

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7216754号
(P7216754)

(45)発行日 令和5年2月1日(2023.2.1)

(24)登録日 令和5年1月24日(2023.1.24)

| | | |
|-------------------------|---------------|-------|
| (51)国際特許分類 | F I | |
| H 1 0 K 50/11 (2023.01) | H 1 0 K 50/11 | |
| C 0 9 K 11/06 (2006.01) | C 0 9 K 11/06 | 6 6 0 |
| H 1 0 K 50/00 (2023.01) | H 0 5 B 33/14 | B |
| H 1 0 K 50/12 (2023.01) | H 1 0 K 50/12 | |
| H 1 0 K 85/30 (2023.01) | H 1 0 K 85/30 | |
| 請求項の数 10 (全136頁) 最終頁に続く | | |

| | | | |
|-------------------|----------------------------------|----------|---|
| (21)出願番号 | 特願2021-29712(P2021-29712) | (73)特許権者 | 000002093 住友化学株式会社 東京都中央区日本橋二丁目7番1号 |
| (22)出願日 | 令和3年2月26日(2021.2.26) | (74)代理人 | 100088155 弁理士 長谷川 芳樹 |
| (65)公開番号 | 特開2021-163964(P2021-163964 A) | (74)代理人 | 100128381 弁理士 清水 義憲 |
| (43)公開日 | 令和3年10月11日(2021.10.11) | (74)代理人 | 100124062 弁理士 三上 敬史 |
| 審査請求日 | 令和4年8月10日(2022.8.10) | (72)発明者 | 齋藤 孝和 茨城県つくば市北原6番 住友化学株式 会社内 |
| (31)優先権主張番号 | 特願2020-64369(P2020-64369) | (72)発明者 | 松本 龍二 茨城県つくば市北原6番 住友化学株式 会社内 |
| (32)優先日 | 令和2年3月31日(2020.3.31) | | |
| (33)優先権主張国・地域又は機関 | 日本国(JP) | | |
| 早期審査対象出願 | | | 最終頁に続く |

(54)【発明の名称】 組成物及びそれを含有する発光素子

(57)【特許請求の範囲】

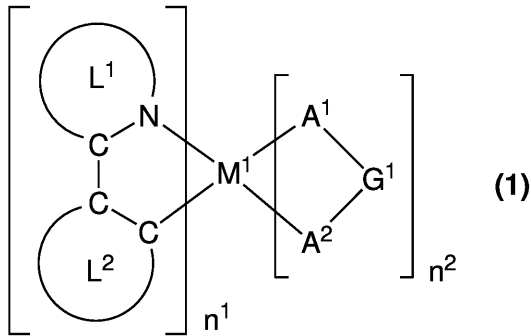
【請求項1】

式(1)で表される燐光発光性化合物と、
窒素原子及びホウ素原子からなる群より選択される少なくとも1種の原子(a)を環内に含む縮合複素環骨格を有する化合物(F)と、
を含有し、

前記縮合複素環骨格が、前記原子(a)として少なくとも窒素原子を環内に有し、
前記燐光発光性化合物の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値を T_P (eV)とし、
前記化合物(F)の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値を T_F (eV)とし、
前記化合物(F)の分子量1000当たりの前記縮合複素環骨格中の前記原子(a)の数を N_f としたとき、式(A)及び式(B)を満たす、組成物。

$$\begin{aligned} &|T_P| - |T_F| \geq 0.15 \cdots (A) \\ &0.01 \leq N_f \leq 4.5 \cdots (B) \end{aligned}$$

【化 1】



10

[式中、

M^1 は、イリジウム原子又は白金原子を表す。

n^1 は 1 以上の整数を表し、 n^2 は 0 以上の整数を表し、 $n^1 + n^2$ は 2 又は 3 である。 M^1 がイリジウム原子の場合、 $n^1 + n^2$ は 3 であり、 M^1 が白金原子の場合、 $n^1 + n^2$ は 2 である。

環 L^1 は、芳香族複素環を表し、この環は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。環 L^1 が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

20

環 L^2 は、芳香族炭化水素環を表し、この環は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。環 L^2 が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

環 L^1 が有していてもよい置換基と環 L^2 が有していてもよい置換基とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

但し、環 L^1 及び環 L^2 からなる群より選択される少なくとも 1 つの環は、式 (1 - T) で表される基を少なくとも一つ有する。式 (1 - T) で表される基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$A^1 - G^1 - A^2$ は、アニオン性の 2 座配位子を表す。 A^1 及び A^2 は、それぞれ独立に、炭素原子、酸素原子又は窒素原子を表し、これらの原子は環を構成する原子であってもよい。 G^1 は、単結合、又は、 A^1 及び A^2 とともに 2 座配位子を構成する原子団を表す。 $A^1 - G^1 - A^2$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

30

【化 2】



[式中、 R^{1T} は、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1 価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、置換アミノ基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基又はシクロアルキニル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

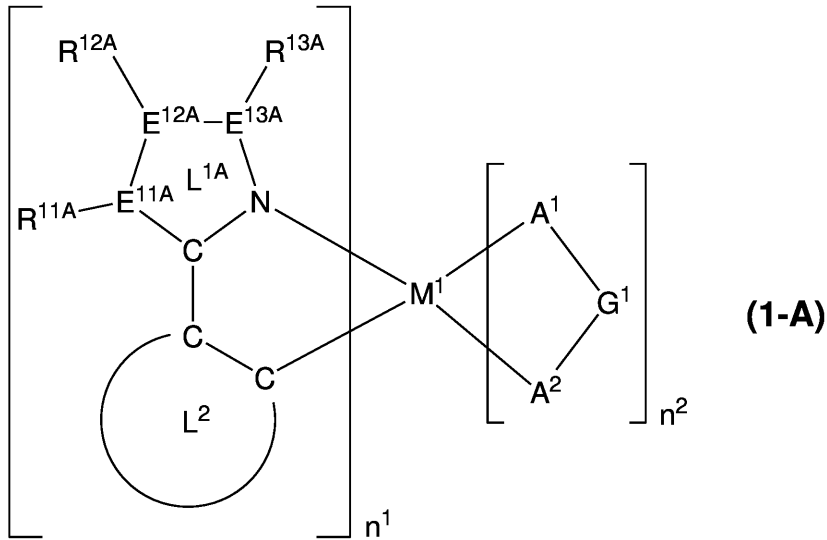
40

【請求項 2】

前記式 (1) で表される燐光発光性化合物が、式 (1 - A) で表される燐光発光性化合物である、請求項 1 に記載の組成物。

50

【化 3】



10

[式中、 M^1 、 n^1 、 n^2 、環 L^2 、及び $A^1 - G^1 - A^2$ は、前記と同じ意味を表す。

環 L^1A は、窒素原子、炭素原子、 E^{11A} 、 E^{12A} 及び E^{13A} で構成されるトリアゾール環又はジアゾール環を表す。環 L^1A が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

20

E^{11A} 、 E^{12A} 及び E^{13A} は、それぞれ独立に、窒素原子又は炭素原子を表す。 E^{11A} 、 E^{12A} 及び E^{13A} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

R^{11A} 、 R^{12A} 及び R^{13A} は、それぞれ独立に、水素原子又は前記式 (1-T) で表される基を表す。 R^{11A} 、 R^{12A} 及び R^{13A} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。 R^{11A} と R^{12A} とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 R^{12A} と R^{13A} とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 R^{11A} と環 L^2 が有していてもよい置換基とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

30

但し、 R^{11A} 、 R^{12A} 、 R^{13A} 及び環 L^2 が有していてもよい置換基からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式 (1-T) で表される基である。前記式 (1-T) で表される基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

E^{11A} が窒素原子の場合、 R^{11A} は存在しても存在しなくてもよい。 E^{12A} が窒素原子の場合、 R^{12A} は存在しても存在しなくてもよい。 E^{13A} が窒素原子の場合、 R^{13A} は存在しても存在しなくてもよい。]

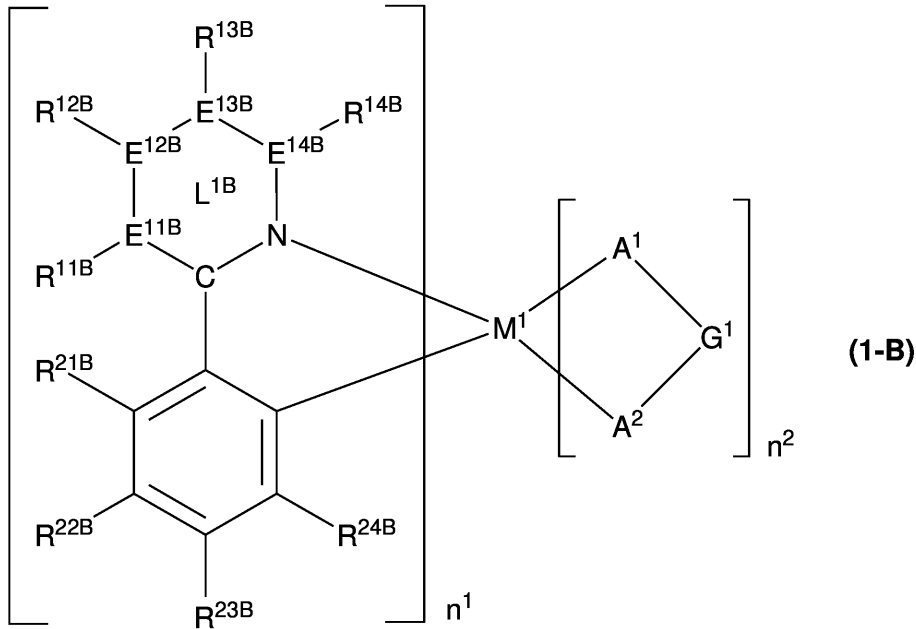
【請求項 3】

前記式 (1-A) で表される燐光発光性化合物が、式 (1-A-2) で表される燐光発光性化合物である、請求項 2 に記載の組成物。

40

50

【化5】



10

[式中、

M^1 、 n^1 、 n^2 及び $A^1 - G^1 - A^2$ は、前記と同じ意味を表す。

20

E^{11B} 、 E^{12B} 、 E^{13B} 及び E^{14B} は、それぞれ独立に、窒素原子又は炭素原子を表す。 E^{11B} 、 E^{12B} 、 E^{13B} 及び E^{14B} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。 E^{11B} が窒素原子の場合、 R^{11B} は存在しない。 E^{12B} が窒素原子の場合、 R^{12B} は存在しない。 E^{13B} が窒素原子の場合、 R^{13B} は存在しない。 E^{14B} が窒素原子の場合、 R^{14B} は存在しない。

環 L^{1B} は、窒素原子、炭素原子、 E^{11B} 、 E^{12B} 、 E^{13B} 及び E^{14B} とで構成されるピリジン環又はピリミジン環を表す。環 L^{1B} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

R^{11B} 、 R^{12B} 、 R^{13B} 、 R^{14B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 及び R^{24B} は、それぞれ独立に、水素原子又は前記式 (1-T) で表される基を表す。 R^{11B} 、 R^{12B} 、 R^{13B} 、 R^{14B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 及び R^{24B} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。 R^{11B} と R^{12B} 、 R^{12B} と R^{13B} 、 R^{13B} と R^{14B} 、 R^{11B} と R^{21B} 、 R^{21B} と R^{22B} 、 R^{22B} と R^{23B} 、及び、 R^{23B} と R^{24B} は、それぞれ結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。但し、 R^{11B} 、 R^{12B} 、 R^{13B} 、 R^{14B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 及び R^{24B} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式 (1-T) で表される基である。

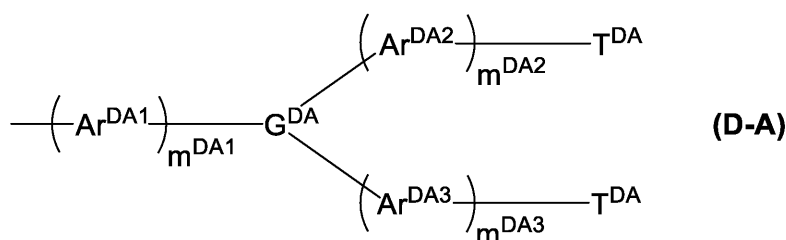
30

【請求項5】

前記 R^{1T} が、アルキル基、シクロアルキル基、式 (D-A) で表される基、式 (D-B) で表される基又は式 (D-C) で表される基である、請求項1~4のいずれか一項に記載の組成物。

40

【化6】

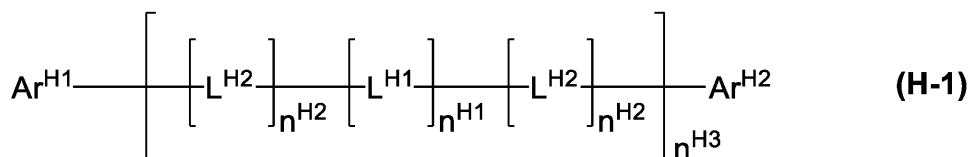


[式中、

50

式 (H-1) で表される化合物を更に含有する、請求項 1 ~ 7 のいずれか一項に記載の組成物。

【化 9】



[式中、

$\text{Ar}^{\text{H}1}$ 及び $\text{Ar}^{\text{H}2}$ は、それぞれ独立に、アリール基又は 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

$n^{\text{H}1}$ 及び $n^{\text{H}2}$ は、それぞれ独立に、0 又は 1 を表す。 $n^{\text{H}1}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。複数存在する $n^{\text{H}2}$ は、同一でも異なってもよい。

$n^{\text{H}3}$ は、0 以上の整数を表す。

$\text{L}^{\text{H}1}$ は、アリーレン基、2 価の複素環基、又は、 $-\text{C}(\text{R}^{\text{H}11})_2-$ で表される基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 $\text{L}^{\text{H}1}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$n^{\text{H}11}$ は、1 以上 10 以下の整数を表す。 $\text{R}^{\text{H}11}$ は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基又は 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する $\text{R}^{\text{H}11}$ は、同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子とともに環を形成していてもよい。

$\text{L}^{\text{H}2}$ は、 $-\text{N}(-\text{L}^{\text{H}21} - \text{R}^{\text{H}21})-$ で表される基を表す。 $\text{L}^{\text{H}2}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$\text{L}^{\text{H}21}$ は、単結合、アリーレン基又は 2 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 $\text{R}^{\text{H}21}$ は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

【請求項 9】

正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選択される少なくとも 1 種の材料を更に含有する、請求項 1 ~ 8 のいずれか一項に記載の組成物。

【請求項 10】

請求項 1 ~ 9 のいずれか一項に記載の組成物を含有する発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、組成物及びそれを含有する発光素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子等の発光素子は、例えば、ディスプレイ及び照明に好適に使用することが可能である。発光素子の発光層に用いられる発光材料として、例えば、特許文献 1 では、燐光発光性化合物である Fipic 又は Dopant-1 と、酸素原子及びホウ素原子を環内に含む縮合複素環骨格を有する化合物 A-65 とを含む組成物が提案されている。

【0003】

10

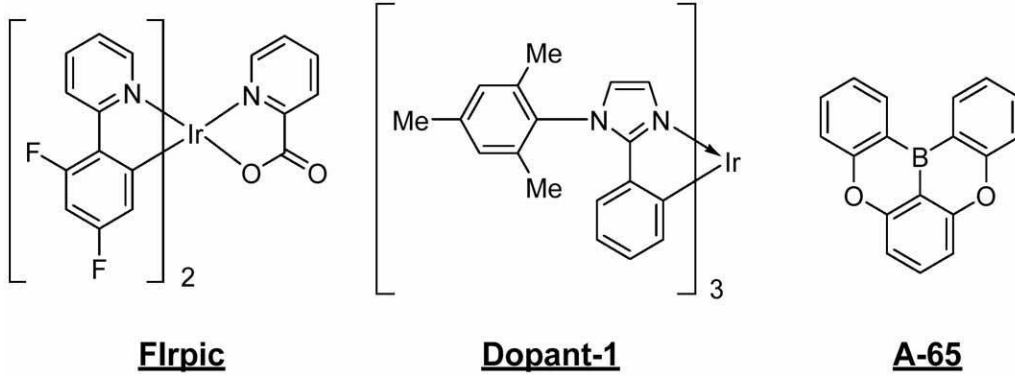
20

30

40

50

【化 1】



10

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【文献】国際公開第2017/018326号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

しかし、上記の組成物を用いて作製される発光素子は、発光効率が必ずしも十分ではない。

20

そこで、本発明は、発光効率が優れる発光素子の製造に有用な組成物を提供することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

【0006】

本発明は、以下の[1]～[10]を提供する。

[1]

式(1)で表される燐光発光性化合物と、

窒素原子及びホウ素原子からなる群より選択される少なくとも1種の原子(a)を環内に含む縮合複素環骨格を有する化合物(F)と、

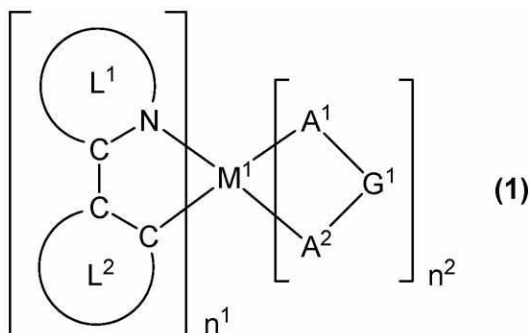
30

を含有し、
前記燐光発光性化合物の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値を T_P (eV)とし、前記化合物(F)の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値を T_F (eV)とし、前記化合物(F)の分子量1000当たりの前記縮合複素環骨格中の前記原子(a)の数を N_f としたとき、式(A)及び式(B)を満たす、組成物。

$$|T_P| - |T_F| \geq 0.15 \cdots (A)$$

$$0.01 \leq N_f \leq 4.5 \cdots (B)$$

【化 2】



40

[式中、

M^1 は、ルテニウム原子、ロジウム原子、パラジウム原子、イリジウム原子又は白金原

50

子を表す。

n^1 は 1 以上の整数を表し、 n^2 は 0 以上の整数を表し、 $n^1 + n^2$ は 2 又は 3 である。
 M^1 がルテニウム原子、ロジウム原子又はイリジウム原子の場合、 $n^1 + n^2$ は 3 であり、
 M^1 がパラジウム原子又は白金原子の場合、 $n^1 + n^2$ は 2 である。

環 L^1 は、芳香族複素環を表し、この環は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。環 L^1 が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

環 L^2 は、芳香族炭化水素環を表し、この環は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。環 L^2 が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

10

環 L^1 が有していてもよい置換基と環 L^2 が有していてもよい置換基とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

但し、環 L^1 及び環 L^2 からなる群より選択される少なくとも 1 つの環は、式 (1-T) で表される基を少なくとも一つ有する。式 (1-T) で表される基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$A^1 - G^1 - A^2$ は、アニオン性の 2 座配位子を表す。 A^1 及び A^2 は、それぞれ独立に、炭素原子、酸素原子又は窒素原子を表し、これらの原子は環を構成する原子であってもよい。 G^1 は、単結合、又は、 A^1 及び A^2 とともに 2 座配位子を構成する原子団を表す。
 $A^1 - G^1 - A^2$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

20

【化 3】



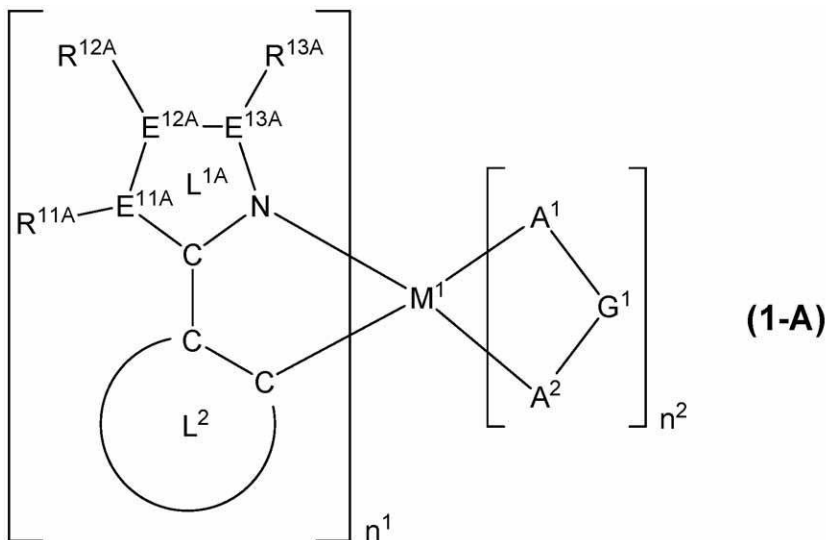
[式中、 R^{1T} は、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1 価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、置換アミノ基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基又はシクロアルキニル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

[2]

前記式 (1) で表される燐光発光性化合物が、式 (1-A) で表される燐光発光性化合物である、[1] に記載の組成物。

30

【化 4】



40

[式中、 M^1 、 n^1 、 n^2 、環 L^2 、及び $A^1 - G^1 - A^2$ は、前記と同じ意味を表す。

環 L^{1A} は、窒素原子、炭素原子、 E^{11A} 、 E^{12A} 及び E^{13A} で構成されるトリアゾール環又はジアゾール環を表す。環 L^{1A} が複数存在する場合、それらは同一でも異な

50

ていてもよい。

E^{11A} 、 E^{12A} 及び E^{13A} は、それぞれ独立に、窒素原子又は炭素原子を表す。 E^{11A} 、 E^{12A} 及び E^{13A} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

R^{11A} 、 R^{12A} 及び R^{13A} は、それぞれ独立に、水素原子又は前記式(1-T)で表される基を表す。 R^{11A} 、 R^{12A} 及び R^{13A} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。 R^{11A} と R^{12A} とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 R^{12A} と R^{13A} とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 R^{11A} と環 L^2 が有していてもよい置換基とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

10

但し、 R^{11A} 、 R^{12A} 、 R^{13A} 及び環 L^2 が有していてもよい置換基からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式(1-T)で表される基である。前記式(1-T)で表される基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

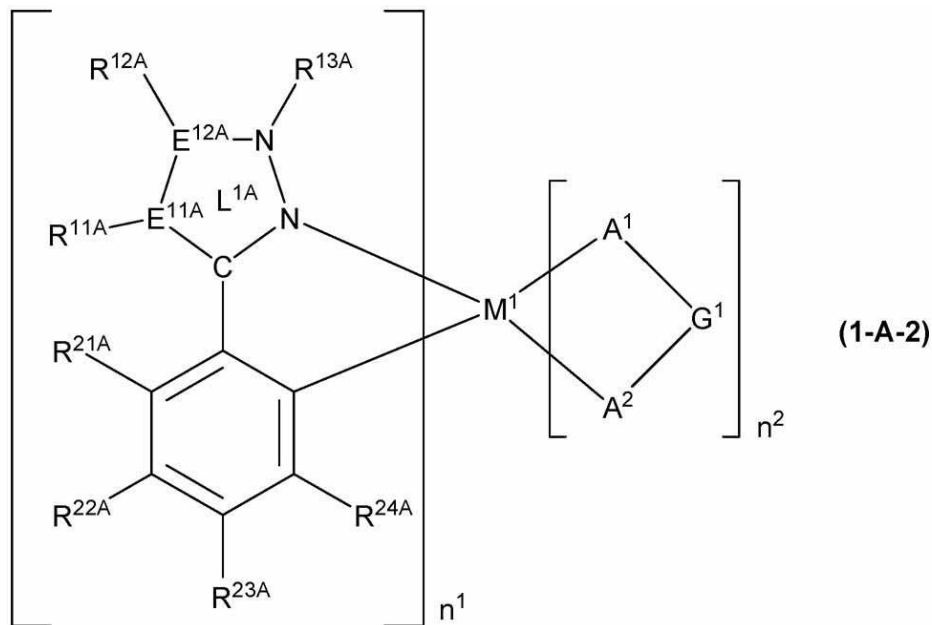
E^{11A} が窒素原子の場合、 R^{11A} は存在しても存在しなくてもよい。 E^{12A} が窒素原子の場合、 R^{12A} は存在しても存在しなくてもよい。 E^{13A} が窒素原子の場合、 R^{13A} は存在しても存在しなくてもよい。]

[3]

前記式(1-A)で表される燐光発光性化合物が、式(1-A-2)で表される燐光発光性化合物である、[2]に記載の組成物。

20

【化5】



30

[式中、

M^1 、 n^1 、 n^2 、環 L^1A 、 E^{11A} 、 E^{12A} 、 R^{11A} 、 R^{12A} 、 R^{13A} 及び $A^1 - G^1 - A^2$ は、前記と同じ意味を表す。

40

R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} は、それぞれ独立に、水素原子又は前記式(1-T)で表される基を表す。 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。 R^{21A} と R^{22A} とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 R^{22A} と R^{23A} とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 R^{23A} と R^{24A} とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 R^{11A} と R^{21A} とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

但し、 R^{11A} 、 R^{12A} 、 R^{13A} 、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} からなる

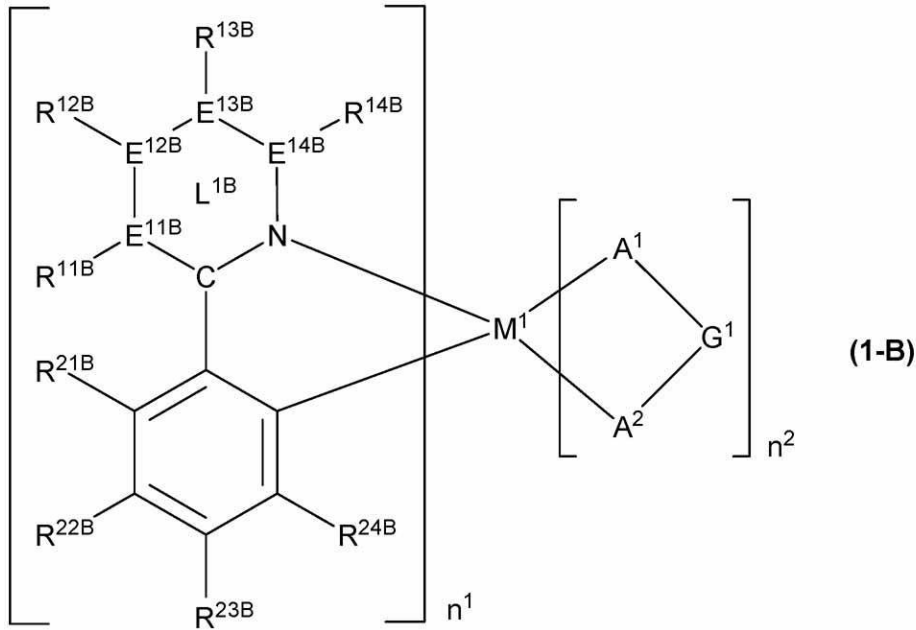
50

群より選択される少なくとも1つは、前記式(1-T)で表される基である。]

[4]

前記式(1)で表される燐光発光性化合物が、式(1-B)で表される燐光発光性化合物である、[1]に記載の組成物。

【化6】



10

20

[式中、

M^1 、 n^1 、 n^2 及び $A^1 - G^1 - A^2$ は、前記と同じ意味を表す。

E^{11B} 、 E^{12B} 、 E^{13B} 及び E^{14B} は、それぞれ独立に、窒素原子又は炭素原子を表す。 E^{11B} 、 E^{12B} 、 E^{13B} 及び E^{14B} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。 E^{11B} が窒素原子の場合、 R^{11B} は存在しない。 E^{12B} が窒素原子の場合、 R^{12B} は存在しない。 E^{13B} が窒素原子の場合、 R^{13B} は存在しない。 E^{14B} が窒素原子の場合、 R^{14B} は存在しない。

環 L^{1B} は、窒素原子、炭素原子、 E^{11B} 、 E^{12B} 、 E^{13B} 及び E^{14B} とで構成されるピリジン環又はピリミジン環を表す。環 L^{1B} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

R^{11B} 、 R^{12B} 、 R^{13B} 、 R^{14B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 及び R^{24B} は、それぞれ独立に、水素原子又は前記式(1-T)で表される基を表す。 R^{11B} 、 R^{12B} 、 R^{13B} 、 R^{14B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 及び R^{24B} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。 R^{11B} と R^{12B} 、 R^{12B} と R^{13B} 、 R^{13B} と R^{14B} 、 R^{11B} と R^{21B} 、 R^{21B} と R^{22B} 、 R^{22B} と R^{23B} 、及び、 R^{23B} と R^{24B} は、それぞれ結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。但し、 R^{11B} 、 R^{12B} 、 R^{13B} 、 R^{14B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 及び R^{24B} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式(1-T)で表される基である。

30

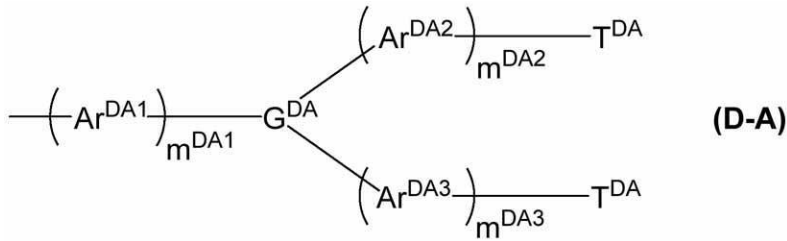
40

[5]

前記 R^{1T} が、アルキル基、シクロアルキル基、式(D-A)で表される基、式(D-B)で表される基又は式(D-C)で表される基である、[1]~[4]のいずれかに記載の組成物。

50

【化7】



[式中、

m^{DA1} 、 m^{DA2} 及び m^{DA3} は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す。

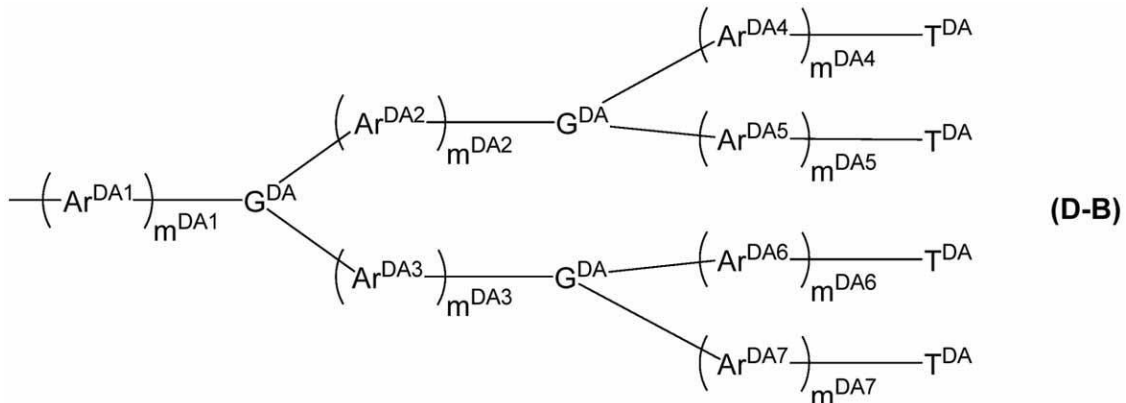
10

G^{DA} は、窒素原子、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} 及び Ar^{DA3} は、それぞれ独立に、アリーレン基又は2価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} 及び Ar^{DA3} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

T^{DA} は、アリアル基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する T^{DA} は、同一でも異なってもよい。]

【化8】



20

[式中、

m^{DA1} 、 m^{DA2} 、 m^{DA3} 、 m^{DA4} 、 m^{DA5} 、 m^{DA6} 及び m^{DA7} は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す。

30

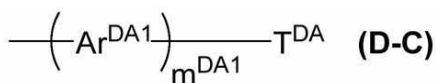
G^{DA} は、窒素原子、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する G^{DA} は、同一でも異なってもよい。

Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} 、 Ar^{DA3} 、 Ar^{DA4} 、 Ar^{DA5} 、 Ar^{DA6} 及び Ar^{DA7} は、それぞれ独立に、アリーレン基又は2価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} 、 Ar^{DA3} 、 Ar^{DA4} 、 Ar^{DA5} 、 Ar^{DA6} 及び Ar^{DA7} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

T^{DA} は、アリアル基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する T^{DA} は、同一でも異なってもよい。]

40

【化9】



[式中、

m^{DA1} は、0以上の整数を表す。

Ar^{DA1} は、アリーレン基又は2価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Ar^{DA1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

T^{DA} は、アリアル基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していても

50

よい。]

[6]

前記化合物 (F) の最低一重項励起状態のエネルギー準位の値を S_F (e V) としたとき、式 (C) を満たす、[1] ~ [5] のいずれかに記載の組成物。

$$| T_P | - | S_F | - 0.30 \dots (C)$$

[7]

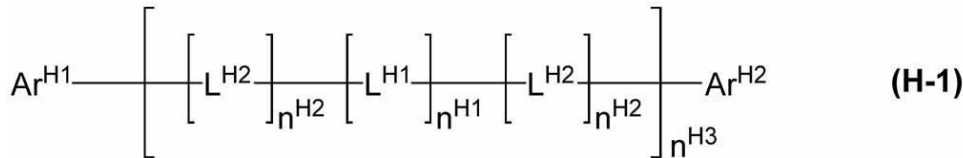
前記縮合複素環骨格が、前記原子 (a) として窒素原子及びホウ素原子の両方を環内に有する、[1] ~ [6] のいずれかに記載の組成物。

[8]

式 (H - 1) で表される化合物を更に含有する、[1] ~ [7] のいずれかに記載の組成物。

10

【化 1 0】



[式中、

$\text{Ar}^{\text{H}1}$ 及び $\text{Ar}^{\text{H}2}$ は、それぞれ独立に、アリアル基又は 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

20

$n^{\text{H}1}$ 及び $n^{\text{H}2}$ は、それぞれ独立に、0 又は 1 を表す。 $n^{\text{H}1}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。複数存在する $n^{\text{H}2}$ は、同一でも異なってもよい。

$n^{\text{H}3}$ は、0 以上の整数を表す。

$\text{L}^{\text{H}1}$ は、アリーレン基、2 価の複素環基、又は、 $- [\text{C} (\text{R}^{\text{H}11})_2]_{n^{\text{H}11}} -$ で表される基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 $\text{L}^{\text{H}1}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$n^{\text{H}11}$ は、1 以上 10 以下の整数を表す。 $\text{R}^{\text{H}11}$ は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリアル基又は 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する $\text{R}^{\text{H}11}$ は、同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子とともに環を形成していてもよい。

30

$\text{L}^{\text{H}2}$ は、 $- \text{N} (- \text{L}^{\text{H}21} - \text{R}^{\text{H}21}) -$ で表される基を表す。 $\text{L}^{\text{H}2}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$\text{L}^{\text{H}21}$ は、単結合、アリーレン基又は 2 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 $\text{R}^{\text{H}21}$ は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリアル基又は 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

[9]

正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選択される少なくとも 1 種の材料を更に含有する、[1] ~ [8] のいずれかに記載の組成物。

40

[1 0]

[1] ~ [9] のいずれかに記載の組成物を含有する発光素子。

【発明の効果】

【0 0 0 7】

本発明によれば、発光効率が優れる発光素子の製造に有用な組成物を提供することができる。また、本発明によれば、当該組成物を含有する発光素子を提供することができる。

【発明を実施するための形態】

【0 0 0 8】

以下、本発明の好適な実施形態について詳細に説明する。

50

【 0 0 0 9 】

< 共通する用語の説明 >

本明細書で共通して用いられる用語は、特記しない限り、以下の意味である。

「室温」とは、25 を意味する。

Me はメチル基、Et はエチル基、Bu はブチル基、i - Pr はイソプロピル基、t - Bu は tert - ブチル基を表す。

水素原子は、重水素原子であっても、軽水素原子であってもよい。

【 0 0 1 0 】

「低分子化合物」とは、分子量分布を有さず、分子量が 1×10^4 以下の化合物を意味する。

「高分子化合物」とは、分子量分布を有し、ポリスチレン換算の数平均分子量が 1×10^3 以上（例えば $1 \times 10^3 \sim 1 \times 10^8$ ）である重合体を意味する。

「構成単位」とは、高分子化合物中に 1 個以上存在する単位を意味する。高分子化合物中に 2 個以上存在する構成単位は、一般に、「繰り返し単位」とも呼ばれる。

【 0 0 1 1 】

高分子化合物は、ブロック共重合体、ランダム共重合体、交互共重合体、グラフト共重合体のいずれであってもよいし、その他の態様であってもよい。

高分子化合物の末端基は、重合活性基がそのまま残っていると、高分子化合物を発光素子の作製に用いた場合、発光特性又は輝度寿命が低下する可能性があるため、好ましくは安定な基である。高分子化合物の末端基としては、好ましくは主鎖と共役結合している基であり、例えば、炭素 - 炭素結合を介して高分子化合物の主鎖と結合するアリール基又は 1 価の複素環基が挙げられる。

【 0 0 1 2 】

「アルキル基」は、直鎖及び分岐のいずれでもよい。直鎖のアルキル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常 1 ~ 50 であり、好ましくは 1 ~ 20 であり、より好ましくは 1 ~ 10 である。分岐のアルキル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常 3 ~ 50 であり、好ましくは 3 ~ 20 であり、より好ましくは 4 ~ 10 である。

アルキル基は、置換基を有していてもよい。アルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、2 - ブチル基、イソブチル基、tert - ブチル基、ペンチル基、イソアミル基、2 - エチルブチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、2 - エチルヘキシル基、3 - プロピルヘプチル基、デシル基、3, 7 - ジメチルオクチル基、2 - エチルオクチル基、2 - ヘキシルデシル基及びドデシル基が挙げられる。また、アルキル基は、これらの基における水素原子の一部又は全部が、置換基（例えば、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、フッ素原子等）で置換された基であってもよい。このようなアルキル基としては、例えば、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、パーフルオロブチル基、パーフルオロヘキシル基、パーフルオロオクチル基、3 - フェニルプロピル基、3 - (4 - メチルフェニル)プロピル基、3 - (3, 5 - ジ - ヘキシルフェニル)プロピル基及び 6 - エチルオキシヘキシル基が挙げられる。

【 0 0 1 3 】

「シクロアルキル基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常 3 ~ 50 であり、好ましくは 4 ~ 10 である。シクロアルキル基は、置換基を有していてもよい。シクロアルキル基としては、例えば、シクロヘキシル基、シクロヘキシルメチル基、及びシクロヘキシルエチル基が挙げられる。

【 0 0 1 4 】

「アルキレン基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常 1 ~ 20 であり、好ましくは 1 ~ 15 であり、より好ましくは 1 ~ 10 である。アルキレン基は、置換基を有していてもよい。アルキレン基としては、例えば、メチレン基、エチレン基、プロピレン基、ブチレン基、ヘキシレン基及びオクチレン基が挙げられる。

10

20

30

40

50

【 0 0 1 5 】

「シクロアルキレン基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常 3 ~ 20 である。シクロアルキレン基は、置換基を有していてもよい。シクロアルキレン基としては、例えば、シクロヘキシレン基が挙げられる。

【 0 0 1 6 】

「芳香族炭化水素基」は、芳香族炭化水素から環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子 1 個以上を除いた基を意味する。芳香族炭化水素から環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基を「アリール基」ともいう。芳香族炭化水素から環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子 2 個を除いた基を「アリーレン基」ともいう。

芳香族炭化水素基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常 6 ~ 60 であり、好ましくは 6 ~ 30 であり、より好ましくは 6 ~ 18 である。

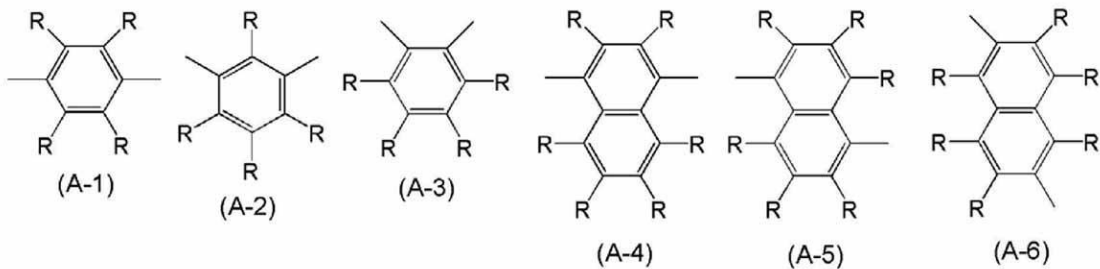
「芳香族炭化水素基」は、例えば、単環式の芳香族炭化水素（例えば、ベンゼンが挙げられる。）、又は、多環式の芳香族炭化水素（例えば、ナフタレン及びインデン等の 2 環式の芳香族炭化水素；アントラセン、フェナントレン、ジヒドロフェナントレン及びフルオレン等の 3 環式の芳香族炭化水素；トリフェニレン、ナフタセン、ベンゾフルオレン、ピレン、クリセン及びフルオランテン等の 4 環式の芳香族炭化水素；ジベンゾフルオレン、ペリレン及びベンゾフルオランテン等の 5 環式の芳香族炭化水素；スピロビフルオレン等の 6 環式の芳香族炭化水素；ベンゾスピロビフルオレン及びアセナフトフルオランテン等の 7 環式の芳香族炭化水素；並びに、ジベンゾスピロビフルオレン等の 8 環式の芳香族炭化水素が挙げられる。）から、環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子 1 個以上を除いた基が挙げられる。芳香族炭化水素基は、これらの基が複数結合した基を含む。芳香族炭化水素基は、置換基を有していてもよい。

【 0 0 1 7 】

アリーレン基は、好ましくは、式 (A - 1) ~ 式 (A - 23) で表される基である。アリーレン基は、これらの基が複数結合した基であってもよい。

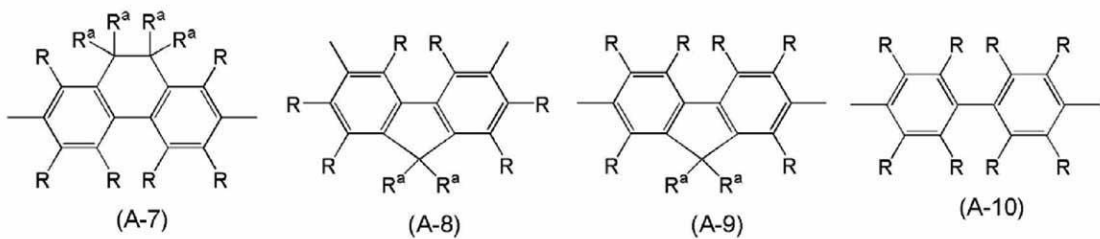
【 0 0 1 8 】

【 化 1 1 】



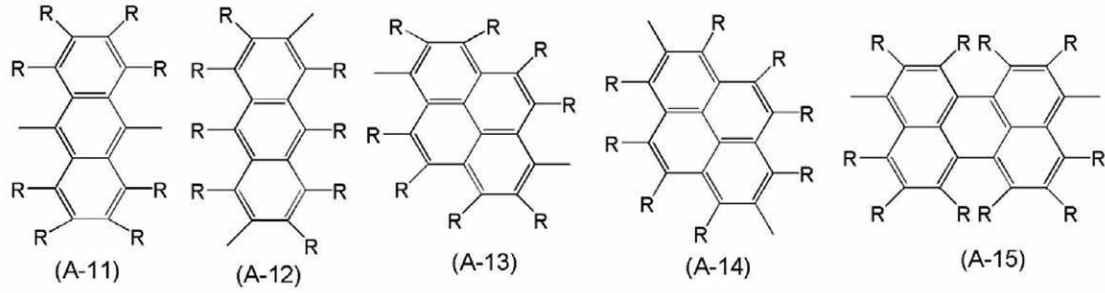
【 0 0 1 9 】

【 化 1 2 】



【 0 0 2 0 】

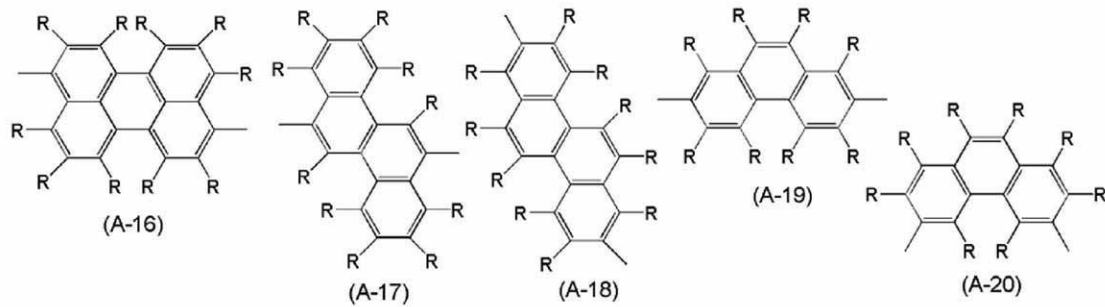
【化 1 3】



10

【 0 0 2 1】

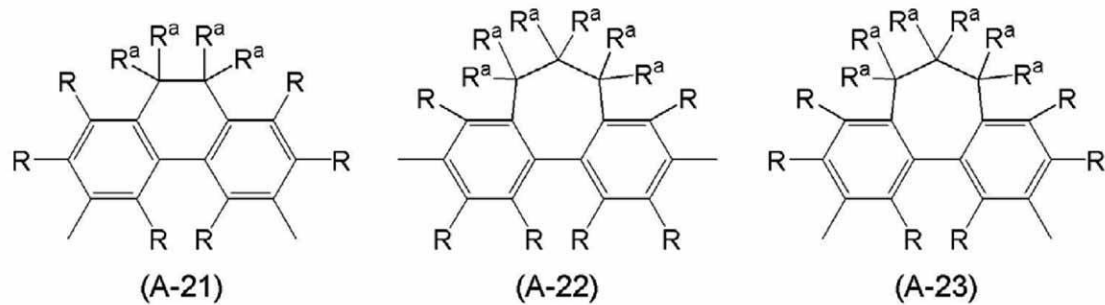
【化 1 4】



20

【 0 0 2 2】

【化 1 5】



30

【 0 0 2 3】

式中、R 及び R^a は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 個の複素環基を表す。複数存在する R 及び R^a はそれぞれ、同一であってもよく異なってもよく、 R^a 同士は互いに結合して、それぞれが結合する原子と共に環を形成していてもよい。

【 0 0 2 4】

「アルコキシ基」は、直鎖及び分岐のいずれでもよい。直鎖のアルコキシ基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常 1 ~ 40 であり、好ましくは 1 ~ 10 である。分岐のアルコキシ基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常 3 ~ 40 であり、好ましくは 4 ~ 10 である。

40

アルコキシ基は、置換基を有していてもよい。アルコキシ基としては、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロピルオキシ基、イソプロピルオキシ基、ブチルオキシ基、イソブチルオキシ基、tert-ブチルオキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、ヘプチルオキシ基、オクチルオキシ基、2-エチルヘキシルオキシ基、ノニルオキシ基、デシルオキシ基、3,7-ジメチルオクチルオキシ基、及びラウリルオキシ基が挙げられる。

【 0 0 2 5】

50

「シクロアルコキシ基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～40であり、好ましくは4～10である。シクロアルコキシ基は、置換基を有していてもよい。シクロアルコキシ基としては、例えば、シクロヘキシルオキシ基が挙げられる。

【0026】

「アリーロキシ基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常6～60であり、好ましくは6～48である。アリーロキシ基は、置換基を有していてもよい。アリーロキシ基としては、例えば、フェノキシ基、1-ナフチロキシ基、2-ナフチロキシ基、1-アントラセニロキシ基、9-アントラセニロキシ基、及び1-ピレニロキシ基が挙げられる。

【0027】

「複素環基」とは、複素環式化合物から環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子1個以上を除いた基を意味する。複素環基の中でも、芳香族複素環式化合物から環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子1個以上を除いた基である「芳香族複素環基」が好ましい。複素環式化合物から環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子p個（pは、1以上の整数を表す。）を除いた基を「p価の複素環基」ともいう。芳香族複素環式化合物から環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子p個を除いた基を「p価の芳香族複素環基」ともいう。

「芳香族複素環式化合物」としては、例えば、オキサジアゾール、チアジアゾール、チアゾール、オキサゾール、チオフェン、ピロール、ホスホール、フラン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、トリアジン、ピリダジン、キノリン、イソキノリン、カルバゾール、ジベンゾホスホール等の複素環自体が芳香族性を示す化合物、及び、フェノキサジン、フェノチアジン、ジベンゾポロール、ジベンゾシロール、ベンゾピラン等の複素環自体は芳香族性を示さなくとも、複素環に芳香環が縮環されている化合物が挙げられる。

複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常1～60であり、好ましくは2～40であり、より好ましくは3～20である。芳香族複素環基のヘテロ原子数は、置換基のヘテロ原子数を含めないで、通常1～30であり、好ましくは、1～10であり、より好ましくは、1～5であり、更に好ましくは1～3である。

複素環基としては、例えば、単環式の複素環式化合物（例えば、フラン、チオフェン、ピロール、ジアゾール、トリアゾール、ピリジン、ジアザベンゼン及びトリアジンが挙げられる。）、又は、多環式の複素環式化合物（例えば、アザナフタレン、ジアザナフタレン、ベンゾフラン、インドール、ベンゾジアゾール及びベンゾチアジアゾール等の2環式の複素環式化合物；ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ジベンゾポロール、ジベンゾシロール、ジベンゾホスホール、ジベンゾセレノフェン、フェノキサジン、フェノチアジン、9,10-ジヒドロアクリジン、5,10-ジヒドロフェナジン、フェナザボリン、フェノホスファジン、フェノセレナジン、フェナザシリン、アザアントラセン、ジアザアントラセン、アザフェナントレン及びジアザフェナントレン等の3環式の複素環式化合物；ヘキサアザトリフェニレン、ベンゾインドール及びベンゾナフトフラン等の4環式の複素環式化合物；ジベンゾカルバゾール、インドロカルバゾール及びインデノカルバゾール等の5環式の複素環式化合物；カルバゾロカルバゾール、ベンゾインドロカルバゾール及びベンゾインデノカルバゾール等の6環式の複素環式化合物；並びに、ジベンゾインドロカルバゾール等の7環式の複素環式化合物が挙げられる。）から、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個以上を除いてなる基が挙げられる。複素環基は、これらの基が複数結合した基を含む。複素環基は置換基を有していてもよい。

【0028】

2価の複素環基は、好ましくは、式(AA-1)～式(AA-34)で表される基である。2価の複素環基は、これらの基が複数結合した基を含む。

【0029】

10

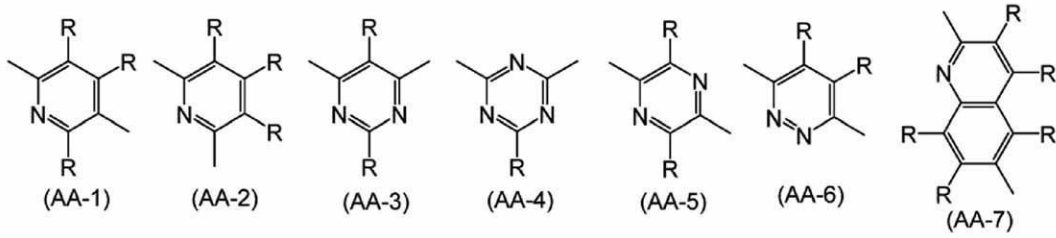
20

30

40

50

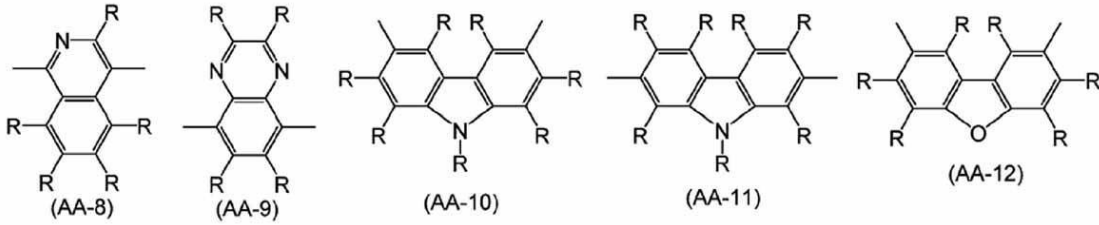
【化16】



【0030】

10

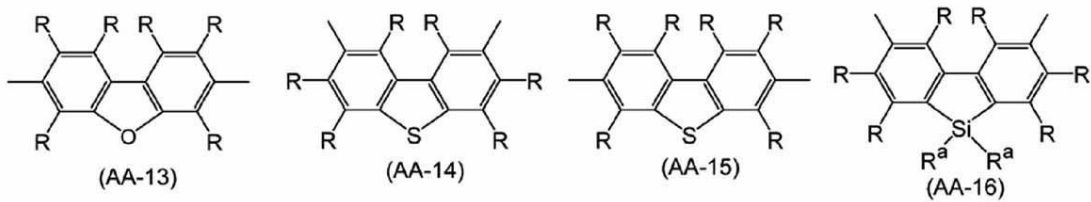
【化17】



【0031】

20

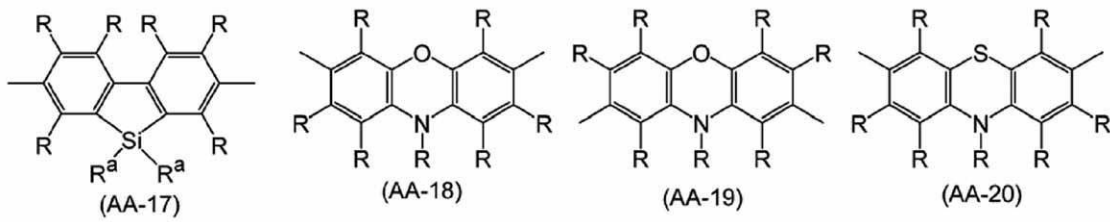
【化18】



【0032】

30

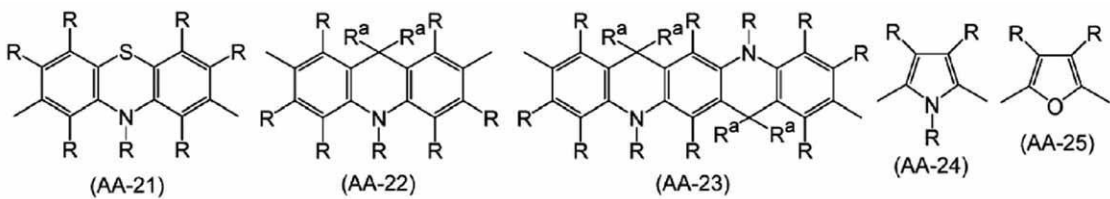
【化19】



【0033】

40

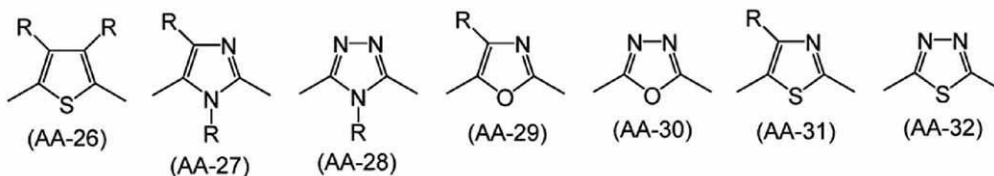
【化20】



【0034】

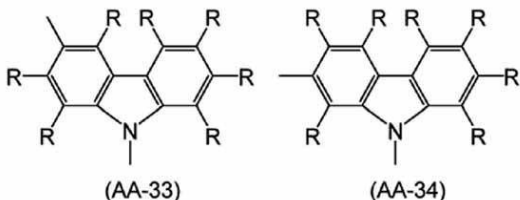
50

【化 2 1】



【0035】

【化 2 2】



10

【0036】

式中、R 及び R^a は、前記と同じ意味を表す。

【0037】

「ハロゲン原子」とは、フッ素原子、塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子を示す。

20

【0038】

「アミノ基」は、置換基を有していてもよく、置換アミノ基（即ち、第2級アミノ基又は第3級アミノ基、より好ましくは第3級アミノ基）が好ましい。アミノ基が有する置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アリアル基又は1個の複素環基が好ましい。アミノ基が有する置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する窒素原子とともに環を形成していてもよい。

置換アミノ基としては、例えば、ジアルキルアミノ基、ジシクロアルキルアミノ基及びジアリアルアミノ基が挙げられる。

アミノ基としては、例えば、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ビス(4-メチルフェニル)アミノ基、ビス(4-tert-ブチルフェニル)アミノ基、ビス(3,5-ジ-tert-ブチルフェニル)アミノ基が挙げられる。

30

【0039】

「アルケニル基」は、直鎖及び分岐のいずれでもよい。直鎖のアルケニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常2~30であり、好ましくは3~20である。分岐のアルケニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3~30であり、好ましくは4~20である。

「シクロアルケニル基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3~30であり、好ましくは4~20である。

アルケニル基及びシクロアルケニル基は、置換基を有していてもよい。アルケニル基としては、例えば、ビニル基、1-プロペニル基、2-プロペニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、3-ペンテニル基、4-ペンテニル基、1-ヘキセニル基、5-ヘキセニル基、7-オクテニル基、及び、これらの基における水素原子の一部又は全部が置換基で置換された基が挙げられる。シクロアルケニル基としては、例えば、シクロヘキセニル基、シクロヘキサジエニル基、シクロオクタトリエニル基、ノルボルニレニル基、及び、これらの基における水素原子の一部又は全部が置換基で置換された基が挙げられる。

40

【0040】

「アルキニル基」は、直鎖及び分岐のいずれでもよい。アルキニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常2~20であり、好ましくは3~20である。分岐のアルキニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常4~30であり、好ましくは4~20である。

50

「シクロアルキニル基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子を含めないで、通常 4 ~ 30 であり、好ましくは 4 ~ 20 である。

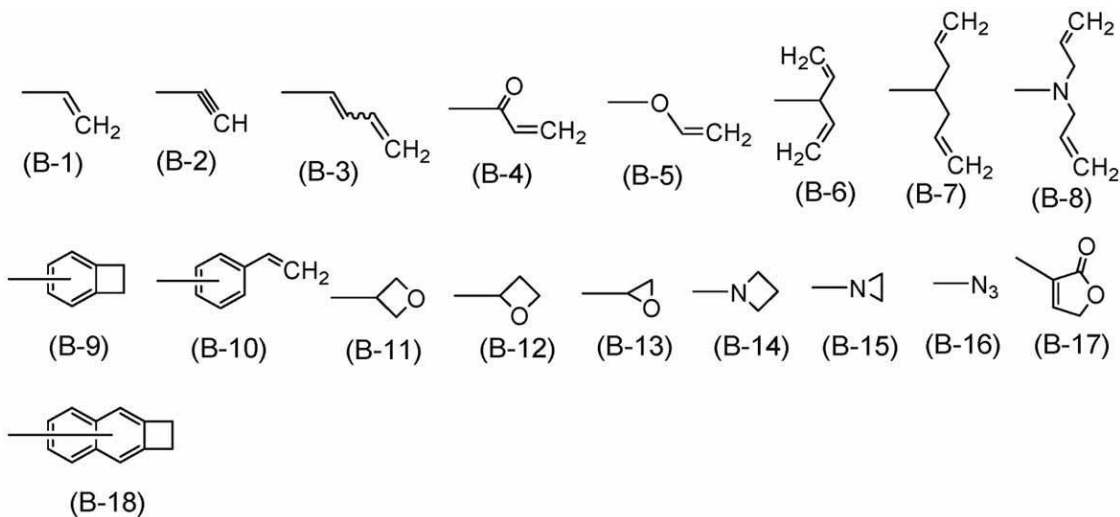
アルキニル基及びシクロアルキニル基は、置換基を有していてもよい。アルキニル基としては、例えば、エチニル基、1 - プロピニル基、2 - プロピニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、3 - ペチニル基、4 - ペチニル基、1 - ヘキシニル基、5 - ヘキシニル基、及び、これらの基における水素原子の一部又は全部が置換基で置換された基が挙げられる。シクロアルキニル基としては、例えば、シクロオクチニル基が挙げられる。

【0041】

「架橋基」とは、加熱、紫外線照射、近紫外線照射、可視光照射、赤外線照射、ラジカル反応等に供することにより、新たな結合を生成することが可能な基である。架橋基としては、式 (B-1) ~ 式 (B-18) のいずれかで表される基が好ましい。これらの基は、置換基を有していてもよい。

【0042】

【化23】



【0043】

「置換基」とは、ハロゲン原子、シアノ基、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1 価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、置換アミノ基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基又はシクロアルキニル基を表す。置換基は架橋基であってもよい。なお、置換基が複数存在する場合、それらは互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよいが、環を形成しないことが好ましい。

【0044】

< 発光素子用組成物 >

本実施形態の組成物は、式 (1) で表される燐光発光性化合物と、窒素原子及びホウ素原子からなる群より選択される少なくとも 1 種の原子 (以下、原子 (a) という。) を環内に含む縮合複素環骨格を有する化合物 (以下、化合物 (F) という。) とを含有する。本実施形態の組成物において、燐光発光性化合物及び化合物 (F) は、それぞれ、1 種のみを含有していてもよく、2 種以上を含有していてもよい。

【0045】

本実施形態の組成物は、 $|T_P| - |T_F|$ が 0.15 以上であるため、燐光発光性化合物から化合物 (F) へのエネルギー移動によって化合物 (F) を効率良く発光させることができる。このため、本実施形態の組成物は、発光素子用組成物として好適に用いることができる。

【0046】

本実施形態の組成物において、化合物 (F) の含有量は、燐光発光性化合物と化合物 (F) との合計を 100 質量部とした場合、通常、0.01 質量部 ~ 99 質量部であり、本

10

20

30

40

50

実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、0.05質量部～50質量部であることが好ましく、0.1質量部～30質量部であることがより好ましく、0.5質量部～25質量部であることが更に好ましく、1質量部～20質量部であることが特に好ましい。

【0047】

燐光発光性化合物の最低一重項励起状態のエネルギー準位の値（以下、 S_P ともいう。）と、化合物（F）の最低一重項励起状態のエネルギー準位の値（以下、 S_F ともいう。）は、量子化学計算によって求めることができるが、各化合物の室温における発光スペクトルの最も長波長側の極大ピーク波長（以下、「 $P_{L,RT}$ 」ともいう。）をエネルギー値に換算することによっても求めることができる。燐光発光性化合物及び化合物（F）が低分子化合物である場合、 S_P 及び S_F は、それぞれ量子化学計算によって求めることが好ましい。燐光発光性化合物及び化合物（F）が高分子化合物である場合、 S_P 及び S_F は、それぞれ $P_{L,RT}$ をエネルギー値に換算することによって求めることが好ましい。

