(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7551273号
(P7551273)

(45)発行日　令和6年9月17日(2024.9.17)

(24)登録日　令和6年9月6日(2024.9.6)

(51)国際特許分類		FI		
C07D 403/14 (2006.01)		C07D	403/14	
C09K 11/06 (2006.01)		C09K	11/06	690
H10K 50/10 (2023.01)		H05B	33/14	B
H10K 50/16 (2023.01)		H05B	33/22	B

請求項の数　12　（全77頁）

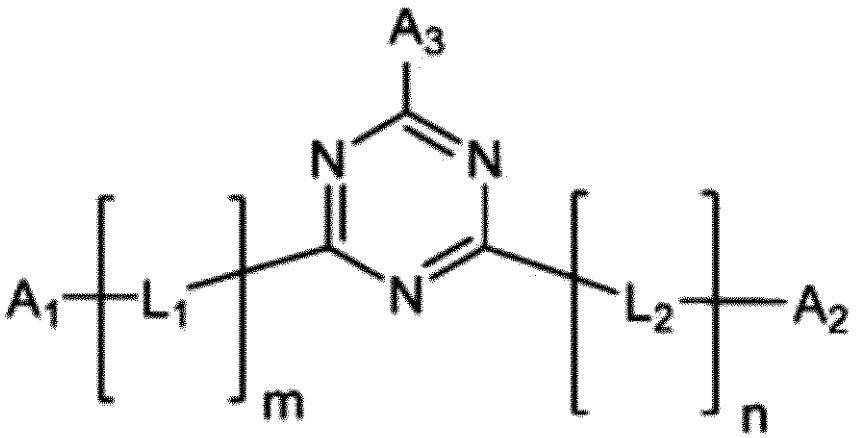
(21)出願番号　特願2018-2610(P2018-2610)
(22)出願日　平成30年1月11日(2018.1.11)
(65)公開番号　特開2019-119723(P2019-119723A)
(43)公開日　令和1年7月22日(2019.7.22)
審査請求日　令和2年12月22日(2020.12.22)
審判番号　不服2022-18480(P2022-18480/J1)
審判請求日　令和4年11月17日(2022.11.17)

(73)特許権者　390019839
三星電子株式会社
Ｓａｍｓｕｎｇ Ｅｌｅｃｔｒｏｎｉｃｓ Ｃｏ．，Ｌｔｄ．
大韓民国京畿道水原市霊通区三星路１２９
１２９，Ｓａｍｓｕｎｇ－ｒｏ，Ｙｅｏｎｇｔｏｎｇ－ｇｕ，Ｓｕｗｏｎ－ｓｉ，Ｇｙｅｏｎｇｇｉ－ｄｏ，Ｒｅｐｕｂｌｉｃ ｏｆ Ｋｏｒｅａ
(74)代理人　100107766
弁理士　伊東 忠重
(74)代理人　100070150
弁理士　伊東 忠彦
(72)発明者　沼田 真樹

最終頁に続く

(54)【発明の名称】　化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子用組成物、及び有機エレクトロルミネッセンス素子

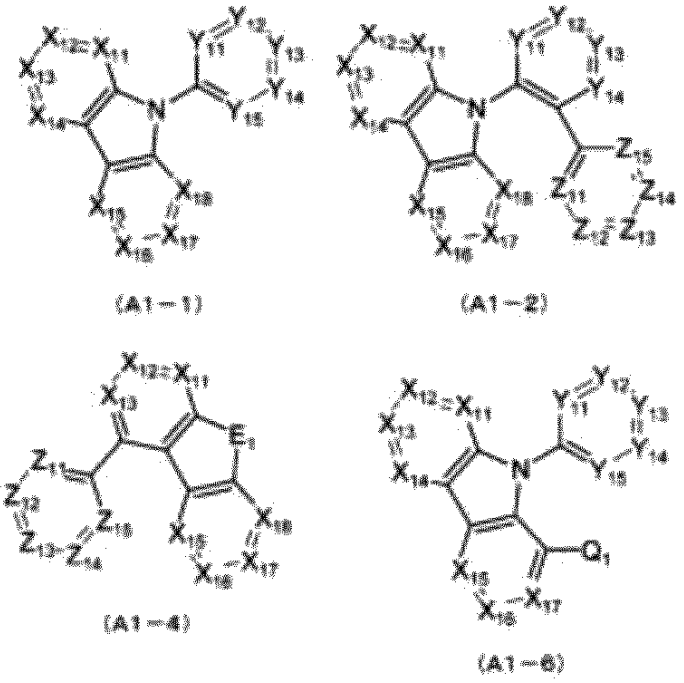
(57)【特許請求の範囲】
【請求項１】
下記一般式（１）：
【化１】



（１）

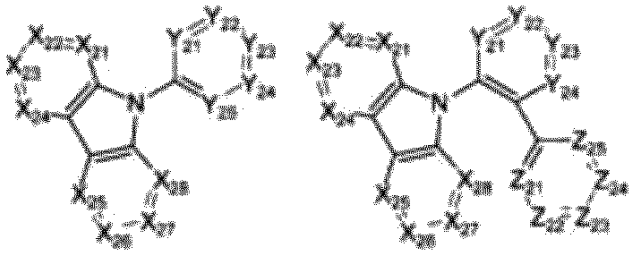
（式中、
Ｌ１及びＬ２は、それぞれ独立して、単結合、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数６～３０の

芳香族複素環基であり、
　ｍ及びｎは、それぞれ独立して、０または１の整数であり、
　Ａ１は、以下の一般式（Ａ１－１）、（Ａ１－２）、（Ａ１－４）及び、（Ａ１－６）：
【化２】



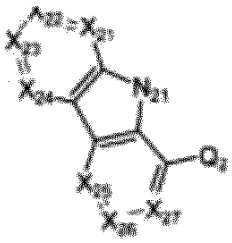
（式中、
　Ｘ１１～Ｘ１８は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ１）または窒素原子であり、
　Ｙ１１～Ｙ１５は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ１）または窒素原子であり、
　Ｚ１１～Ｚ１５は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ１）または窒素原子であり、
　Ｅ１は、Ｎ（Ｒ１５）、であり、
　Ｘ１１～Ｘ１８、Ｙ１１～Ｙ１５、及びＺ１１～Ｚ１５中のＲ１は、それぞれ独立して、水素原子、重水素原子、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基であり、
　Ｅ１中のＲ１５は、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数６～３０の芳香族複素環基であり、
　Ｑ１は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基であり、
　Ｘ１１～Ｘ１８、Ｙ１１～Ｙ１５、Ｚ１１～Ｚ１５のいずれか１つは、Ｌ１と結合する炭素原子である）
から選ばれる置換基であり、
　ただし、Ａ１が前記一般式（Ａ１－１）で表される置換基のとき、Ｌ１はＸ１４と結合し、
　Ａ１が前記一般式（Ａ１－２）で表される置換基のとき、Ｌ１はＸ１４、Ｙ１１～Ｙ１４、Ｚ１１～Ｚ１５のいずれか１つと結合し、
　Ａ１が前記一般式（Ａ１－４）で表される置換基のとき、Ｌ１はＺ１１～Ｚ１５のいずれか１つと結合し、
　Ａ１が前記一般式（Ａ１－６）で表される置換基のとき、Ｌ１はＸ１４、Ｘ１５、Ｙ１１

～Ｙ１５の原子のいずれか１つと結合し、
Ａ２は、下記一般式（Ａ２－１）、（Ａ２－２）及び（Ａ２－５）から選ばれる置換基であり、
【化３】



(A2－1)

(A2－2)



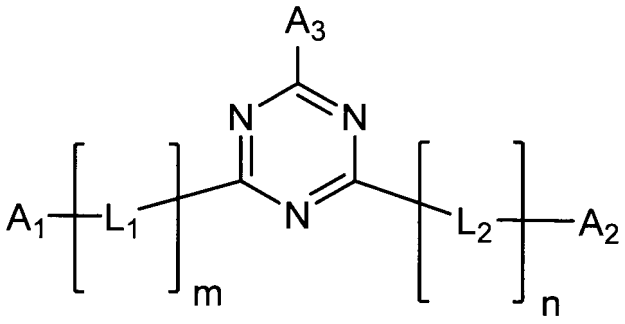
(A2－5)

（式中、
Ｘ２１～Ｘ２８は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ２）または窒素原子であり、
Ｙ２１～Ｙ２５は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ２）または窒素原子であり、
Ｚ２１～Ｚ２５は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ２）または窒素原子であり、
Ｘ２１～Ｘ２８、Ｙ２１～Ｙ２５、及びＺ２１～Ｚ２５中のＲ２は、それぞれ独立して、水素原子、重水素原子、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数６～３０の芳香族複素環基であり、
Ｑ２は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数６～３０の芳香族複素環基であり、
Ｎ２１は、Ｌ２と結合する窒素原子であり、
前記一般式（Ａ２－１）及び（Ａ２－２）中、Ｘ２１～Ｘ２８、Ｙ２１～Ｙ２５、Ｚ２１～Ｚ２５のいずれか１つは、Ｌ２と結合する炭素原子である）
から選ばれる置換基であり、
ただし、Ａ２が前記一般式（Ａ２－１）で表される置換基のとき、Ｌ２はＸ２４、Ｙ２１～Ｙ２５のいずれか１つと結合し、
Ａ２が前記一般式（Ａ２－２）で表される置換基のとき、Ｌ２はＸ２４、Ｙ２１～Ｙ２４、Ｚ２１～Ｚ２５のいずれか１つと結合し、
Ａ２が前記一般式（Ａ２－５）で表される置換基のとき、Ｌ２はＮ２１と結合し、
Ａ３は、ベンゼン、ペンタレン、インデン、ナフタレン、アントラセン、アズレン、ヘプタレン、アセナフタレン、フェナレン、フェナントレン、ビフェニル、ターフェニル、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、ペンタセン、テトラフェン、ヘキサフェン、ヘキサセン、ルビセン、トリナフチレン、ヘプタフェン、ピラントレン、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数６～３０の芳香族複素環基であり、
前記一般式（１）の化合物は、１分子内に含む飽和型窒素原子が３個以下である）

で表される化合物。
【請求項２】
前記一般式（１）中のトリアジン環に結合するＡ$_1$またはＬ$_1$、Ａ$_2$またはＬ$_2$、Ａ$_3$のうち、少なくとも２つは、前記トリアジン環と結合する炭素原子に隣接する２つの原子が、水素原子または重水素原子以外の置換基を有さない炭素原子又は窒素原子である環構造を有する基である、請求項１に記載の化合物。
【請求項３】
前記一般式（Ａ１－２）および（Ａ１－６）において、Ｌ$_1$が、Ｙ$_{12}$もしくはＹ$_{13}$と結合するか、ならびに／または、前記一般式（Ａ２－２）において、Ｌ$_2$が、Ｙ$_{22}$もしくはＹ$_{23}$と結合する、請求項１または２に記載の化合物。
【請求項４】
前記一般式（Ａ１－１）、（Ａ１－２）および（Ａ１－６）において、Ｙ$_{12}$およびＹ$_{13}$のうち、いずれか１つが、Ｃ（Ｒ$_1$）であり、且つ該Ｒ$_1$が、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、ならびに／または、前記一般式（Ａ２－１）および（Ａ２－２）において、Ｙ$_{22}$およびＹ$_{23}$のうち、いずれか１つが、Ｃ（Ｒ$_2$）であり、且つ該Ｒ$_2$が、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数６～３０の芳香族複素環基である、請求項１または２に記載の化合物。
【請求項５】
芳香族複素環基が、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、キノリン、キノキサリン、キナゾリン、ナフチリジン、フェナントリジン、アクリジン、キノン、アントラキノン、キサントン、チオキサントン、クマリン、６Ｈ－ベンゾ［ｃ］クロメン－６－オン（６Ｈ－ｂｅｎｚｏ［ｃ］ｃｈｒｏｍｅｎ－６－ｏｎｅ）、フルオレノン、イミダゾール、ベンゾイミダゾール、ピラゾール、インダゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾイソオキサゾール、チアゾール、イソチアゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイソチアゾール、ホスホール、ジベンゾホスホール、ジベンゾチオフェン５，５－ジオキサイドである、請求項１または４に記載の化合物。
【請求項６】
前記一般式（Ａ１－１）、（Ａ１－２）および（Ａ１－６）において、Ｙ$_{13}$がＣ（Ｒ$_1$）であり、且つ該Ｒ$_1$が、飽和型窒素原子を含まない、ならびに／または、前記一般式（Ａ２－１）および（Ａ２－２）において、Ｙ$_{23}$がＣ（Ｒ$_2$）であり、且つ該Ｒ$_2$が、飽和型窒素原子を含まない、請求項１乃至５のいずれか１項に記載の化合物。
【請求項７】
前記一般式（１）中のトリアジン環に結合する３つの置換基がそれぞれ互いに異なる構造である、請求項１乃至６のいずれか１項に記載の化合物。
【請求項８】
請求項１乃至７のいずれか１項に記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。
【請求項９】
請求項１乃至７のいずれか１項に記載の化合物と、溶媒とを含む、有機エレクトロルミネッセンス素子用組成物。
【請求項１０】
一対の電極と、
前記一対の電極間に配置される１層以上の有機層と、を備え、
前記有機層のうち、少なくとも１層は、請求項１乃至７のいずれか１項に記載の化合物を含む、
有機エレクトロルミネッセンス素子。
【請求項１１】
一対の電極と、
前記一対の電極間に配置される１層以上の有機層と、を備え、

前記有機層のうち、少なくとも１層は、発光材料と請求項１乃至７のいずれか１項に記載の化合物
を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。
【請求項１２】
前記化合物を含む有機層は、塗布法により形成されている、請求項１０または１１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
【発明の詳細な説明】
【技術分野】
【０００１】
本発明は、化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子用組成物、及び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】
近年、自発光型の発光素子である有機エレクトロルミネッセンス素子（ＯｒｇａｎｉｃＥｌｅｃｔｒｏＬｕｍｉｎｅｓｃｅｎｃｅ　Ｄｅｖｉｃｅ）を用いた表示装置および照明機器の開発が活発に行われている。有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、有機電界発光素子または有機ＥＬ素子という場合がある）は、発光材料を含む有機層を有している。有機ＥＬ素子の有機層内では、電子と正孔とが再結合することにより発光材料が励起され、発光材料が基底状態に戻る際に発光が生じる。
【０００３】
このような有機ＥＬ素子では、電流効率、発光寿命等の素子特性の向上を目的として、有機層を構成するための各種材料が開発されている。例えば、特許文献１～５には、カルバゾール化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子が開示されている。
【０００４】
また、有機ＥＬ素子の製造においては、有機ＥＬ素子を構成する有機膜を、蒸着法等の乾式成膜法により成膜するのが一般的である。一方、蒸着法等の乾式成膜法による成膜は、時間とコストがかかることから、このような乾式成膜法に替えて、時間とコストを抑制できる溶液塗布法（以下塗布法という）等の湿式成膜法を用いることが検討されている。
【先行技術文献】
【特許文献】
【０００５】
【文献】国際公開第２０１４／０９４９６３号
【文献】国際公開第２０１３／１２２４０２号
【文献】国際公開第２００３／０７８５４１号
【文献】国際公開第２００６／０６７９７６号
【文献】国際公開第２００６／０６２０６２号
【発明の概要】
【発明が解決しようとする課題】
【０００６】
しかしながら、溶液塗布法等の湿式成膜法により有機ＥＬ素子の成膜を行う場合、蒸着で用いられる有機ＥＬ材料が塗布溶媒に対して溶解し難い場合が多く、また、溶解に問題が無かったとしても湿式法で作製された薄膜では蒸着法で作製された薄膜に比べて有機分子の凝集が起こり易い。複数の有機分子が凝集することで分子軌道が単分子状態よりも拡大されるなどして、単分子状態の時とは異なるＨＯＭＯ、ＬＵＭＯ、Ｓ１、Ｔ１等のエネルギー準位を形成する可能性がある。そしてそれらはキャリアのトラップや発光励起子の失活などの悪影響をもたらす可能性が高い。そのため、塗布法により形成された有機ＥＬ素子では、十分な電流効率、発光寿命が得られていない。
【０００７】
本発明の目的は、電流効率、発光寿命に優れる有機エレクトロルミネッセンス素子を塗布法により作製することができる化合物を提供することにある。

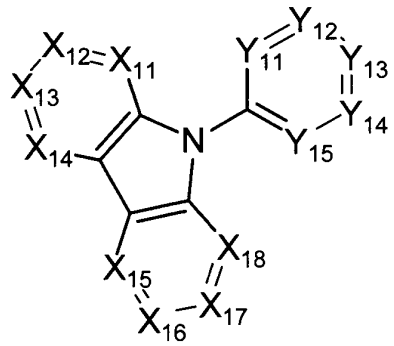
【課題を解決するための手段】
【０００８】
上記課題を解決するため、本発明の一態様は、下記一般式（１）で表される化合物を提供する。
【０００９】
【化１】



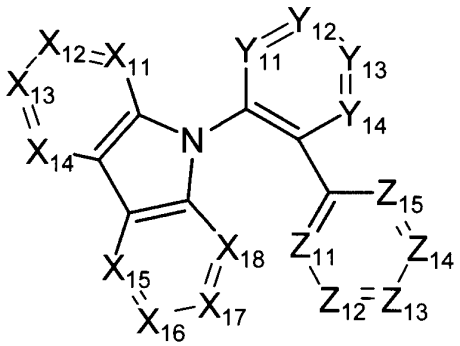
（1）

【００１０】
Ｌ$_1$及びＬ$_2$は、それぞれ独立して、単結合、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であり、
ｍ及びｎは、それぞれ独立して、０または１の整数であり、
Ａ$_1$は、下記一般式（Ａ１－１）～（Ａ１－６）から選ばれる置換基であり、
【００１１】

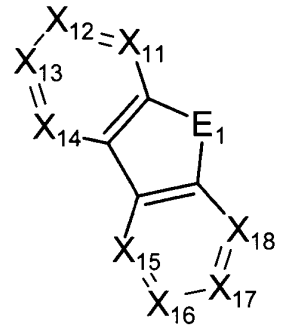
【化２】



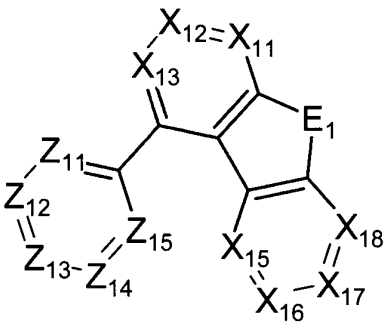
（Ａ１－１）



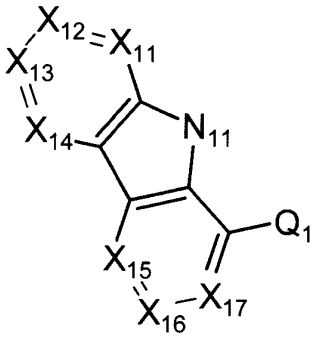
（Ａ１－２）



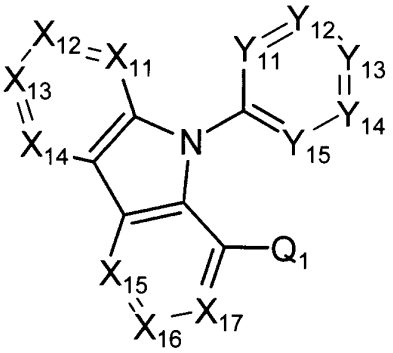
（Ａ１－３）



（Ａ１－４）



（Ａ１－５）



（Ａ１－６）

上記一般式（Ａ１－１）～（Ａ１－６）において、

Ｘ１１～Ｘ１８は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ１）または窒素原子であり、

Ｙ１１～Ｙ１５は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ１）または窒素原子であり、

Ｚ１１～Ｚ１５は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ１）または窒素原子であり、

Ｅ１は、Ｃ（Ｒ１１）（Ｒ１２）、Ｓｉ（Ｒ１３）（Ｒ１４）、Ｎ（Ｒ１５）、酸素原子または硫黄原子であり、

Ｘ１１～Ｘ１８、Ｙ１１～Ｙ１５、及びＺ１１～Ｚ１５中のＲ１は、それぞれ独立して、水素原子、重水素原子、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素

数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であり、

E_1中のR_{11}～R_{14}は、それぞれ独立して、水素原子、重水素原子、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であり、

E_1中のR_{15}は、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であり、

Q_1は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であり、

N_{11}は、L_1と結合する窒素原子であり、

X_{11}～X_{18}、Y_{11}～Y_{15}、Z_{11}～Z_{15}のいずれか１つは、L_1と結合する炭素原子であり、

ただし、A_1が上記一般式（Ａ１－１）で表される置換基のとき、L_1はX_{14}と結合し、

A_1が上記一般式（Ａ１－２）で表される置換基のとき、L_1はX_{14}、Y_{11}～Y_{14}、Z_{11}～Z_{15}のいずれか１つと結合し、

A_1が上記一般式（Ａ１－３）で表される置換基のとき、L_1はX_{14}と結合し、

A_1が上記一般式（Ａ１－４）で表される置換基のとき、L_1はZ_{11}～Z_{15}のいずれか１つと結合し、

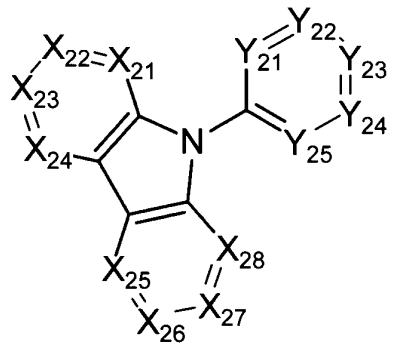
A_1が上記一般式（Ａ１－５）で表される置換基のとき、L_1はX_{14}、X_{15}、Ｑが有する水素原子以外の原子のいずれか１つと結合し、または、

A_1が上記一般式（Ａ１－６）で表される置換基のとき、L_1はX_{14}、X_{15}、Y_{11}～Y_{15}、Q_1が有する水素原子以外の原子のいずれか１つと結合し、

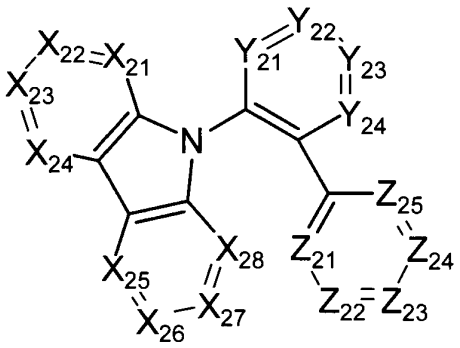
A_2は、下記一般式（Ａ２－１）～（Ａ２－６）から選ばれる置換基であり、

【００１２】

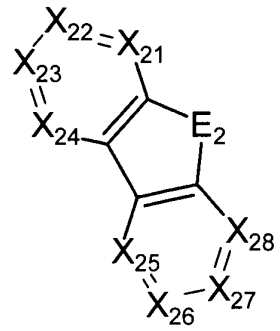
【化３】



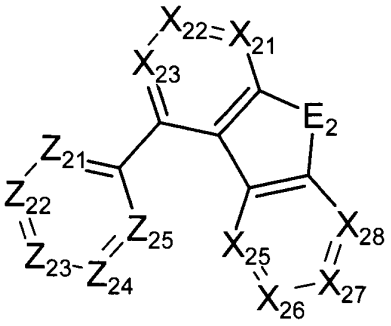
（A2－1）



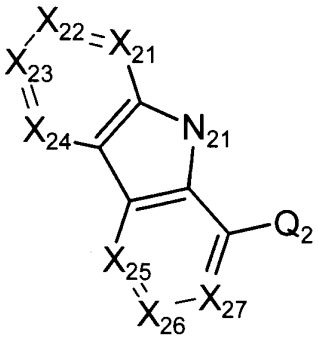
（A2－2）



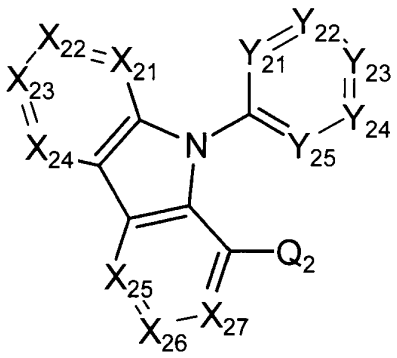
（A2－3）



（A2－4）



（A2－5）



（A2－6）

上記一般式（Ａ２－１）～（Ａ２－６）において、

Ｘ２１～Ｘ２８は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ２）または窒素原子であり、

Ｙ２１～Ｙ２５は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ２）または窒素原子であり、

Ｚ２１～Ｚ２５は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ２）または窒素原子であり、

Ｅ２は、Ｃ（Ｒ２１）（Ｒ２２）、Ｓｉ（Ｒ２３）（Ｒ２４）、Ｎ（Ｒ２５）、酸素原子または硫黄原子であり、

Ｘ２１～Ｘ２８、Ｙ２１～Ｙ２５、及びＺ２１～Ｚ２５中のＲ２は、それぞれ独立して、水素原子、重水素原子、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素

数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であり、

E_2中のR_{21}～R_{24}は、それぞれ独立して、水素原子、重水素原子、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であり、

E_2中のR_{25}は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であり、

Q_2は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であり、

N_{21}は、L_2と結合する窒素原子であり、

X_{21}～X_{28}、Y_{21}～Y_{25}、Z_{21}～Z_{25}のいずれか１つは、L_2と結合する炭素原子であり、

ただし、A_2が上記一般式（Ａ２－１）で表される置換基のとき、L_2はX_{24}、Y_{21}～Y_{25}のいずれか１つと結合し、

A_2が上記一般式（Ａ２－２）で表される置換基のとき、L_2はX_{24}、Y_{21}～Y_{24}、Z_{21}～Z_{25}のいずれか１つと結合し、

A_2が上記一般式（Ａ２－３）で表される置換基のとき、L_2はX_{24}と結合し、

A_2が上記一般式（Ａ２－４）で表される置換基のとき、L_2はZ_{21}～Z_{25}のいずれか１つと結合し、

A_2が上記一般式（Ａ２－５）で表される置換基のとき、L_2はN_{21}、X_{24}、X_{25}、Q_2が有する水素原子以外の原子のいずれか１つと結合し、または、

A_2が上記一般式（Ａ２－６）で表される置換基のとき、L_2はN_{21}、X_{24}、X_{25}、Y_{21}～Y_{25}、Q_2が有する水素原子以外の原子のいずれか１つと結合し、

A_3は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であり、

上記一般式（１）の化合物は、１分子内に含む飽和型窒素原子が３個以下である。

【発明の効果】

【００１３】

本発明の一態様によれば、電流効率、発光寿命に優れる有機エレクトロルミネッセンス素子を塗布法により作製することができる化合物を提供する。

【図面の簡単な説明】

【００１４】

【図１】本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子を示す模式図である。

【発明を実施するための形態】

【００１５】

以下、本発明の実施形態について、詳細に説明する。なお、本発明は、以下の実施の形態のみには限定されない。

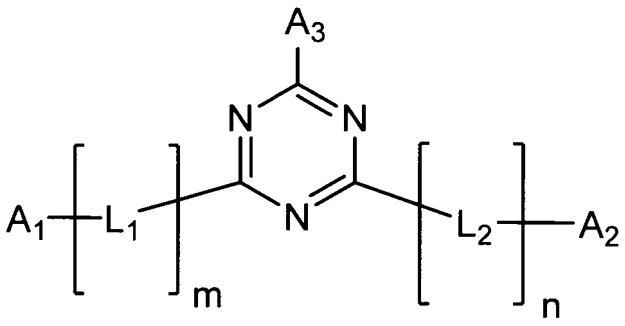
【００１６】

＜化合物＞

本実施形態に係る化合物は、下記一般式（１）で表される化合物である。

【００１７】

【化４】



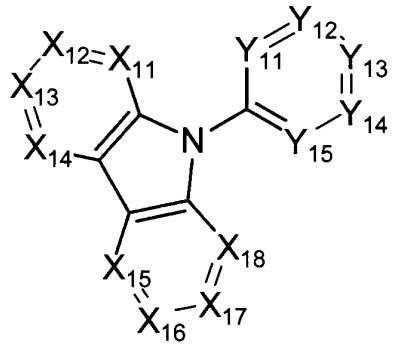
（1）

【００１８】

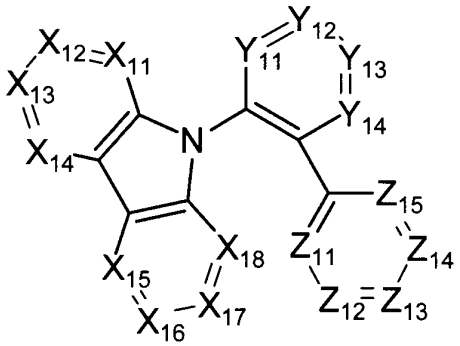
上記一般式（１）において、Ａ１は、下記一般式（Ａ１－１）～（Ａ１－６）から選ばれる置換基である。

