

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2022年2月3日(03.02.2022)



(10) 国際公開番号

WO 2022/024664 A1

- (51) 国際特許分類:
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2021/025092
- (22) 国際出願日: 2021年7月2日(02.07.2021)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2020-127510 2020年7月28日(28.07.2020) JP
- (71) 出願人: 住友化学株式会社
(SUMITOMO CHEMICAL COMPANY, LIMITED) [JP/JP]; 〒1048260 東京都中央区新川二丁目2番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 松本 龍二 (MATSUMOTO, Ryuji);
〒9231201 石川県能美市岩内町1番地4-7 株式会社 J O L E D 内 Ishikawa (JP).
- (74) 代理人: 中山 亨, 外(NAKAYAMA, Tohru et al.);
〒5418550 大阪府大阪市中央区北浜四丁目5番3番3号住友化学株式会社内 Osaka (JP).
- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

(54) Title: COMPOSITION AND LIGHT-EMITTING ELEMENT

(54) 発明の名称: 組成物及び発光素子

(57) Abstract: Provided are: a composition useful for manufacturing a light-emitting element having a high light emission efficiency; and a light-emitting element containing said composition. A composition comprising: a high molecular weight compound having a repeating unit represented by formula (Y) and a structural unit (SM1) obtained by removing at least one hydrogen atom from a low molecular weight compound (SM1) in which the absolute value of the difference between the energy level of a minimum triplet excited state and the energy level of a minimum singlet excited state is 0.50 eV or less; and a low molecular weight compound (SM2) in which the absolute value of the difference between the energy level of the minimum triplet excited state and the energy level of the minimum singlet excited state is 0.50 eV or less, wherein, when dSM1 represents the contained number of the structural unit (SM1) per unit mass in the composition and dSM2 represents the contained number of the low molecular weight compound (SM2) per unit mass in the composition, dSM1+dSM2 is 2.0×10^{19} (count/g) or more and dSM1/dSM2 is 0.020-50.

(57) 要約: 発光効率が高い発光素子の製造に有用な組成物、及び、該組成物を含有する発光素子を提供する。式(Y)で表される繰り返し単位、及び、最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50 eV以下である低分子化合物(SM1)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位(SM1)を有する高分子化合物と、最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50 eV以下である低分子化合物(SM2)と、を含む組成物であって、組成物中の構成単位(SM1)の単位質量当たりの含有数をdSM1、組成物中の低分子化合物(SM2)の単位質量当たりの含有数をdSM2としたとき、dSM1+dSM2が 2.0×10^{19} (個/g)以上であり、且つ、dSM1/dSM2が0.020以上50以下である、組成物。

WO 2022/024664 A1

添付公開書類：

- 一 国際調査報告（条約第21条(3)）

明 細 書

発明の名称：組成物及び発光素子

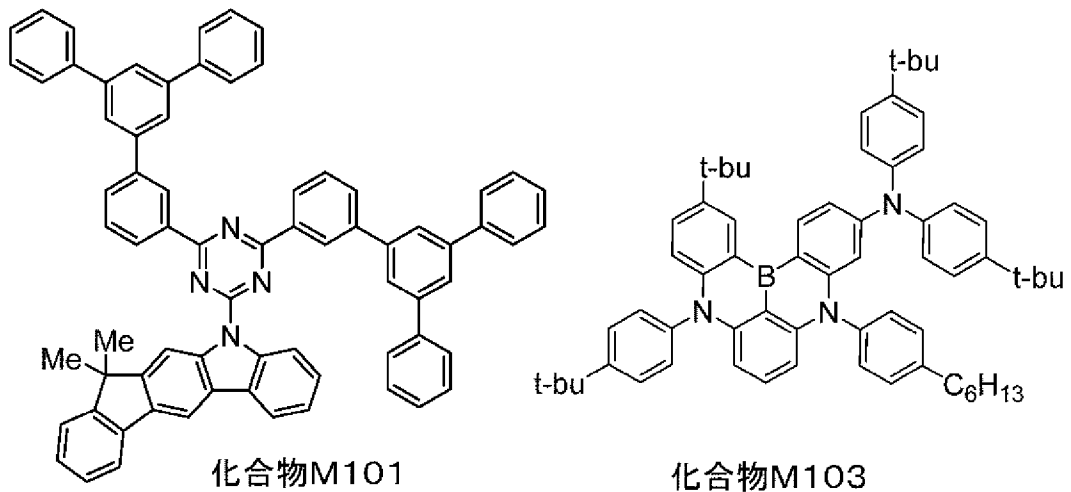
技術分野

[0001] 本発明は、組成物及び発光素子に関する。

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及び2には、化合物M101、化合物M103等の低分子化合物と、高分子化合物とを含む組成物が開示されている。

[化1]



先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：国際公開第2018/062276号

特許文献2：国際公開第2018/062278号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] 特許文献1及び2に記載の組成物において、低分子化合物の最低励起三重項状態のエネルギー準位と最低励起一重項状態のエネルギー準位との差は0

、50 eV以下であり、高分子化合物の最低励起三重項状態のエネルギー準位と最低励起一重項状態のエネルギー準位との差は0.50 eV超であった。これらの組成物を用いた発光素子は、発光効率に更なる向上の余地があった。

[0005] そこで、本発明は、発光効率が高い発光素子の製造に有用な組成物、及び、該組成物を含有する発光素子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]～[12]を提供する。

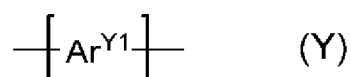
[1]

式(Y)で表される繰り返し単位、及び、最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50 eV以下である低分子化合物(SM1)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位(SM1)を有する高分子化合物と、

最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50 eV以下である低分子化合物(SM2)と、を含む組成物であって

前記組成物中の前記構成単位(SM1)の単位質量当たりの含有数をdSM1、前記組成物中の前記低分子化合物(SM2)の単位質量当たりの含有数をdSM2としたとき、 $dSM1 + dSM2$ が 2.0×10^{19} (個/g)以上であり、且つ、 $dSM1 / dSM2$ が0.020以上50以下である、組成物。

[化2]

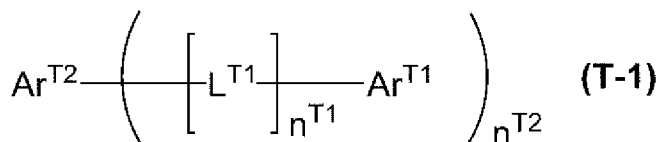


[式中、Ar^{Y1}は、置換基を有していてもよいアリーレン基を表す。]

[2]

前記低分子化合物(SM1)が、式(T-1)で表される化合物、又は、D群から選ばれる基を有する化合物である、[1]に記載の組成物。

[化3]



[式中、

$n^{\text{T}1}$ は、0以上の整数を表す。 $n^{\text{T}1}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$n^{\text{T}2}$ は、0以上の整数を表す。

$\text{Ar}^{\text{T}1}$ は、置換アミノ基又は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。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。 $\text{Ar}^{\text{T}1}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。但し、 $\text{Ar}^{\text{T}1}$ における1価の複素環基は、二重結合を形成していない窒素原子を環内に含み、且つ、 $=\text{N}-$ で表される基、 $-\text{C}(=\text{O})-$ で表される基、 $-\text{S}(=\text{O})-$ で表される基、及び、 $-\text{S}(=\text{O})_2-$ で表される基を環内に含まない1価の複素環基である。

$\text{L}^{\text{T}1}$ は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2価の複素環基、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。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。 $\text{L}^{\text{T}1}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$\text{Ar}^{\text{T}2}$ は、A群、B群及びC群から選ばれる基を表す。但し、 $\text{Ar}^{\text{T}2}$ がA群から選ばれる場合、 $n^{\text{T}2}$ は2である。]

A群： $-\text{C}(=\text{O})-$ 、 $-\text{S}(=\text{O})-$ 及び $-\text{S}(=\text{O})_2-$

B群：電子求引性基を有する芳香族炭化水素から $n^{\text{T}2}$ 個の水素原子を除いた基

C群： $=\text{N}-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から $n^{\text{T}2}$ 個の水素原子を除いた基、 $-\text{C}(=\text{O})-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物

から n^{T2} 個の水素原子を除いた基、 $-S(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T2} 個の水素原子を除いた基、及び、 $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T2} 個の水素原子を除いた基

D群：ホウ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、リン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、アルミニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ガリウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、シリコン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ヒ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、及び、ゲルマニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基

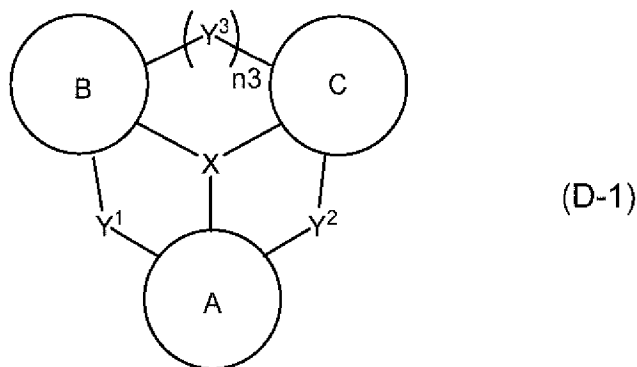
[3]

$dSM1/dSM2$ が、 $0.077 \sim 0.77$ 、又は、 $1.3 \sim 13$ である、[1] 又は [2] に記載の組成物。

[4]

前記低分子化合物 (SM1) が、式 (D-1) で表される化合物である、[1] ~ [3] のいずれかに記載の組成物。

[化4]



[式中、

A環、B環及びC環は、それぞれ独立に、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。

Xは、ホウ素原子、リン原子、 $P=O$ 、 $P=S$ 、アルミニウム原子、ガリウム原子、ヒ素原子、 $Si-R_x$ 又は $Ge-R_x$ を表す。 R_x は、アリー

基又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

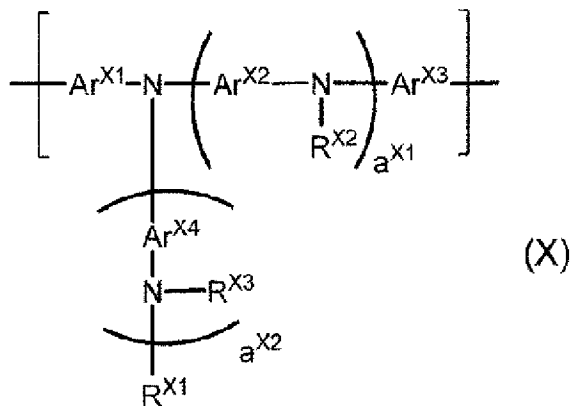
Y^1 は、 $N-R_y$ 、硫黄原子又はセレン原子を表す。 Y^2 及び Y^3 は、それぞれ独立に、酸素原子、 $N-R_y$ 、硫黄原子又はセレン原子を表す。 R_y は、水素原子、アリール基、1価の複素環基、又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R_y が複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。 R_y は、直接又は連結基を介して、前記A環、前記B環又は前記C環と結合していてもよい。

n_3 は、0又は1である。 n_3 が0である場合、 $-Y^3-$ は存在しない。]

[5]

前記高分子化合物が、式(X)で表される構成単位(但し、前記構成単位(SM1)と異なる)を更に含む、[1]~[4]のいずれかに記載の組成物。

[化5]



[式中、

a^{X1} 及び a^{X2} は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す。

Ar^{X1} 及び Ar^{X3} 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。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。

Ar^{X2} 及び Ar^{X4} は、それぞれ独立に、アリーレン基、2価の複素環基、又は、少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基と

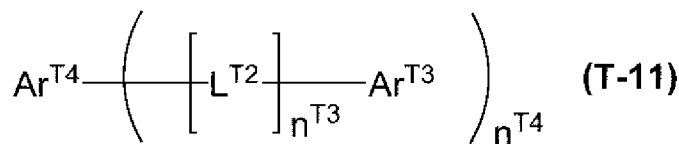
が直接結合した2価の基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。Ar^{x2}及びAr^{x4}が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

R^{x1}、R^{x2}及びR^{x3}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。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。R^{x2}及びR^{x3}が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

[6]

前記低分子化合物(SM2)が、式(T-11)で表される化合物、又は、G群から選ばれる基を有する化合物である、[1]～[5]のいずれかに記載の組成物。

[化6]



[式中、

n^{T3}は、0以上の整数を表す。n^{T3}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^{T4}は、1以上の整数を表す。

Ar^{T3}は、置換アミノ基又は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。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。Ar^{T3}が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。但し、Ar^{T3}における1価の複素環基は、二重結合を形成して

いない窒素原子を環内に含み、且つ、 $=N-$ で表される基、 $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基、及び、 $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含まない1価の複素環基である。

L^{T2} は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2価の複素環基、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。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。 L^{T2} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$A r^{T4}$ は、A群、E群及びF群から選ばれる基を表す。但し、 $A r^{T4}$ がA群から選ばれる基である場合、 n^{T4} は2である。]

A群： $-C(=O)-$ 、 $-S(=O)-$ 及び $-S(=O)_2-$

E群：電子求引性基を有する芳香族炭化水素から n^{T4} 個の水素原子を除いた基

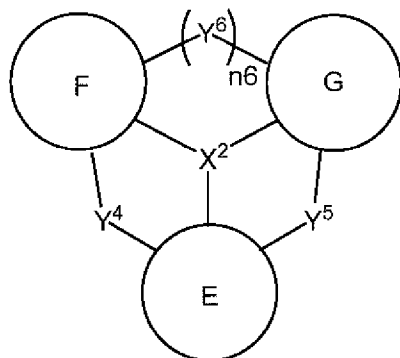
F群： $=N-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T4} 個の水素原子を除いた基、 $-C(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T4} 個の水素原子を除いた基、 $-S(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T4} 個の水素原子を除いた基、及び、 $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T4} 個の水素原子を除いた基

G群：ホウ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、リン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、アルミニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ガリウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、シリコン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ヒ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、及び、ゲルマニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基

[7]

前記低分子化合物(SM2)が、式(D-11)で表される化合物である、[1]～[6]6のいずれかに記載の組成物。

[化7]



(D-11)

[式中、

E環、F環及びG環は、それぞれ独立に、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。

X^2 は、ホウ素原子、リン原子、 $P=O$ 、 $P=S$ 、アルミニウム原子、ガリウム原子、ヒ素原子、 $Si-R_x$ 又は $Ge-R_x$ を表す。 R_x は、アリール基又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Y^4 は、 $N-R_y$ 、硫黄原子又はセレン原子を表す。 Y^5 及び Y^6 は、それぞれ独立に、酸素原子、 $N-R_y$ 、硫黄原子又はセレン原子を表す。 R_y は、水素原子、アリール基、1価の複素環基、又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R_y が複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。 R_y は、直接又は連結基を介して、前記E環、前記F環又は前記G環と結合していてもよい。

n_6 は、0又は1である。 n_6 が0である場合、 $-Y^6-$ は存在しない。]

[8]

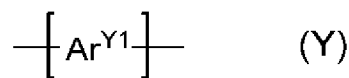
式(Y)で表される繰り返し単位、及び、最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50 eV以下である低分子化合物(SM1-1)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位(SM1-1)を有する第一の高分子化合物と、

式(Y)で表される繰り返し単位、及び、最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50 eV以下である低分子化合物(SM1-2)から水素原子を1つ以上除いてな

る構成単位 (SM1-2) を有する第二の高分子化合物 (但し、前記低分子化合物 (SM1-1) と前記低分子化合物 (SM1-2) とは異なる) と、を含む組成物であって、

前記組成物中の前記構成単位 (SM1-1) の単位質量当たりの含有数を d_{SM1a} 、前記組成物中の前記構成単位 (SM1-2) の単位質量当たりの含有数を d_{SM1b} としたとき、 $d_{SM1a} + d_{SM1b}$ が 2.0×10^1 (個/g) 以上であり、且つ、 d_{SM1a} / d_{SM1b} が 0.020 以上 50 以下である、組成物。

[化8]

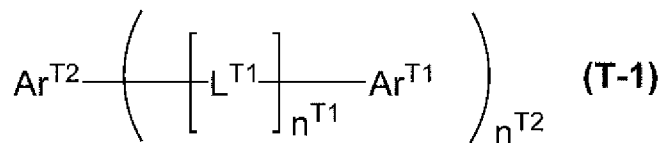


[式中、 Ar^{Y1} は、置換基を有していてもよいアリーレン基を表す。]

[9]

前記低分子化合物 (SM1-1) 及び前記低分子化合物 (SM1-2) が、それぞれ独立に、式 (T-1) で表される化合物、又は、D群から選ばれる基を有する化合物である、[8] に記載の組成物。

[化9]



[式中、

n^{T1} は、0以上の整数を表す。 n^{T1} 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^{T2} は、0以上の整数を表す。

Ar^{T1} は、置換アミノ基又は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。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。 Ar^{T1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。但し、 Ar^{T1} における1価の複素環基は、二重結合を形成して

いない窒素原子を環内に含み、且つ、 $=N-$ で表される基、 $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基、及び、 $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含まない1価の複素環基である。

L^{T1} は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2価の複素環基、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。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。 L^{T1} 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_{rT2} は、A群、B群及びC群から選ばれる基を表す。但し、 A_{rT2} がA群から選ばれる場合、 n^{T2} は2である。]

A群： $-C(=O)-$ 、 $-S(=O)-$ 及び $-S(=O)_2-$

B群：電子求引性基を有する芳香族炭化水素から n^{T2} 個の水素原子を除いた基

C群： $=N-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T2} 個の水素原子を除いた基、 $-C(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T2} 個の水素原子を除いた基、 $-S(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T2} 個の水素原子を除いた基、及び、 $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T2} 個の水素原子を除いた基

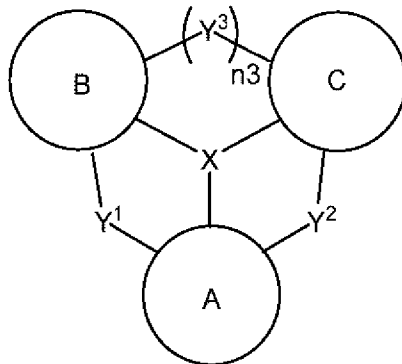
D群：ホウ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、リン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、アルミニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ガリウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、シリコン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ヒ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、及び、ゲルマニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基

[10]

前記低分子化合物(SM1-1)及び前記低分子化合物(SM1-2)が、それぞれ独立に、式(D-1)で表される化合物である、[8]又は[9

]に記載の組成物。

[化10]



(D-1)

[式中、

A環、B環及びC環は、それぞれ独立に、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。

Xは、ホウ素原子、リン原子、P=O、P=S、アルミニウム原子、ガリウム原子、ヒ素原子、Si-R_x又はGe-R_xを表す。R_xは、アリール基又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Y¹は、N-R_y、硫黄原子又はセレン原子を表す。Y²及びY³は、それぞれ独立に、酸素原子、N-R_y、硫黄原子又はセレン原子を表す。R_yは、水素原子、アリール基、1価の複素環基、又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。R_yが複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。R_yは、直接又は連結基を介して、前記A環、前記B環又は前記C環と結合していてもよい。

n₃は、0又は1である。n₃が0である場合、-Y³-は存在しない。]

[11]

[1]～[10]のいずれかに記載の組成物と、溶媒と、を含有する、インク。

[12]

[1]～[10]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

[0007] 本発明によれば、発光効率が高い発光素子の製造に有用な組成物、及び、

該組成物を含有する発光素子が提供される。

発明を実施するための形態

[0008] 以下、本発明の好適な実施形態について詳細に説明する。

[0009] [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。

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。

金属錯体を表す式中、金属との結合を表す実線は、イオン結合、共有結合又は配位結合を意味する。

[0010] 「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。

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。

「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。

「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個以上含まれる構成単位は、一般に、「繰り返し単位」とも呼ばれる。

[0011] 「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3～30であり、より好ましくは4～20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3～30であり、より好ましくは4～20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（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、6-エチルオキシヘキシル基)であってもよい。

[0012] 「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3～30であり、より好ましくは4～20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、シクロヘキシルエチル基、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（例えば、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、フッ素原子等）で置換された基が挙げられる。

[0013] 「芳香族炭化水素基」は、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

成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基を「アリアル基」ともいう。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 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 6～40 であり、より好ましくは 6～20 である。

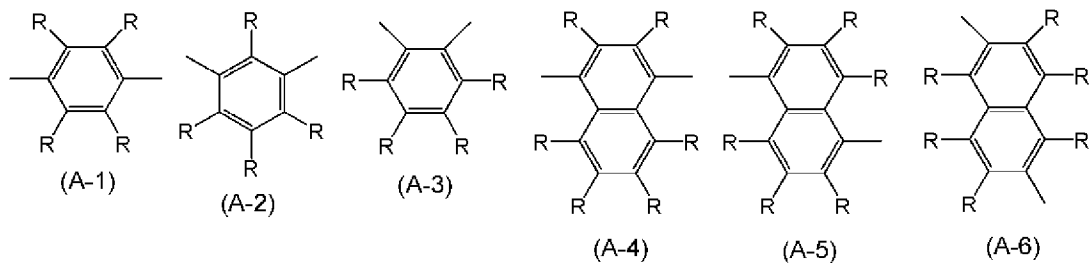
「芳香族炭化水素基」は、例えば、単環式の芳香族炭化水素（例えば、ベンゼンが挙げられる。）、又は、多環式の芳香族炭化水素（例えば、ナフタレン及びインデン等の 2 環式の芳香族炭化水素；アントラセン、フェナントレン、ジヒドロフェナントレン及びフルオレン等の 3 環式の芳香族炭化水素；ベンゾアントラセン、ベンゾフェナントレン、ベンゾフルオレン、ピレン及びフルオランテン等の 4 環式の芳香族炭化水素；ジベンゾアントラセン、ジベンゾフェナントレン、ジベンゾフルオレン、ペリレン及びベンゾフルオランテン等の 5 環式の芳香族炭化水素；スピロビフルオレン等の 6 環式の芳香族炭化水素；並びに、ベンゾスピロビフ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。

[0014] アリア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 6～60 であり、好ましくは 6～20 であり、より好ましくは 6～10 である。アリアル基は、置換基を有していてもよい。アリアル基としては、例えば、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、9-アントラセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、2-フルオレニル基、3-フルオレニル基、4-フルオレニル基、2-フェニルフェニル基、3-フェニルフェニル基、4-フェニルフェニル基、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（例えばアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコ

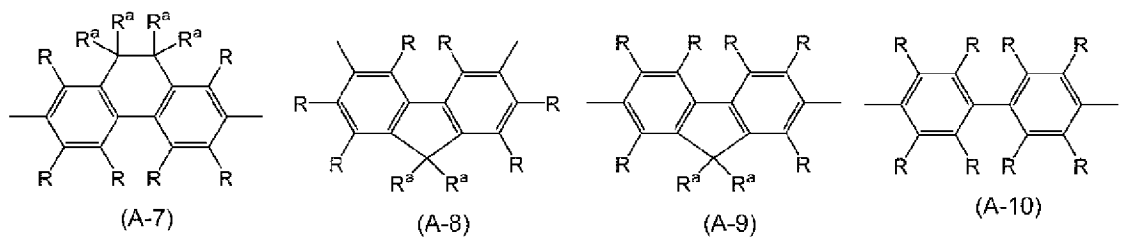
キシ基、アリール基、フッ素原子等)で置換された基が挙げられる。

[0015] アリー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、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。アリーレン基は、置換基を有していてもよい。アリーレン基としては、例えば、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、ナフタセンジイル基、フルオレンジイル基、ピレンジイル基、ペリレンジイル基、クリセンジイル基、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。アリーレン基としては、式(A-1)～式(A-20)で表される基が好ましい。アリーレン基としては、これらの基が複数結合した基を含む。

