

(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
2018年11月29日(29.11.2018)



(10) 国際公開番号

WO 2018/216799 A1

(51) 国際特許分類:

C09K 11/06 (2006.01) C07D 403/14 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01) C07D 405/14 (2006.01)
C07D 209/86 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2018/020142

(22) 国際出願日: 2018年5月25日(25.05.2018)

(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 2017-104012 2017年5月25日(25.05.2017) JP

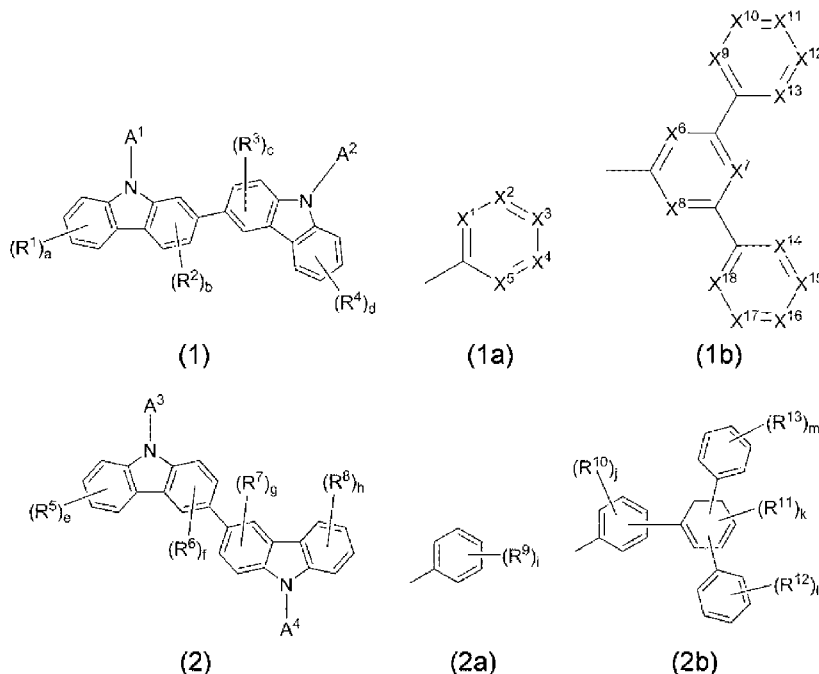
(71) 出願人: 出光興産株式会社(IDEMITSU KOSAN CO.,LTD.) [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区丸の内三丁目1番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 河村 昌宏(KAWAMURA Masahiro); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 岩渕 博之(IWABUCHI Hiroyuki); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 増田 哲也(MASUDA Tetsuya); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 西村 和樹(NISHIMURA Kazuki); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 熊 均(KUMA Hitoshi); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).

(74) 代理人: 特許業務法人樹之下知の財産事務所(KINOSHITA & ASSOCIATES); 〒1670051 東京都杉並区荻窪五丁目26番13号3階 Tokyo (JP).

(54) Title: COMPOSITION, MATERIAL FOR ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, COMPOSITION FILM, ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, AND ELECTRONIC EQUIPMENT

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



(57) Abstract: This composition is obtained by mixing two or more compounds, and contains at least a first compound represented by general formula (1) and a second compound represented by general formula (2). In general formula (1), one of A¹ and A² is a substituent represented by general formula (1a), and the other is a substituent including a partial structure represented by general formula (1b). In general formula (2), one of A³ and A⁴ is a

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告(条約第21条(3))

substituent represented by general formula (2a), and the other is a substituent represented by general formula (2b).

(57) 要約: 2種以上の化合物が混合された組成物であって、少なくとも下記一般式(1)で表される第一の化合物及び下記一般式(2)で表される第二の化合物が含有される組成物。ただし、一般式(1)において、 A^1 及び A^2 のうち、一方が、下記一般式(1a)で表される置換基であり、他方が下記一般式(1b)で表される部分構造を含む置換基である。一般式(2)において、 A^3 及び A^4 のうち、一方が、下記一般式(2a)で表される置換基であり、他方が、下記一般式(2b)で表される置換基である。

明 細 書

発明の名称：

組成物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、組成物膜、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、組成物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、組成物膜、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] 特許文献1には、第一ホストとしてカルバゾリル基誘導体構造及び窒素含有ヘテロ芳香族環の両方を有する化合物を用い、第二ホストとして縮合アリール基、ジベンゾフラニル基、又はジベンゾチエニル基を有する特定構造のビスカルバゾール誘導体を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子が記載されている。この有機エレクトロルミネッセンス素子によれば、高い効率を維持しながら、長寿命であることが特許文献1に記載されている。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：国際公開第2013/062075号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] 従来、2つの材料（例えば、第一ホスト及び第二ホスト）を、互いに異なる蒸着源から蒸着させる場合、有機エレクトロルミネッセンス素子の製造プロセスが複雑化する課題がある。一方で、1つの材料（例えば、第一ホストまたは第二ホストのいずれかのみ）を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子では寿命が短くなる。そのため、1つの蒸着源から2つ（又は複数）の材料を安定的に蒸着させる技術が要望されている。

特許文献1に記載された第一ホスト及び第二ホストの組み合わせでは、2

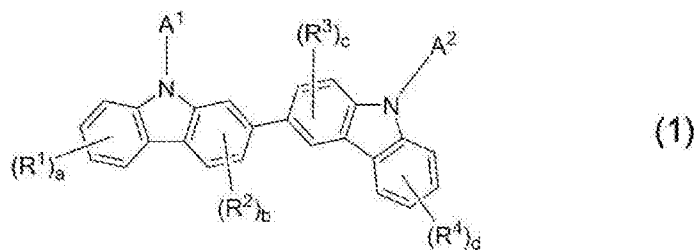
種のホスト材料を1つの蒸着源から蒸着した場合、蒸着初期に形成された層を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子は良好な特性を示す。しかし、同じ蒸着源からの蒸着を長時間、続けた場合、蒸着時間の経過に伴い、形成された層に含まれる第一ホスト及び第二ホストの比率が安定しなくなるため、有機エレクトロルミネッセンス素子の性能が安定しないという課題がある。

[0005] 本発明の目的は、有機エレクトロルミネッセンス素子の性能を維持しながら、1つの蒸着源から材料の比率を安定的に蒸着させることのできる組成物を提供すること、当該組成物を含む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、当該組成物を含む組成物膜を提供すること、当該組成物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器を提供することである。

課題を解決するための手段

[0006] 本発明の一態様によれば、2種以上の化合物が混合された組成物であって、少なくとも下記一般式(1)で表される第一の化合物及び下記一般式(2)で表される第二の化合物が含有される組成物が提供される。

[0007] [化1]



[0008] (前記一般式(1)中、

R¹、R²、R³及びR⁴は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25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6～24のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、
炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基か
らなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は
シアノ基を示す。

a は、0、1、2、3 又は 4 である。

b は、0、1、2 又は 3 である。

c は、0、1、2 又は 3 である。

d は、0、1、2、3 又は 4 である。

a が 2 以上の場合、複数の R^1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

b が 2 以上の場合、複数の R^2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

c が 2 以上の場合、複数の R^3 は、互いに同一であるか、又は異なる。

d が 2 以上の場合、複数の R^4 は、互いに同一であるか、又は異なる。

A^1 及び A^2 のうち、一方が、下記一般式 (1 a) で表される置換基であり、
他方が、下記一般式 (1 b) で表される部分構造を含む置換基である。)

[0009] [化2]



(1a)

[0010] (前記一般式 (1 a) 中、 X^1 、 X^2 、 X^3 、 X^4 及び X^5 は、それぞれ独立して、 CR^x 又は窒素原子を示す。 R^x は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基、

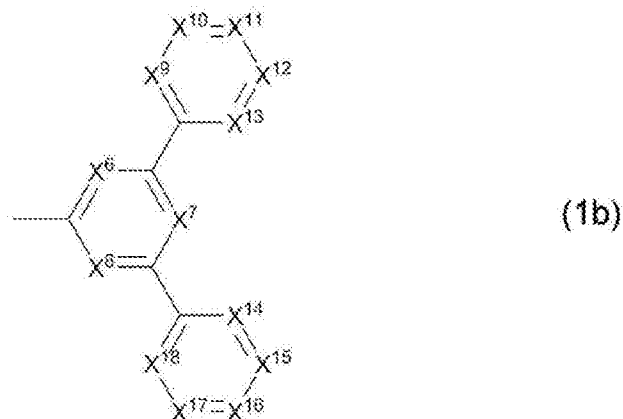
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

複数の R^x は、互いに同一であるか、又は異なる。)

[0011] [化3]



[0012] (前記一般式(1b)中、 X^6 、 X^7 及び X^8 は、それぞれ独立して、 CR^Y 又は窒素原子を示す。 R^Y は、

水素原子、
ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基、
炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又は
シアノ基を示す。

X^6 、 X^7 及び X^8 のうち少なくとも2つは窒素原子である。

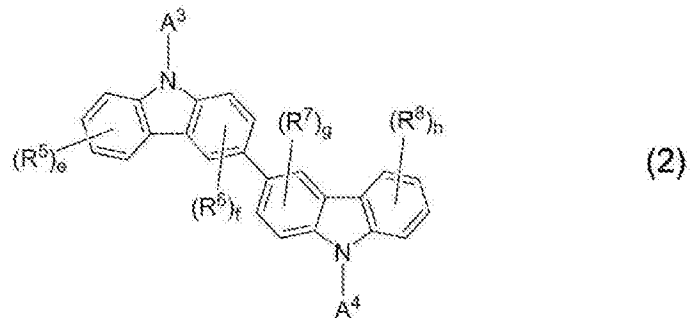
X^9 、 X^{10} 、 X^{11} 、 X^{12} 、 X^{13} 、 X^{14} 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 及び X^{18} は、それぞれ独立して、 CR^Z 又は窒素原子を示す。 R^Z は、

水素原子、
ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25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6～24のアリール基、
炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又は
シアノ基を示す。

(複数の R^Z は、互いに同一であるか、又は異なる。)

[0013]

[化4]



- [0014] (前記一般式(2)中、 R^5 、 R^6 、 R^7 及び R^8 は、それぞれ独立して、
 ハロゲン原子、
 置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25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6～24のアリール基、
 置換もしくは無置換の環形成原子数3～30の複素環基、
 炭素数1～25のアルキル基及び環形成炭素数6～24のアリール基か
 らなる群から選択される1以上の基で置換されたシリル基、又は
 シアノ基を示す。
 e は、0、1、2、3又は4である。
 f は、0、1、2又は3である。
 g は、0、1、2又は3である。
 h は、0、1、2、3又は4である。
 e が2以上の場合、複数の R^5 は、互いに同一であるか、又は異なる。
 f が2以上の場合、複数の R^6 は、互いに同一であるか、又は異なる。
 g が2以上の場合、複数の R^7 は、互いに同一であるか、又は異なる。
 h が2以上の場合、複数の R^8 は、互いに同一であるか、又は異なる。
 A^3 及び A^4 のうち、一方が、下記一般式(2a)で表される置換基であり
 、他方が、下記一般式(2b)で表される置換基である。)

[0015]

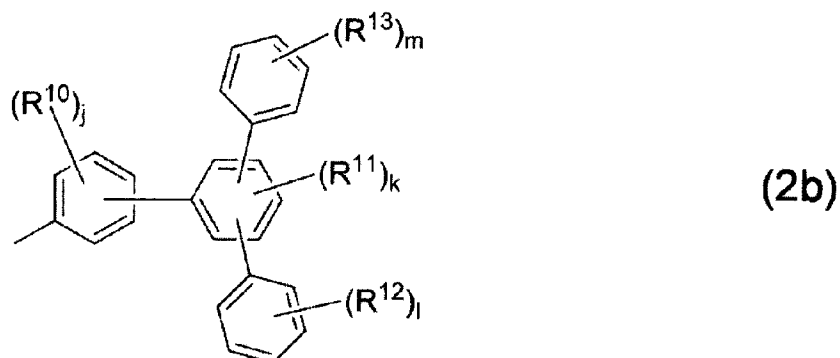
[化5]



(前記一般式 (2 a) 中、 R^9 は、ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、
炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基か
らなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は
シアノ基を示す。

i は 0、1、2、3、4 又は 5 である。)

[0016] [化6]



[0017] (前記一般式 (2 b) 中、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 及び R^{13} は、それぞれ独立して

、

ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、
炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基か

らなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又はシアノ基を示す。

j は、0、1、2、3 又は 4 である。

k は、0、1、2 又は 3 である。

l は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

m は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

j が 2 以上の場合、複数の R^{10} は、互いに同一であるか、又は異なる。

k が 2 以上の場合、複数の R^{11} は、互いに同一であるか、又は異なる。

l が 2 以上の場合、複数の R^{12} は、互いに同一であるか、又は異なる。

m が 2 以上の場合、複数の R^{13} は、互いに同一であるか、又は異なる。)

[0018] 本発明の一態様によれば、前述の本発明の一態様に係る組成物を含む、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。

[0019] 本発明の一態様によれば、前述の本発明の一態様に係る組成物を含む組成物膜が提供される。

[0020] 本発明の一態様によれば、陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に含まれた有機層と、を備え、前記有機層は、前述の本発明の一態様に係る組成物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

[0021] 本発明の一態様によれば、陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に含まれた発光層と、前記発光層と前記陰極との間に含まれた電子輸送帯域を備え、前記電子輸送帯域は、前述の本発明の一態様に係る組成物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

[0022] 本発明の一態様によれば、前述の本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器が提供される。

[0023] 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の性能を維持しながら、1 つの蒸着源から材料の比率を安定的に蒸着させることのできる組成物を提供すること、当該組成物を含む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、当該組成物を含む組成物膜を提供すること、当該組成物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに

当該有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器を提供することができる。

図面の簡単な説明

[0024] [図1]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。

発明を実施するための形態

[0025] [第一実施形態]

(組成物)

本実施形態に係る組成物は、2種以上の化合物が混合された組成物である。

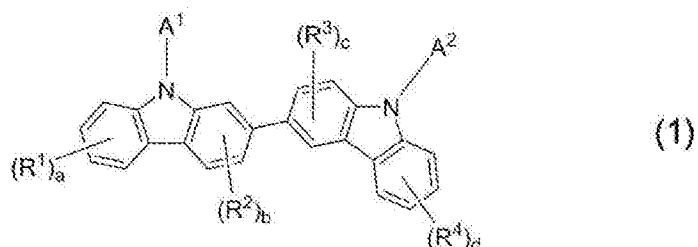
本実施形態に係る組成物は、少なくとも下記一般式(1)で表される第一の化合物及び下記一般式(2)で表される第二の化合物を含有する。

[0026] 本実施形態に係る組成物の形態は特に限定されない。本実施形態に係る組成物の形態としては、例えば、固体、粉末、溶液、及び膜などが挙げられる。本実施形態に係る組成物が固体である場合、ペレット状に成形されていてもよい。

[0027] (第一の化合物)

第一の化合物は、下記一般式(1)で表される。

[0028] [化7]



[0029] (前記一般式(1)中、

R¹、R²、R³及びR⁴は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、
 置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、
 炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基か
 らなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は
 シアノ基を示す。

a は、0、1、2、3 又は 4 である。

b は、0、1、2 又は 3 である。

c は、0、1、2 又は 3 である。

d は、0、1、2、3 又は 4 である。

a が 2 以上の場合、複数の R^1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

b が 2 以上の場合、複数の R^2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

c が 2 以上の場合、複数の R^3 は、互いに同一であるか、又は異なる。

d が 2 以上の場合、複数の R^4 は、互いに同一であるか、又は異なる。

A^1 及び A^2 のうち、一方が、下記一般式 (1 a) で表される置換基であり、
 他方が、下記一般式 (1 b) で表される部分構造を含む置換基である。)

[0030] [化8]



(1a)

[0031] (前記一般式 (1 a) 中、 X^1 、 X^2 、 X^3 、 X^4 及び X^5 は、それぞれ独立して、 CR^x 又は窒素原子を示す。 R^x は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基、

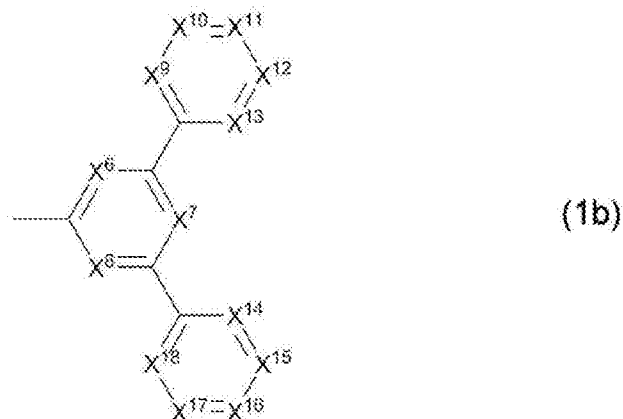
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

複数の R^x は、互いに同一であるか、又は異なる。)

[0032] [化9]



[0033] (前記一般式 (1b) 中、 X^6 、 X^7 及び X^8 は、それぞれ独立して、 CR^y 又は窒素原子を示す。 R^y は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～25 のシクロアルキル基、

炭素数 1～25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

X^6 、 X^7 及び X^8 のうち少なくとも 2 つは窒素原子である。

X^9 、 X^{10} 、 X^{11} 、 X^{12} 、 X^{13} 、 X^{14} 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 及び X^{18} は、それぞれ独立して、 CR^z 又は窒素原子を示す。 R^z は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～25 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 6～24 のアリール基、

炭素数 1～25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

複数の R^z は、互いに同一であるか、又は異なる。)

[0034] 第一の化合物において、 X^1 、 X^2 、 X^3 、 X^4 及び X^5 は、 CR^x であることが好ましい。この場合、 R^x は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

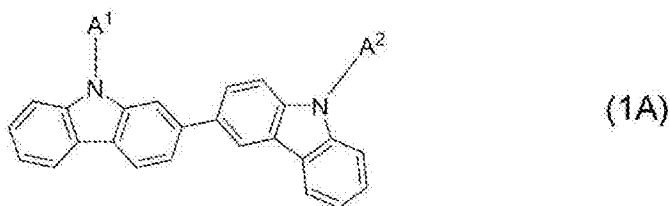
シアノ基を示し、

複数の R^x は、互いに同一であるか、又は異なる。

[0035] 第一の化合物において、 a 、 b 、 c 、及び d が 0 であることが好ましい。

[0036] 前記一般式 (1) における a 、 b 、 c 、及び d が 0 であるとき、第一の化合物は、下記一般式 (1A) で表される。

[0037] [化10]



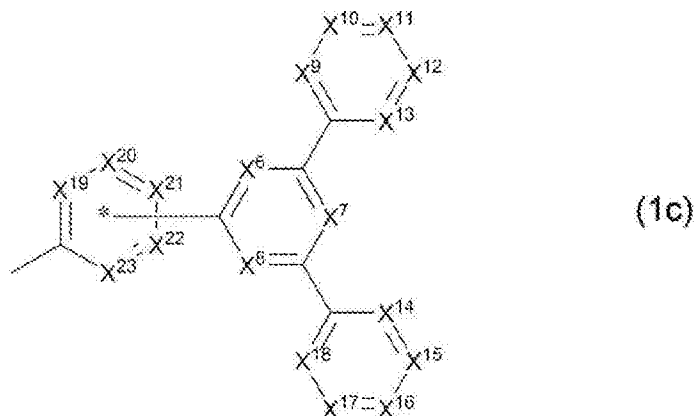
[0038] (前記一般式 (1A) 中、

A^1 及び A^2 のうち、一方が、前記一般式 (1a) で表される置換基であり、他方が、前記一般式 (1b) で表される部分構造を含む置換基である。)

[0039] 第一の化合物において、 A^1 及び A^2 のうち、一方が、前記一般式 (1a) で表される置換基であり、他方が、下記一般式 (1c) で表される置換基であることが好ましい。

[0040]

[化11]



[0041] (前記一般式(1c)中、 X^6 、 X^7 及び X^8 は、それぞれ独立して、 CR^Y 又は窒素原子を示す。 R^Y は、

水素原子、
ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基、
炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又は
シアノ基を示す。

X^6 、 X^7 及び X^8 のうち少なくとも2つは窒素原子である。

X^9 、 X^{10} 、 X^{11} 、 X^{12} 、 X^{13} 、 X^{14} 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 、 X^{18} 、 X^{19} 、 X^{20} 、 X^{21} 、 X^{22} 及び X^{23} は、それぞれ独立して、 CR^Z 又は窒素原子を示す。 R^Z は、

水素原子、
ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基、
炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又は
シアノ基を示す。

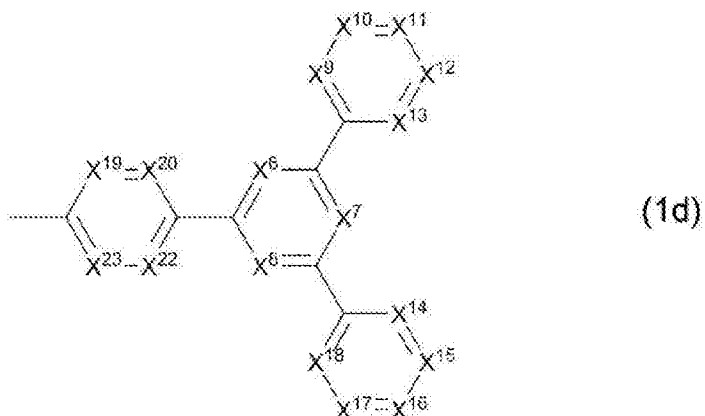
複数の R^Z は、互いに同一であるか、又は異なる。

X^{19} 、 X^{20} 、 X^{21} 、 X^{22} 及び X^{23} の少なくとも1つは CR^Z であり、少な

くとも1つの R^z は、*と結合する単結合である。)

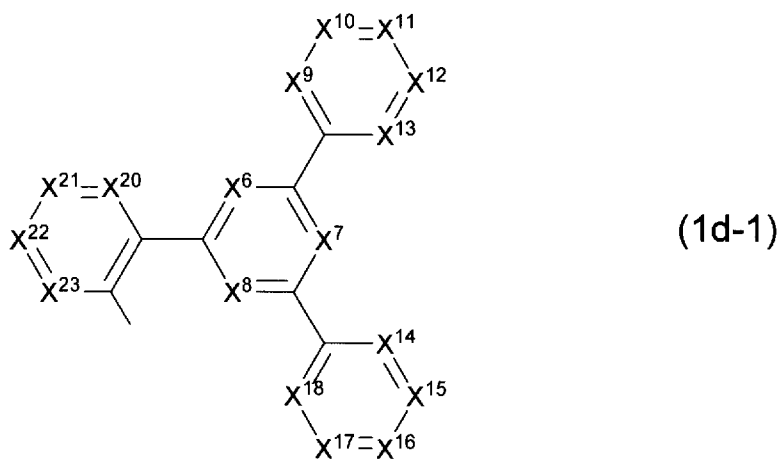
[0042] 例えば、 X^{21} が CR^z で、 R^z が*と結合する単結合である場合は、前記一般式(1c)は下記一般式(1d)で表される。

[0043] [化12]



[0044] X^{19} が CR^z で、 R^z が*と結合する単結合である場合は、前記一般式(1c)は下記一般式(1d-1)で表される。

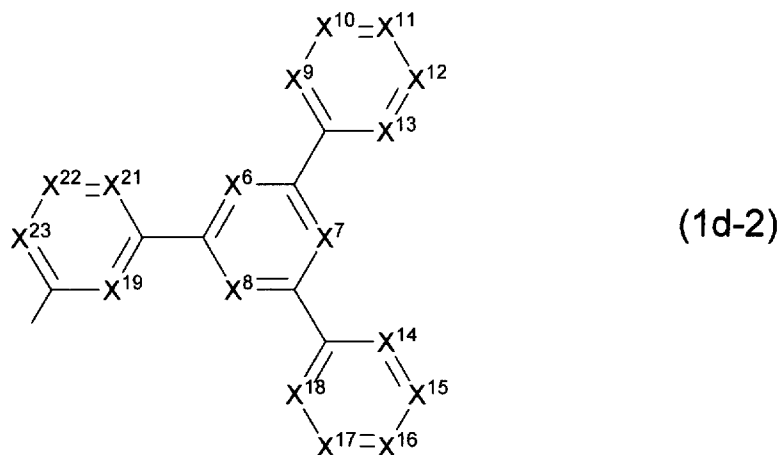
[0045] [化13]



[0046] X^{20} が CR^z で、 R^z が*と結合する単結合である場合は、前記一般式(1c)は下記一般式(1d-2)で表される。

[0047]

[化14]



[0048] (前記一般式 (1 d)、(1 d-1)、及び (1 d-2) 中、 X^6 、 X^7 及び X^8 は、それぞれ独立して、 CR^Y 又は窒素原子を示す。 R^Y は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 25 のシクロアルキル基、

炭素数 1 ~ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

X^6 、 X^7 及び X^8 のうち少なくとも 2 つは窒素原子である。

前記一般式 (1 d) 中、 X^9 、 X^{10} 、 X^{11} 、 X^{12} 、 X^{13} 、 X^{14} 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 、 X^{18} 、 X^{19} 、 X^{20} 、 X^{22} 及び X^{23} は、それぞれ独立して、 CR^Z 又は窒素原子を示す。