【００１９】

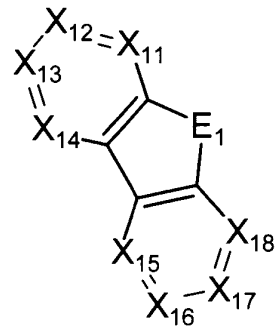
【化５】



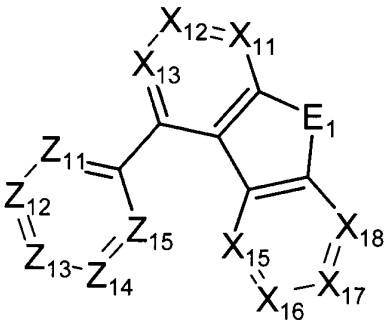
（A1－1）



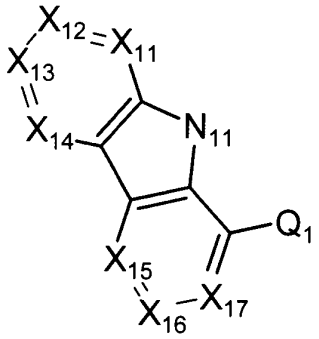
（A1－2）



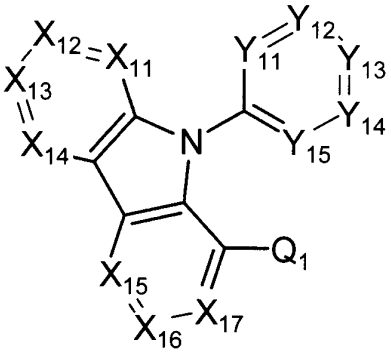
（A1－3）



（A1－4）



（A1－5）



（A1－6）

【００２０】

上記一般式（Ａ１－１）～（Ａ１－６）において、X_{11}～X_{18}は、それぞれ独立して、Ｃ（R_1）または窒素原子である。Y_{11}～Y_{15}は、それぞれ独立して、Ｃ（R_1）または窒素原子である。Z_{11}～Z_{15}は、それぞれ独立して、Ｃ（R_1）または窒素原子である。E_1は、Ｃ（R_{11}）（R_{12}）、Ｓｉ（R_{13}）（R_{14}）、Ｎ（R_{15}）、酸素原子または硫黄原子である。

【００２１】

ここで「それぞれ独立して」とは、R_{11}～R_{14}等の各選択が同一であってもよいし、異なっていてもよいことを意味する。

【００２２】
X_{11}～X_{18}、Y_{11}～Y_{15}、およびZ_{11}～Z_{15}中のR_1は、それぞれ独立して、水素原子、重水素原子、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基である。
【００２３】
本明細書において、「置換されたもしくは無置換の」とは、置換基等が、水素原子および重水素原子を除き、さらに置換基を有してもよいことを意味する。また、これらの置換基は互いに結合して環を形成してもよい。
【００２４】
また、本明細書において、「Ａ～Ｂ」というときは、ＡとＢを含むＡからＢまでの範囲を意味する。
【００２５】
R_1を構成し得る炭素数１～３０のアルキル基は、特に限定されないが、例えば炭素数１～３０の直鎖又は分岐状のアルキル基である。具体的には、メチル基、エチル基、ｎ－プロピル基、イソプロピル基、ｎ－ブチル基、イソブチル基、ｓｅｃ－ブチル基、ｔｅｒｔ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、イソペンチル基、ｔｅｒｔ－ペンチル基、ネオペンチル基、１，２－ジメチルプロピル基、ｎ－ヘキシル基、イソヘキシル基、１，３－ジメチルブチル基、１－イソプロピルプロピル基、１，２－ジメチルブチル基、ｎ－ヘプチル基、１，４－ジメチルペンチル基、３－エチルペンチル基、２－メチル－１－イソプロピルプロピル基、１－エチル－３－メチルブチル基、ｎ－オクチル基、２－エチルヘキシル基、３－メチル－１－イソプロピルブチル基、２－メチル－１－イソプロピル基、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２－メチルプロピル基、ｎ－ノニル基、３，５，５－トリメチルヘキシル基、ｎ－デシル基、イソデシル基、ｎ－ウンデシル基、１－メチルデシル基、ｎ－ドデシル基、ｎ－トリデシル基、ｎ－テトラデシル基、ｎ－ペンタデシル基、ｎ－ヘキサデシル基、ｎ－ヘプタデシル基、ｎ－オクタデシル基、ｎ－ノナデシル基、ｎ－エイコシル基、ｎ－ヘンエイコシル基、ｎ－ドコシル基、ｎ－トリコシル基、ｎ－テトラコシル基などが挙げられる。これらのうち、炭素数１～８の直鎖若しくは分岐状のアルキル基が好ましい。
【００２６】
R_1を構成し得る炭素数１～３０のアルコキシ基は、特に限定されないが、例えば炭素数１～３０の直鎖または分岐状のアルコキシ基である。具体的には、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、イソプロポキシ基、ブトキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、ヘプチルオキシ基、オクチルオキシ基、ノニルオキシ基、デシルオキシ基、ウンデシルオキシ基、ドデシルオキシ基、トリデシルオキシ基、テトラデシルオキシ基、ペンタデシルオキシ基、ヘキサデシルオキシ基、ヘプタデシルオキシ基、オクタデシルオキシ基、２－エチルヘキシルオキシ基、３－エチルペンチルオキシ基などが挙げられる。これらのうち、炭素数１～８の直鎖もしくは分岐状のアルコキシ基が好ましい。
【００２７】
R_1を構成し得る炭素数６～３０のアリールオキシ基は、特に限定されないが、例えば、ヘテロ原子を含んでよい炭素数６～３０の単環または縮合多環アリールオキシ基である。具体的には、フェノキシ基、１－ナフチルオキシ基、２－ナフチルオキシ基、２－アズレニルオキシ基、２－フラニルオキシ基、２－チエニルオキシ基、２－インドリルオキシ基、３－インドリルオキシ基、２－ベンゾフリルオキシ基、２－ベンゾチエニルオキシ基等が挙げられる。
【００２８】
R_1を構成し得る炭素数１～３０のアミノ基は、特に限定されないが、例えば炭素数１～３０の直鎖または分岐状のアルキルアミノ基である。具体的には、Ｎ－メチルアミノ基、Ｎ－エチルアミノ基、Ｎ－プロピルアミノ基、Ｎ－イソプロピルアミノ基、Ｎ－ブチル

アミノ基、Ｎ－イソブチルアミノ基、Ｎ－ｓｅｃ－ブチルアミノ基、Ｎ－ｔｅｒｔ－ブチルアミノ基、Ｎ－ペンチルアミノ基、Ｎ－ヘキシルアミノ基等のＮ－アルキルアミノ基、Ｎ，Ｎ，Ｎ－ジメチルアミノ基、Ｎ－メチル－Ｎ－エチルアミノ基、Ｎ，Ｎ－ジエチルアミノ基、Ｎ，Ｎ－ジプロピルアミノ基、Ｎ，Ｎ－ジイソプロピルアミノ基、Ｎ，Ｎ－ジブチルアミノ基、Ｎ，Ｎ－ジイソブチルアミノ基、Ｎ，Ｎ－ジペンチルアミノ基、Ｎ，Ｎ－ジヘキシルアミノ基等のＮ，Ｎ－ジアルキルアミノ基が挙げられる。

【００２９】

R_1を構成し得る炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基は、炭素数６～３０の１つ以上の芳香族環を含む炭素環を有する炭化水素環（芳香族炭化水素環）由来の基である。また、芳香族炭化水素環基が２以上の環を含む場合、２以上の環は互いに縮合していてもよい。また、これら芳香族炭化水素環基に存在する１以上の水素原子が置換基で置換されていてもよい。

【００３０】

芳香族炭化水素環基を構成する芳香族炭化水素は、特に限定されないが、具体的には、ベンゼン、ペンタレン、インデン、ナフタレン、アントラセン、アズレン、ヘプタレン、アセナフタレン、フェナレン、フルオレン、フェナントレン、ビフェニル、ｏ－ターフェニル、ｍ－ターフェニル、ｐ－ターフェニル、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、ペンタセン、テトラフェン、ヘキサフェン、ヘキサセン、ルビセン、トリナフチレン、ヘプタフェン、ピラントレン等が挙げられる。

【００３１】

R_1を構成し得る環形成原子数３～３０の芳香族複素環基は、１個以上のヘテロ原子（例えば、窒素原子（Ｎ）、酸素原子（Ｏ）、リン原子（Ｐ）、硫黄原子（Ｓ））を有し、残りの環原子が炭素原子（Ｃ）である１以上の芳香族環を含む環形成原子数３～３０の環（芳香族複素環）由来の基である。また、芳香族複素環基が２以上の環を含む場合、２以上の環は互いに縮合していてもよい。また、これら芳香族複素環基に存在する１以上の水素原子が置換基で置換されていてもよい。

【００３２】

ここで、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造（例えば単環、縮合環、環集合）を有する化合物において、環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子（例えば環を構成する原子の結合手を終端する水素原子）や、環が置換基によって置換される場合、該置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。例えば、カルバゾリル基は、環形成原子数が１３である。

【００３３】

芳香族複素環基を構成する芳香族複素環としては、特に限定されないが、例えば、π電子不足系芳香族複素環、π電子過剰系芳香族複素環、π電子不足系芳香族複素環とπ電子過剰系芳香族複素環とを混合したπ電子不足系－π電子過剰系混合芳香族複素環が挙げられる。

【００３４】

π電子不足系芳香族複素環の具体例としては、ピリジン、ピラジン、ピリダジン、ピリミジン、トリアジン、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、キナゾリン、ナフチリジン、アクリジン、フェナジン、ベンゾキノリン、ベンゾイソキノリン、フェナンスリジン、フェナントロリン、ベンゾキノン、クマリン、アントラキノン、フルオレノン等が挙げられる。

【００３５】

π電子過剰系芳香族複素環の具体例としては、フラン、チオフェン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ピロール、インドール、カルバゾール等が挙げられる。

【００３６】

π電子不足系－π電子過剰系混合芳香族複素環の具体例としては、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ピラゾール、インダゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ベンゾ

オキサゾール、ベンゾイソオキサゾール、チアゾール、イソチアゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイソチアゾール、イミダゾリノン、ベンズイミダゾリノン、イミダゾピリジン、イミダゾピリミジン、イミダゾフェナンスリジン、ベンズイミダゾフェナンスリジン、アザジベンゾフラン、アザカルバゾール、アザジベンゾチオフェン、ジアザジベンゾフラン、ジアザカルバゾール、ジアザジベンゾチオフェン、キサントン、チオキサントン等が挙げられる。

【００３７】

上記一般式（Ａ１－３）または（Ａ１－４）中のＥ$_1$を構成し得るＲ$_{11}$～Ｒ$_{14}$は、それぞれ独立して、水素原子、重水素原子、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基である。

【００３８】

ここで「それぞれ独立して」とは、Ｒ$_{11}$～Ｒ$_{14}$等の各置換基が同一であってもよいし、異なっていてもよいことを意味する。また、Ｒ$_{11}$～Ｒ$_{14}$を構成し得る水素原子、重水素原子、アルキル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、シアノ基、芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基は、Ｒ$_1$を構成し得る水素原子、重水素原子、アルキル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、シアノ基、芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基と同様の定義であるため、ここでは説明を省略する。

【００３９】

上記一般式（Ａ１－３）または（Ａ１－４）中のＥ$_1$を構成し得るＲ$_{15}$は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基である。

【００４０】

ここで、Ｒ$_{15}$を構成し得るアルキル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、シアノ基、芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基は、Ｒ$_1$を構成し得るアルキル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、シアノ基、芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基と同様の定義であるため、説明を省略する。

【００４１】

一般式（１）において、Ｌ$_1$及びＬ$_2$は、それぞれ独立して、単結合、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基である。

【００４２】

ここで、Ｌ$_1$、Ｌ$_2$が単結合である場合は、一般式（１）中のトリアジン環に対して、Ａ$_1$、Ａ$_2$が直接結合することを示す。また、Ｌ$_1$、Ｌ$_2$を構成し得る芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基は、上述のＲ$_1$を構成し得る芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基と同様の定義である。

【００４３】

なお、有機エレクトロルミネッセンス素子の電流効率、発光寿命を向上させる観点から、Ｌ$_1$、Ｌ$_2$を構成し得る芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基は、好ましくは置換されたもしくは無置換の炭素数６～１８の芳香族炭化水素環基、置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～１８の芳香族複素環基であり、より好ましくは置換されたもしくは無置換の炭素数６～１３の芳香族炭化水素環基（例えば、フルオレン等）、置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～１３の芳香族複素環基（例えば、ジベンゾフラン等）であり、さらに好ましくは置換されたもしくは無置換の炭素数６～１０（例えば、ベンゼン環、ナフタレン環）、置換されたもしくは無置換のピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、トリアジン環、キノリン環、キノキサリン環、キナゾリン環、ジベンゾフラン環、ジベンゾチオフェン環からなる基である。

【００４４】
ｍ及びｎは、それぞれ独立して、０または１の整数である。「それぞれ独立して」とは、ｍ、ｎが同一であってもよいし、異なっていてもよいことを意味する。なお、ｍ、ｎが０の場合は、一般式（１）中のトリアジン環に対して、A_1、A_2が直接結合することを示す。
【００４５】
上記一般式（Ａ１－５）及び（Ａ１－６）中のQ_1は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基である。なお、Q_1を構成し得る芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基は、上述のA_1においてR_1を構成し得る芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基と同様の定義であるため、説明を省略する。
【００４６】
また、A_1において、X_{11}～X_{18}、Y_{11}～Y_{15}、及びZ_{11}～Z_{15}のいずれか１つは、L_1と結合する炭素原子である。すなわち、A_1は、X_{11}～X_{18}、Y_{11}～Y_{15}、Z_{11}～Z_{15}のいずれか１つの炭素原子を介して、L_1に結合している。
【００４７】
ただし、A_1が上記一般式（Ａ１－１）で表される置換基のとき、L_1はX_{14}と結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ１－１）で表される置換基は、X_{14}を介してL_1に結合する。
【００４８】
また、A_1が上記一般式（Ａ１－２）で表される置換基のとき、L_1はX_{14}、Y_{11}～Y_{14}、Z_{11}～Z_{15}のいずれか１つと結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ１－２）で表される置換基は、X_{14}、Y_{11}～Y_{14}、Z_{11}～Z_{15}のいずれか１つを介してL_1に結合する。
【００４９】
また、A_1が上記一般式（Ａ１－３）で表される置換基のとき、L_1はX_{14}と結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ１－３）で表される置換基は、X_{14}を介してL_1に結合する。
【００５０】
また、A_1が上記一般式（Ａ１－４）で表される置換基のとき、L_1はZ_{11}～Z_{15}のいずれか１つと結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ１－４）で表される置換基は、Z_{11}～Z_{15}のいずれか１つを介してL_1に結合する。
【００５１】
また、A_1が上記一般式（Ａ１－５）で表される置換基のとき、L_1はX_{14}、X_{15}、Q_1が有する水素原子以外の原子のいずれか１つと結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ１－５）で表される置換基は、X_{14}、X_{15}、Q_1が有する水素原子以外の原子のいずれか１つを介してL_1に結合する。
【００５２】
また、A_1が上記一般式（Ａ１－６）で表される置換基のとき、L_1はX_{14}、X_{15}、Y_{11}～Y_{15}、Q_1が有する水素原子以外の原子のいずれか１つと結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ１－６）で表される置換基は、X_{14}、X_{15}、Y_{11}～Y_{15}、Q_1が有する水素原子以外の原子のいずれか１つを介してL_1に結合する。
【００５３】
このようにA_1の結合位置を限定することで、後述する、ＬＵＭＯ領域に対する、A_1を含む平面（後述のA_1平面）の二面角を大きな角度にすることができる。
【００５４】
なお、本実施形態に係る化合物の光化学的安定性を向上させる観点から、A_1が、上記一般式（Ａ１－１）、（Ａ１－２）または（Ａ１－６）で表される置換基の場合、L_1がY_{12}またはY_{13}と結合するのが好ましい。また、L_1がY_{12}またはY_{13}以外と結合

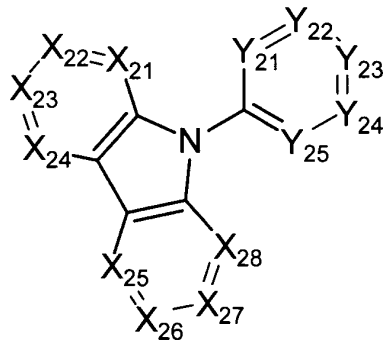
する場合は、Ｙ１２、Ｙ１３のいずれか１つがＣ（Ｒ１）であって、該Ｒ１が置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であることが好ましい。

【００５５】

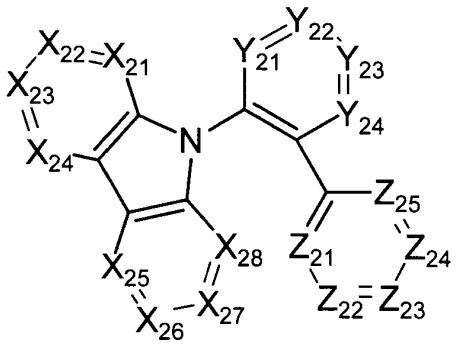
また、上記一般式（１）において、Ａ２は、下記一般式（Ａ２－１）～（Ａ２－６）から選ばれる置換基である。

【００５６】

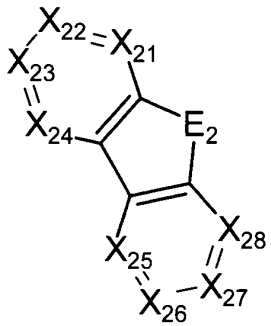
【化６】



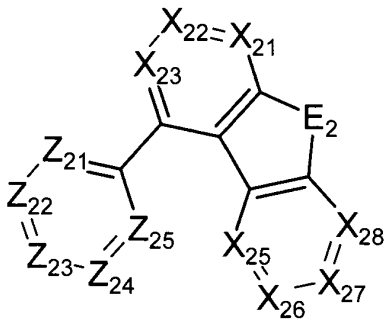
（A2－1）



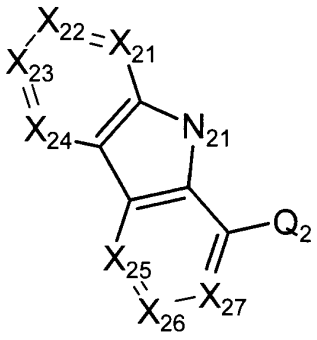
（A2－2）



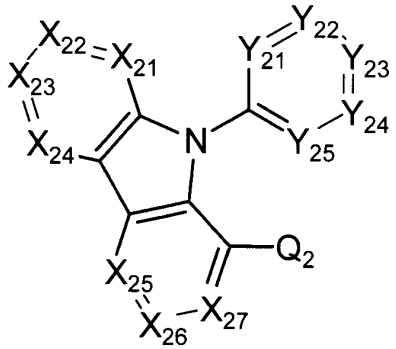
（A2－3）



（A2－4）



（A2－5）



（A2－6）

【００５７】

上記一般式（Ａ２－１）～（Ａ２－６）において、Ｘ２１～Ｘ２８は、それぞれ独立して

、Ｃ（Ｒ$_2$）または窒素原子である。Ｙ$_{21}$～Ｙ$_{25}$は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ$_2$）または窒素原子である。Ｚ$_{21}$～Ｚ$_{25}$は、それぞれ独立して、Ｃ（Ｒ$_2$）または窒素原子である。Ｅ$_2$は、Ｃ（Ｒ$_{21}$）（Ｒ$_{22}$）、Ｓｉ（Ｒ$_{23}$）（Ｒ$_{24}$）、Ｎ（Ｒ$_{25}$）、酸素原子または硫黄原子である。

【００５８】

Ｘ$_{21}$～Ｘ$_{28}$、Ｙ$_{21}$～Ｙ$_{25}$、およびＺ$_{21}$～Ｚ$_{25}$中のＲ$_2$は、それぞれ独立して、水素原子、重水素原子、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基である。

【００５９】

ここで、Ｒ$_2$を構成し得る水素原子、重水素原子、アルキル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、シアノ基、芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基は、上述のＡ$_1$においてＲ$_1$を構成し得る水素原子、重水素原子、アルキル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、シアノ基、芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基と同様の定義であるため、ここでは説明を省略する。

【００６０】

上記一般式（Ａ２－３）及び（Ａ２－４）中のＥ$_2$を構成し得るＲ$_{21}$～Ｒ$_{24}$は、それぞれ独立して、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアルコキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０のアリールオキシ基、置換されたもしくは無置換の炭素数１～３０のアミノ基、シアノ基、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基である。

【００６１】

ここで、Ｒ$_{21}$～Ｒ$_{24}$を構成し得る水素原子、重水素原子、アルキル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、シアノ基、芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基は、上述のＡ$_1$においてＲ$_1$を構成し得る水素原子、重水素原子、アルキル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、シアノ基、芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基と同様の定義であるため、ここでは説明を省略する。

【００６２】

上記一般式（Ａ２－３）及び（Ａ２－４）中のＥ$_2$を構成し得るＲ$_{25}$は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基である。なお、Ｒ$_{25}$を構成し得る芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基は、上述のＡ$_1$においてＲ$_1$を構成し得る芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基と同様の定義であるため、説明を省略する。

【００６３】

上記一般式（Ａ２－５）及び（Ａ２－６）中のＱ$_2$は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基である。なお、Ｑ$_2$を構成し得る芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基は、上述のＡ$_1$においてＲ$_1$を構成し得る芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基と同様の定義であるため、説明を省略する。

【００６４】

上記一般式（Ａ２－５）中のＮ$_{21}$は、Ｌ$_2$と結合する窒素原子である。すなわち、（Ａ２
－５）は、Ｎ$_{21}$を構成する窒素原子を介して、Ｌ$_2$に結合する。

【００６５】

また、上記一般式（Ａ２－１）～（Ａ２－４）及び（Ａ２－６）中のＸ$_{21}$～Ｘ$_{28}$、Ｙ$_{21}$～Ｙ$_{25}$、Ｚ$_{21}$～Ｚ$_{25}$のいずれか１つは、Ｌ$_2$と結合する炭素原子である。すなわち、（Ａ２－１）～（Ａ２－４）及び（Ａ２－６）は、Ｘ$_{21}$～Ｘ$_{28}$、Ｙ$_{21}$～Ｙ$_{25}$、

Z_{21}～Z_{25}のいずれか１つの炭素原子を介して、L_2に結合する。

【００６６】

ただし、A_2が上記一般式（Ａ２－１）で表される置換基のとき、L_2はX_{24}、Y_{21}～Y_{25}のいずれか１つと結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ２－１）で表される置換基は、X_{24}、Y_{21}～Y_{25}のいずれか１つを介してL_2に結合する。

【００６７】

また、A_2が上記一般式（Ａ２－２）で表される置換基のとき、L_2はX_{24}、Y_{21}～Y_{24}、Z_{21}～Z_{25}のいずれか１つと結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ２－２）で表される置換基は、X_{24}、Y_{21}～Y_{24}、Z_{21}～Z_{25}のいずれか１つを介してL_2に結合する。

【００６８】

また、A_2が上記一般式（Ａ２－３）で表される置換基のとき、L_2はX_{24}と結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ２－３）で表される置換基は、X_{24}を介してL_2に結合する。

【００６９】

また、A_2が上記一般式（Ａ２－４）で表される置換基のとき、L_2はZ_{21}～Z_{25}のいずれか１つと結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ２－４）で表される置換基は、Z_{21}～Z_{25}のいずれか１つを介してL_2に結合する。

【００７０】

また、A_2が上記一般式（Ａ２－６）で表される置換基のとき、L_2はX_{24}、X_{25}、Y_{21}～Y_{25}、Q_2が有する水素原子以外の原子のいずれか１つと結合する。すなわち、上記一般式（１）において、上記一般式（Ａ２－６）で表される置換基は、X_{24}、X_{25}、Y_{21}～Y_{25}、Q_2が有する水素原子以外の原子のいずれか１つを介してL_2に結合する。

【００７１】

このようにA_2の結合位置を限定することで、後述する、ＬＵＭＯ領域に対する、A_2を含む平面（後述のA_2平面）の二面角を大きな角度にすることができる。

【００７２】

なお、本実施形態に係る化合物の光化学的安定性を向上させる観点から、A_2が、上記一般式（Ａ２－１）、（Ａ２－２）または（Ａ２－６）で表される置換基の場合、L_2がY_{22}またはY_{23}と結合するのが好ましい。また、L_2がY_{22}またはY_{23}以外と結合する場合は、Y_{22}、Y_{23}のいずれか１つがＣ（R_2）であって、該R_2が置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であることが好ましい。

【００７３】

上記一般式（１）中のA_3は、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基である。上記一般式（１）中で、A_3は、トリアジン環に直接結合している。なお、A_3を構成し得る芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基は、上述のA_1においてR_1を構成し得る芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基と同様の定義であるため、説明を省略する。

【００７４】

一般式（１）の化合物は、１分子内に含む飽和型窒素原子が３個以下である。ここで「１分子内に含む飽和型窒素原子が３個以下」とは、一般式（１）の化合物中に、A_1、L_1、A_2、L_2、及びA_3にそれぞれ結合する置換基を含めて４個以上の飽和型窒素原子を含まないことを意味する。本実施形態では、一般式（１）の化合物中に、一般式（Ａ１－１）～（Ａ１－６）、L_1、（Ａ２－１）～（Ａ２－６）、L_2、A_3およびそれらに結合する置換基を含めて、飽和型窒素原子を４個以上含まない。このことにより、A_1平面に分布するＨＯＭＯの、分子量全体に占める分子量比率（以下、ＨＯＭＯ分子量比率ということがある）を減少させることができ、正孔輸送性を抑制して相対的にＬＵＭＯ領域に由来

する電子輸送性を強調することができる。
【００７５】
上記一般式（Ａ１－１）、（Ａ１－２）および（Ａ１－６）において、Y_{13}がＣ（R_1）であり、且つ該R_1が、飽和型窒素原子を含まない、ならびに／または、上記一般式（Ａ２－１）、（Ａ２－２）および（Ａ２－６）において、Y_{23}がＣ（R_2）であり、且つ該R_2が、飽和型窒素原子を含まないことが好ましい。これはY_{13}およびY_{23}が、上記一般式（Ａ１－１）、一般式（Ａ１－２）、一般式（Ａ１－６）、一般式（Ａ２－１）、一般式（Ａ２－２）および一般式（Ａ２－６）中のＮ原子に対してπ共役効果が高いパラ位であるために、該R_1または該R_2が飽和型窒素原子を含まない態様とすることで、共役効果による正孔輸送性が高いＨＯＭＯ部分構造形成を抑制することができ、電子輸送性を高くできるためである。
【００７６】
上述の一般式（１）で示される化合物では、トリアジン環およびその周辺部分（近傍部分）を含む領域にＬＵＭＯ（Ｌｏｗｅｓｔ　Ｕｎｏｃｃｕｐｉｅｄ　Ｍｏｌｅｃｕｌａｒ　Ｏｒｂｉｔａｌ、最低空軌道）が分布する。本明細書では、このようなＬＵＭＯが分布する領域を、以下「トリアジン環を含むＬＵＭＯ領域」または「ＬＵＭＯ領域」という。また、ＬＵＭＯ領域の一部を構成するトリアジン環の周辺部分（近傍部分）には、トリアジン環を含む平面（以下トリアジン環平面という）に結合するL_1、L_2を含む平面（以下、それぞれL_1、L_2平面という）の全部または一部が含まれる。なお、トリアジン環の周辺部分（近傍部分）は、トリアジン環平面に対して、同一平面である場合とねじれている場合とを含む。
【００７７】
本実施形態の化合物では、このＬＵＭＯ領域に対して、A_1を含む平面（以下、A_1平面という）の二面角およびA_2を含む平面（以下、A_2平面という）の二面角が、いずれも大きな角度を有することができる。なお、二面角は、ＬＵＭＯ領域のうちA_1、A_2が結合する近傍部分を含む平面と、A_1平面、A_2平面のうちＬＵＭＯ領域と結合する近傍部分の一部平面との間の角度である。
【００７８】
具体的には、一般式（１）で表される本実施形態の化合物において、ＬＵＭＯ領域と結合する置換基A_1は、後述する回転障壁エネルギーの測定方法によるシミュレーションによる最安定構造での二面角が大きく（例えば５０°以上）且つ、室温（２９８Ｋ）の熱エネルギーである２５ｍｅＶで到達し得る二面角最小値が大きい（例えば４０°以上）部分構造を有する。また、ＬＵＭＯ領域と結合する置換基A_2は、上記同一のシミュレーションによる最安定構造での二面角が大きい（例えば、３０°以上）且つ、室温（２９８Ｋ）の熱エネルギーである２５ｍｅＶで到達し得る二面角最小値が大きい（例えば、２０°以上）部分構造を有する。
【００７９】
これにより、トリアジン環を含むＬＵＭＯ領域に対する同種分子または異種分子の相互作用を抑制することができる。そのため、塗布法により作製した有機エレクトロルミネッセンス素子の性能（例えば電子輸送性）を向上させることができる。その結果、電流効率、発光寿命に優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ができる。
【００８０】
本実施形態の化合物では、一般式（１）中のトリアジン環に結合するA_1またはL_1、A_2またはL_2、A_3のうち、少なくとも２つは、該トリアジン環と結合する炭素原子に隣接する２つの原子が、水素原子または重水素原子以外の置換基を有さない炭素原子又は窒素原子である環構造を有する基であることが好ましい。
【００８１】
すなわち、A_1またはL_1、A_2またはL_2、及びA_3のうち、２つ以上の置換基は、直接結合するトリアジン環に対するオルト位に、トリアジン環に対して立体障害となる置換基が結合されていない。これにより、トリアジン環に直接結合する置換基の２つ以上が１

