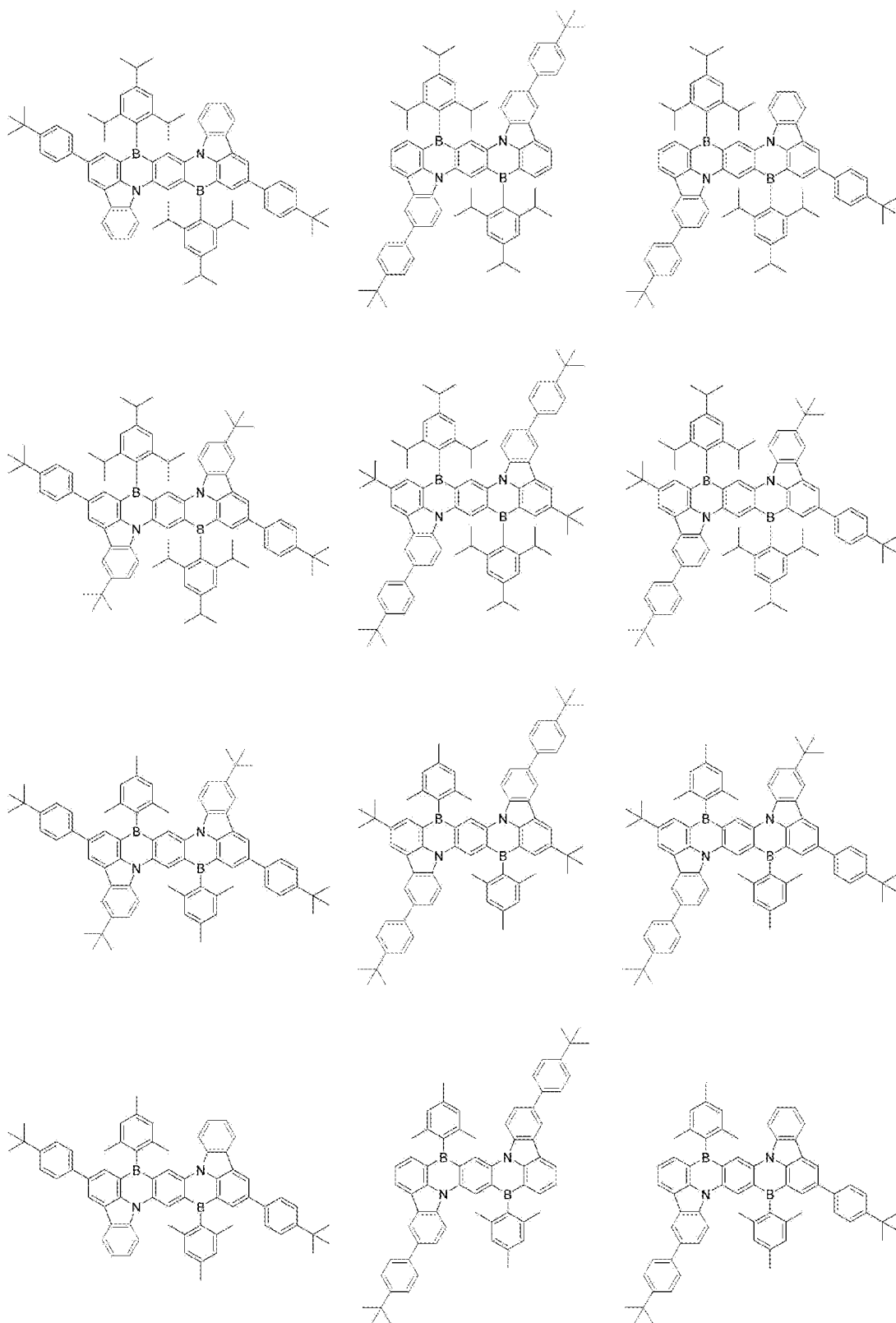
[化29-4]



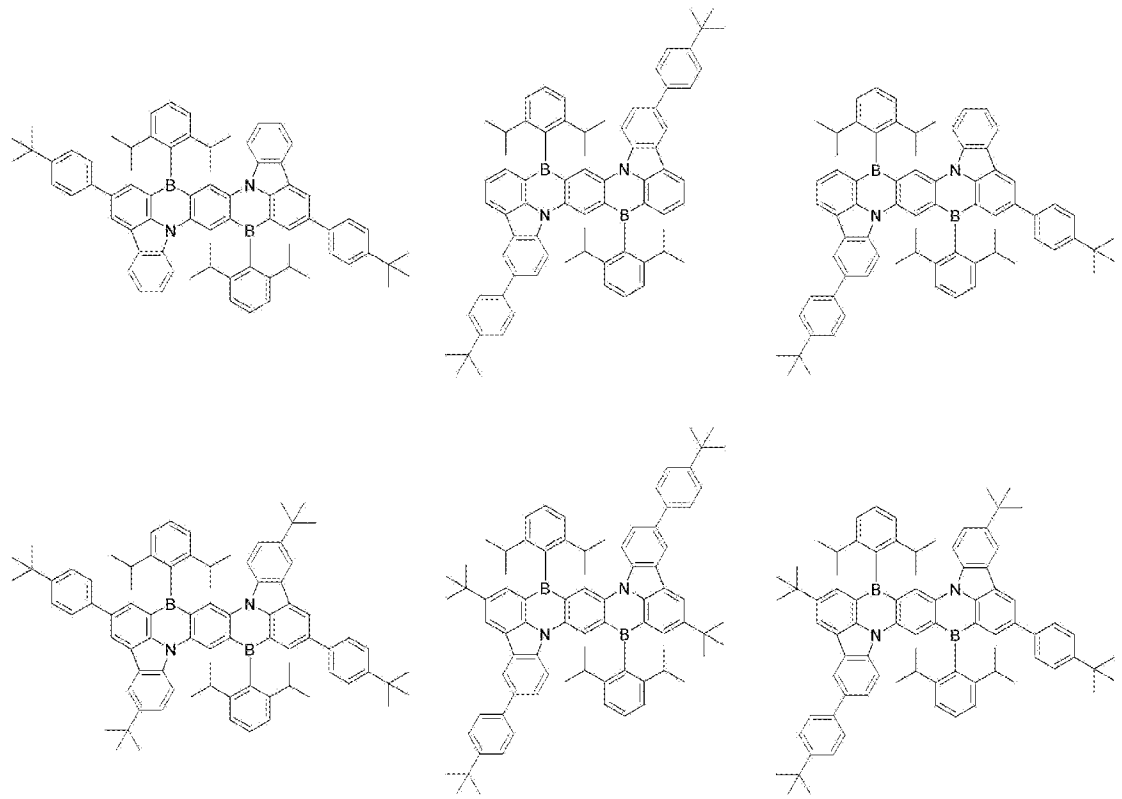
[化29-5]



[化29-6]



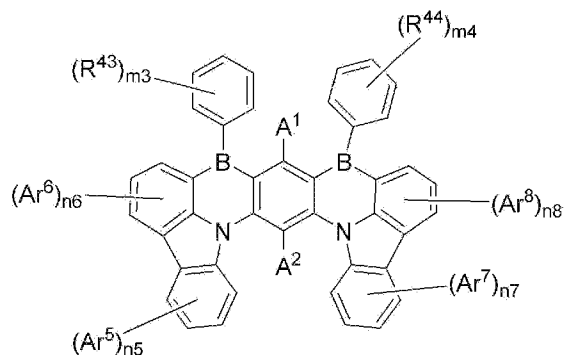
[化29-7]



[0076] 骨格(16b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(16b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(16b)

[化30]

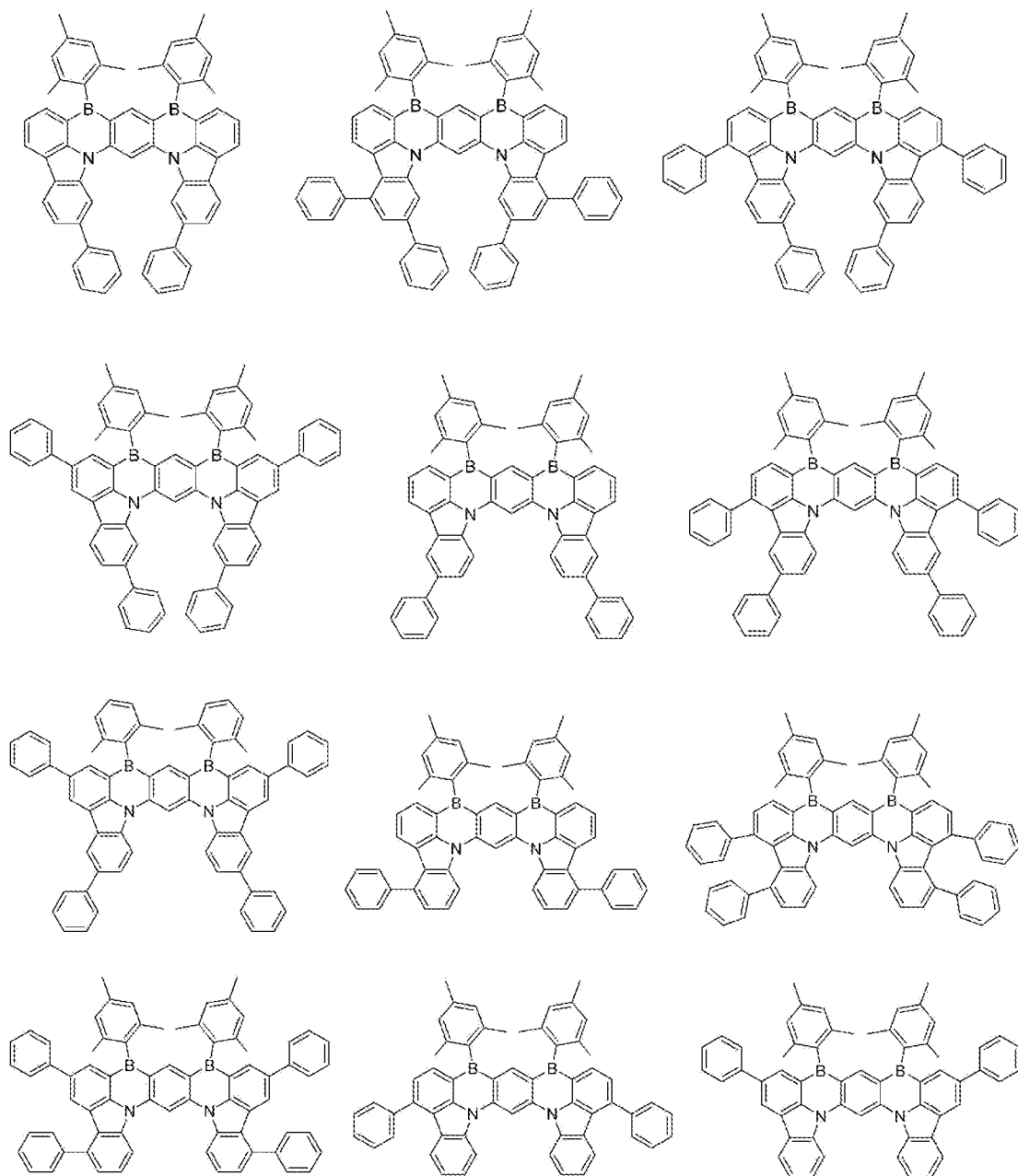


[0077] 一般式(16b)において、 $Ar^5 \sim Ar^8$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^{43} および R^{44} は、各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 $m3$ および $m4$ は各々独立に0～5の整数を表し、 $n6$ および $n8$ は各々独立に0

～3の整数を表し、 n_5 および n_7 は各々独立に0～4の整数を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Ar^5 \sim Ar^8$ 、 R^{43} および R^{44} 、 m_3 および m_4 、 $n_5 \sim n_8$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(16a)の $Ar^1 \sim Ar^4$ 、 R^{41} および R^{42} 、 m_1 および m_2 、 $n_1 \sim n_4$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

[0078] 以下において、一般式(16b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(16b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

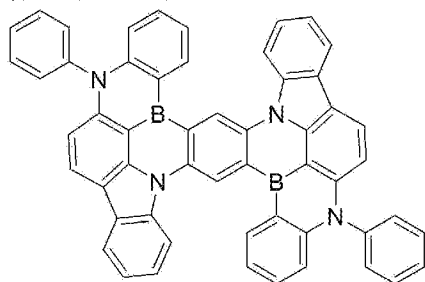
[化31]



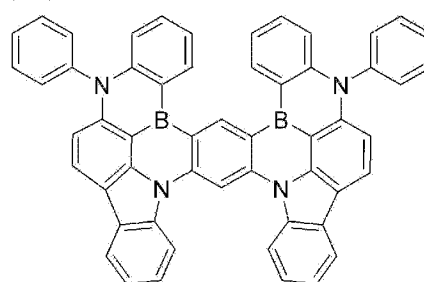
[0079] 一般式(16)の R^7 と R^8 が互いに結合してN-Phを形成するとき、本発明の化合物は X^1 が窒素原子であるときに例えば下記の骨格(17a)を有し、 X^2 が窒素原子であるときに例えば下記の骨格(17b)を有する。Phはフェニル基である。

[化32]

骨格 (17 a)



骨格 (17 b)

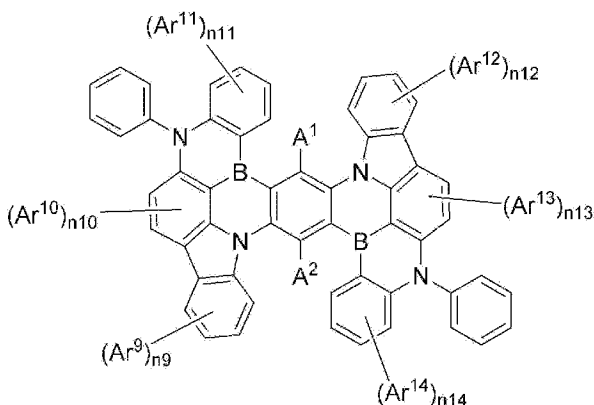


[0080] 骨格 (17 a) および (17 b) における各水素原子は、重水素原子または置換基に置換されていてもよい。また、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していてもよい。詳細については、一般式 (16) の対応する $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。骨格 (17 a) に含まれているカルバゾール部分構造を構成するベンゼン環の少なくとも1つの水素原子は、置換もしくは無置換のアリール基で置換されている。本発明の一態様では、骨格 (17 a) および (17 b) における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0081] 骨格 (17 a) を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式 (17 a) で表される化合物を例示することができる。

一般式 (17 a)

[化33]



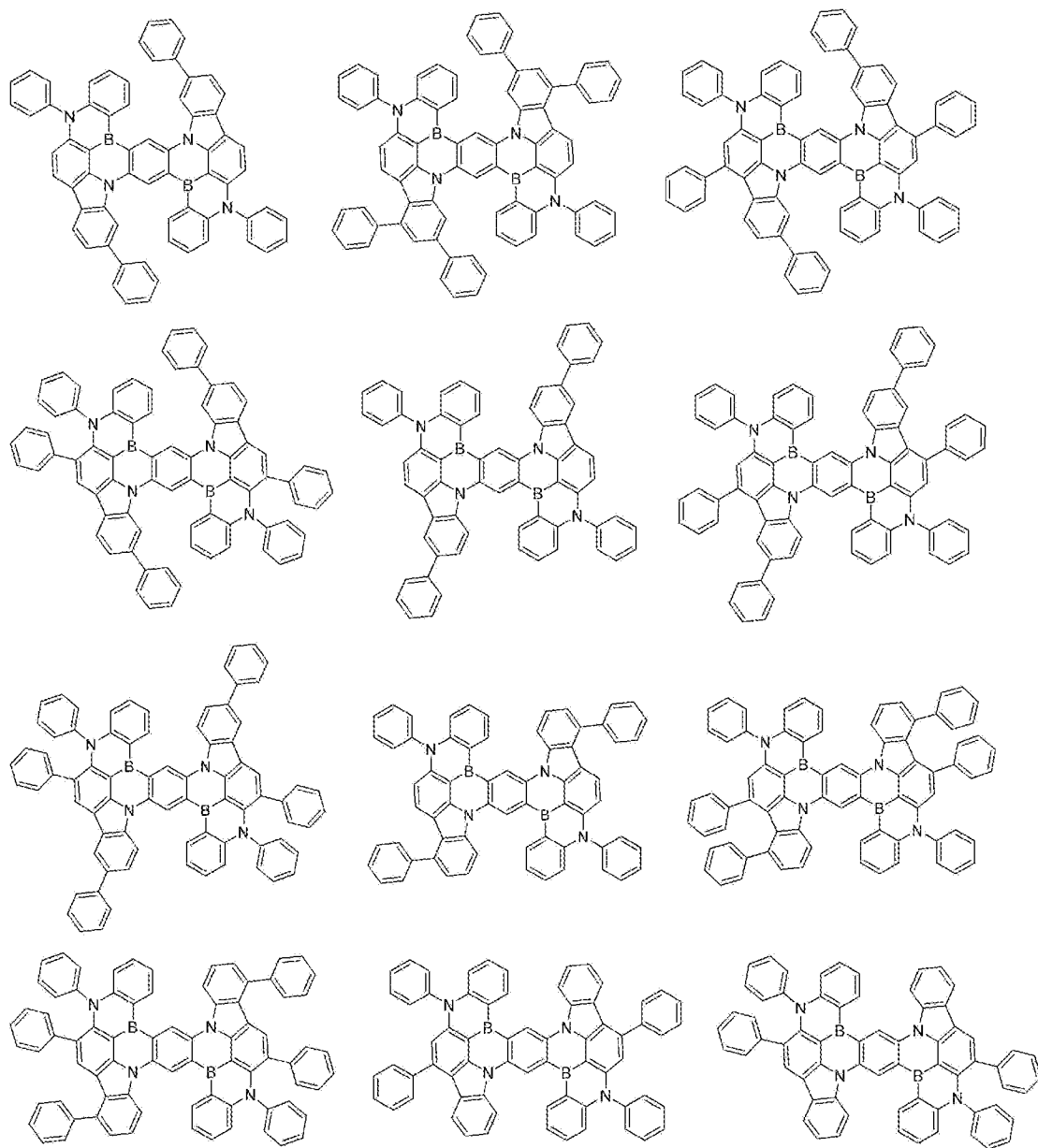
[0082] 一般式 (17 a) において、 $Ar^9 \sim Ar^{14}$ は各々独立に置換もしくは無置

換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 n_9 、 n_{11} 、 n_{12} 、 n_{14} は各々独立に0～4の整数を表し、 n_{10} および n_{13} は各々独立に0～2の整数を表す。ただし、 n_9 、 n_{10} 、 n_{12} 、 n_{13} のうちの少なくとも1つは1以上である。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

本発明の一態様では、 $n_9 \sim n_{14}$ は各々独立に0～2の整数を表す。本発明の一態様では、 $n_9 \sim n_{14}$ の少なくとも1つは1以上であり、例えば、 n_9 および n_{12} を1以上としたり、 n_{10} および n_{13} を1以上としたりすることができる。本発明の好ましい一態様では、 n_9 、 n_{10} 、 n_{12} 、 n_{13} の少なくとも1つは1以上である。本発明の一態様では、 n_9 および n_{12} が各々独立に1または2であり、 n_{10} 、 n_{11} 、 n_{13} 、 n_{14} が0である。本発明の一態様では n_{10} および n_{13} が各々独立に1または2であり、 n_9 、 n_{11} 、 n_{12} 、 n_{14} が0である。本発明の一態様では、 n_9 および n_{12} が各々独立に1または2であり、 n_{10} および n_{13} が各々独立に1または2であり、 n_{11} および n_{14} が0である。本発明の一態様では、 $n_9 \sim n_{14}$ はいずれも1である。 $A_{r^9} \sim A_{r^{14}}$ の結合位置は、カルバゾール環の3，6位としたり、その他の位置としたりすることができる。本発明の好ましい一態様では、 $A_{r^9} \sim A_{r^{14}}$ はすべて同一の基である。 $A_{r^9} \sim A_{r^{14}}$ の好ましい基については、 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ の対応する記載を参照することができる。 A^1 および A^2 の説明と好ましい範囲については、一般式(16)の対応する記載を参照することができる。

[0083] 以下において、一般式(17a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(17a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

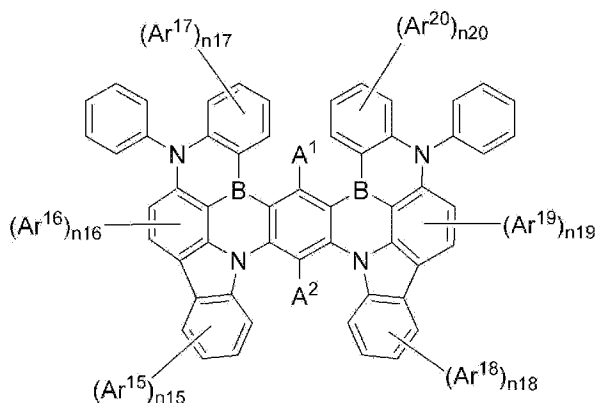
[化34]



[0084] 骨格(17b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(17b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(17b)

[化35]

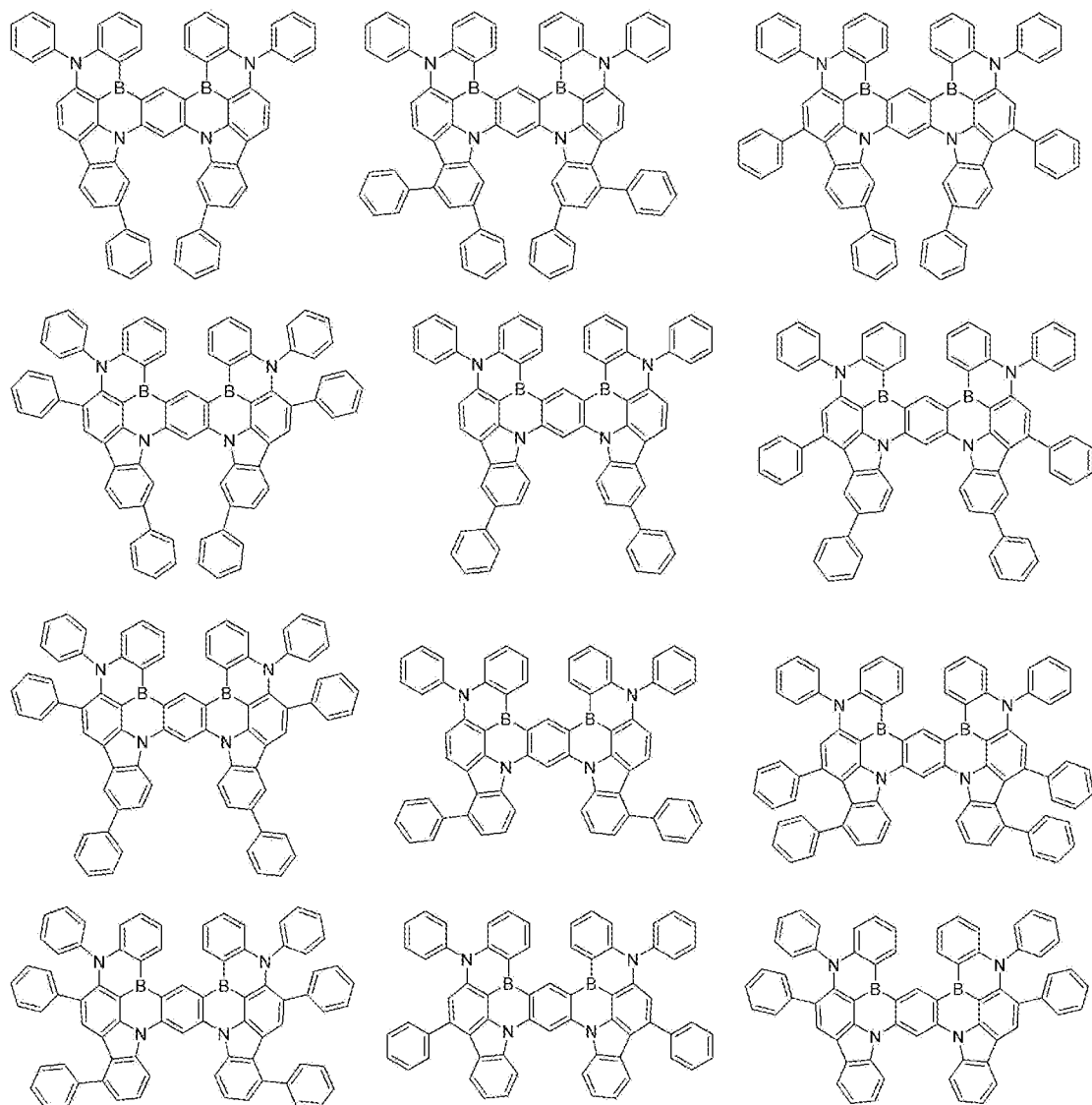


[0085] 一般式(17b)において、 $Ar^{15} \sim Ar^{20}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。

$n15$ 、 $n17$ 、 $n18$ 、 $n20$ は各々独立に0～4の整数を表し、 $n16$ および $n19$ は各々独立に0～2の整数を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Ar^{15} \sim Ar^{20}$ 、 $n15 \sim n20$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(17a)の $Ar^9 \sim Ar^{14}$ 、 $n9 \sim n14$ 、 A^1 、 A^2 の記載を順に参照することができる。

[0086] 以下において、一般式(17b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(17b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

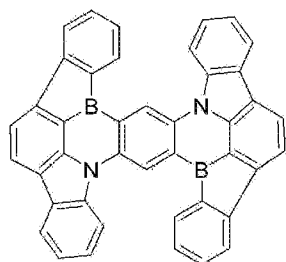
[化36]



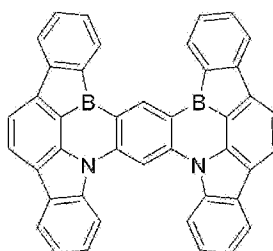
[0087] 一般式(16)の R^7 と R^8 が互いに結合して単結合を形成するとき、本発明の化合物は X^1 が窒素原子であるときに例えば下記の骨格(18a)を有し、 X^2 が窒素原子であるときに例えば下記の骨格(18b)を有する。

[化37]

骨格(18a)



骨格(18b)

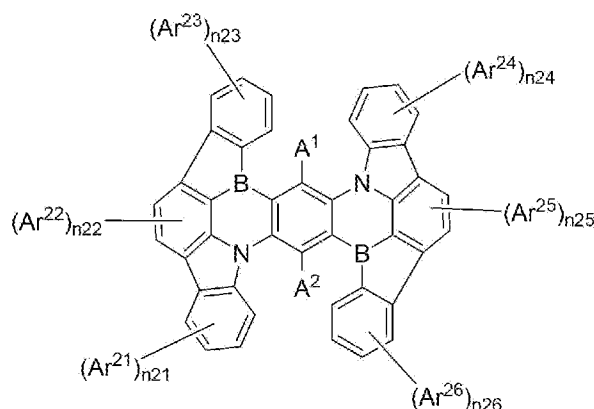


[0088] 骨格(18a)および(18b)における各水素原子は、重水素原子または置換基に置換されていてもよい。また、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していてもよい。詳細については、一般式(16)の対応する $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格(18a)および(18b)における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0089] 骨格(18a)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(18a)で表される化合物を例示することができる。

一般式(18a)

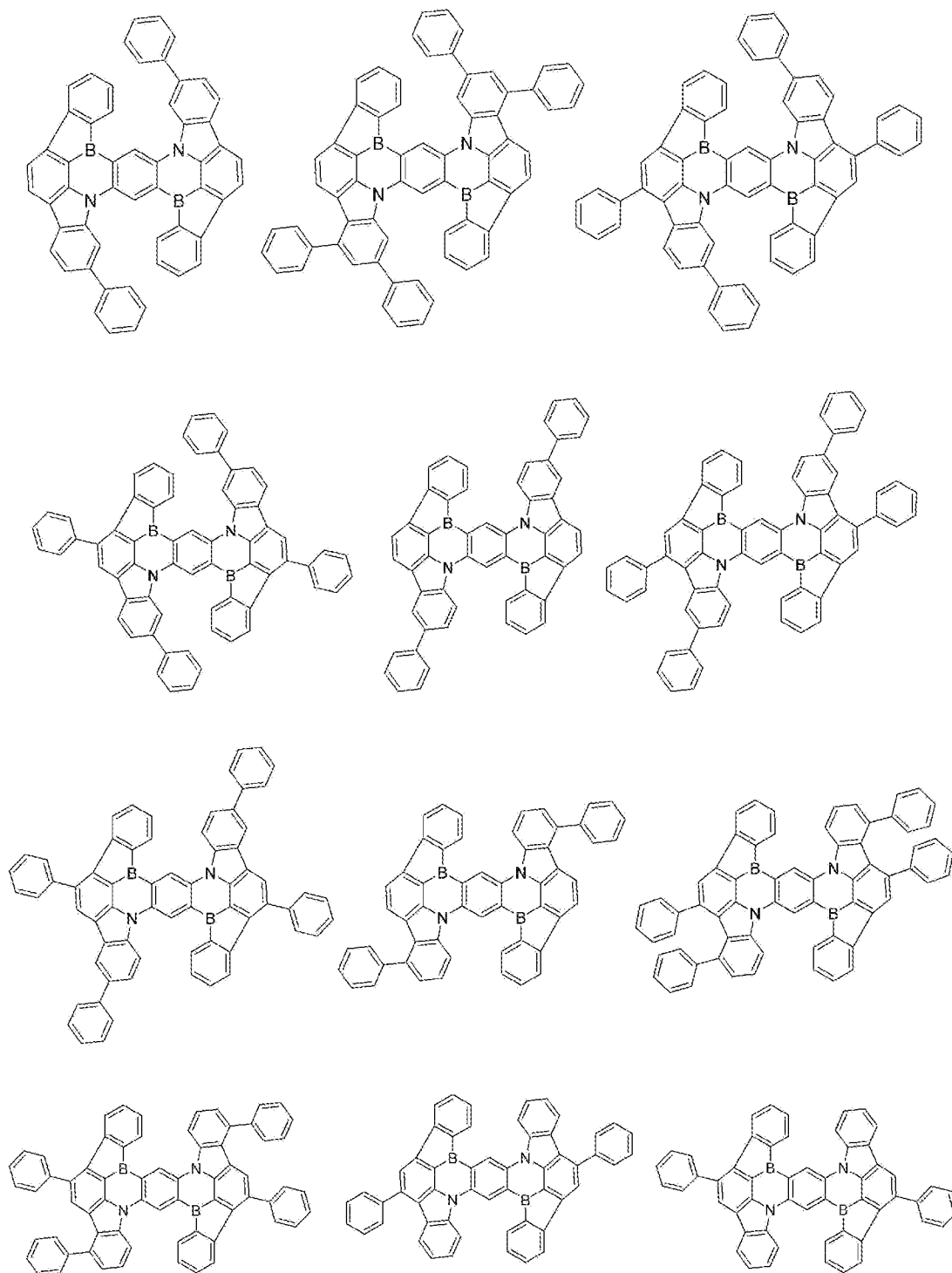
[化38]



[0090] 一般式(18a)において、 $Ar^{21} \sim Ar^{26}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 n_{21} 、 n_{23} 、 n_{24} 、 n_{26} は各々独立に0～4の整数を表し、 n_{22} および n_{25} は各々独立に0～2の整数を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Ar^{21} \sim Ar^{25}$ 、 $n_{21} \sim n_{25}$ の詳細については、一般式(17a)の $Ar^9 \sim Ar^{14}$ 、 $n_9 \sim n_{14}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

[0091] 以下において、一般式(18a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(18a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

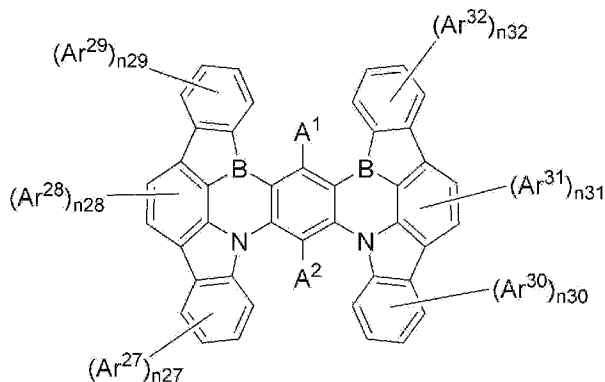
[化39]



[0092] 骨格(18b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(18b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(18b)

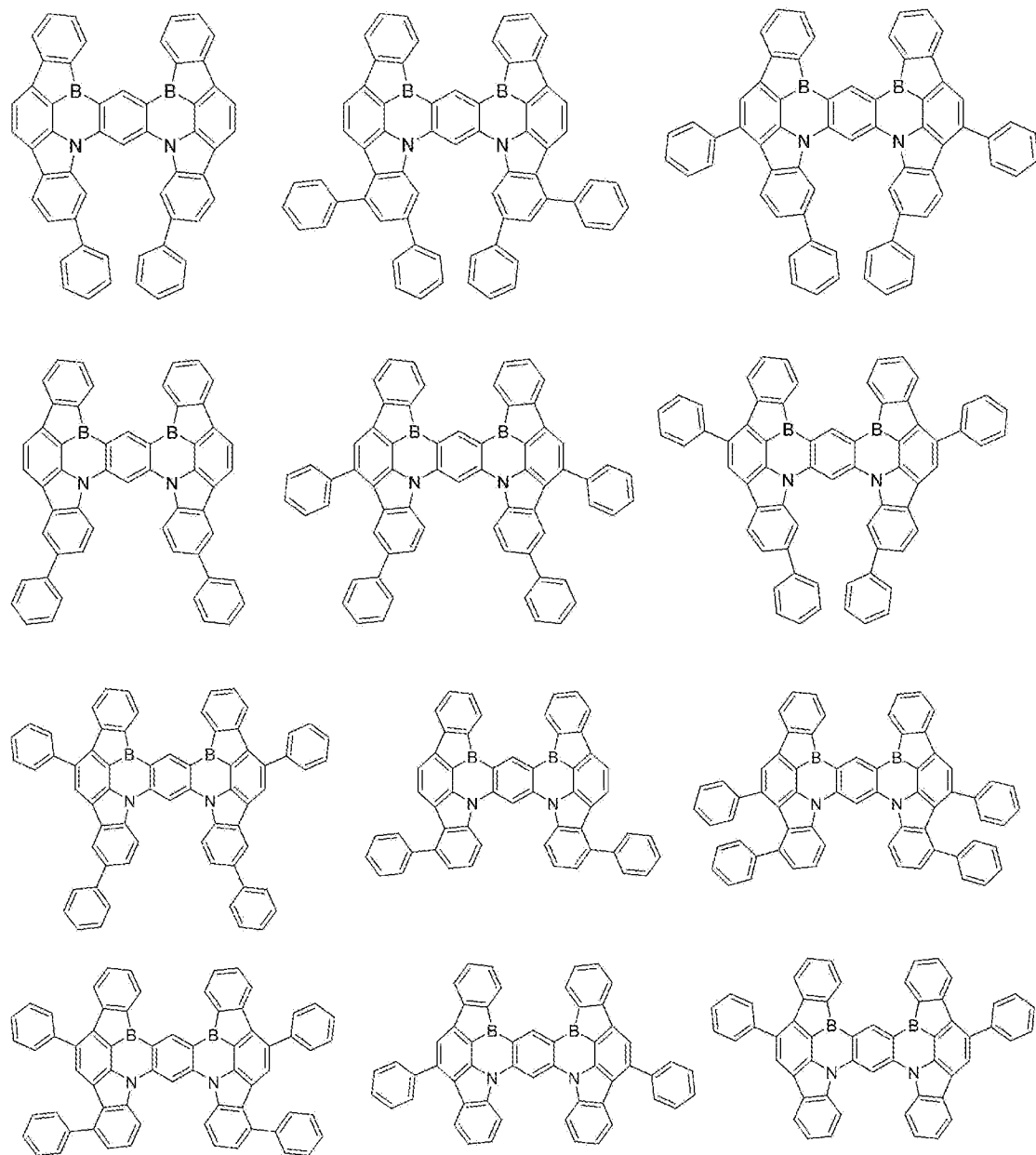
[化40]



[0093] 一般式(18b)において、 $Ar^{27} \sim Ar^{32}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 n_{27} 、 n_{29} 、 n_{30} 、 n_{32} は各々独立に0～4の整数を表し、 n_{28} および n_{31} は各々独立に0～2の整数を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Ar^{27} \sim Ar^{32}$ 、 $n_{27} \sim n_{32}$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(17b)の $Ar^{15} \sim Ar^{20}$ 、 $n_{15} \sim n_{20}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を順に参照することができる。

[0094] 以下において、一般式(18b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(18b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

[化41]



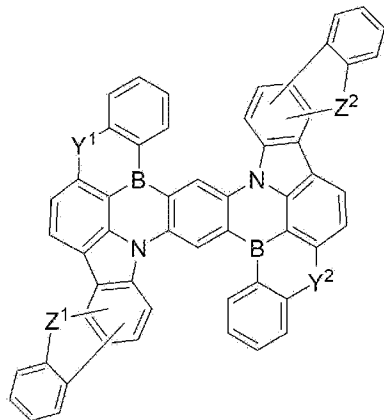
[0095] 本発明の好ましい一態様では、一般式（１６）に存在するカルバゾール部分構造を構成する２つのベンゼン環に他の環が縮合している化合物を選択する。中でも、ベンフラン環が縮合した化合物、ベンゾチオフェン環が縮合した化合物、ベンゼン環が縮合した化合物を特に好ましく選択することができる。以下において、これらの環が縮合した化合物について具体例を挙げながら説明する。

[0096] 一般式（１６）に存在するカルバゾール部分構造を構成する２つのベンゼン

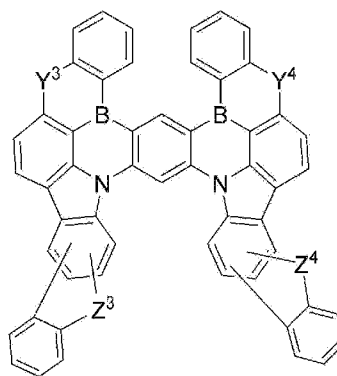
ン環のうちホウ素原子が直接結合していないベンゼン環に、ベンゾフラン環またはベンゾチオフェン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。そのような化合物の例として、下記の骨格（１９ a）を有する化合物と、下記の骨格（１９ b）を有する化合物を例示することができる。

[化42]

骨格（１９ a）



骨格（１９ b）



[0097] 骨格（１９ a）および（１９ b）において、 $Y^1 \sim Y^4$ は、各々独立に水素原子２個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。ここでいう水素原子２個は、ホウ素原子に結合している２つのベンゼン環が互いに連結していない状態を示している。 Y^1 と Y^2 は同じであり、 Y^3 と Y^4 は同じであることが好ましいが、それぞれ異なってもよい。本発明の一態様では、 $Y^1 \sim Y^4$ は単結合である。本発明の一態様では、 $Y^1 \sim Y^4$ は $N(R^{27})$ である。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。

$Z^1 \sim Z^4$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 Z^1 と Z^2 は同じであり、 Z^3 と Z^4 は同じであることが好ましいが、それぞれ異なってもよい。本発明の一態様では $Z^1 \sim Z^4$ は酸素原子である。このとき、ベンゾフランのフラン環が、（１９ a）および（１９ b）におけるカルバゾール部分構造を構成するベンゼン環に縮合している。縮合しているフラン環の向きは制限されない。本発明の一態様では $Z^1 \sim Z^4$ は硫黄原子である。このとき、ベンゾチオフェンのチオフェン環が、（１９ a）および（１９ b）におけるカルバゾール部分構造を構成するベンゼン環に縮合している。縮合している

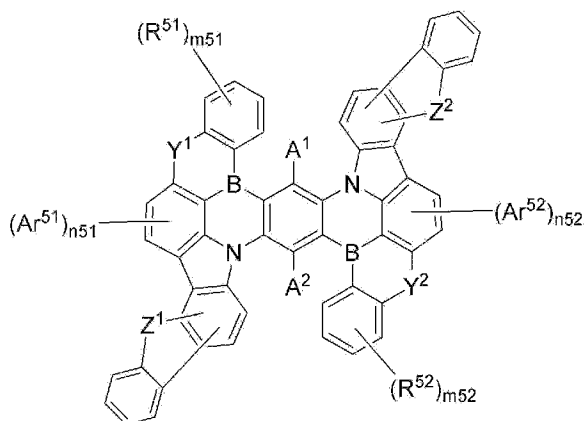
チオフェン環の向きは制限されない。

骨格(19a)および(19b)における各水素原子は、重水素原子または置換基に置換されていてもよい。また、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していてもよい。詳細については、一般式(16)の対応する $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格(19a)および(19b)における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0098] 骨格(19a)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(19a)で表される化合物を例示することができる。具体例中のXは酸素原子または硫黄原子であり、Xが酸素原子である化合物とXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。以降の他の一般式で表される化合物の具体例中のXも同じ意味を表す。

一般式(19a)

[化43]



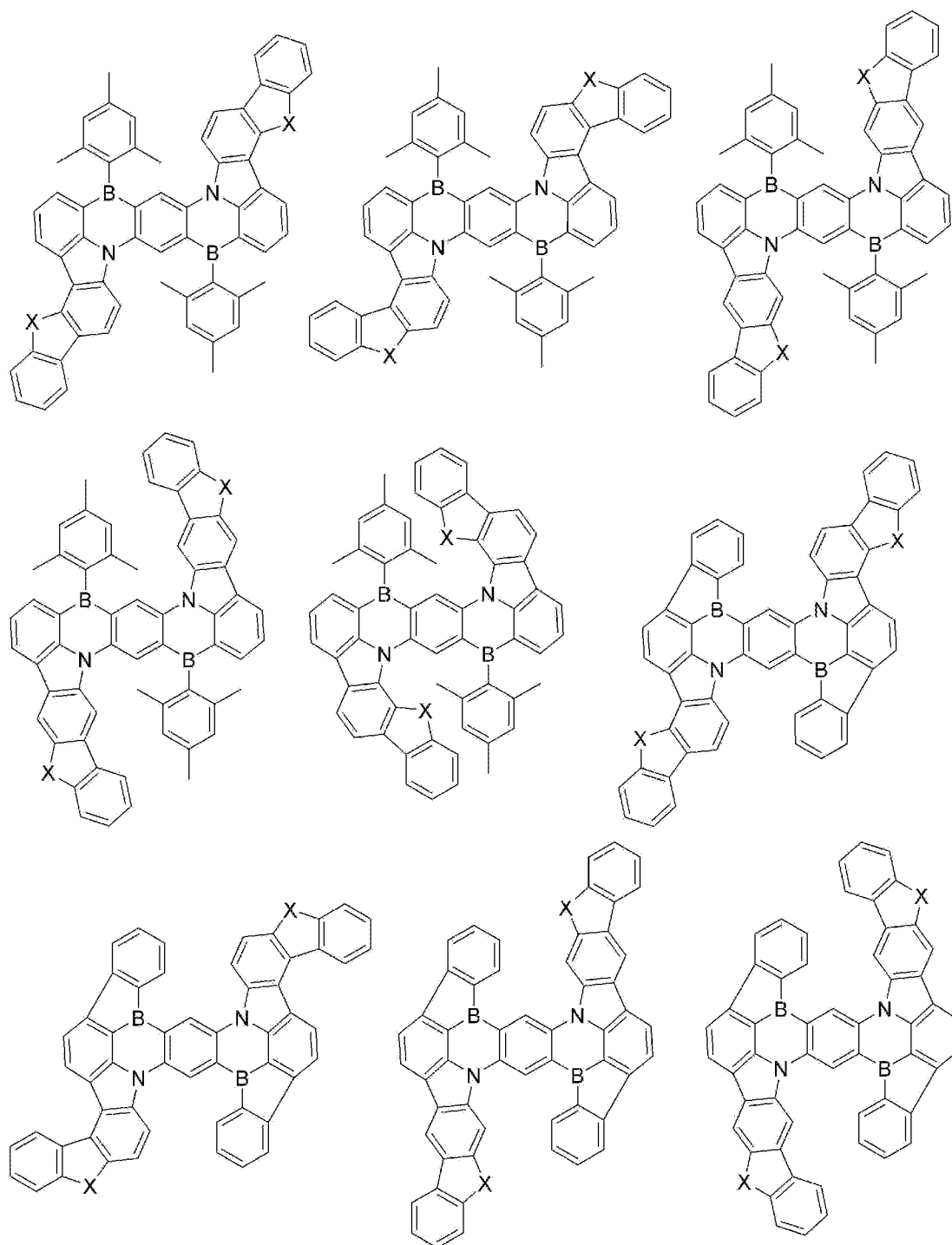
[0099] 一般式(19a)において、 Ar^{51} および Ar^{52} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^{51} および R^{52} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{51} および m_{52} は各々独立に0～4の整数を表す。 n_{51} および n_{52} は各々独立に0～2の整数を表す。 $Y^1 \sim Y^4$ は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Z^1 \sim Z^4$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A

