

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2016年8月18日(18.08.2016)



(10) 国際公開番号
WO 2016/129691 A1

- (51) 国際特許分類:
C07D 403/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2016/054186
- (22) 国際出願日: 2016年2月12日(12.02.2016)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2015-027021 2015年2月13日(13.02.2015) JP
- (71) 出願人: 出光興産株式会社 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区丸の内三丁目1番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 八巻 太郎 (YAMAKI Taro); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 池田 潔 (IKEDA Kiyoshi); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 柏村 孝 (KASHIWAMURA Takashi); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 川上 宏典 (KAWAKAMI Hironori); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).
- (74) 代理人: 特許業務法人樹之下知的財産事務所 (KINOSHITA & ASSOCIATES); 〒1670051 東京都

杉並区荻窪五丁目26番13号 荻窪TMビル
3階 Tokyo (JP).

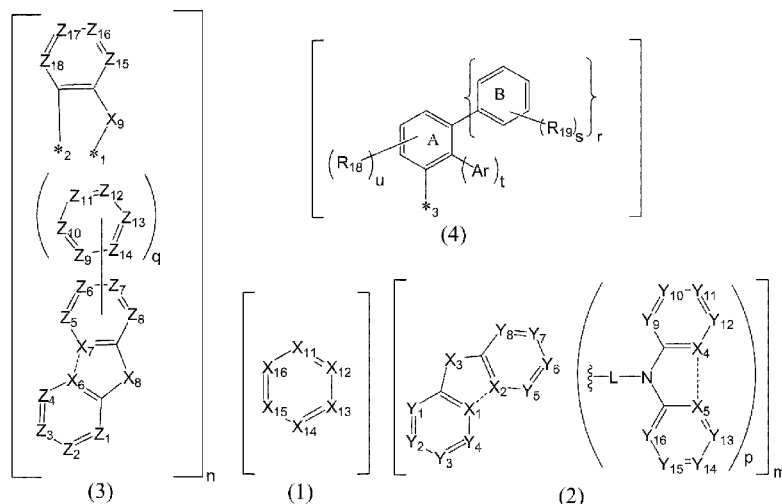
- (81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

- 国際調査報告 (条約第21条(3))

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

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



(57) Abstract: A compound having a first structure represented by the following general formula (1), a second structure represented by the following general formula (2), a third structure represented by the following general formula (3), and a fourth structure represented by the following general formula (4), the first structure, the second structure, the third structure, and the fourth structure each being independent from each other in a molecule.

(57) 要約: 下記一般式(1)で表される第一の構造と、下記一般式(2)で表される第二の構造と、下記一般式(3)で表される第三の構造と、下記一般式(4)で表される第四の構造と、を有し、前記第一の構造、前記第二の構造、前記第三の構造および前記第四の構造は、それぞれ、分子中に互いに独立して含まれる化合物。

WO 2016/129691 A1

明 細 書

発明の名称：

化合物、組成物、有機エレクトロルミネッセンス素子、および電子機器

技術分野

[0001] 本発明は、化合物、組成物、有機エレクトロルミネッセンス素子および電子機器に関する。

背景技術

[0002] 有機物質を使用した有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「有機EL素子」と略記する場合がある。）は、固体発光型の安価な大面積フルカラー表示素子としての用途が有望視され、多くの開発が行われている。一般に有機EL素子は、発光層および該発光層を挟んだ一对の対向電極から構成されている。両電極間に電界が印加されると、陰極側から電子が注入され、陽極側から正孔が注入される。さらに、この電子が発光層において正孔と再結合し、励起状態を生成し、励起状態が基底状態に戻る際にエネルギーを光として放出する。

近年の有機EL素子においては、素子性能向上のため、有機層の形成に用いる化合物が種々検討されている（特許文献1～4）。

先行技術文献

特許文献

- [0003] 特許文献1：国際公開第2011/032686号
特許文献2：国際公開第2012/087007号
特許文献3：国際公開第2013/012298号
特許文献4：国際公開第2012/086170号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

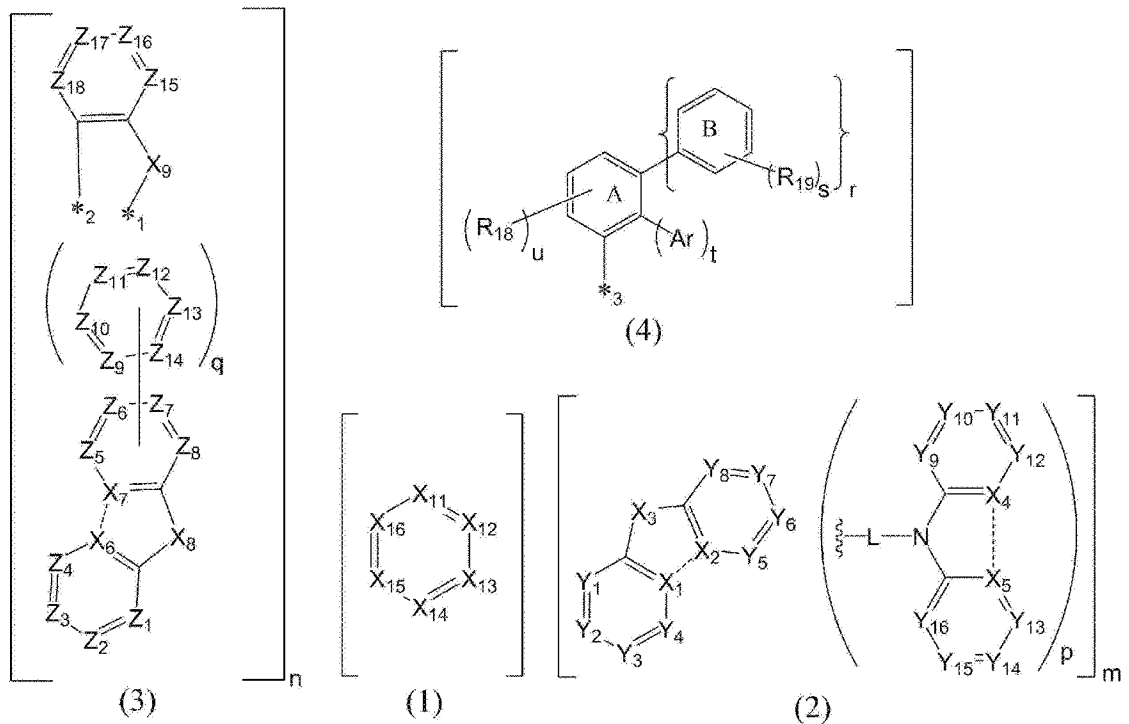
[0004] しかしながら、有機層の形成に用いる化合物の可溶性は、いまだ十分ではなかった。

[0005] 本発明は、可溶性を向上させることのできる化合物を提供することを目的とする。また、本発明は、当該化合物を含む組成物を提供すること、当該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、および当該有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器を提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0006] 本発明の一態様に係る化合物は、下記一般式（１）で表される第一の構造と、下記一般式（２）で表される第二の構造と、下記一般式（３）で表される第三の構造と、下記一般式（４）で表される第四の構造と、を有し、前記第一の構造、前記第二の構造、前記第三の構造および前記第四の構造は、それぞれ、分子中に互いに独立して含まれる。

[0007] [化1]



[0008] （前記一般式（１）において、
 X₁₁～X₁₆は、それぞれ独立に、
 R₁と結合する炭素原子、
 窒素原子、または

分子中の前記第二の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、

$X_{11} \sim X_{16}$ の内、少なくともいずれかが窒素原子であり、

R_1 は、水素原子、または置換基であり、

複数の R_1 は、互いに同一でも異なってもよく、

複数の R_1 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよい。）

[0009] (前記一般式(2)において、

X_1 は、 R_2 と結合する炭素原子、または X_2 と結合する炭素原子であり、

X_2 は、 R_3 と結合する炭素原子、または X_1 と結合する炭素原子であり、

X_3 は、酸素原子、硫黄原子、窒素原子、または R_a および R_b と結合する炭素原子であり、

R_a および R_b は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、

X_3 における窒素原子は、

R_4 と結合するか、

Lと結合するか、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合し、

X_4 は、 R_5 と結合する炭素原子、または X_5 と結合する炭素原子であり、

X_5 は、 R_6 と結合する炭素原子、または X_4 と結合する炭素原子であり、

ただし、 X_1 および X_2 の組み合わせ、並びに X_4 および X_5 の組み合わせの少なくともいずれかは、互いに結合する炭素原子の組み合わせであり、

Lは、

単結合、または

置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基であり、

Lは、 $Y_1 \sim Y_8$ のいずれかと結合するか、 X_3 と結合するか、 R_5 もしくは R_6 と結合するか、前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合するか、または置換基と結合し、

置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基としてのLは、 Y_9 または Y_{16} と結合して環構造を形成していてもよく、

$Y_1 \sim Y_8$ は、それぞれ独立に、

R_7 と結合する炭素原子、

Lと結合する炭素原子、

$Y_9 \sim Y_{16}$ のいずれかと結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、

$Y_9 \sim Y_{16}$ は、それぞれ独立に、

R_8 と結合する炭素原子、

$Y_1 \sim Y_8$ のいずれかと結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、

Y_9 または Y_{16} は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基としてのLと結合して環構造を形成していてもよく、

$R_2 \sim R_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、

複数の R_7 は、互いに同一でも異なってもよく、

複数の R_8 は、互いに同一でも異なってもよく、

mは、分子中の前記第二の構造の数であって、1以上の整数であり、

pは、1以上3以下の整数である。)

[0010] (前記一般式(3)において、

X_6 は、 R_9 と結合する炭素原子、または X_7 と結合する炭素原子であり、

X_7 は、 R_{10} と結合する炭素原子、または X_6 と結合する炭素原子であり、

R_9 および R_{10} は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、

X_8 は、

置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基に結合する窒素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する窒素原子であり、

$Z_1 \sim Z_4$ は、それぞれ独立に、
 R_{11} と結合する炭素原子、
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または
*1もしくは*2で表される部位と結合する炭素原子であり、
 $Z_5 \sim Z_8$ は、それぞれ独立に、
 R_{12} と結合する炭素原子、
 $Z_9 \sim Z_{14}$ のいずれかと結合する炭素原子、
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または
*1もしくは*2で表される部位と結合する炭素原子であり、
 R_{11} および R_{12} は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、
複数の R_{11} は、互いに同一でも異なってもよく、
複数の R_{11} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
複数の R_{12} は、互いに同一でも異なってもよく、
複数の R_{12} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
 $Z_9 \sim Z_{14}$ は、それぞれ独立に、
 R_{13} と結合する炭素原子、
 $Z_5 \sim Z_8$ のいずれかと結合する炭素原子、
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または
*1もしくは*2で表される部位と結合する炭素原子であり、
 R_{13} は、水素原子、または置換基であり、
複数の R_{13} は、互いに同一でも異なってもよく、
複数の R_{13} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
 q は、0または1以上4以下の整数であり、
 X_9 は、酸素原子、硫黄原子、窒素原子、または R_{14} および R_{15} と結合する炭素原子であり、

R_{14} および R_{15} は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、
 X_9 における窒素原子は、
 R_{16} と結合するか、または
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合し、
 R_{16} は、水素原子、または置換基であり、
 $Z_{15} \sim Z_{18}$ は、それぞれ独立に、
 R_{17} と結合する炭素原子、または
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、
 R_{17} は、水素原子、または置換基であり、
複数の R_{17} は、互いに同一でも異なってもよく、
複数の R_{17} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
*1および*2は、それぞれ独立に、
 $Z_1 \sim Z_{14}$ における炭素原子との結合部位、または
 X_8 における窒素原子に結合する置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基との結合部位であり、
 n は、分子中の前記第三の構造の数であって、1以上の整数である。)

[0011] (前記一般式(4)において、

R_{18} は、水素原子、または置換基であり、
複数の R_{18} は、互いに同一でも異なってもよく、
複数の R_{18} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
 A_r は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基であり、
 R_{19} は、置換基であり、
 s は、1以上5以下の整数であり、
複数の R_{19} は、互いに同一でも異なってもよく、
複数の R_{19} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
 u は、3または4であり、

t は、0 または 1 であり、

r は、0 または 1 であり、

t + r は、1 または 2 であり、

r = 0 のとき、t = 1 および u = 4 であり、環 B に代えて R₁₈ が環 A に結合し、

t = 0 のとき、r = 1 および u = 4 であり、A_r に代えて R₁₈ が環 A に結合し、

* 3 は、前記第一の構造、前記第二の構造および前記第三の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する結合部位である。)

[0012] 本発明の一態様に係る組成物は、前述の本発明の一態様に係る化合物と、溶媒と、を含む。

[0013] 本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子は、陽極と、有機層と、陰極と、を含み、前記有機層は、前述の本発明の一態様に係る化合物を含む。

[0014] 本発明の一態様に係る電子機器は、前述の本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子を備える。

[0015] 本発明の一態様によれば、可溶性を向上させることのできる化合物を提供することができる。また、本発明によれば、当該化合物を含む組成物を提供すること、当該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、および当該有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器を提供することができる。

図面の簡単な説明

[0016] [図1]一実施形態に係る有機EL素子の一例の概略構成を示す図である。

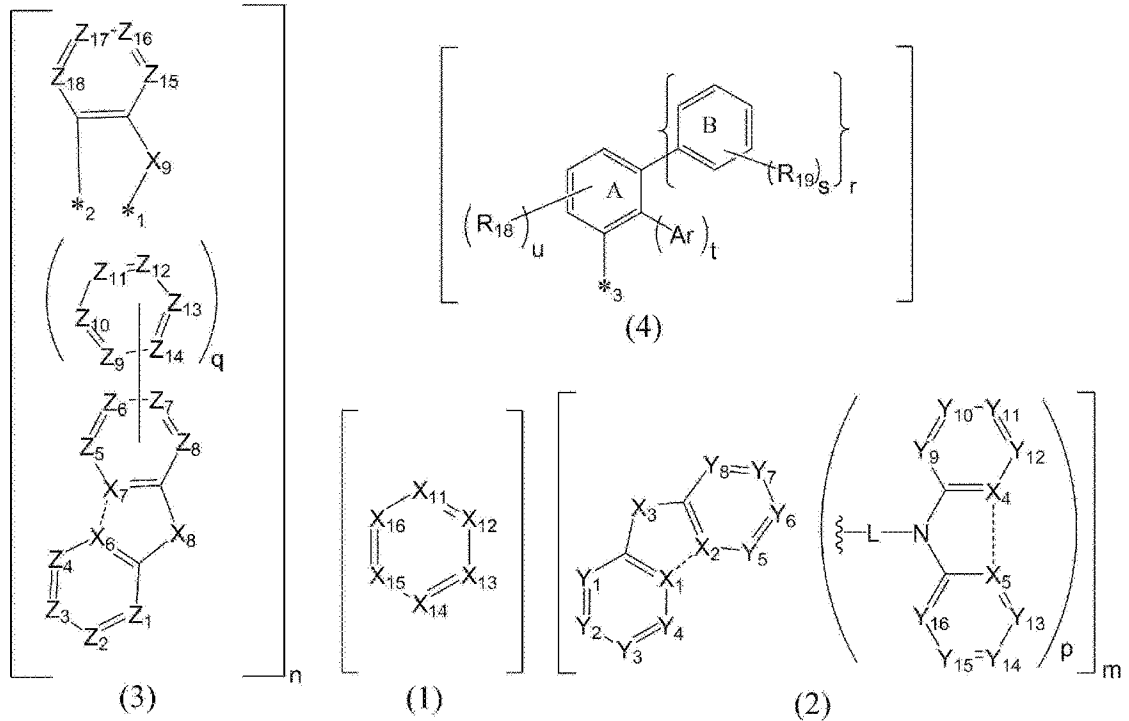
発明を実施するための形態

[0017] [化合物]

本実施形態に係る化合物は、下記一般式(1)で表される第一の構造と、下記一般式(2)で表される第二の構造と、下記一般式(3)で表される第三の構造と、下記一般式(4)で表される第四の構造と、を有し、前記第一

の構造、前記第二の構造、前記第三の構造および前記第四の構造は、それぞれ、分子中に互いに独立して含まれる。

[0018] [化2]



[0019] 前記一般式 (1) において、

X₁₁ ~ X₁₆ は、それぞれ独立に、

R₁ と結合する炭素原子、

窒素原子、または

分子中の前記第二の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、

X₁₁ ~ X₁₆ の内、少なくともいずれかが窒素原子であり、

R₁ は、水素原子、または置換基であり、

複数の R₁ は、互いに同一でも異なっていてもよく、

複数の R₁ 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよい。

[0020] 前記一般式 (2) において、

X₁ は、R₂ と結合する炭素原子、または X₂ と結合する炭素原子であり、

X₂ は、R₃ と結合する炭素原子、または X₁ と結合する炭素原子であり、

X_3 は、酸素原子、硫黄原子、窒素原子、または R_a および R_b と結合する炭素原子であり、

R_a および R_b は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、

X_3 における窒素原子は、

R_4 と結合するか、

Lと結合するか、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合し、

X_4 は、 R_5 と結合する炭素原子、または X_5 と結合する炭素原子であり、

X_5 は、 R_6 と結合する炭素原子、または X_4 と結合する炭素原子であり、

ただし、 X_1 および X_2 の組み合わせ、並びに X_4 および X_5 の組み合わせの少なくともいずれかは、互いに結合する炭素原子の組み合わせであり、

Lは、

単結合、または

置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基であり、

Lは、 $Y_1 \sim Y_8$ のいずれかと結合するか、 X_3 と結合するか、 R_5 もしくは R_6 と結合するか、前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合するか、または置換基と結合し、

置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基としてのLは、 Y_9 または Y_{16} と結合して環構造を形成していてもよく、

$Y_1 \sim Y_8$ は、それぞれ独立に、

R_7 と結合する炭素原子、

Lと結合する炭素原子、

$Y_9 \sim Y_{16}$ のいずれかと結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、

$Y_9 \sim Y_{16}$ は、それぞれ独立に、

R_8 と結合する炭素原子、
 $Y_1 \sim Y_8$ のいずれかと結合する炭素原子、または
分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、
 Y_9 または Y_{16} は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基としてのLと結合して環構造を形成していてもよく、
 $R_2 \sim R_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、
複数の R_7 は、互いに同一でも異なってもよく、
複数の R_8 は、互いに同一でも異なってもよく、
 m は、分子中の前記第二の構造の数であって、1以上の整数であり、
 p は、1以上3以下の整数である。
 m が2以上の整数の場合、複数の第二の構造は、互いに同一でも異なってもよい。また、 m が2以上の整数の場合、複数の第二の構造は、それぞれ独立に、第一の構造、第三の構造、および第四の構造のいずれかと結合する。複数の第二の構造は、それぞれが第一の構造と結合していることが好ましい。

[0021] 前記一般式(3)において、

X_6 は、 R_9 と結合する炭素原子、または X_7 と結合する炭素原子であり、
 X_7 は、 R_{10} と結合する炭素原子、または X_6 と結合する炭素原子であり、
 R_9 および R_{10} は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、
 X_8 は、
置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基に結合する窒素原子、または
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する窒素原子であり、
 $Z_1 \sim Z_4$ は、それぞれ独立に、
 R_{11} と結合する炭素原子、
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または

* 1もしくは* 2で表される部位と結合する炭素原子であり、
 $Z_5 \sim Z_8$ は、それぞれ独立に、
 R_{12} と結合する炭素原子、
 $Z_9 \sim Z_{14}$ のいずれかと結合する炭素原子、
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または

* 1もしくは* 2で表される部位と結合する炭素原子であり、
 R_{11} および R_{12} は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、
複数の R_{11} は、互いに同一でも異なっていてもよく、
複数の R_{11} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
複数の R_{12} は、互いに同一でも異なっていてもよく、
複数の R_{12} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
 $Z_9 \sim Z_{14}$ は、それぞれ独立に、

R_{13} と結合する炭素原子、
 $Z_5 \sim Z_8$ のいずれかと結合する炭素原子、
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または

* 1もしくは* 2で表される部位と結合する炭素原子であり、
 R_{13} は、水素原子、または置換基であり、
複数の R_{13} は、互いに同一でも異なっていてもよく、
複数の R_{13} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
 q は、0または1以上4以下の整数であり、
 X_9 は、酸素原子、硫黄原子、窒素原子、または R_{14} および R_{15} と結合する炭素原子であり、

R_{14} および R_{15} は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、
 X_9 における窒素原子は、

R_{16} と結合するか、または

分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少な

くともいずれかに含まれる原子と結合し、
R₁₆は、水素原子、または置換基であり、
Z₁₅～Z₁₈は、それぞれ独立に、
R₁₇と結合する炭素原子、または
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少な
くともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、
R₁₇は、水素原子、または置換基であり、
複数のR₁₇は、互いに同一でも異なってもよく、
複数のR₁₇同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
*1および*2は、それぞれ独立に、
Z₁～Z₁₄における炭素原子との結合部位、または
X₈における窒素原子に結合する置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基
との結合部位であり、
nは、分子中の前記第三の構造の数であって、1以上の整数である。
nが2以上の整数の場合、複数の第三の構造は、互いに同一でも異なっ
てもよい。また、nが2以上の整数の場合、複数の第三の構造は、それぞ
れ独立に、第一の構造、第二の構造、および第四の構造のいずれかと結合す
る。複数の第三の構造は、それぞれが第一の構造と結合していることが好ま
しい。

[0022] 前記一般式(4)において、

R₁₈は、水素原子、または置換基であり、
複数のR₁₈は、互いに同一でも異なってもよく、
複数のR₁₈同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
A_rは、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基であり、
R₁₉は、置換基であり、
sは、1以上5以下の整数であり、
複数のR₁₉は、互いに同一でも異なってもよく、
複数のR₁₉同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、

uは、3または4であり、

tは、0または1であり、

rは、0または1であり、

t + rは、1または2であり、

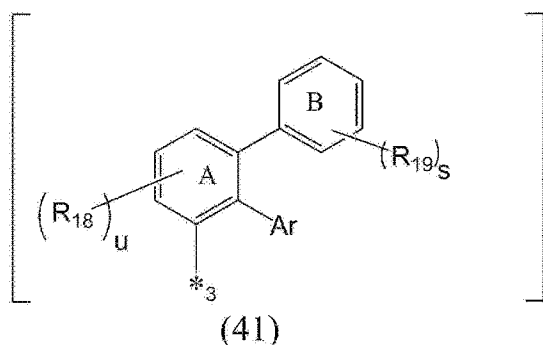
r = 0のとき、t = 1およびu = 4であり、環Bに代えてR₁₈が環Aに結合し、

t = 0のとき、r = 1およびu = 4であり、A_rに代えてR₁₈が環Aに結合し、

*3は、前記第一の構造、前記第二の構造および前記第三の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する結合部位である。

[0023] 本実施形態の化合物において、前記第四の構造は、下記一般式(41)で表されることが好ましい。

[0024] [化3]

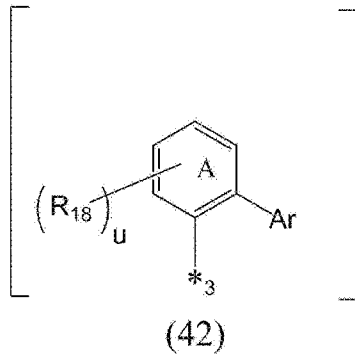


[0025] 前記一般式(41)において、R₁₈、R₁₉、A_r、s、および*3は、前記一般式(4)におけるR₁₈、R₁₉、A_r、s、および*3と、それぞれ同義であり、uは、3である。

[0026] 本実施形態の化合物において、前記第四の構造は、下記一般式(42)で表されることが好ましい。

[0027]

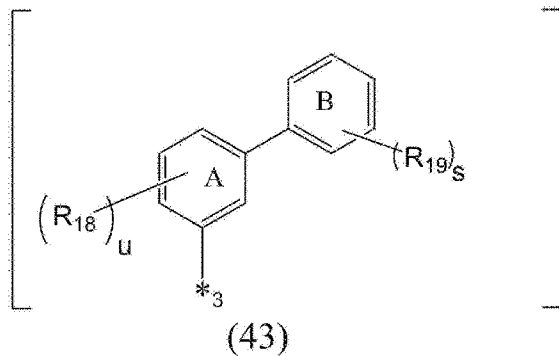
[化4]



[0028] 前記一般式(42)において、 R_{18} 、 Ar 、および $*3$ は、前記一般式(4)における R_{18} 、 Ar 、および $*3$ と、それぞれ同義であり、 u は、4である。

[0029] 本実施形態の化合物において、前記第四の構造は、下記一般式(43)で表されることも好ましい。

[0030] [化5]



[0031] 前記一般式(43)において、 R_{18} 、 R_{19} 、 s 、および $*3$ は、前記一般式(4)における R_{18} 、 R_{19} 、 s 、および $*3$ と、それぞれ同義であり、 u は、4である。

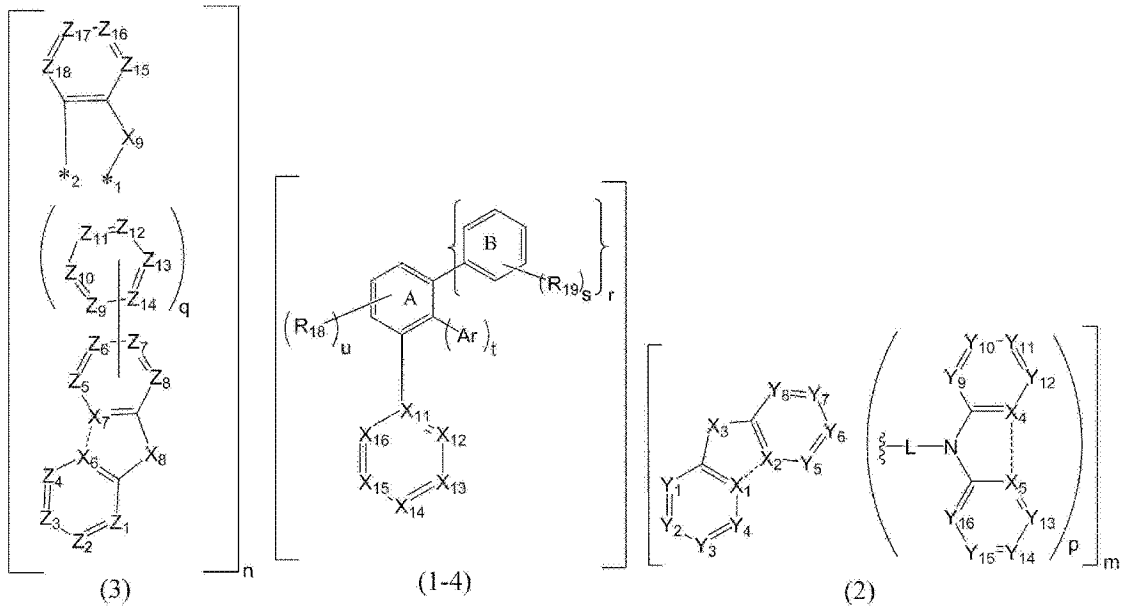
[0032] 本実施形態の化合物において、前記第四の構造は、前記第一の構造と結合することが好ましい。

[0033] 本実施形態の化合物において、前記一般式(4)における $*3$ は、 X_{11} との結合部位であり、

X_{11} が前記第四の構造と結合する炭素原子であることが好ましい。

すなわち、本実施形態の化合物は、前記第一の構造と、前記第四の構造とが結合して形成される下記一般式（1-4）で表される構造を含むことが好ましい。

[0034] [化6]



[0035] 前記一般式（1-4）における $X_{12} \sim X_{16}$ 、 R_{18} 、 R_{19} 、 Ar 、 s 、 u 、 t 、および r は、前記一般式（1）における $X_{12} \sim X_{16}$ 、並びに前記一般式（4）における R_{18} 、 R_{19} 、 Ar 、 s 、 u 、 t 、および r と、それぞれ同義である。 X_{11} は、前記第四の構造と結合する炭素原子である。

[0036] 前記一般式（1-4）において、 $X_{12} \sim X_{16}$ の内、窒素原子が1以上3以下であることが好ましい。

[0037] 前記一般式（1-4）において、 X_{12} および X_{14} は、窒素原子であり、 X_{13} および X_{15} は、前記第二の構造または前記第三の構造と結合する炭素原子であり、

X_{16} は、 R_1 と結合する炭素原子であることも好ましい。

[0038] 前記一般式（1-4）において、 X_{12} 、 X_{14} および X_{16} は、窒素原子であり、

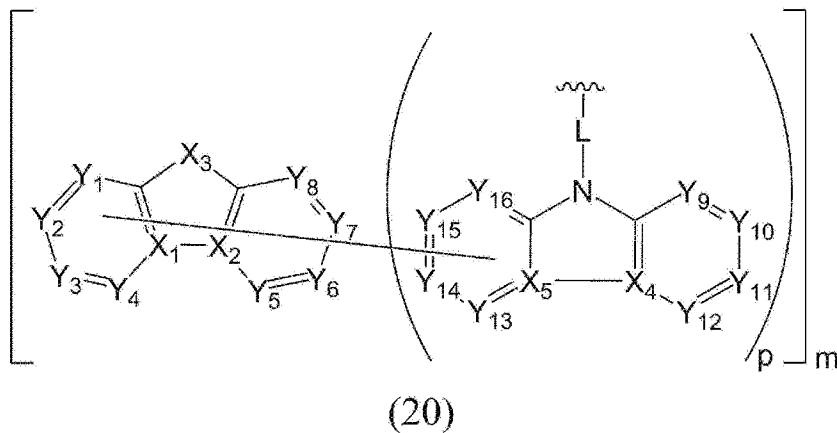
X_{13} および X_{15} は、前記第二の構造または前記第三の構造と結合する炭素原子であることも好ましい。

[0039] 本実施形態の化合物において、前記第二の構造および前記第三の構造の少なくともいずれかが、前記第一の構造の R_1 に結合することが好ましい。

[0040] 本実施形態の化合物において、前記 m と前記 n との合計 ($m+n$) が、2以上4以下の整数であることが好ましい。

[0041] 本実施形態の化合物において、
前記一般式 (2) で表される第二の構造は、下記一般式 (20) で表されることが好ましい。

[0042] [化7]



[0043] 前記一般式 (20) において、 X_3 、 $Y_1 \sim Y_8$ 、 $Y_9 \sim Y_{16}$ 、 L 、 m 、および p は、前記一般式 (2) における X_3 、 $Y_1 \sim Y_8$ 、 $Y_9 \sim Y_{16}$ 、 L 、 m 、および p と、それぞれ同義であり、 X_1 および X_2 は、互いに結合する炭素原子であり、 X_4 および X_5 は、互いに結合する炭素原子である。

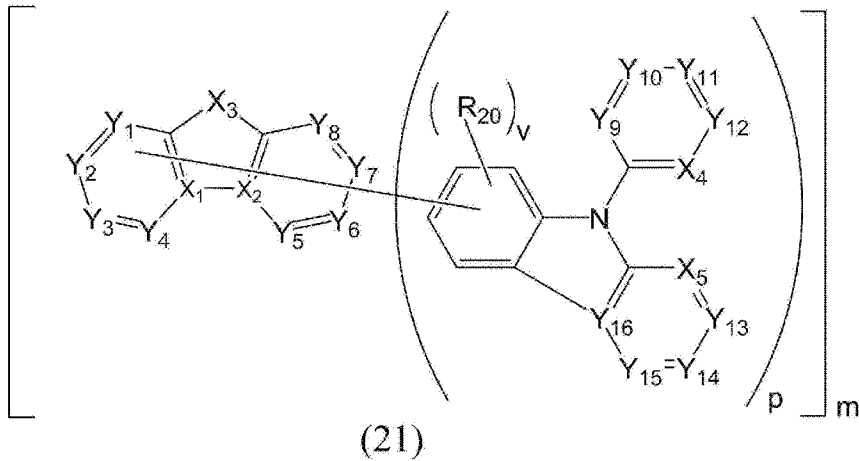
[0044] 前記一般式 (20) において、
 p は、1であることが好ましく、
 $Y_1 \sim Y_8$ のいずれかは、 $Y_{13} \sim Y_{16}$ のいずれかと結合する炭素原子であることが好ましく、
 $Y_{13} \sim Y_{16}$ のいずれかは、 $Y_1 \sim Y_8$ のいずれかと結合する炭素原子であることが好ましい。

[0045] 本実施形態の化合物において、
 L は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6の芳香族炭化水素基であり、

Y_{16} は、Lと結合する炭素原子であり、Lと Y_{16} とが結合して環構造を形成することが好ましい。

すなわち、前記一般式(2)で表される第二の構造は、下記一般式(21)で表されることも好ましい。

[0046] [化8]



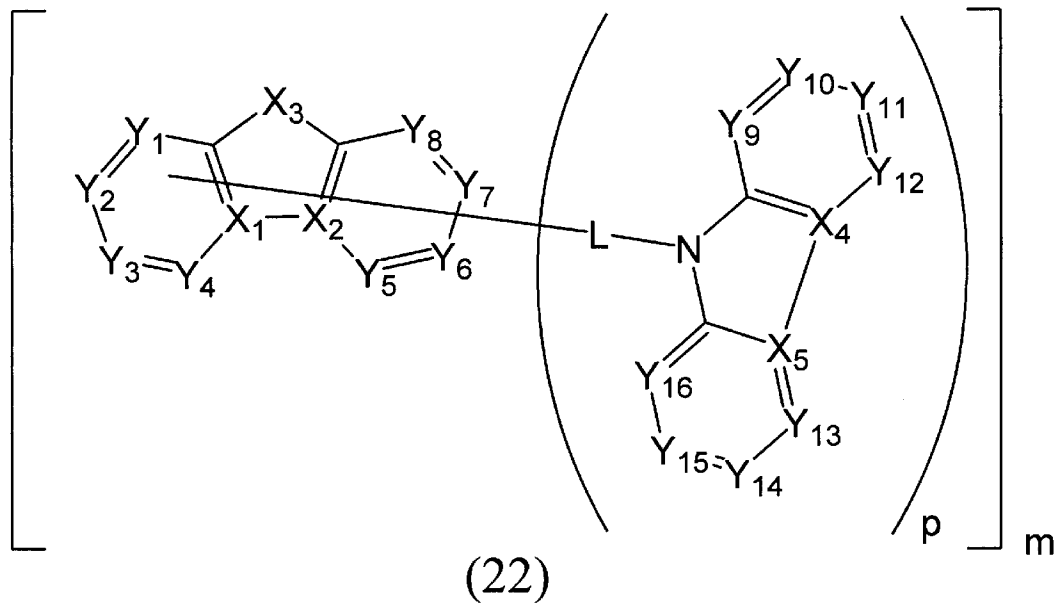
[0047] 前記一般式(21)において、 X_3 、 $Y_1 \sim Y_8$ 、 $Y_9 \sim Y_{16}$ 、 m 、および p は、前記一般式(2)における X_3 、 $Y_1 \sim Y_8$ 、 $Y_9 \sim Y_{16}$ 、 m 、および p と、それぞれ同義であり、ただし、 $Y_1 \sim Y_8$ 、および X_3 のいずれかは、Lである芳香族炭化水素基と結合する炭素原子または窒素原子であり、 X_1 および X_2 は、互いに結合する炭素原子であり、 X_4 は、 R_5 と結合する炭素原子であり、 X_5 は、 R_6 と結合する炭素原子であり、 $R_5 \sim R_6$ は、前記一般式(2)における $R_5 \sim R_6$ と、それぞれ同義であり、 R_{20} は、水素原子、または置換基であり、 v は3である。複数の R_{20} は、同一でも異なってもよい。

[0048] 前記一般式(21)において、
 p は、1以上3以下の整数であることが好ましい。

[0049] 本実施形態の化合物において、前記一般式(2)で表される第二の構造は、下記一般式(22)で表されることも好ましい。

[0050]

[化9]



[0051] 前記一般式(22)において、 X_3 、 $Y_1 \sim Y_{16}$ 、 L 、 m 、および p は、前記一般式(2)における X_3 、 $Y_1 \sim Y_{16}$ 、 L 、 m 、および p と、それぞれ同義であり、ただし、 $Y_1 \sim Y_8$ 、および X_3 のいずれかは、 L と結合する炭素原子または窒素原子であり、 X_1 および X_2 は、互いに結合する炭素原子であり、 X_4 および X_5 は、互いに結合する炭素原子である。

[0052] 前記一般式(22)において、
 p は、2であることが好ましく、
 X_3 は、

R_4 と結合する窒素原子、または
 分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する窒素原子であることが好ましく、

$Y_1 \sim Y_8$ は、それぞれ独立に、

R_7 と結合する炭素原子、

L と結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少

なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であることが好ましく、

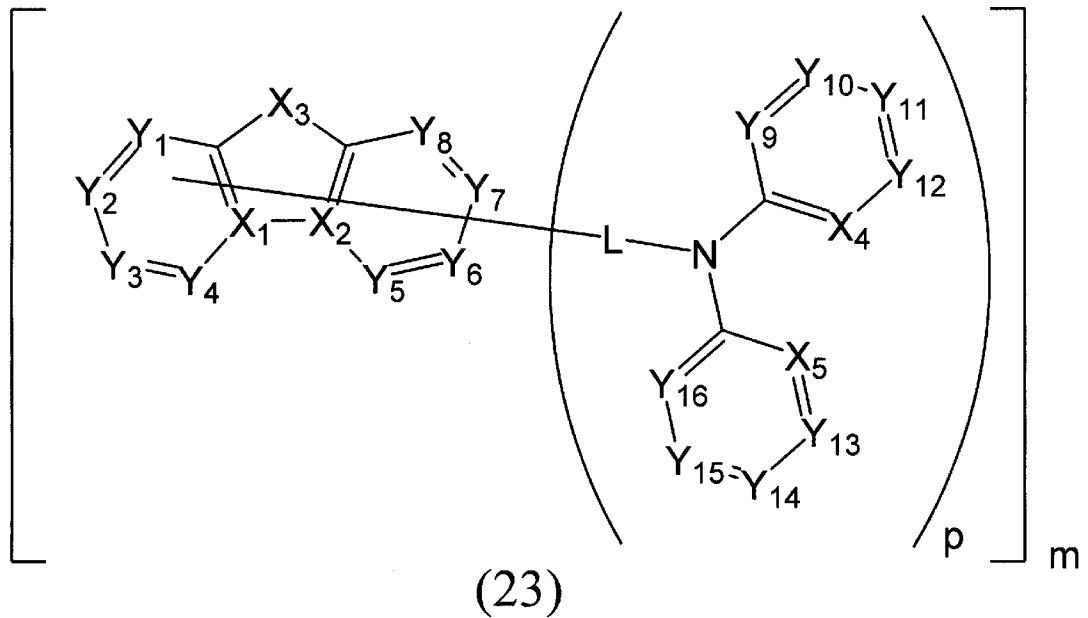
$Y_9 \sim Y_{16}$ は、それぞれ独立に、

R_8 と結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であることが好ましい。

[0053] 本実施形態の化合物において、前記一般式(2)で表される第二の構造は、下記一般式(23)で表されることも好ましい。

[0054] [化10]



[0055] 前記一般式(23)において、 X_3 、 $Y_1 \sim Y_{16}$ 、 L 、 m 、および p は、前記一般式(2)における X_3 、 $Y_1 \sim Y_{16}$ 、 L 、 m 、および p と、それぞれ同義であり、ただし、 $Y_1 \sim Y_8$ 、および X_3 のいずれかは、 L と結合する炭素原子または窒素原子であり、 X_1 および X_2 は、互いに結合する炭素原子であり、 X_4 は、 R_5 と結合する炭素原子であり、 X_5 は、 R_6 と結合する炭素原子である。

[0056] 前記一般式(23)において、

X_3 は、

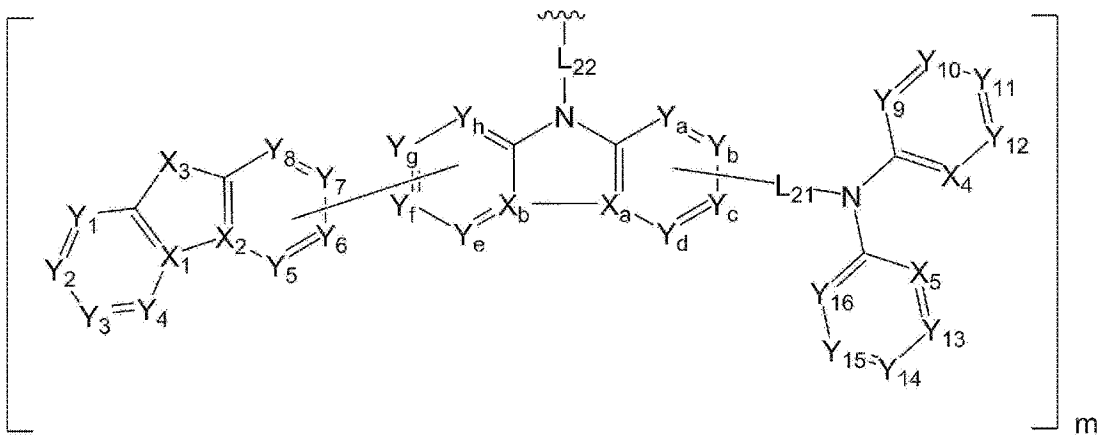
R_4 と結合する窒素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する窒素原子であることが好ましい。

[0057] 本実施形態の化合物において、

前記一般式(2)で表される第二の構造は、下記一般式(24)で表されることも好ましい。

[0058] [化11]



(24)

[0059] 前記一般式(24)において、 X_3 、 $Y_1 \sim Y_{16}$ 、および m は、前記一般式(2)における X_3 、 $Y_1 \sim Y_{16}$ 、および m と、それぞれ同義であり、 $Y_a \sim Y_h$ は前記一般式(2)における $Y_9 \sim Y_{16}$ と、それぞれ同義であり、 L_{21} および L_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における L と同義であり、ただし、 $Y_a \sim Y_d$ のいずれかは、 L_{21} と結合する炭素原子であり、 $Y_e \sim Y_h$ のいずれかは、 $Y_5 \sim Y_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 X_1 および X_2 は、互いに結合する炭素原子であり、 X_4 は、 R_5 と結合する炭素原子であり、 X_5 は、 R_6 と結合する炭素原子であり、 X_a は、 X_b と結合する炭素原子であり、 X_b は、 X_a と結合する炭素原子である。

[0060] 前記一般式(24)において、

X_3 は、

R_4 と結合する窒素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する窒素原子であることが好ましく

、

$Y_a \sim Y_d$ は、それぞれ独立に、

R_8 と結合する炭素原子、

L_{21} と結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であることが好ましく

、

$Y_e \sim Y_h$ は、それぞれ独立に、

R_8 と結合する炭素原子、

$Y_5 \sim Y_8$ のいずれかと結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であることが好ましく

、

$Y_1 \sim Y_4$ は、それぞれ独立に、

R_7 と結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であることが好ましく

、

$Y_5 \sim Y_8$ は、それぞれ独立に、

R_7 と結合する炭素原子、

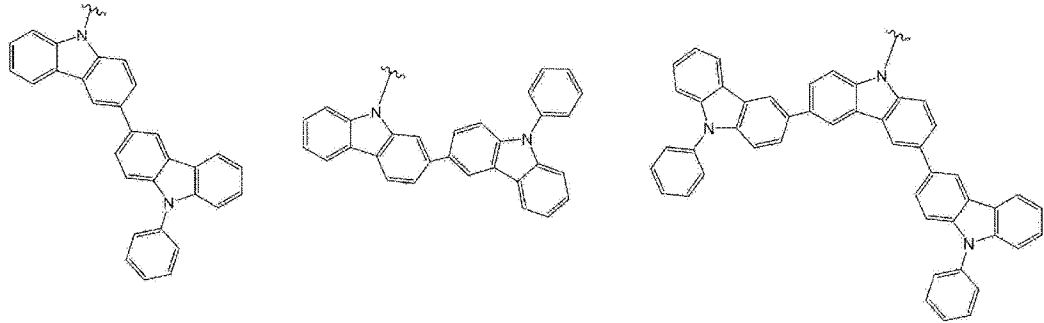
$Y_e \sim Y_h$ のいずれかと結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であることが好ましい

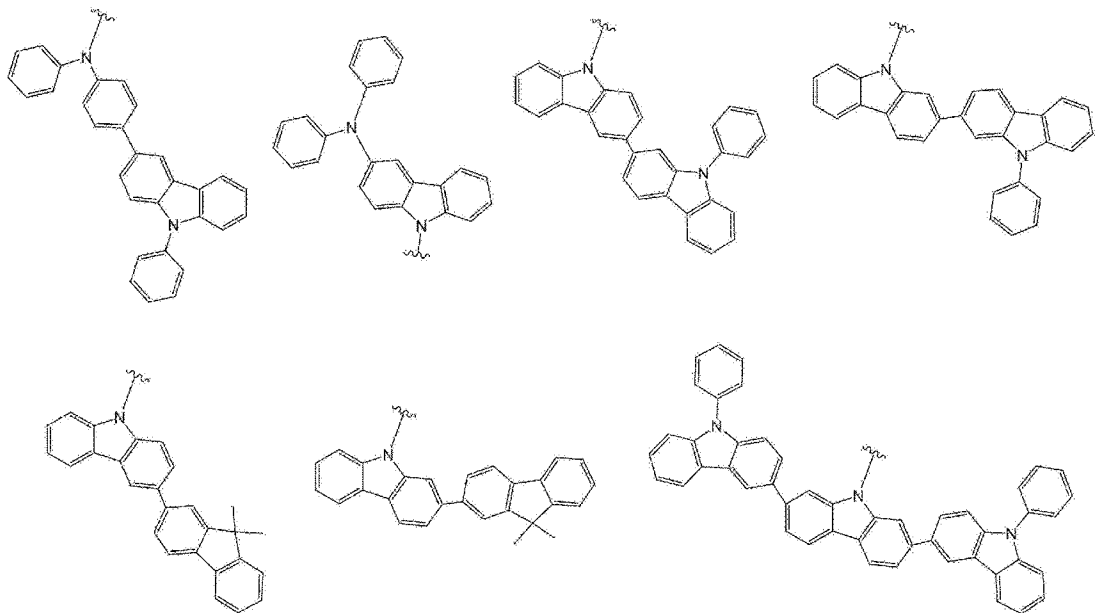
。

[0061] 本実施形態の化合物において、前記第二の構造としては、例えば、下記の構造が挙げられる。下記の構造において、波線部分は、前記第二の構造と他の構造との結合箇所を表す。

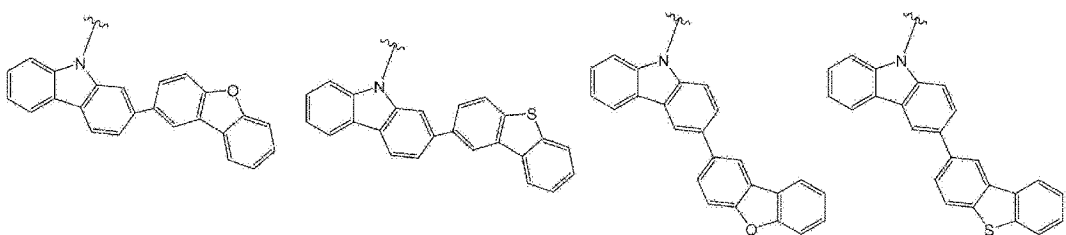
[0062] [化12]



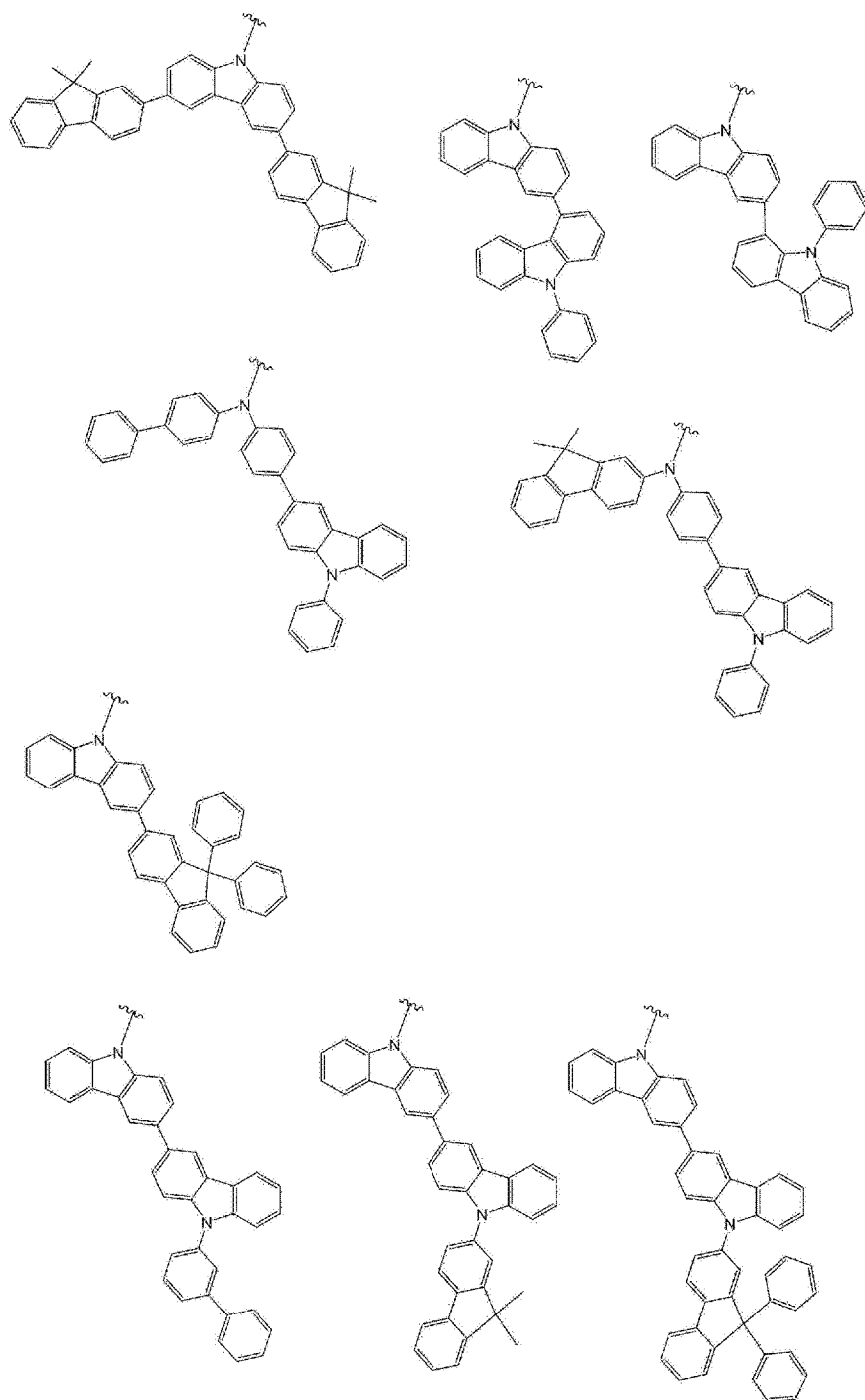
[0063] [化13]



[0064] [化14]

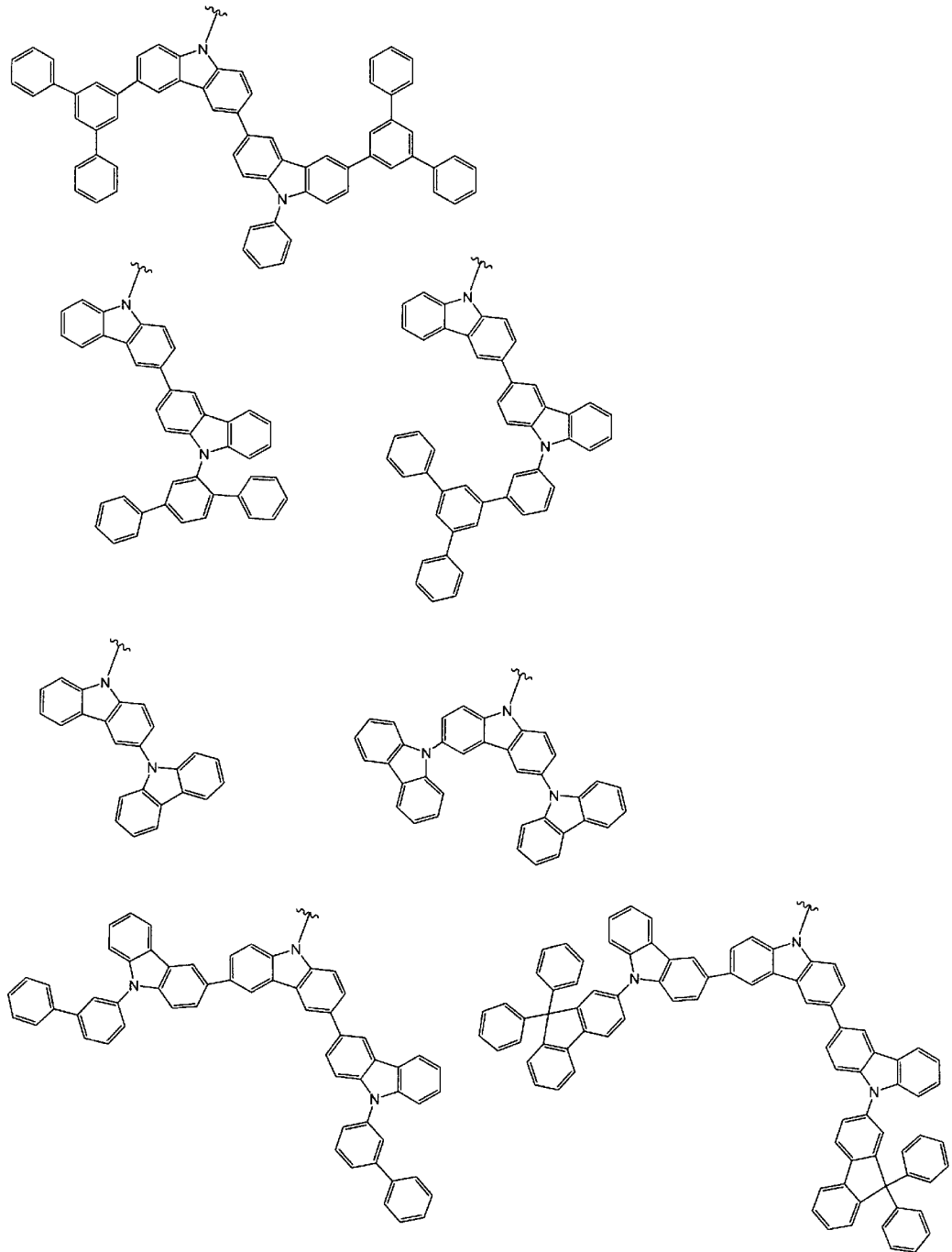


[0065] [化15]



[0066]

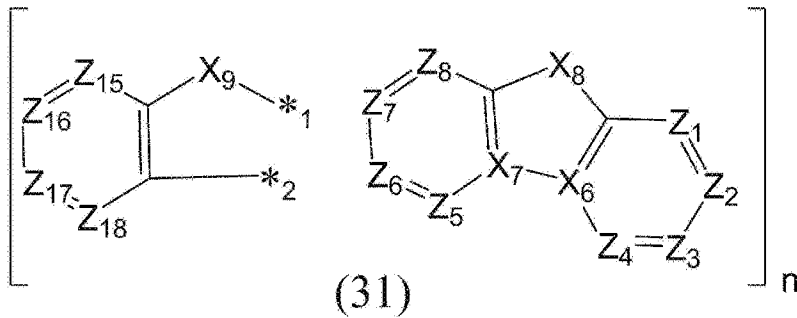
[化16]



[0067] 本実施形態の化合物において、
q = 0であることが好ましく、前記第三の構造は、下記一般式(31)で
表されることがより好ましい。

[0068]

[化17]



[0069] 前記一般式 (31) において、 X_8 、 X_9 、 $Z_1 \sim Z_4$ 、 $Z_{15} \sim Z_{18}$ 、および n は、前記一般式 (3) における X_8 、 X_9 、 $Z_1 \sim Z_4$ 、 $Z_{15} \sim Z_{18}$ 、および n と、それぞれ同義であり、

X_6 および X_7 は、互いに結合する炭素原子であり

*1 および *2 は、それぞれ独立に、 $Z_1 \sim Z_8$ における炭素原子との結合部位であり、

$Z_5 \sim Z_8$ は、それぞれ独立に、

R_{12} と結合する炭素原子、

分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または

*1 もしくは *2 で表される部位と結合する炭素原子であり、

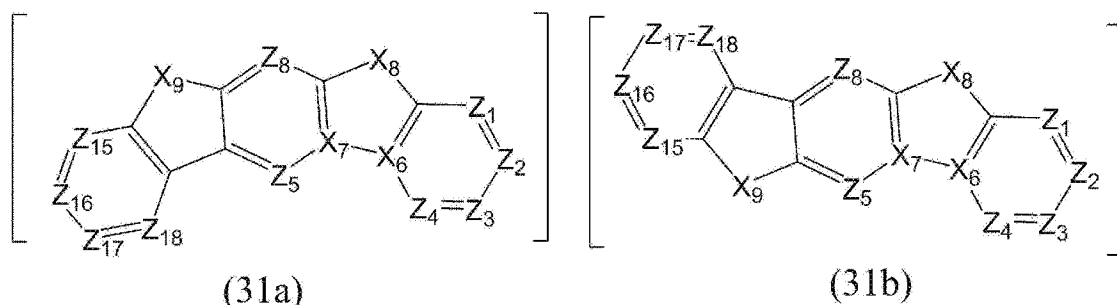
R_{12} は、前記一般式 (3) における R_{12} と同義であり、

$Z_1 \sim Z_8$ の内、少なくともいずれか2つは *1 もしくは *2 で表される部位と結合する炭素原子である。

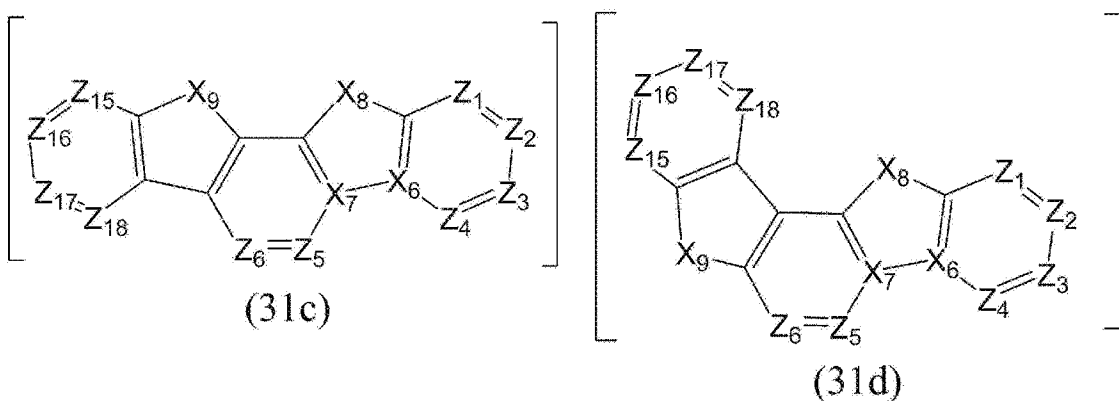
[0070] 前記一般式 (31) において、前記第三の構造は、下記一般式 (31 a) , (31 b) , (31 c) , (31 d) , (31 e) , および (31 f) で表される構造からなる群から選択されるいずれかであることが好ましい。

[0071]