５°以下の小さな二面角で結合し、ＬＵＭＯがトリアジン環からそれら置換基の２方向以上に拡張されて分布される。そのため、該化合物の電子輸送性および安定性をさらに高めることができる。

【００８２】

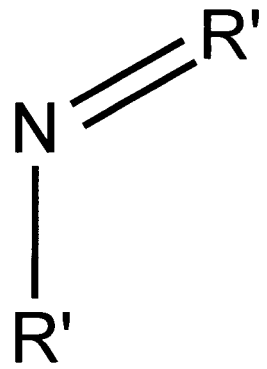
本実施形態に係る化合物は、上記一般式（Ａ１－１）、一般式（Ａ１－２）および一般式（Ａ１－６）において、Y_{12}およびY_{13}のうち、いずれか１つが、Ｃ（R_1）であり、且つ該R_1が、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であるのが好ましい。ここで、該R_1が芳香族複素環基である場合、該芳香族複素環基は、π電子不足系芳香族複素環基であるのがより好ましい。

【００８３】

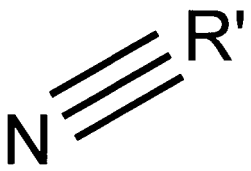
また、π電子不足系芳香族複素環基は、下記一般式（３－１）、（３－２）、（３－３）に示す不飽和ヘテロ原子を有する芳香族複素環に由来する基である。π電子不足系芳香族複素環基を構成するπ電子不足系芳香族複素環としては、例えば、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、キノリン、キノキサリン、キナゾリン、ナフチリジン、フェナントリジン、アクリジン、キノン、アントラキノン、キサントン、チオキサントン、クマリン、６Ｈ－ベンゾ［ｃ］クロメン－６－オン（６Ｈ－ｂｅｎｚｏ［ｃ］ｃｈｒｏｍｅｎ－６－ｏｎｅ）、フルオレノン、イミダゾール、ベンゾイミダゾール、ピラゾール、インダゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾイソオキサゾール、チアゾール、イソチアゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイソチアゾール、ホスホール、ジベンゾホスホール、ジベンゾチオフェン５，５－ジオキサイド等が挙げられる。

【００８４】

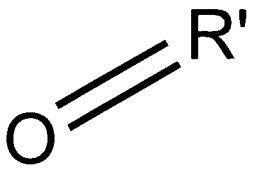
【化７】



（３－１）



（３－２）

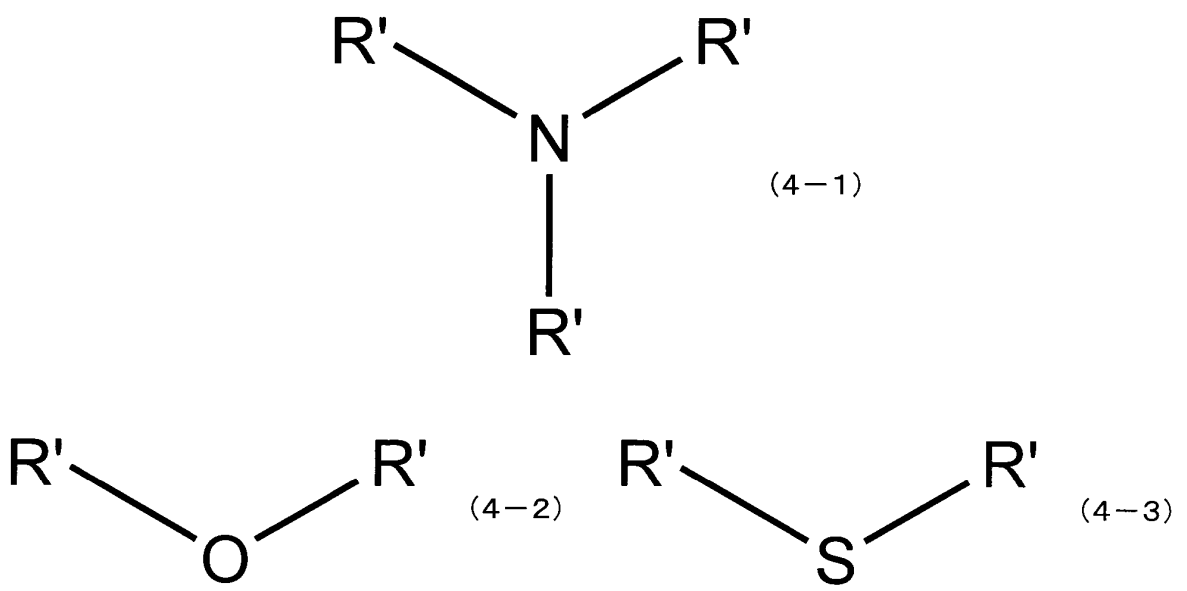


（３－３）

（式中のＲ'は炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子またはリン原子を表す。）

【００８５】

【化８】



（式中のＲ'は炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子またはリン原子を表す。）

【００８６】

なお、上記一般式（２－３）、（３－２）、（４）に示す飽和ヘテロ原子を有する芳香族複素環（π電子過剰系芳香族）を構成するπ電子過剰系芳香族複素環としては、例えば、ピロール、インドール、カルバゾール、フラン、ベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン等が挙げられる。

【００８７】

上記一般式（１）で示される化合物では、トリアジン環を含むＬＵＭＯ領域に対して、カルバゾール環を有するＡ１平面にはＨＯＭＯ（Ｈｉｇｈｅｓｔ　Ｏｃｃｕｐｉｅｄ　Ｍｏｌｅｃｕｌａｒ　Ｏｒｂｉｔａｌ、最高被占軌道）が分布する。一方、上述の一般式（Ａ１－１）、一般式（Ａ１－２）および一般式（Ａ１－６）で示される置換基を有する化合物では、Y_{12}およびY_{13}のいずれか１つが、Ｃ（R_1）であり、且つ該R_1が、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０のπ電子不足系芳香族複素環基であるのが好ましい。

【００８８】

このような態様とすることで、化合物としての光化学的安定性を高めることができる。さらに、このような態様とすることで、上記一般式（１）の化合物において、Ａ１平面に分布するＨＯＭＯの、分子量全体に占める分子量比率（以下、ＨＯＭＯ分子量比率ということがある）を減少させることができる。このため、正孔輸送性を抑制してＬＵＭＯ領域に由来する電子輸送性を強調することができる。

【００８９】

また、一般式（Ａ１－１）、一般式（Ａ１－２）および一般式（Ａ１－６）で示される置換基において、Y_{12}およびY_{13}のうち、いずれか１つが、Ｃ（R_1）であり、且つ該R_1が、π電子不足系芳香族複素環基の場合は、ＬＵＭＯ領域が占める分子量比率を確実に高くすることができ、該化合物の電子輸送性を高めることができる。

【００９０】

本実施形態に係る化合物は、上記一般式（Ａ２－１）、一般式（Ａ２－２）および一般式（Ａ２－６）において、Y_{22}およびY_{23}のうち、いずれか１つが、Ｃ（R_2）であり、且つ該R_2が、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、ま

たは置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０の芳香族複素環基であるのが好ましい。ここで、該R_2が芳香族複素環基である場合、該芳香族複素環基は、π電子不足系芳香族複素環基であるのがより好ましい。

【００９１】

上記一般式（１）で示される化合物では、トリアジン環を含むＬＵＭＯ領域に対して、カルバゾール環を有するＡ２平面にＨＯＭＯが分布する。一方、上述の一般式（１）で示される化合物では、上述の一般式（Ａ２－１）、一般式（Ａ２－２）および一般式（Ａ２－６）で示される置換基を有する化合物では、Y_{22}およびY_{23}のうち、いずれか１つが、Ｃ（R_2）であり、且つ該R_2が、置換されたもしくは無置換の炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基、または置換されたもしくは無置換の環形成原子数３～３０のπ電子不足系芳香族複素環基であるのが好ましい。

【００９２】

このような態様とすることで、化合物としての光化学的安定性を高めることができる。さらに、このような態様とすることで、上記一般式（１）の化合物において、A_2平面に分布するＨＯＭＯの、分子量全体に占める分子量比率（以下、ＨＯＭＯ分子量比率ということがある）を減少させることができ、正孔輸送性を抑制して相対的にＬＵＭＯ領域に由来する電子輸送性を強調することができる。

【００９３】

また、一般式（Ａ２－１）、一般式（Ａ２－２）および一般式（Ａ２－６）で示される置換基において、Y_{22}およびY_{23}のうち、いずれか１つが、Ｃ（R_2）であり、且つ該R_2が、π電子不足系芳香族複素環基の場合は、ＬＵＭＯ領域が占める分子量比率を確実に高くすることができ、該化合物の電子輸送性を高めることができる。

【００９４】

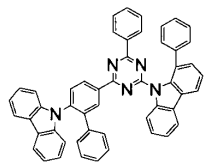
また、上記一般式（１）で示される化合物では、トリアジン環に結合する３つの置換基がそれぞれ互いに異なる構造であることがより好ましい。このような態様とすることで、結晶性を低下させることができ、化合物の溶解性を高めることができる。

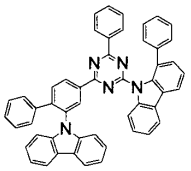
【００９５】

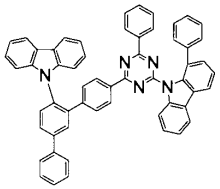
以下、本発明の一般式（１）の具体化合物を例示するが、本発明はこれら具体例に限定されるものではない。なお、以下例示化合物図において、トリアジンに対する左側置換基がA_1およびL_1を含む置換に対応し、右側置換基がA_2およびL_2を含む置換に対応し、上側置換基がA_3に対応する。