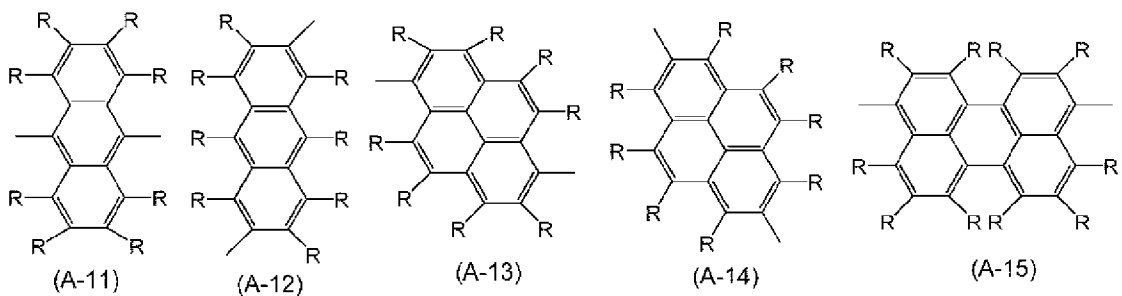
[化11]



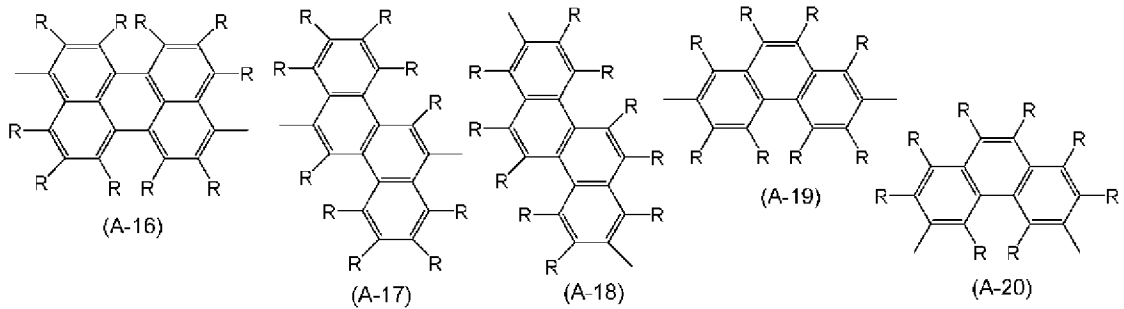
[化12]



[化13]



[化14]



[0016] 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価の複素環基を表す。複数存在するR及びR^aは、各々、同一でも異なってもよく、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。

[0017] 「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4～10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。

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、ラウリルオキシ基、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（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）で置換された基が挙げられる。

「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く、例えば、シクロヘキシルオキシ基が挙げられる。

[0018] 「アリールオキシ基」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。

アリールオキシ基は、置換基を有していてもよく、例えば、フェノキシ基、1-ナフチルオキシ基、2-ナフチルオキシ基、1-アントラセニルオキシ基、9-アントラセニルオキシ基、1-ピレニルオキシ基、及び、これらの基における水素原子一部又は全部が置換基（例えばアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、フッ素原子等）で置換された基が挙げられる。

[0019] 「p価の複素環基」（pは、1以上の整数を表す。）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している水素原子のうちp個の水素原子を除いた残りの原子団を意味する。p価の複素環基の中でも、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している水素原子のうちp個の水素原子を除いた残りの原子団である「p価の芳香族複素環基」が好ましい。

「芳香族複素環式化合物」は、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、ジベンゾボロール、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を意味する。

なお、複素環式化合物及び芳香族複素環式化合物は、低分子化合物（SM1）、低分子化合物（SM1-1）、低分子化合物（SM1-2）及び低分子化合物（SM2）とは異なる化合物であることが好ましい。

[0020] 1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いで、通常、2～60であり、好ましくは4～20である。

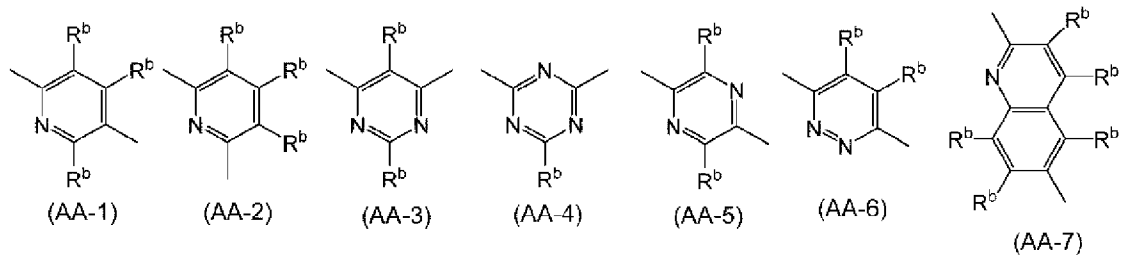
1価の複素環基は、置換基を有していてもよく、例えば、チエニル基、ピロリル基、フリル基、ピリジル基、ピペリジニル基、キノリニル基、イソキ

ノリニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、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（例えばアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基等）で置換された基が挙げられる。

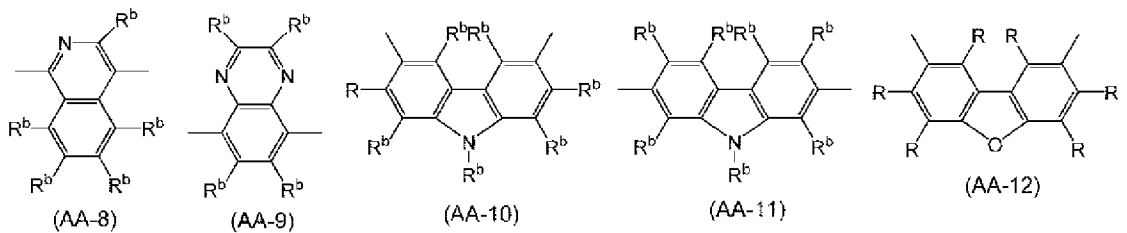
[0021] 2価の複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常、2～60であり、好ましくは、3～20であり、より好ましくは、4～15である。

2価の複素環基は、置換基を有していてもよい。2価の複素環基は、例えば、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、ジベンゾシロール、フェノキサジン、フェノチアジン、アクリジン、ジヒドロアクリジン、フラン、チオフェン、アゾール、ジアゾール又はトリアゾールから、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合している水素原子のうち2個の水素原子を除いた2価の基が挙げられる。2価の複素環基は、好ましくは、式(AA-1)～式(AA-15)及び式(AA-18)～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。

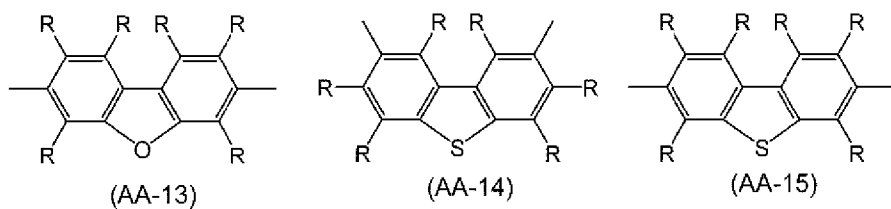
[化15]



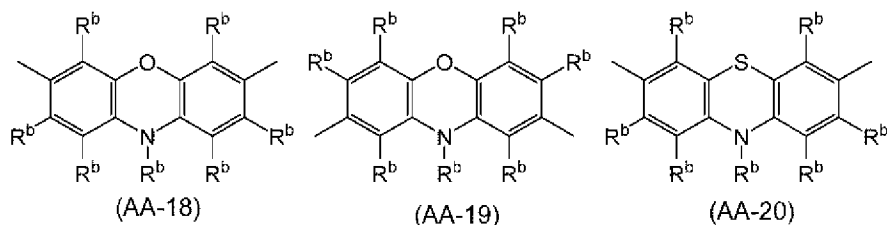
[化16]



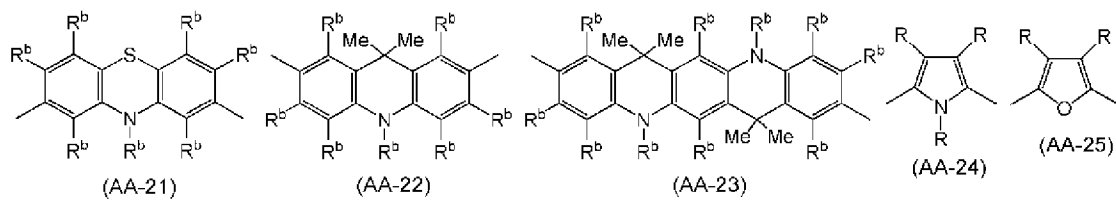
[化17]



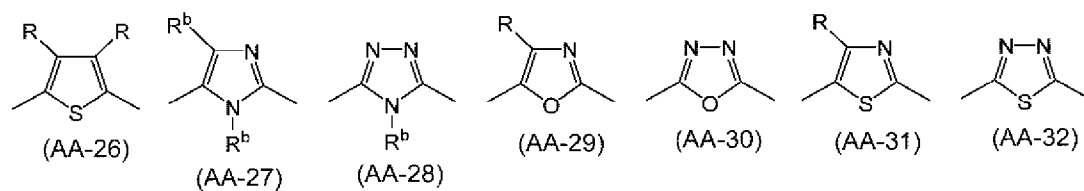
[化18]



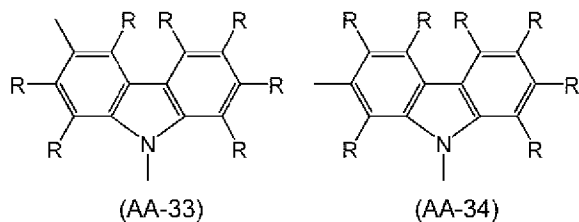
[化19]



[化20]



[化21]



[0022] 式中、R及びR^aは、前記と同じ意味を表す。R^bは、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリアル基を表す。複数存在するR^bは、各々、同一でも異なってもよく、R^b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。

[0023] 「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。

[0024] 「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、特に第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、アリール基又は1価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、それらは同一で異なってもよく、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ールアミノ基が挙げられる。

置換アミノ基としては、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。

[0025] 「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。

[0026] 「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、置換基の炭素原子を含めないで、通常4～30であり、好ましくは4～20である。

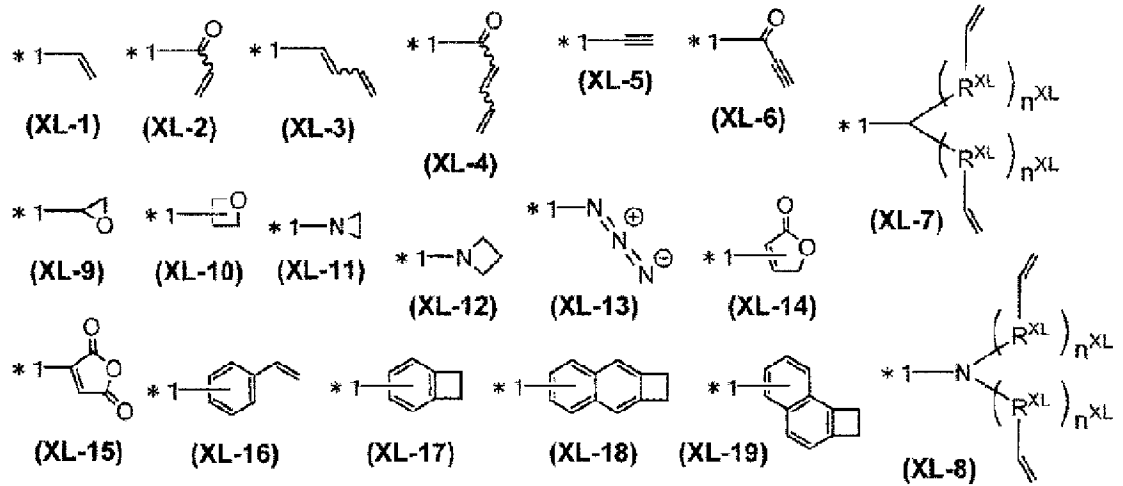
「シクロアルキニル基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子を含めないで、通常4～30であり、好ましくは4～20である。

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-ペンチニル基、4-ペンチニル基、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、及び、こ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。

[0027] 「架橋基」とは、加熱処理、紫外線照射処理、近紫外線照射処理、可視光照射処理、赤外線照射処理、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り、好ましくは、架橋基A群の式(XL-1)～式(XL-19)で表される架橋基であり、より好ましくは、式(XL-1)、式(XL-3)、式(XL-9)、式(XL-10)、式(XL-16)又は式(XL-17)～式(XL-19)で表される架橋基であり、更に好ましくは、式(XL-1)、式(XL-16)又は式(XL-17)～式(XL-19)で表される架橋基であり、特に好ましくは、式(XL-1)又は式(XL-17)で表される架橋基である。

(架橋基A群)

[化22]



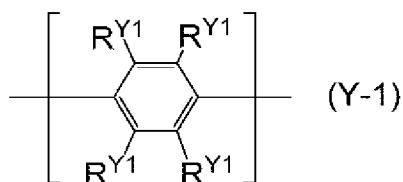
[式中、 R^{XL} は、メチレン基、酸素原子又は硫黄原子を表し、 n^{XL} は、0～5の整数を表す。 R^{XL} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。 n^{XL} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。 $*1$ は結合位置を表す。これらの架橋基は置換基を有していてもよく、該置換基が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子とともに環を形成していてもよい。]

[0028] 「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が好ましい。置換基は架橋基であってもよい。

[0029] [式(Y)で表される構成単位]

式(Y)で表される構成単位としては、発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、式(Y-1)又は式(Y-2)で表される構成単位であり、より好ましくは、式(Y-1)で表される構成単位である。

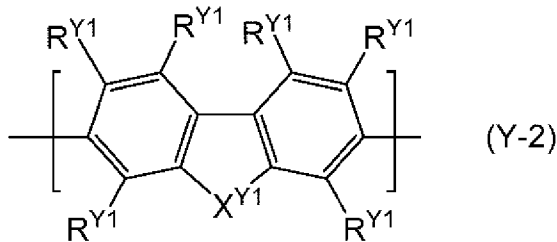
[化23]



[式中、

R^{Y1} 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^{Y1} は、同一でも異なってもよく、隣接する R^{Y1} 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。]

[化24]



[式中、

R^{Y1} は、前記と同じ意味を表す。

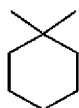
X^{Y1} は、 $-C(R^{Y2})_2-$ 、 $-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-$ 又は $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基を表す。 R^{Y2} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基又はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{Y2} は、同一でも異なってもよく、 R^{Y2} 同士は互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。]

[0030] 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、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。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、 $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基としては、好ましくは式(Y-A1)～式(Y-A5)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。

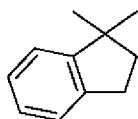
[化25]



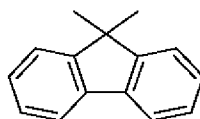
(Y-A1)



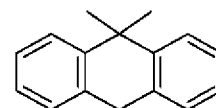
(Y-A2)



(Y-A3)



(Y-A4)

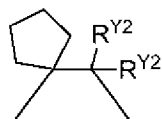


(Y-A5)

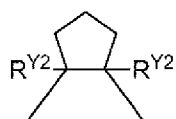
[0031] X^{Y1} において、 $-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-$ で表される基中の2個の R^{Y2} の組み合わせは、好ましくは両方がアルキル基若しくはシクロアルキル基、又は、一方がアルキル基若しくはシクロアルキル基で他方がアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0032] 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、これらの基は置換基を有していてもよい。

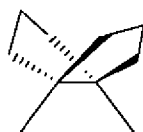
[化26]



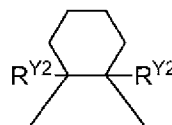
(Y-B1)



(Y-B2)



(Y-B3)



(Y-B4)



(Y-B5)

[式中、 R^{Y2} は前記と同じ意味を表す。]

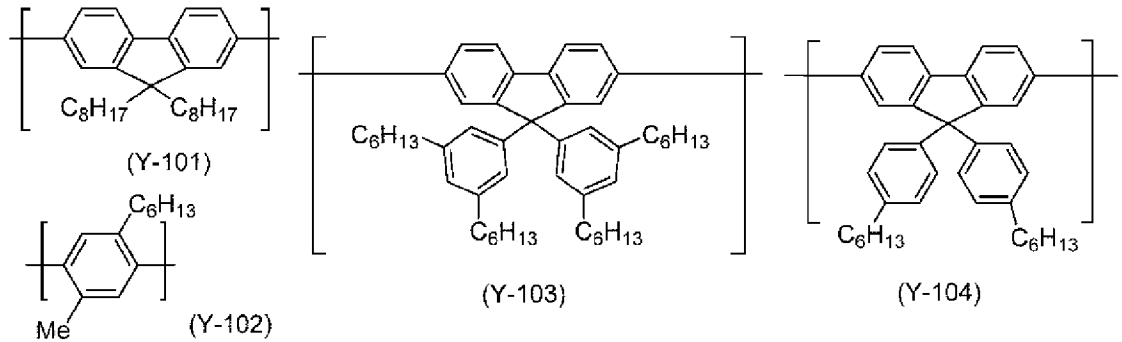
[0033] 式(Y)における Ar^{Y1} としては、好ましくは、式(A-1)、式(A-2)、式(A-6)～(A-10)、式(A-19)又は式(A-20)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0034] Ar^{Y1} で表される基は置換基を有することが好ましく、 Ar^{Y1} で表される基が有していてもよい置換基は、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、より好ましくは、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。

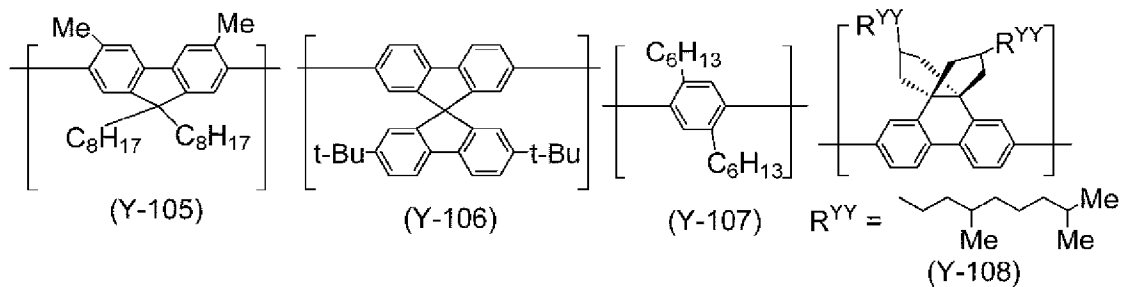
[0035] 式(Y)で表される構成単位としては、例えば、式(Y-101)～式(

Y-108) で表される構成単位が挙げられる。

[化27]



[化28]



[0036] [低分子化合物 (SM1)]

低分子化合物 (SM1) の最低励起三重項状態のエネルギー準位と最低励起一重項状態のエネルギー準位との差 (ΔE_{ST} ともいう) は、 0.50 eV 以下である。低分子化合物 (SM1) の ΔE_{ST} 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、 0.46 eV 以下であり、より好ましくは、 0.40 eV 以下であり、更に好ましくは、 0.35 eV 以下であり、特に好ましくは、 0.30 eV 以下であり、とりわけ好ましくは、 0.25 eV 以下であり、とりわけより好ましくは、 0.20 eV 以下である。また、低分子化合物 (SM1) の ΔE_{ST} は、 0.001 eV 以上であってもよく、 0.005 eV 以上であってもよく、 0.01 eV 以上であってもよく、 0.05 eV 以上であってもよい。

[0037] 低分子化合物 (SM1) としては、熱活性化遅延蛍光 (TADF) 性を有する化合物が好ましい。

[0038] SM1 の ΔE_{ST} は、量子化学計算プログラムである Gaussian09

を用いることができる。例えば、B3LYPレベルの密度汎関数法を用いて、化合物の基底状態を構造最適化した後、B3LYPレベルの時間依存密度汎関数法を用いることで、 ΔE_{ST} を算出することができる。基底関数としては、通常、6-31G*を使用するが、6-31G*を使用できない原子が化合物に含まれる場合は、該原子に対してLANL2DZを使用することができる。

[0039] 低分子化合物(SM1)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(T-1)で表される化合物、又は、D群から選ばれる基を有する化合物であることが好ましい。

[0040] [式(T-1)で表される化合物]

n^{T1} は、通常、0以上10以下の整数であり、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0以上5以下の整数であり、より好ましくは0以上3以下の整数であり、更に好ましくは0以上2以下の整数であり、特に好ましくは0又は1である。

[0041] $A_{r^{T1}}$ における1価の複素環基は、1価のドナー型複素環基が好ましい。前記1価のドナー型複素環基は、二重結合を形成していない窒素原子を環内に含み、且つ、 $=N-$ で表される基、 $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基、及び、 $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含まない1価の複素環基である。

[0042] 1価のドナー型複素環基の窒素原子の数は、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又は2である。

1価のドナー型複素環基において、環を構成する炭素原子の数は、通常1~60であり、好ましくは3~50であり、より好ましくは5~40であり、更に好ましくは7~30であり、特に好ましくは10~25である。

1価のドナー型複素環基において、環を構成するヘテロ原子の数は、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。

1 価のドナー型複素環基は、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、二重結合を形成していない窒素原子を環内に含み、且つ、 $=N-$ で表される基、 $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基及び $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含まない、多環式の複素環式化合物から、環を構成する原子（好ましくは炭素原子又は窒素原子、より好ましくは窒素原子）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、二重結合を形成していない窒素原子を環内に含み、且つ、 $=N-$ で表される基、 $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基及び $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含まない、3 環式~5 環式の複素環式化合物から、環を構成する原子（好ましくは炭素原子又は窒素原子、より好ましくは窒素原子）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、カルバゾール、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、ベンゾカルバゾール、ジベンゾカルバゾール、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（好ましくは炭素原子又は窒素原子、より好ましくは窒素原子）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、カルバゾール、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（好ましくは炭素原子又は窒素原子、より好ましくは窒素原子）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。

[0043] Ar^{T1} における置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、後述の Ar^{T1} が有していてもよい置換基における置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同じである。

[0044] Ar^{T1} が有していてもよい置換基としては、好ましくは、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、アリール基、アリーロキシ基、1 価の複素環基、置換アミノ基、ハロゲン原子又はシアノ基であり、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であり、

更に好ましくは、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、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

[0045] Ar^{T1} 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～7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、単環式又は2環式～5環式（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。

Ar^{T1} が有していてもよい置換基における1価の複素環基は、好ましくは単環式又は2環式～7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又は2環式～5環式（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個以上を除いた基であり、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、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、カルバゾール、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、ベンゾカルバゾール、ジベンゾカルバゾール、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個以上を除いた基であり、特に好ましくはピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェ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個以上を除いた基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

