

(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
2024年9月19日(19.09.2024)



(10) 国際公開番号

WO 2024/190882 A1

(51) 国際特許分類:

C07D 209/86 (2006.01) H10K 50/12 (2023.01)
C07D 491/048 (2006.01) H10K 85/60 (2023.01)
C09K 11/06 (2006.01) H10K 101/20 (2023.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2024/010081

(22) 国際出願日: 2024年3月14日(14.03.2024)

(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 2023-042077 2023年3月16日(16.03.2023) JP

(71) 出願人: 出光興産株式会社(IDEMITSU KOSAN CO.,LTD.) [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 中野 裕基(NAKANO Yuki); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 伴 慎太郎(BAN Shintaro); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo

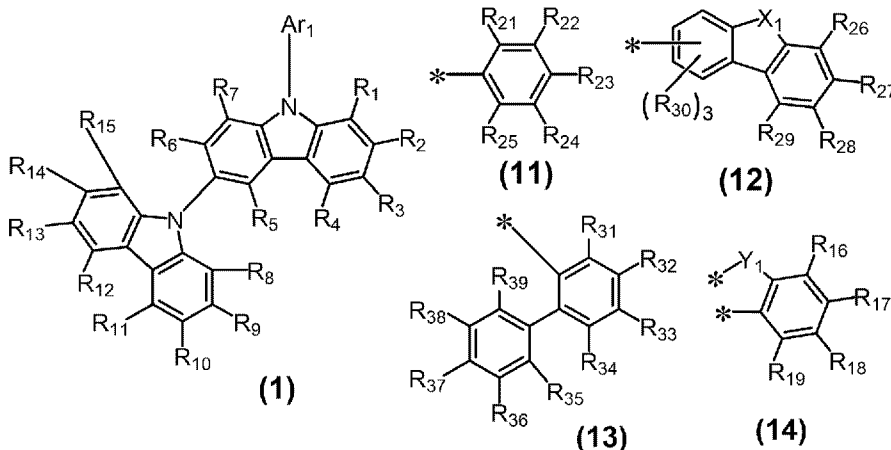
(JP). 永田 亮(NAGATA Ryo); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 高橋 良多(TAKAHASHI Ryota); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 池田 潔(IKEDA Kiyoshi); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 橋本 士雄磨(HASHIMOTO Sigma); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 河村 祐一郎(KAWAMURA Yuichiro); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP).

(74) 代理人: 弁理士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2番13号 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, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC,

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

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



(57) Abstract: Provided is a compound represented by general formula (1). (In general formula (1), Ar₁ is a group represented by general formula (11) or (12); in general formula (14), two * represent bond positions with the carbazole rings in general formula (1); when one or more sets of, e.g., sets including adjacent two or more of R₁ to R₄ are bonded to each other, at least one of R₁ to R₁₉ is a group represented by general formula (13); and when any of, e.g., sets including adjacent two or more of R₁ to R₄ are not bonded to each other, at least one of R₁ to R₁₅ is a group represented by general formula (13).)

EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR,
HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG,
KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU,
LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY,
MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL,
PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK,
SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA,
UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, 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, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

(57) 要約: 一般式 (1) で表される化合物。(一般式 (1) において、 A_{r_1} は、一般式 (1 1) 又は (1 2) で表される基であり、一般式 (1 4) において、2つの*は、一般式 (1) 中のカルバゾール環との結合位置を示し、 $R_1 \sim R_4$ のうち隣接する2つ以上からなる組等のうち1組以上が、互いに結合する場合、 $R_1 \sim R_{19}$ のうち、少なくとも1つが一般式 (1 3) で表される基であり、 $R_1 \sim R_4$ のうち隣接する2つ以上からなる組等がいずれも互いに結合しない場合、 $R_1 \sim R_{15}$ のうち、少なくとも1つが前記一般式 (1 3) で表される基である。)

明 細 書

発明の名称：

化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器

技術分野

[0001] 本発明は、化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器に関する。

背景技術

[0002] 有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「有機ＥＬ素子」という場合がある。）に電圧を印加すると、陽極から正孔が発光層に注入され、また陰極から電子が発光層に注入される。そして、発光層において、注入された正孔と電子とが再結合し、励起子が形成される。このとき、電子スピンの統計則により、一重項励起子が２５％の割合で生成し、及び三重項励起子が７５％の割合で生成する。

一重項励起子からの発光を用いる蛍光型の有機ＥＬ素子は、携帯電話及びテレビ等のフルカラーディスプレイへ応用されつつあるが、内部量子効率２５％が限界といわれている。有機ＥＬ素子の性能向上を図るため、有機ＥＬ素子に用いる化合物について様々な検討がなされている（例えば、特許文献１～６参照）。有機ＥＬ素子の性能としては、例えば、輝度、発光波長、色度、発光効率、駆動電圧、及び寿命が挙げられる。

特許文献７には、遅延蛍光のメカニズムの一つであるＴＴＦ（Ｔｒｉｐｌｅｔ－Ｔｒｉｐｌｅｔ Ｆｕｓｉｏｎ）機構を利用した有機ＥＬ素子が開示されている。ＴＴＦ機構は、２つの三重項励起子の衝突によって一重項励起子が生成する現象を利用する。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献１：米国特許出願公開第２０２２／０１３５６０１号明細書

特許文献2：韓国公開特許第10-2015-0105201号公報

特許文献3：米国特許出願公開第2022/0112163号明細書

特許文献4：米国特許出願公開第2022/0140255号明細書

特許文献5：国際公開第2017/111543号

特許文献6：韓国公開特許第10-2016-0095667号公報

特許文献7：国際公開第2010/134350号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] 特許文献7に記載のTTF機構による遅延蛍光を利用すると、蛍光型発光においても理論的に内部量子効率を40%まで高めることができると考えられている。しかしながら、ディスプレイ等の電子機器の性能を向上させるために、有機EL素子の性能の更なる向上が要望されている。

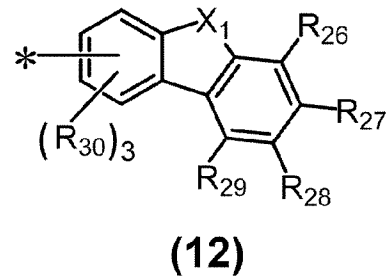
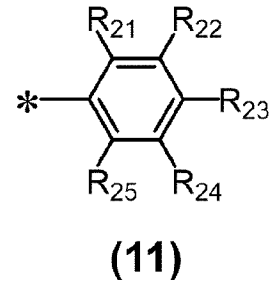
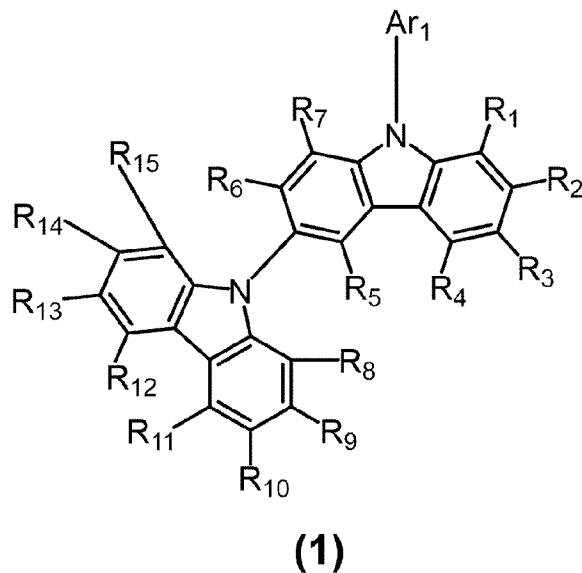
[0005] 本発明の目的は、有機エレクトロルミネッセンス素子を高効率で発光させることができる化合物を提供することである。本発明の別の目的は、当該化合物を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を提供することである。本発明の別の目的は、高効率で発光する有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することである。

課題を解決するための手段

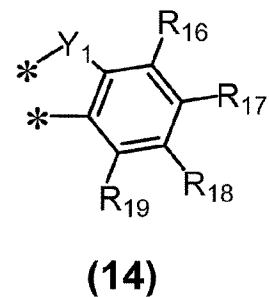
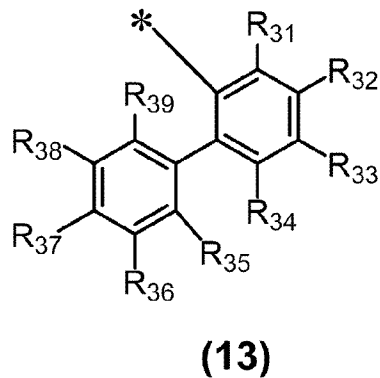
[0006] 本発明の一態様によれば、下記一般式(1)で表される化合物が提供される。

[0007]

[化1]



[0008] [化2]



[0009] (前記一般式(1)において、

Ar_1 は、前記一般式(11)又は(12)で表される基であり、

$R_1 \sim R_4$ のうち隣接する2つ以上からなる組、並びに R_6 及び R_7 の組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_8 \sim R_{11}$ のうち隣接する2つ以上からなる組、並びに $R_{12} \sim R_{15}$ のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、

前記一般式（１）で表される化合物は、（条件 i）又は（条件 i i）を満たす。

（条件 i）： $R_1 \sim R_4$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組、 R_6 及び R_7 の組、 $R_8 \sim R_{11}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組、並びに $R_{12} \sim R_{15}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合する場合、形成する前記置換もしくは無置換の単環及び前記置換もしくは無置換の縮合環は、それぞれ独立に、

前記一般式（１４）で表される環であるか、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 の脂肪族炭化水素環であり

R_5 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_1 \sim R_4$ 及び $R_6 \sim R_{15}$ は、それぞれ独立に

水素原子、

前記一般式（１３）で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基であり

前記一般式（１４）において、

Y_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、

$R_{16} \sim R_{19}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

前記一般式（１３）で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、

— S i (R₄₁) (R₄₂) (R₄₃) で表される基、又は

— G e (R₄₄) (R₄₅) (R₄₆) で表される基であり、

2つの*は、前記一般式(1)中のカルバゾール環との結合位置を示し、

ただし、R₁~R₁₉のうち、少なくとも1つが前記一般式(13)で表される基であり、前記一般式(13)で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式(13)で表される基は互いに同一であるか、又は異なり、前記一般式(14)で表される環が複数存在する場合、複数の前記一般式(14)で表される環は互いに同一であるか、又は異なる。

(条件 i i) : R₁~R₄のうち隣接する2つ以上からなる組、R₆及びR₇の組、R₈~R₁₁のうち隣接する2つ以上からなる組、並びにR₁₂~R₁₅のうち隣接する2つ以上からなる組が、いずれも、互いに結合しない場合、

R₁~R₁₅は、それぞれ独立に、

水素原子、

前記一般式(13)で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数1~20のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~20のシクロアルキル基であり

、

ただし、R₁~R₁₅のうち、少なくとも1つが前記一般式(13)で表される基であり、前記一般式(13)で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式(13)で表される基は互いに同一であるか、又は異なる。)

(前記一般式(11)及び(12)において、

R₂₁~R₂₅のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~20の脂肪族炭化水素環を形成するか、又は

互いに結合せず、

R₂₆~R₂₉のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~20の脂肪族炭化水素環を形成するか、又は

互いに結合せず、

複数の R_{30} のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 の脂肪族炭化水素環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 の脂肪族炭化水素環を形成しない $R_{21} \sim R_{30}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、

$-Si(R_{41})(R_{42})(R_{43})$ で表される基、又は

$-Ge(R_{44})(R_{45})(R_{46})$ で表される基であり、

複数の R_{30} は、互いに同一であるか、または互いに異なり、

X_1 は、酸素原子、硫黄原子、 $C(R_{51})(R_{52})$ 、又は $Si(R_{53})(R_{54})$ であり、

R_{51} 及び R_{52} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

R_{53} 及び R_{54} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{51} \sim R_{54}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 60 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 60 の複素環基であり、
前記一般式 (11) 中の * は、前記一般式 (1) における A_{r_1} が結合する
窒素原子との結合位置である。

前記一般式 (12) 中の * は、前記一般式 (1) における A_{r_1} が結合する
窒素原子との結合位置を示す。)

(前記一般式 (13) において、

$R_{31} \sim R_{39}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、

$-Si(R_{41})(R_{42})(R_{43})$ で表される基、又は

$-Ge(R_{44})(R_{45})(R_{46})$ で表される基であり、

* は、結合位置である。)

(前記一般式 (1) で表される化合物において、

$R_{41} \sim R_{43}$ のうちの隣接する 2 つからなる組の 1 組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_{44} \sim R_{46}$ のうちの隣接する 2 つからなる組の 1 組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換
の縮合環を形成しない $R_{41} \sim R_{46}$ 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 ～ 60 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 60 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基である。
。)

[0010] 本発明の一態様によれば、本発明の一態様に係る化合物を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子用材料が提供される。

[0011] 本発明の一態様によれば、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された発光層と、を含み、前記発光層は、ホスト材料と、増感材料と、を含有し、前記ホスト材料は、本発明の一態様に係る化合物であり、前記増感材料及び前記ホスト材料は、互いに異なる化合物である、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

[0012] 本発明の一態様によれば、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搭載した電子機器が提供される。

[0013] 本発明の一態様によれば、有機エレクトロルミネッセンス素子を高効率で発光させることができる化合物を提供することができる。本発明の一態様によれば、当該化合物を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を提供することができる。本発明の一態様によれば、高効率で発光する有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することができる。

図面の簡単な説明

[0014] [図1]本発明の第一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の概略構成を示す図である。

[図2]過渡PLを測定する装置の概略図である。

[図3]過渡PLの減衰曲線の一例を示す図である。

[図4]本発明の第一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の発光層におけるホスト材料、増感材料（遅延蛍光性化合物）及び蛍光発光性材料のエネルギー準位、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。

発明を実施するための形態

[0015] [定義]

本明細書において、水素原子とは、中性子数が異なる同位体、即ち、軽水

素 (protium)、重水素 (deuterium)、及び三重水素 (tritium) を包含する。

[0016] 本明細書において、化学構造式中、「R」等の記号や重水素原子を表す「D」が明示されていない結合可能位置には、水素原子、即ち、軽水素原子、重水素原子、又は三重水素原子が結合しているものとする。

[0017] 本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、及び複素環化合物）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、別途記載の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、ピリジン環は環形成炭素数5であり、フラン環は環形成炭素数4である。また、例えば、9, 9-ジフェニルフルオレニル基の環形成炭素数は13であり、9, 9'-スピロビフルオレニル基の環形成炭素数は25である。

また、ベンゼ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、ベンゼン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているベンゼン環の環形成炭素数は、6である。また、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、ナフタレン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているナフタレン環の環形成炭素数は、10である。

[0018] 本明細書において、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造（例えば、単環、縮合環、及び環集合）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、及び複素環化合物）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、別途記載のない限り同様とする。例えば、ピリジン環の環形成原子数は6であり、キナゾリン環の環形成原子数は10であり、フラン環の環形成原子数は5である。例えば、ピリジン環に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子の数は、ピリジン環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているピリジン環の環形成原子数は、6である。また、例えば、キナゾリン環の炭素原子に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子については、キナゾリン環の環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているキナゾリン環の環形成原子数は10である。

[0019] 本明細書において、「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を含めない。ここで、「 YY 」は、「 XX 」よりも大きく、「 XX 」は、1以上の整数を意味し、「 YY 」は、2以上の整数を意味する。

[0020] 本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「原子数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の原子数を表し、置換されている場合の置換基の原子数を含めない。ここで、「 YY 」は、「 XX 」よりも大きく、「 XX 」は、1以上の整数を意味し、「 YY 」は、2以上の整数を意味する。

[0021] 本明細書において、無置換の ZZ 基とは「置換もしくは無置換の ZZ 基」が「無置換の ZZ 基」である場合を表し、置換の ZZ 基とは「置換もしくは無置換の ZZ 基」が「置換の ZZ 基」である場合を表す。

本明細書において、「置換もしくは無置換の ZZ 基」という場合における「無置換」とは、 ZZ 基における水素原子が置換基と置き換わっていないことを意味する。「無置換の ZZ 基」における水素原子は、軽水素原子、重水素原子、又は三重水素原子である。

また、本明細書において、「置換もしくは無置換の ZZ 基」という場合における「置換」とは、 ZZ 基における1つ以上の水素原子が、置換基と置き

換わっていることを意味する。「A A基で置換されたB B基」という場合における「置換」も同様に、B B基における1つ以上の水素原子が、A A基と置き換わっていることを意味する。

[0022] 「本明細書に記載の置換基」

以下、本明細書に記載の置換基について説明する。

[0023] 本明細書に記載の「無置換のアリール基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30、より好ましくは6～18である。

本明細書に記載の「無置換の複素環基」の環形成原子数は、本明細書に別途記載のない限り、5～50であり、好ましくは5～30、より好ましくは5～18である。

本明細書に記載の「無置換のアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～20、より好ましくは1～6である。

本明細書に記載の「無置換のアルケニル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、2～50であり、好ましくは2～20、より好ましくは2～6である。

本明細書に記載の「無置換のアルキニル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、2～50であり、好ましくは2～20、より好ましくは2～6である。

本明細書に記載の「無置換のシクロアルキル基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、3～50であり、好ましくは3～20、より好ましくは3～6である。

本明細書に記載の「無置換のアリーレン基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30、より好ましくは6～18である。

本明細書に記載の「無置換の2価の複素環基」の環形成原子数は、本明細書に別途記載のない限り、5～50であり、好ましくは5～30、より好ま

しくは5～18である。

本明細書に記載の「無置換のアルキレン基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～20、より好ましくは1～6である。

[0024] ・「置換もしくは無置換のアリール基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」の具体例（具体例群G1）としては、以下の無置換のアリール基（具体例群G1A）及び置換のアリール基（具体例群G1B）等が挙げられる。（ここで、無置換のアリール基とは「置換もしくは無置換のアリール基」が「無置換のアリール基」である場合を指し、置換のアリール基とは「置換もしくは無置換のアリール基」が「置換のアリール基」である場合を指す。）本明細書において、単に「アリール基」という場合は、「無置換のアリール基」と「置換のアリール基」の両方を含む。

「置換のアリール基」は、「無置換のアリール基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアリール基」としては、例えば、下記具体例群G1Aの「無置換のアリール基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び下記具体例群G1Bの置換のアリール基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のアリール基」の例、及び「置換のアリール基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアリール基」には、下記具体例群G1Bの「置換のアリール基」におけるアリール基自体の炭素原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び下記具体例群G1Bの「置換のアリール基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0025] ・無置換のアリール基（具体例群G1A）：

フェニル基、
p-ビフェニル基、
m-ビフェニル基、
o-ビフェニル基、

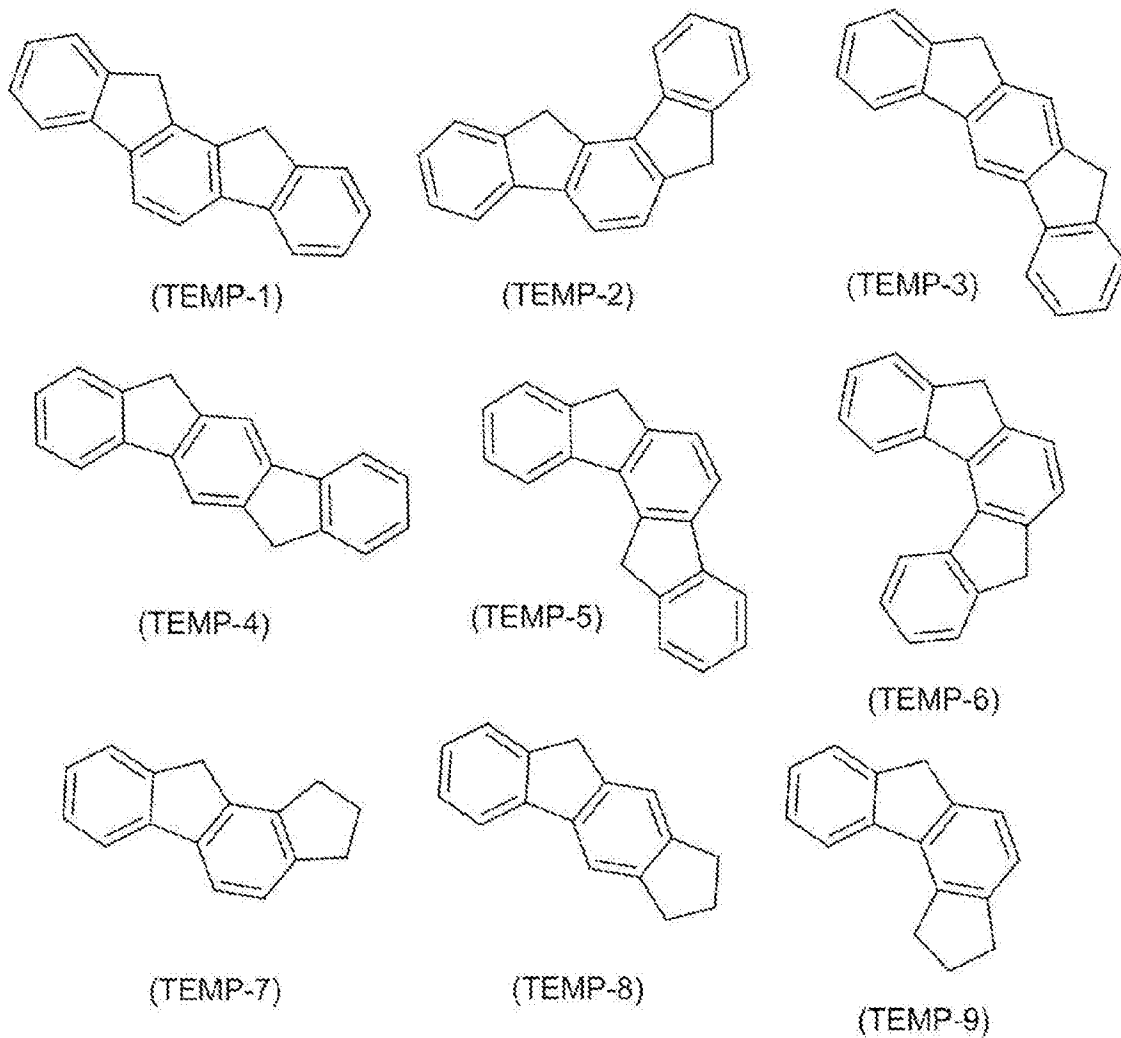
p-ターフェニル-4-イル基、
p-ターフェニル-3-イル基、
p-ターフェニル-2-イル基、
m-ターフェニル-4-イル基、
m-ターフェニル-3-イル基、
m-ターフェニル-2-イル基、
o-ターフェニル-4-イル基、
o-ターフェニル-3-イル基、
o-ターフェニル-2-イル基、
1-ナフチル基、
2-ナフチル基、
アントリル基、
ベンゾアントリル基、
フェナントリル基、
ベンゾフェナントリル基、
フェナレニル基、
ピレニル基、
クリセニル基、
ベンゾクリセニル基、
トリフェニレニル基、
ベンゾトリフェニレニル基、
テトラセニル基、
ペンタセニル基、
フルオレニル基、
9, 9'-スピロビフルオレニル基、
ベンゾフルオレニル基、
ジベンゾフルオレニル基、
フルオランテニル基、

ベンゾフルオランテニル基、

ペリレニル基、及び

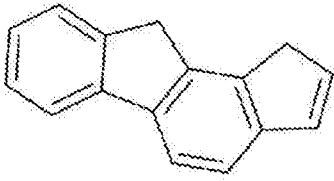
下記一般式（TEMP-1）～（TEMP-15）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価のアリール基。

[0026] [化3]

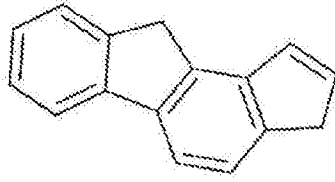


[0027]

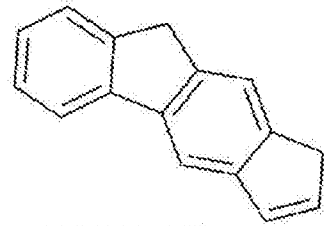
[化4]



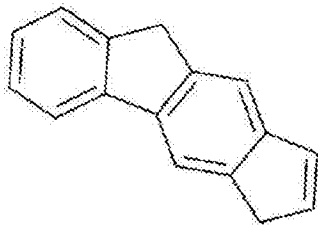
(TEMP-10)



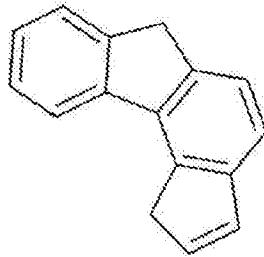
(TEMP-11)



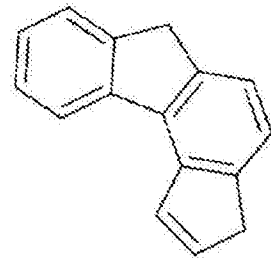
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

[0028] ・置換のアリール基（具体例群G 1 B）：

- o-トリル基、
- m-トリル基、
- p-トリル基、
- パラ-キシリル基、
- メタ-キシリル基、
- オルト-キシリル基、
- パラ-イソプロピルフェニル基、
- メタ-イソプロピルフェニル基、
- オルト-イソプロピルフェニル基、
- パラ-t-ブチルフェニル基、
- メタ-t-ブチルフェニル基、
- オルト-t-ブチルフェニル基、
- 3, 4, 5-トリメチルフェニル基、
- 9, 9-ジメチルフルオレニル基、
- 9, 9-ジフェニルフルオレニル基、

9, 9-ビス(4-メチルフェニル)フルオレニル基、
9, 9-ビス(4-イソプロピルフェニル)フルオレニル基、
9, 9-ビス(4-tert-ブチルフェニル)フルオレニル基、
シアノフェニル基、
トリフェニルシリルフェニル基、
トリメチルシリルフェニル基、
フェニルナフチル基、
ナフチルフェニル基、及び

前記一般式(TEMP-1)～(TEMP-15)で表される環構造から誘導される1価の基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基。

[0029] ・「置換もしくは無置換の複素環基」

本明細書に記載の「複素環基」は、環形成原子にヘテロ原子を少なくとも1つ含む環状の基である。ヘテロ原子の具体例としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、及びホウ素原子が挙げられる。

本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基である。

本明細書に記載の「複素環基」は、芳香族複素環基であるか、又は非芳香族複素環基である。

本明細書に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」の具体例(具体例群G2)としては、以下の無置換の複素環基(具体例群G2A)、及び置換の複素環基(具体例群G2B)等が挙げられる。(ここで、無置換の複素環基とは「置換もしくは無置換の複素環基」が「無置換の複素環基」である場合を指し、置換の複素環基とは「置換もしくは無置換の複素環基」が「置換の複素環基」である場合を指す。)本明細書において、単に「複素環基」という場合は、「無置換の複素環基」と「置換の複素環基」の両方を含む。

「置換の複素環基」は、「無置換の複素環基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換の複素環基」の具体例は、下記具体例群G2Aの「無置換の複素環基」の水素原子が置き換わった基、及び下

記具体例群G 2 Bの置換の複素環基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換の複素環基」の例や「置換の複素環基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換の複素環基」には、具体例群G 2 Bの「置換の複素環基」における複素環基自体の環形成原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G 2 Bの「置換の複素環基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0030] 具体例群G 2 Aは、例えば、以下の窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 1）、酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 2）、硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 3）、及び下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群G 2 A 4）を含む。

[0031] 具体例群G 2 Bは、例えば、以下の窒素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 1）、酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 2）、硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 3）、及び下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から誘導される1価の複素環基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群G 2 B 4）を含む。

[0032] ・窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 1）：

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、

オキサゾリル基、

イソオキサゾリル基、

オキサジアゾリル基、

チアゾリル基、

イソチアゾリル基、
チアジアゾリル基、
ピリジル基、
ピリダジニル基、
ピリミジニル基、
ピラジニル基、
トリアジニル基、
インドリル基、
イソインドリル基、
インドリジニル基、
キノリジニル基、
キノリル基、
イソキノリル基、
シンノリル基、
フタラジニル基、
キナゾリニル基、
キノキサリニル基、
ベンゾイミダゾリル基、
インダゾリル基、
フェナントロリニル基、
フェナントリジニル基、
アクリジニル基、
フェナジニル基、
カルバゾリル基、
ベンゾカルバゾリル基、
モルホリノ基、
フェノキサジニル基、
フェノチアジニル基、

アザカルバゾリル基、及びジアザカルバゾリル基。

[0033] ・酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 2）：

フリル基、
オキサゾリル基、
イソオキサゾリル基、
オキサジアゾリル基、
キサンテニル基、
ベンゾフラニル基、
イソベンゾフラニル基、
ジベンゾフラニル基、
ナフトベンゾフラニル基、
ベンゾオキサゾリル基、
ベンゾイソキサゾリル基、
フェノキサジニル基、
モルホリノ基、
ジナフトフラニル基、
アザジベンゾフラニル基、
ジアザジベンゾフラニル基、
アザナフトベンゾフラニル基、及び
ジアザナフトベンゾフラニル基。

[0034] ・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 3）：

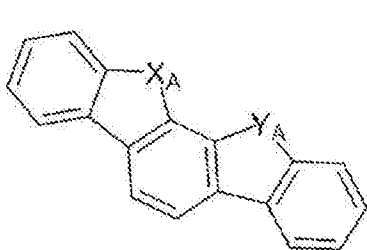
チエニル基、
チアゾリル基、
イソチアゾリル基、
チアジアゾリル基、
ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基）、
イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基）、
ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、

ナフトベンゾチオフェニル基（ナフトベンゾチエニル基）、
ベンゾチアゾリル基、
ベンゾイソチアゾリル基、
フェノチアジニル基、
ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、
アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、
ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、
アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフトベンゾチエニル基）、及び
ジアザナフトベンゾチオフェニル基（ジアザナフトベンゾチエニル基）。

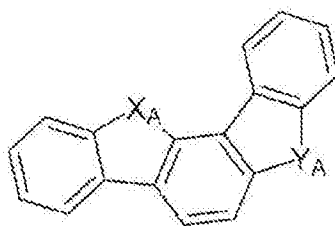
[0035] ・下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群G2A4）：

[0036]

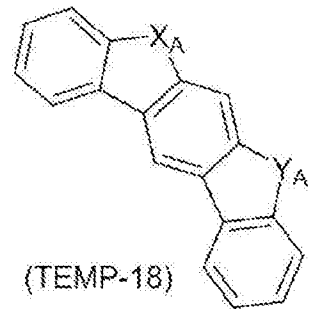
[化5]



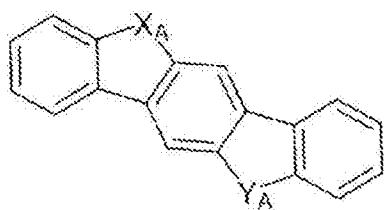
(TEMP-16)



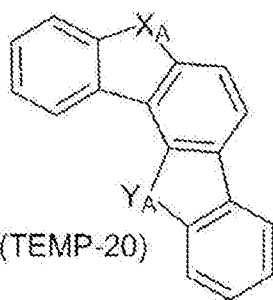
(TEMP-17)



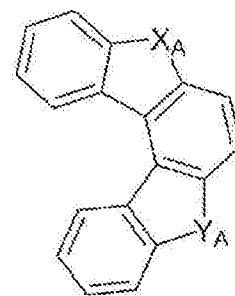
(TEMP-18)



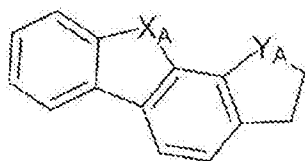
(TEMP-19)



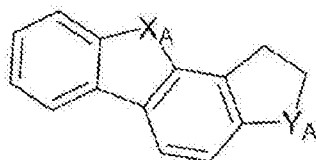
(TEMP-20)



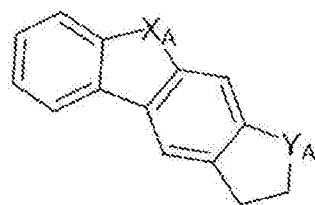
(TEMP-21)



(TEMP-22)



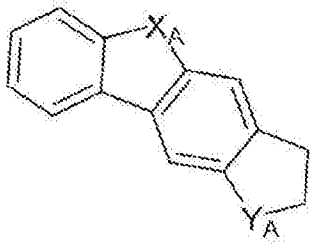
(TEMP-23)



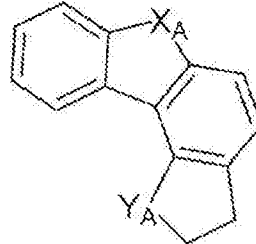
(TEMP-24)

[0037]

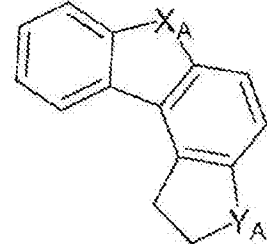
[化6]



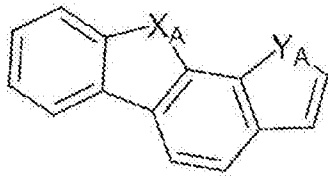
(TEMP-25)



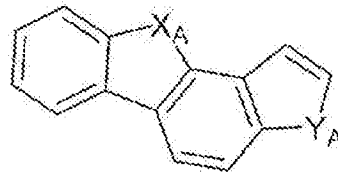
(TEMP-26)



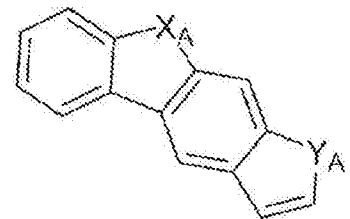
(TEMP-27)



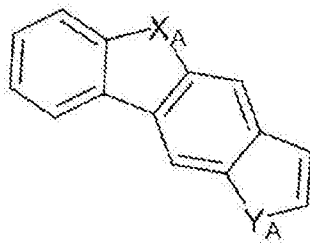
(TEMP-28)



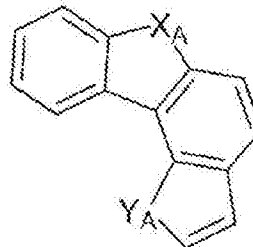
(TEMP-29)



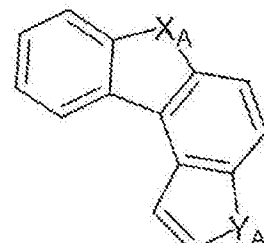
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

[0038] 前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) において、 X_A 及び Y_A は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、NH、又は CH_2 である。ただし、 X_A 及び Y_A のうち少なくとも1つは、酸素原子、硫黄原子、又はNHである。

前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) において、 X_A 及び Y_A の少なくともいずれかがNH、又は CH_2 である場合、前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) で表される環構造から誘導される1価の複素環基には、これらNH、又は CH_2 から1つの水素原子を除いて得られる1価の基が含まれる。

[0039] ・窒素原子を含む置換の複素環基（具体例群G2B1）：

（9-フェニル）カルバゾリル基、

(9-ビフェニル)カルバゾリル基、
(9-フェニル)フェニルカルバゾリル基、
(9-ナフチル)カルバゾリル基、
ジフェニルカルバゾール-9-イル基、
フェニルカルバゾール-9-イル基、
メチルベンゾイミダゾリル基、
エチルベンゾイミダゾリル基、
フェニルトリアジニル基、
ビフェニルトリアジニル基、
ジフェニルトリアジニル基、
フェニルキナゾリニル基、及びビフェニルキナゾリニル基。

[0040] ・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 2）：

フェニルジベンゾフラニル基、
メチルジベンゾフラニル基、
t-ブチルジベンゾフラニル基、及び
スピロ[9H-キサンテン-9, 9' - [9H]フルオレン]の1価の残基。

[0041] ・硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 3）：

フェニルジベンゾチオフェニル基、
メチルジベンゾチオフェニル基、
t-ブチルジベンゾチオフェニル基、及び
スピロ[9H-チオキサンテン-9, 9' - [9H]フルオレン]の1価の残基。

[0042] ・前記一般式(TEMP-16)～(TEMP-33)で表される環構造から誘導される1価の複素環基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群G 2 B 4）：

[0043] 前記「1価の複素環基の1つ以上の水素原子」とは、該1価の複素環基の環形成炭素原子に結合している水素原子、 X_A 及び Y_A の少なくともいずれか

がN Hである場合の窒素原子に結合している水素原子、及び X_A 及び Y_A の一方がC H₂である場合のメチレン基の水素原子から選ばれる1つ以上の水素原子を意味する。

[0044] ・「置換もしくは無置換のアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」の具体例（具体例群G 3）としては、以下の無置換のアルキル基（具体例群G 3 A）及び置換のアルキル基（具体例群G 3 B）が挙げられる。（ここで、無置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「無置換のアルキル基」である場合を指し、置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「置換のアルキル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキル基」という場合は、「無置換のアルキル基」と「置換のアルキル基」の両方を含む。

「置換のアルキル基」は、「無置換のアルキル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキル基」（具体例群G 3 A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のアルキル基（具体例群G 3 B）の例等が挙げられる。本明細書において、「無置換のアルキル基」におけるアルキル基は、鎖状のアルキル基を意味する。そのため、「無置換のアルキル基」は、直鎖である「無置換のアルキル基」、及び分岐状である「無置換のアルキル基」が含まれる。尚、ここに列挙した「無置換のアルキル基」の例や「置換のアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルキル基」には、具体例群G 3 Bの「置換のアルキル基」におけるアルキル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G 3 Bの「置換のアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0045] ・無置換のアルキル基（具体例群G 3 A）：

メチル基、

エチル基、

n-プロピル基、
イソプロピル基、
n-ブチル基、
イソブチル基、
s-ブチル基、及び
t-ブチル基。

[0046] ・置換のアルキル基（具体例群G 3 B）：

ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、
ペンタフルオロエチル基、
2，2，2-トリフルオロエチル基、及び
トリフルオロメチル基。

[0047] ・「置換もしくは無置換のアルケニル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルケニル基」の具体例（具体例群G 4）としては、以下の無置換のアルケニル基（具体例群G 4 A）、及び置換のアルケニル基（具体例群G 4 B）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルケニル基とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「無置換のアルケニル基」である場合を指し、「置換のアルケニル基」とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「置換のアルケニル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「アルケニル基」という場合は、「無置換のアルケニル基」と「置換のアルケニル基」の両方を含む。

「置換のアルケニル基」は、「無置換のアルケニル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルケニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルケニル基」（具体例群G 4 A）が置換基を有する基、及び置換のアルケニル基（具体例群G 4 B）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のアルケニル基」の例や「置換のアルケニル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルケニル基」には、具体例群G 4 Bの「置換のアルケニル基」におけるアルケニル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G 4 Bの「

置換のアルケニル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0048] ・無置換のアルケニル基（具体例群G 4 A）：

ビニル基、
アリル基、
1－ブテニル基、
2－ブテニル基、及び
3－ブテニル基。

[0049] ・置換のアルケニル基（具体例群G 4 B）：

1，3－ブタンジエニル基、
1－メチルビニル基、
1－メチルアリル基、
1，1－ジメチルアリル基、
2－メチルアリル基、及び
1，2－ジメチルアリル基。

[0050] ・「置換もしくは無置換のアルキニル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキニル基」の具体例（具体例群G 5）としては、以下の無置換のアルキニル基（具体例群G 5 A）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルキニル基とは、「置換もしくは無置換のアルキニル基」が「無置換のアルキニル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキニル基」という場合は、「無置換のアルキニル基」と「置換のアルキニル基」の両方を含む。

「置換のアルキニル基」は、「無置換のアルキニル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキニル基」（具体例群G 5 A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基等が挙げられる。

[0051] ・無置換のアルキニル基（具体例群G 5 A）：エチニル基。

[0052] ・「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」の具体例（具体例群G 6）としては、以下の無置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 A）、及び置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 B）等が挙げられる。（ここで、無置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「無置換のシクロアルキル基」である場合を指し、置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「置換のシクロアルキル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「シクロアルキル基」という場合は、「無置換のシクロアルキル基」と「置換のシクロアルキル基」の両方を含む。

「置換のシクロアルキル基」は、「無置換のシクロアルキル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のシクロアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のシクロアルキル基」（具体例群G 6 A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 B）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のシクロアルキル基」の例や「置換のシクロアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のシクロアルキル基」には、具体例群G 6 Bの「置換のシクロアルキル基」におけるシクロアルキル基自体の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び具体例群G 6 Bの「置換のシクロアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0053] ・無置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 A）：

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、
1－アダマンチル基、
2－アダマンチル基、
1－ノルボルニル基、及び

2-ノルボルニル基。

[0054] ・置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 B）：

4-メチルシクロヘキシル基。

[0055] ・「 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基」

本明細書に記載の $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基の具体例（具体例群G 7）としては、

$-Si(G1)(G1)(G1)$ 、
 $-Si(G1)(G2)(G2)$ 、
 $-Si(G1)(G1)(G2)$ 、
 $-Si(G2)(G2)(G2)$ 、
 $-Si(G3)(G3)(G3)$ 、及び
 $-Si(G6)(G6)(G6)$

が挙げられる。ここで、

G 1 は、具体例群G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2 は、具体例群G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3 は、具体例群G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6 は、具体例群G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

$-Si(G1)(G1)(G1)$ における複数のG 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

$-Si(G1)(G2)(G2)$ における複数のG 2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

$-Si(G1)(G1)(G2)$ における複数のG 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

$-Si(G2)(G2)(G2)$ における複数のG 2 は、互いに同一であ

るか、又は異なる。

—S i (G 3) (G 3) (G 3) における複数のG 3は、互いに同一であるか、又は異なる。

—S i (G 6) (G 6) (G 6) における複数のG 6は、互いに同一であるか、又は異なる。

[0056] ・「—O—(R₉₀₄)で表される基」

本明細書に記載の—O—(R₉₀₄)で表される基の具体例(具体例群G 8)としては、

—O (G 1)、

—O (G 2)、

—O (G 3)、及び

—O (G 6)

が挙げられる。

ここで、

G 1は、具体例群G 1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2は、具体例群G 2に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3は、具体例群G 3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6は、具体例群G 6に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

[0057] ・「—S—(R₉₀₅)で表される基」

本明細書に記載の—S—(R₉₀₅)で表される基の具体例(具体例群G 9)としては、

—S (G 1)、

—S (G 2)、

—S (G 3)、及び

—S (G 6)

が挙げられる。

ここで、

G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2 は、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6 は、具体例群 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

[0058] ・「—N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基」

本明細書に記載の—N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基の具体例（具体例群 G 10）としては、

—N (G 1) (G 1)、

—N (G 2) (G 2)、

—N (G 1) (G 2)、

—N (G 3) (G 3)、及び

—N (G 6) (G 6)

が挙げられる。

ここで、

G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2 は、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6 は、具体例群 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基

」である。

－N (G 1) (G 1) における複数の G 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

－N (G 2) (G 2) における複数の G 2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

－N (G 3) (G 3) における複数の G 3 は、互いに同一であるか、又は異なる。

－N (G 6) (G 6) における複数の G 6 は、互いに同一であるか、又は異なる。

[0059] ・「ハロゲン原子」

本明細書に記載の「ハロゲン原子」の具体例（具体例群 G 1 1）としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、及びヨウ素原子等が挙げられる。

[0060] ・「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも 1 つの水素原子がフッ素原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がフッ素原子で置き換わった基（パーフルオロ基）も含む。「無置換のフルオロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50 であり、好ましくは 1～30 であり、より好ましくは 1～18 である。「置換のフルオロアルキル基」は、「フルオロアルキル基」の 1 つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のフルオロアルキル基」には、「置換のフルオロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のフルオロアルキル基」における置換基の 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のフルオロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群 G 3）における 1 つ以上の水素原子がフッ素原子と置き

換わった基の例等が挙げられる。

[0061] ・「置換もしくは無置換のハロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のハロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも1つの水素原子がハロゲン原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がハロゲン原子で置き換わった基も含む。「無置換のハロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。「置換のハロアルキル基」は、「ハロアルキル基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のハロアルキル基」には、「置換のハロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のハロアルキル基」における置換基の1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のハロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群G3）における1つ以上の水素原子がハロゲン原子と置き換わった基の例等が挙げられる。ハロアルキル基をハロゲン化アルキル基と称する場合がある。

[0062] ・「置換もしくは無置換のアルコキシ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルコキシ基」の具体例としては、—O（G3）で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルコキシ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。

[0063] ・「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」の具体例としては、—S（G3）で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルキルチ

オ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。

[0064] ・「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」の具体例としては、 $-O(G1)$ で表される基であり、ここで、G1は、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールオキシ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

[0065] ・「置換もしくは無置換のアリールチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールチオ基」の具体例としては、 $-S(G1)$ で表される基であり、ここで、G1は、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールチオ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

[0066] ・「置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基」

本明細書に記載の「トリアルキルシリル基」の具体例としては、 $-Si(G3)(G3)(G3)$ で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。 $-Si(G3)(G3)(G3)$ における複数のG3は、互いに同一であるか、又は異なる。

「トリアルキルシリル基」の各アルキル基の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～20であり、より好ましくは1～6である。

[0067] ・「置換もしくは無置換のアラルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、 $-(G3)-(G1)$ で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」であり、G1は、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。従って、「アラルキル基」は、「アルキル基」の水素原子が置換基としての「アリール基

」と置き換わった基であり、「置換のアルキル基」の一態様である。「無置換のアラルキル基」は、「無置換のアリール基」が置換した「無置換のアルキル基」であり、「無置換のアラルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、7～50であり、好ましくは7～30であり、より好ましくは7～18である。

「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、ベンジル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-*t*-ブチル基、 α -ナフチルメチル基、1- α -ナフチルエチル基、2- α -ナフチルエチル基、1- α -ナフチルイソプロピル基、2- α -ナフチルイソプロピル基、 β -ナフチルメチル基、1- β -ナフチルエチル基、2- β -ナフチルエチル基、1- β -ナフチルイソプロピル基、及び2- β -ナフチルイソプロピル基等が挙げられる。

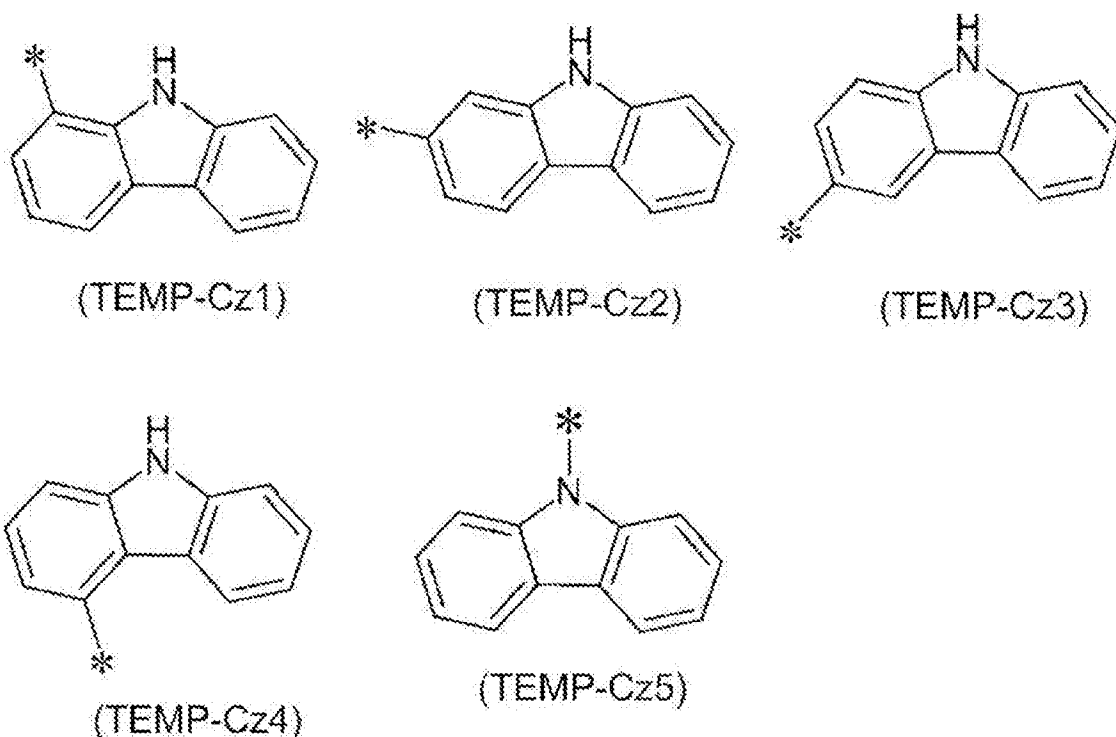
[0068] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリール基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはフェニル基、*p*-ビフェニル基、*m*-ビフェニル基、*o*-ビフェニル基、*p*-ターフェニル-4-イル基、*p*-ターフェニル-3-イル基、*p*-ターフェニル-2-イル基、*m*-ターフェニル-4-イル基、*m*-ターフェニル-3-イル基、*m*-ターフェニル-2-イル基、*o*-ターフェニル-4-イル基、*o*-ターフェニル-3-イル基、*o*-ターフェニル-2-イル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9, 9'-スピロピフルオレニル基、9, 9-ジメチルフルオレニル基、及び9, 9-ジフェニルフルオレニル基等である。

[0069] 本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基、カルバゾリル基（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、又は9-カルバゾリル基

）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ジアザジベンゾチオフェニル基、（９－フェニル）カルバゾリル基（（９－フェニル）カルバゾール－１－イル基、（９－フェニル）カルバゾール－２－イル基、（９－フェニル）カルバゾール－３－イル基、又は（９－フェニル）カルバゾール－４－イル基）、（９－ビフェニリル）カルバゾリル基、（９－フェニル）フェニルカルバゾリル基、ジフェニルカルバゾール－９－イル基、フェニルカルバゾール－９－イル基、フェニルトリアジニル基、ビフェニリルトリアジニル基、ジフェニルトリアジニル基、フェニルジベンゾフラニル基、及びフェニルジベンゾチオフェニル基等である。

[0070] 本明細書において、カルバゾリル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

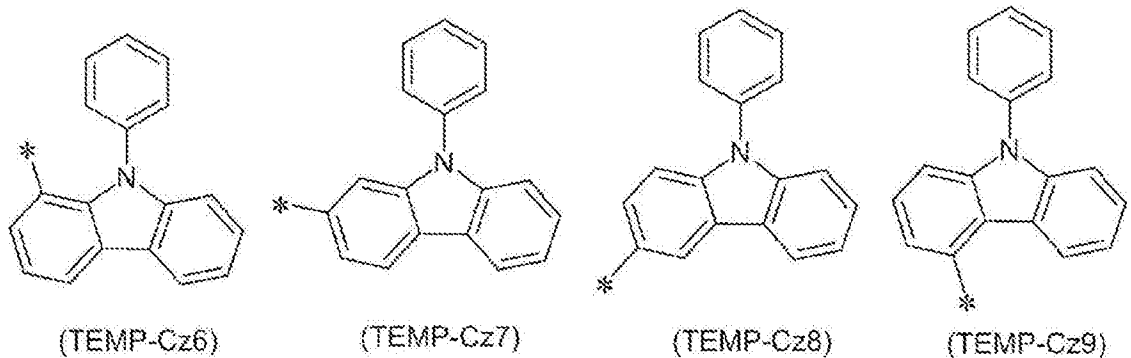
[0071] [化7]



[0072] 本明細書において、（９－フェニル）カルバゾリル基は、本明細書に別途

記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

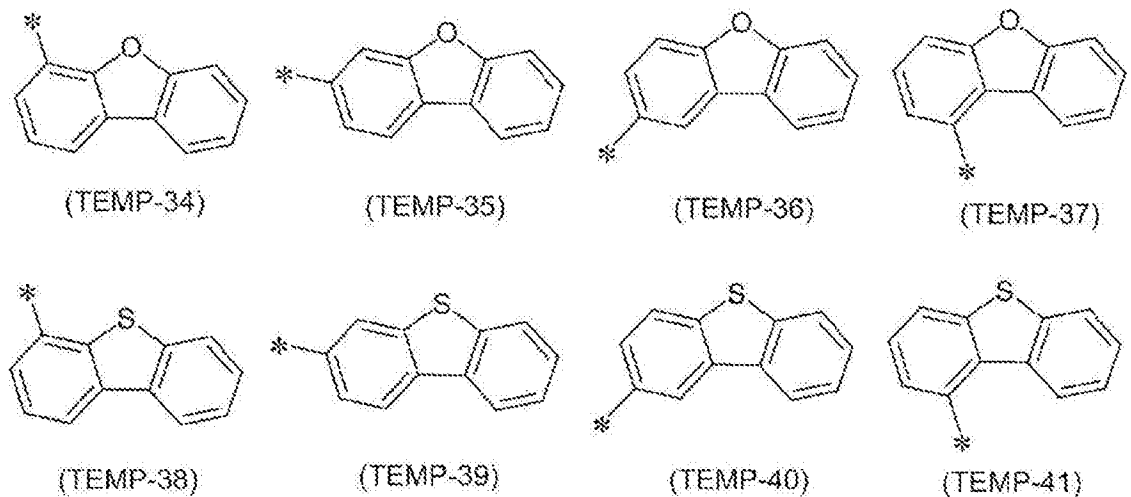
[0073] [化8]



[0074] 前記一般式 (TEMP-Cz1) ~ (TEMP-Cz9) 中、*は、結合位置を表す。

[0075] 本明細書において、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

[0076] [化9]



[0077] 前記一般式 (TEMP-34) ~ (TEMP-41) 中、*は、結合位置を表す。

[0078] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアルキル基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、及びt-ブチル基等である。

[0079] ・「置換もしくは無置換のアリーレン基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリーレン基」は、別途記載の

ない限り、上記「置換もしくは無置換のアリール基」からアリール環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換のアリーレン基」の具体例（具体例群G 1 2）としては、具体例群G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」からアリール環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

[0080] ・「置換もしくは無置換の2価の複素環基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換の2価の複素環基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換の2価の複素環基」の具体例（具体例群G 1 3）としては、具体例群G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

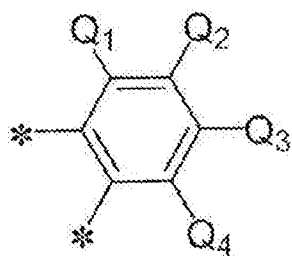
[0081] ・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群G 1 4）としては、具体例群G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

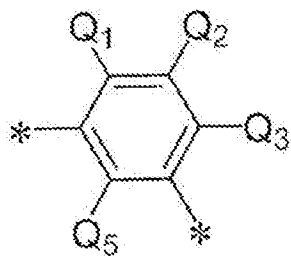
[0082] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式（TEMP-4 2）～（TEMP-6 8）のいずれかの基である。

[0083]

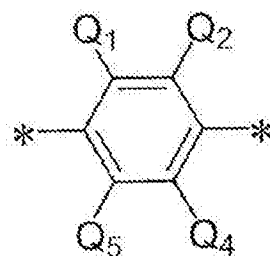
[化10]



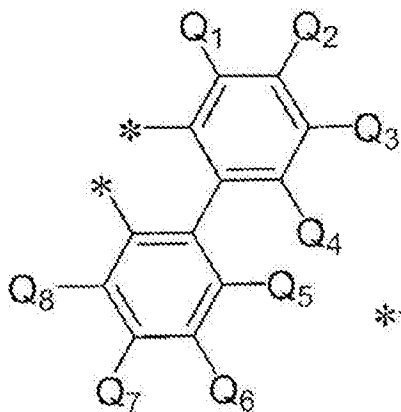
(TEMP-42)



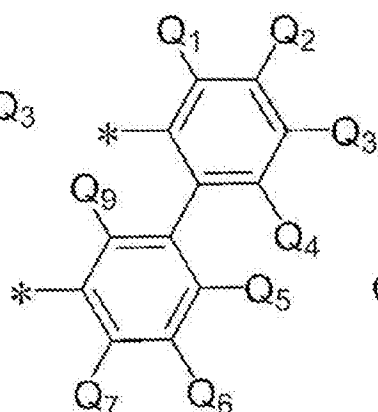
(TEMP-43)



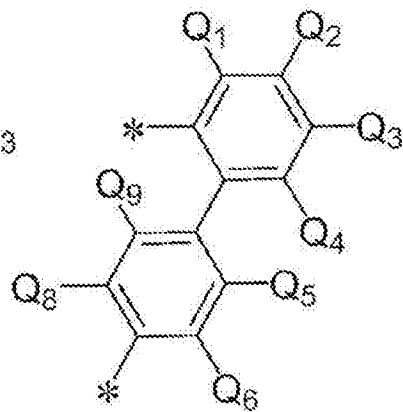
(TEMP-44)



(TEMP-45)

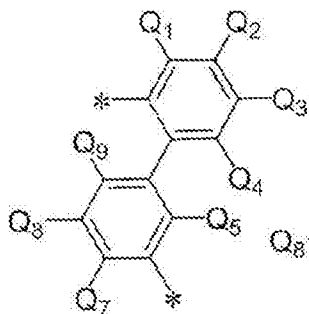


(TEMP-46)

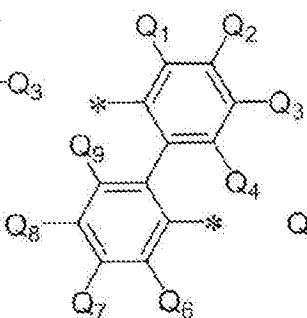


(TEMP-47)

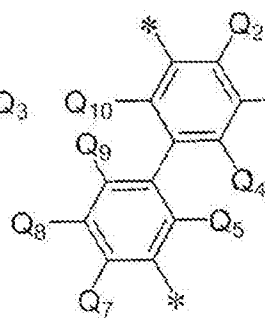
[0084] [化11]



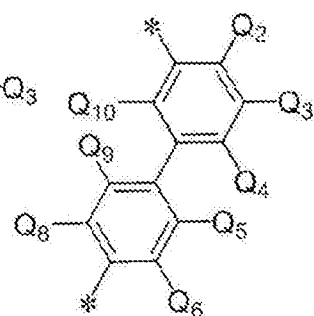
(TEMP-48)



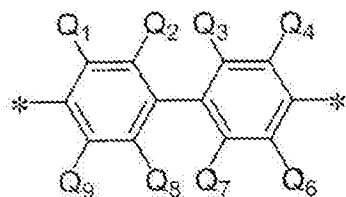
(TEMP-49)



(TEMP-50)



(TEMP-51)



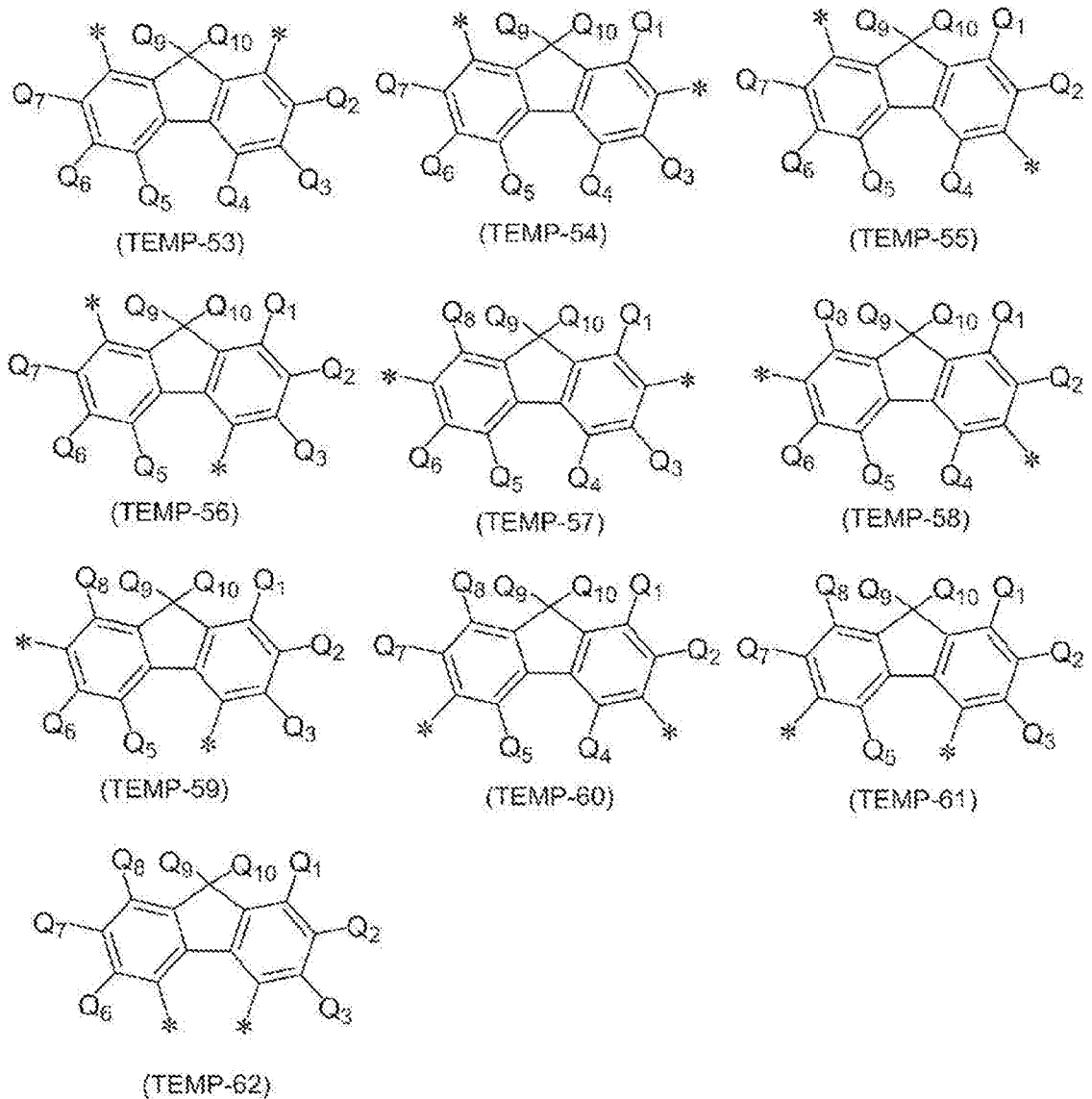
(TEMP-52)

[0085] 前記一般式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中、 $Q_1 \sim Q_{10}$ は、そ

れぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

前記一般式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中、*は、結合位置を表す。

[0086] [化12]



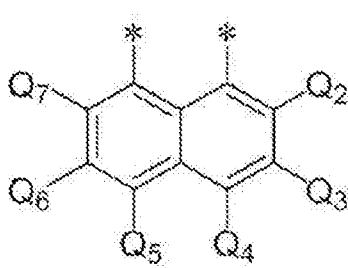
[0087] 前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、Q₁ ~ Q₁₀は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

式Q₉及びQ₁₀は、単結合を介して互いに結合して環を形成してもよい。

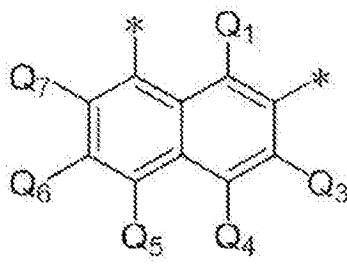
前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、*は、結合位置を表す。

[0088]

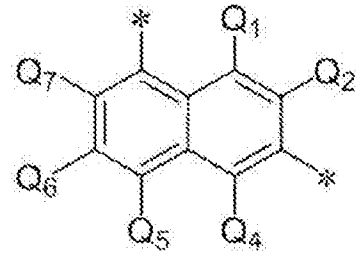
[化13]



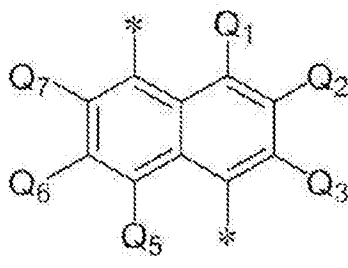
(TEMP-63)



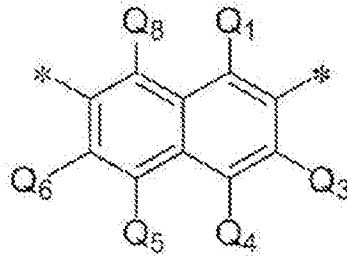
(TEMP-64)



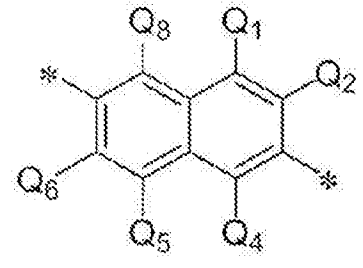
(TEMP-65)



(TEMP-66)



(TEMP-67)



(TEMP-68)

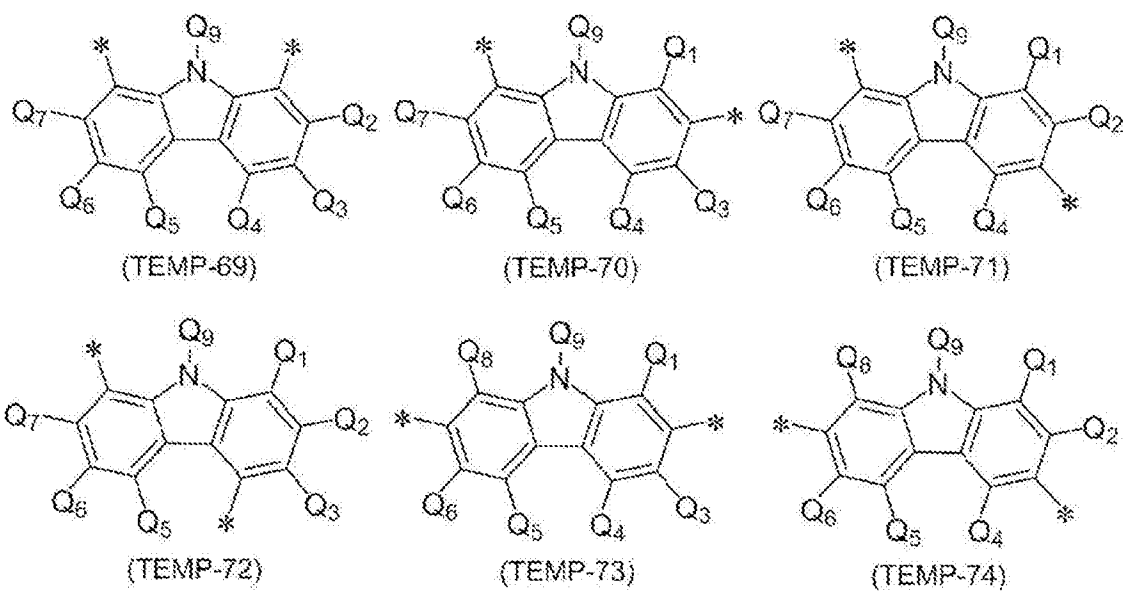
[0089] 前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、Q₁ ~ Q₈は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、*は、結合位置を表す。

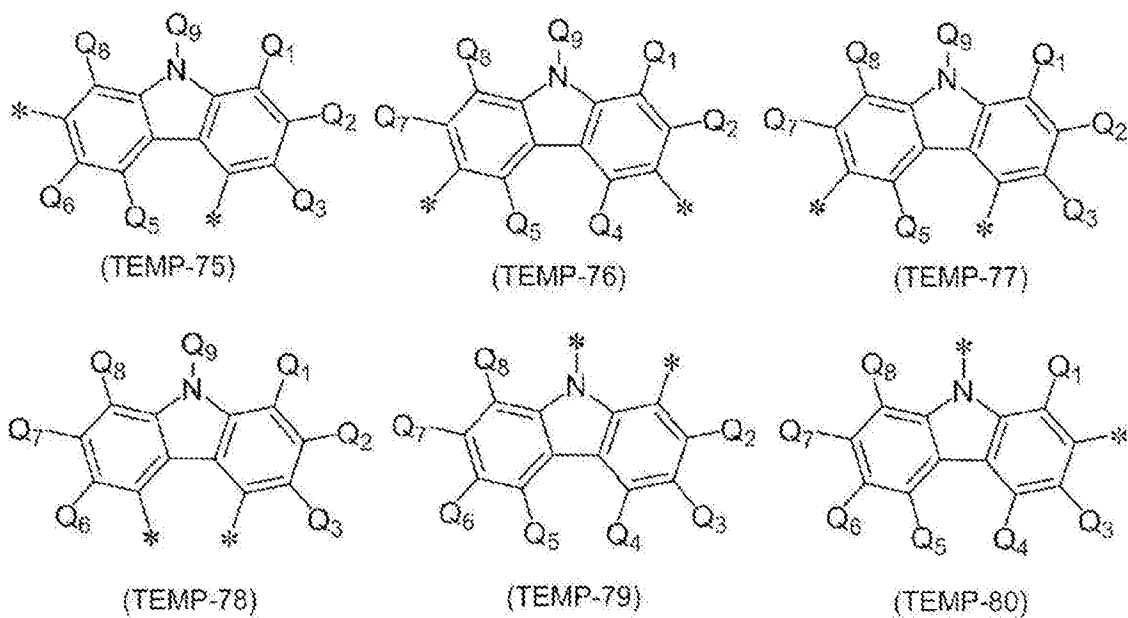
[0090] 本明細書に記載の置換もしくは無置換の2価の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-102) のいずれかの基である。

[0091]

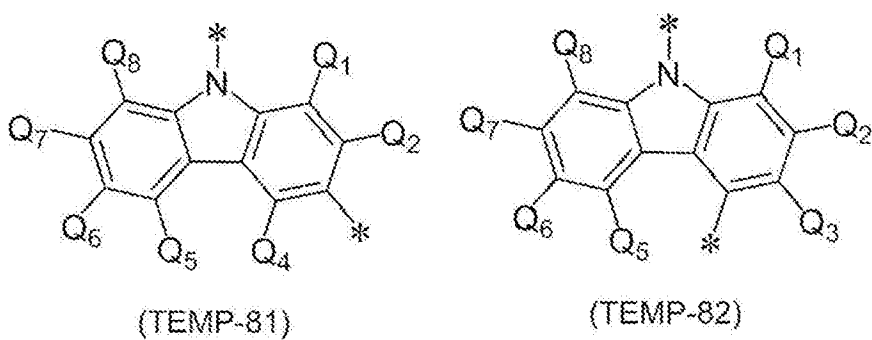
[化14]



[0092] [化15]

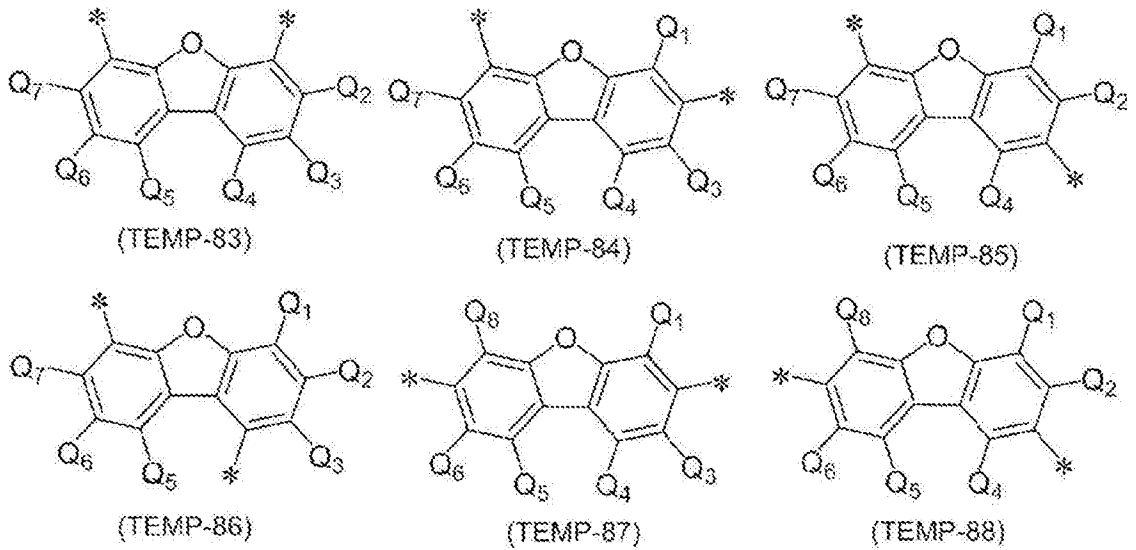


[0093] [化16]

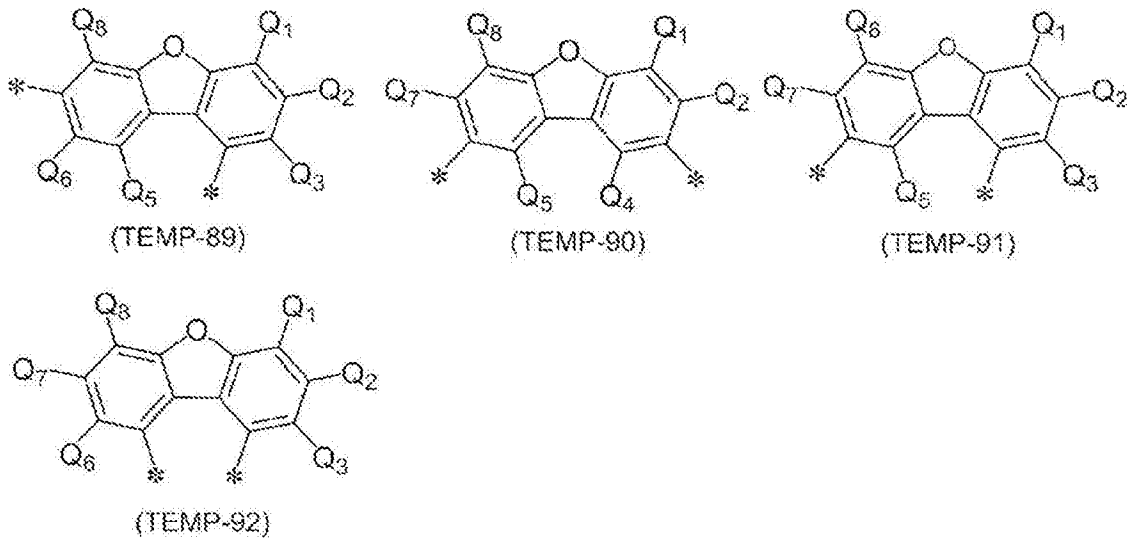


[0094] 前記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-82) 中、 $Q_1 \sim Q_9$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

[0095] [化17]

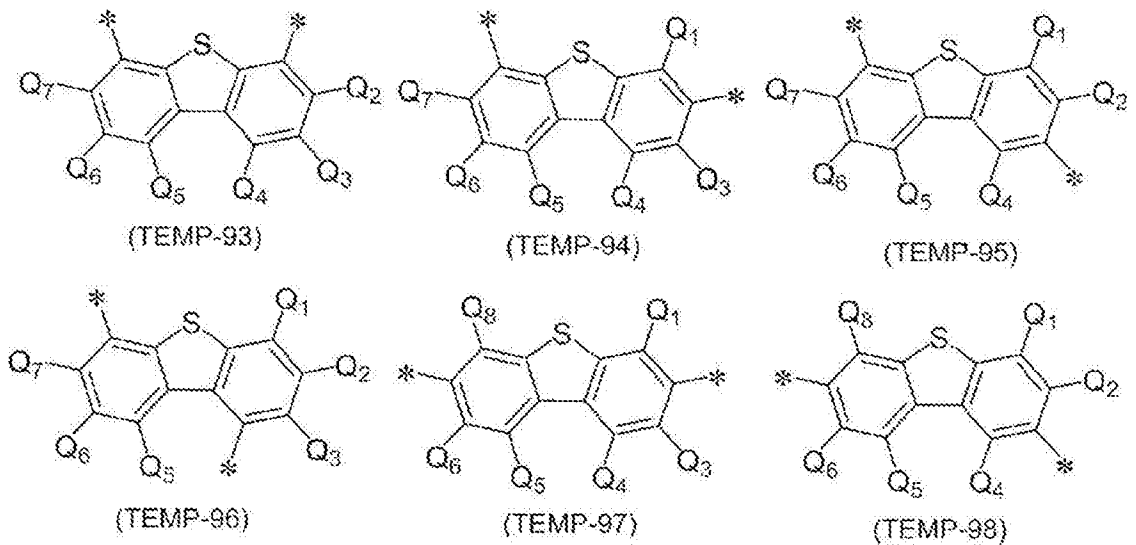


[0096] [化18]