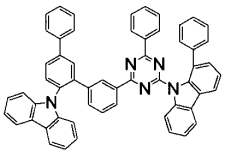
【００９６】

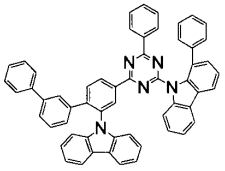
【化９】

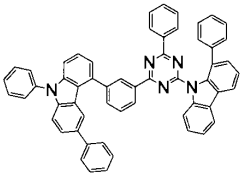

1

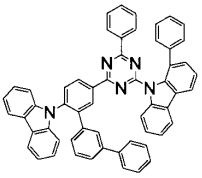

2

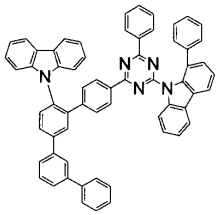

3

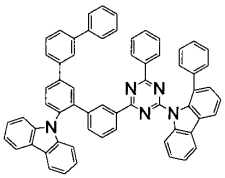

4

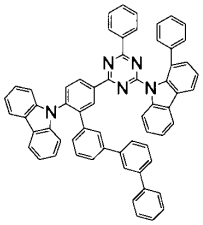

5

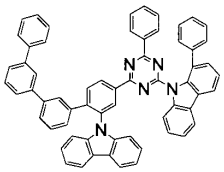

6

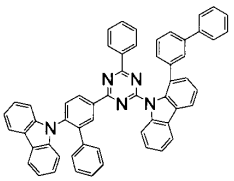

7

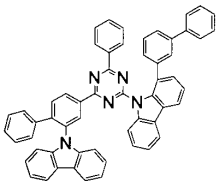

8

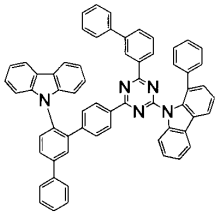

9

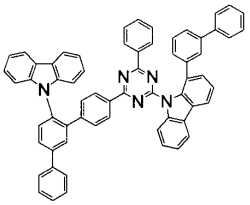

10

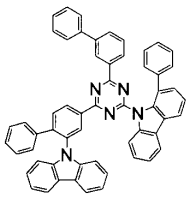

11


12


13

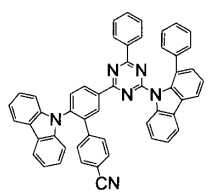

14

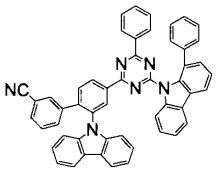

15

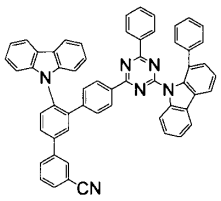

16

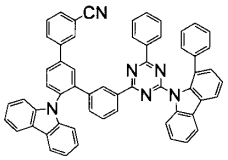
【００９７】

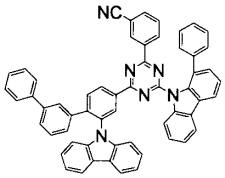
【化１０】

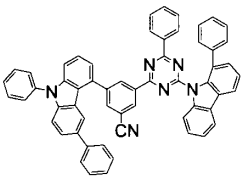

17

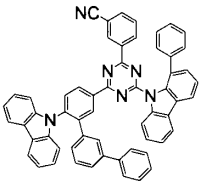

18

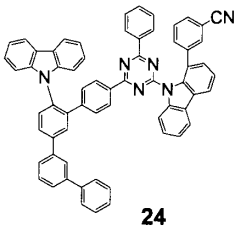

19

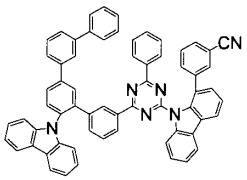

20

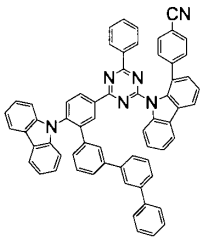

21

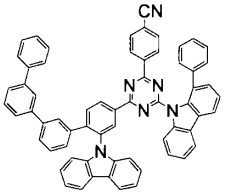

22

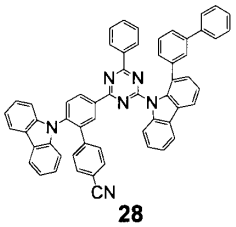

23

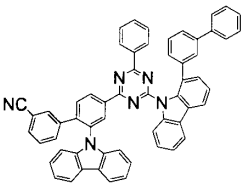

24

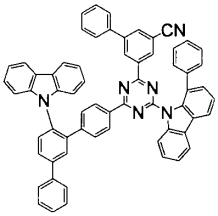

25

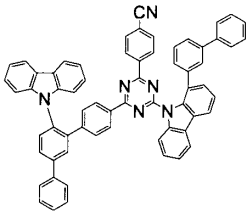

26

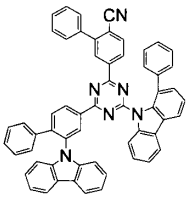

27


28


29

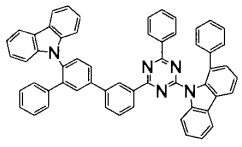

30


31

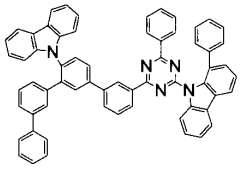

32

【００９８】

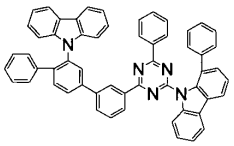
【化１１】



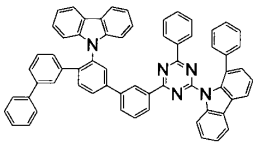
33



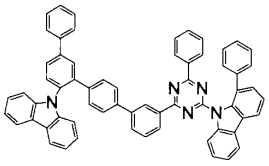
34



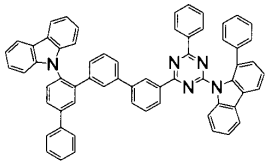
35



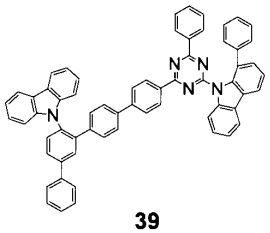
36



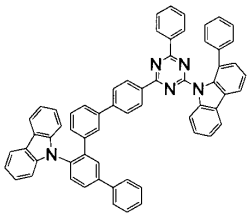
37



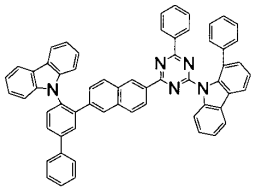
38



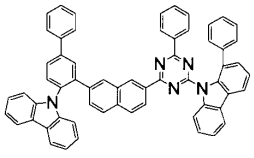
39



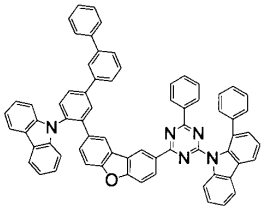
40



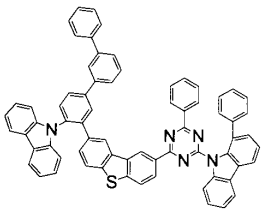
41



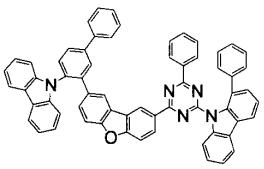
42



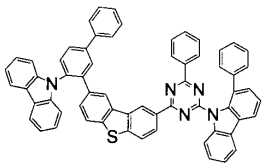
43



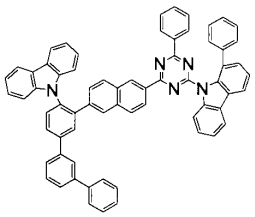
44



45



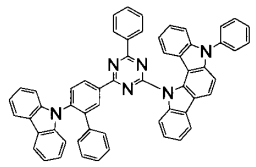
46



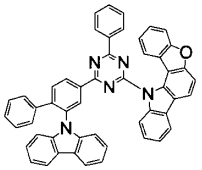
47

【００９９】

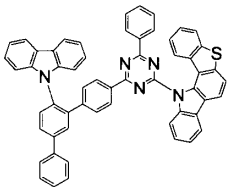
【化１２】



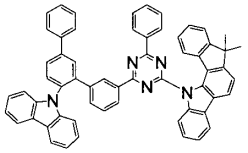
48



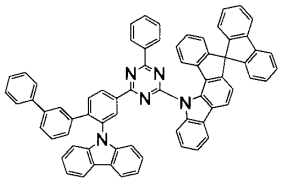
49



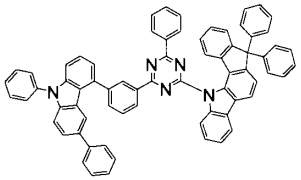
50



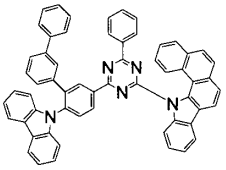
51



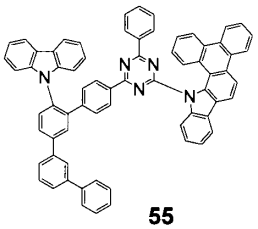
52



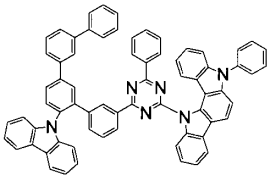
53



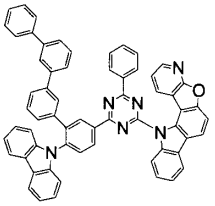
54



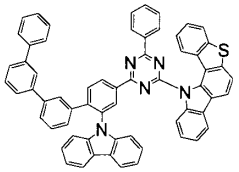
55



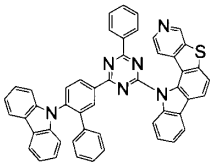
56



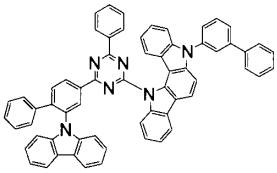
57



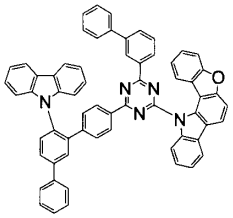
58



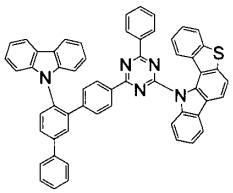
59



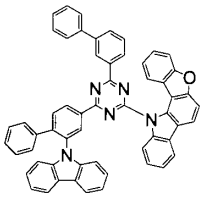
60



61



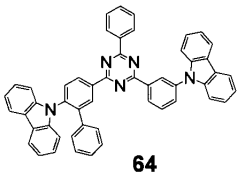
62

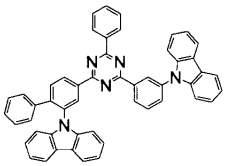


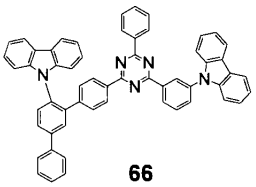
63

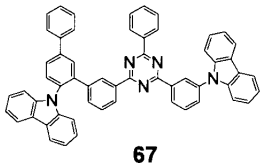
【０１００】

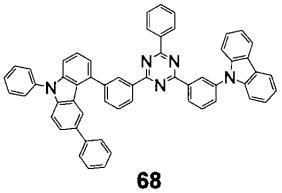
【化１３】

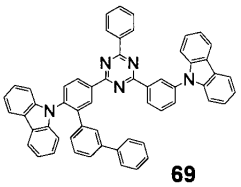

64

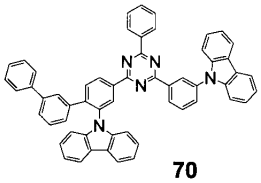

65

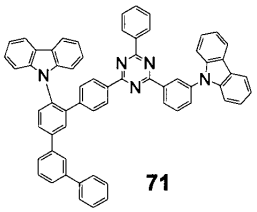

66

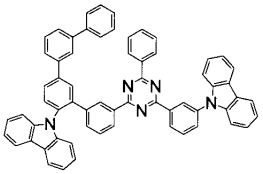

67

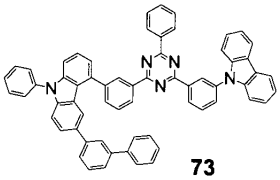

68

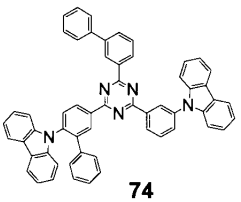

69

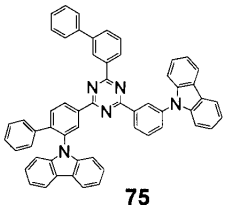

70

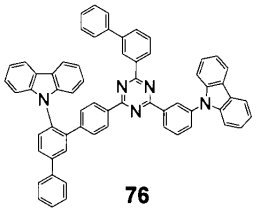

71

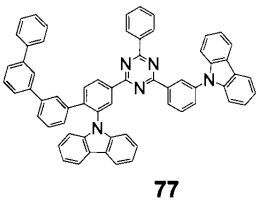

72

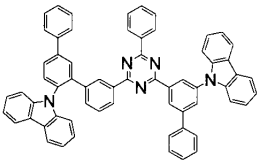

73

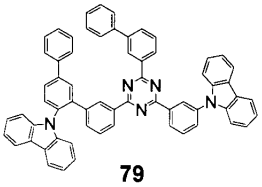

74

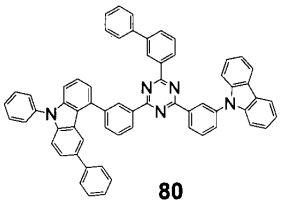

75

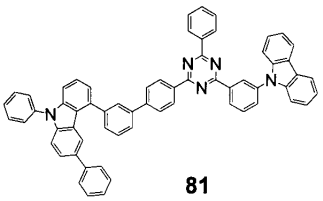

76


77


78

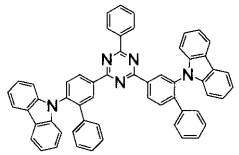

79

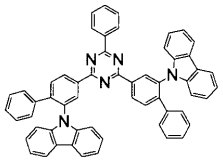

80

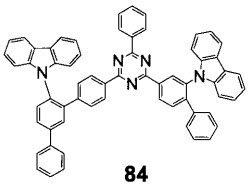

81

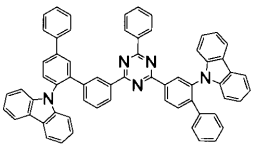
【０１０１】

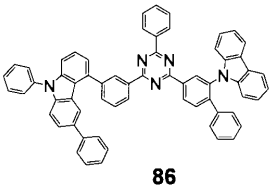
【化１４】

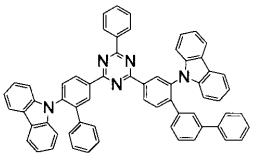

82

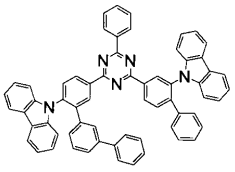

83

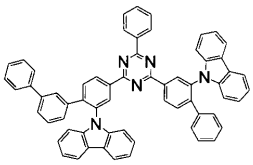

84

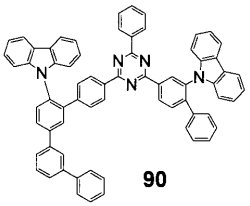

85

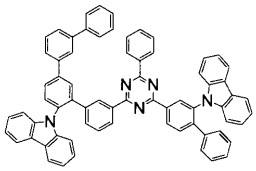

86

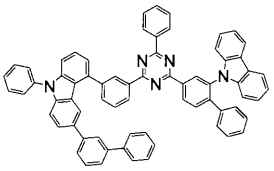

87

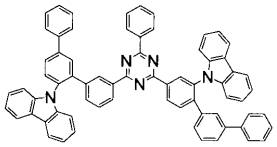

88

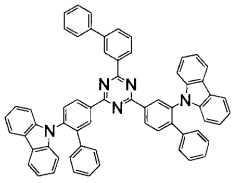

89

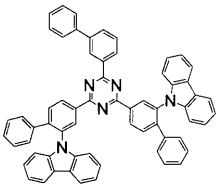

90

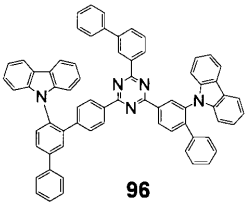

91

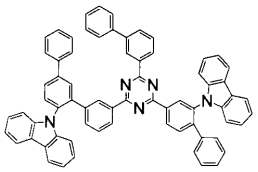

92

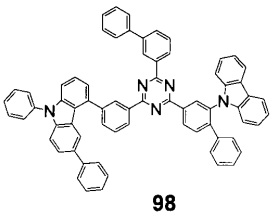

93

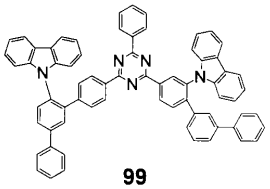

94


95


96

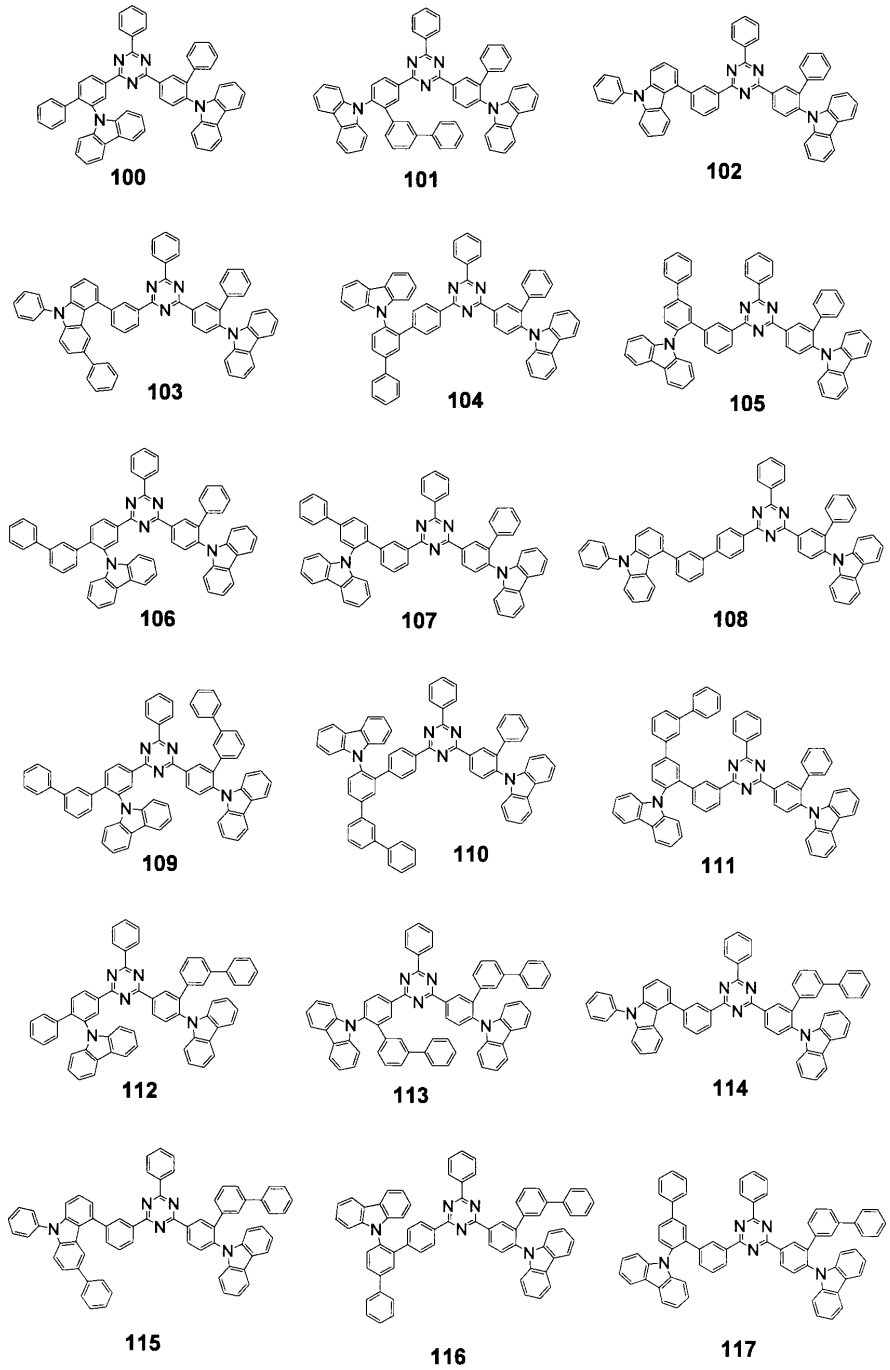

97


98


99

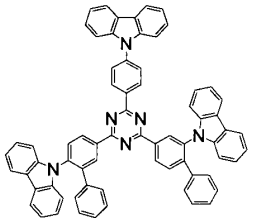
【０１０２】

【化１５】

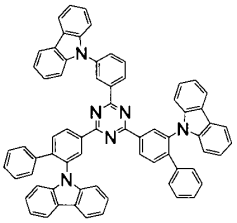

100
101
102
103
104
105
106
107
108
109
110
111
112
113
114
115
116
117

【０１０３】

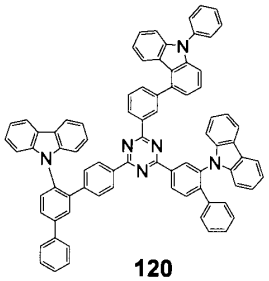
【化１６】



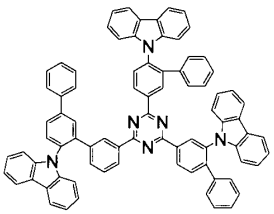
118



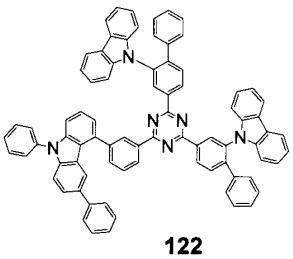
119



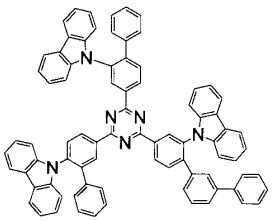
120



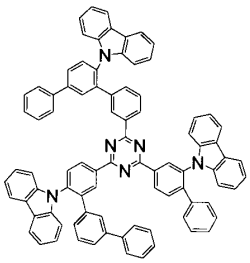
121



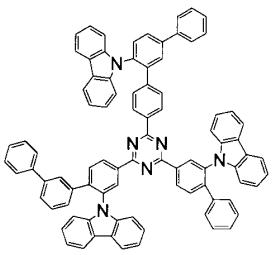
122



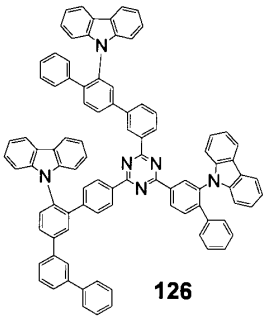
123



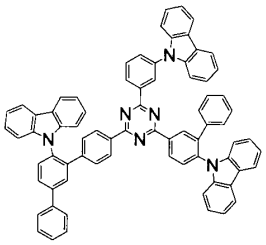
124



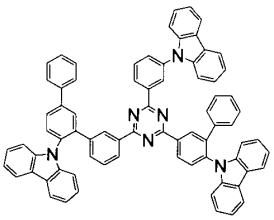
125



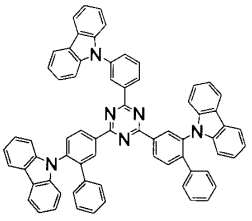
126



127



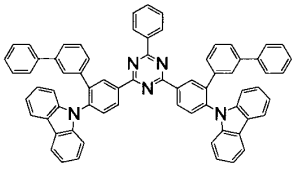
128



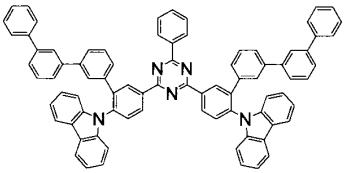
129

【０１０４】

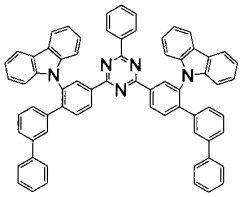
【化１７】



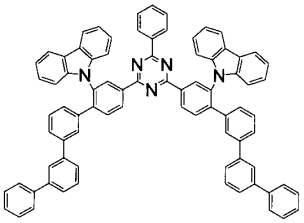
130



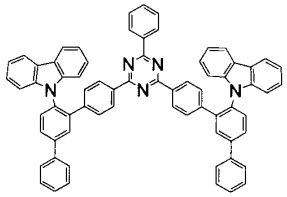
131



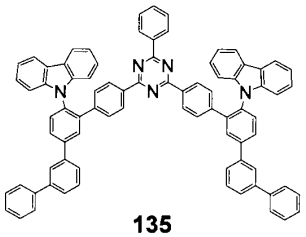
132



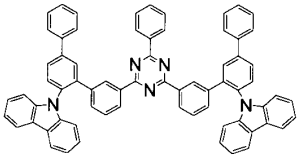
133



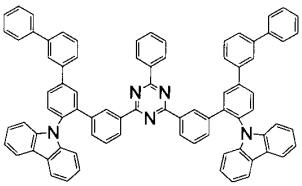
134



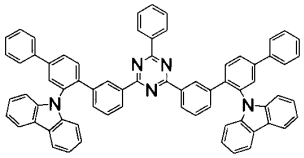
135



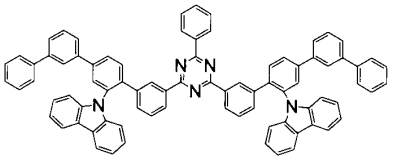
136



137



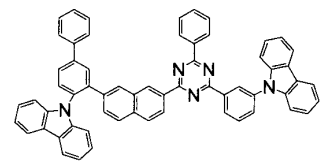
138



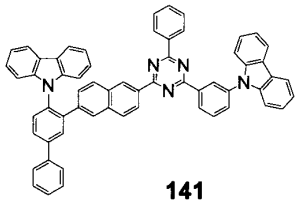
139

【０１０５】

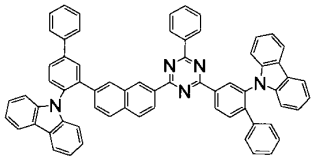
【化１８】



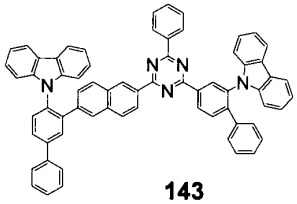
140



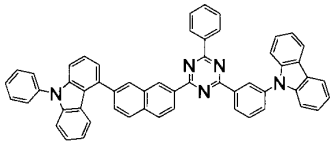
141



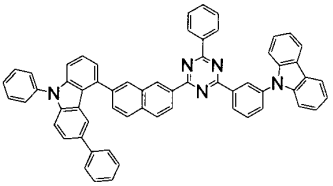
142



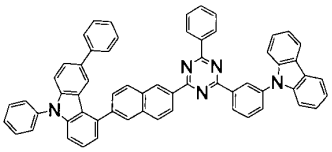
143



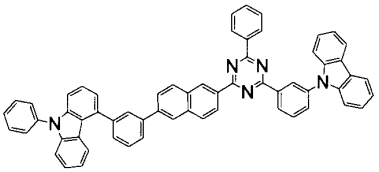
144



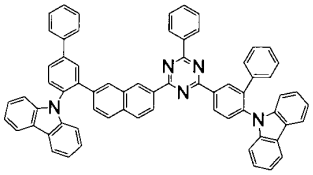
145



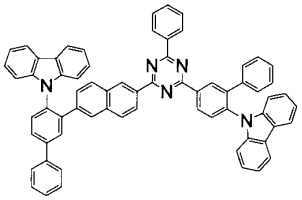
146



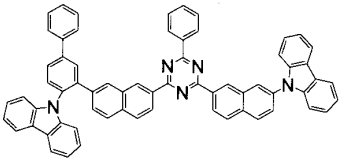
147



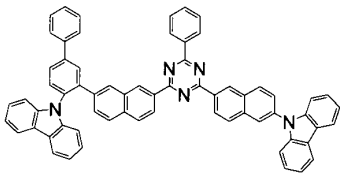
148



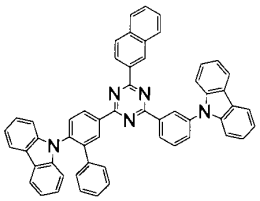
149



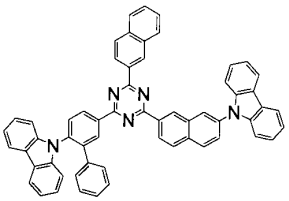
150



151



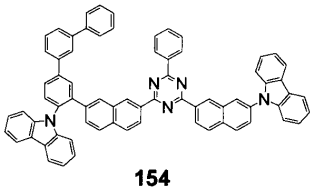
152



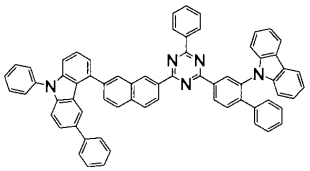
153

【０１０６】

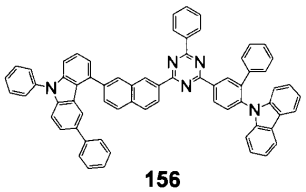
【化１９】



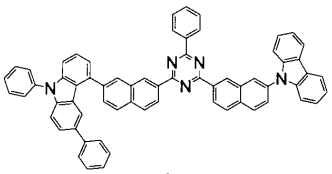
154



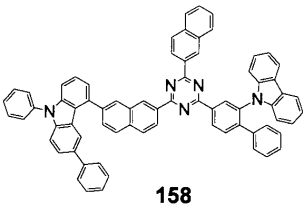
155



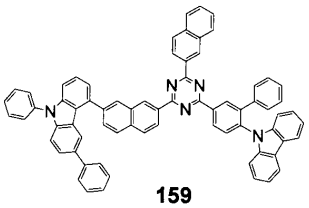
156



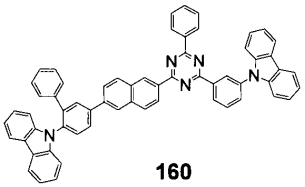
157



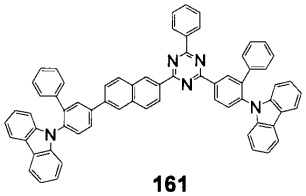
158



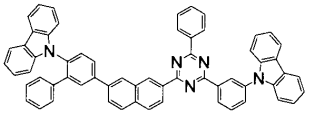
159



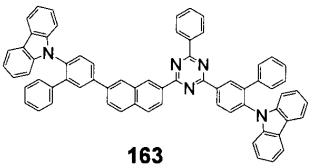
160



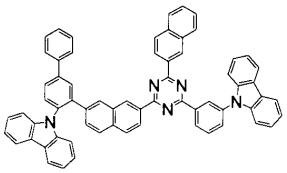
161



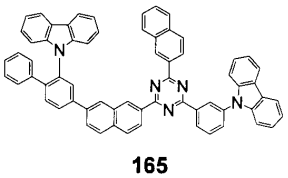
162



163



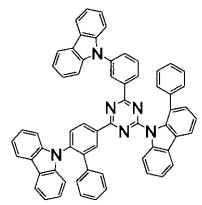
164



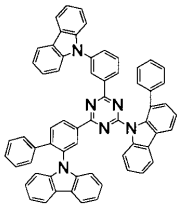
165

【０１０７】

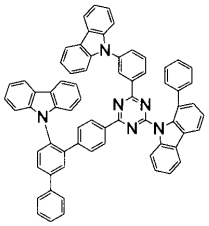
【化２０】



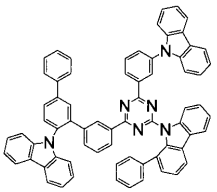
166



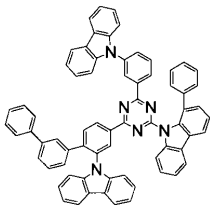
167



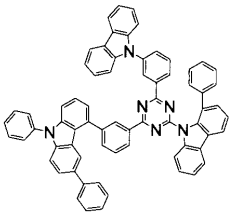
168



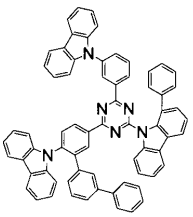
169



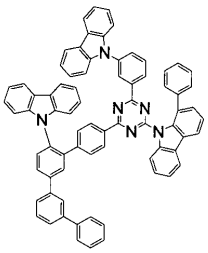
170



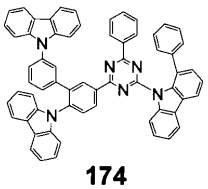
171



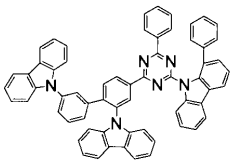
172



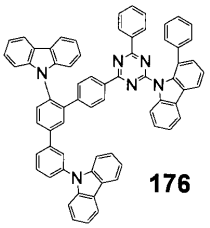
173



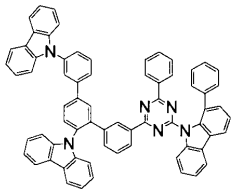
174



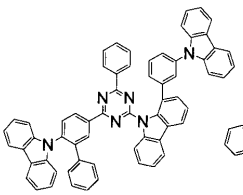
175



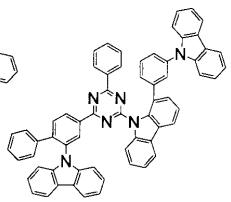
176



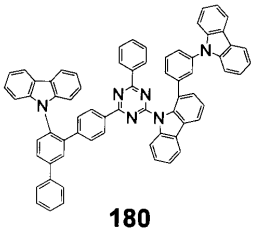
177



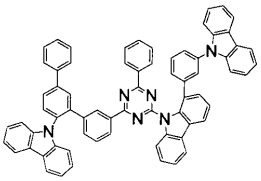
178



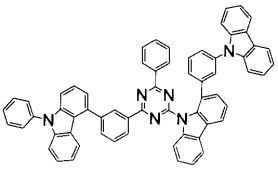
179



180



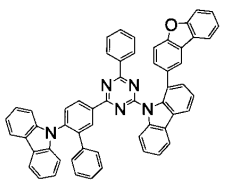
181



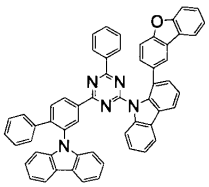
182

【０１０８】

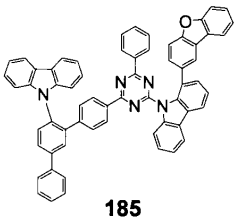
【化２１】



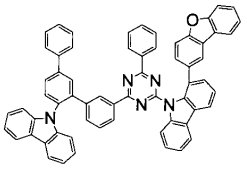
183



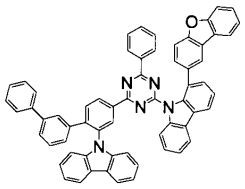
184