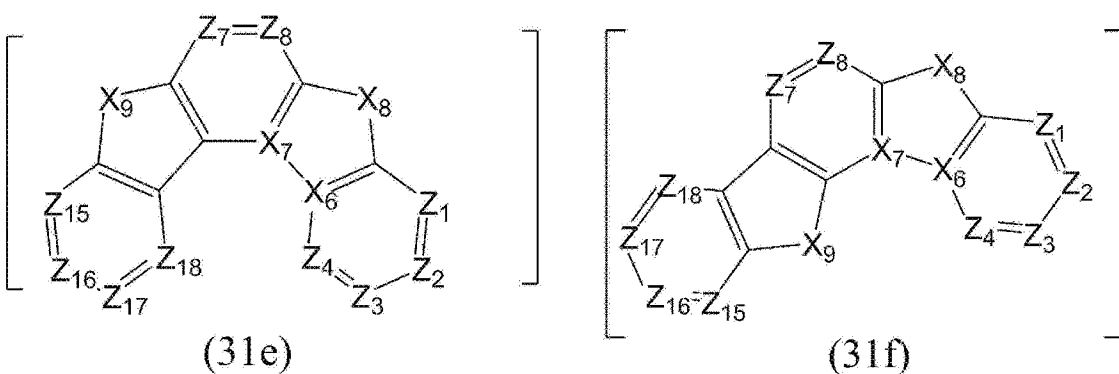
[化18]



[0072] [化19]



[0073] [化20]

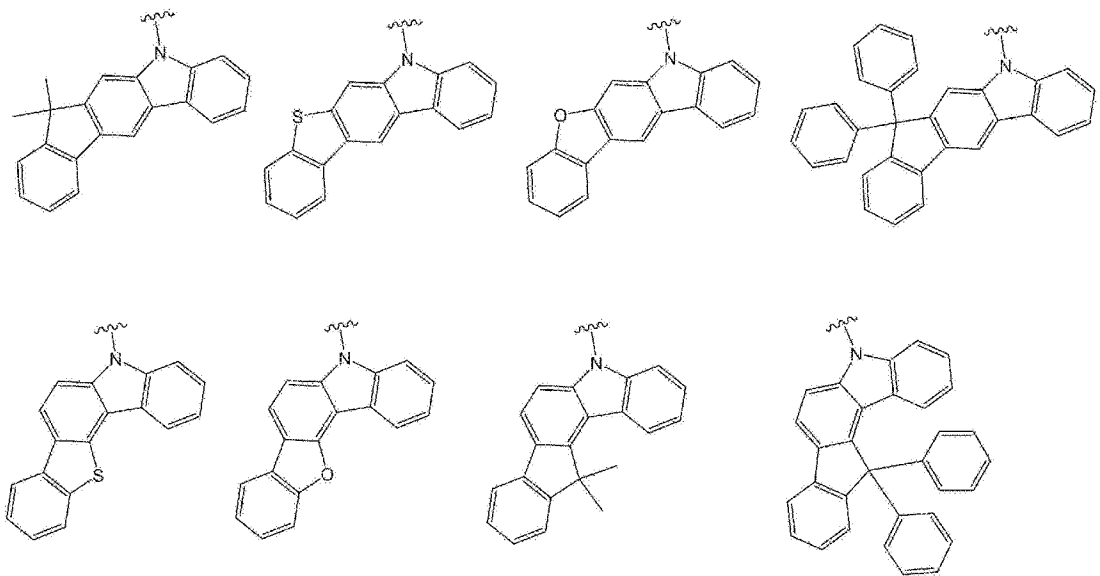


[0074] 前記一般式(31a)～(31f)において、X₆～X₉、Z₁～Z₄、およびZ₁₅～Z₁₈は、前記一般式(31)におけるX₆～X₉、Z₁～Z₄、およびZ₁₅～Z₁₈と、それぞれ同義であり、前記一般式(31a)～(31b)において、Z₅およびZ₈は、前記一般式(31)におけるZ₅およびZ₈と、それぞれ同義であり、前記一般式(31c)～(31d)において、Z₅および

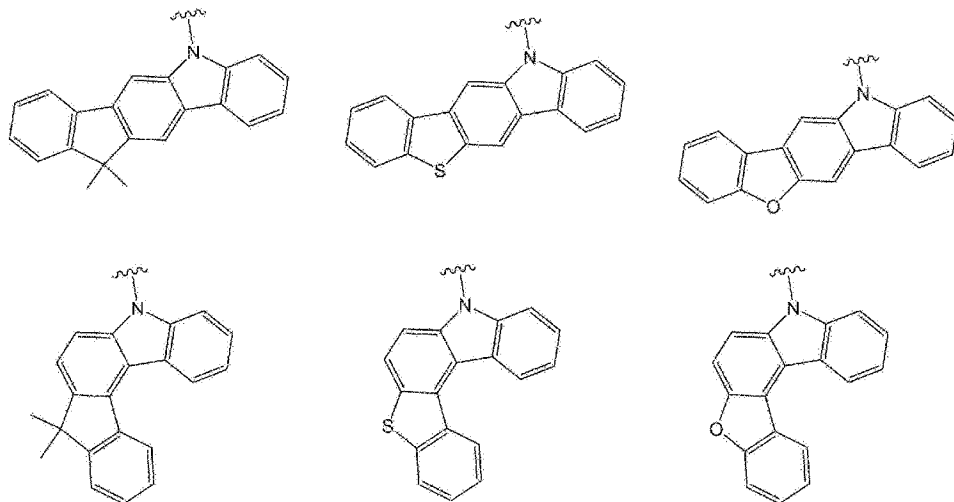
Z₆は、前記一般式(31)におけるZ₅およびZ₆と、それぞれ同義であり、前記一般式(31e)～(31f)において、Z₇およびZ₈は、前記一般式(31)におけるZ₇およびZ₈と、それぞれ同義である。

[0075] 本実施形態の化合物において、前記第三の構造としては、例えば、下記の構造が挙げられる。下記の構造において、波線部分は、前記第三の構造と他の構造との結合箇所を表す。

[0076] [化21]



[0077] [化22]



[0078] 本実施形態の化合物において、複数のR₁同士は、互いに結合せず、環構造

が形成されないことが好ましい。

[0079] 本実施形態の化合物において、複数の R_1 同士は、互いに結合して、環構造が形成されていることも好ましい。

[0080] 本実施形態の化合物において、置換基としての $R_1 \sim R_{20}$ 、 R_a 、および R_b は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のフルオロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数3～30のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数7～30のアラルキル基、置換シリル基、置換ゲルマニウム基、置換ホスフィンオキシド基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、およびカルボキシ基からなる群から選択されることが好ましい。

[0081] 本実施形態の化合物において、置換基としての R_4 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基であることが好ましく、

置換基としての R_{14} 、 R_{15} 、 R_a 、および R_b は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、および

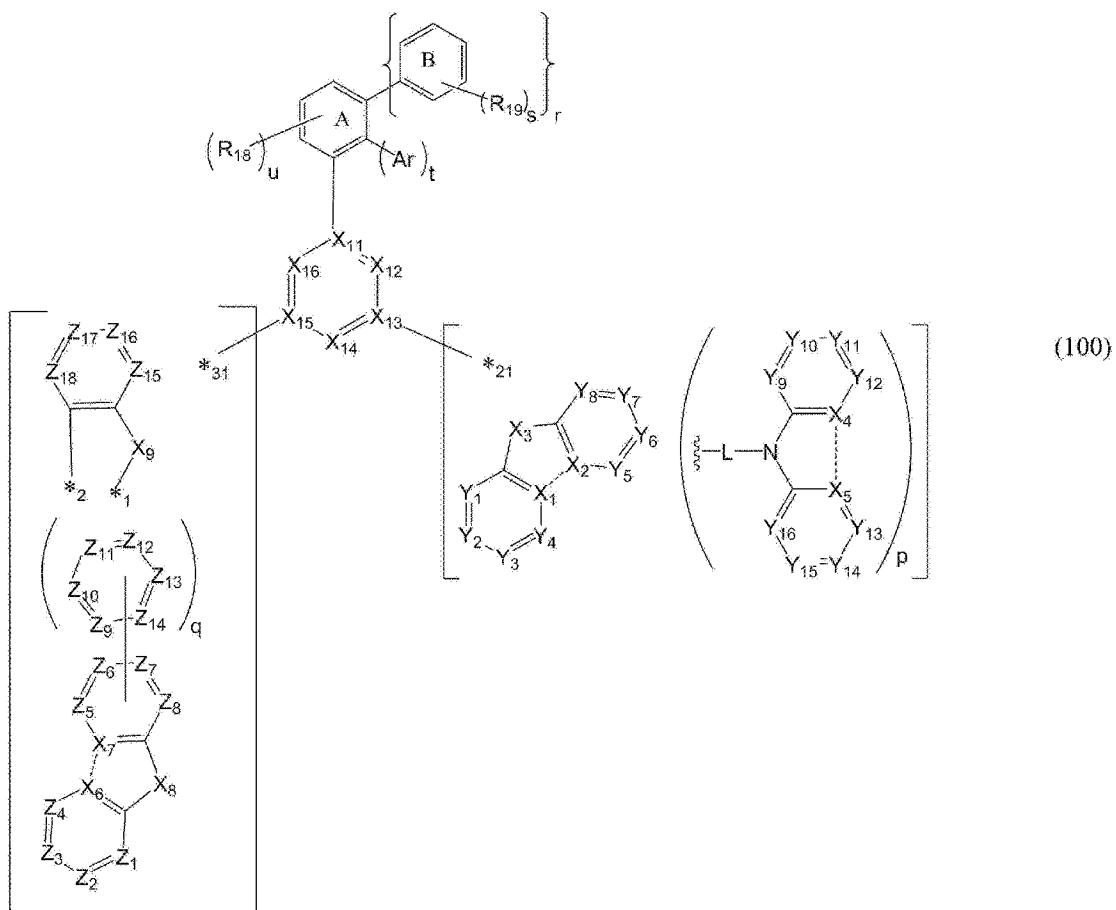
置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基からなる群から選択されることが好ましく、

X_8 に置換する置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基であることが好ましい。

[0082] 本実施形態の化合物は、前記第一の構造と、前記第二の構造とが結合し、前記第一の構造と、前記第三の構造とが結合し、前記第一の構造と、前記第四の構造が結合していることが好ましい。

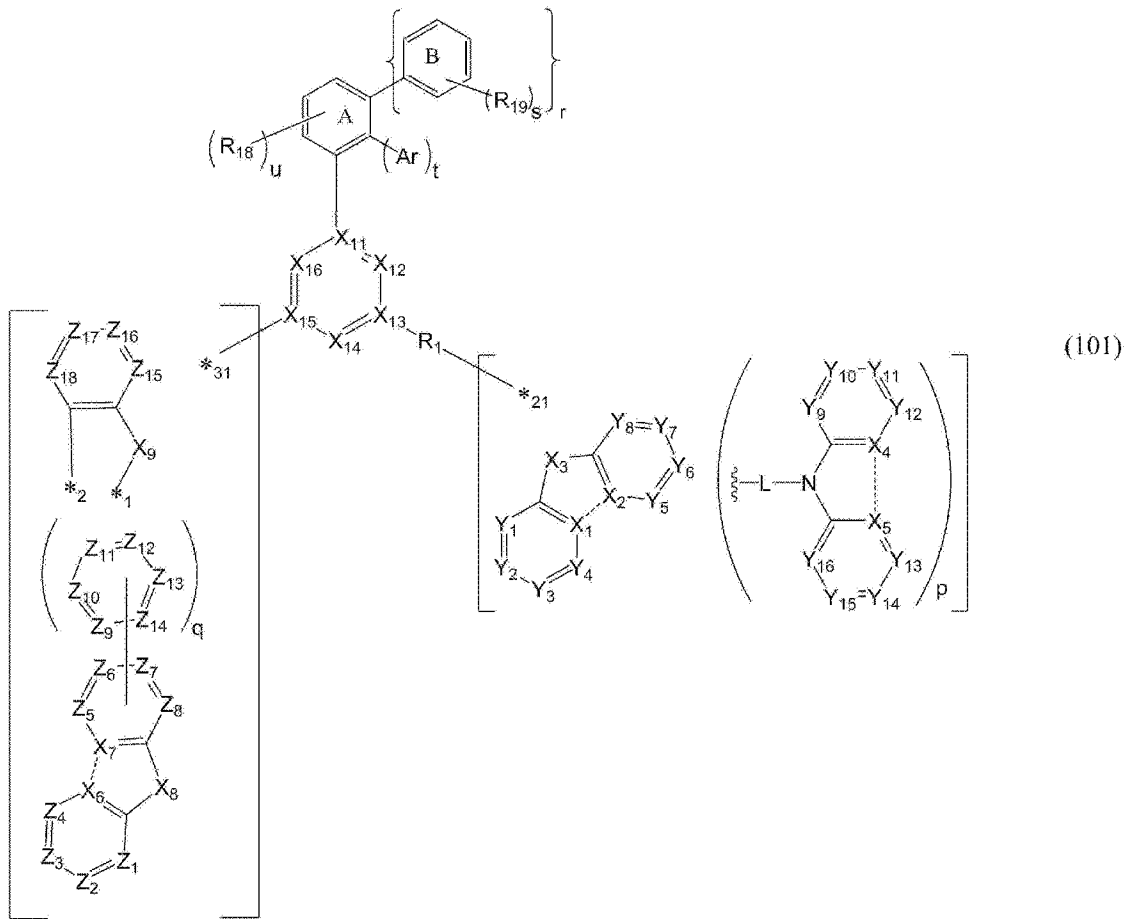
[0083] 本実施形態の化合物は、下記一般式(100)～(109)のいずれかで表されることが好ましい。

[0084] [化23]



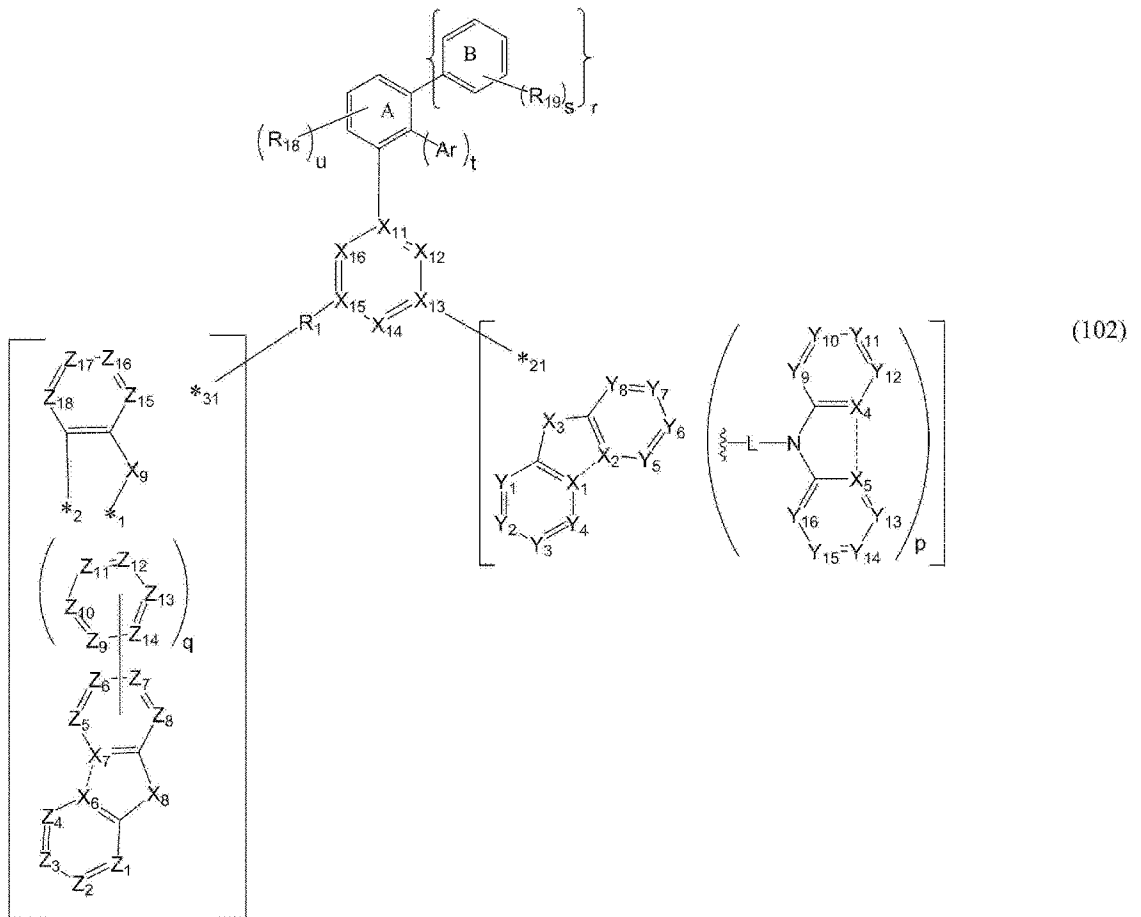
[0085]

[化24]



[0086]

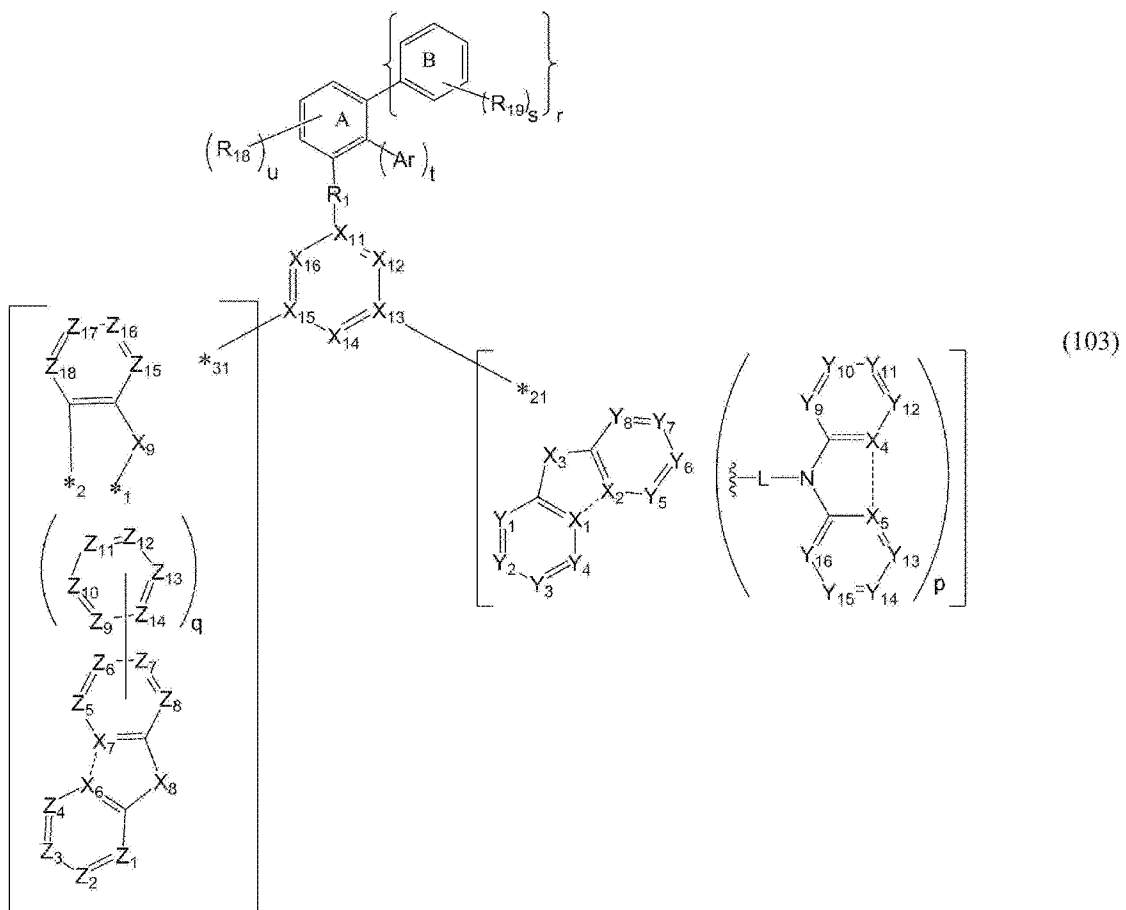
[化25]



(102)

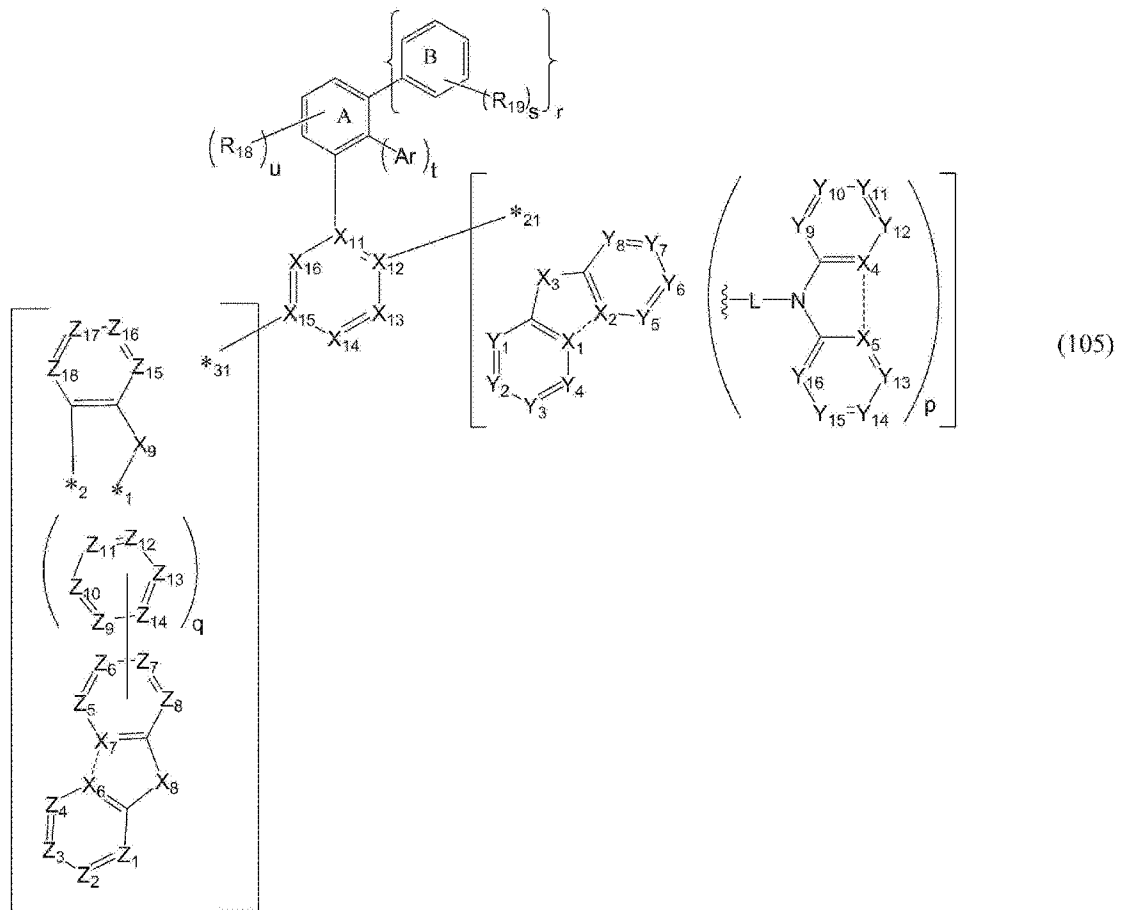
[0087]

[化26]



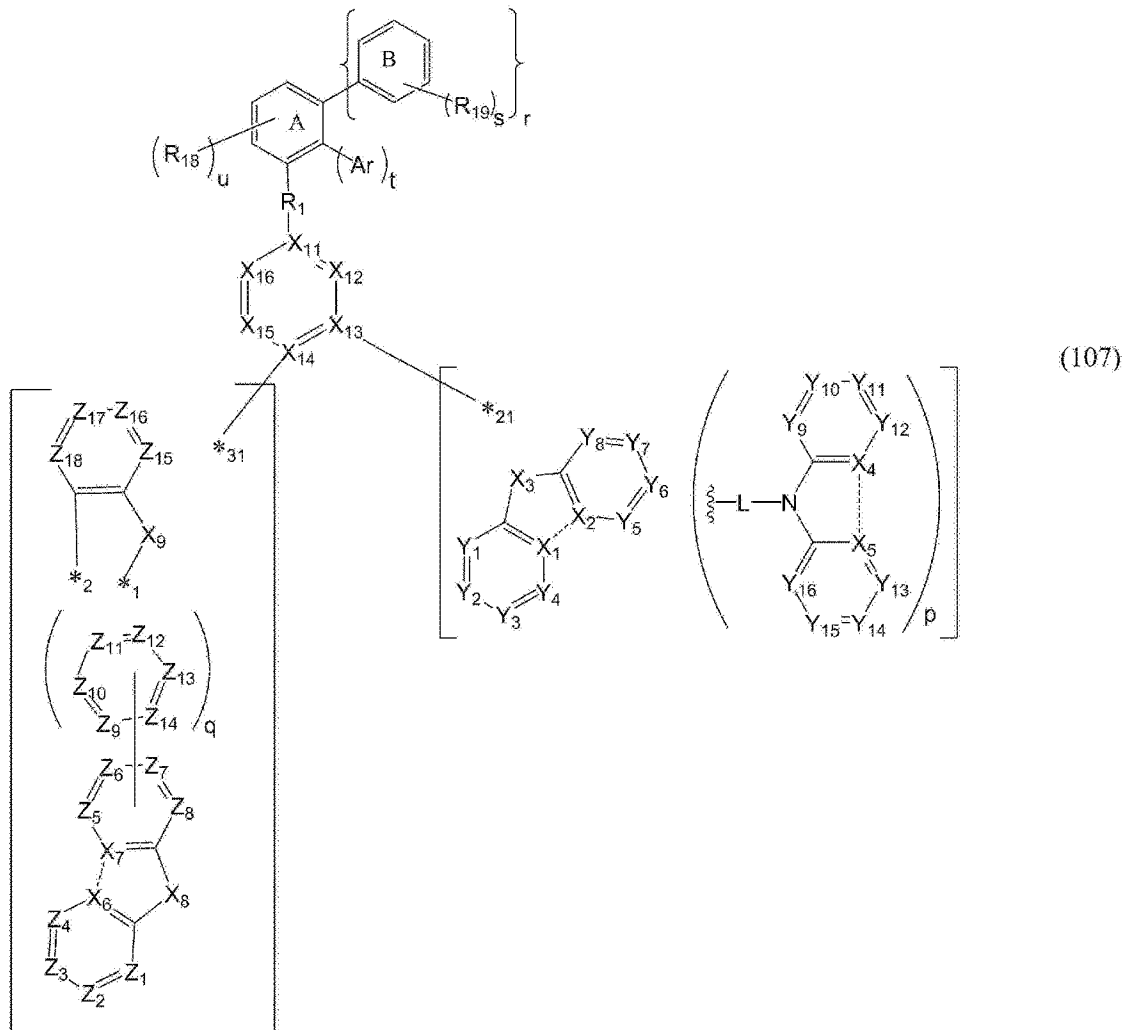
[0088]

[化28]



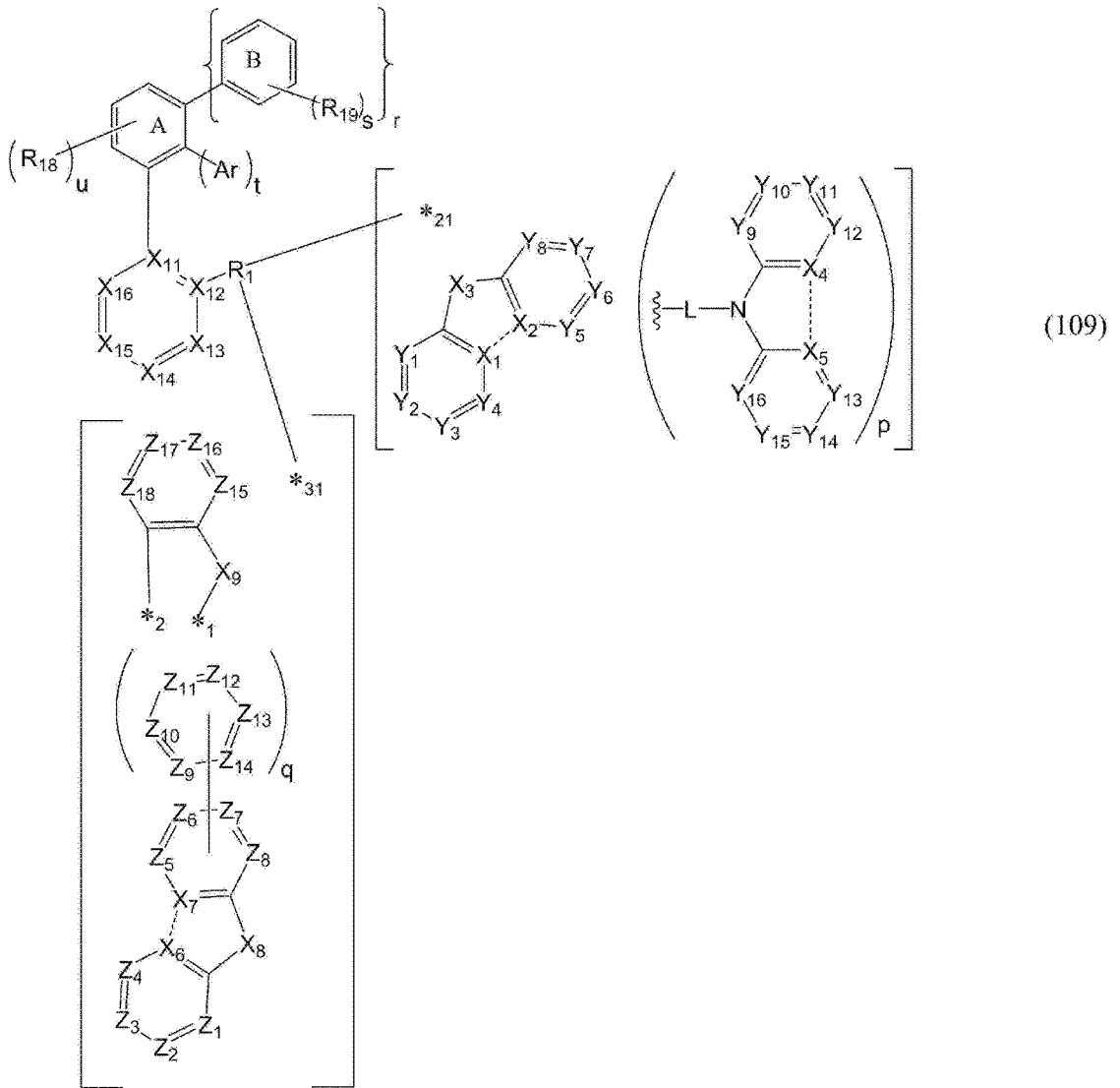
[0090]

[化30]



[0092]

[化32]



[0094] 前記一般式(100)～(109)において、 $X_{11} \sim X_{16}$ 、および R_1 は、前記一般式(1)における $X_{11} \sim X_{16}$ 、および R_1 と、それぞれ同義であり、 $X_1 \sim X_5$ 、 $Y_1 \sim Y_{16}$ 、 L 、および p は、前記一般式(2)における $X_1 \sim X_5$ 、 $Y_1 \sim Y_{16}$ 、 L 、および p と、それぞれ同義であり、 $X_6 \sim X_9$ 、 $Z_1 \sim Z_8$ 、 q 、*1、および*2は、前記一般式(3)における $X_6 \sim X_9$ 、 $Z_1 \sim Z_8$ 、 q 、*1、および*2と、それぞれ同義であり、 R_{18} 、 R_{19} 、 Ar 、 s 、 u 、 t 、および r は、前記一般式(4)における R_{18} 、 R_{19} 、 Ar 、 s 、 u 、 t 、および r とそれぞれ同義であり、*₂₁は前記第二の構造の前記第一の構造との結合部を表し、*₃₁は前記第三の構造の前記第一の構造との結合部

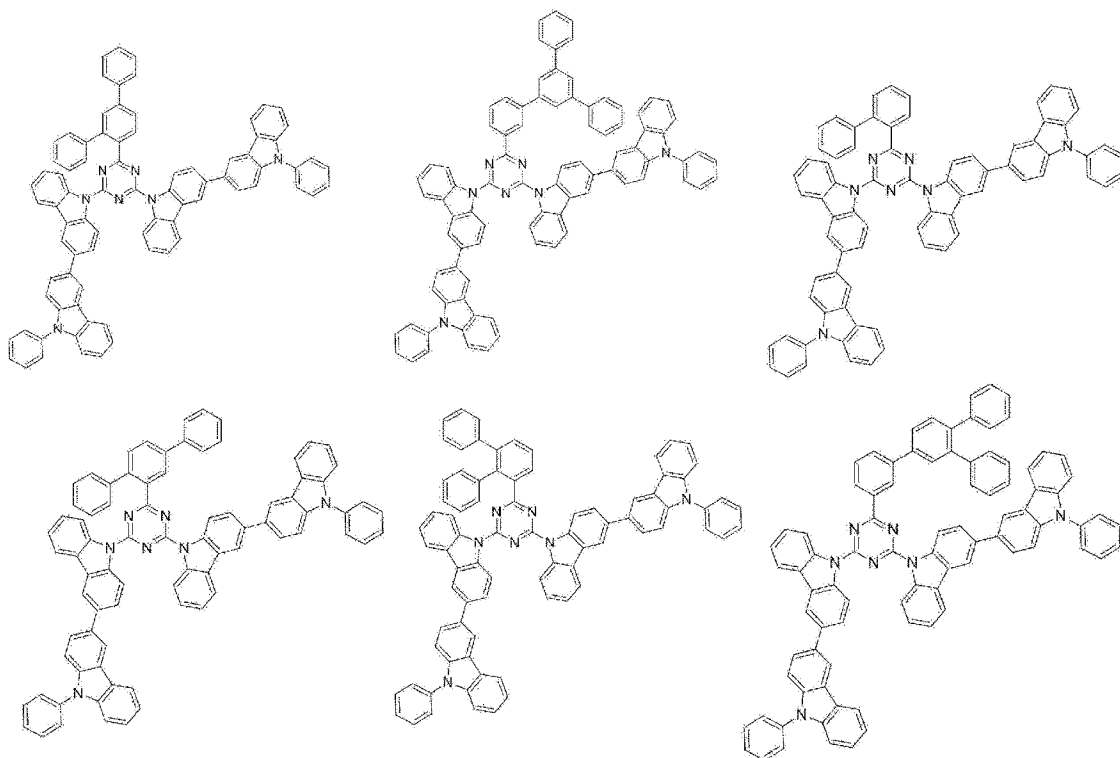
を表す。

[0095] (本実施形態に係る化合物の製造方法)

本実施形態に係る化合物は、例えば、後述する実施例に記載の方法により製造することができる。本実施形態に係る化合物は、当該実施例に記載の方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応や原料を用いることで、製造することができる。

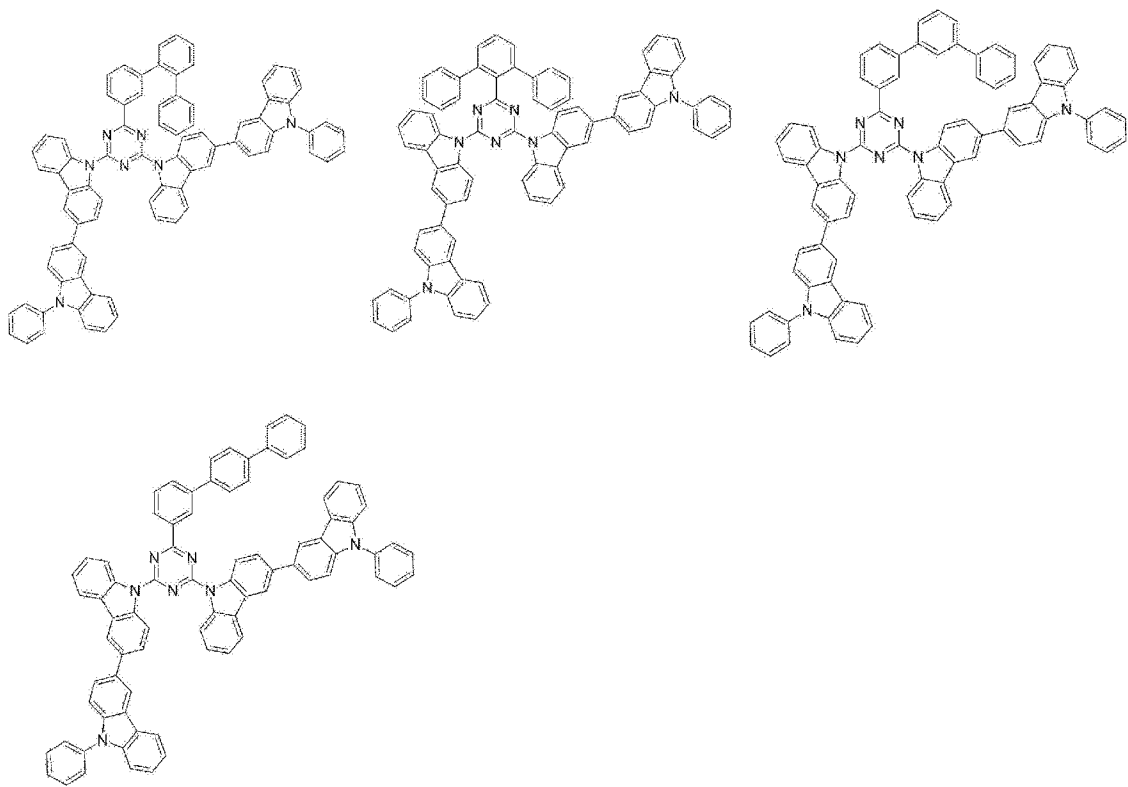
[0096] 本実施形態に係る化合物の例を以下に示す。なお、本発明の化合物は、これらの例に限定されない。

[0097] [化33]

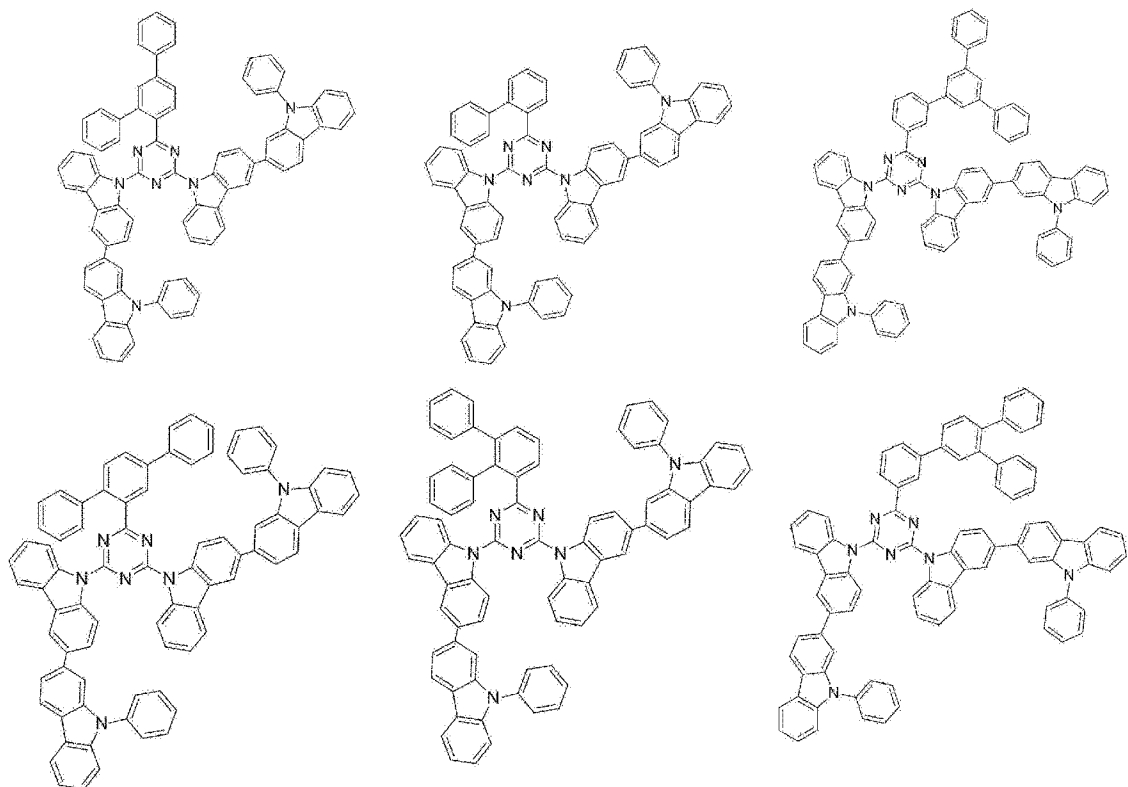


[0098]

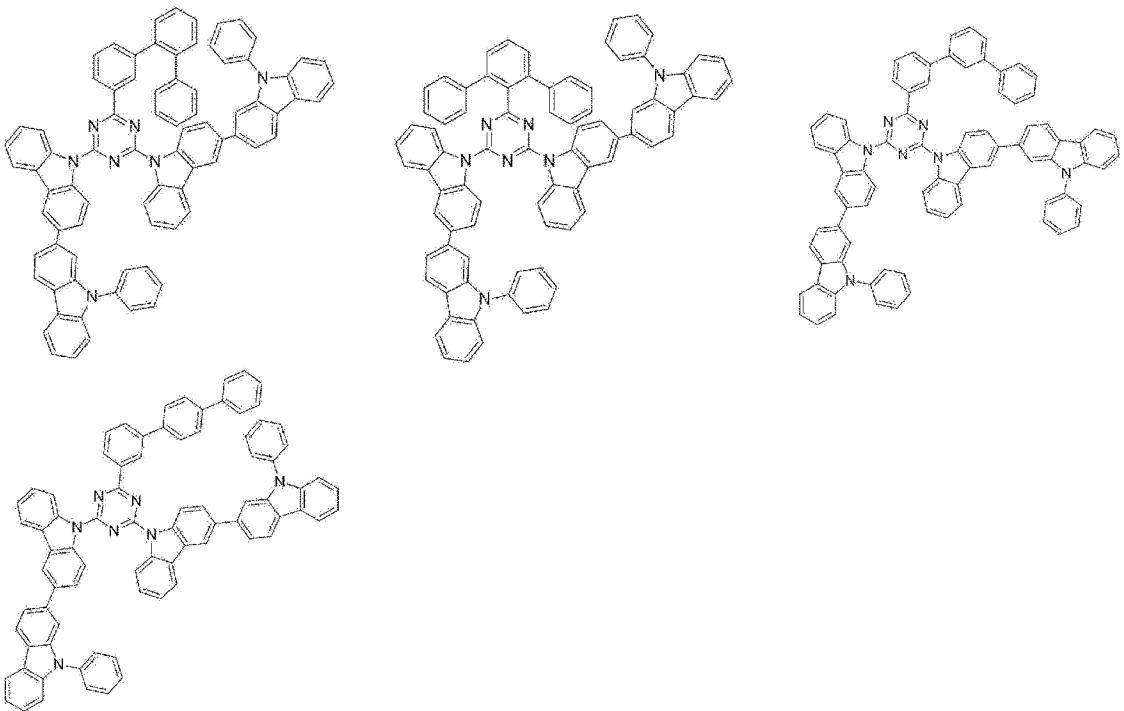
[化34]



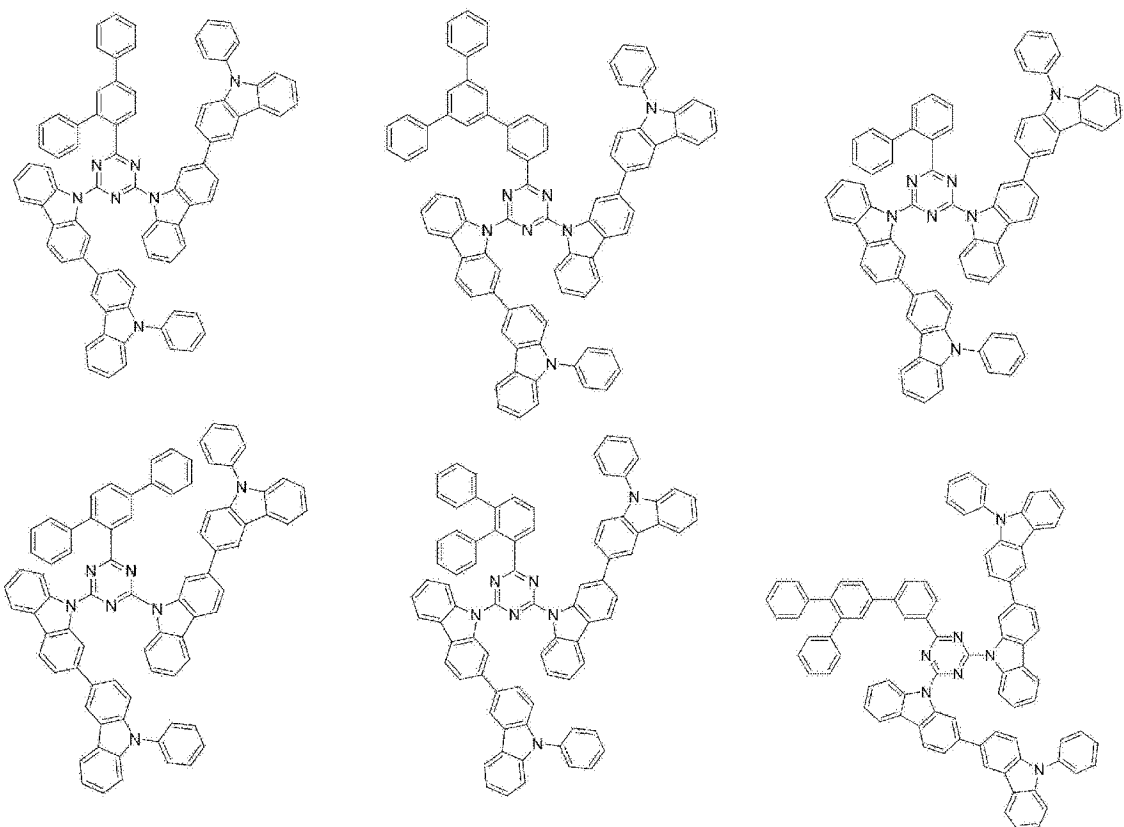
[0099] [化35]



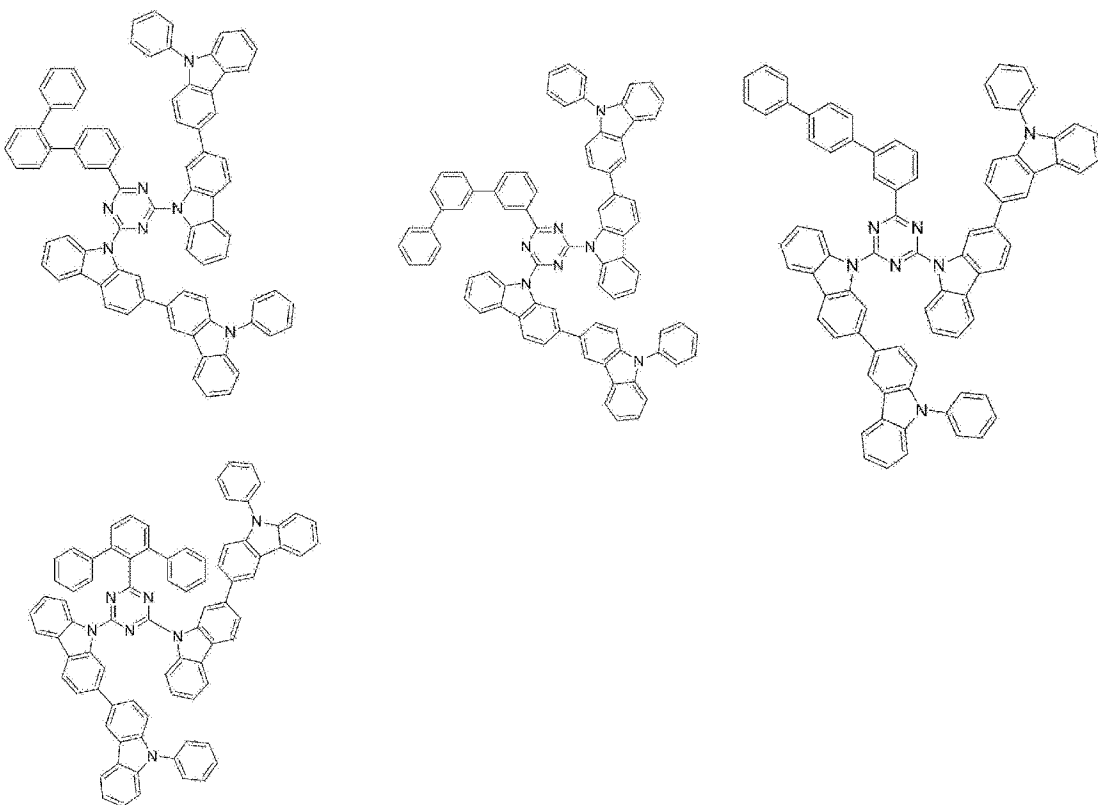
[0100] [化36]



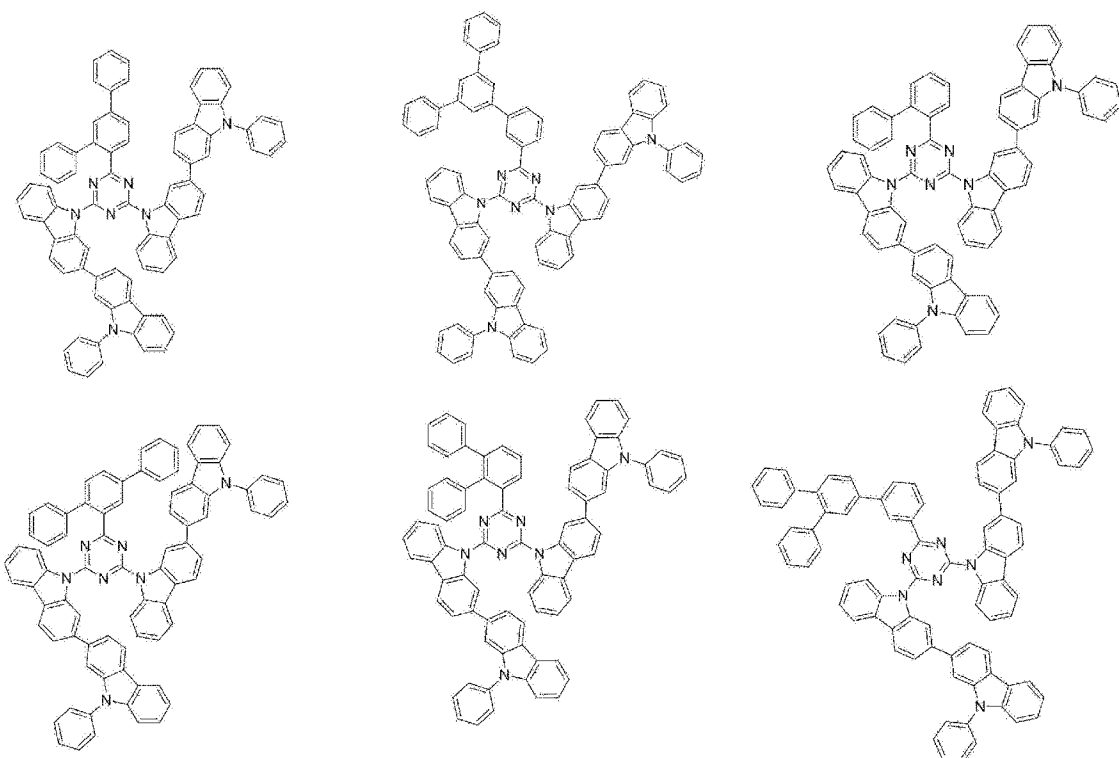
[0101] [化37]



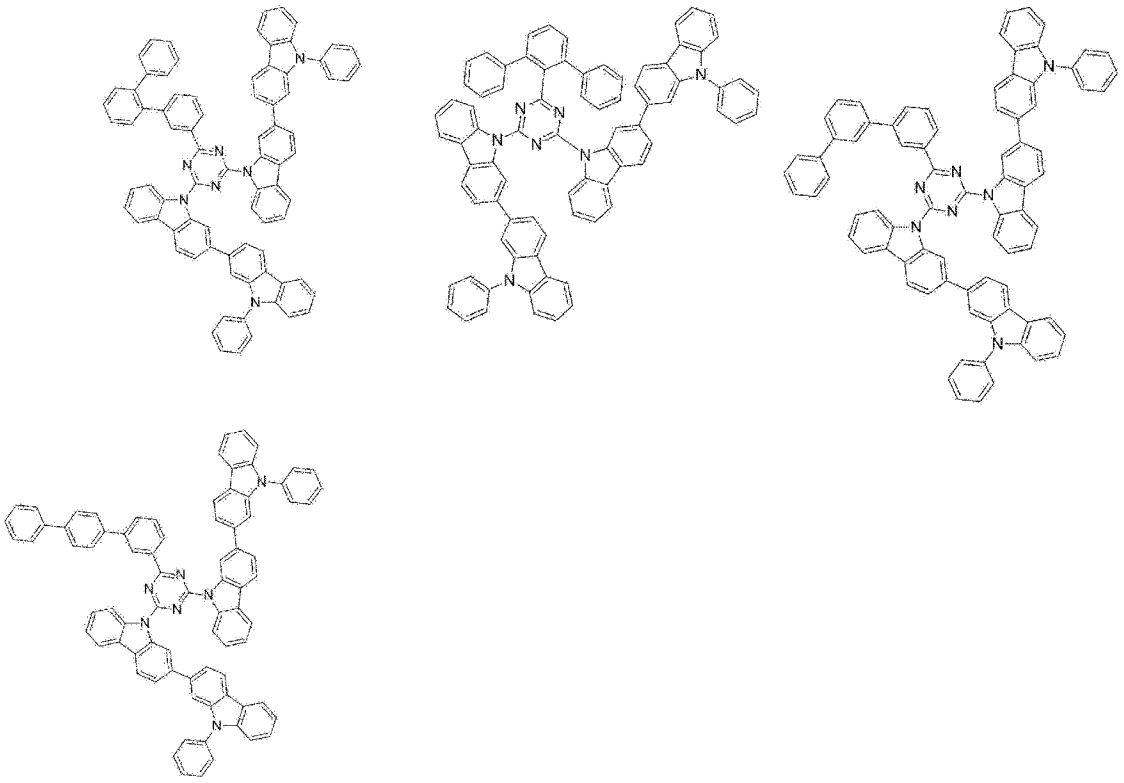
[0102] [化38]



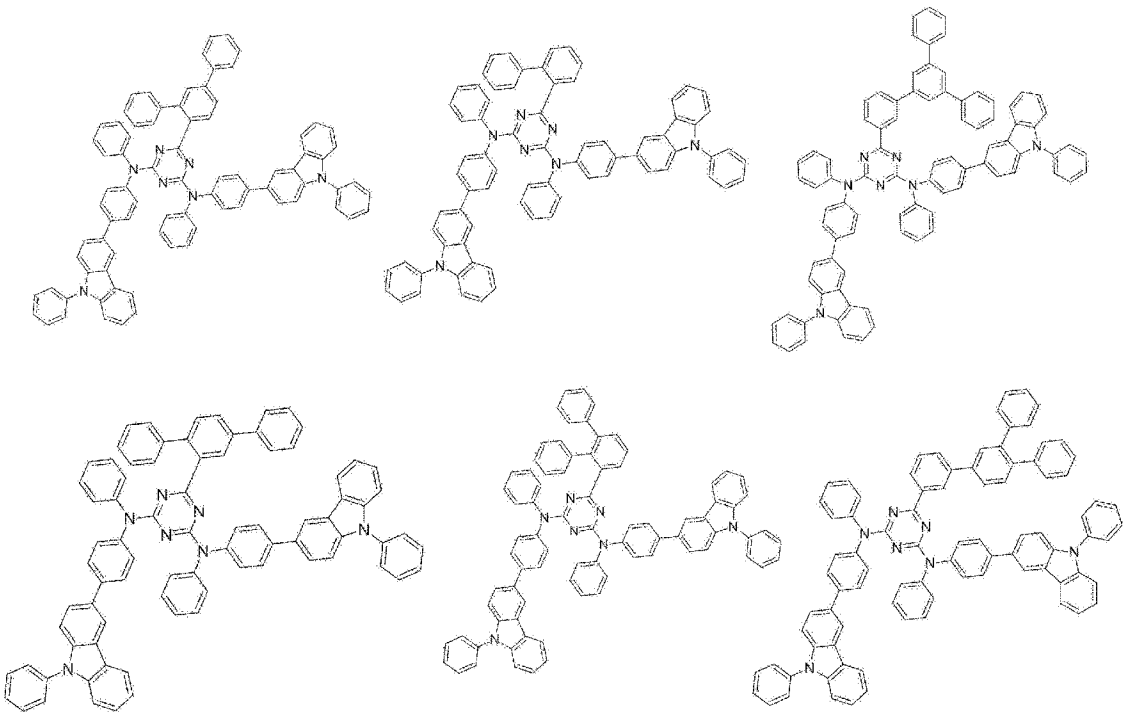
[0103] [化39]



[0104] [化40]

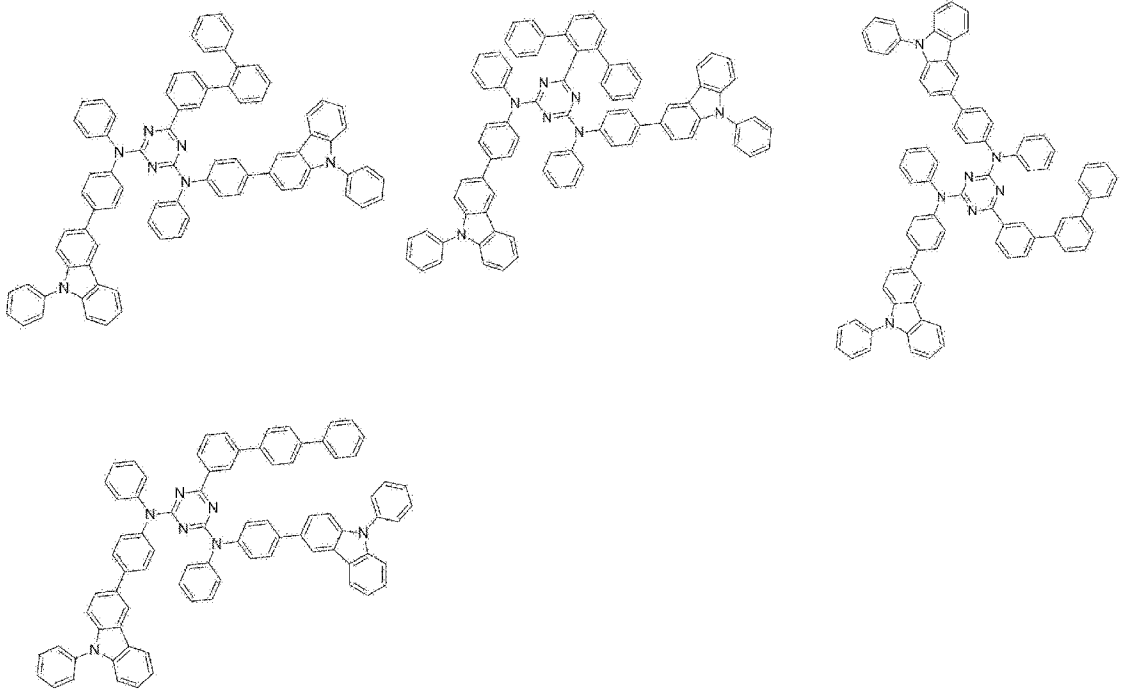


[0105] [化41]