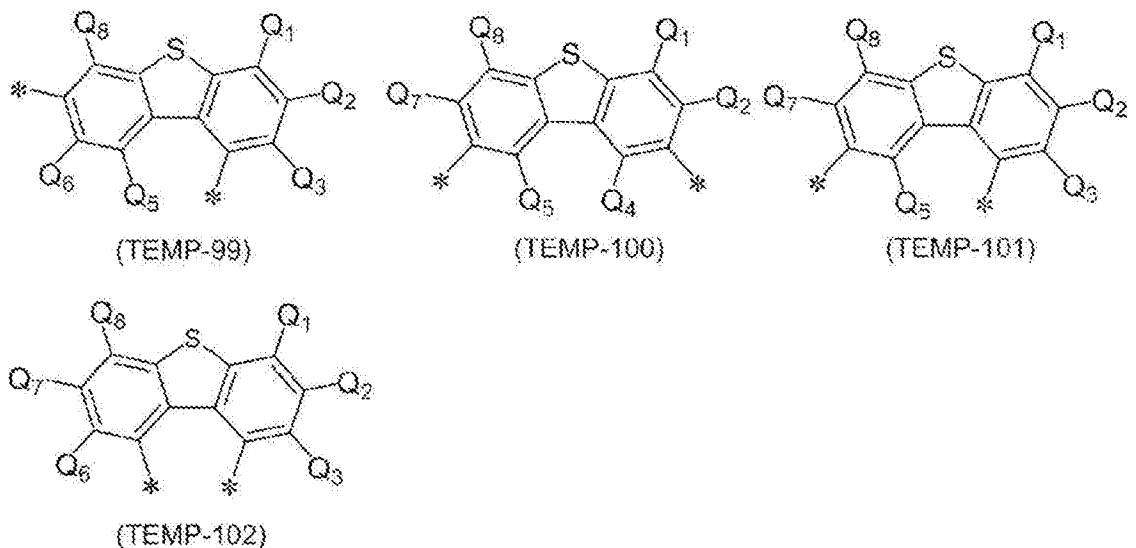


[0097]

[化19]



[0098] [化20]



[0099] 前記一般式 (TEMP-83) ~ (TEMP-102) 中、 $Q_1 \sim Q_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

[0100] 以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

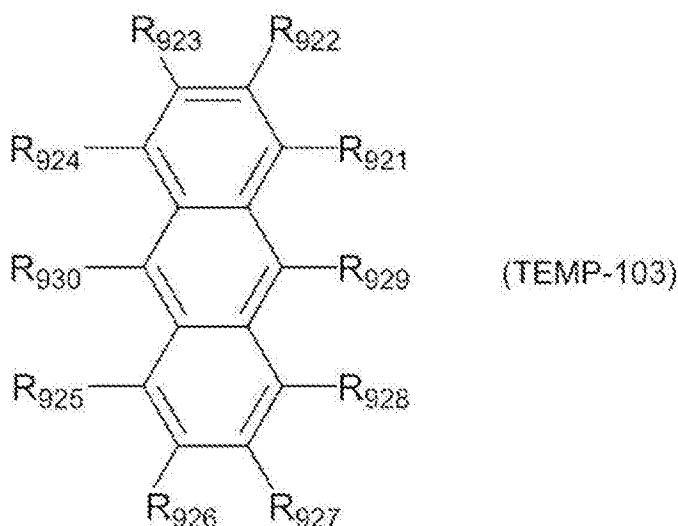
[0101] ・「結合して環を形成する場合」

本明細書において、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず」という場合は、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もし

くは無置換の単環を形成する」場合と、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合と、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合しない」場合と、を意味する。

本明細書における、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合（以下、これらの場合をまとめて「結合して環を形成する場合」と称する場合がある。）について、以下、説明する。母骨格がアントラセン環である下記一般式（TEMP-103）で表されるアントラセン化合物の場合を例として説明する。

[0102] [化21]

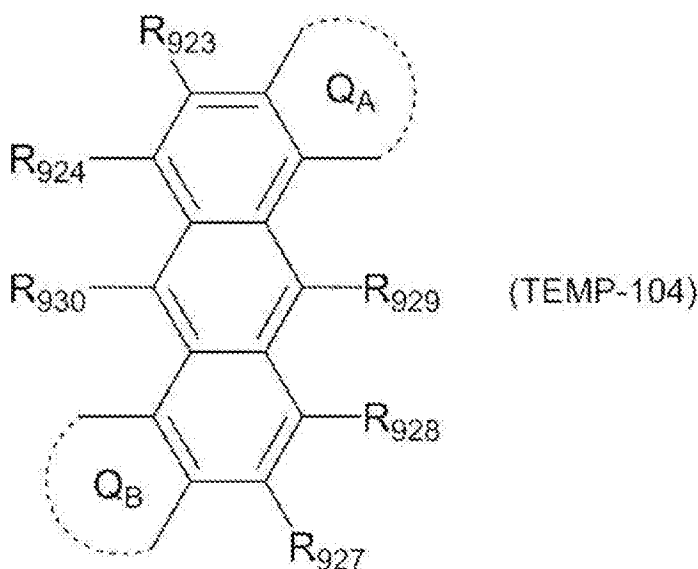


[0103] 例えば、R₉₂₁～R₉₃₀のうちの「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、環を形成する」場合において、1組となる隣接する2つからなる組とは、R₉₂₁とR₉₂₂との組、R₉₂₂とR₉₂₃との組、R₉₂₃とR₉₂₄との組、R₉₂₄とR₉₃₀との組、R₉₃₀とR₉₂₅との組、R₉₂₅とR₉₂₆との組、R₉₂₆とR₉₂₇との組、R₉₂₇とR₉₂₈との組、R₉₂₈とR₉₂₉との組、並びにR₉₂₉とR₉₂₁との組である。

[0104] 上記「1組以上」とは、上記隣接する2つ以上からなる組の2組以上が同

時に環を形成してもよいことを意味する。例えば、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して環 Q_A を形成し、同時に R_{925} と R_{926} とが互いに結合して環 Q_B を形成した場合は、前記一般式（TEMP-103）で表されるアントラセン化合物は、下記一般式（TEMP-104）で表される。

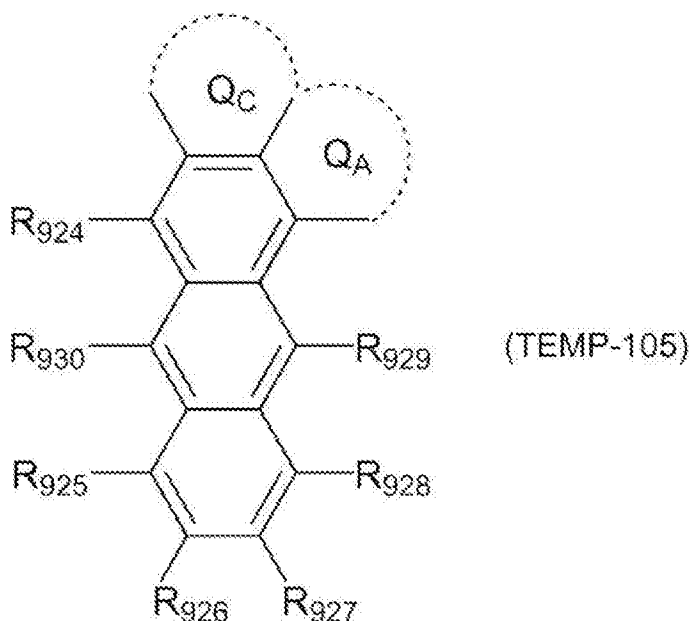
[0105] [化22]



[0106] 「隣接する2つ以上からなる組」が環を形成する場合とは、前述の例のように隣接する「2つ」からなる組が結合する場合だけでなく、隣接する「3つ以上」からなる組が結合する場合も含む。例えば、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して環 Q_A を形成し、かつ、 R_{922} と R_{923} とが互いに結合して環 Q_C を形成し、互いに隣接する3つ（ R_{921} 、 R_{922} 及び R_{923} ）からなる組が互いに結合して環を形成して、アントラセン母骨格に縮合する場合を意味し、この場合、前記一般式（TEMP-103）で表されるアントラセン化合物は、下記一般式（TEMP-105）で表される。下記一般式（TEMP-105）において、環 Q_A 及び環 Q_C は、 R_{922} を共有する。

[0107]

[化23]



[0108] 形成される「単環」、又は「縮合環」は、形成された環のみの構造として、飽和の環であっても不飽和の環であってもよい。「隣接する2つからなる組の1組」が「単環」、又は「縮合環」を形成する場合であっても、当該「単環」、又は「縮合環」は、飽和の環、又は不飽和の環を形成することができる。例えば、前記一般式（TEMP-104）において形成された環 Q_A 及び環 Q_B は、それぞれ、「単環」又は「縮合環」である。また、前記一般式（TEMP-105）において形成された環 Q_A 、及び環 Q_C は、「縮合環」である。前記一般式（TEMP-105）の環 Q_A と環 Q_C とは、環 Q_A と環 Q_C とが縮合することによって縮合環となっている。前記一般式（TEMP-104）の環 Q_A がベンゼン環であれば、環 Q_A は、単環である。前記一般式（TEMP-104）の環 Q_A がナフタレン環であれば、環 Q_A は、縮合環である。

[0109] 「不飽和の環」とは、芳香族炭化水素環、又は芳香族複素環を意味する。

「飽和の環」とは、脂肪族炭化水素環、又は非芳香族複素環を意味する。

芳香族炭化水素環の具体例としては、具体例群G1において具体例として挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

芳香族複素環の具体例としては、具体例群G2において具体例として挙げ

られた芳香族複素環基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

脂肪族炭化水素環の具体例としては、具体例群G 6において具体例として挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

「環を形成する」とは、母骨格の複数の原子のみ、あるいは母骨格の複数の原子とさらに1以上の任意の元素で環を形成することを意味する。例えば、前記一般式(TEMP-104)に示す、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して形成された環 Q_A は、 R_{921} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、 R_{922} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、1以上の任意の元素とで形成する環を意味する。具体例としては、 R_{921} と R_{922} とで環 Q_A を形成する場合において、 R_{921} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、 R_{922} とが結合するアントラセン骨格の炭素原子と、4つの炭素原子とで単環の不飽和の環を形成する場合、 R_{921} と R_{922} とで形成する環は、ベンゼン環である。

[0110] ここで、「任意の元素」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、炭素元素、窒素元素、酸素元素、及び硫黄元素からなる群から選択される少なくとも1種の元素である。任意の元素において(例えば、炭素元素、又は窒素元素の場合)、環を形成しない結合は、水素原子等で終端されてもよい、後述する「任意の置換基」で置換されてもよい。炭素元素以外の任意の元素を含む場合、形成される環は複素環である。

単環または縮合環を構成する「1以上の任意の元素」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは2個以上15個以下であり、より好ましくは3個以上12個以下であり、さらに好ましくは3個以上5個以下である。

本明細書に別途記載のない限り、「単環」、及び「縮合環」のうち、好ましくは「単環」である。

本明細書に別途記載のない限り、「飽和の環」、及び「不飽和の環」のうち、好ましくは「不飽和の環」である。

本明細書に別途記載のない限り、「単環」は、好ましくはベンゼン環である。

本明細書に別途記載のない限り、「不飽和の環」は、好ましくはベンゼン

環である。

「隣接する2つ以上からなる組の1組以上」が、「互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、又は「互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、母骨格の複数の原子と、1個以上15個以下の炭素元素、窒素元素、酸素元素、及び硫黄元素からなる群から選択される少なくとも1種の元素とからなる置換もしくは無置換の「不飽和の環」を形成する。

[0111] 上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基は、例えば後述する「任意の置換基」である。上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基である。

上記の「飽和の環」、又は「不飽和の環」が置換基を有する場合の置換基は、例えば後述する「任意の置換基」である。上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基である。

以上が、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合（「結合して環を形成する場合」）についての説明である。

[0112] ・「置換もしくは無置換の」という場合の置換基

本明細書における一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基（本明細書において、「任意の置換基」と呼ぶことがある。）は、例えば、

無置換の炭素数1～50のアルキル基、

無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)、

—O—(R₉₀₄)、

—S—(R₉₀₅)、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、及び

無置換の環形成原子数5～50の複素環基からなる群から選択される基等であり、

ここで、R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

R₉₀₁が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₂が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₂は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₃が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₃は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₄が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₄は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₅が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₅は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₆が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₆は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₇が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₇は、互いに同一であるか又は異なる。

[0113] 一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、

炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、及び

環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基からなる群から選択される基である。

[0114] 一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、

炭素数 1 ～ 18 のアルキル基、

環形成炭素数 6 ～ 18 のアリール基、及び

環形成原子数 5 ～ 18 の複素環基からなる群から選択される基である。

[0115] 上記任意の置換基の各基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基の具体例である。

[0116] 本明細書において別途記載のない限り、隣接する任意の置換基同士で、「飽和の環」、又は「不飽和の環」を形成してもよく、好ましくは、置換もしくは無置換の飽和の 5 員環、置換もしくは無置換の飽和の 6 員環、置換もしくは無置換の不飽和の 5 員環、又は置換もしくは無置換の不飽和の 6 員環を形成し、より好ましくは、ベンゼン環を形成する。

本明細書において別途記載のない限り、任意の置換基は、さらに置換基を有してもよい。任意の置換基がさらに有する置換基としては、上記任意の置換基と同様である。

[0117] 本明細書において、「A A ～ B B」を用いて表される数値範囲は、「A A ～ B B」の前に記載される数値 A A を下限値とし、「A A ～ B B」の後に記載される数値 B B を上限値として含む範囲を意味する。

[0118] 本明細書において、「 $A \geq B$ 」で表される数式は、A の値と B の値とが等しいか、又は A の値が B の値よりも大きいことを意味する。

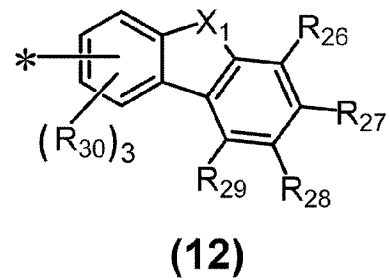
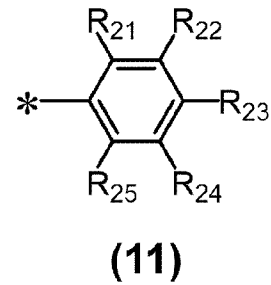
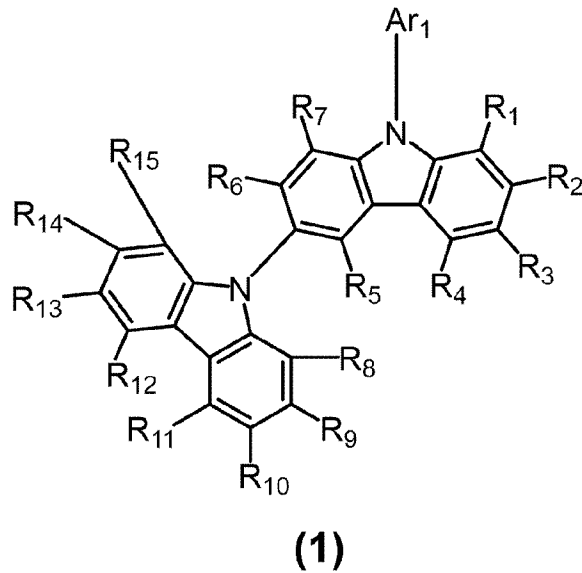
本明細書において、「 $A \leq B$ 」で表される数式は、A の値と B の値とが等しいか、又は A の値が B の値よりも小さいことを意味する。

[0119] [第一実施形態]

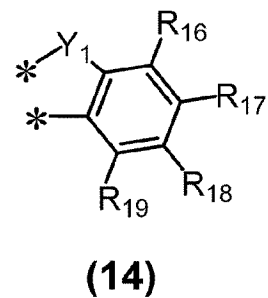
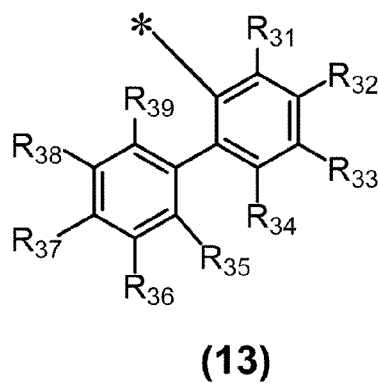
<化合物>

本実施形態に係る化合物は、下記一般式（１）で表される化合物である。

[0120] [化24]



[0121] [化25]



[0122] （前記一般式（１）において、

$A r_1$ は、前記一般式（１１）又は（１２）で表される基であり、

$R_1 \sim R_4$ のうち隣接する２つ以上からなる組、並びに R_6 及び R_7 の組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_8 \sim R_{11}$ のうち隣接する2つ以上からなる組、並びに $R_{12} \sim R_{15}$ のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式(1)で表される化合物は、(条件i)又は(条件ii)を満たす。

(条件i) : $R_1 \sim R_4$ のうち隣接する2つ以上からなる組、 R_6 及び R_7 の組、 $R_8 \sim R_{11}$ のうち隣接する2つ以上からなる組、並びに $R_{12} \sim R_{15}$ のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合する場合、形成する前記置換もしくは無置換の単環及び前記置換もしくは無置換の縮合環は、それぞれ独立に、

前記一般式(14)で表される環であるか、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の脂肪族炭化水素環であり、

、

R_5 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_1 \sim R_4$ 及び $R_6 \sim R_{15}$ は、それぞれ独立に、

、

水素原子、

前記一般式(13)で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基であり、

、

前記一般式(14)において、

Y_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、

$R_{16} \sim R_{19}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

前記一般式(13)で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、

— Si (R₄₁) (R₄₂) (R₄₃) で表される基、又は

— Ge (R₄₄) (R₄₅) (R₄₆) で表される基であり、

2つの*は、前記一般式(1)中のカルバゾール環との結合位置を示し、

ただし、R₁～R₁₉のうち、少なくとも1つが前記一般式(13)で表される基であり、前記一般式(13)で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式(13)で表される基は互いに同一であるか、又は異なり、前記一般式(14)で表される環が複数存在する場合、複数の前記一般式(14)で表される環は互いに同一であるか、又は異なる。

(条件 i i) : R₁～R₄のうち隣接する2つ以上からなる組、R₆及びR₇の組、R₈～R₁₁のうち隣接する2つ以上からなる組、並びにR₁₂～R₁₅のうち隣接する2つ以上からなる組が、いずれも、互いに結合しない場合、

R₁～R₁₅は、それぞれ独立に、

水素原子、

前記一般式(13)で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基であり

、

ただし、R₁～R₁₅のうち、少なくとも1つが前記一般式(13)で表される基であり、前記一般式(13)で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式(13)で表される基は互いに同一であるか、又は異なる。)

(前記一般式(11)及び(12)において、

R₂₁～R₂₅のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 の脂肪族炭化水素環を形成するか、又は

互いに結合せず、

R₂₆～R₂₉のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 の脂肪族炭化水素環を形成するか、又は

互いに結合せず、

複数の R_{30} のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 の脂肪族炭化水素環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 の脂肪族炭化水素環を形成しない $R_{21} \sim R_{30}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、

$-Si(R_{41})(R_{42})(R_{43})$ で表される基、又は

$-Ge(R_{44})(R_{45})(R_{46})$ で表される基であり、

複数の R_{30} は、互いに同一であるか、または互いに異なり、

X_1 は、酸素原子、硫黄原子、 $C(R_{51})(R_{52})$ 、又は $Si(R_{53})(R_{54})$ であり、

R_{51} 及び R_{52} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

R_{53} 及び R_{54} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{51} \sim R_{54}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 60 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 60 の複素環基であり、

前記一般式 (11) 中の * は、前記一般式 (1) における A_{r1} が結合する窒素原子との結合位置である。

前記一般式 (12) 中の * は、前記一般式 (1) における A_{r1} が結合する窒素原子との結合位置を示す。)

(前記一般式 (13) において、

$R_{31} \sim R_{39}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、

$-Si(R_{41})(R_{42})(R_{43})$ で表される基、又は

$-Ge(R_{44})(R_{45})(R_{46})$ で表される基であり、

* は、結合位置である。)

(前記一般式 (1) で表される化合物において、

$R_{41} \sim R_{43}$ のうちの隣接する 2 つからなる組の 1 組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_{44} \sim R_{46}$ のうちの隣接する 2 つからなる組の 1 組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{41} \sim R_{46}$ 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 ～ 60 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 60 の複素環基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基である。
。)

[0123] 本実施形態に係る化合物（前記一般式（1）で表される化合物）は、ビスカルバゾール骨格の少なくともいずれかの位置に、オルトビフェニル基（前記一般式（13）で表される基）が導入された構造を有する。

このような構造により、本実施形態に係る化合物は、オルトビフェニル基が導入される前の化合物に比べて、ガラス転移温度（ T_g ）が上昇するため、当該化合物を発光層に含ませることで、膜（発光層）の熱的安定性が向上する。

また、本実施形態に係る化合物は、ビスカルバゾール骨格に対してオルトビフェニル基が導入された構造を有することで、化合物全体の立体的な嵩高さが上昇する。この立体的な嵩高さにより、当該化合物をホスト化合物として使用した場合に、ドーパント化合物との間に立体障害が生じ相互作用が抑制される。その結果、本発明形態に係る化合物によって、ドーパント化合物の発光に係るエネルギーの消失を低減することができ、有機EL素子を高効率で発光させることができる。

また、本実施形態に係る化合物は、ターフェニル基等が導入された化合物ほど、分子量が増加しないため、当該化合物を蒸着して発光層を形成する際に、蒸着温度の上昇を抑制することができ、当該化合物に掛かる熱的な負荷を低減させることができる。また、蒸着温度の上昇を抑制できることから、当該化合物の蒸着温度と分解温度との差異を広げることができ、その結果、蒸着時における化合物の耐熱マージンを向上させることができる。

本実施形態に係る化合物の一態様によれば、ホスト化合物として用いた場合に、有機EL素子を高効率で発光させることができる。

本実施形態に係る化合物の一態様によれば、青色発光材料と共に発光層に含ませた場合に、有機EL素子を高効率で発光させることができる。

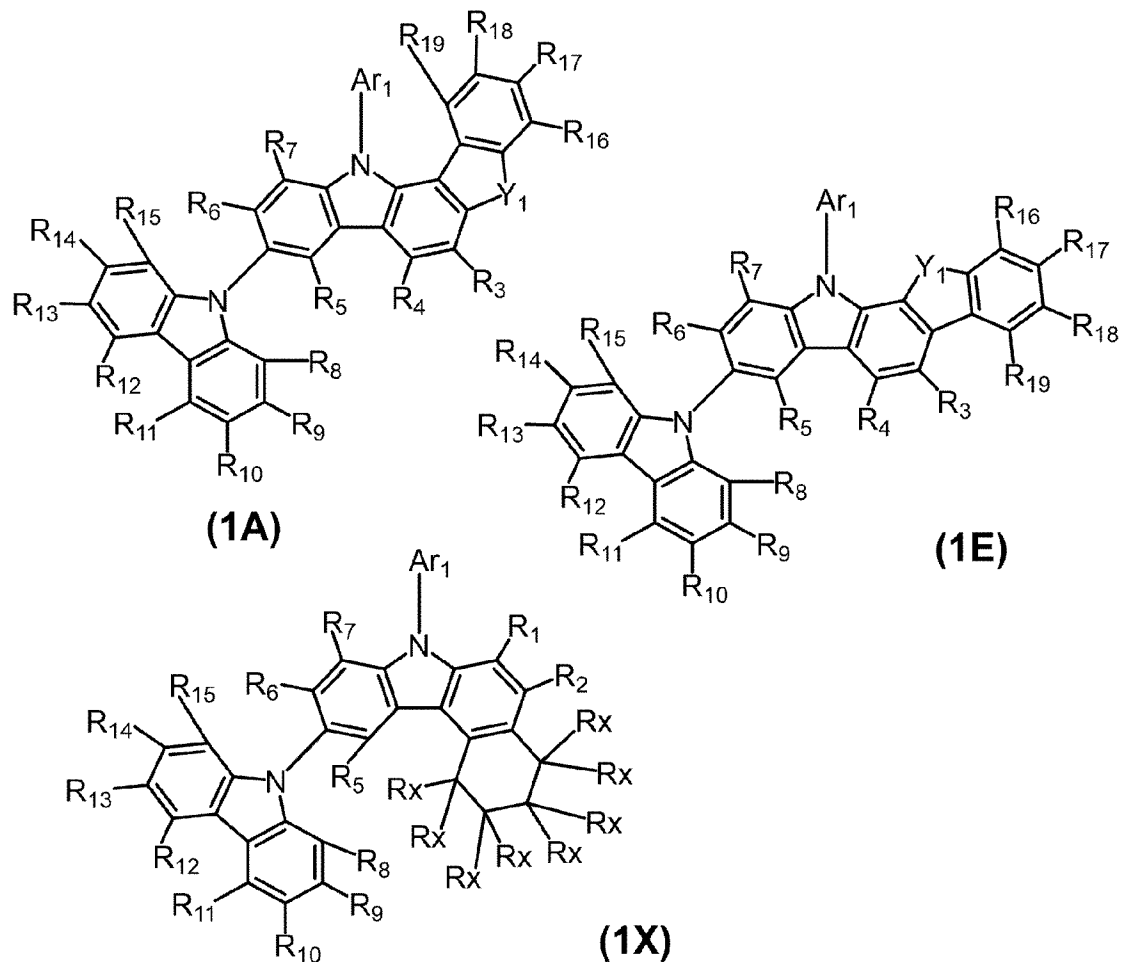
[0124] 本実施形態に係る化合物の一態様において、例えば、前記一般式(1)中、 R_1 及び R_2 の組が互いに結合して、「置換もしくは無置換の縮合環」を形成し、その形成された縮合環が前記一般式(14)で表される環である場合、本実施形態に係る化合物は、下記一般式(1A)又は(1E)で表される。下記一般式(1A)中、 $R_3 \sim R_{19}$ のうち、少なくとも1つが前記一般式(13)で表される基である。下記一般式(1E)中、 $R_3 \sim R_{19}$ のうち、少なくとも1つが前記一般式(13)で表される基である。

本実施形態に係る化合物の一態様において、例えば、前記一般式(1)中、 R_3 及び R_4 の組が互いに結合して、「置換もしくは無置換の単環」を形成し、その形成された環が「置換もしくは無置換の環形成炭素数6の脂肪族炭化水素環」である場合、本実施形態に係る化合物は、下記一般式(1X)で表される。下記一般式(1X)中、 R_x は、前記一般式(13)で表される基ではなく、 $R_1 \sim R_2$ 及び $R_5 \sim R_{15}$ のうち、少なくとも1つが前記一般式(13)で表される基である。

本実施形態に係る化合物の一態様において、例えば、前記一般式(1)中、 R_3 及び R_4 の組が互いに結合して、「置換もしくは無置換の縮合環」を形成し、その形成された縮合環が「置換もしくは無置換の環形成炭素数20の脂肪族炭化水素環」である場合、本実施形態に係る化合物は、下記一般式(1X)中、「置換もしくは無置換の環形成炭素数6の脂肪族炭化水素環」を「置換もしくは無置換の環形成炭素数20の脂肪族炭化水素環」で置き換えた化合物である。当該脂肪族炭化水素環が置換基を有する場合、当該置換基はいずれも前記一般式(13)で表される基ではなく、 $R_1 \sim R_2$ 及び $R_5 \sim R_{15}$ のうち、少なくとも1つが前記一般式(13)で表される基である。

[0125]

[化26]



[0126] (前記一般式 (1A) 及び (1E) において、

Ar₁ 及び R₃ ~ R₁₅ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1) における Ar₁ 及び R₃ ~ R₁₅ と同義であり、Y₁ 及び R₁₆ ~ R₁₉ は、それぞれ独立に、前記一般式 (14) における Y₁ 及び R₁₆ ~ R₁₉ と同義である。)

(前記一般式 (1X) において、

Ar₁、R₁ ~ R₂ 及び R₅ ~ R₁₅ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1) における Ar₁、R₁ ~ R₂ 及び R₅ ~ R₁₅ と同義であり、

複数の Rx のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_x は、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、

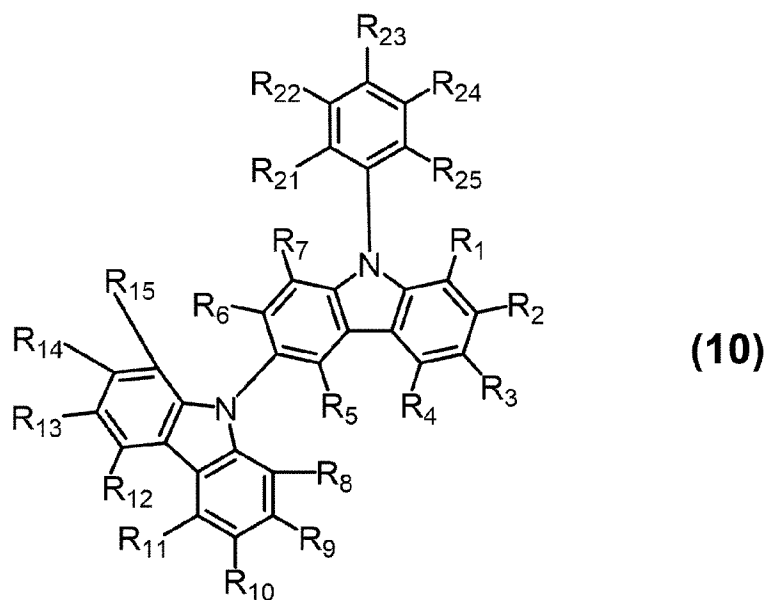
—Si(R_{41})(R_{42})(R_{43}) で表される基、又は

—Ge(R_{44})(R_{45})(R_{46}) で表される基であり、

複数の R_x は互いに同一であるか又は異なる。))

[0127] 本実施形態に係る化合物（前記一般式（1）で表される化合物）の一態様は、下記一般式（10）で表される化合物である。

[0128] [化27]



[0129] （前記一般式（10）において、 $R_1 \sim R_{15}$ は、それぞれ独立に、前記一般式（1）における $R_1 \sim R_{15}$ と同義であり、 $R_{21} \sim R_{25}$ は、それぞれ独立に、前記一般式（11）における $R_{21} \sim R_{25}$ と同義である。）

[0130] 本実施形態に係る化合物の一態様において、 $R_1 \sim R_4$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組、 R_6 及び R_7 の組、 $R_8 \sim R_{11}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組、並びに $R_{12} \sim R_{15}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、または互いに結

合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する。

この態様の場合、 $R_1 \sim R_{19}$ のうち、少なくとも1つが前記一般式(13)で表される基である。 $R_1 \sim R_{19}$ のうち、1つが前記一般式(13)で表される基であることが好ましく、 $R_1 \sim R_4$ 、 $R_6 \sim R_{11}$ 及び $R_{16} \sim R_{18}$ のうち、1つが前記一般式(13)で表される基であることがより好ましく、 R_{10} 、 R_{11} 、 R_{16} 又は R_{18} が前記一般式(13)で表される基であることがさらに好ましく、 R_{10} 又は R_{11} が前記一般式(13)で表される基であることがさらに好ましい。

[0131] 本実施形態に係る化合物の一態様において、 $R_1 \sim R_4$ のうち隣接する2つ以上からなる組、 R_6 及び R_7 の組、 $R_8 \sim R_{11}$ のうち隣接する2つ以上からなる組、並びに $R_{12} \sim R_{15}$ のうち隣接する2つ以上からなる組のいずれも、互いに結合しない。

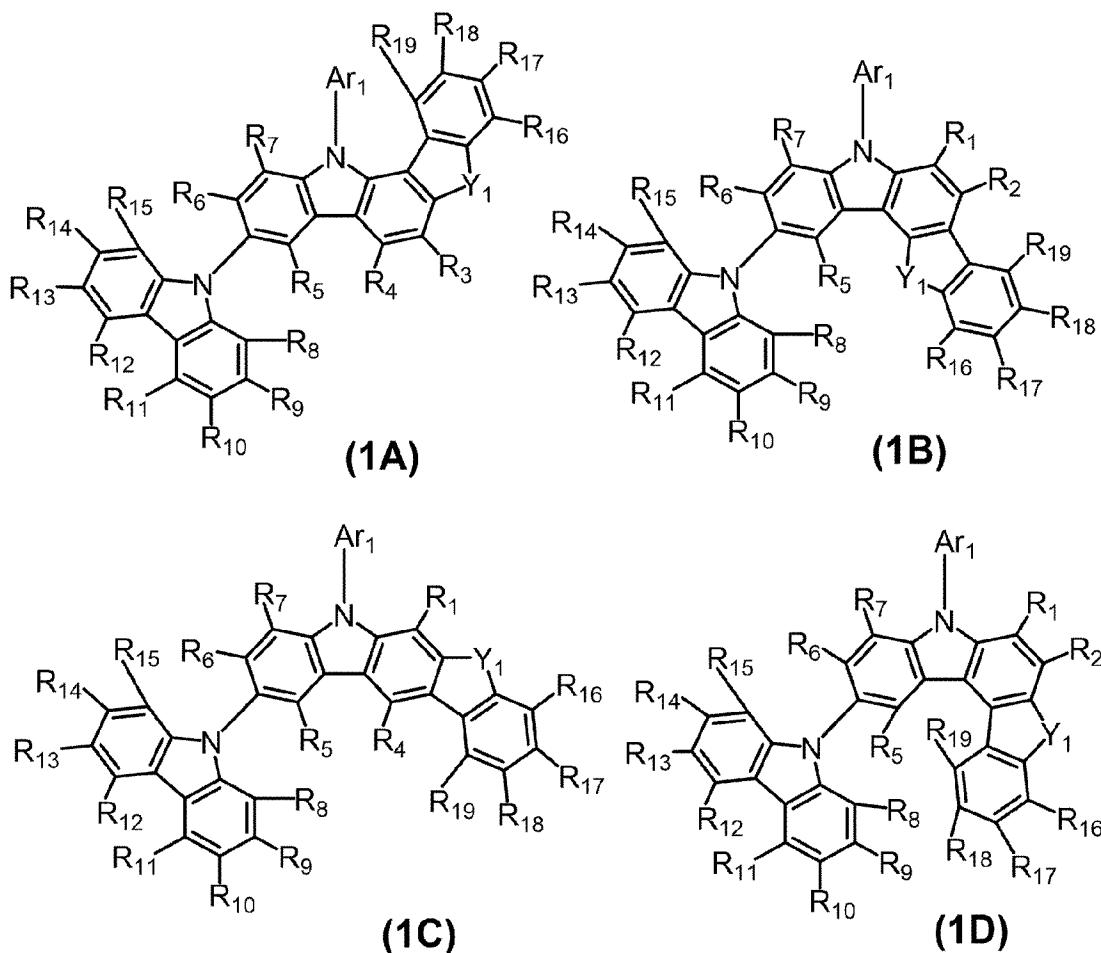
この態様の場合、 $R_1 \sim R_{15}$ のうち、少なくとも1つが前記一般式(13)で表される基である。 $R_1 \sim R_{15}$ のうち、1つが前記一般式(13)で表される基であることが好ましく、 $R_1 \sim R_4$ 及び $R_6 \sim R_{11}$ のうち、1つが前記一般式(13)で表される基であることがより好ましく、 R_{10} 又は R_{11} が前記一般式(13)で表される基であることがさらに好ましい。

[0132] 本実施形態に係る化合物(前記一般式(1)で表される化合物)の一態様は、下記一般式(1A)、(1B)、(1C)又は(1D)で表される化合物である。

下記一般式(1A)で表される化合物は、前述の一般式(1A)で表される化合物と同義である。

[0133]

[化28]



[0134] (前記一般式 (1A)、(1B)、(1C) 及び (1D) において、

Ar_1 は、前記一般式 (1) における Ar_1 と同義であり、

$R_1 \sim R_{15}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1) における $R_1 \sim R_{15}$ と同義であり、

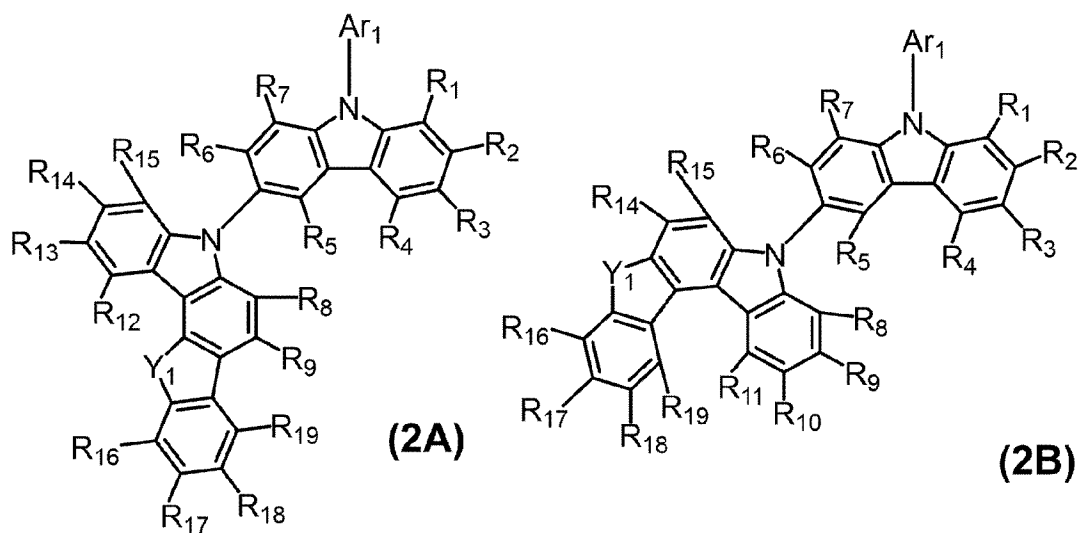
Y_1 及び $R_{16} \sim R_{19}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (14) における Y_1 及び $R_{16} \sim R_{19}$ と同義である。)

[0135] 前記一般式 (1A)、(1B)、(1C) 及び (1D) において、 $R_1 \sim R_{19}$ のうち、1つが前記一般式 (13) で表される基であることが好ましく、 $R_1 \sim R_4$ 、 $R_6 \sim R_{11}$ 及び $R_{16} \sim R_{18}$ のうち、1つが前記一般式 (13) で表される基であることがより好ましく、 R_{10} 、 R_{11} 、 R_{16} 又は R_{18} が前記一般式 (13) で表される基であることがさらに好ましく、 R_{10} 又は R_{11} が前

記一般式（１３）で表される基であることがさらに好ましい。

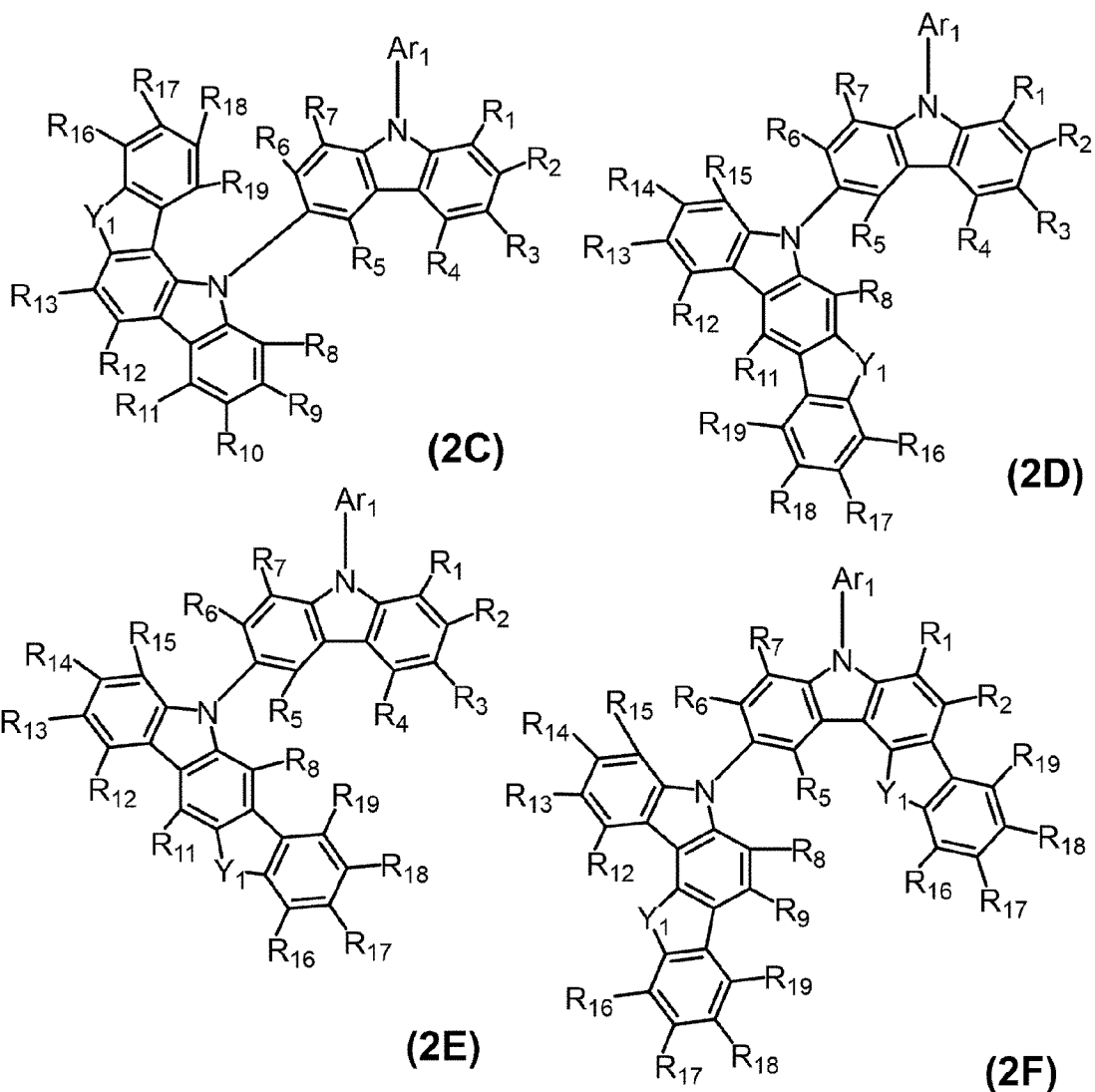
[0136] 本実施形態に係る化合物（前記一般式（１）で表される化合物）の一態様は、下記一般式（２Ａ）、（２Ｂ）、（２Ｃ）、（２Ｄ）、（２Ｅ）及び（２Ｆ）のいずれかで表される化合物である。

[0137] [化29]



[0138]

[化30]



[0139] (前記一般式 (2A)、(2B)、(2C)、(2D)、(2E) 及び (2F) において、 Ar_1 は、前記一般式 (1) における Ar_1 と同義であり、 $R_1 \sim R_{15}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1) における $R_1 \sim R_{15}$ と同義であり、 Y_1 及び $R_{16} \sim R_{19}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (14) における Y_1 及び $R_{16} \sim R_{19}$ と同義である。

前記一般式 (2F) において、2つの Y_1 は互いに同一であるか又は異なり、2つの R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、2つの R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、2つの R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、2つの R_{19} は互いに同一であるか又は異なる。))

[0140] 前記一般式 (2A)、(2B)、(2C)、(2D)、(2E) 及び (2

F)において、 $R_1 \sim R_{19}$ のうち、1つが前記一般式(13)で表される基であることが好ましく、 $R_1 \sim R_4$ 、 $R_6 \sim R_{11}$ 及び $R_{16} \sim R_{18}$ のうち、1つが前記一般式(13)で表される基であることがより好ましく、 R_{10} 、 R_{11} 、 R_{16} 又は R_{18} が前記一般式(13)で表される基であることがさらに好ましく、 R_{10} 又は R_{11} が前記一般式(13)で表される基であることがさらに好ましい。

[0141] 本実施形態に係る化合物において、 $R_{31} \sim R_{39}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基であることが好ましく、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～12のシクロアルキル基、であることがより好ましく、水素原子であることがさらに好ましい。

本実施形態に係る化合物において、 $R_{31} \sim R_{39}$ のうち、少なくとも1つが重水素原子であってもよい。

[0142] 本実施形態に係る化合物において、 $R_{21} \sim R_{30}$ は、それぞれ独立に、水素原子、前記一般式(13)で表される基、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～12のシクロアルキル基、 $-Si(R_{41})(R_{42})(R_{43})$ で表される基、又は $-Ge(R_{44})(R_{45})(R_{46})$ で表される基であることが好ましい。

本実施形態に係る化合物において、 $R_{21} \sim R_{30}$ のうち、少なくとも1つが重水素原子であってもよい。

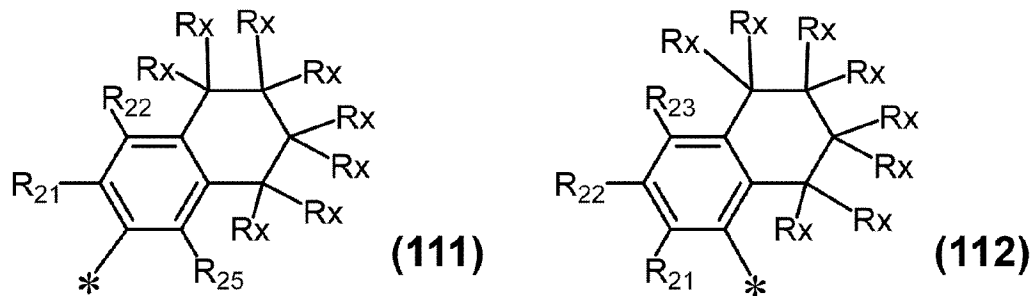
[0143] 本実施形態に係る化合物において、 $R_1 \sim R_{19}$ は、それぞれ独立に、水素原子、前記一般式(13)で表される基、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～12のシクロアルキル基、 $-Si(R_{41})(R_{42})(R_{43})$ で表される基、又は $-Ge(R_{44})(R_{45})(R_{46})$ で表される基であることが好ましい。

本実施形態に係る化合物において、 $R_1 \sim R_{19}$ のうち、少なくとも1つが重水素原子であってもよい。 $R_1 \sim R_{19}$ のうち、1つが前記一般式(13)で表

される基であることが好ましい。

- [0144] 本実施形態に係る化合物の一態様において、 $A r_1$ は、
置換もしくは無置換のフェニル基、
下記一般式（111）で表される基、
下記一般式（112）で表される基、
下記一般式（121）で表される基、
下記一般式（122）で表される基、
下記一般式（123）で表される基、
下記一般式（124）で表される基、
下記一般式（125）で表される基、
下記一般式（126）で表される基、
下記一般式（127）で表される基、又は
下記一般式（128）で表される基である。

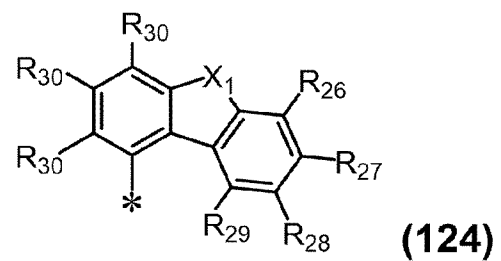
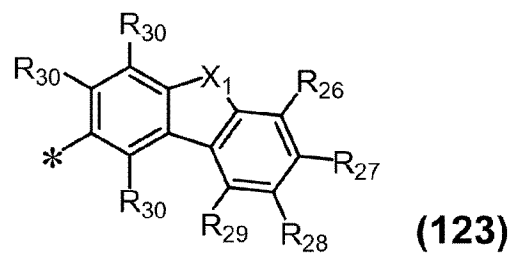
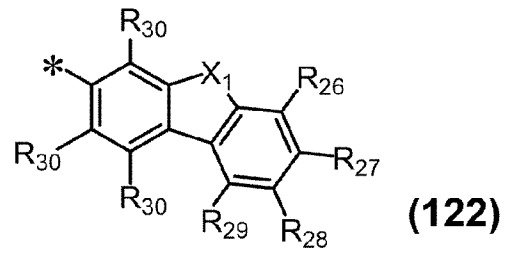
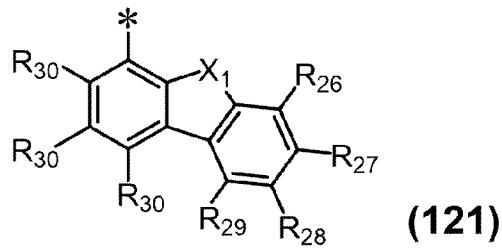
[0145] [化31]



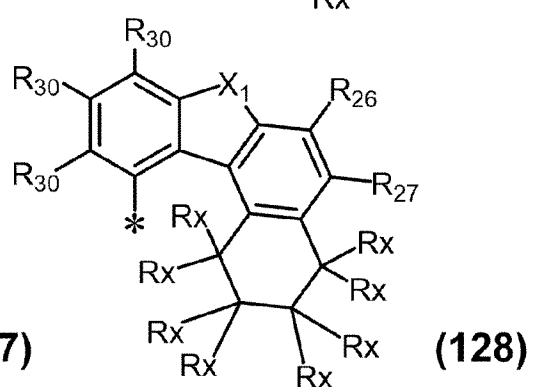
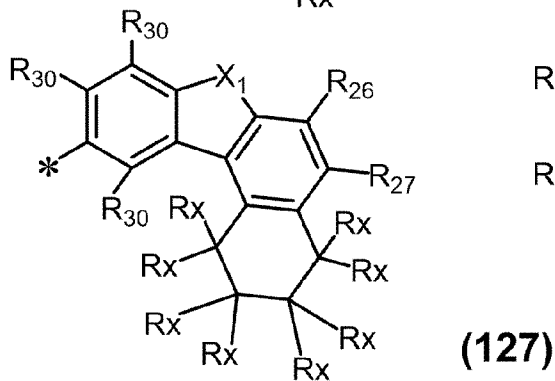
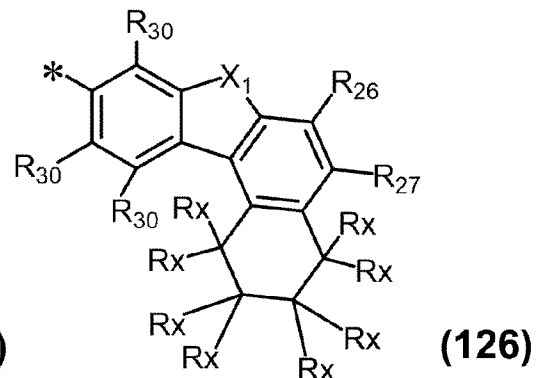
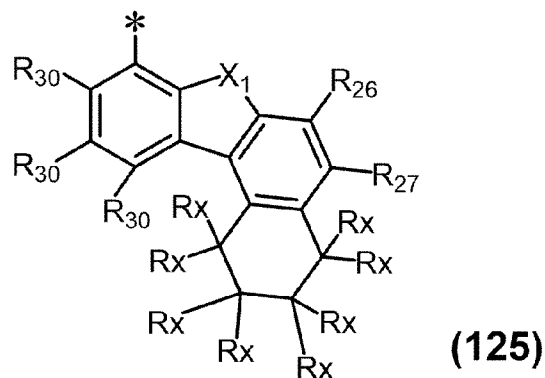
- [0146] （前記一般式（111）～（112）において、 $R_{21} \sim R_{23}$ 及び R_{25} は、それぞれ独立に、前記一般式（11）における $R_{21} \sim R_{23}$ 及び R_{25} と同義であり、
 R_x は、それぞれ独立に、前記一般式（1X）における R_x と同義であり、
*は、前記一般式（1）における $A r_1$ が結合する窒素原子との結合位置を示す。）

[0147]

[化32]



[0148] [化33]



[0149] (前記一般式(121)～(128)において、 X_1 は、前記一般式(12)における X_1 と同義であり、 $R_{26} \sim R_{30}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(12)における $R_{26} \sim R_{30}$ と同義であり、複数の R_{30} は互いに同一であるか又は異なり、

前記一般式 (125) ~ (128) において、 R_x は、それぞれ独立に、前記一般式 (1X) における R_x と同義であり、複数の R_x は互いに同一であるか又は異なる。

*は、前記一般式 (1) における A_{r1} が結合する窒素原子との結合位置を示す。)

[0150] 本実施形態に係る化合物の一態様において、 A_{r1} は、置換もしくは無置換のナフチレン基ではない。

本実施形態に係る化合物の一態様において、前記一般式 (11) 中、 R_{21} ~ R_{25} のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

本実施形態に係る化合物の一態様において、前記一般式 (12) 中、 R_{26} ~ R_{29} のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

本実施形態に係る化合物の一態様において、前記一般式 (12) 中、複数の R_{30} のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

[0151] 前記一般式 (121) ~ (128) において、 X_1 は、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましい。

前記一般式 (111) ~ (112) 及び (121) ~ (128) において、 R_{21} ~ R_{23} 、 R_{25} 、 R_{26} ~ R_{30} 及び R_x は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 12 のシクロアルキル基、 $-Si(R_{41})(R_{42})(R_{43})$ で表される基、又は $-Ge(R_{44})(R_{45})(R_{46})$ で表される基であることが好ましい。

[0152] 本実施形態に係る化合物において、 R_{51} 及び R_{52} からなる組が互い結合し

ないことも好ましく、 R_{53} 及び R_{54} からなる組が互い結合しないことも好ましい。

本実施形態に係る化合物において、 $R_{41} \sim R_{43}$ のうちの隣接する2つからなる組がいずれも互いに結合しないことも好ましく、 $R_{44} \sim R_{46}$ のうちの隣接する2つからなる組がいずれも互いに結合しないことも好ましい。

[0153] 本実施形態に係る化合物において、環形成炭素数3～20のシクロアルキル基としては、例えば、モノシクロアルカン（例えば、シクロペンタン、シクロヘキサン、シクロヘプタン、及びシクロオクタン等）、及びポリシクロアルカン（例えば、アダマンタン、ノルボルナン、イソボルナン、トリシクロデカン、及びテトラシクロデカン等）から1個の水素原子を除いた基が挙げられる。

環形成炭素数3～20のシクロアルキル基としては、アダマンタンから1個の水素原子を除いた基が好ましい。

[0154] 本実施形態に係る化合物において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、無置換の炭素数1～10のアルキル基、無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～12の複素環基であることが好ましい。

[0155] 本実施形態に係る化合物において、「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であることも好ましい。

[0156] 本明細書において、 $-Ge(R_{44})(R_{45})(R_{46})$ で表される基は、 R_{44} 、 R_{45} 及び R_{46} が置換基の場合、置換ゲルマニウム基である。

[0157] 本実施形態に係る化合物は、発光層に用いる材料であることが好ましい。
本実施形態に係る化合物は、ホスト材料であることが好ましい。

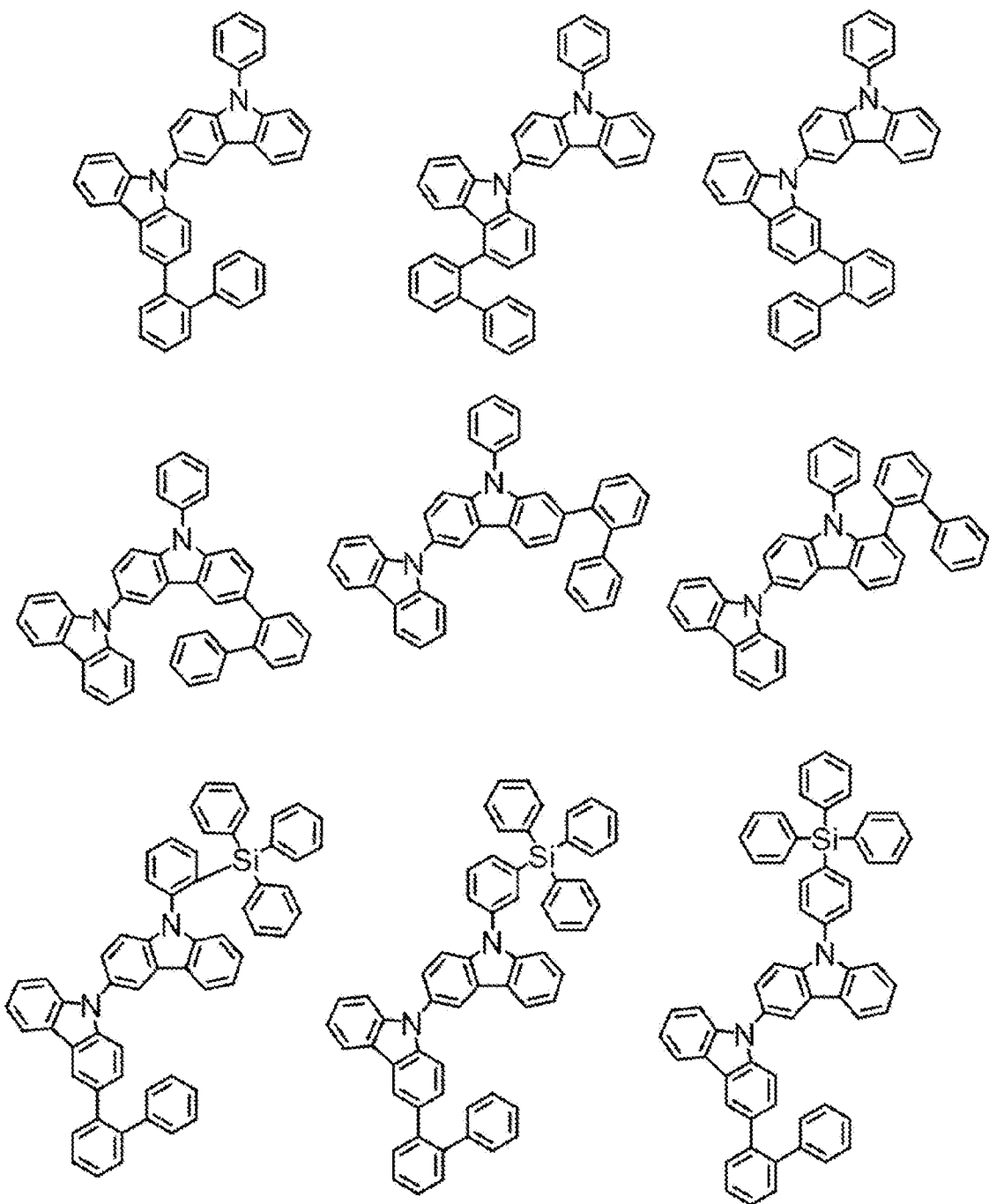
[0158] (本実施形態に係る化合物の製造方法)

本実施形態に係る化合物（一般式(1)で表される化合物）は、後述する実施例に記載の合成方法に従って、又は当該合成方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることで、製造できる。

[0159] (本実施形態に係る化合物の具体例)

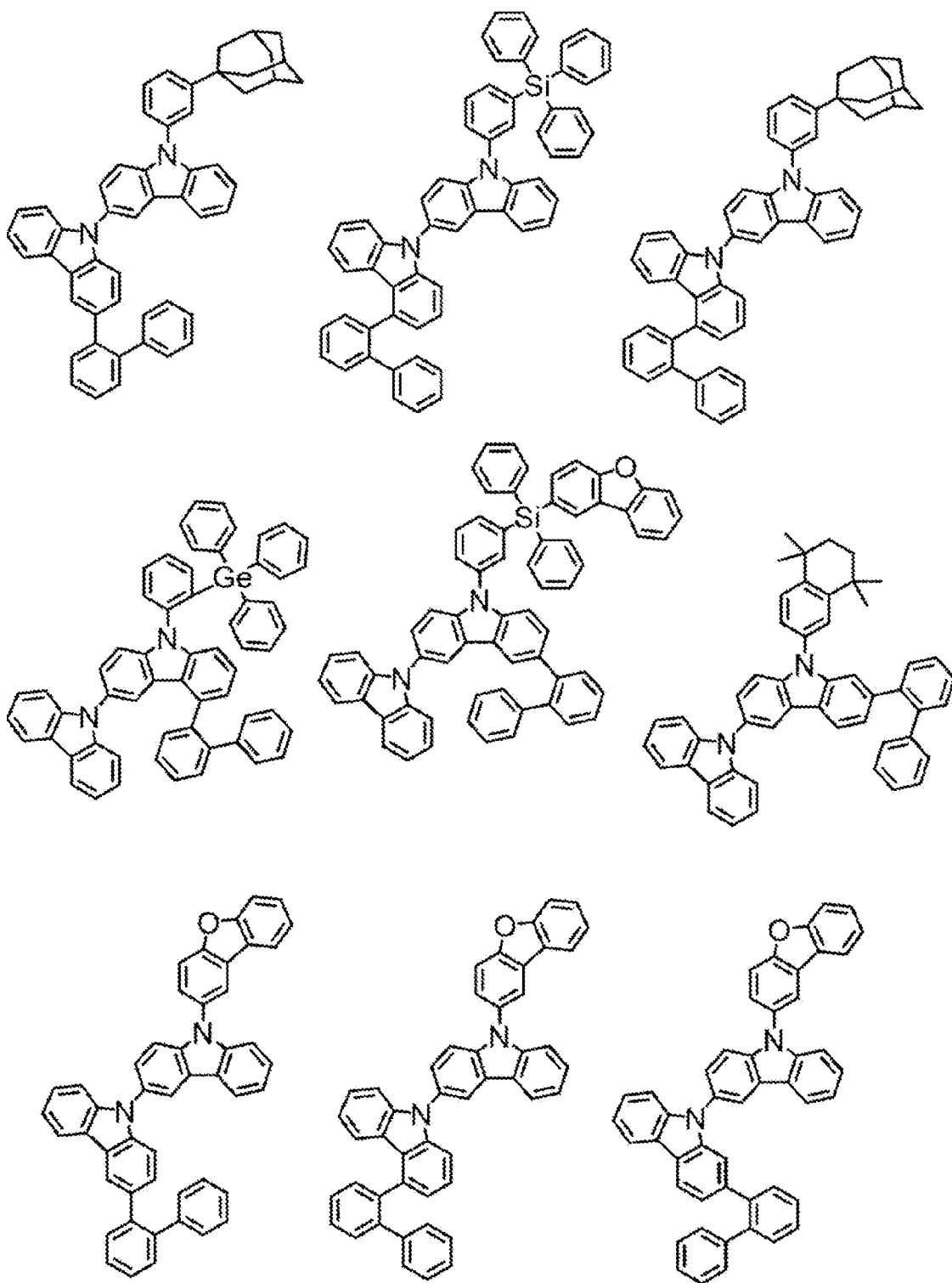
本実施形態に係る化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら具体例に限定されない。

[0160] [化34]



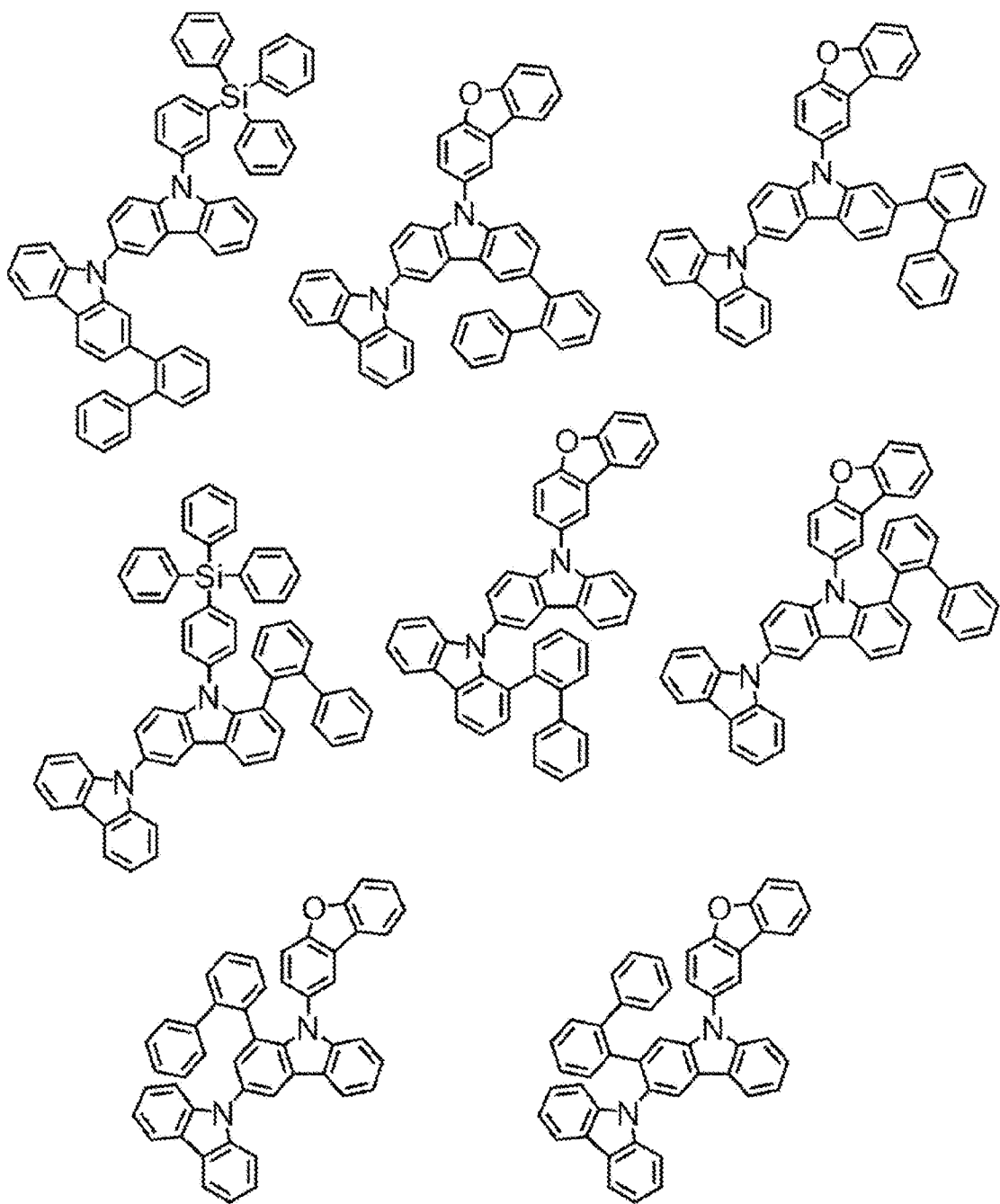
[0161]

[化36]



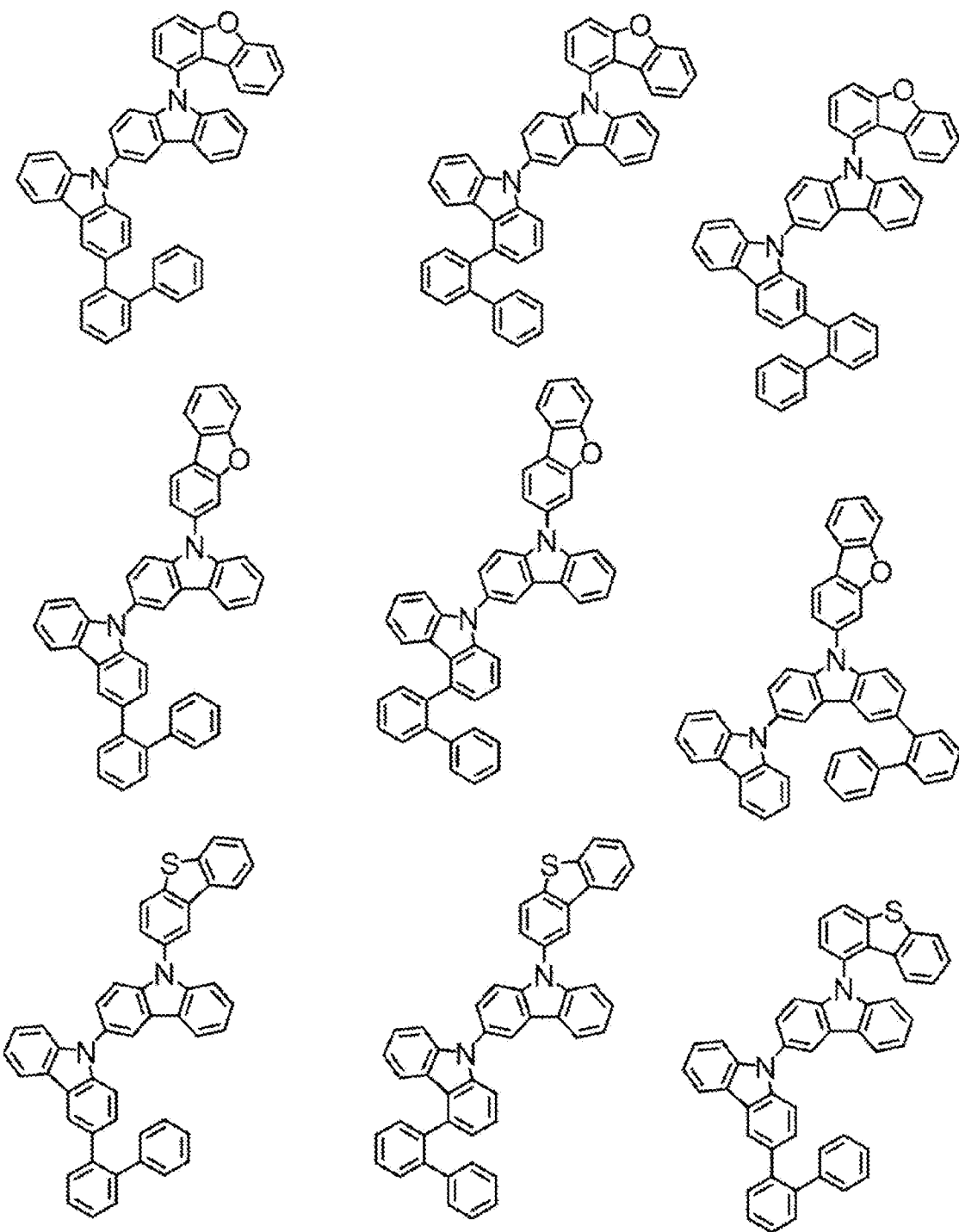
[0163]

[化37]



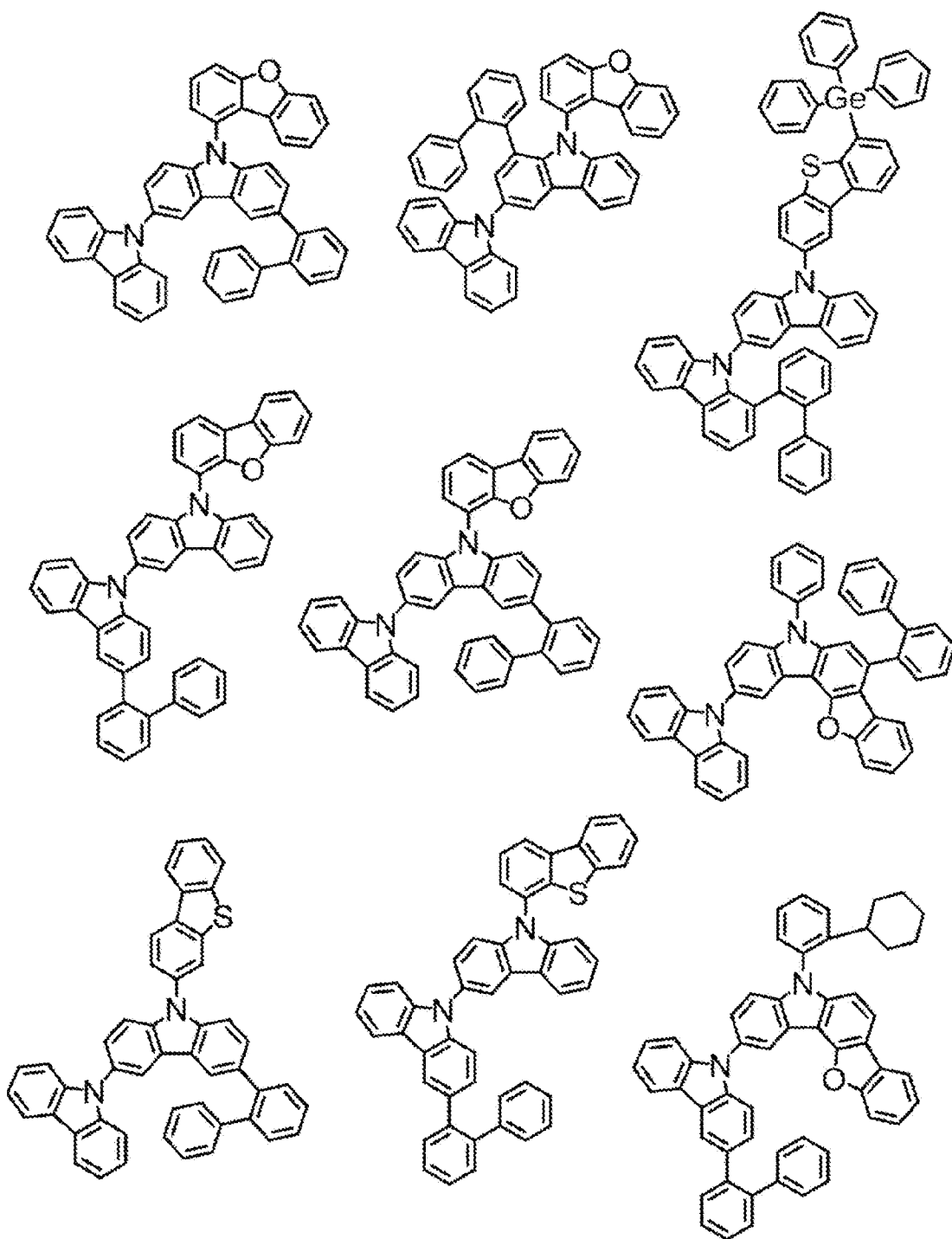
[0164]

[化38]



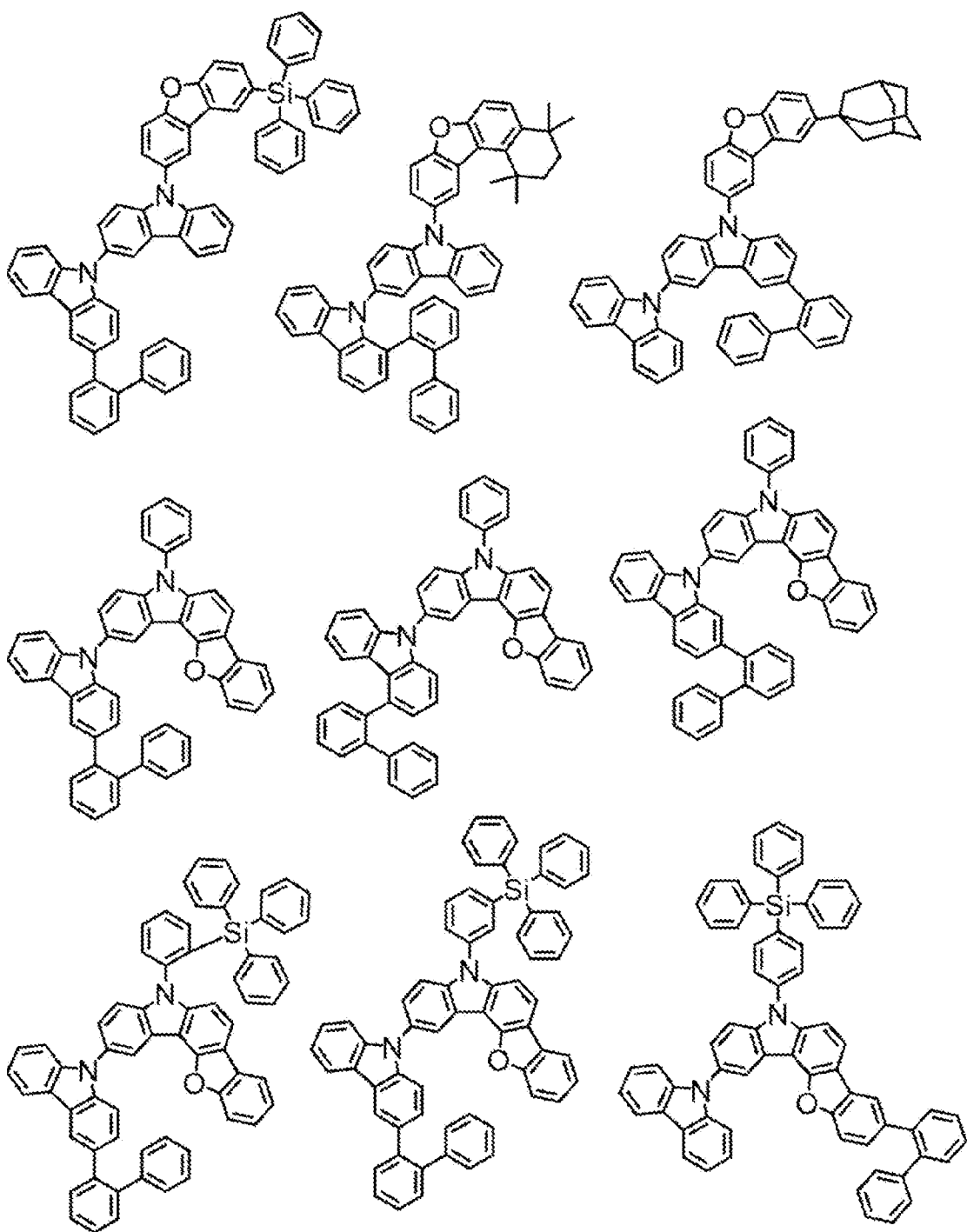
[0165]