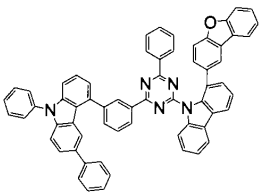
185



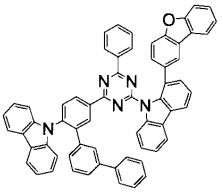
186



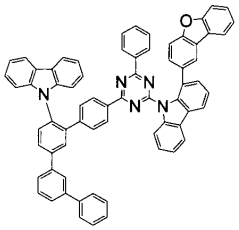
187



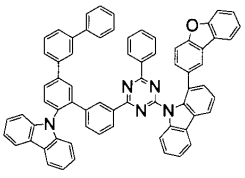
188



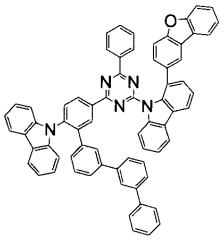
189



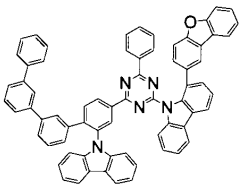
190



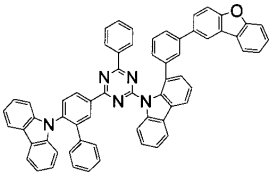
191



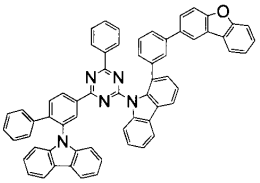
192



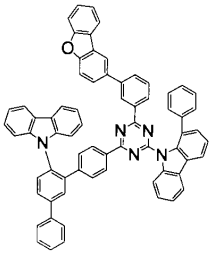
193



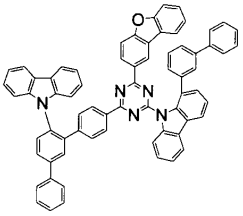
194



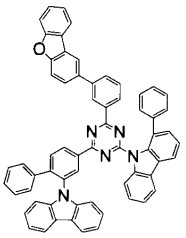
195



196



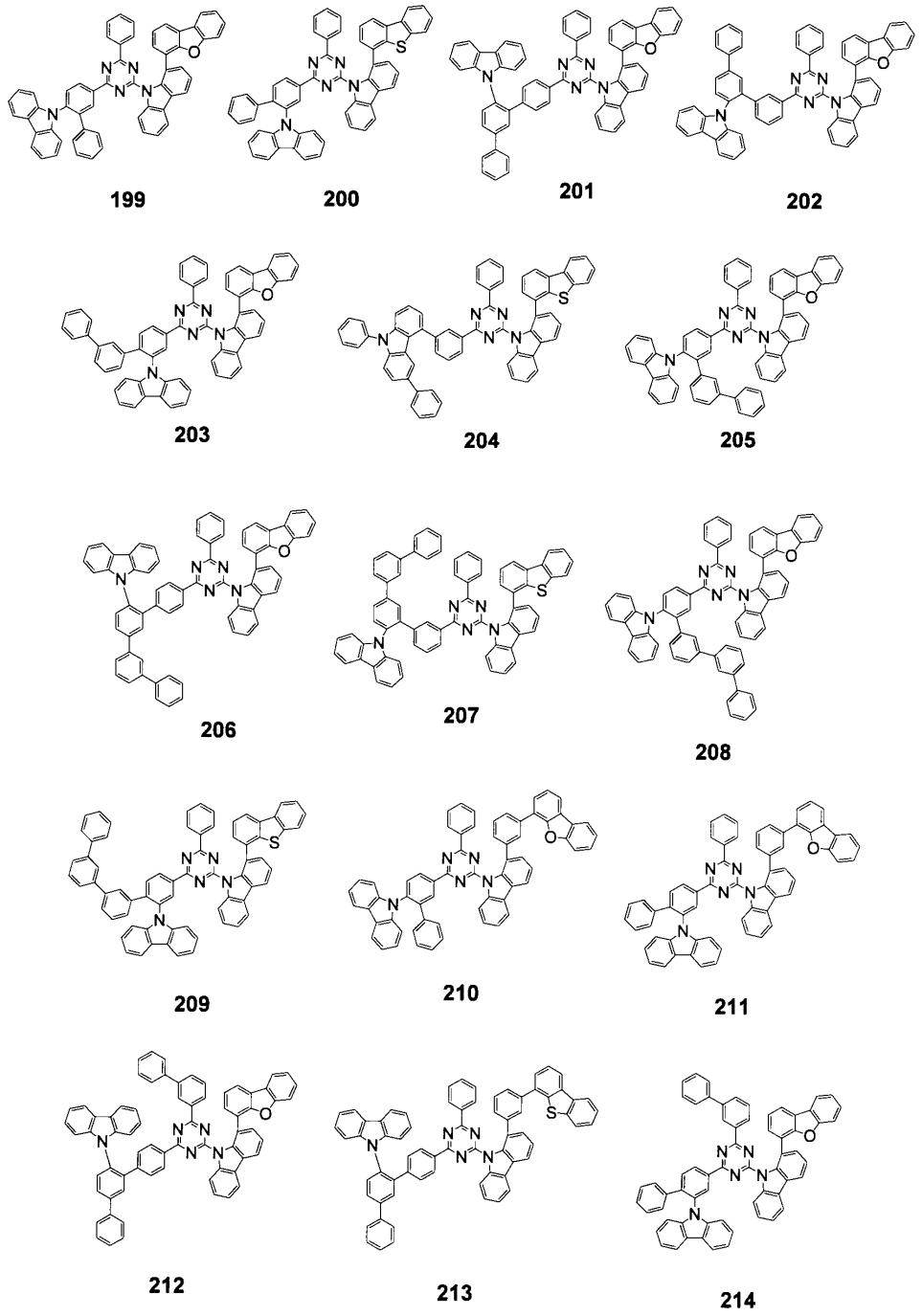
197



198

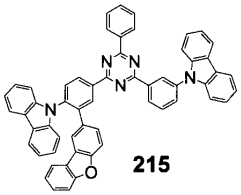
【０１０９】

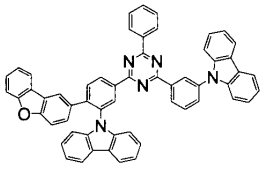
【化２２】

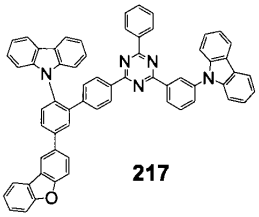


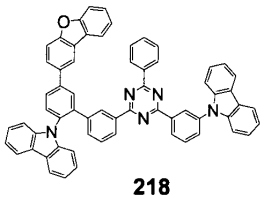
【０１１０】

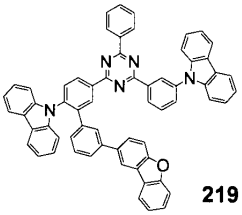
【化２３】

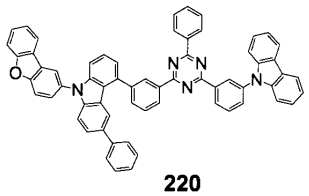

215

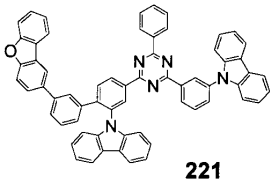

216

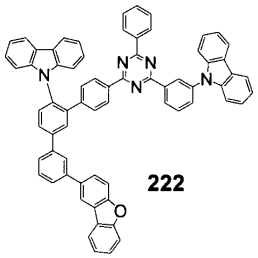

217

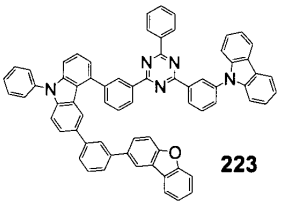

218

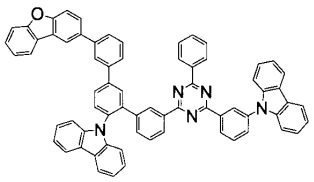

219

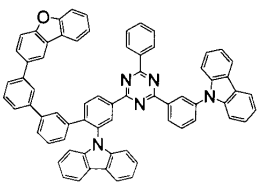

220

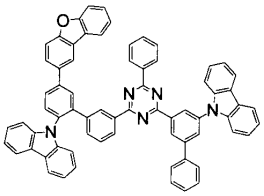

221

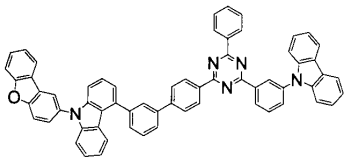

222


223


224

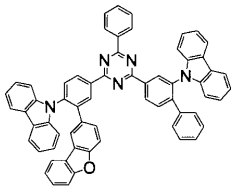

225


226

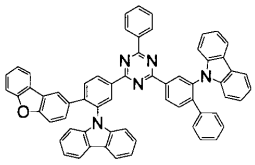

227

【０１１１】

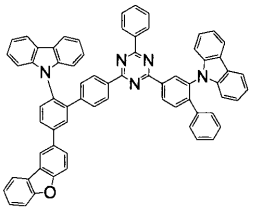
【化２４】



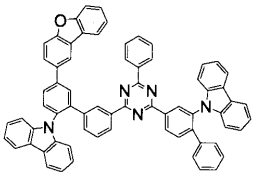
228



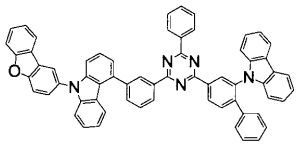
229



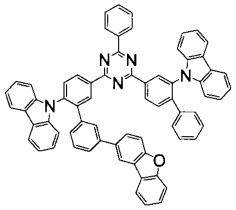
230



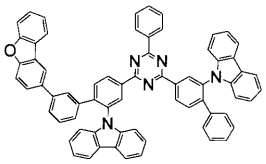
231



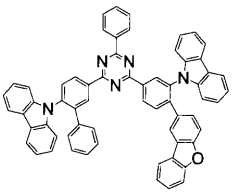
232



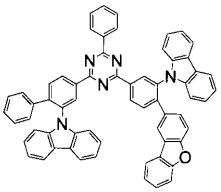
233



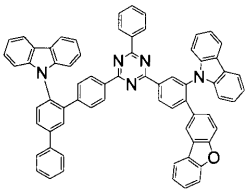
234



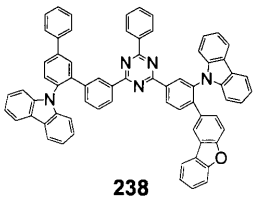
235



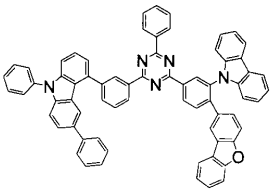
236



237



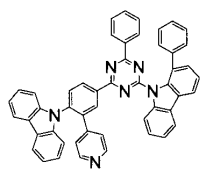
238



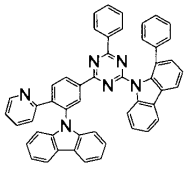
239

【０１１２】

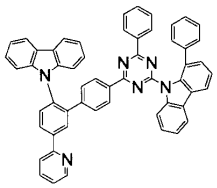
【化２５】



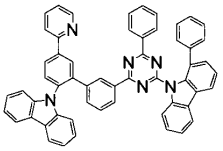
240



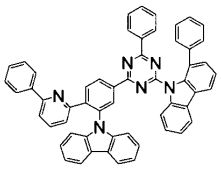
241



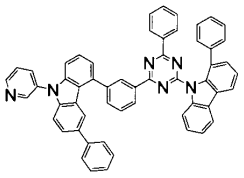
242



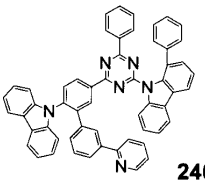
243



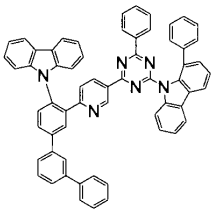
244



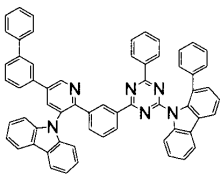
245



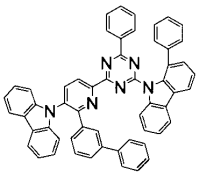
246



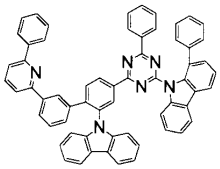
247



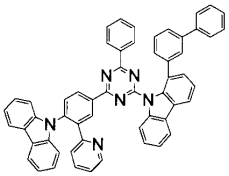
248



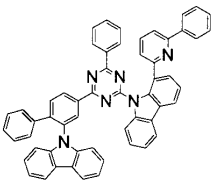
249



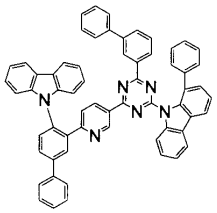
250



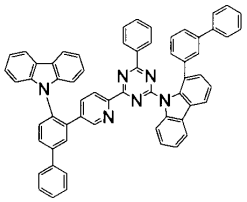
251



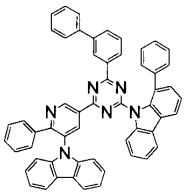
252



253



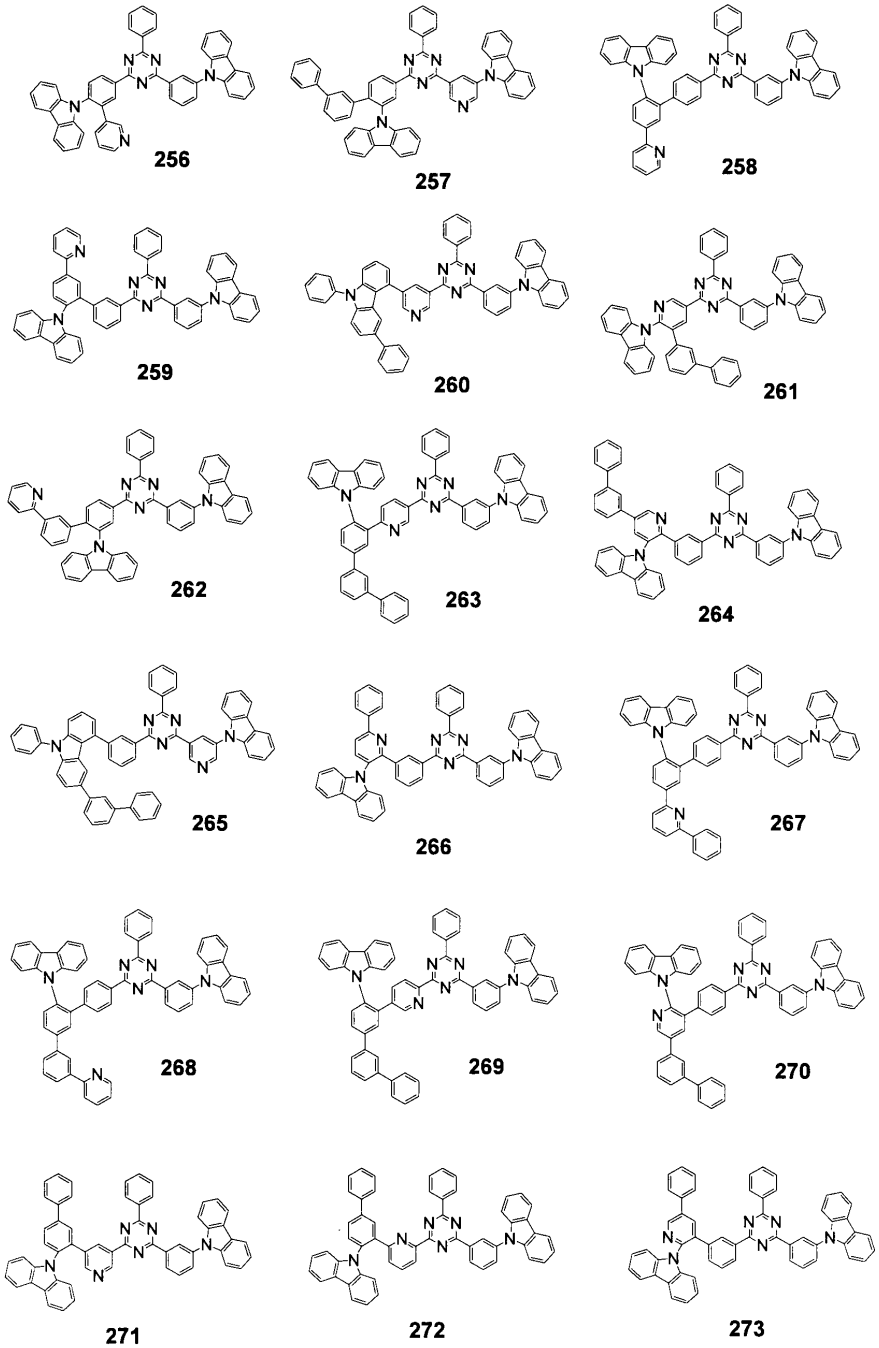
254



255

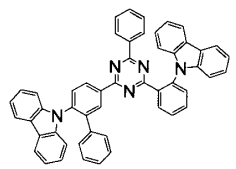
【０１１３】

【化２６】

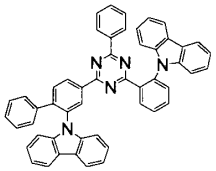

256
257
258
259
260
261
262
263
264
265
266
267
268
269
270
271
272
273

【０１１４】

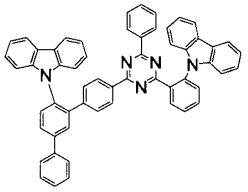
【化２７】



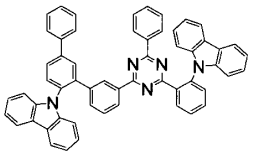
274



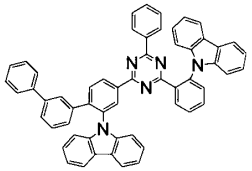
275



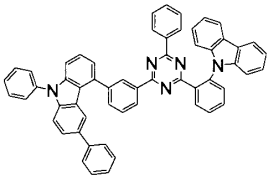
276



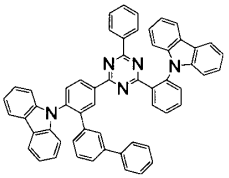
277



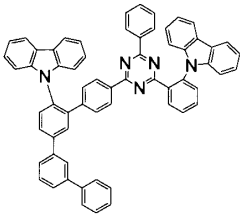
278



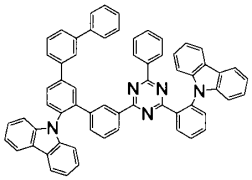
279



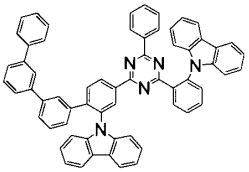
280



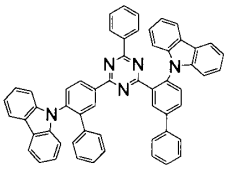
281



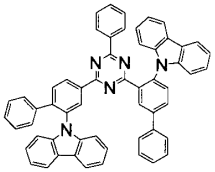
282



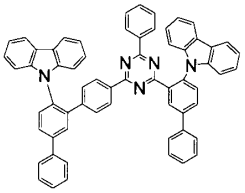
283



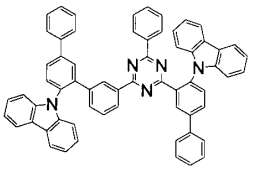
284



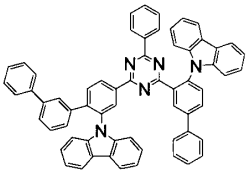
285



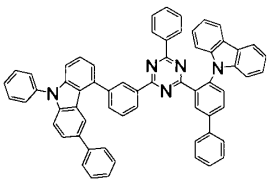
286



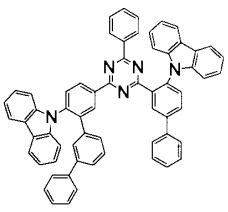
287



288



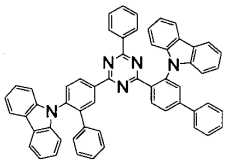
289



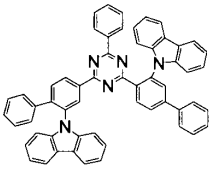
290

【０１１５】

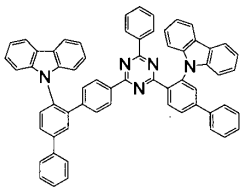
【化２８】



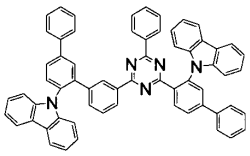
291



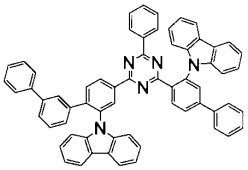
292



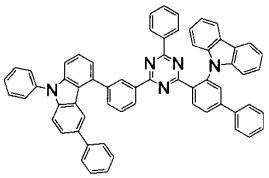
293



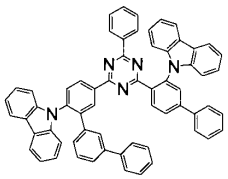
294



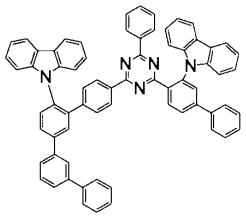
295



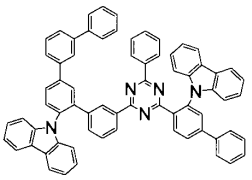
296



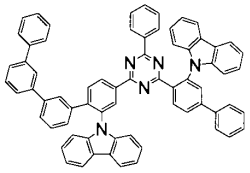
297



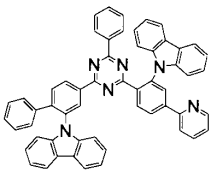
298



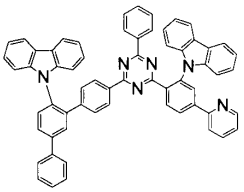
299



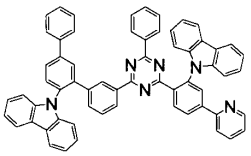
300



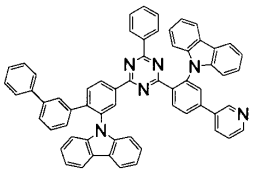
301



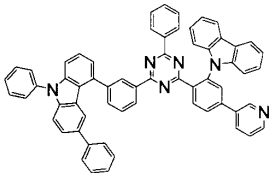
302



303



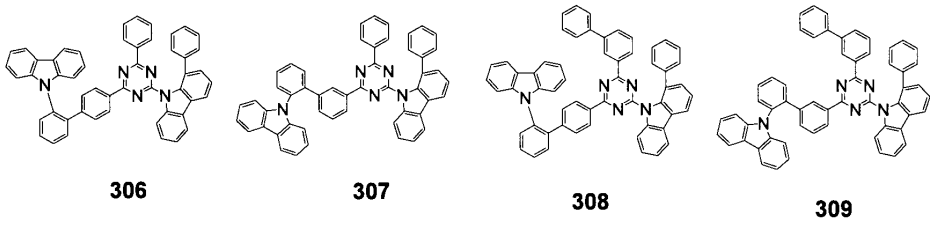
304



305

【０１１６】

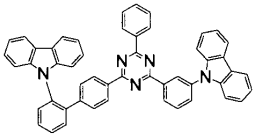
【化２９】

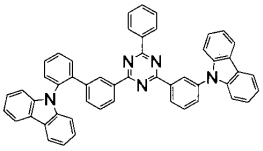

306

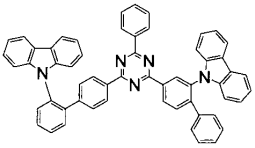
307

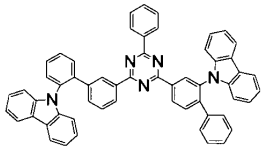
308

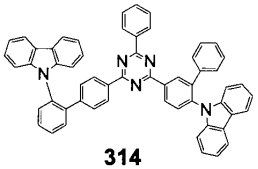
309

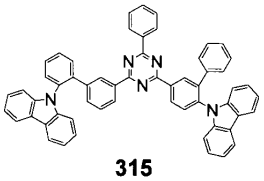

310

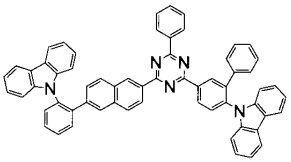

311

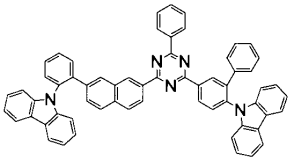

312

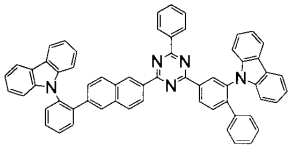

313

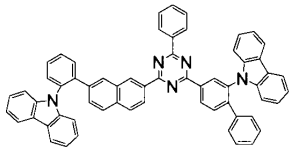

314

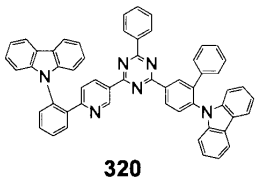

315

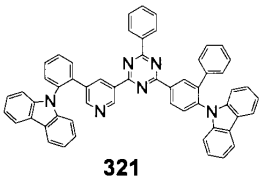

316

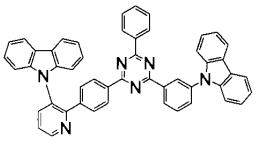

317

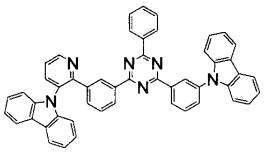

318

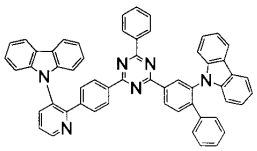

319


320


321

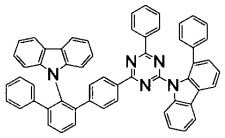

322


323

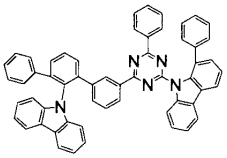

324

【０１１７】

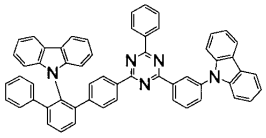
【化３０】



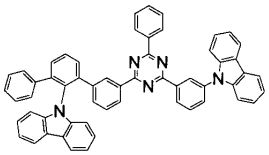
325



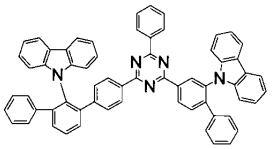
326



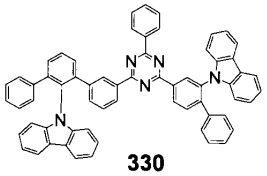
327



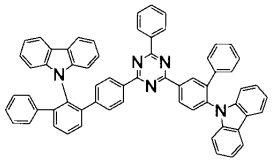
328



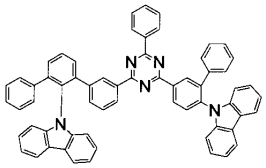
329



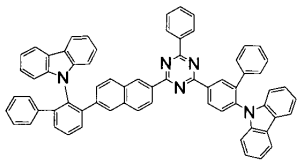
330



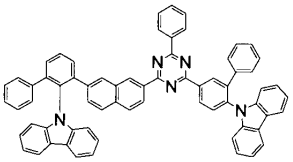
331



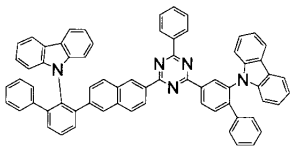
332



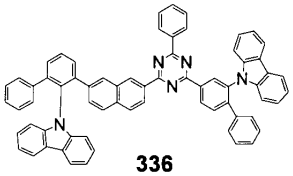
333



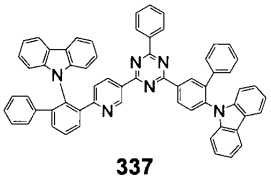
334



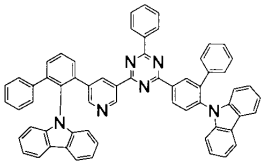
335



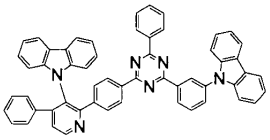
336



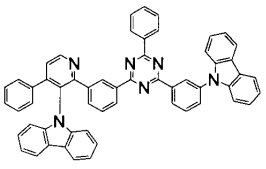
337



338



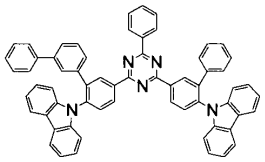
339



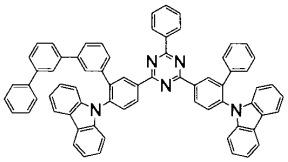
340

【０１１８】

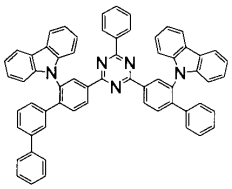
【化３１】



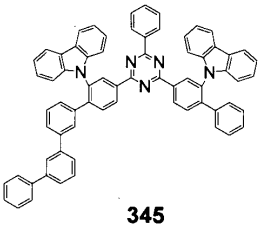
341



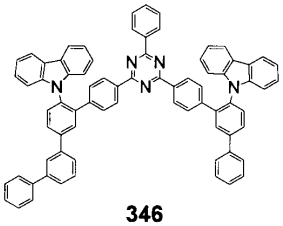
342



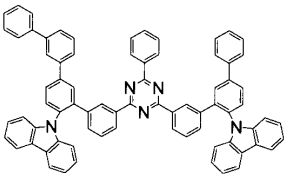
343



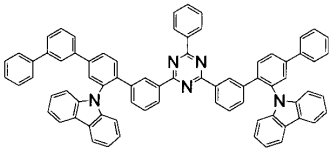
345



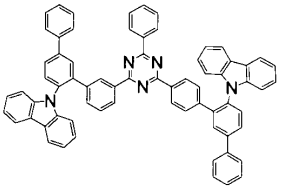
346



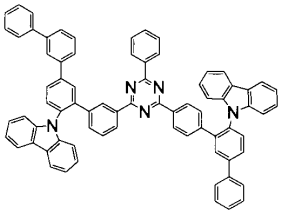
347



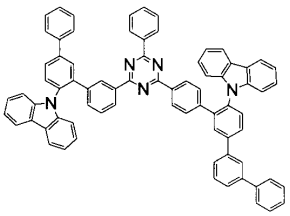
348



349



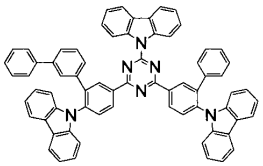
350



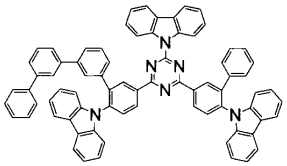
351

【０１１９】

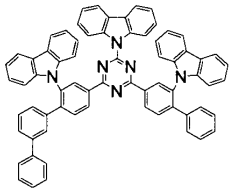
【化３２】



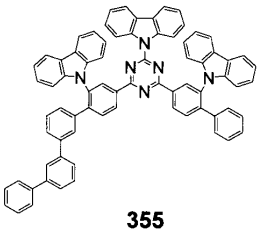
352



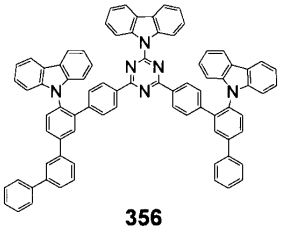
353



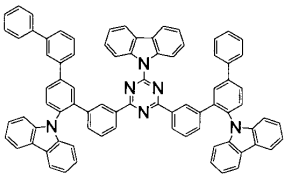
354



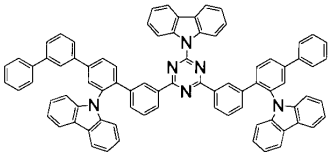
355



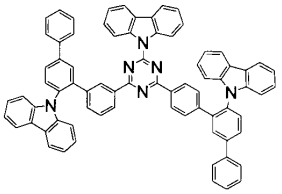
356



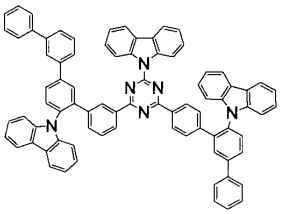
357



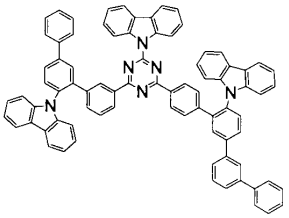
358



359



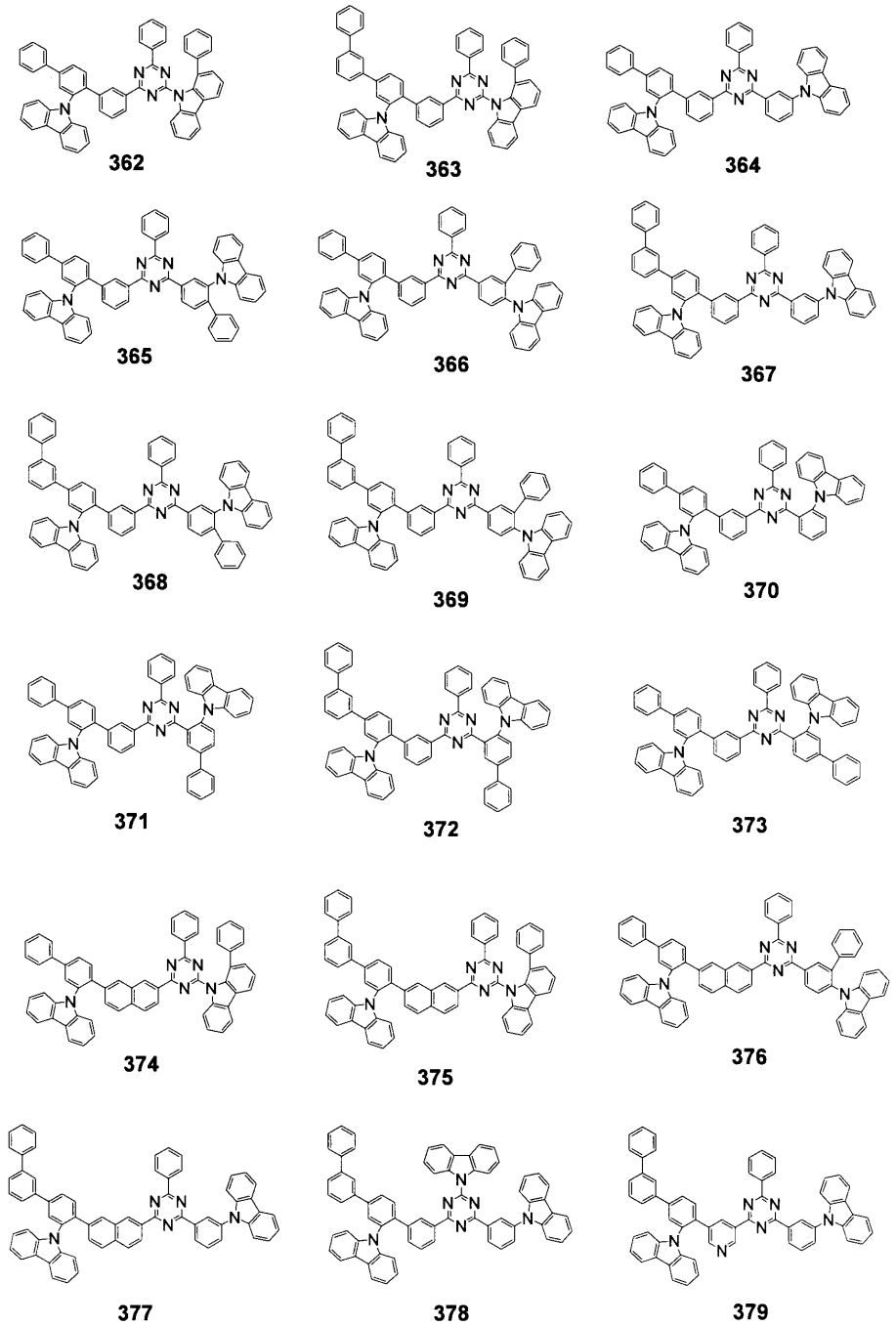
360



361

【０１２０】

【化３３】



上記一般式（１－１）～（１－６３）に例示される本実施形態の化合物によれば、有機エレクトロルミネッセンス素子を塗布法により作製した場合でも、電子輸送性を高めて、電流効率および発光寿命を向上させることができる。

【０１２１】

＜有機エレクトロルミネッセンス素子用材料＞

本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子用材料（以下、有機ＥＬ素子用材料という）は、上述の一般式（１）で表される化合物を含んでいる。一般式（１）で表される化合物は、上述のように分子の凝集が抑制され（溶媒への高い溶解性を示す）ことで、湿式の塗布法により容易に成膜（薄膜化）できる。また、該化合物は、高い電子輸送性

を有している。したがって、該化合物を含む有機ＥＬ素子用材料は、例えば、電子輸送層、電子注入層および発光層の材料として使用可能である。

【０１２２】

これにより、一般式（１）で表される化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子は、湿式の塗布法により作製した場合でも、電流効率および発光寿命を向上させることができる。そのため、一般式（１）で表される化合物は、有機ＥＬ素子用材料として使用することができる。

【０１２３】

すなわち、本実施形態は、一般式（１）で表される化合物を含む有機ＥＬ素子用材料を提供することができる。したがって、一般式（１）で表される化合物を含む有機ＥＬ素子用材料によっても、電流効率、発光寿命に優れる有機エレクトロルミネッセンス素子を塗布法により作製することができる。なお、本実施形態の有機エレクトロルミネッセンス素子材料は、本発明に係るエレクトロルミネッセンス素子用材料の一例である。

【０１２４】

＜有機エレクトロルミネッセンス素子用組成物＞

本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子用組成物（以下、有機ＥＬ素子用組成物という）は、例えば、有機ＥＬ素子の各層を溶液塗布法により形成するために用いられる。

【０１２５】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子用組成物は、一般式（１）で表される化合物と、溶媒とを含む。このような有機ＥＬ素子用組成物は、上述した有機ＥＬ素子用材料と溶媒とを含んで構成することができる。

【０１２６】

溶媒としては、特に限定されないが、上述した有機ＥＬ素子用材料を溶解可能であることが好ましい。すなわち、有機ＥＬ素子用組成物は、溶液組成物であることが好ましい。なお、本実施形態の有機エレクトロルミネッセンス素子用組成物は、本発明に係るエレクトロルミネッセンス素子用組成物の一例である。