10

【0048】

燐光発光性化合物の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値（ T_P ）及び化合物（F）の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値（ T_F ）は、量子化学計算によって求めることができるが、各化合物の77Kにおける発光スペクトルの最も長波長側の極大ピーク波長（以下、「 $P_{L,77K}$ 」ともいう。）をエネルギー値に換算することによっても求めることができる。燐光発光性化合物及び化合物（F）が低分子化合物である場合、 T_P 及び T_F は、それぞれ量子化学計算によって求めることが好ましい。燐光発光性化合物及び化合物（F）が高分子化合物である場合、 T_P 及び T_F は、それぞれ $P_{L,77K}$ をエネルギー値に換算することによって求めることが好ましい。

20

【0049】

燐光発光性化合物及び化合物（F）の $P_{L,RT}$ 及び $P_{L,77K}$ は、それぞれ、溶液法又は薄膜法を用いて測定することができる。

溶液法を用いる場合、化合物を、キシレン、トルエン、クロロホルム、テトラヒドロフラン、2-メチルテトラヒドロフラン等の有機溶媒に溶解させ、希薄溶液を調製し（ 1×10^{-6} 質量%～ 1×10^{-3} 質量%）、該希薄溶液のPLスペクトルを室温又は77Kで測定する。化合物を溶解させる有機溶媒としては、キシレン又は2-メチルテトラヒドロフランが好ましい。

30

薄膜法を用いる場合、化合物を、後述のインクに含有される溶媒と同様の有機溶媒に溶解させ、薄膜形成用溶液を調製し、該薄膜形成用溶液を用いて後述の膜の作製方法と同様の方法により薄膜を作製し、該薄膜のPLスペクトルを室温又は77Kで測定する。化合物を溶解させる有機溶媒としては、キシレン又は2-メチルテトラヒドロフランが好ましい。

【0050】

本実施形態の組成物において、 $|T_P| - |T_F|$ は0.15以上であり、燐光発光性化合物から化合物（F）へのエネルギー移動における損失がより抑制され、結果として本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、 $|T_P| - |T_F|$ は0.18以上であることが好ましく、0.20以上であることがより好ましく、0.25以上であることが更に好ましい。

40

本実施形態の組成物において、化合物（F）の発光割合がより大きくなり、本実施形態の組成物を含有する発光素子の色純度がより優れ、特にカラーフィルターを併用する発光素子における発光効率の損失がより抑制され、結果として本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、 $|T_P| - |T_F|$ は0.80以下であることが好ましく、0.50以下であることがより好ましく、0.35以下であることが更に好ましい。

本実施形態の組成物において、 $|T_P| - |T_F|$ は0.18以上0.80以下であることが好ましく、0.20以上0.50以下であることがより好ましく、0.25以上0.35以下であることが更に好ましい。

50

【0051】

化合物の室温における吸収スペクトルの最も長波長側の極大ピーク波長（以下、「 $\lambda_{ABS, RT}$ 」ともいう。）は、化合物を、キシレン、トルエン、クロロホルム、テトラヒドロフラン、2-メチルテトラヒドロフラン等の有機溶媒に溶解させ、希薄溶液を調製し（ 1×10^{-6} 質量% ~ 1×10^{-3} 質量%）、該希薄溶液の紫外可視吸収スペクトルを室温で測定することで評価することができる。化合物を溶解させる有機溶媒としては、キシレン又は2-メチルテトラヒドロフランが好ましい。

【0052】

本実施形態の組成物において、燐光発光性化合物から化合物（F）へのエネルギー移動がより効率化し、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、燐光発光性化合物の $\lambda_{PL, RT}$ と化合物（F）の $\lambda_{ABS, RT}$ との差は -20 nm 以上 40 nm 以下であることが好ましく、-15 nm 以上 30 nm 以下であることがより好ましく、-15 nm 以上 20 nm 以下であることが更に好ましく、-5 nm 以上 15 nm 以下であることが特に好ましい。

10

【0053】

< 燐光発光性化合物 >

「燐光発光性化合物」は、通常、室温で燐光発光性を示す化合物を意味するが、好ましくは、室温で三重項励起状態からの発光を示す化合物である。この三重項励起状態からの発光を示す化合物は、中心金属原子及び配位子を有する。

【0054】

中心金属原子としては、原子番号40以上の原子で、化合物にスピン-軌道相互作用があり、一重項状態と三重項状態間の項間交差を起こし得る金属原子が例示される。該金属原子としては、ルテニウム原子、ロジウム原子、パラジウム原子、イリジウム原子及び白金原子が例示される。

20

【0055】

配位子としては、中心金属原子との間に、配位結合及び共有結合からなる群より選択される少なくとも1種の結合を形成する、中性若しくはアニオン性の単座配位子、又は、中性若しくはアニオン性の多座配位子が例示される。中心金属原子と配位子との間の結合としては、金属-窒素結合、金属-炭素結合、金属-酸素結合、金属-リン結合、金属-硫黄結合及び金属-ハロゲン結合が例示される。多座配位子とは、通常、2座以上6座以下の配位子を意味する。

30

【0056】

燐光発光性化合物は、Aldrich、Luminescence Technology Corp.、American Dye Source等から入手可能である。

また、上記以外の入手方法として、「Journal of the American Chemical Society, Vol. 107, 1431-1432 (1985)」、「Journal of the American Chemical Society, Vol. 106, 6647-6653 (1984)」、国際公開第2004/026886号、国際公開第2006/121811号、国際公開第2011/024761号、国際公開第2007/097153号等の文献に記載の公知の方法により製造することも可能である。

40

【0057】

[式(1)で表される燐光発光性化合物]

式(1)で表される燐光発光性化合物は、中心金属である M^1 と、添え字 n^1 でその数を規定されている配位子と、添え字 n^2 でその数を規定されている配位子とから構成される燐光発光性化合物である。

【0058】

M^1 は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、イリジウム原子又は白金原子であることが好ましく、イリジウム原子であることがより好ましい。

【0059】

50

M^1 がロジウム原子又はイリジウム原子の場合、 n^1 は 2 又は 3 であることが好ましく、3 であることがより好ましい。

【0060】

M^1 がパラジウム原子又は白金原子の場合、 n^1 は 2 であることが好ましい。

【0061】

環 L^1 は、5 員又は 6 員の芳香族複素環であることが好ましく、5 員の芳香族複素環であることがより好ましい。

【0062】

環 L^1 としては、例えば、ピリジン環、ジアザベンゼン環、キノリン環、イソキノリン環、ジアゾール環及びトリアゾール環が挙げられ、ピリジン環、キノリン環、イソキノリン環、ジアゾール環、トリアゾール環が好ましく、ピリジン環、ジアゾール環及びトリアゾール環がより好ましく、ジアゾール環及びトリアゾール環が更に好ましく、トリアゾール環が特に好ましい。

10

【0063】

環 L^2 は、5 員又は 6 員の芳香族炭化水素環であることが好ましく、6 員の芳香族炭化水素環であることがより好ましい。

【0064】

環 L^2 としては、例えば、ベンゼン環、ナフタレン環、フルオレン環、フェナントレン環及びインデン環が挙げられ、ベンゼン環、ナフタレン環又はフルオレン環であることが好ましく、ベンゼン環であることがより好ましい。

20

【0065】

環 L^1 及び環 L^2 からなる群より選択される少なくとも 1 つの環は、式 (1 - T) で表される基を有する。「環 L^1 及び環 L^2 からなる群より選択される少なくとも 1 つの環は、式 (1 - T) で表される基を有する」とは、複数存在する環のうち、少なくとも 1 つの環を構成する炭素原子又は窒素原子に直接結合する水素原子の一部又は全部が、式 (1 - T) で表される基で置換されていることを意味する。式 (1) で表される燐光発光性化合物において、環 L^1 及び環 L^2 が複数存在する場合 (即ち、 n^1 が 2 又は 3 である場合)、複数存在する環 L^1 及び環 L^2 のうち、それらの少なくとも 1 つの環が式 (1 - T) で表される基を有していればよいが、複数存在する環 L^1 の全て、複数存在する環 L^2 の全て、又は、複数存在する環 L^1 及び環 L^2 の全てが、式 (1 - T) で表される基を有することが好ましく、複数存在する環 L^1 の全て、又は、複数存在する環 L^2 の全てが、式 (1 - T) で表される基を有することがより好ましく、複数存在する環 L^1 の全てが、式 (1 - T) で表される基を有することが更に好ましい。

30

【0066】

式 (1 - T) で表される基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

【0067】

環 L^1 及び環 L^2 が有していてもよい置換基は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、式 (1 - T) で表される基であることが好ましい。

【0068】

環 L^1 及び環 L^2 からなる群より選択される少なくとも 1 つの環は、式 (1 - T) で表される基を有するが、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、環 L^1 及び環 L^2 からなる群より選択される少なくとも 1 つの環を構成する炭素原子が、式 (1 - T) で表される基と直接結合していることが好ましい。

40

【0069】

環 L^1 及び環 L^2 は、式 (1 - T) で表される基とは異なる他の置換基を有していてもよい。他の置換基としては、アルケニル基又はシクロアルケニル基が好ましく、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

【0070】

環 L^1 が他の置換基を複数有する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

50

【0071】

環 L^2 が他の置換基を複数有する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

【0072】

環 L^1 における他の置換基と、環 L^2 における他の置換基とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

【0073】

[式(1-T)で表される基]

R^{1T} は、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基が好ましく、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基がより好ましく、アルキル基又はアリール基が更に好ましく、アルキル基が特に好ましい。これらの基は置換基を有していてもよい。

10

【0074】

R^{1T} におけるアリール基としては、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ジヒドロフェナントレニル基、フルオレニル基又はピレニル基が好ましく、フェニル基、ナフチル基又はフルオレニル基がより好ましく、フェニル基が更に好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0075】

R^{1T} における1価の複素環基としては、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、フェノキサジニル基又はフェノチアジニル基が好ましく、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、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基又はジアザカルバゾリル基がより好ましく、ピリジル基、ピリミジニル基又はトリアジニル基が更に好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

20

【0076】

R^{1T} における置換アミノ基において、アミノ基が有する置換基としては、アリール基又は1価の複素環基が好ましく、これらの基は更に置換基を有していてもよい。アミノ基が有する置換基におけるアリール基の例及び好ましい範囲は、 R^{1T} におけるアリール基の例及び好ましい範囲と同じである。アミノ基が有する置換基における1価の複素環基の例及び好ましい範囲は、 R^{1T} における1価の複素環基の例及び好ましい範囲と同じである。

30

【0077】

R^{1T} が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、 R^{1T} の例及び好ましい範囲と同じである。

【0078】

R^{1T} は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、又は、式(D-A)、式(D-B)若しくは式(D-C)で表される基であり、より好ましくは、アルキル基、又は、式(D-A)、式(D-B)若しくは式(D-C)で表される基であり、更に好ましくは、アルキル基、又は、式(D-A)若しくは式(D-C)で表される基であり、更に好ましくはアルキル基、又は、式(D-C)で表される基である。

40

【0079】

m^{DA1} 、 m^{DA2} 、 m^{DA3} 、 m^{DA4} 、 m^{DA5} 、 m^{DA6} 及び m^{DA7} は、通常10以下の整数であり、好ましくは5以下の整数であり、より好ましくは2以下の整数であり、更に好ましくは0又は1である。 m^{DA2} 、 m^{DA3} 、 m^{DA4} 、 m^{DA5} 、 m^{DA6} 及び m^{DA7} が、同一の整数であることが好ましく、 m^{DA1} 、 m^{DA2} 、 m^{DA3} 、 m^{DA4} 、 m^{DA5} 、 m^{DA6} 及び m^{DA7} が、同一の整数であることがより好ましい。

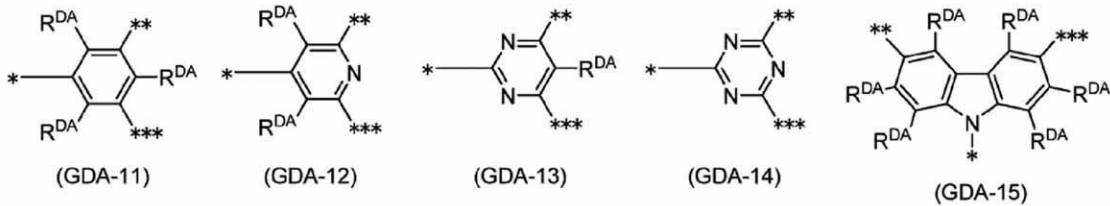
【0080】

R^{1T} における式(D-A)及び式(D-B)で表される基において、 G^{DA} は、好まし

50

くは式 (GDA-11) ~ 式 (GDA-15) で表される基であり、より好ましくは式 (GDA-11) ~ 式 (GDA-14) で表される基であり、更に好ましくは式 (GDA-11) で表される基である。

【化24】



10

[式中、

* は、式 (D-A) における Ar^{DA1} 、式 (D-B) における Ar^{DA1} 、式 (D-B) における Ar^{DA2} 、又は、式 (D-B) における Ar^{DA3} との結合を表す。

** は、式 (D-A) における Ar^{DA2} 、式 (D-B) における Ar^{DA2} 、式 (D-B) における Ar^{DA4} 、又は、式 (D-B) における Ar^{DA6} との結合を表す。

*** は、式 (D-A) における Ar^{DA3} 、式 (D-B) における Ar^{DA3} 、式 (D-B) における Ar^{DA5} 、又は、式 (D-B) における Ar^{DA7} との結合を表す。

R^{DA} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基又は 1 個の複素環基を表し、これらの基は更に置換基を有していてもよい。 R^{DA} が複数ある場合、それらは同一でも異なってもよい。]

20

【0081】

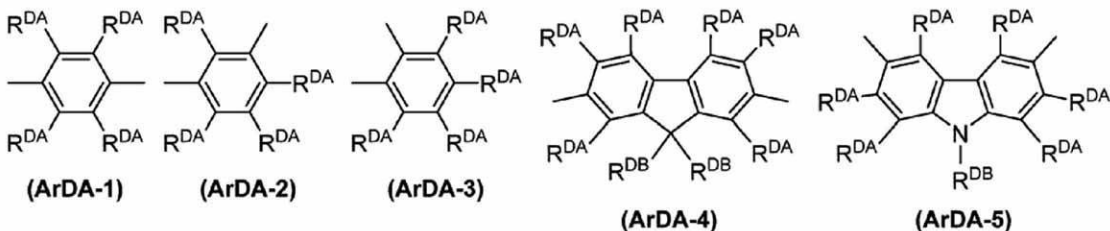
R^{DA} は、好ましくは水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基又はシクロアルコキシ基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基又はシクロアルキル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0082】

Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} 、 Ar^{DA3} 、 Ar^{DA4} 、 Ar^{DA5} 、 Ar^{DA6} 及び Ar^{DA7} は、好ましくは、フェニレン基、フルオレンジル基又はカルバゾールジイル基であり、より好ましくは式 (A-1) ~ 式 (A-3)、式 (A-8)、式 (A-9)、式 (AA-10)、式 (AA-11)、式 (AA-33) 又は式 (AA-34) で表される基であり、更に好ましくは式 (ArDA-1) ~ 式 (ArDA-5) で表される基であり、特に好ましくは式 (ArDA-1) ~ 式 (ArDA-3) で表される基であり、とりわけ好ましくは式 (ArDA-1) で表される基である。

30

【化25】



40

[式中、

R^{DA} は前記と同じ意味を表す。

R^{DB} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 個の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R^{DB} が複数ある場合、それらは同一でも異なってもよい。]

【0083】

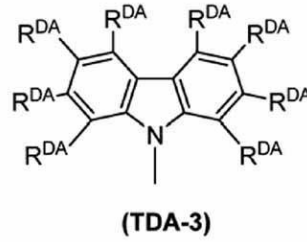
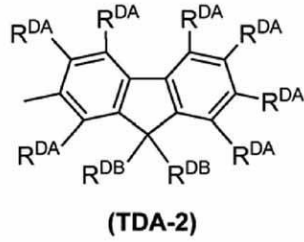
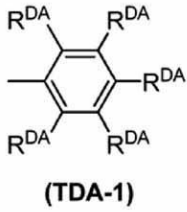
R^{DB} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 個の複素環基であり、より好ましくはアリール基又は 1 個の複素環基であり、更に好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

50

【 0 0 8 4 】

T^{DA} は、好ましくは式(TDA-1)~式(TDA-3)で表される基であり、より好ましくは式(TDA-1)で表される基である。

【 化 2 6 】



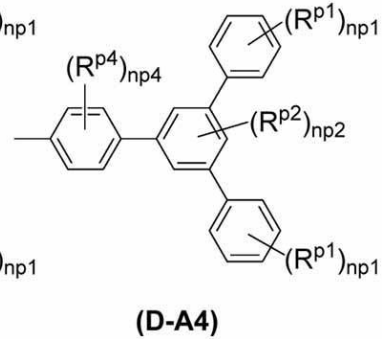
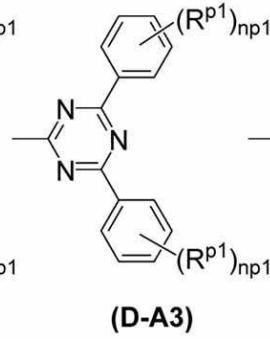
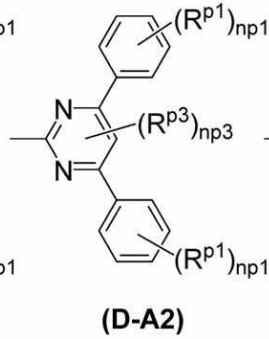
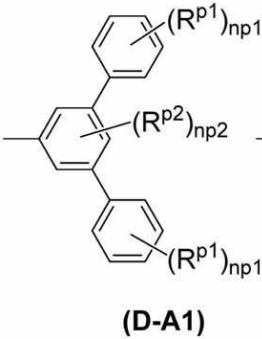
10

[式中、 R^{DA} 及び R^{DB} は、前記と同じ意味を表す。]

【 0 0 8 5 】

R^{1T} において、式(D-A)で表される基は、好ましくは、式(D-A1)~式(D-A4)で表される基であり、より好ましくは式(D-A1)、式(D-A3)又は式(D-A4)で表される基であり、更に好ましくは、式(D-A1)又は式(D-A3)で表される基である。

【 化 2 7 】



20

[式中、

R^{p1} 、 R^{p2} 、 R^{p3} 及び R^{p4} は、それぞれ独立に、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基又はハロゲン原子を表す。 R^{p1} 、 R^{p2} 及び R^{p4} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一であっても異なってもよい。

n_{p1} は、0~5の整数を表し、 n_{p2} は0~3の整数を表し、 n_{p3} は0又は1を表し、 n_{p4} は0~4の整数を表す。複数存在する n_{p1} は、同一でも異なってもよい。]

【 0 0 8 6 】

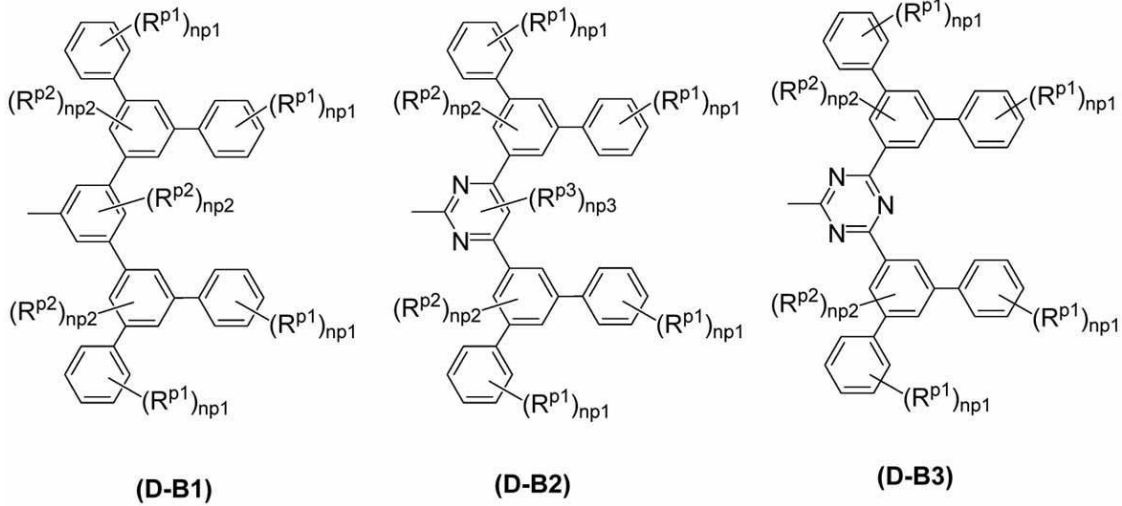
R^{1T} において、式(D-B)で表される基は、好ましくは、式(D-B1)~式(D-B3)で表される基であり、より好ましくは式(D-B1)又は式(D-B3)で表される基である。

30

40

50

【化 2 8】



10

〔式中、

R^{p1} 、 R^{p2} 及び R^{p3} は、それぞれ独立に、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基又はハロゲン原子を表す。 R^{p1} 及び R^{p2} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

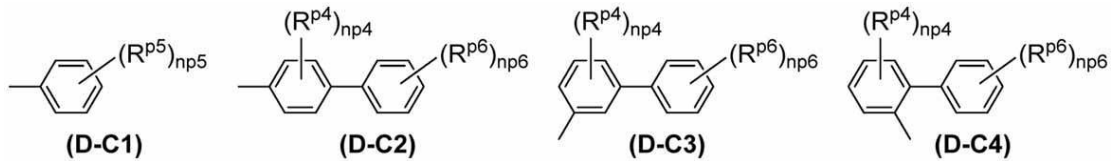
n_{p1} は 0 ~ 5 の整数を表し、 n_{p2} は 0 ~ 3 の整数を表し、 n_{p3} は 0 又は 1 を表す。 n_{p1} 及び n_{p2} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

20

【0087】

R^{1T} において、式 (D-C) で表される基は、好ましくは式 (D-C1) ~ 式 (D-C13) で表される基であり、より好ましくは式 (D-C1) ~ 式 (D-C3) 又は式 (D-C8) ~ 式 (D-C10) で表される基であり、更に好ましくは式 (D-C1)、式 (D-C2) 又は式 (D-C9) で表される基であり、特に好ましくは式 (D-C9) で表される基である。

【化 2 9】

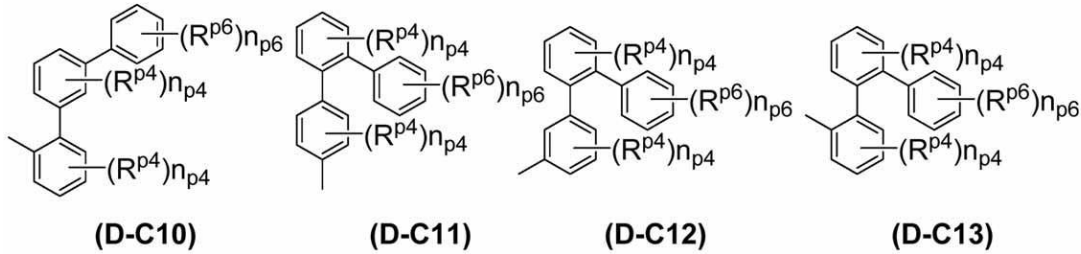
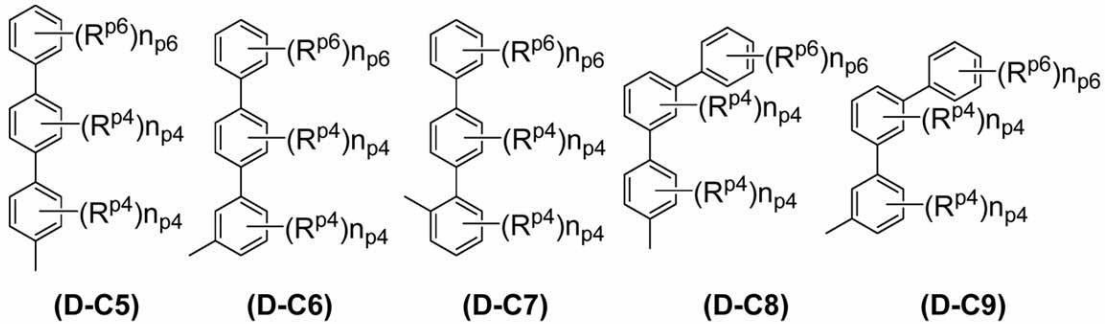


30

40

50

【化 3 0】



[式中、

R^{p4} 、 R^{p5} 及び R^{p6} は、それぞれ独立に、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基又はハロゲン原子を表す。 R^{p4} 、 R^{p5} 及び R^{p6} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一であっても異なってもよい。

n_{p4} は、0 ~ 4 の整数を表し、 n_{p5} は 0 ~ 5 の整数を表し、 n_{p6} は 0 ~ 5 の整数を表す。]

【 0 0 8 8】

n_{p1} は、好ましくは 0 又は 1 であり、より好ましくは 1 である。 n_{p2} は、好ましくは 0 又は 1 であり、より好ましくは 0 である。 n_{p3} は好ましくは 0 である。 n_{p4} は、好ましくは 0 ~ 2 の整数である。 n_{p5} は、好ましくは 1 ~ 3 の整数である。 n_{p6} は、好ましくは 0 ~ 2 の整数である。

【 0 0 8 9】

R^{p1} 、 R^{p2} 、 R^{p3} 、 R^{p4} 、 R^{p5} 及び R^{p6} は、好ましくはアルキル基又はシクロアルキル基であり、より好ましくはメチル基、エチル基、イソプロピル基、tert-ブチル基、ヘキシル基、2-エチルヘキシル基、シクロヘキシル基、メトキシ基、2-エチルヘキシルオキシ基、tert-オクチル基又はシクロヘキシルオキシ基であり、更に好ましくはメチル基、エチル基、イソプロピル基、tert-ブチル基、ヘキシル基、2-エチルヘキシル基又は tert-オクチル基である。

【 0 0 9 0】

式 (D-A) で表される基は、好ましくは式 (D-A1) ~ 式 (D-A4) で表される基であり、より好ましくは式 (D-A1) 又は式 (D-A4) で表される基であり、更に好ましくは式 (D-A1) で表される基である。

【 0 0 9 1】

式 (D-B) で表される基は、好ましくは式 (D-B1) ~ 式 (D-B3) で表される基であり、より好ましくは式 (D-B1) で表される基である。

【 0 0 9 2】

式 (D-C) で表される基は、好ましくは式 (D-C1) ~ 式 (D-C13) で表される基であり、より好ましくは式 (D-C1) ~ 式 (D-C3) で表される基であり、更に好ましくは式 (D-C1) 又は式 (D-C2) で表される基であり、特に好ましくは式 (D-C1) で表される基である。

【 0 0 9 3】

式 (D-A) で表される基としては、例えば、式 (D-A-1) ~ 式 (D-A-12) で表される基が挙げられる。

10

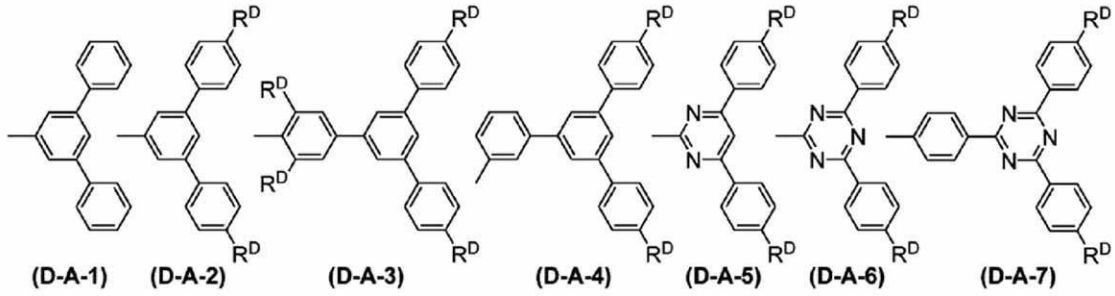
20

30

40

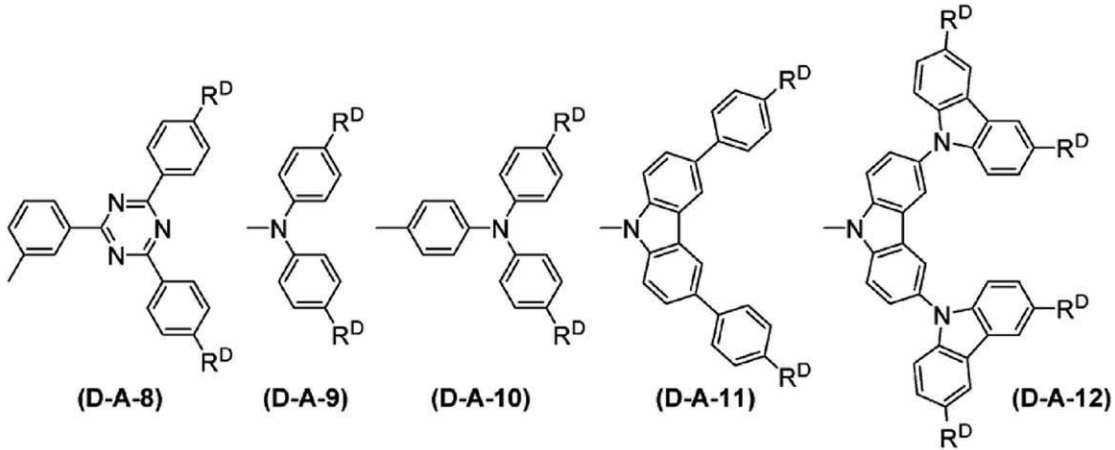
50

【化 3 1】



10

【化 3 2】



20

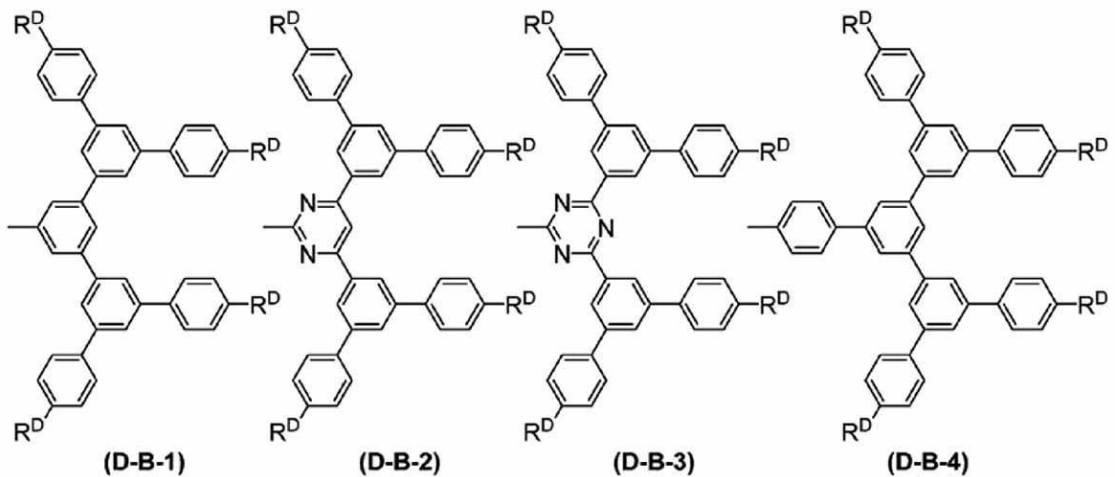
[式中、 R^D は、メチル基、エチル基、イソプロピル基、*tert*-ブチル基、ヘキシル基、2-エチルヘキシル基、*tert*-オクチル基、シクロヘキシル基、メトキシ基、2-エチルヘキシルオキシ基又はシクロヘキシルオキシ基を表す。 R^D が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

【0094】

式(D-B)で表される基としては、例えば、式(D-B-1)~式(D-B-4)で表される基が挙げられる。

30

【化 3 3】



40

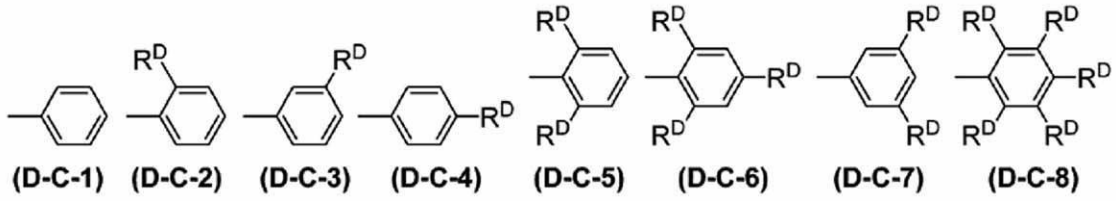
[式中、 R^D は前記と同じ意味を表す。]

【0095】

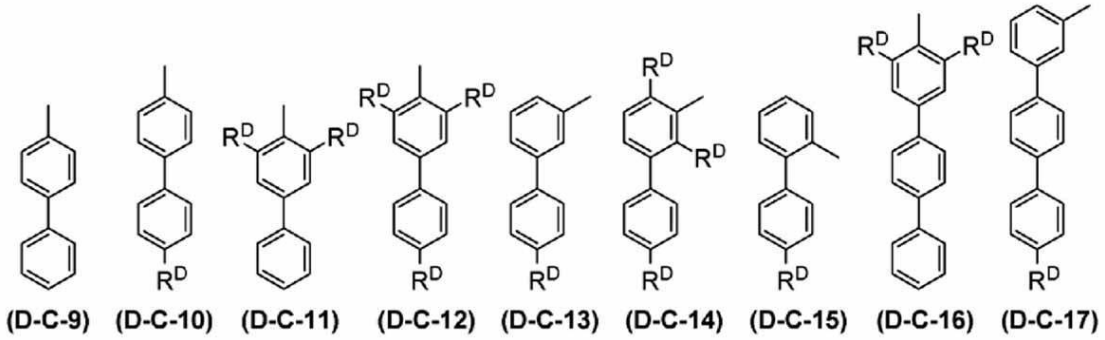
式(D-C)で表される基としては、例えば、式(D-C-1)~式(D-C-26)で表される基が挙げられる。

50

【化 3 4】

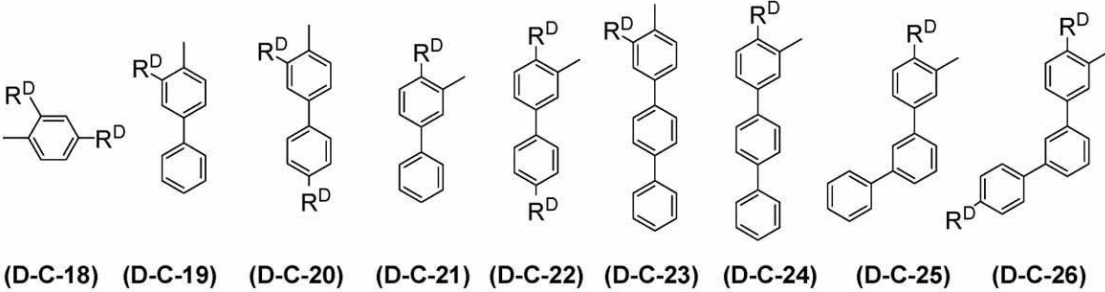


【化 3 5】



10

【化 3 6】



20

[式中、R^Dは前記と同じ意味を表す。]

【 0 0 9 6】

30

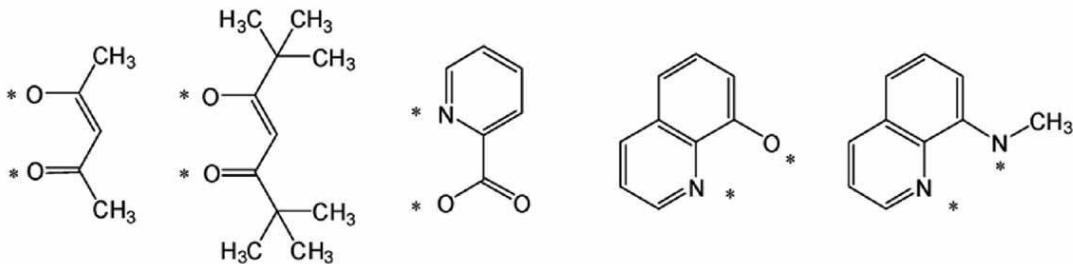
R^Dはメチル基、エチル基、イソプロピル基、tert-ブチル基、ヘキシル基、2-エチルヘキシル基又はtert-オクチル基であることが好ましい。

【 0 0 9 7】

[アニオン性の 2 座配位子]

A¹ - G¹ - A²で表されるアニオン性の 2 座配位子としては、例えば、下記式で表される配位子が挙げられる。

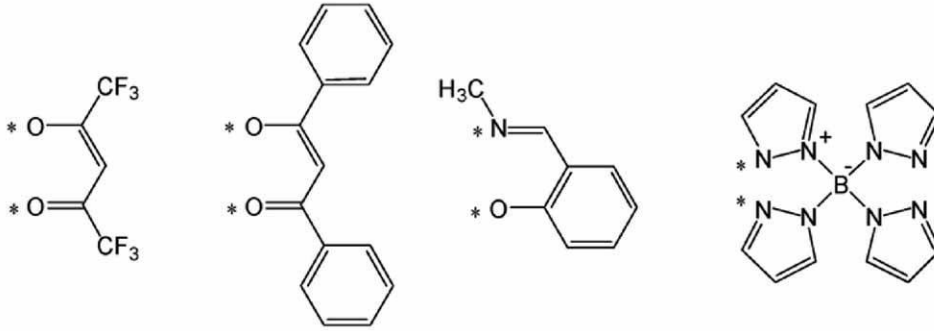
【化 3 7】



40

50

【化 3 8】



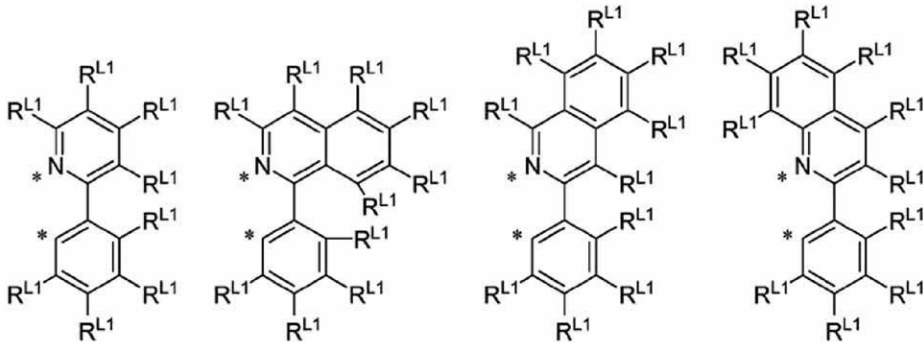
10

[式中、* は、 M^1 と結合する部位を示す。]

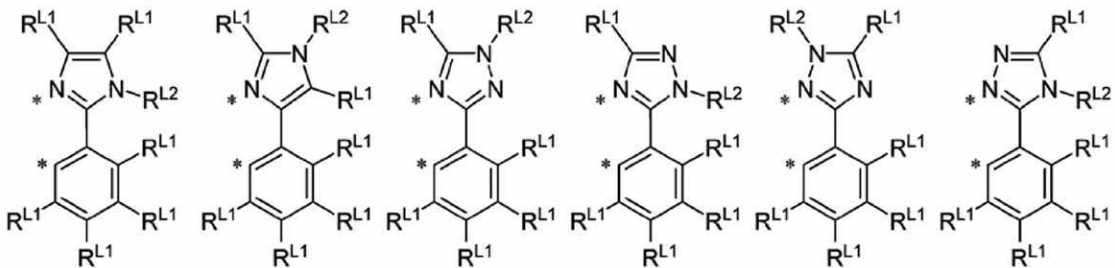
【 0 0 9 8】

$A^1 - G^1 - A^2$ で表されるアニオン性の 2 座配位子は、下記式で表される配位子であってもよい。

【化 3 9】



20



30

[式中、

* は、 M^1 と結合する部位を表す。

R^{L1} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はハロゲン原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{L1} は、同一でも異なってもよい。

R^{L2} は、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1 価の複素環基又はハロゲン原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

40

【 0 0 9 9】

R^{L1} は、好ましくは、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はフッ素原子であり、より好ましくは水素原子又はアルキル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【 0 1 0 0】

R^{L2} は、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基であり、より好ましくはアリール基又は 1 価の複素環基であり、更に好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【 0 1 0 1】

[式 (1 - A) で表される燐光発光性化合物]

50

環 L^1 が 5 員の芳香族複素環であるとき、式 (1) で表される燐光発光性化合物は、式 (1-A) で表される燐光発光性化合物であることが好ましい。

【0102】

環 L^1 がジアゾール環である場合、 E^{11A} が窒素原子であるイミダゾール環、 E^{12A} が窒素原子であるイミダゾール環又は E^{13A} が窒素原子であるピラゾール環が好ましく、 E^{11A} が窒素原子であるイミダゾール環がより好ましい。

【0103】

環 L^1 がトリアゾール環である場合、 E^{11A} 及び E^{12A} が窒素原子であるトリアゾール環又は E^{11A} 及び E^{13A} が窒素原子であるトリアゾール環が好ましく、 E^{11A} 及び E^{13A} が窒素原子であるトリアゾール環がより好ましい。

10

【0104】

E^{11A} が窒素原子であり、かつ、 R^{11A} が存在する場合、 R^{11A} はアルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基であることが好ましく、アリール基又は 1 価の複素環基であることがより好ましく、アリール基であることが更に好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0105】

E^{11A} が炭素原子である場合、 R^{11A} は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基であることが好ましく、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であることがより好ましく、水素原子、アルキル基又はシクロアルキル基であることが更に好ましく、水素原子であることが特に好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

20

【0106】

E^{12A} が窒素原子であり、かつ、 R^{12A} が存在する場合、 R^{12A} はアルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基であることが好ましく、アリール基又は 1 価の複素環基であることがより好ましく、アリール基であることが更に好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0107】

E^{12A} が炭素原子である場合、 R^{12A} は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基であることが好ましく、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であることがより好ましく、水素原子、アルキル基又はシクロアルキル基であることが更に好ましく、アルキル基であることが特に好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

30

【0108】

E^{13A} が窒素原子であり、かつ、 R^{13A} が存在する場合、 R^{13A} はアルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基であることが好ましく、アリール基又は 1 価の複素環基であることがより好ましく、アリール基であることが更に好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0109】

E^{13A} が炭素原子である場合、 R^{13A} は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基であることが好ましく、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であることがより好ましく、水素原子、アルキル基又はシクロアルキル基であることが更に好ましく、アルキル基であることが特に好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

40

【0110】

R^{11A} 、 R^{12A} 及び R^{13A} におけるアリール基、1 価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 R^{1T} におけるアリール基、1 価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同じであり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0111】

R^{11A} 、 R^{12A} 及び R^{13A} が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 R^{1T} が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じであり、これらの

50

基は更に置換基を有していてもよい。

【0112】

R^{11A} 、 R^{12A} 及び R^{13A} におけるアリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは式(D-A)、式(D-B)又は式(D-C)で表される基であり、より好ましくは式(D-A)又は式(D-C)で表される基であり、更に好ましくは式(D-C)で表される基である。

【0113】

本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、 R^{11A} 、 R^{12A} 及び R^{13A} からなる群より選択される少なくとも1つは、式(1-T)で表される基であることが好ましく、 R^{11A} 及び R^{12A} が式(1-T)で表される基であること、並びに、 R^{11A} 及び R^{13A} が式(1-T)で表される基であることがより好ましく、 R^{11A} 及び R^{12A} が式(1-T)で表される基であることが更に好ましい。

10

【0114】

R^{11A} 、 R^{12A} 及び R^{13A} からなる群より選択される少なくとも1つが、置換基を有していてもよいアリール基又は置換基を有していてもよい1価の複素環基である場合、 R^{11A} が置換基を有していてもよいアリール基若しくは置換基を有していてもよい1価の複素環基であること又は R^{13A} が置換基を有していてもよいアリール基若しくは置換基を有していてもよい1価の複素環基であることが好ましく、 R^{11A} が置換基を有していてもよいアリール基又は置換基を有していてもよい1価の複素環基であることがより好ましく、 R^{11A} が置換基を有していてもよいアリール基であることが更に好ましい。

20

【0115】

R^{11A} と R^{12A} とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよいが、燐光発光性化合物の発光スペクトルの最大ピーク波長が長波長になるため、環を形成しないことが好ましい。

【0116】

R^{12A} と R^{13A} とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよいが、燐光発光性化合物の発光スペクトルの最大ピーク波長が長波長になるため、環を形成しないことが好ましい。

【0117】

R^{11A} と環 L^2 が有していてもよい置換基とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよいが、燐光発光性化合物の発光スペクトルの最大ピーク波長が長波長になるため、環を形成しないことが好ましい。

30

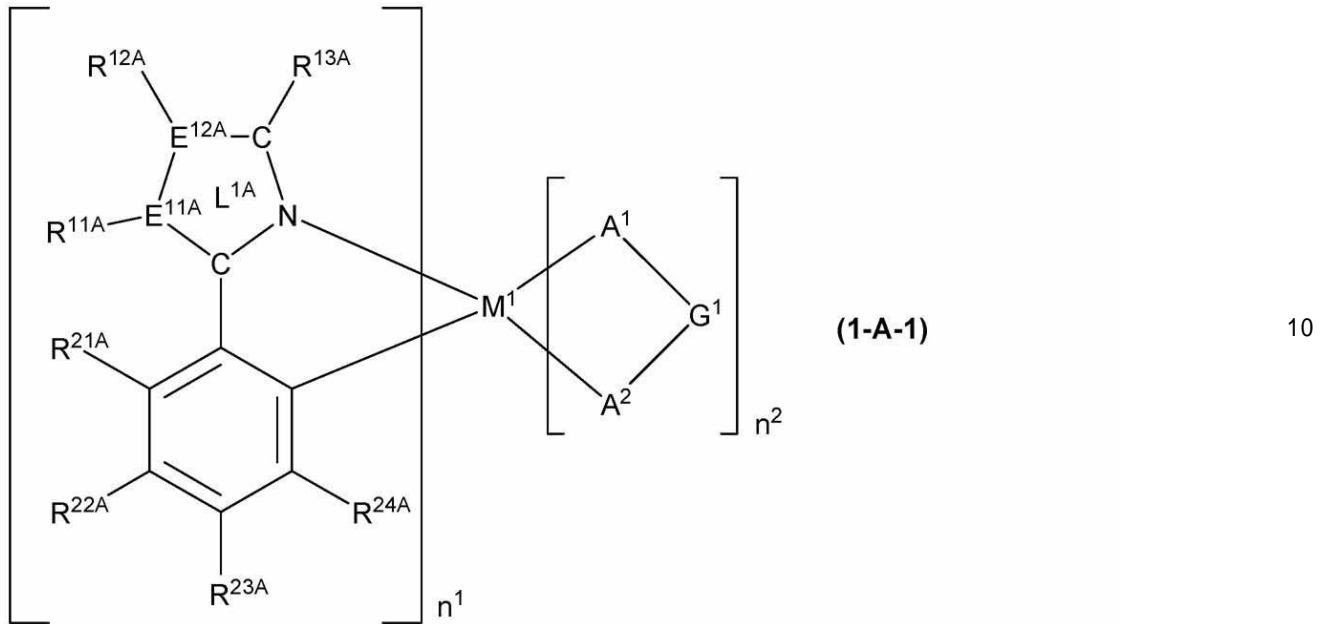
【0118】

式(1-A)で表される燐光発光性化合物は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、式(1-A-1)又は式(1-A-2)で表される燐光発光性化合物であることが好ましく、式(1-A-2)で表される燐光発光性化合物であることがより好ましい。

【0119】

40

【化40】



[式中、 M^1 、 n^1 、 n^2 、環 L^{1A} 、 E^{11A} 、 E^{12A} 、 R^{11A} 、 R^{12A} 、 R^{13A} 、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 、 R^{24A} 及び $A^1 - G^1 - A^2$ は、前記と同じ意味を表す。 20

但し、 R^{11A} 、 R^{12A} 、 R^{13A} 、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式(1-T)で表される基である。]

【0120】

R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} の例及び好ましい範囲は、 R^{1T} における例及び好ましい範囲と同じであり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0121】

R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 R^{1T} におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0122】 30

R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、 R^{1T} が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0123】

本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} からなる群より選択される少なくとも1つは、式(1-T)で表される基であることが好ましい。

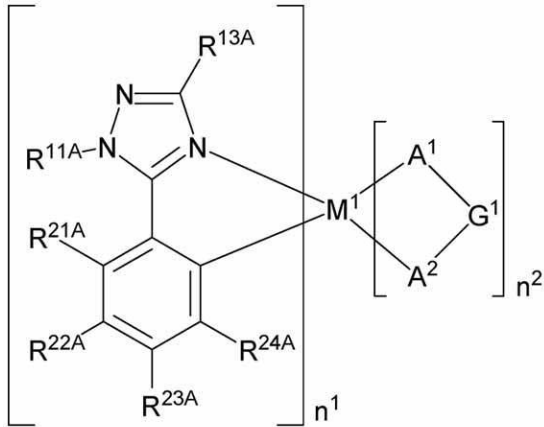
【0124】

R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} からなる群より選択される少なくとも1つが、式(1-T)で表される基である場合、 R^{22A} 又は R^{23A} が、式(1-T)で表される基であることが好ましく、 R^{22A} が、式(1-T)で表される基であることがより好ましい。 40

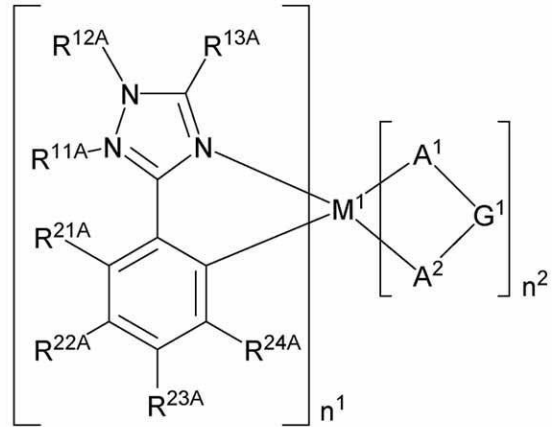
【0125】

式(1-A-1)で表される燐光発光性化合物は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率が更に優れるので、式(1-A-11)で表される燐光発光性化合物、式(1-A-12)で表される燐光発光性化合物、式(1-A-13)で表される燐光発光性化合物又は式(1-A-14)で表される燐光発光性化合物であることが好ましく、式(1-A-11)で表される燐光発光性化合物又は式(1-A-13)で表される燐光発光性化合物であることがより好ましく、式(1-A-11)で表される燐光発光性化合物であることが更に好ましい。

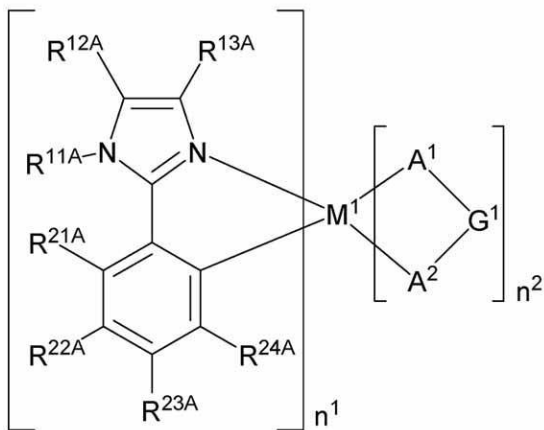
【化 4 1】



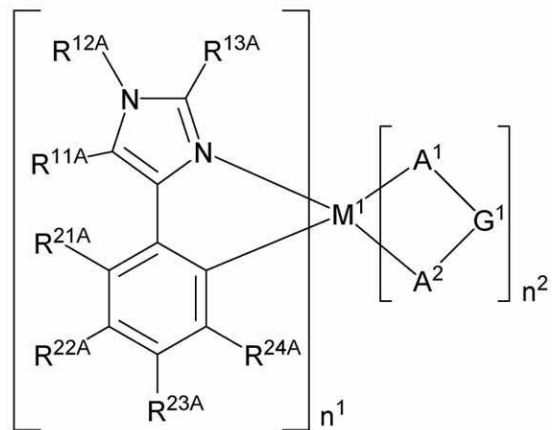
(1-A-11)



(1-A-12)



(1-A-13)



(1-A-14)

[式中、 M^1 、 n^1 、 n^2 、 R^{11A} 、 R^{12A} 、 R^{13A} 、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 、 R^{24A} 及び $A^1 - G^1 - A^2$ は、前記と同じ意味を表す。

但し、式 (1-A-11) 中、 R^{11A} 、 R^{13A} 、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式 (1-T) で表される基であり、式 (1-A-12) 中、 R^{12A} 、 R^{13A} 、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式 (1-T) で表される基であり、式 (1-A-13) 及び式 (1-A-14) 中、 R^{11A} 、 R^{12A} 、 R^{13A} 、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式 (1-T) で表される基である。]

【0126】

式 (1-A-1) で表される燐光発光性化合物としては、例えば、下記式で表される燐光発光性化合物及び後述の化合物 P3 等が挙げられる。

【0127】

10

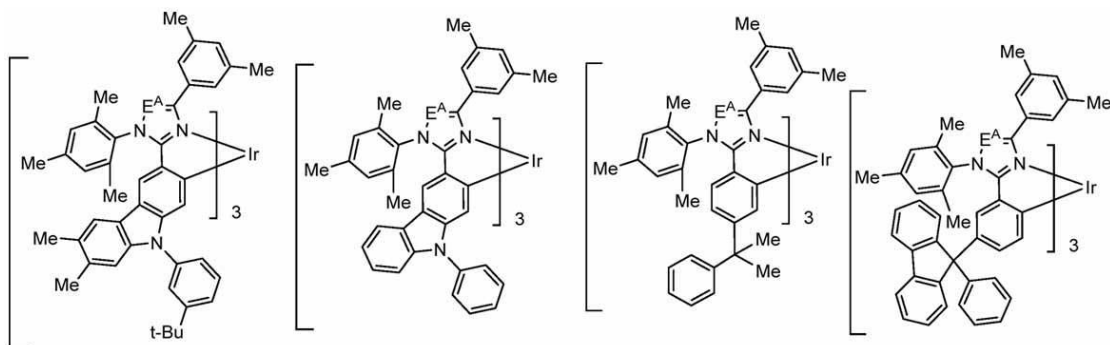
20

30

40

50

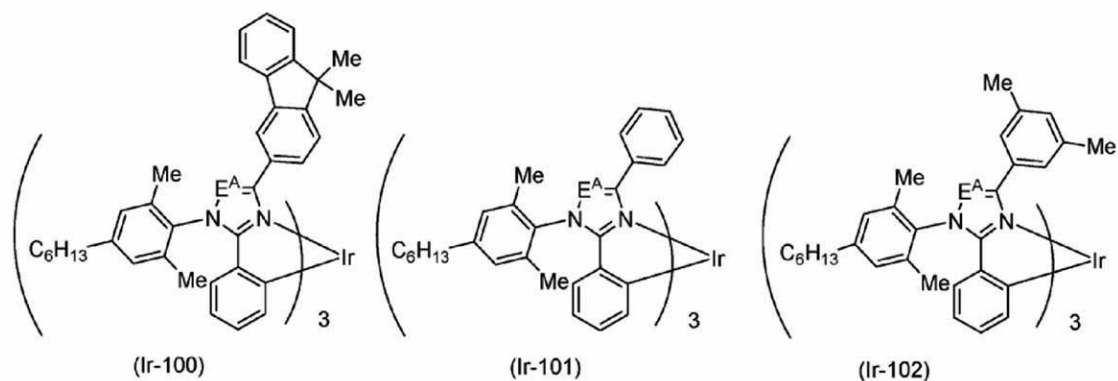
【化 4 2】



10

【 0 1 2 8】

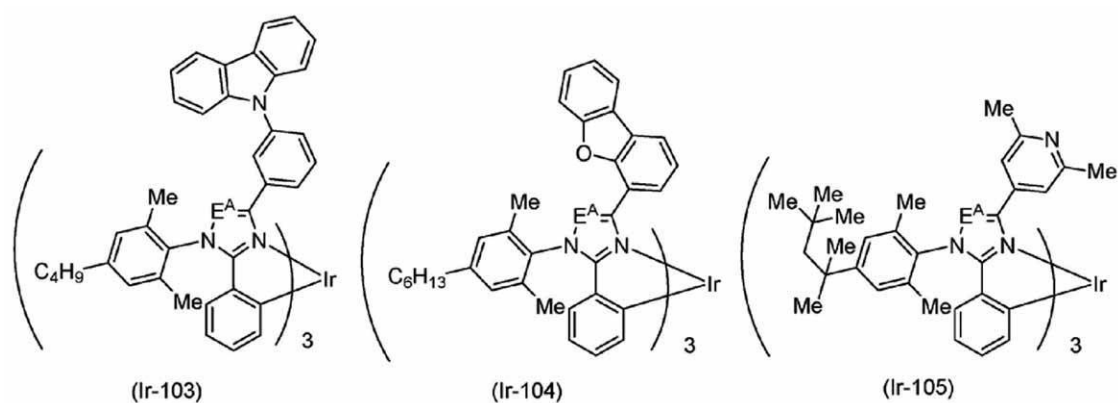
【化 4 3】



20

【 0 1 2 9】

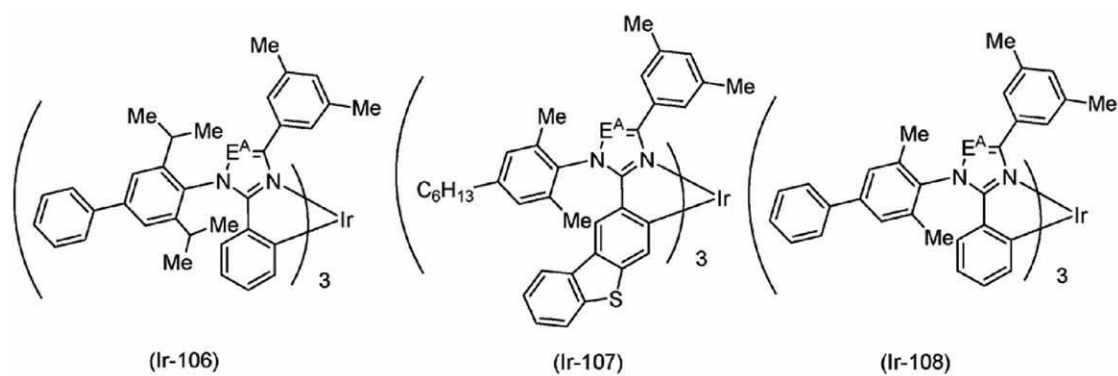
【化 4 4】



30

【 0 1 3 0】

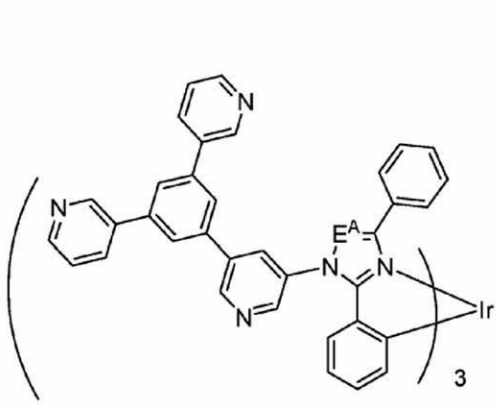
【化 4 5】



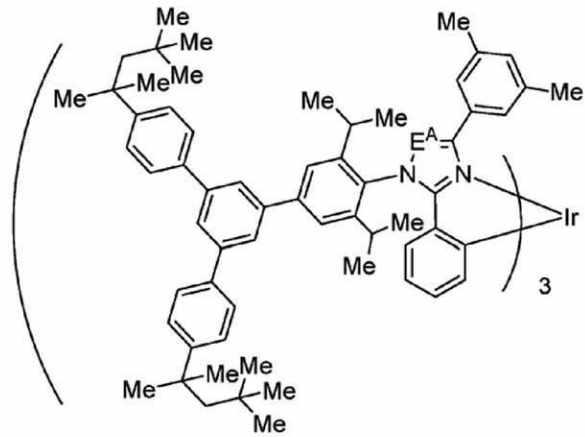
50

【 0 1 3 1 】

【 化 4 6 】



(Ir-109)

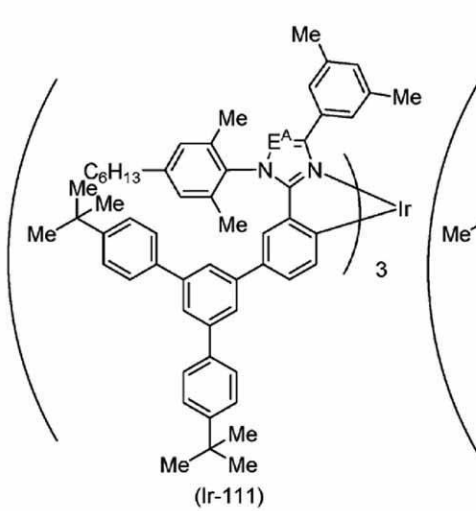


(Ir-110)

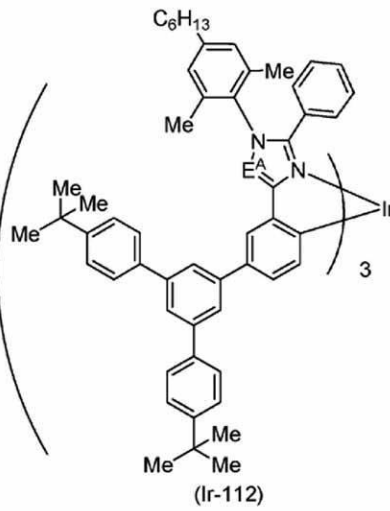
10

【 0 1 3 2 】

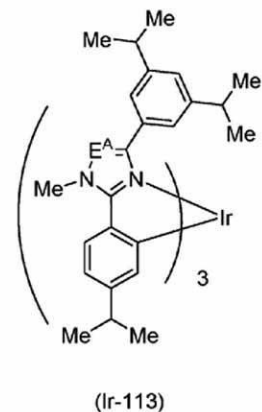
【 化 4 7 】



(Ir-111)



(Ir-112)