²は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

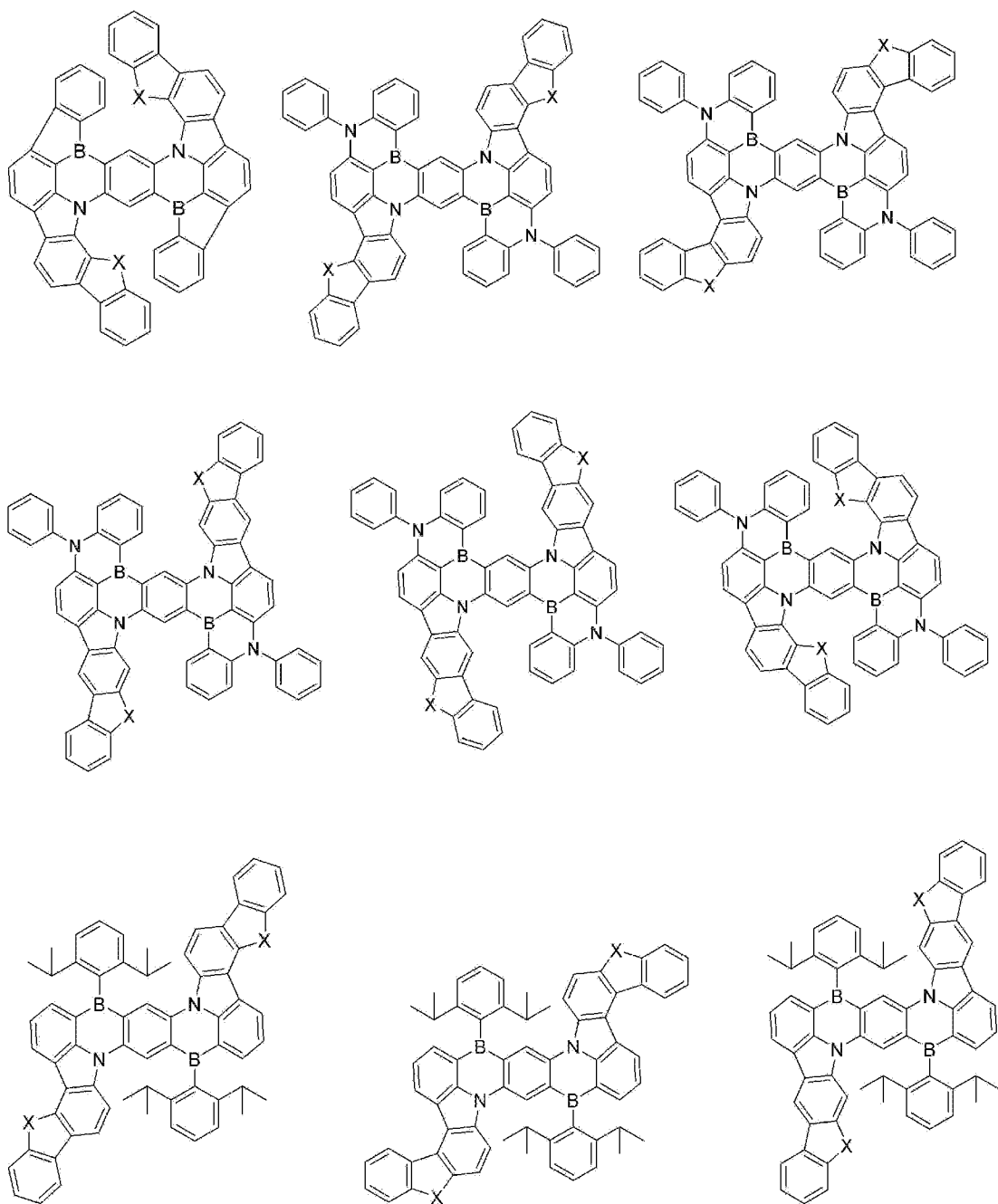
本発明の一態様では、 n_{51} と n_{52} は同じ数である。例えば、 n_{51} と n_{52} は0であってもよく、 n_{51} と n_{52} は1であってもよい。本発明の一態様では、 m_{51} と m_{52} は同じ数である。本発明の一態様では、 m_{51} と m_{52} は0～3の整数である。例えば、 m_{51} と m_{52} は0であってもよく、 m_{51} と m_{52} は1であってもよく、 m_{51} と m_{52} は2であってもよく、 m_{51} と m_{52} は3であってもよい。 Ar^{51} 、 Ar^{52} 、 R^{51} 、 R^{52} 、 A^1 、 A^2 の好ましい基については、一般式(16a)の $Ar^1 \sim Ar^4$ 、 $R^{41} \sim R^{42}$ 、 A^1 、 A^2 の対応する記載を参照することができる。

[0100] 以下において、一般式(19a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(19a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

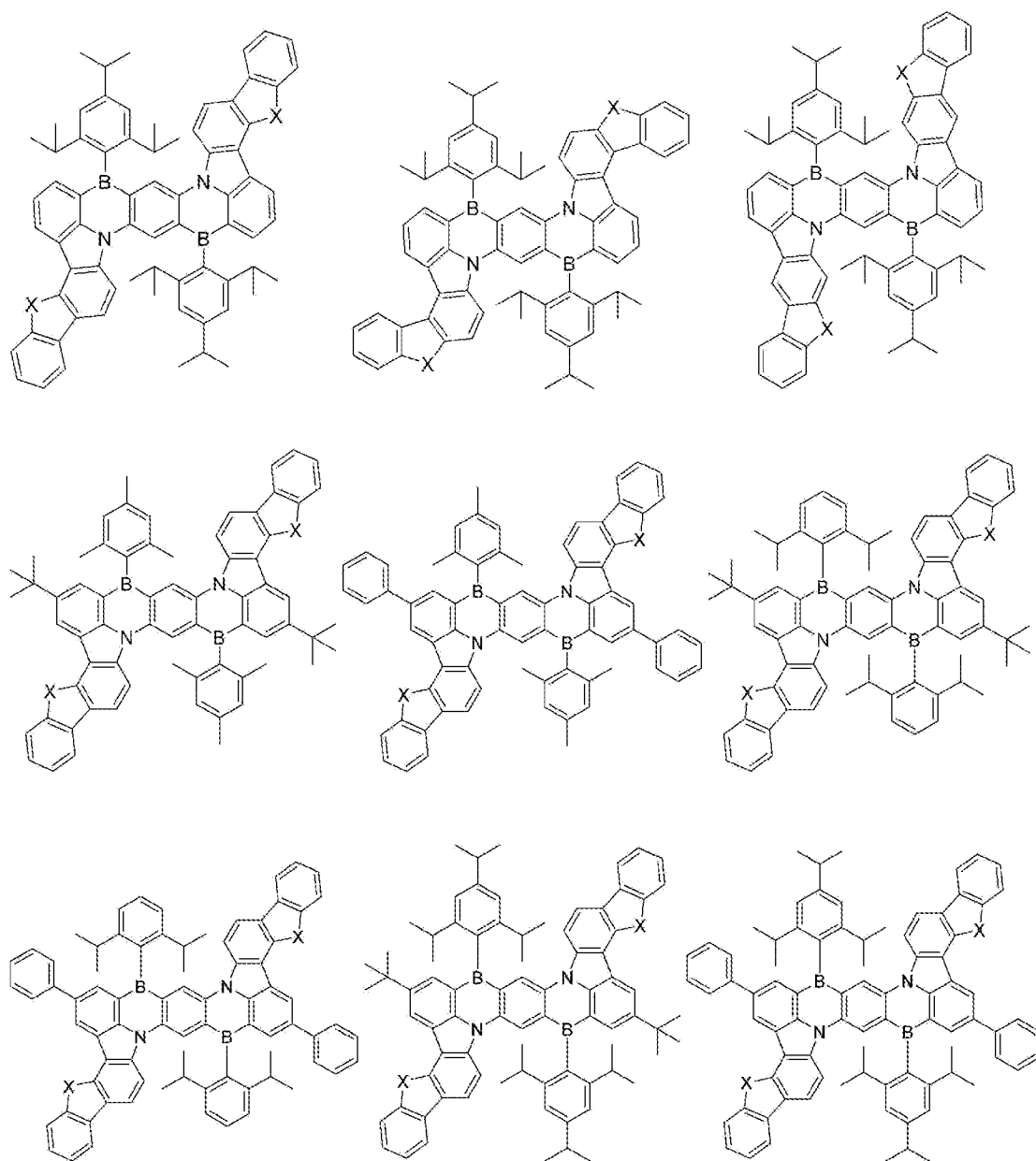
[化44-1]



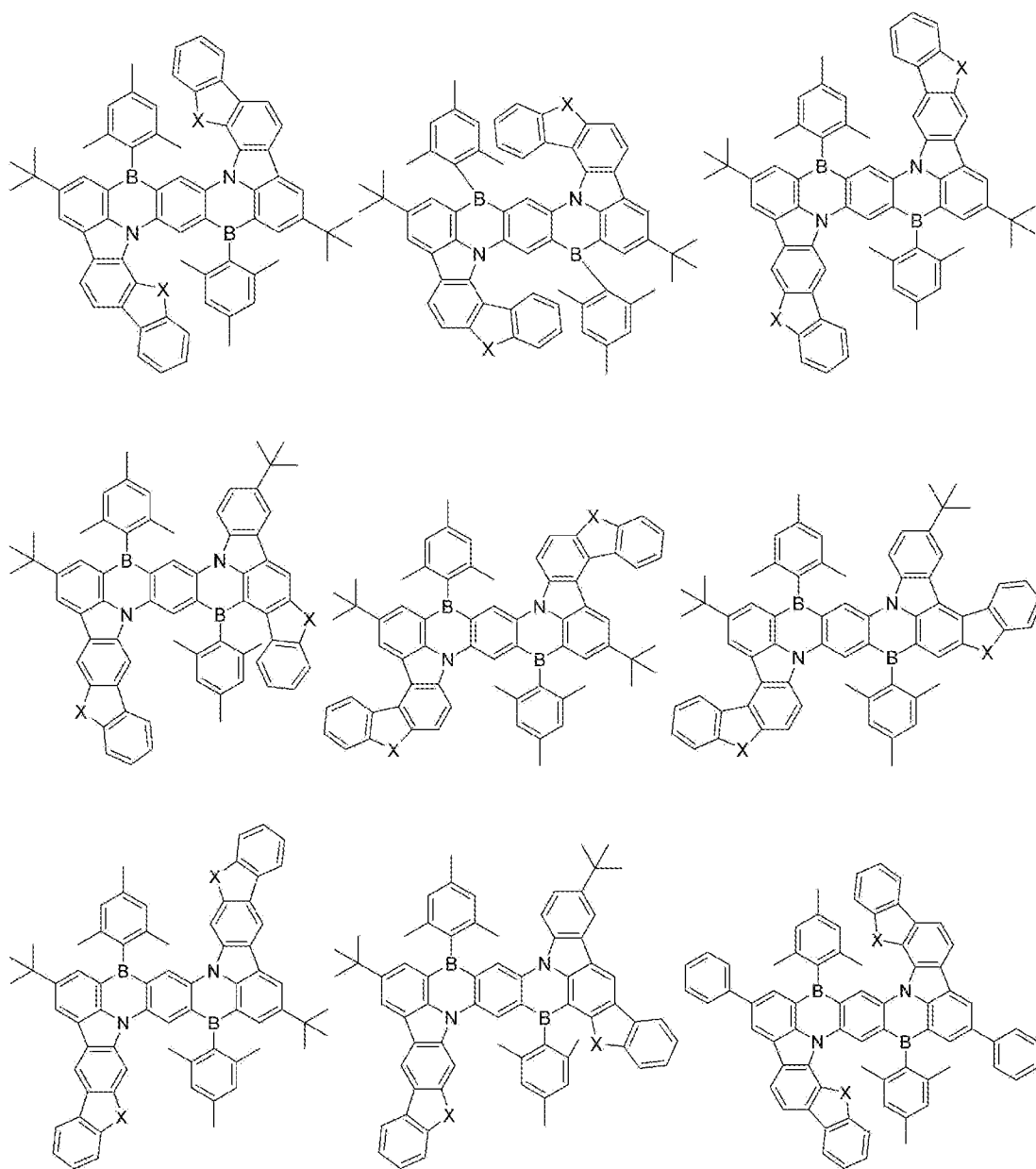
[化44-2]



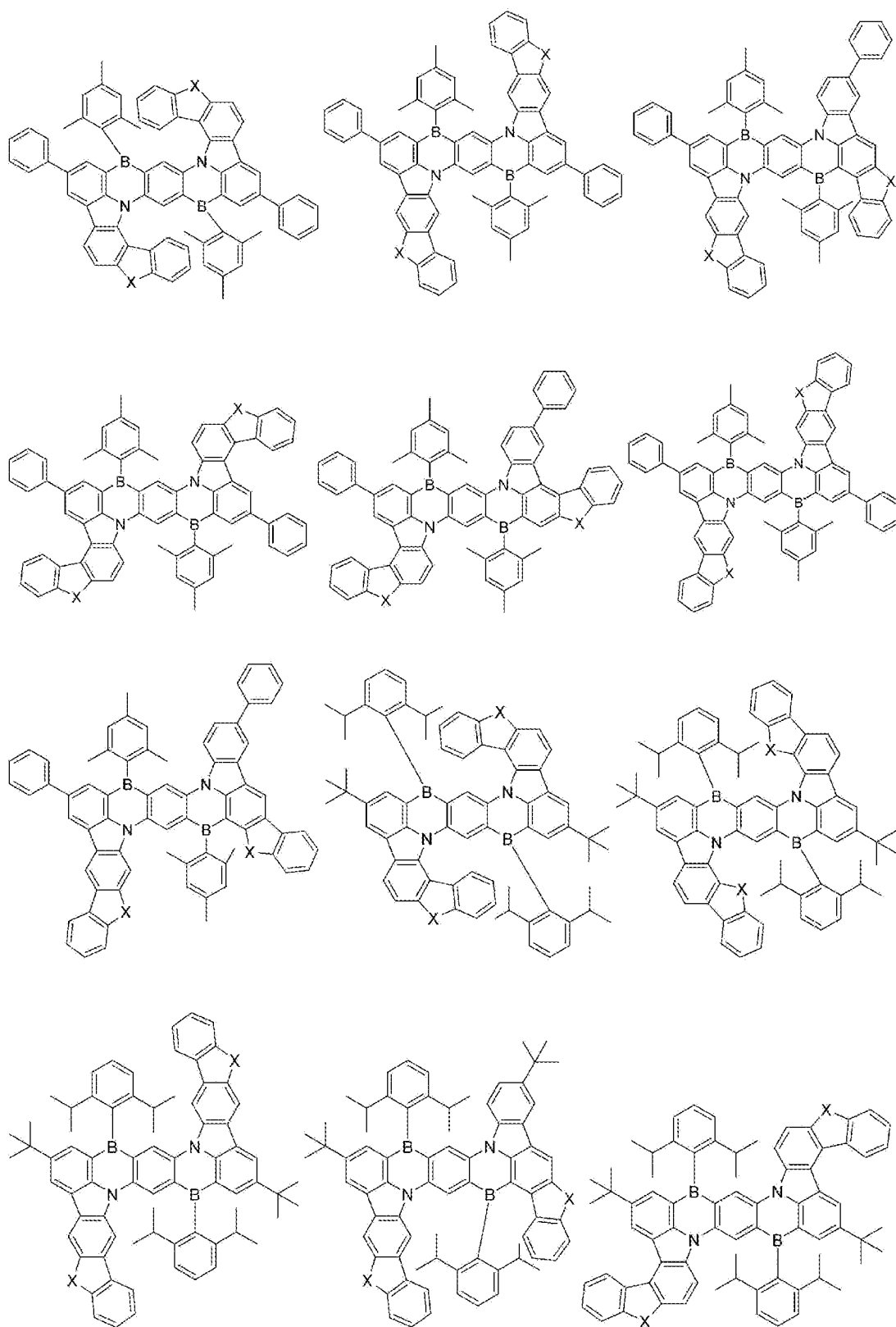
[化44-3]



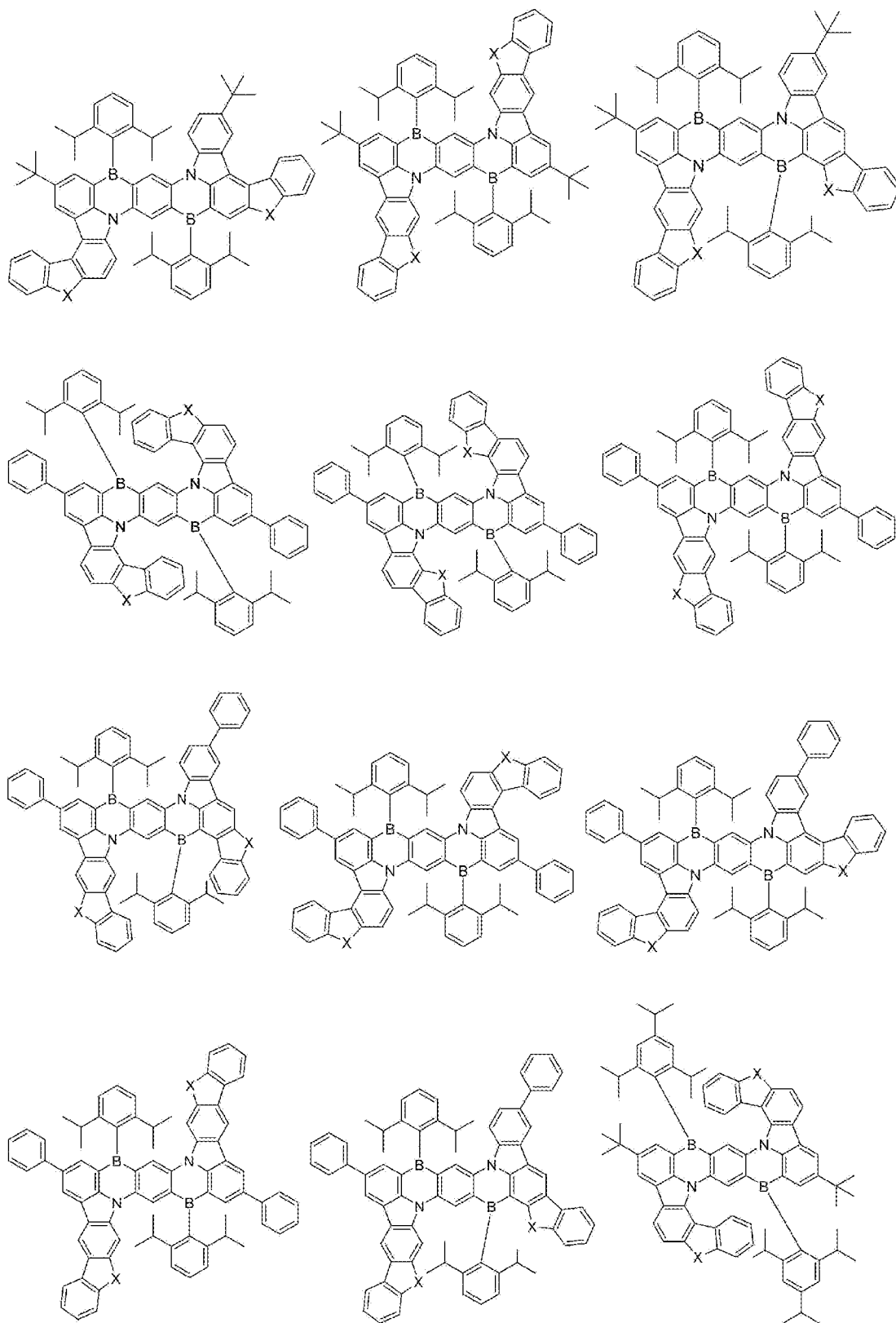
[化44-4]



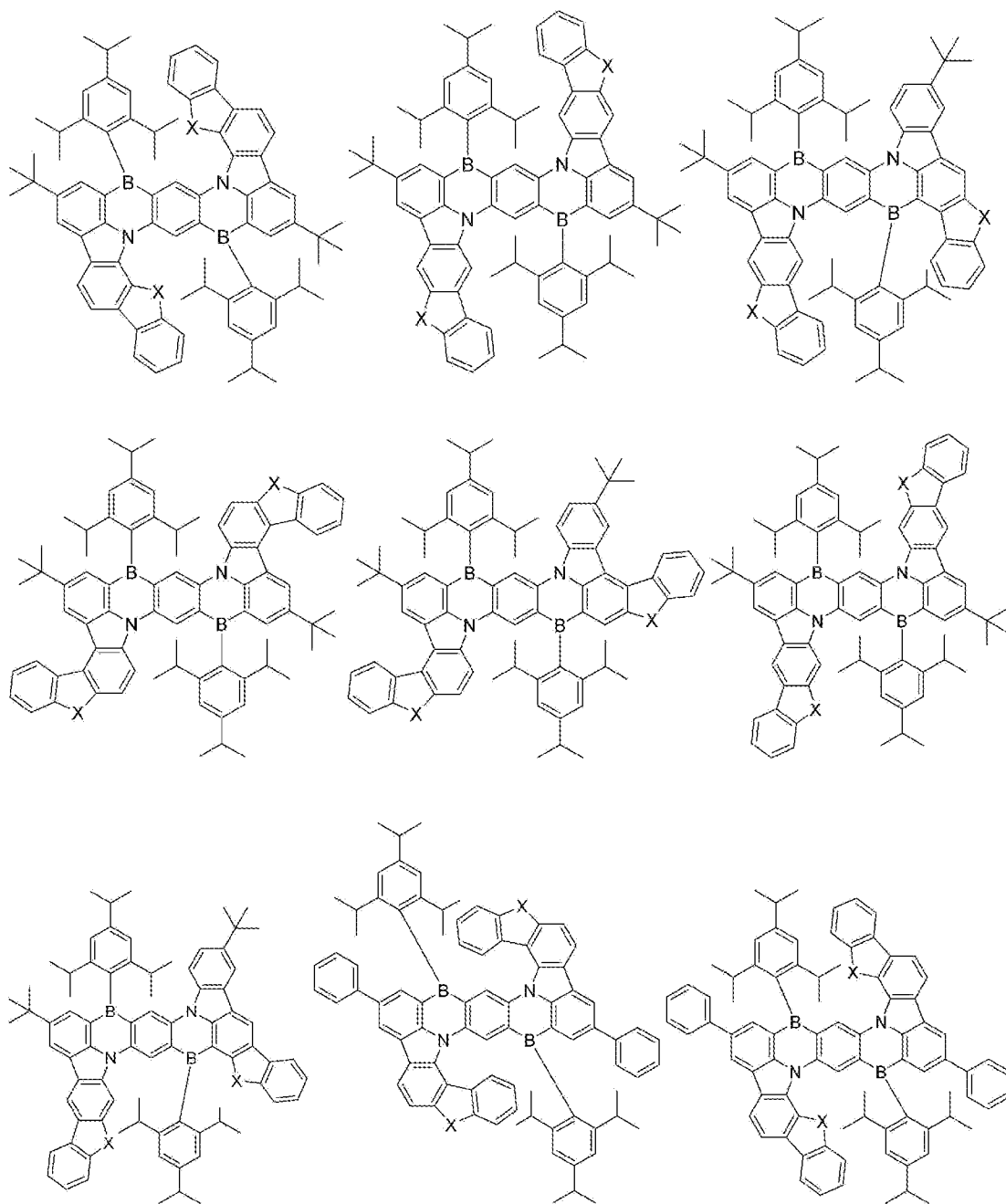
[化44-5]



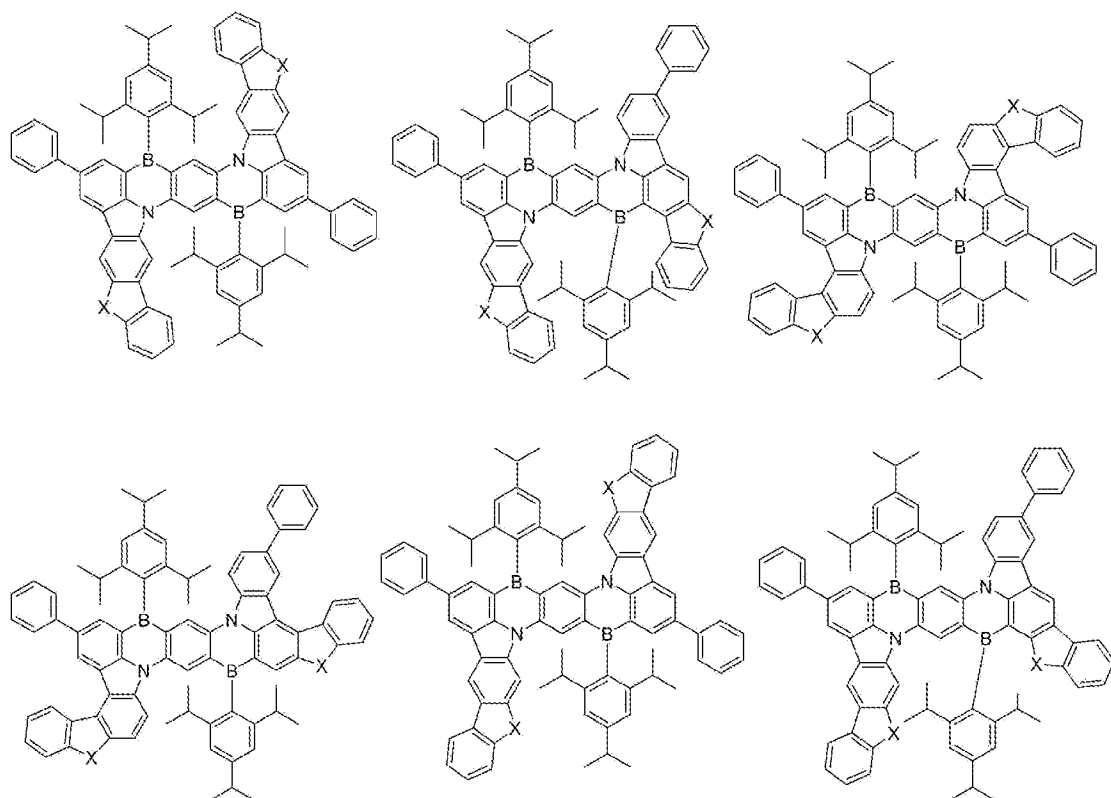
[化44-6]



[化44-7]



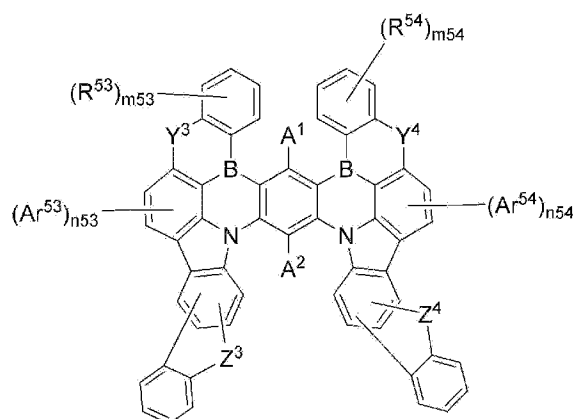
[化44-8]



[0101] 骨格（１９ｂ）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（１９ｂ）で表される化合物を例示することができる。

一般式（１９ｂ）

[化45]

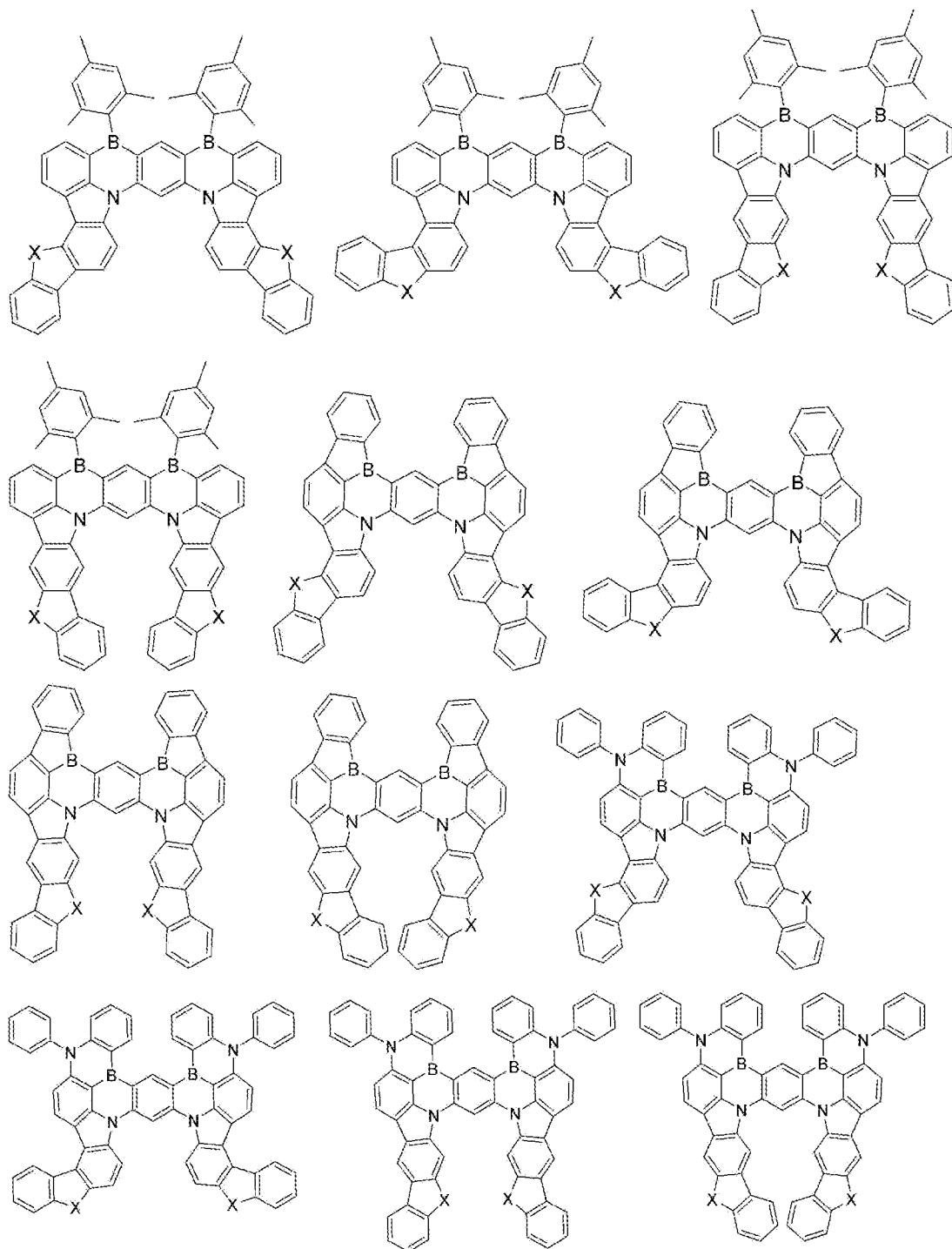


[0102] 一般式（１９ｂ）において、 Ar^{53} および Ar^{54} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^{53} および R^{54} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。

m_{53} および m_{54} は各々独立に 0～4 の整数を表す。 n_{53} および n_{54} は各々独立に 0～2 の整数を表す。 Y^3 および Y^4 は、各々独立に水素原子 2 個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Z^3 および Z^4 は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Ar^{53} 、 Ar^{54} 、 R^{53} 、 R^{54} 、 m_{53} 、 m_{54} 、 n_{53} 、 n_{54} 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式 (19a) の Ar^{51} 、 Ar^{52} 、 R^{51} 、 R^{52} 、 m_{51} 、 m_{52} 、 n_{51} 、 n_{52} 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

[0103] 以下において、一般式 (19b) で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式 (19b) の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。X を含む具体例については、分子内のすべての X が酸素原子である化合物と、分子内のすべての X が硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内の X の一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

[化46]

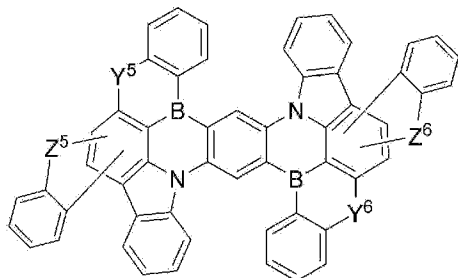


[0104] 一般式(16)に存在するカルバゾール部分構造を構成する2つのベンゼン環のうちホウ素原子が直接結合しているベンゼン環に、ベンゾフラン環またはベンゾチオフェン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。そのような化合物の例として、下記の骨格(20a)を有する化合物と、下

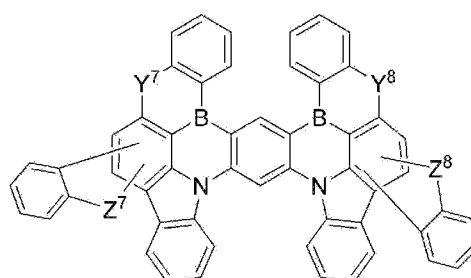
記の骨格（20b）を有する化合物を例示することができる。

[化47]

骨格（20a）



骨格（20b）

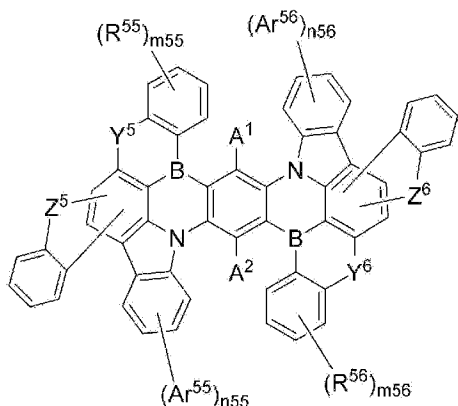


[0105] 骨格（20a）および（20b）において、 $Y^5 \sim Y^8$ は、各々独立に水素原子2個、単結合またはN（ R^{27} ）を表す。 $Z^5 \sim Z^8$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 $Y^5 \sim Y^8$ 、 $Z^5 \sim Z^8$ の詳細については、骨格（19a）および（19b）の対応する記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格（20a）および（20b）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0106] 骨格（20a）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（20a）で表される化合物を例示することができる。

一般式（20a）

[化48]



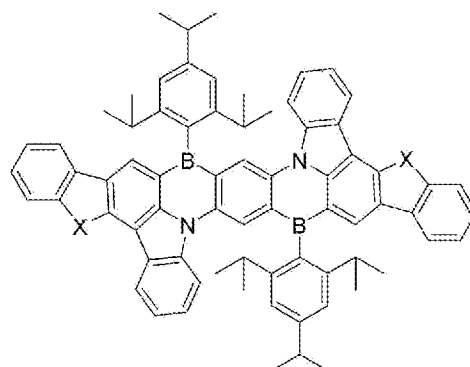
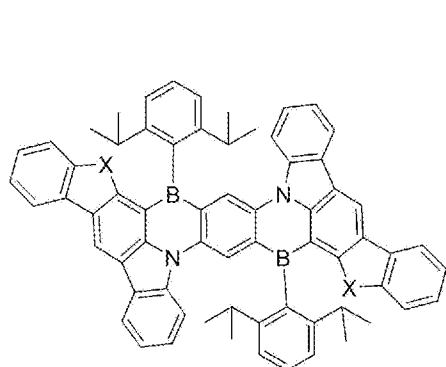
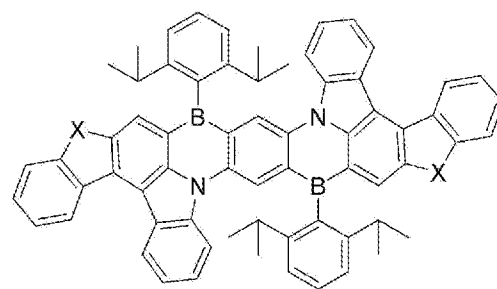
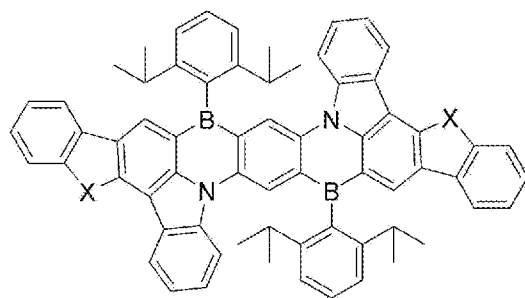
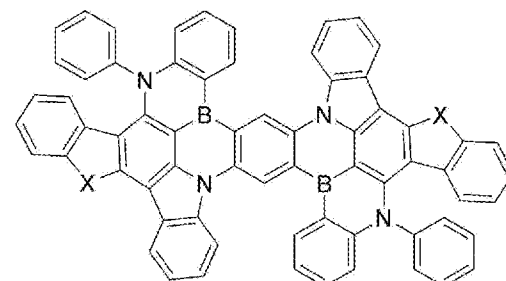
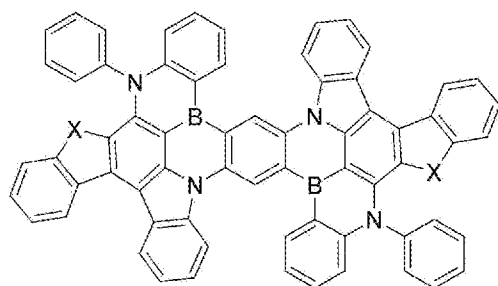
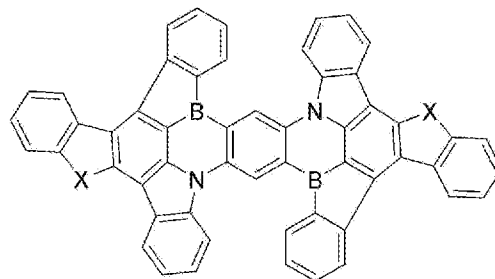
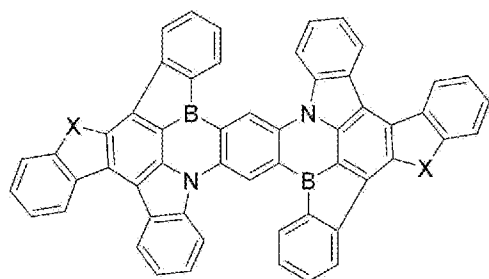
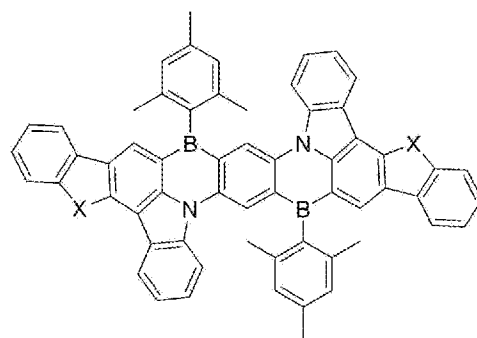
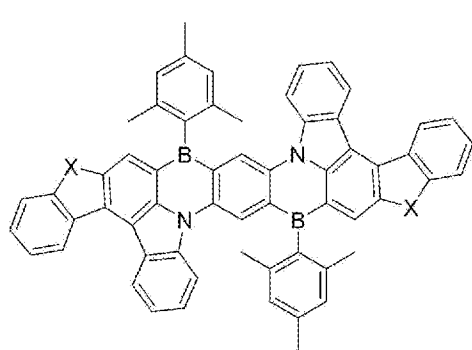
[0107] 一般式（20a）において、 Ar^{55} および Ar^{56} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^{55} および R^{56} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m^{55} および m^{56} は各々独立に0～4の整数を表す。 n^{55} および n^{56}

は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^5 および Y^6 は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Z^5 および Z^6 は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

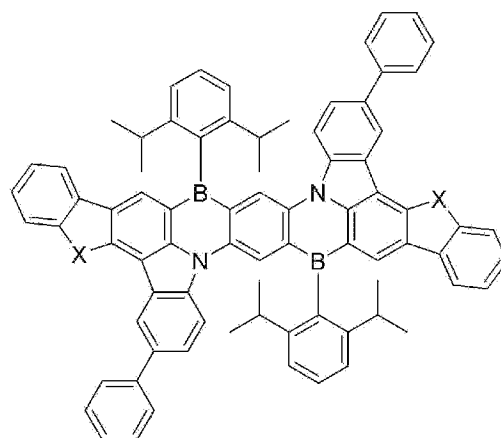
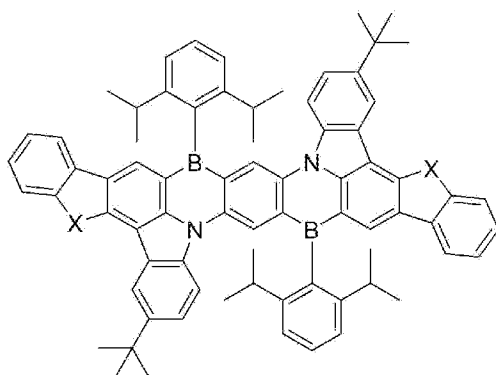
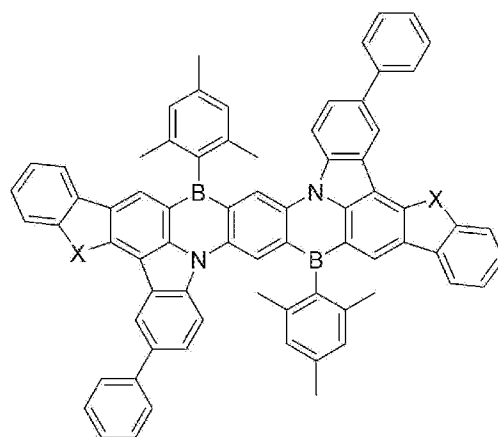
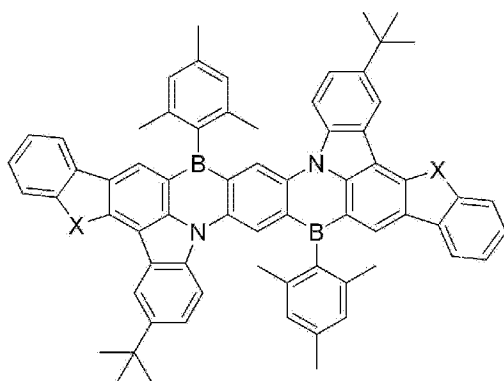
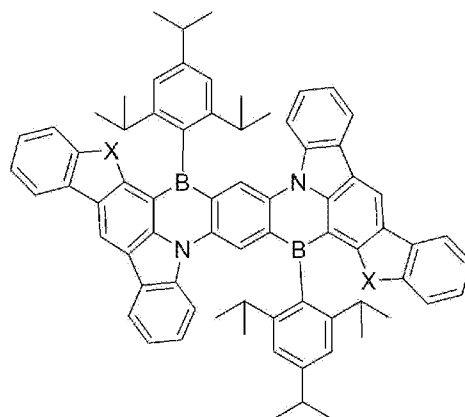
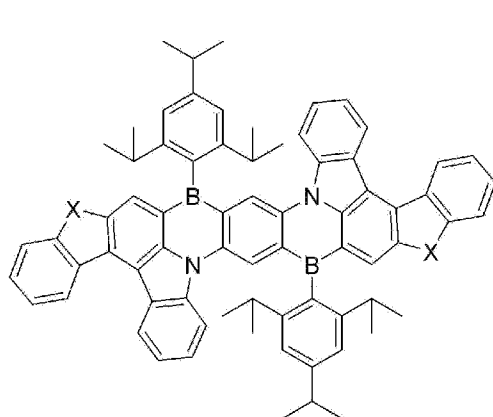
本発明の一態様では、 n_{55} と n_{56} は0～2の整数である。例えば、 n_{55} と n_{56} は0であってもよく、 n_{55} と n_{56} は1であってもよい。本発明の一態様では、 m_{51} と m_{52} は同じ数である。 m_{55} と m_{56} の詳細については、一般式(19a)の m_{51} と m_{52} の記載を参照することができる。 Ar^{55} 、 Ar^{56} 、 R^{55} 、 R^{56} 、 A^1 、 A^2 の好ましい基については、一般式(16a)の Ar^1 、 Ar^3 、 R^{41} 、 R^{42} 、 A^1 、 A^2 の対応する記載を参照することができる。