【０１２７】

有機ＥＬ素子用組成物に含まれる溶媒は、特に限定されないが、例えば、トルエン（ｔｏｌｕｅｎｅ）、キシレン（ｘｙｌｅｎｅ）、エチルベンゼン（ｅｔｈｙｌｂｅｎｚｅｎｅ）、ジエチルベンゼン（ｄｉｅｔｈｙｌｂｅｎｚｅｎｅ）、メチシレン（ｍｅｓｉｔｙｌｅｎｅ）、プロピルベンゼン（ｐｒｏｐｙｌｂｅｎｚｅｎｅ）、シクロヘキシルベンゼン（ｃｙｃｌｏｈｅｘｙｌｂｅｎｚｅｎｅ）、ジメトキシベンゼン（ｄｉｍｅｔｈｏｘｙｂｅｎｚｅｎｅ）、アニソール（ａｎｉｓｏｌｅ）、エトキシトルエン（ｅｔｈｏｘｙｔｏｌｕｅｎｅ）、フェノキシトルエン（ｐｈｅｎｏｘｙｔｏｌｕｅｎｅ）、イソプロピルビフェニル（ｉｓｏｐｒｏｐｙｌｂｉｐｈｅｎｙｌ）、ジメチルアニソール（ｄｉｍｅｔｈｙｌａｎｉｓｏｌｅ）、酢酸フェニル（ｐｈｅｎｙｌ　ａｃｅｔａｔｅ）、プロピオン酸フェニル（ｐｈｅｎｙｌ　ｐｒｏｐｉｏｎｉｃ　ａｃｉｄ）、安息香酸メチル（ｍｅｔｈｙｌ　ｂｅｎｚｏａｔｅ）、安息香酸エチル（ｅｔｈｙｌ　ｂｅｎｚｏａｔｅ）等が挙げられる。

【０１２８】

有機ＥＬ素子用組成物中における有機ＥＬ素子用材料の濃度は、特に限定されず、用途に応じて適宜調整可能である。ただし、塗布容易性等の観点から、このような有機ＥＬ素子用材料の濃度は、一般式（１）で表される化合物の濃度が、好ましくは０．１質量％以上１０質量％以下、より好ましくは０．５質量％～５質量％となるように調整される。

【０１２９】

＜有機エレクトロルミネッセンス素子＞

以下、図１を参照して、本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子について、詳細に説明する。図１は、本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子を示す模式図である。なお、本明細書において、「有機エレクトロルミネッセンス素子」は「有

機ＥＬ素子」と省略する場合がある。

【０１３０】

図１に示すように、本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子（有機ＥＬ素子）１００は、基板１１０と、基板１１０上に配置された第１電極１２０と、第１電極１２０上に配置された正孔注入層１３０と、正孔注入層１３０上に配置された正孔輸送層１４０と、正孔輸送層１４０上に配置された発光層１５０と、発光層１５０上に配置された電子輸送層１６０と、電子輸送層１６０上に配置された電子注入層１７０と、電子注入層１７０上に配置された第２電極１８０とを備える。

【０１３１】

ここで、本実施形態の一般式（１）で表される化合物は、例えば、第１電極１２０と第２電極１８０との間に配置されたいずれかの有機層中に含まれる。具体的には、一般式（１）で表される化合物は、発光層材料（ホスト）として発光層１５０、電子輸送材料として電子輸送層１６０、または電子注入層として電子注入層１７０に含まれることが好ましく、発光層材料（ホスト）として発光層１５０または電子輸送材料として電子輸送層１６０に含まれることがより好ましく、発光層材料（ホスト）として発光層１５０に含まれることが特に好ましい。

【０１３２】

また、本実施形態の一般式（１）で表される化合物を含む有機層は、塗布法によって形成される。具体的には、一般式（１）で表される化合物を含む有機層は、スピンコート（ｓｐｉｎ　ｃｏａｔ）法、キャスティング（ｃａｓｔｉｎｇ）法、マイクログラビアコート（ｍｉｃｒｏ　ｇｒａｖｕｒｅ　ｃｏａｔ）法、グラビアコート（ｇｒａｖｕｒｅ　ｃｏａｔ）法、バーコート（ｂａｒ　ｃｏａｔ）法、ロールコート（ｒｏｌｌ　ｃｏａｔ）法、ワイアーバーコート（ｗｉｒｅ　ｂａｒ　ｃｏａｔ）法、ディップコート（ｄｉｐ　ｃｏａｔ）法、スプレーコート（ｓｐｒｙ　ｃｏａｔ）法、スクリーン（ｓｃｒｅｅｎ）印刷法、フレキソ（ｆｌｅｘｏｇｒａｐｈｉｃ）印刷法、オフセット（ｏｆｆｓｅｔ）印刷法、インクジェット（ｉｎｋ　ｊｅｔ）印刷法等の溶液塗布法を用いて成膜することができる。

【０１３３】

溶液塗布法に使用する溶媒は、一般式（１）で表される化合物を溶解することができるものであれば、どのような溶媒でも使用することができる。このような溶媒としては、例えば、トルエン、キシレン、エチルベンゼン、ジエチルベンゼン、メチシレン、プロピルベンゼン、シクロヘキシルベンゼン、ジメトキシベンゼン、アニソール、エトキシトルエン、フェノキシトルエン、イソプロピルビフェニル、ジメチルアニソール、酢酸フェニル、プロピオン酸フェニル、安息香酸メチル、安息香酸エチル等が挙げられる。また、溶媒の使用量は、特に制限されないが、塗布容易性等の観点から、一般式（１）で表される化合物の濃度が、好ましくは０．１質量％～１０質量％、より好ましくは０．５質量％～５質量％である。

【０１３４】

なお、一般式（１）で表される化合物を含む有機層以外の層の成膜方法については、特に限定されない。このような有機層以外の層は、例えば、真空蒸着法にて成膜されてもよく、溶液塗布法にて成膜されてもよい。

【０１３５】

基板１１０は、一般的な有機ＥＬ素子で使用される基板を使用することができる。例えば、基板１１０は、ガラス（ｇｌａｓｓ）基板、シリコン（ｓｉｌｉｃｏｎ）基板などの半導体基板、またはプラスチック（ｐｌａｓｔｉｃ）基板等であってもよい。

【０１３６】

基板１１０上には、第１電極１２０が形成される。第１電極１２０は、具体的には、陽極であり、金属、合金、または導電性化合物等のうち仕事関数（物質内にある電子を一個外へ取り出すのに必要な最小エネルギー）が大きいものによって形成される。例えば、第１電極１２０は、透明性および導電性に優れる酸化インジウムスズ（$In_2O_3-SnO_2$：ＩＴＯ）、酸化インジウム亜鉛（In_2O_3-ZnO）、酸化スズ（SnO_2）、酸化亜

鉛（ＺｎＯ）等によって透過型電極として形成されてもよい。また、第１電極１２０は、上記透明導電膜に対して、マグネシウム（Ｍｇ）、アルミニウム（Ａｌ）などを積層することによって反射型電極として形成されてもよい。

【０１３７】

第１電極１２０上には、正孔注入層１３０が形成される。正孔注入層１３０は、第１電極１２０からの正孔の注入を容易にする層であり、具体的には、約１０ｎｍ～約１０００ｎｍ、より具体的には、約１０ｎｍ～約１００ｎｍの厚さで形成されてもよい。

【０１３８】

正孔注入層１３０は、公知の正孔注入材料で形成することができる。正孔注入層１３０を形成する公知の正孔注入材料としては、例えば、トリフェニルアミン含有ポリエーテルケトン（ｐｏｌｙ（ｅｔｈｅｒ　ｋｅｔｏｎｅ）－ｃｏｎｔａｉｎｇ　ｔｒｉｐｈｅｎｙｌａｍｉｎｅ：ＴＰＡＰＥＫ）、４－イソプロピル－４'－メチルジフェニルヨードニウムテトラキス（ペンタフルオロフェニル）ボラート（４－ｉｓｏｐｒｏｐｙｌ－４'－ｍｅｔｈｙｌｄｉｐｈｅｎｙｌｉｏｄｏｎｉｕｍ　ｔｅｔｒａｋｉｓ（ｐｅｎｔａｆｌｕｏｒｏｐｈｅｎｙｌ）ｂｏｒａｔｅ：ＰＰＢＩ）、Ｎ，Ｎ'－ジフェニル－Ｎ，Ｎ'－ビス－［４－（フェニル－ｍ－トリル－アミノ）－フェニル］－ビフェニル－４，４'－ジアミン（Ｎ，Ｎ'－ｄｉｐｈｅｎｙｌ－Ｎ，Ｎ'－ｂｉｓ－［４－（ｐｈｅｎｙｌ－ｍ－ｔｏｌｙｌ－ａｍｉｎｏ）－ｐｈｅｎｙｌ］－ｂｉｐｈｅｎｙｌ－４，４'－ｄｉａｍｉｎｅ：ＤＮＴＰＤ）、銅フタロシアニン（ｃｏｐｐｅｒ　ｐｈｔｈａｌｏｃｙａｎｉｎｅ）、４，４'，４"－トリス（３－メチルフェニルフェニルアミノ）トリフェニルアミン（４，４'，４"－ｔｒｉｓ（３－ｍｅｔｈｙｌｐｈｅｎｙｌｐｈｅｎｙｌａｍｉｎｏ）ｔｒｉｐｈｅｎｙｌａｍｉｎｅ：ｍ－ＭＴＤＡＴＡ）、Ｎ，Ｎ'－ジ（１－ナフチル）－Ｎ，Ｎ'－ジフェニルベンジジン（Ｎ，Ｎ'－ｄｉ（１－ｎａｐｈｔｈｙｌ）－Ｎ，Ｎ'－ｄｉｐｈｅｎｙｌｂｅｎｚｉｄｉｎｅ：ＮＰＢ）、４，４'，４"－トリス（ジフェニルアミノ）トリフェニルアミン（４，４'，４"－ｔｒｉｓ（ｄｉｐｈｅｎｙｌａｍｉｎｏ）ｔｒｉｐｈｅｎｙｌａｍｉｎｅ：ＴＤＡＴＡ）、４，４'，４"－トリス（Ｎ，Ｎ－２－ナフチルフェニルアミノ）トリフェニルアミン（４，４'，４"－ｔｒｉｓ（Ｎ，Ｎ－２－ｎａｐｈｔｈｙｌｐｈｅｎｙｌａｍｉｎｏ）ｔｒｉｐｈｅｎｙｌａｍｉｎｅ：２－ＴＮＡＴＡ）、ポリアニリン／ドデシルベンゼンスルホン酸（ｐｏｌｙａｎｉｌｉｎｅ／ｄｏｄｅｃｙｌｂｅｎｚｅｎｅｓｕｌｐｈｏｎｉｃ　ａｃｉｄ）、ポリ（３，４－エチレンジオキシチオフェン）／ポリ（４－スチレンスルホネート）（ｐｏｌｙ（３，４－ｅｔｈｙｌｅｎｅｄｉｏｘｙｔｈｉｏｐｈｅｎｅ）／ｐｏｌｙ（４－ｓｔｙｒｅｎｅｓｕｌｆｏｎａｔｅ）：ＰＥＤＯＴ／ＰＳＳ）、およびポリアニリン／１０－カンファースルホン酸（ｐｏｌｙａｎｉｌｉｎｅ／１０－ｃａｍｐｈｏｒｓｕｌｆｏｎｉｃ　ａｃｉｄ）等を挙げることができる。

【０１３９】

正孔注入層１３０上には、正孔輸送層１４０が形成される。正孔輸送層１４０は、正孔を輸送する機能を備えた層であり、例えば、約１０ｎｍ～１５０ｎｍの厚さで形成されてもよい。また、正孔輸送層１４０は、公知の正孔輸送材料で形成されてもよい。

【０１４０】

公知の正孔輸送材料としては、例えば、１，１－ビス［（ジ－４－トリルアミノ）フェニル］シクロヘキサン（１，１－ｂｉｓ［（ｄｉ－４－ｔｏｌｙｌａｍｉｎｏ）ｐｈｅｎｙｌ］ｃｙｃｌｏｈｅｘａｎｅ：ＴＡＰＣ）、Ｎ－フェニルカルバゾール（Ｎ－ｐｈｅｎｙｌｃａｒｂａｚｏｌｅ）およびポリビニルカルバゾール（ｐｏｌｙｖｉｎｙｌｃａｒｂａｚｏｌｅ）などのカルバゾール（ｃａｒｂａｚｏｌｅ）誘導体、Ｎ，Ｎ'－ビス（３－メチルフェニル）－Ｎ，Ｎ'－ジフェニル－［１，１－ビフェニル］－４，４'－ジアミン（Ｎ，Ｎ'－ｂｉｓ（３－ｍｅｔｈｙｌｐｈｅｎｙｌ）－Ｎ，Ｎ'－ｄｉｐｈｅｎｙｌ－［１，１－ｂｉｐｈｅｎｙｌ］－４，４'－ｄｉａｍｉｎｅ：ＴＰＤ）、４，４'，４"－トリス（Ｎ－カルバゾリル）トリフェニルアミン（４，４'，４"－ｔｒｉｓ（Ｎ－ｃａｒｂａｚｏｌｙｌ）ｔｒｉｐｈｅｎｙｌａｍｉｎｅ：ＴＣＴＡ）、ならびにＮ，Ｎ'－ジ（１－ナフチル）－Ｎ，Ｎ'－ジフェニルベンジジン（Ｎ，Ｎ'－ｄｉ（１－ｎａｐｈｔｈｙｌ）－Ｎ

，Ｎ'－ｄｉｐｈｅｎｙｌｂｅｎｚｉｄｉｎｅ：ＮＰＢ）等を挙げることができる。

【０１４１】

正孔輸送層１４０上には、発光層１５０が形成される。発光層１５０は、蛍光、りん光等によって光を発する層である。発光層１５０は、例えば、約１０ｎｍ～約６０ｎｍの厚さで形成されてもよい。発光層１５０の発光材料としては、公知の発光材料を用いることができる。ただし、発光層１５０に含まれる発光材料は、三重項励起子からの発光（すなわち、りん光発光）が可能な発光材料であることが好ましい。このような場合、有機ＥＬ素子１００の電流効率および発光寿命をさらに向上させることができる。

【０１４２】

また、発光層１５０は、本実施形態に係る有機ＥＬ素子用材料を用いて溶液塗布法によって成膜することができる。また、本実施形態では、このような溶液塗布法により、有機ＥＬ素子１００の電流効率および発光寿命を向上させることが可能な一般式（１）で表される化合物を含む発光層１５０を効率的に大面積にて成膜することができる。

【０１４３】

ただし、有機ＥＬ素子１００のいずれかの他の有機層が本実施形態に係る一般式（１）で表される化合物を含む場合、発光層１５０は、公知の材料によって構成されてもよい。

【０１４４】

発光層１５０は、ホスト材料として、例えば、トリス（８－キノリノラト）アルミニウム（ｔｒｉｓ（８－ｑｕｉｎｏｌｉｎａｔｏ）ａｌｕｍｉｎｉｕｍ：Ａｌｑ３）、４，４'－ビス（カルバゾール－９－イル）ビフェニル（４，４'－ｂｉｓ（ｃａｒｂａｚｏｌ－９－ｙｌ）ｂｉｐｈｅｎｙｌ：ＣＢＰ）、ポリ（ｎ－ビニルカルバゾール）（ｐｏｌｙ（ｎ－ｖｉｎｙｌ ｃａｒｂａｚｏｌｅ）：ＰＶＫ）、９，１０－ジ（ナフタレン－２－イル）アントラセン（９，１０－ｄｉ（ｎａｐｈｔｈａｌｅｎｅ）ａｎｔｈｒａｃｅｎｅ：ＡＤＮ）、４，４'，４"－トリス（Ｎ－カルバゾリル）トリフェニルアミン（４，４'，４"－ｔｒｉｓ（Ｎ－ｃａｒｂａｚｏｌｙｌ）ｔｒｉｐｈｅｎｙｌａｍｉｎｅ：ＴＣＴＡ）、１，３，５－トリス（Ｎ－フェニルベンズイミダゾール－２－イル）ベンゼン（１，３，５－ｔｒｉｓ（Ｎ－ｐｈｅｎｙｌ－ｂｅｎｚｉｍｉｄａｚｏｌ－２－ｙｌ）ｂｅｎｚｅｎｅ：ＴＰＢＩ）、３－ｔｅｒｔ－ブチル－９，１０－ジ（ナフト－２－イル）アントラセン（３－ｔｅｒｔ－ｂｕｔｙｌ－９，１０－ｄｉ（ｎａｐｈｔｈ－２－ｙｌ）ａｎｔｈｒａｃｅｎｅ：ＴＢＡＤＮ）、ジスチリルアリーレン（ｄｉｓｔｙｒｙｌａｒｙｌｅｎｅ：ＤＳＡ）、４，４'－ビス（９－カルバゾール）－２，２'－ジメチル－ビフェニル（４，４'－ｂｉｓ（９－ｃａｒｂａｚｏｌｅ）２，２'－ｄｉｍｅｔｈｙｌ－ｂｉｐｈｅｎｙ：ｄｍＣＢＰ）などを含んでもよい。

【０１４５】

また、発光層１５０は、ドーパント材料として、例えば、ペリレン（ｐｅｒｙｌｅｎｅ）およびその誘導体、ルブレン（ｒｕｂｒｅｎｅ）およびその誘導体、クマリン（ｃｏｕｍａｒｉｎ）およびその誘導体、４－ジシアノメチレン－２－（ｐ－ジメチルアミノスチリル）－６－メチル－４Ｈ－ピラン（４－ｄｉｃｙａｎｏｍｅｔｈｙｌｅｎｅ－２－（ｐｄｉｍｅｔｈｙｌａｍｉｎｏｓｔｙｒｙｌ）－６－ｍｅｔｈｙｌ－４Ｈ－ｐｙｒａｎ：ＤＣＭ）およびその誘導体、ビス［２－（４，６－ジフルオロフェニル）ピリジネート］ピコリネートイリジウム（ＩＩＩ）（ｂｉｓ［２－（４，６－ｄｉｆｌｕｏｒｏｐｈｅｎｙｌ）ｐｙｒｉｄｉｎａｔｅ］ｐｉｃｏｌｉｎａｔｅ ｉｒｉｄｉｕｍ（ＩＩＩ）：ＦＩｒｐｉｃ）、ビス（１－フェニルイソキノリン）（アセチルアセトネート）イリジウム（ＩＩＩ）（ｂｉｓ（１－ｐｈｅｎｙｌｉｓｏｑｕｉｎｏｌｉｎｅ）（ａｃｅｔｙｌａｃｅｔｏｎａｔｅ）ｉｒｉｄｉｕｍ（ＩＩＩ）：Ｉｒ（ｐｉｑ）２（ａｃａｃ））、トリス（２－フェニルピリジン）イリジウム（ＩＩＩ）（ｔｒｉｓ（２－ｐｈｅｎｙｌｐｙｒｉｄｉｎｅ）ｉｒｉｄｉｕｍ（ＩＩＩ）：Ｉｒ（ｐｐｙ）３）、トリス（２－（３－ｐ－キシイル）フェニル）ピリジン イリジウム（ＩＩＩ）などイリジウム（Ｉｒ）錯体、オスミウム（Ｏｓ）錯体、白金錯体などを含んでもよい。

【０１４６】

また、発光層１５０は、発光材料として量子ドットなどのナノ粒子を含んでよい。量子ドットは、Ｉ－ＶＩ族系列の半導体、ＩＩＩ－Ｖ族系列の半導体またはＩＶ－ＩＶ族系列の半導体で構成されるナノ粒子である。上記半導体の例として、ＣｄＳ、ＣｄＳｅ、ＣｄＴｅ、ＺｎＳｅ、ＺｎＳ、ＰｂＳ、ＰｂＳｅ、ＨｇＳ、ＨｇＳｅ、ＨｇＴｅ、ＣｄＨｇＴｅ、$CdSe_xTe_{1-x}$、ＧａＡｓ、ＩｎＡｓおよびＩｎＰなどが挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【０１４７】

また、ナノ粒子の直径は、特に限定されないが、例えば、１～２０ｎｍであることができる。また、量子ドット等のナノ粒子は、単一コア構造を有していてもよいし、コアの表面上にシェルが被覆された、いわゆるコア／シェル構造を有していてもよい。

【０１４８】

発光層１５０上には、電子輸送層１６０が形成される。電子輸送層１６０は、電子を輸送する機能を備えた層である。電子輸送層１６０は、例えば、約１５ｎｍ～約５０ｎｍの厚さで形成されてもよい。

【０１４９】

電子輸送層１６０は、公知の電子輸送材料にて形成されてもよい。公知の電子輸送材料としては、例えば、トリス（８－キノリノラト）アルミニウム（ｔｒｉｓ（８－ｑｕｉｎｏｌｉｎａｔｏ）ａｌｕｍｉｎｉｕｍ：Ａｌｑ３）、および含窒素芳香環を有する化合物等を挙げることができる。含窒素芳香環を有する化合物の具体例としては、例えば、１，３，５－トリ［（３－ピリジル）－フェン－３－イル］ベンゼン（１，３，５－ｔｒｉ［（３－ｐｙｒｉｄｙｌ）－ｐｈｅｎ－３－ｙｌ］ｂｅｎｚｅｎｅ）のようなピリジン（ｐｙｒｉｄｉｎｅ）環を含む化合物、２，４，６－トリス（３'－（ピリジン－３－イル）ビフェニル－３－イル）－１，３，５－トリアジン（２，４，６－ｔｒｉｓ（３'－（ｐｙｒｉｄｉｎ－３－ｙｌ）ｂｉｐｈｅｎｙｌ－３－ｙｌ）－１，３，５－ｔｒｉａｚｉｎｅ）のようなトリアジン（ｔｒｉａｚｉｎｅ）環を含む化合物、２－（４－（Ｎ－フェニルベンゾイミダゾリル－１－イル－フェニル）－９，１０－ジナフチルアントラセン（２－（４－（Ｎ－ｐｈｅｎｙｌｂｅｎｚｏｉｍｉｄａｚｏｌｙｌ－１－ｙｌ－ｐｈｅｎｙｌ）－９，１０－ｄｉｎａｐｈｔｈｙｌａｎｔｈｒａｃｅｎｅ）のようなイミダゾール（ｉｍｉｄａｚｏｌｅ）環を含む化合物等を挙げることができる。

【０１５０】

電子輸送層１６０上には、電子注入層１７０が形成される。電子注入層１７０は、第２電極１８０からの電子の注入を容易にする機能を備えた層である。電子注入層１７０は、０．３ｎｍ～２０ｎｍの厚さで形成されてもよい。電子注入層１７０は、特に限定されず、電子注入層１７０を形成する材料として公知の材料を使用することができる。例えば、電子注入層１７０は、（８－キノリノラト）リチウム（（８－ｑｕｉｎｏｌｉｎａｔｏ）ｌｉｔｈｉｕｍ：Ｌｉｑ）およびフッ化リチウム（ＬｉＦ）等のリチウム（ｌｉｔｈｉｕｍ）化合物、塩化ナトリウム（ＮａＣｌ）、フッ化セシウム（ＣｓＦ）、酸化リチウム（Li_2O）、または酸化バリウム（ＢａＯ）等で形成されてもよい。

【０１５１】

電子注入層１７０上には、第２電極１８０が形成される。第２電極１８０は、具体的には、陰極であり、金属、合金、または導電性化合物等のうち仕事関数が小さいものによって形成される。例えば、第２電極１８０は、リチウム（Ｌｉ）、マグネシウム（Ｍｇ）、アルミニウム（Ａｌ）、カルシウム（Ｃａ）等の金属、またはアルミニウム－リチウム（Ａｌ－Ｌｉ）、マグネシウム－インジウム（Ｍｇ－Ｉｎ）、マグネシウム－銀（Ｍｇ－Ａｇ）等の合金で反射型電極として形成されてもよい。また、第２電極１８０は、上記金属材料の２０ｎｍ以下の薄膜、酸化インジウムスズ（$In_2O_3-SnO_2$）および酸化インジウム亜鉛（In_2O_3-ZnO）などの透明導電膜によって透過型電極として形成されてもよい。

【０１５２】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子１００は、一般式（１）で表される化合物を含む有機層

を有することにより、電流効率、発光寿命に優れる有機エレクトロルミネッセンス素子を塗布法により作製することができる。なお、本実施形態に係る有機ＥＬ素子１００は、本発明に係るエレクトロルミネッセンス素子の一例である。

【０１５３】

なお、本実施形態に係る有機ＥＬ素子１００の積層構造は、上記の例示に限定されない。本実施形態に係る有機ＥＬ素子１００は、他の公知の積層構造にて形成されてもよい。例えば、有機ＥＬ素子１００は、正孔注入層１３０、正孔輸送層１４０、電子輸送層１６０および電子注入層１７０のうちの１層以上が省略されてもよく、また、追加で他の層を備えていてもよい。また、有機ＥＬ素子１００の各層は、それぞれ単層で形成されてもよく、複数層で形成されてもよい。

【０１５４】

例えば、有機ＥＬ素子１００は、励起子または正孔が電子輸送層１６０に拡散することを防止するために、発光層１５０と電子輸送層１６０との間に正孔阻止層をさらに備えていてもよい。なお、正孔阻止層は、例えば、オキサジアゾール（ｏｘａｄｉａｚｏｌｅ）誘導体、トリアゾール（ｔｒｉａｚｏｌｅ）誘導体、または、フェナントロリン（ｐｈｅｎａｎｔｈｒｏｌｉｎｅ）誘導体等によって形成することができる。

【実施例】

【０１５５】

以下、本発明について、さらに詳細な実施例に基づいて説明する。なお、本発明は、これら実施例に限定されない。以下において、「％」は、特に断りのない限り重量基準である。また、試験および評価は、下記に従った。

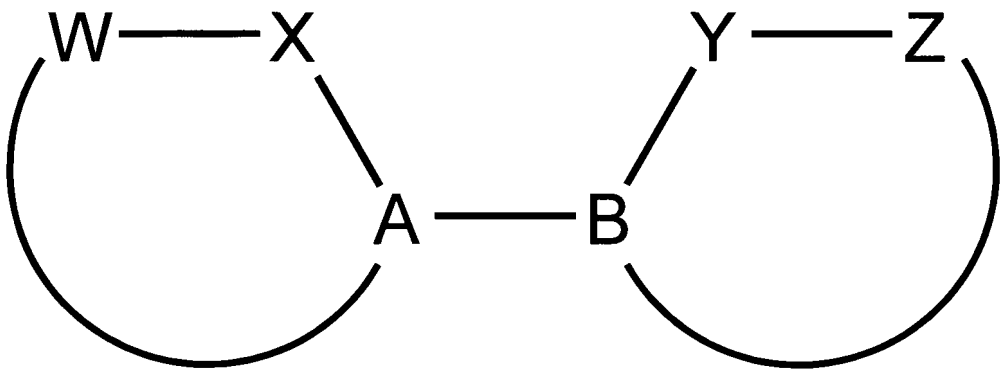
【０１５６】

＜二面角の解析＞

化合物の二面角を解析する。まず、下記一般式（５）において、単結合がＡ－Ｂで表され、ＬＵＭＯが分布する部分構造が結合して点Ｘ－Ａ－Ｂを含む平面を形成する。一方、置換基は点Ａ－Ｂ－Ｙを含む平面を形成する。そして、この２つの平面（点Ｘ－Ａ－Ｂを含む平面と点Ａ－Ｂ－Ｙを含む平面）の間の角度を二面角と定義する。本実施形態では、式（１）におけるトリアジン環平面とＡ１平面の間の角度を二面角Ｉとし、トリアジン環とＡ２平面の間の角度を二面角ＩＩとする。なお、実際の化合物は、公知の方法（例えば、二面角部分の元素が同位体元素で標識された化合物等を用いた固体ＮＭＲ分析等）により確認できる。

【０１５７】

【化３４】



(5)

【０１５８】

上記二面角は、量子計算ソフトウェア（Ｇａｕｓｓｉａｎ　０９、Ｒｅｖｉｓｉｏｎ　Ｄ

．０１）を使用して計算した。具体的には、まず１段階目に、分子描画ソフトウェア（Ｍａｒｖｉｎ　ｓｋｅｔｃｈ１７．５．０、ＣｈｅｍＡｘｏｎ社製）を用いて分子構造を描画してコンフォメーション（Ｃｏｎｆｏｒｍａｔｉｏｎ）計算を行い、エネルギー最小値のコンフォメーション構造を初期構造として用いる。

【０１５９】

２段階目に、１段階目で得た初期構造から、量子化学計算プログラム（Ｇａｕｓｓｉａｎ　０９、Ｒｅｖｉｓｉｏｎ　Ｄ．０１、Ｇａｕｓｓｉａｎ社）を用いて二面角を計算する。このとき、現実の分子構造に対するシミュレーションの精度を高めるため、分子構造の最適化を行う。具体的には、一般式（５）におけるＷ－Ｘ－Ａ－Ｂ、Ａ－Ｂ－Ｙ－Ｚのそれぞれの二面角は初期構造から変化しないように制限する指定を行い、それ以外の部分を可動と設定して、キーワードとしてＢ３ＬＹＰ／６－３１Ｇ＊を用いて、分子構造の最適化を行う。

