

(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
2020年4月30日(30.04.2020)



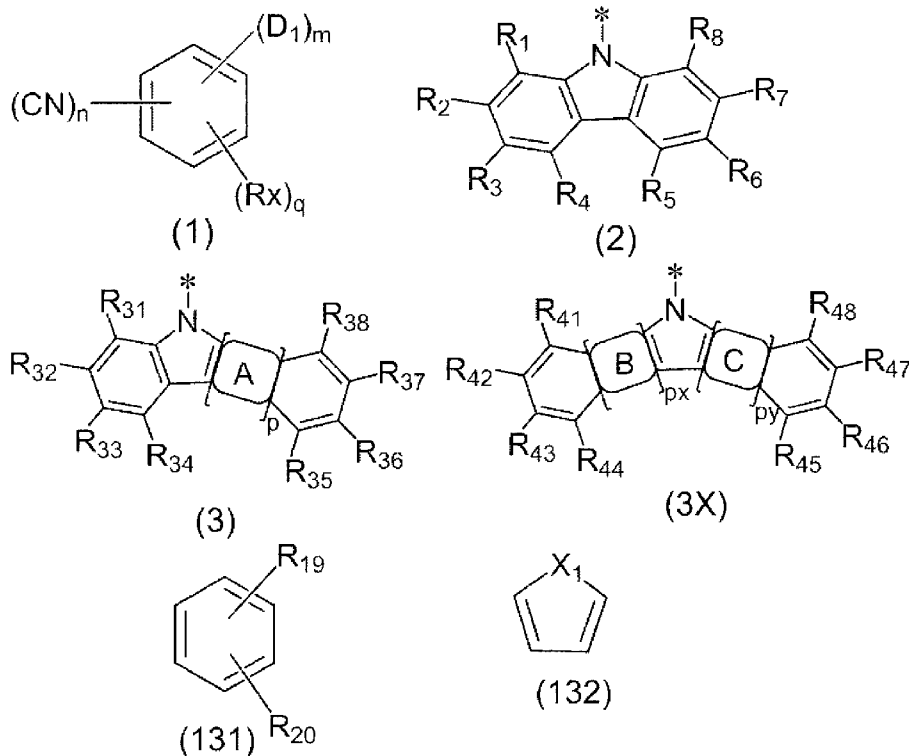
(10) 国際公開番号

WO 2020/085446 A1

- (51) 国際特許分類:
C07D 209/86 (2006.01) C07D 495/04 (2006.01)
C07D 487/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 491/147 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2019/041761
- (22) 国際出願日: 2019年10月24日(24.10.2019)
- (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 2018-201078 2018年10月25日(25.10.2018) JP
特願 2019-062836 2019年3月28日(28.03.2019) 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: 安川 圭一 (YASUKAWA Keiichi); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 澤野 将太 (SAWANO Shota); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 中野 裕美 (NAKANO Hiromi); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 塩見 拓史 (SHIOMI Takushi); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).
- (74) 代理人: 特許業務法人樹之下知的財産事務所 (KINOSHITA & ASSOCIATES); 〒1670051 東

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

(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、および電子機器



(57) Abstract: A compound represented by formula (1). In formula (1), n is 2-4, m is 1-4, q is 0-3, and m+n+q=6; CN is a cyano group; D₁ is a group represented by formula (2), (3), or (3X), and when two or more D₁'s are present, then the D₁'s are the same; and R_x represents a hydrogen atom, a substituent, etc. In formula (2), R₁ to R₈ are



京都杉並区荻窪五丁目26番13号3階Tokyo (JP).

- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, 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))

each independently a hydrogen atom, a substituent, etc. In formulae (3) and (3X), R₃₁ to R₃₈ and R₄₁ to R₄₈ are each independently a hydrogen atom, a substituent, etc.; p, px, and py are each independently 1-4; and A, B, and C each independently represent a ring structure represented by formula (131) or (132). In formula (131), R₁₉ and R₂₀ are each independently a hydrogen atom, a substituent, etc. In formula (132), X₁ is a sulfur atom, etc. Symbol * indicates a site of bonding to a carbon atom of the benzene ring in formula (1).

(57) 要約: 式(1)で表される化合物。式(1)中、nは2~4、mは1~4、qは0~3、m+n+q=6、CNはシアノ基、D₁は式(2)、(3)又は(3X)で表される基であり、D₁が複数ある場合、複数のD₁は同一であり、R_xは、水素原子又は置換基等であり、式(2)中、R₁~R₈は、各々独立に、水素原子又は置換基等であり、式(3)及び(3X)中、R₃₁~R₃₈及びR₄₁~R₄₈は、各々独立に、水素原子又は置換基等であり、p、px及びpyは、各々独立に、1~4であり、A、B及びCは、各々独立に、式(131)又は式(132)で表される環構造を示し、式(131)中、R₁₉及びR₂₀は、各々独立に、水素原子又は置換基等であり、式(132)中、X₁は、硫黄原子等であり、*は、式(1)中、ベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

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、および電子機器

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、およ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。そのため、有機EL素子の性能を向上するための検討が行われている。

[0003] また、一重項励起子に加えて三重項励起子を利用し、有機EL素子をさらに効率的に発光させることが期待されている。このような背景から、熱活性化遅延蛍光（以下、単に「遅延蛍光」という場合がある。）を利用した高効率の蛍光型の有機EL素子が提案され、研究がなされている。

例えば、TADF (Thermally Activated Delayed Fluorescence、熱活性化遅延蛍光) 機構 (メカニズム) が研究されている。このTADF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。熱活性化遅延蛍光については、例えば、『安達千波矢編、「有機半導体のデバイス物性」、講談社、2012年4月1日発行、261-268ページ』に記載されている。

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。

例えば、特許文献1、2には、ベンゼン環に、縮合カルbazolil基と、シアノ基とが結合した化合物などが開示されている。

特許文献3には、発光特性を有する化合物として、 $(A)_m-L-(D)_n$ で表される化合物が開示されている。当該化合物において、Lは、 $m+n$ 価の芳香族連結基であり、Aはハメットの σ_p 値が正の基またはフェニル基であり、Dはハメットの σ_p 値が負の基（ただしフェニル基は除く）であり、 m は1以上の整数であり、 n は2以上の整数である。特許文献3には、この化合物の例示として、ベンゼン環に、縮合カルbazolil基と、シアノ基とが結合した化合物が開示されている。

先行技術文献

特許文献

- [0004] 特許文献1：国際公開第2014/146752号公報
特許文献2：国際公開第2014/208698号公報
特許文献3：国際公開第2018/155642号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

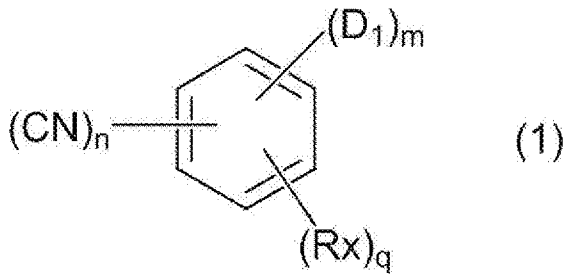
- [0005] 近年においては、有機EL素子に用いることのできる化合物として、より優れた性能を有する化合物が求められている。
- [0006] 本発明の目的は、有機EL素子に用いるために優れた性能を有する化合物、当該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、及び当該化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子、並びに当該有機エレクト

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

[0007] 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。

[0008] [化1]



[0009] 前記一般式（1）において、 n は、2以上4以下の整数であり、 m は、1以上4以下の整数であり、 q は、0以上3以下の整数であり、 $m + n + q = 6$ であり、

CN は、シアノ基であり、

前記 D_1 は、下記一般式（2）、下記一般式（3）又は下記一般式（3X）で表される基であり、 D_1 が複数ある場合、複数の D_1 は互いに同一であり、

Rx は、水素原子もしくは置換基であるか、又は隣接する Rx 同士が互いに結合して環を形成し、 Rx が複数ある場合、複数の Rx は、互いに同一又は異なり、

置換基としての Rx は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

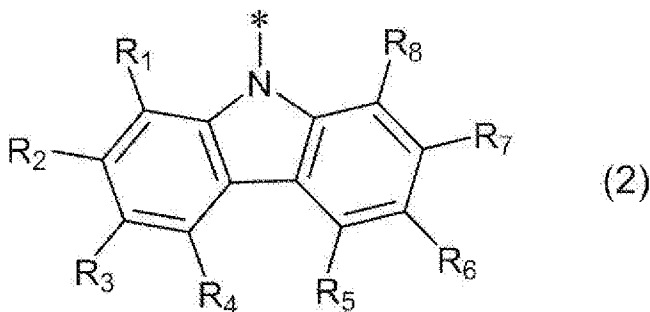
置換もしくは無置換の炭素数3～30のアルキルシリル基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールシリル基であり

R_xが置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基である場合、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基としてのR_xは、ピリジル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリニル基、ナフチリジニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾピリジニル基、ベンズトリアゾリル基、フリル基、チエニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサジアゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ピペリジニル基、ピロリジニル基、ピペラジニル基、モルホリル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、またはフェノキサジニル基であり、

C_N、D₁及びR_xは、それぞれ6員環の炭素原子に結合する。

[0010] [化2]



[0011] 前記一般式(2)において、R₁～R₈は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR₁及びR₂の組、R₂及びR₃の組、R₃及びR₄の組、R₅及びR₆の組、R₆及びR₇の組、並びにR₇及びR₈の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、ただし、R₁及びR₂の組、R₂及びR₃の組、R₃及びR₄の組、R₅及びR₆の組、R₆及びR₇の組、並びにR₇及

び R_8 の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_1 \sim R_8$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、

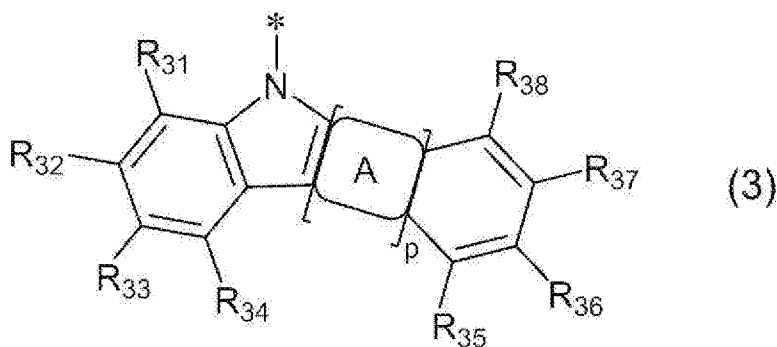
チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基である。

*は、前記一般式 (1) 中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0012] [化3]



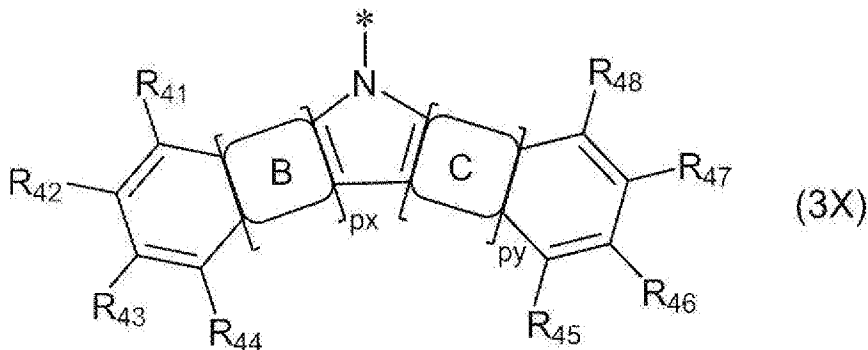
[0013] 前記一般式 (3) において、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子も

しくは置換基であるか、又は R_{31} 及び R_{32} の組、 R_{32} 及び R_{33} の組、 R_{33} 及び R_{34} の組、 R_{35} 及び R_{36} の組、 R_{36} 及び R_{37} の組、並びに R_{37} 及び R_{38} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における置換基としての $R_1 \sim R_8$ と同義であり、

Aは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造を示し、この環構造Aは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、pは、1以上4以下の整数であり、pが2以上の整数の場合、複数の環構造Aは、互いに同一又は異なる。*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0014] [化4]



[0015] 前記一般式(3X)において、 $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

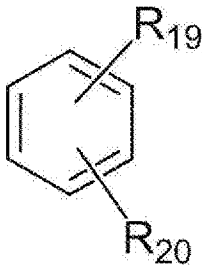
置換基としての $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(3)における置換基としての $R_{31} \sim R_{38}$ と同義であり、

Bは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造を示し、この環構造Bは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、pxは、1以上4以下の整数であり、pxが2以上の整数の場合、複数の環構造Bは、互いに同一又は異なり、

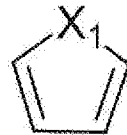
Cは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造

を示し、この環構造Cは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、 p_y は、1以上4以下の整数であり、 p_y が2以上の整数の場合、複数の環構造Cは、互いに同一又は異なる。*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。)

[0016] [化5]



(131)



(132)

[0017] 前記一般式(131)において、 R_{19} 及び R_{20} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、隣接する環構造の一部と互いに結合して環を形成するか、又は R_{19} 及び R_{20} の組が互いに結合して環を形成し、

前記一般式(132)において、 X_1 は、 $CR_{50}R_{51}$ 、 NR_{52} 、硫黄原子、もしくは酸素原子であり、 R_{50} 、 R_{51} 及び R_{52} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{50} 及び R_{51} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての R_{19} 、 R_{20} 、 R_{50} 、 R_{51} 及び R_{52} は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における置換基としての $R_1 \sim R_8$ と同義である。

[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化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料が提供される。

[0019] 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る第一の有機層と、

を有し、

前記第一の有機層は、第一の化合物を含み、

前記第一の化合物は、前述の本発明の一態様に係る化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

[0020] 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。

[0021] 本発明の一態様によれば、有機EL素子に用いるために優れた性能を有する化合物、当該化合物を含む有機EL素子用材料、及び当該化合物を用いた有機EL素子、並びに当該有機EL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

[0022] [図1]本発明の第三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]本発明の第三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第一の化合物、及び第二の化合物のエネルギー準位、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。

[図5]本発明の第四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第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物のエネルギー準位、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。

[図6]本発明の第五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第一の化合物、及び第四の化合物のエネルギー準位、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

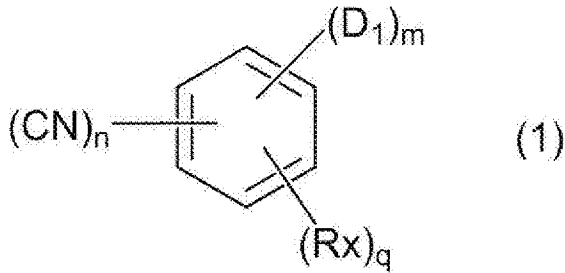
[0023] [第一実施形態]

[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。

[0024]

[化6]



[0025] 前記一般式(1)において、 n は、2以上4以下の整数であり、 m は、1以上4以下の整数であり、 q は、0以上3以下の整数であり、 $m+n+q=6$ であり、

CNは、シアノ基であり、

前記 D_1 は、下記一般式(2)、下記一般式(3)又は下記一般式(3x)で表される基であり、 D_1 が複数ある場合、複数の D_1 は互いに同一であり、

R_x は、水素原子もしくは置換基であるか、又は隣接する R_x 同士が互いに結合して環を形成し、 R_x が複数ある場合、複数の R_x は、互いに同一又は異なり、

置換基としての R_x は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3~30のアルキルシリル基、または

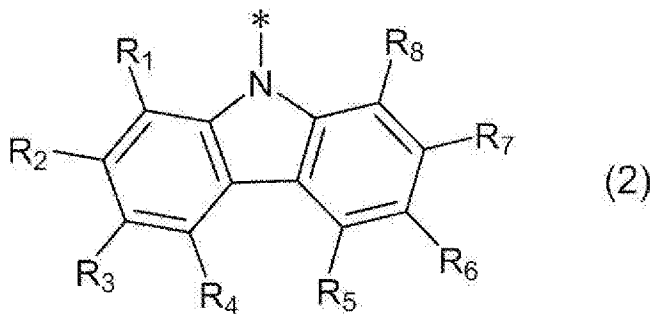
置換もしくは無置換の環形成炭素数6~60のアリールシリル基であり

R_x が置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基である場合、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基としての R_x は、ピリジル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリニル基、ナフチリジニル基、フタラジニル基

、キノキサリニル基、キナゾリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾピリジニル基、ベンズトリアゾリル基、フリル基、チエニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサジアゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ピペリジニル基、ピロリジニル基、ピペラジニル基、モルホリル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、またはフェノキサジニル基であり、

C N、D₁及びR_xは、それぞれ6員環の炭素原子に結合する。

[0026] [化7]



[0027] 前記一般式(2)において、R₁~R₈は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR₁及びR₂の組、R₂及びR₃の組、R₃及びR₄の組、R₅及びR₆の組、R₆及びR₇の組、並びにR₇及びR₈の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、ただし、R₁及びR₂の組、R₂及びR₃の組、R₃及びR₄の組、R₅及びR₆の組、R₆及びR₇の組、並びにR₇及びR₈の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としてのR₁~R₈は、それぞれ独立に、

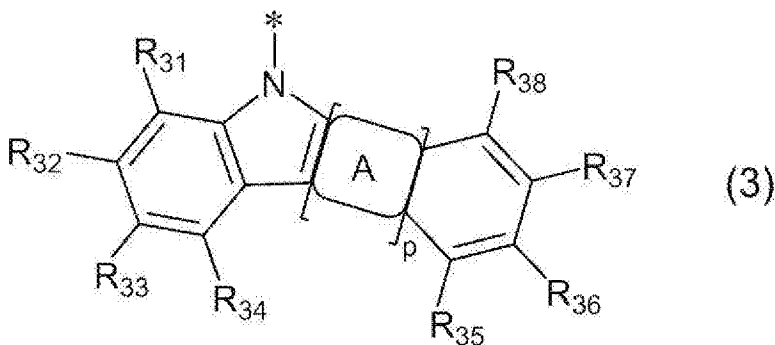
ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 の複素環基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のハロゲン化アルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 3 ～ 30 のアルキルシリル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 60 のアリアルシリル基、
 ヒドロキシ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルコキシ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のハロゲン化アルコキシ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリアルオキシ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 30 のアルキルアミノ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 60 のアリアルアミノ基、
 チオール基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキルチオ基、または
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリアルチオ基である。

*は、前記一般式 (1) 中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0028] [化8]



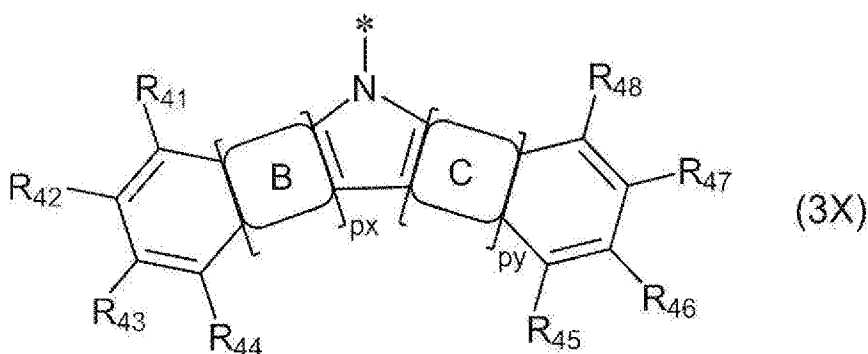
[0029] 前記一般式 (3) において、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{31} 及び R_{32} の組、 R_{32} 及び R_{33} の組、 R_{33} 及び R_{34} の組、 R_{35} 及び R_{36} の組、 R_{36} 及び R_{37} の組、並びに R_{37} 及び R_{38} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (2) におけ

る $R_1 \sim R_8$ と同義であり、

Aは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造を示し、この環構造Aは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、 p は、1以上4以下の整数であり、 p が2以上の整数の場合、複数の環構造Aは、互いに同一又は異なる。*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0030] [化9]



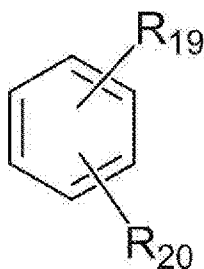
[0031] 前記一般式(3X)において、 $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(3)における置換基としての $R_{31} \sim R_{38}$ と同義であり、

Bは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造を示し、この環構造Bは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、 p_x は、1以上4以下の整数であり、 p_x が2以上の整数の場合、複数の環構造Bは、互いに同一又は異なり、

Cは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造を示し、この環構造Cは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、 p_y は、1以上4以下の整数であり、 p_y が2以上の整数の場合、複数の環構造Cは、互いに同一又は異なる。*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0032] [化10]



(131)



(132)

[0033] 前記一般式(131)において、 R_{19} 及び R_{20} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、隣接する環構造の一部と互いに結合して環を形成するか、又は R_{19} 及び R_{20} の組が互いに結合して環を形成し、

前記一般式(132)において、 X_1 は、 $CR_{50}R_{51}$ 、 NR_{52} 、硫黄原子、もしくは酸素原子であり、 R_{50} 、 R_{51} 及び R_{52} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{50} 及び R_{51} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての R_{19} 、 R_{20} 、 R_{50} 、 R_{51} 及び R_{52} は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における置換基としての $R_1 \sim R_8$ と同義である。

[0034] 一般式(131)において、 R_{19} 及び R_{20} は、それぞれ独立に、隣接する環構造の一部と互いに結合して環を形成するとは、具体的には、以下の(I)～(IV)のいずれかをいう。

また、一般式(131)において、 R_{19} 及び R_{20} の組が互いに結合して環を形成するとは、具体的には、以下の(V)をいう。(I)一般式(131)で表される環構造同士が隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{19} の組、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{20} の組、並びに一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{20} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

(II)一般式(131)で表される環構造と、一般式(3)における $R_{35} \sim R_{38}$ を有するベンゼン環とが隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{35} の組、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{38} の組、一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{35} の組、並びに一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{38} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成する

こと。

(III) 一般式 (1 3 1) で表される環構造と、一般式 (3 X) における $R_{41} \sim R_{44}$

を有するベンゼン環とが隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{41} の組、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{44} の組、一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{41} の組、並びに一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{44} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

(IV) 一般式 (1 3 1) で表される環構造と、一般式 (3 X) における $R_{45} \sim R_{48}$ を有するベンゼン環とが隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{45} の組、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{48} の組、一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{45} の組、並びに一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

(V) 一般式 (1 3 1) で表される環構造の R_{19} 及び R_{20} の組が互いに結合して環を形成すること。すなわち、(V) は、同じ環に結合する R_{19} 及び R_{20} の組が互いに結合して環を形成することをいう。

[0035] 一般式 (1) において、「 D_1 が複数ある場合、複数の D_1 は互いに同一である」とは、 D_1 を表す一般式が同一であり、かつ、一般式内の同じ記号で表される変数同士が全て同一であることを意味する。

「一般式内の変数」とは、一般式が、一般式 (2) である場合は、 $R_1 \sim R_8$ を意味し、一般式が、一般式 (3) である場合は、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{19} 、 R_{20} 、 $R_{50} \sim R_{52}$ 及び p を意味し、一般式が、一般式 (3 X) である場合は、 $R_{41} \sim R_{48}$ 、 R_{19} 、 R_{20} 、 $R_{50} \sim R_{52}$ 、 p_x 及び p_y を意味する。

具体的には、 D_1 の基として、前記一般式 (2) で表される基が m' 個選ばれた場合は、該 m' 個の一般式 (2) 内の同じ記号で表される変数同士は、全て同一である。

また、 D_1 の基として、前記一般式 (3) で表される基が m' 個選ばれた場

合は、該 m' 個の一般式 (3) 内の同じ記号で表される変数同士は、全て同一である。

また、 D_1 の基として、前記一般式 (3 X) で表される基が m' 個選ばれた場合は、該 m' 個の一般式 (3 X) 内の同じ記号で表される変数同士は、全て同一である。

m' は 2、3 又は 4 である。

例えば、 D_1 の基として、一般式 (2) で表される基が 2 つ選ばれた場合、該 2 つの一般式 (2) で表される基は、 R_1 同士が同一であり、 R_2 同士が同一であり、 R_3 同士が同一であり、 R_4 同士が同一であり、 R_5 同士が同一であり、 R_6 同士が同一であり、 R_7 同士が同一であり、 R_8 同士が同一の基である。

例えば、 D_1 の基として、一般式 (3) で表される基が 2 つ選ばれた場合、該 2 つの一般式 (3) で表される基は、 R_{31} 同士が同一であり、 R_{32} 同士が同一であり、 R_{33} 同士が同一であり、 R_{34} 同士が同一であり、 R_{35} 同士が同一であり、 R_{36} 同士が同一であり、 R_{37} 同士が同一であり、 R_{38} 同士が同一であり、 R_{19} 同士が同一であり、 R_{20} 同士が同一であり、 R_{50} 同士が同一であり、 R_{51} 同士が同一であり、 R_{52} が同一であり、 p 同士が同一の基である。

例えば、 D_1 の基として、一般式 (3 X) で表される基が 2 つ選ばれた場合、該 2 つの一般式 (3 X) で表される基は、 R_{41} 同士が同一であり、 R_{42} 同士が同一であり、 R_{43} 同士が同一であり、 R_{44} 同士が同一であり、 R_{45} 同士が同一であり、 R_{46} 同士が同一であり、 R_{47} 同士が同一であり、 R_{48} 同士が同一であり、 R_{19} 同士が同一であり、 R_{20} 同士が同一であり、 R_{50} 同士が同一であり、 R_{51} 同士が同一であり、 R_{52} が同一であり、 $p x$ 同士が同一であり、 $p y$ 同士が同一の基である。

[0036] 本発明者らは、一般式 (1) で表される化合物 (以下、「本実施形態の化合物」とも称する) が、有機 EL 素子に用いるために優れた性能を有することを見出した。

有機EL素子に用いるために優れた性能を有するとは、例えば、以下の（1）～（3）のうち、少なくとも1つが実現されることを意味する。

（1）本実施形態の化合物を有機EL素子に用いた際に、有機EL素子の発光効率、素子寿命、及び駆動電圧のうち、少なくとも一つが改善すること。

（2）TADF性に優れていること。

（3）耐熱性に優れていること。

[0037] TADF性に優れているとは、例えば、後述の測定方法で測定される「 X_D/X_P の値」が0.05以上であることをいう。なお、 X_P の値はPrompt発光（即時発光）の量であり、 X_D の値はDelay発光（遅延発光）の量である。

耐熱性に優れているとは、本実施形態の化合物の分解温度が高いこと又は昇華温度が低いことをいう。本実施形態において、耐熱性に優れた化合物を用いて、有機EL素子を作製した場合、当該化合物に対して、比較的高い温度をかけることができるので、より速く、当該化合物を蒸着して、目的とする有機層（例えば、発光層、正孔輸送層及び電子輸送層等）を得ることができる。その結果、有機EL素子の作製時間を短縮することができる。この作製時間の短縮は、例えば、有機EL素子を搭載した電子機器（例えば、有機ELパネル等の表示装置）の製造時間の短縮にもつながる。したがって、耐熱性に優れた化合物を用いることにより、有機EL素子、及び有機EL素子を搭載した電子機器の低コスト化を実現できる。

本実施形態の化合物の耐熱性（昇華温度）を表す指標として、例えば、熱重量示差熱測定（TG-DTA）で測定される1%重量減少温度及び5%重量減少温度を用いることができる。1%重量減少温度及び5%重量減少温度は、示差熱熱重量同時測定装置を用いて、以下の条件で測定することができる。

熱重量示差熱測定（TG-DTA）は、試料を加熱した時に、試料の質量変化を連続的に測定する方法であり、昇華及び蒸発等の質量変化を伴う物理変化の検出に利用される。

[0038] ー測定条件ー

- ・装置：示差熱重量同時測定装置(日立ハイテクノロジーズ社製、STA 7200RV)・容器：アルミ製パン
- ・試料の質量：3.0mg
- ・測定雰囲気：窒素ガス雰囲気
- ・昇温速度：10℃/分
- ・測定範囲：35℃以上600℃以下

[0039] 本実施形態の化合物において、R_xは、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

無置換の環形成原子数5～30の複素環基、または

無置換の炭素数1～30のアルキル基であり、

R_xが無置換の環形成原子数5～30の複素環基である場合、無置換の環形成原子数5～30の複素環基としてのR_xは、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、またはジベンゾチエニル基であることが好ましい。

本明細書において、トリアジニル基とは、1, 3, 5-トリアジン、1, 2, 4-トリアジン、又は1, 2, 3-トリアジンから水素原子1つを除いた基をいう。

トリアジニル基は、1, 3, 5-トリアジンから水素原子1つを除いた基であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、R_xは、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、または

無置換のジベンゾフラニル基、または

無置換のジベンゾチエニル基であることがより好ましい。

本実施形態の化合物において、R_xは、水素原子であることがさらに好ましい。

[0040] 本実施形態の化合物において、置換基としての $R_1 \sim R_8$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{19} \sim R_{20}$ 、 $R_{41} \sim R_{48}$ 、及び $R_{50} \sim R_{52}$ は、それぞれ独立に、

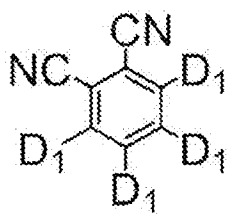
無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

無置換の環形成原子数5～30の複素環基、または

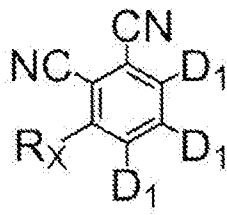
無置換の炭素数1～30のアルキル基であることが好ましい。

[0041] 本実施形態の化合物は、下記一般式(1-1)～(1-47)のいずれかで表される化合物であることが好ましい。

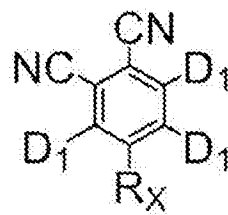
[0042] [化11]



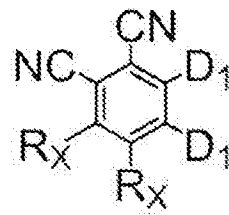
(1-1)



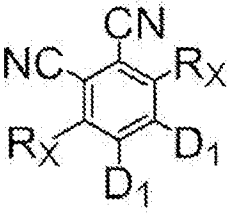
(1-2)



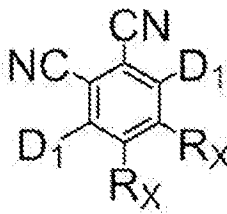
(1-3)



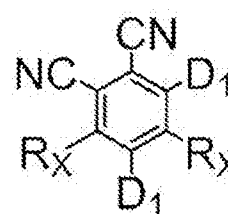
(1-4)



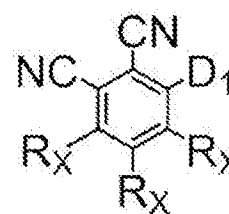
(1-5)



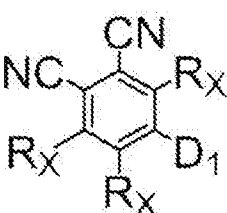
(1-6)



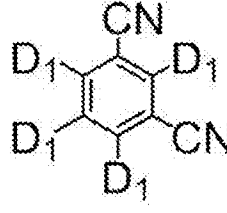
(1-7)



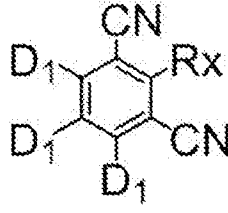
(1-8)



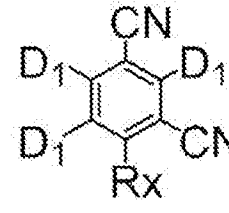
(1-9)



(1-10)



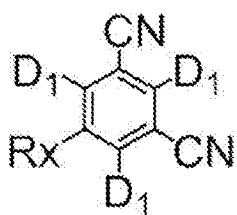
(1-11)



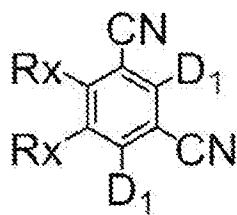
(1-12)

[0043]

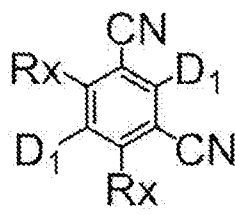
[化12]



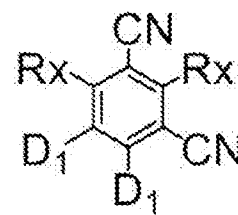
(1-13)



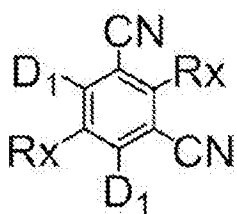
(1-14)



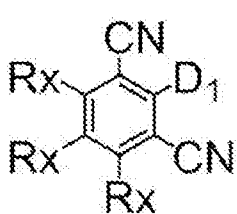
(1-15)



(1-16)



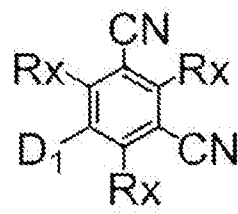
(1-17)



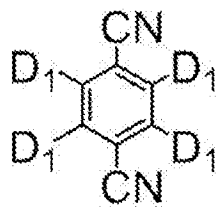
(1-18)



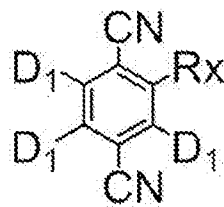
(1-19)



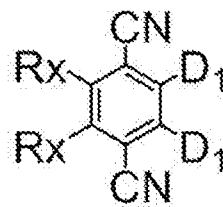
(1-20)



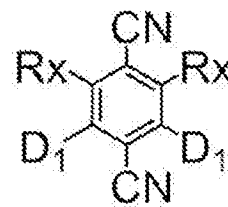
(1-21)



(1-22)



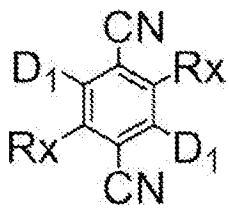
(1-23)



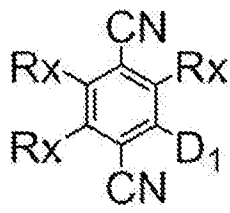
(1-24)

[0044]

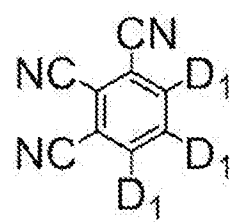
[化13]



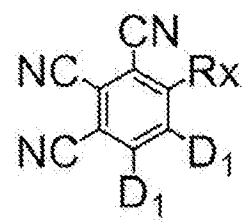
(1-25)



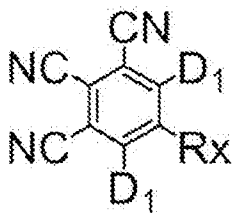
(1-26)



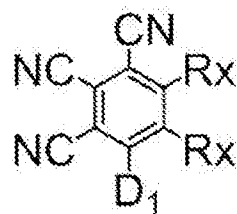
(1-27)



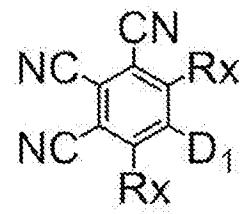
(1-28)



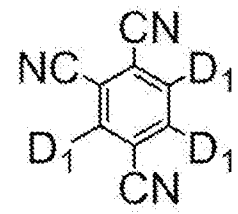
(1-29)



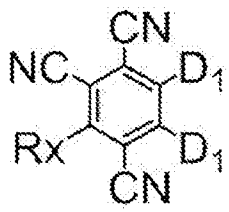
(1-30)



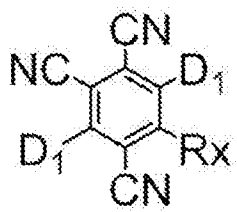
(1-31)



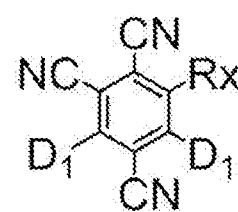
(1-32)



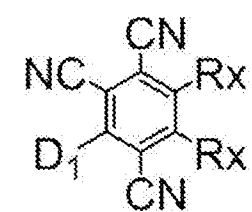
(1-33)



(1-34)



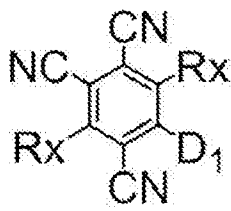
(1-35)



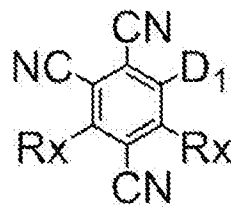
(1-36)

[0045]

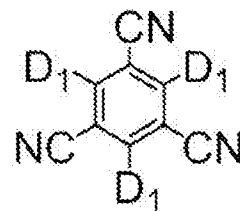
[化14]



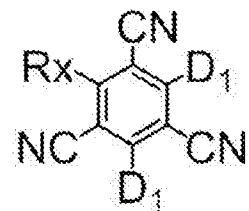
(1-37)



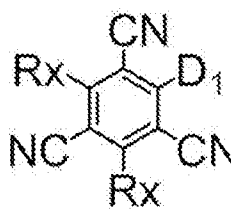
(1-38)



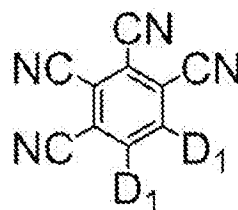
(1-39)



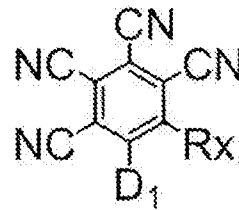
(1-40)



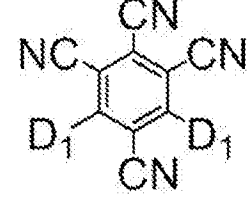
(1-41)



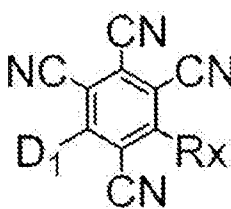
(1-42)



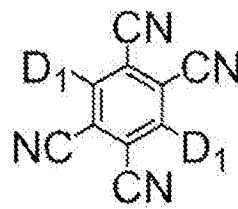
(1-43)



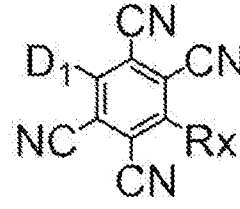
(1-44)



(1-45)



(1-46)



(1-47)

[0046] 前記一般式(1-1)～(1-47)における D_1 は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における D_1 と同義であり、 R_x は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における R_x と同義である。

[0047] 本実施形態の化合物において、前記一般式(132)における X_1 は、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましい。

すなわち、本実施形態の化合物において、前記一般式(1-1)～(1-47)における D_1 は、前記一般式(3)又は前記一般式(3X)で表される基であり、

前記 D_1 が前記一般式(3)で表される基である場合、前記一般式(3)におけるAは、前記一般式(132)で表される環構造を有し、当該環構造における X_1 が酸素原子又は硫黄原子であり、

前記 D_1 が前記一般式(3X)で表される基である場合、前記一般式(3X)

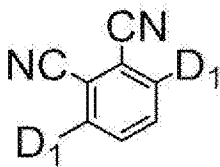
)におけるB及びCの少なくとも一方は、前記一般式(132)で表される環構造を有し、当該環構造における X_1 が酸素原子又は硫黄原子であることが好ましい。

[0048] 本実施形態の化合物は、一般式(1-4)～(1-7)、(1-14)～(1-17)及び(1-23)～(1-25)のいずれかで表される化合物であることが好ましい。

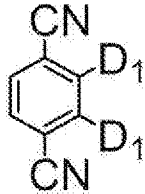
[0049] 本実施形態の化合物は、一般式(1-6)、(1-23)又は(1-24)で表される化合物であることがより好ましい。

[0050] 本実施形態の化合物は、TADF性および耐熱性に優れる観点から、下記一般式(1-6A)、(1-23A)又は(1-24A)で表される化合物であることがさらに好ましい。

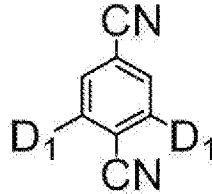
[0051] [化15]



(1-6A)



(1-23A)



(1-24A)

[0052] 前記一般式(1-6A)、(1-23A)及び(1-24A)における D_1 は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における D_1 と同義である。

[0053] 本実施形態の化合物は、一般式(1-6)で表される化合物であることも好ましい。

[0054] 本実施形態の化合物は、一般式(1-23)で表される化合物であることも好ましい。

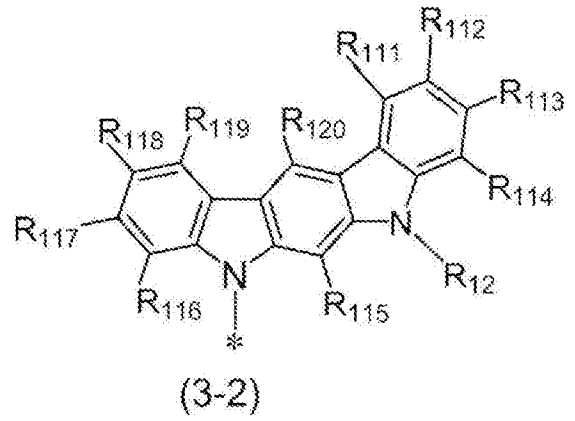
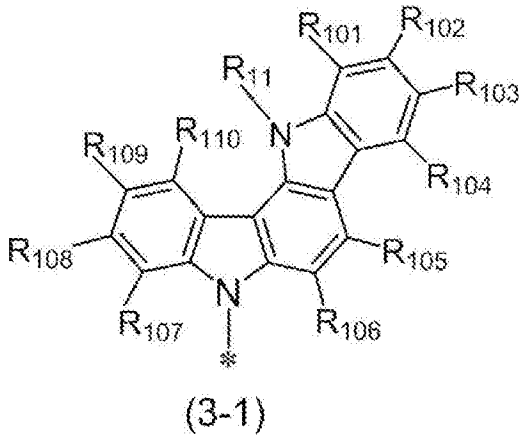
[0055] 本実施形態の化合物は、一般式(1-24)で表される化合物であることも好ましい。

[0056] 本実施形態の化合物は、一般式(1-1)、(1-10)又は(1-21)で表される化合物であることも好ましい。

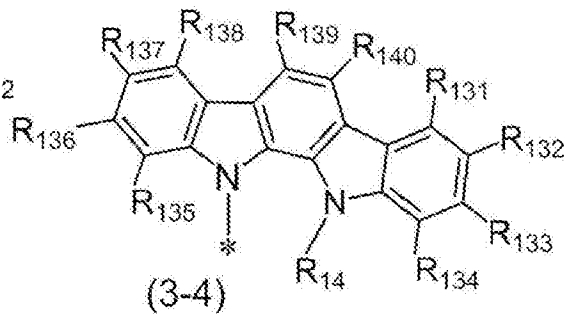
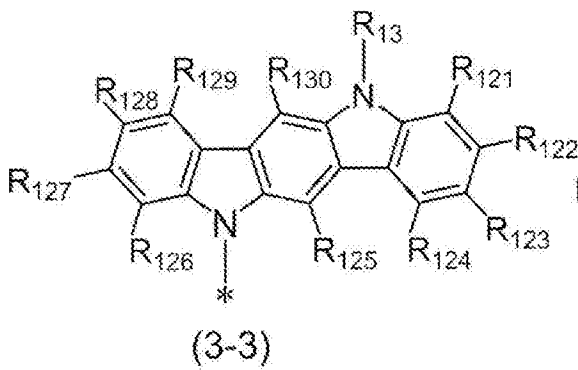
[0057] 本実施形態の化合物において、前記 D_1 は、下記一般式(3-1)～(3-

12) のいずれかで表される基であることが好ましい。

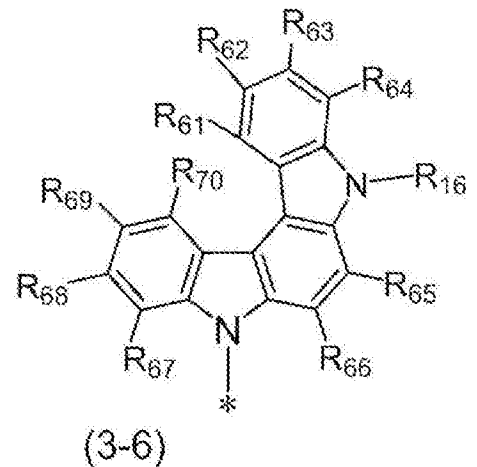
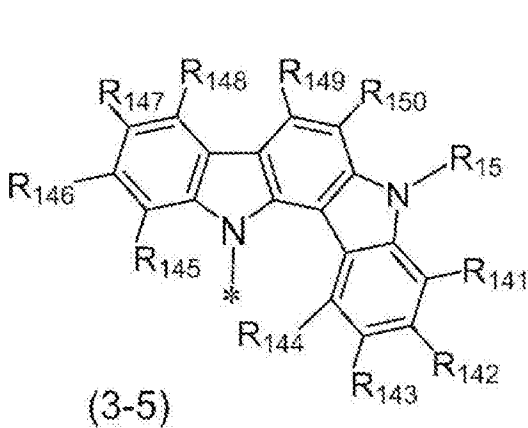
[0058] [化16]



[0059] [化17]



[0060] [化18]



[0061] 前記一般式(3-1)～(3-6)において、 R_{11} ～ R_{16} は、置換基であり、 R_{101} ～ R_{150} 及び R_{61} ～ R_{70} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

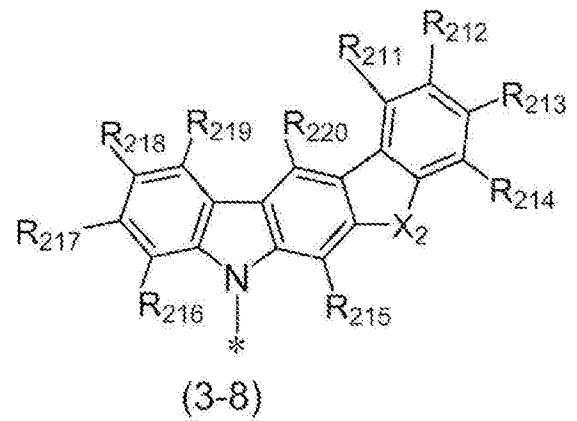
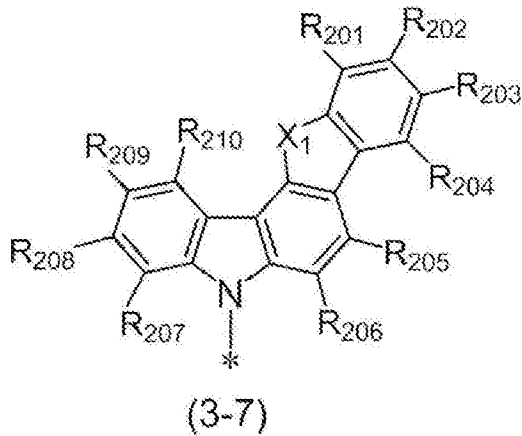
置換基としての $R_{101} \sim R_{150}$ 及び $R_{61} \sim R_{70}$ は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、
ヒドロキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルコキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～28のアリールアミノ基、
置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、
チオール基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基であり、

置換基としての $R_{11} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、
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6～14のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、
置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基である。

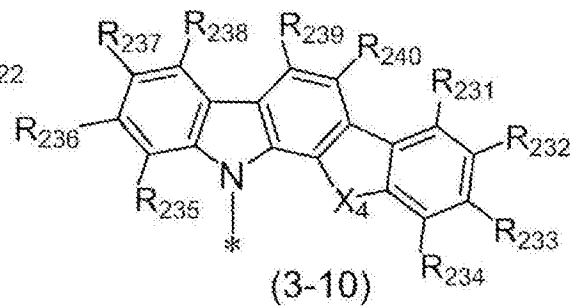
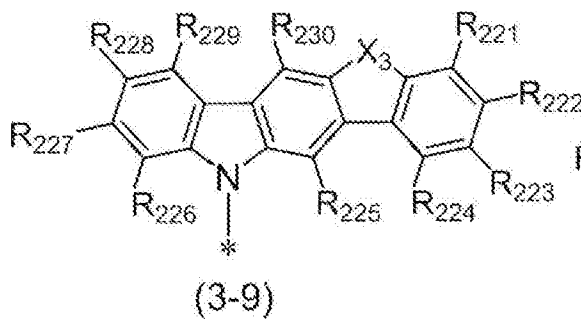
*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0062]

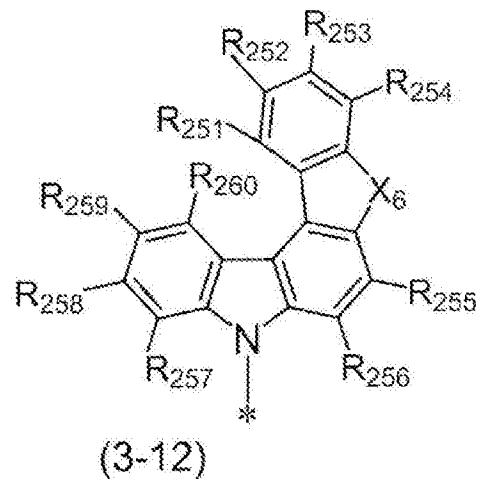
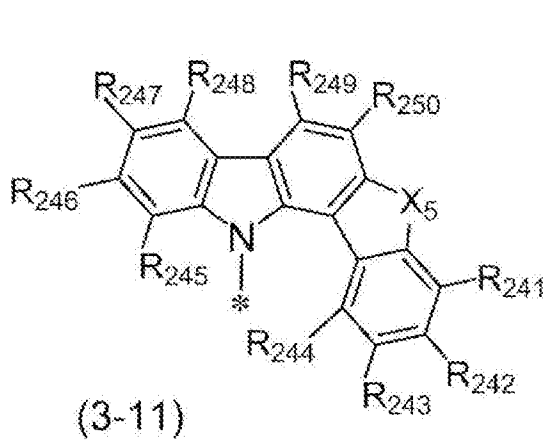
[化19]



[0063] [化20]



[0064] [化21]



[0065] 前記一般式(3-7)~(3-12)において、 $X_1 \sim X_6$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{151}R_{152}$ であり、 $R_{201} \sim R_{260}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{151} 及び R_{152} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{201} \sim R_{260}$ 、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、
ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、
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炭素数1～6のハロゲン化アルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、
ヒドロキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルコキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のハロゲン化アルコキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～28のアリールアミノ基、
置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、
チオール基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基である。

*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0066] 本実施形態の化合物は、前記 D_1 が、一般式(3-7)～(3-12)のいずれかで表される基であることも好ましく、長波長化効果を発現する観点から、一般式(3-7)～(3-12)における $X_1 \sim X_6$ は、硫黄原子であることも好ましい。

[0067] 本実施形態の化合物は、前記 D_1 が、一般式(3-12)で表される基であることも好ましく、長波長化効果をより発現する観点から、一般式(3-12)における X_6 は、硫黄原子であることも好ましい。

[0068] 本実施形態の化合物は、前記 D_1 が、一般式(3-7)～(3-12)のいずれかで表される基であり、一般式(3-7)～(3-12)における $X_1 \sim X_6$ は、酸素原子であることも好ましい。

- [0069] 本実施形態の化合物は、前記 D_1 が、一般式(3-7)～(3-12)のいずれかで表される基であり、一般式(3-7)～(3-12)における X_1 ～ X_6 は、 $CR_{151}R_{152}$ であることも好ましい。
- [0070] 本実施形態の化合物は、前記 D_1 が、一般式(3-1)～(3-6)のいずれかで表される基であることも好ましい。
- [0071] 本実施形態の化合物は、一般式(1-4)～(1-7)、(1-14)～(1-17)及び(1-23)～(1-25)のいずれかで表される化合物であり、かつ、 D_1 は、一般式(3-1)～(3-12)のいずれかで表される基であることも好ましい。
- [0072] 本実施形態の化合物は、一般式(1-4)～(1-7)、(1-14)～(1-17)及び(1-23)～(1-25)のいずれかで表される化合物であり、 D_1 は、一般式(3-7)～(3-12)のいずれかで表される基であり、かつ、一般式(3-7)～(3-12)における X_1 ～ X_6 は、硫黄原子であることも好ましい。
- [0073] 本実施形態の化合物は、TADF性に優れる観点、及び長波長化効果を発現する観点から、一般式(1-6)、(1-23)又は(1-24)で表される化合物であり、 D_1 は、一般式(3-7)～(3-12)のいずれかで表される基であり、かつ、一般式(3-7)～(3-12)における X_1 ～ X_6 は、硫黄原子であることも好ましい。
- [0074] 本実施形態の化合物は、一般式(1-4)～(1-7)、(1-14)～(1-17)及び(1-23)～(1-25)のいずれかで表される化合物であり、 D_1 は、一般式(3-7)～(3-12)のいずれかで表される基であり、かつ、一般式(3-7)～(3-12)における X_1 ～ X_6 は、酸素原子であることも好ましい。
- [0075] 本実施形態の化合物は、一般式(1-6)、(1-23)又は(1-24)で表される化合物であり、 D_1 は、一般式(3-7)～(3-12)のいずれかで表される基であり、かつ、一般式(3-7)～(3-12)における X_1 ～ X_6 は、酸素原子であることも好ましい。

[0076] 本実施形態の化合物は、一般式(1-4)～(1-7)、(1-14)～(1-17)及び(1-23)～(1-25)のいずれかで表される化合物であり、 D_1 は、一般式(3-7)～(3-12)のいずれかで表される基であり、かつ、一般式(3-7)～(3-12)における $X_1 \sim X_6$ は、 $CR_{151}R_{152}$ であることも好ましい。

[0077] 本実施形態の化合物は、一般式(1-6)、(1-23)又は(1-24)で表される化合物であり、 D_1 は、一般式(3-7)～(3-12)のいずれかで表される基であり、かつ、一般式(3-7)～(3-12)における $X_1 \sim X_6$ は、 $CR_{151}R_{152}$ であることも好ましい。

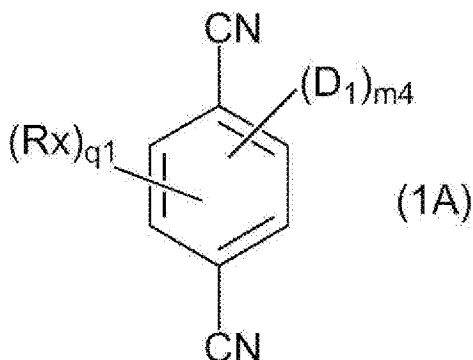
[0078] 本実施形態の化合物は、一般式(1-4)～(1-7)、(1-14)～(1-17)及び(1-23)～(1-25)のいずれかで表される化合物であり、 D_1 は、一般式(3-1)～(3-6)のいずれかで表される基であることも好ましい。

[0079] 本実施形態の化合物は、一般式(1-6)、(1-23)又は(1-24)で表される化合物であり、 D_1 は、一般式(3-1)～(3-6)のいずれかで表される基であることも好ましい。

[0080] ・一般式(1A)で表される化合物

本実施形態の化合物は、下記一般式(1A)で表される化合物であることも好ましい。

[0081] [化22]

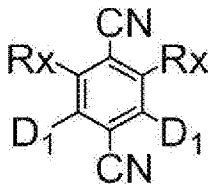


[0082] 前記一般式(1A)において、 m_4 は、1以上4以下の整数であり、 q_1 は、0以上3以下の整数であり、 $m_4 + q_1 = 4$ であり、

前記D₁は、それぞれ独立に、前記一般式(1)におけるD₁と同義であり、前記R_xは、それぞれ独立に、前記一般式(1)におけるR_xと同義であり、D₁及びR_xは、それぞれ前記一般式(1A)中におけるベンゼン環の炭素原子に結合する。

[0083] 前記一般式(1A)で表される化合物は、下記一般式(1-24)で表される化合物であることが好ましい。

[0084] [化23]



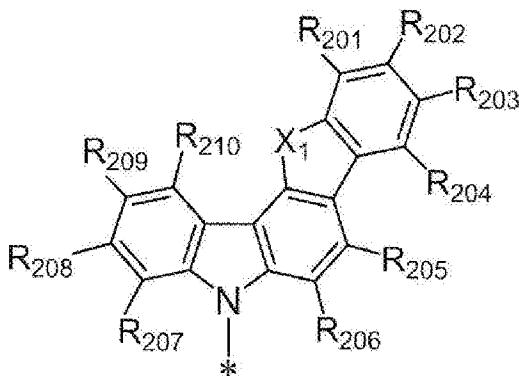
(1-24)

[0085] 前記一般式(1-24)におけるD₁は、前記一般式(1A)におけるD₁と同義であり、R_xは、それぞれ独立に、前記一般式(1A)におけるR_xと同義である。

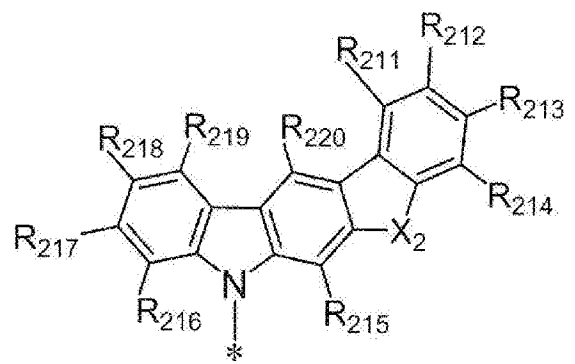
[0086] 本実施形態の化合物において、前記一般式(1-24)におけるD₁は、前記一般式(3)で表される基であることが好ましい。

[0087] 本実施形態の化合物において、前記一般式(1-24)におけるD₁は、下記一般式(3-7A)～(3-12A)のいずれかで表される基であることが好ましい。

[0088] [化24]

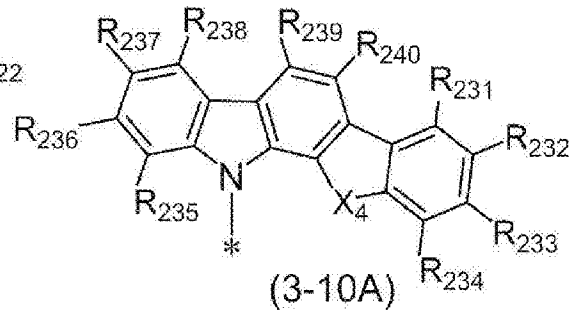
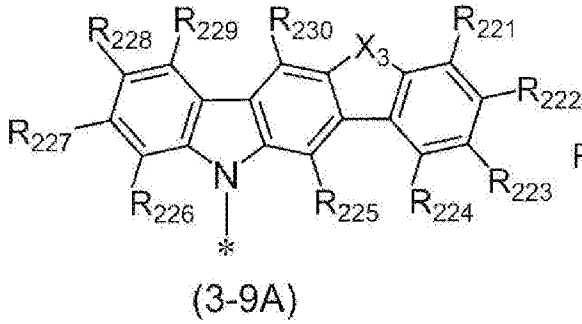


(3-7A)

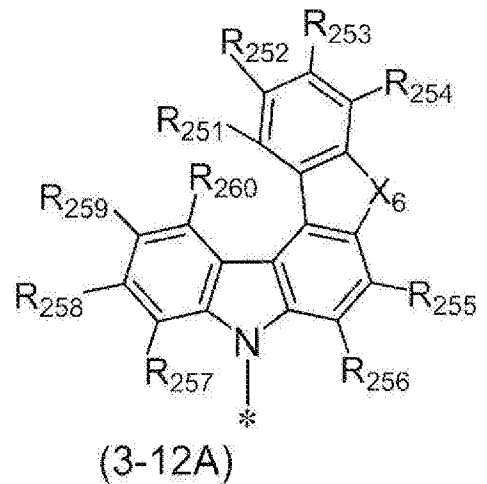
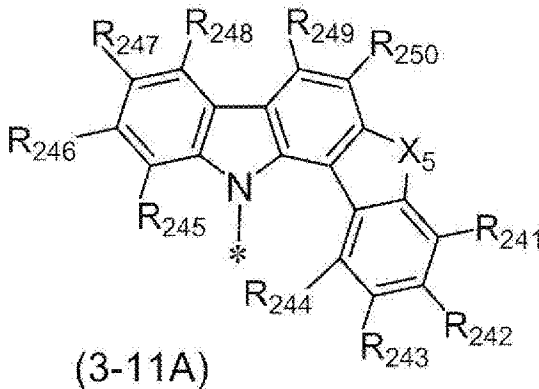


(3-8A)

[0089] [化25]



[0090] [化26]



[0091] 前記一般式(3-7A)～(3-12A)における $X_1 \sim X_6$ 及び $R_{201} \sim R_{260}$ は、それぞれ、前記一般式(3-7)～(3-12)における $X_1 \sim X_6$ 及び $R_{201} \sim R_{260}$ と同義であり、前記一般式(3-7A)～(3-12A)における $X_1 \sim X_6$ が $CR_{151}R_{152}$ のときの R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ、前記一般式(3-7)～(3-12)における $X_1 \sim X_6$ が $CR_{151}R_{152}$ のときの R_{151} 及び R_{152} と同義である。

*は、前記一般式(1-24)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0092] 本実施形態の化合物において、前記一般式(1-24)における D_1 は、前記一般式(3-7A)又は(3-10A)で表される基であることが好ましい。

[0093] 本実施形態の化合物において、前記一般式(3-7A)における X_1 は、酸

素原子または硫黄原子であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、前記一般式（3-8A）における X_2 は、酸素原子または硫黄原子であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、前記一般式（3-9A）における X_3 は、酸素原子または硫黄原子であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、前記一般式（3-10A）における X_4 は、酸素原子または硫黄原子であることが好ましい。

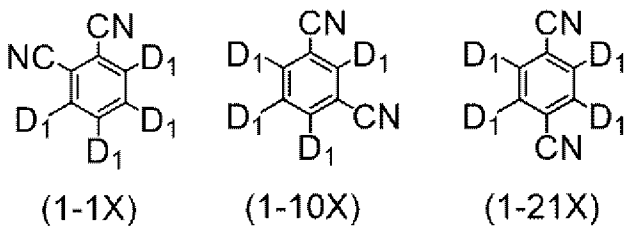
本実施形態の化合物において、前記一般式（3-11A）における X_5 は、酸素原子または硫黄原子であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、前記一般式（3-12A）における X_6 は、酸素原子または硫黄原子であることが好ましい。

[0094] ・一般式（1-1X）、（1-10X）又は（1-21X）で表される化合物

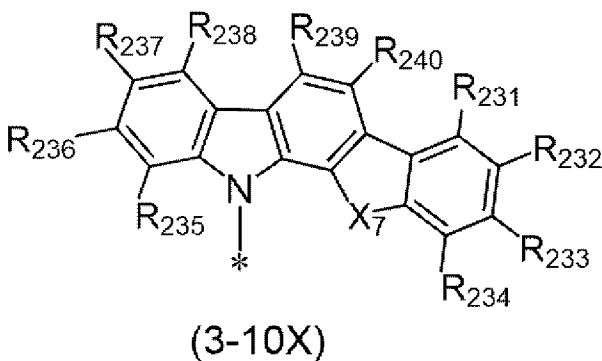
本実施形態の化合物は、下記一般式（1-1X）、（1-10X）又は（1-21X）で表される化合物であることも好ましい。

[化27]



[0095] 前記一般式（1-1X）、（1-10X）又は（1-21X）において、 D_1 は、下記一般式（3-10X）で表される基である。

[0096] [化28]



[0097] 前記一般式(3-10X)において、 X_7 は、酸素原子、硫黄原子、 NR_{52} 、または $CR_{151}R_{152}$ であり、 $R_{231} \sim R_{240}$ 及び R_{52} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{151} 及び R_{152} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{231} \sim R_{240}$ 、 R_{52} 、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~14のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~14の複素環基、

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炭素数1~6のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3~6のアルキルシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1~6のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~14のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~28のアリールアミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2~12のアルキルアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~14のアリールチオ基である。

*は、前記一般式(1-1X)、(1-10X)及び(1-21X)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0098] 本実施形態の化合物において、前記一般式(3-10X)における X_7 は、酸素原子または硫黄原子であることが好ましい。

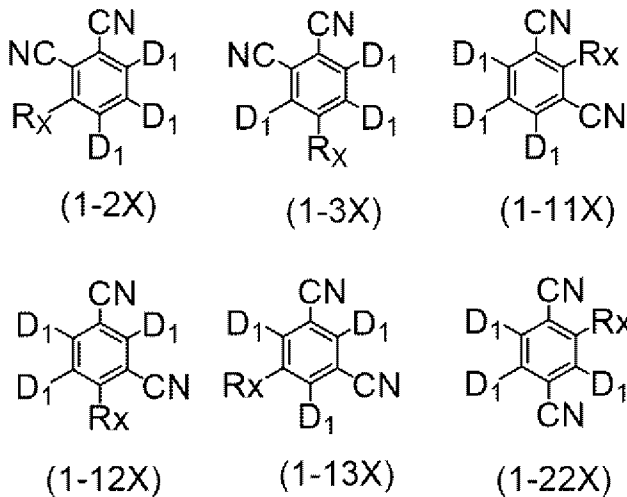
[0099] 本実施形態の化合物は、前記一般式(1-10X)で表される化合物であることが好ましい。

[0100] 本実施形態の化合物は、前記一般式(1-10X)で表される化合物であり、前記一般式(3-10X)におけるX₇は、酸素原子または硫黄原子であることが好ましい。

[0101] 一般式(1-2X)、(1-3X)、(1-11X)、(1-12X)、(1-13X)及び(1-22X)のいずれかで表される化合物

本実施形態の化合物は、下記一般式(1-2X)、(1-3X)、(1-11X)、(1-12X)、(1-13X)及び(1-22X)のいずれかで表される化合物であることも好ましい。

[0102] [化29]



[0103] 前記一般式(1-2X)、(1-3X)、(1-11X)、(1-12X)、(1-13X)及び(1-22X)におけるD₁は、前記一般式(1)におけるD₁と同義であり、R_xは、前記一般式(1)におけるR_xと同義である。

[0104] 本実施形態の化合物は、前記一般式(1-22X)で表される化合物であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、前記一般式(1-2X)、(1-3X)、(1-11X)、(1-12X)、(1-13X)及び(1-22X)におけるR_xは、水素原子であることが好ましい。

本実施形態の化合物は、前記一般式(1-22X)で表される化合物であり、前記一般式(1-22X)におけるR_xは、水素原子であることがより

好ましい。

[0105] 本実施形態の化合物において、前記一般式 (1-2 X)、(1-3 X)、(1-11 X)、(1-12 X)、(1-13 X) 及び (1-22 X) における D_1 は、前記一般式 (3-10 X) で表される基であることが好ましい。

なお、前記一般式 (3-10 X) 中の * は、前記一般式 (1-2 X)、(1-3 X)、(1-11 X)、(1-12 X)、(1-13 X) 及び (1-22 X) 中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

また、本実施形態の化合物において、前記一般式 (1-2 X)、(1-3 X)、(1-11 X)、(1-12 X)、(1-13 X) 及び (1-22 X) における D_1 は、前記一般式 (3-10 X) で表される基であり、

前記一般式 (3-10 X) における X_7 は、酸素原子又は硫黄原子であることがより好ましい。

[0106] 本実施形態の化合物は、前記一般式 (1-22 X) で表される化合物であり、前記一般式 (1-22 X) における D_1 は、前記一般式 (3-10 X) で表される基であることがより好ましい。

前記一般式 (1-2 X)、(1-3 X)、(1-11 X)、(1-12 X)、(1-13 X) 及び (1-22 X) において、 D_1 は、前記一般式 (3-10 X) で表される基であり、かつ R_x は、水素原子であることがより好ましい。

本実施形態の化合物は、前記一般式 (1-22 X) で表される化合物であり、

前記一般式 (1-22 X) における D_1 は、前記一般式 (3-10 X) で表される基であり、

前記一般式 (1-22 X) における R_x は、水素原子であることがより好ましい。

本実施形態の化合物は、前記一般式 (1-22 X) で表される化合物であり、

前記一般式 (1-22 X) における D_1 は、前記一般式 (3-10 X) で表

される基であり、

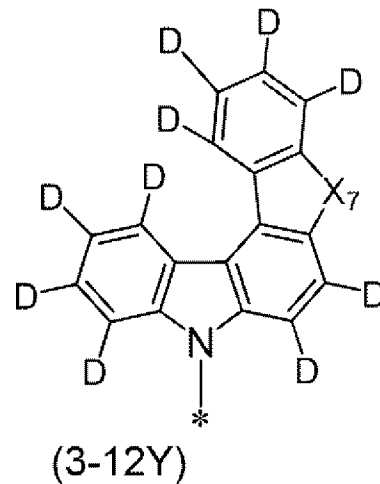
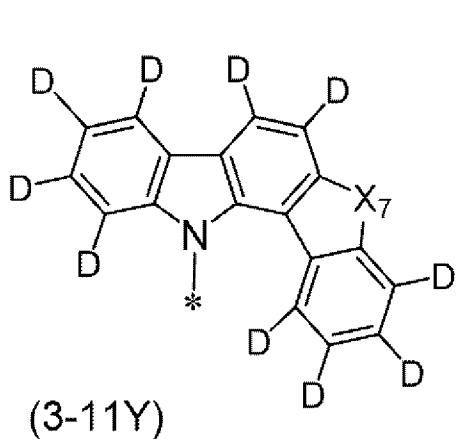
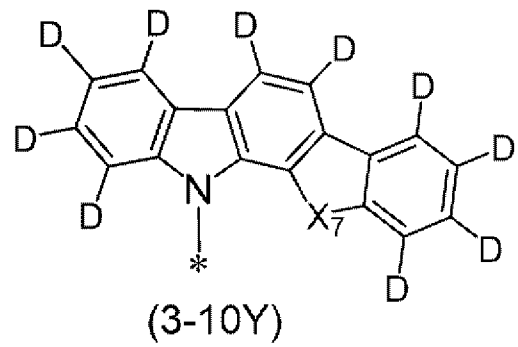
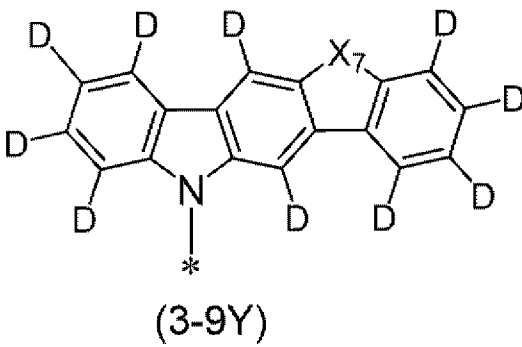
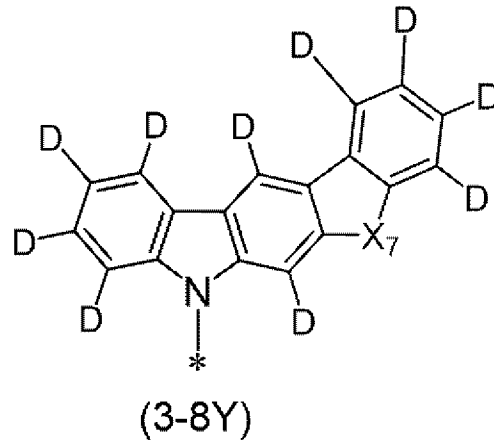
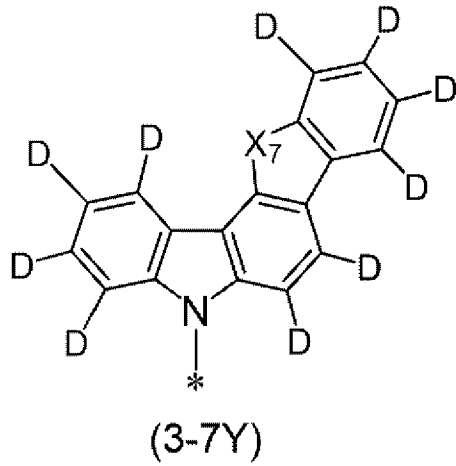
前記一般式 (1-22X) における R_x は、水素原子であり、

前記一般式 (3-10X) における X_7 は、酸素原子又は硫黄原子であることがさらに好ましい。

[0107] 本実施形態の化合物において、前記一般式 (1-2X)、(1-3X)、(1-11X)、(1-12X)、(1-13X) 及び (1-22X) における D_1 は、下記一般式 (3-7Y) ~ (3-12Y) のいずれかで表される基であってもよい。

[0108]

[化30]



[0109] 前記一般式(3-7Y)~(3-12Y)における X_7 は、前記一般式(3-10X)における X_7 と同義であり、前記一般式(3-7Y)~(3-12Y)における X_7 が NR_{52} のときの R_{52} は、前記一般式(3-10X)における X_7 が NR_{52} のときの R_{52} と同義であり、前記一般式(3-7Y)~(3-12Y)における X_7 が $CR_{151}R_{152}$ のときの R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ、前記一般式(3-10X)における X_7 が $CR_{151}R_{152}$ のときの R_{151} 及び

R_{152} と同義である。

前記一般式(3-7Y)～(3-12Y)中のDは、重水素を表す。

前記一般式(3-7Y)～(3-12Y)中の*は、前記一般式(1-2X)、(1-3X)、(1-11X)、(1-12X)、(1-13X)及び(1-22X)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0110] 本実施形態の化合物において、置換基としての $R_{101} \sim R_{150}$ 及び $R_{61} \sim R_{70}$ は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、

無置換の環形成原子数5～14の複素環基、または

無置換の炭素数1～6のアルキル基であり、

置換基としての $R_{11} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、または

無置換の環形成原子数5～14の複素環基であることが好ましい。

[0111] 本実施形態の化合物において、 $R_{101} \sim R_{150}$ 及び $R_{61} \sim R_{70}$ は、水素原子であり、

置換基としての $R_{11} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、または

無置換の環形成原子数5～14の複素環基であることも好ましい。

[0112] 本実施形態の化合物において、置換基としての $R_{201} \sim R_{260}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、

無置換の環形成原子数5～14の複素環基、

無置換の炭素数1～6のアルキル基、

置換基としての R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、または

無置換の炭素数1～6のアルキル基であることが好ましい。

また、本実施形態の化合物において、置換基としての $R_{201} \sim R_{260}$ は、そ

それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数 6～14 のアリール基、

無置換の環形成原子数 5～14 の複素環基、

無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、

置換基としての R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数 6～14 のアリール基、または

無置換の炭素数 1～6 のアルキル基であることがより好ましい。

[0113] 本実施形態の化合物において、 $R_{201} \sim R_{260}$ は、水素原子であり、

置換基としての R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、

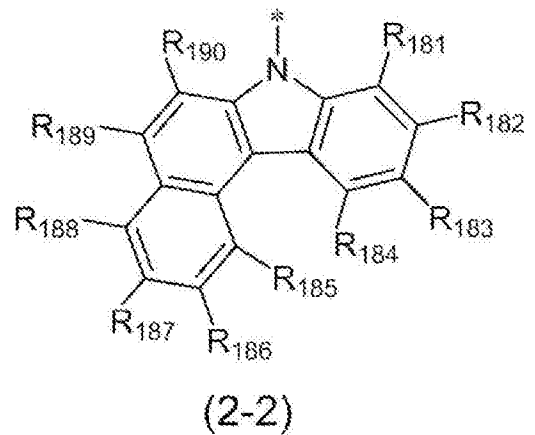
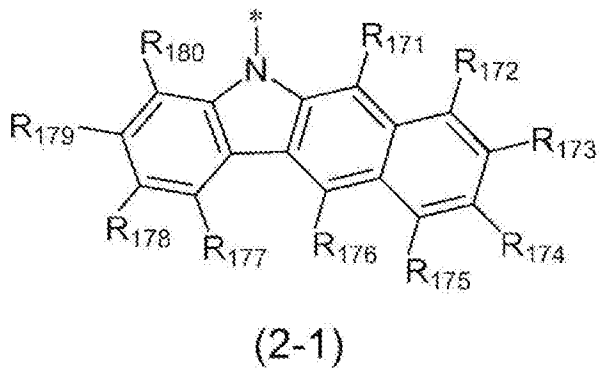
無置換の環形成炭素数 6～14 のアリール基、または

無置換の炭素数 1～6 のアルキル基であることも好ましい。

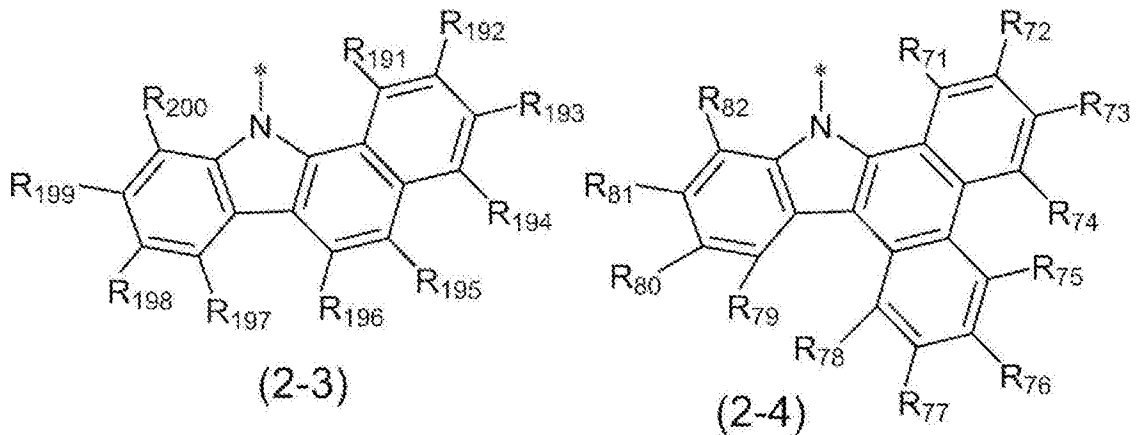
[0114] 本実施形態の化合物において、前記 D_1 は、下記一般式 (2-1)、(2-

2)、(2-3) 又は (2-4) で表される基であることも好ましい。

[0115] [化31]



[化32]



[0116] 前記一般式(2-1)～(2-4)において、R₁₇₁～R₂₀₀及びR₇₁～R₈₂は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR₁₇₁及びR₁₇₂の組、R₁₇₂及びR₁₇₃の組、R₁₇₃及びR₁₇₄の組、R₁₇₄及びR₁₇₅の組、R₁₇₅及びR₁₇₆の組、R₁₇₇及びR₁₇₈の組、R₁₇₈及びR₁₇₉の組、R₁₇₉及びR₁₈₀の組、R₁₈₁及びR₁₈₂の組、R₁₈₂及びR₁₈₃の組、R₁₈₃及びR₁₈₄の組、R₁₈₅及びR₁₈₆の組、R₁₈₆及びR₁₈₇の組、R₁₈₇及びR₁₈₈の組、R₁₈₈及びR₁₈₉の組、R₁₈₉及びR₁₉₀の組、R₁₉₁及びR₁₉₂の組、R₁₉₂及びR₁₉₃の組、R₁₉₃及びR₁₉₄の組、R₁₉₄及びR₁₉₅の組、R₁₉₅及びR₁₉₆の組、R₁₉₇及びR₁₉₈の組、R₁₉₈及びR₁₉₉の組、R₁₉₉及びR₂₀₀の組、R₇₁及びR₇₂の組、R₇₂及びR₇₃の組、R₇₃及びR₇₄の組、R₇₅及びR₇₆の組、R₇₆及びR₇₇の組、R₇₇及びR₇₈の組、R₇₉及びR₈₀の組、R₈₀及びR₈₁の組、並びにR₈₁及びR₈₂の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としてのR₁₇₁～R₂₀₀及びR₇₁～R₈₂は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、

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炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、

ヒドロキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルコキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のハロゲン化アルコキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～14 のアリーロキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数 2～12 のアルキルアミノ基、
チオール基、
置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～14 のアリールチオ基である。

*は、前記一般式 (1) 中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

[0117] 本実施形態の化合物において、前記 D_1 は、一般式 (2-1)、(2-3)、又は (2-4) で表される基であることもより好ましい。

本実施形態の化合物において、前記 D_1 は、一般式 (2-1) 又は (2-3) で表される基であることもさらに好ましい。

[0118] 本実施形態の化合物は、一般式 (1-1)、(1-4)～(1-7)、(1-10)、(1-14)～(1-17)、(1-21) 及び (1-23)～(1-25) のいずれかで表される化合物であり、かつ、 D_1 は、一般式 (2-1)、(2-2)、(2-3)、又は (2-4) で表される基であることも好ましい。

[0119] 本実施形態の化合物は、一般式 (1-6)、(1-23) 又は (1-24) で表される化合物であり、かつ、 D_1 は、一般式 (2-1)、(2-2)、(2-3)、又は (2-4) で表される基であることも好ましい。

[0120] 本実施形態の化合物は、一般式 (1-1)、(1-10) 又は (1-21) で表される化合物であり、かつ、 D_1 は、一般式 (2-1)、(2-2)、(2-3)、又は (2-4) で表される基であることも好ましく、一般式 (2-1)、(2-3)、又は (2-4) で表される基であることもより好ましい。

[0121] 本実施形態の化合物において、置換基としての $R_{171} \sim R_{200}$ 及び $R_{71} \sim R$

R_{82} は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数 6～14 のアリール基、

無置換の環形成原子数 5～14 の複素環基、または

無置換の炭素数 1～6 のアルキル基であることが好ましい。

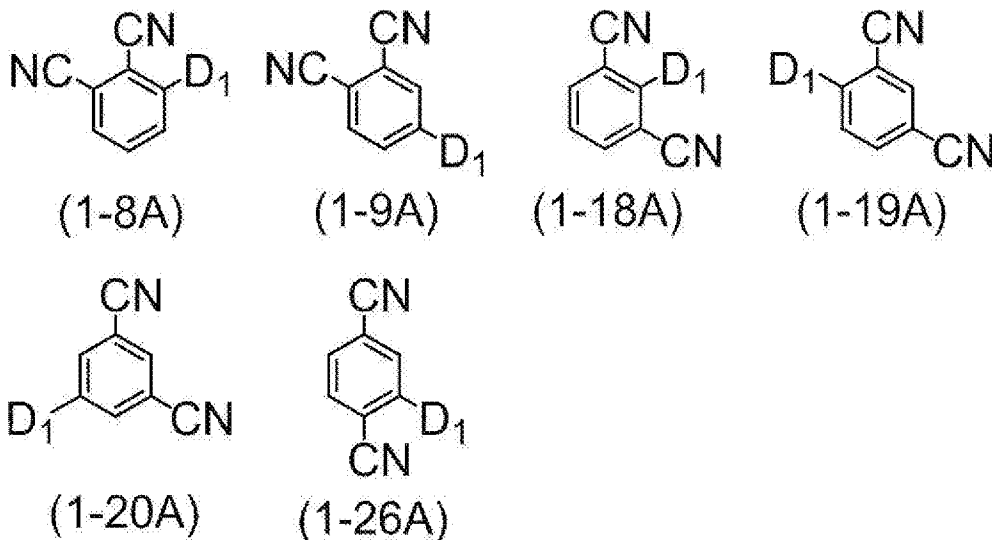
[0122] 本実施形態の化合物において、 $R_{171} \sim R_{200}$ 及び $R_{71} \sim R_{82}$ は、水素原子であることも好ましい。

[0123] 本実施形態に係る化合物の製造方法

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

[0124] 本実施形態に係る化合物の具体例としては、例えば、下記一般式 (1-8A)、一般式 (1-9A)、(1-18A)、(1-19A)、(1-20A) 及び一般式 (1-26A) で表される化合物が挙げられる。

[0125] [化33]



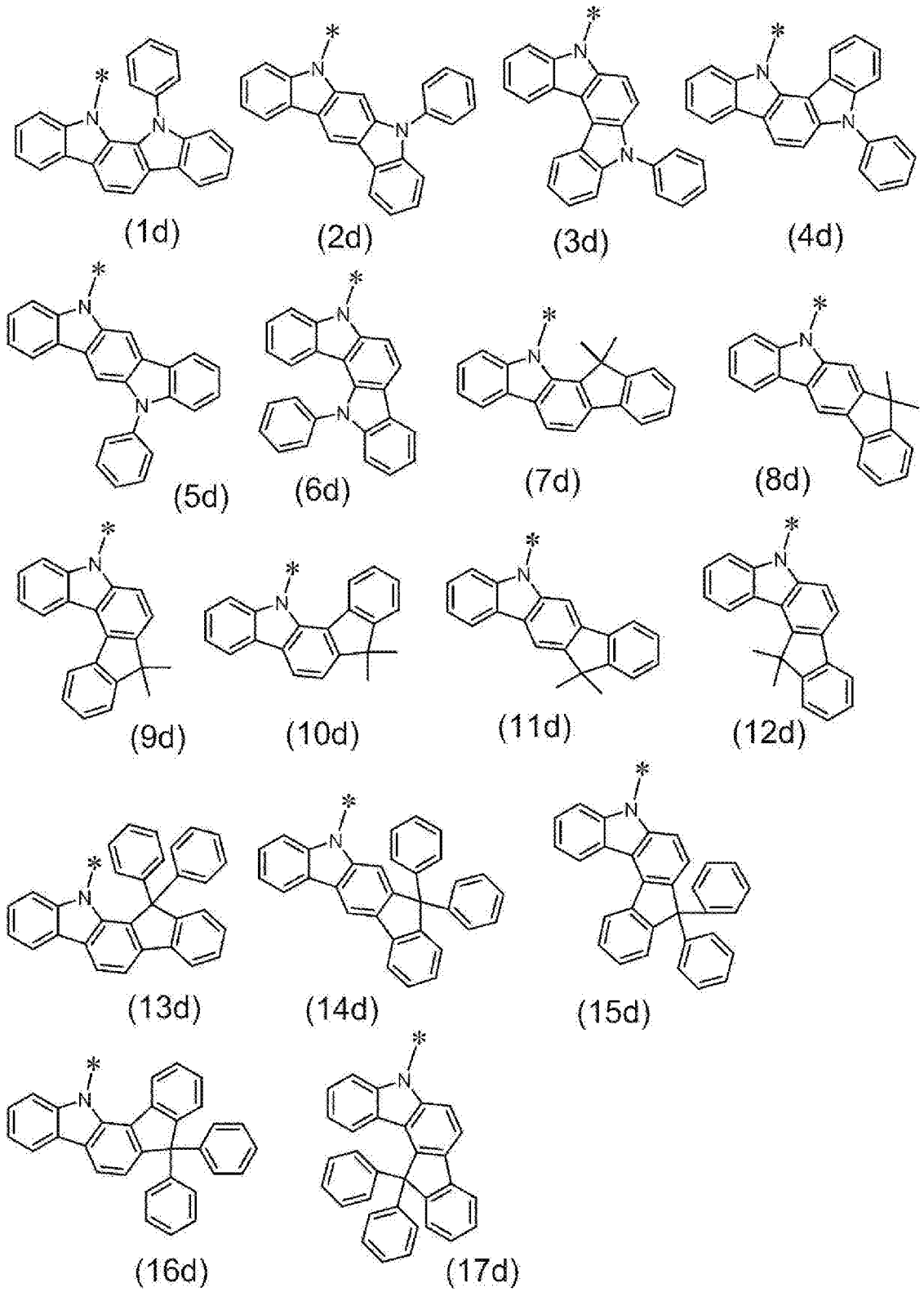
[0126] 一般式 (1-8A)、(1-9A) 及び (1-18A) 中の D_1 は、下記表 1 中の D_1 の欄に記載された番号 1d～38d の基を表す。

一般式 (1-19A)、(1-20A) 及び (1-26A) 中の D_1 は、下記表 2 中の D_1 の欄に記載された番号 1d～38d の基を表す。

[0127] 以下、表中に記載された1 d～38 dの基（基（1 d）～基（38 d））を示す。*は、それぞれ独立に、一般式（1-8 A）、（1-9 A）、（1-18 A）～（1-20 A）及び（1-26 A）、並びに後述の一般式（1-1 A）、（1-10 A）、（1-21 A）、（1-30 A）、（1-31 A）、（1-36 A）～（1-38 A）、（1-41 A）、（1-43 A）及び（1-47 A）中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

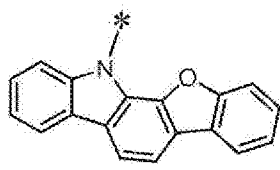
[0128]

[化34]

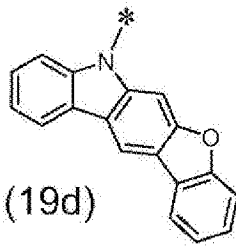


[0129]

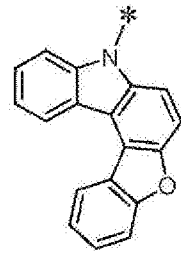
[化35]



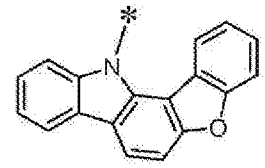
(18d)



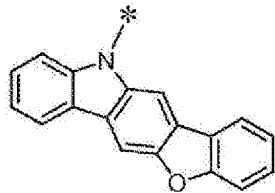
(19d)



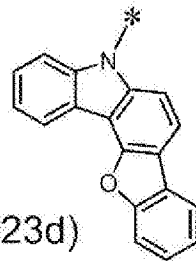
(20d)



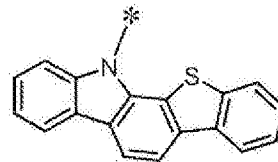
(21d)



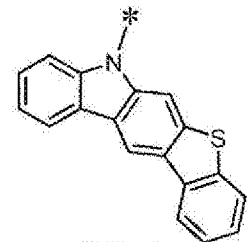
(22d)



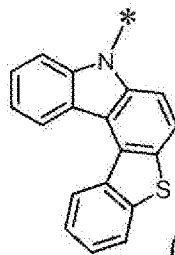
(23d)



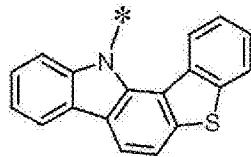
(24d)



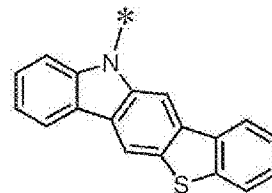
(25d)



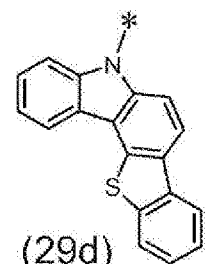
(26d)



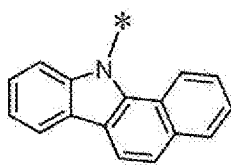
(27d)



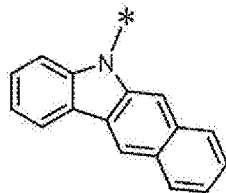
(28d)



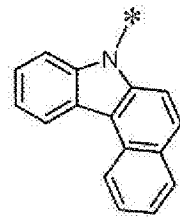
(29d)



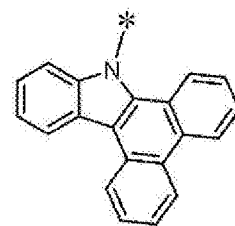
(30d)



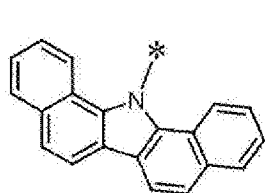
(31d)



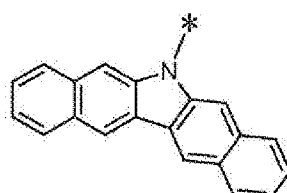
(32d)



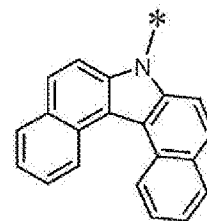
(33d)



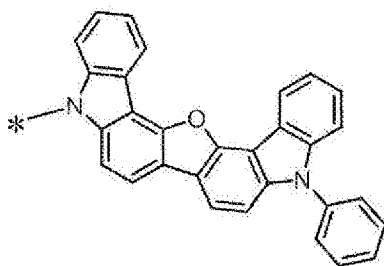
(34d)



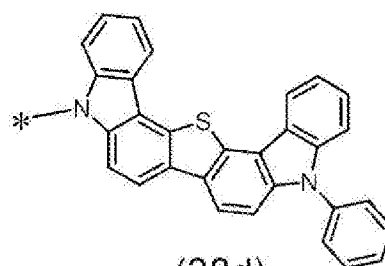
(35d)



(36d)



(37d)



(38d)

[0130] [表1]

化合物No.	一般式	D _i	化合物No.	一般式	D _i	化合物No.	一般式	D _i
化合物 1	1-8A	1d	化合物 39	1-9A	1d	化合物 77	1-18A	1d
化合物 2	1-8A	2d	化合物 40	1-9A	2d	化合物 78	1-18A	2d
化合物 3	1-8A	3d	化合物 41	1-9A	3d	化合物 79	1-18A	3d
化合物 4	1-8A	4d	化合物 42	1-9A	4d	化合物 80	1-18A	4d
化合物 5	1-8A	5d	化合物 43	1-9A	5d	化合物 81	1-18A	5d
化合物 6	1-8A	6d	化合物 44	1-9A	6d	化合物 82	1-18A	6d
化合物 7	1-8A	7d	化合物 45	1-9A	7d	化合物 83	1-18A	7d
化合物 8	1-8A	8d	化合物 46	1-9A	8d	化合物 84	1-18A	8d
化合物 9	1-8A	9d	化合物 47	1-9A	9d	化合物 85	1-18A	9d
化合物 10	1-8A	10d	化合物 48	1-9A	10d	化合物 86	1-18A	10d
化合物 11	1-8A	11d	化合物 49	1-9A	11d	化合物 87	1-18A	11d
化合物 12	1-8A	12d	化合物 50	1-9A	12d	化合物 88	1-18A	12d
化合物 13	1-8A	13d	化合物 51	1-9A	13d	化合物 89	1-18A	13d
化合物 14	1-8A	14d	化合物 52	1-9A	14d	化合物 90	1-18A	14d
化合物 15	1-8A	15d	化合物 53	1-9A	15d	化合物 91	1-18A	15d
化合物 16	1-8A	16d	化合物 54	1-9A	16d	化合物 92	1-18A	16d
化合物 17	1-8A	17d	化合物 55	1-9A	17d	化合物 93	1-18A	17d
化合物 18	1-8A	18d	化合物 56	1-9A	18d	化合物 94	1-18A	18d
化合物 19	1-8A	19d	化合物 57	1-9A	19d	化合物 95	1-18A	19d
化合物 20	1-8A	20d	化合物 58	1-9A	20d	化合物 96	1-18A	20d
化合物 21	1-8A	21d	化合物 59	1-9A	21d	化合物 97	1-18A	21d
化合物 22	1-8A	22d	化合物 60	1-9A	22d	化合物 98	1-18A	22d
化合物 23	1-8A	23d	化合物 61	1-9A	23d	化合物 99	1-18A	23d
化合物 24	1-8A	24d	化合物 62	1-9A	24d	化合物 100	1-18A	24d
化合物 25	1-8A	25d	化合物 63	1-9A	25d	化合物 101	1-18A	25d
化合物 26	1-8A	26d	化合物 64	1-9A	26d	化合物 102	1-18A	26d
化合物 27	1-8A	27d	化合物 65	1-9A	27d	化合物 103	1-18A	27d
化合物 28	1-8A	28d	化合物 66	1-9A	28d	化合物 104	1-18A	28d
化合物 29	1-8A	29d	化合物 67	1-9A	29d	化合物 105	1-18A	29d
化合物 30	1-8A	30d	化合物 68	1-9A	30d	化合物 106	1-18A	30d
化合物 31	1-8A	31d	化合物 69	1-9A	31d	化合物 107	1-18A	31d
化合物 32	1-8A	32d	化合物 70	1-9A	32d	化合物 108	1-18A	32d
化合物 33	1-8A	33d	化合物 71	1-9A	33d	化合物 109	1-18A	33d
化合物 34	1-8A	34d	化合物 72	1-9A	34d	化合物 110	1-18A	34d
化合物 35	1-8A	35d	化合物 73	1-9A	35d	化合物 111	1-18A	35d
化合物 36	1-8A	36d	化合物 74	1-9A	36d	化合物 112	1-18A	36d
化合物 37	1-8A	37d	化合物 75	1-9A	37d	化合物 113	1-18A	37d
化合物 38	1-8A	38d	化合物 76	1-9A	38d	化合物 114	1-18A	38d

[0131]

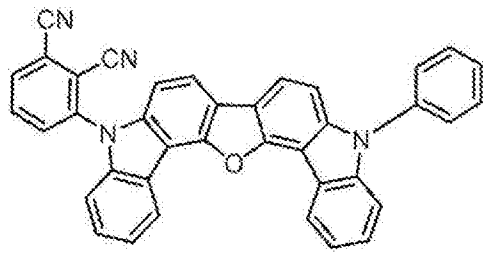
[表2]

化合物No.	一般式	D ₁	化合物No.	一般式	D ₁	化合物No.	一般式	D ₁
化合物 115	1-19A	1d	化合物 153	1-20A	1d	化合物 191	1-26A	1d
化合物 116	1-19A	2d	化合物 154	1-20A	2d	化合物 192	1-26A	2d
化合物 117	1-19A	3d	化合物 155	1-20A	3d	化合物 193	1-26A	3d
化合物 118	1-19A	4d	化合物 156	1-20A	4d	化合物 194	1-26A	4d
化合物 119	1-19A	5d	化合物 157	1-20A	5d	化合物 195	1-26A	5d
化合物 120	1-19A	6d	化合物 158	1-20A	6d	化合物 196	1-26A	6d
化合物 121	1-19A	7d	化合物 159	1-20A	7d	化合物 197	1-26A	7d
化合物 122	1-19A	8d	化合物 160	1-20A	8d	化合物 198	1-26A	8d
化合物 123	1-19A	9d	化合物 161	1-20A	9d	化合物 199	1-26A	9d
化合物 124	1-19A	10d	化合物 162	1-20A	10d	化合物 200	1-26A	10d
化合物 125	1-19A	11d	化合物 163	1-20A	11d	化合物 201	1-26A	11d
化合物 126	1-19A	12d	化合物 164	1-20A	12d	化合物 202	1-26A	12d
化合物 127	1-19A	13d	化合物 165	1-20A	13d	化合物 203	1-26A	13d
化合物 128	1-19A	14d	化合物 166	1-20A	14d	化合物 204	1-26A	14d
化合物 129	1-19A	15d	化合物 167	1-20A	15d	化合物 205	1-26A	15d
化合物 130	1-19A	16d	化合物 168	1-20A	16d	化合物 206	1-26A	16d
化合物 131	1-19A	17d	化合物 169	1-20A	17d	化合物 207	1-26A	17d
化合物 132	1-19A	18d	化合物 170	1-20A	18d	化合物 208	1-26A	18d
化合物 133	1-19A	19d	化合物 171	1-20A	19d	化合物 209	1-26A	19d
化合物 134	1-19A	20d	化合物 172	1-20A	20d	化合物 210	1-26A	20d
化合物 135	1-19A	21d	化合物 173	1-20A	21d	化合物 211	1-26A	21d
化合物 136	1-19A	22d	化合物 174	1-20A	22d	化合物 212	1-26A	22d
化合物 137	1-19A	23d	化合物 175	1-20A	23d	化合物 213	1-26A	23d
化合物 138	1-19A	24d	化合物 176	1-20A	24d	化合物 214	1-26A	24d
化合物 139	1-19A	25d	化合物 177	1-20A	25d	化合物 215	1-26A	25d
化合物 140	1-19A	26d	化合物 178	1-20A	26d	化合物 216	1-26A	26d
化合物 141	1-19A	27d	化合物 179	1-20A	27d	化合物 217	1-26A	27d
化合物 142	1-19A	28d	化合物 180	1-20A	28d	化合物 218	1-26A	28d
化合物 143	1-19A	29d	化合物 181	1-20A	29d	化合物 219	1-26A	29d
化合物 144	1-19A	30d	化合物 182	1-20A	30d	化合物 220	1-26A	30d
化合物 145	1-19A	31d	化合物 183	1-20A	31d	化合物 221	1-26A	31d
化合物 146	1-19A	32d	化合物 184	1-20A	32d	化合物 222	1-26A	32d
化合物 147	1-19A	33d	化合物 185	1-20A	33d	化合物 223	1-26A	33d
化合物 148	1-19A	34d	化合物 186	1-20A	34d	化合物 224	1-26A	34d
化合物 149	1-19A	35d	化合物 187	1-20A	35d	化合物 225	1-26A	35d
化合物 150	1-19A	36d	化合物 188	1-20A	36d	化合物 226	1-26A	36d
化合物 151	1-19A	37d	化合物 189	1-20A	37d	化合物 227	1-26A	37d
化合物 152	1-19A	38d	化合物 190	1-20A	38d	化合物 228	1-26A	38d