前記一般式 (1 d-1) 中、 X^9 、 X^{10} 、 X^{11} 、 X^{12} 、 X^{13} 、 X^{14} 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 、 X^{18} 、 X^{20} 、 X^{21} 、 X^{22} 及び X^{23} は、それぞれ独立して、 CR^Z 又は窒素原子を示す。

前記一般式 (1 d-2) 中、 X^9 、 X^{10} 、 X^{11} 、 X^{12} 、 X^{13} 、 X^{14} 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 、 X^{18} 、 X^{19} 、 X^{21} 、 X^{22} 及び X^{23} は、それぞれ独立して、 CR^Z 又は窒素原子を示す。

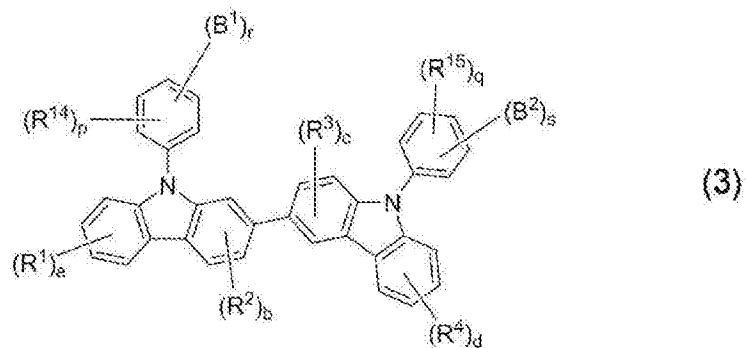
前記一般式 (1 d)、(1 d-1)、及び (1 d-2) 中、 R^Z は、

水素原子、
ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基、
炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は
シアノ基を示す。

複数の R^z は、互いに同一であるか、又は異なる。）

[0049] 第一の化合物が、下記一般式 (3) で表される化合物であることが好ましい。

[0050] [化15]



[0051] (前記一般式 (3) 中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^{14} 及び R^{15} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

a は、0、1、2、3 又は 4 である。

b は、0、1、2 又は 3 である。

c は、0、1、2 又は 3 である。

d は、0、1、2、3 又は 4 である。

p は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

q は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

a が 2 以上の場合、複数の R^1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

b が 2 以上の場合、複数の R^2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

c が 2 以上の場合、複数の R^3 は、互いに同一であるか、又は異なる。

d が 2 以上の場合、複数の R^4 は、互いに同一であるか、又は異なる。

p が 2 以上の場合、複数の R^{14} は、互いに同一であるか、又は異なる。

q が 2 以上の場合、複数の R^{15} は、互いに同一であるか、又は異なる。

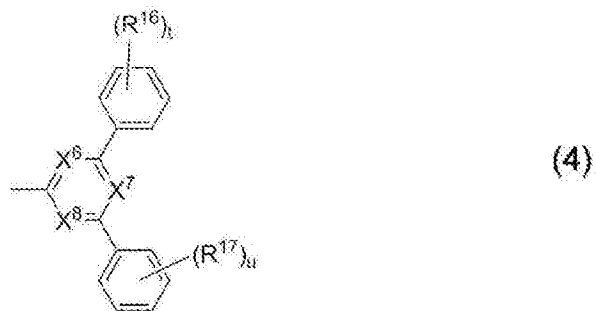
B^1 及び B^2 は、下記一般式 (4) で表される置換基を示す。

r は、0 又は 1 である。

s は、0 又は 1 である。

ただし、 $r + s = 1$ である。)

[0052] [化16]



[0053] (前記一般式 (4) 中、

X^6 、 X^7 及び X^8 は、それぞれ独立して、 CR^y 又は窒素原子を示す。 R^y は

、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

X^6 、 X^7 及び X^8 のうち少なくとも 2 つは窒素原子である。

R^{16} 及び R^{17} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25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6～24のアリール基、又は

シアノ基を示す。

t は、0、1、2、3、4又は5である。

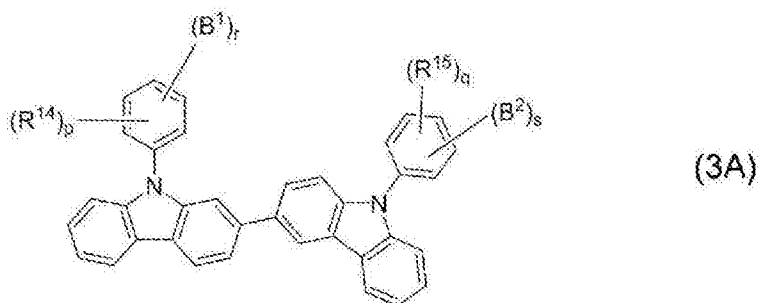
u は、0、1、2、3、4又は5である。

t が2以上の場合、複数の R^{16} は、互いに同一であるか、又は異なる。

u が2以上の場合、複数の R^{17} は、互いに同一であるか、又は異なる。))

[0054] 前記一般式(3)における a 、 b 、 c 及び d が0であるとき、第一の化合物は、下記一般式(3A)で表される。

[0055] [化17]



[0056] (前記一般式(3A)中、

R^{14} 及び R^{15} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基、

炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

p は、0、1、2、3、4又は5である。

q は、0、1、2、3、4又は5である。

p が2以上の場合、複数の R^{14} は、互いに同一であるか、又は異なる。

q が 2 以上の場合、複数の R^{15} は、互いに同一であるか、又は異なる。

B^1 及び B^2 は、前記一般式 (4) で表される置換基を示す。

r は、0 又は 1 である。

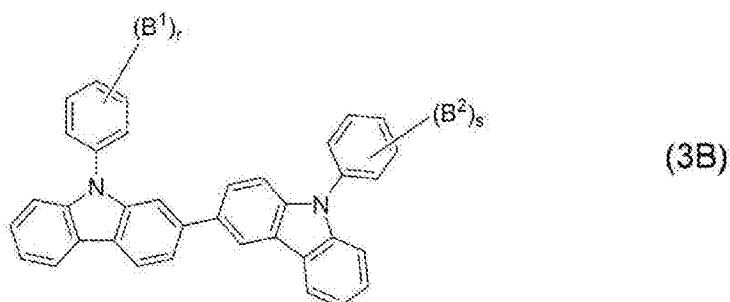
s は、0 又は 1 である。

ただし、 $r + s = 1$ である。))

[0057] 第一の化合物において、a、b、c、d、p、及び q が 0 であることが好ましい。

[0058] 前記一般式 (3) における a、b、c、d、p、及び q が 0 であるとき、第一の化合物は、下記一般式 (3B) で表される。

[0059] [化18]



[0060] (前記一般式 (3B) 中、

B^1 及び B^2 は、前記一般式 (4) で表される置換基を示す。

r は、0 又は 1 である。

s は、0 又は 1 である。

ただし、 $r + s = 1$ である。))

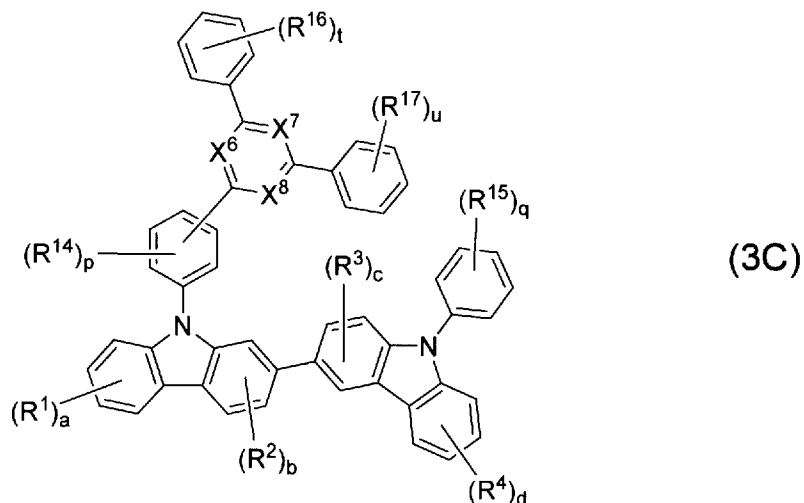
[0061] 第一の化合物において、 X^6 、 X^7 及び X^8 が、窒素原子を示すことが好ましい。

[0062] 第一の化合物において、r が 1 であり、s が 0 であることが好ましい。

[0063] 例えば、前記一般式 (3) における r が 1 であり、s が 0 である場合、第一の化合物は、下記一般式 (3C) で表される。

[0064]

[化19]



[0065] (前記一般式 (3C) 中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^{14} 及び R^{15} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基、

炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

aは、0、1、2、3又は4である。

bは、0、1、2又は3である。

cは、0、1、2又は3である。

dは、0、1、2、3又は4である。

pは、0、1、2、3又は4である。

qは、0、1、2、3、4又は5である。

aが2以上の場合、複数の R^1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

bが2以上の場合、複数の R^2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

cが2以上の場合、複数の R^3 は、互いに同一であるか、又は異なる。

dが2以上の場合、複数の R^4 は、互いに同一であるか、又は異なる。

pが2以上の場合、複数の R^{14} は、互いに同一であるか、又は異なる。

q が 2 以上の場合、複数の R^{15} は、互いに同一であるか、又は異なる。

X^6 、 X^7 及び X^8 は、それぞれ独立して、 CR^Y 又は窒素原子を示す。 R^Y は

、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

X^6 、 X^7 及び X^8 のうち少なくとも 2 つは窒素原子である。

R^{16} 及び R^{17} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、又は

シアノ基を示す。

t は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

u は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

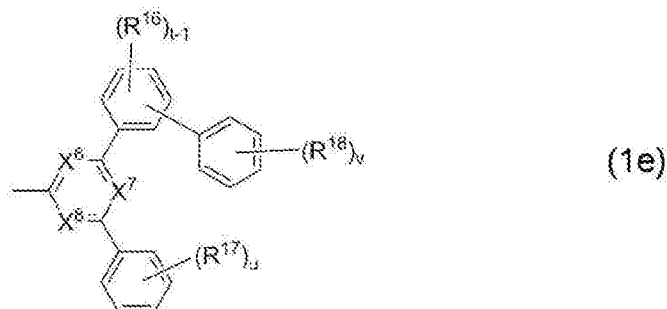
t が 2 以上の場合、複数の R^{16} は、互いに同一であるか、又は異なる。

u が 2 以上の場合、複数の R^{17} は、互いに同一であるか、又は異なる。)

[0066] 第一の化合物において、 A^1 及び A^2 のうち、一方が、前記一般式 (1 a) で表される置換基であり、他方が、下記一般式 (1 e) で表されることも好ましい。

[0067]

[化20]



[0068] (前記一般式 (1 e) 中、

X^6 、 X^7 及び X^8 は、それぞれ独立して、 CR^Y 又は窒素原子を示す。 R^Y は

、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基、

炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

X^6 、 X^7 及び X^8 のうち少なくとも2つは窒素原子である。

R^{16} 、 R^{17} 及び R^{18} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25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6～24のアリール基、又は

シアノ基を示す。

t は、1、2、3、4又は5である。

u は、0、1、2、3、4又は5である。

v は、0、1、2、3、4又は5である。

t が3以上の場合 ($t-1=2$ 以上の場合)、複数の R^{16} は、互いに同一であるか、又は異なる。

u が 2 以上の場合、複数の R^{17} は、互いに同一であるか、又は異なる。

v が 2 以上の場合、複数の R^{18} は、互いに同一であるか、又は異なる。）

[0069] 第一の化合物におけるアルキル基の例としては、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基（異性体基を含む）、ヘキシル基（異性体基を含む）、ヘプチル基（異性体基を含む）、オクチル基（異性体基を含む）、ノニル基（異性体基を含む）、デシル基（異性体基を含む）、ウンデシル基（異性体基を含む）、及びドデシル基（異性体基を含む）などが挙げられる。これらの中でも、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、*t*-ブチル基、及びペンチル基（いずれも異性体基を含む）が好ましく、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*-ブチル基がより好ましく、メチル基、エチル基、イソプロピル基、及び *t*-ブチル基がさらに好ましい。

[0070] 第一の化合物におけるアルキル基の炭素数は、1～25であり、好ましくは1～10である。

[0071] 第一の化合物におけるシクロアルキル基の例としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンチル基などが挙げられる。これらの中でも、シクロペンチル基、シクロヘキシル基が好ましい。

[0072] 第一の化合物におけるシクロアルキル基の環形成炭素数は、3～25であり、好ましくは3～10であり、より好ましくは3～8であり、さらに好ましくは3～6である。

[0073] 第一の化合物におけるハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、及びヨウ素等が挙げられ、好ましくはフッ素原子である。

[0074] 第一の化合物におけるアリール基の例としては、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アセナフチレニル基、アントリル基、ベンゾアントリル基、アセアントリル基、フェナントリル基、ベンゾ [c

〕フェナントリル基、フェナレニル基、フルオレニル基、ピセニル基、ペンタフェニル基、プレニル基、クリセニル基、ベンゾ〔g〕クリセニル基、sーインダセニル基、a sーインダセニル基、フルオランテニル基、ベンゾ〔k〕フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ベンゾ〔b〕トリフェニレニル基、及びペリレニル基などが挙げられる。これらの中でも、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フェナントリル基、トリフェニレニル基、フルオランテニル基、及びフルオレニル基が好ましく、フェニル基、ビフェニリル基、及びターフェニリル基がより好ましく、フェニル基がさらに好ましい。

[0075] 第一の化合物におけるアリール基の環形成炭素数は、6～24であり、好ましくは6～20であり、より好ましくは6～18である。

[0076] 第一の化合物における複素環基は、芳香族性を有しない複素環基と、芳香族性を有する芳香族複素環基（1価であればヘテロアリール基、2価であればヘテロアリーレン基という）を含む。

[0077] 第一の化合物における芳香族性を有しない複素環基としては、窒素原子、酸素原子もしくは硫黄原子を含む、環形成原子数3～30、好ましくは3～20の複素環基が挙げられる。芳香族性を有しない複素環の具体例としては、アジリジン、オキシラン、チイラン、アゼチジン、オキセタン、トリメチレンスルフィド、ピロリジン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ピペリジン、テトラヒドロピラン、及びテトラヒドロチオピラン等が挙げられる。

[0078] 第一の化合物における複素環基としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、及びリン原子等のヘテロ原子を含む環状基が挙げられ、環形成原子として、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子からなる群から選ばれる原子を含有することが好ましい。複素環基としては、芳香族性を有するヘテロアリール基が好ましい。ヘテロアリール基の例としては、ピロリル基、フリル基、チエニル基、ピリジル基、イミダゾピリジル基、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、イミダゾリル基、オキサゾリル基、チア

ゾリル基、ピラゾリル基、イソオキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、イソベンゾチエニル基、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、ベンズイミダゾリル基、ベンズオキサゾリル基、ベンズチアゾリル基、インダゾリル基、ベンズイソキサゾリル基、ベンズイソチアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、9-フェニルカルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基、及びキサンテニル基などが挙げられる。これらの中でも、ピリジル基、イミダゾピリジル基、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、ベンズイミダゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、9位にアリール基又は複素環基が置換したカルバゾリル基、フェナントロリニル基、及びキナゾリニル基が好ましい。

[0079] 第一の化合物における複素環基の環形成原子数は、3～30であり、好ましくは5～24であり、より好ましくは5～18である。

第一の化合物におけるヘテロアリール基の環形成原子数は、5～30であり、好ましくは5～24であり、より好ましくは5～18である。

第一の化合物におけるヘテロアリール基の炭素原子以外の環形成原子としては、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子が好ましい。

[0080] 第一の化合物におけるヘテロアリーレン基は、前記ヘテロアリール基からさらに1つの水素原子又は置換基が除去された2価の基である。

[0081] 第一の化合物における炭素数1～25のアルキル基及び環形成炭素数6～24のアリール基からなる群から選択される1以上の基で置換されたシリル基の例としては、モノ置換シリル基、ジ置換シリル基、及びトリ置換シリル基が挙げられる。

[0082] 第一の化合物におけるモノ置換シリル基は、 $-\text{SiH}_2(\text{Y}^{10})$ 、又は $-\text{SiH}(\text{Y}^{20})$ で表される。

第一の化合物におけるジ置換シリル基は、 $-\text{SiH}(\text{Y}^{10})_2$ 、 $-\text{SiH}(\text{Y}^{20})_2$ 、又は $-\text{SiH}(\text{Y}^{10})(\text{Y}^{20})$ で表される。

第一の化合物におけるトリ置換シリル基は、 $-\text{Si}(\text{Y}^{10})_3$ 、 $-\text{Si}(\text{Y}^{20})_3$ 、 $-\text{Si}(\text{Y}^{10})_2(\text{Y}^{20})$ 、又は $-\text{Si}(\text{Y}^{10})(\text{Y}^{20})_2$ で表される。

上記において、 Y^{10} は炭素数1～25のアルキル基を表し、 Y^{20} は環形成炭素数6～24のアリール基を表す。

Y^{10} が複数存在する場合、複数の Y^{10} は、互いに同一であっても、異なってもよい。

Y^{20} が複数存在する場合、複数の Y^{20} は、互いに同一であっても、異なってもよい。

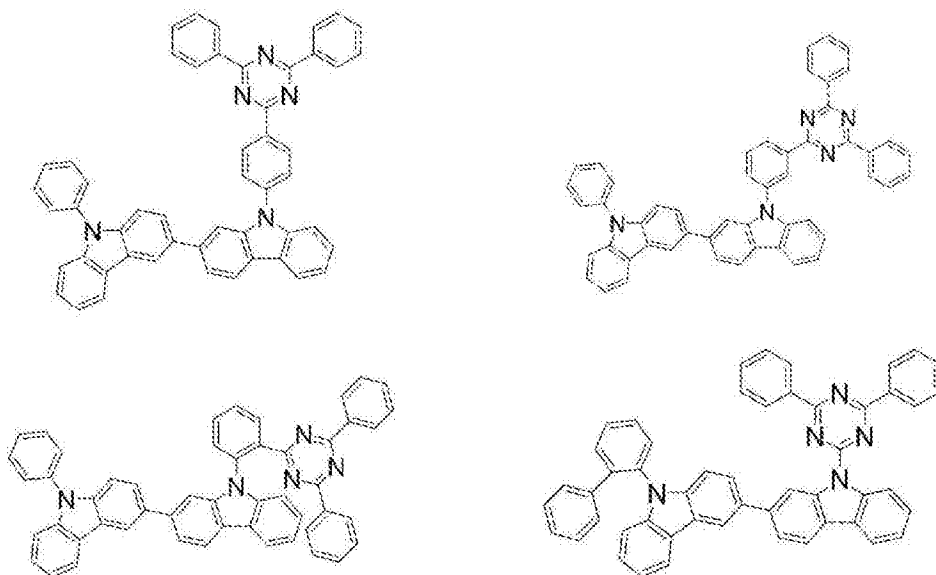
[0083] 第一の化合物において、 R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 は、それぞれ独立して、ハロゲン原子、置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基、炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又はシアノ基を示すことが好ましい。

[0084] 第一の化合物は、従来公知の合成方法（例えば、国際公開第2011/132684号に記載の方法など）を組み合わせ製造することができる。

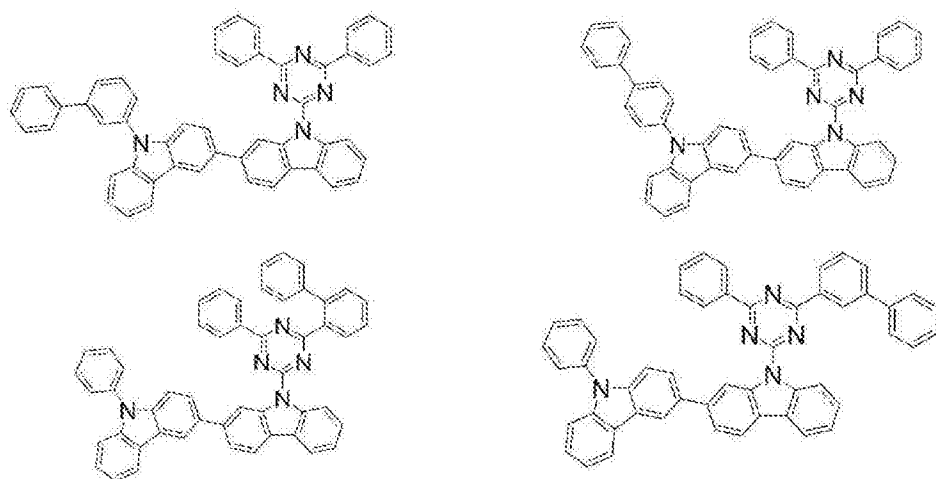
本実施形態に係る第一の化合物の例を以下に示す。本発明における第一の化合物は、これらの具体例に限定されない。

[0085]

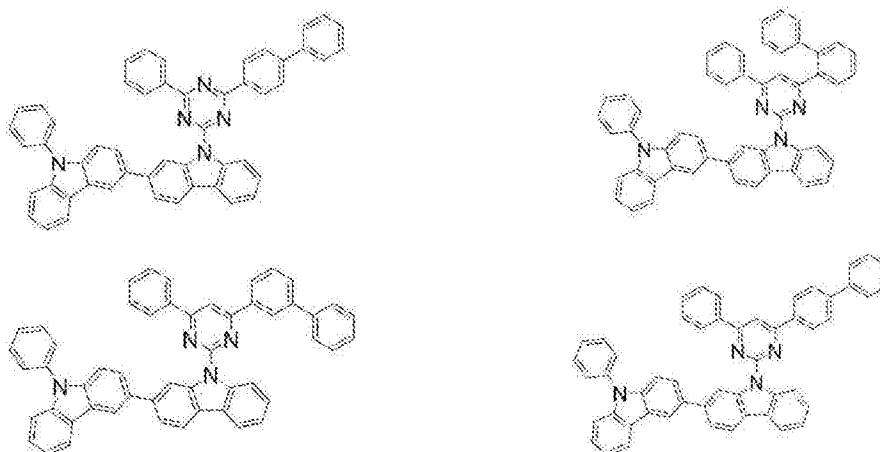
[化21]



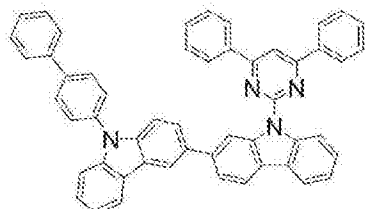
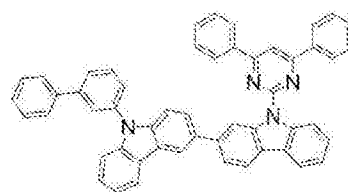
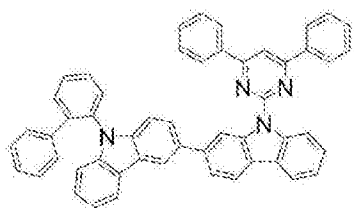
[0086] [化22]



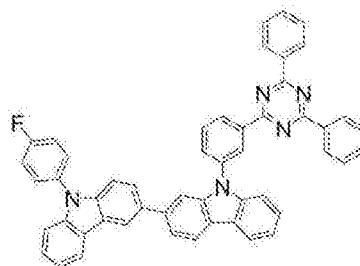
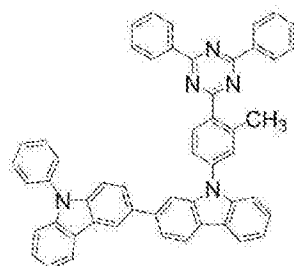
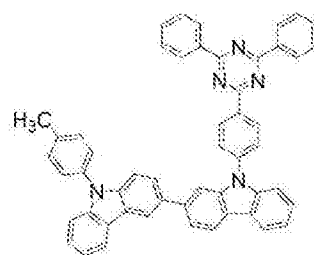
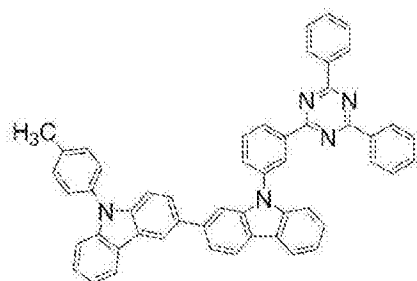
[0087] [化23]



[0088] [化24]

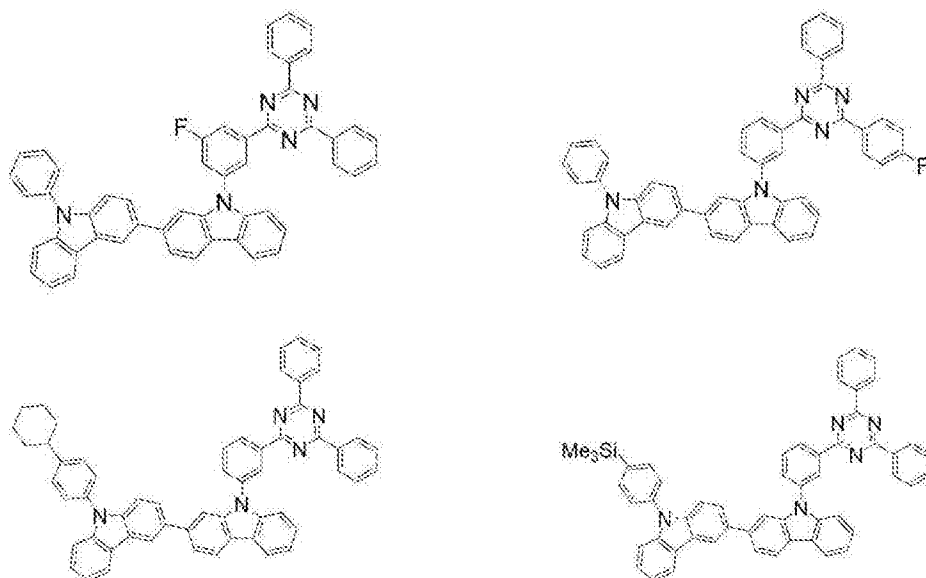


[0089] [化25]