[0108] 以下において、一般式(20a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(20a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

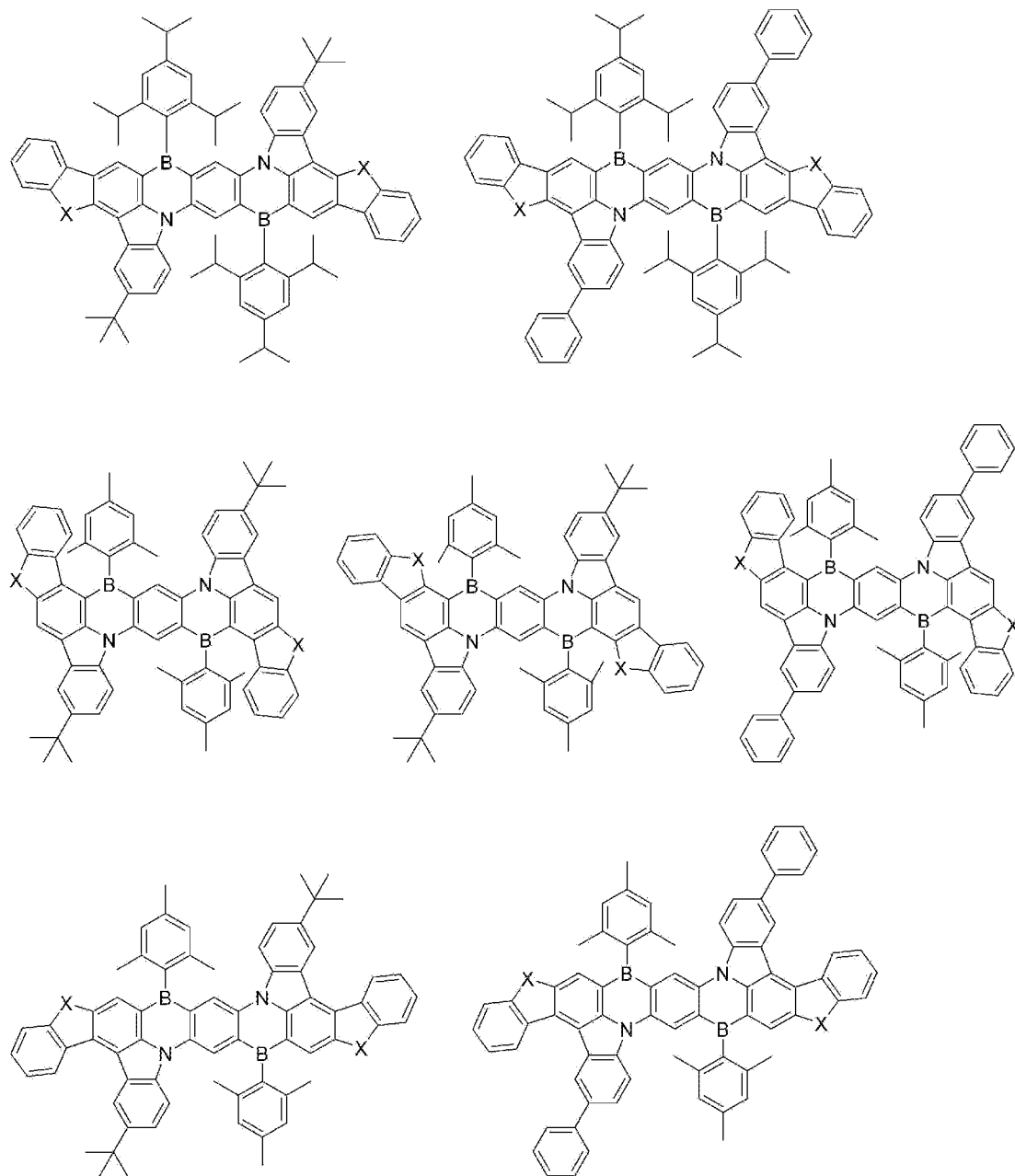
[化49-1]



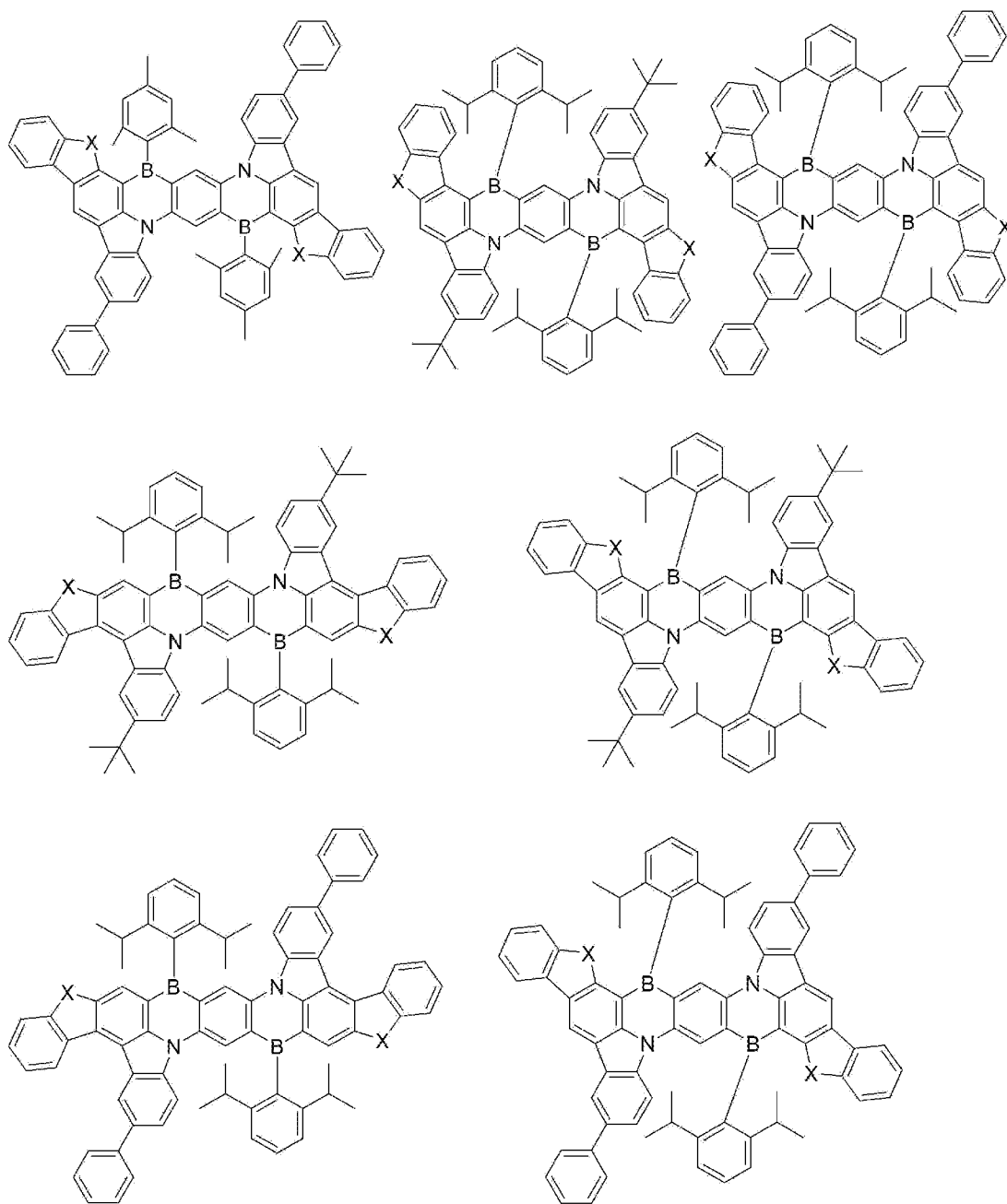
[化49-2]



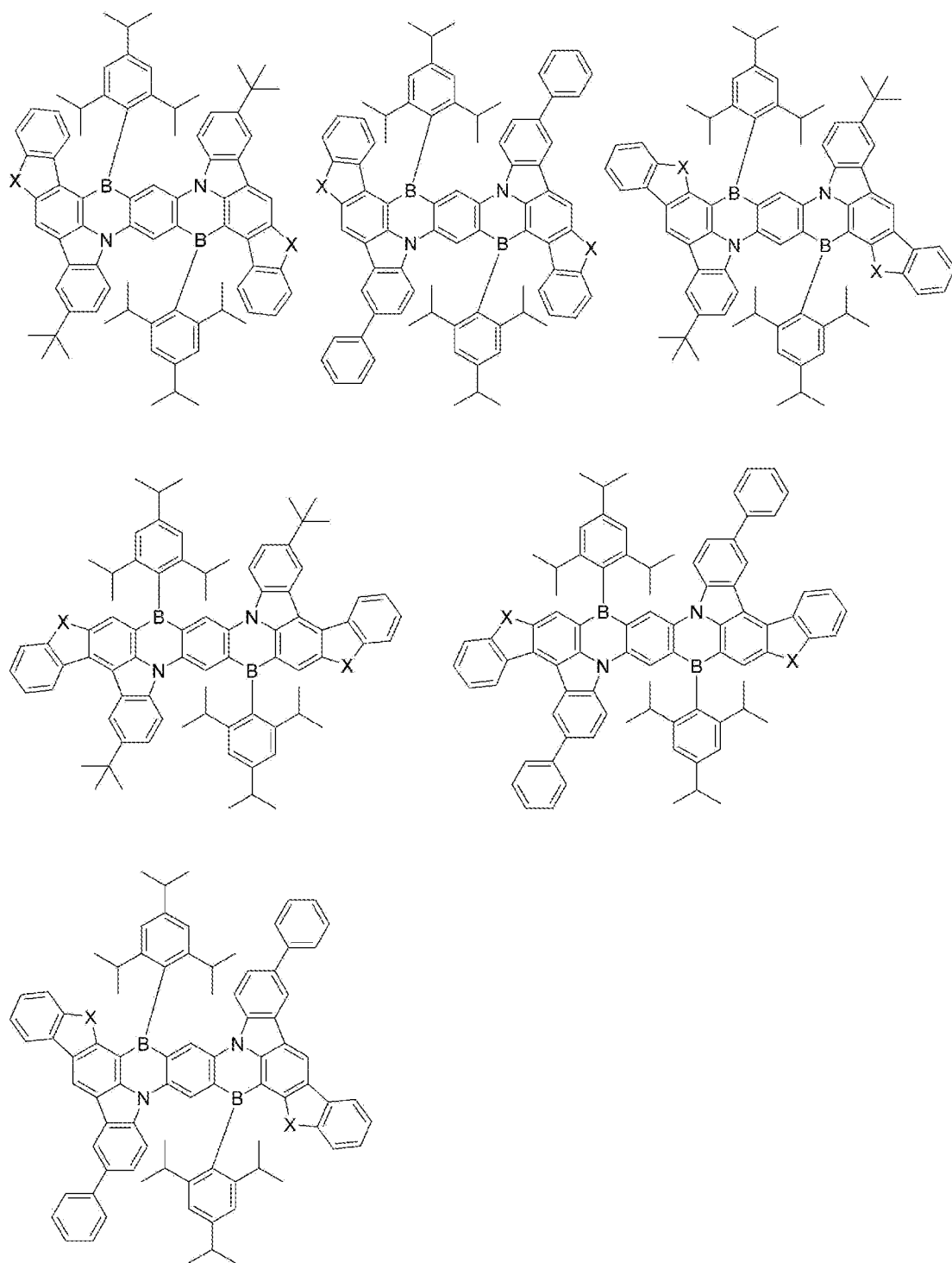
[化49-3]



[化49-4]



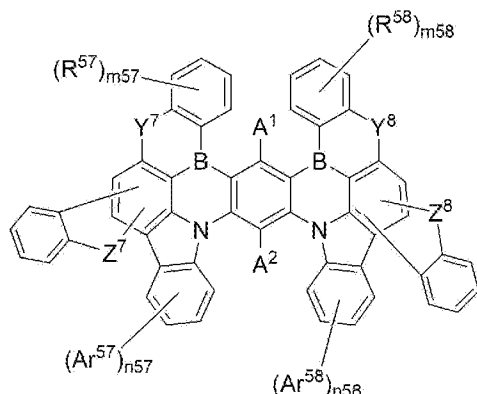
[化49-5]



[0109] 骨格(20b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(20b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(20b)

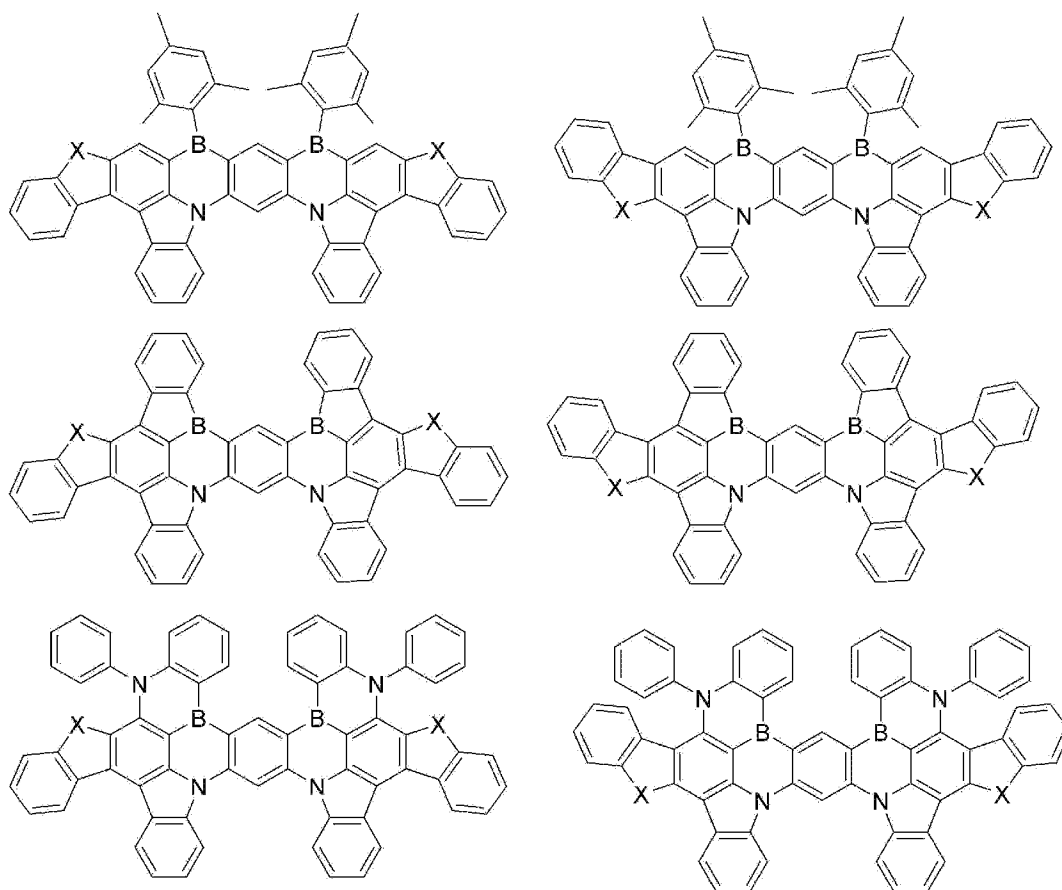
[化50]



[0110] 一般式(20b)において、 Ar^{57} および Ar^{58} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^{57} および R^{58} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 $m57$ および $m58$ は各々独立に0~4の整数を表す。 $n57$ および $n58$ は各々独立に0~4の整数を表す。 Y^7 および Y^8 は、各々独立に水素原子2個、単結合またはN(R^{27})を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Z^7 および Z^8 は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Ar^{57} 、 Ar^{58} 、 R^{57} 、 R^{58} 、 $m57$ 、 $m58$ 、 $n57$ 、 $n58$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(20a)の Ar^{55} 、 Ar^{56} 、 R^{55} 、 R^{56} 、 $m55$ 、 $m56$ 、 $n55$ 、 $n56$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

[0111] 以下において、一般式(20b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(20b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

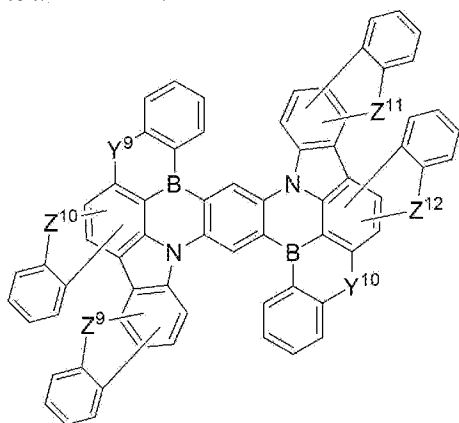
[化51]



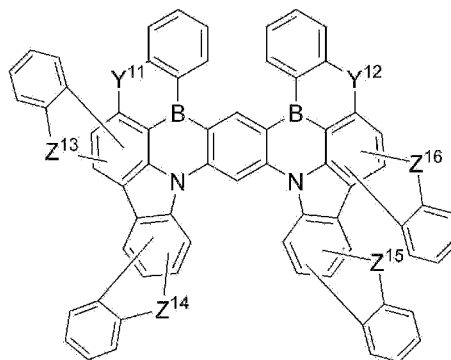
[0112] 一般式（１６）に存在するカルバゾール部分構造を構成する２つのベンゼン環の両方に、ベンゾフラン環またはベンゾチオフェン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。そのような化合物の例として、下記の骨格（２１a）を有する化合物と、下記の骨格（２１b）を有する化合物を例示することができる。

[化52]

骨格 (21 a)



骨格 (21 b)

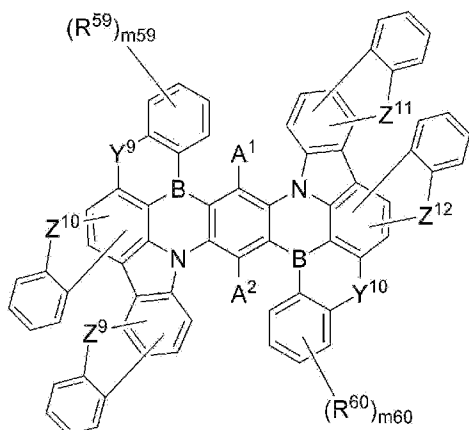


[0113] 骨格 (21 a) および (21 b) において、 $Y^9 \sim Y^{12}$ は、各々独立に水素原子2個、単結合またはN (R^{27})を表す。 $Z^9 \sim Z^{16}$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 $Z^9 \sim Z^{16}$ は同一であることが好ましいが、異なっても構わない。本発明の一態様では、 $Z^9 \sim Z^{16}$ は酸素原子である。本発明の一態様では、 $Z^9 \sim Z^{16}$ は硫黄原子である。 $Y^9 \sim Y^{12}$ の詳細については、骨格 (19 a) および (19 b) の対応する記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格 (21 a) および (21 b) における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0114] 骨格 (21 a) を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式 (21 a) で表される化合物を例示することができる。

一般式 (21 a)

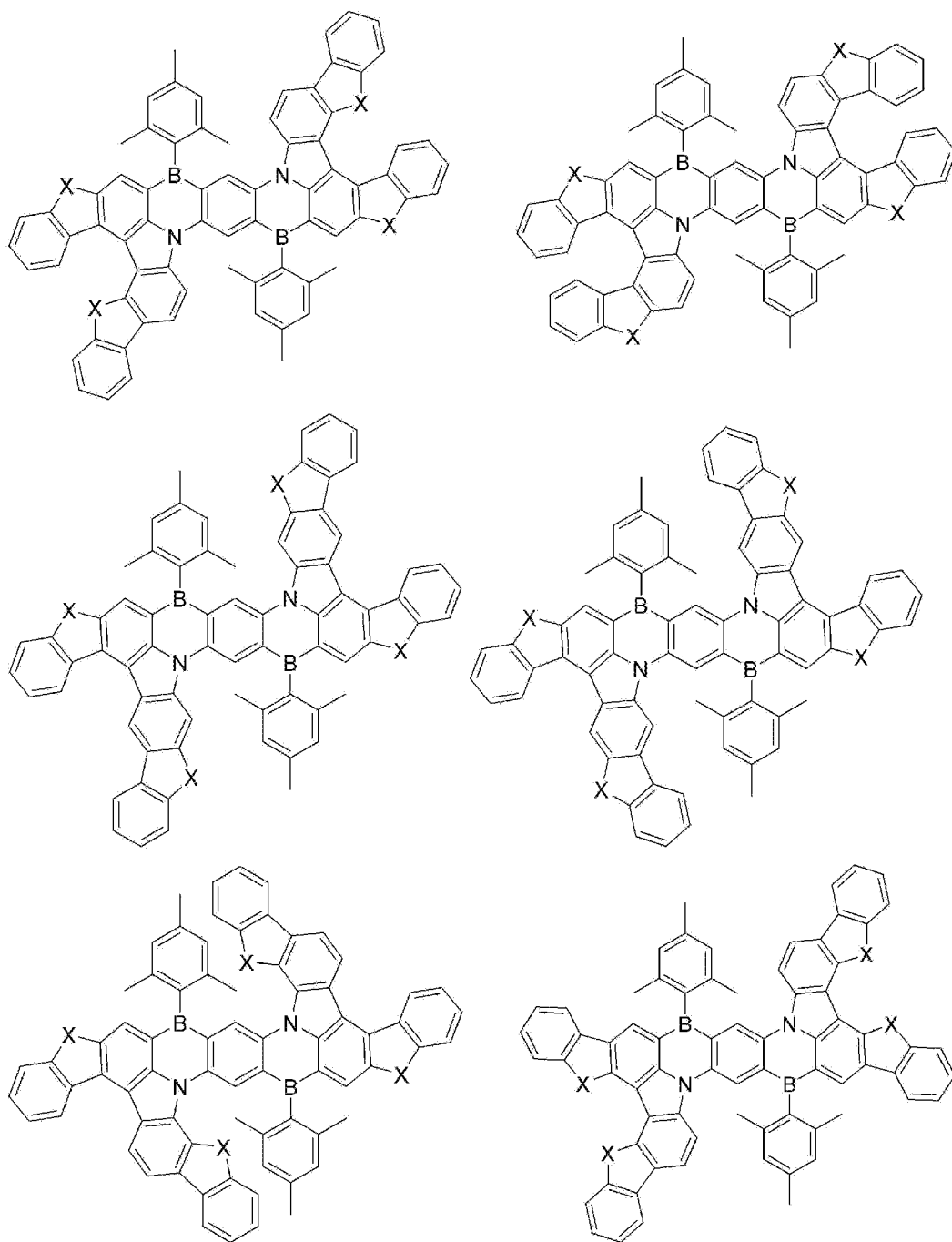
[化53]



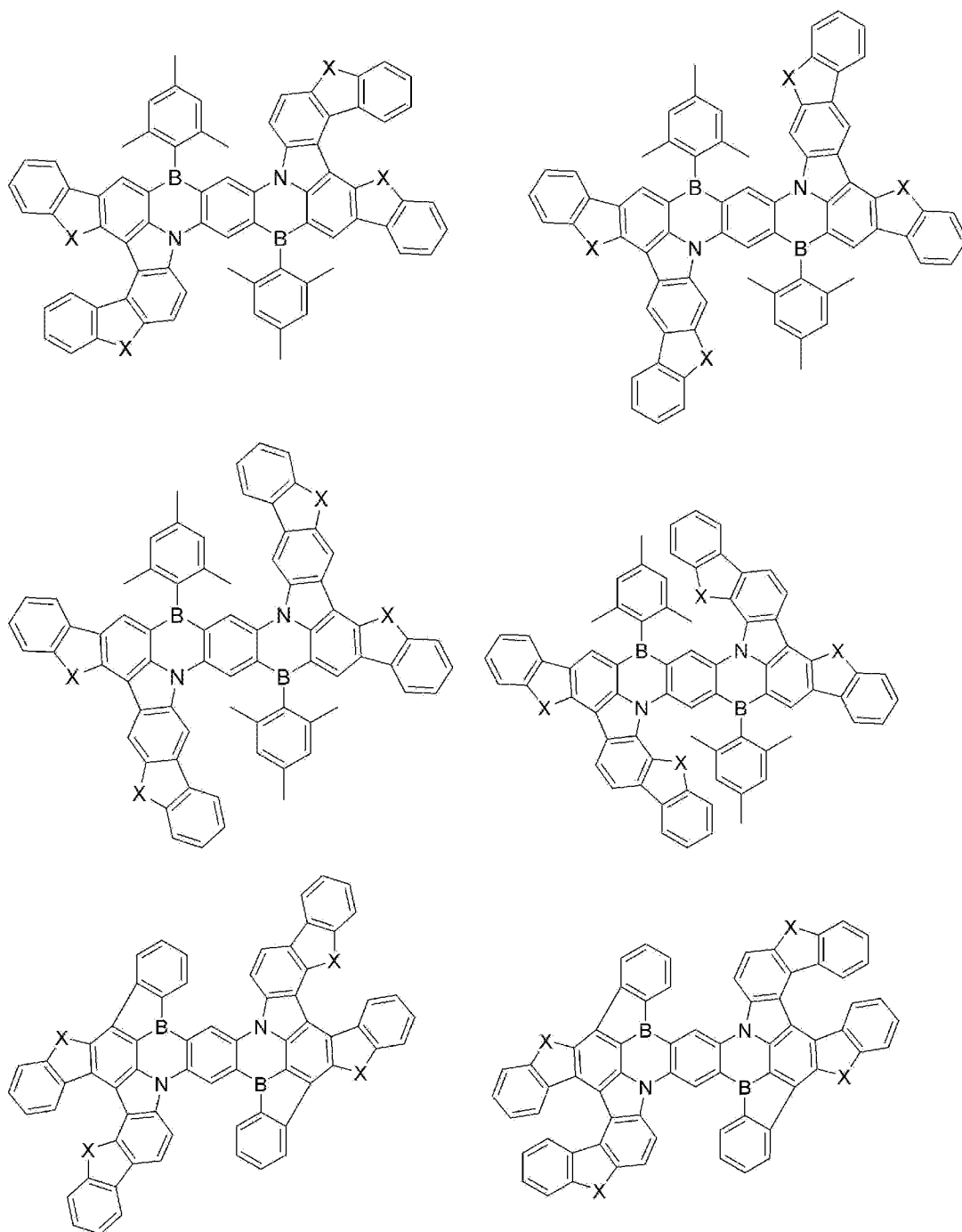
[0115] 一般式(21a)において、 R^{59} および R^{60} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{59} および m_{60} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^9 および Y^{10} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Z^9 \sim Z^{12}$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^{59} 、 R^{60} 、 m_{59} 、 m_{60} 、 $Z^9 \sim Z^{12}$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(20a)の R^{55} 、 R^{56} 、 m_{55} 、 m_{56} 、 A^1 、 A^2 と、骨格(21a)における $Z^9 \sim Z^{12}$ の記載を参照することができる。

[0116] 以下において、一般式(21a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(21a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

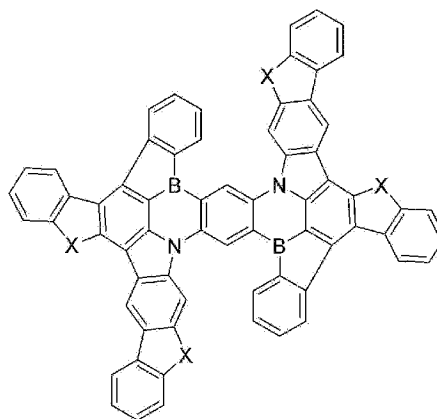
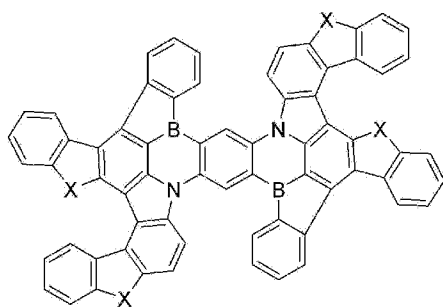
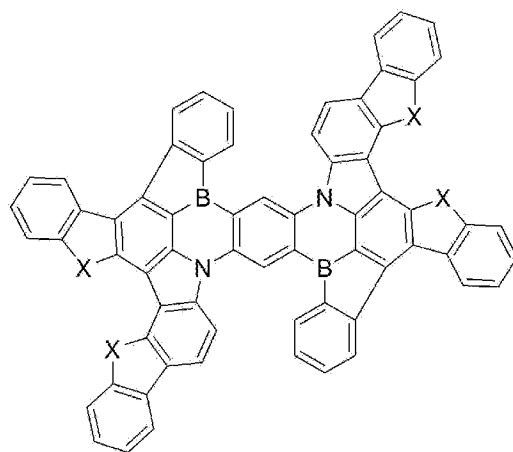
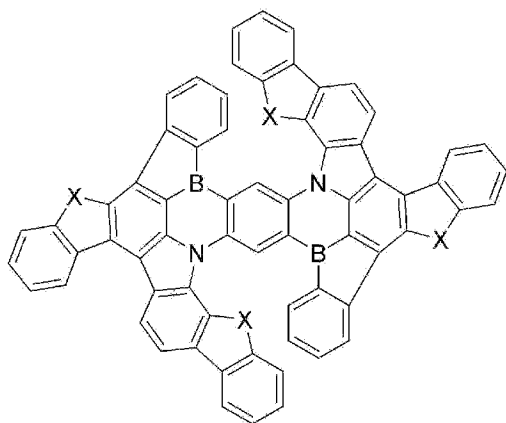
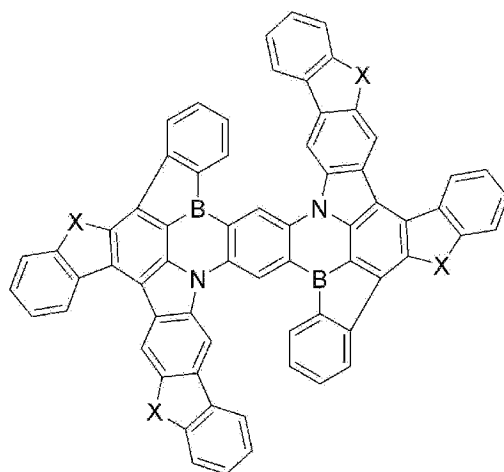
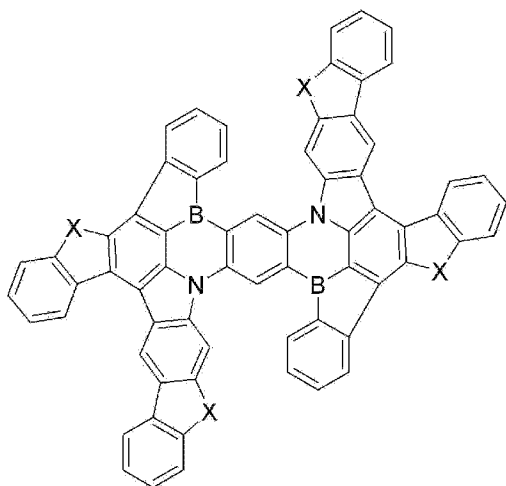
[化54-1]



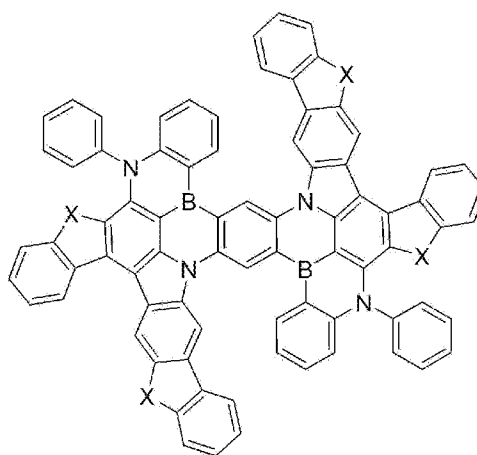
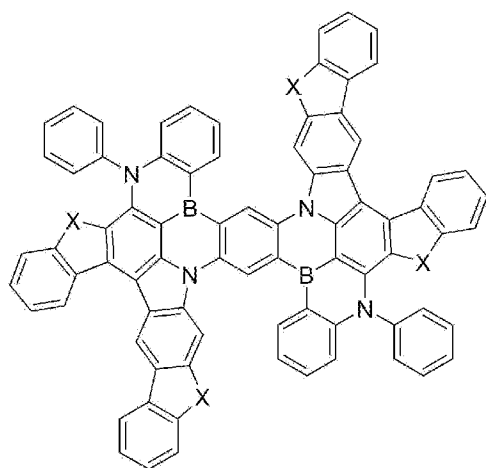
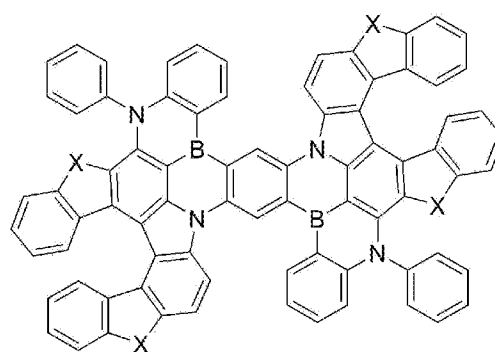
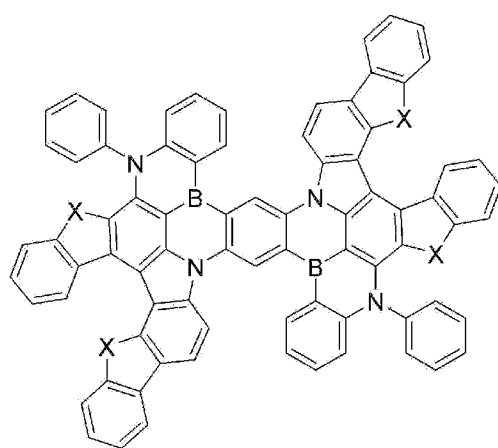
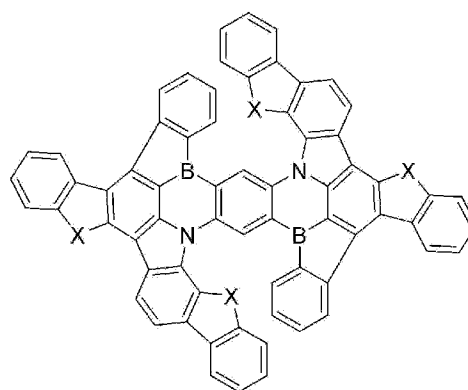
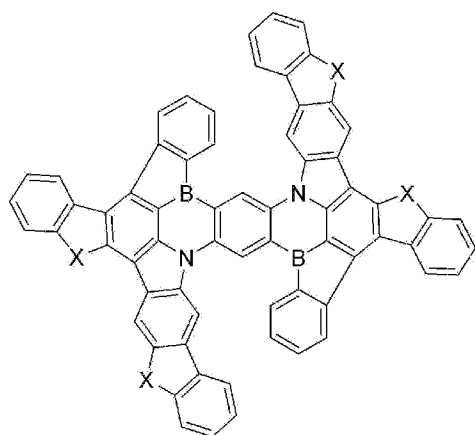
[化54-2]



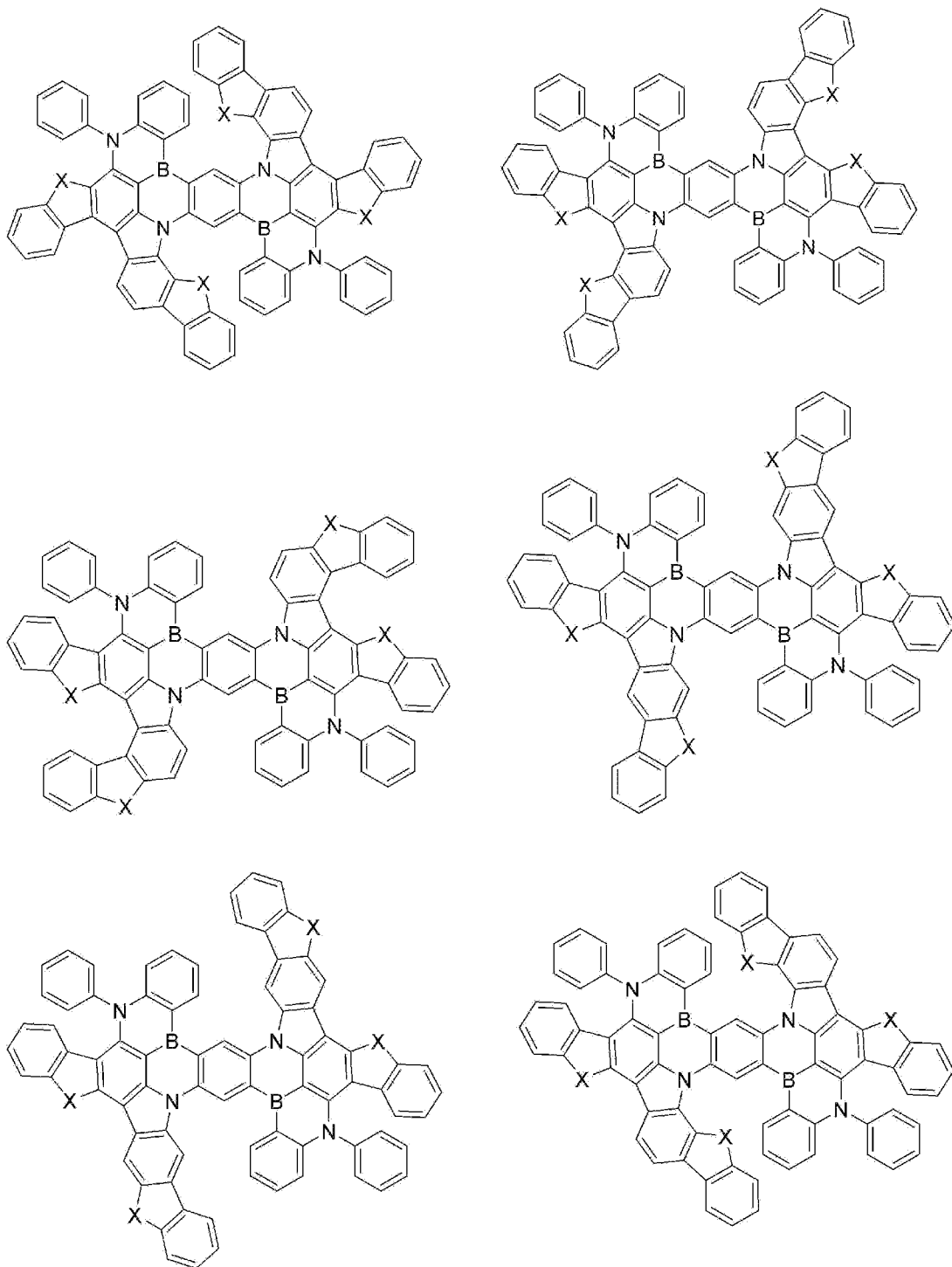
[化54-3]



[化54-4]



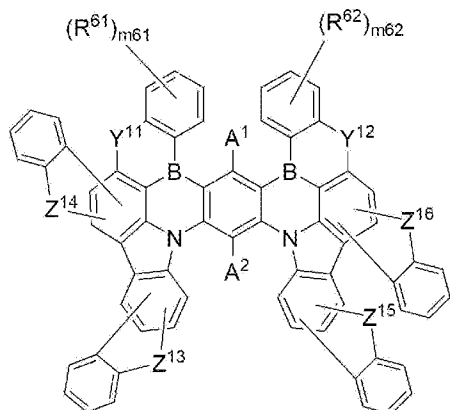
[化54-5]



[0117] 骨格(21b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(21b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(21b)