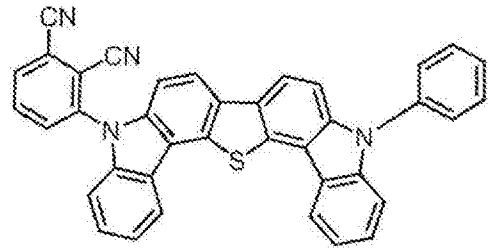
[0132] 例えば、表1～2において、化合物37～38、75～76、113～114、151～152、189～190及び227～228を、化学構造式で示すと下記の通りとなる。

[0133]

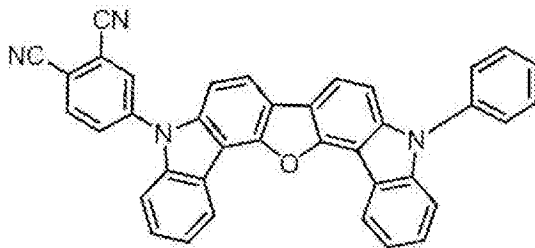
[化36]



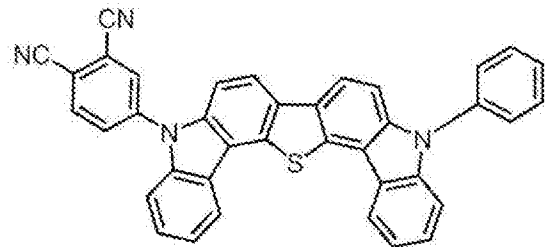
化合物37



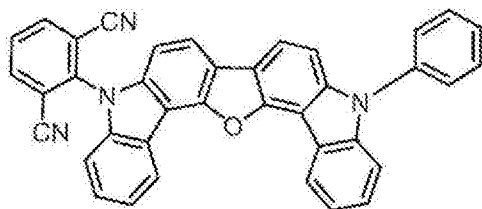
化合物38



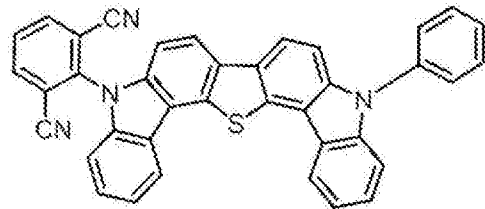
化合物75



化合物76



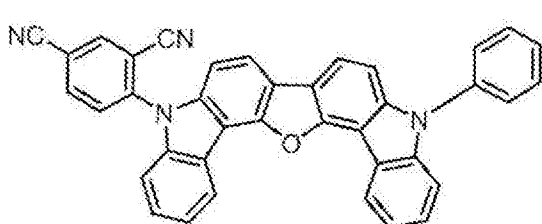
化合物113



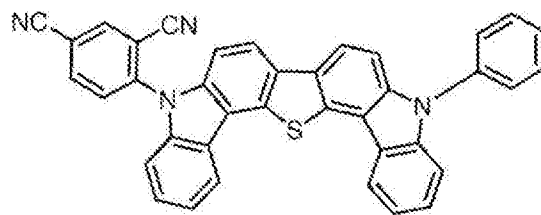
化合物114

[0134]

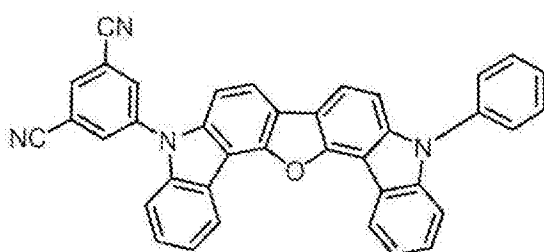
[化37]



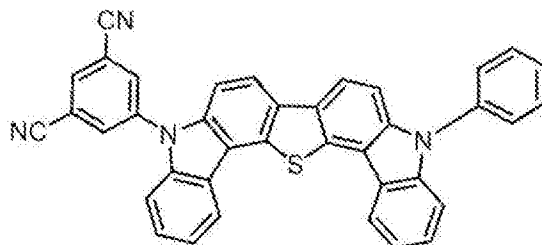
化合物151



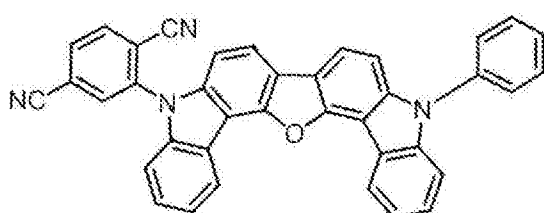
化合物152



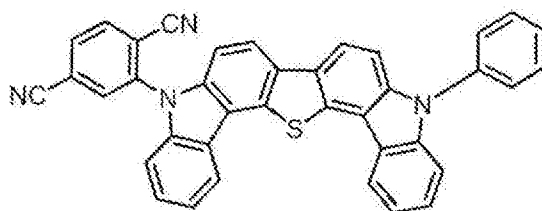
化合物189



化合物190



化合物227

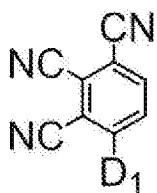


化合物228

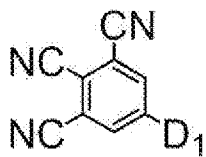
[0135] また、本実施形態に係る化合物の具体例としては、例えば、下記一般式（1-30A）、（1-31A）、（1-36A）、（1-37A）、（1-38A）、（1-41A）、（1-43A）及び（1-47A）で表される化合物が挙げられる。

[0136]

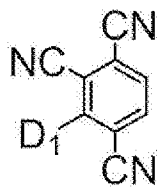
[化38]



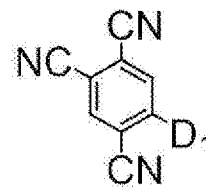
(1-30A)



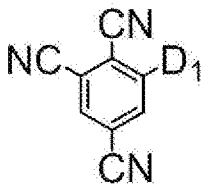
(1-31A)



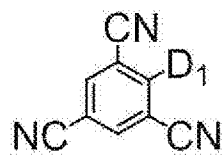
(1-36A)



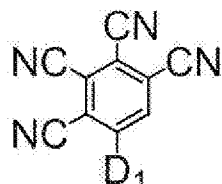
(1-37A)



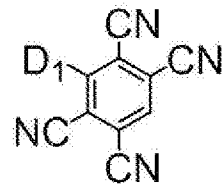
(1-38A)



(1-41A)



(1-43A)



(1-47A)

[0137] 一般式(1-30A)、(1-31A)及び(1-36A)中の D_1 は、下記表3中の D_1 の欄に記載された番号の基を表す。

一般式(1-37A)、(1-38A)及び(1-41A)中の D_1 は、下記表4中の D_1 の欄に記載された番号の基を表す。

一般式(1-43A)及び(1-47A)中の D_1 は、下記表5中の D_1 の欄に記載された番号の基を表す。

[0138]

[表3]

化合物No.	一般式	D ₁	化合物No.	一般式	D ₁	化合物No.	一般式	D ₁
化合物 229	1-30A	1d	化合物 267	1-31A	1d	化合物 305	1-36A	1d
化合物 230	1-30A	2d	化合物 268	1-31A	2d	化合物 306	1-36A	2d
化合物 231	1-30A	3d	化合物 269	1-31A	3d	化合物 307	1-36A	3d
化合物 232	1-30A	4d	化合物 270	1-31A	4d	化合物 308	1-36A	4d
化合物 233	1-30A	5d	化合物 271	1-31A	5d	化合物 309	1-36A	5d
化合物 234	1-30A	6d	化合物 272	1-31A	6d	化合物 310	1-36A	6d
化合物 235	1-30A	7d	化合物 273	1-31A	7d	化合物 311	1-36A	7d
化合物 236	1-30A	8d	化合物 274	1-31A	8d	化合物 312	1-36A	8d
化合物 237	1-30A	9d	化合物 275	1-31A	9d	化合物 313	1-36A	9d
化合物 238	1-30A	10d	化合物 276	1-31A	10d	化合物 314	1-36A	10d
化合物 239	1-30A	11d	化合物 277	1-31A	11d	化合物 315	1-36A	11d
化合物 240	1-30A	12d	化合物 278	1-31A	12d	化合物 316	1-36A	12d
化合物 241	1-30A	13d	化合物 279	1-31A	13d	化合物 317	1-36A	13d
化合物 242	1-30A	14d	化合物 280	1-31A	14d	化合物 318	1-36A	14d
化合物 243	1-30A	15d	化合物 281	1-31A	15d	化合物 319	1-36A	15d
化合物 244	1-30A	16d	化合物 282	1-31A	16d	化合物 320	1-36A	16d
化合物 245	1-30A	17d	化合物 283	1-31A	17d	化合物 321	1-36A	17d
化合物 246	1-30A	18d	化合物 284	1-31A	18d	化合物 322	1-36A	18d
化合物 247	1-30A	19d	化合物 285	1-31A	19d	化合物 323	1-36A	19d
化合物 248	1-30A	20d	化合物 286	1-31A	20d	化合物 324	1-36A	20d
化合物 249	1-30A	21d	化合物 287	1-31A	21d	化合物 325	1-36A	21d
化合物 250	1-30A	22d	化合物 288	1-31A	22d	化合物 326	1-36A	22d
化合物 251	1-30A	23d	化合物 289	1-31A	23d	化合物 327	1-36A	23d
化合物 252	1-30A	24d	化合物 290	1-31A	24d	化合物 328	1-36A	24d
化合物 253	1-30A	25d	化合物 291	1-31A	25d	化合物 329	1-36A	25d
化合物 254	1-30A	26d	化合物 292	1-31A	26d	化合物 330	1-36A	26d
化合物 255	1-30A	27d	化合物 293	1-31A	27d	化合物 331	1-36A	27d
化合物 256	1-30A	28d	化合物 294	1-31A	28d	化合物 332	1-36A	28d
化合物 257	1-30A	29d	化合物 295	1-31A	29d	化合物 333	1-36A	29d
化合物 258	1-30A	30d	化合物 296	1-31A	30d	化合物 334	1-36A	30d
化合物 259	1-30A	31d	化合物 297	1-31A	31d	化合物 335	1-36A	31d
化合物 260	1-30A	32d	化合物 298	1-31A	32d	化合物 336	1-36A	32d
化合物 261	1-30A	33d	化合物 299	1-31A	33d	化合物 337	1-36A	33d
化合物 262	1-30A	34d	化合物 300	1-31A	34d	化合物 338	1-36A	34d
化合物 263	1-30A	35d	化合物 301	1-31A	35d	化合物 339	1-36A	35d
化合物 264	1-30A	36d	化合物 302	1-31A	36d	化合物 340	1-36A	36d
化合物 265	1-30A	37d	化合物 303	1-31A	37d	化合物 341	1-36A	37d
化合物 266	1-30A	38d	化合物 304	1-31A	38d	化合物 342	1-36A	38d

[0139]

[表4]

化合物No.	一般式	D ₁	化合物No.	一般式	D ₁	化合物No.	一般式	D ₁
化合物 343	1-37A	1d	化合物 381	1-38A	1d	化合物 419	1-41A	1d
化合物 344	1-37A	2d	化合物 382	1-38A	2d	化合物 420	1-41A	2d
化合物 345	1-37A	3d	化合物 383	1-38A	3d	化合物 421	1-41A	3d
化合物 346	1-37A	4d	化合物 384	1-38A	4d	化合物 422	1-41A	4d
化合物 347	1-37A	5d	化合物 385	1-38A	5d	化合物 423	1-41A	5d
化合物 348	1-37A	6d	化合物 386	1-38A	6d	化合物 424	1-41A	6d
化合物 349	1-37A	7d	化合物 387	1-38A	7d	化合物 425	1-41A	7d
化合物 350	1-37A	8d	化合物 388	1-38A	8d	化合物 426	1-41A	8d
化合物 351	1-37A	9d	化合物 389	1-38A	9d	化合物 427	1-41A	9d
化合物 352	1-37A	10d	化合物 390	1-38A	10d	化合物 428	1-41A	10d
化合物 353	1-37A	11d	化合物 391	1-38A	11d	化合物 429	1-41A	11d
化合物 354	1-37A	12d	化合物 392	1-38A	12d	化合物 430	1-41A	12d
化合物 355	1-37A	13d	化合物 393	1-38A	13d	化合物 431	1-41A	13d
化合物 356	1-37A	14d	化合物 394	1-38A	14d	化合物 432	1-41A	14d
化合物 367	1-37A	15d	化合物 395	1-38A	15d	化合物 433	1-41A	15d
化合物 358	1-37A	16d	化合物 396	1-38A	16d	化合物 434	1-41A	16d
化合物 359	1-37A	17d	化合物 397	1-38A	17d	化合物 435	1-41A	17d
化合物 360	1-37A	18d	化合物 398	1-38A	18d	化合物 436	1-41A	18d
化合物 361	1-37A	19d	化合物 399	1-38A	19d	化合物 437	1-41A	19d
化合物 362	1-37A	20d	化合物 400	1-38A	20d	化合物 438	1-41A	20d
化合物 363	1-37A	21d	化合物 401	1-38A	21d	化合物 439	1-41A	21d
化合物 364	1-37A	22d	化合物 402	1-38A	22d	化合物 440	1-41A	22d
化合物 365	1-37A	23d	化合物 403	1-38A	23d	化合物 441	1-41A	23d
化合物 366	1-37A	24d	化合物 404	1-38A	24d	化合物 442	1-41A	24d
化合物 367	1-37A	25d	化合物 405	1-38A	25d	化合物 443	1-41A	25d
化合物 368	1-37A	26d	化合物 406	1-38A	26d	化合物 444	1-41A	26d
化合物 369	1-37A	27d	化合物 407	1-38A	27d	化合物 445	1-41A	27d
化合物 370	1-37A	28d	化合物 408	1-38A	28d	化合物 446	1-41A	28d
化合物 371	1-37A	29d	化合物 409	1-38A	29d	化合物 447	1-41A	29d
化合物 372	1-37A	30d	化合物 410	1-38A	30d	化合物 448	1-41A	30d
化合物 373	1-37A	31d	化合物 411	1-38A	31d	化合物 449	1-41A	31d
化合物 374	1-37A	32d	化合物 412	1-38A	32d	化合物 450	1-41A	32d
化合物 375	1-37A	33d	化合物 413	1-38A	33d	化合物 451	1-41A	33d
化合物 376	1-37A	34d	化合物 414	1-38A	34d	化合物 452	1-41A	34d
化合物 377	1-37A	35d	化合物 415	1-38A	35d	化合物 453	1-41A	35d
化合物 378	1-37A	36d	化合物 416	1-38A	36d	化合物 454	1-41A	36d
化合物 379	1-37A	37d	化合物 417	1-38A	37d	化合物 455	1-41A	37d
化合物 380	1-37A	38d	化合物 418	1-38A	38d	化合物 456	1-41A	38d

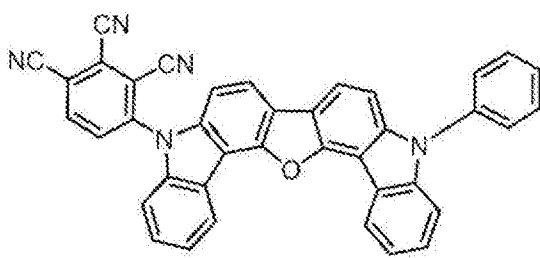
[0140]

[表5]

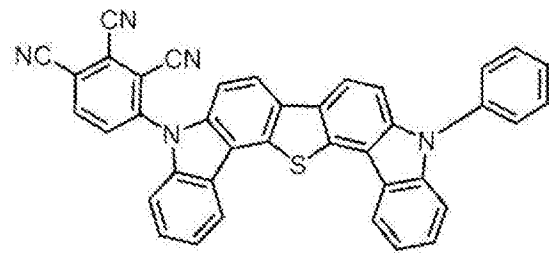
化合物No.	一般式	D ₁	化合物No.	一般式	D ₁
化合物 457	1-43A	1d	化合物 495	1-47A	1d
化合物 458	1-43A	2d	化合物 496	1-47A	2d
化合物 459	1-43A	3d	化合物 497	1-47A	3d
化合物 460	1-43A	4d	化合物 498	1-47A	4d
化合物 461	1-43A	5d	化合物 499	1-47A	5d
化合物 462	1-43A	6d	化合物 500	1-47A	6d
化合物 463	1-43A	7d	化合物 501	1-47A	7d
化合物 464	1-43A	8d	化合物 502	1-47A	8d
化合物 465	1-43A	9d	化合物 503	1-47A	9d
化合物 466	1-43A	10d	化合物 504	1-47A	10d
化合物 467	1-43A	11d	化合物 505	1-47A	11d
化合物 468	1-43A	12d	化合物 506	1-47A	12d
化合物 469	1-43A	13d	化合物 507	1-47A	13d
化合物 470	1-43A	14d	化合物 508	1-47A	14d
化合物 471	1-43A	15d	化合物 509	1-47A	15d
化合物 472	1-43A	16d	化合物 510	1-47A	16d
化合物 473	1-43A	17d	化合物 511	1-47A	17d
化合物 474	1-43A	18d	化合物 512	1-47A	18d
化合物 475	1-43A	19d	化合物 513	1-47A	19d
化合物 476	1-43A	20d	化合物 514	1-47A	20d
化合物 477	1-43A	21d	化合物 515	1-47A	21d
化合物 478	1-43A	22d	化合物 516	1-47A	22d
化合物 479	1-43A	23d	化合物 517	1-47A	23d
化合物 480	1-43A	24d	化合物 518	1-47A	24d
化合物 481	1-43A	25d	化合物 519	1-47A	25d
化合物 482	1-43A	26d	化合物 520	1-47A	26d
化合物 483	1-43A	27d	化合物 521	1-47A	27d
化合物 484	1-43A	28d	化合物 522	1-47A	28d
化合物 485	1-43A	29d	化合物 523	1-47A	29d
化合物 486	1-43A	30d	化合物 524	1-47A	30d
化合物 487	1-43A	31d	化合物 525	1-47A	31d
化合物 488	1-43A	32d	化合物 526	1-47A	32d
化合物 489	1-43A	33d	化合物 527	1-47A	33d
化合物 490	1-43A	34d	化合物 528	1-47A	34d
化合物 491	1-43A	35d	化合物 529	1-47A	35d
化合物 492	1-43A	36d	化合物 530	1-47A	36d
化合物 493	1-43A	37d	化合物 531	1-47A	37d
化合物 494	1-43A	38d	化合物 532	1-47A	38d

[0141] 例えば、表3～5において、化合物265～266、303～304、341～342、379～380、417～418、455～456、493～494及び531～532を、化学構造式で示すと下記の通りとなる。

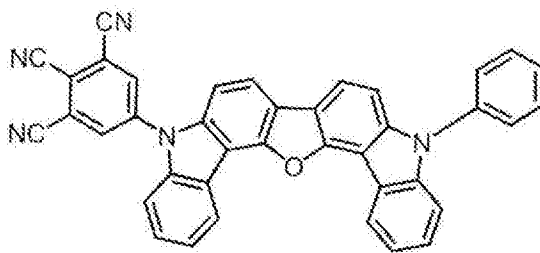
[0142] [化39]



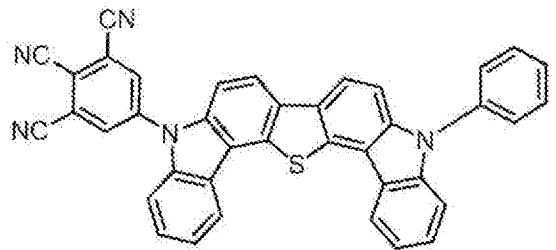
化合物265



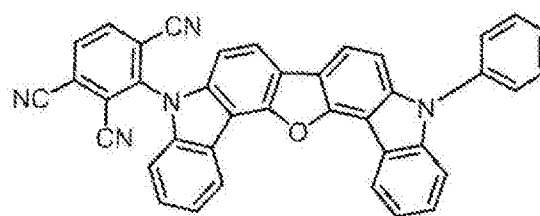
化合物266



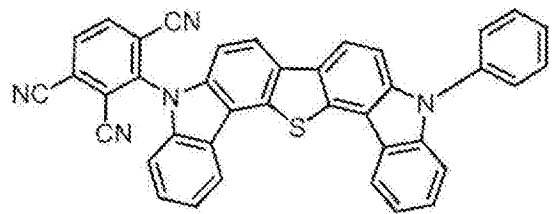
化合物303



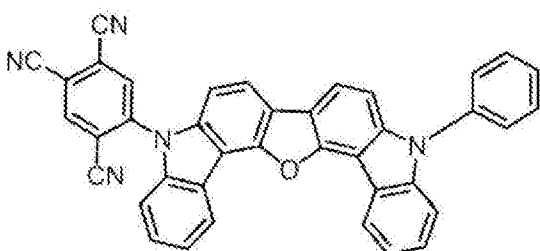
化合物304



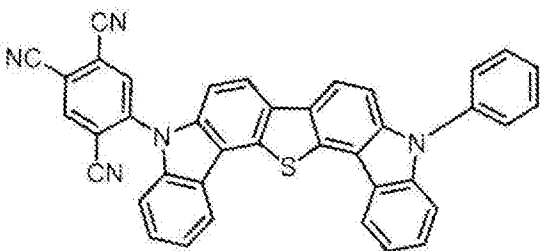
化合物341



化合物342



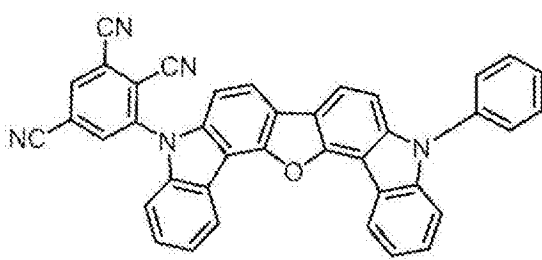
化合物379



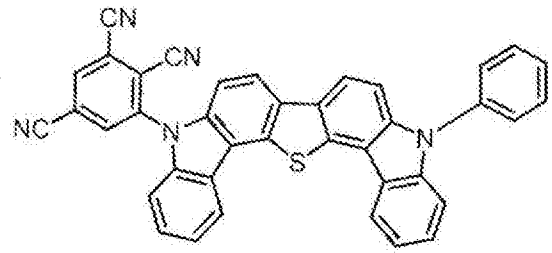
化合物380

[0143]

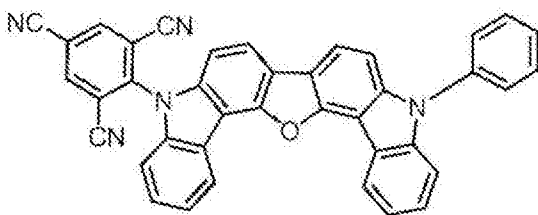
[化40]



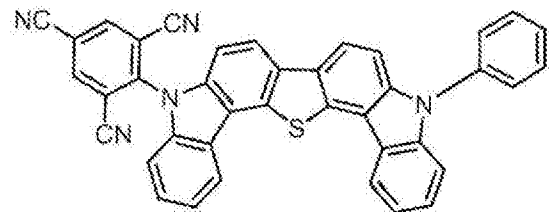
化合物417



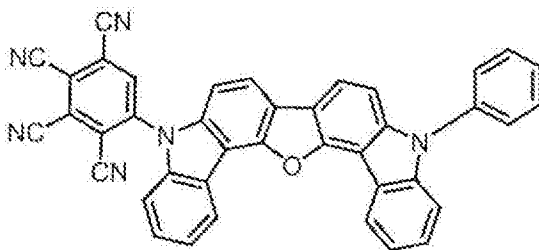
化合物418



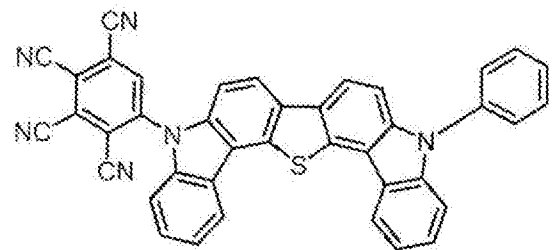
化合物455



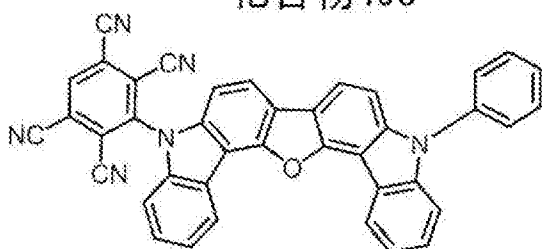
化合物456



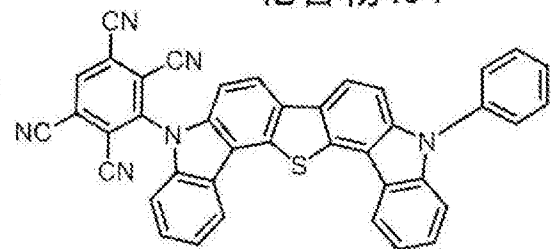
化合物493



化合物494



化合物531

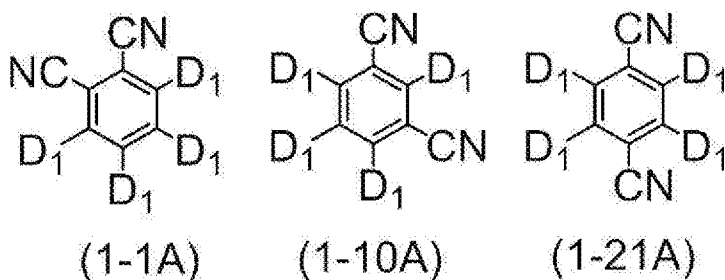


化合物532

[0144] また、本実施形態に係る化合物の具体例としては、例えば、下記一般式（1-1A）、（1-10A）及び（1-21A）で表される化合物が挙げられる。

[0145]

[化41]



[0146] 一般式 (1-1A)、(1-10A) 及び (1-21A) 中の D_1 は、下記表 6 中の D_1 の欄に記載された番号の基を表す。

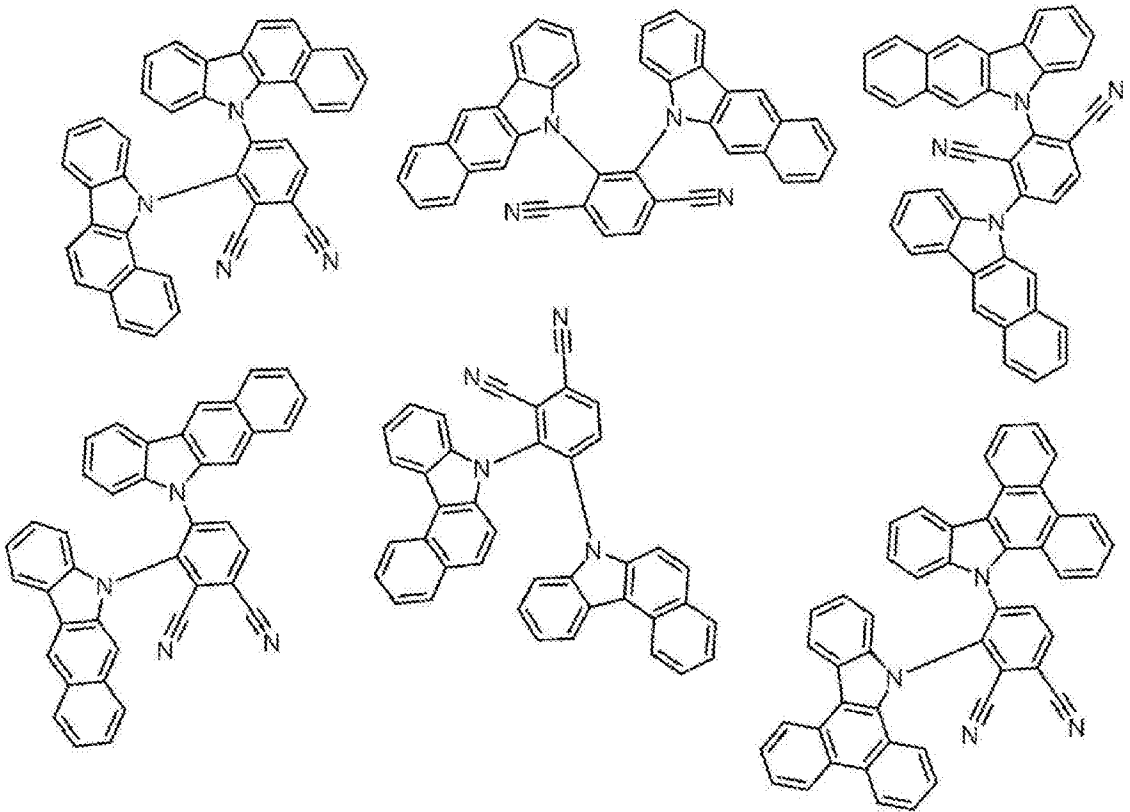
[0147] [表6]

化合物No.	一般式	D_1	化合物No.	一般式	D_1	化合物No.	一般式	D_1
化合物 533	1-1A	1d	化合物 550	1-10A	1d	化合物 567	1-21A	1d
化合物 534	1-1A	2d	化合物 551	1-10A	2d	化合物 568	1-21A	2d
化合物 535	1-1A	3d	化合物 552	1-10A	3d	化合物 569	1-21A	3d
化合物 536	1-1A	4d	化合物 553	1-10A	4d	化合物 570	1-21A	4d
化合物 537	1-1A	5d	化合物 554	1-10A	5d	化合物 571	1-21A	5d
化合物 538	1-1A	6d	化合物 555	1-10A	6d	化合物 572	1-21A	6d
化合物 539	1-1A	7d	化合物 556	1-10A	7d	化合物 573	1-21A	7d
化合物 540	1-1A	8d	化合物 557	1-10A	8d	化合物 574	1-21A	8d
化合物 541	1-1A	9d	化合物 558	1-10A	9d	化合物 575	1-21A	9d
化合物 542	1-1A	10d	化合物 559	1-10A	10d	化合物 576	1-21A	10d
化合物 543	1-1A	11d	化合物 560	1-10A	11d	化合物 577	1-21A	11d
化合物 544	1-1A	12d	化合物 561	1-10A	12d	化合物 578	1-21A	12d
化合物 545	1-1A	13d	化合物 562	1-10A	13d	化合物 579	1-21A	13d
化合物 546	1-1A	14d	化合物 563	1-10A	14d	化合物 580	1-21A	14d
化合物 547	1-1A	15d	化合物 564	1-10A	15d	化合物 581	1-21A	15d
化合物 548	1-1A	16d	化合物 565	1-10A	16d	化合物 582	1-21A	16d
化合物 549	1-1A	17d	化合物 566	1-10A	17d	化合物 583	1-21A	17d

[0148] また、本実施形態に係る化合物の具体例としては、以下の化合物が挙げられる。本発明の化合物は、これらの具体例に限定されない。

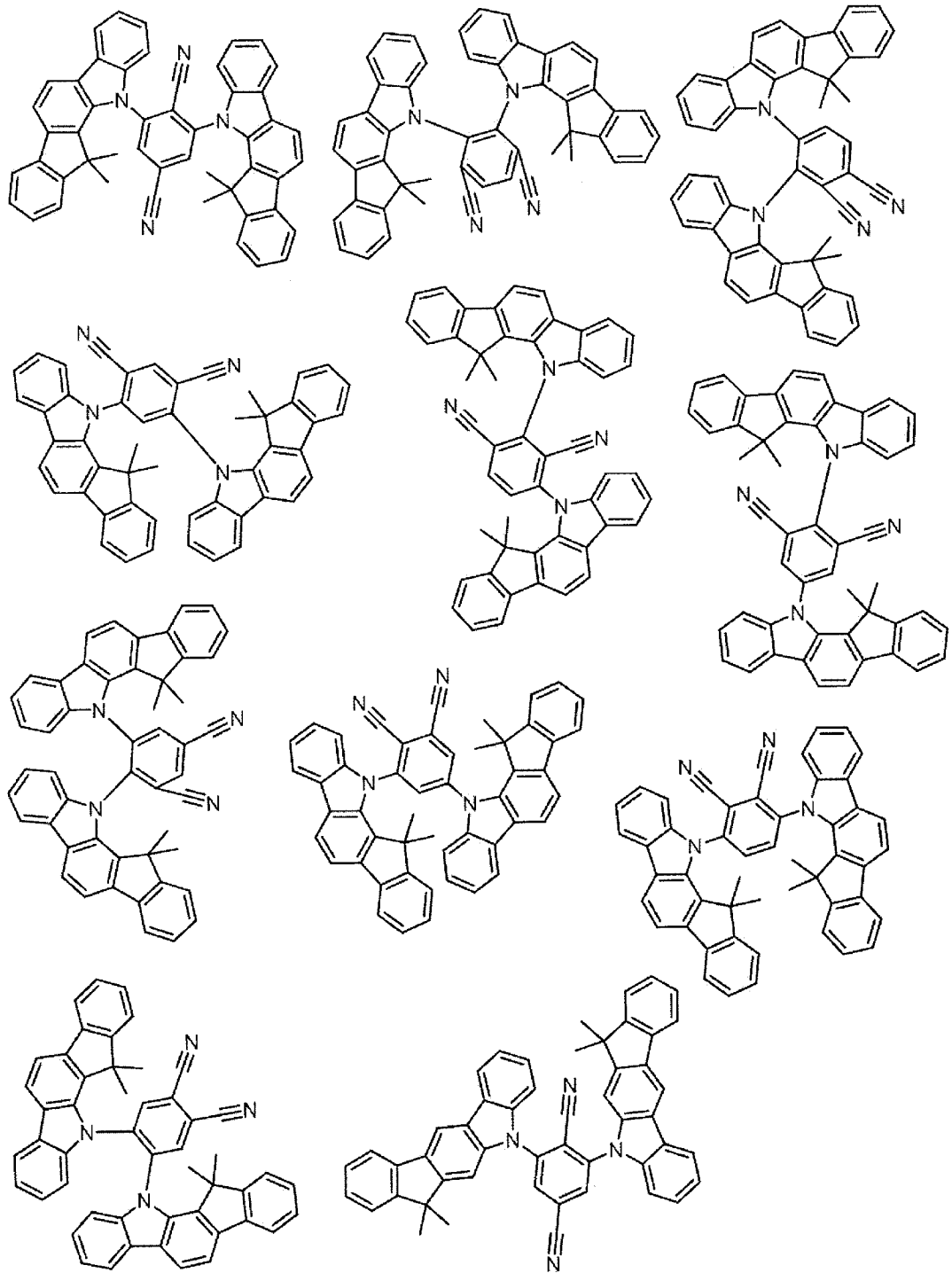
[0149]

[化42]



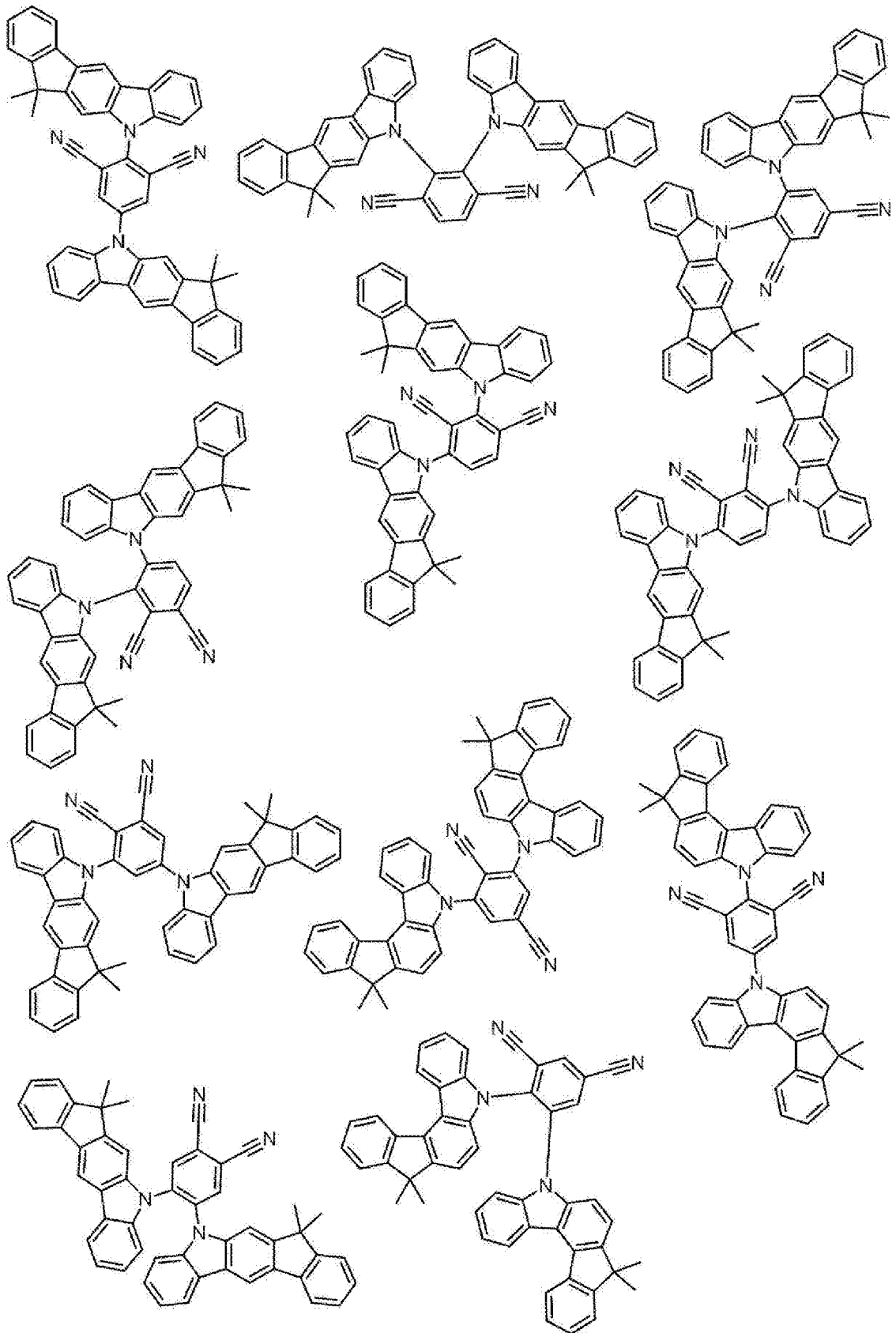
[0150]

[化43]

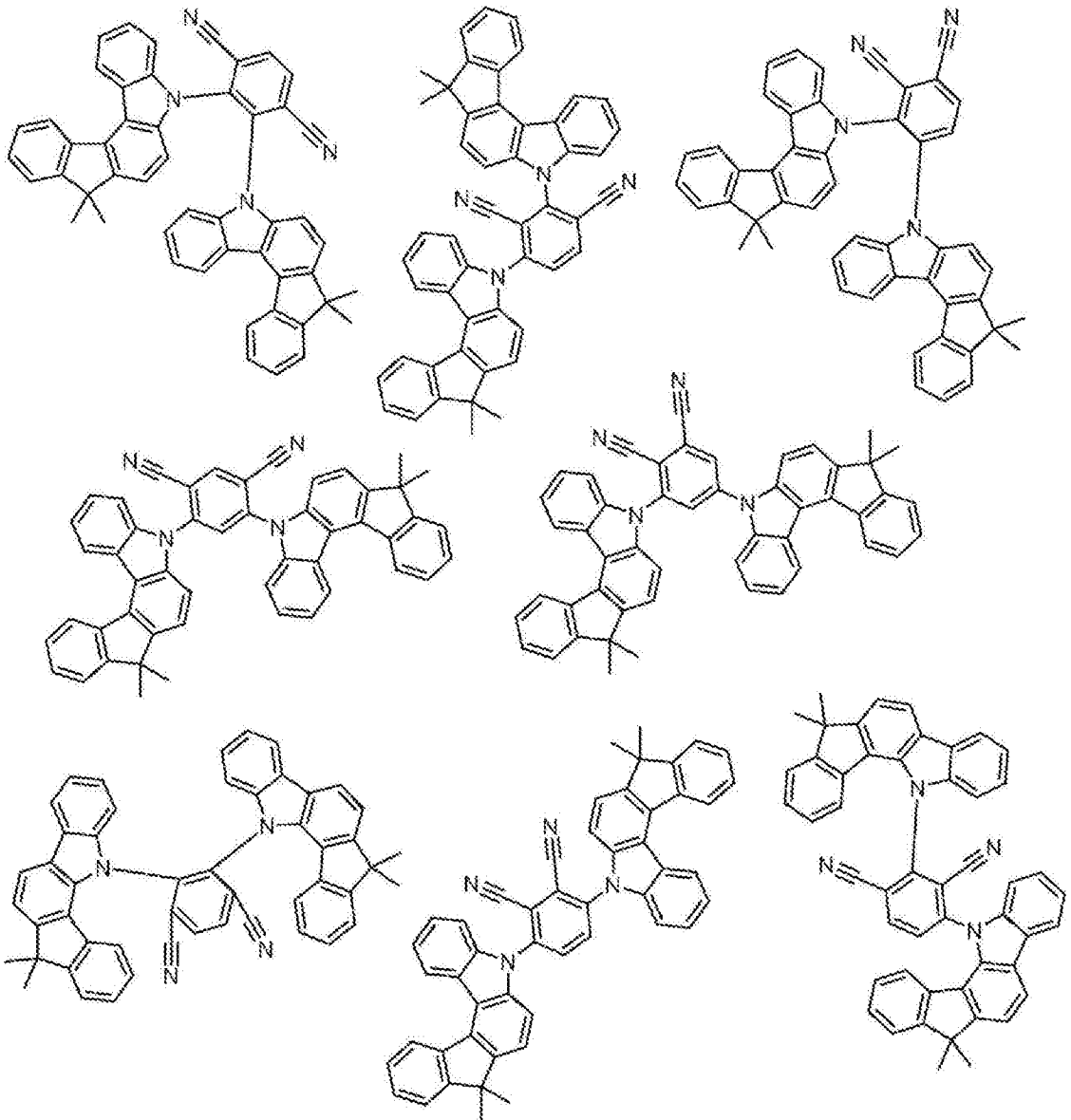


[0151]

[化44]

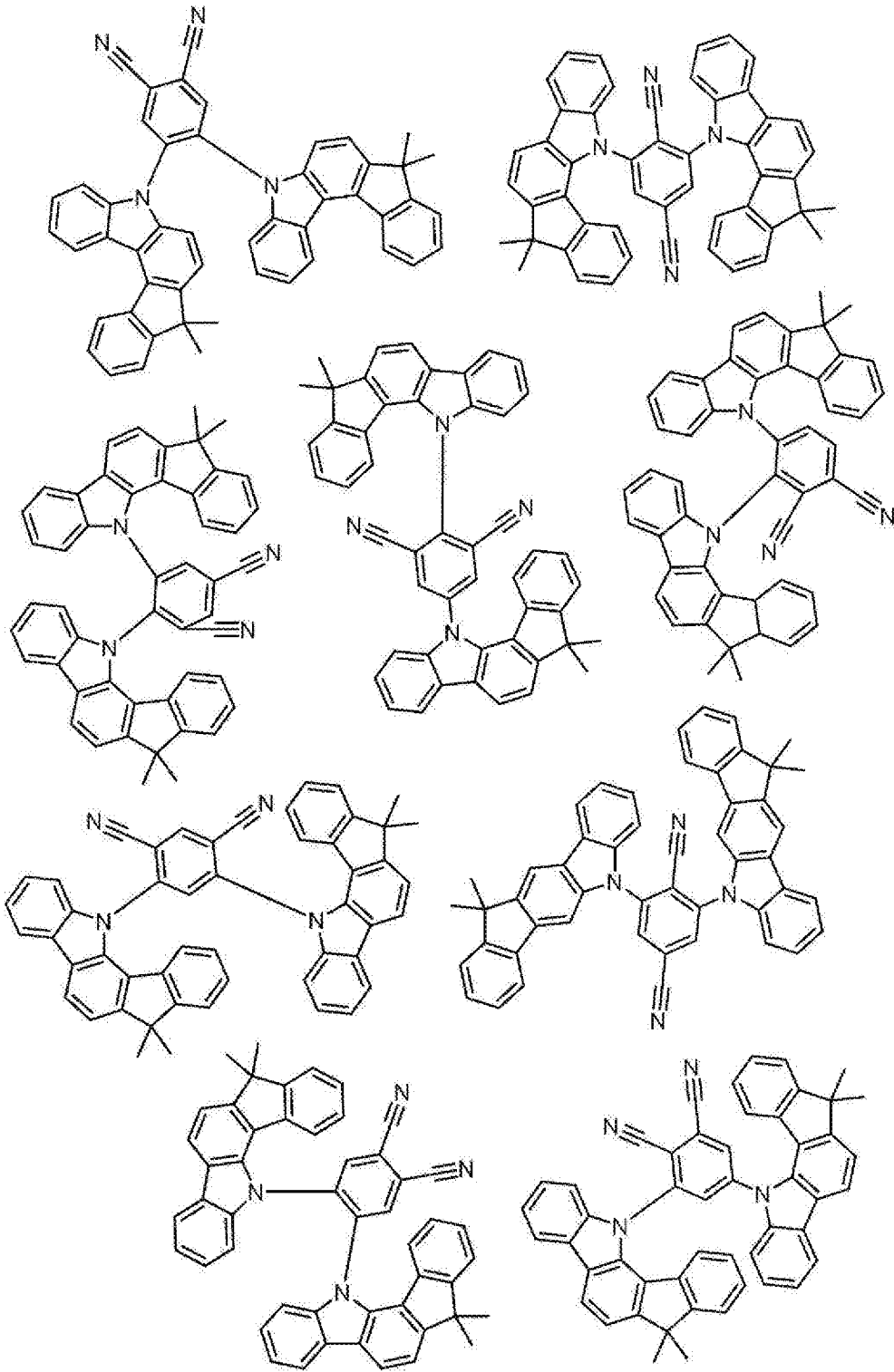


[0152] [化45]



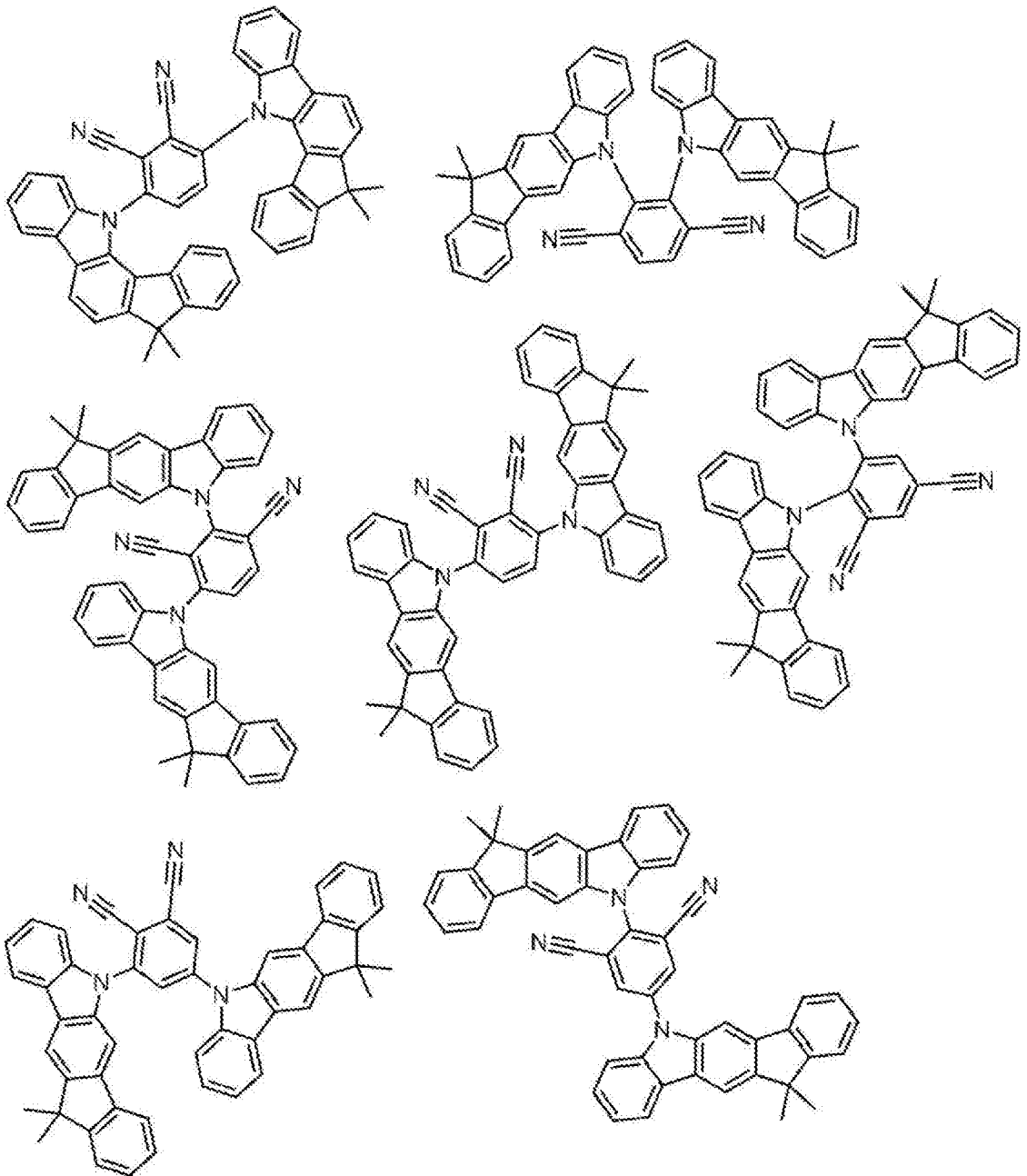
[0153]

[化46]



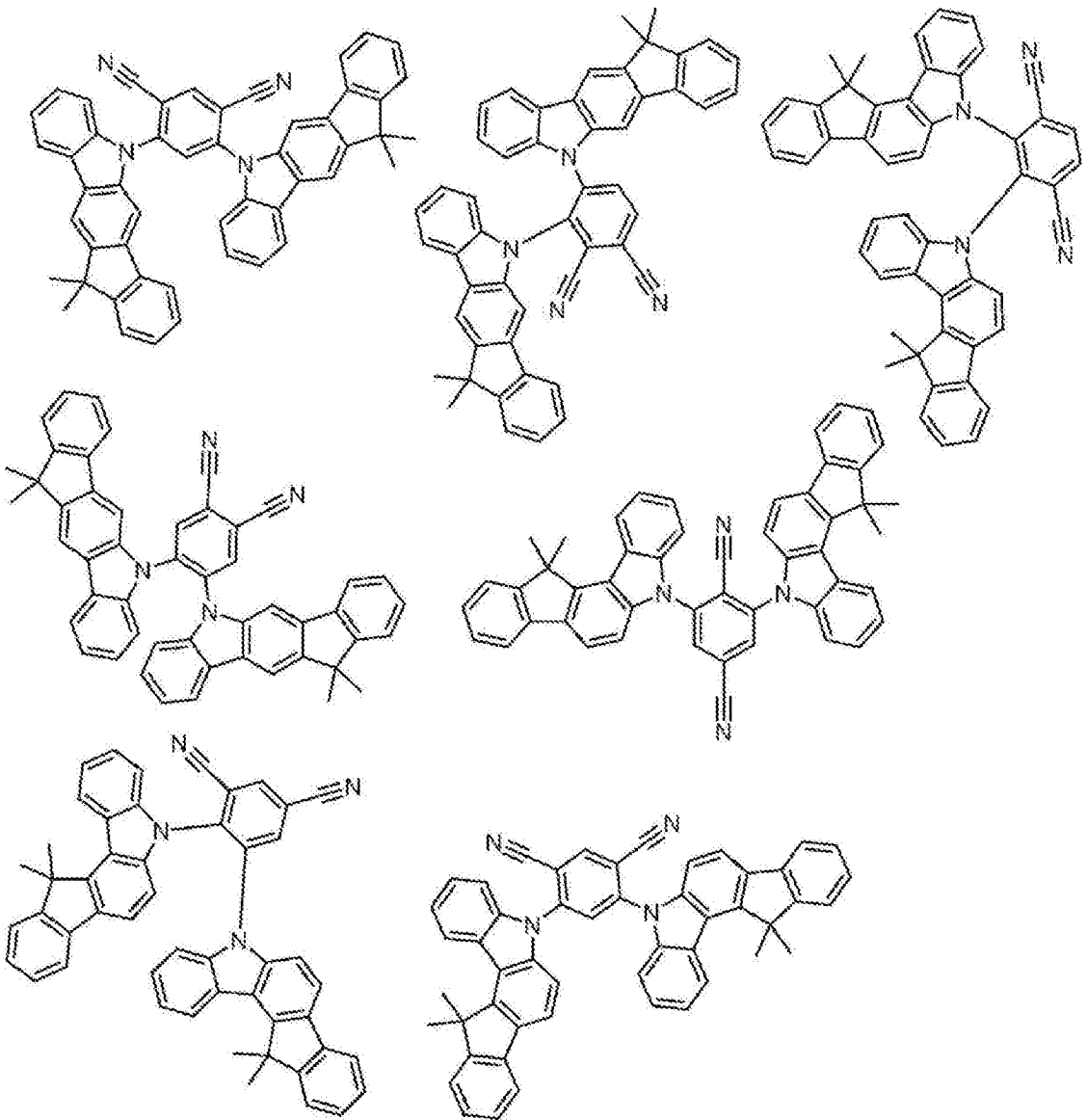
[0154]

[化47]



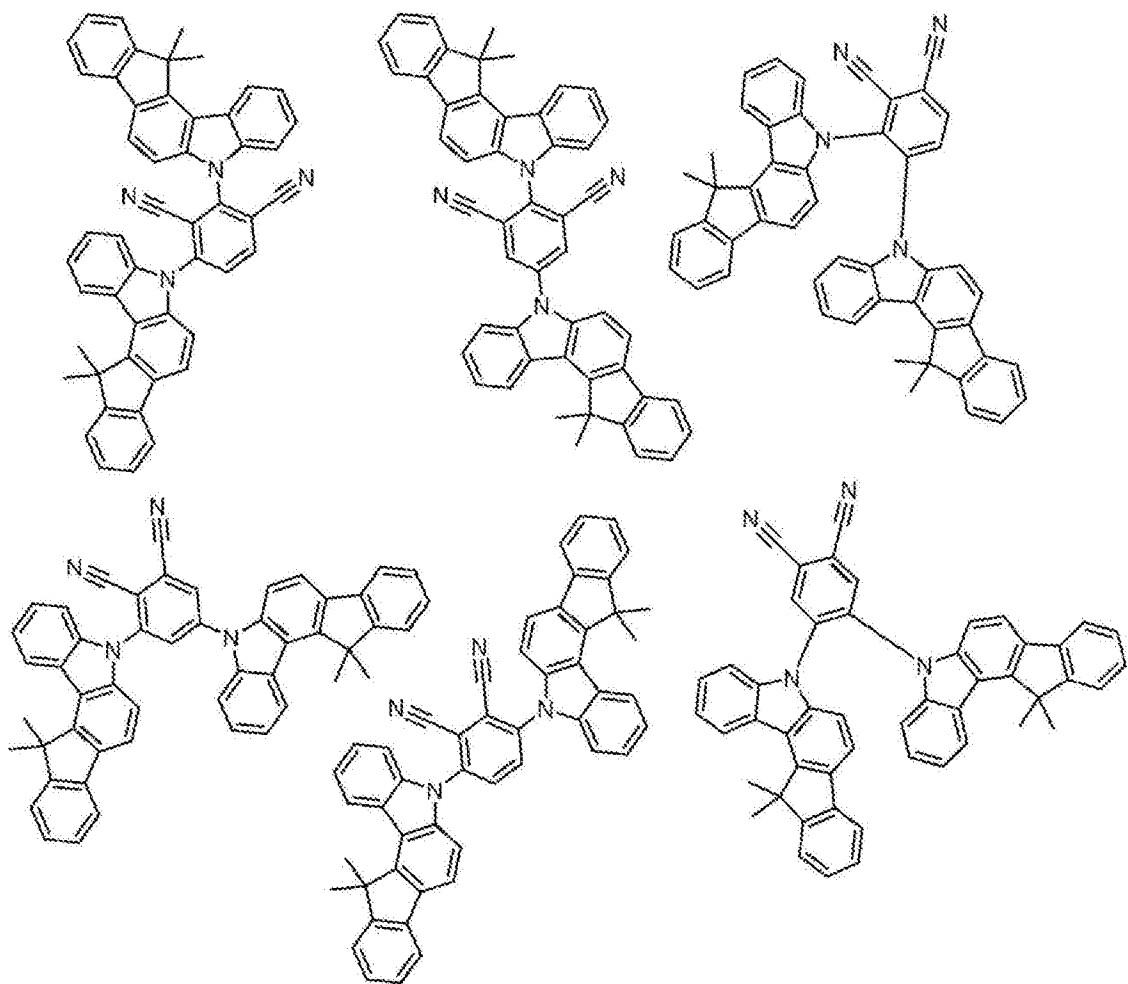
[0155]

[化48]



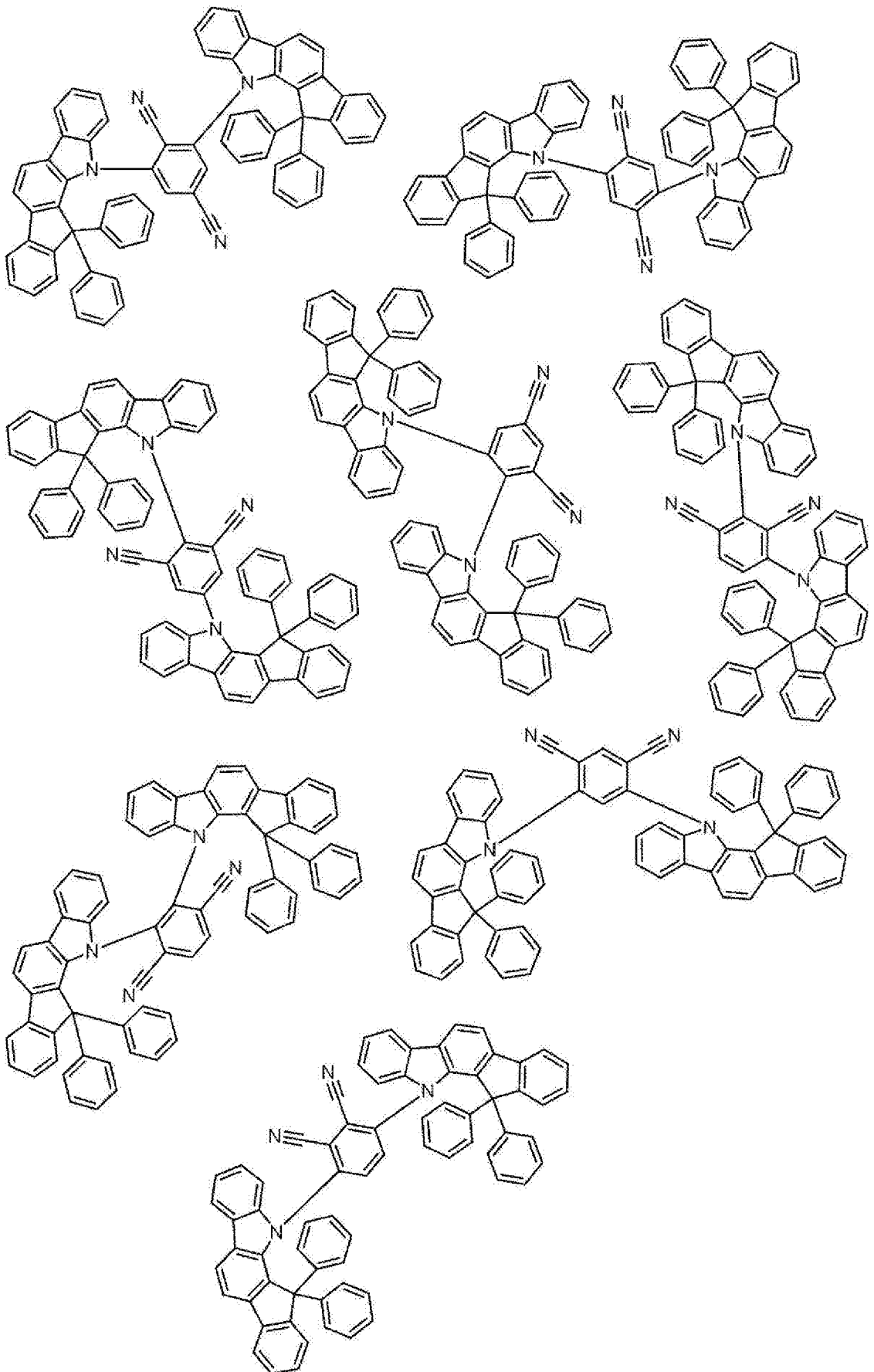
[0156]

[化49]

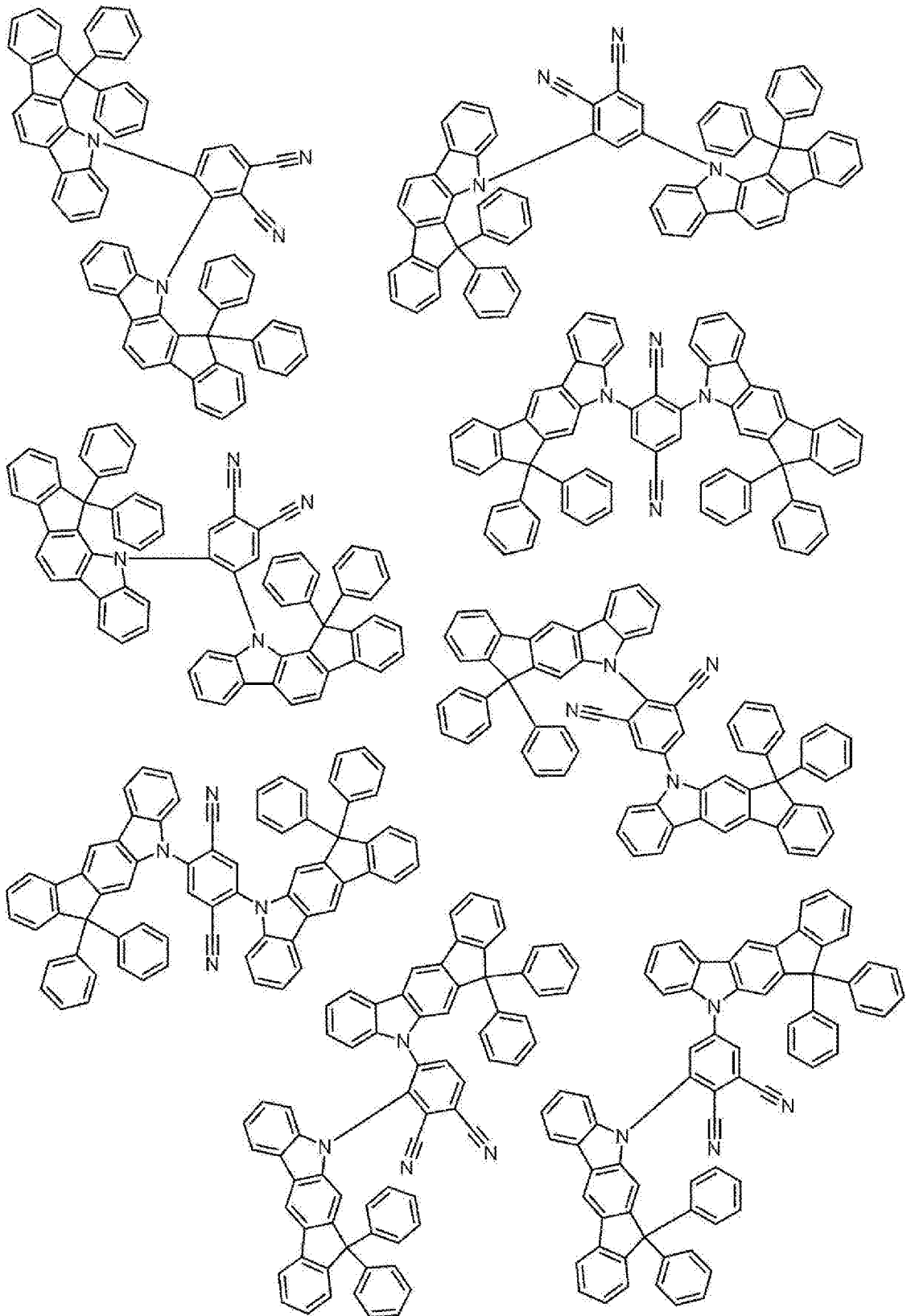


[0157]

[化50]

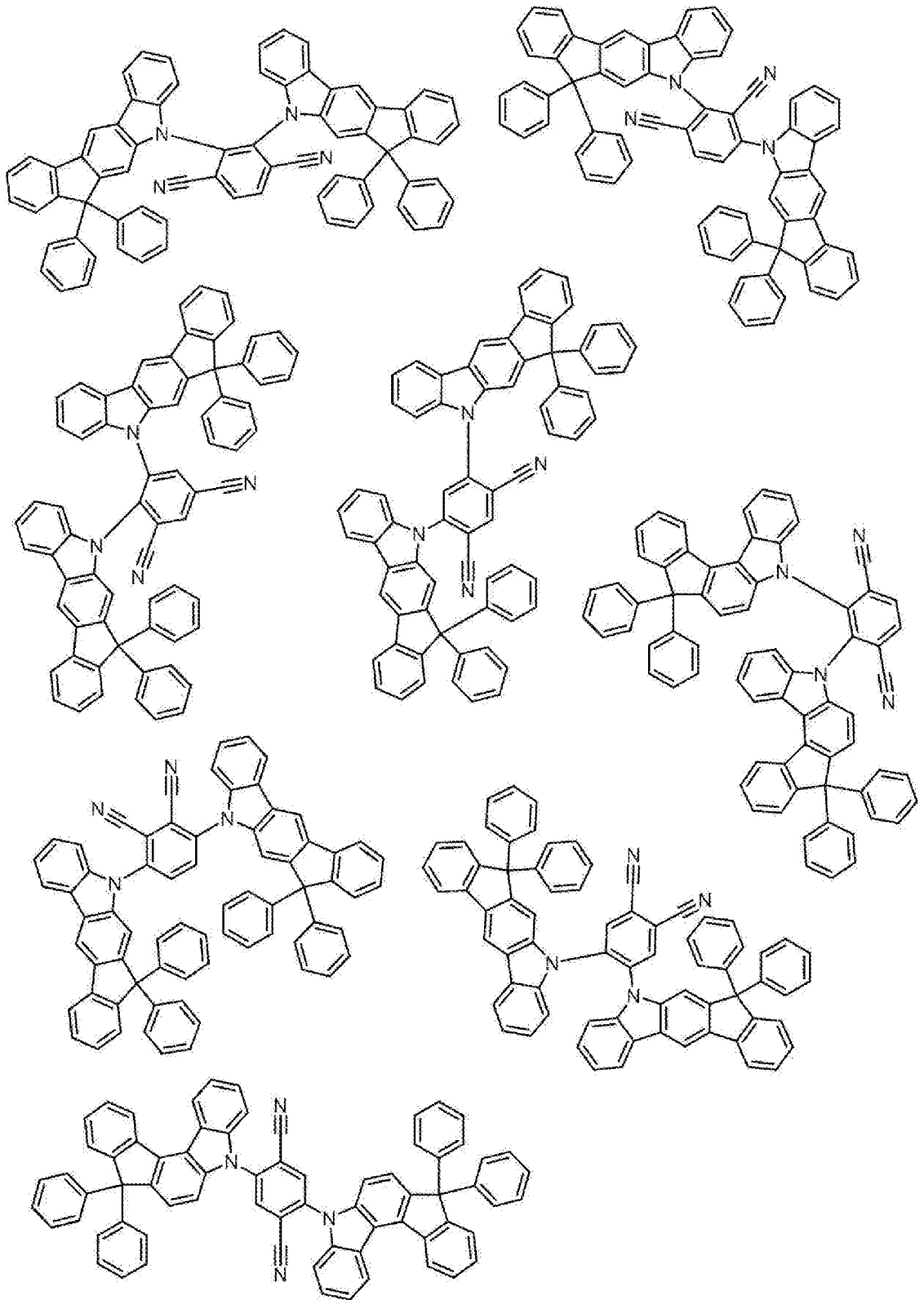


[0158] [化51]



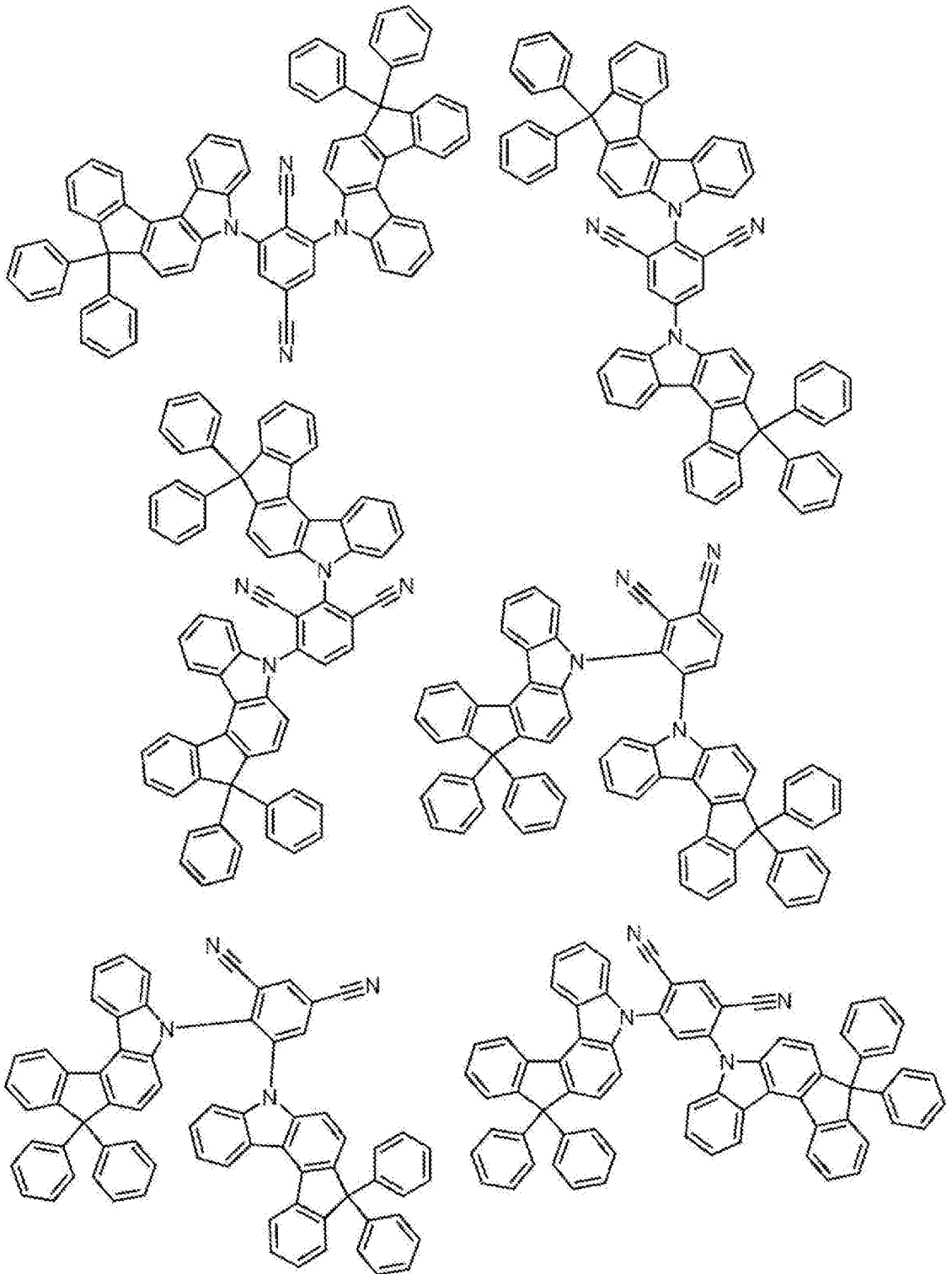
[0159]

[化52]



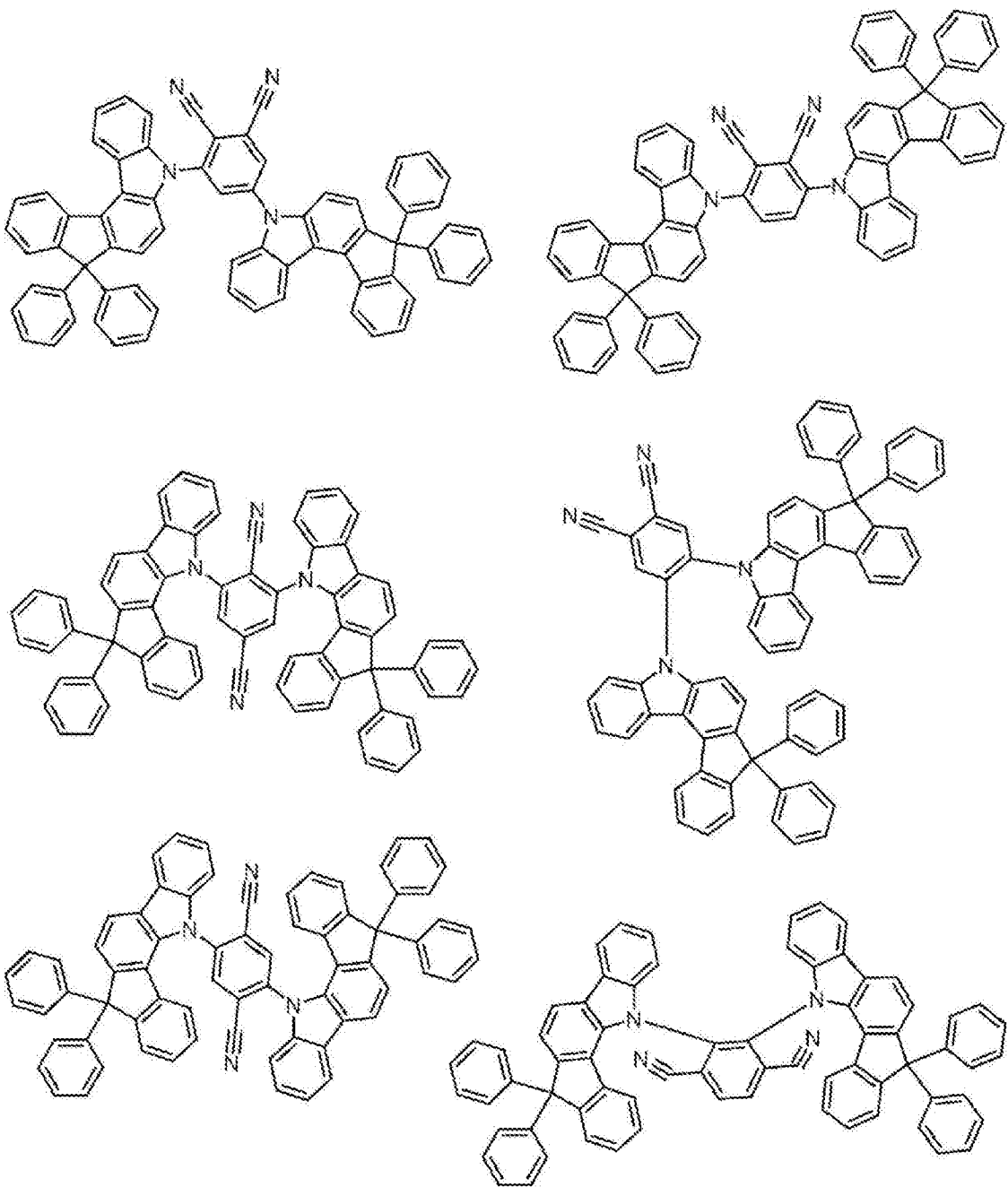
[0160]

[化53]



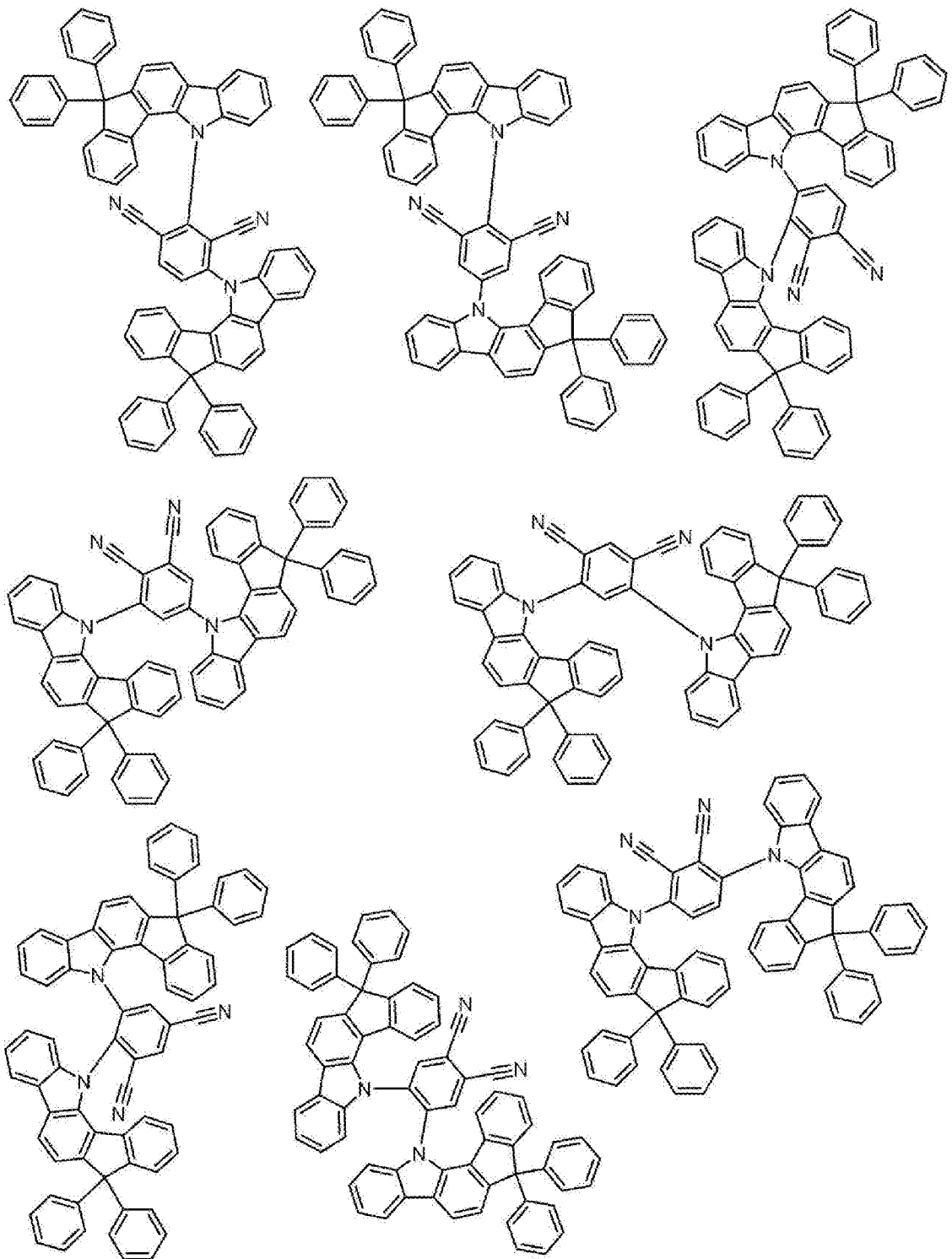
[0161]

[化54]



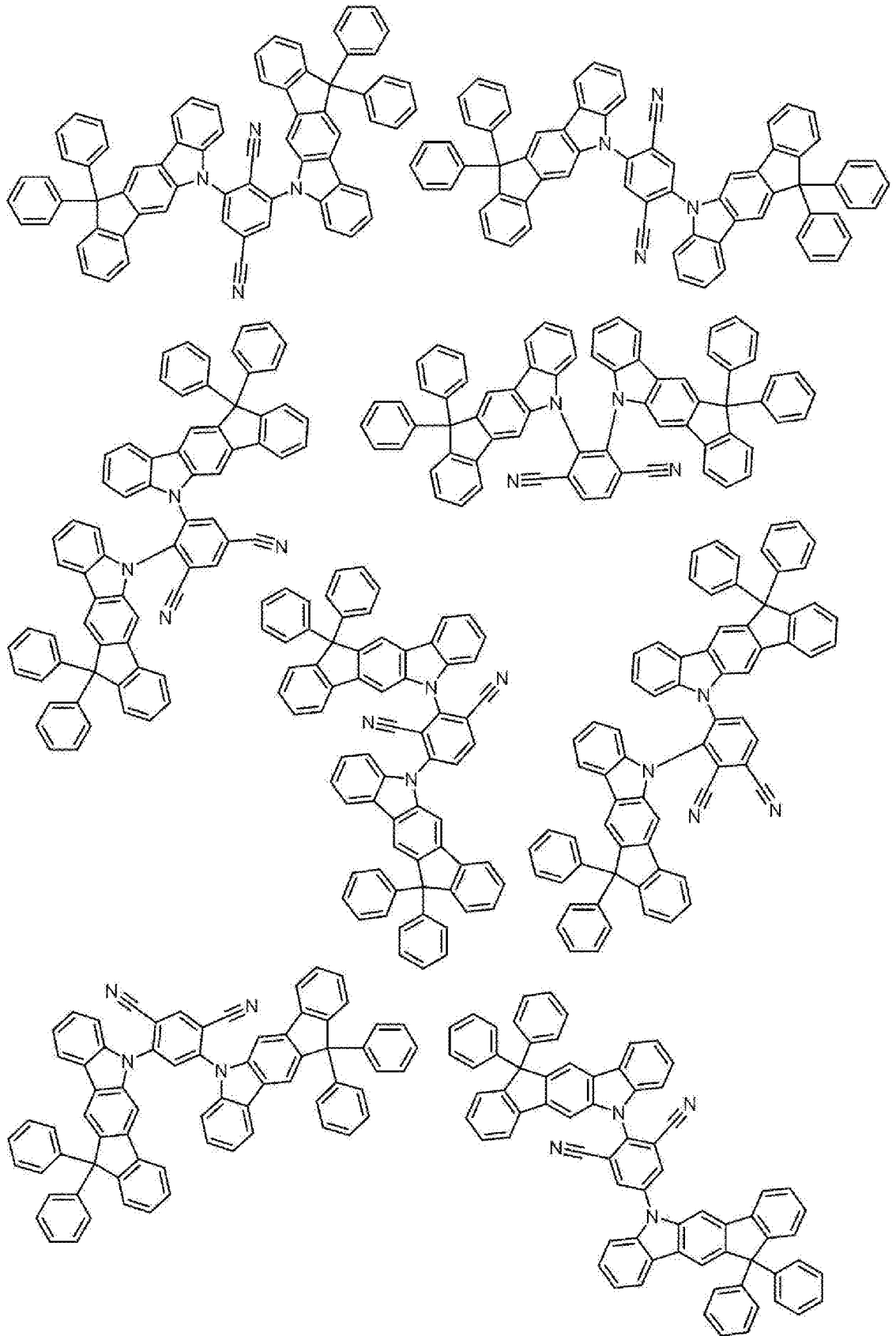
[0162]

[化55]

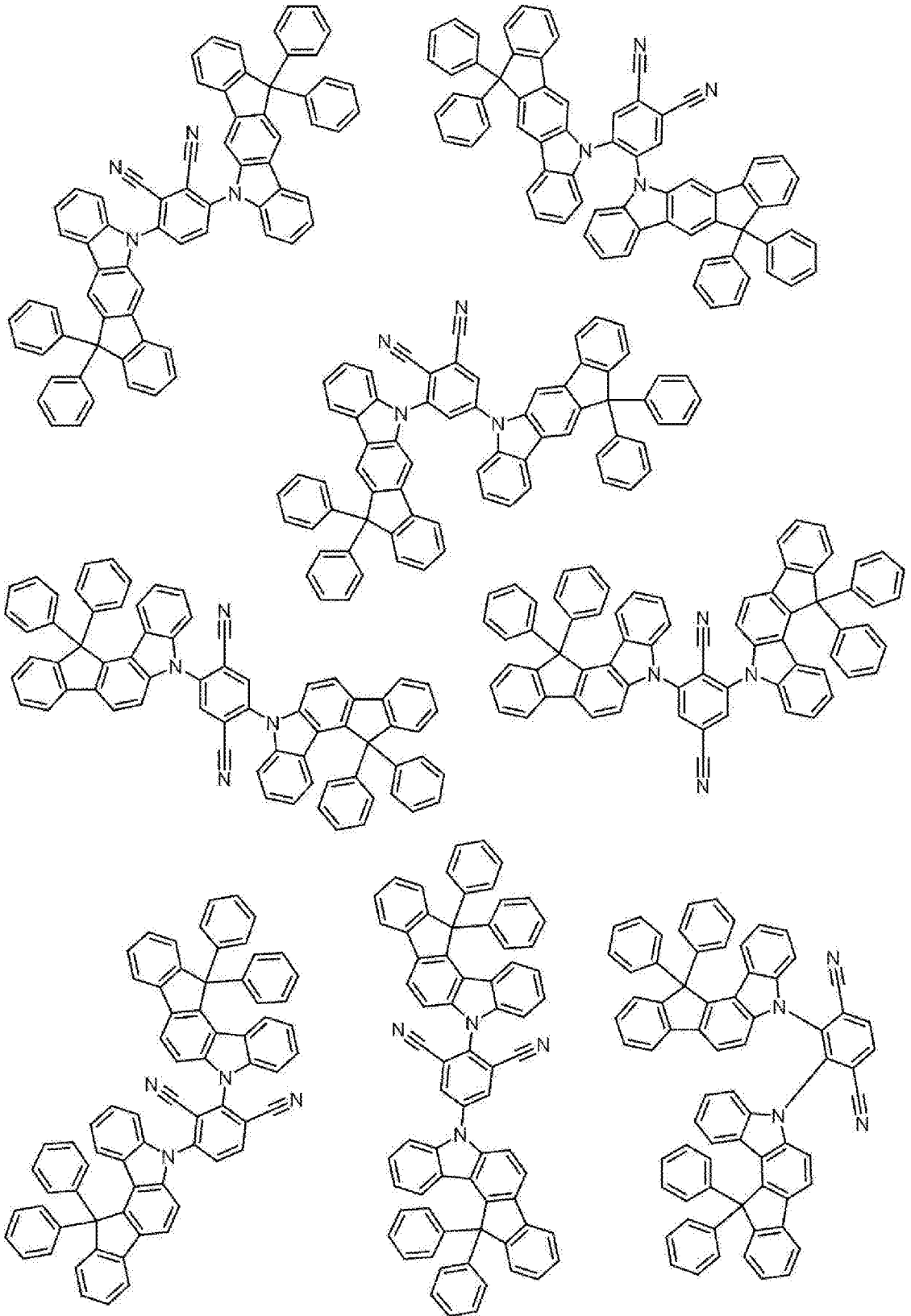


[0163]

[化56]

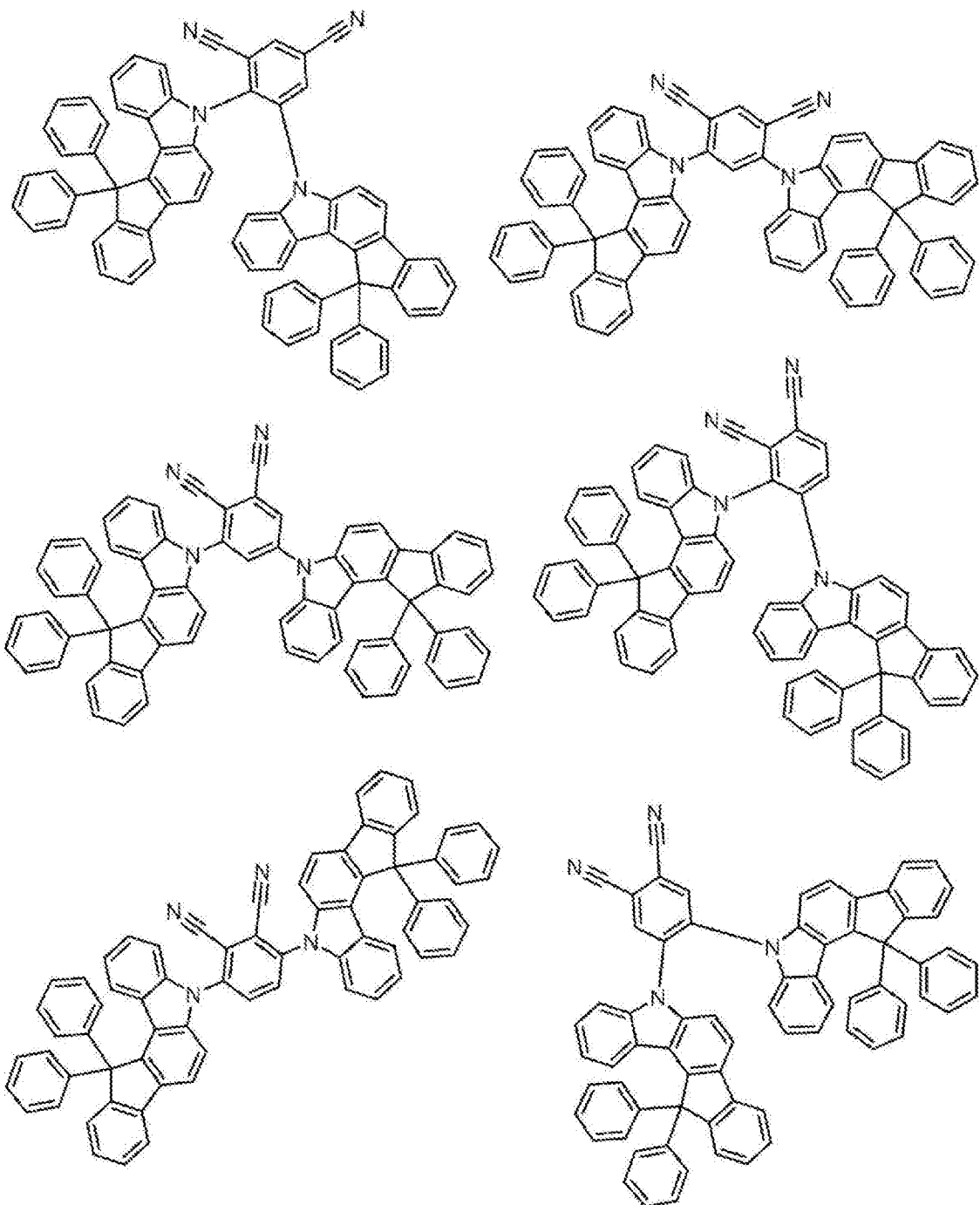


[0164] [化57]



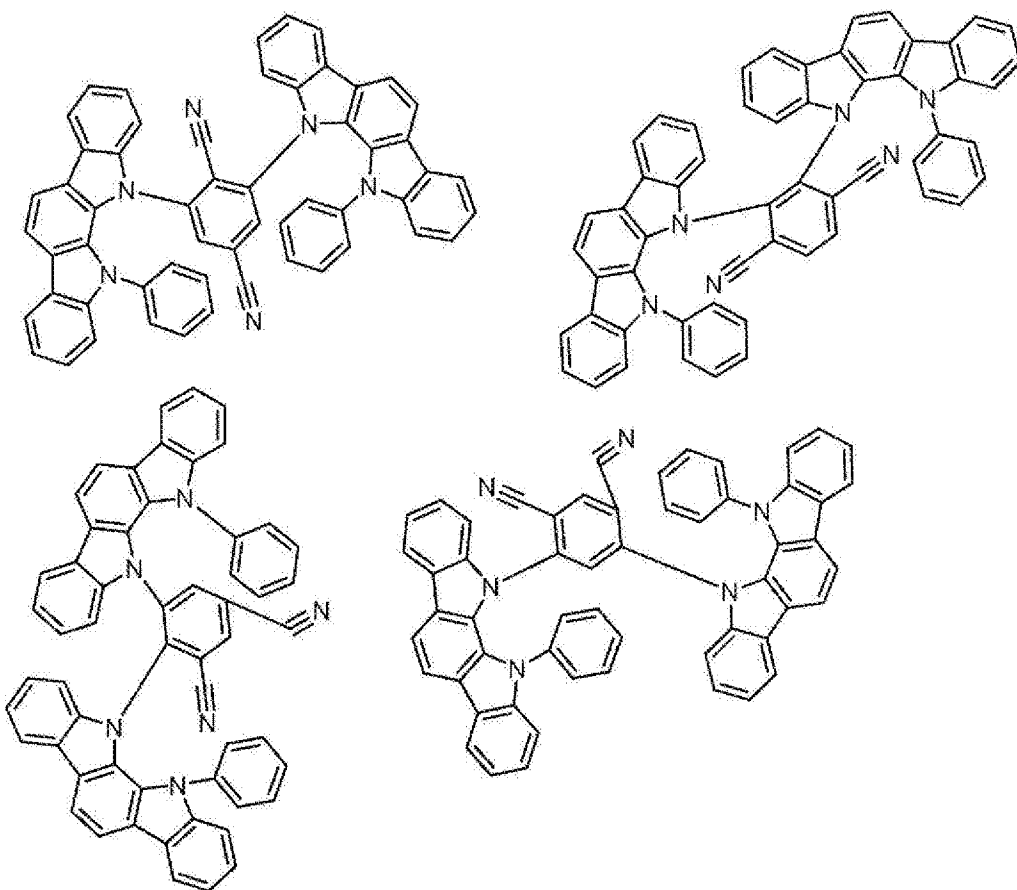
[0165]

[化58]



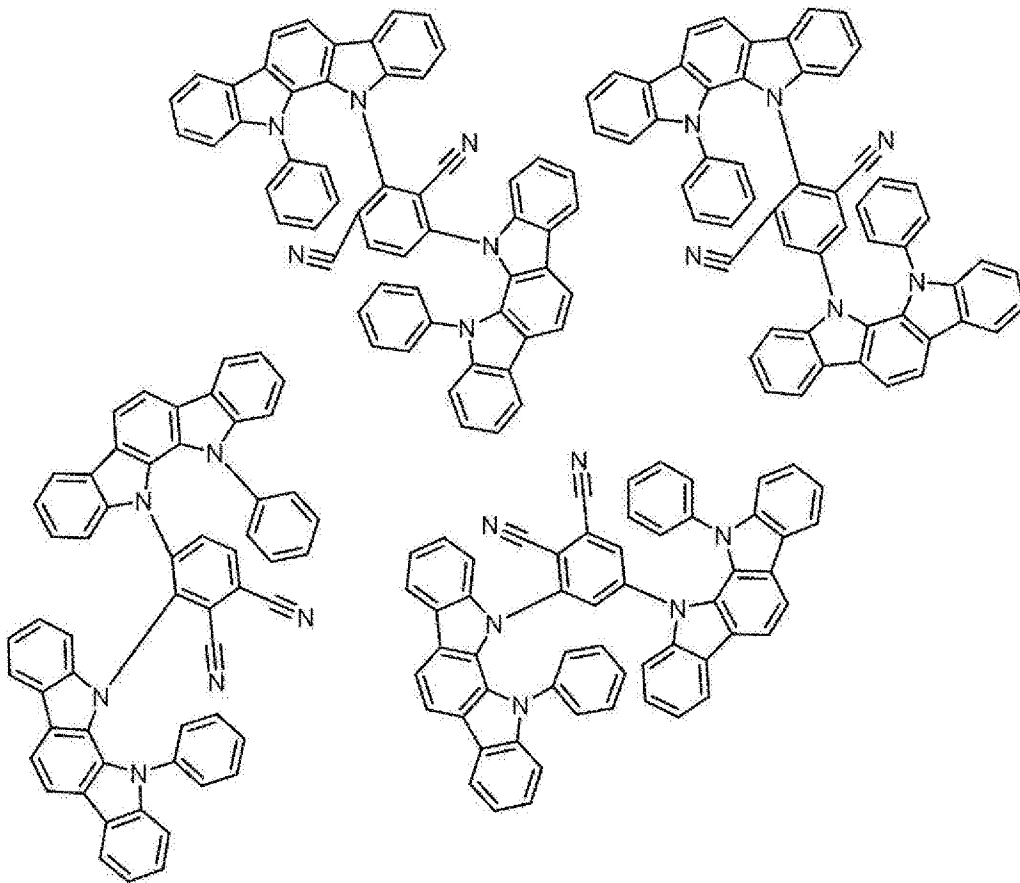
[0166]

[化59]



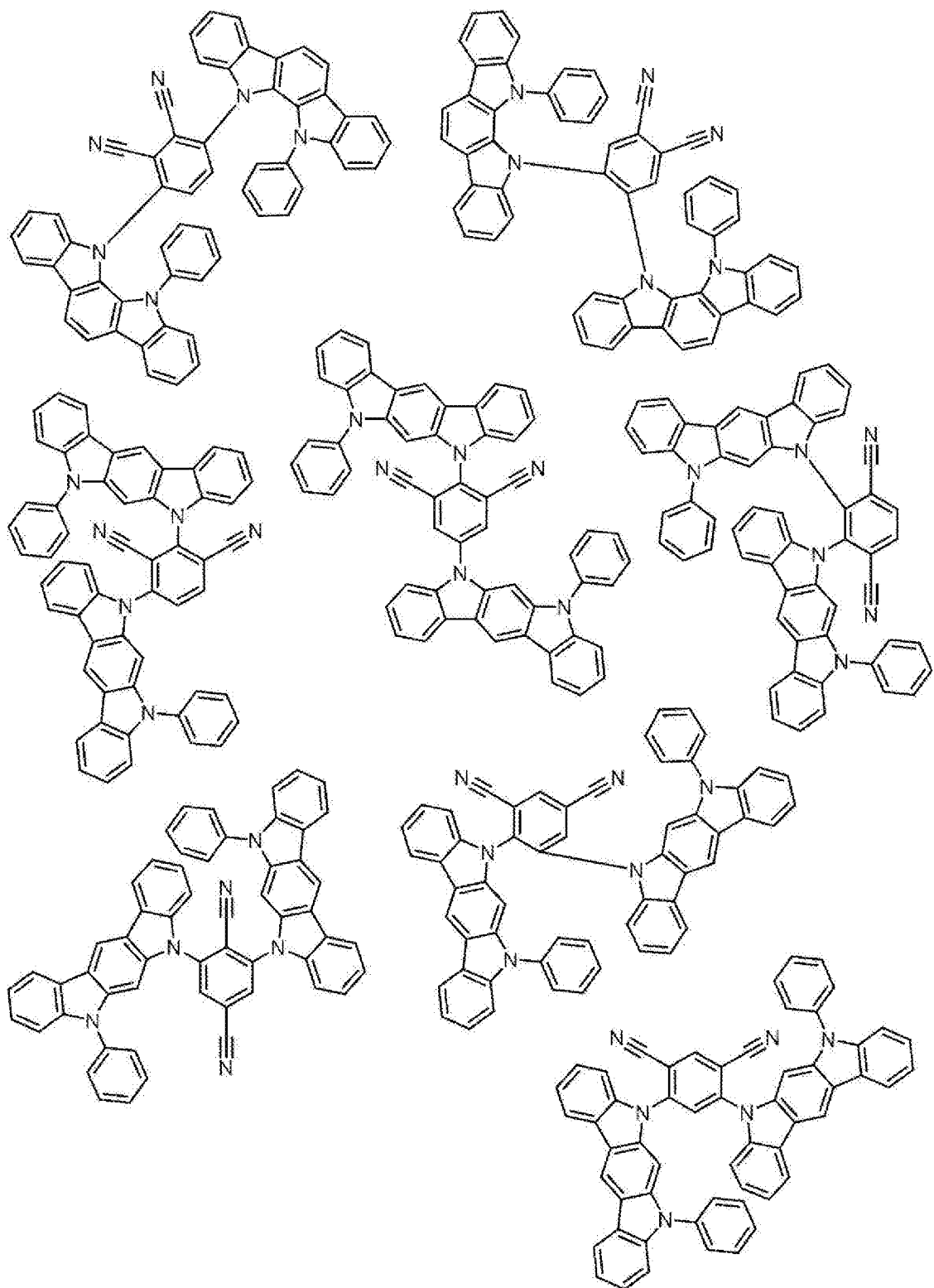
[0167]