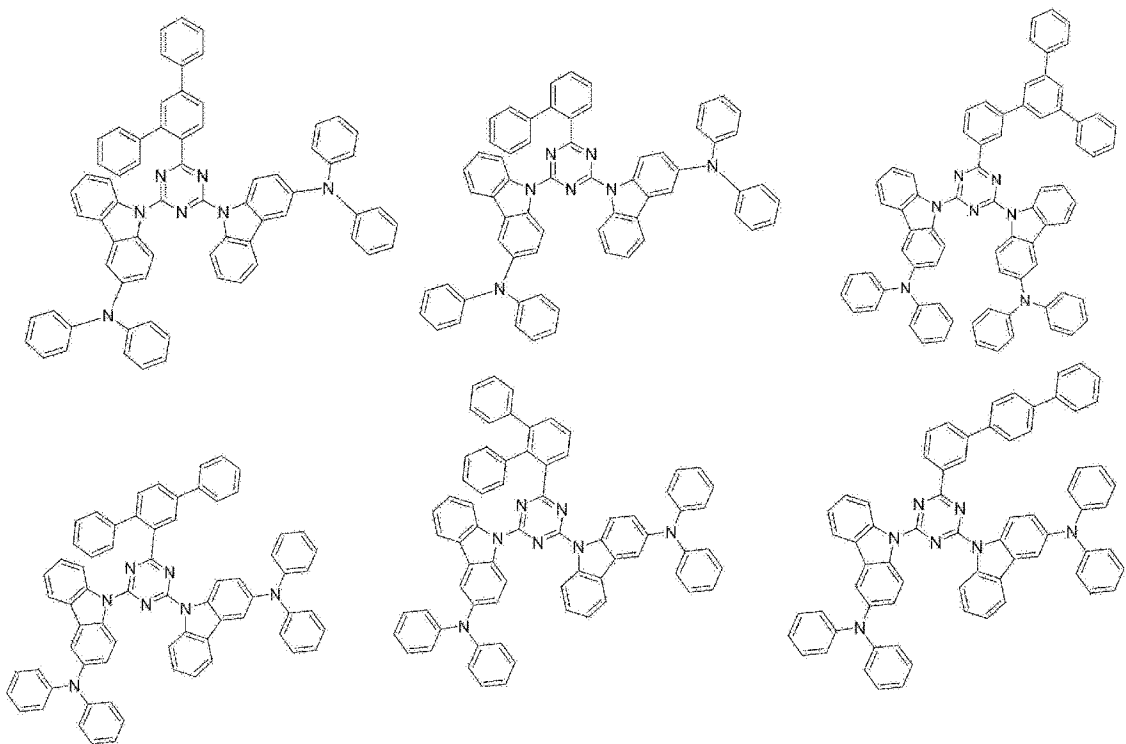


[0106]

[化42]

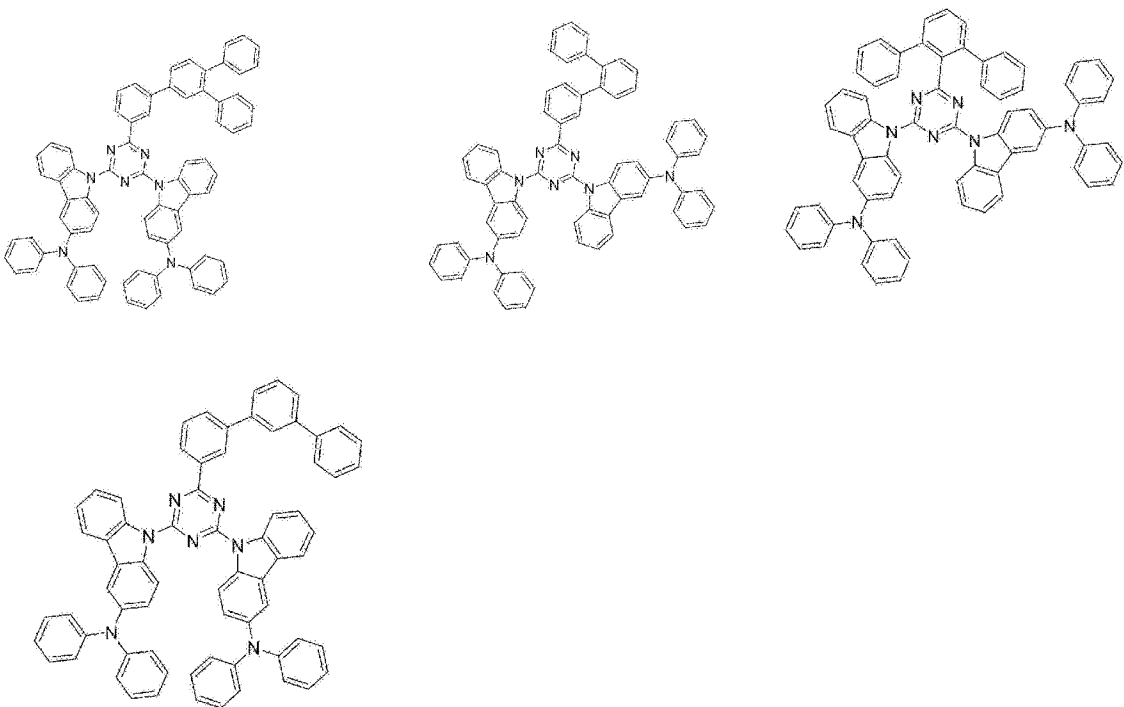


[0107] [化43]

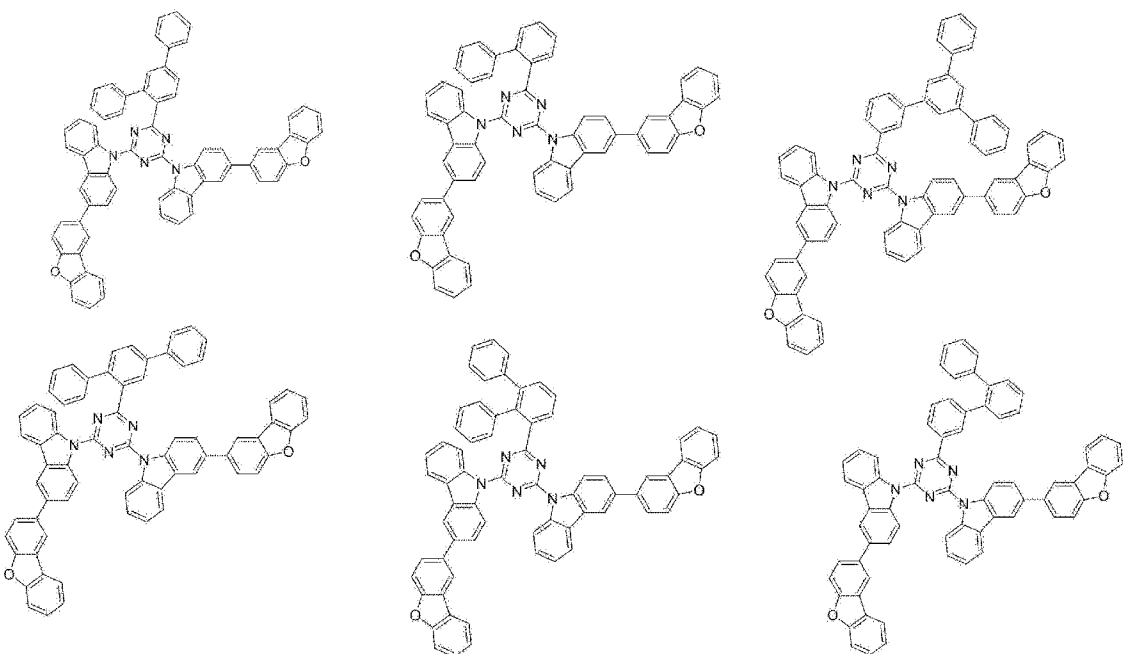


[0108]

[化44]

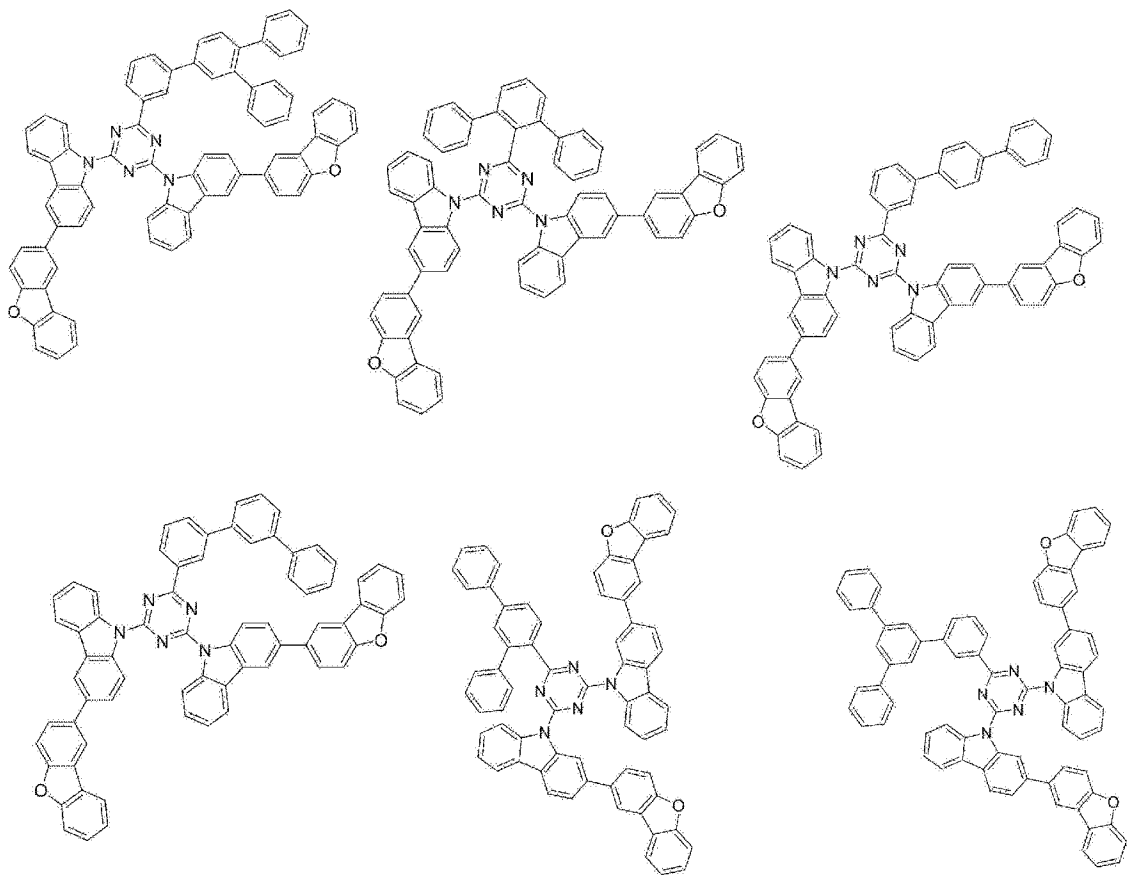


[0109] [化45]



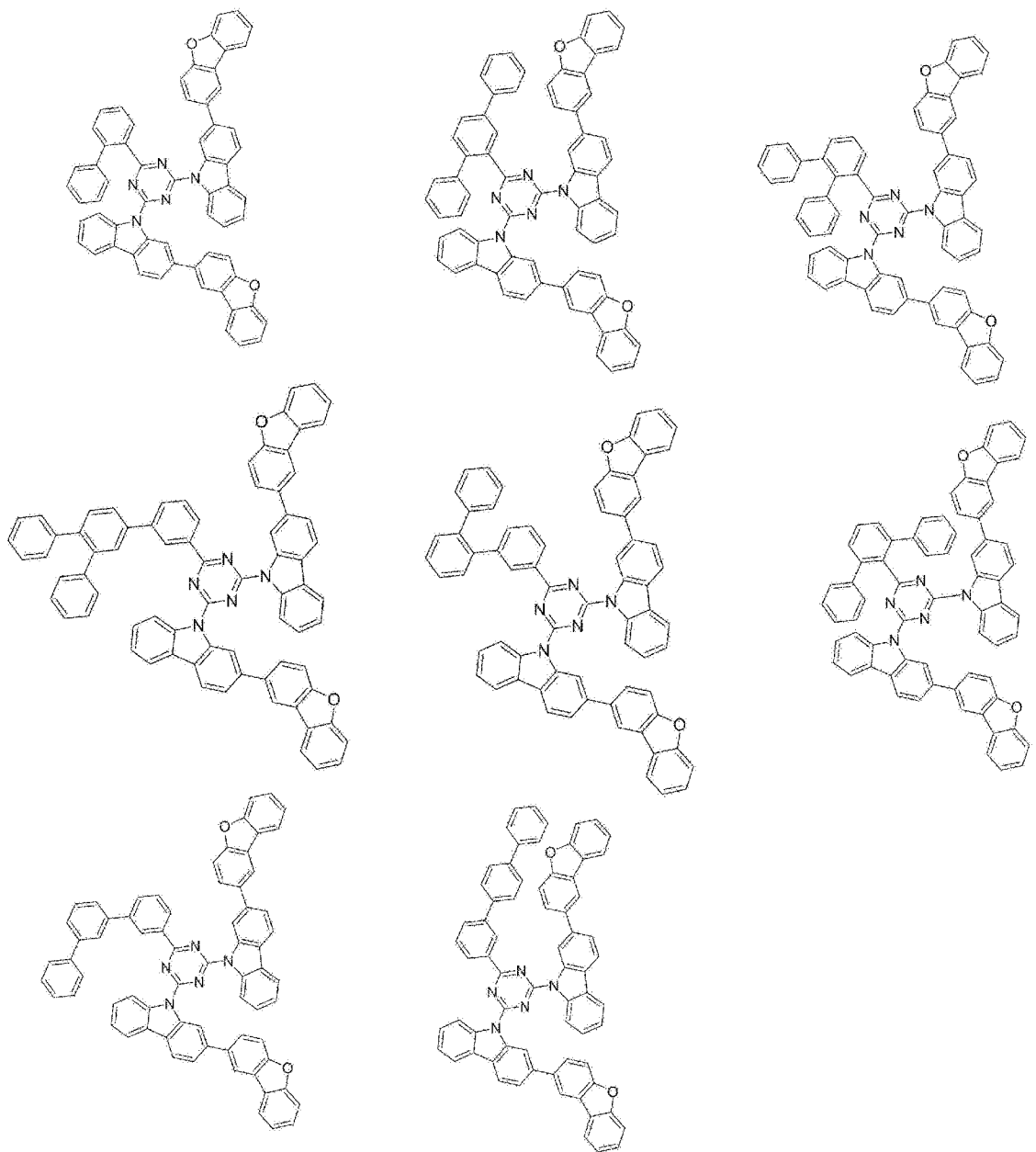
[0110]

[化46]



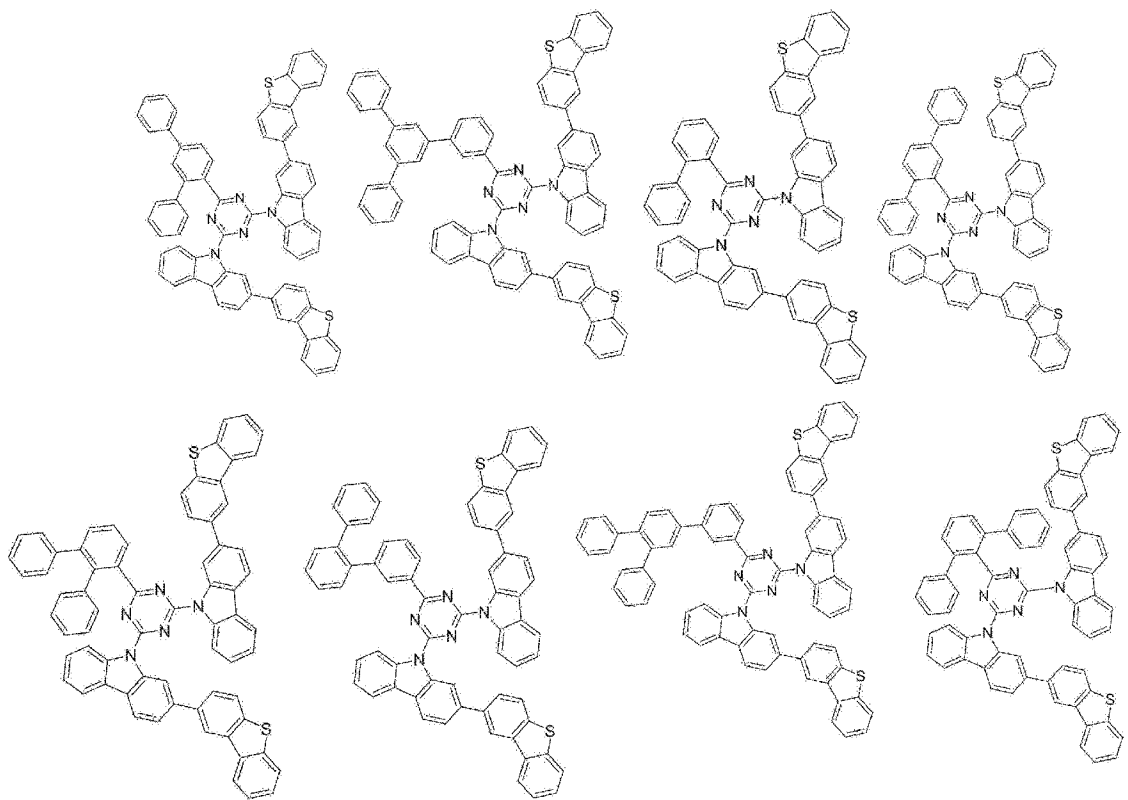
[0111]

[化47]

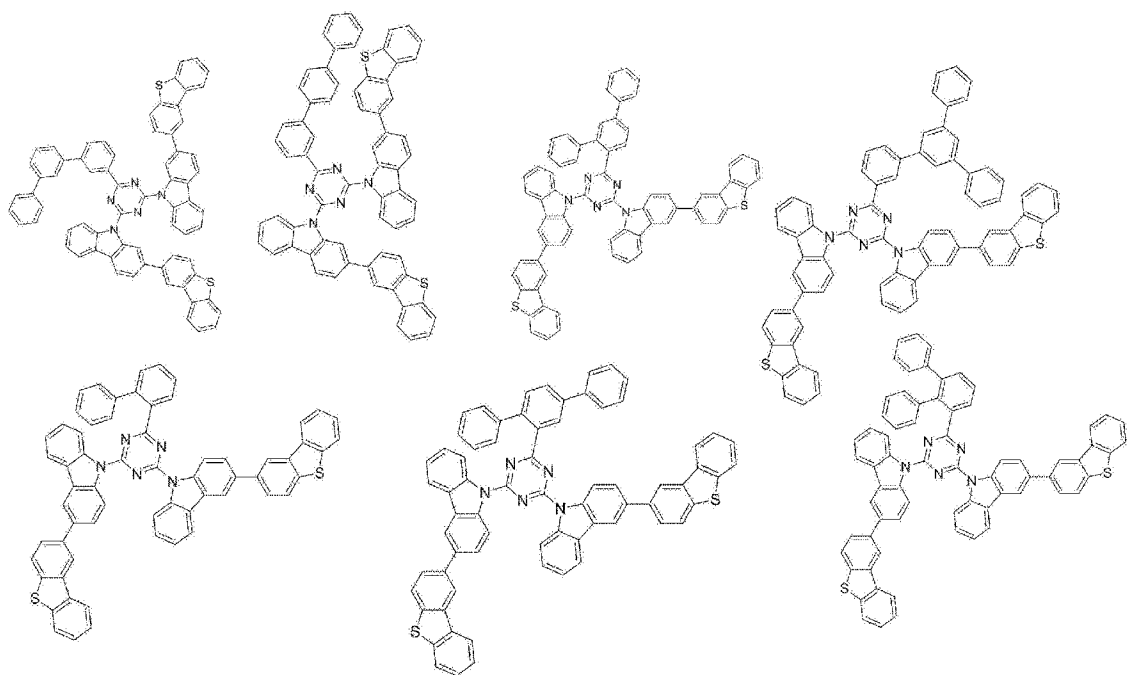


[0112]

[化48]

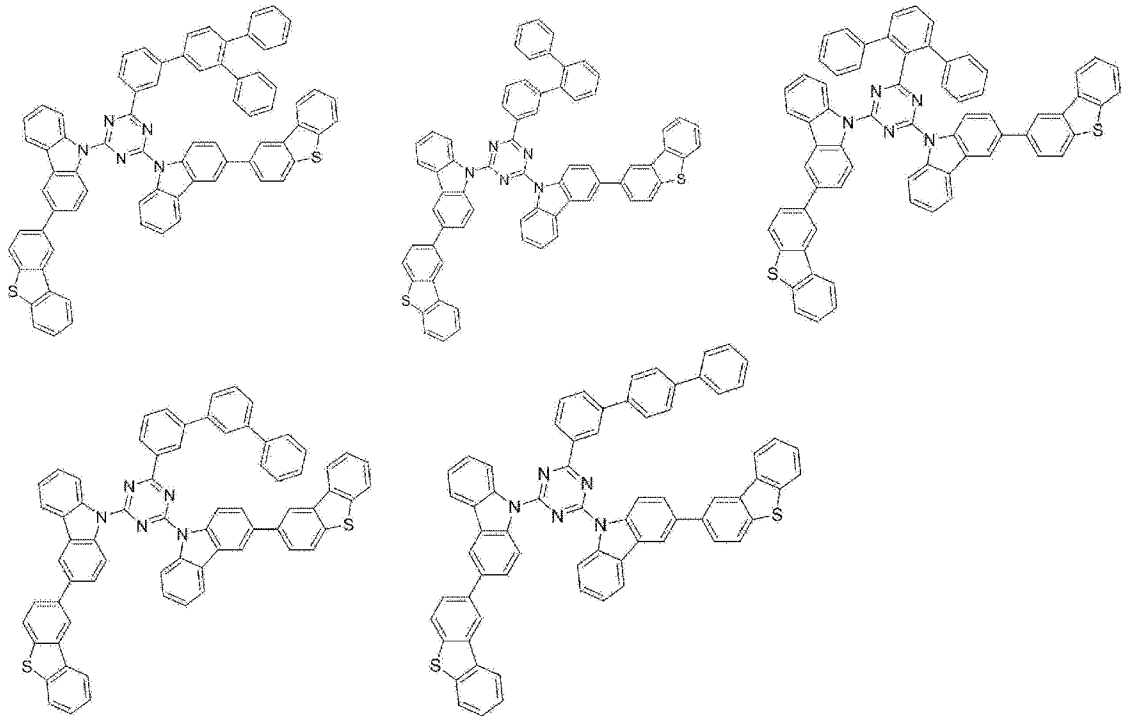


[0113] [化49]



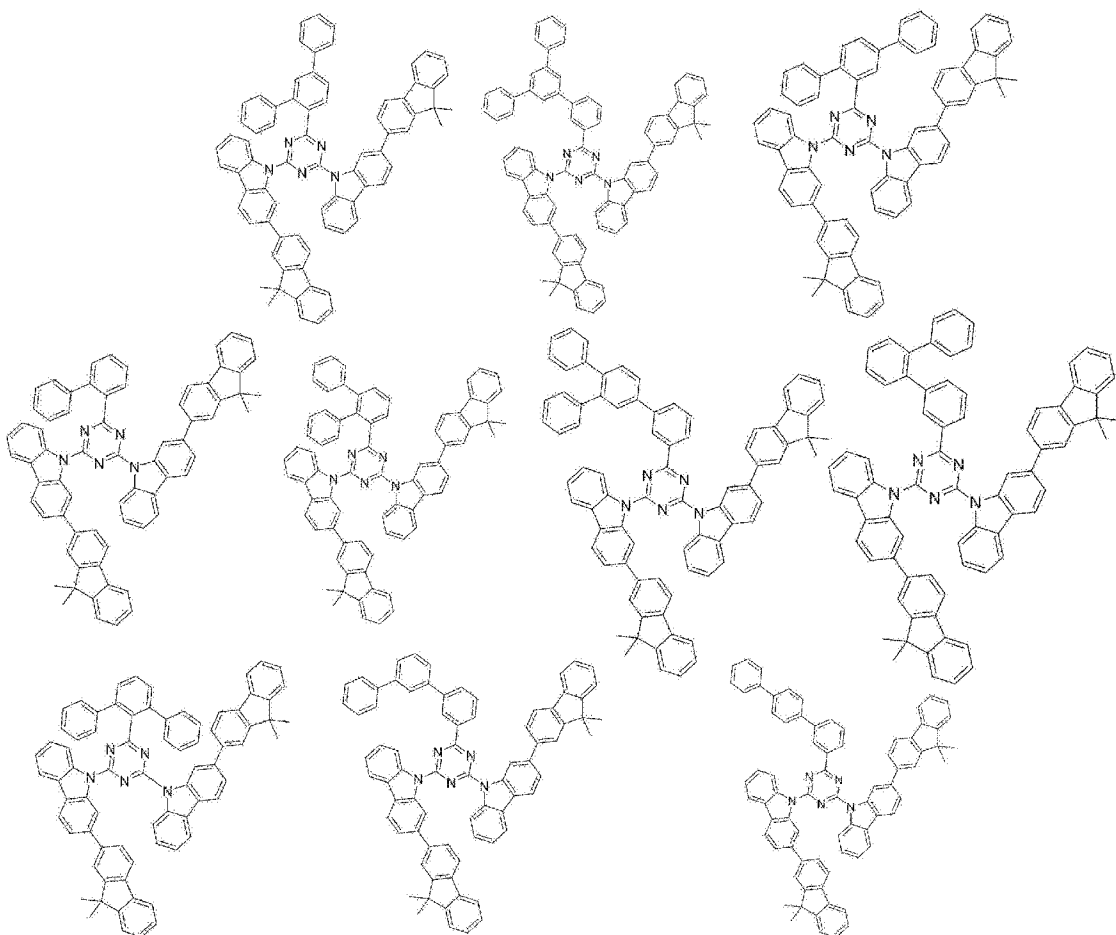
[0114]

[化50]



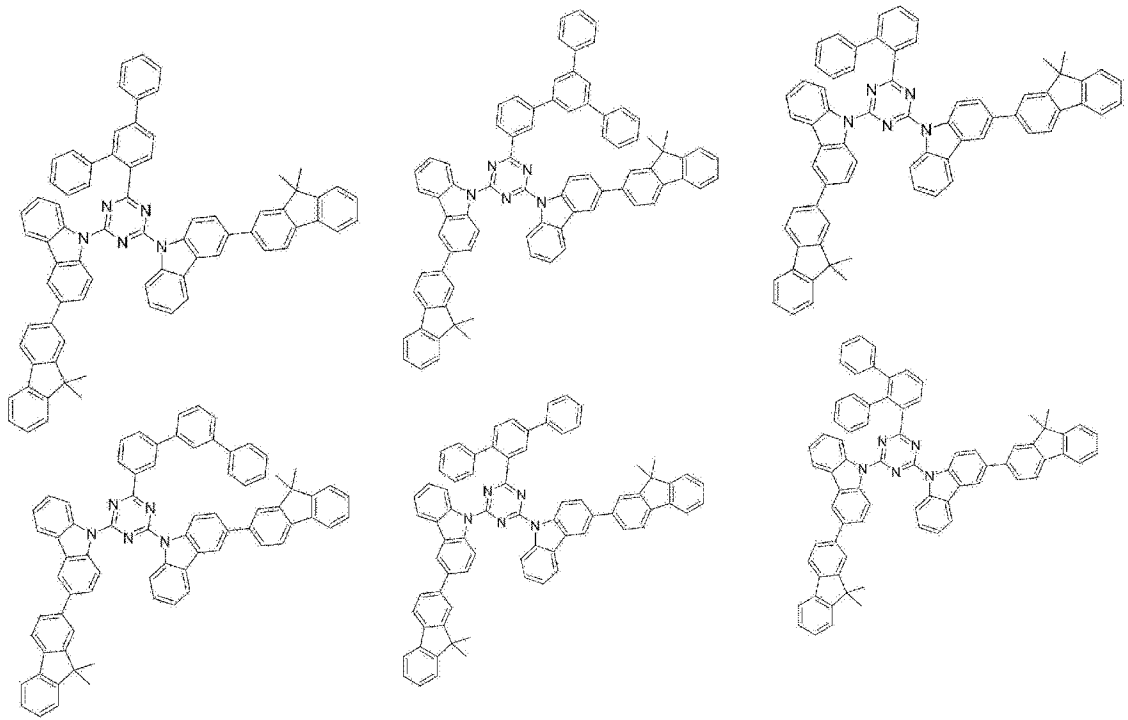
[0115]

[化51]

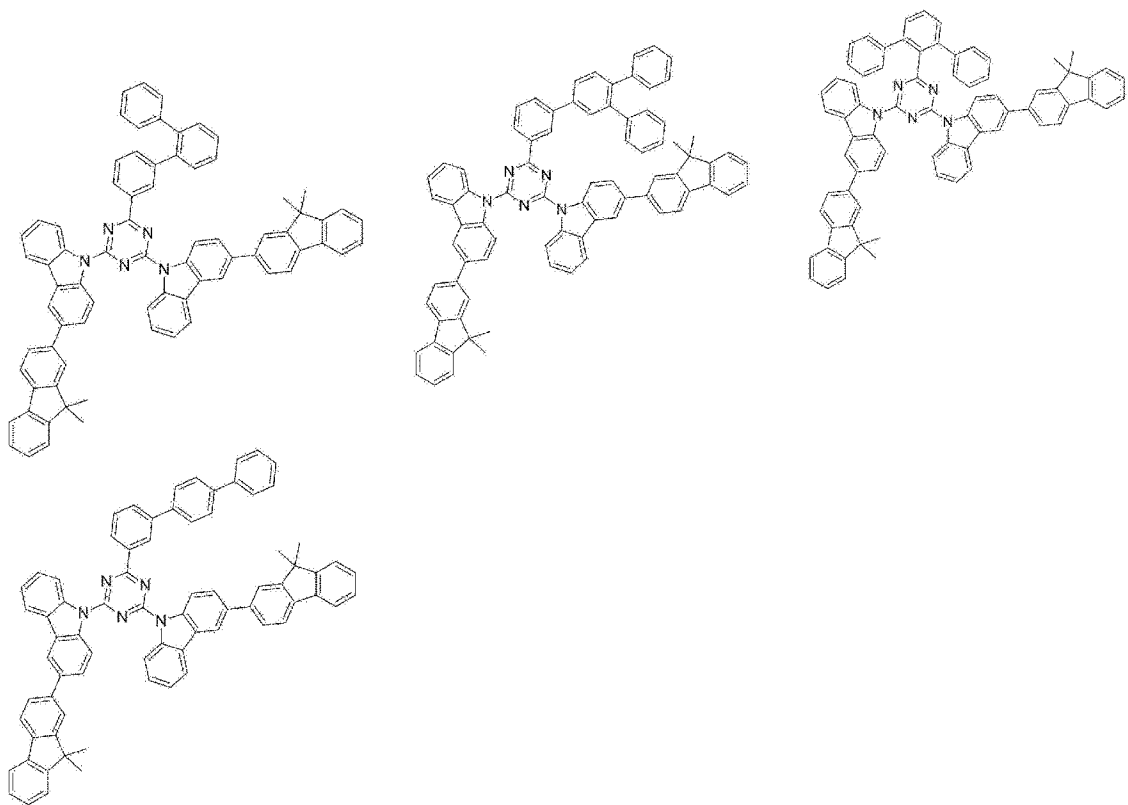


[0116]

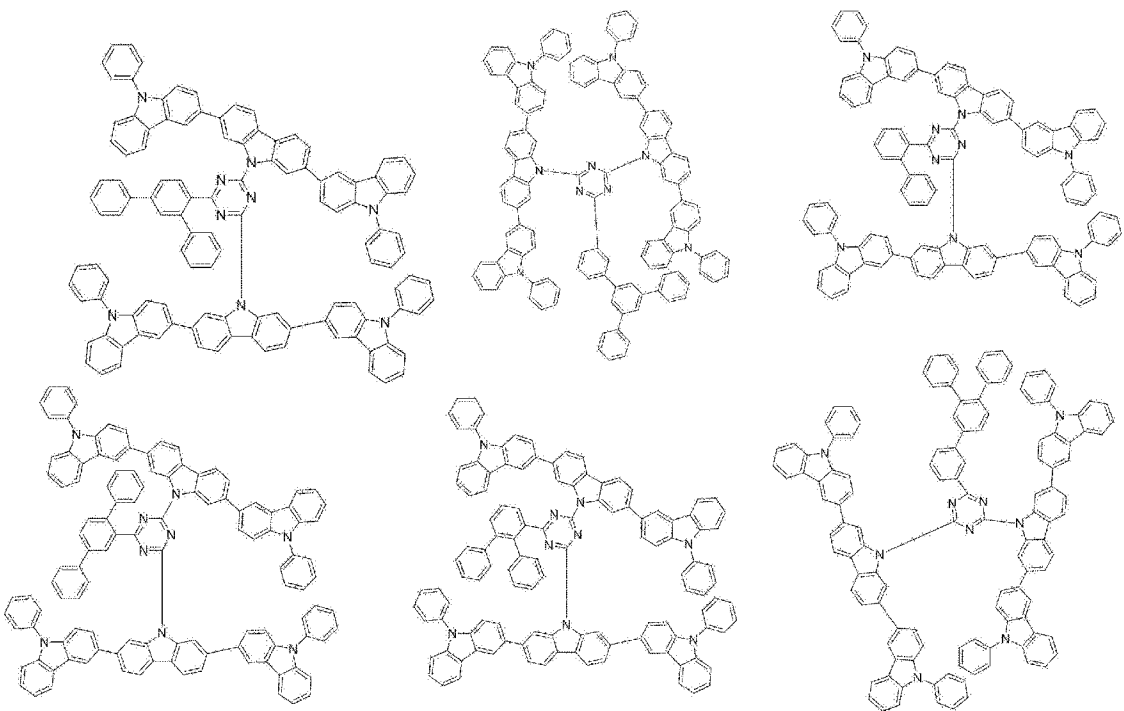
[化52]



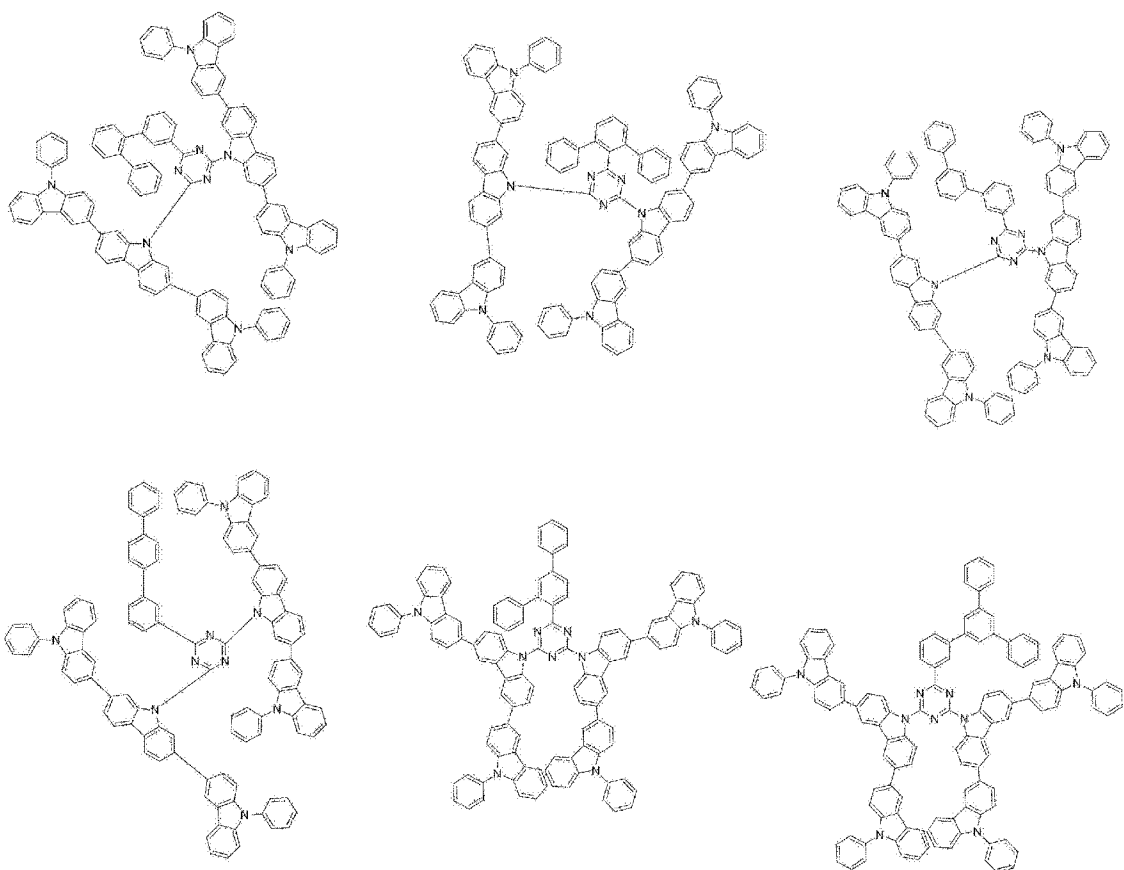
[0117] [化53]



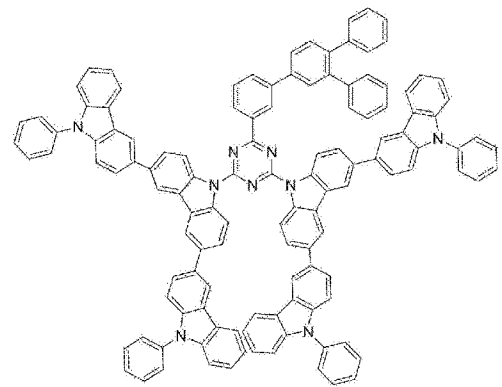
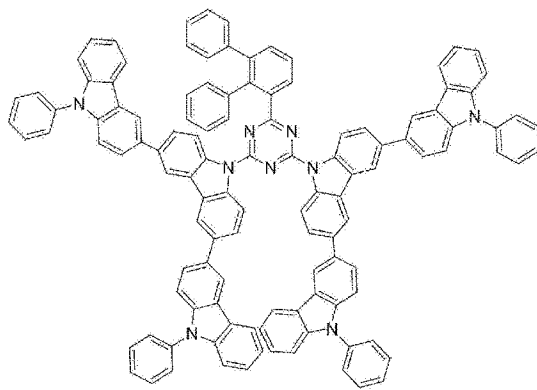
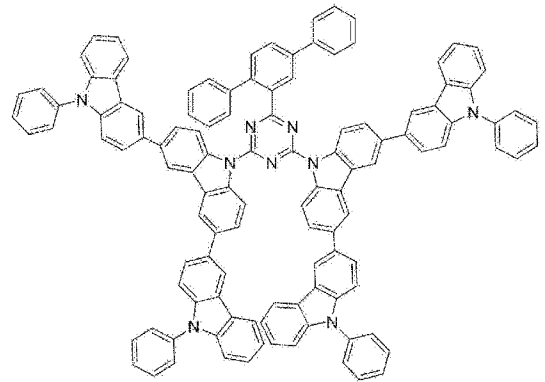
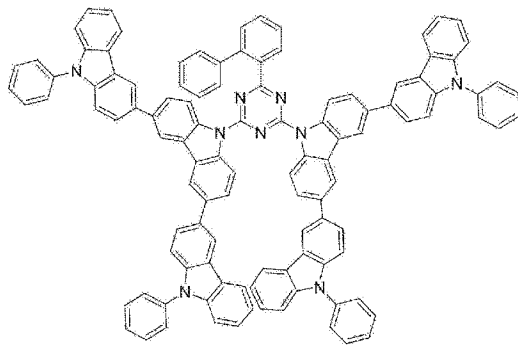
[0118] [化54]



[0119] [化55]

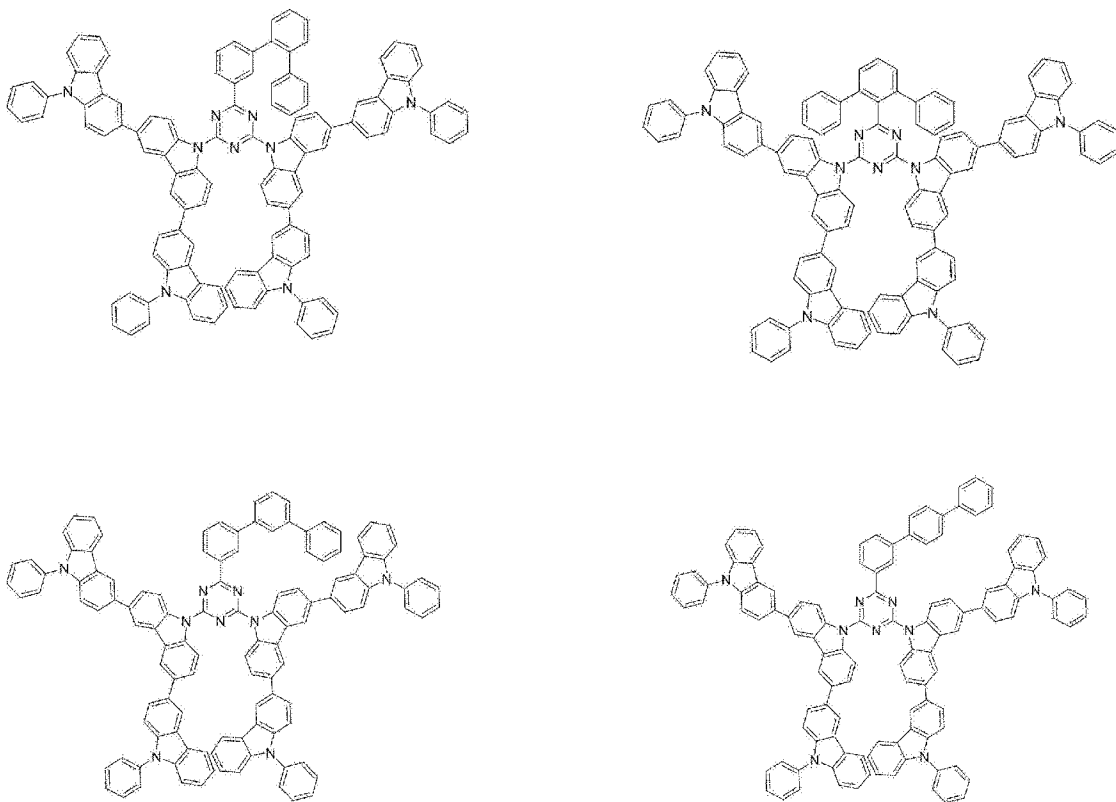


[0120] [化56]

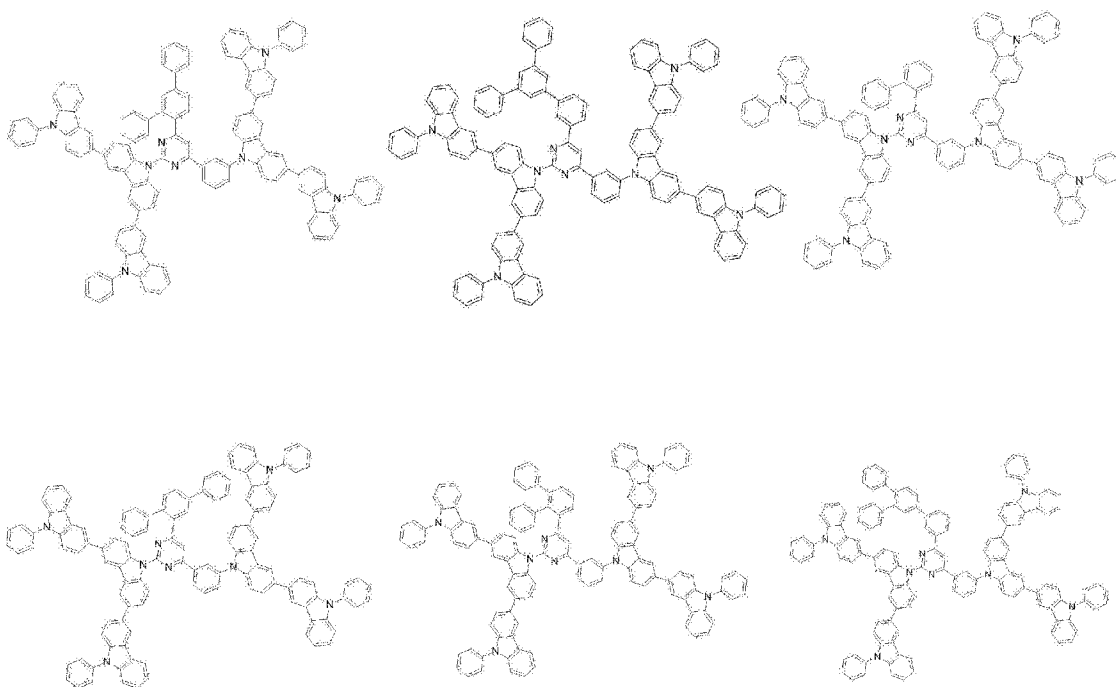


[0121]

[化57]

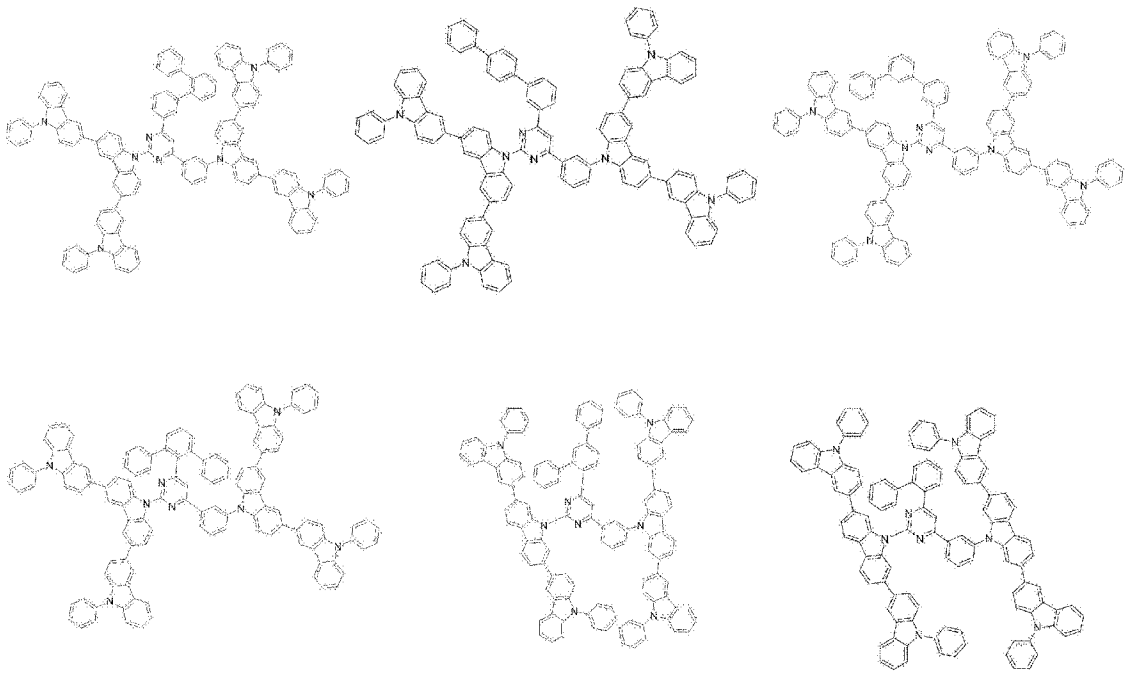


[0122] [化58]



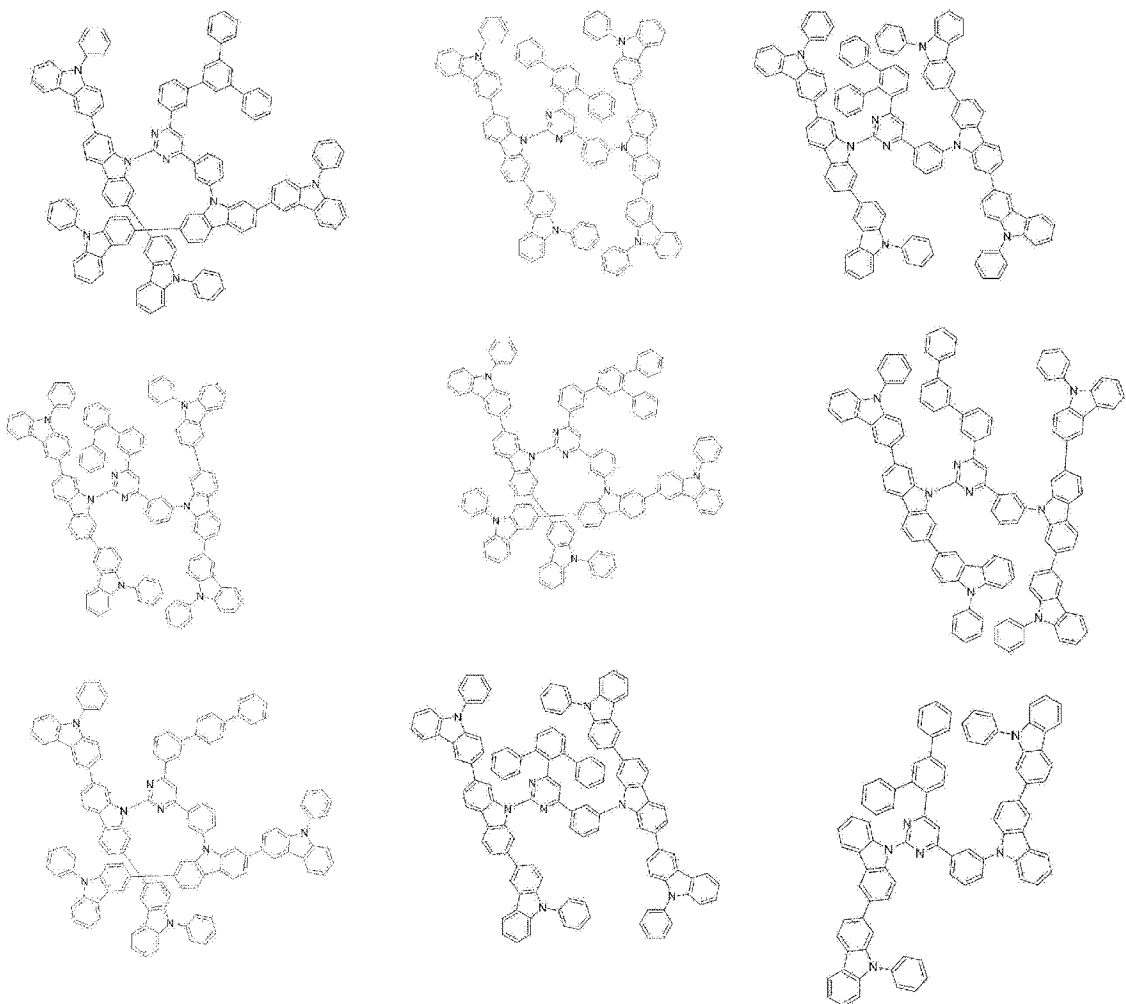
[0123]

[化59]



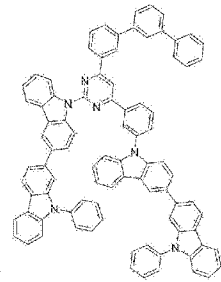
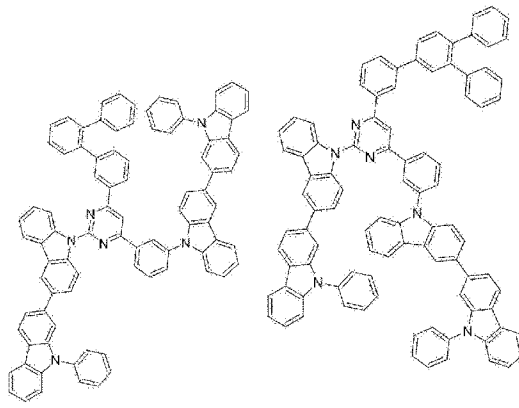
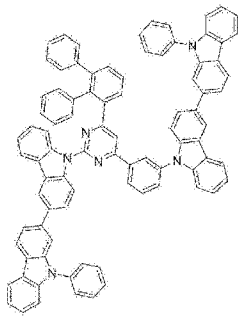
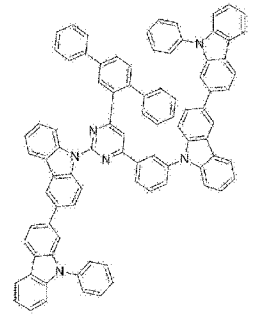
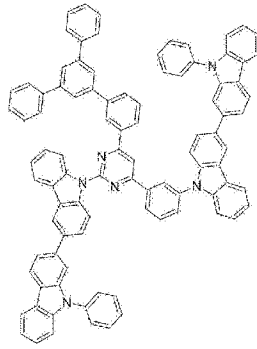
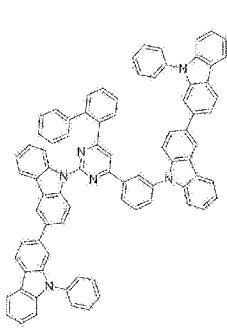
[0124]

[化60]



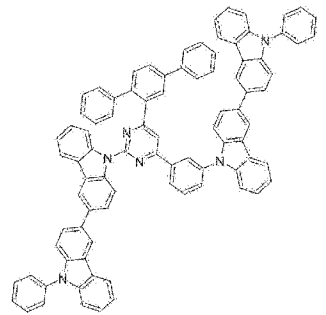
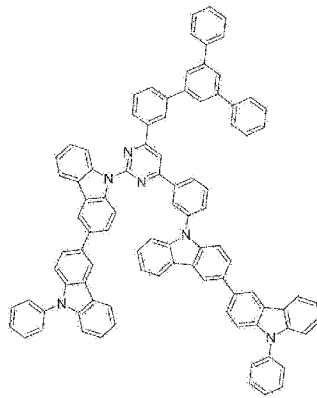
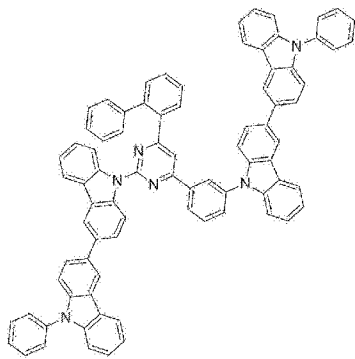
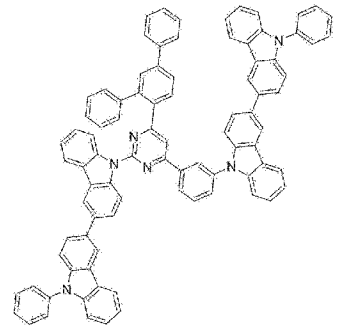
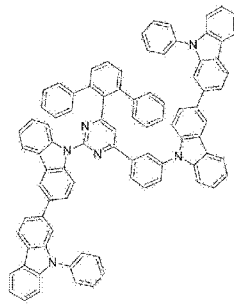
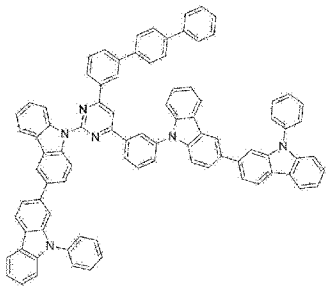
[0125]

[化61]



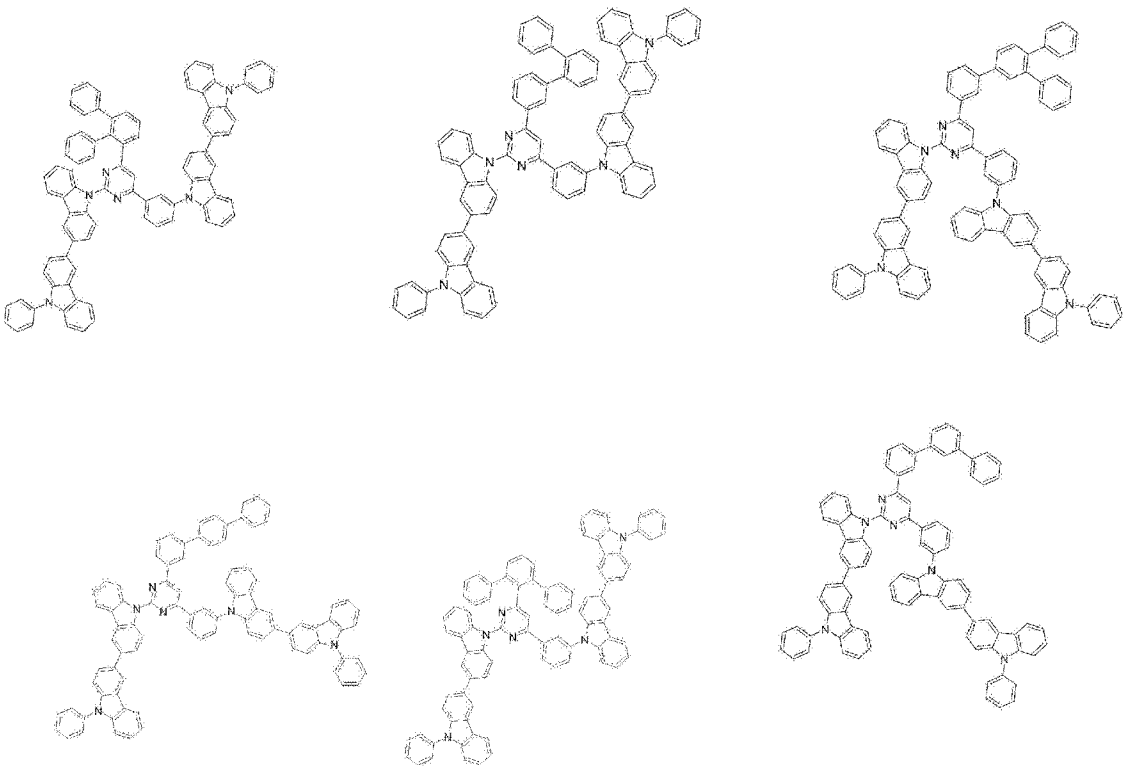
[0126]

[化62]

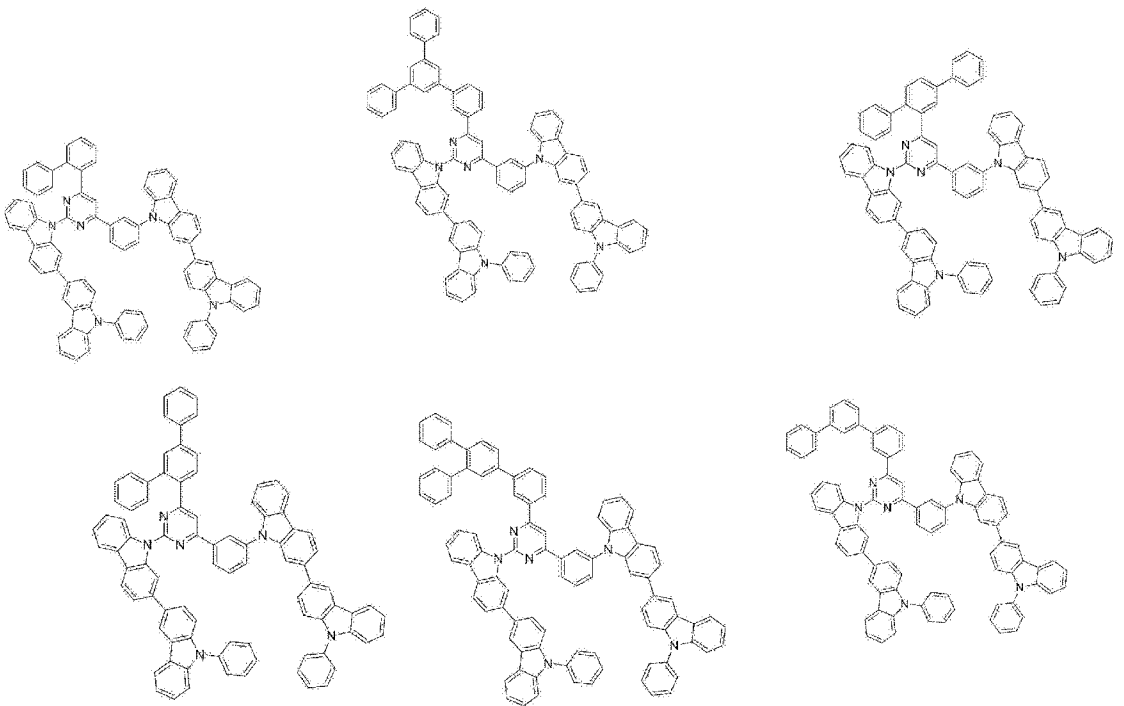


[0127]