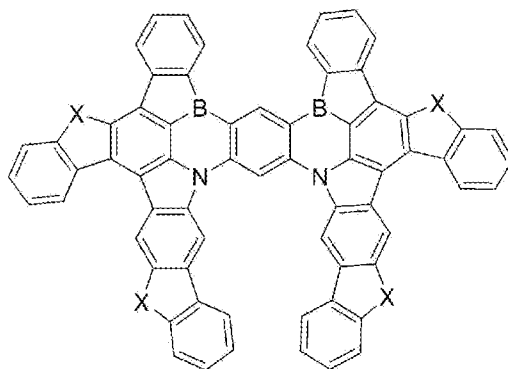
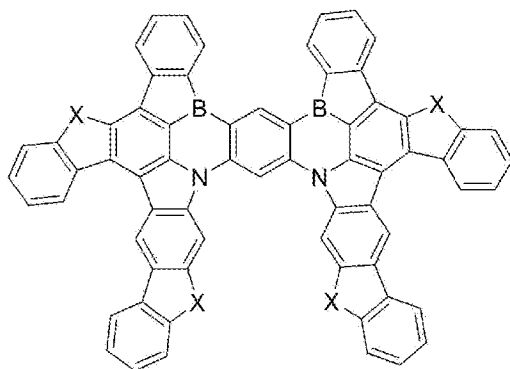
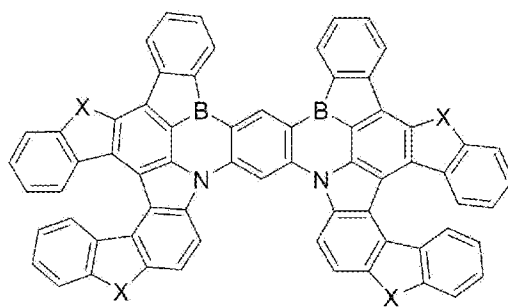
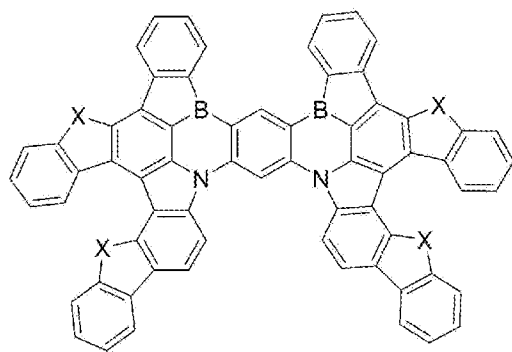
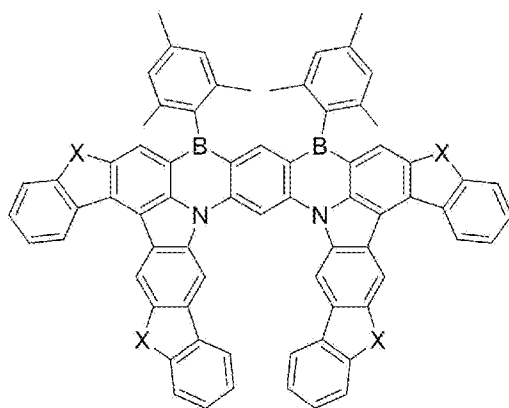
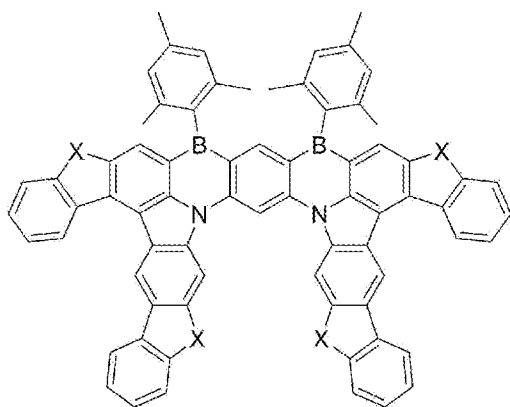
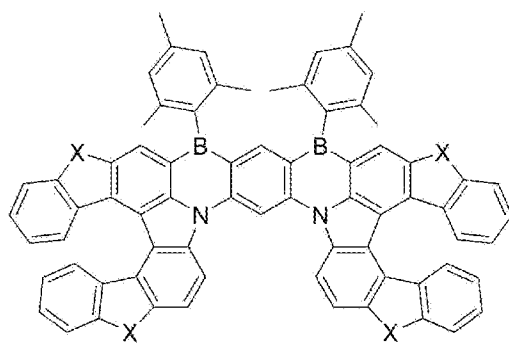
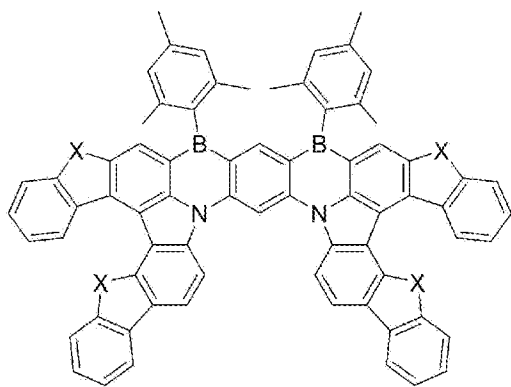
[化55]



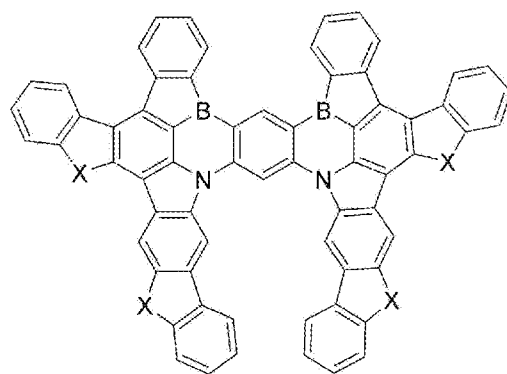
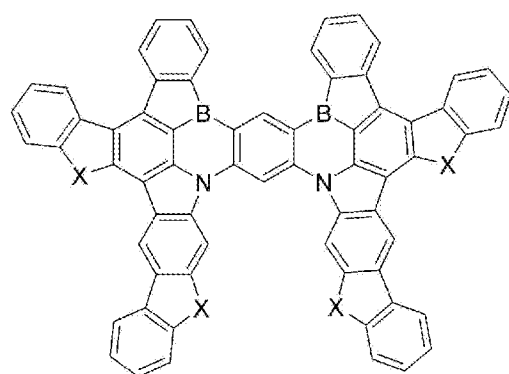
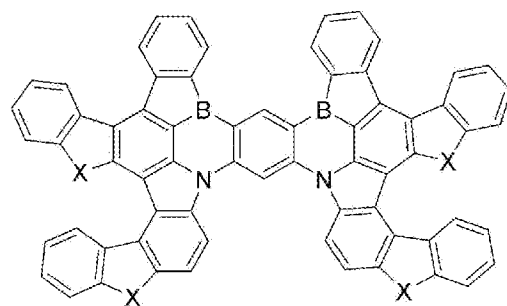
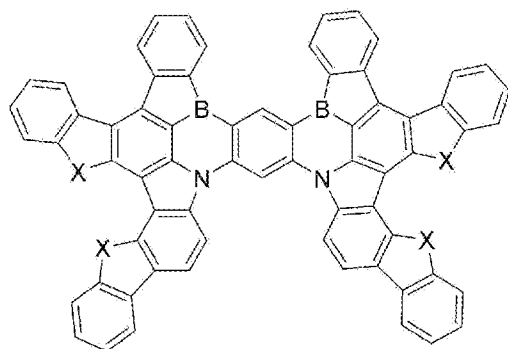
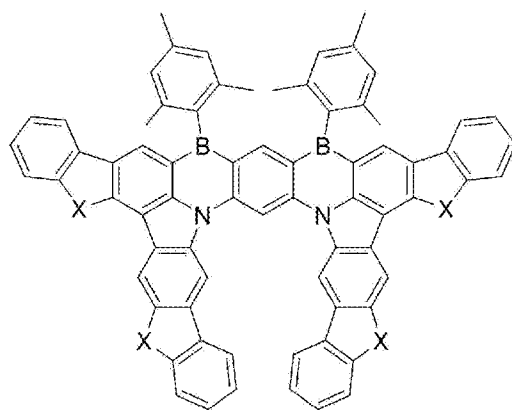
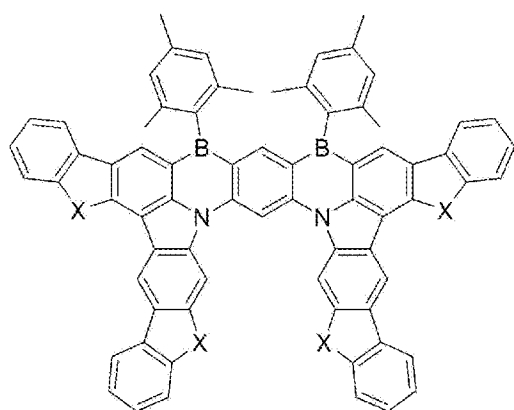
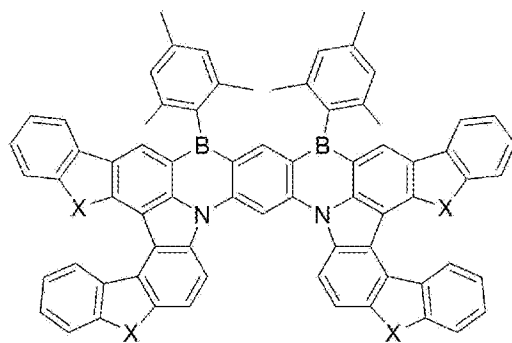
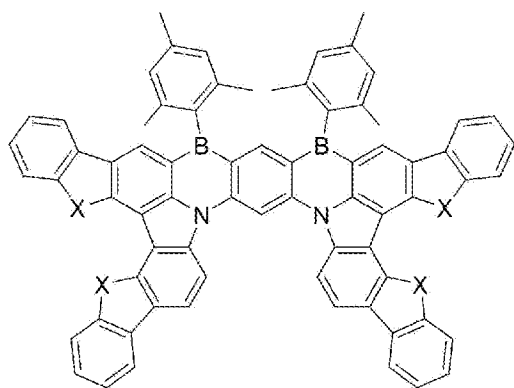
[0118] 一般式(21b)において、 R^{61} および R^{62} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{61} および m_{60} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^{11} および Y^{12} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Z^{13} \sim Z^{16}$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^{61} 、 R^{62} 、 m_{61} 、 m_{62} 、 $Z^{13} \sim Z^{16}$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(21a)の R^{59} 、 R^{60} 、 m_{59} 、 m_{60} 、 A^1 、 A^2 と、骨格(21b)における $Z^{13} \sim Z^{16}$ の記載を参照することができる。

[0119] 以下において、一般式(21b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(21b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

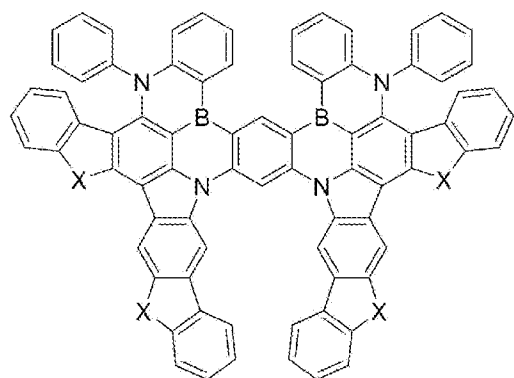
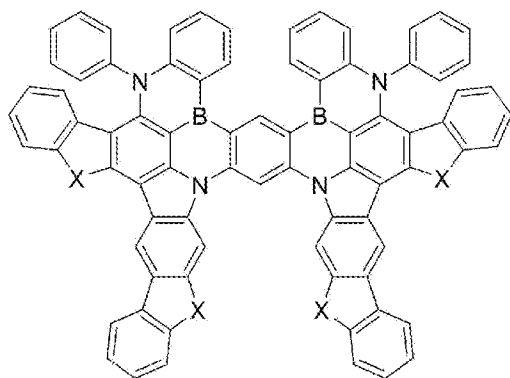
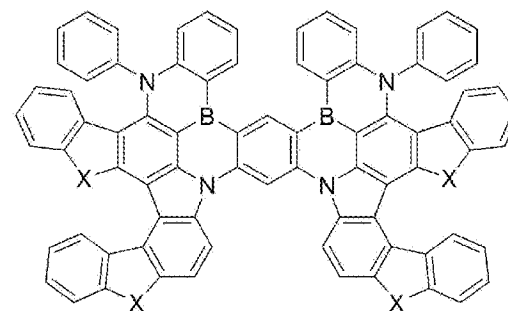
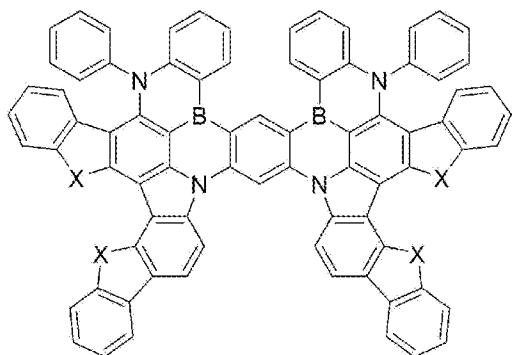
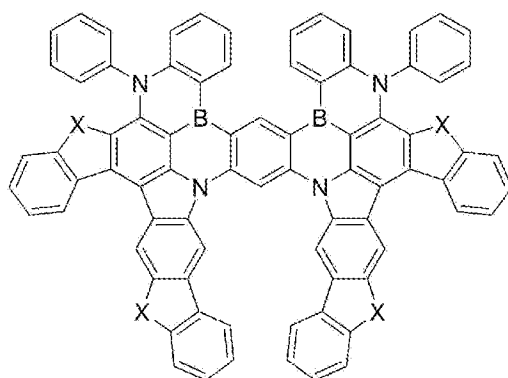
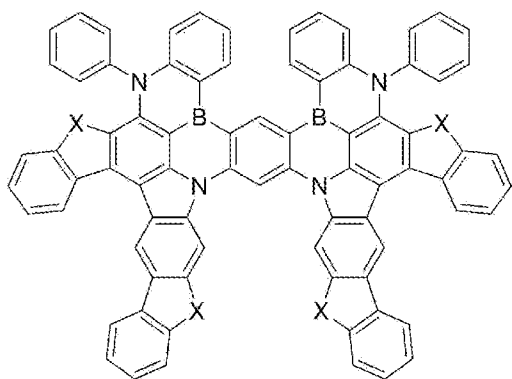
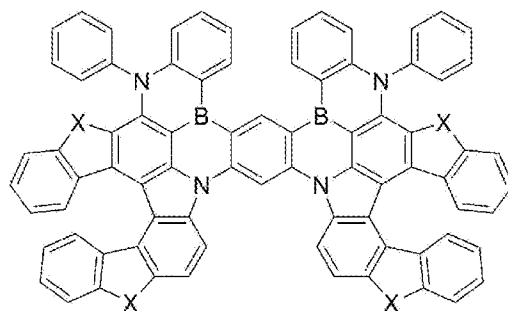
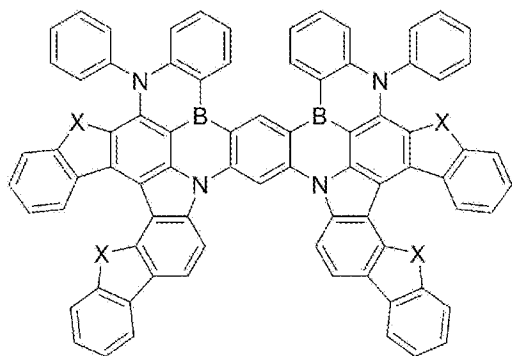
[化56-1]



[化56-2]



[化56-3]

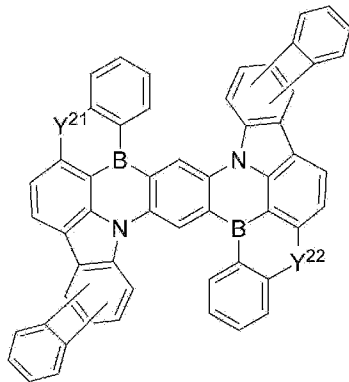


[0120] 一般式(16)に存在するカルバゾール部分構造を構成する2つのベンゼ

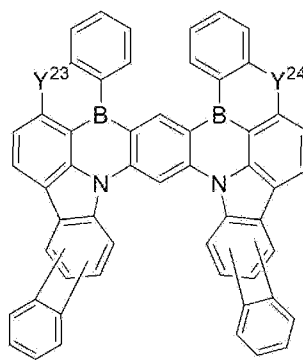
ン環のうちホウ素原子が直接結合していないベンゼン環に、ベンゼン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。そのような化合物の例として、下記の骨格（２２ａ）を有する化合物と、下記の骨格（２２ｂ）を有する化合物を例示することができる。

[化57]

骨格（２２ａ）



骨格（２２ｂ）

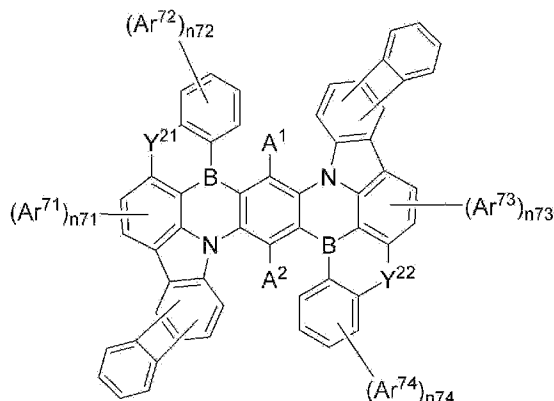


[0121] 骨格（２２ａ）および（２２ｂ）において、 $Y^{21} \sim Y^{24}$ は、各々独立に水素原子２個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 $Y^{21} \sim Y^{24}$ の詳細については、骨格（１９ａ）および（１９ｂ）の $Y^1 \sim Y^4$ の記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格（２２ａ）および（２２ｂ）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0122] 骨格（２２ａ）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（２２ａ）で表される化合物を例示することができる。

一般式（２２ａ）

[化58]

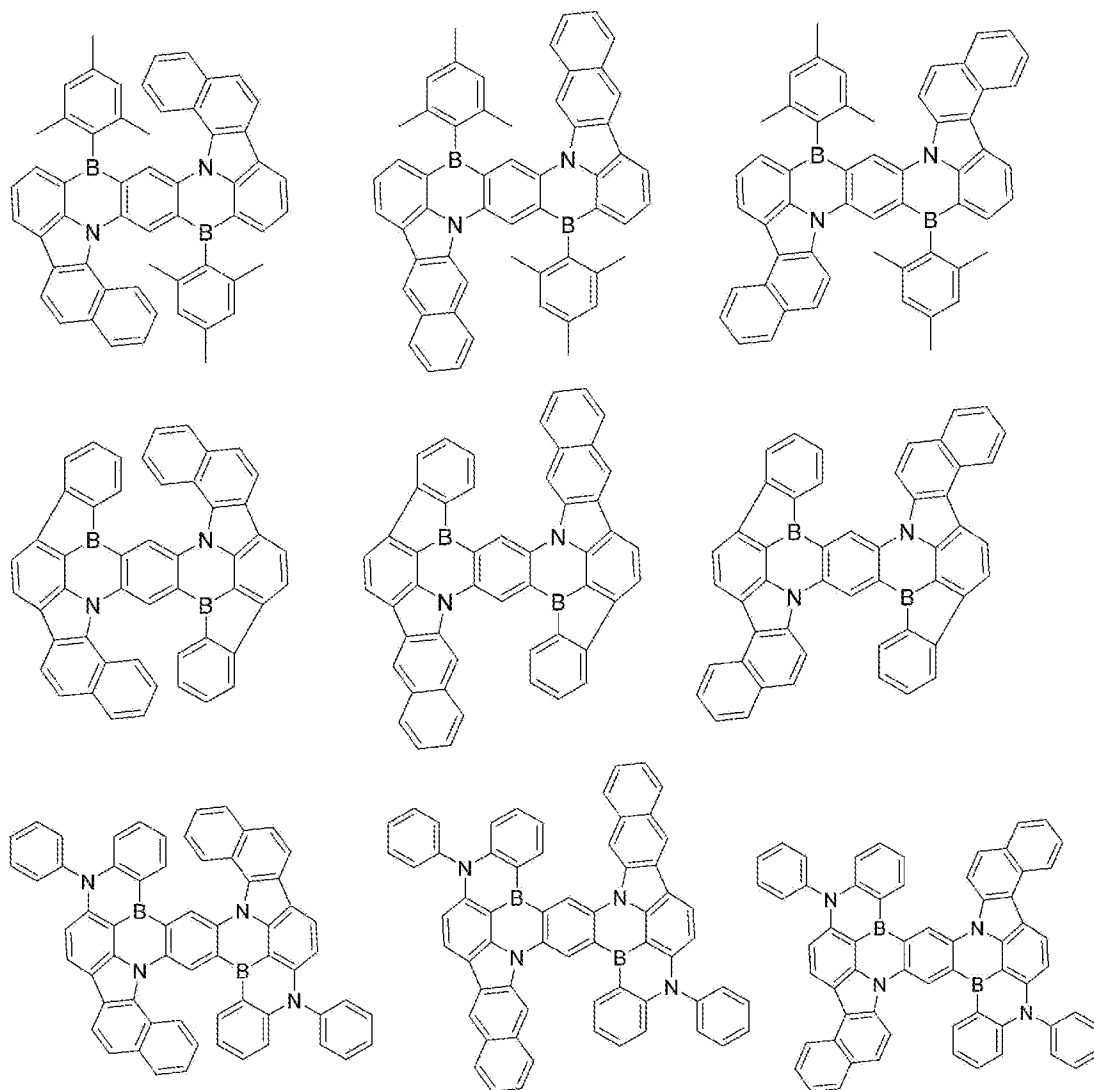


[0123] 一般式(22a)において、 $Ar^{71} \sim Ar^{74}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 n_{71} および n_{73} は各々独立に0～2の整数を表す。 n_{72} および n_{74} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^{21} および Y^{22} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

本発明の一態様では、 $n_{71} \sim n_{74}$ は0～2の整数である。本発明の一態様では、 n_{71} と n_{73} は同じ数であり、 n_{72} と n_{74} は同じ数である。 $n_{71} \sim n_{74}$ が同じ数でもよい。例えば、 $n_{71} \sim n_{74}$ は0であってもよい。 $n_{71} \sim n_{74}$ はすべてが1であってもよい。また、例えば、 n_{71} と n_{73} は0であってもよく、 n_{72} と n_{74} は1であってもよい。 $Ar^{71} \sim Ar^{74}$ 、 A^1 、 A^2 の好ましい基については、一般式(16a)の $Ar^1 \sim Ar^4$ 、 A^1 、 A^2 の対応する記載を参照することができる。

[0124] 以下において、一般式(22a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(22a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

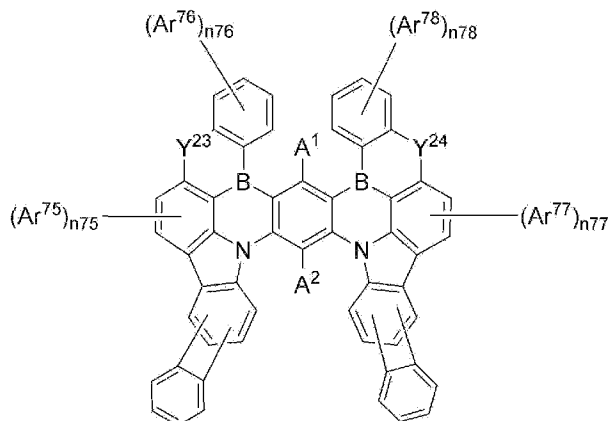
[化59]



[0125] 骨格(22b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(22b)で表される化合物を例示することができる。

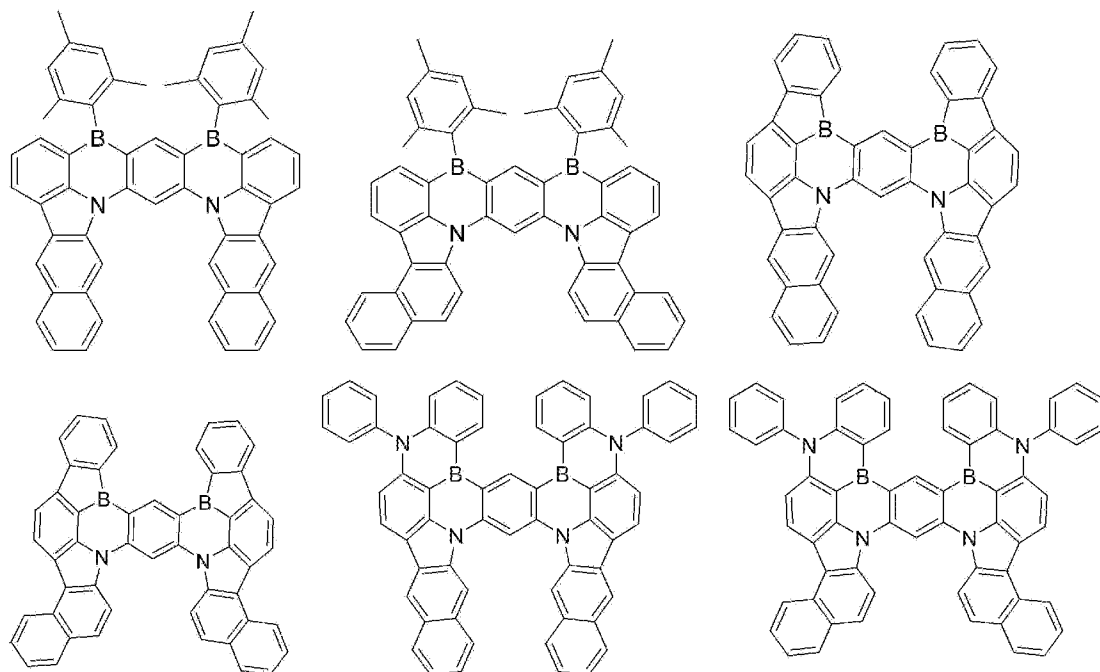
一般式(22b)

[化60]



- [0126] 一般式(22b)において、 $Ar^{75} \sim Ar^{78}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 n_{75} および n_{77} は各々独立に0～2の整数を表す。 n_{76} および n_{78} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^{23} および Y^{24} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $n_{75} \sim n_{78}$ の詳しい説明については、順に、一般式(22a)の $n_{71} \sim n_{74}$ の記載を参照することができる。 $Ar^{75} \sim Ar^{78}$ の好ましい基については、一般式(16a)の $Ar^1 \sim Ar^4$ の対応する記載を参照することができる。
- [0127] 以下において、一般式(22b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(22b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

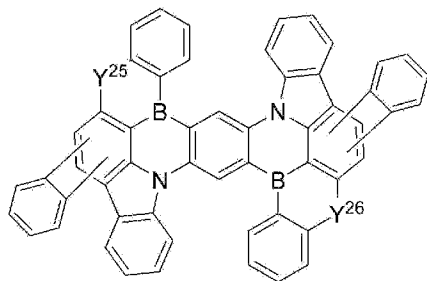
[化61]



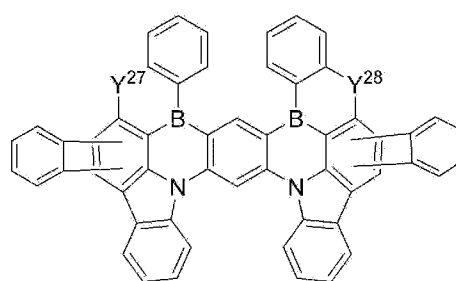
[0128] 一般式(16)に存在するカルバゾール部分構造を構成する2つのベンゼン環のうちホウ素原子が直接結合しているベンゼン環に、ベンゼン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。そのような化合物の例として、下記の骨格(23a)を有する化合物と、下記の骨格(23b)を有する化合物を例示することができる。

[化62]

骨格(23a)



骨格(23b)



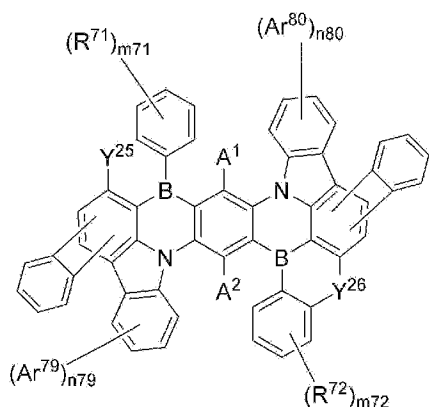
[0129] 骨格(23a)および(23b)において、 $Y^{25} \sim Y^{28}$ は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 $Y^{25} \sim Y^{28}$ の詳細については、骨格(19a)および(19b)の対応する記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格(23a)および(23b)における各水素原

子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0130] 骨格(23a)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(23a)で表される化合物を例示することができる。

一般式(23a)

[化63]



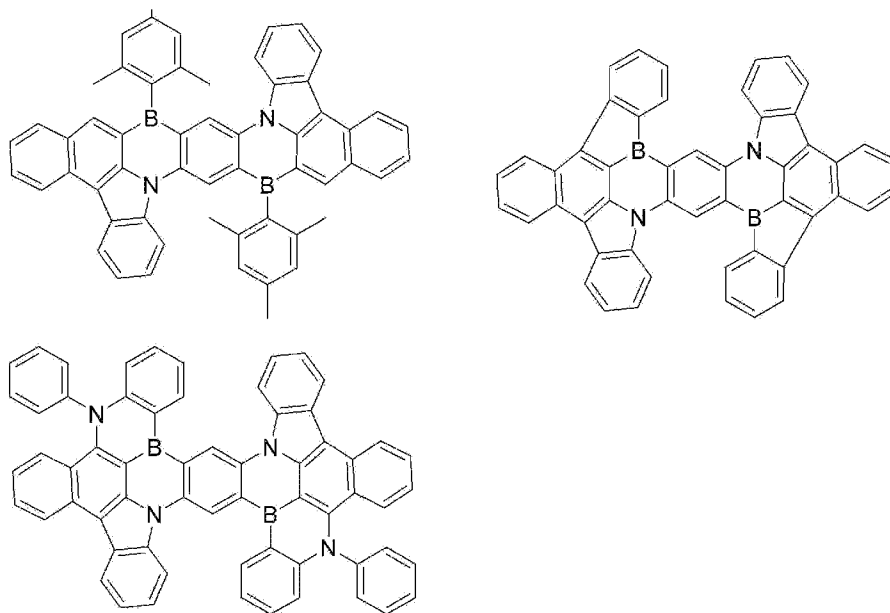
[0131] 一般式(23a)において、 Ar^{79} および Ar^{80} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^{71} および R^{72} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{71} および m_{72} は各々独立に0～4の整数を表す。 n_{79} および n_{80} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^{25} および Y^{26} は、各々独立に水素原子2個、単結合またはN(R^{27})を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

本発明の一態様では、 n_{79} および n_{80} は0～2の整数である。本発明の一態様では、 n_{79} と n_{80} は同じ数であり、例えばいずれも0であってもよいし、いずれも1であってもよい。本発明の一態様では、 m_{71} および m_{72} は0～2の整数である。本発明の一態様では、 m_{71} および m_{72} は同じ数であり、例えばいずれも0であってもよいし、いずれも1であってもよい。 Ar^{79} 、 Ar^{80} 、 R^{71} 、 R^{72} 、 A^1 、 A^2 の好ましい基については、一般式(16a)の Ar^1 、 Ar^3 、 R^{41} 、 R^{42} 、 A^1 、 A^2 の対応する記載を参

照することができる。

[0132] 以下において、一般式（23a）で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式（23a）の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

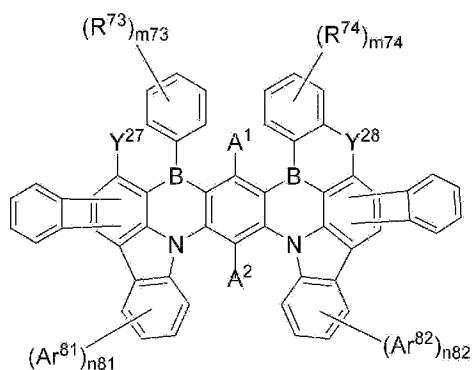
[化64]



[0133] 骨格（23b）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（23b）で表される化合物を例示することができる。

一般式（23b）

[化65]



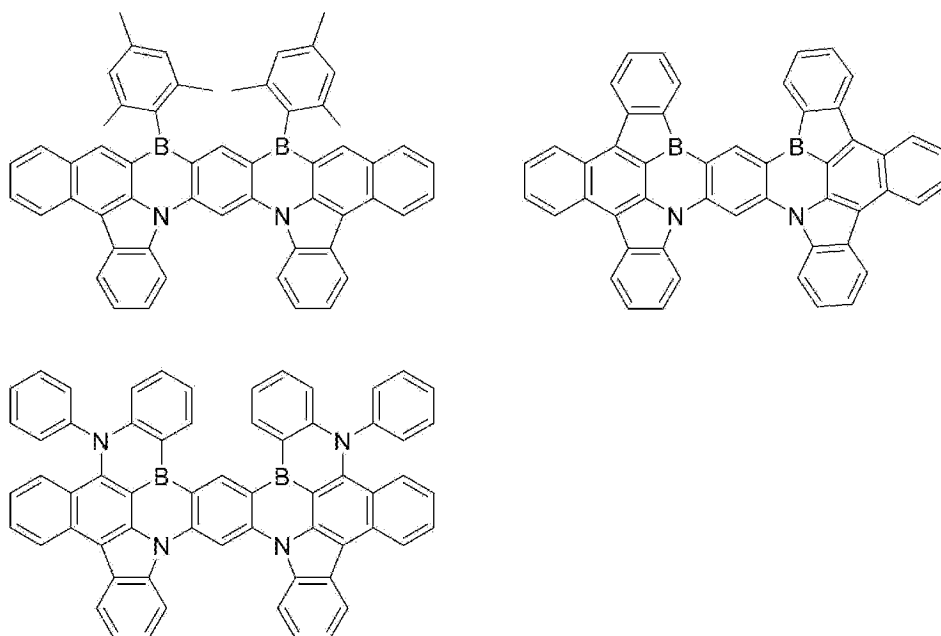
[0134] 一般式（23b）において、 Ar^{81} および Ar^{82} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^{73} および R^{74} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。

$m73$ および $m74$ は各々独立に $0 \sim 4$ の整数を表す。 $n81$ および $n82$ は各々独立に $0 \sim 4$ の整数を表す。 Y^{27} および Y^{28} は、各々独立に水素原子 2 個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

$m73$ 、 $m74$ 、 $n81$ 、 $n82$ の詳しい説明については、一般式 (23 a) の $m71$ 、 $m72$ 、 $n79$ 、 $n80$ の記載を参照することができる。 Ar^{81} 、 Ar^{82} 、 R^{73} 、 R^{74} 、 A^1 、 A^2 の好ましい基については、一般式 (16 a) の Ar^1 、 Ar^3 、 R^{41} 、 R^{42} 、 A^1 、 A^2 の対応する記載を参照することができる。

[0135] 以下において、一般式 (23 b) で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式 (23 b) の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

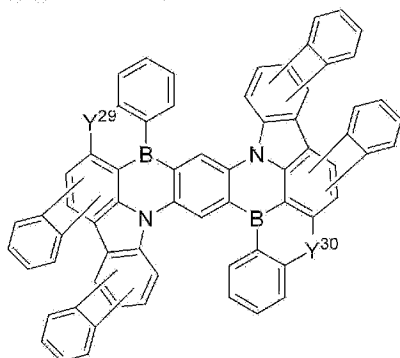
[化66]



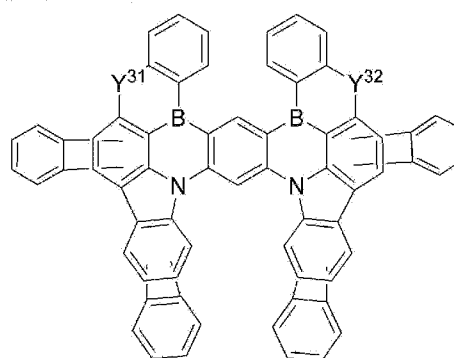
[0136] 一般式 (16) に存在するカルバゾール部分構造を構成する 2 つのベンゼン環の両方に、ベンゼン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。そのような化合物の例として、下記の骨格 (24 a) を有する化合物と、下記の骨格 (24 b) を有する化合物を例示することができる。

[化67]

骨格 (24 a)



骨格 (24 b)

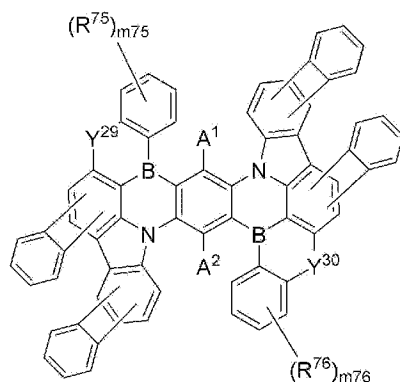


[0137] 骨格 (24 a) および (24 b) において、 $Y^{29} \sim Y^{32}$ は、各々独立に水素原子2個、単結合またはN (R^{27})を表す。 $Y^{29} \sim Y^{32}$ の詳細については、骨格 (19 a) および (19 b) の対応する記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格 (24 a) および (24 b) における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0138] 骨格 (24 a) を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式 (24 a) で表される化合物を例示することができる。

一般式 (24 a)

[化68]

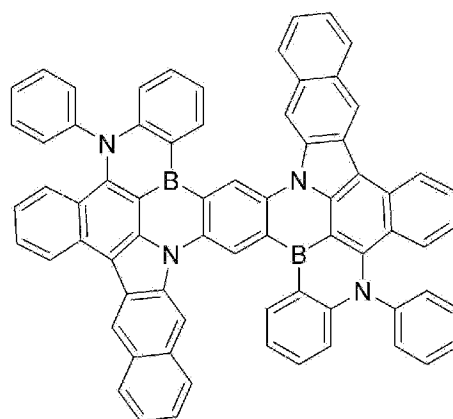
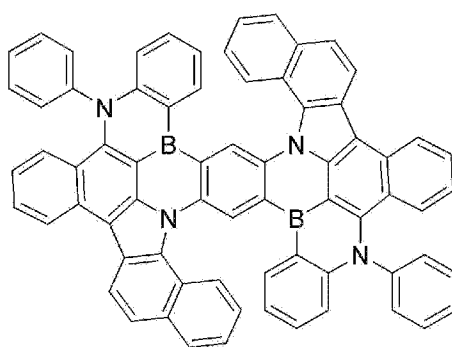
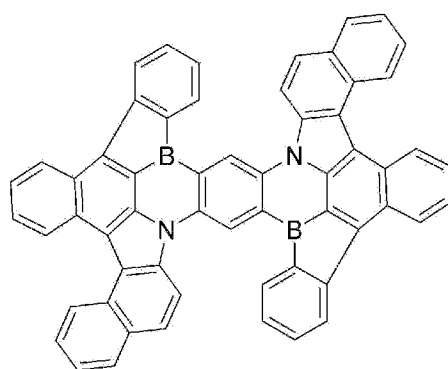
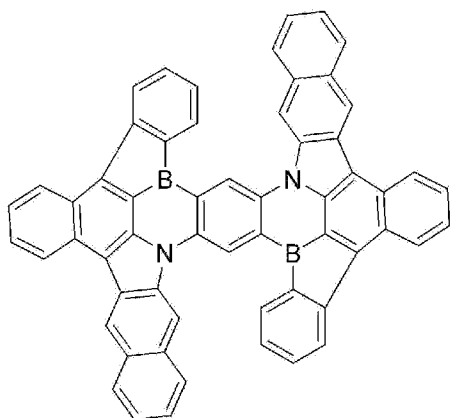
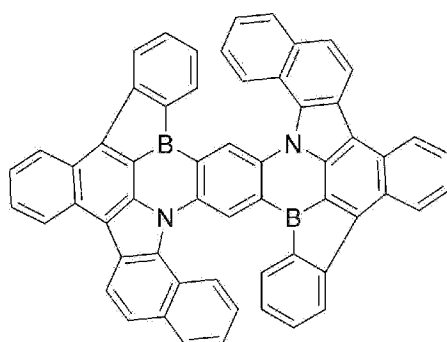
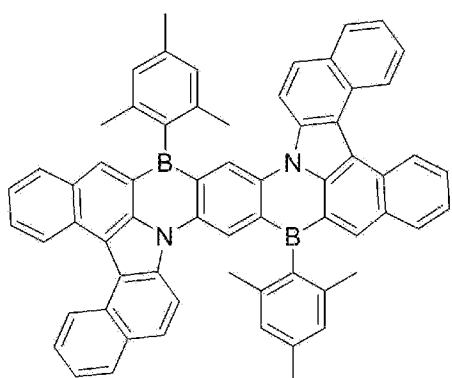
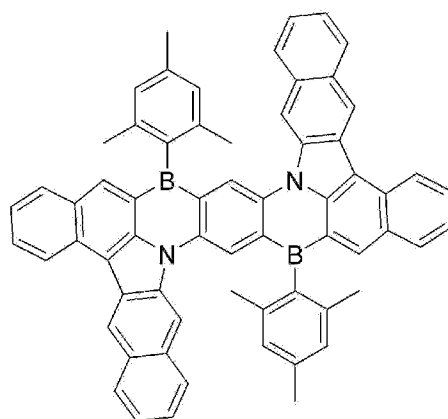
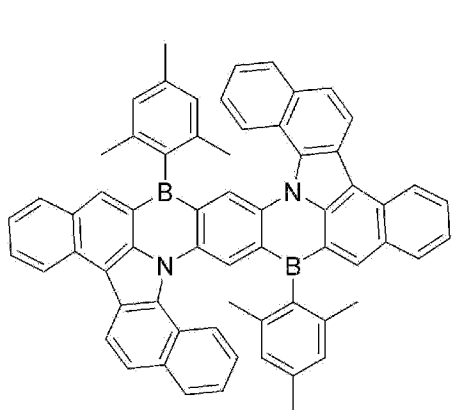


[0139] 一般式 (24 a) において、 R^{75} および R^{76} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 $m75$ および $m76$ は各々独立に0~4の整数を表す。 Y^{29} および Y^{30} は、各々独立に水素原子2個、単結合またはN (R^{27})を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 A^1 、 A^2 は

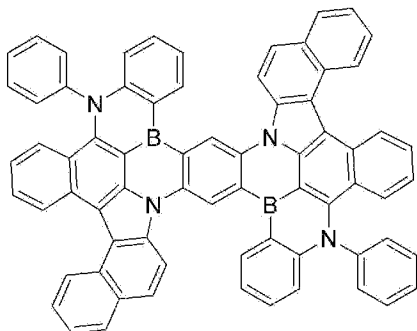
、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^{75} 、 R^{76} 、 m^{75} 、 m^{76} 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(23a)の R^{71} 、 R^{72} 、 m^{71} 、 m^{72} 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

[0140] 以下において、一般式(24a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(24a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

[化69-1]



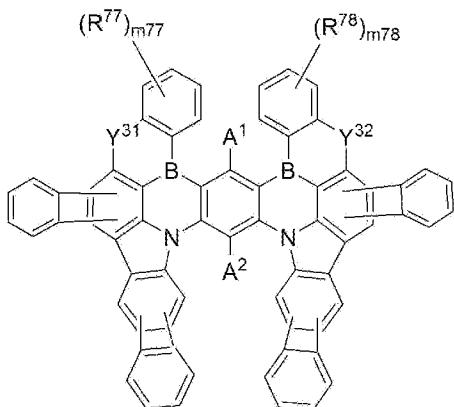
[化69-2]



[0141] 骨格(24b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(24b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(24b)