[化60]



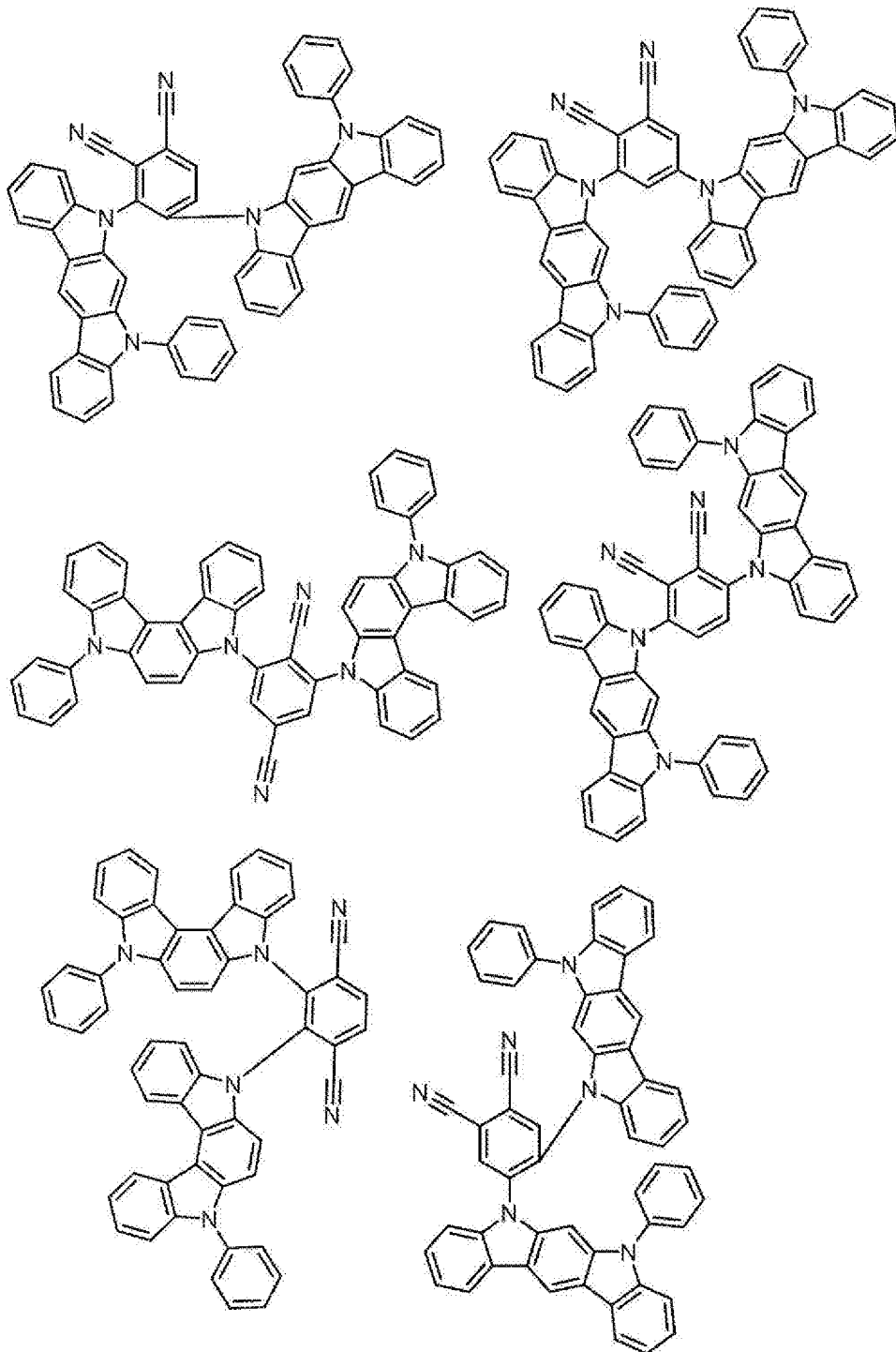
[0168]

[化61]



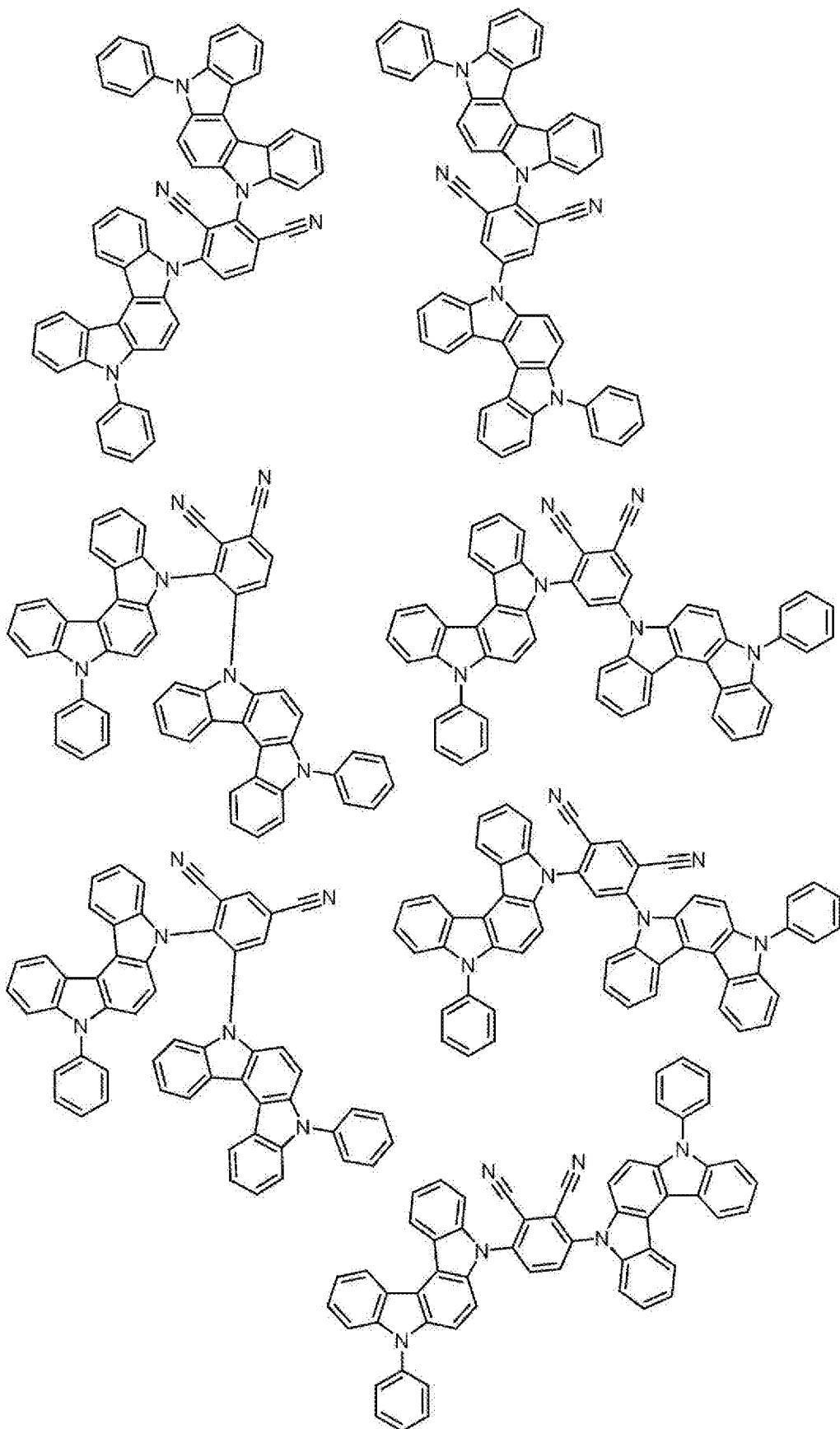
[0169]

[化62]

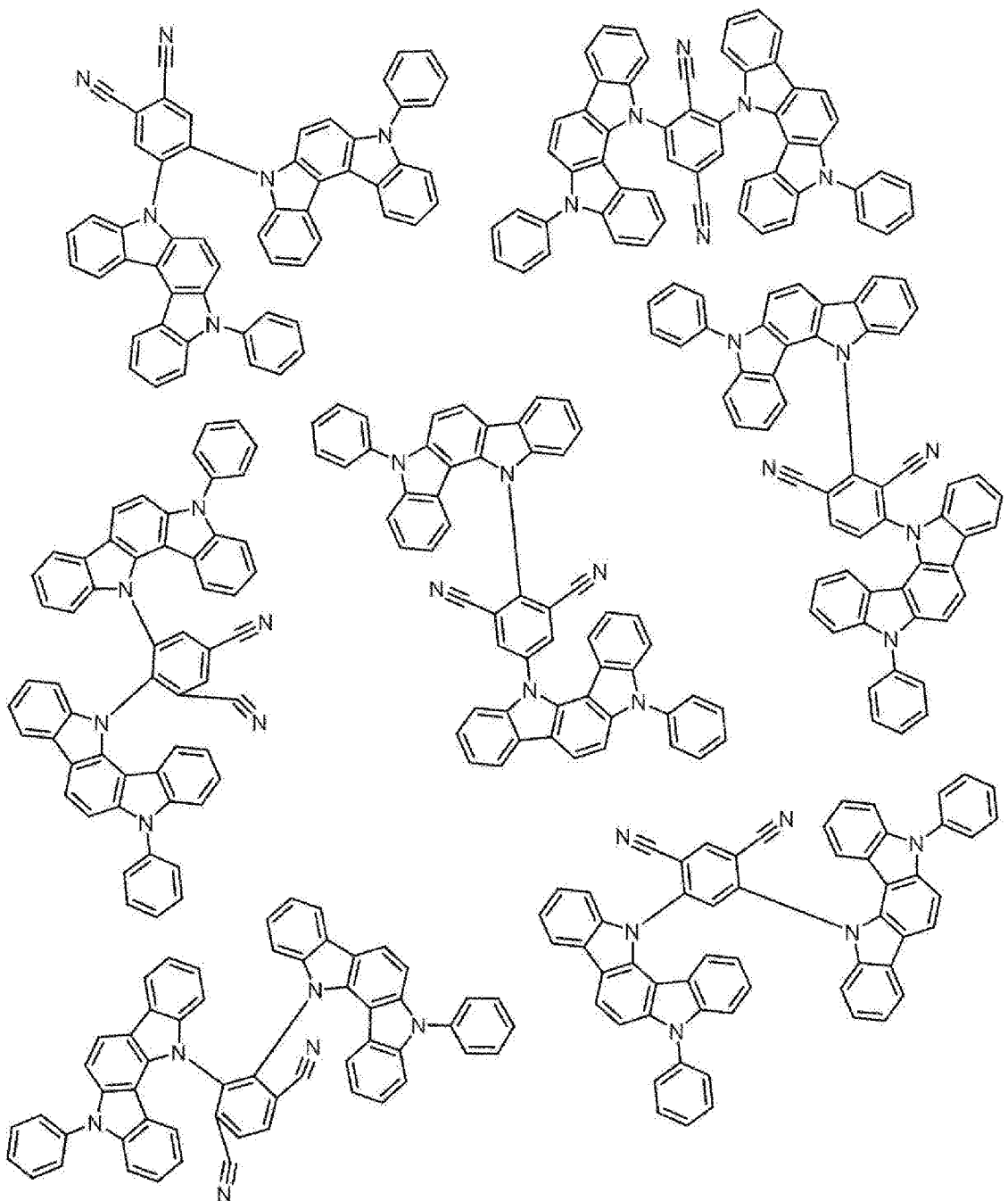


[0170]

[化63]

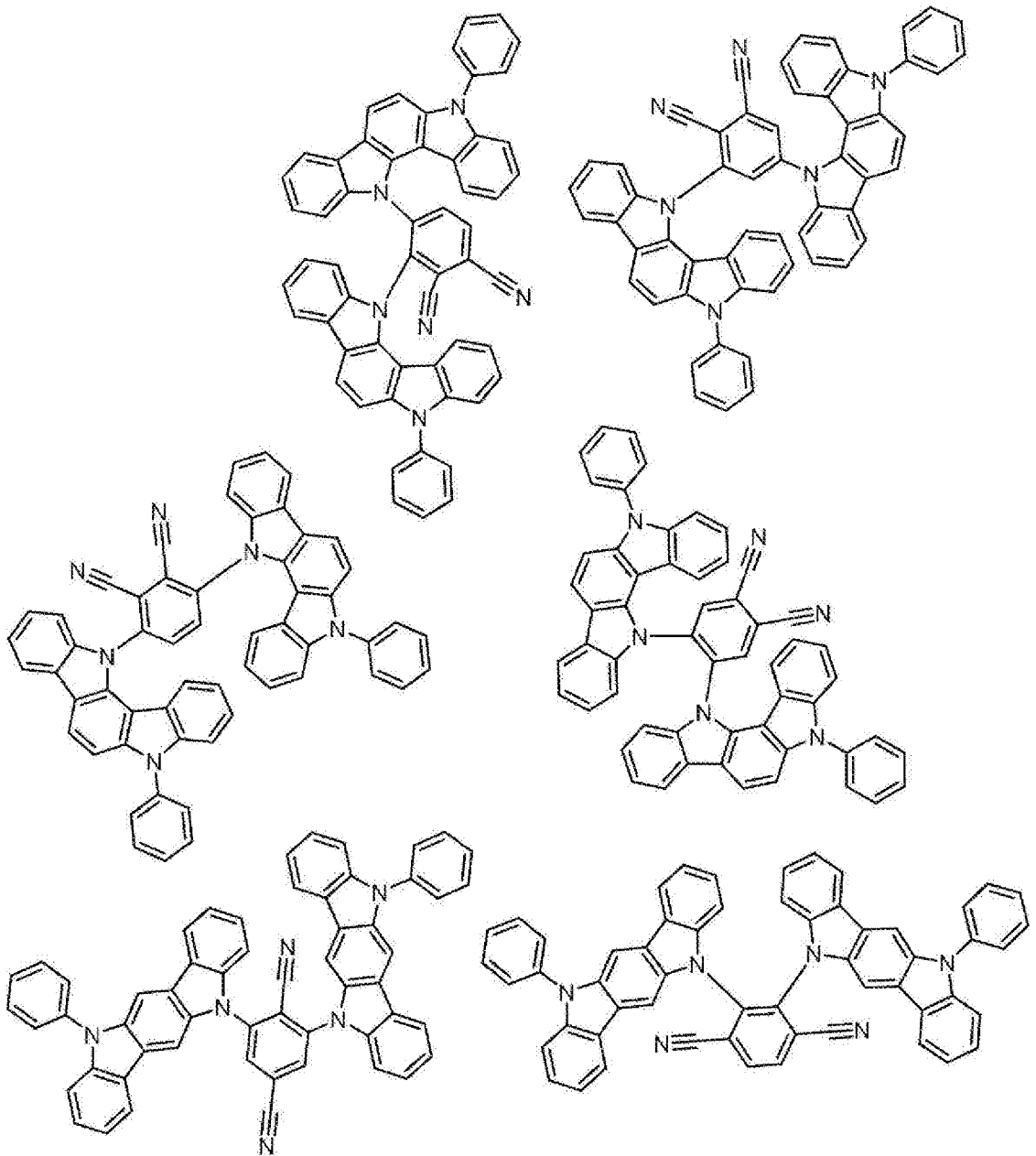


[0171] [化64]



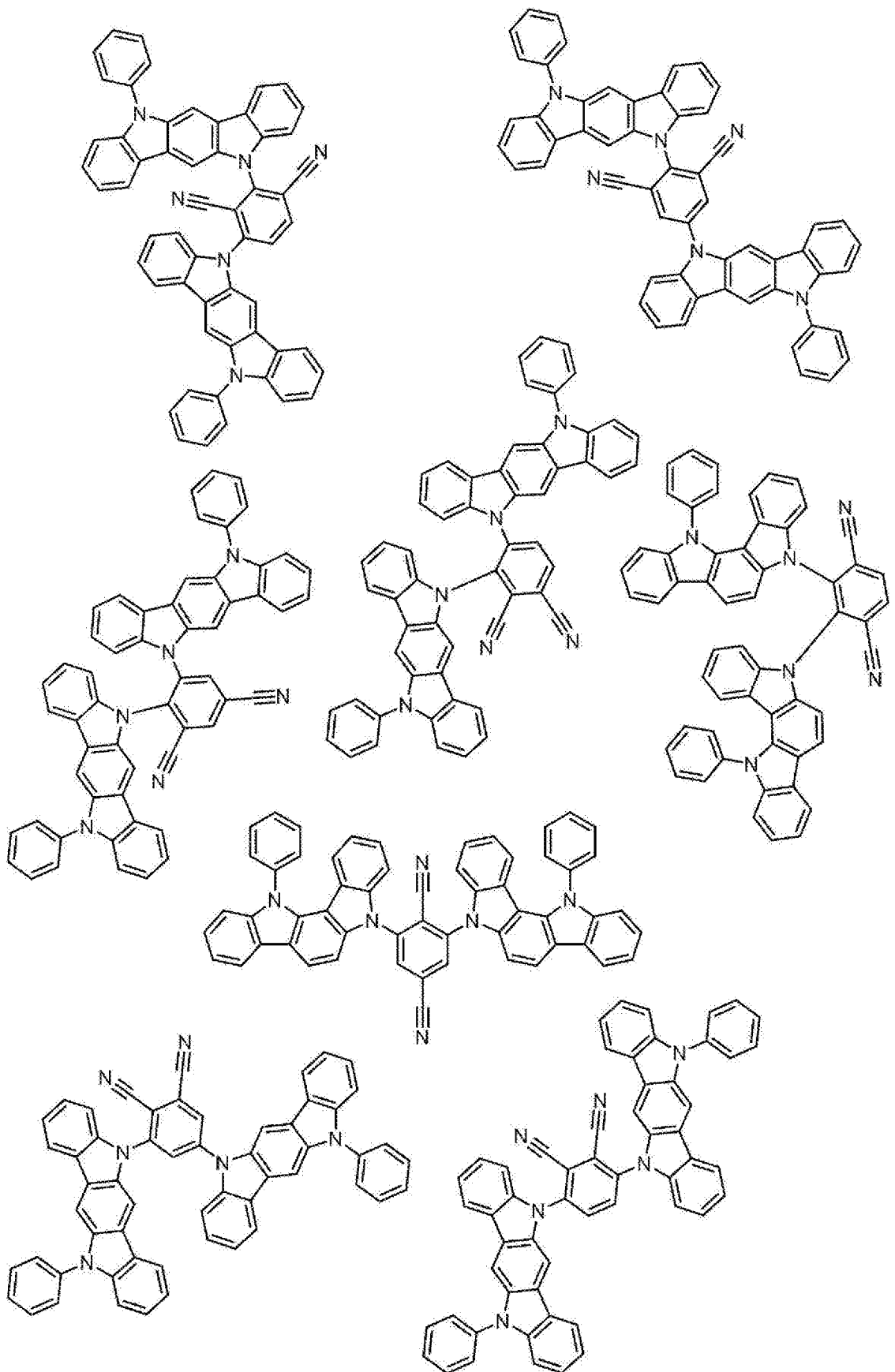
[0172]

[化65]

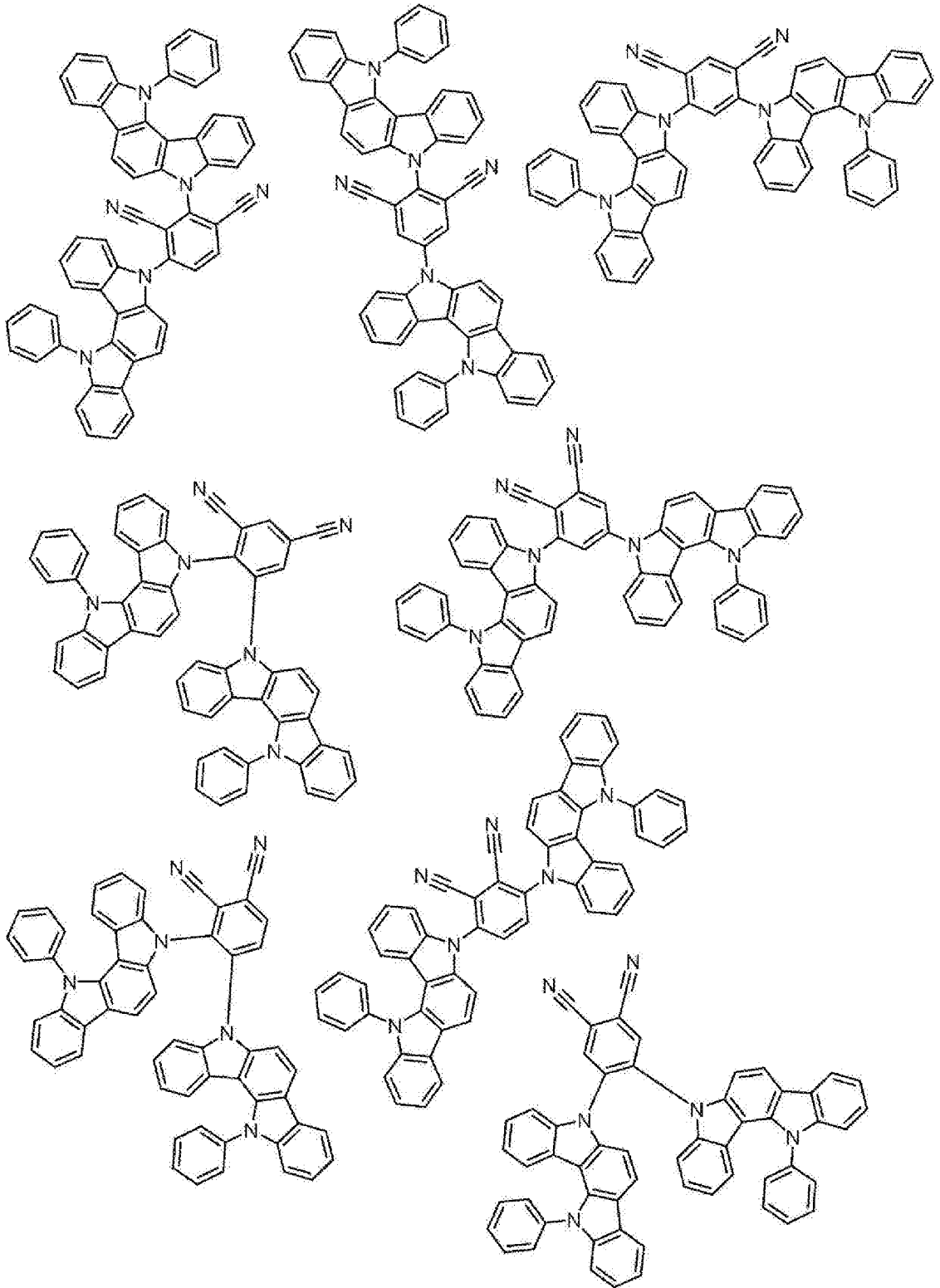


[0173]

[化66]

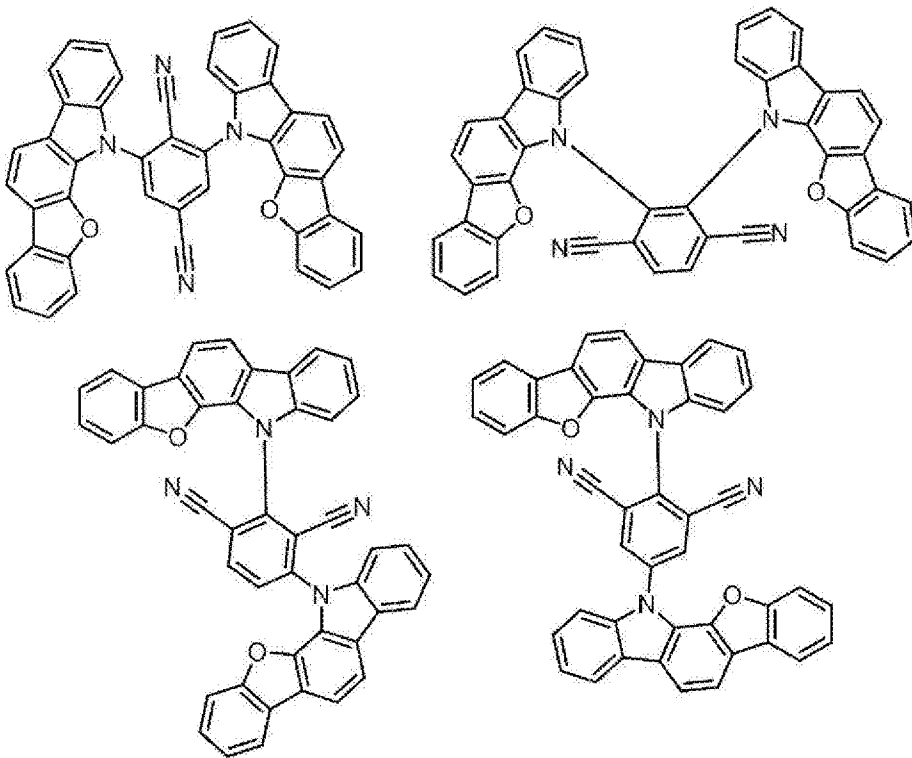


[0174] [化67]

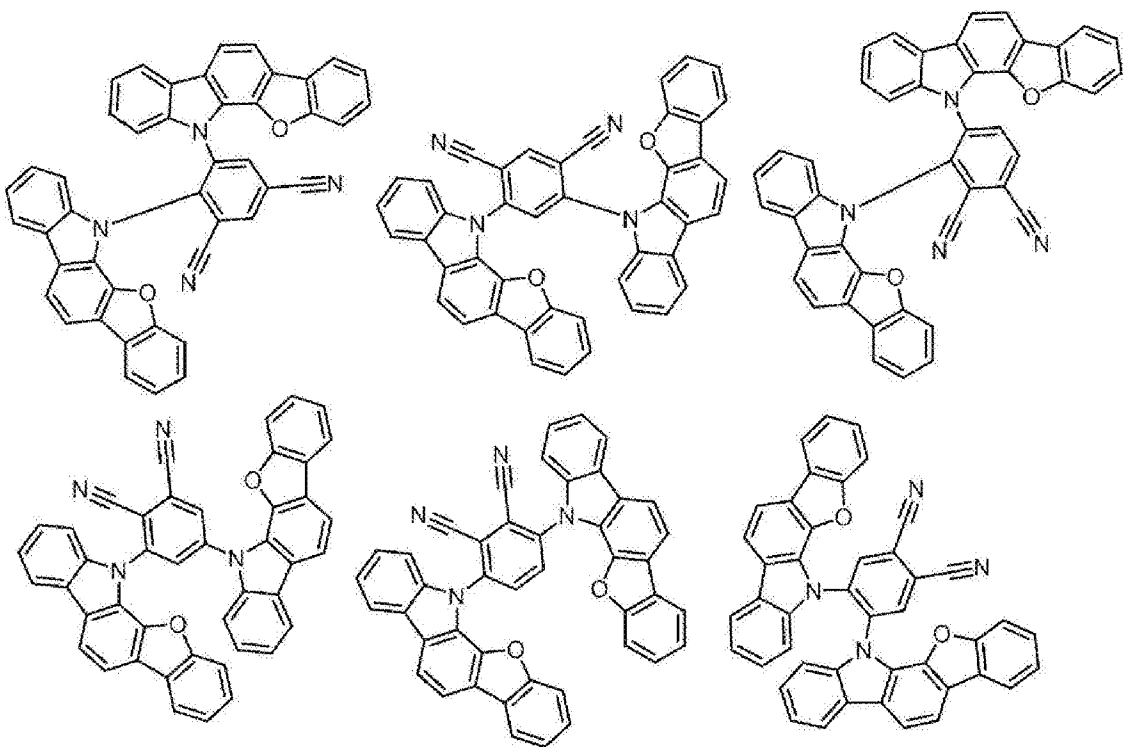


[0175]

[化68]

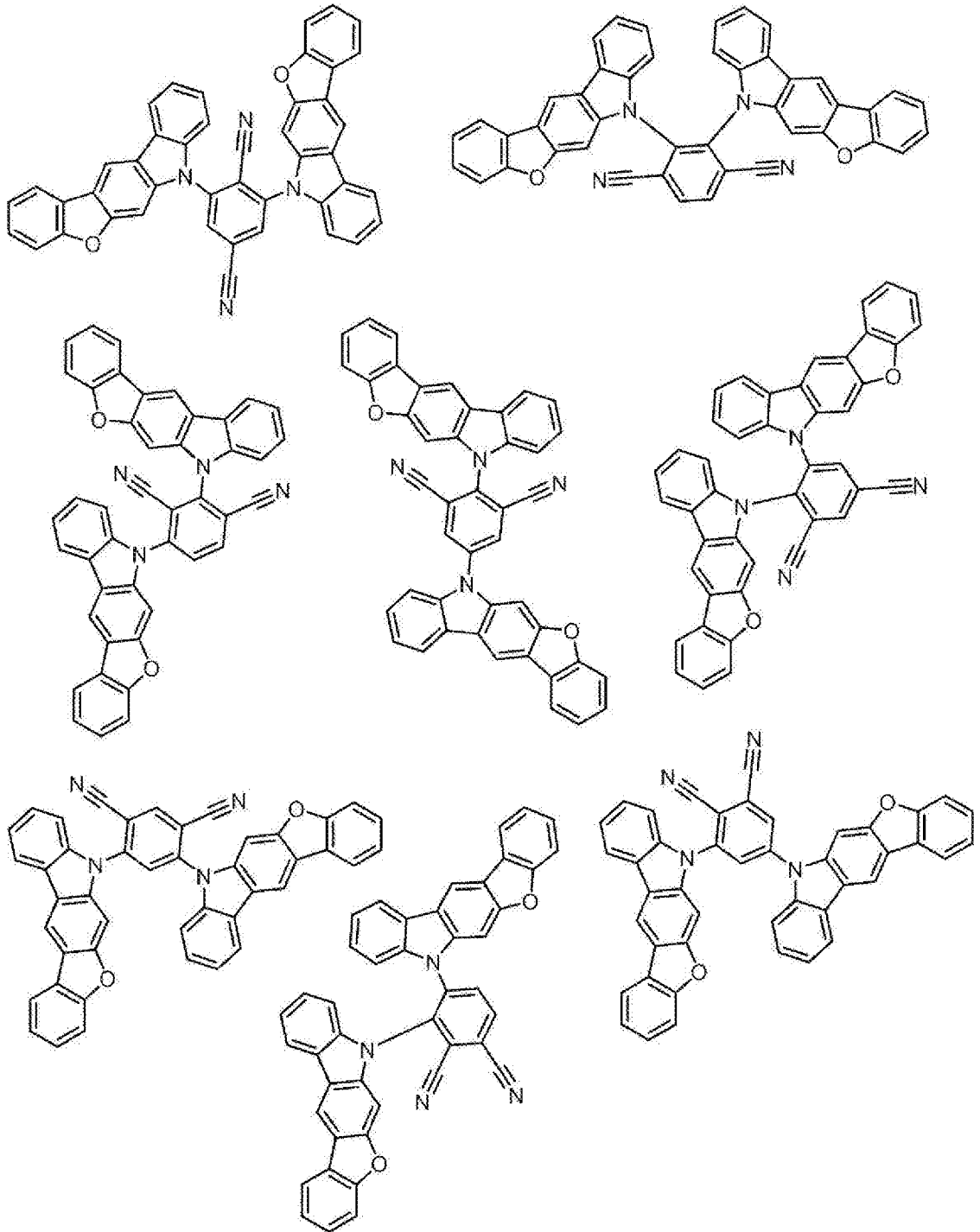


[0176] [化69]



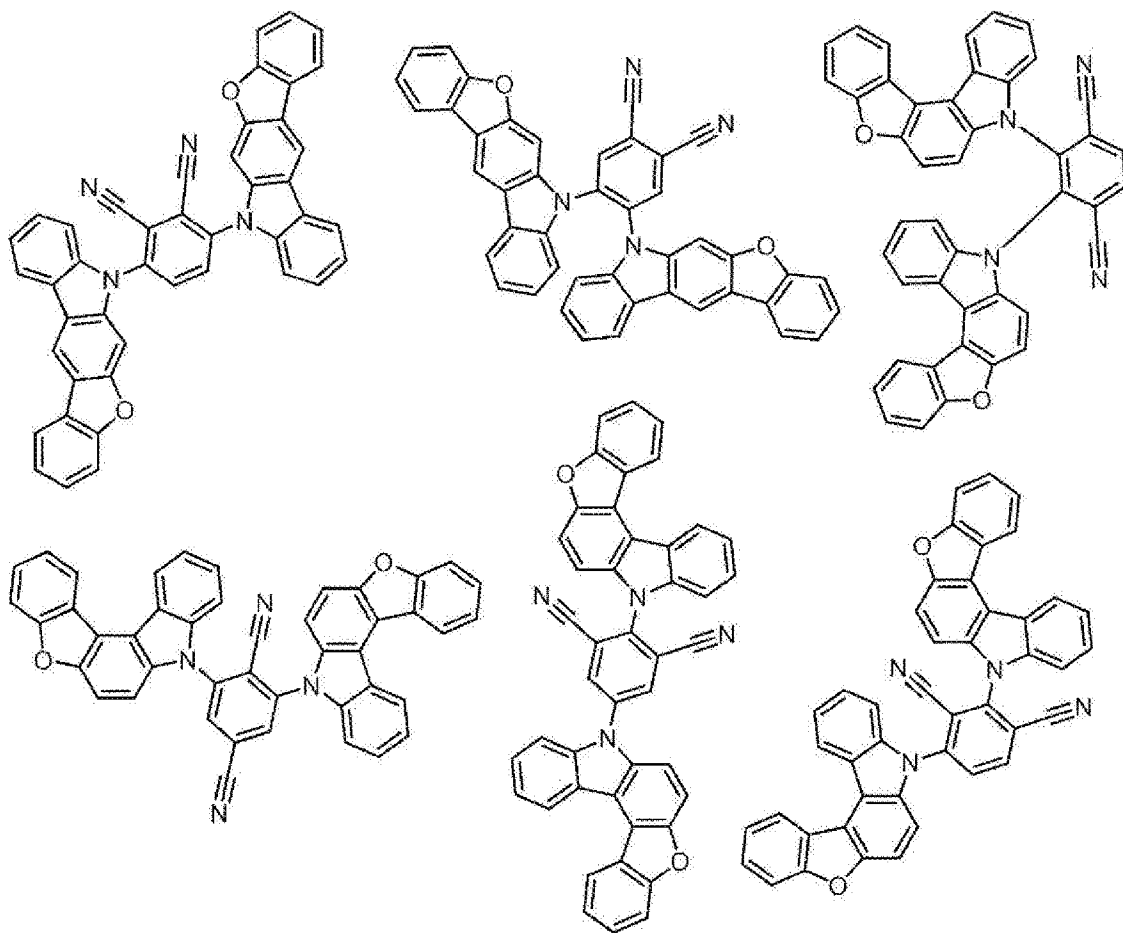
[0177]

[化70]



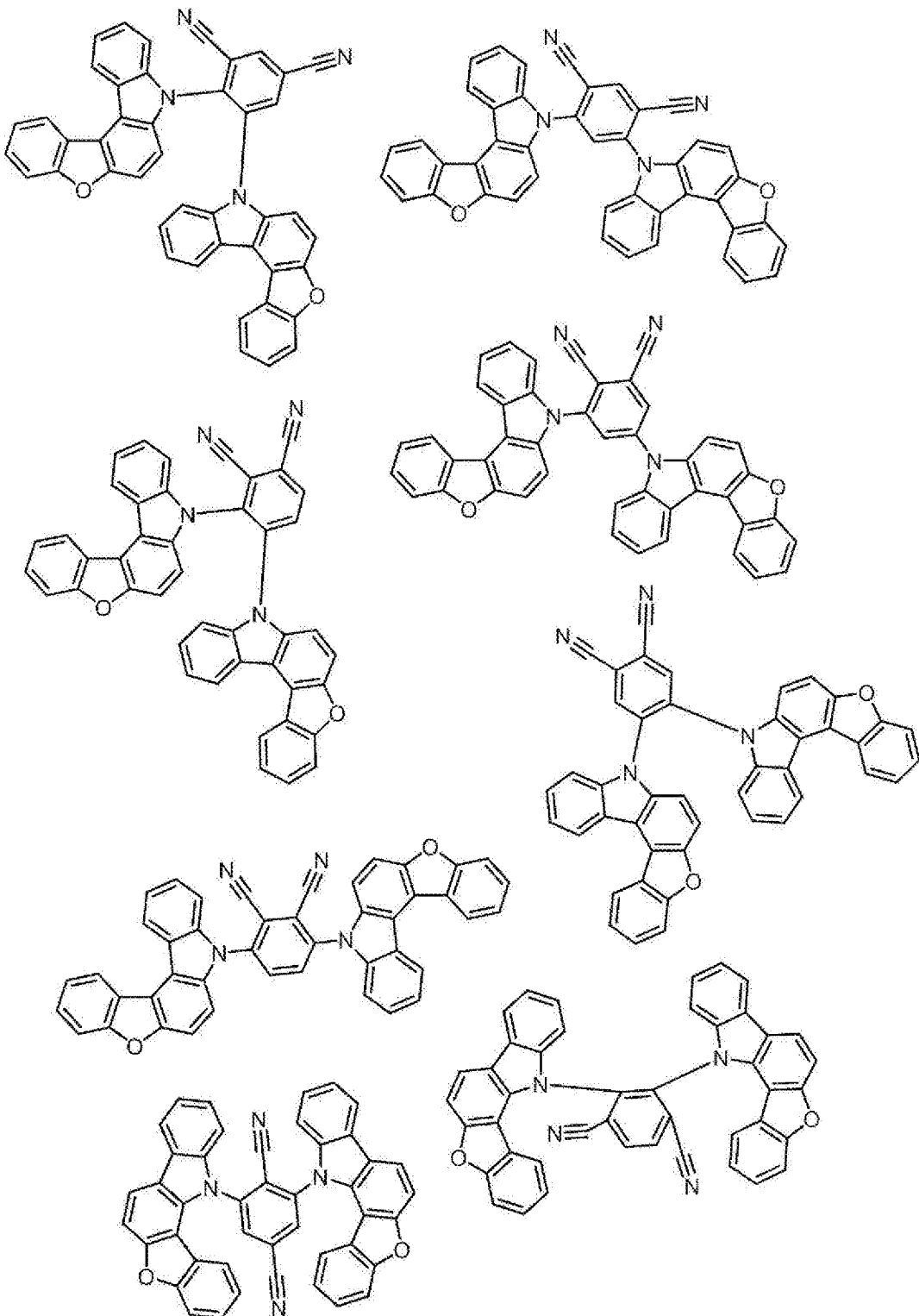
[0178]

[化71]



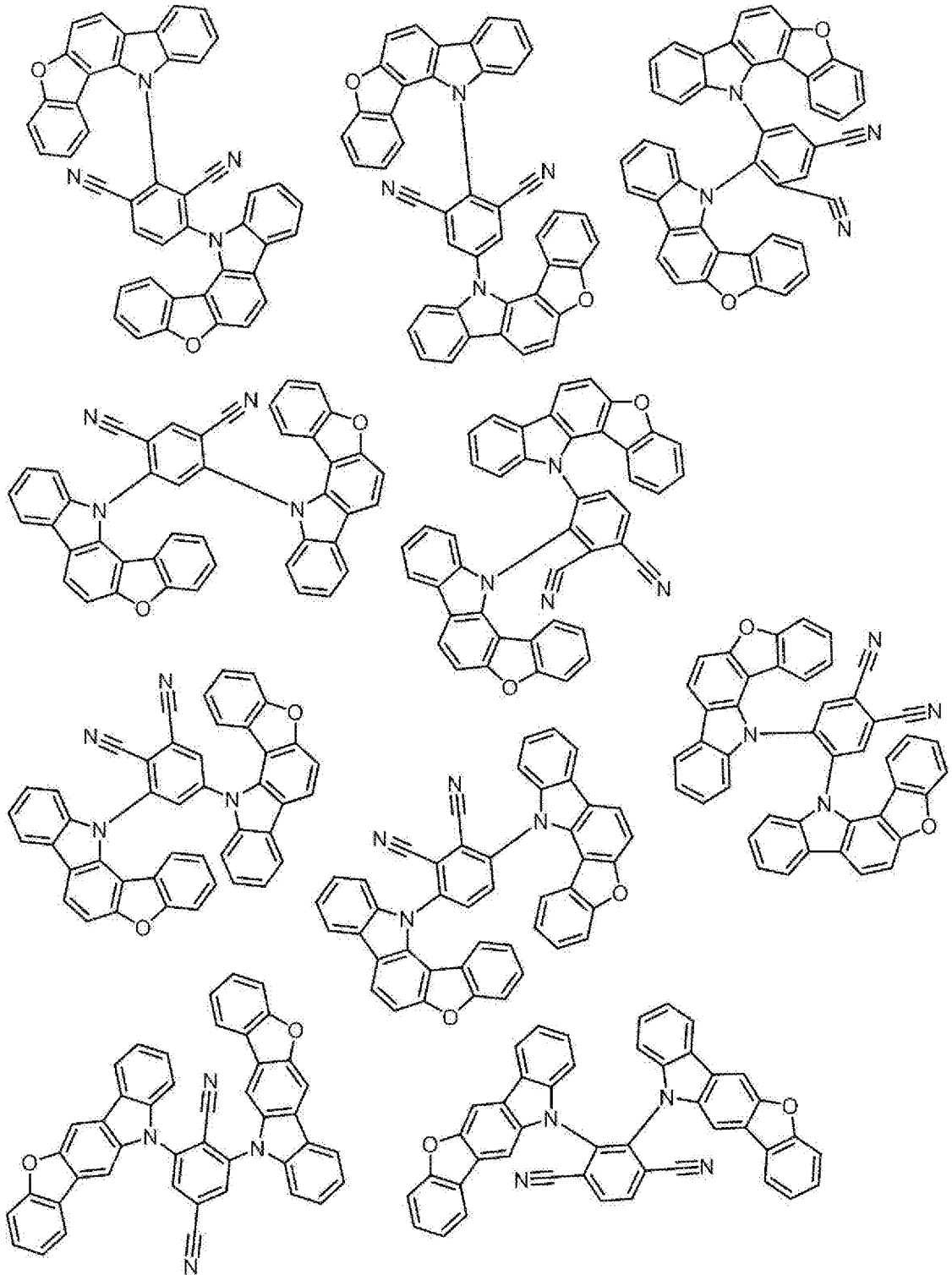
[0179]

[化72]



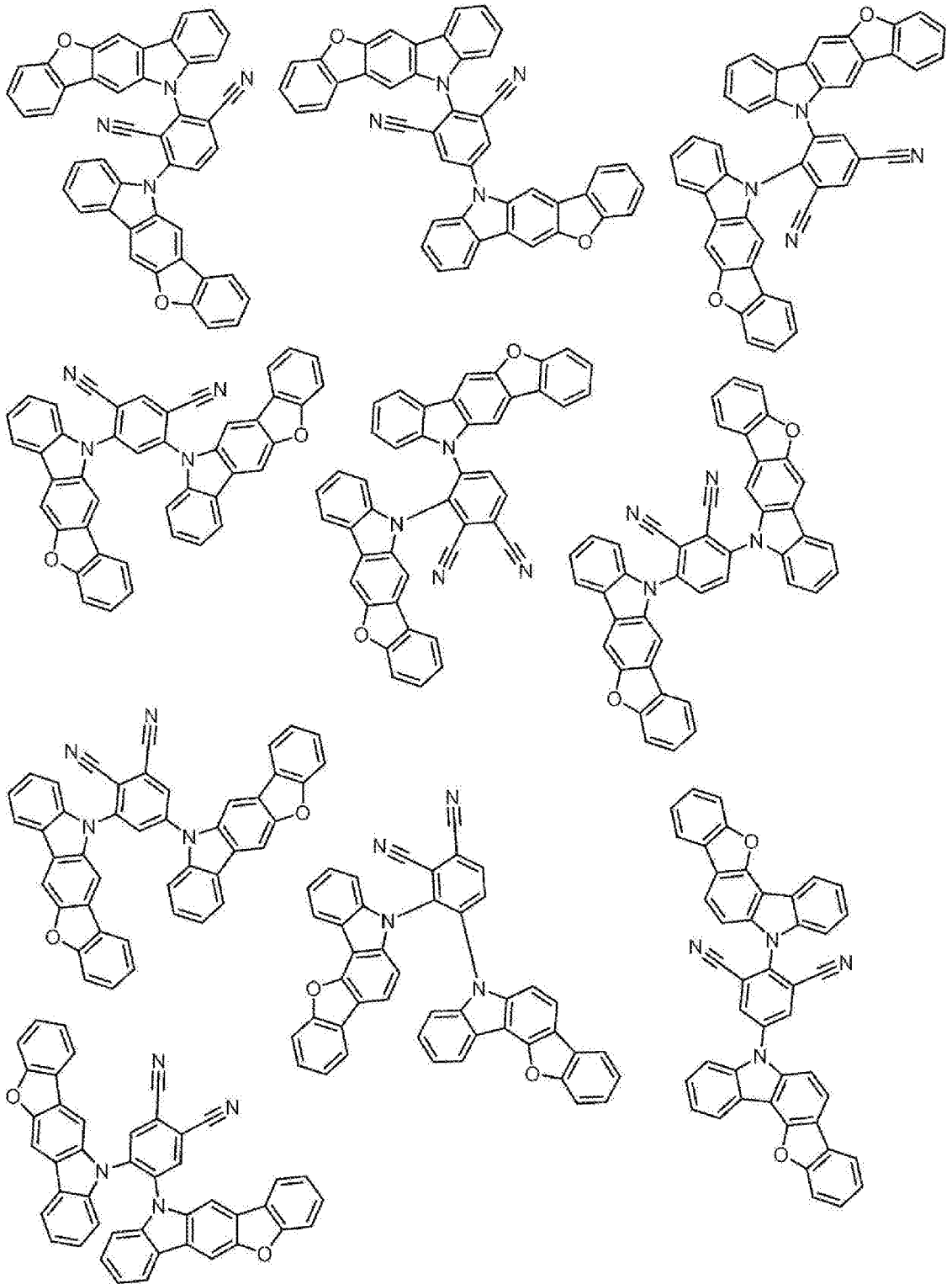
[0180]

[化73]



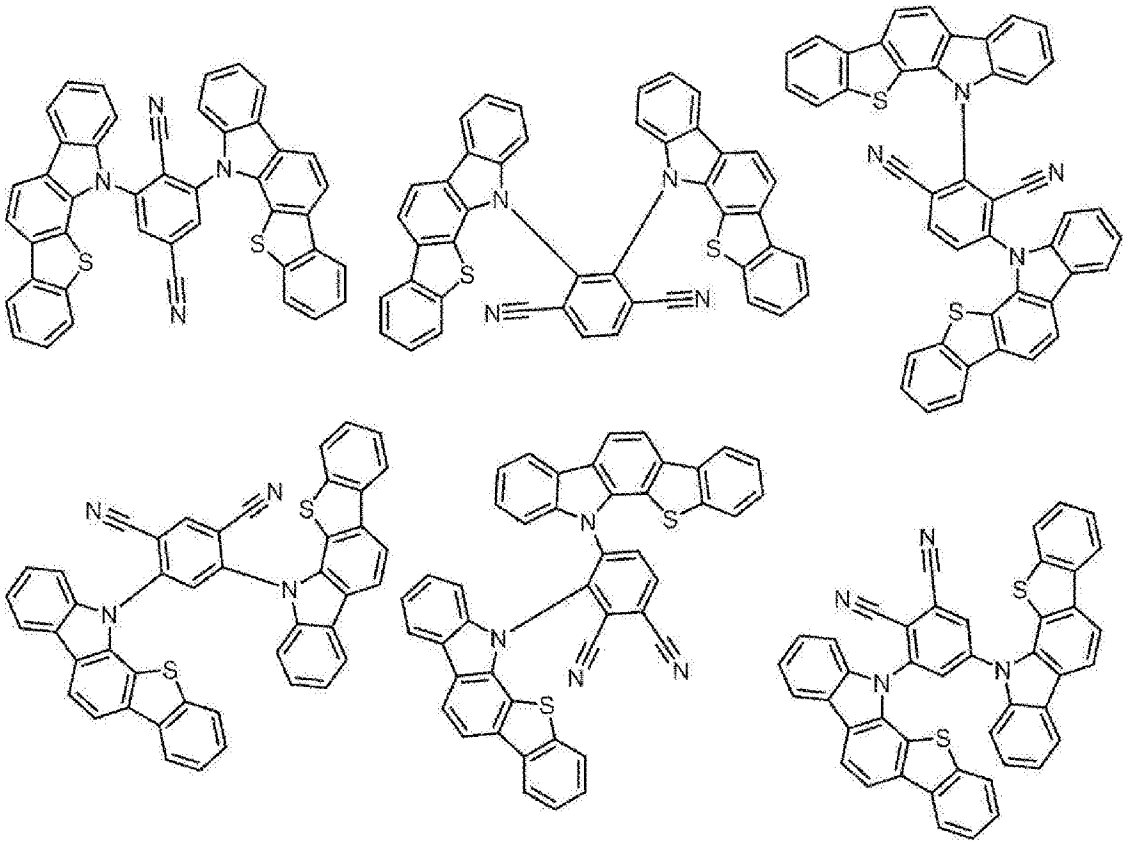
[0181]

[化74]



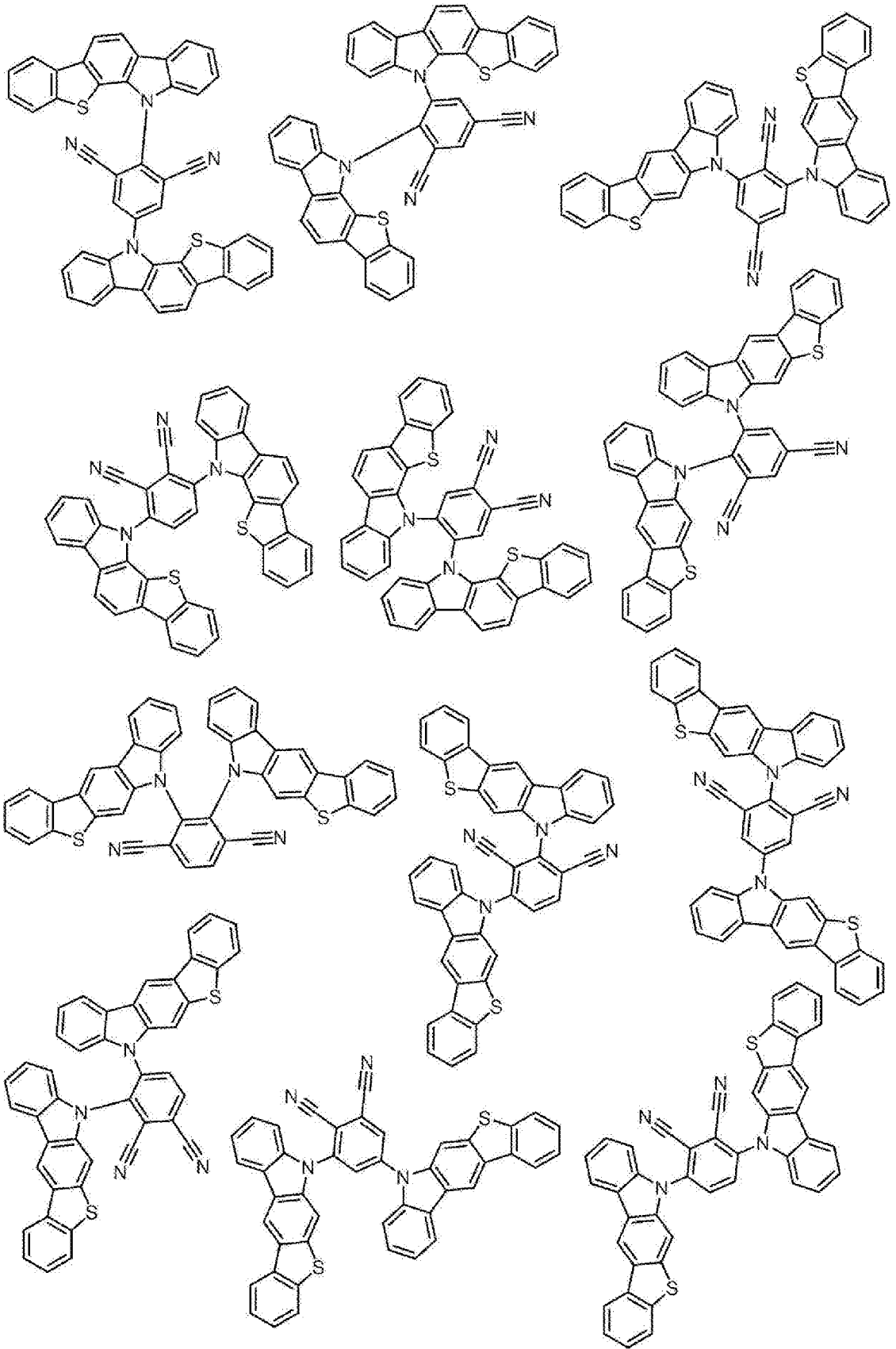
[0182]

[化75]

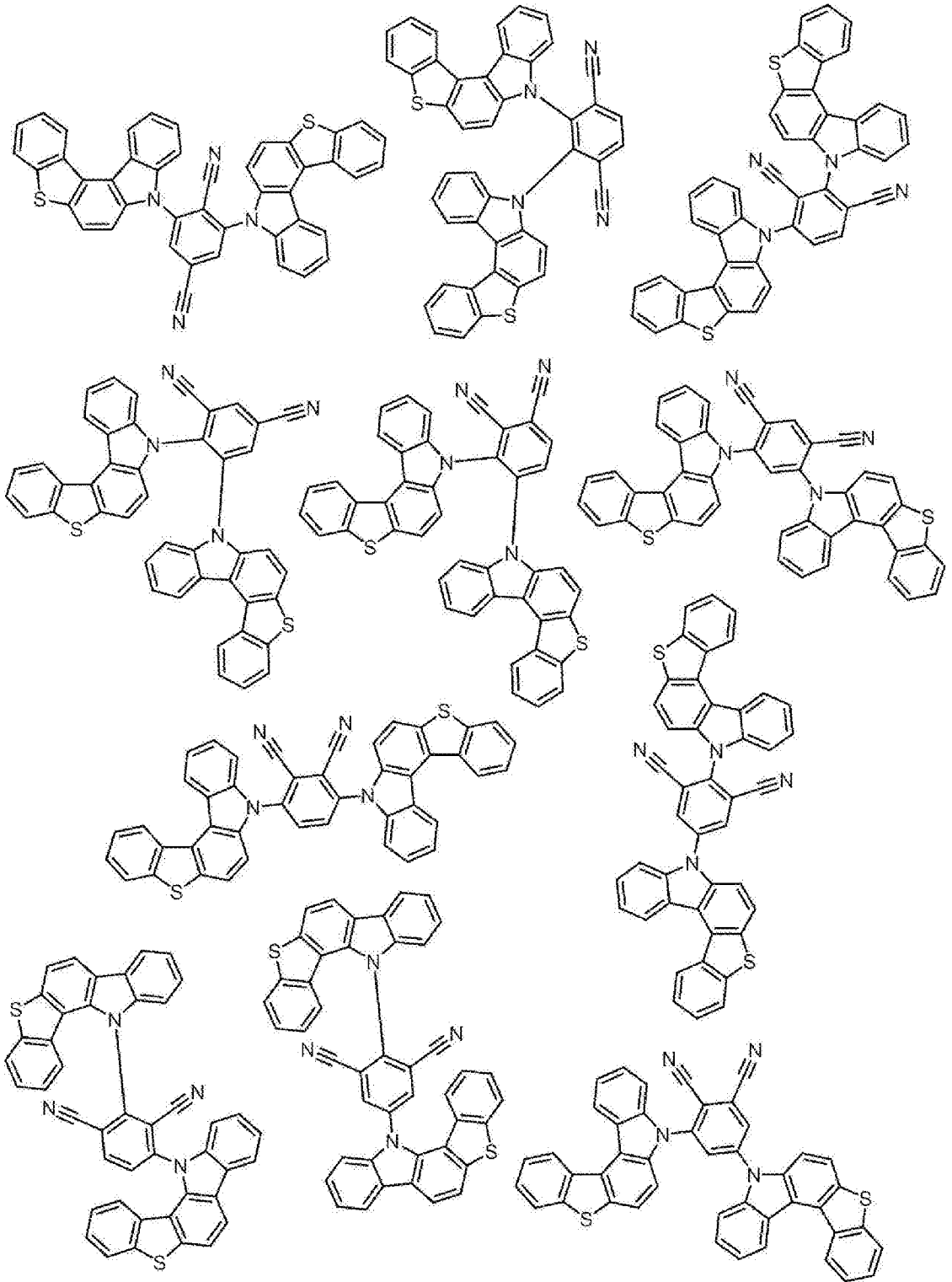


[0183]

[化76]

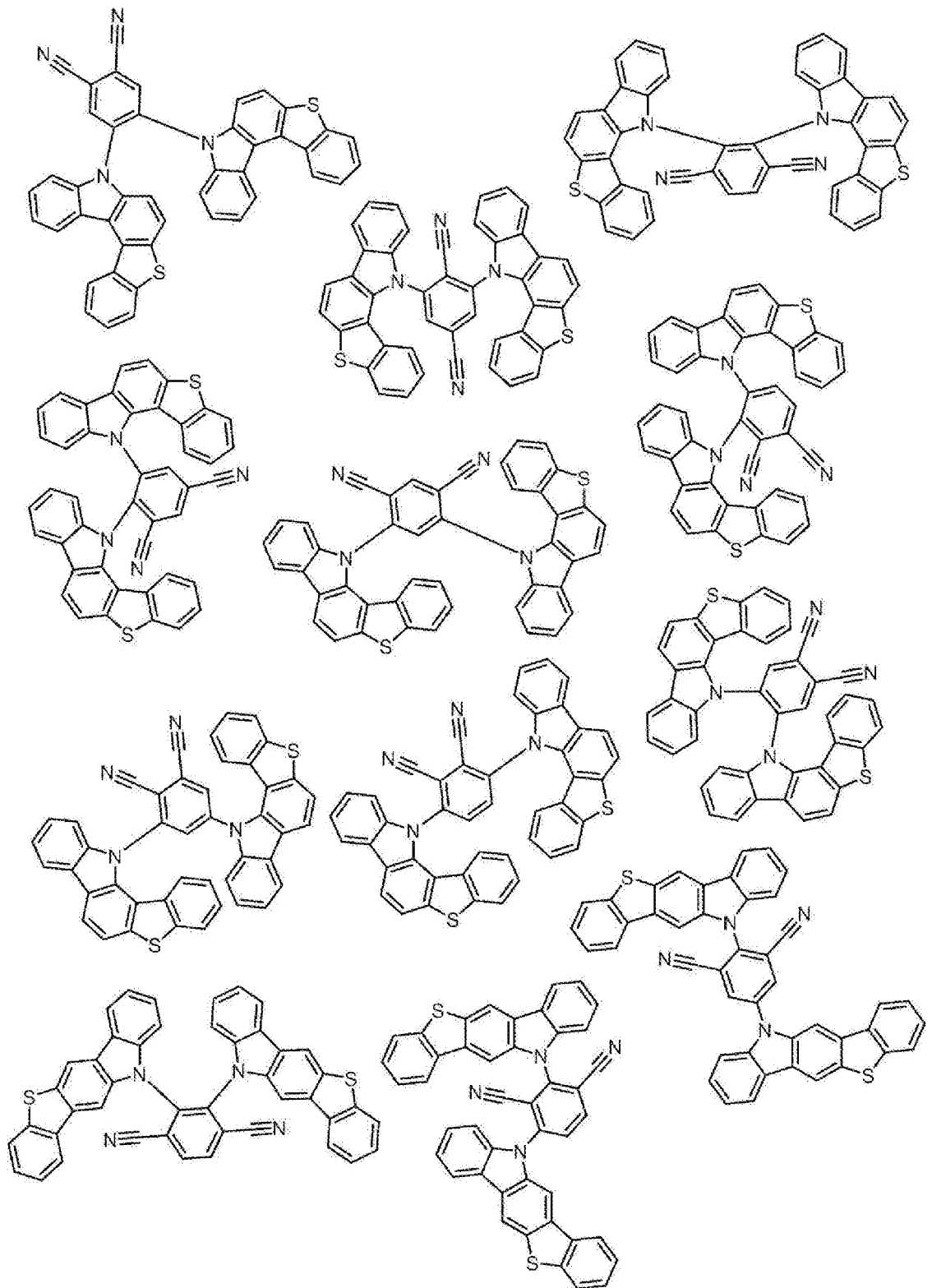


[0184] [化77]



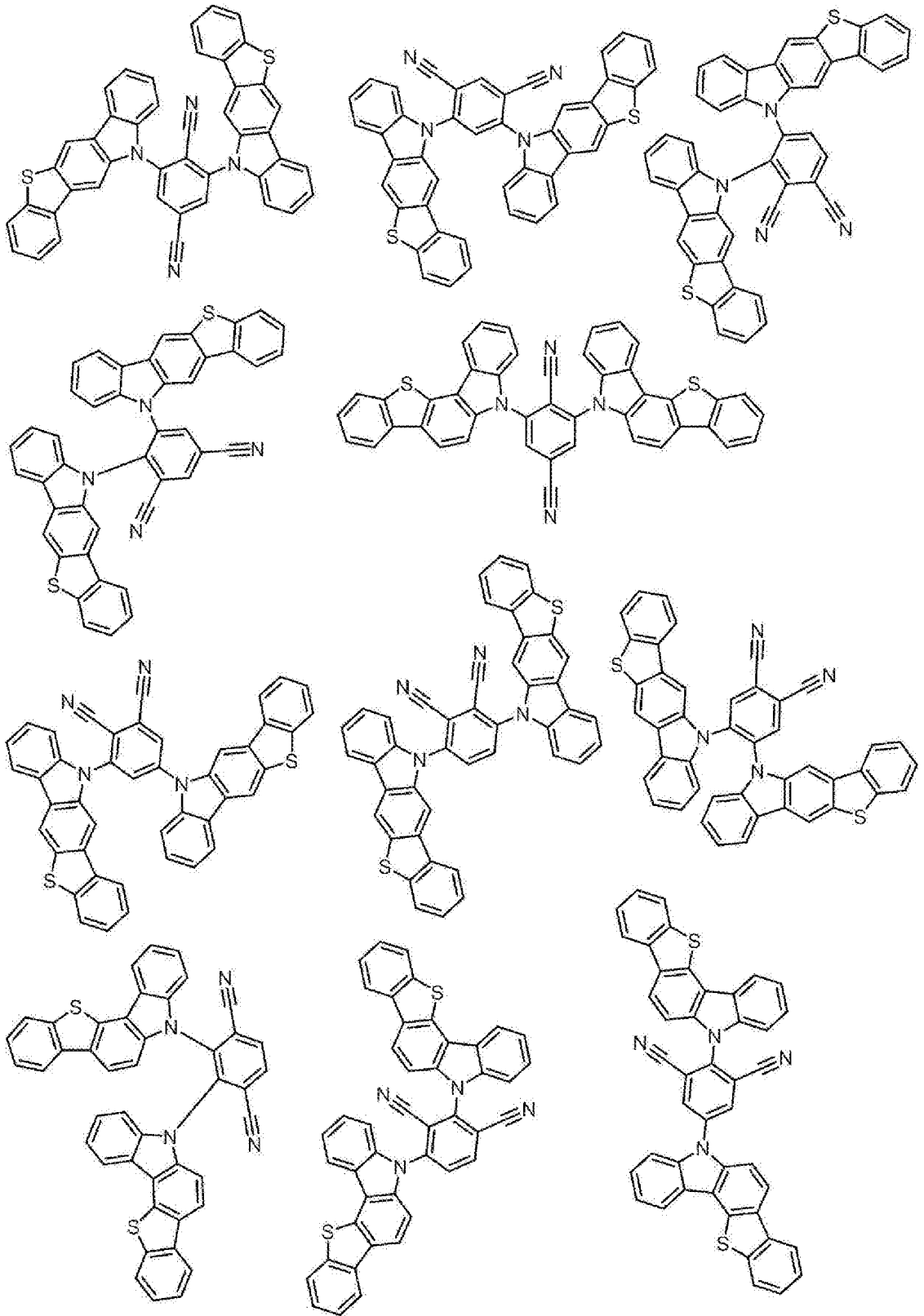
[0185]

[化78]



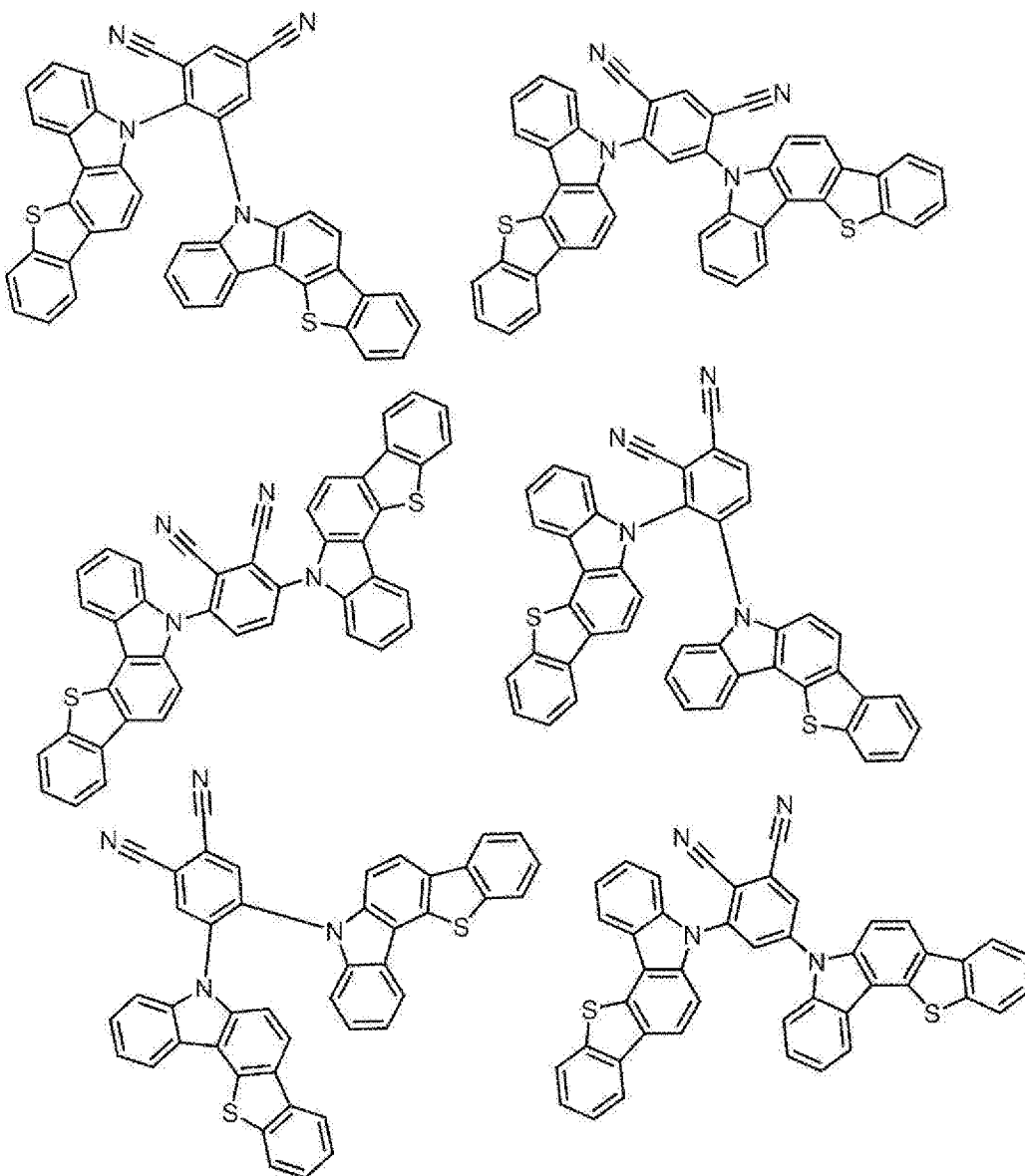
[0186]

[化79]



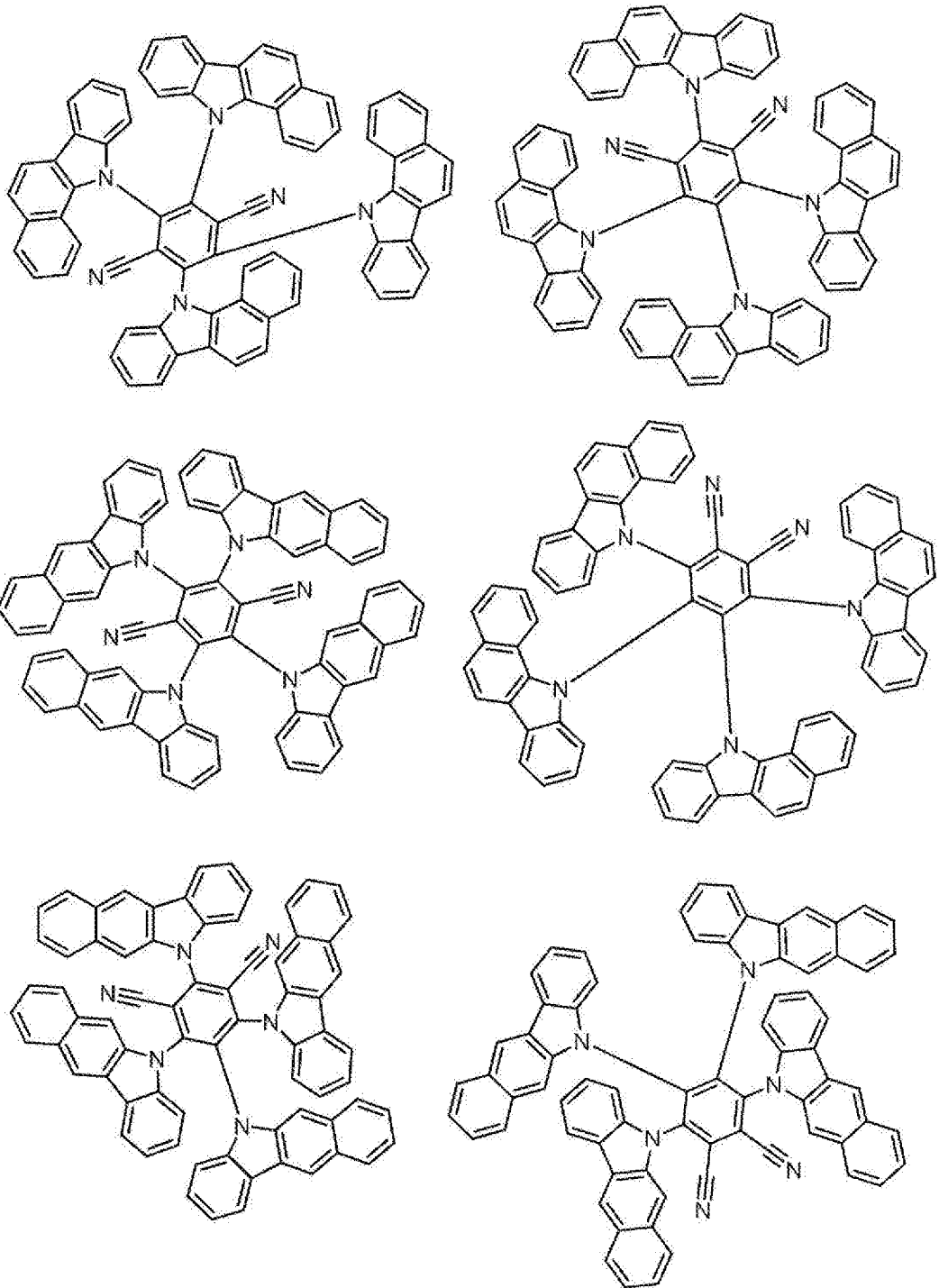
[0187]

[化80]



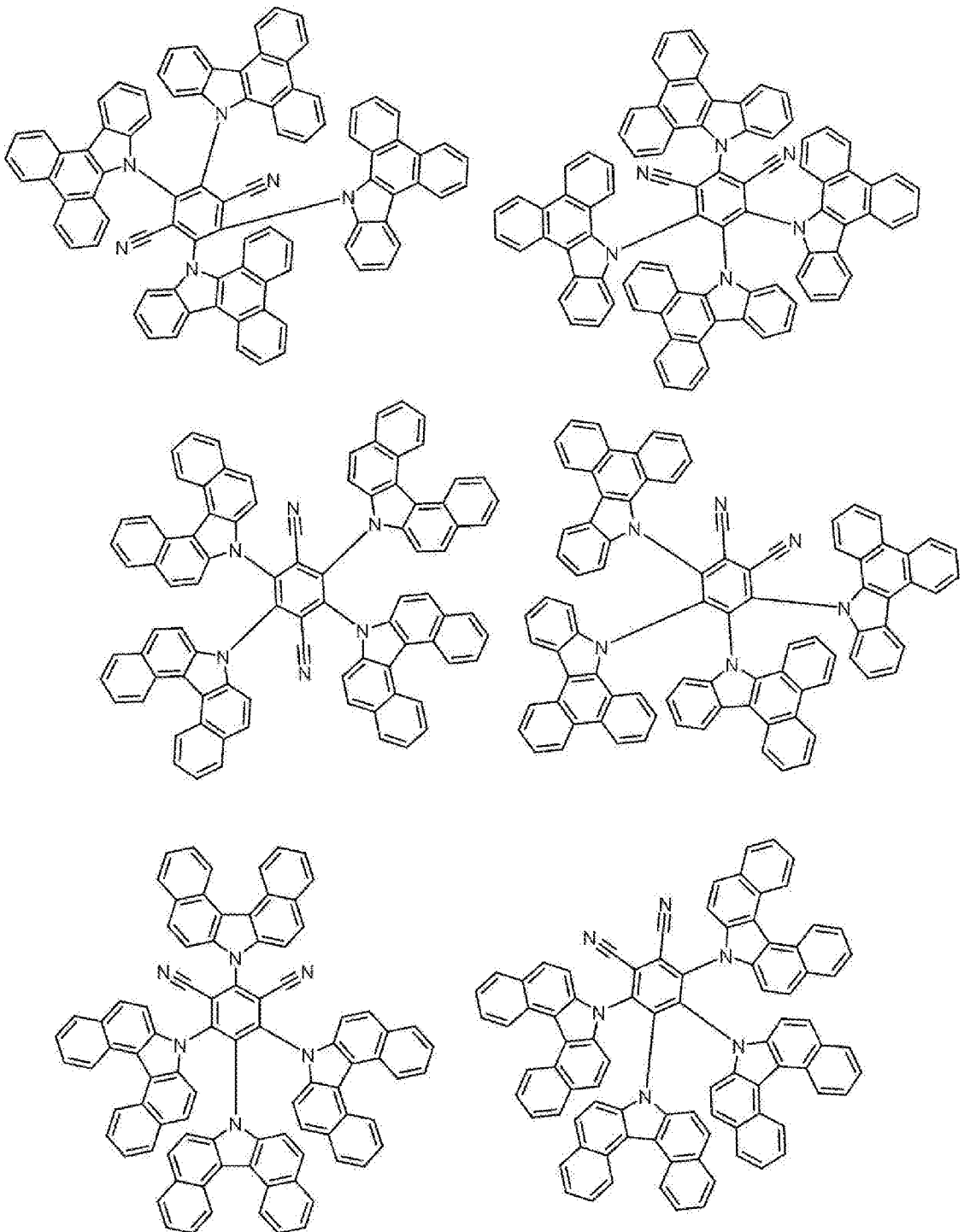
[0188]

[化81]



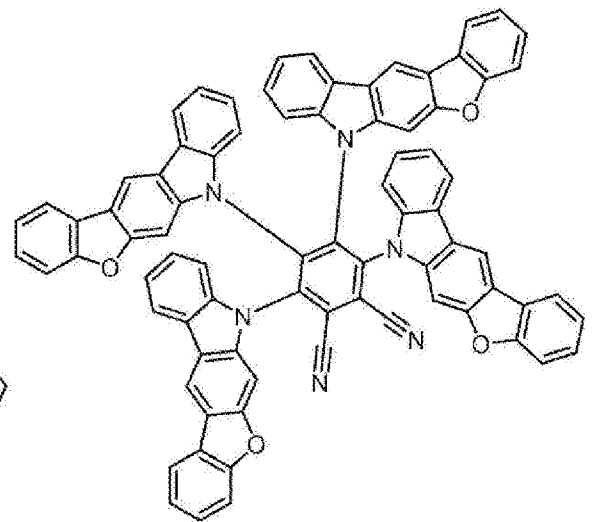
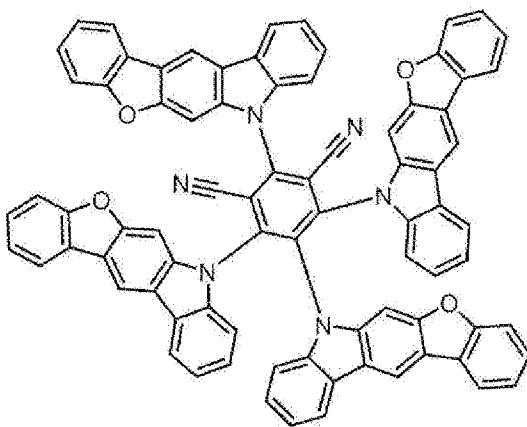
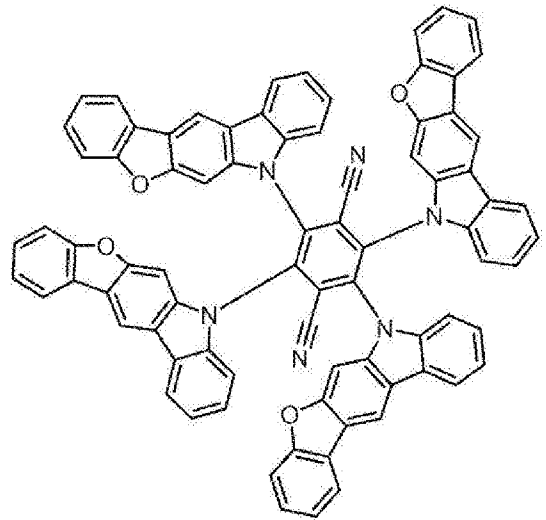
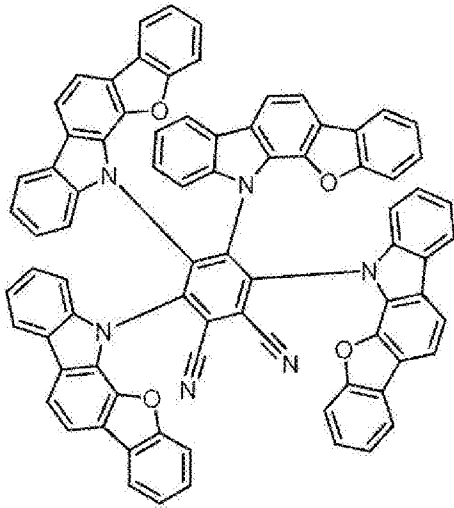
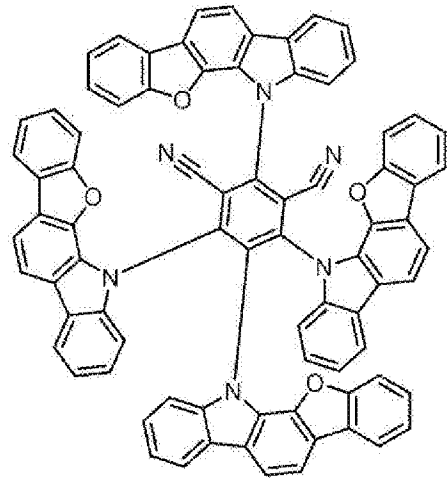
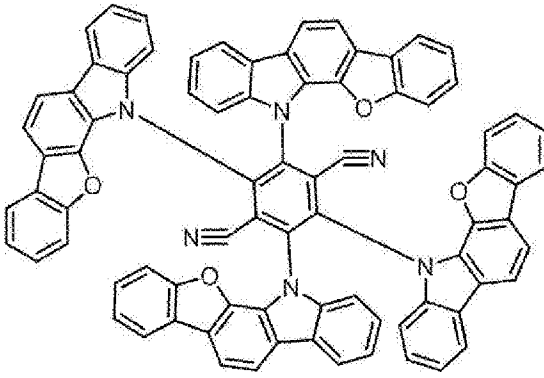
[0189]

[化82]



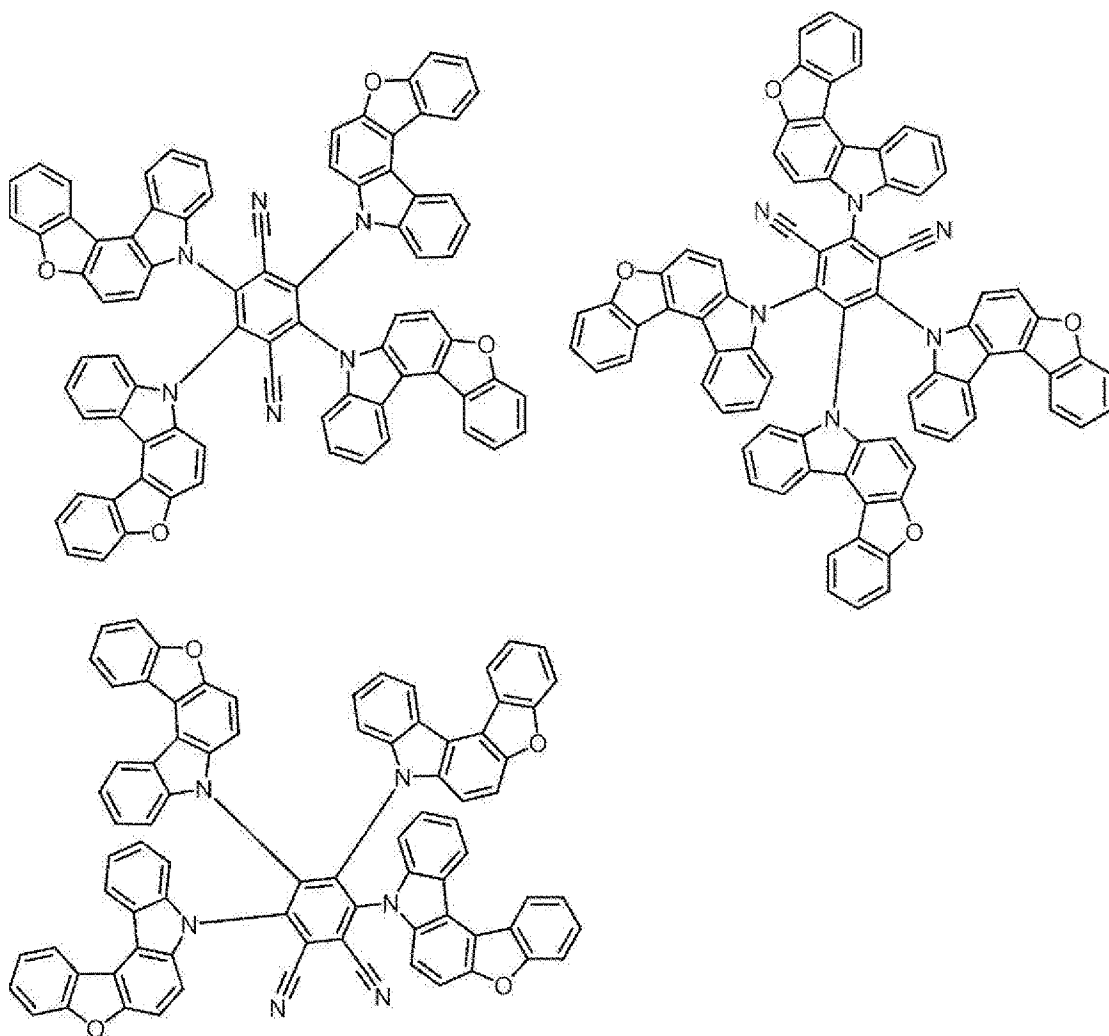
[0190]

[化83]



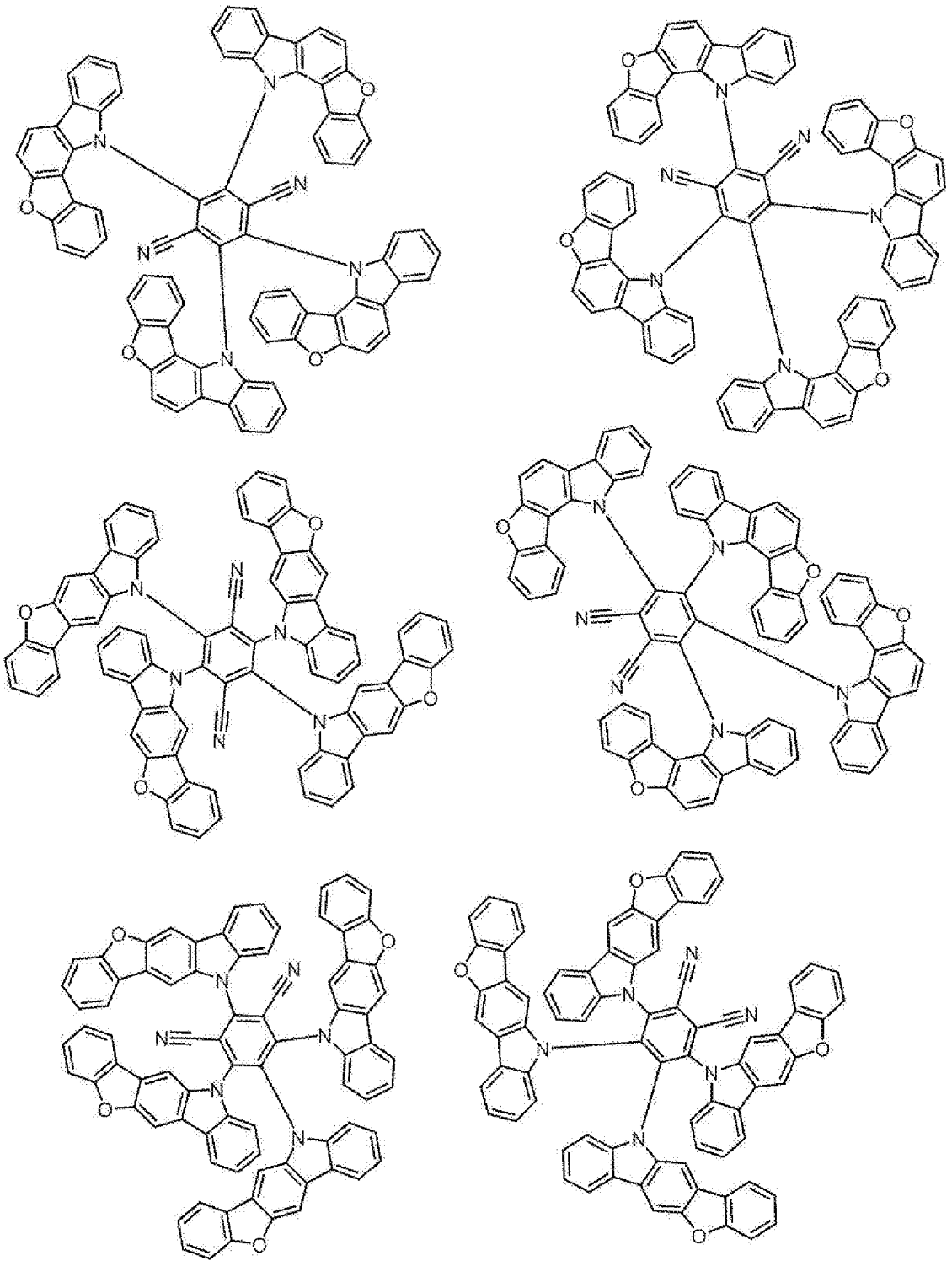
[0191]

[化84]



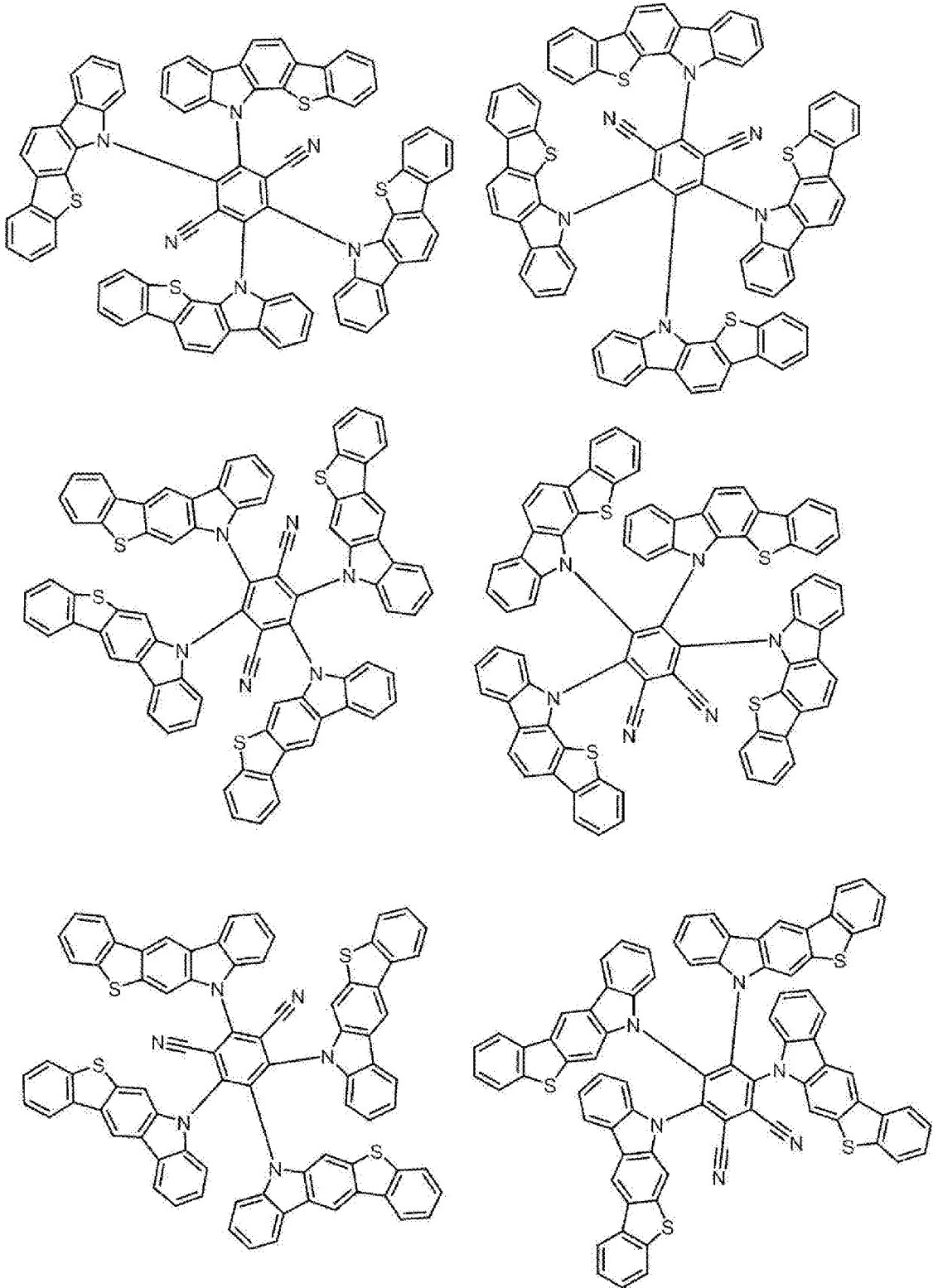
[0192]

[化85]



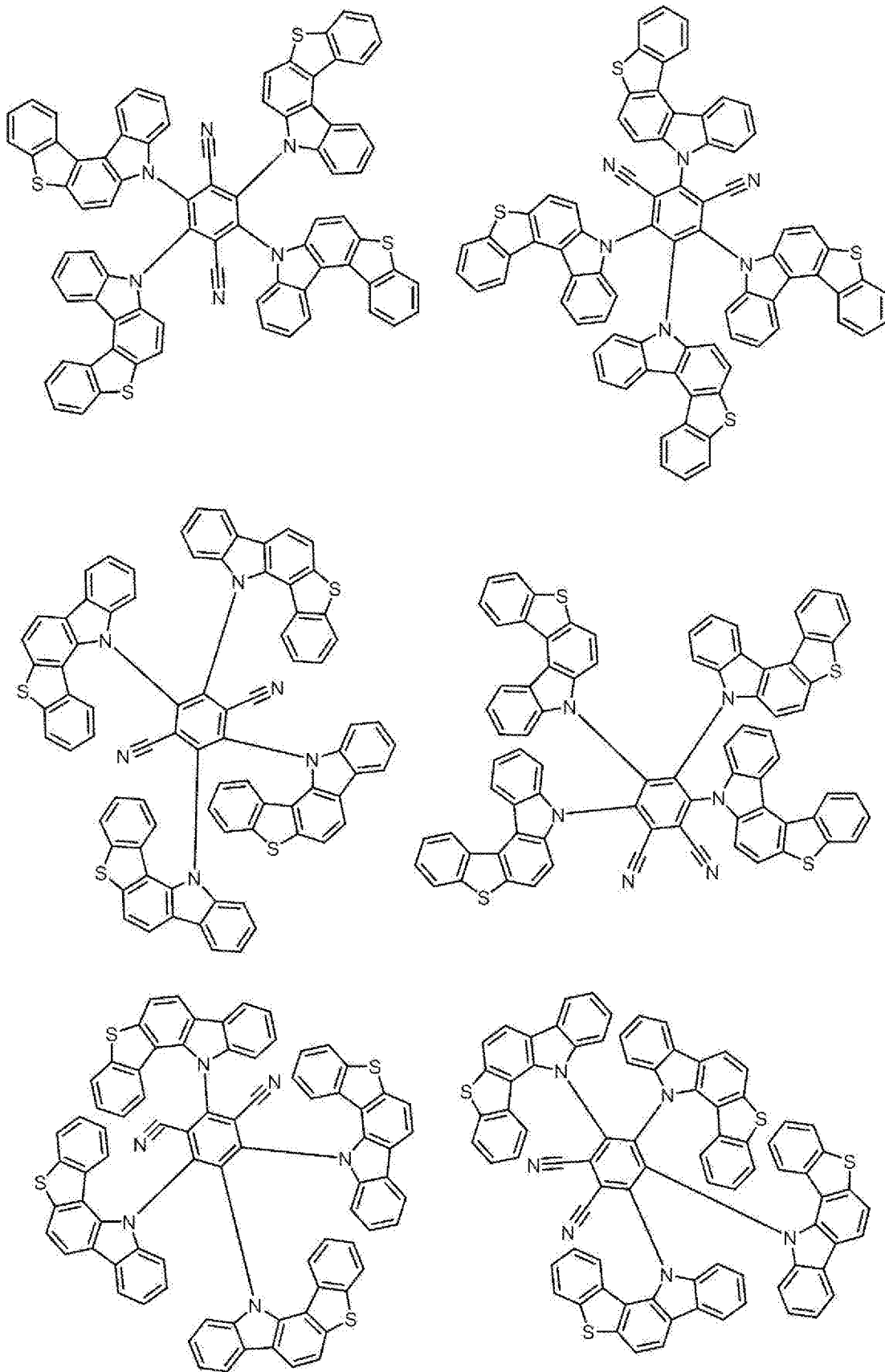
[0193]

[化86]

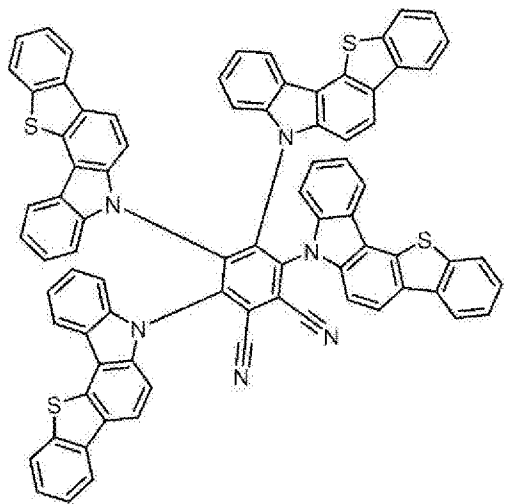
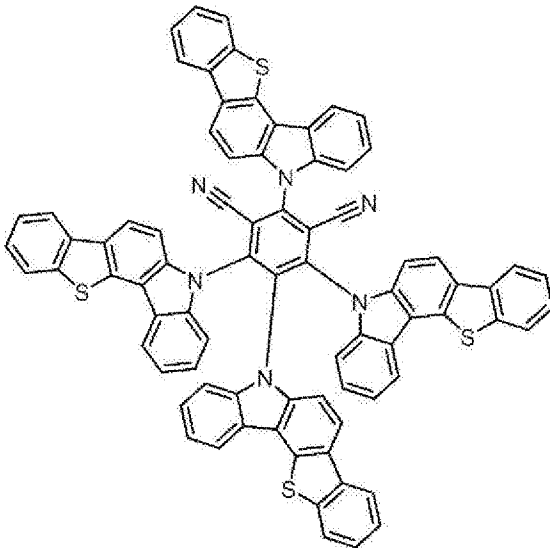
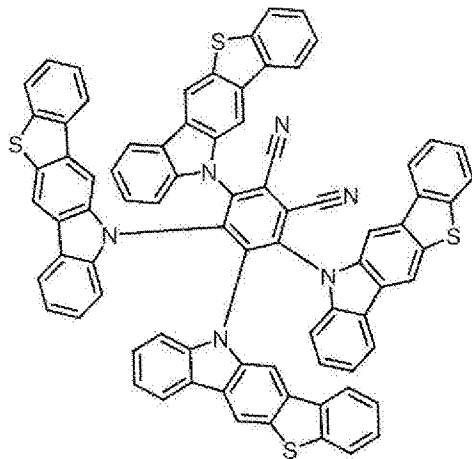
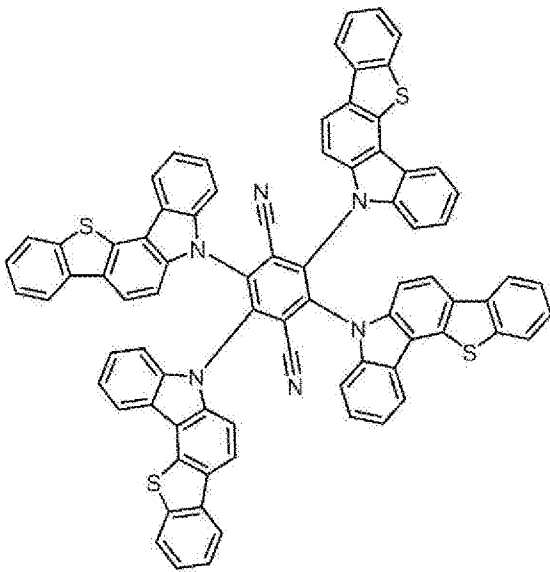
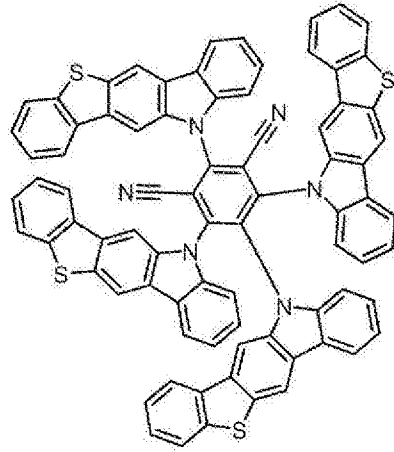
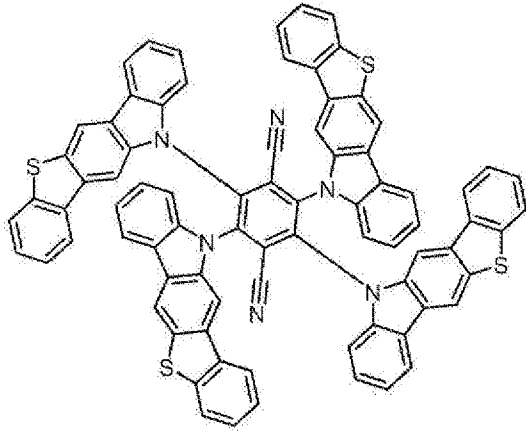