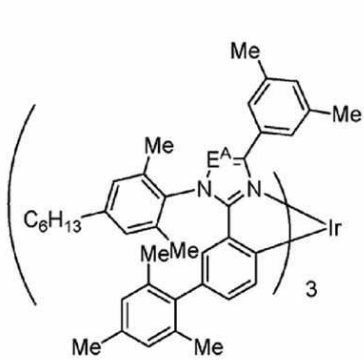
(Ir-113)

20

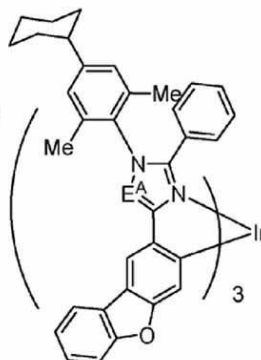
30

【 0 1 3 3 】

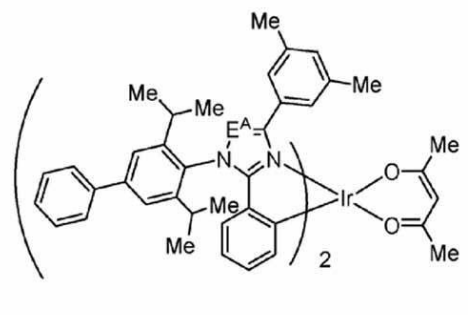
【 化 4 8 】



(Ir-114)



(Ir-115)



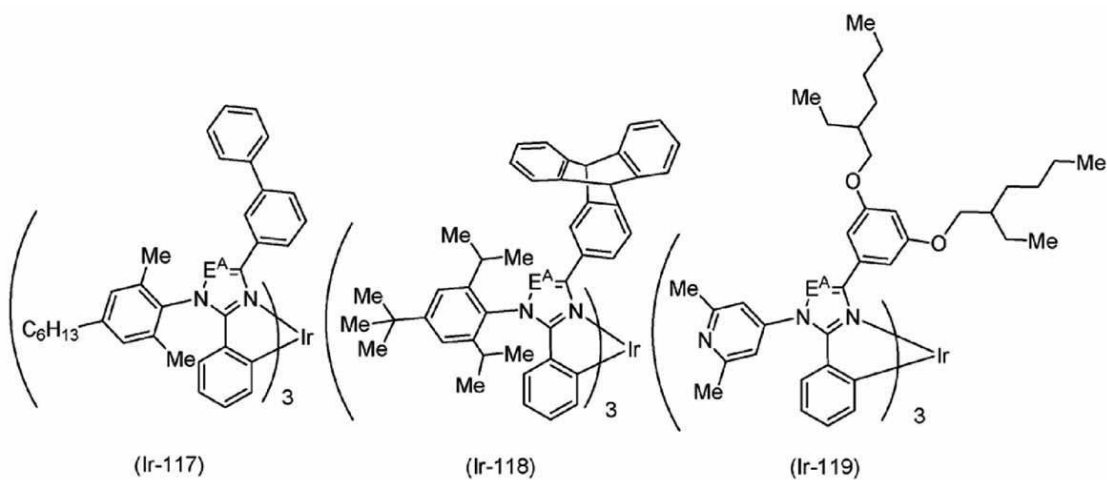
(Ir-116)

40

【 0 1 3 4 】

50

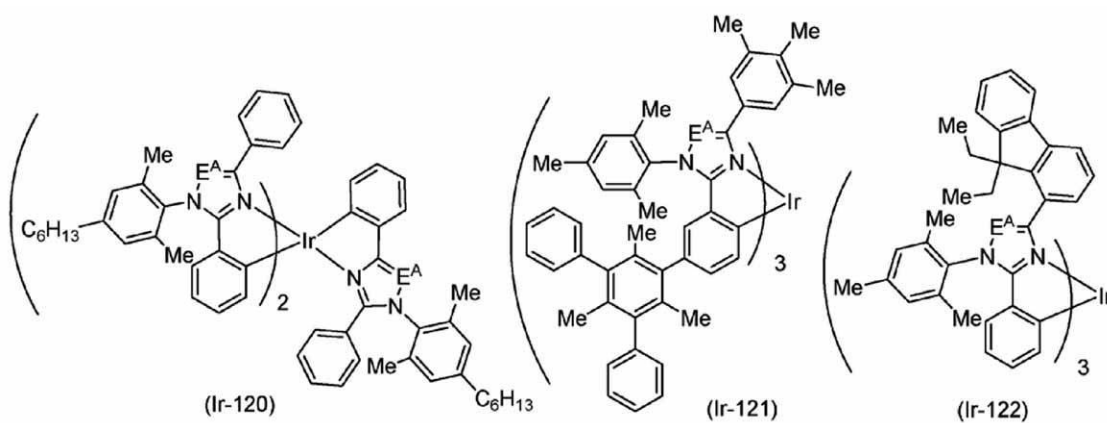
【化 4 9】



10

【 0 1 3 5】

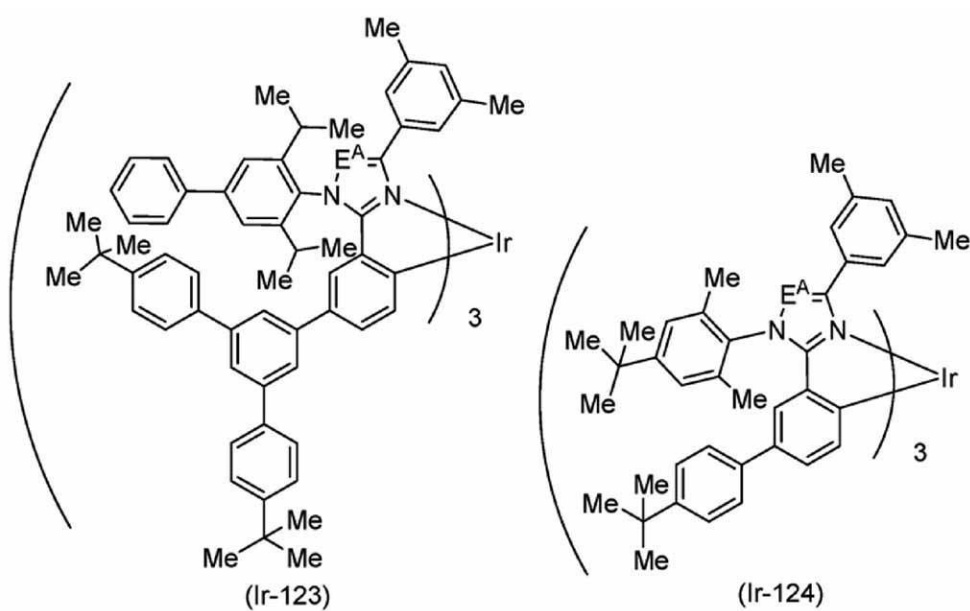
【化 5 0】



20

【 0 1 3 6】

【化 5 1】

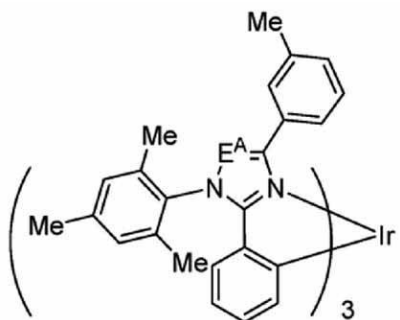


40

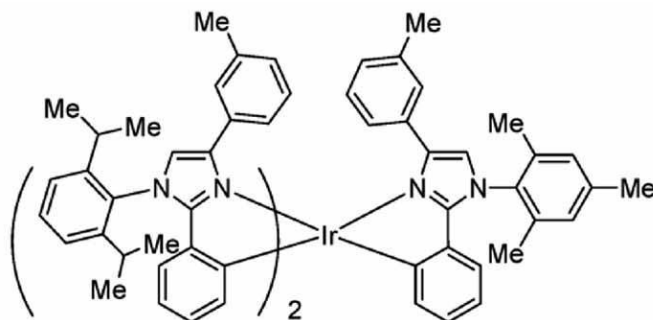
【 0 1 3 7】

50

【化 5 2】



(Ir-125)

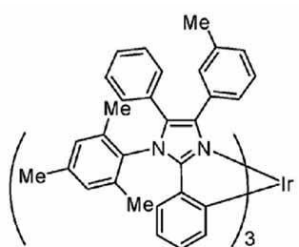


(Ir-126)

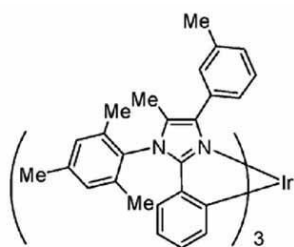
10

【 0 1 3 8 】

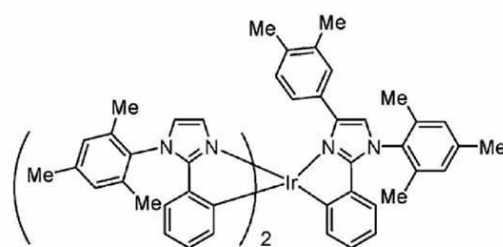
【化 5 3】



(Ir-127)



(Ir-128)

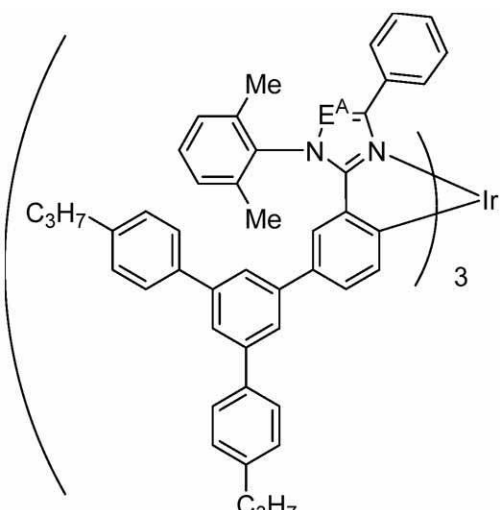


(Ir-129)

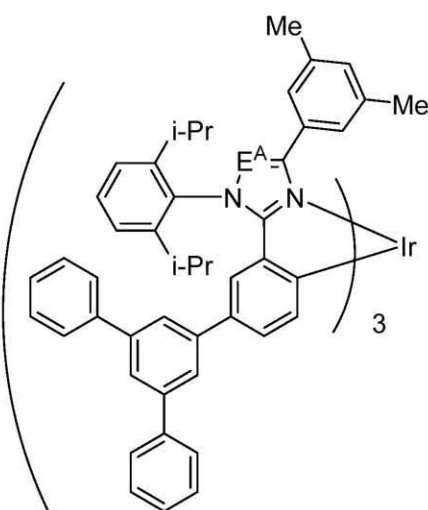
20

【 0 1 3 9 】

【化 5 4】



(Ir-130)



(Ir-131)

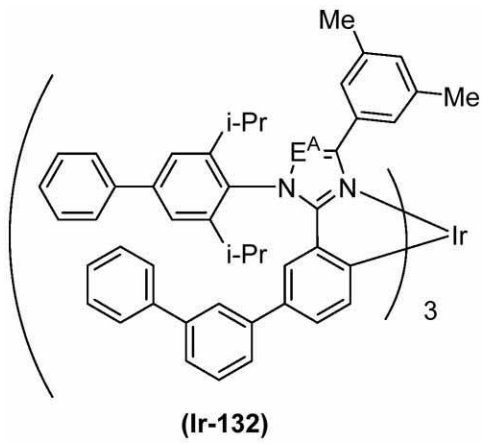
30

【 0 1 4 0 】

40

50

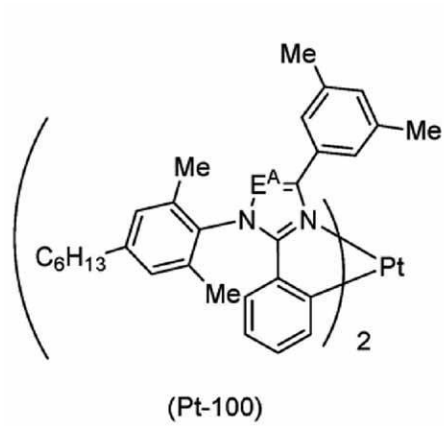
【化 5 5】



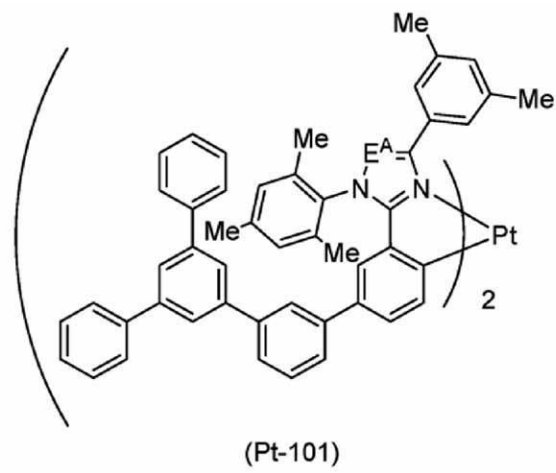
10

【 0 1 4 1】

【化 5 6】

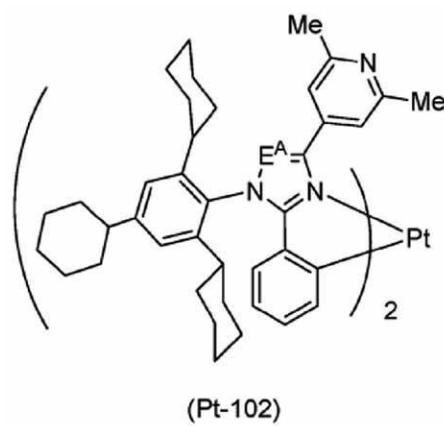


20

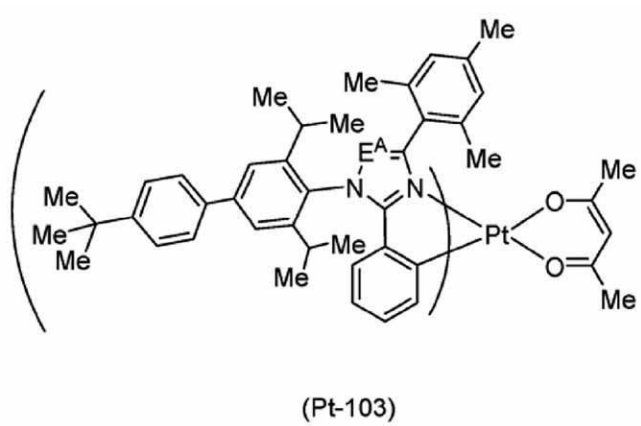


【 0 1 4 2】

【化 5 7】



30

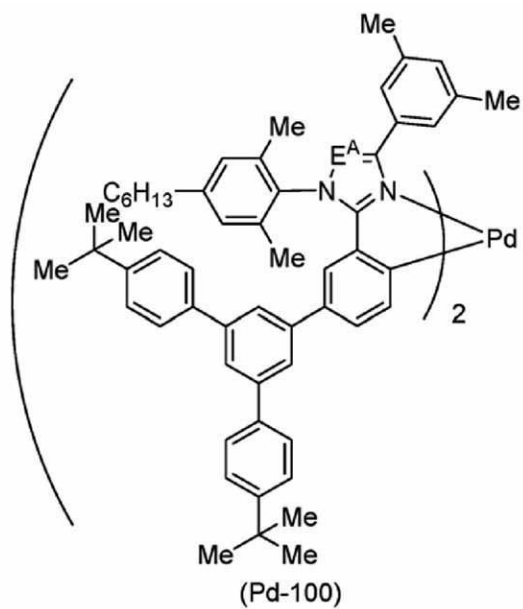
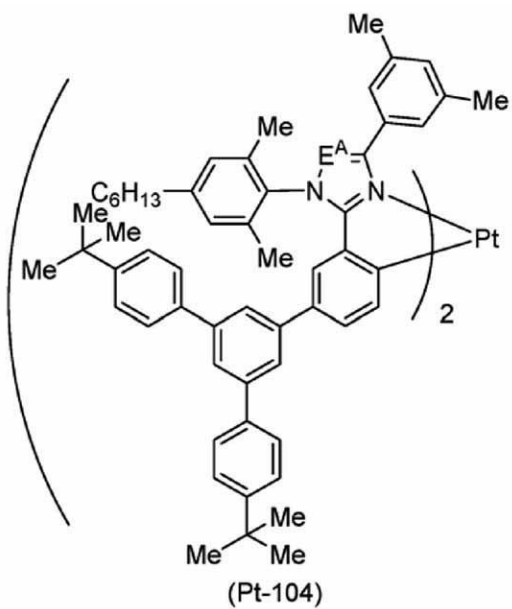


40

【 0 1 4 3】

50

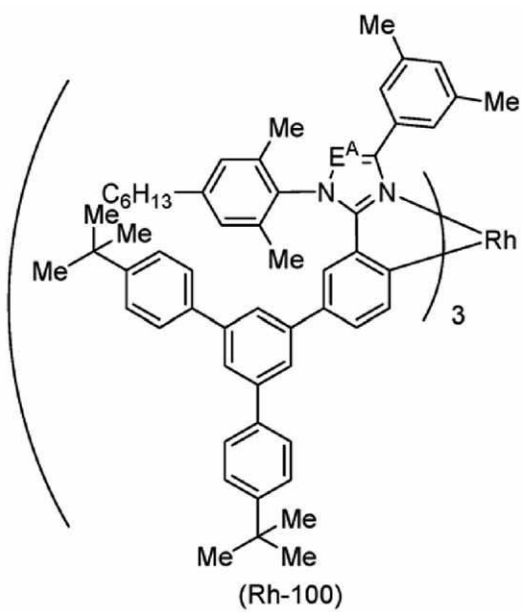
【化 5 8】



10

【 0 1 4 4】

【化 5 9】



20

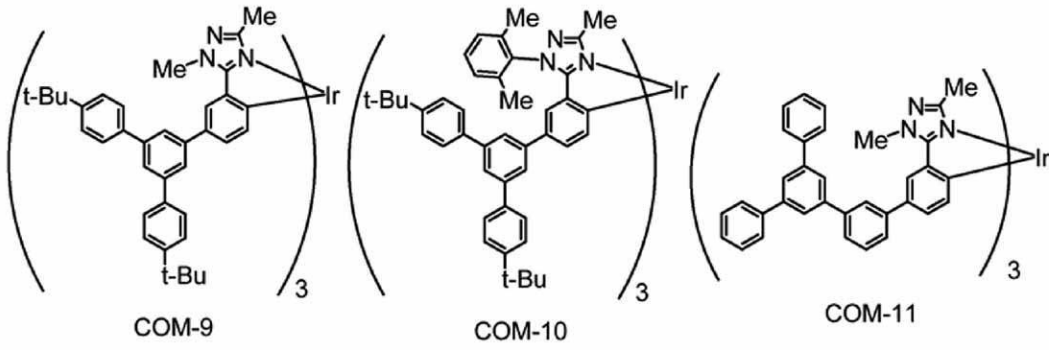
30

【 0 1 4 5】

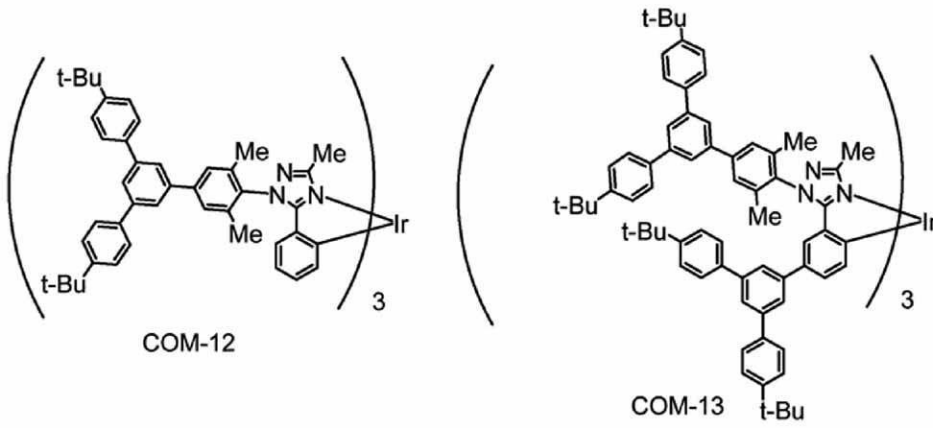
40

50

【化 6 0】



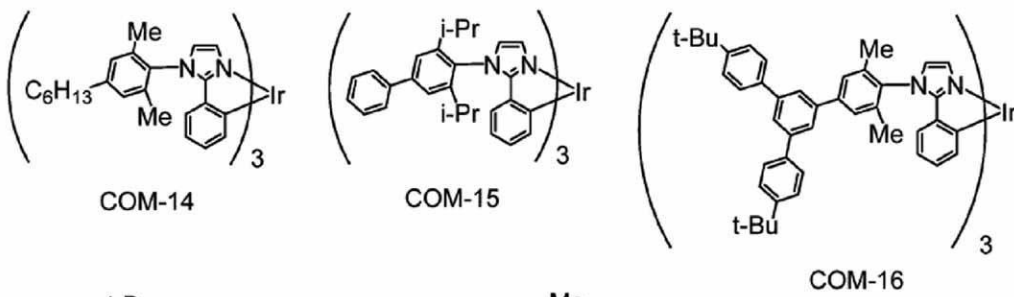
10



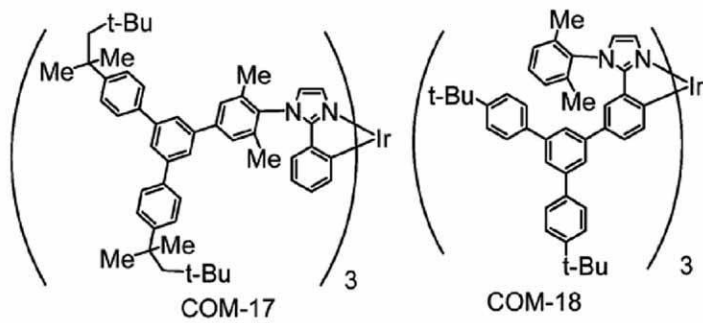
20

【 0 1 4 6】

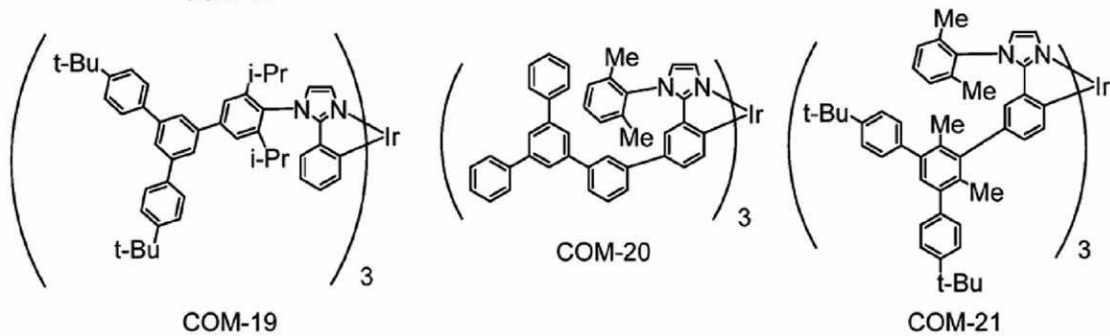
【化 6 1】



30



40



【 0 1 4 7】

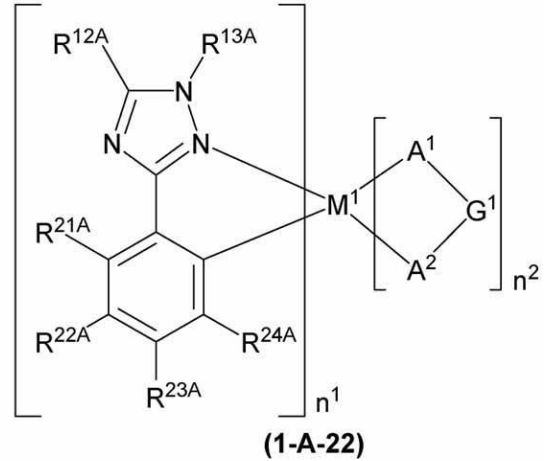
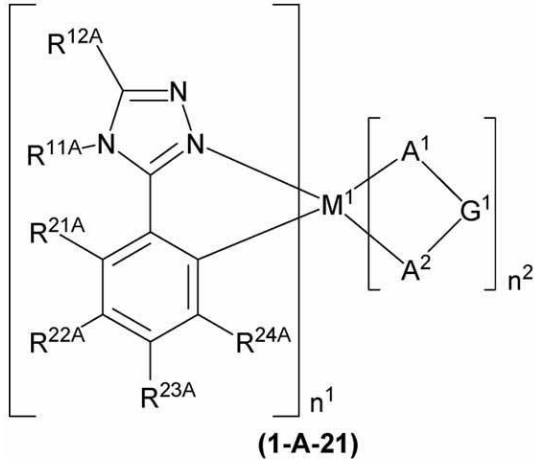
50

式中、 E^A は、 $-CH=$ で表される基又は $-N=$ で表される基を表す。

【0148】

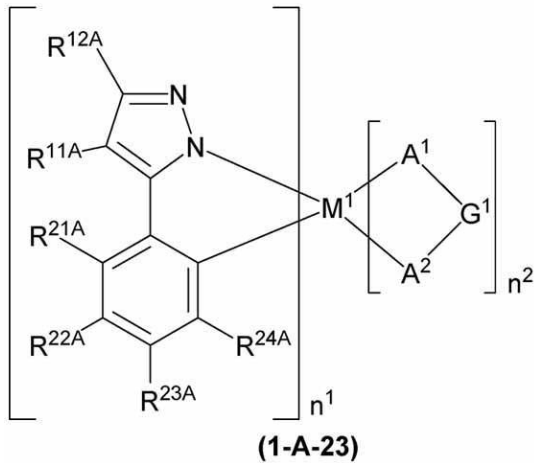
式(1-A-2)で表される燐光発光性化合物は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率が更に優れるので、式(1-A-21)で表される燐光発光性化合物、式(1-A-22)で表される燐光発光性化合物又は式(1-A-23)で表される燐光発光性化合物であることが好ましく、式(1-A-21)で表される燐光発光性化合物又は式(1-A-22)で表される燐光発光性化合物であることがより好ましく、式(1-A-21)で表される燐光発光性化合物であることが更に好ましい。

【化62】



10

20



30

[式中、 M^1 、 n^1 、 n^2 、 R^{11A} 、 R^{12A} 、 R^{13A} 、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 、 R^{24A} 及び $A^1-G^1-A^2$ は、前記と同じ意味を表す。

但し、式(1-A-21)及び式(1-A-23)中、 R^{11A} 、 R^{12A} 、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式(1-T)で表される基であり、式(1-A-22)中、 R^{12A} 、 R^{13A} 、 R^{21A} 、 R^{22A} 、 R^{23A} 及び R^{24A} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式(1-T)で表される基である。]

40

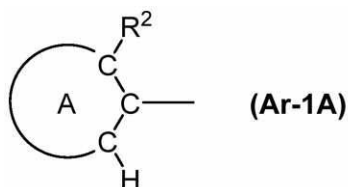
【0149】

式(1-A-21)及び式(1-A-23)中、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、 R^{11A} 及び R^{12A} からなる群より選択される少なくとも1つは、式(Ar-1A)で表される基であることが好ましく、 R^{11A} は式(Ar-1A)で表される基であることがより好ましい。

式(1-A-22)中、 R^{12A} 及び R^{13A} からなる群より選択される少なくとも1つは、式(Ar-1A)で表される基であることが好ましく、 R^{12A} は式(Ar-1A)で表される基であることがより好ましい。

50

【化 6 3】



[式中、

環 A は、芳香族炭化水素環又は芳香族複素環を表し、これらの環は置換基を有していてもよい。前記置換基が複数存在する場合、それらは互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

10

R² は、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリーール基、アリーールオキシ基、1 価の複素環基、置換アミノ基又はハロゲン原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

【 0 1 5 0】

環 A における芳香族炭化水素環の例及び好ましい範囲は、環 L² における芳香族炭化水素環の例及び好ましい範囲と同じである。環 A における芳香族複素環の例及び好ましい範囲は、環 L¹ における芳香族複素環の例及び好ましい範囲と同じである。

【 0 1 5 1】

環 A は、5 員若しくは 6 員の芳香族炭化水素環、又は、5 員若しくは 6 員の芳香族複素環であることが好ましく、6 員の芳香族炭化水素環又は 6 員の芳香族複素環であることがより好ましく、6 員の芳香族炭化水素環であることが更に好ましく、これらの環は置換基を有していてもよい。

20

【 0 1 5 2】

環 A は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、ベンゼン環、フルオレン環、スピロビフルオレン環、ジヒドロフェナントレン環、ピリジン環、ジアザベンゼン環、カルバゾール環、ジベンゾフラン環又はジベンゾチオフェン環であり、より好ましくは、ベンゼン環、ピリジン環又はジアザベンゼン環であり、更に好ましくはベンゼン環であり、これらの環は置換基を有していてもよい。

【 0 1 5 3】

環 A が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、環 L² が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

30

【 0 1 5 4】

燐光発光性化合物の合成が容易になるので、環 A が有していてもよい置換基が複数存在する場合、それらは互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成しないことが好ましい。

【 0 1 5 5】

R² は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリーール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基又はアリーール基であり、更に好ましくは、アルキル基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

40

R² におけるアリーール基、1 価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、R^{1 1 A} ~ R^{1 3 A} におけるアリーール基、1 価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同じである。

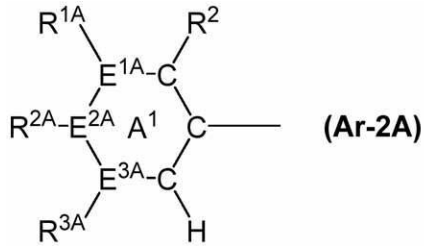
R² が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、R^{1 1 A} ~ R^{1 3 A} が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

【 0 1 5 6】

式 (Ar - 1 A) で表される基は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、式 (Ar - 2 A) で表される基である。

50

【化64】



[式中、 R^2 は、前記と同じ意味を表す。]

10

環 A^1 は、ベンゼン環、ピリジン環又はジアザベンゼン環を表す。

E^{1A} 、 E^{2A} 及び E^{3A} は、それぞれ独立に、窒素原子又は炭素原子を表す。 E^{1A} が窒素原子の場合、 R^{1A} は存在しない。 E^{2A} が窒素原子の場合、 R^{2A} は存在しない。 E^{3A} が窒素原子の場合、 R^{3A} は存在しない。

R^{1A} 、 R^{2A} 及び R^{3A} は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1 価の複素環基、置換アミノ基又はハロゲン原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

R^{1A} と R^{2A} 、及び、 R^{2A} と R^{3A} は、それぞれ結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。]

【0157】

20

$E^{1A} \sim E^{3A}$ は、好ましくは、炭素原子である。

【0158】

環 A^1 がピリジン環である場合、 E^{1A} が窒素原子であるピリジン環が好ましい。

環 A^1 がジアザベンゼン環である場合、 E^{1A} 及び E^{3A} が窒素原子であるピリミジン環が好ましい。

環 A^1 は、ベンゼン環が好ましい。

【0159】

$R^{1A} \sim R^{3A}$ は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基であり、より好ましくは、水素原子、アルキル基又はアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

30

R^{1A} 及び R^{3A} は、更に好ましくは、水素原子である。

R^{2A} は、更に好ましくはアルキル基又はアリール基であり、特に好ましくはアルキル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0160】

$R^{1A} \sim R^{3A}$ におけるアリール基、1 価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 $R^{11A} \sim R^{13A}$ におけるアリール基、1 価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同じである。

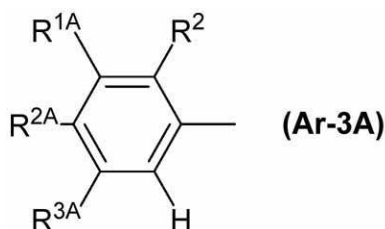
$R^{1A} \sim R^{3A}$ が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、 $R^{11A} \sim R^{13A}$ が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

40

【0161】

前記式 (Ar-2A) で表される基は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、式 (Ar-3A) で表される基である。

【化65】



50

[式中、 R^2 、 R^{1A} 、 R^{2A} 及び R^{3A} は、前記と同じ意味を表す。]

【 0 1 6 2 】

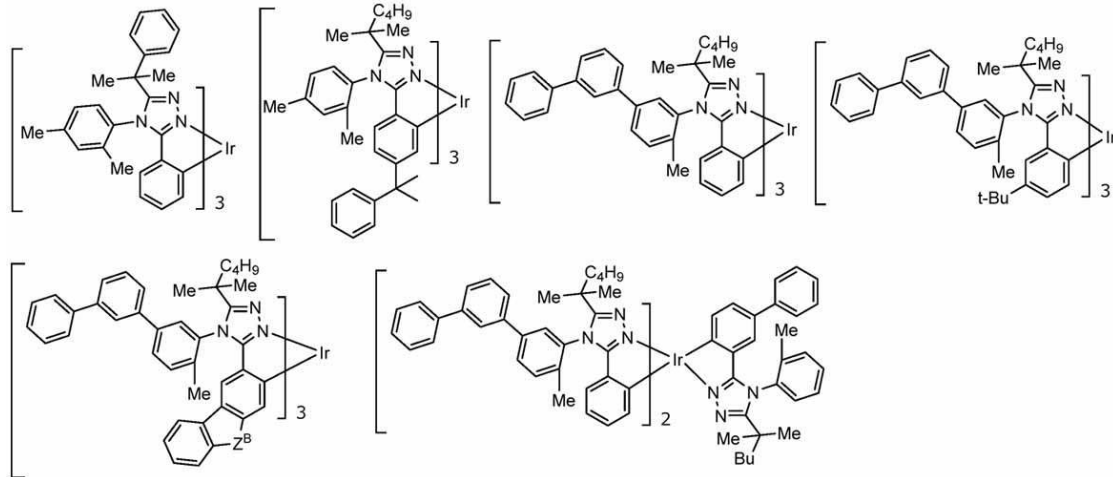
R^{1A} と R^{2A} 、及び、 R^{2A} と R^{3A} は、それぞれ結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよいが、燐光発光性化合物の合成が容易になるので、環を形成しないことが好ましい。

【 0 1 6 3 】

式 (1 - A - 2) で表される燐光発光性化合物としては、例えば、下記式で表される燐光発光性化合物及び後述の化合物 P 4 及び P 5 等が挙げられる。

【 0 1 6 4 】

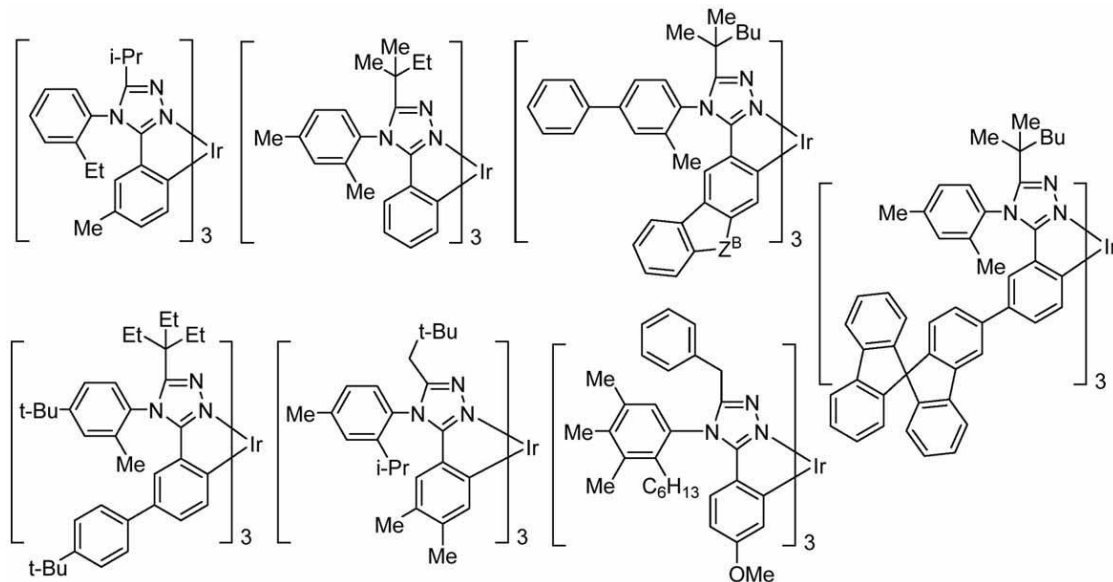
【 化 6 6 】



10

【 0 1 6 5 】

【 化 6 7 】



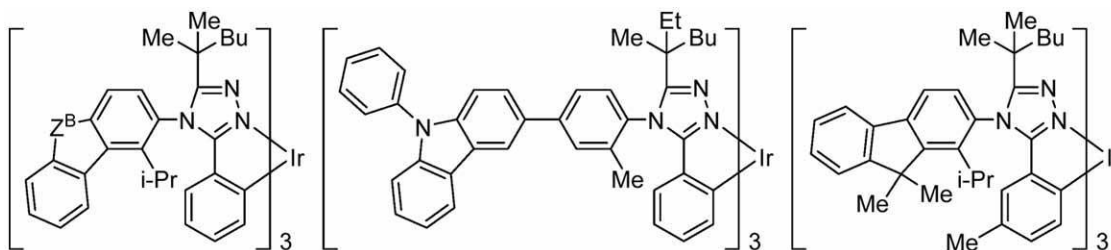
30

【 0 1 6 6 】

40

50

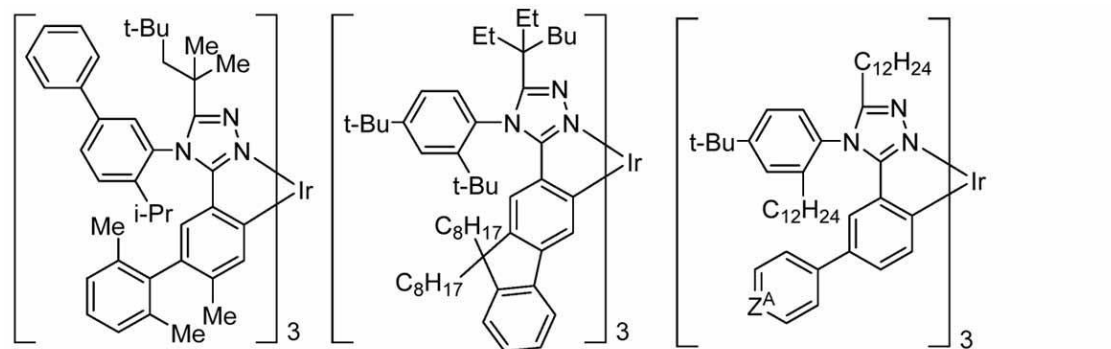
【化 6 8】



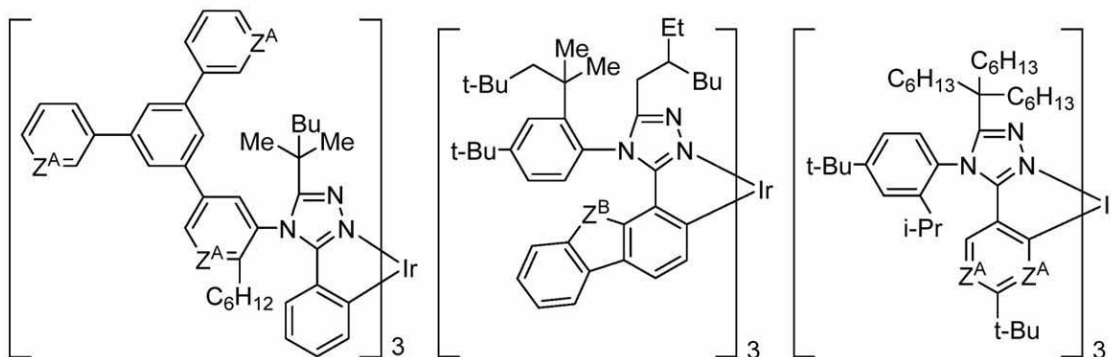
【 0 1 6 7】

10

【化 6 9】



20



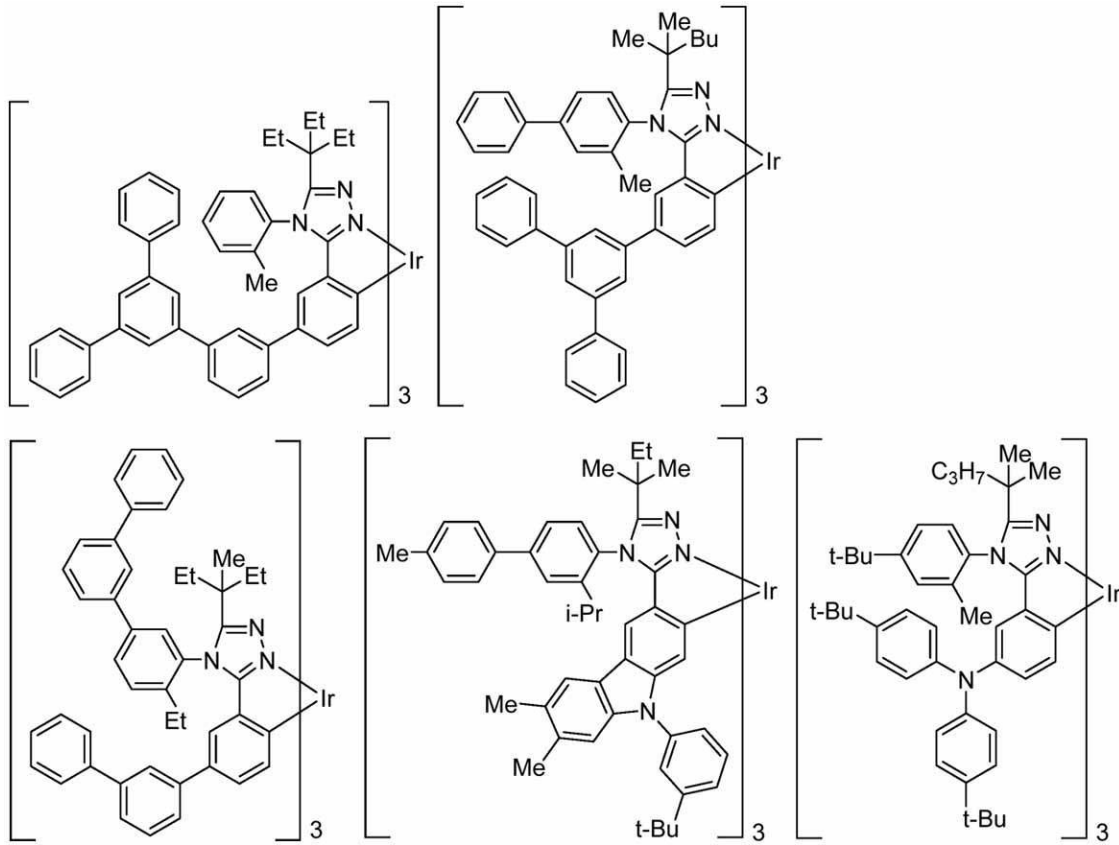
30

【 0 1 6 8】

40

50

【化 7 0】

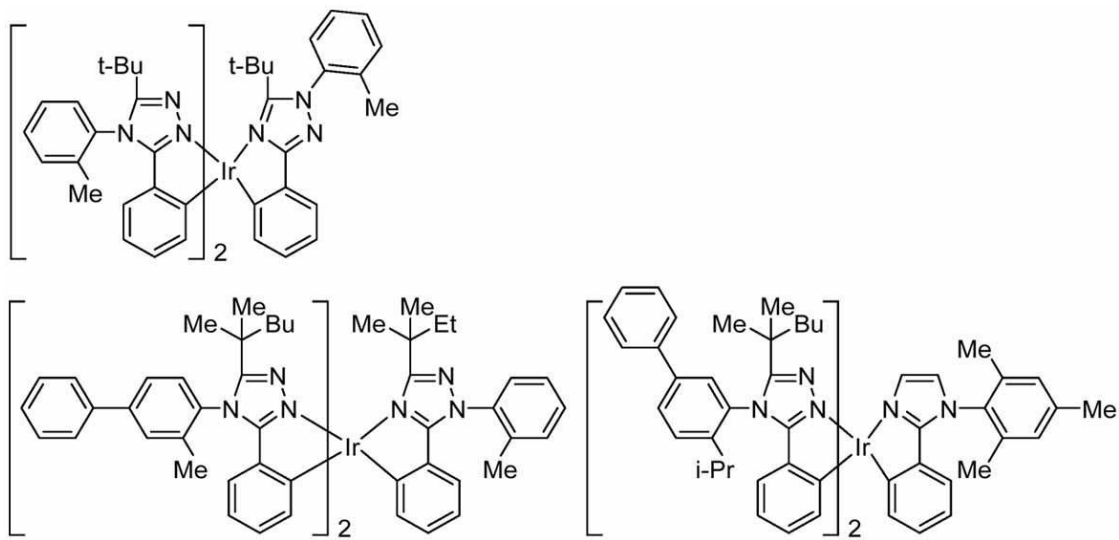


10

20

【 0 1 6 9】

【化 7 1】



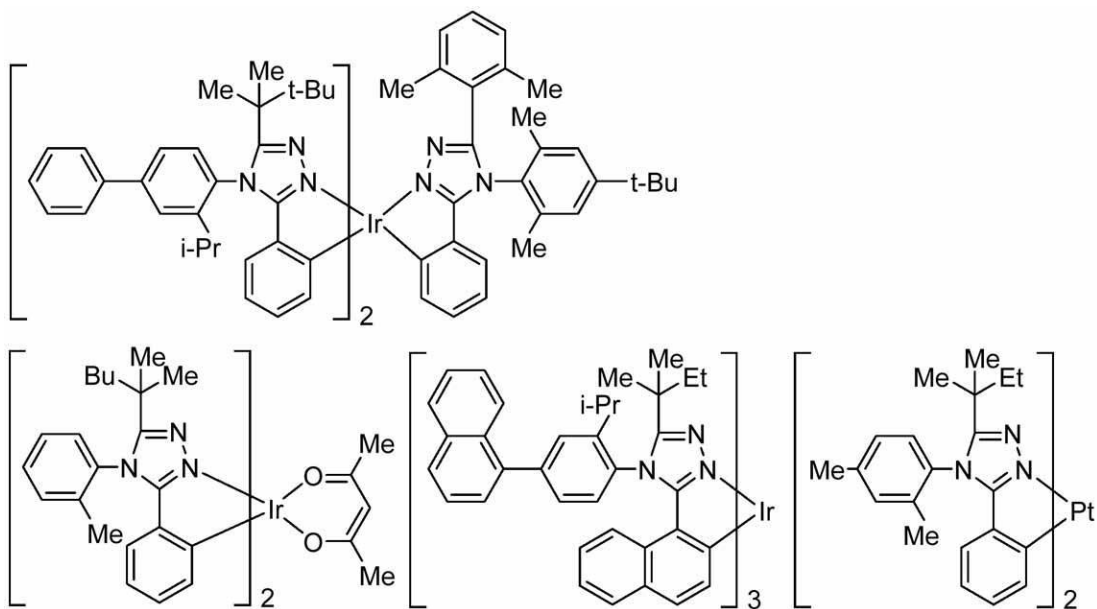
30

40

【 0 1 7 0】

50

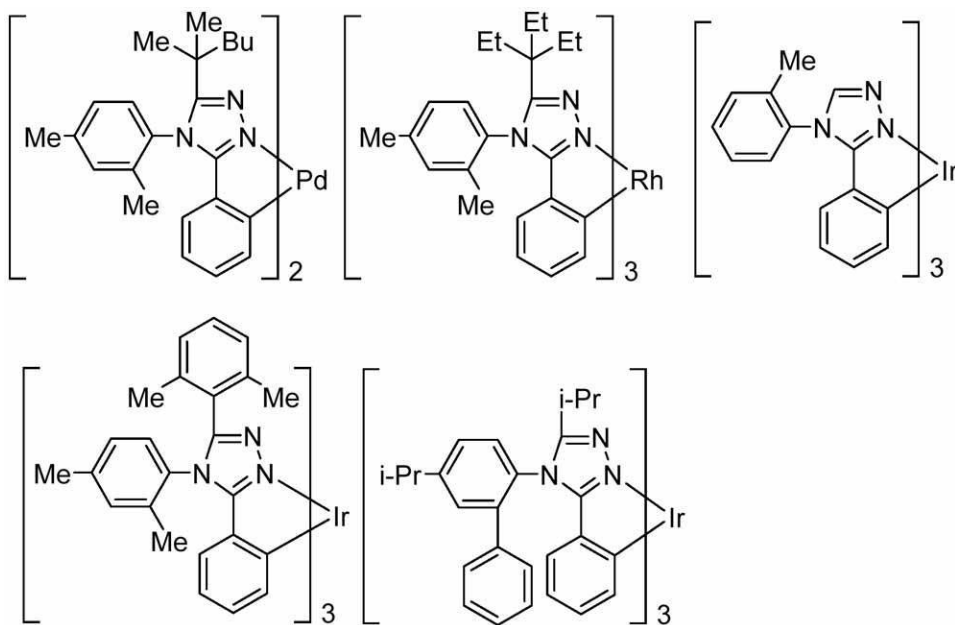
【化 7 2】



10

【 0 1 7 1】

【化 7 3】



20

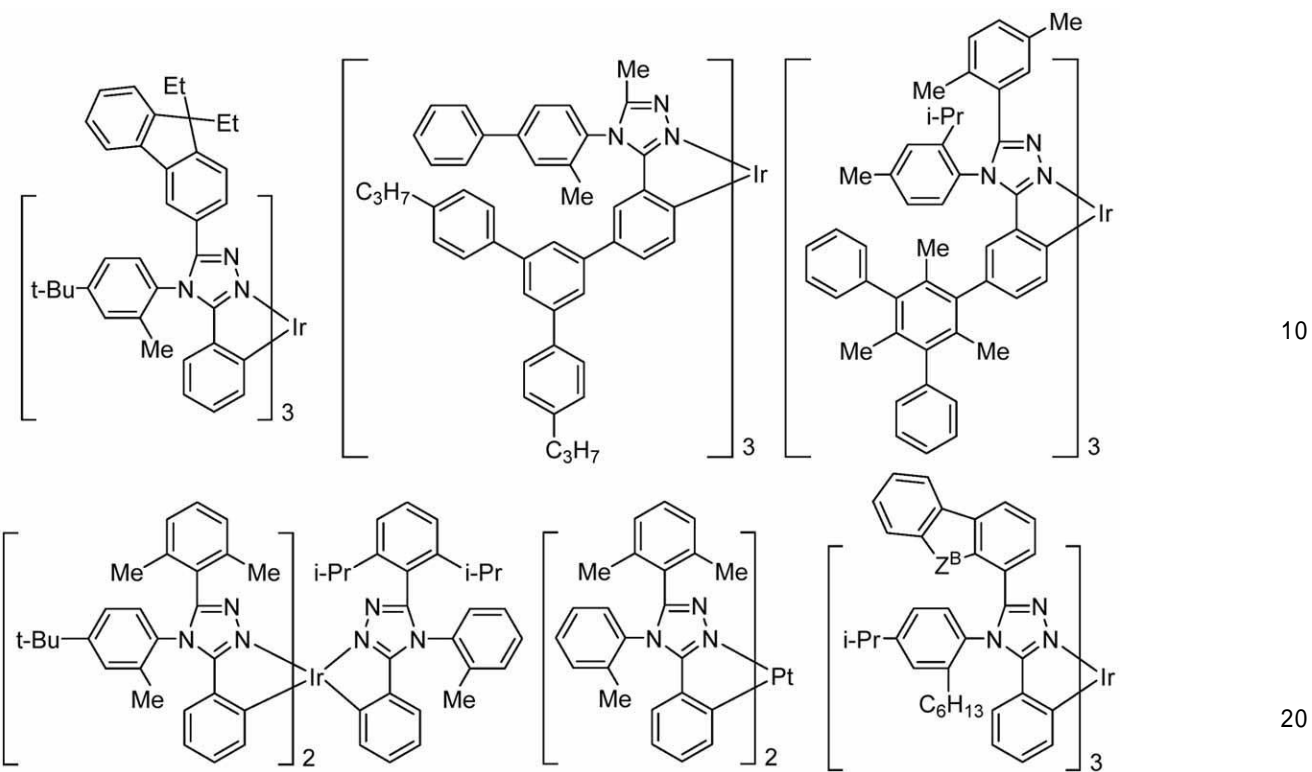
30

【 0 1 7 2】

40

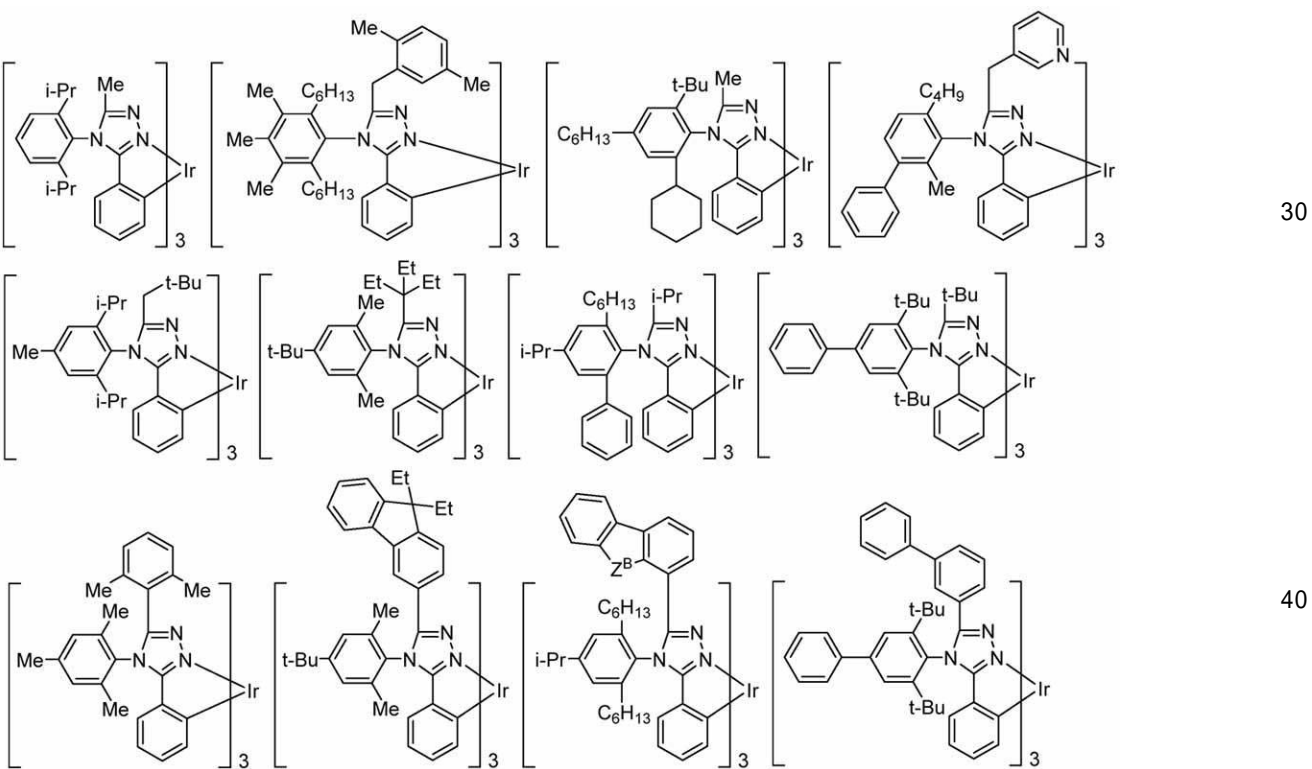
50

【化 7 4】



【 0 1 7 3】

【化 7 5】



【 0 1 7 4】

10

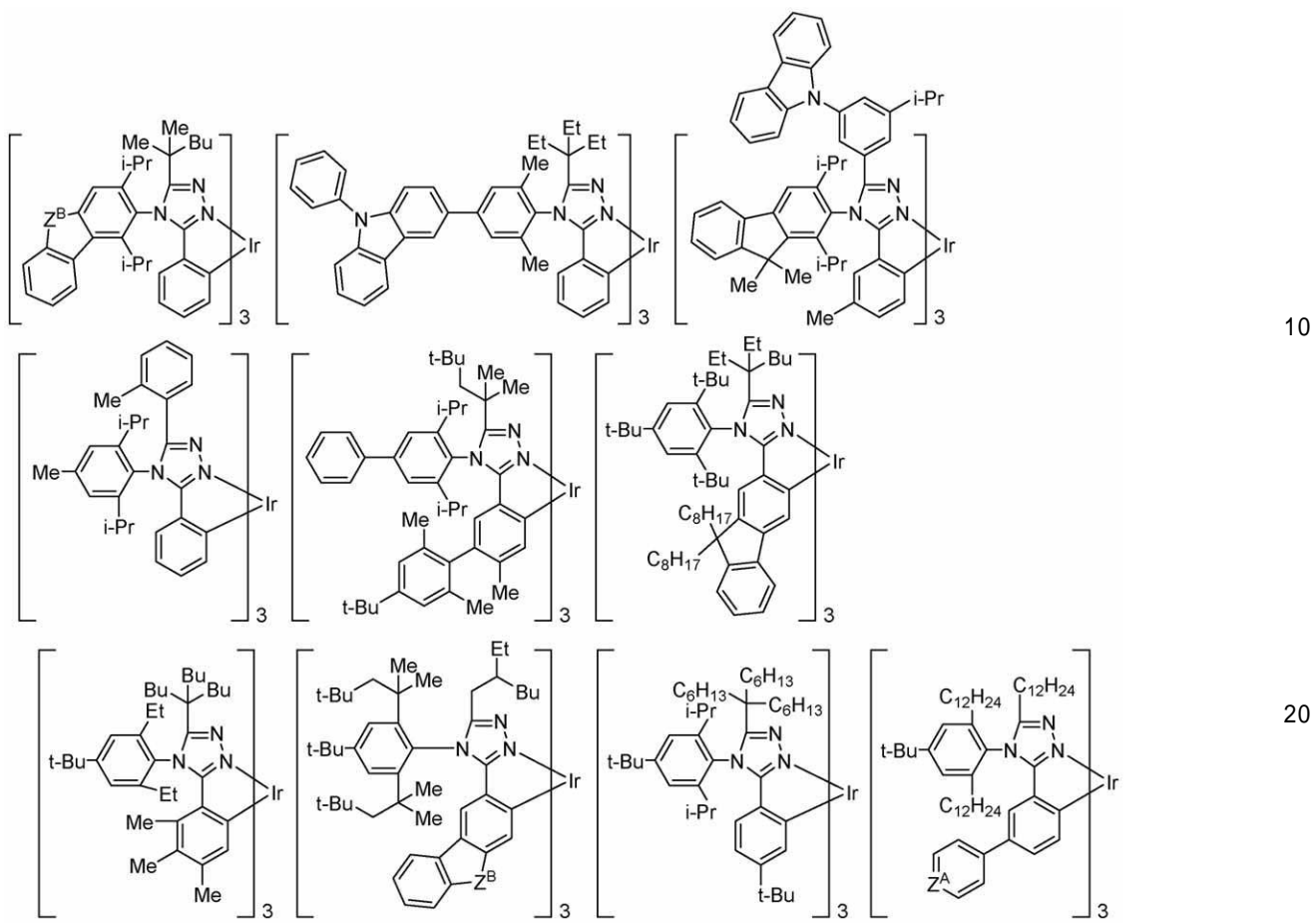
20

30

40

50

【化 7 6】



【 0 1 7 5】

10

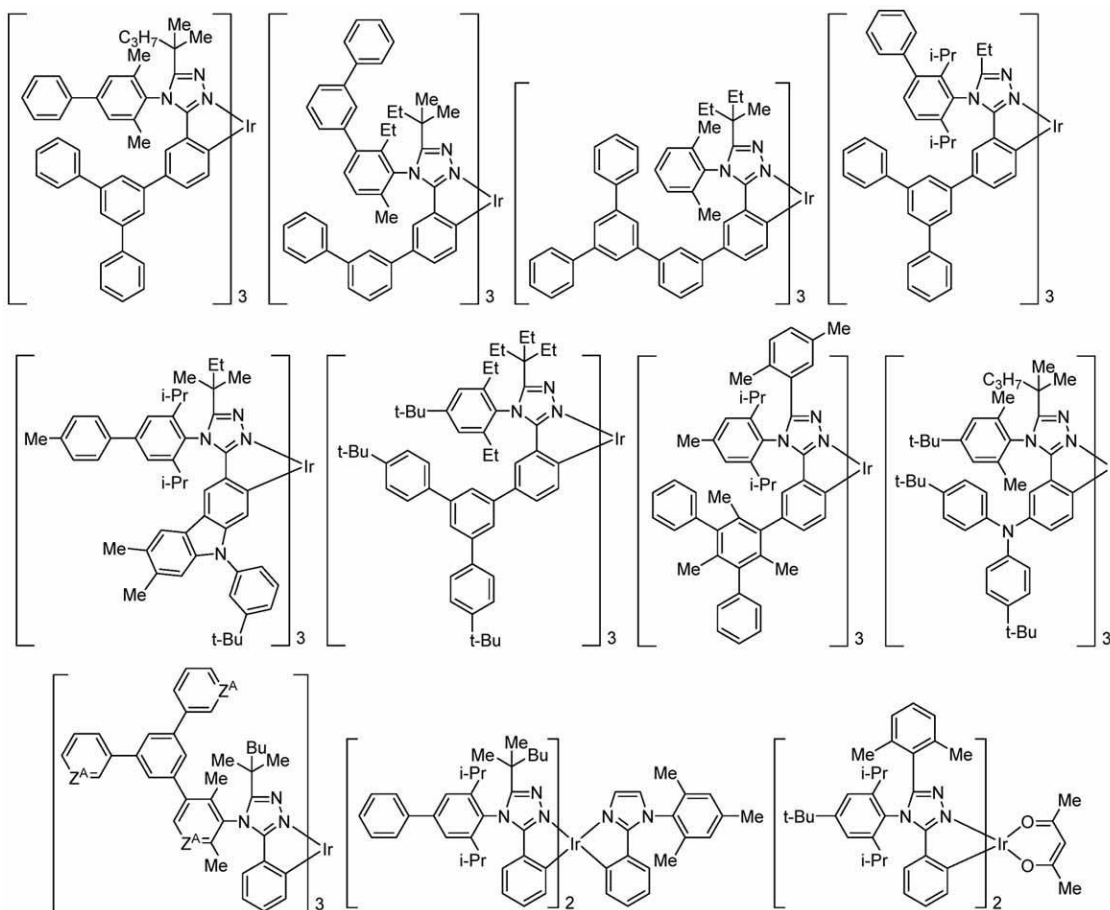
20

30

40

50

【化 7 7】

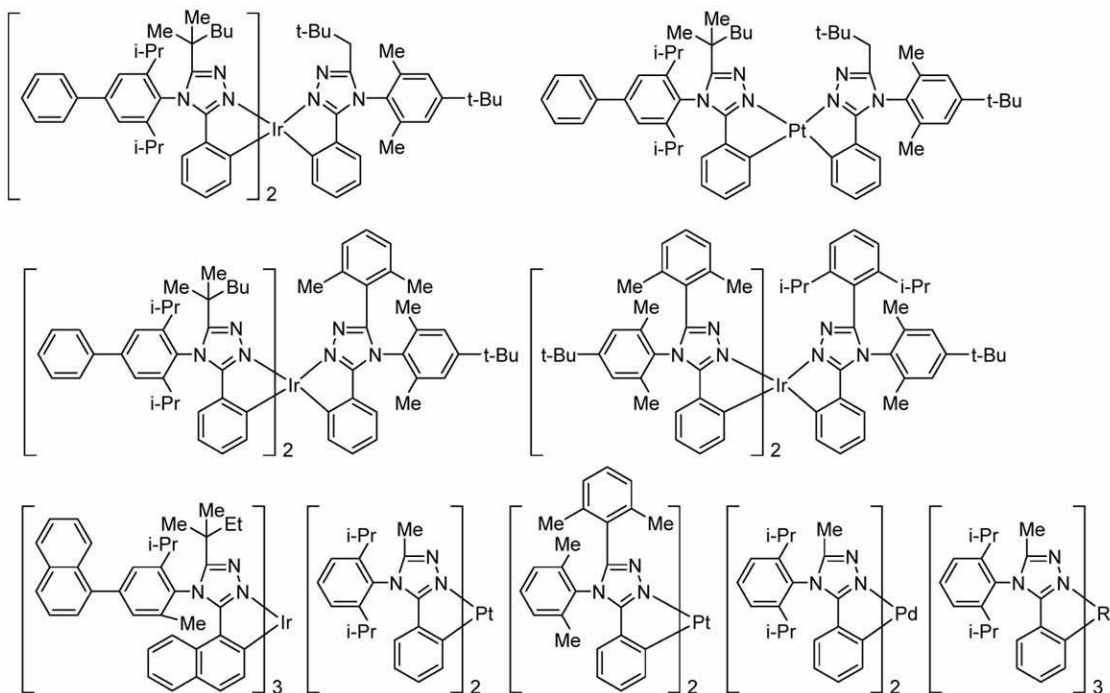


10

20

【 0 1 7 6】

【化 7 8】



30

40

【 0 1 7 7】

式中、Z^Aは、-CH=で表される基又は-N=で表される基を表す。Z^Aが複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。Z^Aは、好ましくは-N=で表される