【０１６０】

そして、３段階目に、最適化された分子構造を用い、キーワードとしてＢ３ＬＹＰ／６－３１＋Ｇ＊＊を用いて、エネルギー計算（分子が有する全エネルギー値、分子軌道エネルギー準位等）と分子軌道分布を計算した。この計算結果からＬＵＭＯの分布を知ることができ、化合物ごとにＸ－Ａ－Ｂ－Ｙにあたる部位を選択し、狭角側の二面角の絶対値を読み取った。この最適化構造における二面角をDA_0と表記して、結果を表Ｘに示す。

【０１６１】

＜回転障壁エネルギーの計算＞

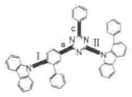
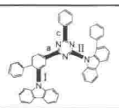
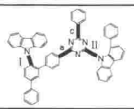
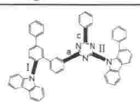
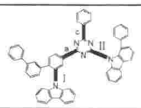
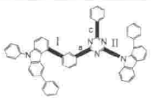
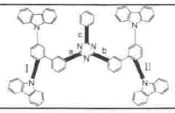
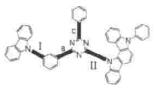
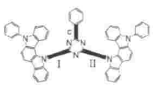
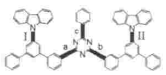
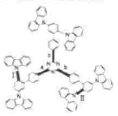
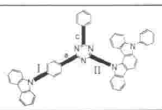
前述の二面角の解析において用いた方法の２段階目で得られた最適化構造を初期構造として用いて、二面角の回転障壁エネルギーを計算した。回転障壁エネルギーの計算では、まず、一般式（５）におけるＷ－Ｘ－Ａ－Ｂ、Ａ－Ｂ－Ｙ－Ｚそれぞれの二面角が初期構造から変化しないように制限する指定を行い、それ以外の部分を可動と設定して、対象とする部分の二面角を１ステップあたり５°ずつ変化させる。このときも、現実の分子構造に対するシミュレーション精度を高めるため、分子構造の最適化を行う。分子構造の最適化では、キーワードとしてＢ３ＬＹＰ／６－３１Ｇ＊を用いた。

【０１６２】

次いで、キーワードとしてＢ３ＬＹＰ／６－３１＋Ｇ＊＊を用いたエネルギー計算（分子が有する全エネルギー値、分子軌道エネルギー準位等）を行う。このステップを二面角０°～３６０°にわたって行う。二面角をｘ軸として、このときに得られる分子が有する全エネルギー値をｙ軸とすることで、対象とする二面角の回転障壁エネルギーを求めた。この結果から室温の熱エネルギー（２９８Ｋ＝２５ｍｅＶ（ミリエレクトロンボルト）＝２．５ｋＪ／ｍｏｌ）で到達しうる二面角の最小値を求めた。この計算における二面角をDA_{rt}と表記して、結果を表１に示す。

【０１６３】

【表１】

化合物	分子構造	I		II		a	b	c
		DA_o	DA_{rt}	DA_o	DA_{rt}	DA_o	DA_o	DA_o
化合物1		67.8	52	47.1	32	3.2	–	5.4
化合物2		70.9	52	46.2	32	2.7	–	4.6
化合物3		69.4	52	49.1	32	4.6	–	4.6
化合物4		75.6	52	52.1	32	6.8	–	3.3
化合物5		70.9	52	46.2	32	7.0	–	5.9
化合物6		59.1	40	46.6	32	9.0	–	5.3
比較例化合物1		69.3	52	70.0	52	8.4	6.7	0.5
比較例化合物2		54.9	36	38.7	27	3.4	–	3.0
比較例化合物3		38.7	27	38.7	27	–	–	3.0
比較例化合物4		58.5	36	56.8	36	7.7	1.8	0.4
比較例化合物5		71.8	52	53.5	36	0.5	1.9	1.1
比較例化合物6		51.3	36	40.9	27	3.3	–	1.7

【０１６４】

表１から、本発明の一般式（１）で表される化合物は、ＬＵＭＯ領域と結合する置換基Ａ１は、５０°以上の大きなＤＡ$_0$を有し、且つ、４０°以上の大きなＤＡ$_{rt}$を有し、さらに、ＬＵＭＯ領域と結合する置換基Ａ２は、３０°以上の大きなＤＡ$_0$を有し、且つ、２０°以上の大きなＤＡ$_{rt}$を有することが分かる。

【０１６５】

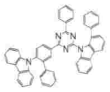
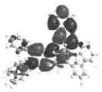
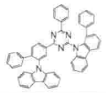
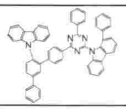
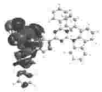
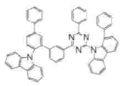
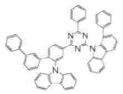
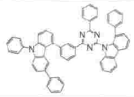
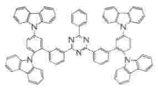
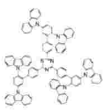
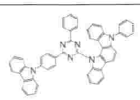
＜分子量および分子量比率＞

各化合物の分子量は分子構造描画ソフト（ＣｈｅｍＢｉｏＤｒａｗ　Ｕｌｔｒａ、ＣａｍｖｒｉｄｇｅＳｏｆｔ社製）を用いて計算した。ＨＯＭＯ分布については、前述の量子

化学計算プログラムを使用した分子軌道計算により求め、ＨＯＭＯを可視化することでＨＯＭＯが分布する分子構造ユニットを特定した（表２のグレースケール部分）。前述の分子構造描画ソフト上で該ユニットの分子量をもとに分子量比率を求めた。結果を表２に示す。

【０１６６】

【表２】

化合物	分子構造	HOMO	LUMO
	分子量	HOMOエネルギー、 HOMO phore分子量 分子量比率	LUMOエネルギー
化合物1			
	715.86	−5.68eV, 241.29, 33.7%	−2.35eV
化合物2			
	715.86	−5.67eV, 241.29, 33.7%	−2.37eV
化合物3			
	791.96	−5.69eV, 241.29, 30.5%	−2.26eV
化合物4			
	791.96	−5.62eV, 241.29, 30.5%	−2.17eV
化合物5			
	791.96	−5.70eV, 241.29, 30.5%	−2.37eV
化合物6			
	791.96	−5.35eV, 318.40, 40.2%	−2.13eV
比較例 化合物1			
	1122.35	−5.61eV, 815.00, 72.6%	−2.26eV
比較例 化合物5			
	1528.84	−5.68eV, 815.00, 53.3%	−2.37eV
比較例 化合物6			
	728.86	−5.45eV, 331.40, 45.5%	−2.29eV

【０１６７】

表１（二面角）と表２（ＨＯＭＯ／ＬＵＭＯ図）から、本発明の一般式（１）で表される化合物は、トリアジン環に対して直接結合する置換基の少なくとも２つが１５°以下の小さな二面角で結合し、そのことによってＬＵＭＯがトリアジン環からそれら置換基の２

方向以上に拡張されて分布していることが分かる。

【０１６８】

＜溶解度の測定＞

サンプル固体試料５０ｍｇを無色透明のサンプル瓶に入れ、溶媒を５００ｍｇ入れて室温にて超音波照射を５分間行い、目視にてサンプル固体の残存有無を確認した。この時点でサンプル固体の残存が無く溶解していれば溶解度は１０ｗｔ％以上となる。サンプル固体の残存が有れば、少量ずつ溶媒追加と超音波照射を繰り返し、完全に溶解した時点での溶媒量から溶解度を算出した。結果を表３に示す。

【０１６９】

【表３】

化合物	安息香酸メチルへの溶解度
化合物1	5wt%
化合物3	4wt%
化合物4	6wt%
化合物5	4wt%
化合物6	6wt%
化合物130	2wt%
化合物341	4wt%
比較例化合物1	1wt%
比較例化合物4	0.5wt%
比較例化合物5	0.2wt%
比較例化合物6	0.2wt%

【０１７０】

＜光化学的安定性の評価＞

光化学的安定性（Ｐｈｏｔｏ　Ｃｈｅｍｉｃａｌ　Ｓｔａｂｉｌｉｔｙ）は、以下の条件で評価した。

【０１７１】

［測定用サンプルの作成］

水分濃度１ｐｐｍ以下、酸素濃度１ｐｐｍ以下の窒素雰囲気グローブボックス中で、石英基板上に塗布法により、固形分比率として評価ホスト材料：緑色燐光発光材料ＴＥＧ＝１００重量％：５重量％、固形分インク濃度４重量％の安息香酸メチル（Ｍｅｔｈｙｌ　ｂｅｎｚｏａｔｅ）溶液から、膜厚５０ｎｍの薄膜層を形成し、真空度１Ｅ$^{-3}$Ｐａにて１２０℃で１５分間処理する。真空蒸着機に搬送し、この膜上に直径２ｍｍの円形の膜厚１００ｎｍのアルミニウム薄膜を、メタルマスクを用いて真空蒸着により形成する。これを乾燥剤付きのガラス製の封止管と紫外線硬化型樹脂を用いて封止して測定用サンプルとした。

【０１７２】
［測定系］
測定系は、主に以下の２つから構成される。
１．フォトルミネッセンス（ＰＬ）強度測定系
２．ＵＶ照射劣化系
【０１７３】
１．フォトルミネッセンス（ＰＬ）強度測定系
高出力ＵＶ－Ｖｉｓファイバ光源ユニット（浜松ホトニクス社製　Ｌ１０２９０）と紫外透過可視吸収フィルタ（駿河精機製、Ｓ７６－Ｕ３４０）を用いて、波長が２５０ｎｍ以下の光と４００ｎｍ以上の光を除去した光を励起光源として用いた。受光器は、小型ファイバ光学分光器（オーシャンフォトニクス社製、ＵＳＢ２０００＋ＵＶ－ＶＩＳ）を用いた。測定時、サンプル基板は石英基板側の正面から２０℃以上傾いた角度から上述のアルミニウムで被覆されたサンプル膜測定部位に正確に励起光が入射されるように設置される。励起光によってサンプル膜測定部位は、石英基板正面の半球方向に対して発光を放射する。受光器は、この発光を捕捉できる距離内で、且つ、石英基板による励起光の正反射を避ける位置に設置する。測定の都度、サンプルに照射される励起光強度を一定にするために、励起光源強度および光学系の幾何配置関係は一定に保たれるようにする。
【０１７４】
２．ＵＶ照射劣化系
極大発光波長３６５ｎｍのＵＶ－ＬＥＤ（ＣＣＳ社製）を光源に用い、直径２ｍｍ、長さ７５ｍｍの合成石英製ライトパイプ（Ｅｄｍｕｎｄ　Ｏｐｔｉｃｓ社製、＃６５－８２９）を通じて照射口面内強度を均一化した光を劣化用励起光として用いた。励起光の全光束強度はデジタル電源（ＣＣＳ社製、ＰＤ３－１００２４－８－ＰＩ）と光パワーメータ（ＡＤＣＭＴ社製、８２３０Ｅ）を用いて制御した。励起光照射口とサンプル膜の石英基板側は位置合せした上で密着させる。石英基板側からサンプル膜に励起光を一定時間照射することでサンプル膜が光学的に負荷を受けて劣化される。
【０１７５】
［励起光全光束強度１０ｍＷにおける光化学的劣化試験］
１段階目に上記１．のフォトルミネッセンス（ＰＬ）強度測定系を用いて、劣化前のサンプル薄膜のフォトルミネッセンス（ＰＬ）強度を測定する。２段階目に上記２．のＵＶ照射劣化系を用いて、励起光の全光束強度を１０ｍＷにおいて、５分間の劣化用励起光照射を行い、その後に上記１．のフォトルミネッセンス（ＰＬ）強度測定系を用いて、５分間負荷を与えたサンプル薄膜のフォトルミネッセンス（ＰＬ）強度を測定する。以降、２段階目と同じ操作を繰り返すことにより、励起光負荷を与えた時間に対するサンプル薄膜のフォトルミネッセンス（ＰＬ）強度を測定する。
【０１７６】
［励起光全光束強度２０ｍＷにおける光化学的劣化試験］
励起光全光束強度を２０ｍＷに変更した以外は前記１０ｍＷにおける劣化試験と同様に測定を行った。
【０１７７】
［励起光全光束強度５０ｍＷにおける光化学的劣化試験］
励起光全光束強度を５０ｍＷに変更した以外は前記１０ｍＷにおける劣化試験と同様に測定を行った。
【０１７８】
［光化学的劣化試験の解析］
まず、上記の励起光全光束強度を各種変化させた光化学的劣化試験から得られた発光強度の減衰データをもとに、以下の対応関係を適用して、加速度係数ａを調整することによって、励起光全光束強度に依存しない減衰曲線を求める。
縦軸：$R_{I(t)}=I_{(t)}/I_0$
横軸：$X_c=E^a\times t$

$R_{I(t)}$：励起光照射時間ｔにおける初期輝度に対するサンプル膜のフォトルミネッセンス強度比率
ｔ：励起光照射時間
$I_{(t)}$：励起光照射時間ｔにおけるサンプル膜のフォトルミネッセンス強度
I_0：励起光照射前のサンプル膜のフォトルミネッセンス強度
X_c：補正励起光積算強度
Ｅ：励起光全光束強度
ａ：加速度係数

【０１７９】

この解析によって得られた「励起光全光束強度に依存しない減衰曲線」から、$R_{I(t)}$が０．９（発光強度が１０％低下する）に達するのに要する補正励起光積算強度Ｘｃ９０を、本実施形態における光化学的安定性の指標とする。このＸｃ９０の数値が大きいほど、発光強度の劣化に大きなエネルギーが必要であり、劣化しにくいことを表す。表４に、Ｘｃ９０の結果を相対値で示す。

【０１８０】

【表４】

化合物	光化学的安定性相対値(Xc90)
化合物3	290
化合物4	410
化合物306	100
化合物307	140

【０１８１】

＜有機ＥＬ素子評価方法＞

［電流効率および耐久性（発光寿命）の評価］

実施例および比較例について、電流効率および耐久性（発光寿命）を以下の条件で評価した。まず、有機ＥＬ素子に印加する電圧・電流を直流定電圧電源（ＫＥＹＥＮＣＥ製、ソースメータ（ｓｏｕｒｃｅ　ｍｅｔｅｒ））を用いて測定し、有機ＥＬ素子の発光輝度を輝度測定装置（Ｔｏｐｃｏｎ製、ＳＲ－３）を用いて測定した。

【０１８２】

有機ＥＬ素子の面積と電流値から単位面積あたりの電流値（電流密度）を計算し、輝度（ｃｄ／ｍ２）を電流密度（Ａ／ｍ２）にて除算することで、電流効率（ｃｄ／Ａ）を算出した。なお、電流効率は、電流を発光エネルギーへ変換する効率（変換効率）を示し、電流効率が高いほど有機ＥＬ素子の性能が高いことを示す。

【０１８３】

耐久性（発光寿命）は、各有機EL素子において初期輝度が6000cd/m2となる電流値において連続駆動し、時間経過とともに減衰する発光輝度が初期輝度の８０％になるまでの時間（時間）を「ＬＴ８０（ｈ）」とした。

【０１８４】

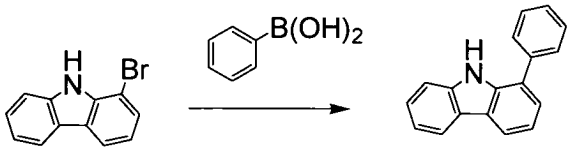
＜化合物の合成＞

［合成例１］

下記反応スキーム（６）により、まず化合物１－１を合成した。

【０１８５】

【化３５】



（6）

化合物1-1

【０１８６】

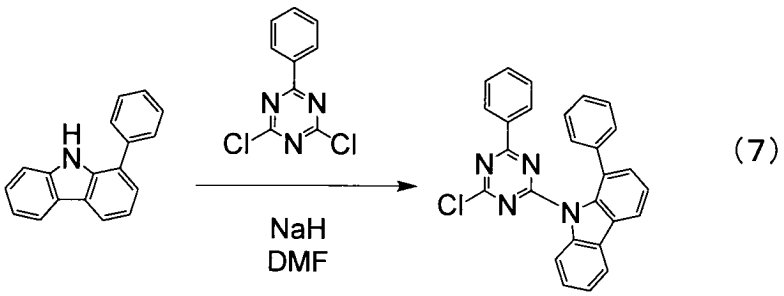
具体的には、三口フラスコに１－ブロモカルバゾール（１－Ｂｒｏｍｏｃａｒｂａｚｏｌｅ）（３０７ｍｍｏｌ、７５．６ｇ）、フェニルボロン酸（Ｐｈｅｎｙｌｂｏｒｏｎｉｃ ａｃｉｄ）（３３８ｍｍｏｌ、４１．２ｇ）、炭酸カリウム（４６１ｍｍｏｌ、６３．７ｇ）２Ｍ水溶液（２３０ｍｌ）、１，４－ジオキサン（６１４ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、酢酸パラジウム（II）（９．２ｍｍｏｌ、２．０７ｇ）、トリ(ｏ－トリル)ホスフィン［Ｐ（ｏ－ｔｏｌｙｌ）$_3$］（１３．８ｍｍｏｌ、４．２０ｇ）を加えて８０℃で８時間加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（１Ｌ）で希釈し、セライトを用いて濾過し、分液ロートで２回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。固体が析出し、これをヘキサン（３００ｍｌ）に分散させて窒素雰囲気中、２時間還流させた。室温まで冷却後、濾過して個体を回収して化合物１－１を得た。化合物１－１の収量は、５８．９ｇで、収率は、７９％であった。

【０１８７】

次いで、下記反応スキーム（７）により、化合物１－２を合成した。

【０１８８】

【化３６】



（7）

化合物1-2

【０１８９】

具体的には、三口フラスコに化合物１－１（２２４．４ｍｍｏｌ、５４．５ｇ）、ジメチルホルムアミド（Ｄｉｍｅｔｈｙｌｆｏｒｍａｍｉｄｅ）（４４０ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、０℃に冷却した。水素化ナトリウム（６２％パラフィン分散）（２３５．６ｍｍｏｌ、９．１２ｇ）を水素ガスの発生量に注意しながら段階的に加えて０℃で

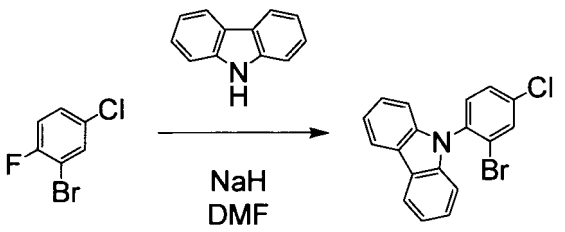
１時間加熱撹拌した。２－フェニル－４，６－ジクロロトリアジン（２－Ｐｈｎｅｙｌ－４，６－ｄｉｃｈｌｏｒｏｔｒｉａｚｉｎｅ）（２４６．８ｍｍｏｌ、５５．８ｇ）を加えて０℃で３０分間撹拌し、室温で１時間撹拌した。その後８０℃で４時間撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（５００ｍｌ）で希釈し、少量の水で反応を失活させた。セライトを用いて濾過し、分液ロートで３回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過して、濃縮した。これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（展開溶媒　ヘキサン：酢酸エチル＝７：３）で精製し化合物１－２を得た。化合物１－２の収量は、　５６．２ｇ、収率は、５８％であった。

【０１９０】

次いで、下記反応スキーム（８）により、化合物１－３を合成した。

【０１９１】

【化３７】



（８）

化合物1-3

【０１９２】

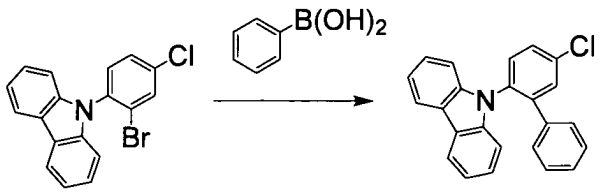
具体的には、三口フラスコにカルバゾール（ｃａｒｂａｚｏｌｅ）（８００ｍｍｏｌ、１３３．８ｇ）、２－ブロモ－４－クロロ－１－フルオロベンゼン（２－ｂｒｏｍｏ－４－ｃｈｌｏｒｏ－１－ｆｌｕｏｒｏｂｅｎｚｅｎｅ）（８４０ｍｍｏｌ、１７５．９ｇ）、ジメチルホルムアミド（Ｄｉｍｅｔｈｙｌｆｏｒｍａｍｉｄｅ）（１６０ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、水素化ナトリウム（６２％パラフィン分散）（８００ｍｍｏｌ、３１．０ｇ）を水素ガスの発生量に注意しながら５回以上に分けて段階的に加えた後、水素ガスの発生量に注意しながらゆっくりと加熱して、１５０℃で２０時間加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（１Ｌ）で希釈し、窒素雰囲気下において少量の水で失活させた。セライトを用いて濾過し、分液ロートで３回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。これをエタノール：メタノール＝１：１の混合溶媒から再結晶し化合物１－３を得た。化合物１－３の収量は１５６．１ｇ、収率は５５％であった。

【０１９３】

次いで、下記反応スキーム（９）により、化合物１－４を合成した。

【０１９４】

【化３８】



（9）

化合物1-4

【０１９５】

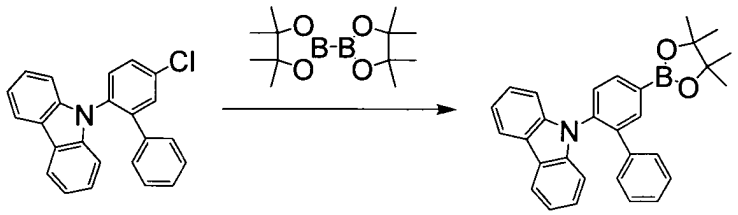
具体的には、三口フラスコに化合物１－３（４３５ｍｍｏｌ、１５５．１ｇ）、フェニルボロン酸（Ｐｈｅｎｙｌｂｏｒｏｎｉｃ ａｃｉｄ）（４７８．５ｍｍｏｌ、５８．３ｇ）、炭酸カリウム（６５２．５ｍｍｏｌ、９０．２ｇ）２Ｍ水溶液（４３５ｍｌ）、トルエン（８７０ｍｌ）、エタノール（２１８ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０）（Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_4$）（２１．８ｍｍｏｌ、２５．１ｇ）を加えて８０℃で８時間加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（１Ｌ）で希釈し、セライトを用いて濾過し、分液ロートで２回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。固体が析出し、これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（展開溶媒　ヘキサン：トルエン＝７：３）で精製し、さらにエタノールから再結晶し化合物１－４を得た。化合物１－４の収量は、１０９．３ｇ、収率は、７１％であった。

【０１９６】

次いで、下記反応スキーム（１０）により、化合物１－５を合成した。

【０１９７】

【化３９】



（10）

化合物1-5

【０１９８】

具体的には、三口フラスコに化合物１－４（３０５ｍｍｏｌ、１０７．９ｇ）、ビス（ピナコラト）ジボロン（Ｂｉｓ（ｐｉｎａｃｏｌａｔｏ）ｄｉｂｏｒｏｎ）（３３５．５ｍｍｏｌ、８５．２ｇ），酢酸カリウム（６１０ｍｍｏｌ、５９．９ｇ）、１，４－ジオキサン（１，４－ｄｉｏｘａｎｅ）（６１０ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、ビス（ジベンジリデンアセトン）パラジウム（０）（Ｂｉｓ（ｄｉｂｅｎｚｙｌｉｄｅｎｅａｃｅｔｏｎｅ）ｐａｌｌａｄｉｕｍ（０））（１５．２５ｍｍｏｌ、８．７６ｇ）、トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート（Ｔｒｉｃｙｃｌｏｈｅｘｙｌｐｈｏｓｐｈｏｎｉｕｍ Ｔｅｔｒａｆｌｕｏｒｏｂｏｒａｔｅ）（１２．２ｍｍｏｌ、４．

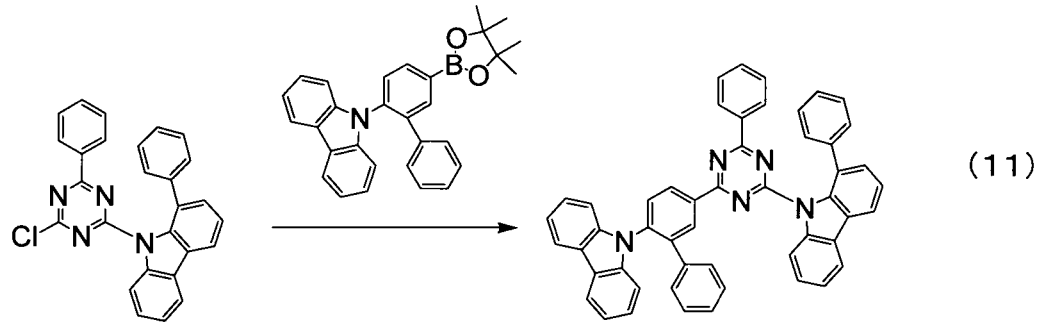
４９ｇ）を加えて８０℃で８時間　加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（１Ｌ）で希釈し、セライトを用い濾過して、分液ロートで２回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。これをヘキサン（３００ｍｌ）に分散させて超音波処理を３０分行い、濾過、真空乾燥（５０℃、６時間）して化合物１－５を得た。化合物１－５の収量は、１１２．７ｇ、収率は、８３％であった。

【０１９９】

次いで、下記反応スキーム（１１）により、化合物１を合成した。

【０２００】

【化４０】



（11）

化合物1

【０２０１】

具体的には、三口フラスコに化合物１－２（１０ｍｍｏｌ、４．３３ｇ）、化合物１－５（１１ｍｍｏｌ、４．９０ｇ）、炭酸カリウム（１５ｍｍｏｌ、２．０７ｇ）１Ｍ水溶液（１５ｍｌ）、トルエン（１００ｍｌ）、エタノール（２０ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０）（Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_4$）（０．５ｍｍｏｌ、０．５８ｇ）を加えて８０℃で８時間加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（２００ｍｌ）で希釈し、セライトを用いて濾過し、分液ロートで２回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（展開溶媒　ヘキサン：トルエン＝６：４）で精製し、さらに酢酸エチル：エタノール＝２：８の混合溶媒から再結晶し化合物１を得た。化合物１の収量は、５．３０ｇ、収率は、７４％であった。

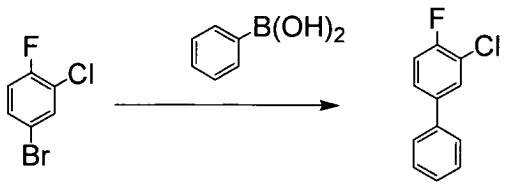
【０２０２】

［合成例２］

下記反応スキーム（１２）により、化合物３－１を合成した。

【０２０３】

【化４１】



（12）

化合物3-1

【０２０４】

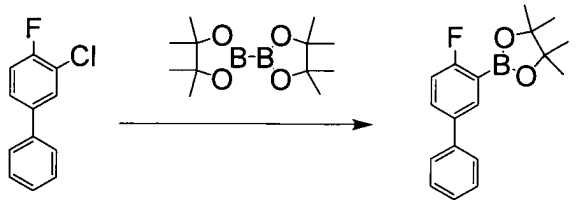
具体的には、三口フラスコに4-ブロモ-2-クロロ-1-フルオロベンゼン（７２０ｍｍｏｌ、１５０．８ｇ）、フェニルボロン酸（Ｐｈｅｎｙｌｂｏｒｏｎｉｃ ａｃｉｄ）（７９２ｍｍｏｌ、９６．６ｇ）、炭酸カリウム（１０８０ｍｍｏｌ、１４９．３ｇ）２Ｍ水溶液（３６０ｍｌ）、トルエン（７２０ｍｌ）、エタノール（１４４ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０）（Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_4$）（２１．６ｍｍｏｌ、２１．６ｇ）を加えて８０℃で８時間加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（１Ｌ）で希釈し、セライトを用いて濾過し、分液ロートで２回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。固体が析出し、これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（展開溶媒　ヘキサン：トルエン＝７：３）で精製し、さらにメタノールから再結晶し化合物３－１を得た。化合物３－１の収量は、１０１．２ｇ、収率は、６８％であった。