[化39]



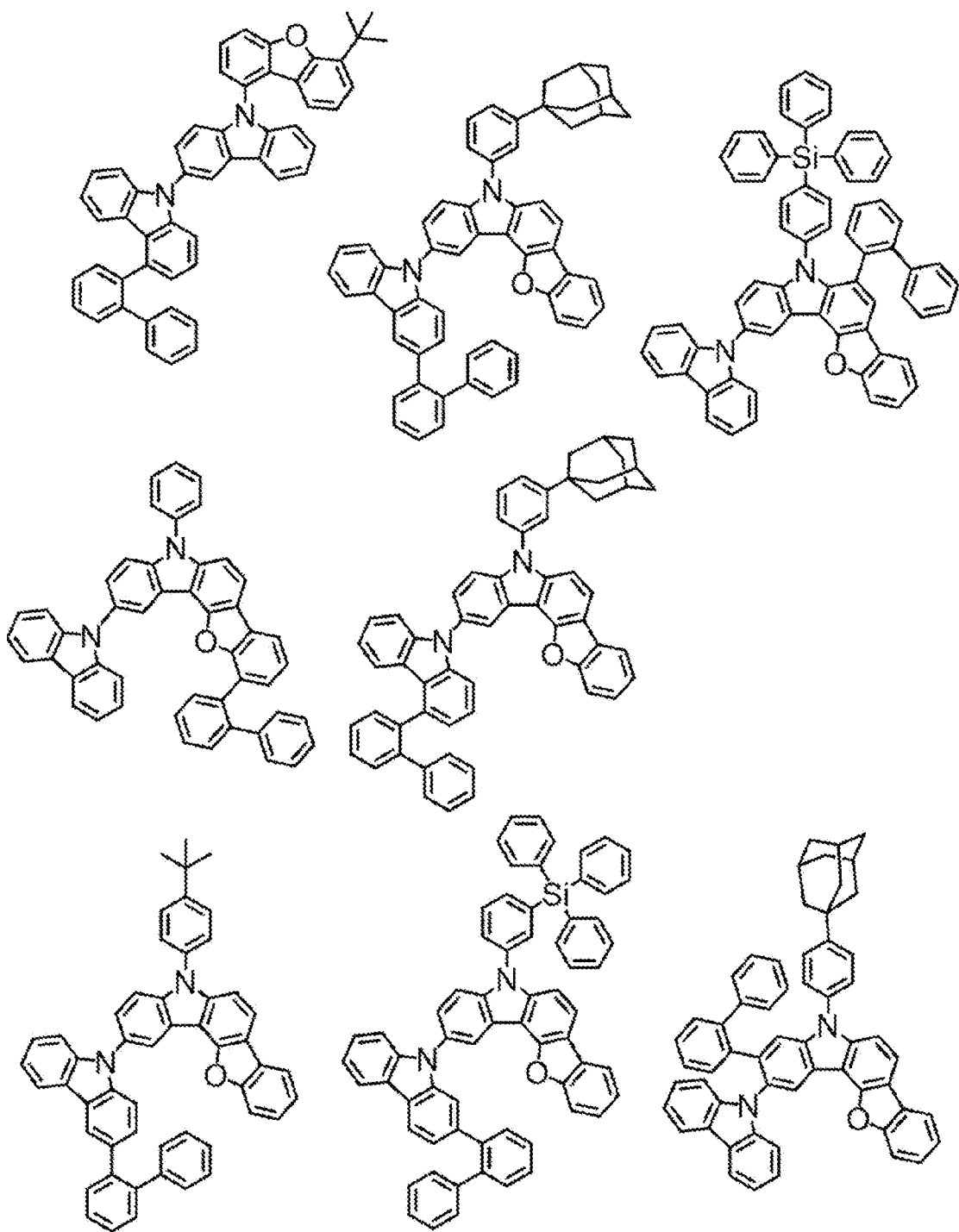
[0166]

[化40]



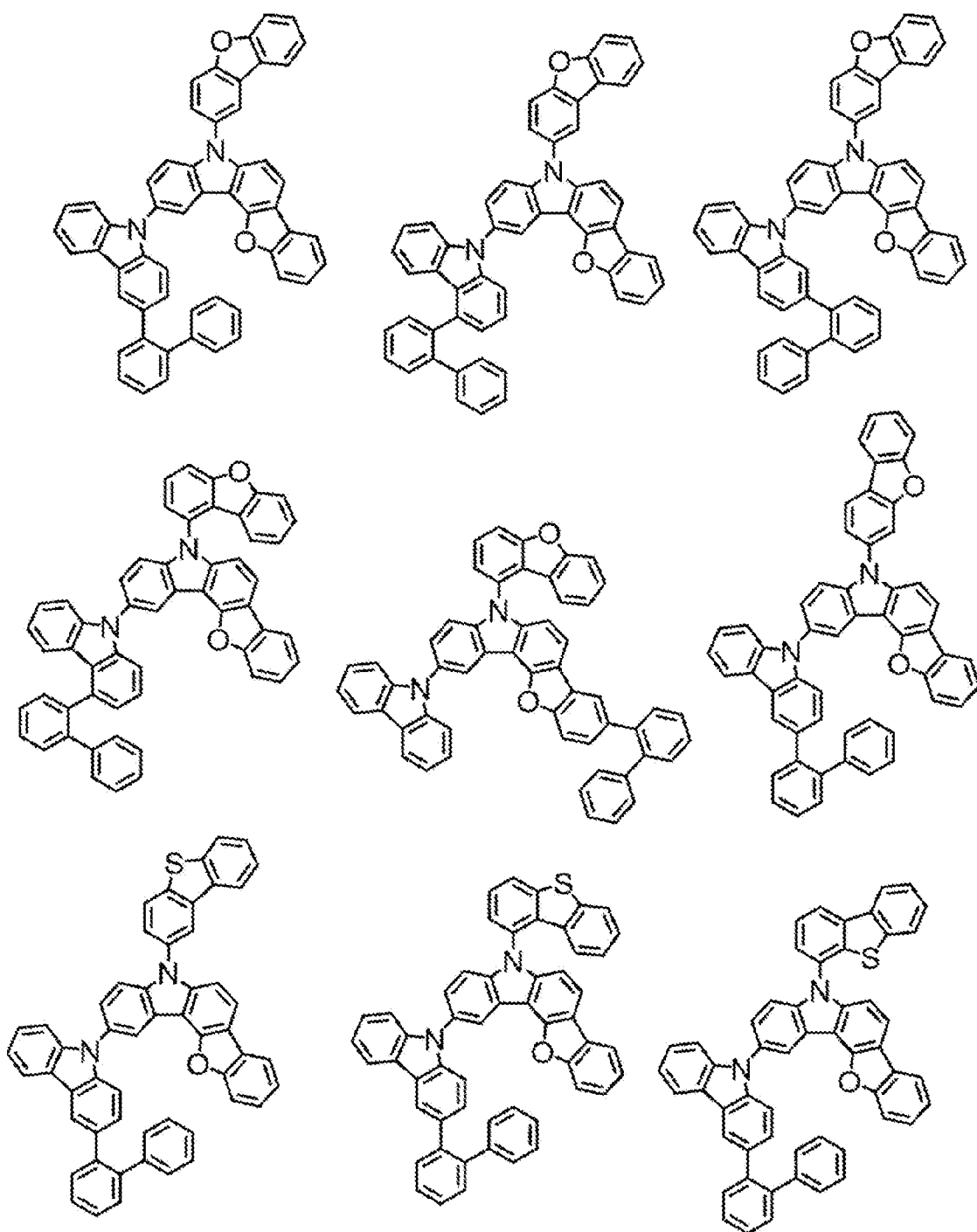
[0167]

[化41]



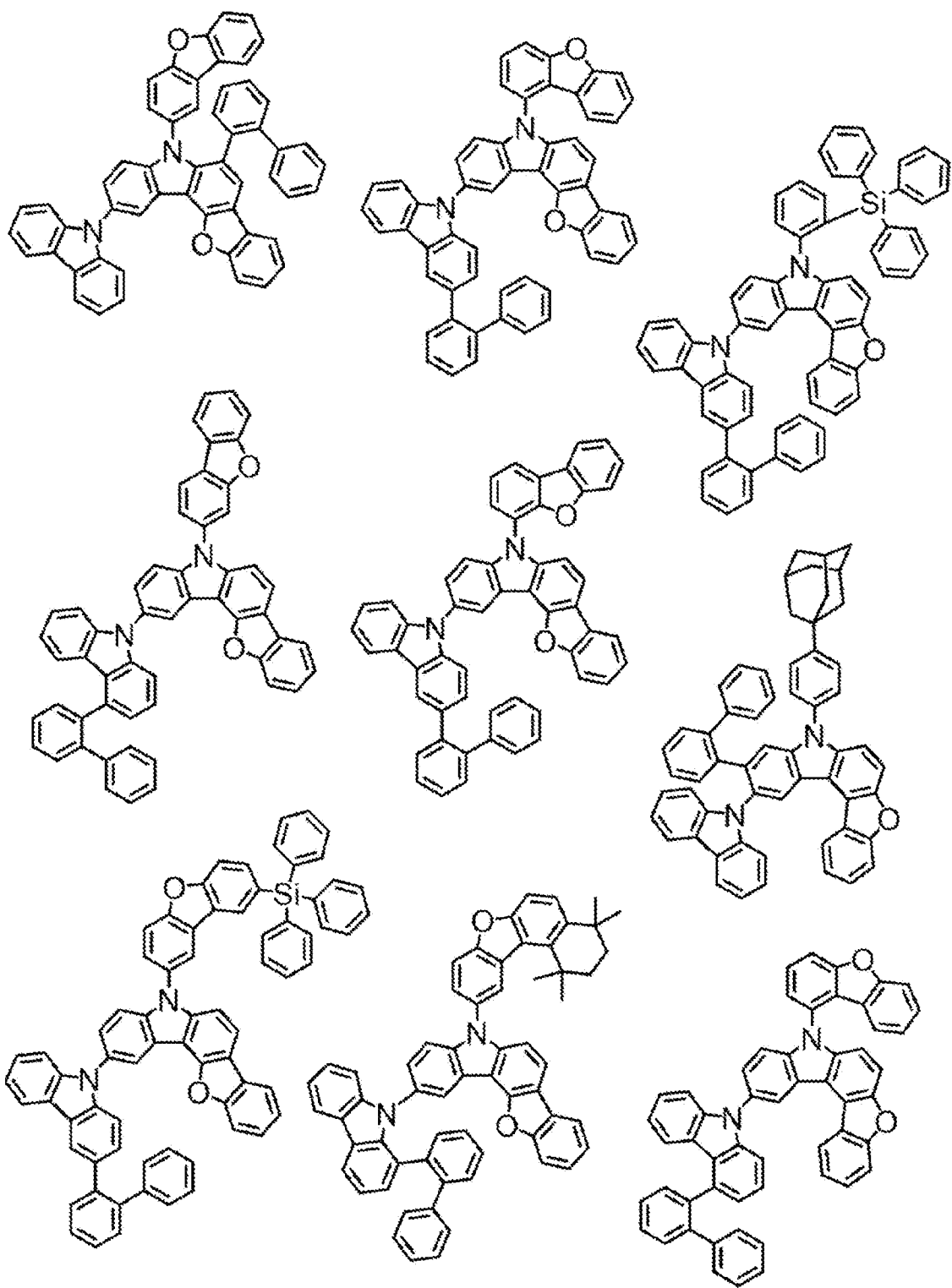
[0168]

[化42]



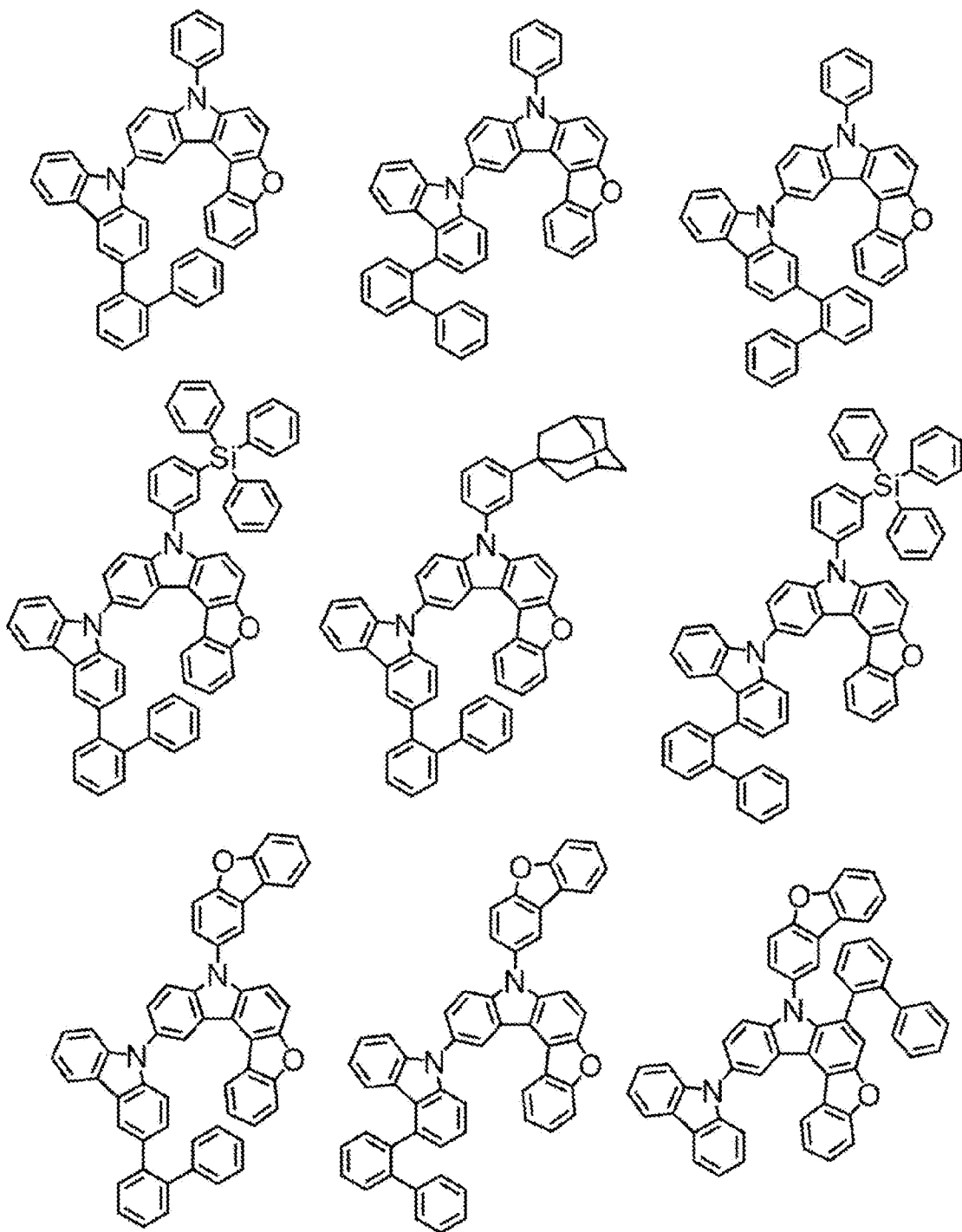
[0169]

[化43]



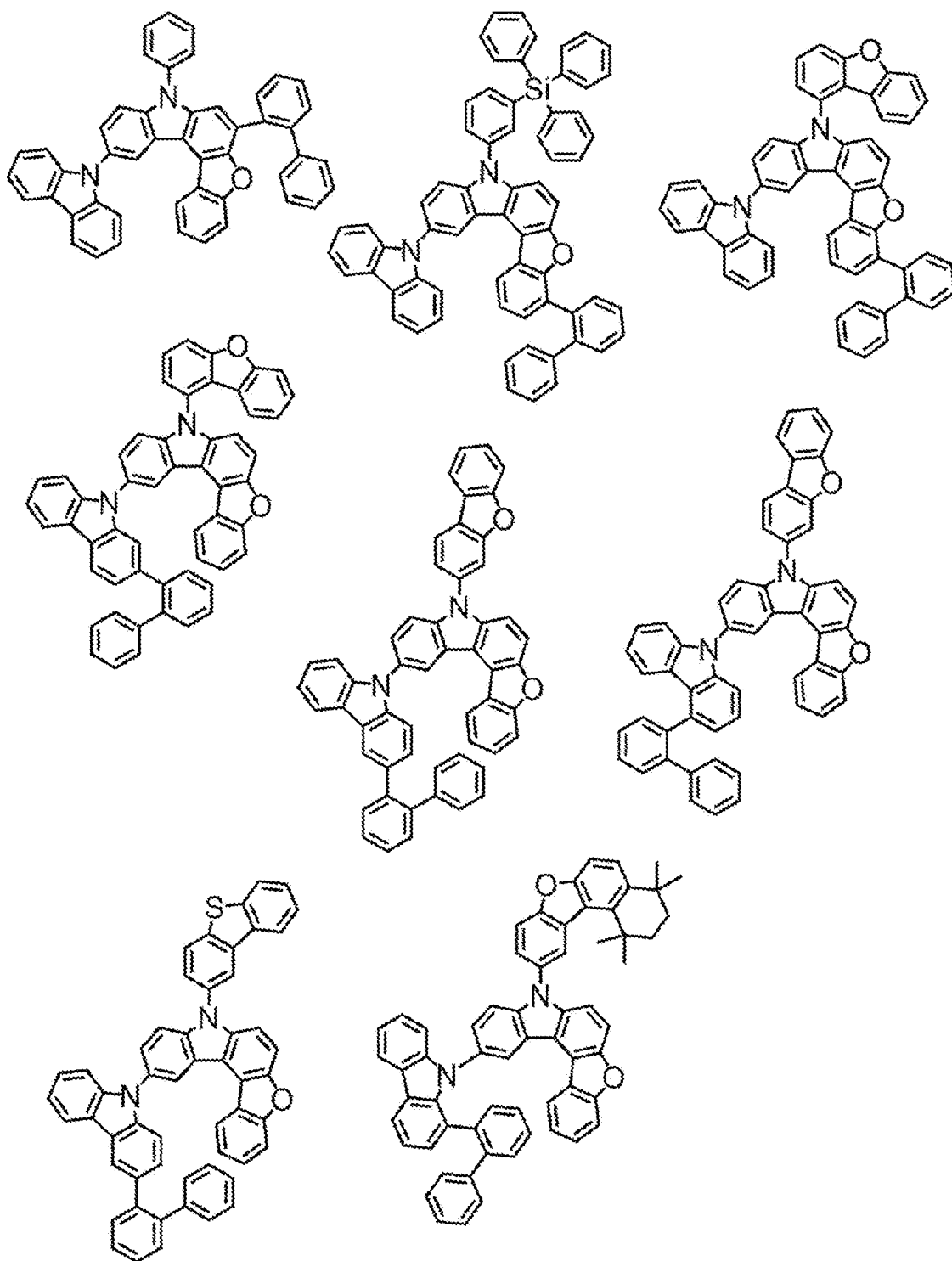
[0170]

[化44]



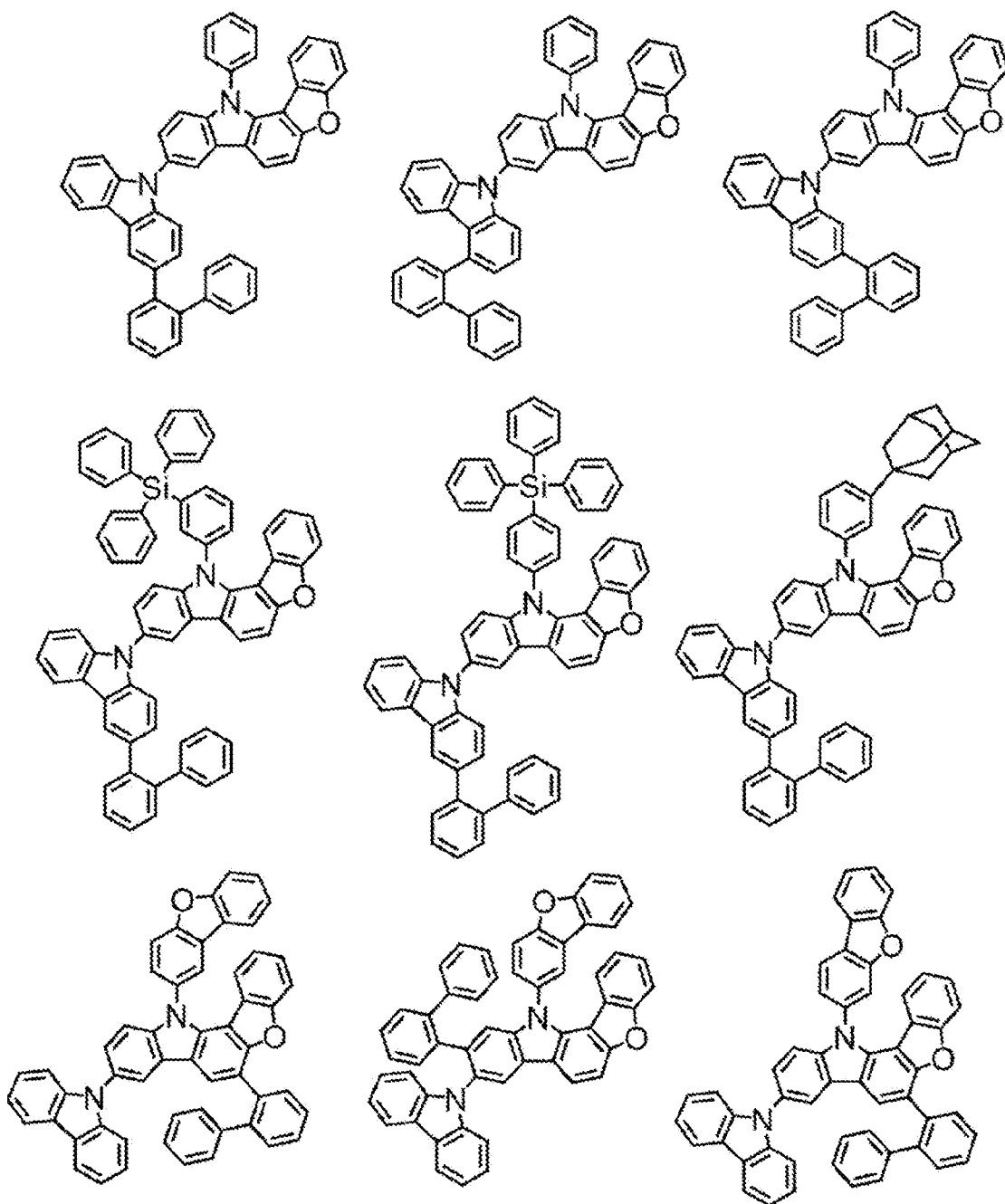
[0171]

[化45]



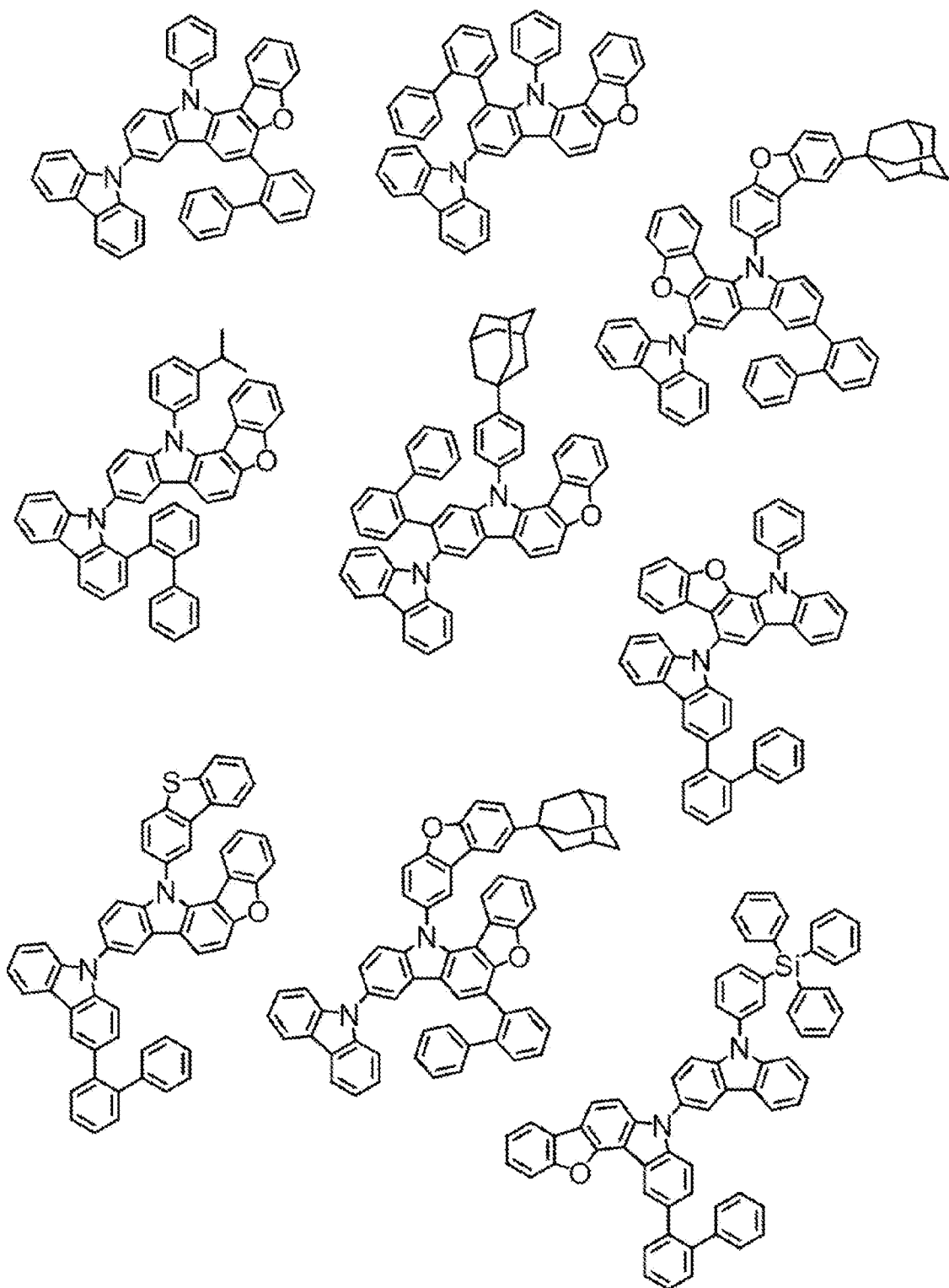
[0172]

[化46]



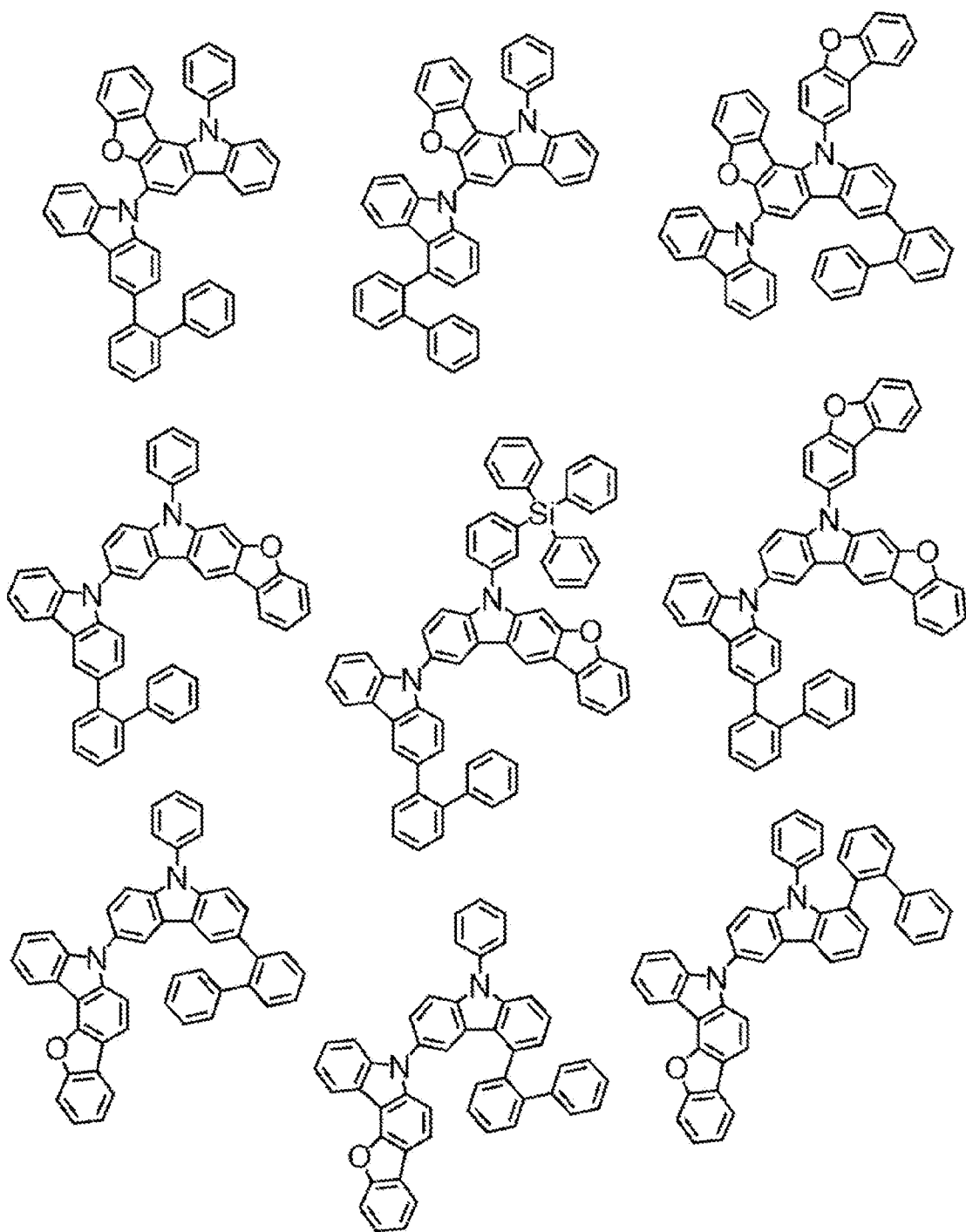
[0173]

[化47]



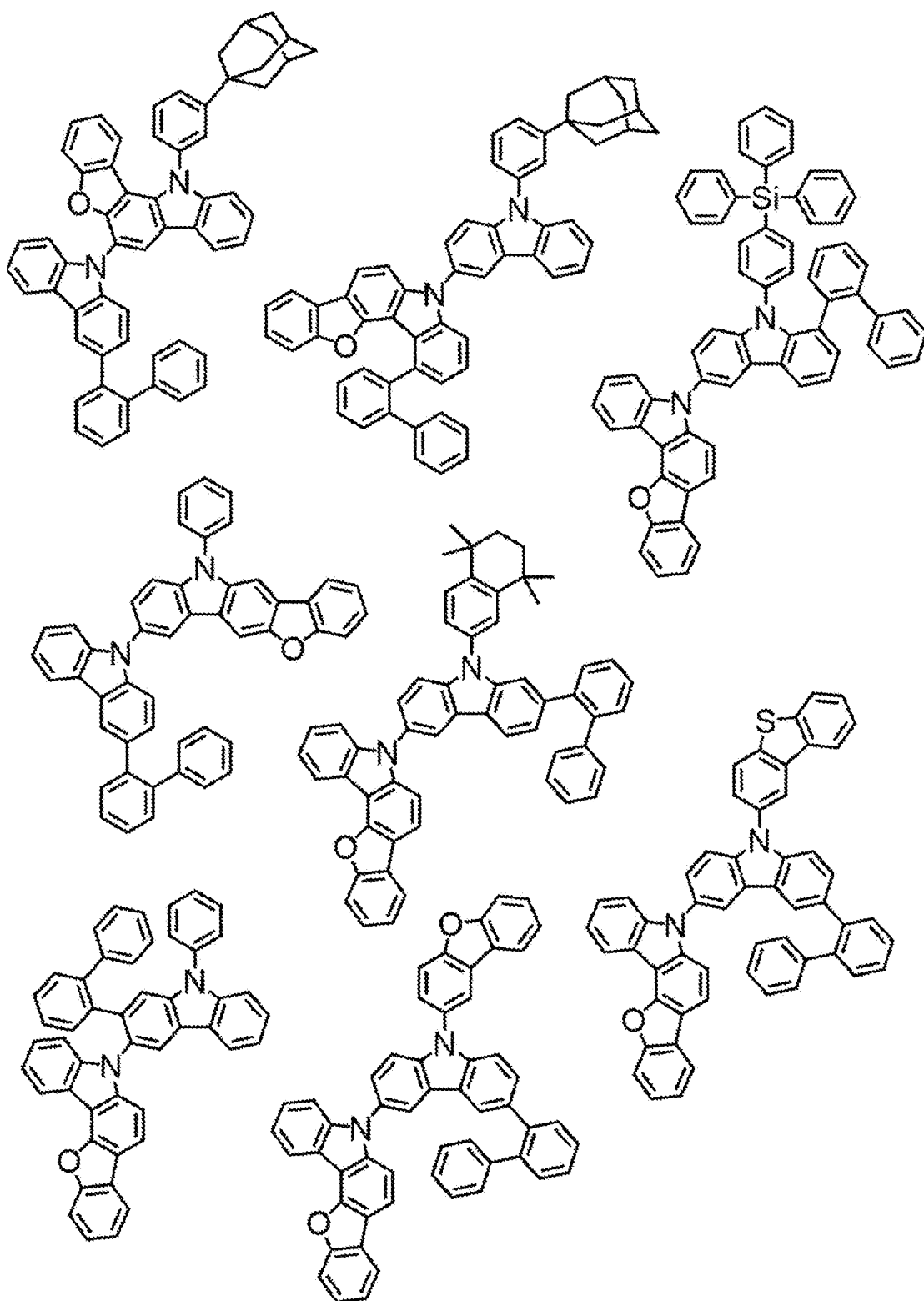
[0174]

[化48]



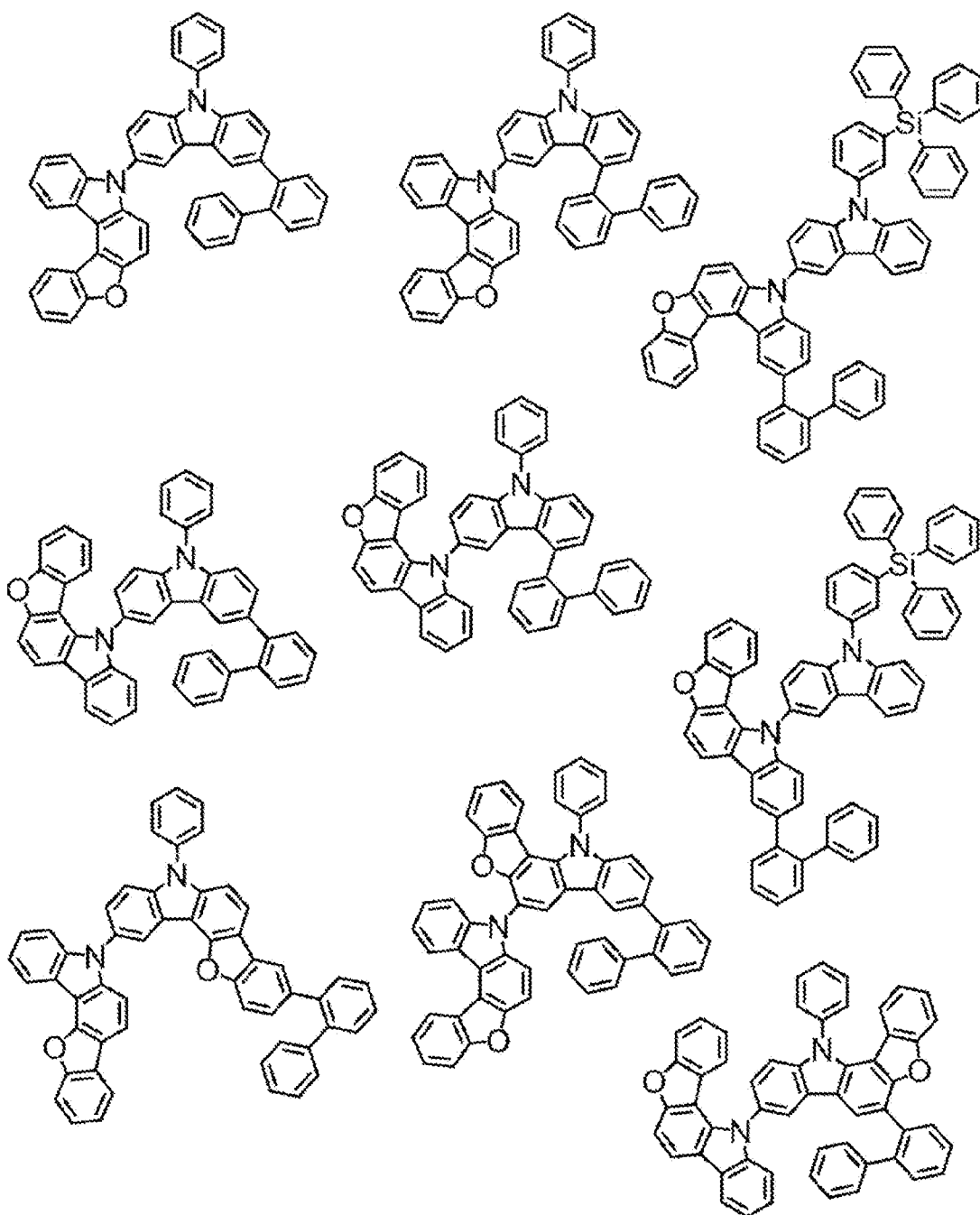
[0175]

[化49]



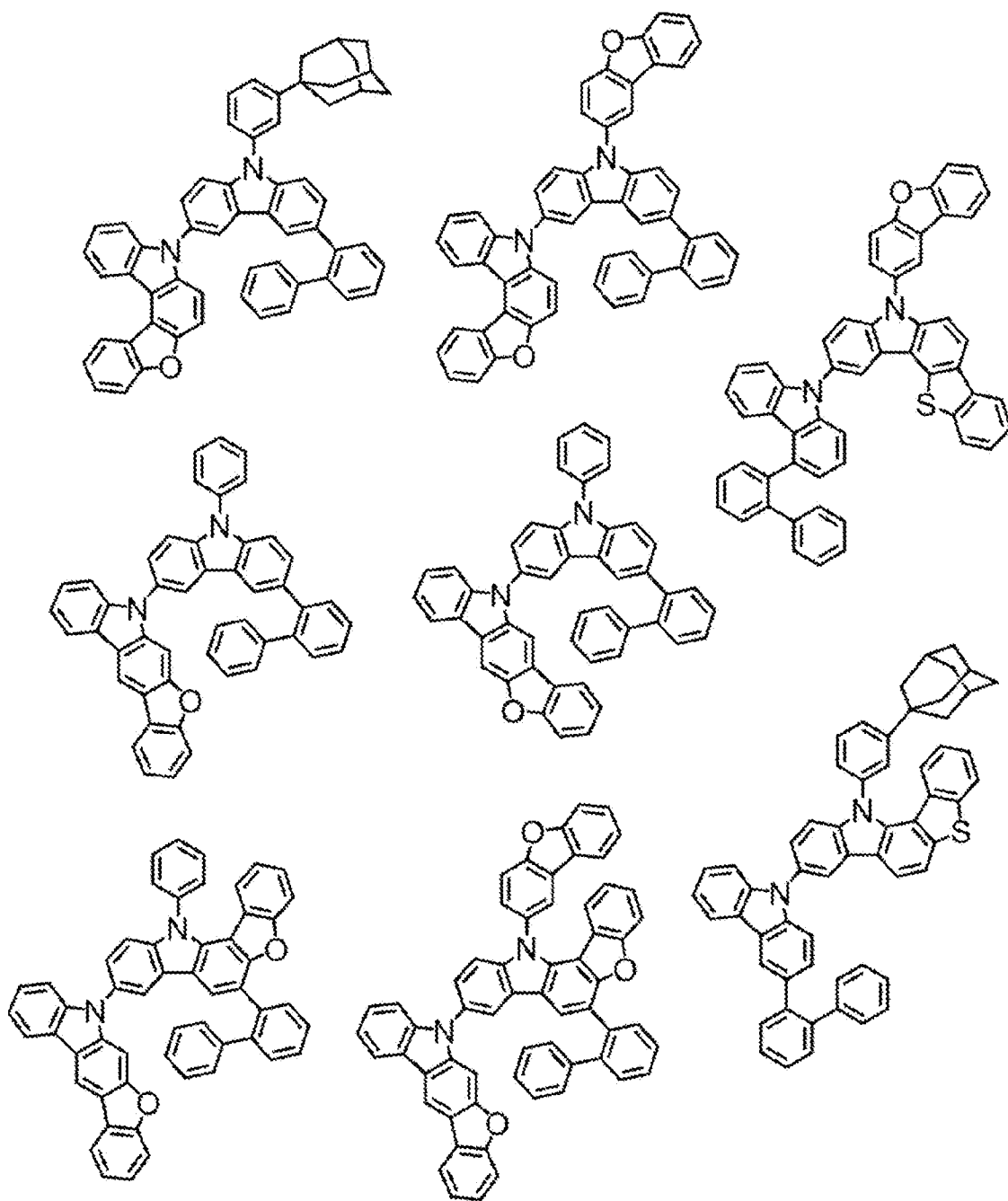
[0176]

[化50]



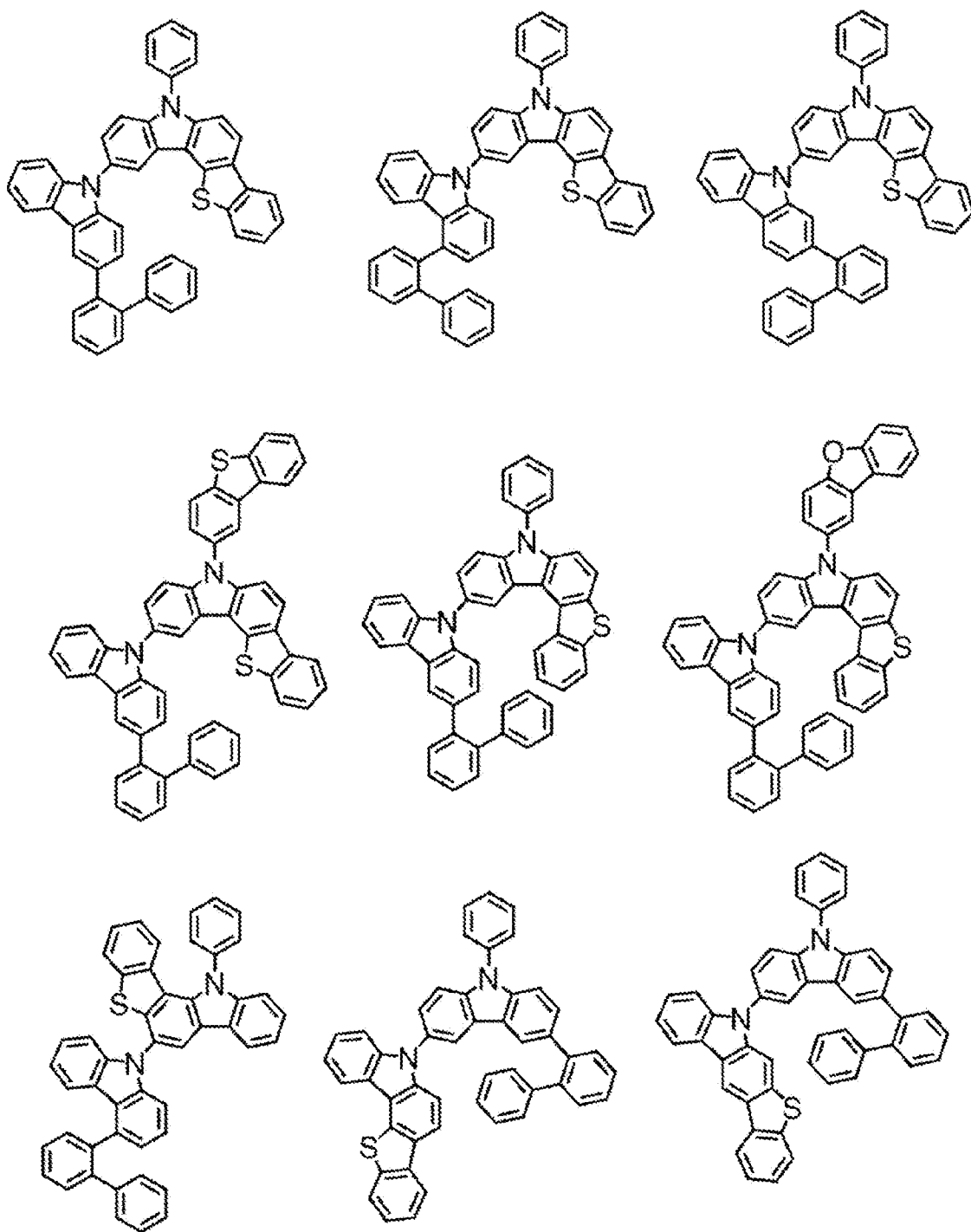
[0177]

[化51]



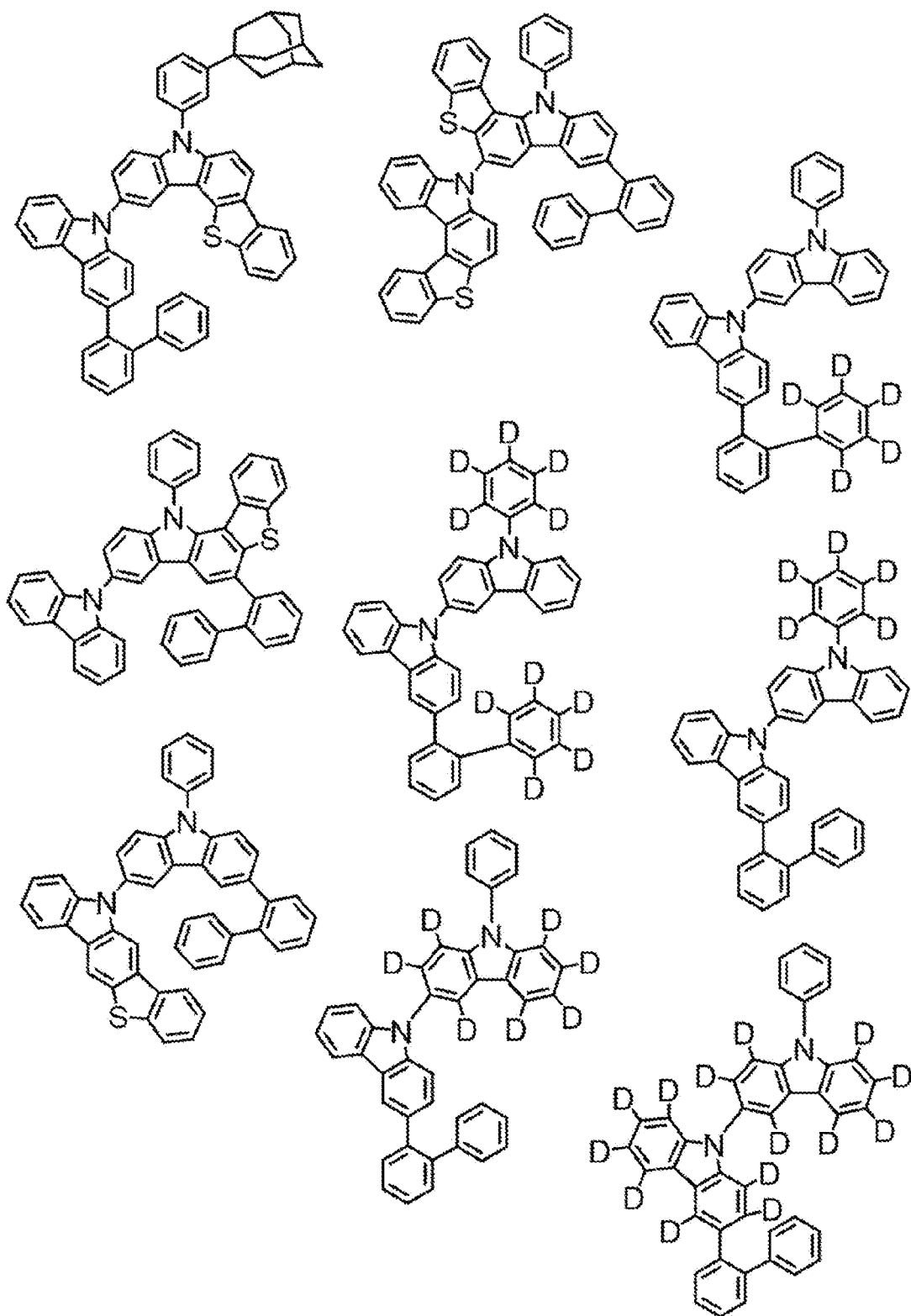
[0178]

[化52]



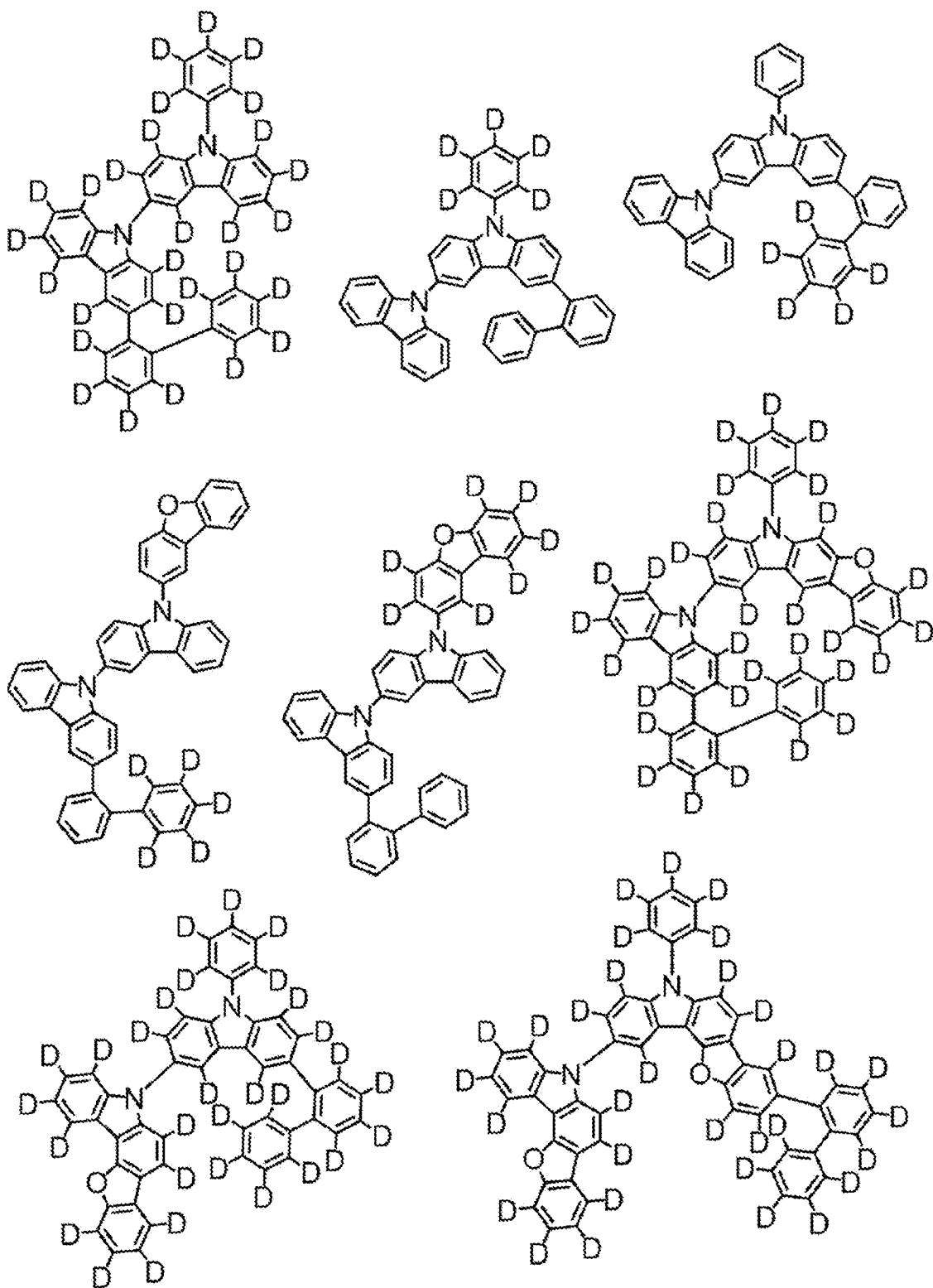
[0179]

[化53]



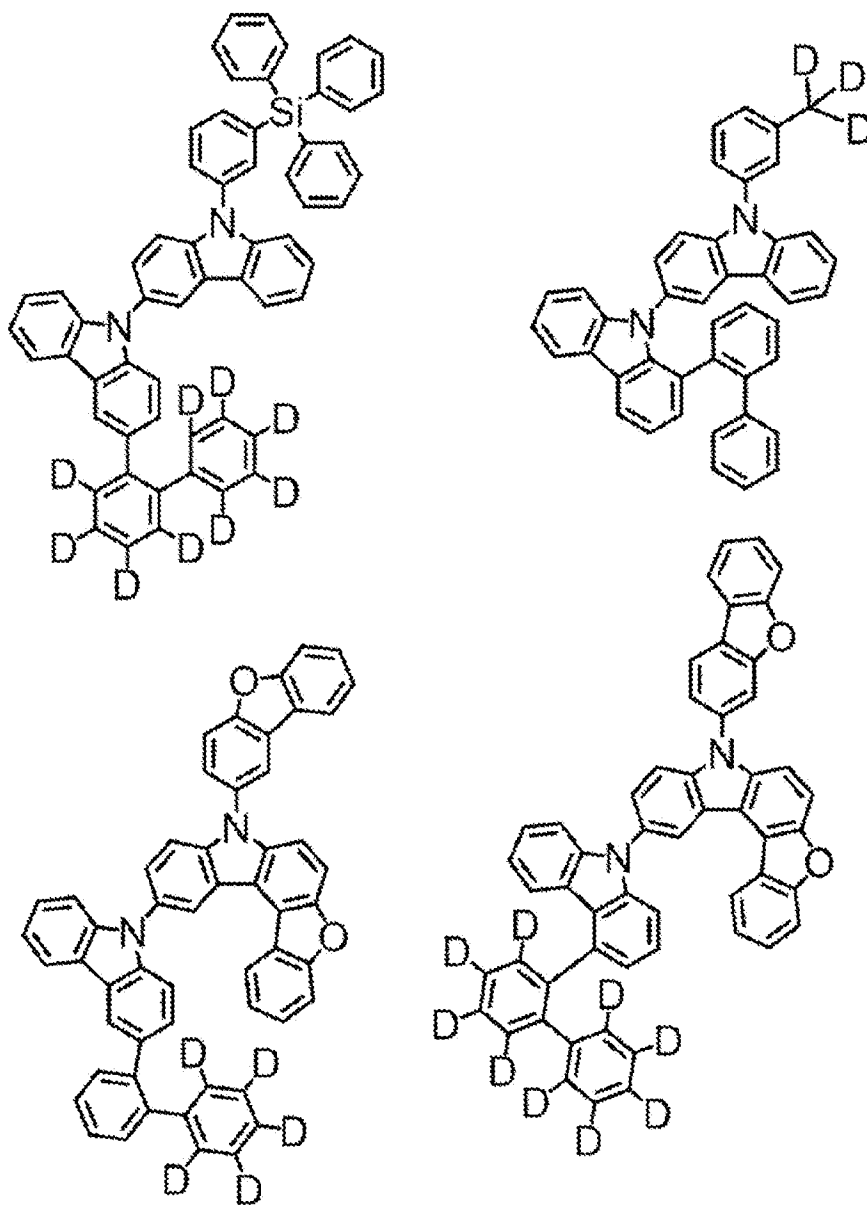
[0180]

[化54]



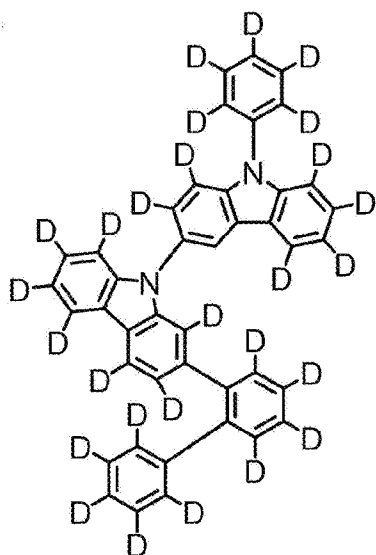
[0181]

[化55]



[0182]

[化56]



[0183] [第二実施形態]

＜有機エレクトロルミネッセンス素子用材料＞

本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は、第一実施形態に係る化合物を含有する。一態様としては、第一実施形態に係る化合物のみを含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料が挙げられ、別の一態様としては、第一実施形態に係る化合物と、第一実施形態における化合物とは異なる他の化合物とを含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料が挙げられる。

有機エレクトロルミネッセンス素子用材料の一態様は、ホスト材料としての第一実施形態に係る化合物と、増感材料（好ましくは遅延蛍光性化合物）等の他の化合物とを含む。

有機エレクトロルミネッセンス素子用材料の一態様は、ホスト材料としての第一実施形態に係る化合物と、増感材料（好ましくは遅延蛍光性化合物）と、蛍光発光性材料とを含む。

[0184] [第三実施形態]

＜有機エレクトロルミネッセンス素子＞

第三実施形態に係る有機EL素子について説明する。

第三実施形態に係る有機EL素子は、陽極及び陰極の両電極間に有機層を

備える。この有機層は、有機化合物で構成される層を少なくとも一つ含む。
あるいは、この有機層は、有機化合物で構成される複数の層が積層されてなる。有機層は、無機化合物をさらに含んでいてもよい。

[0185] 第三実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された発光層と、を含み、発光層は、ホスト材料と、増感材料と、蛍光発光性材料とを含有する。ホスト材料は、第一実施形態に係る化合物である。

ホスト材料、増感材料及び蛍光発光性材料は、互いに異なる化合物である。

[0186] 発光層においては、正孔と電子との再結合が、蛍光発光性材料ではなく、ホスト材料又は増感材料の分子上で起こり易くなり、増感材料においては、増感材料が遅延蛍光性化合物である場合は、最低励起三重項状態が最低励起一重項状態に逆項間交差すると考えられる。このように、増感材料において最低励起一重項状態へのエネルギー状態の遷移が効率的に起こった後、増感材料から蛍光発光性材料へのエネルギー移動が生じ、蛍光発光性材料の最低励起一重項状態からの蛍光発光が生じると考えられる。

ホスト材料として用いる第一実施形態に係る化合物（一般式（1）で表される化合物）は、立体的に嵩高い置換基を持つことにより、ドーパント化合物との相互作用によるエネルギー消失を低減することが出来る。その結果、増感材料からエネルギーを受け取った蛍光発光性材料は、高効率で発光すると考えられる。

[0187] （有機層）

第三実施形態の有機EL素子において、有機層は、例えば、一つの発光層で構成されていてもよいし、有機EL素子に採用され得る層を含んでいてもよい。有機EL素子に採用され得る層としては、特に限定されないが、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子障壁層、正孔障壁層、電子輸送層及び電子注入層からなる群から選択される少なくともいずれかの層が挙げられる。

[0188] 第三実施形態の有機EL素子において、陽極と発光層との間に正孔輸送層

が配置されていてもよい。

[0189] 第三実施形態の有機EL素子において、陰極と発光層との間に電子輸送層が配置されていてもよい。

[0190] 図1に、本実施形態に係る有機EL素子の一例の概略構成を示す。

有機EL素子1は、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、を含む。有機層10は、陽極3側から順に、正孔注入層6、正孔輸送層7、発光層5、電子輸送層8及び電子注入層9が、この順番で積層されて構成される。本発明は、図1に示す有機EL素子の構成に限定されない。

[0191] (発光層)

一実施形態において、ホスト材料と、増感材料と、蛍光発光性材料とが単一の層中に含有されている。例えば、ホスト材料と、増感材料と、蛍光発光性材料とは、有機EL素子が1つの発光層を有している場合は、当該単一の発光層に含有され、複数の発光層を有している場合は、複数の発光層のうちのいずれかの単一の発光層中に含有されている。

[0192] 一実施形態において、発光層が増感材料として遅延蛍光性化合物を含有する場合、発光層は、燐光発光性金属錯体を含有しない。

[0193] [ホスト材料]

一実施形態において、ホスト材料は、第一実施形態に係る化合物である。本明細書において、ホスト材料として用いられる化合物を第一の化合物と称する場合がある。

[0194] [増感材料]

一実施形態において、増感材料は、燐光発光性金属錯体及び遅延蛍光性化合物からなる群から選択される1以上の化合物である。本明細書において、増感材料として用いられる化合物を第二の化合物と称する場合がある。

一実施形態において、増感材料は、遅延蛍光性化合物である。

[0195] (遅延蛍光性化合物)

本実施形態において、遅延蛍光性化合物は、燐光発光性金属錯体ではない

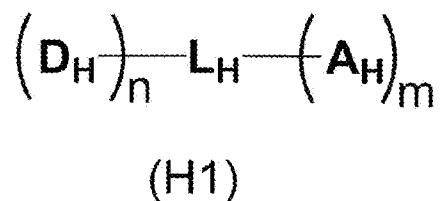
。本実施形態において、遅延蛍光性化合物は、金属錯体ではないことが好ましい。

[0196] (遅延蛍光性化合物)

本実施形態において、遅延蛍光性化合物は、燐光発光性金属錯体ではない。
本実施形態において、遅延蛍光性化合物は、金属錯体ではないことが好ましい。

[0197] 本実施形態において、遅延蛍光性化合物は、下記一般式 (H 1) で表される化合物であることが好ましい。

[0198] [化57]



[0199] (前記一般式 (H 1) において、

A_H は、下記一般式 (a-1)、(a-2)、(a-3)、(a-4)、(a-5)、(a-6)、(a-7) 及び (a-8) からなる群から選択される少なくとも1つの部分構造を有する基であり、

D_H は、下記一般式 (2 2 1)、(2 2 2) 又は (2 2 3) で表される基であり、

L_H は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール環、又は

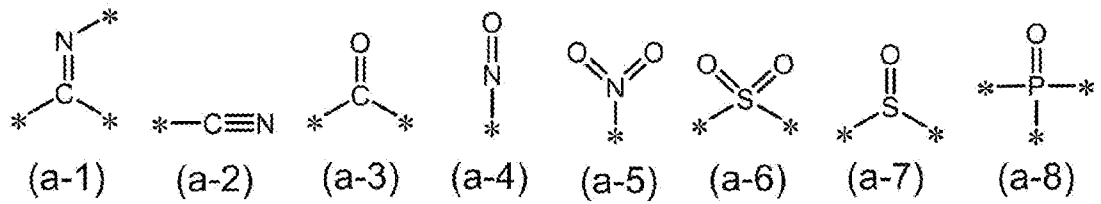
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環であり、

m は、1、2、3、4 又は 5 であり、複数の A_H は、互いに同一であるか又は異なり、

n は、1、2、3、4 又は 5 であり、複数の D_H は、互いに同一であるか又は異なる。))

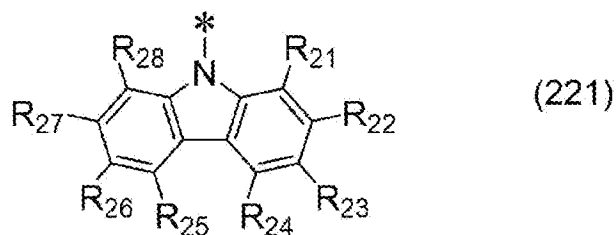
[0200]

[化58]

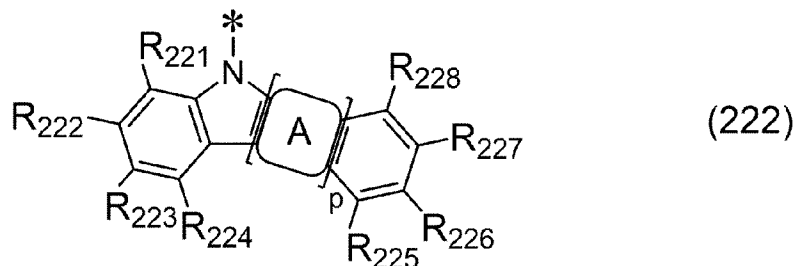


[0201] (前記一般式 (a-1) ~ (a-8) において、*は、それぞれ独立に、前記遅延蛍光性化合物の分子中の他の原子との結合位置を示す。)

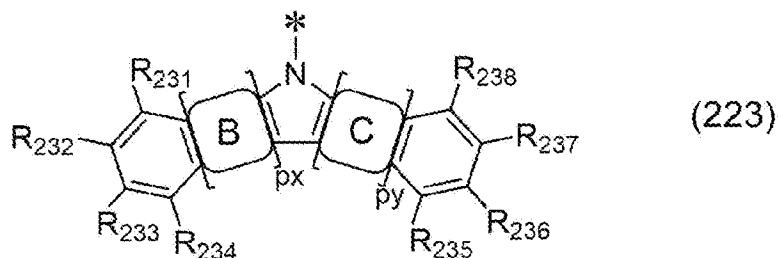
[0202] [化59]



[0203] [化60]



[0204] [化61]



[0205] (前記一般式 (221) における $R_{21} \sim R_{28}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式 (2 2 2) における $R_{221} \sim R_{228}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式 (2 2 3) における $R_{231} \sim R_{238}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式 (2 2 1) における置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{21} \sim R_{28}$ 、前記一般式 (2 2 2) における置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{221} \sim R_{228}$ 、並びに前記一般式 (2 2 3) における置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{231} \sim R_{238}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903}) で表される基、

— O — (R_{904}) で表される基、

— S — (R_{905}) で表される基、

— N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

—C(=O)R₉₀₈で表される基、

—COOR₉₀₉で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

—P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)で表される基、

—Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅)で表される基、

—B(R₉₃₆)(R₉₃₇)で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

前記一般式(222)及び前記一般式(223)において、

環A、環B及び環Cは、それぞれ独立に、下記一般式(224)及び一般式(225)で表される環構造からなる群から選択されるいずれかの環構造であり、

環A、環B及び環Cは、隣接する環と任意の位置で縮合し、

p、p_x及びp_yは、それぞれ独立に、1、2、3又は4であり、

pが2、3又は4の場合、複数の環Aは、互いに同一であるか又は異なり、

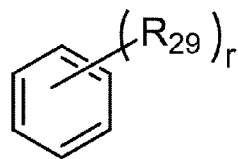
、

p_xが2、3又は4の場合、複数の環Bは、互いに同一であるか又は異なり、

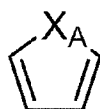
p_yが2、3又は4の場合、複数の環Cは、互いに同一であるか又は異なり、

前記一般式(221)～(223)中の*は、L_Hとの結合位置を示す。)

[0206] [化62]



(224)



(225)

[0207] (前記一般式 (2 2 4) において、

r は、0、2 又は 4 であり、

複数の R_{29} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式 (2 2 5) において、 X_A は、硫黄原子、酸素原子又は C (R_{29}

₁) (R_{292}) であり、

R_{291} 及び R_{292} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{29} 、 R_{291} 及び R_{292} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903}) で表される基、

— O — (R_{904}) で表される基、

— S — (R_{905}) で表される基、

— N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

— C (=O) R_{908} で表される基、

— C O O R_{909} で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

—P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)で表される基、

—Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅)で表される基、

—B(R₉₃₆)(R₉₃₇)で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

複数のR₂₉は、互いに同一であるか又は異なり、

複数のR₂₉₁は、互いに同一であるか又は異なり、

複数のR₂₉₂は、互いに同一であるか又は異なり、

複数のX_Aは、互いに同一であるか又は異なる。))

[0208] (前記遅延蛍光性化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₉₀₆、R₉₀₇、R₉₀₈、R₉₀₉、R₉₃₁、R₉₃₂、R₉₃₃、R₉₃₄、R₉₃₅、R₉₃₆及びR₉₃₇は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₉₀₁が複数存在する場合、複数のR₉₀₁は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₂が複数存在する場合、複数のR₉₀₂は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₃が複数存在する場合、複数のR₉₀₃は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₄が複数存在する場合、複数のR₉₀₄は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₅が複数存在する場合、複数のR₉₀₅は、互いに同一であるか又は異なり、

り、

R_{906} が複数存在する場合、複数の R_{906} は、互いに同一であるか又は異な

り、

R_{907} が複数存在する場合、複数の R_{907} は、互いに同一であるか又は異な

り、

R_{908} が複数存在する場合、複数の R_{908} は、互いに同一であるか又は異な

り、

R_{909} が複数存在する場合、複数の R_{909} は、互いに同一であるか又は異な

り、

R_{931} が複数存在する場合、複数の R_{931} は、互いに同一であるか又は異な

り、

R_{932} が複数存在する場合、複数の R_{932} は、互いに同一であるか又は異な

り、

R_{933} が複数存在する場合、複数の R_{933} は、互いに同一であるか又は異な

り、

R_{934} が複数存在する場合、複数の R_{934} は、互いに同一であるか又は異な

り、

R_{935} が複数存在する場合、複数の R_{935} は、互いに同一であるか又は異な

り、

R_{936} が複数存在する場合、複数の R_{936} は、互いに同一であるか又は異な

り、

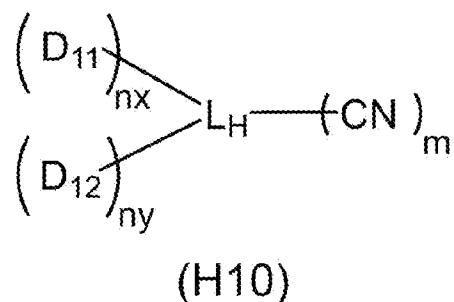
R_{937} が複数存在する場合、複数の R_{937} は、互いに同一であるか又は異な

る。)

[0209] 本実施形態において、遅延蛍光性化合物は、下記一般式(H10)で表される化合物であることが好ましい。

[0210]

[化63]



[0211] (前記一般式 (H 1 0) において、

CNは、シアノ基であり、

L_H は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素環であり、

D_{11} 及び D_{12} は、それぞれ独立に、前記一般式(2 2 1)、(2 2 2)又は(2 2 3)で表される基であり、

m は、1、2、3、4又は5であり、

nx は、0、1、2、3、4又は5であり、

ny は、0、1、2、3、4又は5であり、

$nx + ny$ は、1、2、3、4又は5であり、

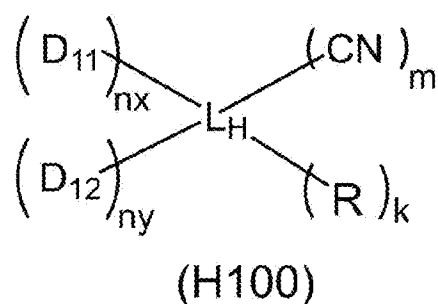
D_{11} 及び D_{12} は、互いに同一であるか又は異なり、

複数の D_{11} は、互いに同一であるか又は異なり、

複数の D_{12} は、互いに同一であるか又は異なる。))

[0212] 本実施形態において、遅延蛍光性化合物は、下記一般式(H 1 0 0)で表される化合物であることが好ましい。

[0213] [化64]



[0214] (前記一般式(H 1 0 0)において、 L_H 、 D_{11} 、 D_{12} 、 m 、 nx 及び ny は

、それぞれ、前記一般式 (H 1 0) における L_H 、 D_{11} 、 D_{12} 、 m 、 n_x 及び n_y と同義であり、

R は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

—Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903}) で表される基、

—O— (R_{904}) で表される基、

—S— (R_{905}) で表される基、

—N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

—C (=O) R_{908} で表される基、

—COOR₉₀₉ で表される基、

シアノ基、

ニトロ基、

—P (=O) (R_{931}) (R_{932}) で表される基、

—Ge (R_{933}) (R_{934}) (R_{935}) で表される基、

—B (R_{936}) (R_{937}) で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

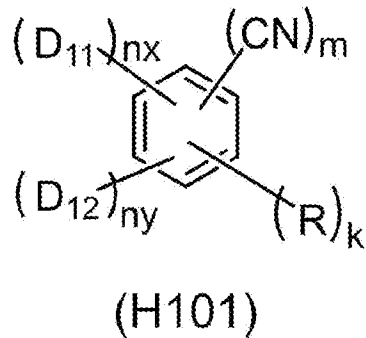
但し、少なくとも 1 つの R は、置換基であり、少なくとも 1 つの置換基としての R は、前記一般式 (H 1 0 0) で表される化合物の L_H に対して炭素—炭素結合により結合し、

k は、1 以上の整数であり、

複数の R は、互いに同一であるか又は異なる。))

[0215] 本実施形態において、遅延蛍光性化合物は、下記一般式（H101）で表される化合物であることが好ましい。

[0216] [化65]



[0217] （前記一般式（H101）において、

D_{11} 及び D_{12} は、それぞれ、前記一般式（H10）における D_{11} 及び D_{12} と同義であり、

R は、それぞれ独立に、前記一般式（H100）における R と同義であり、

、

m は、1、2、3又は4であり、

n_x は、0、1、2、3又は4であり、

n_y は、0、1、2、3又は4であり、

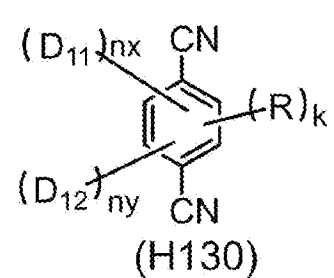
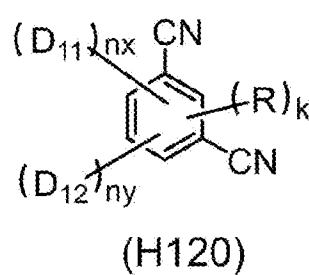
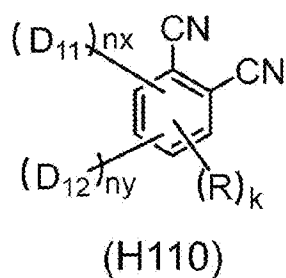
k は、1、2、3又は4であり、

$n_x + n_y$ は、1、2、3又は4であり、

$m + n_x + n_y + k = 6$ である。）

[0218] 本実施形態において、遅延蛍光性化合物は、下記一般式（H110）、（H120）又は（H130）で表される化合物であることが好ましい。

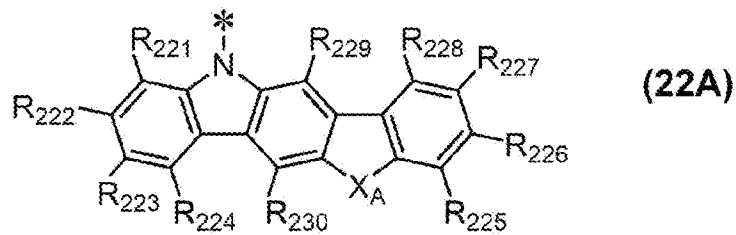
[0219] [化66]