Ar^{T1} 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の例及び好ましい範囲は、 $A r^{T1}$ が有していてもよい置換基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、 $A r^{T1}$ が有していてもよい置換基における1価の複素環基の例及び好ましい範囲と同じである。

[0046] $A r^{T1}$ 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、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、ハロゲン原子又はシアノ基であり、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、更に好ましくは、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。

$A r^{T1}$ 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、 $A r^{T1}$ 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。

[0047] n^{T2} が1以上の整数の場合、 n^{T2} 個の $A r^{T1}$ の少なくとも1つは、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、置換アミノ基、又は置換基を有していてもよい1価のドナー型複素環基であり、更に好ましくは、1価のドナー型複素環基である。

[0048] L^{T1} 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、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基又は2価の複素環基であり、より好ましくはアリーレン基又は2価の複素環基であり、更に好ましくはアリーレン基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

L^{T1} におけるアリーレン基としては、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2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 2 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 2 個を除いた基であり、特に好ましくは、フェニレン基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

L^{T1}における 2 価の複素環基は、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（好ましくは炭素原子）に直接結合する水素原子 2 個を除いた基であり、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（好ましくは炭素原子）に直接結合する水素原子 2 個を除いた基であり、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（好ましくは炭素原子）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、ピリジン、ジアザベンゼン又はトリアジンから環を構成する原子（好ましくは炭素原子）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。

L^{T1}が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、Ar^{T1}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。

[0049] <B 群>

B 群において、電子求引性基を有する芳香族炭化水素とは、電子求引性基を置換基として有する芳香族炭化水素を意味し、該芳香族炭化水素は電子求引性基以外の置換基を有していてもよい。

[0050] 電子求引性基を含む芳香族炭化水素において、芳香族炭化水素が有する電子求引性基の数は、通常、1～20 個であり、好ましくは 1～10 個であり、より好ましくは 1～7 個であり、更に好ましくは 1～5 個であり、特に好ましくは 1～3 個である。

[0051] 電子求引性基としては、例えば、フッ素原子を置換基として有するアルキル基、フッ素原子、シアノ基、ニトロ基、アシル基及びカルボキシル基が挙

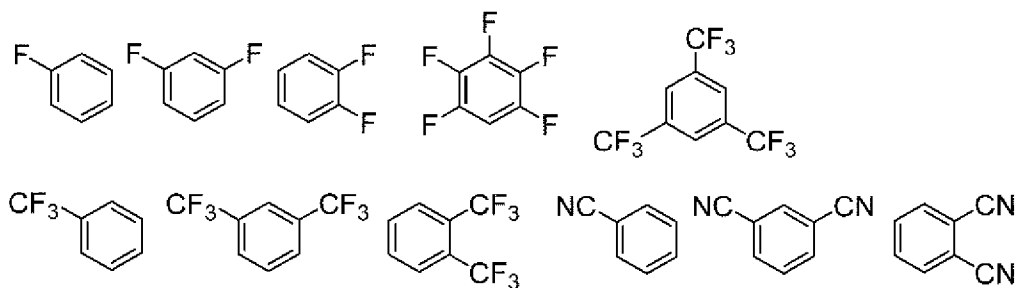
げられ、好ましくは、シアノ基、フッ素原子を置換基として有するアルキル基又はフッ素原子であり、より好ましくはシアノ基である。

[0052] フッ素原子を置換基として有するアルキル基としては、好ましくは、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又はパーフルオロオクチル基である。

[0053] 電子求引性基を含む芳香族炭化水素基における芳香族炭化水素基としては、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個以上を除いた基であり、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個以上を除いた基であり、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、電子求引性基以外の置換基を有していてもよい。

[0054] 電子求引性基を有する芳香族炭化水素としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。

[化29]



[0055] B群の基は、後述するC群の基及びD群の基ではない。

[0056] <C群>

—C(=O)—で表される基を環内に含む複素環式化合物における、環を構成する—C(=O)—で表される基の数は、通常1～10であり、好ましくは1～7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。

$-C(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物としては、例えば、 $-C(=O)-$ で表される基を環内に含む芳香族炭化水素が挙げられ、好ましくは、 $-C(=O)-$ で表される基を環内に含む、2環式又は3環式の芳香族炭化水素であり、より好ましくは、ナフトキノン、アントラキノン、フェナントキノン、インデノン、フルオレノン又はテトラロンであり、更に好ましくはアントラキノン、フェナントキノン又はフルオレノンであり、これらの芳香族炭化水素は置換基を有していてもよい。

[0057] $=N-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物、 $-C(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物、 $-S(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物及び $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物（以下、「アクセプター型複素環式化合物」という。）における、環を構成する $=N-$ で表される基、 $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基及び $-S(=O)_2-$ で表される基の合計の個数は、通常、1～20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。

アクセプター型複素環式化合物において、環を構成する炭素原子の数は、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。

アクセプター型複素環式化合物において、環を構成するヘテロ原子の数は、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。

アクセプター型複素環式化合物は、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、 $-C(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物、 $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物及び $=N-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物からなる群から選ばれる少なくとも1つの複素環式化合物であり、より好ましくは、 $-C(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物及び $=N-$ で表される基を環内に含

む複素環式化合物からなる群から選ばれる少なくとも1つの複素環式化合物であり、更に好ましくは、=N-で表される基を環内に含む複素環式化合物であり、これらの複素環式化合物は置換基を有していてもよい。

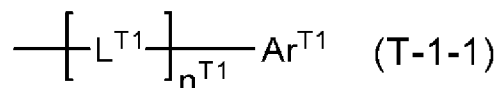
[0058] アクセプター型複素環式化合物は、好ましくは、単環式又は2～5環式の複素環式化合物であり、より好ましくは、オキサジアゾール、チアジアゾール、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、アザナフタレン、ジアザナフタレン、ジベンゾチオフェンジオキシド、ジベンゾチオフェンオキシド、ジベンゾピラノン、アザアントラセン、ジアザアントラセン、アザフェナントレン、ジアザフェナントレン、アザカルバゾール、ジアザカルバゾール、又は、アクリドンであり、更に好ましくは、オキサジアゾール、チアジアゾール、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、ジベンゾチオフェンジオキシド、ジベンゾチオフェンオキシド又はジベンゾピラノンであり、これらの複素環式化合物は置換基を有していてもよい。

[0059] C群の基は、後述するD群の基ではない。

[0060] Ar^{T2} は、好ましくはC群から選ばれる基である。

[0061] Ar^{T2} は、式(T-1-1)で表される基以外の置換基を有していてもよい。該置換基としては、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、及びシクロアルコキシ基であり、より好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基である。

[化30]



[式中、 L^{T1} 、 n^{T1} 及び Ar^{T1} の定義は、上記と同じである。]

[0062] n^{T2} は、通常、0以上10以下の整数であり、本実施形態の発光素子の発光効率が優れるので、好ましくは0以上7以下の整数であり、より好ましくは0以上5以下の整数である。更に好ましくは1以上4以下の整数であり、2又は3であってもよい。

[0063] [D群から選ばれる基を有する化合物]

D群から選ばれる基を有する化合物は、D群から選ばれる基と水素原子とが結合した化合物（即ち、ホウ素原子、リン原子、アルミニウム原子、ガリウム原子、シリコン原子、ヒ素原子又はゲルマニウム原子を含む複素環式化合物）であってもよく、D群から選ばれる基と1個以上の式（ $T-1-1$ ）で表される基とが結合した化合物であってもよく、これらの化合物は置換基を有していてもよい。

[0064] D群から選ばれる基を有する化合物において、D群から選ばれる基に結合する式（ $T-1-1$ ）で表される基の数は、通常、0以上10以下の整数であり、本実施形態の発光素子の発光効率が優れるので、好ましくは0以上7以下の整数であり、より好ましくは0以上5以下の整数である。更に好ましくは0以上4以下の整数であり、0又は1であってもよい。

[0065] D群のホウ素原子、リン原子、アルミニウム原子、ガリウム原子、シリコン原子、ヒ素原子又はゲルマニウム原子を含む複素環式化合物における、ホウ素原子、リン原子、アルミニウム原子、ガリウム原子、シリコン原子、ヒ素原子又はゲルマニウム原子の合計の個数は、通常、1~20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。

[0066] D群のホウ素原子、リン原子、アルミニウム原子、ガリウム原子、シリコン原子、ヒ素原子又はゲルマニウム原子を含む複素環式化合物における、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5~40であり、より好ましくは10~25である。また、複素環式化合物は、酸素原子、窒素原子、硫黄原子、又はセレン原子等を含んでもよい。

[0067] D群のホウ素原子、リン原子、アルミニウム原子、ガリウム原子、シリコン原子、ヒ素原子又はゲルマニウム原子を含む複素環式化合物は、ホウ素原子、リン原子、アルミニウム原子、ガリウム原子、シリコン原子、ヒ素原子及びゲルマニウム原子の群から選ばれる1種以上、及び窒素原子を環内に含む縮合複素環骨格（b）を有する複素環式化合物であることが好ましい。該

縮合複素環骨格 (b) において、縮合複素環骨格 (b) 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 (b) 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。

[0068] 縮合複素環骨格 (b) 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5～40であり、より好ましくは10～25である。

縮合複素環骨格 (b) 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。

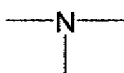
縮合複素環骨格 (b) のホウ素原子、リン原子、アルミニウム原子、ガリウム原子、シリコン原子、ヒ素原子、及びゲルマニウム原子の総数は、置換基に含まれる場合を含めず、通常1～10であり、好ましくは1～5であり、より好ましくは1～3であり、更に好ましくは1である。

縮合複素環骨格 (b) の窒素原子数は、置換基の窒素原子数を含めないで、通常1～20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であり、特に好ましくは2である。

縮合複素環骨格 (b) 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。

[0069] 「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：

[化31]



で表される基を含むことを意味する。

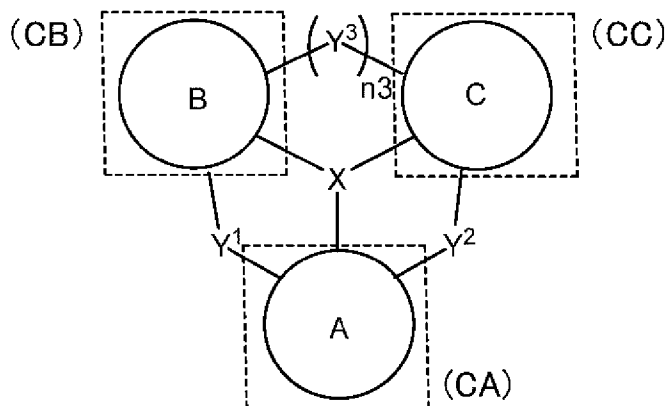
[0070] D群のホウ素原子、リン原子、アルミニウム原子、ガリウム原子、シリコン原子、ヒ素原子又はゲルマニウム原子を含む複素環式化合物としては、式(D-1)で表される化合物が好ましい。

[0071] D群のホウ素原子、リン原子、アルミニウム原子、ガリウム原子、シリコン原子、ヒ素原子又はゲルマニウム原子を含む複素環式化合物としては、ホウ素原子を含む複素環式化合物及びリン原子を含む複素環式化合物が好ましく、ホウ素原子を含む複素環式化合物がより好ましい。

[0072] 式(D-1)における、A環、B環及びC環が有していてもよい置換基としては、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、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、アリール基、又は置換アミノ基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

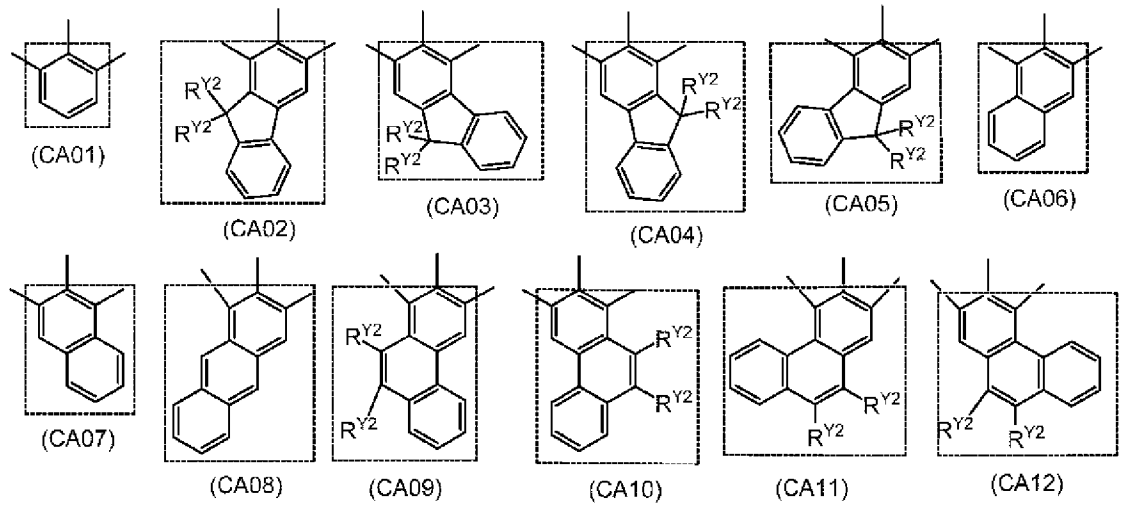
[0073] 式(D-1)における、A環、B環及びC環のより詳しい構造(CA、CB及びCC)を以下に説明する。

[化32]

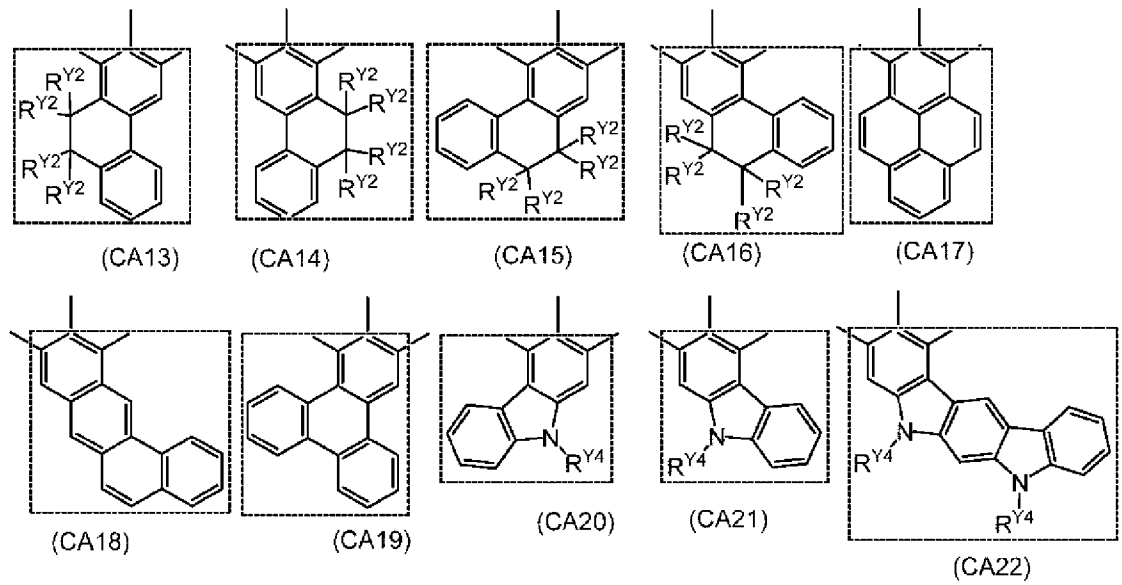


[0074] A環の詳しい構造(CA)としては、例えば、式(CA01)～式(CA38)で表される構造が挙げられ、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、式(CA01)～式(CA19)で表される構造であり、より好ましくは、式(CA01)～式(CA05)で表される構造であり、更に好ましくは、式(CA01)で表される構造である。

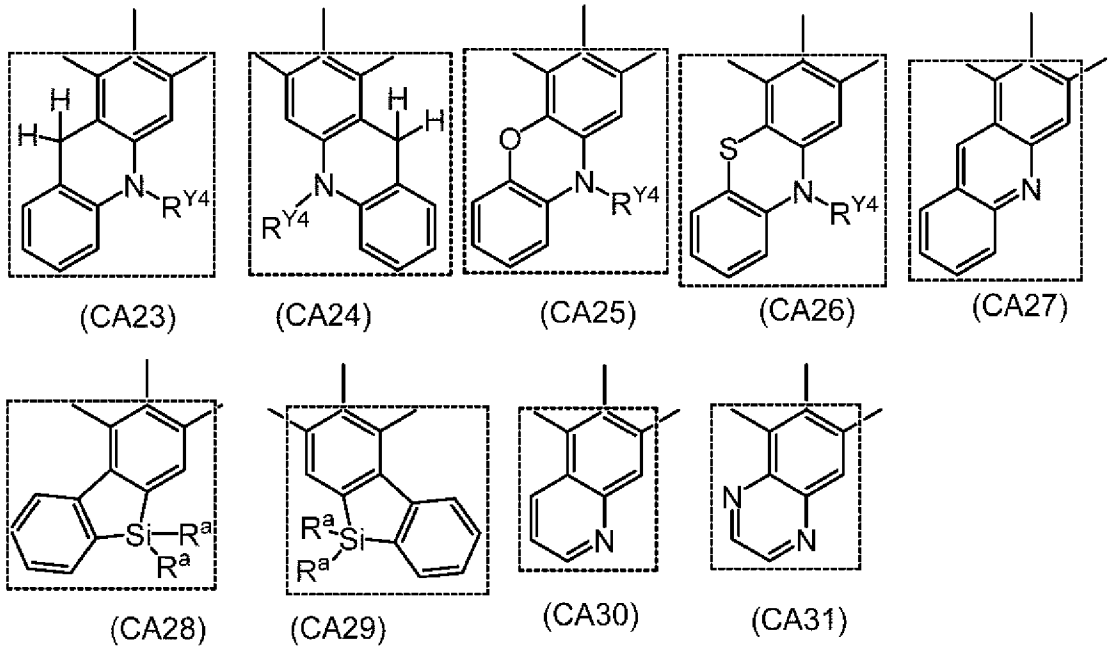
[化33]



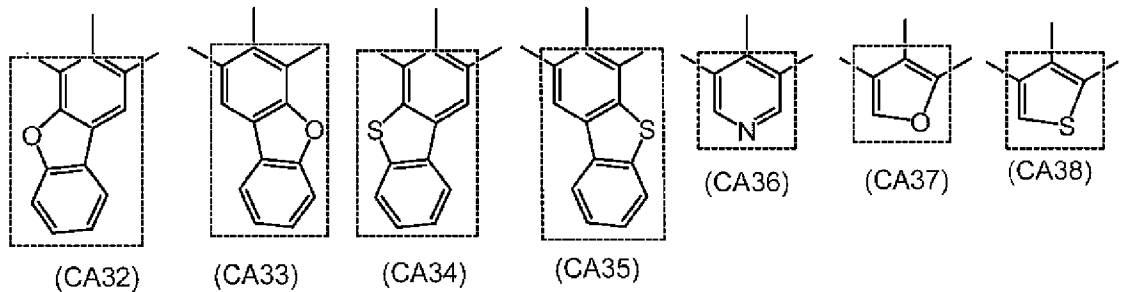
[化34]



[化35]



[化36]



[式中、 R^{Y2} 及び R^a は、前記と同じ意味を表す。

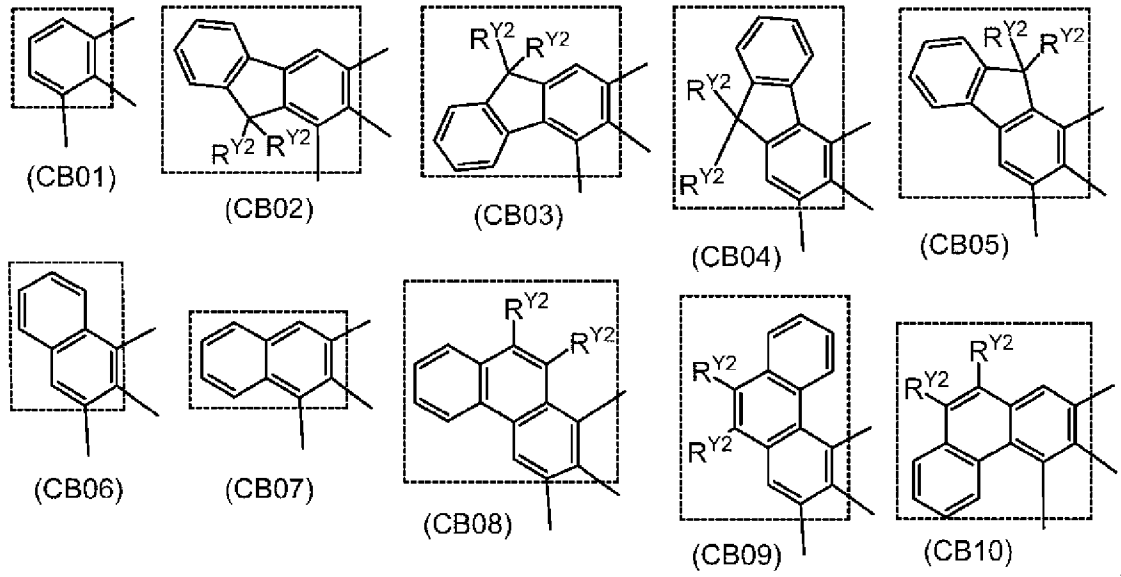
R^{Y4} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R^{Y4} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

式中の水素原子は、A環が有していてもよい置換基に置き換わってもよい。]

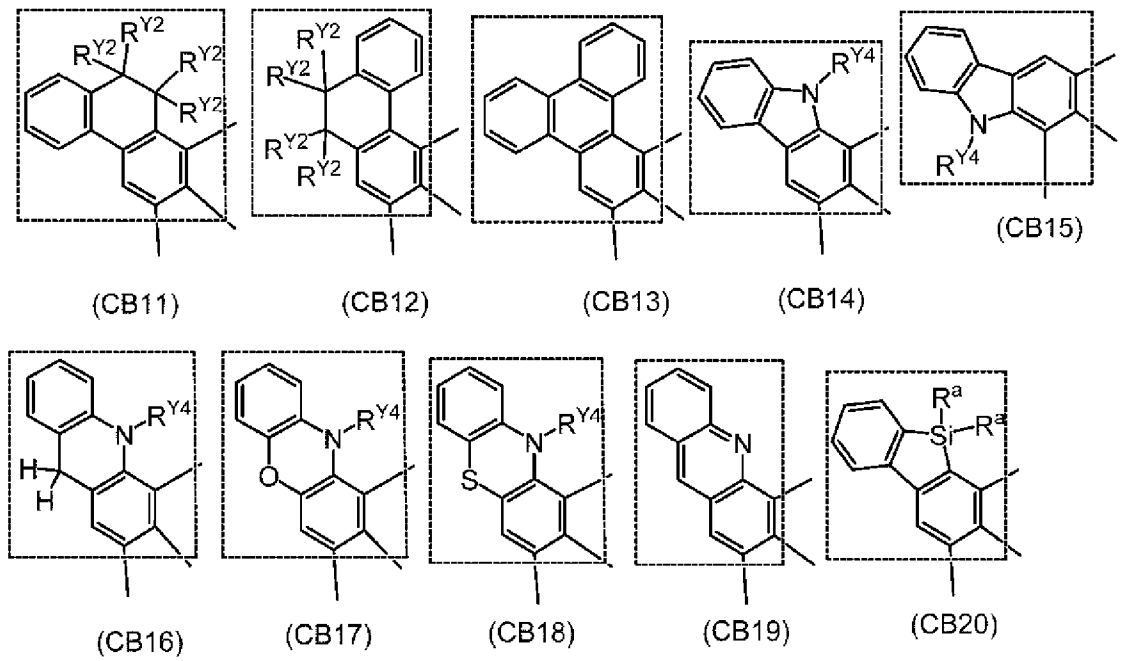
[0075] B環の詳しい構造(CB)としては、例えば、式(CB01)～式(CB24)で表される構造が挙げられ、本実施形態の発光素子の発光効率が優れるので、好ましくは、式(CB01)～式(CB13)で表される構造であり、より好ましくは、式(CB01)～式(CB05)で表される構造であ