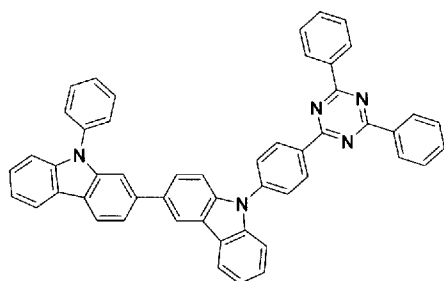


[0090]

[化26]



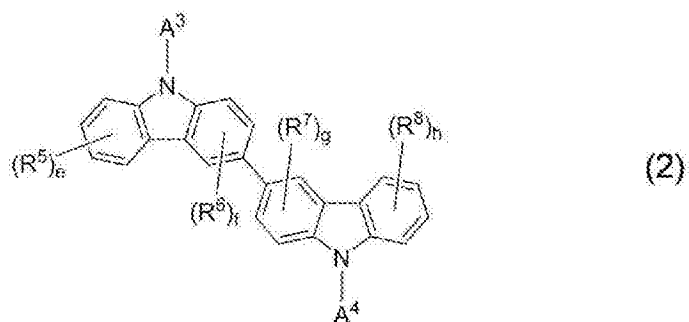
[0091] [化27]



[0092] (第二の化合物)

第二の化合物は、下記一般式(2)で表される。

[0093] [化28]



[0094] (前記一般式(2)中、 R^5 、 R^6 、 R^7 及び R^8 は、それぞれ独立して、ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、
 置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、
 炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基か
 らなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は
 シアノ基を示す。

e は、0、1、2、3 又は 4 である。

f は、0、1、2 又は 3 である。

g は、0、1、2 又は 3 である。

h は、0、1、2、3 又は 4 である。

e が 2 以上の場合、複数の R^5 は、互いに同一であるか、又は異なる。

f が 2 以上の場合、複数の R^6 は、互いに同一であるか、又は異なる。

g が 2 以上の場合、複数の R^7 は、互いに同一であるか、又は異なる。

h が 2 以上の場合、複数の R^8 は、互いに同一であるか、又は異なる。

A^3 及び A^4 のうち、一方が、下記一般式 (2 a) で表される置換基であり、
 他方が、下記一般式 (2 b) で表される置換基である。)

[0095] [化29]



[0096] (前記一般式 (2 a) 中、 R^9 は、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、

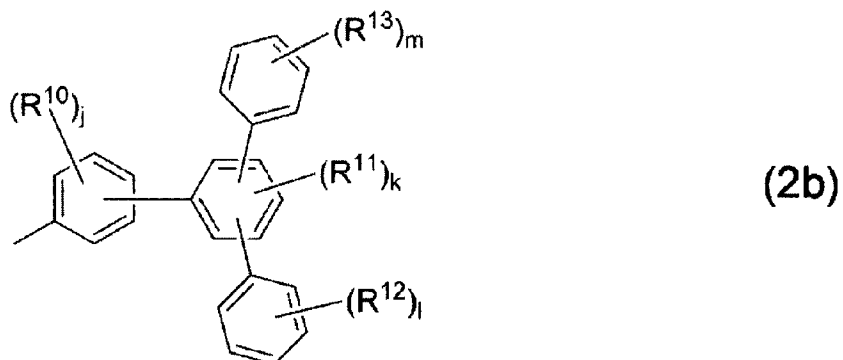
置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基か
 らなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

i は 0、1、2、3、4 又は 5 である。)

[0097] [化30]



[0098] (前記一般式 (2 b) 中、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 及び R^{13} は、それぞれ独立して

、
ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、
炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基か
らなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は
シアノ基を示す。

j は、0、1、2、3 又は 4 である。

k は、0、1、2 又は 3 である。

l は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

m は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

j が 2 以上の場合、複数の R^{10} は、互いに同一であるか、又は異なる。

k が 2 以上の場合、複数の R^{11} は、互いに同一であるか、又は異なる。

l が 2 以上の場合、複数の R^{12} は、互いに同一であるか、又は異なる。

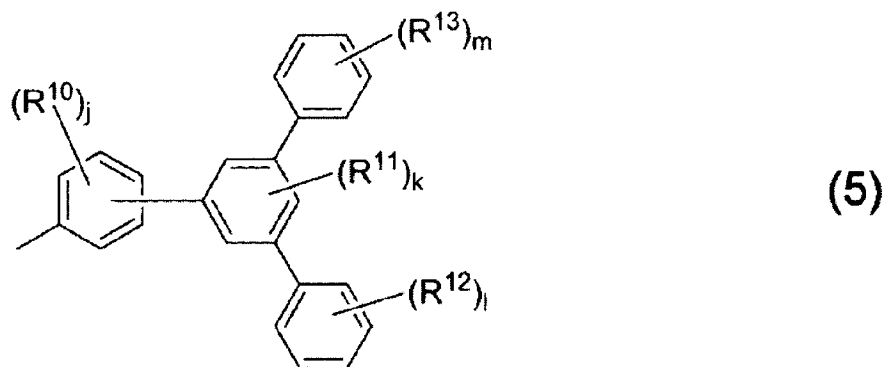
m が 2 以上の場合、複数の R^{13} は、互いに同一であるか、又は異なる。)

[0099] 第二の化合物において、 R^9 は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、
炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は
シアノ基を示すことが好ましい。

[0100] 第二の化合物において、 A^3 及び A^4 のうち、一方が、前記一般式 (2 a) で表される置換基であり、他方が、下記一般式 (5) で表される置換基であることが好ましい。

[0101] [化31]



[0102] (前記一般式 (5) 中、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 及び R^{13} は、それぞれ独立して、ハロゲン原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又はシアノ基を示す。

j は、0、1、2、3又は4である。

k は、0、1、2又は3である。

l は、0、1、2、3、4又は5である。

m は、0、1、2、3、4又は5である。

j が 2 以上の場合、複数の R^{10} は、互いに同一であるか、又は異なる。

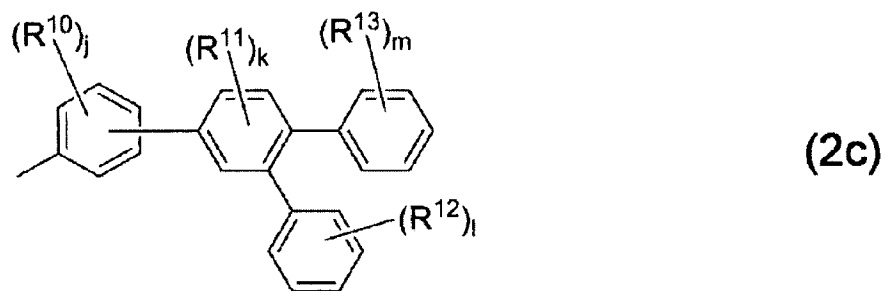
k が 2 以上の場合、複数の R^{11} は、互いに同一であるか、又は異なる。

l が 2 以上の場合、複数の R^{12} は、互いに同一であるか、又は異なる。

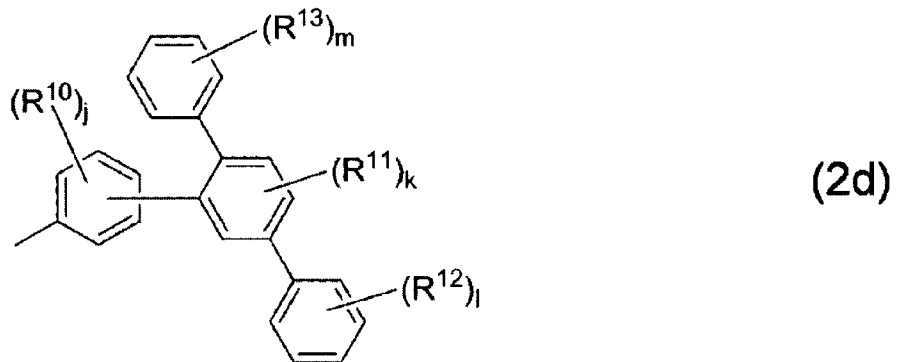
m が 2 以上の場合、複数の R^{13} は、互いに同一であるか、又は異なる。）

[0103] 第二の化合物において、 A^3 及び A^4 のうち、一方が、前記一般式 (2 a) で表される置換基であり、他方が、下記一般式 (2 c)、下記一般式 (2 d)、又は下記一般式 (2 e) で表される置換基であることも好ましい。

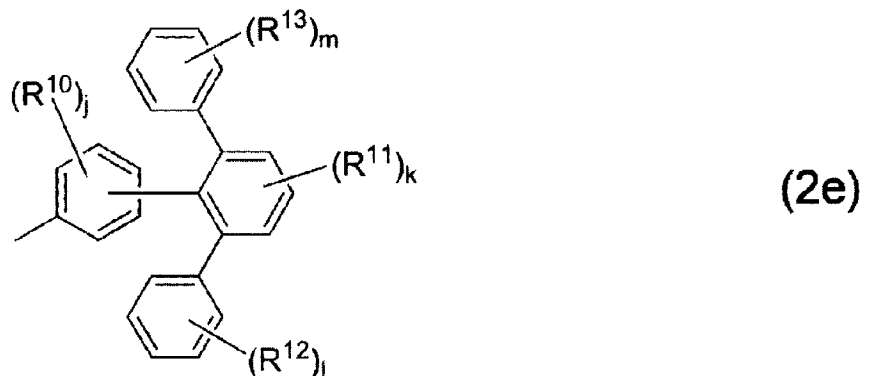
[0104] [化32]



[0105] [化33]



[0106] [化34]



[0107] (前記一般式(2c)、前記一般式(2d)、及び前記一般式(2e)中、

R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 及び R^{13} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25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6～24のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数3～30の複素環基、

炭素数1～25のアルキル基及び環形成炭素数6～24のアリール基からなる群から選択される1以上の基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

j は、0、1、2、3又は4である。

k は、0、1、2又は3である。

l は、0、1、2、3、4又は5である。

m は、0、1、2、3、4又は5である。

j が2以上の場合、複数の R^{10} は、互いに同一であるか、又は異なる。

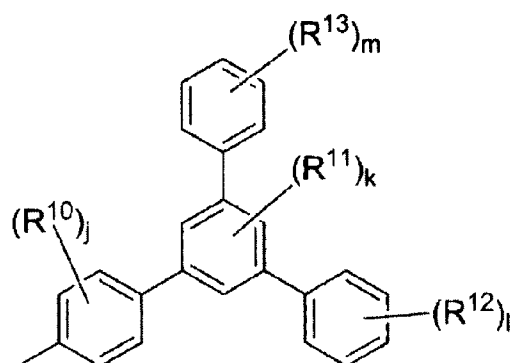
k が2以上の場合、複数の R^{11} は、互いに同一であるか、又は異なる。

l が2以上の場合、複数の R^{12} は、互いに同一であるか、又は異なる。

m が2以上の場合、複数の R^{13} は、互いに同一であるか、又は異なる。)

[0108] 第二の化合物において、 A^3 及び A^4 のうち、一方が、前記一般式(2a)で表される置換基であり、他方が、下記一般式(5a)で表される置換基であることが好ましい。

[0109] [化35]



(5a)

[0110] (前記一般式 (5 a) 中、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 及び R^{13} は、それぞれ独立して

、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 25 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 ~ 24 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ~ 30 の複素環基、

炭素数 1 ~ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 24 のアリール基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

j は、0、1、2、3又は4である。

k は、0、1、2又は3である。

l は、0、1、2、3、4又は5である。

m は、0、1、2、3、4又は5である。

j が 2 以上の場合、複数の R^{10} は、互いに同一であるか、又は異なる。

k が 2 以上の場合、複数の R^{11} は、互いに同一であるか、又は異なる。

l が 2 以上の場合、複数の R^{12} は、互いに同一であるか、又は異なる。

m が 2 以上の場合、複数の R^{13} は、互いに同一であるか、又は異なる。)

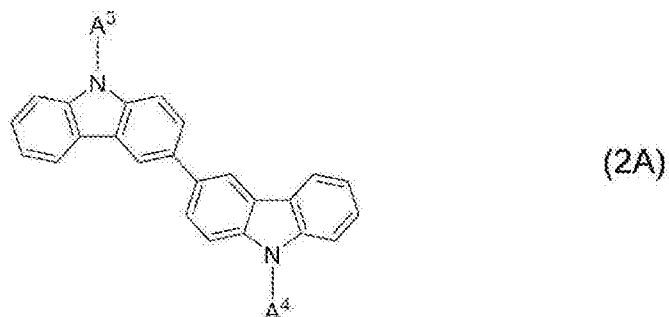
[0111] 第二の化合物において、 A^3 及び A^4 のうち、一方が、前記一般式 (2 a) で表される置換基であり、他方が、前記一般式 (5)、一般式 (2 c)、一般式 (2 d)、又は一般式 (2 e) で表される置換基であることが好ましい。

第二の化合物において、 A^3 及び A^4 のうち、一方が、前記一般式 (2 a) で表される置換基であり、他方が、前記一般式 (5 a) であることがより好ましい。

[0112] 第二の化合物において、 e 、 f 、 g 及び h が0であることが好ましい。

[0113] 前記一般式 (2) における e 、 f 、 g 及び h が0であるとき、第二の化合物は、下記一般式 (2 A) で表される。

[0114] [化36]



[0115] (前記一般式(2A)中、 A^3 及び A^4 のうち、一方が、前記一般式(2a)で表される置換基であり、他方が、前記一般式(2b)で表される置換基である。)

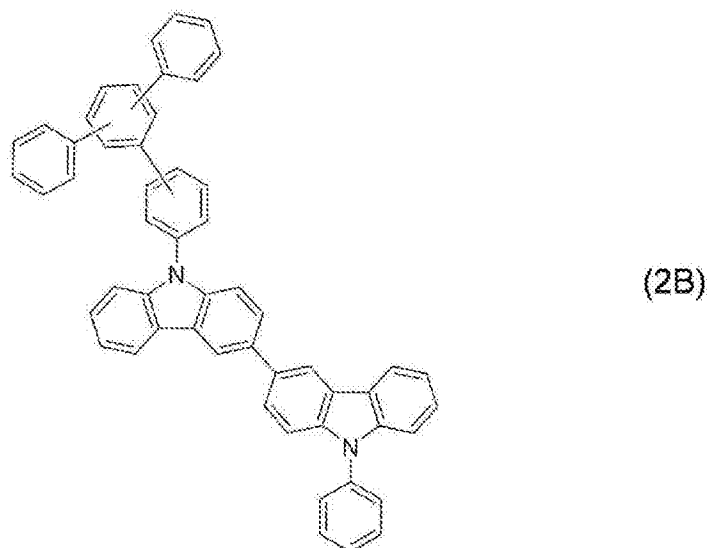
[0116] 第二の化合物において、 j 、 k 、 l 及び m が0であることが好ましい。

第二の化合物において、 i 、 j 、 k 、 l 及び m が0であることがより好ましい。

第二の化合物において、 e 、 f 、 g 、 h 、 i 、 j 、 k 、 l 及び m が0であることがさらに好ましい。

[0117] 第二の化合物において、 e 、 f 、 g 、 h 、 i 、 j 、 k 、 l 及び m が0であるとき、第二の化合物は、下記一般式(2B)で表される。

[0118] [化37]



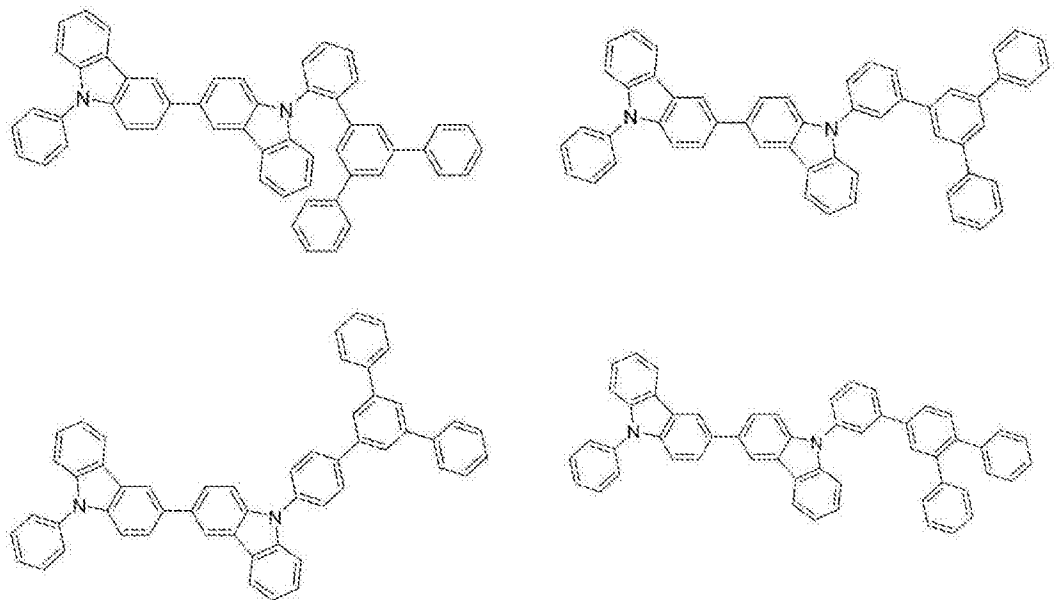
[0119] 第二の化合物における炭素数1～25のアルキル基、環形成炭素数3～2

5のシクロアルキル基、環形成炭素数6～24のアリール基、環形成原子数3～30の複素環基、及び炭素数1～25のアルキル基及び環形成炭素数6～24のアリール基からなる群から選択される1以上の基で置換されたシリル基の具体例は、それぞれ、第一の化合物において説明した置換基の具体例と同様である。

[0120] 第二の化合物は、従来公知の合成方法（例えば、国際公開第2013/084885号に記載の方法など）を組み合わせる製造することができる。

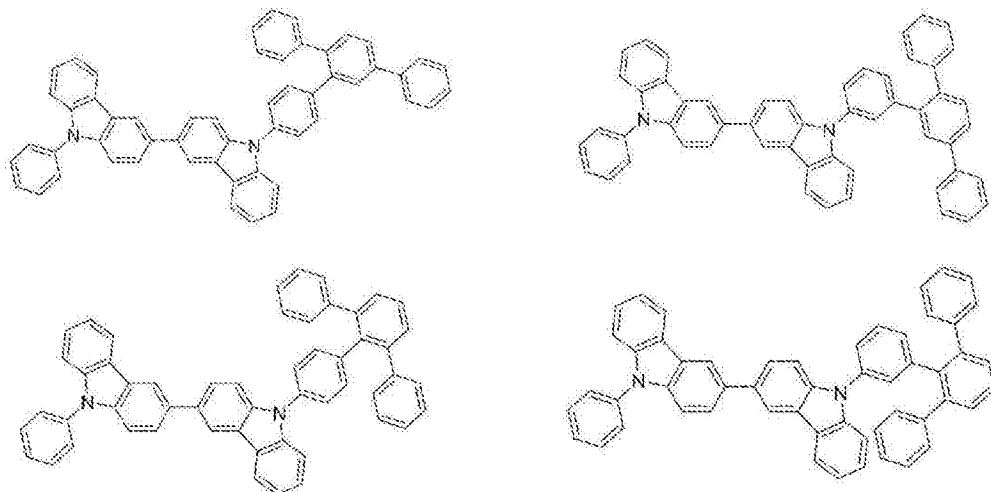
本実施形態に係る第二の化合物の例を以下に示す。本発明における第二の化合物は、これらの具体例に限定されない。

[0121] [化38]

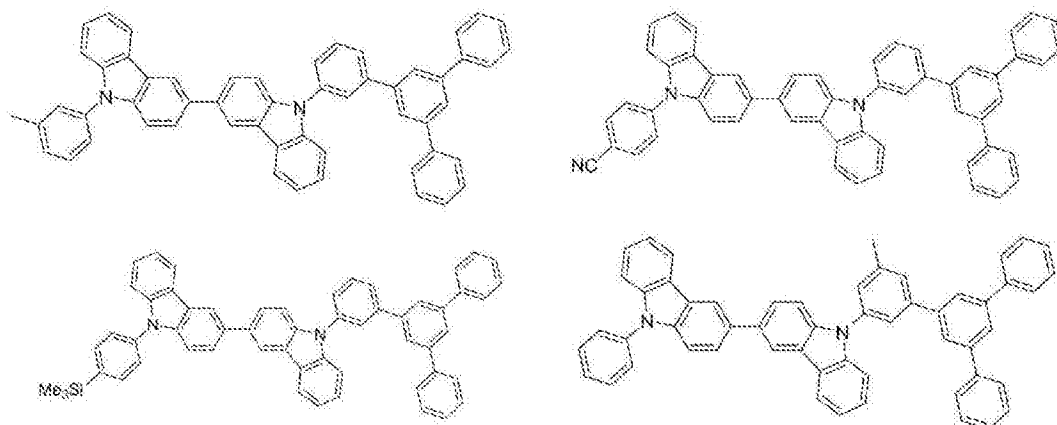


[0122]

[化39]



[0123] [化40]



[0124] 本実施形態の組成物は、前記第一の化合物及び前記第二の化合物を組み合わせて含有しているため、本実施形態の組成物は、有機エレクトロルミネッセンス素子の性能を維持しながら、1つの蒸着源から材料の比率を安定的に蒸着させることができる。

[0125] (組成物の配合比)

本発明の一実施形態では、前記第一の化合物と前記第二の化合物との配合比は特に限定されない。組成物に求める効果に応じて、前記第一の化合物と前記第二の化合物との配合比を適宜決定すればよい。「第一の化合物：第二の化合物」で表される化合物の配合比（質量比）は、通常、1：99～99：1の範囲内であり、10：90～90：10の範囲内が好ましく、40：

60～60：40の範囲内がより好ましい。

[0126] (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、本実施形態に係る組成物を含む。すなわち、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、前記第一の化合物、及び前記第二の化合物を含有する。

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、さらにその他の化合物を含有していてもよい。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が、さらにその他の化合物を含んでいる場合、該その他の化合物は、固体であっても液体であってもよい。

[0127] (組成物膜)

本実施形態に係る組成物膜は、本実施形態に係る組成物を含む。すなわち、本実施形態に係る組成物を含む膜（組成物膜）は、前記第一の化合物、及び前記第二の化合物を含有する膜を意味する。

本実施形態に係る組成物膜は、さらにその他の化合物を含有していてもよい。

本実施形態に係る組成物膜の形成方法は、本明細書において特に限定される旨を言及した場合を除いて、形成方法は特に制限されない。組成物膜の形成方法としては、乾式成膜法、及び湿式成膜法等の公知の方法を採用できる。乾式成膜法としては、真空蒸着法、スパッタリング法、プラズマ法、及びイオンプレーティング法等が挙げられる。湿式成膜法としては、スピンコーティング法、ディッピング法、フローコーティング法、及びインクジェット法等が挙げられる。

[0128] (有機EL素子の素子構成)

本実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に有機層を備える。前記有機層は、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、前記有機層は、有機化合物で構成される複数の層が積層されてなる。前記有機層は、無機化合物をさらに含んでもよい。

。本実施形態の有機EL素子において、前記有機層のうち少なくとも一層は、発光層である。ゆえに、前記有機層は、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、電子注入層、電子輸送層、及び障壁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。

[0129] 本実施形態において、前記有機層は、複数の層で構成され、本実施形態に係る組成物は、前記複数の層のうちの1層以上に含まれていることが好ましい。

[0130] 本実施形態に係る有機EL素子のいずれか1層以上に本実施形態に係る組成物を使用することにより、高い有機EL性能（例えば、駆動電圧、発光効率、及び寿命の少なくともいずれかの発光性能）を得ることができる。さらに、本実施形態に係る組成物が本実施形態に係る方法（例えば真空蒸着法）を用いて成膜されている場合、蒸着初期から蒸着終期まで、発光層中の第一の化合物と第二の化合物との材料比が安定する。その結果、有機EL素子も、蒸着時間によらず、安定して高い発光性能を維持することができる。

本実施形態に係る有機EL素子において、発光層が本実施形態に係る組成物を含有することが好ましい。

[0131] 本実施形態において、前記陽極と前記発光層との間に、さらに正孔輸送層を有することが好ましい。

本実施形態において、前記陰極と前記発光層との間に、さらに電子輸送層を有することが好ましい。

別の実施形態として、本発明の一実施形態に係る組成物が電子輸送帯域に使用されることも好ましい。

[0132] 有機EL素子の代表的な素子構成としては、例えば、次の（a）～（f）等の構成を挙げることができる。

（a）陽極／発光層／陰極

（b）陽極／正孔注入・輸送層／発光層／陰極

(c) 陽極／発光層／電子注入・輸送層／陰極

(d) 陽極／正孔注入・輸送層／発光層／電子注入・輸送層／陰極

(e) 陽極／正孔注入・輸送層／発光層／障壁層／電子注入・輸送層／陰極

(f) 陽極／正孔注入・輸送層／障壁層／発光層／障壁層／電子注入・輸送層／陰極

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

[0133] 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、透光性の基板2と、陽極3と、陰極4と、陽極3と陰極4との間に配置された有機層10と、を有する。有機層10は、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いる。