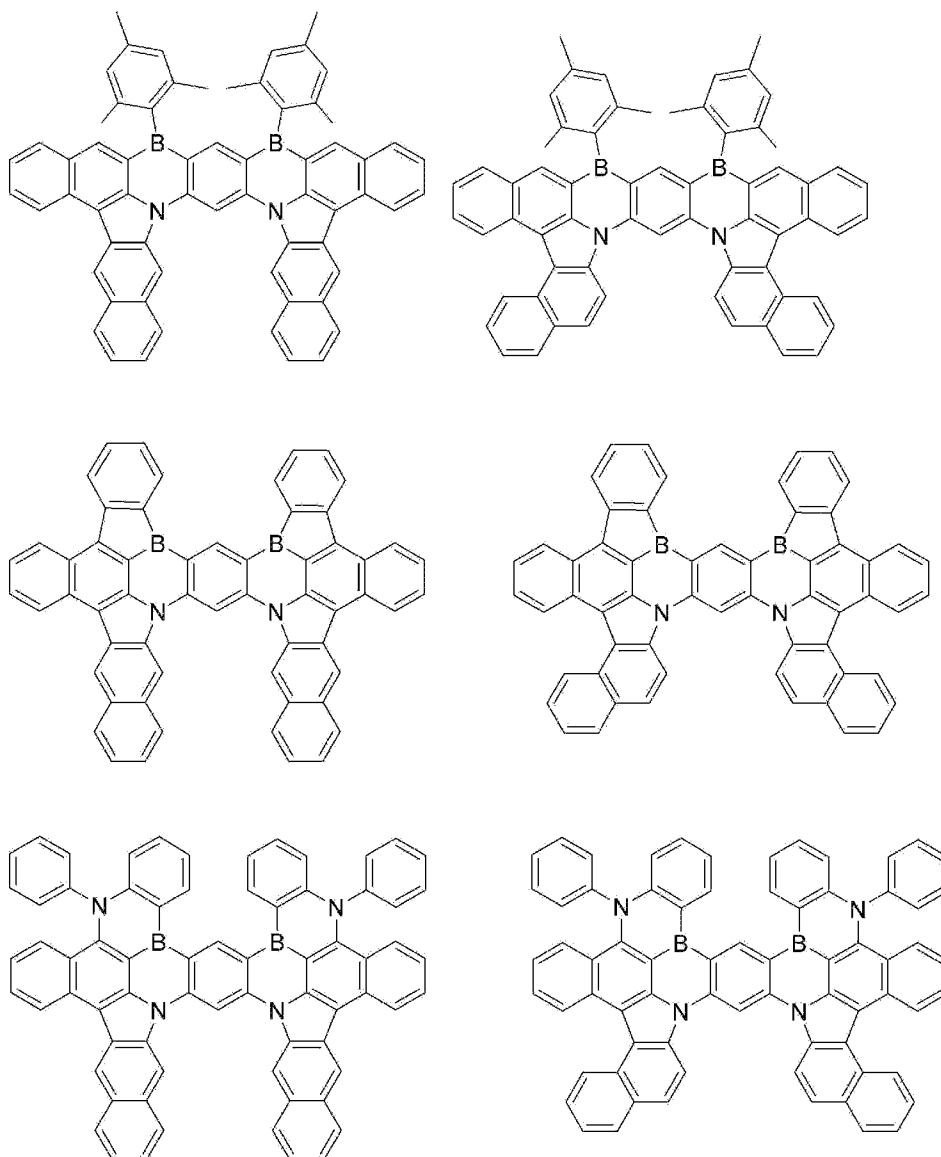
[化70]



[0142] 一般式(24b)において、 R^{77} および R^{78} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 $m77$ および $m78$ は各々独立に0~4の整数を表す。 Y^{31} および Y^{32} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^{77} 、 R^{78} 、 $m77$ 、 $m78$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(23a)の R^{71} 、 R^{72} 、 $m71$ 、 $m72$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

[0143] 以下において、一般式(24b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(24b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

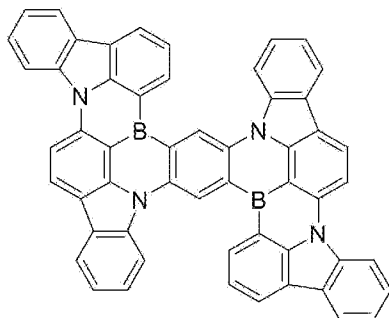
[化71]



[0144] 一般式（１６）で表される化合物としては、分子内に４つ以上のカルバゾール部分構造を含む化合物も好ましい。そのような化合物の例として、下記の骨格（２５）を有する化合物を例示することができる。

骨格（２５）

[化72]

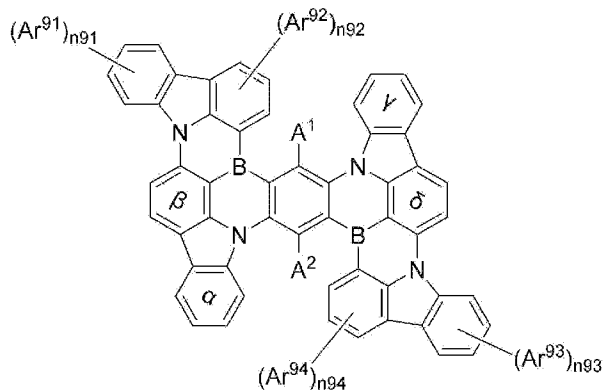


[0145] 骨格（２５）における各水素原子は、重水素原子または置換基に置換されていてもよい。また、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していてもよい。詳細については、一般式（１６）の対応する $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。骨格（２５）に含まれているカルバゾール部分構造を構成するベンゼン環の少なくとも１つの水素原子は、置換もしくは無置換のアリール基で置換されている。本発明の一態様では、骨格（２５）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0146] 骨格（２５）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（２５）で表される化合物を例示することができる。

一般式（２５）

[化73]



[0147] 一般式（２５）において、 $Ar^{91} \sim Ar^{94}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 n_{91} および n_{93} は各々独立に０～４の整数を表し、 n_{92} および n_{94} は

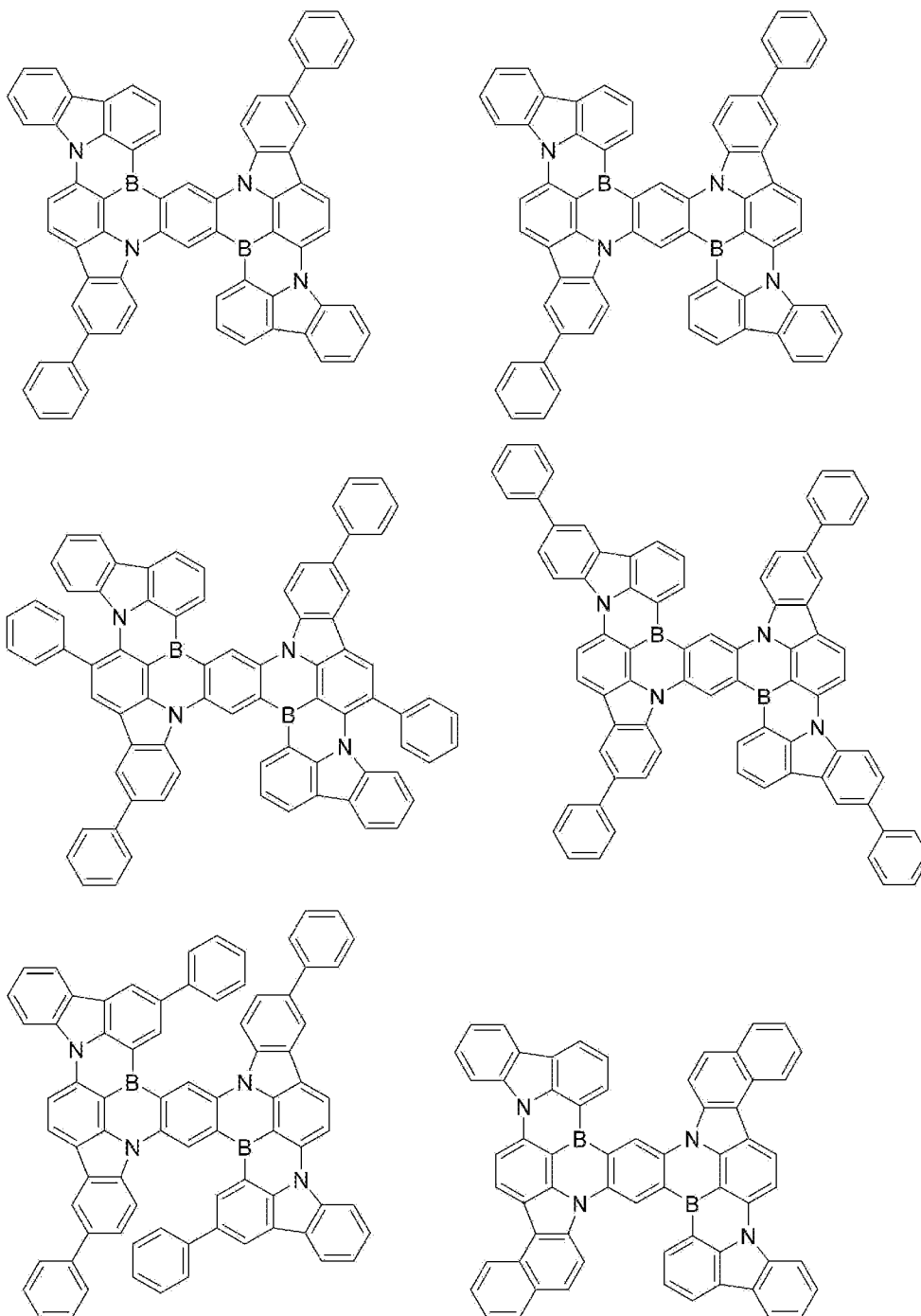
各々独立に0～3の整数を表す。 α 環、 β 環、 γ 環、 δ 環は置換されていてもよく、少なくとも1つの環は、置換もしくは無置換のアリール基で置換されているか、置換されていてもよいベンゼン環が縮合しているか、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環または置換もしくは無置換のチオフェンのチオフェン環が縮合している。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

本発明の一態様では、 $n_{91} \sim n_{94}$ は0～2の整数である。本発明の一態様では、 n_{91} と n_{93} は同じ数であり、 n_{92} と n_{94} は同じ数である。 $n_{91} \sim n_{94}$ はすべてが同じ数であってもよく、例えばいずれも0であってもよいし、いずれも1であってもよい。 $Ar^{91} \sim Ar^{94}$ の好ましい基については、一般式(16a)の $Ar^1 \sim Ar^4$ の対応する記載を参照することができる。本発明の一態様では、 α 環と γ 環は同じ置換基を有しているか、同じ縮合構造を有しており、 β 環と δ 環は同じ置換基を有しているか、同じ縮合構造を有している。本発明の一態様では、 β 環と δ 環がともに置換もしくは無置換のアリール基で置換されているか、置換されていてもよいベンゼン環が縮合しているか、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環または置換もしくは無置換のチオフェンのチオフェン環が縮合している。本発明の一態様では、 α 環と γ 環がともに置換もしくは無置換のアリール基で置換されているか、置換されていてもよいベンゼン環が縮合しているか、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環または置換もしくは無置換のチオフェンのチオフェン環が縮合している。本発明の一態様では、 α 環、 β 環、 γ 環、 δ 環のすべてが、置換もしくは無置換のアリール基で置換されているか、置換されていてもよいベンゼン環が縮合しているか、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環または置換もしくは無置換のチオフェンのチオフェン環が縮合している。 A^1 および A^2 の説明と好ましい範囲については、一般式(16)の対応する記載を参照することができる。

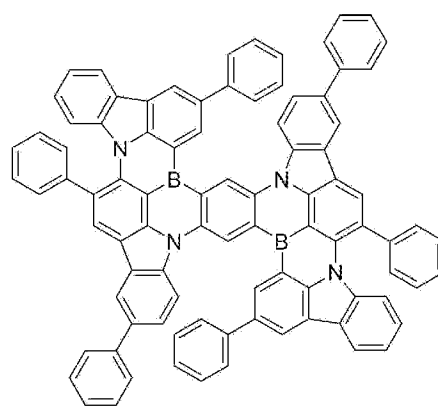
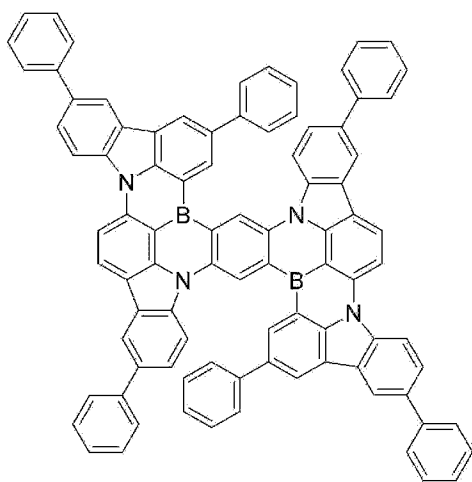
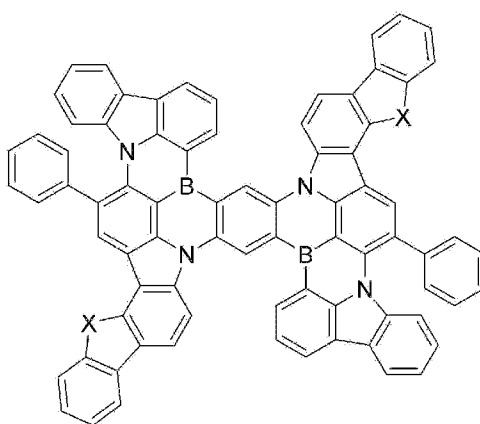
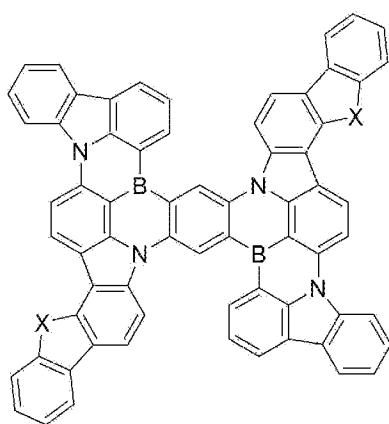
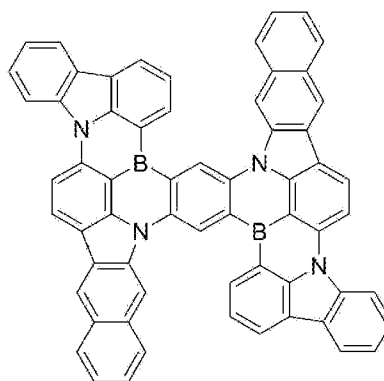
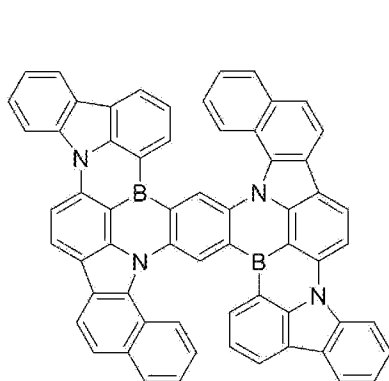
[0148] 以下において、一般式(25)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(25)の化合物は、下記の具体例により限

定的に解釈されることはない。

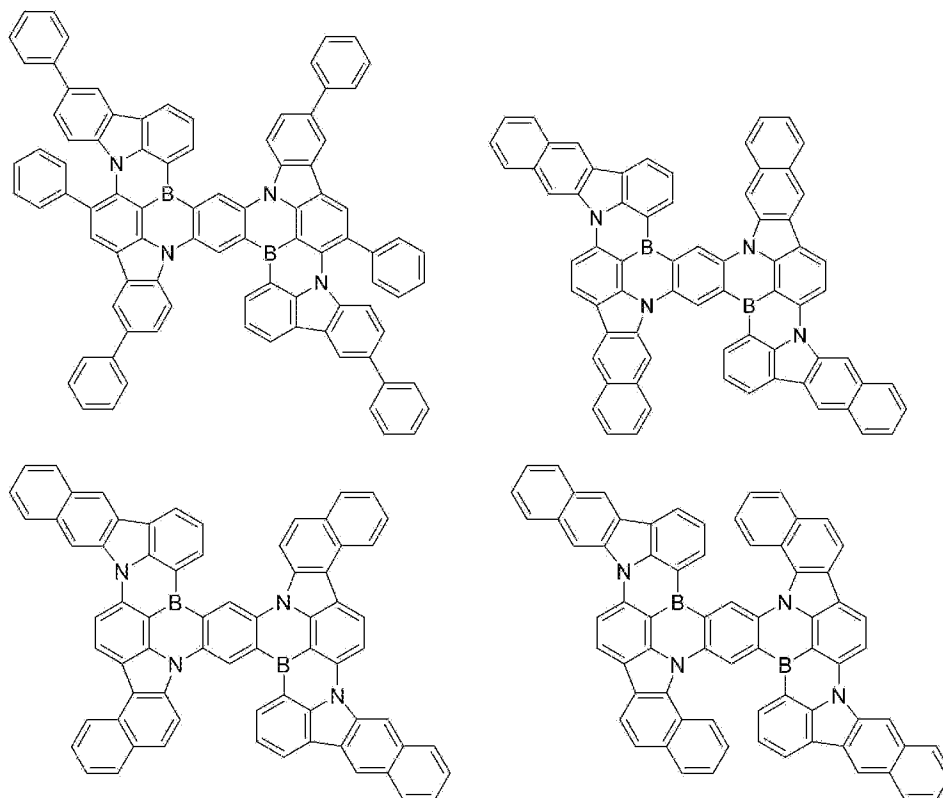
[化74-1]



[化74-2]



[化74-3]



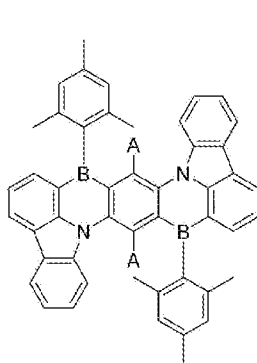
[0149] 本発明の一態様では、上記骨格（16a）～（25）は、他の環が縮合していない骨格である。本発明の一態様では、上記骨格（16a）～（25）は、他の環が縮合していてもよい骨格である。ここでいう他の環については、上記の R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} が互いに結合して形成する環状構造の記載を参照することができる。

[0150] 本発明の一態様では、一般式（16）の A^1 と A^2 がアクセプター性基である。例えば、 A^1 と A^2 の位置がアクセプター性基であり、骨格（16a）～（25）のいずれかを有する化合物を挙げることができる。アクセプター性基の説明と具体例については、上記の一般式（16）の A^1 と A^2 のアクセプター性基の説明と具体例を参照することができる。

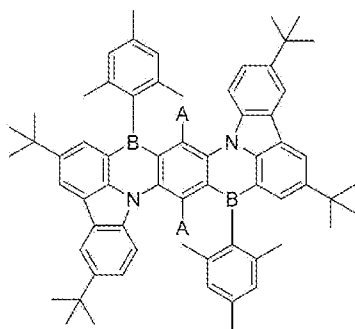
以下において、 A^1 と A^2 がアクセプター性基である化合物の具体例を挙げ

る。本発明で用いることができる A^1 と A^2 がアクセプター性基である化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。以下の具体例は、 A^1 と A^2 がともに「A」である構造を有しており、その「A」を個別に特定することにより各化合物の構造を特定している。

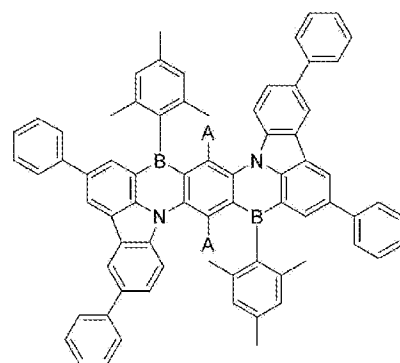
[化75-1]



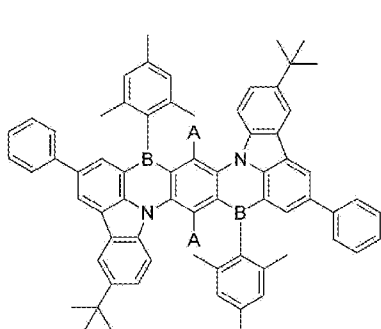
1 a : A=A 1
1 b : A=A 2
1 c : A=A 3
1 d : A=A 4
1 e : A=A 7
1 f : A=A 10
1 g : A=A 11
1 h : A=A 16
1 i : A=A 35
1 j : A=A 39
1 k : A=A 40
1 l : A=A 41
1 m : A=A 42



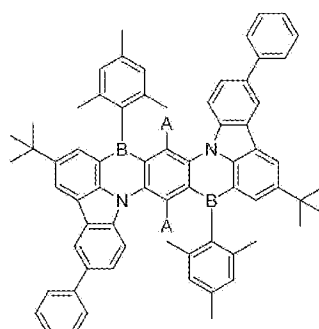
2 a : A=A 1
2 b : A=A 2
2 c : A=A 3
2 d : A=A 4
2 e : A=A 7
2 f : A=A 10
2 g : A=A 11
2 h : A=A 16
2 i : A=A 35
2 j : A=A 39
2 k : A=A 40
2 l : A=A 41
2 m : A=A 42



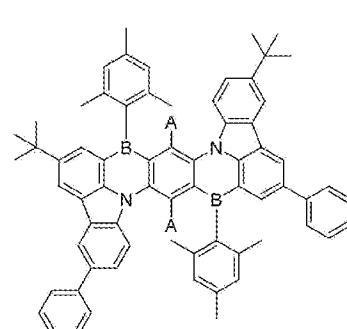
3 a : A=A 1
3 b : A=A 2
3 c : A=A 3
3 d : A=A 4
3 e : A=A 7
3 f : A=A 10
3 g : A=A 11
3 h : A=A 16
3 i : A=A 35
3 j : A=A 39
3 k : A=A 40
3 l : A=A 41
3 m : A=A 42



4 a : A=A 1
4 b : A=A 2
4 c : A=A 3
4 d : A=A 4
4 e : A=A 7
4 f : A=A 10
4 g : A=A 11
4 h : A=A 16
4 i : A=A 35
4 j : A=A 39
4 k : A=A 40
4 l : A=A 41
4 m : A=A 42

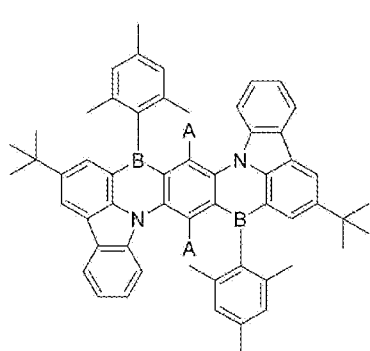


5 a : A=A 1
5 b : A=A 2
5 c : A=A 3
5 d : A=A 4
5 e : A=A 7
5 f : A=A 10
5 g : A=A 11
5 h : A=A 16
5 i : A=A 35
5 j : A=A 39
5 k : A=A 40
5 l : A=A 41
5 m : A=A 42

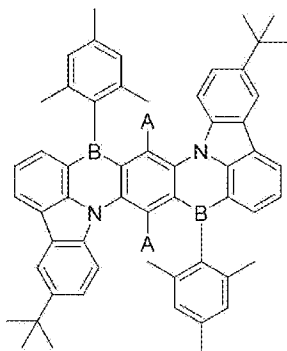


6 a : A=A 1
6 b : A=A 2
6 c : A=A 3
6 d : A=A 4
6 e : A=A 7
6 f : A=A 10
6 g : A=A 11
6 h : A=A 16
6 i : A=A 35
6 j : A=A 39
6 k : A=A 40
6 l : A=A 41
6 m : A=A 42

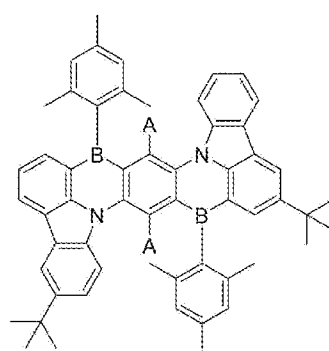
[化75-2]



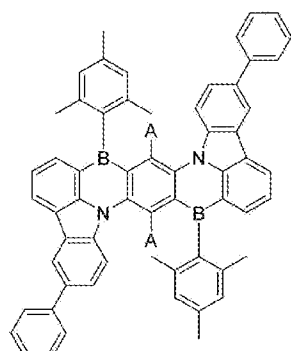
7 a : A=A 1
7 b : A=A 2
7 c : A=A 3
7 d : A=A 4
7 e : A=A 7
7 f : A=A 10
7 g : A=A 11
7 h : A=A 16
7 i : A=A 35
7 j : A=A 39
7 k : A=A 40
7 l : A=A 41
7 m : A=A 42



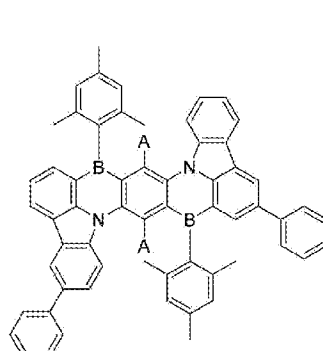
8 a : A=A 1
8 b : A=A 2
8 c : A=A 3
8 d : A=A 4
8 e : A=A 7
8 f : A=A 10
8 g : A=A 11
8 h : A=A 16
8 i : A=A 35
8 j : A=A 39
8 k : A=A 40
8 l : A=A 41
8 m : A=A 42



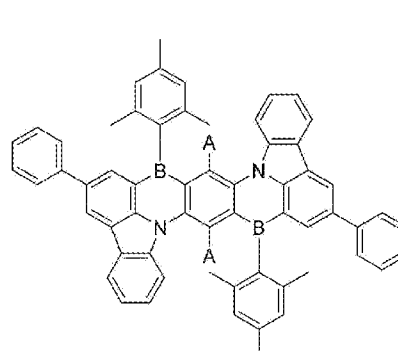
9 a : A=A 1
9 b : A=A 2
9 c : A=A 3
9 d : A=A 4
9 e : A=A 7
9 f : A=A 10
9 g : A=A 11
9 h : A=A 16
9 i : A=A 35
9 j : A=A 39
9 k : A=A 40
9 l : A=A 41
9 m : A=A 42



10 a : A=A 1
10 b : A=A 2
10 c : A=A 3
10 d : A=A 4
10 e : A=A 7
10 f : A=A 10
10 g : A=A 11
10 h : A=A 16
10 i : A=A 35
10 j : A=A 39
10 k : A=A 40
10 l : A=A 41
10 m : A=A 42

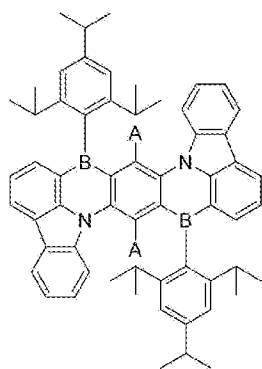


11 a : A=A 1
11 b : A=A 2
11 c : A=A 3
11 d : A=A 4
11 e : A=A 7
11 f : A=A 10
11 g : A=A 11
11 h : A=A 16
11 i : A=A 35
11 j : A=A 39
11 k : A=A 40
11 l : A=A 41
11 m : A=A 42

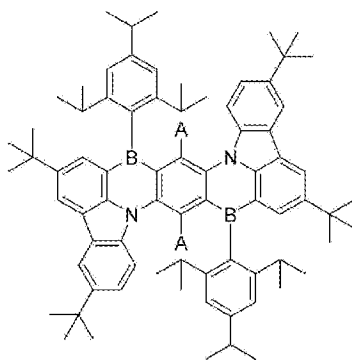


12 a : A=A 1
12 b : A=A 2
12 c : A=A 3
12 d : A=A 4
12 e : A=A 7
12 f : A=A 10
12 g : A=A 11
12 h : A=A 16
12 i : A=A 35
12 j : A=A 39
12 k : A=A 40
12 l : A=A 41
12 m : A=A 42

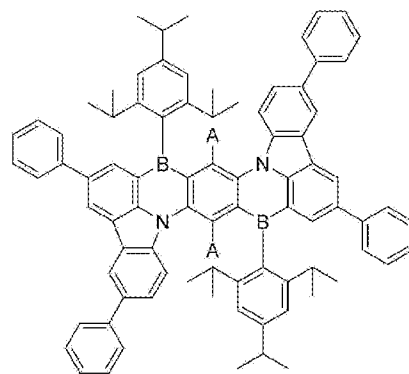
[化75-3]



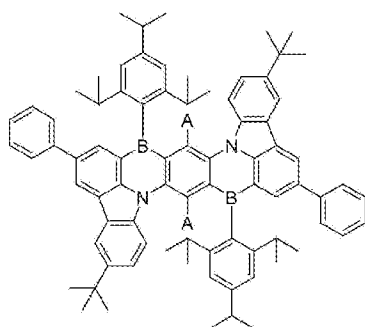
13 a : A=A 1
13 b : A=A 2
13 c : A=A 3
13 d : A=A 4
13 e : A=A 7
13 f : A=A 10
13 g : A=A 11
13 h : A=A 16
13 i : A=A 35
13 j : A=A 39
13 k : A=A 40
13 l : A=A 41
13 m : A=A 42



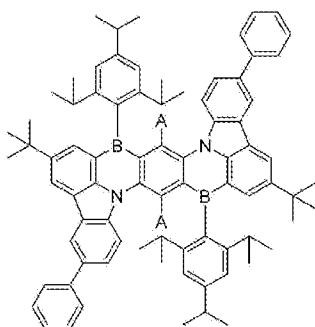
14 a : A=A 1
14 b : A=A 2
14 c : A=A 3
14 d : A=A 4
14 e : A=A 7
14 f : A=A 10
14 g : A=A 11
14 h : A=A 16
14 i : A=A 35
14 j : A=A 39
14 k : A=A 40
14 l : A=A 41
14 m : A=A 42



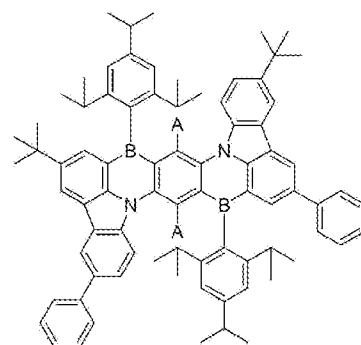
15 a : A=A 1
15 b : A=A 2
15 c : A=A 3
15 d : A=A 4
15 e : A=A 7
15 f : A=A 10
15 g : A=A 11
15 h : A=A 16
15 i : A=A 35
15 j : A=A 39
15 k : A=A 40
15 l : A=A 41
15 m : A=A 42



16 a : A=A 1
16 b : A=A 2
16 c : A=A 3
16 d : A=A 4
16 e : A=A 7
16 f : A=A 10
16 g : A=A 11
16 h : A=A 16
16 i : A=A 35
16 j : A=A 39
16 k : A=A 40
16 l : A=A 41
16 m : A=A 42

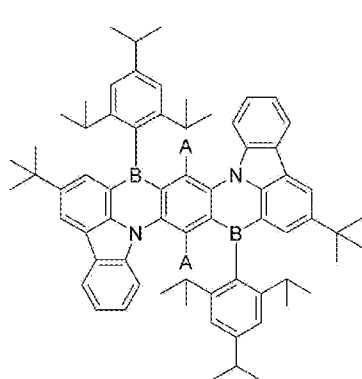


17 a : A=A 1
17 b : A=A 2
17 c : A=A 3
17 d : A=A 4
17 e : A=A 7
17 f : A=A 10
17 g : A=A 11
17 h : A=A 16
17 i : A=A 35
17 j : A=A 39
17 k : A=A 40
17 l : A=A 41
17 m : A=A 42

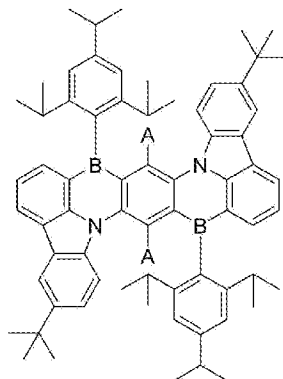


18 a : A=A 1
18 b : A=A 2
18 c : A=A 3
18 d : A=A 4
18 e : A=A 7
18 f : A=A 10
18 g : A=A 11
18 h : A=A 16
18 i : A=A 35
18 j : A=A 39
18 k : A=A 40
18 l : A=A 41
18 m : A=A 42

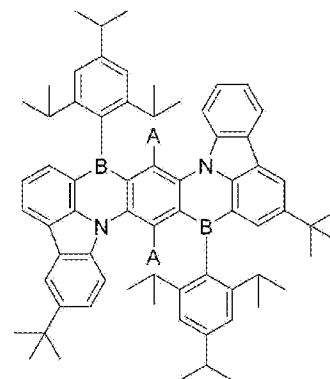
[化75-4]



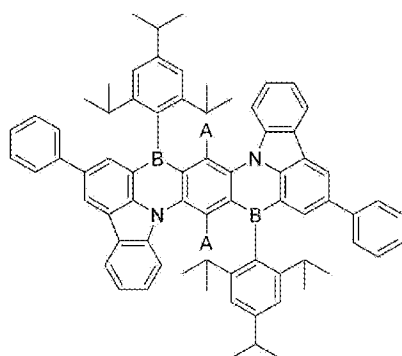
19 a : A=A 1
19 b : A=A 2
19 c : A=A 3
19 d : A=A 4
19 e : A=A 7
19 f : A=A 10
19 g : A=A 11
19 h : A=A 16
19 i : A=A 35
19 j : A=A 39
19 k : A=A 40
19 l : A=A 41
19 m : A=A 42



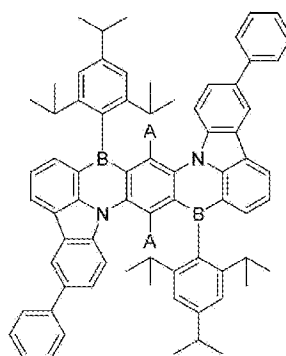
20 a : A=A 1
20 b : A=A 2
20 c : A=A 3
20 d : A=A 4
20 e : A=A 7
20 f : A=A 10
20 g : A=A 11
20 h : A=A 16
20 i : A=A 35
20 j : A=A 39
20 k : A=A 40
20 l : A=A 41
20 m : A=A 42



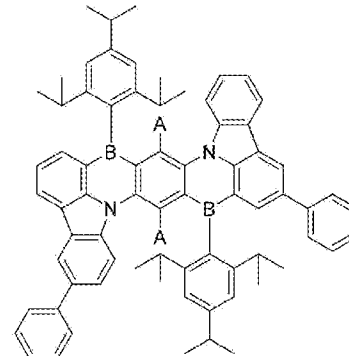
21 a : A=A 1
21 b : A=A 2
21 c : A=A 3
21 d : A=A 4
21 e : A=A 7
21 f : A=A 10
21 g : A=A 11
21 h : A=A 16
21 i : A=A 35
21 j : A=A 39
21 k : A=A 40
21 l : A=A 41
21 m : A=A 42



22 a : A=A 1
22 b : A=A 2
22 c : A=A 3
22 d : A=A 4
22 e : A=A 7
22 f : A=A 10
22 g : A=A 11
22 h : A=A 16
22 i : A=A 35
22 j : A=A 39
22 k : A=A 40
22 l : A=A 41
22 m : A=A 42

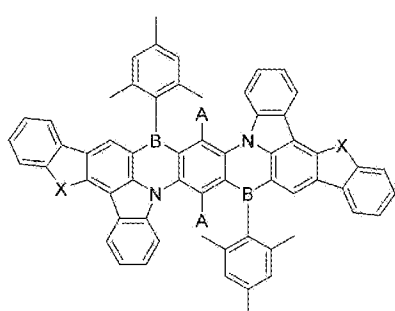
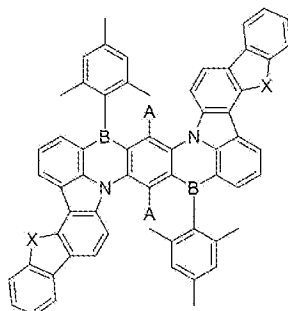
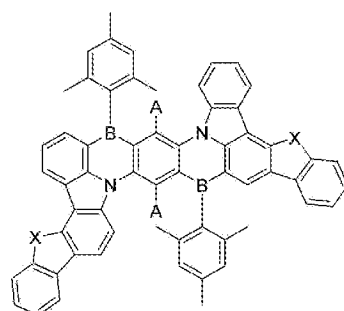
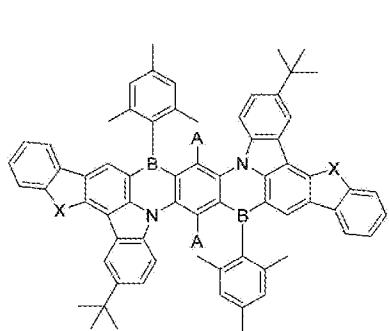
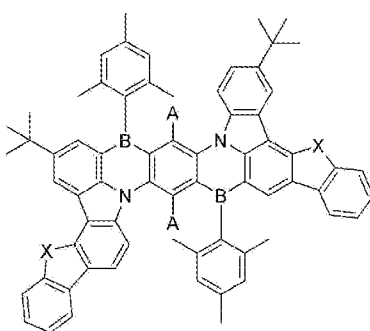
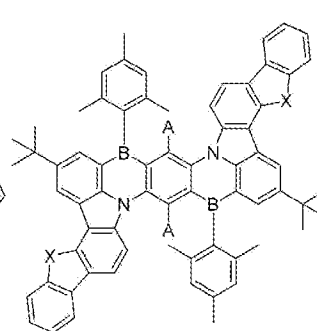


23 a : A=A 1
23 b : A=A 2
23 c : A=A 3
23 d : A=A 4
23 e : A=A 7
23 f : A=A 10
23 g : A=A 11
23 h : A=A 16
23 i : A=A 35
23 j : A=A 39
23 k : A=A 40
23 l : A=A 41
23 m : A=A 42

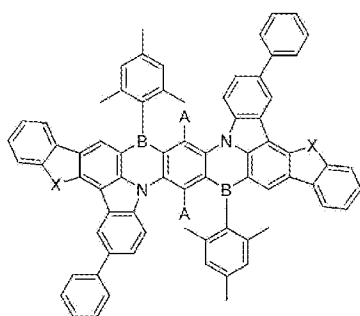


24 a : A=A 1
24 b : A=A 2
24 c : A=A 3
24 d : A=A 4
24 e : A=A 7
24 f : A=A 10
24 g : A=A 11
24 h : A=A 16
24 i : A=A 35
24 j : A=A 39
24 k : A=A 40
24 l : A=A 41
24 m : A=A 42

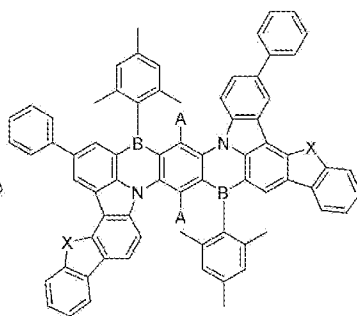
[化75-5]

25 a : A=A 125 b : A=A 225 c : A=A 325 d : A=A 425 e : A=A 725 f : A=A 1025 g : A=A 1125 h : A=A 1625 i : A=A 3525 j : A=A 3925 k : A=A 4025 l : A=A 4125 m : A=A 4226 a : A=A 126 b : A=A 226 c : A=A 326 d : A=A 426 e : A=A 726 f : A=A 1026 g : A=A 1126 h : A=A 1626 i : A=A 3526 j : A=A 3926 k : A=A 4026 l : A=A 4126 m : A=A 4227 a : A=A 127 b : A=A 227 c : A=A 327 d : A=A 427 e : A=A 727 f : A=A 1027 g : A=A 1127 h : A=A 1627 i : A=A 3527 j : A=A 3927 k : A=A 4027 l : A=A 4127 m : A=A 4228 a : A=A 128 b : A=A 228 c : A=A 328 d : A=A 428 e : A=A 728 f : A=A 1028 g : A=A 1128 h : A=A 1628 i : A=A 3528 j : A=A 3928 k : A=A 4028 l : A=A 4128 m : A=A 4229 a : A=A 129 b : A=A 229 c : A=A 329 d : A=A 429 e : A=A 729 f : A=A 1029 g : A=A 1129 h : A=A 1629 i : A=A 3529 j : A=A 3929 k : A=A 4029 l : A=A 4129 m : A=A 4230 a : A=A 130 b : A=A 230 c : A=A 330 d : A=A 430 e : A=A 730 f : A=A 1030 g : A=A 1130 h : A=A 1630 i : A=A 3530 j : A=A 3930 k : A=A 4030 l : A=A 4130 m : A=A 42

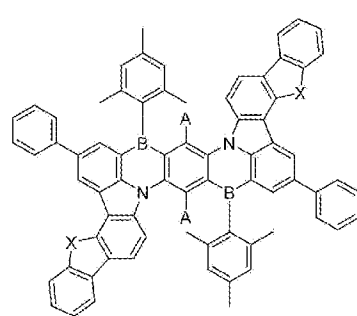
[化75-6]



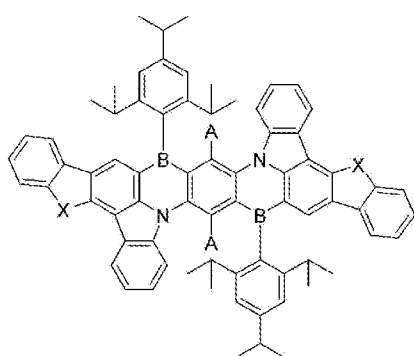
31 a : A=A 1
31 b : A=A 2
31 c : A=A 3
31 d : A=A 4
31 e : A=A 7
31 f : A=A 10
31 g : A=A 11
31 h : A=A 16
31 i : A=A 35
31 j : A=A 39
31 k : A=A 40
31 l : A=A 41
31 m : A=A 42



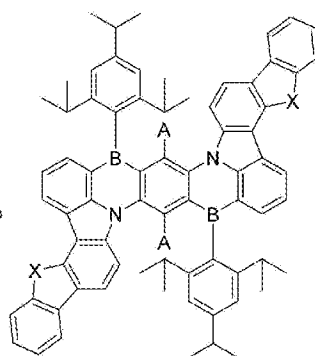
32 a : A=A 1
32 b : A=A 2
32 c : A=A 3
32 d : A=A 4
32 e : A=A 7
32 f : A=A 10
32 g : A=A 11
32 h : A=A 16
32 i : A=A 35
32 j : A=A 39
32 k : A=A 40
32 l : A=A 41
32 m : A=A 42



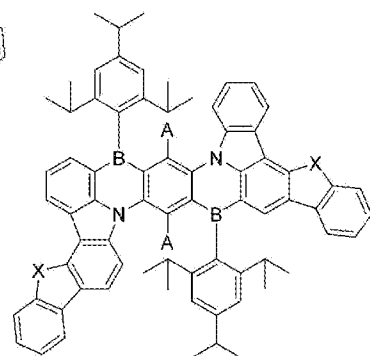
33 a : A=A 1
33 b : A=A 2
33 c : A=A 3
33 d : A=A 4
33 e : A=A 7
33 f : A=A 10
33 g : A=A 11
33 h : A=A 16
33 i : A=A 35
33 j : A=A 39
33 k : A=A 40
33 l : A=A 41
33 m : A=A 42



34 a : A=A 1
34 b : A=A 2
34 c : A=A 3
34 d : A=A 4
34 e : A=A 7
34 f : A=A 10
34 g : A=A 11
34 h : A=A 16
34 i : A=A 35
34 j : A=A 39
34 k : A=A 40
34 l : A=A 41
34 m : A=A 42

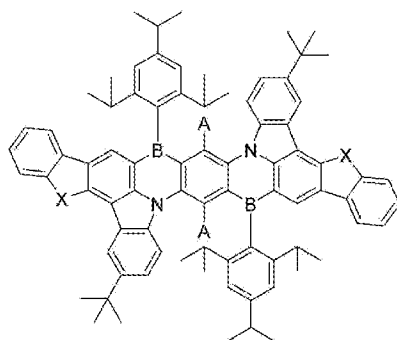


35 a : A=A 1
35 b : A=A 2
35 c : A=A 3
35 d : A=A 4
35 e : A=A 7
35 f : A=A 10
35 g : A=A 11
35 h : A=A 16
35 i : A=A 35
35 j : A=A 39
35 k : A=A 40
35 l : A=A 41
35 m : A=A 42

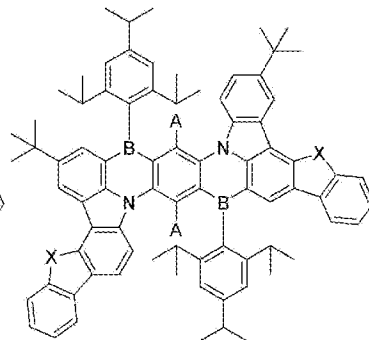


36 a : A=A 1
36 b : A=A 2
36 c : A=A 3
36 d : A=A 4
36 e : A=A 7
36 f : A=A 10
36 g : A=A 11
36 h : A=A 16
36 i : A=A 35
36 j : A=A 39
36 k : A=A 40
36 l : A=A 41
36 m : A=A 42