[0194]

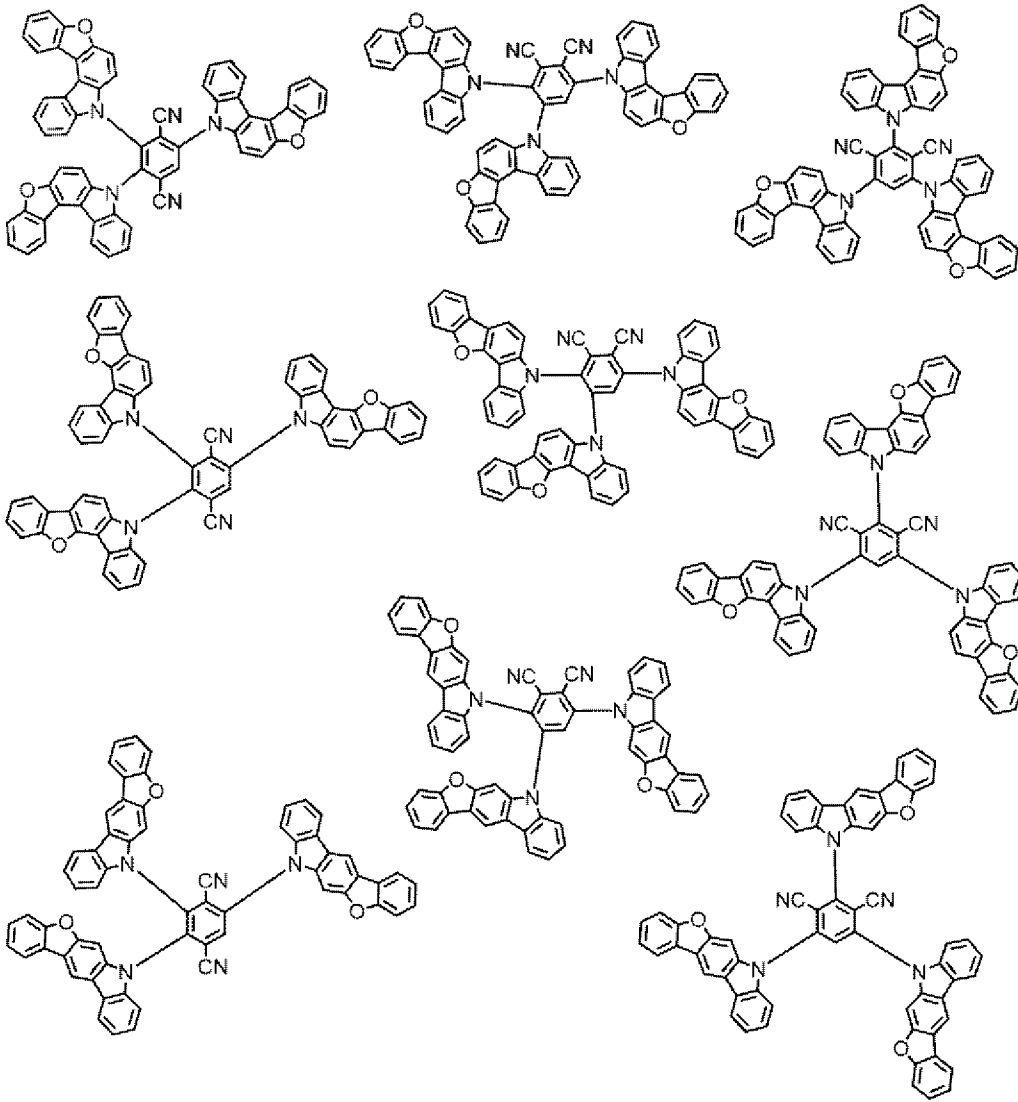
[化87]



[0195] [化88]

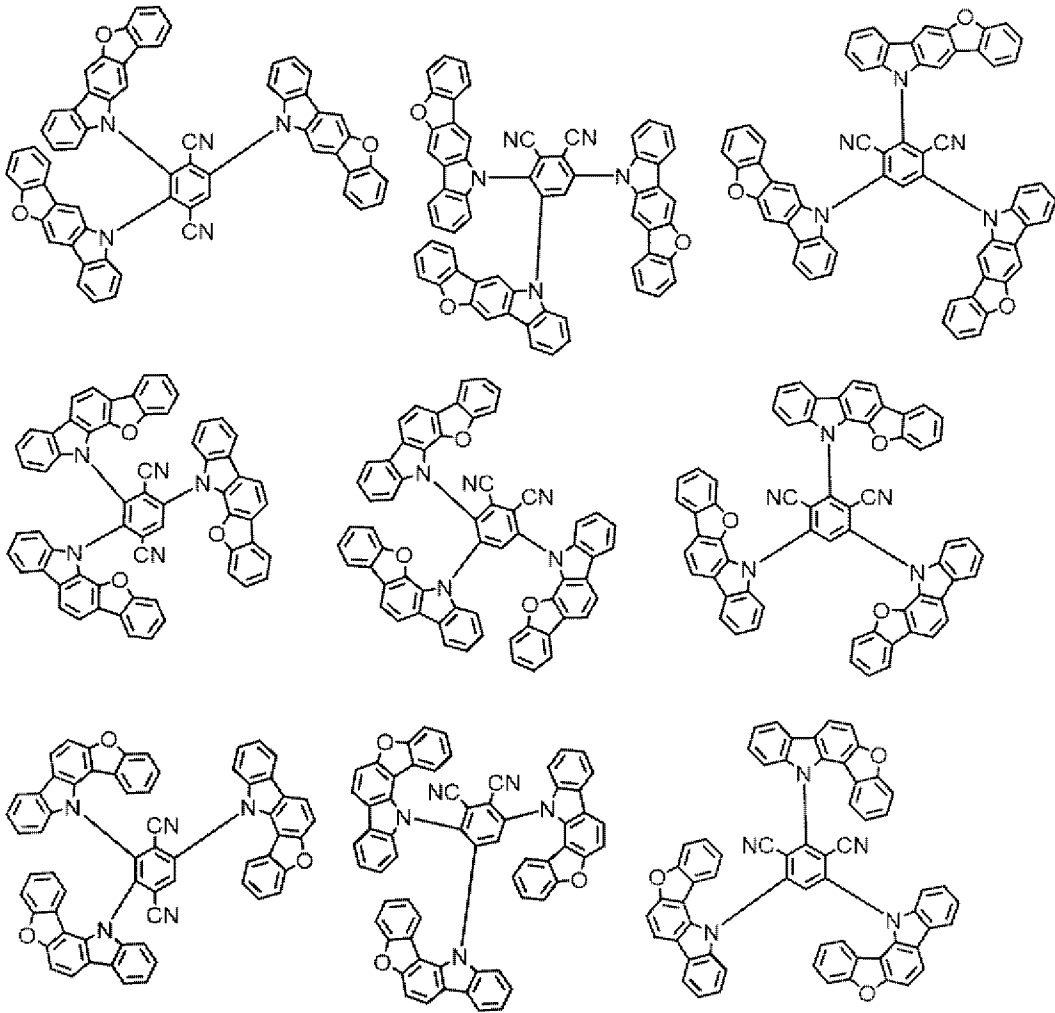


[0196] [化89]



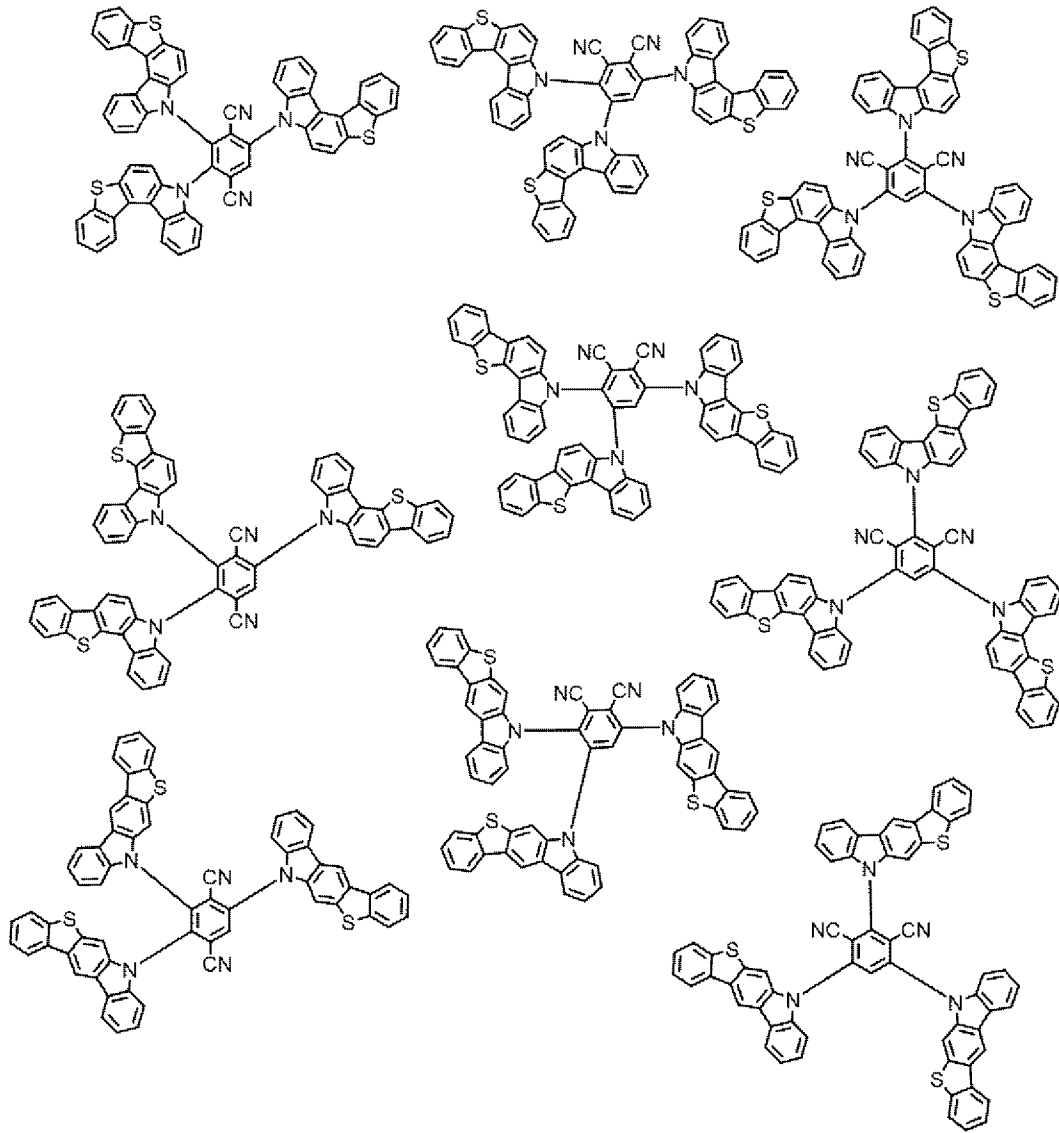
[0197]

[化90]



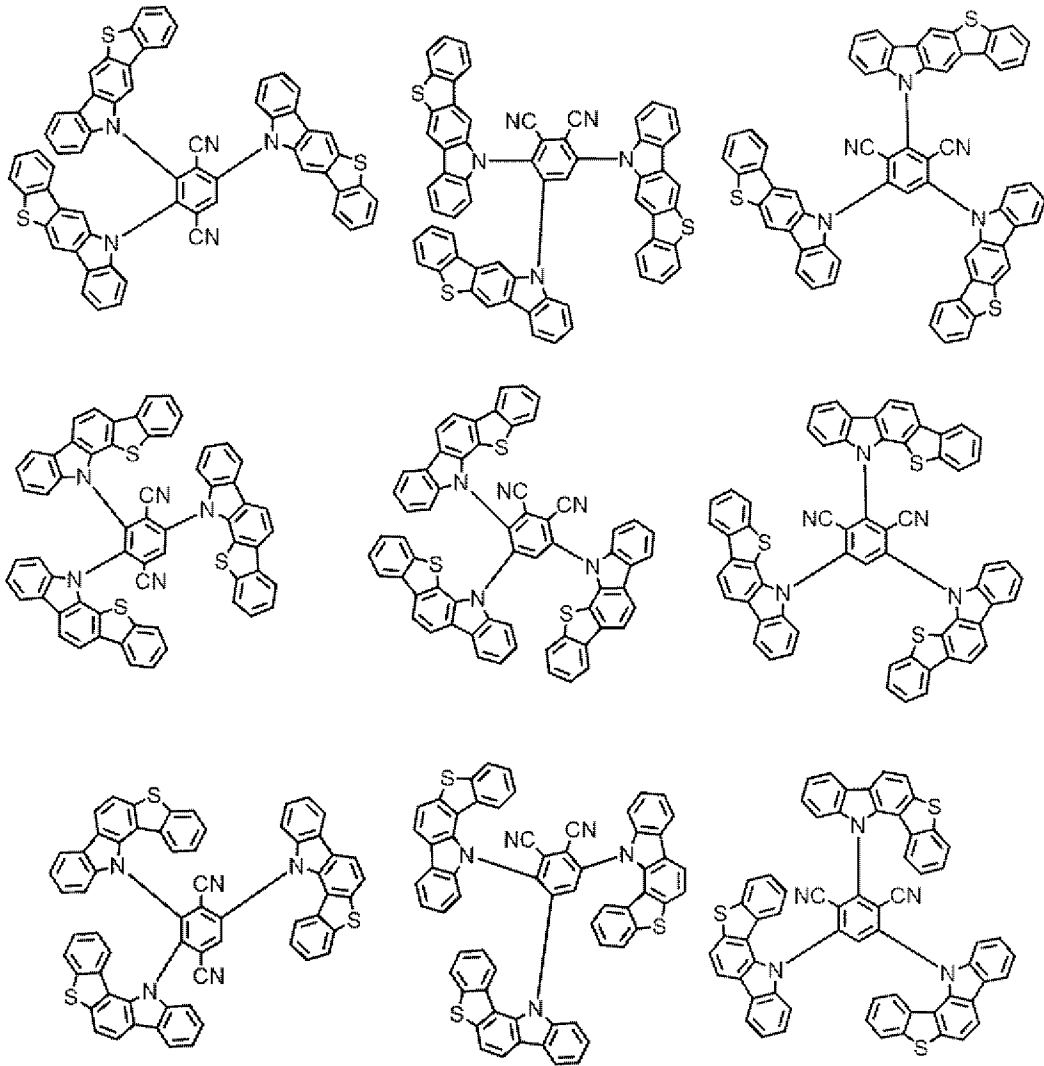
[0198]

[化91]



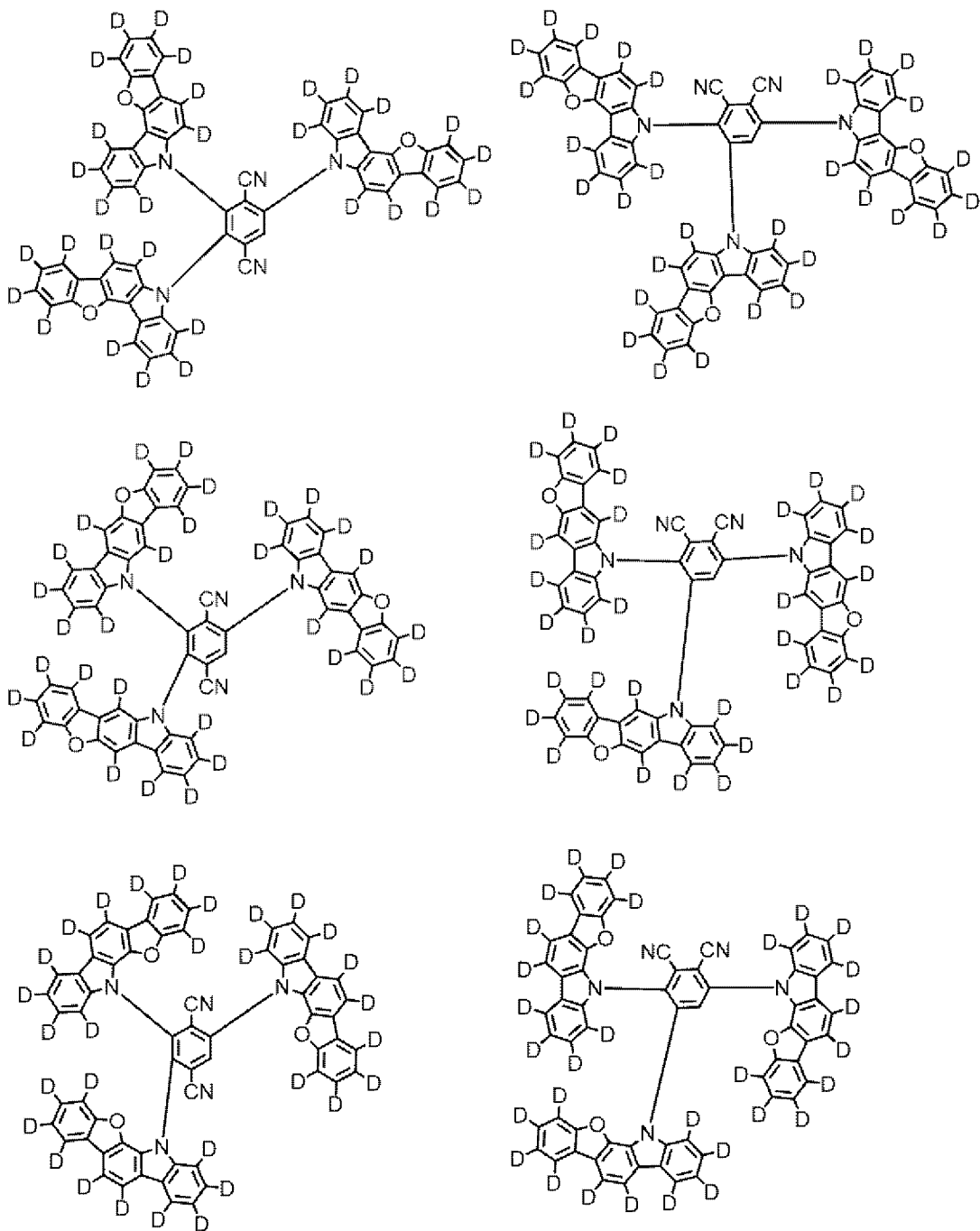
[0199]

[化92]



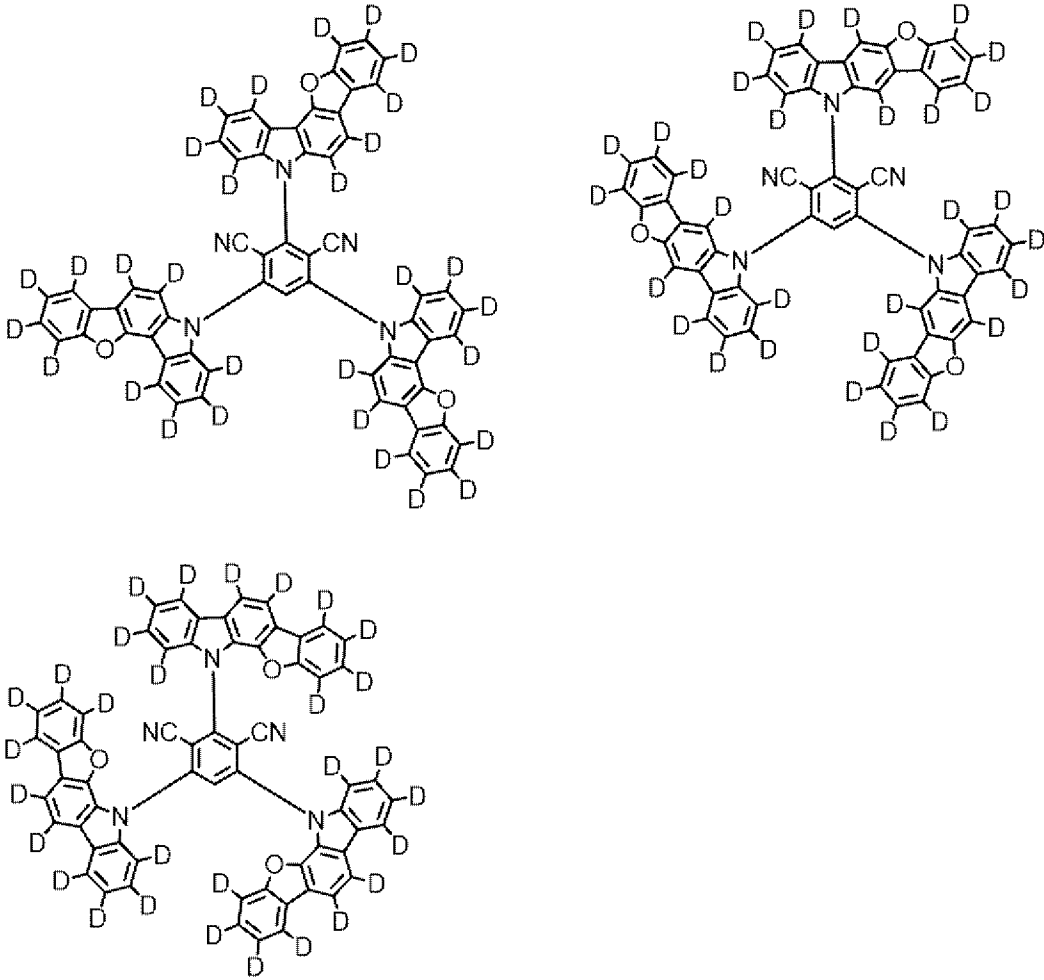
[0200]

[化93]



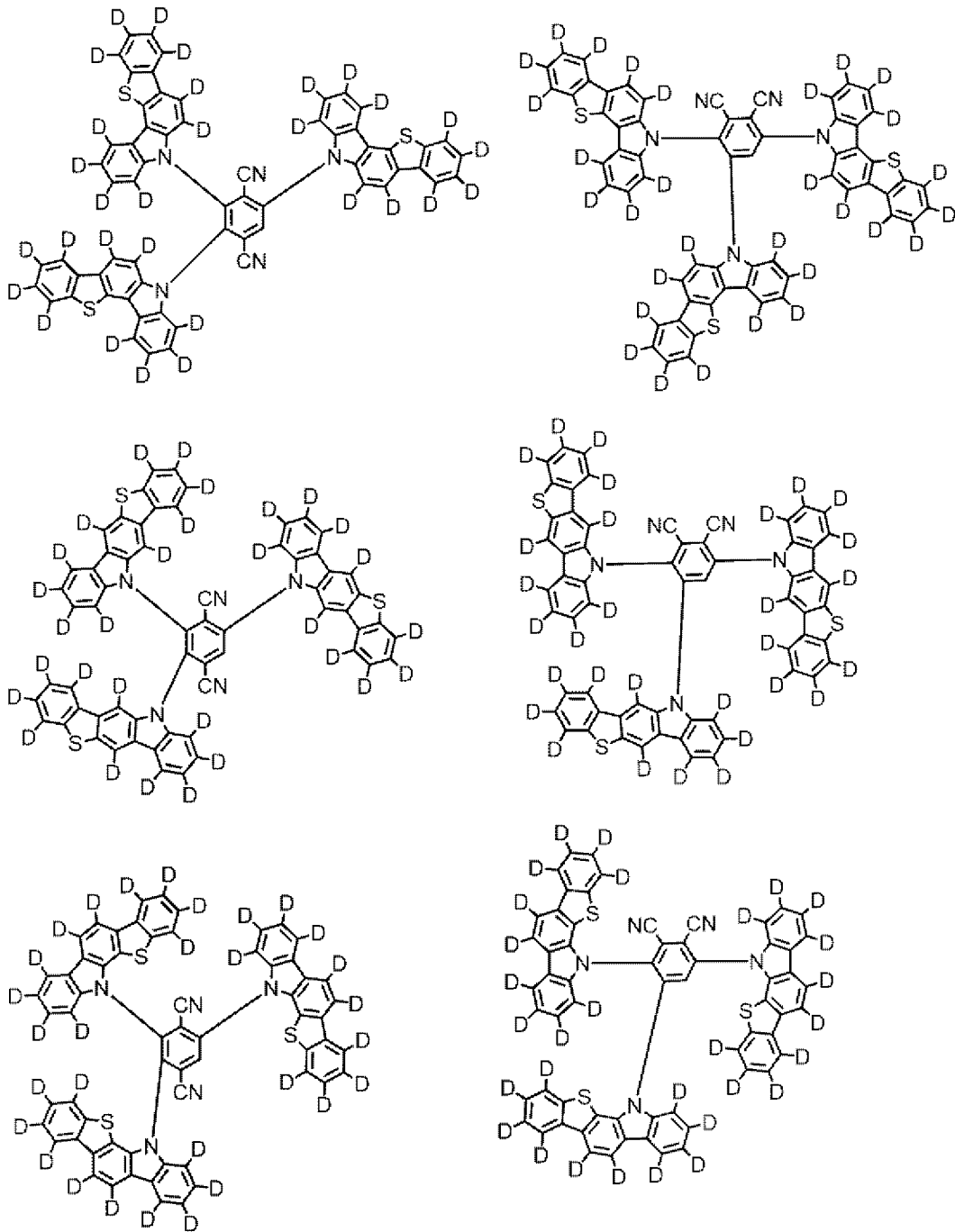
[0201]

[化94]



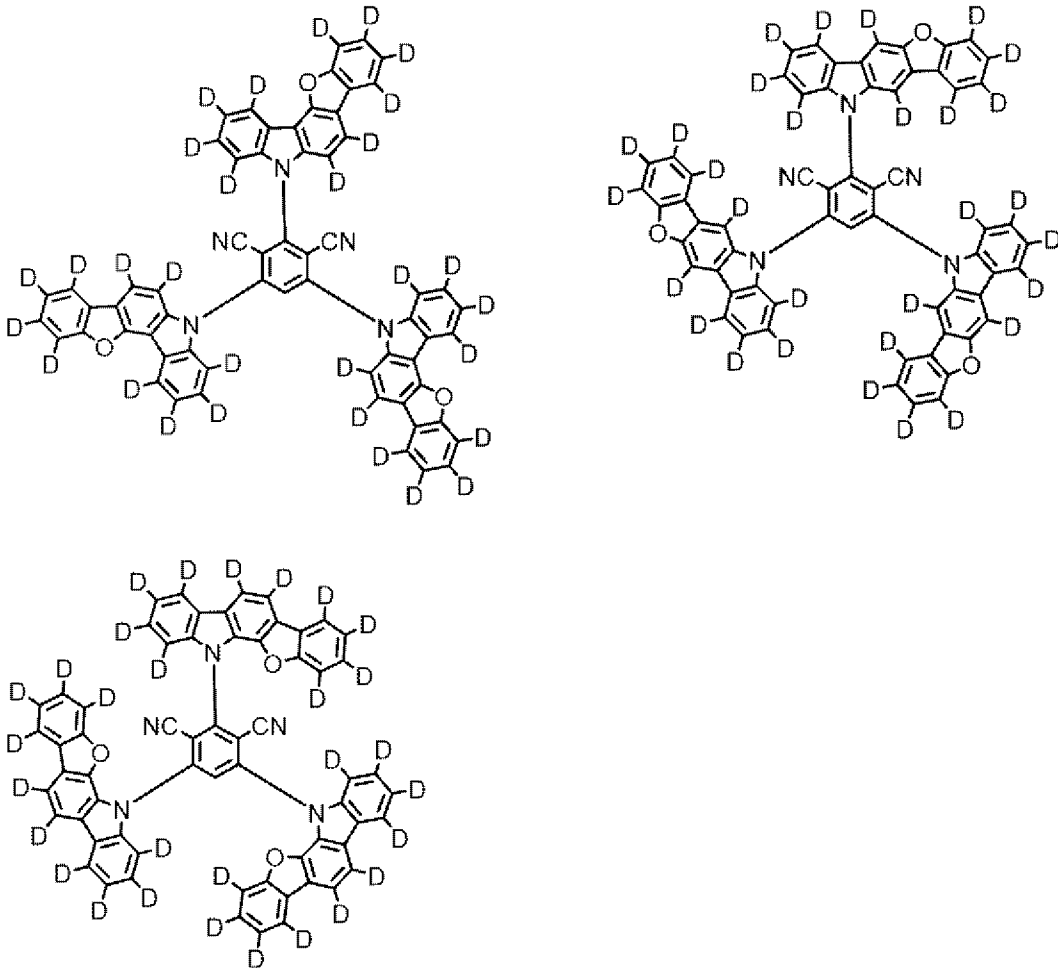
[0202]

[化95]



[0203]

[化96]



[0204] [第二実施形態]

[有機EL素子用材料]

第二実施形態に係る有機EL素子用材料は、第一実施形態の化合物（一般式（11）～（13）のいずれかで表される化合物の少なくともいずれか）を含む。

第二実施形態によれば、TADF性を維持しつつ、昇華精製する際の昇華温度を低下し得る有機EL素子用材料が得られる。

なお、第二実施形態に係る有機EL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。第二実施形態に係る有機EL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。

[0205] [第三実施形態]

[有機EL素子]

以下、第三実施形態に係る有機EL素子の構成について説明する。

[0206] 有機EL素子は、陽極および陰極の両電極間に有機層を備える。この有機層は、通常、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もよい。本実施形態の有機EL素子は、陽極と陰極との間に含まれる第一の有機層を有する。第一の有機層は、前記一般式(11)～(13)のいずれかで表される化合物の少なくともいずれかを含む。

第一の有機層としては、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子注入層、電子輸送層、正孔障壁層、及び電子障壁層等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。

[0207] 第一の有機層は発光層であることが好ましい。

本実施形態の有機EL素子は、第一の有機層が発光層である。

本実施形態において、有機層は、第一の有機層としての発光層だけで構成されていてもよいが、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、正孔障壁層、及び電子障壁層等からなる群から選択される少なくともいずれかの層をさらに有していてもよい。

[0208] 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、第一の有機層としての発光層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。

[0209] 本実施形態の有機EL素子1において、発光層5は、第一の化合物を含む。

第一の化合物は、第一実施形態に係る化合物(一般式(11)～(13)のいずれかで表される化合物の少なくともいずれか)である。

発光層5は、燐光発光性材料(ドーパント材料)を含まないことが好ましい。

発光層5は、重金属錯体及び燐光発光性の希土類金属錯体を含まないことが好ましい。ここで、重金属錯体としては、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

また、発光層5は、金属錯体を含まないことも好ましい。

[0210] 本実施形態の有機EL素子1は、発光層5が、第一の化合物と、さらに第二の化合物とを含む。

この態様の場合、第一の化合物は、ホスト材料（マトリックス材料と称する場合もある。）であることが好ましく、第二の化合物は、ドーパント材料（ゲスト材料、エミッター、発光材料と称する場合もある。）であることが好ましい。

[0211] <第一の化合物>

第一の化合物は、第一実施形態に係る化合物である。

第一の化合物は、遅延蛍光性の化合物であることが好ましい。

[0212] ・遅延蛍光性

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。本実施形態における第一の化合物は、このようなメカニズムで発生する熱活性化遅延蛍光を示す化合物であることが好ましい。

[0213] 一般に、遅延蛍光の発光は過渡PL（Photo Luminescence）測定により確認できる。

[0214] 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材料における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、三重項励起子を經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經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、三重項励起子を經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。

[0215] 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、および遅延蛍光の挙動解析の一例を説明する。

[0216] 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。

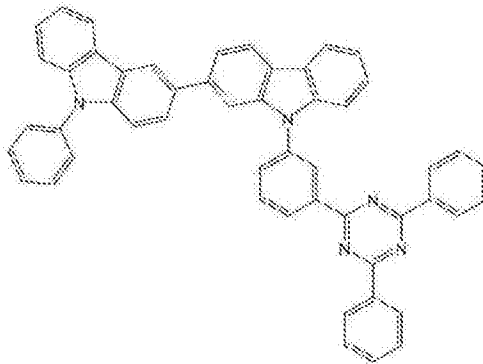
[0217] 試料室102に収容される試料は、マトリックス材料に対し、ドーピング材料が12質量%の濃度でドーピングされた薄膜を石英基板に成膜することで得られる。

[0218] 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

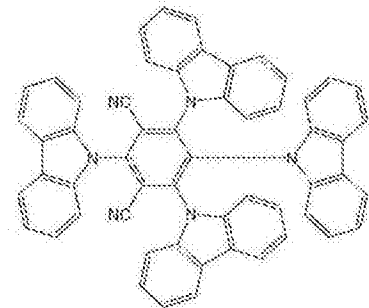
時間に対応し、横軸が波長に対応し、輝点が発光強度に対応する2次元画像を得ることができる。この2次元画像を所定の時間軸で切り出すと、縦軸が発光強度であり、横軸が波長である発光スペクトルを得ることができる。また、当該2次元画像を波長軸で切り出すと、縦軸が発光強度の対数であり、横軸が時間である減衰曲線（過渡PL）を得ることができる。

[0219] 例えば、マトリックス材料として、下記参考化合物H1を用い、ドーピング材料として下記参考化合物D1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。

[0220] [化97]



(参考化合物 H1)

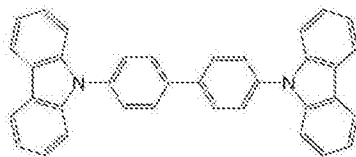


(参考化合物 D1)

[0221] ここでは、前述の薄膜試料A、および薄膜試料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参考化合物H2を用い、ドーピング材料として前記参考化合物D1を用いて、上述のようにして薄膜試料を作製した。

[0222] 図3には、薄膜試料Aおよび薄膜試料Bについて測定した過渡PLから得た減衰曲線が示されている。

[0223] [化98]



(参考化合物 H2)

[0224] 上記したように過渡PL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。

[0225] 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。

[0226] 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 4 9 2, 2 3 4 – 2 3 8, 2 0 1 2”（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。

[0227] また、本明細書では、第一の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、第一の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. 8 0 (1 9

76) 969中の(1)式により全蛍光量子収率を算出する。

[0228] 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。

本実施形態においては、測定対象化合物(第一の化合物)の 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以上であることが好ましい。

本明細書における第一の化合物以外の化合物の Prompt 発光と Delay 発光の量とその比の測定も、第一の化合物の Prompt 発光と Delay 発光の量とその比の測定と同様である。

[0229] <第二の化合物>

第二の化合物は、蛍光発光性の化合物であることが好ましい。第二の化合物は、遅延蛍光性の化合物でもよいし、遅延蛍光性を示さない化合物でもよい。

[0230] 本実施形態に係る第二の化合物としては、蛍光発光性材料を用いることができる。蛍光発光性材料としては、具体的には、例えば、ビスアリールアミノナフタレン誘導体、アリール置換ナフタレン誘導体、ビスアリールアミノアントラセン誘導体、アリール置換アントラセン誘導体、ビスアリールアミノピレン誘導体、アリール置換ピレン誘導体、ビスアリールアミノクリセン誘導体、アリール置換クリセン誘導体、ビスアリールアミノフルオランテン誘導体、アリール置換フルオランテン誘導体、インデノペリレン誘導体、アセナフトフルオランテン誘導体、ピロメテンホウ素錯体化合物、ピロメテン骨格を有する化合物、ピロメテン骨格を有する化合物の金属錯体、ジケトピロロピロール誘導体、ペリレン誘導体、およびナフタセン誘導体などが挙げられる。

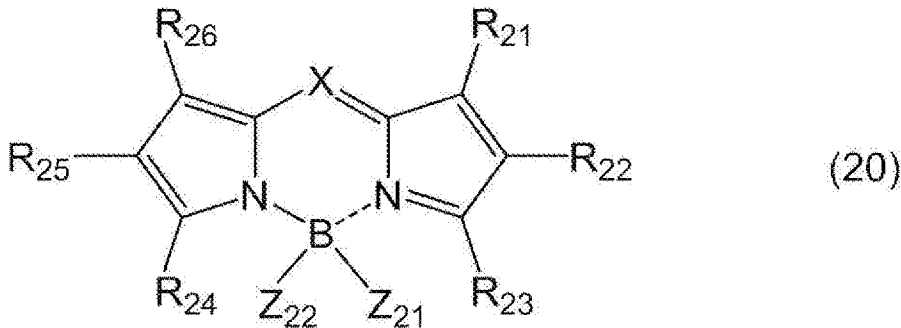
[0231] 本実施形態において、第二の化合物は、下記一般式(20)で表される化

合物であることが好ましい。

第二の化合物は、下記一般式（20）で表される化合物である。

第二の化合物は、蛍光発光性を有する化合物であることが好ましい。

[0232] [化99]



[0233] 前記一般式（20）において、

前記一般式（20）において、

Xは、窒素原子、又はYと結合する炭素原子であり、

Yは、水素原子又は置換基であり、

R₂₁～R₂₆は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR₂₁及びR₂₂の組、R₂₂及びR₂₃の組、R₂₄及びR₂₅の組、並びにR₂₅及びR₂₆の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としてのY、及びR₂₁～R₂₆は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～30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6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数7～30のアラルキル基、

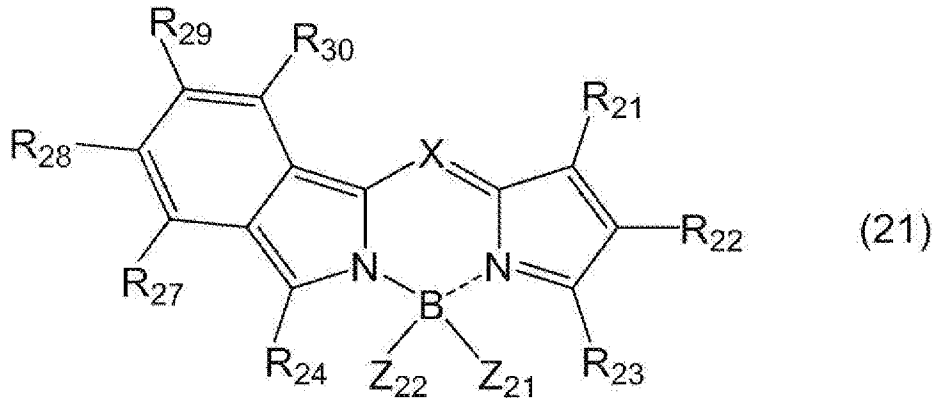
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアル基、
 ハロゲン原子、
 カルボキシ基、
 置換もしくは無置換のエステル基、
 置換もしくは無置換のカルバモイル基、
 置換もしくは無置換のアミノ基、
 ニトロ基、
 シアノ基、
 置換もしくは無置換のシリル基、および
 置換もしくは無置換のシロキサニル基からなる群から選択され、
 Z_{21} および Z_{22} は、それぞれ独立に、置換基であるか、又は Z_{21} 及び Z_{22}
 が互いに結合して環を形成し、
 置換基としての Z_{21} 及び Z_{22} は、それぞれ独立に、
 ハロゲン原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルコキシ基、およ
 び
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシ基からな
 る群から選択される。

[0234] 前記一般式 (20) において、例えば、 R_{25} 及び R_{26} の組が互いに結合し
 て環を形成している場合、第二の化合物は、下記一般式 (21) で表される

。

[0235]

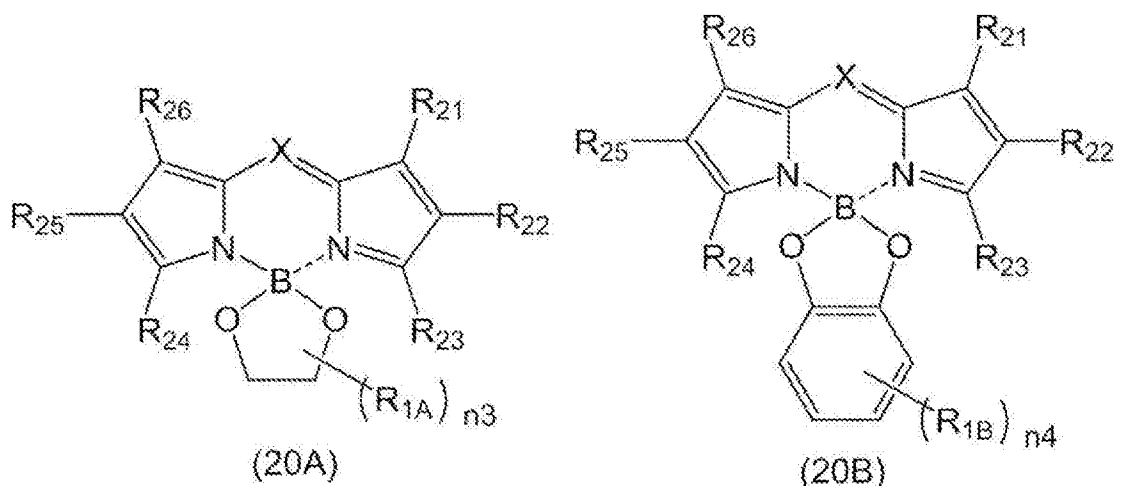
[化100]



[0236] 前記一般式(21)において、X、Y、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 Z_{21} 、および Z_{22} は、それぞれ、前記一般式(20)におけるX、Y、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 Z_{21} 、および Z_{22} と同義であり、 $R_{27} \sim R_{30}$ は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、 $R_{27} \sim R_{30}$ が置換基である場合の置換基としては、 $R_{21} \sim R_{24}$ について列挙した置換基と同義である。

[0237] 前記一般式(20)において、 Z_{21} 及び Z_{22} が互いに結合して環を形成している場合、第二の化合物は、例えば、下記一般式(20A)、または下記一般式(20B)で表される。ただし、第二の化合物は、以下の構造に限定されない。

[0238] [化101]



[0239] 前記一般式(20A)において、X、Y、および $R_{21} \sim R_{26}$ は、それぞれ、前記一般式(20)におけるX、Y、および $R_{21} \sim R_{26}$ と同義であり、 R_{1A} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、 R_{1A} が置換基である場

合の置換基としては、 $R_{21} \sim R_{26}$ について列挙した置換基と同義であり、 n は4である。

前記一般式(20B)において、 X 、 Y 、および $R_{21} \sim R_{26}$ は、それぞれ、前記一般式(20)における X 、 Y 、および $R_{21} \sim R_{26}$ と同義であり、 R_{1B} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、 R_{1B} が置換基である場合の置換基としては、 $R_{21} \sim R_{26}$ について列挙した置換基と同義であり、 n は4である。

[0240] Z_{21} 及び Z_{22} のうち少なくともいずれか(好ましくは Z_{21} 及び Z_{22})は、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルコキシ基、及び置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

Z_{21} 及び Z_{22} のうち少なくともいずれかは、フッ素原子で置換された炭素数1~30のアルコキシ基、フッ素原子で置換された環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、及び炭素数1~30のフルオロアルキル基で置換された環形成炭素数6~30のアリールオキシ基からなる群から選択される基であることがより好ましい。

Z_{21} 及び Z_{22} のうち少なくともいずれかは、フッ素原子で置換された炭素数1~30のアルコキシ基であることがさらに好ましく、 Z_{21} 及び Z_{22} がフッ素原子で置換された炭素数1~30のアルコキシ基であることがさらに好ましい。

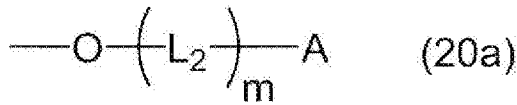
[0241] Z_{21} 及び Z_{22} が同じであることも好ましい。

[0242] 一方、前記 Z_{21} および前記 Z_{22} のうち少なくともいずれかがフッ素原子であることも好ましく、前記 Z_{21} および前記 Z_{22} がフッ素原子であることもより好ましい。

[0243] 前記 Z_{21} および前記 Z_{22} のうち少なくともいずれかは、下記一般式(20

a) で表される基であることも好ましい。

[0244] [化102]

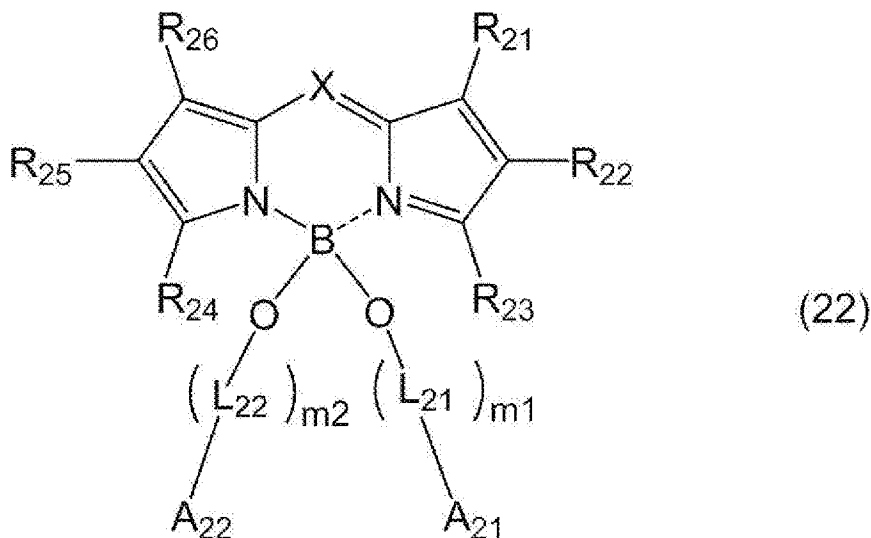


[0245] 前記一般式(20a)において、Aは、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～6のハロゲン化アルキル基、または置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基であり、L₂は、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキレン基、または置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基であり、mは、0、1、2、3、4、5、6、又は7であり、mが2、3、4、5、6、又は7である場合、複数のL₂は、互いに同一または異なる。mは、0、1、又は2であることが好ましい。mが0の場合、Aは、O(酸素原子)に直接結合する。

[0246] 前記一般式(20)において、Z₂₁およびZ₂₂が前記一般式(20a)で表される基である場合、第二の化合物は、下記一般式(22)で表される化合物である。

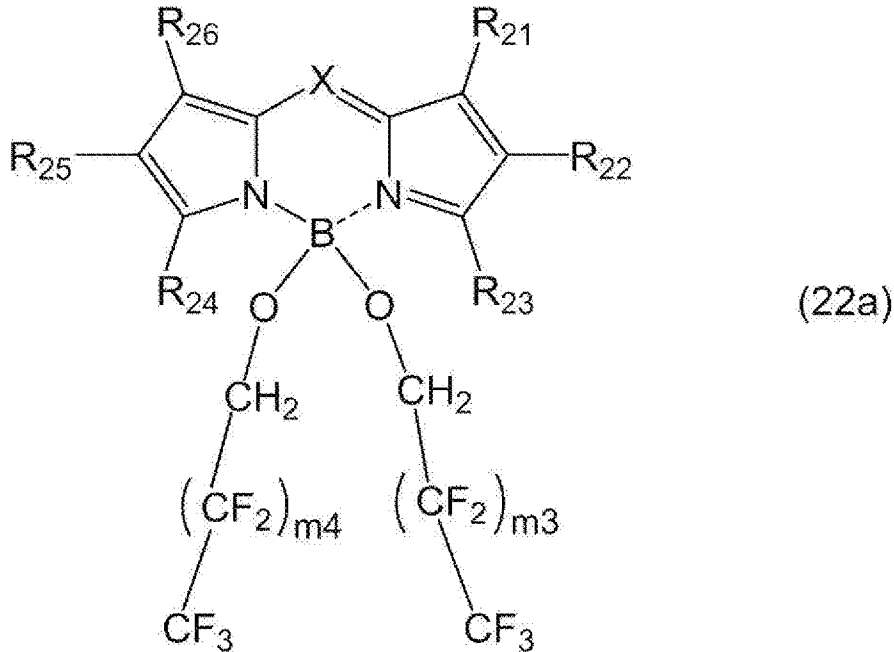
第二の化合物は、下記一般式(22)で表される化合物であることも好ましい。

[0247] [化103]



- [0248] 前記一般式(22)において、X、XがYと結合する炭素原子であるときのY、 $R_{21} \sim R_{26}$ は、それぞれ、前記一般式(20)におけるX、Y、 $R_{21} \sim R_{26}$ と同義である。 A_{21} および A_{22} は、前記一般式(20a)におけるAと同義であり、互いに同一でも異なってもよい。 L_{21} および L_{22} は、前記一般式(20a)における L_2 と同義であり、互いに同一でも異なってもよい。 m_1 および m_2 は、それぞれ独立に、0、1、2、3、4、5、6、又は7であり、0、1、又は2であることが好ましい。 m_1 が2、3、4、5、6、又は7である場合、複数の L_{21} は、互いに同一または異なり、 m_2 が2、3、4、5、6、又は7である場合、複数の L_{22} は、互いに同一または異なる。 m_1 が0の場合、 A_{21} は、O(酸素原子)に直接結合し、 m_2 が0の場合、 A_{22} は、O(酸素原子)に直接結合する。
- [0249] 前記一般式(20a)におけるAおよび L_2 のうち少なくともいずれかが、ハロゲン原子で置換されていることが好ましく、フッ素原子で置換されていることがより好ましい。
- [0250] 前記一般式(20a)におけるAは、炭素数1~6のパーフルオロアルキル基、または環形成炭素数6~12のパーフルオロアリール基であることがより好ましく、炭素数1~6のパーフルオロアルキル基であることがさらに好ましい。
- [0251] 前記一般式(20a)における L_2 は、炭素数1~6のパーフルオロアルキレン基、または環形成炭素数6~12のパーフルオロアリーレン基であることがより好ましく、炭素数1~6のパーフルオロアルキレン基であることがさらに好ましい。
- [0252] すなわち、前記第二の化合物は、下記一般式(22a)で表される化合物であることも好ましい。
- [0253]

[化104]



[0254] 前記一般式 (22a) において、

Xは、前記一般式 (20) におけるXと同義であり、XがYと結合する炭素原子であるときのYは、前記一般式 (20) におけるYと同義であり、

R₂₁～R₂₆は、それぞれ独立に、前記一般式 (20) におけるR₂₁～R₂₆とそれぞれ同義であり、

m₃は、0以上4以下であり、

m₄は、0以上4以下であり、

m₃及びm₄は、互いに同一であるか又は異なる。

[0255] 前記一般式 (20)、(21)、(22)、及び(22a)において、

Xは、Yと結合する炭素原子であり、

Yは、水素原子又は置換基であり、

置換基としてのYは、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基及び置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基からなる群から選択される置換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6～30のアリール基であることがより好ましい。

[0256] 前記一般式 (20)、(21)、(22)、及び(22a)において、

より好ましい態様としては、

Xは、Yと結合する炭素原子であり、

Yは、水素原子又は置換基であり、

置換基としてのYは、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であり、

置換基としてのYが置換基を有する環形成炭素数6～30のアリール基である場合の当該置換基は、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルコキシ基、又は

炭素数1～30のアルキル基で置換された環形成炭素数6～30のアリール基である態様が挙げられる。

[0257] 第二の化合物は、前記Z₂₁と前記Z₂₂とが互いに結合して環を形成してもよいが、前記Z₂₁と前記Z₂₂とが互いに結合して環を形成しないことが好ましい。

[0258] 前記一般式(20)、(22)、及び(22a)において、R₂₁、R₂₃、R₂₄、およびR₂₆のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。

前記一般式(20)、(22)、及び(22a)において、R₂₁、R₂₃、R₂₄、およびR₂₆が置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基であることがより好ましい。この場合、R₂₂およびR₂₅が水素原子であることが好ましい。

[0259] 前記一般式(20)、(22)、及び(22a)において、R₂₁、R₂₃、R₂₄、およびR₂₆のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることが好ましい。

前記一般式(20)、(22)、及び(22a)において、 R_{21} 、 R_{23} 、 R_{24} 、および R_{26} が置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることがより好ましい。この場合、 R_{22} および R_{25} が水素原子であることが好ましい。

- [0260] 前記一般式(20)、(22)、及び(22a)において、より好ましい態様としては、 R_{21} 、 R_{23} 、 R_{24} 、及び R_{26} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1~30(好ましくは炭素数1~6)のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30(好ましくは炭素数1~6)のハロゲン化アルキル基、又は炭素数1~30のアルキル基で置換された環形成炭素数6~30(好ましくは環形成炭素数6~12)のアリール基であり、 R_{22} 及び R_{25} が水素原子である態様が挙げられる。

- [0261] 前記一般式(21)において、 R_{21} 、 R_{23} 、および R_{24} のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。

- [0262] 前記一般式(21)において、 R_{21} 、 R_{23} 、および R_{24} が置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基であることがより好ましい。この場合、 R_{22} は水素原子であることが好ましい。

- [0263] 前記一般式(21)において、 R_{21} 、 R_{23} 、および R_{24} のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることが好ましい。

- [0264] 前記一般式(21)において、 R_{21} 、 R_{23} 、および R_{24} が置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることがより好ましい。この場合、 R_{22} は水素原子であることが好ましい。

[0265] 前記一般式(21)において、

より好ましい態様としては、

R_{21} 、 R_{23} 、および R_{24} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1~30(好ましくは炭素数1~6)のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30(好ましくは炭素数1~6)のハロゲン化アルキル基、又は

炭素数1~30のアルキル基で置換された環形成炭素数6~30(好ましくは環形成炭素数6~12)のアリール基であり、

R_{22} が水素原子である態様が挙げられる。

[0266] 第二の化合物において、フッ素原子で置換されたアルコキシ基としては、

例えば、2, 2, 2-トリフルオロエトキシ基、2, 2-ジフルオロエトキシ基、2, 2, 3, 3, 3-ペンタフルオロ-1-プロポキシ基、2, 2, 3, 3-テトラフルオロ-1-プロポキシ基、1, 1, 1, 3, 3, 3-ヘキサフルオロ-2-プロポキシ基、2, 2, 3, 3, 4, 4, 4-ヘプタフルオロ-1-ブチルオキシ基、2, 2, 3, 3, 4, 4-ヘキサフルオロ-1-ブチルオキシ基、ノナフルオロターシャリーブチルオキシ基、2, 2, 3, 3, 4, 4, 5, 5, 5-ノナフルオロペンタノキシ基、2, 2, 3, 3, 4, 4, 5, 5, 6, 6, 6-ウンデカフルオロヘキサノキシ基、2, 3-ビス(トリフルオロメチル)-2, 3-ブタンジオキシ基、1, 1, 2, 2-テトラ(トリフルオロメチル)エチレングリコキシ基、4, 4, 5, 5, 6, 6, 6-ヘプタフルオロヘキサン-1, 2-ジオキシ基、および4, 4, 5, 5, 6, 6, 7, 7, 8, 8, 9, 9, 9-トリデカフルオロノン-1, 2-ジオキシ基等が挙げられる。

[0267] 第二の化合物において、フッ素原子で置換されたアリールオキシ基、または

フルオロアルキル基で置換されたアリールオキシ基としては、例えば、ペンタフルオロフェノキシ基、3, 4, 5-トリフルオロフェノキシ基、4-トリフルオロメチルフェノキシ基、3, 5-ビス(トリフルオロメチル)フェノ

キシ基、3-フルオロ-4-トリフルオロメチルフェノキシ基、2, 3, 5, 6-テトラフルオロ-4-トリフルオロメチルフェノキシ基、4-フルオロカテコラート基、4-トリフルオロメチルカテコラート基、および3, 5-ビストリフルオロメチルカテコラート基等が挙げられる。

[0268] 第二の化合物が蛍光発光性の化合物である場合、第二の化合物は、主ピーク波長が、400 nm以上700 nm以下の発光を示すことが好ましい。

本明細書において、主ピーク波長とは、測定対象化合物が 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ピーク波長をいう。測定装置は、分光蛍光光度計（日立ハイテクサイエンス社製、F-7000）を用いる。

[0269] 第二の化合物は、赤色の発光又は緑色の発光を示すことが好ましい。

本明細書において、赤色の発光とは、蛍光スペクトルの主ピーク波長が600 nm以上660 nm以下の範囲内である発光をいう。

第二の化合物が赤色の蛍光発光性の化合物である場合、第二の化合物の主ピーク波長は、好ましくは600 nm以上660 nm以下、より好ましくは600 nm以上640 nm以下、さらに好ましくは610 nm以上630 nm以下である。

本明細書において、緑色の発光とは、蛍光スペクトルの主ピーク波長が500 nm以上560 nm以下の範囲内である発光をいう。

第二の化合物が緑色の蛍光発光性の化合物である場合、第二の化合物の主ピーク波長は、好ましくは500 nm以上560 nm以下、より好ましくは500 nm以上540 nm以下、さらに好ましくは510 nm以上530 nm以下である。

本明細書において、青色の発光とは、蛍光スペクトルの主ピーク波長が430 nm以上480 nm以下の範囲内である発光をいう。

第二の化合物が青色の蛍光発光性の化合物である場合、第二の化合物の主ピーク波長は、好ましくは430 nm以上480 nm以下、より好ましくは

445 nm以上480 nm以下である。

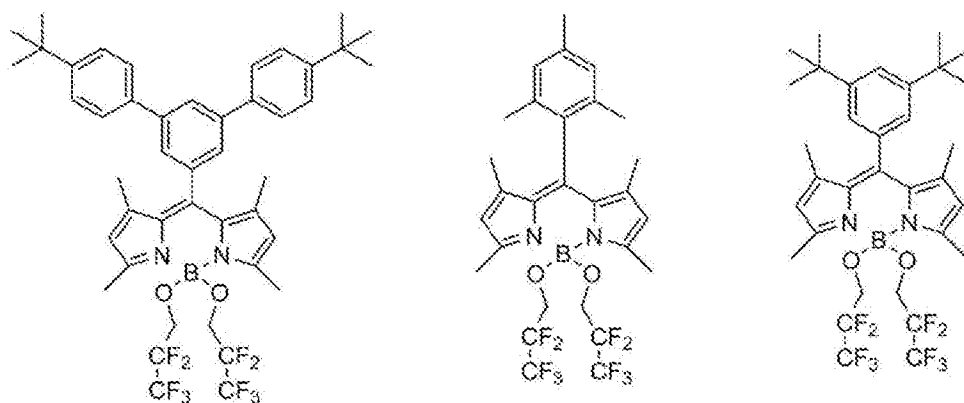
[0270] ・第二の化合物の製造方法

第二の化合物は、公知の方法により製造することができる。

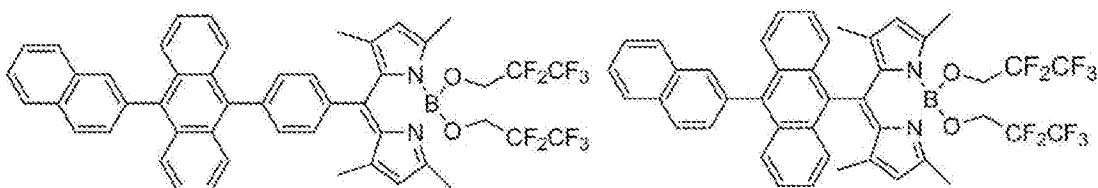
[0271] 本実施形態に係る第二の化合物の具体例を以下に示す。なお、本発明における第二の化合物は、これらの具体例に限定されない。

なお、ピロメテン骨格中におけるホウ素原子と窒素原子との配位結合は、実線、破線、矢印、もしくは省略するなど、種々の表記方法がある。本明細書においては、実線で表すか、破線で表すか、又は記載を省略する。

[0272] [化105]

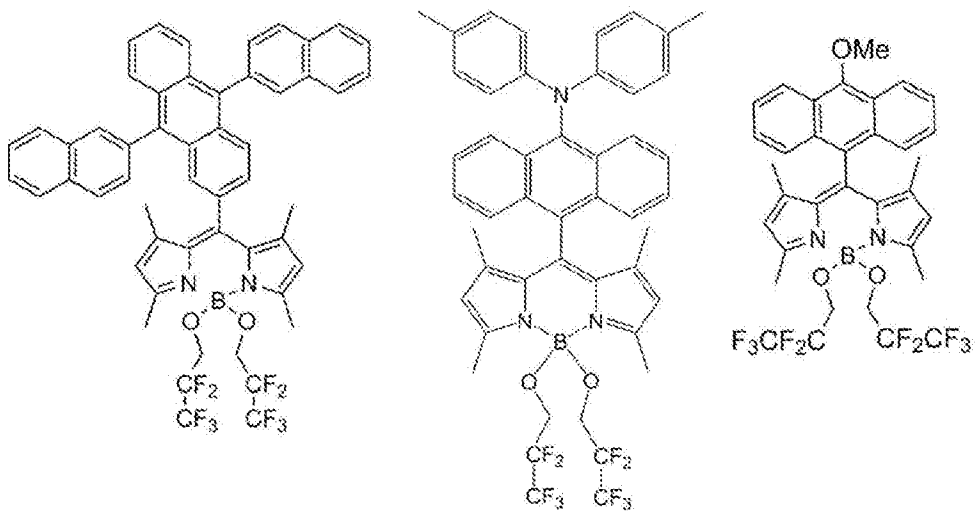


[0273] [化106]

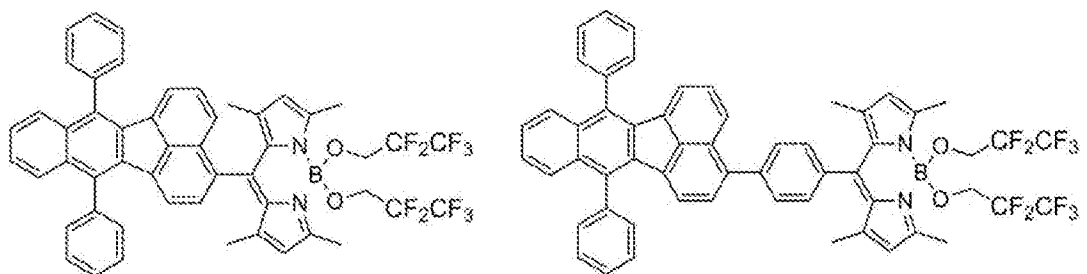


[0274]

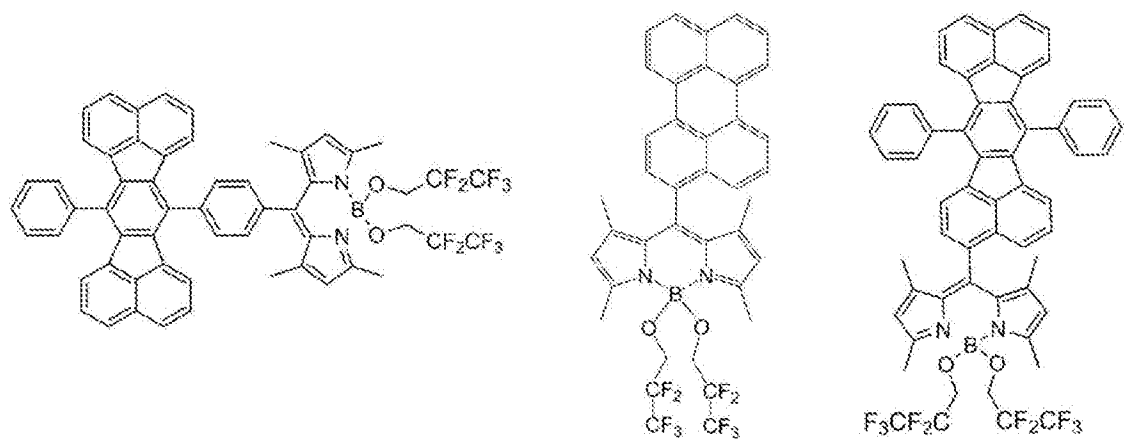
[化107]



[0275] [化108]

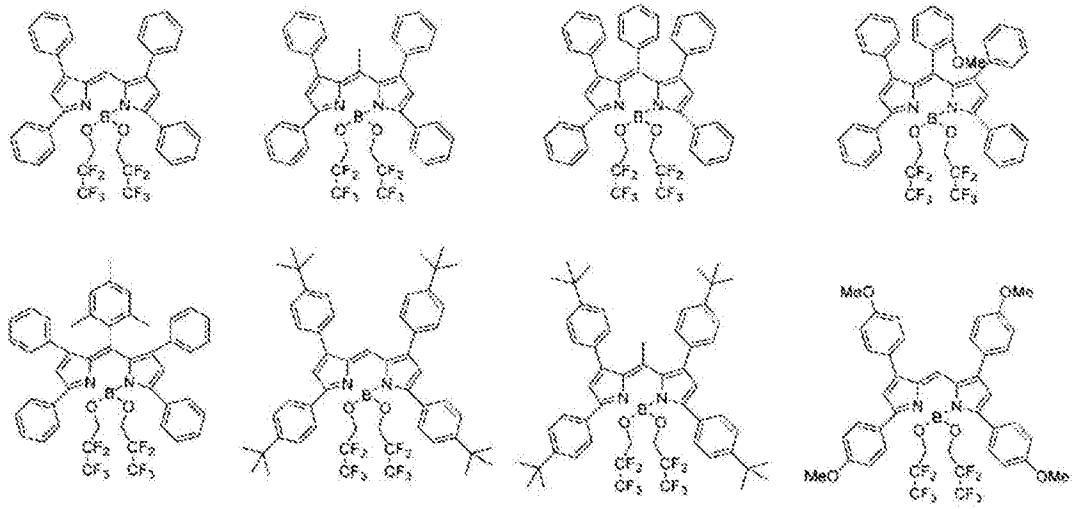


[0276] [化109]

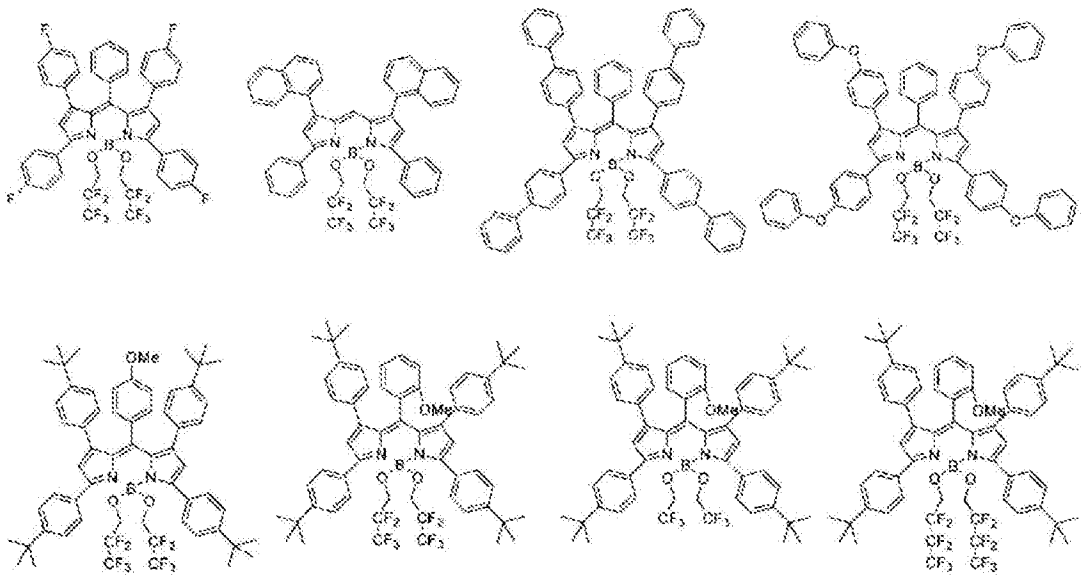


[0277]

[化110]

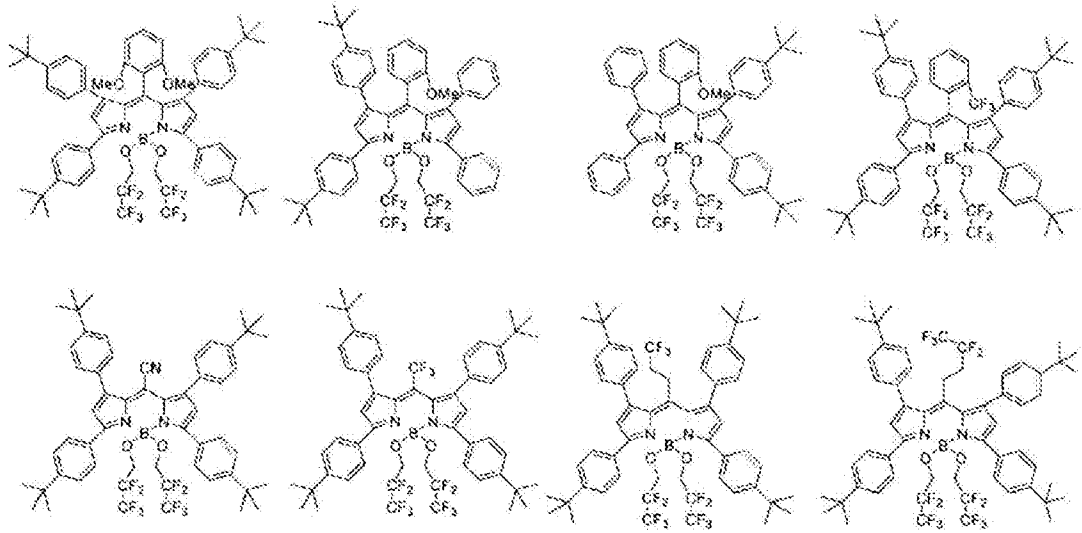


[0278] [化111]

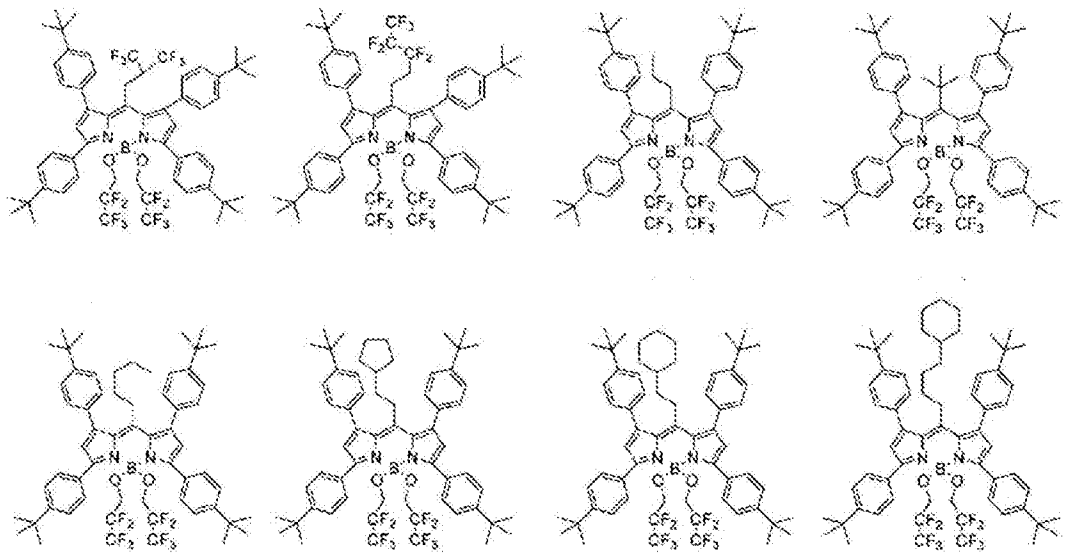


[0279]

[化112]

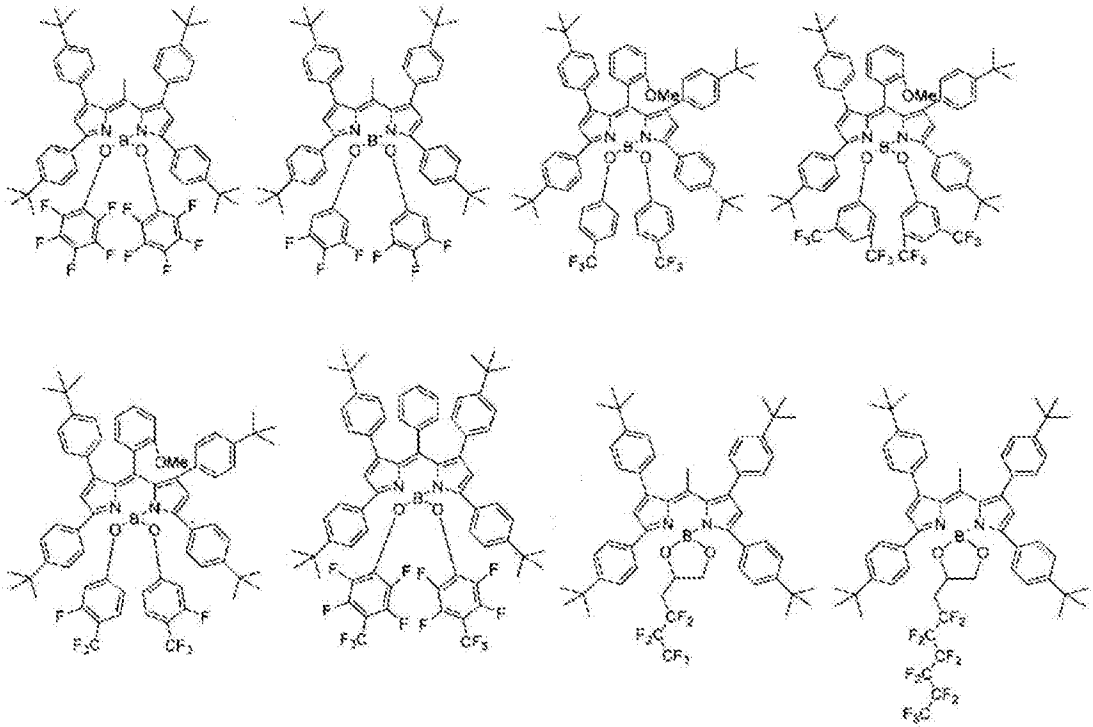


[0280] [化113]

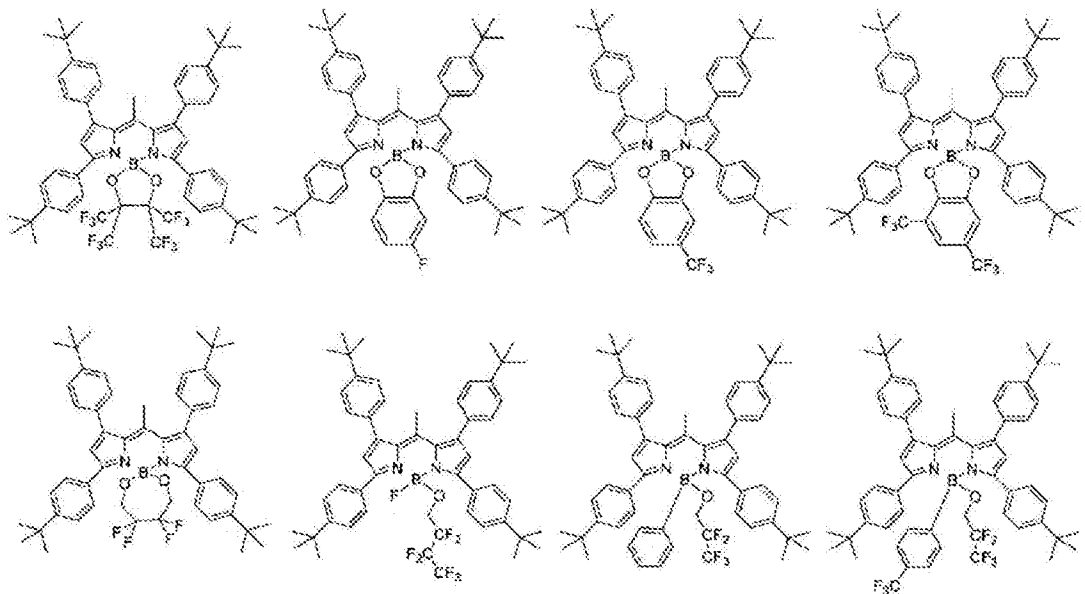


[0281]

[化114]

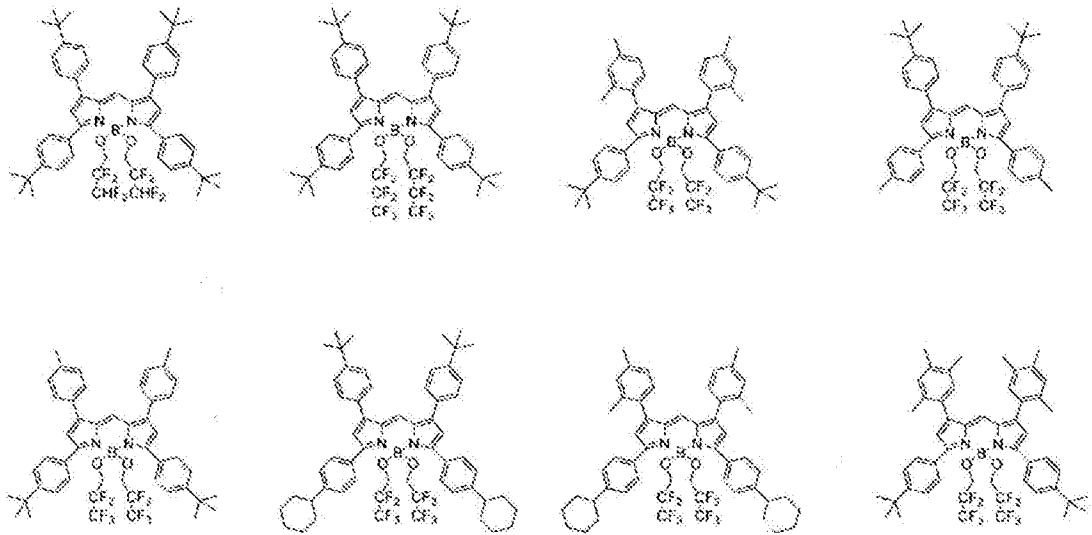


[0282] [化115]

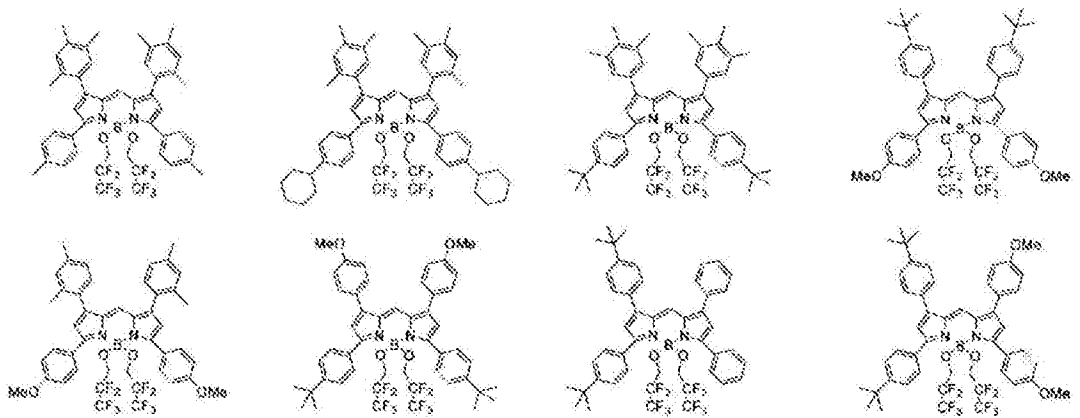


[0283]

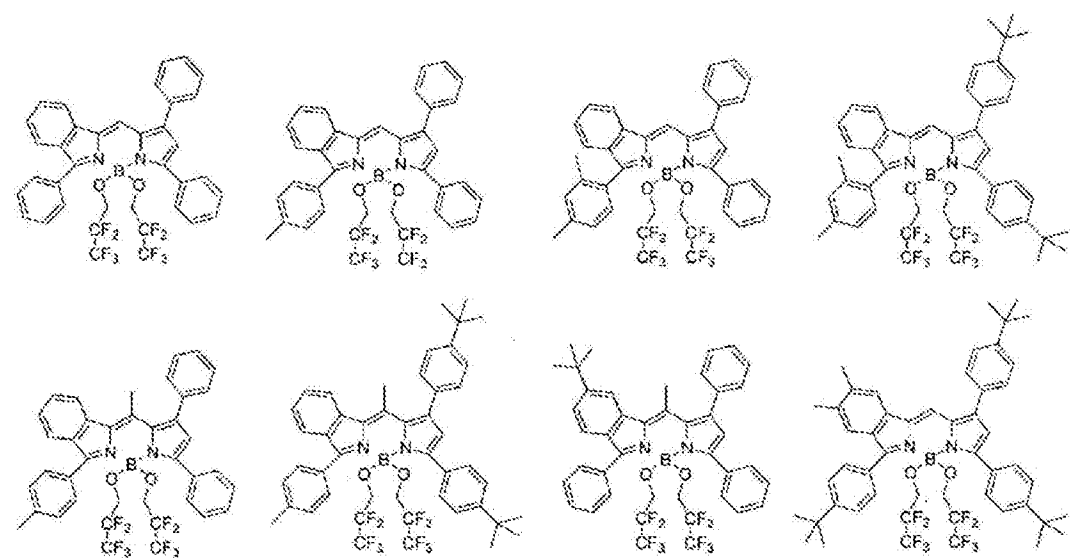
[化116]



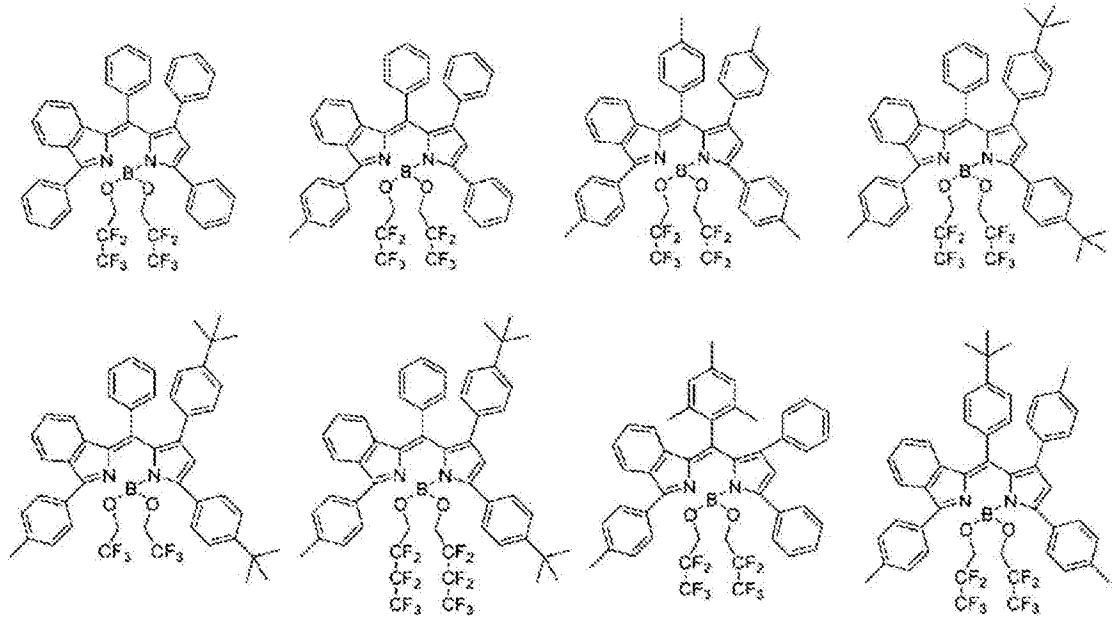
[0284] [化117]



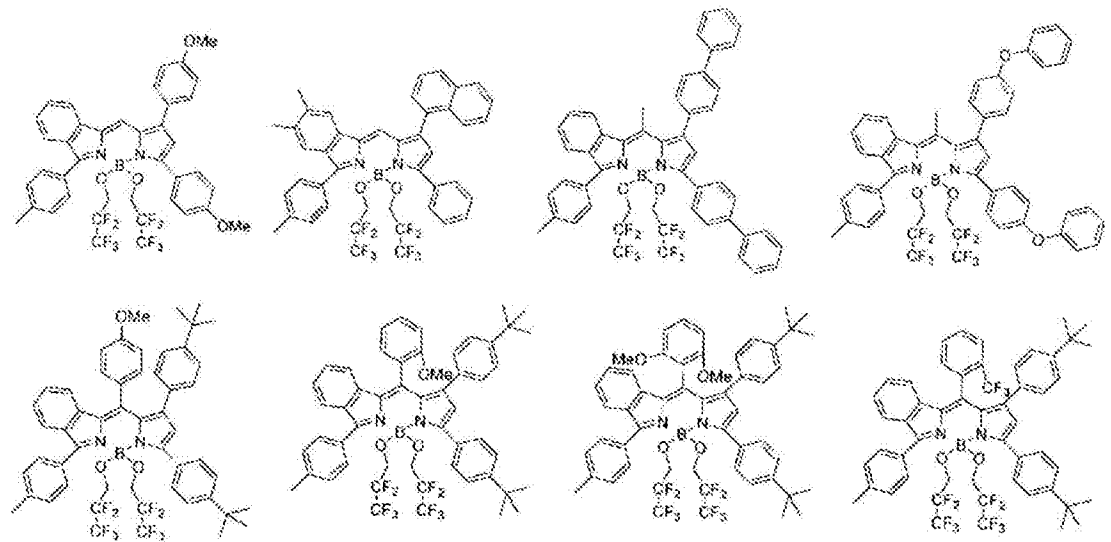
[0285] [化118]



[0286] [化119]

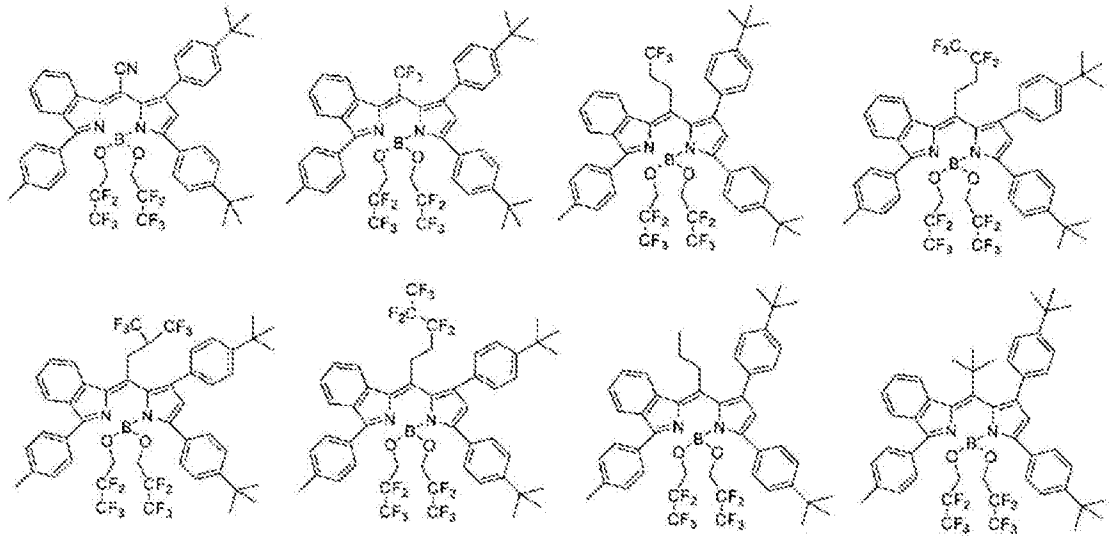


[0287] [化120]

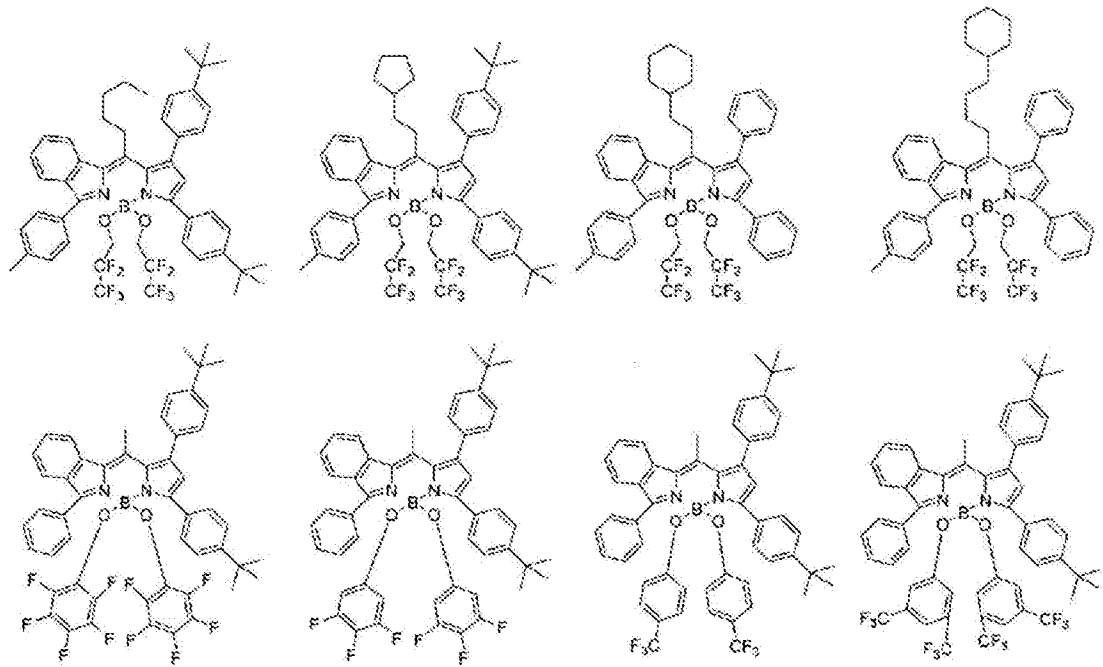


[0288]

[化121]

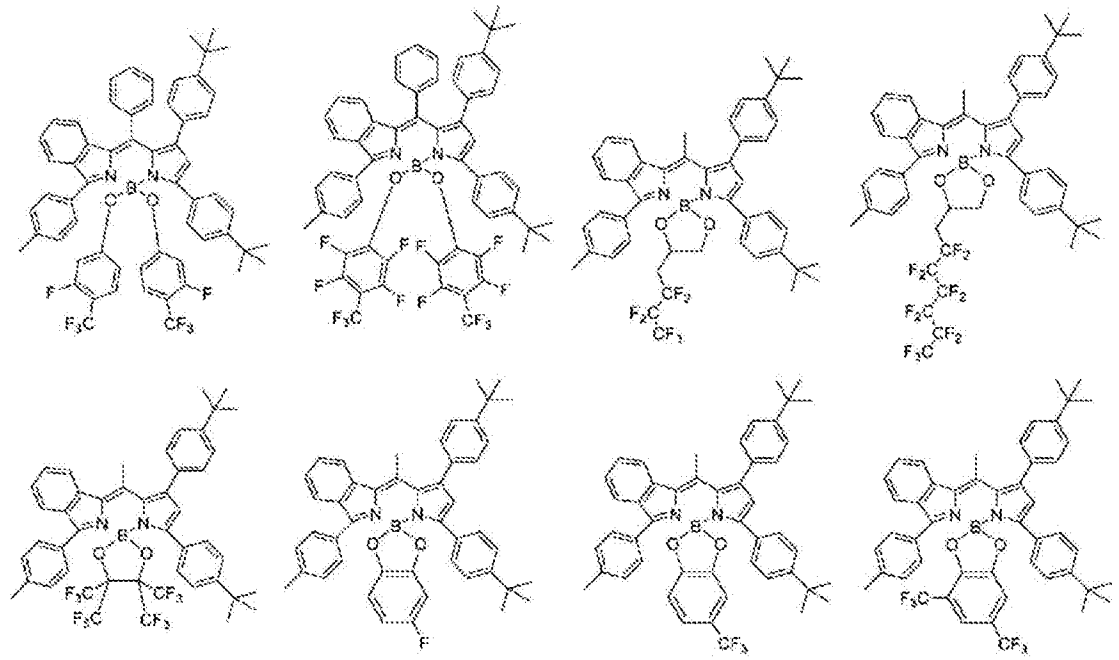


[0289] [化122]

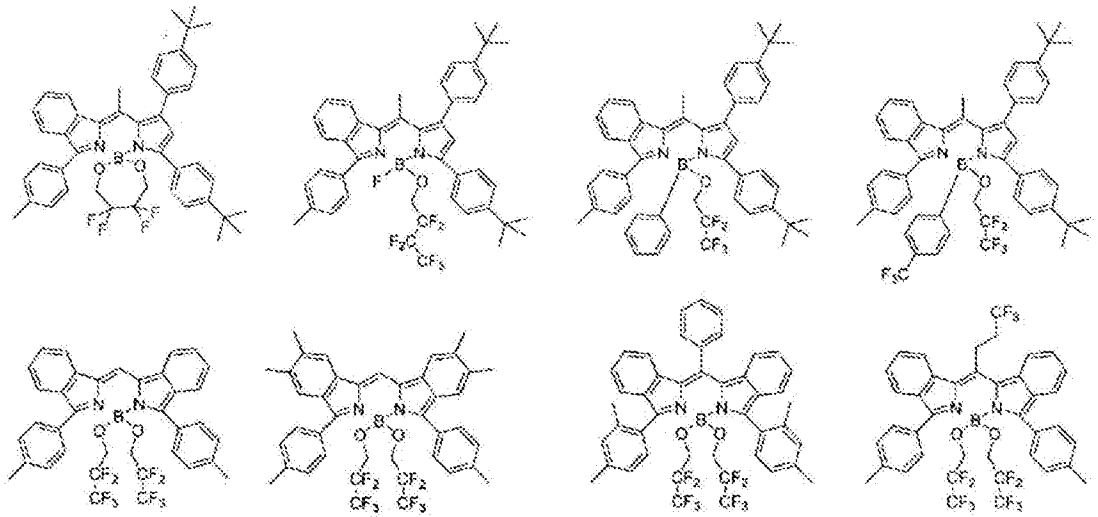


[0290]

[化123]

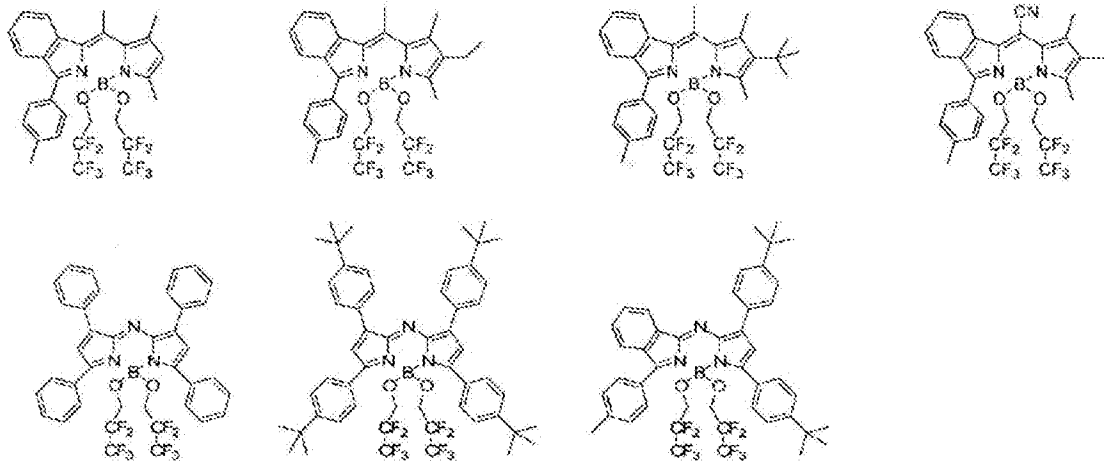


[0291] [化124]

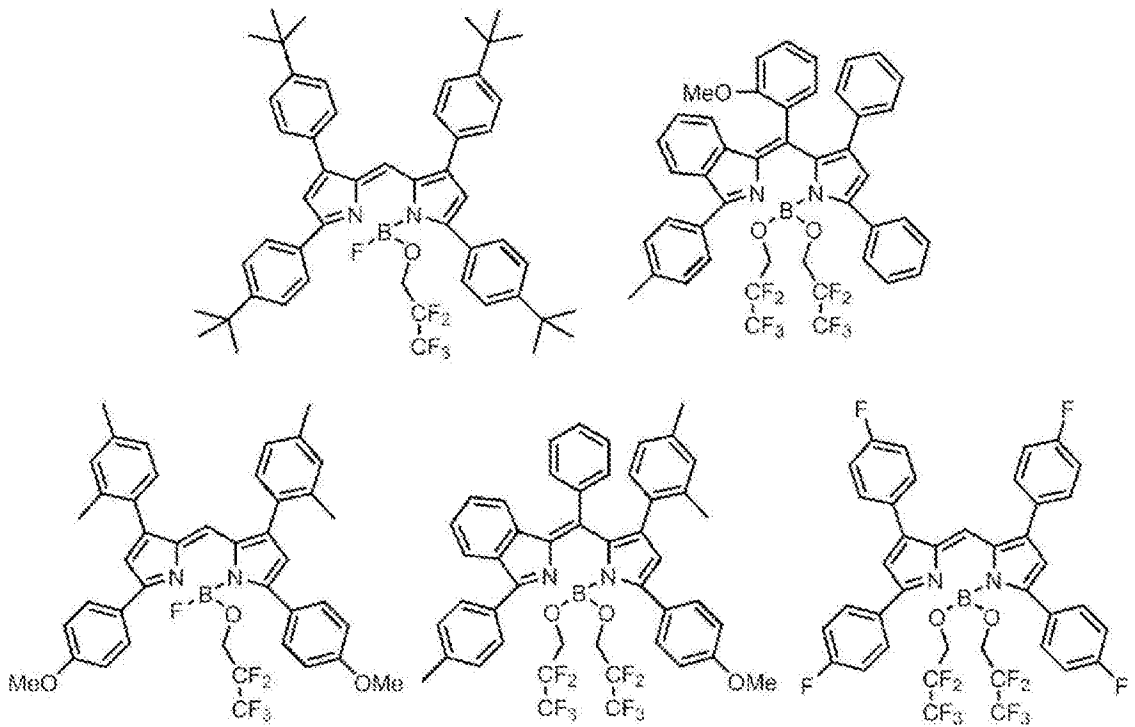


[0292]

[化125]