50

基である。Z^Bは、-O-で表される基又は-S-で表される基を表す。

【0178】

[式(1-B)で表される燐光発光性化合物]

環L¹が6員の芳香族複素環であるとき、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、式(1)で表される燐光発光性化合物は、式(1-B)で表される燐光発光性化合物であることが好ましい。

【0179】

環L^{1B}がピリミジン環である場合、E^{11B}が窒素原子であるピリミジン環が好ましい。

【0180】

環L^{1B}は、ピリジン環が好ましい。

【0181】

環L^{1B}が式(1-T)で表される基を有する場合、R^{11B}、R^{12B}又はR^{13B}が式(1-T)で表される基であることが好ましく、R^{12B}又はR^{13B}が式(1-T)で表される基であることがより好ましく、R^{13B}が式(1-T)で表される基であることが更に好ましい。

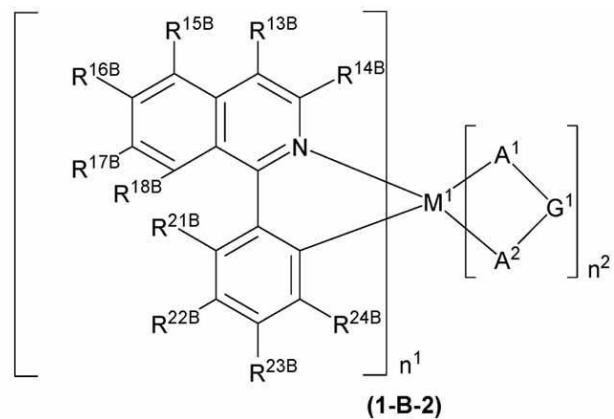
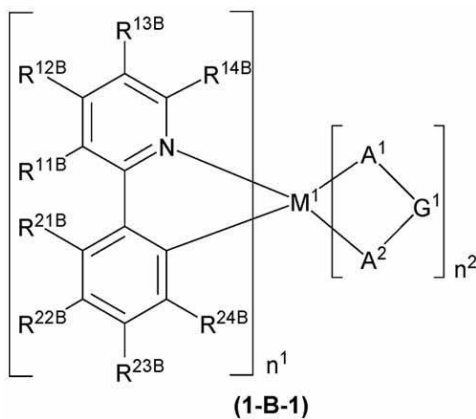
【0182】

R^{21B}~R^{24B}が結合するベンゼン環が式(1-T)で表される基を有する場合、R^{22B}、R^{23B}又はR^{24B}が式(1-T)で表される基であることが好ましく、R^{22B}又はR^{23B}が式(1-T)で表される基であることがより好ましい。

【0183】

本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率が更に優れるので、式(1-B)で表される燐光発光性化合物は、式(1-B-1)で表される燐光発光性化合物、式(1-B-2)で表される燐光発光性化合物、式(1-B-3)で表される燐光発光性化合物、式(1-B-4)で表される燐光発光性化合物又は式(1-B-5)で表される燐光発光性化合物であることが好ましく、式(1-B-1)で表される燐光発光性化合物、式(1-B-2)で表される燐光発光性化合物又は式(1-B-3)で表される燐光発光性化合物であることがより好ましい。

【化79】



10

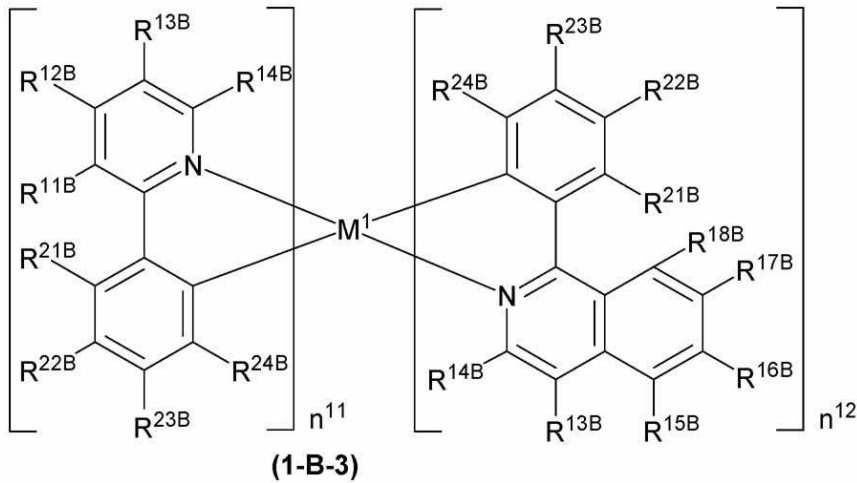
20

30

40

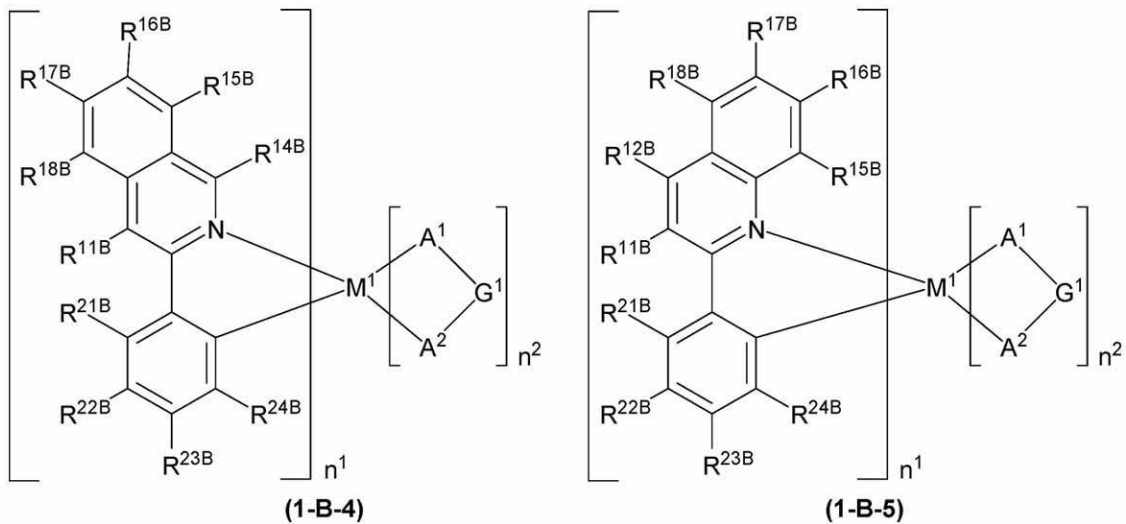
50

【化 8 0】



10

【化 8 1】



20

30

〔式中、

M^1 、 n^1 、 n^2 、 R^{11B} 、 R^{12B} 、 R^{13B} 、 R^{14B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 、 R^{24B} 及び $A^1 - G^1 - A^2$ は、前記と同じ意味を表す。

n^1 及び n^2 は、それぞれ独立に、1以上の整数を表し、 $n^1 + n^2$ は2又は3である。 M^1 がガリウム原子、ロジウム原子又はイリジウム原子の場合、 $n^1 + n^2$ は3であり、 M^1 がパラジウム原子又は白金原子の場合、 $n^1 + n^2$ は2である。

R^{15B} 、 R^{16B} 、 R^{17B} 及び R^{18B} は、それぞれ独立に、水素原子又は前記式(1-T)で表される基を表す。 R^{15B} 、 R^{16B} 、 R^{17B} 及び R^{18B} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。 R^{15B} と R^{16B} 、 R^{16B} と R^{17B} 、及び、 R^{17B} と R^{18B} は、それぞれ結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。

40

但し、式(1-B-1)及び式(1-B-3)中、 R^{11B} 、 R^{12B} 、 R^{13B} 、 R^{14B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 及び R^{24B} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式(1-T)で表される基であり、式(1-B-2)中、 R^{13B} 、 R^{14B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 及び R^{24B} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式(1-T)で表される基であり、式(1-B-4)中、 R^{11B} 、 R^{14B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 及び R^{24B} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式(1-T)で表される基であり、式(1-B-5)中、 R^{11B} 、 R^{12B} 、 R^{21B} 、 R^{22B} 、 R^{23B} 及び R^{24B} からなる群より選択される少なくとも1つは、前記式(1-T)で表さ

50

れる基である。]

【0184】

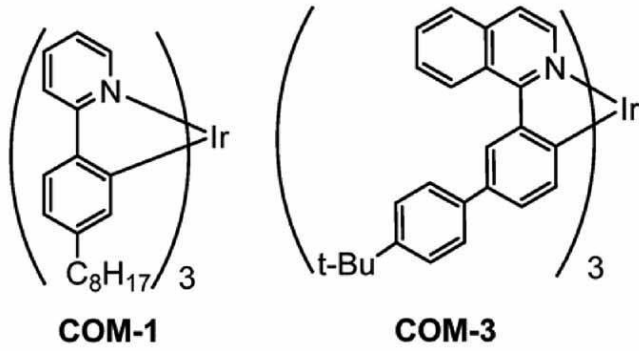
R^{15B}、R^{16B}、R^{17B}及びR^{18B}は、水素原子であることが好ましい。

【0185】

式(1-B)で表される燐光発光性化合物としては、例えば、下記式で表される燐光発光性化合物が挙げられる。

【0186】

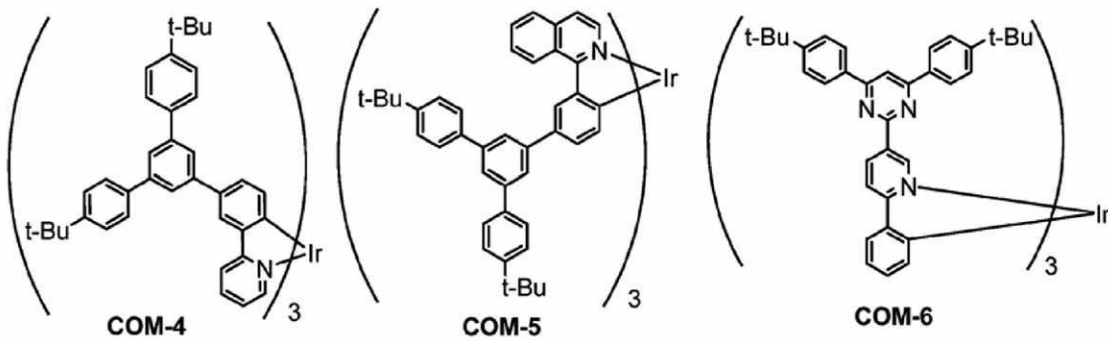
【化82】



10

【0187】

【化83】

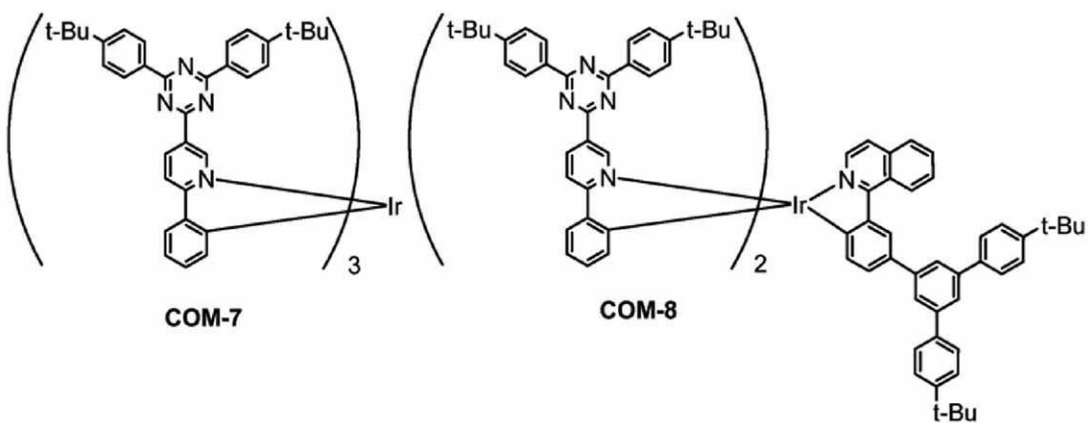


20

30

【0188】

【化84】

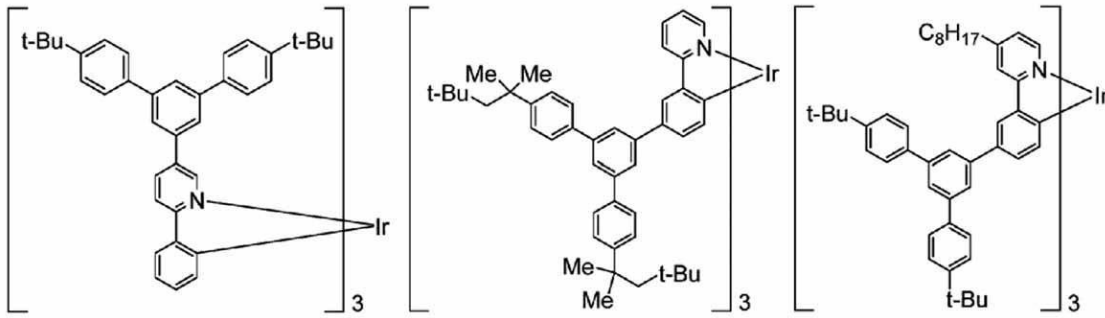


40

【0189】

50

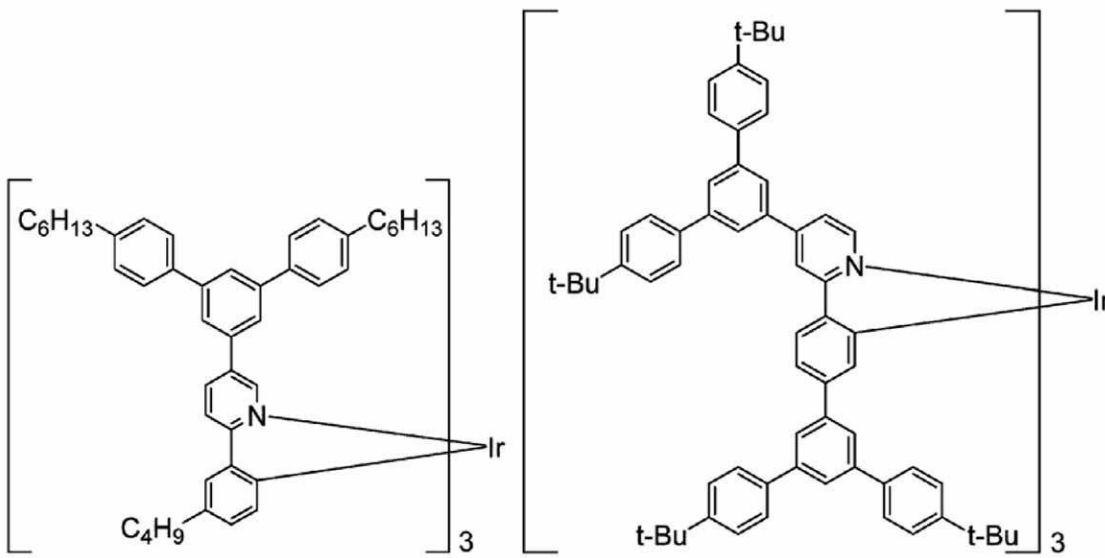
【化 8 5】



10

【 0 1 9 0】

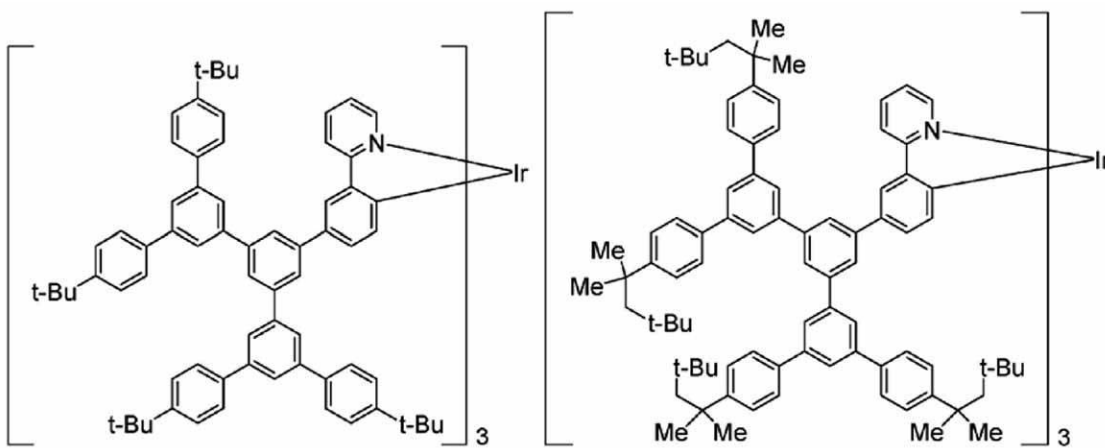
【化 8 6】



20

【 0 1 9 1】

【化 8 7】

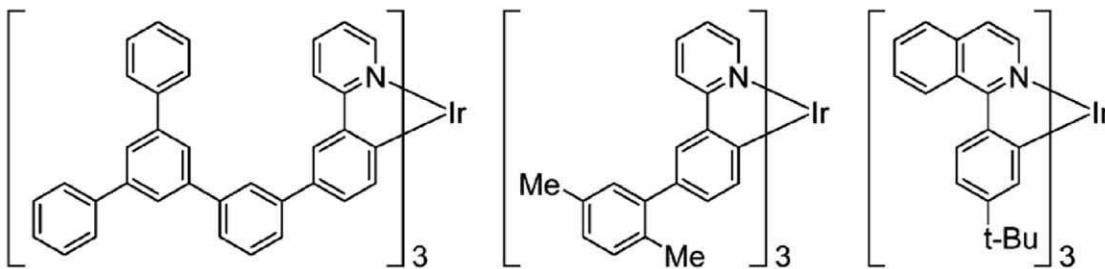


40

【 0 1 9 2】

50

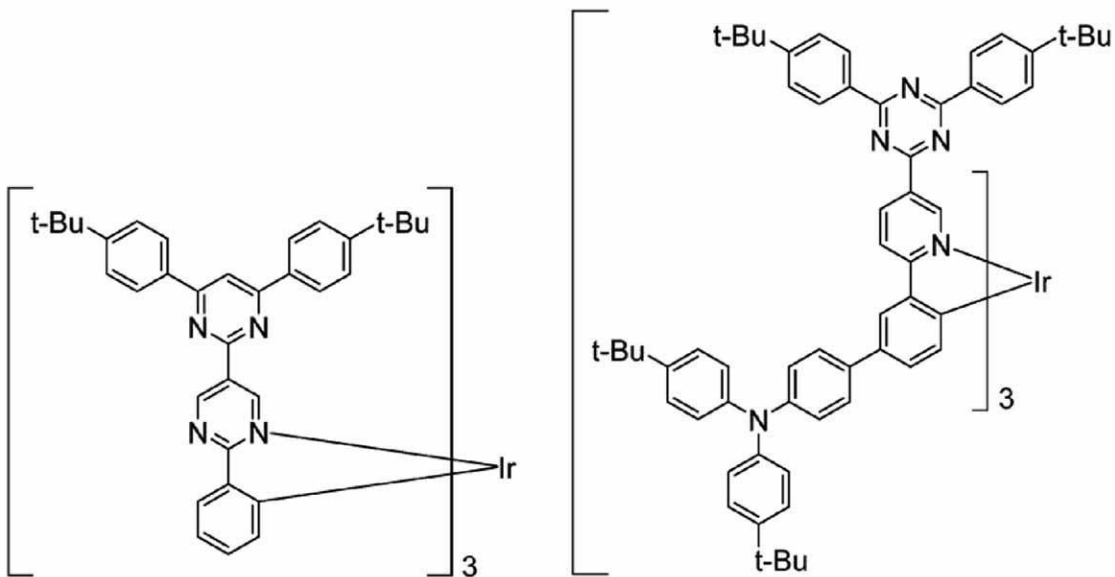
【化 8 8】



【 0 1 9 3】

10

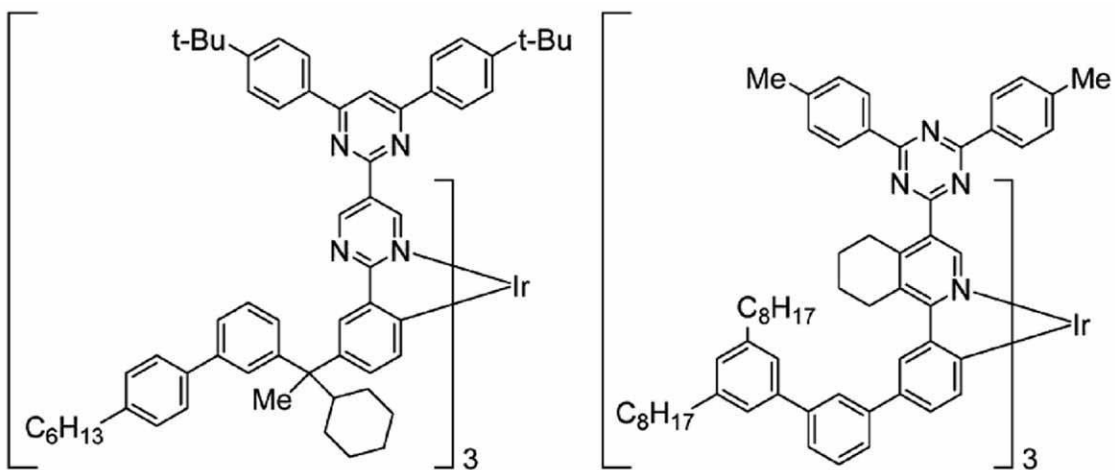
【化 8 9】



20

【 0 1 9 4】

【化 9 0】



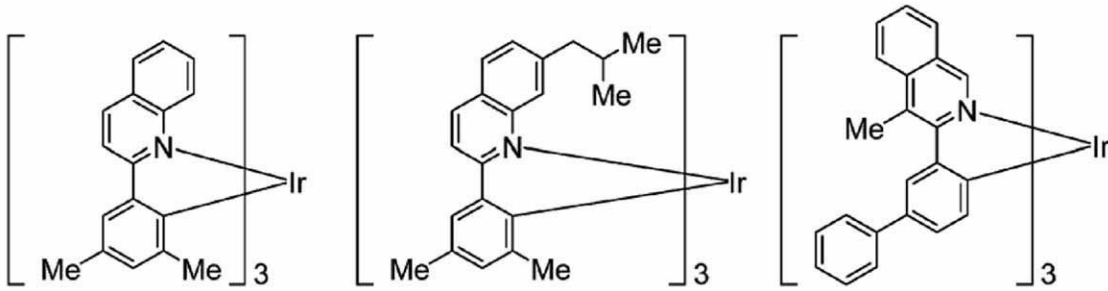
30

40

【 0 1 9 5】

50

【化 9 1】



10

【0196】

<化合物(F)>

化合物(F)は、窒素原子及びホウ素原子からなる群より選択される少なくとも1種の原子(a)を環内に含む縮合複素環骨格(f)を有する化合物であり、かつ、前記式(B)を満たす化合物である。化合物(F)は、低分子化合物と高分子化合物とに分類され、本実施形態の組成物はいずれの化合物を含有していてもよいが、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、低分子化合物であることが好ましい。

【0197】

化合物(F)は金属原子を含まない化合物であることが好ましい。

【0198】

化合物(F)において、縮合複素環骨格(f)が窒素原子を含む場合、縮合複素環骨格(f)に含まれる窒素原子のうち、少なくとも1つは二重結合を形成していない窒素原子であることが好ましく、縮合複素環骨格(f)に含まれる窒素原子の全てが二重結合を形成していない窒素原子であることがより好ましい。

20

【0199】

縮合複素環骨格(f)の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めなくて、通常1~60であり、好ましくは5~40であり、より好ましくは10~25である。

縮合複素環骨格(f)のホウ素原子数は、置換基のホウ素原子数を含めなくて、通常1~10であり、好ましくは1~5であり、より好ましくは1~3であり、更に好ましくは1である。

30

縮合複素環骨格(f)の窒素原子数は、置換基の窒素原子数を含めなくて、通常1~20であり、好ましくは1~15であり、より好ましくは1~10であり、更に好ましくは2~5であり、特に好ましくは2又は3である。

縮合複素環骨格(f)のヘテロ原子数は、置換基のヘテロ原子数を含めなくて、通常2~30であり、好ましくは2~15であり、より好ましくは2~10であり、更に好ましくは2~5であり、特に好ましくは2又は3である。

【0200】

縮合複素環骨格(f)は、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、ホウ素原子及び窒素原子を環内に含むことがより好ましく、ホウ素原子と二重結合を形成していない窒素原子とを環内に含むことが更に好ましい。

40

【0201】

縮合複素環骨格(f)は、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは3~12環式縮合複素環骨格であり、より好ましくは3~6環式縮合複素環骨格であり、更に好ましくは5環式縮合複素環骨格である。

【0202】

化合物(F)は、縮合複素環骨格(f)を含む複素環基(f')を有する化合物ということもできる。

【0203】

複素環基(f')は、原子(a)を環内に含む、多環式の複素環式化合物から、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個以上を除いた基であってよく、該基は置換基を有し

50

ていてもよい。複素環基 (f') において、多環式の複素環式化合物は、好ましくは、ホウ素原子及び窒素原子を環内に含む、多環式の複素環式化合物であり、より好ましくは、ホウ素原子と二重結合を形成していない窒素原子とを環内に含む、多環式の複素環式化合物である。複素環基 (f') において、多環式の複素環式化合物は、好ましくは 3 ~ 12 環式の複素環式化合物であり、より好ましくは 3 ~ 6 環式の複素環式化合物であり、更に好ましくは 5 環式の複素環式化合物である。

【0204】

複素環基 (f') が有していてもよい置換基としては、ハロゲン原子、シアノ基、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基が好ましく、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基がより好ましく、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基が更に好ましく、アルキル基、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基が特に好ましく、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

10

【0205】

複素環基 (f') が有していてもよい置換基における、アリール基としては、好ましくは、単環式又は 2 環式 ~ 6 環式の芳香族炭化水素から、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、より好ましくは、単環式、2 環式又は 3 環式の芳香族炭化水素から、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、更に好ましくは、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン又はフルオレンから環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、特に好ましくは、フェニル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

20

【0206】

複素環基 (f') が有していてもよい置換基における、1 価の複素環基としては、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、単環式又は 2 環式 ~ 6 環式の複素環式化合物から、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、より好ましくは、単環式、2 環式又は 3 環式の複素環式化合物から、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、更に好ましくは、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、アザナフタレン、ジアザナフタレン、カルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、フェノキサジン又はフェノチアジンから環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、特に好ましくは、ピリジン、カルバゾール、フェノキサジン又はフェノチアジンから環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、とりわけ好ましくは、カルバゾールから環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

30

【0207】

複素環基 (f') が有していてもよい置換基における置換アミノ基において、アミノ基が有する置換基としては、アリール基又は 1 価の複素環基が好ましく、アリール基がより好ましく、これらの基は更に置換基を有していてもよい。アミノ基が有する置換基におけるアリール基及び 1 価の複素環基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、複素環基 (f') が有していてもよい置換基におけるアリール基及び 1 価の複素環基の例及び好ましい範囲と同じである。

40

【0208】

複素環基 (f') が有していてもよい置換基が更に有していてもよい置換基としては、ハロゲン原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基が好ましく、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基がより好ましく、アルキル基又はシクロアルキル基が更に好ましく、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

【0209】

複素環基 (f') が有していてもよい置換基が更に有していてもよい置換基におけるアリール基、1 価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、複素環基

50

(f ') が有していてもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0210】

「二重結合を形成していない窒素原子」とは、他の3つの原子とそれぞれ単結合で結合する窒素原子を意味する。

「環内に二重結合を形成していない窒素原子を含む」とは、環内に - N (- R^N) - (式中、R^Nは水素原子又は置換基を表す。) 又は式 (DN) で表される基を含むことを意味する。

【化92】



10

【0211】

化合物 (F) は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、熱活性化遅延蛍光 (TADF) 性化合物であることが好ましい。以下、化合物の最低一重項励起状態のエネルギー準位の値と、最低三重項励起状態のエネルギー準位の値との差を E_{ST}ともいう。化合物 (F) の E_{ST}は、| S_F | - | T_F | と同じである。

【0212】

化合物 (F) の E_{ST}は、2.0 eV以下であってもよく、1.5 eV以下であってもよく、1.0 eV以下であってもよく、0.80 eV以下であってもよく、0.60 eV以下であってもよいが、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは0.50 eV以下であり、より好ましくは0.48 eV以下である。また、化合物 (F) の E_{ST}は、0.001 eV以上であってもよく、0.01 eV以上であってもよく、0.10 eV以上であってもよく、0.20 eV以上であってもよく、0.30 eV以上であってもよく、0.40 eV以上であってもよい。

20

【0213】

化合物の室温における発光スペクトルの半値幅は、前記 P_{L, RT}の測定において、P_{L, RT}における発光強度が1となる様に発光スペクトルを規格化したときに、発光強度が0.5となる最も長波長側の波長と、発光強度が0.5となる最も短波長側の波長をそれぞれ求め、両者の差を算出することで求めることができる。

30

【0214】

発光素子をディスプレイ用途に用いる場合、特にカラーフィルターを併用する場合において、発光素子用組成物及びそれを含有する発光素子の発光スペクトルの半値幅はそれぞれ小さいことが好ましい。式 (1) で表される燐光発光性化合物は、室温で三重項励起状態からの発光を示す化合物であるため、式 (1) で表される燐光発光性化合物を含有する発光素子は発光効率が優れるものが多いが、式 (1) で表される燐光発光性化合物を含有する発光素子の発光スペクトルの半値幅は大きいことが多く、特に50 nm以上であることが多い。一方、化合物 (F) は、化合物 (F) が TADF 性化合物である場合などを除いて、室温で三重項励起状態を発光として利用できない化合物であるため、化合物 (F) を含有する発光素子の発光効率は優れないものが多いが、化合物 (F) は式 (1) で表される燐光発光性化合物よりも材料設計の自由度が大きく、分子内での構造変化を抑制した材料設計が可能となるため、化合物 (F) を含有する発光素子の発光スペクトルの半値幅を、式 (1) で表される燐光発光性化合物を含有する発光素子の発光スペクトルの半値幅よりも小さくすることができる。

40

【0215】

本実施形態の組成物は、式 (1) で表される燐光発光性化合物と化合物 (F) とを含有するが、式 (1) で表される燐光発光性化合物から化合物 (F) への効率的なエネルギー移動を実現させ、化合物 (F) の発光スペクトルに基づく発光を、式 (1) で表される燐光発光性化合物の優れた発光効率と同等の発光効率で達成できる。このため、本実施形態の組成物は、式 (1) で表される燐光発光性化合物と発光スペクトルの半値幅が50 nm

50

以下である化合物 (F) とを含有することが好ましく、式 (1) で表される燐光発光性化合物と発光スペクトルの半値幅が 30 nm 以下である化合物 (F) とを含有することがより好ましく、式 (1) で表される燐光発光性化合物と発光スペクトルの半値幅が 25 nm 以下である化合物 (F) とを含有することが更に好ましく、式 (1) で表される燐光発光性化合物と発光スペクトルの半値幅が 20 nm 以下である化合物 (F) とを含有することが特に好ましい。

【0216】

化合物 (F) の発光スペクトルの半値幅は、本実施形態の組成物がディスプレイ用途に好適となり、化合物 (F) のストークスシフトの減少を介して、式 (1) で表される燐光発光性化合物から化合物 (F) へのエネルギー移動が効率化し、結果として、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、5 nm 以上 100 nm 以下であることが好ましく、5 nm 以上 50 nm 以下であることがより好ましく、10 nm 以上 30 nm 以下であることが更に好ましく、15 nm 以上 25 nm 以下であることが特に好ましく、15 nm 以上 20 nm 以下であることがとりわけ好ましい。

10

【0217】

以下、化合物 (F) の分子量 1000 当たりの縮合複素環骨格 (f) 中の原子 (a) の数を N_f とし、化合物 (F) の分子量 1000 当たりの縮合複素環骨格 (f) 中の窒素原子の数を N_N とし、化合物 (F) の分子量 1000 当たりの縮合複素環骨格 (f) 中のホウ素原子の数を N_B とする。 N_f は、 $N_N + N_B$ と同義である。

【0218】

N_B は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、0 以上 3.0 以下であることが好ましく、0 以上 1.5 以下であることがより好ましく、0.1 以上 1.5 以下であることが更に好ましく、0.5 以上 1.2 以下であることが特に好ましい。

20

【0219】

N_N は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、0.0 1 以上 4.5 以下であることが好ましく、0.1 以上 4.0 以下であることがより好ましく、0.5 以上 3.0 以下であることが更に好ましく、1.0 以上 3.0 以下であることが特に好ましい。

【0220】

本実施形態の組成物において、 $N_N + N_B$ は 0.01 以上 4.5 以下であるが、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、 $N_N + N_B$ は 0.1 以上 4.5 以下であることが好ましく、0.2 以上 4.5 以下であることがより好ましく、0.5 以上 4.5 以下であることが更に好ましく、1.0 以上 4.5 以下であることが特に好ましく、2.0 以上 4.0 以下であることがとりわけ好ましい。

30

【0221】

化合物 (F) において、窒素原子数及びホウ素原子数の合計指標である N_f (即ち、 $N_N + N_B$) が規定される理由としては、例えば、化合物 (F) の特徴的な骨格である縮合複素環骨格 (f) 中の窒素原子及びホウ素原子の数が、本実施形態の組成物の電荷輸送性に顕著に影響を与えることや、化合物 (F) の発光スペクトルの半値幅に影響を与えることが挙げられる。

40

【0222】

本実施形態の組成物は、式 (1) で表される燐光発光性化合物と化合物 (F) とを含有し、式 (1) で表される燐光発光性化合物が置換基として式 (1-T) で表される基を少なくとも一つ有し、且つ、化合物 (F) が式 (B) を満たす。前記の通り、式 (1) で表される燐光発光性化合物から化合物 (F) への効率的なエネルギー移動を実現することが、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率を優れたものとするために重要となるが、当該エネルギー移動には、式 (1) で表される燐光発光性化合物の最低三重項励起状態から化合物 (F) の最低三重項励起状態へ遷移するエネルギー移動 (以下、エネルギー移動 D という。) と、式 (1) で表される燐光発光性化合物の最低三重項励起状態から

50

化合物(F)の最低一重項励起状態へ遷移するエネルギー移動(以下、エネルギー移動Fという。)の2種類が存在する。化合物(F)は、化合物(F)がTADF性化合物である場合などを除いて、室温で三重項励起状態を発光として利用できない化合物であるため、エネルギー移動Dは効率的ではなく、エネルギー移動Fが効率的となる。エネルギー移動Dの速度とエネルギー移動Fの速度は、それぞれ、式(1)で表される燐光発光性化合物と化合物(F)との間の距離に依存し、前記距離が大きいほどいずれの速度も減少する傾向があるが、エネルギー移動Fの速度よりもエネルギー移動Dの速度の方が前記距離に対する依存性が大きいので、前記距離を適切な範囲に設定することが、エネルギー移動Fの速度の減少を最小限に抑え、且つ、エネルギー移動Dに対してエネルギー移動Fを優位とするために必要である。ここで、式(B)は、化合物(F)が発光部位の他にどの程度の置換基を有するかを表す指標であると言える。即ち、式(B)は、式(1)で表される燐光発光性化合物が式(1-T)で表される基を少なくとも一つ有することと併せて、前記距離を適切な範囲に設定するための設計となっており、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率を優れたものとするために重要である。

10

【0223】

本実施形態の組成物において、化合物(F)がTADF性化合物である場合など、室温で三重項励起状態を発光として利用できる化合物である場合、エネルギー移動Dの速度に対してエネルギー移動Fの速度が十分に優位でなくても過度に発光効率が損失しないため、 $|T_P| - |S_F|$ は-0.30以上であることが好ましいが、化合物(F)が室温で三重項励起状態を発光として利用できない化合物である場合、式(1)で表される燐光発光性化合物から化合物(F)へのエネルギー移動における損失がより抑制され、結果として、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、 $|T_P| - |S_F|$ は-0.28以上であることが好ましく、-0.24以上であることがより好ましく、-0.20以上であることが特に好ましい。

20

本実施形態の組成物において、式(1)で表される燐光発光性化合物から化合物(F)へのエネルギー移動における損失がより抑制され、結果として、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、 $|T_P| - |S_F|$ は0.50以下であることが好ましく、0以下であることがより好ましく、-0.05以下であることが更に好ましく、-0.10以下であることが特に好ましい。

本実施形態の組成物において、式(1)で表される燐光発光性化合物から化合物(F)へのエネルギー移動における損失がより抑制され、結果として、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、 $|T_P| - |S_F|$ は-0.30以上0.50以下であることが好ましく、-0.28以上0以下であることがより好ましく、-0.24以上-0.05以下であることが更に好ましく、-0.20以上-0.10以下であることが特に好ましい。

30

【0224】

[低分子化合物(F)]

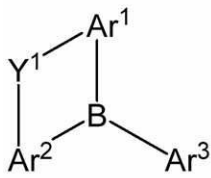
化合物(F)が低分子化合物である場合、化合物(F)の分子量は、好ましくは $1 \times 10^2 \sim 5 \times 10^3$ であり、より好ましくは $2 \times 10^2 \sim 3 \times 10^3$ であり、更に好ましくは $3 \times 10^2 \sim 2 \times 10^3$ であり、特に好ましくは $6.5 \times 10^2 \sim 1.5 \times 10^3$ である。

40

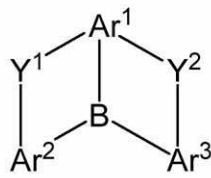
【0225】

化合物(F)が低分子化合物である場合、化合物(F)は、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、式(1-1)、式(1-2)又は式(1-3)で表される化合物であることが好ましく、式(1-2)又は式(1-3)で表される化合物であることがより好ましく、式(1-2)で表される化合物であることが更に好ましい。

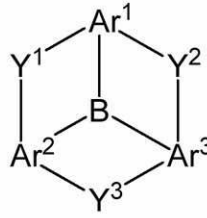
【化93】



(1-1)



(1-2)



(1-3)

【0226】

Ar¹、Ar²及びAr³は、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、単環式、2環式若しくは3環式の芳香族炭化水素又は単環式、2環式若しくは3環式の複素環式化合物から、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個以上を除いた基であり、より好ましくは、単環式の芳香族炭化水素又は単環式の複素環式化合物から、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個以上を除いた基であり、更に好ましくは、ベンゼン、ピリジン又はジアザベンゼンから、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個以上を除いた基であり、特に好ましくは、ベンゼンから、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個以上を除いた基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ar¹、Ar²及びAr³が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、複素環基(f')が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0227】

Y¹は、好ましくは、酸素原子、硫黄原子、-N(Ry)-で表される基又はメチレン基であり、より好ましくは、酸素原子、硫黄原子又は-N(Ry)-で表される基であり、更に好ましくは、-N(Ry)-で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0228】

Y²及びY³は、好ましくは、単結合、酸素原子、硫黄原子、-N(Ry)-で表される基又はメチレン基であり、より好ましくは、単結合、酸素原子、硫黄原子又は-N(Ry)-で表される基であり、更に好ましくは、酸素原子、硫黄原子又は-N(Ry)-で表される基であり、特に好ましくは、-N(Ry)-で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0229】

本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、Y¹、Y²及びY³の全てが、酸素原子、硫黄原子又は-N(Ry)-で表される基であることが好ましく、Y¹、Y²及びY³の全てが、-N(Ry)-で表される基であることがより好ましい。

【0230】

Y¹、Y²及びY³が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、複素環基(f')が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0231】

Ryは、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基であり、より好ましくはアリール基又は1価の複素環基であり、更に好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ryにおけるアリール基及び1価の複素環基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、複素環基(f')が有していてもよい置換基におけるアリール基及び1価の複素環基の例及び好ましい範囲と同じである。

Ryが有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、複素環基(f')が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0232】

Ryは、直接結合して又は連結基を介して、Ar¹、Ar²又はAr³と結合していてもよいが、結合していないことが好ましい。連結基としては、例えば、-O-で表される基

10

20

30

40

50

、 - S - で表される基、 - N (R y) - で表される基、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基及び2価の複素環基が挙げられ、好ましくは、 - O - で表される基、 - S - で表される基、 - N (R y) - で表される基又はメチレン基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【 0 2 3 3 】

R y は、直接結合して又は連結基を介して、 A r ¹、 A r ² 又は A r ³ と結合していてもよいが、結合していないことが好ましい。

【 0 2 3 4 】

化合物 (F) が低分子化合物である場合、化合物 (F) は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の色純度がより優れ (発光素子の発光スペクトルの半値幅がより狭い)、特にカラーフィルターを併用する発光素子における発光効率の損失がより抑制され、結果として本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、式 (D - A)、式 (D - B) 又は式 (D - C) で表される基を置換基として有することが好ましく、 R y が式 (D - A)、式 (D - B) 又は式 (D - C) で表される基であることがより好ましく、 R y が式 (D - A) で表される基であることが更に好ましい。

10

【 0 2 3 5 】

化合物 (F) が低分子化合物である場合、 N _B 及び N _N は、例えば、以下の方法で求めることができる。

化合物 (F) の分子量を M _F、化合物 (F) に含まれる全ての縮合複素環骨格 (f) について環内に含まれるホウ素原子数を総和した値を S _B、化合物 (F) に含まれる全ての縮合複素環骨格 (f) について環内に含まれる窒素原子数を総和した値を S _N とするとき、 N _B 及び N _N は、それぞれ以下のとおり求められる。低分子化合物の分子量は、例えば、 ChemDraw (Perkin Elmer Informatics 社製) の Molecular Weight の値を用いて算出することができる。

20

$$N_B = (S_B \times 1000) / M_F$$

$$N_N = (S_N \times 1000) / M_F$$

【 0 2 3 6 】

化合物 (F) が低分子化合物である場合の N _B 及び N _N の具体的な算出方法を、後述の化合物 F 2 及び F 3 をそれぞれ例に挙げて詳細に説明する。尚、化合物 F 2 では、 S _B = 1、 S _N = 2、 M _F = 922.17、化合物 F 3 では、 S _B = 1、 S _N = 2、 M _F = 896.13 である。

30

【 0 2 3 7 】

化合物 F 2 の N _B 及び N _N は、それぞれ、以下のとおり求められる。

$$N_B = 1 \times 1000 / 922.17 = 1.08$$

$$N_N = 2 \times 1000 / 922.17 = 2.17$$

【 0 2 3 8 】

化合物 F 3 の N _B 及び N _N は、それぞれ、以下のとおり求められる。

$$N_B = 1 \times 1000 / 896.13 = 1.12$$

$$N_N = 2 \times 1000 / 896.13 = 2.23$$

【 0 2 3 9 】

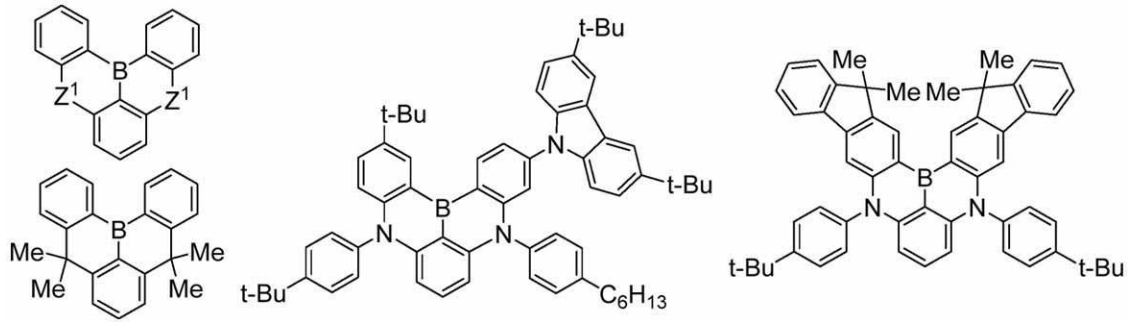
化合物 (F) が低分子化合物である場合、化合物 (F) としては、下記式で表される化合物及び後述の化合物 F 2 ~ F 7 等が例示される。なお、式中、 Z ¹ は、酸素原子又は硫黄原子を表す。

40

【 0 2 4 0 】

50

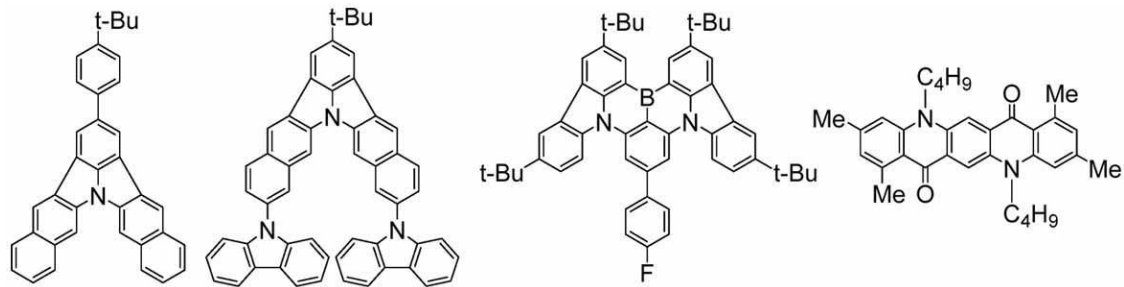
【化 9 4】



10

【 0 2 4 1】

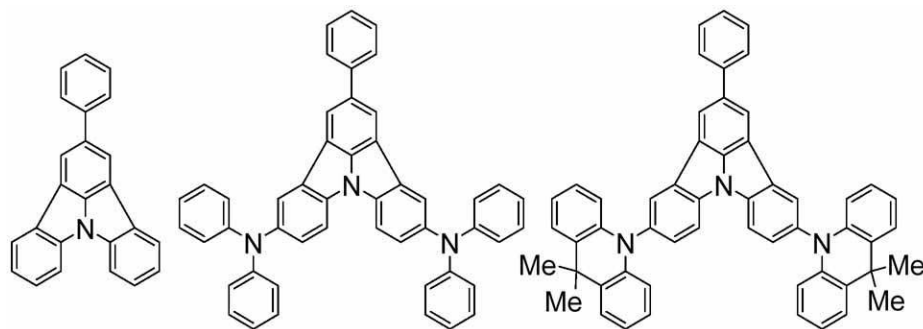
【化 9 5】



20

【 0 2 4 2】

【化 9 6】



30

【 0 2 4 3】

[高分子化合物 (F)]

化合物 (F) が高分子化合物である場合、化合物 (F) のポリスチレン換算の数平均分子量は、好ましくは $5 \times 10^3 \sim 1 \times 10^6$ であり、より好ましくは $1 \times 10^4 \sim 5 \times 10^5$ であり、より好ましくは $5 \times 10^4 \sim 2 \times 10^5$ である。化合物 (F) が高分子化合物である場合、化合物 (F) のポリスチレン換算の重量平均分子量は、好ましくは $1 \times 10^4 \sim 2 \times 10^6$ であり、より好ましくは $2 \times 10^4 \sim 1 \times 10^6$ であり、より好ましくは $1 \times 10^5 \sim 5 \times 10^5$ である。

40

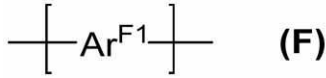
化合物 (F) が高分子化合物である場合、化合物 (F) は、ブロック共重合体、ランダム共重合体、交互共重合体、グラフト共重合体のいずれであってもよいし、その他の態様であってもよいが、複数種の原料モノマーを共重合した共重合体であることが好ましい。

【 0 2 4 4】

化合物 (F) が高分子化合物である場合、化合物 (F) は、好ましくは、式 (F) で表される構成単位を含む高分子化合物である。

50

【化97】



【0245】

$\text{Ar}^{\text{F}1}$ は、2価の複素環基(f')、又は、アリーレン基と2価の複素環基(f')とが直接結合した2価の基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0246】

$\text{Ar}^{\text{F}1}$ において、アリーレン基と2価の複素環基(f')とが直接結合した2価の基における、前記アリーレン基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、後述の $\text{Ar}^{\text{Y}1}$ で表される基の例及び好ましい範囲と同じである。

10

【0247】

$\text{Ar}^{\text{F}1}$ が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、複素環基(f')が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0248】

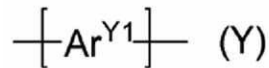
式(F)で表される構成単位は、化合物(F)中に、1種のみ含まれていてもよく、2種以上含まれていてもよい。

【0249】

化合物(F)が高分子化合物である場合、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、更に、式(Y)で表される構成単位を含むことが好ましい。

20

【化98】



[式中、 $\text{Ar}^{\text{Y}1}$ は、置換基を有していてもよいアリーレン基を表す。]

【0250】

$\text{Ar}^{\text{Y}1}$ で表される基は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、フェニレン基、ナフタレンジイル基、アントラセンジイル基、フェナントレンジイル基、ジヒドロフェナントレンジイル基、ピレンジイル基、フルオレンジイル基又はジベンゾシクロヘプタンジイル基であり、より好ましくは、フェニレン基、ナフタレンジイル基、アントラセンジイル基、フェナントレンジイル基、ジヒドロフェナントレンジイル基又はフルオレンジイル基であり、さらに好ましくは、フェニレン基、アントラセンジイル基又はフルオレンジイル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

30

$\text{Ar}^{\text{Y}1}$ で表される基は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、式(A-1)~式(A-14)又は式(A-19)~式(A-23)で表される基であり、より好ましくは、式(A-1)~式(A-9)、式(A-11)、式(A-12)又は式(A-19)~式(A-21)で表される基であり、さらに好ましくは、式(A-1)~(A-3)、式(A-8)、式(A-9)、式(A-11)又は式(A-12)で表される基であり、特に好ましくは、式(A-1)、式(A-2)、式(A-9)又は式(A-11)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

40

【0251】

$\text{Ar}^{\text{Y}1}$ で表される基が有していてもよい置換基は、好ましくは、フッ素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基又は置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基であり、さらに好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基であり、特に好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であり、とりわけ好ましくはアルキル基又はアリール基であり、これらの基はさらに置換基を有していてもよい。

50

【0252】

Ar^{Y1}で表される基が有していてもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、複素環基(f')が有していてもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同様である。

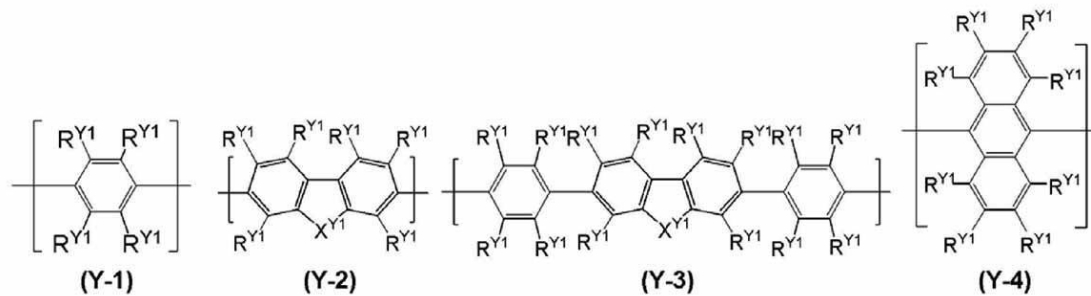
【0253】

Ar^{Y1}で表される基が有していてもよい置換基がさらに有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、複素環基(f')が有していてもよい置換基が更に有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同様である。

【0254】

本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、式(Y)で表される構成単位は、好ましくは、式(Y-1)~式(Y-4)で表される構成単位であり、より好ましくは式(Y-1)、式(Y-2)又は式(Y-4)で表される構成単位であり、さらに好ましくは、式(Y-1)又は式(Y-2)で表される構成単位である。

【化99】



[式中、

R^{Y1}は前記と同じ意味を表す。

X^{Y1}は、-C(R^{Y2})₂-、-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-又は-C(R^{Y2})₂-C(R^{Y2})₂-で表される基を表す。R^{Y2}は、水素原子、フッ素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在するR^{Y2}は、同一であってもよく異なってもよく、R^{Y2}同士は互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。]

【0255】

R^{Y2}は、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

R^{Y2}で表される基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、複素環基(f')が有していてもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同様である。

R^{Y2}が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、複素環基(f')が有していてもよい置換基が更に有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同様である。

【0256】

X^{Y1}において、-C(R^{Y2})₂-で表される基中の2個のR^{Y2}の組み合わせは、好ましくは、両方がアルキル基若しくはシクロアルキル基、両方がアリール基、両方が1価の複素環基、又は、一方がアルキル基若しくはシクロアルキル基で他方がアリール基若しくは1価の複素環基であり、より好ましくは、一方がアルキル基若しくはシクロアルキル基で他方がアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

2個存在するR^{Y2}は互いに結合して、それぞれが結合する原子と共に環を形成していてもよく、R^{Y2}が環を形成する場合、-C(R^{Y2})₂-で表される基は、好ましくは、

10

20

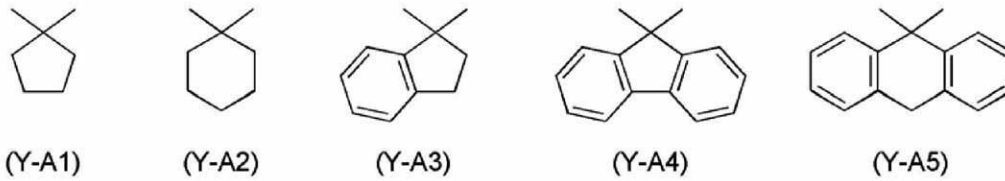
30

40

50

式(Y-A1)~式(Y-A5)で表される基であり、より好ましくは式(Y-A4)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【化100】



【0257】

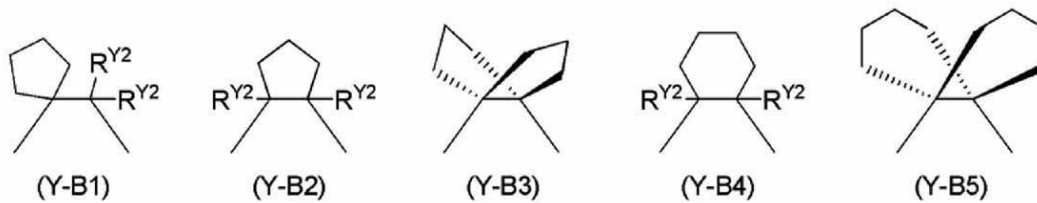
X^{Y1} において、 $-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-$ で表される基中の2個の R^{Y2} の組み合わせは、好ましくは、両方がアルキル基若しくはシクロアルキル基、又は、一方がアルキル基若しくはシクロアルキル基で他方がアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0258】

X^{Y1} において、 $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基中の4個の R^{Y2} は、好ましくは、置換基を有していてもよいアルキル基又はシクロアルキル基である。

複数ある R^{Y2} は互いに結合して、それぞれが結合する原子と共に環を形成していてもよく、 R^{Y2} が環を形成する場合、 $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基は、好ましくは、式(Y-B1)~式(Y-B5)で表される基であり、より好ましくは式(Y-B3)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【化101】



[式中、 R^{Y2} は前記と同じ意味を表す。]

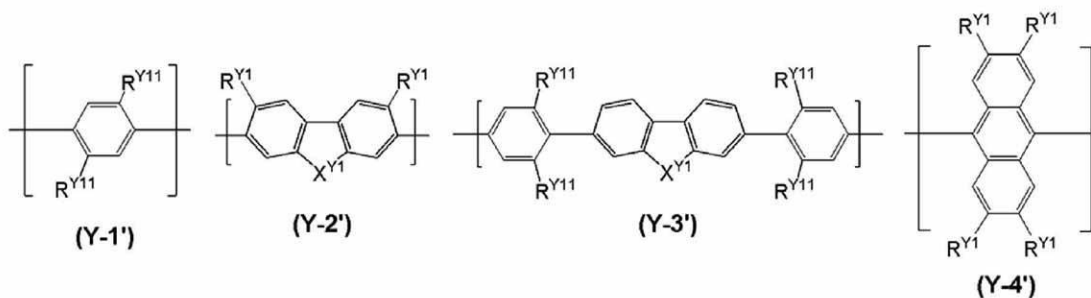
【0259】

X^{Y1} は、好ましくは $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基である。

【0260】

式(Y-1)で表される構成単位は、好ましくは式(Y-1')で表される構成単位である。式(Y-2)で表される構成単位は、好ましくは式(Y-2')で表される構成単位である。式(Y-3)で表される構成単位は、好ましくは式(Y-3')で表される構成単位である。式(Y-4)で表される構成単位は、好ましくは式(Y-4')で表される構成単位である。

【化102】



[式中、

R^{Y1} 及び X^{Y1} は前記と同じ意味を表す。

10

20

30

40

50

R^{Y11} は、フッ素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{Y11} は、同一であってもよく異なってもよい。

]

【0261】

R^{Y11} は、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基であり、より好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であり、さらに好ましくは、アルキル基又はシクロアルキル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

R^{Y11} で表される基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、複素環基(f')が有していてもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同様である。

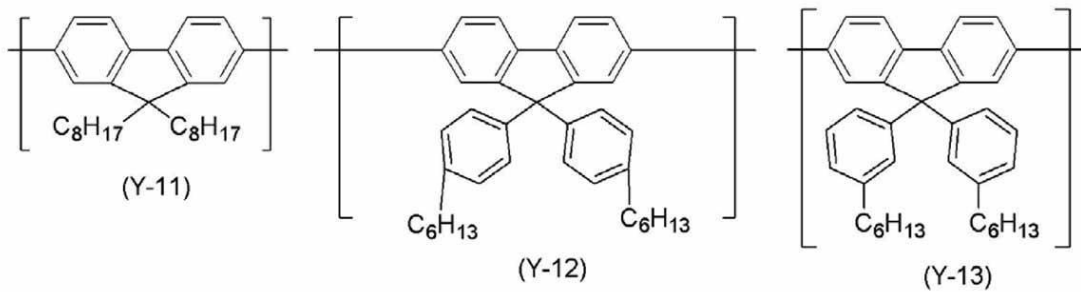
R^{Y11} が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、複素環基(f')が有していてもよい置換基が更に有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同様である。