【０２０５】

次いで、下記反応スキーム（１３）により、化合物３－２を合成した。

【０２０６】

【化４２】



（13）

化合物3-2

【０２０７】

具体的には、三口フラスコに化合物３－１（４８８ｍｍｏｌ、１００．８ｇ）、ビス（ピナコラト）ジボロン（Ｂｉｓ（ｐｉｎａｃｏｌａｔｏ）ｄｉｂｏｒｏｎ）（５３６．８ｍｍｏｌ、１３６．３ｇ），酢酸カリウム（９７６ｍｍｏｌ、９５．８ｇ）、１，４－ジオキサン（１，４－ｄｉｏｘａｎｅ）（９７６ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、ビス（ジベンジリデンアセトン）パラジウム（０）（Ｂｉｓ（ｄｉｂｅｎｚｙｌｉｄｅｎｅａｃｅｔｏｎｅ）ｐａｌｌａｄｉｕｍ（０））（２４．４ｍｍｏｌ、１４．０ｇ）、トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート（Ｔｒｉｃｙｃｌｏｈｅｘｙｌｐｈｏｓｐｈｏｎｉｕｍ Ｔｅｔｒａｆｌｕｏｒｏｂｏｒａｔｅ）（１９．５ｍｍｏｌ、７．

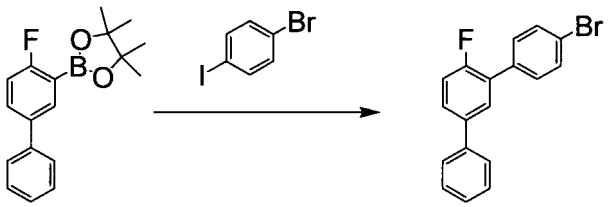
２ｇ）を加えて８０℃で８時間　加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（１Ｌ）で希釈し、セライトを用い濾過して、分液ロートで２回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。これをヘキサン（３００ｍｌ）に分散させて超音波処理を３０分行い、濾過、真空乾燥（５０℃、６時間）して化合物３－２を得た。化合物３－２の収量は、１１６．４ｇ、収率は、８０％であった。

【０２０８】

下記反応スキーム（１４）により、化合物３－３を合成した。

【０２０９】

【化４３】



（14）

化合物3-3

【０２１０】

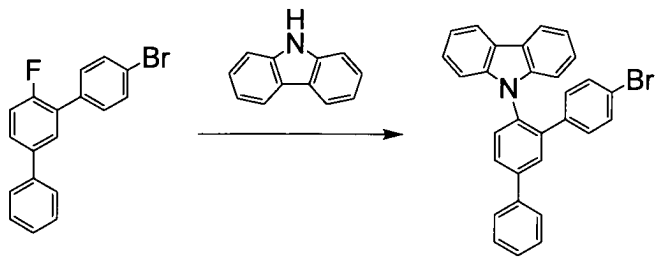
具体的には、三口フラスコに化合物３－２（３８８ｍｍｏｌ、１１５．７ｇ）、1-ブロモ-4-ヨードベンゼン（４２６．８ｍｍｏｌ、１２０．７ｇ）、炭酸カリウム（５８２ｍｍｏｌ、８０．４ｇ）２Ｍ水溶液（２９１ｍｌ）、トルエン（７７６ｍｌ）、エタノール（１９４ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０）（Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_4$）（１９．４ｍｍｏｌ、２２．４ｇ）を加えて７０℃で８時間加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（１Ｌ）で希釈し、セライトを用いて濾過し、分液ロートで２回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。固体が析出し、これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（展開溶媒ヘキサン：トルエン＝７：３）で精製し、さらにメタノールから再結晶し化合物３－３を得た。化合物３－３の収量は、９０．１ｇ、収率は、７１％であった。

【０２１１】

下記反応スキーム（１５）により、化合物３－４を合成した。

【０２１２】

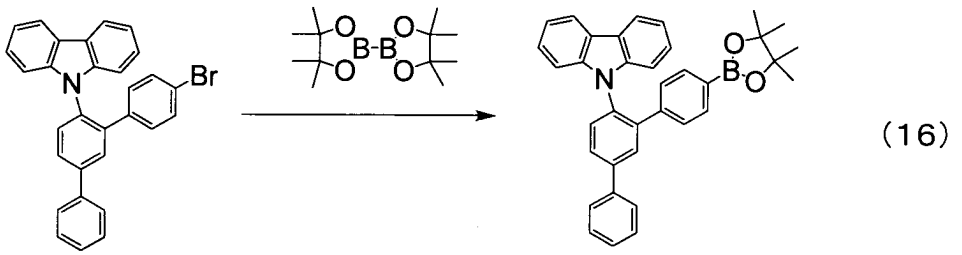
【化４４】



（15）

化合物3-4

【０２１３】
具体的には、三口フラスコにカルバゾール（ｃａｒｂａｚｏｌｅ）（４０９．５ｍｍｏｌ、６８．５ｇ）、化合物３－３（２７３ｍｍｏｌ、８９．３ｇ）、ジメチルホルムアミド（Ｄｉｍｅｔｈｙｌｆｏｒｍａｍｉｄｅ）（１３７ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、水素化ナトリウム（６２％パラフィン分散）（３２７．６ｍｍｏｌ、１２．７ｇ）を水素ガスの発生量に注意しながら５回以上に分けて段階的に加えた後、水素ガスの発生量に注意しながらゆっくりと加熱して、１５０℃で２０時間加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（１Ｌ）で希釈し、窒素雰囲気下において少量の水で失活させた。セライトを用いて濾過し、分液ロートで３回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。これをエタノール：メタノール＝１：１の混合溶媒から再結晶し化合物３－４を得た。化合物３－４の収量は１１０．１ｇ、収率は８５％であった。
【０２１４】
下記反応スキーム（１６）により、化合物３－５を合成した。
【０２１５】
【化４５】

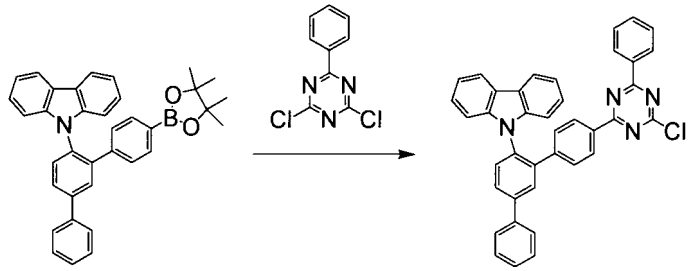


（16）

化合物3-5

【０２１６】
具体的には、三口フラスコに化合物３－４（２３０ｍｍｏｌ、１０９．１ｇ）、ビス（ピナコラト）ジボロン（Ｂｉｓ（ｐｉｎａｃｏｌａｔｏ）ｄｉｂｏｒｏｎ）（２５３ｍｍｏｌ、６４．２ｇ），酢酸カリウム（４６０ｍｍｏｌ、４５．１ｇ）、１，４－ジオキサン（１，４－ｄｉｏｘａｎｅ）（４６０ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、ビス（ジベンジリデンアセトン）パラジウム（０）（Ｂｉｓ（ｄｉｂｅｎｚｙｌｉｄｅｎｅａｃｅｔｏｎｅ）ｐａｌｌａｄｉｕｍ（０））（１１．５ｍｍｏｌ、６．６１ｇ）、トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート（Ｔｒｉｃｙｃｌｏｈｅｘｙｌｐｈｏｓｐｈｏｎｉｕｍ　Ｔｅｔｒａｆｌｕｏｒｏｂｏｒａｔｅ）（９．２ｍｍｏｌ、９．６ｇ）を加えて８０℃で８時間　加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（１Ｌ）で希釈し、セライトを用い濾過して、分液ロートで２回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。これをヘキサン（３００ｍｌ）に分散させて超音波処理を３０分行い、濾過、真空乾燥（５０℃、６時間）して化合物３－５を得た。化合物３－５の収量は、１００．７ｇ、収率は、８４％であった。
【０２１７】
下記反応スキーム（１７）により、化合物３－６を合成した。
【０２１８】

【化４６】



（17）

化合物3-6

【０２１９】

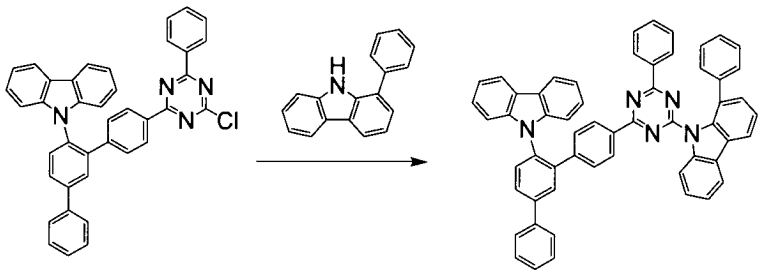
具体的には、三口フラスコに化合物３－５（１９０ｍｍｏｌ、９９．１ｇ）、２，４－ジクロロ－６－フェニル－1,3,5－トリアジン（３８０ｍｍｏｌ、８５．９ｇ）、炭酸カリウム（３８０ｍｍｏｌ、５２．５ｇ）２Ｍ水溶液（１９０ｍｌ）、テトラヒドロフラン（９５０ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、７０℃で３０分間加熱撹拌して試料を溶解させ、室温まで冷却した。そこへ炭酸カリウム（３８０ｍｍｏｌ、５２．５ｇ）２Ｍ水溶液（１９０ｍｌ）、トリ(o-トリル)ホスフィン（１５．２ｍｍｏｌ、４．６ｇ）、酢酸パラジウム（９．５ｍｍｏｌ、２．１ｇ）を加えて５０℃で２時間加熱撹拌した。室温まで冷却後、トルエン（1.５Ｌ）で希釈し、セライトを用いて濾過し、分液ロートで２回水洗した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。これを酢酸エチル：ヘキサン＝３：７で２回再結晶し化合物３－６を得た。化合物３－６の収量は、７２．３ｇ、収率は、６５％であった。

【０２２０】

下記反応スキーム（１８）により、化合物３を合成した。

【０２２１】

【化４７】



（18）

化合物3

【０２２２】

具体的には、三口フラスコに化合物３－６（１５ｍｍｏｌ、８．７８ｇ）、１－フェニルカルバゾール（２２．５ｍｍｏｌ、５．４７ｇ）、ジメチルホルムアミド（Ｄｉｍｅｔｈｙｌｆｏｒｍａｍｉｄｅ）（３０ｍｌ）を入れ、反応系内を窒素置換し、水素化ナトリウム（６２％パラフィン分散）（２２．５ｍｍｏｌ、０．８７ｇ）を水素ガスの発生量に

注意しながら段階的に加えた後、水素ガスの発生量に注意しながらゆっくりと加熱して、１２０℃で８時間加熱撹拌した。室温まで冷却後、窒素雰囲気下においてメタノール（２００ｍｌ）で希釈し、失活させた。析出した固体を１０分間超音波処理して、濾過した。真空乾燥（５０℃、６時間）した後、トルエン（２００ｍｌ）に加熱して溶解させ、シリカゲルパッドを通して濾過し、濃縮した。これを酢酸エチルから２回再結晶し化合物３を得た。化合物３の収量は８．３２ｇ、収率は７０％であった。

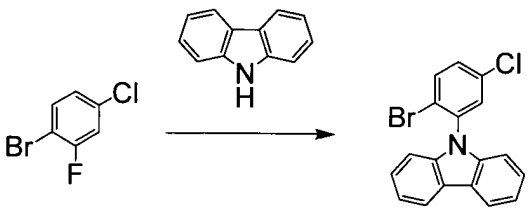
【０２２３】

［合成例３］

下記反応スキーム（１９）により、化合物５－１を合成した。

【０２２４】

【化４８】



（19）

化合物5-1

【０２２５】

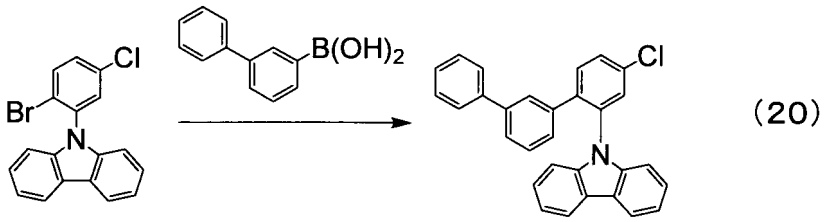
具体的には、試薬を上記反応スキーム（１２）に示す試薬に変更した以外は、上記反応スキーム（８）（化合物１－３の合成）と同様の方法で、化合物５－１を合成した。化合物５－１の収量は、２１４．０ｇ、収率は、７５％であった。

【０２２６】

次いで、下記反応スキーム（２０）により、化合物５－２を合成した。

【０２２７】

【化４９】



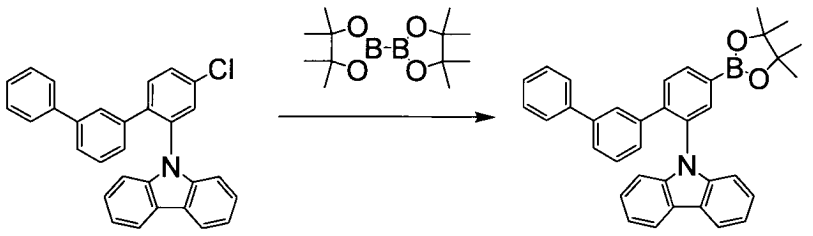
（20）

化合物5-2

【０２２８】

具体的には、フェニルボロン酸（Ｐｈｅｎｙｌｂｏｒｏｎｉｃ ａｃｉｄ）を３－ビフェニルボロン酸（３－Ｂｉｐｈｅｎｙｌｂｏｒｏｎｉｃ ａｃｉｄ）（６６０ｍｍｏｌ、１３０．７ｇ）に変更した以外は、上記反応スキーム（９）（化合物１－４の合成）と同様の方法で、化合物５－２を合成した。化合物５－２の収量は、２２１．９ｇ、収率は、８６％であった。

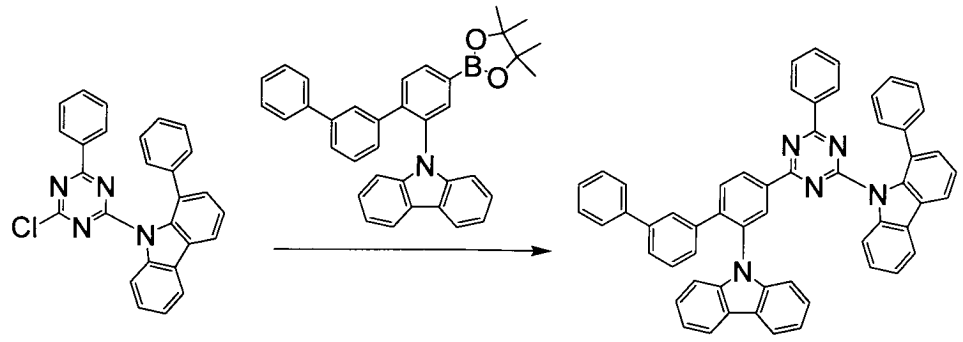
【０２２９】
次いで、下記反応スキーム（２１）により、化合物５－３を合成した。
【０２３０】
【化５０】



（21）

化合物5-3

【０２３１】
具体的には、化合物１－４を化合物５－２に変更した以外は、上記反応スキーム（１０）（化合物１－５の合成）と同様の方法で、化合物５－３を合成した。化合物５－３の収量は、１２６．７ｇ、収率は、８１％であった。
【０２３２】
次いで、下記反応スキーム（２２）により、化合物５を合成した。
【０２３３】
【化５１】

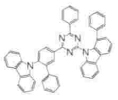
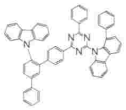
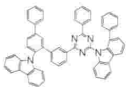
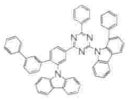
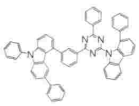
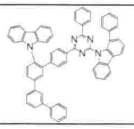
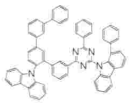
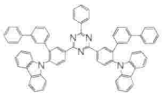
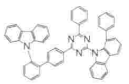
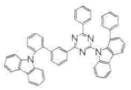
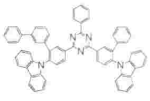


（22）

化合物5

【０２３４】
具体的には、化合物１－５を化合物５－３に変更した以外は、上記反応スキーム（１１）（化合物１の合成）と同様の方法で、化合物５を合成した。化合物５の収量は、６．５７ｇ、収率は、８３％であった。
【０２３５】
前述で得られた化合物1、３、５以外の化合物も同様の方法、または、当業者に公知の方法を組み合わせることで表５に示す化合物を合成した。
【０２３６】

【表５】

化合物番号	分子構造
1	
3	
4	
5	
6	
8	
9	
130	
306	
307	
341	

【０２３７】
＜実施例および比較例＞
［実施例１］
まず、第１電極（陽極）として、ストライプ（ｓｔｒｉｐｅ）状の酸化インジウムスズ（ＩＴＯ）が膜厚１５０ｎｍにて成膜されたＩＴＯ付きガラス基板を用意する。このガラス基板上に、ポリ（３，４－エチレンジオキシチオフェン）／ポリ（４－スチレンスルホネート）（ｐｏｌｙ（３，４－ｅｔｈｙｌｅｎｅ　ｄｉｏｘｙｔｈｉｏｐｈｅｎｅ）／ｐｏｌｙ（４－ｓｔｙｒｅｎｅ　ｓｕｌｆｏｎａｔｅ）：ＰＥＤＯＴ／ＰＳＳ）（Ｓｉｇｍａ－Ａｌｄｒｉｃｈ製）を、乾燥膜厚が３０ｎｍになるようにスピンコート法にて塗布し

、正孔注入層を形成した。

【０２３８】

次に、市販のＴＦＢをキシレン（ｘｙｌｅｎｅ）に１質量％にて溶解し、正孔輸送層塗布液を調製した。正孔注入層上に、正孔輸送層塗布液を乾燥膜厚が３０ｎｍになるようにスピンコート法にて塗布し、２３０℃にて１時間加熱して、正孔輸送層を形成した。

【０２３９】

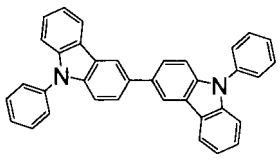
次いで、正孔輸送性ホスト材料として下記に分子構造を示す化合物Ｈ－１、電子輸送性ホスト材料として上記合成例１で合成した化合物１と、発光ドーパント材料として、下記に分子構造を示すトリス（２－（３－ｐ－キシイル）フェニル）ピリジン イリジウム（以下、ＴＥＧという）とを用い、トルエン溶液を調整した。これをスピンコート法で膜厚５０ｎｍになるように正孔輸送層上に塗布し、１２０℃で１時間加熱して、発光層を形成した。なお、発光層における正孔輸送性ホスト材料としてのＨ－１、電子輸送性ホスト材料としての化合物１、発光ドーパント材料としてＴＥＧの含有比率は、発光層の総質量に対して、それぞれ２５：７０：５質量％とした。

【０２４０】

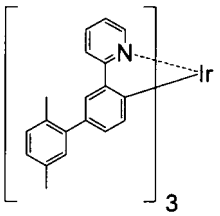
次に、発光層上に、下記に分子構造を示す（８－キノリノラト）リチウム（Ｌｉｑ）およびＫＬＥＴ－０３（ケミプロ化成製）を真空蒸着装置にて共蒸着し、膜厚３０ｎｍの電子輸送層を形成した。また、電子輸送層上に、フッ化リチウム（ＬｉＦ）を真空蒸着装置にて蒸着し、膜厚１ｎｍの電子注入層を形成した。さらに、電子注入層上に、アルミニウム（Ａｌ）を真空蒸着装置にて蒸着し、膜厚１００ｎｍの第２電極（陰極）を形成した。その後、水分濃度１ｐｐｍ以下、酸素濃度１ｐｐｍ以下の窒素雰囲気グローブボックス中で、乾燥剤付きのガラス製の封止管と紫外線硬化型樹脂を用いて封止して評価用有機ＥＬ素子サンプルとして用いた。このような方法で、有機ＥＬ素子を製造した。結果を表６に示す。

【０２４１】

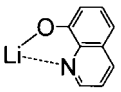
【化５２】



H-1



TEG



Liq

【０２４２】

［実施例２］

電子輸送性ホスト材料として化合物１に代えて化合物３を用いた以外は、実施例１と同様に有機ＥＬ素子を製造した。結果を表６に示す。

【０２４３】

［実施例３］

電子輸送性ホスト材料として化合物１に代えて化合物４を用いた以外は、実施例１と同様に有機ＥＬ素子を製造した。結果を表６に示す。

【０２４４】

［実施例４］

電子輸送性ホスト材料として化合物１に代えて化合物５を用いた以外は、実施例１と同

様に有機ＥＬ素子を製造した。結果を表６に示す。

【０２４５】

［実施例５］

電子輸送性ホスト材料として化合物１に代えて化合物６を用いた以外は、実施例１と同様に有機ＥＬ素子を製造した。結果を表６に示す。

【０２４６】

［実施例６］

電子輸送性ホスト材料として化合物１に代えて化合物８を用いた以外は、実施例１と同様に有機ＥＬ素子を製造した。結果を表６に示す。

【０２４７】

［実施例７］

電子輸送性ホスト材料として化合物１に代えて化合物９を用いた以外は、実施例１と同様に有機ＥＬ素子を製造した。結果を表６に示す。

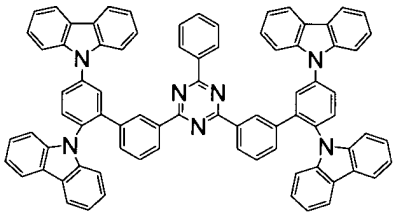
【０２４８】

［比較例１］

電子輸送性ホスト材料として化合物１に代えて下記に分子構造を示す比較例化合物１を用いた以外は、実施例１と同様に有機ＥＬ素子を製造した。結果を表６に示す。

【０２４９】

【化５３】



比較例化合物1

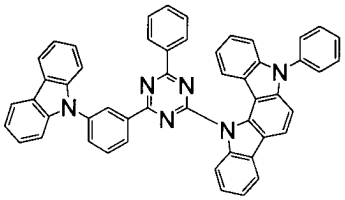
【０２５０】

［比較例２］

電子輸送性ホスト材料として化合物１に代えて下記に分子構造を示す比較例化合物２を用いた以外は、実施例１と同様に、有機ＥＬ素子を製造した。結果を表６に示す。

【０２５１】

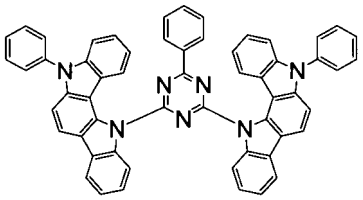
【化５４】



比較例化合物2

【０２５２】

［比較例３］
電子輸送性ホスト材料として化合物１に代えて下記に分子構造を示す比較例化合物３を用いた以外は、実施例１と同様に、有機ＥＬ素子を製造した。結果を表６に示す。
【０２５３】
【化５５】



比較例化合物3

【０２５４】
【表６】

	電子輸送性ホスト材料	電流効率	発光寿命
実施例1	化合物1	131	190
実施例2	化合物3	148	205
実施例3	化合物4	144	245
実施例4	化合物5	137	195
実施例5	化合物6	122	140
実施例6	化合物8	140	200
実施例7	化合物9	139	185
比較例1	比較例化合物1	100	100
比較例2	比較例化合物2	94	115
比較例3	比較例化合物3	69	90

【０２５５】
表１より、本実施形態の化合物は、比較例化合物に対して、ＬＵＭＯ領域に対するＡ１平面およびＡ２平面の、最安定構造における二面角DA_0および室温の熱エネルギーで到達しうる二面角最小値DA_{rt}が大きい化合物であることが分かった。したがって、本実施形態の化合物は、ＬＵＭＯが分布するトリアジン環平面に対して、周囲に存在する同種分子または異種分子の相互作用を立体的に抑制できることを示している。そのため、塗布法により有機エレクトロルミネッセンス素子を作製した場合でも、凝集による膜質低下を

抑制することが期待できる。

【０２５６】

表２より、本実施形態の化合物は、比較例化合物に対してＨＯＭＯ部分の分子量比率が小さいものとなった。すなわち、本実施形態の化合物は、ＨＯＭＯ分子量比率が低いことで正孔輸送性が抑制され、ＬＵＭＯ領域に由来する電子輸送性が強調されることを示している。したがって、有機ＥＬ素子の発光層、電子輸送層、電子注入層、正孔阻止層等に利用することが期待できる。

【０２５７】

表３より、本発明の特徴である前述の二面角の条件、もしくは飽和型窒素原子が３個以下である条件を満足しない比較例化合物１、４、５、６は溶解度が低く、前述の条件を全て満足する本実施形態の化合物は溶解度が高いことが分かる。また、表２、表３から、トリアジン環に結合する３つの置換基がそれぞれ互いに異なる構造である化合物は、トリアジン環に結合する置換基の２つ以上が同一構造である化合物よりも溶解度が高いことが分かる。したがって、トリアジン環に結合する３つの置換基がそれぞれ互いに異なる構造である化合物は、本実施形態の中でも特に塗布法による有機ＥＬ素子の作製に好適であることがわかる。

【０２５８】

さらに、表４より、Ａ１が式Ａ１－１もしくは式Ａ１－２に該当する化合物において、Ｙ３がフェニル基である化合物の方が、X_{c90}が大きくなり、光化学的安定性が高いことを示した。したがって、本実施形態の内、一般式（Ａ１－１）、（Ａ１－２）、（Ａ１－６）、（Ａ２－１）、（Ａ２－２）、（Ａ２－６）において、Ｙ２またはＹ３がＣ（Ｒ）であり、且つ、該Ｒが芳香族炭化水素環基、または芳香族複素環基である化合物は、有機エレクトロルミネッセンス素子（特に発光層）に適用した場合に特に長寿命化が期待できる。

【０２５９】

表６より、本実施形態に係る化合物をホスト材料として用いた実施例１～７は、比較例１～３に対して、ほぼ同等以上の電流効率を示し、かつ発光寿命が大幅に向上していることが分かった。また、実施例１～７は、１２５℃で加熱した後も膜が均一で欠陥のない状態であり、良好な成膜性を示した。したがって、本発明に係る化合物が、塗布法のための有機ＥＬ素子用材料として有用であることが分かった。

【０２６０】

また、実施例１～７で用いた化合物は、塗布法により有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層を形成できるため、大量生産の観点から好ましい。

【０２６１】

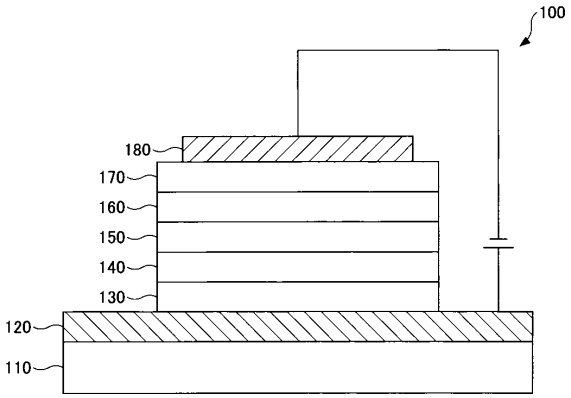
以上、本発明について実施形態および実施例を挙げて説明したが、本発明は特定の実施形態、実施例に限定されるものではなく、特許請求の範囲に記載された発明の範囲内において、種々の変形、変更が可能である。

【符号の説明】

【０２６２】

１００　有機エレクトロルミネッセンス素子（有機ＥＬ素子）
１１０　基板
１２０　第１電極
１３０　正孔注入層
１４０　正孔輸送層
１５０　発光層
１６０　電子輸送層
１７０　電子注入層
１８０　第２電極

【図面】
【図１】



フロントページの続き

神奈川県横浜市鶴見区菅沢町２－７　株式会社サムスン日本研究所内
(72)発明者　稲山　智
神奈川県横浜市鶴見区菅沢町２－７　株式会社サムスン日本研究所内
(72)発明者　高麗　敬介
神奈川県横浜市鶴見区菅沢町２－７　株式会社サムスン日本研究所内
(72)発明者　櫻井　理恵
神奈川県横浜市鶴見区菅沢町２－７　株式会社サムスン日本研究所内
(72)発明者　入佐　史郎
神奈川県横浜市鶴見区菅沢町２－７　株式会社サムスン日本研究所内
(72)発明者　伊藤　光則
神奈川県横浜市鶴見区菅沢町２－７　株式会社サムスン日本研究所内

合議体
審判長　井上　典之
審判官　瀬良　聡機
審判官　野田　定文

(56)参考文献　国際公開第２０１５／１３７４７２（WO，Ａ１）
特表２０１７－５３０９４５（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２０１７／０１６６３０（WO，Ａ１）
特表２０１９－５２４７４１（ＪＰ，Ａ）
米国特許出願公開第２０１５／２２８９０８（ＵＳ，Ａ１）
韓国公開特許第１０－２０１７－００５７７９７（ＫＲ，Ａ）

(58)調査した分野　(Int.Cl.，ＤＢ名)
C07D,C09K,H05B
CAPLUS/REGISTRY STN