り、特に好ましくは、式 (CB01) で表される構造である。

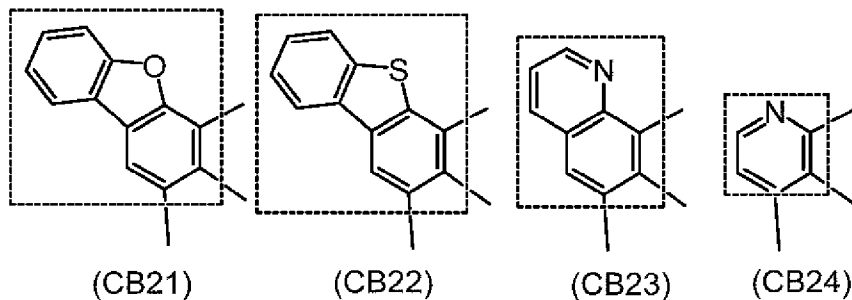
[化37]



[化38]



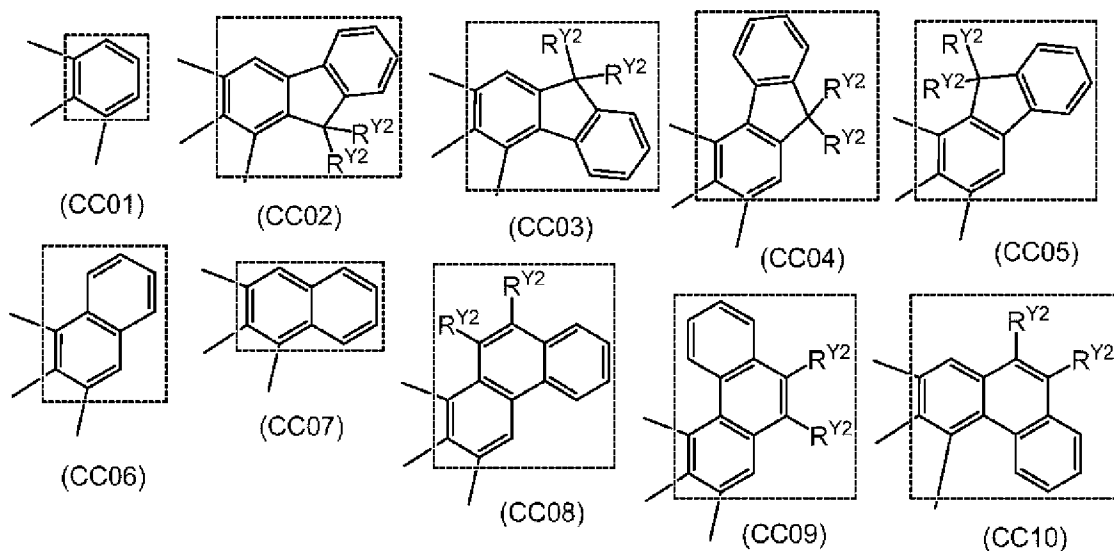
[化39]



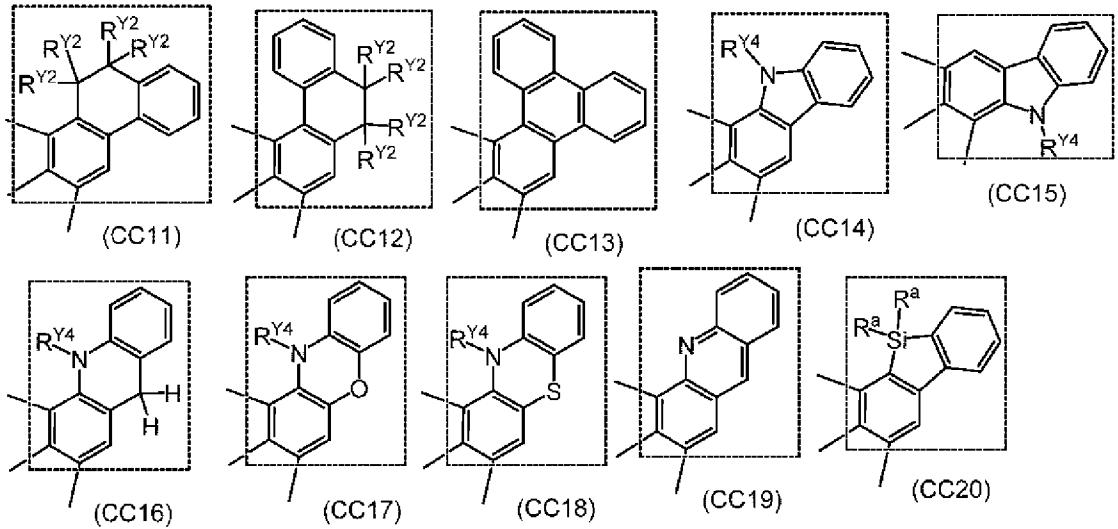
[式中、 R^{Y2} 、 R^{Y4} 及び R^a は、前記と同じ意味を表す。水素原子は、B環が有していてもよい置換基に置き換わっていてもよい。]

[0076] C環の詳しい構造(CC)としては、例えば、式(CC01)~式(CC24)で表される構造が挙げられ、好ましくは、式(CC01)~式(CC13)で表される構造であり、より好ましくは、式(CC01)~式(CC05)で表される構造であり、更に好ましくは、式(CC01)で表される構造である。

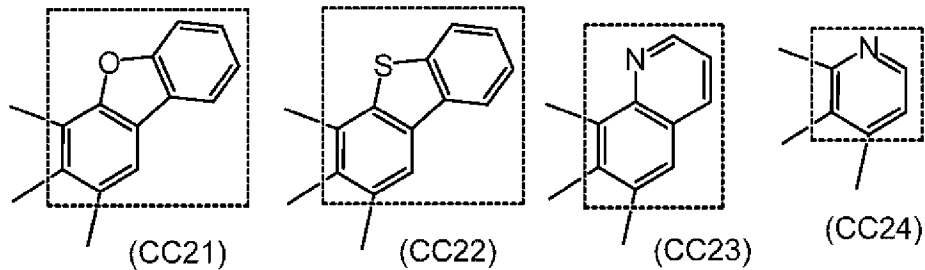
[化40]



[化41]



[化42]



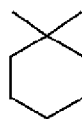
[式中、 R^{Y2} 、 R^{Y4} 及び R^a は、前記と同じ意味を表す。水素原子は、C環が有していてもよい置換基に置き換わっていてもよい。]

[0077] 式(CA02)～式(CA05)、式(CB02)～式(CB05)、及び式(CC02)～式(CC05)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。 $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基における2個の R^{Y2} が互いに結合して、該炭素原子と共に環を形成する場合、 $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基としては、好ましくは式(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。

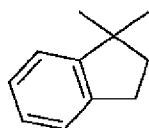
[化43]



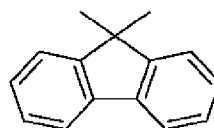
(Y-A1)



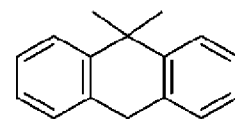
(Y-A2)



(Y-A3)



(Y-A4)

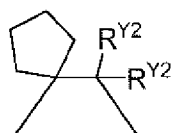


(Y-A5)

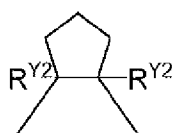
[0078] 式 (CA09) ~ 式 (CA12)、式 (CB08) ~ 式 (CB10) 及び式 (CC08) ~ 式 (CC10) において、 $-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-$ で表される基中の2個の R^{Y2} の組み合わせは、好ましくは両方がアルキル基若しくはシクロアルキル基、又は、一方がアルキル基若しくはシクロアルキル基で他方がアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0079] 式 (CA13) ~ 式 (CA16)、式 (CB11)、式 (CB12)、式 (CC11) 及び式 (CC12) 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置換基を有していてもよい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炭素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。

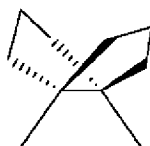
[化44]



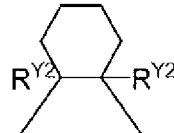
(Y-B1)



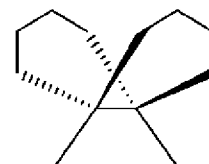
(Y-B2)



(Y-B3)



(Y-B4)



(Y-B5)

[式中、 R^{Y2} は前記と同じ意味を表す。]

[0080] 式 (CA20) ~ 式 (CA26)、式 (CB14) ~ 式 (CB18) 及び式 (CC14) ~ 式 (CC18) において、 R^{Y4} は、好ましくはアルキル基、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であり、これらの基は置

換基を有していてもよい。

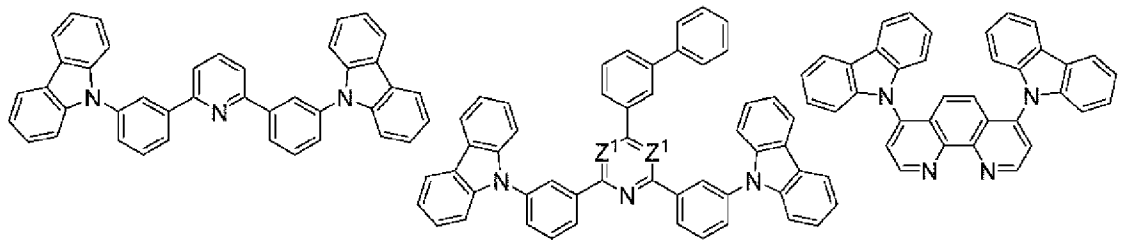
- [0081] 化合物 (B) において、A環、B環及びC環の組み合わせとしては、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは、A環が式 (CA01) ~ 式 (CA05) で表される構造であり、B環が式 (CB01) ~ 式 (CB05) で表される構造であり、且つ、C環が式 (CC01) ~ 式 (CC05) で表される構造であり、より好ましくは、A環が式 (CA01) で表される構造であり、B環が式 (CB01) ~ 式 (CB05) で表される構造であり、且つ、C環が式 (CC01) ~ 式 (CC05) で表される構造であり、更に好ましくは、A環が式 (CA01) で表される構造であり、B環が式 (CB01) で表される構造であり、且つ、C環が式 (CC01) で表される構造である。
- [0082] n_3 は、本実施形態の発光素子の外部量子効率がより優れるので、好ましくは0である。
- [0083] Y^2 及び Y^3 は、好ましくは、 $-N(-R_y)-$ 又は硫黄原子であり、より好ましくは、 $-N(-R_y)-$ である。
- [0084] Y^2 及び Y^3 の少なくとも一つは、本実施形態の発光効率がより優れるので、 $-N(-R_y)-$ であることが好ましく、 Y^2 及び Y^3 の双方が $-N(-R_y)-$ であることがより好ましい。但し、 n_3 が0である場合、 Y^2 は、 $-N(-R_y)-$ が好ましい。
- [0085] R_y 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、水素原子、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価の複素環基であり、より好ましくは、水素原子、又は、置換基を有していてもよいアリール基であり、更に好ましくは、置換基を有していてもよいアリール基である。
- [0086] R_y が連結基を介して、A環、B環又はC環と結合している場合、連結基としては、例えば、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CH_2-$ 等の2価の基、ホウ素原子等の3価の基が挙げられる。
- [0087] R_y が3価の基を介してA環、B環又はC環と結合する場合、通常、A環

とA環上の置換基と連結するか、B環とB環上の置換基と連結するか、C環とC環上の置換基と連結する。

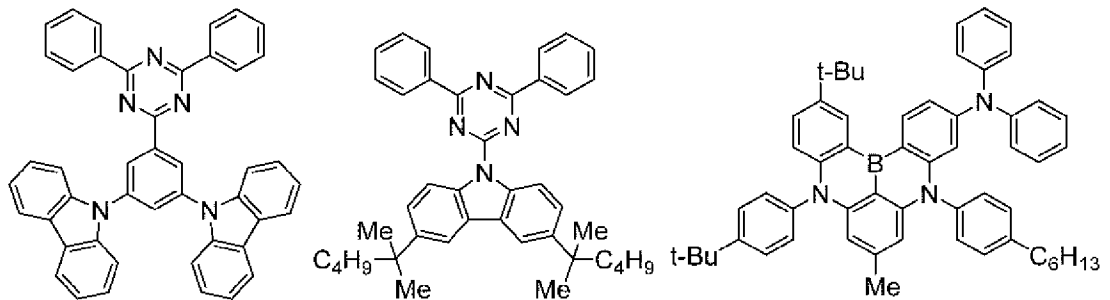
[0088] 低分子化合物 (SM1) の分子量は、好ましくは $1 \times 10^2 \sim 5 \times 10^3$ であり、より好ましくは $2 \times 10^2 \sim 3 \times 10^3$ であり、更に好ましくは $3 \times 10^2 \sim 1.5 \times 10^3$ であり、特に好ましくは $4 \times 10^2 \sim 1 \times 10^3$ である。

[0089] 低分子化合物 (SM1) としては、例えば、下記式で表される化合物が挙げられる。

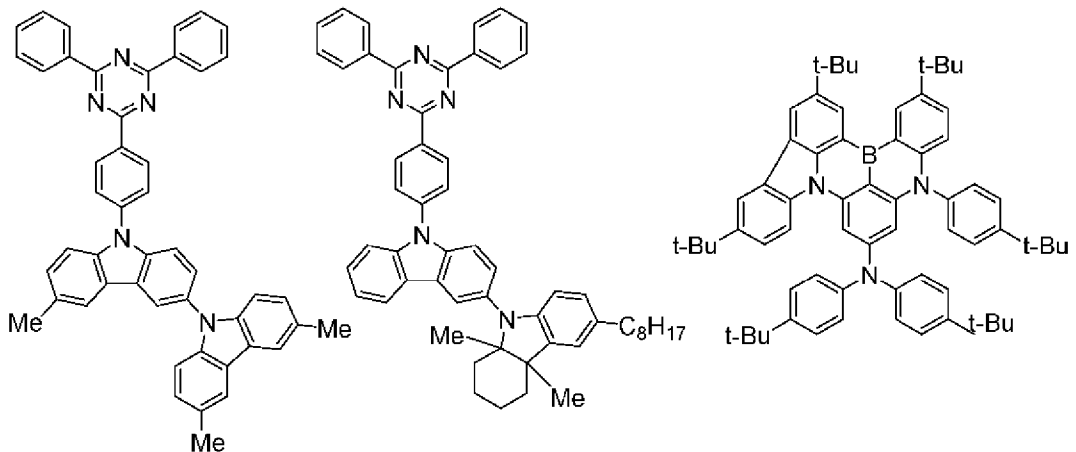
[化45]



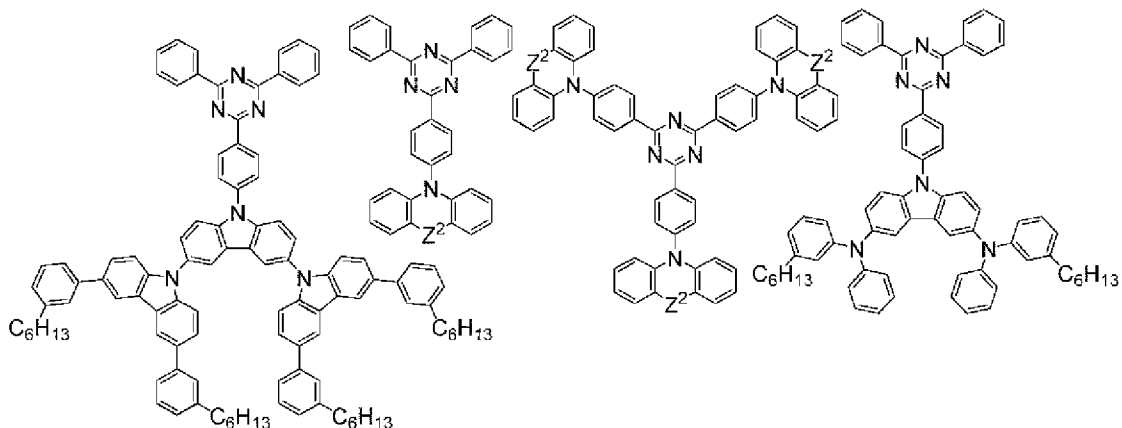
[化46]



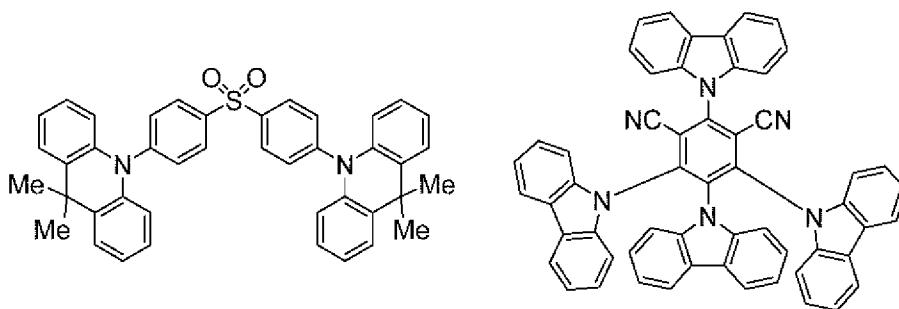
[化47]



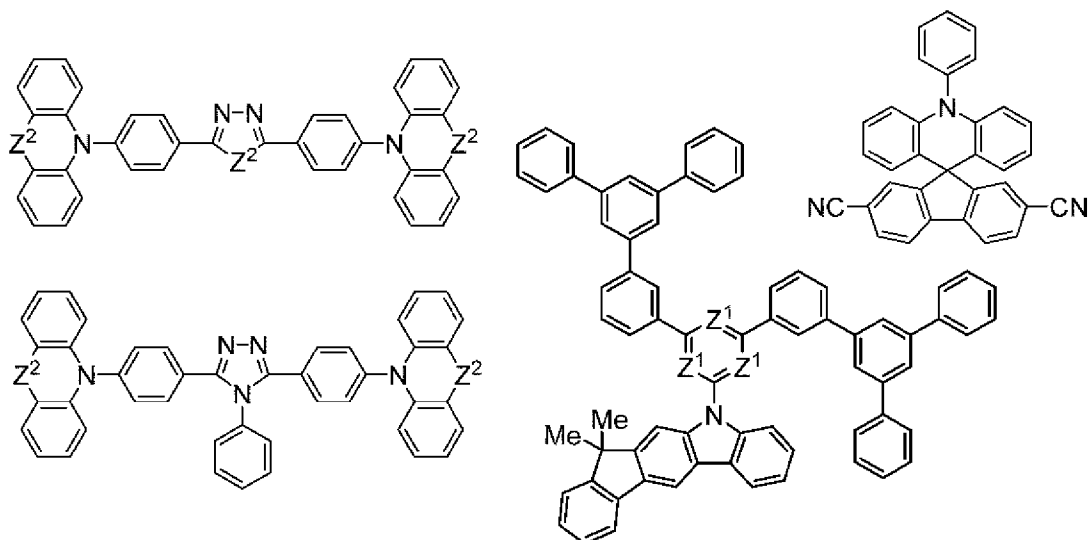
[化48]



[化49]



[化50]



[式中、

Z¹は、-N=で表される基、又は、-CH=で表される基を表す。

Z²は、酸素原子又は硫黄原子を表す。

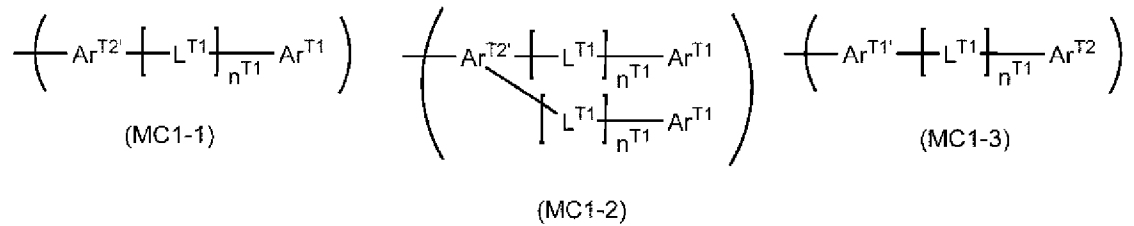
複数存在するZ¹及びZ²は、各々、同一でも異なってもよい。]

[0090] Z¹は-N=で表される基であることが好ましい。Z²は酸素原子であることが好ましい。

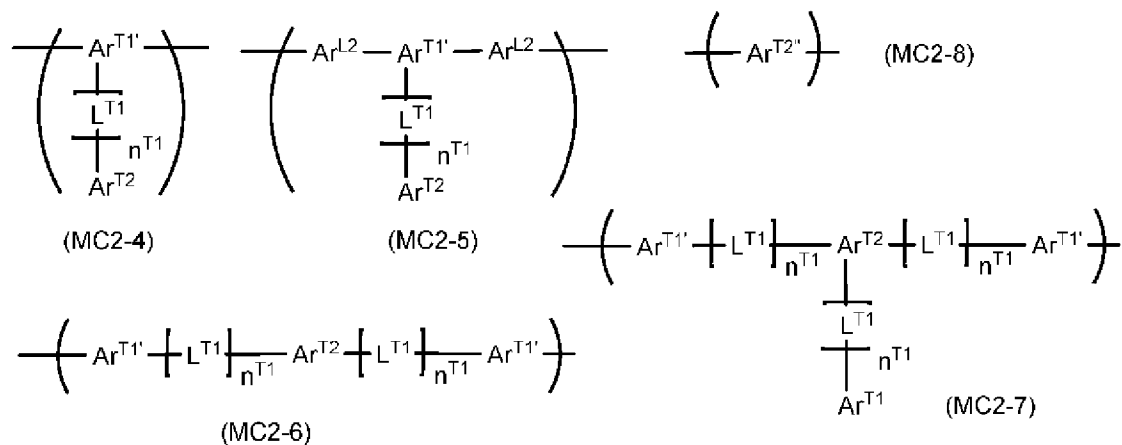
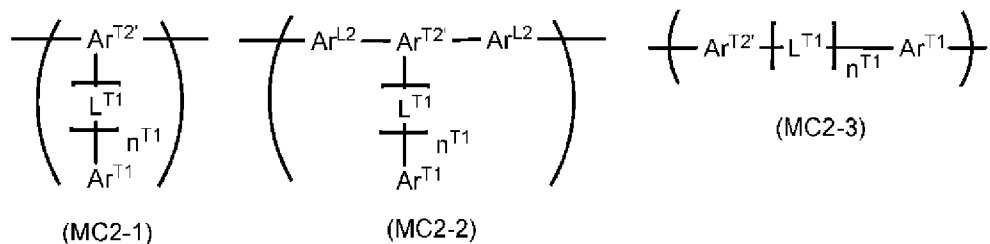
[0091] 低分子化合物 (SM1) は、Aldrich、Luminescence Technology Corp. 等から入手可能である。その他には、例えば、国際公開第2007/063754号、国際公開第2008/056746号、国際公開第2011/032686号、国際公開第2012/096263号、特開2009-227663号公報、特開2010-275255号公報、Advanced Materials, 26巻, 7931-7958頁, 2014年に記載されている方法に従って合成することができる。