[化63]

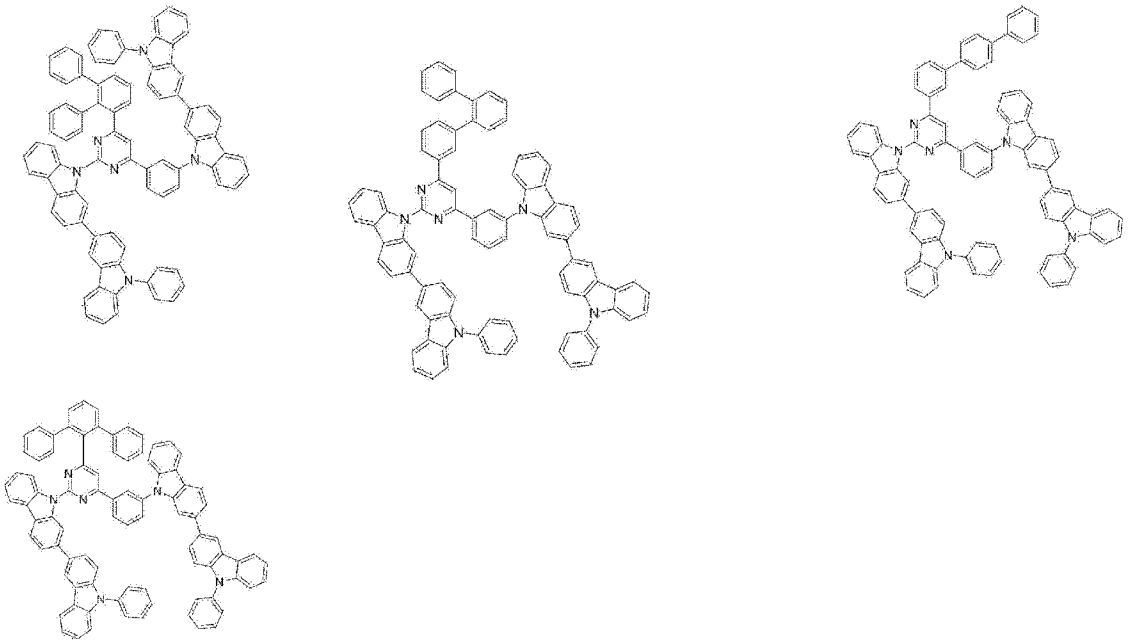


[0128] [化64]

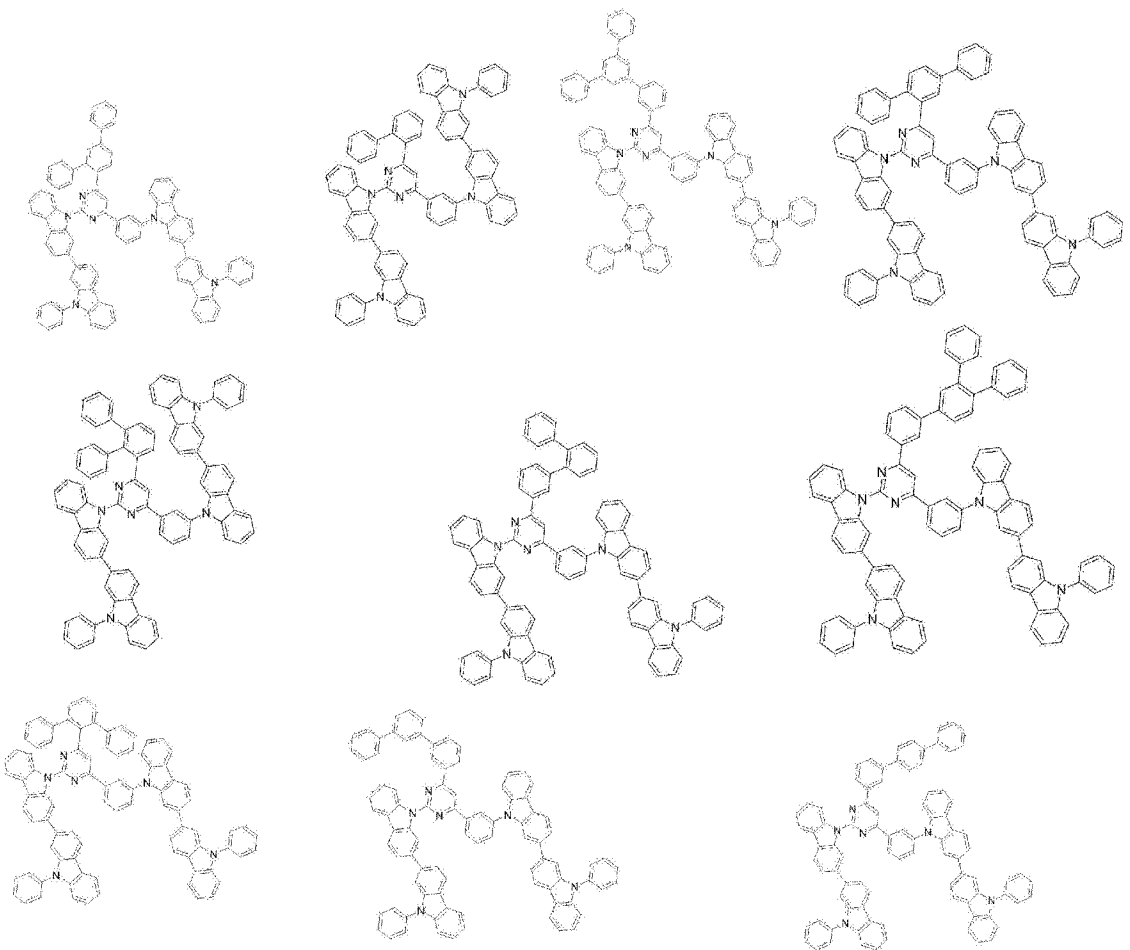


[0129]

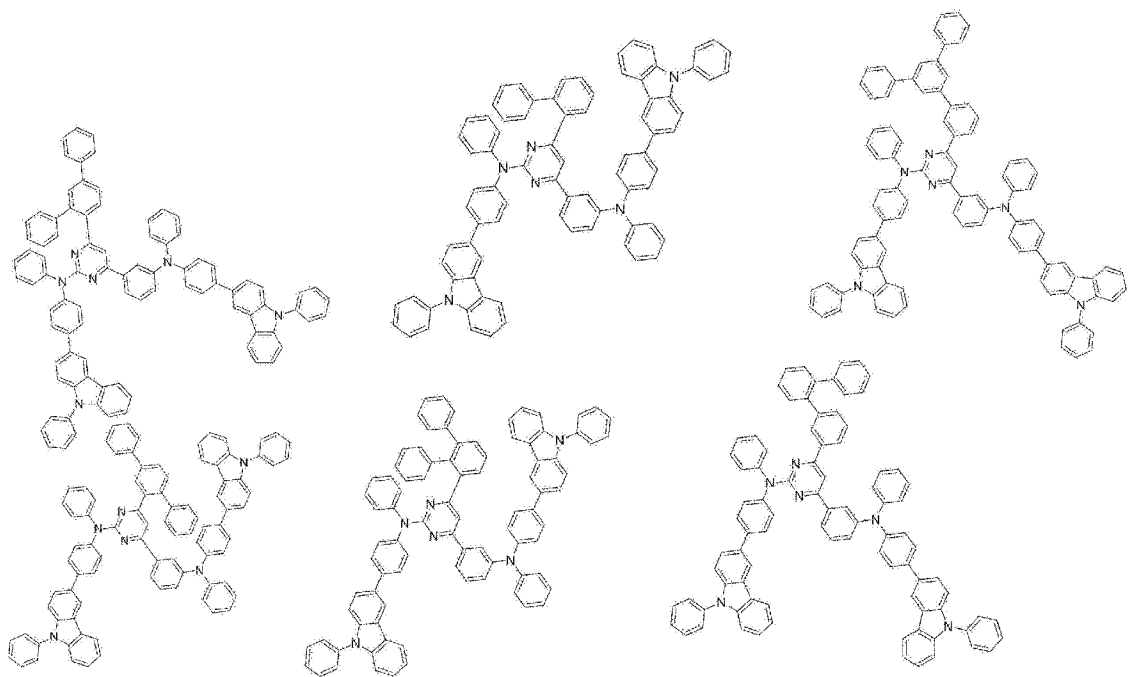
[化65]



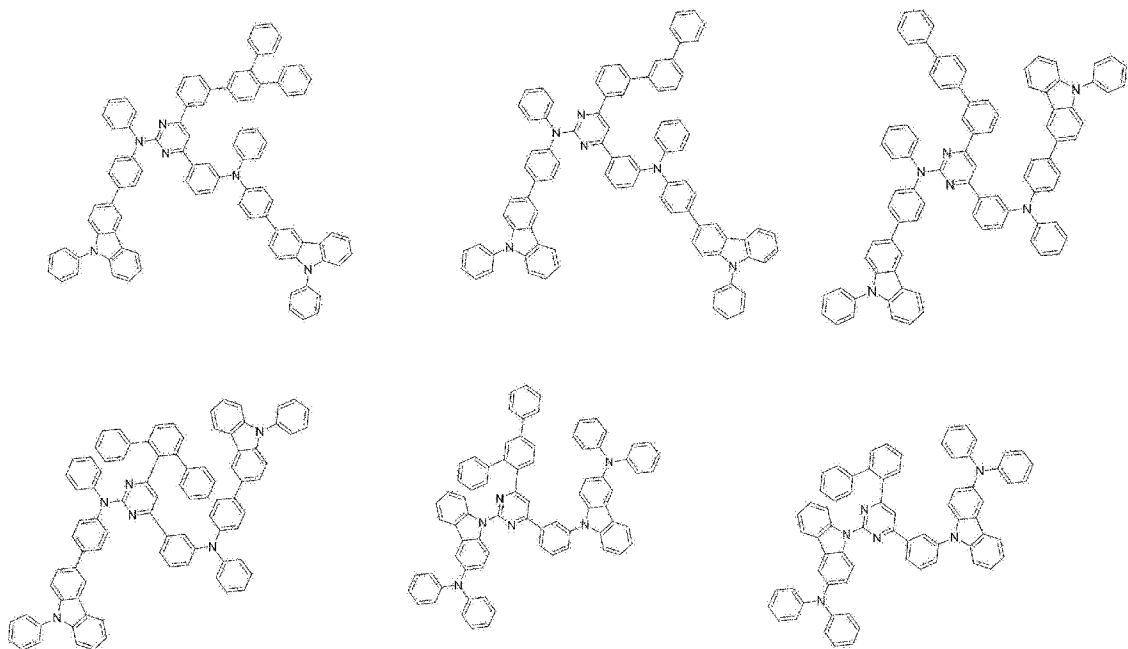
[0130] [化66]



[0131] [化67]

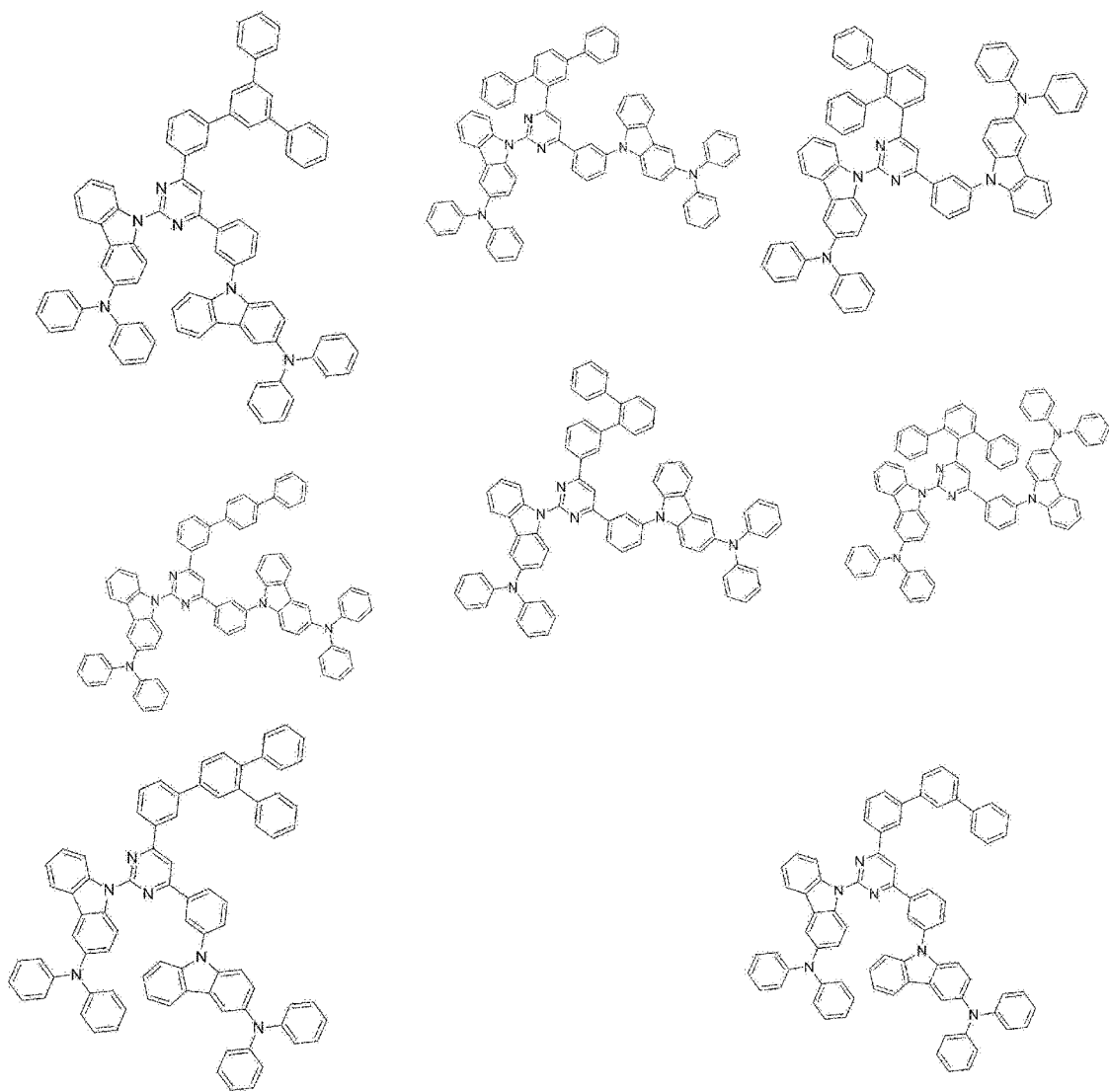


[0132] [化68]



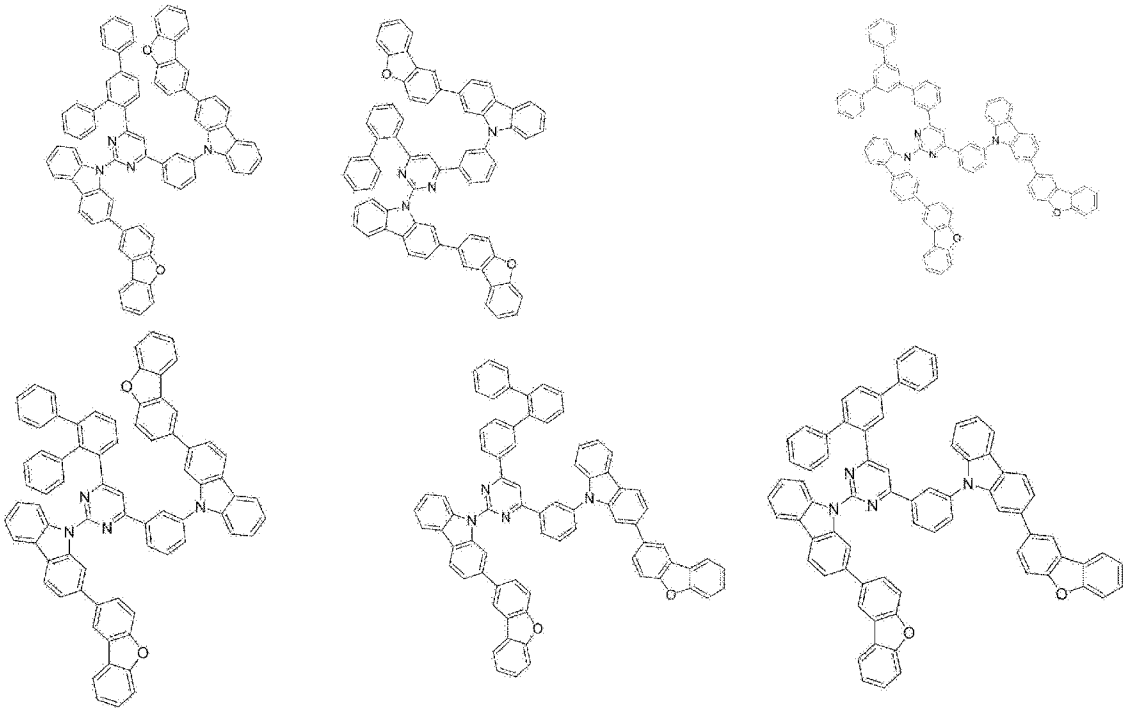
[0133]

[化69]

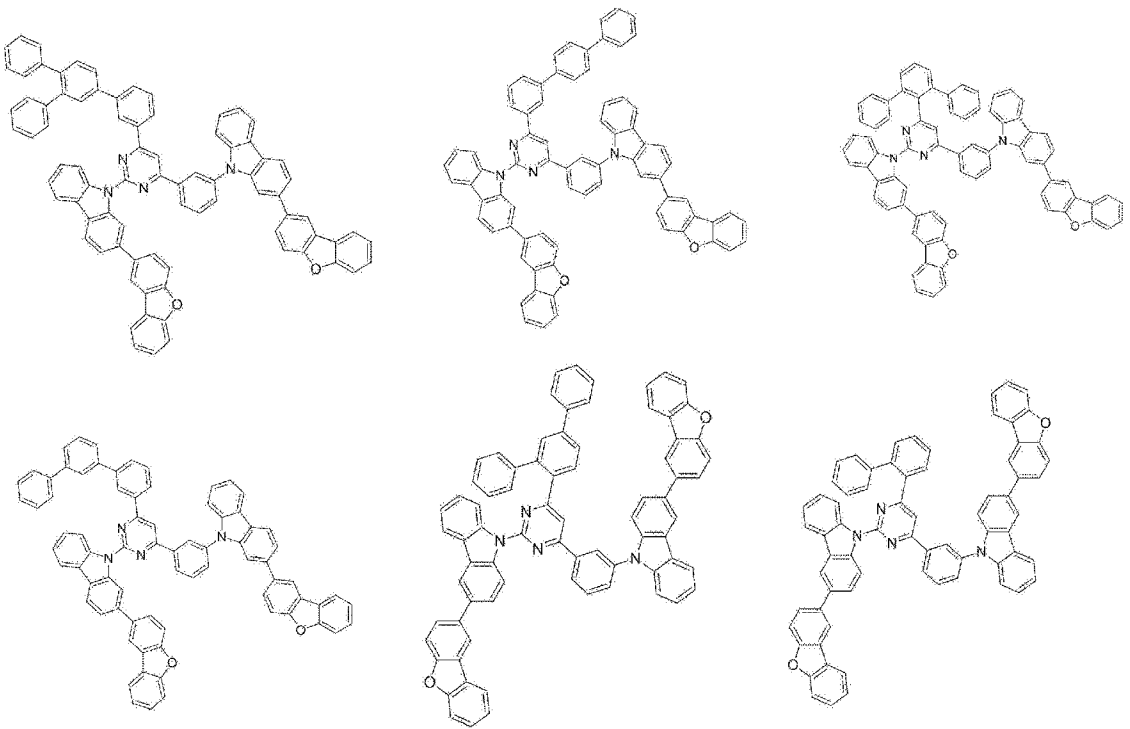


[0134]

[化70]

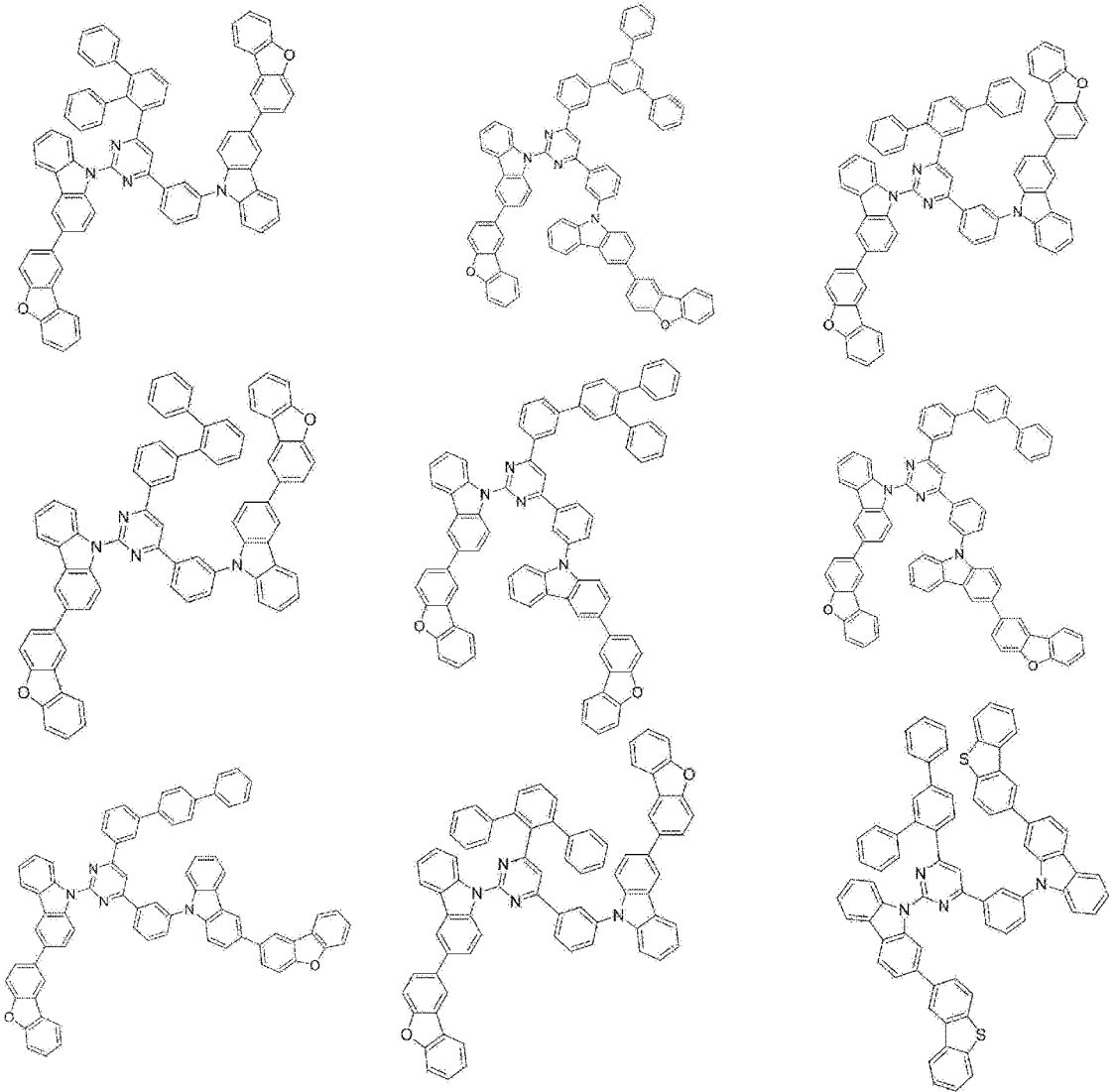


[0135] [化71]



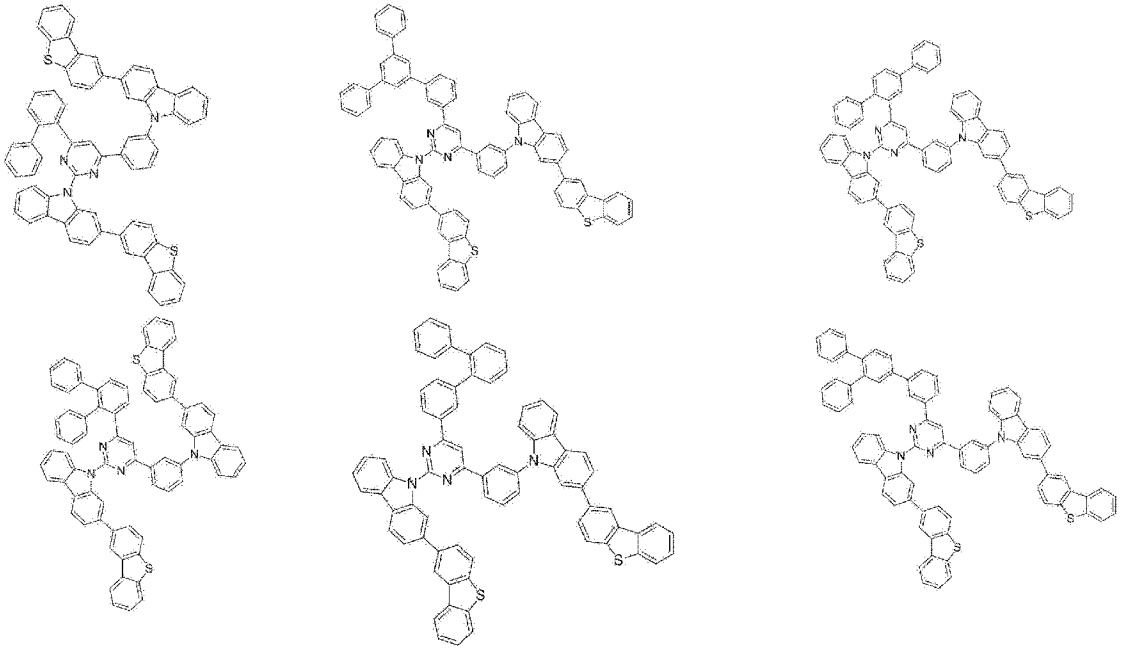
[0136]

[化72]

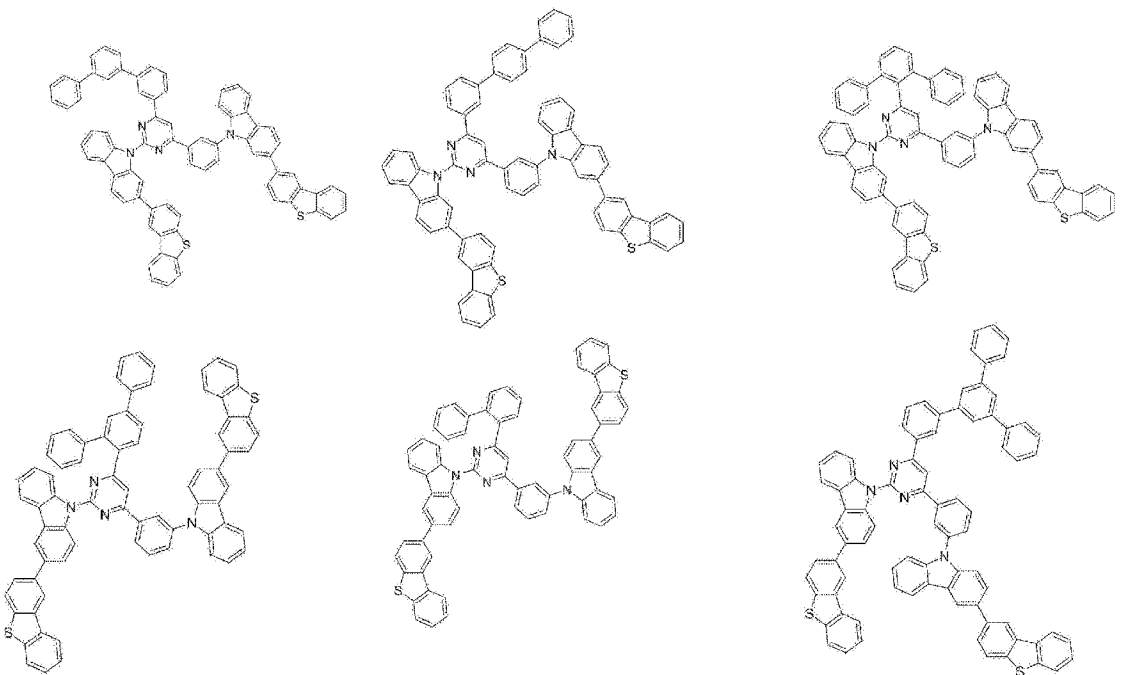


[0137]

[化73]

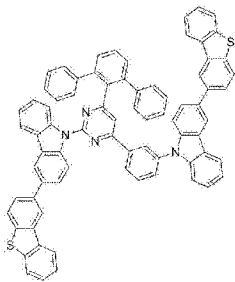
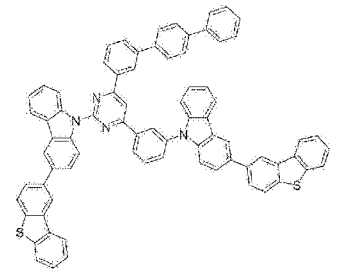
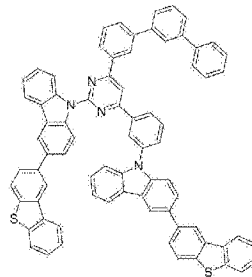
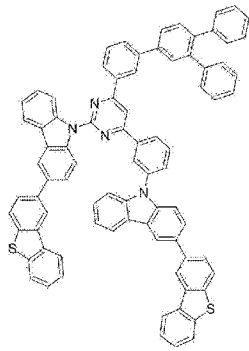
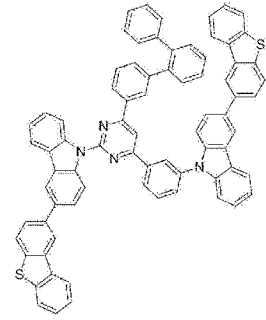
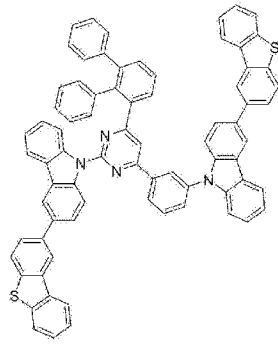
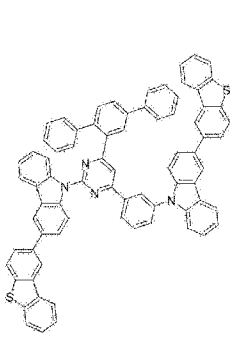


[0138] [化74]



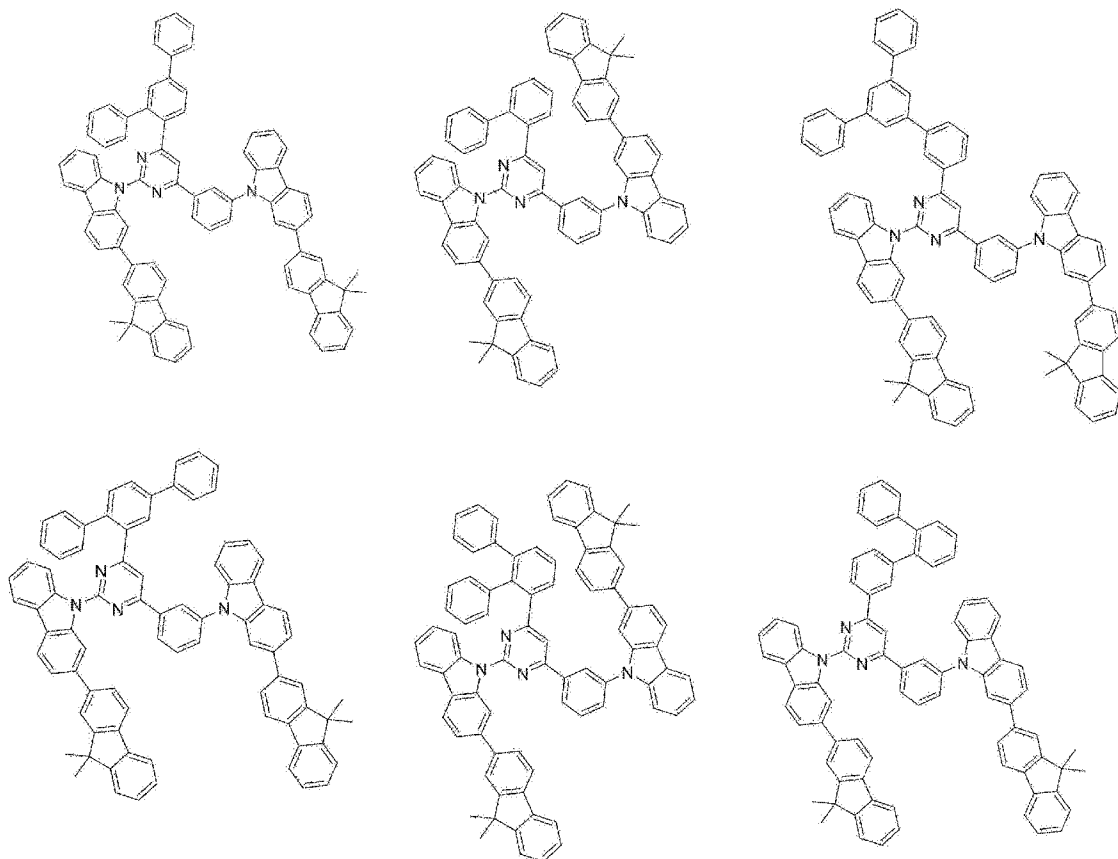
[0139]

[化75]



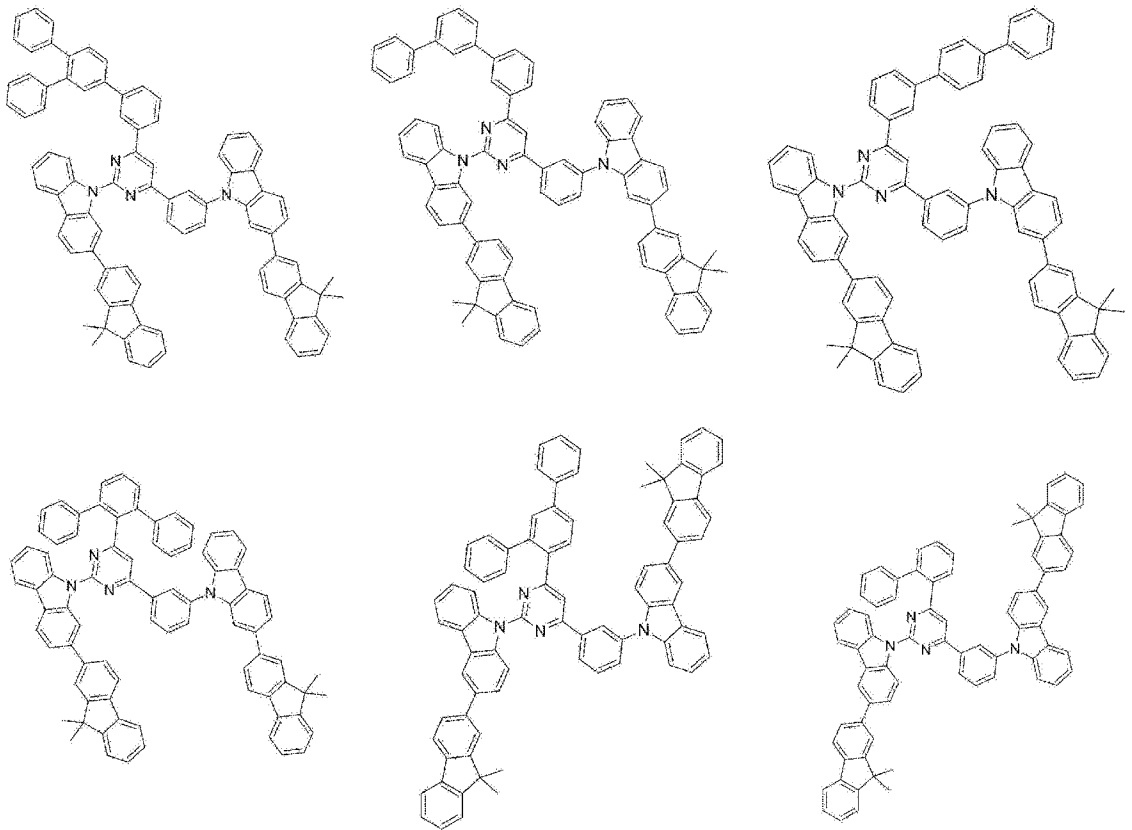
[0140]

[化76]



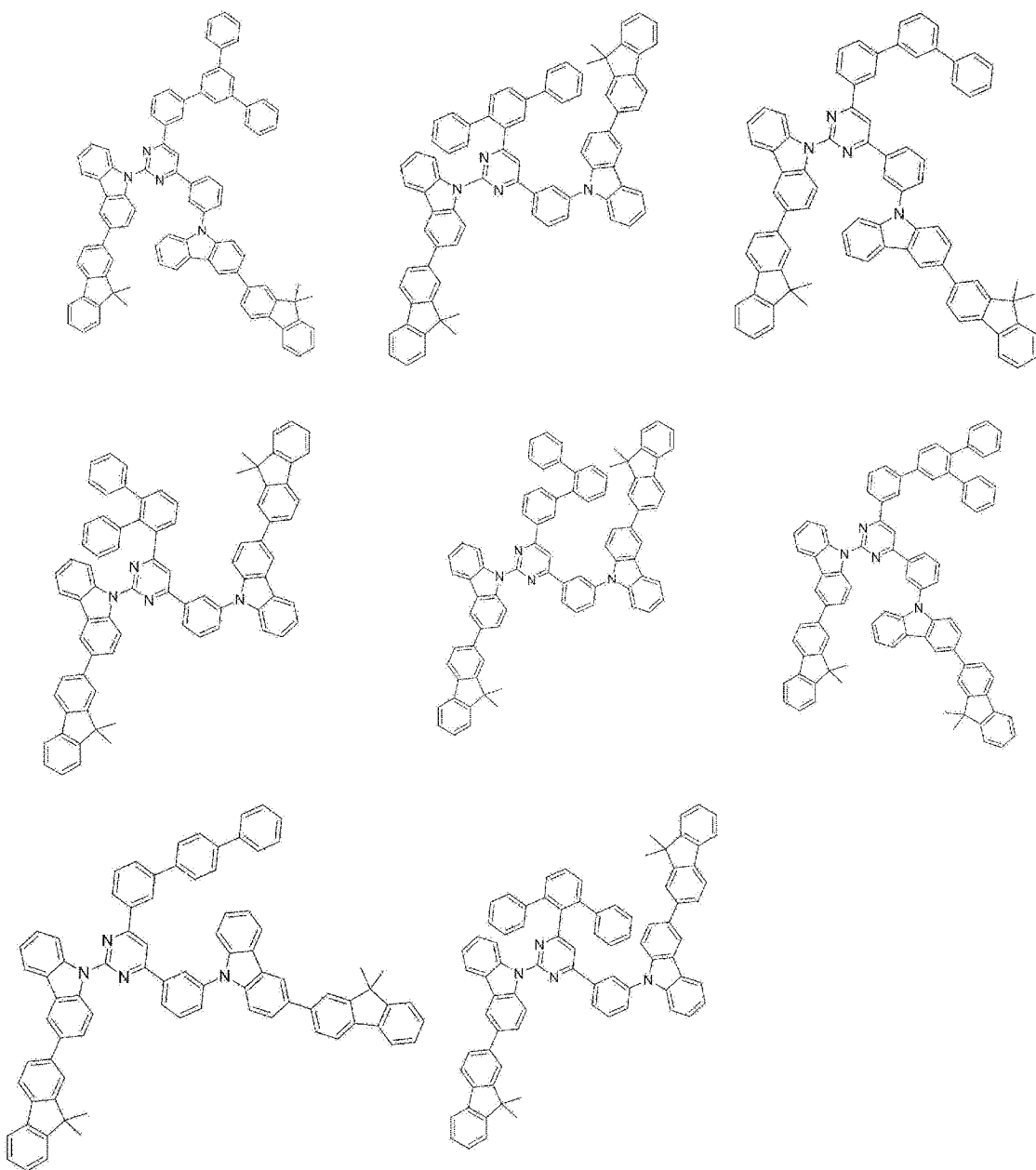
[0141]

[化77]



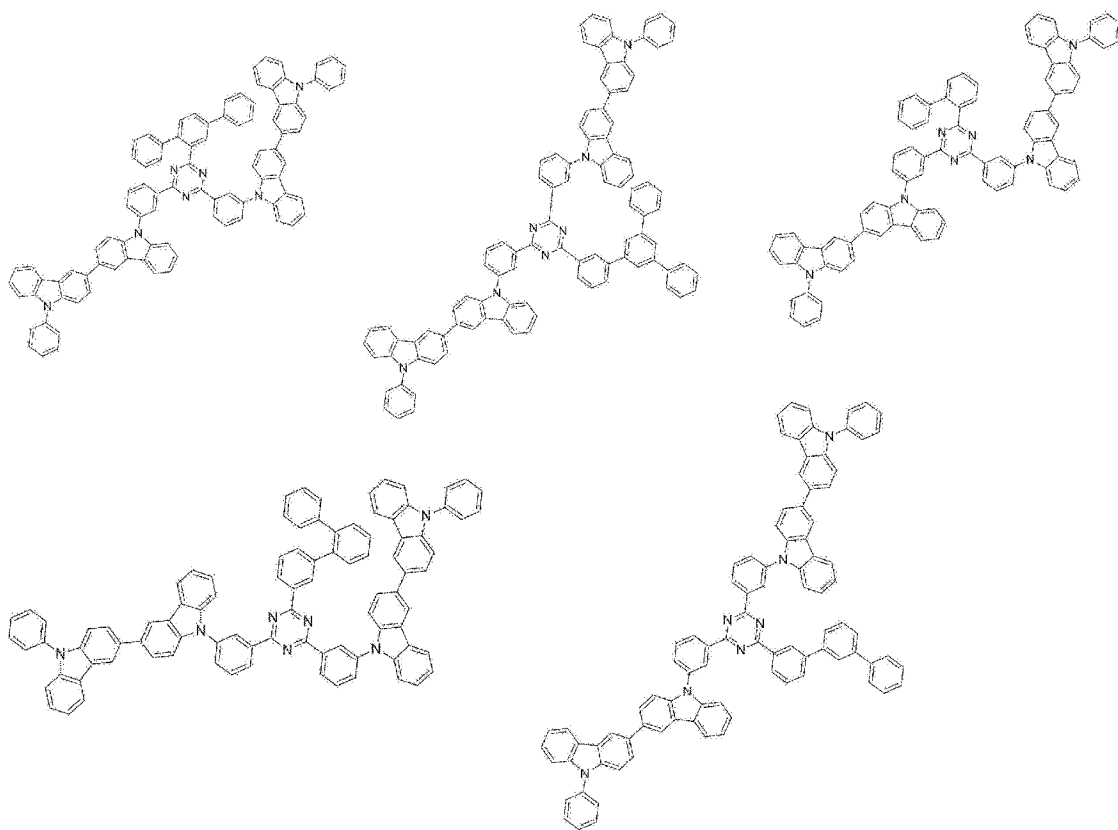
[0142]

[化78]



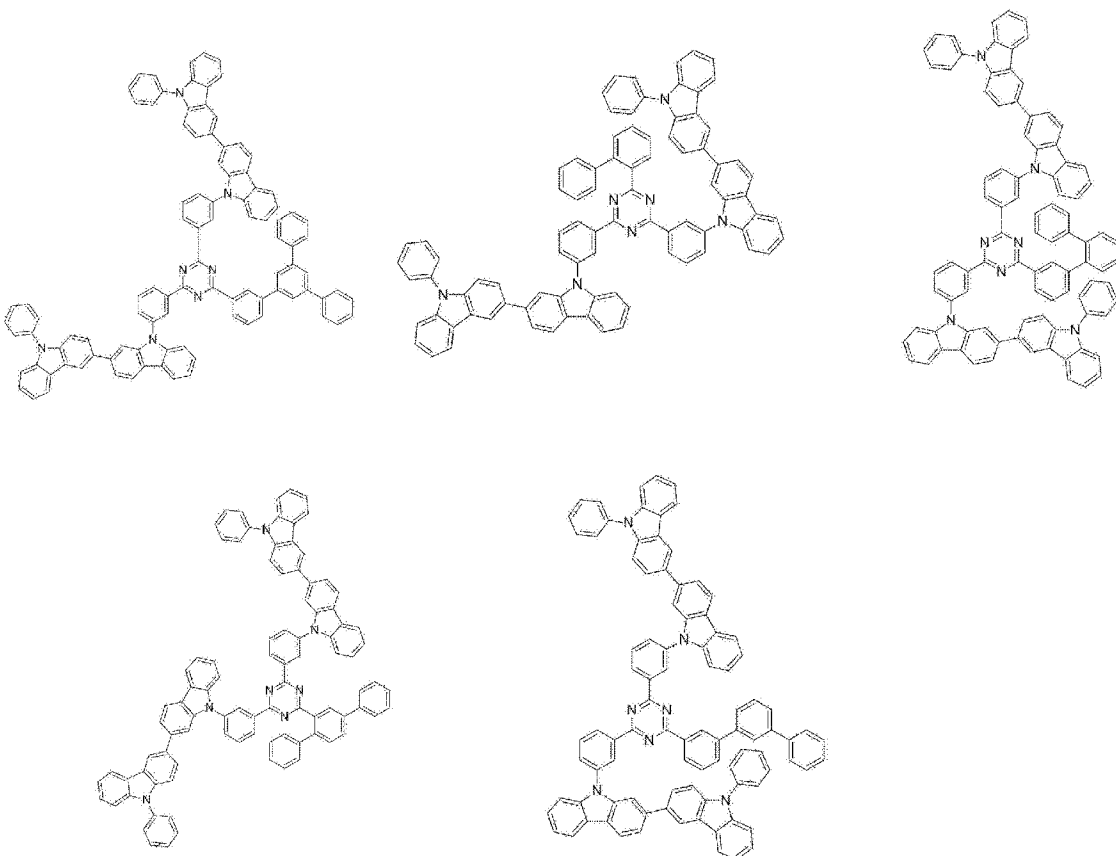
[0143]

[化79]

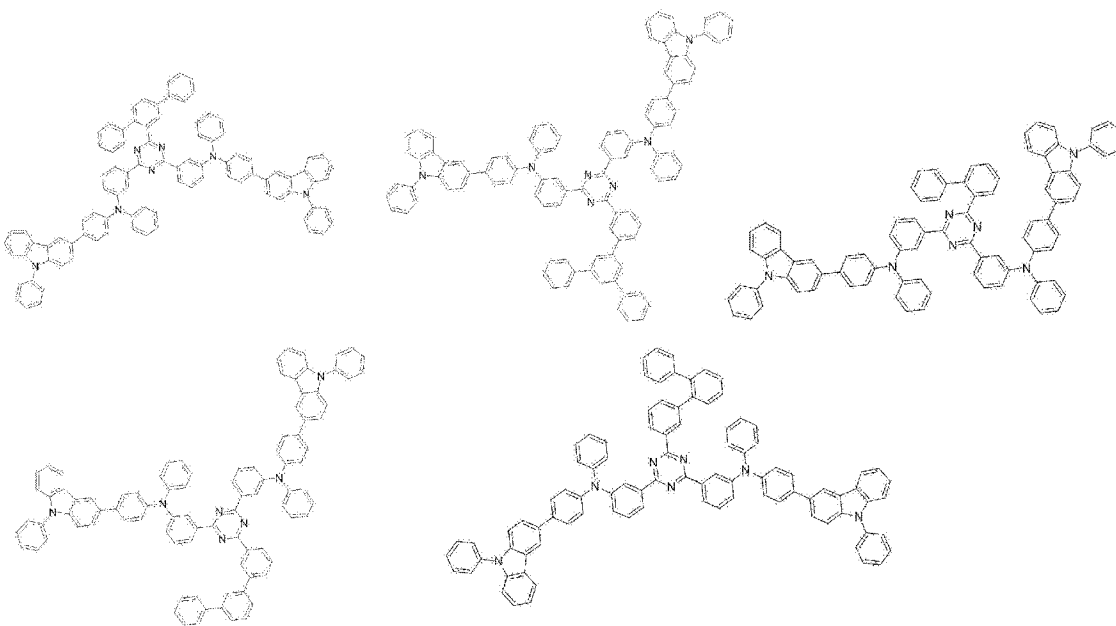


[0144]

[化80]

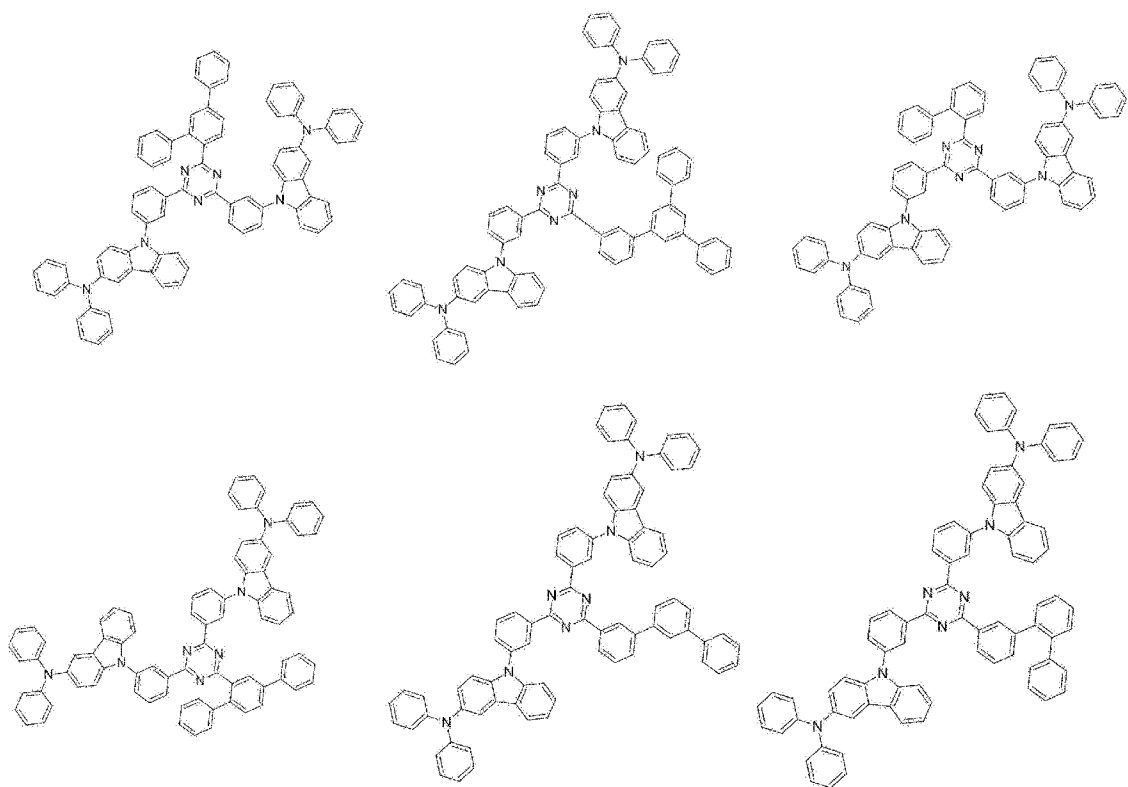


[0145] [化81]

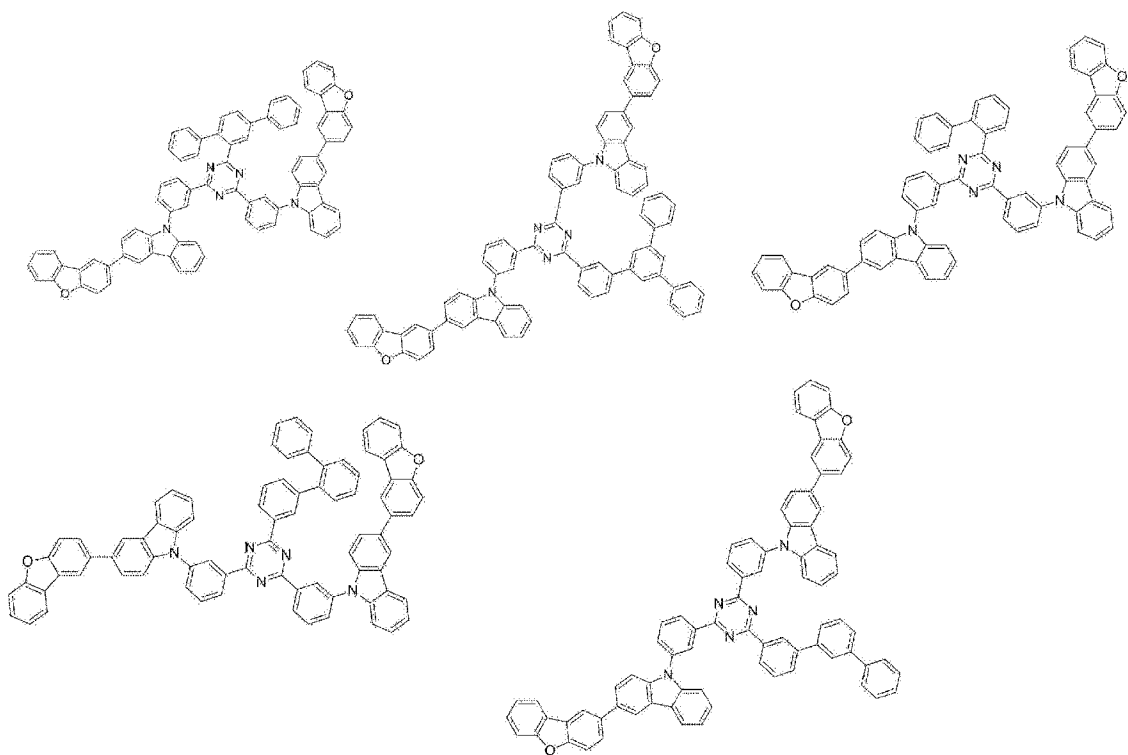


[0146]

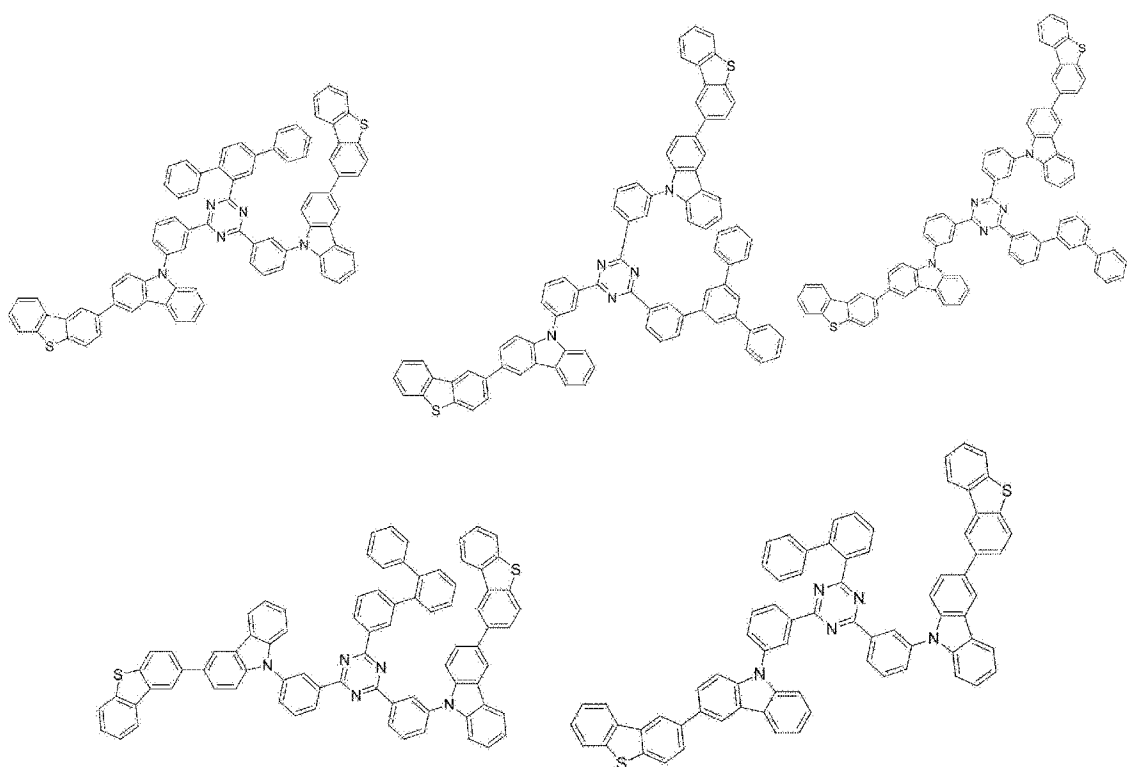
[化82]



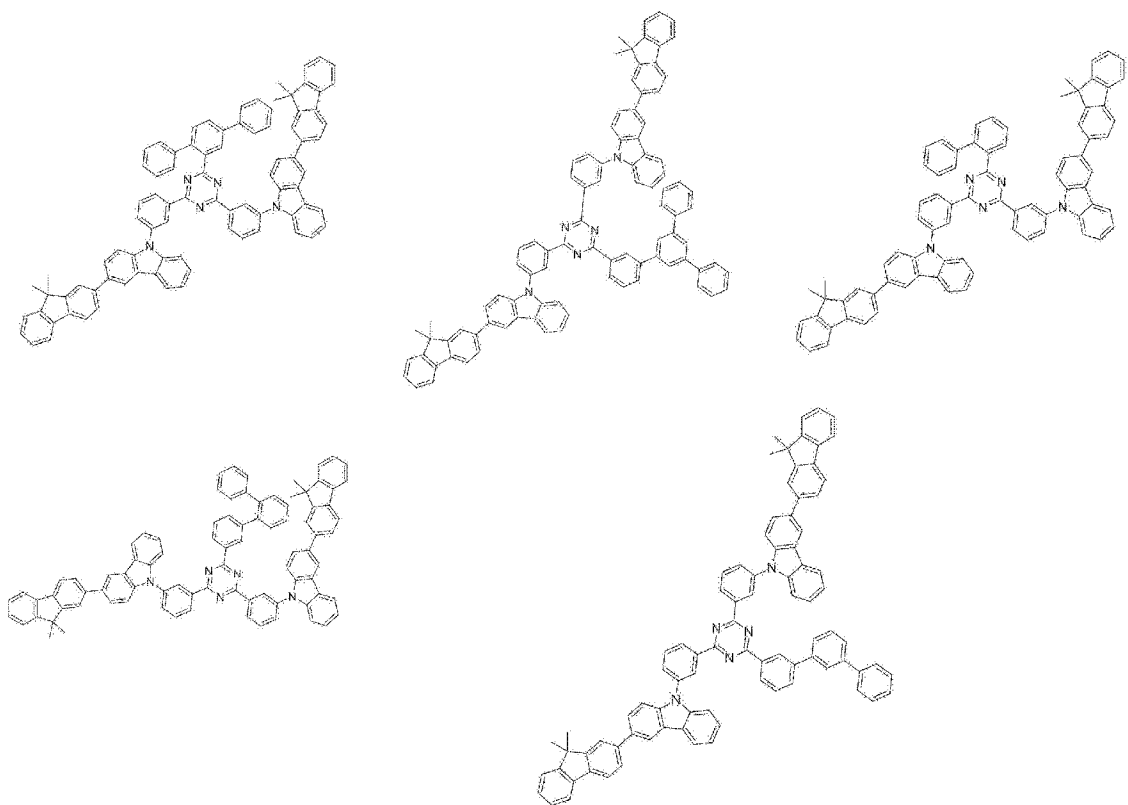
[0147] [化83]