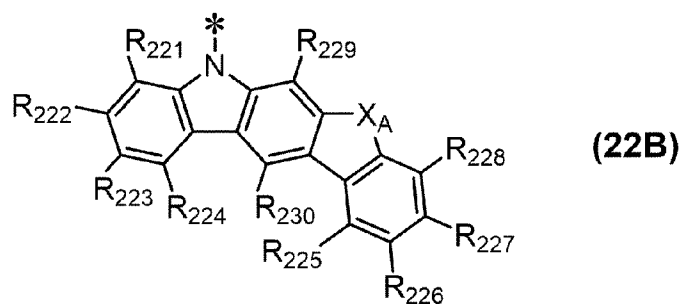
- [0220] (前記一般式 (H 1 1 0)、(H 1 2 0) 及び (H 1 3 0) において、
 D_{11} 及び D_{12} は、それぞれ、前記一般式 (H 1 0) における D_{11} 及び D_{12} と同義であり、
 R は、それぞれ独立に、前記一般式 (H 1 0 0) における R と同義であり、
 n_x は、0、1、2 又は 3 であり、
 n_y は、0、1、2 又は 3 であり、
 k は、1、2 又は 3 であり、
 $n_x + n_y$ は、1、2 又は 3 であり、
 $n_x + n_y + k = 4$ である。)

- [0221] 本実施形態において、遅延蛍光性化合物における前記一般式 (2 2 2) で表される基は、下記一般式 (2 2 A)、(2 2 B)、(2 2 C)、(2 2 D)、(2 2 E) 及び (2 2 F) で表される基からなる群から選択されるいずれかの基であることが好ましい。

- [0222] [化67]

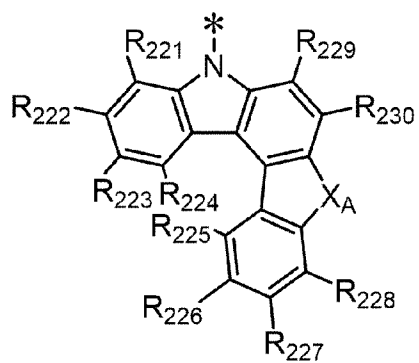


- [0223] [化68]



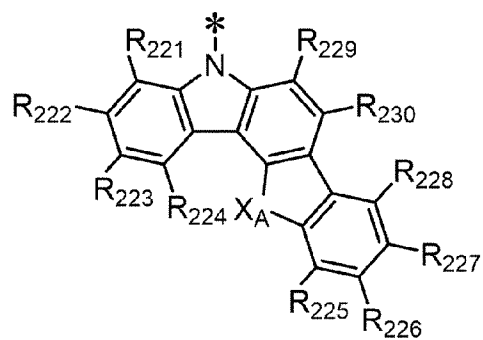
- [0224]

[化69]



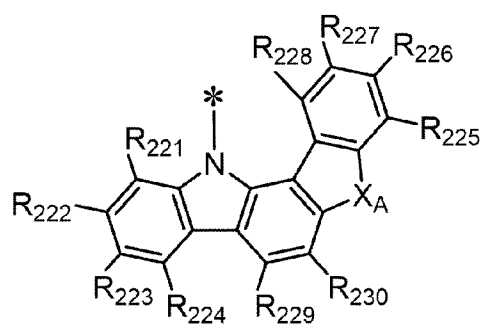
(22C)

[0225] [化70]



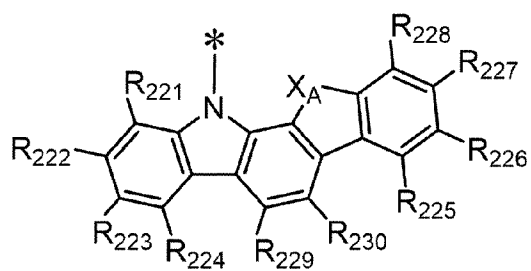
(22D)

[0226] [化71]



(22E)

[0227] [化72]



(22F)

[0228] (前記一般式 (22A)、(22B)、(22C)、(22D)、(22E)

) 及び (22F) において、

$R_{221} \sim R_{228}$ は、それぞれ、前記一般式 (222) における $R_{221} \sim R_{228}$ と同義であり、

R_{229} 及び R_{230} は、それぞれ独立に、前記一般式 (224) における R_{29} と同義であり、

X_A は、前記一般式 (225) における X_A と同義であり、

前記一般式 (22A)、(22B)、(22C)、(22D)、(22E) 及び (22F) 中の * は、結合位置を示す。)

[0229] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、遅延蛍光性化合物が一般式 (H101) で表される化合物である場合、一般式 (22A)、(22B)、(22C)、(22D)、(22E) 及び (22F) 中の * は、一般式 (H101) において明示的に示されているベンゼン環そのものに結合する。

[0230] 本実施形態の遅延蛍光性化合物において、 X_A は、硫黄原子又は酸素原子であることも好ましい。

[0231] 本実施形態の遅延蛍光性化合物において、 X_A が、 $C(R_{291})(R_{292})$ である場合、 R_{291} 及び R_{292} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であることが好ましく、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基であることがより好ましい。

[0232] 本実施形態の遅延蛍光性化合物において、 $R_{21} \sim R_{28}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組は、いずれも互いに結合しないことも好ましい。

本実施形態の遅延蛍光性化合物において、 $R_{221} \sim R_{228}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組は、いずれも互いに結合しないことも好ましい。

本実施形態の遅延蛍光性化合物において、 $R_{231} \sim R_{238}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組は、いずれも互いに結合しないことも好ましい。

[0233] 本実施形態の遅延蛍光性化合物におけるRは、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることが好ましい。

[0234] 本実施形態の遅延蛍光性化合物におけるRは、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～18の複素環基であることが好ましい。

[0235] 本実施形態の遅延蛍光性化合物における $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{221} \sim R_{228}$ 、 $R_{231} \sim R_{238}$ 、並びに R_{29} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることが好ましい。

[0236] 本実施形態の遅延蛍光性化合物における $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{221} \sim R_{228}$ 、 $R_{231} \sim R_{238}$ 、並びに R_{29} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～18の複素環基であることが好ましい。

[0237] 本実施形態の遅延蛍光性化合物におけるRは、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であり、

本実施形態の遅延蛍光性化合物における $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{221} \sim R_{228}$ 、 $R_{231} \sim R_{238}$ 、並びに R_{29} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることが好ましい。

[0238] 本実施形態の遅延蛍光性化合物におけるRは、それぞれ独立に、水素原子

、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 18 の複素環基であり、

本実施形態の遅延蛍光性化合物における $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{221} \sim R_{228}$ 、 $R_{231} \sim R_{238}$ 、並びに R_{29} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 18 の複素環基であることが好ましい。

[0239] 本実施形態に係る遅延蛍光性化合物において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、
無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルケニル基、
無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルキニル基、
無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基、
—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})で表される基、
—O—(R_{904})で表される基、
—S—(R_{905})で表される基、
—N(R_{906})(R_{907})で表される基、
無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、
—C(=O) R_{908} で表される基、
—COO R_{909} で表される基、
—P(=O)(R_{931})(R_{932})で表される基、
—Ge(R_{933})(R_{934})(R_{935})で表される基、
—B(R_{936})(R_{937})で表される基、
—S(=O)₂ R_{938} で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、

無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{909}$ 、並びに $R_{931} \sim R_{938}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であることが好ましい。

[0240] 本実施形態に係る遅延蛍光性化合物において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、ハロゲン原子、無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であることが好ましい。

[0241] 本実施形態に係る遅延蛍光性化合物において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、無置換の炭素数 1 ～ 10 のアルキル基、無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5 ～ 12 の複素環基であることが好ましい。

[0242] 本実施形態に係る遅延蛍光性化合物において、「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であることも好ましい。

[0243] 本明細書において、 $-O-(R_{904})$ で表される基は、 R_{904} が水素原子の場合、ヒドロキシ基である。

本明細書において、 $-S-(R_{905})$ で表される基は、 R_{905} が水素原子の場合、チオール基である。

本明細書において、 $-P(=O)(R_{931})(R_{932})$ で表される基は、 R_{931} 及び R_{932} が置換基の場合、置換ホスフィンオキシド基である。

本明細書において、 $-Ge(R_{933})(R_{934})(R_{935})$ で表される基は、 R_{933} 、 R_{934} 及び R_{935} が置換基の場合、置換ゲルマニウム基である。

本明細書において、 $-B(R_{936})(R_{937})$ で表される基は、 R_{936} 及び R_{937} が置換基の場合、置換ボリル基である。

[0244] (熱活性化遅延蛍光性)

本明細書において、熱活性化遅延蛍光性を遅延蛍光性と称する場合がある。

遅延蛍光については、「有機半導体のデバイス物性」（安達千波矢編、講談社発行）の261～268ページで解説されている。その文献の中で、蛍光発光材料の励起一重項状態と励起三重項状態のエネルギー差 ΔE_{13} を小さくすることができれば、通常は遷移確率が低い励起三重項状態から励起一重項状態への逆エネルギー移動が高効率で生じ、熱活性化遅延蛍光（Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF）が発現すると説明されている。さらに、当該文献中の図10.38で、遅延蛍光の発生メカニズムが説明されている。TADF機構（メカニズム）は、一重項準位と三重項準位とのエネルギー差（ ΔST ）の小さな材料を用いた場合に、三重項励起子から一重項励起子への逆項間交差が熱的に生じる現象を利用するメカニズムである。熱活性化遅延蛍光性（TADF性）を示す化合物（以下、TADF性化合物とも称する）としては、例えば、分子内に、ドナー部位とアクセプター部位とが結合した化合物が知られている。

[0245] 一般に、遅延蛍光の発光は過渡PL（Photoluminescence）測定により確認できる。

[0246] 過渡PL測定から得た減衰曲線に基づいて遅延蛍光の挙動を解析することもできる。過渡PL測定とは、試料にパルスレーザーを照射して励起させ、照射を止めた後のPL発光の減衰挙動（過渡特性）を測定する手法である。TADF性化合物におけるPL発光は、最初のPL励起で生成する一重項励起子からの発光成分と、三重項励起子を経由して生成する一重項励起子からの発光成分に分類される。最初のPL励起で生成する一重項励起子の寿命は、ナノ秒オーダーであり、非常に短い。そのため、当該一重項励起子からの発光は、パルスレーザーを照射後、速やかに減衰する。

一方、遅延蛍光は、寿命の長い三重項励起子を経由して生成する一重項励起子からの発光のため、ゆるやかに減衰する。このように最初のPL励起で

生成する一重項励起子からの発光と、三重項励起子を経由して生成する一重項励起子からの発光とでは、時間的に大きな差がある。そのため、遅延蛍光由来の発光強度を求めることができる。

[0247] 図2には、過渡PLを測定するための例示的装置の概略図が示されている。図2を用いた過渡PLの測定方法、及び遅延蛍光の挙動解析の一例を説明する。

[0248] 図2の過渡PL測定装置100は、所定波長の光を照射可能なパルスレーザー部101と、測定試料を収容する試料室102と、測定試料から放射された光を分光する分光器103と、2次元像を結像するためのストリークカメラ104と、2次元像を取り込んで解析するパーソナルコンピュータ105とを備える。なお、過渡PLの測定は、図2に記載の装置に限定されない。

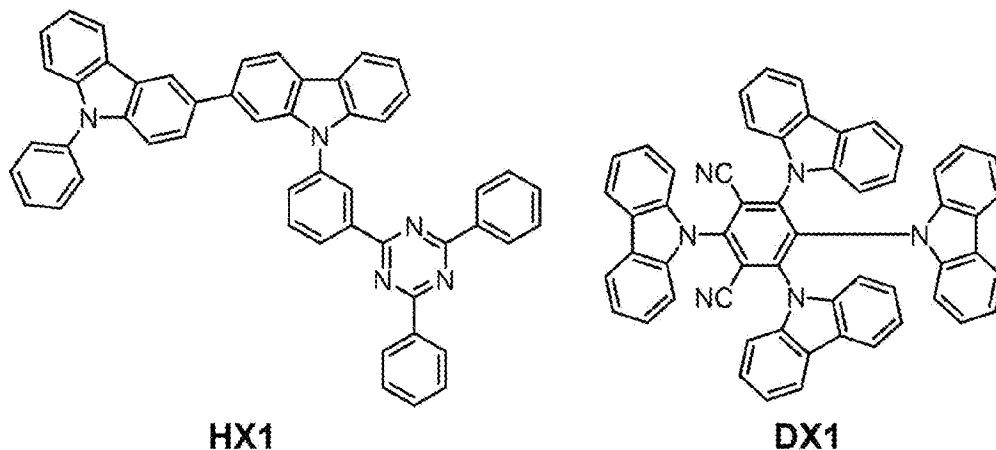
[0249] 試料室102に収容される試料は、マトリックス材料に対し、ドーピング材料が12質量%の濃度でドーピングされた薄膜を石英基板に成膜することで得られる。

[0250] 試料室102に収容された薄膜試料に対し、パルスレーザー部101からパルスレーザーを照射してドーピング材料を励起させる。励起光の照射方向に対して90度の方向へ発光を取り出し、取り出した光を分光器103で分光し、ストリークカメラ104内で2次元像を結像する。その結果、縦軸が時間に対応し、横軸が波長に対応し、輝点が発光強度に対応する2次元画像を得ることができる。この2次元画像を所定の時間軸で切り出すと、縦軸が発光強度であり、横軸が波長である発光スペクトルを得ることができる。また、当該2次元画像を波長軸で切り出すと、縦軸が発光強度の対数であり、横軸が時間である減衰曲線（過渡PL）を得ることができる。

[0251] 例えば、マトリックス材料として、下記化合物HX1を用い、ドーピング材料として下記化合物DX1を用いて上述のようにして薄膜試料Aを作製し、過渡PL測定を行った。

[0252]

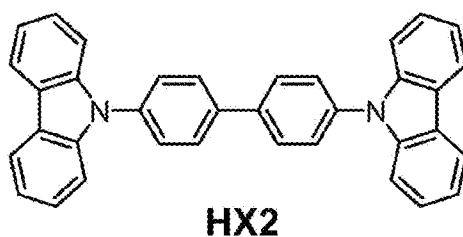
[化73]



[0253] ここでは、前述の薄膜試料 A、及び薄膜試料 B を用いて減衰曲線を解析した。薄膜試料 B は、マトリックス材料として下記化合物 H X 2 を用い、ドーピング材料として前記化合物 D X 1 を用いて、上述のようにして薄膜試料を作製した。

[0254] 図 3 には、薄膜試料 A 及び薄膜試料 B について測定した過渡 P L から得た減衰曲線が示されている。

[0255] [化74]



[0256] 上記したように過渡 P L 測定によって、縦軸を発光強度とし、横軸を時間とする発光減衰曲線を得ることができる。この発光減衰曲線に基づいて、光励起により生成した一重項励起状態から発光する蛍光と、三重項励起状態を経由し、逆エネルギー移動により生成する一重項励起状態から発光する遅延蛍光との、蛍光強度比を見積もることができる。遅延蛍光性の材料では、素早く減衰する蛍光の強度に対し、緩やかに減衰する遅延蛍光の強度の割合が、ある程度大きい。

[0257] 具体的には、遅延蛍光性の材料からの発光としては、P r o m p t 発光（即時発光）と、D e l a y 発光（遅延発光）とが存在する。P r o m p t 発光（即時発光）とは、当該遅延蛍光性の材料が吸収する波長のパルス光（パルスレーザーから照射される光）で励起された後、当該励起状態から即座に観察される発光である。D e l a y 発光（遅延発光）とは、当該パルス光による励起後、即座には観察されず、その後観察される発光である。

[0258] P r o m p t 発光とD e l a y 発光の量とその比は、“N a t u r e 492, 234–238, 2012”（参考文献1）に記載された方法と同様の方法により求めることができる。なお、P r o m p t 発光とD e l a y 発光の量の算出に使用される装置は、前記参考文献1に記載の装置、または図2に記載の装置に限定されない。

[0259] また、本実施形態に係る遅延蛍光性化合物の遅延蛍光性の測定には、次に示す方法により作製した試料を用いる。例えば、本実施形態に係る遅延蛍光性化合物をトルエンに溶解し、自己吸収の寄与を取り除くため励起波長において吸光度が0.05以下の希薄溶液を調製する。また酸素による消光を防ぐため、試料溶液を凍結脱気した後にアルゴン雰囲気下で蓋付きのセルに封入することで、アルゴンで飽和された酸素フリーの試料溶液とする。

上記試料溶液の蛍光スペクトルを分光蛍光光度計F P - 8 6 0 0（日本分光社製）で測定し、また同条件で9,10-ジフェニルアントラセンのエタノール溶液の蛍光スペクトルを測定する。両スペクトルの蛍光面積強度を用いて、M o r r i s e t a l. J. P h y s. C h e m. 80 (1976) 969中の(1)式により全蛍光量子収率を算出する。

[0260] 本実施形態においては、測定対象化合物のP r o m p t 発光（即時発光）の量を X_P とし、D e l a y 発光（遅延発光）の量を X_D としたときに、 X_D/X_P の値が0.05以上であることが好ましい。

本明細書における遅延蛍光性化合物以外の化合物のP r o m p t 発光とD e l a y 発光の量とその比の測定も、本実施形態に係る遅延蛍光性化合物のP r o m p t 発光とD e l a y 発光の量とその比の測定と同様である。

[0261] ($\Delta S T$)

本実施形態では、最低励起一重項エネルギー S_1 と、77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} との差 ($S_1 - T_{77K}$) を $\Delta S T$ として定義する。

[0262] 本実施形態において、遅延蛍光性化合物の最低励起一重項エネルギー S_1 (GT 2) と、遅延蛍光性化合物の 77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} (GT 2) との差 $\Delta S T$ (GT 2) は、好ましくは 0.5 eV 未満、より好ましくは 0.3 eV 未満、さらに好ましくは 0.2 eV 未満、よりさらに好ましくは 0.1 eV 未満、さらになお好ましくは、0.05 eV 未満である。すなわち、 $\Delta S T$ (GT 2) は、下記数式 (数 2)、(数 2 A)、(数 2 B)、(数 2 C) 又は (数 2 D) の関係を満たすことが好ましい。

$$\Delta S T (GT 2) = S_1 (GT 2) - T_{77K} (GT 2) < 0.5 \text{ eV} \quad \dots (\text{数 } 2)$$

$$\Delta S T (GT 2) = S_1 (GT 2) - T_{77K} (GT 2) < 0.3 \text{ eV} \quad \dots (\text{数 } 2 \text{ A})$$

$$\Delta S T (GT 2) = S_1 (GT 2) - T_{77K} (GT 2) < 0.2 \text{ eV} \quad \dots (\text{数 } 2 \text{ B})$$

$$\Delta S T (GT 2) = S_1 (GT 2) - T_{77K} (GT 2) < 0.1 \text{ eV} \quad \dots (\text{数 } 2 \text{ C})$$

$$\Delta S T (GT 2) = S_1 (GT 2) - T_{77K} (GT 2) < 0.05 \text{ eV} \quad \dots (\text{数 } 2 \text{ D})$$

[0263] (三重項エネルギーと 77 [K] におけるエネルギーギャップとの関係)

ここで、三重項エネルギーと 77 [K] におけるエネルギーギャップとの関係について説明する。本実施形態では、77 [K] におけるエネルギーギャップは、通常定義される三重項エネルギーとは異なる点がある。

三重項エネルギーの測定は、次のようにして行われる。まず、測定対象となる化合物を適切な溶媒中に溶解した溶液を石英ガラス管内に封入した試料を作製する。この試料について、低温 (77 [K]) で燐光スペクトル (縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。) を測定し、この燐光スペクトルの

短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値に基づいて、所定の換算式から三重項エネルギーを算出する。

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

そのため、本実施形態では、通常の三重項エネルギー T と測定手法は同じであるが、その厳密な意味において異なることを区別するため、次のようにして測定される値をエネルギーギャップ T_{77K} と称する。測定対象となる化合物をEPA（ジエチルエーテル：イソペンタン：エタノール＝5：5：2（容積比））中に、濃度が $10 \mu\text{mol/L}$ となるように溶解して溶液を得て、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とする。この測定試料について、低温（77 [K]）で燐光スペクトル（縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。）を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $\lambda_{\text{edge}} [\text{nm}]$ に基づいて、次の換算式（F1）から算出されるエネルギー量を77 [K]におけるエネルギーギャップ T_{77K} とする。

$$\text{換算式 (F1)} : T_{77K} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

[0264] 燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ（つまり縦軸が増加するにつれ）、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線（すなわち変曲点における接線）が、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

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

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

[0265] (最低励起一重項エネルギー S_1)

溶液を用いた最低励起一重項エネルギー S_1 の測定方法 (溶液法と称する場合がある。) としては、下記の方法が挙げられる。

測定対象となる化合物の $10 \mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温 (300 K) でこの試料の吸収スペクトル (縦軸: 吸収強度、横軸: 波長とする。) を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $\lambda_{\text{edge}} [\text{nm}]$ を次に示す換算式 (F2) に代入して最低励起一重項エネルギーを算出する。

$$\text{換算式 (F2)} : S_1 [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

吸収スペクトル測定装置としては、例えば、日立社製の分光光度計 (装置名: U3310) が挙げられるが、これに限定されない。

[0266] 吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ (つまり縦軸の値が減少するにつれ)、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側 (ただし、吸光度が0.1以下となる場合は除く) で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

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

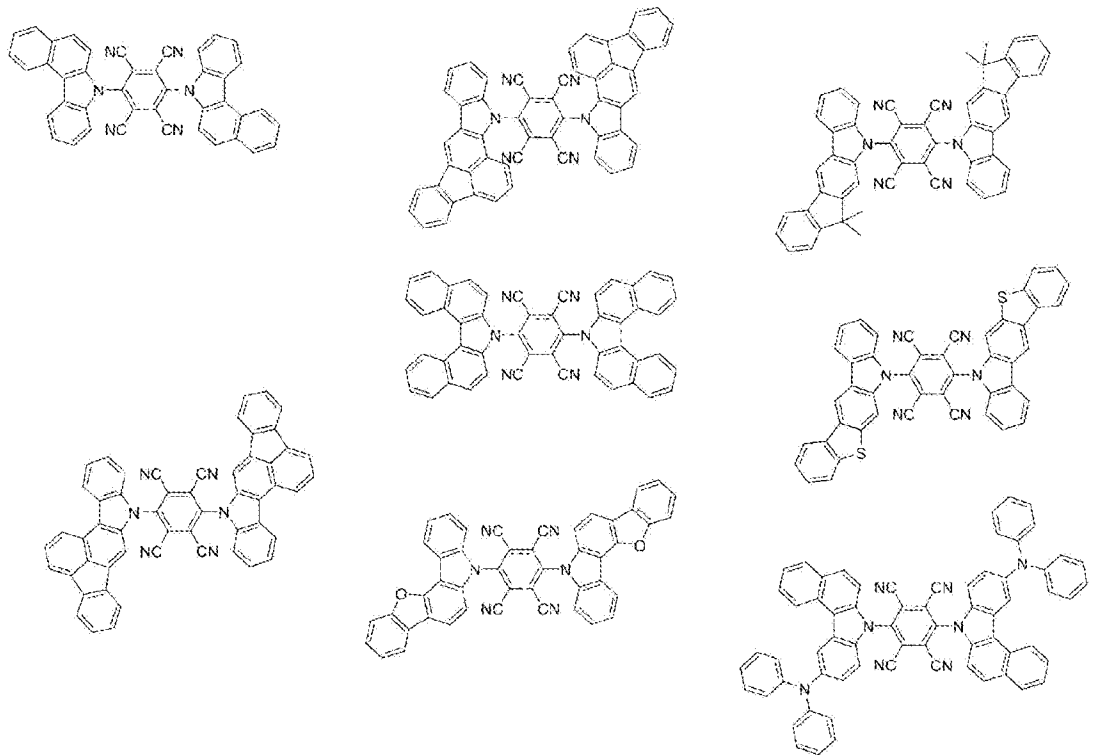
[0267] (遅延蛍光性化合物の製造方法)

遅延蛍光性化合物は、公知の方法により製造できる。また、遅延蛍光性化合物は、公知の方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。

[0268] (遅延蛍光性化合物の具体例)

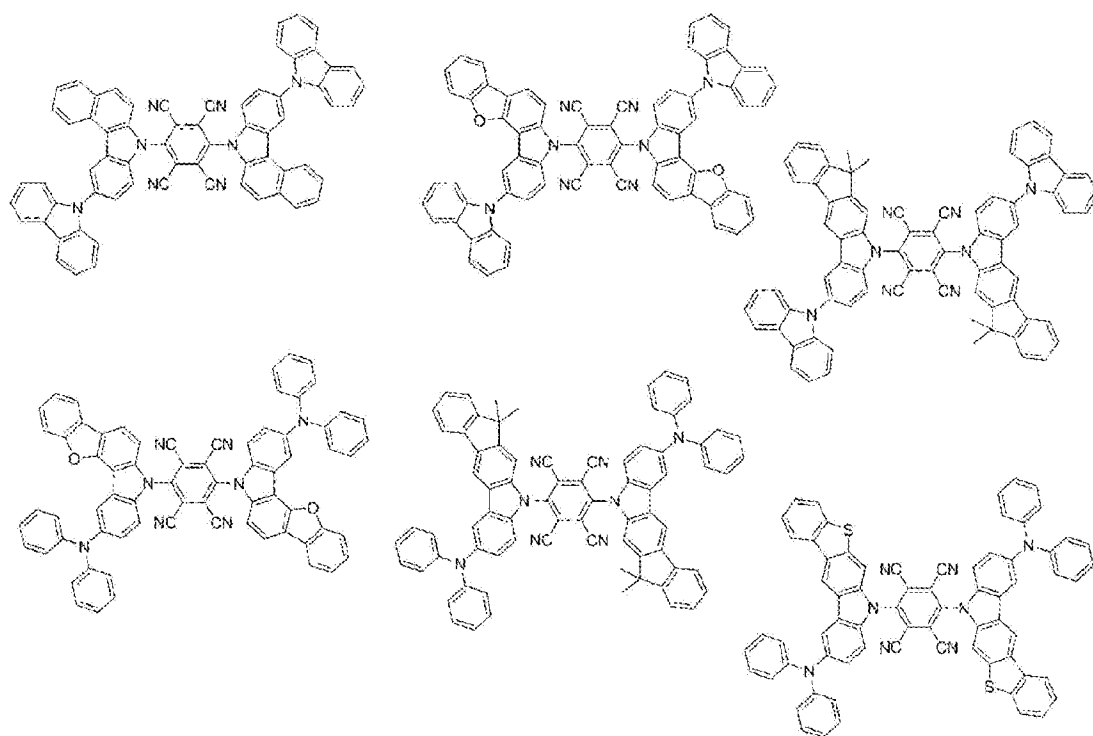
遅延蛍光性化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら具体例に限定されない。

[0269] [化75]

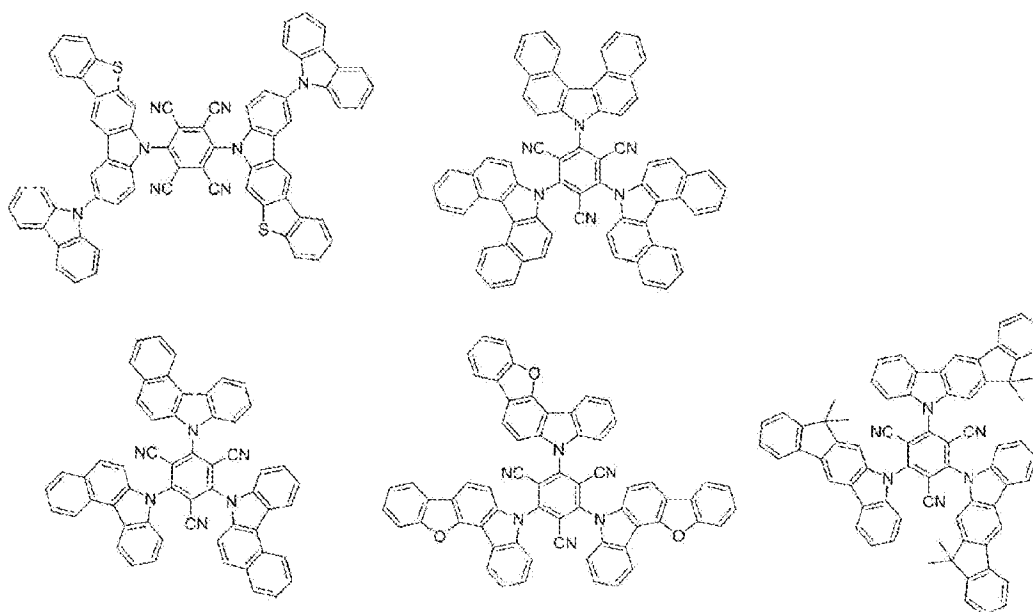


[0270]

[化76]

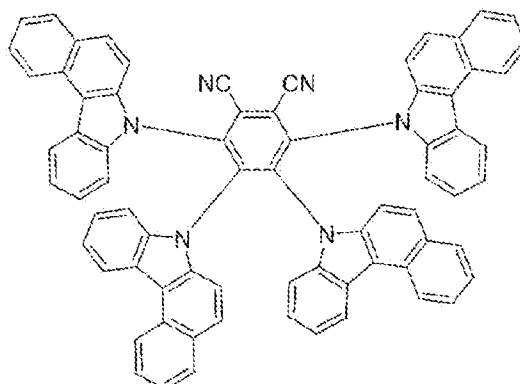
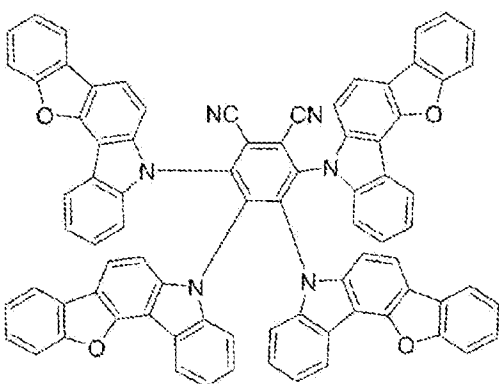
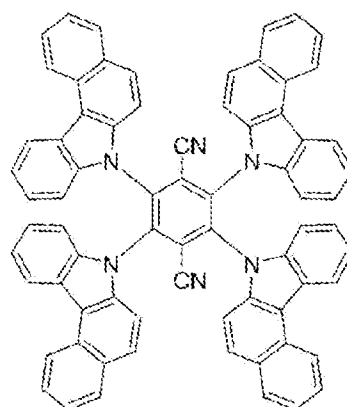
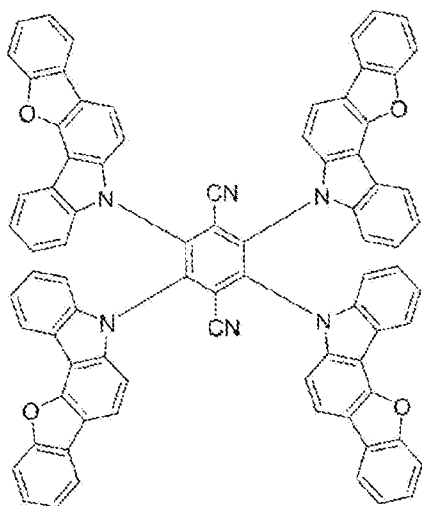
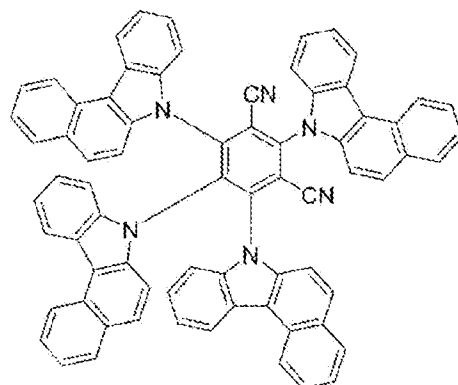
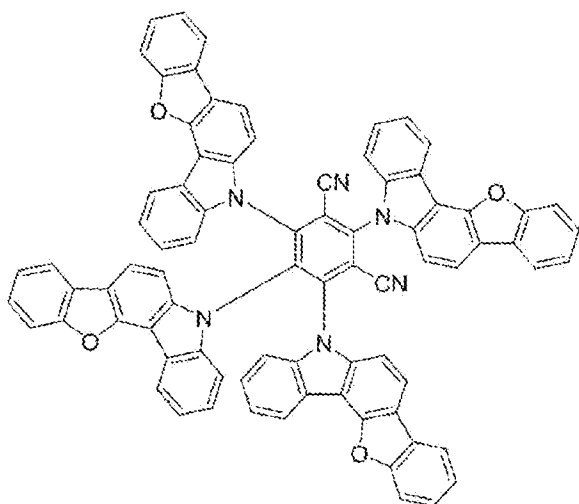


[0271] [化77]



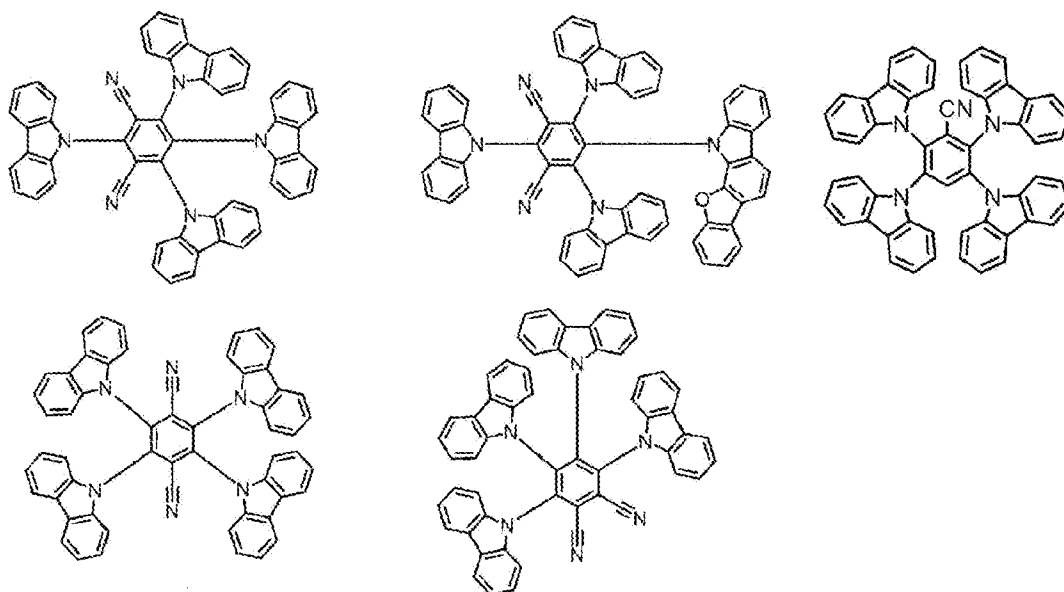
[0272]

[化78]

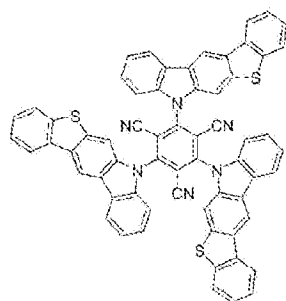


[0273]

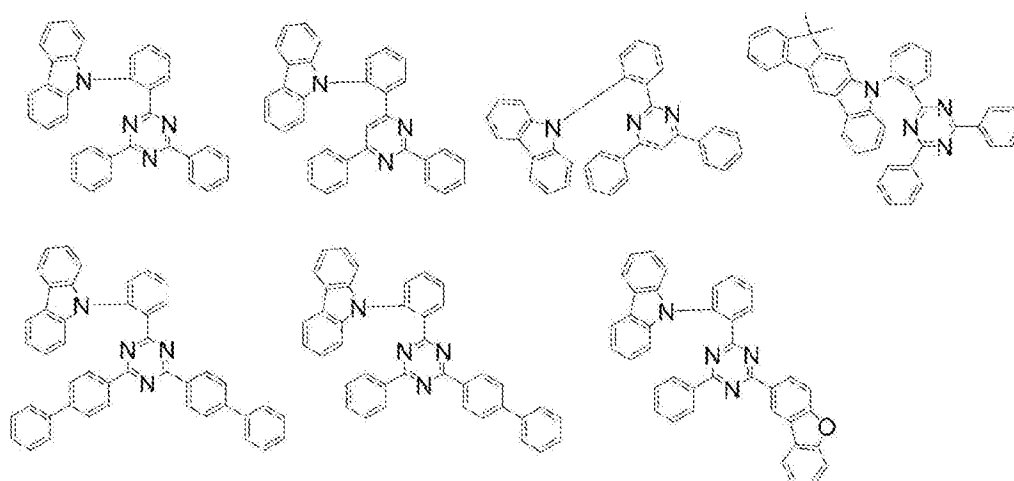
[化79]



[0274] [化80]

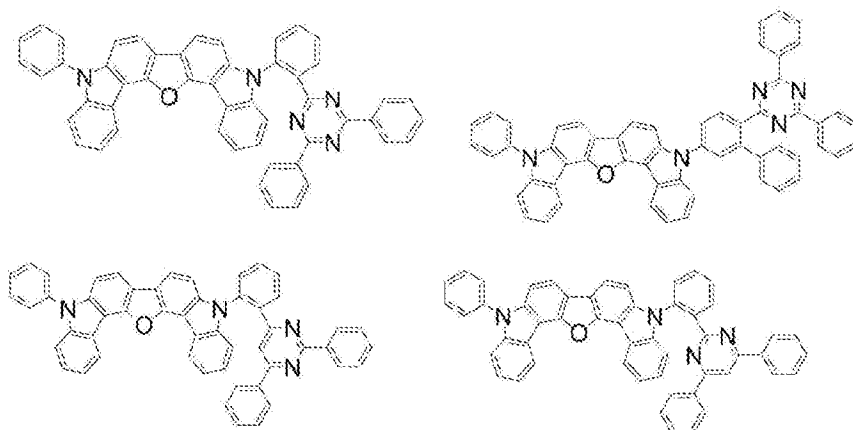


[0275] [化81]

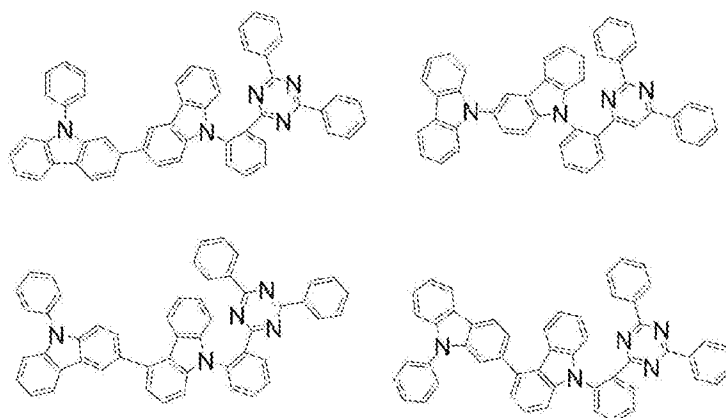


[0276]

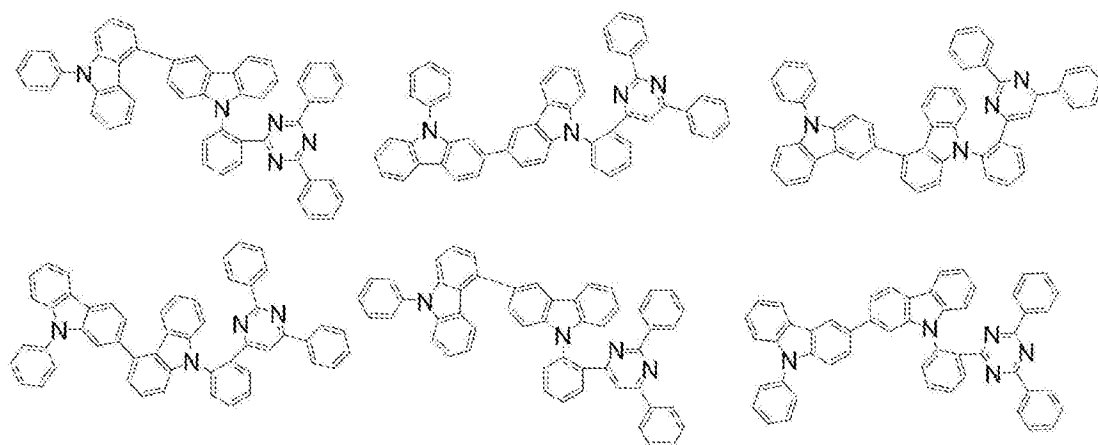
[化82]



[0277] [化83]

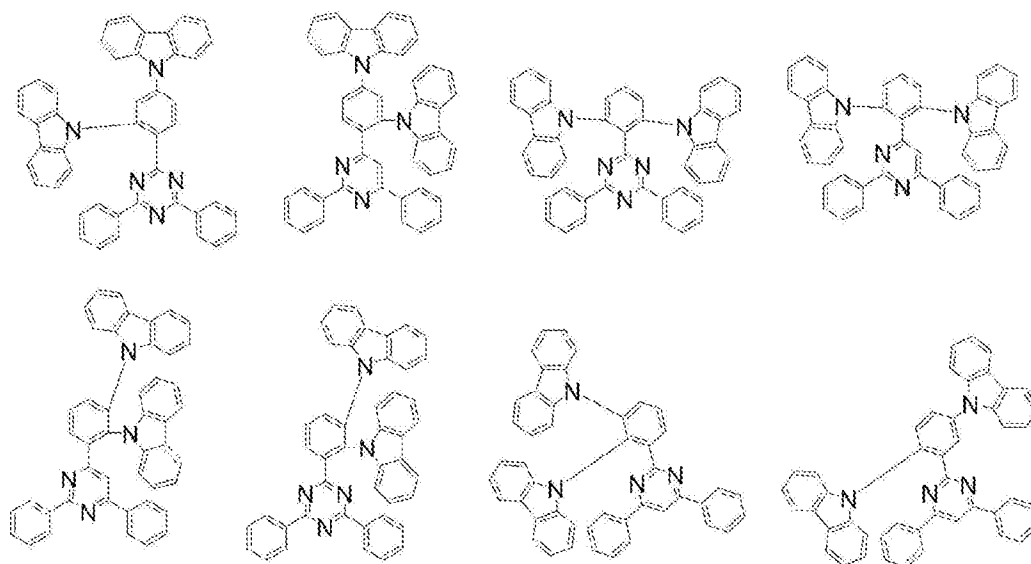


[0278] [化84]

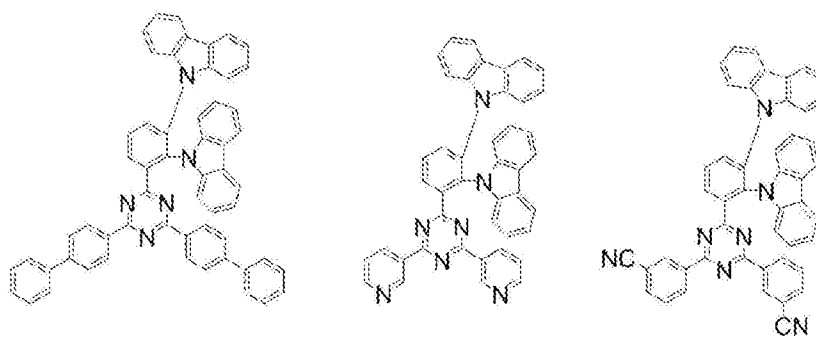


[0279]

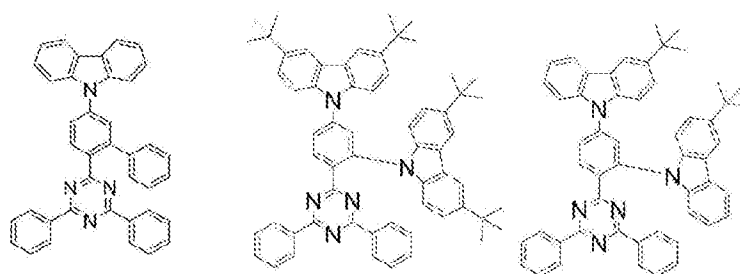
[化85]



[0280] [化86]

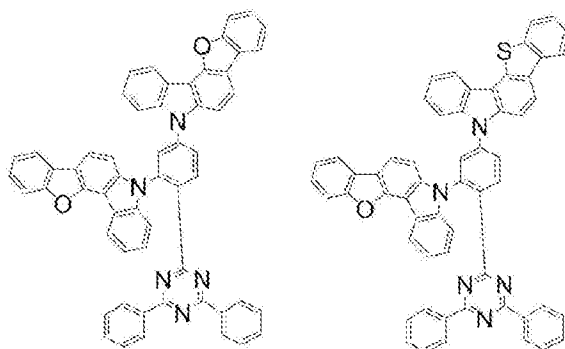


[0281] [化87]

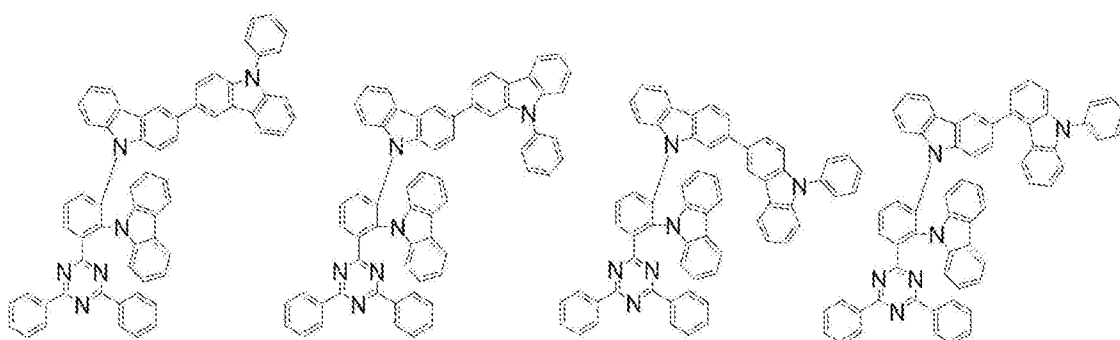


[0282]

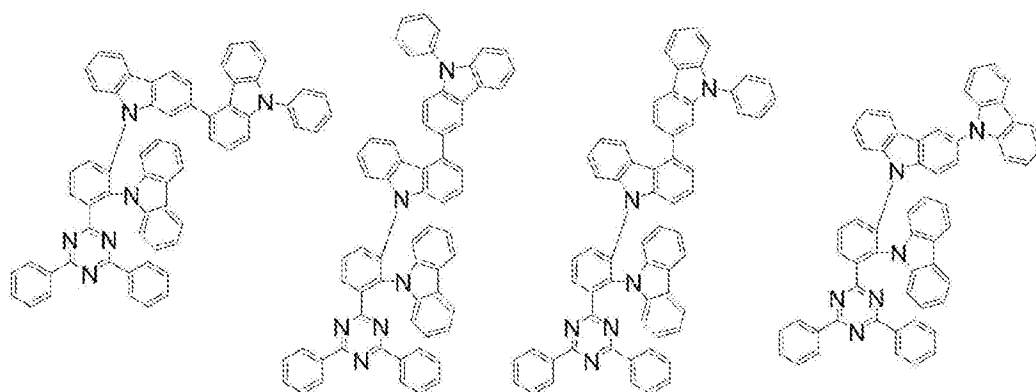
[化88]



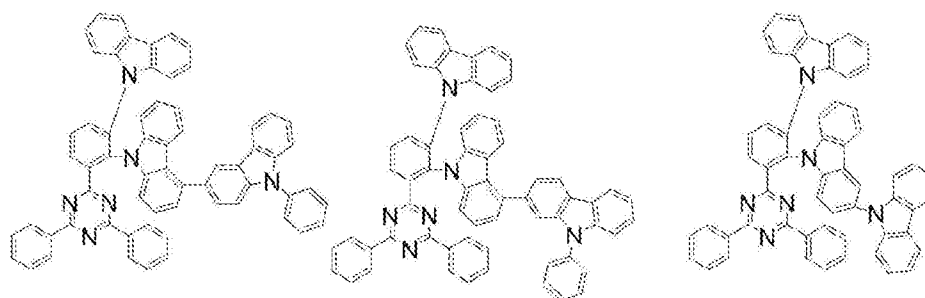
[0283] [化89]



[0284] [化90]

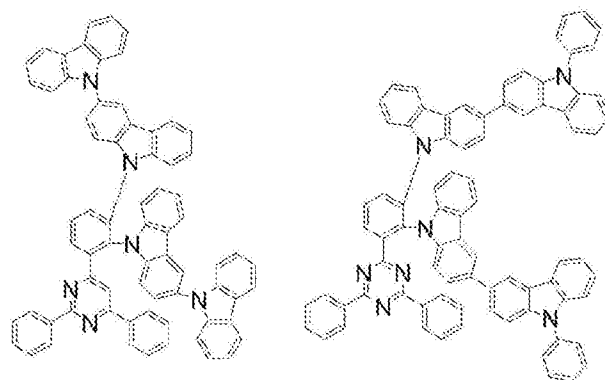


[0285] [化91]

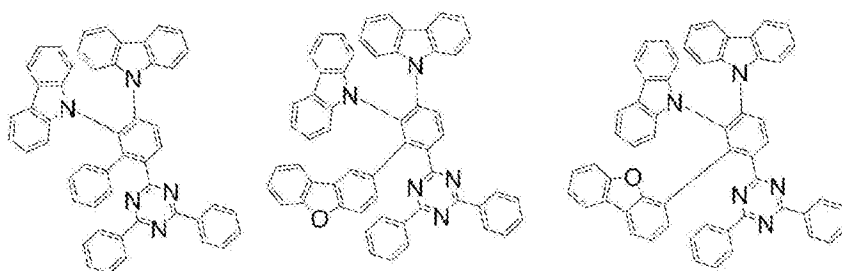


[0286]

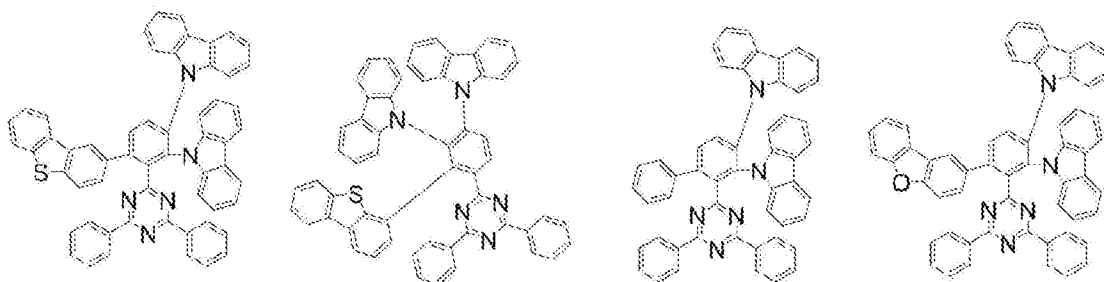
[化92]



[0287] [化93]

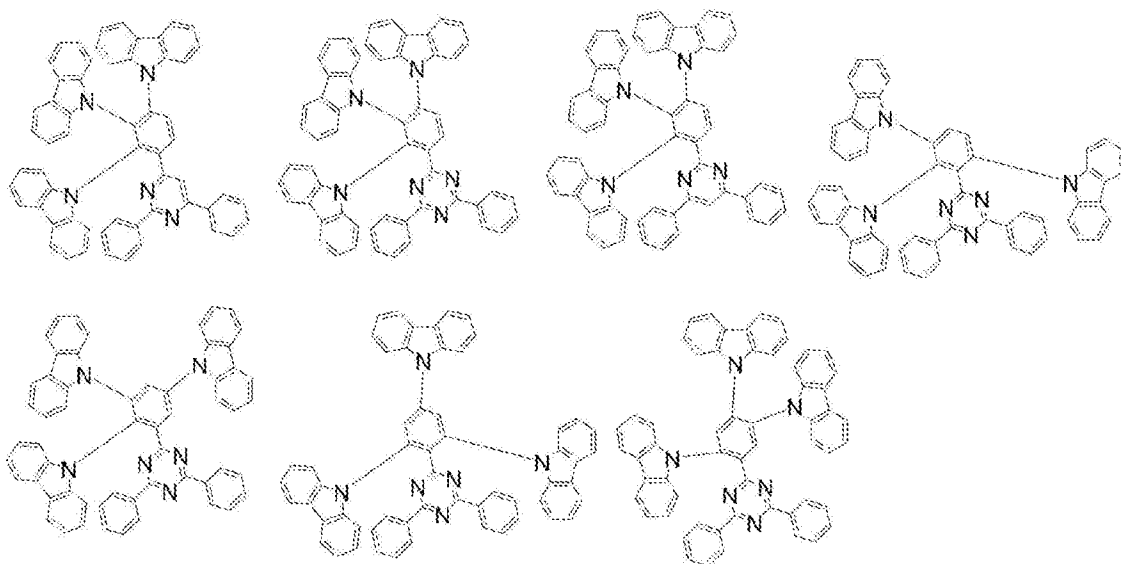


[0288] [化94]

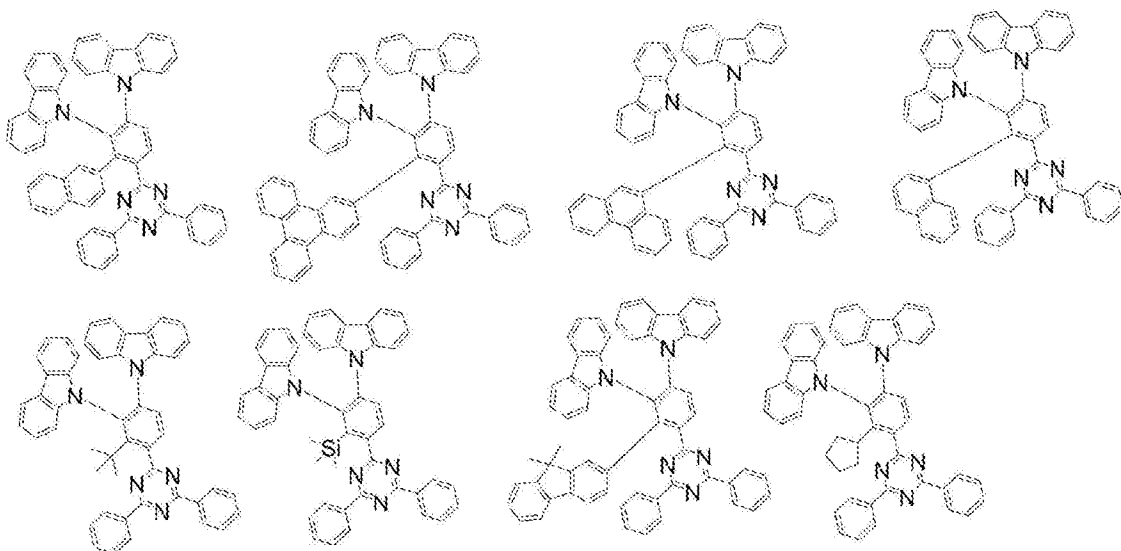


[0289]

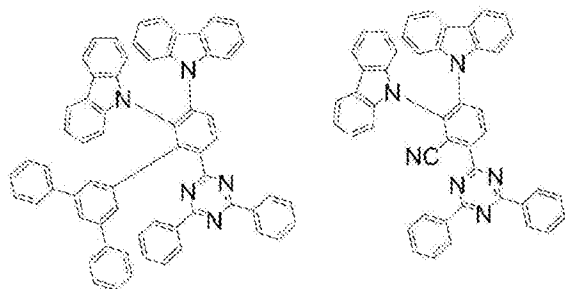
[化95]



[0290] [化96]

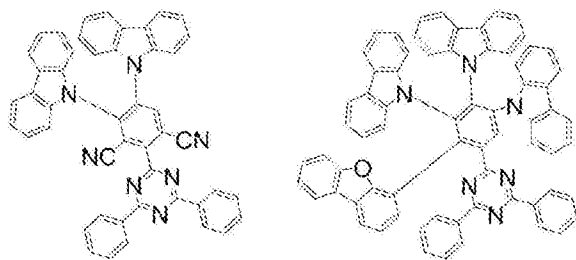


[0291] [化97]

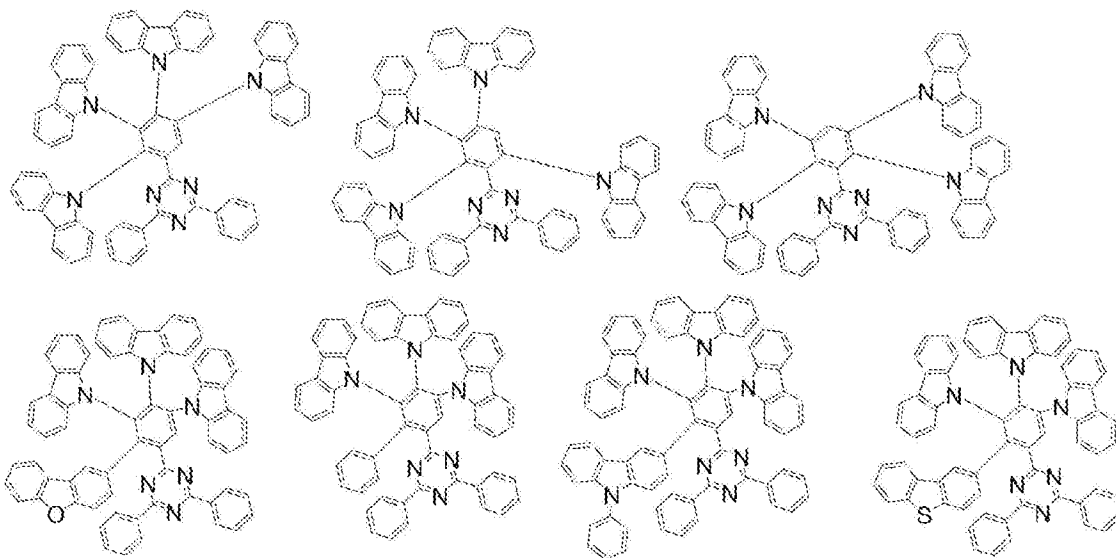


[0292]

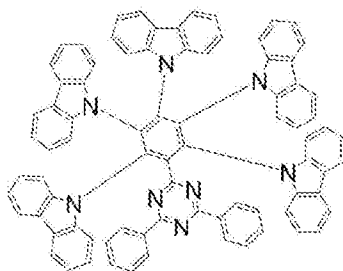
[化98]



[0293] [化99]



[0294] [化100]

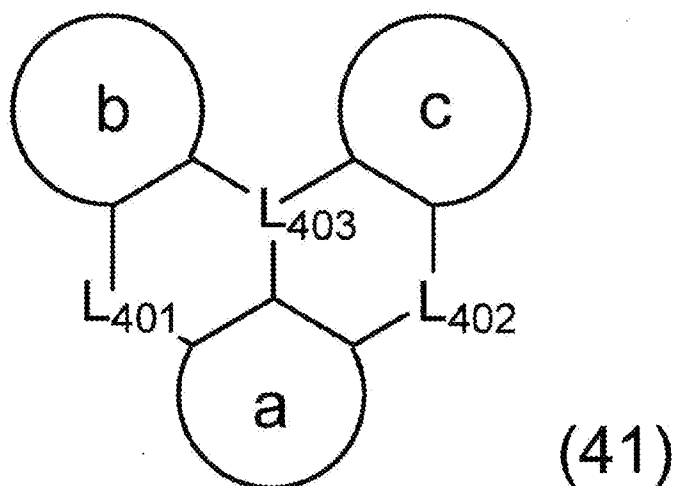


[0295] [蛍光発光性材料]

本実施形態において、蛍光発光性材料は、熱活性化遅延蛍光性を示さない化合物であることが好ましい。本実施形態において、蛍光発光性材料は、燐光発光性の金属錯体ではない。本実施形態において、蛍光発光性材料は、金属錯体ではないことが好ましい。

[0296] 本実施形態において、蛍光発光性材料は、下記一般式（41）で表される第三の化合物からなる群から選択される1以上の化合物である。

[0297] [化101]



[0298] (前記一般式 (41) において、

a 環、b 環及び c 環は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 の芳香族炭化水素環、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環であり、

L_{401} 及び L_{402} は、それぞれ独立に、O、S、Se、 NR_{40} 、 $C(R_{41})$

(R_{42})、又は $Si(R_{43})(R_{44})$ であり、

L_{403} は、B、P、又は $P=O$ であり、

$R_{40} \sim R_{44}$ は、それぞれ独立に、

前記 a 環、b 環又は c 環と結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

前記 a 環、b 環又は c 環と結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

前記 a 環、b 環及び c 環と結合せず、

R_{41} 及び R_{42} は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

R_{43} 及び R_{44} は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換
の縮合環を形成しない $R_{40} \sim R_{44}$ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、
 $-CR_{45}=N$ で表されるイミニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R_{45} は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 60 のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 60 の複素環基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基であり

、

R_{40} が複数存在する場合、複数の R_{40} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{41} が複数存在する場合、複数の R_{41} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{42} が複数存在する場合、複数の R_{42} は、互いに同一であるか、又は異なり、

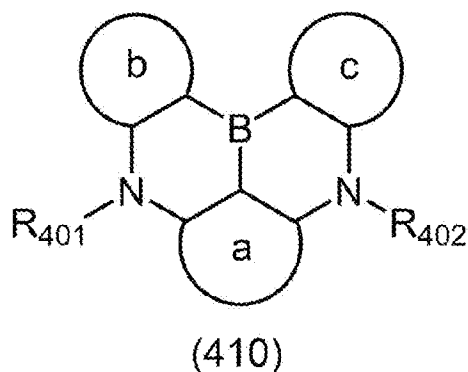
R_{43} が複数存在する場合、複数の R_{43} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{44} が複数存在する場合、複数の R_{44} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{45} が複数存在する場合、複数の R_{45} は、互いに同一であるか、又は異なる。))

[0299] 本実施形態において、前記一般式(41)で表される化合物は、下記一般式(410)で表される化合物であることが好ましい。

[0300] [化102]



[0301] (前記一般式(410)において、

a環、b環及びc環は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環であり、

R_{401} 及び R_{402} は、それぞれ独立に、

前記a環、b環又はc環と結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

前記a環、b環又はc環と結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

前記a環、b環及びc環と結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{401} 及び R_{402} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

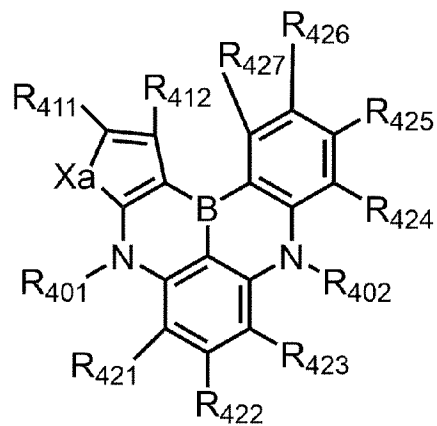
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

$-CR_{45}=N$ で表されるイミニル基、

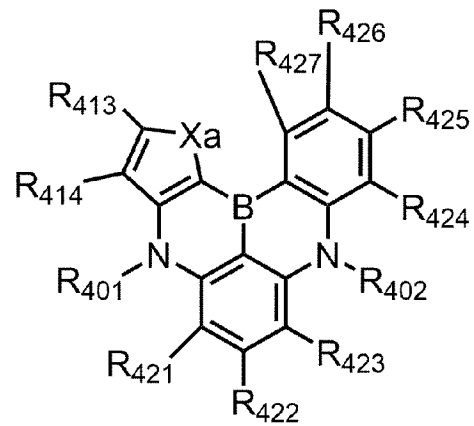
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である。)

[0302] 本実施形態において、前記一般式 (41) で表される化合物は、下記一般式 (41-1) ～ (41-6) で表される化合物からなる群から選択される化合物であることが好ましい。

[0303] [化103]

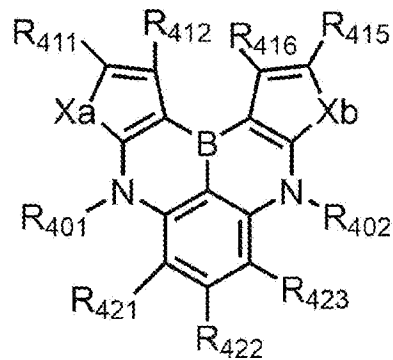


(41-1)

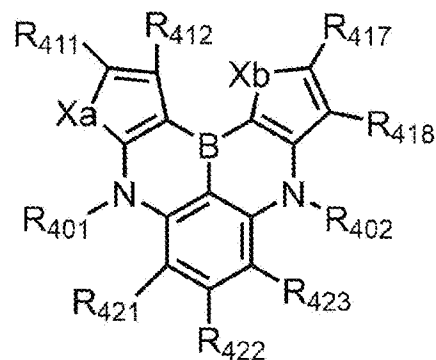


(41-2)

[0304] [化104]



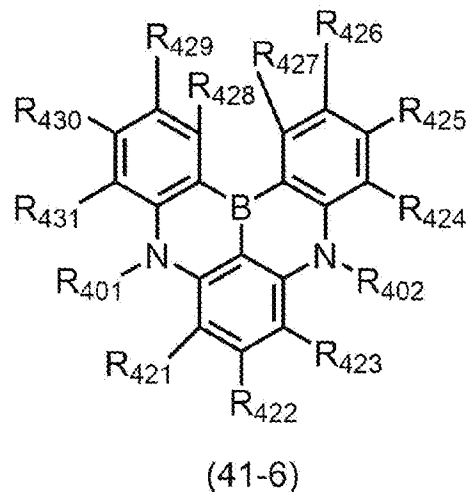
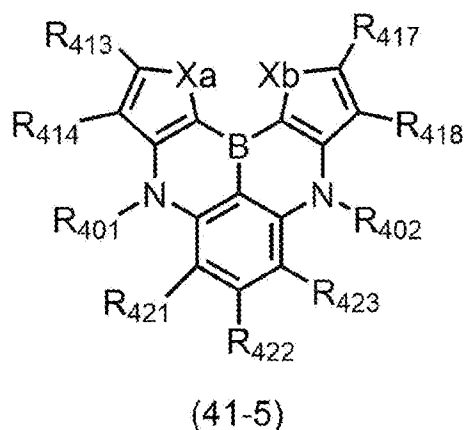
(41-3)



(41-4)

[0305]

[化105]



[0306] (前記一般式(41-1)において、

Xaは、O、S、Se、C(R₄₀₃)(R₄₀₄)、又はNR₄₀₅であり、

R₄₀₁とR₄₂₁との組、R₄₂₁～R₄₂₃のうち隣接する2つ以上からなる組、R₄₂₃とR₄₀₂との組、R₄₀₂とR₄₂₄との組、R₄₂₄～R₄₂₇のうち隣接する2つ以上からなる組、R₄₂₇とR₄₁₂との組、並びにR₄₁₂とR₄₁₁との組からなる群から選択される1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₄₀₁及びR₄₀₂は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—CR₄₅=Nで表されるイミニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₄₀₃～R₄₀₅、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前

記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{411} 、 R_{412} 、及び $R_{421} \sim R_{427}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R_X であり、

当該置換基 R_X は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903}) で表される基、

—O—(R_{904}) で表される基、

—S—(R_{905}) で表される基、

—N(R_{906})(R_{907}) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R_{901} が複数存在する場合、複数の R_{901} は、互いに同一であるか又は異なり、 R_{902} が複数存在する場合、複数の R_{902} は、互いに同一であるか又は異なり、 R_{903} が複数存在する場合、複数の R_{903} は、互いに同一であるか又は異なり、 R_{904} が複数存在する場合、複数の R_{904} は、互いに同一であるか又は異なり、 R_{905} が複数存在する場合、複数の R_{905} は、互いに同一であるか又は異なり、 R_{906} が複数存在する場合、複数の R_{906} は、互いに同一である

か又は異なり、 R_{907} が複数存在する場合、複数の R_{907} は、互いに同一であるか又は異なる。))

(前記一般式(41-2)において、

X_a は、O、S、Se、C(R_{403})(R_{404})、又は NR_{405} であり、
 R_{401} と R_{421} との組、 $R_{421} \sim R_{423}$ のうち隣接する2つ以上からなる組、
 R_{423} と R_{402} との組、 R_{402} と R_{424} との組、 $R_{424} \sim R_{427}$ のうち隣接する2つ以上からなる組、 R_{413} と R_{414} との組、並びに R_{414} と R_{401} との組からなる群から選択される1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{401} 及び R_{402} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

$-CR_{45}=N$ で表されるイミニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

$R_{403} \sim R_{405}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{413} 、 R_{414} 、及び $R_{421} \sim R_{427}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R_x であり、置換基 R_x は、前記一般式(41-1)における置換基 R_x と同義である。)

(前記一般式(41-3)において、

X_a 及び X_b は、それぞれ独立に、O、S、Se、C(R_{403})(R_{404})、又は NR_{405} であり、

R_{401} と R_{421} との組、 $R_{421} \sim R_{423}$ のうち隣接する2つ以上からなる組

、 R_{423} と R_{402} との組、 R_{415} と R_{416} との組、 R_{416} と R_{412} との組、並びに R_{412} と R_{411} との組からなる群から選択される1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{401} 及び R_{402} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

— $CR_{45}=N$ で表されるイミニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

$R_{403} \sim R_{405}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{411} 、 R_{412} 、 R_{415} 、 R_{416} 、及び $R_{421} \sim R_{423}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R_X であり、置換基 R_X は、前記一般式(41-1)における置換基 R_X と同義であり、

R_{403} が複数存在する場合、複数の R_{403} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{404} が複数存在する場合、複数の R_{404} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{405} が複数存在する場合、複数の R_{405} は、互いに同一であるか、又は異なる。))

(前記一般式(41-4)において、

X_a 及び X_b は、それぞれ独立に、O、S、Se、C(R_{403})(R_{404})、又は NR_{405} であり、

R_{401} と R_{421} との組、 $R_{421} \sim R_{423}$ のうち隣接する2つ以上からなる組

、 R_{423} と R_{402} との組、 R_{402} と R_{418} との組、 R_{418} と R_{417} との組、並びに R_{412} と R_{411} との組からなる群から選択される1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{401} 及び R_{402} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

— $CR_{45}=N$ で表されるイミニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

$R_{403} \sim R_{405}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{411} 、 R_{412} 、 R_{417} 、 R_{418} 、及び $R_{421} \sim R_{423}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R_X であり、置換基 R_X は、前記一般式(41-1)における置換基 R_X と同義であり、

R_{403} が複数存在する場合、複数の R_{403} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{404} が複数存在する場合、複数の R_{404} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{405} が複数存在する場合、複数の R_{405} は、互いに同一であるか、又は異なる。))

(前記一般式(41-5)において、

X_a 及び X_b は、それぞれ独立に、O、S、Se、C(R_{403})(R_{404})、又は NR_{405} であり、

R_{401} と R_{421} との組、 $R_{421} \sim R_{423}$ のうち隣接する2つ以上からなる組

、 R_{423} と R_{402} との組、 R_{402} と R_{418} との組、 R_{418} と R_{417} との組、 R_{413} と R_{414} との組、並びに R_{414} と R_{401} との組からなる群から選択される1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{401} 及び R_{402} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

$-CR_{45}=N$ で表されるイミニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

$R_{403} \sim R_{405}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{413} 、 R_{414} 、 R_{417} 、 R_{418} 、及び $R_{421} \sim R_{423}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R_x であり、置換基 R_x は、前記一般式(41-1)における置換基 R_x と同義であり、

R_{403} が複数存在する場合、複数の R_{403} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{404} が複数存在する場合、複数の R_{404} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{405} が複数存在する場合、複数の R_{405} は、互いに同一であるか、又は異なる。))

(前記一般式(41-6)において、

R_{401} と R_{421} との組、 $R_{421} \sim R_{423}$ のうち隣接する2つ以上からなる組、 R_{423} と R_{402} との組、 R_{402} と R_{424} との組、 $R_{424} \sim R_{427}$ のうち隣接す

る2つ以上からなる組、 R_{427} と R_{428} との組、 $R_{428} \sim R_{431}$ のうち隣接する2つ以上からなる組、並びに R_{431} と R_{401} との組からなる群から選択される1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{401} 及び R_{402} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

$-CR_{45}=N$ で表されるイミニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

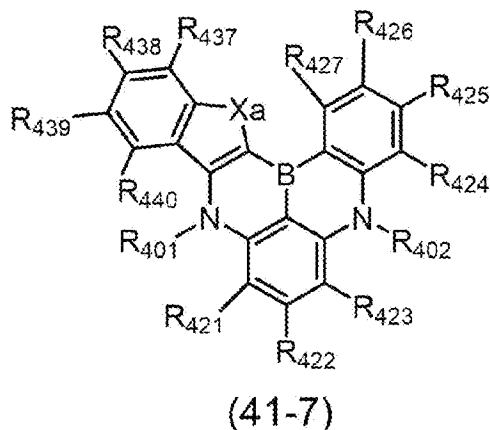
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{421} \sim R_{431}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R_x であり、置換基 R_x は、前記一般式(41-1)における置換基 R_x と同義である。)

[0307] 前記一般式(41-1)～(41-5)で表される化合物において、 R_{412} と R_{411} との組、 R_{413} と R_{414} との組、 R_{415} と R_{416} との組、並びに R_{417} と R_{418} との組からなる群から選択される1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、又は互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成することも好ましい。

[0308] 本実施形態において、前記一般式(41)で表される化合物は、下記一般式(41-7)で表される化合物であることも好ましい。

[0309]

[化106]



[0310] (前記一般式(41-7)において、

Xaは、O、S、Se、C(R₄₀₃)(R₄₀₄)、又はNR₄₀₅であり、
 R₄₀₁とR₄₂₁との組、R₄₂₁～R₄₂₃のうち隣接する2つ以上からなる組、
 R₄₂₃とR₄₀₂との組、R₄₀₂とR₄₂₄との組、R₄₂₄～R₄₂₇のうち隣接する2つ以上からなる組、並びにR₄₃₇～R₄₄₀のうち隣接する2つ以上からなる組からなる群から選択される1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₄₀₁及びR₄₀₂は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

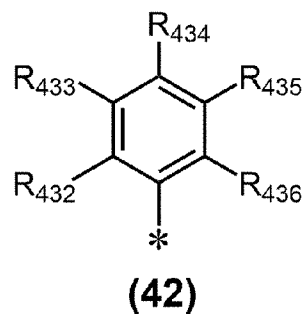
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₄₀₃～R₄₀₅、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₄₂₁～R₄₂₇及びR₄₃₇～R₄₄₀は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基R_xであり、置換基R_xは、前記一

般式（４１－１）における置換基 R_x と同義である。）

[0311] 本実施形態において、 R_{401} 及び R_{402} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基であることがより好ましく、下記一般式（４２）で表される基であることがさらに好ましい。

[0312] [化107]



[0313] （前記一般式（４２）において、

$R_{432} \sim R_{436}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{432} \sim R_{436}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R_x であり、置換基 R_x は、前記一般式（４１－１）における置換基 R_x と同義であり、

複数の R_{432} が存在する場合、複数の R_{432} は互いに同一であるか又は異なり、

複数の R_{433} が存在する場合、複数の R_{433} は互いに同一であるか又は異なり、

複数の R_{434} が存在する場合、複数の R_{434} は互いに同一であるか又は異なり、

複数の R_{435} が存在する場合、複数の R_{435} は互いに同一であるか又は異なり、

り、

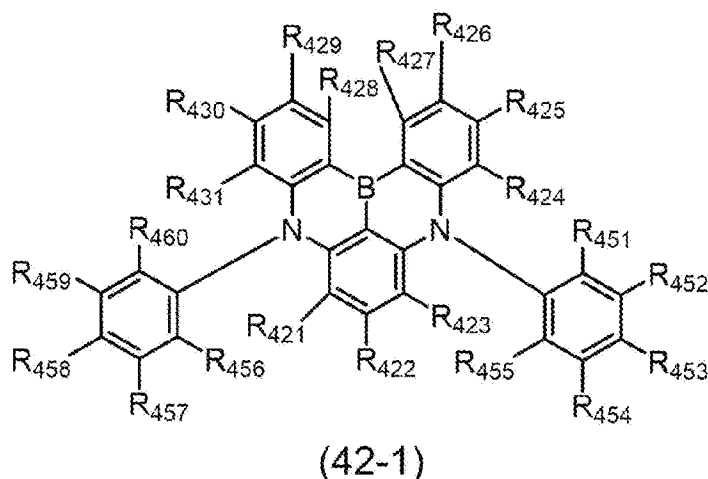
複数の R_{436} が存在する場合、複数の R_{436} は互いに同一であるか又は異なり、