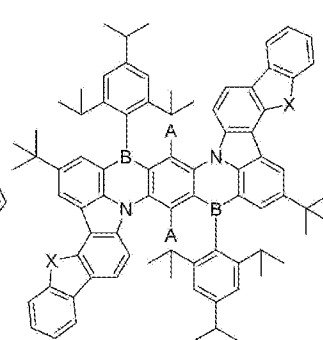
[化75-7]



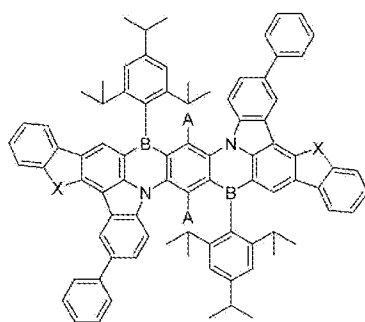
37 a : A=A 1
37 b : A=A 2
37 c : A=A 3
37 d : A=A 4
37 e : A=A 7
37 f : A=A 10
37 g : A=A 11
37 h : A=A 16
37 i : A=A 35
37 j : A=A 39
37 k : A=A 40
37 l : A=A 41
37 m : A=A 42



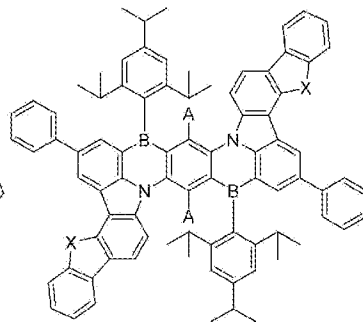
38 a : A=A 1
38 b : A=A 2
38 c : A=A 3
38 d : A=A 4
38 e : A=A 7
38 f : A=A 10
38 g : A=A 11
38 h : A=A 16
38 i : A=A 35
38 j : A=A 39
38 k : A=A 40
38 l : A=A 41
38 m : A=A 42



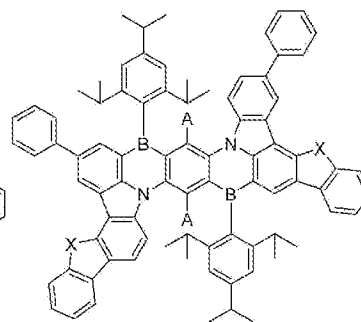
39 a : A=A 1
39 b : A=A 2
39 c : A=A 3
39 d : A=A 4
39 e : A=A 7
39 f : A=A 10
39 g : A=A 11
39 h : A=A 16
39 i : A=A 35
39 j : A=A 39
39 k : A=A 40
39 l : A=A 41
39 m : A=A 42



40 a : A=A 1
40 b : A=A 2
40 c : A=A 3
40 d : A=A 4
40 e : A=A 7
40 f : A=A 10
40 g : A=A 11
40 h : A=A 16
40 i : A=A 35
40 j : A=A 39
40 k : A=A 40
40 l : A=A 41
40 m : A=A 42

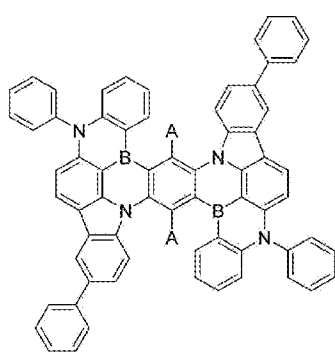


41 a : A=A 1
41 b : A=A 2
41 c : A=A 3
41 d : A=A 4
41 e : A=A 7
41 f : A=A 10
41 g : A=A 11
41 h : A=A 16
41 i : A=A 35
41 j : A=A 39
41 k : A=A 40
41 l : A=A 41
41 m : A=A 42

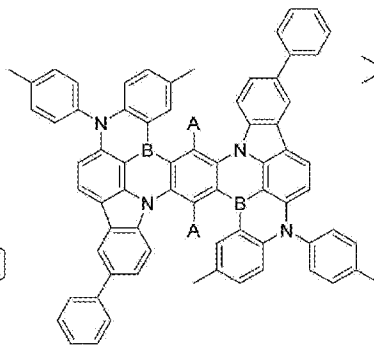


42 a : A=A 1
42 b : A=A 2
42 c : A=A 3
42 d : A=A 4
42 e : A=A 7
42 f : A=A 10
42 g : A=A 11
42 h : A=A 16
42 i : A=A 35
42 j : A=A 39
42 k : A=A 40
42 l : A=A 41
42 m : A=A 42

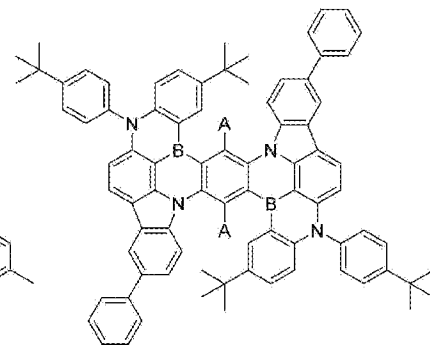
[化75-8]



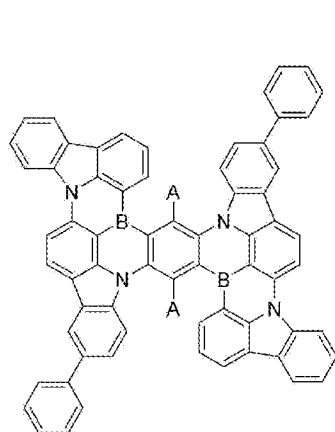
43 a : A=A 1
43 b : A=A 2
43 c : A=A 3
43 d : A=A 4
43 e : A=A 7
43 f : A=A 10
43 g : A=A 11
43 h : A=A 16
43 i : A=A 35
43 j : A=A 39
43 k : A=A 40
43 l : A=A 41
43 m : A=A 42



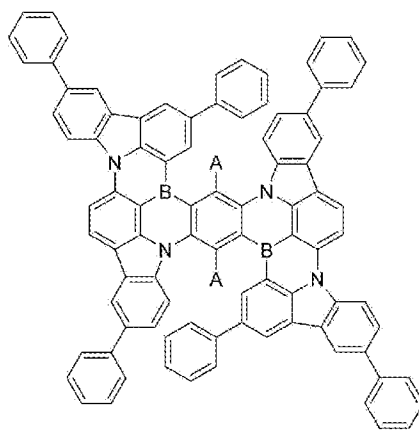
44 a : A=A 1
44 b : A=A 2
44 c : A=A 3
44 d : A=A 4
44 e : A=A 7
44 f : A=A 10
44 g : A=A 11
44 h : A=A 16
44 i : A=A 35
44 j : A=A 39
44 k : A=A 40
44 l : A=A 41
44 m : A=A 42



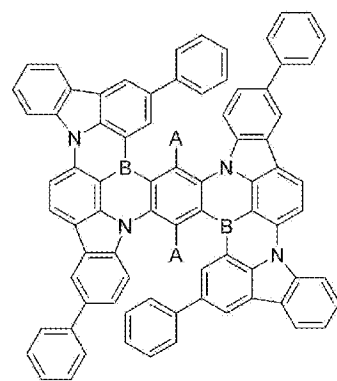
45 a : A=A 1
45 b : A=A 2
45 c : A=A 3
45 d : A=A 4
45 e : A=A 7
45 f : A=A 10
45 g : A=A 11
45 h : A=A 16
45 i : A=A 35
45 j : A=A 39
45 k : A=A 40
45 l : A=A 41
45 m : A=A 42



46 a : A=A 1
46 b : A=A 2
46 c : A=A 3
46 d : A=A 4
46 e : A=A 7
46 f : A=A 10
46 g : A=A 11
46 h : A=A 16
46 i : A=A 35
46 j : A=A 39
46 k : A=A 40
46 l : A=A 41
46 m : A=A 42

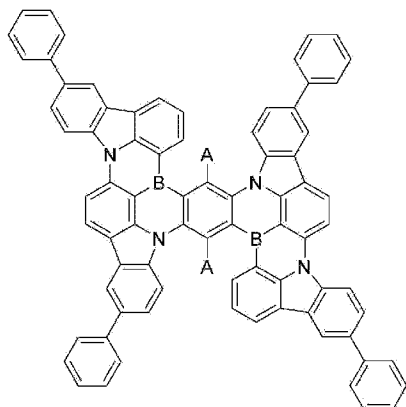


47 a : A=A 1
47 b : A=A 2
47 c : A=A 3
47 d : A=A 4
47 e : A=A 7
47 f : A=A 10
47 g : A=A 11
47 h : A=A 16
47 i : A=A 35
47 j : A=A 39
47 k : A=A 40
47 l : A=A 41
47 m : A=A 42



48 a : A=A 1
48 b : A=A 2
48 c : A=A 3
48 d : A=A 4
48 e : A=A 7
48 f : A=A 10
48 g : A=A 11
48 h : A=A 16
48 i : A=A 35
48 j : A=A 39
48 k : A=A 40
48 l : A=A 41
48 m : A=A 42

[化75-9]

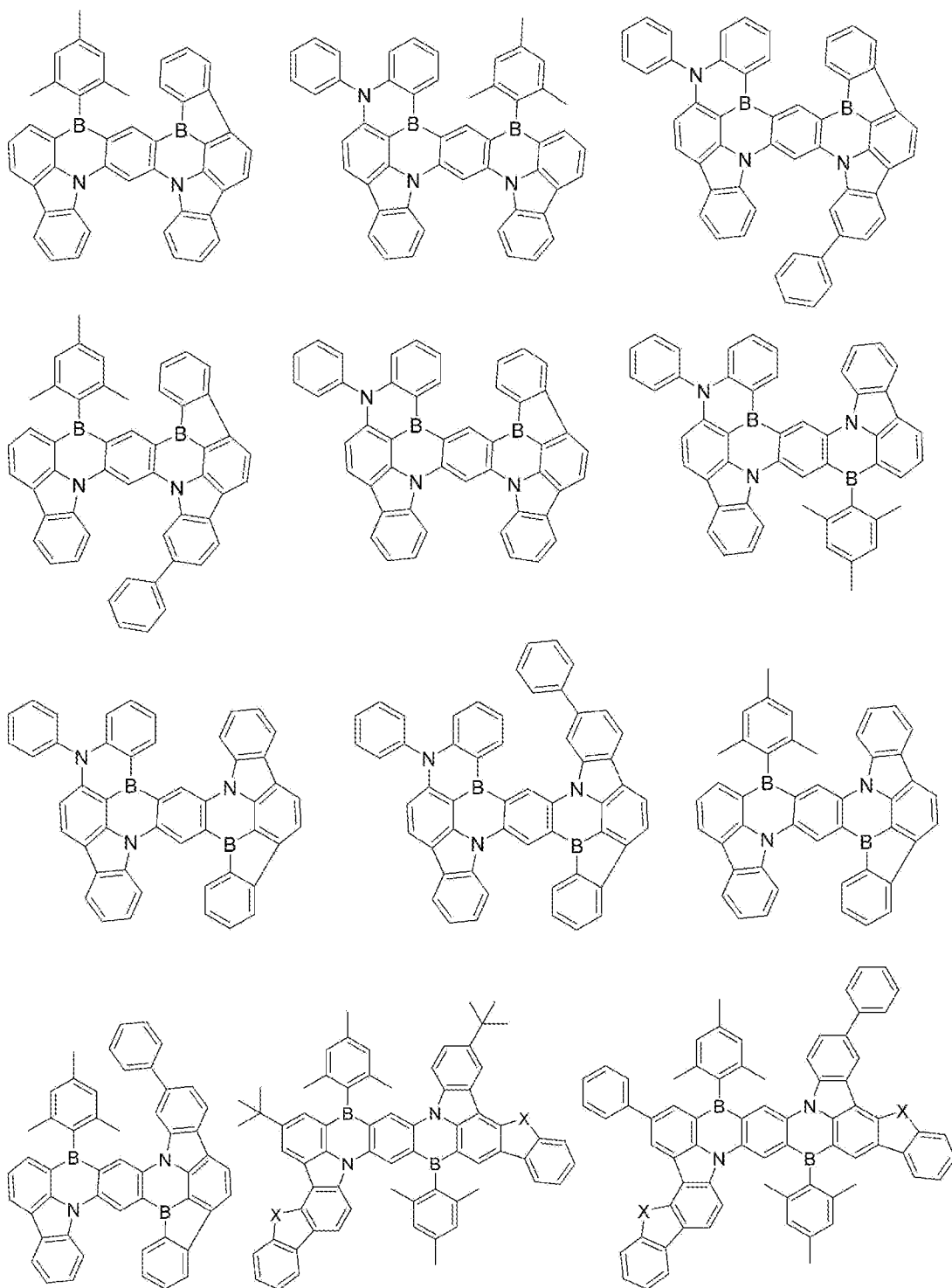


- 49 a : A = A 1
49 b : A = A 2
49 c : A = A 3
49 d : A = A 4
49 e : A = A 7
49 f : A = A 10
49 g : A = A 11
49 h : A = A 16
49 i : A = A 35
49 j : A = A 39
49 k : A = A 40
49 l : A = A 41
49 m : A = A 42

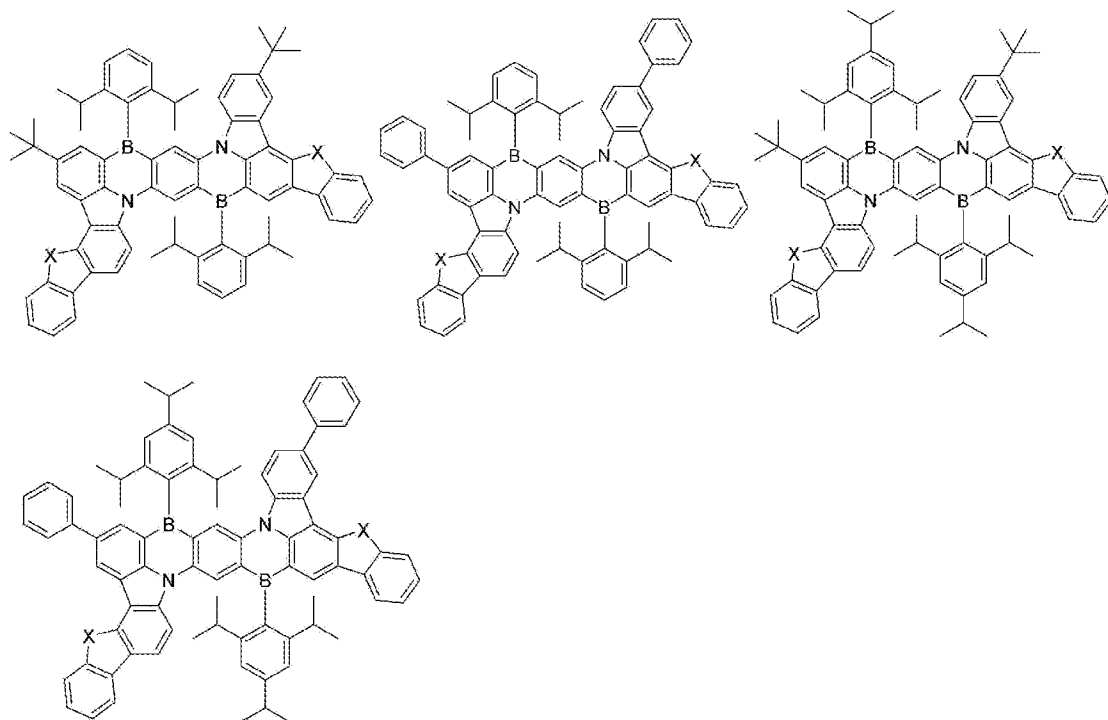
[0151] 本発明の一態様では、一般式（16）で表される化合物として回転対称構造を有する化合物を選択する。本発明の一態様では、一般式（16）で表される化合物として線対称構造を有する化合物を選択する。本発明の一態様では、一般式（16）で表される化合物として非対称構造を有する化合物を選択する。

以下に非対称骨格を有する化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる非対称骨格を有する化合物や非対称構造を有する化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

[化76-1]



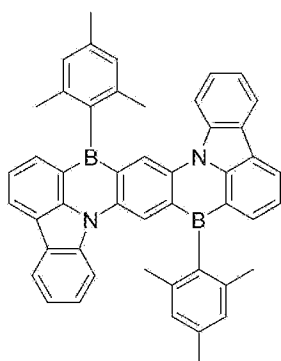
[化76-2]



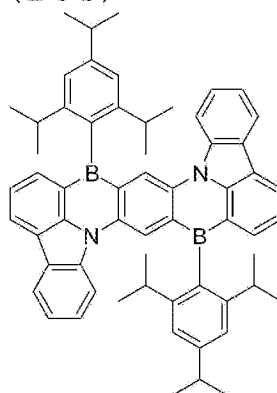
[0152] 本発明の特に好ましい態様では、第3有機化合物として、下記の骨格（26 a）または骨格（26 b）にtert-ブチル基およびフェニル基の少なくとも一方を導入した化合物を選択する。

[化77]

骨格（26 a）

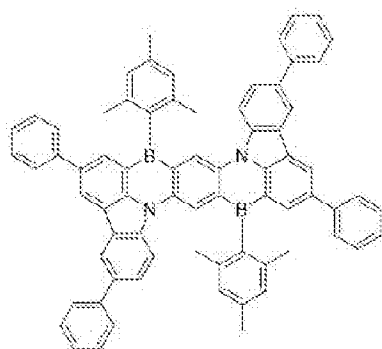
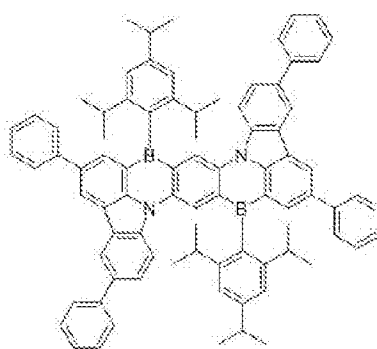
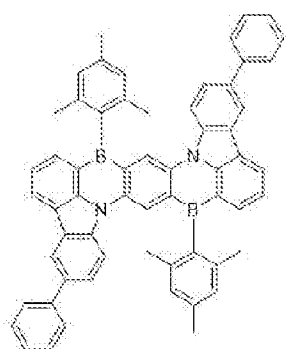
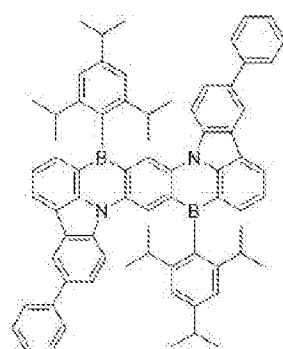
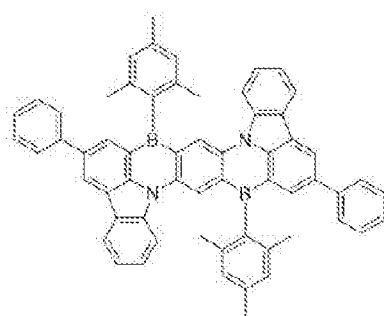
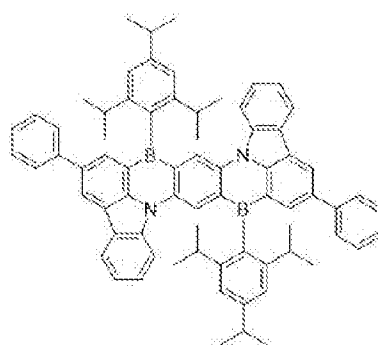
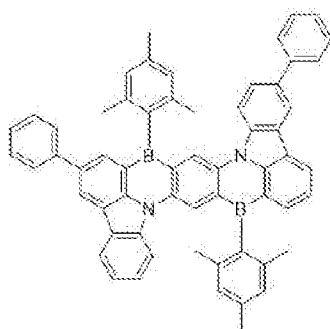
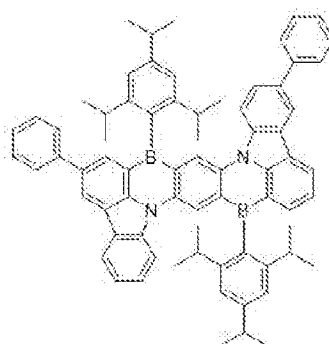


骨格（26 b）

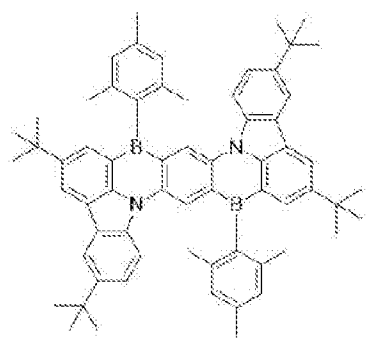
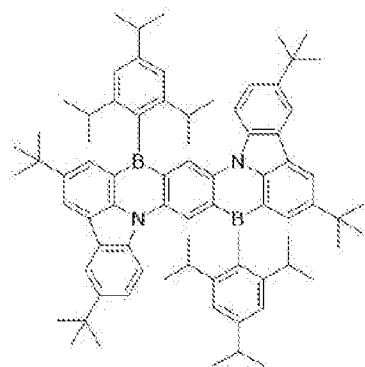
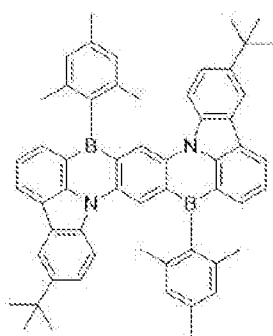
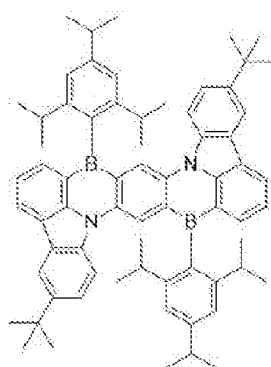
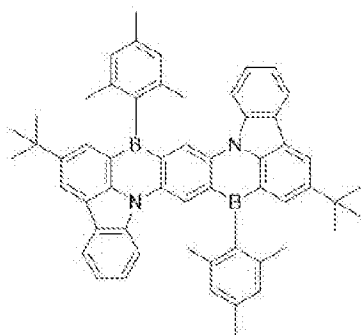
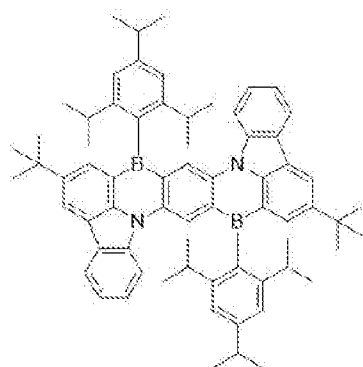


[0153] 以下において、骨格（26 a）または骨格（26 b）にtert-ブチル基およびフェニル基の少なくとも一方を導入した化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式（16）の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

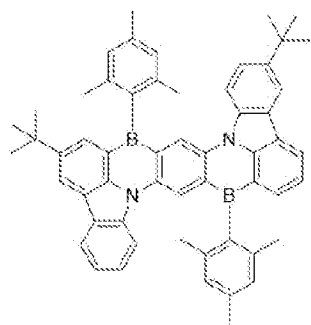
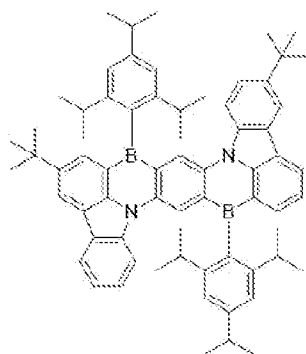
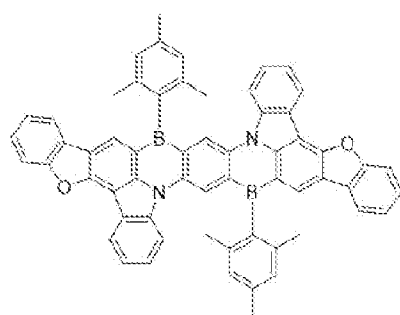
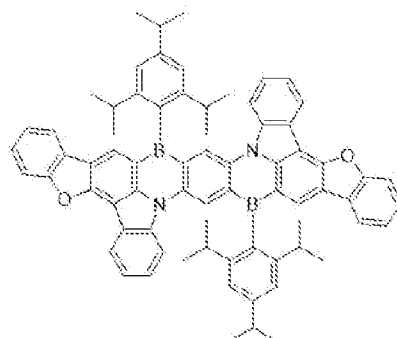
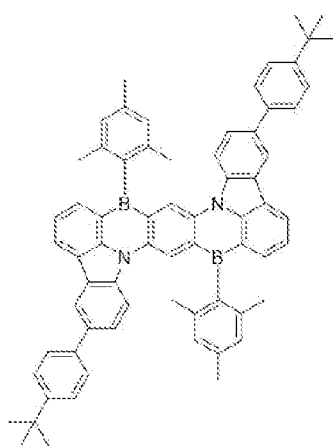
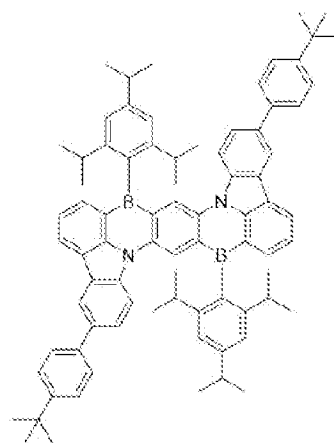
[化78-1]

F 1 0 1F 1 0 2F 1 0 3F 1 0 4F 1 0 5F 1 0 6F 1 0 7F 1 0 8

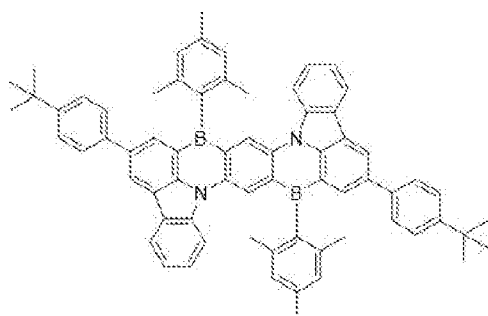
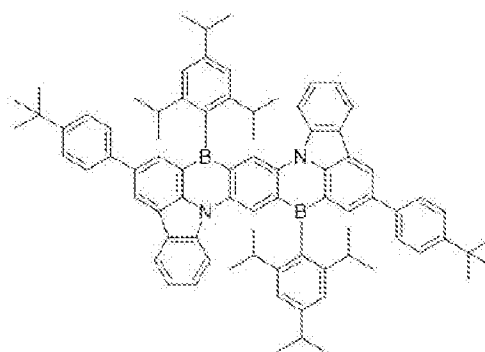
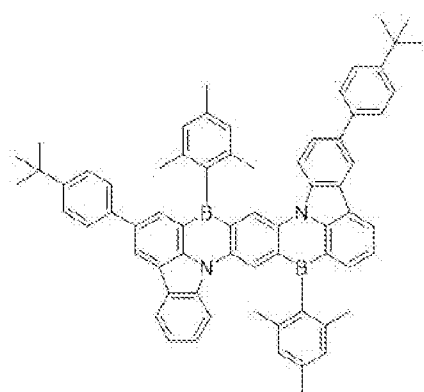
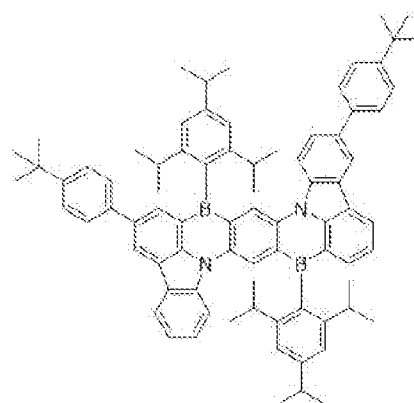
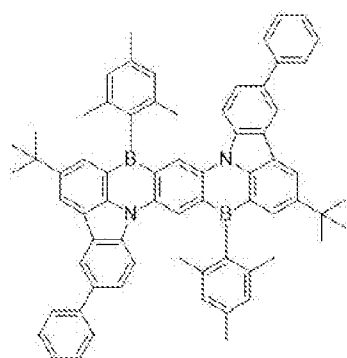
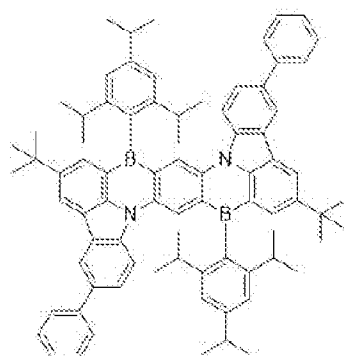
[化78-2]

F 1 0 9F 1 1 0F 1 1 1F 1 1 2F 1 1 3F 1 1 4

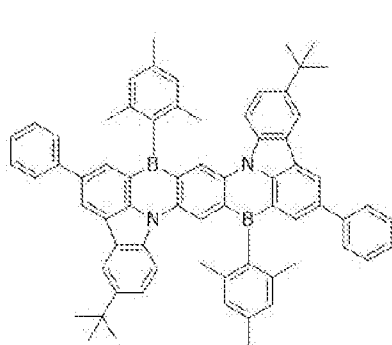
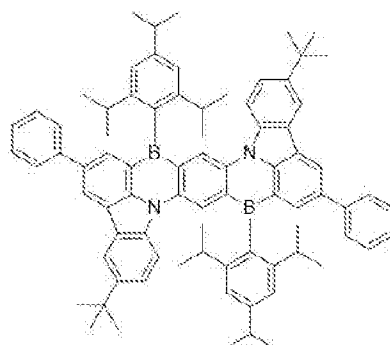
[化78-3]

F 1 1 5F 1 1 6F 1 1 7F 1 1 8F 1 1 9F 1 2 0

[化78-4]

F 1 2 1F 1 2 2F 1 2 3F 1 2 4F 1 2 5F 1 2 6

[化78-5]

F 1 2 7F 1 2 8

[0154] 一般式(16)で表される化合物の分子量は、例えば一般式(16)で表される化合物を含む有機層を蒸着法により製膜して利用することを意図する場合には、1500以下であることが好ましく、1200以下であることがより好ましく、1000以下であることがさらに好ましく、900以下であることがさらに好ましい。分子量の下限値は、一般式(16)で表される化合物群の最小化合物の分子量である。好ましくは624以上である。

一般式(16)で表される化合物は、分子量にかかわらず塗布法で成膜してもよい。塗布法を用いれば、分子量が比較的大きな化合物であっても成膜することが可能である。一般式(16)で表される化合物は有機溶媒に溶解しやすいという利点がある。このため、一般式(16)で表される化合物は塗布法を適用しやすいうえ、精製して純度を高めやすい。

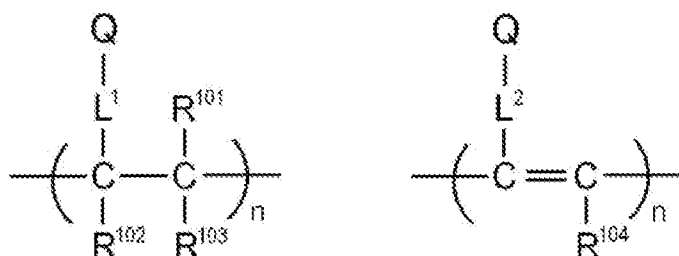
[0155] 本発明を応用して、分子内に一般式(16)で表される構造を複数個含む化合物を、発光材料として用いることも考えられる。

例えば、一般式(16)で表される構造中にあらかじめ重合性基を存在させておいて、その重合性基を重合させることによって得られる重合体を、発光材料として用いることが考えられる。具体的には、一般式(16)で表される構造のいずれかに重合性官能基を含むモノマーを用意して、これを単独で重合させるか、他のモノマーとともに共重合させることにより、繰り返し単位を有する重合体を得て、その重合体を発光材料として用いることが考えられる。あるいは、一般式(16)で表される化合物どうしをカップリング

させることにより、二量体や三量体を得て、それらを発光材料として用いることも考えられる。

[0156] 一般式(16)で表される構造を含む繰り返し単位を有する重合体の例として、下記一般式で表される構造を含む重合体を挙げることができる。

[化79]



[0157] 上記一般式において、Qは一般式(16)で表される構造を含む基を表し、 L^1 および L^2 は連結基を表す。連結基の炭素数は、好ましくは0～20であり、より好ましくは1～15であり、さらに好ましくは2～10である。連結基は $-X^{11}-L^{11}-$ で表される構造を有するものであることが好ましい。ここで、 X^{11} は酸素原子または硫黄原子を表し、酸素原子であることが好ましい。 L^{11} は連結基を表し、置換もしくは無置換のアルキレン基、または置換もしくは無置換のアリーレン基であることが好ましく、炭素数1～10の置換もしくは無置換のアルキレン基、または置換もしくは無置換のフェニレン基であることがより好ましい。

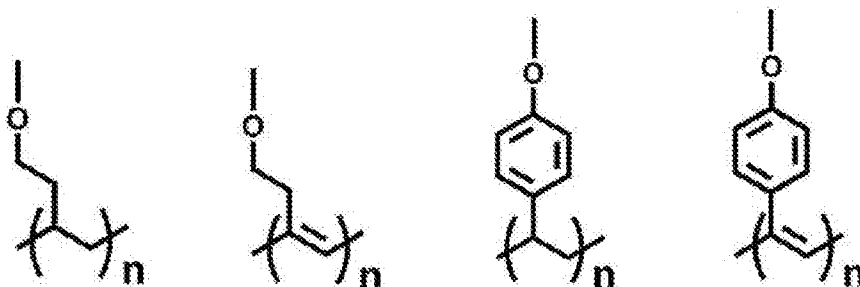
R^{101} 、 R^{102} 、 R^{103} および R^{104} は、各々独立に置換基を表す。好ましくは、炭素数1～6の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数1～6の置換もしくは無置換のアルコキシ基、ハロゲン原子であり、より好ましくは炭素数1～3の無置換のアルキル基、炭素数1～3の無置換のアルコキシ基、フッ素原子、塩素原子であり、さらに好ましくは炭素数1～3の無置換のアルキル基、炭素数1～3の無置換のアルコキシ基である。

L^1 および L^2 で表される連結基は、Qを構成する一般式(16)で表される構造のいずれかの位置に結合することができる。1つのQに対して連結基が2つ以上連結して架橋構造や網目構造を形成していてもよい。

[0158] 繰り返し単位 of 具体的な構造例として、下記式で表される構造を挙げるこ

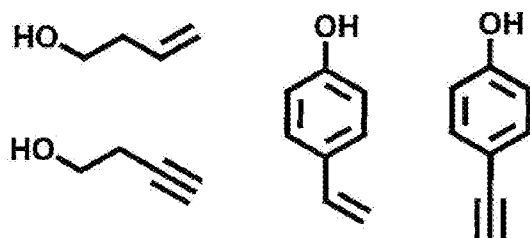
とができる。

[化80]



[0159] これらの式を含む繰り返し単位を有する重合体は、一般式（１６）で表される構造のいずれかの位置にヒドロキシ基を導入しておき、それをリンカーとして下記化合物を反応させて重合性基を導入し、その重合性基を重合させることにより合成することができる。

[化81]



[0160] 分子内に一般式（１６）で表される構造を含む重合体は、一般式（１６）で表される構造を有する繰り返し単位のみからなる重合体であってもよいし、それ以外の構造を有する繰り返し単位を含む重合体であってもよい。また、重合体の中に含まれる一般式（１６）で表される構造を有する繰り返し単位は、単一種であってもよいし、２種以上であってもよい。一般式（１６）で表される構造を有さない繰り返し単位としては、通常の共重合に用いられるモノマーから誘導されるものを挙げるることができる。例えば、エチレン、スチレンなどのエチレン性不飽和結合を有するモノマーから誘導される繰り返し単位を挙げるることができる。

[0161] 一般式（１６）で表される化合物は、金属原子を含まないことが好ましい。ここでいう金属原子にはホウ素原子は含まれない。例えば、一般式（１６

）で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式（１６）で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式（１６）で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、硫黄原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式（１６）で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。

[0162] 本明細書において「アルキル基」は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよい。また、直鎖部分と環状部分と分枝部分のうちの２種以上が混在していてもよい。アルキル基の炭素数は、例えば１以上、２以上、４以上とすることができる。また、炭素数は３０以下、２０以下、１０以下、６以下、４以下とすることができる。アルキル基の具体例として、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*tert*-ブチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、*n*-ヘキシル基、イソヘキシル基、２-エチルヘキシル基、*n*-ヘプチル基、イソヘプチル基、*n*-オクチル基、イソオクチル基、*n*-ノニル基、イソノニル基、*n*-デカニル基、イソデカニル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基を挙げることができる。置換基たるアルキル基は、さらにアリール基で置換されていてもよい。

「アルケニル基」は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよい。また、直鎖部分と環状部分と分枝部分のうちの２種以上が混在していてもよい。アルケニル基の炭素数は、例えば２以上、４以上とすることができる。ま

た、炭素数は30以下、20以下、10以下、6以下、4以下とすることができる。アルケニル基の具体例として、エテニル基、*n*-プロペニル基、イソプロペニル基、*n*-ブテニル基、イソブテニル基、*n*-ペンテニル基、イソペンテニル基、*n*-ヘキセニル基、イソヘキセニル基、2-エチルヘキセニル基を挙げることができる。置換基たるアルケニル基は、さらに置換基で置換されていてもよい。

「アリール基」および「ヘテロアリール基」は、単環であってもよいし、2つ以上の環が縮合した縮合環であってもよい。縮合環である場合、縮合している環の数は2～6であることが好ましく、例えば2～4の中から選択することができる。環の具体例として、ベンゼン環、ピリジン環、ピリミジン環、トリアジン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、トリフェニレン環、キノリン環、ピラジン環、キノキサリン環、ナフチリジン環を挙げることができ、これらが縮合した環であってもよい。アリール基またはヘテロアリール基の具体例として、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、9-アントラセニル基、2-ピリジル基、3-ピリジル基、4-ピリジル基を挙げることができる。アリール基の環骨格構成原子数は6～40であることが好ましく、6～20であることがより好ましく、6～14の範囲内で選択したり、6～10の範囲内で選択したりしてもよい。ヘテロアリール基の環骨格構成原子数は4～40であることが好ましく、5～20であることがより好ましく、5～14の範囲内で選択したり、5～10の範囲内で選択したりしてもよい。「アリーレン基」および「ヘテロアリーレン基」は、アリール基およびヘテロアリール基の説明における価数を1から2へ読み替えたものとしてすることができる。

[0163] 本明細書において「置換基群A」とは、ヒドロキシル基、ハロゲン原子（例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子）、アルキル基（例えば炭素数1～40）、アルコキシ基（例えば炭素数1～40）、アルキルチオ基（例えば炭素数1～40）、アリール基（例えば炭素数6～30）、ア

リールオキシ基（例えば炭素数 6 ～ 30）、アリールチオ基（例えば炭素数 6 ～ 30）、ヘテロアリール基（例えば環骨格構成原子数 5 ～ 30）、ヘテロアリールオキシ基（例えば環骨格構成原子数 5 ～ 30）、ヘテロアリールチオ基（例えば環骨格構成原子数 5 ～ 30）、アシル基（例えば炭素数 1 ～ 40）、アルケニル基（例えば炭素数 1 ～ 40）、アルキニル基（例えば炭素数 1 ～ 40）、アルコキシカルボニル基（例えば炭素数 1 ～ 40）、アリールオキシカルボニル基（例えば炭素数 1 ～ 40）、ヘテロアリールオキシカルボニル基（例えば炭素数 1 ～ 40）、シリル基（例えば炭素数 1 ～ 40 のトリアルキルシリル基）およびニトロ基からなる群より選択される 1 つの基または 2 つ以上を組み合わせた基を意味する。

本明細書において「置換基群 B」とは、アルキル基（例えば炭素数 1 ～ 40）、アルコキシ基（例えば炭素数 1 ～ 40）、アリール基（例えば炭素数 6 ～ 30）、アリールオキシ基（例えば炭素数 6 ～ 30）、ヘテロアリール基（例えば環骨格構成原子数 5 ～ 30）、ヘテロアリールオキシ基（例えば環骨格構成原子数 5 ～ 30）、ジアリールアミノアミノ基（例えば炭素原子数 0 ～ 20）からなる群より選択される 1 つの基または 2 つ以上を組み合わせた基を意味する。

本明細書において「置換基群 C」とは、アルキル基（例えば炭素数 1 ～ 20）、アリール基（例えば炭素数 6 ～ 22）、ヘテロアリール基（例えば環骨格構成原子数 5 ～ 20）、ジアリールアミノ基（例えば炭素原子数 12 ～ 20）からなる群より選択される 1 つの基または 2 つ以上を組み合わせた基を意味する。

本明細書において「置換基群 D」とは、アルキル基（例えば炭素数 1 ～ 20）、アリール基（例えば炭素数 6 ～ 22）およびヘテロアリール基（例えば環骨格構成原子数 5 ～ 20）からなる群より選択される 1 つの基または 2 つ以上を組み合わせた基を意味する。

本明細書において「置換基群 E」とは、アルキル基（例えば炭素数 1 ～ 20）およびアリール基（例えば炭素数 6 ～ 22）からなる群より選択される

1つの基または2つ以上を組み合わせた基を意味する。

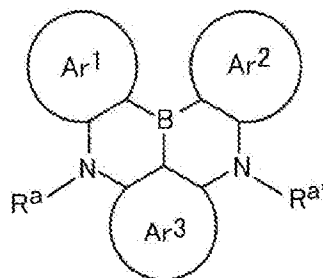
本明細書において「置換基」や「置換もしくは無置換の」と記載されている場合の置換基は、例えば置換基群Aの中から選択してもよいし、置換基群Bの中から選択してもよいし、置換基群Cの中から選択してもよいし、置換基群Dの中から選択してもよいし、置換基群Eの中から選択してもよい。

[0164] 第3有機化合物として、以下の化合物も用いることができる。

本発明の好ましい一態様では、第3有機化合物として下記一般式(27)で表される化合物を用いる。

一般式(27)

[化82]



[0165] 上記一般式(27)において、 $Ar^1 \sim Ar^3$ は各々独立に、アリール環またはヘテロアリール環であり、これらの環における少なくとも1つの水素原子は置換されていてもよく、また環が縮合していてもよい。水素原子が置換されている場合、重水素原子、アリール基、ヘテロアリール基およびアルキル基からなる群より選択される1つの基か2つ以上を組み合わせた基で置換されていることが好ましい。また、環が縮合している場合は、ベンゼン環が複素芳香環(例えばフラン環、チオフェン環、ピロール環等)が縮合していることが好ましい。 R^a および $R^{a'}$ は各々独立に置換基を表し、好ましくは、重水素原子、アリール基、ヘテロアリール基およびアルキル基からなる群より選択される1つの基か2つ以上を組み合わせた基である。 R^a と Ar^1 、 Ar^1 と Ar^2 、 Ar^2 と $R^{a'}$ 、 $R^{a'}$ と Ar^3 、 Ar^3 と R^a は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0166] 一般式(27)で表される化合物には、少なくとも1つのカルバゾール構

造が含まれていることが好ましい。例えば、カルバゾール構造を構成する一方のベンゼン環が $A r^1$ で表される環であってもよく、カルバゾール構造を構成する一方のベンゼン環が $A r^2$ で表される環であってもよく、カルバゾール構造を構成する一方のベンゼン環が $A r^3$ で表される環であってもよい。また、 $A r^1 \sim A r^3$ のいずれか 1 つ以上にカルバゾリル基が結合していてもよい。例えば、 $A r^3$ で表される環に置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基が結合していてもよい。