[0092] 低分子化合物 (SM1) から水素原子を除いてなる基からなる構成単位としては、例えば、式 (MC1-1) ~ 式 (MC1-3)、式 (MC2-1) ~ 式 (MC2-8)、及び式 (MC3-1) ~ 式 (MC3-5) で表される構成単位が挙げられる。

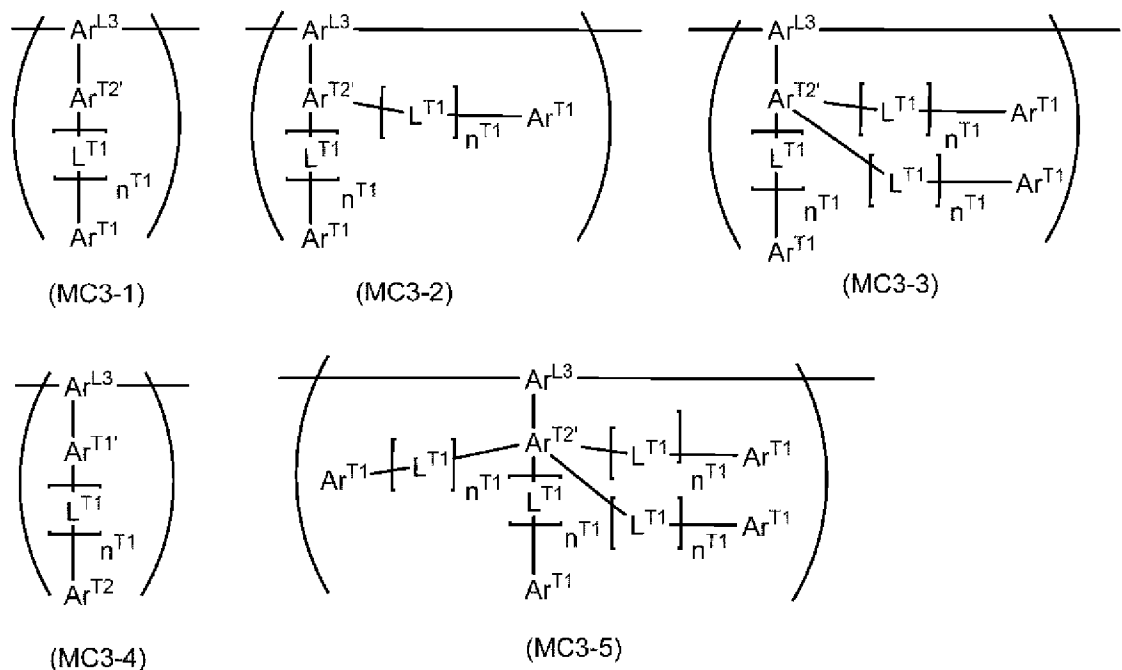
[化51]



[化52]



[化53]



[式中、

$n^{\text{T}1}$ 、 $L^{\text{T}1}$ 、 $Ar^{\text{T}1}$ 及び $Ar^{\text{T}2}$ は、前記と同じ意味である。

$Ar^{\text{L}2}$ 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^{L3}は、芳香族炭化水素環又は芳香族複素環から3個の水素原子を除いた基である。

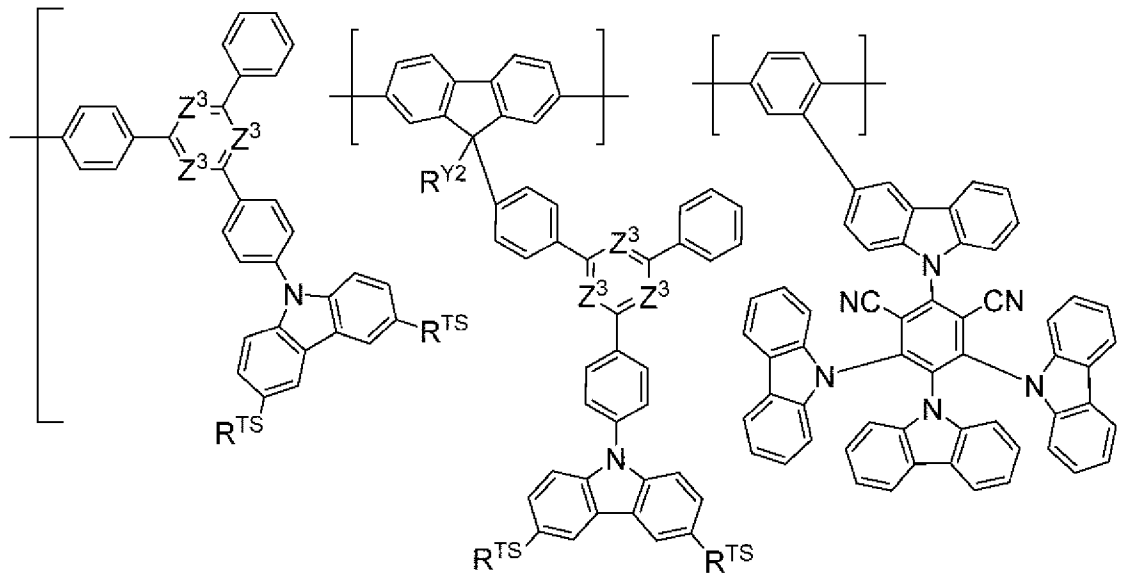
Ar^{T1'}は、Ar^{T1}から水素原子を1個除いた基である。

Ar^{T2'}は、Ar^{T2}から水素原子を1個除いた基若しくは水素原子を2個除いた基、又は、D群から選ばれる基である。

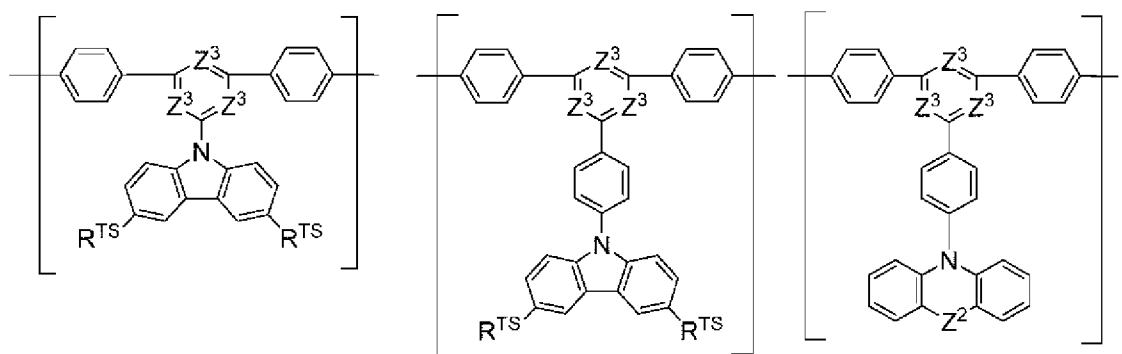
Ar^{T2''}は、D群から選ばれる基である]

[0093] 式 (MC 1-1) ~式 (MC 1-3)、式 (MC 2-1) ~式 (MC 2-7)、及び式 (MC 3-1) ~式 (MC 3-5) における好ましい構造として、次の構造が例示される。

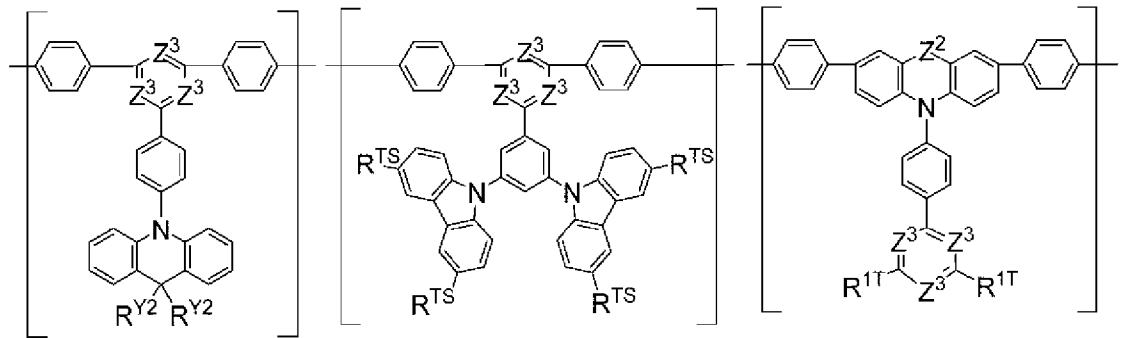
[化54]



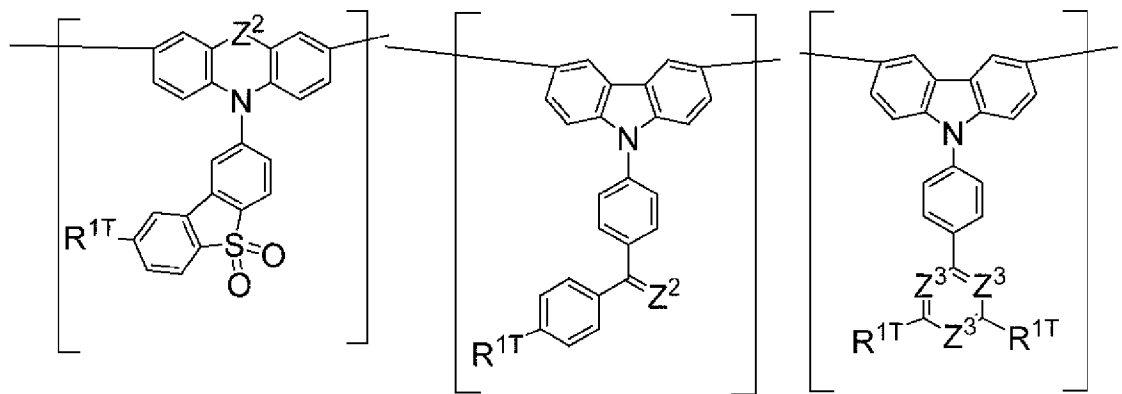
[化55]



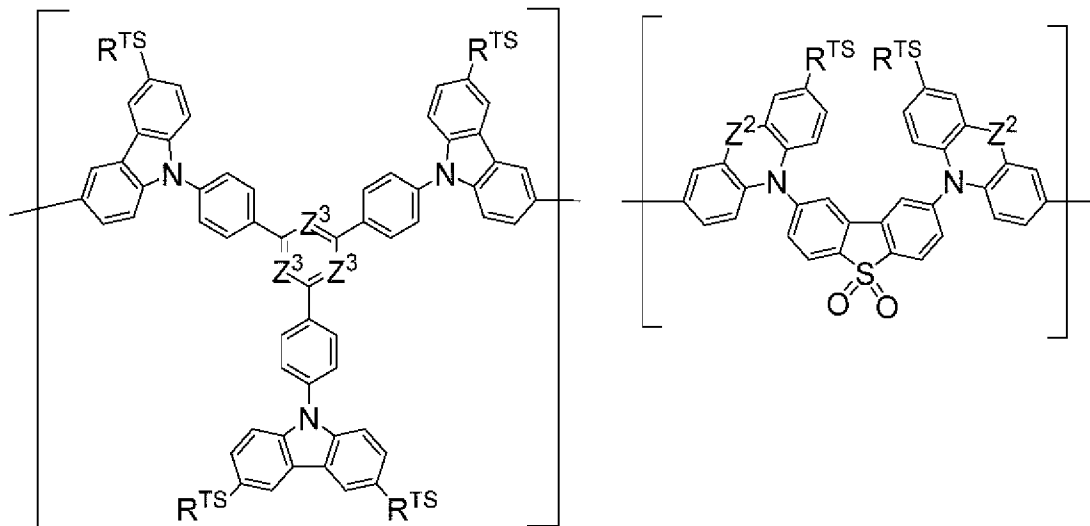
[化56]



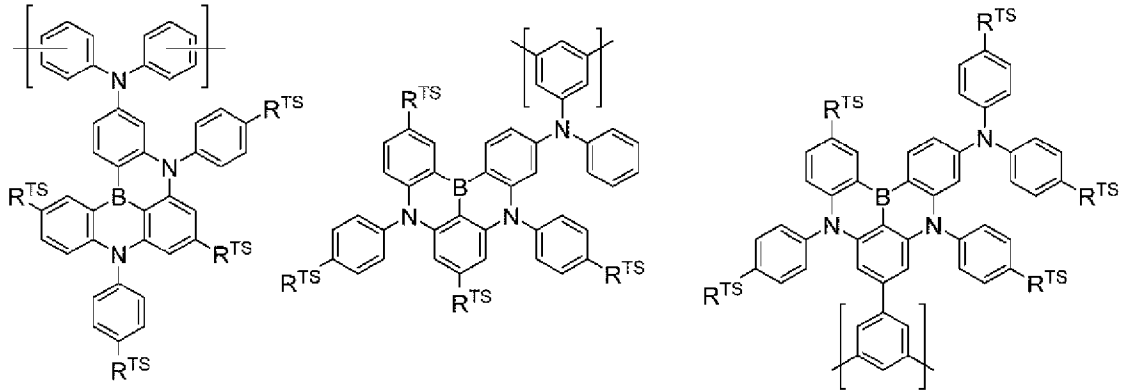
[化57]



[化58]

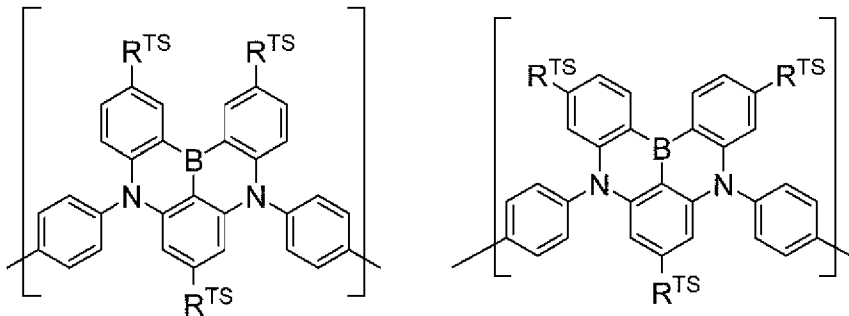


[化59]



[0094] 式 (MC 2-8) における好ましい構造として、次の構造が例示される。

[化60]



[式中、

R^{Y2} 及び Z^2 は前記と同じ意味を表す。

Z^3 は、 $-CH-$ 、又は $=N-$ を表す。

R^{1T} 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、ハロゲン原子、シアノ基、又は、式 (T 1-1-1) 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。

R^{TS} 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、アリールオキシ基、1価の複素環基、置換アミノ基、ハロゲン原子又はシアノ基であり、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。]

[0095] R^{TS} 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、1価の複素環基、置換アミノ基又はシアノ基であることが好ましく、水素原子、アルキル基又は1価の複素環基であるこ

とがより好ましい。

[0096] R^{TS} で表されるアリール基、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^{T1} 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。

[0097] R^{TS} 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、 Ar^{T1} 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。

[0098] [式(X)で表される構成単位]

a^{x1} 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2以下であり、より好ましくは0又は1であり、更に好ましくは0である。

a^{x2} 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2以下であり、より好ましくは0である。

[0099] R^{x1} 、 R^{x2} 及び R^{x3} 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であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0100] Ar^{x1} 、 Ar^{x2} 、 Ar^{x3} 及び Ar^{x4} で表されるアリーレン基及び2価の複素環基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 Ar^{y1} で表されるアリーレン基の好ましい範囲、及び、[共通する用語の説明]に記載の2価の複素環基の好ましい範囲である。

[0101] Ar^{x2} 及び Ar^{x4} で表される少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基における、アリーレン基及び2価の複素環基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 Ar^{y1} で表されるアリーレン基の好ましい範囲、及び、[共通する用語の説明]に記載の2価の複素環基の好ましい範囲である。

Ar^{x2} 及び Ar^{x4} で表される少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基としては、式(A-1)～式(A-20)から選ばれる少なくとも1種と、式(AA-1)～式(AA

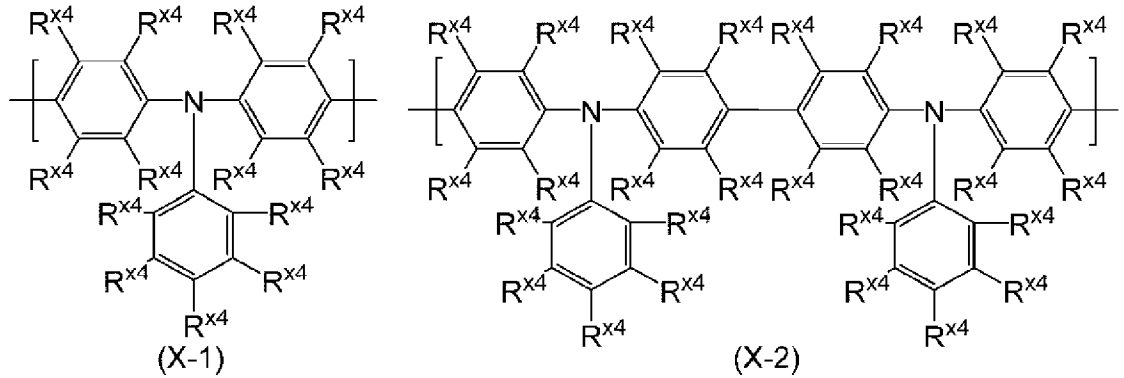
− 15) 及び式 (AA-18) ~ 式 (AA-34) から選ばれる少なくとも 1 種が結合した基が挙げられる。

$A r^{x1}$ 、 $A r^{x2}$ 、 $A r^{x3}$ 及び $A r^{x4}$ は、好ましくは置換基を有していてもよいアリーレン基である。

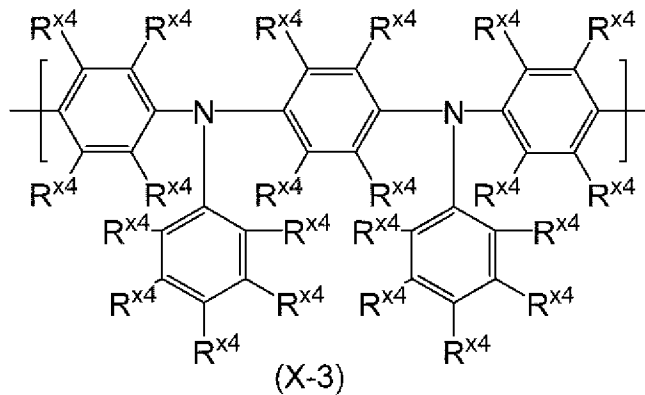
[0102] $A r^{x1}$ ~ $A r^{x4}$ 及び R^{x1} ~ R^{x3} で表される基が有してもよい置換基の例及び好ましい範囲は、 $A r^{y1}$ で表される基が有してもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

[0103] 式 (X) で表される構成単位としては、好ましくは式 (X-1) ~ 式 (X-7) で表される構成単位である。

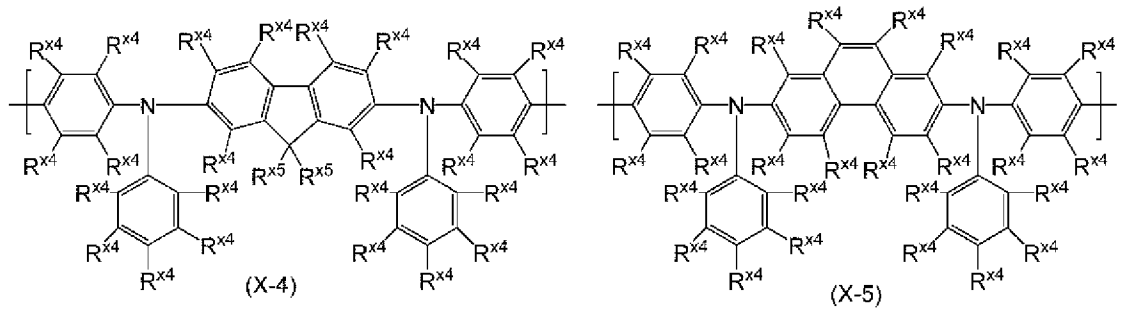
[化61]



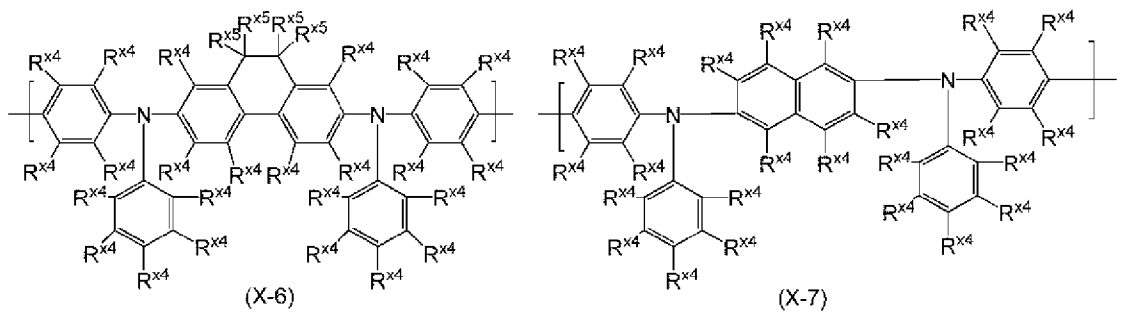
[化62]



[化63]



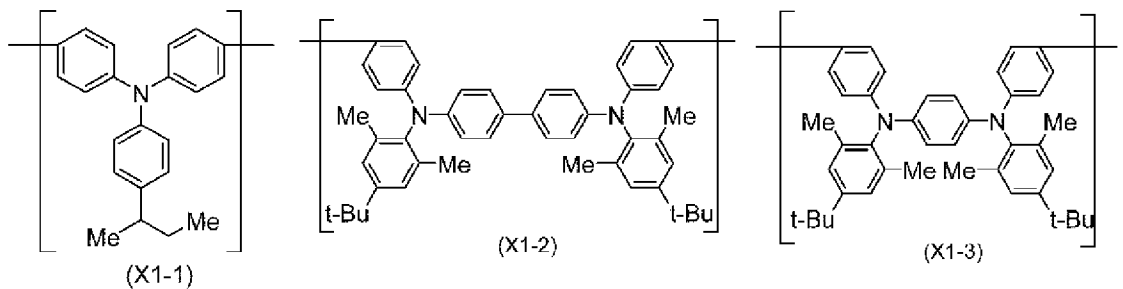
[化64]