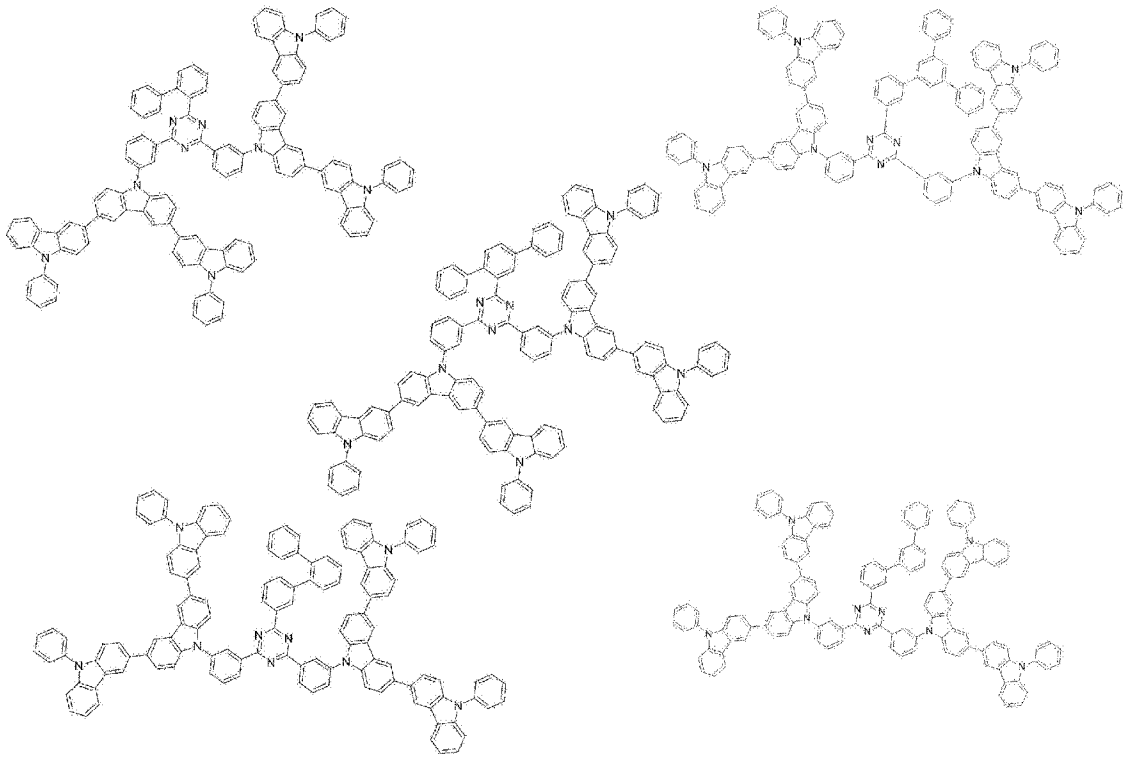
[0148] [化84]



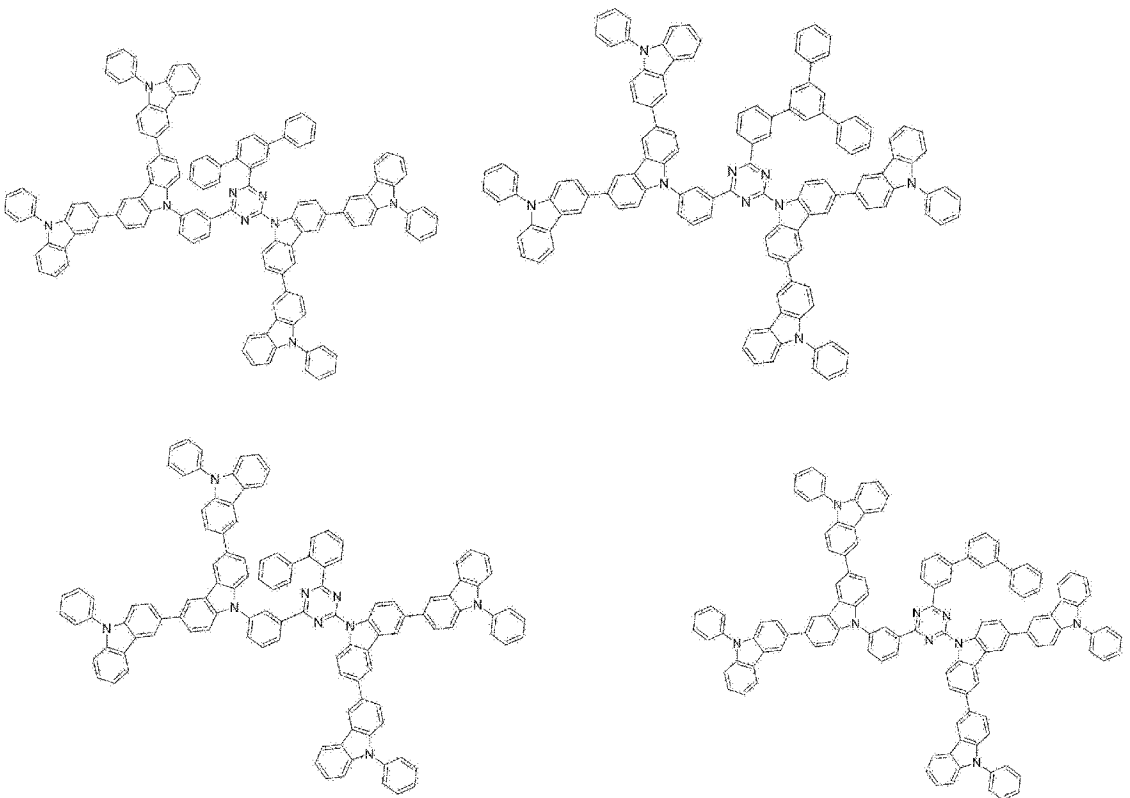
[0149] [化85]



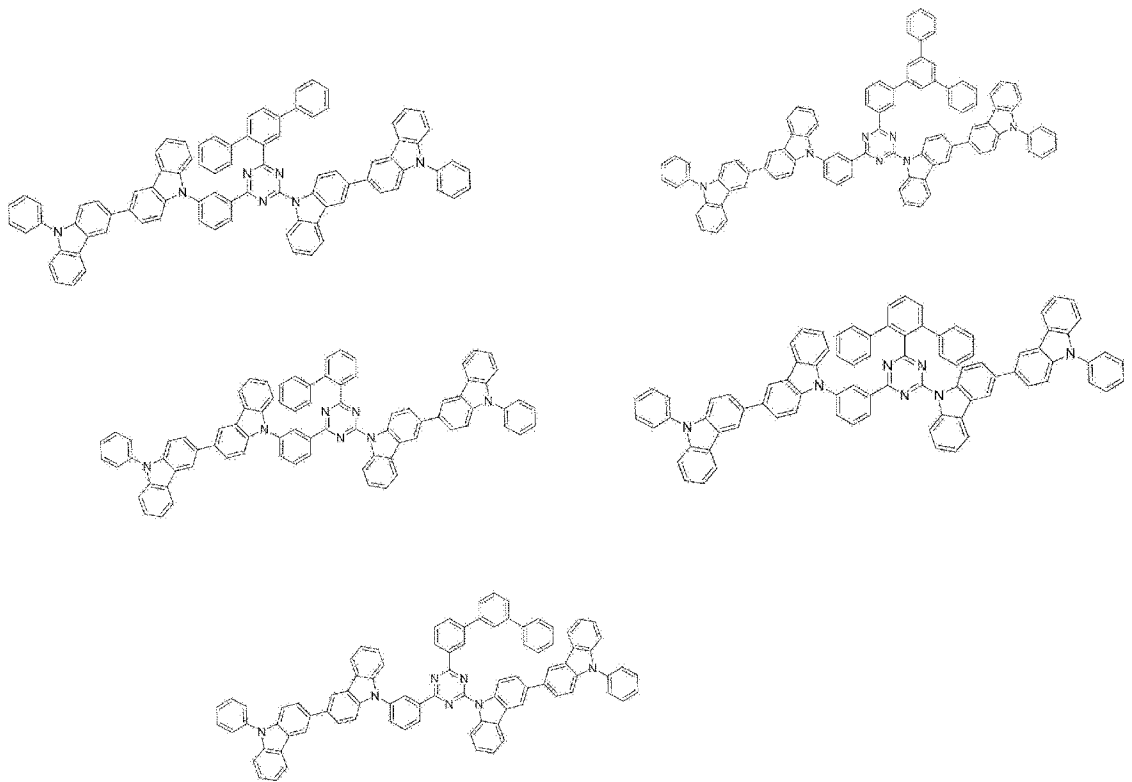
[0150] [化86]



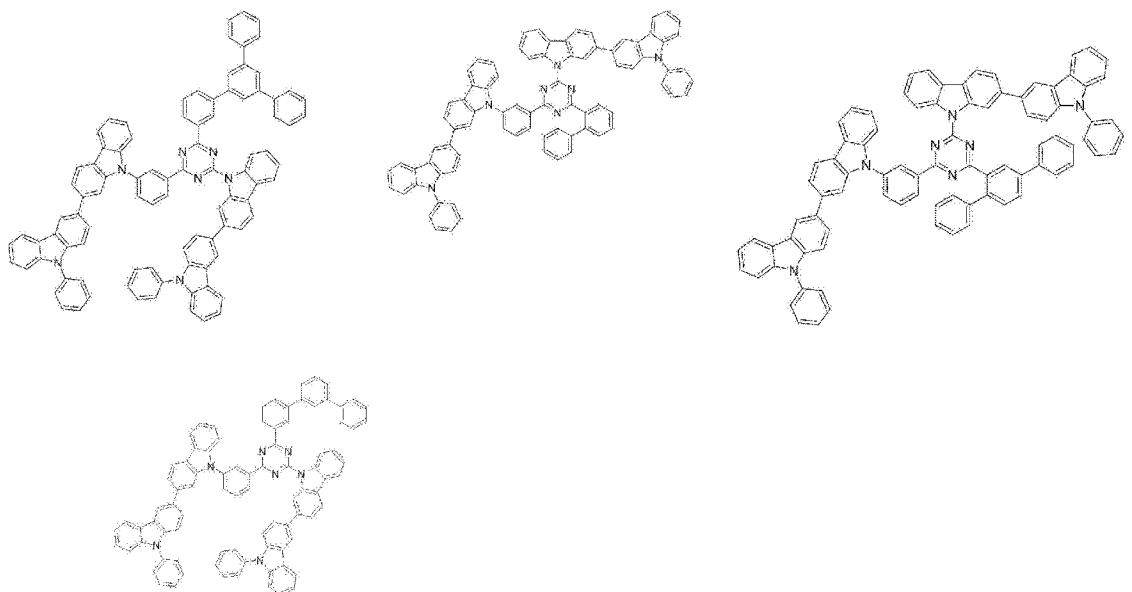
[0151] [化87]



[0152] [化88]

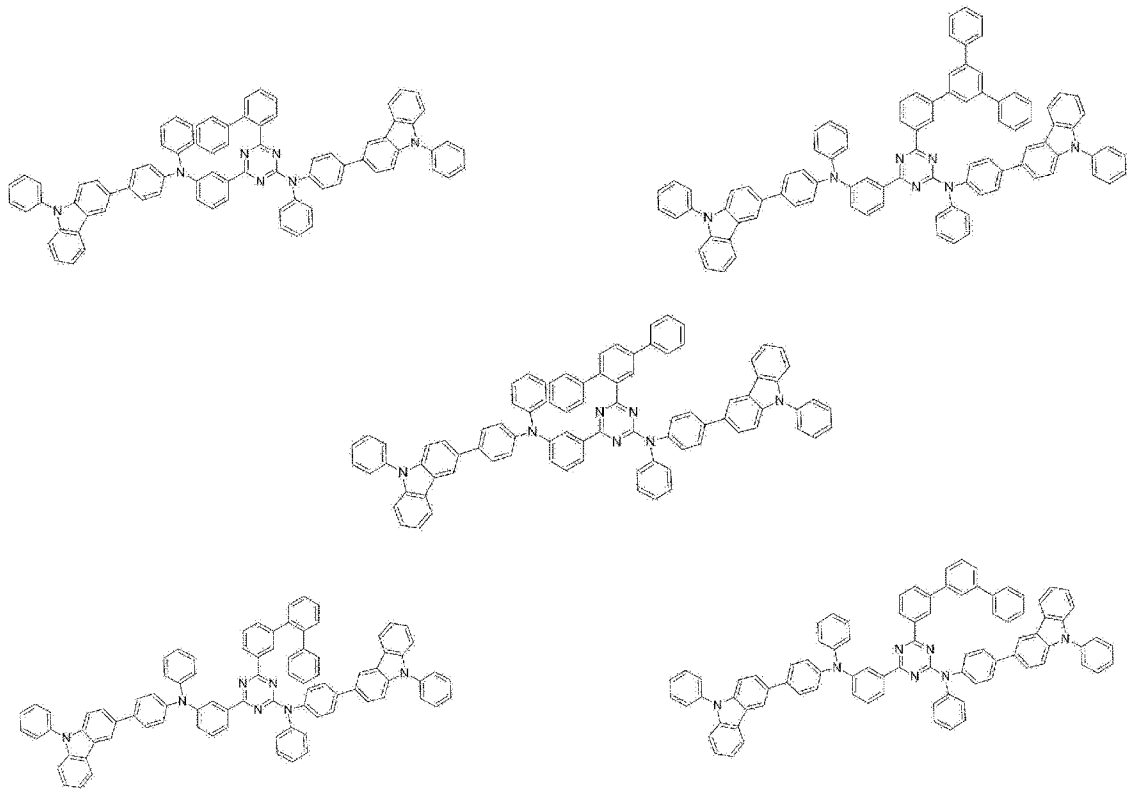


[0153] [化89]

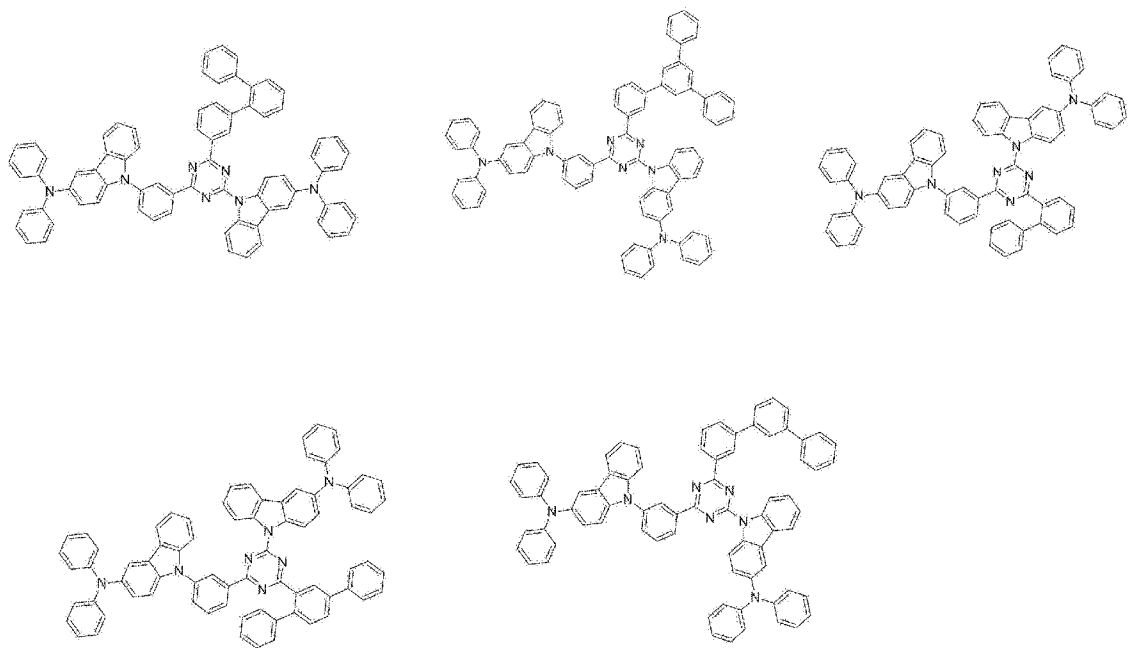


[0154]

[化90]

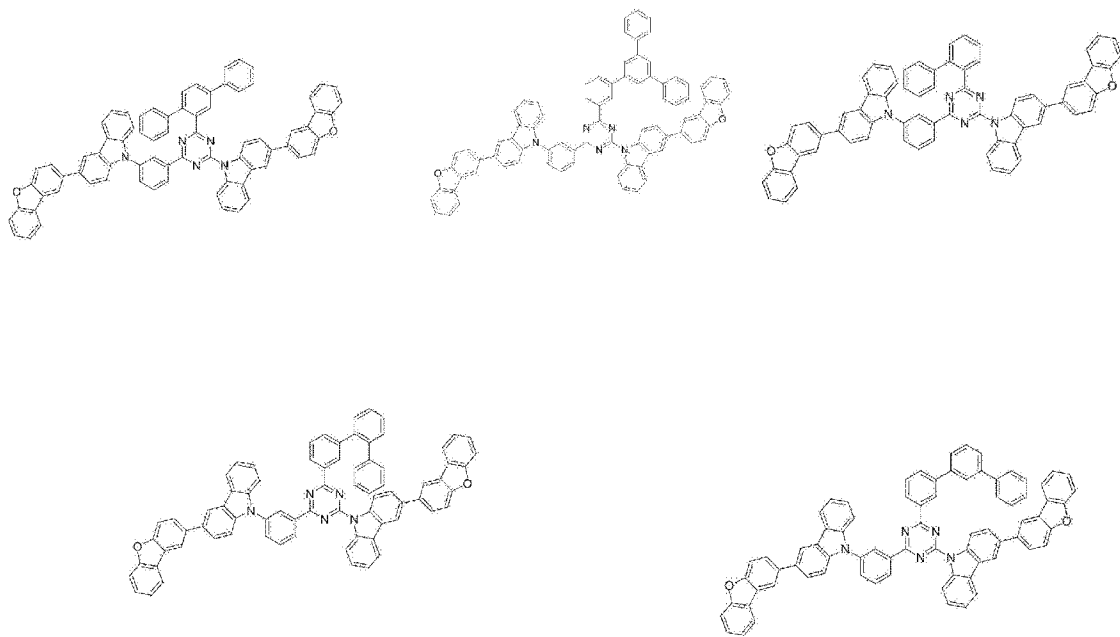


[0155] [化91]

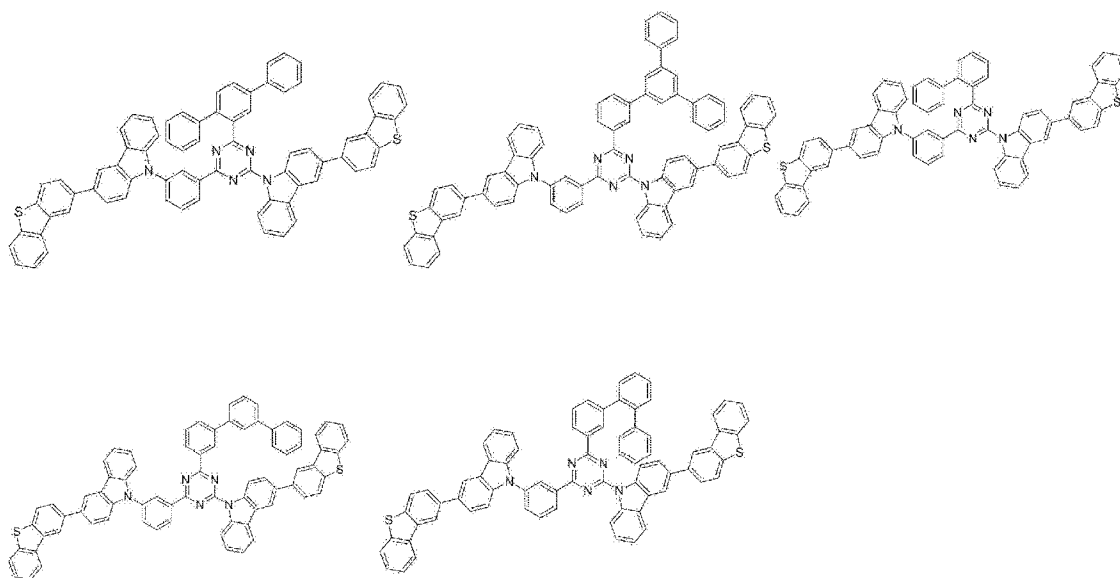


[0156]

[化92]

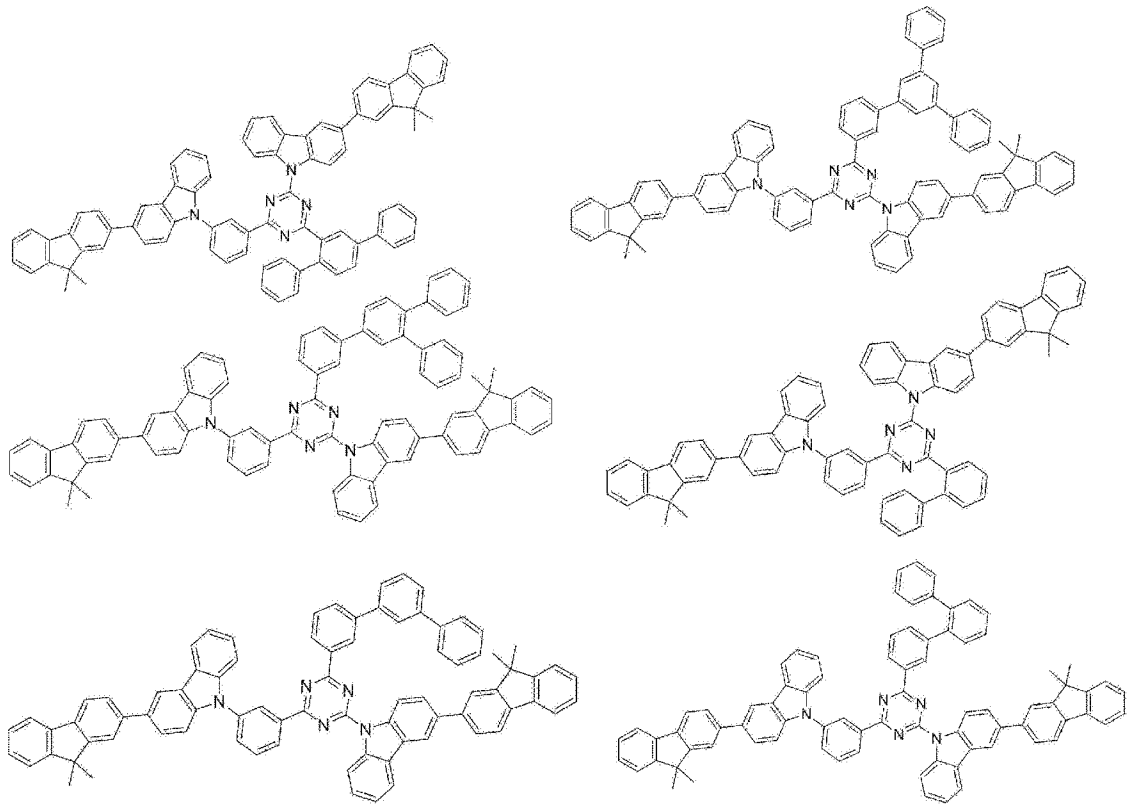


[0157] [化93]

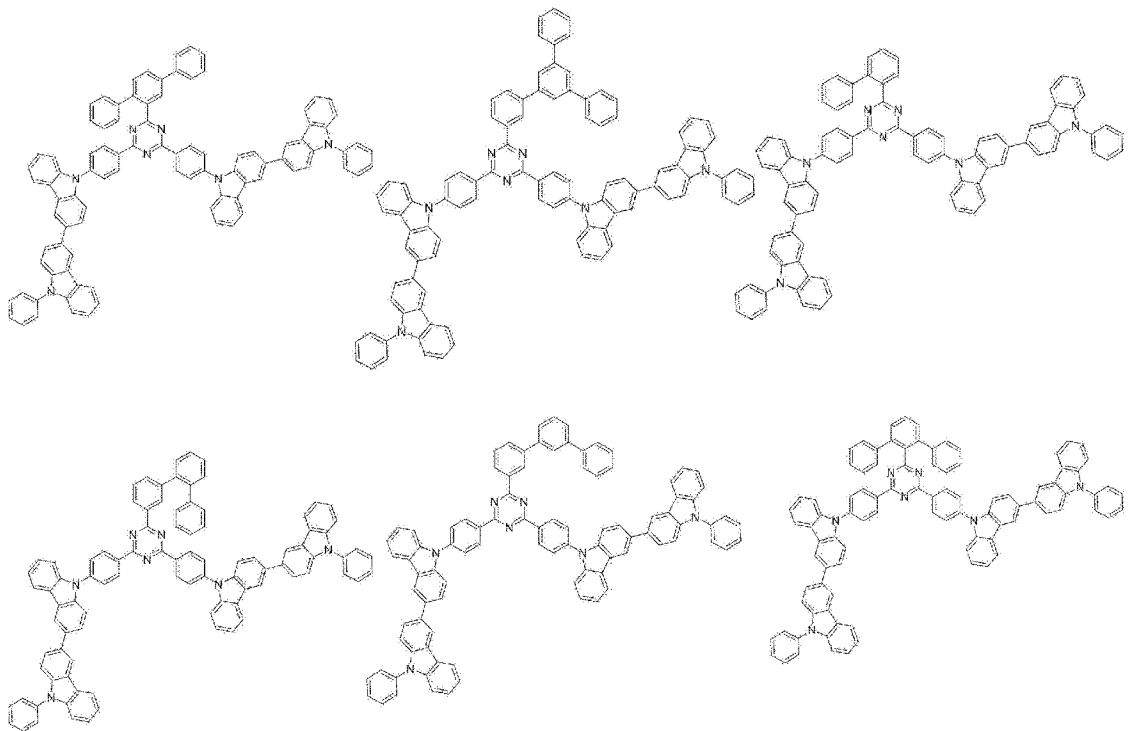


[0158]

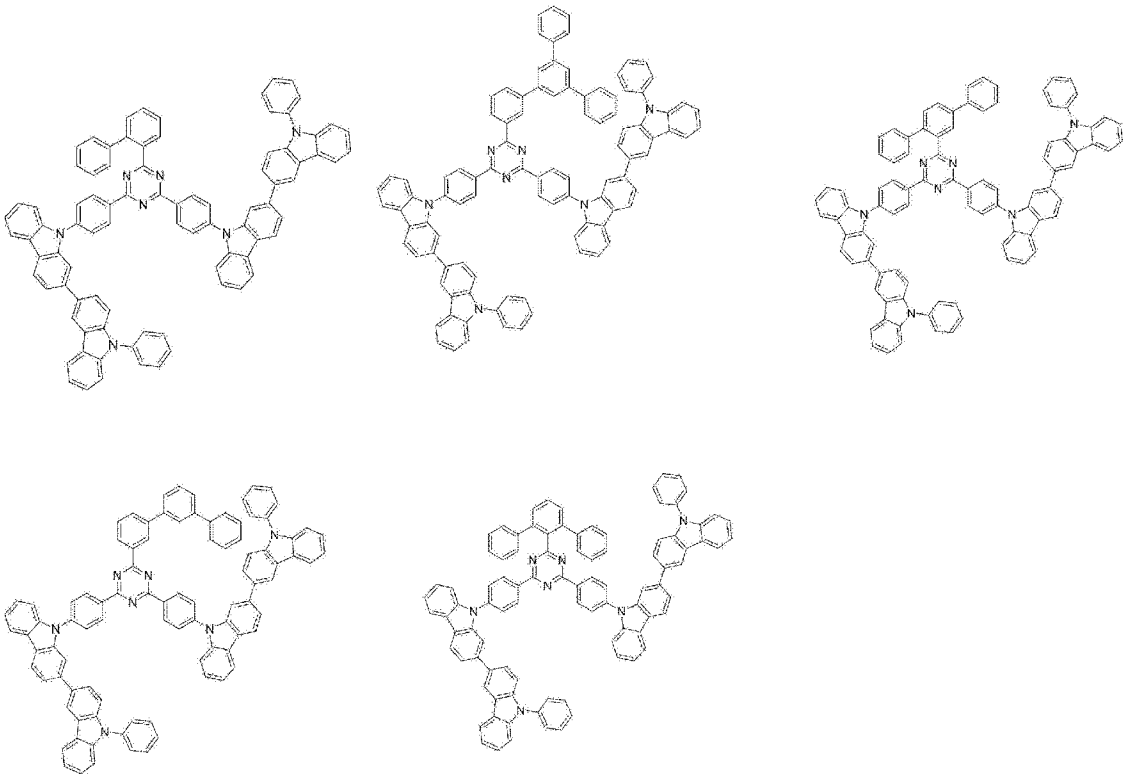
[化94]



[0159] [化95]

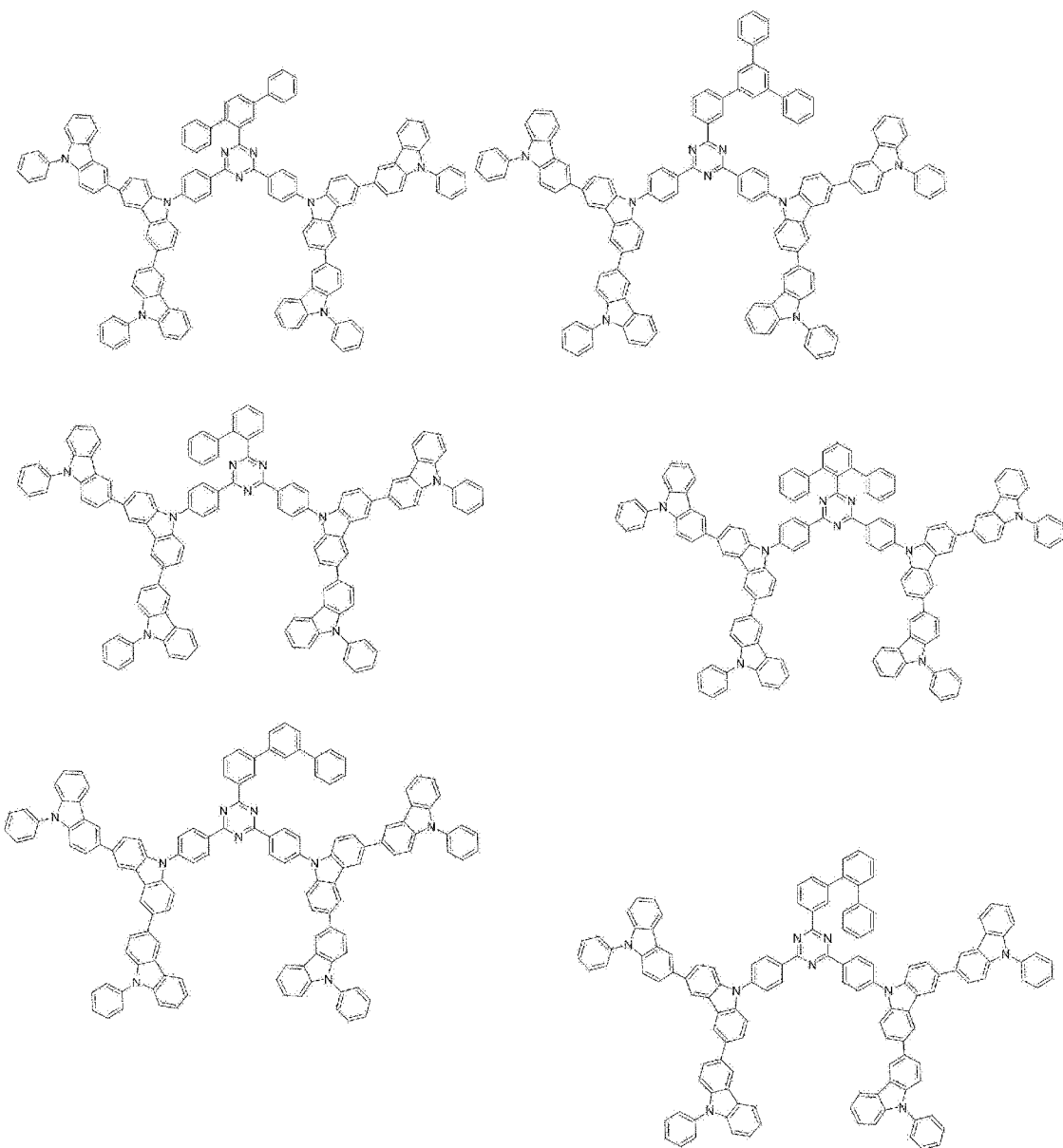


[0160] [化96]



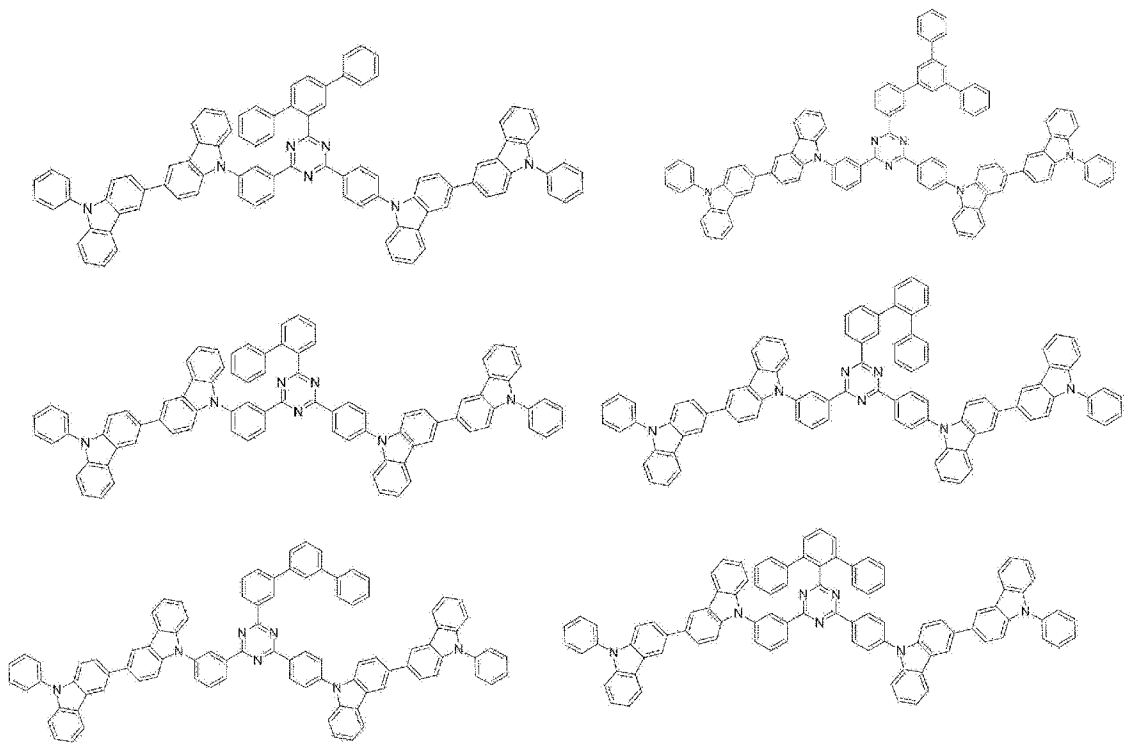
[0161]

[化97]



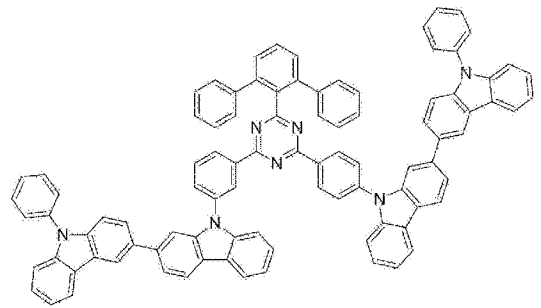
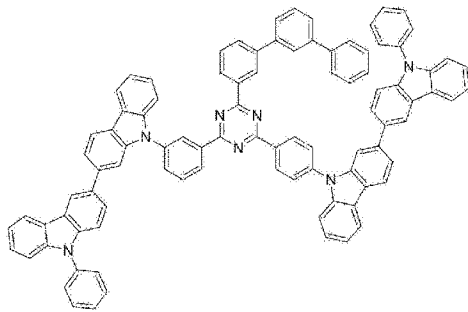
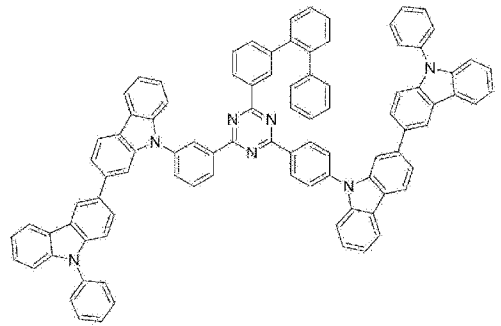
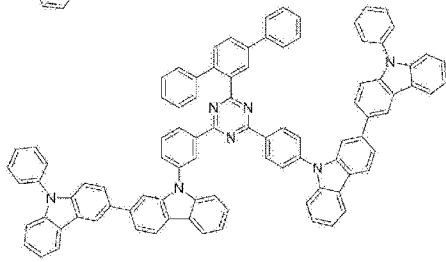
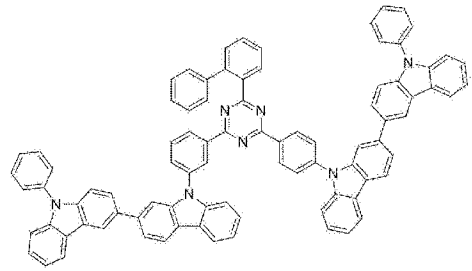
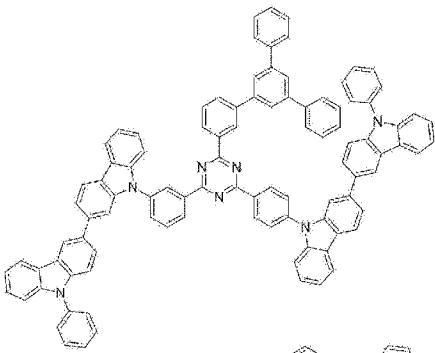
[0162]

[化98]



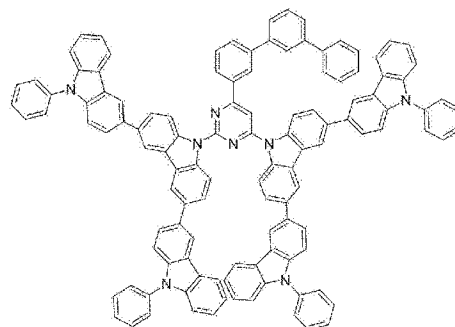
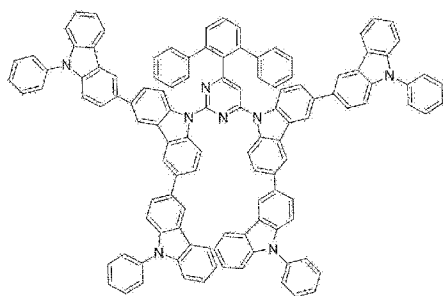
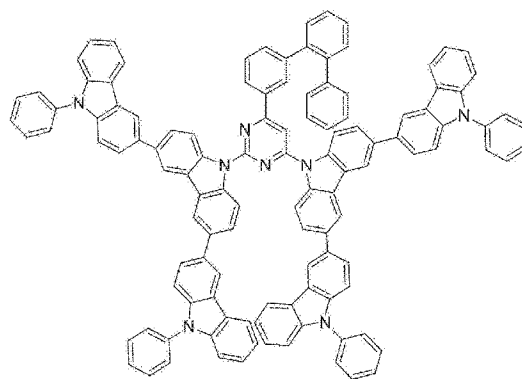
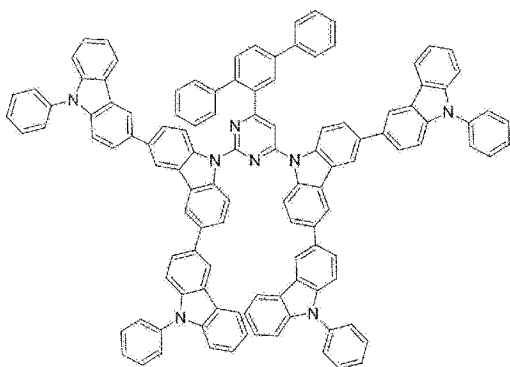
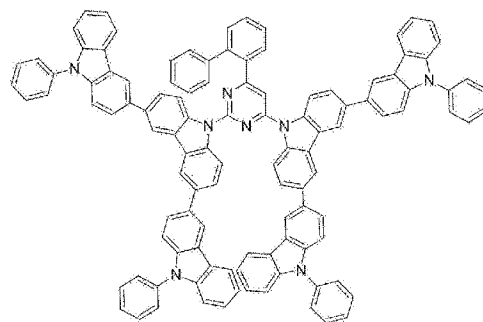
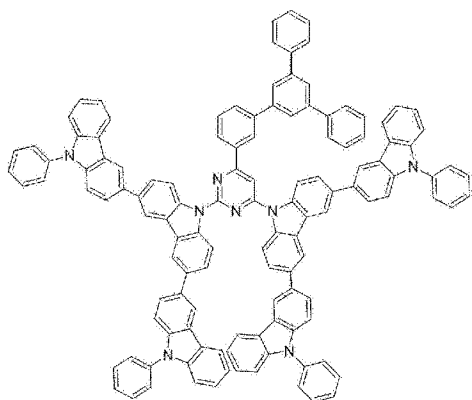
[0163]

[化99]



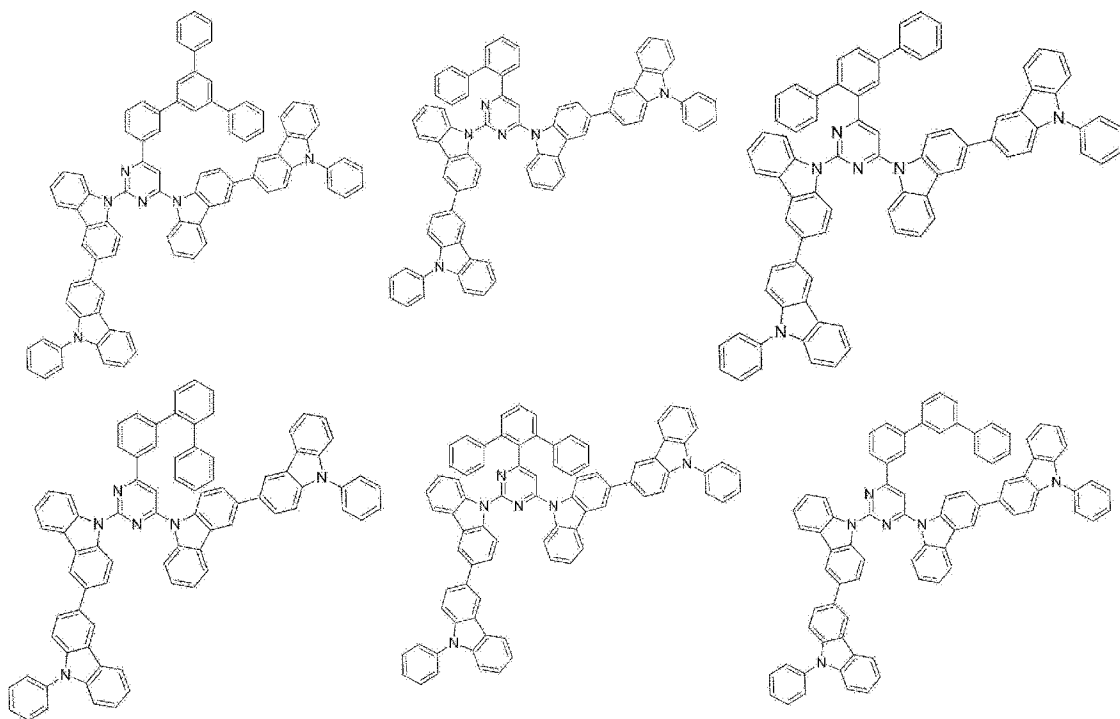
[0164]

[化100]

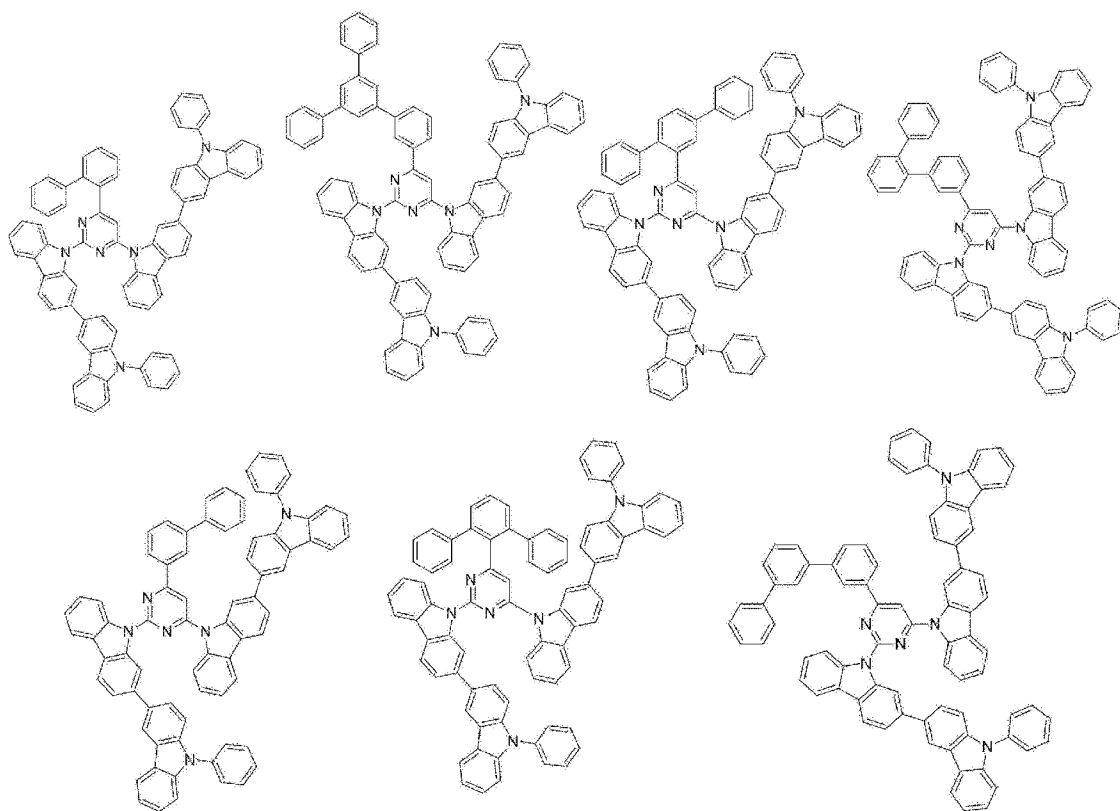


[0165]

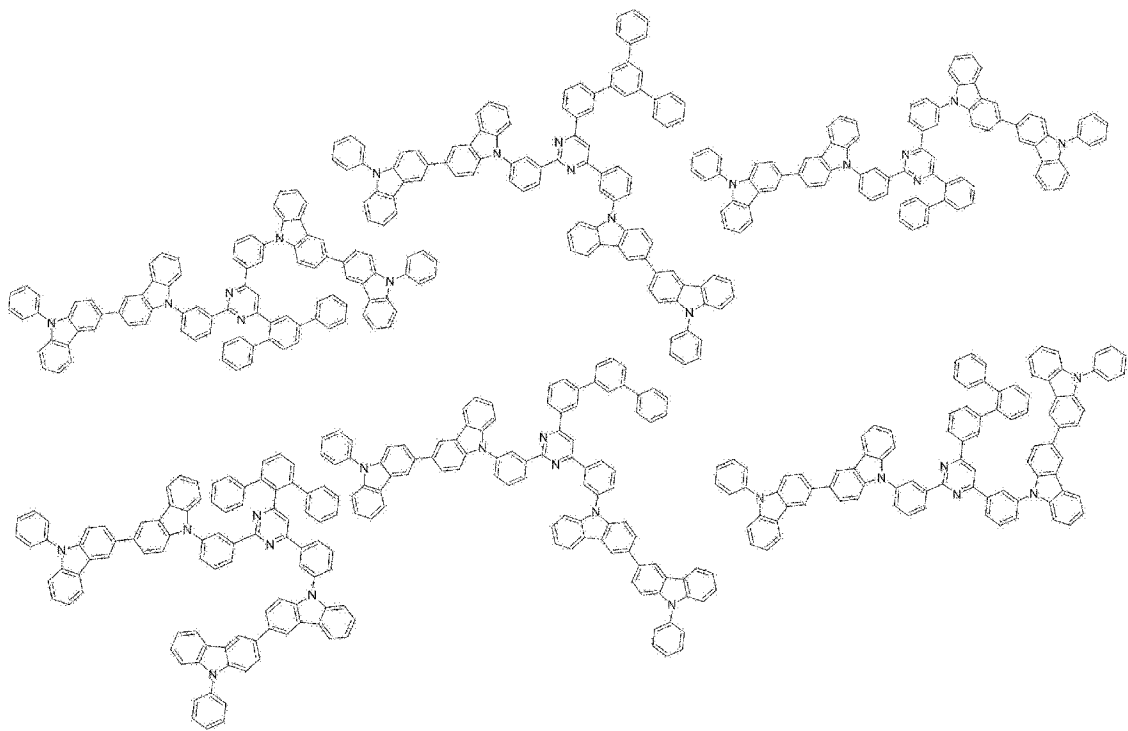
[化101]



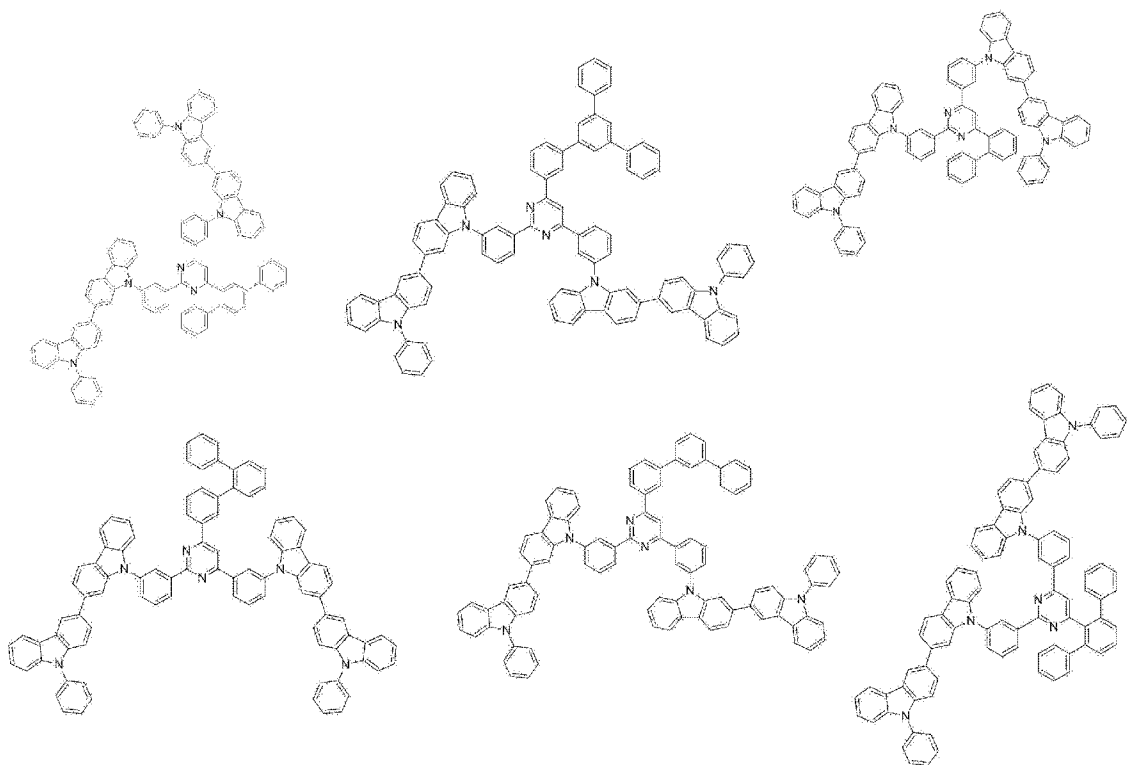
[0166] [化102]



[0167] [化103]

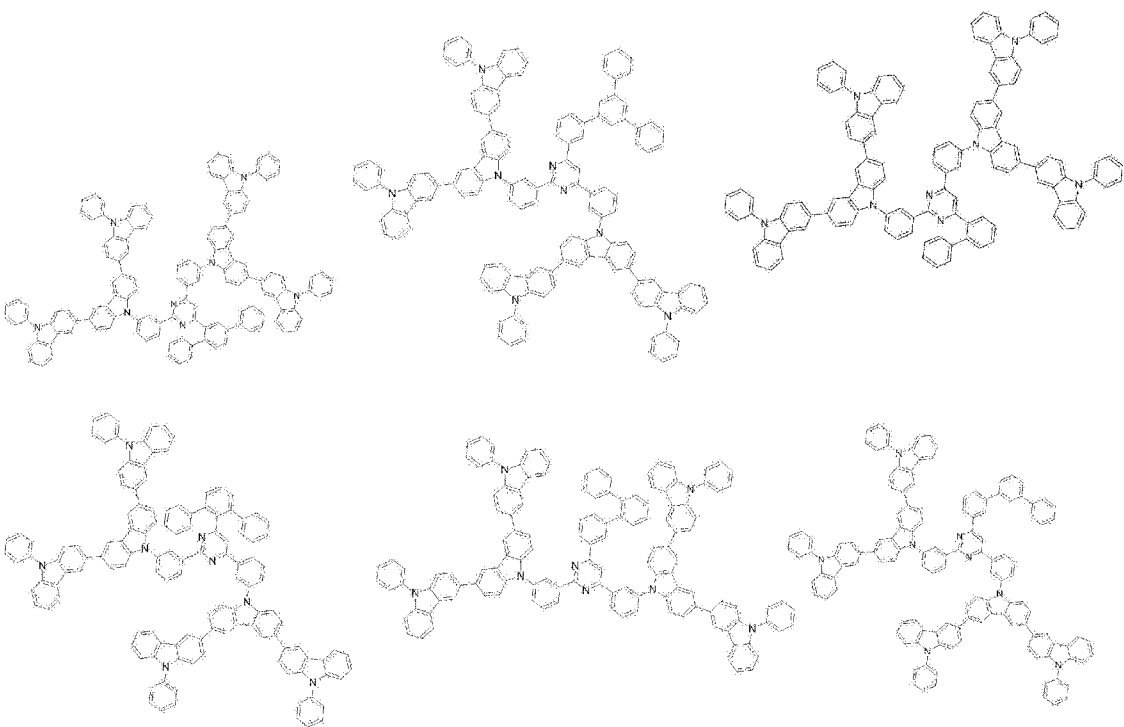


[0168] [化104]

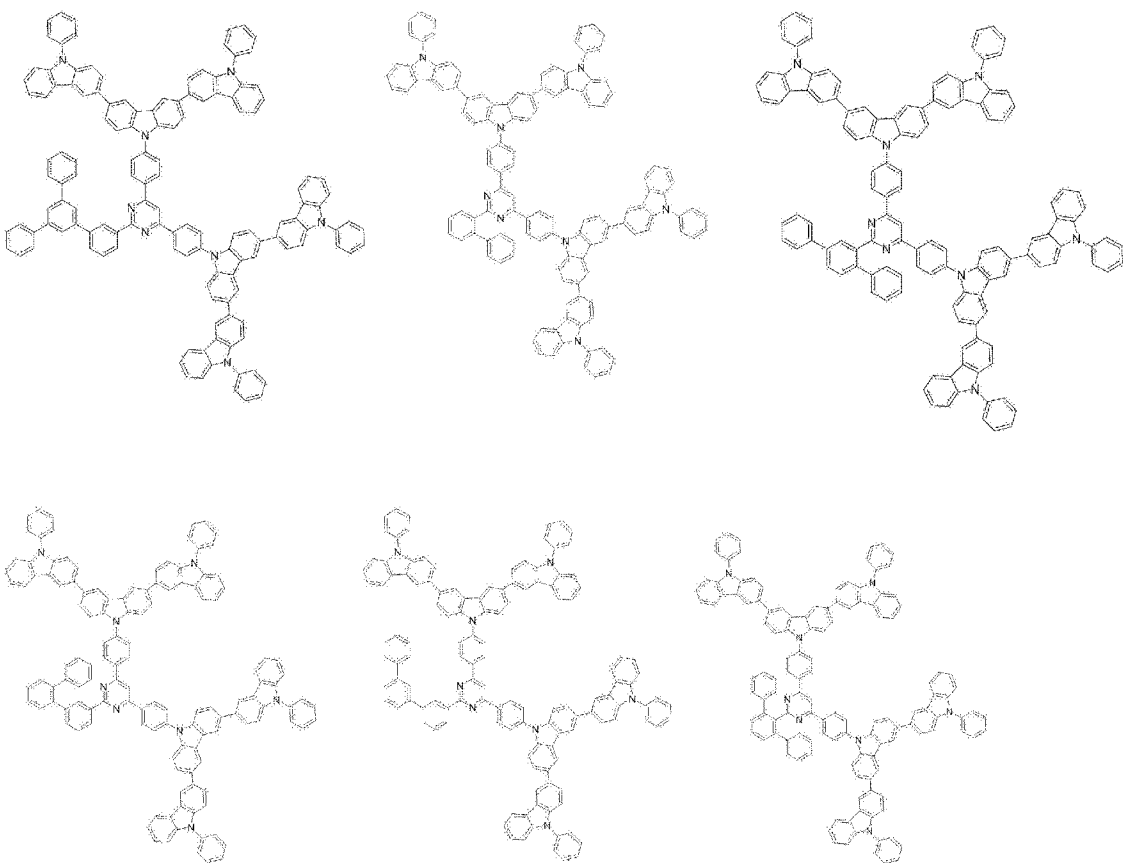


[0169]