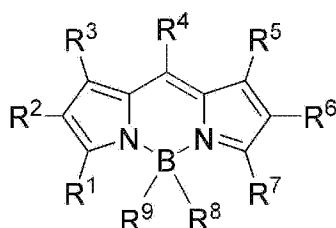
[0167] $A r^1 \sim A r^3$ には、アントラセン、ピレン、ペリレン等の縮合芳香族環構造が結合していてもよい。また、 $A r^1 \sim A r^3$ で表される環は、縮合芳香族環構造を構成する 1 つの環であってもよい。さらに R^a および $R^{a'}$ の少なくとも一方が、縮合芳香族環構造を有する基であってもよい。

[0168] 一般式 (27) で表される骨格は、化合物中に複数個存在していてもよい。例えば、一般式 (27) で表される骨格どうしが単結合または連結基を介して互いに結合した構造を有していてもよい。また、一般式 (27) で表される骨格には、さらにホウ素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子によってベンゼン環どうしを連結させた多重共鳴効果を示す構造が付加されていてもよい。

[0169] 本発明の好ましい一態様では、第 3 有機化合物として BODIPY (4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacene) 構造を含む化合物を用いる。例えば、下記一般式 (28) で表される化合物を用いる。

一般式 (28)

[化83]

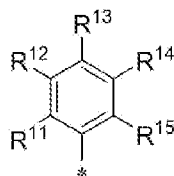


[0170] 一般式 (28) において、 $R^1 \sim R^7$ は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基である。 $R^1 \sim R^7$ のうち少なくとも 1 つは、下記一般式 (29)

で表される基であることが好ましい。

一般式（29）

[化84]



一般式（29）において、 $R^{11} \sim R^{15}$ は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表し、*は結合位置を表す。

一般式（29）で表される基は、一般式（28）の $R^1 \sim R^7$ の1つであってもよいし、2つであってもよいし、3つであってもよい。また、少なくとも4つとしてもよく、例えば4つまたは5つとすることができる。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^7$ のうちの1つが一般式（29）で表される基である。本発明の好ましい一態様では、少なくとも R^1 、 R^3 、 R^5 、 R^7 が一般式（29）で表される基である。本発明の好ましい一態様では、 R^1 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^7 だけが一般式（29）で表される基である。本発明の好ましい一態様では、 R^1 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^7 が一般式（29）で表される基であり、 R^2 および R^6 が水素原子、重水素原子、無置換のアルキル基（例えば炭素数1～10）、または無置換のアリール基（例えば炭素数6～14）である。本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^7$ のすべてが一般式（29）で表される基である。

本発明の好ましい一態様では、 R^1 と R^7 が同一である。本発明の好ましい一態様では、 R^3 と R^5 が同一である。本発明の好ましい一態様では、 R^2 と R^6 が同一である。本発明の好ましい一態様では、 R^1 と R^7 が同一であり、 R^3 と R^5 が同一であり、なおかつ、 R^1 と R^3 は互いに異なる。本発明の好ましい一態様では、 R^1 、 R^3 、 R^5 、 R^7 が同一である。本発明の好ましい一態様では、 R^1 と R^4 と R^7 が同一であり、 R^3 や R^5 とは異なる。本発明の好ましい一態様では、 R^3 と R^4 と R^5 が同一であり、 R^1 や R^7 とは異なる。本発明の好ましい一態様では、 R^1 、 R^3 、 R^5 、 R^7 は、いずれも R^4 とは異なる。

[0171] 一般式(29)の $R^{11} \sim R^{15}$ が採りうる置換基としては、例えば上記置換基群Aの基を選択することができる。 $R^{11} \sim R^{15}$ が採りうる置換基は、置換もしくは無置換のアルキル基(例えば炭素数1~40)、置換もしくは無置換のアルコキシ基(例えば炭素数1~40)、置換もしくは無置換のアリール基(例えば炭素数6~30)、置換もしくは無置換のアリールオキシ基(例えば炭素数6~30)、置換もしくは無置換のアミノ基(例えば炭素原子数0~20)からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせた基であることが好ましい(以下においてこれらの基を「置換基群Cの基」という)。置換基群Cの中でも、炭素数1~20の無置換のアルキル基、炭素数1~20の無置換のアルコキシ基、炭素数6~14の無置換のアリール基、炭素数6~14のアリールオキシ基、または環骨格構成原子数5~20の無置換のジアリールアミノ基を選択することが好ましい(以下においてこれらの基を「置換基群Dの基」という)。ここでいう置換アミノ基としては、ジ置換アミノ基が好ましく、アミノ基に対する2つの置換基としては、各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基であることが好ましく、置換もしくは無置換のアリール基であること(ジアリールアミノ基であること)が特に好ましい。ジアリールアミノ基の2つのアリール基が採りうる置換基としては、上記置換基群Aの基を選択したり、上記置換基群Bの基を選択したり、上記置換基群Cの基を選択したりすることができる。ジアリールアミノ基の2つのアリール基は互いに単結合または連結基を介して結合していてもよく、ここでいう連結基については R^{33} と R^{34} における連結基の説明を参照することができる。ジアリールアミノ基の具体例として、例えば置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を採用することができる。置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基としては、例えば上記一般式(6)の L^{11} が単結合である基を挙げることができる。

本発明の好ましい一態様では、一般式(29)の R^{13} だけが置換基であり、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{14} 、 R^{15} は水素原子である。本発明の好ましい一態様では

、一般式(29)の R^{11} だけが置換基であり、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} は水素原子である。本発明の好ましい一態様では、一般式(29)の R^{11} と R^{13} だけが置換基であり、 R^{12} 、 R^{14} 、 R^{15} は水素原子である。

一般式(28)の $R^1 \sim R^7$ の中には、一般式(29)の $R^{11} \sim R^{15}$ がすべて水素原子である基(すなわちフェニル基)が含まれていてもよい。例えば、 R^2 、 R^4 、 R^6 はフェニル基であってもよい。

[0172] 一般式(28)において、 R^8 および R^9 は各々独立に水素原子、重水素原子、ハロゲン原子、アルキル基(例えば炭素数1~40)、アルコキシ基(例えば炭素数1~40)、アリーロキシ基(例えば炭素数6~30)およびシアノ基からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせた基であることが好ましい。本発明の好ましい実施態様では、 R^8 と R^9 は同一である。本発明の好ましい実施態様では、 R^8 と R^9 はハロゲン原子であり、特に好ましくはフッ素原子である。

[0173] 本発明の一態様では、一般式(28)の $R^1 \sim R^9$ に存在する置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリーロキシ基、置換もしくは無置換のアミノ基の数は合計で3つ以上であることが好ましく、例えば3つである化合物を採用したり、あるいは4つである化合物を採用したりすることができる。より好ましくは、一般式(28)の $R^1 \sim R^7$ に存在する置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリーロキシ基、置換もしくは無置換のアミノ基の数は合計で3つ以上であることが好ましく、例えば3つである化合物を採用したり、あるいは4つである化合物を採用したりすることができる。このとき、 R^8 と R^9 にはアルコキシ基、アリーロキシ基、アミノ基が存在しなくてもよい。さらに好ましくは、一般式(28)の R^1 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^7 に存在する置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリーロキシ基、置換もしくは無置換のアミノ基の数は合計で3つ以上であることが好ましく、例えば3つである化合物を採用したり、あるいは4つである化合物を採用したりすることができる。このとき、 R^2 、 R^6 、 R^8 、 R^9 にはアルコキシ基、アリーロキシ基、アミ

ノ基が存在しなくてもよい。本発明の好ましい一態様では、置換もしくは無置換のアルコキシ基が3つ以上存在する。本発明の好ましい一態様では、置換もしくは無置換のアルコキシ基が4つ以上存在する。本発明の好ましい一態様では、置換もしくは無置換のアルコキシ基が1つ以上と、置換もしくは無置換のアリールオキシ基が2つ以上存在する。本発明の好ましい一態様では、置換もしくは無置換のアルコキシ基が2つ以上と、置換もしくは無置換のアミノ基が1つ以上存在する。本発明の好ましい一態様では、 R^1 、 R^4 、 R^7 にそれぞれ置換もしくは無置換のアルコキシ基または置換もしくは無置換のアリールオキシ基が存在する。本発明の好ましい一態様では、 R^1 、 R^4 、 R^7 にそれぞれ置換もしくは無置換のアルコキシ基が存在する。

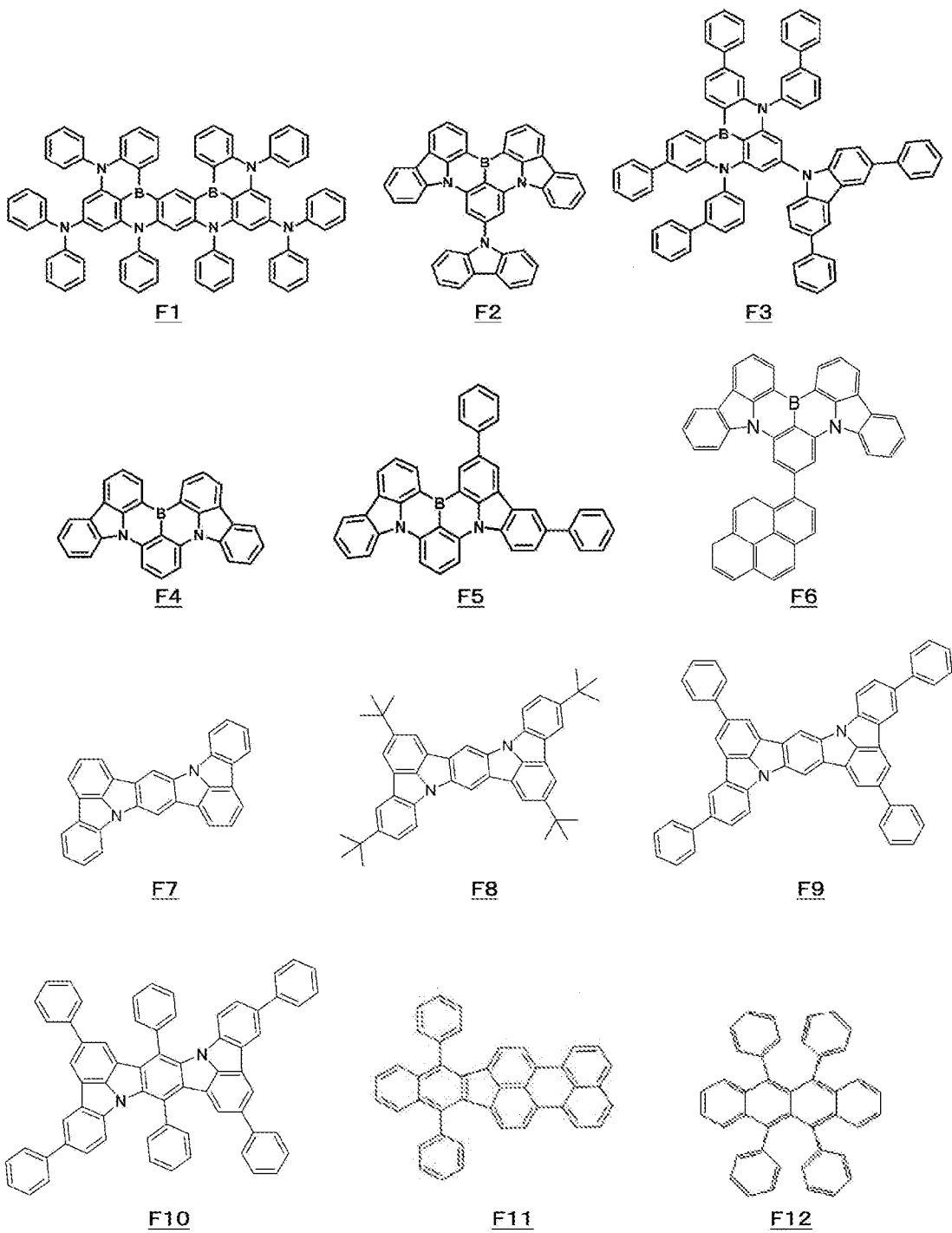
[0174] 本発明の一態様では、一般式(28)の $R^1 \sim R^9$ に存在するハメットの σ_p 値が -0.2 未満の置換基の合計は3つ以上である。ハメットの σ_p 値が -0.2 未満の置換基として、例えばメトキシ基(-0.27)、エトキシ基(-0.24)、*n*-プロポキシ基(-0.25)、イソプロポキシ基(-0.45)、*n*-ブトキシ基(-0.32)を挙げることができる。一方、フッ素原子(0.06)、メチル基(-0.17)、エチル基(-0.15)、*tert*-ブチル基(-0.20)、*n*-ヘキシル基(-0.15)、シクロヘキシル基(-0.15)などはハメットの σ_p 値が -0.2 未満の置換基ではない。

本発明の一態様では、一般式(28)の $R^1 \sim R^9$ に存在するハメットの σ_p 値が -0.2 未満の置換基の数が3つである化合物を採用したり、あるいは4つである化合物を採用したりすることができる。より好ましくは、一般式(28)の $R^1 \sim R^7$ に存在するハメットの σ_p 値が -0.2 未満の置換基の数が3つ以上であることが好ましく、例えば3つである化合物を採用したり、あるいは4つである化合物を採用したりすることができる。このとき、 R^8 と R^9 にはハメットの σ_p 値が -0.2 未満の置換基が存在しなくてもよい。さらに好ましくは、一般式(28)の R^1 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^7 に存在するハメットの σ_p 値が -0.2 未満の置換基の数は3つ以上であることが好

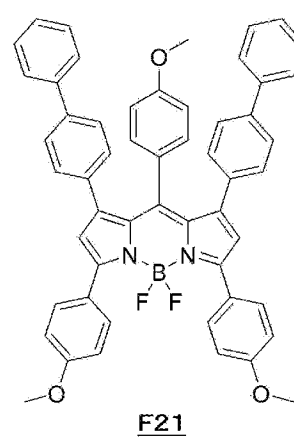
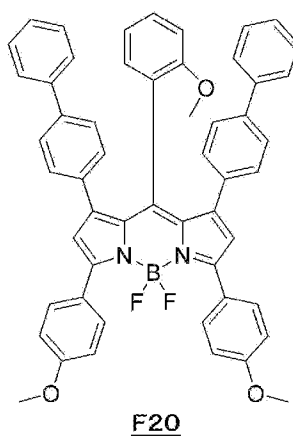
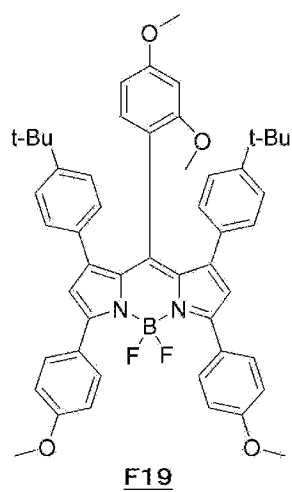
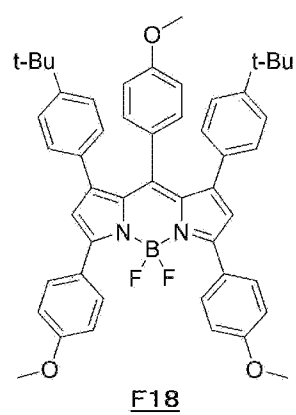
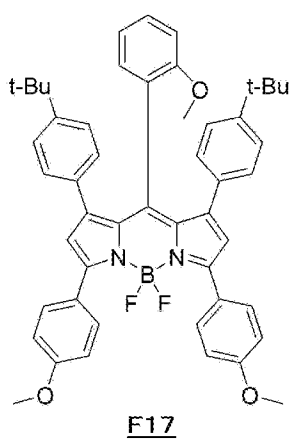
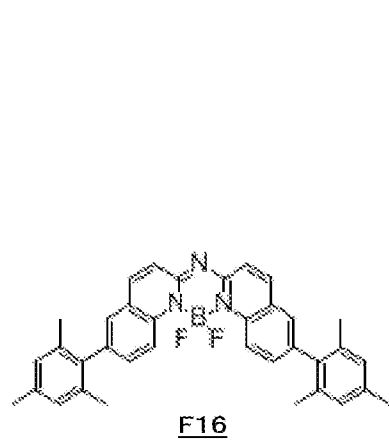
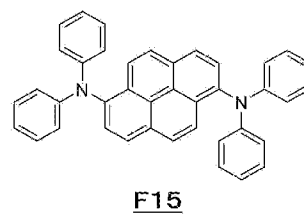
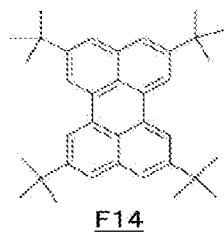
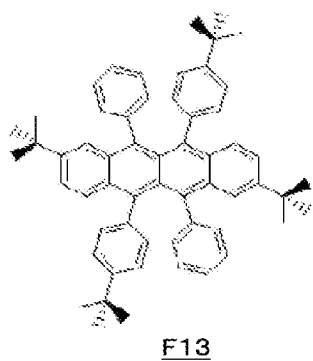
ましく、例えば3つである化合物を採用したり、あるいは4つである化合物を採用したりすることができる。このとき、 R^2 、 R^6 、 R^8 、 R^9 にはハメットの σ_p 値が -0.2 未満の置換基が存在しなくてもよい。本発明の好ましい態様では、 R^1 、 R^4 、 R^7 にそれぞれハメットの σ_p 値が -0.2 未満の置換基が存在する。

[0175] 以下に、第3有機化合物として用いることができる好ましい化合物を挙げる。以下の例示化合物の構造式において、 $t-Bu$ はターシャリーブチル基を表す。

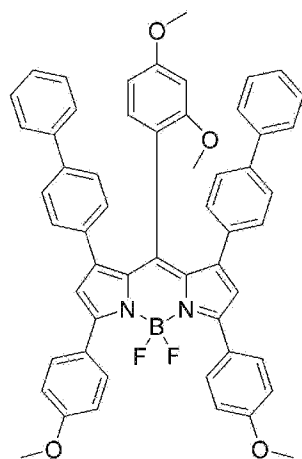
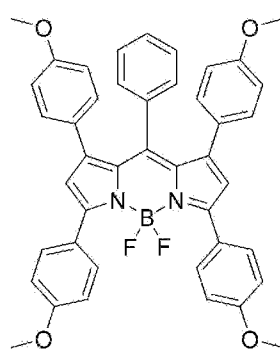
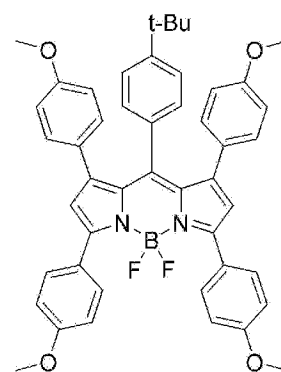
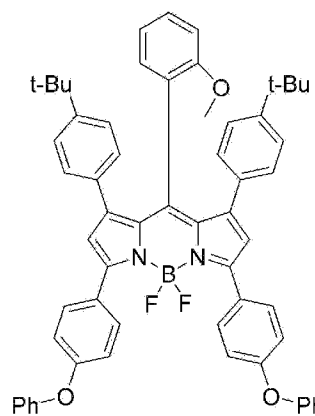
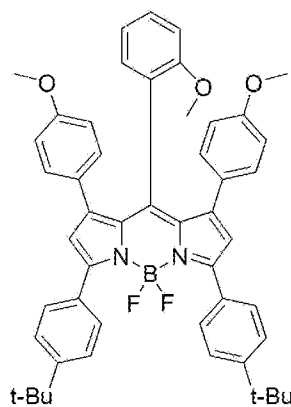
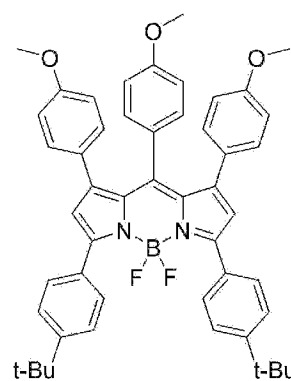
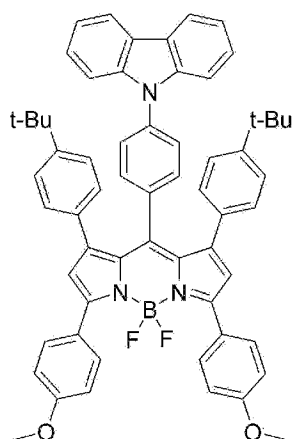
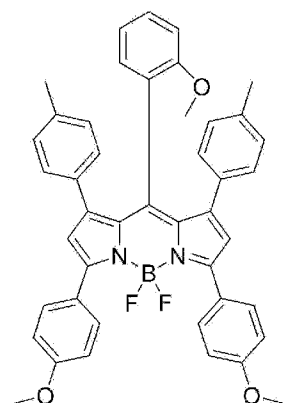
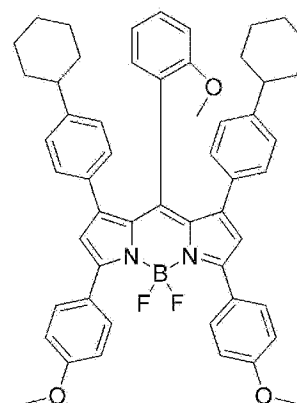
[化85-1]



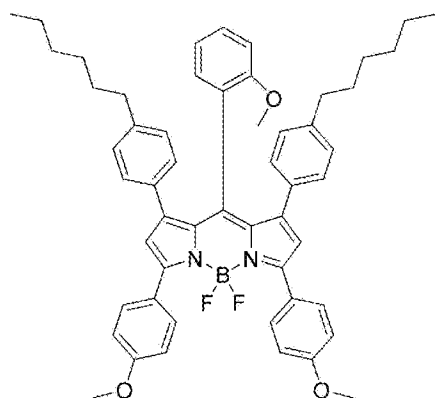
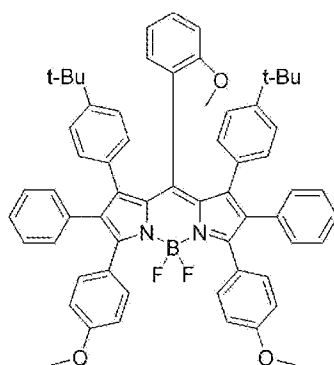
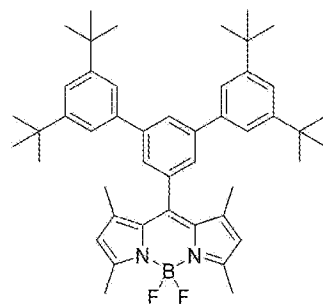
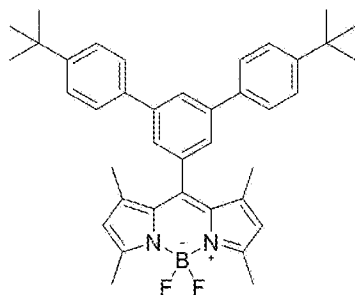
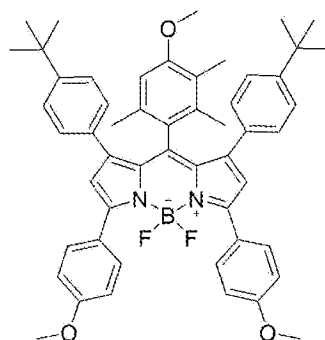
[化85-2]



[化85-3]

F22F23F24F25F26F27F28F29F30

[化85-4]

F31F32F33F34F35

[0176] 上記例示化合物の誘導体として、少なくとも1つの水素原子が重水素原子、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、ジアリールアミノ基で置換された化合物を挙げることができる。

[0177] また、WO 2015/022974号公報の段落0220～0239、WO 2019/111971号公報の段落0066および0117、WO 2021/015177号公報の段落0196～0255に記載の化合物も、本発明の第3有機化合物として特に好ましく用いることができる。

[0178] (発光層)

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層は、条件(a)および(b)を満たす第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物を含む。本発明の好ましい態様では、第2有機化合物として化合物T132を用い、第3有機化合物として化合物F101～F128からなる群より選択され

着することにより形成してもよいし、第1有機化合物、第2有機化合物および第3有機化合物を溶解させた溶液を用いて塗布法により形成してもよい。共蒸着により発光層を形成するときには、第1有機化合物、第2有機化合物および第3有機化合物のうちの2つ以上をあらかじめ混合してつぼ等に入れて蒸着源とし、その蒸着源を用いて共蒸着により発光層を形成してもよい。例えば、第1有機化合物および第2有機化合物をあらかじめ混合して1つの蒸着源を作成しておき、その蒸着源と第3有機化合物の蒸着源を用いて共蒸着することにより発光層を形成してもよい。

[0179] 以下において、有機エレクトロルミネッセンス素子の各部材および発光層以外の各層について説明する。

[0180] 基材：

いくつかの実施形態では、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は基材により保持され、当該基材は特に限定されず、有機エレクトロルミネッセンス素子で一般的に用いられる、例えばガラス、透明プラスチック、クォーツおよびシリコンにより形成されたいずれかの材料を用いればよい。

[0181] 陽極：

いくつかの実施形態では、有機エレクトロルミネッセンス装置の陽極は、金属、合金、導電性化合物またはそれらの組み合わせから製造される。いくつかの実施形態では、前記の金属、合金または導電性化合物は高い仕事関数（4 eV以上）を有する。いくつかの実施形態では、前記金属はAuである。いくつかの実施形態では、導電性の透明材料は、CuI、酸化インジウム・スズ（ITO）、 SnO_2 およびZnOから選択される。いくつかの実施形態では、 $\text{In}_2\text{O}_3-\text{ZnO}$ などの、透明な導電性フィルムを形成できるアモルファス材料を使用する。いくつかの実施形態では、前記陽極は薄膜である。いくつかの実施形態では、前記薄膜は蒸着またはスパッタリングにより作製される。いくつかの実施形態では、前記フィルムはフォトリソグラフィ方法によりパターン化される。いくつかの実施形態では、パターンが高精度である必要がない（例えば約100 μm 以上）場合、当該パ

ターンは、電極材料への蒸着またはスパッタリングに好適な形状のマスクを用いて形成してもよい。いくつかの実施形態では、有機導電性化合物などのコーティング材料を塗布しうるとき、プリント法やコーティング法などの湿式フィルム形成方法が用いられる。いくつかの実施形態では、放射光が陽極を通過するとき、陽極は10%超の透過度を有し、当該陽極は、単位面積あたり数百オーム以下のシート抵抗を有する。いくつかの実施形態では、陽極の厚みは10~1,000nmである。いくつかの実施形態では、陽極の厚みは10~200nmである。いくつかの実施形態では、陽極の厚みは用いる材料に応じて変動する。

[0182] 陰極：

いくつかの実施形態では、前記陰極は、低い仕事関数を有する金属（4 eV以下）（電子注入金属と称される）、合金、導電性化合物またはその組み合わせなどの電極材料で作製される。いくつかの実施形態では、前記電極材料は、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および希土類元素から選択される。いくつかの実施形態では、電子注入金属と、電子注入金属より高い仕事関数を有する安定な金属である第2の金属との混合物が用いられる。いくつかの実施形態では、前記混合物は、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およびアルミニウムから選択される。いくつかの実施形態では、前記混合物は電子注入特性および酸化に対する耐性を向上させる。いくつかの実施形態では、陰極は、蒸着またはスパッタリングにより電極材料を薄膜として形成させることによって製造される。いくつかの実施形態では、前記陰極は単位面積あたり数百オーム以下のシート抵抗を有する。いくつかの実施形態では、前記陰極の厚は10nm~5μmである。いく

つかの実施形態では、前記陰極の厚は50～200nmである。いくつかの実施形態では、放射光を透過させるため、有機エレクトロルミネッセンス素子の陽極および陰極のいずれか1つは透明または半透明である。いくつかの実施形態では、透明または半透明のエレクトロルミネッセンス素子は光放射輝度を向上させる。

いくつかの実施形態では、前記陰極を、前記陽極に関して前述した導電性の透明な材料で形成されることにより、透明または半透明の陰極が形成される。いくつかの実施形態では、素子は陽極と陰極とを含むが、いずれも透明または半透明である。

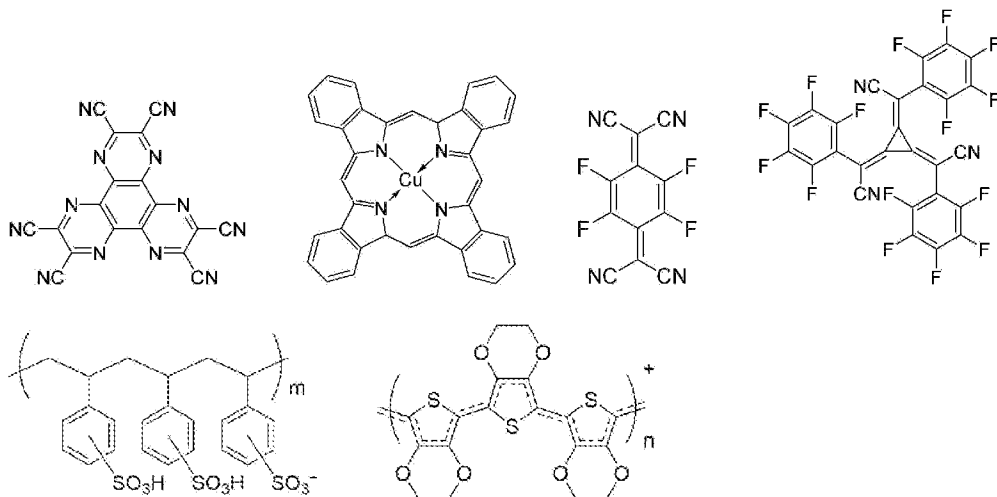
[0183] 注入層：

注入層は、電極と有機層との間の層である。いくつかの実施形態では、前記注入層は駆動電圧を減少させ、光放射輝度を増強する。いくつかの実施形態では、前記注入層は、正孔注入層と電子注入層とを含む。前記注入層は、陽極と発光層または正孔輸送層との間、並びに陰極と発光層または電子輸送層との間に配置することがきる。いくつかの実施形態では、注入層が存在する。いくつかの実施形態では、注入層が存在しない。

以下に、正孔注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

[0184] [化86]

$M \circ O_3$,



[0185] 次に、電子注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

[化87]



[0186] 障壁層：

障壁層は、発光層に存在する電荷（電子または正孔）および／または励起子が、発光層の外側に拡散することを阻止できる層である。いくつかの実施形態では、電子障壁層は、発光層と正孔輸送層との間に存在し、電子が発光層を通過して正孔輸送層へ至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、正孔障壁層は、発光層と電子輸送層との間に存在し、正孔が発光層を通過して電子輸送層へ至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、障壁層は、励起子が発光層の外側に拡散することを阻止する。いくつかの実施形態では、電子障壁層および正孔障壁層は励起子障壁層を構成する。本明細書で用いる用語「電子障壁層」または「励起子障壁層」には、電子障壁層の、および励起子障壁層の機能の両方を有する層が含まれる。

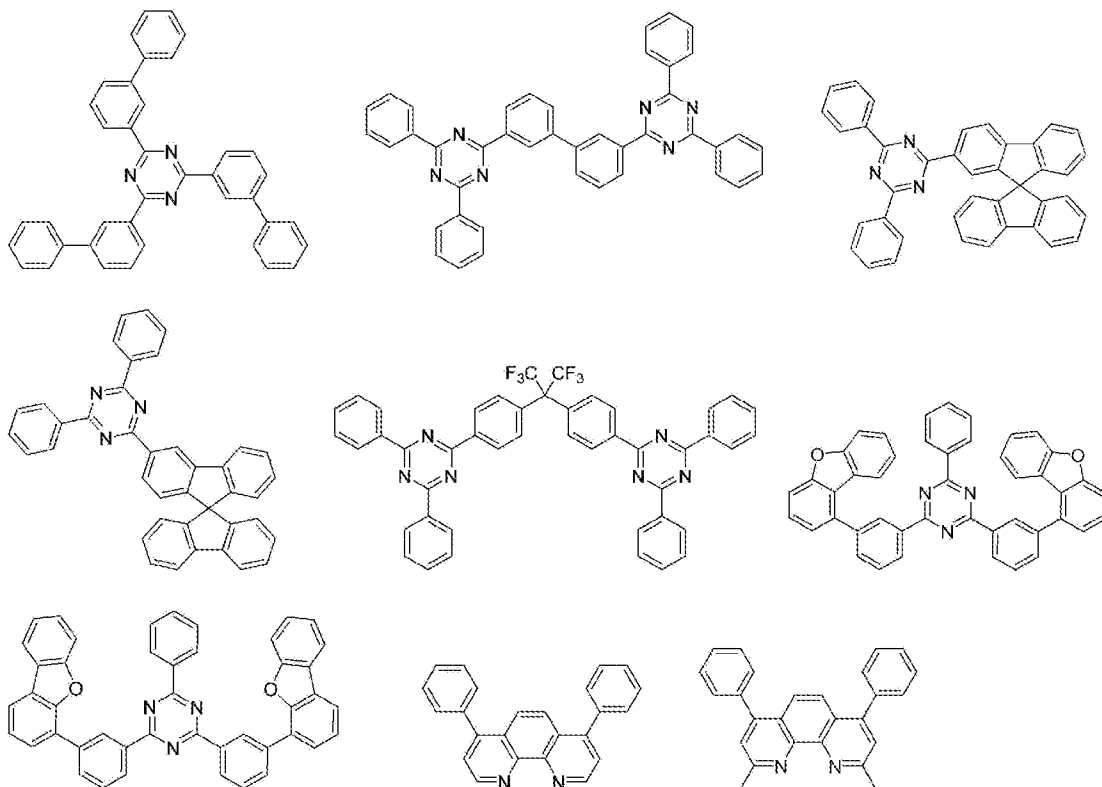
[0187] 正孔障壁層：

正孔障壁層は、電子輸送層として機能する。いくつかの実施形態では、電子の輸送の間、正孔障壁層は正孔が電子輸送層に至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、正孔障壁層は、発光層における電子と正孔との再結合の確率を高める。正孔障壁層に用いる材料は、電子輸送層について前述したのと同じ材料であってもよい。

以下に、正孔障壁層に用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

[0188]

[化88]



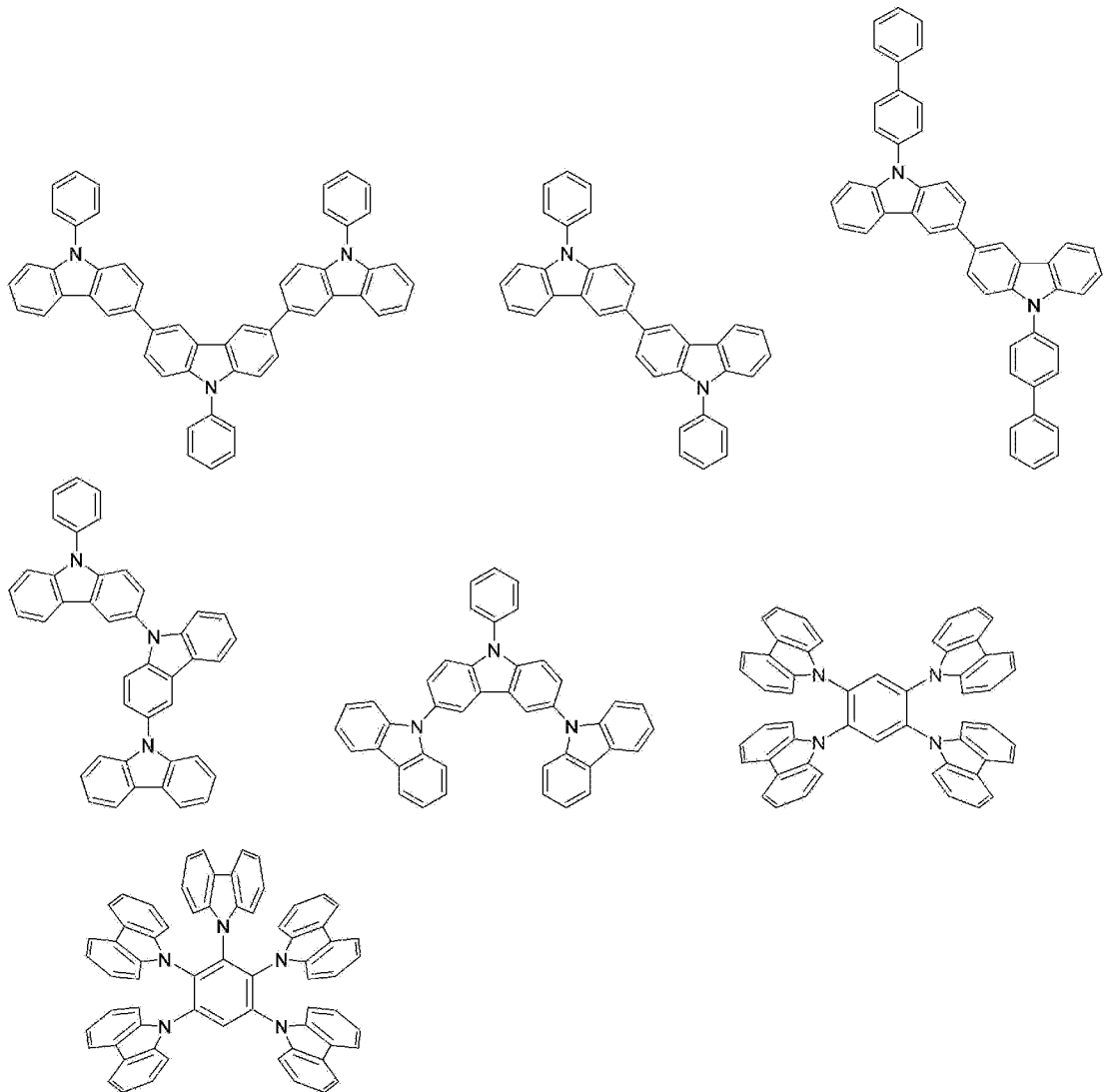
[0189] 電子障壁層：

電子障壁層は、正孔を輸送する。いくつかの実施形態では、正孔の輸送の間、電子障壁層は電子が正孔輸送層に至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、電子障壁層は、発光層における電子と正孔との再結合の確率を高める。電子障壁層に用いる材料は、正孔輸送層について前述したのと同じ材料であってもよい。

以下に電子障壁材料として用いることができる好ましい化合物の具体例を挙げる。

[0190]

[化89]



[0191] 励起子障壁層：

励起子障壁層は、発光層における正孔と電子との再結合を通じて生じた励起子が電荷輸送層まで拡散することを阻止する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層は、発光層における励起子の有効な閉じ込め（confinement）を可能にする。いくつかの実施形態では、装置の光放射効率が向上する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層は、陽極の側と陰極の側のいずれかで、およびその両側の発光層に隣接する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層が陽極側に存在するとき、当該層は、正孔輸送層と発光層との間に存在し、当該発光層に隣接してもよい。いくつかの実施形態では、励起子障壁層が

陰極側に存在するとき、当該層は、発光層と陰極との間に存在し、当該発光層に隣接してもよい。いくつかの実施形態では、正孔注入層、電子障壁層または同様の層は、陽極と、陽極側の発光層に隣接する励起子障壁層との間に存在する。いくつかの実施形態では、正孔注入層、電子障壁層、正孔障壁層または同様の層は、陰極と、陰極側の発光層に隣接する励起子障壁層との間に存在する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層は、励起一重項エネルギーと励起三重項エネルギーを含み、その少なくとも1つが、それぞれ、発光材料の励起一重項エネルギーと励起三重項エネルギーより高い。

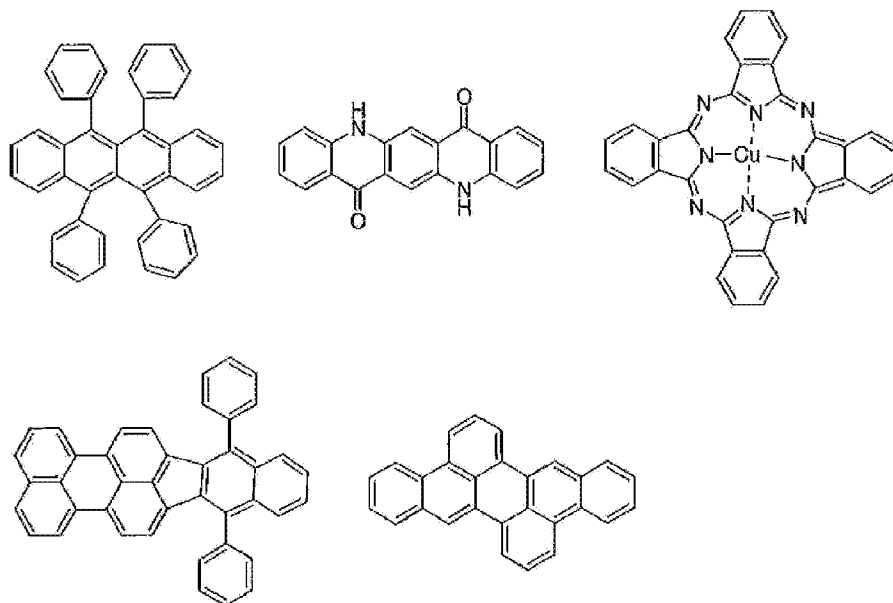
[0192] 正孔輸送層：

正孔輸送層は、正孔輸送材料を含む。いくつかの実施形態では、正孔輸送層は単層である。いくつかの実施形態では、正孔輸送層は複数の層を有する。

いくつかの実施形態では、正孔輸送材料は、正孔の注入または輸送特性および電子の障壁特性のうちの1つの特性を有する。いくつかの実施形態では、正孔輸送材料は有機材料である。いくつかの実施形態では、正孔輸送材料は無機材料である。本発明で利用できる公知の正孔輸送材料の例としては、限定されないが、トリアゾール誘導体、オキサジアゾール誘導剤、イミダゾール誘導体、カルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、ポリアリーールアルカン誘導剤、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、アリルアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、オキサゾール誘導体、スチリルアントラセン誘導剤、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザン誘導体、アニリンコポリマーおよび導電性ポリマーオリゴマー（特にチオフェンオリゴマー）、またはその組合せが挙げられる。いくつかの実施形態では、正孔輸送材料はポルフィリン化合物、芳香族三級アミン化合物およびスチリルアミン化合物から選択される。いくつかの実施形態では、正孔輸送材料は芳香族三級アミン化合物である。以下に正孔輸送材料として用いることができる好ましい化合物の具体例を挙げる。

[0196] さらに、各有機層に添加可能な材料として好ましい化合物例を挙げる。例えば、安定化材料として添加すること等が考えられる。

[0197] [化92]



[0198] 有機エレクトロルミネッセンス素子に用いることができる好ましい材料を具体的に例示したが、本発明において用いることができる材料は、以下の例示化合物によって限定的に解釈されることはない。また、特定の機能を有する材料として例示した化合物であっても、その他の機能を有する材料として転用することも可能である。

[0199] デバイス：

いくつかの実施形態では、発光層はデバイス中に組み込まれる。例えば、デバイスには、OLEDバルブ、OLEDランプ、テレビ用ディスプレイ、コンピューター用モニター、携帯電話およびタブレットが含まれるが、これらに限定されない。

いくつかの実施形態では、電子デバイスは、陽極、陰極、および当該陽極と当該陰極との間の発光層を含む少なくとも1つの有機層を有するOLEDを含む。

いくつかの実施形態では、本願明細書に記載の構成物は、OLEDまたは光電子デバイスなどの、様々な感光性または光活性化デバイスに組み込まれ

うる。いくつかの実施形態では、前記構成物はデバイス内の電荷移動またはエネルギー移動の促進に、および／または正孔輸送材料として有用でありうる。前記デバイスとしては、例えば有機発光ダイオード（OLED）、有機集積回路（IC）、有機電界効果トランジスタ（OFET）、有機薄膜トランジスタ（OTFT）、有機発光トランジスタ（OLET）、有機太陽電池（OSC）、有機光学検出装置、有機光受容体、有機磁場クエンチ（field-quench）装置（OFQD）、発光燃料電池（LEC）または有機レーザダイオード（O-レーザー）が挙げられる。