[0134] 有機EL素子1の発光層5は、本実施形態に係る組成物を含有する。すなわち、発光層5は、前記第一の化合物、及び前記第二の化合物を含む。

[0135] 本実施形態の有機EL素子によれば、前記第一の化合物、及び前記第二の化合物を組み合わせ有機層に用いたことにより、有機EL素子が低電圧で駆動する。有機EL素子を低電圧で駆動させるという観点から、前記第一の

化合物、及び前記第二の化合物が1つの発光層に含まれている態様が好ましい。

[0136] (有機EL素子における配合比)

本発明の一実施形態では、第一の化合物と第二の化合物との配合比は特に限定されない。有機EL素子に求める効果に応じて、第一の化合物と第二の化合物との配合比を適宜決定すればよい。「第一の化合物：第二の化合物」で表される化合物の配合比（質量比）は、通常、1：99～99：1の範囲内であり、10：90～90：10の範囲内が好ましく、40：60～60：40の範囲内がより好ましい。

[0137] (発光材料)

本発明の一態様である有機EL素子は、前記発光層が、さらに発光材料を含有することが好ましい。

本発明の一実施形態では、前記発光層が発光材料として燐光発光材料を含有することが好ましい。前記燐光発光材料がイリジウム（Ir）、オスミウム（Os）、及び白金（Pt）からなる群から選択されるいずれかの金属原子のオルトメタル化錯体であることが好ましい。好適な燐光発光材料については後述する。

[0138] 前記発光層が、第一の化合物と第二の化合物と発光材料とを含む場合、発光層における発光材料の含有率は、0.1質量%以上50質量%以下であることが好ましく、1質量%以上20質量%以下であることがより好ましい。

[0139] (層形成方法)

本発明の一態様である有機EL素子の各層の形成方法は、本明細書において特に限定される旨を言及した場合を除いて、形成方法は特に制限されない。各層の形成方法としては、乾式成膜法、及び湿式成膜法等の公知の方法を採用できる。乾式成膜法としては、真空蒸着法、スパッタリング法、プラズマ法、及びイオンプレーティング法等が挙げられる。湿式成膜法としては、スピンコーティング法、ディッピング法、フローコーティング法、及びインクジェット法等が挙げられる。

[0140] (膜厚)

本発明の一態様である有機EL素子の各層の膜厚は、本明細書において特に言及した以外には制限されない。各層の膜厚は、適切な膜厚に設定することが好ましい。膜が厚すぎると、一定の光出力を得るために大きな印加電圧が必要になり効率が悪くなるおそれがある。膜が薄すぎるとピンホール等が発生して、電界を印加しても十分な発光輝度が得られないおそれがある。通常、膜厚は、 $5\text{ nm} \sim 10\text{ }\mu\text{m}$ の範囲が適しており、 $10\text{ nm} \sim 0.2\text{ }\mu\text{m}$ の範囲がさらに好ましい。

[0141] 以下、有機EL素子の構成要素の材料等について説明する。

(基板)

基板は、発光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、又はプラスチック等を用いることができる。また、基板としては、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブル）基板のことであり、例えば、ポリカーボネート、及びポリ塩化ビニルからなるプラスチック基板等が挙げられる。

[0142] (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、及びこれらの混合物等を用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム－酸化スズ（ITO: Indium Tin Oxide）、珪素若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、及び酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、並びにグラフェン等が挙げられる。この他、金（Au）、白金（Pt）、又は金属材料の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

[0143] (正孔注入層)

正孔注入層は、陽極から有機層に効率よく正孔を注入するために設けられる層である。正孔注入層に使用される物質としては、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、芳香族アミン化合物、アクセプター性の化合物、又は高分子化合物（オリゴマー、デンドリマー、ポリマー等）等も使用できる。

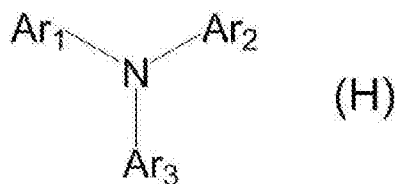
正孔注入層に使用される物質としては、中でも、芳香族アミン誘導体、又はアクセプター性の化合物であることが好ましく、アクセプター性の化合物であることが更に好ましい。アクセプター性の化合物として、電子吸引基により置換された複素環誘導体、電子吸引基により置換されたキノン誘導体、アリールボラン誘導体、またはヘテロアリールボラン誘導体等が好適に用いられ、中でも、ヘキサシアノヘキサアザトリフェニレン、 F_4TCNQ （2, 3, 5, 6-テトラフルオロ-7, 7, 8, 8-テトラシアノキノジメタン）、又は1, 2, 3-トリス〔（シアノ）（4-シアノ-2, 3, 5, 6-テトラフルオロフェニル）メチレン〕シクロプロパン等が好ましく用いられる。

アクセプター性の化合物を含む層は、更にマトリクス材料を含有する形態であっても好ましい。マトリクス材料としては、有機EL用の材料を幅広く使用することができる。アクセプター性の化合物と共に使用するマトリクス材料として、ドナー性化合物を用いることが好ましく、芳香族アミン化合物を用いることが更に好ましい。

[0144] （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、又はアントラセン誘導体等を使用する事ができる。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。尚、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層でもよく、又は上記物質からなる層が二層以上積層されていてもよい。正孔輸送材料は、好ましくは、下記一般式（H）で表される化合物である。

[0145] [化41]



[0146] 前記一般式 (H) 中、 $\text{Ar}_1 \sim \text{Ar}_3$ 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、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基または、置換もしくは無置換のアリール基と置換もしくは無置換の複素環基との組合せで構成される基を示す。アリール基としては、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、フルオレニル基、スピロビフルオレニル基、インデノフルオレニル基、ナフチル基、フェナントリル基、アントリル基、又はトリフェニレニル基等の置換基が好ましい。複素環基としては、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、又はカルバゾリル基等が好ましい。アリール基と複素環基との組合せで構成される基としては、ジベンゾフラン置換のアリール基、ジベンゾチオフェン置換のアリール基、又はカルバゾール置換のアリール基等が好ましい。これら置換基はさらに置換基を有していてもよく、好ましい置換基は後述の通りである。

好ましい 1 つの態様として、前記一般式 (H) の $\text{Ar}_1 \sim \text{Ar}_3$ の少なくとも 1 つが、アリールアミノ基によって更に置換されている化合物であることが好ましく、ジアミン誘導体、トリアミン誘導体、又はテトラアミン誘導体であることも好ましい。ジアミン誘導体として、テトラアリール置換ベンジジン誘導体、及び TPTE (4, 4' -ビス [N-フェニル-N-[4'-ジフェニルアミノ-1, 1'-ビフェニル-4-イル] アミノ] -1, 1'-ビフェニル) 等が好ましく用いられる。

燐光発光層に接する層に使用する正孔輸送材料は、三重項準位が高いことが好ましく、前記一般式 (H) における $\text{Ar}_1 \sim \text{Ar}_3$ は、それぞれ独立に、フルオレニル基、スピロフルオレニル基、フェニル基、ビフェニル基、フェナントリル基、トリフェニレニル基、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチエニル基等の置換基、並びにそれらの基の組合せで形成される基からなる群

から選択される少なくともいずれかの基であることが好ましい。

[0147] (発光層)

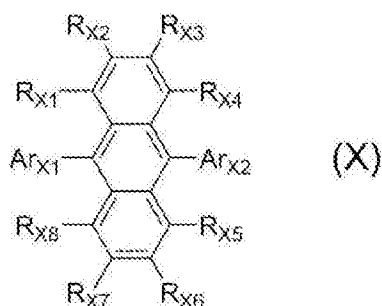
発光層は、発光性の高い物質を含む層である。発光層には、種々の材料を用いることができる。発光層は、通常、発光性の高い発光材料（ドーパント材料）と、発光材料を効率よく発光させるためのホスト材料とが含有されている。例えば、発光性の高い物質としては、蛍光を発光する蛍光性化合物又は燐光を発光する燐光性化合物を用いることができる。蛍光性化合物は、一重項励起状態から発光可能な化合物である。燐光性化合物は、三重項励起状態から発光可能な化合物である。蛍光性化合物を含む発光層は、蛍光発光層と呼ばれる。燐光性化合物を含む発光層は、燐光発光層と呼ばれている。

[0148] 蛍光発光層のドーパント材料として、蛍光発光性の化合物を幅広く用いることができる。蛍光発光層のドーパント材料としては、中でも、縮合多環芳香族誘導体、スチリルアミン誘導体、縮合環アミン誘導体、ハウ素含有化合物、ピロール誘導体、インドール誘導体、及びカルバゾール誘導体等が好ましい。蛍光発光層のドーパント材料としては、さらに好ましくは、縮合環アミン誘導体、及びハウ素含有化合物が挙げられる。縮合環アミン誘導体としては、例えば、ジアミノピレン誘導体、ジアミノクリセン誘導体、ジアミノアントラセン誘導体、ジアミノフルオレン誘導体、及びベンゾフロ骨格が1つ以上縮環したジアミノフルオレン誘導体などが挙げられる。ハウ素含有化合物としては、例えば、ピロメテン誘導体、及びトリフェニルボラン誘導体等が挙げられる。ここで誘導体とは、当該骨格を部分構造として含む化合物を示す言葉であり、当該骨格と更なる環を有し縮合環を形成する化合物、及び置換基同士で環を形成する当該骨格を有する化合物も含有する。例えば、縮合多環芳香族誘導体の場合は、縮合多環芳香族骨格を部分構造として含む化合物であり、当該縮合多環芳香族骨格にさらに縮合環を形成する化合物、及び当該縮合多環芳香族骨格の置換基同士で環を形成する化合物も含有する。

[0149] 蛍光発光層に用いるホスト材料としては、一般的な蛍光材料を使用するこ

とができる。蛍光発光層に用いるホスト材料としては、中でも、縮合多環芳香族誘導体を主骨格に持つ化合物であることが好ましく、より好ましくは、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、クリセン誘導体、及びナфтаセン誘導体等が挙げられる。青色ホスト材料（青色蛍光発光性のドーパント材料と共に用いられるホスト材料）、及び緑色ホスト材料（緑色蛍光発光性のドーパント材料と共に用いられるホスト材料）として好適なホストは、下記一般式（X）で表されるアントラセン誘導体である。

[0150] [化42]



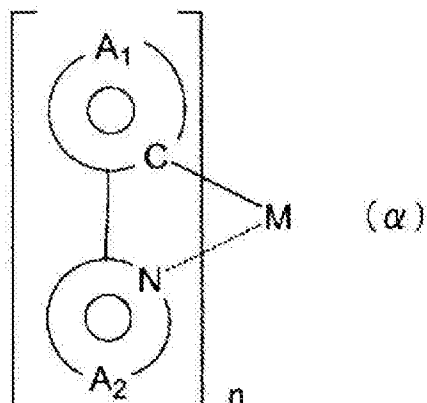
[0151] 前記一般式（X）において、 Ar_{x1} 、及び Ar_{x2} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数3～50の複素環基を示す。 Ar_{x1} 、及び Ar_{x2} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基を示すことが好ましい。

[0152] 燐光発光層に用いることができる燐光発光材料（ドーパント材料）として、イリジウム錯体、オスミウム錯体、及び白金錯体等の金属錯体を使用される。

イリジウム（Ir）、オスミウム（Os）、及び白金（Pt）からなる群から選択される金属原子のオルトメタル化錯体である燐光発光材料は、下記式（α）で表される錯体であることが好ましい。

[0153]

[化43]



[0154] 式(α)において、Mは、オスミウム、イリジウム及び白金からなる群から選ばれる少なくとも一つの金属を示し、nは、該金属の価数を示す。

環A₁は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24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のヘテロアリール基を表し、環A₂は、窒素をヘテロ環形成原子として含有する置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基を表す。

[0155] 式(α)の環A₁における環形成炭素数6～24のアリール基としては、前述した一般式(1)におけるアリール基が挙げられる。

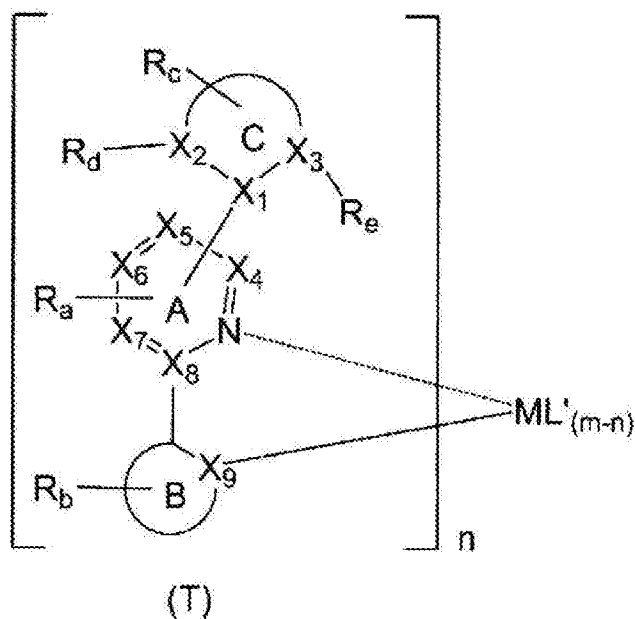
式(α)の環A₁及び環A₂における環形成原子数5～30のヘテロアリール基としては、前述した一般式(1)におけるヘテロアリール基が挙げられる。

式(α)の環A₁及び環A₂が有し得る置換基は、前述した一般式(1)における置換基と同じである。

さらに、式(α)で表される錯体は、下記式(T)又は(U)で表される錯体であることが好ましい。

[0156]

[化44]



[0157] 式 (T) において、Mは、金属を表し、環B及び環Cは、各々独立に環形成原子数5若しくは6のアリール基又はヘテロアリール基を表す。

環A－環Bは、ヘテロアリール基と、アリール基又はヘテロアリール基との結合対を表す。環A－環Bは、環Aの窒素原子及び環Bのsp²混成原子を介して金属Mに配位する。

環A－環Cは、ヘテロアリール基と、アリール基又はヘテロアリール基との結合対を表す。

R_a、R_b及びR_cは、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数2～25のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～25のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基からなる群より選択されるいずれかを表し、R_aは、1つ以上4つ以下であり、R_bは、1つ以上4つ以下であり、R_cは、1つ以上4つ以下であり、R_a、R_b及びR_cの数は、各々独立である。

X₁～X₉は、各々独立に、炭素原子又は窒素原子を表す。

R_d 及び R_e は、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基からなる群より選択されるいずれかを表し、環 C に結合する R_c 、 R_d 及び R_e の少なくとも 1 つは、水素原子ではない。

m は、金属 M の酸化状態を表し、 n は 1 以上である。 L' は、モノアニオン性の二座配位子を表す。

[0158] 式 (T) において、M は、オスミウム、イリジウム、及び白金等が挙げられ、中でもイリジウムが好ましい。

環 B 及び環 C で表される環形成炭素数 6 のアリール基としては、前述した一般式 (1) におけるアリール基が挙げられる。

環 B 及び環 C で表される環形成原子数 5 若しくは 6 のヘテロアリール基としては、前述した一般式 (1) におけるヘテロアリール基が挙げられる。

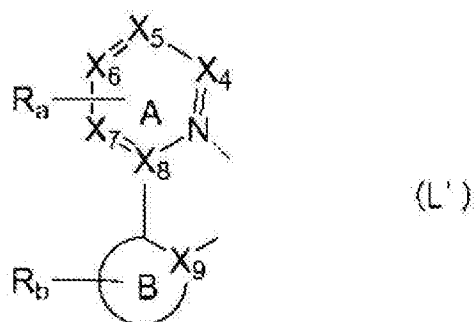
R_1 、 R_2 、 R_a 、 R_b 及び R_c で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基としては、それぞれ、前述した基と同様の基が挙げられる。

R_1 、 R_2 、 R_a 、 R_b 及び R_c で表される置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルケニル基、及び置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルキニル基としては、それぞれ、前述した基と同様の基が挙げられる。

L' で表されるモノアニオン性の二座配位子としては、下記式 (L') で表わされる配位子が挙げられる。

[0159]

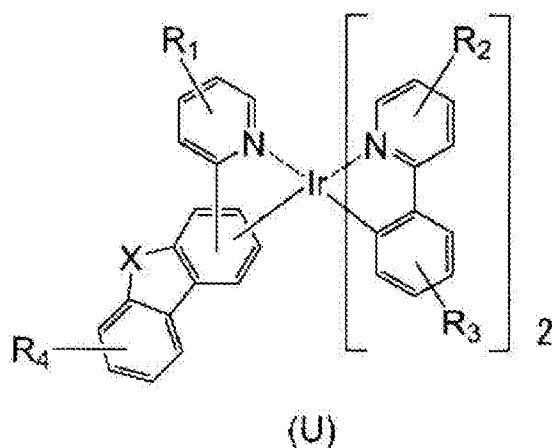
[化45]



[0160] 式 (L') において、 $X_4 \sim X_9$ 、 R_a 、及び R_b は、式 (T) における $X_4 \sim X_9$ 、 R_a 、及び R_b と同義であり、好ましい態様も同様である。

X_9 から環 B より外側に伸びる実線と、環 A の窒素原子から環 A より外側に伸びる破線を介して、式 (L') で表わされる配位子は、式 (T) で表される金属 M に配位する。

[0161] [化46]



[0162] 式 (U) において、X は、NR、酸素原子、硫黄原子、BR、及びセレン原子からなる群より選択されるいずれかを表し、R は、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基である。

R_1 、 R_2 、 R_3 及び R_4 は、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、及び置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群より選択されるいずれかを表し、 R_1 は、1 つ以上 4 つ以下であり、 R_2 は、1 つ以上 4 つ以下であり、 R_3 は、1 つ以上 4 つ

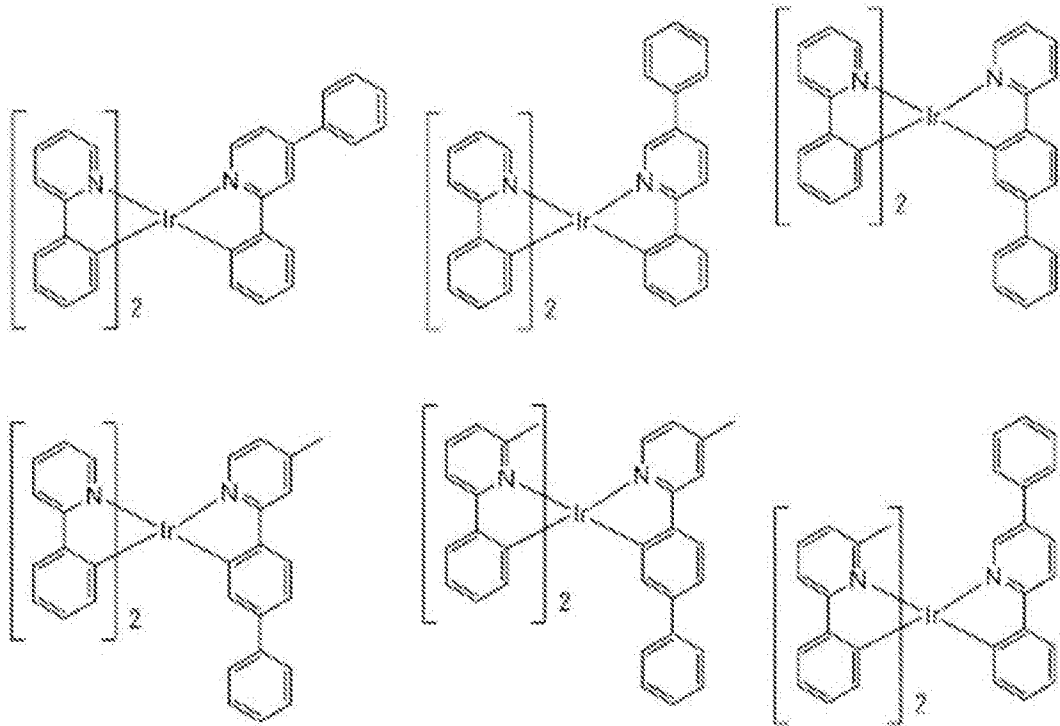
以下であり、 R_4 は、1つ以上4つ以下であり、 R_1 、 R_2 、 R_3 及び R_4 の数は、各々独立である。

[0163] 式(U)において、 R 、 R_1 、 R_2 、 R_3 及び R_4 で表される炭素数1～25のアルキル基としては、前述した基が挙げられ、好ましい態様も同様である。

また、 R_1 、 R_2 、 R_3 及び R_4 で表される環形成炭素数6～24のアリール基としては、前述した基が挙げられ、好ましい態様も同様である。

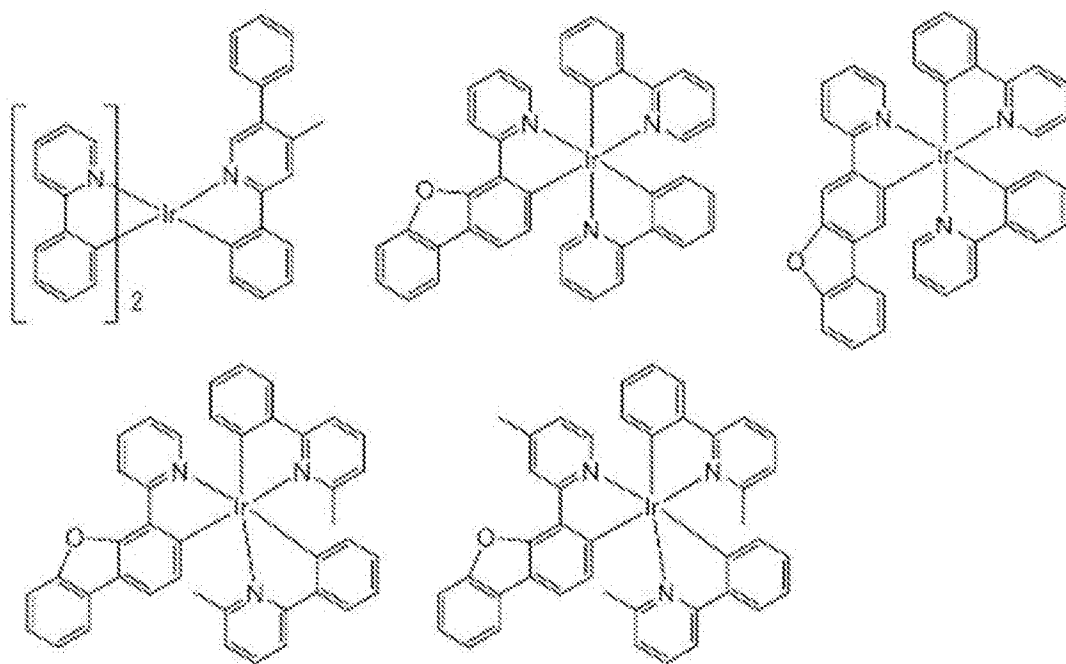
[0164] 式(T)又は(U)で表される錯体としては、以下の化合物が好適であるが、特にこれらに限定されない。

[0165] [化47]

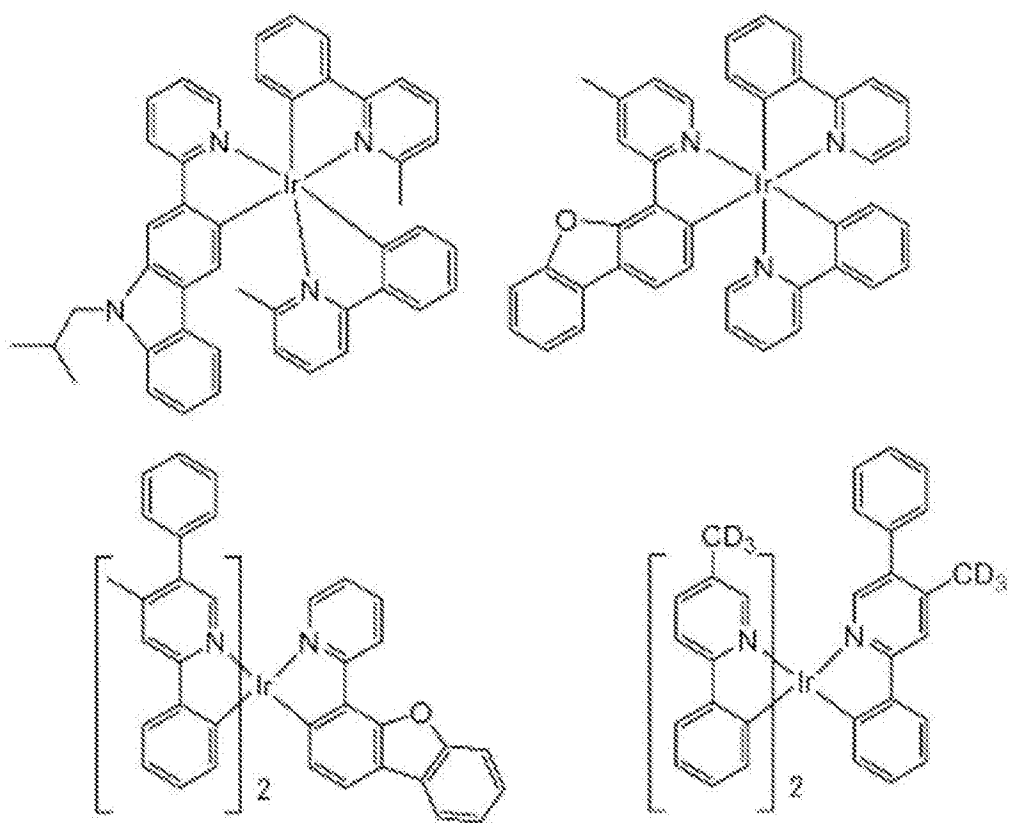


[0166]