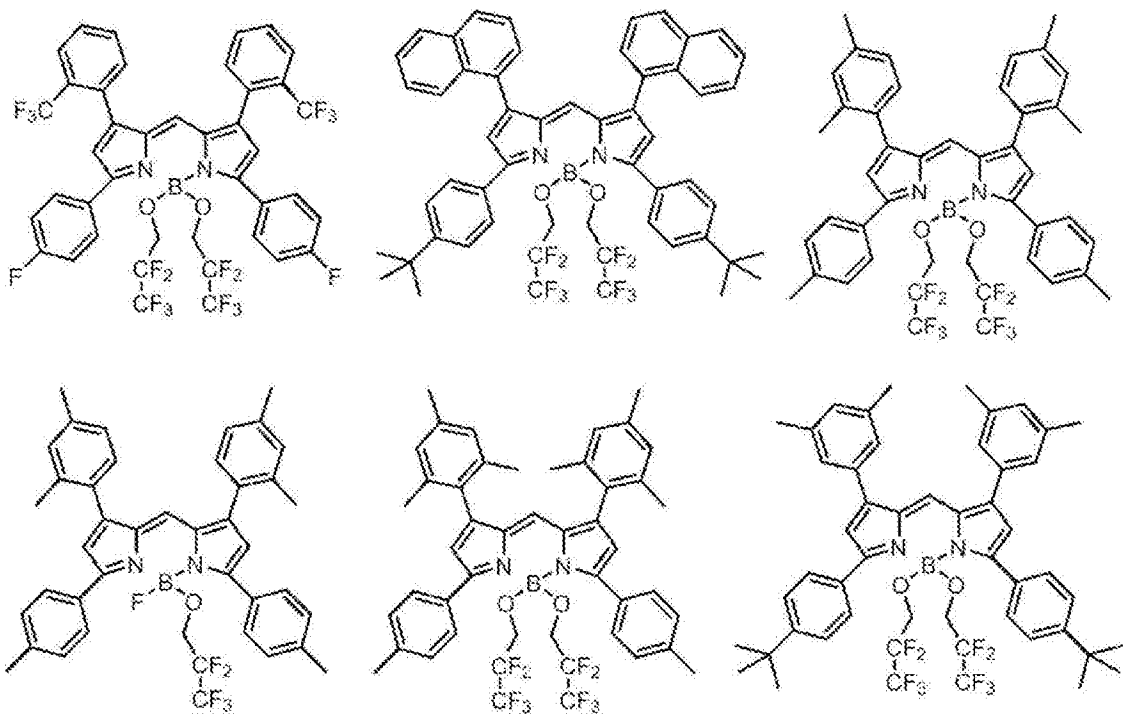


[0293] [化126]

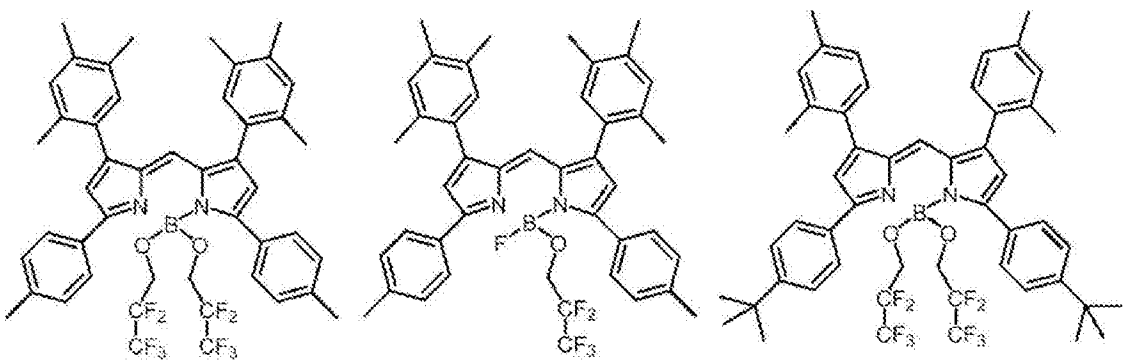


[0294]

[化127]

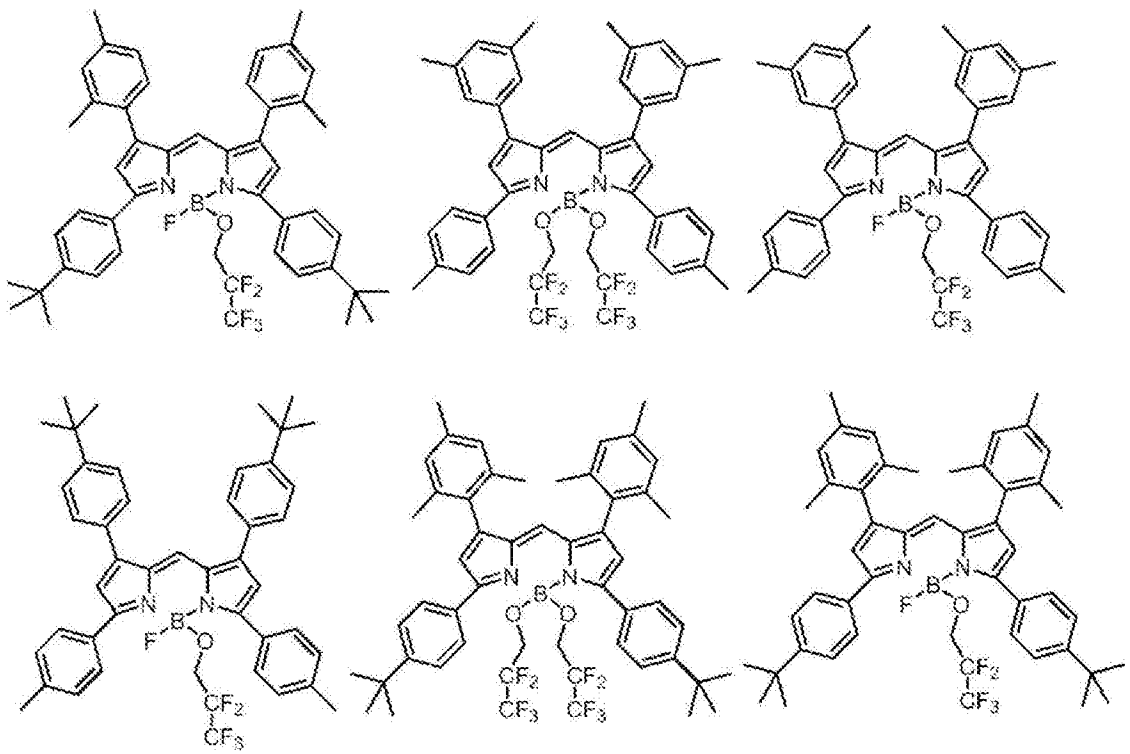


[0295] [化128]

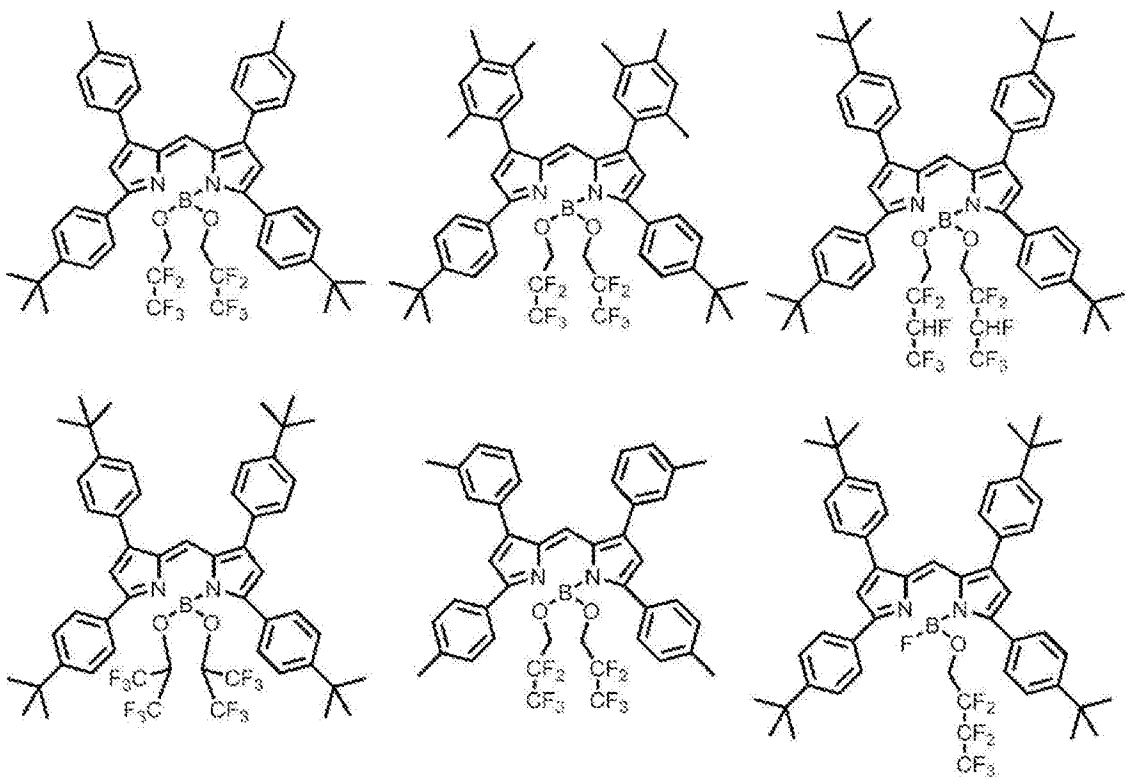


[0296]

[化129]

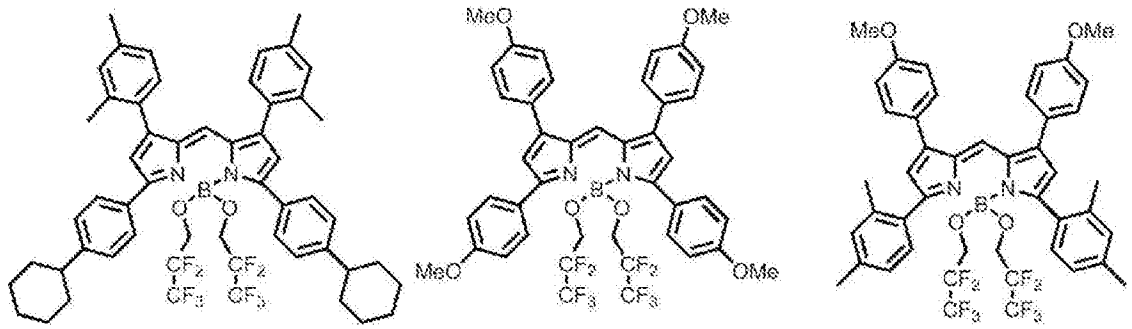


[0297] [化130]

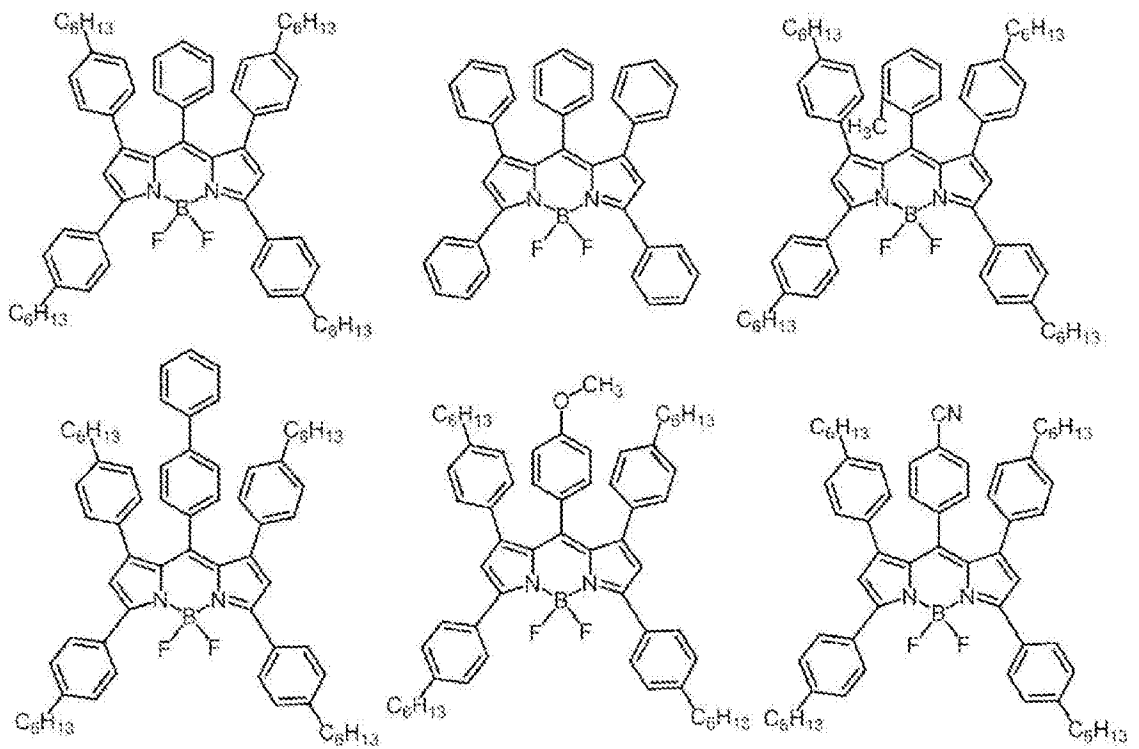


[0298]

[化131]

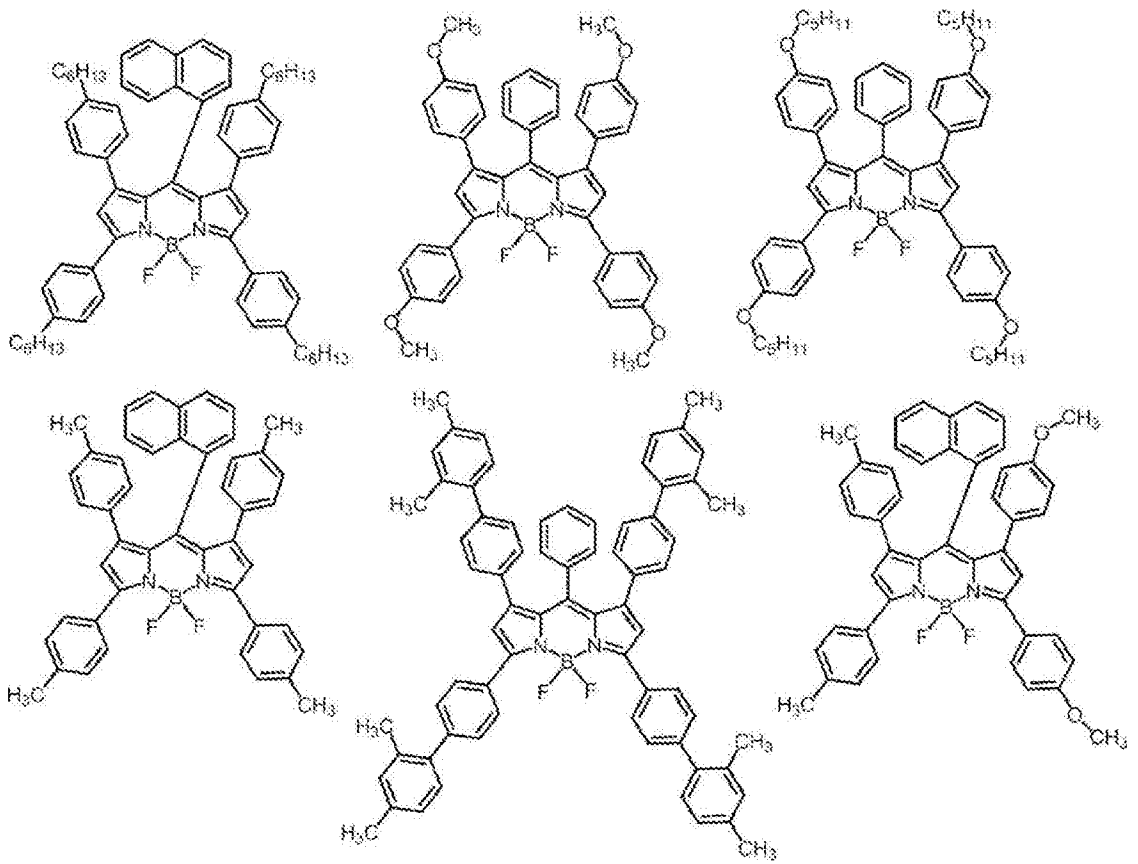


[0299] [化132]

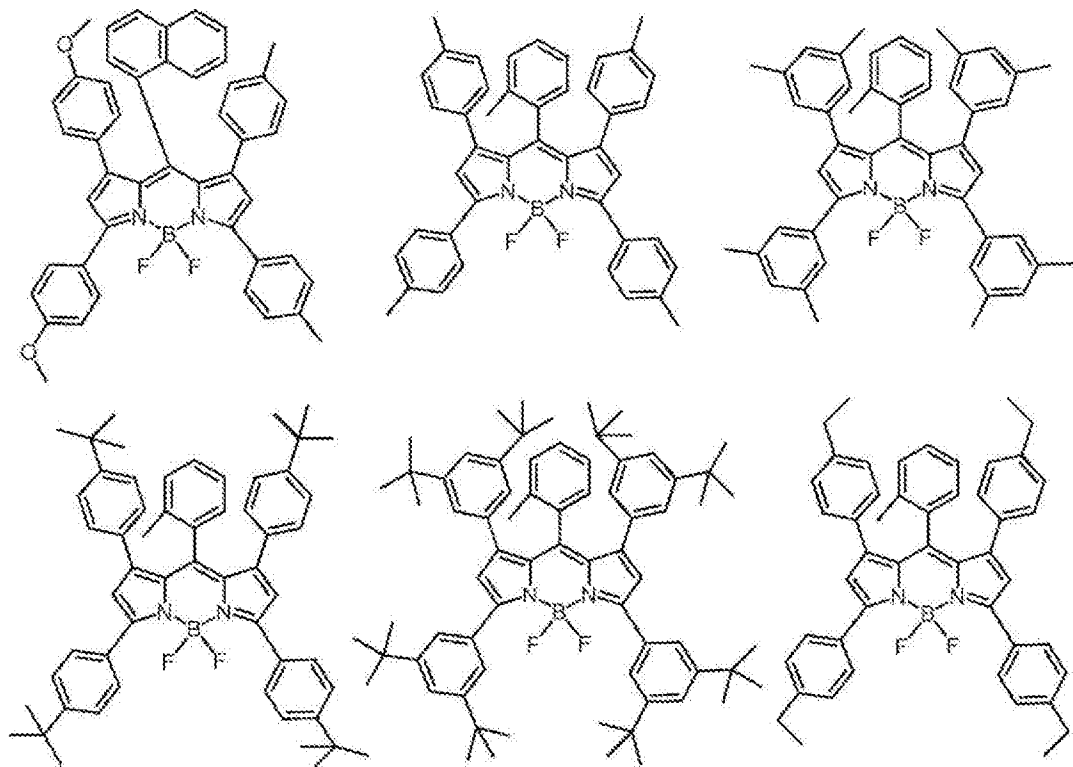


[0300]

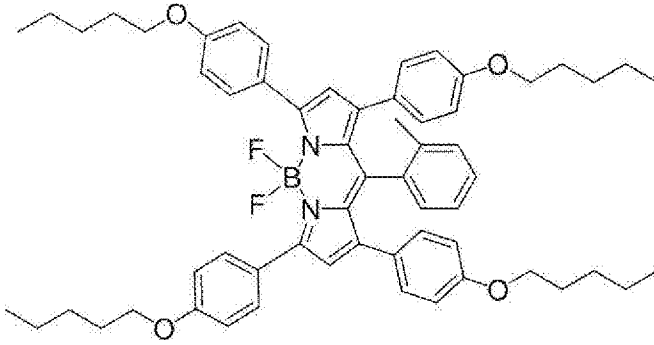
[化133]



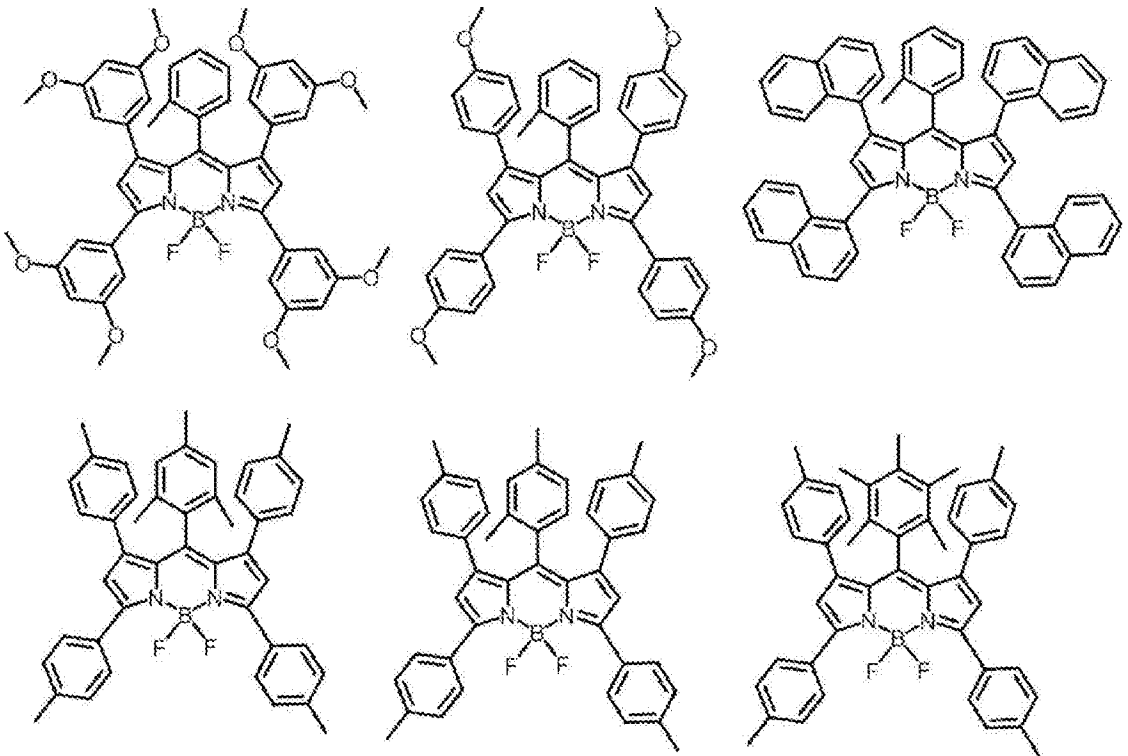
[0301] [化134]



[0302] [化135]

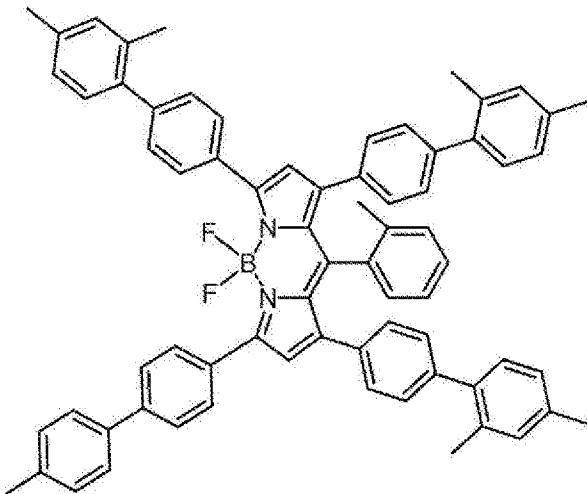


[0303] [化136]

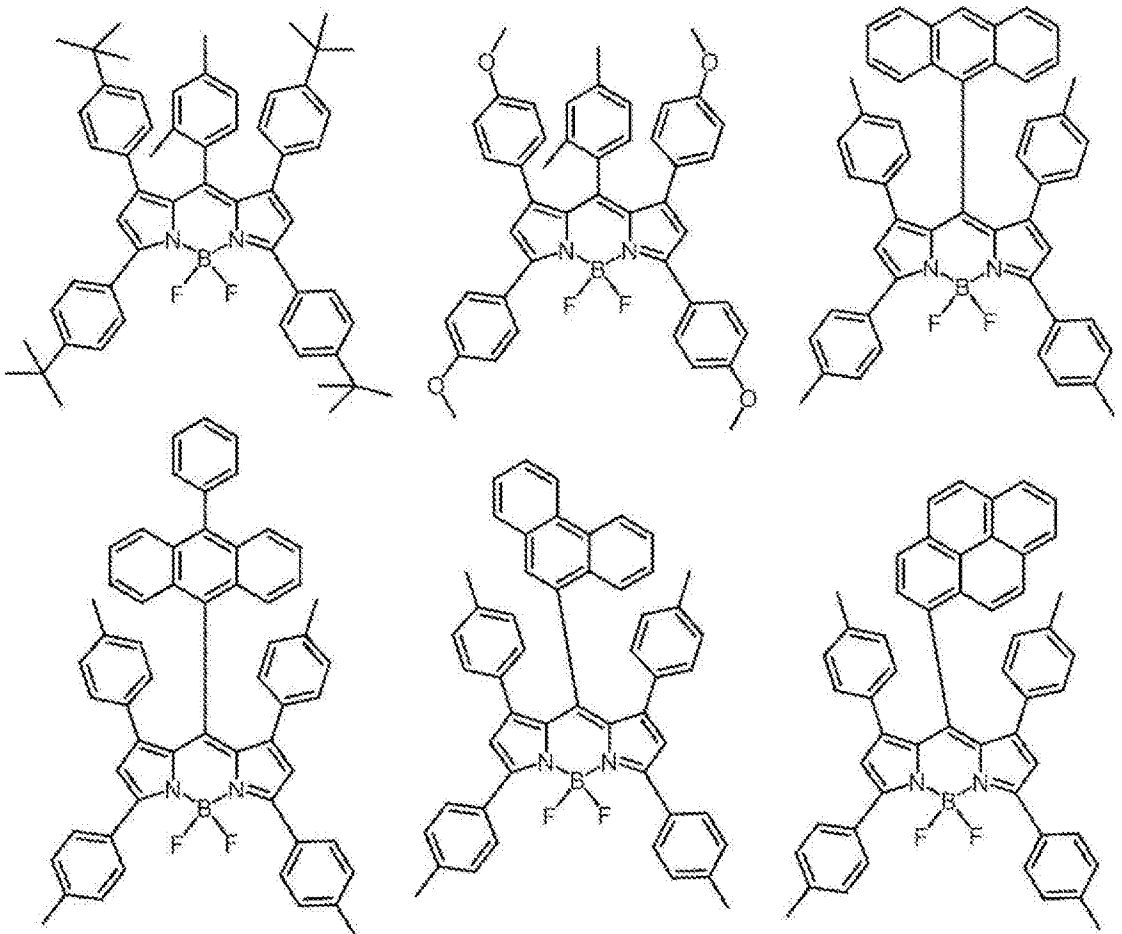


[0304]

[化137]

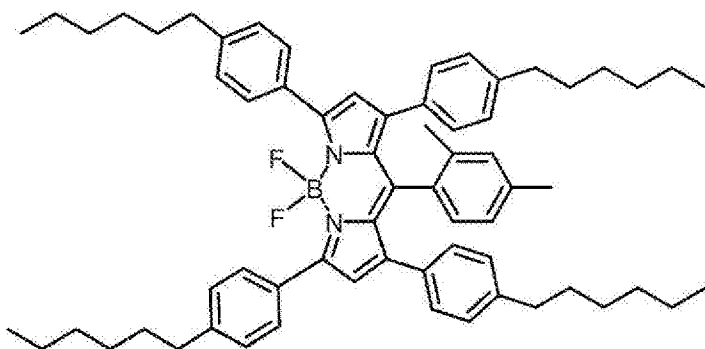


[0305] [化138]

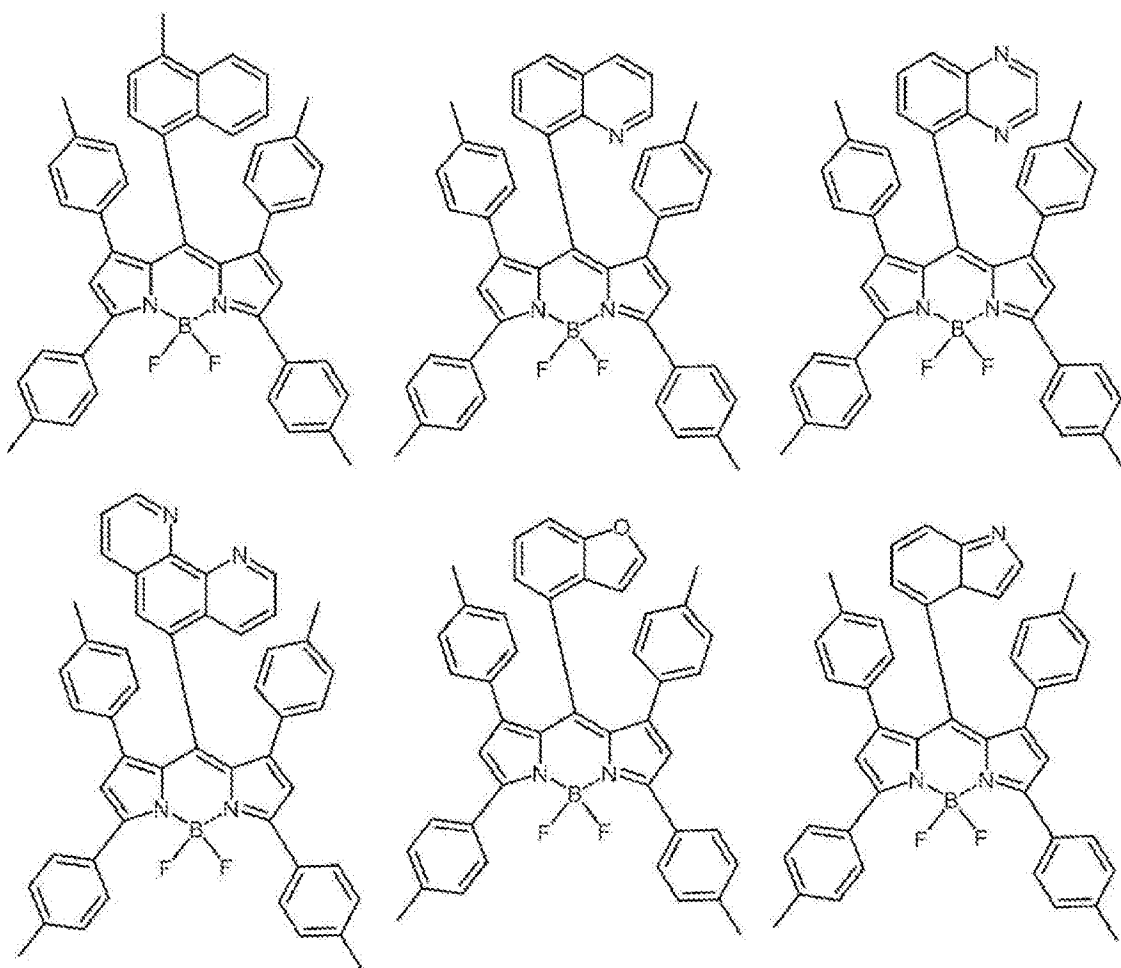


[0306]

[化139]

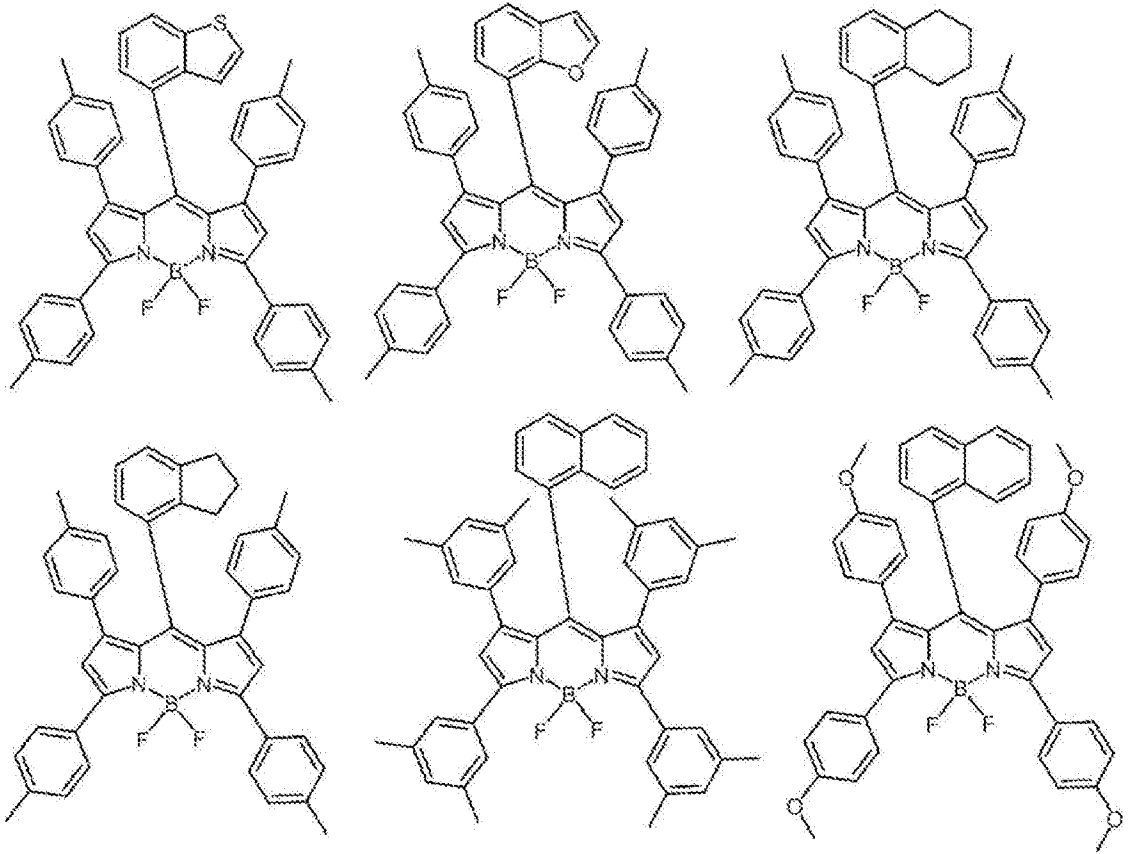


[0307] [化140]

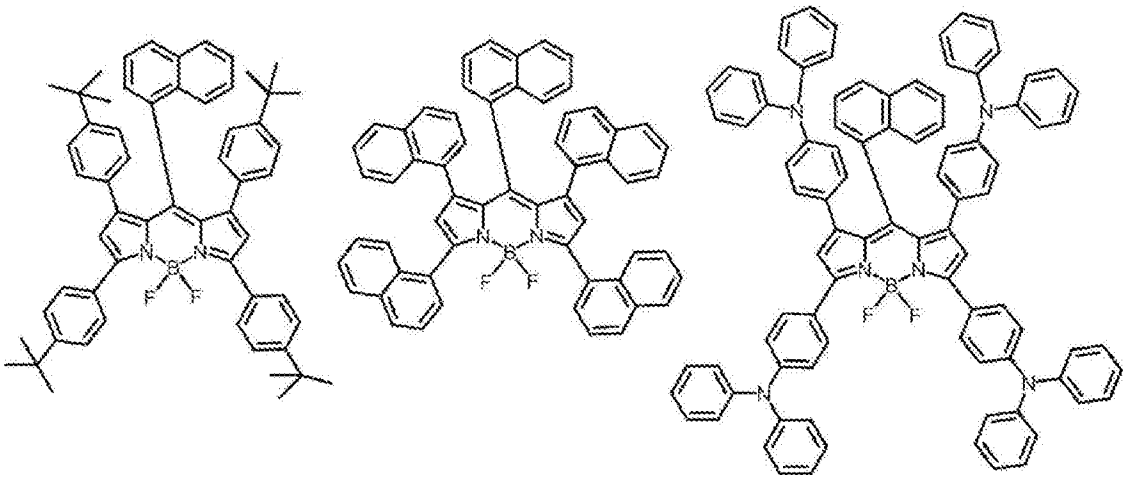


[0308]

[化141]

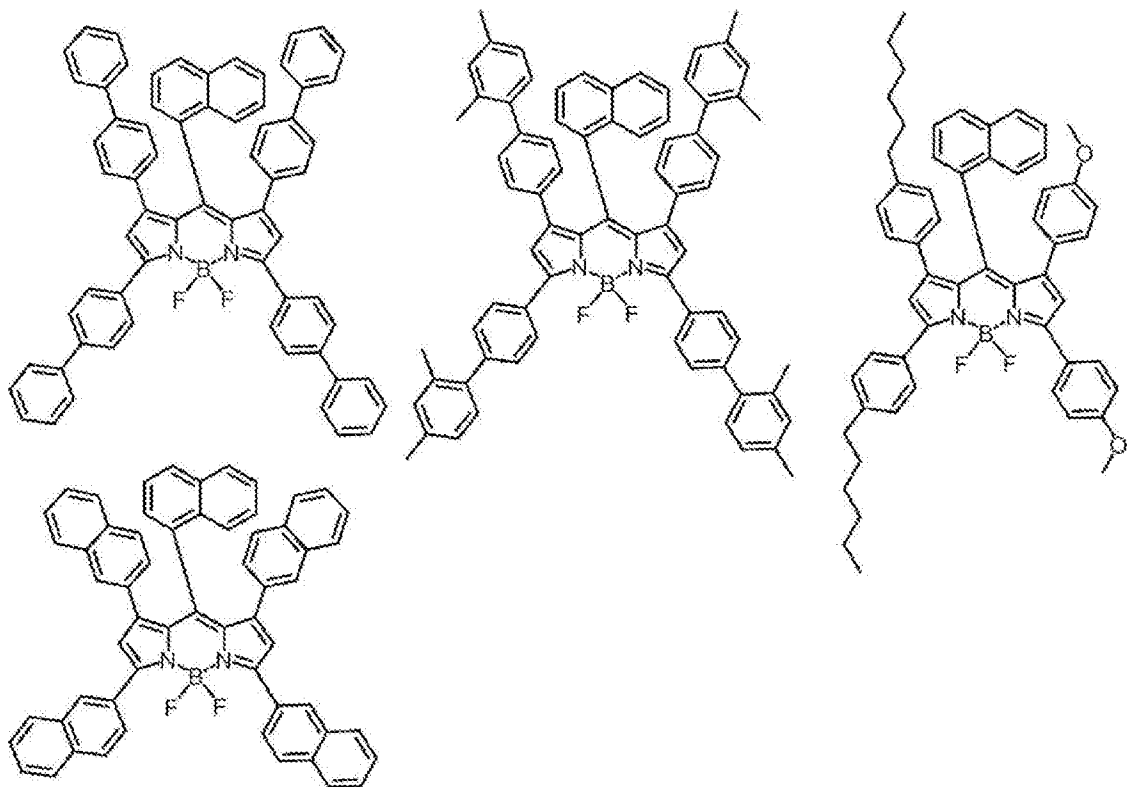


[0309] [化142]

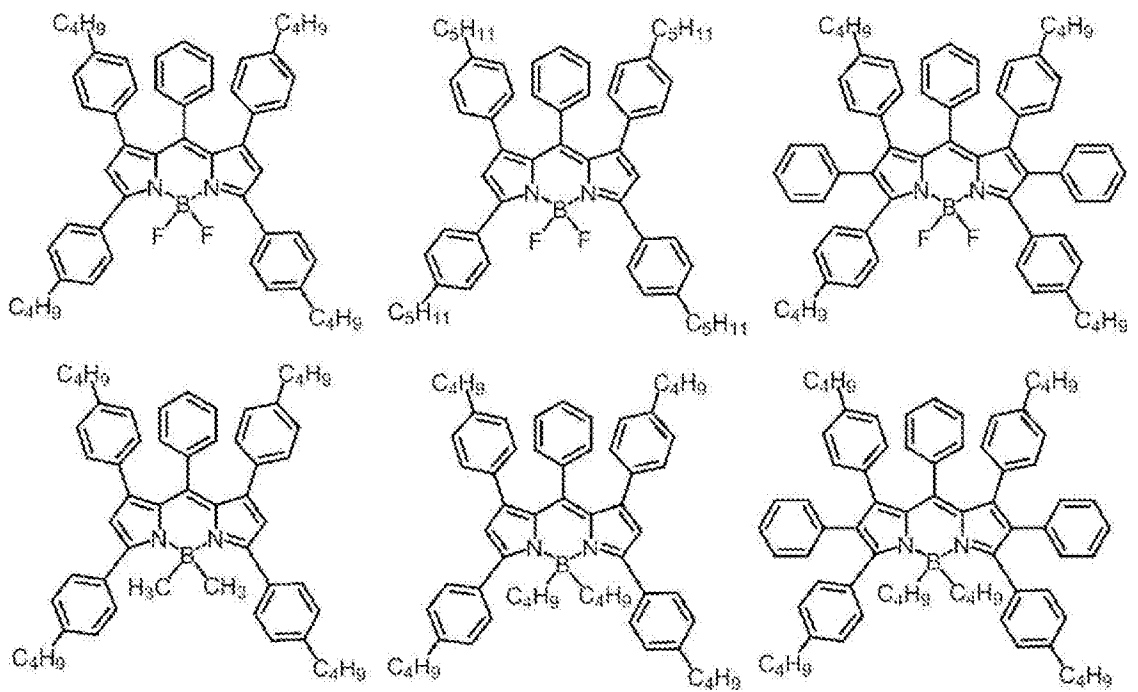


[0310]

[化143]

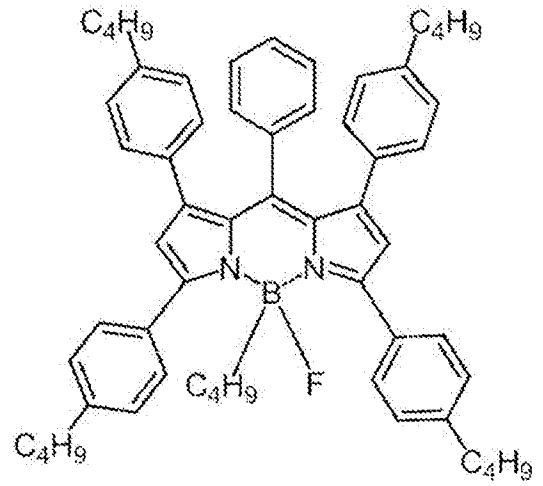
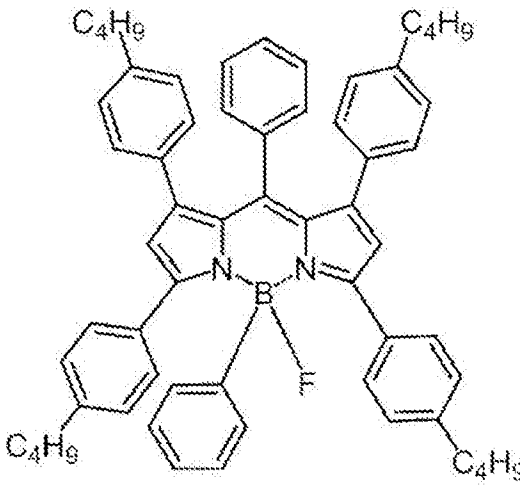
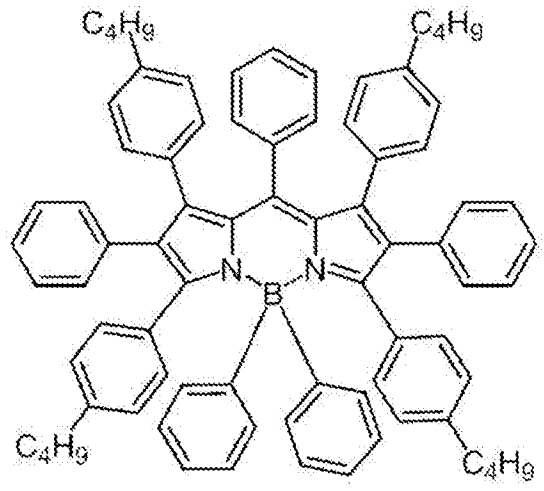
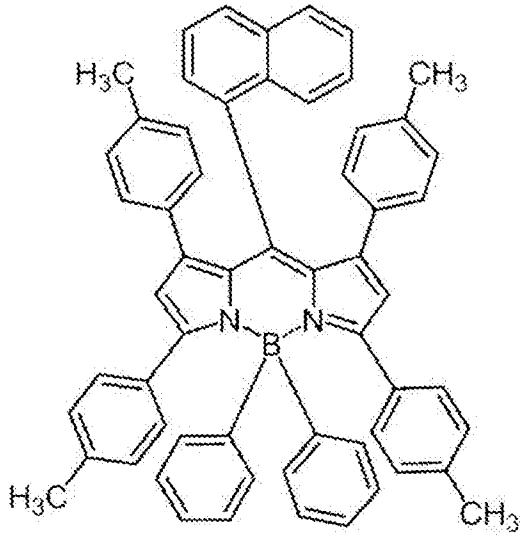


[0311] [化144]



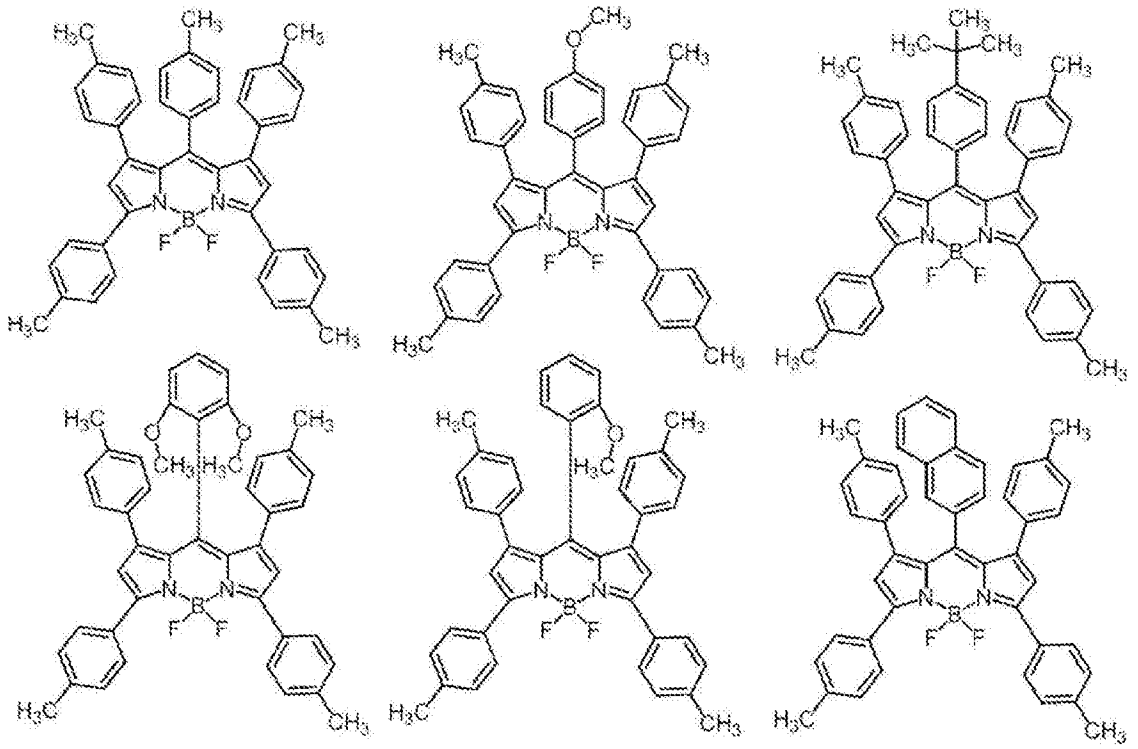
[0312]

[化145]

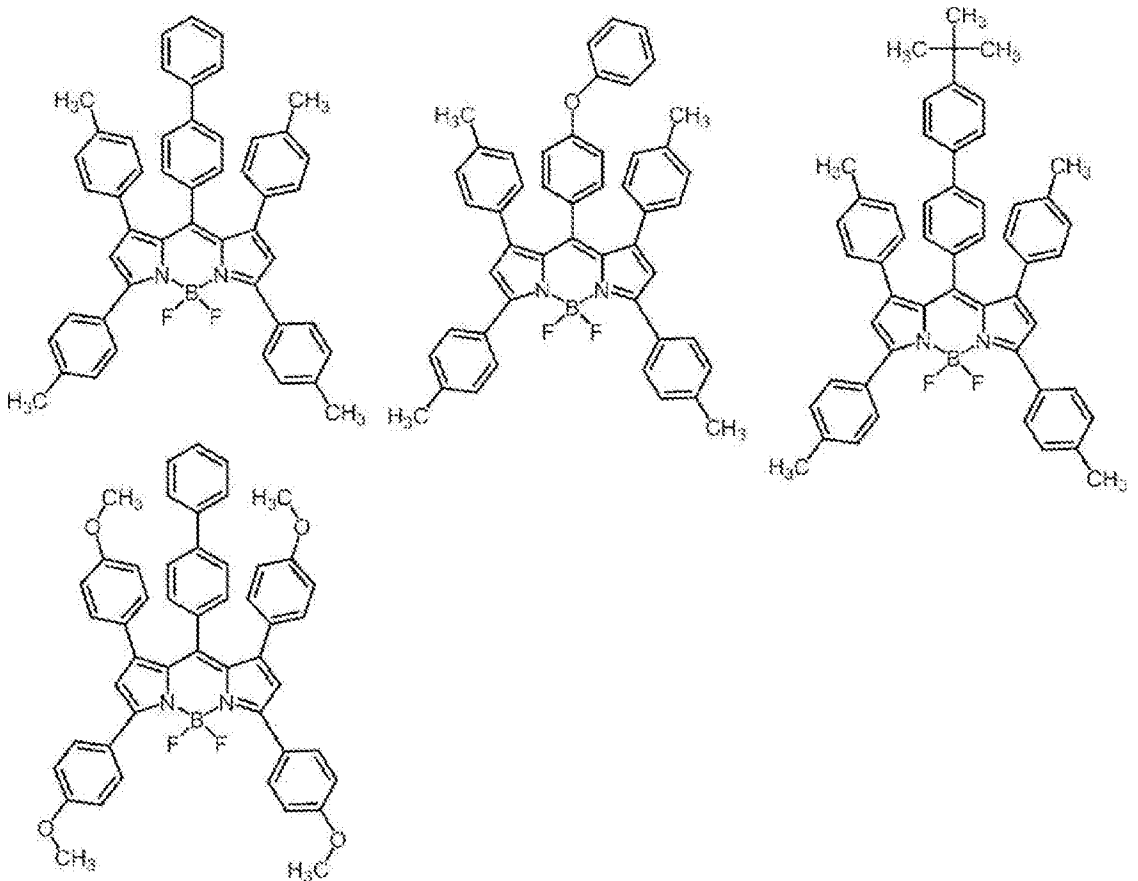


[0313]

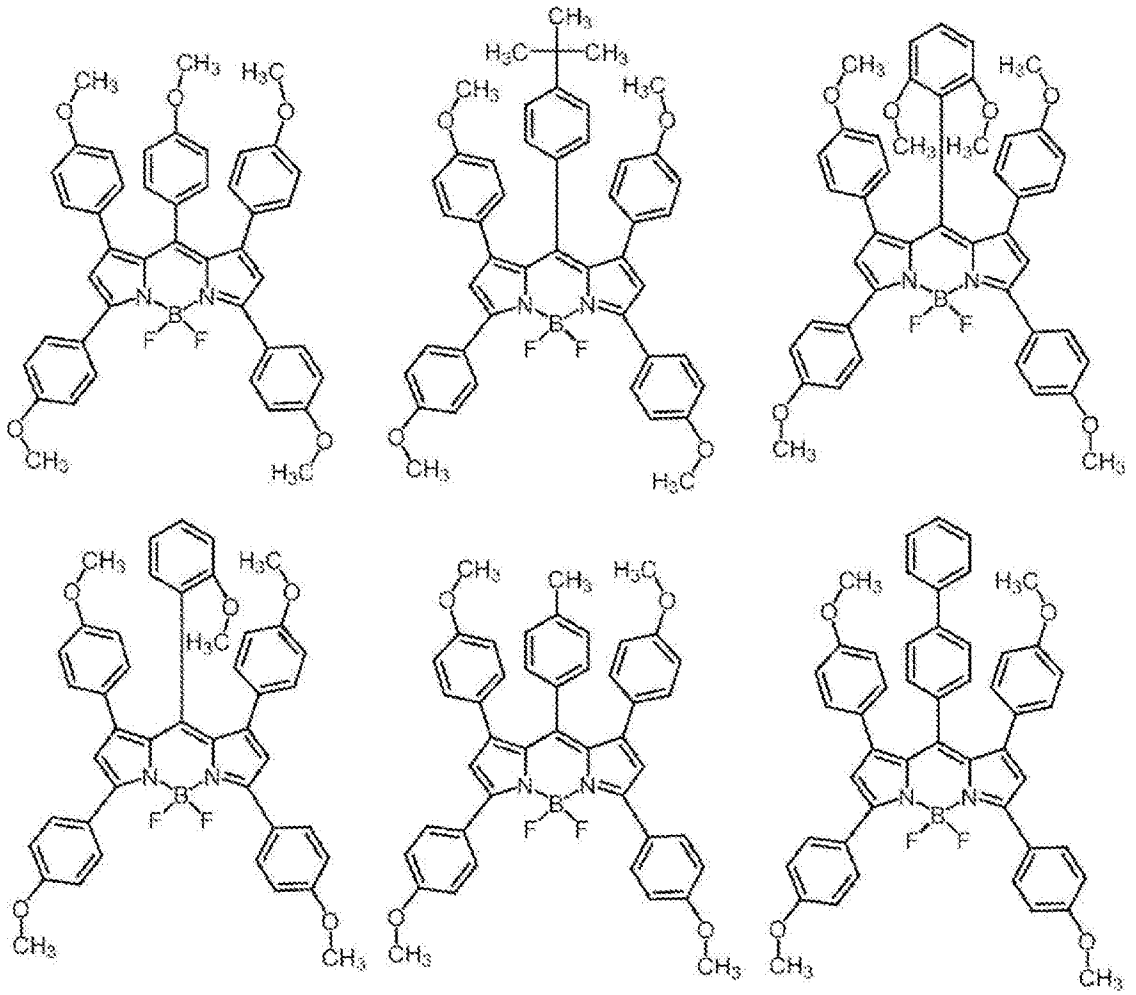
[化146]



[0314] [化147]

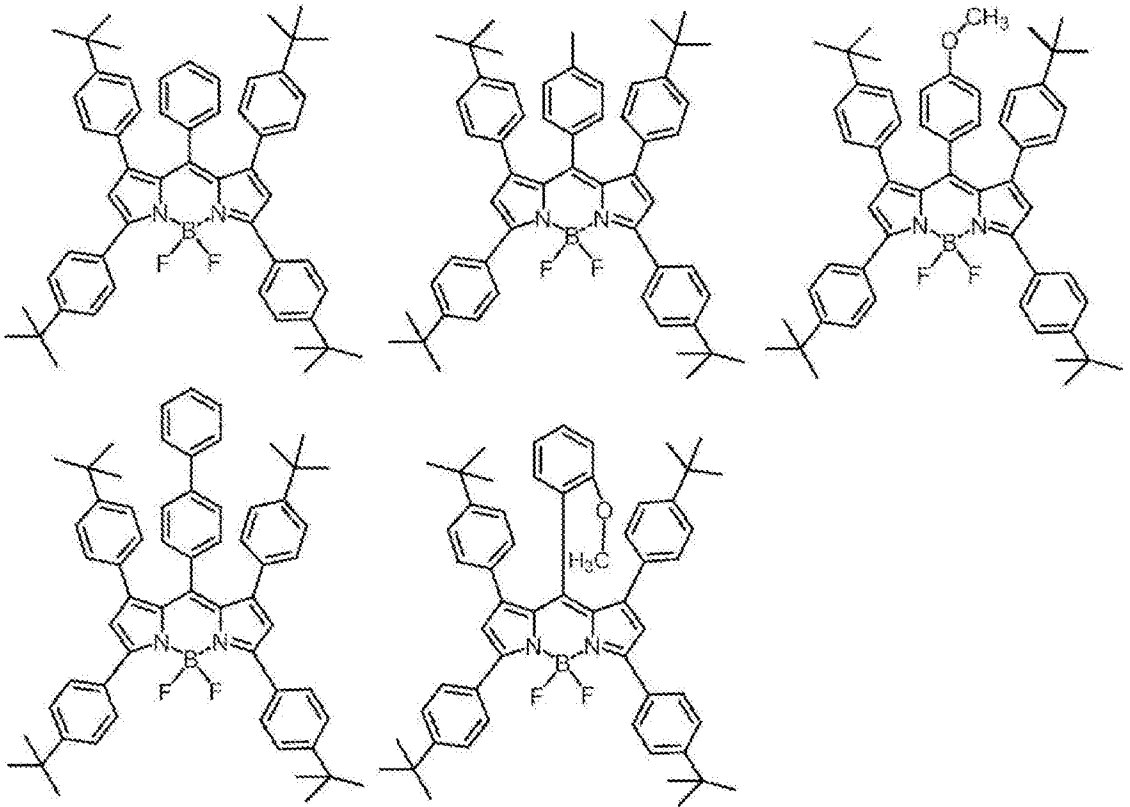


[0315] [化148]



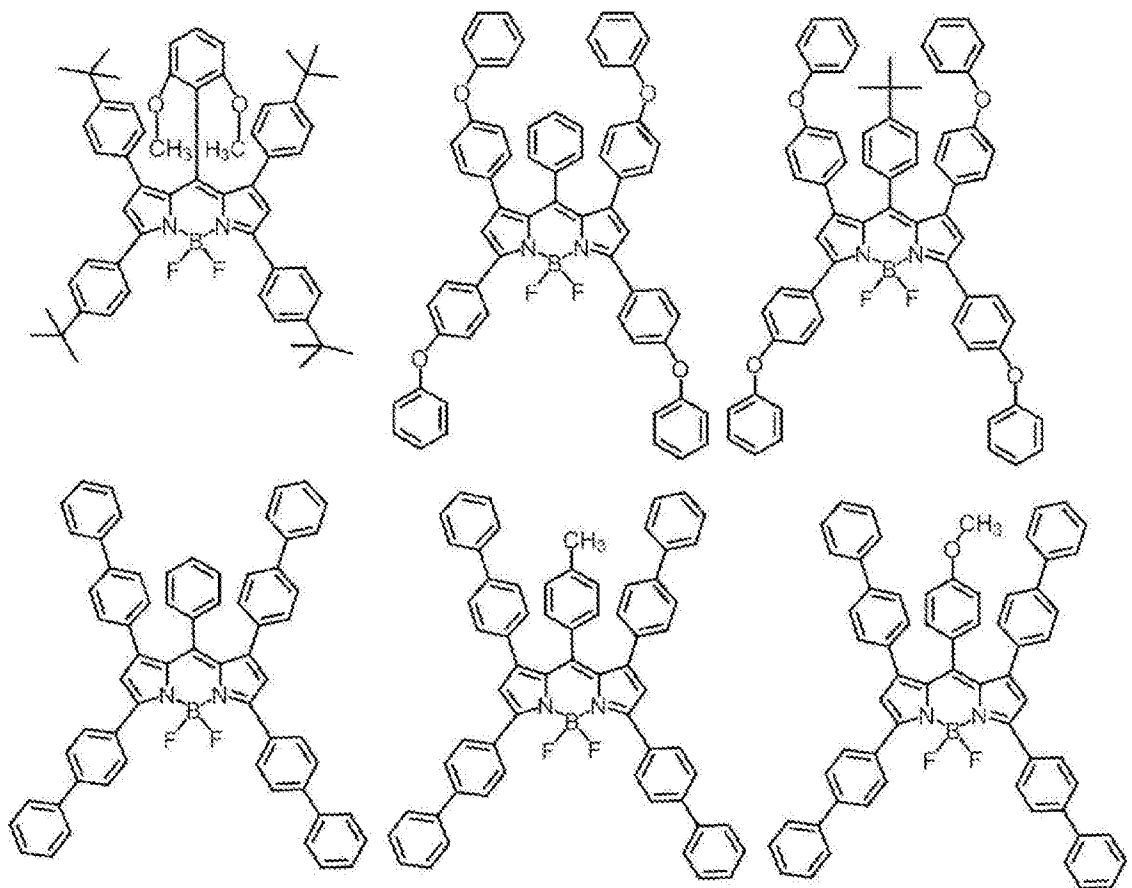
[0316]

[化149]

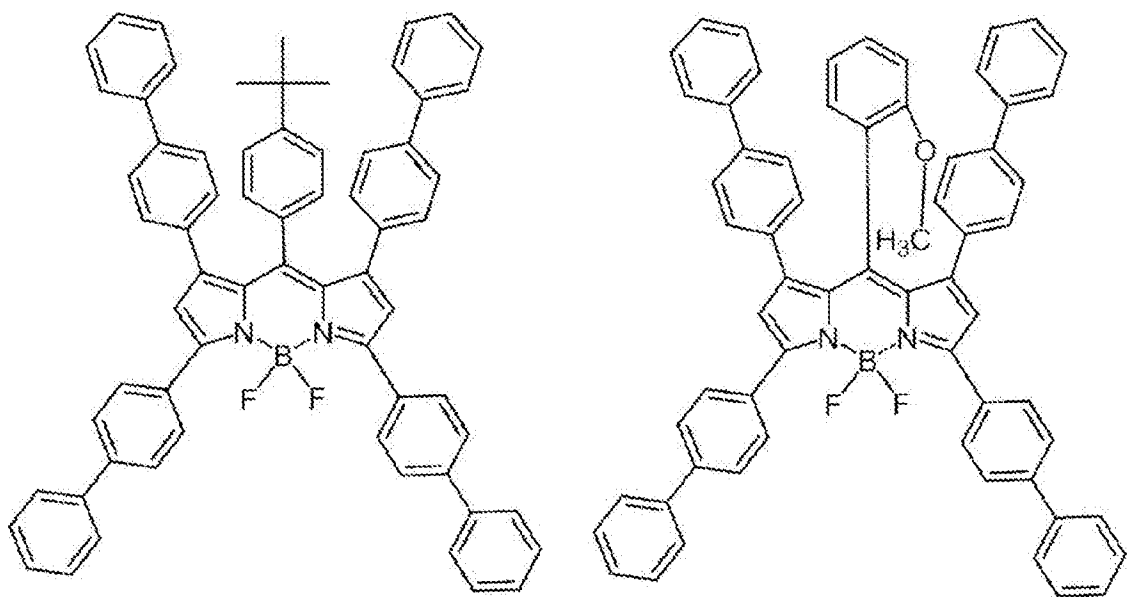


[0317]

[化150]

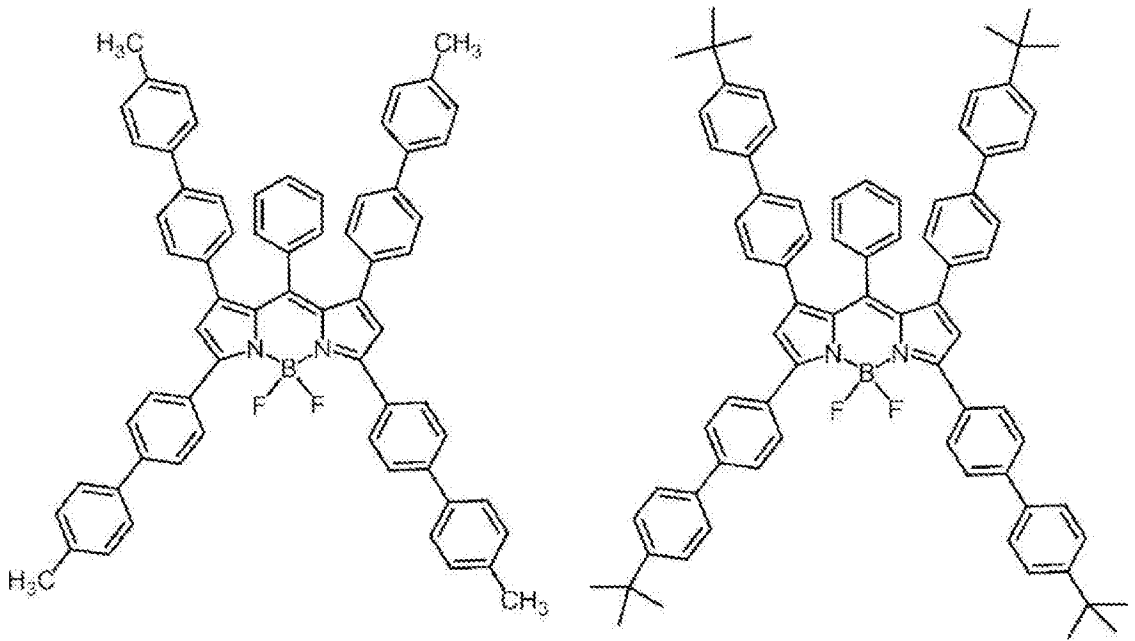


[0318] [化151]

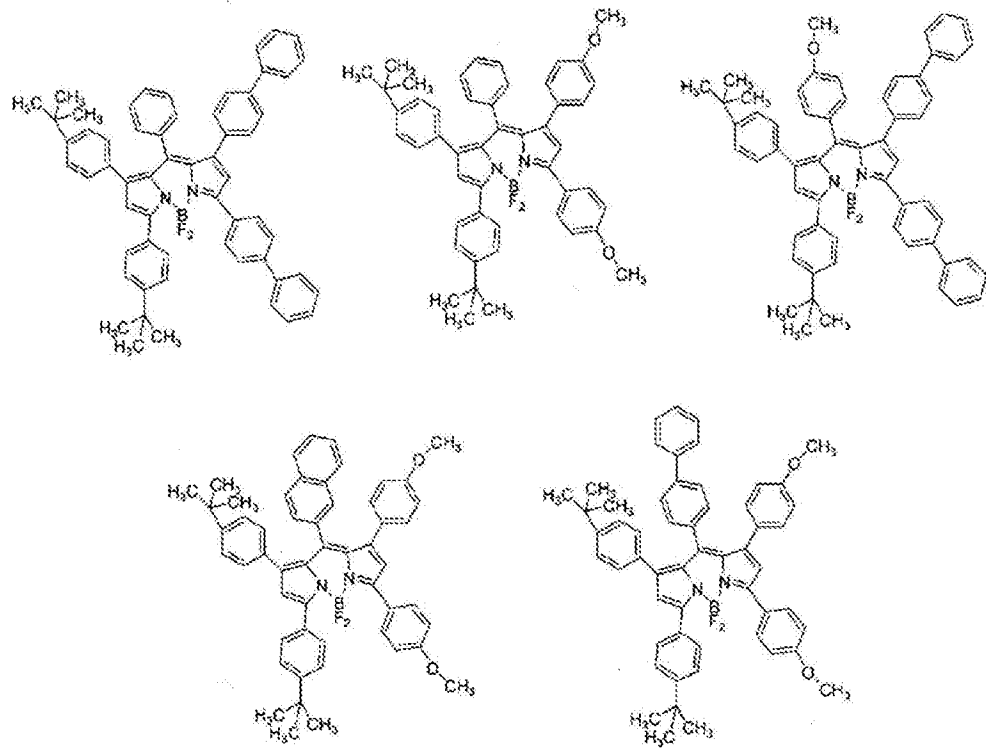


[0319]

[化152]

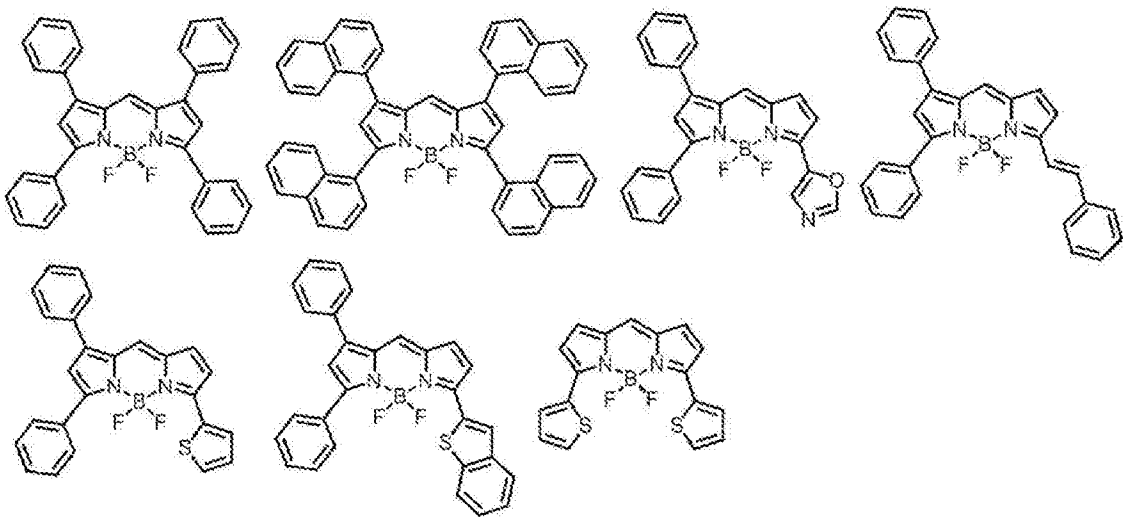


[0320] [化153]

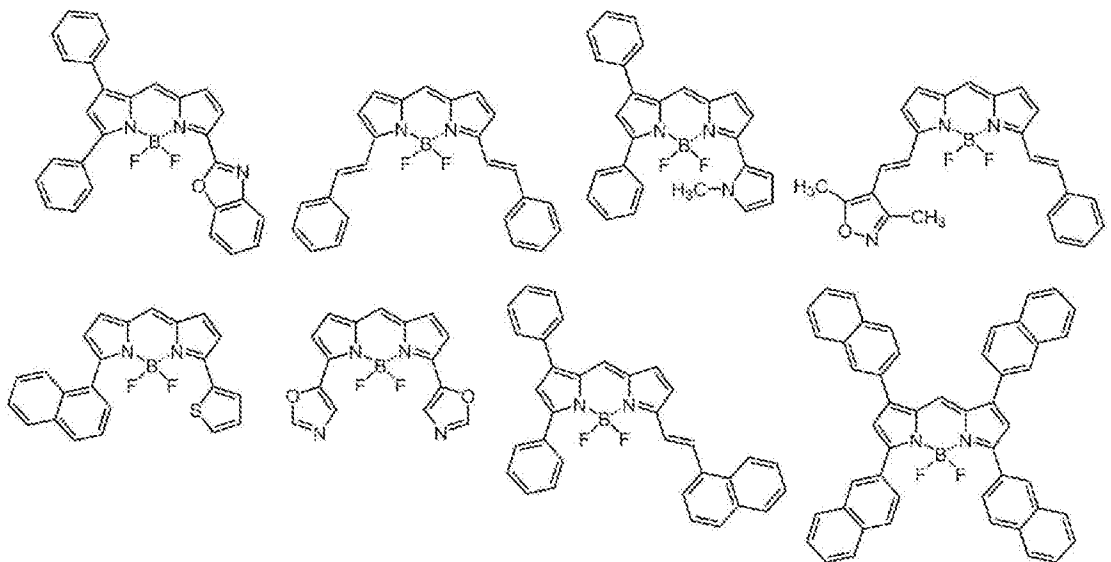


[0321]

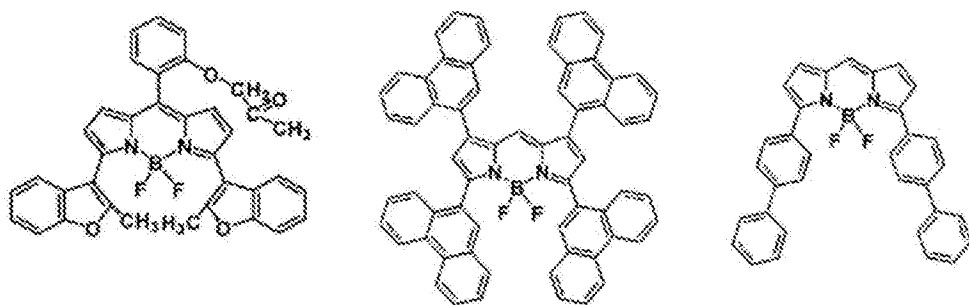
[化154]



[0322] [化155]

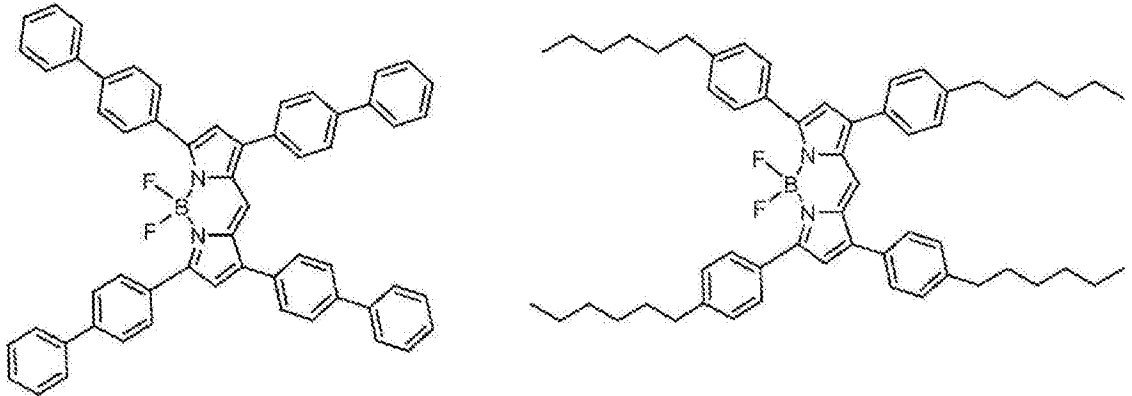


[0323] [化156]

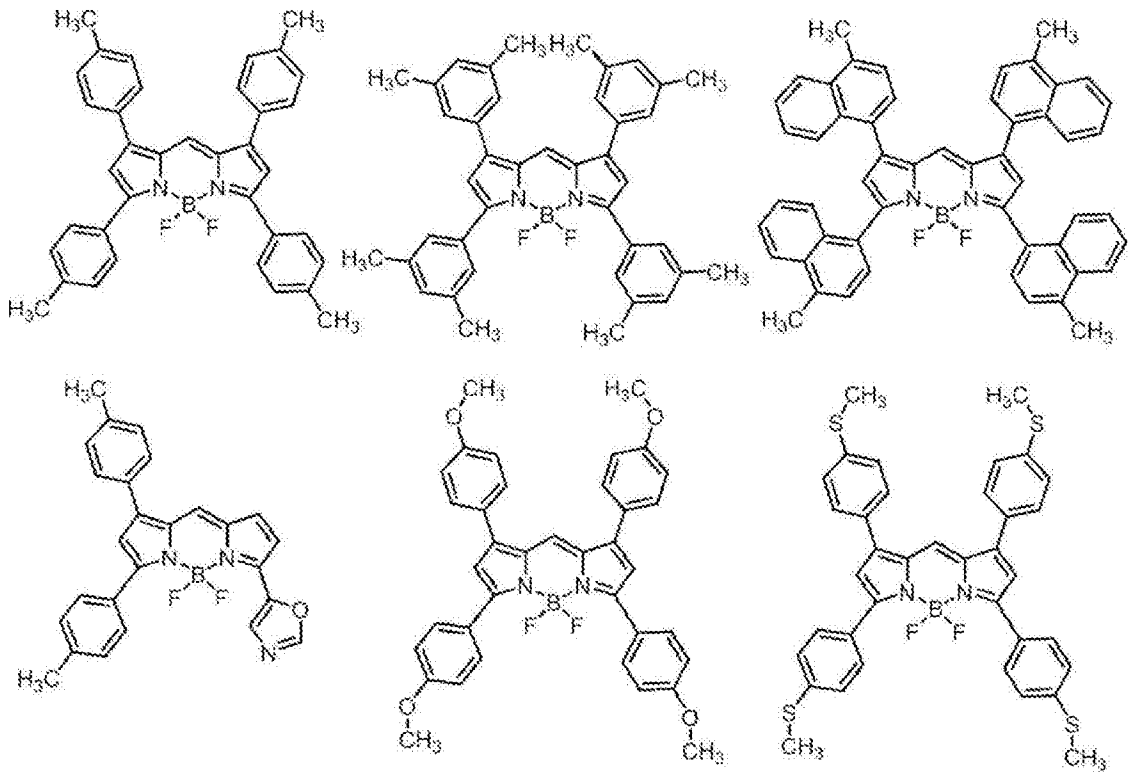


[0324]

[化157]

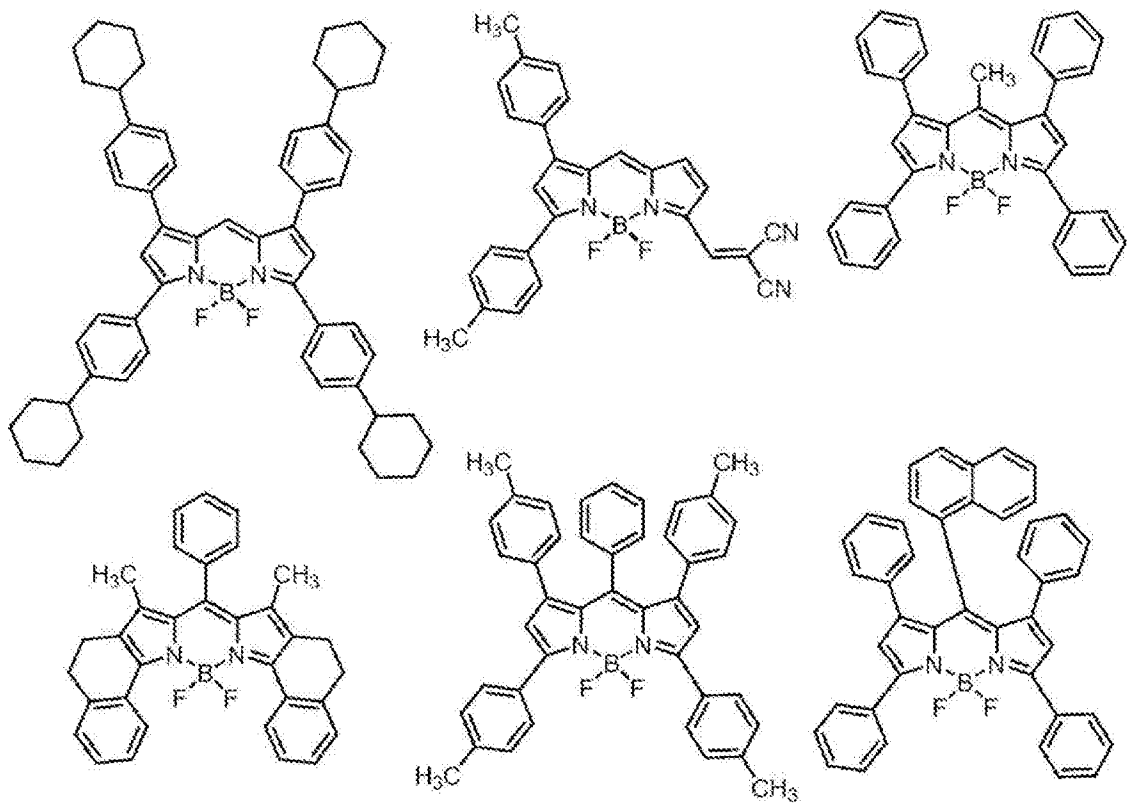


[0325] [化158]

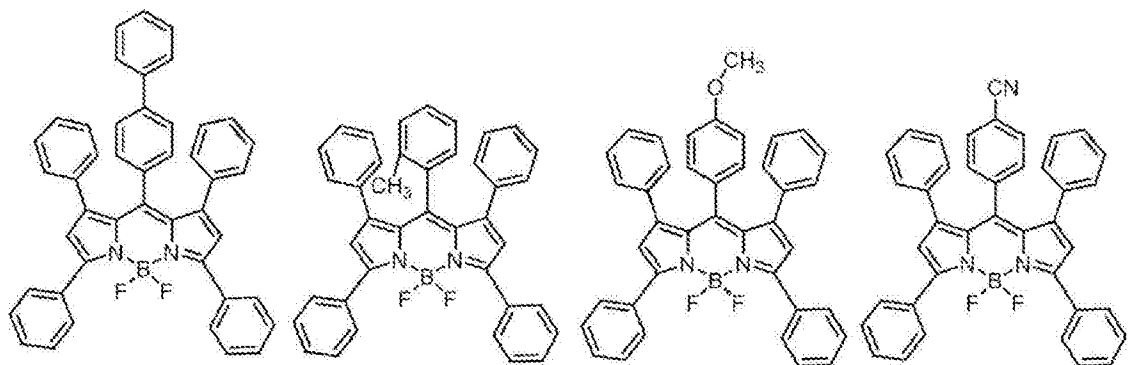


[0326]

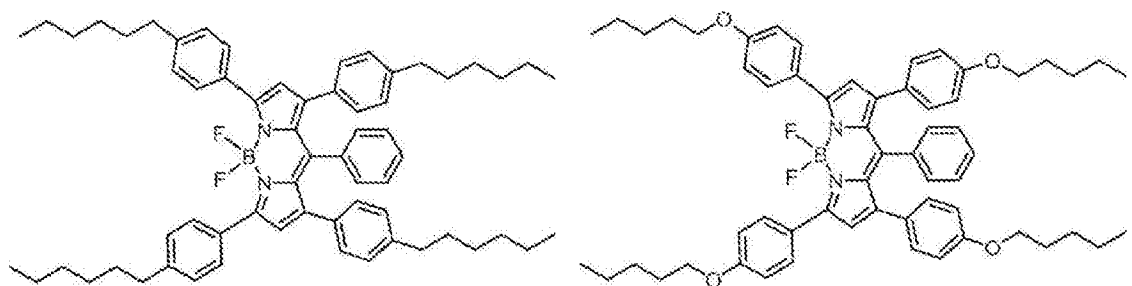
[化159]



[0327] [化160]

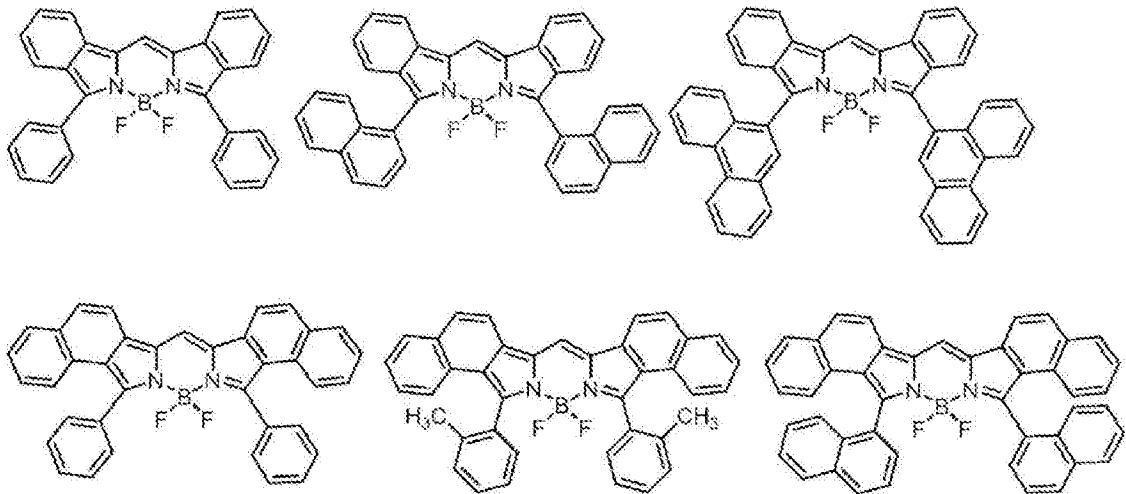


[0328] [化161]

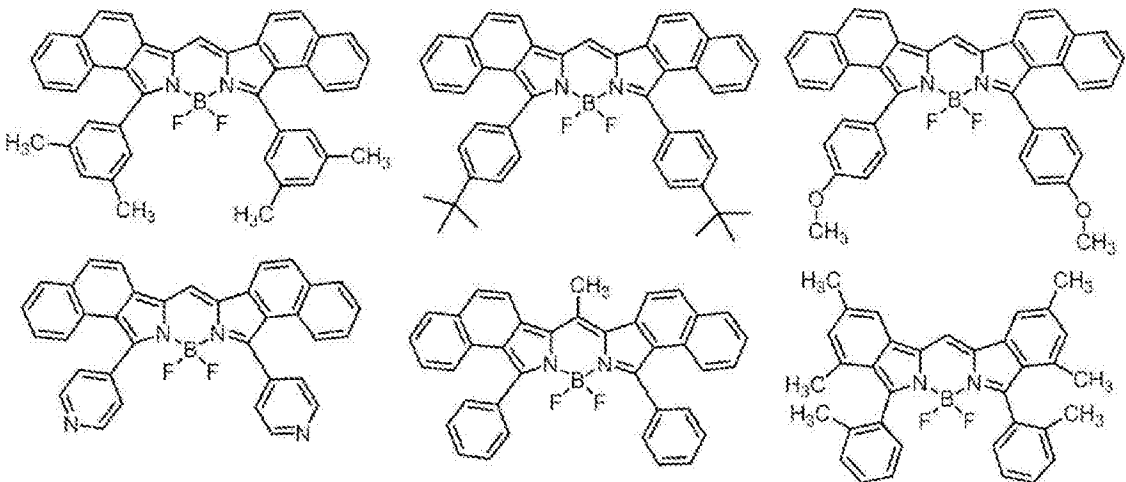


[0329]

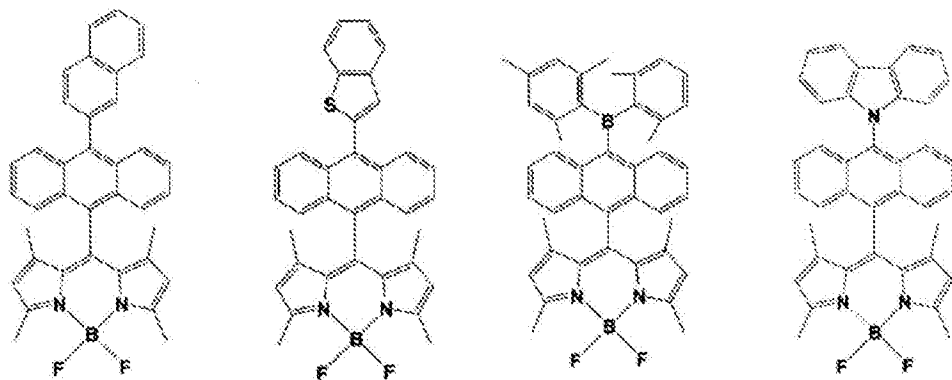
[化162]



[0330] [化163]

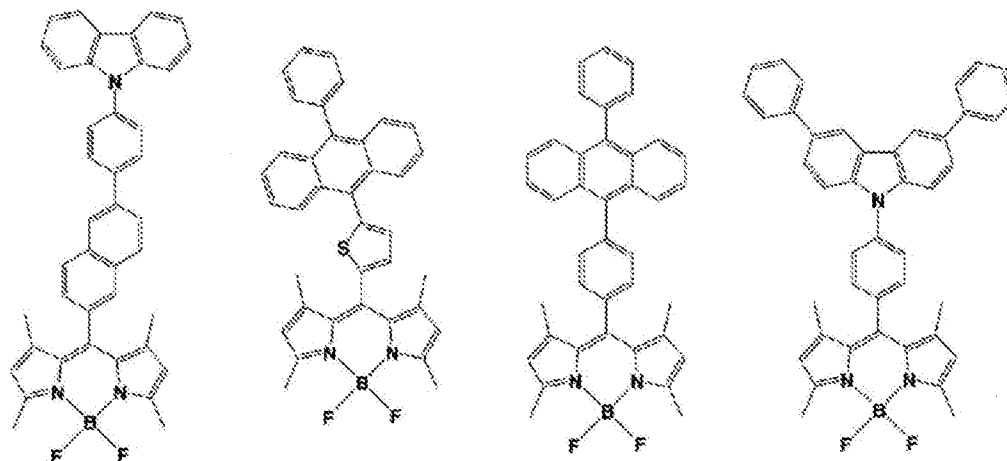


[0331] [化164]

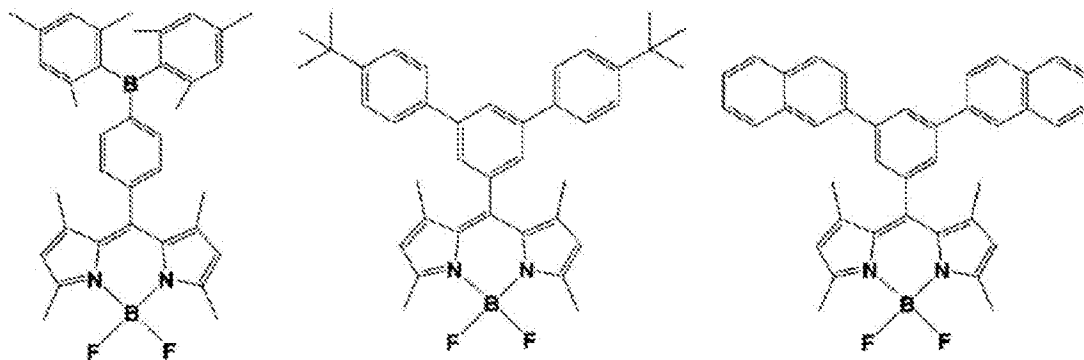


[0332]

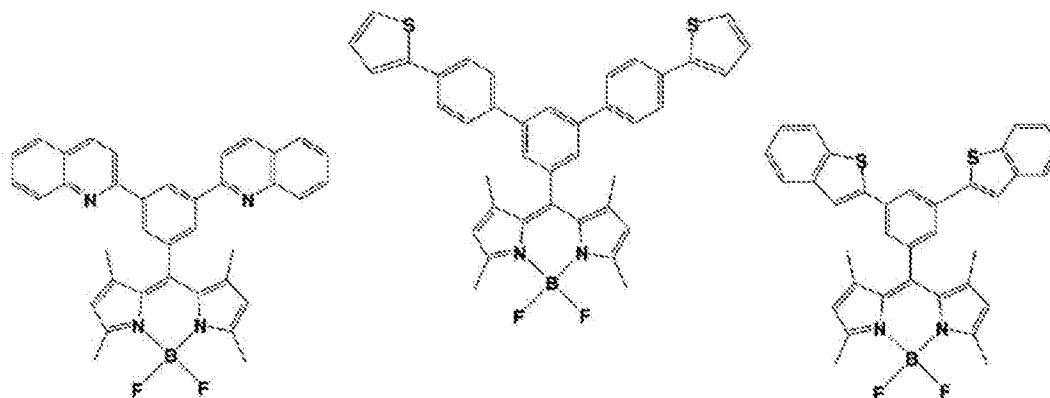
[化165]



[0333] [化166]

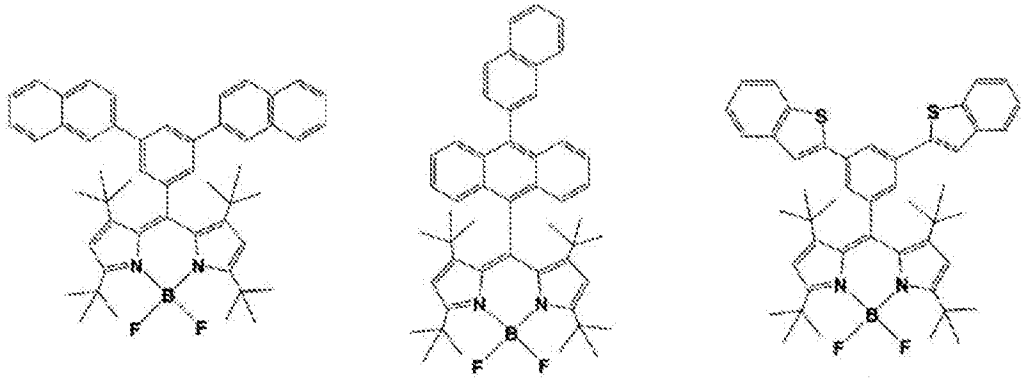


[0334] [化167]

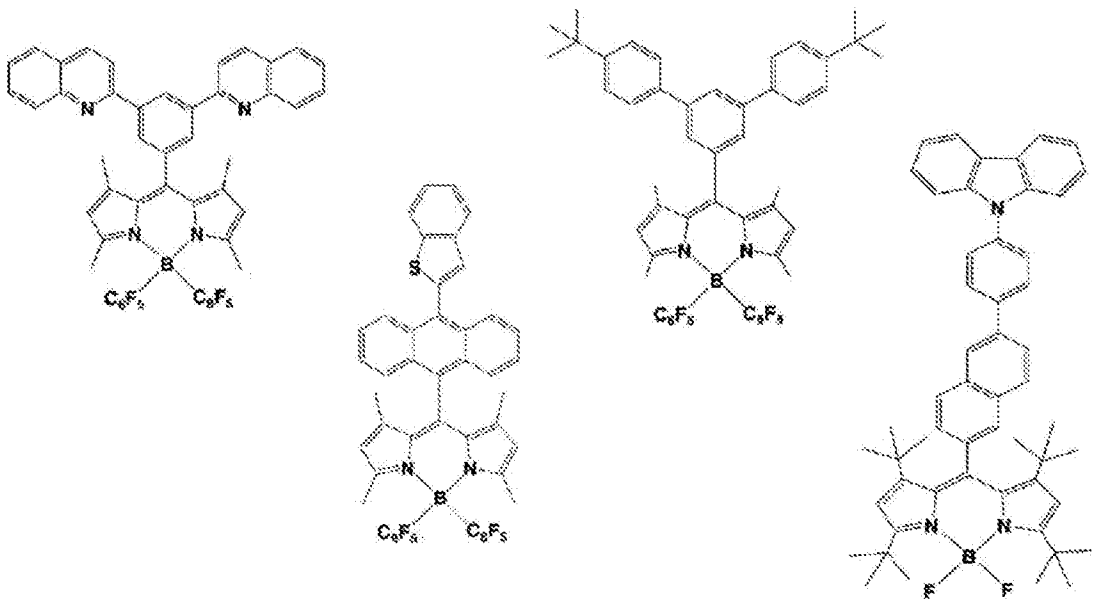


[0335]

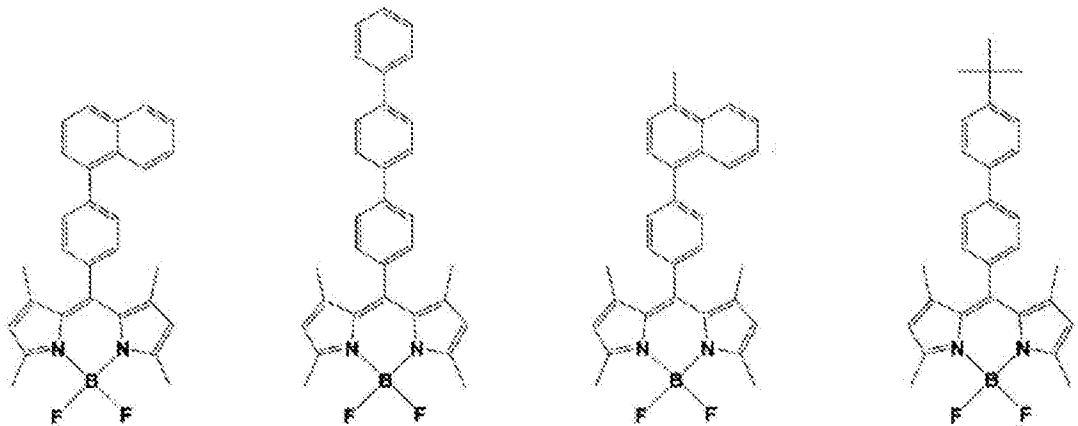
[化168]



[0336] [化169]

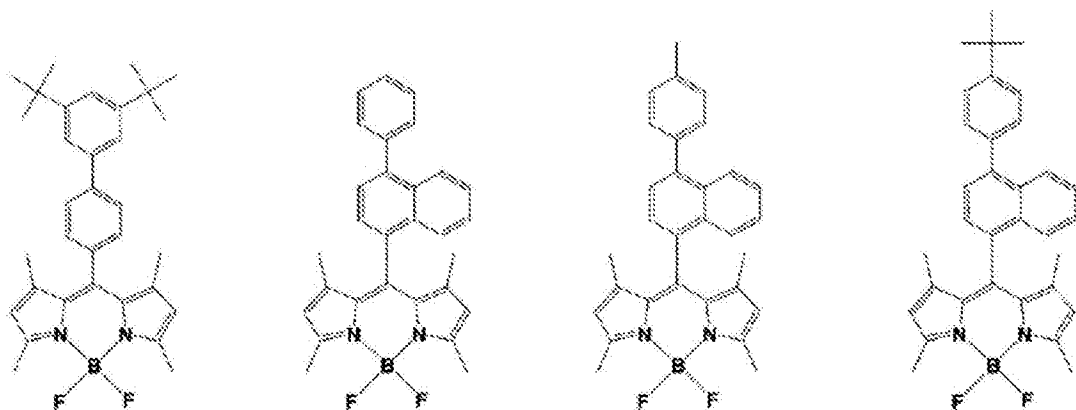


[0337] [化170]

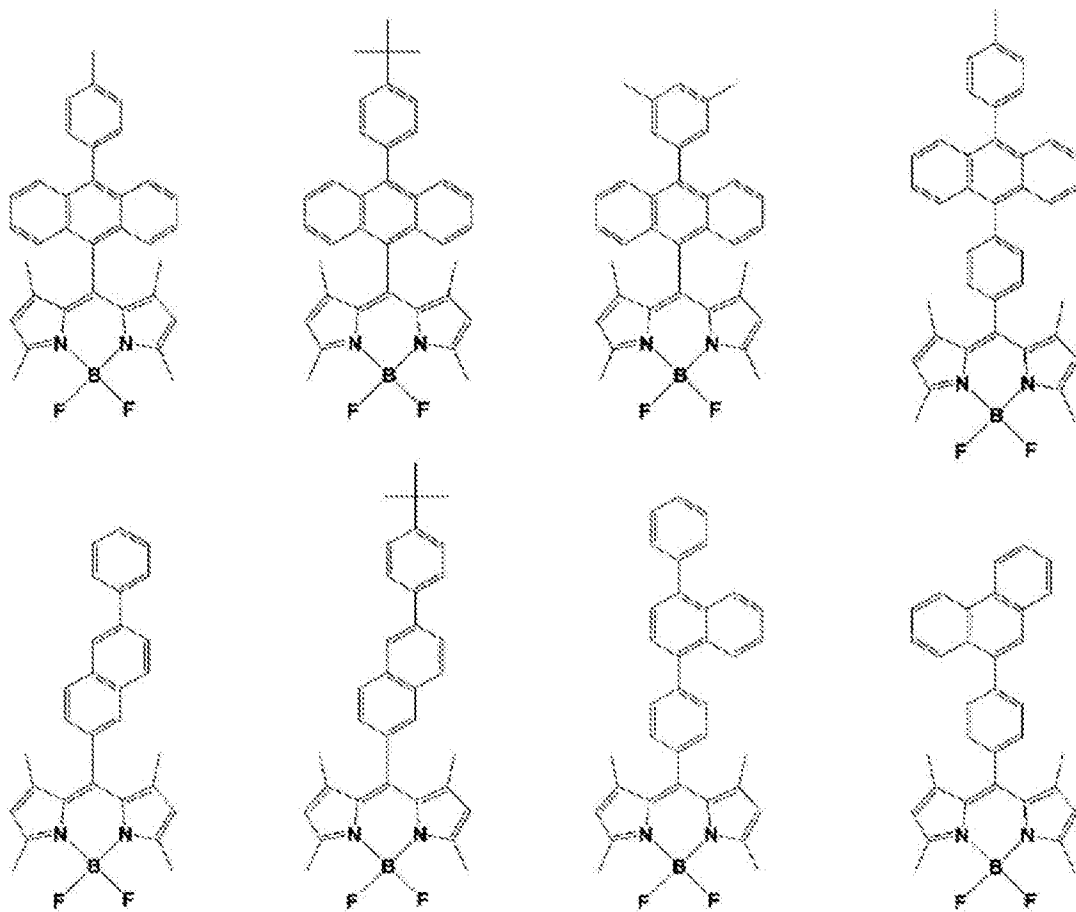


[0338]