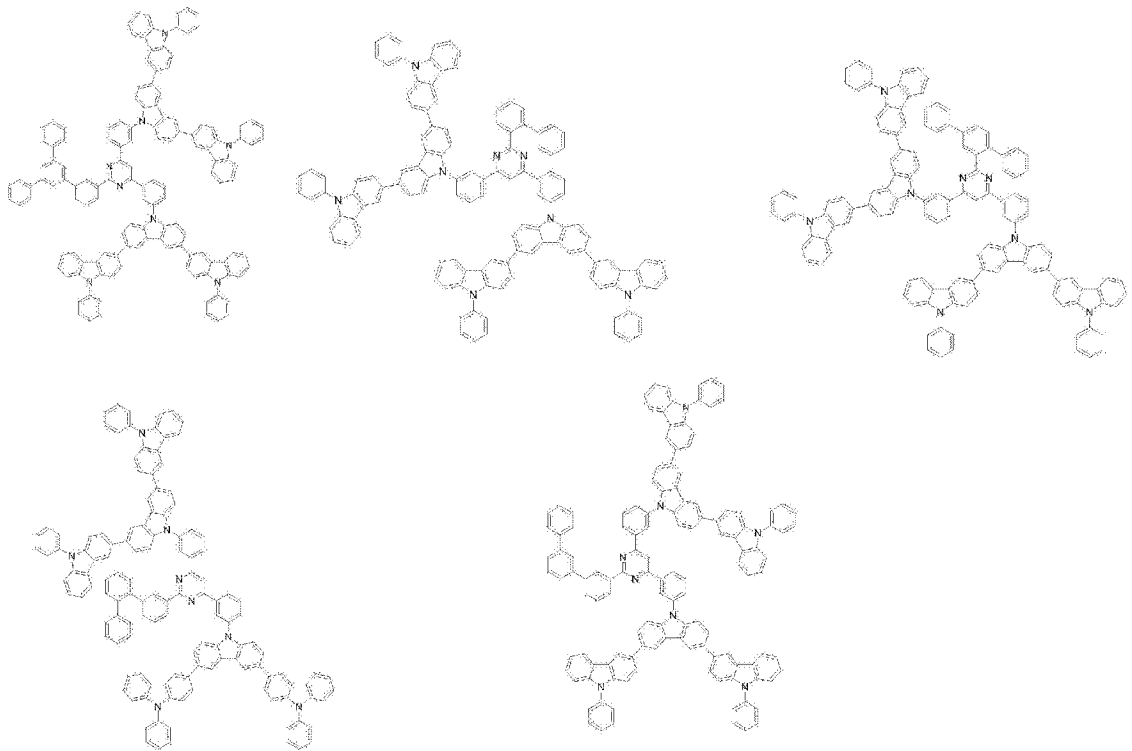
[化105]



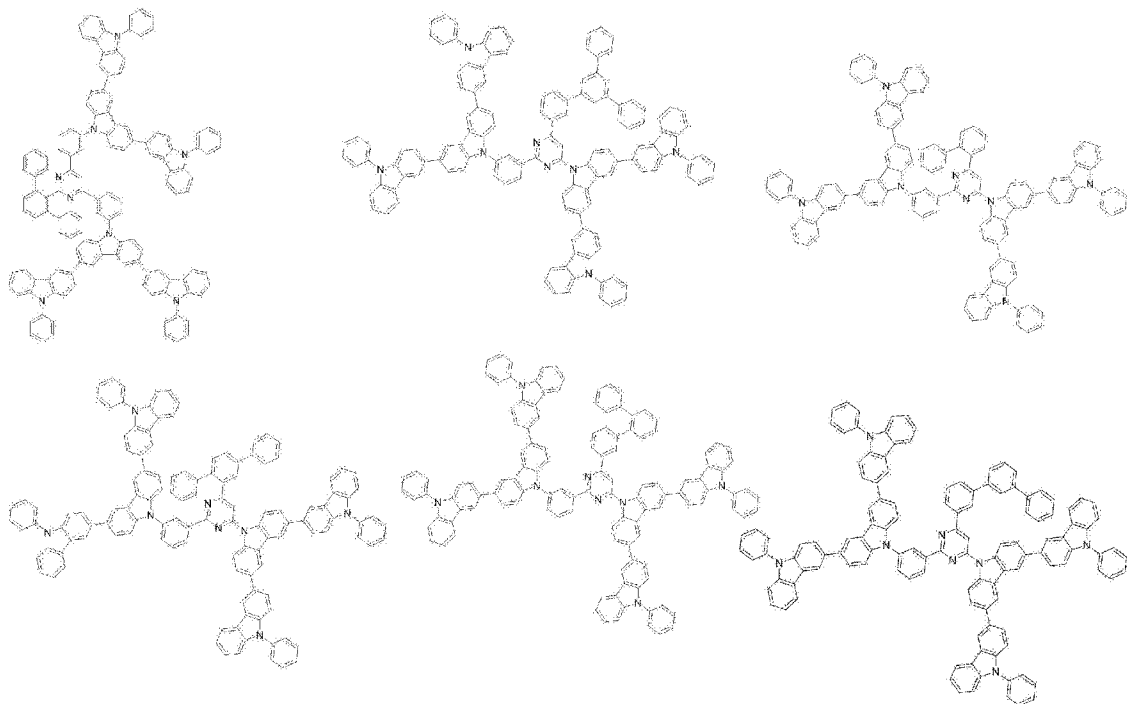
[0170] [化106]



[0171] [化107]

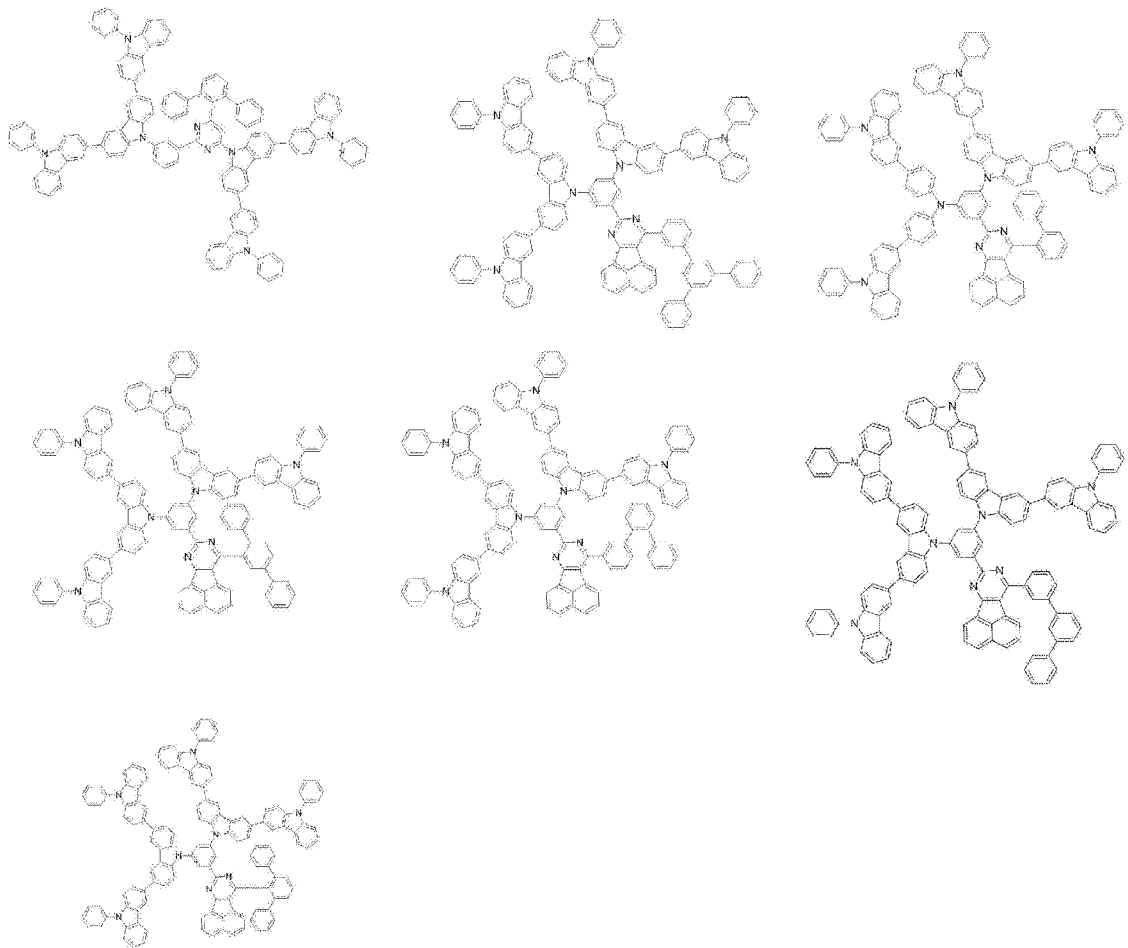


[0172] [化108]



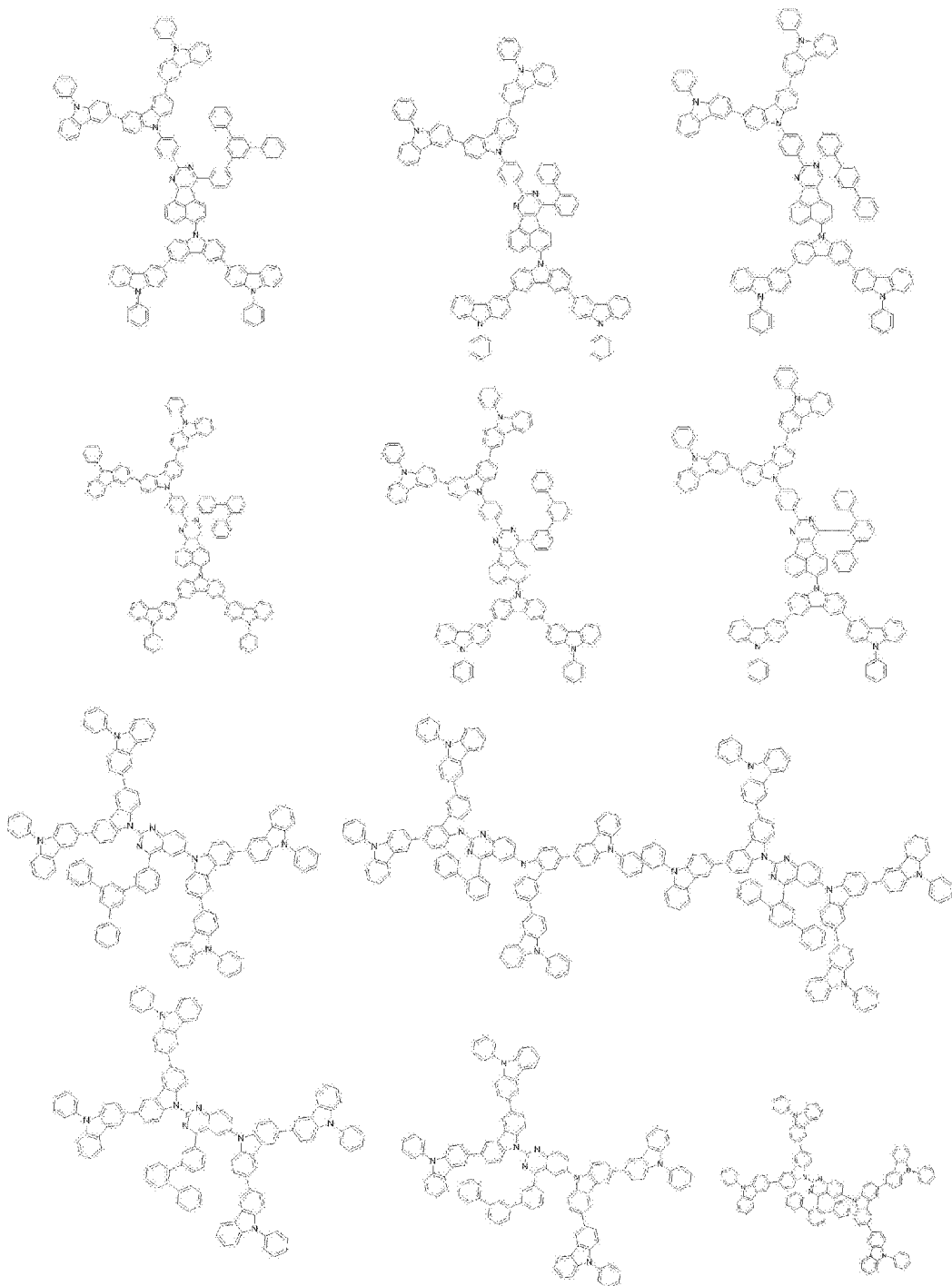
[0173]

[化109]



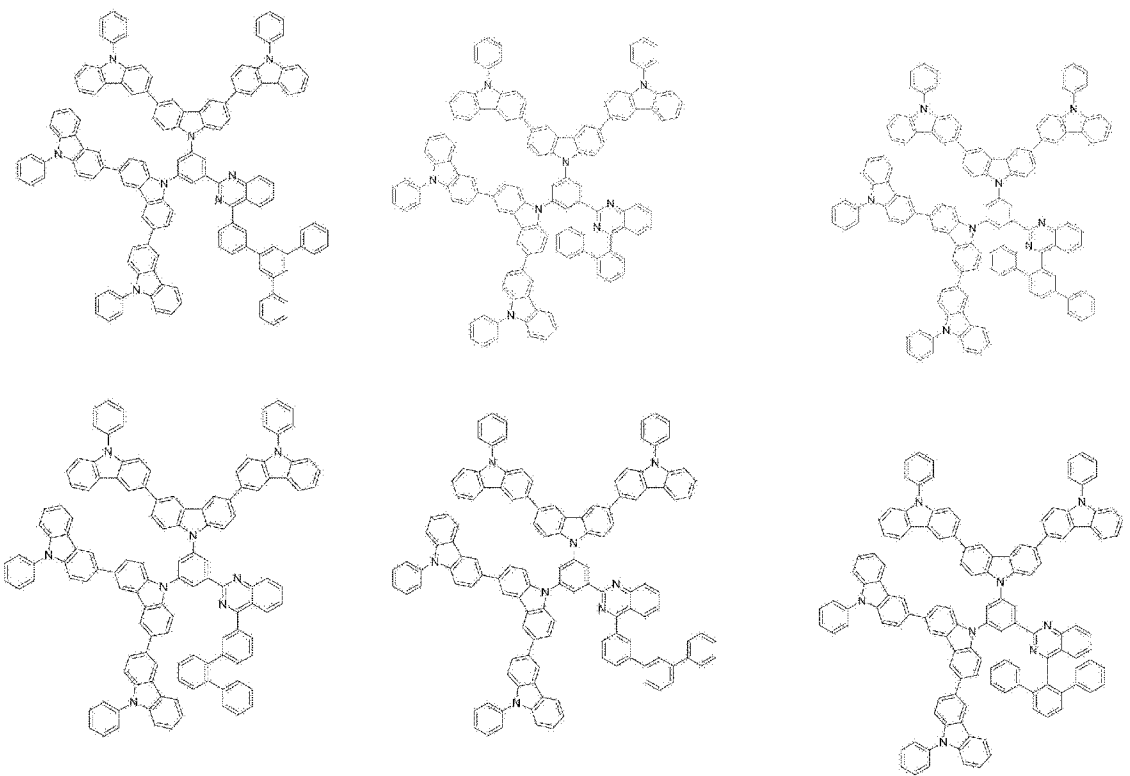
[0174]

[化110]



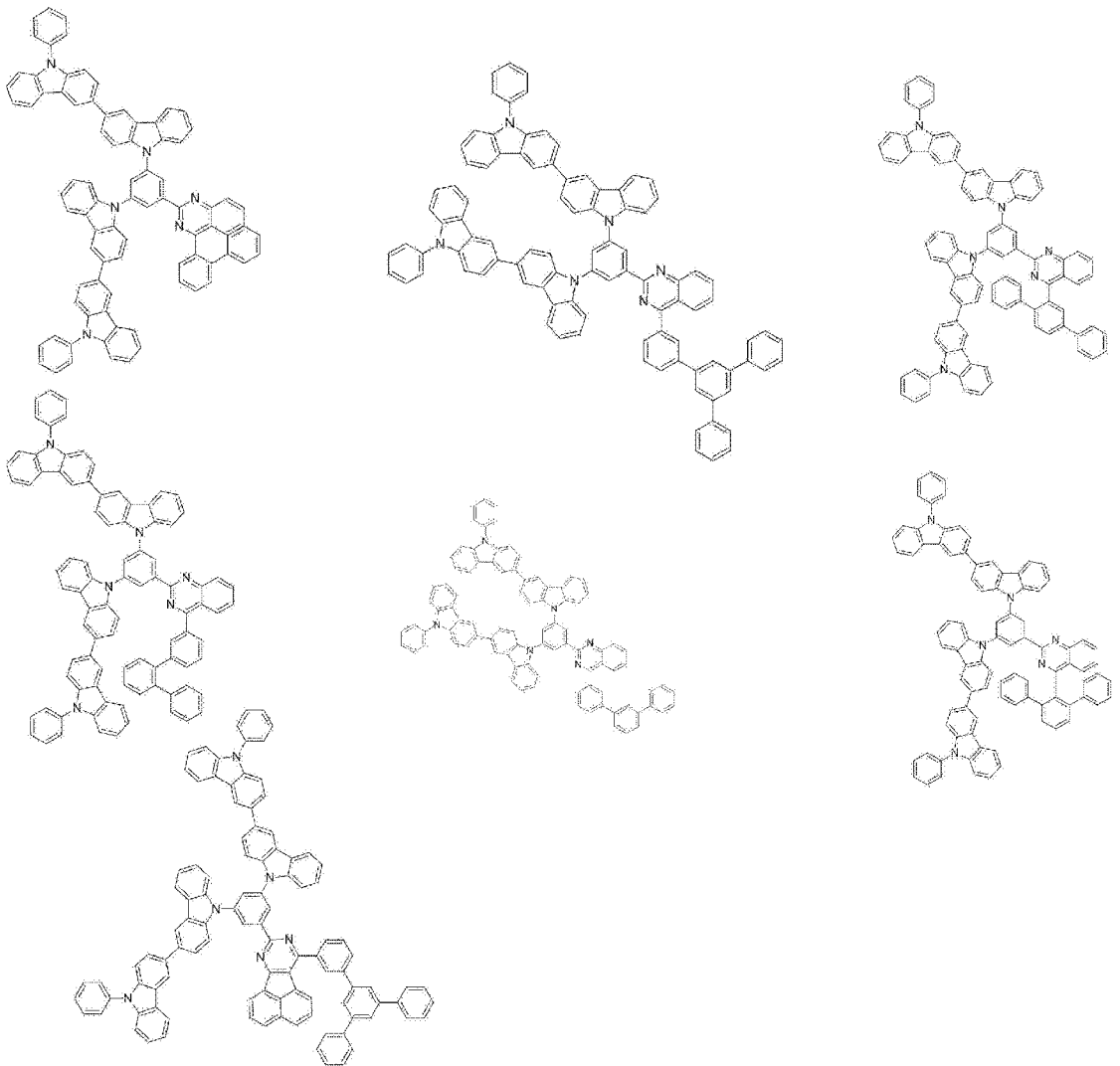
[0175]

[化111]



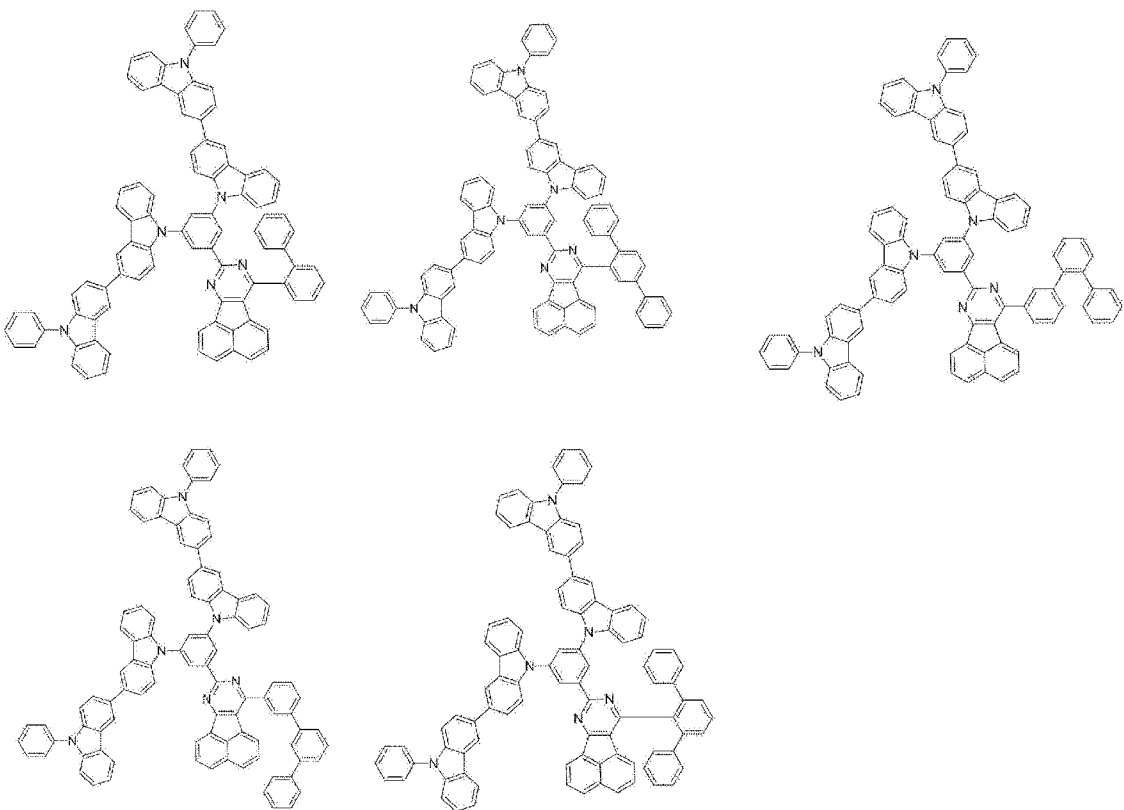
[0176]

[化112]

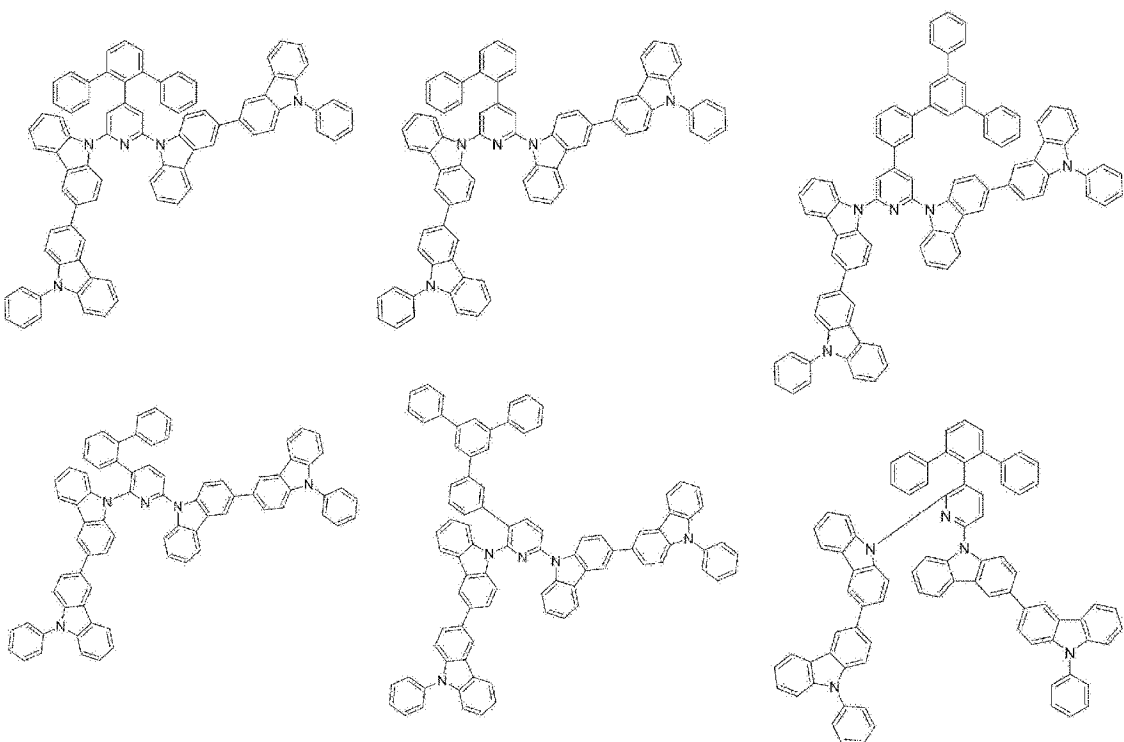


[0177]

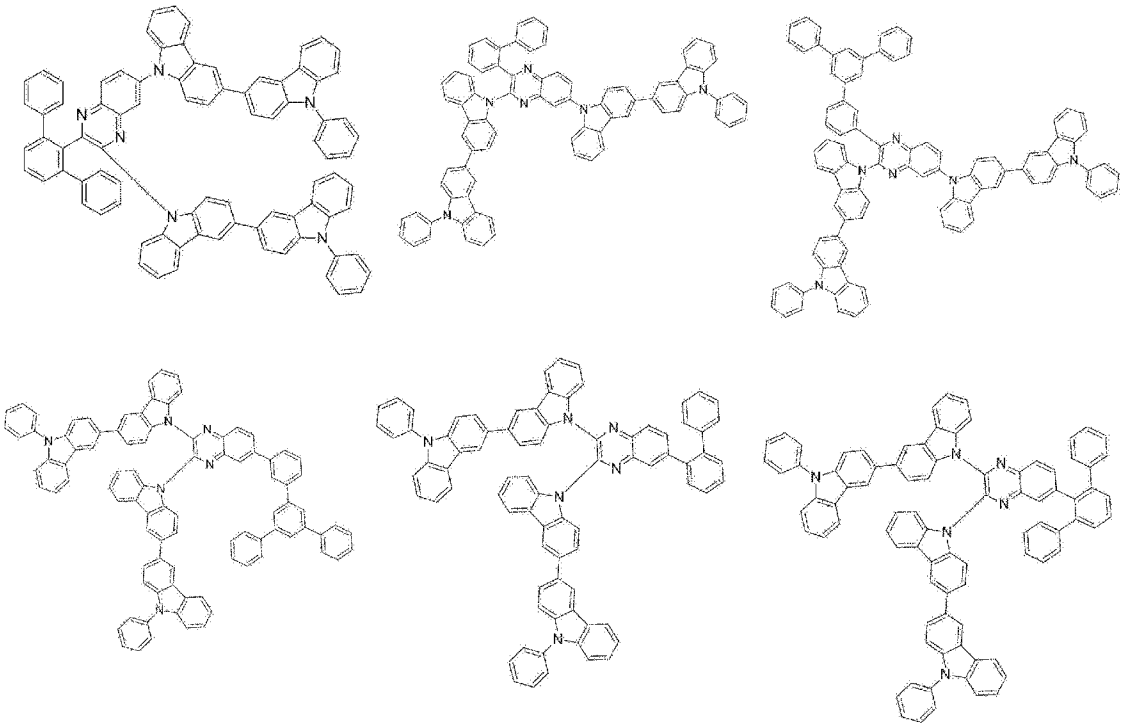
[化113]



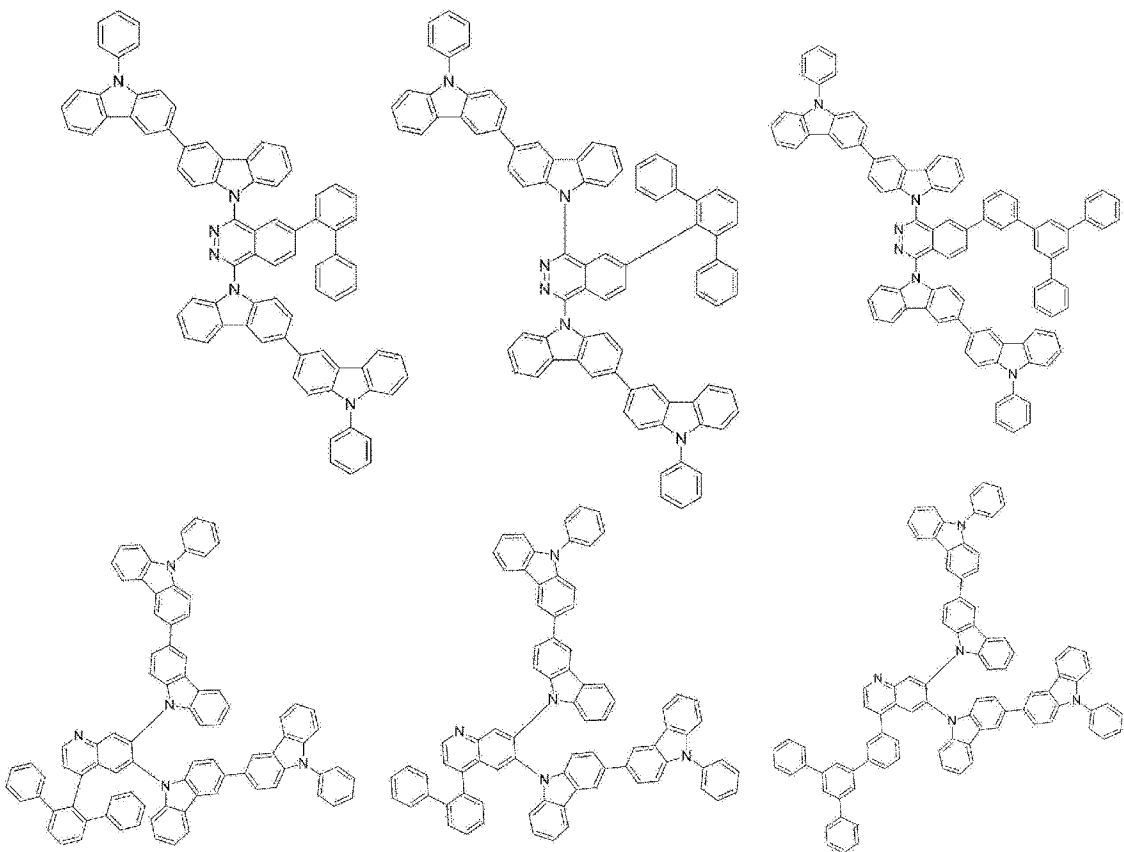
[0178] [化114]



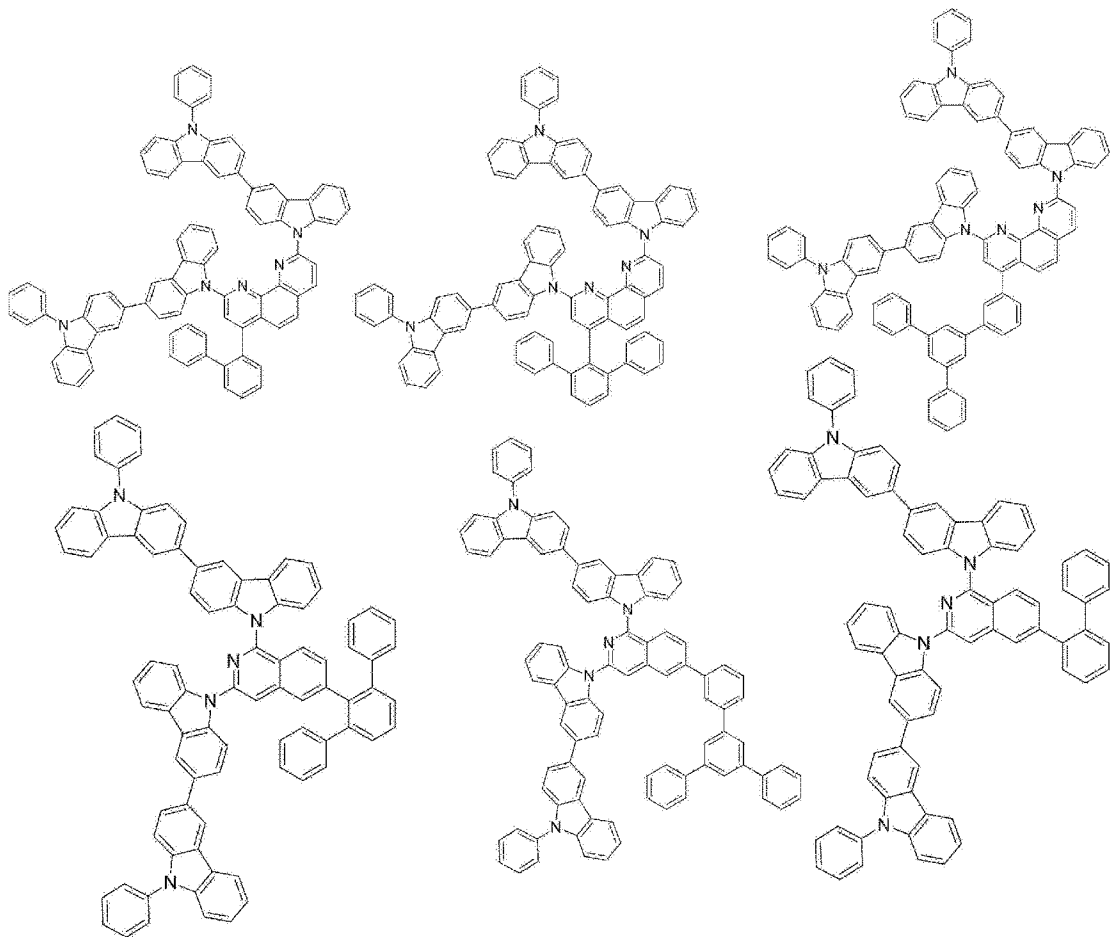
[0179] [化115]



[0180] [化116]

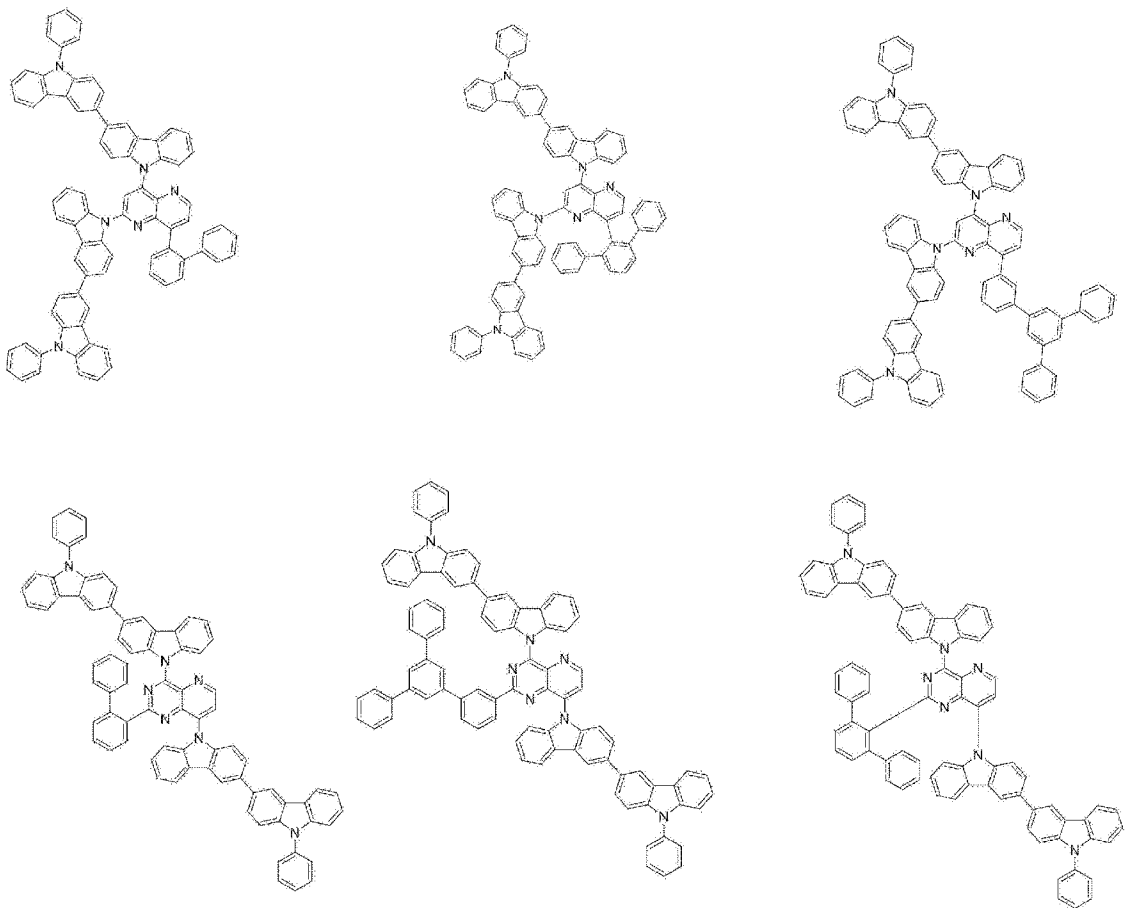


[0181] [化117]

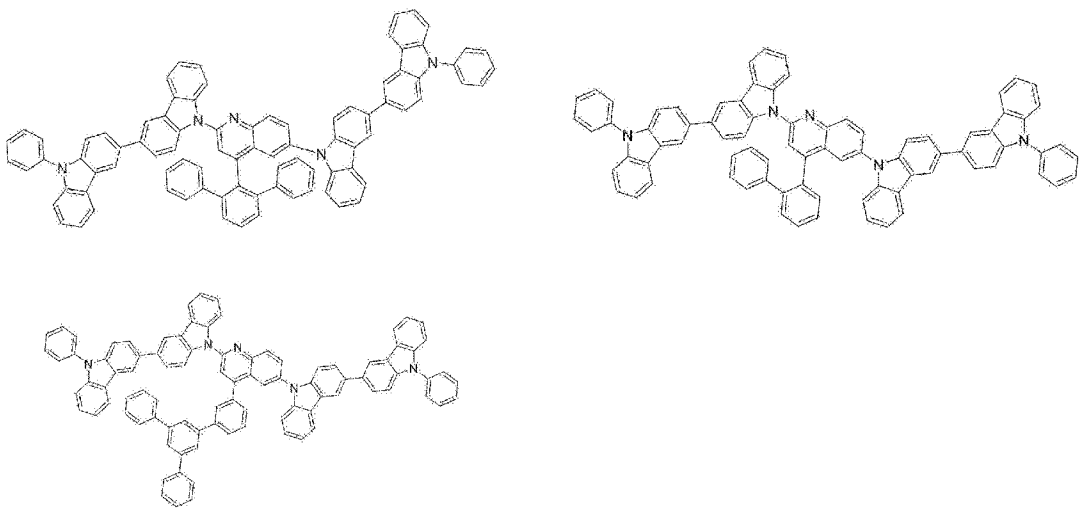


[0182]

[化118]

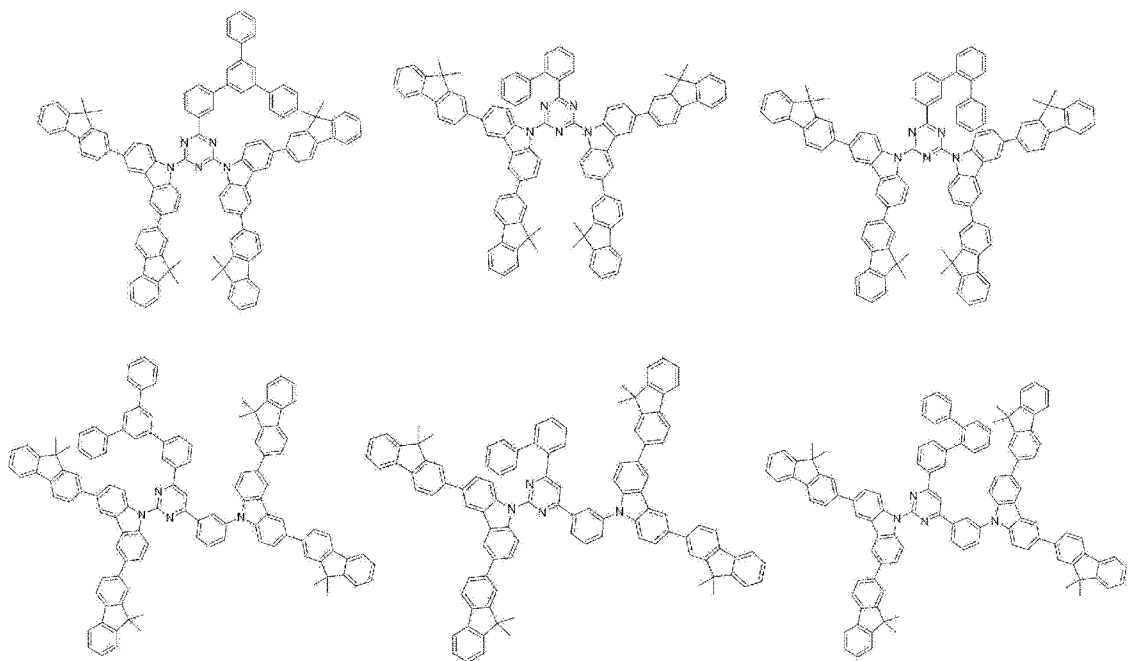


[0183] [化119]

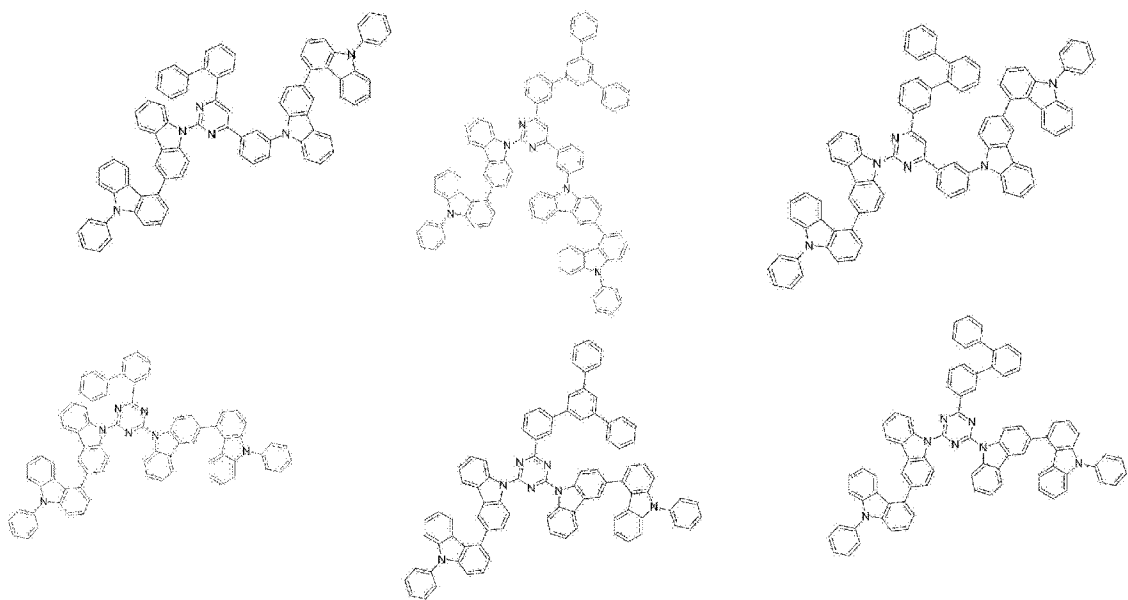


[0184]

[化120]

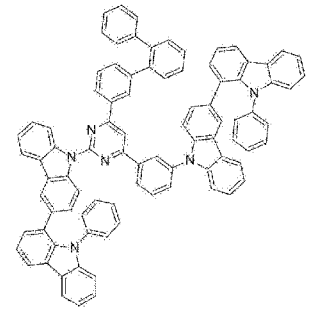
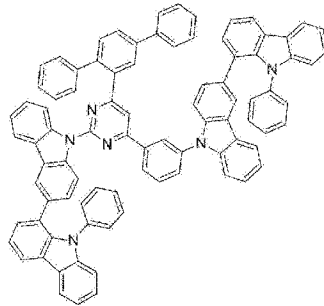
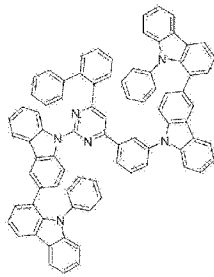
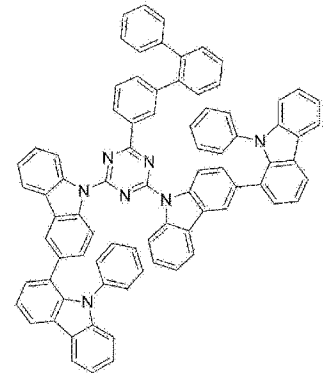
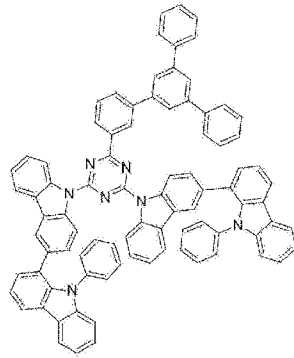
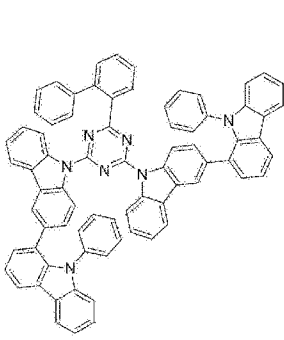


[0185] [化121]



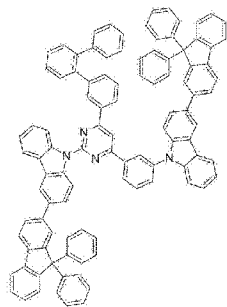
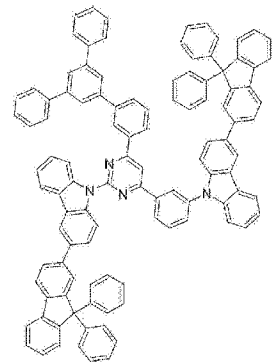
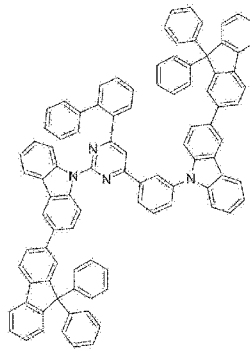
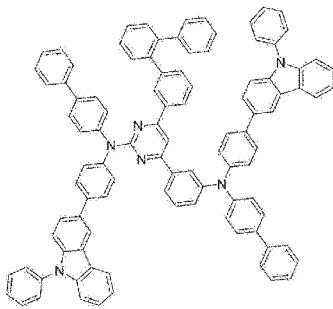
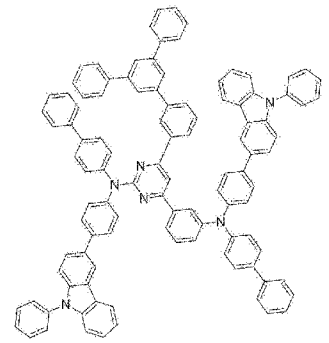
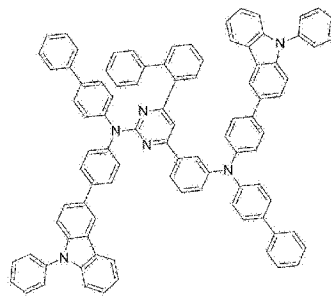
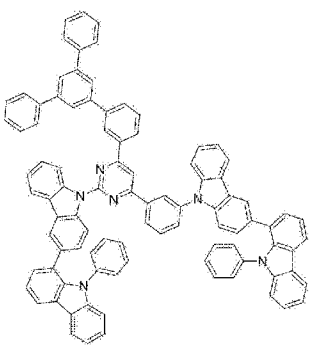
[0186]

[化122]



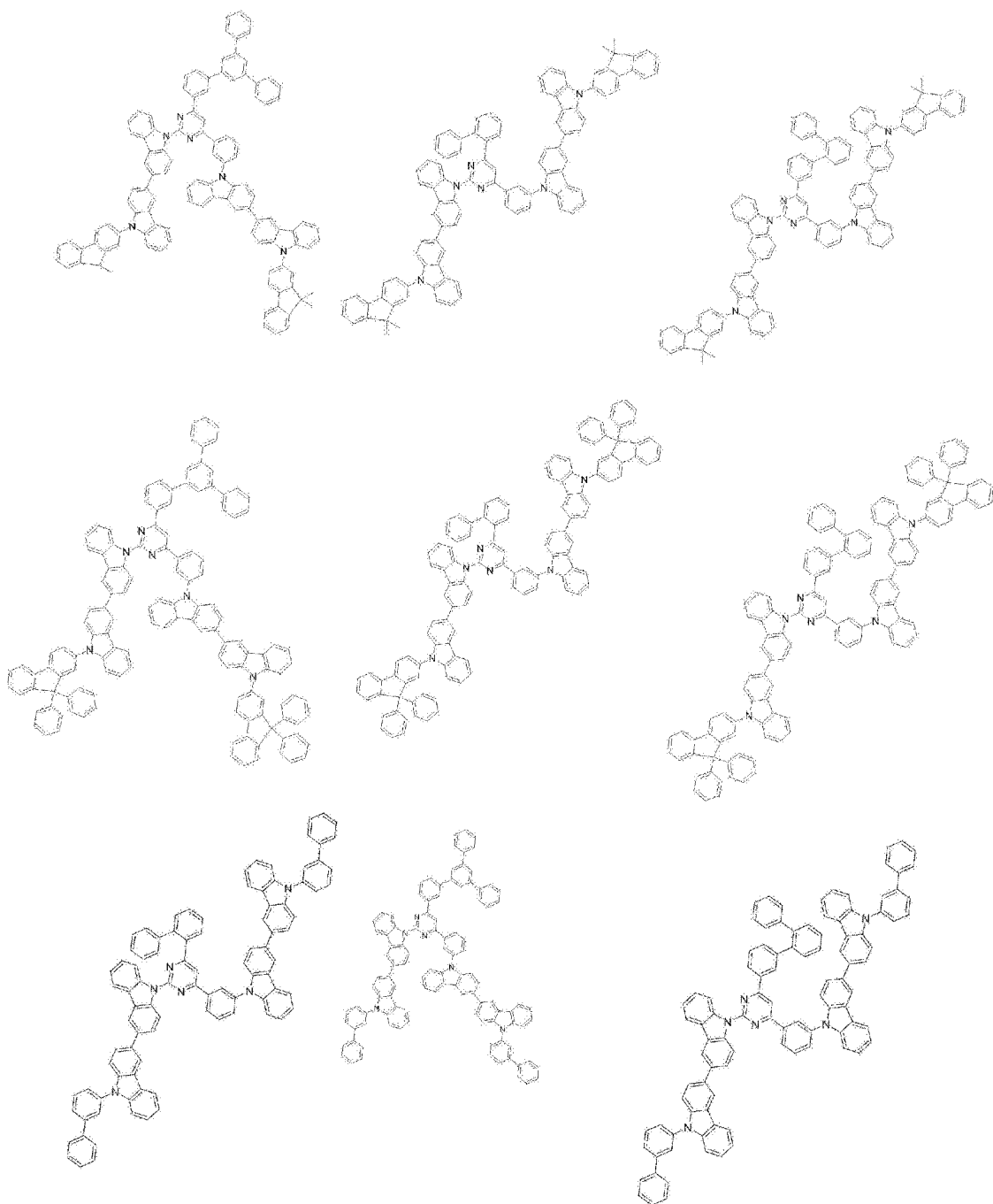
[0187]

[化123]



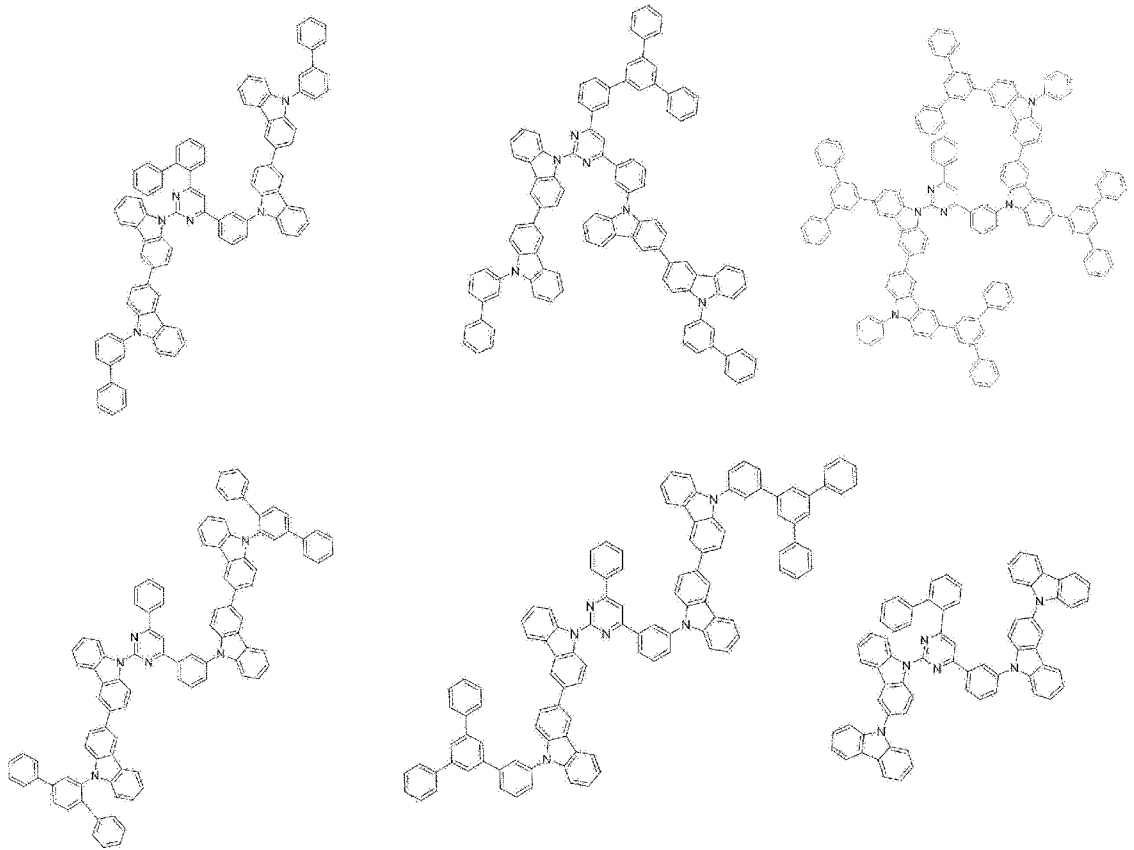
[0188]

[化124]

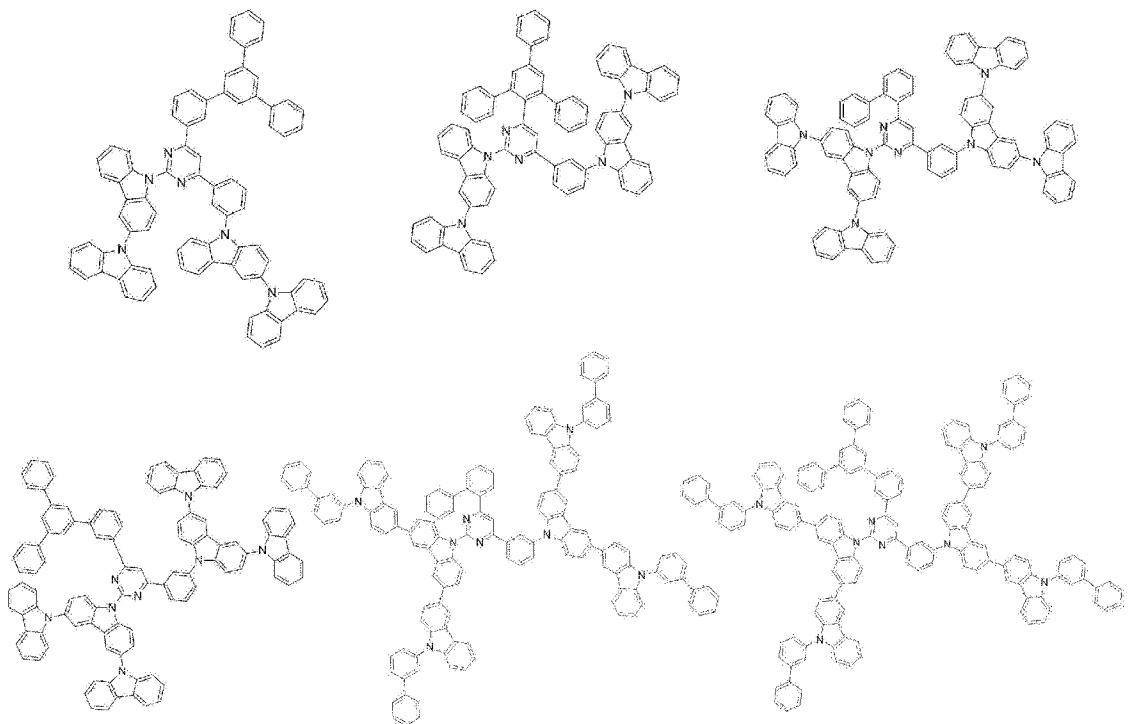


[0189]

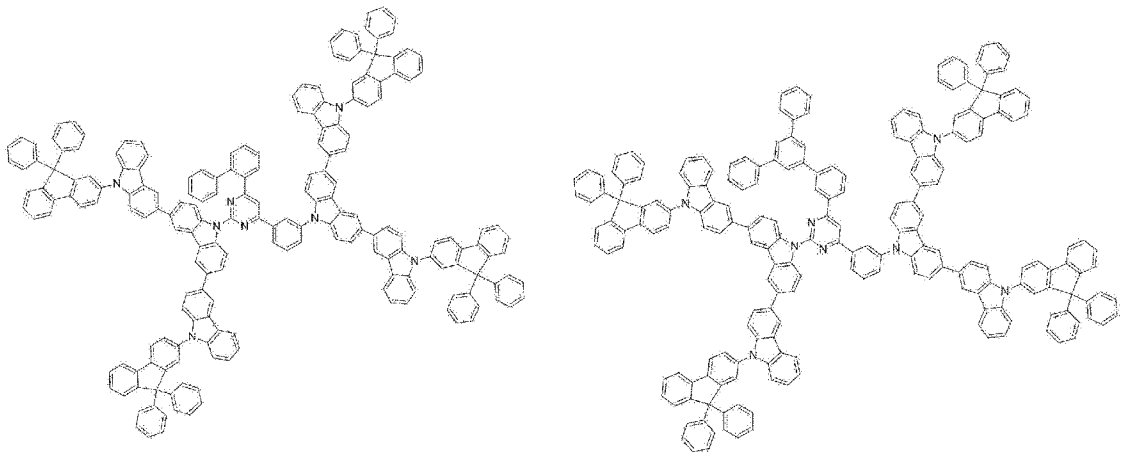
[化125]



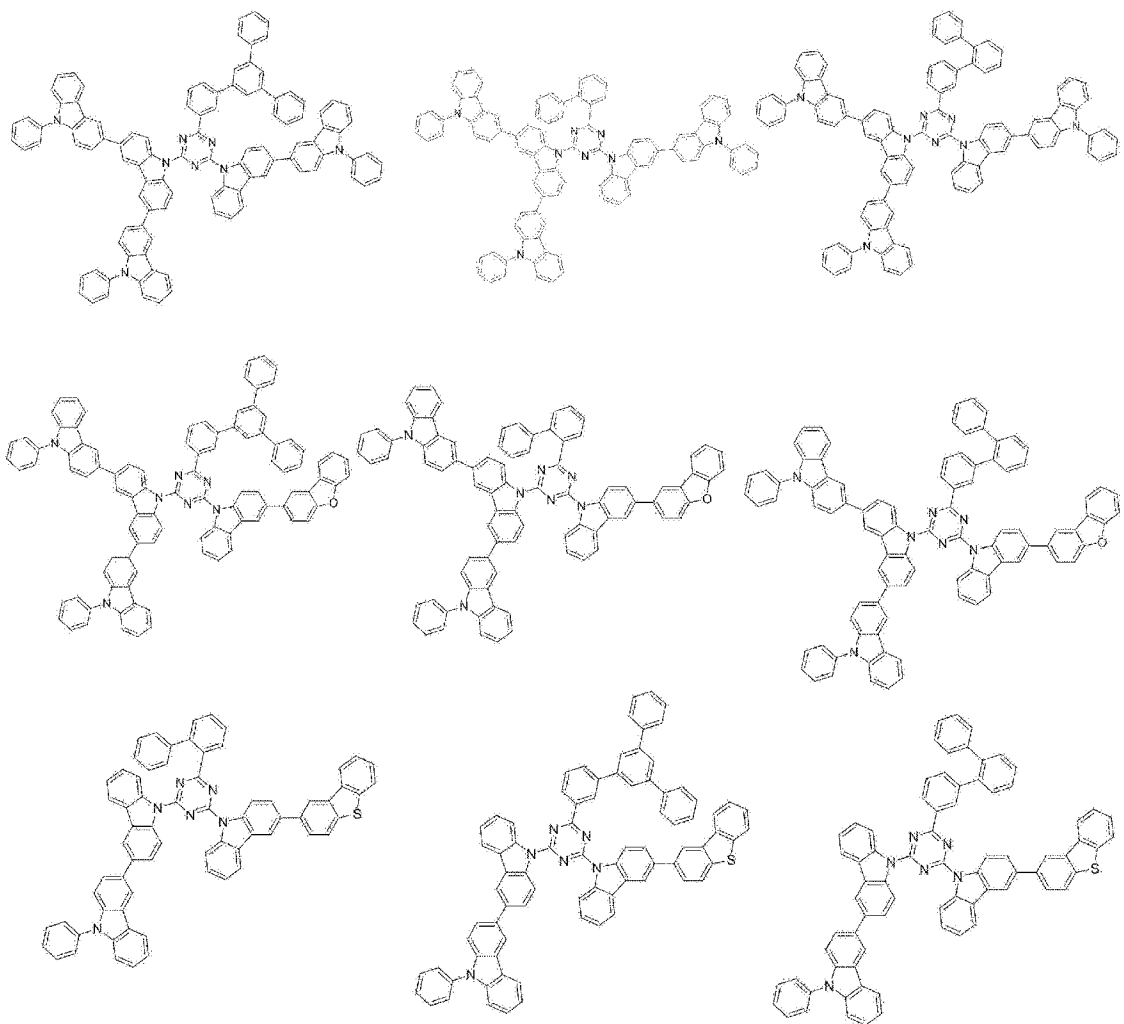
[0190] [化126]