[化48]

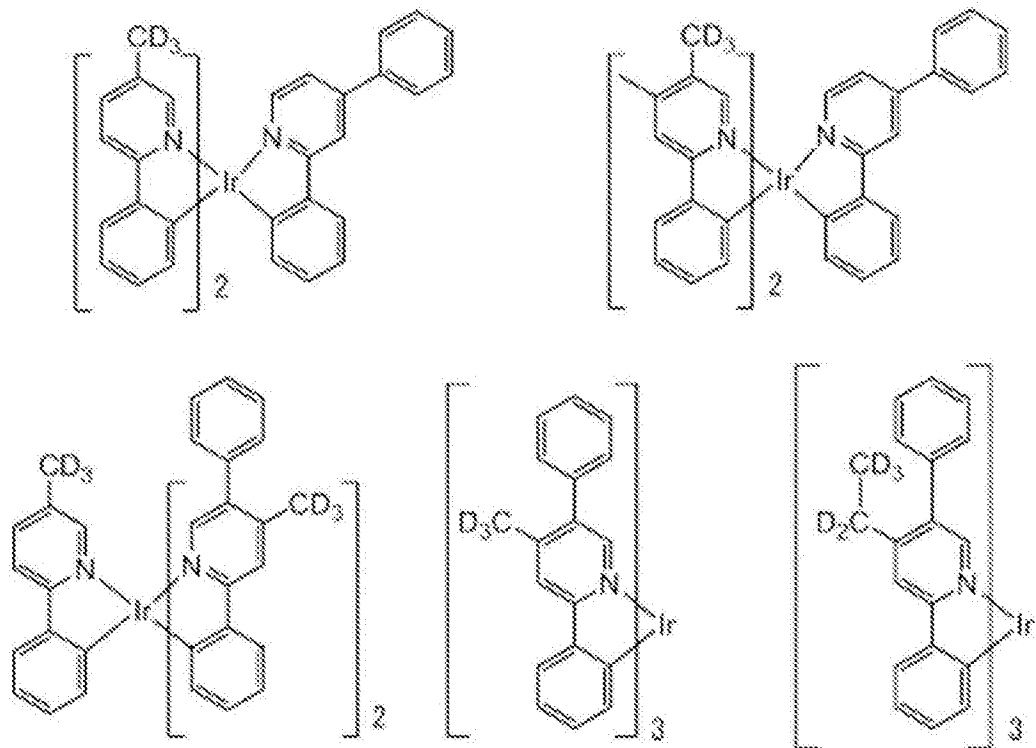


[0167] [化49]



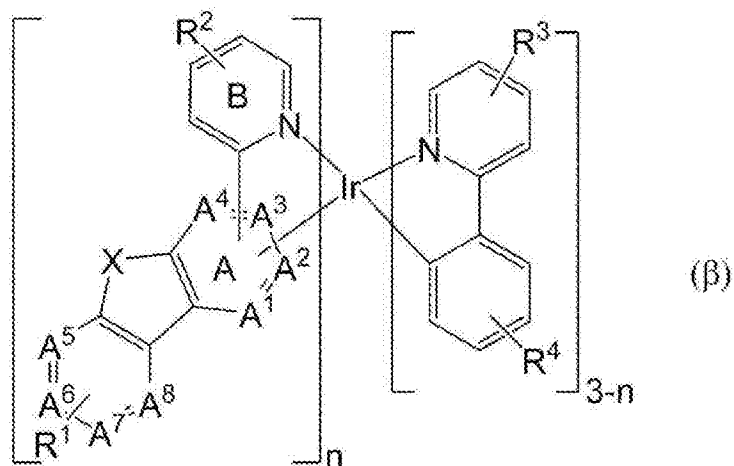
[0168]

[化50]



[0169] また、燐光発光材料として、下記式 (β) で表されるイリジウム錯体も好ましい。

[0170] [化51]



[0171] 式 (β) において、A¹～A⁸は炭素原子又は窒素原子を含み、A¹～A⁸の少なくとも1つは窒素原子であり、環BはC-C結合により環Aに結合し、イリジウム (Ir) はIr-C結合により環Aに結合する。

式 (β) において、A¹～A⁸の内、1つのみが窒素原子であることが好ま

しく、 $A^5 \sim A^8$ の内、1つのみが窒素原子であることがさらに好ましく、 A^5 が窒素原子であることが好ましい。式(β)において、 $A^1 \sim A^4$ の内、 A^3 及び A^4 が炭素原子であることが好ましい。式(β)において、 A^5 が窒素原子であり、 $A^1 \sim A^4$ 、並びに $A^6 \sim A^8$ が炭素原子であることが好ましい。

A^6 が、CR (Rが結合する炭素原子)であることが好ましく、Rは、置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル、及びこれらの組み合わせからなる群から選択される。Rは、好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル又は置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキルである。

式(β)において、XはO、S又はSeであり、Oが好ましい。

式(β)において、 $R^1 \sim R^4$ は、各々独立して、モノー置換、ジー置換、トリー置換もしくはテトラー置換、又は無置換であり、隣接する R^1 は互いに結合して環を形成してもよく、隣接する R^2 は互いに結合して環を形成してもよく、隣接する R^3 は互いに結合して環を形成してもよく、隣接する R^4 は互いに結合して環を形成してもよく、 $R^1 \sim R^4$ は、各々独立して、

水素、

重水素、

ハロゲン、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル、

置換もしくは無置換の原子数2～25のヘテロアルキル、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアリールアルキル、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルコキシ、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24のアリールオキシ、

置換もしくは無置換のアミノ、

置換シリル、

置換もしくは無置換の炭素数2～25のアルケニル、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルケニル、
置換もしくは無置換の原子数 3 ～ 25 のヘテロアルケニル、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルキニル、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール、
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール、
アシル、
置換カルボニル、
カルボン酸、
エステル、
ニトリル、
イソニトリル、
スルファニル、
スルフィニル、
スルホニル、

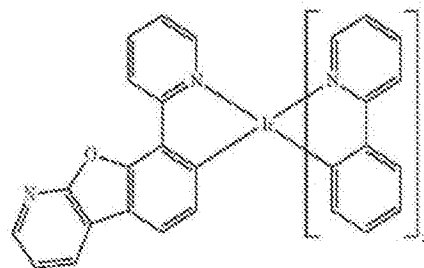
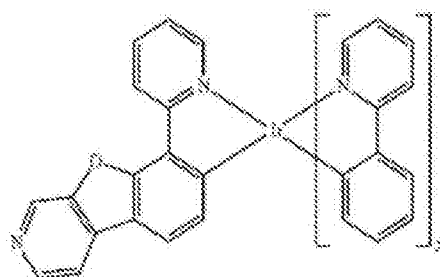
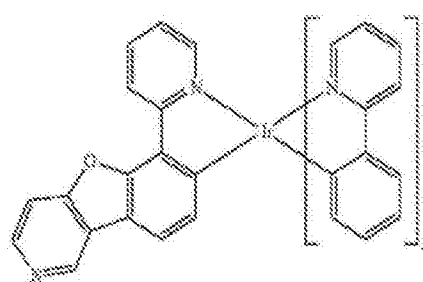
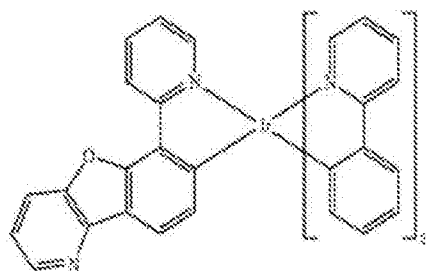
ホスフィノ、及びこれらの組み合わせからなる群から選択され、置換シリルは、炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリルであり、置換カルボニルは、炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたカルボニルである。式 (β) において、 $R^1 \sim R^4$ は、各々独立して、水素、重水素、炭素数 1 ～ 25 のアルキル及びこれらの組み合わせからなる群から選択することが好ましい。 R^2 及び R^3 の少なくともいずれかが炭素数 1 ～ 25 のアルキル基であることが好ましく、当該アルキル基が重水素化されているか、もしくは部分的に重水素化されていることがさらに好ましい。

式 (β) において、 n は 1 ～ 3 の整数であり、1 であることが好ましい。

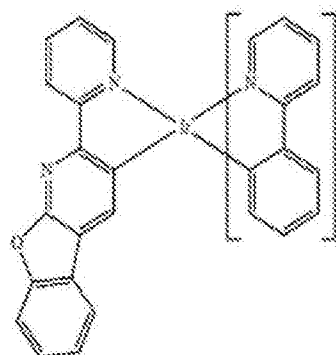
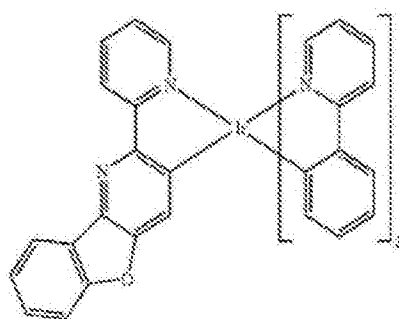
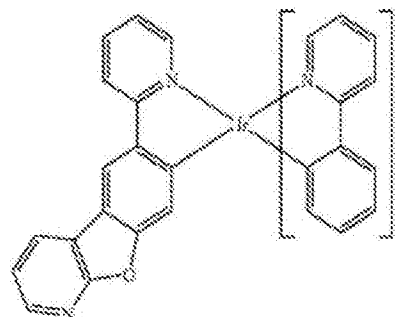
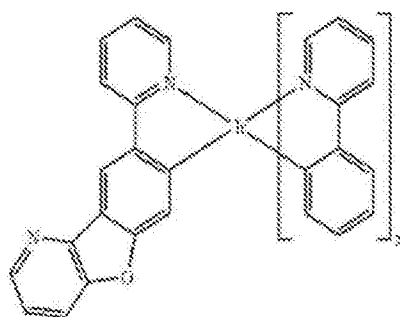
[0172] 式 (β) で表されるイリジウム錯体の具体例を以下に示すが、これらに限定されない。

[0173]

[化52]

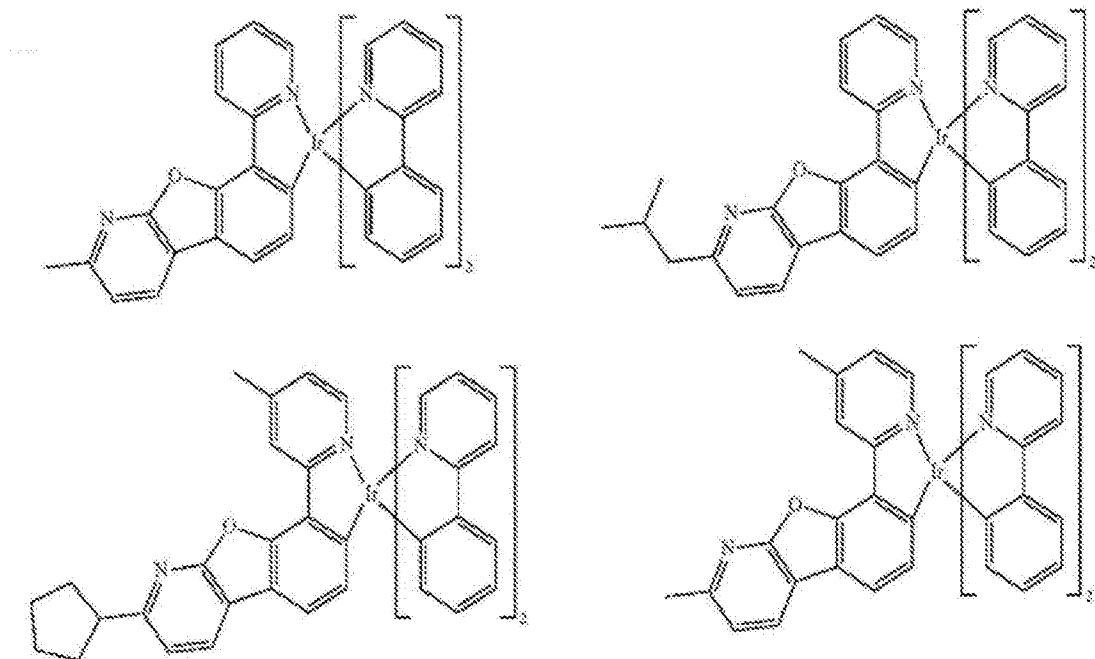


[0174] [化53]

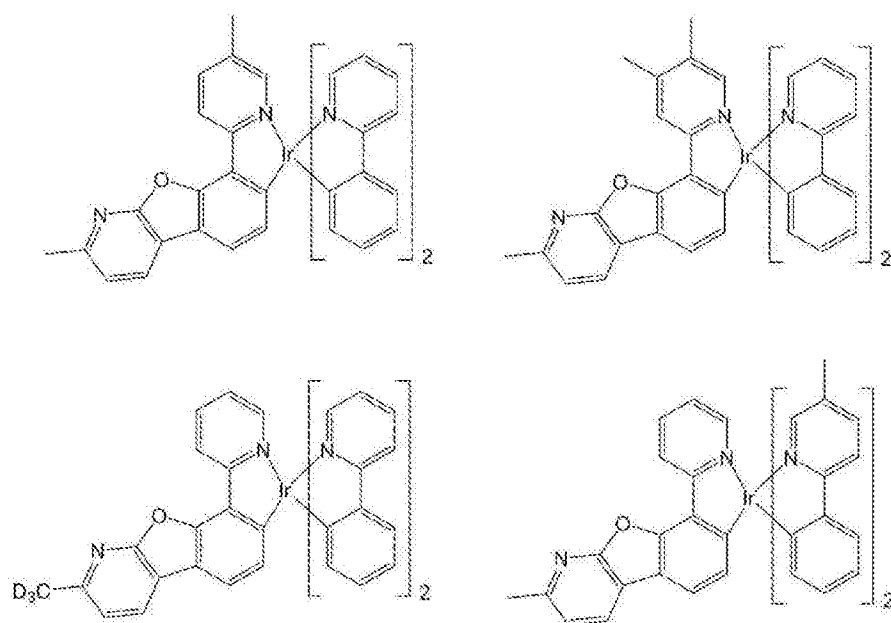


[0175]

[化54]

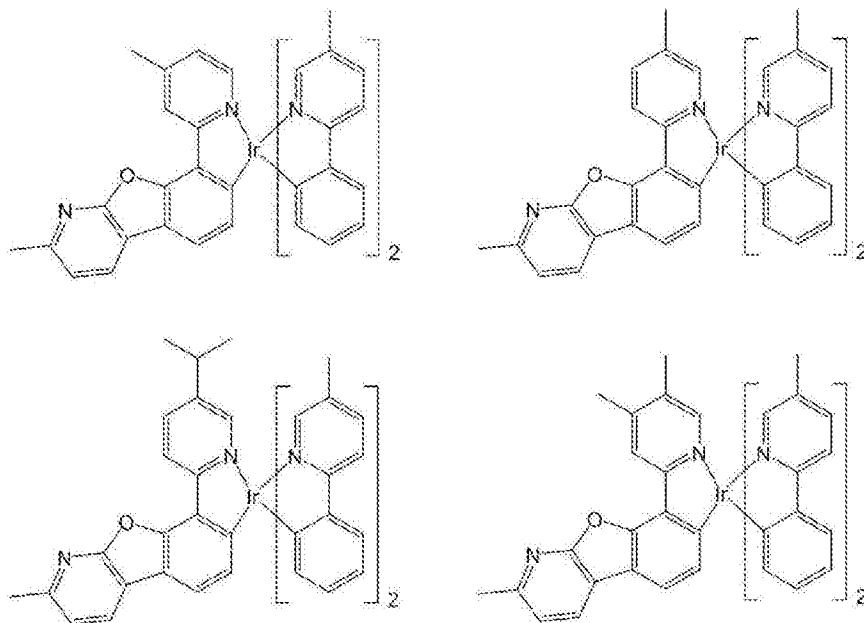


[0176] [化55]

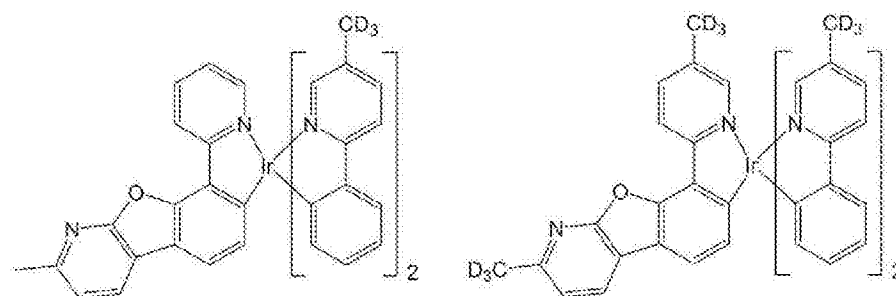


[0177]

[化56]



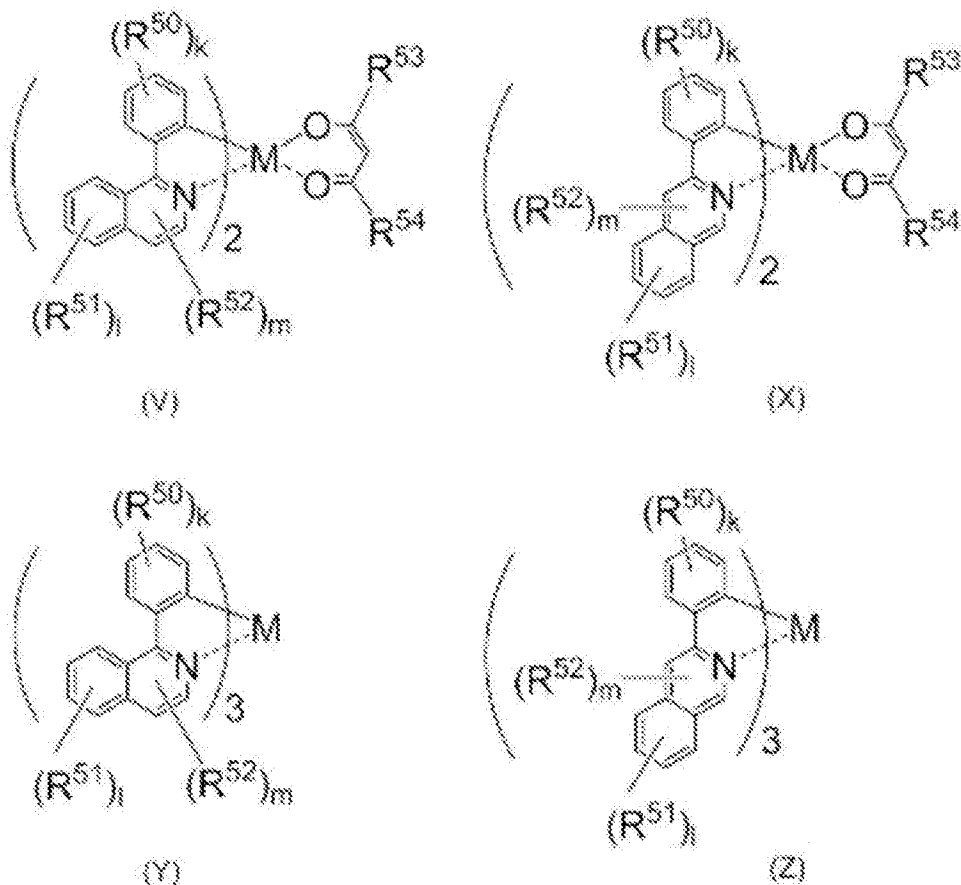
[0178] [化57]



[0179] 式 (α) で表される錯体として、式 (T) 又は (U) で表される錯体以外に、下記式 (V)、(X)、(Y) 又は (Z) で表される錯体を用いることもできる。

[0180]

[化58]



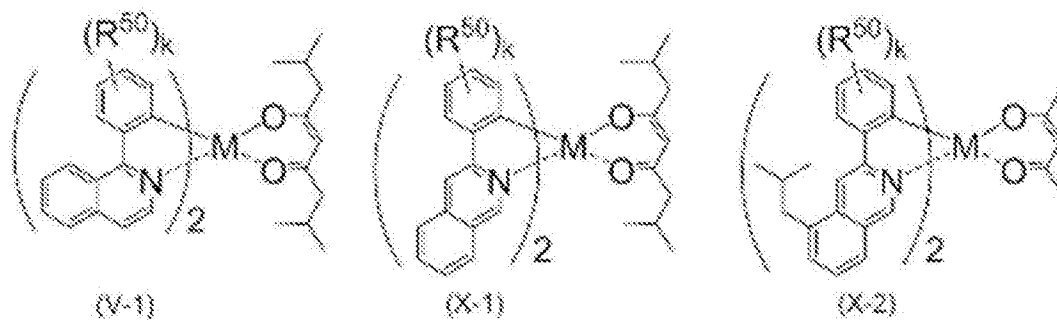
[0181] 式 (V)、(X)、(Y) 又は (Z) において、 $R^{50} \sim R^{54}$ は、各々独立に、水素原子又は置換基であり、 k は 1～4 の整数であり、 l は 1～4 の整数であり、 m は 1～2 の整数である。 M は、 Ir 、 Os 、又は Pt である。

$R^{50} \sim R^{54}$ の示す置換基としては、前述した置換基と同様の置換基が挙げられる。

式 (V) は下記式 (V-1) で表されることが好ましく、式 (X) は下記式 (X-1) 又は式 (X-2) で表されることが好ましい。下記式 (V-1)、(X-1)、及び (X-2) において、 R^{50} 、 k 及び M は、上記の、 R^{50} 、 k 及び M と同じである。

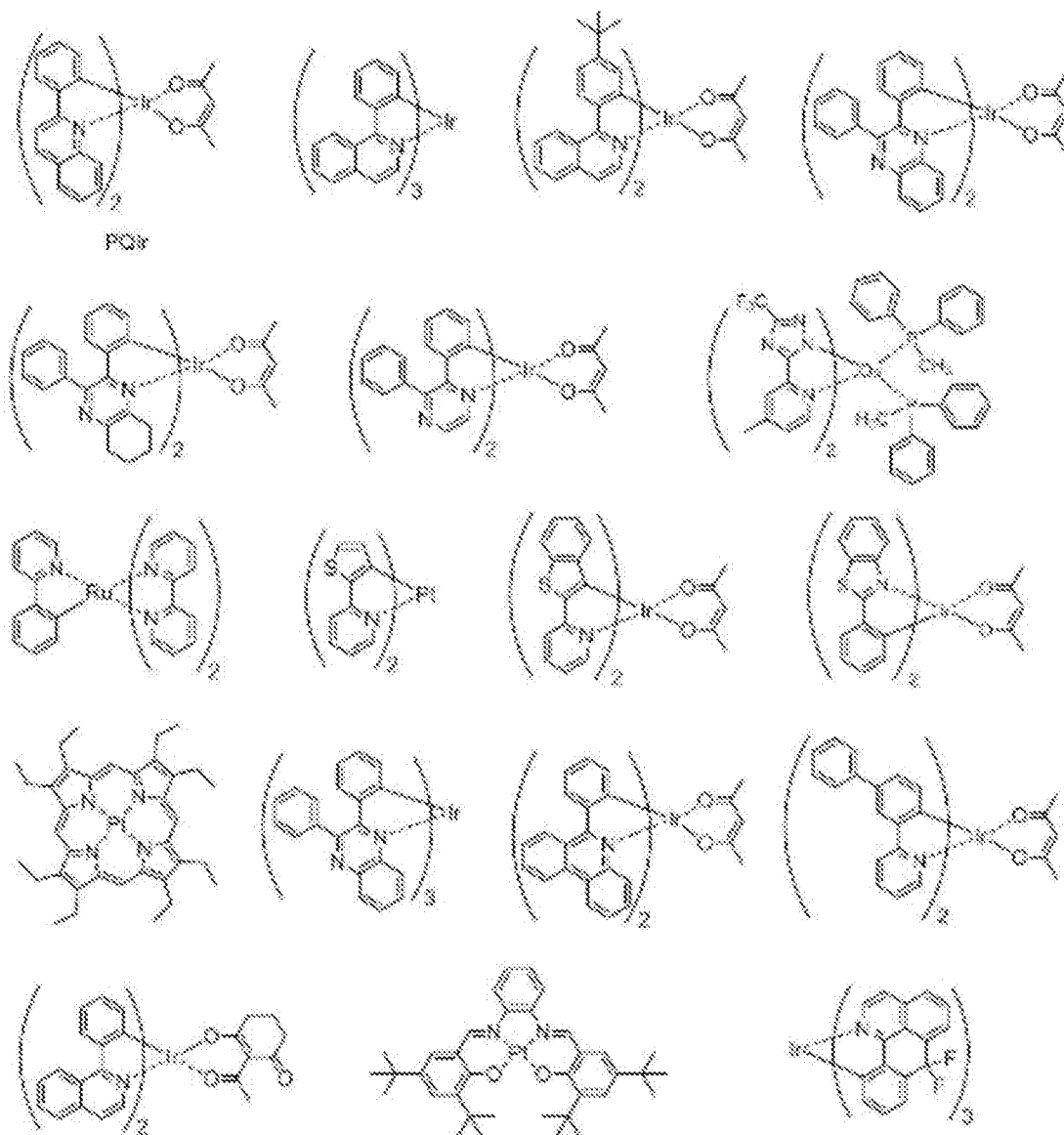
[0182]