り、

＊は、結合位置を示す。）

[0314] 本実施形態において、前記一般式（４１）で表される化合物は、下記一般式（４２－１）で表される化合物であることも好ましい。

[0315] [化108]



（前記一般式（４２－１）において、

$R_{421} \sim R_{431}$ は、それぞれ、前記一般式（４１－６）における $R_{421} \sim R_{431}$ と同義であり、

$R_{451} \sim R_{455}$ のうち隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_{456} \sim R_{460}$ のうち隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

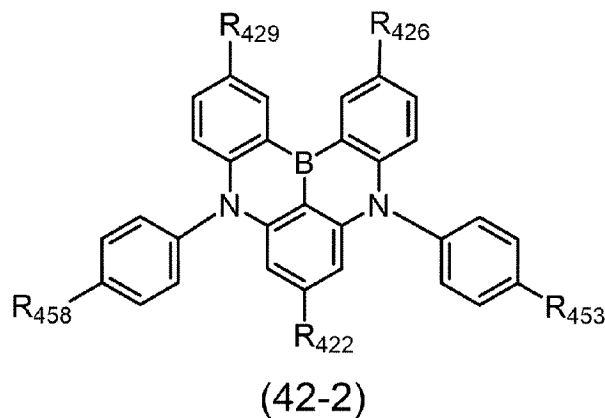
互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{451} \sim R_{455}$ 及び $R_{456} \sim R_{460}$ は、それぞれ独立に

、水素原子又は置換基 R_x であり、置換基 R_x は、前記一般式 (41-1) における置換基 R_x と同義である。)

[0316] 本実施形態において、前記一般式 (41) で表される化合物は、下記一般式 (42-2) で表される化合物であることも好ましい。

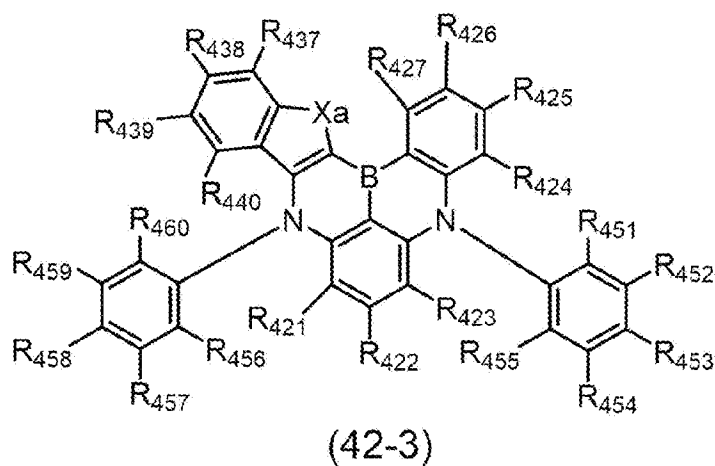
[0317] [化109]



[0318] (前記一般式 (42-2) において、 R_{422} 、 R_{426} 、 R_{429} 、 R_{453} 、及び R_{458} は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R_x であり、置換基 R_x は、前記一般式 (41-1) における置換基 R_x と同義である。)

[0319] 本実施形態において、前記一般式 (41) で表される化合物は、下記一般式 (42-3) で表される化合物であることも好ましい。

[0320] [化110]



[0321] (前記一般式 (42-3) において、

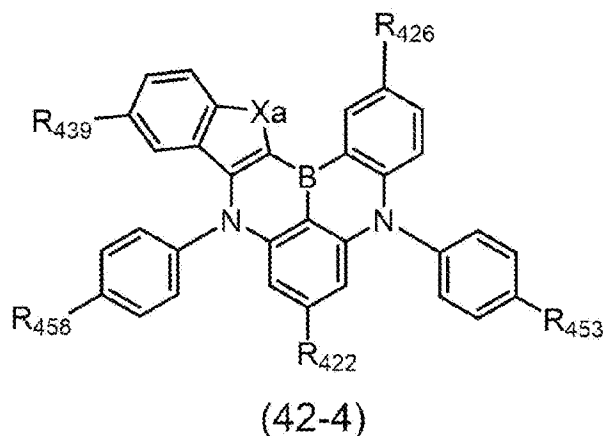
$R_{421} \sim R_{427}$ 、 $R_{437} \sim R_{440}$ 及び Xa は、それぞれ、前記一般式 (41

－ 7) における $R_{421} \sim R_{427}$ 、 $R_{437} \sim R_{440}$ 及び Xa と同義であり、
 $R_{451} \sim R_{455}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
 互いに結合せず、
 $R_{456} \sim R_{460}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
 互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{451} \sim R_{455}$ 及び $R_{456} \sim R_{460}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R_x であり、置換基 R_x は、前記一般式 (41-1) における置換基 R_x と同義である。)

[0322] 本実施形態において、前記一般式 (41) で表される化合物は、下記一般式 (42-4) で表される化合物であることも好ましい。

[0323] [化111]



[0324] (前記一般式 (42-4) において、 Xa は、前記一般式 (41-7) における Xa と同義であり、 R_{422} 、 R_{426} 、 R_{429} 、 R_{439} 、 R_{453} 、及び R_{458} は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R_x であり、置換基 R_x は、前記一般式 (41-1) における置換基 R_x と同義である。)

[0325] 本実施形態において、第三の化合物中の R_{422} 、 R_{426} 、 R_{429} 、 R_{439} 、

R_{453} 、及び R_{458} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基であることが好ましく、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基であることがより好ましく、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基であることがさらに好ましい。

[0326] 本実施形態において、第三の化合物中の X_a 及び X_b は、それぞれ独立に、O又はSであることが好ましい。

[0327] (一般式(41)で表される化合物の製造方法)

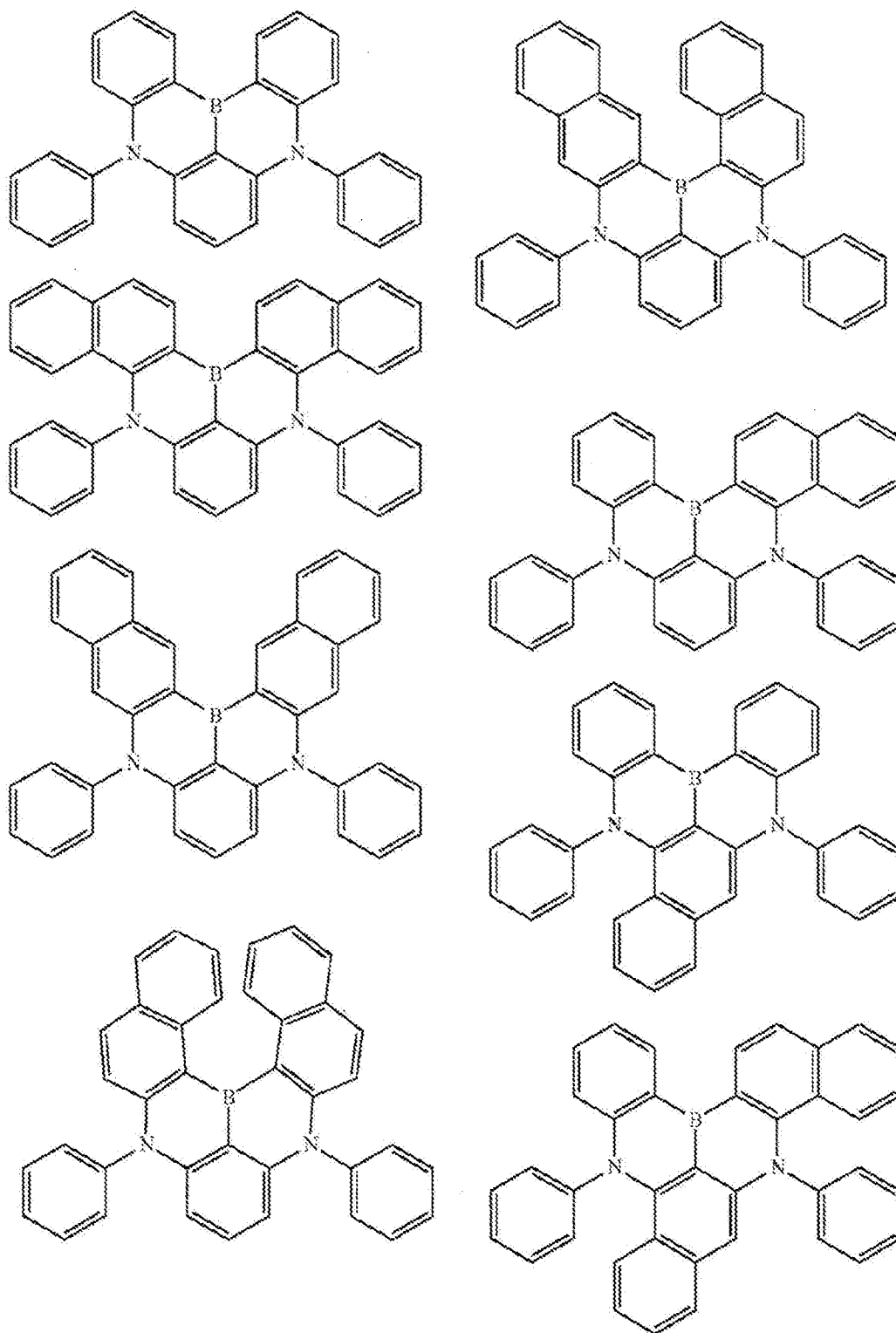
前記一般式(41)で表される化合物は、公知の方法により製造できる。
また、前記一般式(41)で表される化合物は、公知の方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。

[0328] (一般式(41)で表される化合物の具体例)

前記一般式(41)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。下記具体例中、Meは、メチル基、tBuは、ターシャリーブチル基、Phは、フェニル基を示す。

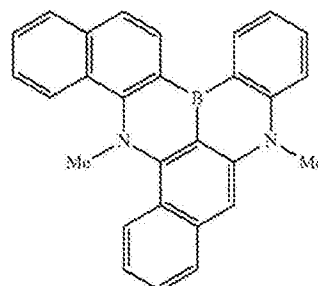
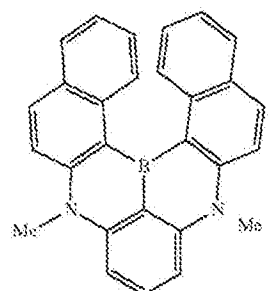
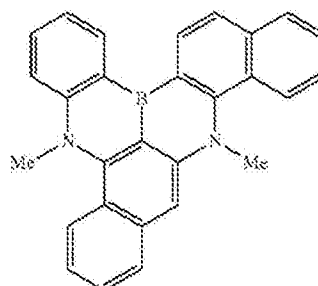
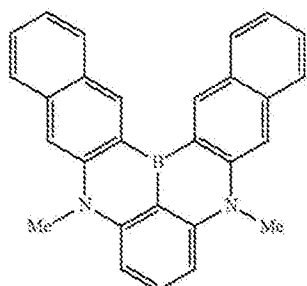
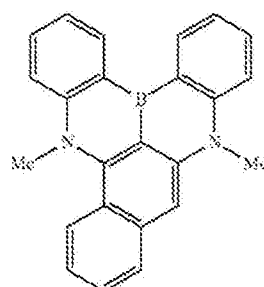
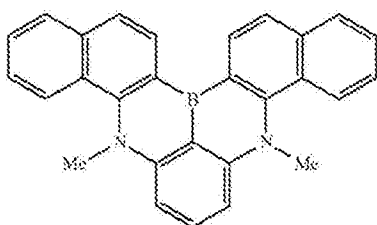
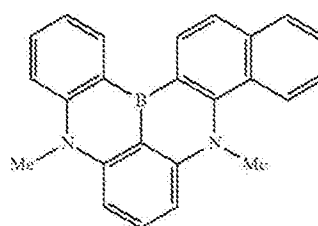
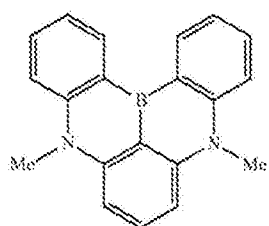
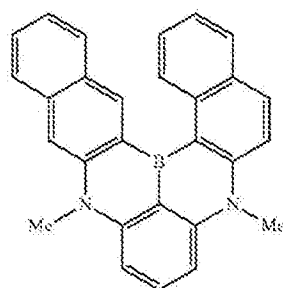
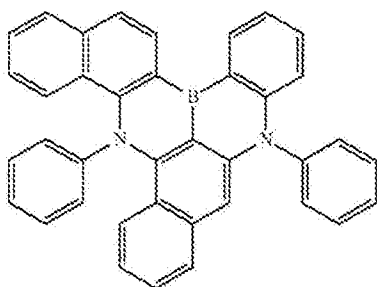
[0329]

[化112]

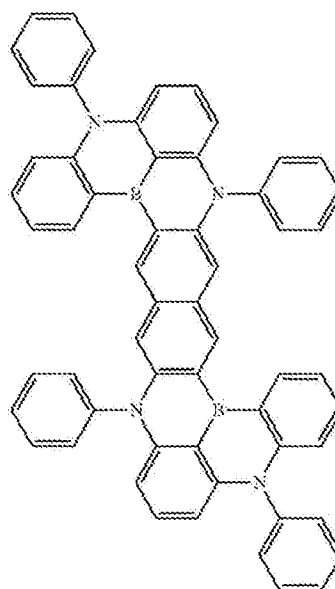
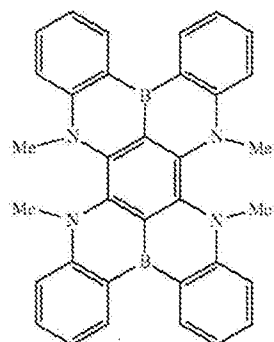
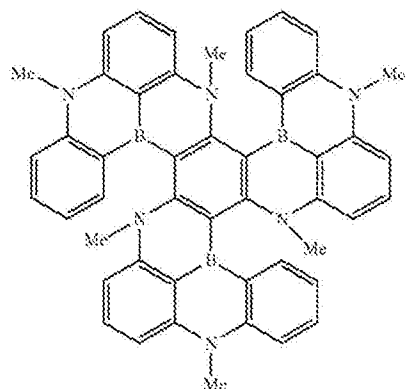
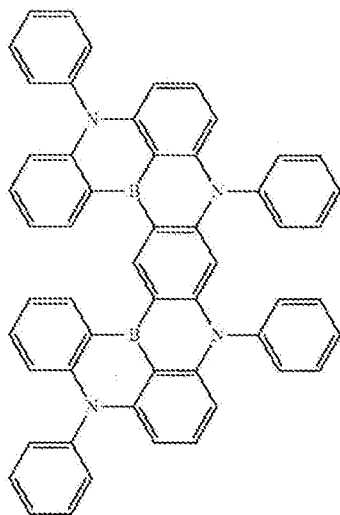
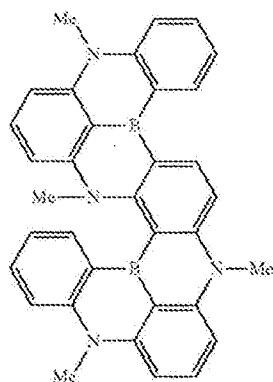
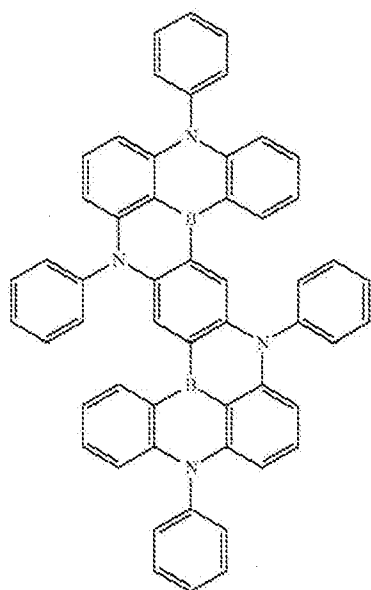


[0330]

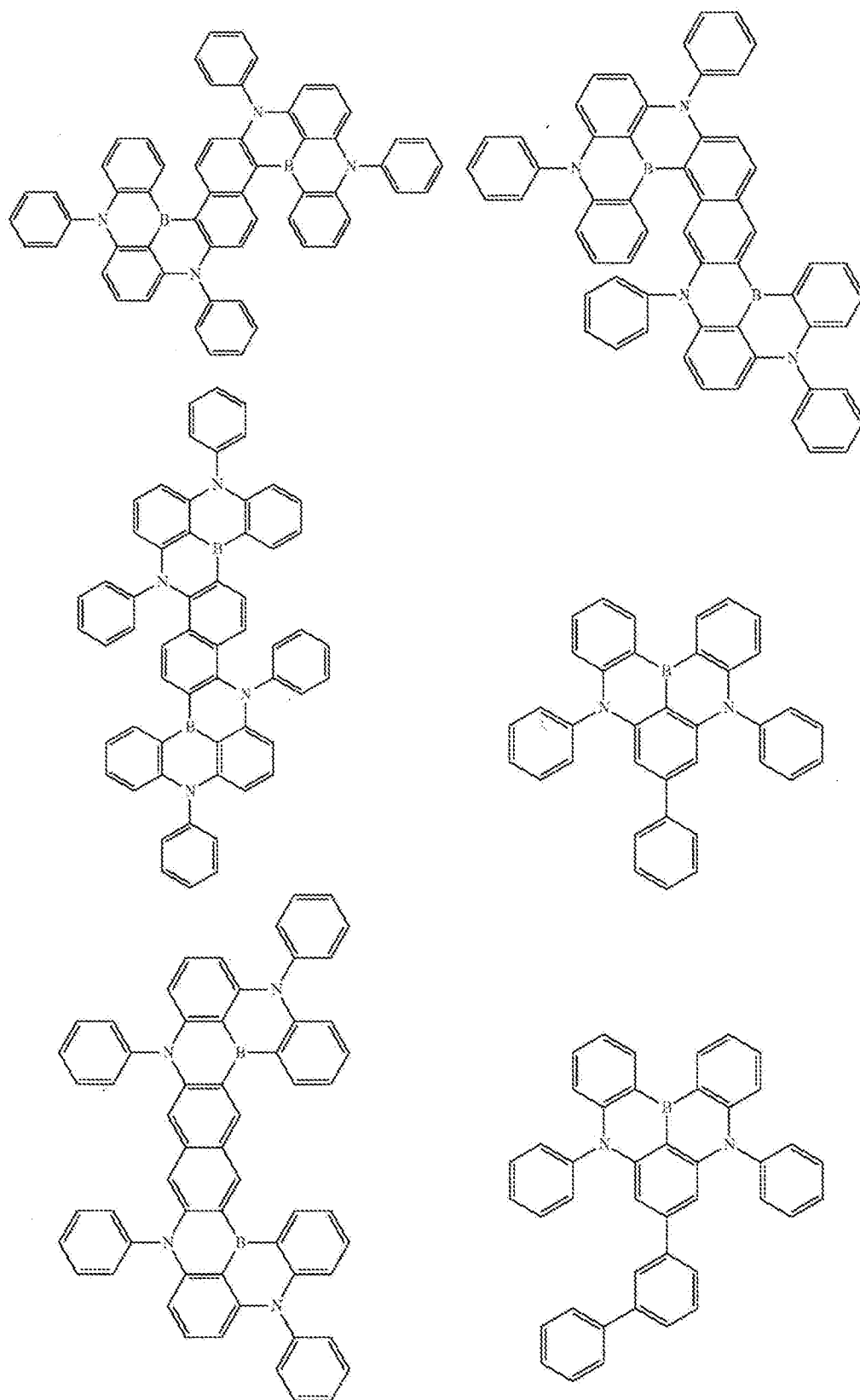
[化113]



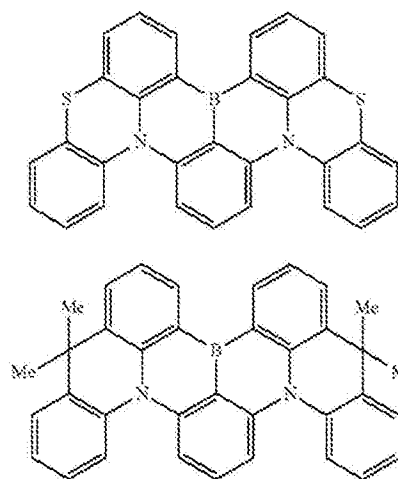
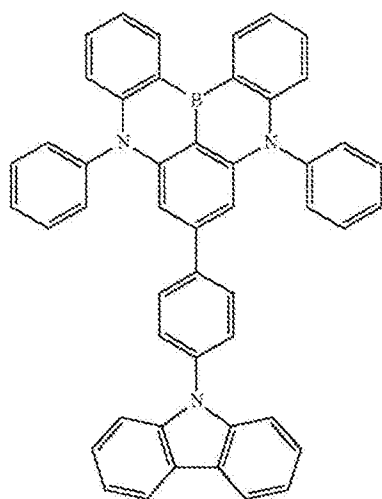
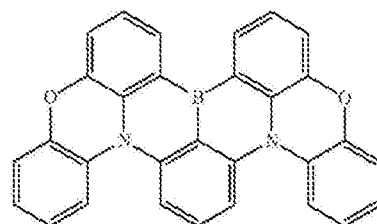
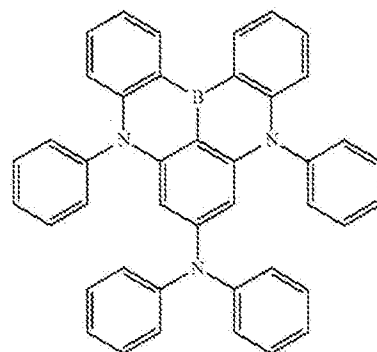
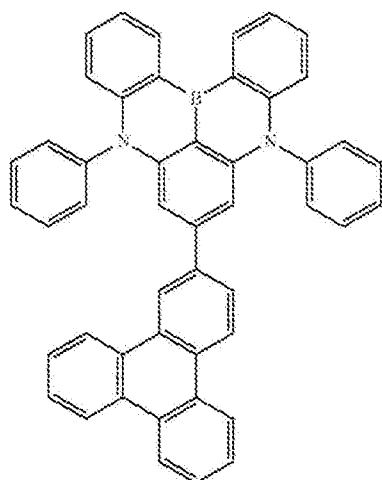
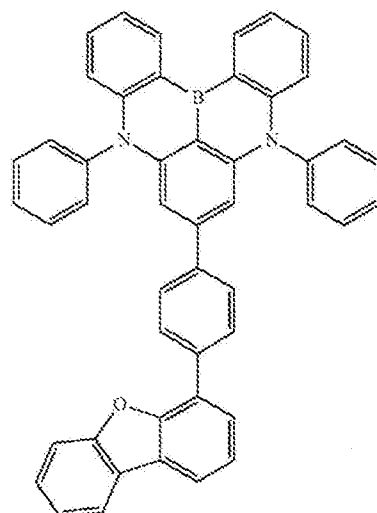
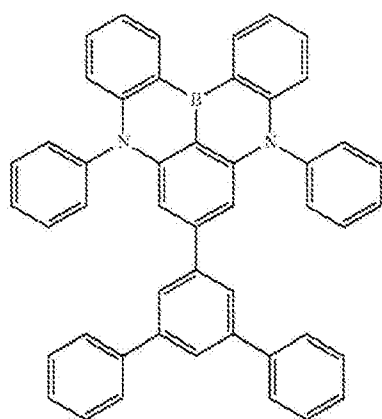
[0331] [化114]



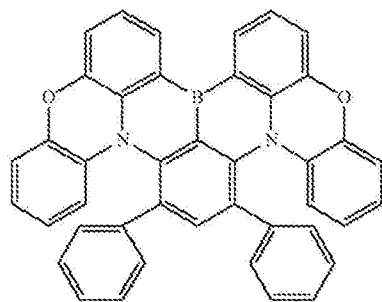
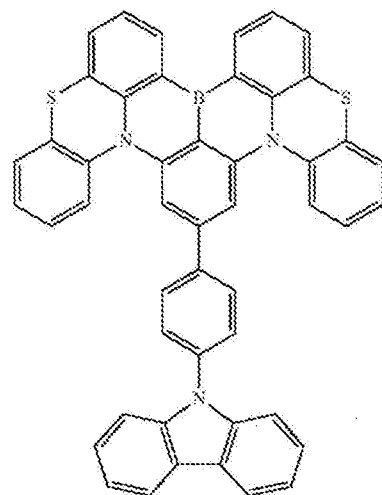
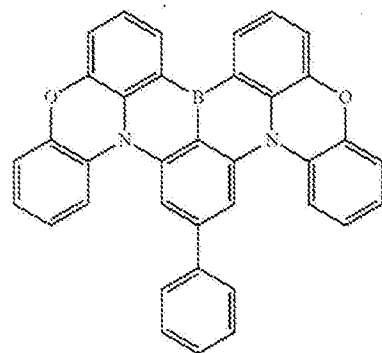
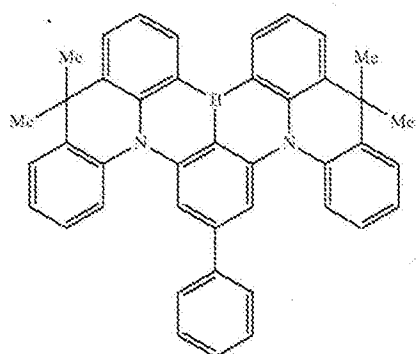
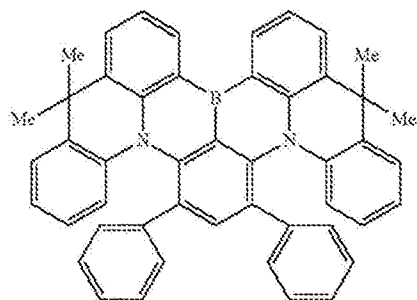
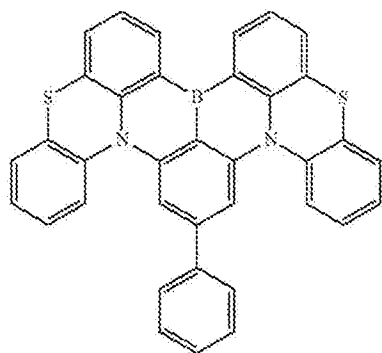
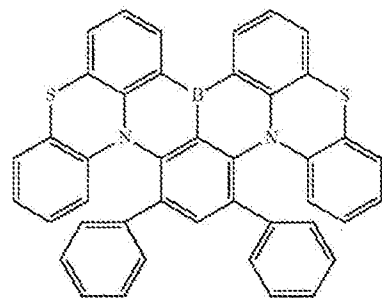
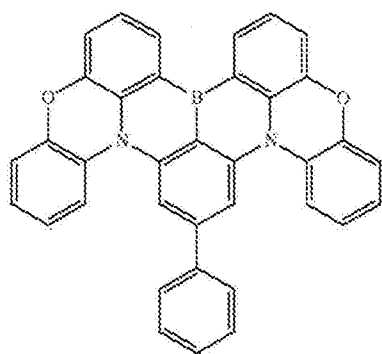
[0332] [化115]



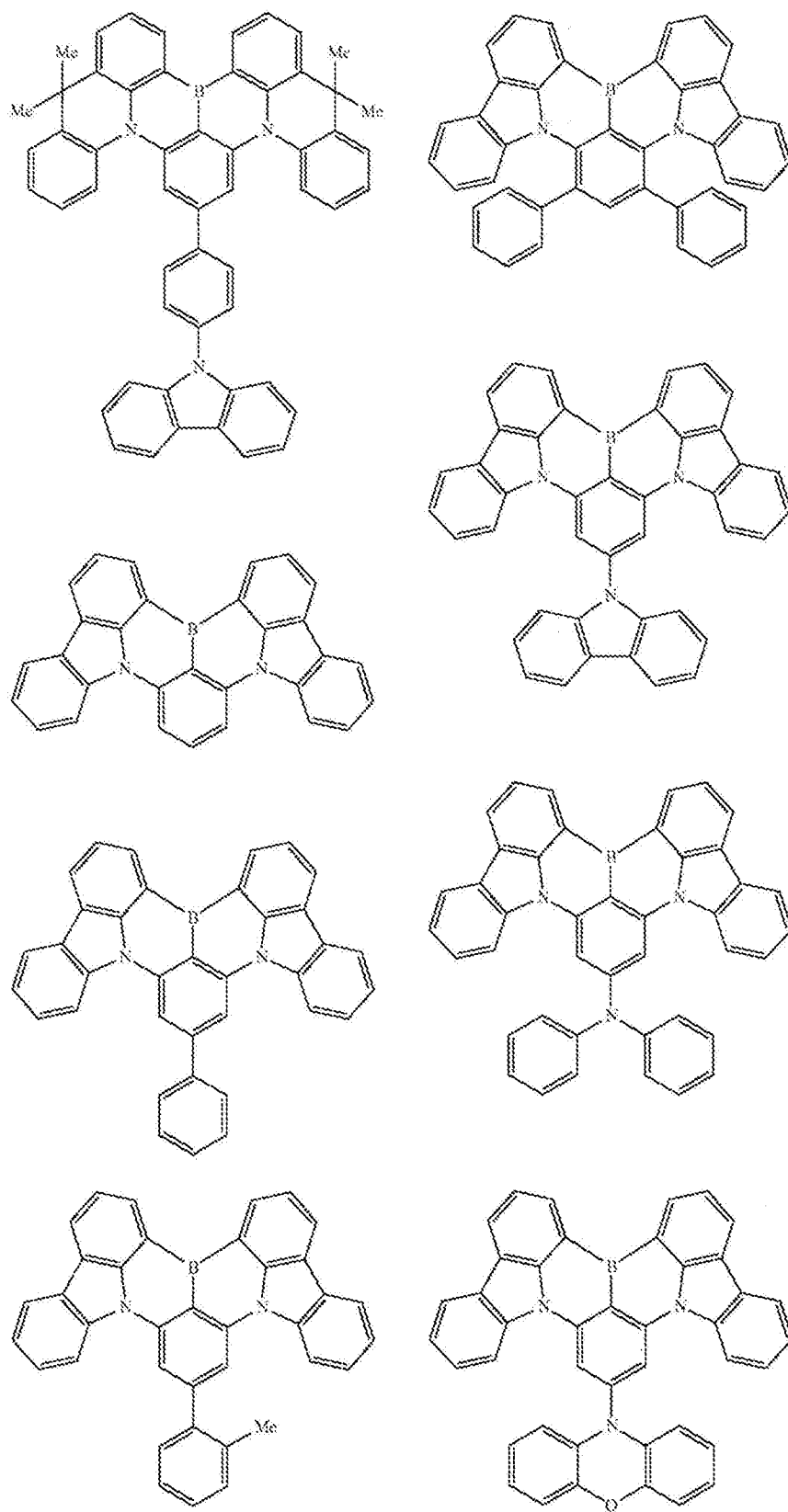
[0333] [化116]



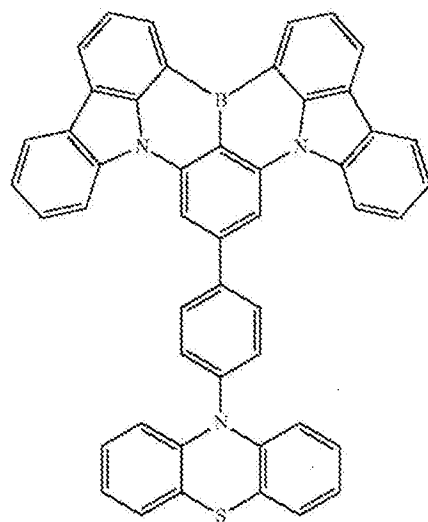
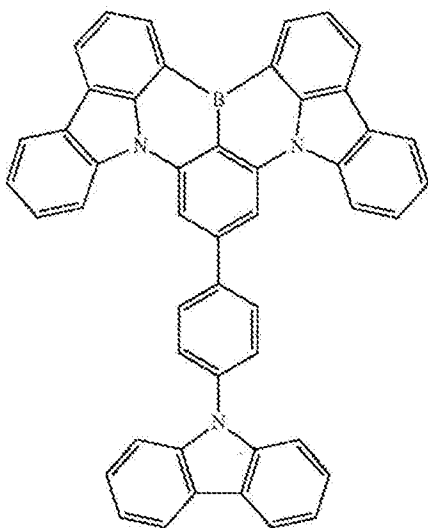
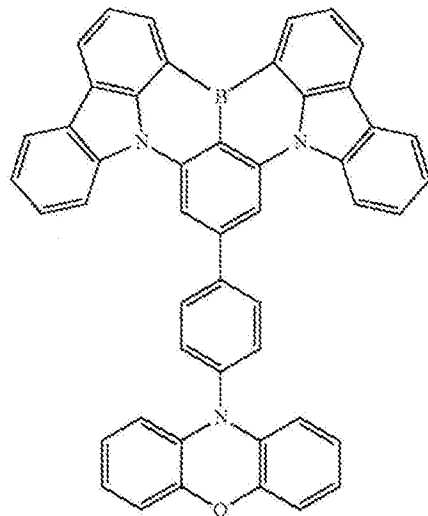
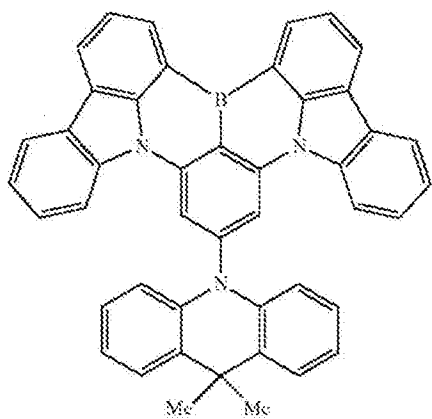
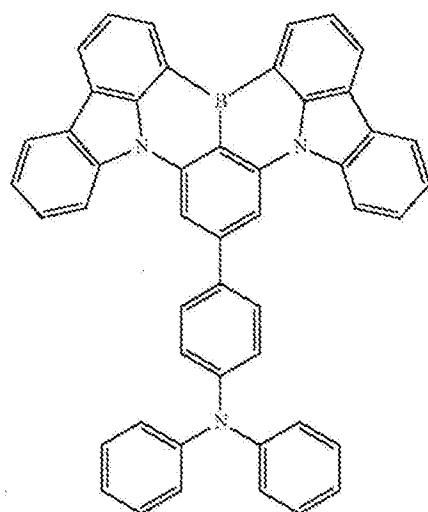
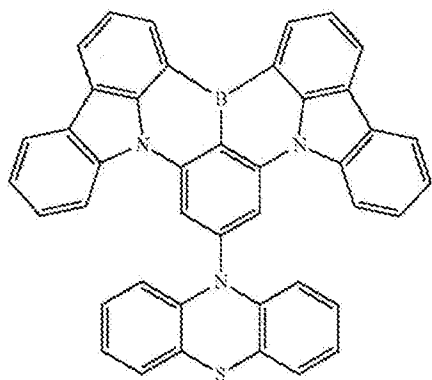
[0334] [化117]



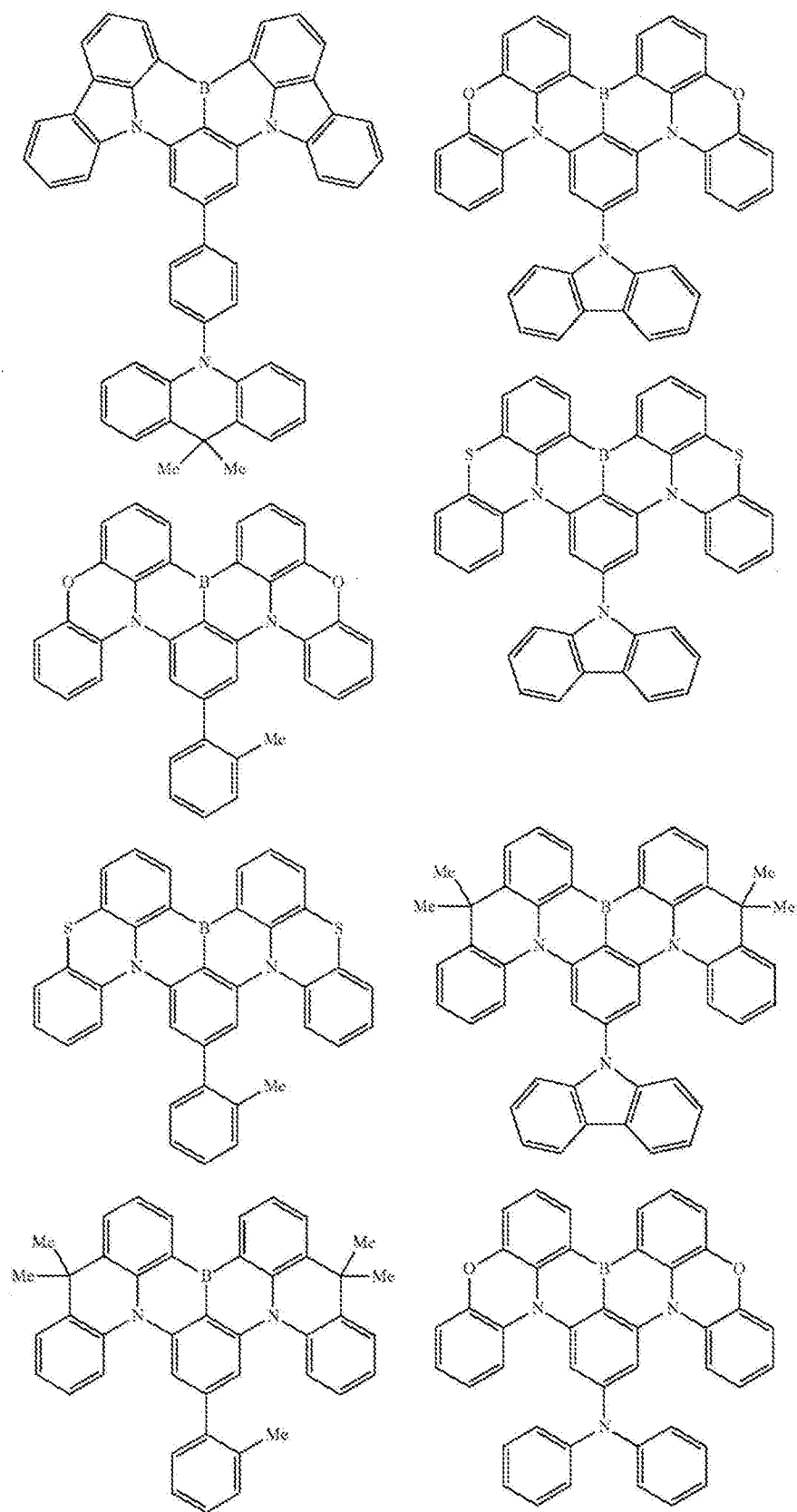
[0335] [化118]



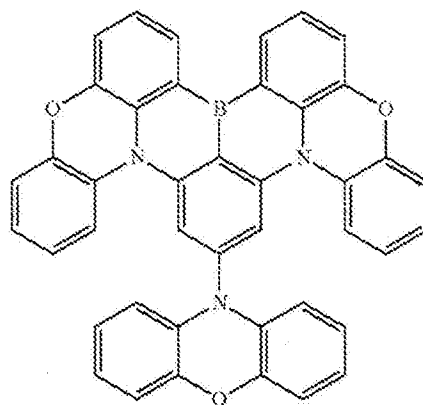
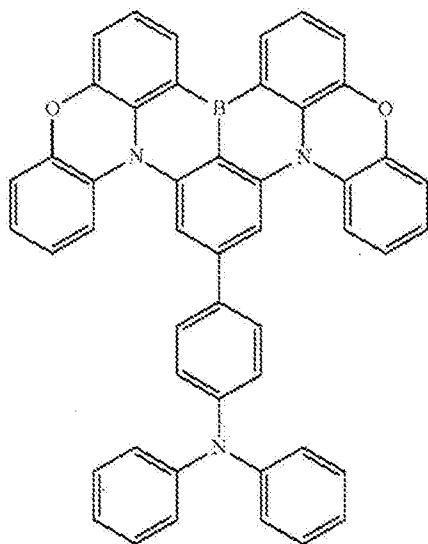
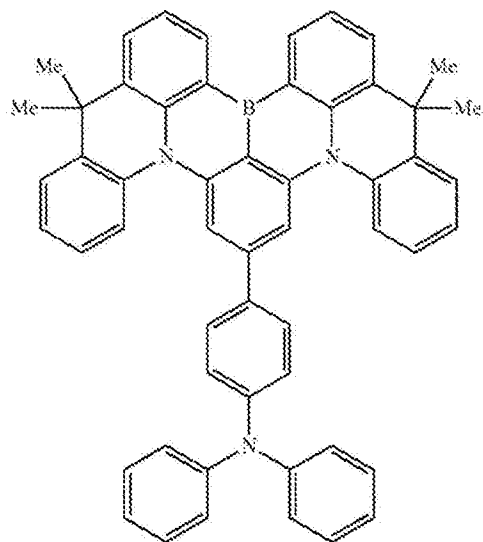
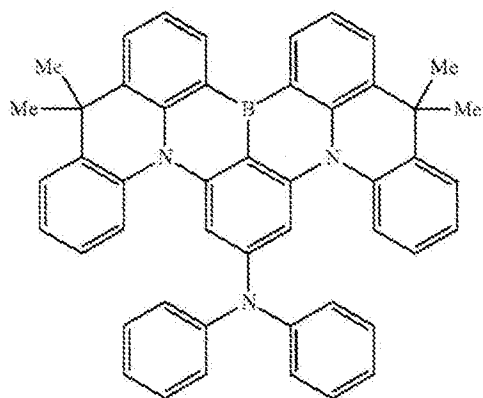
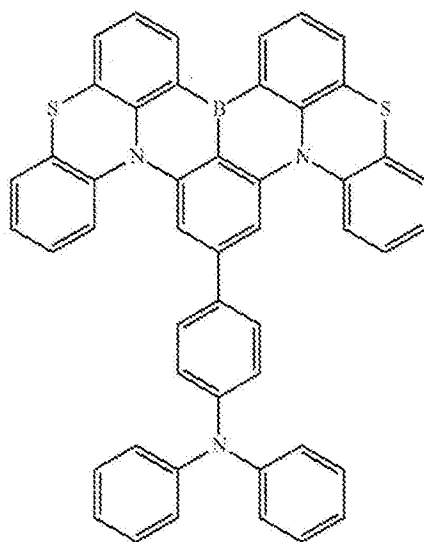
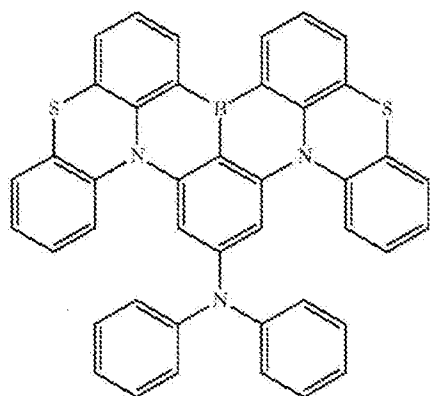
[0336] [化119]



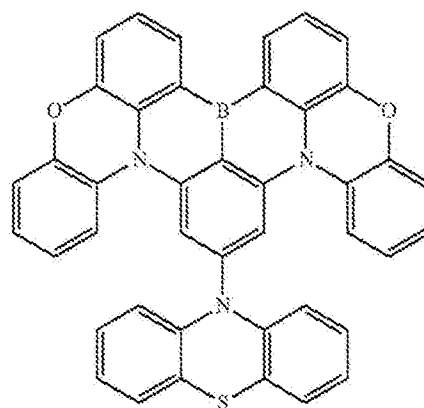
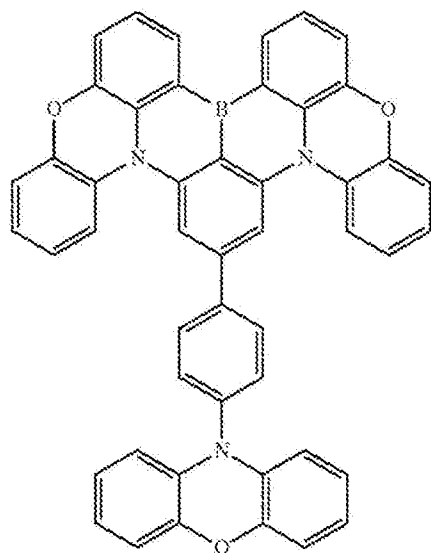
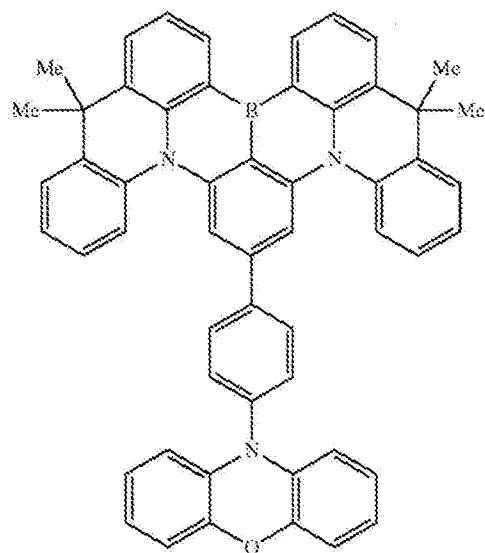
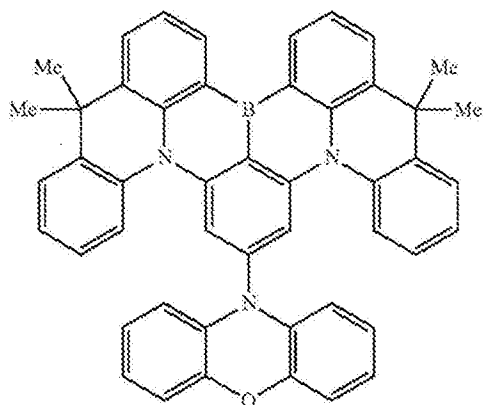
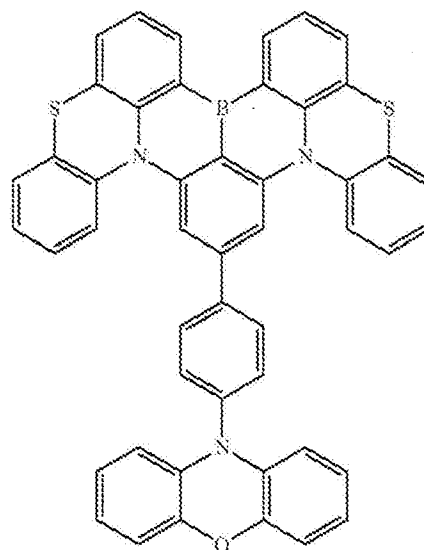
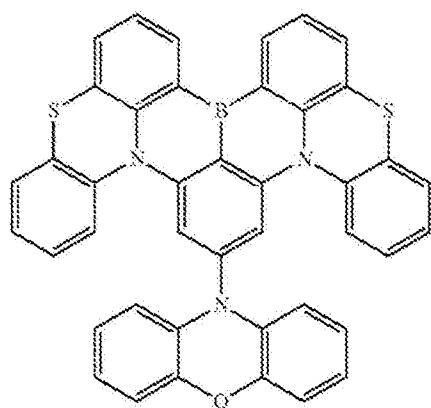
[0337] [化120]



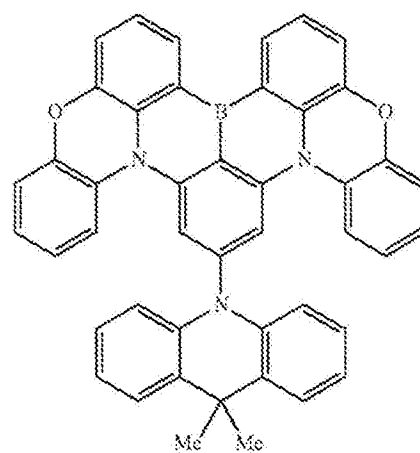
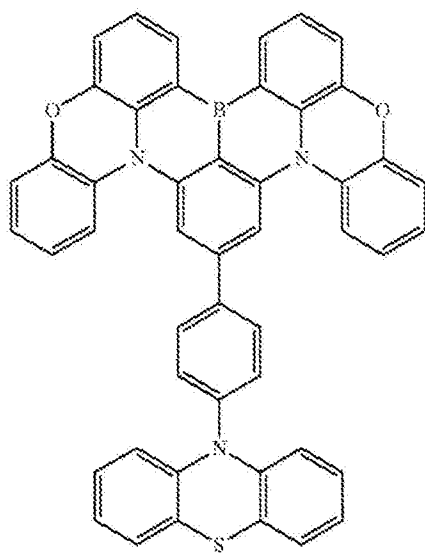
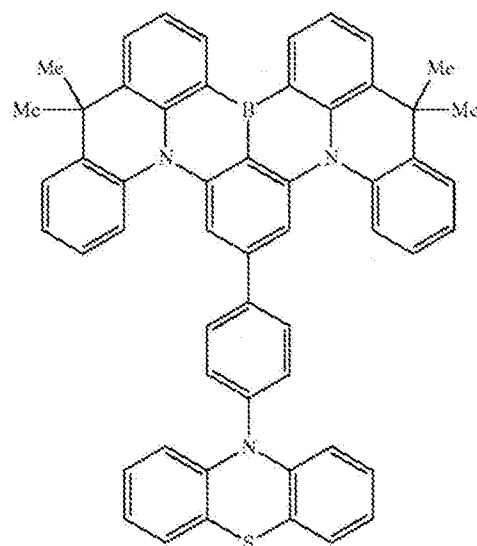
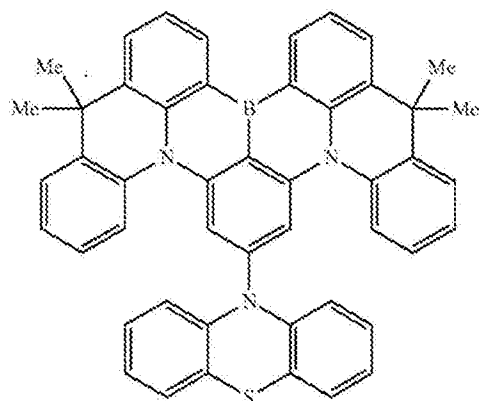
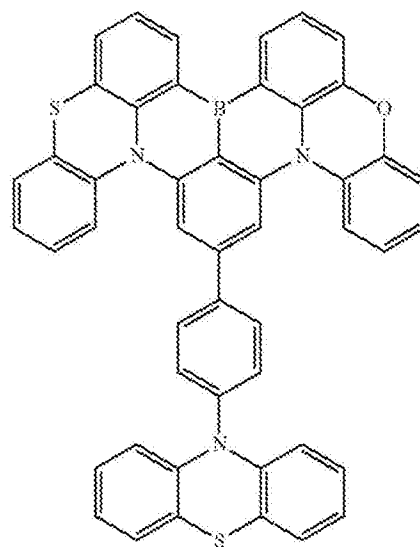
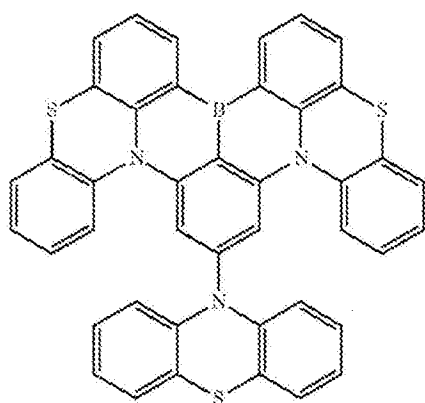
[0338] [化121]



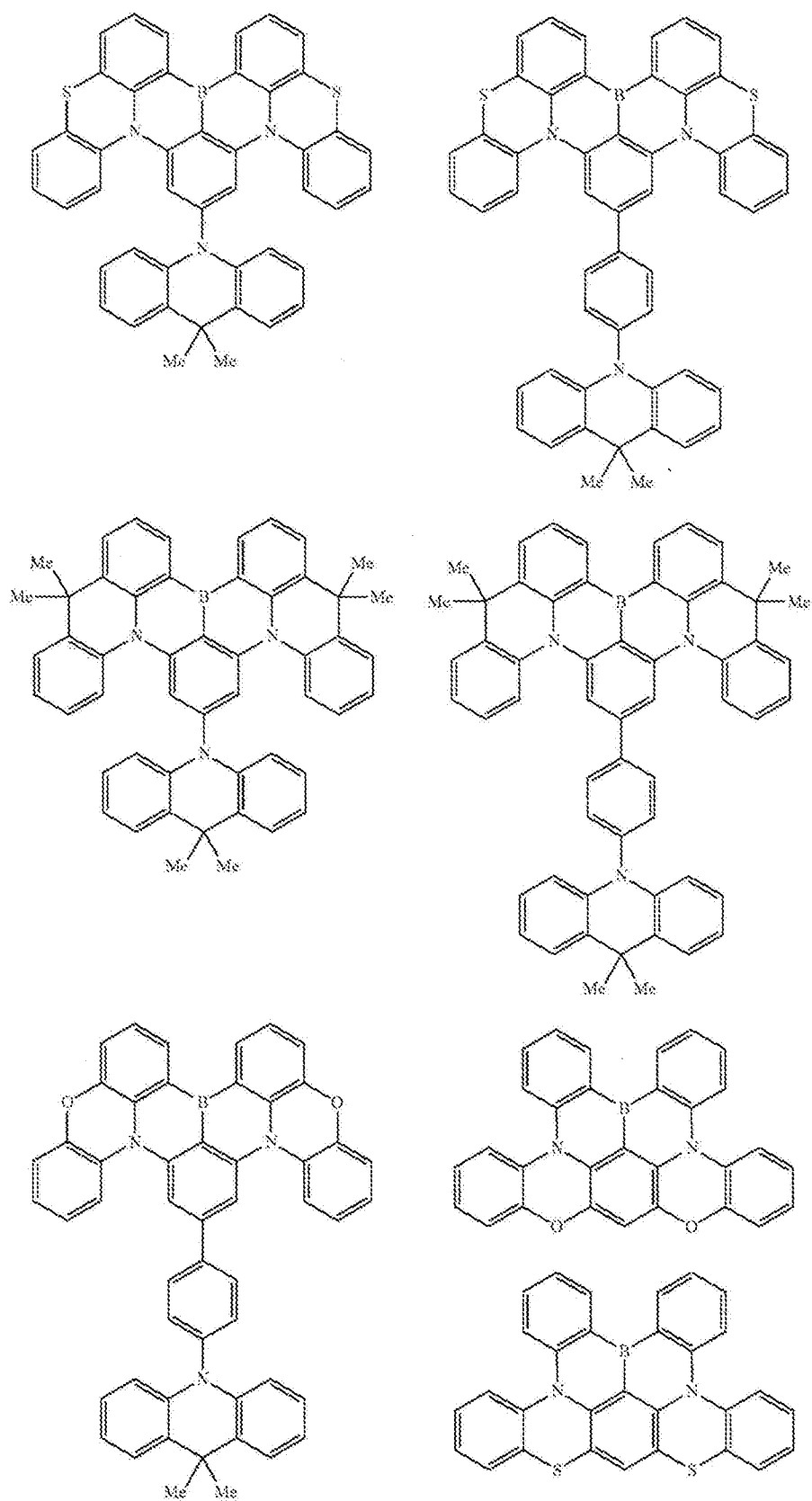
[0339] [化122]



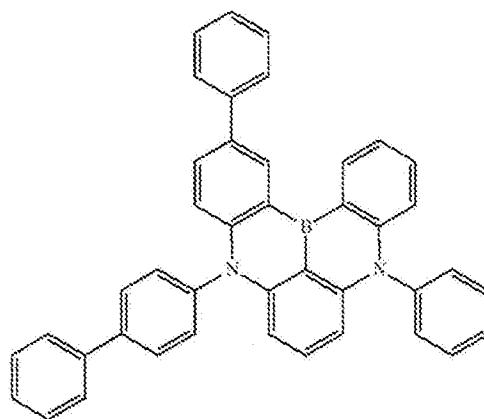
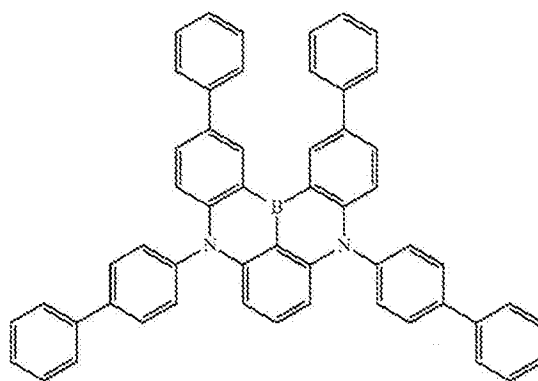
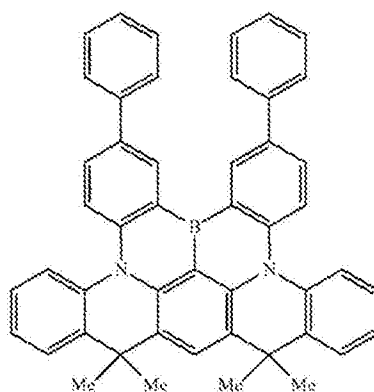
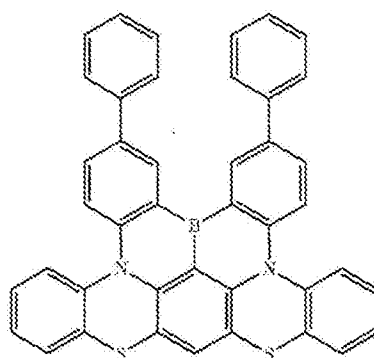
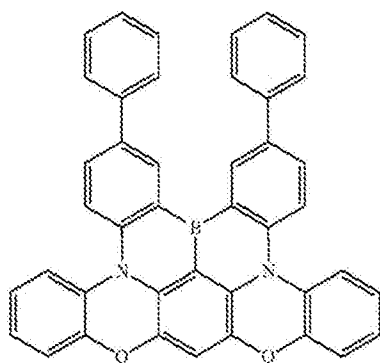
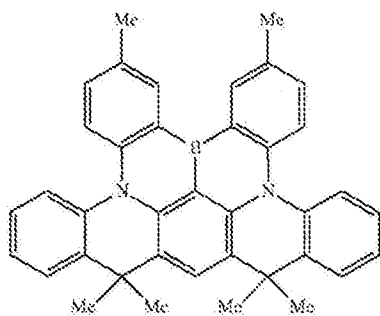
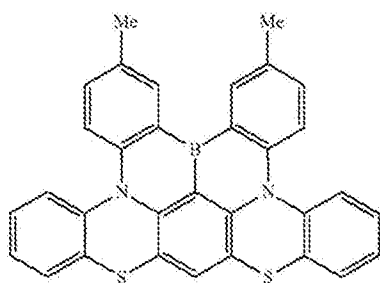
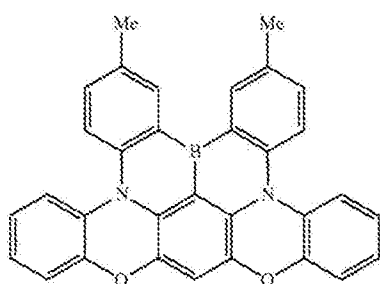
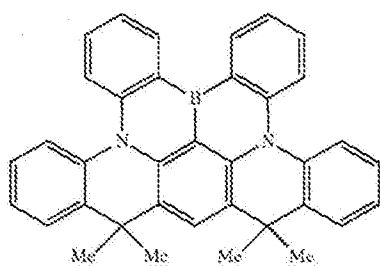
[0340] [化123]



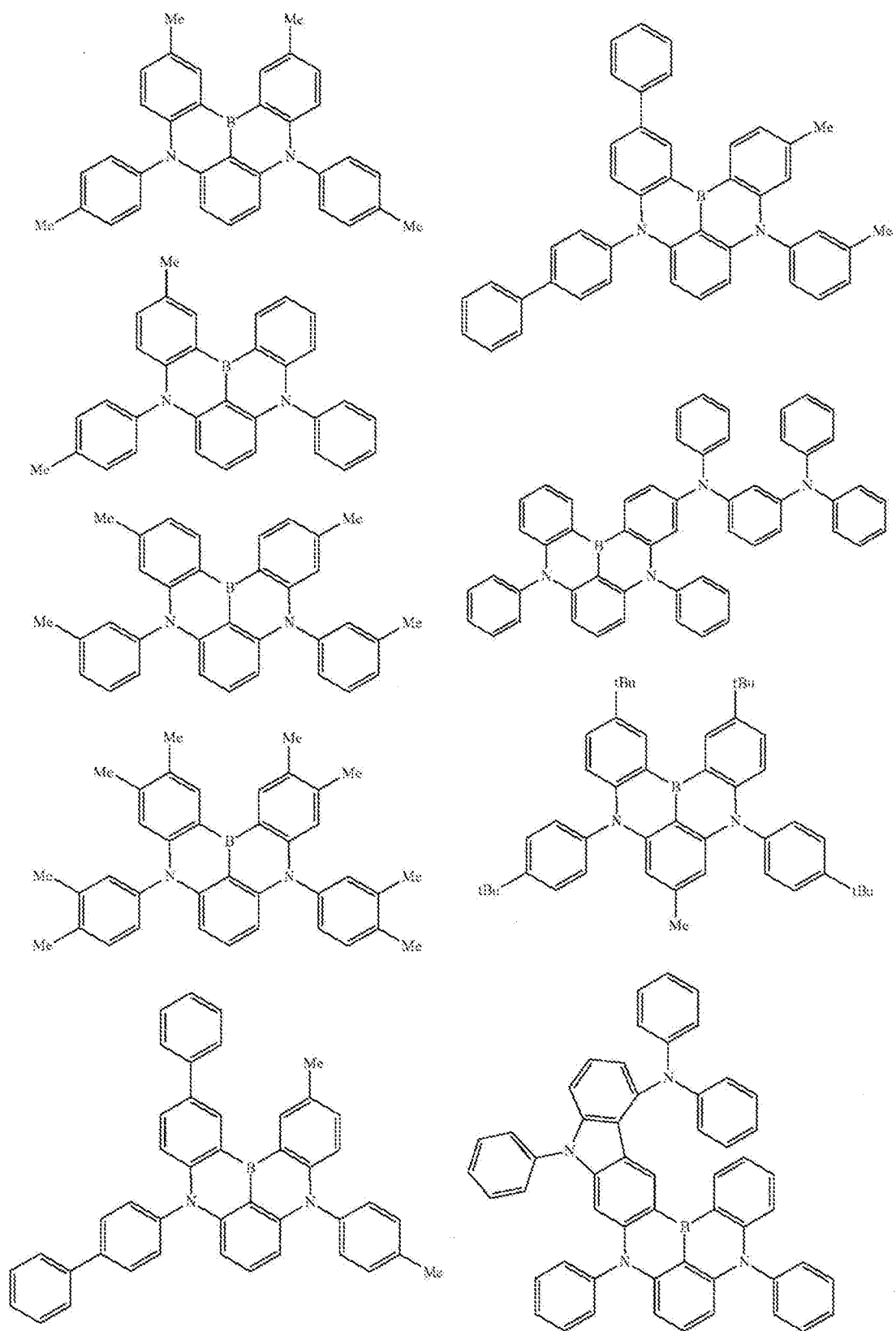
[0341] [化124]



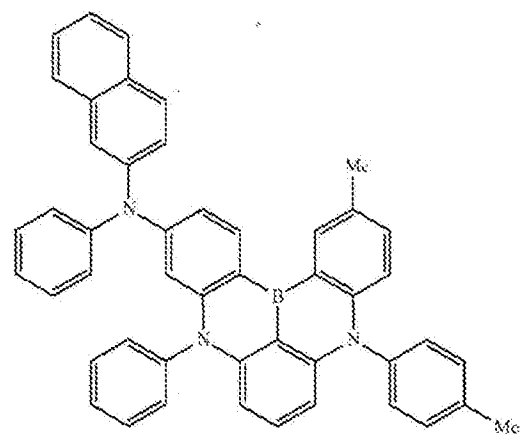
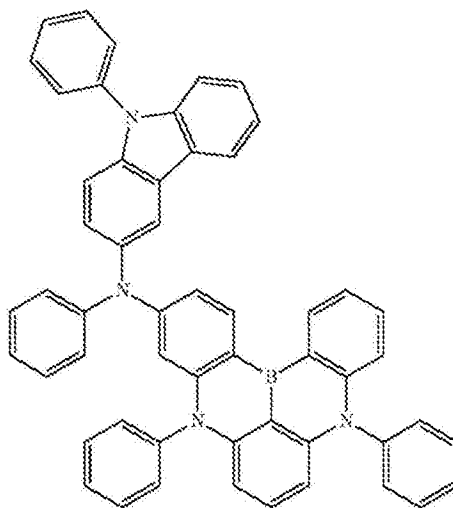
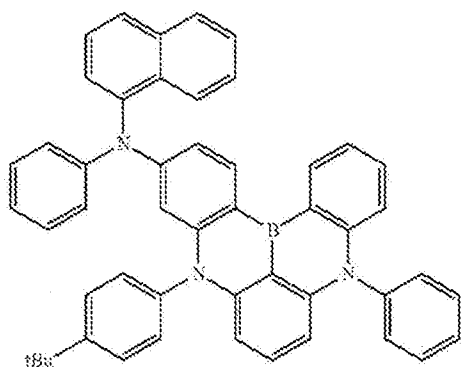
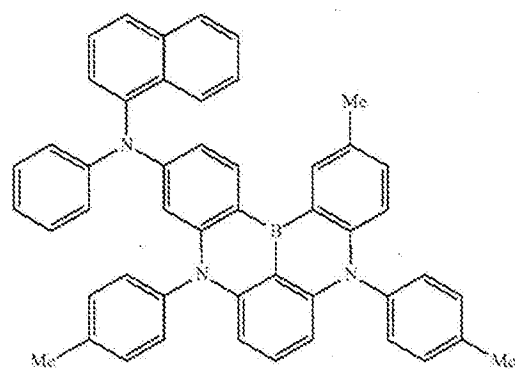
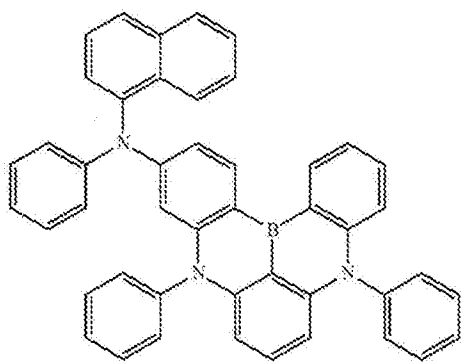
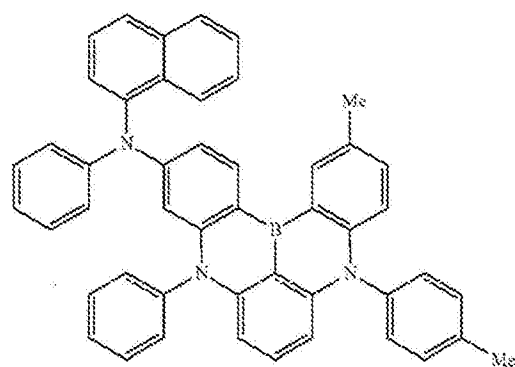
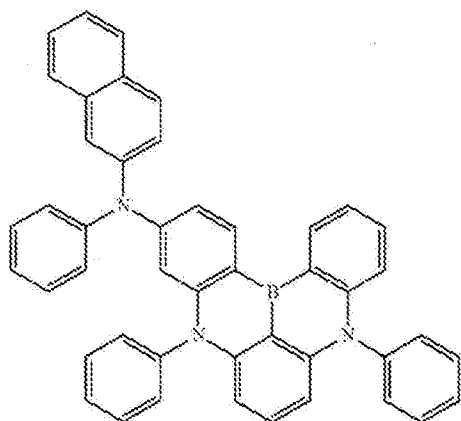
[0342] [化125]



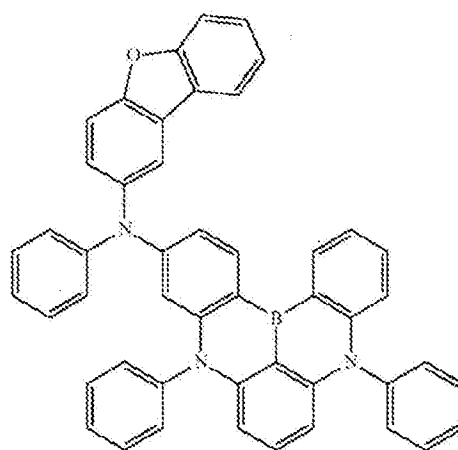
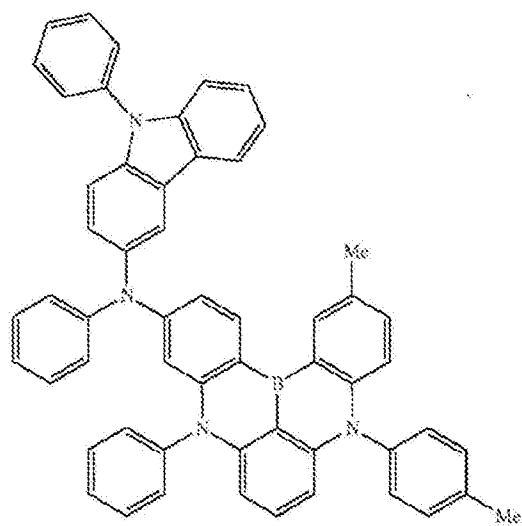
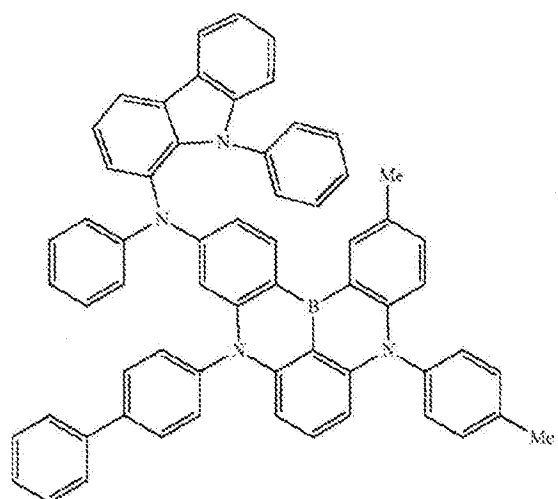
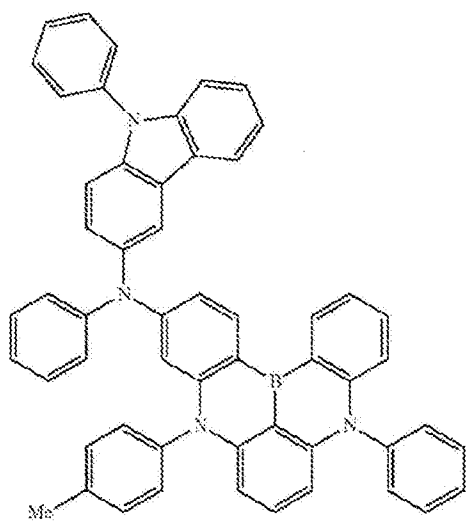
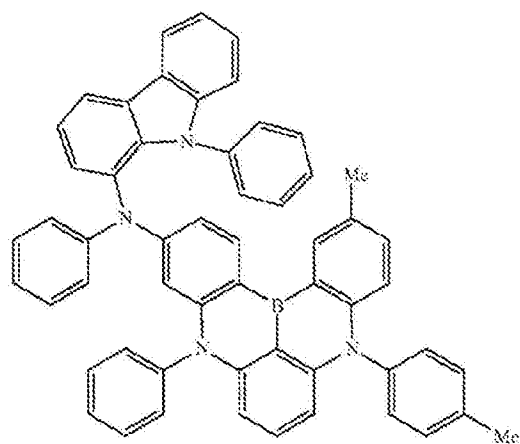
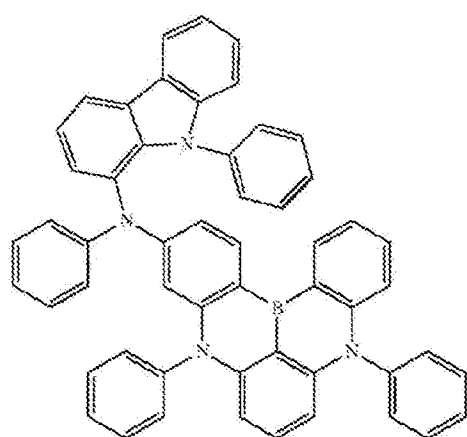
[0343] [化126]



[0345] [化128]

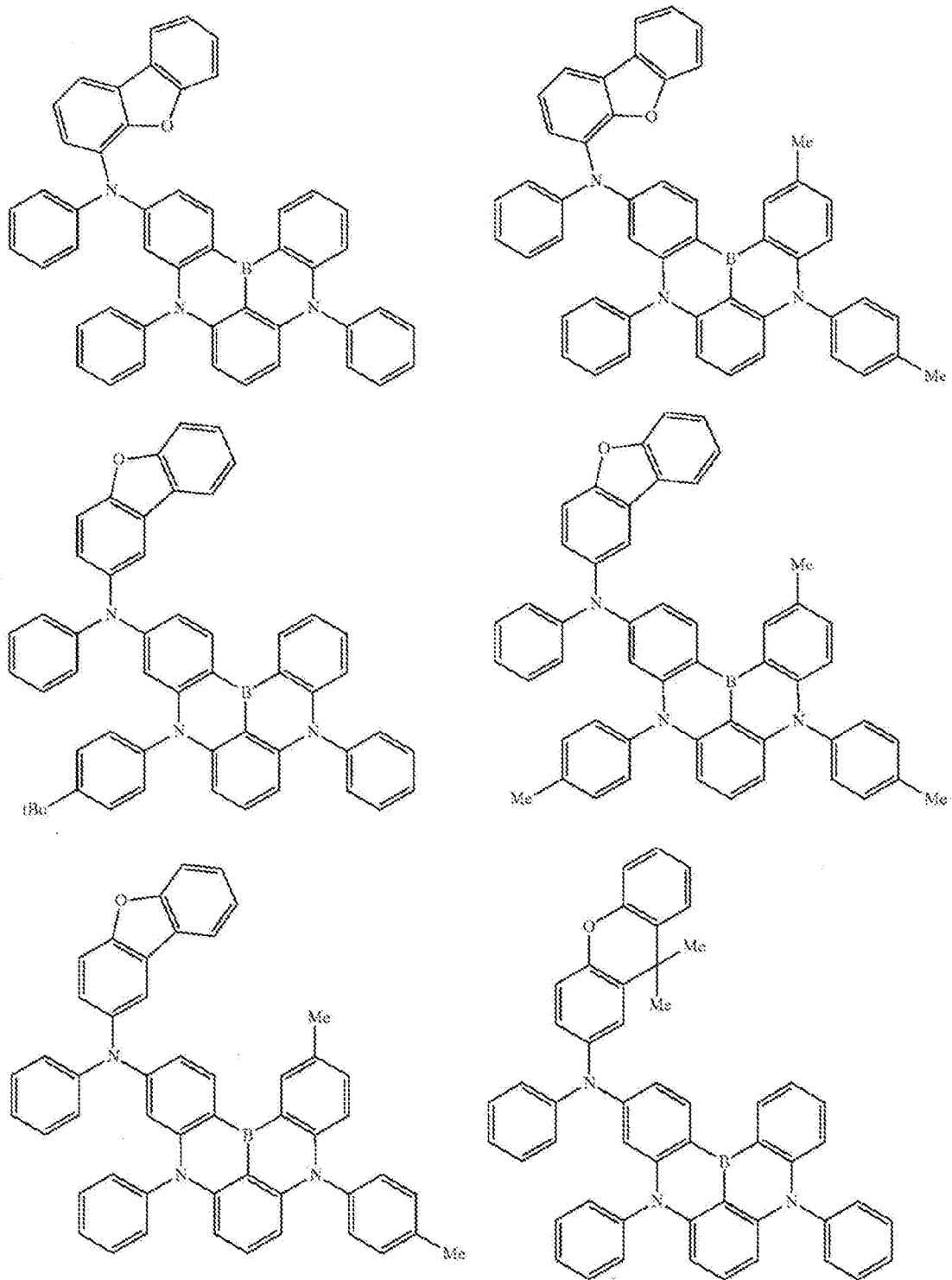


[0346] [化129]