【0262】

式(Y)で表される構成単位としては、例えば、式(Y-11)~式(Y-49)で表される構成単位が挙げられる。

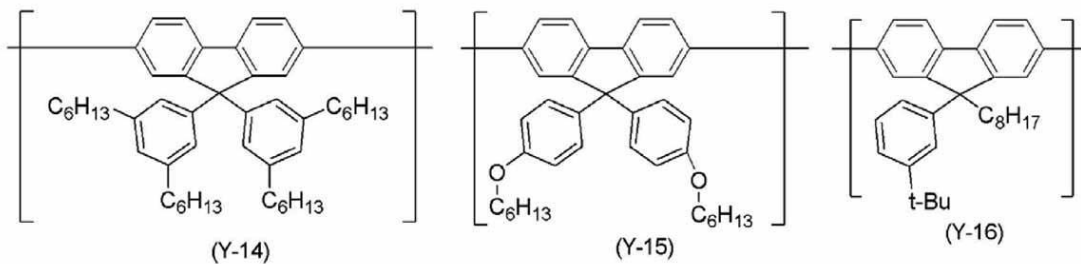
【0263】

【化103】



【0264】

【化104】



【0265】

10

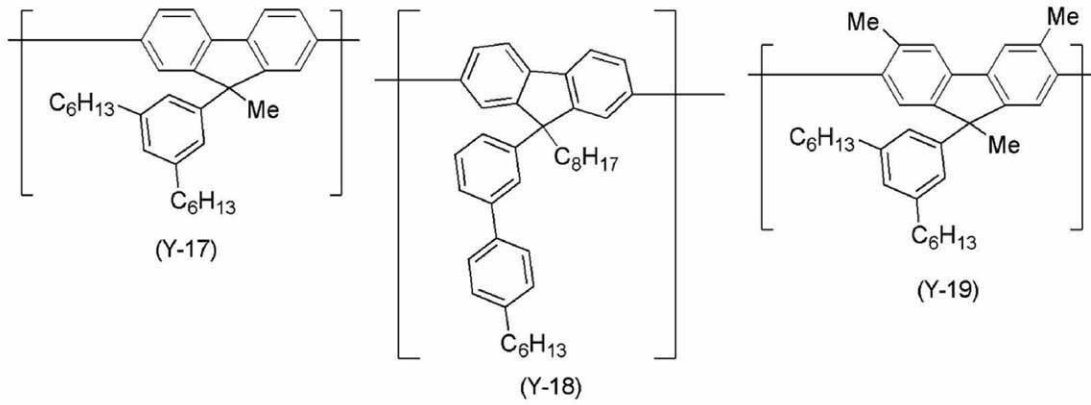
20

30

40

50

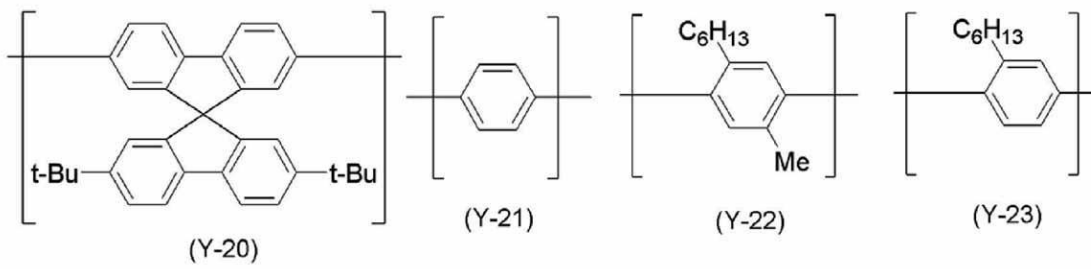
【化 1 0 5】



10

【 0 2 6 6】

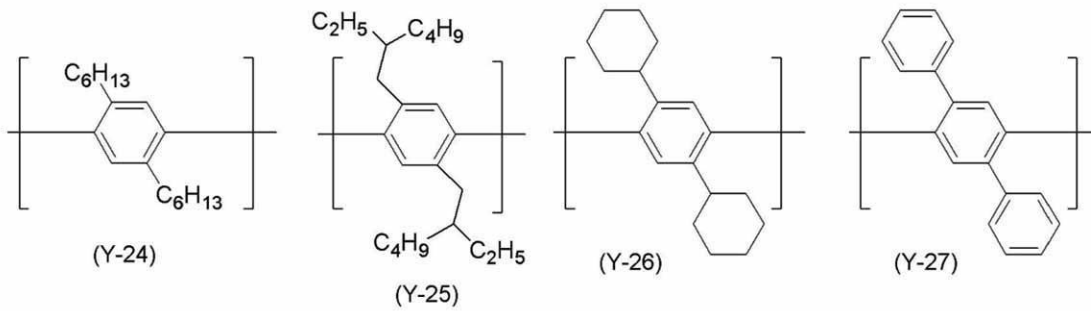
【化 1 0 6】



20

【 0 2 6 7】

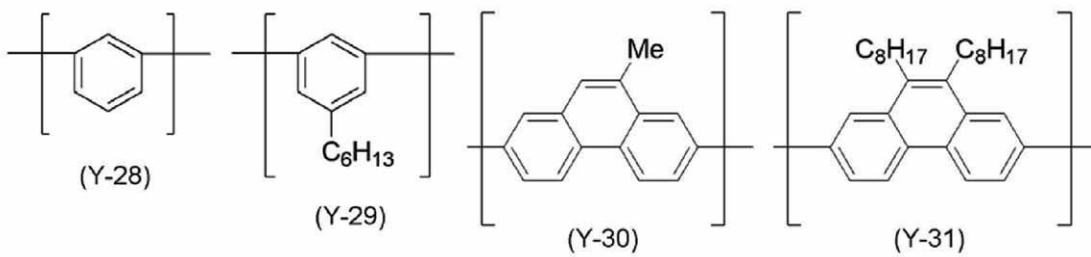
【化 1 0 7】



30

【 0 2 6 8】

【化 1 0 8】

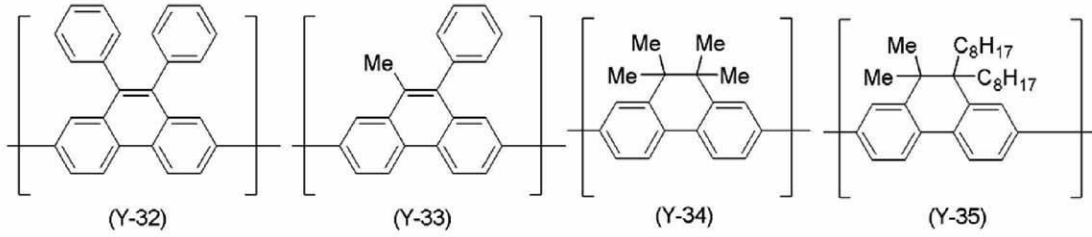


40

【 0 2 6 9】

50

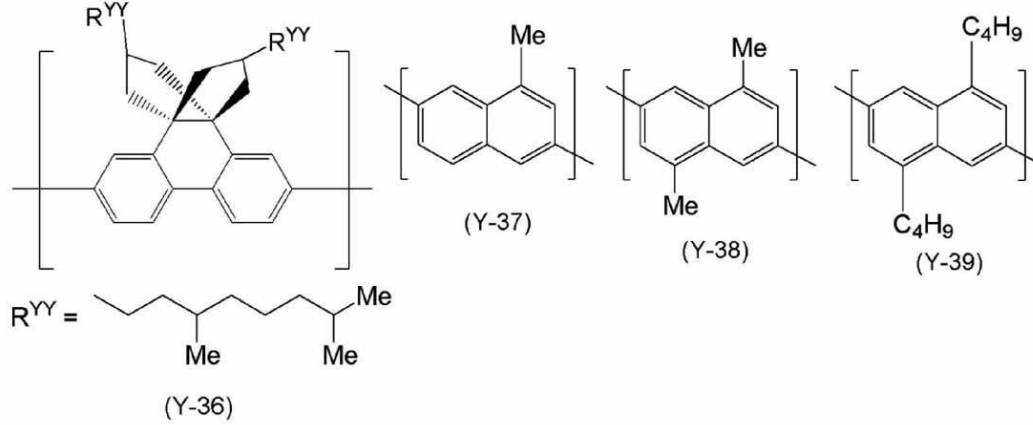
【化 1 0 9】



【 0 2 7 0】

10

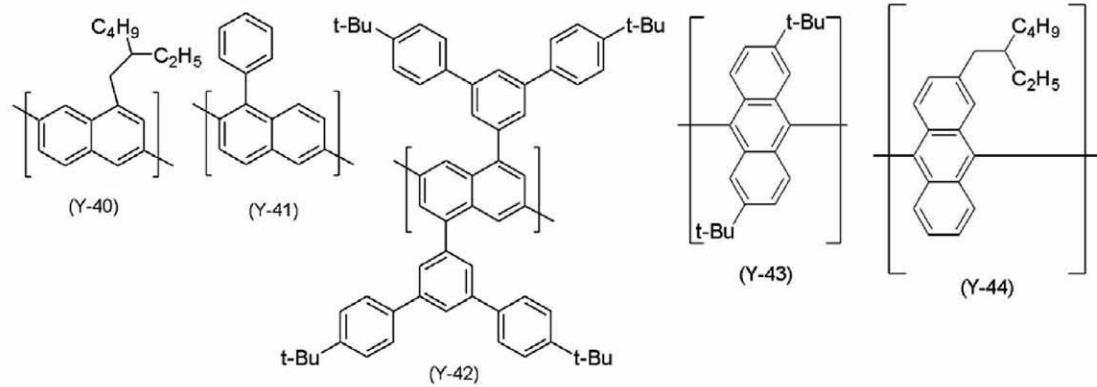
【化 1 1 0】



20

【 0 2 7 1】

【化 1 1 1】



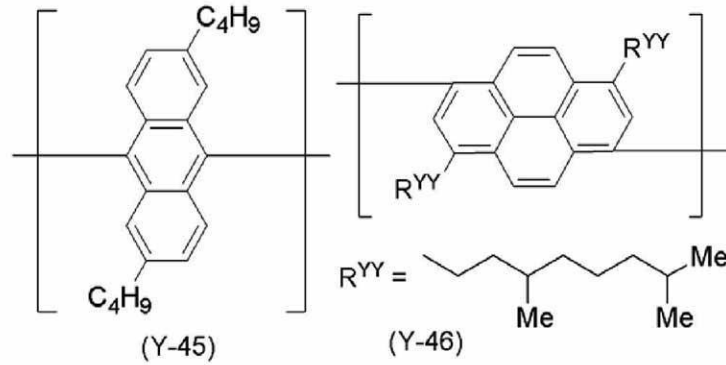
30

【 0 2 7 2】

40

50

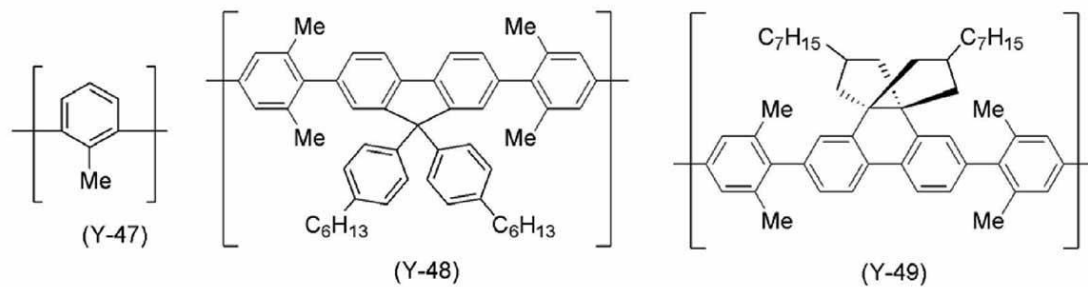
【化 1 1 2】



10

【 0 2 7 3】

【化 1 1 3】



20

【 0 2 7 4】

式 (Y) で表される構成単位は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、化合物 (F) に含まれる構成単位の合計量に対して、好ましくは 0 . 5 モル % ~ 9 0 モル % であり、より好ましくは 3 0 モル % ~ 8 0 モル % である。

【 0 2 7 5】

式 (Y) で表される構成単位は、化合物 (F) 中に、1 種のみ含まれていてもよく、2 種以上含まれていてもよい。

30

【 0 2 7 6】

化合物 (F) が高分子化合物である場合、縮合複素環骨格 (f) の環内に含まれるホウ素原子数及び縮合複素環骨格 (f) の環内に含まれる窒素原子数は、それぞれ、高分子化合物の平均分子量 1 0 0 0 あたりの縮合複素環骨格 (f) の環内に含まれるホウ素原子数の平均値、及び高分子化合物の平均分子量 1 0 0 0 あたりの縮合複素環骨格 (f) の環内に含まれる窒素原子数の平均値を意味する。 N_B 及び N_N は、例えば、以下の方法で求めることができる。

k 種類の構成単位を含む高分子化合物において (k は 1 以上の整数)、高分子化合物の平均分子量を M_{FP} 、j 種類目の構成単位の分子量を M_j (j は 1 ~ j ~ k を満たす整数)、末端基を除く全構成単位の本数の総和に対する j 種類目の構成単位の本数の比を P_j 、j 種類目の構成単位に含まれる全ての縮合複素環骨格 (f) について環内に含まれるホウ素原子数を総和した値を S_{Bj} 、j 種類目の構成単位に含まれる全ての縮合複素環骨格 (f) について環内に含まれる窒素原子数を総和した値を S_{Nj} とするとき、 N_B 及び N_N は、それぞれ、以下のとおり求めることができる。 M_j は、化合物 (F) が低分子化合物である場合と同様に算出することができる。

40

【数 1】

50

$$M_{FP} = \sum_{j=1}^k M_j P_j$$

$$N_B = \left(\sum_{j=1}^k S_{Bj} P_j \right) \times 1000 / M_{FP}$$

$$N_N = \left(\sum_{j=1}^k S_{Nj} P_j \right) \times 1000 / M_{FP}$$

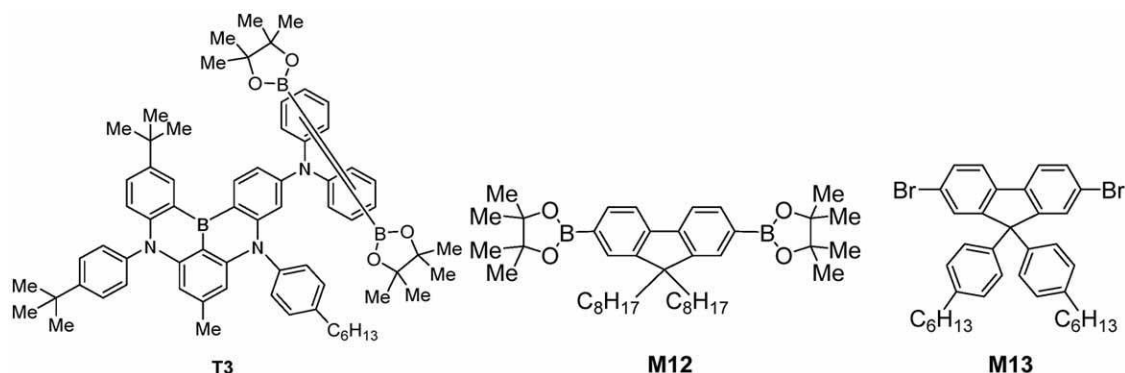
10

【0277】

化合物(F)が高分子化合物である場合の N_B 及び N_N の具体的な算出方法を、国際公開第2019/004247号に記載の高分子化合物TP-3を例に挙げて説明する。高分子化合物TP-3は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物M12から誘導される構成単位と、化合物T3から誘導される構成単位と、化合物M13から誘導される構成単位とが、45:5:50のモル比で構成された共重合体である。化合物M12から誘導される構成単位の分子量は388.64、化合物T3から誘導される構成単位の分子量は795.92、化合物M13から誘導される構成単位の分子量は484.73である。

【化114】

20



30

【0278】

前記高分子化合物TP-3の M_{FP} は、以下のとおり求めることができる。

$$M_{FP} = (388.64 \times 0.45) + (795.92 \times 0.05) + (484.73 \times 0.50) = 457.05$$

【0279】

前記高分子化合物TP-3の N_B は、以下のとおり求めることができる。

$$N_B = \{ (0 \times 0.45) + (1 \times 0.05) + (0 \times 0.50) \} \times 1000 / 457.049 = 0.109$$

【0280】

前記高分子化合物TP-3の N_N は、以下のとおり求めることができる。

$$N_N = \{ (0 \times 0.45) + (2 \times 0.05) + (0 \times 0.50) \} \times 1000 / 457.049 = 0.219$$

【0281】

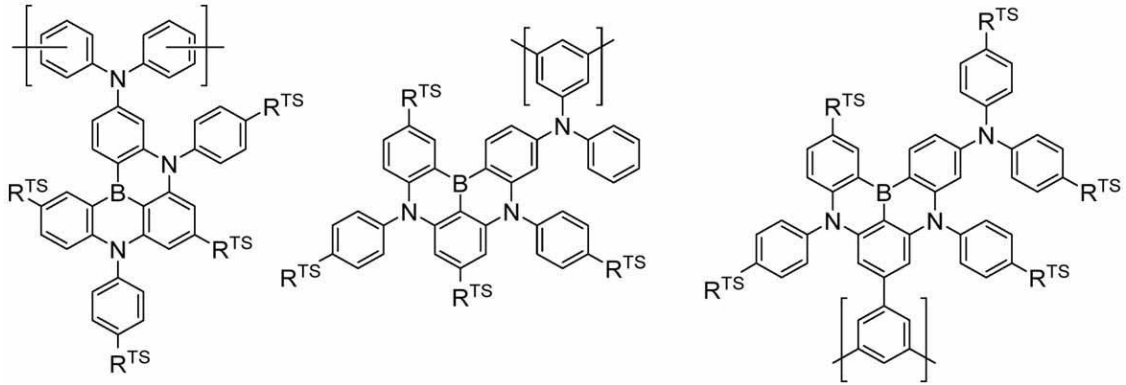
式(F)で表される構成単位としては、例えば、化合物(F)が低分子化合物である場合の例から2個の水素原子を取り除いてなる基を含む構成単位と、下記式で表される構成単位が挙げられる。

【0282】

40

50

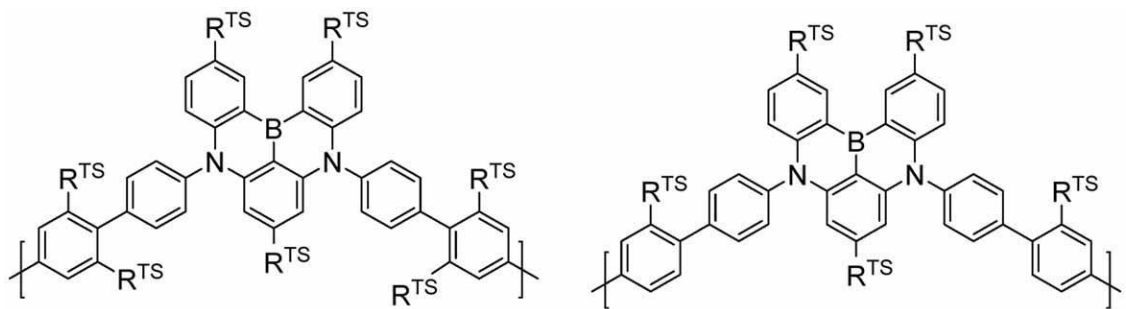
【化 1 1 5】



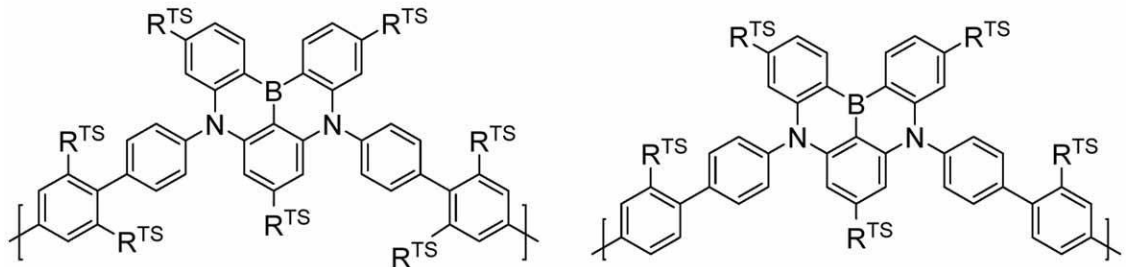
10

【 0 2 8 3】

【化 1 1 6】



20



30

【 0 2 8 4】

式中、 R^{TS} は、水素原子、アルキル基、アリール基、又は1価の複素環基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよい。複数存在する R^{TS} は、同一でも異なってもよい。

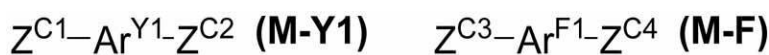
【 0 2 8 5】

〔高分子化合物(F)の製造方法〕

化合物(F)が高分子化合物である場合、化合物(F)は、例えば、式(M-Y1)で表される化合物と、式(M-F1)で表される化合物と、他の化合物(例えば、式(M-Y2)で表される化合物)とを縮合重合させることにより製造することができる。本明細書において、本実施形態の化合物(F)の製造に使用される化合物を総称して、「原料モノマー」ということがある。

40

【化 1 1 7】



〔式中、

Ar^{Y1} 及び Ar^{F1} は、前記と同じ意味を表す。

50

$Z^{C1} \sim Z^{C6}$ は、それぞれ独立に、置換基 A 群及び置換基 B 群からなる群より選択される基を表す。]

【0286】

例えば、 $Z^{C1} \sim Z^{C4}$ が置換基 A 群から選ばれる基である場合、 Z^{C5} 及び Z^{C6} は、それぞれ、置換基 B 群から選ばれる基を選択する。

【0287】

例えば、 $Z^{C1} \sim Z^{C4}$ が置換基 B 群から選ばれる基である場合、 Z^{C5} 及び Z^{C6} は、それぞれ、置換基 A 群から選ばれる基を選択する。

【0288】

<置換基 A 群>

塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、 $-O-S(=O)_2R^{C1}$ (式中、 R^{C1} は、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。) で表される基。

【0289】

<置換基 B 群>

$-B(OR^{C2})_2$ (式中、 R^{C2} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{C2} は同一でも異なってもよく、互いに連結して、それぞれが結合する酸素原子とともに環構造を形成していてもよい。) で表される基；

$-BF_3Q'$ (式中、 Q' は、Li、Na、K、Rb 又は Cs を表す。) で表される基；

$-MgY'$ (式中、 Y' は、塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子を表す。) で表される基；

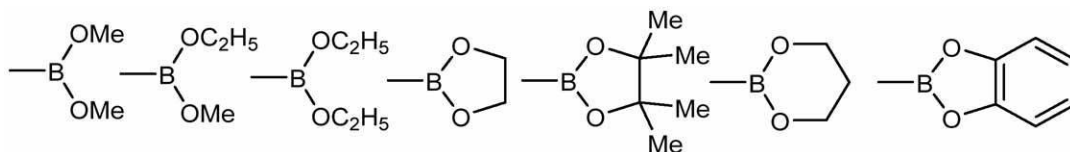
$-ZnY''$ (式中、 Y'' は、塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子を表す。) で表される基；及び、

$-Sn(R^{C3})_3$ (式中、 R^{C3} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{C3} は同一でも異なってもよく、互いに連結して、それぞれが結合するスズ原子とともに環構造を形成していてもよい。) で表される基。

【0290】

$-B(OR^{C2})_2$ で表される基としては、下記式で表される基が例示される。

【化118】



【0291】

置換基 A 群から選ばれる基を有する化合物と置換基 B 群から選ばれる基を有する化合物とは、公知のカップリング反応により縮合重合して、置換基 A 群から選ばれる基及び置換基 B 群から選ばれる基と結合する炭素原子同士が結合する。そのため、置換基 A 群から選ばれる基を 2 個有する化合物と、置換基 B 群から選ばれる基を 2 個有する化合物を公知のカップリング反応に供すれば、縮合重合により、これらの化合物の縮合重合体を得ることができる。

【0292】

縮合重合は、通常、触媒、塩基及び溶媒の存在下で行われるが、必要に応じて、相間移動触媒を共存させて行ってもよい。

【0293】

触媒としては、例えば、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド、ビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)、酢酸パラジウム等のパラジウム錯体、テトラキス(トリフェ

10

20

30

40

50

ニルホスフィン)ニッケル(0)、[1,3-ビス(ジフェニルホスフィノ)プロパン)ニッケル(II)ジクロリド、ビス(1,4-シクロオクタジエン)ニッケル(0)等のニッケル錯体等の遷移金属錯体；これらの遷移金属錯体が、更にトリフェニルホスフィン、トリ(o-トリル)ホスフィン、トリ(tert-ブチル)ホスフィン、トリシクロヘキシルホスフィン、1,3-ビス(ジフェニルホスフィノ)プロパン、ビピリジル等の配位子を有する錯体が挙げられる。触媒は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

【0294】

触媒の使用量は、原料モノマーのモル数の合計に対する遷移金属の量として、通常、0.00001モル当量～3モル当量である。

【0295】

塩基及び相間移動触媒としては、例えば、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム、炭酸セシウム、フッ化カリウム、フッ化セシウム、リン酸三カリウム等の無機塩基；フッ化テトラブチルアンモニウム、水酸化テトラエチルアンモニウム、水酸化テトラブチルアンモニウム等の有機塩基；塩化テトラブチルアンモニウム、臭化テトラブチルアンモニウム等の相間移動触媒が挙げられる。塩基及び相間移動触媒は、それぞれ、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

【0296】

塩基及び相間移動触媒の使用量は、それぞれ、原料モノマーの合計モル数に対して、通常0.001モル当量～100モル当量である。

【0297】

溶媒としては、例えば、トルエン、キシレン、メシチレン、テトラヒドロフラン、1,4-ジオキサン、ジメトキシエタン、N,N-ジメチルアセトアミド、N,N-ジメチルホルムアミド等の有機溶媒、水が挙げられる。溶媒は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

【0298】

溶媒の使用量は、通常、原料モノマーの合計100質量部に対して、10質量部～10000質量部である。

【0299】

縮合重合の反応温度は、通常-100～200である。縮合重合の反応時間は、通常1時間以上である。

【0300】

重合反応の後処理は、公知の方法、例えば、分液により水溶性不純物を除去する方法、メタノール等の低級アルコールに重合反応後の反応液を加えて、析出させた沈殿を濾過した後、乾燥させる方法等を単独、又は組み合わせて行う。高分子化合物の純度が低い場合、例えば、晶析、再沈殿、ソックスレー抽出器による連続抽出、カラムクロマトグラフィー等の通常の方法にて精製することができる。

【0301】

[ホスト材料]

本実施形態の組成物は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、正孔注入性、正孔輸送性、電子注入性及び電子輸送性から選ばれる少なくとも1つの機能を有するホスト材料を更に含むことが好ましい。本実施形態の組成物は、ホスト材料を、1種のみ含有していてもよく、2種以上含有していてもよい。但し、ホスト材料は、式(1)で表される燐光発光性化合物及び化合物(F)の各々と異なる。

【0302】

ホスト材料は金属原子を含まないことが好ましい。

【0303】

本実施形態の組成物が、ホスト材料を更に含む場合、ホスト材料の含有量は、式(1)で表される燐光発光性化合物及び化合物(F)の合計を100質量部として、通常、 1×10^2 質量部～ 1×10^5 質量部であり、好ましくは 1×10^2 質量部～ 1×10^4 質量部であり、より好ましくは 1×10^2 質量部～ 1×10^3 質量部であり、更に好ましくは2

10

20

30

40

50

$\times 10^2$ 質量部 $\sim 8 \times 10^2$ 質量部である。

【0304】

本実施形態の組成物がホスト材料を更に含む場合、ホスト材料と、式(1)で表される燐光発光性化合物と、化合物(F)とは、物理的、化学的又は電氣的に相互作用することが好ましい。この相互作用により、例えば、本実施形態の組成物の発光特性、電荷輸送特性又は電荷注入特性を向上又は調整することが可能となる。

本実施形態の組成物がホスト材料を更に含む場合について、発光材料を一例として説明すれば、ホスト材料と、式(1)で表される燐光発光性化合物と、化合物(F)とが電氣的に相互作用し、ホスト材料から、式(1)で表される燐光発光性化合物へ効率的に電気エネルギーを渡し、更に、式(1)で表される燐光発光性化合物から化合物(F)へ効率的に電気エネルギーを渡すことで、化合物(F)をより効率的に発光させることができ、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れる。

10

上記観点から、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、ホスト材料の有する最低三重項励起状態のエネルギー準位の絶対値は、 $|T_P|$ 及び $|T_F|$ より大きいことが好ましい。また、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、ホスト材料の有する最低一重項励起状態のエネルギー準位の絶対値は、 $|T_F|$ より大きいことが好ましい。

ホスト材料としては、本実施形態の発光素子を湿式法で作製できるので、式(1)で表される燐光発光性化合物及び化合物(F)を溶解することが可能な溶媒に対して溶解性を示すものが好ましい。

20

【0305】

ホスト材料は、低分子化合物(低分子ホスト)と高分子化合物(高分子ホスト)とに分類され、本実施形態の組成物はいずれのホスト材料を含有していてもよい。本実施形態の組成物に含有されていてもよいホスト材料としては、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、低分子ホストが好ましい。

高分子ホストとしては、例えば、後述の正孔輸送材料である高分子化合物、後述の電子輸送材料である高分子化合物が挙げられる。

【0306】

[低分子ホスト]

低分子ホストは、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、式(H-1)で表される化合物である。ここで、式(H-1)で表される化合物は、化合物中に、縮合複素環骨格(f)を有さない化合物であることが好ましい。

30

【0307】

式(H-1)で表される化合物の分子量は、好ましくは、 $1 \times 10^2 \sim 5 \times 10^3$ であり、より好ましくは $2 \times 10^2 \sim 3 \times 10^3$ であり、更に好ましくは $3 \times 10^2 \sim 1.5 \times 10^3$ であり、特に好ましくは $4 \times 10^2 \sim 1 \times 10^3$ である。

【0308】

Ar^{H1} 及び Ar^{H2} において、アリール基及び1価の複素環基としては、例えば、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、ジヒドロフェナントレン、トリフェニレン、フルオレン、ベンゾフルオレン、スピロピフルオレン、ベンゾスピロピフルオレン、ピレン、クリセン、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、カルバゾール、アザカルバゾール、ジアザカルバゾール、アザナフタレン、ジアザナフタレン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、フェノキサジン、フェノチアジン、9,10-ジヒドロアクリジン、5,10-ジヒドロフェナジン、アザアントラセン、ジアザアントラセン、アザフェナントレン、ジアザフェナントレン、インドロカルバゾール又はインデノカルバゾールから、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個を除いた基が挙げられ、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、フルオレン、スピロピフルオレン、ピレン、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、アザナフタレン、ジアザナフタレン、カルバゾール、アザカルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、フェノキサジン、フェノチ

40

50

アジン、インドロカルバゾール又はインデノカルバゾールから、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、より好ましくは、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フルオレン、スピロピフルオレン、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、カルバゾール、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフエンから、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、更に好ましくは、ベンゼン又はカルバゾールから、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0309】

Ar^{H1} 及び Ar^{H2} が有していてもよい置換基としては、好ましくは、ハロゲン原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、1 個の複素環基又は置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 個の複素環基であり、更に好ましくは、アルキル基又はシクロアルキル基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

10

Ar^{H1} 及び Ar^{H2} が有していてもよい置換基におけるアリール基及び 1 個の複素環基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 Ar^{H1} 及び Ar^{H2} におけるアリール基及び 1 個の複素環基の例及び好ましい範囲と同じである。

Ar^{H1} 及び Ar^{H2} が有していてもよい置換基における置換アミノ基において、アミノ基が有する置換基としては、アリール基又は 1 個の複素環基が好ましく、アリール基がより好ましく、これらの基は更に置換基を有していてもよい。アミノ基が有する置換基におけるアリール基及び 1 個の複素環基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 Ar^{H1} 及び Ar^{H2} におけるアリール基及び 1 個の複素環基の例及び好ましい範囲と同じである。

20

Ar^{H1} 及び Ar^{H2} が有していてもよい置換基が更に有していてもよい置換基としては、好ましくは、ハロゲン原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、1 個の複素環基又は置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 個の複素環基であり、更に好ましくは、アルキル基又はシクロアルキル基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよいが、更に置換基を有さないことが好ましい。

Ar^{H1} 及び Ar^{H2} が有していてもよい置換基が更に有していてもよい置換基におけるアリール基、1 個の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、 Ar^{H1} 及び Ar^{H2} が有していてもよい置換基におけるアリール基、1 個の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同じである。

30

【0310】

n^{H1} は、好ましくは 1 である。 n^{H2} は、好ましくは 0 である。

n^{H3} は、通常、0 以上 10 以下の整数であり、好ましくは 0 以上 5 以下の整数であり、より好ましくは 1 以上 3 以下の整数であり、更に好ましくは 2 である。

【0311】

L^{H1} は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、アリール基又は 2 個の複素環基であることが好ましい。

【0312】

L^{H1} としては、例えば、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、ジヒドロフェナントレン、トリフェニレン、フルオレン、ベンゾフルオレン、スピロピフルオレン、ベンゾスピロピフルオレン、ピレン、クリセン、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、カルバゾール、アザカルバゾール、ジアザカルバゾール、アザナフタレン、ジアザナフタレン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフエン、フェノキサジン、フェノチアジン、9, 10 - ジヒドロアクリジン、5, 10 - ジヒドロフェナジン、アザアントラセン、ジアザアントラセン、アザフェナントレン、ジアザフェナントレン、インドロカルバゾール又はインデノカルバゾールから、環を構成する原子に直接結合する水素原子 2 個を除いた基が挙げられ、好ましくは、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、フルオレン、スピロピフルオレン、ピレン、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、アザナフタレン、ジアザナフタレン、カルバゾール、アザカルバゾール、ジベンゾフラン

40

50

、ジベンゾチオフェン、フェノキサジン、フェノチアジン、インドロカルバゾール又はインドノカルバゾールから、環を構成する原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、より好ましくは、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フルオレン、スピロピフルオレン、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、カルバゾール、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンから、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個を除いた基であり、更に好ましくは、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、カルバゾール、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンから、環を構成する原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0313】

L^{H1} が有していてもよい置換基としては、ハロゲン原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基が好ましく、アルキル基、アルコキシ基、アリール基又は1価の複素環基がより好ましく、アルキル基、アリール基又は1価の複素環基が更に好ましく、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

10

L^{H1} が有していてもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 Ar^{H1} 及び Ar^{H2} が有していてもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同じである。

L^{H1} が有していてもよい置換基が有していてもよい置換基が更に有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、 Ar^{H1} 及び Ar^{H2} が有していてもよい置換基が更に有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

20

【0314】

R^{H21} は、アリール基又は1価の複素環基であることが好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

R^{H21} で表されるアリール基及び1価の複素環基の定義及び例は、 Ar^{H1} 及び Ar^{H2} で表されるアリール基及び1価の複素環基の定義及び例と同様である。

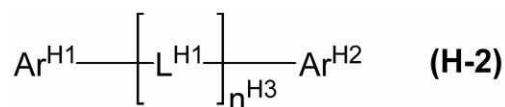
R^{H21} が有していてもよい置換基の定義及び例は、 Ar^{H1} 及び Ar^{H2} が有していてもよい置換基の定義及び例と同様である。

【0315】

式(H-1)で表される化合物は、式(H-2)で表される化合物であることが好ましい。

30

【化119】



[式中、 Ar^{H1} 、 Ar^{H2} 、 nH^3 及び L^{H1} は、前記と同じ意味を表す。]

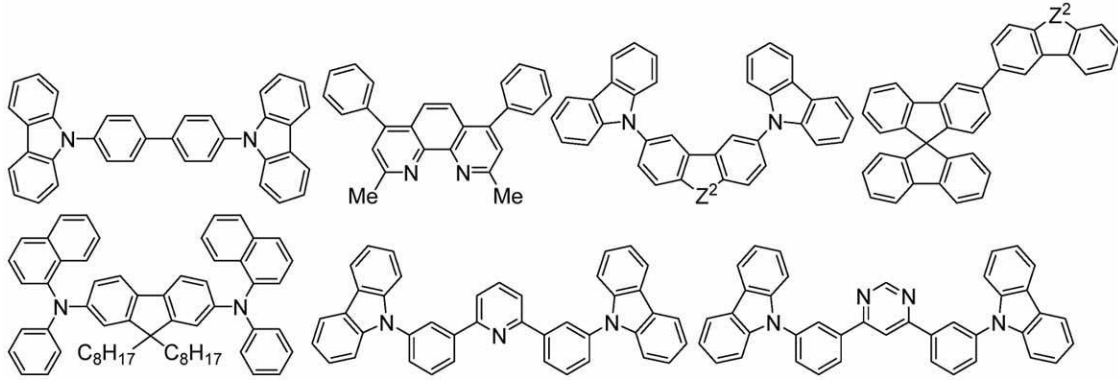
【0316】

低分子ホスト材料としては、下記式で表される化合物並びに後述の化合物H1が例示される。

【0317】

40

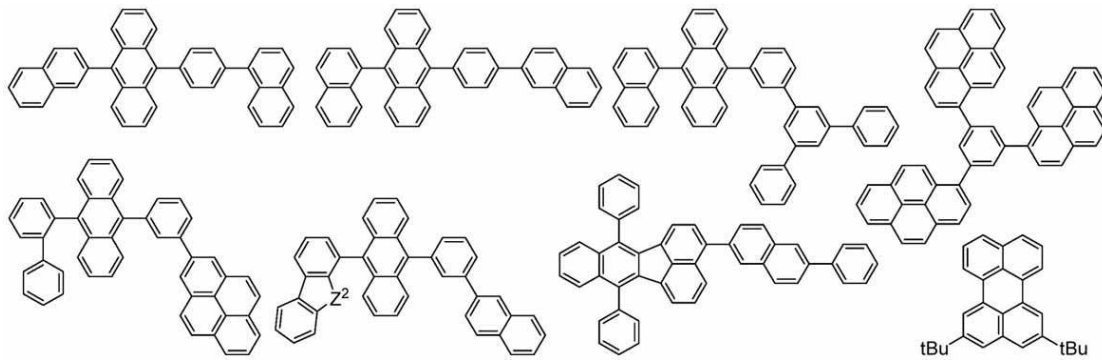
【化 1 2 0】



10

【 0 3 1 8】

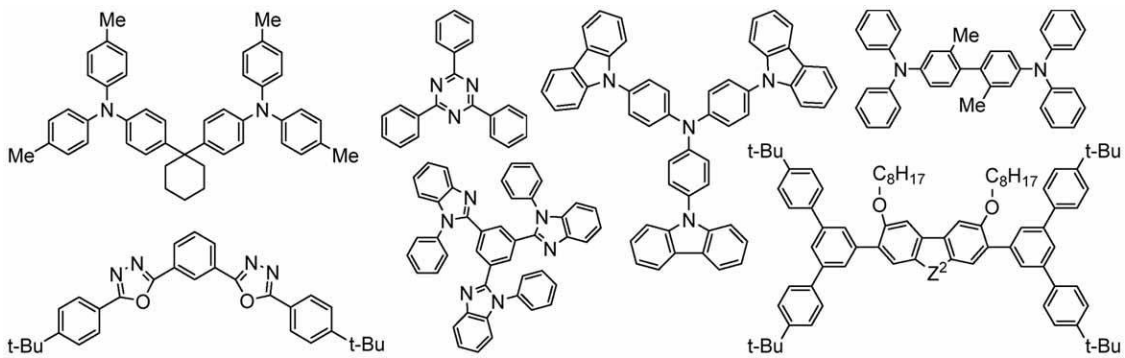
【化 1 2 1】



20

【 0 3 1 9】

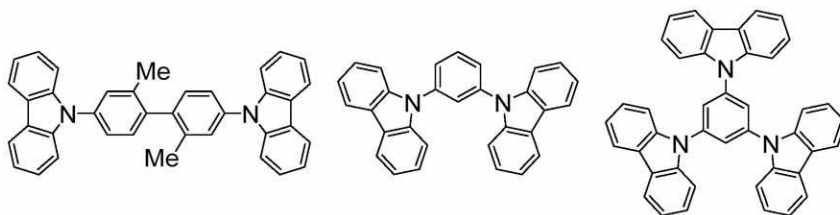
【化 1 2 2】



30

【 0 3 2 0】

【化 1 2 3】



40

【 0 3 2 1】

式中、 Z^2 は、酸素原子又は硫黄原子を表す。

【 0 3 2 2】

〔高分子ホスト〕

高分子ホスト材料としては、例えば、後述の正孔輸送材料である高分子化合物、及び、

50

後述の電子輸送材料である高分子化合物が挙げられる。ここで、高分子ホスト材料は、化合物中に、縮合複素環骨格 (f) を有さない化合物であることが好ましい。

【0323】

高分子ホスト材料のポリスチレン換算の数平均分子量は、好ましくは $5 \times 10^3 \sim 1 \times 10^6$ であり、より好ましくは $1 \times 10^4 \sim 5 \times 10^5$ であり、より好ましくは $5 \times 10^4 \sim 2 \times 10^5$ である。高分子ホスト材料のポリスチレン換算の重量平均分子量は、好ましくは $1 \times 10^4 \sim 2 \times 10^6$ であり、より好ましくは $2 \times 10^4 \sim 1 \times 10^6$ であり、より好ましくは $1 \times 10^5 \sim 5 \times 10^5$ である。

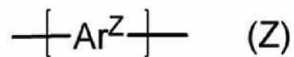
高分子ホスト材料は、ブロック共重合体、ランダム共重合体、交互共重合体、グラフト共重合体のいずれであってもよいし、その他の態様であってもよいが、複数種の原料モノマーを共重合した共重合体であることが好ましい。

10

【0324】

高分子ホスト材料は、本実施形態の組成物を含有する発光素子の発光効率がより優れるので、前記式 (Y) 又は後述の式 (Z) で表される構成単位を含む高分子化合物であることが好ましく、前記式 (Y) 及び後述の式 (Z) で表される構成単位をそれぞれ含む高分子化合物であることがより好ましい。高分子ホスト材料が含んでいてもよい式 (Y) で表される構成単位の例及び好ましい範囲は、化合物 (F) における式 (Y) で表される構成単位の例及び好ましい範囲と同様である。

【化124】



20

[式中、 Ar^Z は、2価の複素環基、又は、アリーレン基と2価の複素環基とが直接結合した2価の基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

【0325】

Ar^Z における2価の複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めなくて、通常2以上60以下であり、好ましくは2以上30以下であり、より好ましくは3以上15以下である。

Ar^Z における2価の複素環基のヘテロ原子の数は、置換基のヘテロ原子数を含めなくて、通常1以上30以下であり、好ましくは1以上10以下であり、より好ましくは1以上5以下であり、さらに好ましくは1以上3以下である。

30

Ar^Z における2価の複素環基は、環構成原子として、ホウ素原子、窒素原子、酸素原子、ケイ素原子、リン原子、硫黄原子及びセレン原子からなる群より選ばれる少なくとも1種のヘテロ原子を含む複素環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であることが好ましく、環構成原子として、窒素原子、酸素原子及び硫黄原子からなる群より選ばれる少なくとも1種のヘテロ原子を含む複素環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であることがより好ましく、環構成原子として、窒素原子を含む複素環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基(以下、「2価の含窒素複素環基」ともいう。)であることがさらに好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

40

【0326】

Ar^Z における2価の複素環基に関して、2価の含窒素複素環基以外の2価の複素環基としては、例えば、ポロール環、フラン環、シロール環、ホスホール環、チオフェン環、セレノフェン環、ベンゾフラン環、ベンゾチオフェン環、ジベンゾポロール環、ジベンゾフラン環、ジベンゾシロール環、ジベンゾホスホール環、ジベンゾチオフェン環又はジベンゾセレノフェン環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基が挙げられ、発光素子の発光効率向上に有利であることから、好ましくは、フラン環、チオフェン環、ベンゾフラン環、ベンゾチオフェン環、ジベンゾフラン環又はジベンゾチオフェン環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、より好ましくは、式(AA-12)~式(AA-15)で表

50

される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

【0327】

Ar^Z における2価の複素環基に関して、縮合複素環骨格(f)を有さない2価の複素環基であることが好ましい。

【0328】

Ar^Z における2価の複素環基に関して、2価の含窒素複素環基は、発光素子の発光効率向上及び電荷輸送性向上(とりわけ正孔輸送性向上)に有利であることから、二重結合を形成していない窒素原子を含む2価の含窒素複素環基であることが好ましく、この基は置換基を有していてもよい。また、 Ar^Z における2価の複素環基に関して、2価の含窒素複素環基は、発光素子の発光効率向上及び電荷輸送性向上(とりわけ電子輸送性向上)に有利であることから、環構成原子として二重結合を形成している窒素原子を含む、2価の含窒素複素環基(以下、「二重結合を形成している窒素原子を含む2価の含窒素複素環基」ともいう。)であることが好ましく、この基は置換基を有していてもよい。

10

【0329】

「二重結合を形成している窒素原子」とは、窒素原子と、その窒素原子と結合する原子との間に二重結合を有する窒素原子を意味する。

「環構成原子として二重結合を形成している窒素原子を含む」とは、 $-N=$ で表される基を環内に含むことを意味する。

【0330】

Ar^Z における二重結合を形成していない窒素原子を含む2価の含窒素複素環基としては、例えば、ピロール環、インドール環、イソインドール環、カルバゾール環、ジヒドロアクリジン環、5,10-ジヒドロフェナジン環、アクリドン環、キナクリドン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、インドロカルバゾール環又はインデノカルバゾール環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基が挙げられ、発光素子の発光効率向上に有利であることから、好ましくは、カルバゾール環、ジヒドロアクリジン環、5,10-ジヒドロフェナジン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、インドロカルバゾール環又はインデノカルバゾール環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、より好ましくは、カルバゾール環、ジヒドロアクリジン環、5,10-ジヒドロフェナジン環、フェノキサジン環又はフェノチアジン環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、さらに好ましくは、カルバゾール環、フェノキサジン環又はフェノチアジン環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、特に好ましくはフェノキサジン環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

20

30

二重結合を形成していない窒素原子を含む2価の含窒素複素環基は、発光素子の発光効率向上及び電荷輸送性向上(とりわけ正孔輸送性向上)に有利であることから、好ましくは、式(AA-10)、式(AA-11)、式(AA-18)~式(AA-22)、式(AA-33)又は式(AA-34)で表される基であり、より好ましくは、式(AA-10)、式(AA-11)、式(AA-18)~式(AA-21)で表される基であり、さらに好ましくは、式(AA-18)又は式(AA-19)で表される基である。

40

【0331】

Ar^Z における二重結合を形成している窒素原子を含む2価の含窒素複素環基としては、ジアゾール環、トリアゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、チアゾール環、オキサゾール環、ベンゾジアゾール環、ベンゾトリアゾール環、ベンゾオキサジアゾール環、ベンゾチアジアゾール環、アザカルバゾール環、ジアザカルバゾール環、ピリジン環、ジアザベンゼン環、トリアジン環、アザナフタレン環、ジアザナフタレン環、トリアザナフタレン環、アザアントラセン環、ジアザアントラセン環、トリアザアントラセン環、アザフェナントレン環、ジアザフェナントレン環又はトリアザフェナントレン環から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合する水素原子2個を除いた基が挙げら

50

れ、発光素子の発光効率向上に有利であることから、好ましくは、ピリジン環、ジアザベンゼン環、トリアジン環、アザナフタレン環、ジアザナフタレン環、アザアントラセン環、ジアザアントラセン環、アザフェナントレン環又はジアザフェナントレン環から、環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、より好ましくは、ピリジン環、ジアザベンゼン環、トリアジン環、アザナフタレン環又はジアザナフタレン環から、環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、さらに好ましくは、ピリジン環、ジアザベンゼン環又はトリアジン環から、環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、特に好ましくは、トリアジン環から、環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子2個を除いた基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

10

二重結合を形成している窒素原子を含む2価の含窒素複素環基は、発光素子の発光効率向上及び電荷輸送性向上（とりわけ電子輸送性向上）に有利であることから、好ましくは、式(AA-1)～式(AA-9)で表される基であり、より好ましくは、式(AA-1)～式(AA-4)で表される基であり、さらに好ましくは、式(AA-4)で表される基である。

【0332】

Ar^Z において、アリーレン基と2価の複素環基とが直接結合した2価の基における、アリーレン基の例及び好ましい例は、 Ar^{Y1} で表される基の例及び好ましい例と同様である。

Ar^Z において、アリーレン基と2価の複素環基とが直接結合した2価の基における、2価の複素環基の例及び好ましい例は、 Ar^Z で表される2価の複素環基の例及び好ましい例と同様である。

20

Ar^Z におけるアリーレン基と2価の複素環基とが直接結合した2価の基の例としては、例えば、 Ar^{Y1} で表される基と Ar^Z で表される2価の複素環基とが直接結合した2価の基の例が挙げられる。

【0333】

Ar^Z で表される基が有していてもよい置換基は、好ましくは、フッ素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基又は置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基であり、さらに好ましくは、アルキル基又はアリール基であり、これらの基はさらに置換基を有していてもよい。

30

Ar^Z で表される基が有していてもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい例は、それぞれ、 Ar^{Y1} で表される基が有していてもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい例と同様である。

【0334】

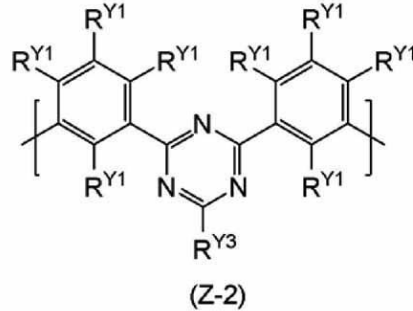
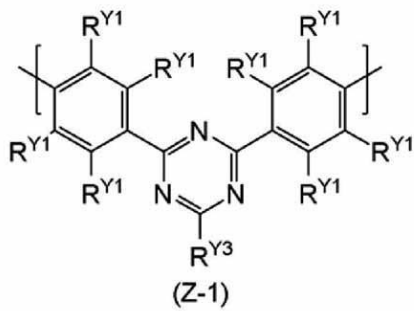
Ar^Z で表される基が有していてもよい置換基がさらに有していてもよい置換基の例及び好ましい例は、 Ar^{Y1} で表される基が有していてもよい置換基がさらに有していてもよい置換基の例及び好ましい例と同様である。

【0335】

式(Z)で表される構成単位は、発光素子の発光効率向上及び電荷輸送性向上（とりわけ電子輸送性向上）に有利であることから、好ましくは、式(Z-1)～式(Z-4)で表される構成単位であり、より好ましくは、式(Z-1)又は式(Z-3)で表される構成単位である。また、式(Z)で表される構成単位は、発光素子の発光効率向上及び電荷輸送性向上（とりわけ正孔輸送性向上）に有利であることから、好ましくは、式(Z-5)～式(Z-7)で表される構成単位であり、より好ましくは、式(Z-5)で表される構成単位である。

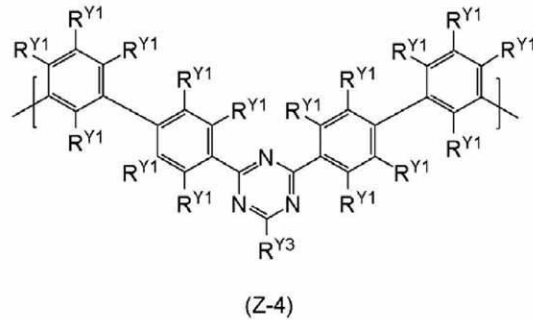
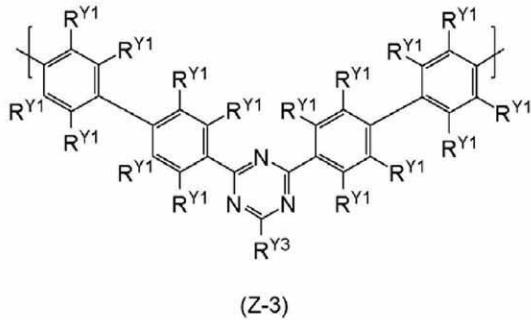
40

【化 1 2 5】



10

【化 1 2 6】



20

[式中、 R^{Y1} 及び R^{Y3} は、それぞれ独立に、水素原子、フッ素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1 価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{Y1} は、同一であってもよく異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。]

【 0 3 3 6】

R^{Y1} は、好ましくは、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基であり、より好ましくは、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はア

30

リール基であり、さらに好ましくは、水素原子又はアルキル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

R^{Y3} は、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基であり、より好ましくは、アリール基又は 1 価の複素環基であり、さらに好ましくはア

リール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

R^{Y1} 及び R^{Y3} で表される基におけるアリール基、1 価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい例は、それぞれ、 Ar^{Y1} で表される基が有していてもよい置換基におけるアリール基、1 価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい例と同様である。

R^{Y1} 及び R^{Y3} が有していてもよい置換基の例及び好ましい例は、 Ar^{Y1} で表される基が有していてもよい置換基の例及び好ましい例と同様である。

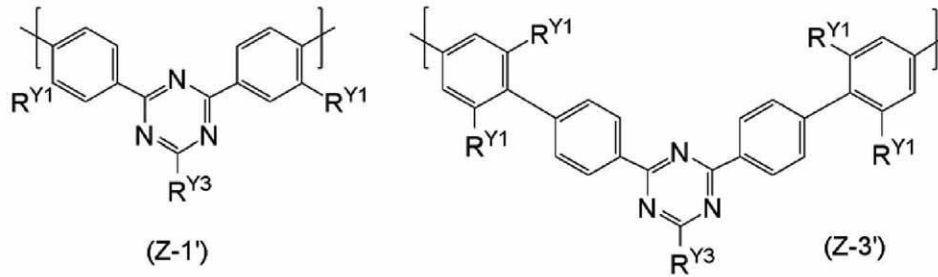
40

【 0 3 3 7】

式 (Z-1) で表される構成単位は、式 (Z-1') で表される構成単位であることが好ましい。また、式 (Z-3) で表される構成単位は、式 (Z-3') で表される構成単位であることが好ましい。

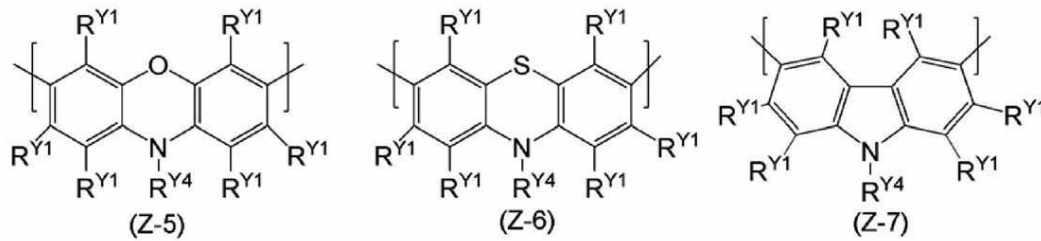
50

【化 1 2 7】



[式中、 R^{Y1} 及び R^{Y3} は前記と同じ意味を表す。]

【化 1 2 8】



[式中、 R^{Y1} は前記を同じ意味を表す。 R^{Y4} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基又は 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

【 0 3 3 8】

R^{Y4} は、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基であり、より好ましくは、アリール基又は 1 価の複素環基であり、さらに好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

R^{Y4} で表される基におけるアリール基及び 1 価の複素環基の例及び好ましい例は、それぞれ、 Ar^{Y1} で表される基が有していてもよい置換基におけるアリール基及び 1 価の複素環基の例及び好ましい例と同様である。

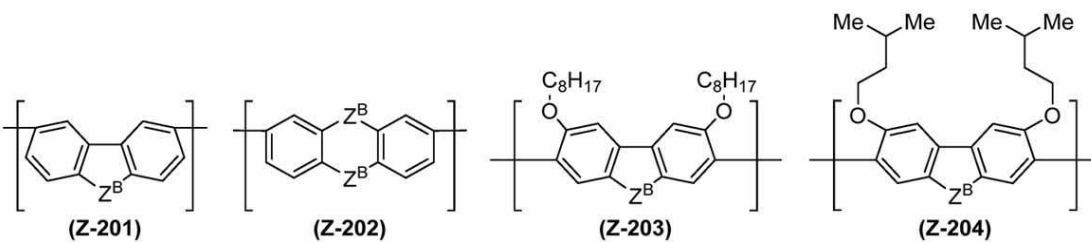
R^{Y4} が有していてもよい置換基の例及び好ましい例は、 Ar^{Y1} で表される基が有していてもよい置換基の例及び好ましい例と同様である。

【 0 3 3 9】

式 (Z) で表される構成単位としては、例えば、式 (Z-201) ~ 式 (Z-215) で表される 2 価の複素環基からなる構成単位、式 (Z-301) ~ 式 (Z-310) で表されるアリーレン基と 2 価の複素環基とが直接結合した 2 価の基からなる構成単位が挙げられる。

【 0 3 4 0】

【化 1 2 9】



【 0 3 4 1】

10

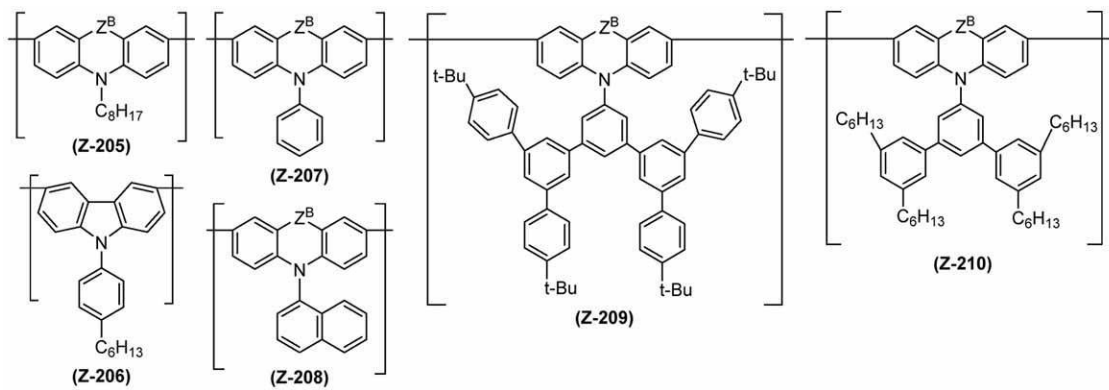
20

30

40

50

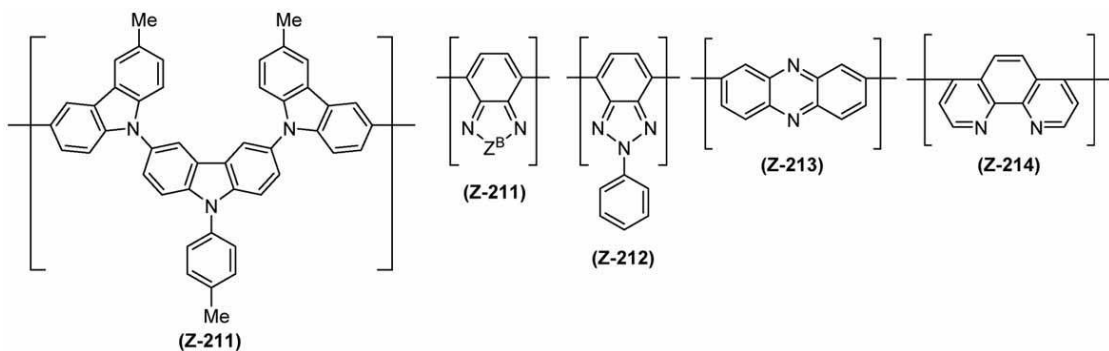
【化 1 3 0】



10

【 0 3 4 2】

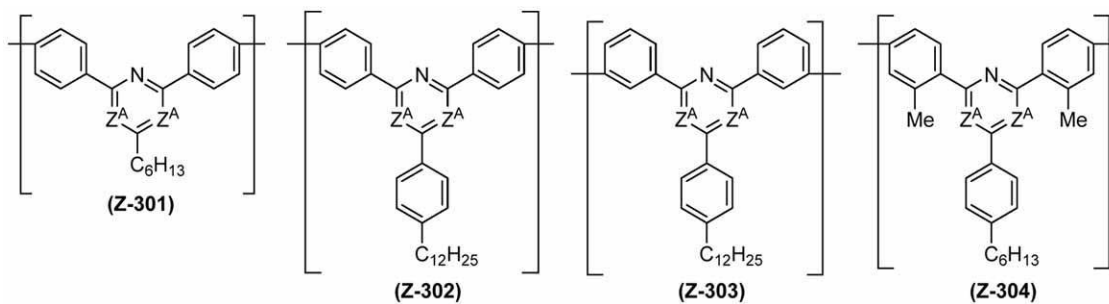
【化 1 3 1】



20

【 0 3 4 3】

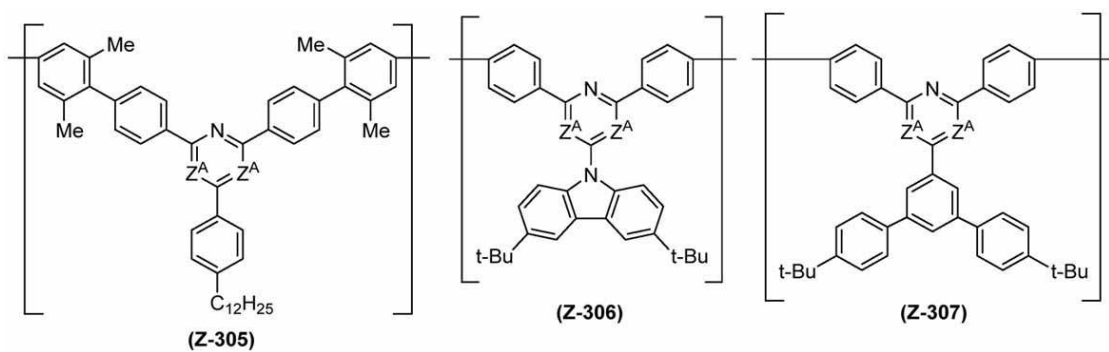
【化 1 3 2】



30

【 0 3 4 4】

【化 1 3 3】

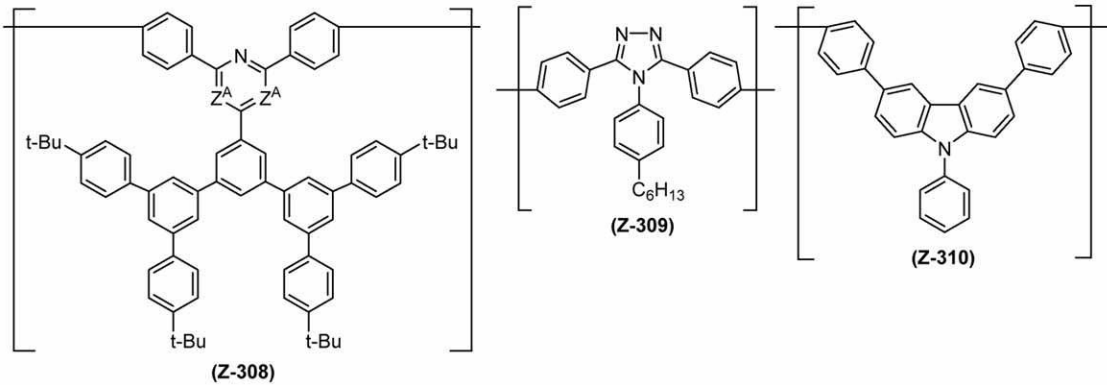


40

【 0 3 4 5】

50

【化 1 3 4】



10

【 0 3 4 6】

[正孔輸送材料]