[化171]

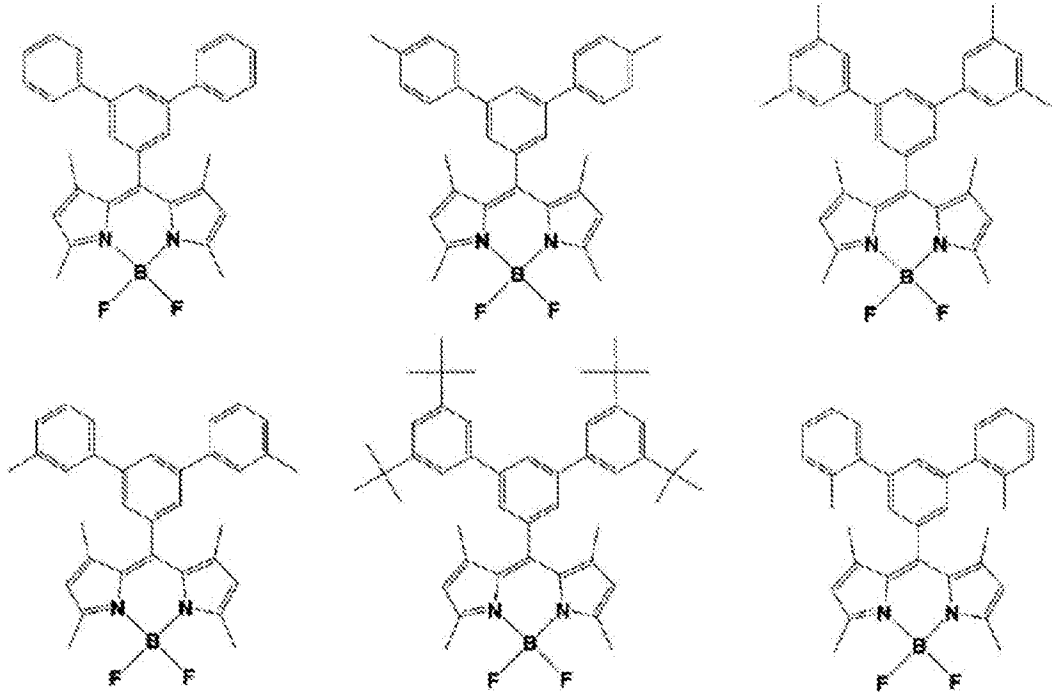


[0339] [化172]

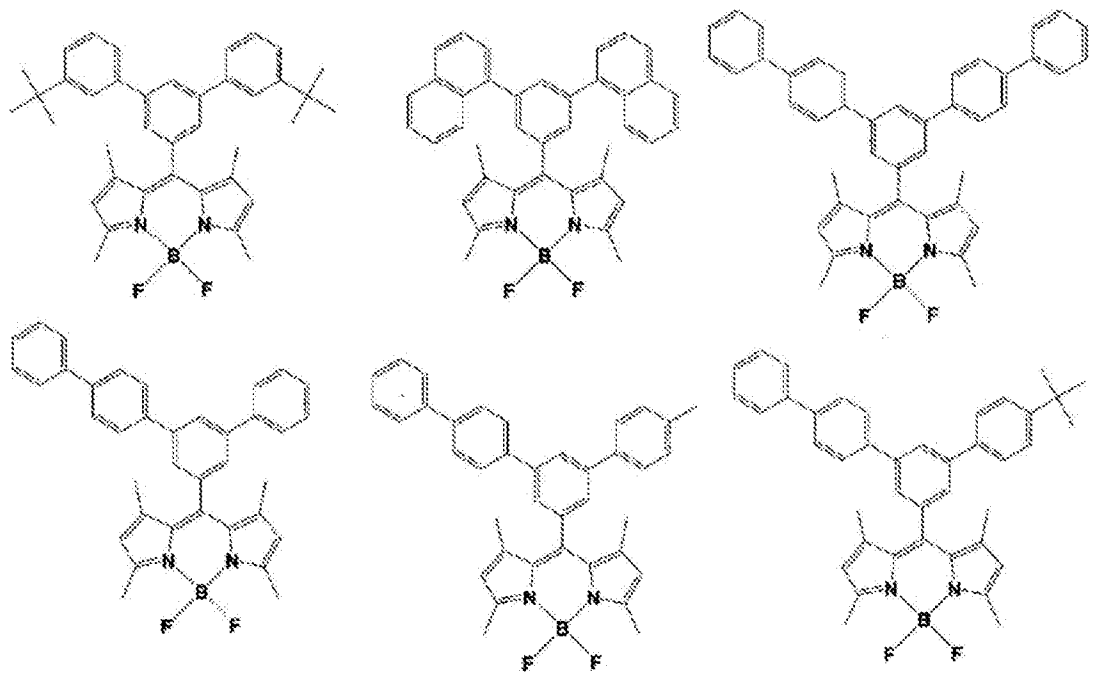


[0340]

[化173]

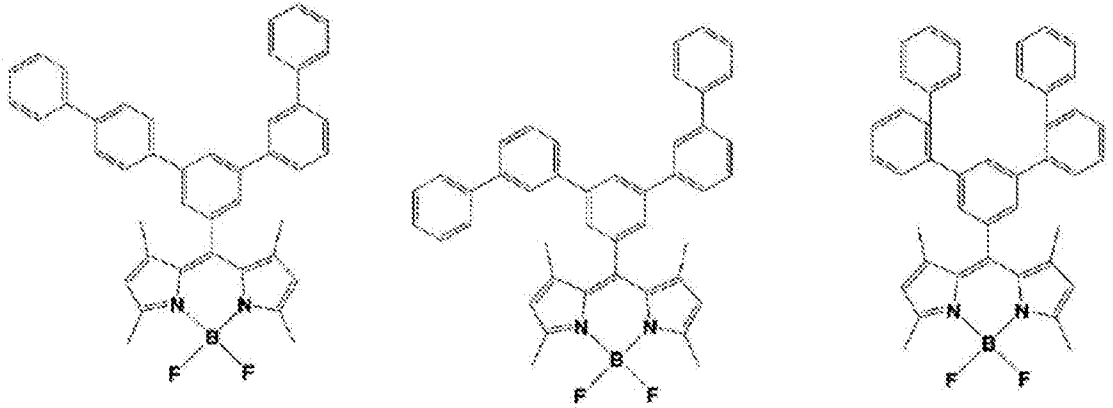


[0341] [化174]

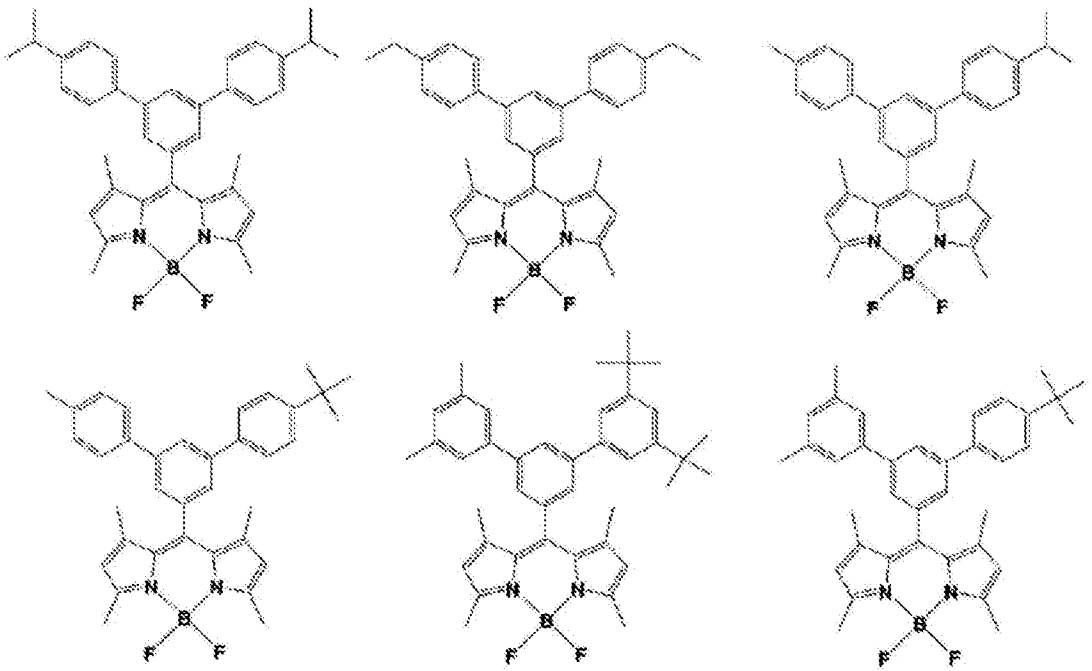


[0342]

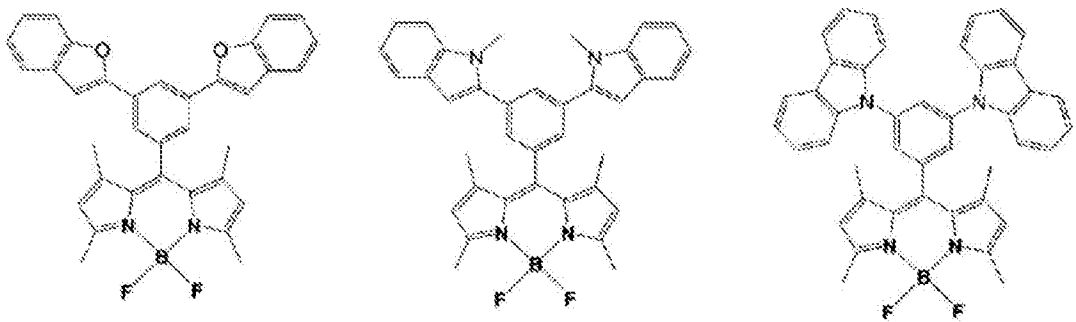
[化175]



[0343] [化176]

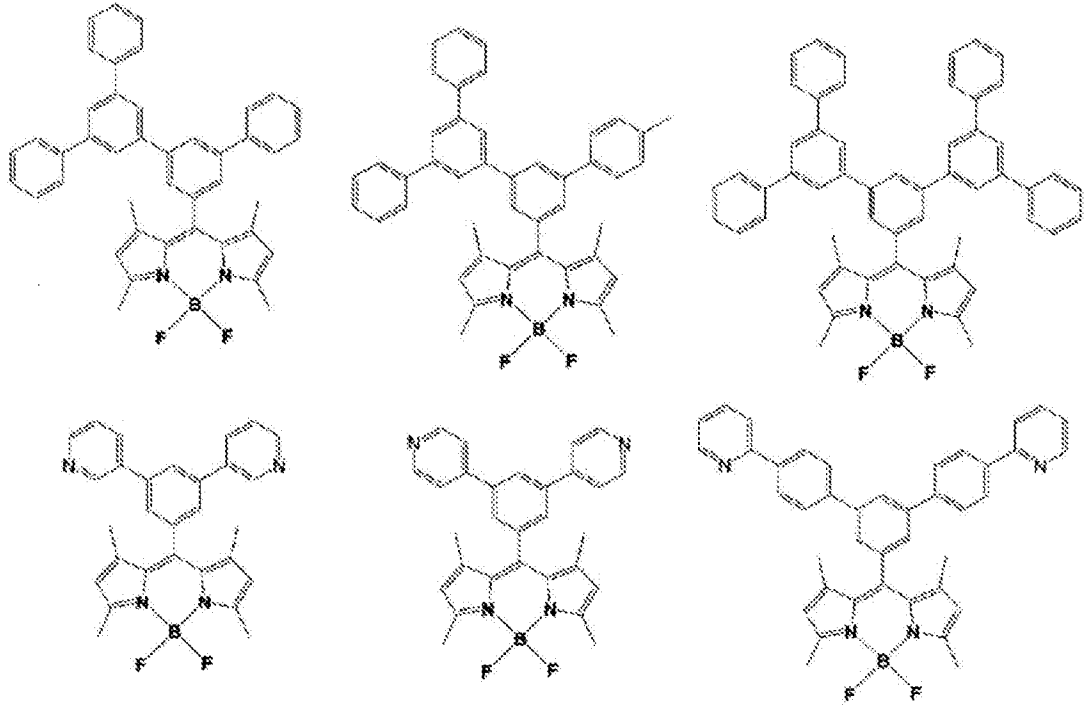


[0344] [化177]

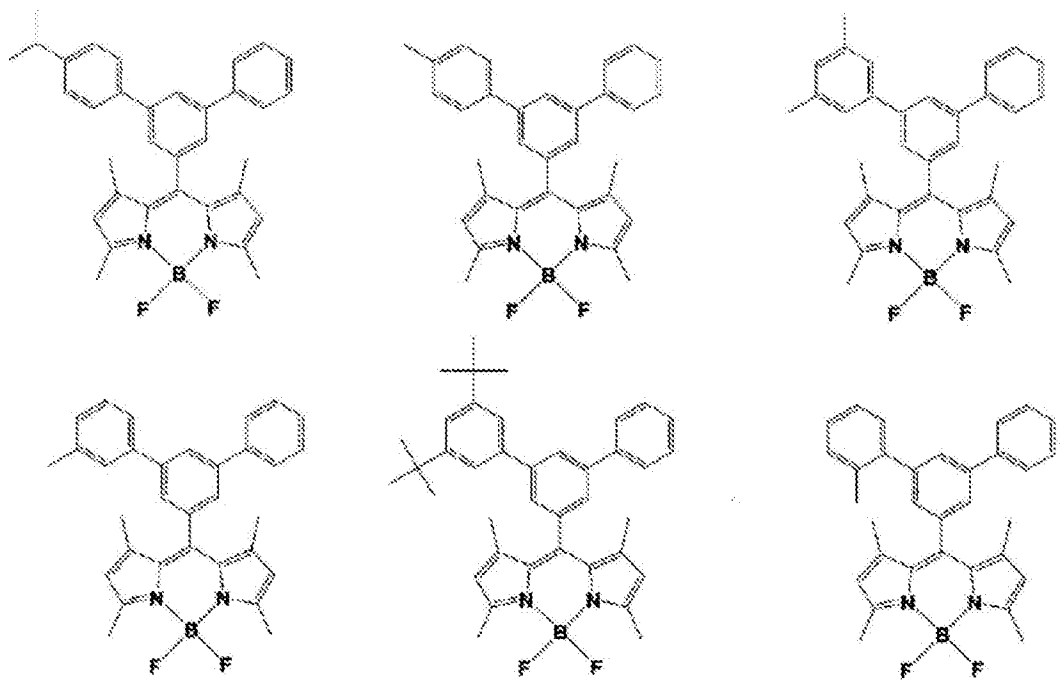


[0345]

[化178]

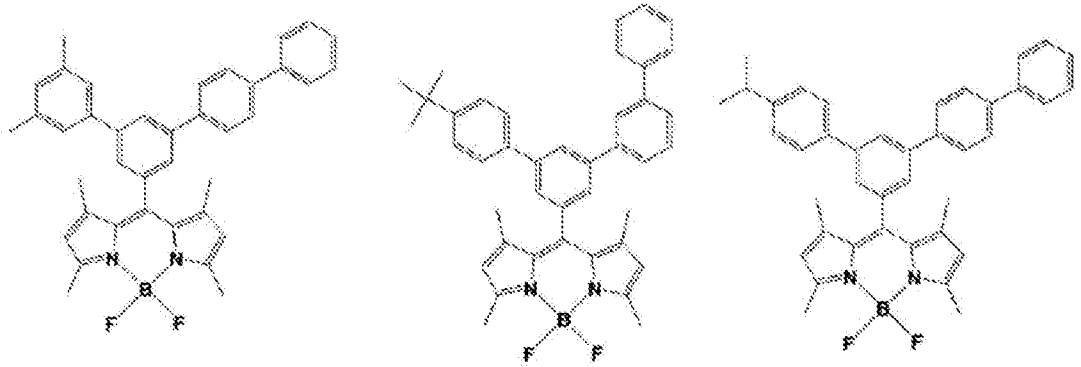


[0346] [化179]

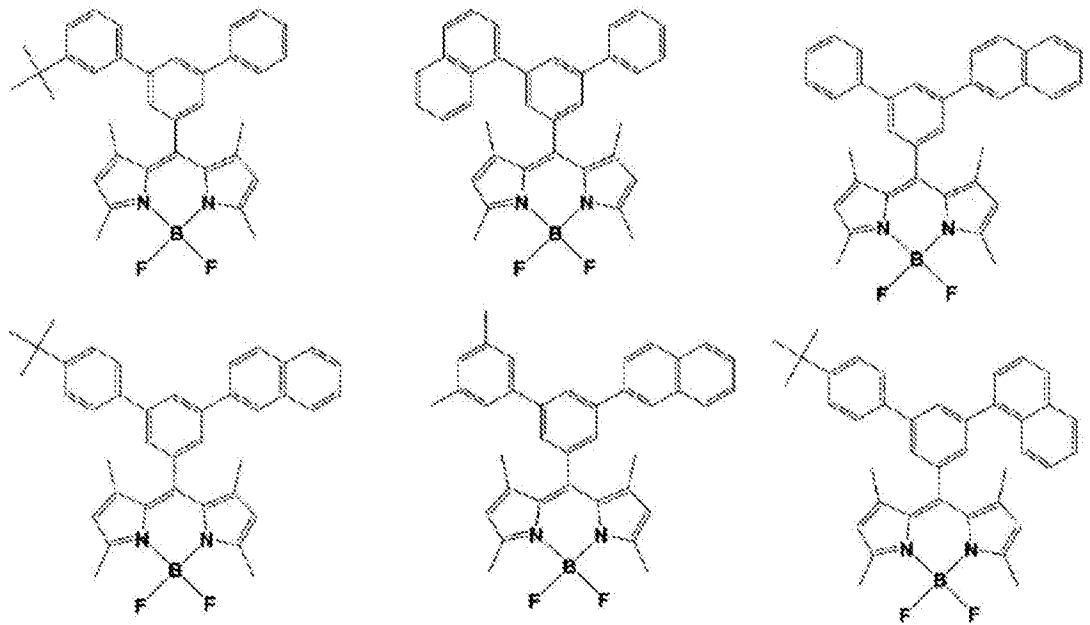


[0347]

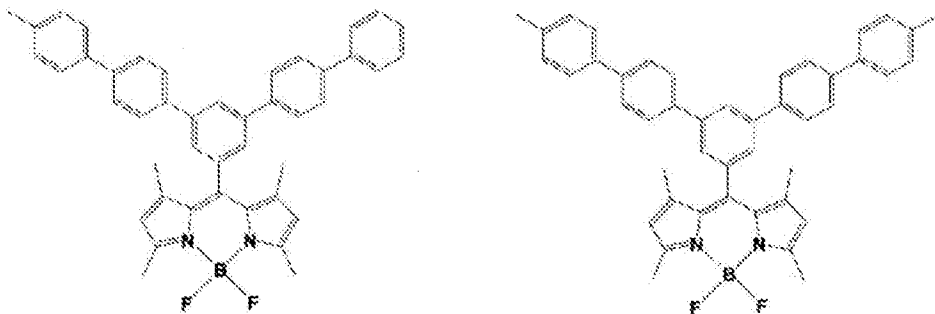
[化180]



[0348] [化181]

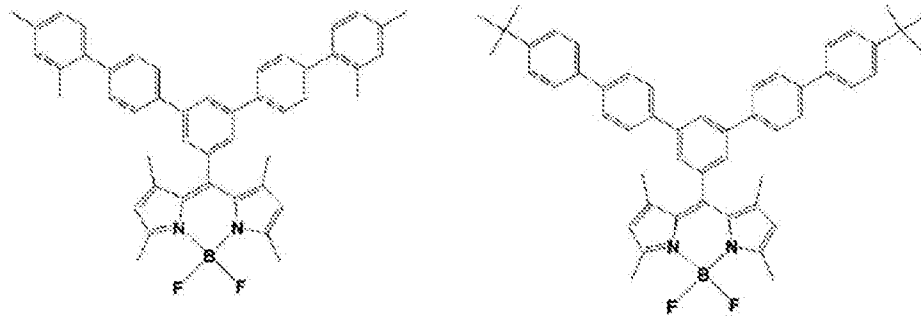


[0349] [化182]

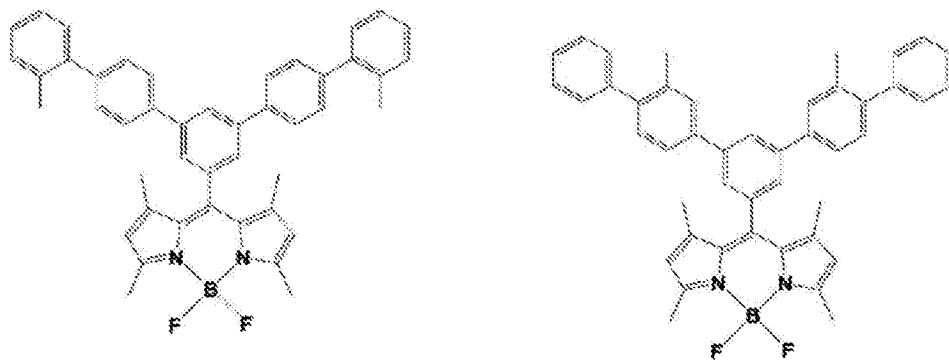


[0350]

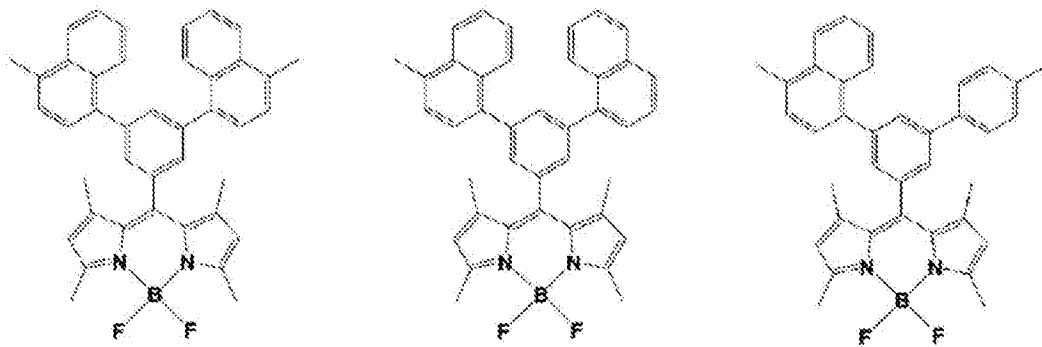
[化183]



[0351] [化184]

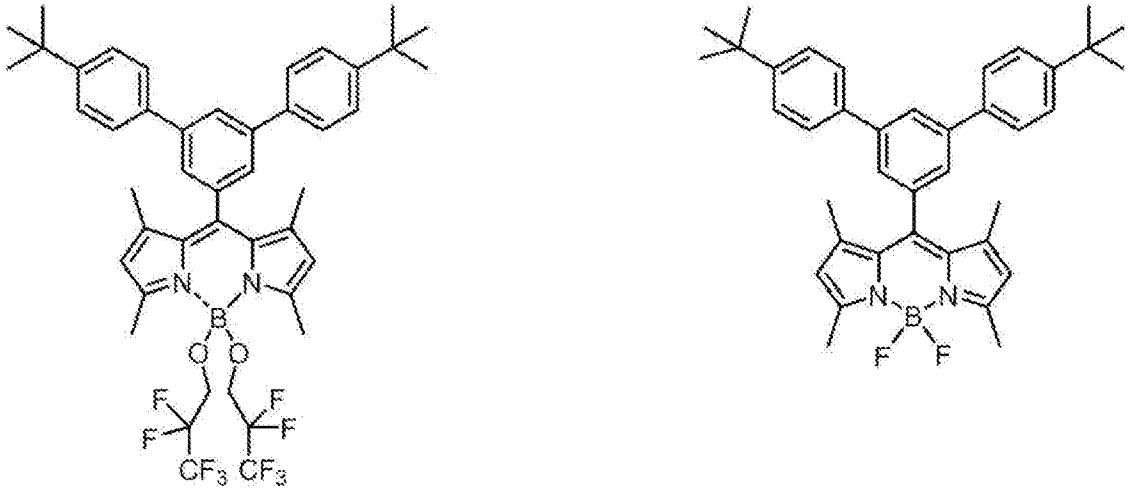


[0352] [化185]



[0353]

[化186]



[0354] <発光層における第一の化合物及び第二の化合物の関係>

本実施形態の有機EL素子1において、第一の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 1) と、第二の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 2) とが、下記数式(数3)の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(\text{Mat } 1) > S_1(\text{Mat } 2) \quad \dots (\text{数 } 3)$$

[0355] 第一の化合物の77 [K]におけるエネルギーギャップ $T_{77\text{K}}$ (Mat 1) は、第二の化合物の77 [K]におけるエネルギーギャップ $T_{77\text{K}}$ (Mat 2) よりも大きいことが好ましい。すなわち、下記数式(数5)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77\text{K}}(\text{Mat } 1) > T_{77\text{K}}(\text{Mat } 2) \quad \dots (\text{数 } 5)$$

[0356] 本実施形態の有機EL素子1を発光させたときに、発光層5において、主に第二の化合物が発光していることが好ましい。

[0357] ・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、本実施形態に係る化合物の内、熱活性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、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 λ_{edge} [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。

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

[0358] 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。

[0359] ・一重項エネルギー S_1

溶液を用いた一重項エネルギー 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 $10 \mu\text{m} \circ \text{l} / \text{L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（300K）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。

[0360] 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。

[0361] 本実施形態では、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 ΔST として定義する。

[0362] 本実施形態において、前記第一の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 1)と、前記第一の化合物の77 [K]におけるエネルギーギャップ T_{77K} (Mat 1)との差 ΔST (Mat 1)は、好ましくは0.3 eV未満、より好ましくは0.2 eV未満、さらに好ましくは0.1 eV未満である。すなわち、 ΔST (Mat 1)は、下記数式(数1A)～(数1C)の関係を満たすことが好ましい。

$$\Delta ST (Mat 1) = S_1 (Mat 1) - T_{77K} (Mat 1) < 0.3 \text{ eV (数1A)}$$
$$\Delta ST (Mat 1) = S_1 (Mat 1) - T_{77K} (Mat 1) < 0.2 \text{ eV (数1B)}$$
$$\Delta ST (Mat 1) = S_1 (Mat 1) - T_{77K} (Mat 1) < 0.1 \text{ eV (数1C)}$$

[0363] 本実施形態の有機EL素子1は、赤色発光または緑色発光することが好ましい。

本実施形態の有機EL素子1が緑色発光する場合、有機EL素子1から発光する光の主ピーク波長は、500 nm以上560 nm以下であることが好ましい。

本実施形態の有機EL素子1が赤色発光する場合、有機EL素子1から発光する光の主ピーク波長は、600 nm以上660 nm以下であることが好ましい。

本実施形態の有機EL素子1が青色発光する場合、有機EL素子1から発光する光の主ピーク波長は、430 nm以上480 nm以下であることが好ましい。

[0364] 有機EL素子から発光する光の主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/cm²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、これを主ピーク波長（単位：nm）とする。

[0365] ・発光層の膜厚

本実施形態の有機EL素子1における発光層5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、最も好ましくは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。

[0366] ・発光層における化合物の含有率

発光層5に含まれている第一の化合物及び第二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。

第一の化合物の含有率は、10質量%以上80質量%以下であることが好ましく、10質量%以上60質量%以下であることがより好ましく、20質量%以上60質量%以下であることがさらに好ましい。

第二の化合物の含有率は、0.01質量%以上10質量%以下であることが好ましく、0.01質量%以上5質量%以下であることがより好ましく、0.01質量%以上1質量%以下であることがさらに好ましい。

なお、本実施形態は、発光層5に、第一の化合物及び第二の化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

発光層5は、第一の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。発光層5は、第二の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

[0367] ・TADF機構（メカニズム）

図4、発光層における第一の化合物及び第二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

(Mat 1) は、第一の化合物の最低励起一重項状態を表す。T 1 (Mat 1) は、第一の化合物の最低励起三重項状態を表す。S 1 (Mat 2) は、第二の化合物の最低励起一重項状態を表す。T 1 (Mat 2) は、第二の化合物の最低励起三重項状態を表す。

図4中のS 1 (Mat 1) からS 1 (Mat 2) へ向かう破線の矢印は、第一の化合物の最低励起一重項状態から第二の化合物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、第一の化合物として ΔST (Mat 1) の小さな化合物を用いると、最低励起三重項状態T 1 (Mat 1) は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態S 1 (Mat 1) に逆項間交差が可能である。そして、第一の化合物の最低励起一重項状態S 1 (Mat 1) から第二の化合物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S 1 (Mat 2) が生成する。この結果、第二の化合物の最低励起一重項状態S 1 (Mat 2) からの蛍光発光を観測することができる。このTADF機構による遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部効率を100%まで高めることができると考えられている。

[0368] 第三実施形態に係る有機EL素子1は、発光層5に、第一の化合物としての第一実施形態の化合物(一般式(11)~(13)のいずれかで表される化合物の少なくともいずれか)と、第一の化合物よりも小さな一重項エネルギーを有する第二の化合物と、を含んでいる。

第三実施形態に係る有機EL素子1は、表示装置および発光装置等の電子機器に使用できる。

[0369] 有機EL素子1の構成についてさらに説明する。以下、符号の記載は省略することができる。

[0370] (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。

[0371] (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。

[0372] 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。

[0373] 陽極上に形成されるEL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。

[0374] 仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム(Li)及びセシウム(Cs)等のアルカリ金属、マグネシウム(Mg)、カルシウム(Ca)及びストロンチウム(Sr)等のアルカリ土類金属、並びにこれらを含む合金(例えば、MgAg、AlLi)、ユーロピウム(Eu)及びイッテルビウム(Yb)等の希土類金属並びに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。

[0375] (陰極)

陰極には、仕事関数の小さい(具体的には3.8eV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)及びセシウム(Cs)等のアルカリ金属、マグネシウム(Mg)、カルシウム(Ca)及びストロンチウム(Sr)等のアルカリ土類金属、並びにこれらを含む合金(例えば、MgAg、AlLi)、ユーロピウム(Eu)及びイッテルビウム(Yb)等の希土類金属並びにこれらを含む合金等が挙げられる。

[0376] 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。

[0377] 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、スピニング法等を用いて成膜することができる。

[0378] (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。

[0379] また、正孔注入性の高い物質としては、低分子の有機化合物である4, 4', 4''-トリリス(N, N-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン(略称: TDATA)、4, 4', 4''-トリリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称: MTDATA)、4, 4'-ビス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称: DPAB)、4, 4'-ビス(N-{4-[N'-(3-メチルフェニル)-N'-フェニルアミノ]フェニル}-N-フェニルアミノ)ビフェニル(略称: DNTPD)、1, 3, 5-トリリス[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やジピラジノ[2, 3-f: 20, 30-h]キノキサリン-2, 3, 6, 7, 10, 11-ヘキサカルボニトリル(HAT-CN)も挙げられる。

[0380] 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。

[0381] (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: BAFAP)、4, 4'-ビス[N-(9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称: DFLLDPBi)、4, 4', 4''-トリス(N, N'-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン(略称: TDATA)、4, 4', 4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称: MTDATA)、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 $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の正孔移動度を有する物質である。

[0382] 正孔輸送層には、CBP、9-[4-(N-カルバゾリル)]フェニル-10-フェニルアントラセン(CzPA)、9-フェニル-3-[4-(1

0-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(PCzPA)のようなカルバゾール誘導体や、t-BuDNA、DNA、DPAnthのようなアントラセン誘導体を用いても良い。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。

[0383] 但し、電子よりも正孔の輸送性の高い物質であれば、これら以外のものを用いてもよい。なお、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。

[0384] 正孔輸送層を二層以上配置する場合、エネルギーギャップのより大きい材料を発光層に近い側に配置することが好ましい。このような材料として、後記する実施例で用いた、HT-2が挙げられる。

[0385] (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：B P h e n）、バソキュプロイン（略称：B C P）、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：B z O s）などの複素芳香族化合物も用いることができる。本実施態様においては、ベンゾイミダゾール化合物を好適に用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層で構成されていてもよいし、上記物質からなる層が二層以上積層されて構成されていてもよい。

[0386] 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) - c o - (ピリジン - 3, 5 -ジイル)]（略称：P F - P y）、ポリ [(9, 9 -ジオクチルフルオレン - 2, 7 -ジイル) - c o - (2, 2' -ビピリジン - 6, 6' -ジイル)]（略称：P F - B P y）などを用いることができる。

[0387]（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。

[0388] 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、イッテ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：TTF）等の有機化合物を用いることもできる。

（層形成方法）

本実施形態の有機EL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、スピコーティング法、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

[0389] （膜厚）

本実施形態の有機EL素子の各有機層の膜厚は、上記で特に言及した以外には制限されないが、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、逆に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、通常は数nmから1 μ mの範囲が好ましい。

[0390] 〔第四実施形態〕

第四実施形態に係る有機EL素子の構成について説明する。第四実施形態の説明において第三実施形態と同一の構成要素は、同一符号や名称を付す等して説明を省略もしくは簡略化する。また、第四実施形態では、特に言及されない材料や化合物については、第三実施形態で説明した材料や化合物と同様の材料や化合物を用いることができる。

[0391] 第四実施形態に係る有機EL素子は、発光層が、さらに第三の化合物を含んでいる点で、第三実施形態に係る有機EL素子と異なる。その他の点につ

いては第三実施形態と同様である。

すなわち、第四実施形態において、第一の有機層としての発光層は、第一の化合物と、第二の化合物と、第三の化合物とを含む。

この態様の場合、第一の化合物は、ホスト材料であることが好ましく、第二の化合物は、ドーパント材料であることが好ましく、第三の化合物は、分散材として、ドーパント材料を発光層中に分散させる材料であることが好ましい。

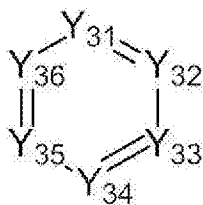
[0392] <第三の化合物>

第三の化合物は、遅延蛍光性の化合物でもよいし、遅延蛍光性を示さない化合物でもよい。

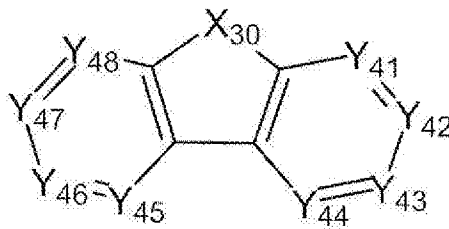
[0393] 第三の化合物としては、特に限定されないが、アミン化合物以外の化合物であることが好ましい。また、例えば、第三の化合物としては、カルバゾール誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフェン誘導体を用いることができるが、これら誘導体に限定されない。

[0394] 第三の化合物は、一つの分子中に下記一般式(31)で表される部分構造、下記一般式(32)で表される部分構造、下記一般式(33)で表される部分構造、及び下記一般式(34)で表される部分構造のうち少なくともいずれかを含む化合物であることも好ましい。

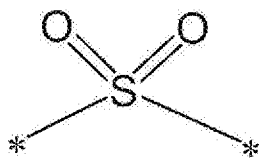
[0395] [化187]



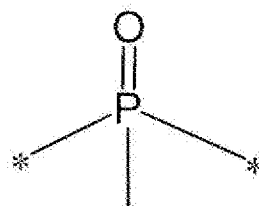
(31)



(32)



(33)



(34)

[0396] 前記一般式 (31) において、

$Y_{31} \sim Y_{36}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

ただし、 $Y_{31} \sim Y_{36}$ のうち少なくともいずれかは、第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

前記一般式 (32) において、

$Y_{41} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

ただし、 $Y_{41} \sim Y_{48}$ のうち少なくともいずれかは、第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

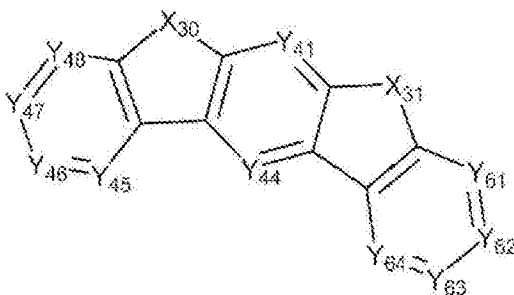
X_{30} は、第三の化合物の分子中における他の原子と結合する窒素原子、または酸素原子、もしくは硫黄原子である。

前記一般式 (33) ~ (34) 中、* は、それぞれ独立に、第三の化合物の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。

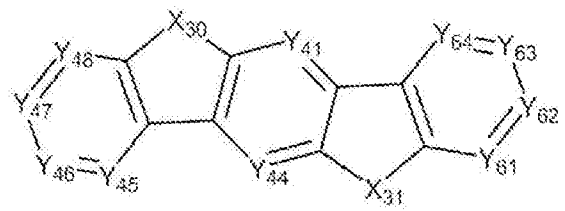
[0397] 前記一般式 (32) において、 $Y_{41} \sim Y_{48}$ のうち少なくとも2つが第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、当該炭素原子を含む環構造が構築されていることも好ましい。

例えば、前記一般式 (32) で表される部分構造が、下記一般式 (321)、一般式 (322)、一般式 (323)、一般式 (324)、一般式 (325)、及び一般式 (326) で表される部分構造からなる群から選択されるいずれかの部分構造であることが好ましい。

[0398] [化188]

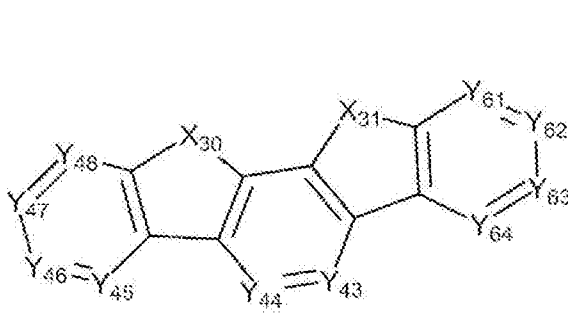


(321)

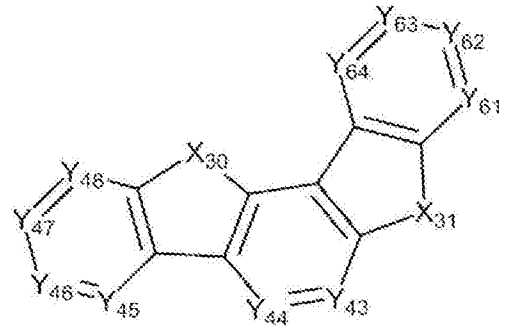


(322)

[0399] [化189]

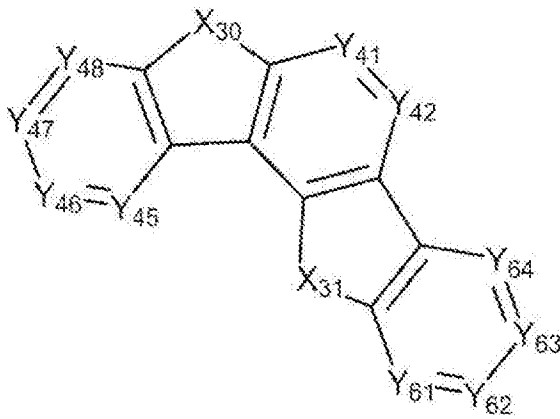


(323)

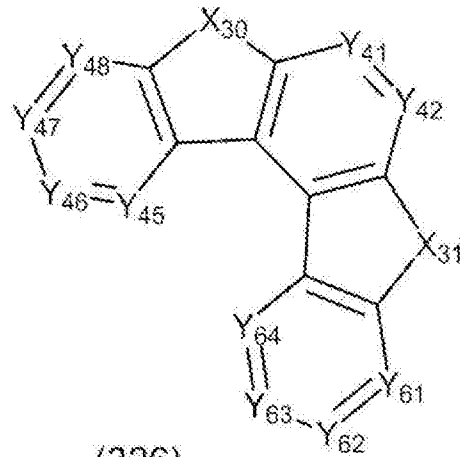


(324)

[0400] [化190]



(325)



(326)

[0401] 前記一般式 (321) ~ (326) において、

X₃₀は、それぞれ独立に、第三の化合物の分子中における他の原子と結合する窒素原子、または酸素原子、もしくは硫黄原子であり、

Y₄₁ ~ Y₄₈は、それぞれ独立に、窒素原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

X₃₁は、それぞれ独立に、第三の化合物の分子中における他の原子と結合する窒素原子、酸素原子、硫黄原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

Y₆₁ ~ Y₆₄は、それぞれ独立に、窒素原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子である。

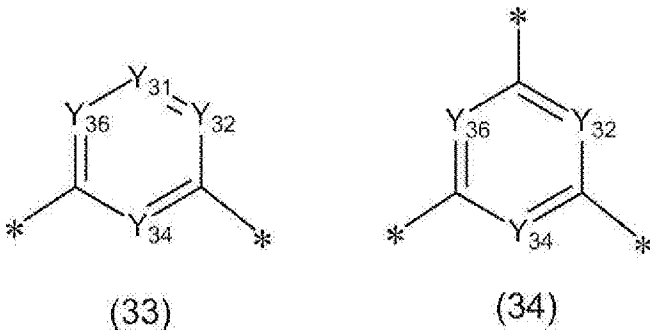
本実施形態においては、第三の化合物は、前記一般式 (321) ~ (32

6) のうち前記一般式 (3 2 3) で表される部分構造を有することが好ましい。

[0402] 前記一般式 (3 1) で表される部分構造は、下記一般式 (3 3) で表される基、及び下記一般式 (3 4) で表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として第三の化合物に含まれることが好ましい。

第三の化合物は、下記一般式 (3 3)、及び下記一般式 (3 4) で表される部分構造のうち少なくともいずれかの部分構造を有することも好ましい。下記一般式 (3 3)、及び下記一般式 (3 4) で表される部分構造のように結合箇所が互いにメタ位に位置するため、第三の化合物の 7 7 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} (Mat 3) を高く保つことができる。

[0403] [化191]



[0404] 前記一般式 (3 3) において、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{31} である。

前記一般式 (3 4) において、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{31} である。

前記一般式 (3 3)、及び (3 4) において、

R_{31} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、

置換基としての R_{31} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアルキル基、

置換または無置換のシリル基、

置換ゲルマニウム基、

置換ホスフィンオキシド基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、及び

置換または無置換のカルボキシ基

からなる群から選択される。

ただし、前記 R_{31} における置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基は、非縮合環であることが好ましい。

前記一般式 (33)、及び前記一般式 (34) において、* は、それぞれ独立に、第三の化合物の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。

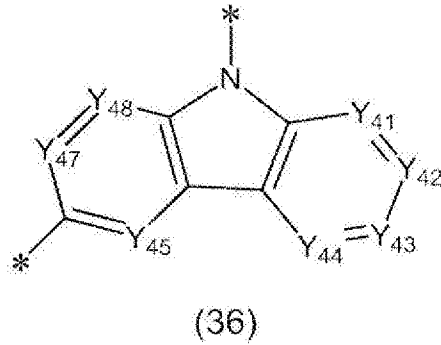
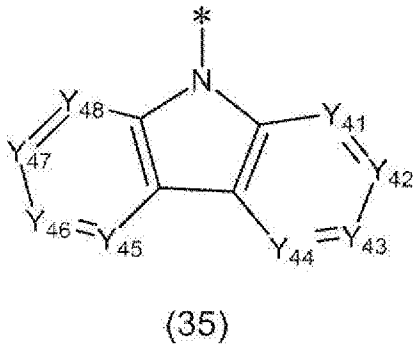
[0405] 前記一般式 (33) において、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、 CR_{31} であることが好ましく、複数の R_{31} は、互いに同一であるか、または異なる。

また、前記一般式 (34) において、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、 CR_{31} であることが好ましく、複数の R_{31} は、互いに同一であるか、または異なる。

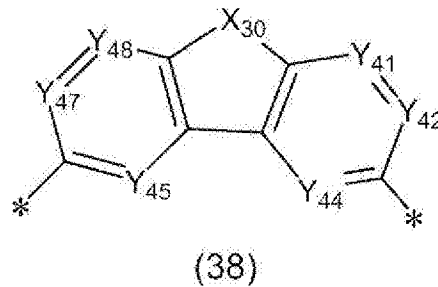
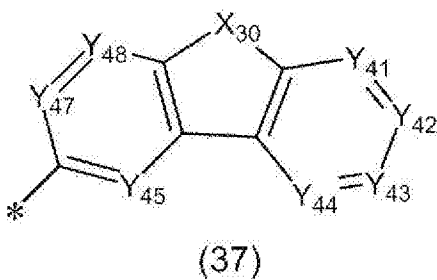
[0406] 置換ゲルマニウム基は、 $-Ge(R_{301})_3$ で表されることが好ましい。 R_{301} は、それぞれ独立に、置換基である。置換基 R_{301} は、置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、または置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であることが好ましい。複数の R_{301} は、互いに同一であるかまたは異なる。

[0407] 前記一般式 (32) で表される部分構造は、下記一般式 (35) ~ (39)、及び下記一般式 (30a) で表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として第三の化合物に含まれることが好ましい。

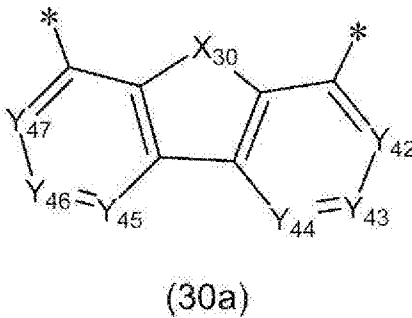
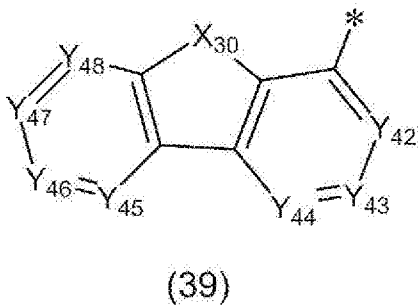
[0408] [化192]



[0409] [化193]



[0410] [化194]



[0411] 前記一般式(35)において、 Y_{41} 乃至 Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{32} である。

前記一般式(36)、及び(37)において、 Y_{41} ~ Y_{45} 、 Y_{47} 、及び Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{32} である。

前記一般式(38)において、 Y_{41} 、 Y_{42} 、 Y_{44} 、 Y_{45} 、 Y_{47} 、及び Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{32} である。

前記一般式(39)において、 Y_{42} ~ Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{32} である。

前記一般式(30a)において、 Y_{42} ~ Y_{47} は、それぞれ独立に、窒素原

子または CR_{32} である。

前記一般式(35)～(39)、及び(30a)において、

R_{32} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、

置換基としての R_{32} は、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数3～30のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数7～30のアラルキル基、

置換または無置換のシリル基、

置換ゲルマニウム基、

置換ホスフィンオキシド基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、及び

置換または無置換のカルボキシ基

からなる群から選択され、

複数の R_{32} は、互いに同一であるかまたは異なる。

前記一般式(37)～(39)、及び(30a)において、

X_{30} は、 NR_{33} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

R_{33} は、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数3～30のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数7～30のアラルキル基、

置換または無置換のシリル基、

置換ゲルマニウム基、

置換ホスフィンオキシド基、

フッ素原子、

シアノ基、

ニトロ基、及び

置換または無置換のカルボキシ基

からなる群から選択され、

複数の R_{33} は、互いに同一であるかまたは異なる。

ただし、前記 R_{33} における置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基は、非縮合環であることが好ましい。

前記一般式(35)～(39)、及び(30a)において、*は、それぞれ独立に、第三の化合物の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。

[0412] 前記一般式(35)において、 $Y_{41} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式(36)、及び前記一般式(37)において、 $Y_{41} \sim Y_{45}$ 、 Y_{47} 、及び Y_{48} は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式(38)において、 Y_{41} 、 Y_{42} 、 Y_{44} 、 Y_{45} 、 Y_{47} 、及び Y_{48} は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式(39)において、 $Y_{42} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式(30a)において、 $Y_{42} \sim Y_{47}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、複数の R_{32} は、互いに同一であるかまたは異なる。

[0413] 第三の化合物において、 X_{30} は、酸素原子または硫黄原子であることが好ましく、酸素原子であることがより好ましい。

[0414] 第三の化合物において、 R_{31} 、及び R_{32} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であって、置換基としての R_{31} 、及び置換基としての R_{32} は、それぞれ独立に、フッ素原子、シアノ基、置換または無置換の炭素数1～30

のアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、及び置換また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から選択されるいずれかの基であることが好ましい。R₃₁、及びR₃₂は、水素原子、シアノ基、置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、または置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であることがより好ましい。ただし、置換基としてのR₃₁、及び置換基としてのR₃₂が置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基である場合、当該アリール基は、非縮合環であることが好ましい。

[0415] 第三の化合物は、芳香族炭化水素化合物、または芳香族複素環化合物であることも好ましい。

[0416] ・第三の化合物の製造方法

第三の化合物は、例えば、国際公開第2012/153780号、及び国際公開第2013/038650号等に記載の方法により製造することができる。また、例えば、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、第三の化合物を製造できる。

[0417] 第三の化合物における置換基の例は、例えば、以下のとおりであるが、本発明は、これらの例に限定されない。

[0418] アリール基（芳香族炭化水素基と称する場合がある。）の具体例としては、フェニル基、トリル基、キシリル基、ナフチル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾ[c]フェナントリル基、ベンゾ[g]クリセニル基、ベンゾアントリル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、クォーターフェニル基、フルオランテニル基等が挙げられ、好ましくはフェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、クォーターフェニル基、ナフチル基、トリフェニレニル基、及びフルオレニル基等を挙げる事ができる。

置換基を有するアリール基としては、トリル基、キシリル基、及び9,9-ジメチルフルオレニル基等を挙げる事ができる。

具体例が示すように、アリール基は、縮合アリール基、及び非縮合アリール基の両方を含む。

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、クォーターフェニル基、ナフチル基、トリフェニレニル基、またはフルオレニル基が好ましい。

[0419] ヘテロアリール基（複素環基、ヘテロ芳香族環基、または芳香族複素環基と称する場合がある。）の具体例としては、ピロリル基、ピラゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、ピリジル基、トリアジニル基、インドリル基、イソインドリル基、イミダゾリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾ [1, 2-a] ピリジニル基、フリル基、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、アザジベンゾフラニル基、チオフェニル基、ベンゾチエニル基、ジベンゾチエニル基、アザジベンゾチエニル基、キノリル基、イソキノリル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、ナフチリジニル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、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、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、フラザニル基、ベンズオキサゾリル基、チエニル基、チアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンズチアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基等が挙げられ、好ましくは、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、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、アザジベンゾフラニル基、及びアザジベンゾチエニル基等を挙げることができる。

ヘテロアリール基としては、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、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、アザジベンゾフラニル基、またはアザジベンゾチエニル基が好ましく、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、アザジベンゾフラニル基、またはアザジベンゾチエニル基がさらに好ましい。

[0420] 第三の化合物において、置換シリル基は、置換または無置換のトリアルキ

ルシリル基、置換または無置換のアリールアルキルシリル基、及び置換または無置換のトリアリールシリル基からなる群から選択されることも好ましい。

置換または無置換のトリアルキルシリル基の具体例としては、トリメチルシリル基、及びトリエチルシリル基を挙げることができる。

置換若しくは無置換のアリールアルキルシリル基の具体例としては、ジフェニルメチルシリル基、ジトリルメチルシリル基、及びフェニルジメチルシリル基等を挙げることができる。

置換または無置換のトリアリールシリル基の具体例としては、トリフェニルシリル基、及びトリトリルシリル基等を挙げることができる。

[0421] 第三の化合物において、置換ホスフィンオキシド基は、置換または無置換のジアリールホスフィンオキシド基であることも好ましい。

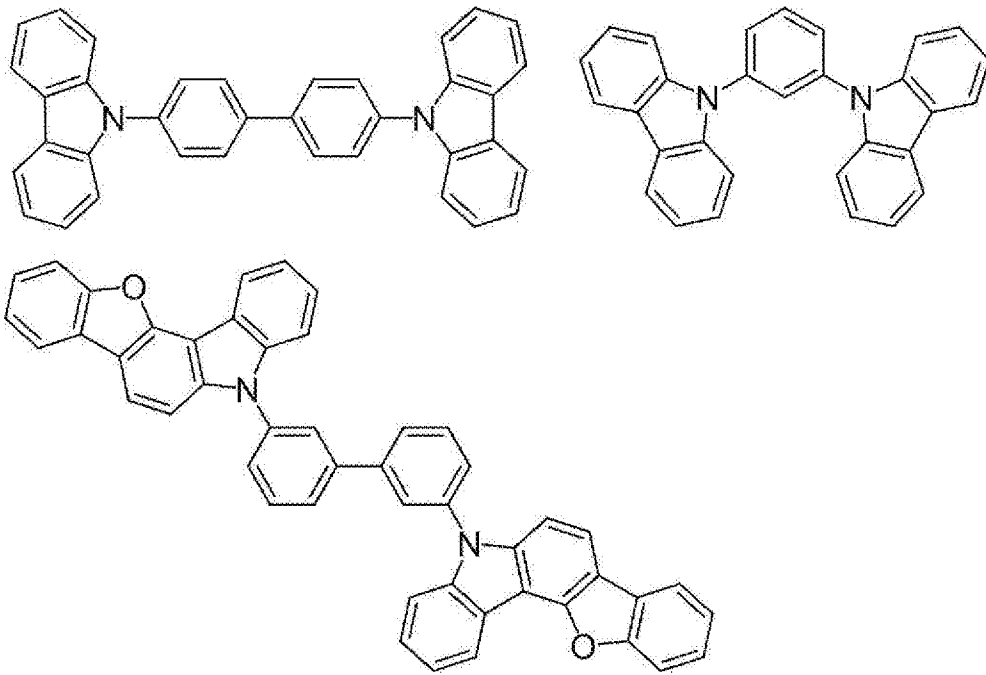
置換または無置換のジアリールホスフィンオキシド基の具体例としては、ジフェニルホスフィンオキシド基、及びジトリルホスフィンオキシド基等を挙げることができる。

[0422] 第三の化合物において、置換カルボキシ基としては、例えば、ベンゾイルオキシ基等が挙げられる。

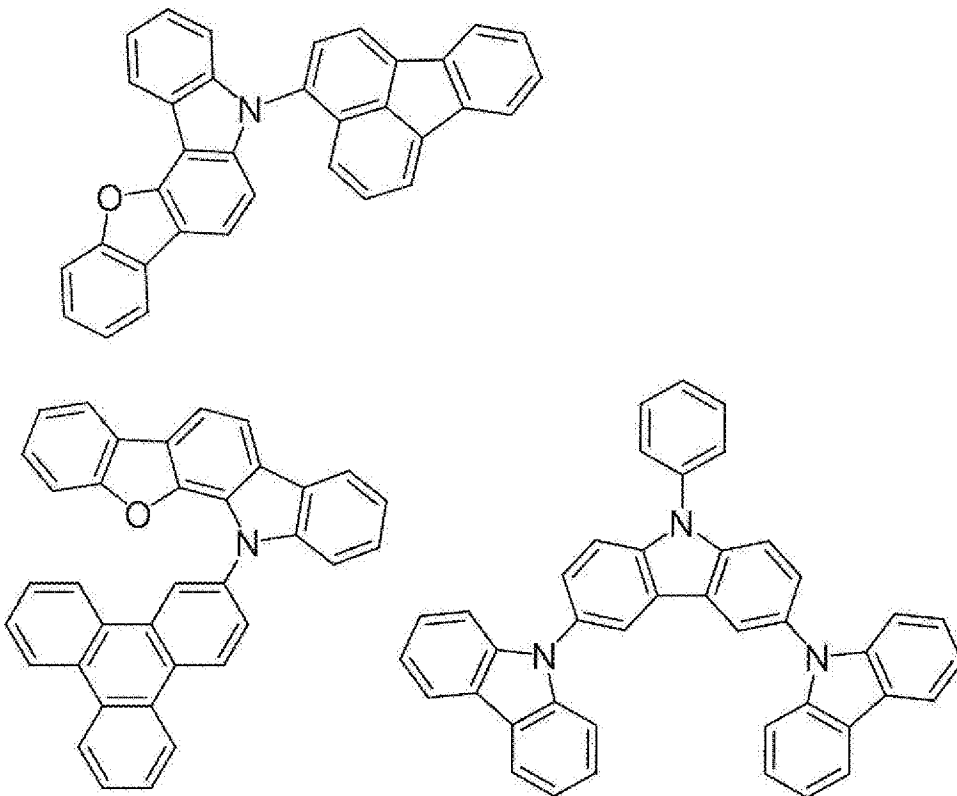
[0423] 本実施形態に係る第三の化合物の具体例を以下に示す。なお、本発明における第三の化合物は、これらの具体例に限定されない。

[0424]

[化195]

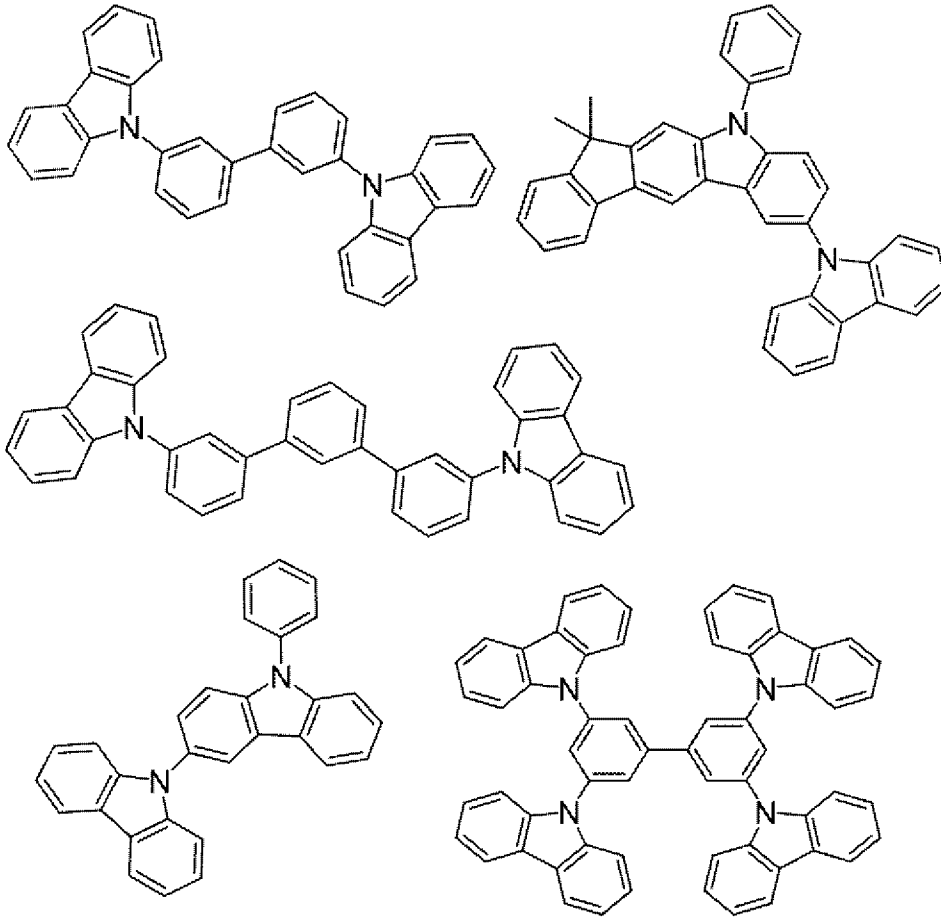


[0425] [化196]



[0426]

[化197]



[0427] <発光層における第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物の関係>

本実施形態の有機EL素子において、第一の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 1) と、第三の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 3) とは、下記数式 (数2) の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1 (\text{Mat } 3) > S_1 (\text{Mat } 1) \quad (\text{数 } 2)$$

[0428] 第三の化合物の77 [K]におけるエネルギーギャップ T_{77K} (Mat 3) は、第一の化合物の77 [K]におけるエネルギーギャップ T_{77K} (Mat 1) よりも大きいことが好ましい。

第三の化合物の77 [K]におけるエネルギーギャップ T_{77K} (Mat 3) は、第二の化合物の77 [K]におけるエネルギーギャップ T_{77K} (Mat 2) よりも大きいことが好ましい。

[0429] 第一の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 1) と、第二の化合物の一重

項エネルギー S_1 (Mat 2) と、第三の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 3) とは、下記数式 (数 2 A) の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(\text{Mat } 3) > S_1(\text{Mat } 1) > S_1(\text{Mat } 2) \quad \dots (\text{数 } 2 \text{ A})$$

[0430] 第一の化合物の 77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} (Mat 1) と、第二の化合物の 77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} (Mat 2) と、第三の化合物の 77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} (Mat 3) とは、下記数式 (数 2 B) の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(\text{Mat } 3) > T_{77K}(\text{Mat } 1) > T_{77K}(\text{Mat } 2) \quad \dots (\text{数 } 2 \text{ B})$$

[0431] 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。

本実施形態の有機 EL 素子は、第三実施形態の有機 EL 素子と同様に、赤色発光または緑色発光することが好ましい。

有機 EL 素子から発光する光の主ピーク波長は、第三実施形態の有機 EL 素子と同様の方法で測定することができる。

[0432] ・発光層における化合物の含有率

発光層に含まれている第一の化合物、第二の化合物、及び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。

第一の化合物の含有率は、10質量%以上80質量%以下であることが好ましく、10質量%以上60質量%以下であることがより好ましく、20質量%以上60質量%であることがさらに好ましい。

第二の化合物の含有率は、0.01質量%以上10質量%以下であることが好ましく、0.01質量%以上5質量%以下であることがより好ましく、0.01質量%以上1質量%以下であることがさらに好ましい。

第三の化合物の含有率は、10質量%以上80質量%以下であることが好ましい。

発光層における第一の化合物、第二の化合物、及び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、第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

発光層は、第一の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。発光層は、第二の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。発光層は、第三の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

[0433] 図5は、発光層における第一の化合物、第二の化合物、及び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5において、S0は、基底状態を表す。S1 (Mat 1)は、第一の化合物の最低励起一重項状態を表し、T1 (Mat 1)は、第一の化合物の最低励起三重項状態を表す。S1 (Mat 2)は、第二の化合物の最低励起一重項状態を表し、T1 (Mat 2)は、第二の化合物の最低励起三重項状態を表す。S1 (Mat 3)は、第三の化合物の最低励起一重項状態を表し、T1 (Mat 3)は、第三の化合物の最低励起三重項状態を表す。図5中のS1 (Mat 1)からS1 (Mat 2)へ向かう破線の矢印は、第一の化合物の最低励起一重項状態から第二の化合物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5に示すように、第一の化合物として ΔST (Mat 1)の小さな化合物を用いると、最低励起三重項状態T1 (Mat 1)は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態S1 (Mat 1)に逆項間交差が可能である。そして、第一の化合物の最低励起一重項状態S1 (Mat 1)から第二の化合物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 (Mat 2)が生成する。この結果、第二の化合物の最低励起一重項状態S1 (Mat 2)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。

[0434] 第四実施形態に係る有機EL素子は、発光層に、第一の化合物としての第

一実施形態の化合物（一般式（11）～（13）のいずれかで表される化合物の少なくともいずれか）と、第一の化合物よりも小さな一重項エネルギーを有する第二の化合物と、第一の化合物よりも大きな一重項エネルギーを有する第三の化合物と、を含んでいる。

第四実施形態に係る有機EL素子は、表示装置および発光装置等の電子機器に使用できる。

[0435]〔第五実施形態〕

第五実施形態に係る有機EL素子の構成について説明する。第五実施形態の説明において第三実施形態及び第四実施形態と同一の構成要素は、同一符号や名称を付す等して説明を省略もしくは簡略化する。また、第五実施形態では、特に言及されない材料や化合物については、第三実施形態及び第四実施形態で説明した材料や化合物と同様の材料や化合物を用いることができる。

[0436] 第五実施形態に係る有機EL素子は、発光層が、第二の化合物に代えて、第四の化合物を含んでいる点で、第三実施形態に係る有機EL素子と異なる。その他の点については第三実施形態と同様である。

第五実施形態において、発光層は、第一の化合物と、第四の化合物とを含む。

この態様の場合、第一の化合物は、ドーパント材料（ゲスト材料、エミッター、発光材料と称する場合もある。）であることが好ましく、第四の化合物は、ホスト材料（マトリックス材料と称する場合もある。）であることが好ましい。

第四の化合物は、遅延蛍光性の化合物でもよいし、遅延蛍光性を示さない化合物でもよい。

第四の化合物としては特に限定されないが、例えば、第四実施形態の項で記載した第三の化合物を用いることができる。

[0437] <発光層における第一の化合物及び第四の化合物の関係>

本実施形態の有機EL素子1において、第一の化合物の一重項エネルギー

$S_1(\text{Mat } 1)$ と、第四の化合物の一重項エネルギー $S_1(\text{Mat } 4)$ とが、下記数式 (数4) の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(\text{Mat } 4) > S_1(\text{Mat } 1) \quad (\text{数4})$$

[0438] 第四の化合物の77 [K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(\text{Mat } 4)$ は、第一の化合物の77 [K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(\text{Mat } 1)$ よりも大きいことが好ましい。すなわち、下記数式 (数4 A) の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(\text{Mat } 4) > T_{77K}(\text{Mat } 1) \quad \dots (\text{数4 A})$$

[0439] 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、主に第一の化合物が発光していることが好ましい。

[0440] ・発光層における化合物の含有率

発光層に含まれている第一の化合物及び第四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。

第一の化合物の含有率は、10質量%以上80質量%以下であることが好ましく、10質量%以上60質量%以下であることがより好ましく、20質量%以上60質量%以下であることがさらに好ましい。

第四の化合物の含有率は、20質量%以上90質量%以下であることが好ましく、40質量%以上90質量%以下であることがより好ましく、40質量%以上80質量%以下であることがさらに好ましい。

なお、本実施形態は、発光層に、第一の化合物及び第四の化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

発光層は、第一の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。発光層は、第四の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

[0441] 図6は、発光層における第一の化合物および第四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6において、 S_0 は、基底状態を表す。 $S_1(\text{Mat } 1)$ は、第一の化合物の最低励起一重項状態を表し、 $T_1(\text{Mat } 1)$ は、第一の化合物の最低励起三重項状態を表す。 $S_1(\text{Mat } 4)$

は、第四の化合物の最低励起一重項状態を表し、T1 (Mat 4) は、第四の化合物の最低励起三重項状態を表す。図6中の破線の矢印は、各励起状態間のエネルギー移動を表す。第四の化合物の最低励起一重項状態S1からのフェルスター移動、または最低励起三重項状態T1からのデクスター移動により、第一の化合物の最低励起一重項状態S1または最低励起三重項状態T1に、それぞれエネルギー移動する。さらに、第一の化合物として ΔST (Mat 1) の小さな材料を用いると、第一の化合物の最低励起三重項状態T1は熱エネルギーによって最低励起一重項状態S1に逆項間交差することが可能である。この結果、第一の化合物の最低励起一重項状態S1からの蛍光発光を観測することができる。このTADF機構による遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部効率を100%まで高めることができると考えられている。

[0442] 第五実施形態に係る有機EL素子は、発光層に、第一の化合物としての第一実施形態の化合物（一般式(11)～(13)のいずれかで表される化合物の少なくともいずれか）と、第一の化合物よりも大きな一重項エネルギーを有する第四の化合物と、を含んでいる。

第五実施形態に係る有機EL素子は、表示装置および発光装置等の電子機器に使用できる。

[0443] [第六実施形態]

[電子機器]

本実施形態に係る電子機器は、上述の実施形態のいずれかの有機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。

[0444] [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。

[0445] 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。

[0446] 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。

[0447] 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。

[0448] 本明細書において、「～」を用いて表される数値範囲は、「～」の前に記

載される数値を下限値とし、「～」の後に記載される数値を上限値として含む範囲を意味する。

[0449] 本明細書において、 R_x 及び R_y が互いに結合して環を形成するとは、例えば、 R_x 及び R_y が炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子又はケイ素原子を含み、 R_x に含まれる原子（炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子又はケイ素原子）と、 R_y に含まれる原子（炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子又はケイ素原子）とが、単結合、二重結合、三重結合、又は二価の連結基を介して結合し、環形成原子数が5以上の環（具体的には、複素環又は芳香族炭化水素環）を形成することを意味する。 x は、数字、文字、又は、数字と文字との組み合わせである。 y は、数字、文字、又は、数字と文字との組み合わせである。

二価の連結基としては特に制限されないが、例えば、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO_2-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-NH-$ 、 $-NR_a-$ 、及びこれらの連結基を2以上組み合わせた基等が挙げられる。

複素環の具体例としては、後述の「一般式中における各置換基についての説明」で例示した「ヘテロアリール基 Sub_2 」から結合手を除いた環構造（複素環）が挙げられる。これらの複素環は置換基を有していてもよい。

芳香族炭化水素環の具体例としては、後述の「一般式中における各置換基についての説明」で例示した「アリール基 Sub_1 」から結合手を除いた環構造（芳香族炭化水素環）が挙げられる。これらの芳香族炭化水素環は置換基を有していてもよい。

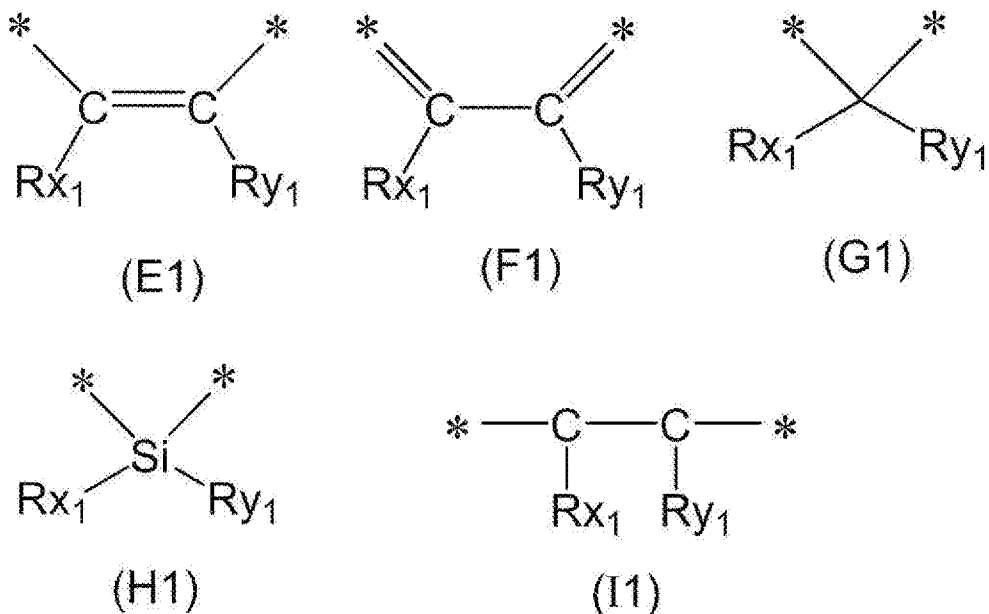
R_a としては、例えば、後述の「一般式中における各置換基についての説明」で例示した置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基 Sub_3 、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基 Sub_1 、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基 Sub_2 等が挙げられる。

例えば、 R_x 及び R_y が互いに結合して環を形成するとは、下記一般式（E1）で表される分子構造において、 R_{x_1} に含まれる原子と、 R_{y_1} に含まれ

る原子とが、一般式 (E 2) で表される環 (環構造) E を形成すること ; 一般式 (F 1) で表される分子構造において、 R_{x_1} に含まれる原子と、 R_{y_1} に含まれる原子とが、一般式 (F 2) で表される環 F を形成すること ; 一般式 (G 1) で表される分子構造において、 R_{x_1} に含まれる原子と、 R_{y_1} に含まれる原子とが、一般式 (G 2) で表される環 G を形成すること ; 一般式 (H 1) で表される分子構造において、 R_{x_1} に含まれる原子と、 R_{y_1} に含まれる原子とが、一般式 (H 2) で表される環 H を形成すること ; 一般式 (I 1) で表される分子構造において、 R_{x_1} に含まれる原子と、 R_{y_1} に含まれる原子とが、一般式 (I 2) で表される環 I を形成すること ; を意味する。

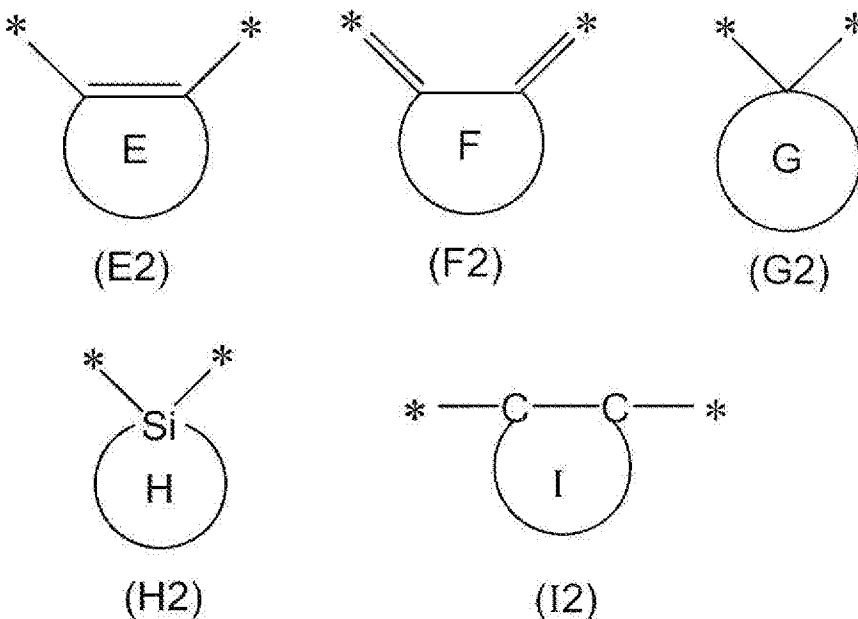
一般式 (E 1) ~ (I 1) 中、* は、それぞれ独立に、一分子中の他の原子との結合位置を表す。一般式 (E 1) 中の 2 つの * は一般式 (E 2) 中の 2 つの * にそれぞれ対応し、一般式 (F 1) 中の 2 つの * は一般式 (F 2) 中の 2 つの * にそれぞれ対応し、一般式 (G 1) 中の 2 つの * は一般式 (G 2) 中の 2 つの * にそれぞれ対応し、一般式 (H 1) 中の 2 つの * は一般式 (H 2) 中の 2 つの * にそれぞれ対応し、一般式 (I 1) 中の 2 つの * は一般式 (I 2) 中の 2 つの * にそれぞれ対応する。

[0450] [化198]



[0451]

[化199]



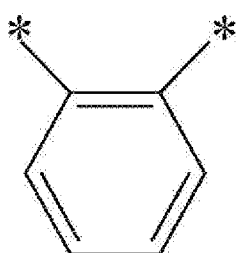
[0452] 一般式 (E 2) ~ (I 2) で表される分子構造において、E ~ I はそれぞれ環構造 (前記環形成原子数が 5 以上の環) を表す。一般式 (E 2) ~ (I 2) 中、* は、それぞれ独立に、一分子中の他の原子との結合位置を表す。一般式 (E 2) 中の 2 つの * は一般式 (E 1) 中の 2 つの * にそれぞれ対応する。一般式 (F 2) ~ (I 2) 中の 2 つの * についても同様に、一般式 (F 1) ~ (I 1) 中の 2 つの * にそれぞれ対応する。

[0453] 例えば、一般式 (E 1) において、 R_{x_1} 及び R_{y_1} が互いに結合して一般式 (E 2) 中の環 E を形成し、環 E が無置換のベンゼン環である場合、一般式 (E 1) で表される分子構造は、下記一般式 (E 3) で表される分子構造になる。ここで、一般式 (E 3) 中の 2 つの * は、それぞれ独立に、一般式 (E 2) および一般式 (E 1) 中の 2 つの * に対応する。

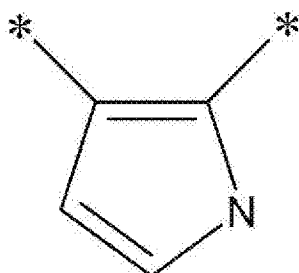
例えば、一般式 (E 1) において、 R_{x_1} 及び R_{y_1} が互いに結合して一般式 (E 2) 中の環 E を形成し、環 E が無置換のピロール環である場合、一般式 (E 1) で表される分子構造は、下記一般式 (E 4) で表される分子構造になる。ここで、一般式 (E 4) 中の 2 つの * は、それぞれ独立に、一般式 (E 2) および一般式 (E 1) 中の 2 つの * に対応する。一般式 (E 3) 及び (E 4) 中、* は、それぞれ独立に、一分子中の他の原子との結合位置を

表す。

[0454] [化200]



(E3)



(E4)

[0455] 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、フランニル基は環形成炭素数4である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

[0456] 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。

[0457] ・本明細書における一般式中における各置換基についての説明（各置換基の説明）

本明細書におけるアリール基（芳香族炭化水素基と称する場合がある。）は、例えば、アリール基 $S u b_1$ であり、アリール基 $S u b_1$ は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、フルオレニル基、ピレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾ [a] アントリル基、ベンゾ [c] フェナントリル基、トリフェニレニル基、ベンゾ [k] フルオランテニル基、ベンゾ [g] クリセニル基、ベンゾ [b] トリフェニレニル基、ピセニル基、及びペリレニル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。

[0458] 本明細書におけるアリール基 $S u b_1$ としては、環形成炭素数が、6～30であることが好ましく、6～20であることがより好ましく、6～14であることがさらに好ましく、6～12であることがよりさらに好ましい。上記アリール基 $S u b_1$ の中でもフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、ターフェニル基、及びフルオレニル基が好ましい。1-フルオレニル基、2-フルオレニル基、3-フルオレニル基及び4-フルオレニル基については、9位の炭素原子に、後述する本明細書における置換もしくは無置換のアルキル基 $S u b_3$ や、置換もしくは無置換のアリール基 $S u b_1$ が置換されていることが好ましい。

[0459] 本明細書におけるヘテロアリール基（複素環基、ヘテロ芳香族環基、または芳香族複素環基と称する場合がある。）は、例えば、複素環基 $S u b_2$ である。複素環基 $S u b_2$ は、ヘテロ原子として、窒素、硫黄、酸素、ケイ素、セレン原子、及びゲルマニウム原子からなる群から選択される少なくともいずれ

れかの原子を含む基である。複素環基 $S u b_2$ は、ヘテロ原子として、窒素、硫黄、及び酸素からなる群から選択される少なくともいずれかの原子を含む基であることが好ましい。

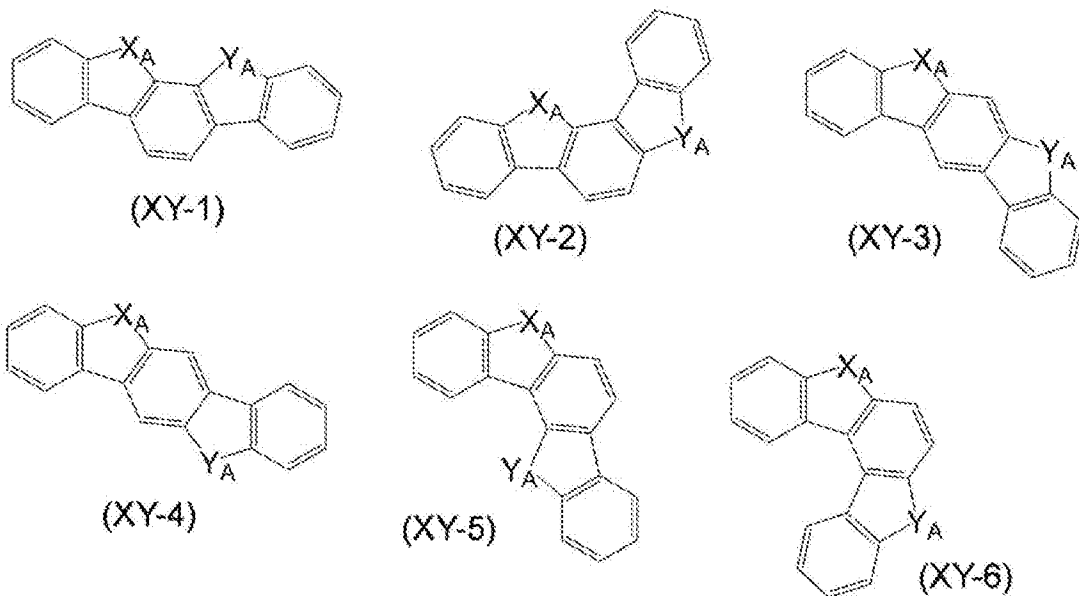
[0460] 本明細書における複素環基 $S u b_2$ は、例えば、ピリジル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリニル基、ナフチリジニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾピリジニル基、ベンズトリアゾリル基、カルバゾリル基、フリル基、チエニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサジアゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ピペリジニル基、ピロリジニル基、ピペラジニル基、モルホリル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、及びフェノキサジニル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。

[0461] 本明細書における複素環基 $S u b_2$ としては、環形成原子数が、5~30であることが好ましく、5~20であることがより好ましく、5~14であることがさらに好ましい。上記複素環基 $S u b_2$ の中でも1-ジベンゾフラニル基、2-ジベンゾフラニル基、3-ジベンゾフラニル基、4-ジベンゾフラニル基、1-ジベンゾチエニル基、2-ジベンゾチエニル基、3-ジベンゾチエニル基、4-ジベンゾチエニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、及び9-カルバゾリル基がさらにより好ましい。1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基及び4-カルバゾリル基については、9位の窒素原子に、本明細書における置換もしくは無置換のアリール基 $S u b_1$ や、置換もしくは無

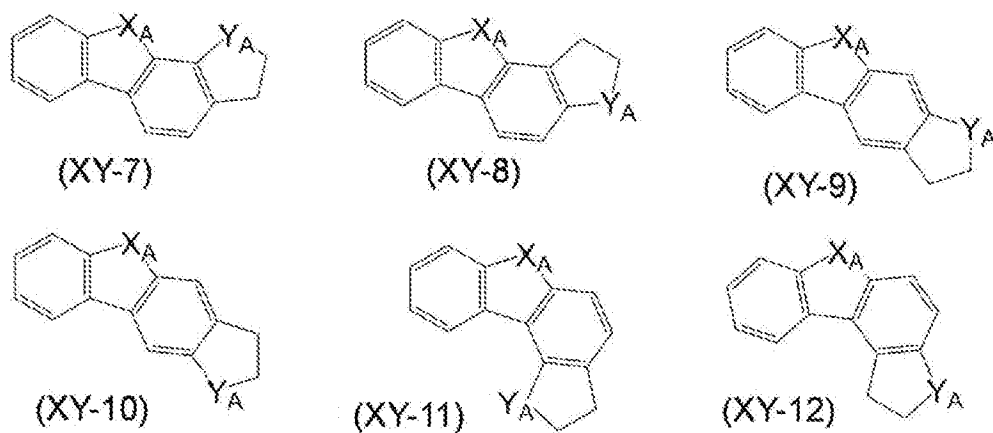
置換の複素環基 $S u b_2$ が置換していることが好ましい。

[0462] また、本明細書において、複素環基 $S u b_2$ 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。

[0463] [化201]

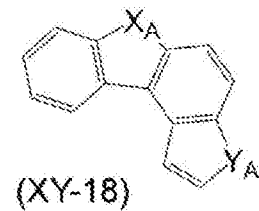
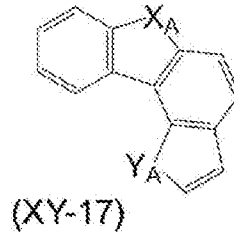
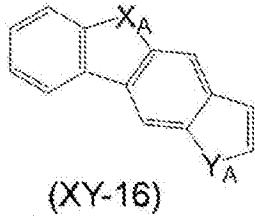
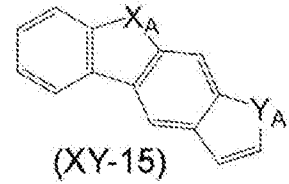
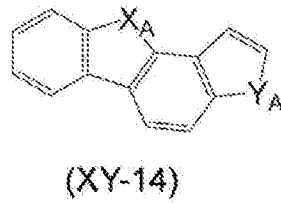
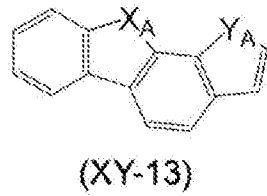


[0464] [化202]



[0465]

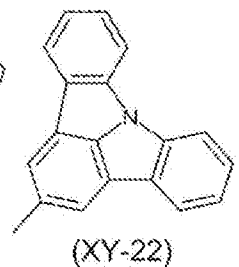
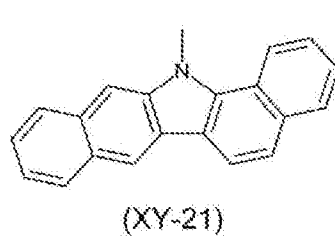
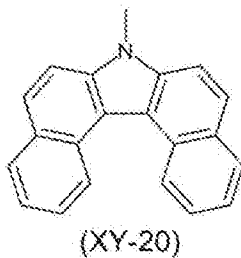
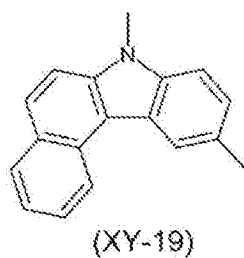
[化203]



[0466] 前記一般式 (XY-1) ~ (XY-18) において、 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。

[0467] また、本明細書において、複素環基 Sub_2 は、例えば、下記一般式 (XY-19) ~ (XY-22) で表される基であってもよい。また、結合手の位置も適宜変更され得る。

[0468] [化204]



[0469] 本明細書におけるアルキル基は、直鎖のアルキル基、分岐鎖のアルキル基または環状のアルキル基のいずれであってもよい。

本明細書におけるアルキル基は、例えば、アルキル基 Sub_3 である。

本明細書における直鎖のアルキル基は、例えば、直鎖のアルキル基 Sub_3 である。

₁である。

本明細書における分岐鎖のアルキル基は、例えば、分岐鎖のアルキル基 $S u b_{32}$ である。

本明細書における環状のアルキル基は、例えば、環状のアルキル基 $S u b_{33}$ である。

アルキル基 $S u b_{3}$ は、例えば、直鎖のアルキル基 $S u b_{31}$ 、分岐鎖のアルキル基 $S u b_{32}$ 、及び環状のアルキル基 $S u b_{33}$ 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。

[0470] 直鎖のアルキル基 $S u b_{31}$ または分岐鎖のアルキル基 $S u b_{32}$ は、例えば、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、*n*-ノニル基、*n*-デシル基、*n*-ウンデシル基、*n*-ドデシル基、*n*-トリデシル基、*n*-テトラデシル基、*n*-ペンタデシル基、*n*-ヘキサデシル基、*n*-ヘプタデシル基、*n*-オクタデシル基、ネオペンチル基、アミル基、イソアミル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、及び3-メチルペンチル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。

[0471] 本明細書における直鎖のアルキル基 $S u b_{31}$ または分岐鎖のアルキル基 $S u b_{32}$ の炭素数は、1~30であることが好ましく、1~20であることがより好ましく、1~10であることがさらに好ましく、1~6であることがよりさらに好ましい。上記直鎖のアルキル基 $S u b_{31}$ または分岐鎖のアルキル基 $S u b_{32}$ としては、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、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、アミル基、イソアミル基、及びネオペンチル基がさらにより好ましい。

[0472] 本明細書における環状のアルキル基 $S u b_{33}$ は、例えば、シクロアルキル基 $S u b_{331}$ である。

[0473] 本明細書におけるシクロアルキル基 $Su b_{331}$ は、例えば、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、4-メチルシクロヘキシル基、アダマンチル基、及びノルボルニル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。シクロアルキル基 $Su b_{331}$ の環形成炭素数は、3~30であることが好ましく、3~20であることがより好ましく、3~10であることがさらに好ましく、5~8であることがよりさらに好ましい。シクロアルキル基 $Su b_{331}$ の中でも、シクロペンチル基やシクロヘキシル基がさらにより好ましい。

[0474] 本明細書におけるハロゲン化アルキル基は、例えば、ハロゲン化アルキル基 $Su b_4$ であり、ハロゲン化アルキル基 $Su b_4$ は、例えば、アルキル基 $Su b_3$ 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アルキル基である。

[0475] 本明細書におけるハロゲン化アルキル基 $Su b_4$ は、例えば、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基、トリフルオロエチル基、及びペンタフルオロエチル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。

[0476] 本明細書における置換シリル基は、例えば、置換シリル基 $Su b_5$ であり、置換シリル基 $Su b_5$ は、例えば、アルキルシリル基 $Su b_{51}$ 及びアリールシリル基 $Su b_{52}$ 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。

[0477] 本明細書におけるアルキルシリル基 $Su b_{51}$ は、例えば、上記アルキル基 $Su b_3$ を有するトリアルキルシリル基 $Su b_{511}$ である。

トリアルキルシリル基 $Su b_{511}$ は、例えば、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリー-n-ブチルシリル基、トリー-n-オクチルシリル基、トリーソブチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルイソプロピルシリル基、ジメチル-n-プロピルシリル基、ジメチル-n-ブチルシリル基、ジメチル-t-ブチルシリル基、ジエチルイソプロピルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、及びトリーソプロピルシリル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。トリアル

キルシリル基 $S u b_{511}$ における3つのアルキル基 $S u b_3$ は、互いに同一でも異なってもよい。

[0478] 本明細書におけるアリールシリル基 $S u b_{52}$ は、例えば、ジアルキルアリールシリル基 $S u b_{521}$ 、アルキルジアアリールシリル基 $S u b_{522}$ 、及びトリアアリールシリル基 $S u b_{523}$ 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。

[0479] ジアルキルアリールシリル基 $S u b_{521}$ は、例えば、上記アルキル基 $S u b_3$ を2つ有し、上記アリール基 $S u b_1$ を1つ有するジアルキルアリールシリル基である。ジアルキルアリールシリル基 $S u b_{521}$ の炭素数は、8~30であることが好ましい。

[0480] アルキルジアアリールシリル基 $S u b_{522}$ は、例えば、上記アルキル基 $S u b_3$ を1つ有し、上記アリール基 $S u b_1$ を2つ有するアルキルジアアリールシリル基である。アルキルジアアリールシリル基 $S u b_{522}$ の炭素数は、13~30であることが好ましい。

[0481] トリアアリールシリル基 $S u b_{523}$ は、例えば、上記アリール基 $S u b_1$ を3つ有するトリアアリールシリル基である。トリアアリールシリル基 $S u b_{523}$ の炭素数は、18~30であることが好ましい。

[0482] 本明細書における置換もしくは無置換のアルキルスルホニル基は、例えば、アルキルスルホニル基 $S u b_6$ であり、アルキルスルホニル基 $S u b_6$ は、 $-S O_2 R_w$ で表される。 $-S O_2 R_w$ における R_w は、置換もしくは無置換の上記アルキル基 $S u b_3$ を表す。

[0483] 本明細書におけるアラルキル基（アリールアルキル基と称する場合がある）は、例えば、アラルキル基 $S u b_7$ である。アラルキル基 $S u b_7$ におけるアリール基は、例えば、上記アリール基 $S u b_1$ 及び上記ヘテロアリール基 $S u b_2$ の少なくとも一方を含む。

[0484] 本明細書におけるアラルキル基 $S u b_7$ は、アリール基 $S u b_1$ を有する基であることが好ましく、 $-Z_3-Z_4$ と表される。この Z_3 は、例えば、上記アルキル基 $S u b_3$ に対応するアルキレン基等である。この Z_4 は、例えば、上

記アリール基 $S u b_1$ である。このアラルキル基 $S u b_7$ は、アリール部分が炭素数 6 ~ 30 (好ましくは 6 ~ 20、より好ましくは 6 ~ 12)、アルキル部分が炭素数 1 ~ 30 (好ましくは 1 ~ 20、より好ましくは 1 ~ 10、さらに好ましくは 1 ~ 6) であることが好ましい。このアラルキル基 $S u b_7$ は、例えば、ベンジル基、2-フェニルプロパン-2-イル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-t-ブチル基、 α -ナフチルメチル基、1- α -ナフチルエチル基、2- α -ナフチルエチル基、1- α -ナフチルイソプロピル基、2- α -ナフチルイソプロピル基、 β -ナフチルメチル基、1- β -ナフチルエチル基、2- β -ナフチルエチル基、1- β -ナフチルイソプロピル基、及び 2- β -ナフチルイソプロピル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。

[0485] 本明細書におけるアルコキシ基は、例えば、アルコキシ基 $S u b_8$ であり、アルコキシ基 $S u b_8$ は、 $-O Z_1$ と表される。この Z_1 は、例えば、上記アルキル基 $S u b_3$ である。アルコキシ基 $S u b_8$ は、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペンチルオキシ基、及びヘキシルオキシ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。アルコキシ基 $S u b_8$ の炭素数は、1 ~ 30 であることが好ましく、1 ~ 20 であることがより好ましい。

[0486] 本明細書におけるハロゲン化アルコキシ基は、例えば、ハロゲン化アルコキシ基 $S u b_9$ であり、ハロゲン化アルコキシ基 $S u b_9$ は、例えば、上記アルコキシ基 $S u b_8$ 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アルコキシ基である。

[0487] 本明細書におけるアリールオキシ基 (アリールアルコキシ基と称する場合がある) は、例えば、アリールアルコキシ基 $S u b_{10}$ である。アリールアルコキシ基 $S u b_{10}$ におけるアリール基は、アリール基 $S u b_1$ 及びヘテロアリール基 $S u b_2$ の少なくとも一方を含む。

[0488] 本明細書におけるアリアルアルコキシ基 $S u b_{10}$ は、 $-O Z_2$ と表される。この Z_2 のは、例えば、アリアル基 $S u b_1$ またはヘテロアリアル基 $S u b_2$ である。アリアルアルコキシ基 $S u b_{10}$ の環形成炭素数は、6～30 であることが好ましく、6～20 であることがより好ましい。このアリアルアルコキシ基 $S u b_{10}$ としては、例えば、フェノキシ基が挙げられる。

[0489] 本明細書における置換アミノ基は、例えば、置換アミノ基 $S u b_{11}$ であり、置換アミノ基 $S u b_{11}$ は、例えば、アリアルアミノ基 $S u b_{111}$ 及びアルキルアミノ基 $S u b_{112}$ 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。

アリアルアミノ基 $S u b_{111}$ は、 $-N H R_{v1}$ 、または $-N (R_{v1})_2$ と表される。この R_{v1} は、例えば、アリアル基 $S u b_1$ である。 $-N (R_{v1})_2$ における2つの R_{v1} は、同一または異なる。

アルキルアミノ基 $S u b_{112}$ は、 $-N H R_{v2}$ 、または $-N (R_{v2})_2$ と表される。この R_{v2} は、例えば、アルキル基 $S u b_3$ である。 $-N (R_{v2})_2$ における2つの R_{v2} は、同一または異なる。

[0490] 本明細書におけるアルケニル基は、例えば、アルケニル基 $S u b_{12}$ であり、アルケニル基 $S u b_{12}$ は、直鎖または分岐鎖のいずれかであり、例えば、ビニル基、プロペニル基、ブテニル基、オレイル基、エイコサペンタエニル基、ドコサヘキサエニル基、スチリル基、2, 2-ジフェニルビニル基、1, 2, 2-トリフェニルビニル基、及び2-フェニル-2-プロペニル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。

[0491] 本明細書におけるアルキニル基は、例えば、アルキニル基 $S u b_{13}$ であり、アルキニル基 $S u b_{13}$ は、直鎖または分岐鎖のいずれであってもよく、例えば、エチニル、プロピニル、および2-フェニルエチニル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。

[0492] 本明細書におけるアルキルチオ基は、例えば、アルキルチオ基 $S u b_{14}$ である。

アルキルチオ基 $S u b_{14}$ は、 $-S R_{v3}$ と表される。この R_{v3} は、例えば、

アルキル基 $S u b_3$ である。アルキルチオ基 $S u b_{14}$ の炭素数は、1～30であることが好ましく、1～20であることがより好ましい。

本明細書におけるアリールチオ基は、例えば、アリールチオ基 $S u b_{15}$ である。

アリールチオ基 $S u b_{15}$ は、 $-S R_{V4}$ と表される。この R_{V4} は、例えば、アリール基 $S u b_1$ である。アリールチオ基 $S u b_{15}$ の環形成炭素数は、6～30であることが好ましく、6～20であることがより好ましい。

[0493] 本明細書におけるハロゲン原子としては、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、フッ素原子が好ましい。

[0494] 本明細書における置換ホスフィノ基は、例えば、置換ホスフィノ基 $S u b_{16}$ であり、置換ホスフィノ基 $S u b_{16}$ は、例えば、フェニルホスファニル基である。

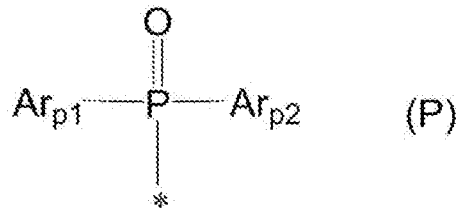
[0495] 本明細書におけるアリールカルボニル基は、例えば、アリールカルボニル基 $S u b_{17}$ であり、アリールカルボニル基 $S u b_{17}$ は、 $-C O Y'$ と表される。この Y' は、例えば、アリール基 $S u b_1$ である。本明細書におけるアリールカルボニル基 $S u b_{17}$ は、例えば、フェニルカルボニル基、ジフェニルカルボニル基、ナフチルカルボニル基、及びトリフェニルカルボニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

[0496] 本明細書におけるアシル基は、例えば、アシル基 $S u b_{18}$ であり、アシル基 $S u b_{18}$ は、 $-C O R'$ と表される。この R' は、例えば、アルキル基 $S u b_3$ である。本明細書におけるアシル基 $S u b_{18}$ は、例えば、アセチル基及びプロピオニル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。

[0497] 本明細書における置換ホスホリル基は、例えば、置換ホスホリル基 $S u b_{19}$ であり、置換ホスホリル基 $S u b_{19}$ は、下記一般式 (P) で表される。

[0498]

[化205]



[0499] 前記一般式 (P) において、 Ar_{p1} 及び Ar_{p2} は、上記アルキル基 Sub_3 、及び上記アリール基 Sub_1 からなる群から選択されるいずれかの置換基である。

[0500] 本明細書におけるエステル基は、例えば、エステル基 Sub_{20} であり、エステル基 Sub_{20} は、例えば、アルキルエステル基である。

本明細書におけるアルキルエステル基は、例えば、アルキルエステル基 Sub_{201} であり、アルキルエステル基 Sub_{201} は、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}^E$ で表される。 R^E は、例えば、置換もしくは無置換の上記アルキル基 Sub_3 である。

[0501] 本明細書におけるシロキサニル基は、例えば、シロキサニル基 Sub_{21} であり、シロキサニル基 Sub_{21} は、エーテル結合を介したケイ素化合物基である。シロキサニル基 Sub_{21} は、例えば、トリメチルシロキサニル基である。

[0502] 本明細書におけるカルバモイル基は、 $-\text{CONH}_2$ で表される。

本明細書における置換のカルバモイル基は、例えば、カルバモイル基 Sub_{22} であり、カルバモイル基 Sub_{22} は、 $-\text{CONH}-\text{Ar}^C$ 、または $-\text{CONH}-\text{R}^C$ で表される。 Ar^C は、例えば、置換もしくは無置換の上記アリール基 Sub_1 (好ましくは環形成炭素数 6~10) 及び上記ヘテロアリール基 Sub_2 (好ましくは環形成原子数 5~14) 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。 Ar^C は、アリール基 Sub_1 とヘテロアリール基 Sub_2 とが結合した基であってもよい。