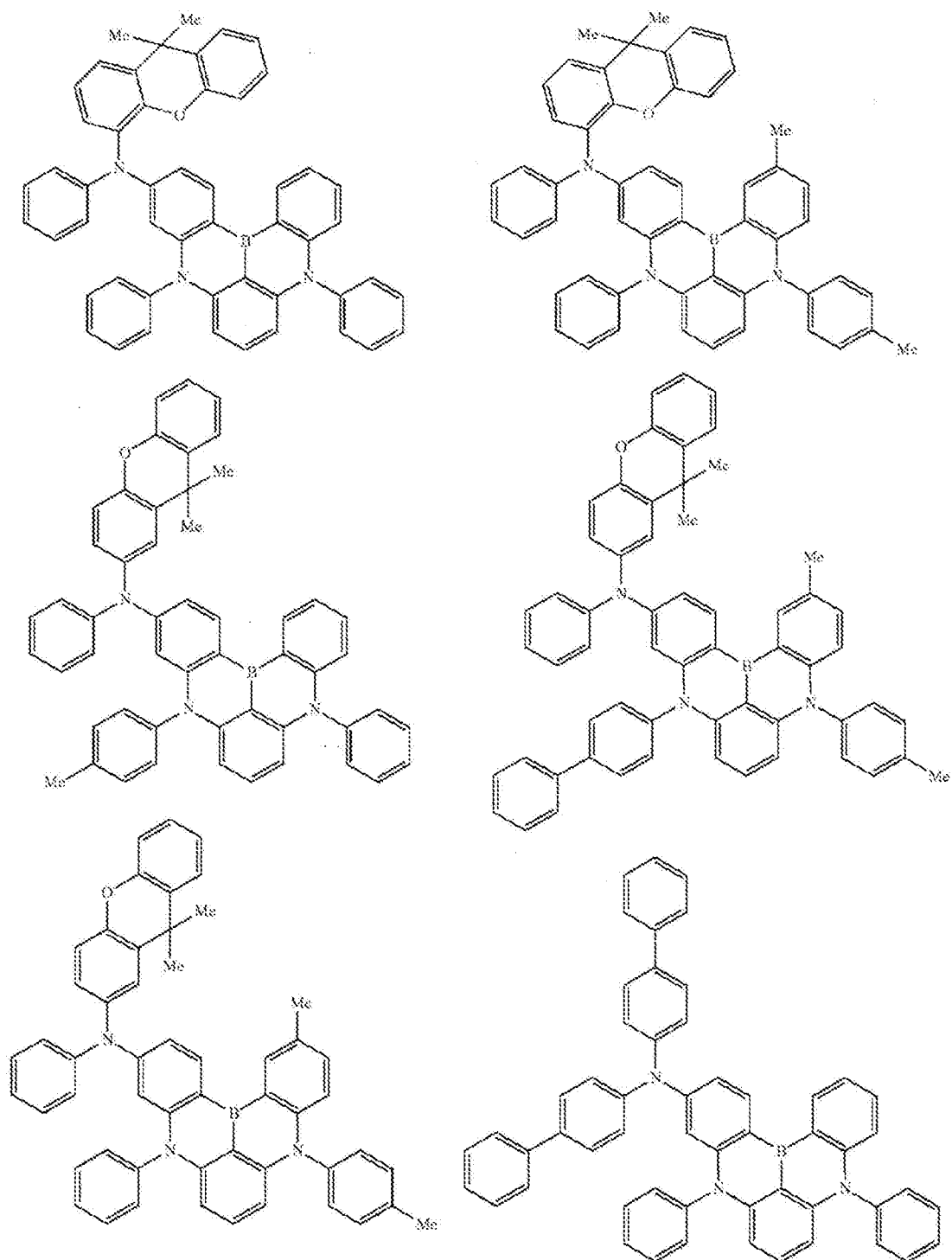
[0347]

[化130]



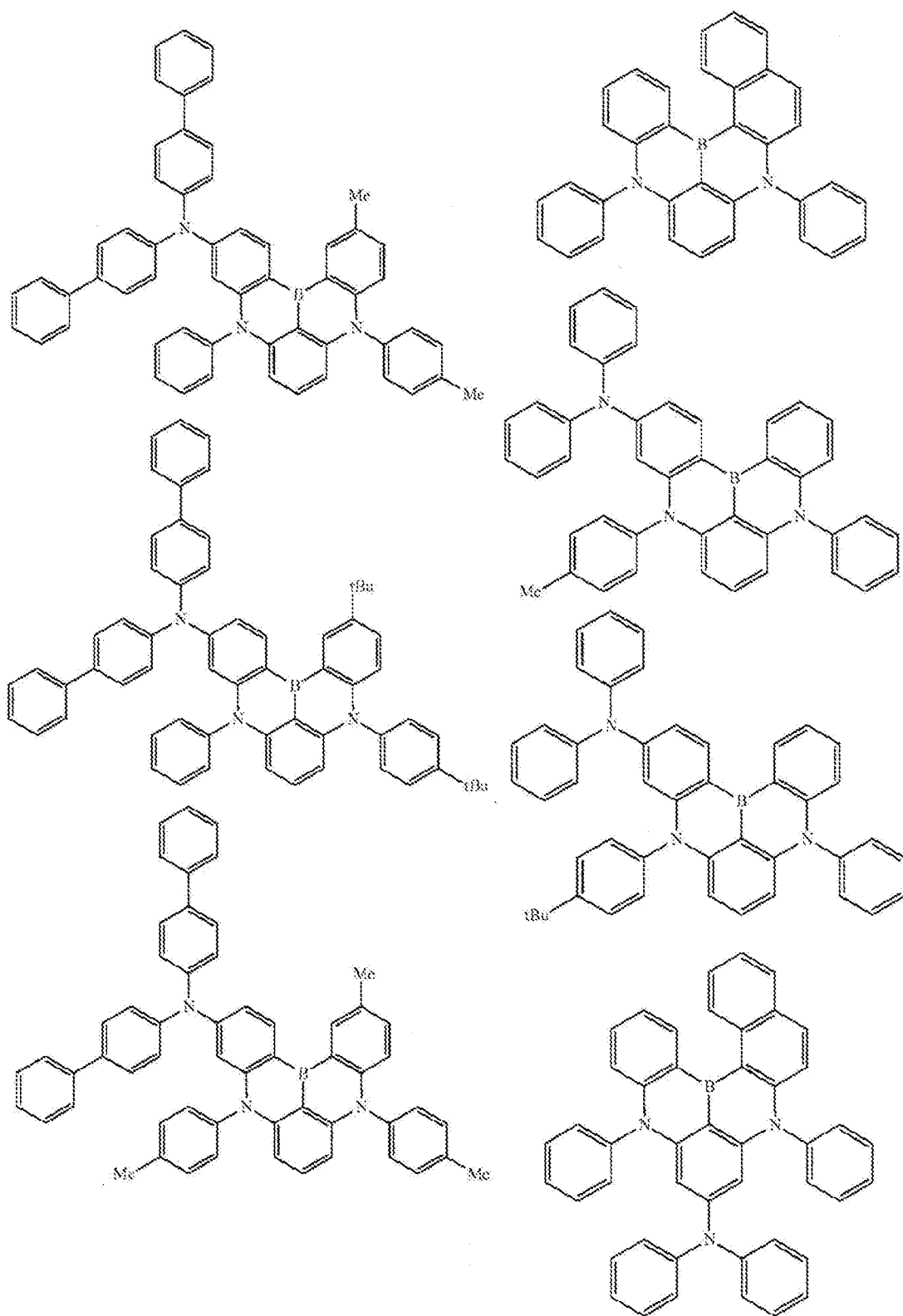
[0348]

[化131]



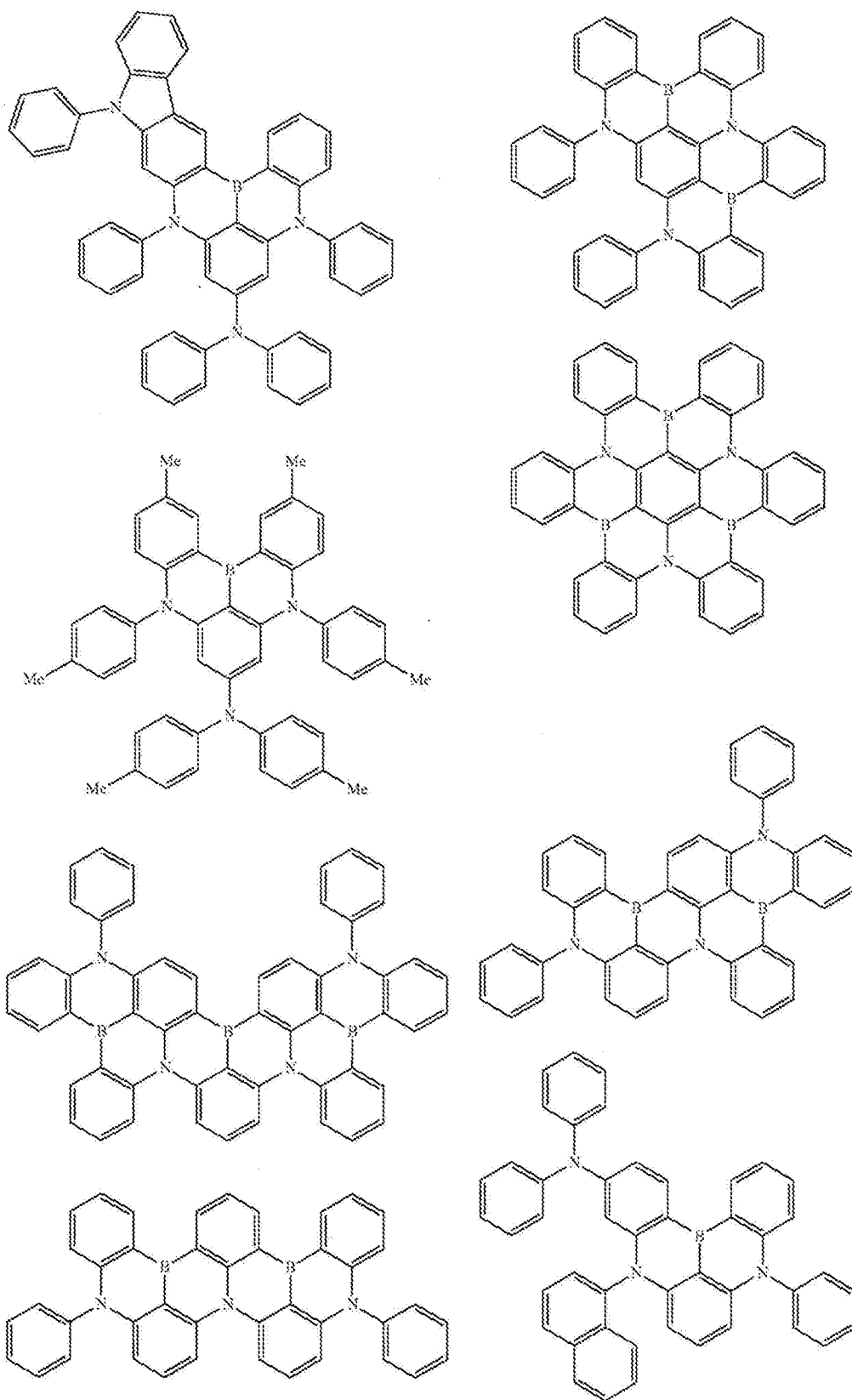
[0349]

[化132]

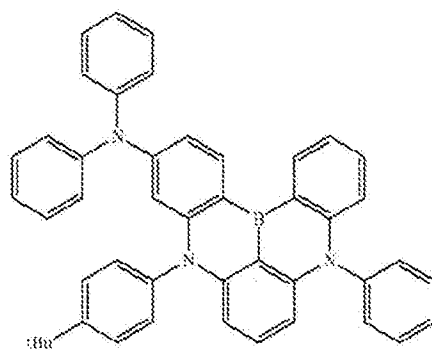
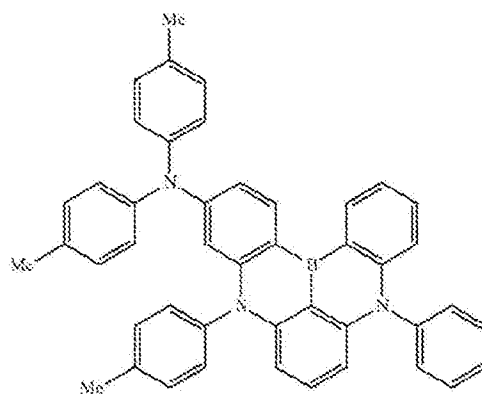
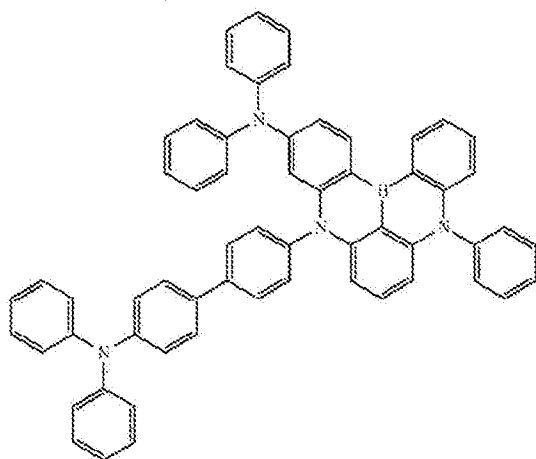
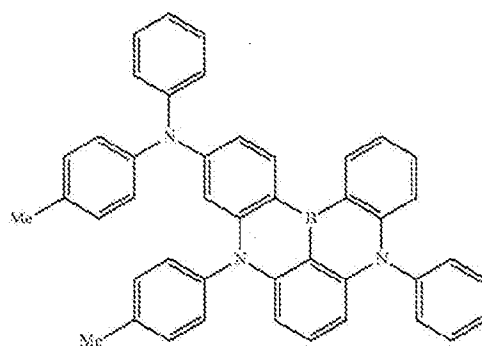
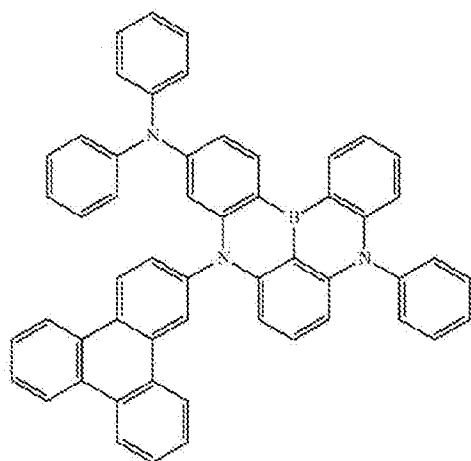
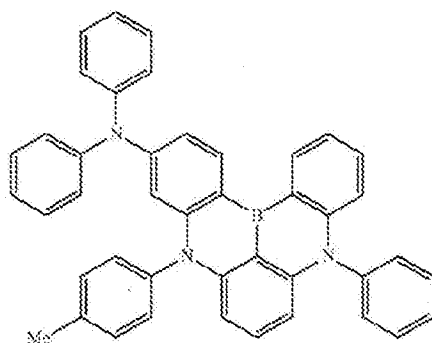
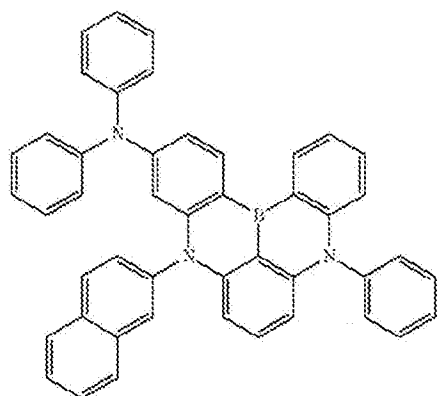


[0350]

[化133]

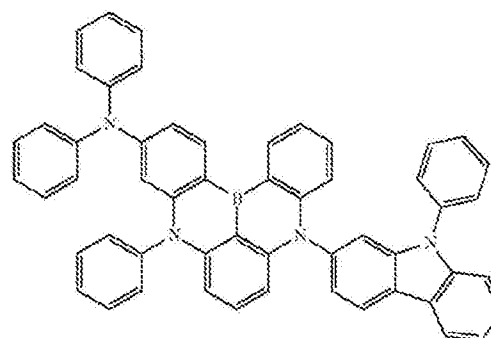
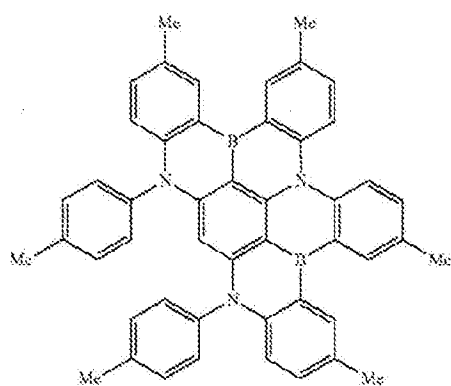
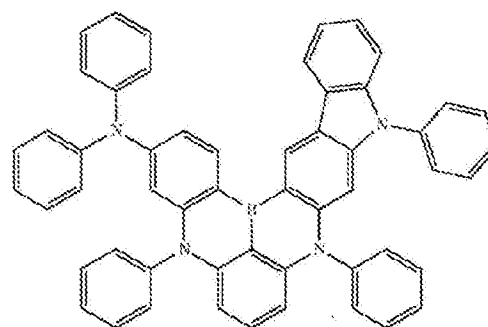
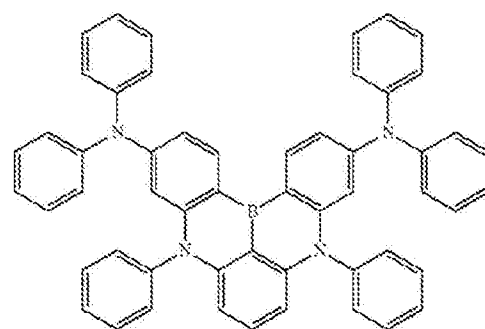
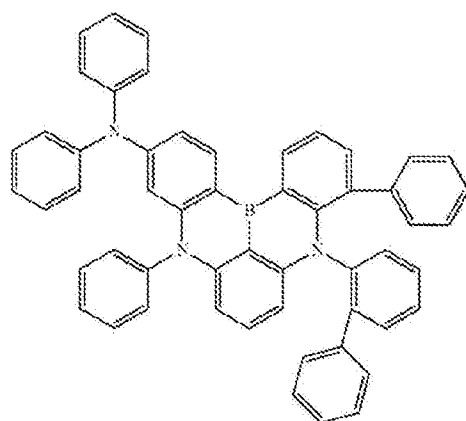
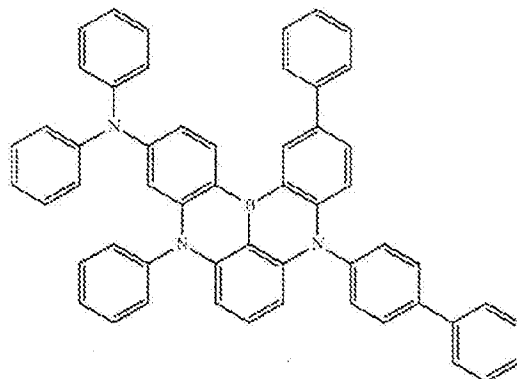
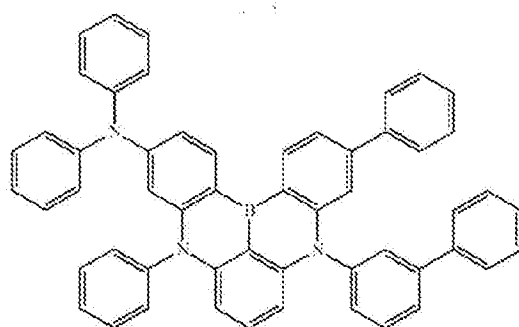


[0351] [化134]



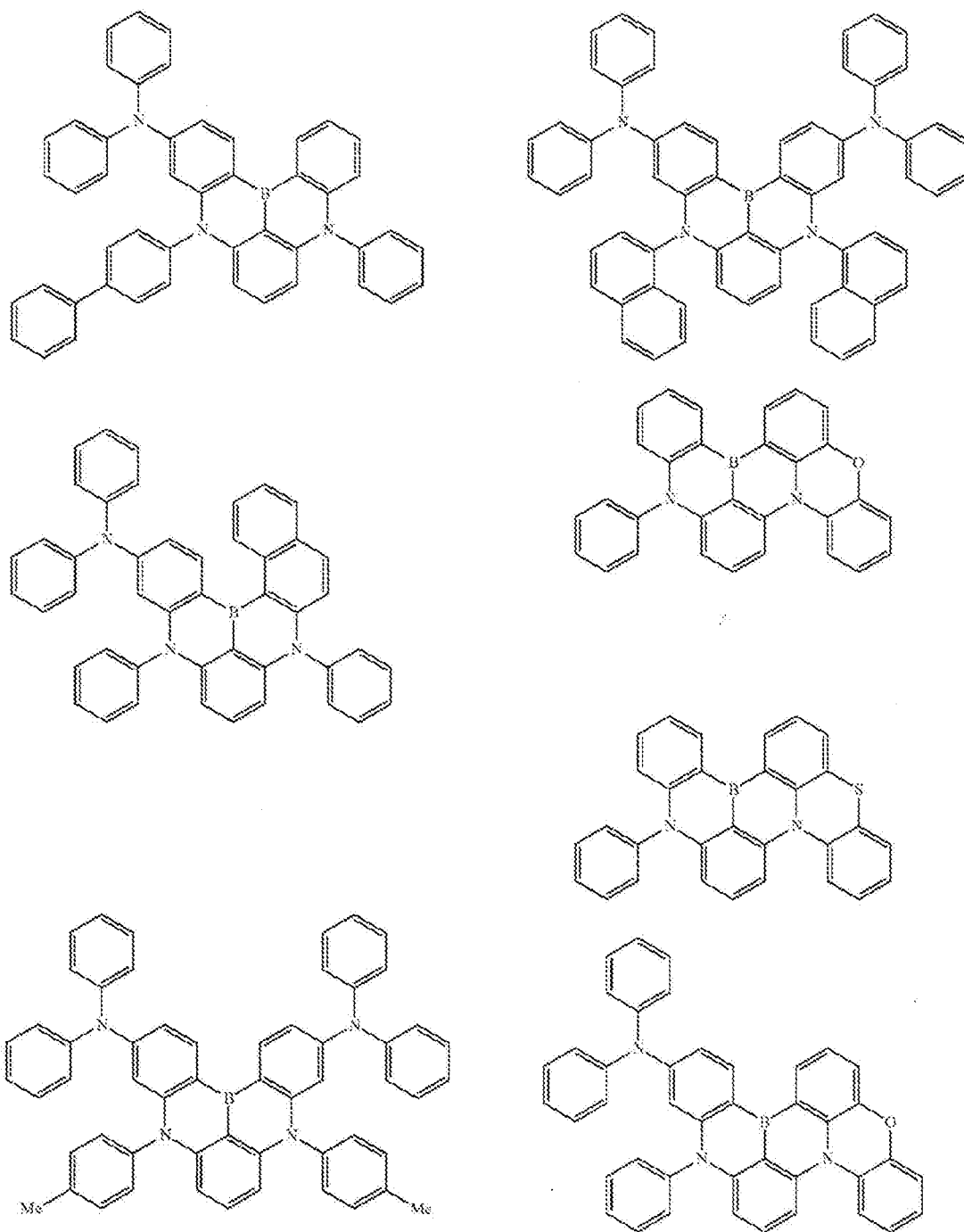
[0352]

[化135]



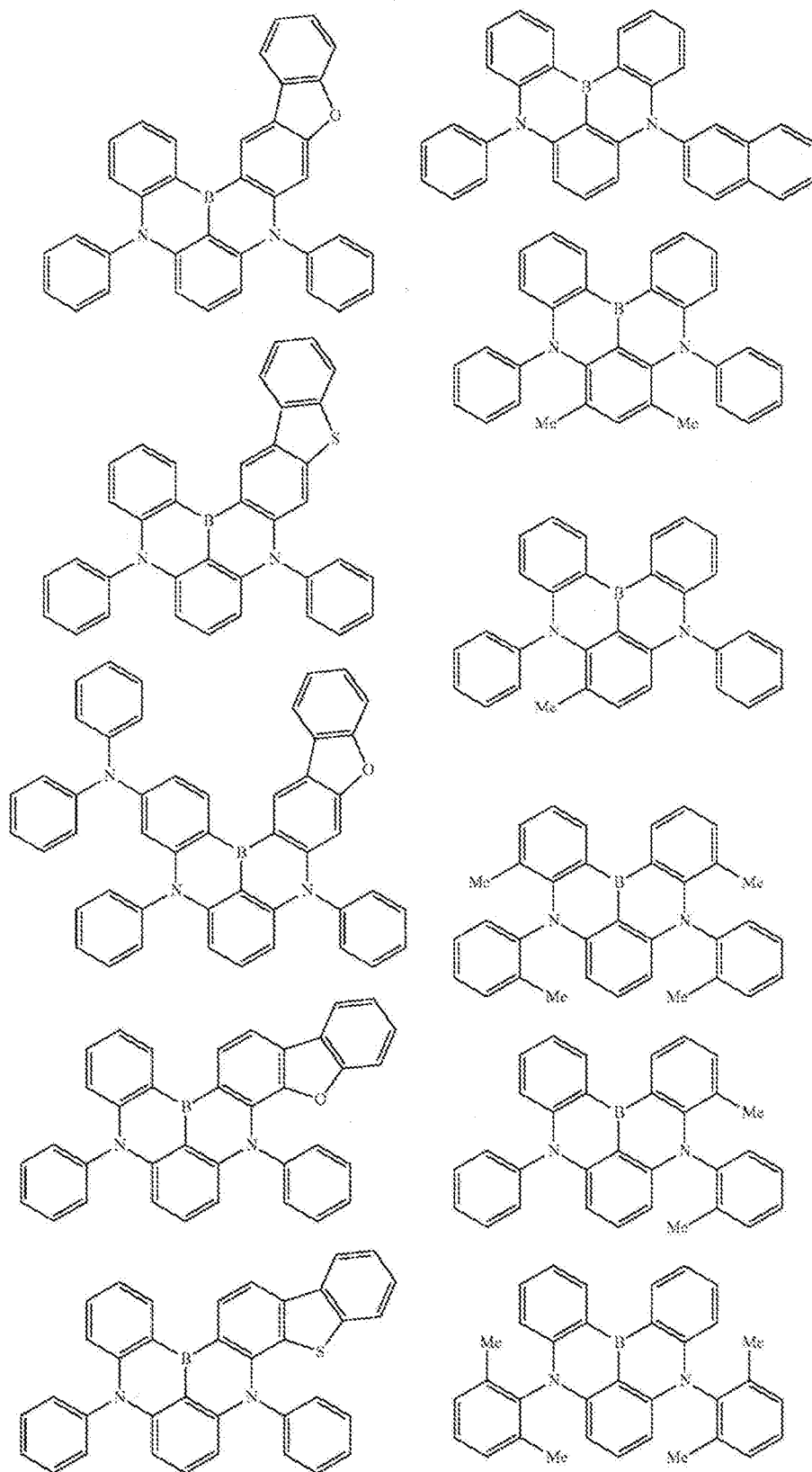
[0353]

[化136]

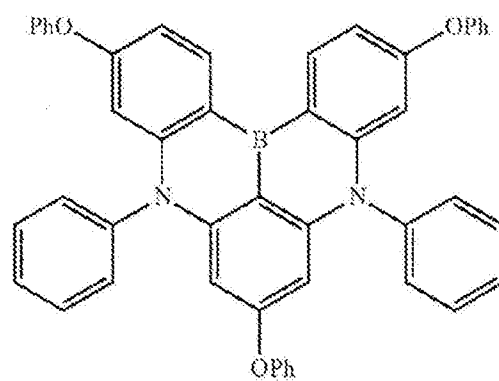
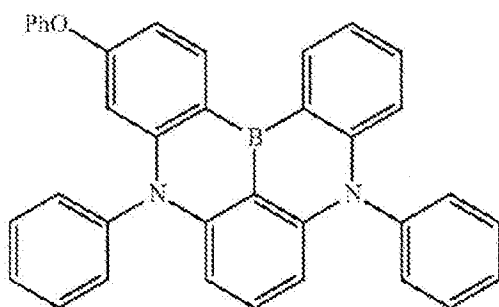
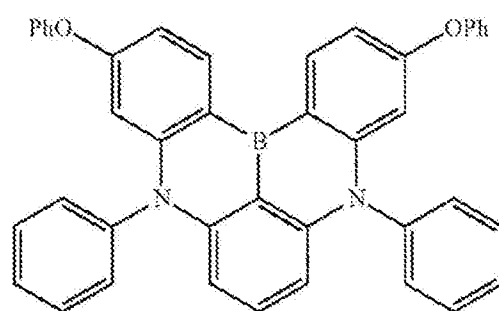
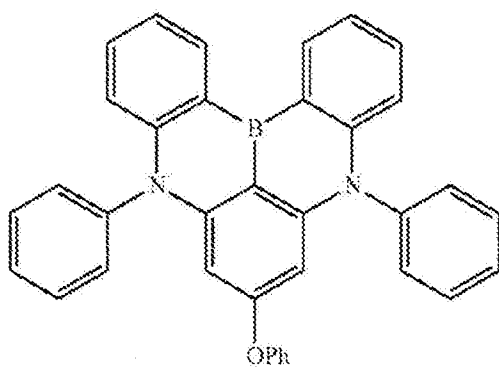
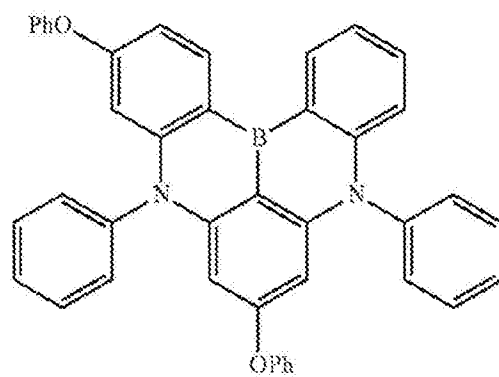
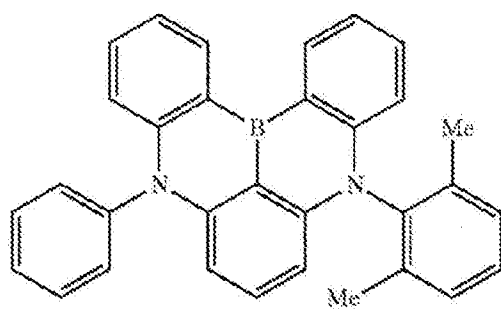


[0354]

[化137]

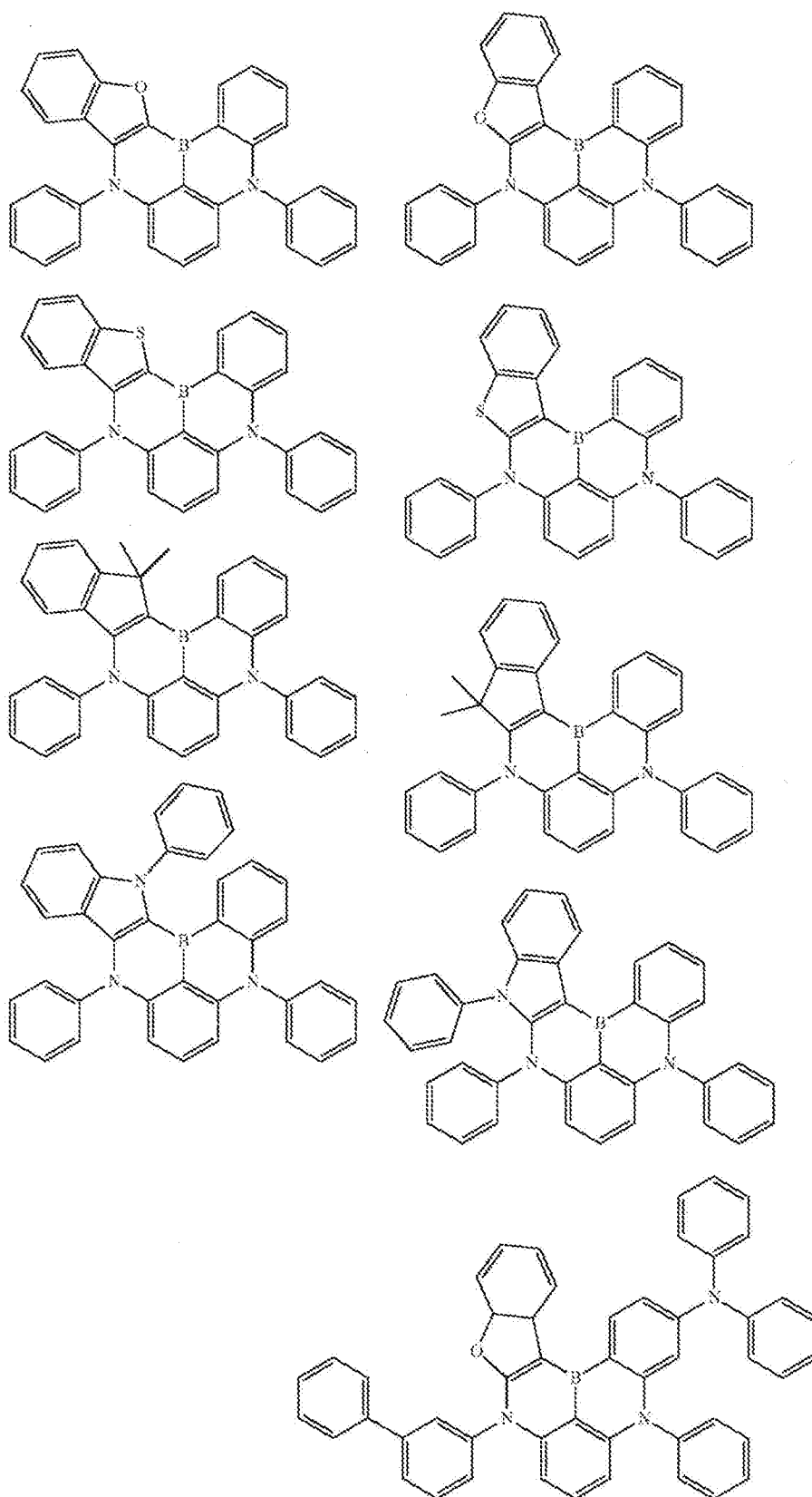


[0355] [化138]

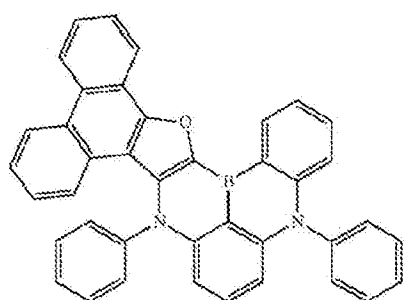
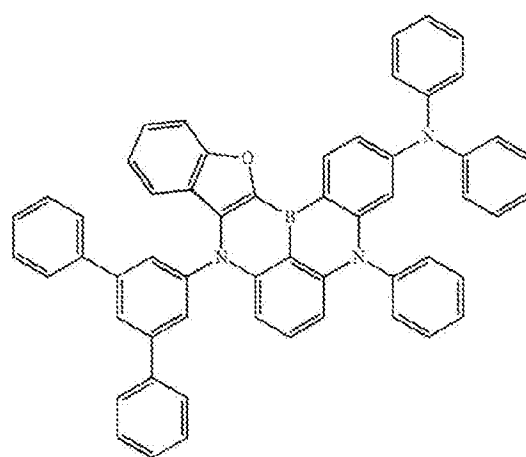
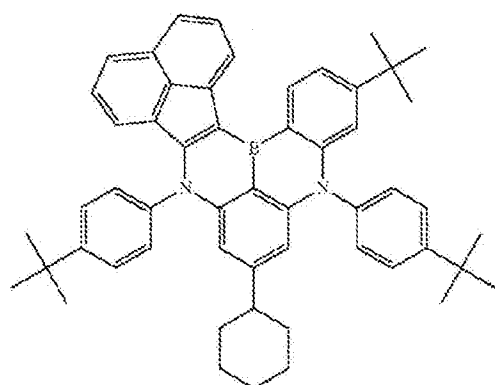
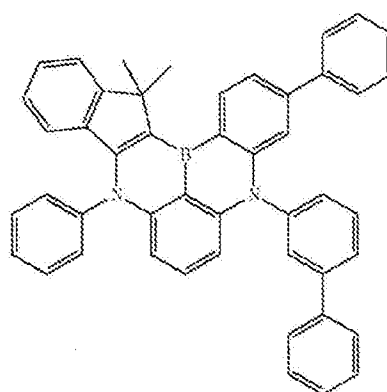
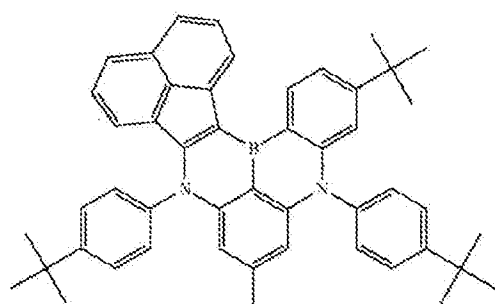
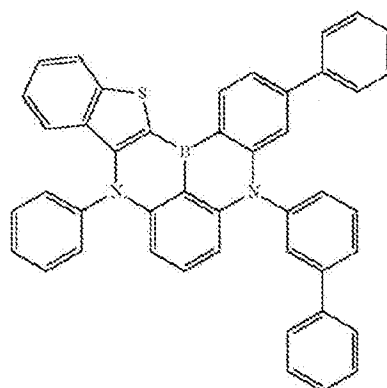
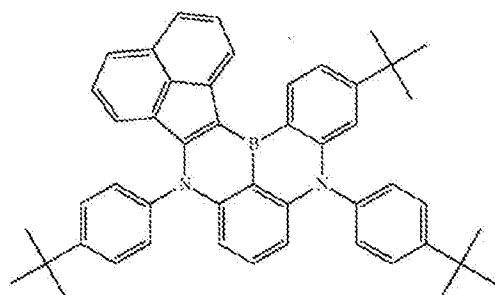


[0356]

[化139]

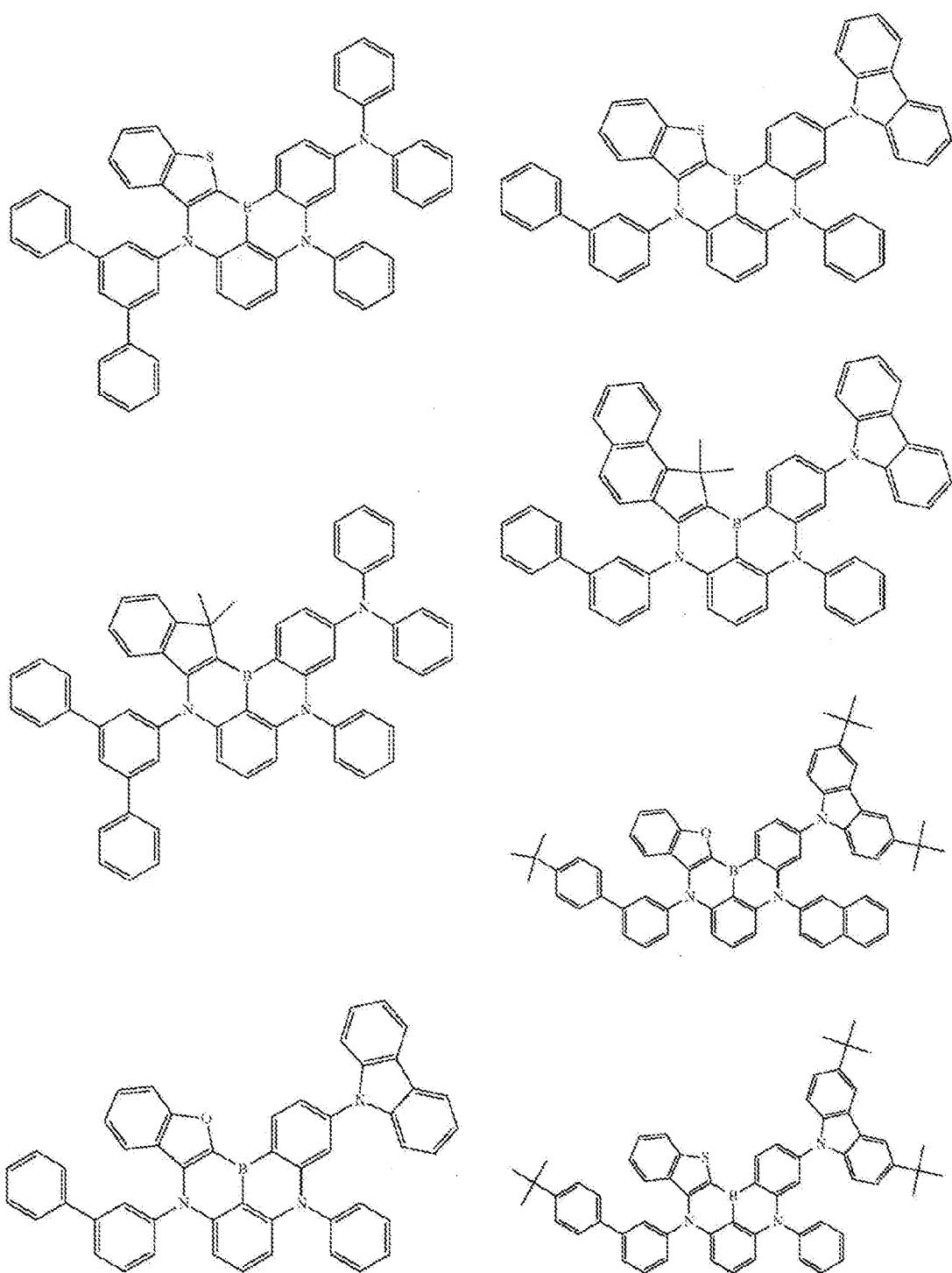


[化141]



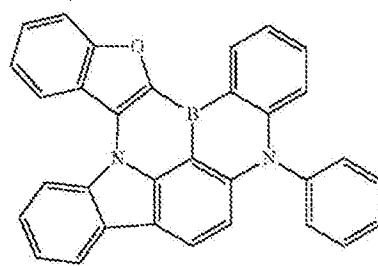
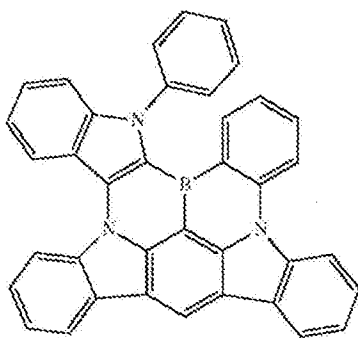
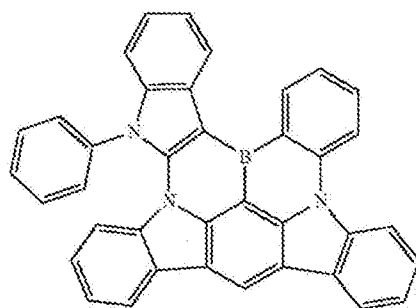
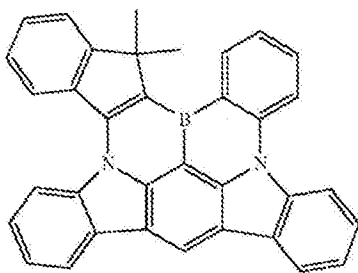
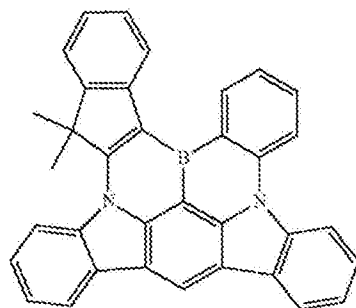
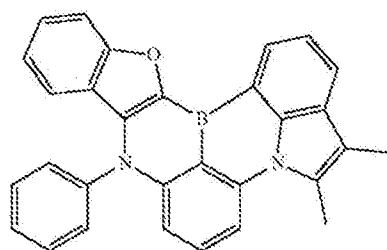
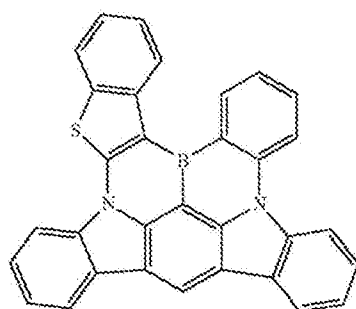
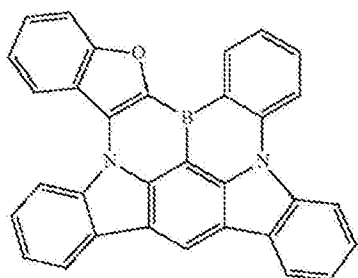
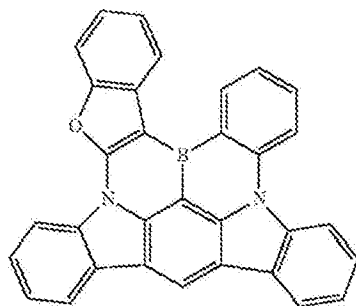
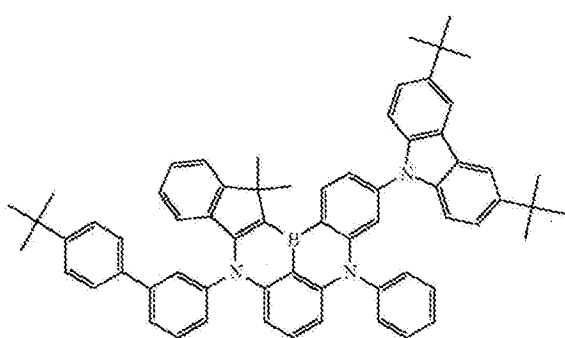
[0359]

[化142]

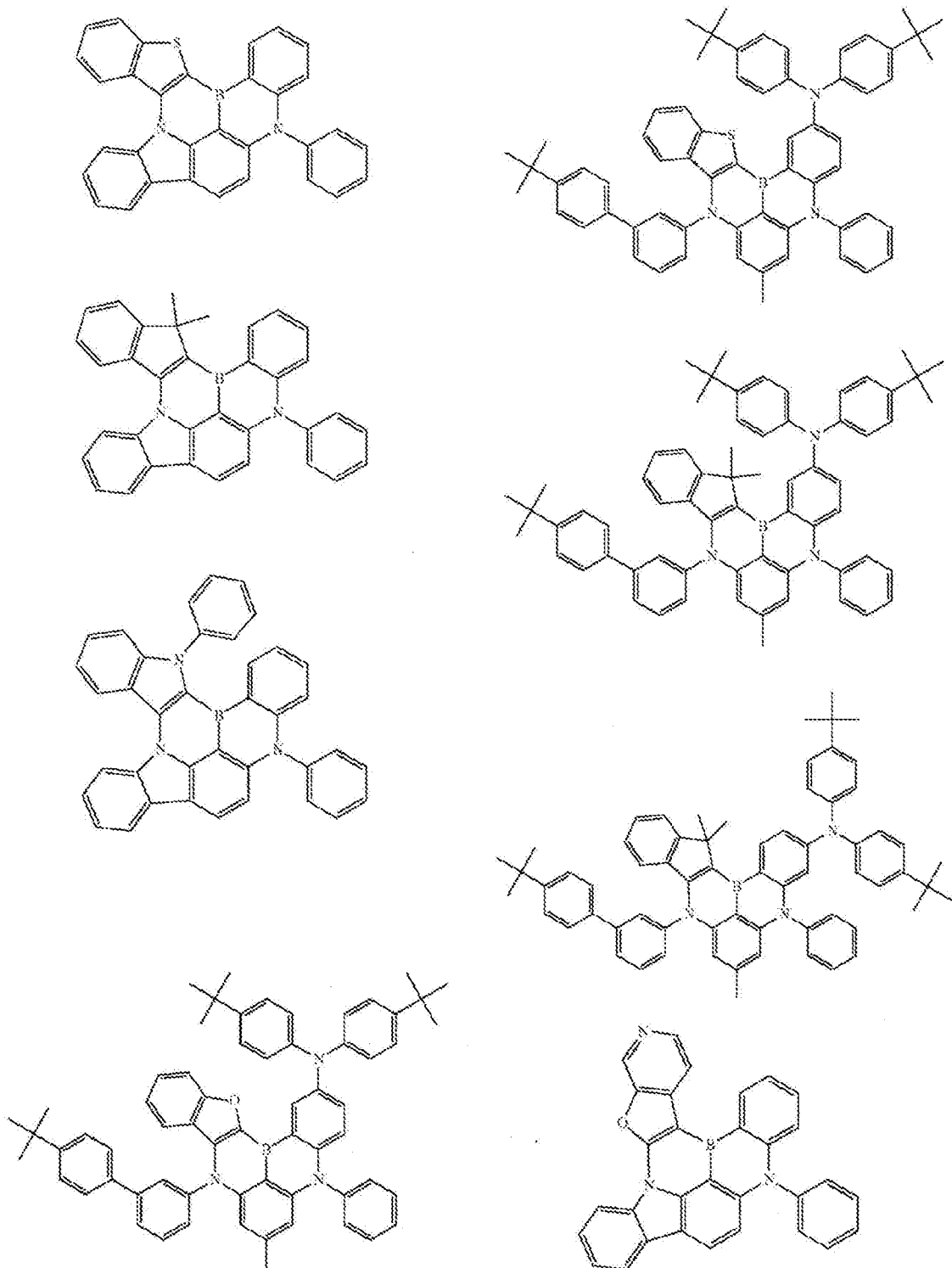


[0360]

[化143]

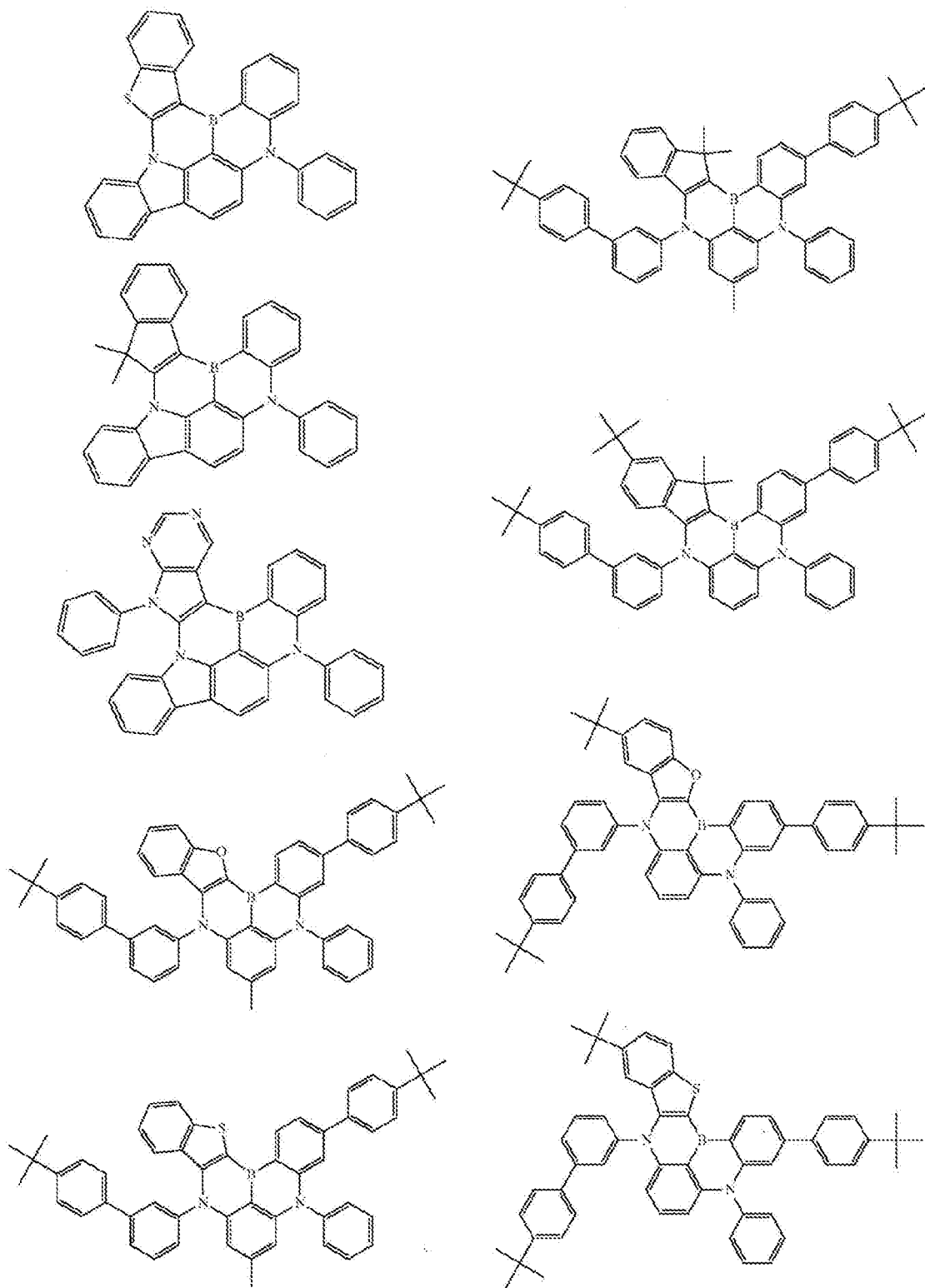


[0361] [化144]



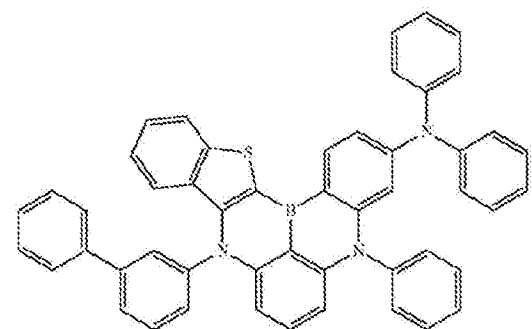
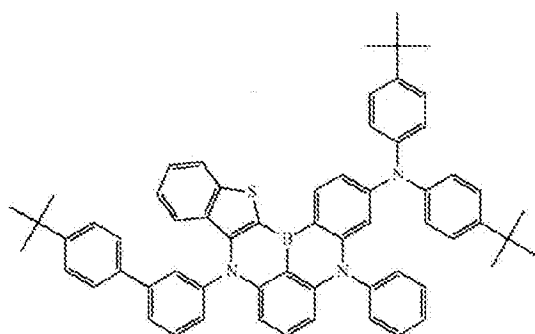
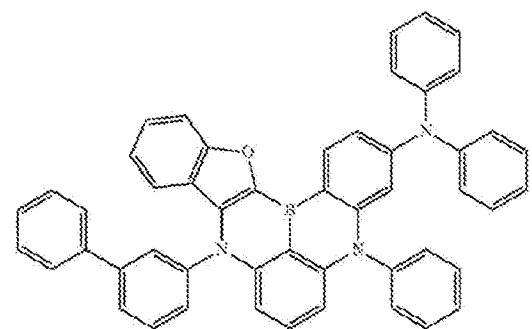
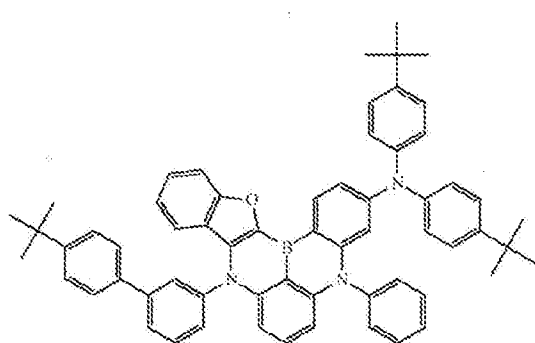
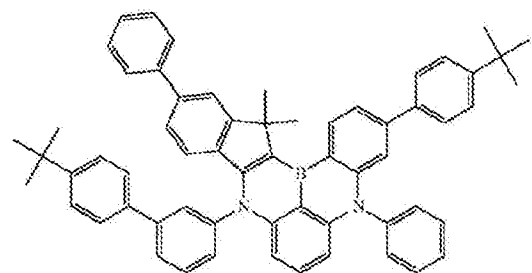
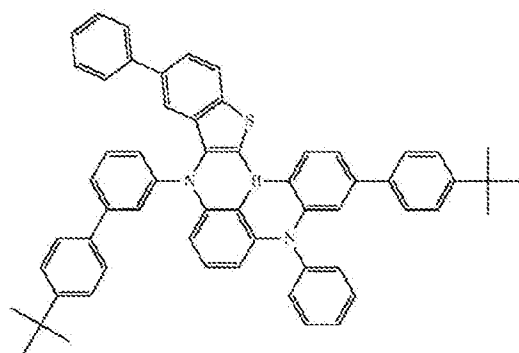
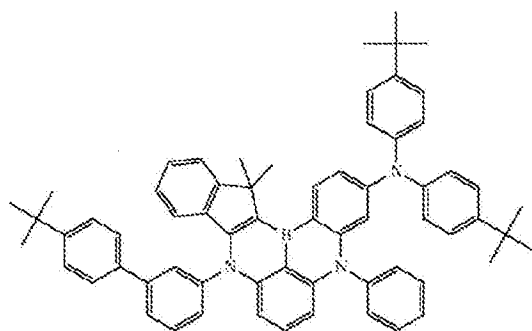
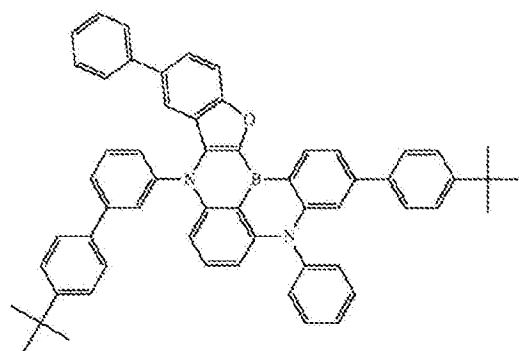
[0362]

[化145]



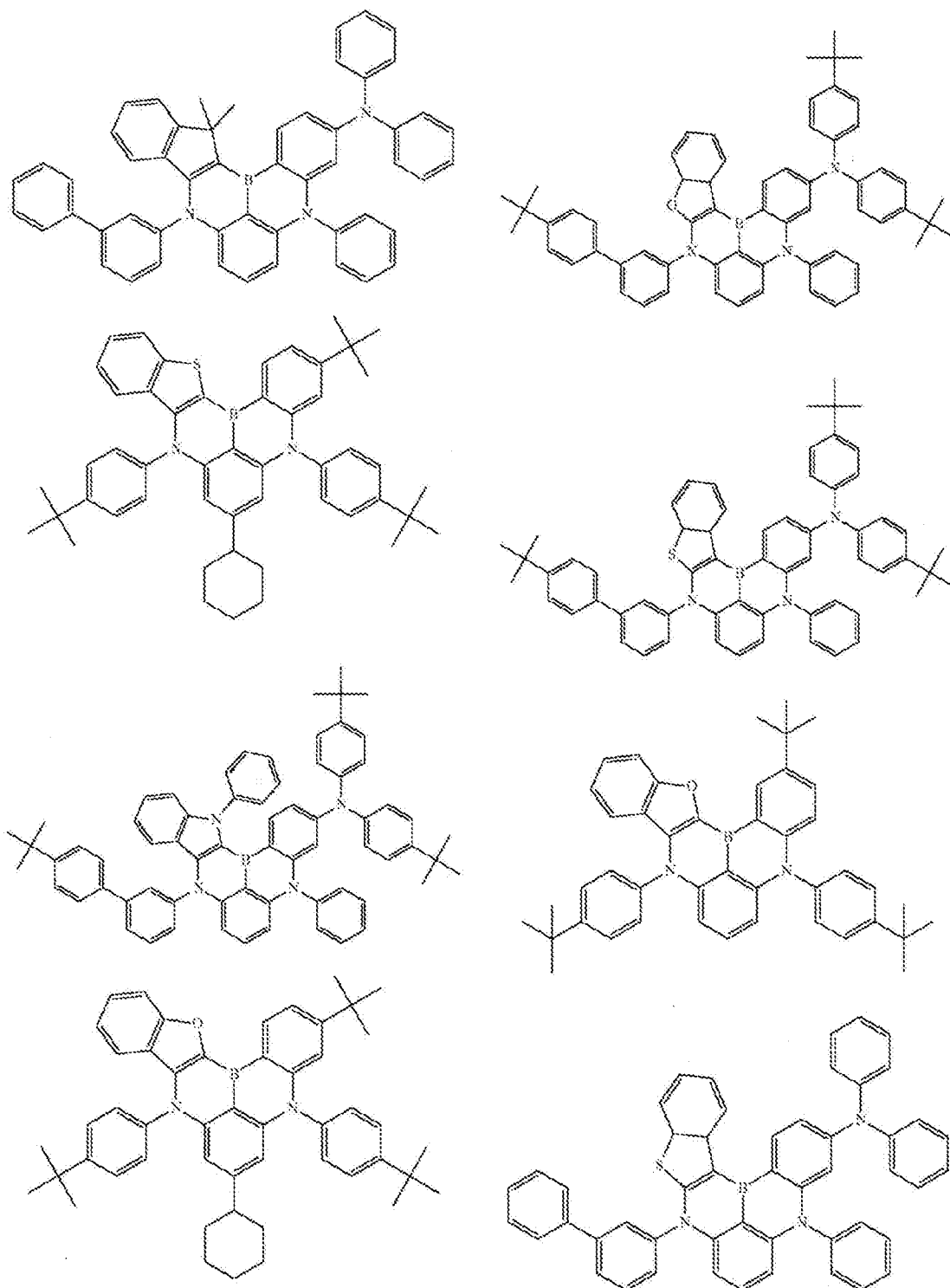
[0363]

[化146]



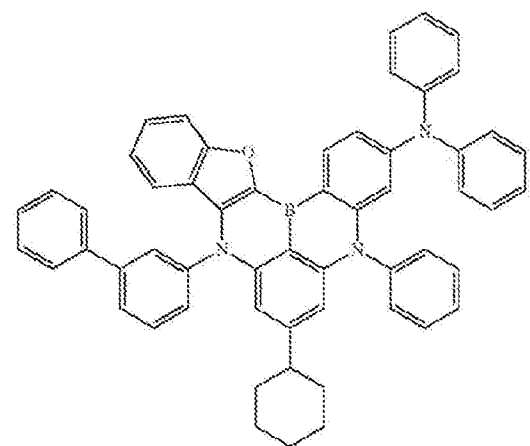
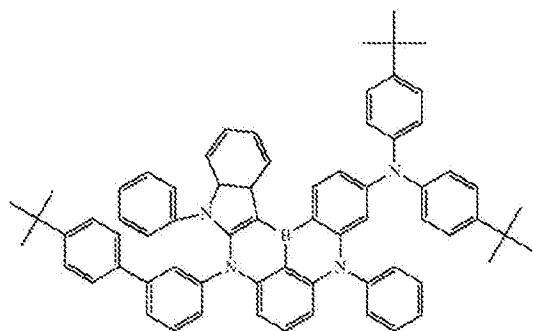
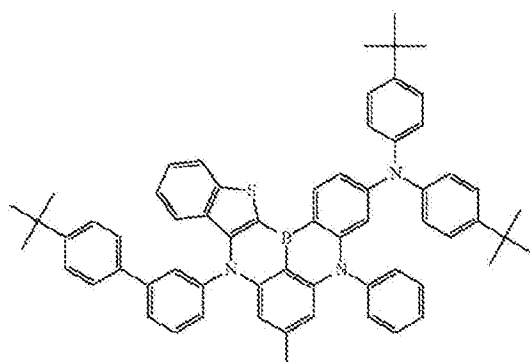
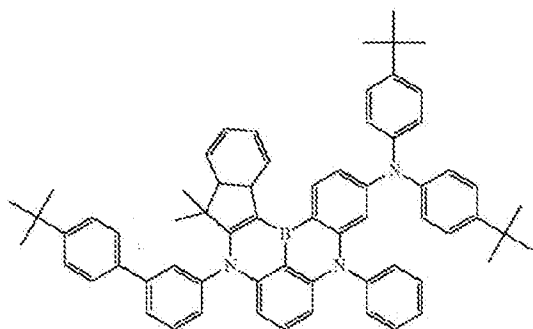
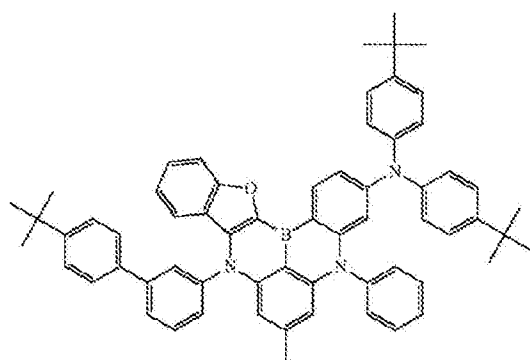
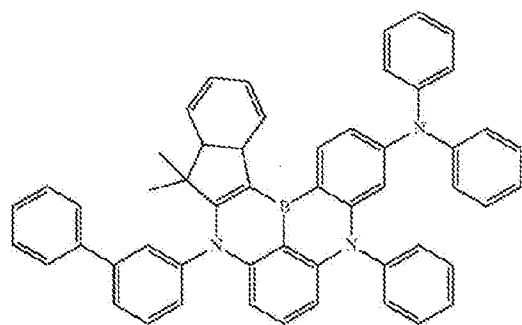
[0364]

[化147]



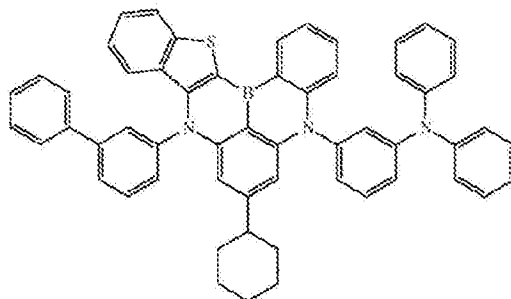
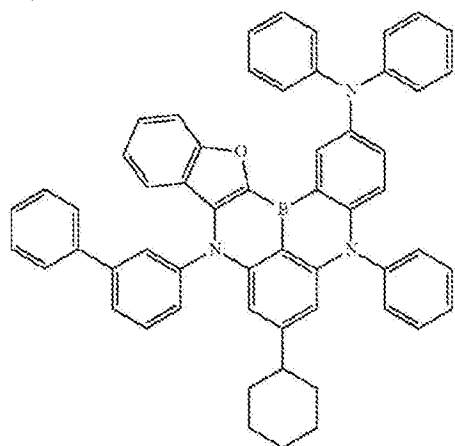
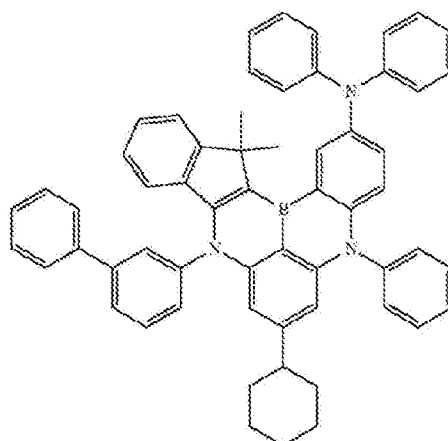
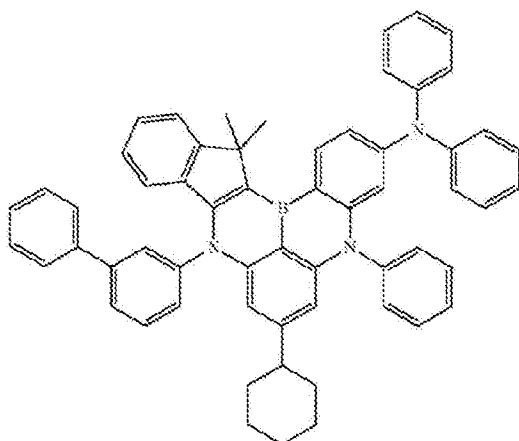
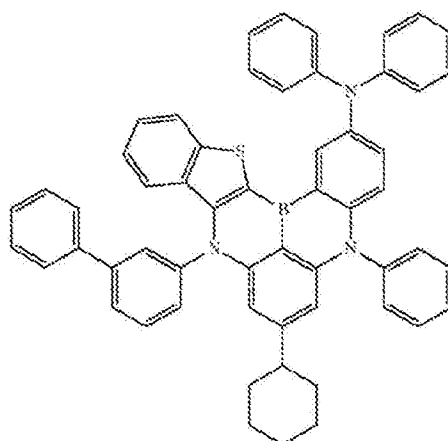
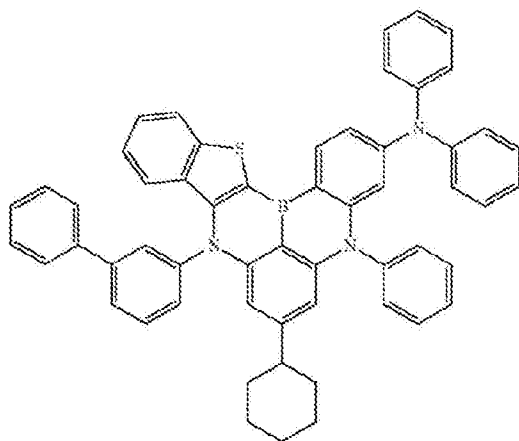
[0365]

[化148]



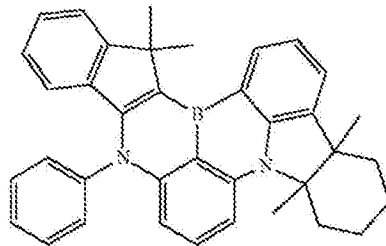
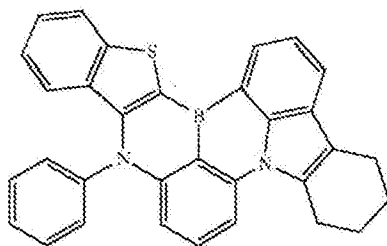
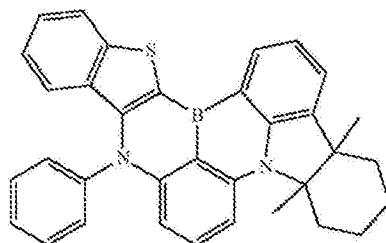
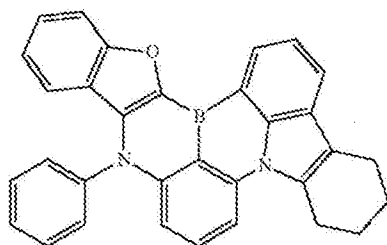
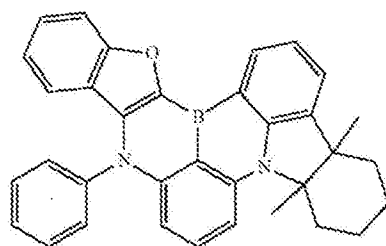
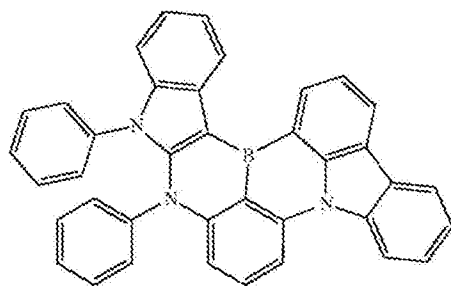
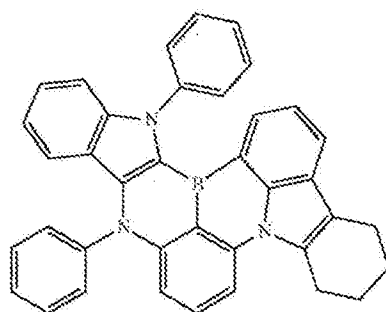
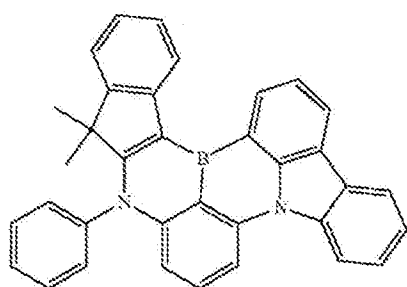
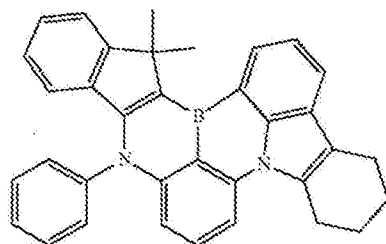
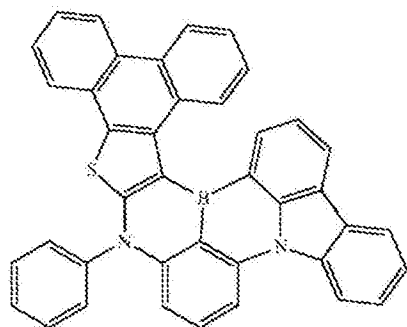
[0366]

[化149]

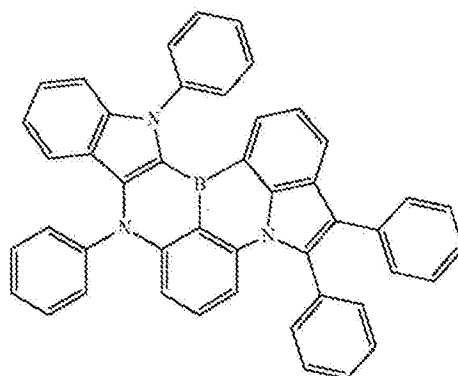
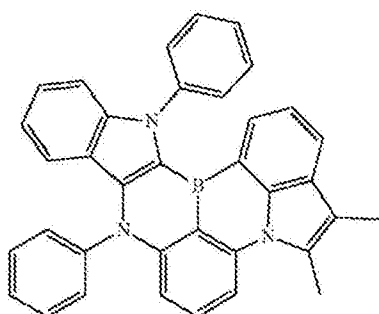
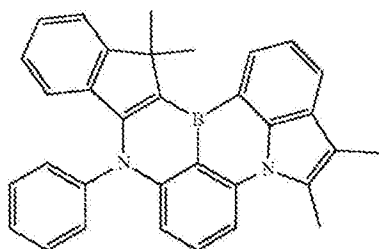
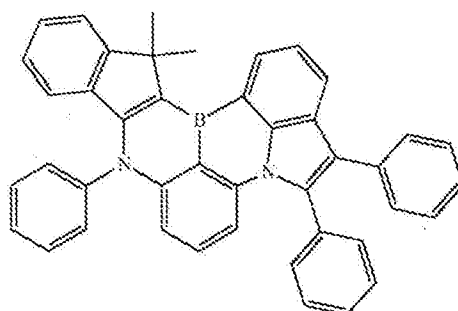
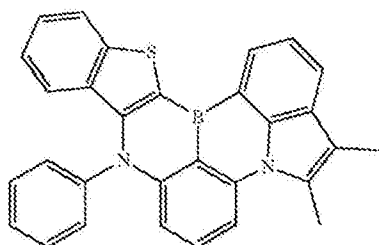
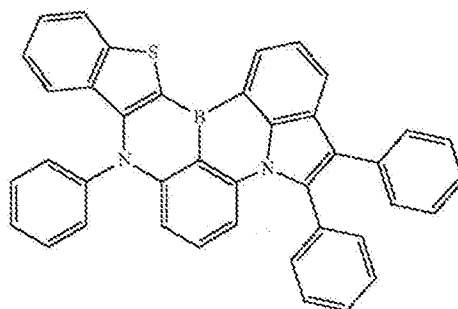
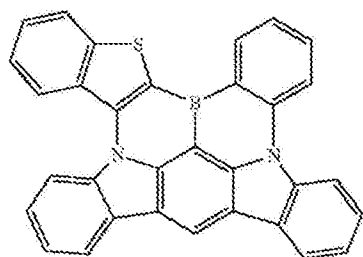
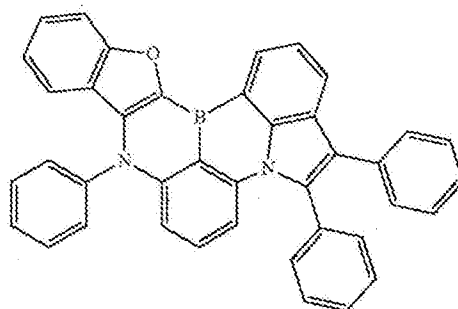
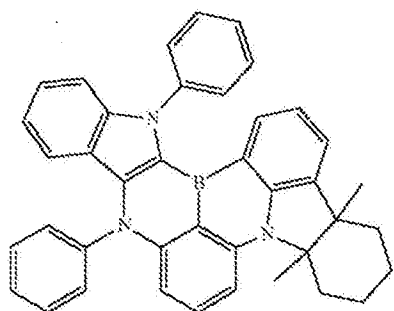