正孔輸送材料は、低分子化合物と高分子化合物とに分類され、好ましくは高分子化合物である。正孔輸送材料は、架橋基を有していてもよい。

【 0 3 4 7】

低分子化合物としては、例えば、トリフェニルアミン及びその誘導体、N, N' - ジ - 1 - ナフチル - N, N' - ジフェニルベンジジン (- N P D)、並びに、N, N' - ジフェニル - N, N' - ジ (m - トリル) ベンジジン (T P D) 等の芳香族アミン化合物が挙げられる。

20

【 0 3 4 8】

高分子化合物としては、例えば、ポリビニルカルバゾール及びその誘導体；側鎖又は主鎖に芳香族アミン構造を有するポリアリーレン及びその誘導体が挙げられる。高分子化合物は、電子受容性部位が結合された化合物でもよい。電子受容性部位としては、例えば、フラレン、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン、テトラシアノエチレン、トリニトロフルオレノン等が挙げられ、好ましくはフラレンである。

【 0 3 4 9】

本実施形態の組成物が正孔輸送材料を含有する場合、正孔輸送材料の配合量は、式 (1) で表される燐光発光性化合物及び化合物 (F) の合計を 1 0 0 質量部とした場合、通常、1 質量部 ~ 4 0 0 質量部であり、好ましくは 5 質量部 ~ 1 5 0 質量部である。

30

【 0 3 5 0】

正孔輸送材料は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【 0 3 5 1】

[電子輸送材料]

電子輸送材料は、低分子化合物と高分子化合物とに分類される。電子輸送材料は、架橋基を有していてもよい。

【 0 3 5 2】

低分子化合物としては、例えば、8 - ヒドロキシキノリンを配位子とする金属錯体、オキサジアゾール、アントラキノジメタン、ベンゾキノン、ナフトキノン、アントラキノン、テトラシアノアントラキノジメタン、フルオレノン、ジフェニルジシアノエチレン及びジフェノキノン、並びに、これらの誘導体が挙げられる。

40

【 0 3 5 3】

高分子化合物としては、例えば、ポリフェニレン、ポリフルオレン、及び、これらの誘導体が挙げられる。高分子化合物は、金属でドーブされていてもよい。

【 0 3 5 4】

本実施形態の組成物が電子輸送材料を含有する場合、電子輸送材料の配合量は、式 (1) で表される燐光発光性化合物及び化合物 (F) の合計を 1 0 0 質量部とした場合、通常、1 質量部 ~ 4 0 0 質量部であり、好ましくは 5 質量部 ~ 1 5 0 質量部である。

【 0 3 5 5】

50

電子輸送材料は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【0356】

[正孔注入材料及び電子注入材料]

正孔注入材料及び電子注入材料は、各々、低分子化合物と高分子化合物とに分類される。正孔注入材料及び電子注入材料は、架橋基を有していてもよい。

【0357】

低分子化合物としては、例えば、銅フタロシアニン等の金属フタロシアニン；カーボン；モリブデン、タングステン等の金属酸化物；フッ化リチウム、フッ化ナトリウム、フッ化セシウム、フッ化カリウム等の金属フッ化物が挙げられる。

【0358】

高分子化合物としては、例えば、ポリアニリン、ポリチオフェン、ポリピロール、ポリフェニレンビニレン、ポリチエニレンビニレン、ポリキノリン及びポリキノキサリン、並びに、これらの誘導体；芳香族アミン構造を主鎖又は側鎖に含む重合体等の導電性高分子が挙げられる。

【0359】

本実施形態の組成物が正孔注入材料及び電子注入材料を含有する場合、正孔注入材料及び電子注入材料の配合量は、各々、式(1)で表される燐光発光性化合物及び化合物(F)の合計を100質量部とした場合、通常、1質量部～400質量部であり、好ましくは5質量部～150質量部である。

【0360】

電子注入材料及び正孔注入材料は、各々、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【0361】

[イオンドープ]

正孔注入材料又は電子注入材料が導電性高分子を含む場合、導電性高分子の電気伝導度は、好ましくは $1 \times 10^{-5} \text{ S/cm} \sim 1 \times 10^3 \text{ S/cm}$ である。導電性高分子の電気伝導度をかかるとするために、導電性高分子に適量のイオンをドープすることができる。

【0362】

ドープするイオンの種類は、正孔注入材料であればアニオン、電子注入材料であればカチオンである。アニオンとしては、例えば、ポリスチレンスルホン酸イオン、アルキルベンゼンスルホン酸イオン、樟脳スルホン酸イオンが挙げられる。カチオンとしては、例えば、リチウムイオン、ナトリウムイオン、カリウムイオン、テトラブチルアンモニウムイオンが挙げられる。

【0363】

ドープするイオンは、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【0364】

[発光材料]

発光材料(但し、式(1)で表される燐光発光性化合物及び化合物(F)とは異なる。)は、低分子化合物と高分子化合物とに分類される。発光材料は、架橋基を有していてもよい。

【0365】

低分子化合物としては、例えば、ナフタレン及びその誘導体、アントラセン及びその誘導体、ペリレン及びその誘導体等の燐光発光性化合物、並びに、式(1)で表される燐光発光性化合物とは異なる燐光発光性化合物(以下、「その他の燐光発光性化合物」ともいう)が挙げられる。その他の燐光発光性化合物としては、例えば、イリジウム、白金又はユーロピウムを中心金属原子とする燐光発光性化合物が挙げられる。

【0366】

高分子化合物としては、例えば、フェニレン基、ナフタレンジイル基、フルオレンジイル基、フェナントレンジイル基、ジヒドロフェナントレンジイル基、式(X)で表される基、カルバゾールジイル基、フェノキサジンジイル基、フェノチアジンジイル基、

10

20

30

40

50

アントラセンジイル基、ピレンジイル基等を含む高分子化合物が挙げられる。

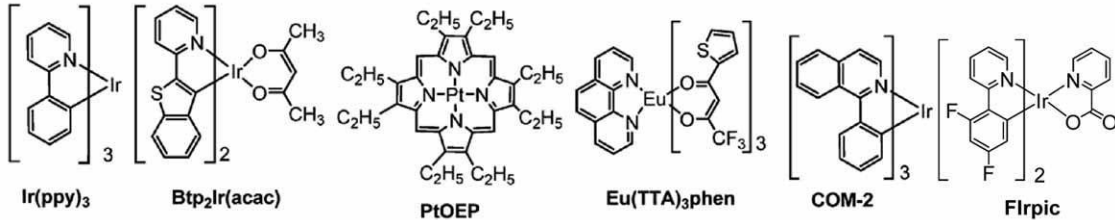
【 0 3 6 7 】

発光材料は、好ましくは、その他の燐光発光性化合物である。

【 0 3 6 8 】

その他の燐光発光性化合物としては、例えば、以下に示す化合物が挙げられる。

【 化 1 3 5 】



10

【 0 3 6 9 】

本実施形態の組成物において、発光材料の含有量は、式(1)で表される燐光発光性化合物及び化合物(F)の合計を100質量部とした場合、通常、0.001質量部~10質量部である。

【 0 3 7 0 】

[酸化防止剤]

酸化防止剤は、式(1)で表される燐光発光性化合物及び化合物(F)と同じ溶媒に可溶であり、発光及び電荷輸送を阻害しない化合物であればよく、例えば、フェノール系酸化防止剤、リン系酸化防止剤が挙げられる。

20

【 0 3 7 1 】

本実施形態の組成物において、酸化防止剤の配合量は、式(1)で表される燐光発光性化合物及び化合物(F)の合計を100質量部とした場合、通常、0.001質量部~10質量部である。

【 0 3 7 2 】

酸化防止剤は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【 0 3 7 3 】

<インク>

本実施形態の組成物は溶媒を含有していてもよい。以下では、溶媒を含有する本実施形態の組成物を「インク」という。

30

【 0 3 7 4 】

本実施形態のインクは、スピコート法、キャスト法、マイクログラビアコート法、グラビアコート法、バーコート法、ロールコート法、ワイヤーバーコート法、ディップコート法、スプレーコート法、スクリーン印刷法、フレキソ印刷法、オフセット印刷法、インクジェット印刷法、キャピラリコート法、ノズルコート法等の塗布法に好適に使用することができる。

【 0 3 7 5 】

本実施形態のインクの粘度は、塗布法の種類によって調整すればよいが、インクジェット印刷法等の溶液が吐出装置を経由する印刷法に適用する場合には、吐出時の目づまり及び飛行曲がりが起こりづらいので、好ましくは25において1mPa·s~30mPa·sである。

40

【 0 3 7 6 】

本実施形態のインクに含有される溶媒は、好ましくは、インク中の固形分を溶解又は均一に分散できる溶媒である。溶媒としては、例えば、1,2-ジクロロエタン、1,1,2-トリクロロエタン、クロロベンゼン、o-ジクロロベンゼン等の塩素系溶媒；THF、ジオキサン、アニソール、4-メチルアニソール等のエーテル系溶媒；トルエン、キシレン、メシチレン、エチルベンゼン、n-ヘキシルベンゼン、シクロヘキシルベンゼン等の芳香族炭化水素系溶媒；シクロヘキサン、メチルシクロヘキサン、n-ペンタン、n-

50

ヘキサン、n - ヘプタン、n - オクタン、n - ノナン、n - デカン、n - ドデカン、ビシクロヘキシル等の脂肪族炭化水素系溶媒；アセトン、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン、アセトフェノン等のケトン系溶媒；酢酸エチル、酢酸ブチル、エチルセルソルブアセテート、安息香酸メチル、酢酸フェニル等のエステル系溶媒；エチレングリコール、グリセリン、1, 2 - ヘキサンジオール等の多価アルコール系溶媒；イソプロピルアルコール、シクロヘキサノール等のアルコール系溶媒；ジメチルスルホキシド等のスルホキシド系溶媒；N - メチル - 2 - ピロリドン、N, N - ジメチルホルムアミド等のアミド系溶媒が挙げられる。溶媒は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【0377】

本実施形態のインクにおいて、溶媒の配合量は、式(1)で表される燐光発光性化合物及び化合物(F)の合計を100質量部とした場合、通常、1000質量部～10000質量部であり、好ましくは2000質量部～20000質量部である。

10

【0378】

本実施形態のインクは、式(1)で表される燐光発光性化合物、化合物(F)及び溶媒以外の成分を含んでいてよい。例えば、本実施形態のインクは、前述のホスト材料、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料(式(1)で表される燐光発光性化合物及び化合物(F)とは異なる。)及び酸化防止剤からなる群より選択される少なくとも1種の材料を更に含んでいてよい。

【0379】

<膜>

膜は、式(1)で表される燐光発光性化合物と、化合物(F)とを含有する。

20

【0380】

膜は、発光素子における発光層として好適である。

【0381】

膜は、本実施形態のインクを用いて、例えば、スピコート法、キャスト法、マイクログラビアコート法、グラビアコート法、バーコート法、ロールコート法、ワイヤーバーコート法、ディップコート法、スプレーコート法、スクリーン印刷法、フレキソ印刷法、オフセット印刷法、インクジェット印刷法、キャピラリーコート法、ノズルコート法等の塗布法により作製することができる。

【0382】

膜の厚さは、通常、1nm～10μmである。

30

【0383】

<発光素子>

本実施形態の発光素子は、本実施形態の組成物を含有する発光素子である。

【0384】

本実施形態の発光素子は、例えば、陽極と、陰極と、陽極及び陰極の間に設けられた本実施形態の組成物を含有する層とを有する。

【0385】

[層構成]

本実施形態の組成物を含有する層は、通常、発光層、正孔輸送層、正孔注入層、電子輸送層、電子注入層の1種以上の層であり、好ましくは、発光層である。これらの層は、各々、発光材料、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料を含有する。これらの層の形成方法としては、低分子化合物を用いる場合、例えば、粉末からの真空蒸着法、及び、溶液又は熔融状態からの成膜による方法が挙げられ、高分子化合物を用いる場合、例えば、溶液又は熔融状態からの成膜による方法が挙げられる。各々の層は、例えば、発光材料、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料を、上述した溶媒に溶解させ、インク状の組成物を調製した後、これを用いて、上述した膜の作製と同じ塗布法により形成することができる。

40

【0386】

発光素子は、陽極と陰極の間に発光層を有する。本実施形態の発光素子は、正孔注入性

50

及び正孔輸送性の観点からは、陽極と発光層との間に、正孔注入層及び正孔輸送層の少なくとも1層を有することが好ましく、電子注入性及び電子輸送性の観点からは、陰極と発光層の間に、電子注入層及び電子輸送層の少なくとも1層を有することが好ましい。

【0387】

正孔輸送層、電子輸送層、発光層、正孔注入層及び電子注入層の材料としては、本実施形態の組成物の他、各々、上述した正孔輸送材料、電子輸送材料、発光材料、正孔注入材料及び電子注入材料等が挙げられる。

【0388】

正孔輸送層の材料、電子輸送層の材料及び発光層の材料は、各々、正孔輸送層、電子輸送層及び発光層に隣接する層の形成時に使用される溶媒に溶解する場合、発光素子の作製において、該溶媒に該材料が溶解することを回避するために、該材料が架橋基を有することが好ましい。架橋基を有する材料を用いて各層を形成した後、該架橋基を架橋させることにより、該層を不溶化させることができる。

10

【0389】

積層する層の順番及び数、並びに各層の厚さは、発光効率、輝度寿命等を勘案して調整することができる。

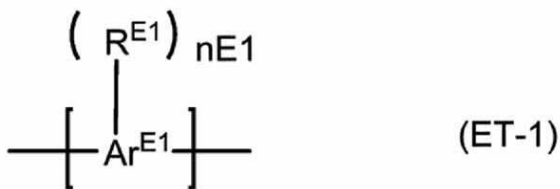
【0390】

本実施形態の発光素子が電子輸送層を有する場合、電子輸送層に含有される電子輸送材料としては、低分子化合物又は高分子化合物が挙げられるが、低分子化合物が好ましい。電子輸送層に含有される高分子化合物としては、式(ET-1)で表される構成単位及び式(ET-2)で表される構成単位からなる群より選択される少なくとも1種の構成単位を含む高分子化合物(以下、「電子輸送層の高分子化合物」ともいう。)が好ましい。

20

【0391】

【化136】



30

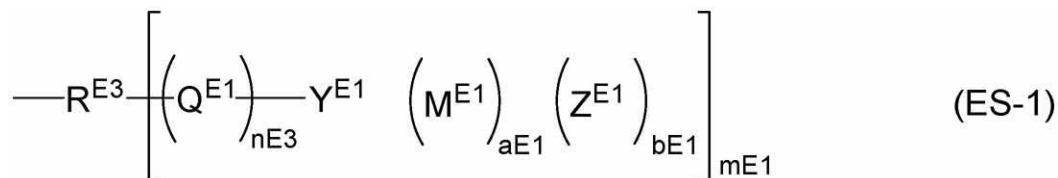
[式中、

$nE1$ は、1以上の整数を表す。

Ar^{E1} は、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は R^{E1} 以外の置換基を有していてもよい。

R^{E1} は、式(ES-1)で表される基を表す。 R^{E1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

【化137】



40

[式中、

$nE3$ は0以上の整数を表し、 $aE1$ は1以上の整数を表し、 $bE1$ は0以上の整数を表し、 $mE1$ は1以上の整数を表す。 $nE3$ 、 $aE1$ 及び $bE1$ が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。但し、 R^{E3} が単結合である場合、 $mE1$ は1である。また、 $aE1$ 及び $bE1$ は、式(ES-1)で表される基の電荷が0となるように選択される。

R^{E3} は、単結合、炭化水素基、複素環基又は $-\text{O}-\text{R}^{E3}$ 、 $-\text{}$ を表し (R^{E3} は、炭化

50

水素基又は複素環基を表す。) 、これらの基は置換基を有していてもよい。

Q^{E1} は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、酸素原子又は硫黄原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Q^{E1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Y^{E1} は、 $-CO_2^-$ 、 $-SO_3^-$ 、 $-SO_2^-$ 又は $-PO_3^{2-}$ を表す。 Y^{E1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

M^{E1} は、アルカリ金属カチオン、アルカリ土類金属カチオン又はアンモニウムカチオンを表し、このアンモニウムカチオンは置換基を有していてもよい。 M^{E1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Z^{E1} は、 F^- 、 Cl^- 、 Br^- 、 I^- 、 OH^- 、 $B(R^{E4})_4^-$ 、 $R^{E4}SO_3^-$ 、 $R^{E4}COO^-$ 、 NO_3^- 、 SO_4^{2-} 、 HSO_4^- 、 PO_4^{3-} 、 HPO_4^{2-} 、 $H_2PO_4^-$ 、 BF_4^- 又は PF_6^- を表す。 R^{E4} は、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Z^{E1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

【0392】

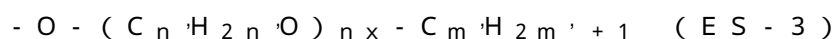
$nE1$ は、通常 1 ~ 4 の整数であり、好ましくは 1 又は 2 である。

【0393】

Ar^{E1} で表される芳香族炭化水素基又は複素環基としては、1, 4 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 2 - フェニレン基、2, 6 - ナフトレンジイル基、1, 4 - ナフトレンジイル基、2, 7 - フルオレンジイル基、3, 6 - フルオレンジイル基、2, 7 - フェナントレンジイル基又は 2, 7 - カルバゾールジイル基から、環を構成する原子に直接結合する水素原子 $nE1$ 個を除いた基が好ましく、 R^{E1} 以外の置換基を有していてもよい。

【0394】

Ar^{E1} が有していてもよい R^{E1} 以外の置換基としては、ハロゲン原子、シアノ基、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1 価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリーロキシ基、アミノ基、置換アミノ基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基、シクロアルキニル基、カルボキシ基及び式 (ES - 3) で表される基が挙げられる。



[式中、 n' 、 m' 及び n_x は、それぞれ独立に、1 以上の整数を表す。]

【0395】

$nE3$ は、通常 0 ~ 10 の整数であり、好ましくは 0 ~ 8 の整数であり、より好ましくは 0 ~ 2 の整数である。

【0396】

$aE1$ は、通常 1 ~ 10 の整数であり、好ましくは 1 ~ 5 の整数であり、より好ましくは 1 又は 2 である。

【0397】

$bE1$ は、通常 0 ~ 10 の整数であり、好ましくは 0 ~ 4 の整数であり、より好ましくは 0 又は 1 である。

【0398】

$mE1$ は、通常 1 ~ 5 の整数であり、好ましくは 1 又は 2 であり、より好ましくは 0 又は 1 である。

【0399】

R^{E3} が $-O-R^{E3'}$ - の場合、式 (ES - 1) で表される基は、下記で表される基である。

10

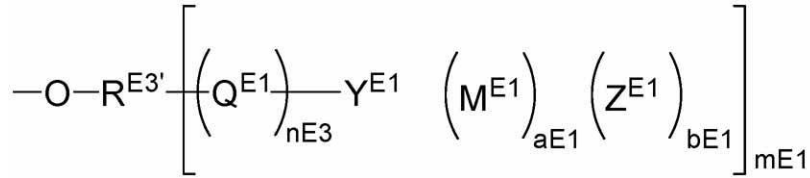
20

30

40

50

【化 1 3 8】



【0 4 0 0】

$\text{R}^{\text{E}3}$ としては、炭化水素基又は複素環基が好ましく、芳香族炭化水素基又は芳香族複素環基がより好ましく、芳香族炭化水素基が更に好ましい。

10

【0 4 0 1】

$\text{R}^{\text{E}3}$ が有していてもよい置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基及び式(ES-3)で表される基が挙げられ、式(ES-3)で表される基が好ましい。

【0 4 0 2】

$\text{Q}^{\text{E}1}$ としては、アルキレン基、アリーレン基又は酸素原子が好ましく、アルキレン基又は酸素原子がより好ましい。

【0 4 0 3】

$\text{Y}^{\text{E}1}$ としては、 $-\text{CO}_2^-$ 、 $-\text{SO}_2^-$ 又は PO_3^{2-} が好ましく、 $-\text{CO}_2^-$ がより好ましい。

20

【0 4 0 4】

$\text{M}^{\text{E}1}$ で表されるアルカリ金属カチオンとしては、例えば、 Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 、 Rb^+ 、 Cs^+ が挙げられ、 K^+ 、 Rb^+ 又は Cs^+ が好ましく、 Cs^+ がより好ましい。

【0 4 0 5】

$\text{M}^{\text{E}1}$ で表されるアルカリ土類金属カチオンとしては、例えば、 Be^{2+} 、 Mg^{2+} 、 Ca^{2+} 、 Sr^{2+} 、 Ba^{2+} が挙げられ、 Mg^{2+} 、 Ca^{2+} 、 Sr^{2+} 又は Ba^{2+} が好ましく、 Ba^{2+} がより好ましい。

【0 4 0 6】

$\text{M}^{\text{E}1}$ としては、アルカリ金属カチオン又はアルカリ土類金属カチオンが好ましく、アルカリ金属カチオンがより好ましい。

30

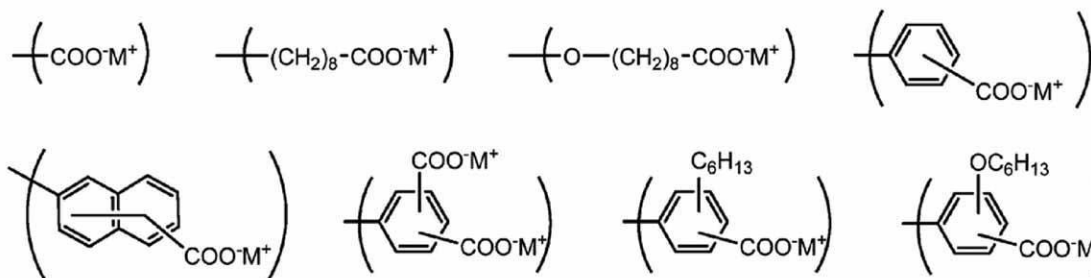
【0 4 0 7】

$\text{Z}^{\text{E}1}$ としては、 F^- 、 Cl^- 、 Br^- 、 I^- 、 OH^- 、 $\text{B}(\text{R}^{\text{E}4})_4^-$ 、 $\text{R}^{\text{E}4}\text{SO}_3^-$ 、 $\text{R}^{\text{E}4}\text{COO}^-$ 又は NO_3^- が好ましく、 F^- 、 Cl^- 、 Br^- 、 I^- 、 OH^- 、 $\text{R}^{\text{E}4}\text{SO}_3^-$ 又は $\text{R}^{\text{E}4}\text{COO}^-$ が好ましい。 $\text{R}^{\text{E}4}$ としては、アルキル基が好ましい。

【0 4 0 8】

式(ES-1)で表される基としては、例えば、下記式で表される基が挙げられる。

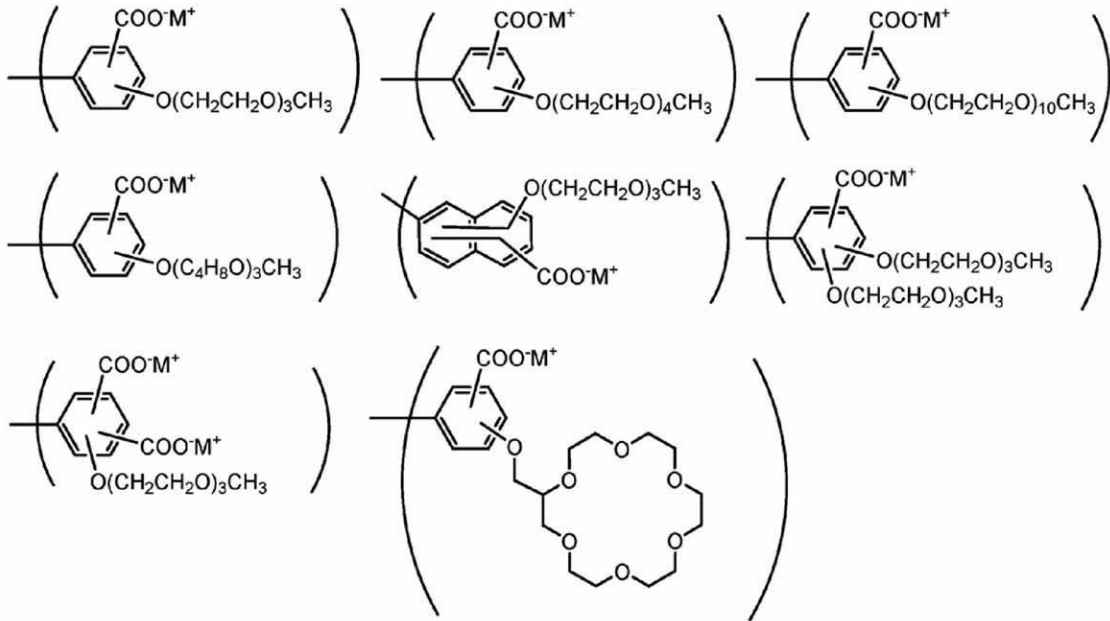
【化 1 3 9】



40

50

【化 1 4 0】



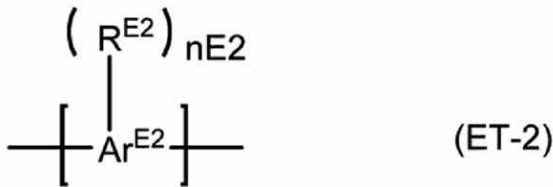
10

[式中、 M^+ は、 Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 、 Cs^+ 又は $\text{N}(\text{CH}_3)_4^+$ を表す。 M^+ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

20

【0 4 0 9】

【化 1 4 1】



[式中、

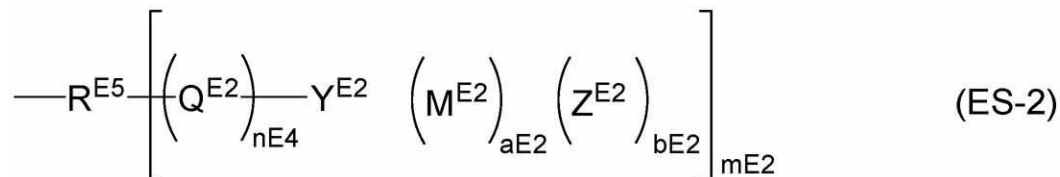
$n\text{E}2$ は、1以上の整数を表す。

30

$\text{Ar}^{\text{E}2}$ は、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は $\text{R}^{\text{E}2}$ 以外の置換基を有していてもよい。

$\text{R}^{\text{E}2}$ は、式(ES-2)で表される基を表す。 $\text{R}^{\text{E}2}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

【化 1 4 2】



40

[式中、

$n\text{E}4$ は0以上の整数を表し、 $a\text{E}2$ は1以上の整数を表し、 $b\text{E}2$ は0以上の整数を表し、 $m\text{E}2$ は1以上の整数を表す。 $n\text{E}4$ 、 $a\text{E}2$ 及び $b\text{E}2$ が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。但し、 $\text{R}^{\text{E}5}$ が単結合である場合、 $m\text{E}2$ は1である。また、 $a\text{E}2$ 及び $b\text{E}2$ は、式(ES-2)で表される基の電荷が0となるように選択される。

$\text{R}^{\text{E}5}$ は、単結合、炭化水素基、複素環基又は $-\text{O}-\text{R}^{\text{E}5}$ 、 $-\text{R}^{\text{E}5}$ を表し($\text{R}^{\text{E}5}$ は、炭化水素基又は複素環基を表す。)、これらの基は置換基を有していてもよい。

$\text{Q}^{\text{E}2}$ は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、酸素原子又は硫黄原子

50

を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Q^{E2} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Y^{E2} は、 $-C^+R^{E6}2$ 、 $-N^+R^{E6}3$ 、 $-P^+R^{E6}3$ 、 $-S^+R^{E6}2$ 又は $-I^+R^{E6}2$ を表す。 R^{E6} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{E6} は、同一でも異なってもよい。 Y^{E2} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

M^{E2} は、 F^- 、 Cl^- 、 Br^- 、 I^- 、 OH^- 、 $B(R^{E7})4^-$ 、 $R^{E7}SO3^-$ 、 $R^{E7}COO^-$ 、 $BF4^-$ 、 $SbCl6^-$ 又は $SbF6^-$ を表す。 R^{E7} は、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

M^{E2} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Z^{E2} は、アルカリ金属カチオン又はアルカリ土類金属カチオンを表す。 Z^{E2} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

【0410】

$nE2$ は、通常1~4の整数であり、好ましくは1又は2である。

【0411】

Ar^{E2} で表される芳香族炭化水素基又は複素環基としては、1,4-フェニレン基、1,3-フェニレン基、1,2-フェニレン基、2,6-ナフタレンジイル基、1,4-ナフタレンジイル基、2,7-フルオレンジイル基、3,6-フルオレンジイル基、2,7-フェナントレンジイル基又は2,7-カルバゾールジイル基から、環を構成する原子に直接結合する水素原子 $nE2$ 個を除いた基が好ましく、 R^{E2} 以外の置換基を有していてもよい。

【0412】

Ar^{E2} が有していてもよい R^{E2} 以外の置換基としては、 Ar^{E1} が有していてもよい R^{E1} 以外の置換基と同様である。

【0413】

$nE4$ は、通常0~10の整数であり、好ましくは0~8の整数であり、より好ましくは0~2の整数である。

【0414】

$aE2$ は、通常1~10の整数であり、好ましくは1~5の整数であり、より好ましくは1又は2である。

【0415】

$bE2$ は、通常0~10の整数であり、好ましくは0~4の整数であり、より好ましくは0又は1である。

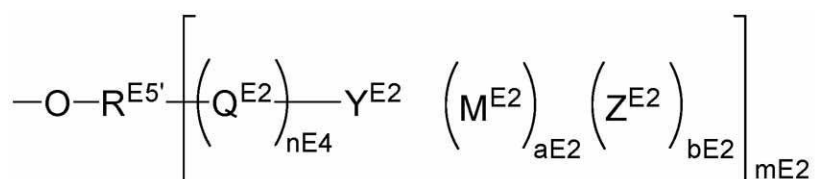
【0416】

$mE2$ は、通常1~5の整数であり、好ましくは1又は2であり、より好ましくは0又は1である。

【0417】

R^{E5} が $-O-R^{E5}$ の場合、式(ES-2)で表される基は、下記で表される基である。

【化143】



【0418】

R^{E5} としては、炭化水素基又は複素環基が好ましく、芳香族炭化水素基又は芳香族複素環基がより好ましく、芳香族炭化水素基が更に好ましい。

【0419】

10

20

30

40

50

R^{E5} が有していてもよい置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基及び式 (ES-3) で表される基が挙げられ、式 (ES-3) で表される基が好ましい。

【0420】

Q^{E2} としては、アルキレン基、アリーレン基又は酸素原子が好ましく、アルキレン基又は酸素原子がより好ましい。

【0421】

Y^{E2} としては、 $-C^+R^{E6}2$ 、 $-N^+R^{E6}3$ 、 $-P^+R^{E6}3$ 又は $-S^+R^{E6}2$ が好ましく、 $-N^+R^{E6}3$ がより好ましい。 R^{E6} としては、水素原子、アルキル基又はアリール基が好ましく、水素原子又はアルキル基がより好ましい。

10

【0422】

M^{E2} としては、 F^- 、 Cl^- 、 Br^- 、 I^- 、 $B(R^{E7})4^-$ 、 $R^{E7}SO3^-$ 、 $R^{E7}COO^-$ 、 $BF4^-$ 又は $SbF6^-$ が好ましく、 Br^- 、 I^- 、 $B(R^{E7})4^-$ 、 $R^{E7}COO^-$ 又は $SbF6^-$ がより好ましい。 R^{E7} としては、アルキル基が好ましい。

【0423】

Z^{E2} で表されるアルカリ金属カチオンとしては、例えば、 Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 、 Rb^+ 、 Cs^+ が挙げられ、 Li^+ 、 Na^+ 又は K^+ が好ましい。

【0424】

Z^{E2} で表されるアルカリ土類金属カチオンとしては、例えば、 Be^{2+} 、 Mg^{2+} 、 Ca^{2+} 、 Sr^{2+} 、 Ba^{2+} が挙げられ、 Mg^{2+} 又は Ca^{2+} が好ましい。

20

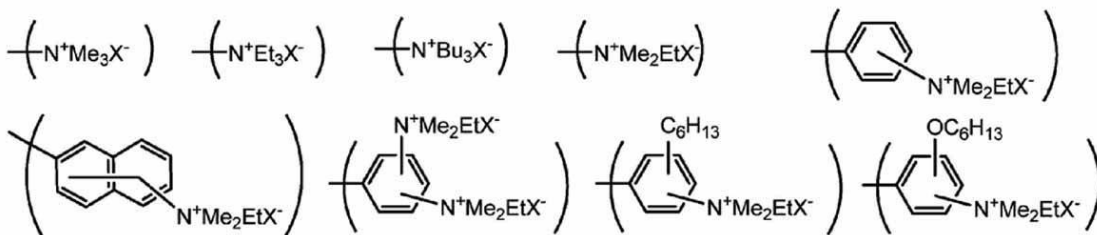
【0425】

Z^{E2} としては、アルカリ金属カチオンが好ましい。

【0426】

式 (ES-2) で表される基としては、例えば、下記式で表される基が挙げられる。

【化144】

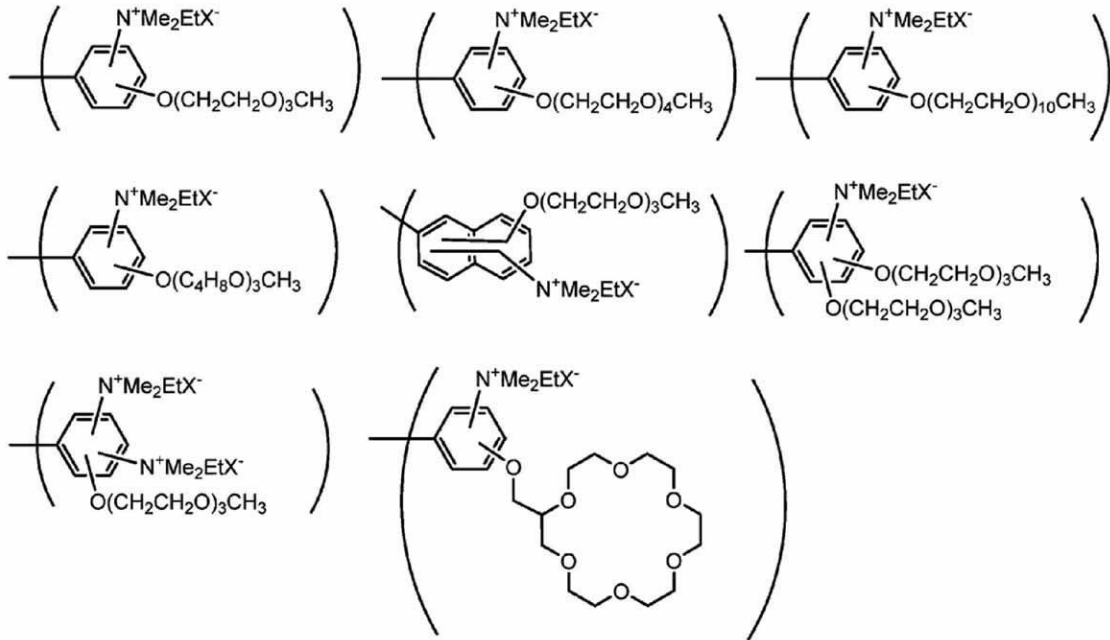


30

40

50

【化 1 4 5】



10

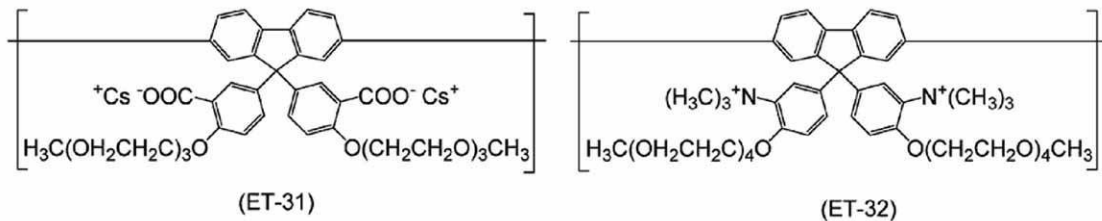
[式中、 X^- は、 F^- 、 Cl^- 、 Br^- 、 I^- 、 $B(C_6H_5)_4^-$ 、 CH_3COO^- 又は $CF_3SO_3^-$ を表す。 X^- が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

20

【 0 4 2 7】

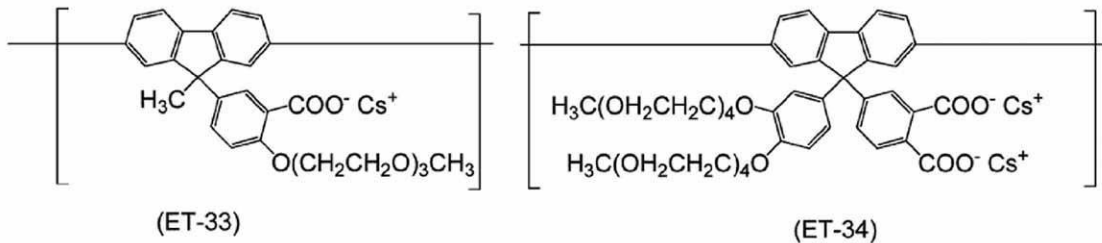
式 (ET-1) 又は (ET-2) で表される構成単位としては、例えば、式 (ET-31) ~ (ET-38) で表される構成単位が挙げられる。

【化 1 4 6】



30

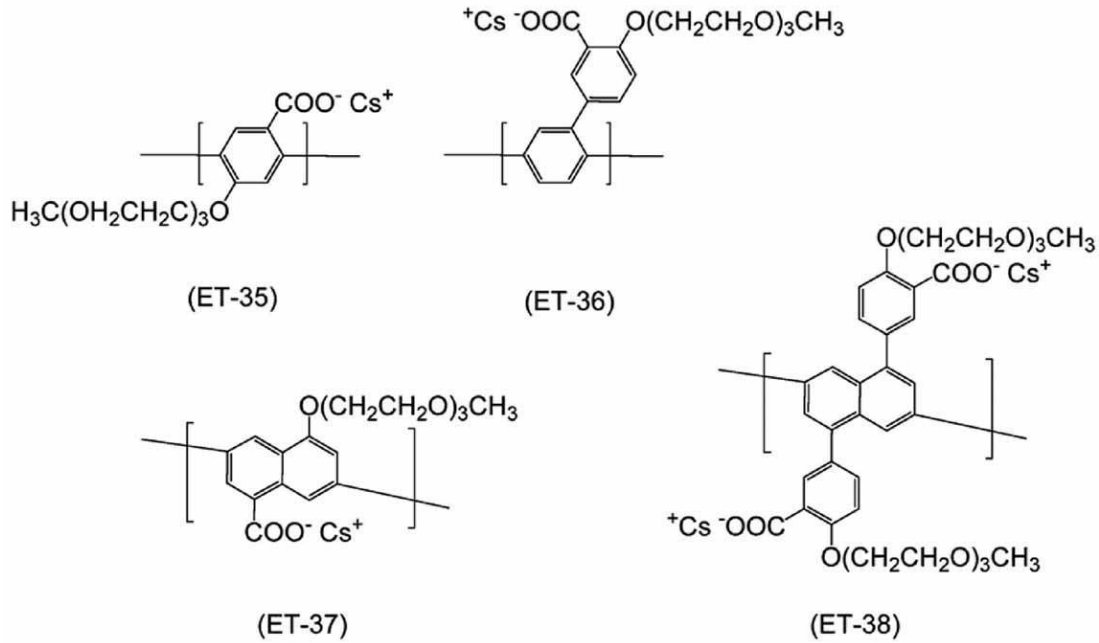
【化 1 4 7】



40

50

【化148】



10

【0428】

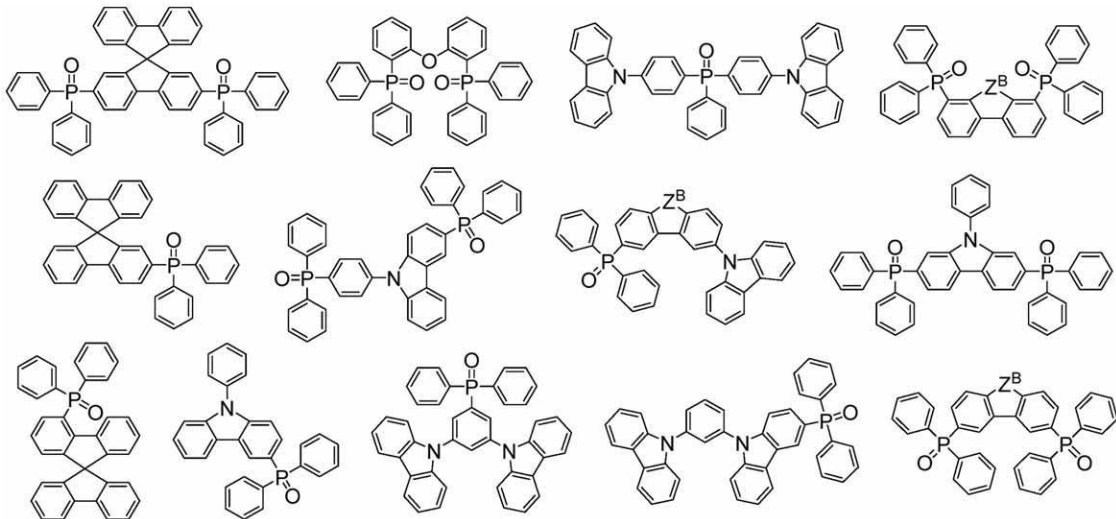
電子輸送層の高分子化合物は、例えば、特開2009-239279号公報、特開2012-033845号公報、特開2012-216821号公報、特開2012-216822号公報、特開2012-216815号公報に記載の方法に従って合成することができる。

20

【0429】

電子輸送層に含有される低分子化合物としては、フォスフィンオキシド基を有する低分子化合物が好ましく、例えば、下記式で表される低分子化合物が挙げられる。

【化149】



30

40

[式中、Z^Bは前記と同じ意味を表す。]

【0430】

[基板 / 電極]

本実施形態の発光素子は基板を有していてもよい。発光素子における基板は、電極を形成することができ、かつ、有機層（例えば、発光層、正孔輸送層、正孔注入層、電子輸送層、電子注入層等）を形成する際に化学的に変化しない基板であればよく、例えば、ガラス、プラスチック、シリコン等の材料からなる基板である。不透明な基板の場合には、基

50

板から最も遠くにある電極が透明又は半透明であることが好ましい。

【0431】

陽極の材料としては、例えば、導電性の金属酸化物及び半透明の金属が挙げられ、好ましくは、酸化インジウム、酸化亜鉛、酸化スズ；インジウム・スズ・オキサイド（ITO）、インジウム・亜鉛・オキไซด์等の導電性化合物；銀とパラジウムと銅との複合体（APC）；NESEA、金、白金、銀、銅である。

【0432】

陰極の材料としては、例えば、リチウム、ナトリウム、カリウム、ルビジウム、セシウム、ベリリウム、マグネシウム、カルシウム、ストロンチウム、バリウム、アルミニウム、亜鉛、インジウム等の金属；それらのうち2種以上の合金；それらのうち1種以上と、銀、銅、マンガン、チタン、コバルト、ニッケル、タングステン、錫のうち1種以上との合金；並びに、グラファイト及びグラファイト層間化合物が挙げられる。合金としては、例えば、マグネシウム - 銀合金、マグネシウム - インジウム合金、マグネシウム - アルミニウム合金、インジウム - 銀合金、リチウム - アルミニウム合金、リチウム - マグネシウム合金、リチウム - インジウム合金、カルシウム - アルミニウム合金等が挙げられる。

10

【0433】

陽極及び陰極は、各々、2層以上の積層構造としてもよい。

【0434】

[発光素子の用途]

本実施形態の発光素子は、例えば、照明、ディスプレイに有用である。

20

【0435】

以上、本発明の好適な実施形態について説明したが、本発明は上記実施形態に限定されるものではない。

【0436】

例えば、本発明の一側面は、組成物の製造方法に関するものであってよい。

【0437】

一態様において、組成物の製造方法は、式(1)で表される燐光発光性化合物を準備する工程と、窒素原子及びホウ素原子からなる群より選択される少なくとも1種の原子(a)を環内に含む縮合複素環骨格を有し、式(B)を満たし、且つ、最低三重項励起状態のエネルギー準位の値 T_F (eV)が、準備工程で準備した燐光発光性化合物の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値 T_P (eV)に対して式(A)を満たす、化合物(F)を選別する選別工程と、準備工程で準備した燐光発光性化合物と選別工程で選別した化合物(F)とを混合して組成物を得る製造工程と、を備える製造方法(以下、製造方法(1)ともいう。)であってよい。

30

【0438】

製造方法(1)の選別工程では、最低一重項励起状態のエネルギー準位の値 S_F (eV)が、準備工程で準備した燐光発光性化合物の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値 T_P (eV)に対して式(C)を満たすように、化合物(F)を更に選別してもよい。

【0439】

製造方法(1)は、準備工程で準備した燐光発光性化合物の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値 T_P (eV)を求める工程を更に含んでもよい。また、製造方法(1)は、化合物(F)の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値 T_F (eV)を求める工程を更に含んでもよい。また、製造方法(1)は、化合物(F)の最低一重項励起状態のエネルギー準位の値 S_F (eV)を求める工程を更に含んでもよい。

40

【0440】

他の一態様において、組成物の製造方法は、窒素原子及びホウ素原子からなる群より選択される少なくとも1種の原子(a)を環内に含む縮合複素環骨格を有し、式(B)を満たす化合物(F)を準備する準備工程と、式(1)で表される燐光発光性化合物であって、最低三重項励起状態のエネルギー準位の値 T_P (eV)が、準備工程で準備した化合物(F)の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値 T_F (eV)に対して式(A)を満た

50

す、燐光発光性化合物を選別する選別工程と、準備工程で準備した化合物 (F) と選別工程で選別した燐光発光性化合物とを混合して組成物を得る製造工程と、を備える製造方法 (以下、製造方法 (2) ともいう。) であってよい。

【 0 4 4 1 】

製造方法 (2) の選別工程では、最低三重項励起状態のエネルギー準位の値 T_p (e V) が、準備工程で準備した化合物 (F) の最低一重項励起状態のエネルギー準位の値 S_F (e V) に対して式 (C) を満たすように、燐光発光性化合物を更に選別してもよい。

【 0 4 4 2 】

製造方法 (2) は、準備工程で準備した化合物 (F) の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値 T_F (e V) を求める工程を更に含んでいてもよい。また、製造方法 (2) は、準備工程で準備した化合物 (F) の最低一重項励起状態のエネルギー準位の値 S_F (e V) を求める工程を更に含んでいてもよい。また、製造方法 (2) は、燐光発光性化合物の最低三重項励起状態のエネルギー準位の値 T_p (e V) を求める工程を更に含んでいてもよい。

10

【 0 4 4 3 】

本発明の更に他の一側面は、発光素子の製造方法に関するものであってよい。

【 0 4 4 4 】

一態様において、発光素子の製造方法は、陽極と、陰極と、陽極及び陰極の間に設けられた有機層とを含む発光素子の製造方法であってよく、この製造方法は、上述の製造方法 (例えば、製造方法 (1) 又は製造方法 (2)) により組成物を製造する工程と、該工程で製造された組成物を用いて、有機層を形成する工程と、を備えていてよい。

20

【 0 4 4 5 】

この態様において、有機層の形成方法としては、例えば、上述した膜の作製と同じ方法を用いて形成することができる。また、本態様の発光素子の製造方法では、上述した < 発光素子 > の項で説明した製造方法を用いてもよい。また、本態様の発光素子の製造方法により得られる発光素子としては、例えば、上述した < 発光素子 > の項で説明した発光素子が挙げられる。

【 実施例 】

【 0 4 4 6 】

以下、実施例によって本発明を更に詳細に説明するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。

30

【 0 4 4 7 】

実施例において、高分子化合物のポリスチレン換算の数平均分子量 (M_n) 及びポリスチレン換算の重量平均分子量 (M_w) は、移動相にテトラヒドロフランを用い、下記のサイズエクスクルージョンクロマトグラフィー (SEC) により求めた。

測定する高分子化合物を約 0 . 0 5 質量 % の濃度でテトラヒドロフランに溶解させ、SEC に 1 0 μ L 注入した。移動相は、1 . 0 m L / 分の流量で流した。カラムとして、P L g e l M I X E D - B (ポリマーラポラトリーズ製) を用いた。検出器には UV - V I S 検出器 (東ソー製、商品名 : UV - 8 3 2 0 G P C) を用いた。

実施例において、化合物の S_1 準位及び T_1 準位の値の算出は、量子化学計算プログラムとしては G a u s s i a n 0 9 を用いて行った。基底関数として、イリジウム以外の原子には 6 - 3 1 G * を用い、イリジウム原子には 1 a n 1 2 d z を用いた。化合物の基底状態の構造最適化を密度汎関数法 (B 3 L Y P 法) にて行い、得られた最適構造を用いて S_1 及び T_1 準位のエネルギーを時間依存密度汎関数法 (B 3 L Y P 法) にて求めた。

40

実施例において、化合物の P_L , R_T 及び発光スペクトルの半値幅 (以下、「 F W H M 」ともいう。) は、分光光度計 (日本分光株式会社製、F P - 6 5 0 0) により室温にて測定した。化合物をキシレンに、約 8×10^{-4} 質量 % の濃度で溶解させたキシレン溶液を試料として用いた。励起光としては、波長 3 2 5 n m の紫外 (UV) 光を用いた。

実施例において、化合物の A_{BS} , R_T は、紫外可視分光光度計 (バリアン社製、C a r y 5 E) により室温にて測定した。化合物をキシレンに、約 8×10^{-4} 質量 % の濃度

50

で溶解させたキシレン溶液を試料として用いた。

【 0 4 4 8 】

< 化合物 H 1、E 1、P 1 ~ P 9、F 1 ~ F 7 の入手及び合成 >

化合物 H 1、E 1、P 1、P 6、P 7 及び F 1 は、L u m i n e s c e n c e T e c h n o l o g y 社製を用いた。

化合物 P 2 は、国際公開第 2 0 1 7 / 1 3 0 9 7 7 号に記載の方法に準じて合成した。

化合物 P 3 は、特開 2 0 1 3 - 1 4 7 4 5 1 号公報に記載の方法に準じて合成した。

化合物 P 4 は、国際公開第 2 0 1 7 / 1 7 0 9 1 6 号に記載の方法に準じて合成した。

化合物 P 5 は、下記の方法で合成した。

化合物 P 8 は、特開 2 0 1 3 - 2 3 7 7 8 9 号公報に記載の方法に準じて合成した。

化合物 P 9 は、国際公開第 2 0 0 9 / 1 3 1 2 5 5 号に記載の方法に準じて合成した。

化合物 F 2 は、下記の方法で合成した。

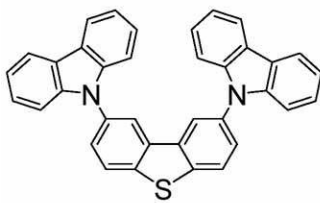
化合物 F 3 及び F 4 は、国際公開第 2 0 1 5 / 1 0 2 1 1 8 号に記載の方法に準じて合成した。

化合物 F 5 は、下記の方法で合成した。

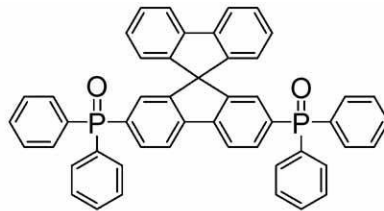
化合物 F 6 は、東京化成工業株式会社製を用いた。

化合物 F 7 は、J . P h y s . C h e m . B 2 0 0 5 , 1 0 9 , 1 6 , 8 0 0 8 - 8 0 1 6 に記載の方法に準じて合成した。

【 化 1 5 0 】

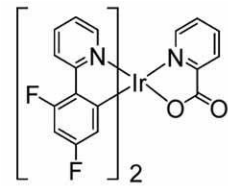


H1

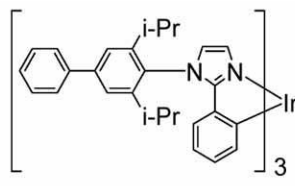


E1

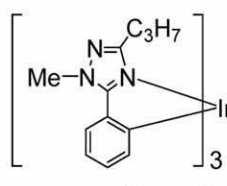
【 化 1 5 1 】



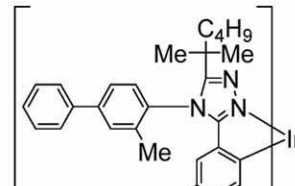
P1



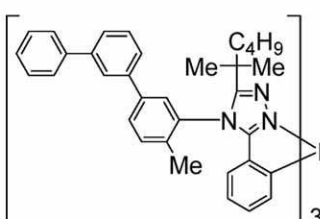
P2



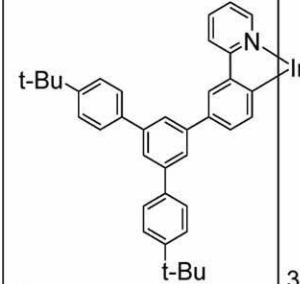
P3



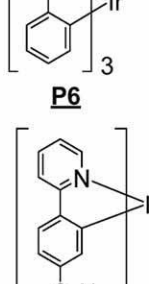
P4



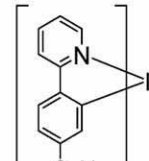
P5



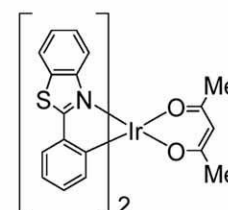
P9



P6



P8



P7

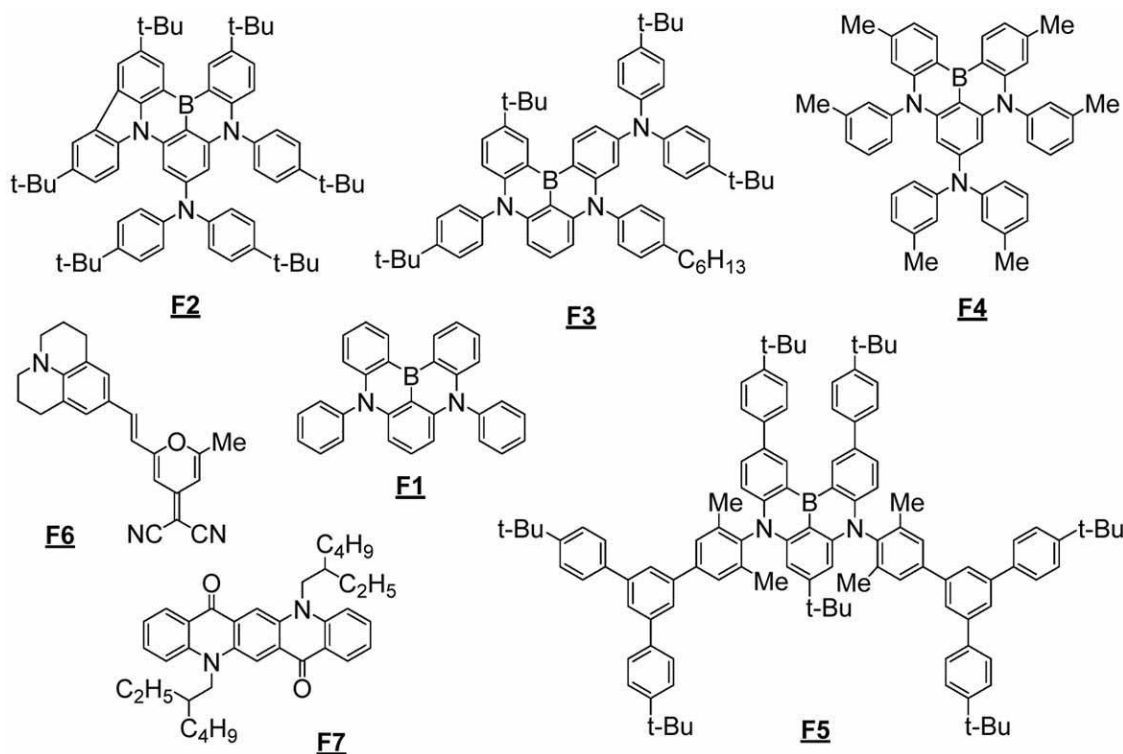
20

30

40

50

【化 1 5 2】



10

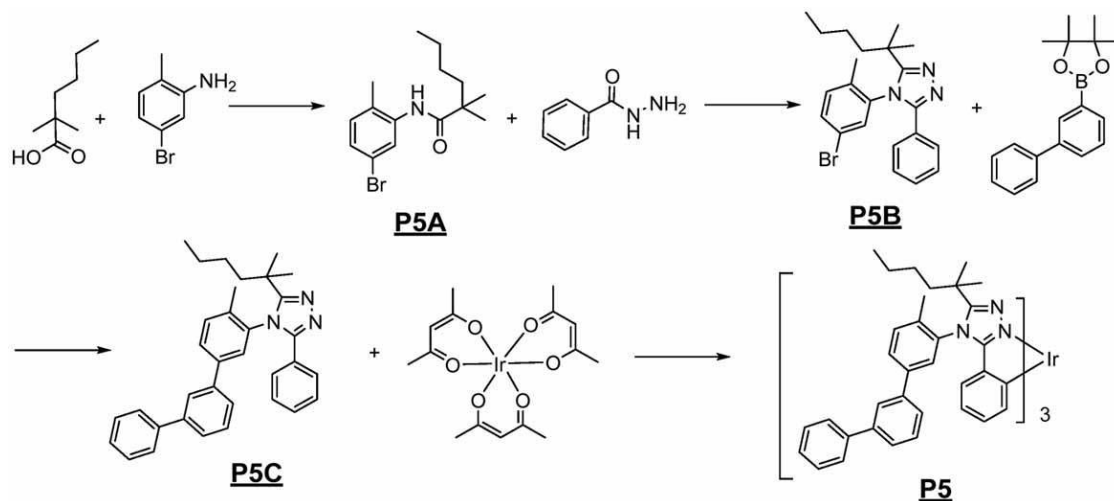
20

【 0 4 4 9】

< 合成例 P 5 > 化合物 P 5 の合成

下記の方法で、化合物 P 5 を合成した。

【化 1 5 3】



30

40

【 0 4 5 0】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、2, 2'-ジメチルヘキサ酸 (23.8 g)、クロロホルム (143 mL)、及び、N, N'-ジメチルホルムアミド (0.12 g) を加え、50 で攪拌した。そこに塩化チオニル (21.6 g) を滴下し、50 で3時間攪拌し2, 2'-ジメチルヘキサノイルクロライドを発生させた。

別途用意した反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、5-ブロモ-2-メチルアニリン (29.3 g)、クロロホルム (293 mL)、及び、トリエチルアミン (21.9 mL) を加え、攪拌した。その後、反応容器を氷浴を用いて冷却し、そこに上記で調製した2, 2'-ジメチルヘキサノイルクロライドを滴下した。滴下後、室温で2.5時間攪拌を継続し、その後、1 mol/L 炭酸ナトリウム水溶液 (165 mL) を加え室温で攪拌した

50

。分液し、得られた有機層に1 mol/L塩酸(83 mL)を加え室温で攪拌した。分液し、イオン交換水で洗浄した。得られた洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。得られたろ液を減圧濃縮した後、ヘプタンを用いて2回再結晶を行い、40℃で減圧乾燥させることで化合物P5A(39 g、白色固体)を収率76%で得た。化合物P5AのHPLC面積百分率値は98.7%であった。

化合物P5AのNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) (ppm) = 8.06 (1H, d), 7.25 - 7.11 (2H, m), 7.04 (1H, d), 2.17 (3H, s), 1.60 - 1.53 (2H, m), 1.32 - 1.22 (10H, m), 0.87 (3H, s).
【0451】

10

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、化合物P5A(25 g)、モノクロロベンゼン(200 mL)、2-フルオロピリジン(7.6 mL)及びトリフルオロメタンスルホン酸無水物(15 mL)を加え、室温下で30分攪拌した。そこへ、ベンゾイルヒドラジン(12 g)を加え、90℃で3.5時間攪拌した。その後、そこへイオン交換水(250 mL)を加えて有機層を洗浄した。分液後、得られた有機層に1 mol/L炭酸水素ナトリウム水溶液(66 mL)を加え有機層を抽出し、得られた有機層をイオン交換水で洗浄した。得られた有機層を減圧濃縮することで油状物を得た。得られた油状物にクロロホルムとTHFの混合溶媒(体積比8:2、50 mL)を加え溶解させた後、シリカゲルを敷いたろ過器でろ過して得られたろ液を減圧濃縮した。その後、ヘプタンを用いて再結晶し、50℃で減圧乾燥させることにより、化合物P5B(27.3 g)を白色固体として収率83%で得た。化合物P5BのHPLC面積百分率値は99.1%であった。

20

化合物P5BのNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) (ppm) = 7.58 - 7.50 (2H, m), 7.35 - 7.22 (5H, m), 7.12 - 7.07 (1H, d), 1.71 (3H, s), 1.67 - 1.57 (1H, m), 1.45 - 1.07 (11H, m), 0.88 (3H, t).
【0452】

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、化合物P5B(7.0 g)、2-([1,1'-ピフェニル]-3-イル)-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン(5.2 g)、及び、トルエンを加え室温で攪拌した。そこに、ビス(ジ-tert-ブチル(4-ジメチルアミノピフェニル)ホスフィン)ジクロロパラジウム(60 mg)を加え、80℃に加熱した。その後、40質量%テトラブチルアンモニウム水溶液(66 g)を滴下し、80℃で16時間攪拌した。その後、反応容器を室温まで冷却し、分液した。得られた有機層をイオン交換水で洗浄した。得られた洗浄液を分液し、得られた有機層をイオン交換水で洗浄した。得られた洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。得られたろ液に活性炭を加え、室温で30分間攪拌した後、セライトを敷いたろ過器でろ過した。得られたろ液を減圧濃縮した後、トルエンと酢酸エチルの混合溶媒(体積比9:1)を用いてシリカゲルカラム精製を行った。その後、ヘプタンと2-プロパノールの混合溶媒(体積比5:1)を用いて再結晶を3回行い、50℃で減圧乾燥させることで化合物P5C(5.5 g、白色固体)を収率66%で得た。化合物P5CのHPLC面積百分率値は99.5%以上であった。

30

40

化合物P5CのLC-MS及びNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

LC-MS (APCI, positive): m/z = 542 [M+H]⁺
 $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) (ppm) = 7.82 (1H, t), 7.73 - 7.71 (2H, m), 7.64 - 7.57 (4H, m), 7.53 (1H, t), 7.45 (2H, t), 7.40 - 7.33 (3H, m), 7.32 - 7.25 (2H, m), 7.22 (2H, t), 1.80 (3H, s), 1.78 - 1.67 (1H, m), 1.52 - 1.42 (1H, m), 1.37 (3H, s), 1.35 - 1.16 (4H, m), 1.14 (3H, s), 0.82 (3H, t).
【0453】

50

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、トリスアセチルアセトナトイリジウム（1.2 g）、化合物 P 5 C（5.0 g）及びペンタデカン（25 mL）を加え、加熱還流下で55時間攪拌した。その後、そこへ、トルエンを加え、シリカゲルを敷いたろ過器でろ過した後、トルエン及び酢酸エチルの混合溶媒を用いて金属錯体 P 5 を含む黄色溶液を抽出した。得られた溶液を減圧濃縮することで固体を得た後、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（トルエン及び酢酸エチルの混合溶媒）で精製することにより、固体を得た。得られた固体をトルエン及びアセトニトリルの混合溶媒を用いての再結晶、並びに、トルエン及びエタノールの混合溶媒を用いての再結晶を複数回繰り返し、50で減圧乾燥させることにより化合物 P 5（3.5 g、黄色固体）を収率82%で得た。化合物 P 5 の H P L C 面積百分率値は96%であった。

10

化合物 P 5 の L C - M S 及び N M R の測定結果は、以下のとおりであった。

L C - M S (A P P I , p o s i t i v e) : m / z = 1 6 4 5 . 8 [M + H] ⁺
¹ H - N M R (4 0 0 M H z , C D ₂ C l ₂) (p p m) = 7 . 8 9 - 7 . 6 9 (9 H , m) , 7 . 6 7 - 7 . 3 1 (2 7 H , m) , 6 . 9 9 - 6 . 3 8 (9 H , m) , 6 . 1 2 - 6 . 1 0 (3 H , m) , 2 . 2 3 - 1 . 8 2 (9 H , m) , 1 . 4 7 - 0 . 8 4 (3 6 H , m) , 0 . 7 8 - 0 . 4 6 (9 H , m) .