[0191] [化127]

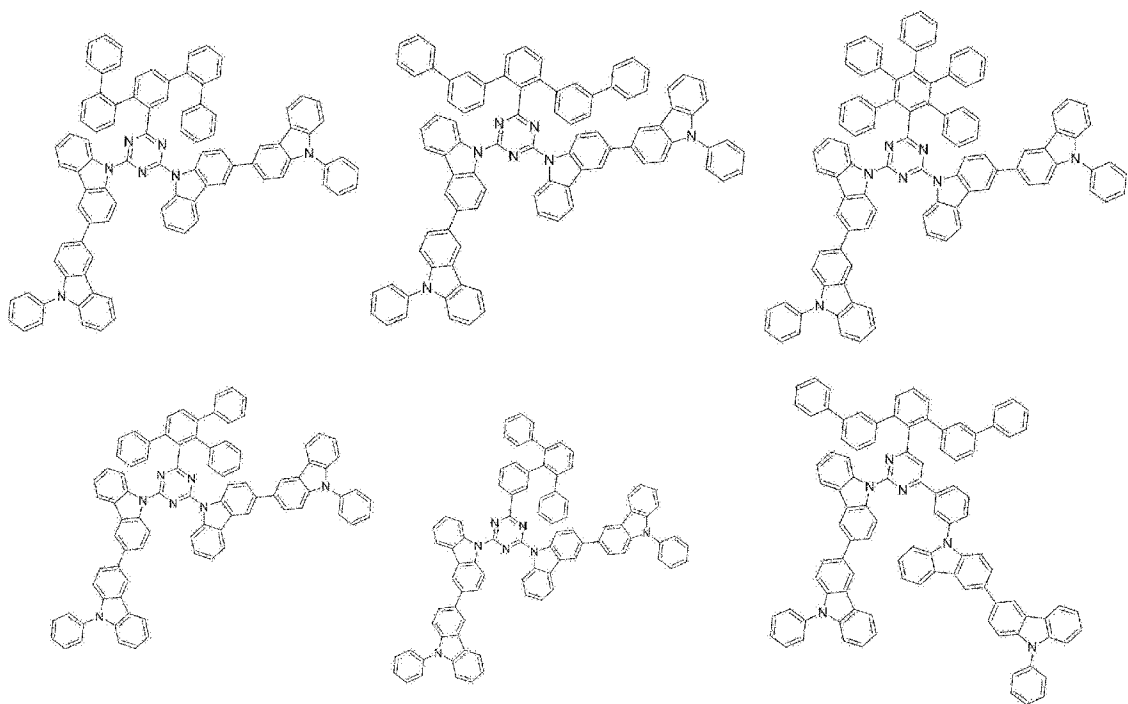


[0192] [化128]

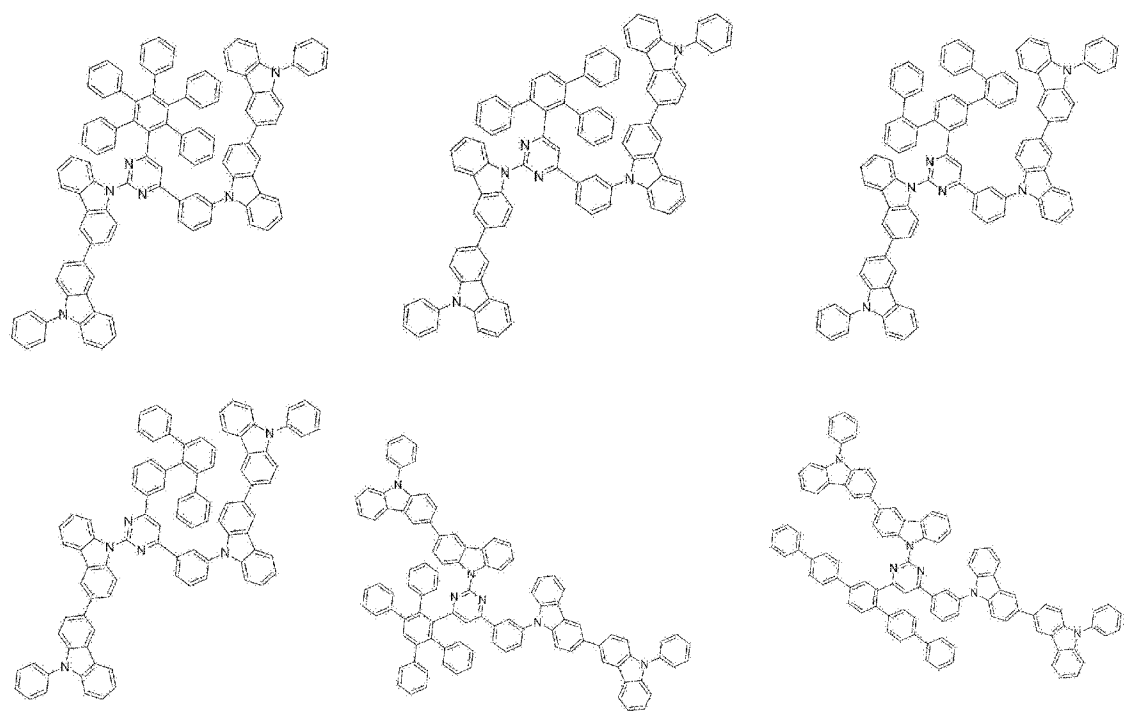


[0193]

[化129]

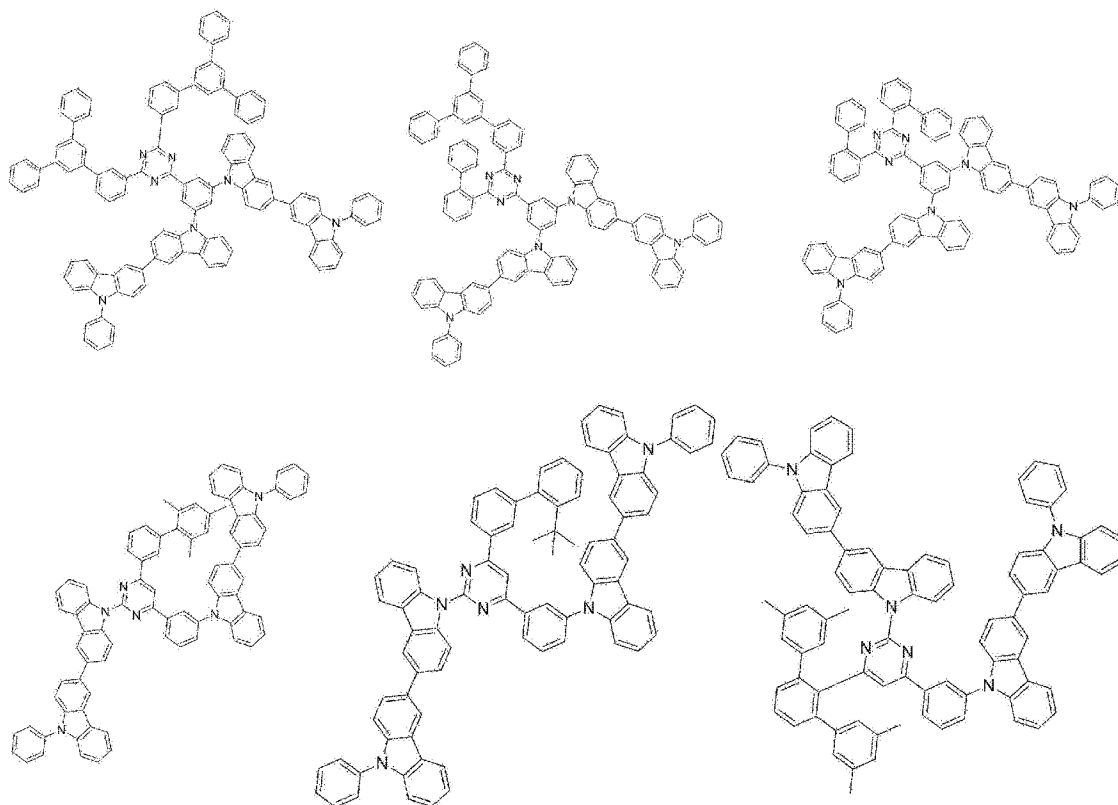


[0194] [化130]

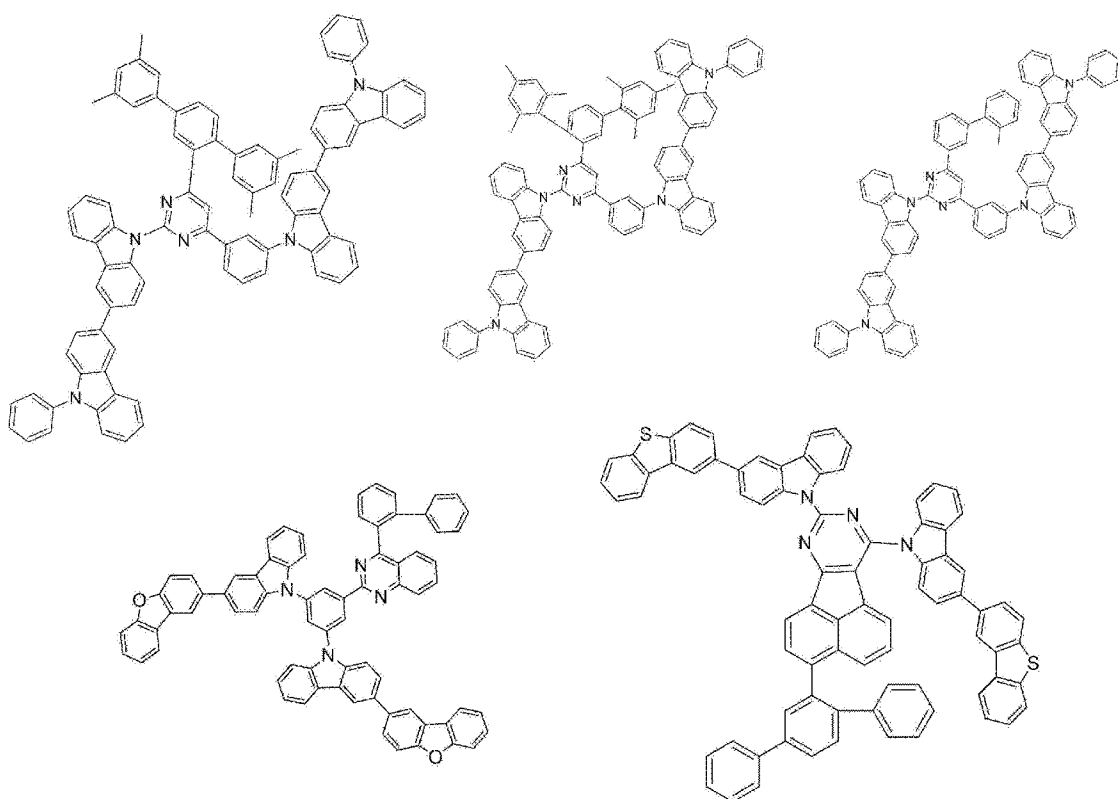


[0195]

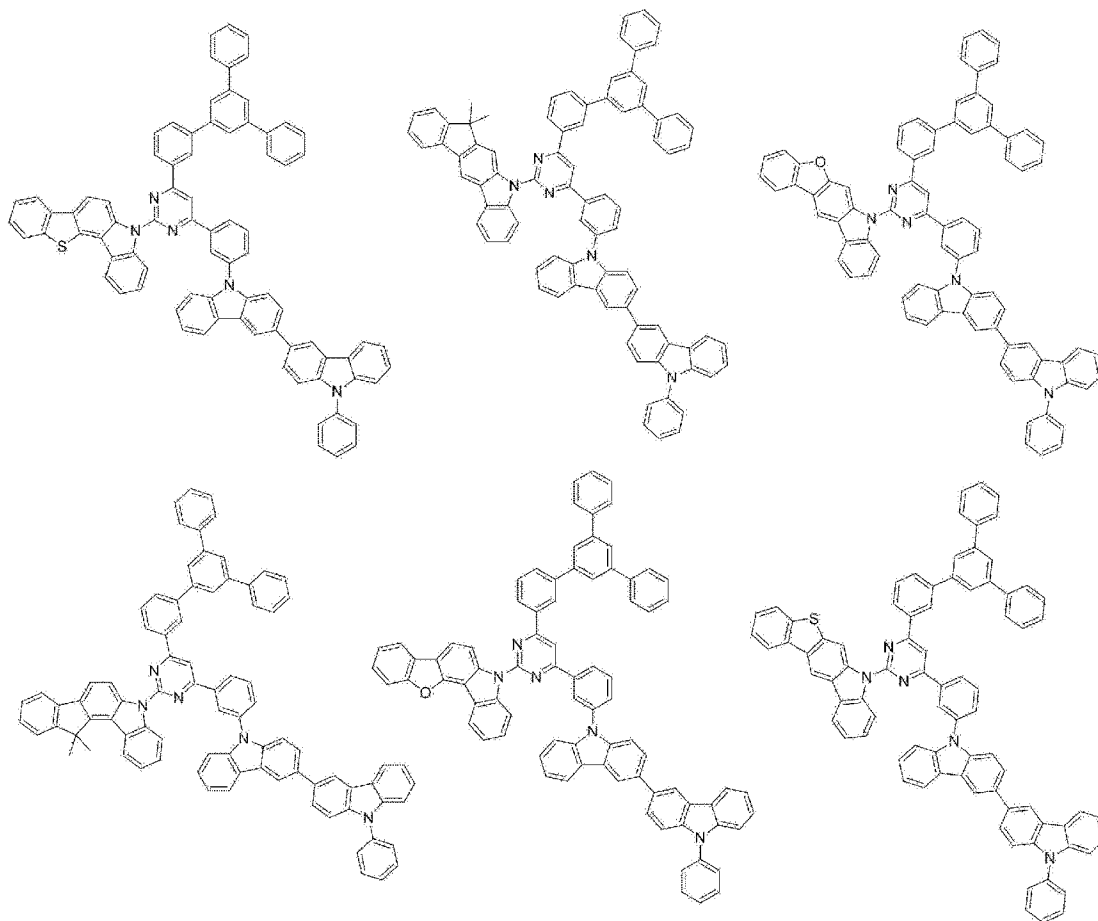
[化131]



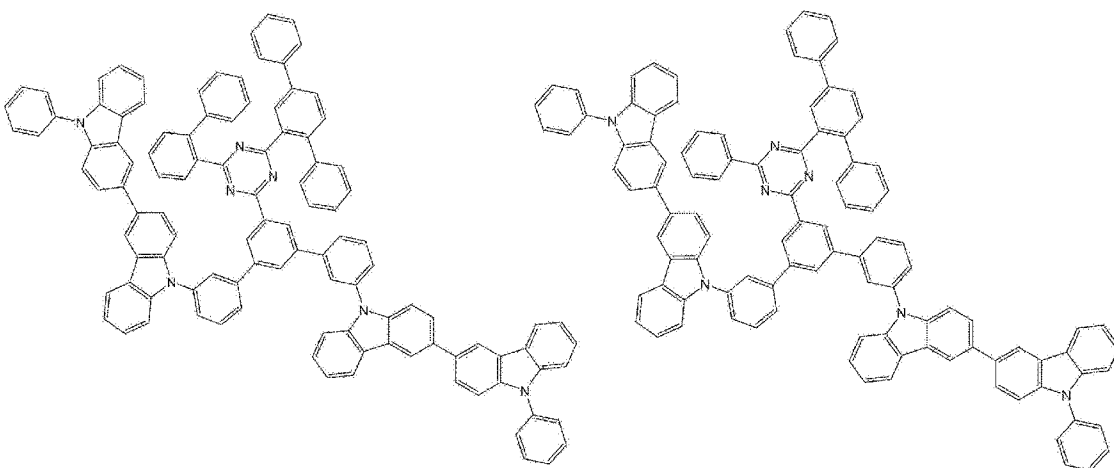
[0196] [化132]



[0197] [化133]

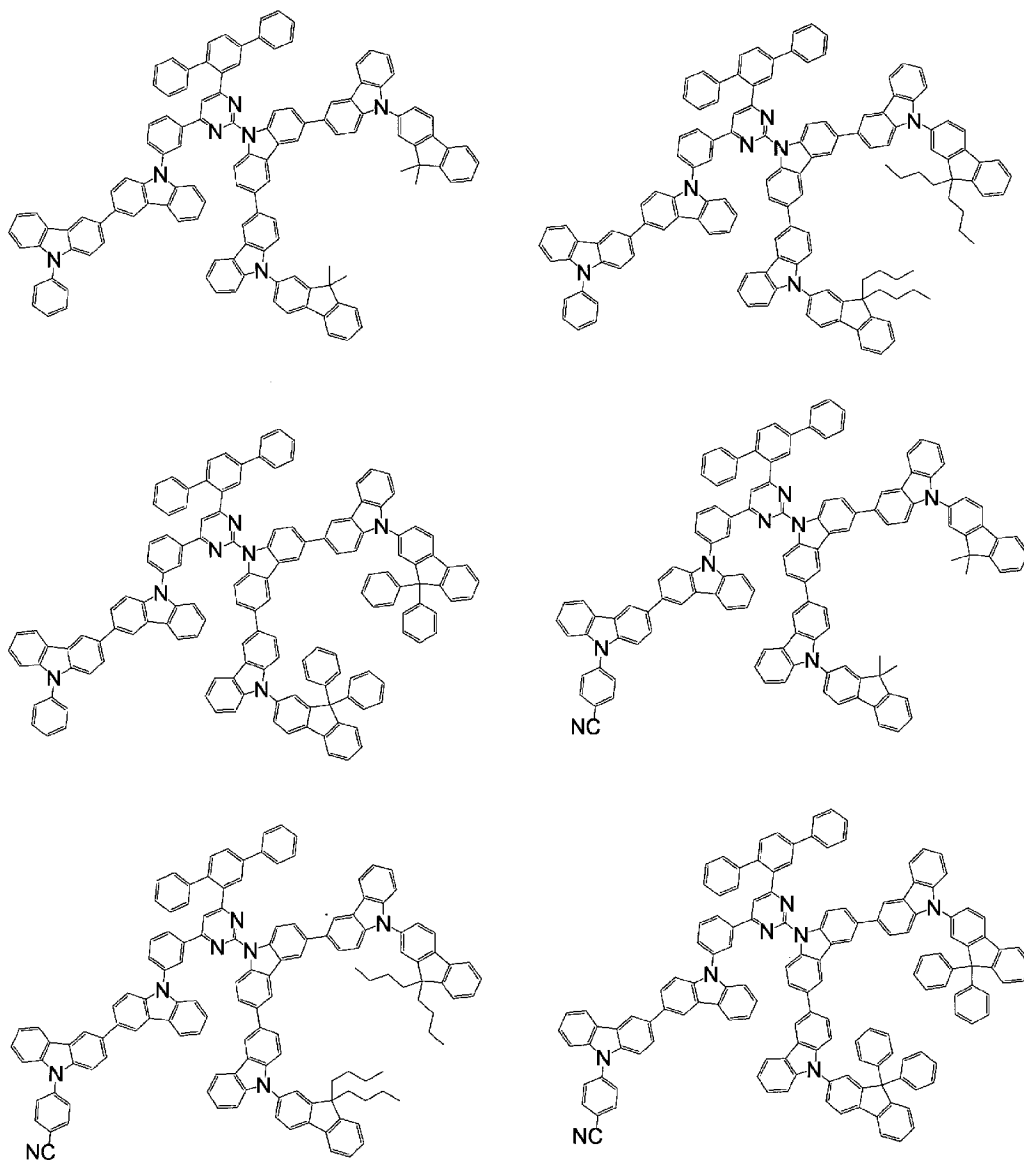


[0198] [化134]



[0199]

[化135]



[0200] 本実施形態の化合物は、可溶性に優れる。

[0201] [組成物]

本実施形態の組成物は、本発明の一実施形態に係る化合物と、溶媒と、を含む。

溶媒は、有機溶媒であることが好ましい。有機溶媒としては、例えば、塩素系溶媒（例えば、クロロホルム、クロロベンゼン、クロロトルエン、クロロキシレン、クロロアニソール、ジクロロメタン、ジクロロベンゼン、ジクロロトルエン、ジクロロエタン、トリクロロエタン、トリクロロベンゼン、

トリクロロメチルベンゼン、ブromoベンゼン、ジブromoベンゼン、およびブromoアニソール等)、エーテル系溶媒(例えば、テトラヒドロフラン、ジオキサン、ジオキソラン、オキサゾール、メチルベンゾオキサゾール、ベンゾイソオキサゾール、フラン、フラザン、ベンゾフラン、およびジヒドロベンゾフラン等)、芳香族炭化水素系溶媒(例えば、エチルベンゼン、ジエチルベンゼン、トリエチルベンゼン、トリメチルベンゼン、トリメトキシベンゼン、プロピルベンゼン、イソプロピルベンゼン、ジイソプロピルベンゼン、ジブチルベンゼン、アミルベンゼン、ジヘキシルベンゼン、シクロヘキシルベンゼン、テトラメチルベンゼン、ドデシルベンゼン、ベンゾニトリル、アセトフェノン、メチルアセトフェノン、メトキシアセトフェノン、トルイル酸エチルエステル、トルエン、エチルトルエン、メトキシトルエン、ジメトキシトルエン、トリメトキシトルエン、イソプロピルトルエン、キシレン、ブチルキシレン、イソプロピルキシレン、アニソール、エチルアニソール、ジメチルアニソール、トリメチルアニソール、プロピルアニソール、イソプロピルアニソール、ブチルアニソール、メチルエチルアニソール、アネトールアニシラルコール、安息香酸メチル、安息香酸エチル、安息香酸プロピル、安息香酸ブチル、ジフェニルエーテル、ブチルフェニルエーテル、ベンジルメチルエーテル、ベンジルのエチルエーテル、メチレンジオキシベンゼン、メチルナフタレン、テトラヒドロナフタレン、アニリン、メチルアニリン、エチルアニリン、ブチルアニリン、ビフェニル、メチルビフェニル、およびイソプロピルビフェニル等)、脂肪族炭化水素系溶媒(例えば、シクロヘキサン、メチルシクロヘキサン、n-ペンタン、n-ヘキサン、n-ヘプタン、n-オクタン、n-ノナン、n-デカン、テトラデカン、デカリン、およびイソプロピルシクロヘキサン等)、ケトン系溶媒(例えば、アセトン、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン、およびアセトフェノン等)、エステル系溶媒(例えば、酢酸エチル、酢酸ブチル、エチルセロソルブアセテート、安息香酸メチル、および酢酸フェニル等)、多価アルコールおよびその誘導体(例えば、エチレングリコール、エチレングリコールモノブチルエー

テル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノメチルエーテル、ジメトキシエタン、プロピレングリコール、ジエトキシメタン、トリエチレングリコールモノエチルエーテル、グリセリン、および1, 2-ヘキサンジオール等)、アルコール系溶媒(例えば、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、およびシクロヘキサノール等)、スルホキシド系溶媒(例えば、ジメチルスルホキシド等)、並びに、アミド系溶媒(例えば、N-メチル-2-ピロリドン、およびN, N-ジメチルホルムアミド等)等が例示される。

これらの有機溶媒は、一種を単独で用いてもよく、複数種を組み合わせ用いてもよい。

[0202] 本実施形態の組成物は、本実施形態の化合物および溶媒の他に、他の材料を含んでもよい。

本発明の一実施形態に係る組成物は、有機EL素子用材料として好適に用いることができる。

[0203] [有機EL素子]

本実施形態に係る有機EL素子の構成について説明する。

有機EL素子は、陽極と、有機層と、陰極と、を含む。有機層は、有機化合物で構成される1以上の層を含む。有機層は、無機化合物をさらに含んでもよい。本実施形態の有機EL素子は、有機層のうちの少なくともいずれかが、本実施形態に係る化合物を含む。

[0204] 有機EL素子の代表的な素子構成としては、例えば、次の(a)~(e)等の構成を挙げることができる。

(a) 陽極/発光層/陰極

(b) 陽極/正孔注入・輸送層/発光層/陰極

(c) 陽極/発光層/電子注入・輸送層/陰極

(d) 陽極/正孔注入・輸送層/発光層/電子注入・輸送層/陰極

(e) 陽極/正孔注入・輸送層/発光層/障壁層/電子注入・輸送層/

陰極

[0205] 上記の中で (b)、(c)、および (d) の構成が好ましく用いられる。ただし、本発明は、これらの構成に限定されない。なお、上記「発光層」とは、発光機能を有する有機層である。前記「正孔注入・輸送層」は「正孔注入層および正孔輸送層のうちの少なくともいずれか1つ」を意味する。前記「電子注入・輸送層」は「電子注入層および電子輸送層のうちの少なくともいずれか1つ」を意味する。有機EL素子が、正孔注入層および正孔輸送層を有する場合には、正孔輸送層と陽極との間に正孔注入層が設けられていることが好ましい。また、有機EL素子が電子注入層および電子輸送層を有する場合には、電子輸送層と陰極との間に電子注入層が設けられていることが好ましい。また、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層および電子注入層は、それぞれ、一層で構成されていてもよいし、複数の層で構成されていてもよい。

[0206] 本実施形態の有機EL素子は、有機層が発光層を含むことが好ましく、当該発光層が本実施形態の化合物を含むことが好ましい。

図1に、本実施形態における有機EL素子の一例の概略構成を示す。

有機EL素子1は、透光性の基板2と、陽極3と、陰極4と、陽極3と陰極4との間に配置された有機層10と、を有する。

有機層10は、発光層7と、陽極3および発光層7の間に設けられた正孔注入層5と、正孔注入層5および発光層7の間に設けられた正孔輸送層6と、発光層7および陰極4の間に設けられた電子輸送帯域11と、を含む。

電子輸送帯域11は、電子輸送層8と電子注入層9とを含む。

本実施形態において、発光層7が本発明の一実施形態に係る化合物を含んでいる。

[0207] (発光層)

有機EL素子1の発光層7は、本発明の一実施形態に係る化合物を少なくとも含む。

有機EL素子1の発光層7において、本発明の一実施形態に係る化合物の含有率は、0.1質量%以上含まれていることが好ましく、1質量%以上9

9. 9質量%以下であることがより好ましく、5質量%以上95質量%以下であることがさらに好ましい。

[0208] 本実施形態の有機EL素子1は、発光層7に、本発明の一実施形態に係る化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

例えば、発光層7は、発光材料として、蛍光を発光する蛍光性化合物、または燐光を発光する燐光性化合物を含んでいてもよい。蛍光性化合物は一重項励起状態から発光可能な化合物であり、燐光性化合物は三重項励起状態から発光可能な化合物である。

[0209] 発光層7に用いることができる青色系の蛍光発光材料として、例えば、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、およびトリアリールアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N, N'-ビス[4-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル]-N, N'-ジフェニルスチルベン-4, 4'-ジアミン(略称: YGA2S)、4-(9H-カルバゾール-9-イル)-4'-(10-フェニル-9-アントリル)トリフェニルアミン(略称: YGAPA)、および4-(10-フェニル-9-アントリル)-4'-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)トリフェニルアミン(略称: PCBAPA)等が挙げられる。

[0210] 発光層7に用いることができる緑色系の蛍光発光材料として、例えば、芳香族アミン誘導体等を使用できる。具体的には、N-(9, 10-ジフェニル-2-アントリル)-N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン(略称: 2PCAPA)、N-[9, 10-ビス(1, 1'-ビフェニル-2-イル)-2-アントリル]-N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン(略称: 2PCABPhA)、N-(9, 10-ジフェニル-2-アントリル)-N, N', N'-トリフェニル-1, 4-フェニレンジアミン(略称: 2DPAPA)、N-[9, 10-ビス(1, 1'-ビフェニル-2-イル)-2-アントリル]-N, N', N'-トリフェニル-1, 4-フェニレンジアミン(略称: 2DPABPhA)、N-[9, 1

0-ビス(1, 1'-ビフェニル-2-イル)]-N-[4-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル]-N-フェニルアントラセン-2-アミン(略称: 2YGABPhA)、およびN, N, 9-トリフェニルアントラセン-9-アミン(略称: DPhAPhA)等が挙げられる。

[0211] 発光層7に用いることができる赤色系の蛍光発光材料として、例えば、テトラセン誘導体、およびジアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N, N, N', N'-テトラキス(4-メチルフェニル)テトラセン-5, 11-ジアミン(略称: p-mPhTD)、および7, 14-ジフェニル-N, N, N', N'-テトラキス(4-メチルフェニル)アセナフト[1, 2-a]フルオランテン-3, 10-ジアミン(略称: p-mPhAFD)等が挙げられる。

[0212] 発光層7に用いることができる青色系の燐光発光材料として、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、および白金錯体等の金属錯体を使用される。具体的には、ビス[2-(4', 6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N, C2']イリジウム(III)テトラキス(1-ピラゾリル)ボラート(略称: Fir6)、ビス[2-(4', 6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N, C2']イリジウム(III)ピコリナート(略称: Fir(pic))、ビス[2-(3', 5'-ビストリフルオロメチルフェニル)ピリジナト-N, C2']イリジウム(III)ピコリナート(略称: Ir(CF₃ppy)₂(pic))、およびビス[2-(4', 6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N, C2']イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: Fir(acac))等が挙げられる。

[0213] 発光層7に用いることができる緑色系の燐光発光材料として、例えば、イリジウム錯体等が使用される。トリス(2-フェニルピリジナト-N, C2')イリジウム(III)(略称: Ir(ppy)₃)、ビス(2-フェニルピリジナト-N, C2')イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: Ir(ppy)₂(acac))、ビス(1, 2-ジフェニル-1H-ベンゾイミダゾラト)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: I

$\text{Ir}(\text{pbi})_2(\text{acac})$ 、およびビス(ベンゾ[h]キノリナト)イリジウム($\text{Ir}(\text{bzq})_2(\text{acac})$)等が挙げられる。

[0214] 発光層7に用いることができる赤色系の燐光発光材料として、例えば、イリジウム錯体、白金錯体、テルビウム錯体、およびユーロピウム錯体等の金属錯体等が使用される。具体的には、ビス[2-(2'-ベンゾ[4,5- α]チエニル)ピリジナト-N, C3']イリジウム($\text{Ir}(\text{bt p})_2(\text{acac})$)、ビス(1-フェニルイソキノリナト-N, C2')イリジウム($\text{Ir}(\text{pi q})_2(\text{acac})$)、(アセチルアセトナート)ビス[2,3-ビス(4-フルオロフェニル)キノキサリナト]イリジウム($\text{Ir}(\text{Fdp q})_2(\text{acac})$)、および2,3,7,8,12,13,17,18-オクタエチル-21H,23H-ポルフィリン白金(PtOEP)等の有機金属錯体が挙げられる。

また、例えば、トリス(アセチルアセトナート)(モノフェナントロリン)テルビウム($\text{Tb}(\text{acac})_3(\text{Phen})$)、トリス(1,3-ジフェニル-1,3-プロパンジオナト)(モノフェナントロリン)ユーロピウム($\text{Eu}(\text{DBM})_3(\text{Phen})$)、およびトリス[1-(2-テノイル)-3,3,3-トリフルオロアセトナート](モノフェナントロリン)ユーロピウム($\text{Eu}(\text{TTA})_3(\text{Phen})$)等の希土類金属錯体は、希土類金属イオンからの発光(異なる多重度間の電子遷移)であるため、燐光性化合物として用いることができる。

[0215] ・発光層の膜厚

本実施形態の有機EL素子1における発光層7の膜厚は、好ましくは5nm以上50nm以下、より好ましくは7nm以上50nm以下、さらに好ましくは10nm以上50nm以下である。5nm以上であれば、発光層7を容易に形成でき、色度の調整も容易となる。また、50nm以下であれば、

駆動電圧の上昇を抑えることができる。

[0216] (基板)

基板2は、有機EL素子1の支持体として用いられる。基板2としては、例えば、ガラス、石英、およびプラスチック等を用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブル）基板のことであり、例えば、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエーテルスルホン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニル、ポリイミド、およびポリエチレンナフタレートからなるプラスチック基板等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。

[0217] (陽極)

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

これらの材料は、通常、スパッタリング法により成膜される。例えば、酸化インジウム-酸化亜鉛は、酸化インジウムに対し1質量%以上10質量%以下の酸化亜鉛を加えたターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。また、例えば、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウムは、酸化インジウムに対し酸化タングステンを0.5質量%以上5質量%以下、酸化亜鉛を0.1質量%以上1質量%以下含有したターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成すること

ができる。その他、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、またはスピニングコート法等により作製してもよい。

陽極3上に形成される有機層のうち、陽極3に接して形成される正孔注入層5は、陽極3の仕事関数に関係なく正孔（ホール）注入が容易である複合材料を用いて形成されるため、電極材料として可能な材料（例えば、金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物、その他、元素周期表の第1族または第2族に属する元素も含む）を用いることもできる。

仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム（Li）およびセシウム（Cs）等のアルカリ金属、およびマグネシウム（Mg）、カルシウム（Ca）、およびストロンチウム（Sr）等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金（例えば、MgAg、AlLi）、並びにユーロピウム（Eu）およびイッテルビウム（Yb）等の希土類金属、およびこれらを含む合金等を用いることもできる。なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、およびこれらを含む合金を用いて陽極3を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。さらに、銀ペースト等を用いる場合には、塗布法またはインクジェット法等を用いることができる。

[0218]（正孔注入層）

正孔注入層5は、正孔注入性の高い物質を含む層である。正孔注入性の高い物質としては、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、およびマンガン酸化物等を用いることができる。

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

ノ] ビフェニル (略称: DPAB)、4, 4' -ビス (N- {4- [N' - (3-メチルフェニル) -N' -フェニルアミノ] フェニル} -N-フェニルアミノ) ビフェニル (略称: DNTPD)、1, 3, 5-トリス [N- (4-ジフェニルアミノフェニル) -N-フェニルアミノ] ベンゼン (略称: DPA3B)、3- [N- (9-フェニルカルバゾール-3-イル) -N-フェニルアミノ] -9-フェニルカルバゾール (略称: PCzPCA1)、3, 6-ビス [N- (9-フェニルカルバゾール-3-イル) -N-フェニルアミノ] -9-フェニルカルバゾール (略称: PCzPCA2)、および 3- [N- (1-ナフチル) -N- (9-フェニルカルバゾール-3-イル) アミノ] -9-フェニルカルバゾール (略称: PCzPCN1) 等の芳香族アミン化合物等やジピラジノ [2, 3-f : 20, 30-h] キノキサリン-2, 3, 6, 7, 10, 11-ヘキサカルボニトリル (HAT-CN) も挙げられる。

また、正孔注入性の高い物質としては、高分子化合物 (オリゴマー、 dendrimer、およびポリマー等) を用いることもできる。例えば、ポリ (N-ビニルカルバゾール) (略称: PVK)、ポリ (4-ビニルトリフェニルアミン) (略称: PVTPA)、ポリ [N- (4- {N' - [4- (4-ジフェニルアミノ) フェニル] フェニル-N' -フェニルアミノ} フェニル) メタクリルアミド] (略称: PTPDMA)、およびポリ [N, N' -ビス (4-ブチルフェニル) -N, N' -ビス (フェニル) ベンジジン] (略称: Poly-TPD) 等の高分子化合物が挙げられる。また、ポリ (3, 4-エチレンジオキシチオフェン) /ポリ (スチレンスルホン酸) (PEDOT / PSS)、およびポリアニリン /ポリ (スチレンスルホン酸) (PANI / PSS) 等の酸を添加した高分子化合物を用いることもできる。

[0219] (正孔輸送層)

正孔輸送層6は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層6には、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、およびアントラセン誘導体等を使用する事ができる。具体的には、4, 4' -ビス [N- (1-ナフチル

ル) -N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: NPB) やN, N' -ビス (3-メチルフェニル) -N, N' -ジフェニル- [1, 1' -ビフェニル] -4, 4' -ジアミン (略称: TPD)、4-フェニル-4' - (9-フェニルフルオレン-9-イル) トリフェニルアミン (略称: BAFAP)、4, 4' -ビス [N- (9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル) -N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: DFLLDPBi)、4, 4', 4'' -トリス (N, N-ジフェニルアミノ) トリフェニルアミン (略称: TDATA)、4, 4', 4'' -トリス [N- (3-メチルフェニル) -N-フェニルアミノ] トリフェニルアミン (略称: MTDATA)、および4, 4' -ビス [N- (スピロ-9, 9' -ビフルオレン-2-イル) -N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: BSPB) 等の芳香族アミン化合物等を用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の正孔移動度を有する物質である。

正孔輸送層6には、CBP、9- [4- (N-カルバゾリル)] フェニル-10-フェニルアントラセン (CzPA)、および9-フェニル-3- [4- (10-フェニル-9-アントリル) フェニル] -9H-カルバゾール (PCzPA) のようなカルバゾール誘導体や、t-BuDNA、DNA、DPAnthのようなアントラセン誘導体を用いてもよい。ポリ (N-ビニルカルバゾール) (略称: PVK) やポリ (4-ビニルトリフェニルアミン) (略称: PVTPA) 等の高分子化合物を用いることもできる。

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

正孔輸送層を二層以上配置する場合、エネルギーギャップのより大きい材料を含む層を、発光層7に近い側に配置することが好ましい。

[0220] 本実施形態において、正孔輸送層6は、発光層7で生成する三重項励起子が正孔輸送層へ拡散することを防止し、三重項励起子を発光層7内に閉じ込める機能を有することが好ましい。

[0221] (電子輸送層)

電子輸送層 8 は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層 8 には、1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、および亜鉛錯体等の金属錯体、2) イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、およびフェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、並びに 3) 高分子化合物を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、Alq、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(略称: Almq₃)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(略称: BeBq₂)、BALq、Znq、ZnPBO、および ZnBTZ 等の金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、2-(4-ビフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称: PBD)、1,3-ビス[5-(tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称: OXD-7)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称: TAZ)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-(4-エチルフェニル)-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称: p-EtTAZ)、バソフェナントロリン(略称: BPhen)、バソキュプロイン(略称: BCP)、および 4,4'-ビス(5-メチルベンゾオキサゾール-2-イル)スチルベン(略称: BzOs) 等の複素芳香族化合物も用いることができる。本実施態様においては、ベンゾイミダゾール化合物を好適に用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層 8 として用いてもよい。また、電子輸送層 8 は、単層だけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層した層としてもよい。

また、電子輸送層 8 には、高分子化合物を用いることもできる。例えば、ポリ[(9,9-ジヘキシルフルオレン-2,7-ジイル)-co-(ピリ

ジン-3, 5-ジイル)] (略称: PF-Py)、およびポリ [(9, 9-ジオクチルフルオレン-2, 7-ジイル) -co-(2, 2'-ビピリジン-6, 6'-ジイル)] (略称: PF-BPy) 等を用いることができる。

[0222] 本実施形態において、電子輸送層8は、発光層7で生成する三重項励起子が電子輸送層8や電子注入層9へ拡散することを防止し、三重項励起子を発光層7内に閉じ込める機能を有することが好ましい。

[0223] (電子注入層)

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

あるいは、電子注入層9に、有機化合物と電子供与体(ドナー)とを混合してなる複合材料を用いてもよい。このような複合材料は、電子供与体によって有機化合物に電子が発生するため、電子注入性および電子輸送性に優れている。この場合、有機化合物としては、発生した電子の輸送に優れた材料であることが好ましく、具体的には、例えば上述した電子輸送層8を構成する物質(金属錯体や複素芳香族化合物等)を用いることができる。

電子供与体としては、有機化合物に対し電子供与性を示す物質であればよい。具体的には、アルカリ金属やアルカリ土類金属や希土類金属が好ましく、リチウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、エルビウム、およびイットルビウム等が挙げられる。また、アルカリ金属酸化物やアルカリ土類金属酸化物が好ましく、リチウム酸化物、カルシウム酸化物、およびバリウム酸化物等が挙げられる。また、酸化マグネシウムのようなルイス塩基を用い

することもできる。また、テトラチアフルバレン（略称：TTF）等の有機化合物を用いることもできる。

[0224]（陰極）

陰極4には、仕事関数の小さい（具体的には3.8 eV以下）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物等を用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム（Li）およびセシウム（Cs）等のアルカリ金属、マグネシウム（Mg）、カルシウム（Ca）、およびストロンチウム（Sr）等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金（例えば、MgAg、AlLi）、並びにユーロピウム（Eu）およびイッテルビウム（Yb）等の希土類金属、およびこれらを含む合金等が挙げられる。

なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、またはこれらを含む合金を用いて陰極4を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。また、銀ペースト等を用いる場合には、塗布法またはインクジェット法等を用いることができる。

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

[0225]（層形成方法）

本実施形態の有機EL素子1の各層の形成方法としては、上記で特に言及した以外には制限されない。例えば、乾式成膜法、および湿式成膜法等の公知の方法を採用できる。乾式成膜法としては、例えば、真空蒸着法、分子線蒸着法（MBE法）、スパッタリング法、プラズマ法、およびイオンプレーティング法等が挙げられる。湿式成膜法としては、例えば、スピコーティング法、ディッピング法、フローコーティング法、キャスト法、バーコート法、ロールコート法、インクジェット法、印刷法（例えば、凸版印刷

法、凹版印刷法、平版印刷法、孔版印刷法、および、それらとオフセット印刷法を組み合わせた印刷法)、インクジェット印刷法、スプレーコート法、スリットコート法、キャップコート法、グラビアロールコート法、並びにメニスカスコート法等が挙げられる。

[0226] 本実施形態の有機EL素子1において、本発明の一実施形態に係る化合物を含有する発光層は、溶媒および本発明の一実施形態に係る化合物を含む溶液(以下、「塗布液」ともいう)を用いて、塗布法により成膜することが好ましい。塗布液には、必要に応じて、発光材料等の他の材料を含有させてもよい。

[0227] 塗布法としては、湿式成膜法が好適に用いられる。特に微細なパターンニングを要する場合、例えば、印刷法、インクジェット印刷法、およびディスペンサー塗布等が好ましい。また、転写前駆基板へ本発明の一実施形態に係る化合物を前記の湿式成膜法により成膜した後、レーザー光や熱プレス等で対象とする電極を有する配線基板上へ転写する方法を用いることもできる。これらの方法による成膜は当業者に周知の条件により行うことができ、その詳細は省略する。

[0228] 塗布法に使用する塗布液は、本発明の一実施形態に係る化合物を少なくとも1種類含有していればよく、溶媒に溶解していても、分散していてもよい。上記塗布液中の本発明の一実施形態に係る化合物の含有量は、成膜用溶液全体に対して0.1~15質量%が好ましく、0.5~10質量%がより好ましい。

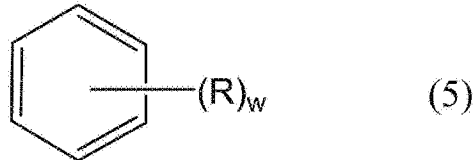
溶媒としては、本発明の一実施形態に係る組成物における溶媒と同様の有機溶媒を挙げることができる。

[0229] 上記有機溶媒のうち、溶解性、成膜の均一性、および粘度特性等の観点から、少なくとも、トルエン、キシレン、エチルベンゼン、アミルベンゼン、アニソール、4-メトキシトルエン、2-メトキシトルエン、1,2-ジメトキシベンゼン、メシチレン、テトラヒドロナフタレン、シクロヘキシルベンゼン、2,3-ジヒドロベンゾフラン、シクロヘキサノン、およびメチル

シクロヘキサノンのいずれか1種以上を含むことが好ましい。

[0230] 塗布液に用いる有機溶媒は、沸点が110℃以上、かつ20℃での水への溶解度が1質量%以下であることが好ましく、下記一般式(5)で表される化合物であることが、より好ましい。

[0231] [化136]



[0232] (前記一般式(5)中、Rは炭素数1~20の置換基であり、wは0~6の整数を表す。複数のRは、互いに同一でも異なってもよい。)

[0233] 成膜用の塗布液は、本発明の一実施形態に係る化合物と、溶媒として、沸点が110℃以上、かつ20℃での水への溶解度が1質量%以下である前記一般式(5)で表される化合物とを含むことが好ましい。また、成膜用の塗布液には、必要に応じて添加剤を添加してもよい。添加剤としては、例えば、粘度の調整剤、表面張力の調整剤、架橋反応の開始剤、および架橋反応の触媒等が挙げられる。なお、当該添加剤は、膜中に残留しても素子特性に影響を与えないものを選択するか、成膜工程で膜中から除去できるものが望ましい。

[0234] (膜厚)

本実施形態の有機EL素子1の各有機層の膜厚は、上記で特に言及した以外には制限されない。ピンホール等の欠陥が生じにくく、低印加電圧で効率が向上するため、通常、膜厚は、数nmから1μmの範囲が好ましい。

[0235] 本実施形態において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物(例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物)の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が6であり、ナフタレ

ン環は環形成炭素数が10であり、ピリジニル基は環形成炭素数5であり、フラニル基は環形成炭素数4である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

本実施形態において、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造（例えば単環、縮合環、環集合）の化合物（例えば単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子（例えば環を構成する原子の結合手を終端する水素原子）や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。以下で記される「環形成原子数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ピリジン環は、環形成原子数が6であり、キナゾリン環は、環形成原子数が10であり、フラン環は、環形成原子数が5である。ピリジン環やキナゾリン環の炭素原子にそれぞれ結合している水素原子や置換基を構成する原子については、環形成原子数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の原子数は環形成原子数の数に含めない。

次に前記一般式に記載の各置換基について説明する。

[0236] 本実施形態における環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基（アリール基と称する場合がある。）としては、例えば、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、フルオレニル基、プレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾ[a]アントリル基、ベンゾ[c]フェナントリル基、トリフェニレニル基、ベンゾ[k]フルオランテニル基、ベンゾ[g]クリセニル基、ベンゾ[b]トリフェニレニル基、ピセニル基、およびペリレニル基等が挙げられる。

本実施形態におけるアリール基としては、環形成炭素数が6～20である

ことが好ましく、6～14であることがより好ましく、6～12であることがさらに好ましい。上記アリアル基の中でもフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、ターフェニル基、フルオレニル基が特に好ましい。1-フルオレニル基、2-フルオレニル基、3-フルオレニル基および4-フルオレニル基については、9位の炭素原子に、後述する本実施形態における置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基や置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリアル基が置換されていることが好ましい。

[0237] 本実施形態における環形成原子数5～30の複素環基（ヘテロアリアル基、ヘテロ芳香族環基、または芳香族複素環基と称する場合がある。）は、ヘテロ原子として、窒素原子、硫黄原子、酸素原子、ケイ素原子、セレン原子、およびゲルマニウム原子からなる群から選択される少なくともいずれかの原子を含むことが好ましく、窒素、硫黄、および酸素からなる群から選択される少なくともいずれかの原子を含むことがより好ましい。

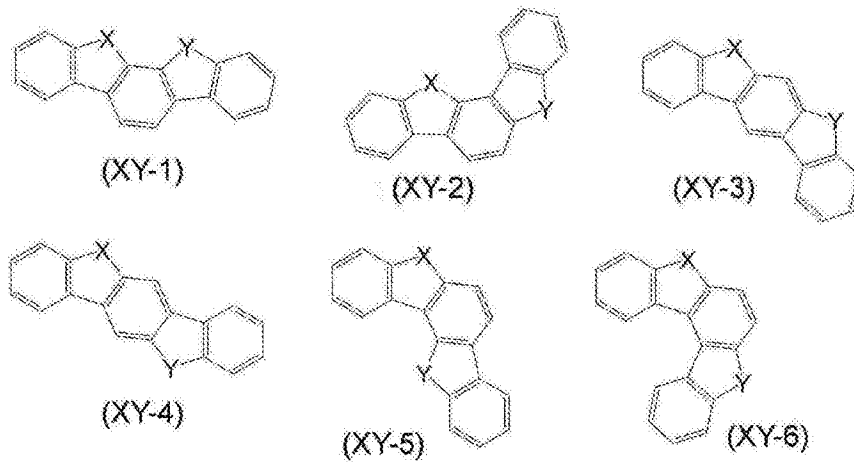
本実施形態における環形成原子数5～30の複素環基としては、例えば、ピリジル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリニル基、ナフチリジニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾピリジニル基、ベンズトリアゾリル基、カルバゾリル基、フリル基、チエニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサジアゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ペペリジニル基、ピロリジニル基、ピペラジニル基、モルホルル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、およびフェノキサジ

ニル基等が挙げられる。

本実施形態における複素環基の環形成原子数は、5～20であることが好ましく、5～14であることがさらに好ましい。上記複素環基の中でも1-ジベンゾフラニル基、2-ジベンゾフラニル基、3-ジベンゾフラニル基、4-ジベンゾフラニル基、1-ジベンゾチオフェニル基、2-ジベンゾチオフェニル基、3-ジベンゾチオフェニル基、4-ジベンゾチオフェニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、および9-カルバゾリル基が特に好ましい。1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基および4-カルバゾリル基については、9位の窒素原子に、本実施形態における置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基または置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基が置換されていることが好ましい。

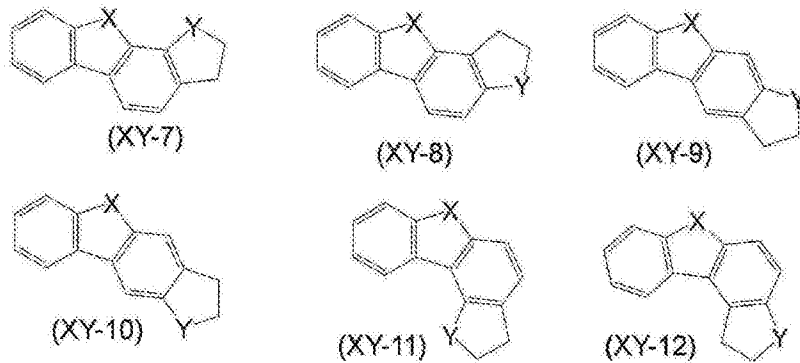
[0238] また、本実施形態において、複素環基は、例えば、下記一般式(XY-1)～(XY-18)で表される部分構造から誘導される基であってもよい。

[0239] [化137]

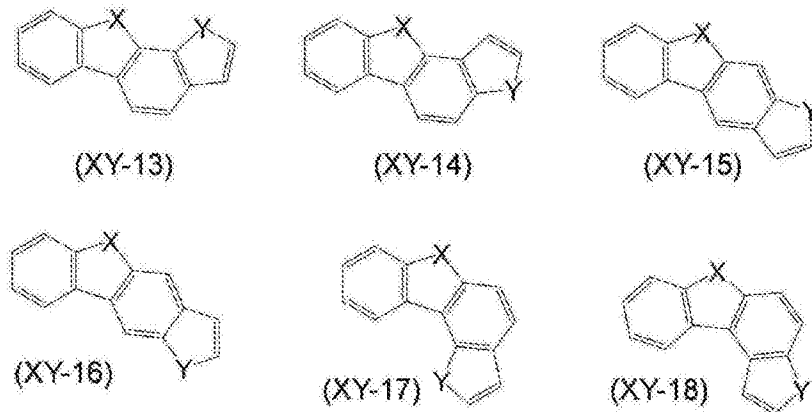


[0240]

[化138]



[0241] [化139]

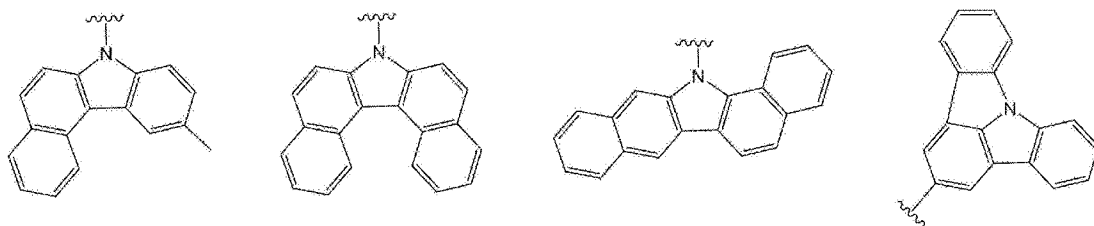


[0242] 前記一般式 (XY-1) ~ (XY-18) において、XおよびYは、それぞれ独立に、ヘテロ原子であり、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、ケイ素原子、またはゲルマニウム原子であることが好ましい。前記一般式 (XY-1) ~ (XY-18) で表される部分構造は、任意の位置で結合手を有して複素環基となり、この複素環基は、置換基を有していてもよい。

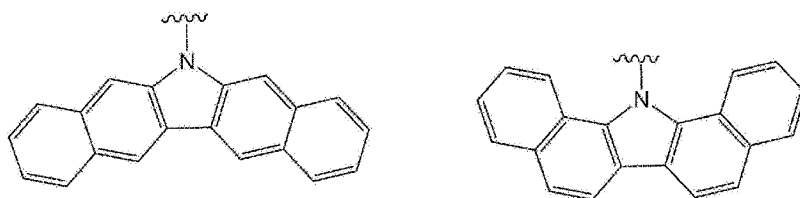
[0243] また、本実施形態において、カルバゾリル基としては、例えば、下記式で表されるようなカルバゾール環に対してさらに環が縮合した基も含み得る。このような基も置換基を有していてもよい。また、結合手（波線部分）の位置も適宜変更され得る。

[0244]

[化140]



[0245] [化141]



[0246] 本実施形態における炭素数1～30のアルキル基としては、直鎖、分岐鎖または環状のいずれであってもよい。直鎖または分岐鎖のアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、*n*-ノニル基、*n*-デシル基、*n*-ウンデシル基、*n*-ドデシル基、*n*-トリデシル基、*n*-テトラデシル基、*n*-ペンタデシル基、*n*-ヘキサデシル基、*n*-ヘプタデシル基、*n*-オクタデシル基、ネオペンチル基、アミル基、イソアミル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、および3-メチルペンチル基等が挙げられる。

本実施形態における直鎖または分岐鎖のアルキル基の炭素数は、1～10であることが好ましく、1～6であることがさらに好ましい。上記直鎖または分岐鎖のアルキル基の中でもメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、アミル基、イソアミル基、およびネオペンチル基が特に好ましい。

本実施形態における炭素数3～30のシクロアルキル基としては、シクロ

プロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、4-メチルシクロヘキシル基、アダマンチル基、ノルボルニル基等が挙げられる。シクロアルキル基の環形成炭素数は、3~10であることが好ましく、5~8であることがさらに好ましい。上記シクロアルキル基の中でも、シクロペンチル基やシクロヘキシル基が特に好ましい。

アルキル基がハロゲン原子で置換されたハロゲン化アルキル基としては、例えば、上記炭素数1~30のアルキル基が1以上のハロゲン原子で置換されたフルオロアルキル基が挙げられる。具体的には、フルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、フルオロエチル基、トリフルオロメチルメチル基、トリフルオロエチル基、およびペンタフルオロエチル基等が挙げられる。

[0247] アラルキル基としては、環形成炭素数6~30のアラルキル基が好ましく、 $-Z_3-Z_4$ と表される。この Z_3 の例として、上記炭素数1~30のアルキル基に対応するアルキレン基が挙げられる。この Z_4 の例として、上記環形成炭素数6~30のアリール基の例が挙げられる。このアラルキル基は、炭素数7~30のアラルキル基（アリール部分は炭素数6~30、好ましくは6~20、より好ましくは6~12）、アルキル部分は炭素数1~30（好ましくは1~20、より好ましくは1~10、さらに好ましくは1~6）であることが好ましい。このアラルキル基としては、例えば、ベンジル基、2-フェニルプロパン-2-イル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-t-ブチル基、 α -ナフチルメチル基、1- α -ナフチルエチル基、2- α -ナフチルエチル基、1- α -ナフチルイソプロピル基、2- α -ナフチルイソプロピル基、 β -ナフチルメチル基、1- β -ナフチルエチル基、2- β -ナフチルエチル基、1- β -ナフチルイソプロピル基、2- β -ナフチルイソプロピル基が挙げられる。

[0248] 本実施形態における置換シリル基としては、炭素数3~30のアルキルシリル基、および環形成炭素数6~30のアリールシリル基が挙げられる。

本実施形態における炭素数3～30のアルキルシリル基としては、上記炭素数1～30のアルキル基で例示したアルキル基を有するトリアルキルシリル基が挙げられ、具体的にはトリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリ-*n*-ブチルシリル基、トリ-*n*-オクチルシリル基、トリスブチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルイソプロピルシリル基、ジメチル-*n*-プロピルシリル基、ジメチル-*n*-ブチルシリル基、ジメチル-*t*-ブチルシリル基、ジエチルイソプロピルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、およびトリスプロピルシリル基等が挙げられる。トリアルキルシリル基における3つのアルキル基は、それぞれ同一でも異なってもよい。

[0249] 本実施形態における環形成炭素数6～30のアリールシリル基としては、ジアルキルアリールシリル基、アルキルジアリールシリル基、およびトリアリールシリル基が挙げられる。

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

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

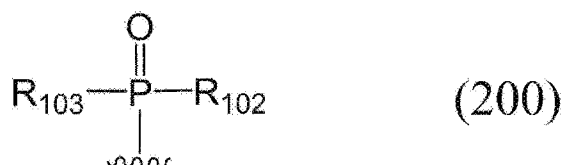
トリアリールシリル基は、例えば、上記環形成炭素数6～30のアリール基を3つ有するトリアリールシリル基が挙げられる。トリアリールシリル基の炭素数は、18～30であることが好ましい。

[0250] 本実施形態における置換ゲルマニウム基としては、 $-Ge(R_{101})_3$ で表されることが好ましい。R₁₀₁は、それぞれ独立に、置換基である。置換基R₁₀₁は、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、または置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基であることが好まし

い。複数の R_{101} は、互いに同一でも異なってもよい。

[0251] 本実施形態における置換ホスフィンオキシド基としては、下記一般式(200)で表されることが好ましい。

[0252] [化142]



[0253] 前記一般式(200)において、 R_{102} および R_{103} は、それぞれ独立に、置換基である。置換基 R_{102} および置換基 R_{103} は、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、または置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30の芳香族炭化水素基であることが好ましい。波線部分は結合手である。

[0254] ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、およびヨウ素原子等が挙げられ、フッ素原子が好ましい。