[0367]

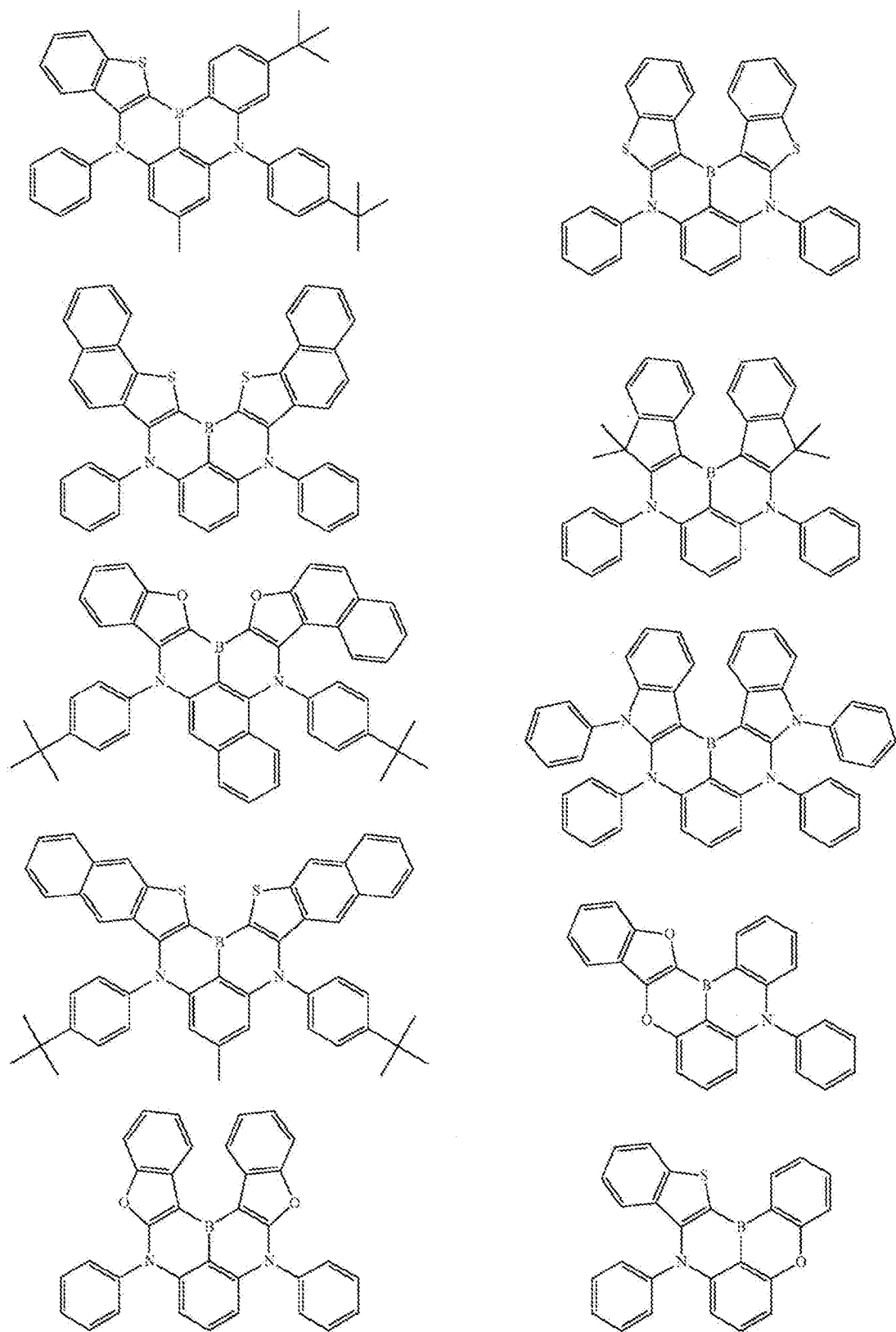
[0368] [化151]



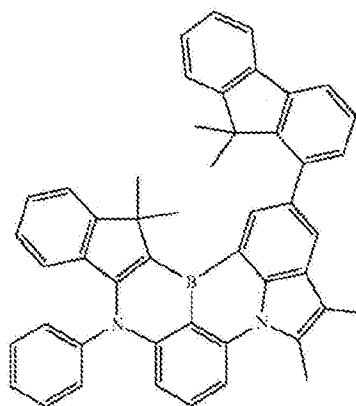
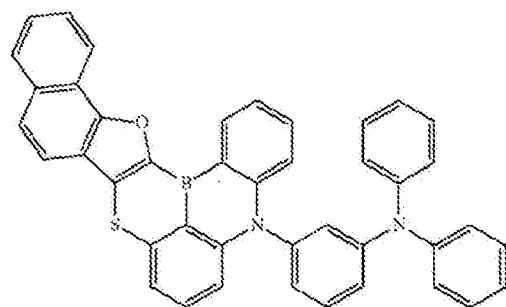
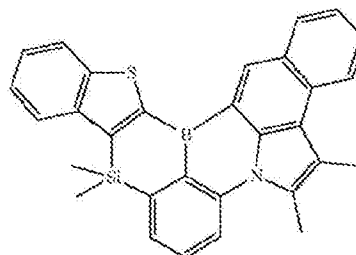
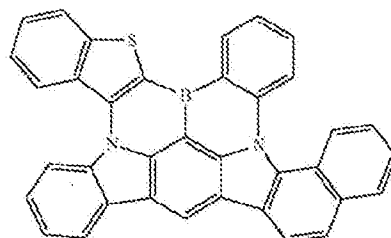
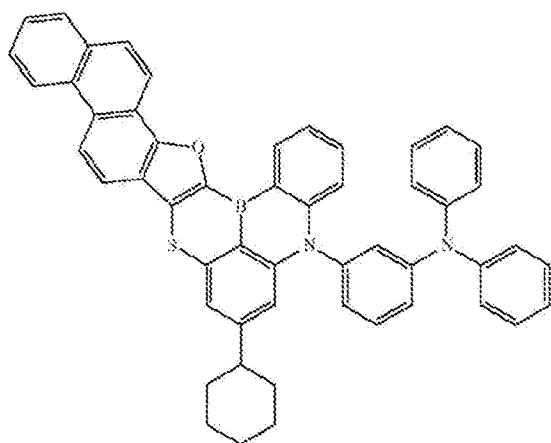
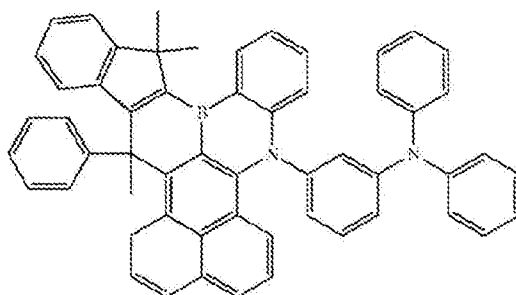
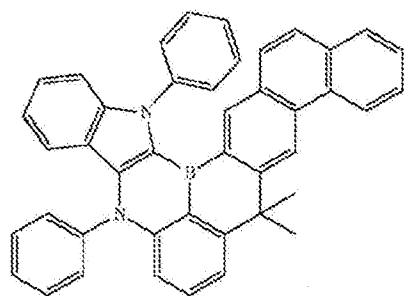
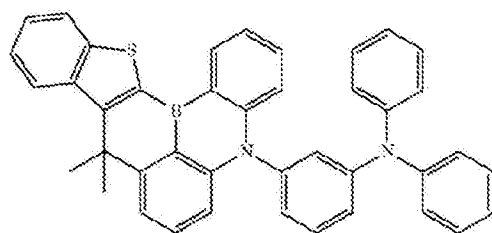
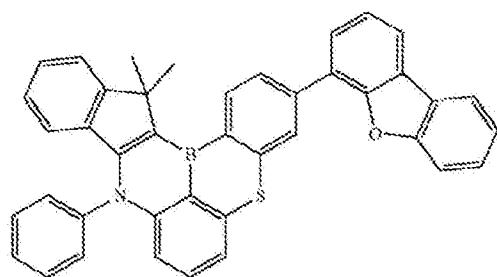
[0369] [化152]



[0370] [化153]

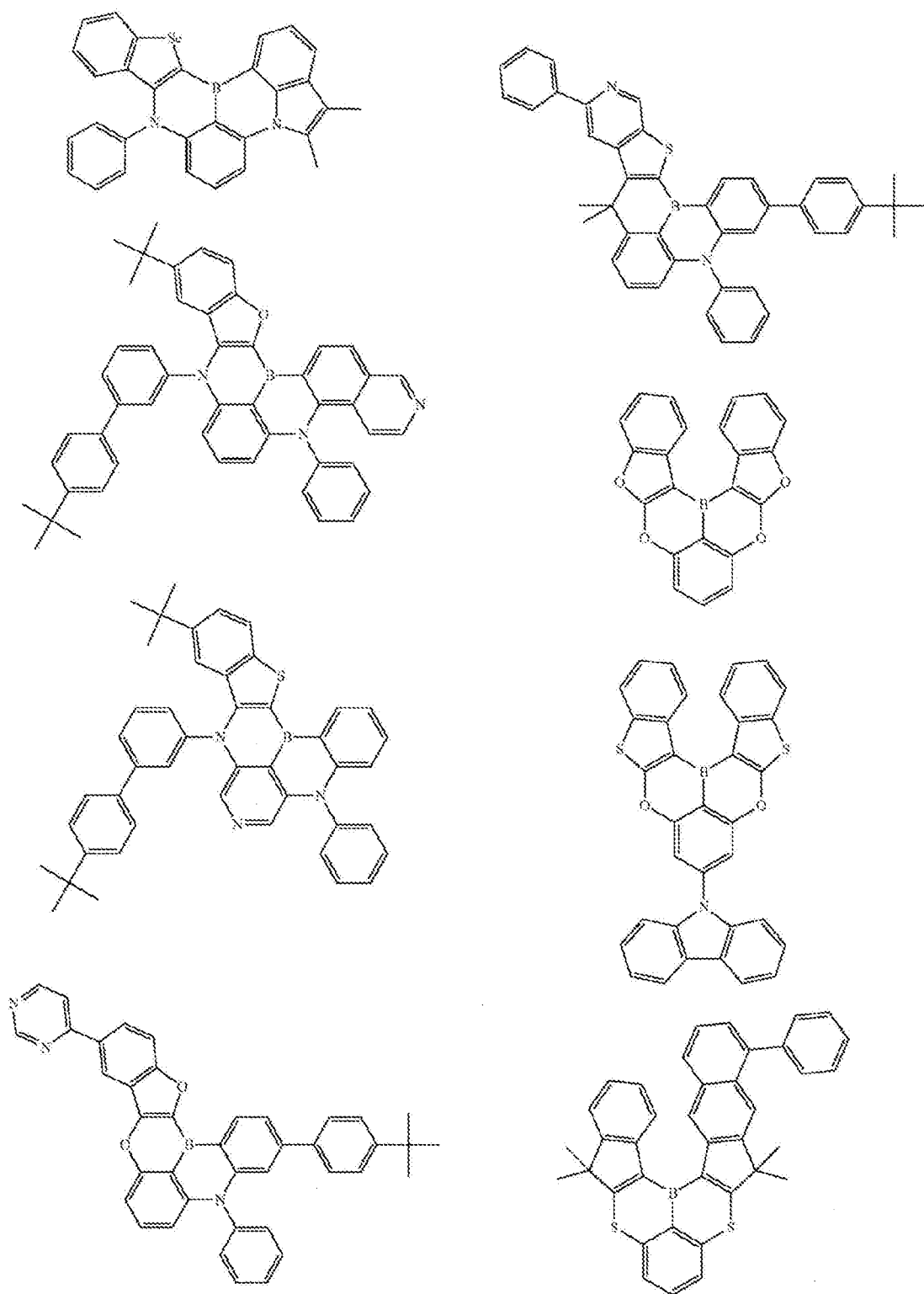


[0371] [化154]



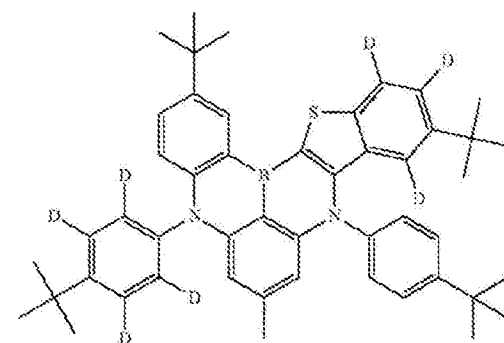
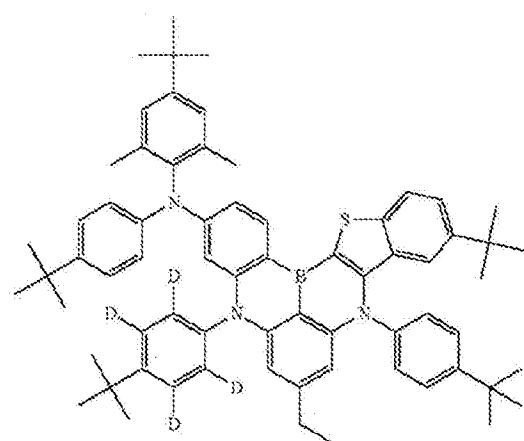
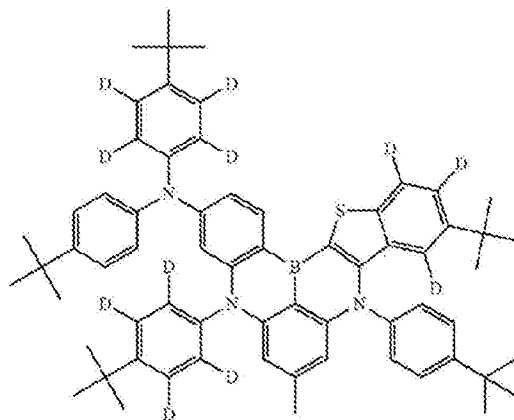
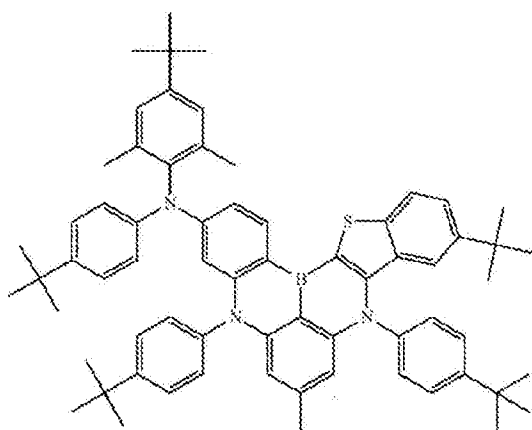
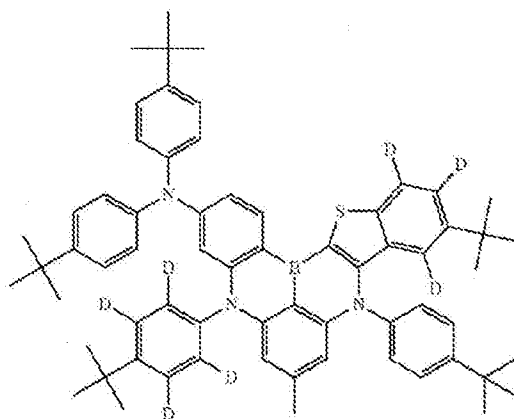
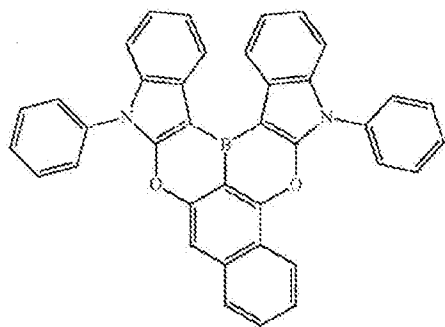
[0372]

[化155]



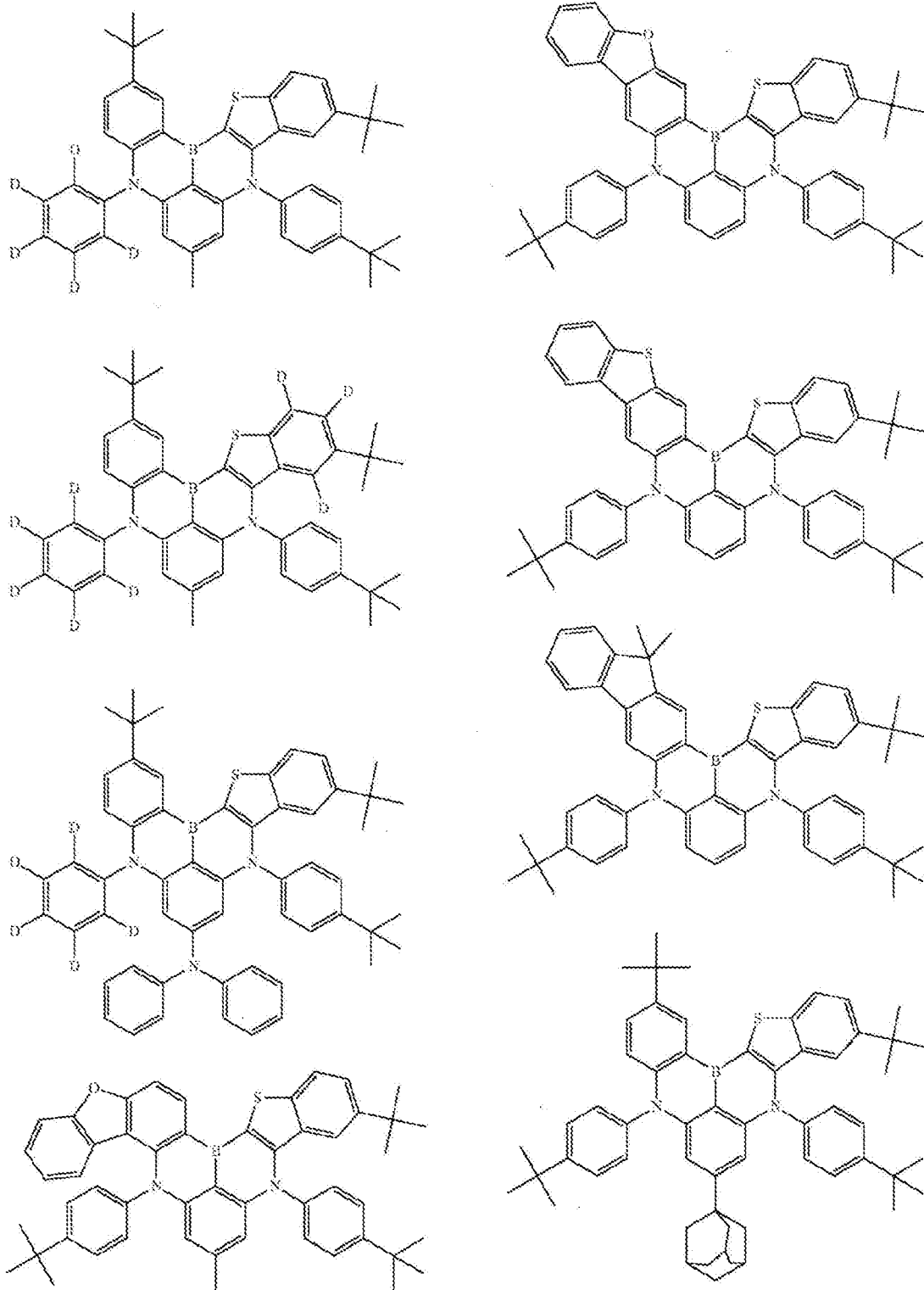
[0373]

[化156]



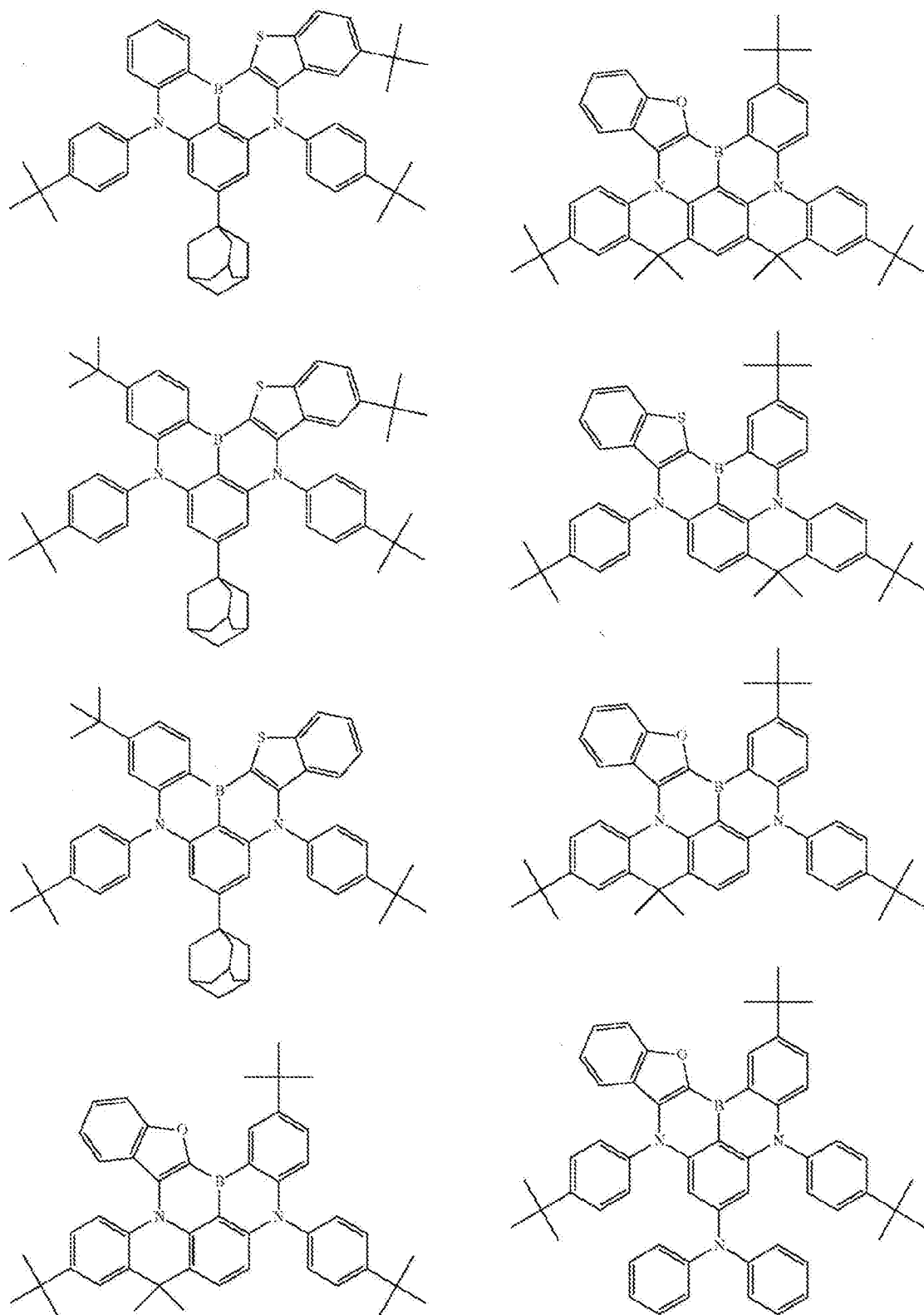
[0374]

[化157]



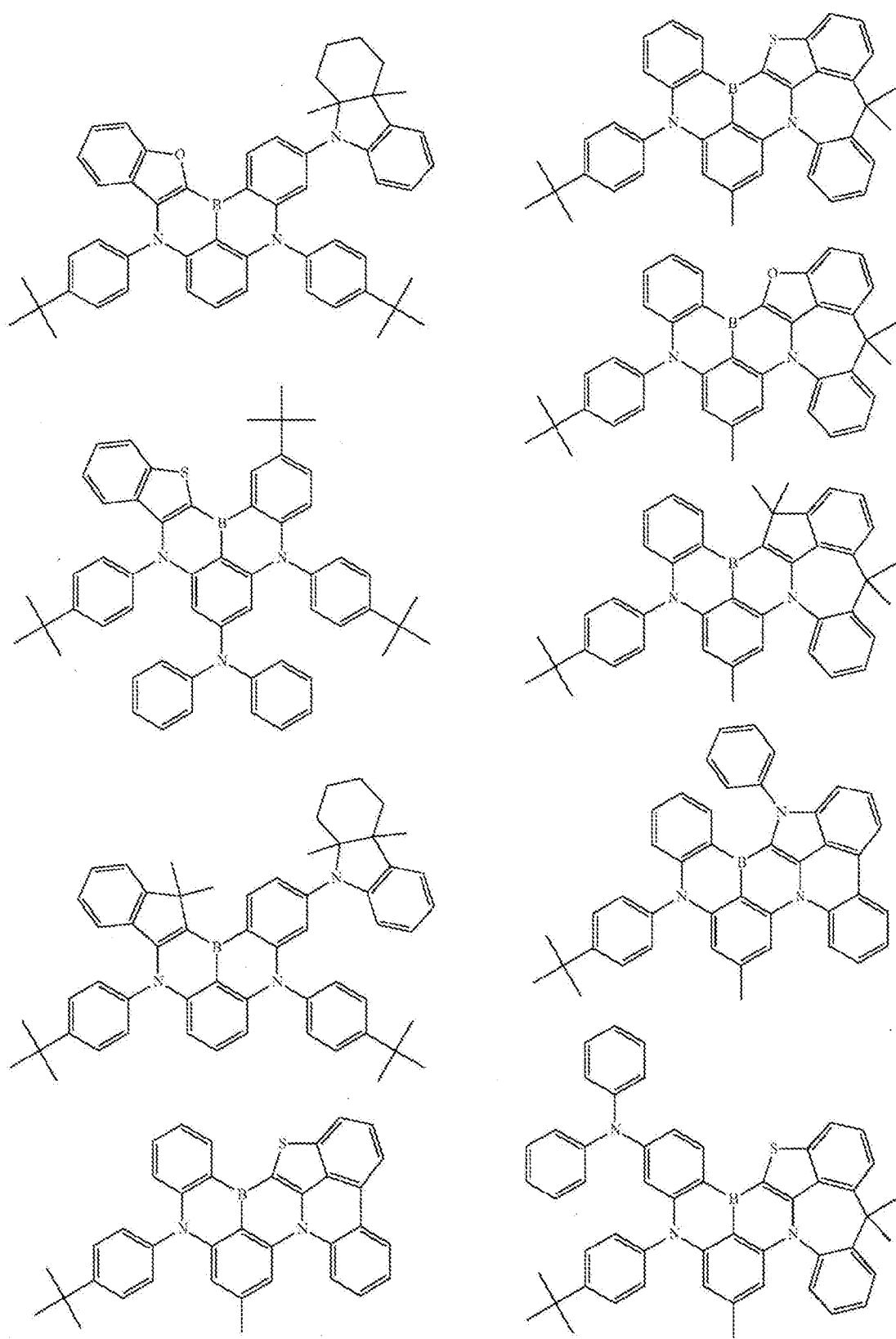
[0375]

[化158]

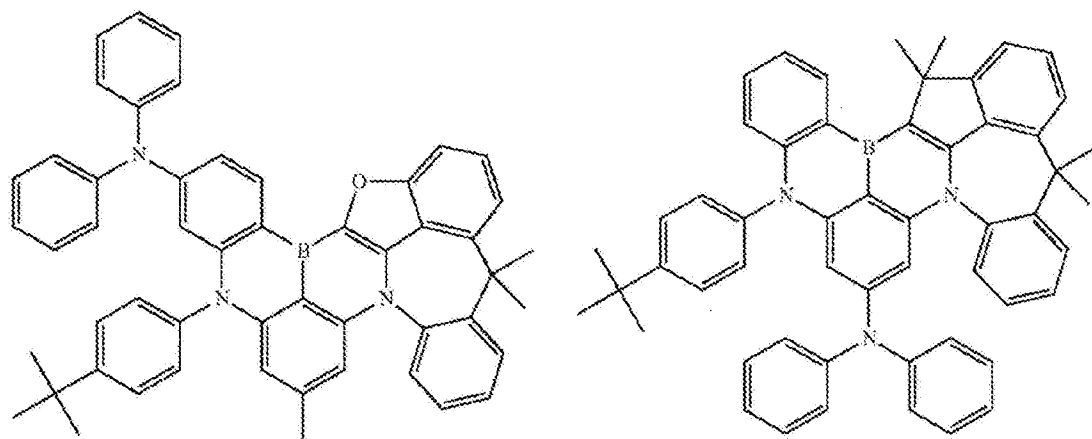


[0376]

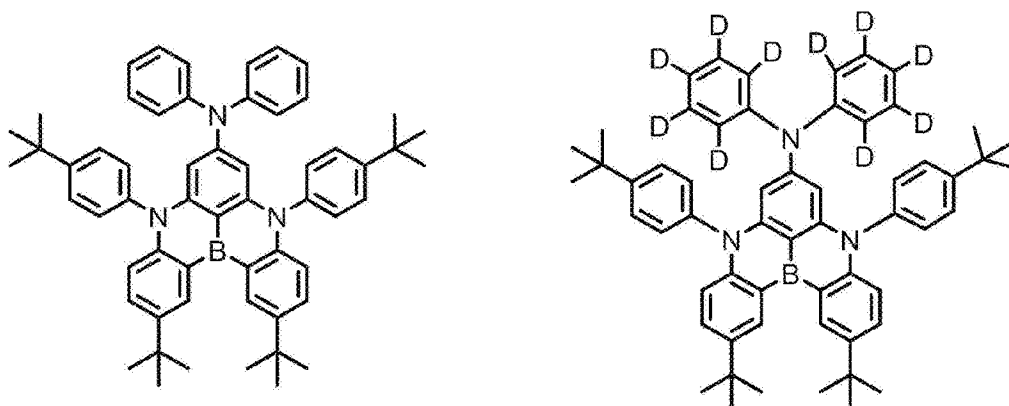
[化159]



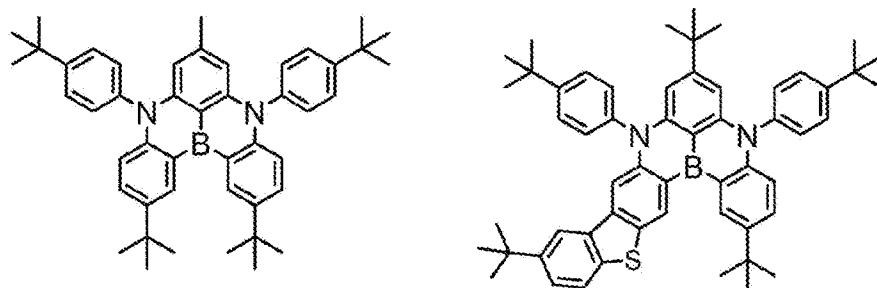
[0377] [化160]



[0378] [化161]

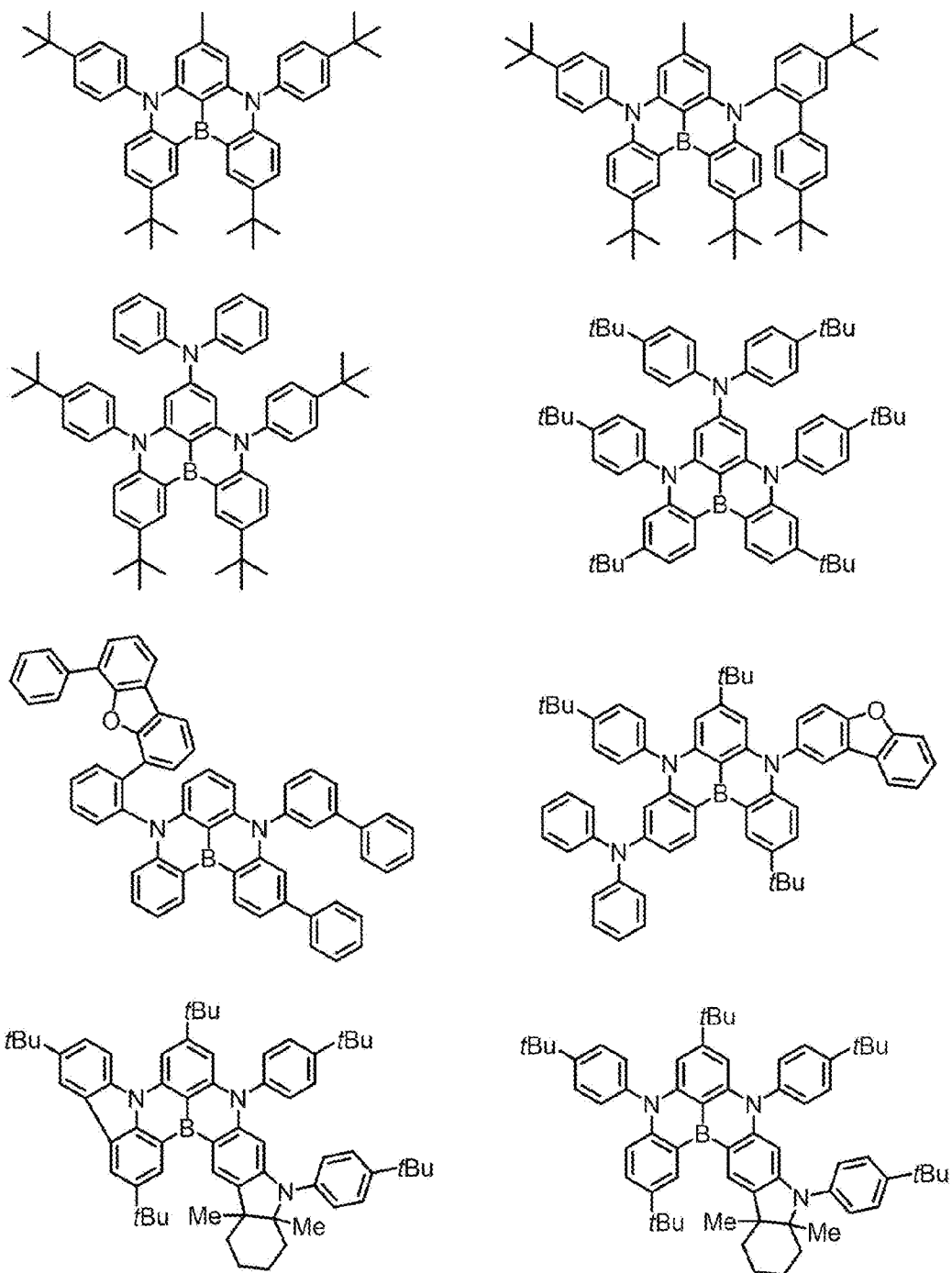


[0379] [化162]



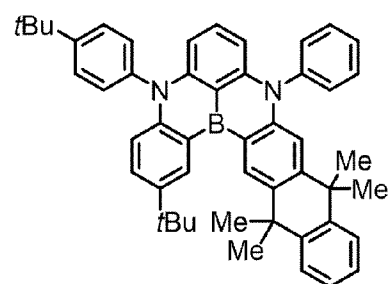
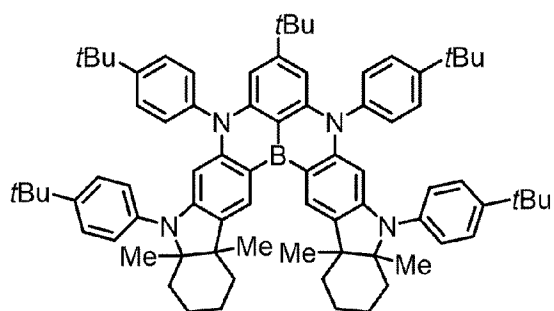
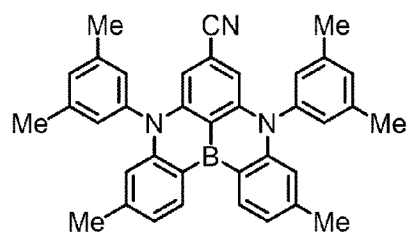
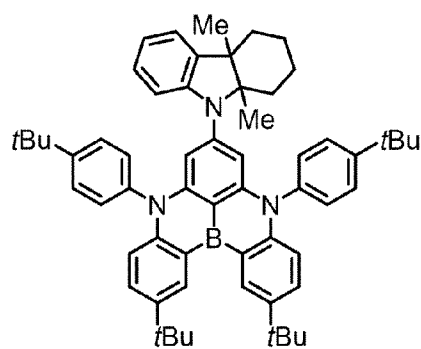
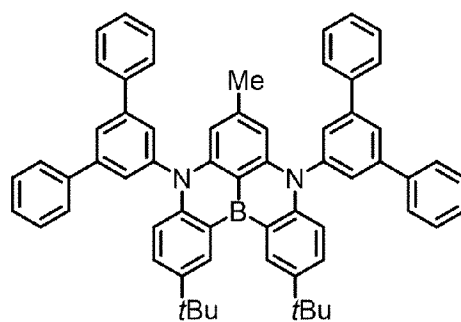
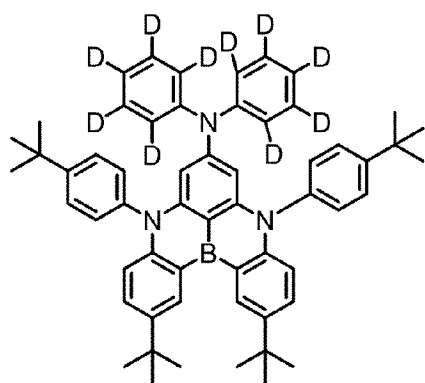
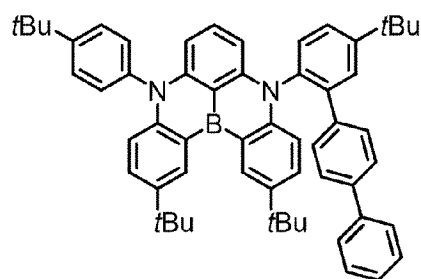
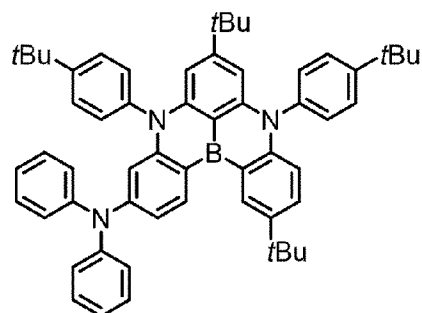
[0380]

[化163]



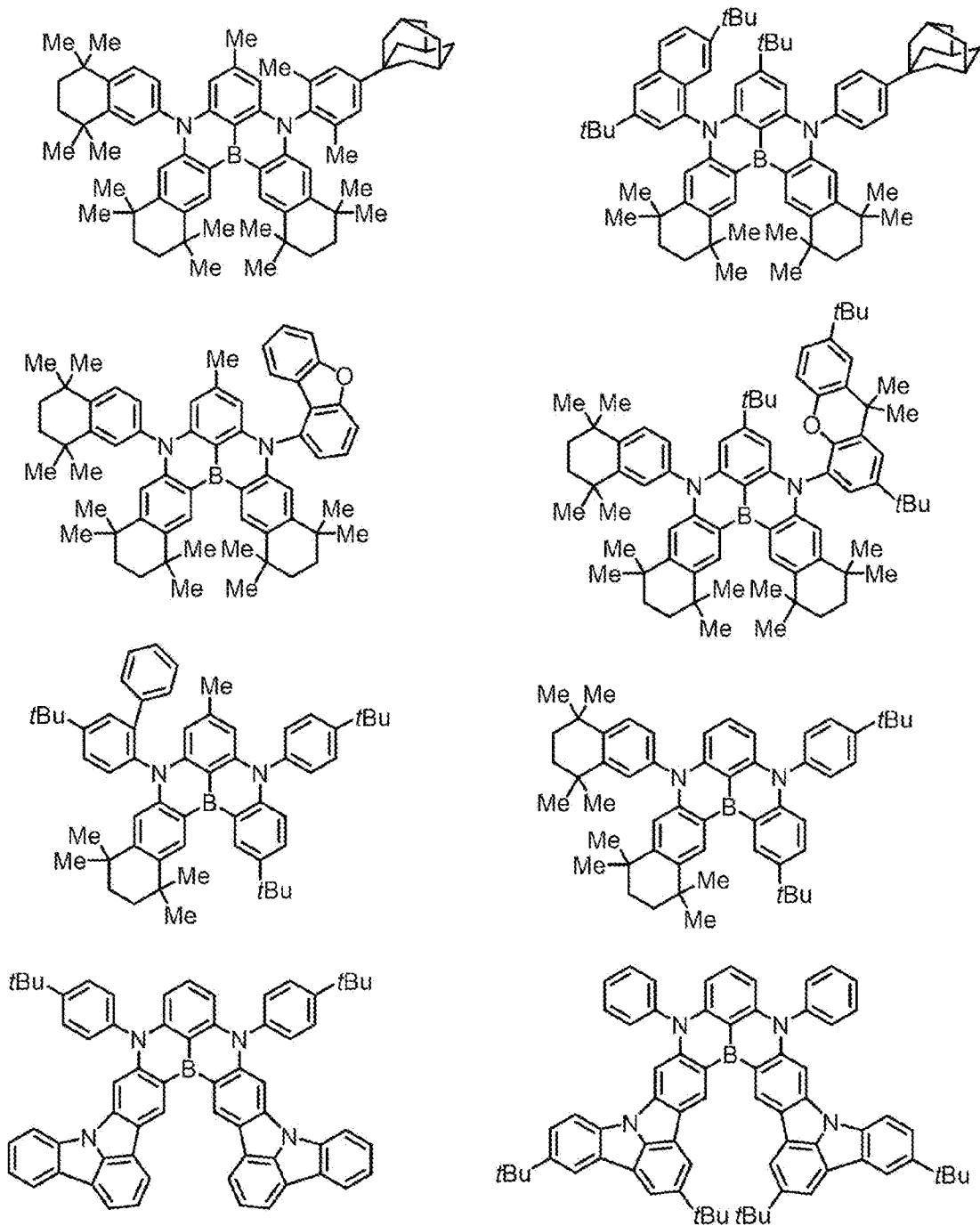
[0381]

[化164]



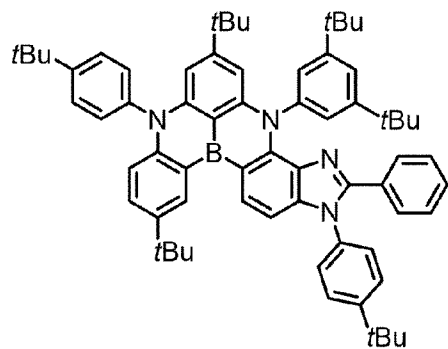
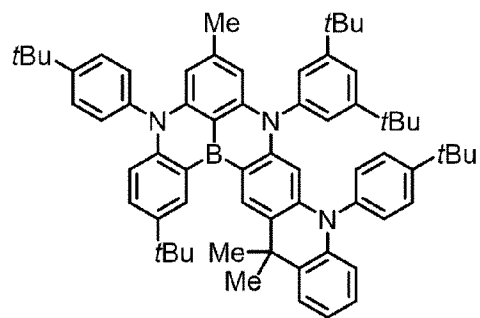
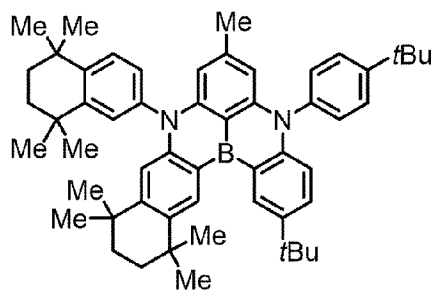
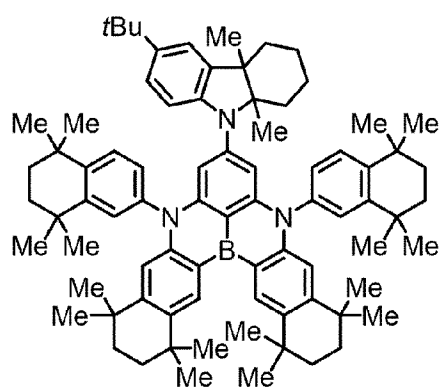
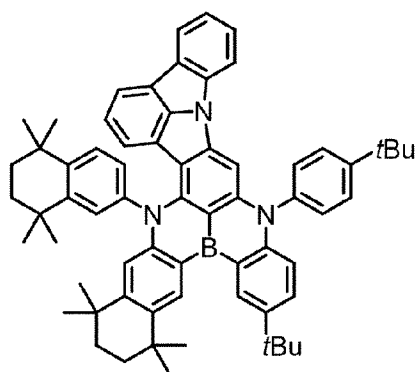
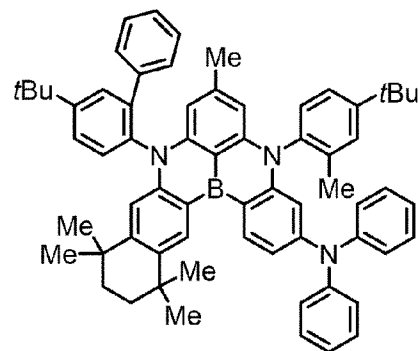
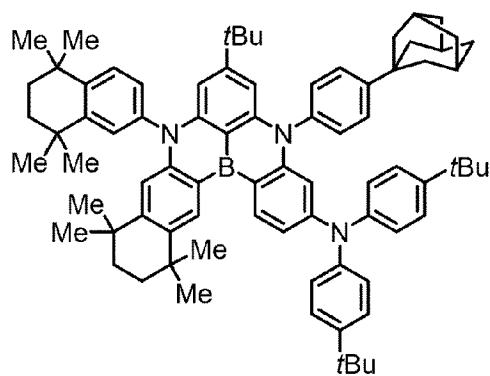
[0382]

[化165]



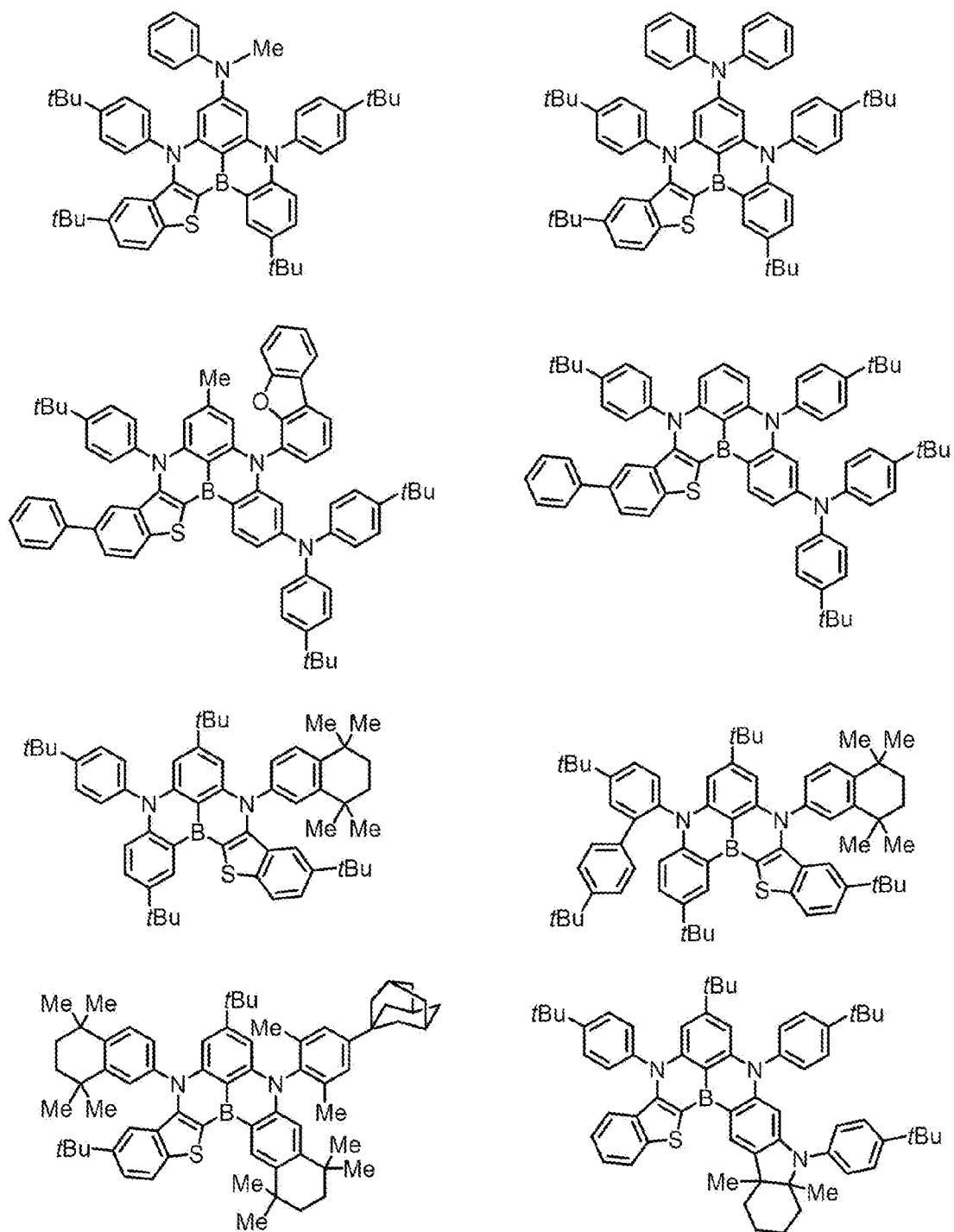
[0383]

[化166]



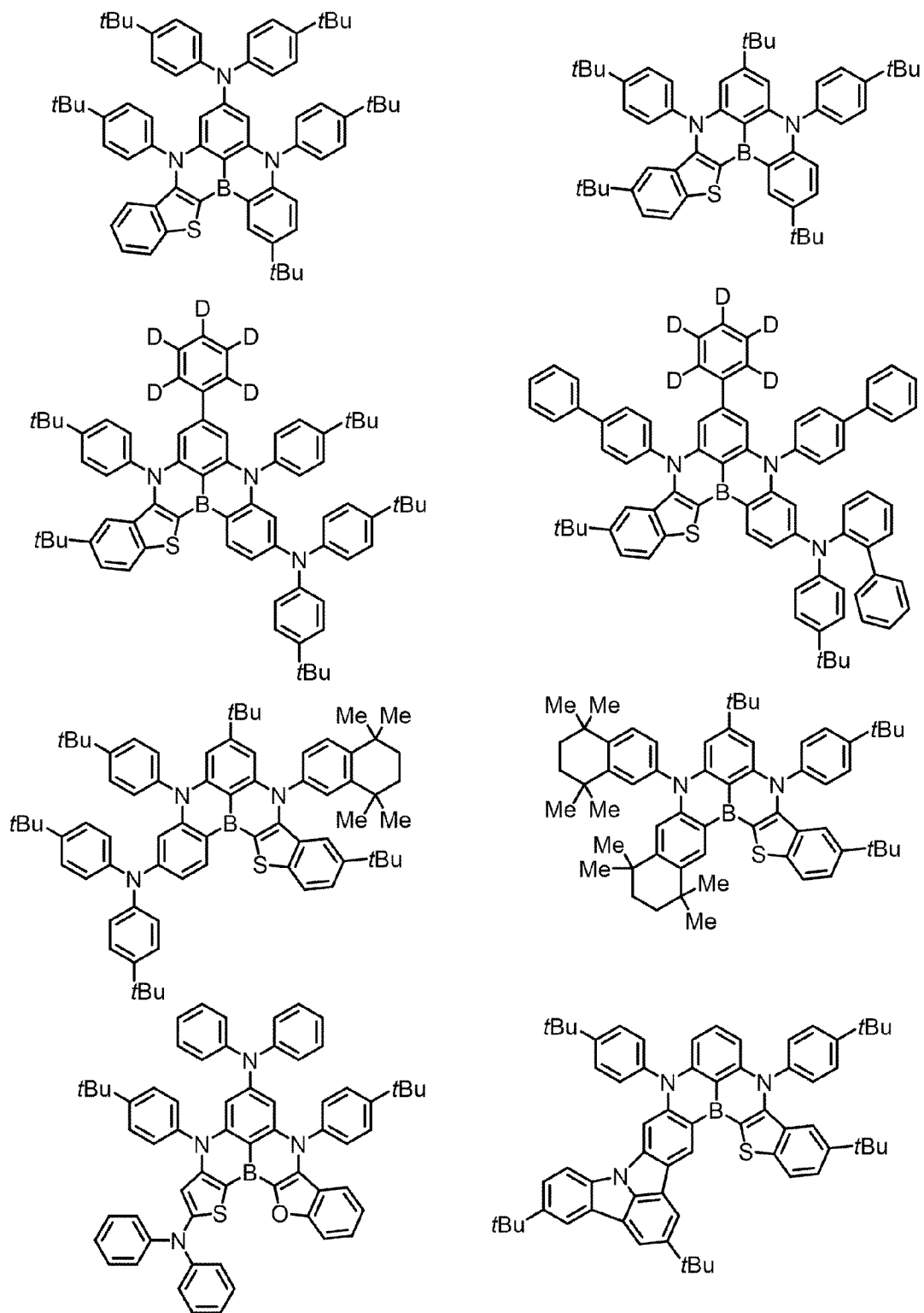
[0384]

[化167]



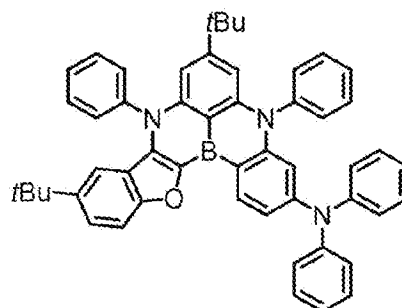
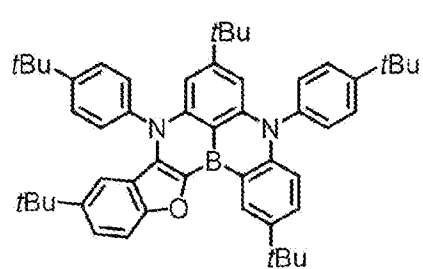
[0385]

[化168]

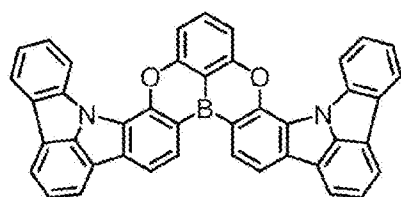
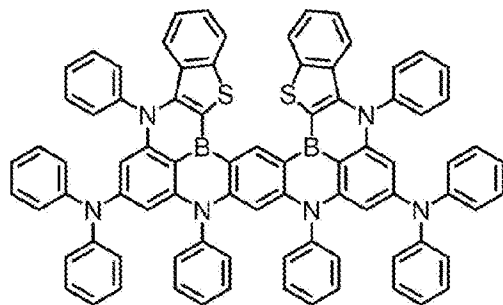
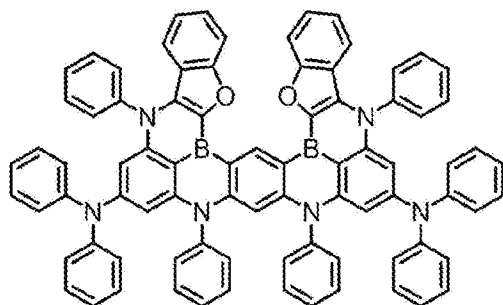
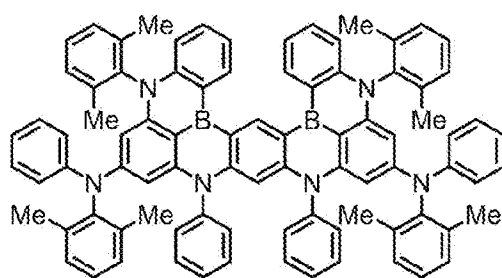
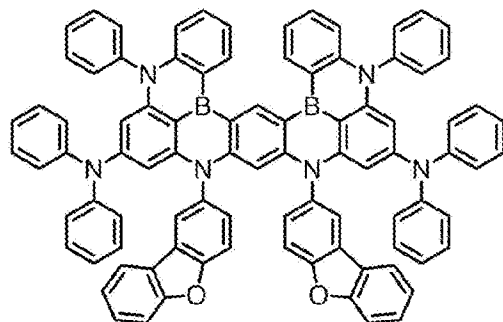
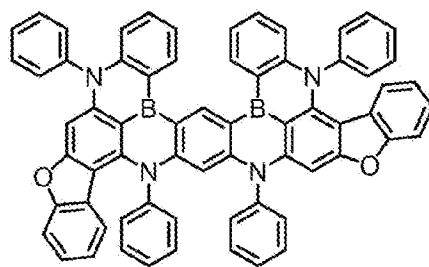
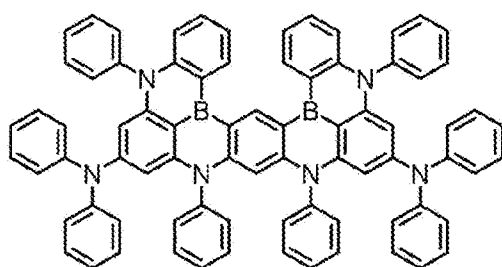


[0386]

[化169]

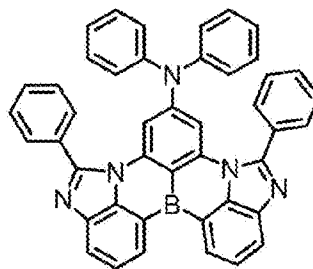
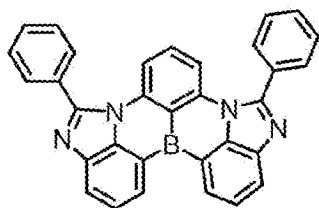


[0387] [化170]

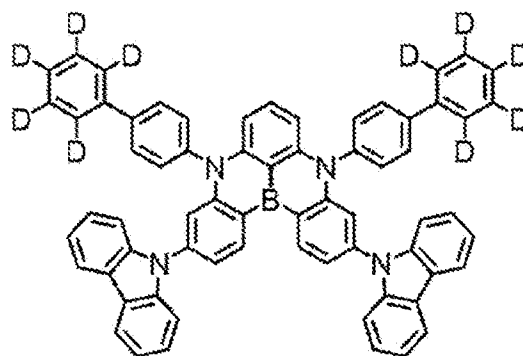
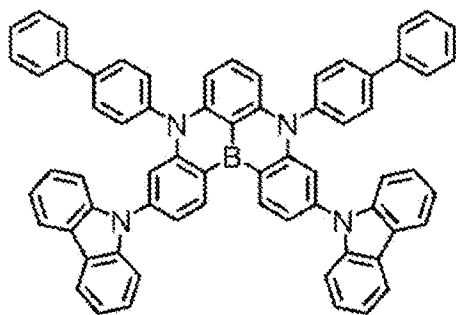
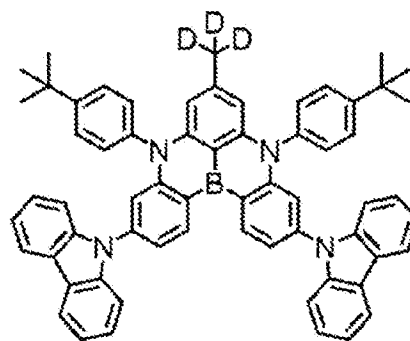
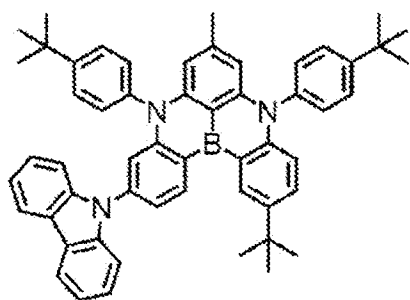
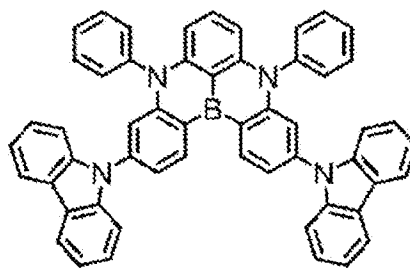
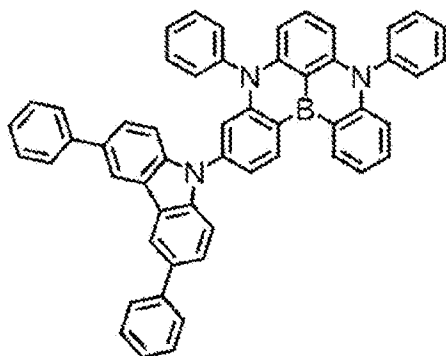


[0388]

[化171]

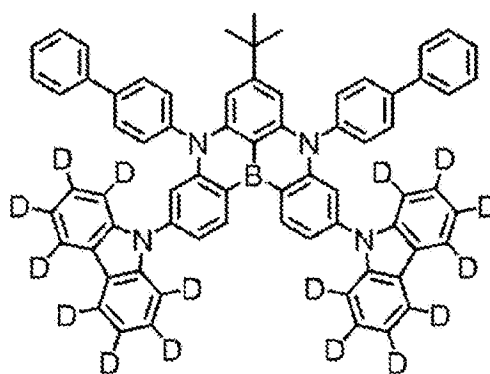
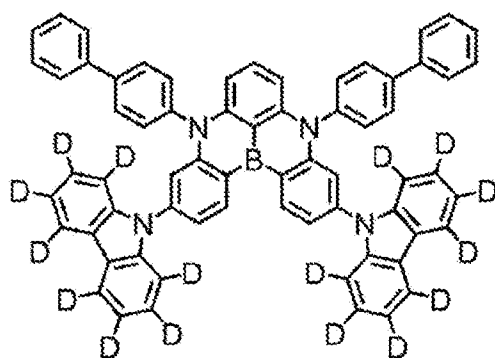
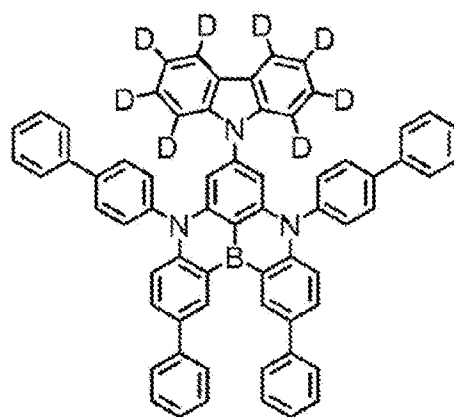
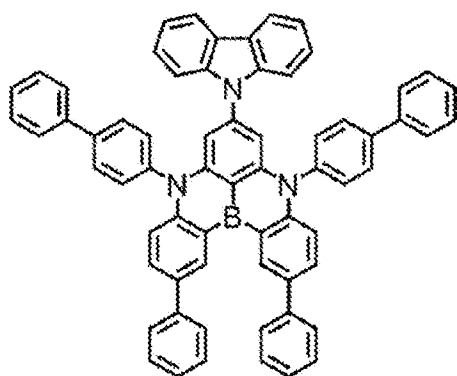
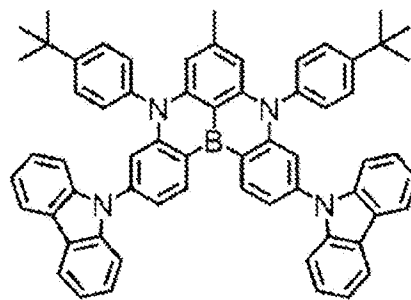
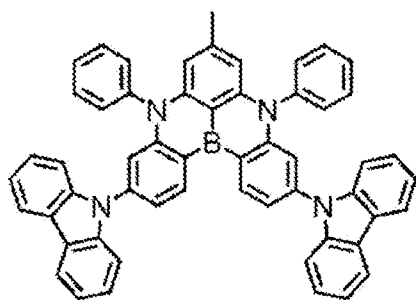


[0389] [化172]



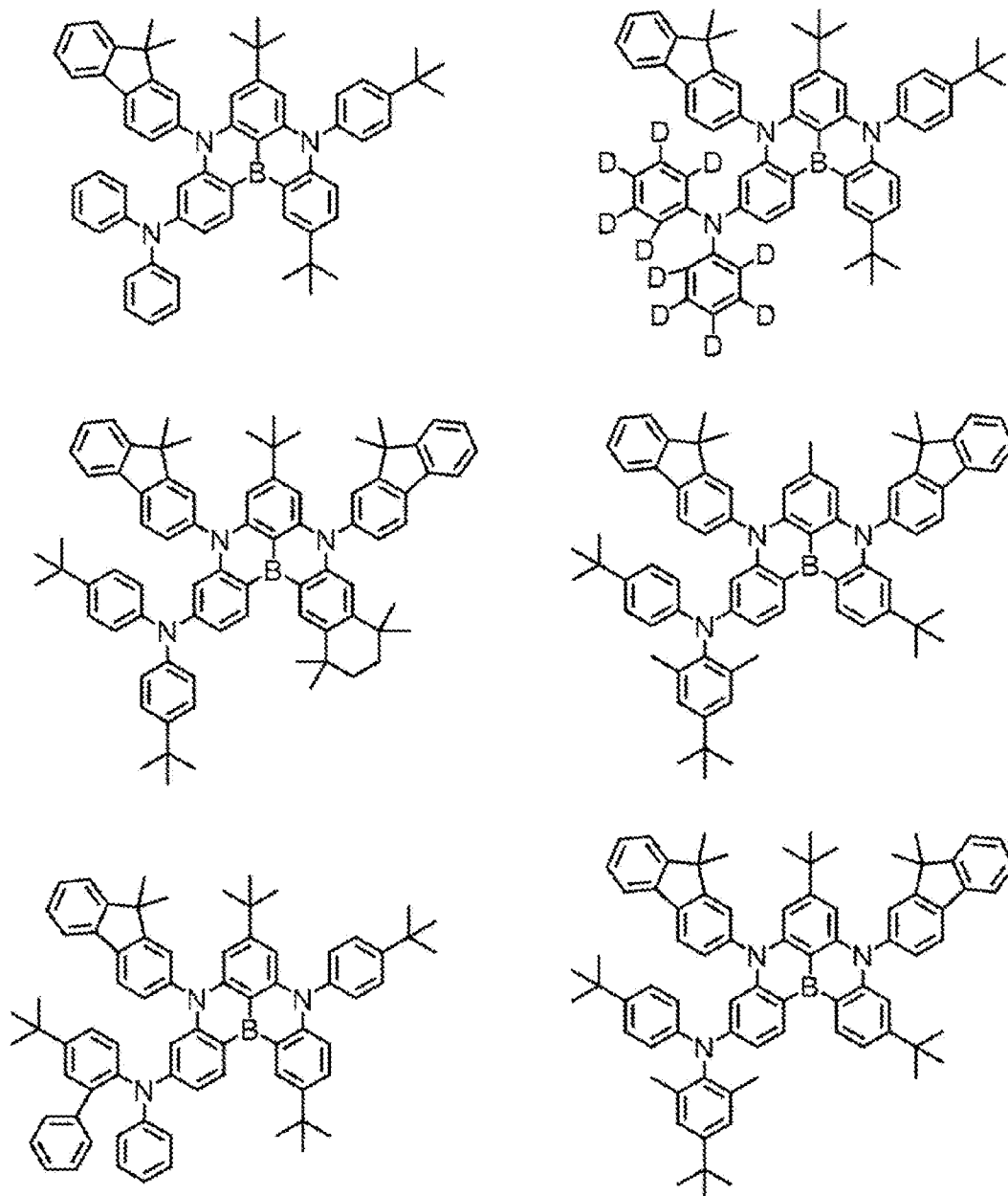
[0390]

[化173]



[0391]

[化174]



[0392] 一実施形態においては、前記各一般式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、無置換の炭素数1～50のアルキル基、無置換の炭素数2～50のアルケニル基、無置換の炭素数2～50のアルキニル基、無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{901a})(\text{R}_{902a})(\text{R}_{903a})$ 、 $-\text{O}-$ (R_{904a})、 $-\text{S}-$ (R_{905a})、 $-\text{N}(\text{R}_{906a})(\text{R}_{907a})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50の複素環基であ

り、

$R_{901a} \sim R_{907a}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1～50のアルキル基、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R_{901a} が2以上存在する場合、2以上の R_{901a} は、互いに同一であるか、又は異なり、 R_{902a} が2以上存在する場合、2以上の R_{902a} は、互いに同一であるか、又は異なり、 R_{903a} が2以上存在する場合、2以上の R_{903a} は、互いに同一であるか、又は異なり、 R_{904a} が2以上存在する場合、2以上の R_{904a} は、互いに同一であるか、又は異なり、 R_{905a} が2以上存在する場合、2以上の R_{905a} は、互いに同一であるか、又は異なり、 R_{906a} が2以上存在する場合、2以上の R_{906a} は、互いに同一であるか、又は異なり、 R_{907a} が2以上存在する場合、2以上の R_{907a} は、互いに同一であるか、又は異なる。

[0393] 一実施形態においては、前記各一般式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、無置換の炭素数1～50のアルキル基、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

[0394] 一実施形態においては、前記各一般式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、無置換の炭素数1～18のアルキル基、無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～18の複素環基である。

[0395] (最大ピーク波長)

本実施形態において、蛍光発光性材料としての第三の化合物の最大ピーク波長は、480nm以下であることが好ましく、475nm以下であることがより好ましい。

本実施形態において、蛍光発光性材料としての第三の化合物の最大ピーク波長は、430nm以上であることが好ましく、440nm以上であることがより好ましい。

本明細書において、蛍光発光の最大ピーク波長を、蛍光発光最大ピーク波長と称する場合がある。

本実施形態の有機EL素子において、第一の化合物は、青色の発光を示すことが好ましい。本明細書において、青色の発光とは、蛍光スペクトルの最大ピーク波長が430nm以上、480nm以下の範囲内である発光をいう。

[0396] (発光スペクトル半値幅)

本実施形態において、蛍光発光性材料としての第三の化合物の発光スペクトル半値幅FWHMは、40nm以下であることが好ましく、30nm以下であることがより好ましい。

本実施形態において、蛍光発光性材料としての第三の化合物の発光スペクトル半値幅FWHMは、5nm以上であることが好ましく、10nm以上であることがより好ましい。

FWHMは、半値全幅 (full width at half maximum) の略称である。

[0397] 本明細書において、蛍光発光最大ピーク波長とは、測定対象となる化合物が、 10^{-6} モル／リットル以上、 10^{-5} モル／リットル以下の濃度で溶解しているトルエン溶液について、測定した蛍光スペクトルにおける発光強度が最大となる蛍光スペクトルの最大ピーク波長をいう。発光スペクトル半値幅FWHMは、蛍光スペクトルの最大ピークにおける半値全幅である。蛍光スペクトルを測定する装置として、蛍光スペクトル測定装置を用いることができる。例えば、日本分光株式会社製の蛍光スペクトル測定装置（装置名：FP-8300）を用いることができる。なお、蛍光スペクトル測定装置は、ここで例示した装置に限定されない。

[0398] (ストークスシフト)

本実施形態において、蛍光発光性材料としての第三の化合物のストークスシフトは、25nm以下であることが好ましく、20nm以下であることがより好ましい。

本実施形態において、蛍光発光性材料としての第三の化合物のストークスシフトは、5 nm以上であることが好ましく、10 nm以上であることがより好ましい。

第三の化合物のストークスシフトが20 nm以下であることにより、励起エネルギーを低減することができる。

第三の化合物のストークスシフトが10 nm以上であることにより、自己吸収を抑制し効率の損失を低減することができる。

ストークスシフトは、次に記載する方法で測定できる。測定対象となる化合物を $2.0 \times 10^{-5} \text{ mol/L}$ の濃度でトルエンに溶解し、測定用試料を調製する。石英セルへ入れた測定用試料に室温（300 K）で紫外～可視領域の連続光を照射し、吸収スペクトル（縦軸：吸光度、横軸：波長）を測定する。吸収スペクトル測定には、分光光度計を用いることができ、例えば、日立ハイテクサイエンス社の分光光度計U-3900/3900H形を用いることができる。また、測定対象となる化合物を $4.9 \times 10^{-6} \text{ mol/L}$ の濃度でトルエンに溶解し、測定用試料を調製する。石英セルへ入れた測定用試料に室温（300 K）で励起光を照射し、蛍光スペクトル（縦軸：蛍光強度、横軸：波長）を測定する。蛍光スペクトル測定には、分光光度計を用いることができ、例えば、日立ハイテクサイエンス社の分光蛍光光度計F-7000形を用いることができる。これらの吸収スペクトルと蛍光スペクトルから、吸収極大波長と蛍光極大波長の差を算出し、ストークスシフト（SS）を求める。ストークスシフトSSの単位は、nmである。

[0399] （発光層におけるホスト材料、増感材料、及び蛍光発光性材料の関係）

一実施形態において、増感材料は、前記遅延蛍光性化合物である。一実施形態において、発光層は、増感材料として遅延蛍光性化合物を含有し、燐光発光性金属錯体を含有していなくてもよい。

[0400] 図4は、発光層におけるホスト材料（第一の化合物）、増感材料としての遅延蛍光性化合物（第二の化合物）、及び蛍光発光性材料（第三の化合物）のエネルギー準位の関係の一例を示す図である。図4において、S0は、基

底状態を表す。S₁ (M₁) は、ホスト材料の最低励起一重項状態を表し、T₁ (M₁) は、ホスト材料の最低励起三重項状態を表す。S₁ (M₂) は、遅延蛍光性化合物の最低励起一重項状態を表し、T₁ (M₂) は、遅延蛍光性化合物の最低励起三重項状態を表す。S₁ (M₃) は、蛍光発光性材料の最低励起一重項状態を表し、T₁ (M₃) は、蛍光発光性材料の最低励起三重項状態を表す。図4中のS₁ (M₂) からS₁ (M₃) へ向かう破線の矢印は、遅延蛍光性化合物の最低励起一重項状態から蛍光発光性材料の最低励起一重項状態へのフェルスター型エネルギー移動を表す。

図4に示すように、遅延蛍光性化合物としてΔST (M₂) の小さな化合物を用いると、最低励起三重項状態T₁ (M₂) は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態S₁ (M₂) に逆項間交差が可能である。そして、遅延蛍光性化合物の最低励起一重項状態S₁ (M₂) から蛍光発光性材料へのフェルスター型エネルギー移動が生じ、最低励起一重項状態S₁ (M₃) が生成する。この結果、蛍光発光性材料の最低励起一重項状態S₁ (M₃) からの蛍光発光を観測することができる。このTADFメカニズムによる遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部量子効率を100%まで高めることができると考えられている。

[0401] 一実施形態において、ホスト材料の77 [K] におけるエネルギーギャップT_{77K} (H₁) と、増感材料の77 [K] におけるエネルギーギャップT_{77K} (G₂) とが下記数式(数1) の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K} (H_1) > T_{77K} (G_2) \quad \cdots \text{(数1)}$$