R^C は、例えば、置換もしくは無置換の上記アルキル基 Sub_3 (好ましくは炭素数 1~6) である。

- [0503] 本明細書において、「環形成炭素」とは飽和環、不飽和環、または芳香環を構成する炭素原子を意味する。「環形成原子」とはヘテロ環（飽和環、不飽和環、及び芳香環を含む）を構成する炭素原子及びヘテロ原子を意味する。
- [0504] また、本明細書において、水素原子とは、中性子数の異なる同位体、すなわち、軽水素（Protium）、重水素（Deuterium）、三重水素（Tritium）を包含する。
- [0505] 以下、アルキル基 $S u b_3$ とは、「各置換基の説明」で説明した直鎖のアルキル基 $S u b_{31}$ 、分岐鎖のアルキル基 $S u b_{32}$ 、及び環状のアルキル基 $S u b_{33}$ のいずれか1以上の基を意味する。
- 同様に、置換シリル基 $S u b_5$ とは、アルキルシリル基 $S u b_{51}$ 及びアリーールシリル基 $S u b_{52}$ のいずれか1以上の基を意味する。
- 同様に、置換アミノ基 $S u b_{11}$ とは、アリーールアミノ基 $S u b_{111}$ 及びアルキルアミノ基 $S u b_{112}$ のいずれか1以上の基を意味する。
- [0506] 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置換基としては、例えば置換基 R_{F1} であり、置換基 R_{F1} は、アリーール基 $S u b_1$ 、ヘテロアリーール基 $S u b_2$ 、アルキル基 $S u b_3$ 、ハロゲン化アルキル基 $S u b_4$ 、置換シリル基 $S u b_5$ 、アルキルスルホニル基 $S u b_6$ 、アラルキル基 $S u b_7$ 、アルコキシ基 $S u b_8$ 、ハロゲン化アルコキシ基 $S u b_9$ 、アリーールアルコキシ基 $S u b_{10}$ 、置換アミノ基 $S u b_{11}$ 、アルケニル基 $S u b_{12}$ 、アルキニル基 $S u b_{13}$ 、アルキルチオ基 $S u b_{14}$ 、アリーールチオ基 $S u b_{15}$ 、置換ホスフィノ基 $S u b_{16}$ 、アリーールカルボニル基 $S u b_{17}$ 、アシル基 $S u b_{18}$ 、置換ホスホリル基 $S u b_{19}$ 、エステル基 $S u b_{20}$ 、シロキサニル基 $S u b_{21}$ 、カルバモイル基 $S u b_{22}$ 、無置換のアミノ基、無置換のシリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシ基、チオール基、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である。
- [0507] 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置換基 R_{F1} は、ジアリーールホウ素基 ($A r_{B1} A r_{B2} B-$) であってもよい。このA

r_{B1} 及び $A r_{B2}$ の例としては、上述のアリール基 $S u b_1$ が挙げられる。 $A r_{B1} A r_{B2} B-$ における $A r_{B1}$ 及び $A r_{B2}$ は同一または異なる。

[0508] 置換基 R_{F1} の具体例及び好ましい基としては、「各置換基の説明」中の置換基（例えば、アリール基 $S u b_1$ 、ヘテロアリール基 $S u b_2$ 、アルキル基 $S u b_3$ 、ハロゲン化アルキル基 $S u b_4$ 、置換シリル基 $S u b_5$ 、アルキルスルホニル基 $S u b_6$ 、アラルキル基 $S u b_7$ 、アルコキシ基 $S u b_8$ 、ハロゲン化アルコキシ基 $S u b_9$ 、アリールアルコキシ基 $S u b_{10}$ 、置換アミノ基 $S u b_{11}$ 、アルケニル基 $S u b_{12}$ 、アルキニル基 $S u b_{13}$ 、アルキルチオ基 $S u b_{14}$ 、アリールチオ基 $S u b_{15}$ 、置換ホスフィノ基 $S u b_{16}$ 、アリールカルボニル基 $S u b_{17}$ 、アシル基 $S u b_{18}$ 、置換ホスホリル基 $S u b_{19}$ 、エステル基 $S u b_{20}$ 、シロキサニル基 $S u b_{21}$ 、及びカルバモイル基 $S u b_{22}$ ）の具体例及び好ましい基と同様の基が挙げられる。

[0509] 「置換もしくは無置換の」という場合における置換基 R_{F1} は、アリール基 $S u b_1$ 、ヘテロアリール基 $S u b_2$ 、アルキル基 $S u b_3$ 、ハロゲン化アルキル基 $S u b_4$ 、置換シリル基 $S u b_5$ 、アルキルスルホニル基 $S u b_6$ 、アラルキル基 $S u b_7$ 、アルコキシ基 $S u b_8$ 、ハロゲン化アルコキシ基 $S u b_9$ 、アリールアルコキシ基 $S u b_{10}$ 、置換アミノ基 $S u b_{11}$ 、アルケニル基 $S u b_{12}$ 、アルキニル基 $S u b_{13}$ 、アルキルチオ基 $S u b_{14}$ 、アリールチオ基 $S u b_{15}$ 、置換ホスフィノ基 $S u b_{16}$ 、アリールカルボニル基 $S u b_{17}$ 、アシル基 $S u b_{18}$ 、置換ホスホリル基 $S u b_{19}$ 、エステル基 $S u b_{20}$ 、シロキサニル基 $S u b_{21}$ 、カルバモイル基 $S u b_{22}$ 、無置換のアミノ基、無置換のシリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシ基、チオール基、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（以下、置換基 R_{F2} と称する）によってさらに置換されてもよい。また、これらの置換基 R_{F2} は複数が互いに結合して環を形成してもよい。

[0510] 「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 R_{F1} 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。

[0511] なお、本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数 $X X \sim Y Y$ の Z

Z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 R_{F1} の炭素数は含めない。

[0512] 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 R_{F1} の原子数は含めない。

[0513] 本明細書において説明する化合物、またはその部分構造において、「置換もしくは無置換の」という場合についても、前記と同様である。

[0514] 本明細書において、置換基同士が互いに結合して環が構築される場合、当該環の構造は、飽和環、不飽和環、芳香族炭化水素環、または複素環である。

[0515] 本明細書において、連結基における芳香族炭化水素基としては、例えば、上述した一価のアリール基 $Su b_1$ から、1つ以上の原子を除いて得られる二価以上の基が挙げられる。

本明細書において、連結基における複素環基としては、例えば、上述した一価のヘテロアリール基 $Su b_2$ から、1つ以上の原子を除いて得られる二価以上の基が挙げられる。

実施例

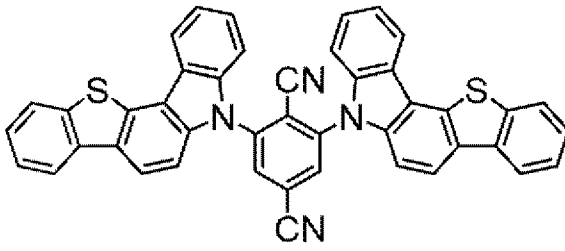
[0516] 以下、本発明に係る実施例を説明する。本発明はこれらの実施例によって何ら限定されない。

[0517] <化合物>

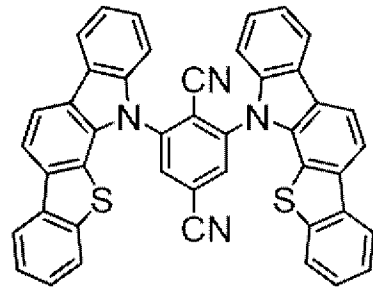
有機EL素子の製造に用いた、一般式(1)で表される化合物を以下に示す。

[0518]

[化206]

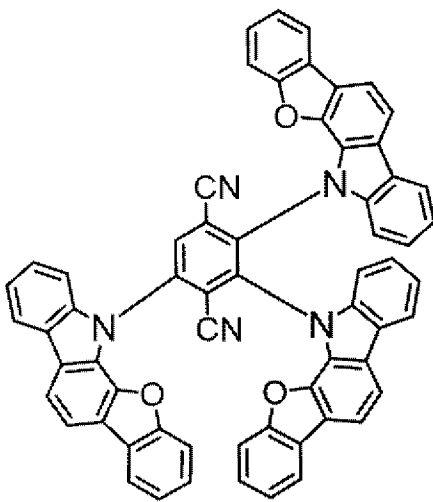


化合物2

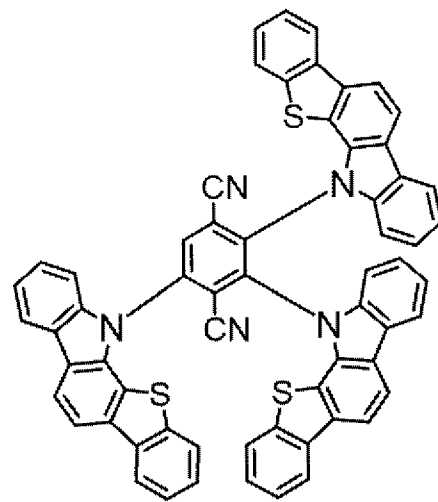


化合物3

[0519] [化207]



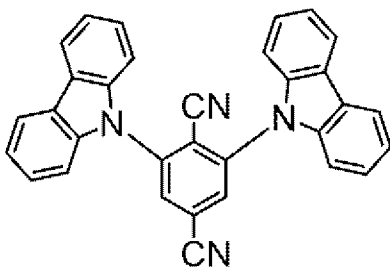
化合物28



化合物29

[0520] 比較例の有機EL素子の製造に用いた化合物の構造を以下に示す。

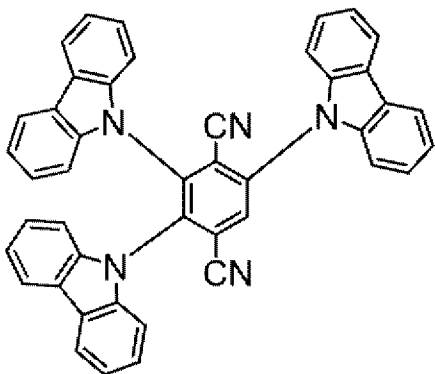
[0521] [化208]



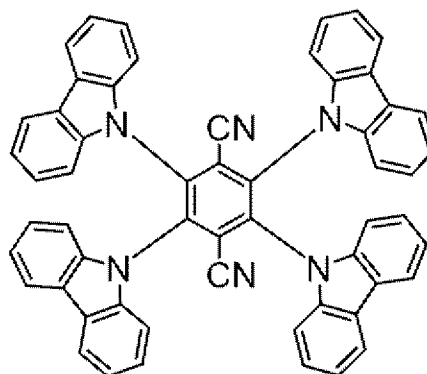
比較化合物1
(Ref-1)

[0522]

[化209]



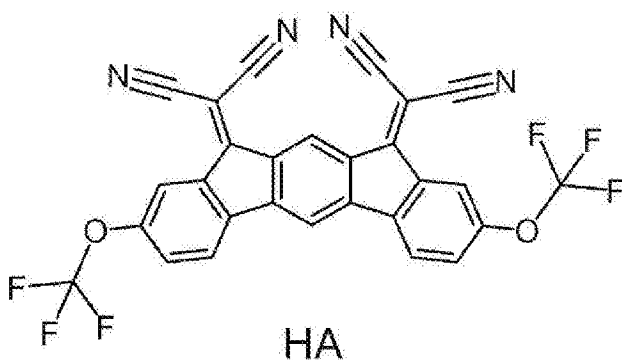
Ref-2



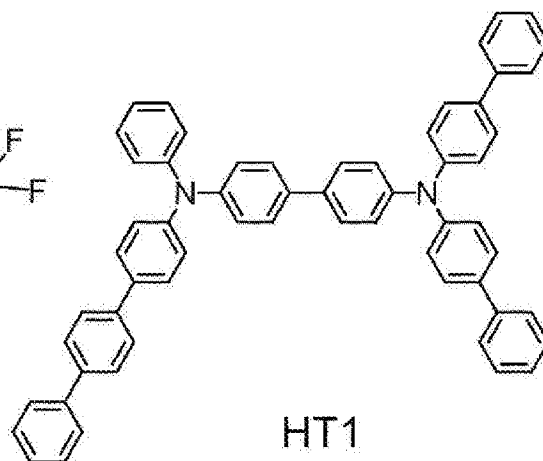
Ref-3

[0523] 実施例及び比較例の有機EL素子の製造に用いた、他の化合物の構造を以下に示す。

[0524] [化210]

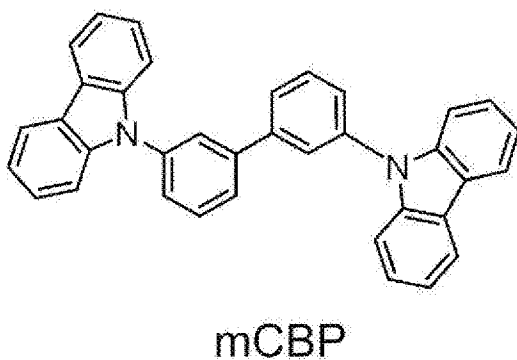


HA

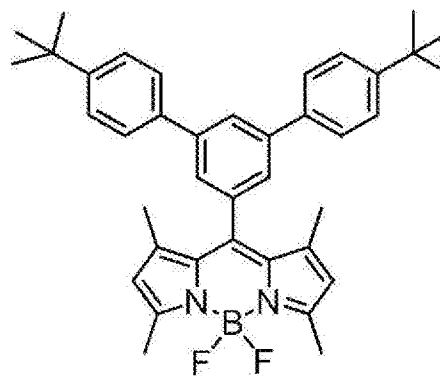


HT1

[0525] [化211]



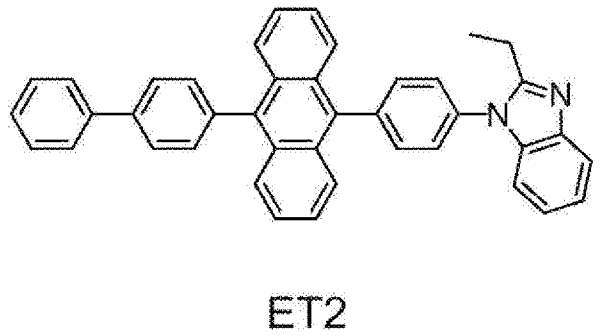
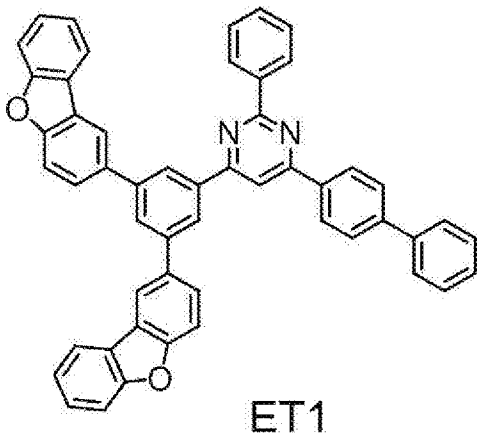
mCBP



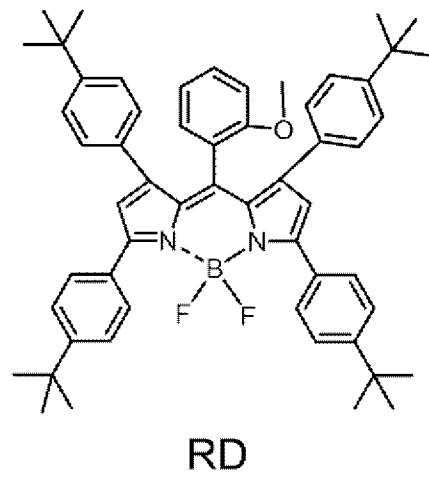
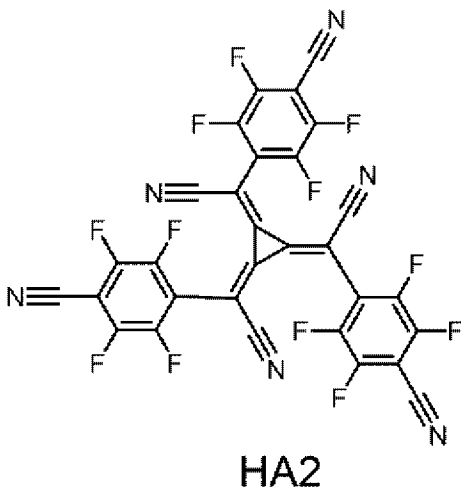
GD

[0526]

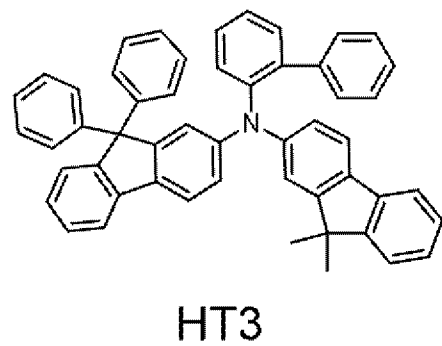
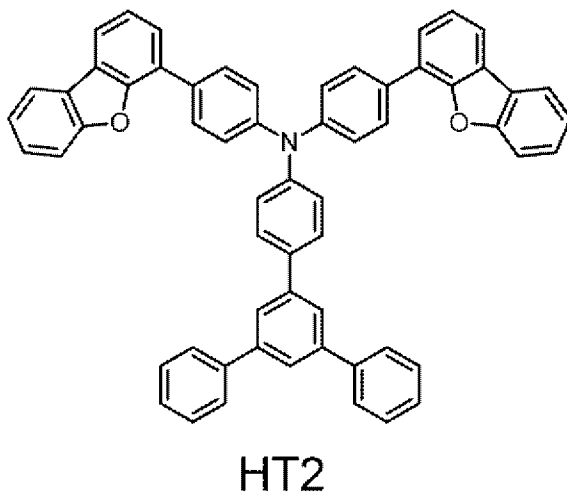
[化212]



[0527] [化213]

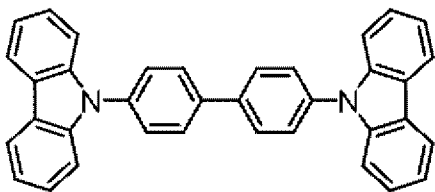


[0528] [化214]

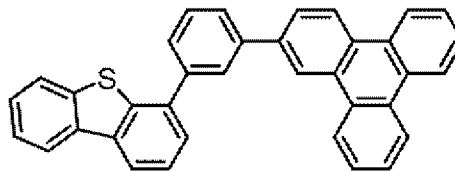


[0529]

[化215]



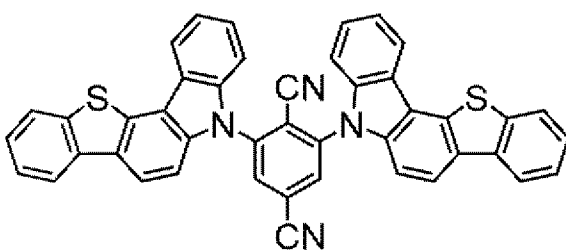
CBP



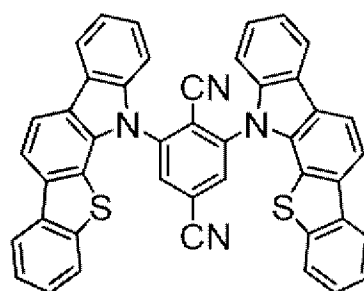
H1

[0530] 化合物の評価に用いた、一般式(1)で表される化合物を以下に示す。

[0531] [化216]

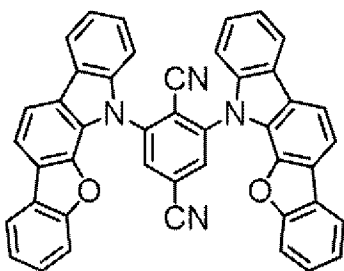


化合物2

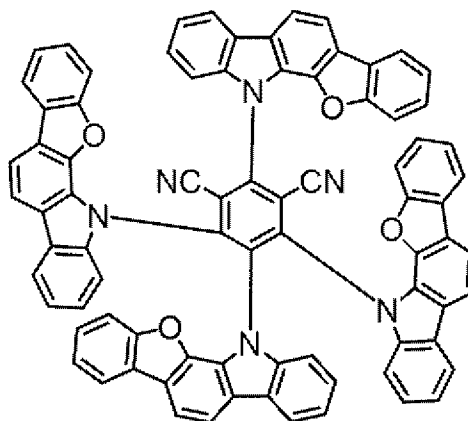


化合物3

[0532] [化217]



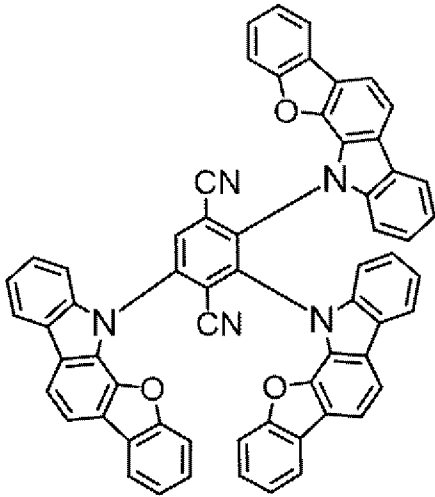
化合物26



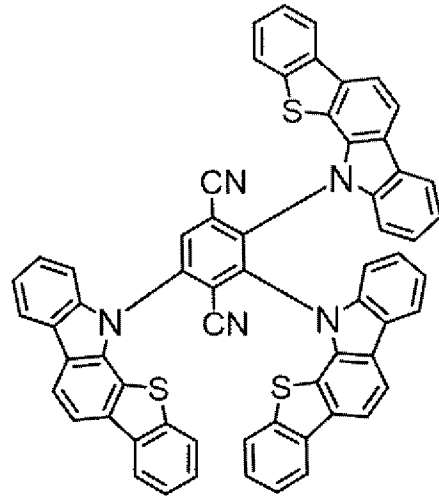
化合物27

[0533]

[化218]



化合物28



化合物29

[0534] <有機EL素子の評価>

化合物2、化合物3、化合物28～29及びRef-1～Ref-3を用いて、有機EL素子の評価を行った。

[0535] <有機EL素子の作製1>

〔実施例1A〕

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HAを蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層を形成した。

次に、正孔注入層上に、化合物HT1を蒸着し、正孔注入層上に膜厚110nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物mCBPを蒸着し、膜厚10nmの第二正孔輸送層を形成した。

次に、この第二正孔輸送層上に、第一の化合物としての化合物2と、第二の化合物としての化合物GDと、第三の化合物としての化合物mCBPとを

共蒸着し、膜厚 25 nm の第一の有機層としての発光層を形成した。発光層における化合物 2 の濃度を 25 質量%とし、化合物 GD の濃度を 1 質量%とし、化合物 mCBP の濃度を 74 質量%とした。

次に、この発光層上に、化合物 ET1 を蒸着し、膜厚 5 nm の第一電子輸送層を形成した。

次に、この第一電子輸送層上に、化合物 ET2 を蒸着し、膜厚 50 nm の第二電子輸送層を形成した。

次に、この第二電子輸送層上に、フッ化リチウム (LiF) を蒸着し、膜厚 1 nm の電子注入性電極 (陰極) を形成した。

そして、この電子注入性電極上に、金属アルミニウム (Al) を蒸着し、膜厚 80 nm の金属 Al 陰極を形成した。

実施例 1 A の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HA(5)/HT1(110)/mCBP(10)/mCBP:化合物2:GD (25,74%:25%:1%) /ET1(5)/ET2(50)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚 (単位: nm) を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字 (74%:25%:1%) は、発光層における第三の化合物、第一の化合物、及び第二の化合物の割合 (質量%) を示す。以下、同様の表記とする。

[0536] (実施例 2 A)

実施例 2 A の有機 EL 素子は、実施例 1 A の発光層における化合物 2 に代えて、化合物 3 を用いたこと以外、実施例 1 A と同様にして作製した。

実施例 2 A の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HA(5)/HT1(110)/mCBP(10)/mCBP:化合物3:GD (25,74%:25%:1%) /ET1(5)/ET2(50)/LiF(1)/Al(80)

[0537] (比較例 1 A)

比較例 1 A の有機 EL 素子は、実施例 1 A の発光層における化合物 2 に代えて、比較化合物 1 (Ref-1) を用いたこと以外、実施例 1 A と同様にして作製した。

比較例 1 A の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HA(5)/HT1(110)/mCBP(10)/mCBP:比較化合物1(Ref-1):GD (25,74%:25%:1%) /ET1(5)/ET2(50)/LiF(1)/Al(80)

[0538] <評価 1 >

実施例 1 A ~ 2 A 及び比較例 1 A で作製した有機 EL 素子について、以下の評価を行った。評価結果を表 7 に示す。

[0539] ・寿命 LT95

分光放射輝度計 CS-2000 (コニカミノルタ株式会社製) を用いて、電流密度が 50 mA/cm^2 となるように素子に電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が 95% となるまでの時間 (単位: h) を測定した。

以下では、初期輝度に対して輝度が 95% となるまでの時間を「寿命 LT95 (h)」と称する。

[0540] 下記数式 (数 100) を用いて、比較例 1 A の「寿命 LT95 (h)」を 100 としたときの実施例 1 A の「寿命 LT95 (h)」を「寿命 LT95 (相対値: %)」として求めた。実施例 2 A の「寿命 LT95 (相対値: %)」についても同様の方法で求めた。

実施例 1 A の寿命 LT95 (相対値: %) = (実施例 1 A の寿命 LT95 (h) / 比較例 1 A の寿命 LT95 (h)) × 100 (数 100)

[0541] ・主ピーク波長 λ_p

分光放射輝度計 CS-2000 (コニカミノルタ株式会社製) を用いて、電流密度が 10 mA/cm^2 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計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、主ピーク波長 λ_p (単位: nm) を算出した。

[0542]

[表7]

	発光層			評価	
	第一の化合物	第二の化合物	第三の化合物	λ_p [nm]	LT95 (相対値:%)
実施例1A	化合物2	GD	mCBP	523	255
実施例2A	化合物3	GD	mCBP	522	824
比較例1A	比較化合物1	GD	mCBP	520	100

[0543] 実施例1A及び2Aの有機EL素子は、比較例1Aの有機EL素子に比べ、寿命が長くなった。

[0544] <有機EL素子の作製2>

[実施例1B]

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HAを蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層を形成した。

次に、正孔注入層上に、化合物HT1を蒸着し、正孔注入層上に膜厚110nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物mCBPを蒸着し、膜厚10nmの第二正孔輸送層を形成した。

次に、この第二正孔輸送層上に、第一の化合物としての化合物2と、第四の化合物としての化合物mCBPとを共蒸着し、膜厚25nmの第一の有機層としての発光層を形成した。発光層における化合物2の濃度を25質量%とし、化合物mCBPの濃度を75質量%とした。

次に、この発光層上に、化合物ET1を蒸着し、膜厚5nmの第一電子輸送層を形成した。

次に、この第一電子輸送層上に、化合物ET2を蒸着し、膜厚50nmの第二電子輸送層を形成した。

次に、この第二電子輸送層上に、フッ化リチウム(LiF)を蒸着し、膜厚1nmの電子注入性電極(陰極)を形成した。

そして、この電子注入性電極上に、金属アルミニウム(Al)を蒸着し、膜厚80nmの金属Al陰極を形成した。

実施例1Bの素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HA(5)/HT1(110)/mCBP(10)/mCBP:化合物2(25,75%:25%)/ET1(5)/ET2(50)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚(単位:nm)を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字(75%:25%)は、発光層における第四の化合物及び第一の化合物の割合(質量%)を示す。以下、同様の表記とする。

[0545] (実施例2B)

実施例2Bの有機EL素子は、実施例1Bの発光層における化合物2に代えて、化合物3を用いたこと以外、実施例1Bと同様にして作製した。

実施例2Bの素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HA(5)/HT1(110)/mCBP(10)/mCBP:化合物3(25,75%:25%)/ET1(5)/ET2(50)/LiF(1)/Al(80)

[0546] (比較例1B)

比較例1Bの有機EL素子は、実施例1Bの発光層における化合物2に代えて、比較化合物1(Ref-1)を用いたこと以外、実施例1Bと同様にして作製した。

比較例1Bの素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HA(5)/HT1(110)/mCBP(10)/mCBP:比較化合物1(Ref-1)(25,75%:25%)/ET1(5)/ET2(50)/LiF(1)/Al(80)

[0547] <評価2>

実施例1B～2B及び比較例1Bで作製した有機EL素子について、実施例1Aと同様の評価を行った。評価結果を表8に示す。

寿命LT95については、実施例1Aと同様の方法で、比較例1Bの「寿命LT95(h)」を100としたときの実施例1Bの「寿命LT95(h)」を「寿命LT95(相対値:%)」として求めた。実施例2Bの「寿命LT95(相対値:%)」についても同様の方法で求めた。

[0548] [表8]

	発光層		評価	
	第一の化合物	第四の化合物	λ_p [nm]	LT95 (相対値:%)
実施例1B	化合物2	mCBP	538	492
実施例2B	化合物3	mCBP	539	1780
比較例1B	比較化合物1	mCBP	509	100

[0549] 実施例1B及び2Bの有機EL素子は、比較例1Bの有機EL素子に比べ、寿命が長くなった。

[0550] <有機EL素子の作製3>

[実施例1C]

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HT1と化合物HA2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HT1の濃度を97質量%とし、化合物HA2の濃度を3質量%とした。

次に、正孔注入層上に、化合物HT1を蒸着し、正孔注入層上に膜厚110nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物HT2を蒸着し、膜厚5nmの第二正孔輸送層を形成した。

次に、この第二正孔輸送層上に、化合物CBPを蒸着し、膜厚5nmの電子障壁層を形成した。

次に、この電子障壁層上に、第一の化合物としての化合物28と、第四の化合物としての化合物H1とを共蒸着し、膜厚25nmの第一の有機層としての発光層を形成した。発光層における化合物28の濃度を50質量%とし、化合物H1の濃度を50質量%とした。

次に、この発光層上に、化合物ET1を蒸着し、膜厚5nmの第一電子輸送層を形成した。

次に、この第一電子輸送層上に、化合物ET2を蒸着し、膜厚50nmの第二電子輸送層を形成した。

次に、この第二電子輸送層上に、フッ化リチウム(LiF)を蒸着し、膜厚1nmの電子注入性電極(陰極)を形成した。

そして、この電子注入性電極上に、金属アルミニウム(Al)を蒸着し、膜厚80nmの金属Al陰極を形成した。

実施例1Cの素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HT1:HA2 (10, 97%:3%) /HT1(110)/HT2(5)/CBP(5)/H1:化合物28 (25, 50%:50%) /ET1(5)/ET2(50)/LiF(1)/Al(80)

[0551] (比較例1C)

比較例1Cの有機EL素子は、実施例1Cの発光層における化合物28を表9に記載の化合物に置き換えたこと以外、実施例1Cと同様にして作製した。

[0552] <評価3>

実施例1C及び比較例1Cで作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。結果を表9に示す。

[0553] ・駆動電圧

電流密度が10mA/cm²となるように陽極と陰極との間に通電したときの電圧(単位:V)を計測した。

次に、下記数式(数101)を用いて、比較例1Cの「駆動電圧(V)」を100としたときの実施例1Cの「駆動電圧(V)」を「駆動電圧(相対値:%)」として求めた。

$$\text{実施例1Cの駆動電圧(相対値:%)} = (\text{実施例1Cの駆動電圧(V)} / \text{比較例1Cの駆動電圧(V)}) \times 100 \quad (\text{数101})$$

[0554] ・寿命LT95

実施例1Aと同様の方法で、比較例1Cの「寿命LT95(h)」を100としたときの実施例1Cの「寿命LT95(h)」を「寿命LT95(相対値:%)」として求めた。

・主ピーク波長λ_p

実施例1Aと同様の方法で測定した。

[0555] [表9]

	発光層		評価		
	第一の化合物	第四の化合物	駆動電圧 (相対値:%)	LT95 (相対値:%)	λ _p [nm]
実施例1C	化合物28	H1	100	650	541
比較例1C	Ref-2	H1	100	100	555

[0556] 実施例1Cの有機EL素子は、比較例1Cの有機EL素子に比べ、寿命が大幅に改善した。

[0557] <有機EL素子の作製4>

〔実施例 1 D〕

25 mm×75 mm×1.1 mm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、130 nm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HT3と化合物HA2とを共蒸着し、膜厚10 nmの正孔注入層を形成した。正孔注入層における化合物HT3の濃度を97質量%とし、化合物HA2の濃度を3質量%とした。

次に、正孔注入層上に、化合物HT3を蒸着し、正孔注入層上に膜厚200 nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物HT2を蒸着し、膜厚10 nmの第二正孔輸送層を形成した。

次に、この第二正孔輸送層上に、第一の化合物としての化合物29と、第二の化合物としての化合物RDと、第三の化合物としての化合物CBPとを共蒸着し、膜厚25 nmの第一の有機層としての発光層を形成した。発光層における化合物29の濃度を25質量%とし、化合物RDの濃度を1質量%とし、化合物CBPの濃度を74質量%とした。

次に、この発光層上に、化合物ET1を蒸着し、膜厚10 nmの第一電子輸送層を形成した。

次に、この第一電子輸送層上に、化合物ET2を蒸着し、膜厚30 nmの第二電子輸送層を形成した。

次に、この第二電子輸送層上に、フッ化リチウム（LiF）を蒸着し、膜厚1 nmの電子注入性電極（陰極）を形成した。

そして、この電子注入性電極上に、金属アルミニウム（Al）を蒸着し、膜厚80 nmの金属Al陰極を形成した。

実施例 1 Dの素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

IT0(130)/HT3:HA2 (10, 97%:3%) /HT3(200)/HT2(10)/CBP:化合物29:RD (25, 74 %:25%, 1%) /ET1(10)/ET2(30)/LiF(1)/Al(80)

[0558] (比較例1D)

比較例1Dの有機EL素子は、実施例1Dの発光層における化合物29を表10に記載の化合物に置き換えたこと以外、実施例1Dと同様にして作製した。

[0559] <評価4>

実施例1D及び比較例1Dで作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。結果を表10に示す。

[0560] ・駆動電圧

実施例1Cと同様の方法で、比較例1Dの「駆動電圧(V)」を100としたときの実施例1Dの「駆動電圧(V)」を「駆動電圧(相対値:%)」として求めた。

[0561] ・寿命LT95

実施例1Aと同様の方法で、比較例1Dの「寿命LT95(h)」を100としたときの実施例1Dの「寿命LT95(h)」を「寿命LT95(相対値:%)」として求めた。

・主ピーク波長 λ_p

実施例1Aと同様の方法で測定した。

[0562] [表10]

	発光層			評価		
	第一の化合物	第二の化合物	第三の化合物	駆動電圧 (相対値:%)	LT95 (相対値:%)	λ_p [nm]
実施例1D	化合物29	RD	CBP	98	159	619
比較例1D	Ref-3	RD	CBP	100	100	621

[0563] 実施例1Dの有機EL素子は、比較例1Dの有機EL素子に比べ、駆動電圧が低下し、かつ寿命が長くなった。

[0564] <化合物の評価>

化合物の性質を測定する方法を以下に示す。

[0565] (遅延蛍光性)

・化合物2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2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。

前記化合物2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2について、D e l a y 発光（遅延発光）の量が P r o m p t 発光（即時発光）の量に対して5%以上あることが確認された。

具体的には、化合物2について、 X_D/X_P の値が0.05以上であった。

[0566] ・化合物3、化合物26～29及びR e f - 1～R e f - 3の遅延蛍光性
化合物2に代えて、化合物3、化合物26～29及びR e f - 1～R e f - 3をそれぞれ用いたこと以外、上記と同様にして化合物3、化合物26～29及びR e f - 1～R e f - 3の遅延蛍光性を確認した。

化合物3、化合物26～29及びR e f - 1～R e f - 3について、 X_D/X_P の値は、いずれも0.05以上であった。

[0567] ・一重項エネルギー S_1

化合物2、化合物3、化合物26～29、GD、RD、mCBP、CBP、H1、及びR e f - 1～R e f - 3の一重項エネルギー S_1 は、前述の溶液法により測定した。結果を表11に示す。

[0568] ・ $\Delta S T$

化合物2、化合物3、化合物26～29及びR e f - 1～R e f - 3の T_{77K} を測定し、その結果と上記の一重項エネルギー S_1 の値から $\Delta S T$ を確認した。

化合物2、化合物3、化合物26～29及びR e f - 1～R e f - 3の 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。

化合物2、化合物3、化合物26～29、R e f - 1及びR e f - 3の $\Delta S T$ は、いずれも0.01 eV未満であった。R e f - 2の $\Delta S T$ は、0.07 eVであった。

[0569] （化合物の主ピーク波長）

測定対象となる化合物の5 $\mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（300 K）でこの試料の蛍光スペクトル（縦軸：蛍光発光強度、横軸：波長とする。）を測定した。本実施例では、蛍光スペクトルを日

立社製の分光光度計（装置名：F-7000）で測定した。なお、蛍光スペクトル測定装置は、ここで用いた装置に限定されない。蛍光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる蛍光スペクトルのピーク波長を主ピーク波長とした。結果を表11に示す。

[0570]

[表11]

化合物	S_1 [eV]	λ [nm]
化合物2	2.59	509
化合物3	2.56	515
化合物26	2.76	468
化合物27	2.70	480
化合物28	2.62	501
化合物29	2.39	536
GD	2.39	516
RD	2.02	609
mCBP	3.56	-
CBP	3.52	-
H1	3.58	-
Ref-1 (比較化合物1)	2.73	476
Ref-2	2.53	517
Ref-3	2.38	531

[0571] ・表中の説明

「-」は、測定していないことを表す。

[0572] <化合物の合成>

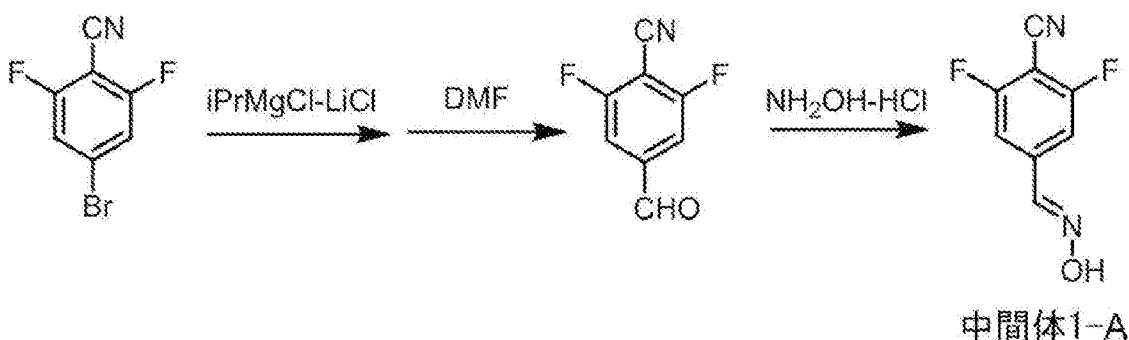
一般式(1)で表される化合物1~29を合成した。

[0573] [実施例1]

(1) 合成実施例1: 化合物1の合成

(1-1) 中間体1-Aの合成

[0574] [化219]

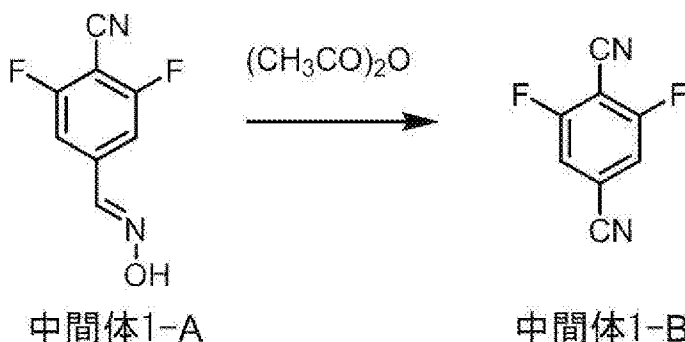


[0575] 窒素雰囲気下、4-ブromo-2,6-ジフルオロベンゾニトリル(5.00g、22.9mmol)、テトラヒドロフラン(THF)(15mL)、及びヘプタン(30mL)の混合物に、-72℃でイソプロピルマグネシウムクロリド-塩化リチウムの1Mテトラヒドロフラン溶液(25.2mL、25.2mmol)を滴下し、1時間攪拌した。次に、-72℃でN,N-ジメチルホルムアミド(DMF)(8.82mL、114.5mmol)を滴下し、徐々に室温(25℃)まで昇温した。反応終了後、水及び希塩酸を加え、エーテルで有機層を抽出し、有機層を濃縮して2,6-ジフルオロ-4-ホルミルベンゾニトリルを黄色オイル状物質として得た。この黄色オイル状物質をそのまま次の反応に全量用いた。

上記2,6-ジフルオロ-4-ホルミルベンゾニトリルの黄色オイル状物質とエタノール(12mL)との混合物に、塩酸ヒドロキシルアミン(1.91g、27.5mmol)を水(3mL)に溶かして加え、室温(25℃)で30分攪拌した。反応終了後、固体をろ取り、水で洗い、中間体1-Aを得た(3.75g、収率90%)。

[0576] (1-2) 中間体1-Bの合成

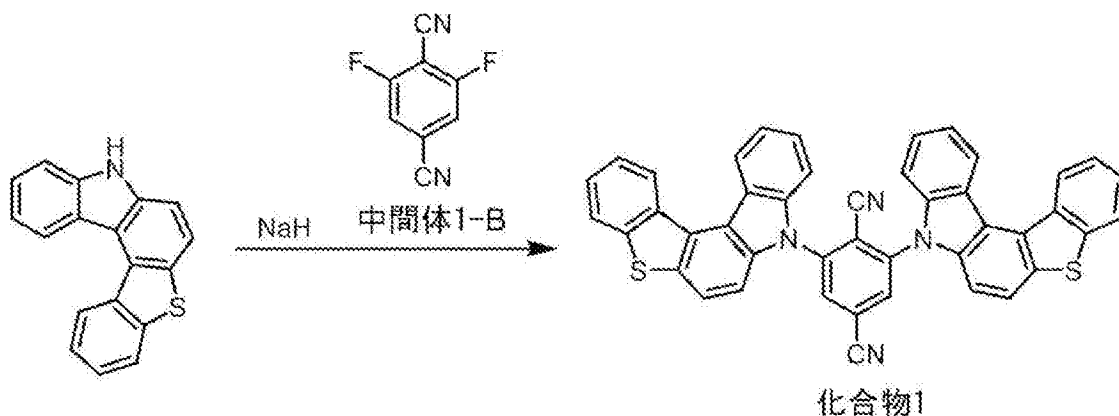
[0577] [化220]



[0578] 窒素雰囲気下、中間体1-A (3.75 g、20.6 mmol) に無水酢酸(9 mL、103.0 mmol)を加え、4時間攪拌した。反応終了後、水を加え、1時間攪拌した。固体をろ取し、水及びメタノールで洗い、中間体1-Bを得た(3.38 g、収率100%)。

[0579] (1-3) 化合物1の合成

[0580] [化221]



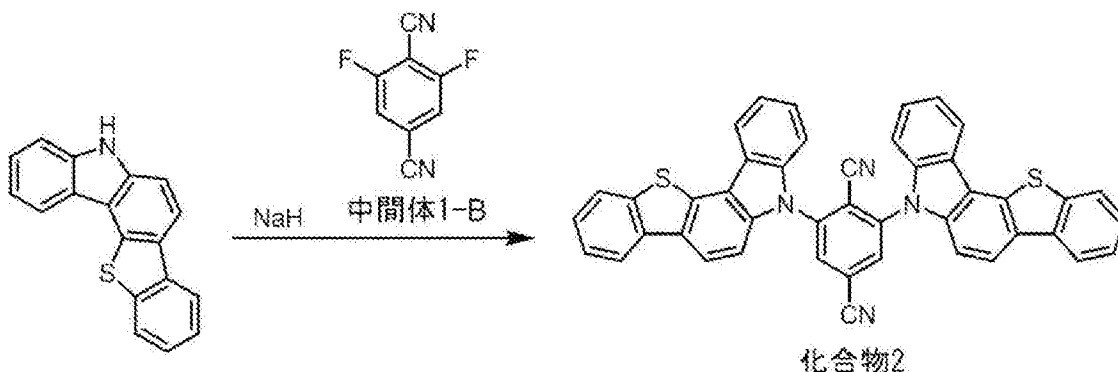
[0581] 窒素雰囲気下、水素化ナトリウム(0.140 g、5.85 mmol)及びテトラヒドロフラン(20 mL)の混合物に、0℃で8H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]カルバゾール(1.40 g、5.12 mmol)を加え、室温(25℃)で30分攪拌した。次に、0℃で中間体1-Bを加え、室温(25℃)で6時間攪拌した。水及び希塩酸を加え、固体をろ取し、水、メタノール、酢酸エチル及びジクロロメタンで洗い、化合物1を得た(0.33 g、収率20%)。LC-MS(Liquid chromatography mass spectrometry)の分析により、化合

物 1 と同定した。

[0582] [実施例 2]

(2) 合成実施例 2 : 化合物 2 の合成

[0583] [化222]

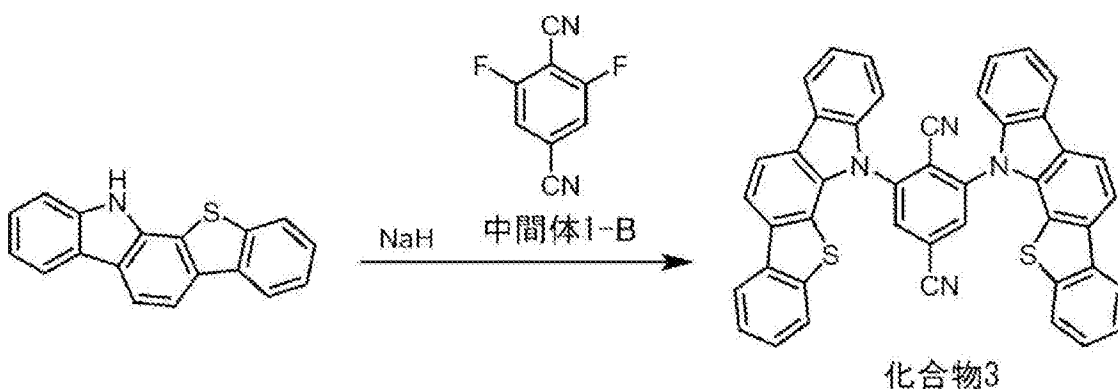


[0584] 合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、8H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]カルバゾールの代わりに5H-ベンゾ[4,5]チエノ[3,2-c]カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 2 を得た。収率は 31%であった。LC-MSの分析により、化合物 2 と同定した。

[0585] [実施例 3]

(3) 合成実施例 3 : 化合物 3 の合成

[0586] [化223]



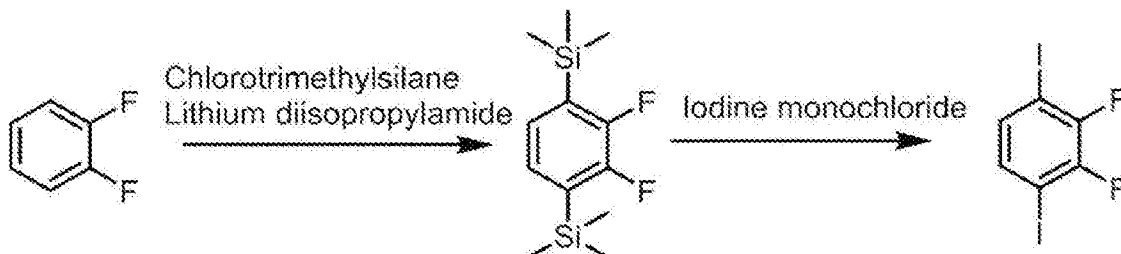
[0587] 合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、8H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]カルバゾールの代わりに12H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-a]カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 3 を得た。収率は 22%であった。LC-MSの分析により、化合物 3 と同定した。

[0588] [実施例4]

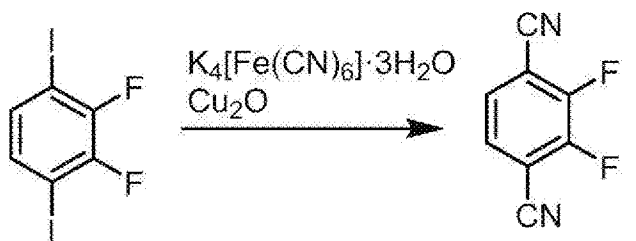
(4) 合成実施例4：化合物4の合成

(4-1) 中間体4-Aの合成

[0589] [化224]



[0590] [化225]



中間体4-A

[0591] 窒素雰囲気下、1, 2-ジフルオロベンゼン (12.55 g、110 mmol) 及び THF (120 mL) の混合物に、 -78°C で、クロロトリメチルシラン (34.7 mL、275 mmol) を加え、さらにリチウムジイソプロピルアミドの 2.3 M テトラヒドロフラン溶液 (120 mL、275 mmol) を 45 分かけて滴下したのち、室温 (25°C) まで昇温した。室温 (25°C) で 20 分間攪拌した後、 -78°C で、水 (10 mL) を加えた。酢酸エチルで有機層を抽出し、溶媒を除去して、(2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン)ビス(トリメチルシラン)を白色固体として得た。この白色固体をそのまま次の反応に全量用いた。

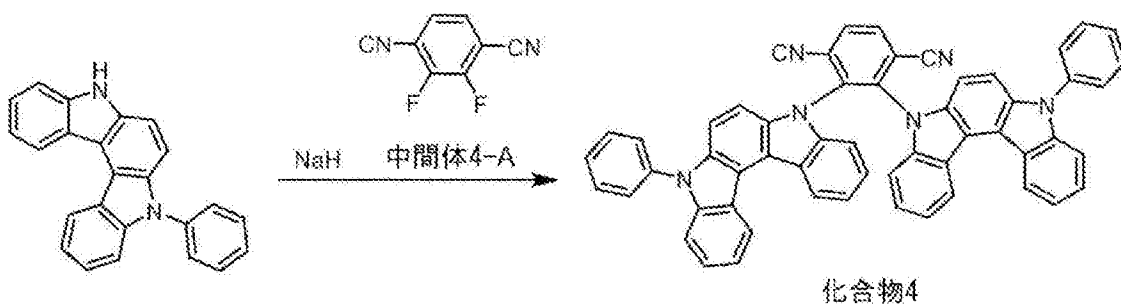
上記 (2, 3-ジフルオロ-1, 4-フェニレン)ビス(トリメチルシラン)の白色固体とジクロロメタン (500 mL) との混合物に、 0°C で、一塩化ヨウ素 (12.0 mL、240 mmol) を 20 分かけて滴下した。室温 (25°C) にて、2 時間半攪拌した後、チオ硫酸ナトリウムの飽和水溶液を加えた。ジクロロメタンで有機層を抽出し、有機層を濃縮して 2, 3-ジ

フルオロ-1,4-ジヨードベンゼンを黄色固体として得た。

この黄色固体をそのまま次の反応に全量用いた。上記2,3-ジフルオロ-1,4-ジヨードベンゼンの黄色固体、フェロシアン化カリウム三水和物（26.6g、63.0mmol）酸化銅（4.29g、30mmol）及びDMF（350mL）の混合物を、150℃で1.5時間攪拌した。室温（25℃）まで放冷してから、セライトパッドを用いたろ過により固体を有機層から除き、水を加えた後、酢酸エチルで有機層を抽出し、有機層を濃縮して、粗生成物を得た。この粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、中間体4-Aを得た（0.35g、収率7%）。

[0592] (4-2) 化合物4の合成

[0593] [化226]



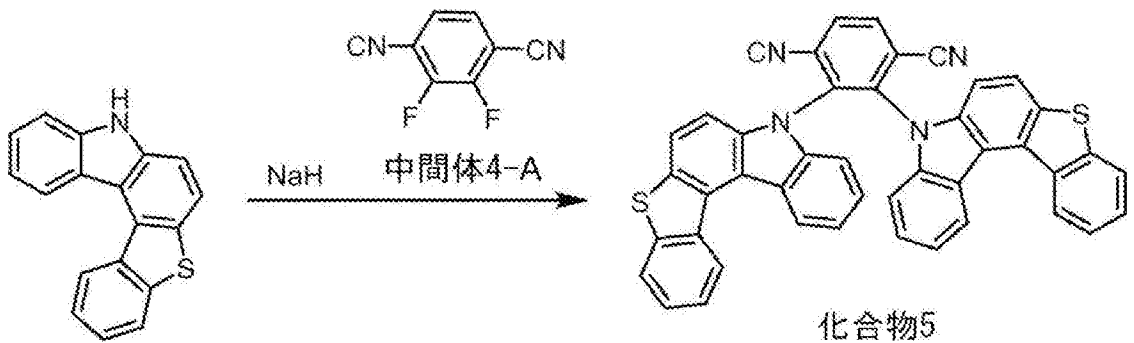
[0594] 合成実施例1の化合物1の合成において、中間体1-Bの代わりに中間体4-Aを用い、8H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]カルバゾールの代わりに5-フェニル-5,8-ジヒドロインドロ[2,3-c]カルバゾールを用いた他は合成実施例1と同様に合成し、化合物4を得た。収率は21%であった。LC-MSの分析により、化合物4と同定した。

[0595] [実施例5]

(5) 合成実施例5：化合物5の合成

[0596]

[化227]

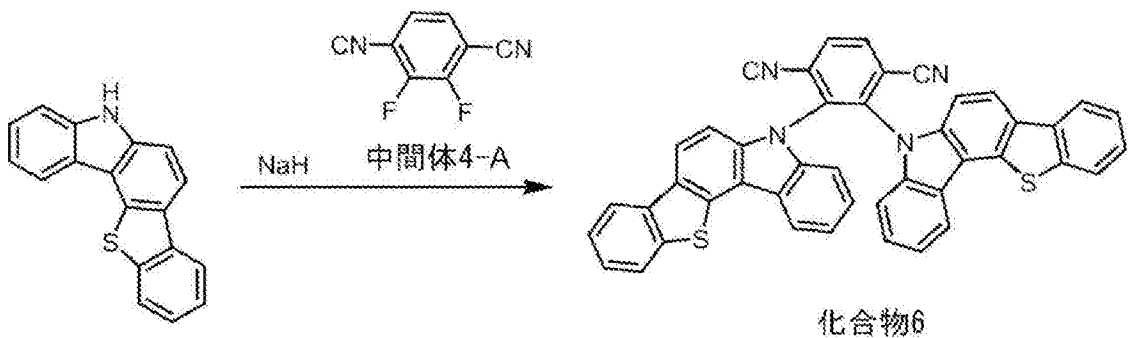


[0597] 合成実施例1の化合物1の合成において、中間体1-Bの代わりに中間体4-Aを用いた他は合成実施例1と同様に合成し、化合物5を得た。収率は21%であった。LC-MSの分析により、化合物5と同定した。

[0598] [実施例6]

(6) 合成実施例6：化合物6の合成

[0599] [化228]



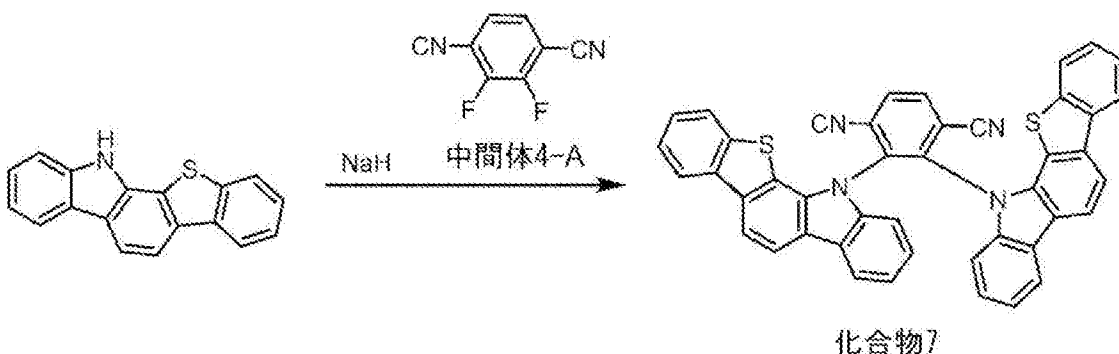
[0600] 合成実施例1の化合物1の合成において、中間体1-Bの代わりに中間体4-Aを用い、8H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]カルバゾールの代わりに5H-ベンゾ[4,5]チエノ[3,2-c]カルバゾールを用いた他は合成実施例1と同様に合成し、化合物6を得た。収率は25%であった。LC-MSの分析により、化合物6と同定した。

[0601] [実施例7]

(7) 合成実施例7：化合物7の合成

[0602]

[化229]

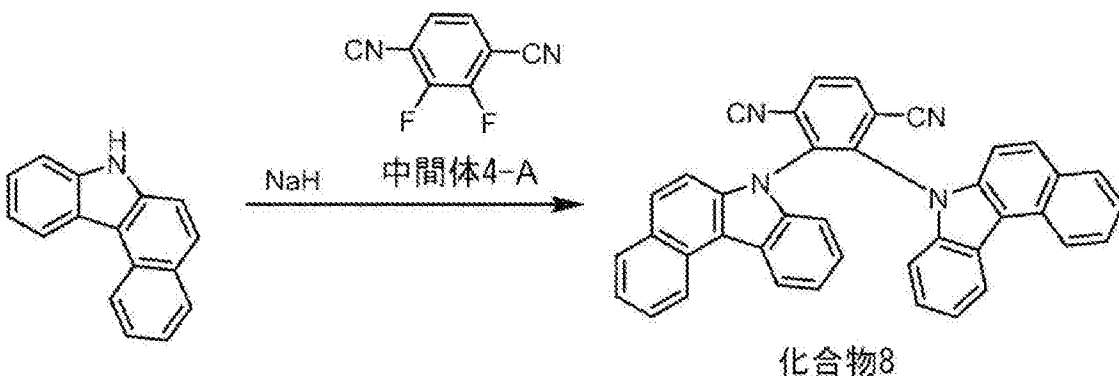


[0603] 合成実施例1の化合物1の合成において、中間体1-Bの代わりに中間体4-Aを用い、8H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]カルバゾールの代わりに12H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-a]カルバゾールを用いた他は合成実施例1と同様に合成し、化合物7を得た。収率は19%であった。LC-MSの分析により、化合物7と同定した。

[0604] [実施例8]

(8) 合成実施例8：化合物8の合成

[0605] [化230]

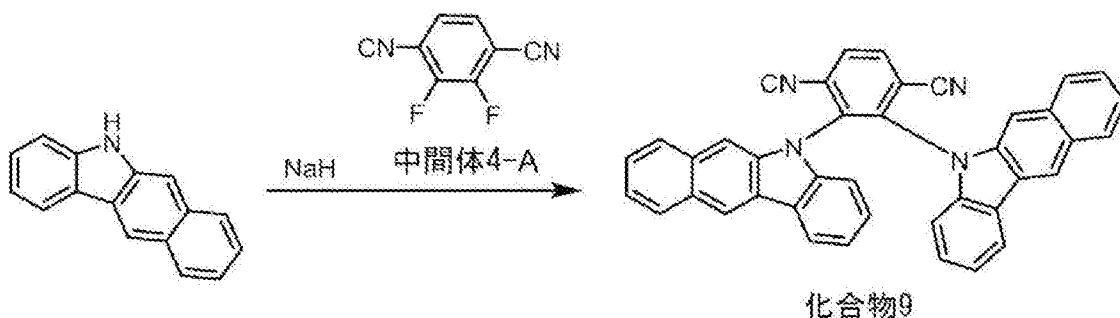


[0606] 合成実施例1の化合物1の合成において、中間体1-Bの代わりに中間体4-Aを用い、8H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]カルバゾールの代わりに7H-ベンゾ[c]カルバゾールを用いた他は合成実施例1と同様に合成し、化合物8を得た。収率は22%であった。LC-MSの分析により、化合物8と同定した。

[0607] [実施例9]

(9) 合成実施例9：化合物9の合成

[0608] [化231]

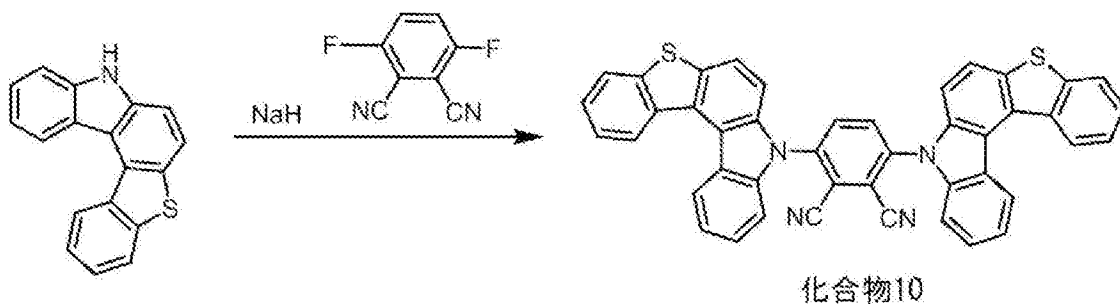


[0609] 合成実施例1の化合物1の合成において、中間体1-Bの代わりに中間体4-Aを用い、8H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]カルバゾールの代わりに5H-ベンゾ[b]カルバゾールを用いた他は合成実施例1と同様に合成し、化合物9を得た。収率は20%であった。LC-MSの分析により、化合物9と同定した。

[0610] [実施例10]

(10) 合成実施例10：化合物10の合成

[0611] [化232]



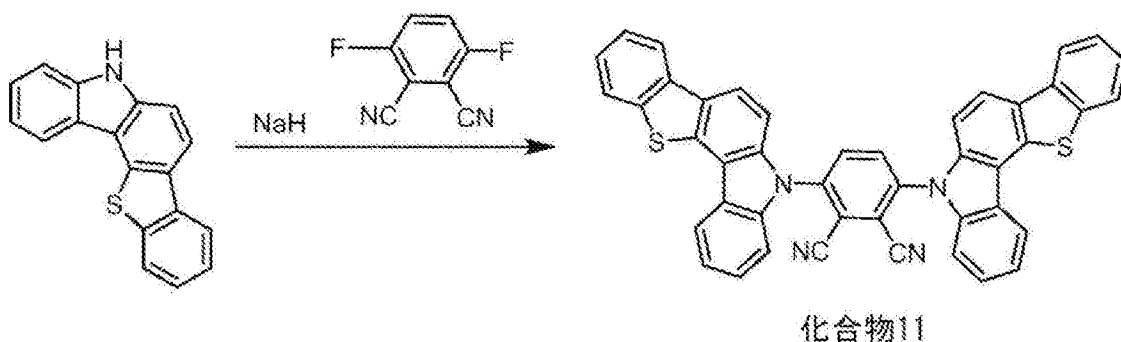
[0612] 合成実施例1の化合物1の合成において、中間体1-Bの代わりに3,6-ジフルオロフタロニトリルを用いた他は合成実施例1と同様に合成し、化合物10を得た。収率は20%であった。LC-MSの分析により、化合物10と同定した。

[0613] [実施例11]

(11) 合成実施例11：化合物11の合成

[0614]

[化233]

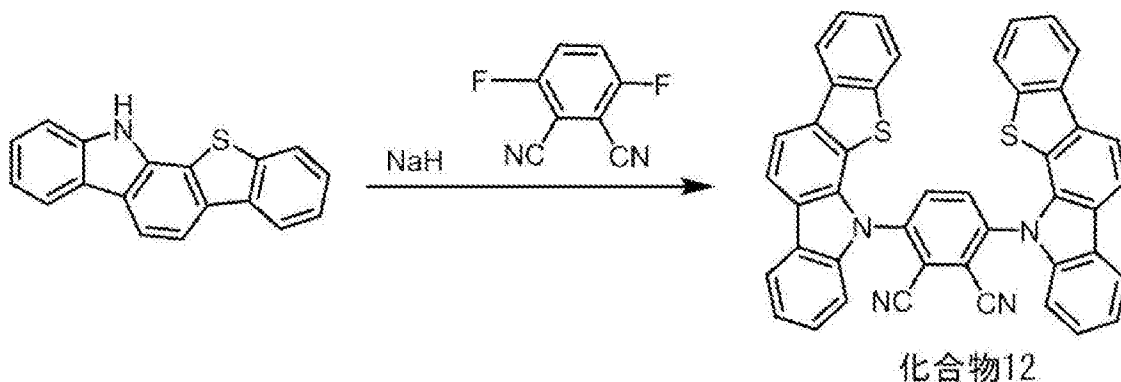


[0615] 合成実施例1の化合物1の合成において、中間体1-Bの代わりに3,6-ジフルオロフタロニトリルを用い、8H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]カルバゾールの代わりに5H-ベンゾ[4,5]チエノ[3,2-c]カルバゾールを用いた他は合成実施例1と同様に合成し、化合物11を得た。収率は23%であった。LC-MSの分析により、化合物11と同定した。

[0616] [実施例12]

(12) 合成実施例12：化合物12の合成

[0617] [化234]

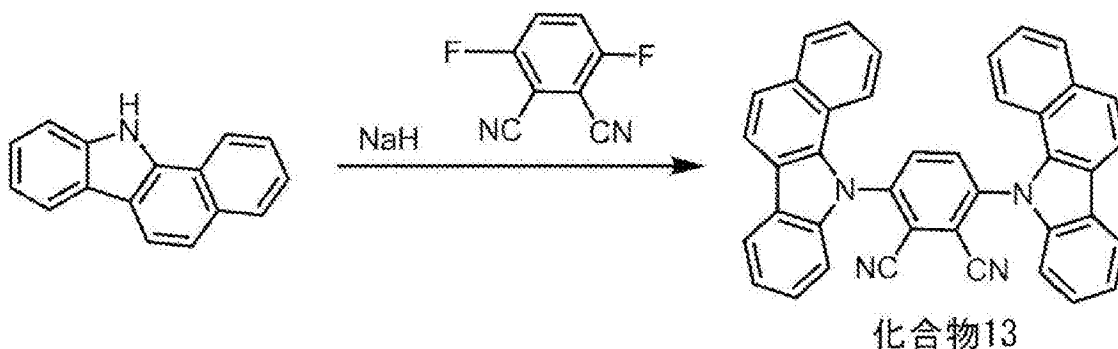


[0618] 合成実施例1の化合物1の合成において、中間体1-Bの代わりに3,6-ジフルオロフタロニトリルを用い、8H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-c]カルバゾールの代わりに12H-ベンゾ[4,5]チエノ[2,3-a]カルバゾールを用いた他は合成実施例1と同様に合成し、化合物12を得た。収率は18%であった。LC-MSの分析により、化合物12と同定した。

[0619] [実施例 1 3]

(1 3) 合成実施例 1 3 : 化合物 1 3 の合成

[0620] [化235]

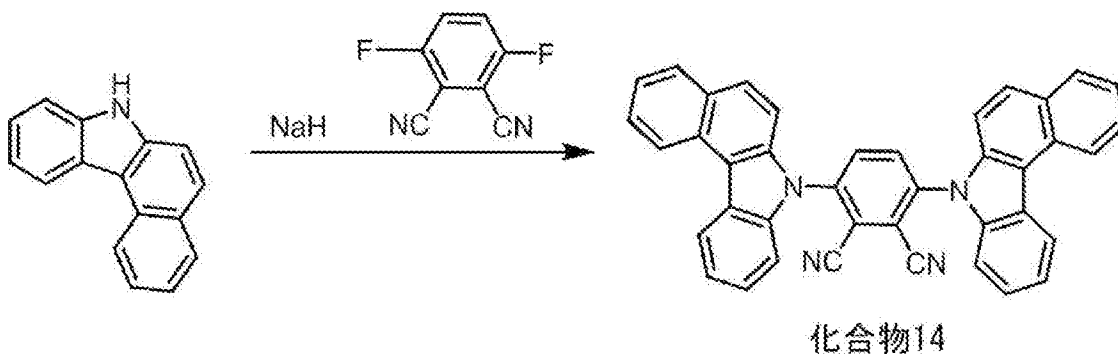


[0621] 合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、中間体 1-B の代わりに 3, 6-ジフルオロフタロニトリルを用い、8H-ベンゾ[4, 5]チエノ[2, 3-c]カルバゾールの代わりに 11H-ベンゾ[a]カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 1 3 を得た。収率は 10% であった。LC-MS の分析により、化合物 1 3 と同定した。

[0622] [実施例 1 4]

(1 4) 合成実施例 1 4 : 化合物 1 4 の合成

[0623] [化236]

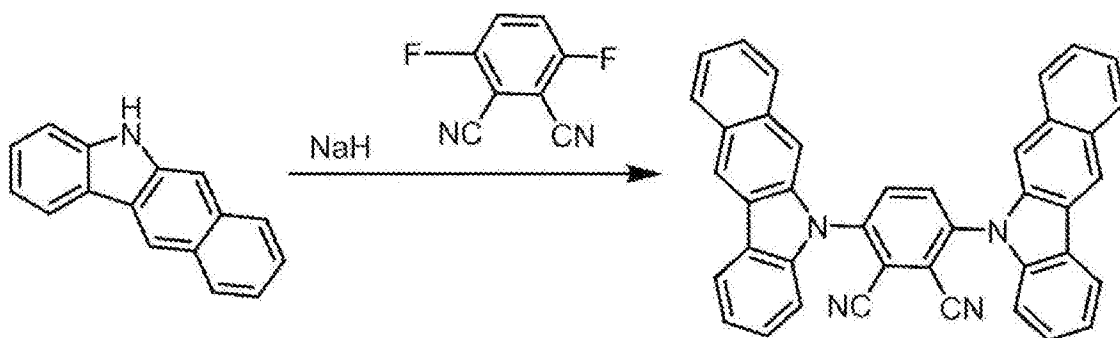


[0624] 合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、中間体 1-B の代わりに 3, 6-ジフルオロフタロニトリルを用い、8H-ベンゾ[4, 5]チエノ[2, 3-c]カルバゾールの代わりに 7H-ベンゾ[c]カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 1 4 を得た。収率は 26% であった。LC-MS の分析により、化合物 1 4 と同定した。

[0625] [実施例 15]

(15) 合成実施例 15 : 化合物 15 の合成

[0626] [化237]



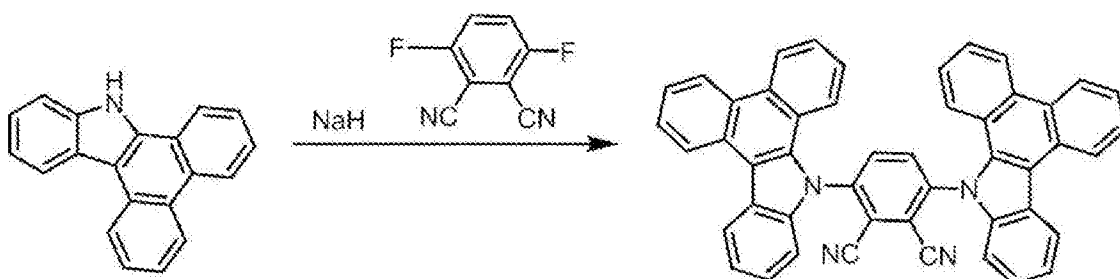
化合物15

[0627] 合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、中間体 1-B の代わりに 3, 6-ジフルオロフタロニトリルを用い、8H-ベンゾ[4, 5]チエノ[2, 3-C]カルバゾールの代わりに 5H-ベンゾ[b]カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 15 を得た。収率は 23% であった。LC-MS の分析により、化合物 15 と同定した。

[0628] [実施例 16]

(16) 合成実施例 16 : 化合物 16 の合成

[0629] [化238]



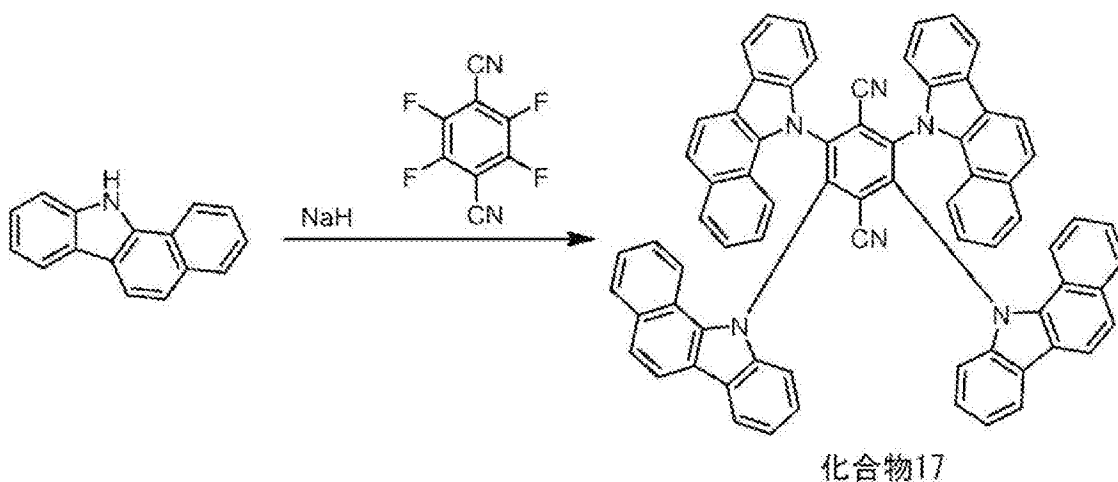
化合物16

[0630] 合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、中間体 1-B の代わりに 3, 6-ジフルオロフタロニトリルを用い、8H-ベンゾ[4, 5]チエノ[2, 3-c]カルバゾールの代わりに 9H-ジベンゾ[a, c]カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 16 を得た。収率は 8% であった。LC-MS の分析により、化合物 16 と同定した。

[0631] [実施例 17]

(17) 合成実施例 17 : 化合物 17 の合成

[0632] [化239]



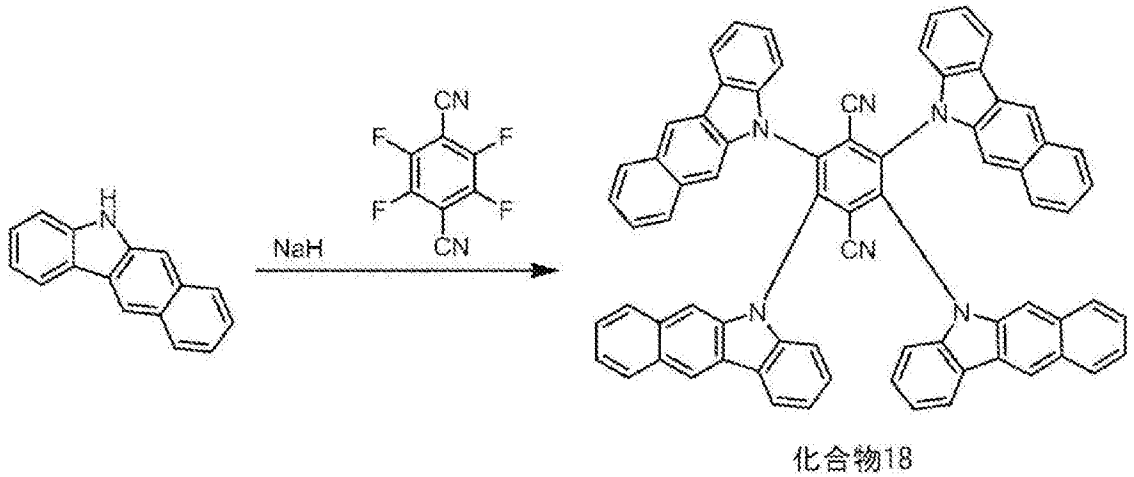
[0633] 窒素雰囲気下、水素化ナトリウム (1.40 g、58.5 mmol) 及びテトラヒドロフラン (200 mL) の混合物に、0℃で1H-ベンゾ [a] カルバゾール (11.1 g、51.2 mmol) を加え、室温 (25℃) で30分攪拌した。次に、0℃でテトラフルオロテレフタロニトリル (2.00 g、10.0 mmol) を加え、室温 (25℃) で18時間攪拌した。水及び希塩酸を加え、固体をろ取し、水、メタノール、酢酸エチル及びジクロロメタンで洗い、化合物 17 を得た (1.88 g、収率 19%)。LC-MS の分析により、化合物 17 と同定した。

[0634] [実施例 18]

(18) 合成実施例 18 : 化合物 18 の合成

[0635]

[化240]

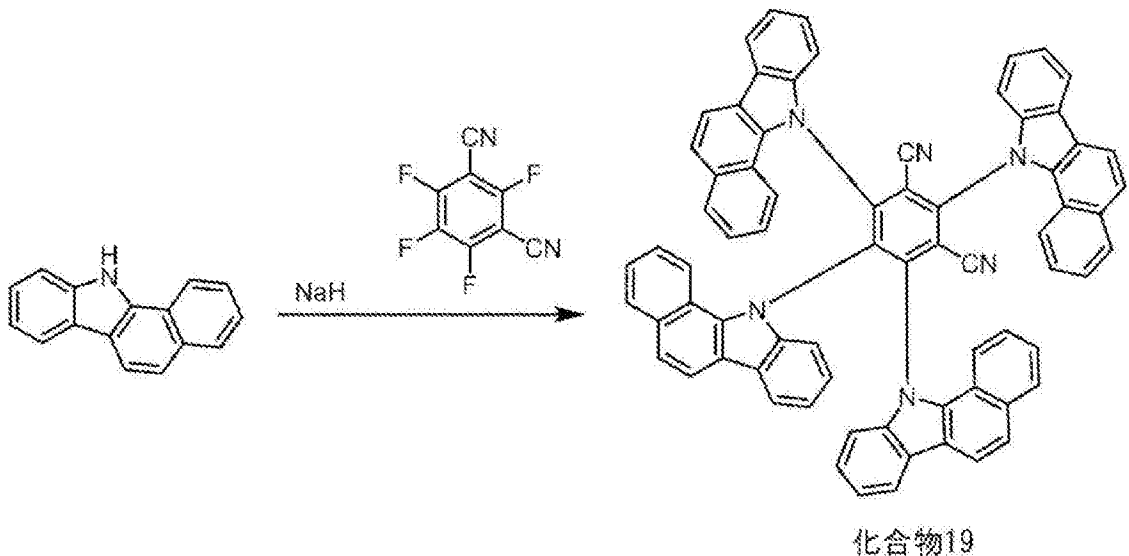


[0636] 合成実施例17の化合物17の合成において、11H-ベンゾ[a]カルバゾールの代わりに5H-ベンゾ[b]カルバゾールを用いた他は合成実施例17と同様に合成し、化合物18を得た。収率11%であった。LC-MSの分析により、化合物18と同定した。

[0637] [実施例19]

(19) 合成実施例19：化合物19の合成

[0638] [化241]



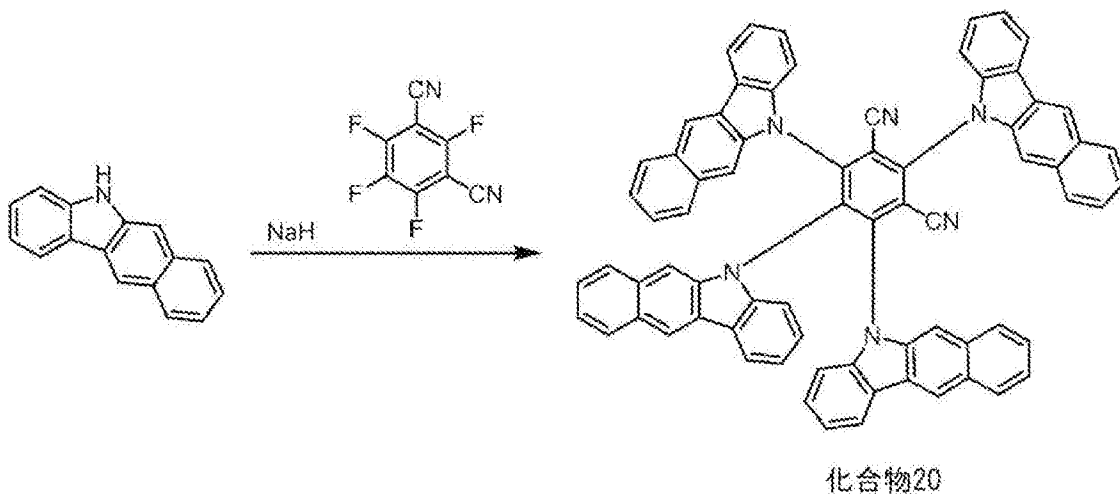
[0639] 合成実施例17の化合物17の合成において、テトラフルオロテレフタロニトリルの代わりにテトラフルオロイソフタロニトリルを用いた他は合成実施例17と同様に合成し、化合物19を得た。収率8%であった。LC-MS

Sの分析により、化合物19と同定した。

[0640] [実施例20]

(20) 合成実施例20：化合物20の合成

[0641] [化242]

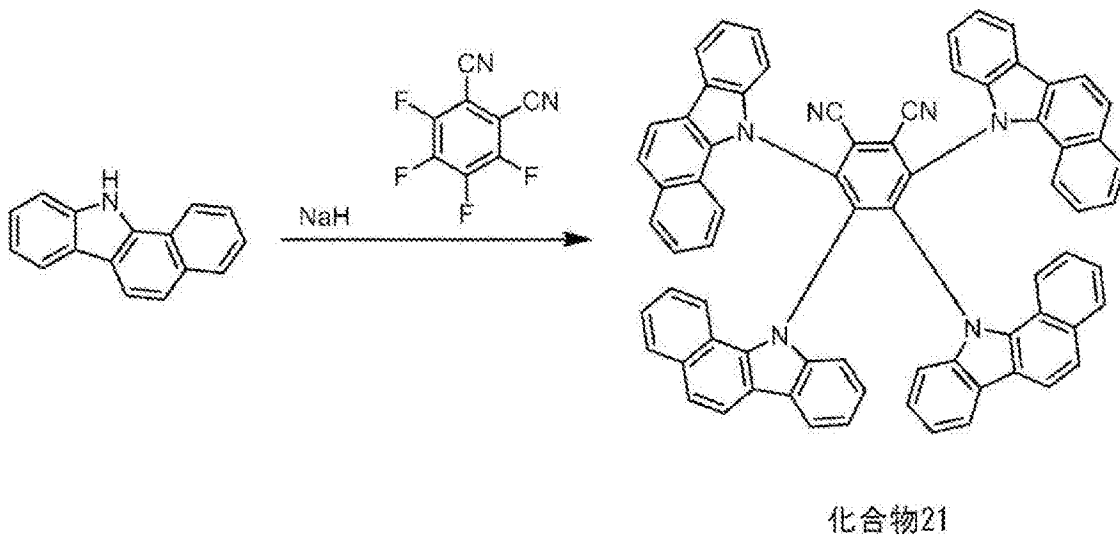


[0642] 合成実施例17の化合物17の合成において、テトラフルオロテレフタロニトリルの代わりにテトラフルオロイソフタロニトリルを用い、11H-ベンゾ[a]カルバゾールの代わりに5H-ベンゾ[b]カルバゾールを用いた他は合成実施例17と同様に合成し、化合物20を得た。収率13%であった。LC-MSの分析により、化合物20と同定した。

[0643] [実施例21]

(21) 合成実施例21：化合物21の合成

[0644] [化243]

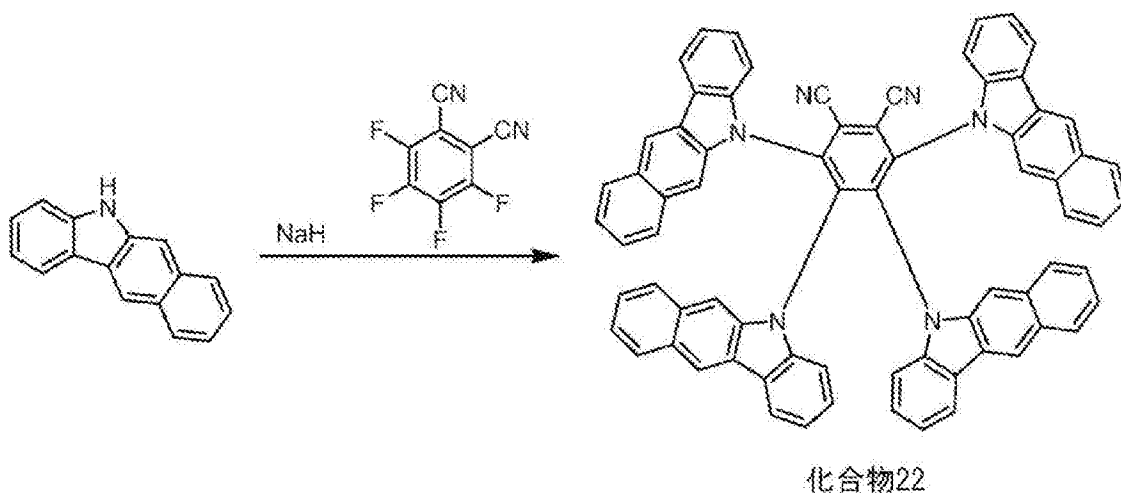


[0645] 合成実施例 17 の化合物 17 の合成において、テトラフルオロテレフタロニトリルの代わりにテトラフルオロフタロニトリルを用いた他は合成実施例 17 と同様に合成し、化合物 21 を得た。収率 8% であった。LC-MS の分析により、化合物 21 と同定した。

[0646] [実施例 22]

(22) 合成実施例 22 : 化合物 22 の合成

[0647] [化244]

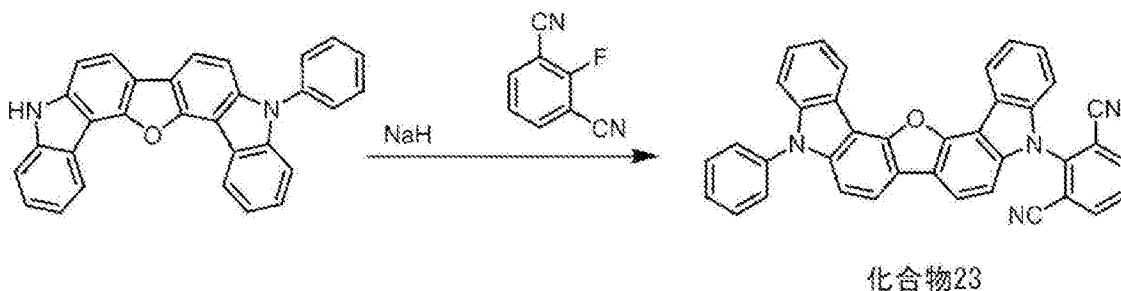


[0648] 合成実施例 17 の化合物 17 の合成において、テトラフルオロテレフタロニトリルの代わりにテトラフルオロフタロニトリルを用い、11H-ベンゾ [a] カルバゾールの代わりに5H-ベンゾ [b] カルバゾールを用いた他は合成実施例 17 と同様に合成し、化合物 22 を得た。収率 10% であった。LC-MS の分析により、化合物 22 と同定した。

[0649] [実施例 23]

(23) 合成実施例 23 : 化合物 23 の合成

[0650] [化245]

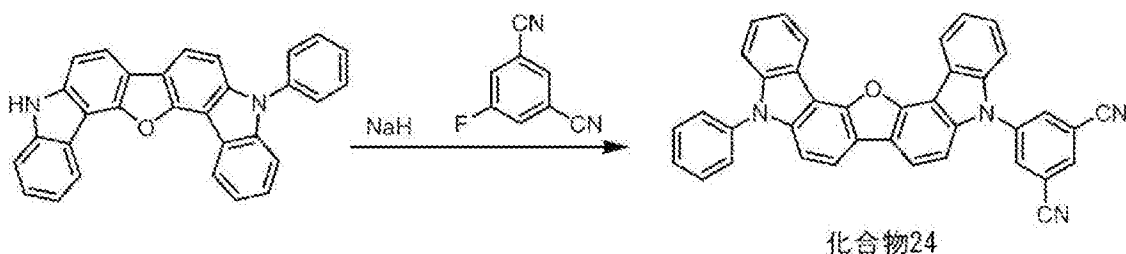


[0651] 窒素雰囲気下、水素化ナトリウム (0.350 g、14.6 mmol)、テトラヒドロフラン (200 mL) の混合物に、0°C で 5-フェニル-5,10-ジヒドロフロ [3,2-c:4,5-c'] ジカルバゾール (5.41 g、12.8 mmol) を加え、室温 (25°C) で 30 分攪拌した。次に、0°C で 2-フルオロイソフタロニトリル (1.46 g、10.0 mmol) を加え、室温 (25°C) で 18 時間攪拌した。水及び希塩酸を加え、固体をろ取り、水、メタノール、酢酸エチル及びジクロロメタンで洗い、化合物 23 を得た (1.48 g、収率 27%)。LC-MS の分析により、化合物 23 と同定した。

[0652] [実施例 24]

(24) 合成実施例 24 : 化合物 24 の合成

[0653] [化246]

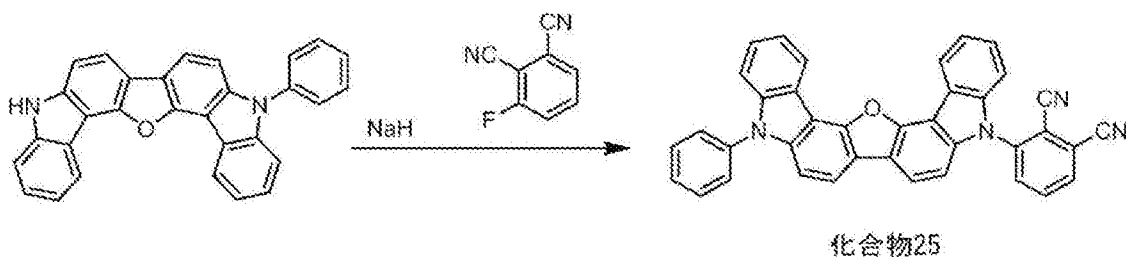


[0654] 合成実施例 23 の化合物 23 の合成において、2-フルオロイソフタロニトリルの代わりに 5-フルオロイソフタロニトリルを用いた他は合成実施例 23 と同様に合成し、化合物 24 を得た。収率 18% であった。LC-MS の分析により、化合物 24 と同定した。

[0655] [実施例 25]

(25) 合成実施例 25 : 化合物 25 の合成

[0656] [化247]



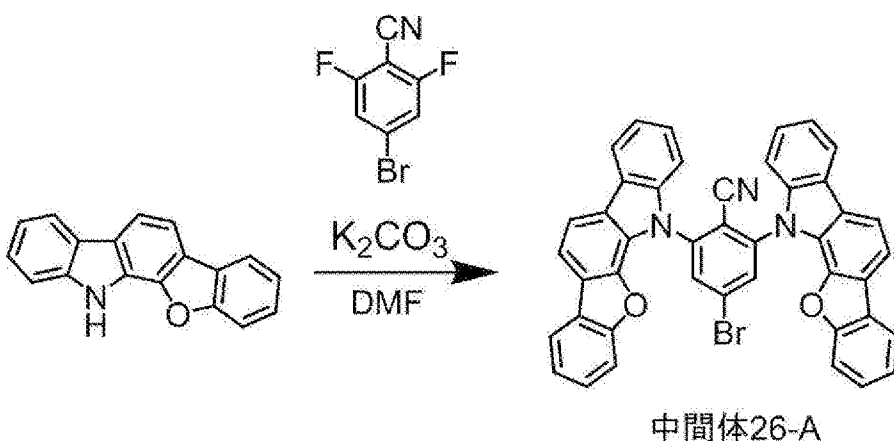
[0657] 合成実施例 23 の化合物 23 の合成において、2-フルオロイソフタロニトリルの代わりに 3-フルオロフタロニトリルを用いた他は合成実施例 23 と同様に合成し、化合物 25 を得た。収率 21% であった。LC-MS の分析により、化合物 25 と同定した。

[0658] [実施例 26]

(26) 合成実施例 26 : 化合物 26 の合成

(26-1) 中間体 26-A の合成

[0659] [化248]

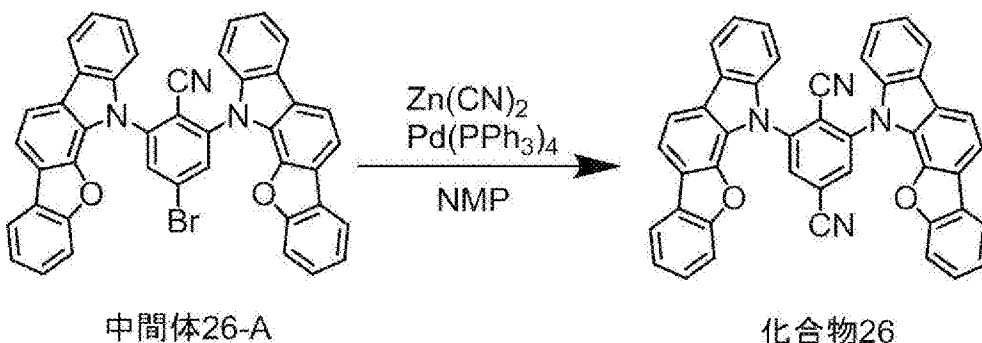


[0660] 窒素雰囲気下、200 mL の三口フラスコに、12H-Benzofuro[2,3-a]carbazole (6.4 g、25 mmol)、炭酸カリウム (5.2 g、37.5 mmol)、4-Bromo-2,6-difluorobenzonitrile (2.2 g、10 mmol) 及び N,N-ジメチルホルムアミドを 200 mL 入れた。100°C で 4 時間加熱攪拌後に室温 (25°C) に戻し、水 50 mL を加え、析出した固体をメタノール及び酢酸エチルで洗浄した。6.2 g の黄色固体を得た。ASAP-MS (Atmospheric Pressure Solid Analysis Probe Mass Spectrometry) により中間体 26-A と同定した (収率 90%)。

[0661] (1-2) 化合物 26 の合成

[0662]

[化249]

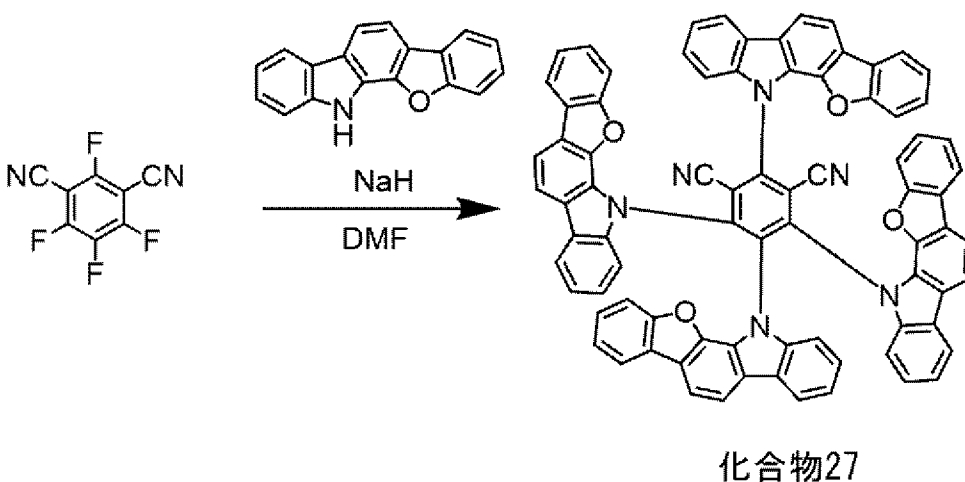


[0663] 窒素雰囲気下、100 mLの三口フラスコに、中間体26-A (4.0 g、5.80 mmol)、シアン化亜鉛 (3.39 g、29 mmol)、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム(0) (0.33 g、0.29 mmol) 及びN-メチル-2-ピロリドン50 mLをいれた。130°Cで4時間加熱攪拌後に室温(25°C)に戻し、反応溶液にアンモニア水(20 mL、30質量%)入れた。析出した固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、2.9 gの黄色固体を得た。ASAP-MSの分析により化合物26と同一した(収率78%)。

[0664] [実施例27]

(27) 合成実施例27：化合物27の合成

[0665] [化250]



[0666] 窒素雰囲気下、300 mLの三口フラスコに、12H-Benzofuro[2,3-a]carbazole (8.35 g、33 mmol)、水素化ナトリウム (1.20 g、30 mmol) 及びDMF 100 mLをいれ、室温

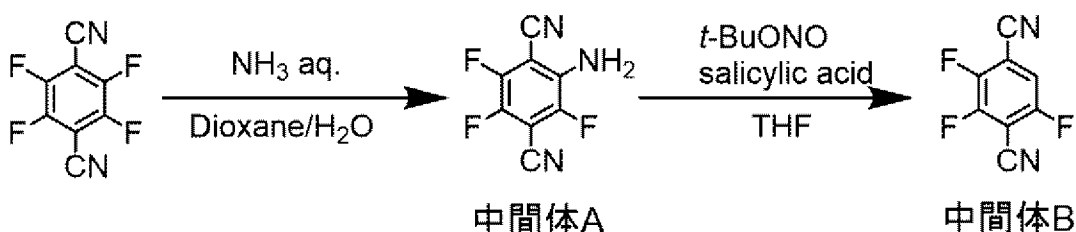
(25℃)で30分攪拌した。次にテトラフルオロイソフタロニトリル(1.30g、6.5mmol)を入れ、100℃で4時間攪拌した。その後、反応混合物を飽和塩化アンモニウム水溶液50mLに加え、析出した固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、2.85gの黄色固体を得た。ASAP-MSの分析により化合物27と同定した(収率38%)。

[0667] [実施例28]

(28) 合成実施例28：化合物28の合成

(28-1) 中間体A及び中間体Bの合成

[0668] [化251]

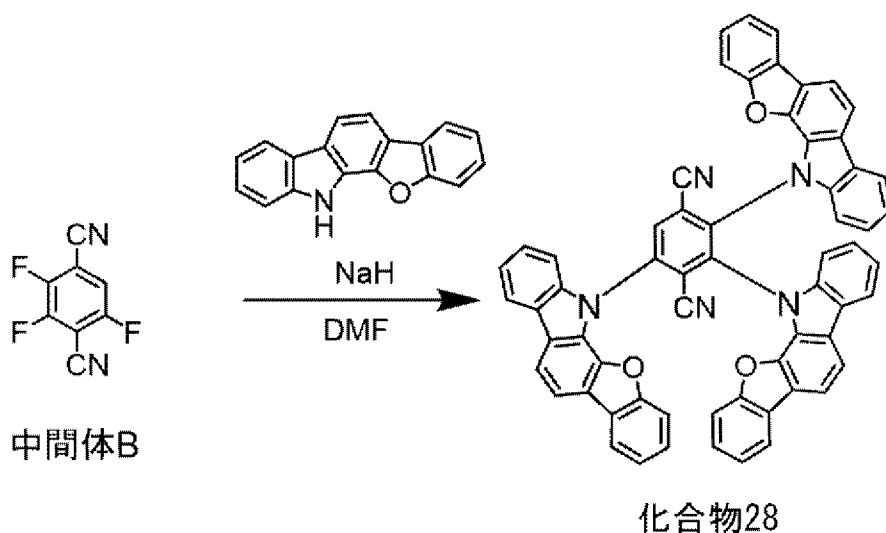


[0669] 窒素雰囲気下、2000mLの三口フラスコに、テトラフルオロテレフタロニトリル(25g、125mmol)、1,4-ジオキサン625mL及び水400mLをいれた。次に30質量%アンモニア水13mLを入れ、80℃で10時間加熱攪拌後に室温(25℃)に戻した。エバポレータを用いて溶媒を留去し、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製した。24gの白固体を得た。GC-MS (Gas Chromatograph Mass Spectrometer) により中間体Aと同定した(収率98%)。