[化59]

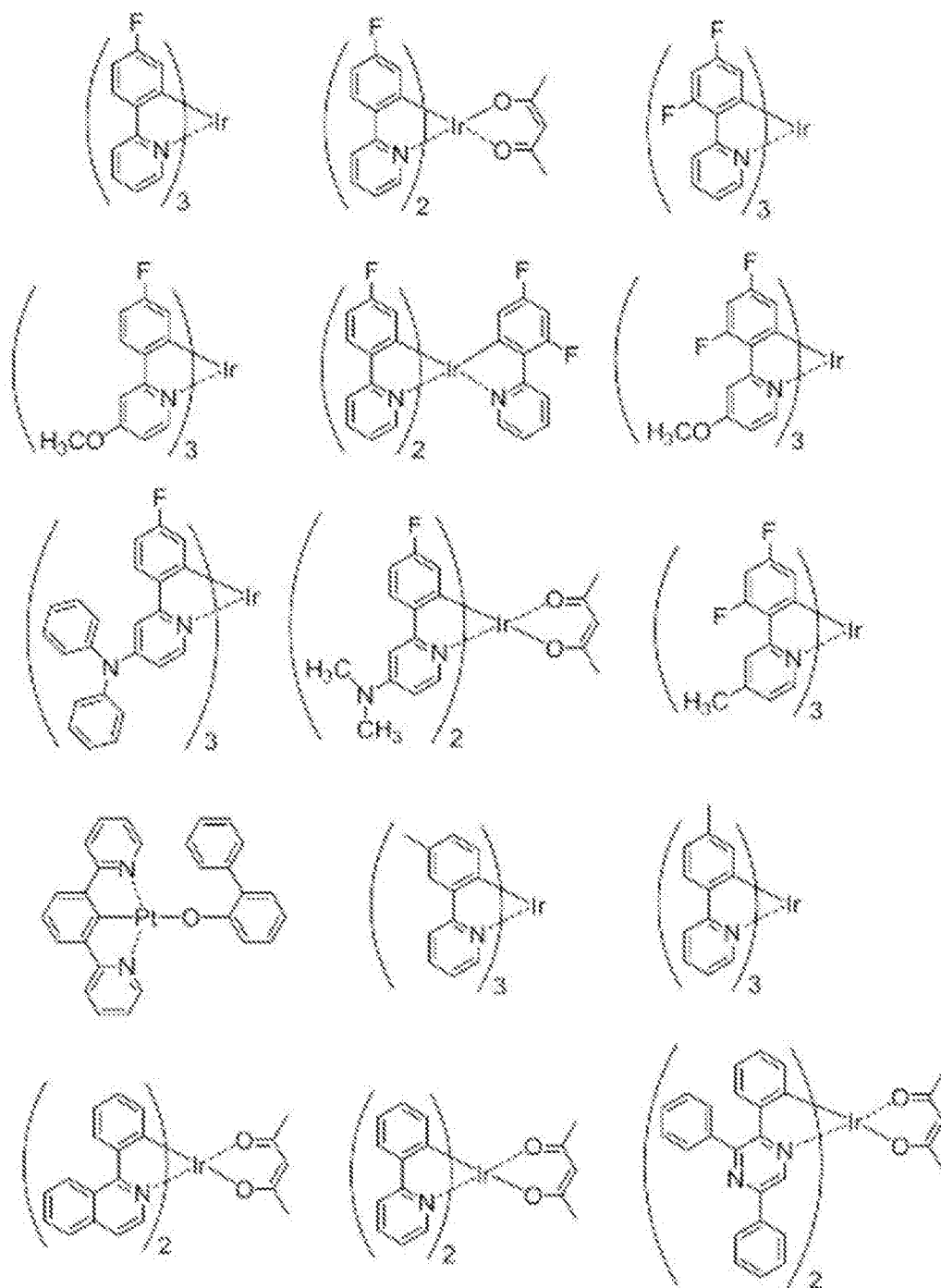


[0183] 式 (V)、(X)、(Y) 又は (Z) で表される錯体の具体例を、以下に示すが、特にこれらに限定されない。

[0184] [化60]

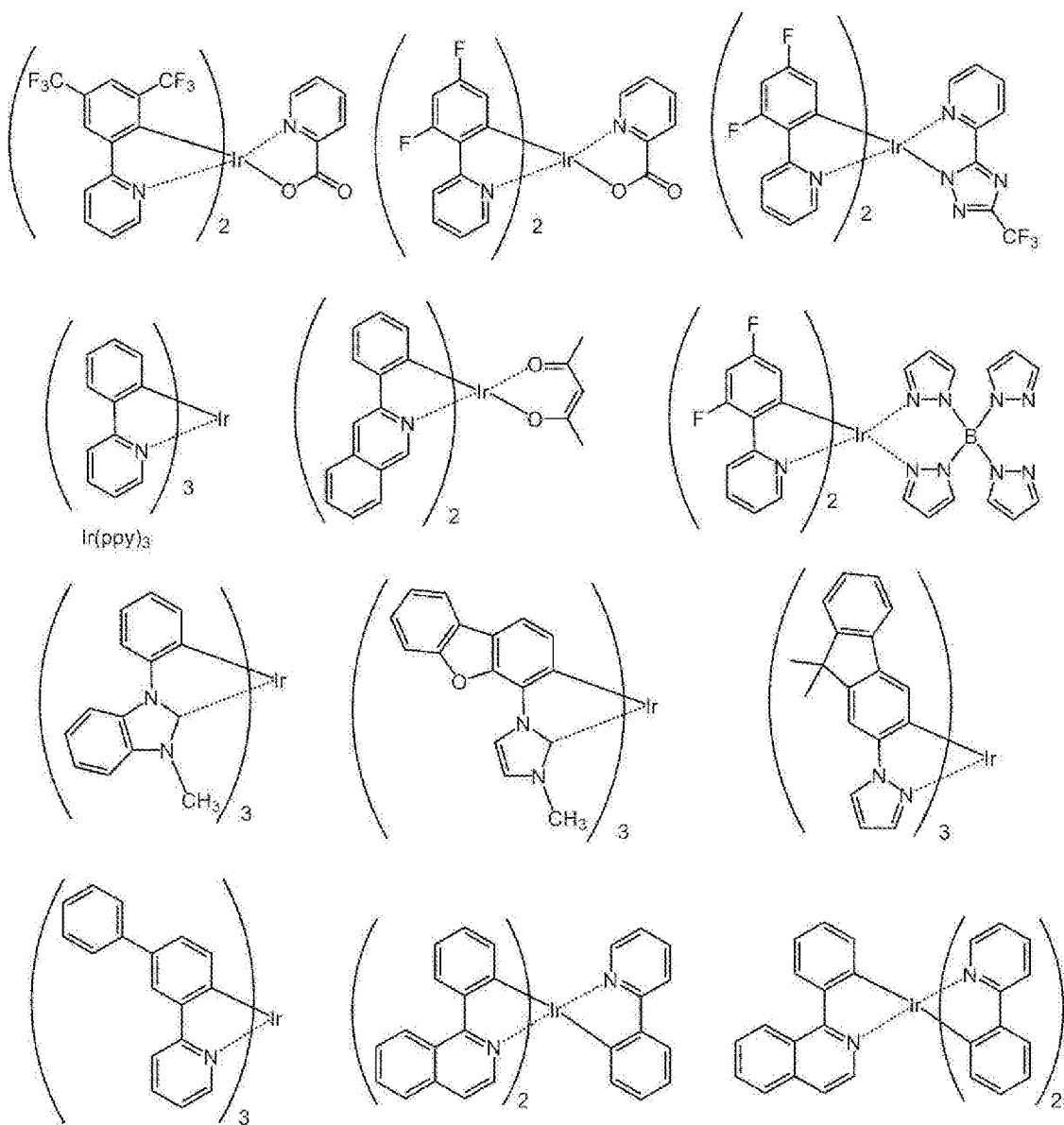


[0185] [化61]



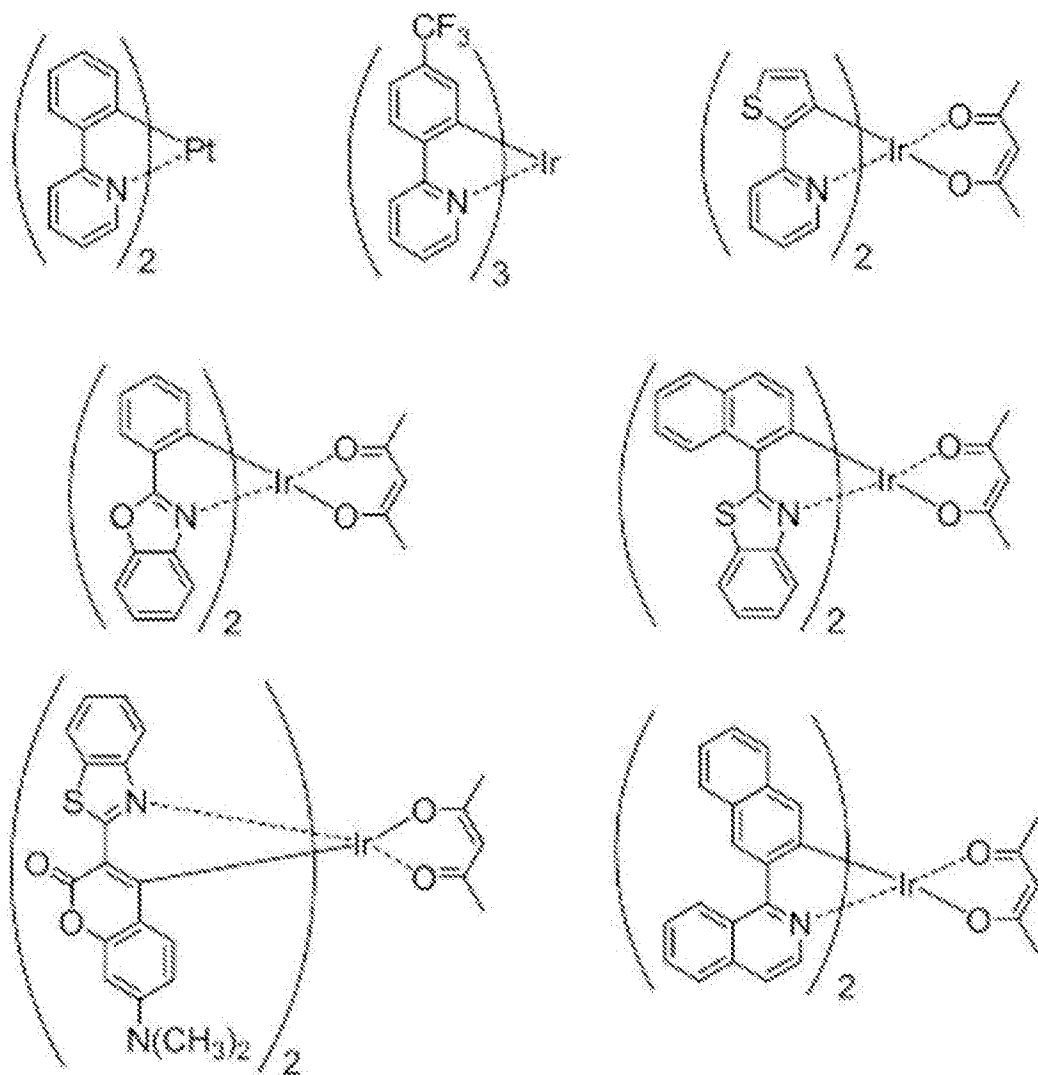
[0186]

[化62]



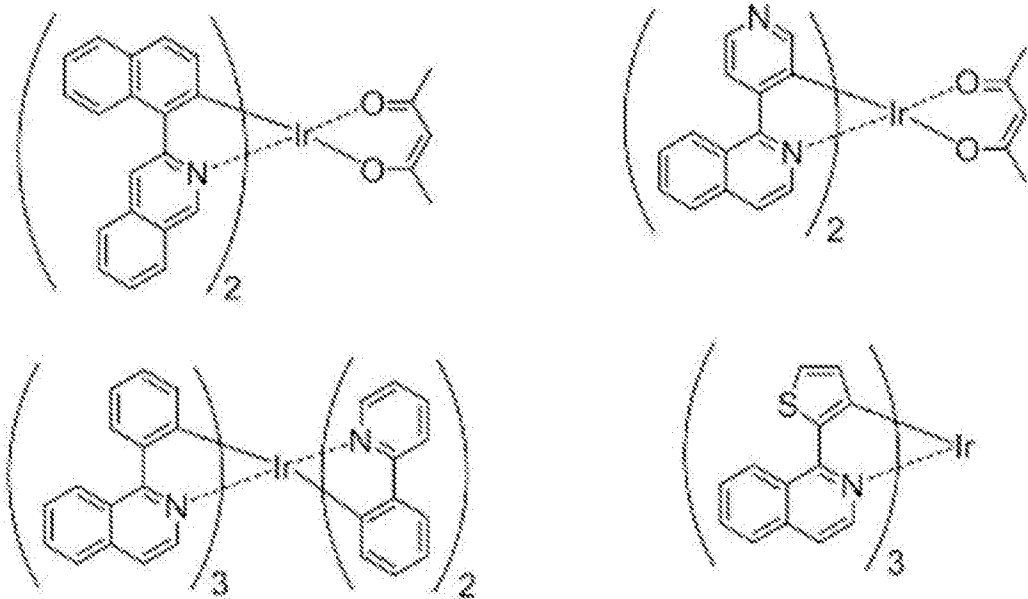
[0187]

[化63]

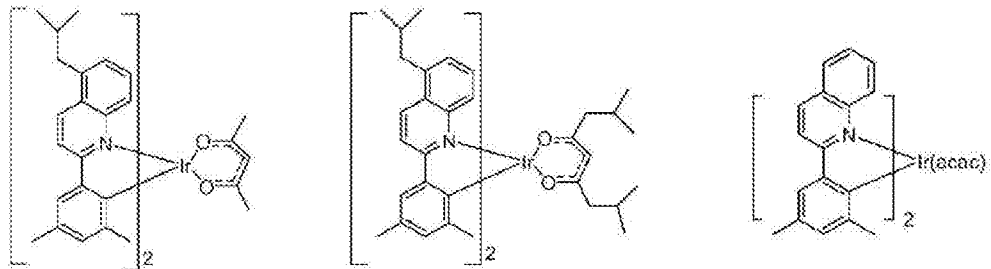


[0188]

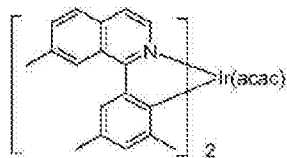
[化64]



[0189] [化65]



[0190] [化66]



[0191] (発光層のホスト材料)

燐光発光層に用いるホスト材料としては、燐光ドーパントよりも高い三重項準位を持つ材料であることが好ましく、一般的な芳香族誘導体、複素環誘導体、及び金属錯体等の燐光ホスト材料を使用することができる。燐光発光層に用いるホスト材料としては、中でも芳香族誘導体、及び複素環誘導体が好ましく、芳香族誘導体としては、例えば、ナフタレン誘導体、トリフェニレン誘導体、フェナントレン誘導体、及びフルオランテン誘導体等が挙げら

れ、複素環誘導体としては、例えば、インドール誘導体、カルバゾール誘導体、ピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、トリアジン誘導体、キノリン誘導体、イソキノリン誘導体、キナゾリン誘導体、ジベンゾフラン誘導体、及びジベンゾチエニル誘導体等が挙げられる。ここで、誘導体とは前述した通りの定義である。

燐光発光層に用いるホスト材料の好ましい一つの形態として、本発明の一実施形態に係る組成物が挙げられる。

[0192] (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。

有機EL素子の性能向上のために、電子輸送層と発光層との間に1つ以上の層を設けることもできる。この層は第2電子輸送層、正孔障壁層、又は三重項ブロック層などと呼ばれる。正孔障壁性を高めるためには、HOMO準位が深い材料を用いることが好ましい。三重項ブロック性を高めるためには、三重項準位が高い材料を用いることが好ましい。

電子輸送層には、アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、及び亜鉛錯体等の金属錯体、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、及びフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、縮合芳香族炭化水素誘導体、並びに高分子化合物を使用することができる。好ましくは、イミダゾール誘導体（例えばベンズイミダゾール誘導体、イミダゾピリジン誘導体、ベンズイミダゾフェナントリジン誘導体）、アジン誘導体（例えば、ピリミジン誘導体、トリアジン誘導体、キノリン誘導体、イソキノリン誘導体、フェナントロリン誘導体が挙げられ、これら複素環はホスフィンオキサイド系の置換基で置換されていてもよい。）、及び芳香族炭化水素誘導体（例えば、アントラセン誘導体、フルオランテン誘導体が挙げられる）である。

電子輸送層、正孔障壁層、又は三重項ブロック層に含まれる材料の好ましい一つの形態として、本発明の一実施形態に係る組成物を用いることができる。

好ましい一つの形態として、電子輸送層は、アルカリ金属（LiやCs等）、アルカリ土類金属（Mg等）、および、これらを含む合金等、アルカリ金属の誘導体（例えば、リチウムキノリネート錯体）、並びにアルカリ土類金属の誘導体からなる群から選択される少なくとも一種を含有していてもよい。電子輸送層がアルカリ金属、アルカリ土類金属およびそれら合金の少なくともいずれかを含有する場合、電子輸送層中の含有比率は、好ましくは0.1～50質量%、より好ましくは0.1～20質量%、更に好ましくは1～10質量%であり、電子輸送層がアルカリ金属の誘導体及びアルカリ土類金属の誘導体の少なくともいずれかを含有する場合、電子輸送層中の含有比率は、好ましくは、1～99質量%、より好ましくは10～90質量%である。

[0193] （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（Li）、フッ化リチウム（LiF）、フッ化セシウム（CsF）、フッ化カルシウム（CaF₂）、リチウム酸化物（LiO_x）等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、又はこれらを含む合金等、アルカリ金属の誘導体（例えば、リチウムキノリネート錯体）、並びにアルカリ土類金属の誘導体を用いることができる。

[0194] （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、及びこれらの混合物等を用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第1族又は第2族に属する元素、即ちリチウム（Li）やセシウム（Cs）等のアルカリ金属、及びマグネシウム（Mg）等のアルカリ土類金属、及びこれらを含む合金（例えば、MgAg、AlLi）等の希土類金属及びこれらを含む合金等が挙げられる。

[0195] 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）、三重水素（tritium）、を包含する。

[0196] 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、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。以下で記載される「環形成炭素数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が6であり、ナフタレン環は環形成炭素数が10であり、ピリジニル基は環形成炭素数が5であり、フラニル基は環形成炭素数が4である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

[0197] 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、環集合）の化合物（例えば単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子や、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。以下で記載される「環形成原子数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ピリジン環は環形成原子数が6であり、キナゾリン環は環形成原子数が10であり、フラン環は環形成原子数が5である。ピリジン環やキナゾリン環の炭素原子にそれぞれ結合している水素原子や置換基を構成する原子については、環形成原子数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の原子数は環形成原子数の数に含めない。

[0198] 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は含めない。

[0199] 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X X～Y Y」は、Z Z基が無置換である場合の原子数を表し、置換されている場合の置換基の原子数は含めない。

[0200] 本明細書において、「置換もしくは無置換の」という場合における「無置換」とは前記置換基で置換されておらず、水素原子が結合していることを意味する。

[0201] 本明細書における式中の各基、及び前記「置換もしくは無置換の」という記載における置換基の具体例について説明する。

[0202] 本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基（第一置換基）としては、環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～25のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、環形成炭素数3～25のシクロアルキル基、炭素数1～25のハロゲン化アルキル基、炭素数3～25のアルキルシリル基、環形成炭素数6～30のアリールシリル基、炭素数1～25のアルコキシ基、環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、環形成原子数5～30のヘテロアリールオキシ基、置換アミノ基、炭素数1～25のアルキルチオ基、環形成炭素数6～30のアリールチオ基、環形成原子数5～30のヘテロアリールチオ基、炭素数7～30のアラルキル基、炭素数5～30のヘテロアリール基が置換されたアルキル基、炭素数2～30のアルケニル基、炭素数2～30のアルキニル基、炭素数6～30のアリール基または原子数5～30の複素環基が置換されたホスホリル基、炭素数6～30のアリール基または原子数5～30の複素環基が置換されたボリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択される少なくとも一種の基が挙げられる。

[0203] 本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基（第一置換基）としては、環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～25のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、炭素数3～25のアルキルシリル基、環形成炭素数6～30のアリールシリル基、及びシアノ基からなる群から選択される少なく

とも一種の基が好ましく、さらには、各置換基の説明において好ましいとした具体的な置換基が好ましい。

[0204] 本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基（第一置換基）は、環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～25のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、炭素数3～25のシクロアルキル基、炭素数3～25のアルキルシリル基、環形成炭素数6～30のアリールシリル基、炭素数1～25のアルコキシ基、環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、置換アミノ基、炭素数1～25のアルキルチオ基、環形成炭素数6～30のアリールチオ基、炭素数7～30のアラルキル基、炭素数2～30のアルケニル基、炭素数2～30のアルキニル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択される少なくとも一種の基（第二置換基）によってさらに置換されてもよい。また、これらの置換基は複数が互いに結合して環を形成してもよい。

[0205] 本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基（第一置換基）に、さらに置換する置換基（第二置換基）としては、環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～25のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される少なくとも一種の基であることが好ましく、各置換基の説明において好ましいとした具体的な置換基から選択される少なくとも一種の基であることがさらに好ましい。

[0206] アルキル基の例としては、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基（異性体基を含む）、ヘキシル基（異性体基を含む）、ヘプチル基（異性体基を含む）、オクチル基（異性体基を含む）、ノニル基（異性体基を含む）、デシル基（異性体基を含む）、ウンデシル基（異性体基を含む）、及びドデシル基（異性体基を含む）などが挙げられる。これらの中でも、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、t-ブチル基及びペンチル基（いずれも異性体基を含む）が好ましく、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-ブチル基がより好ましく、メチル基、エチル基、イソプロピル基及びt-ブチル基がさらに好ましい。

[0207] アルキル基の炭素数は、1～25であり、好ましくは1～10である。

[0208] アルキル基がハロゲン原子で置換されたハロゲン化アルキル基としては、例えば、前記炭素数1～25のアルキル基が1以上のハロゲン原子、好ましくはフッ素原子で置換された基が挙げられる。

本明細書における炭素数1～25のハロゲン化アルキル基としては、具体的には、フルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、フルオロエチル基、トリフルオロメチルメチル基、トリフルオロエチル基、及びペンタフルオロエチル基等が挙げられる。

[0209] アルケニル基は、前記アルキル基中に二重結合を有する基であり、アルケニル基の炭素数は、2～25であり、好ましくは2～10である。より好ましくはビニル基である。

[0210] アルキニル基は、前記アルキル基中に三重結合を有する基であり、アルキニル基の炭素数は、2～25であり、好ましくは2～10である。より好ましくはエチニル基である。

[0211] シクロアルキル基の例としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、及びアダマンチル基などが挙げられる。これらの中でも、シクロペンチル基、及びシクロヘキシル基が好ましい。

シクロアルキル基の環形成炭素数は、3～25であり、好ましくは3～10であり、より好ましくは3～8であり、さらに好ましくは3～6である。

[0212] アルコキシ基は、 $-OY^{10}$ で表される基であり、 Y^{10} の例としては、前記アルキル基及び前記シクロアルキル基として挙げた基と同様の基が挙げられる。アルコキシ基の炭素数は、好ましくは1～25であり、より好ましくは

1～10である。

[0213] アルキルチオ基は、 $-SY^{10}$ で表される基であり、 Y^{10} の例としては、前記アルキル基及び前記シクロアルキル基として挙げた基と同様の基が挙げられる。

アルキルチオ基の炭素数は、1～25であり、好ましくは1～10である。

[0214] ハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、及びヨウ素等が挙げられ、好ましくはフッ素原子である。

[0215] アリール基の例としては、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アセナフチレニル基、アントリル基、ベンゾアントリル基、アセアントリル基、フェナントリル基、ベンゾ[c]フェナントリル基、フェナレニル基、フルオレニル基、ピセニル基、ペンタフェニル基、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾ[g]クリセニル基、s-インダセニル基、a-s-インダセニル基、フルオランテニル基、ベンゾ[k]フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ベンゾ[b]トリフェニレニル基及びペリレニル基などが挙げられる。これらの中でも、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、トリフェニレニル基、フルオランテニル基、及びフルオレニル基が好ましく、フェニル基、ビフェニル基、及びターフェニル基がより好ましく、フェニル基がさらに好ましい。