[0200] バルブまたはランプ：

いくつかの実施形態では、電子デバイスは、陽極、陰極、当該陽極と当該陰極との間の発光層を含む少なくとも1つの有機層を含むOLEDを含む。

いくつかの実施形態では、デバイスは色彩の異なるOLEDを含む。いくつかの実施形態では、デバイスはOLEDの組合せを含むアレイを含む。いくつかの実施形態では、OLEDの前記組合せは、3色の組合せ（例えばRGB）である。いくつかの実施形態では、OLEDの前記組合せは、赤色でも緑色でも青色でもない色（例えばオレンジ色および黄緑色）の組合せである。いくつかの実施形態では、OLEDの前記組合せは、2色、4色またはそれ以上の色の組合せである。

いくつかの実施形態では、デバイスは、

取り付け面を有する第1面とそれと反対の第2面とを有し、少なくとも1つの開口部を画定する回路基板と、

前記取り付け面上の少なくとも1つのOLEDであって、当該少なくとも1つのOLEDが、陽極、陰極、および当該陽極と当該陰極との間の発光層を含む少なくとも1つの有機層を含む、発光する構成を有する少なくとも1つのOLEDと、

回路基板用のハウジングと、

前記ハウジングの端部に配置された少なくとも1つのコネクタであって、前記ハウジングおよび前記コネクタが照明設備への取付けに適するパッ

ケージを画定する、少なくとも1つのコネクタと、を備えるOLEDライトである。

いくつかの実施形態では、前記OLEDライトは、複数の方向に光が放射されるように回路基板に取り付けられた複数のOLEDを有する。いくつかの実施形態では、第1方向に発せられた一部の光は偏光されて第2方向に放射される。いくつかの実施形態では、反射器を用いて第1方向に発せられた光を偏光する。

[0201] ディスプレイまたはスクリーン：

いくつかの実施形態では、本発明の発光層はスクリーンまたはディスプレイにおいて使用できる。いくつかの実施形態では、本発明に係る化合物は、限定されないが真空蒸発、堆積、蒸着または化学蒸着（CVD）などの工程を用いて基材上へ堆積させる。いくつかの実施形態では、前記基材は、独特のアスペクト比のピクセルを提供する2面エッチングにおいて有用なフォトリソプレート構造である。前記スクリーン（またマスクとも呼ばれる）は、OLEDディスプレイの製造工程で用いられる。対応するアートワークパターンの設計により、垂直方向ではピクセルの間の非常に急な狭いタイバーの、並びに水平方向では大きな広範囲の斜角開口部の配置を可能にする。これにより、TFTバックプレーン上への化学蒸着を最適化しつつ、高解像度ディスプレイに必要とされるピクセルの微細なパターン構成が可能となる。

ピクセルの内部パターンニングにより、水平および垂直方向での様々なアスペクト比の三次元ピクセル開口部を構成することが可能となる。更に、ピクセル領域中の画像化された「ストライプ」またはハーフトーン円の使用は、これらの特定のパターンをアンダーカットし基材から除くまで、特定の領域におけるエッチングが保護される。その時、全てのピクセル領域は同様のエッチング速度で処理されるが、その深さはハーフトーンパターンにより変化する。ハーフトーンパターンのサイズおよび間隔を変更することにより、ピクセル内での保護率が様々異なるエッチングが可能となり、急な垂直斜角を形成するのに必要な局在化された深いエッチングが可能となる。

蒸着マスク用の好ましい材料はインバーである。インバーは、製鉄所で長い薄型シート状に冷延された金属合金である。インバーは、ニッケルマスクとしてスピンマンドレル上へ電着することができない。蒸着用マスク内に開口領域を形成するための適切かつ低コストの方法は、湿式化学エッチングによる方法である。

いくつかの実施形態では、スクリーンまたはディスプレイパターンは、基材上のピクセルマトリックスである。いくつかの実施形態では、スクリーンまたはディスプレイパターンは、リソグラフィー（例えばフォトリソグラフィーおよびeビームリソグラフィー）を使用して加工される。いくつかの実施形態では、スクリーンまたはディスプレイパターンは、湿式化学エッチングを使用して加工される。更なる実施形態では、スクリーンまたはディスプレイパターンは、プラズマエッチングを使用して加工される。

[0202] デバイスの製造方法：

OLEDディスプレイは、一般的には、大型のマザーパネルを形成し、次に当該マザーパネルをセルパネル単位で切断することによって製造される。通常は、マザーパネル上の各セルパネルは、ベース基材上に、活性層とソース／ドレイン電極とを有する薄膜トランジスタ（TFT）を形成し、前記TFTに平坦化フィルムを塗布し、ピクセル電極、発光層、対電極およびカプセル化層、を順に経時的に形成し、前記マザーパネルから切断することにより形成される。

OLEDディスプレイは、一般的には、大型のマザーパネルを形成し、次に当該マザーパネルをセルパネル単位で切断することによって製造される。通常は、マザーパネル上の各セルパネルは、ベース基材上に、活性層とソース／ドレイン電極とを有する薄膜トランジスタ（TFT）を形成し、前記TFTに平坦化フィルムを塗布し、ピクセル電極、発光層、対電極およびカプセル化層、を順に経時的に形成し、前記マザーパネルから切断することにより形成される。

[0203] 本発明の他の態様では、有機発光ダイオード（OLED）ディスプレイの

製造方法を提供し、当該方法は、

マザーパネルのベース基材上に障壁層を形成する工程と、

前記障壁層上に、セルパネル単位で複数のディスプレイユニットを形成する工程と、

前記セルパネルのディスプレイユニットのそれぞれの上にカプセル化層を形成する工程と、

前記セルパネル間のインタフェース部に有機フィルムを塗布する工程と、を含む。

いくつかの実施形態では、障壁層は、例えば SiN_x で形成された無機フィルムであり、障壁層の端部はポリイミドまたはアクリルで形成された有機フィルムで被覆される。いくつかの実施形態では、有機フィルムは、マザーパネルがセルパネル単位で軟らかく切断されるように補助する。

いくつかの実施形態では、薄膜トランジスタ（TFT）層は、発光層と、ゲート電極と、ソース／ドレイン電極と、を有する。複数のディスプレイユニットの各々は、薄膜トランジスタ（TFT）層と、TFT層上に形成された平坦化フィルムと、平坦化フィルム上に形成された発光ユニットと、を有してもよく、前記インタフェース部に塗布された有機フィルムは、前記平坦化フィルムの材料と同じ材料で形成され、前記平坦化フィルムの形成と同時に形成される。いくつかの実施形態では、前記発光ユニットは、不動態化層と、その間の平坦化フィルムと、発光ユニットを被覆し保護するカプセル化層と、によりTFT層と連結される。前記製造方法のいくつかの実施形態では、前記有機フィルムは、ディスプレイユニットにもカプセル化層にも連結されない。

[0204] 前記有機フィルムと平坦化フィルムの各々は、ポリイミドおよびアクリルのいずれか1つを含んでもよい。いくつかの実施形態では、前記障壁層は無機フィルムであってもよい。いくつかの実施形態では、前記ベース基材はポリイミドで形成されてもよい。前記方法は更に、ポリイミドで形成されたベース基材の1つの表面に障壁層を形成する前に、当該ベース基材のもう1つ

の表面にガラス材料で形成されたキャリア基材を取り付ける工程と、インタフェース部に沿った切断の前に、前記キャリア基材をベース基材から分離する工程と、を含んでもよい。いくつかの実施形態では、前記OLEDディスプレイはフレキシブルなディスプレイである。

いくつかの実施形態では、前記不動態化層は、TFT層の被覆のためにTFT層上に配置された有機フィルムである。いくつかの実施形態では、前記平坦化フィルムは、不動態化層上に形成された有機フィルムである。いくつかの実施形態では、前記平坦化フィルムは、障壁層の端部に形成された有機フィルムと同様、ポリイミドまたはアクリルで形成される。いくつかの実施形態では、OLEDディスプレイの製造の際、前記平坦化フィルムおよび有機フィルムは同時に形成される。いくつかの実施形態では、前記有機フィルムは、障壁層の端部に形成されてもよく、それにより、当該有機フィルムの一部が直接ベース基材と接触し、当該有機フィルムの残りの部分が、障壁層の端部を囲みつつ、障壁層と接触する。

[0205] いくつかの実施形態では、前記発光層は、ピクセル電極と、対電極と、当該ピクセル電極と当該対電極との間に配置された有機発光層と、を有する。いくつかの実施形態では、前記ピクセル電極は、TFT層のソース／ドレイン電極に連結している。

いくつかの実施形態では、TFT層を通じてピクセル電極に電圧が印加されるとき、ピクセル電極と対電極との間に適切な電圧が形成され、それにより有機発光層が光を放射し、それにより画像が形成される。以下、TFT層と発光ユニットとを有する画像形成ユニットを、ディスプレイユニットと称する。

いくつかの実施形態では、ディスプレイユニットを被覆し、外部の水分の浸透を防止するカプセル化層は、有機フィルムと無機フィルムとが交互に積層する薄膜状のカプセル化構造に形成されてもよい。いくつかの実施形態では、前記カプセル化層は、複数の薄膜が積層した薄膜状カプセル化構造を有する。いくつかの実施形態では、インタフェース部に塗布される有機フィル

ムは、複数のディスプレイユニットの各々と間隔を置いて配置される。いくつかの実施形態では、前記有機フィルムは、一部の有機フィルムが直接ベース基材と接触し、有機フィルムの残りの部分が障壁層の端部を囲む一方で障壁層と接触する態様で形成される。

[0206] 一実施形態では、OLEDディスプレイはフレキシブルであり、ポリイミドで形成された柔軟なベース基材を使用する。いくつかの実施形態では、前記ベース基材はガラス材料で形成されたキャリア基材上に形成され、次に当該キャリア基材が分離される。

いくつかの実施形態では、障壁層は、キャリア基材の反対側のベース基材の表面に形成される。一実施形態では、前記障壁層は、各セルパネルのサイズに従いパターン化される。例えば、ベース基材がマザーパネルの全ての表面上に形成される一方で、障壁層が各セルパネルのサイズに従い形成され、それにより、セルパネルの障壁層の間のインタフェース部に溝が形成される。各セルパネルは、前記溝に沿って切断できる。

[0207] いくつかの実施形態では、前記の製造方法は、更にインタフェース部に沿って切断する工程を含み、そこでは溝が障壁層に形成され、少なくとも一部の有機フィルムが溝で形成され、当該溝がベース基材に浸透しない。いくつかの実施形態では、各セルパネルのTFT層が形成され、無機フィルムである不動態化層と有機フィルムである平坦化フィルムが、TFT層上に配置され、TFT層を被覆する。例えばポリイミドまたはアクリル製の平坦化フィルムが形成されるのと同時に、インタフェース部の溝は、例えばポリイミドまたはアクリル製の有機フィルムで被覆される。これは、各セルパネルがインタフェース部で溝に沿って切断されるとき、生じた衝撃を有機フィルムに吸収させることによってひびが生じるのを防止する。すなわち、全ての障壁層が有機フィルムなしで完全に露出している場合、各セルパネルがインタフェース部で溝に沿って切断されるとき、生じた衝撃が障壁層に伝達され、それによりひびが生じるリスクが増加する。しかしながら、一実施形態では、障壁層間のインタフェース部の溝が有機フィルムで被覆されて、有機フィル

ムがなければ障壁層に伝達されうる衝撃を吸収するため、各セルパネルをソフトに切断し、障壁層でひびが生じるのを防止してもよい。一実施形態では、インタフェース部の溝を被覆する有機フィルムおよび平坦化フィルムは、互いに間隔を置いて配置される。例えば、有機フィルムおよび平坦化フィルムが1つの層として相互に接続している場合には、平坦化フィルムと有機フィルムが残っている部分とを通じてディスプレイユニットに外部の水分が浸入するおそれがあるため、有機フィルムおよび平坦化フィルムは、有機フィルムがディスプレイユニットから間隔を置いて配置されるように、相互に間隔を置いて配置される。

[0208] いくつかの実施形態では、ディスプレイユニットは、発光ユニットの形成により形成され、カプセル化層は、ディスプレイユニットを被覆するためディスプレイユニット上に配置される。これにより、マザーパネルが完全に製造された後、ベース基材を担持するキャリア基材がベース基材から分離される。いくつかの実施形態では、レーザー光線がキャリア基材へ放射されると、キャリア基材は、キャリア基材とベース基材との間の熱膨張率の相違により、ベース基材から分離される。

いくつかの実施形態では、マザーパネルは、セルパネル単位で切断される。いくつかの実施形態では、マザーパネルは、カッターを用いてセルパネル間のインタフェース部に沿って切断される。いくつかの実施形態では、マザーパネルが沿って切断されるインタフェース部の溝が有機フィルムで被覆されているため、切断の間、当該有機フィルムが衝撃を吸収する。いくつかの実施形態では、切断の間、障壁層でひびが生じるのを防止できる。

いくつかの実施形態では、前記方法は製品の不良率を減少させ、その品質を安定させる。

他の態様は、ベース基材上に形成された障壁層と、障壁層上に形成されたディスプレイユニットと、ディスプレイユニット上に形成されたカプセル化層と、障壁層の端部に塗布された有機フィルムと、を有するOLEDディスプレイである。

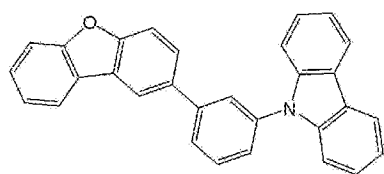
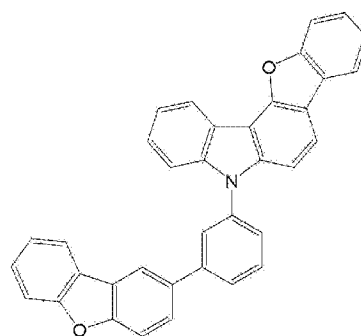
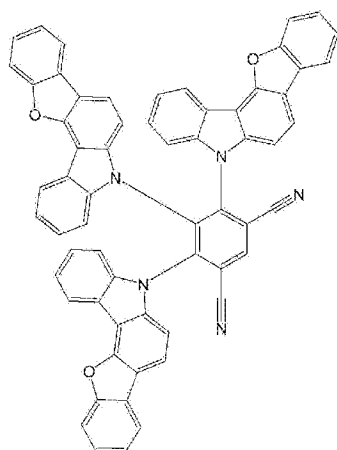
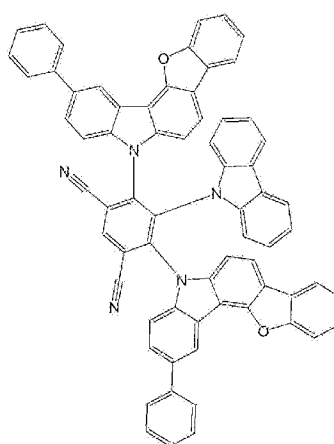
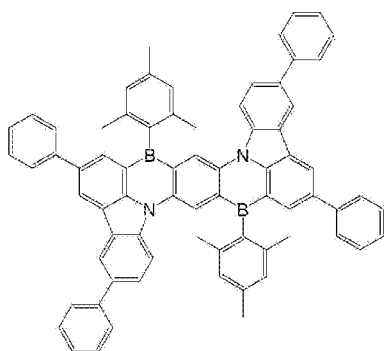
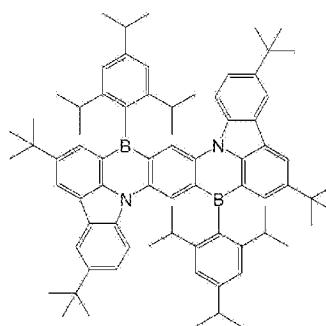
実施例

[0209] 以下に実施例を挙げて本発明の特徴をさらに具体的に説明する。以下に示す材料、処理内容、処理手順等は、本発明の趣旨を逸脱しない限り適宜変更することができる。したがって、本発明の範囲は以下に示す具体例により限定的に解釈されるべきものではない。なお、発光性能の評価は、ソースメータ（ケースレー社製：2400シリーズ）、半導体パラメータ・アナライザ（アジレント・テクノロジー社製：E5273A）、光パワーメータ測定装置（ニューポート社製：1930C）、光学分光器（オーシャン옵ティクス社製：USB2000）、分光放射計（トプコン社製：SR-3）およびストリークカメラ（浜松ホトニクス（株）製C4334型）を用いて行い、配向値の測定は、（浜松ホトニクス（株）分子配向特性測定装置C14234-01）を用いて行った。

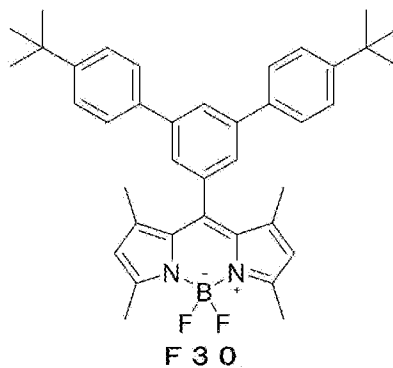
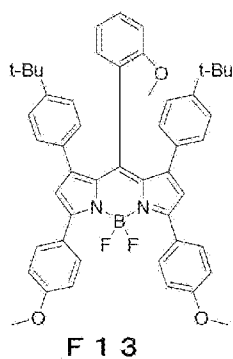
[0210] <実施例および比較例で用いた第1～第3有機化合物>

以下の各実施例および各比較例で用いた第1～第3有機化合物を以下に示す。

[化93-1]

第1有機化合物H 1H 4 1第2有機化合物（遅延蛍光材料）T 5 5T 1 3 2第3有機化合物（蛍光材料）F 1 0 1F 1 1 0

[化93-2]



[0211] 上記の化合物のHOMOのエネルギー E_{HOMO} 、LUMOのエネルギー E_{LUMO} を下記表1に示す。また、一部の化合物について測定した最低励起一重項エネルギー E_{S1} と最低励起三重項エネルギー E_{T1} も併せて示す。

[0212] [表1]

		E_{LUMO}	E_{HOMO}	E_{S1}	E_{T1}
第1有機化合物	化合物H1	-2.63	-6.13	-3.69	-2.83
	化合物H41	-2.50	-5.87	-3.50	-2.70
第2有機化合物	化合物T55	-3.55	-5.98	-2.43	-2.24
	化合物T132	-3.46	-5.92	-2.44	—
第3有機化合物	化合物F101	-3.70	-5.93	-2.34	—
	化合物F110	-3.57	-5.91	-2.44	—
	化合物F13	-3.79	-5.76	—	—
	化合物F30	-3.65	-5.95	—	—

(単位eV)

[0213] (実施例1～10、比較例5～7、9、10、12)

膜厚50nmのインジウム・スズ酸化物(ITO)からなる陽極が形成された厚さ2mmのガラス基材上に、各薄膜を真空蒸着法にて、真空度 1×10^{-6} Paで積層した。まず、ITO上にHATCNを5nmの厚さに蒸着して正孔注入層を形成し、その上にNPDを60nmの厚さに蒸着して正孔輸送層を形成した。続いて、EB1を5nmの厚さに蒸着して電子ブロック層を形成した。次に、表2または表3に示す組成となるように、第1有機化合物と第2有機化合物と第3有機化合物を異なる蒸着源から共蒸着し、40nmの厚さの発光層を形成した。次に、HB1を10nmの厚さに蒸着して正孔ブロック層を形成し、続いて、ET1を30nmの厚さに蒸着して電子輸

送層を形成した。さらに、Li qを2 nmの厚さに蒸着して電子注入層を形成し、次いでアルミニウム (Al) を100 nmの厚さに蒸着することにより陰極を形成した。これによって、有機エレクトロルミネッセンス素子を作製した。ここで作製した素子は、いずれも式 (a) を満たし、発光の最大成分が第3有機化合物からの蛍光であることが確認された。

[0214] (比較例1～4、8、11)

発光層を形成する際、第3有機化合物の蒸着源を用いずに、第1有機化合物と第2有機化合物の共蒸着により、表2に示す組成の発光層を形成したこと以外は、実施例1と同様にして有機エレクトロルミネッセンス素子を作製した。

[0215] (発光層の組成と評価結果)

実施例1～6、比較例1～10で作製した各素子について、発光層の組成と、外部量子効率EQEおよび発光極大波長の測定結果を表2に示す。発光層の組成のうち、実施例1～4、比較例5～7、9、10の第3有機化合物の組成比は、第1有機化合物と第2有機化合物の全重量に対する割合(重量%)で表し、その他の有機化合物の組成比は、発光層を構成する有機化合物の全重量に対する割合(重量%)で表した。また、表2中、「—」は第3有機化合物を添加していないことを表す。

[0216]

[表2]

実施例No.	発光層の組成						第3有機化合物 の配向値S	評価結果	
	第1有機化合物		第2有機化合物		第3有機化合物			EQE (%)	発光極大波長 (nm)
	化合物	含有量 (wt%)	化合物	含有量 (wt%)	化合物	含有量 (wt%)			
比較例1	H1	55.0	T132	45.0	—		—	15.37	536
実施例1	H1	55.0	T132	45.0	F110	0.5	−0.42	17.30	529
実施例2	H1	55.0	T132	45.0	F110	1.0	−0.43	18.93	529
比較例2	H1	65.0	T132	35.0	—		—	16.97	532
実施例3	H1	65.0	T132	35.0	F110	0.5	−0.39	19.82	528
実施例4	H1	65.0	T132	35.0	F110	1.0	−0.39	20.96	529
比較例3	H1	65.0	T132	35.0	—		—	17.50	539
実施例5	H1	64.5	T132	35.0	F101	0.5	−0.31	19.00	542
実施例6	H1	64.0	T132	35.0	F101	1.0	−0.34	20.20	544
比較例4	H1	55.0	T132	45.0	—		—	15.10	540
比較例5	H1	55.0	T132	45.0	F30	0.3	0.12	13.90	523
比較例6	H1	55.0	T132	45.0	F30	0.5	0.13	12.90	523
比較例7	H1	55.0	T132	45.0	F30	1.0	0.13	11.50	523
比較例8	H1	65.0	T132	35.0	—		—	16.2	540
比較例9	H1	65.0	T132	35.0	F30	0.5	0.12	15.0	524
比較例10	H1	65.0	T132	35.0	F30	1.0	0.13	12.5	524
比較例11	H41	60.0	T55	40.0	—		—	13.17	554
比較例12	H41	59.5	T55	40.0	F13	0.5	−0.29	10.40	634

[0217] 表2に示すように、第3有機化合物の配向値Sが−0.3以下である実施例1～6の素子は、第3有機化合物を発光層に含まない比較例1～3の素子に比べて高い外部量子効率を示した。また、第3有機化合物の濃度がより高い実施例2、4、6の素子の方が、実施例1、3、5の素子よりも高い外部量子効率を得られた。これに対して、第3有機化合物の配向値Sが−0.3よりも大きい比較例5～7、9～10、12の素子は、それぞれ発光層に第3有機化合物を含まないこと以外は同じ構成の比較例4、8、11の素子よりも外部量子効率が低下していた。また、比較例5～7および比較例9～10の結果から、第3有機化合物の濃度が高くなる程、外部量子効率が低下する傾向が見られた。以上の結果から、第2有機化合物のLUMOのエネルギーよりも第3有機化合物のLUMOのエネルギーが低い素子であっても、第3有機化合物の配向値Sが−0.3以下であれば、第3有機化合物の濃度を

上げて外部量子効率の向上が図れることが確認された。

[0218] 実施例 7 ～ 10 で作製した各素子の発光層の組成と耐久性の評価結果を表 3 に示す。表 3 中の「LT95%」は、各素子を 12.6 mA/cm^2 の電流密度で連続駆動して輝度が初期輝度の 95% になるまでの時間 (T95%) を測定し、その T95% の値を、実施例 7 で作製した素子の T95% で割って算出した相対値である。LT95% が大きな値である程、耐久性に優れることを意味する。

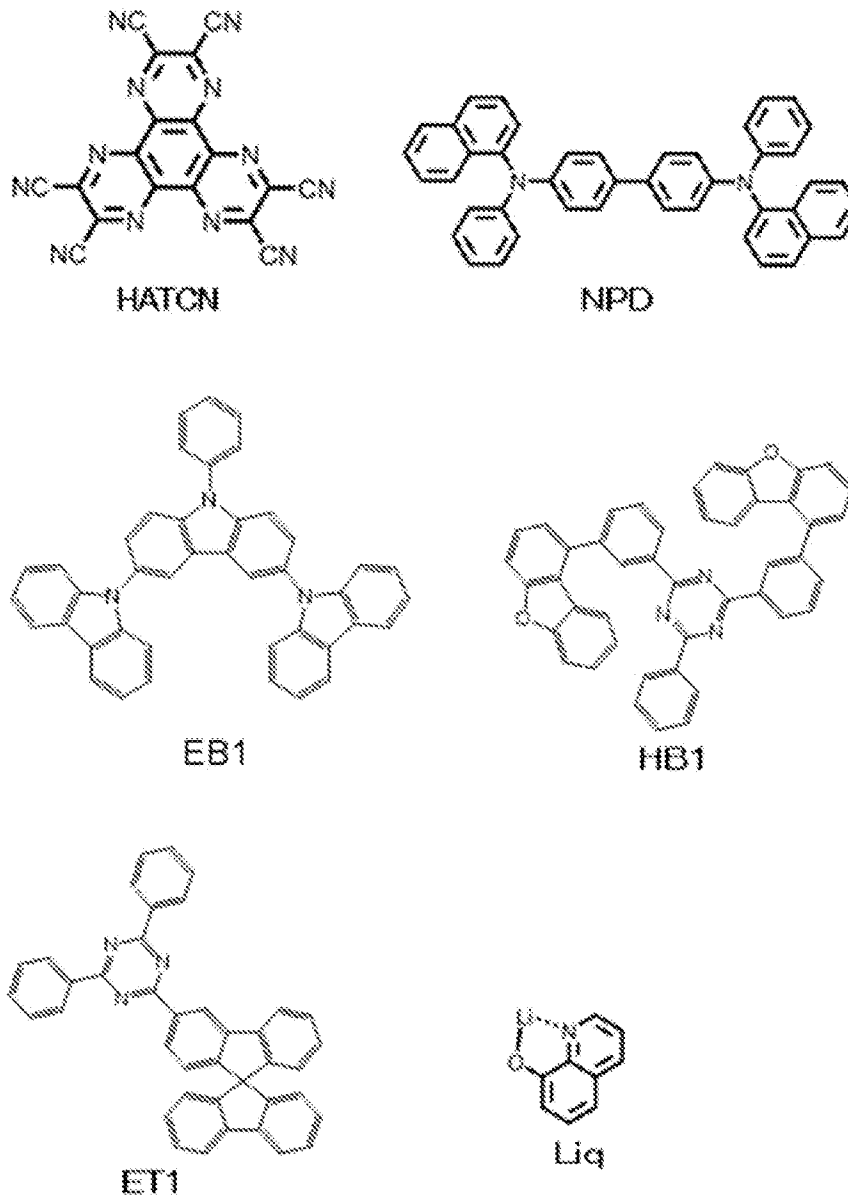
[0219] [表3]

実施例No.	発光層の組成						第3有機化合物 の配向値S	LT95%
	第1有機化合物		第2有機化合物		第3有機化合物			
	化合物	含有量 (wt%)	化合物	含有量 (wt%)	化合物	含有量 (wt%)		
実施例7	H1	79.2	T132	20.0	F110	0.8	−0.40	1
実施例8	H1	74.2	T132	25.0	F110	0.8	−0.41	1.5
実施例9	H1	69.2	T132	30.0	F110	0.8	−0.40	2.0
実施例10	H1	64.2	T132	35.0	F110	0.8	−0.39	2.2

[0220] 実施例 7 ～ 10 の素子は、発光層における第 2 有機化合物の濃度を変化させたものであり、発光極大波長が 529 nm 、外部量子効率が約 22% で同等であった。また、表 3 から、第 2 有機化合物の濃度を高くすることで、素子の耐久性が改善される傾向が示された。

[0221]

[化94]



産業上の利用可能性

[0222] 本発明によれば、第1有機化合物と、遅延蛍光材料である第2有機化合物と、蛍光を放射する第3有機化合物を発光層に含む有機エレクトロルミネッセンス素子において、第2有機化合物のLUMOのエネルギーよりも第1有機化合物の方がLUMOのエネルギーが低い場合でも、第2有機化合物の濃度を上げて、外部量子効率の向上を図ることができる。これにより、第3有機化合物のLUMOエネルギーの選択の幅を拡大することができるため、有機エレクトロルミネッセンス素子の材料設計の自由度を上げることができる。

。そのため、本発明は産業上の利用可能性が高い。

請求の範囲

[請求項1] 陽極、陰極、および前記陽極と前記陰極の間に発光層を含む少なくとも一層の有機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、

前記発光層は、第1有機化合物、第2有機化合物および第3有機化合物を含み、下記(a)および下記式(b)を満たしており、

前記第2有機化合物は遅延蛍光材料であり、

前記素子からの発光の最大成分は前記第3有機化合物からの蛍光である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[数1]

$$E_{\text{LUMO}}(2) > E_{\text{LUMO}}(3) \quad \text{式(a)}$$

$$S \leq -0.3 \quad \text{式(b)}$$

[ここで、

$E_{\text{LUMO}}(2)$ は、前記第2有機化合物のLUMOのエネルギー

$E_{\text{LUMO}}(3)$ は、前記第3有機化合物のLUMOのエネルギー

S は、前記発光層における前記第3有機化合物の配向値を表す。]

[請求項2] 前記発光層における前記第3有機化合物の濃度が0.3重量%より大きい、請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

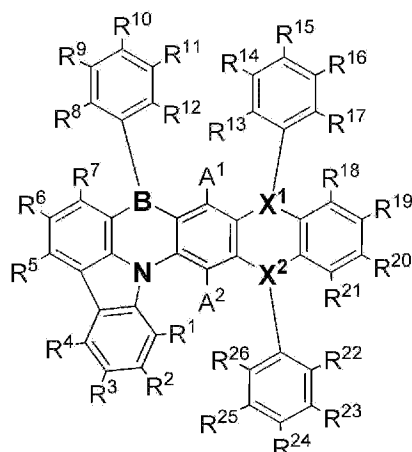
[請求項3] 前記第3有機化合物は、多重共鳴効果を示すホウ素原子と窒素原子を含み、構成環数が4つ以上である縮合環構造を有する化合物である、請求項1または2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項4] 前記第3有機化合物は、ホウ素原子と窒素原子を含む複素6員環に、窒素原子を共有するピロール環および2つのベンゼン環が縮合した構造を有する化合物である、請求項1～3のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項5] 前記第3有機化合物は、下記一般式(16)で表される化合物である、請求項1～4のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

一般式 (16)

[化1]



[一般式 (16) において、 X^1 および X^2 は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。 $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ただし、 X^1 が窒素原子であるとき、 R^{17} と R^{18} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成し、 X^2 が窒素原子であるとき、 R^{21} と R^{22} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。ただし、 X^1 が窒素原子であって、 R^7 と R^8 および R^{21} と R^{22} が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して単結合を形成しているとき、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換もしくは無置換のアリール基であるか、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 のいずれかが互いに結合して芳香環または複素芳香環を形成している。]

[請求項6]

前記発光層における前記第2有機化合物の濃度が25重量%以上で

ある、請求項 1 ～ 5 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項7] 前記第 2 有機化合物が、ベンゼン環に 1 ～ 2 つのシアノ基と少なくとも 1 つのドナー性基が結合した構造を有する、請求項 1 ～ 6 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項8] 前記ドナー性基が、カルバゾールー 9 -イル基を構成するベンゼン環に置換もしくは無置換のベンゾフラン環が縮合した構造を有する、請求項 7 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項9] 前記ドナー性基が、置換もしくは無置換の 5 H -ベンゾフロ [3, 2 - c] カルバゾールー 5 -イル基である、請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項10] 前記ベンゼン環に前記ドナー性基が 3 つ以上結合している、請求項 7 ～ 9 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項11] 前記第 1 有機化合物、前記第 2 有機化合物および前記第 3 有機化合物が下記 (a 1) を満たしている、請求項 1 ～ 10 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$E_{\text{LUMO}}(1) > E_{\text{LUMO}}(2) > E_{\text{LUMO}}(3) \quad \text{式 (a 1)}$$

[ここで、

$E_{\text{LUMO}}(1)$ は、前記第 1 有機化合物の LUMO のエネルギー

$E_{\text{LUMO}}(2)$ は、前記第 2 有機化合物の LUMO のエネルギー

$E_{\text{LUMO}}(3)$ は、前記第 3 有機化合物の LUMO のエネルギー

S は、前記発光層における前記第 3 有機化合物の配向値を表す。]

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/015888

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07F 5/02(2006.01)i; **C09K 11/06**(2006.01)i; **C07D 209/86**(2006.01)i; **C07D 519/00**(2006.01)i; **H01L 51/50**(2006.01)i
 FI: H05B33/14 B; C09K11/06 660; C07D209/86; C09K11/06 690; C09K11/06 645; C09K11/06 635; C07D519/00 CSP;
 C07F5/02 A CSP; C07D519/00 301

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)

C07F5/02; C09K11/06; C07D209/86; C07D519/00; H01L51/50

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

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022
 Registered utility model specifications of Japan 1996-2022
 Published registered utility model applications of Japan 1994-2022

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CAplus/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2021/0119145 A1 (LG DISPLAY CO., LTD.) 22 April 2021 (2021-04-22) claims, paragraphs [0091]-[0102], [0107]-[0114], examples 1-3, table 2, fig. 4A, 5	1-2, 6-7, 10-11
Y		7-9
A		3-5
X	JP 2020-132636 A (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION) 31 August 2020 (2020-08-31) claims, paragraphs [0254]-[0255], [0348], [0352], [0615]-[0619], example 4 (constitution D)	1-11
Y		3-5, 7-9
X	JP 2020-203875 A (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION) 24 December 2020 (2020-12-24) claims, paragraphs [0248], [0252], [0503]-[0510], examples 8-11	1-3, 6-11
Y		3-5, 7-9

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
 “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date
 “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
 “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
 “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
 “X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
 “Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
 “&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

30 May 2022

Date of mailing of the international search report

14 June 2022

Name and mailing address of the ISA/JP

**Japan Patent Office (ISA/JP)
 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915
 Japan**

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/015888

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2020/039930 A1 (NATIONAL UNIVERSITY CORPORATION KYUSHU UNIVERSITY) 27 February 2020 (2020-02-27) claims, paragraphs [0115]-[0120], example 2 (mCBP/compounds 2-38/compound 1)	1-3, 6-7, 10-11
Y		3-5, 7-9
X	WO 2020/040298 A1 (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION) 27 February 2020 (2020-02-27) claims, paragraphs [0401]-[0406], examples 1-12 to 1-15 (table 10)	1-3, 6-7, 10-11
Y		3-5, 7-9
Y	WO 2018/212169 A1 (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION) 22 November 2018 (2018-11-22) claims, general formula (1), paragraph [0086], compounds (1-16), paragraph [0090], compounds (1-116), paragraph [0105], compounds (1-616), paragraph [0108], compounds (1-716), paragraph [0148], compounds (1-2216)	3-5
P, A	WO 2022/025248 A1 (KYULUX INC.) 03 February 2022 (2022-02-03) entire text, all drawings	1-11
P, A	WO 2021/245221 A1 (CYNORA GMBH) 09 December 2021 (2021-12-09) entire text	3-5

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2022/015888

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)		Publication date (day/month/year)
US	2021/0119145	A1	22 April 2021	DE 102020126636	A1	
				KR 10-2021-0046539	A	
				CN 112687816	A	
JP	2020-132636	A	31 August 2020	KR 10-2020-0099107	A	
				CN 111560031	A	
JP	2020-203875	A	24 December 2020	CN 112079855	A	
				KR 10-2020-0143653	A	
WO	2020/039930	A1	27 February 2020	US 2021/0202851	A1	
				claims, paragraphs [0154]- [0163], example 2 (mCBP/ compounds 2-38/compound 1)		
				EP 3843168	A1	
				CN 112585778	A	
				KR 10-2021-0055712	A	
WO	2020/040298	A1	27 February 2020	KR 10-2021-0050537	A	
WO	2018/212169	A1	22 November 2018	US 2020/0190115	A1	
				claims, general formula (1), paragraph [0126], compounds (1-16), (1-116), (1-616), (1- 716), (1-2216)		
				EP 3626722	A1	
				CN 110612304	A	
				KR 10-2020-0006965	A	
				TW 201900656	A	
WO	2022/025248	A1	03 February 2022	(Family: none)		
WO	2021/245221	A1	09 December 2021	(Family: none)		

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） C07F 5/02(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; C07D 209/86(2006.01)i; C07D 519/00(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i FI: H05B33/14 B; C09K11/06 660; C07D209/86; C09K11/06 690; C09K11/06 645; C09K11/06 635; C07D519/00 CSP; C07F5/02 A CSP; C07D519/00 301																																
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）） C07F5/02; C09K11/06; C07D209/86; C07D519/00; 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 <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2022年</td> </tr> </table> 国際調査で利用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語） CAplus/REGISTRY (STN)			日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2022年	日本国実用新案登録公報	1996-2022年	日本国登録実用新案公報	1994-2022年																						
日本国実用新案公報	1922-1996年																															
日本国公開実用新案公報	1971-2022年																															
日本国実用新案登録公報	1996-2022年																															
日本国登録実用新案公報	1994-2022年																															
C. 関連すると認められる文献 <table border="1"> <thead> <tr> <th>引用文献の カテゴリー*</th> <th>引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示</th> <th>関連する 請求項の番号</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>X</td> <td>US 2021/0119145 A1 (LG DISPLAY CO., LTD.) 22.04.2021 (2021-04-22) 請求の範囲, [0091]-[0102], [0107]-[0114], 実施例1-3, TABLE 2, 図4A, 図5</td> <td>1-2, 6-7, 10-11</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td></td> <td>7-9</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td></td> <td>3-5</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>JP 2020-132636 A (学校法人関西学院) 31.08.2020 (2020-08-31) 特許請求の範囲, [0254]-[0255], [0348][0352], [0615]-[0619]実施例4(構成D)</td> <td>1-11</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td></td> <td>3-5, 7-9</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>JP 2020-203875 A (学校法人関西学院) 24.12.2020 (2020-12-24) 特許請求の範囲, [0248][0252], [0503]-[0510]実施例8-11</td> <td>1-3, 6-11</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td></td> <td>3-5, 7-9</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>WO 2020/039930 A1 (国立大学法人九州大学) 27.02.2020 (2020-02-27) 請求の範囲, [0115]-[0120], 実施例2(mCBP/化合物2-38/化合物1)</td> <td>1-3, 6-7, 10-11</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td></td> <td>3-5, 7-9</td> </tr> </tbody> </table>			引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号	X	US 2021/0119145 A1 (LG DISPLAY CO., LTD.) 22.04.2021 (2021-04-22) 請求の範囲, [0091]-[0102], [0107]-[0114], 実施例1-3, TABLE 2, 図4A, 図5	1-2, 6-7, 10-11	Y		7-9	A		3-5	X	JP 2020-132636 A (学校法人関西学院) 31.08.2020 (2020-08-31) 特許請求の範囲, [0254]-[0255], [0348][0352], [0615]-[0619]実施例4(構成D)	1-11	Y		3-5, 7-9	X	JP 2020-203875 A (学校法人関西学院) 24.12.2020 (2020-12-24) 特許請求の範囲, [0248][0252], [0503]-[0510]実施例8-11	1-3, 6-11	Y		3-5, 7-9	X	WO 2020/039930 A1 (国立大学法人九州大学) 27.02.2020 (2020-02-27) 請求の範囲, [0115]-[0120], 実施例2(mCBP/化合物2-38/化合物1)	1-3, 6-7, 10-11	Y		3-5, 7-9
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	US 2021/0119145 A1 (LG DISPLAY CO., LTD.) 22.04.2021 (2021-04-22) 請求の範囲, [0091]-[0102], [0107]-[0114], 実施例1-3, TABLE 2, 図4A, 図5	1-2, 6-7, 10-11																														
Y		7-9																														
A		3-5																														
X	JP 2020-132636 A (学校法人関西学院) 31.08.2020 (2020-08-31) 特許請求の範囲, [0254]-[0255], [0348][0352], [0615]-[0619]実施例4(構成D)	1-11																														
Y		3-5, 7-9																														
X	JP 2020-203875 A (学校法人関西学院) 24.12.2020 (2020-12-24) 特許請求の範囲, [0248][0252], [0503]-[0510]実施例8-11	1-3, 6-11																														
Y		3-5, 7-9																														
X	WO 2020/039930 A1 (国立大学法人九州大学) 27.02.2020 (2020-02-27) 請求の範囲, [0115]-[0120], 実施例2(mCBP/化合物2-38/化合物1)	1-3, 6-7, 10-11																														
Y		3-5, 7-9																														
☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。																																
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献																																
国際調査を完了した日 30.05.2022		国際調査報告の発送日 14.06.2022																														
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		権限のある職員（特許庁審査官） 岩井 好子 20 4160 電話番号 03-3581-1101 内線 3271																														

C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	WO 2020/040298 A1 (学校法人関西学院) 27.02.2020 (2020 - 02 - 27) 請求の範囲, [0401]-[0406], 実施例1-12~1-15(表10)	1-3, 6-7, 10-11
Y		3-5, 7-9
Y	WO 2018/212169 A1 (学校法人関西学院) 22.11.2018 (2018 - 11 - 22) 請求の範囲, 一般式(1), [0086]化合物(1-16), [0090]化合物(1-116), [0105]化合物 (1-616), [0108]化合物(1-716), [0148]化合物(1-2216)	3-5
P, A	WO 2022/025248 A1 (株式会社K y u l u x) 03.02.2022 (2022 - 02 - 03) 全文全図	1-11
P, A	WO 2021/245221 A1 (CYNORA GMBH) 09.12.2021 (2021 - 12 - 09) 全文	3-5

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2022/015888

引用文献			公表日	パテントファミリー文献			公表日
US	2021/0119145	A1	22.04.2021	DE	102020126636	A1	
				KR	10-2021-0046539	A	
				CN	112687816	A	
JP	2020-132636	A	31.08.2020	KR	10-2020-0099107	A	
				CN	111560031	A	
JP	2020-203875	A	24.12.2020	CN	112079855	A	
				KR	10-2020-0143653	A	
WO	2020/039930	A1	27.02.2020	US	2021/0202851	A1	
				請求の範囲, [0154]-[0163], 実施例2(mCBP/化合物2-38/ 化合物1)			
				EP	3843168	A1	
				CN	112585778	A	
				KR	10-2021-0055712	A	
WO	2020/040298	A1	27.02.2020	KR	10-2021-0050537	A	
WO	2018/212169	A1	22.11.2018	US	2020/0190115	A1	
				請求の範囲, 一般式(1), [0126]化合物(1-16), 化合 物(1-116), 化合物(1-616), 化合物(1-716), 化合物(1- 2216)			
				EP	3626722	A1	
				CN	110612304	A	
				KR	10-2020-0006965	A	
				TW	201900656	A	
WO	2022/025248	A1	03.02.2022	(ファミリーなし)			
WO	2021/245221	A1	09.12.2021	(ファミリーなし)			