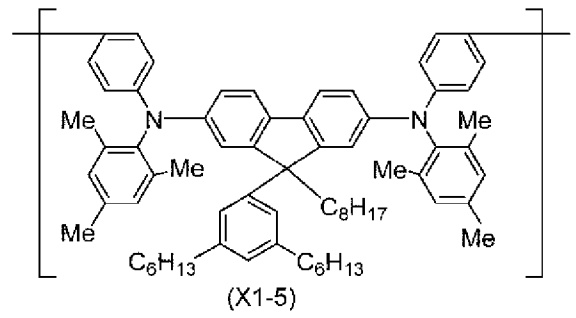
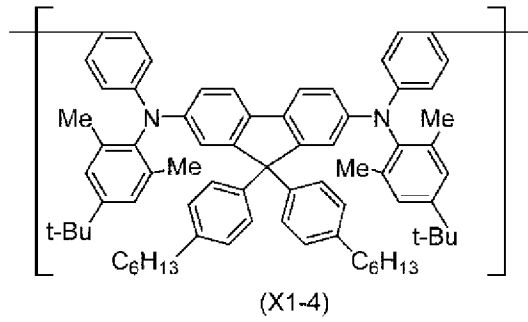
[式中、R^{x4}及びR^{x5}は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリーロキシ基、ハロゲン原子、1価の複素環基又はシアノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在するR^{x4}は、同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。複数存在するR^{x5}は、同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。]

[0104] 式(X)で表される構成単位としては、例えば、式(X1-1)~式(X1-15)で表される構成単位が挙げられる。

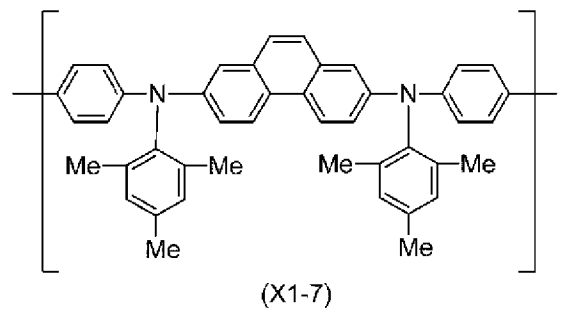
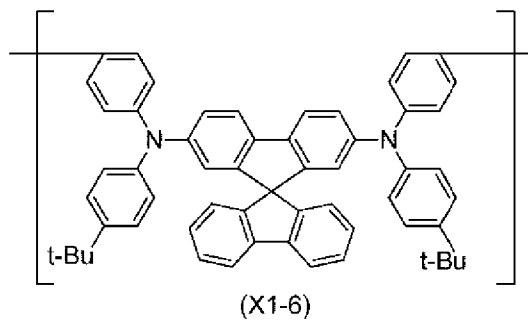
[化65]



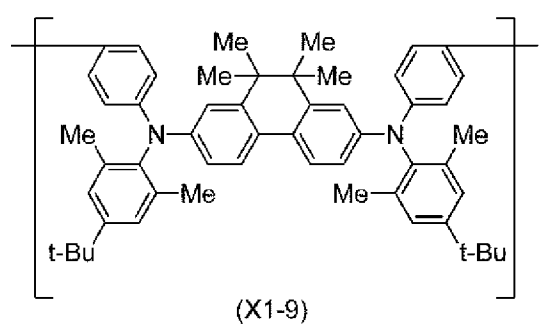
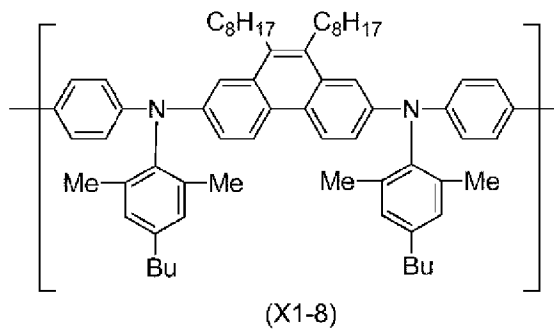
[化66]



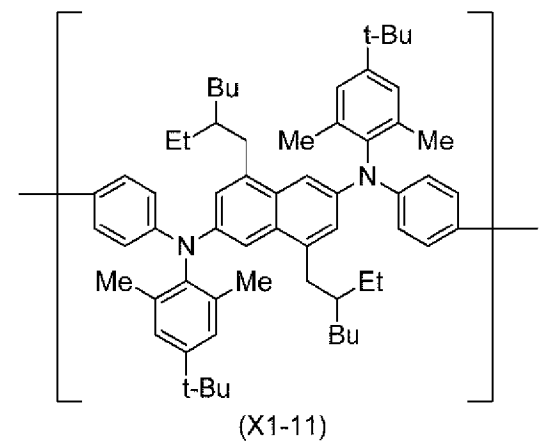
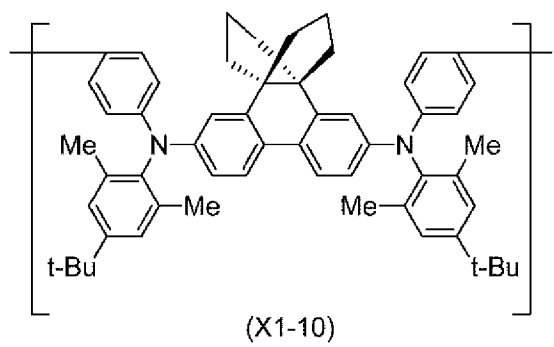
[化67]



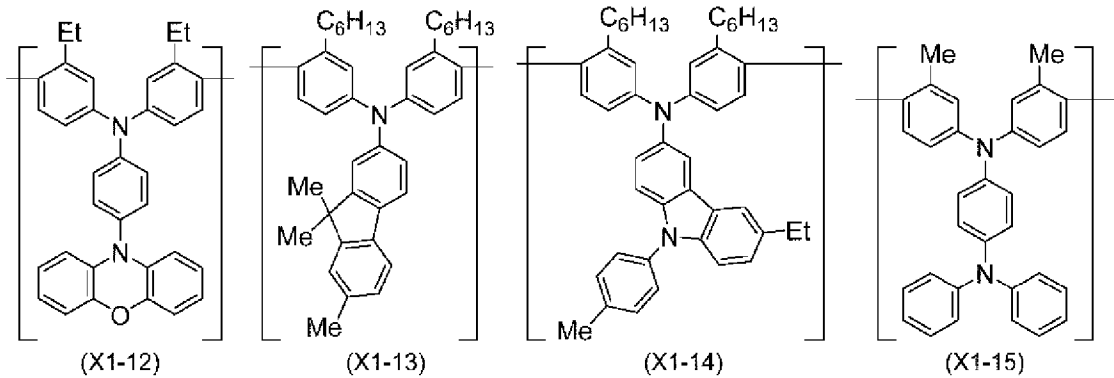
[化68]



[化69]



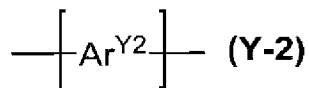
[化70]



[0105] 式 (Y) で表される繰り返し単位、及び、低分子化合物 (SM1) から水素原子を1つ以上除いてなる基からなる構成単位 (SM1) を有する高分子化合物において、構成単位 (SM1) の合計量は、本実施形態の発光素子の発光効率が優れるので、高分子化合物に含まれる構成単位の合計量に対して、好ましくは0.01~50モル%であり、より好ましくは0.1~30モル%であり、更に好ましくは0.5~15モル%であり、特に好ましくは1~15モル%である。

[0106] 高分子化合物は、更に式 (Y-2) で表される繰り返し単位を有してもよい。

[0107] [化71]



[式中、Ar^{Y2}は、置換基を有していてもよい2価の複素環基である。]

[0108] 式 (Y-2) における2価の複素環基の好ましくは、式 (AA-1) ~ 式 (AA-15) 及び式 (AA-18) ~ 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。

[0109] 高分子化合物としては、下記の高分子化合物 P-1 ~ P-4 が挙げられる。ここで、「その他」の構成単位とは、構成単位 (SM1)、式 (X) で表される構成単位、式 (Y) で表される構成単位及び式 (Y-2) で表される構成単位以外の構成単位を意味する。

[0110]

[表1]

高分子化合物	構成単位とそのモル比率				
	式(X)	式(Y)	式(Y-2)	式(C)	その他
	r'	s'	t'	u'	v'
P-1	0	0.1~99.9	0	0.1~99.9	0~30
P-2	0.1~99.8	0.1~99.8	0	0.1~99.8	0~30
P-3	0	0.1~99.8	0.1~99.8	0.1~99.8	0~30
P-4	0.1~99.7	0.1~99.7	0.1~99.7	0.1~99.7	0~30

[表1において r'、s'、t'、u' 及び v' は、各構成単位のモル比率（モル％）を表す。r' + s' + t' + u' + v' = 100 であり、且つ、70 ≤ r' + u' + s' ≤ 100 である。]

[0111] 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が、複数種の原料モノマーを共重合してなる共重合体であることが好ましい。

[0112] 高分子化合物のポリスチレン換算の重量平均分子量は、好ましくは $5 \times 10^3 \sim 1 \times 10^6$ であり、より好ましくは $1.5 \times 10^4 \sim 1 \times 10^5$ である。

[0113] [高分子化合物の製造方法]

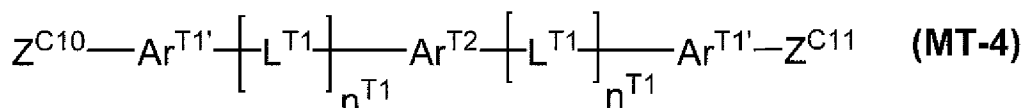
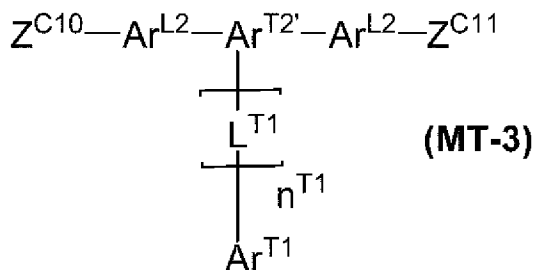
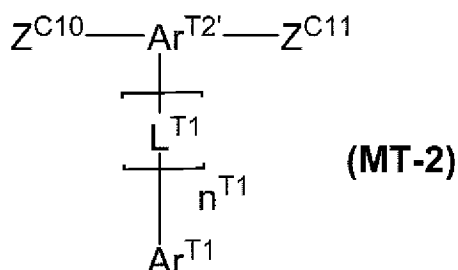
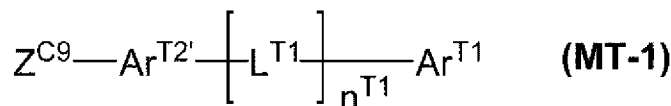
次に、高分子化合物の製造方法について説明する。

[0114] 高分子化合物は、例えば、式 (M-1) で表される化合物と、式 (M-2) で表される化合物と、式 (MT-1) ~ 式 (MT-4) で表される化合物の少なくとも1種と、を縮合重合させることにより製造することができる。

[化72]



[化73]



[式中、

Ar^Y 、 Ar^{T1} 、 Ar^{T2} 、 $Ar^{T1'}$ 、 $Ar^{T2'}$ 、 Ar^{L2} 、 L^{T1} 及び n^{T1} は、前記と同じ意味を表す。

$Z^{C1} \sim Z^{C4}$ 及び $Z^{C9} \sim Z^{C11}$ は、それぞれ独立に、置換基A群及び置換基B群からなる群から選ばれる基を表す。]

[0115] 例えば、 Z^{C1} 及び Z^{C2} が置換基A群から選ばれる基である場合、 Z^{C3} 、 Z^{C4} 及び $Z^{C9} \sim Z^{C11}$ は、それぞれ、置換基B群から選ばれる基を選択する。

[0116] 例えば、 Z^{C1} 及び Z^{C2} が置換基B群から選ばれる基である場合、 Z^{C3} 、 Z^{C4} 及び $Z^{C9} \sim Z^{C11}$ は、置換基A群から選ばれる基を選択する。

[0117] <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。

[0118] <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；

—B F₃ Q' (式中、Q' は、L i、N a、K、R b又はC sを表す。) で表される基；

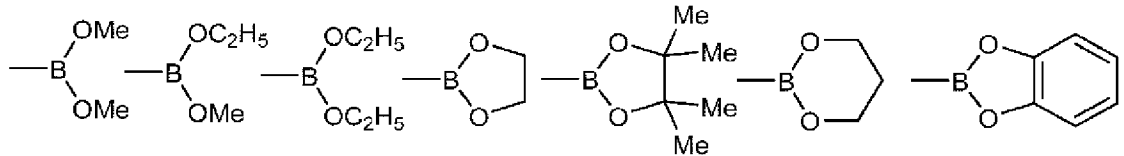
—M g Y' (式中、Y' は、塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子を表す。) で表される基；

—Z n Y' ' (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、

—S n (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。

[0119] —B (O R^{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74]



[0120] 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。

[0121] 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。

[0122] 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（11）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（11）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。

[0123] 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、0.00001～3モル当量である。

[0124] 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。

[0125] 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0.001～100モル当量である。

[0126] 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。

[0127] 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、10～100000質量部である。

[0128] 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。

[0129] 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。

[0130] [低分子化合物 (SM2)]

低分子化合物 (SM2) の最低励起三重項状態のエネルギー準位と最低励起一重項状態のエネルギー準位との差 (ΔE_{ST} ともいう) は、 0.50 eV 以下である。低分子化合物 (SM2) の ΔE_{ST} 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、 0.46 eV 以下であり、より好ましくは、 0.40 eV 以下であり、更に好ましくは、 0.35 eV 以下であり、特に好ましくは、 0.30 eV 以下であり、とりわけ好ましくは、 0.25 eV 以下であり、とりわけより好ましくは、 0.20 eV 以下である。また、SM2の ΔE_{ST} は、 0.001 eV 以上であってもよく、 0.005 eV 以上であってもよく、 0.01 eV 以上であってもよく、 0.05 eV 以上であってもよい。

[0131] 低分子化合物 (SM2) は、熱活性化遅延蛍光 (TADF) 性を有する化合物が好ましい。

[0132] 低分子化合物 (SM2) の ΔE_{ST} は、量子化学計算プログラムである Gaussian 09 を用いることができる。例えば、B3LYPレベルの密度汎関数法を用いて、化合物の基底状態を構造最適化した後、B3LYPレベルの時間依存密度汎関数法を用いることで、 ΔE_{ST} を算出することができる。基底関数としては、通常、6-31G*を使用するが、6-31G*を使用できない原子が化合物に含まれる場合は、該原子に対してLANL2DZを使用することができる。

[0133] 低分子化合物 (SM2) 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 (T-11) で表される化合物、又は、G群から選ばれる基を有する化合物であることが好ましい。

[0134] 式 (T-11) における $A r^{T3}$ の好ましい範囲、及び例示は、式 (T-1) における $A r^{T1}$ の好ましい範囲、及び例示と同じである。

式 (T-11) における $A r^{T4}$ の好ましい範囲、及び例示は、式 (T-1) における $A r^{T2}$ の好ましい範囲、及び例示と同じである。また、E群は、F群、及びG群ではなく、F群は、G群ではない。

式 (T-11) における L^{T2} の好ましい範囲、及び例示は、式 (T-1) における L^{T1} の好ましい範囲、及び例示と同じである。

式 (T-11) における n^{T3} の好ましい範囲は、式 (T-1) における n^{T1} の好ましい範囲と同じである。

式 (T-11) における n^{T4} の好ましい範囲は、式 (T-1) における n^{T2} の好ましい範囲と同じである。

式 (T-11) で表される化合物の好ましい範囲、及び例示は、式 (T-1) で表される化合物の好ましい範囲、及び例示と同じである。

[0135] G群から選ばれる基の好ましい範囲、及び例示は、D群から選ばれる基の好ましい範囲、及び例示と同じである。

G群から選ばれる基を有する化合物の好ましい範囲、及び例示は、D群から選ばれる基を有する化合物の好ましい範囲、及び例示と同じである。

[0136] 低分子化合物 (SM2) 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 (D-11) で表される化合物であることが好ましい。

[0137] 式 (D-11) におけるE環の好ましい範囲、及び例示は、式 (D-1) におけるA環の好ましい範囲、及び例示と同じである。

式 (D-11) におけるF環の好ましい範囲、及び例示は、式 (D-1) におけるB環の好ましい範囲、及び例示と同じである。

式 (D-11) におけるG環の好ましい範囲、及び例示は、式 (D-1) におけるC環の好ましい範囲、及び例示と同じである。

式 (D-11) における X^2 の好ましい範囲は、式 (D-1) におけるXの

好ましい範囲と同じである。

式 (D-11) における Y^4 の好ましい範囲は、式 (D-1) における Y^1 の好ましい範囲と同じである。

式 (D-11) における Y^5 の好ましい範囲は、式 (D-1) における Y^2 の好ましい範囲と同じである。

式 (D-11) における Y^6 の好ましい範囲は、式 (D-1) における Y^3 の好ましい範囲と同じである。

式 (D-11) において、 n_6 は、好ましくは 0 である。

式 (D-11) で表される化合物の好ましい範囲、及び例示は、式 (D-1) で表される化合物の好ましい範囲、及び例示と同じである。

[0138] [組成物]

本実施形態の組成物は、高分子化合物を含んでおり、且つ、組成物中に、最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が 0.50 eV 以下である低分子化合物から水素原子を 1 つ以上除いてなる構造 (SM0) が 2 種以上存在している。すなわち、本実施形態の組成物中には、高分子化合物中の構成単位 (SM1) として、及び、低分子化合物 (SM2) として、構造 (SM0) が存在してよい (以下、このような組成物を、組成物の第一の形態という。)。また、本実施形態の組成物中には、第一の高分子化合物中の構成単位 (SM1-1)、及び、第二の高分子化合物中の構成単位 (SM1-2) として、構造 (SM0) が存在していてもよい (以下、このような組成物を、組成物の第二の形態という。))。

[0139] 本実施形態の組成物によれば、2 種の構造 (SM0) の物理的、化学的又は電気的な相互作用によって、発光素子の優れた発光効率が実現される。本発明者は、2 種の構造 (SM0) が、効率的に、物理的、化学的又は電気的に相互作用するような設計 (特に、効率的に電気的に相互作用するような設計) を検討した。より効率的に電気的な相互作用を得るためには、2 種の構造 (SM0) の一方と、2 種の構造 (SM0) の他方との分子間距離が重要

と考え、2種の構造(SM0)の単位質量当たりの含有数と、その比率と、に着目した。より詳細には、単位質量当たりの含有数とその比率とが、後述に示す関係となるよう設計することで、電気エネルギーが、2種の構造(SM0)のうちのいずれか一方へと速やかに移動するため、その結果、発光素子の発光特性(特に発光効率)がより優れると推測される。

[0140] なお、構成単位(SM1-1)は、低分子化合物(SM1-1)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位であり、低分子化合物(SM1-1)の好ましい範囲及び例示は、低分子化合物(SM1)の好ましい範囲及び例示と同じである。また、構成単位(SM1-2)は、低分子化合物(SM1-2)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位であり、低分子化合物(SM1-2)の好ましい範囲及び例示は、低分子化合物(SM1)の好ましい範囲及び例示と同じである。但し、低分子化合物(SM1-1)と低分子化合物(SM1-2)とは異なる。

[0141] 組成物の第一の形態において、組成物中の構成単位(SM1)の単位質量当たりの含有数を d_{SM1} (個/g)、組成物中の低分子化合物(SM2)の単位質量当たりの含有数を d_{SM2} (個/g)としたとき、 d_{SM1} 及び d_{SM2} の合計値($d_{SM1} + d_{SM2}$)は、 2.0×10^{19} (個/g)以上であり、 3.0×10^{19} (個/g)以上であってもよく、 5.0×10^{19} (個/g)以上であってもよく、 7.0×10^{19} (個/g)以上であってもよい。また、 $d_{SM1} + d_{SM2}$ は、通常、 4.0×10^{20} (個/g)以下であり、 3.0×10^{20} (個/g)以下であってもよく、 2.5×10^{20} (個/g)以下であってもよい。

[0142] また、 d_{SM1} (個/g)と d_{SM2} (個/g)との比率は、特定の範囲内であることが好ましい。これにより構成単位(SM1)と低分子化合物(SM2)とが、より効率的に、物理的、化学的又は電氣的に相互作用しやすくなり、本実施形態の組成物を用いた発光素子の発光効率がより優れる。上記観点から、 d_{SM1} / d_{SM2} は、0.020以上であり、0.033以上であってもよく、0.050以上であってもよく、0.077以上であっ

てもよく、0.083以上であってもよい。また、上記観点から、 $dSM1/dSM2$ は、50以下であり、30以下であってもよく、20以下であってもよく、13以下であってもよく、12以下であってもよい。

[0143] また、構成単位 (SM1) と低分子化合物 (SM2) との比率は、少なくとも一方が他方に対して多くなる比率であることが好ましい。構成単位 (SM1) が低分子化合物 (SM2) より組成物中に多く存在する場合、 $dSM1/dSM2$ は、例えば、1.1~50であり、好ましくは1.2~20、より好ましくは1.3~13、更に好ましくは1.7~12.7であってよい。また、低分子化合物 (SM2) が構成単位 (SM1) より組成物中に多く存在する場合、 $dSM1/dSM2$ は、例えば、0.020~0.91であり、好ましくは0.050~0.83、より好ましくは0.077~0.77、更に好ましくは0.079~0.59であってよい。このような関係を有することで、構成単位 (SM1) と低分子化合物 (SM2) とが、より効率的に、物理的、化学的又は電氣的に相互作用しやすくなり、本実施形態の組成物を用いた発光素子の発光効率がより優れる。

[0144] 組成物の第二の形態において、組成物中の構成単位 (SM1-1) の単位質量当たりの含有数を $dSM1a$ (個/g)、組成物中の構成単位 (SM1-2) の単位質量当たりの含有数を $dSM1b$ (個/g) としたとき、 $dSM1a$ 及び $dSM1b$ の合計数 ($dSM1a + dSM1b$) は、 2.0×10^{19} (個/g) 以上であり、 3.0×10^{19} (個/g) 以上であってもよく、 5.0×10^{19} (個/g) 以上であってもよく、 7.0×10^{19} (個/g) 以上であってもよい。また、 $dSM1a + dSM1b$ は、通常、 4.0×10^{20} (個/g) 以下であり、 3.0×10^{20} (個/g) 以下であってもよく、 2.5×10^{20} (個/g) 以下であってもよい。

[0145] また、 $dSM1a$ (個/g) と $dSM1b$ (個/g) との比率は、特定の範囲内であることが好ましい。これにより構成単位 (SM1-1) と構成単位 (SM1-2) とが、より効率的に、物理的、化学的又は電氣的に相互作用しやすくなり、本実施形態の組成物を用いた発光素子の発光効率がより優

れる。上記観点から、 $dSM1a/dSM1b$ は、0.020以上であり、0.033以上であってもよく、0.050以上であってもよく、0.077以上であってもよく、0.083以上であってもよい。また、上記観点から、 $dSM1a/dSM1b$ は、50以下であり、30以下であってもよく、20以下であってもよく、13以下であってもよく、12以下であってもよい。