アリール基の環形成炭素数は、6～30であり、好ましくは6～24であり、より好ましくは6～20であり、さらに好ましくは6～18である。

[0216] アリーレン基は、前記アリール基からさらに1つの水素原子又は置換基が除去された2価の基である。

[0217] アラルキル基は、 $-Y^{11}-Y^{20}$ と表される。 Y^{11} の例としては、前記アルキル基及び前記シクロアルキル基として挙げた基からさらに1つの水素原子又は置換基が除去された2価の基（アルキレン基又はシクロアルキレン基）である。 Y^{20} の例としては、前記アリール基が挙げられる。

[0218] アリールオキシ基は、 $-OY^{20}$ と表され、 Y^{20} の例としては前記アリール基として挙げた基と同様の基が挙げられる。

ヘテロアリールオキシ基は、 $-OY^{30}$ と表され、 Y^{30} の例としては前記ヘテロアリール基として挙げた基と同様の基が挙げられる。

[0219] アリールチオ基は、 $-SY^{20}$ と表され、 Y^{20} の例としては前記アリール基として挙げた基と同様の基が挙げられる。

ヘテロアリールチオ基は、 $-SY^{30}$ と表され、 Y^{30} の例としては前記ヘテロアリール基として挙げた基と同様の基が挙げられる。

[0220] アリールカルボニルオキシ基は、 $-O-(C=O)-Y^{20}$ と表され、 Y^{20} の例としては前記アリール基として挙げた基と同様の基が挙げられる。

[0221] アルキル基及びアリール基から選ばれる置換基を有する置換カルボニル基は、 $-(C=O)-Y^{10}$ 又は $-(C=O)-Y^{20}$ と表され、 Y^{10} の例としては、前記アルキル基及び前記シクロアルキル基として挙げた基と同様の基が挙げられ、 Y^{20} の例としては前記アリール基として挙げた基と同様の基が挙げられる。

[0222] 複素環基は、芳香族性を有しない複素環基と、芳香族性を有する芳香族複素環基（1価であればヘテロアリール基、2価であればヘテロアリーレン基という）を含む。

[0223] 芳香族性を有しない複素環基としては、窒素原子、酸素原子もしくは硫黄原子を含む、環形成原子数3～30、好ましくは3～20の複素環基が挙げられる。芳香族性を有しない複素環の具体例としては、アジリジン、オキシラン、チイラン、アゼチジン、オキセタン、トリメチレンスルフィド、ピロリジン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、ピペリジン、テトラヒドロピラン、及びテトラヒドロチオピラン等が挙げられる。

[0224] 複素環基としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、及びリン原子等のヘテロ原子を含む環状基が挙げられ、環形成原子として、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子からなる群から選ばれる原子を含有することが好ましい。複素環基としては、芳香族性を有するヘテロアリール基が好ましい。ヘテロアリ

ール基の例としては、ピロリル基、フリル基、チエニル基、ピリジル基、イミダゾピリジル基、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、イミダゾリル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、ピラゾリル基、イソオキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、イソベンゾチエニル基、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、ベンズイミダゾリル基、ベンズオキサゾリル基、ベンズチアゾリル基、インダゾリル基、ベンズイソキサゾリル基、ベンズイソチアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、9-フェニルカルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基及びキサンテニル基などが挙げられる。これらの中でも、ピリジル基、イミダゾピリジル基、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、ベンズイミダゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、9位にアリール基又は複素環基が置換したカルバゾリル基、フェナントロリニル基、及びキナゾリニル基が好ましい。

[0225] 複素環基の環形成原子数は、3～30であり、好ましくは5～24であり、より好ましくは5～18である。

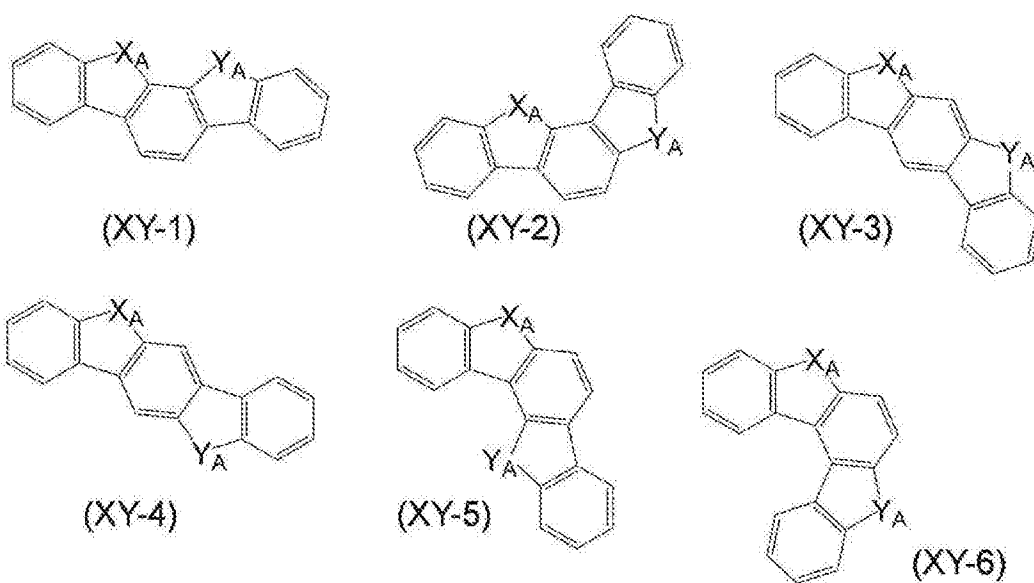
ヘテロアリール基の環形成原子数は、5～30であり、好ましくは5～24であり、より好ましくは5～18である。

ヘテロアリール基の炭素原子以外の環形成原子としては、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子が好ましい。

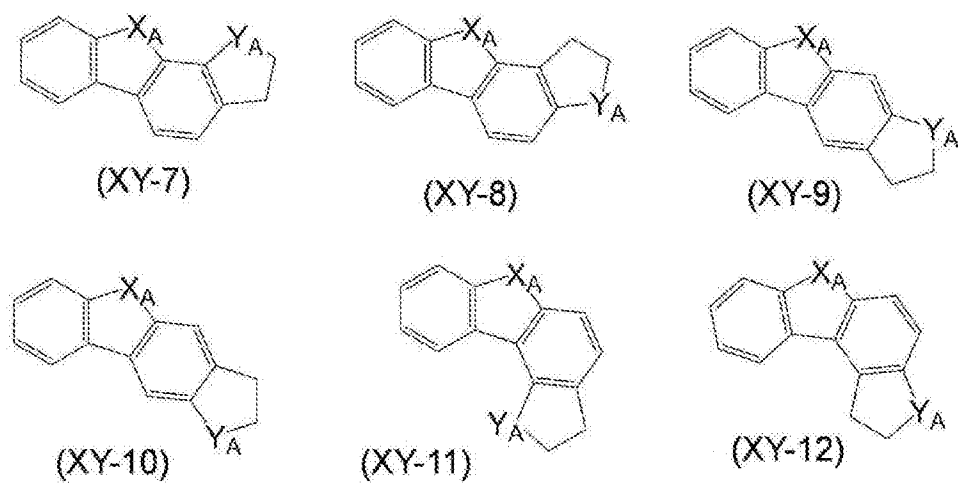
[0226] ヘテロアリーレン基は、前記ヘテロアリール基からさらに1つの水素原子又は置換基が除去された2価の基である。

[0227] また、本明細書において、複素環基は、例えば、下記一般式(XY-1)～(XY-18)で表される部分構造から誘導される基であってもよい。

[0228] [化67]

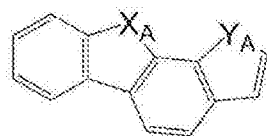


[0229] [化68]

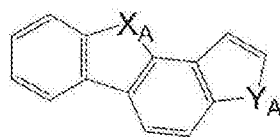


[0230]

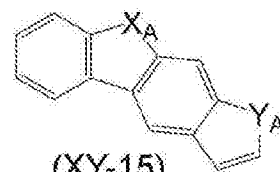
[化69]



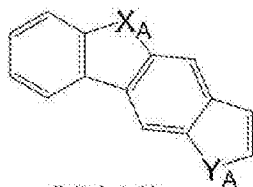
(XY-13)



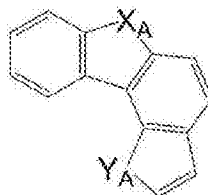
(XY-14)



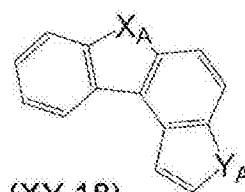
(XY-15)



(XY-16)



(XY-17)



(XY-18)

[0231] 前記一般式 (XY-1) ~ (XY-18) 中、 X_A 及び Y_A は、それぞれ独立に、ヘテロ原子であり、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、ケイ素原子、またはゲルマニウム原子であることが好ましい。前記一般式 (XY-1) ~ (XY-18) で表される部分構造は、任意の位置で結合手を有して複素環基となり、この複素環基は、置換基を有していてもよい。

[0232] アルキル基及びアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換アミノ基は、 $-NH(Y^{10})$ 又は $-NH(Y^{20})$ で表され、 Y^{10} 及び Y^{20} は上記の通りである。

アルキル基及びアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換アミノ基は、 $-N(Y^{10})_2$ 、 $-N(Y^{20})_2$ 又は $-N(Y^{10})(Y^{20})$ で表され、 Y^{10} 及び Y^{20} は上記の通りである。 Y^{10} 又は Y^{20} が2つある場合は、互いに同一であっても、異なってもよい。

[0233] アルキル基及びアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換シリル基は、 $-SiH_2(Y^{10})$ 又は $-SiH_2(Y^{20})$ で表される。

アルキル基及びアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換シリル基は、 $-SiH(Y^{10})_2$ 、 $-SiH(Y^{20})_2$ 又は $-SiH(Y^{10})(Y^{20})$ で表される。

アルキル基及びアリール基から選ばれる置換基を有するトリ置換シリル基

は、 $-\text{Si}(\text{Y}^{10})_3$ 、 $-\text{Si}(\text{Y}^{20})_3$ 、 $-\text{Si}(\text{Y}^{10})_2(\text{Y}^{20})$ 又は $-\text{Si}(\text{Y}^{10})(\text{Y}^{20})_2$ で表される。 Y^{10} 及び Y^{20} は前記の通りであり、 Y^{10} 又は Y^{20} がそれぞれ複数存在する場合は、互いに同一であっても、異なってもよい。

[0234] アルキル基及びアリール基から選ばれる置換基を有する置換スルホニル基は、 $-\text{S}(=\text{O})_2-\text{Y}^{10}$ 又は $-\text{S}(=\text{O})_2-\text{Y}^{20}$ で表され、 Y^{10} 及び Y^{20} は前記の通りである。

[0235] アルキル基及びアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスホリル基は、 $-\text{O}-\text{P}(=\text{O})(\text{Y}^{10})_2$ 、 $-\text{O}-\text{P}(=\text{O})(\text{Y}^{20})_2$ 又は $-\text{O}-\text{P}(=\text{O})(\text{Y}^{10})(\text{Y}^{20})$ で表される。 Y^{10} 及び Y^{20} は前記の通りであり、 Y^{10} 又は Y^{20} がそれぞれ2つ存在する場合は、互いに同一であっても、異なってもよい。

[0236] アルキル基を有するアルキルスルホニルオキシ基は、 $-\text{O}-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Y}^{10})$ で表され、 Y^{10} は前記の通りである。

[0237] アリール基から選ばれる置換基を有するアリールスルホニルオキシ基は、 $-\text{O}-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Y}^{20})$ で表され、 Y^{20} は前記の通りである。

[0238] (電子機器)

本発明の一態様である電子機器は、前記本発明の一態様である有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載している。

本発明の一態様である有機エレクトロルミネッセンス素子は、様々な電子機器に使用できる。例えば本発明の一態様である有機エレクトロルミネッセンス素子は、平面発光体、バックライト、計器類等の光源、表示板、及び標識灯等に利用できる。平面発光体としては、壁掛けテレビのフラットパネルディスプレイ等が挙げられる。バックライトとしては、複写機、プリンター、及び液晶ディスプレイ等のバックライトが挙げられる。

また、本発明の化合物は、有機EL素子だけでなく、電子写真感光体、光電変換素子、太陽電池、イメージセンサー等の分野においても使用できる。

[0239] [実施形態の変形]

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

[0240] 前記実施形態では、発光層に組成物が含まれている態様を例に挙げて説明した。他の態様としては、例えば、発光層以外の有機層のうちの1層に組成物が含まれている態様の有機EL素子が挙げられる。例えば、陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に含まれた発光層と、前記発光層と前記陰極との間に含まれた電子輸送帯域を備え、前記電子輸送帯域は、前記実施形態に係る組成物を含む有機EL素子の態様が例示される。

[0241] 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。

[0242] 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、電子輸送層や正孔輸送層）に移動することを阻止する。

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

[0243] 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。

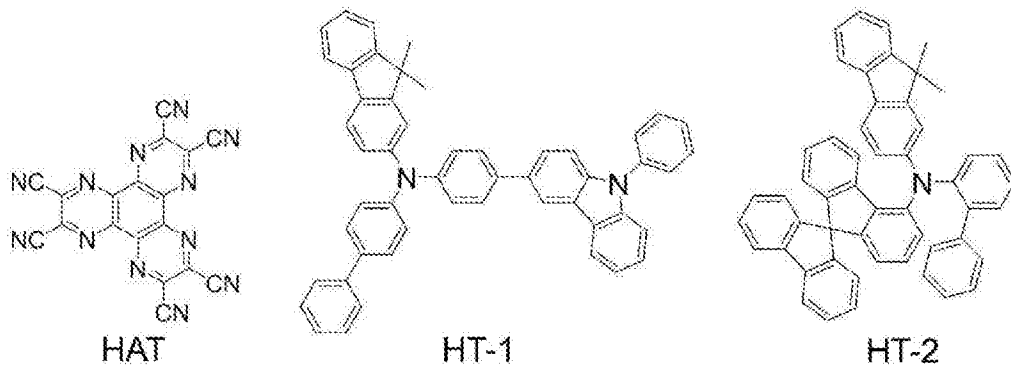
実施例

[0244] 以下、本発明に係る実施例を説明する。本発明はこれらの実施例によって何ら限定されない。

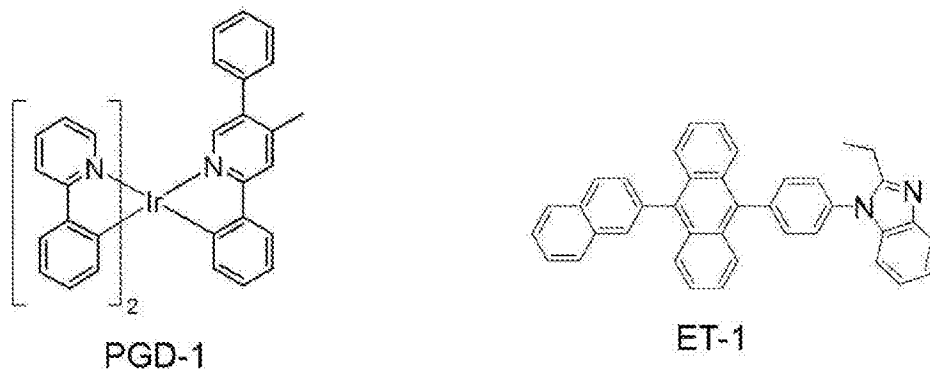
[0245] <化合物>

有機EL素子の製造に用いた化合物を以下に示す。

[0246] [化70]

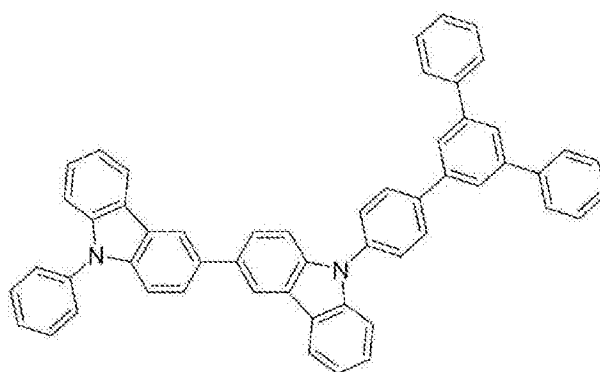


[0247] [化71]



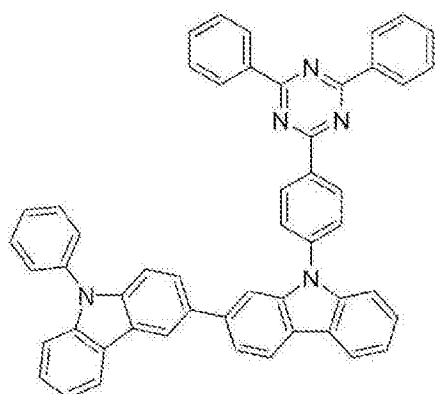
[0248]

[化72]

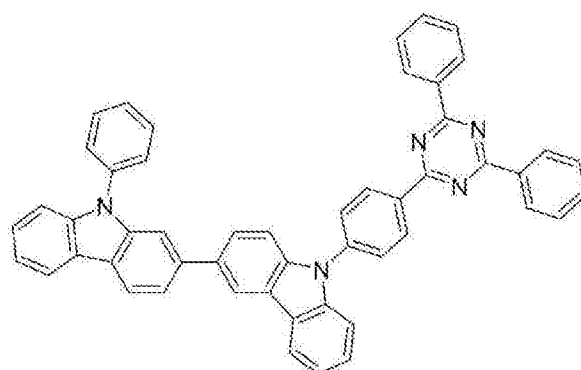


PGH-P1

[0249] [化73]

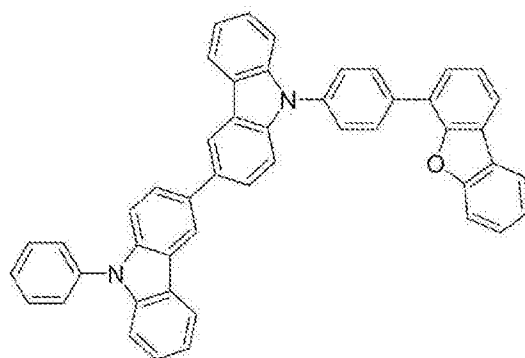


PGH-N1

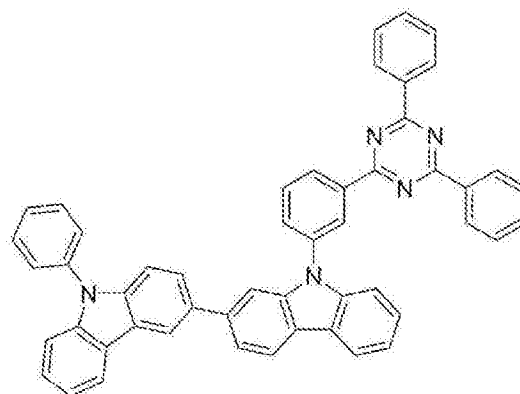


PGH-N2

[0250] [化74]



PGH-C1



PGH-C2

[0251] <有機EL素子の作製>

有機EL素子を以下のように作製した。

[0252] (実施例 1)

化合物 P G H - P 1 を 1. 1 g 測り取り、化合物 P G H - N 1 を 1. 1 g 測り取り、これら 2 つの化合物を乳鉢で混合した。混合後、混合物 2 g を、真空蒸着装置用の石英製のるつぼに充填した。るつぼ中の化合物 P G H - P 1 と化合物 P G H - N 1 との混合物の一部を採取し、採取物をテトラヒドロフランに溶解し、HPLC (High Performance Liquid Chromatography) で検出された各成分のピーク面積値から化合物 P G H - P 1 と化合物 P G H - N 1 との比率を測定したところ、質量比 (初期比率) は、化合物 P G H - P 1 : 化合物 P G H - N 1 = 5 : 5 であった。

この化合物 P G H - P 1 と化合物 P G H - N 1 との混合物を充填したるつぼ、化合物 H A T を充填したるつぼ、化合物 H T - 1 を充填したるつぼ、化合物 H T - 2 を充填したるつぼ、化合物 P G D - 1 を充填したるつぼ、化合物 E T - 1 を充填したるつぼ、並びに 8 - キノリノラトリチウム (L i q) を充填したるつぼを真空蒸着装置にセットした。

[0253] 25 mm × 75 mm × 1. 1 mm 厚の I T O 透明電極 (陽極) 付きガラス基板 (ジオマテック社製) をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を 5 分間行なった後、UV オゾン洗浄を 30 分間行なった。I T O の膜厚は、130 nm とした。洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、一方をマスクで保護した後、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして化合物 H A T を蒸着して膜厚 10 nm の H A T 膜を成膜し、正孔注入層を形成した。

次に、この正孔注入層の上に、化合物 H T - 1 を蒸着して膜厚 110 nm の H T - 1 膜を成膜し、第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層の上に、化合物 H T - 2 を蒸着して膜厚 35 nm の H T - 2 膜を成膜し、第二正孔輸送層を形成した。

次に、この第二正孔輸送層の上に、化合物 P G H - P 1 と化合物 P G H - N 1 との混合物、及び化合物 P G D - 1 を共蒸着により成膜し、膜厚 40 nm

mの発光層を形成した。発光層に含まれる化合物PGD-1の濃度は、5質量%とした。

この発光層の成膜に続けて、化合物ET-1と8-キノリノラトリチウム(Liq)とを50:50の質量比で共蒸着により成膜し、膜厚30nmの電子輸送層を形成した。

この電子輸送層上にLiqを蒸着して、膜厚1nmの電子注入層を形成した。

この電子注入層上に金属Alを蒸着して、膜厚80nmの金属陰極を形成した。

このようにして作製した有機EL素子を、蒸着初期の有機EL素子とした。

[0254] 有機EL素子を作製した後、ITO基板をチャンバーの外に退避させ、化合物PGH-P1と化合物PGH-N1との混合物の蒸着を、るつぼ内の材料の質量が0.4g(残量20質量%)になるまで連続して続けた。その後、ITO基板をチャンバーに戻し、既に作製済の有機EL素子部をマスクで保護した後、透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして化合物HATを蒸着して膜厚10nmのHAT膜を成膜し、正孔注入層を形成した。

次に、この正孔注入層の上に、化合物HT-1を蒸着して膜厚110nmのHT-1膜を成膜し、第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層の上に、化合物HT-2を蒸着して膜厚35nmのHT-2膜を成膜し、第二正孔輸送層を形成した。

次に、この第二正孔輸送層の上に、化合物PGH-P1と化合物PGH-N1との混合物、及び化合物PGD-1を共蒸着により成膜し、膜厚40nmの発光層を形成した。発光層に含まれる化合物PGD-1の濃度は、5質量%とした。

この発光層の成膜に続けて、化合物ET-1と8-キノリノラトリチウム(Liq)とを50:50の質量比で共蒸着により成膜し、膜厚30nmの

電子輸送層を形成した。

この電子輸送層上にLiqを蒸着して、膜厚1nmの電子注入層を形成した。

この電子注入層上に金属Alを蒸着して、膜厚80nmの金属陰極を形成した。

このようにして作製した有機EL素子を、蒸着終期の有機EL素子とした。

最後に蒸着装置からるつぼ残渣を取り出し、るつぼ残渣をテトラヒドロフランに溶解し、HPLCで検出された各成分のピーク面積値から化合物PGH-P1と化合物PGH-N1との比率（残渣比率）を求めた。

[0255] 表1に、初期（蒸着前）のるつぼ中の化合物PGH-P1と化合物PGH-N1との比率（初期比率）、及び蒸着後のるつぼ中の化合物PGH-P1と化合物PGH-N1との比率（残渣比率）を示す。

[0256] （実施例2）

実施例2は、実施例1の発光層における化合物PGH-N1に代えて、化合物PGH-N2を用いたこと以外、実施例1と同様にして実施した。

表1に、初期（蒸着前）のるつぼ中の化合物PGH-P1と化合物PGH-N2との比率（初期比率）、及び蒸着後のるつぼ中の化合物PGH-P1と化合物PGH-N2との比率（残渣比率）を示す。

[0257] （比較例1）

比較例1は、実施例1の発光層における化合物PGH-P1に代えて、化合物PGH-C1を用い、化合物PGH-N1に代えて、化合物PGH-C2を用いたこと以外、実施例1と同様にして実施した。

表1に、初期（蒸着前）のるつぼ中の化合物PGH-C1と化合物PGH-C2との比率（初期比率）、及び蒸着後のるつぼ中の化合物PGH-C1と化合物PGH-C2との比率（残渣比率）を示す。

[0258]

[表1]

	混合物	るつぼ中の材料比	
		初期比率	残渣比率
実施例1	PGH-P1;PGH-N1	5:5	5:5
実施例2	PGH-P1;PGH-N2	5:5	5:5
比較例1	PGH-C1;PGH-C2	5:5	4:6

[0259] 実施例1に係る蒸着初期の有機EL素子において、発光層中の化合物PGH-P1と化合物PGH-N1との質量比（フィルム比率）をHPLCにて分析したところ、化合物PGH-P1：化合物PGH-N1＝5：5であった。

[0260] 実施例2に係る蒸着初期の有機EL素子において、発光層中の化合物PGH-P1と化合物PGH-N2との質量比（フィルム比率）をHPLCにて分析したところ、化合物PGH-P1：化合物PGH-N2＝5：5であった。

[0261] 比較例1に係る蒸着初期の有機EL素子において、発光層中の化合物PGH-C1と化合物PGH-C2との質量比（フィルム比率）をHPLCにて分析したところ、化合物PGH-C1：化合物PGH-C2＝6：4であった。