[0670] 窒素雰囲気下、200mLの三口フラスコに、中間体A(5g、25mmol)、サリチル酸(0.35g、2.5mmol)及びTHF100mLをいれた。次に亜硝酸tert-ブチル(t-BuONO)(2.5g、25mmol)を入れ、25℃で8時間攪拌後した。反応溶液をロータリーエバポレータを用いて溶媒を除去し、固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製した。4.1gの白固体を得た。GC-MSにより中間体Bと同定した(収率90%)。

[0671] (28-2) 化合物28の合成

[0672] [化252]



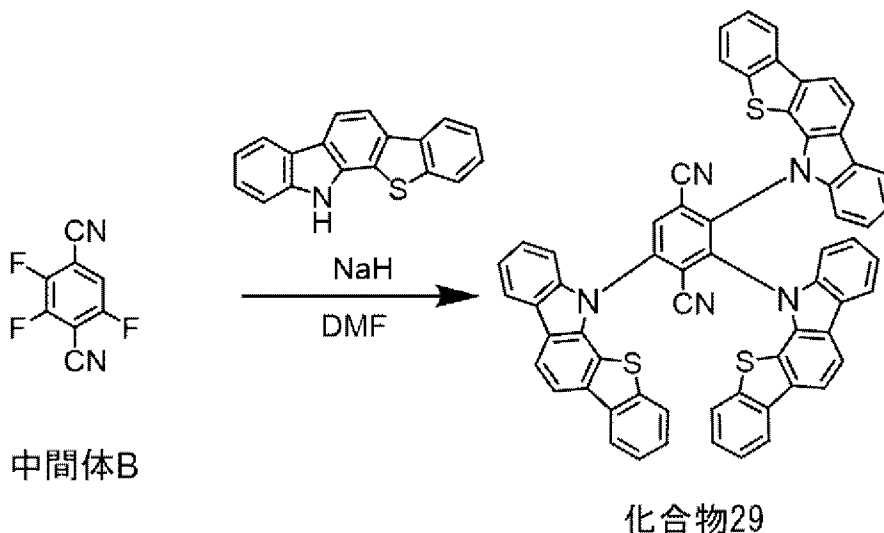
[0673] 窒素雰囲気下、200 mLの三口フラスコに、12H-Benzofuro[2,3-a]carbazole (2.25 g、8.75 mmol)、水素化ナトリウム (0.33 g、8.25 mmol) 及びDMF 30 mLをいれ、室温 (25°C) で30分攪拌した。次に中間体B (0.46 g、2.5 mmol) を入れ、100°Cで4時間攪拌した。その後、反応混合物を飽和塩化アンモニウム水溶液 50 mLに加え、析出した固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、1.22 gの黄色固体を得た。ASAP-MSの分析により化合物28と同定した (収率55%)。

[0674] [実施例29]

(29) 合成実施例29：化合物29の合成

[0675]

[化253]



[0676] 窒素雰囲気下、200 mLの三口フラスコに、12H-[1] Benzo thieno [2, 3-a] carbazole (1.53 g、5.6 mmol)、水素化ナトリウム (0.21 g、5.3 mmol) 及びDMF 30 mLをいれ、室温 (25°C) で30分攪拌した。次に中間体B (0.29 g、1.6 mmol) を入れ、100°Cで4時間攪拌した。その後、反応混合物を飽和塩化アンモニウム水溶液 50 mLに加え、析出した固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、0.73 gの橙色固体を得た。ASAP-MSの分析により化合物29と同定した (収率48%)。

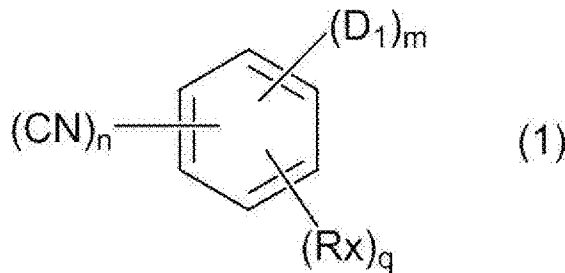
符号の説明

[0677] 1…有機EL素子、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]



（前記一般式（1）において、 n は、2以上4以下の整数であり、 m は、1以上4以下の整数であり、 q は、0以上3以下の整数であり、 $m + n + q = 6$ であり、

CNは、シアノ基であり、

前記 D_1 は、下記一般式（2）、下記一般式（3）又は下記一般式（3X）で表される基であり、 D_1 が複数ある場合、複数の D_1 は互いに同一であり、

R_x は、水素原子もしくは置換基であるか、又は隣接する R_x 同士の組が互いに結合して環を形成し、 R_x が複数ある場合、複数の R_x は、互いに同一又は異なり、

置換基としての R_x は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～30のアルキルシリル基、または

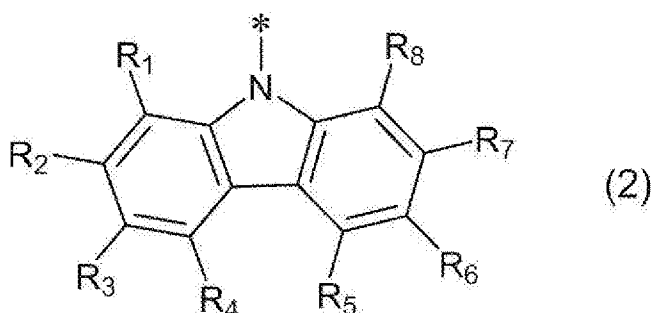
は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールシリル基であり、

R_xが置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基である場合、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基としてのR_xは、ピリジル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリニル基、ナフチリジニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾピリジニル基、ベンズトリアゾリル基、フリル基、チエニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサジアゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ピペリジニル基、ピロリジニル基、ピペラジニル基、モルホルル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、またはフェノキサジニル基であり、

CN、D₁及びR_xは、それぞれ前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子に結合する。)

[化2]



(前記一般式(2)において、R₁～R₈は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR₁及びR₂の組、R₂及びR₃の組、R₃及びR₄の組、R₅及びR₆の組、R₆及びR₇の組、並びにR₇

及びR₈の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、
ただし、R₁及びR₂の組、R₂及びR₃の組、R₃及びR₄の組、R₅及
びR₆の組、R₆及びR₇の組、並びにR₇及びR₈の組のいずれか1つ
以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としてのR₁～R₈は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールシリル基

、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルコキシ基

、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基

、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールアミノ基

、

チオール基、

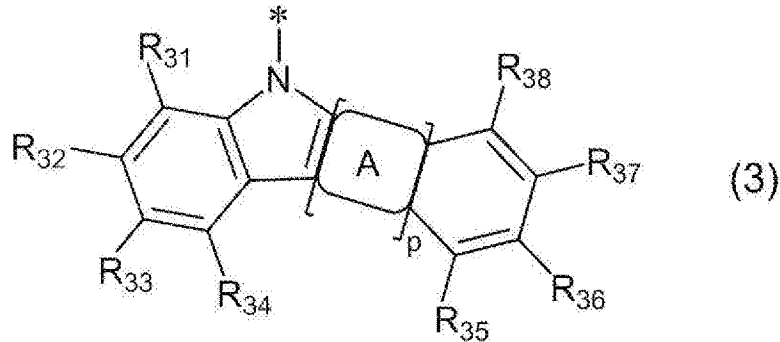
置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基で

ある。

*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合
部位を表す。)

[化3]

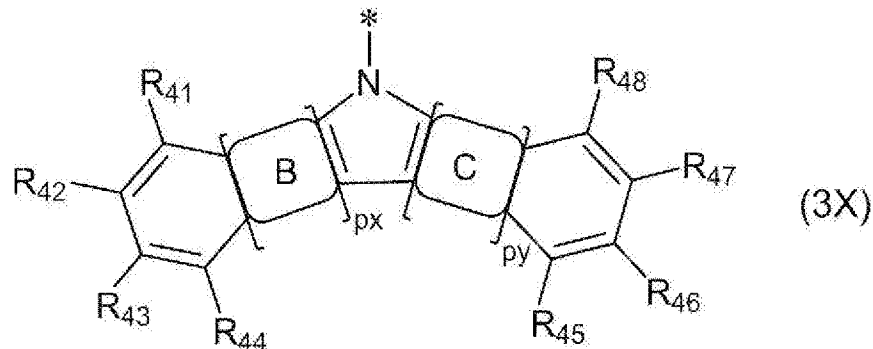


(前記一般式 (3) において、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{31} 及び R_{32} の組、 R_{32} 及び R_{33} の組、 R_{33} 及び R_{34} の組、 R_{35} 及び R_{36} の組、 R_{36} 及び R_{37} の組、並びに R_{37} 及び R_{38} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (2) における置換基としての $R_1 \sim R_8$ と同義であり、

A は、下記一般式 (131) 又は下記一般式 (132) で表される環構造を示し、この環構造 A は、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、 p は、1 以上 4 以下の整数であり、 p が 2 以上の整数の場合、複数の環構造 A は、互いに同一又は異なる。* は、前記一般式 (1) 中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。)

[化4]



(前記一般式 (3X) において、 $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及

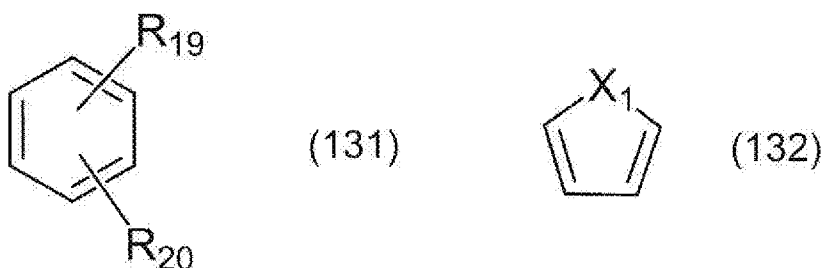
び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(3)における置換基としての $R_{31} \sim R_{38}$ と同義であり、

Bは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造を示し、この環構造Bは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、 $p \times$ は、1以上4以下の整数であり、 $p \times$ が2以上の整数の場合、複数の環構造Bは、互いに同一又は異なり、

Cは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造を示し、この環構造Cは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、 $p y$ は、1以上4以下の整数であり、 $p y$ が2以上の整数の場合、複数の環構造Cは、互いに同一又は異なる。*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。)

[化5]



(前記一般式(131)において、 R_{19} 及び R_{20} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、隣接する環構造の一部と互いに結合して環を形成するか、又は R_{19} 及び R_{20} の組が互いに結合して環を形成し、

前記一般式(132)において、 X_1 は、 $CR_{50}R_{51}$ 、 NR_{52} 、硫黄原子、もしくは酸素原子であり、 R_{50} 、 R_{51} 及び R_{52} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{50} 及び R_{51} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての R_{19} 、 R_{20} 、 R_{50} 、 R_{51} 及び R_{52} は、それぞれ独

立に、前記一般式（２）における置換基としての $R_1 \sim R_8$ と同義である。）

[請求項2]

請求項１に記載の化合物において、

R_x は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、

無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、または

無置換の炭素数１～３０のアルキル基であり、

R_x が無置換の環形成原子数５～３０の複素環基である場合、無置換の環形成原子数５～３０の複素環基としての R_x は、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、またはジベンゾチエニル基である、

化合物。

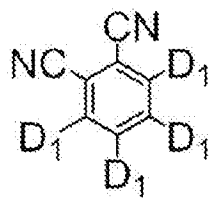
[請求項3]

請求項１または請求項２に記載の化合物において、

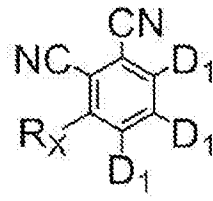
前記化合物は、下記一般式（１－１）～（１－４７）のいずれかで表される、

化合物。

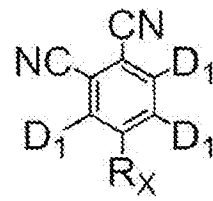
[化6]



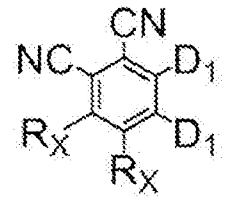
(1-1)



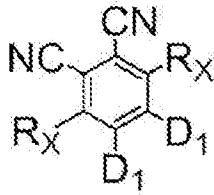
(1-2)



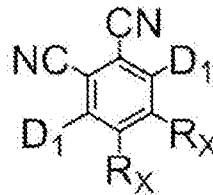
(1-3)



(1-4)



(1-5)



(1-6)



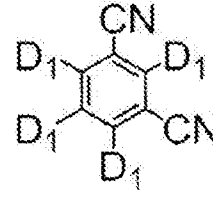
(1-7)



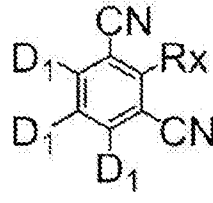
(1-8)



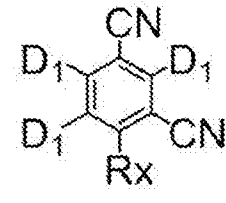
(1-9)



(1-10)

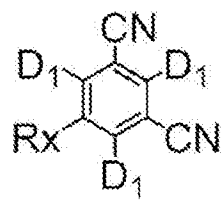


(1-11)

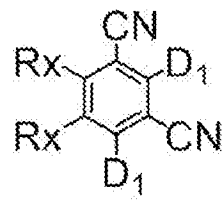


(1-12)

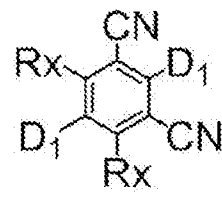
[化7]



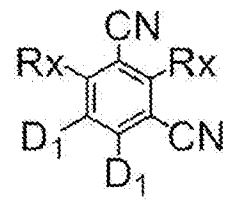
(1-13)



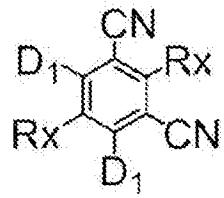
(1-14)



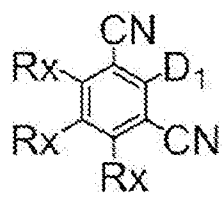
(1-15)



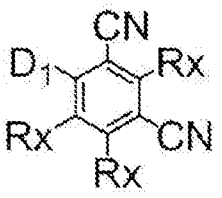
(1-16)



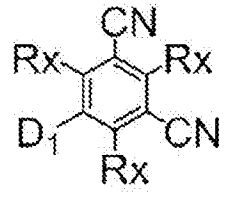
(1-17)



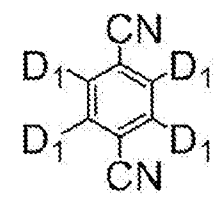
(1-18)



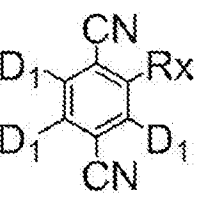
(1-19)



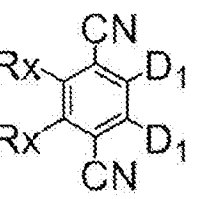
(1-20)



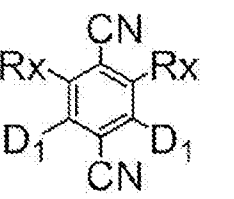
(1-21)



(1-22)

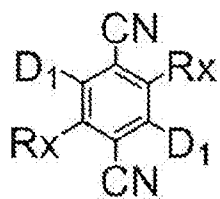


(1-23)

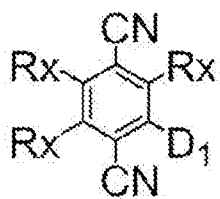


(1-24)

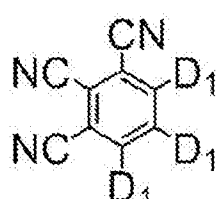
[化8]



(1-25)



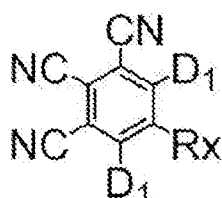
(1-26)



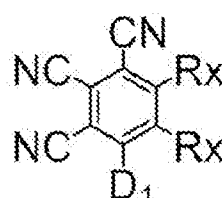
(1-27)



(1-28)



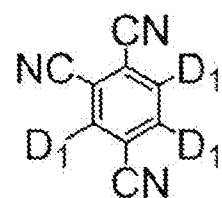
(1-29)



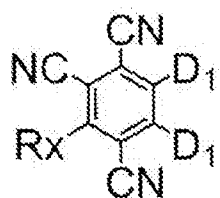
(1-30)



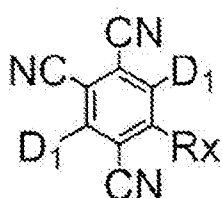
(1-31)



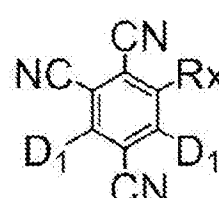
(1-32)



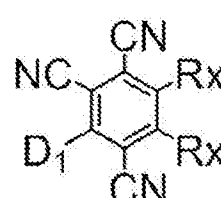
(1-33)



(1-34)

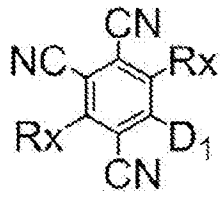


(1-35)

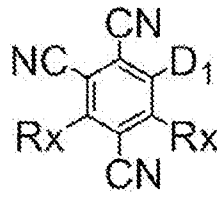


(1-36)

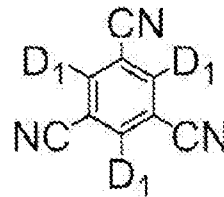
[化9]



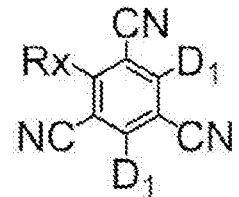
(1-37)



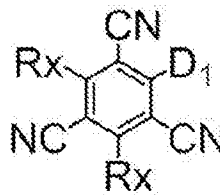
(1-38)



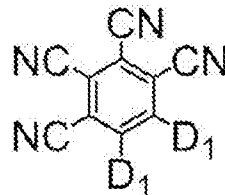
(1-39)



(1-40)



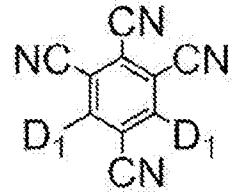
(1-41)



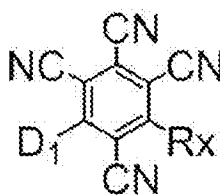
(1-42)



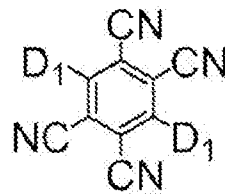
(1-43)



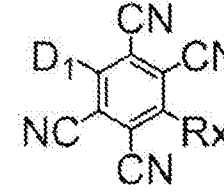
(1-44)



(1-45)



(1-46)



(1-47)

(前記一般式(1-1)～(1-47)におけるD₁は、それぞれ独立に、前記一般式(1)におけるD₁と同義であり、R_xは、それぞれ独立に、前記一般式(1)におけるR_xと同義である。)

[請求項4]

請求項3に記載の化合物において、

前記化合物は、前記一般式(1-4)～(1-7)、(1-14)～(1-17)及び(1-23)～(1-25)のいずれかで表される、

化合物。

[請求項5]

請求項4に記載の化合物において、

前記化合物は、前記一般式(1-6)、(1-23)又は(1-24)で表される、

化合物。

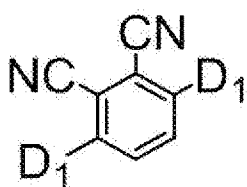
[請求項6]

請求項5に記載の化合物において、

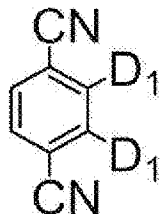
前記化合物は、下記一般式（1-6A）、（1-23A）又は（1-24A）で表される、

化合物。

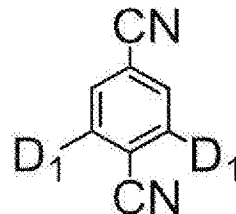
[化10]



(1-6A)



(1-23A)



(1-24A)

（前記一般式（1-6A）、（1-23A）及び（1-24A）におけるD₁は、それぞれ独立に、前記一般式（1）におけるD₁と同義である。）

[請求項7]

請求項4または請求項5に記載の化合物において、前記化合物は、前記一般式（1-6）で表される、化合物。

[請求項8]

請求項4または請求項5に記載の化合物において、前記化合物は、前記一般式（1-23）で表される、化合物。

[請求項9]

請求項4または請求項5に記載の化合物において、前記化合物は、前記一般式（1-24）で表される、化合物。

[請求項10]

請求項3に記載の化合物において、前記化合物は、前記一般式（1-1）、（1-10）又は（1-21）で表される、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において、置換基としてのR₁～R₈、R₃₁～R₃₈、R₁₉～R₂₀、R₄₁～R₄₈、及びR₅₀～R₅₂は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
 無置換の環形成原子数5～30の複素環基、または
 無置換の炭素数1～30のアルキル基である、

化合物。

[請求項12]

請求項1から請求項11のいずれか一項に記載の化合物において、
 前記一般式(132)におけるX₁は、酸素原子又は硫黄原子である、

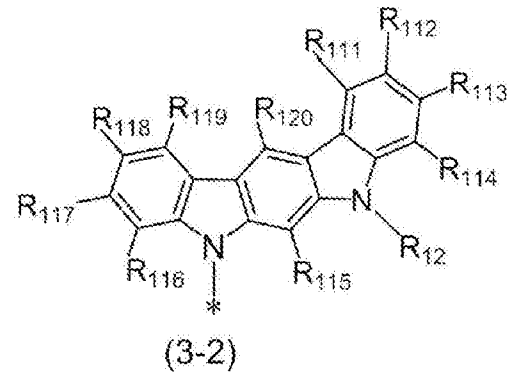
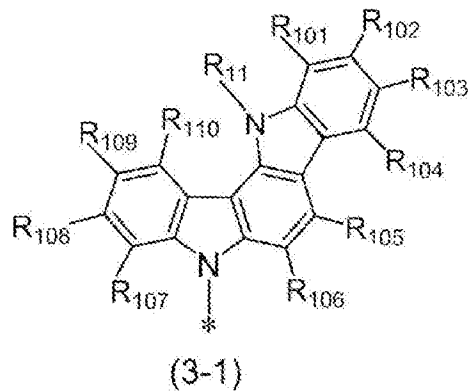
化合物。

[請求項13]

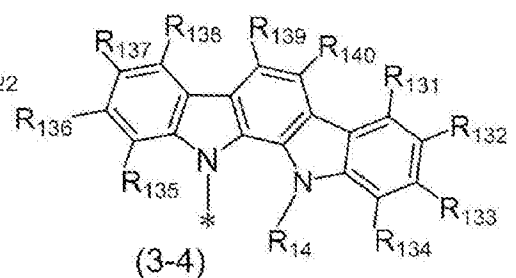
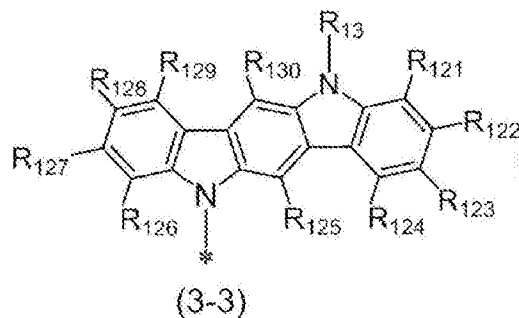
請求項1から請求項10のいずれか一項に記載の化合物において、
 前記D₁は、前記一般式(3)で表され、
 前記D₁は、下記一般式(3-1)～(3-12)のいずれかで表
 される基である、

化合物。

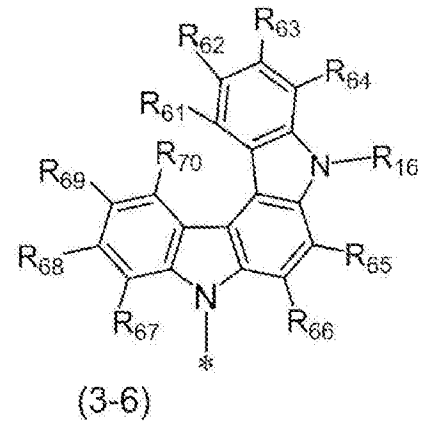
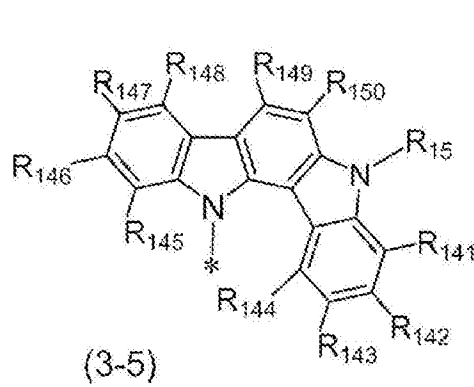
[化11]



[化12]



[化13]



(前記一般式(3-1)～(3-6)において、 $R_{11} \sim R_{16}$ は、置換基であり、 $R_{101} \sim R_{150}$ 及び $R_{61} \sim R_{70}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

置換基としての $R_{101} \sim R_{150}$ 及び $R_{61} \sim R_{70}$ は、それぞれ独立に

、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、

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炭素数3～6のアルキルシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基

、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～28のアリールアミノ基

、

置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基で

あり、

置換基としての $R_{11} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、

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6～14のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基

、

置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、

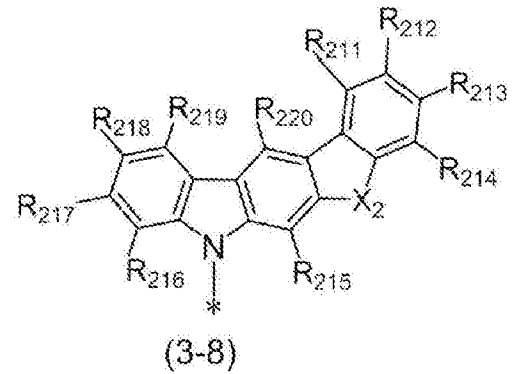
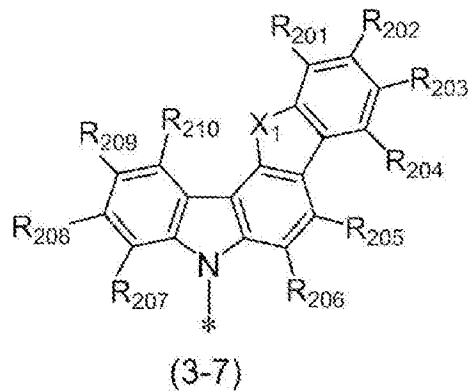
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基で

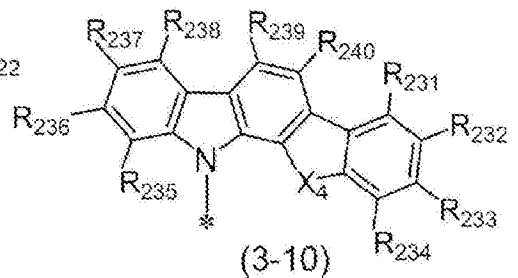
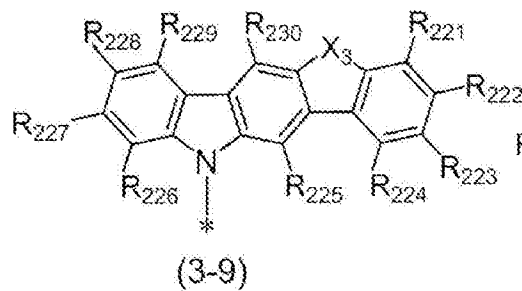
ある。

*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。)

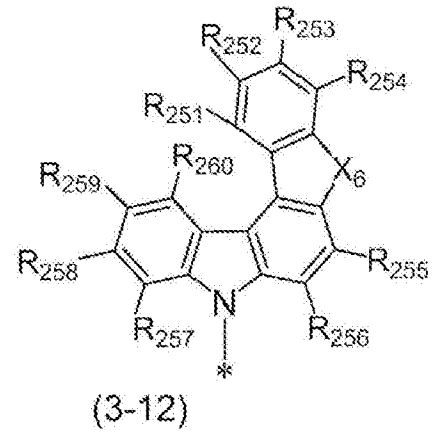
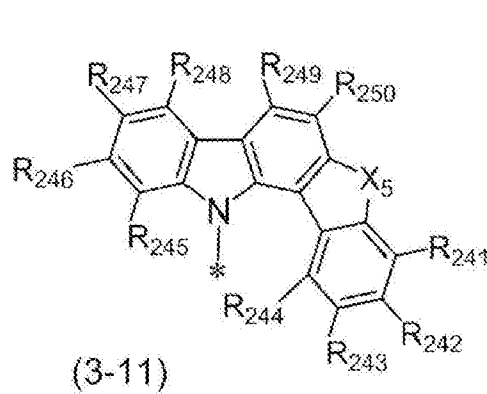
[化14]



[化15]



[化16]



(前記一般式(3-7)～(3-12)において、 $X_1 \sim X_6$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{151}R_{152}$ であり、 $R_{201} \sim R_{260}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{151} 及び R_{152} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{201} \sim R_{260}$ 、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、

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炭素数1～6のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基

、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～28のアリールアミノ基

、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 12 のアルキルアミノ基、
チオール基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 6 のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 14 のアリールチオ基で
ある。

*は、前記一般式 (1) 中におけるベンゼン環の炭素原子との結合
部位を表す。)

- [請求項14] 請求項 13 に記載の化合物において、
前記 D_1 は、前記一般式 (3-7) ～ (3-12) のいずれかで表
される基であり、
前記一般式 (3-7) ～ (3-12) における $X_1 \sim X_6$ は、硫黄
原子である、
化合物。
- [請求項15] 請求項 14 に記載の化合物において、
前記 D_1 は、前記一般式 (3-12) で表される基である、
化合物。
- [請求項16] 請求項 13 に記載の化合物において、
前記 D_1 は、前記一般式 (3-7) ～ (3-12) のいずれかで表
される基であり、
前記一般式 (3-7) ～ (3-12) における $X_1 \sim X_6$ は、酸素
原子である、
化合物。
- [請求項17] 請求項 13 に記載の化合物において、
前記 D_1 は、前記一般式 (3-7) ～ (3-12) のいずれかで表
される基であり、
前記一般式 (3-7) ～ (3-12) における $X_1 \sim X_6$ は、 CR_{151}
 R_{152} である、
化合物。

[請求項18] 請求項13に記載の化合物において、
前記D₁は、前記一般式(3-1)～(3-6)のいずれかで表される基である、

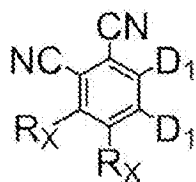
化合物。

[請求項19] 請求項3または請求項4に記載の化合物において、
前記化合物は、前記一般式(1-1)～(1-47)のうち、下記一般式(1-4)～(1-7)、(1-14)～(1-17)及び(1-23)～(1-25)のいずれかで表され、

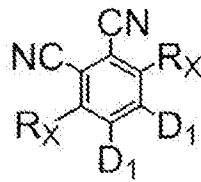
前記D₁は、下記一般式(3-1)～(3-12)のいずれかで表される基である、

化合物。

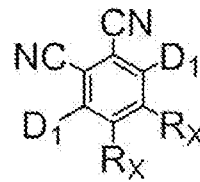
[化17]



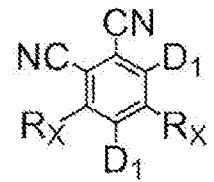
(1-4)



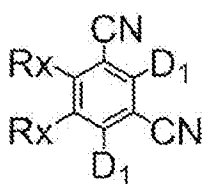
(1-5)



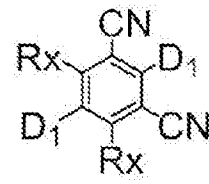
(1-6)



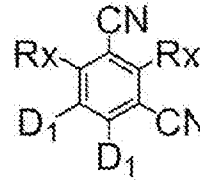
(1-7)



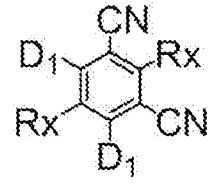
(1-14)



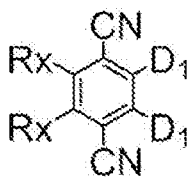
(1-15)



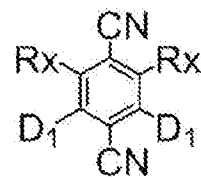
(1-16)



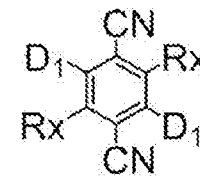
(1-17)



(1-23)



(1-24)

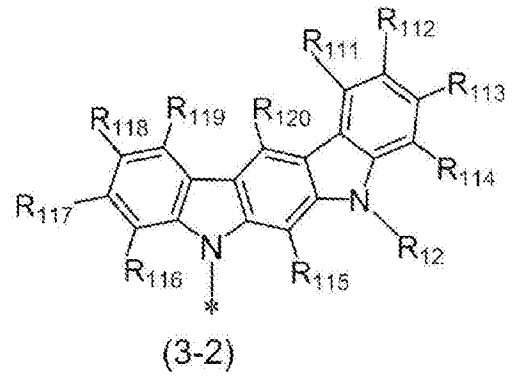
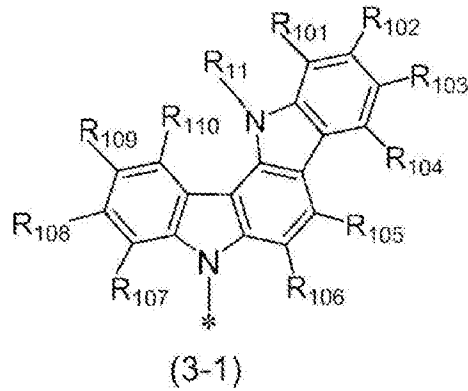


(1-25)

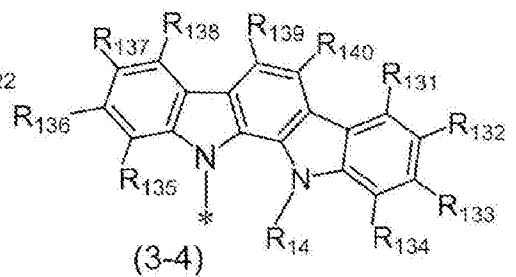
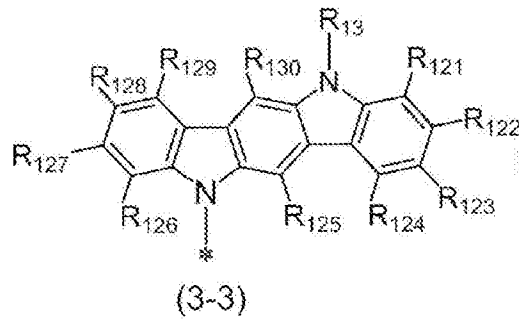
(前記一般式(1-4)～(1-7)、(1-14)～(1-17)及び(1-23)～(1-25)におけるD₁は、それぞれ独立に、前記一般式(1)におけるD₁と同義であり、R_xは、それぞれ独立

に、前記一般式（１）におけるR_xと同義である。）

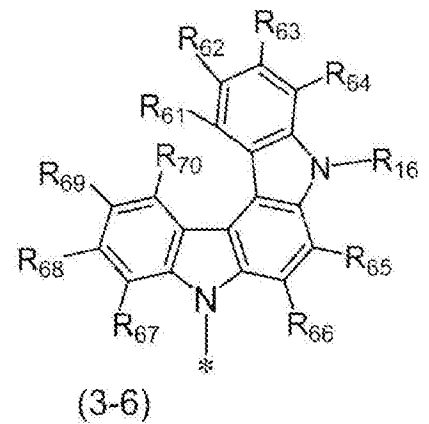
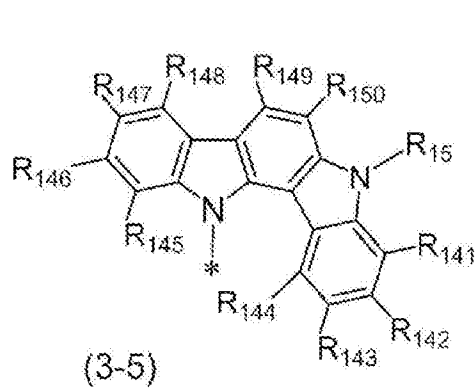
[化18]



[化19]



[化20]



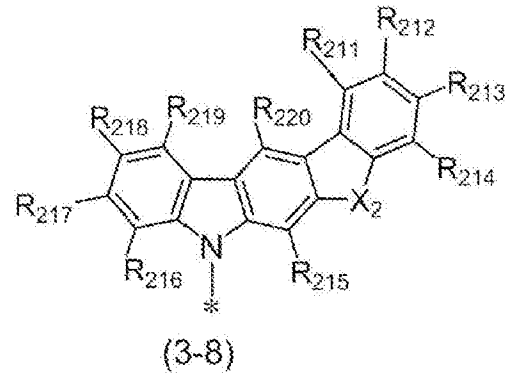
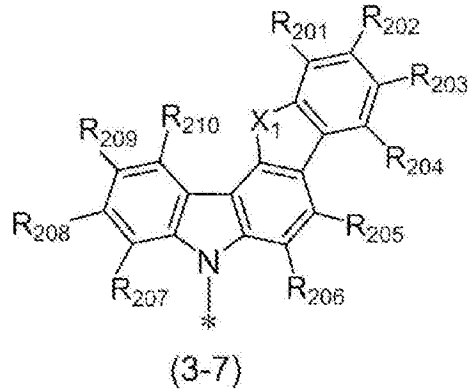
（前記一般式（３－１）～（３－６）において、R₁₁～R₁₆は、置換基であり、R₁₀₁～R₁₅₀及びR₆₁～R₇₀は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

置換基としてのR₁₀₁～R₁₅₀及びR₆₁～R₇₀は、それぞれ独立に

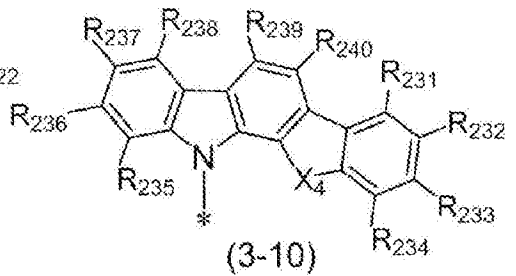
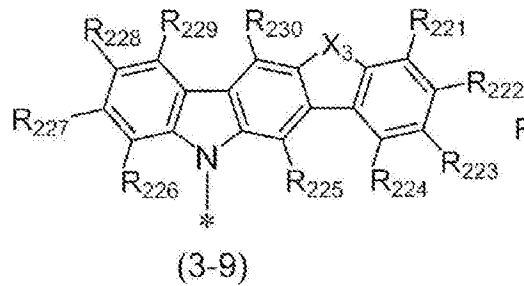
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、
ヒドロキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルコキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基
、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～28のアリールアミノ基
、
置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、
チオール基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基で
あり、
置換基としての $R_{11} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、
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6～14のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、
置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基
、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～28のアリールアミノ基
、
置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基で
ある。

*は、前記一般式（１）中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。）

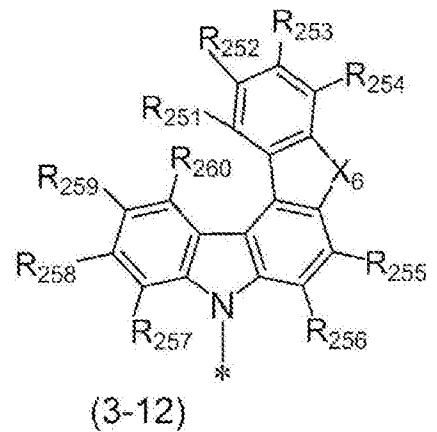
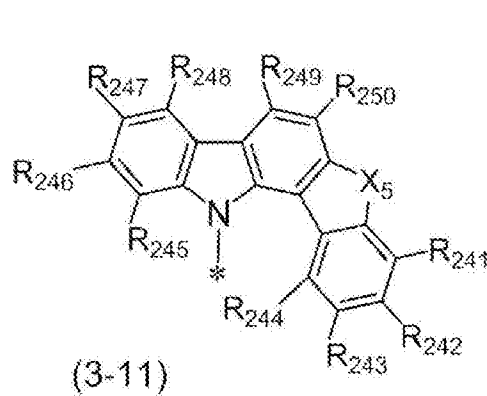
[化21]



[化22]



[化23]



（前記一般式（３－７）～（３－１２）において、 $X_1 \sim X_6$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{151}R_{152}$ であり、 $R_{201} \sim R_{260}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{151} 及び R_{152} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{201} \sim R_{260}$ 、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、

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炭素数1～6のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基

、

置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基で

ある。

*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。)

[請求項20]

請求項19に記載の化合物において、

前記 D_1 は、前記一般式(3-7)～(3-12)のいずれかで表される基であり、

前記一般式(3-7)～(3-12)における $X_1 \sim X_6$ は、硫黄原子である、

化合物。

[請求項21]

請求項19に記載の化合物において、

前記 D_1 は、前記一般式(3-1)～(3-6)のいずれかで表さ

れる基である、

化合物。

[請求項22]

請求項20または請求項21に記載の化合物において、

前記化合物は、前記一般式(1-6)、(1-23)又は(1-24)で表される、

化合物。

[請求項23]

請求項19から請求項22のいずれか一項に記載の化合物において

、

前記一般式(3-7)における X_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、

前記一般式(3-8)における X_2 は、酸素原子又は硫黄原子であり、

前記一般式(3-9)における X_3 は、酸素原子又は硫黄原子であり、

前記一般式(3-10)における X_4 は、酸素原子又は硫黄原子であり、

前記一般式(3-11)における X_5 は、酸素原子又は硫黄原子であり、

前記一般式(3-12)における X_6 は、酸素原子又は硫黄原子である、

化合物。

[請求項24]

請求項13から請求項23のいずれか一項に記載の化合物において

、

置換基としての $R_{101} \sim R_{150}$ 及び $R_{61} \sim R_{70}$ は、それぞれ独立に

、

無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、

無置換の環形成原子数5～14の複素環基、または

無置換の炭素数1～6のアルキル基であり、

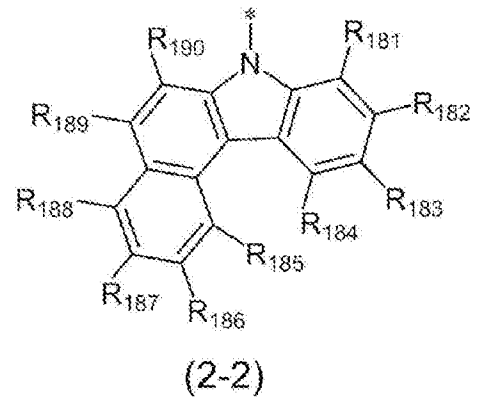
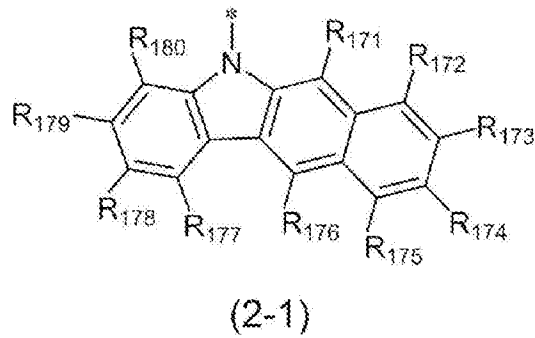
置換基としての $R_{11} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、
 無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、または
 無置換の環形成原子数5～14の複素環基であり、
 置換基としての $R_{201} \sim R_{260}$ は、それぞれ独立に、
 無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、
 無置換の環形成原子数5～14の複素環基、または
 無置換の炭素数1～6のアルキル基であり、
 置換基としての R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、
 無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、または
 無置換の炭素数1～6のアルキル基である、
 化合物。

[請求項25] 請求項13から請求項23のいずれか一項に記載の化合物において

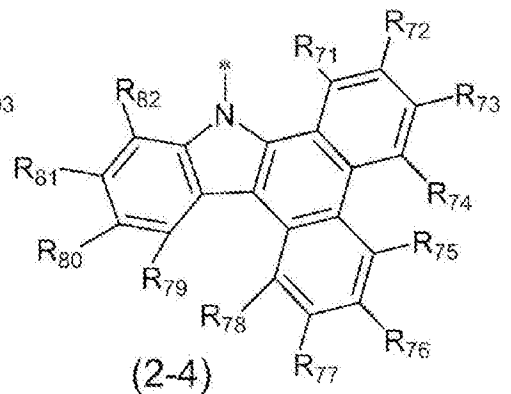
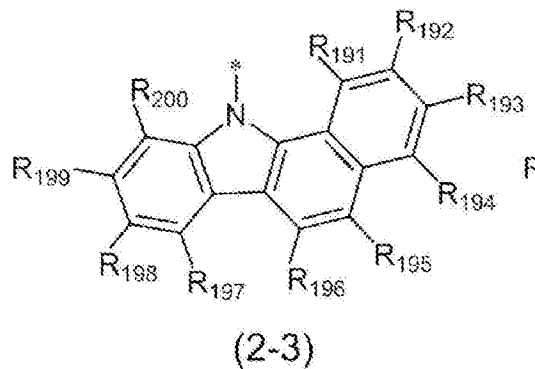
、
 $R_{101} \sim R_{150}$ 及び $R_{61} \sim R_{70}$ は、水素原子であり、
 置換基としての $R_{11} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、
 無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、または
 無置換の環形成原子数5～14の複素環基であり、
 $R_{201} \sim R_{260}$ は、水素原子であり、
 置換基としての R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、
 無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、または
 無置換の炭素数1～6のアルキル基である、
 化合物。

[請求項26] 請求項1から請求項10のいずれか一項に記載の化合物において、
 前記 D_1 は、下記一般式(2-1)、(2-2)、(2-3)又は
 (2-4)で表される基である、
 化合物。

[化24]



[化25]



(前記一般式 (2-1) ~ (2-4) において、R₁₇₁ ~ R₂₀₀ 及び R₇₁ ~ R₈₂ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R₁₇₁ 及び R₁₇₂ の組、R₁₇₂ 及び R₁₇₃ の組、R₁₇₃ 及び R₁₇₄ の組、R₁₇₄ 及び R₁₇₅ の組、R₁₇₅ 及び R₁₇₆ の組、R₁₇₇ 及び R₁₇₈ の組、R₁₇₈ 及び R₁₇₉ の組、R₁₇₉ 及び R₁₈₀ の組、R₁₈₁ 及び R₁₈₂ の組、R₁₈₂ 及び R₁₈₃ の組、R₁₈₃ 及び R₁₈₄ の組、R₁₈₅ 及び R₁₈₆ の組、R₁₈₆ 及び R₁₈₇ の組、R₁₈₇ 及び R₁₈₈ の組、R₁₈₈ 及び R₁₈₉ の組、R₁₈₉ 及び R₁₉₀ の組、R₁₉₁ 及び R₁₉₂ の組、R₁₉₂ 及び R₁₉₃ の組、R₁₉₃ 及び R₁₉₄ の組、R₁₉₄ 及び R₁₉₅ の組、R₁₉₅ 及び R₁₉₆ の組、R₁₉₇ 及び R₁₉₈ の組、R₁₉₈ 及び R₁₉₉ の組、R₁₉₉ 及び R₂₀₀ の組、R₇₁ 及び R₇₂ の組、R₇₂ 及び R₇₃ の組、R₇₃ 及び R₇₄ の組、R₇₅ 及び R₇₆ の組、R₇₆ 及び R₇₇ の組、R₇₇ 及び R₇₈ の組、R₇₉ 及び R₈₀ の組、R₈₀ 及び R₈₁ の組、並びに R₈₁ 及び R₈₂ の組、

$_2$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、
置換基としての $R_{171} \sim R_{200}$ 及び $R_{71} \sim R_{82}$ は、それぞれ独立に

、
ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、
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炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、
ヒドロキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルコキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のハロゲン化アルコキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基

、
置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、
チオール基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基で
ある。

*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合
部位を表す。)

[請求項27] 請求項26に記載の化合物において、
前記 D_1 は、前記一般式(2-1)、(2-3)、又は(2-4)
で表される基である、
化合物。

[請求項28] 請求項26または請求項27に記載の化合物において、
前記 D_1 は、前記一般式(2-1)または(2-3)で表される基
である、

化合物。

[請求項29]

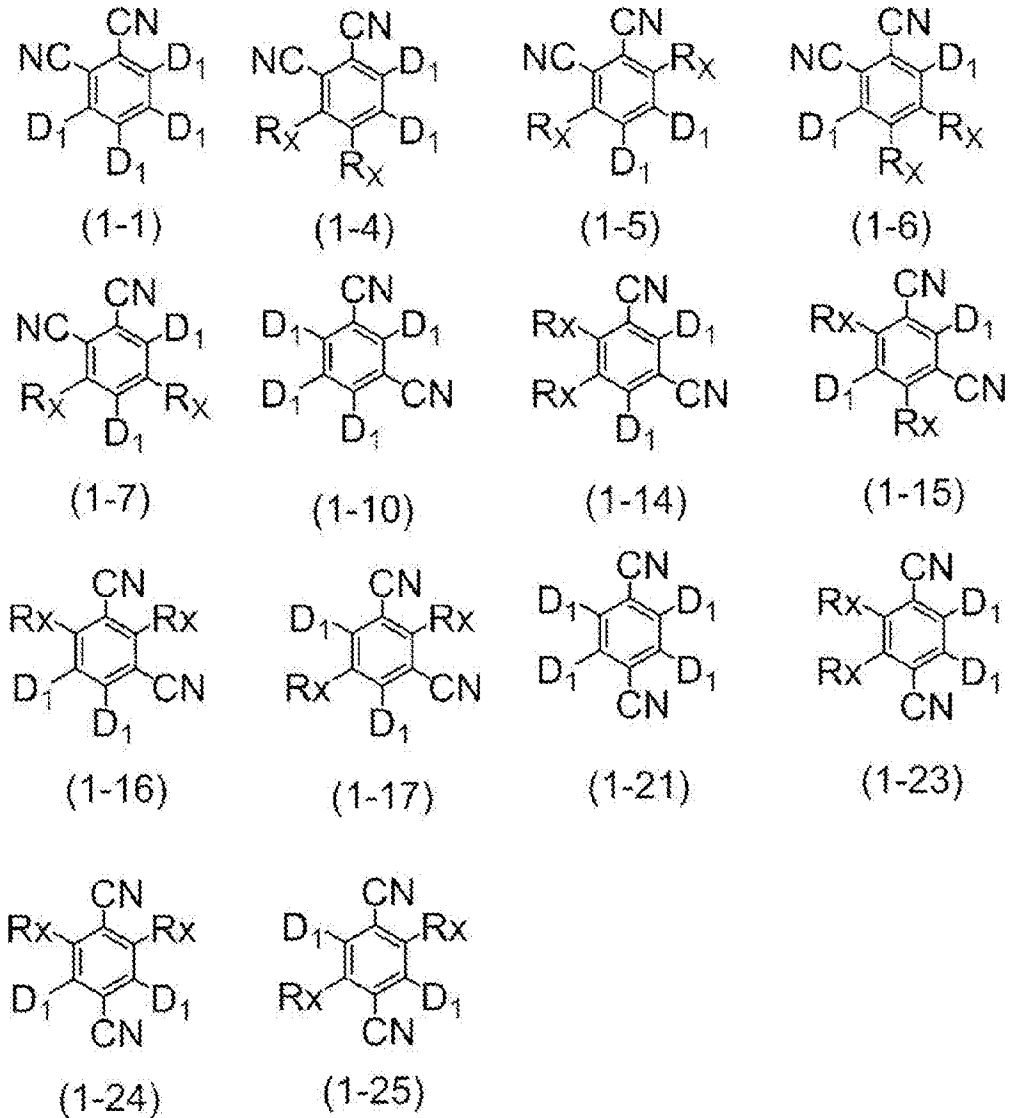
請求項3に記載の化合物において、

前記化合物は、前記一般式(1-1)～(1-47)のうち、下記一般式(1-1)、(1-4)～(1-7)、(1-10)、(1-14)～(1-17)、(1-21)及び(1-23)～(1-25)のいずれかで表され、

前記D₁は、下記一般式(2-1)～(2-4)のいずれかで表される基である、

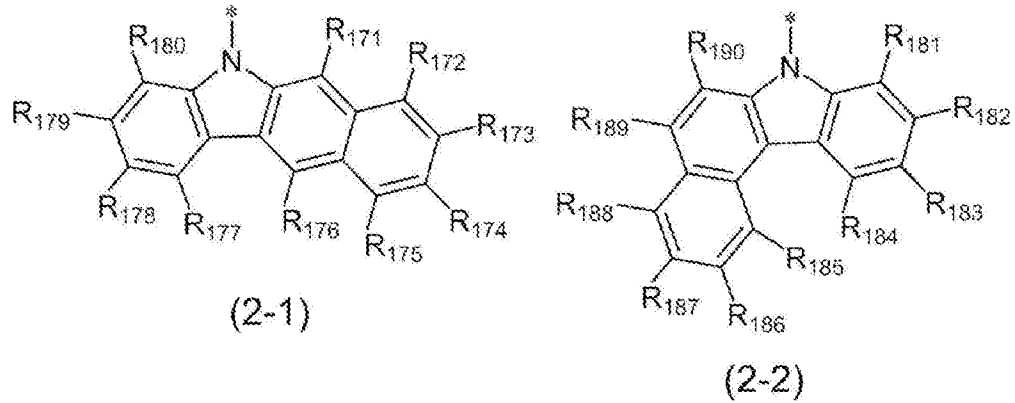
化合物。

[化26]

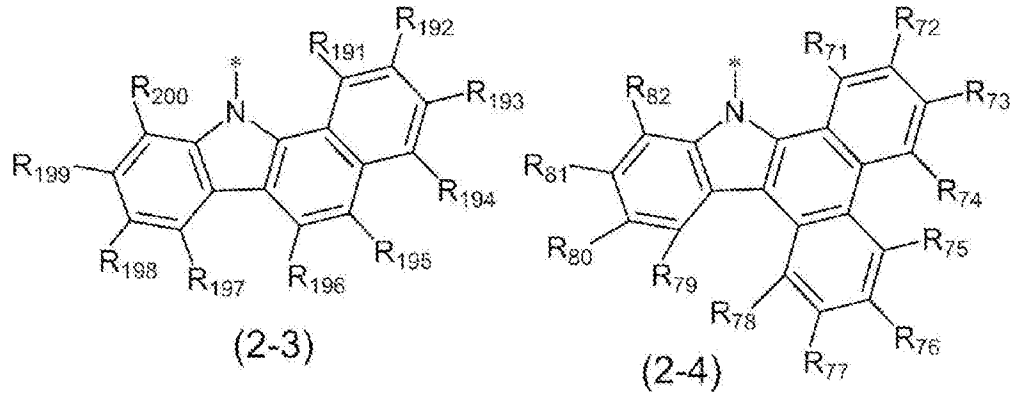


(前記一般式(1-1)、(1-4)～(1-7)、(1-10)、(1-14)～(1-17)、(1-21)及び(1-23)～(1-25)における R_x は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における R_x と同義である。)

[化27]



[化28]



(前記一般式(2-1)～(2-4)において、 R_{171} ～ R_{200} 及び R_{71} ～ R_{82} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{171} 及び R_{172} の組、 R_{172} 及び R_{173} の組、 R_{173} 及び R_{174} の組、 R_{174} 及び R_{175} の組、 R_{175} 及び R_{176} の組、 R_{177} 及び R_{178} の組、 R_{178} 及び R_{179} の組、 R_{179} 及び R_{180} の組、 R_{181} 及び R_{182} の組、 R_{182} 及び R_{183} の組、 R_{183} 及び R_{184} の組、 R_{185} 及び R_{186} の組、 R_{186} 及び R_{187} の組、 R_{187} 及び R_{188} の組、 R_{188} 及び R_{189} の組、 R_{189} 及び R_{190} の組、 R_{191} 及び R_{192} の組、 R_{192} 及び R_{193} の組、 R_{193} 及び R_{194} の組、 R_{194} 及び R_{195} の組、 R_{195}

R_{195} 及び R_{196} の組、 R_{197} 及び R_{198} の組、 R_{198} 及び R_{199} の組、 R_{199} 及び R_{200} の組、 R_{71} 及び R_{72} の組、 R_{72} 及び R_{73} の組、 R_{73} 及び R_{74} の組、 R_{75} 及び R_{76} の組、 R_{76} 及び R_{77} の組、 R_{77} 及び R_{78} の組、 R_{79} 及び R_{80} の組、 R_{80} 及び R_{81} の組、並びに R_{81} 及び R_{82} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{171} \sim R_{200}$ 及び $R_{71} \sim R_{82}$ は、それぞれ独立に

、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、

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炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基

、

置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基で

ある。

*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。)

[請求項30]

請求項29に記載の化合物において、

前記化合物は、前記一般式(1-6)、(1-23)又は(1-24)で表される、

化合物。

[請求項31]

請求項29に記載の化合物において、

前記化合物は、前記一般式(1-1)、(1-10)又は(1-21)で表される、

化合物。

[請求項32]

請求項26から請求項31のいずれか一項に記載の化合物において

、

置換基としての $R_{171} \sim R_{200}$ 及び $R_{71} \sim R_{82}$ は、それぞれ独立に

、

無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、

無置換の環形成原子数5～14の複素環基、または

無置換の炭素数1～6のアルキル基である、

化合物。

[請求項33]

請求項26から請求項31のいずれか一項に記載の化合物において

、

$R_{171} \sim R_{200}$ 及び $R_{71} \sim R_{82}$ は、水素原子である、

化合物。

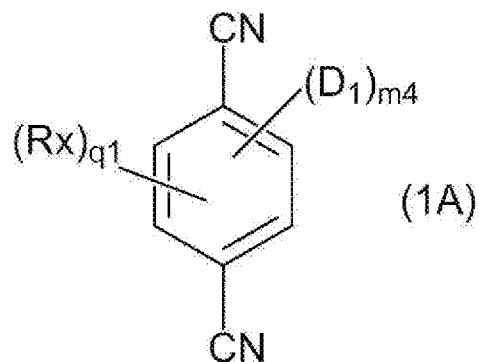
[請求項34]

請求項1に記載の化合物において、

前記一般式(1)で表される化合物は、下記一般式(1A)で表される化合物である、

化合物。

[化29]



(前記一般式(1A)において、 m_4 は、1以上4以下の整数であり、 q_1 は、0以上3以下の整数であり、 $m_4 + q_1 = 4$ であり、CNは、シアノ基であり、

前記 D_1 は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における D_1 と同義であり、前記 R_x は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における R_x と同義であり、 D_1 及び R_x は、それぞれ、前記一般式(1A)中におけるベンゼン環の炭素原子に結合する。)

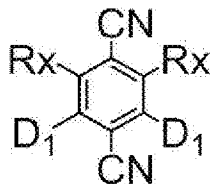
[請求項35]

請求項34に記載の化合物において、

前記一般式(1A)で表される化合物は、下記一般式(1-24)で表される化合物である、

化合物。

[化30]



(1-24)

(前記一般式(1-24)における D_1 は、前記一般式(1A)における D_1 と同義であり、 R_x は、それぞれ独立に、前記一般式(1A)における R_x と同義である。)

[請求項36]

請求項35に記載の化合物において、

前記一般式(1-24)における D_1 は、前記一般式(3)で表される基である、

化合物。

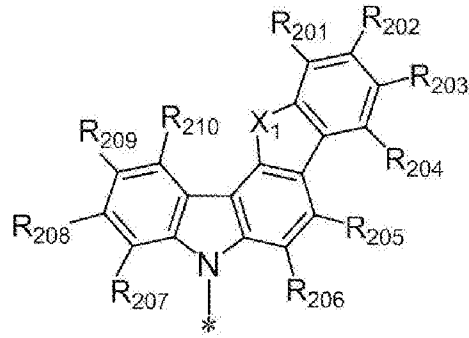
[請求項37]

請求項35または請求項36に記載の化合物において、

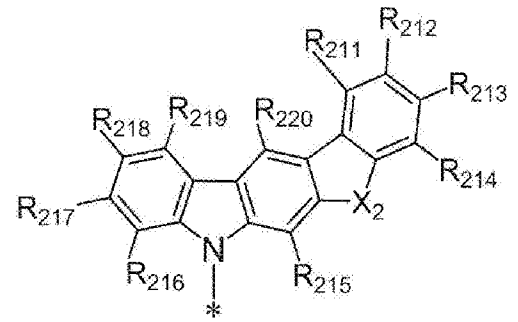
前記一般式(1-24)における D_1 は、下記一般式(3-7A)～(3-12A)のいずれかで表される基である、

化合物。

[化31]

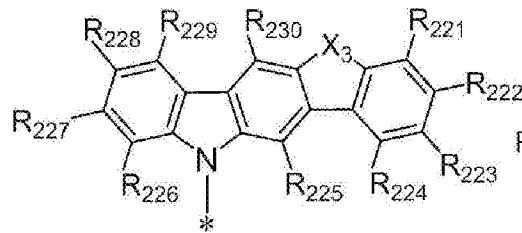


(3-7A)

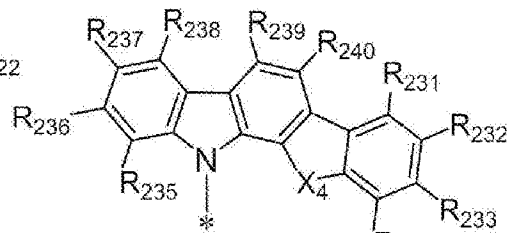


(3-8A)

[化32]

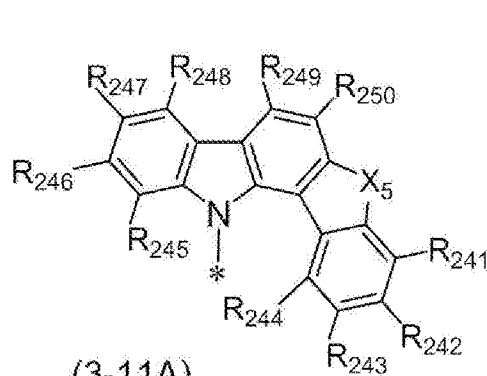


(3-9A)

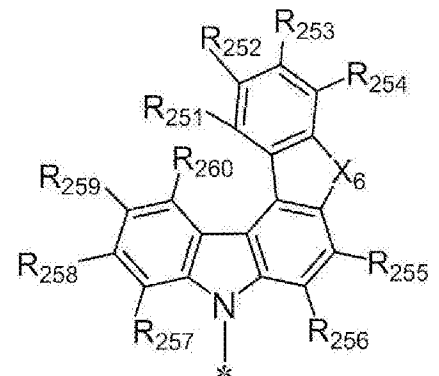


(3-10A)

[化33]



(3-11A)



(3-12A)

(前記一般式 (3-7A) ~ (3-12A) において、 $X_1 \sim X_6$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{151}R_{152}$ であり、 $R_{201} \sim R_{260}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{151} 及び R_{152} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{201} \sim R_{260}$ 、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立

に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、

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炭素数1～6のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基

、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～28のアリールアミノ基

、

置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基で

ある。

*は、前記一般式(1-24)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。)

[請求項38]

請求項37に記載の化合物において、

前記一般式(3-7A)における X_1 は、酸素原子または硫黄原子であり、

前記一般式(3-8A)における X_2 は、酸素原子または硫黄原子であり、

前記一般式(3-9A)における X_3 は、酸素原子または硫黄原子であり、

前記一般式 (3-10A) における X_4 は、酸素原子または硫黄原子であり、

前記一般式 (3-11A) における X_5 は、酸素原子または硫黄原子であり、

前記一般式 (3-12A) における X_6 は、酸素原子または硫黄原子である、

化合物。

[請求項39]

請求項37または請求項38に記載の化合物において、

前記一般式 (1-24) における D_1 は、前記一般式 (3-7A) 又は (3-10A) で表される基である、

化合物。

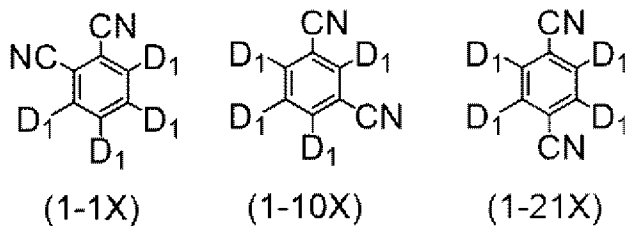
[請求項40]

請求項1に記載の化合物において、

前記化合物は、下記一般式 (1-1X)、(1-10X) 又は (1-21X) で表される、

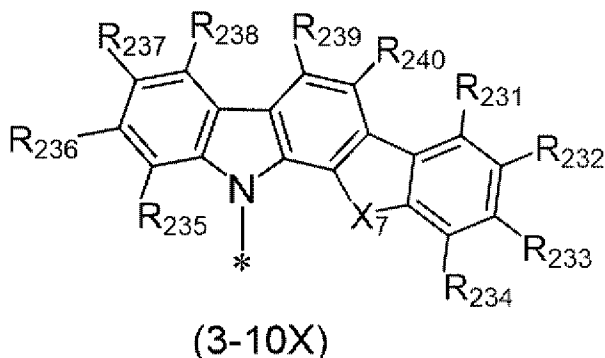
化合物。

[化34]



(前記一般式 (1-1X)、(1-10X) 又は (1-21X) において、 D_1 は、下記一般式 (3-10X) で表される基である。)

[化35]



(前記一般式 (3-10X) において、 X_7 は、酸素原子、硫黄原子、 NR_{52} 、または $CR_{151}R_{152}$ であり、 $R_{231} \sim R_{240}$ 及び R_{52} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{151} 及び R_{152} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{231} \sim R_{240}$ 、 R_{52} 、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～14 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～14 の複素環基、

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炭素数 1～6 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3～6 のアルキルシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～14 のアリールオキシ基

、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～28 のアリールアミノ基

、

置換もしくは無置換の炭素数 2～12 のアルキルアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～14 のアリールチオ基で

ある。

*は、前記一般式 (1-1X)、(1-10X) 及び (1-21X) 中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。)

[請求項41]

請求項40に記載の化合物において、

前記一般式 (3-10X) における X₇ は、酸素原子または硫黄原子である、

化合物。

[請求項42] 請求項40または請求項41に記載の化合物において、
前記化合物は、前記一般式 (1-10X) で表される、
化合物。

[請求項43] 請求項40から請求項42のいずれか一項に記載の化合物において、
、
前記化合物は、前記一般式 (1-10X) で表される化合物であり、
、

前記一般式 (3-10X) における X₇ は、酸素原子または硫黄原子である、

化合物。

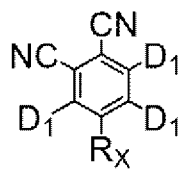
[請求項44] 請求項1または請求項2に記載の化合物において、
前記化合物は、下記一般式 (1-2X)、(1-3X)、(1-11X)、(1-12X)、(1-13X) 及び (1-22X) のいずれかで表される、

化合物。

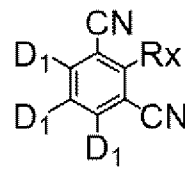
[化36]



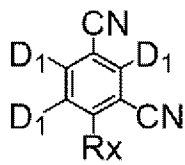
(1-2X)



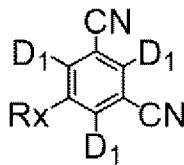
(1-3X)



(1-11X)



(1-12X)



(1-13X)



(1-22X)

(前記一般式 (1-2X)、(1-3X)、(1-11X)、(1-

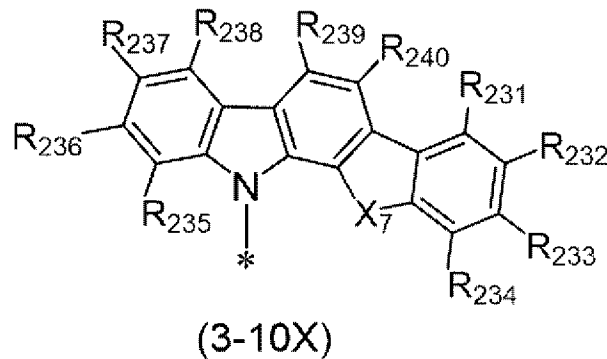
1 2 X)、(1-1 3 X) 及び (1-2 2 X) における D_1 は、前記一般式 (1) における D_1 と同義であり、 R_x は、前記一般式 (1) における R_x と同義である。)

[請求項45] 請求項4 4 に記載の化合物において、
前記化合物は、前記一般式 (1-2 2 X) で表される、
化合物。

[請求項46] 請求項4 4 または請求項4 5 に記載の化合物において、
 R_x は、水素原子である、
化合物。

[請求項47] 請求項4 4 から請求項4 6 のいずれか一項に記載の化合物において
、
 D_1 は、下記一般式 (3-1 0 X) で表される基である、
化合物。

[化37]



(前記一般式 (3-1 0 X) において、 X_7 は、酸素原子、硫黄原子、 NR_{52} 、または $CR_{151}R_{152}$ であり、 $R_{231} \sim R_{240}$ 及び NR_{52} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{151} 及び R_{152} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{231} \sim R_{240}$ 、 NR_{52} 、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5～14の複素環基、
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炭素数1～6のハロゲン化アルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数3～6のアルキルシリル基、
ヒドロキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルコキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のハロゲン化アルコキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールオキシ基
、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～28のアリールアミノ基
、
置換もしくは無置換の炭素数2～12のアルキルアミノ基、
チオール基、
置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～14のアリールチオ基で
ある。

*は、前記一般式(1-2X)、(1-3X)、(1-11X)、
(1-12X)、(1-13X)及び(1-22X)中におけるベン
ゼン環の炭素原子との結合部位を表す。)

[請求項48] 請求項47に記載の化合物において、
前記一般式(3-10X)におけるX₇は、酸素原子または硫黄原
子である、
化合物。

[請求項49] 請求項1から請求項48のいずれか一項に記載の化合物を含む、有
機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

[請求項50] 陽極と、
陰極と、

前記陽極と前記陰極との間に含まれる第一の有機層と、
を有し、

前記第一の有機層は、第一の化合物を含み、

前記第一の化合物は、請求項 1 から請求項 4 8 のいずれか一項に記載の化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項51] 請求項 5 0 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第一の有機層は、発光層である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項52] 請求項 5 0 または請求項 5 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の有機層は、前記第一の化合物と、さらに第二の化合物とを含み、

前記第二の化合物は、蛍光発光性の化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項53] 請求項 5 2 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第一の有機層は、前記第一の化合物及び前記第二の化合物と、
さらに第三の化合物を含み、

前記第一の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 1) と、前記第三の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 3) とが、下記数式 (数 2) の関係を満たす、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$S_1 (\text{Mat } 3) > S_1 (\text{Mat } 1) \quad (\text{数 } 2)$$

[請求項54] 請求項 5 2 または請求項 5 3 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第二の化合物は、下記一般式 (2 0) で表される化合物であり、

前記第一の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 1) と、前記第

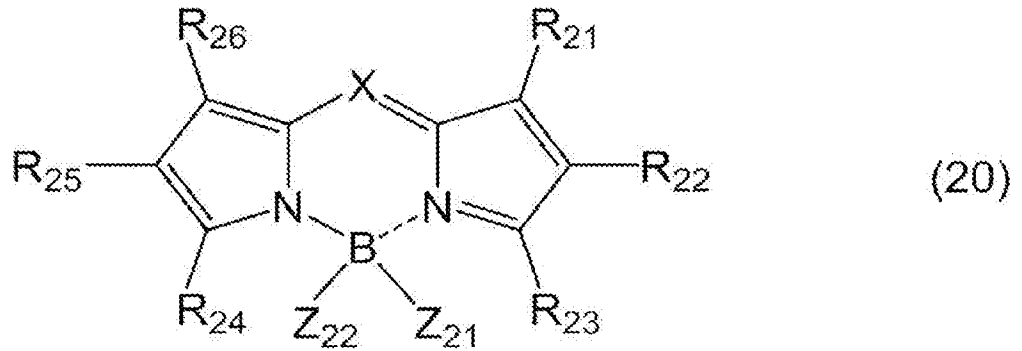
二の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 2) とが、下記数式 (数 3) の関係を満たす、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$S_1 (\text{Mat 1}) > S_1 (\text{Mat 2}) \quad (\text{数 3})$$

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化38]



(前記一般式 (20) において、

Xは、窒素原子、又はYと結合する炭素原子であり、

Yは、水素原子又は置換基であり、

$R_{21} \sim R_{26}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{21} 及び R_{22} の組、 R_{22} 及び R_{23} の組、 R_{24} 及び R_{25} の組、並びに R_{25} 及び R_{26} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としてのY、及び $R_{21} \sim R_{26}$ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～30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6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルコキシ基

、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基

、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、
置換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

、

ハロゲン原子、
カルボキシ基、
置換もしくは無置換のエステル基、
置換もしくは無置換のカルバモイル基、
置換もしくは無置換のアミノ基、
ニトロ基、
シアノ基、
置換もしくは無置換のシリル基、および
置換もしくは無置換のシロキサニル基からなる群から選択され、
 Z_{21} および Z_{22} は、それぞれ独立に、置換基であるか、又は Z_{21}
及び Z_{22} が互いに結合して環を形成し、
置換基としての Z_{21} 及び Z_{22} は、それぞれ独立に、
ハロゲン原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルコキシ基

、 および

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基

からなる群から選択される。)

[請求項55] 請求項52から請求項54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、

前記第二の化合物の主ピーク波長は、600nm以上660nm以下である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項56] 請求項55に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

当該有機エレクトロルミネッセンス素子から発光する光の主ピーク波長は、600nm以上660nm以下である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項57] 請求項52から請求項54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、

前記第二の化合物の主ピーク波長は、500nm以上560nm以下である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項58] 請求項57に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

当該有機エレクトロルミネッセンス素子から発光する光の主ピーク波長は、500nm以上560nm以下である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項59] 請求項50または請求項51に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の有機層は、前記第一の化合物と、さらに第四の化合物とを含み、

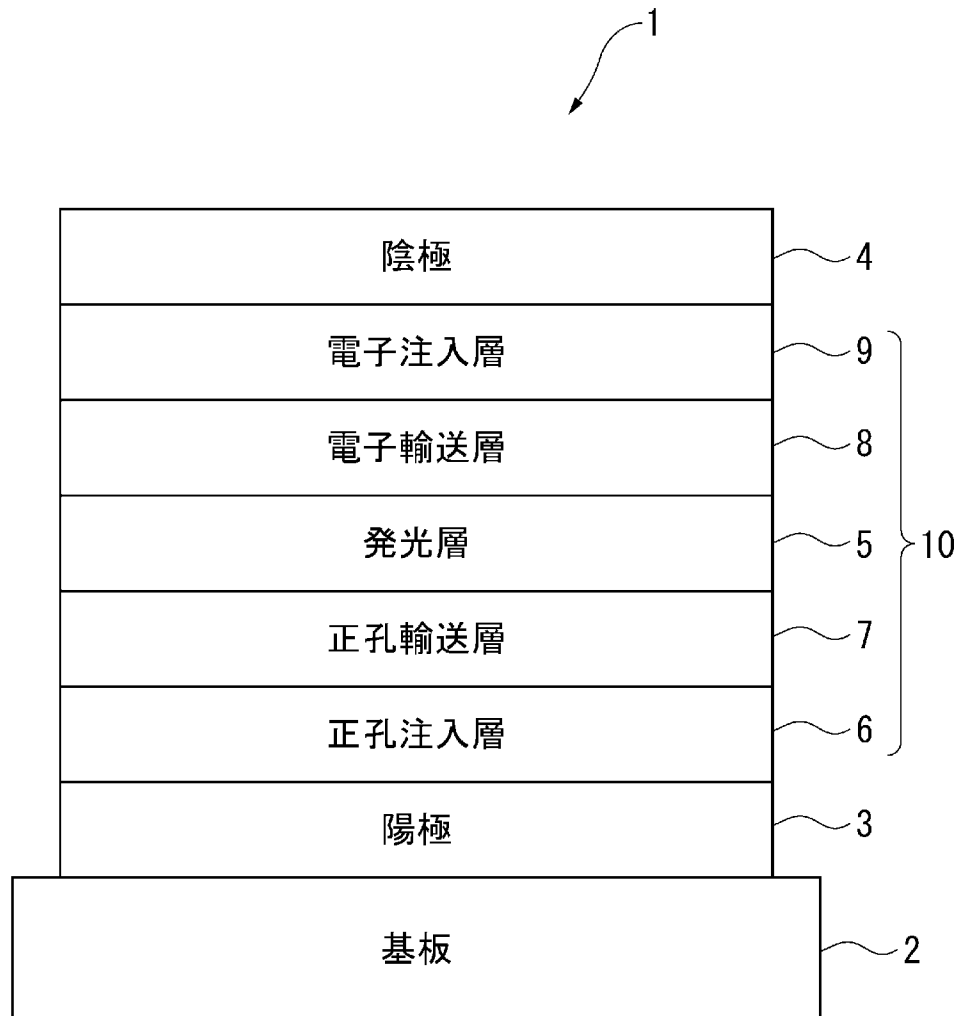
前記第一の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 1) と、前記第四の化合物の一重項エネルギー S_1 (Mat 4) とが、下記数式 (数4) の関係を満たす、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

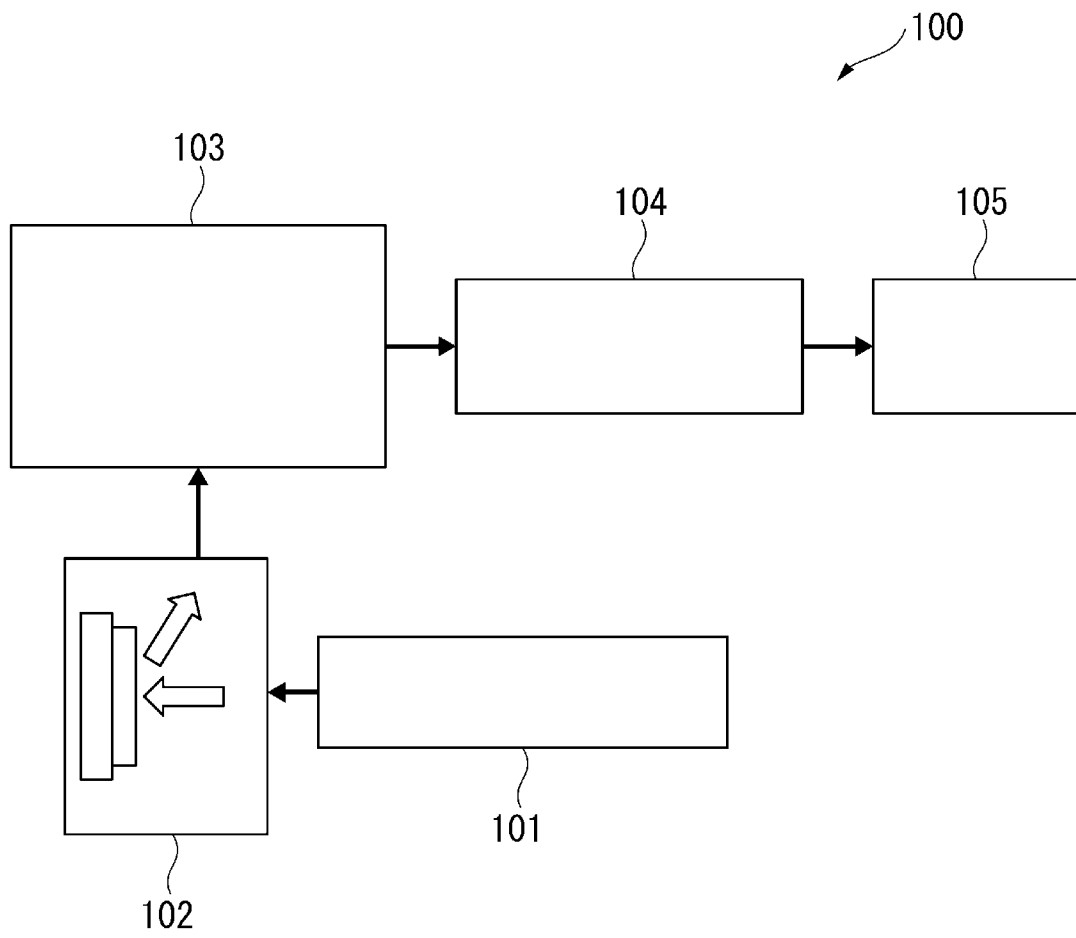
$$S_1 (\text{Mat } 4) > S_1 (\text{Mat } 1) \quad (\text{数 } 4)$$

- [請求項60] 請求項50から請求項59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、
前記第一の有機層は、金属錯体を含まない、
有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項61] 請求項50から請求項60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、
前記第一の化合物は、遅延蛍光性の化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項62] 請求項50から請求項61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。

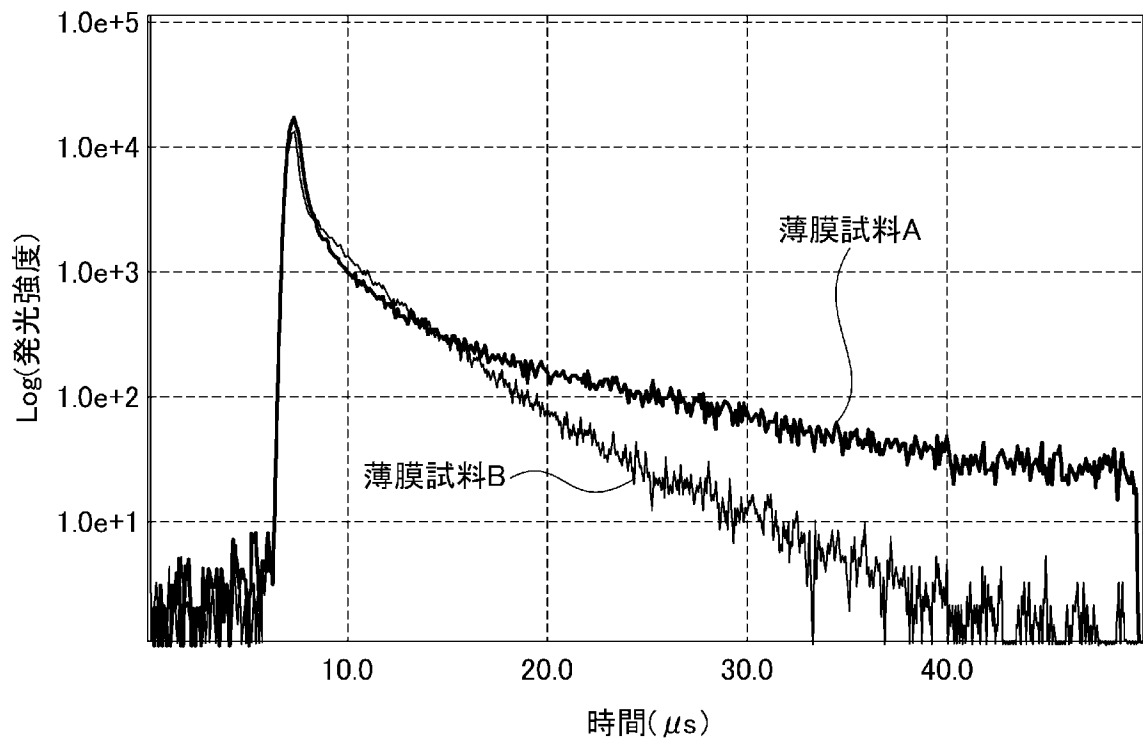
[図1]



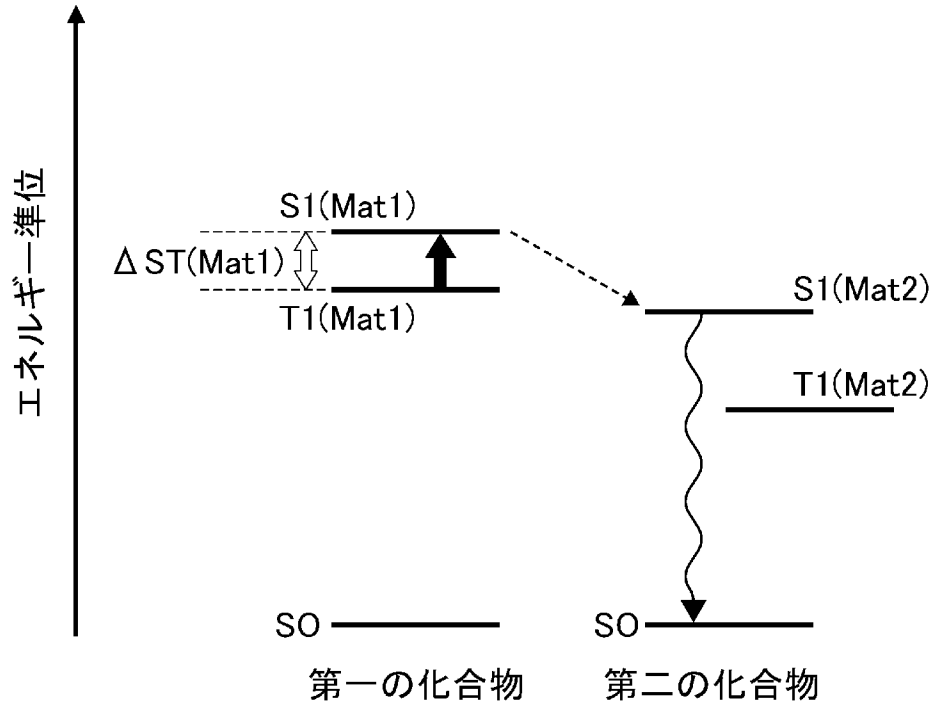
[図2]



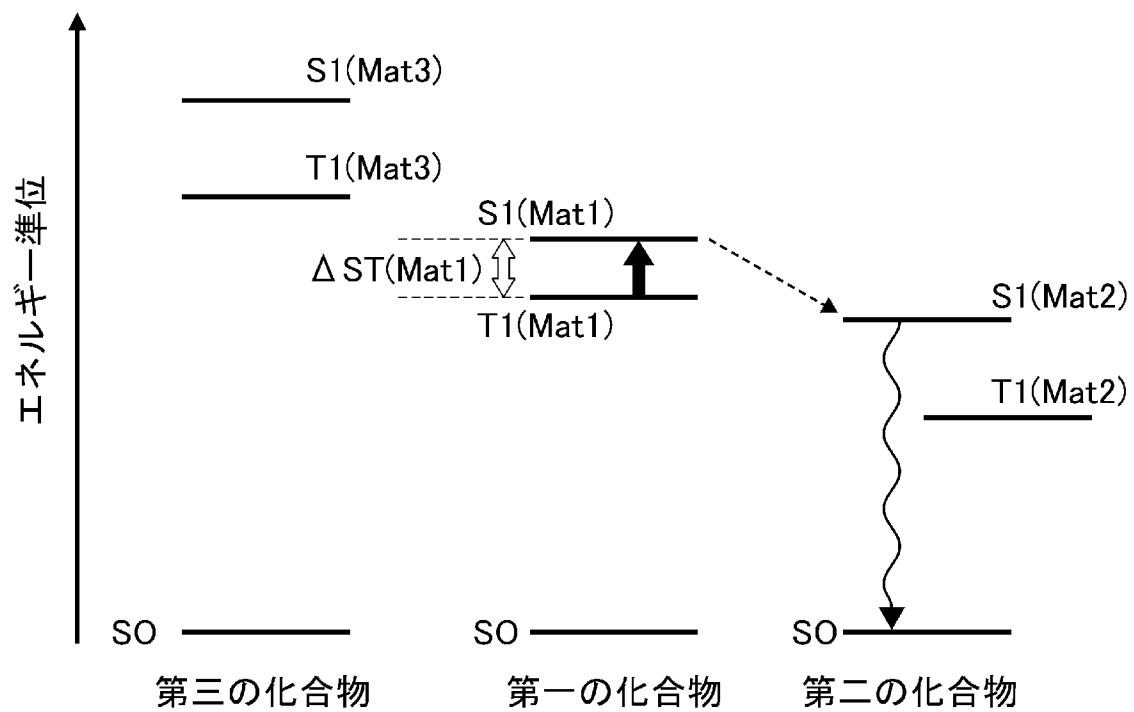
[図3]



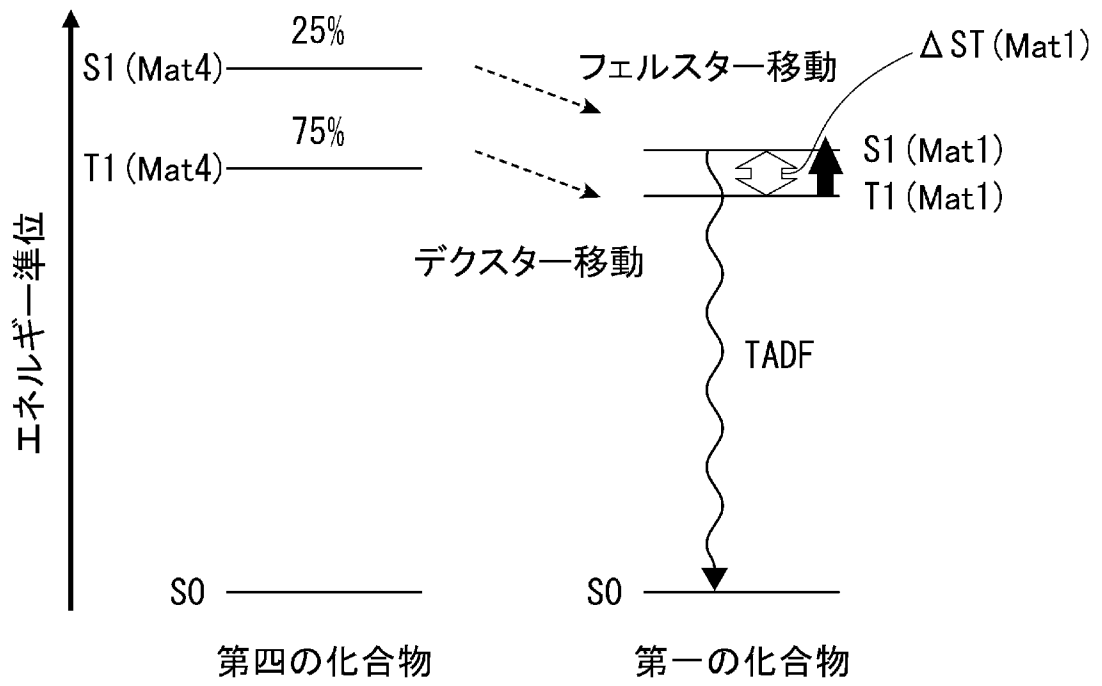
[図4]



[図5]



[図6]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2019/041761

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER Int.Cl. C07D209/86(2006.01)i, C07D487/04(2006.01)i, C07D491/147(2006.01)i, C07D495/04(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC										
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) Int.Cl. C07D209/86, C07D487/04, C07D491/147, C07D495/04, C09K11/06, H01L51/50 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched <table style="width:100%; border: none;"> <tr> <td style="width: 70%;">Published examined utility model applications of Japan</td> <td style="text-align: right;">1922-1996</td> </tr> <tr> <td>Published unexamined utility model applications of Japan</td> <td style="text-align: right;">1971-2019</td> </tr> <tr> <td>Registered utility model specifications of Japan</td> <td style="text-align: right;">1996-2019</td> </tr> <tr> <td>Published registered utility model applications of Japan</td> <td style="text-align: right;">1994-2019</td> </tr> </table> Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)		Published examined utility model applications of Japan	1922-1996	Published unexamined utility model applications of Japan	1971-2019	Registered utility model specifications of Japan	1996-2019	Published registered utility model applications of Japan	1994-2019	
Published examined utility model applications of Japan	1922-1996									
Published unexamined utility model applications of Japan	1971-2019									
Registered utility model specifications of Japan	1996-2019									
Published registered utility model applications of Japan	1994-2019									
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT <table border="1" style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="width: 10%;">Category*</th> <th style="width: 70%;">Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages</th> <th style="width: 20%;">Relevant to claim No.</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="text-align: center;">X A</td> <td>WO 2014/208698 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 31 December 2014, claims, pp. 51-115, examples & US 2016/0130225 A1; claims, pp. 17-211, examples & EP 3015457 A1 & CN 105209434 A & KR 10-2016-0023655 A</td> <td style="text-align: center;">1-43, 49-62 44-48</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">A</td> <td>JP 2016-539938 A (MERCK PATENT GMBH) 22 December 2016, claims, pp. 37-70, examples & US 2016/0301016 A1; claims, pp. 19-59, examples & WO 2015/070944 A1 & EP 3069392 A1 & CN 105706260 A & KR 10-2016-0086916 A</td> <td style="text-align: center;">1-5, 7, 8, 11-30, 32-34, 49-62</td> </tr> </tbody> </table>		Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.	X A	WO 2014/208698 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 31 December 2014, claims, pp. 51-115, examples & US 2016/0130225 A1; claims, pp. 17-211, examples & EP 3015457 A1 & CN 105209434 A & KR 10-2016-0023655 A	1-43, 49-62 44-48	A	JP 2016-539938 A (MERCK PATENT GMBH) 22 December 2016, claims, pp. 37-70, examples & US 2016/0301016 A1; claims, pp. 19-59, examples & WO 2015/070944 A1 & EP 3069392 A1 & CN 105706260 A & KR 10-2016-0086916 A	1-5, 7, 8, 11-30, 32-34, 49-62
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.								
X A	WO 2014/208698 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 31 December 2014, claims, pp. 51-115, examples & US 2016/0130225 A1; claims, pp. 17-211, examples & EP 3015457 A1 & CN 105209434 A & KR 10-2016-0023655 A	1-43, 49-62 44-48								
A	JP 2016-539938 A (MERCK PATENT GMBH) 22 December 2016, claims, pp. 37-70, examples & US 2016/0301016 A1; claims, pp. 19-59, examples & WO 2015/070944 A1 & EP 3069392 A1 & CN 105706260 A & KR 10-2016-0086916 A	1-5, 7, 8, 11-30, 32-34, 49-62								
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input type="checkbox"/> See patent family annex.										
<table style="width:100%; border: none;"> <tr> <td style="width: 50%; border: none;"> * 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 </td> <td style="width: 50%; border: none;"> "I" 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 </td> </tr> </table>		* 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	"I" 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							
* 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	"I" 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 December 2019 (09.12.2019)	Date of mailing of the international search report 17 December 2019 (17.12.2019)									
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/JP2019/041761

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2016/138077 A1 (NITTO DENKO CORPORATION) 01 September 2016, claims, EM-30 (Family: none)	1-4, 10, 11, 26, 29, 31, 33, 34
X	CN 108264478 A (FAMING ZHUANLI SHENQING) 10 July 2018, claims, formulas 1-4, 1-5 (Family: none)	1-4, 11-21, 23-25, 44, 46, 47, 49-62
X	CN 108203403 A (FAMING ZHUANLI SHENQING) 26 June 2018, claims, compound 32 (Family: none)	1-4, 13, 17, 19, 24, 25, 49-62
X	US 2018/0230156 A1 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 16 August 2018, claims & KR 10-2018-0093246 A & CN 108409742 A	1-4, 49-62
X	JP 2016-516085 A (MERCK PATENT GMBH) 02 June 2016, claims, pp. 37-58 & US 2016/0072076 A1; claims, pp. 24-56 & WO 2014/146752 A1 & EP 2976329 A1 & CN 105051014 A & KR 10-2015-0132872 A	1-3, 11-18, 26, 49-62
X	US 2017/0186974 A1 (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.) 29 June 2017, claims & KR 10-2017-0076474 A	1-3, 11-18, 24, 25, 34, 49-62
X	US 2018/0294420 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 11 October 2018, claims (Family: none)	1-3, 13, 18, 49-62
P, X	WO 2019/190235 A1 (LG CHEM, LTD.) 03 October 2019, claims (Family: none)	1-4, 13-16, 18-21, 23-25, 49-62
P, X	WO 2018/237389 A1 (KYULUX INC.) 27 December 2018, claims (Family: none)	1-4, 13, 18, 19, 23-25, 49-62

<p>A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))</p> <p>Int.Cl. C07D209/86(2006.01)i, C07D487/04(2006.01)i, C07D491/147(2006.01)i, C07D495/04(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i</p>											
<p>B. 調査を行った分野</p> <p>調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))</p> <p>Int.Cl. C07D209/86, C07D487/04, C07D491/147, C07D495/04, C09K11/06, H01L51/50</p>											
<p>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</p> <table style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width:30%;">日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2019年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2019年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2019年</td> </tr> </table>				日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2019年	日本国実用新案登録公報	1996-2019年	日本国登録実用新案公報	1994-2019年
日本国実用新案公報	1922-1996年										
日本国公開実用新案公報	1971-2019年										
日本国実用新案登録公報	1996-2019年										
日本国登録実用新案公報	1994-2019年										
<p>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)</p> <p>CAplus/REGISTRY (STN)</p>											
<p>C. 関連すると認められる文献</p>											
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号									
X A	WO 2014/208698 A1 (出光興産株式会社) 2014.12.31, 請求の範囲、第51-115頁、実施例 & US 2016/0130225 A1; claims, pp.17-211, Example & EP 3015457 A1 & CN 105209434 A & KR 10-2016-0023655 A	1-43, 49-62 44-48									
X	JP 2016-539938 A (メルク パテント ゲーエムベーハー) 2016.12.22, 特許請求の範囲、第37-70頁、例 & US 2016/0301016 A1; claims, pp.19-59, Example & WO 2015/070944 A1 & EP 3069392 A1 & CN 105706260 A & KR 10-2016-0086916 A	1-5, 7, 8, 11-30, 32-34, 49-62									
<input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。		<input type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。									
<p>* 引用文献のカテゴリー</p> <p>「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</p> <p>「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</p> <p>「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)</p> <p>「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献</p> <p>「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願</p>		<p>の日の後に公表された文献</p> <p>「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</p> <p>「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</p> <p>「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</p> <p>「&」同一パテントファミリー文献</p>									
<p>国際調査を完了した日</p> <p style="text-align: center;">09.12.2019</p>		<p>国際調査報告の発送日</p> <p style="text-align: center;">17.12.2019</p>									
<p>国際調査機関の名称及びあて先</p> <p style="text-align: center;">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</p>		<p>特許庁審査官 (権限のある職員)</p> <p style="text-align: center;">三上 晶子</p> <p>電話番号 03-3581-1101 内線 3492</p>	<p>4 P</p>	<p>4042</p>							

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	WO 2016/138077 A1 (NITTO DENKO CORPORATION) 2016.09.01, claims, EM-30 (ファミリーなし)	1-4, 10, 11, 26, 29, 31, 33, 34
X	CN 108264478 A (FAMING ZHUANLI SHENQING) 2018.07.10, 特許請求の範囲、式 1-4, 1-5 (ファミリーなし)	1-4, 11-21, 23-25, 44, 46, 47, 49-62
X	CN 108203403 A (FAMING ZHUANLI SHENQING) 2018.06.26, 特許請求の範囲、化合物 32 (ファミリーなし)	1-4, 13, 17, 19, 24, 25, 49-62
X	US 2018/0230156 A1 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.,) 2018.08.16, claims & KR 10-2018-0093246 A & CN 108409742 A	1-4, 49-62
X	JP 2016-516085 A (メルク パテント ゲーエムベーハー) 2016.06.02, 特許請求の範囲、第 37-58 頁 & US 2016/0072076 A1; claims, pp. 24-56 & WO 2014/146752 A1 & EP 2976329 A1 & CN 105051014 A & KR 10-2015-0132872 A	1-3, 11-18, 26, 49-62
X	US 2017/0186974 A1 (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.,) 2017.06.29, claims & KR 10-2017-0076474 A	1-3, 11-18, 24, 25, 34, 49-62
X	US 2018/0294420 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 2018.10.11, claims (ファミリーなし)	1-3, 13, 18, 49-62
P, X	WO 2019/190235 A1 (LG CHEM, LTD.) 2019.10.03, 請求の範囲 (ファミリーなし)	1-4, 13-16, 18-21, 23-25, 49-62
P, X	WO 2018/237389 A1 (KYULUX INC.) 2018.12.27, claims (ファミリーなし)	1-4, 13, 18, 19, 23-25, 49-62