[0146] また、構成単位 (SM1-1) と構成単位 (SM1-2) と比率は、少なくとも一方が他方に対して多くなる比率であることが好ましい。構成単位 (SM1-1) が構成単位 (SM1-2) より組成物中に多く存在する場合、 $dSM1a/dSM1b$ は、例えば、1.1~50であり、好ましくは1.2~20、より好ましくは1.3~13、更に好ましくは1.7~12.7であってよい。また、構成単位 (SM1-2) が構成単位 (SM1-1) より組成物中に多く存在する場合、 $dSM1/dSM2$ は、例えば、0.020~0.91であり、好ましくは0.050~0.83、より好ましくは0.077~0.77、更に好ましくは0.079~0.59であってよい。このような関係を有することで、構成単位 (SM1-1) と構成単位 (SM1-2) とが、より効率的に、物理的、化学的又は電氣的に相互作用しやすくなり、本実施形態の組成物を用いた発光素子の発光効率がより優れる。

[0147] 本実施形態の組成物は、上記以外の他の材料を更に含んでもよい。例えば、本実施形態の組成物は、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料及び酸化防止剤からなる群から選ばれる少なくとも1種の材料を更に含んでもよい。

[0148] [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る。

[0149] 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、及び、式 (X) で表される構成単位を含む高分子化合物が挙げられる。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、フラーレン、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が挙げられ、好ましくはフラーレンである。

[0150] 組成物の第一の形態において、正孔輸送材料の配合量は、本実施形態における高分子化合物を100質量部とした場合、通常、1～400質量部であり、好ましくは5～150質量部である。

また、組成物の第二の形態において、正孔輸送材料の配合量は、本実施形態における高分子化合物の総量を100質量部とした場合、通常、1～400質量部であり、好ましくは5～150質量部である。

正孔輸送材料は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0151] [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。

[0152] 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。

[0153] 高分子化合物としては、例えば、式(Y)で表される構成単位及び式(Y-2)で表される構成単位からなる群より選ばれる1種以上の構成単位を含む高分子化合物が挙げられ、その例としては、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、金属でドーピングされていてもよい。

[0154] 電子輸送材料の配合量は、高分子化合物(TP)を100質量部とした場合、通常、1～400質量部であり、好ましくは5～150質量部である。

電子輸送材料は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0155] [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。

[0156] 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。

[0157] 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。

[0158] 正孔注入材料及び電子注入材料の配合量は、各々、高分子化合物を100質量部とした場合、通常、1～400質量部であり、好ましくは5～150質量部である。

電子注入材料及び正孔注入材料は、各々、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0159] 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える範囲とするために、導電性高分子に適量のイオンをドーピングすることができる。

[0160] ドーピング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。

ドーピングするイオンは、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0161] [発光材料]

発光材料は、低分子化合物と高分子化合物とに分類され、本実施形態の発光素子の発光効率がより優れるので、発光材料は低分子化合物であることが好ましい。

[0162] 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に代表される蛍光発光性化合物、並びに、イリジウム、白金又はユーロピウムを中心金属とする燐光発光性化合物が挙げられる。

[0163] 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、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、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。

[0164] [酸化防止剤]

酸化防止剤は、高分子化合物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。

[0165] 組成物の第一の形態において、酸化防止剤の配合量は、高分子化合物を100質量部とした場合、通常、0.001～10質量部である。

酸化防止剤は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0166] [溶媒を含有する組成物]

本実施形態の組成物は、溶媒と混合することで、溶媒を含有する組成物（以下、「第1のインク」ともいう。）を製造することができ、該組成物は、スピンコート法、インクジェット法等の湿式成膜法に好適に使用することができる。

[0167] 第1のインクの粘度は、湿式法の種類によって調整すればよいが、インクジェット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、吐出時の目づまりと飛行曲がりが起こりづらいので、好ましくは25℃において1～20 mPa・sである。

[0168] 第1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；テトラヒドロフラン、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*-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、ビス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、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0169] 第1のインクにおいて、溶媒の配合量は、本実施形態の組成物を100質量部とした場合、通常、1000~100000質量部である。

[0170] <発光素子>

本実施形態の組成物は、例えば、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有する発光素子に利用できる。

[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、上述した溶媒に溶解させ、インクを調製して用い、例えば、スピンコート法、キャストイング法、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、インクジェツ

ト印刷法、キャピラリーコート法、ノズルコート法により形成することができる。

- [0171] (D 1) 陽極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／陰極
(D 2) 陽極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／電子注入層／陰極
(D 3) 陽極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極

[0172] 上記の (D 1) ~ (D 3) 中、「／」は、その前後の層が隣接して積層していることを意味する。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、(D 1) ~ (D 2) である。

[0173] 発光素子において、発光層、正孔輸送層、電子輸送層、正孔注入層、電子注入層等の各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、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。

[0174] 積層する層の順番、数、及び、厚さは、発光効率及び素子寿命を勘案して調整すればよい。

[0175] [基板／電極]

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。

[0176] 陽極の材料としては、例えば、導電性の金属酸化物、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・オキサイド等の導電性化合物；銀とパラジウムと銅との複合体 (APC)；NES A、金、白金、銀、銅である。

[0177] 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－アルミニウム合金が挙げられる。

[0178] 陽極及び陰極は、各々、2層以上の積層構造としてもよい。

[0179] [用途]

本実施形態の発光素子は、例えば、ディスプレイ、照明に有用である。

実施例

[0180] 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。

[0181] 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0.05質量%の濃度でテトラヒドロフランに溶解させ、SECに10 μ L注入した。移動相は、1.0mL/分の流量で流した。カラムとして、PLgel MIXED-B (ポリマーラボラトリーズ製) を用いた。検出器にはUV-VIS検出器 (東ソー製、商品名: UV-8320GPC) を用いた。

[0182] <合成例> 化合物M1~M17、及び化合物M101~M104の入手方法

化合物M1は、国際公開第2002/045184号に記載の方法に従って合成した。

化合物M2は、特表2002-539292号公報に記載の方法に従って

合成した。

化合物M3は、国際公開第2011/049241号に記載の方法に従って合成した。

化合物M4は、国際公開第2015/014871号に記載の方法に従って合成した。

化合物M5は、国際公開第2013/146806号に記載の方法に従って合成した。

化合物M6は、特表2007-512249号公報に記載の方法に従って合成した。

化合物M7及びM11は、市販品を用いた。

化合物M8は、国際公開第2019/004247号に記載の方法に従って合成した。尚、化合物M8は、化合物M8a、M8b、M8c、及びM8dの混合物を用いた。

化合物M9は、国際公開第2012/086671号に記載の方法に従って合成した。

化合物M10及びM14は、特開2010-189630号公報に記載の方法に従って合成した。

化合物M12は、国際公開第2013/191086号に記載の方法に従って合成した。

化合物M13及びM16は、国際公開第2013/191088号に記載の方法に従って合成した。

化合物M15は、国際公開第2019/004247号に記載の方法に従って合成した。

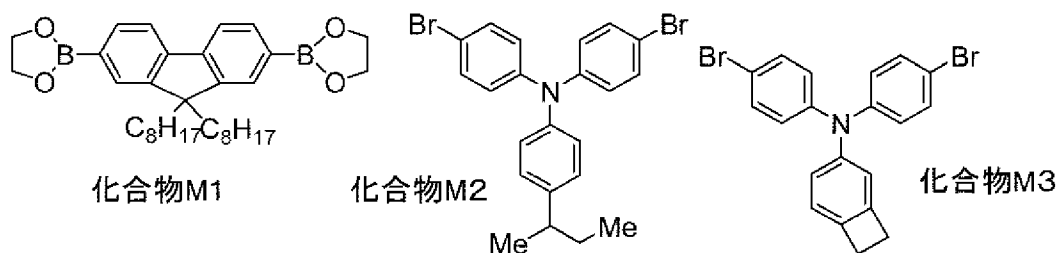
化合物M17は、特開2010-196040号公報に記載の方法に従って合成した。

化合物M101は、国際公開第2010/136109号に記載の方法に従って合成した。

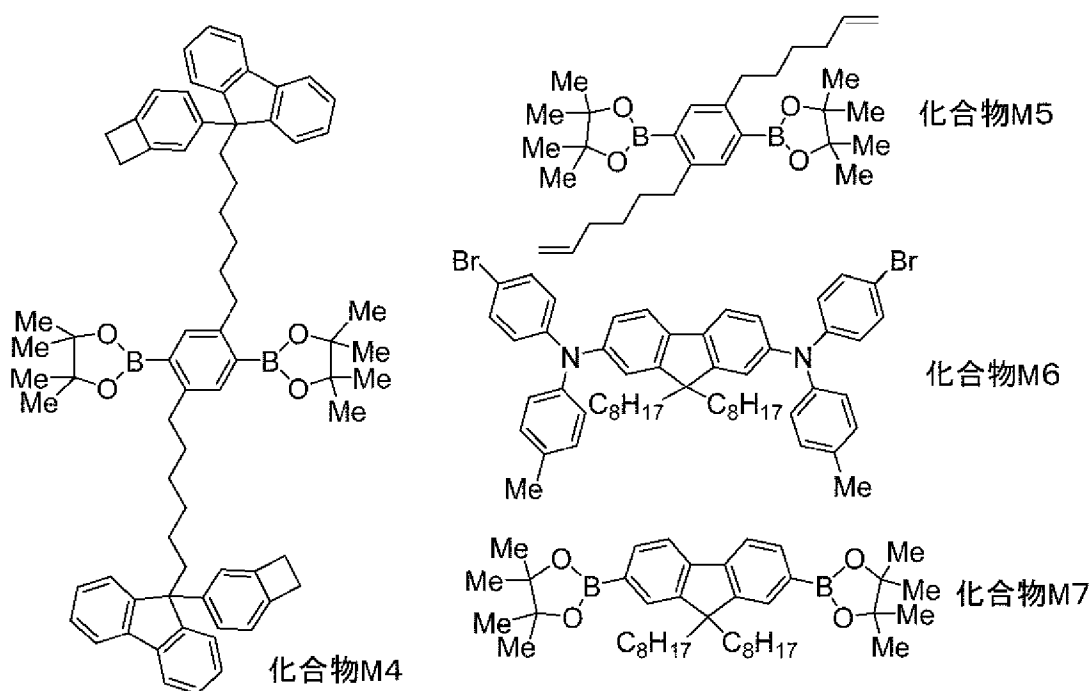
化合物M102は、Amadis Chemical社製を用いた。

化合物M103及びM104は、国際公開第2015/102118号に記載の方法に従って合成した。

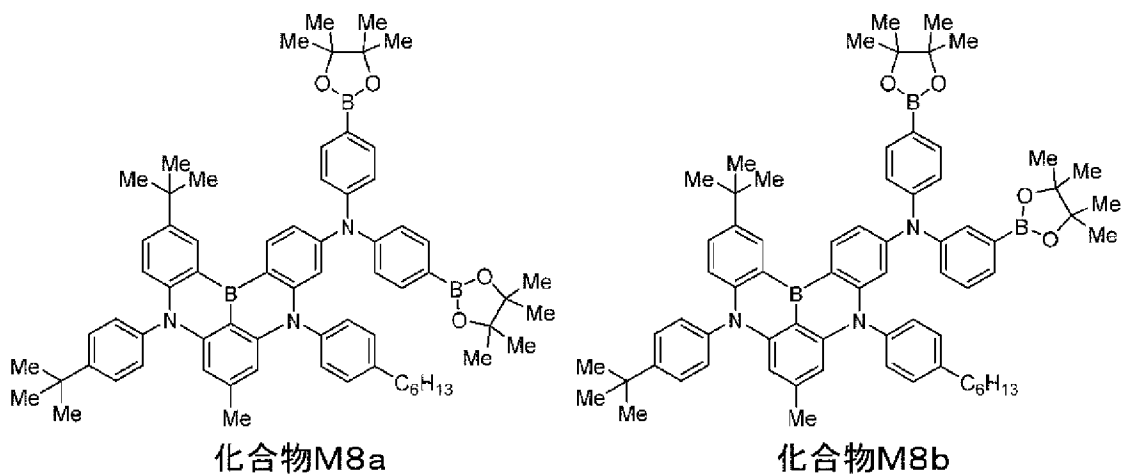
[化75]



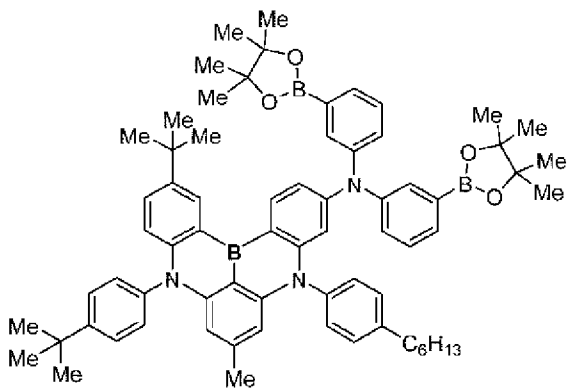
[化76]



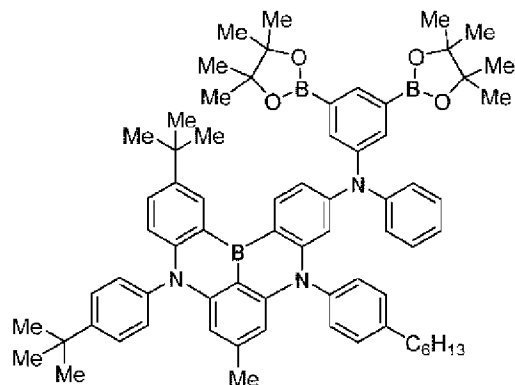
[化77]



[化78]

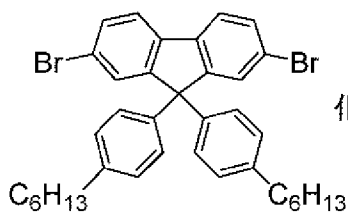


化合物M8c

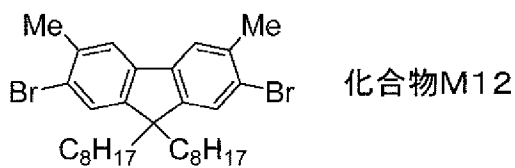


化合物M8d

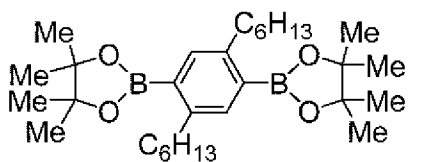
[化79]



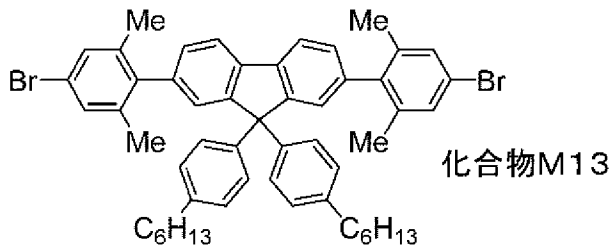
化合物M9



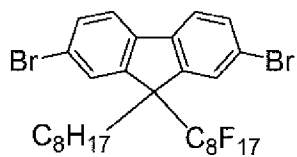
化合物M12



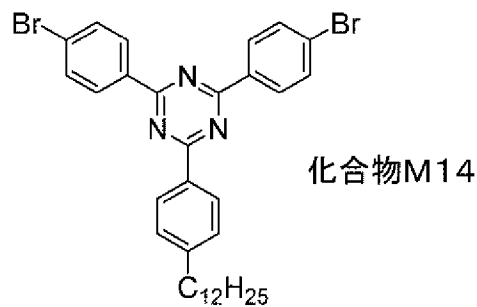
化合物M10



化合物M13

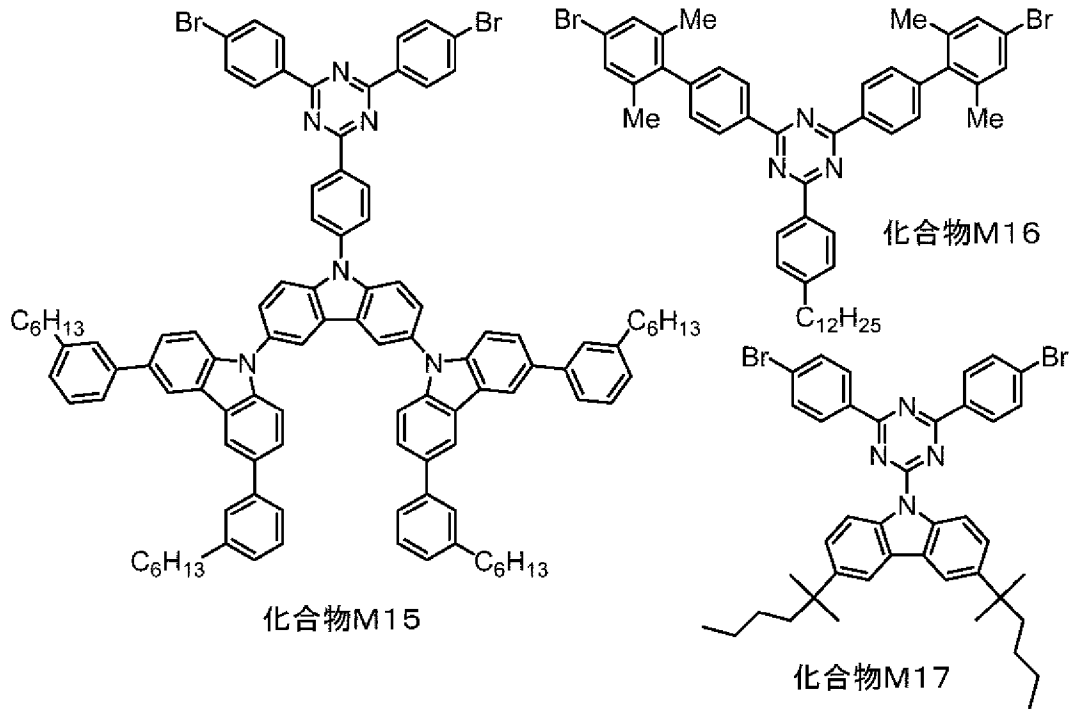


化合物M11

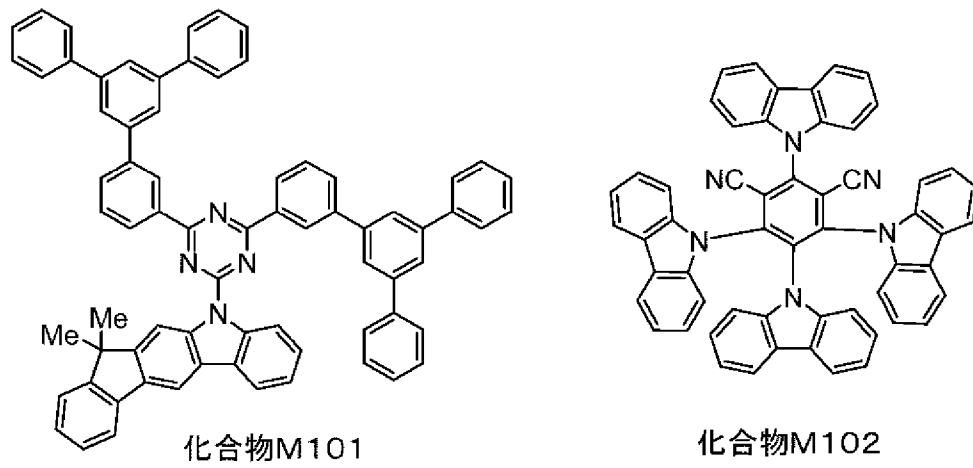


化合物M14

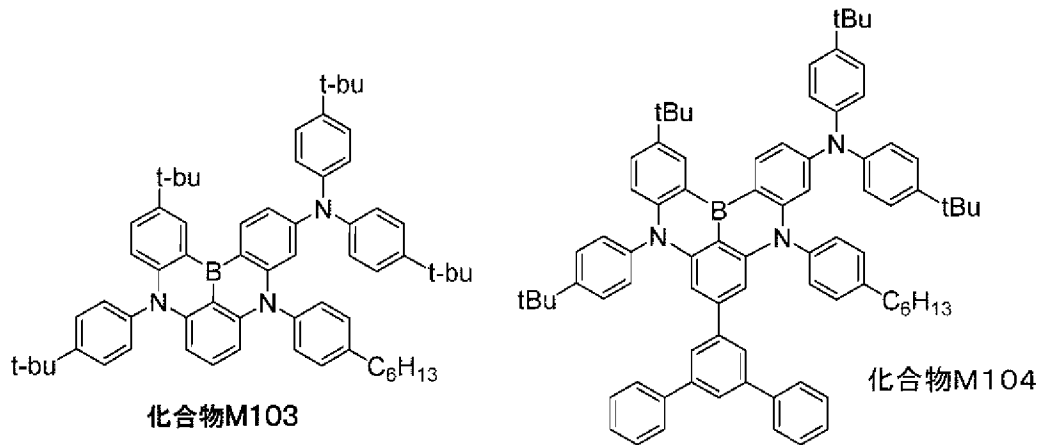
[化80]



[化81]



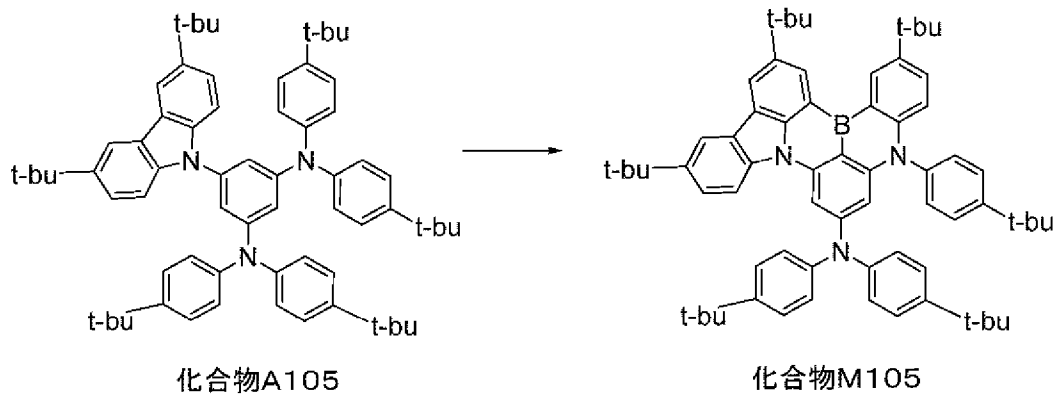
[化82]



[0183] 化合物M101、化合物M102、化合物M103、及び化合物M104の ΔE_{st} は、それぞれ、0.13 eV、0.12 eV、0.46 eV、及び0.46 eVであった。

[0184] <合成例1> 化合物M105の合成

[化83]



[0185] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 11316–11320に記載の方法で合成した化合物A105 (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 (25℃) 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、得られた有機層を合一し、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45g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(340mL)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(790mL)に溶解させた。得られた溶液にカルボラフィン(33g)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M105(30.9g、黄色固体)を得た。化合物M105のHPLC面積百分率値は99.5%以上であった。

LC-MS (APCI, positive) : 「M+H」⁺ 922.

¹H-NMR (CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) : 9.05 (d, 1H), 9.00 (d, 1H), 8.32 (d, 1H), 8.15 (d, 1H), 7.52 (td, 2H), 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).