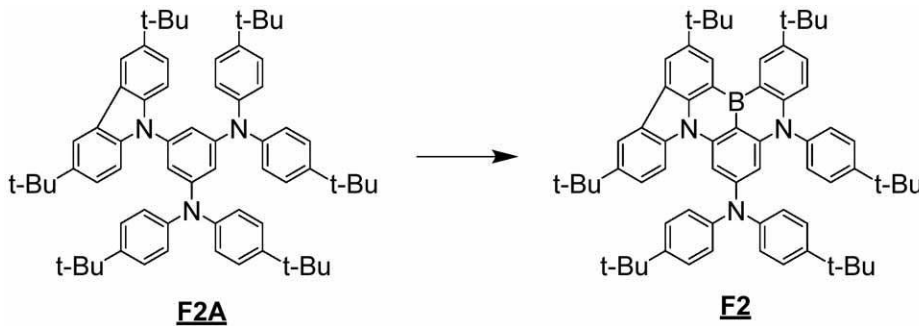
【 0 4 5 4 】

< 合成例 F 2 > 化合物 F 2 の合成

下記の方法で、化合物 F 2 を合成した。

【 化 1 5 4 】

20



【 0 4 5 5 】

30

反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、アンゲヴァンテ・ケミー・インターナショナル・エディション (Angewandte Chemie , International Edition) , 2018年, 第57巻, 11316 - 11320頁に記載の方法で合成した化合物 F 2 A (22.5 g) とクロロベンゼンを加え攪拌したところに、三ヨウ化ホウ素 (16.4 g) を加え、90 で6時間加熱攪拌した。その後、室温まで冷却し、N, N - ジイソプロピルエチルアミン (14.3 mL) を滴下し、室温で15分攪拌を継続した。得られた溶液に10質量%亜硫酸ナトリウム水溶液 (70 mL) を加えた。以上の操作を二度繰り返し、得られた有機層を混合し、10質量%亜硫酸ナトリウム水溶液及びイオン交換で洗浄した。得られた洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、フロリジル 45 g を積んだ濾過器でろ過した。得られたろ液を濃縮した後、そこにアセトニトリル (340 mL) を加え、1時間攪拌し、得られた固体を濾過した。得られた固体をトルエン (790 mL) に溶解させた。得られた溶液にカルボラフィン (33 g) を加えて1時間攪拌した後、セライトを敷いた濾過器で濾過をする操作を3回行った。得られた溶液を減圧濃縮し、得られた固体をトルエン及びアセトニトリルの混合溶媒、トルエン及びエタノールの混合溶媒を用いて複数回再結晶し、50で減圧乾燥させることで化合物 F 2 (30.9 g、黄色固体) を得た。

40

化合物 F 2 の L C - M S 及び N M R の測定結果は、以下のとおりであった。

L C - M S (A P C I , p o s i t i v e) : m / z = 9 2 2 [M + H] ⁺
¹ H - N M R (C D C l ₃ , 4 0 0 M H z) (p p m) = 9 . 0 5 (d , 1 H) , 9 . 0 0 (d , 1 H) , 8 . 3 2 (d , 1 H) , 8 . 1 5 (d , 1 H) , 7 . 5 2 (t d , 2

50

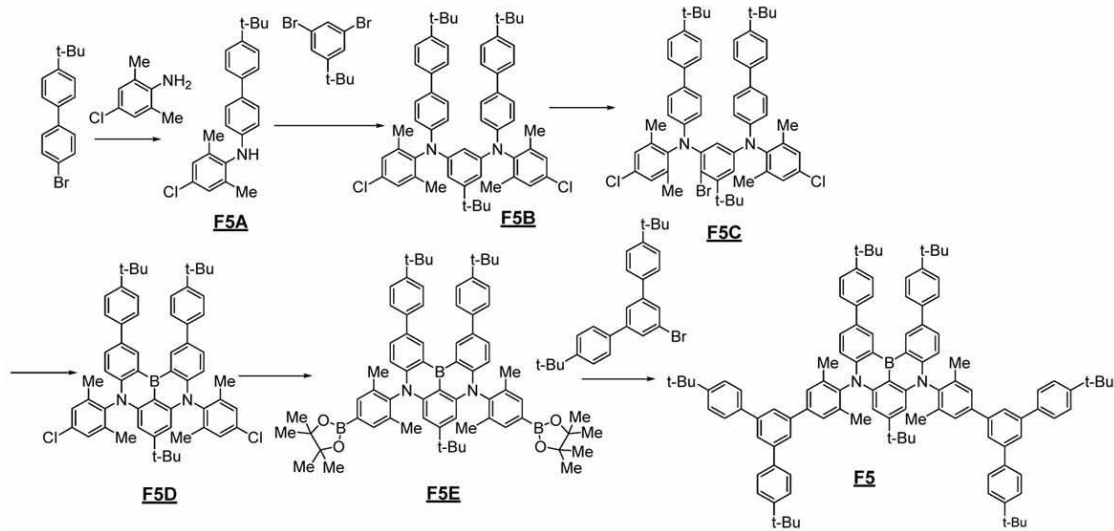
H), 7.43 (d, 1H), 7.38 (d, 1H), 7.32 - 7.22 (m, 6H), 7.20 (td, 2H), 7.13 (td, 4H), 6.65 (d, 1H), 6.16 (d, 1H), 1.62 (s, 9H), 1.48 (s, 9H), 1.43 (s, 9H), 1.36 (s, 18H), 1.34 (s, 9H).

【0456】

<合成例F5> 化合物F5の合成

下記の方法で、化合物F5を合成した。

【化155】



10

20

【0457】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、4-ブロモ-4'-tert-ブチルビフェニル (30g)、4-クロロ-2,6-ジメチルアニリン (17.76g)、Pd₂(dba)₃(dba)_{0.92} (0.88g)、t-Bu₃PHBF₄ (0.95g)、t-BuONa (14.95g)、及びトルエン (900mL) を加え、50 で4時間撹拌した。その後、室温まで冷却し、反応液をシリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過した。ろ液を減圧濃縮することにより粗生成物を得た。この粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (ヘキサン及びトルエンの混合溶媒) により精製した後、減圧濃縮した。その後、トルエン及びイソプロピルアルコールの混合液で再結晶した後乾燥させることにより、化合物F5A (25.2g、白色固体) を得た。化合物F5AのHPLC面積百分率値は99%であった。

30

化合物F5AのNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

¹H-NMR (CD₂Cl₂-d₂, 400MHz): (ppm) = 7.44 - 7.36 (m, 6H), 7.11 (s, 2H), 6.52 (td, 2H), 5.26 (br, 1H), 2.18 (s, 6H), 1.31 (s, 9H)

【0458】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物F5A (24.30g)、1,3-ジブロモ-5-tert-ブチルベンゼン (9.7g)、Pd₂(dba)₃(dba)_{0.92} (0.56g)、t-Bu₃PHBF₄ (0.60g)、t-BuONa (7.98g)、及びトルエン (291mL) を加え、50 で4時間撹拌した。その後、室温まで冷却し、反応液をシリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過した。ろ液を減圧濃縮することにより粗生成物を得た。この粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (ヘキサン及びトルエンの混合溶媒) により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物F5B (18.1g、白色固体) を得た。化合物F5BのHPLC面積百分率値は99%であった。

40

化合物F5BのNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

¹H-NMR (CD₂Cl₂-d₂, 400MHz): (ppm) = 7.47 - 7.45

50

(m , 4 H) , 7 . 4 1 - 7 . 3 8 (m , 8 H) , 7 . 0 9 (s , 4 H) , 6 . 9 2 (t d , 4 H) , 6 . 5 2 (d , 2 H) , 6 . 4 8 (t , 1 H) , 1 . 9 7 (s , 1 2 H) , 1 . 3 2 (s , 1 8 H) , 1 . 1 0 (s , 9 H) .

【 0 4 5 9 】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物 F 5 B (1 8 . 1 g) 及びクロロホルム (3 6 3 m L) を加え、0 まで冷却した後、そこに、N - プロモスクシンイミド (3 . 9 3 g) を分割して加え攪拌した。その後、亜硫酸ナトリウム水溶液で洗浄後、減圧濃縮した。その後、トルエン (1 8 0 m L) を加え、シリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過し、減圧濃縮した。その後、トルエン及びエタノールの混合液で再結晶した後乾燥させることにより、化合物 F 5 C (1 7 . 5 g 、白色固体) を得た。化合物 F 5 C の H P L C 面積百分率値は 9 9 % であった。

10

化合物 F 5 C の N M R の測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{CD}_2\text{Cl}_2 - d_2$, 4 0 0 M H z) : (p p m) = 7 . 4 9 - 7 . 3 3 (m , 1 4 H) , 7 . 0 6 (s , 2 H) , 6 . 9 9 (s , 2 H) , 6 . 8 8 (s , 1 H) , 6 . 8 4 (d , 2 H) , 6 . 6 5 (b r , 2 H) , 6 . 3 2 (s , 1 H) , 1 . 8 9 (s , 1 2 H) , 1 . 4 2 (s , 9 H) , 1 . 3 1 (s , 1 8 H) .

【 0 4 6 0 】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物 F 5 C 及びキシレン (4 2 9 . 5 m L) を加え、- 4 0 に冷却した後、そこに、sec - BuLi・シクロヘキサン溶液 (1 . 0 M , 1 8 . 3 m L) をゆっくりと加えた。反応液を - 1 0 で 1 時間攪拌した。その後、反応液を - 6 0 まで冷却し、 BBr_3 (3 . 5 7 m L) を加え、1 時間攪拌した。その後 9 0 まで徐々に昇温し反応させた。その後、反応液を室温まで冷却し、N , N - ジイソプロピルアミン (3 1 . 4 m L) 及びトルエン (2 5 8 m L) を加え、有機層を亜硫酸ナトリウム水溶液及びイオン交換水で洗浄した。得られた有機層を減圧濃縮することにより黄色固体を得た。得られた固体を、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (ヘキサン及びトルエンの混合溶媒) により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させた。その後、トルエン及びエタノールの混合液で再結晶した後乾燥させることにより、化合物 F 5 D (6 . 6 g 、黄色固体) を得た。化合物 F 5 D の H P L C 面積百分率値は 9 9 % であった。

20

化合物 F 5 D の N M R の測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{CD}_2\text{Cl}_2 - d_2$, 4 0 0 M H z) : (p p m) = 9 . 3 6 (d , 2 H) , 7 . 7 5 - 7 . 7 1 (m , 6 H) , 7 . 5 1 (d , 4 H) , 7 . 3 9 (s , 4 H) , 6 . 7 4 (d , 2 H) , 6 . 1 8 (s , 2 H) , 1 . 9 1 (s , 1 2 H) , 1 . 3 7 (s , 1 8 H) , 1 . 0 4 (s , 9 H) .

30

【 0 4 6 1 】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物 F 5 D (1 0 g) 、ビス (ピナコラト) ジボロン (5 . 7 2 g) 、酢酸カリウム (6 . 5 g) 、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3(\text{dba})_0.92$ (0 . 2 1 g) 、2 - ジシクロヘキシルホスフィノ - 2 ' , 4 ' , 6 ' - トリイソプロピルピフェニル (0 . 3 8 g) 、及び、シクロペンチルメチルエーテル (1 3 0 m L) 加え、4 5 時間加熱攪拌した。その後、トルエン (1 3 0 m l) を加え、セライトを敷いたろ過器でろ過し、得られたろ液を減圧濃縮し、アセトニトリルを加え、得られた固体をろ取した。その後、トルエン及び活性炭を加え、室温で 3 0 分攪拌した後、セライトを敷いたろ過器でろ過し、得られたろ液を減圧濃縮し、更にトルエン及びアセトニトリルの混合溶媒で再結晶することにより、化合物 F 5 E (5 . 8 g) を黄色固体として得た。化合物 F 5 E の H P L C 面積百分率値は 9 9 . 5 % 以上を示した。

40

化合物 F 5 E の N M R の測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{CD}_2\text{Cl}_2 - d_2$, 4 0 0 M H z) : (p p m) = 9 . 3 7 (d , 2 H) , 7 . 7 7 (s , 4 H) , 7 . 7 3 (d , 4 H) , 7 . 6 8 (d d , 2 H) , 7 . 5 1 (d , 4 H) , 6 . 6 8 (d , 2 H) , 6 . 1 9 (s , 2 H) , 1 . 9 3 (s , 1 2 H) , 1 . 3 8 - 1 . 3 7 (m , 4 2 H) , 1 . 0 0 (s , 9 H) .

【 0 4 6 2 】

50

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物 F 5 E (2 . 3 g)、2 - ブロモ - 4 , 6 - ジ (4 - tert - ブチルフェニル) ベンゼン (1 . 9 g)、Pd₂(dba)₃(dba)_{0.92}(0 . 0 2 g)、2 - ジシクロヘキシルホスフィノ - 2' , 6' - ジメトキシビフェニル (0 . 0 4 g)、トルエン (1 1 5 m l) 及び、40 質量%テトラブチルアンモニウムヒドロキシド水溶液 (7 . 1 g)、イオン交換水 (2 8 m l) 加え、1 時間加熱攪拌した。得られた反応液を室温まで冷却した後、イオン交換水 (4 0 m l) を加え、水層を除去した。得られた有機層をイオン交換水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥、ろ過し、得られたろ液を減圧濃縮した。トルエン及び活性炭を加え、室温で 3 0 分攪拌した後、セライトを敷いたろ過器でろ過し、得られたろ液を減圧濃縮した。トルエン及びアセトニトリルの混合溶媒で再結晶することにより、化合物 F 5 (3 . 0 g) を黄色固体として得た。化合物 F 5 の H P L C 面積百分率値は 9 9 . 0 % 以上を示した。

10

化合物 F 5 の LC - MS 及び NMR の測定結果は、以下のとおりであった。

LC - MS (A P C I positive) : m / z = 1 4 7 6 . 9 [M + H] ⁺
¹H - NMR (C D ₂ C l ₂ - d ₂ , 4 0 0 M H z) : (p p m) = 9 . 4 6 (d , 2 H) , 7 . 9 8 (d , 4 H) , 7 . 8 8 (t , 2 H) , 7 . 7 4 - 7 . 8 2 (m , 1 8 H) , 7 . 5 4 - 7 . 5 9 (m , 1 2 H) , 6 . 9 4 (d , 2 H) , 6 . 3 5 (s , 2 H) , 2 . 0 7 (t , 1 2 H) , 1 . 3 4 - 1 . 4 5 (m , 5 4 H) , 1 . 0 4 - 1 . 0 8 (m , 9 H) .

【 0 4 6 3 】

< 化合物 H 2、P 1 0 ~ P 1 5、F 8 ~ F 1 1 の合成 >

20

化合物 H 2 は、特開 2 0 1 5 - 1 1 0 7 5 1 号公報に記載の方法に準じて合成した。

化合物 P 1 0 は、特開 2 0 1 3 - 1 4 7 5 5 1 号公報に記載の方法に準じて合成した。

化合物 P 1 1 ~ P 1 2 は、下記の方法で合成した。

化合物 P 1 3 は、国際公開 2 0 0 8 / 0 9 0 7 9 5 号及び国際公開 2 0 0 6 / 1 2 1 8 1 1 号に記載の方法に準じて合成した。

化合物 P 1 4 は、国際公開第 2 0 1 6 / 0 0 6 5 2 3 号に記載の方法に準じて合成した。

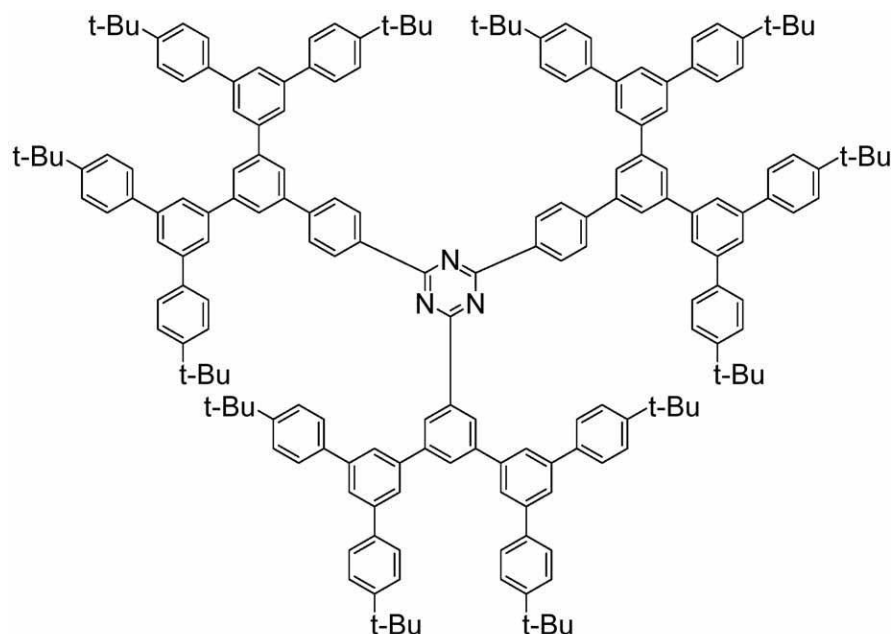
化合物 P 1 5 は、下記の方法で合成した。

化合物 F 8 ~ F 1 0 は、下記の方法で合成した。

化合物 F 1 1 は、Angew. Chem. Int. Ed. 2 0 2 0 , 5 9 , 1 7 4 4 2 - 1 7 4 4 6 に記載の方法に準じて合成した。

30

【 化 1 5 6 】

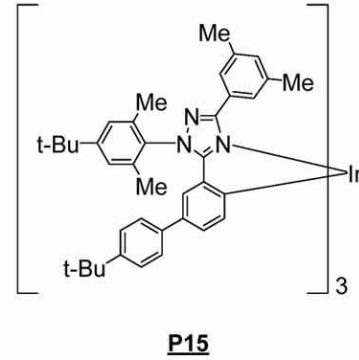
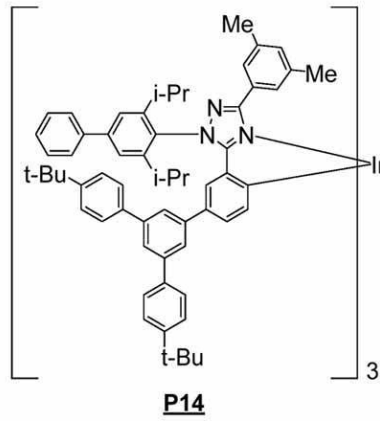
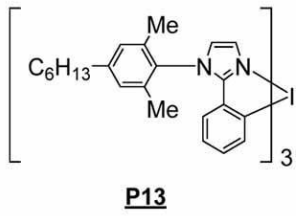
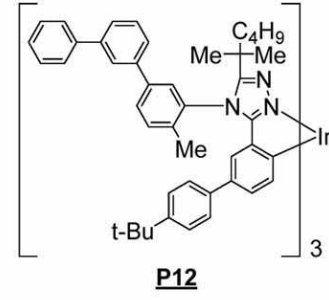
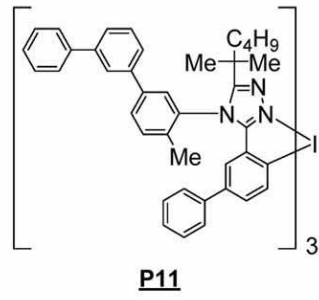
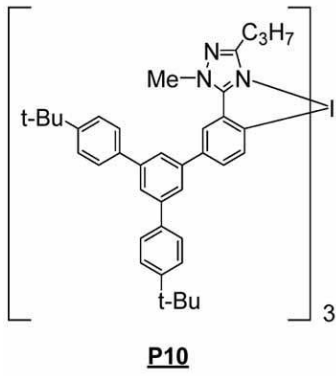


40

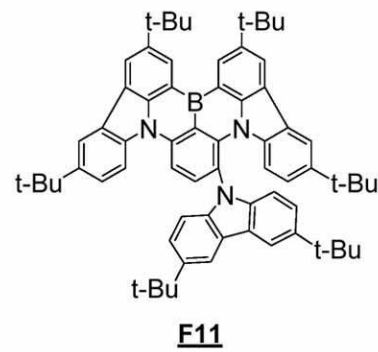
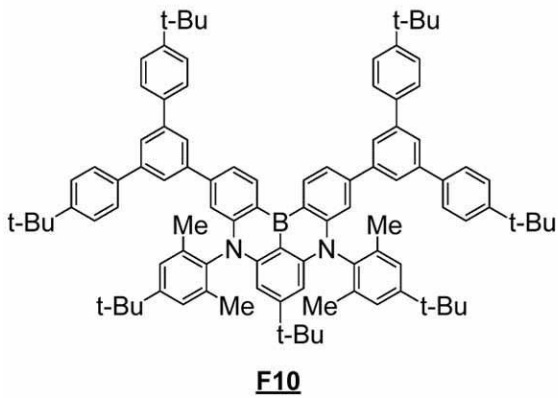
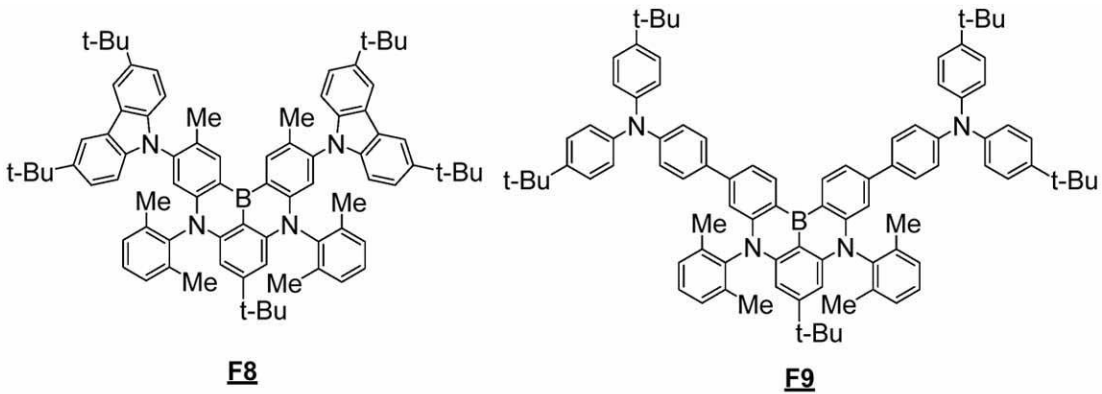
H2

50

【化 1 5 7】



【化 1 5 8】



【0 4 6 4】

<合成例 P 1 1> 化合物 P 1 1 の合成
下記の方法で、化合物 P 1 1 を合成した。

10

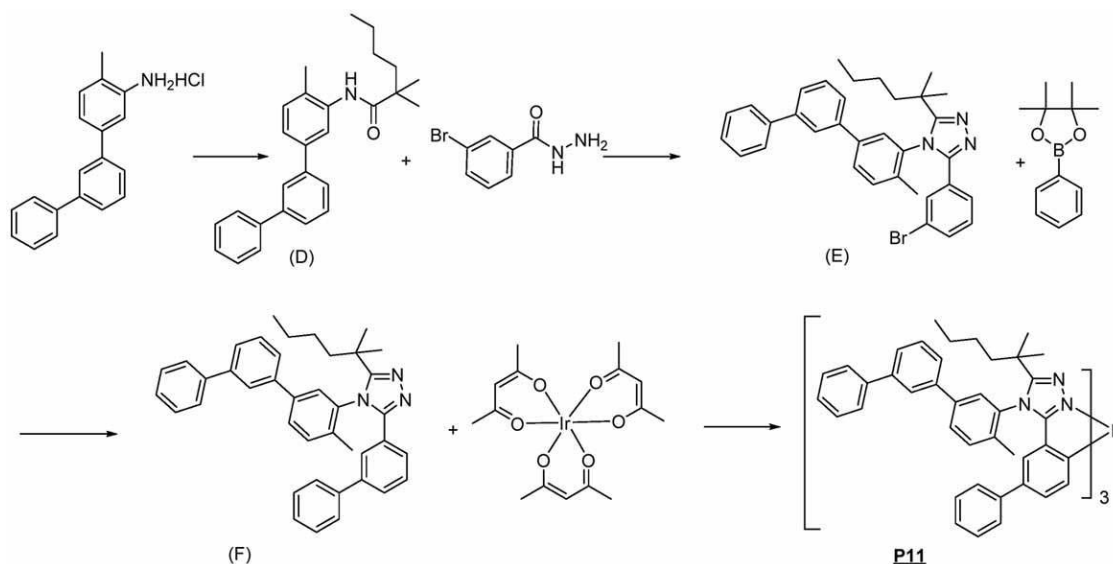
20

30

40

50

【化 1 5 9】



10

【 0 4 6 5】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、2, 2'-ジメチルヘキサノ酸 (11.8 g)、クロロホルム (60 mL)、及び、N, N'-ジメチルホルムアミド (0.07 g) を加え、50 で攪拌した。そこに塩化チオニル (11.3 g) を滴下し、50 で3時間攪拌し、2, 2'-ジメチルヘキサノイルクロライドを発生させた。

20

別途用意した反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、2-メチル-5-(3-フェニルフェニル)アニリン塩酸塩 (22.0 g)、クロロホルム (176 mL)、及び、トリエチルアミン (20.7 mL) を加え、攪拌した。その後、反応容器を氷浴を用いて冷却し、そこに上記で調製した2, 2'-ジメチルヘキサノイルクロライド溶液を滴下した。滴下後、室温で2.5時間攪拌を継続し、その後、1 mol/L炭酸ナトリウム水溶液 (82 mL) を加え、室温で攪拌した。得られた溶液を分液し、有機層に1 mol/L塩酸 (41 mL) を加え、室温で攪拌した。得られた溶液を分液し、イオン交換水で洗浄した。洗浄液を分液し、有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。ろ液を減圧濃縮した後、ヘプタンを用いて再結晶を行い、40 で減圧乾燥させることで、化合物 (D) (2.7 g、白色固体) を収率94%で得た。化合物 (D) のHPLC面積百分率値は99.5%以上であった。

30

化合物 (D) のNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz、 CDCl_3) (ppm) = 8.08 (1H, d), 7.91 (1H, t), 7.64 (2H, d), 7.57 (2H, t), 7.51 - 7.41 (3H, m), 7.38 - 7.31 (2H, m), 7.28 (1H, d), 7.24 (1H, br), 2.28 (3H, s), 1.60 (2H, m), 1.37 - 1.30 (10H, m), 0.88 (3H, t)。

【 0 4 6 6】

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、化合物 (D) (2.5 g)、モノクロロベンゼン (84 mL)、2-フルオロピリジン (2.6 mL) 及びトリフルオロメタンスルホン酸無水物 (5 mL) を加え、室温下で30分攪拌した。そこへ、3-プロモベンゾイルヒドラジン (6.4 g) を加え、90 で4.5時間攪拌した。その後、そこへイオン交換水 (105 mL) 及びヘプタン (105 mL) を加えて、有機層を洗浄した。分液後、得られた有機層に1 mol/L炭酸水素ナトリウム水溶液 (45 mL) を加え、有機層を抽出し、有機層をイオン交換水で洗浄した。得られた有機層を減圧濃縮することで油状物を得た。油状物にクロロホルムとTHFの混合溶媒 (体積比8:2、50 mL) を加え溶解させた後、シリカゲルを敷いたろ過器でろ過して得られたろ液を減圧濃縮した。その後、ヘプタンを用いて再結晶し、50 で減圧乾燥させることにより、化合物 (E) (1.4

40

50

． 3 g) を白色固体として収率 93 % で得た。化合物 (E) の H P L C 面積百分率値は 99 . 5 % 以上であった。

【 0 4 6 7 】

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、化合物 (E) (13 . 6 g)、2 - フェニル - 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン (5 . 4 g)、及び、トルエン (136 mL) を加え室温で攪拌した。そこに、[(ジ (1 - アダマンチル) - N - ブチルホスフィン) - 2 - (2 ' - アミノ - 1 , 1 ' - ビフェニル)] パラジウム (I I) メタンスルホン酸塩 (175 mg) を加え、80 に加熱した。その後、40 質量 % テトラブチルアンモニウム水溶液 (38 g) 及びイオン交換水 (56 mL) の混合液を滴下し、80 で 16 時間攪拌した。その後、反応容器を室温まで冷却し、反応液を分液した。得られた有機層をイオン交換水で洗浄した。洗浄液を分液し、得られた有機層をイオン交換水で洗浄した。洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。ろ液にシリカゲル (49 g) を加え、室温で 30 分間攪拌した後、セライトを敷いたろ過器でろ過した。クロロホルムとテトラヒドロフランの混合溶媒で、ろ上を洗浄した。得られたろ液を減圧濃縮した後、ヘプタンと 2 - プロパノールの混合溶媒 (体積比 8 : 1) を用いて再結晶を 3 回行い、50 で減圧乾燥させることで、化合物 (F) (12 . 2 g、白色固体) を収率 90 % で得た。化合物 (F) の H P L C 面積百分率値は 99 . 5 % 以上であった。

化合物 (F) の L C - M S 及び N M R の測定結果は、以下のとおりであった。

L C - M S (A P P I , p o s i t i v e) : m / z = 562 [M + H] ⁺
¹ H - N M R (400 M H z、C D C l ₃) (p p m) = 7 . 82 (2 H , t) , 7 . 75 (1 H , d) , 7 . 63 - 7 . 60 (4 H , m) , 7 . 59 - 7 . 53 (3 H , m) , 7 . 49 - 7 . 43 (3 H , m) , 7 . 38 - 7 . 33 (3 H , m) , 7 . 26 - 7 . 22 (5 H , m) , 1 . 80 - 1 . 73 (4 H , m) , 1 . 56 - 1 . 40 (4 H , m) , 1 . 35 - 1 . 18 (7 H , m) , 0 . 82 (3 H , t) .

【 0 4 6 8 】

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、トリスアセチルアセトナトイリジウム (2 . 2 g)、化合物 (F) (10 g) 及びペンタデカン (40 mL) を加え、加熱還流下で 67 時間攪拌した。その後、そこへ、トルエンを加え、シリカゲルを敷いたろ過器でろ過した後、トルエン及び酢酸エチルの混合溶媒を用いて化合物 P 11 を含む黄色溶液を抽出した。得られた溶液を減圧濃縮することで固体を得た後、固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (トルエン及び酢酸エチルの混合溶媒) で精製することにより、固体を得た。固体をトルエン及びアセトニトリルの混合溶媒を用いての再結晶、並びに、トルエン及びエタノールの混合溶媒を用いての再結晶を複数回繰り返し、50 で減圧乾燥させることにより化合物 P 11 (3 . 5 g、黄色固体) を収率 82 % で得た。化合物 P 11 の H P L C 面積百分率値は 99 . 5 % 以上であった。

化合物 P 11 の L C - M S 及び N M R の測定結果は、以下のとおりであった。

L C - M S (A P C I , p o s i t i v e) : m / z = 1874 . 9 [M + H] ⁺
¹ H - N M R (400 M H z、C D ₂ C l ₂) (p p m) = 7 . 93 - 7 . 68 (m , 9 H) , 7 . 65 - 7 . 28 (m , 27 H) , 7 . 21 - 7 . 04 (m , 15 H) , 7 . 00 - 6 . 71 (m , 6 H) , 6 . 40 - 6 . 25 (m , 3 H) , 2 . 33 - 1 . 82 (m , 9 H) , 1 . 80 - 1 . 54 (m , 3 H) , 1 . 48 - 0 . 80 (m , 33 H) , 0 . 79 - 0 . 32 (m , 9 H) .

【 0 4 6 9 】

< 合成例 P 12 > 化合物 P 12 の合成

下記の方法で、化合物 P 12 を合成した。

10

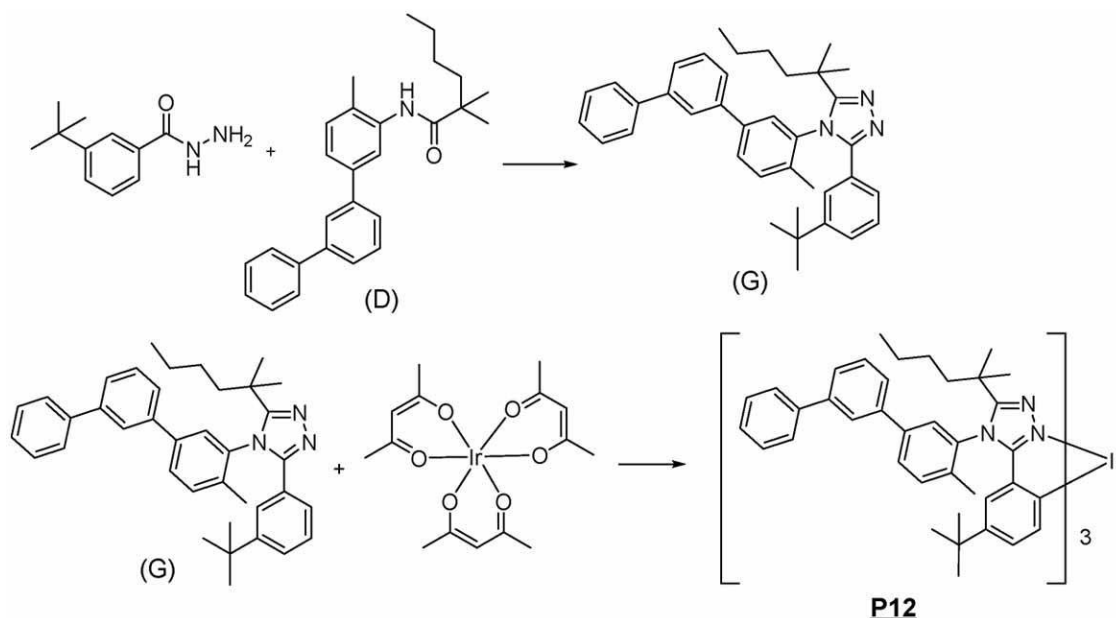
20

30

40

50

【化 1 6 0】



10

【0 4 7 0】

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、化合物 (D) (40 g)、モノクロロベンゼン (320 mL)、2-フルオロピリジン (9.8 mL) 及びトリフルオロメタンスルホン酸無水物 (19 mL) を加え、室温下で30分撹拌した。そこへ、3-tert-ブチルベンゾイルヒドラジン (22 g) を加え、90 で3.5時間撹拌した。その後、そこへイオン交換水 (360 mL) を加えて有機層を洗浄した。分液後、得られた有機層に1 mol/L 炭酸水素ナトリウム水溶液 (77 mL) を加え有機層を抽出し、有機層をイオン交換水で洗浄した。得られた有機層を減圧濃縮することで油状物を得た。油状物にクロロホルムとTHFの混合溶媒 (体積比8:2、90 mL) を加え、溶解させた後、シリカゲルを敷いたろ過器でろ過して得られたろ液を減圧濃縮した。その後、ヘプタンと2-プロパノールの混合溶媒 (体積比5:0.3、295 mL) を用いて再結晶し、50 で減圧乾燥させることにより、化合物 (G) (47.6 g) を白色固体として収率85%で得た。化合物 (G) のHPLC面積百分率値は99.9%であった。

20

化合物 (G) のNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz、 CD_2Cl_2) (ppm) = 7.79 (1H, t), 7.73 (1H, d), 7.68 (1H, dd), 7.65 - 7.58 (3H, m), 7.58 - 7.50 (2H, m), 7.48 - 7.40 (3H, m), 7.35 (1H, tt), 7.33 - 7.27 (2H, m), 7.23 - 7.18 (2H, m), 1.80 (3H, s), 1.78 - 1.68 (1H, m), 1.53 - 1.41 (1H, m), 1.38 (3H, s), 1.35 - 1.18 (4H, m), 1.16 (3H, s), 1.06 (9H, s), 0.81 (3H, t)。

TLC-MS (positive): $m/z = 542.3$ [M+H]⁺

40

【0 4 7 1】

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、トリスアセチルアセトナトイリジウム (1.5 g)、化合物 (G) (6.8 g) 及びペンタデカン (34 mL) を加え、加熱還流下で30時間撹拌した。その後、そこへ、トルエンを加え、シリカゲルを敷いたろ過器でろ過した後、トルエン及び酢酸エチルの混合溶媒を用いて化合物 P12 を含む黄色溶液を抽出した。得られた溶液を減圧濃縮することで固体を得た後、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (トルエン及び酢酸エチルの混合溶媒) で精製することにより、固体を得た。得られた固体をヘプタン及び2-プロパノールの混合溶媒を用いての再結晶を複数回繰り返し、50 で減圧乾燥させることにより化合物 P12 (4.3 g、黄色固体) を収率75%で得た。化合物 P12 のHPLC面積百分率値は94%であった。

50

化合物 P 1 2 の LC - MS 及び NMR の測定結果は、以下のとおりであった。

TLC - MS (positive) : $m/z = 1814.7 [M+H]^+$

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz、 CD_2Cl_2) (ppm) = 7.89 - 7.28 (7.2 H , m) , 6.95 - 6.30 (6 H , m) , 6.02 - 6.20 (3 H , m) , 2.23 - 0.50 (45 H , m) .

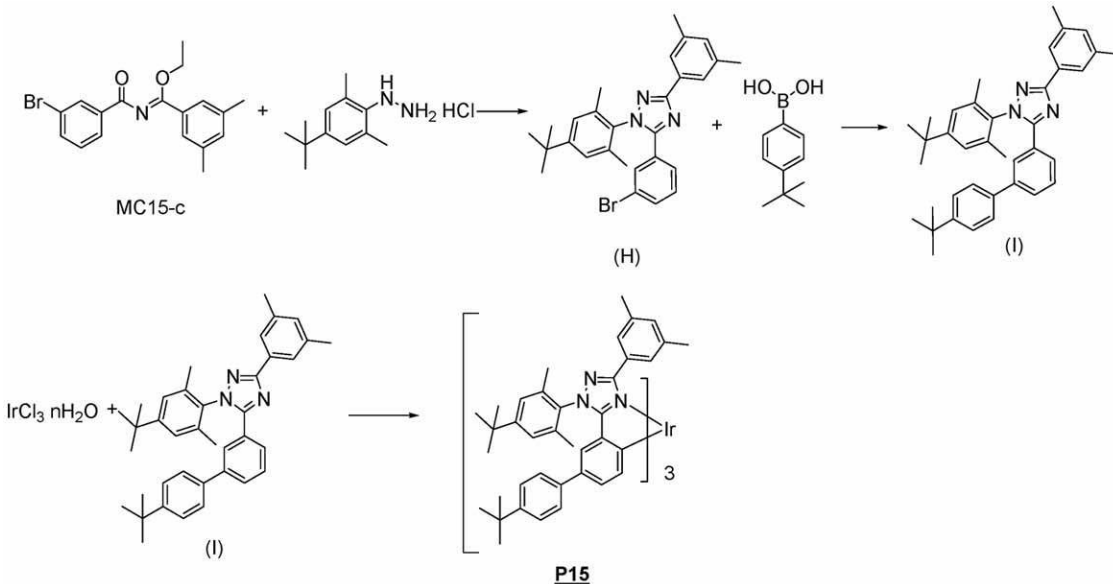
【 0 4 7 2 】

< 合成例 P 1 5 > 化合物 P 1 5 の合成

下記の方法で、化合物 P 1 5 を合成した。

【 0 4 7 3 】

【 化 1 6 1 】



【 0 4 7 4 】

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、2, 6 - ジメチル - 4 - tert - ブチルフェニルヒドラジン塩酸塩 (101 g) 及び tert - ブチルメチルエーテル (1070 mL) を加え、反応容器を氷浴に設置して冷却した。その後、そこへ、水酸化ナトリウム水溶液 (1 mol / L、1330 mL) を加え、反応容器を氷浴で冷却しながら30分間攪拌した。得られた反応液の有機層を抽出し、有機層である tert - ブチルメチルエーテル溶液を得た。

別途用意した反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、化合物 MC 1 5 - c (145 g) 及びクロロホルム (3200 mL) を加え、反応容器を氷浴に設置して冷却した。その後、そこへ、上記で得られた tert - ブチルメチルエーテル溶液を加えた。その後、反応容器を氷浴で冷却しながら7時間攪拌し、次いで、室温で70時間攪拌した。得られた反応液にイオン交換水 (3200 mL) を加え、有機層を抽出し、トルエン (500 mL) を加えて有機層を一部減圧濃縮し、トルエン溶液を得た。トルエン溶液をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (トルエン溶媒) で精製し、エタノールとメタノールの混合溶媒 (質量比 1 : 1) を用いて2回再結晶した後、50 で減圧乾燥させることにより、化合物 (H) (129 g、収率 66%) を白色固体として得た。化合物 (H) の HPLC 面積百分率値は 99.5% 以上であった。

LC - MS (ESI , positive) : $m/z = 542.4 [M+H]^+$

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 400 MHz) : (ppm) = 7.90 (2 H , s) , 7.80 (1 H , d) , 7.58 - 7.55 (1 H , m) , 7.48 (1 H , d) , 7.38 (1 H , t) , 7.27 - 7.10 (3 H , m) , 2.35 (6 H , s) , 1.94 (6 H , s) , 1.34 (9 H , s) .

【 0 4 7 5 】

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、化合物 (H) (87 g)、4 - tert -

ブチルフェニルボロン酸 (35 g)、ビス(ジ-tert-ブチル(4-ジメチルアミノフェニル)ホスフィン)ジクロロパラジウム(II) (1.3 g)、トルエン(1500 mL)及び20質量%テトラブチルアンモニウムヒドロキシド水溶液(555 g)を加え、加熱還流下で4時間攪拌した。室温まで冷却後、そこへ、イオン交換水を加え、有機層を抽出した。有機層をイオン交換水で洗浄し、有機層を得た。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥させた後、シリカゲル(170 g)を加えてろ過し、ろ液を減圧濃縮することにより固体を得た。固体を酢酸エチルとアセトニトリル(体積比1:1)の混合溶媒を用いて2回再結晶した後、50℃で減圧乾燥させることにより、化合物(I) (73 g、収率76%)を白色固体として得た。化合物(I)のHPLC面積百分率値は99.5%以上であった。

10

LC-MS (ESI, positive): $m/z = 486.3 [M+H]^+$
【0476】

反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、塩化イリジウムn水和物(10.1 g)、化合物(H) (32.3 g)、イオン交換水(81 mL)及びジグライム(253 mL)を加え、140℃で48時間加熱攪拌した。その後、そこへ、トルエンを加え、イオン交換水で洗浄し、有機層を得た。得られた有機層を減圧濃縮することにより固体を得た。得られた固体をシリカゲルクロマトグラフィー(トルエンとエタノールの混合溶媒)で精製した。その後、50℃で減圧乾燥させることにより、黄褐色固体(38.0 g)を得た。

別途用意した反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、上記で得られた固体(30.8 g)、トリフルオロメタンスルホン酸銀(11.2 g)、化合物(H) (19.7 g)、ジフェニルエーテル(76 mL)及び2,6-ルチジン(16.9 mL)を加え、165℃で50時間加熱攪拌した。その後室温まで冷却してトルエンを加え、セライトを敷いたろ過器でろ過し、得られたろ液にシリカゲル(228 g)を加えてろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することにより黄色液体を得た。得られた液体にヘキサン(760 mL)を加えて0℃で1時間攪拌することにより沈殿を析出させた。沈殿物をろ過して回収し、得られた沈殿物トルエンとヘプタン(体積比3:10)の混合溶媒を用いて2回再結晶した。その後、50℃で減圧乾燥させることにより、化合物P15 (15.8 g、収率30%)を黄色固体として得た。化合物P15のHPLC面積百分率値は99.5%以上であった。

20

LC-MS (APCI, positive): $m/z = 1815.0 [M+H]^+$

30

$^1\text{H-NMR}$ (CD_2Cl_2 , 300 MHz): (ppm) = 8.03 (s, 6H), 7.35 (s, 6H), 7.31 - 7.26 (m, 6H), 7.11 - 7.03 (m, 6H), 6.98 - 6.90 (m, 6H), 6.62 - 6.57 (m, 3H), 6.52 (d, 3H), 2.11 (s, 18H), 1.97 (s, 9H), 1.68 (s, 9H), 1.46 (s, 27H), 1.33 (s, 27H).

【0477】

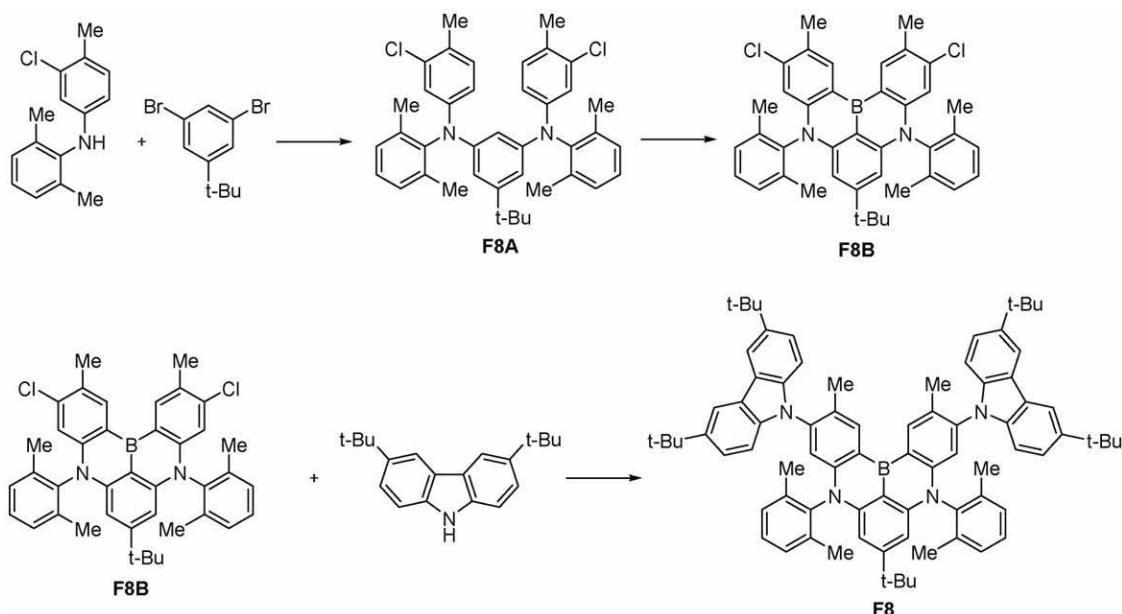
<合成例F8> 化合物F8の合成

下記の方法で、化合物F8を合成した。

40

50

【化 1 6 2】



10

【0 4 7 8】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、N - (3 - クロロ - 4 - メチルフェニル) - 2 , 6 - ジメチル - ベンゼンアミン (20 . 0 g)、1 , 3 - ジブプロモ - 5 - tert - ブチルベンゼン (11 . 7 g)、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (1 . 1 g)、トリ - tert - ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート (0 . 72 g)、ナトリウム tert - ブトキシド (9 . 6 g)、及び、トルエン (500 mL) を加え、50 で4時間撹拌した。その後、水 (400 mL) を加え室温で撹拌した。反応液を分液し、イオン交換水で洗浄した。洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。ろ液を減圧濃縮した後、得られた油状物にトルエンを加え溶解させた後、シリカゲルを敷いたろ過器でろ過して得られたろ液を減圧濃縮した。その後、トルエンと酢酸エチルとアセトニトリルの混合溶媒を用いて2回再結晶を行い、40 で減圧乾燥させることで、化合物 F 8 A (19 . 2 g、白色固体) を収率 77 % で得た。化合物 F 8 A の LC 面積百分率値は 98 . 6 % であった。

20

化合物 F 8 A の NMR の測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz、 CDCl_3) (ppm) = 7 . 11 - 7 . 03 (m , 6 H) , 6 . 97 (d , 2 H) , 6 . 88 (d , 2 H) , 6 . 67 (dd , 2 H) , 6 . 51 (t , 1 H) , 6 . 42 (d , 2 H) , 2 . 34 (s , 6 H) , 1 . 92 (s , 12 H) , 1 . 07 (s , 9 H) .

30

【0 4 7 9】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物 F 8 A (5 . 5 g)、三ヨウ化ホウ素 (6 . 9 g)、及び、1 , 2 - ジクロロベンゼン (66 mL) を加え、120 で75時間撹拌した。その後、N , N - ジイソプロピルエチルアミン (6 . 8 mL)、及び、10 質量 % 亜硫酸ナトリウム水溶液 (23 mL) を加え、室温で撹拌した。反応液を分液し、イオン交換水で洗浄した。洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。ろ液を減圧濃縮した後、トルエンとアセトニトリルの混合溶媒を用いて1回再結晶を行い、40 で減圧乾燥させることで化合物 F 8 B (2 . 0 g、黄色固体) を収率 40 % で得た。化合物 F 8 B の LC 面積百分率値は 96 . 9 % であった。以上の工程を繰り返すことにより、化合物 F 8 B を必要量得た。

40

化合物 F 8 B の NMR の測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz、 CDCl_3) (ppm) = 8 . 74 (s , 2 H) , 7 . 41 - 7 . 29 (md , 6 H) , 6 . 68 (s , 2 H) , 6 . 05 (s , 2 H) , 2 . 56 (s , 6 H) , 1 . 90 (s , 12 H) , 0 . 98 (s , 9 H) .

50

【0480】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物F8B(8.0g)、3,6-ジ-tert-ブチルカルバゾール(7.1g)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0.45g)、2-ジ-tert-ブチルホスフィノ-2',4',6'-トリイソプロピルピフェニル(0.66g)、リチウム(ビストリメチルシリル)アミドのトルエン溶液(1mol/L、28mL)、及び、キシレン(76mL)を加え、130で6時間撹拌した。その後、分液し、イオン交換水で洗浄した。洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。ろ液を減圧濃縮した後、トルエンとヘプタンの混合溶媒を用いてシリカゲルカラム精製を行った。その後、トルエンとアセトニトリルの混合溶媒を用いて複数回再結晶を行い、40で減圧乾燥させることで化合物F8(4.0g、黄色固体)を収率28%で得た。化合物F8のLC面積百分率値は97.0%であった。

10

化合物F8のNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz、 CDCl_3) (ppm) = 9.09 (s, 2H), 8.13 (d, 4H), 7.42 (dd, 4H), 7.24 (d, 6H), 7.00 (d, 4H), 6.82 (s, 2H), 6.12 (s, 2H), 2.11 (s, 6H), 1.99 (s, 12H), 1.47 (s, 36H), 1.00 (s, 9H).

LC-MS (APCI、positive) : $m/z = 1115.7 [M+H]^+$

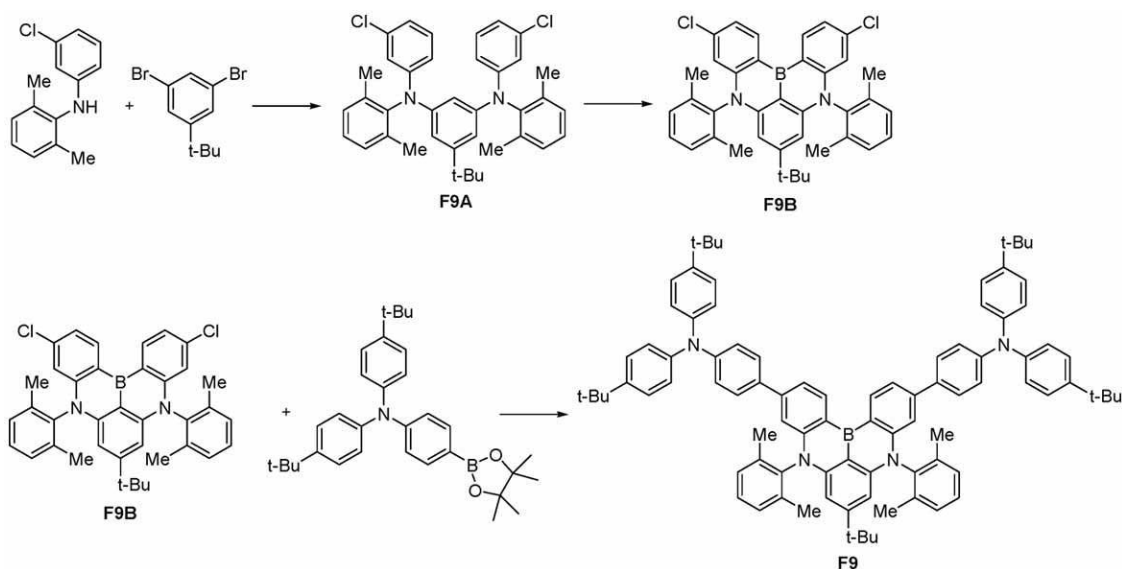
【0481】

<合成例F9> 化合物F9の合成

20

下記の方法で、化合物F9を合成した。

【化163】



30

【0482】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、N-(3-クロロフェニル)-2,6-ジメチルベンゼンアミン(10.0g)、1,3-ジブromo-5-tert-ブチルベンゼン(5.8g)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0.35g)、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート(0.34g)、ナトリウムtert-ブトキシド(5.7g)、及び、トルエン(250mL)を加え、50で5時間撹拌した。その後、水(100mL)を加え室温で撹拌した。分液し、イオン交換水で洗浄した。得られた洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。得られたろ液を減圧濃縮した後、トルエンとヘプタンの混合溶媒(体積比1:9)を用いてシリカゲルカラム精製を行った。その後、トルエンと酢酸エチルとメタノールの混合溶媒を用いて1回再結晶を行い、40で減圧乾燥させることで化合物F9A(8.3g、白色固体)を収率71%で得た。化合物F9AのLC面積百分率値は97.8

40

50

%であった。

化合物F 9 AのNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CD_2Cl_2) (ppm) = 7.14 - 7.02 (8 H, m), 6.79 (2 H, t), 6.73 (4 H, td), 6.53 (1 H, t), 6.50 (2 H, d), 1.95 (12 H, s), 1.05 (9 H, s).

TLC-MS (positive): $m/z = 593.2$ [$\text{M} + \text{H}$]⁺

【0483】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物F 9 A (2.0 g)、三ヨウ化ホウ素 (2.6 g)、及び、1, 2 - ジクロロベンゼン (40 mL) を加え、120 で90時間攪拌した。その後、N, N - ジイソプロピルエチルアミン (8.9 g)、及び、10質量% 亜硫酸ナトリウム水溶液 (20 mL) を加え室温で攪拌した。分液し、イオン交換水で洗浄した。得られた洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。得られたろ液を減圧濃縮した後、トルエンとアセトニトリルの混合溶媒を用いて1回再結晶を行い、40 で減圧乾燥させることで化合物F 9 B (0.76 g、黄色固体) を収率30%で得た。化合物F 9 BのLC面積百分率値は97.6%であった。

10

化合物F 9 BのNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CD_2Cl_2) (ppm) = 8.81 (2 H, d), 7.43 - 7.32 (6 H, m), 7.20 (2 H, dd), 6.65 (2 H, d), 6.12 (2 H, s), 1.88 (12 H, s), 0.95 (9 H, s).

TLC-MS (positive): $m/z = 601.2$ [$\text{M} + \text{H}$]⁺

20

【0484】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物F 9 B (0.10 g)、4 - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - [4 - (1, 1 - ジメチルエチル) フェニル] - N - [4 - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) フェニル] - ベンゼンアミン (0.18 g)、[(ジ(1 - アダマンチル) - N - ブチルホスフィン) - 2 - (2' - アミノ - 1, 1' - ビフェニル)] パラジウム (II) メタンスルホン酸塩 (4.8 mg)、5質量% 炭酸ナトリウム水溶液 (13 mL)、及び、トルエン (10 mL) を加え、80 で5時間攪拌した。その後、分液し、イオン交換水で洗浄した。得られた洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。得られたろ液を減圧濃縮した後、トルエンとヘプタンの混合溶媒を用いてシリカゲルカラム精製を行った。その後、トルエンとアセトニトリルの混合溶媒を用いて1回再結晶を行い、40 で減圧乾燥させることで化合物F 9 (0.19 g、黄色固体) を収率83%で得た。化合物F 9のLC面積百分率値は99.9%であった。

30

化合物F 9のNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CD_2Cl_2) (ppm) = 9.01 (2 H, d), 7.48 (2 H, d), 7.42 - 7.30 (10 H, m), 7.28 (8 H, d), 7.03 - 6.95 (12 H, m), 6.85 (2 H, d), 6.12 (2 H, s), 1.92 (12 H, s), 1.29 (36 H, s), 0.98 (9 H, s).

TLC-MS (positive): $m/z = 1243.5$ [$\text{M} + \text{H}$]⁺

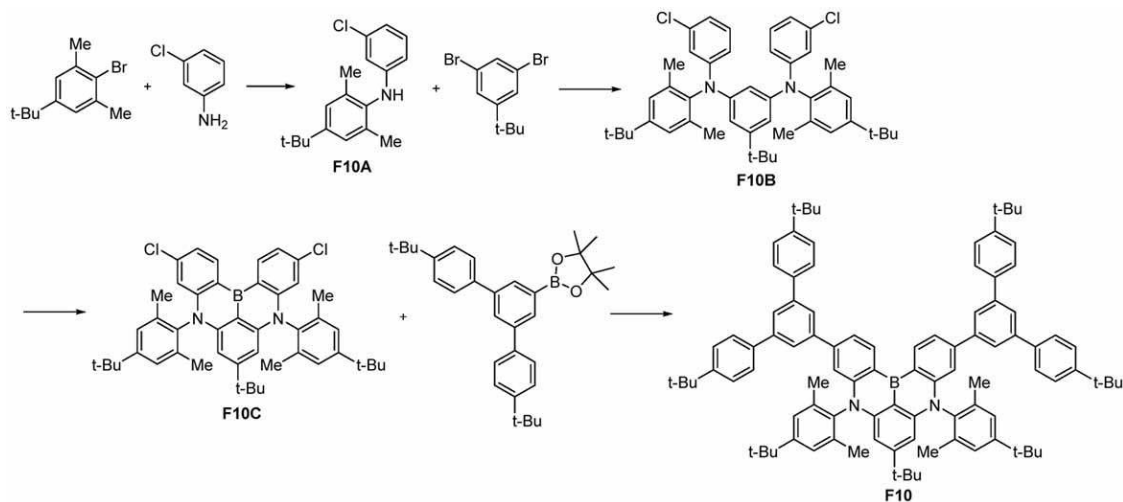
【0485】

<合成例F 10> 化合物F 10の合成

下記の方法で、化合物F 10を合成した。

40

【化 1 6 4】



10

【0 4 8 6】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、2-ブロモ-5-tert-ブチル-1,3-ジメチルベンゼン(5.0g)、3-クロロアニリン(3.2g)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0.10g)、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート(0.10g)、ナトリウムtert-ブトキシド(4.0g)、及び、トルエン(90mL)を加え、50で5時間撹拌した。その後、水(10mL)を加え室温で撹拌した。分液し、イオン交換水で洗浄した。得られた洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。得られたろ液を減圧濃縮した後、トルエンとヘプタンの混合溶媒(体積比2:8)を用いてシリカゲルカラム精製を行った。その後、メタノールを用いて1回再結晶を行い、40で減圧乾燥させることで化合物F10A(3.8g、白色固体)を収率64%で得た。化合物F10AのGC面積百分率値は99.7%であった。

20

化合物F10AのNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz、 CD_2Cl_2) (ppm) = 7.12 - 7.07 (3H, m), 7.04 (1H, t), 6.69 (1H, t), 6.82 (1H, d), 6.77 (1H, d), 6.44 (1H, d), 6.17 (1H, d), 6.10 (1H, t), 5.70 (1H, broad-s), 5.19 (1H, broad-s), 2.19 (6H, s), 1.29 (9H, s)。

30

TLC-MS (positive): $m/z = 288.1 [M+H]^+$

【0 4 8 7】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物F10A(3.7g)、1,3-ジブロモ-5-tert-ブチルベンゼン(1.9g)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0.11g)、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート(0.11g)、ナトリウムtert-ブトキシド(1.8g)、及び、トルエン(44mL)を加え、50で5時間撹拌した。その後、水(20mL)を加え室温で撹拌した。分液し、イオン交換水で洗浄した。洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。ろ液を減圧濃縮した後、トルエンとヘプタンの混合溶媒(体積比1:9)を用いて、シリカゲルカラム精製を行った。その後、トルエンと酢酸エチルとアセトニトリルの混合溶媒を用いて1回再結晶を行い、40で減圧乾燥させることで化合物F10B(2.5g、白色固体)を収率55%で得た。化合物F10BのLC面積百分率値は97.7%であった。

40

化合物F10BのNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz、 CD_2Cl_2) (ppm) = 7.06 (4H, s), 7.02 (2H, t), 6.78 (2H, t), 6.73 - 6.68 (4H, m), 6.58 (2H, d), 6.36 (1H, t), 1.92 (12H, s), 1.30 (18H, s)

50

), 1.08 (9H, s).