[0255] 本実施形態において、「環形成炭素」とは飽和環、不飽和環、または芳香環を構成する炭素原子を意味する。「環形成原子」とはヘテロ環(飽和環、不飽和環、および芳香環を含む)を構成する炭素原子およびヘテロ原子を意味する。

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

[0256] また、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基としては、上述のようなアリール基、複素環基、アルキル基(直鎖または分岐鎖のアルキル基、シクロアルキル基、ハロアルキル基)、アラルキル基、アルキルシリル基、アリールシリル基、ハロゲン原子、シアノ基の他に、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アルキルチオ基、アリールチオ基、シロキサニル基、アルキルアミノ基、アリールアミノ基、アミノ基、アルデヒド基、カルボニル基、エステル基、カルバモイル基、ヒドロキシル基、ニトロ基、およびカルボキシ基が挙げられる。

ここで挙げた置換基の中では、アリール基、複素環基、アルキル基、ハロゲン原子、アルキルシリル基、アリールシリル基、およびシアノ基が好ましく、さらには、各置換基の説明において好ましいとした具体的な置換基が好ましい。

これらの置換基は、上記のアリール基、複素環基、アルキル基、アラルキル基、アルキルシリル基、アリールシリル基、ハロゲン原子、およびシアノ基の他に、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アルキルチオ基、アリールチオ基、シロキサニル基、アルキルアミノ基、アリールアミノ基、アミノ基、アルデヒド基、カルボニル基、エステル基、カルバモイル基、ヒドロキシル基、ニトロ基、およびカルボキシ基によってさらに置換されてもよい。また、これらの置換基は複数が互いに結合して環を形成してもよい。

[0257] 炭素数2～30のアルケニル基としては、直鎖、分岐鎖、または環状のいずれであってもよく、例えば、ビニル基、プロペニル基、ブテニル基、オレイル基、エイコサペンタエニル基、ドコサヘキサエニル基、スチリル基、2,2-ジフェニルビニル基、1,2,2-トリフェニルビニル基、2-フェニル-2-プロペニル基、シクロペンタジエニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、およびシクロヘキサジエニル基等が挙げられる。

[0258] 炭素数2～30のアルキニル基としては、直鎖、分岐鎖、または環状のいずれであってもよく、例えば、エチニル、プロピニル、および2-フェニルエチニル等が挙げられる。

[0259] 炭素数1～30のアルコキシ基は、 $-OZ_a$ と表される。この Z_a の例として、上記炭素数1～30のアルキル基が挙げられる。アルコキシ基は、例えばメトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペンチルオキシ基、およびヘキシルオキシ基があげられる。アルコキシ基の炭素数は、1～20であることが好ましい。

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

換された基が挙げられる。

[0260] 環形成炭素数 6～30 のアリールオキシ基は、 $-OZ_b$ と表される。この Z_b の例として、上記環形成炭素数 6～30 のアリール基が挙げられる。アリールオキシ基の環形成炭素数は、6～20 であることが好ましい。このアリールオキシ基としては、例えば、フェノキシ基が挙げられる。

[0261] 炭素数 1～30 のアルキルチオ基は、 $-SR_v$ と表される。この R_v の例として、上記炭素数 1～30 のアルキル基が挙げられる。アルキルチオ基の炭素数は、1～20 であることが好ましい。

環形成炭素数 6～30 のアリールチオ基は、 $-SR_w$ と表される。この R_w の例として、上記環形成炭素数 6～30 のアリール基が挙げられる。アリールチオ基の環形成炭素数は、6～20 であることが好ましい。

[0262] シロキサニル基は、エーテル結合を介したケイ素化合物基であり、例えば、トリメチルシロキサニル基等が挙げられる。

[0263] 炭素数 2～30 のアルキルアミノ基は、 $-NHR_v$ 、または $-N(R_v)_2$ と表される。この R_v の例として、上記炭素数 1～30 のアルキル基が挙げられる。

[0264] 環形成炭素数 6～60 のアリールアミノ基は、 $-NHR_w$ 、または $-N(R_w)_2$ と表される。この R_w の例として、上記環形成炭素数 6～30 のアリール基が挙げられる。

[0265] アルデヒド基、カルボニル基、エステル基、カルバモイル基、およびアミノ基は、脂肪族炭化水素、脂環式炭化水素、芳香族炭化水素、または複素環等で置換されていてもよく、脂肪族炭化水素、脂環式炭化水素、芳香族炭化水素、および複素環は、置換基をさらに有していてもよい。

[0266] 「置換もしくは無置換の」という場合における「無置換」とは前記置換基で置換されておらず、水素原子が結合していることを意味する。

なお、本実施形態において、「置換もしくは無置換の炭素数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の炭素数を表し、置換されている場合の置換基の炭素数は含めない。

ここで、「YY」は「XX」よりも大きく、「XX」と「YY」はそれぞれ1以上の整数を意味する。

本実施形態において、「置換もしくは無置換の原子数XX~YYのZZ基」という表現における「原子数XX~YY」は、ZZ基が無置換である場合の原子数を表し、置換されている場合の置換基の原子数は含めない。ここで、「YY」は「XX」よりも大きく、「XX」と「YY」はそれぞれ1以上の整数を意味する。

[0267] 本実施形態において、置換基同士が互いに結合して環構造が構築される場合、環構造は、飽和環、不飽和環、芳香族炭化水素環、または複素環である。また、本実施形態において、芳香族炭化水素環および複素環としては、上述した一価の基の由来となる環構造が挙げられる。

[0268] 本実施形態において、連結基における芳香族炭化水素基および複素環基としては、上述した一価の基から、1つ以上の原子を除いて得られる二価以上の基が挙げられる。また、連結基における「炭素-炭素二重結合を有する炭素数2~30の鎖状または分岐状の炭化水素基」は、上述したアルケニル基から、1つ以上の原子を除いて得られる二価以上の基が挙げられ、「炭素-炭素三重結合を有する炭素数2~30の鎖状または分岐状の炭化水素基」は、上述したアルキニル基から、1つ以上の原子を除いて得られる二価以上の基が挙げられる。

[0269] [電子機器]

本発明の一実施形態に係る有機EL素子は、表示装置および発光装置等の電子機器に使用できる。表示装置としては、例えば、有機ELパネルモジュール等の表示部品、テレビ、携帯電話、タブレット、およびパーソナルコンピュータ等が挙げられる。発光装置としては、例えば、照明、および車両用灯具等が挙げられる。

[0270] [実施形態の変形]

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

[0271] 有機EL素子の構成は、前記実施形態で説明した構成に限定されない。

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

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

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

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

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

[0272] 本発明の一実施形態に係る化合物は、正孔輸送層に含まれていてもよいし、電子輸送層に含まれていてもよいし、正孔輸送層および電子輸送層の両方に含まれていてもよい。

本発明の一実施形態に係る化合物を含む層である場合、正孔輸送層および電子輸送層は、溶媒および本発明の一実施形態に係る化合物を含む溶液を用いて、上記塗布法により成膜することが好ましい。

[0273] その他、本発明の実施における具体的な構造および形状等は、本発明の目的を達成できる範囲で他の構造等としてもよい。

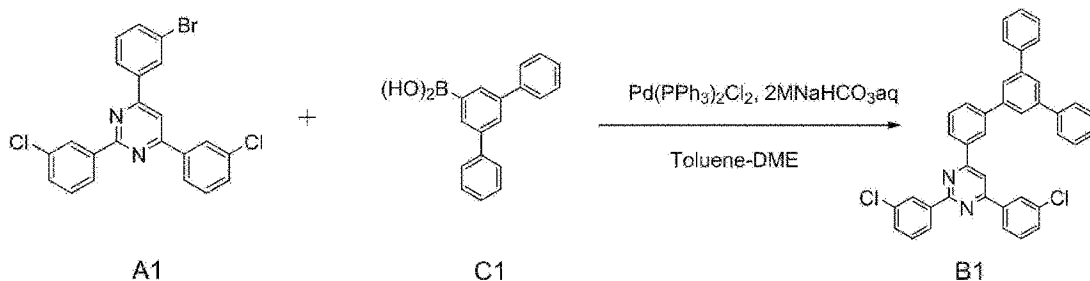
実施例

[0274] 以下、本発明に係る実施例を説明する。本発明はこれらの実施例によって限定されない。

[0275] [合成実施例 1] 化合物 H-1 の合成

(1) 化合物 B 1 の合成

[0276] [化143]

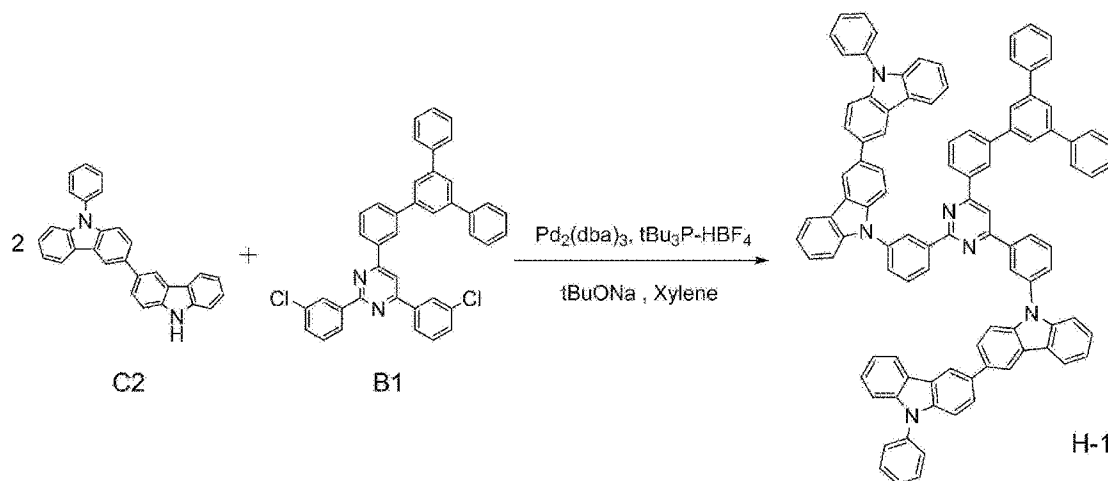


[0277] アルゴン雰囲気下、ピリミジン中間体である化合物 A 1 (5.47 g、12.0 mmol)、ボロン酸 C 1 (3.62 g、13.2 mmol)、ジクロロ(ビストリフェニルホスフィン)パラジウム錯体 (210 mg、48.0 mmol)、2 M 炭酸ナトリウム水溶液 (24 mL)、トルエン (24 mL)、および DME (24 mL) を順次加えて 100°C で 8 時間加熱撹拌した。

室温まで反応液を冷却した後、分液操作にて水層と有機層に分け、有機層の有機溶媒を減圧下留去した。得られた固体を再結晶にて精製し、ピリミジン中間体である化合物 B 1 (3.63 g、収率 50%) を得た。

[0278] (2) 化合物 H-1 の合成

[0279] [化144]



[0280] アルゴン雰囲気下、ビスカルバゾリル体C 2 (4.90g、12.0mmol)、化合物B 1 (3.63g、6.00mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(110mg、0.120mmol)、トリ-*t*-ブチルホスホニウムテトラフルオロボロ酸塩(70.0mg、0.240mmol)、*t*-ブトキシナトリウム(1.73g、18.0mmol)、および無水キシレン(80mL)を順次加えて8時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物H-1(5.68g、収率70%)を得た。

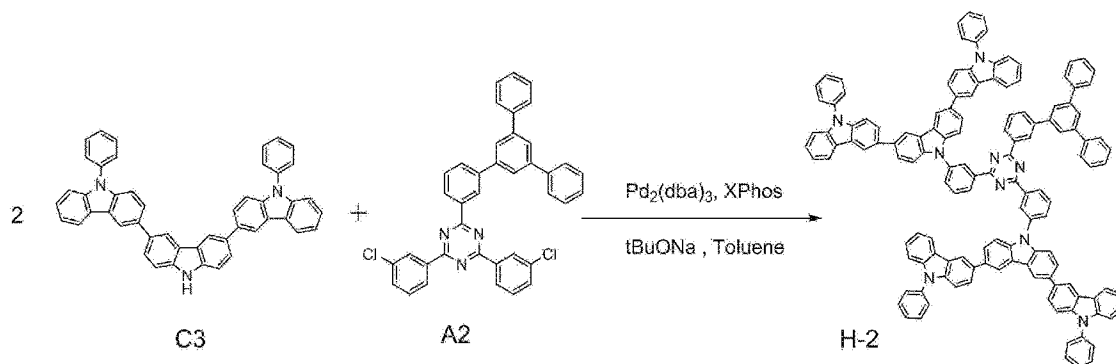
[0281] 化合物H-1について、HPLC(High Performance Liquid Chromatography)およびLC-MS(Liquid Chromatography-Mass Spectrometry)の分析結果を以下に示す。

HPLC: 純度98.6%

LC-MS: calcd for $C_{100}H_{64}N_6 = 1348$,
found $m/z = 1348$ (M+, 100)

[0282] [合成実施例2] 化合物H-2の合成

[0283] [化145]



[0284] アルゴン雰囲気下、トリカルバゾリル体C 3 (2.73g、4.20mmol)、トリアジン中間体である化合物A 2 (1.21g、2.00mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(73.0mg、0

、0.800 mmol)、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2', 4', 6'-トリイソプロピルビフェニル (150 mg、0.320 mmol)、t-ブトキシナトリウム (1.15 g、12.0 mmol)、および無水トルエン (40 mL) を順次加えて7時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物H-2 (1.94 g, 収率53%) を得た。

[0285] 化合物H-2について、HPLCおよびLC-MSの分析結果を以下に示す。

HPLC : 純度98.9%

LC-MS : calcd for $C_{135}H_{85}N_9 = 1833$ 、
found $m/z = 1833$ (M+, 100)

[0286] [実施例1]

(基板の洗浄)

25 mm × 25 mm × 厚さ1.1 mmのITO透明電極付きガラス基板 (ジオマテック株式会社製) に対し、イソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行った後、UVオゾン洗浄を5分間行った。

[0287] (下地層の形成)

正孔輸送材料としてHERAEUS社製CLEVIOUS A14083 (商品名) を30 nmの厚さで前記のITO基板上にスピンコート法により成膜した。成膜後、アセトンにより不要部分を除去し、次いで大気中200 °Cのホットプレートで10分間焼成し、下地層を形成した下地基板を作製した。

[0288] (発光層の形成)

ホスト材料として合成実施例1で得た化合物H-1、ドーパント材料として化合物D-1を用い、化合物H-1 : 化合物D-1が質量比で90 : 10となるような混合比で、1.6質量%のトルエン溶液を作製した。材料の溶解には超音波を用いた。このトルエン溶液を目視し、全ての化合物が完全に

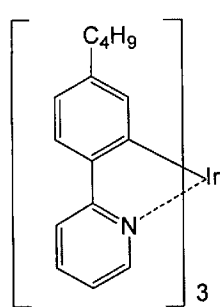
溶解し透明になっていることを確認した。このトルエン溶液を用い、前記下地基板の上にスピコート法により、50 nmの膜厚になるように塗布成膜した。塗布成膜後、不要部分をトルエンにて除去し、150℃のホットプレート上で加熱乾燥し、発光層を成膜した塗布積層基板を作製した。なお、発光層の成膜にかかる全ての操作は窒素雰囲気グローブボックス中で実施した。

[0289] (蒸着、封止)

塗布積層基板を蒸着チャンバー中に搬送し、電子輸送層としてとして下記化合物ET-1を50 nm蒸着した。さらに、フッ化リチウムを1 nm、アルミニウムを80 nm蒸着積層した。全ての蒸着工程を完了させた後、窒素雰囲気グローブボックス中でザグリガラスによる封止を行い、有機EL素子を作製した。

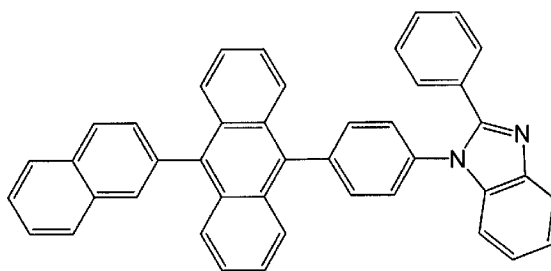
得られた有機EL素子を、直流電流駆動により発光させ、電流密度10 mA/cm²における外部量子収率(EQE)を測定した。測定結果を表1に示す。

[0290] [化146]



Ir (nBuppy)₃

D-1



ET-1

[0291] [実施例2]

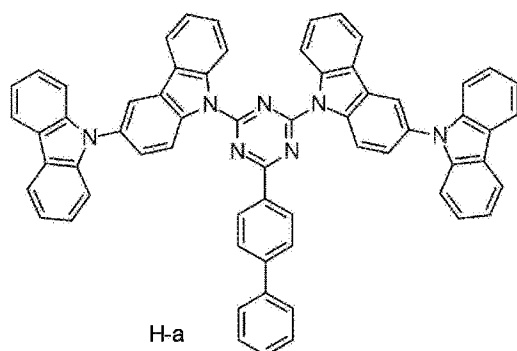
ホスト材料として、化合物H-1の代わりに合成実施例2で得た化合物H-2を用いたこと以外は、実施例1と同様の方法で有機EL素子を作製した。得られた有機EL素子を、直流電流駆動により発光させ、電流密度10 mA/cm²における外部量子収率(EQE)を測定した。測定結果を表1に示す。

す。

[0292] [比較例 1]

ホスト材料として、化合物 H-1 の代わりに下記比較化合物 H-a を用いたこと以外は、実施例 1 と同様の方法で有機 EL 素子を作製しようとしたが、トルエン溶液中で材料が溶けずに白濁しており、溶液調製ができなかったことから、素子作製に至らなかった。

[0293] [化147]



[0294] [表1]

	ホスト材料	ドーパント材料	外部量子効率 (%)
実施例 1	H-1	D-1	11.0
実施例 2	H-2	D-1	9.2

[0295] 上記のように、実施例 1 および実施例 2 で用いた本発明の一実施形態に係る化合物は、可溶性に優れることが確認できた。

また、表 1 が示すように、実施例 1 および実施例 2 の有機 EL 素子は、外部量子効率 EQE が高いことが確認できた。

符号の説明

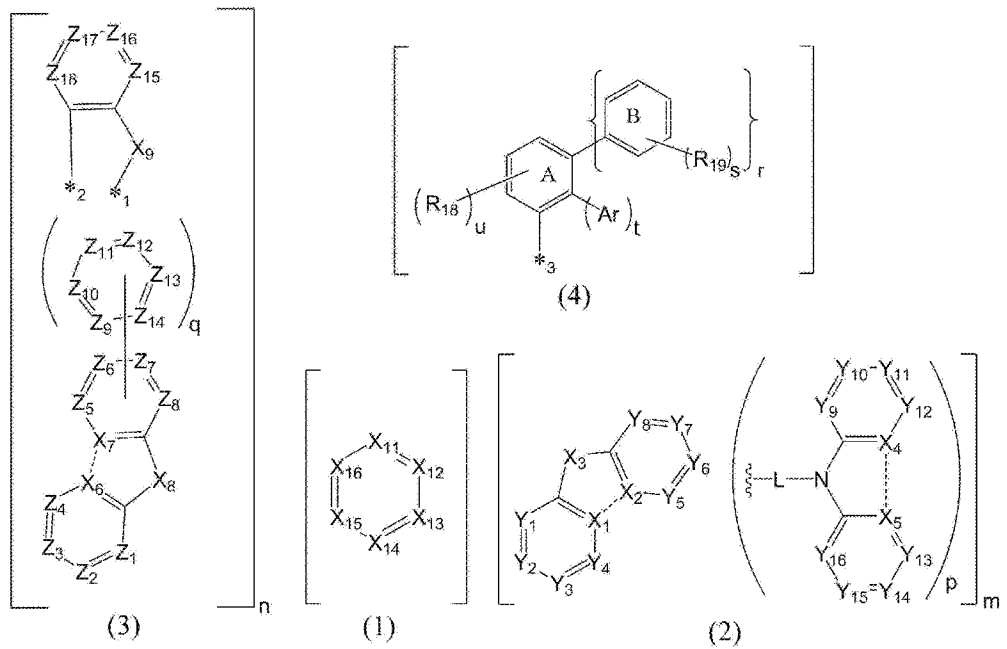
[0296] 1…有機 EL 素子、2…基板、3…陽極、4…陰極、7…発光層、10…有機層、
11…電子輸送帯域。

請求の範囲

[請求項1]

下記一般式（1）で表される第一の構造と、
 下記一般式（2）で表される第二の構造と、
 下記一般式（3）で表される第三の構造と、
 下記一般式（4）で表される第四の構造と、を有し、
 前記第一の構造、前記第二の構造、前記第三の構造および前記第四
 の構造は、それぞれ、分子中に互いに独立して含まれる化合物。

[化1]



(前記一般式（1）において、

X₁₁～X₁₆は、それぞれ独立に、

R₁と結合する炭素原子、

窒素原子、または

分子中の前記第二の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、

X₁₁～X₁₆の内、少なくともいずれかが窒素原子であり、

R₁は、水素原子、または置換基であり、

複数のR₁は、互いに同一でも異なってもよく、

複数の R_1 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよい。

)

(前記一般式(2)において、

X_1 は、 R_2 と結合する炭素原子、または X_2 と結合する炭素原子であり、

X_2 は、 R_3 と結合する炭素原子、または X_1 と結合する炭素原子であり、

X_3 は、酸素原子、硫黄原子、窒素原子、または R_a および R_b と結合する炭素原子であり、

R_a および R_b は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、

X_3 における窒素原子は、

R_4 と結合するか、

Lと結合するか、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合し、

X_4 は、 R_5 と結合する炭素原子、または X_5 と結合する炭素原子であり、

X_5 は、 R_6 と結合する炭素原子、または X_4 と結合する炭素原子であり、

ただし、 X_1 および X_2 の組み合わせ、並びに X_4 および X_5 の組み合わせの少なくともいずれかは、互いに結合する炭素原子の組み合わせであり、

Lは、

単結合、または

置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基であり、

Lは、 $Y_1 \sim Y_8$ のいずれかと結合するか、 X_3 と結合するか、 R_5 もしくは R_6 と結合するか、前記第一の構造、前記第三の構造、およ

び前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合するか、または置換基と結合し、

置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基としてのLは、 Y_9 または Y_{16} と結合して環構造を形成していてもよく、

$Y_1 \sim Y_8$ は、それぞれ独立に、

R_7 と結合する炭素原子、

Lと結合する炭素原子、

$Y_9 \sim Y_{16}$ のいずれかと結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、

$Y_9 \sim Y_{16}$ は、それぞれ独立に、

R_8 と結合する炭素原子、

$Y_1 \sim Y_8$ のいずれかと結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、

Y_9 または Y_{16} は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基としてのLと結合して環構造を形成していてもよく、

$R_2 \sim R_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、

複数の R_7 は、互いに同一でも異なってもよく、

複数の R_8 は、互いに同一でも異なってもよく、

mは、分子中の前記第二の構造の数であって、1以上の整数であり

、

pは、1以上3以下の整数である。)

(前記一般式(3)において、

X_6 は、 R_9 と結合する炭素原子、または X_7 と結合する炭素原子であり、

X_7 は、 R_{10} と結合する炭素原子、または X_6 と結合する炭素原子であり、

R_9 および R_{10} は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、

X_8 は、

置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基に結合する窒素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する窒素原子であり、

$Z_1 \sim Z_4$ は、それぞれ独立に、

R_{11} と結合する炭素原子、

分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または

*1もしくは*2で表される部位と結合する炭素原子であり、

$Z_5 \sim Z_8$ は、それぞれ独立に、

R_{12} と結合する炭素原子、

$Z_9 \sim Z_{14}$ のいずれかと結合する炭素原子、

分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または

*1もしくは*2で表される部位と結合する炭素原子であり、

R_{11} および R_{12} は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、

複数の R_{11} は、互いに同一でも異なってもよく、

複数の R_{11} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく

、

複数の R_{12} は、互いに同一でも異なってもよく、

複数の R_{12} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく

、

$Z_9 \sim Z_{14}$ は、それぞれ独立に、

R_{13} と結合する炭素原子、

$Z_5 \sim Z_8$ のいずれかと結合する炭素原子、
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または
* 1 もしくは * 2 で表される部位と結合する炭素原子であり、
 R_{13} は、水素原子、または置換基であり、
複数の R_{13} は、互いに同一でも異なっていてもよく、
複数の R_{13} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
、
 q は、0または1以上4以下の整数であり、
 X_9 は、酸素原子、硫黄原子、窒素原子、または R_{14} および R_{15} と結合する炭素原子であり、
 R_{14} および R_{15} は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、
 X_9 における窒素原子は、
 R_{16} と結合するか、または
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合し、
 R_{16} は、水素原子、または置換基であり、
 $Z_{15} \sim Z_{18}$ は、それぞれ独立に、
 R_{17} と結合する炭素原子、または
分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、
 R_{17} は、水素原子、または置換基であり、
複数の R_{17} は、互いに同一でも異なっていてもよく、
複数の R_{17} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく、
、
* 1 および * 2 は、それぞれ独立に、
 $Z_1 \sim Z_{14}$ における炭素原子との結合部位、または

X_8 における窒素原子に結合する置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基との結合部位であり、

n は、分子中の前記第三の構造の数であって、1以上の整数である。
。)

(前記一般式(4)において、

R_{18} は、水素原子、または置換基であり、

複数の R_{18} は、互いに同一でも異なっていてもよく、

複数の R_{18} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく

、

A_r は、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基であり、

R_{19} は、置換基であり、

s は、1以上5以下の整数であり、

複数の R_{19} は、互いに同一でも異なっていてもよく、

複数の R_{19} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよく

、

u は、3または4であり、

t は、0または1であり、

r は、0または1であり、

$t+r$ は、1または2であり、

$r=0$ のとき、 $t=1$ および $u=4$ であり、環Bに代えて R_{18} が環Aに結合し、

$t=0$ のとき、 $r=1$ および $u=4$ であり、 A_r に代えて R_{18} が環Aに結合し、

*3は、前記第一の構造、前記第二の構造および前記第三の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する結合部位である。)

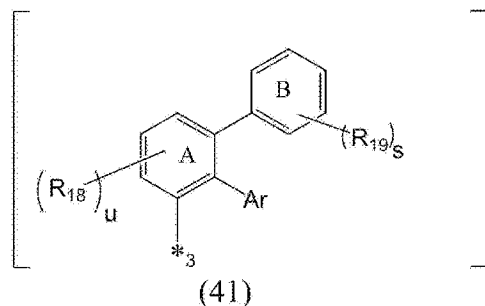
[請求項2]

前記第四の構造は、下記一般式(41)で表され、 u は、3である

、

請求項1に記載の化合物。

[化2]

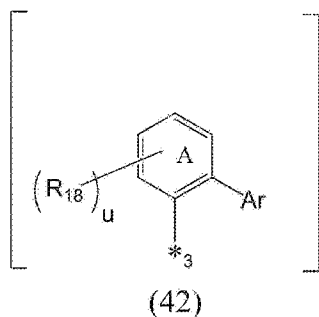


[請求項3] 前記第四の構造は、下記一般式(42)で表され、uは、4である

、

請求項1に記載の化合物。

[化3]

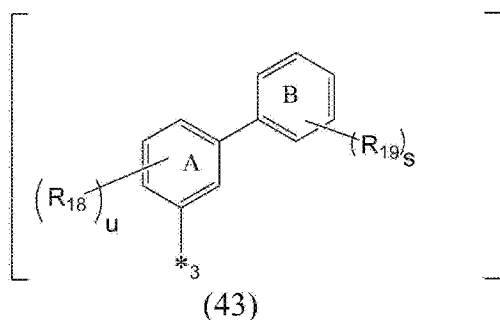


[請求項4] 前記第四の構造は、下記一般式(43)で表され、uは、4である

、

請求項1に記載の化合物。

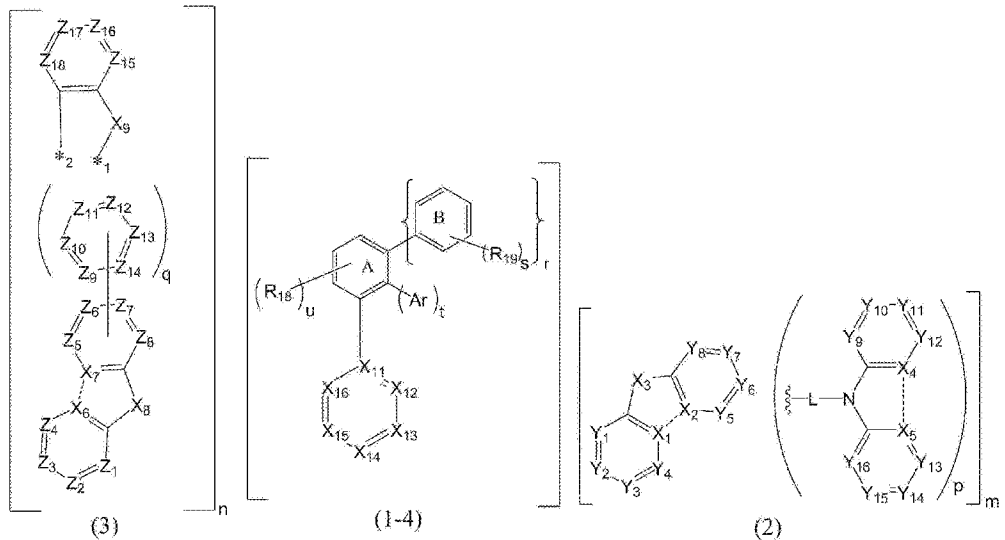
[化4]



[請求項5] 前記第四の構造は、前記第一の構造と結合する、
請求項1から請求項4のいずれか一項に記載の化合物。

[請求項6] 前記一般式(4)における*3が、 X_{11} との結合部位であり、
 X_{11} が前記第四の構造と結合する炭素原子であり、
 前記第一の構造と、前記第四の構造とが結合して形成される下記一般式(1-4)で表される構造を含む、
 請求項1から請求項5のいずれか一項に記載の化合物。

[化5]



[請求項7] $X_{12} \sim X_{16}$ の内、窒素原子が1以上3以下である、
 請求項6に記載の化合物。

[請求項8] X_{12} および X_{14} は、窒素原子であり、
 X_{13} および X_{15} は、前記第二の構造または前記第三の構造と結合する炭素原子であり、
 X_{16} は、 R_1 と結合する炭素原子である、
 請求項6に記載の化合物。

[請求項9] X_{12} 、 X_{14} および X_{16} は、窒素原子であり、
 X_{13} および X_{15} は、前記第二の構造または前記第三の構造と結合する炭素原子である、
 請求項6に記載の化合物。

[請求項10] 前記第二の構造および前記第三の構造の少なくともいずれかが、前記第一の構造の R_1 に結合する、

請求項 1 から請求項 9 のいずれか一項に記載の化合物。

[請求項11]

$m + n$ は、2 以上 4 以下の整数である、

請求項 1 から請求項 10 のいずれか一項に記載の化合物。

[請求項12]

請求項 1 から請求項 11 のいずれか一項に記載の化合物において、
前記一般式 (2) で表される第二の構造は、下記一般式 (20) で表され、

下記一般式 (20) において、

X_1 および X_2 は、互いに結合する炭素原子であり、

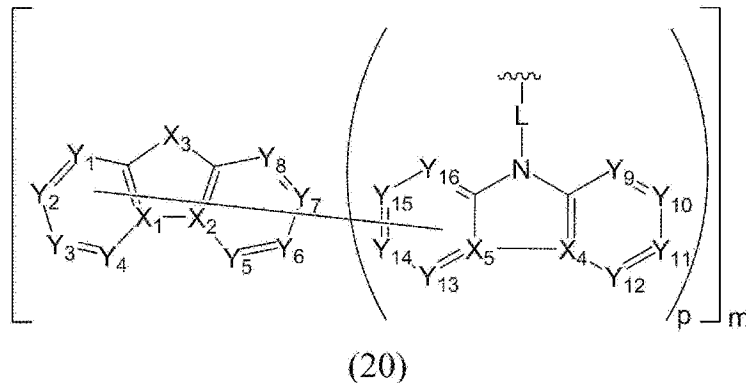
X_4 および X_5 は、互いに結合する炭素原子であり、

p は、1 であり、

$Y_1 \sim Y_8$ のいずれかは、 $Y_{13} \sim Y_{16}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、

$Y_{13} \sim Y_{16}$ のいずれかは、 $Y_1 \sim Y_8$ のいずれかと結合する炭素原子である、化合物。

[化6]



[請求項13]

請求項 1 から請求項 11 のいずれか一項に記載の化合物において、

L は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 の芳香族炭化水素基であり、

Y_{16} は、 L と結合する炭素原子であり、 L と Y_{16} とが結合して環構造を形成し、

前記一般式 (2) で表される第二の構造は、下記一般式 (21) で

表され、

下記一般式（21）において、

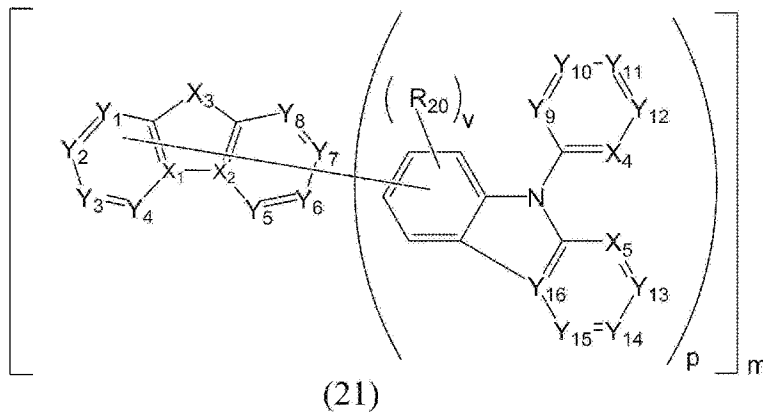
X_1 および X_2 は、互いに結合する炭素原子であり、

R_{20} は、水素原子、または置換基であり、

v は3であり、複数の R_{20} は、同一でも異なっていてもよく、

p は、1以上3以下の整数である、化合物。

[化7]



[請求項14]

請求項1から請求項11のいずれか一項に記載の化合物において、

前記一般式（2）で表される第二の構造は、下記一般式（22）で

表され、

下記一般式（22）において、

X_1 および X_2 は、互いに結合する炭素原子であり、

X_4 および X_5 は、互いに結合する炭素原子であり、

p は、2であり、

X_3 は、

R_4 と結合する窒素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する窒素原子であり、

$Y_1 \sim Y_8$ は、それぞれ独立に、

R_7 と結合する炭素原子、

Lと結合する炭素原子、または

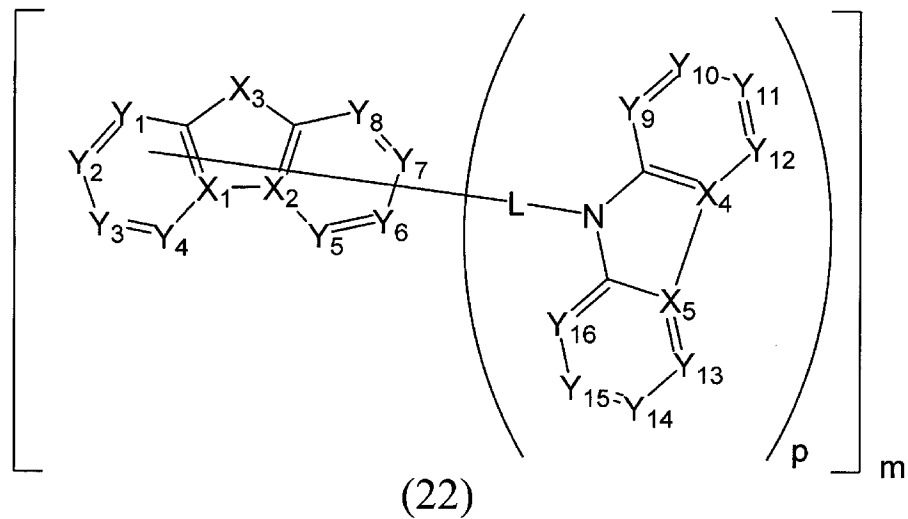
分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、

$Y_9 \sim Y_{16}$ は、それぞれ独立に、

R_8 と結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子である、化合物。

[化8]



[請求項15]

請求項1から請求項11のいずれか一項に記載の化合物において、前記一般式(2)で表される第二の構造は、下記一般式(23)で表され、

下記一般式(23)において、

X_1 および X_2 は、互いに結合する炭素原子であり、

X_3 は、

R_4 と結合する窒素原子、または

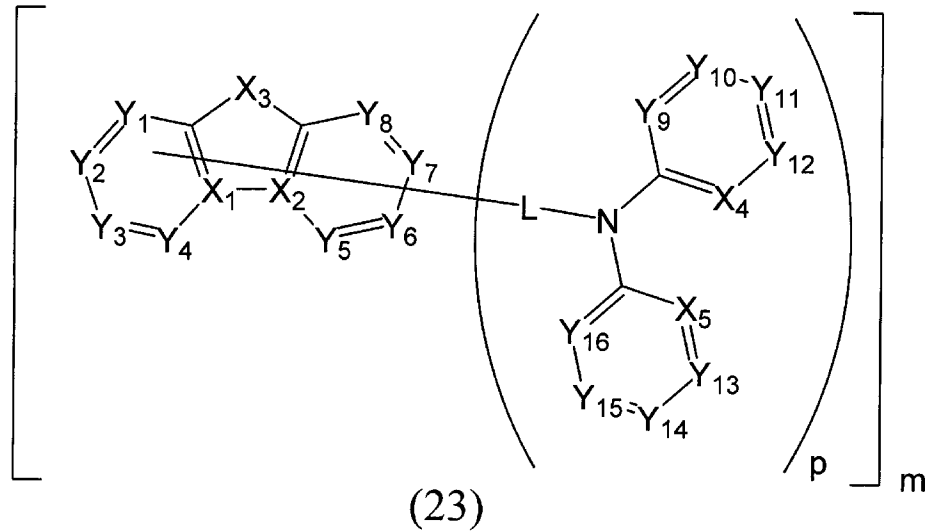
分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する窒素原子であり、

X_4 は、 R_5 と結合する炭素原子であり、

X_5 は、 R_6 と結合する炭素原子であり、

$Y_1 \sim Y_8$ のいずれかは、Lと結合する炭素原子である、化合物。

[化9]



[請求項16]

請求項1から請求項11のいずれか一項に記載の化合物において、前記一般式(2)で表される第二の構造は、下記一般式(24)で表され、

下記一般式(24)において、

X_1 および X_2 は、互いに結合する炭素原子であり、

X_3 は、

R_4 と結合する窒素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する窒素原子であり、

X_4 は、 R_5 と結合する炭素原子であり、

X_5 は、 R_6 と結合する炭素原子であり、

X_a は、 X_b と結合する炭素原子であり、

X_b は、 X_a と結合する炭素原子であり、

L_{21} および L_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式(2)におけるLと同義であり、

$Y_a \sim Y_d$ は、それぞれ独立に、

R_8 と結合する炭素原子、

L_{21} と結合する炭素原子、または
分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり

$Y_e \sim Y_h$ は、それぞれ独立に、

R_8 と結合する炭素原子、

$Y_5 \sim Y_8$ のいずれかと結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり

$Y_1 \sim Y_4$ は、それぞれ独立に、

R_7 と結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子であり、

$Y_5 \sim Y_8$ は、それぞれ独立に、

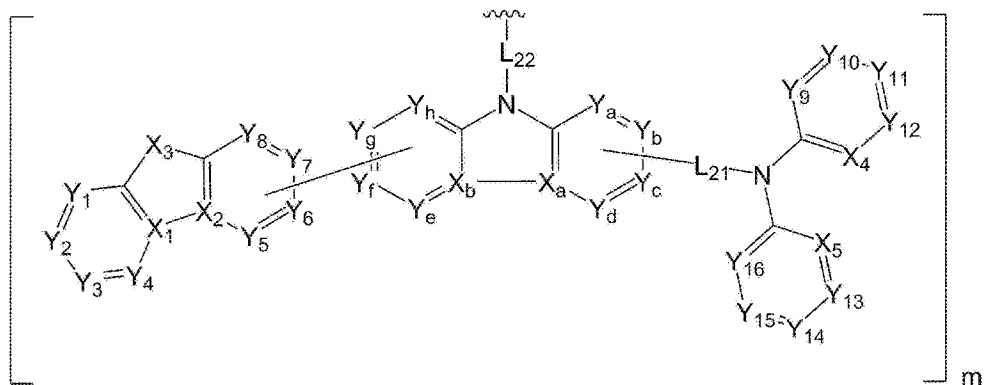
R_7 と結合する炭素原子、

$Y_e \sim Y_h$ のいずれかと結合する炭素原子、または

分子中の前記第一の構造、前記第三の構造、および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子である、

化合物。

[化10]



(24)

[請求項17]

請求項1から請求項16のいずれか一項に記載の化合物において、

$q = 0$ であり、前記第三の構造は、下記一般式 (31) で表され、
*1 および *2 は、それぞれ独立に、 $Z_1 \sim Z_8$ における炭素原子との結合部位であり、

$Z_1 \sim Z_4$ は、それぞれ独立に、

R_{11} と結合する炭素原子、

分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または

*1 もしくは *2 で表される部位と結合する炭素原子であり、

$Z_5 \sim Z_8$ は、それぞれ独立に、

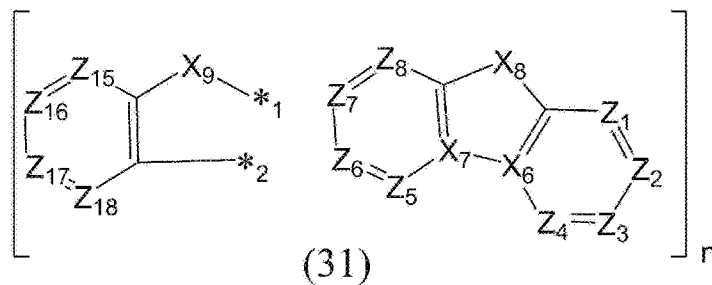
R_{12} と結合する炭素原子、

分子中の前記第一の構造、前記第二の構造および前記第四の構造の少なくともいずれかに含まれる原子と結合する炭素原子、または

*1 もしくは *2 で表される部位と結合する炭素原子であり、

$Z_1 \sim Z_8$ の内、少なくともいずれか2つは *1 もしくは *2 で表される部位と結合する炭素原子である、化合物。

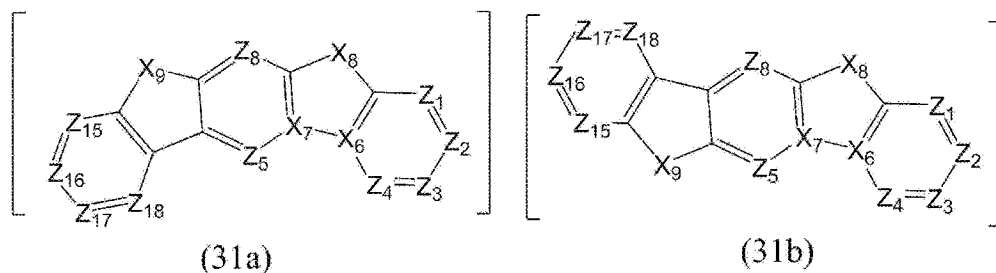
[化11]



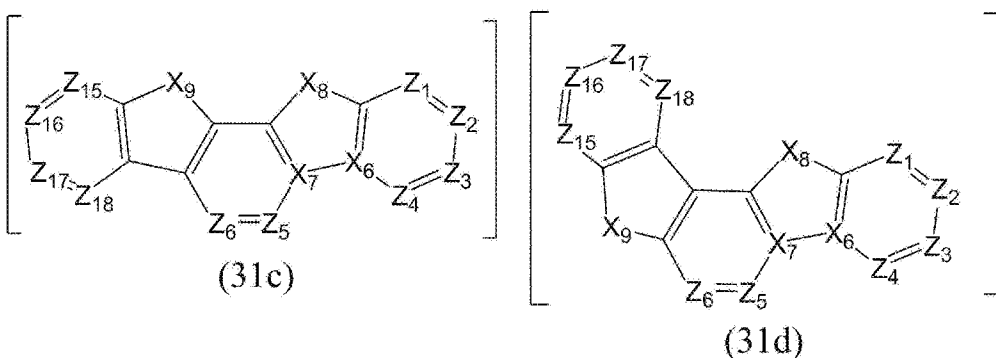
[請求項18]

前記第三の構造は、下記一般式 (31 a), (31 b), (31 c), (31 d), (31 e), および (31 f) で表される構造からなる群から選択されるいずれかである、請求項1から請求項17のいずれか一項に記載の化合物。

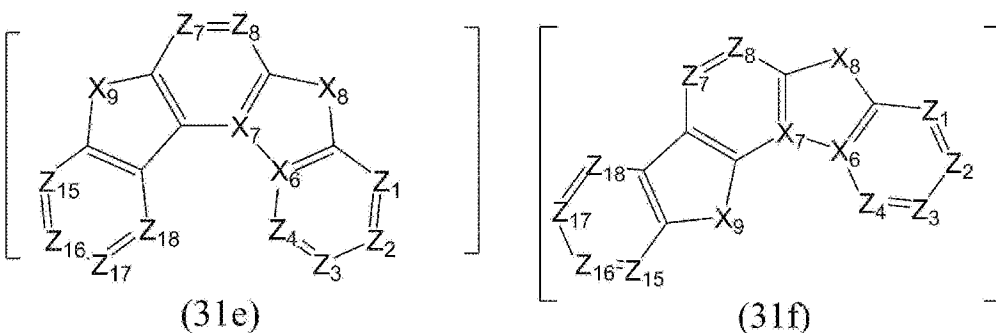
[化12]



[化13]



[化14]



- [請求項19] 複数の R_1 同士は、互いに結合せず、環構造が形成されない、請求項1から請求項18のいずれか一項に記載の化合物。
- [請求項20] 複数の R_1 同士は、互いに結合して、環構造が形成されている、請求項1から請求項18のいずれか一項に記載の化合物。
- [請求項21] 請求項1から請求項20のいずれか一項に記載の化合物において、置換基としての $R_1 \sim R_{20}$ 、 R_a 、および R_b は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、
置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数1～30のフルオロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数3～30のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数7～30のアラルキル基、
置換シリル基、
置換ゲルマニウム基、
置換ホスフィンオキシド基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、および
カルボキシ基からなる群から選択される、化合物。

[請求項22] 請求項1から請求項21のいずれか一項に記載の化合物と、溶媒と、を含む組成物。

[請求項23] 陽極と、有機層と、陰極と、を含み、
前記有機層は、請求項1から請求項21のいずれか一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24] 前記有機層は、発光層を含み、
前記発光層は、前記化合物を含む、
請求項23に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項25] 前記発光層は、さらに発光材料を含む、
請求項24に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

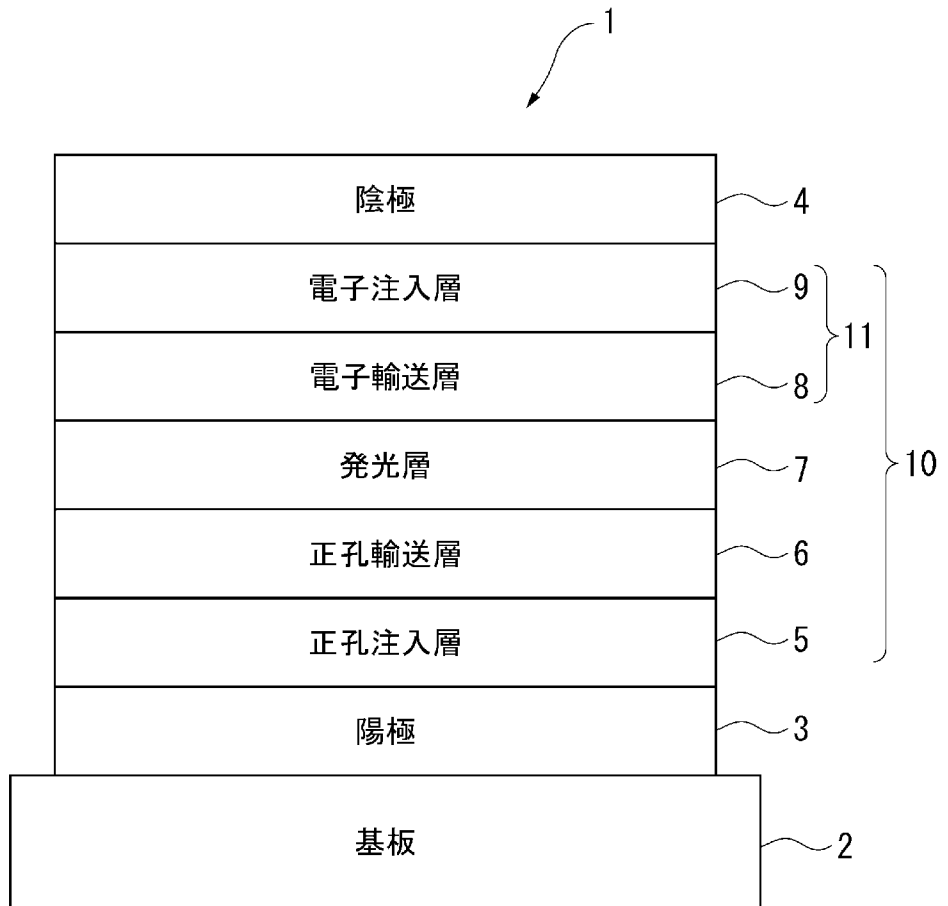
[請求項26] 前記陽極と前記発光層との間に正孔輸送層を含む、
請求項24または請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項27] 前記発光層と前記陰極との間に電子輸送層を含む、

請求項 2 4 から請求項 2 6 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項 28] 請求項 2 3 から請求項 2 7 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器。

[図1]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2016/054186

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C07D403/14(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C07D403/14, C09K11/06, H01L51/50

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

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2016
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2016	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2016

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X/A	WO 2015/011924 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 29 January 2015 (29.01.2015), page 56, chemical formula 52, 2nd to 4th in the left, 2nd in the center; page 57, chemical formula 53, 1st in the left, 4th in the center, 3rd in the right; page 58, chemical formula 54, 1st, 4th in the left, 4th in the center & CN 105339365 A	1, 3-14, 17-28 /2, 15, 16
X/A	JP 2010-40830 A (Konica Minolta Holdings, Inc.), 18 February 2010 (18.02.2010); page 132, HA-21; page 135, HB-12; page 143, HC- 13; page 147, HC-23 (Family: none)	1, 4-14, 17-28 /2, 3, 15, 16

Further documents are listed in the continuation of Box C. See patent family annex.

* Special categories of cited documents:	"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date	"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)	"&" document member of the same patent family
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	

Date of the actual completion of the international search 28 April 2016 (28.04.16)	Date of mailing of the international search report 17 May 2016 (17.05.16)
---	--

Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan	Authorized officer Telephone No.
--	---

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/054186

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X/A	WO 2013/137001 A1 (Nippon Steel & Sumikin Chemical Co., Ltd.), 19 September 2013 (19.09.2013), page 17, (A-21); page 41, (C-40); page 73, (E-40); page 76, (E-59); page 88, (G-11); page 91, (G-34); page 94, (H-11); page 100, (J-10) & US 2015/0041785 A1 page 15, (A-21); page 45, (C-40); page 88, (E-40); page 92, (E-59); page 109, (G-11); page 113, (G-34); page 119, (H-11); page 128, (J-10) & EP 2827397 A1 & CN 104160525 A & KR 10-2014-0143397 A	1, 4-14, 17-28 /2, 3, 15, 16
X/A	WO 2011/070963 A1 (Nippon Steel & Sumikin Chemical Co., Ltd.), 16 June 2011 (16.06.2011), page 83, compound (692) & US 2015/0166886 A1 page 138, compound (692) & JP 5124785 B & US 8993129 B2 & EP 2511360 A1 & CN 102648268 A & KR 10-2012-0112517 A	1, 4-14, 17-28 /2, 3, 15, 16
X/A	WO 2011/080972 A1 (Nippon Steel & Sumikin Chemical Co., Ltd.), 07 July 2011 (07.07.2011), page 34, compound (8-5) & US 2012/0235133 A1 page 47, compound (8-5) & JP 5596706 B & EP 2521196 A1 & CN 102696126 A & KR 10-2012-0123368 A	1, 4-14, 17-28 /2, 3, 15, 16
X/A	WO 2014/038677 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 13 March 2014 (13.03.2014), page 33, chemical formula 21, 5th in right column; page 46, chemical formula 35 & US 2015/0214491 A1 page 19, 2nd; pages 76 to 78 & CN 104603107 A & KR 10-2015-0053913 A	1, 4-14, 17-28 /2, 3, 15, 16
X/A	JP 2011-198899 A (Nippon Steel Chemical Co., Ltd.), 06 October 2011 (06.10.2011), page 24, compounds (47), (48) (Family: none)	1, 4-14, 17-28 /2, 3, 15, 16
X/A	JP 2013-527989 A (Merck Patent GmbH), 04 July 2013 (04.07.2013), page 56, chemical formula 73 & WO 2011/137922 A1 page 61, 1st in the right & EP 2566875 A1 & KR 10-2013-0099814 A	1, 4-28/2, 3

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/054186

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X/A	JP 2013-504884 A (Merck Patent GmbH), 07 February 2013 (07.02.2013), page 55, chemical formula 52-1, right column, 2nd from the bottom & WO 2011/032686 A1 page 64, 1st in the right & EP 2477999 A1 & US 2012/0238105 A1 & KR 10-2012-0081155 A & CN 102498120 A	1, 4-28/2, 3
X	JP 2014-508114 A (Merck Patent GmbH), 03 April 2014 (03.04.2014), page 66, formula (402); page 61, formula (371); page 63, formula (381) & US 2013/0261708 A1 page 58, formula (402); page 51, formula (371); page 54, formula (381) & US 2015/0057445 A1 & WO 2012/079678 A1 & EP 2651862 A1 & CN 103261131 A & KR 10-2013-0127994 A	1-28
P, X/P, A	WO 2015/192939 A1 (Merck Patent GmbH), 23 December 2015 (23.12.2015), page 62, compound 14s (Family: none)	1, 4, 10, 11, 17-19, 21-28/ 2, 3, 5-9, 12-16, 20
P, X/P, A	WO 2015/137471 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 17 September 2015 (17.09.2015), page 212, chemical formula 203; page 237, chemical formula 228 & CN 105431425 A	1, 4-8, 10, 11, 19, 20, 22-28/ 2, 3, 9, 12-18, 21

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC)) Int.Cl. C07D403/14(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i											
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC)) Int.Cl. C07D403/14, C09K11/06, H01L51/50											
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの <table style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width:30%;">日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2016年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2016年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2016年</td> </tr> </table>				日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2016年	日本国実用新案登録公報	1996-2016年	日本国登録実用新案公報	1994-2016年
日本国実用新案公報	1922-1996年										
日本国公開実用新案公報	1971-2016年										
日本国実用新案登録公報	1996-2016年										
日本国登録実用新案公報	1994-2016年										
国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語) CAplus/REGISTRY (STN)											
C. 関連すると認められる文献											
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号									
X / A	WO 2015/011924 A1 (出光興産株式会社) 2015.01.29 56頁[化52]左2-4番目, 中央2番目, 57頁[化53]左1番目, 中央4番目, 右3番目, 58頁[化54]左1,4番目, 中央4番目 & CN 105339365 A	1,3-14,17-28 / 2,15,16									
X / A	JP 2010-40830 A (コニカミノルタホールディングス株式会社) 2010.02.18, 132頁HA-21、135頁HB-12、143頁HC-13、147頁HC-23 (ファミリーなし)	1,4-14,17-28 / 2,3,15,16									
☑ C欄の続きにも文献が列挙されている。		☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。									
* 引用文献のカテゴリー 「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの 「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの 「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す) 「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願		の日の後に公表された文献 「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの 「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの 「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの 「&」同一パテントファミリー文献									
国際調査を完了した日 28.04.2016		国際調査報告の発送日 17.05.2016									
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁 (ISA/J P) 郵便番号100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		特許庁審査官 (権限のある職員) 安藤 倫世	4 P 9837								
		電話番号 03-3581-1101 内線	3492								

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X / A	WO 2013/137001 A1 (新日鉄住金化学株式会社) 2013. 09. 19 17 頁(A-21), 41 頁(C-40), 73 頁(E-40), 76 頁(E-59), 88 頁(G-11), 91 頁(G-34), 94 頁(H-11), 100 頁(J-10) & US 2015/0041785 A1: 15 頁(A-21), 45 頁(C-40), 88 頁(E-40), 92 頁 (E-59), 109 頁(G-11), 113 頁(G-34), 119 頁(H-11), 128 頁(J-10) & EP 2827397 A1 & CN 104160525 A & KR 10-2014-0143397 A	1, 4-14, 17-28 / 2, 3, 15, 16
X / A	WO 2011/070963 A1 (新日鉄住金化学株式会社) 2011. 06. 16 83 頁化合物(692) & US 2015/0166886 A1: 138 頁化合物(692) & JP 5124785 B & US 8993129 B2 & EP 2511360 A1 & CN 102648268 A & KR 10-2012-0112517 A	1, 4-14, 17-28 / 2, 3, 15, 16
X / A	WO 2011/080972 A1 (新日鉄住金化学株式会社) 2011. 07. 07 34 頁化合物(8-5) & US 2012/0235133 A1: 47 頁化合物(8-5) & JP 5596706 B & EP 2521196 A1 & CN 102696126 A & KR 10-2012-0123368 A	1, 4-14, 17-28 / 2, 3, 15, 16
X / A	WO 2014/038677 A1 (出光興産株式会社) 2014. 03. 13 33 頁[化 21]右欄 5 番目, 46 頁[化 35] & US 2015/0214491 A1: 19 頁 2 番目, 76-78 頁 & CN 104603107 A & KR 10-2015-0053913 A	1, 4-14, 17-28 / 2, 3, 15, 16
X / A	JP 2011-198899 A (新日鐵化学株式会社) 2011. 10. 06 24 頁化合物(47), 化合物(48) (ファミリーなし)	1, 4-14, 17-28 / 2, 3, 15, 16
X / A	JP 2013-527989 A (メルク パテント ゲーエムベーハー) 2013. 07. 04 56 頁[化 73] & WO 2011/137922 A1: 61 頁右 1 番目 & EP 2566875 A1 & KR 10-2013-0099814 A	1, 4-28 / 2, 3
X / A	JP 2013-504884 A (メルク パテント ゲーエムベーハー) 2013. 02. 07 55 頁[化 52-1]右欄下から 2 番目 & WO 2011/032686 A1: 64 頁右 1 番目 & EP 2477999 A1 & US 2012/0238105 A1 & KR 10-2012-0081155 A & CN 102498120 A	1, 4-28 / 2, 3

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	JP 2014-508114 A (メルク パテント ゲーエムベーハー) 2014. 04. 03 66 頁式(402)、61 頁式(371)、63 頁式(381) & US 2013/0261708 A1: 58 頁式(402)、51 頁式(371)、54 頁式(381) & US 2015/0057445 A1 & WO 2012/079678 A1 & EP 2651862 A1 & CN 103261131 A & KR 10-2013-0127994 A	1-28
P, X / P, A	WO 2015/192939 A1 (MERCK PATENT GMBH) 2015. 12. 23 62 頁化合物 14s (ファミリーなし)	1, 4, 10, 11, 17-19, 21-28/ 2, 3, 5-9, 12-16, 20
P, X / P, A	WO 2015/137471 A1 (出光興産株式会社) 2015. 09. 17 212 頁[化 203], 237 頁[化 228] & CN 105431425 A	1, 4-8, 10, 11, 19, 20, 22-28/ 2, 3, 9, 12-18, 21