[0262] 実施例1の有機EL素子（蒸着初期）に関して、発光層中の化合物PGH-P1と化合物PGH-N1との質量比（フィルム比率）は、初期（蒸着前）のるつぼ中の化合物PGH-P1と化合物PGH-N1との質量比（初期比率）と同様の比率であった。

また、実施例2の有機EL素子（蒸着初期）に関して、発光層中の化合物PGH-P1と化合物PGH-N2との質量比（フィルム比率）は、初期（蒸着前）のるつぼ中の化合物PGH-P1と化合物PGH-N2との質量比（初期比率）と同様の比率であった。

一方で、比較例1の有機EL素子（蒸着初期）に関して、発光層中の化合物PGH-C1と化合物PGH-C2との質量比（フィルム比率）は、初期（蒸着前）のるつぼ中の化合物PGH-C1と化合物PGH-C2との質量比（初期比率）と大きく異なっていた。比較例1では、るつぼ中には化合物

PGH-C1と化合物PGH-C2とが5：5の質量比で混合されていたが、膜中の質量比は6：4であり、発光層中の比率は、材料の仕込み比率と同等に成膜されていないことが分かった。

[0263] <有機EL素子の評価>

実施例1、実施例2及び比較例1において作製した蒸着初期の有機EL素子、及び蒸着終期の有機EL素子について、以下の評価を行った。評価結果を表2に示す。

[0264] ・駆動電圧V

電流密度が10mA/cm²となるようにITO透明電極と金属Al陰極との間に通電したときの電圧（単位：V）を計測した。

[0265] ・外部量子効率EQE

電流密度が10mA/cm²となるように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-1000（コニカミノルタ社製）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なったと仮定し、外部量子効率EQE（単位：%）を算出した。

[0266] [表2]

	混合物	有機EL素子	電圧(V)	EQE(%)
実施例1	PGH-P1:PGH-N1	蒸着初期	4.52	20.0
		蒸着終期	4.53	20.1
実施例2	PGH-P1:PGH-N2	蒸着初期	4.37	19.6
		蒸着終期	4.36	19.5
比較例1	PGH-C1:PGH-C2	蒸着初期	4.63	19.4
		蒸着終期	4.87	18.5

[0267] 実施例1及び実施例2によれば、蒸着初期の有機EL素子及び蒸着終期の有機EL素子に関して、素子性能のばらつきが、比較例1に比べて少ないことが分かった。前記一般式（1）で表される第一の化合物と前記一般式（2）で表される第二の化合物とを含む組成物を用いることで、有機エレクトロルミネッセンス素子の性能を維持しながら、1つの蒸着源から材料の比率を安定的に蒸着させることが可能であることが分かった。

符号の説明

[0268] 1…有機EL素子、3…陽極、4…陰極、5…発光層、7…正孔輸送層、

8…電子輸送層。

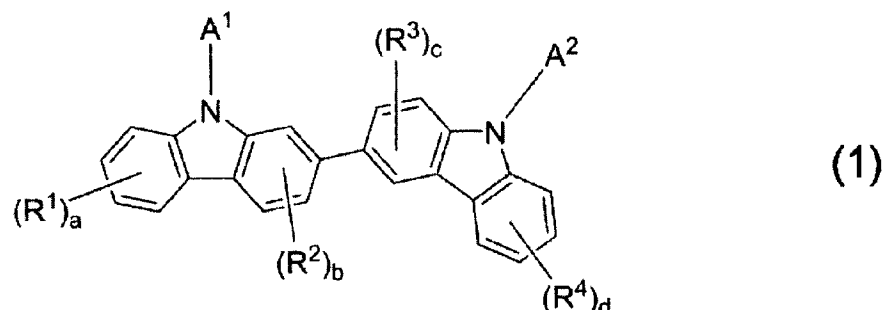
請求の範囲

[請求項1]

2 種以上の化合物が混合された組成物であって、

少なくとも下記一般式（1）で表される第一の化合物及び下記一般式（2）で表される第二の化合物が含有される組成物。

[化1]



（前記一般式（1）中、

R¹、R²、R³及びR⁴は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

a は、0、1、2、3 又は 4 である。

b は、0、1、2 又は 3 である。

c は、0、1、2 又は 3 である。

d は、0、1、2、3 又は 4 である。

a が 2 以上の場合、複数の R¹ は、互いに同一であるか、又は異なる

る。

b が 2 以上の場合、複数の R^2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

c が 2 以上の場合、複数の R^3 は、互いに同一であるか、又は異なる。

d が 2 以上の場合、複数の R^4 は、互いに同一であるか、又は異なる。

A^1 及び A^2 のうち、一方が、下記一般式 (1 a) で表される置換基であり、他方が、下記一般式 (1 b) で表される部分構造を含む置換基である。)

[化2]



(前記一般式 (1 a) 中、 X^1 、 X^2 、 X^3 、 X^4 及び X^5 は、それぞれ独立して、 CR^x 又は窒素原子を示す。 R^x は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基

、

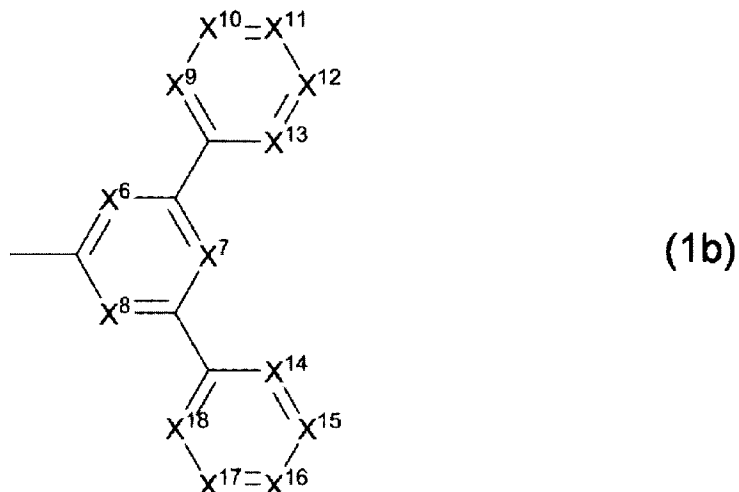
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

複数の R^x は、互いに同一であるか、又は異なる。)

[化3]



(前記一般式 (1 b) 中、 X^6 、 X^7 及び X^8 は、それぞれ独立して、 CR^Y 又は窒素原子を示す。 R^Y は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基

、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

X^6 、 X^7 及び X^8 のうち少なくとも 2 つは窒素原子である。

X^9 、 X^{10} 、 X^{11} 、 X^{12} 、 X^{13} 、 X^{14} 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 及び X^{18} は、それぞれ独立して、 CR^Z 又は窒素原子を示す。 R^Z は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基

、

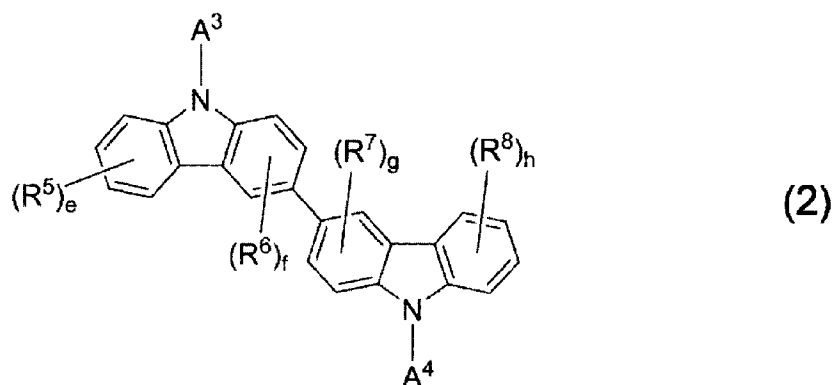
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

複数の R^z は、互いに同一であるか、又は異なる。）

[化4]



(前記一般式 (2) 中、 R^5 、 R^6 、 R^7 及び R^8 は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

e は、0、1、2、3 又は 4 である。

f は、0、1、2 又は 3 である。

g は、0、1、2 又は 3 である。

h は、0、1、2、3 又は 4 である。

e が 2 以上の場合、複数の R^5 は、互いに同一であるか、又は異なる。

f が 2 以上の場合、複数の R^6 は、互いに同一であるか、又は異なる。

g が 2 以上の場合、複数の R^7 は、互いに同一であるか、又は異なる。

h が 2 以上の場合、複数の R^8 は、互いに同一であるか、又は異なる。

A^3 及び A^4 のうち、一方が、下記一般式 (2 a) で表される置換基であり、他方が、下記一般式 (2 b) で表される置換基である。)
 [化5]



(前記一般式 (2 a) 中、 R^9 は、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、

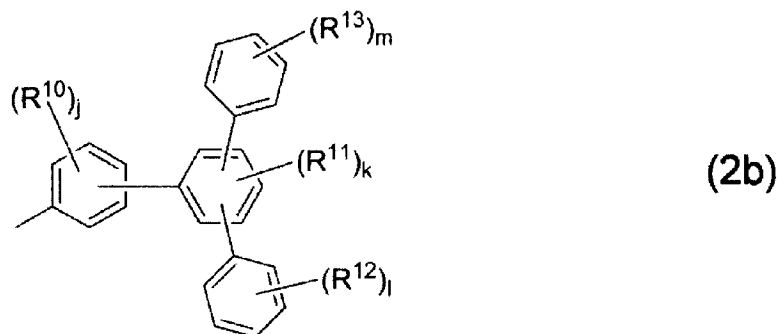
置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

i は 0、1、2、3、4 又は 5 である。)

[化6]



(前記一般式 (2 b) 中、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 及び R^{13} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ～ 30 の複素環基、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

j は、0、1、2、3 又は 4 である。

k は、0、1、2 又は 3 である。

l は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

m は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

j が 2 以上の場合、複数の R^{10} は、互いに同一であるか、又は異なる。

k が 2 以上の場合、複数の R^{11} は、互いに同一であるか、又は異なる。

l が 2 以上の場合、複数の R^{12} は、互いに同一であるか、又は異なる。

なる。

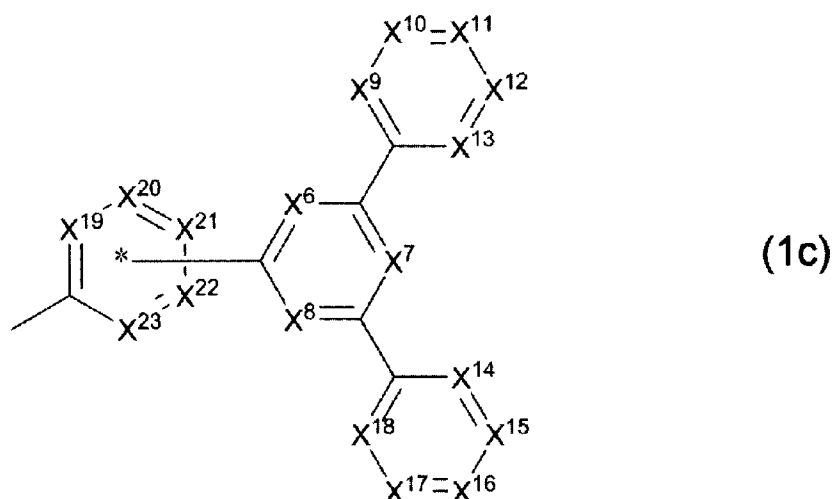
mが2以上の場合、複数の R^{13} は、互いに同一であるか、又は異なる。))

[請求項2]

請求項1に記載の組成物において、

前記一般式(1)中、 A^1 及び A^2 のうち、一方が、前記一般式(1a)で表される置換基であり、他方が、下記一般式(1c)で表される置換基である、組成物。

[化7]



(前記一般式(1c)中、 X^6 、 X^7 及び X^8 は、それぞれ独立して、 CR^Y 又は窒素原子を示す。 R^Y は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基

、

炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

X^6 、 X^7 及び X^8 のうち少なくとも2つは窒素原子である。

X^9 、 X^{10} 、 X^{11} 、 X^{12} 、 X^{13} 、 X^{14} 、 X^{15} 、 X^{16} 、 X^{17} 、 X^{18}

、 X^{19} 、 X^{20} 、 X^{21} 、 X^{22} 及び X^{23} は、それぞれ独立して、 CR^Z 又は窒素原子を示す。 R^Z は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基

、

炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

複数の R^Z は、互いに同一であるか、又は異なる。

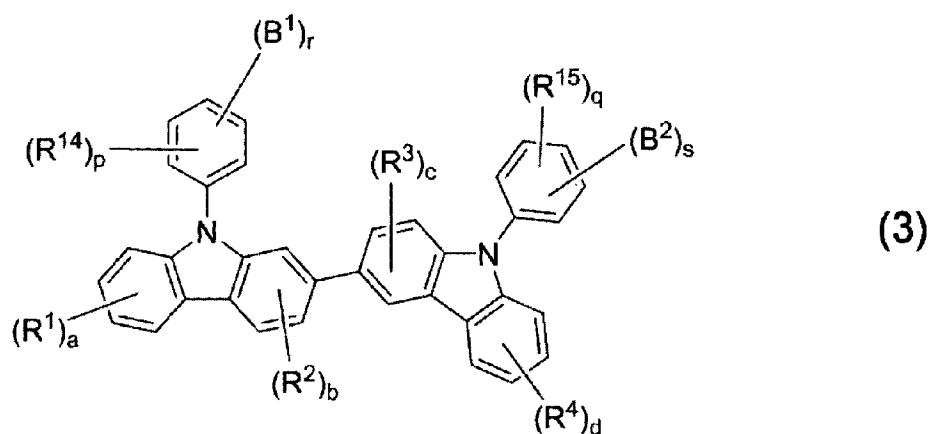
X^{19} 、 X^{20} 、 X^{21} 、 X^{22} 及び X^{23} の少なくとも1つは CR^Z であり、少なくとも1つの R^Z は、*と結合する単結合である。)

[請求項3]

請求項1又は請求項2に記載の組成物において、

前記第一の化合物が、下記一般式(3)で表される化合物である、組成物。

[化8]



(前記一般式(3)中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^{14} 及び R^{15} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基

、

炭素数1～25のアルキル基で置換されたシリル基、又は
シアノ基を示す。

aは、0、1、2、3又は4である。

bは、0、1、2又は3である。

cは、0、1、2又は3である。

dは、0、1、2、3又は4である。

pは、0、1、2、3、4又は5である。

qは、0、1、2、3、4又は5である。

aが2以上の場合、複数の R^1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

bが2以上の場合、複数の R^2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

cが2以上の場合、複数の R^3 は、互いに同一であるか、又は異なる。

dが2以上の場合、複数の R^4 は、互いに同一であるか、又は異なる。

pが2以上の場合、複数の R^{14} は、互いに同一であるか、又は異なる。

qが2以上の場合、複数の R^{15} は、互いに同一であるか、又は異なる。

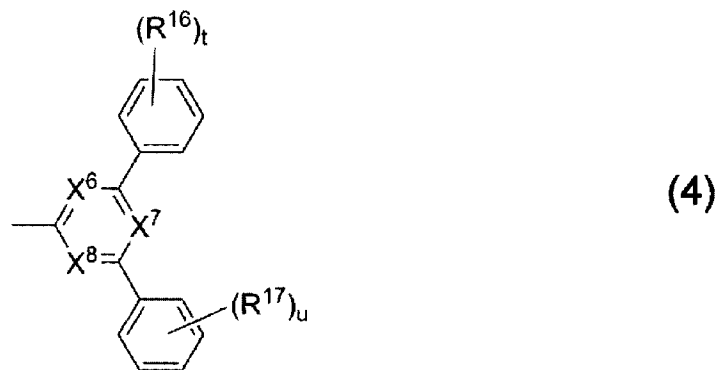
B^1 及び B^2 は、下記一般式(4)で表される置換基を示す。

rは、0又は1である。

sは、0又は1である。

ただし、 $r + s = 1$ である。)

[化9]



(前記一般式 (4) 中、

X^6 、 X^7 及び X^8 は、それぞれ独立して、 CR^Y 又は窒素原子を示す。 R^Y は、

水素原子、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基

、

炭素数 1 ～ 25 のアルキル基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

X^6 、 X^7 及び X^8 のうち少なくとも 2 つは窒素原子である。

R^{16} 及び R^{17} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 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 ～ 24 のアリール基、又は

シアノ基を示す。

t は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

u は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

t が 2 以上の場合、複数の R^{16} は、互いに同一であるか、又は異

なる。

u が 2 以上の場合、複数の R^{17} は、互いに同一であるか、又は異なる。))

[請求項4]

請求項 3 に記載の組成物において、

前記一般式 (4) における X^6 、 X^7 及び X^8 が、窒素原子である、組成物。

[請求項5]

請求項 3 又は請求項 4 に記載の組成物において、

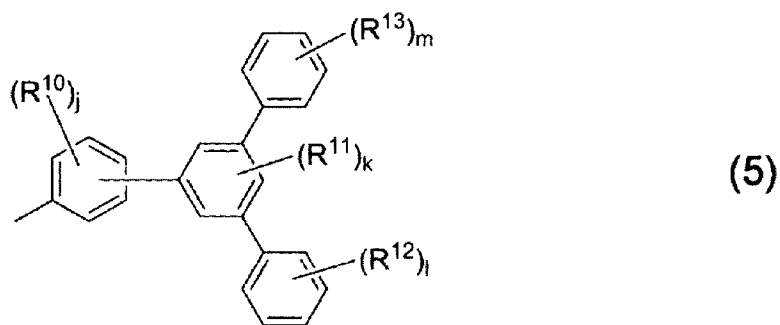
$r = 1$ 、 $s = 0$ である、組成物。

[請求項6]

請求項 1 から請求項 5 のいずれか一項に記載の組成物において、

前記第二の化合物において、 A^3 及び A^4 のうち、一方が、前記一般式 (2 a) で表される置換基であり、他方が、下記一般式 (5) で表される置換基である、組成物。

[化10]



(前記一般式 (5) 中、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 及び R^{13} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 25 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 25 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 ~ 24 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ~ 30 の複素環基、

炭素数 1 ~ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 24 のアリー

ル基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル基、又は

シアノ基を示す。

j は、0、1、2、3 又は 4 である。

k は、0、1、2 又は 3 である。

l は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

m は、0、1、2、3、4 又は 5 である。

j が 2 以上の場合、複数の R^{10} は、互いに同一であるか、又は異なる。

k が 2 以上の場合、複数の R^{11} は、互いに同一であるか、又は異なる。

l が 2 以上の場合、複数の R^{12} は、互いに同一であるか、又は異なる。

m が 2 以上の場合、複数の R^{13} は、互いに同一であるか、又は異なる。))

[請求項7] 請求項 1 から請求項 6 のいずれか一項に記載の組成物において、
a、b、c、d、e、f、g、h、i、j、k、l 及び m が、0 である、組成物。

[請求項8] 請求項 1 から請求項 7 のいずれか一項に記載の組成物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

[請求項9] 請求項 1 から請求項 7 のいずれか一項に記載の組成物を含む、組成物膜。

[請求項10] 陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に含まれた有機層と、
を備え、

前記有機層は、請求項 1 から請求項 7 のいずれか一項に記載の組成物を含む、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項11] 請求項 10 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記有機層は、複数の層で構成され、

前記組成物は、前記複数の層のうちの1層に含まれている、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項12] 請求項10又は請求項11に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記有機層は、発光層を含み、

前記発光層は、前記組成物を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項13] 請求項12に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記発光層が、さらに発光材料を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項14] 請求項13に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記発光層は、前記発光材料として燐光発光材料を含有し、
前記燐光発光材料は、イリジウム、オスミウム、及び白金からなる群から選択されるいずれかの金属原子のオルトメタル化錯体である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項15] 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において、
前記陽極と前記発光層との間に、さらに正孔輸送層を有する、有機エレクトロルミネッセンス素子。

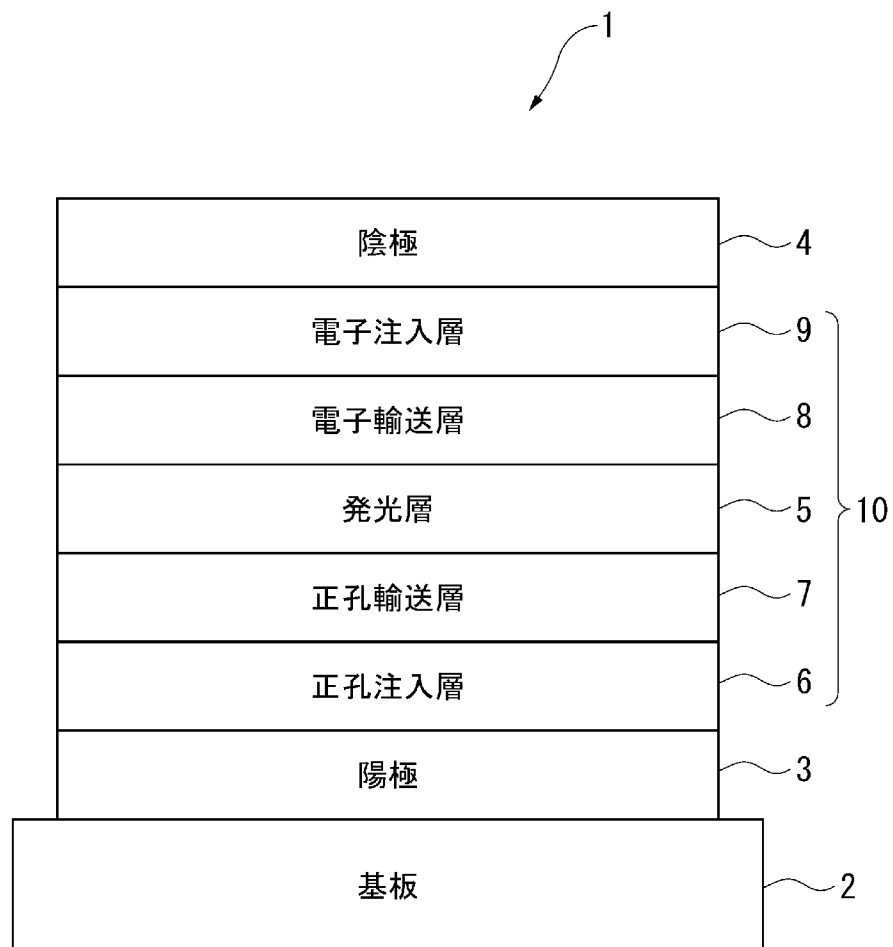
[請求項16] 請求項12から請求項15のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記陰極と前記発光層との間に、さらに電子輸送層を有する、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項17] 陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に含まれた発光層と、
前記発光層と前記陰極との間に含まれた電子輸送帯域を備え、
前記電子輸送帯域は、請求項1から請求項7のいずれか一項に記載の組成物を含む、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項18] 請求項10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を搭載した、電子機器。

[図1]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2018/020142

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int.Cl. C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i, C07D209/86(2006.01)n,
C07D403/14(2006.01)n, C07D405/14(2006.01)n

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)

Int.Cl. C09K11/06, H01L51/50, C07D209/86, C07D403/14, C07D405/14

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	1971-2018
Registered utility model specifications of Japan	1996-2018
Published registered utility model applications of Japan	1994-2018

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

CAPLUS/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2017/0117486 A1 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 27 April 2017, claims, examples, pp. 67-83, paragraph [0299] & KR 10-2017-0049714 A & CN 106611822 A	1-18
A	WO 2014/017484 A1 (TORAY INDUSTRIES, INC.) 30 January 2014 & EP 2879196 A1 & CN 104488105 A & KR 10-2015-0039131 A & TW 201412712 A	1-18



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

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

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

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

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
26 July 2018 (26.07.2018)

Date of mailing of the international search report
07 August 2018 (07.08.2018)

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2018/020142

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2014-157947 A (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 28 August 2014 & US 2014/0231769 A1	1-18
A	JP 2014-110348 A (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 12 June 2014 & US 2015/0303391 A1 & WO 2014/087913 A1	1-18
P, A	US 2017/0194569 A1 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 06 July 2017 & KR 10-2017-0075877 A	1-18

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i, C07D209/86(2006.01)n, C07D403/14(2006.01)n, C07D405/14(2006.01)n

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. C09K11/06, H01L51/50, C07D209/86, C07D403/14, C07D405/14

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	1971-2018年
日本国実用新案登録公報	1996-2018年
日本国登録実用新案公報	1994-2018年

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

CAPLUS/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	US 2017/0117486 A1 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 2017.04.27, Claims, Examples, pp. 67-83, [0299] & KR 10-2017-0049714 A & CN 106611822 A	1-18
A	WO 2014/017484 A1 (東レ株式会社) 2014.01.30, & EP 2879196 A1 & CN 104488105 A & KR 10-2015-0039131 A & TW 201412712 A	1-18

☑ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)

「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

26.07.2018

国際調査報告の発送日

07.08.2018

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/J P)

郵便番号 100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

古妻 泰一

4 V

3408

電話番号 03-3581-1101 内線 3483

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2014-157947 A (出光興産株式会社) 2014.08.28, & US 2014/0231769 A1	1-18
A	JP 2014-110348 A (出光興産株式会社) 2014.06.12, & US 2015/0303391 A1 & WO 2014/087913 A1	1-18
P, A	US 2017/0194569 A1 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 2017.07.06, & KR 10-2017-0075877 A	1-18