TLC-MS (positive): $m/z = 705.3 [M+H]^+$

【0488】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物F10B (2.0g)、三ヨウ化ホウ素 (2.2g)、及び、1,2-ジクロロベンゼン (40mL) を加え、120 で90時間攪拌した。その後、N,N-ジイソプロピルエチルアミン (7.5g)、及び、10質量%亜硫酸ナトリウム水溶液 (20mL) を加え、室温で攪拌した。反応液を分液し、イオン交換水で洗浄した。洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。ろ液を減圧濃縮した後、トルエンとアセトニトリルの混合溶媒を用いて1回再結晶を行い、40 で減圧乾燥させることで、化合物F10C (1.1g、黄色固体) を収率50%で得た。化合物F10CのLC面積百分率値は92.0%であった。

10

化合物F10CのNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CD_2Cl_2) (ppm) = 8.80 (2H, d), 7.36 (4H, s), 7.19 (2H, dd), 6.72 (2H, d), 6.07 (2H, s), 1.85 (12H, s), 1.41 (18H, s), 0.94 (9H, s).

TLC-MS (positive): $m/z = 713.3 [M+H]^+$

【0489】

反応容器内をアルゴン雰囲気とした後、化合物F10C (0.30g)、2-[4,4'-ビス(1,1-ジメチルエチル)[1,1':3',1''-ターフェニル]-5'-イル]-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン (0.43g)、[(ジ(1-アダマンチル)-N-ブチルホスフィン)-2-(2'-アミノ-1,1'-ビフェニル)]パラジウム(II)メタンスルホン酸塩 (12mg)、5質量%炭酸ナトリウム水溶液 (15mL)、及び、トルエン (15mL) を加え、80 で5時間攪拌した。その後、分液し、イオン交換水で洗浄した。洗浄液を分液し、得られた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後、ろ過した。ろ液を減圧濃縮した後、トルエンとヘプタンの混合溶媒を用いてシリカゲルカラム精製を行った。その後、トルエンとアセトニトリルの混合溶媒を用いて1回再結晶を行い、40 で減圧乾燥させることで化合物F10 (0.34g、黄色固体) を収率61%で得た。化合物F10のLC面積百分率値は99.7%であった。

20

化合物F10のNMRの測定結果は、以下のとおりであった。

30

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CD_2Cl_2) (ppm) = 9.11 (2H, d), 7.75 (2H, t), 7.70 (4H, d), 7.66 (2H, dd), 7.57 (8H, d), 7.48 (8H, d), 7.40 (4H, s), 7.06 (2H, d), 6.26 (2H, s), 1.94 (12H, s), 1.41 (18H, s), 1.36 (36H, s), 1.12 (9H, s).

TLC-MS (positive): $m/z = 1324.6 [M+H]^+$

【0490】

<化合物P1~P15の|S_P|及び|T_P|、化合物F1~F11の|S_F|及び|T_F|の量子化学計算>

化合物P1~P15の|S_P|及び|T_P|、化合物F1~F11の|S_F|及び|T_F|の計算結果を表1に示す。

40

【0491】

【表 1】

| Compound | S _P [eV] | T _P [eV] | Compound | S _F [eV] | T _F [eV] |
|----------|-----------------------|-----------------------|----------|-----------------------|-----------------------|
| P1 | 3.10 | 2.73 | F1 | 3.13 | 2.64 |
| P2 | 3.05 | 2.89 | F2 | 2.96 | 2.53 |
| P3 | 3.31 | 2.97 | F3 | 3.05 | 2.59 |
| P4 | 2.92 | 2.89 | F4 | 3.17 | 2.70 |
| P5 | 2.97 | 2.89 | F5 | 2.99 | 2.56 |
| P6 | 2.90 | 2.64 | F6 | 2.77 | 1.71 |
| P7 | 2.71 | 2.12 | F7 | 2.71 | 2.00 |
| P8 | 2.90 | 2.63 | | | |
| P9 | 2.86 | 2.58 | | | |
| P10 | 3.27 | 2.87 | F8 | 2.97 | 2.51 |
| P11 | 3.03 | 2.82 | F9 | 2.88 | 2.50 |
| P12 | 2.90 | 2.83 | F10 | 2.91 | 2.50 |
| P13 | 3.29 | 2.90 | F11 | 2.69 | 2.37 |
| P14 | 3.29 | 2.83 | | | |
| P15 | 3.28 | 2.85 | | | |

10

【0492】

20

<化合物 P 1 ~ P 1 5、化合物 F 1 ~ F 1 1 及び高分子化合物 P F 1 ~ P F 2 の各種極大ピーク波長の測定>

化合物 P 1 ~ P 1 5、化合物 F 1 ~ F 1 1 及び高分子化合物 P F 1 ~ P F 2 の P_L, R_T 及び FWHM、化合物 F 1 ~ F 7 の A_{BS}, R_T 、並びに、化合物 P 3、P 5、P 1 1、高分子化合物 P F 1 及び P F 2 の $P_L, 77K$ を、表 2 に示す。

【0493】

30

40

50

【表 2】

| Compound | $\lambda_{\text{ABS,RT}}$ [nm] | $\lambda_{\text{PL,RT}}$ [nm] | FWHM [nm] | $\lambda_{\text{PL,77K}}$ [nm] |
|----------|--------------------------------|-------------------------------|-----------|--------------------------------|
| F1 | 439 | 452 | 21.6 | |
| F2 | 451 | 465 | 21.4 | |
| F3 | 441 | 454 | 21.2 | |
| F4 | 427 | 440 | 19.1 | |
| F5 | 454 | 465 | 18.3 | |
| F6 | 488 | 568 | 70.2 | |
| F7 | 512 | 522 | 21.8 | |
| P1 | | 470 | 47.4 | |
| P2 | | 471 | 51.0 | |
| P3 | | 450 | 49.9 | 443 |
| P4 | | 450 | 56.9 | |
| P5 | | 465 | 55.1 | 455 |
| P6 | | 510 | 59.7 | |
| P7 | | 614 | 32.0 | |
| P8 | | 508 | 55.8 | |
| P9 | | 513 | 54.7 | |
| F8 | 456 | 469 | 19.1 | |
| F9 | 456 | 471 | 19.7 | |
| F10 | 461 | 477 | 21.4 | |
| F11 | 484 | 514 | 38.2 | |
| PF1 | | 468 | 23.2 | 509 |
| PF2 | | 451 | 24.0 | 483 |
| P10 | | 469 | 50.8 | |
| P11 | | 475 | 54.5 | 467 |
| P12 | | 471 | 61.2 | |
| P13 | | 470 | 54.1 | |
| P14 | | 469 | 47.4 | |
| P15 | | 472 | 55.2 | |

10

20

【0494】

< 合成例 M X > 化合物 M 1 ~ M 6 の合成

化合物 M 1 は、国際公開第 2 0 1 5 / 1 4 5 8 7 1 号に記載の方法に準じて合成した。

化合物 M 2 は、国際公開第 2 0 1 3 / 1 4 6 8 0 6 号に記載の方法に準じて合成した。

化合物 M 3 は、国際公開第 2 0 0 5 / 0 4 9 5 4 6 号に記載の方法に準じて合成した。

化合物 M 4 は、特開 2 0 1 0 - 1 8 9 6 3 0 号公報に記載の方法に準じて合成した。

化合物 M 5 は、国際公開第 2 0 1 2 / 0 8 6 6 7 1 号に記載の方法に準じて合成した。

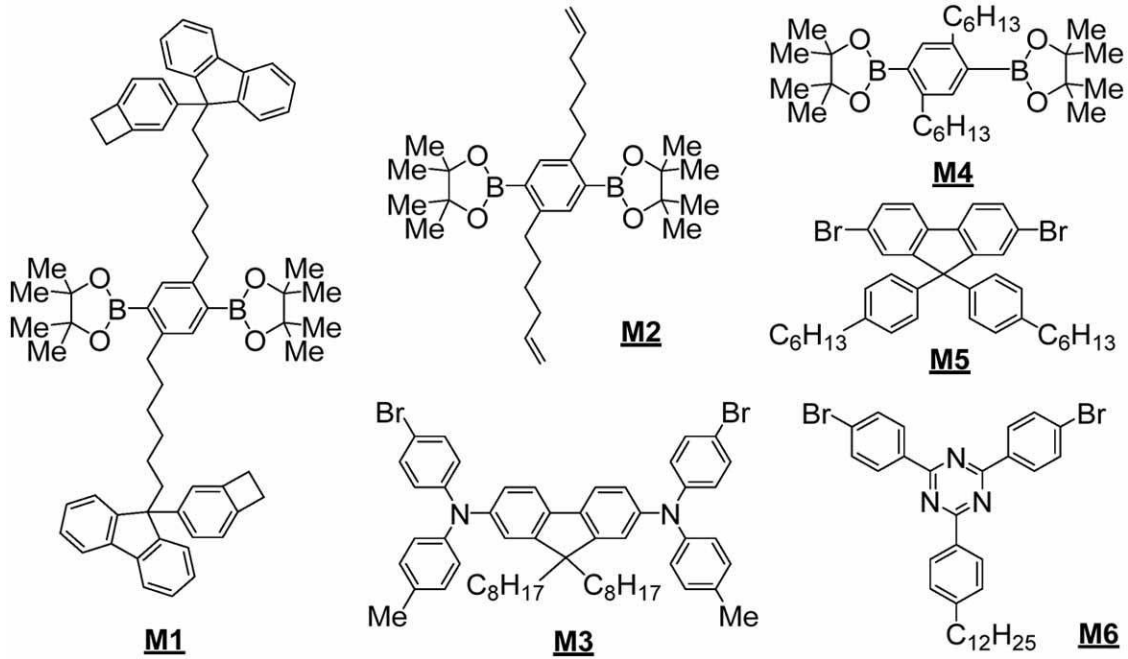
化合物 M 6 は、特開 2 0 1 2 - 0 3 6 3 8 8 号公報に記載の方法に準じて合成した。

30

40

50

【化 1 6 5】



10

【 0 4 9 5】

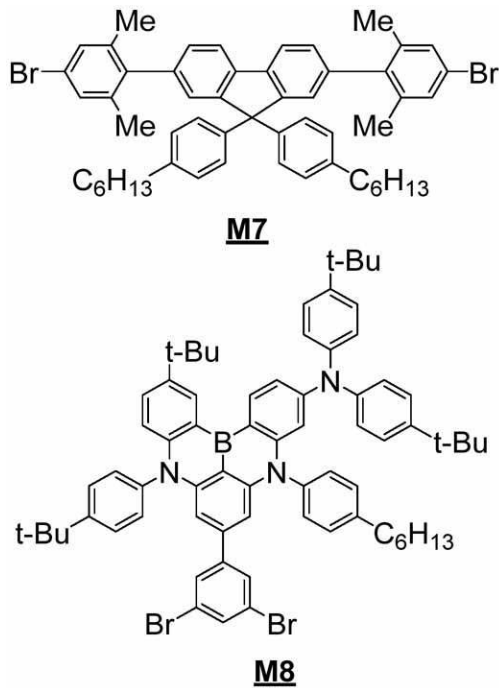
< 合成例 M Y > 化合物 M 7 ~ M 9 の合成

化合物 M 7 は、国際公開第 2 0 1 3 / 1 9 1 0 8 8 号に記載の方法に準じて合成した。

化合物 M 8 及び M 9 は、国際公開第 2 0 1 9 / 0 0 4 2 4 8 号に記載の方法に準じて合成した。

20

【化 1 6 6】



30

40

【 0 4 9 6】

< 合成例 H T L - 1 > 高分子化合物 H T L - 1 の合成

高分子化合物 H T L - 1 は、化合物 M 1、化合物 M 2 及び化合物 M 3 を用いて、国際公開第 2 0 1 5 / 1 4 5 8 7 1 号に記載の方法に従って合成した。高分子化合物 H T L - 1 の M n は 2.3×10^4 であり、M w は 1.2×10^5 であった。

高分子化合物 H T L - 1 は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物 M 1 から誘

50

導される構成単位と、化合物 M 2 から誘導される構成単位と、化合物 M 3 から誘導される構成単位とを 4 5 : 5 : 5 0 のモル比で有する共重合体である。

【 0 4 9 7 】

< 合成例 H P - 1 > 高分子化合物 H P - 1 の合成

高分子化合物 H P - 1 は、化合物 M 4、化合物 M 5 及び化合物 M 6 を用いて、特開 2 0 1 2 - 3 6 3 8 8 号公報に記載の方法に従って合成した。高分子化合物 H P - 1 の M n は 9.6×10^4 であり、M w は 2.2×10^5 であった。

高分子化合物 H P - 1 は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物 M 4 から誘導される構成単位と、化合物 M 5 から誘導される構成単位と、化合物 M 6 から誘導される構成単位とが、5 0 : 4 0 : 1 0 のモル比で構成されてなる共重合体である。

10

【 0 4 9 8 】

< 合成例 P F 1 > 高分子化合物 P F 1 の合成

(工程 1) 反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、上記の化合物 M 4 (0 . 3 4 4 4 g)、上記の化合物 M 7 (0 . 5 7 6 2 g)、上記の化合物 M 8 (0 . 0 8 5 1 g)、ジクロロビス(トリス - o - メトキシフェニルホスフィン)パラジウム (0 . 2 7 m g) 及びトルエン (3 0 m L) を加え、8 0 に加熱した。

(工程 2) その後、そこへ、2 0 質量%水酸化テトラエチルアンモニウム水溶液 (1 6 . 0 g) を滴下し、6 時間還流させた。

(工程 3) その後、そこへ、フェニルボロン酸 (4 5 . 7 m g) 及びジクロロビス(トリス - o - メトキシフェニルホスフィン)パラジウム (0 . 2 7 m g) を加え、8 0 で 3 時間攪拌した。

20

(工程 4) 反応混合物を冷却した後、ジエチルジチアカルバミン酸ナトリウム水溶液を加え、4 0 で 1 時間攪拌した。反応液を冷却し、水層を除去した後、得られた有機層を、3 質量%アンモニア水で 2 回、水で 2 回洗浄した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌したところ、沈澱が生じた。沈澱物をトルエン (4 4 m L) に溶解させ、アルミナ (2 6 g) 加え 3 時間攪拌した後、得られた懸濁液をシリカゲルカラムに通液することにより精製した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌したところ、沈澱が生じた。得られた沈澱物をろ取り、乾燥させることにより、高分子化合物 P F 1 を 0 . 5 1 g 得た。高分子化合物 P F 1 の M n は 6.2×10^4 であり、M w は 1.5×10^5 であった。

高分子化合物 P F 1 は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物 M 4 から誘導される構成単位と、化合物 M 7 から誘導される構成単位と、化合物 M 8 から誘導される構成単位とが、5 0 : 4 5 : 5 のモル比で構成されてなる共重合体である。

30

【 0 4 9 9 】

< 合成例 P F 2 > 高分子化合物 P F 2 の合成

(工程 1) 反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、上記の化合物 M 4 (0 . 3 0 7 0 g)、上記の化合物 M 7 (0 . 6 4 0 3 g)、上記の化合物 M 9 (0 . 0 9 2 7 g)、ジクロロビス(トリス - o - メトキシフェニルホスフィン)パラジウム (0 . 2 7 m g) 及びトルエン (3 1 m L) を加え、8 0 に加熱した。

(工程 2) その後、そこへ、2 0 質量%水酸化テトラエチルアンモニウム水溶液 (1 5 . 7 g) を滴下し、6 時間還流させた。

(工程 3) その後、そこへ、フェニルボロン酸 (4 5 . 7 m g) 及びジクロロビス(トリス - o - メトキシフェニルホスフィン)パラジウム (0 . 2 7 m g) を加え、8 0 で 3 時間攪拌した。

40

(工程 4) 反応混合物を冷却した後、ジエチルジチアカルバミン酸ナトリウム水溶液を加え、4 0 で 1 時間攪拌した。反応液を冷却し、水層を除去した後、得られた有機層を、3 質量%アンモニア水で 2 回、水で 2 回洗浄した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌したところ、沈澱が生じた。沈澱物をトルエン (4 4 m L) に溶解させ、アルミナ (2 7 g) 加え 3 時間攪拌した後、得られた懸濁液をシリカゲルカラムに通液することにより精製した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌したところ、沈澱が生じた。沈澱物をろ取り、乾燥させることにより、高分子化合物 P F 2 を 0 . 5 2 g 得た。高分子化合

50

物 P F 2 の M n は 6.3×10^4 であり、M w は 1.5×10^5 であった。

高分子化合物 P F 2 は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物 M 4 から誘導される構成単位と、化合物 M 7 から誘導される構成単位と、化合物 M 9 から誘導される構成単位とが、45 : 50 : 5 のモル比で構成されてなる共重合体である。

【0500】

<比較例 B C D 1> 発光素子 B C D 1 の作製と評価

(陽極及び正孔注入層の形成)

ガラス基板にスパッタ法により 45 nm の厚さで I T O 膜を付けることにより、陽極を形成した。該陽極上に、正孔注入材料(製品名: N D - 3 2 0 2、日産化学工業製)をスピコート法により 35 nm の厚さで成膜した。正孔注入層を積層した基板を大気雰囲気下において、ホットプレート上で 50 、3 分間加熱し、更に 230 、15 分間加熱することにより正孔注入層を形成した。

10

【0501】

(正孔輸送層の形成)

キシレンに高分子化合物 H T L - 1 を 0.6 質量% の濃度で溶解させた。得られたキシレン溶液を用いて、正孔注入層の上にスピコート法により 20 nm の厚さで成膜し、窒素ガス雰囲気下において、ホットプレート上で 180 、60 分間加熱させることにより正孔輸送層を形成した。

【0502】

(発光層の形成)

クロロベンゼンに、化合物 H 1、化合物 P 1 及び化合物 F 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 / 化合物 F 1 = 73 質量% / 25 質量% / 2 質量%) を 2 質量% の濃度で溶解させた。得られたクロロベンゼン溶液を用いて、正孔輸送層の上にスピコート法により 60 nm の厚さで成膜し、窒素ガス雰囲気下において、130 、10 分間加熱させることにより発光層を形成した。

20

【0503】

(電子輸送層の形成)

2, 2, 3, 3, 4, 4, 5, 5 - オクタフルオロ - 1 - ペンタノールに、化合物 E 1 を 0.4 質量% の濃度で溶解させた。得られた 2, 2, 3, 3, 4, 4, 5, 5 - オクタフルオロ - 1 - ペンタノール溶液を用いて、正孔輸送層の上にスピコート法により 20 nm の厚さで成膜し、窒素ガス雰囲気下において、130 、10 分間加熱させることにより電子輸送層を形成した。

30

【0504】

(陰極の形成)

電子輸送層を形成した基板を蒸着機内において、 1.0×10^{-4} Pa 以下にまで減圧した後、陰極として、電子輸送層の上にフッ化ナトリウムを約 4 nm、次いで、フッ化ナトリウム層の上にアルミニウムを約 80 nm 蒸着した。蒸着後、陰極を形成した基板をガラス基板で封止することにより、発光素子 B C D 1 を作製した。

【0505】

(発光素子の評価)

発光素子 B C D 1 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。電圧が - 5 V から 12 V までの範囲で 0.2 V ごとに発光素子を評価し、 5000 cd/m^2 における外部量子効率(以下、「EQE」ともいう。)は 4.5%、C I E 色度座標(x, y)は(0.149, 0.301)であった。結果を表 3 に示す。

40

【0506】

<比較例 B C D 2> 発光素子 B C D 2 の作製と評価

比較例 B C D 1 の(発光層の形成)における「化合物 H 1、化合物 P 1 及び化合物 F 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 / 化合物 F 1 = 73 質量% / 25 質量% / 2 質量%)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 1 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 / 化合物 F 2 = 73 質量% / 25 質量% / 2 質量%)を用いた以外は、比較例 B C D 1 と同様にして、発光

50

素子 B C D 2 を作製した。

発光素子 B C D 2 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 4 . 6 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 3 2 , 0 . 2 4 8) であった。結果を表 3 に示す。

【 0 5 0 7 】

< 比較例 B C D 3 > 発光素子 B C D 3 の作製と評価

比較例 B C D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 1 及び化合物 F 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 / 化合物 F 1 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 2 及び化合物 F 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 2 / 化合物 F 1 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、比較例 B C D 1 と同様にして、発光素子 B C D 3 を作製した。

10

発光素子 B C D 3 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 5 . 6 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 7 5 , 0 . 3 5 7) であった。結果を表 3 に示す。

【 0 5 0 8 】

< 比較例 B C D 4 > 発光素子 B C D 4 の作製と評価

比較例 B C D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 1 及び化合物 F 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 / 化合物 F 1 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 1 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、比較例 B C D 1 と同様にして、発光素子 B C D 4 を作製した。

20

発光素子 B C D 4 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 7 . 3 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 3 9 , 0 . 1 1 0) であった。結果を表 3 に示す。

【 0 5 0 9 】

< 実施例 B D 1 > 発光素子 B D 1 の作製と評価

比較例 B C D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 1 及び化合物 F 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 / 化合物 F 1 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、比較例 B C D 1 と同様にして、発光素子 B D 1 を作製した。

30

発光素子 B D 1 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 2 . 6 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 2 1 , 0 . 1 5 3) であった。結果を表 3 に示す。発光素子 B D 1 の 5 0 0 0 c d / m² における発光スペクトルの半値幅は 2 8 . 6 n m であった。

【 0 5 1 0 】

< 実施例 B D 2 > 発光素子 B D 2 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 4 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 4 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 2 を作製した。

40

発光素子 B D 2 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 0 . 1 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 2 1 , 0 . 1 5 1) であった。結果を表 3 に示す。発光素子 B D 2 の 5 0 0 0 c d / m² における発光スペクトルの半値幅は 2 8 . 7 n m であった。

【 0 5 1 1 】

< 実施例 B D 3 > 発光素子 B D 3 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%)」に代えて

50

、化合物 H 1、化合物 P 5 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 5 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 3 を作製した。

発光素子 B D 3 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 1 . 9 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 3 4 , 0 . 2 1 2) であった。結果を表 3 に示す。発光素子 B D 3 の 5 0 0 0 c d / m² における発光スペクトルの半値幅は 3 1 . 3 n m であった。

【 0 5 1 2 】

< 実施例 B D 4 > 発光素子 B D 4 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) 」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 3 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 3 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 4 を作製した。

10

発光素子 B D 4 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 9 . 5 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 3 8 , 0 . 1 0 1) であった。結果を表 3 に示す。

【 0 5 1 3 】

< 実施例 B D 5 > 発光素子 B D 5 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) 」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 5 及び化合物 F 3 (化合物 H 1 / 化合物 P 5 / 化合物 F 3 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 5 を作製した。

20

発光素子 B D 5 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 1 . 8 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 5 8 , 0 . 2 4 7) であった。結果を表 3 に示す。

【 0 5 1 4 】

< 実施例 B D 6 > 発光素子 B D 6 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) 」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 5 及び化合物 F 4 (化合物 H 1 / 化合物 P 5 / 化合物 F 4 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 6 を作製した。

30

発光素子 B D 6 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 1 . 3 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 6 9 , 0 . 3 2 7) であった。結果を表 3 に示す。

【 0 5 1 5 】

< 実施例 B D 7 > 発光素子 B D 7 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) 」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 5 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 5 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 7 を作製した。

40

発光素子 B D 7 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 3 . 4 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 2 2 , 0 . 1 3 6) であった。結果を表 3 に示す。発光素子 B D 7 の 5 0 0 0 c d / m² における発光スペクトルの半値幅は 2 5 . 0 n m であった。

【 0 5 1 6 】

< 実施例 B D 8 > 発光素子 B D 8 の作製と評価

50

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 4 及び化合物 F 5 (化合物 H 1 / 化合物 P 4 / 化合物 F 5 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 8 を作製した。

発光素子 B D 8 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 0 . 0 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 2 2 , 0 . 1 3 4) であった。結果を表 3 に示す。発光素子 B D 8 の 5 0 0 0 c d / m² における発光スペクトルの半値幅は 2 4 . 8 n m であった。

【 0 5 1 7 】

< 実施例 B D 9 > 発光素子 B D 9 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 5 及び化合物 F 5 (化合物 H 1 / 化合物 P 5 / 化合物 F 5 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 9 を作製した。

発光素子 B D 9 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 1 . 6 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 3 6 , 0 . 2 0 4) であった。結果を表 3 に示す。発光素子 B D 9 の 5 0 0 0 c d / m² における発光スペクトルの半値幅は 2 6 . 8 n m であった。

【 0 5 1 8 】

< 実施例 B D 1 0 > 発光素子 B D 1 0 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 1 0 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 0 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 1 0 を作製した。

発光素子 B D 1 0 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 9 . 8 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 2 5 , 0 . 1 8 5) であった。結果を表 3 に示す。発光素子 B D 1 0 の 5 0 0 0 c d / m² における発光スペクトルの半値幅は 3 0 . 4 n m であった。

【 0 5 1 9 】

< 実施例 B D 1 1 > 発光素子 B D 1 1 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 1 1 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 1 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 1 1 を作製した。

発光素子 B D 1 1 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 3 . 5 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 4 3 , 0 . 3 0 3) であった。結果を表 3 に示す。発光素子 B D 1 1 の 5 0 0 0 c d / m² における発光スペクトルの半値幅は 3 8 . 3 n m であった。

【 0 5 2 0 】

< 実施例 B D 1 2 > 発光素子 B D 1 2 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 1 0 及び化合物 F 8 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 0 / 化合物 F 8 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 1 2 を作製した。

発光素子 B D 1 2 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d /

10

20

30

40

50

m^2 におけるEQEは10.3%、CIE色度座標(x, y)は(0.119, 0.201)であった。結果を表3に示す。発光素子BD12の5000 cd/ m^2 における発光スペクトルの半値幅は28.1 nmであった。

【0521】

<実施例BD13> 発光素子BD13の作製と評価

実施例BD1の(発光層の形成)における「化合物H1、化合物P3及び化合物F2(化合物H1/化合物P3/化合物F2 = 73質量%/25質量%/2質量%)」に代えて、化合物H1、化合物P10及び化合物F9(化合物H1/化合物P10/化合物F9 = 73質量%/25質量%/2質量%)を用いた以外は、実施例BD1と同様にして、発光素子BD13を作製した。

10

発光素子BD13に電圧を印加することによりEL発光が観測された。5000 cd/ m^2 におけるEQEは9.0%、CIE色度座標(x, y)は(0.116, 0.216)であった。結果を表3に示す。発光素子BD13の5000 cd/ m^2 における発光スペクトルの半値幅は28.2 nmであった。

【0522】

<実施例BD14> 発光素子BD14の作製と評価

実施例BD1の(発光層の形成)における「化合物H1、化合物P3及び化合物F2(化合物H1/化合物P3/化合物F2 = 73質量%/25質量%/2質量%)」に代えて、化合物H1、化合物P10及び化合物F10(化合物H1/化合物P10/化合物F10 = 73質量%/25質量%/2質量%)を用いた以外は、実施例BD1と同様にして、発光素子BD14を作製した。

20

発光素子BD14に電圧を印加することによりEL発光が観測された。5000 cd/ m^2 におけるEQEは11.1%、CIE色度座標(x, y)は(0.112, 0.271)であった。結果を表3に示す。発光素子BD14の5000 cd/ m^2 における発光スペクトルの半値幅は29.7 nmであった。

【0523】

<実施例BD15> 発光素子BD15の作製と評価

実施例BD1の(発光層の形成)における「化合物H1、化合物P3及び化合物F2(化合物H1/化合物P3/化合物F2 = 73質量%/25質量%/2質量%)」に代えて、化合物H1、化合物P11及び化合物F8(化合物H1/化合物P11/化合物F8 = 73質量%/25質量%/2質量%)を用いた以外は、実施例BD1と同様にして、発光素子BD15を作製した。

30

発光素子BD15に電圧を印加することによりEL発光が観測された。5000 cd/ m^2 におけるEQEは12.6%、CIE色度座標(x, y)は(0.133, 0.290)であった。結果を表3に示す。発光素子BD15の5000 cd/ m^2 における発光スペクトルの半値幅は31.4 nmであった。

【0524】

<実施例BD16> 発光素子BD16の作製と評価

実施例BD1の(発光層の形成)における「化合物H1、化合物P3及び化合物F2(化合物H1/化合物P3/化合物F2 = 73質量%/25質量%/2質量%)」に代えて、化合物H1、化合物P11及び化合物F9(化合物H1/化合物P11/化合物F9 = 73質量%/25質量%/2質量%)を用いた以外は、実施例BD1と同様にして、発光素子BD16を作製した。

40

発光素子BD16に電圧を印加することによりEL発光が観測された。5000 cd/ m^2 におけるEQEは12.5%、CIE色度座標(x, y)は(0.127, 0.286)であった。結果を表3に示す。発光素子BD16の5000 cd/ m^2 における発光スペクトルの半値幅は29.4 nmであった。

【0525】

<実施例BD17> 発光素子BD17の作製と評価

実施例BD1の(発光層の形成)における「化合物H1、化合物P3及び化合物F2(

50

化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 1 1 及び化合物 F 1 0 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 1 / 化合物 F 1 0 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B D 1 7 を作製した。

発光素子 B D 1 7 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 4 . 5 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 2 4 , 0 . 3 3 2) であった。結果を表 3 に示す。発光素子 B D 1 7 の 5 0 0 0 c d / m² における発光スペクトルの半値幅は 3 1 . 8 n m であった。

【 0 5 2 6 】

【表 3】

| Example / Comparative Example | Device | Conformation | Emission Layer | | T _P - S _F [eV] | T _P - T _F [eV] | EQE 5kcd/m ² | CIE(x,y) 5kcd/m ² |
|-------------------------------|--------|--------------|--------------------|----------------|---|---|-------------------------|------------------------------|
| | | | Mixing Ratio (wt%) | N _r | | | | |
| Comparative Example BCD1 | BCD1 | H1/P1/F1 | 73/25/2 | 7.14 | -0.41 | 0.09 | 4.5 | (0.149, 0.301) |
| Comparative Example BCD2 | BCD2 | H1/P1/F2 | 73/25/2 | 3.25 | -0.23 | 0.20 | 4.6 | (0.132, 0.248) |
| Comparative Example BCD3 | BCD3 | H1/P2/F1 | 73/25/2 | 7.14 | -0.25 | 0.25 | 5.6 | (0.175, 0.357) |
| Comparative Example BCD4 | BCD4 | H1/P3/F1 | 73/25/2 | 7.14 | -0.17 | 0.33 | 7.3 | (0.139, 0.110) |
| Example BD1 | BD1 | H1/P3/F2 | 73/25/2 | 3.25 | 0.01 | 0.44 | 12.6 | (0.121, 0.153) |
| Example BD2 | BD2 | H1/P4/F2 | 73/25/2 | 3.25 | -0.07 | 0.36 | 10.1 | (0.121, 0.151) |
| Example BD3 | BD3 | H1/P5/F2 | 73/25/2 | 3.25 | -0.07 | 0.36 | 11.9 | (0.134, 0.212) |
| Example BD4 | BD4 | H1/P3/F3 | 73/25/2 | 3.35 | -0.08 | 0.37 | 9.5 | (0.138, 0.101) |
| Example BD5 | BD5 | H1/P5/F3 | 73/25/2 | 3.35 | -0.16 | 0.29 | 11.8 | (0.158, 0.247) |
| Example BD6 | BD6 | H1/P5/F4 | 73/25/2 | 4.47 | -0.29 | 0.19 | 11.3 | (0.169, 0.327) |
| Example BD7 | BD7 | H1/P3/F5 | 73/25/2 | 2.03 | -0.02 | 0.41 | 13.4 | (0.122, 0.136) |
| Example BD8 | BD8 | H1/P4/F5 | 73/25/2 | 2.03 | -0.10 | 0.33 | 10.0 | (0.122, 0.134) |
| Example BD9 | BD9 | H1/P5/F5 | 73/25/2 | 2.03 | -0.10 | 0.33 | 11.6 | (0.136, 0.204) |
| Example BD10 | BD10 | H1/P10/F2 | 73/25/2 | 3.25 | -0.09 | 0.34 | 9.8 | (0.125, 0.185) |
| Example BD11 | BD11 | H1/P11/F2 | 73/25/2 | 3.25 | -0.14 | 0.29 | 13.5 | (0.143, 0.303) |
| Example BD12 | BD12 | H1/P10/F8 | 73/25/2 | 4.48 | -0.10 | 0.36 | 10.3 | (0.119, 0.201) |
| Example BD13 | BD13 | H1/P10/F9 | 73/25/2 | 2.41 | -0.01 | 0.37 | 9.0 | (0.116, 0.216) |
| Example BD14 | BD14 | H1/P10/F10 | 73/25/2 | 2.26 | -0.04 | 0.37 | 11.1 | (0.112, 0.271) |
| Example BD15 | BD15 | H1/P11/F8 | 73/25/2 | 4.48 | -0.15 | 0.31 | 12.6 | (0.133, 0.290) |
| Example BD16 | BD16 | H1/P11/F9 | 73/25/2 | 2.41 | -0.06 | 0.32 | 12.5 | (0.127, 0.286) |
| Example BD17 | BD17 | H1/P11/F10 | 73/25/2 | 2.26 | -0.09 | 0.32 | 14.5 | (0.124, 0.332) |

【 0 5 2 7 】

< 実施例 B P D 1 > 発光素子 B P D 1 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 3 及び高分子化合物 P F 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 高分子化合物 P F 1 = 5 5 質量 % / 2 5 質量 % / 2 0 質量 %) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B P D 1 を作製した。

発光素子 B P D 1 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。1 0 0 c d / m² における E Q E は 1 6 . 4 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 3 0 , 0 . 1 5 3) であった。結果を表 4 に示す。発光素子 B P D 1 の 1 0 0 c d / m² における発光スペクトルの半値幅は 2 7 . 1 n m であった。

【 0 5 2 8 】

< 実施例 B P D 2 > 発光素子 B P D 2 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %)」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 5 及び高分子化合物 P F 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 5 / 高分子化合物 P F 1 = 5 5 質量 % / 2 5 質量 % / 2 0 質量 %) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B P D 2 を作製した。

発光素子 B P D 2 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。1 0 0 c d / m² における E Q E は 1 6 . 0 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 1 3 8 , 0 . 1 9 7) であった。結果を表 4 に示す。発光素子 B P D 2 の 1 0 0 c d / m² における発光スペ

10

20

30

40

50

クトルの半値幅は26.0nmであった。

【0529】

<実施例BPD3> 発光素子BPD3の作製と評価

実施例BD1の(発光層の形成)における「化合物H1、化合物P3及び化合物F2(化合物H1/化合物P3/化合物F2=73質量%/25質量%/2質量%)」に代えて、化合物H1、化合物P11及び高分子化合物PF1(化合物H1/化合物P11/高分子化合物PF1=55質量%/25質量%/20質量%)を用いた以外は、実施例BD1と同様にして、発光素子BPD3を作製した。

発光素子BPD3に電圧を印加することによりEL発光が観測された。100cd/m²におけるEQEは16.2%、CIE色度座標(x,y)は(0.143,0.274)であった。結果を表4に示す。発光素子BPD3の100cd/m²における発光スペクトルの半値幅は34.2nmであった。

10

【0530】

<実施例BPD4> 発光素子BPD4の作製と評価

実施例BD1の(発光層の形成)における「化合物H1、化合物P3及び化合物F2(化合物H1/化合物P3/化合物F2=73質量%/25質量%/2質量%)」に代えて、化合物H1、化合物P3及び高分子化合物PF2(化合物H1/化合物P3/高分子化合物PF1=55質量%/25質量%/20質量%)を用いた以外は、実施例BD1と同様にして、発光素子BPD4を作製した。

発光素子BPD4に電圧を印加することによりEL発光が観測された。100cd/m²におけるEQEは11.6%、CIE色度座標(x,y)は(0.149,0.141)であった。結果を表4に示す。発光素子BPD4の100cd/m²における発光スペクトルの半値幅は40.0nmであった。

20

【0531】

<実施例BPD5> 発光素子BPD5の作製と評価

実施例BD1の(発光層の形成)における「化合物H1、化合物P3及び化合物F2(化合物H1/化合物P3/化合物F2=73質量%/25質量%/2質量%)」に代えて、化合物H1、化合物P5及び高分子化合物PF2(化合物H1/化合物P5/高分子化合物PF1=55質量%/25質量%/20質量%)を用いた以外は、実施例BD1と同様にして、発光素子BPD5を作製した。

発光素子BPD5に電圧を印加することによりEL発光が観測された。100cd/m²におけるEQEは14.7%、CIE色度座標(x,y)は(0.170,0.314)であった。結果を表4に示す。発光素子BPD5の100cd/m²における発光スペクトルの半値幅は67.8nmであった。

30

【0532】

<実施例BPD7> 発光素子BPD7の作製と評価

実施例BD1の(発光層の形成)における「化合物H1、化合物P3及び化合物F2(化合物H1/化合物P3/化合物F2=73質量%/25質量%/2質量%)」に代えて、高分子化合物PF1及び化合物P3(高分子化合物PF1/化合物P3=75質量%/25質量%)を用いた以外は、実施例BD1と同様にして、発光素子BPD7を作製した。

発光素子BPD7に電圧を印加することによりEL発光が観測された。100cd/m²におけるEQEは11.0%、CIE色度座標(x,y)は(0.127,0.124)であった。結果を表4に示す。発光素子BPD7の100cd/m²における発光スペクトルの半値幅は23.6nmであった。

40

【0533】

<実施例BPD8> 発光素子BPD8の作製と評価

実施例BD1の(発光層の形成)における「化合物H1、化合物P3及び化合物F2(化合物H1/化合物P3/化合物F2=73質量%/25質量%/2質量%)」に代えて、高分子化合物PF1及び化合物P5(高分子化合物PF1/化合物P5=75質量%/25質量%)を用いた以外は、実施例BD1と同様にして、発光素子BPD8を作製した。

50

発光素子 B P D 8 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。100 cd / m² における E Q E は 13.7%、C I E 色度座標 (x , y) は (0.127 , 0.132) であった。結果を表 4 に示す。発光素子 B P D 8 の 100 cd / m² における発光スペクトルの半値幅は 23.7 nm であった。

【 0 5 3 4 】

< 実施例 B P D 9 > 発光素子 B P D 9 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 73 質量% / 25 質量% / 2 質量%)」に代えて、高分子化合物 P F 1 及び化合物 P 1 1 (高分子化合物 P F 1 / 化合物 P 1 1 = 75 質量% / 25 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B P D 9 を作製した。

10

発光素子 B P D 9 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。100 cd / m² における E Q E は 14.0%、C I E 色度座標 (x , y) は (0.130 , 0.166) であった。結果を表 4 に示す。発光素子 B P D 9 の 100 cd / m² における発光スペクトルの半値幅は 25.1 nm であった。

【 0 5 3 5 】

< 実施例 B P D 1 0 > 発光素子 B P D 1 0 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 73 質量% / 25 質量% / 2 質量%)」に代えて、高分子化合物 P F 2 及び化合物 P 5 (高分子化合物 P F 2 / 化合物 P 5 = 75 質量% / 25 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 B P D 1 0 を作製した。

20

発光素子 B P D 1 0 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。100 cd / m² における E Q E は 11.2%、C I E 色度座標 (x , y) は (0.162 , 0.240) であった。結果を表 4 に示す。発光素子 B P D 1 0 の 100 cd / m² における発光スペクトルの半値幅は 68.9 nm であった。

【 0 5 3 6 】

【 表 4 】

| Example / Comparative Example | Device | Conformation | Emission Layer | | N _r | T _p - S _f [eV] | T _p - T _f [eV] | EQE 100cd/m ² | CIE(x,y) 100cd/m ² |
|-------------------------------|--------|--------------|--------------------|--|----------------|---|---|--------------------------|-------------------------------|
| | | | Mixing Ratio (wt%) | | | | | | |
| Example BPD1 | BPD1 | H1/P3/PF1 | 55/25/20 | | 0.311 | 0.15 | 0.36 | 16.4 | (0.130, 0.153) |
| Example BPD2 | BPD2 | H1/P5/PF1 | 55/25/20 | | 0.311 | 0.08 | 0.29 | 16.0 | (0.138, 0.197) |
| Example BPD3 | BPD3 | H1/P11/PF1 | 55/25/20 | | 0.311 | 0.01 | 0.22 | 16.2 | (0.143, 0.274) |
| Example BPD4 | BPD4 | H1/P3/PF2 | 55/25/20 | | 0.297 | 0.05 | 0.23 | 11.6 | (0.149, 0.141) |
| Example BPD5 | BPD5 | H1/P5/PF2 | 55/25/20 | | 0.297 | -0.02 | 0.16 | 14.7 | (0.170, 0.314) |
| Example BPD7 | BPD7 | P3/PF1 | 25/75 | | 0.311 | 0.15 | 0.36 | 11.0 | (0.127, 0.124) |
| Example BPD8 | BPD8 | P5/PF1 | 25/75 | | 0.311 | 0.08 | 0.29 | 13.7 | (0.127, 0.132) |
| Example BPD9 | BPD9 | P11/PF1 | 25/75 | | 0.311 | 0.01 | 0.22 | 14.0 | (0.130, 0.166) |
| Example BDP10 | BDP10 | P5/PF2 | 25/75 | | 0.297 | -0.02 | 0.16 | 11.2 | (0.162, 0.240) |

30

【 0 5 3 7 】

なお、表 4 に記載の | T P | - | S F | 及び | T P | - | T F | は、表 2 に記載の実験地に基づいて算出した。

【 0 5 3 8 】

40

< 比較例 R C D 1 > 発光素子 R C D 1 の作製と評価

(陽極及び正孔注入層の形成)

ガラス基板にスパッタ法により 45 nm の厚さで I T O 膜を付けることにより、陽極を形成した。該陽極上に、正孔注入材料 (製品名 : N D - 3 2 0 2、日産化学工業製) をスピコート法により 65 nm の厚さで成膜した。正孔注入層を積層した基板を大気雰囲気下において、ホットプレート上で 50℃、3 分間加熱し、更に 230℃、15 分間加熱することにより正孔注入層を形成した。

【 0 5 3 9 】

(正孔輸送層の形成)

キシレンに高分子化合物 H T L - 1 を 0.6 質量% の濃度で溶解させた。得られたキシ

50

レン溶液を用いて、正孔注入層の上にスピコート法により20 nmの厚さで成膜し、窒素ガス雰囲気下において、ホットプレート上で180、60分間加熱させることにより正孔輸送層を形成した。

【0540】

(発光層の形成)

クロロベンゼンに、高分子化合物HP-1、化合物P6及び化合物F6(化合物HP-1/化合物P6/化合物F6=69.5質量%/30質量%/0.5質量%)を2質量%の濃度で溶解させた。得られたクロロベンゼン溶液を用いて、正孔輸送層の上にスピコート法により80 nmの厚さで成膜し、窒素ガス雰囲気下において、170、10分間加熱させることにより発光層を形成した。

10

【0541】

(陰極の形成)

発光層を形成した基板を蒸着機内において、 1.0×10^{-4} Pa以下にまで減圧した後、陰極として、発光層の上にフッ化ナトリウムを約4 nm、次いで、フッ化ナトリウム層の上にアルミニウムを約80 nm蒸着した。蒸着後、陰極を形成した基板をガラス基板で封止することにより、発光素子RCD1を作製した。

【0542】

(発光素子の評価)

発光素子RCD1に電圧を印加することによりEL発光が観測された。電圧が-5 Vから12 Vまでの範囲で0.2 Vごとに発光素子の評価し、 5000 cd/m^2 におけるEQEは2.3%、CIE色度座標(x, y)は(0.283, 0.603)であった。結果を表5に示す。

20

【0543】

<比較例RCD2> 発光素子RCD2の作製と評価

比較例RCD1の(発光層の形成)における「高分子化合物HP-1、化合物P6及び化合物F6(化合物HP-1/化合物P6/化合物F6=69.5質量%/30質量%/0.5質量%)」に代えて、高分子化合物HP-1、化合物P1及び化合物F6(化合物HP-1/化合物P1/化合物F6=69.5質量%/30質量%/0.5質量%)を用いた以外は、比較例RCD1と同様にして、発光素子RCD2を作製した。

発光素子RCD2に電圧を印加することによりEL発光が観測された。電圧が-5 Vから12 Vまでの範囲では 5000 cd/m^2 に到達しなかった。結果を表5に示す。

30

【0544】

<比較例RCD3> 発光素子RCD3の作製と評価

比較例RCD1の(発光層の形成)における「高分子化合物HP-1、化合物P6及び化合物F6(化合物HP-1/化合物P6/化合物F6=69.5質量%/30質量%/0.5質量%)」に代えて、高分子化合物HP-1、化合物P7及び化合物F6(化合物HP-1/化合物P7/化合物F6=69.5質量%/30質量%/0.5質量%)を用いた以外は、比較例RCD1と同様にして、発光素子RCD3を作製した。

発光素子RCD3に電圧を印加することによりEL発光が観測された。電圧が-5 Vから12 Vまでの範囲では 5000 cd/m^2 に到達しなかった。結果を表5に示す。

40

【0545】

<実施例RD1> 発光素子RD1の作製と評価

比較例RCD1の(発光層の形成)における「高分子化合物HP-1、化合物P6及び化合物F6(化合物HP-1/化合物P6/化合物F6=69.5質量%/30質量%/0.5質量%)」に代えて、高分子化合物HP-1、化合物P8及び化合物F6(化合物HP-1/化合物P8/化合物F6=69.5質量%/30質量%/0.5質量%)を用いた以外は、比較例RCD1と同様にして、発光素子RD1を作製した。

発光素子RD1に電圧を印加することによりEL発光が観測された。 5000 cd/m^2 におけるEQEは13.2%、CIE色度座標(x, y)は(0.280, 0.633)であった。結果を表5に示す。

50

【 0 5 4 6 】

< 実施例 R D 2 > 発光素子 R D 2 の作製と評価

実施例 R D 1 の (発光層の形成) における「高分子化合物 H P - 1、化合物 P 8 及び化合物 F 6 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 8 / 化合物 F 6 = 6 9 . 5 質量 % / 3 0 質量 % / 0 . 5 質量 %)」に代えて、高分子化合物 H P - 1、化合物 P 9 及び化合物 F 6 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 9 / 化合物 F 6 = 6 9 . 5 質量 % / 3 0 質量 % / 0 . 5 質量 %) を用いた以外は、実施例 R D 1 と同様にして、発光素子 R D 2 を作製した。

発光素子 R D 2 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 9 . 5 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 3 0 7 , 0 . 6 3 7) であった。結果を表 5 に示す。

【 0 5 4 7 】

【表 5】

| Example /Comparative Example | Device | Emission Layer Conformation | Emission Layer Mixing Ratio (wt%) | N _r | T _p - S _F [eV] | T _p - T _F [eV] | EQE 5kcd/m ² | CIE(x,y) 5kcd/m ² |
|---------------------------------|--------|--------------------------------|--------------------------------------|----------------|--|--|----------------------------|---------------------------------|
| | | | | | | | | |
| Comparative Example RCD1 | RCD1 | HP-1/P6/F6 | 69.5/30/0.5 | 2.81 | -0.13 | 0.92 | 2.3 | (0.283, 0.603) |
| Comparative Example RCD2 | RCD2 | HP-1/P1/F6 | 69.5/30/0.5 | 2.81 | -0.04 | 1.01 | unable to be evaluated | |
| Comparative Example RCD3 | RCD3 | HP-1/P7/F6 | 69.5/30/0.5 | 2.81 | -0.65 | 0.40 | unable to be evaluated | |
| Example RD1 | RD1 | HP-1/P8/F6 | 69.5/30/0.5 | 2.81 | -0.14 | 0.92 | 13.2 | (0.280, 0.633) |
| Example RD2 | RD2 | HP-1/P9/F6 | 69.5/30/0.5 | 2.81 | -0.19 | 0.87 | 19.5 | (0.307, 0.637) |

10

【 0 5 4 8 】

< 比較例 G C D 1 > 発光素子 G C D 1 の作製と評価

比較例 R C D 1 の (発光層の形成) における「高分子化合物 H P - 1、化合物 P 6 及び化合物 F 6 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 6 / 化合物 F 6 = 6 9 . 5 質量 % / 3 0 質量 % / 0 . 5 質量 %)」に代えて、高分子化合物 H P - 1、化合物 P 6 及び化合物 F 7 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 6 / 化合物 F 7 = 6 9 . 5 質量 % / 3 0 質量 % / 0 . 5 質量 %) を用いた以外は、比較例 R C D 1 と同様にして、発光素子 G C D 1 を作製した。

発光素子 G C D 1 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。電圧が - 5 V から 1 2 V までの範囲では 1 0 0 c d / m² に到達しなかった。結果を表 6 に示す。

【 0 5 4 9 】

< 実施例 G D 1 > 発光素子 G D 1 の作製と評価

比較例 G C D 1 の (発光層の形成) における「高分子化合物 H P - 1、化合物 P 6 及び化合物 F 7 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 6 / 化合物 F 7 = 6 9 . 5 質量 % / 3 0 質量 % / 0 . 5 質量 %)」に代えて、高分子化合物 H P - 1、化合物 P 8 及び化合物 F 7 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 8 / 化合物 F 7 = 6 9 . 5 質量 % / 3 0 質量 % / 0 . 5 質量 %) を用いた以外は、比較例 G C D 1 と同様にして、発光素子 G D 1 を作製した。

発光素子 G D 1 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。1 0 0 c d / m² における E Q E は 5 . 9 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 7 1 , 0 . 6 5 3) であった。結果を表 6 に示す。

【 0 5 5 0 】

< 実施例 G D 2 > 発光素子 G D 2 の作製と評価

実施例 G D 1 の (発光層の形成) における「高分子化合物 H P - 1、化合物 P 8 及び化合物 F 7 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 8 / 化合物 F 7 = 6 9 . 5 質量 % / 3 0 質量 % / 0 . 5 質量 %)」に代えて、高分子化合物 H P - 1、化合物 P 9 及び化合物 F 7 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 9 / 化合物 F 7 = 6 9 . 5 質量 % / 3 0 質量 % / 0 . 5 質量 %) を用いた以外は、実施例 G D 1 と同様にして、発光素子 G D 2 を作製した。

発光素子 G D 2 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。1 0 0 c d / m² における E Q E は 5 . 3 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 9 0 , 0 . 6 5 1) であった。結果を表 6 に示す。

【 0 5 5 1 】

< 実施例 G D 3 > 発光素子 G D 3 の作製と評価

実施例 G D 1 の (発光層の形成) における「高分子化合物 H P - 1、化合物 P 8 及び化

20

30

40

50

化合物 F 7 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 8 / 化合物 F 7 = 6 9 . 5 質量% / 3 0 質量% / 0 . 5 質量%)」に代えて、高分子化合物 H P - 1、化合物 P 9 及び化合物 F 1 1 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 9 / 化合物 F 1 1 = 6 9 . 5 質量% / 3 0 質量% / 0 . 5 質量%) を用いた以外は、実施例 G D 1 と同様にして、発光素子 G D 3 を作製した。

発光素子 G D 3 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。1 0 0 c d / m² における E Q E は 2 2 . 4 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 9 7 , 0 . 6 4 2) であった。結果を表 6 に示す。

【 0 5 5 2 】

< 実施例 G D 4 > 発光素子 G D 4 の作製と評価

実施例 G D 1 の (発光層の形成) における「高分子化合物 H P - 1、化合物 P 8 及び化合物 F 7 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 8 / 化合物 F 7 = 6 9 . 5 質量% / 3 0 質量% / 0 . 5 質量%)」に代えて、高分子化合物 H P - 1、化合物 P 8 及び化合物 F 1 1 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 8 / 化合物 F 1 1 = 6 9 . 5 質量% / 3 0 質量% / 0 . 5 質量%) を用いた以外は、実施例 G D 1 と同様にして、発光素子 G D 4 を作製した。

発光素子 G D 4 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。1 0 0 c d / m² における E Q E は 1 6 . 0 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 7 1 , 0 . 6 4 8) であった。結果を表 6 に示す。

【 0 5 5 3 】

< 実施例 G D 5 > 発光素子 G D 5 の作製と評価

実施例 G D 1 の (発光層の形成) における「高分子化合物 H P - 1、化合物 P 8 及び化合物 F 7 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 8 / 化合物 F 7 = 6 9 . 5 質量% / 3 0 質量% / 0 . 5 質量%)」に代えて、化合物 H 2、化合物 P 9 及び化合物 F 1 1 (化合物 H 2 / 化合物 P 9 / 化合物 F 1 1 = 6 9 . 5 質量% / 3 0 質量% / 0 . 5 質量%) を用いた以外は、実施例 G D 1 と同様にして、発光素子 G D 5 を作製した。

発光素子 G D 5 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。1 0 0 c d / m² における E Q E は 1 8 . 6 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 8 1 , 0 . 6 5 6) であった。結果を表 6 に示す。

【 0 5 5 4 】

< 実施例 G D 6 > 発光素子 G D 6 の作製と評価

実施例 G D 1 の (発光層の形成) における「高分子化合物 H P - 1、化合物 P 8 及び化合物 F 7 (化合物 H P - 1 / 化合物 P 8 / 化合物 F 7 = 6 9 . 5 質量% / 3 0 質量% / 0 . 5 質量%)」に代えて、化合物 H 2、化合物 P 8 及び化合物 F 1 1 (化合物 H 2 / 化合物 P 8 / 化合物 F 1 1 = 6 9 . 5 質量% / 3 0 質量% / 0 . 5 質量%) を用いた以外は、実施例 G D 1 と同様にして、発光素子 G D 6 を作製した。

発光素子 G D 6 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。1 0 0 c d / m² における E Q E は 1 6 . 5 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 3 3 3 , 0 . 6 0 9) であった。結果を表 6 に示す。

【 0 5 5 5 】

【 表 6 】

| Example / Comparative Example | Device | Emission Layer Conformation | Emission Layer | | T _p - S _F [eV] | T _p -T _F [eV] | EQE 100cd/m ² | CIE(x,y) 100kcd/m ² |
|-------------------------------|--------|-----------------------------|--------------------|----------------|---|--------------------------------------|--------------------------|--------------------------------|
| | | | Mixing Ratio (wt%) | N _f | | | | |
| Example GCD1 | GCD1 | HP-1/P6/F7 | 69.5/30/0.5 | 3.73 | -0.07 | 0.64 | unable to be evaluated | |
| Example GD1 | GD1 | HP-1/P8/F7 | 69.5/30/0.5 | 3.73 | -0.08 | 0.63 | 5.9 | (0.271, 0.653) |
| Example GD2 | GD2 | HP-1/P9/F7 | 69.5/30/0.5 | 3.73 | -0.13 | 0.58 | 5.3 | (0.290, 0.651) |
| Example GD3 | GD3 | HP-1/P9/F11 | 69.5/30/0.5 | 4.36 | -0.11 | 0.21 | 22.4 | (0.297, 0.642) |
| Example GD4 | GD4 | HP-1/P8/F11 | 69.5/30/0.5 | 4.36 | -0.06 | 0.26 | 16.0 | (0.271, 0.648) |
| Example GD5 | GD5 | H2/P9/F11 | 69.5/30/0.5 | 4.36 | -0.11 | 0.21 | 18.6 | (0.281, 0.656) |
| Example GD6 | GD6 | H2/P8/F11 | 69.5/30/0.5 | 4.36 | -0.06 | 0.26 | 16.5 | (0.333, 0.609) |

【 0 5 5 6 】

< 実施例 G D 7 > 発光素子 G D 7 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%)」に代えて

、化合物 H 1、化合物 P 1 0 及び化合物 F 1 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 0 / 化合物 F 1 1 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 G D 7 を作製した。

発光素子 G D 7 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 0 . 3 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 0 3 , 0 . 6 7 5) であった。結果を表 7 に示す。

【 0 5 5 7 】

< 実施例 G D 8 > 発光素子 G D 8 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) 」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 1 2 及び化合物 F 1 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 2 / 化合物 F 1 1 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 G D 8 を作製した。

発光素子 G D 8 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 1 . 6 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 1 7 , 0 . 6 7 8) であった。結果を表 7 に示す。

【 0 5 5 8 】

< 実施例 G D 9 > 発光素子 G D 9 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) 」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 1 1 及び化合物 F 1 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 1 / 化合物 F 1 1 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 G D 9 を作製した。

発光素子 G D 9 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 2 . 6 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 1 3 , 0 . 6 8 1) であった。結果を表 7 に示す。

【 0 5 5 9 】

< 実施例 G D 1 0 > 発光素子 G D 1 0 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) 」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 1 3 及び化合物 F 1 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 3 / 化合物 F 1 1 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 G D 1 0 を作製した。

発光素子 G D 1 0 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 1 . 8 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 6 2 , 0 . 6 4 7) であった。結果を表 7 に示す。

【 0 5 6 0 】

< 実施例 G D 1 1 > 発光素子 G D 1 1 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) 」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 2 及び化合物 F 1 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 2 / 化合物 F 1 1 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 G D 1 1 を作製した。

発光素子 G D 1 1 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 1 0 . 7 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 2 1 , 0 . 6 7 7) であった。結果を表 7 に示す。

【 0 5 6 1 】

< 実施例 G D 1 2 > 発光素子 G D 1 2 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量% / 2 5 質量% / 2 質量%) 」に代えて

、化合物 H 1、化合物 P 1 4 及び化合物 F 1 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 4 / 化合物 F 1 1 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 G D 1 2 を作製した。

発光素子 G D 1 2 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 9 . 1 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 0 3 , 0 . 6 7 6) であった。結果を表 7 に示す。

【 0 5 6 2 】

< 実施例 G D 1 3 > 発光素子 G D 1 3 の作製と評価

実施例 B D 1 の (発光層の形成) における「化合物 H 1、化合物 P 3 及び化合物 F 2 (化合物 H 1 / 化合物 P 3 / 化合物 F 2 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %) 」に代えて、化合物 H 1、化合物 P 1 5 及び化合物 F 1 1 (化合物 H 1 / 化合物 P 1 5 / 化合物 F 1 1 = 7 3 質量 % / 2 5 質量 % / 2 質量 %) を用いた以外は、実施例 B D 1 と同様にして、発光素子 G D 1 3 を作製した。

発光素子 G D 1 3 に電圧を印加することにより E L 発光が観測された。5 0 0 0 c d / m² における E Q E は 9 . 0 %、C I E 色度座標 (x , y) は (0 . 2 1 1 , 0 . 6 7 5) であった。結果を表 7 に示す。

【 0 5 6 3 】

【 表 7 】

| Example / Comparative Example | Device | Conformation | Emission Layer | | N _f | T _p - S _F [eV] | T _p - T _F [eV] | EQE 5kcd/m ² | CIE(x,y) 5kcd/m ² |
|-------------------------------|--------|--------------|--------------------|--|----------------|---|---|-------------------------|------------------------------|
| | | | Mixing Ratio (wt%) | | | | | | |
| Example GD7 | GD7 | H1/P10/F11 | 73/25/2 | | 4.36 | 0.18 | 0.50 | 10.3 | (0.203, 0.675) |
| Example GD8 | GD8 | H1/P12/F11 | 73/25/2 | | 4.36 | 0.14 | 0.46 | 11.6 | (0.217, 0.678) |
| Example GD9 | GD9 | H1/P11/F11 | 73/25/2 | | 4.36 | 0.13 | 0.45 | 12.6 | (0.213, 0.681) |
| Example GD10 | GD10 | H1/P13/F11 | 73/25/2 | | 4.36 | 0.21 | 0.53 | 11.8 | (0.262, 0.647) |
| Example GD11 | GD11 | H1/P2/F11 | 73/25/2 | | 4.36 | 0.20 | 0.52 | 10.7 | (0.221, 0.677) |
| Example GD12 | GD12 | H1/P14/F11 | 73/25/2 | | 4.36 | 0.14 | 0.46 | 9.1 | (0.203, 0.676) |
| Example GD13 | GD13 | H1/P15/F11 | 73/25/2 | | 4.36 | 0.16 | 0.48 | 9.0 | (0.211, 0.675) |

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

| | | | | | |
|----------------|--------------|-----------|----------------|--------|---|
| <i>H 1 0 K</i> | 85/60 | (2023.01) | <i>H 1 0 K</i> | 85/60 | |
| <i>C 0 7 F</i> | 5/02 | (2006.01) | <i>C 0 7 F</i> | 5/02 | F |
| <i>C 0 7 F</i> | 15/00 | (2006.01) | <i>C 0 7 F</i> | 15/00 | E |
| <i>H 1 0 K</i> | 101/10 | (2023.01) | <i>H 1 0 K</i> | 101:10 | |
| <i>H 1 0 K</i> | 101/30 | (2023.01) | <i>H 1 0 K</i> | 101:30 | |

(72)発明者 飯島 孝幸

茨城県つくば市北原 6 番 住友化学株式会社内

(72)発明者 浅田 浩平

茨城県つくば市北原 6 番 住友化学株式会社内

(72)発明者 安倍 太一

茨城県つくば市北原 6 番 住友化学株式会社内

審査官 岩井 好子

(56)参考文献

特表 2 0 1 7 - 5 0 2 5 1 6 (J P , A)

国際公開第 2 0 1 6 / 1 4 3 6 2 4 (W O , A 1)

国際公開第 2 0 1 9 / 0 0 4 2 4 7 (W O , A 1)

国際公開第 2 0 2 0 / 2 0 3 2 0 9 (W O , A 1)

LEE, Kyung Hyung, et al. , Phosphor sensitized thermally activated delayed fluorescence or ganic light-emitting diodes with ideal deep blue device performances , JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY C , 2019年07月28日 , VOL.7, NO.28 , Pages.8562-8568 , Figs.1,3-4

(58)調査した分野 (Int.Cl. , D B 名)

H 1 0 K 5 0 / 1 1

C 0 9 K 1 1 / 0 6

H 1 0 K 5 0 / 0 0

H 1 0 K 5 0 / 1 2

H 1 0 K 8 5 / 3 0

H 1 0 K 8 5 / 6 0

C 0 7 F 5 / 0 2

C 0 7 F 1 5 / 0 0

H 1 0 K 1 0 1 / 1 0

H 1 0 K 1 0 1 / 3 0

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)