[0402] 一実施形態において、遅延蛍光性化合物の最低励起一重項エネルギーS₁ (GT₂) と、蛍光発光性材料の最低励起一重項エネルギーS₁ (D) とが下記数式(数4) の関係を満たすことも好ましい。

$$S_1 (GT_2) > S_1 (D) \quad \cdots \text{(数4)}$$

[0403] 一実施形態において、ホスト材料の最低励起一重項エネルギーS₁ (H₁) と、遅延蛍光性化合物の最低励起一重項エネルギーS₁ (GT₂) とが下記数式(数4A) の関係を満たすことも好ましい。

$$S_1(H1) > S_1(GT2) \quad \dots \text{(数4 A)}$$

[0404] 一実施形態において、ホスト材料、遅延蛍光性化合物及び蛍光発光性材料の最低励起一重項エネルギー S_1 が下記数式（数4 B）の関係を満たすことも好ましい。

$$S_1(H1) > S_1(GT2) > S_1(D) \quad \dots \text{(数4 B)}$$

[0405] 本実施形態において、増感材料が遅延蛍光性化合物である場合の前記数式（数1）は、下記数式（数6）で表される。

$$T_{77K}(H1) > T_{77K}(GT2) \quad \dots \text{(数6)}$$

[0406] 一実施形態において、遅延蛍光性化合物の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(GT2)$ と、蛍光発光性材料の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(D)$ とが下記数式（数6 A）の関係を満たすことも好ましい。

$$T_{77K}(GT2) > T_{77K}(D) \quad \dots \text{(数6 A)}$$

[0407] 一実施形態において、ホスト材料、遅延蛍光性化合物及び蛍光発光性材料の77[K]におけるエネルギーギャップ T_{77K} が下記数式（数6 B）の関係を満たすことも好ましい。

$$T_{77K}(H1) > T_{77K}(GT2) > T_{77K}(D) \quad \dots \text{(数6 B)}$$

[0408] 本実施形態の有機EL素子を発光させたときに、発光層において、主に蛍光発光性の化合物が発光していることが好ましい。

[0409] 有機EL素子から発光する光の最大ピーク波長の測定は、以下のようにして行う。

電流密度が 10 mA/cm^2 となるように有機EL素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計CS-2000（コニカミノルタ株式会社製）で計測する。

得られた分光放射輝度スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を測定し、これを最大ピーク波長（単位：nm）とする。

[0410] （発光層における化合物の含有率）

発光層に含まれているホスト材料（第一の化合物）、増感材料（第二の化合物）、及び蛍光発光性材料（第三の化合物）の含有率は、例えば、以下の範囲であることが好ましい。

[0411] 発光層中のホスト材料（第一の化合物）の含有率は、50質量%以上であることが好ましく、70質量%以上であることがより好ましい。

発光層中のホスト材料（第一の化合物）の含有率は、95質量%以下であることが好ましく、90質量%以下であることがより好ましい。

[0412] 増感材料（第二の化合物）が遅延蛍光性化合物である場合、発光層中の遅延蛍光性化合物の含有率は、5質量%以上であることが好ましく、10質量%以上であることがより好ましい。

発光層中の遅延蛍光性化合物の含有率は、50質量%以下であることが好ましく、30質量%以下であることがより好ましい。

[0413] 発光層中の蛍光発光性材料（第三の化合物）の含有率は、0.5質量%以上であることが好ましく、1質量%以上であることがより好ましい。

発光層中の蛍光発光性材料（第三の化合物）の含有率は、10質量%以下であることが好ましく、5質量%以下であることがより好ましい。

発光層におけるホスト材料（第一の化合物）、増感材料（第二の化合物）、及び蛍光発光性材料（第三の化合物）の合計含有率の上限は、100質量%である。なお、本実施形態は、発光層に、ホスト材料、増感材料、及び蛍光発光性材料以外の材料が含まれることを除外しない。本実施形態において、発光層は、ホスト材料を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

[0414] （発光層の膜厚）

本実施形態の有機EL素子における発光層の膜厚は、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以上であると、発光層形成及び色度の調整が容易になりやすく、50nm以下であると、駆動電圧の上昇が抑制されやすい。

[0415] 有機EL素子の構成についてさらに説明する。

[0416] (基板)

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

[0417] (陽極)

基板上に形成される陽極には、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など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、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。

[0418] 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、スピンコート法などにより作製してもよい。

[0419] 陽極上に形成されるE L層のうち、陽極に接して形成される正孔注入層は、陽極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）を用いることができる。

[0420] 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（L i）やセシウム（C s）等のアルカリ金属、およびマグネシウム（M g）、カルシウム（C a）、ストロンチウム（S r）等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金（例えば、M g A g、A l L i）、ユーロピウム（E u）、イッテルビウム（Y b）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、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

[0421] 有機E L素子がボトムエミッション型である場合、陽極は、発光層からの光を透過する光透過性もしくは半透過性を有する金属材料で形成されることが好ましい。本明細書において、光透過性もしくは半透過性とは、発光層から発光される光を50%以上（好ましくは80%以上）透過する性質を意味する。光透過性もしくは半透過性を有する金属材料は、前記陽極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。

[0422] 有機E L素子がトップエミッション型である場合、陽極は反射層を有する反射性電極である。反射層は、光反射性を有する金属材料で形成されることが好ましい。本明細書において、光反射性とは、発光層から発光される光を50%以上（好ましくは80%以上）反射する性質を意味する。光反射性を有する金属材料は、前記陽極の項で列挙した材料から適宜選択して使用する

ことができる。

陽極は反射層のみで構成されていてもよいが、反射層と、導電層（好ましくは透明導電層）とを有する多層構造であってもよい。陽極が反射層及び導電層を有する場合、反射層と正孔輸送帯域との間に当該導電層が配置されることが好ましい。導電層は、前記陽極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。

[0423] （陰極）

陰極には、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など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）やセシウム（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）、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）、ユーロピウム（Eu）、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。

[0424] なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、これらを含む合金を用いて陰極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、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

[0425] なお、電子注入層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、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、スピンコート法等を用いて成膜することができる。

[0426] 有機EL素子がボトムエミッション型である場合、陰極は、反射性電極である。反射性電極は、光反射性を有する金属材料で形成されることが好ましい。光反射性を有する金属材料は、前記陰極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。

[0427] 有機EL素子がトップエミッション型である場合、陰極は、発光層からの光を透過する光透過性もしくは半透過性を有する金属材料で形成されることが好ましい。光透過性もしくは半透過性を有する金属材料は、前記陰極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。

[0428] 本実施形態に係る有機EL素子は、ボトムエミッション型の有機EL素子でもよい。また、本実施形態に係る有機EL素子は、トップエミッション型の有機EL素子でもよい。

有機EL素子がボトムエミッション型である場合、陽極が光透過性を有する光透過性電極であり、陰極が光反射性を有する光反射性電極であることが好ましい。

有機EL素子がトップエミッション型である場合、陽極が光反射性を有する光反射性電極であり、陰極が光透過性を有する光透過性電極であることが好ましい。

[0429] (キャッピング層)

有機EL素子がトップエミッション型である場合、有機EL素子は、通常、陰極の上部にキャッピング層を備える。

キャッピング層は、例えば、高分子化合物、金属酸化物、金属フッ化物、金属ホウ化物、窒化ケイ素、及びシリコン化合物（酸化ケイ素等）からなる群から選択される少なくともいずれかの化合物を含有していてもよい。

また、キャッピング層は、例えば、芳香族アミン誘導体、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、フルオレン誘導体、又はジベンゾフラン誘導体からなる群から選択される少なくともいずれかの化合物を含有していてもよい。

また、これらの物質を含む層を積層させた積層体も、キャッピング層として用いることができる。

[0430] (正孔注入層)

正孔注入層は、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、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''-トリス(N, N-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン(略称: TDATA)、4, 4', 4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称: MTDATA)、4, 4'-ビス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称: DPAB)、4, 4'-ビス(N-{4-[N'-(3-メチルフェニル)-N'-フェニルアミノ]フェニル}-N-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)、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、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)、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)など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)、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。

[0431] (正孔輸送層)

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層には、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用することができる。具体的には、4, 4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称: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:BAFLP)、4, 4'-ビス[N-(9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:DFLDPBi)、4, 4', 4''-トリス(N, N-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン(略称:TDATA)、4, 4', 4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称:MTDATA)、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)など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 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上の正孔移動度を有する物質である。

正孔輸送層には、CBP、CzPA、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良い。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、単層であっても、上記物質からなる層が二層以上積層された層であってもよい。

[0432] (電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層には、

1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、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、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、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)、BAIq、Znq、ZnPBO、ZnBTZなど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-(p-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)、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)などの複素芳香族化合物も用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 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として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層であっても、上記物質からなる層が二層以上積層された層であってもよい。

また、電子輸送層には、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)、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)などを用いることができる。

[0433] (電子注入層)

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層には、リチウム（L i）、セシウム（C s）、カルシウム（C a）、フッ化リチウム（L i F）、フッ化セシウム（C s F）、フッ化カルシウム（C a F₂）、リチウム酸化物（L i O_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もの、具体的にはA l q中にマグネシウム（M g）を含有させたもの等を用いてもよい。なお、この場合には、陰極からの電子注入をより効率良く行うことができる。

あるいは、電子注入層に、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、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、バリウム酸化物等が挙げられる。また、酸化マグネシウムのようなルイス塩基を用いることもできる。また、テトラシアフルバレン（略称：T T F）等の有機化合物を用いることもできる。

[0434]（層形成方法）

前述のいずれかの実施形態に係る有機E L素子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が、真空蒸着法、スパッタリング法、プラズマ法、イオンプレーティング法などの乾式成膜法や、スピニング法、ディッピング法、フローコーティング法、インクジェット法などの湿式成膜法などの公知の方法を採用することができる。

[0435] (膜厚)

本実施形態に係る有機EL素子の各有機層の膜厚は、上記で特に言及した場合を除いて限定されない。一般に、膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、膜厚が厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常、有機EL素子の各有機層の膜厚は、数nmから1 μ mの範囲が好ましい。

[0436] 本実施形態に係る有機EL素子は、表示装置及び発光装置等の電子機器に使用できる。

[0437] 第三実施形態によれば、有機EL素子の高効率化を実現できる。第三実施形態に係る有機EL素子は、表示装置及び発光装置等の電子機器に使用できる。

[0438] [第四実施形態]

(電子機器)

本実施形態に係る電子機器は、上述の実施形態に係る有機EL素子及び後述の他の実施形態に係る有機EL素子からなる群から選択される1種以上の有機EL素子を搭載している。電子機器としては、例えば、表示装置及び発光装置等が挙げられる。表示装置としては、例えば、表示部品（例えば、有機ELパネルモジュール等）、テレビ、携帯電話、タブレット、及びパーソナルコンピュータ等が挙げられる。発光装置としては、例えば、照明及び車両用灯具等が挙げられる。発光装置は、表示装置に用いることもでき、例えば、表示装置のバックライトとして用いることもできる。

[0439] 本実施形態に係る電子機器としての表示装置は、赤色画素、緑色画素及び青色画素としての有機EL素子を搭載した有機EL表示装置であることが好ましい。この有機EL表示装置において、青色画素は、第三実施形態に係る有機EL素子であることが好ましい。

[0440] [他の実施形態]

一実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、陽極及び陰極の間に配置された発光層とを含み、発光層は、ホスト材料としての第一実施形態に

係る化合物と、ドーパント材料としての燐光発光性金属錯体とを含んでもよい。

一実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、陽極及び陰極の間に配置された発光層とを含み、発光層は、ホスト材料としての第一実施形態に係る化合物と、増感材料としての燐光発光性金属錯体と、ドーパント材料としての蛍光発光性材料（第三の化合物）とを含んでもよい。

[0441] 他の実施形態によれば、有機EL素子の高効率化を実現できる。他の実施形態に係る有機EL素子は、表示装置及び発光装置等の電子機器に使用できる。

[0442] 〔実施形態の変更〕

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、改良などは、本発明に含まれる。

[0443] 例えば、発光層は、1層に限られず、複数の発光層が積層されていてもよい。有機EL素子が複数の発光層を有する場合、少なくとも1つの発光層が上記実施形態で説明した条件を満たしていればよい。例えば、その他の発光層が、蛍光発光型の発光層であっても、三重項励起状態から直接基底状態への電子遷移による発光を利用した燐光発光型の発光層であってもよい。

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

[0444] また、例えば、発光層の陽極側、及び陰極側の少なくとも一方に障壁層を隣接させて設けてもよい。障壁層は、発光層に接して配置され、正孔、電子、及び励起子の少なくともいずれかを阻止することが好ましい。

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

また、発光層の陽極側で接して障壁層が配置された場合、当該障壁層は、

正孔を輸送し、かつ電子が当該障壁層よりも陽極側の層（例えば、正孔輸送層）に到達することを阻止する。有機EL素子が、正孔輸送層を含む場合は、発光層と正孔輸送層との間に当該障壁層を含むことが好ましい。

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

一実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、陽極及び陰極の間に配置された発光層と、陽極と発光層との間に電子障壁層とを含み、電子障壁層は、第一実施形態に係る化合物（前記一般式（1）で表される化合物）を含んでもよい。電子障壁層は発光層と直接、接することが好ましい。電子障壁層は、正孔輸送層と発光層との間に配置されていることが好ましい。また、正孔障壁層は、電子輸送層と発光層との間に配置されていることが好ましい。

一実施形態に係る有機EL素子は、例えば、図1の有機層10に代えて、陽極側から順に、正孔注入層、正孔輸送層、電子障壁層、発光層、正孔障壁層、電子輸送層及び電子注入層が、この順番で積層されて構成される有機層を備えた有機EL素子でもよい。

[0445] その他、本発明の実施における具体的な構造、及び形状等は、本発明の目的を達成できる範囲で他の構造等としてもよい。

実施例

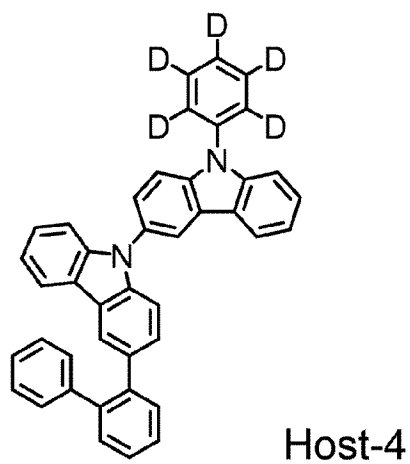
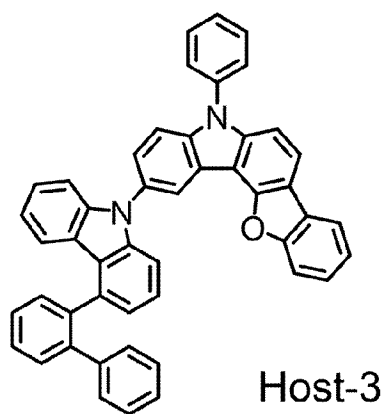
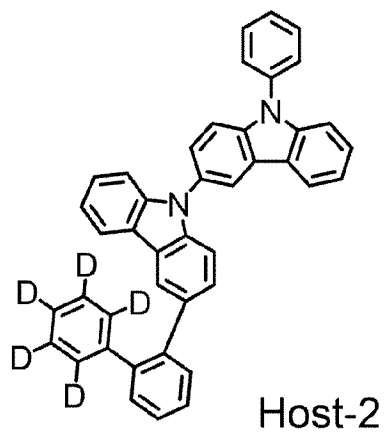
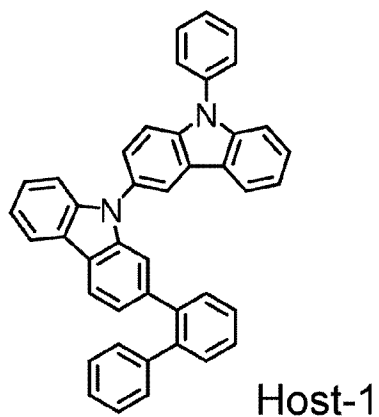
[0446] 以下、実施例を挙げて本発明をさらに詳細に説明する。本発明はこれら実施例に何ら限定されない。

[0447] <化合物>

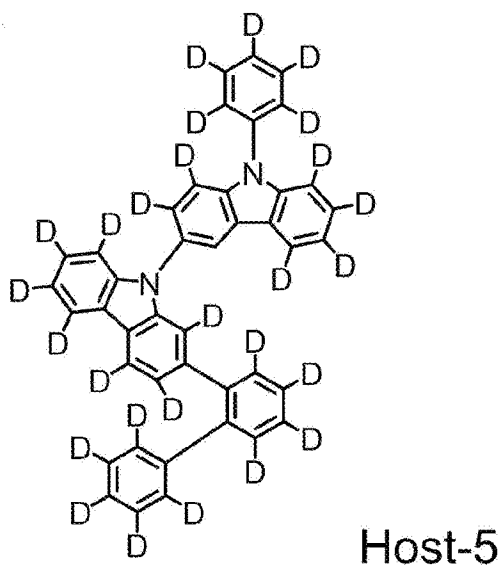
実施例1～5に係る有機EL素子の製造に用いた、一般式（1）で表される化合物の構造を以下に示す。

[0448]

[化175]



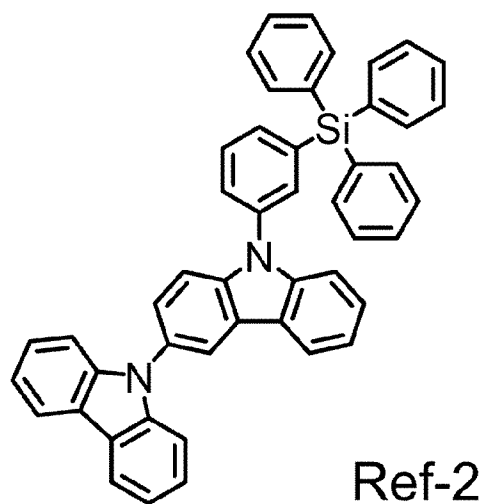
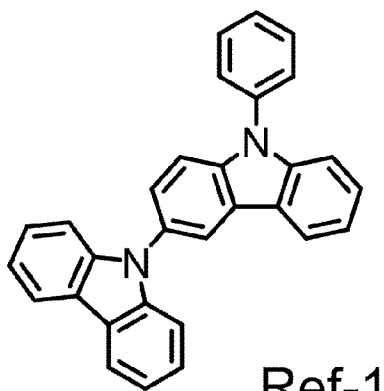
[0449] [化176]



[0450] 比較例 1 ～ 2 に係る有機 EL 素子の製造に用いた化合物の構造を以下に示

す。

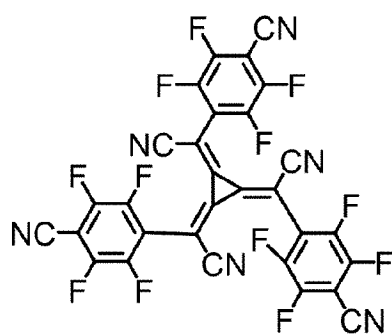
[0451] [化177]



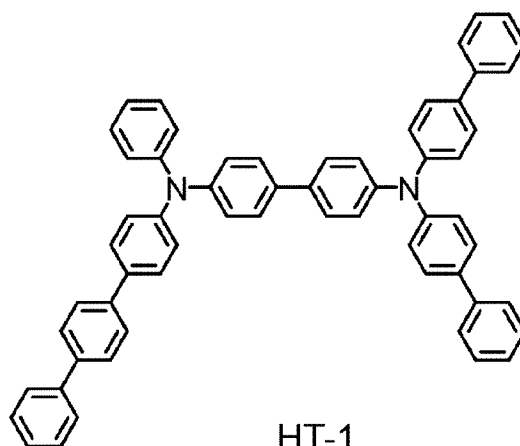
[0452] 実施例 1 ～ 5 及び比較例 1 ～ 2 に係る有機 EL 素子の製造に用いたその他の化合物の構造を以下に示す。

[0453]

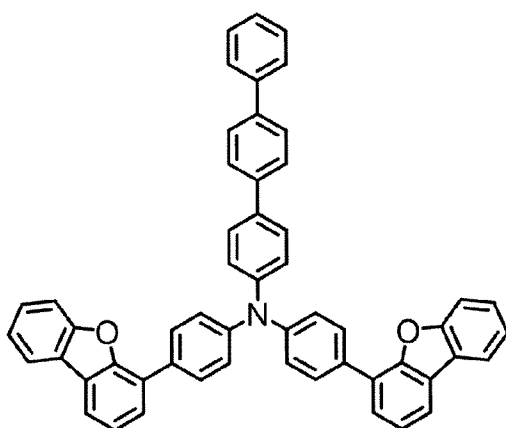
[化178]



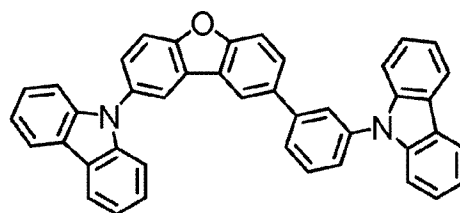
HA-1



HT-1



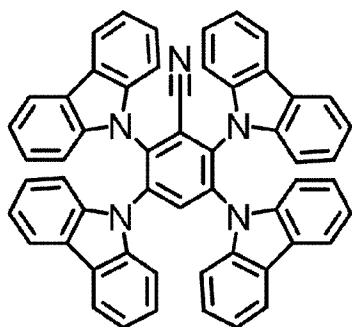
HT-2



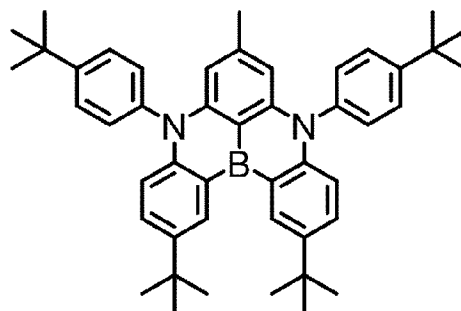
EBL-1

[0454]

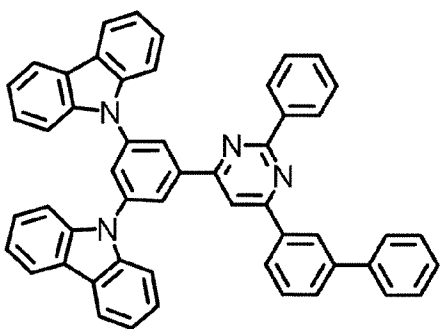
[化179]



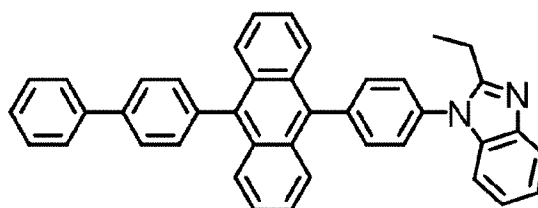
STZ-1



BD-1



HBL-1



ET-1

[0455] <有機EL素子の作製（１）>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

[0456] （実施例１）

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）を、イソプロピルアルコール中で5分間超音波洗浄を行った後、UVオゾン洗浄を1分間行った。ITOの膜厚は、130nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-1と化合物HA-1とを共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層を形成した。正孔注入層における化合物HT-1の割合を97質量%とし、化合物HA-1の割合を3質量%とした。

次に、正孔注入層の上に、化合物HT-1を蒸着し、膜厚80nmの第1正孔輸送層を形成した。

次に、第1正孔輸送層の上に、化合物HT-2を蒸着し、膜厚5 nmの第2正孔輸送層を形成した。

次に、第2正孔輸送層の上に、化合物EBL-1を蒸着し、膜厚5 nmの第3正孔輸送層（電子障壁層ともいう。）を形成した。

次に、第3正孔輸送層の上に、ホスト材料（第一の化合物）としての化合物Host-1と、増感材料としての化合物STZ-1（第二の化合物）と、蛍光発光性材料（第三の化合物）としての化合物BD-1と、を共蒸着し、膜厚30 nmの発光層を形成した。発光層における化合物Host-1の割合を74質量%とし、化合物STZ-1の割合を25質量%とし、化合物BD-1の割合を1質量%とした。

次に、発光層の上に、化合物HBL-1を蒸着し、膜厚10 nmの正孔障壁層を形成した。

次に、正孔障壁層の上に、化合物ET-1を蒸着し、膜厚20 nmの電子輸送層を形成した。

次に、電子輸送層の上に、LiFを蒸着し、膜厚1 nmの電子注入層を形成した。

そして、電子注入層の上に、金属アルミニウム（Al）を蒸着し、膜厚50 nmの金属Al陰極を形成した。

以上のようにして、実施例1に係る有機EL素子を作製した。実施例1に係る有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HT-1:HA-1(10, 97%:3%)/HT-1(80)/HT-2(5)/EBL-1(5)/Host-1:STZ-1:BD-1(30, 74%:25%:1%)/HBL-1(10)/ET-1(20)/LiF(1)/Al(50)

なお、上記素子構成中、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。同じく、上記素子構成中、括弧内において、パーセント表示された数字（97%：3%）は、正孔注入層における化合物HT-1及び化合物HA-1の割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（74%：25%：1%）は、発光層における化合物Host-1、化合物STZ-1及び化合物BD-1の割合（質量%）を示す。以下、同様の表記とする。

[0457] (実施例 2 ～ 5)

実施例 2 ～ 5 の有機 EL 素子は、それぞれ、実施例 1 の発光層に用いたホスト材料としての化合物 Host-1 を表 1 に記載の化合物に変更した以外、実施例 1 と同様にして作製した。

[0458] (比較例 1 ～ 2)

比較例 1 ～ 2 の有機 EL 素子は、それぞれ、実施例 1 の発光層に用いたホスト材料としての化合物 Host-1 を表 1 に記載の化合物に変更した以外、実施例 1 と同様にして作製した。

[0459] <有機 EL 素子の評価>

作製した有機 EL 素子について、以下の評価を行った。評価結果を表 1 に示す。また、各例の発光層で使用了化合物の最低励起一重項エネルギー S_1 及びエネルギーギャップ T_{77K} も表 1 に示す。

[0460] (外部量子効率 EQE)

作製した有機 EL 素子に電流密度が 10.00 mA/cm^2 となるように電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計 CS-2000 (コニカミノルタ株式会社製) で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、ランバシアン放射を行ったと仮定し外部量子効率 EQE (単位: %) を算出した。各例の EQE の測定値、並びに下記数式 (数 1 X) に基づいて、「EQE (相対値)」 (単位: %) を算出した。

$$\text{EQE (相対値)} = (\text{各例の EQE} / \text{比較例 1 の EQE}) \times 100 \dots (\text{数 1 X})$$

[0461]

[表1]

	発光層							素子評価
	ホスト材料 (第一の化合物)	増感材料 (第二の化合物)			蛍光発光性材料 (第三の化合物)			EQE (相対値) [%]
	名称	名称	S ₁ [eV]	T _{77K} [eV]	名称	S ₁ [eV]	T _{77K} [eV]	
比較例1	Ref-1	STZ-1	2.90	2.87	BD-1	2.71	2.64	100
比較例2	Ref-2	STZ-1	2.90	2.87	BD-1	2.71	2.64	97
実施例1	Host-1	STZ-1	2.90	2.87	BD-1	2.71	2.64	108
実施例2	Host-2	STZ-1	2.90	2.87	BD-1	2.71	2.64	108
実施例3	Host-3	STZ-1	2.90	2.87	BD-1	2.71	2.64	110
実施例4	Host-4	STZ-1	2.90	2.87	BD-1	2.71	2.64	107
実施例5	Host-5	STZ-1	2.90	2.87	BD-1	2.71	2.64	108

[0462] 表1に示されるように、実施例1～5の有機EL素子は、発光層に、一般式(1)で表されるホスト材料と、増感材料と、蛍光発光性材料とを含有しており、比較例1～2の有機EL素子に比べて、高効率で発光した。

[0463] <化合物の評価>

化合物について以下の評価を行った。

[0464] (最低励起一重項エネルギーS₁)

測定対象化合物の最低励起一重項エネルギーS₁は、前述の溶液法により測定した。

[0465] (化合物の遅延蛍光性)

遅延蛍光性は図2に示す装置を利用して過渡PLを測定することにより確認した。前記化合物STZ-1をトルエンに溶解し、自己吸収の寄与を取り除くため励起波長において吸光度が0.05以下の希薄溶液を調製した。また酸素による消光を防ぐため、試料溶液を凍結脱気した後にアルゴン雰囲気下で蓋付きのセルに封入することで、アルゴンで飽和された酸素フリーの試料溶液とした。

上記試料溶液の蛍光スペクトルを分光蛍光光度計FP-8600(日本分光社製)で測定し、また同条件で9,10-ジフェニルアントラセンのエタノール溶液の蛍光スペクトルを測定した。両スペクトルの蛍光面積強度を用

いて、Morris et al., J. Phys. Chem., 80 (1976) 969中の(1)式により全蛍光量子収率を算出した。

化合物STZ-1が吸収する波長のパルス光（パルスレーザーから照射される光）で励起された後、当該励起状態から即座に観察されるPrompt発光（即時発光）と、当該励起後、即座には観察されず、その後観察されるDelay発光（遅延発光）とが存在する。本実施例における遅延蛍光発光とは、Delay発光（遅延発光）の量がPrompt発光（即時発光）の量に対して5%以上を意味する。具体的には、Prompt発光（即時発光）の量を X_P とし、Delay発光（遅延発光）の量を X_D としたときに、 X_D/X_P の値が0.05以上であることを意味する。

Prompt発光とDelay発光の量とその比は、“Nature 492, 234–238, 2012”（参考文献1）に記載された方法と同様の方法により求めることができる。なお、Prompt発光とDelay発光の量の算出に使用される装置は、前記参考文献1に記載の装置、または図2に記載の装置に限定されない。

化合物STZ-1について、Delay発光（遅延発光）の量がPrompt発光（即時発光）の量に対して5%以上であることが確認された。具体的には、化合物STZ-1について、 X_D/X_P の値が0.05以上であった。

[0466]（エネルギーギャップ T_{77K} ）

測定対象化合物のエネルギーギャップ T_{77K} は、前述の「三重項エネルギーと77[K]におけるエネルギーギャップとの関係」で記載したエネルギーギャップ T_{77K} の測定方法により測定した。

[0467]（蛍光発光最大ピーク波長 λ_{FL} 及び発光スペクトル半値幅FWHM）

測定対象の化合物をトルエンに溶解させ、 $5.0 \times 10^{-6} \text{ mol/L}$ の溶液を調製した。得られた溶液を石英セル（光路長1.0cm）に入れ、蛍光スペクトル測定装置「分光蛍光光度計FP-8300」（日本分光株式会社製）を用いて、400nmで励起した場合の蛍光発光最大ピーク波長 λ_{FL} （

単位：nm）及び発光スペクトル半値幅FWHM（単位：nm）を測定した。

[0468] （ストークスシフト）

測定対象となる化合物を $2.0 \times 10^{-5} \text{ mol/L}$ の濃度でトルエンに溶解し、測定用試料を調製した。石英セルへ入れた測定用試料に室温（300 K）で紫外～可視領域の連続光を照射し、吸収スペクトル（縦軸：吸光度、横軸：波長）を測定した。吸収スペクトル測定には、日立ハイテクサイエンス社の分光光度計U-3900/3900H形を用いた。また、測定対象となる化合物を $4.9 \times 10^{-6} \text{ mol/L}$ の濃度でトルエンに溶解し、測定用試料を調製した。石英セルへ入れた測定用試料に室温（300 K）で励起光を照射し、蛍光スペクトル（縦軸：蛍光強度、横軸：波長）を測定した。蛍光スペクトル測定には、日立ハイテクサイエンス社の分光蛍光光度計F-7000形を用いた。

これらの吸収スペクトルと蛍光スペクトルから、吸収極大波長と蛍光極大波長の差を算出し、ストークスシフト（SS）を求めた。ストークスシフトSSの単位は、nmとした。

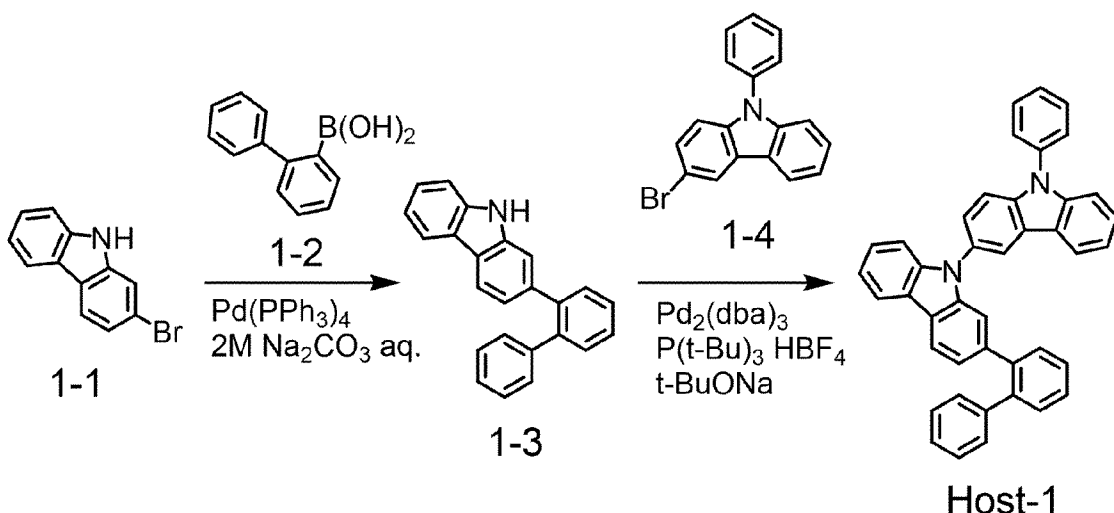
[0469] 化合物BD-1の最大ピーク波長 λ_{FL} は、455 nmであり、発光スペクトル半値幅FWHMは、23 nmであり、ストークスシフトが14 nmであった。

[0470] <合成例>

（1）化合物Host-1の合成

[0471]

[化180]



[0472] (1-1) 化合物1-3の合成

アルゴン雰囲気下、化合物1-1 (5.00 g, 20.3 mmol)、化合物1-2 (4.02 g, 20.3 mmol)、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム (1.17 g, 1.02 mmol)、2M炭酸ナトリウム水溶液 (30 mL)、及び1,2-ジメトキシエタン (150 mL) を加え、80℃にて20時間加熱攪拌した。反応終了後、水及びトルエンを加え、有機層を抽出し、溶媒を留去して得られた粗体をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色の固体 (4.86 g, 収率75%) を得た。得られた固体は目的物である化合物1-3であり、マスペクトル分析の結果、分子量319に対し、 $m/e = 319$ であった。

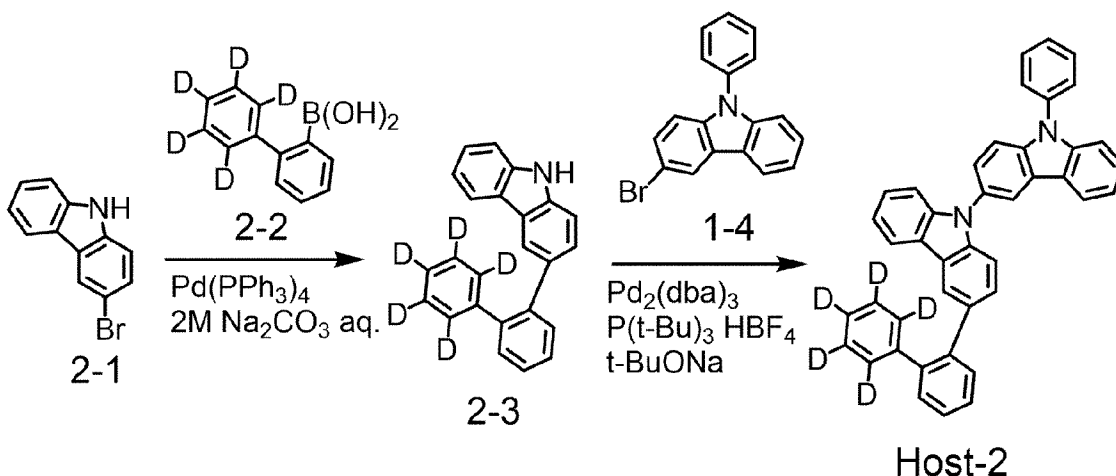
[0473] (1-2) 化合物Host-1の合成

アルゴン雰囲気下、化合物1-3 (4.00 g, 12.5 mmol)、化合物1-4 (4.03 g, 12.5 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) (0.343 g, 0.375 mmol)、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート (0.435 g, 1.50 mmol)、ナトリウム-tert-ブトキシド (3.60 g, 37.5 mmol)、及びトルエン (130 mL) を加え、110℃にて5時間加熱攪拌した。反応終了後、反応物を濾過し、粗体を得た。得られた粗体

をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色の固体（5.12 g，収率73%）を得た。得られた固体は目的物である化合物Host-1であり、マスペクトル分析の結果、分子量560に対し、 $m/e = 560$ であった。

[0474] (2) 化合物Host-2の合成

[0475] [化181]



[0476] (2-1) 化合物2-3の合成

アルゴン雰囲気下、化合物2-1（3.50 g，14.2 mmol）、化合物2-2（2.89 g，14.2 mmol）、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム（0.820 g，0.710 mmol）、2M炭酸ナトリウム水溶液（20 mL）、及び1,2-ジメトキシエタン（100 mL）を加え、80℃にて22時間加熱攪拌した。反応終了後、水及びトルエンを加え、有機層を抽出し、溶媒を留去して得られた粗体をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色の固体（3.18 g，収率69%）を得た。得られた固体は目的物である化合物2-3であり、マスペクトル分析の結果、分子量324に対し、 $m/e = 324$ であった。

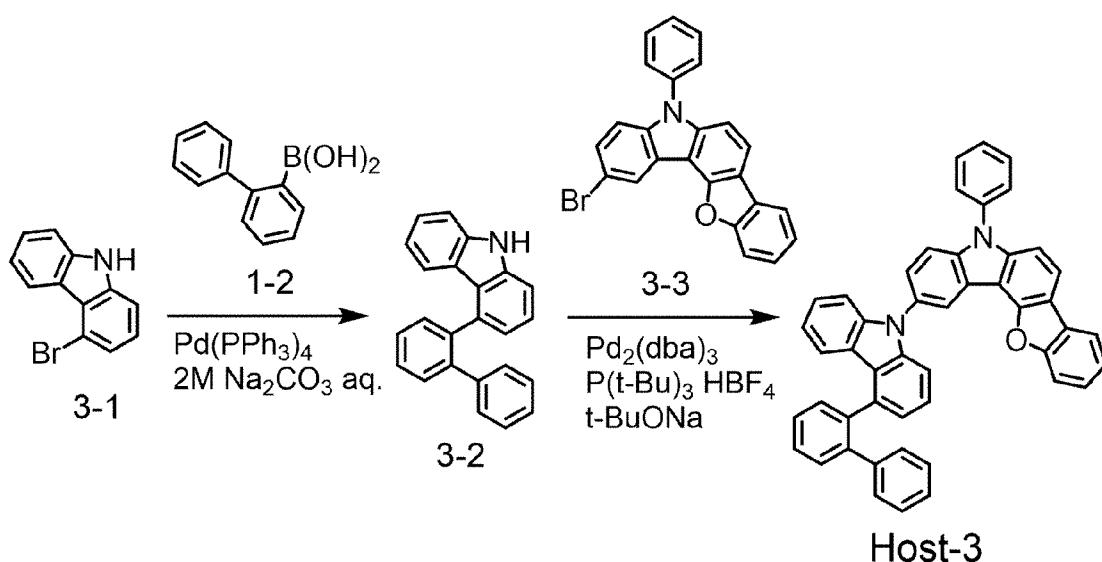
[0477] (2-2) 化合物Host-2の合成

アルゴン雰囲気下、化合物2-3（3.00 g，9.25 mmol）、化合物1-4（2.98 g，9.25 mmol）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（0）（0.254 g，0.278 mmol）、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート（0.323 g，

1. 11 mmol)、ナトリウム-tert-ブトキシド (2.67 g, 27.8 mmol)、及びトルエン (100 mL) を加え、110℃にて7時間加熱攪拌した。反応終了後、反応物を濾過し、粗体を得た。得られた粗体をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色の固体 (4.08 g, 収率78%) を得た。得られた固体は目的物である化合物Host-2であり、マスペクトル分析の結果、分子量565に対し、 $m/e = 565$ であった。

[0478] (3) 化合物Host-3の合成

[0479] [化182]



[0480] (3-1) 化合物3-2の合成

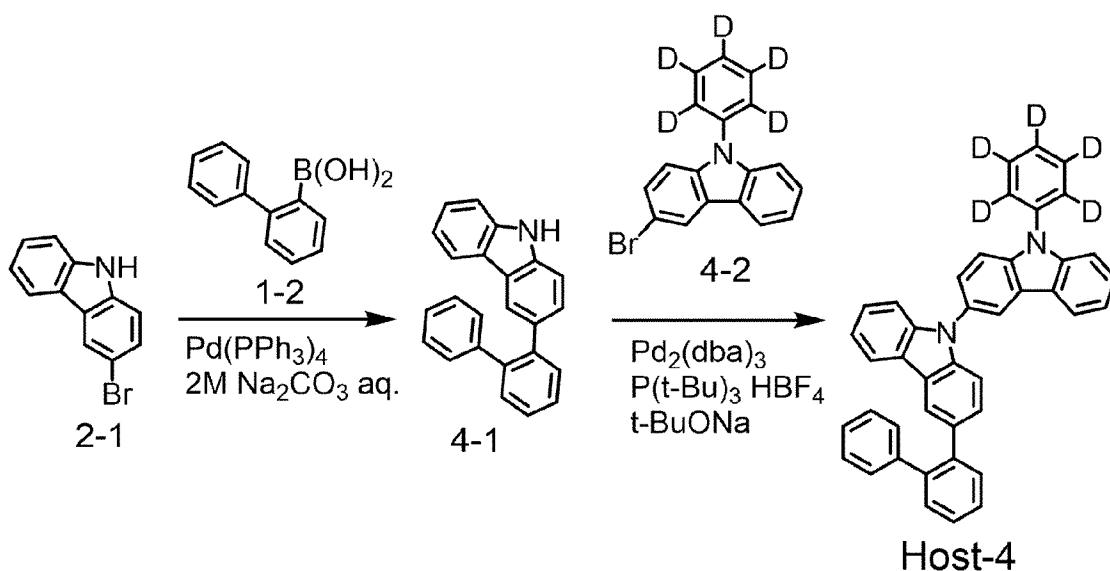
アルゴン雰囲気下、化合物3-1 (4.00 g, 16.3 mmol)、化合物1-2 (3.22 g, 16.3 mmol)、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム (0.942 g, 0.815 mmol)、2M炭酸ナトリウム水溶液 (25 mL)、及び1,2-ジメトキシエタン (125 mL) を加え、80℃にて24時間加熱攪拌した。反応終了後、水、トルエンを加え、有機層を抽出し、溶媒を留去して得られた粗体をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色の固体 (3.28 g, 収率63%) を得た。得られた固体は目的物である化合物3-2であり、マスペクトル分析の結果、分子量319に対し、 $m/e = 319$ であった。

[0481] (3-2) 化合物Host-3の合成

アルゴン雰囲気下、化合物 3-2 (3.00 g, 9.39 mmol)、化合物 3-3 (3.87 g, 9.39 mmol)、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (0.258 g, 0.282 mmol)、トリ-*tert*-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート (0.327 g, 1.13 mmol)、ナトリウム-*tert*-ブトキシド (2.71 g, 28.2 mmol)、及びトルエン (100 mL) を加え、110℃にて8時間加熱攪拌した。反応終了後、反応物を濾過し、粗体を得た。得られた粗体をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色の固体 (4.39 g, 収率 72%) を得た。得られた固体は目的物である化合物 Host-3 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 650 に対し、 $m/e = 650$ であった。

[0482] (4) 化合物 Host-4 の合成

[0483] [化183]



[0484] (4-1) 化合物 4-1 の合成

アルゴン雰囲気下、化合物 2-1 (4.00 g, 16.3 mmol)、化合物 1-2 (3.22 g, 16.3 mmol)、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム (0.942 g, 0.815 mmol)、2M炭酸ナトリウム水溶液 (25 mL)、及び1,2-ジメトキシエタン (125 mL) を加え、80℃にて20時間加熱攪拌した。反応終了後、水、トルエンを加え、有機層を抽出し、溶媒を留去して得られた粗体をカラムクロマトグラフ

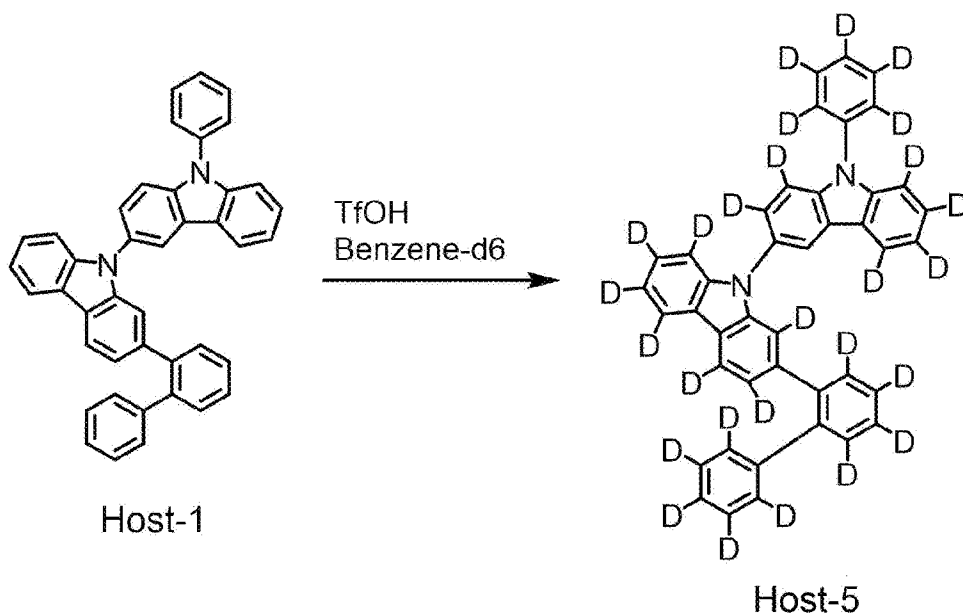
ィーで精製し、白色の固体（3.79 g, 収率73%）を得た。得られた固体は目的物である化合物4-1であり、マスペクトル分析の結果、分子量319に対し、 $m/e = 319$ であった。

[0485] (4-2) 化合物Host-4の合成

アルゴン雰囲気下、化合物4-1（3.00 g, 9.39 mmol）、化合物4-2（3.07 g, 9.39 mmol）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（0）（0.258 g, 0.282 mmol）、トリ-*tert*-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート（0.327 g, 1.13 mmol）、ナトリウム-*tert*-ブトキシド（2.67 g, 27.8 mmol）、及びトルエン（100 mL）を加え、110℃にて7時間加熱攪拌した。反応終了後、反応物を濾過し、粗体を得た。得られた粗体をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色の固体（4.20 g, 収率79%）を得た。得られた固体は目的物である化合物Host-4であり、マスペクトル分析の結果、分子量565に対し、 $m/e = 565$ であった。

[0486] (5) 化合物Host-5の合成

[0487] [化184]



[0488] 化合物Host-1（1.00 g, 1.78 mmol）及びオルト-ジクロロベンゼン（10 mL）をフラスコに仕込み、室温で攪拌しながら完全溶

解させた後、ベンゼン-d₆（5 mL）を加え、10℃で5分攪拌した。その後、トリフルオロメタンスルホン酸（0.26 mL, 2.90 mmol）を加え、10℃で2時間攪拌した。その後、重水20 mLを加えさらに15分攪拌した。攪拌後、水層を除去し残った有機層を濃縮、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色の固体（0.544 g, 収率52%）を得た。得られた固体は目的物である化合物Host-5であり、マスマスペクトル分析の結果、分子量587に対し、 $m/e = 587$ であった。

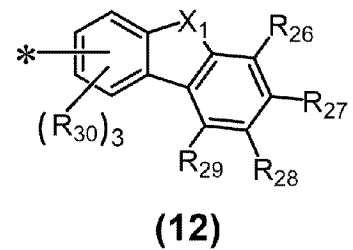
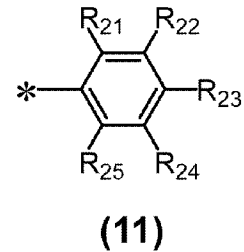
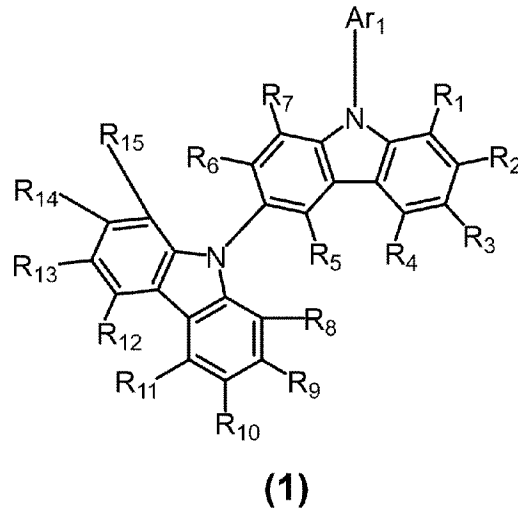
符号の説明

[0489] 1…有機エレクトロルミネッセンス素子、10…有機層、2…基板、3…陽極、4…陰極、5…発光層、6…正孔注入層、7…正孔輸送層、8…電子輸送層、9…電子注入層。

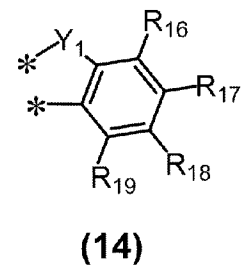
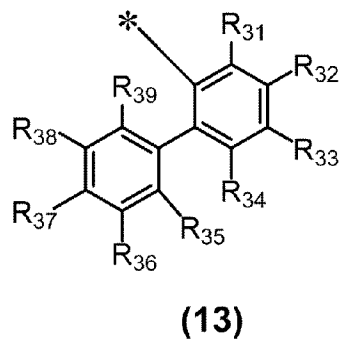
請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（１）で表される化合物。

[化1]



[化2]



（前記一般式（１）において、

A r₁は、前記一般式（１１）又は（１２）で表される基であり、

R₁～R₄のうち隣接する２つ以上からなる組、並びにR₆及びR₇の組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_8 \sim R_{11}$ のうち隣接する2つ以上からなる組、並びに $R_{12} \sim R_{15}$ のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式(1)で表される化合物は、(条件i)又は(条件ii)を満たす。

(条件i) : $R_1 \sim R_4$ のうち隣接する2つ以上からなる組、 R_6 及び R_7 の組、 $R_8 \sim R_{11}$ のうち隣接する2つ以上からなる組、並びに $R_{12} \sim R_{15}$ のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合する場合、形成する前記置換もしくは無置換の単環及び前記置換もしくは無置換の縮合環は、それぞれ独立に、

前記一般式(14)で表される環であるか、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の脂肪族炭化水素環であり、

R_5 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_1 \sim R_4$ 及び $R_6 \sim R_{15}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

前記一般式(13)で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基であり、

前記一般式(14)において、

Y_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、

$R_{16} \sim R_{19}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

前記一般式 (13) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 1～20 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～20 のシクロアルキル基

、

—Si(R₄₁)(R₄₂)(R₄₃) で表される基、又は

—Ge(R₄₄)(R₄₅)(R₄₆) で表される基であり、

2つの*は、前記一般式 (1) 中のカルバゾール環との結合位置を示し、

ただし、R₁～R₁₉のうち、少なくとも1つが前記一般式 (13) で表される基であり、前記一般式 (13) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式 (13) で表される基は互いに同一であるか、又は異なり、前記一般式 (14) で表される環が複数存在する場合、複数の前記一般式 (14) で表される環は互いに同一であるか、又は異なる。

(条件 i i) : R₁～R₄のうち隣接する2つ以上からなる組、R₆及びR₇の組、R₈～R₁₁のうち隣接する2つ以上からなる組、並びにR₁₂～R₁₅のうち隣接する2つ以上からなる組が、いずれも、互いに結合しない場合、

R₁～R₁₅は、それぞれ独立に、

水素原子、

前記一般式 (13) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 1～20 のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～20 のシクロアルキル基であり、

ただし、R₁～R₁₅のうち、少なくとも1つが前記一般式 (13) で表される基であり、前記一般式 (13) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式 (13) で表される基は互いに同一であるか、又は異なる。))

(前記一般式 (1 1) 及び (1 2) において、

$R_{21} \sim R_{25}$ のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の脂肪族炭化水素環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_{26} \sim R_{29}$ のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の脂肪族炭化水素環を形成するか、又は

互いに結合せず、

複数の R_{30} のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の脂肪族炭化水素環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の脂肪族炭化水素環を形成しない $R_{21} \sim R_{30}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基

、

—Si(R_{41})(R_{42})(R_{43})で表される基、又は

—Ge(R_{44})(R_{45})(R_{46})で表される基であり、

複数の R_{30} は、互いに同一であるか、または互いに異なり、

X_1 は、酸素原子、硫黄原子、C(R_{51})(R_{52})、又はSi(R_{53})(R_{54})であり、

R_{51} 及び R_{52} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

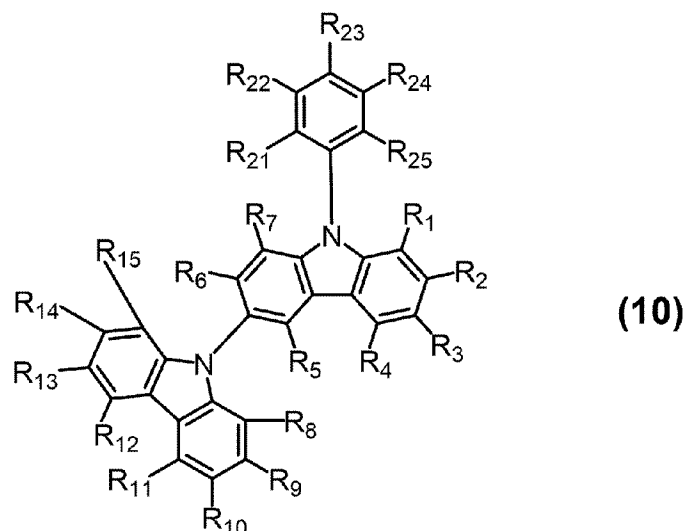
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、
 R_{53} 及び R_{54} からなる組が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
は
互いに結合せず、
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{51} \sim R_{54}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基
、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 60 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 60 の複素環基であり、
前記一般式 (11) 中の * は、前記一般式 (1) における Ar_1 が結合する窒素原子との結合位置である。
前記一般式 (12) 中の * は、前記一般式 (1) における Ar_1 が結合する窒素原子との結合位置を示す。)
(前記一般式 (13) において、
 $R_{31} \sim R_{39}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基
、
— Si (R_{41}) (R_{42}) (R_{43}) で表される基、又は
— Ge (R_{44}) (R_{45}) (R_{46}) で表される基であり、
* は、結合位置である。)
(前記一般式 (1) で表される化合物において、

$R_{41} \sim R_{43}$ のうちの隣接する2つからなる組の1組が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
 $R_{44} \sim R_{46}$ のうちの隣接する2つからなる組の1組が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{41} \sim R_{46}$ は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5～60の複素環基、
置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基である。)

[請求項2] 前記一般式(1)で表される化合物は、下記一般式(10)で表される化合物である、
請求項1に記載の化合物。

[化3]



(前記一般式 (10) において、

$R_1 \sim R_{15}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1) における $R_1 \sim R_{15}$ と同義であり、

$R_{21} \sim R_{25}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における $R_{21} \sim R_{25}$ と同義である。)

[請求項3] $R_1 \sim R_4$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組、 R_6 及び R_7 の組、 $R_8 \sim R_{11}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組、並びに $R_{12} \sim R_{15}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組が、いずれも、互いに結合しない、請求項 1 または請求項 2 に記載の化合物。

[請求項4] $R_1 \sim R_{15}$ のうち、1 つが前記一般式 (13) で表される基である、請求項 3 に記載の化合物。

[請求項5] $R_1 \sim R_4$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組、 R_6 及び R_7 の組、 $R_8 \sim R_{11}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組、並びに $R_{12} \sim R_{15}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、または互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する、請求項 1 または請求項 2 に記載の化合物。

[請求項6] $R_1 \sim R_{19}$ のうち、1つが前記一般式(13)で表される基である

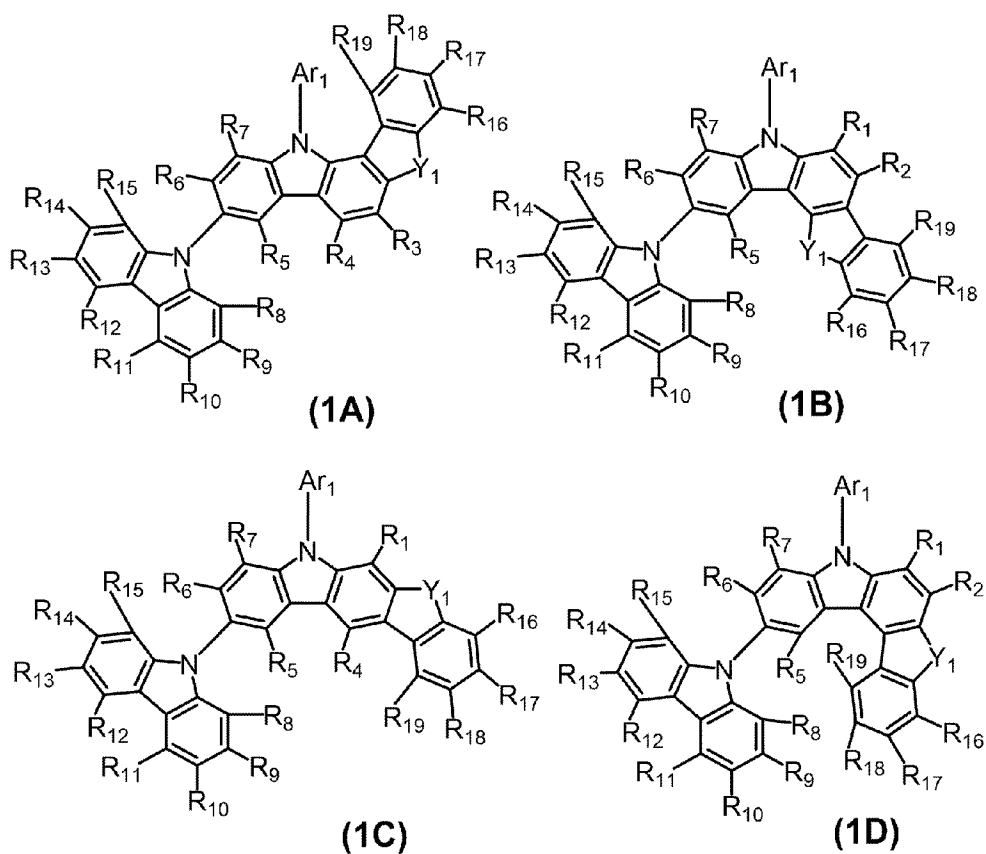
、

請求項5に記載の化合物。

[請求項7] 前記一般式(1)で表される化合物は、下記一般式(1A)、(1B)、(1C)又は(1D)で表される化合物である、

請求項5または請求項6に記載の化合物。

[化4]



(前記一般式(1A)、(1B)、(1C)及び(1D)において、

Ar_1 は、前記一般式(1)における Ar_1 と同義であり、

$R_1 \sim R_{15}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における $R_1 \sim R_{15}$ と同義であり、

Y_1 及び $R_{16} \sim R_{19}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(14)における Y_1 及び $R_{16} \sim R_{19}$ と同義である。)

[請求項8] R_{10} 、 R_{11} 、 R_{16} 又は R_{18} が前記一般式(13)で表される基で

ある、

請求項 7 に記載の化合物。

[請求項9] R_{10} 又は R_{11} が前記一般式 (13) で表される基である、
請求項 1 から請求項 8 のいずれか一項に記載の化合物。

[請求項10] $R_{31} \sim R_{39}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基
である、

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] 請求項 1 から請求項 10 のいずれか一項に記載の化合物を含有する
、
有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

[請求項12] 陽極と、
陰極と、
前記陽極及び前記陰極の間に配置された発光層と、を含み、
前記発光層は、ホスト材料と、増感材料と、蛍光発光性材料とを含有し、

前記ホスト材料は、請求項 1 から請求項 10 のいずれか一項に記載
の化合物であり、

前記増感材料、前記ホスト材料及び前記蛍光発光性材料は、互いに
異なる化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項13] 前記増感材料は、遅延蛍光性化合物である、
請求項 12 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

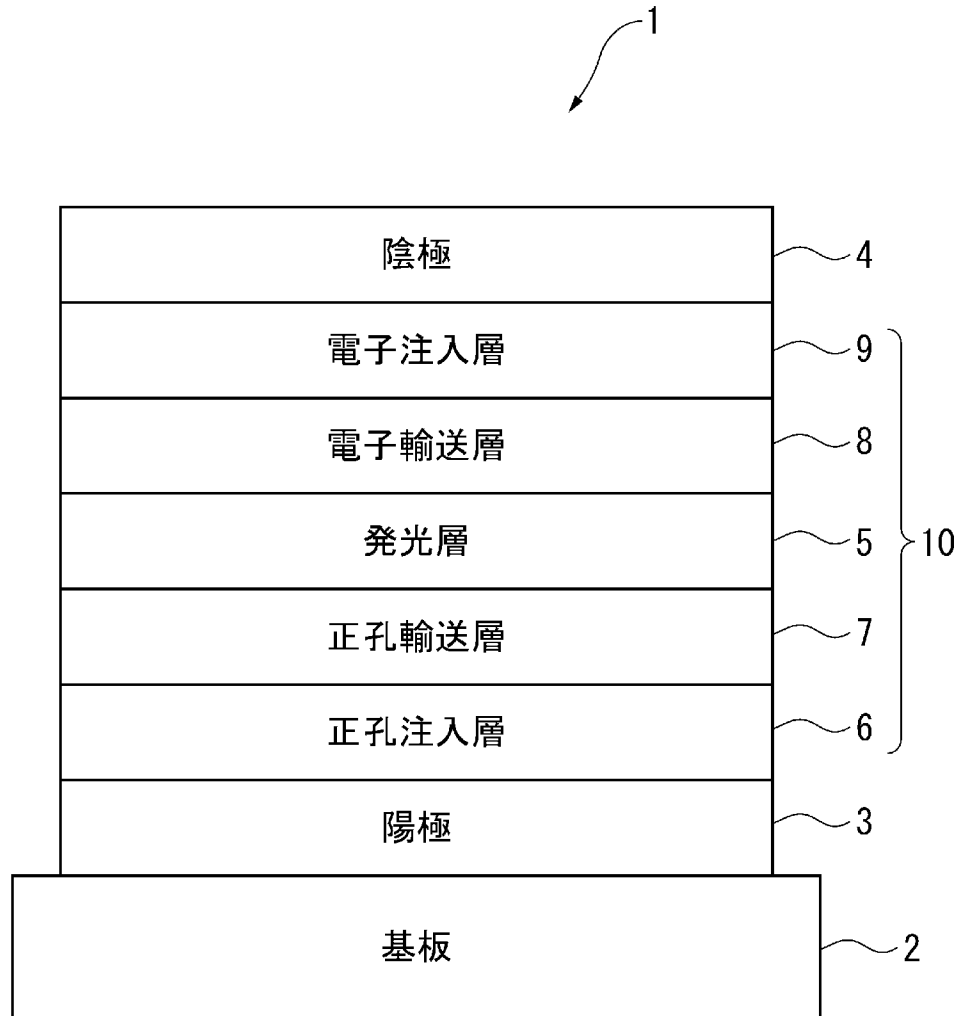
[請求項14] 前記増感材料と、前記ホスト材料と、前記蛍光発光性材料とが単一
の層中に含有されている、

請求項 12 または請求項 13 に記載の有機エレクトロルミネッセン

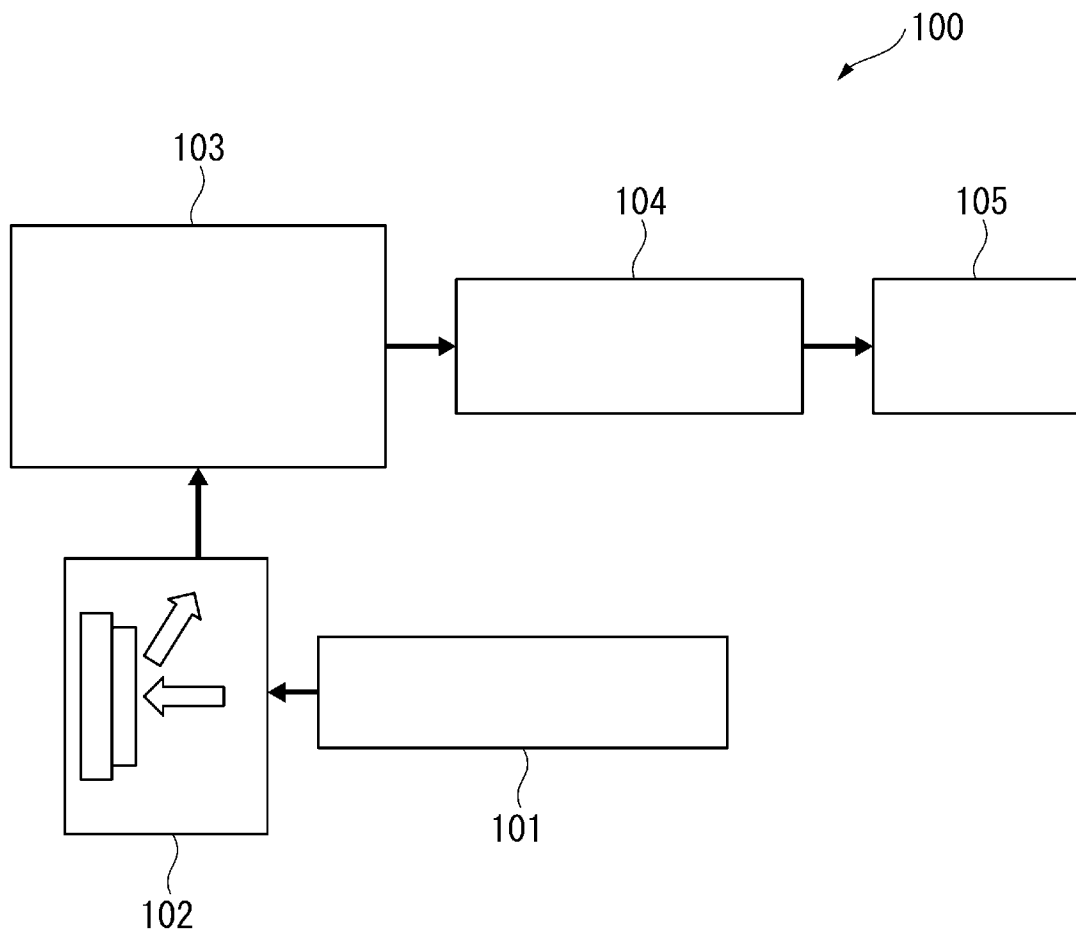
ス素子。

- [請求項15] 前記陽極と前記発光層との間に正孔輸送層が配置されている、
請求項12から請求項14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16] 前記陽極と前記発光層との間に電子障壁層が配置されている、
請求項12から請求項15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17] 前記電子障壁層は、前記発光層と直接、接する、
請求項16に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項18] 前記陰極と前記発光層との間に電子輸送層が配置されている、
請求項12から請求項17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19] 請求項12から請求項18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搭載した、電子機器。

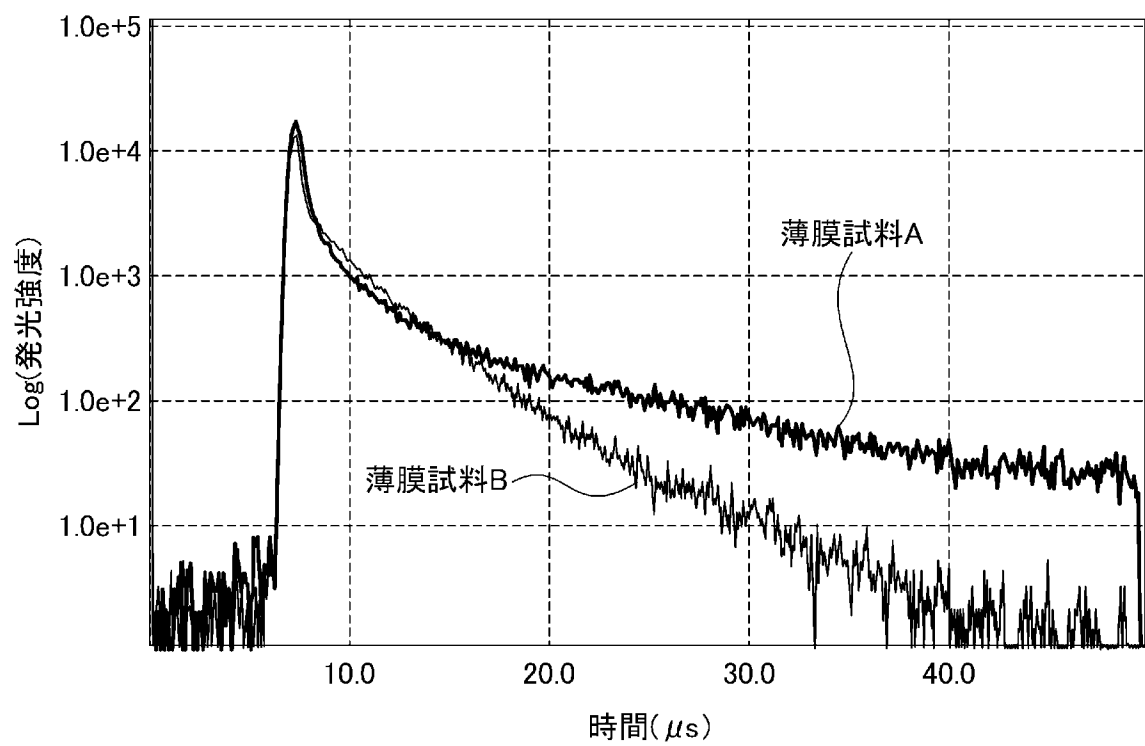
[図1]



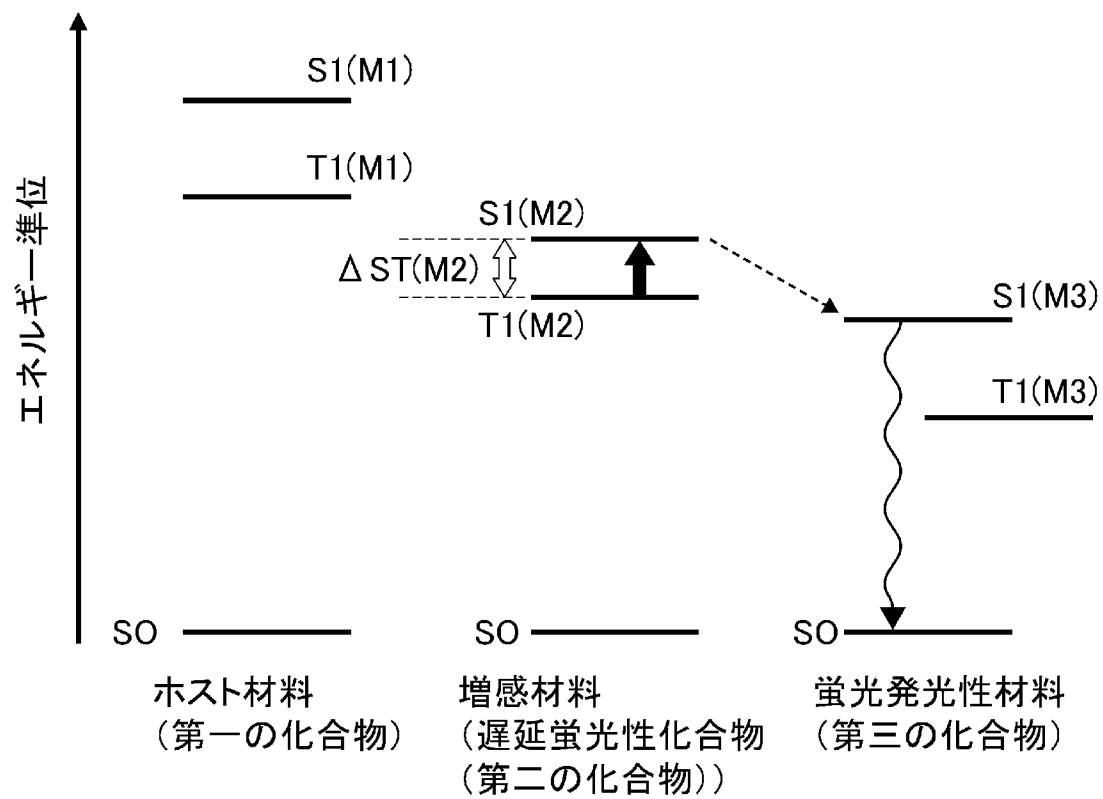
[図2]



[図3]



[図4]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/010081

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 209/86(2006.01)i; **C07D 491/048**(2006.01)i; **C09K 11/06**(2006.01)i; **H10K 50/12**(2023.01)i; **H10K 85/60**(2023.01)i; **H10K 101/20**(2023.01)n

FI: C07D209/86 CSP; C07D491/048; C09K11/06 690; H10K50/12; H10K85/60; H10K101:20

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D209/86; C07D491/048; C09K11/06; H10K50/12; H10K85/60; H10K101/20

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

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2024
Registered utility model specifications of Japan 1996-2024
Published registered utility model applications of Japan 1994-2024

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

CAplus/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2017/111543 A1 (DOOSAN CORPORATION) 29 June 2017 (2017-06-29) claim 10, compound J-25	1-19
A	KR 10-2015-0105201 A (CS ELSOLAR CO., LTD.) 16 September 2015 (2015-09-16) claim 7, compound 216	1-19
A	US 2022/0135601 A1 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 05 May 2022 (2022-05-05) claim 13, compounds 3, 28, etc.	1-19
A	US 2016/0155949 A1 (LUMINESCENCE TECHNOLOGY CORPORATION) 02 June 2016 (2016-06-02) paragraphs [0061], [0062]	1-19



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

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

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

09 May 2024

Date of mailing of the international search report

21 May 2024

Name and mailing address of the ISA/JP

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

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2024/010081

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO	2017/111543	A1	29 June 2017	KR 10-2017-0075524	A
KR	10-2015-0105201	A	16 September 2015	(Family: none)	
US	2022/0135601	A1	05 May 2022	KR 10-2022-0062147	A
US	2016/0155949	A1	02 June 2016	CN 105646480	A

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））
C07D 209/86(2006.01)i; C07D 491/048(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; H10K 50/12(2023.01)i;
H10K 85/60(2023.01)i; H10K 101/20(2023.01)n
FI: C07D209/86 CSP; C07D491/048; C09K11/06 690; H10K50/12; H10K85/60; H10K101:20

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））
C07D209/86; C07D491/048; C09K11/06; H10K50/12; H10K85/60; H10K101/20
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの
日本国実用新案公報 1922-1996年
日本国公開実用新案公報 1971-2024年
日本国実用新案登録公報 1996-2024年
日本国登録実用新案公報 1994-2024年
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）
CAplus/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	WO 2017/111543 A1 (DOOSAN CORPORATION) 29.06.2017 (2017-06-29) 請求項10の化合物J-25	1-19
A	KR 10-2015-0105201 A (CS ELSOLAR CO., LTD.) 16.09.2015 (2015-09-16) 請求項7の化合物216	1-19
A	US 2022/0135601 A1 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 05.05.2022 (2022-05-05) 請求項13の化合物3, 28等	1-19
A	US 2016/0155949 A1 (LUMINESCENCE TECHNOLOGY CORPORATION) 02.06.2016 (2016-06-02) [0061], [0062]	1-19

☐ 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、一般的技术水準を示すもの
“D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献
“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献

“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
“&” 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日
09.05.2024

国際調査報告の発送日
21.05.2024

名称及びあて先
日本国特許庁(ISA/JP)
〒100-8915
日本国
東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

権限のある職員（特許庁審査官）

鳥居 福代 4P 3436

電話番号 03-3581-1101 内線 3443

様式 PCT/ISA/210（第2ページ）（2022年7月）

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2024/010081

引用文献			公表日	パテントファミリー文献		公表日
WO	2017/111543	A1	29.06.2017	KR 10-2017-0075524	A	
KR	10-2015-0105201	A	16.09.2015	(ファミリーなし)		
US	2022/0135601	A1	05.05.2022	KR 10-2022-0062147	A	
US	2016/0155949	A1	02.06.2016	CN 105646480	A	