化合物M105の ΔE_{st} は、0.43eVであった。

[0186] <合成例2> 高分子化合物PC1の合成

高分子化合物PC1は、化合物M1、化合物M2及び化合物M3を用いて、国際公開第2011/049241号に記載の方法に準じて合成した。高分子化合物PC1のM_nは 8.9×10^4 であり、M_wは 4.2×10^5 であった。

高分子化合物PC1は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物M1から誘導される構成単位と、化合物M2から誘導される構成単位と、化合物M3から誘導される構成単位とが、50:42.5:7.5のモル比で構

成されてなる共重合体である。

[0187] <合成例3> 高分子化合物PC2～高分子化合物PC8の合成

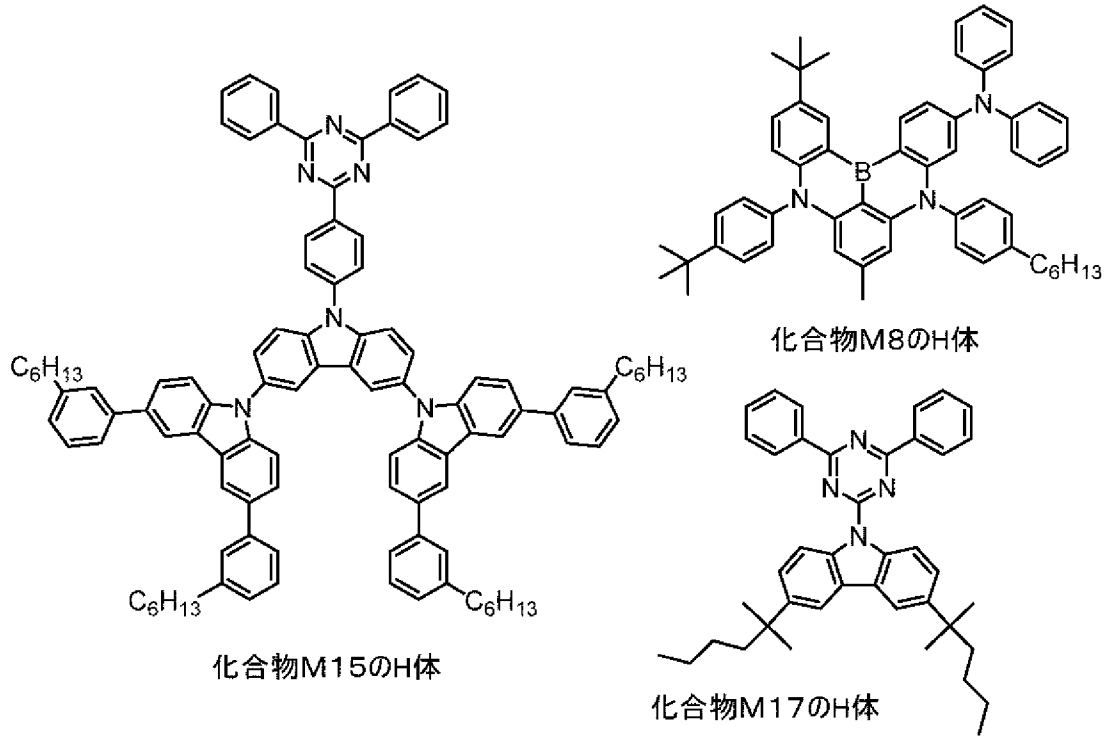
高分子化合物PC2～高分子化合物PC8は、高分子化合物PC1における、「化合物M1、化合物M2及び化合物M3」を、次の表に記載のモノマー、及びモル分率に変更したことを除き、高分子化合物PC1同様の手順で合成した。表2に、得られた高分子化合物のMn、Mw、モル分率、及び合成方法を示す。

[0188] [表2]

高分子化合物	モル比率			合成方法	Mn	Mw
	M1 (50)	M2 (42.5)	M3 (7.5)			
PC1	M1 (50)	M2 (42.5)	M3 (7.5)	国際公開第2011-049241号 に記載の方法	89×10 ³	420×10 ³
PC2	M4 (45)	M5 (5)	M6 (50)	国際公開第2015-145871号 に記載の方法	23×10 ³	120×10 ³
PC3	M7 (45)	M8 (5)	M9 (50)	国際公開第2019-004248号 に記載の方法	45×10 ³	111×10 ³
PC4	M10 (50)	M11 (40)	M15 (10)	国際公開第2019-004247号 に記載の方法	59×10 ³	121×10 ³
PC5	M10 (50)	M12 (40)	M15 (10)	国際公開第2019-004247号 に記載の方法	53×10 ³	112×10 ³
PC6	M10 (50)	M13 (26)	M16 (24)	国際公開第2015-008851号 に記載の方法	85×10 ³	220×10 ³
PC7	M10 (50)	M9 (40)	M14 (10)	特開2012-036388号公報 に記載の方法	96×10 ³	220×10 ³
PC8	M10 (50)	M11 (40)	M17 (10)	国際公開第2019-004247号 に記載の方法	121×10 ³	400×10 ³

[0189] 高分子化合物PC3におけるM8のH体の ΔE_{st} は、0.44 eVであった。高分子化合物PC4、及び高分子化合物PC5におけるM15のH体の ΔE_{st} は、0.06 eVであった。高分子化合物PC8におけるM17のH体の ΔE_{st} は、0.16 eVであった。なお、高分子化合物PC6及び高分子化合物PC7は、 ΔE_{st} が0.50 eV以下である化合物から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位を有さなかった。

[化84]



[0190] 高分子化合物PC3について、高分子化合物PC3中の低分子化合物(SM1)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位(SM1)の単位質量当たりの含有数(個/g)は、アボガドロ数(N_A)を用いて、次のように計算される。

化合物M7から得られる繰り返し単位の分子量：388.64、

化合物M8から得られる繰り返し単位の分子量：795.92、

化合物M9から得られる繰り返し単位の分子量：484.73、

より、

$$0.05 \times N_A / (388.64 \times 0.45 + 795.92 \times 0.05 + 484.73 \times 0.5) = 6.56 \times 10^{19} \text{ (個/g)}$$

[0191] 高分子化合物PC4について、高分子化合物PC4中の低分子化合物(SM1)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位(SM1)の単位質量当たりの含有数(個/g)を、同様に算出すると、

化合物M10から得られる繰り返し単位の分子量：244.42、

化合物M11から得られる繰り返し単位の分子量：388.64、

化合物M15から得られる繰り返し単位の分子量：1443.98、
より、

$$0.1 \times N_A / (244.42 \times 0.5 + 388.64 \times 0.4 + 1443.98 \times 0.1) = 1.42 \times 10^{20} \text{ (個/g)}$$

[0192] 高分子化合物PC5について、高分子化合物PC5中の低分子化合物(SM1)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位(構成単位SM1)の単位質量当たりの含有数(個/g)を、同様に算出すると、

化合物M12から得られる繰り返し単位の分子量：416.69、
より、

$$0.1 \times N_A / (244.42 \times 0.5 + 416.69 \times 0.4 + 1443.98 \times 0.1) = 1.38 \times 10^{20} \text{ (個/g)}$$

[0193] 高分子化合物PC8について、高分子化合物PC8中の低分子化合物(SM1)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位(構成単位SM1)の単位質量当たりの含有数(個/g)を、同様に算出すると、

化合物M17から得られる繰り返し単位の分子量：606.86、
より、

$$0.1 \times N_A / (244.42 \times 0.5 + 388.64 \times 0.4 + 606.86 \times 0.1) = 1.77 \times 10^{20} \text{ (個/g)}$$

[0194] <実施例D1> 発光素子D1の作製

<ITO基板及び正孔注入層>

ガラス基板に、ITO膜をスパッタ法により45nmの厚みで形成することで陽極を形成した。正孔注入材料であるND-3202(日産化学工業製)を陽極の上にスピコート法により50nmの厚さで成膜し、大気雰囲気下において、ホットプレート上で240℃、15分間加熱した。これにより正孔注入層を形成した。

<正孔輸送層>

高分子化合物PC1をキシレンに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20n

m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200℃、30分間加熱した。これにより、正孔輸送層が形成された。

<発光層>

高分子化合物PC3、及び化合物M101（高分子化合物PC3：化合物M101＝85質量%：15質量%）をキシレンに1.4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、正孔輸送層の上にスピコート法により70nm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150℃、10分間加熱した。これにより、発光層が形成された。

<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4nm、次いで、フッ化ナトリウム層の上にアルミニウムを約80nm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D1を作製した。

[0195] <実施例D2～実施例D6、及び比較例CD1> 発光素子D2～発光素子D6、及び発光素子CD1の作製

発光素子D1における、「高分子化合物PC3、及び化合物M101（高分子化合物PC3：化合物M101＝85質量%：15質量%）」を、表3に記載の材料に変更したこと以外は、発光素子D1と同様の手順で作製した。

[0196] <実施例D7>発光素子D7の作製

I TO陽極、正孔注入層、正孔輸送層及び陰極は、発光素子D1と同様の手順で作製した。

<発光層>

高分子化合物PC4、及び化合物M102（高分子化合物PC4：化合物M102＝85質量%：15質量%）をクロロベンゼンに1.2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、正孔輸送層の上にスピコート法により70nm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150℃、10分間加熱した。これにより、発光層が形成された。

<陰極の形成>

発光素子D1と同様の手順で作製した。

[0197] <実施例D8～実施例D10、及び比較例CD2>発光素子D8～実施例D10、及び発光素子CD2の作製

発光素子D7における、「高分子化合物PC4、及び化合物M102（高分子化合物PC4：化合物M102＝85質量%：15質量%）」を、表4に記載の材料に変更したこと以外は、発光素子D7と同様の手順で作製した。

[0198] <実施例D11>発光素子D11の作製

<ITO基板及び正孔注入層>

ガラス基板に、ITO膜をスパッタ法により45nmの厚みで形成することで陽極を形成した。正孔注入材料であるND-3202（日産化学工業製）を陽極の上にスピコート法により35nmの厚さで成膜し、大気雰囲気下において、ホットプレート上で240℃、15分間加熱した。これにより正孔注入層を形成した。

<正孔輸送層>

高分子化合物PC2をキシレンに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20nm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200℃、30分間加熱した。これにより、正孔輸送層が形成された。

<発光層>

高分子化合物PC8、及び化合物M103（高分子化合物PC8：化合物M103＝98質量%：2質量%）をキシレンに1.2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、正孔輸送層の上にスピコート法により60nm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150℃、10分間加熱した。これにより、発光層が形成された。

<陰極の形成>

発光素子D 1と同様の手順で作製した。

[0199] <実施例D 1 2～実施例D 1 9、及び比較例C D 3>発光素子D 1 2～発光素子D 1 9、及び発光素子C D 3の作製

発光素子D 1 1における、「高分子化合物P C 8、及び化合物M 1 0 3（高分子化合物P C 8：化合物M 1 0 3＝9 8質量%：2質量%）」を、表5に記載の材料に変更したこと以外は、発光素子D 1 1と同様の手順で作製した。

[0200] <実施例D 2 0>発光素子D 2 0の作製

I T O陽極、正孔注入層、正孔輸送層及び陰極は、発光素子D 2 0と同様の手順で作製した。

<発光層>

高分子化合物P C 3、及び化合物M 1 0 5（高分子化合物P C 3：化合物M 1 0 5＝9 8質量%：2質量%）をキシレンに1. 2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、正孔輸送層の上にスピコート法により6 0 n m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1 5 0℃、1 0分間加熱した。これにより、発光層が形成された。

[0201] <比較例C D 4>発光素子C D 4の作製

I T O陽極、正孔注入層、正孔輸送層及び陰極は、発光素子D 1 1と同様の手順で作製した。

<発光層>

高分子化合物P C 3をキシレンに1. 2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、正孔輸送層の上にスピコート法により6 0 n m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1 5 0℃、1 0分間加熱した。これにより、発光層が形成された。

[0202] <実施例D 2 1>発光素子D 2 1の作製

I T O陽極、正孔注入層、正孔輸送層及び陰極は、発光素子D 1と同様の手順で作製した。

<発光層>

高分子化合物PC3、及び高分子化合物PC4（高分子化合物PC3：高分子化合物PC4＝50質量%：50質量%）をキシレンに1.2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、正孔輸送層の上にスピコート法により70nm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150℃、10分間加熱した。これにより、発光層が形成された。

[0203] <実施例D22>発光素子D22の作製

I TO陽極、正孔注入層、正孔輸送層及び陰極は、発光素子D1と同様の手順で作製した。

<発光層>

高分子化合物PC3、及び高分子化合物PC5（高分子化合物PC3：高分子化合物PC5＝50質量%：50質量%）をキシレンに1.2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、正孔輸送層の上にスピコート法により70nm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150℃、10分間加熱した。これにより、発光層が形成された。

[0204] <比較例CD5>発光素子CD5の作製

I TO陽極、正孔注入層、正孔輸送層及び陰極は、発光素子D1と同様の手順で作製した。

<発光層>

高分子化合物PC3をキシレンに1.2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、正孔輸送層の上にスピコート法により70nm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150℃、10分間加熱した。これにより、発光層が形成された。

[0205] <発光素子D1～発光素子D6、及び発光素子CD1の発光特性>

発光素子D1～発光素子D6、及び発光素子CD1に電圧を印加することによりEL発光が観測された。5mA/cm²における発光効率 [単位：Lm

／W、以下同様] を測定した。

実施例D 1～D 6 及び比較例C D 1 の結果を表 3 に示す。発光素子C D 1 の発光効率を 1. 0 としたときの発光素子D 1～D 6 の発光効率の相対値を示す。尚、 $\Delta E_{st 1}$ は、低分子化合物 (SM 1) の ΔE_{sT} を表し、 $\Delta E_{st 2}$ は、低分子化合物 (SM 2) の ΔE_{sT} を表す。

また、実施例D 1 の発光層の組成物において、d SM 1 と d SM 2 との和、及び配合比率は、高分子化合物P C 3 における構成単位 (SM 1) の単位質量当たりの含有数と、化合物M 1 0 1 の分子量：9 7 1. 2 2 を用いて、次のように算出される。

$$d SM 1 + d SM 2 = 0. 85 \times 6. 56 \times 10^{19} + 0. 15 \times N_A / (971. 22) = 1. 48 \times 10^{20} \text{ [個/g]}$$

$$d SM 1 / d SM 2 = (0. 85 \times 6. 56 \times 10^{19}) / (0. 15 \times N_A / (971. 22)) = 0. 60 \text{ [-]}$$

実施例D 2～D 6 における発光層の組成物においても、同様の手順で d S M 1、d S M 2 の和、及び配合比率が計算できる。結果を表 3 に示す。

[0206]

[表3]

	発光素子	発光層							発光効率の相対値[-]	
		高分子化合物	SM1	SM2	比率	$\Delta Est1$ [eV]	$\Delta Est2$ [eV]	dSM1+dSM2 [個/g]		dSM1/dSM2 [-]
実施例D1	D1	PC3	M8のH体	M101	85:15	0.44	0.13	1.5×10^{20}	0.60	1.6
実施例D2	D2	PC4	M15のH体	M101	78:22	0.06	0.13	2.5×10^{20}	0.82	1.5
実施例D3	D3	PC4	M15のH体	M101	88:12	0.06	0.13	2.0×10^{20}	1.7	2.4
実施例D4	D4	PC4	M15のH体	M101	94:6	0.06	0.13	1.7×10^{20}	3.6	2.3
実施例D5	D5	PC4	M15のH体	M101	97:3	0.06	0.13	1.6×10^{20}	7.4	2.1
実施例D6	D5	PC5	M15のH体	M101	85:15	0.06	0.13	2.1×10^{20}	1.3	1.5
比較例CD1	CD1	PC6	なし	M101	85:15	—	0.13	—	—	1.0

[0207] <発光素子D7～発光素子D10、及び発光素子CD2の発光特性>

発光素子D7～発光素子D10、及び発光素子CD2に電圧を印加することによりEL発光が観測された。5 mA/cm²における発光効率を測定した

。

発光素子D7～発光素子D10、及び発光素子CD2の結果を表4に示す。発光素子CD2の発光効率を1.0としたときの発光素子D7～発光素子D10の発光効率の相対値を示す。

[0208]

[表4]

	発光素子	発光層							発光効率の相対値[-]	
		高分子化合物	SM1	SM2	比率	ΔEst1 [eV]	ΔEst2 [eV]	dSM1+dSM2 [個/g]		dSM1/dSM2 [-]
実施例D7	D7	PC4	M15のH体	M102	85:15	0.06	0.12	2.3×10^{20}	1.1	1.3
実施例D8	D8	PC4	M15のH体	M102	94:6	0.06	0.12	1.8×10^{20}	2.9	2.0
実施例D9	D9	PC4	M15のH体	M102	97:3	0.06	0.12	1.6×10^{20}	6.0	1.9
実施例D10	D10	PC5	M15のH体	M102	85:15	0.06	0.12	2.3×10^{20}	1.0	1.4
比較例CD2	CD2	PC7	なし	M102	85:15	-	0.12	-	-	1.0

[0209] <発光素子D 1 1～発光素子D 1 9、及び発光素子C D 3の発光特性>

発光素子D 1 1～発光素子D 1 9、及び発光素子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 m A / c m ²における発光効率を測定した。

発光素子D 1 1～発光素子D 1 9、及び発光素子C D 3の結果を表5に示す。発光素子C D 3の発光効率を1. 0としたときの発光素子D 1 1～発光素子D 1 9の発光効率の相対値を示す。

[0210]

[表5]

	発光素子	発光層							発光効率の相対値[-]	
		高分子化合物	SM1	SM2	比率	$\Delta Est1$ [eV]	$\Delta Est2$ [eV]	dSM1+dSM2 [個/g]		dSM1/dSM2 [-]
実施例D11	D11	PC8	M17のH体	M103	98:2	0.16	0.46	1.9×10^{20}	13.0	1.3
実施例D12	D12	PC4	M15のH体	M103	98:2	0.06	0.46	1.5×10^{20}	10.4	1.7
実施例D13	D13	PC5	M15のH体	M103	98:2	0.06	0.46	1.5×10^{20}	10.1	1.6
実施例D14	D14	PC5	M15のH体	M104	98:2	0.06	0.46	1.5×10^{20}	12.7	1.5
実施例D15	D15	PC4	M15のH体	M105	98:2	0.06	0.43	1.5×10^{20}	10.7	1.5
実施例D16	D16	PC4	M15のH体	M105	95:5	0.06	0.43	1.7×10^{20}	4.2	1.5
実施例D17	D17	PC4	M15のH体	M105	89:11	0.06	0.43	2.0×10^{20}	1.8	1.6
実施例D18	D18	PC4	M15のH体	M105	86:14	0.06	0.43	2.1×10^{20}	1.3	1.2
実施例D19	D19	PC4	M15のH体	M105	83:17	0.06	0.43	2.3×10^{20}	1.1	1.3
比較例CD3	CD3	PC6	なし	M103	98:2	—	0.46	—	—	1.0

[0211] <発光素子D20、及び発光素子CD4の発光特性>

発光素子D20、及び発光素子CD4に電圧を印加することによりEL発光が観測された。5 mA/cm²における発光効率を測定した。

発光素子D20及び発光素子CD4の結果を表6に示す。発光素子CD4の発光効率を1.0としたときの発光素子D20の発光効率の相対値を示す

。

[0212]

[表6]

	発光素子	発光層							発光効率の相対値 [-]	
		高分子化合物	SM1	SM2	比率	$\Delta Est1$ [eV]	$\Delta Est2$ [eV]	$dSM1 + dSM2$ [個/g]		$dSM1 / dSM2$ [-]
実施例D20	D20	PC3	M8のH体	M105	98:2	0.44	0.43	7.7×10^{19}	4.9	1.2
比較例CD4	CD4	PC3	M8のH体	なし	100	0.44	-	-	-	1.0

[0213] <発光素子D 2 1、発光素子D 2 2、及び発光素子C D 5の発光特性>

発光素子D 2 1、発光素子D 2 2、及び発光素子C 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 m A / c m ²における発光効率を測定した。

発光素子D 2 1、発光素子D 2 2、及び発光素子C D 5の結果を表7に示す。発光素子C D 5の発光効率を1. 0としたときの発光素子D 2 1及び発光素子D 2 2の発光効率の相対値を示す。

なお、2種の高分子化合物のうち、1種目の高分子化合物における低分子化合物(S M 1)に相当する化合物をS M 1 - 1とし、2種目の高分子化合物における低分子化合物(S M 1)に相当する化合物をS M 1 - 2とした。S M 1 - 1の $\Delta E_{s t}$ 及びS M 1 - 2の $\Delta E_{s t}$ を、それぞれ $\Delta E_{s t 1 (a)}$ 及び $\Delta E_{s t 1 (b)}$ とした。

[0214]

[表7]

発光素子	発光層							発光効率の相対値 [-]	
	高分子化合物	SM1-1	SM1-2	比率	$\Delta Est1$ (a) [eV]	$\Delta Est1$ (b) [eV]	dSM1a+dSM1b [個/g]		dSM1a/ dSM1b [-]
実施例D21	PC3、PC4	M8のH体	M15のH体	50:50	0.44	0.06	1.0×10^{20}	0.46	2.0
実施例D22	PC3、PC5	M8のH体	M15のH体	50:50	0.44	0.06	1.0×10^{20}	0.47	1.6
比較例CD5	PC3	M8のH体	-	-	0.44	-	-	-	1.0

請求の範囲

[請求項1]

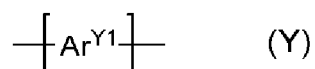
式 (Y) で表される繰り返し単位、及び、最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50 eV以下である低分子化合物 (SM1) から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位 (SM1) を有する高分子化合物と、

最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50 eV以下である低分子化合物 (SM2) と、

を含む組成物であって

前記組成物中の前記構成単位 (SM1) の単位質量当たりの含有数を d_{SM1} 、前記組成物中の前記低分子化合物 (SM2) の単位質量当たりの含有数を d_{SM2} としたとき、 $d_{SM1} + d_{SM2}$ が 2.0×10^{19} (個/g) 以上であり、且つ、 d_{SM1} / d_{SM2} が0.020以上50以下である、組成物。

[化1]

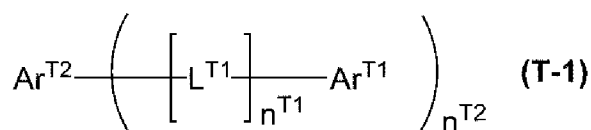


[式中、 Ar^{Y1} は、置換基を有していてもよいアリーレン基を表す。]

[請求項2]

前記低分子化合物 (SM1) が、式 (T-1) で表される化合物、又は、D群から選ばれる基を有する化合物である、請求項1に記載の組成物。

[化2]



[式中、

n^{T1} は、0以上の整数を表す。 n^{T1} 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^{T2} は、0以上の整数を表す。

$A_{r^{T1}}$ は、置換アミノ基又は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。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。 $A_{r^{T1}}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。但し、 $A_{r^{T1}}$ における1価の複素環基は、二重結合を形成していない窒素原子を環内に含み、且つ、 $=N-$ で表される基、 $-C(=O)-$ で表される基、 $-S(=O)-$ で表される基、及び、 $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含まない1価の複素環基である。

L^{T1} は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2価の複素環基、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。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。 L^{T1} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$A_{r^{T2}}$ は、A群、B群及びC群から選ばれる基を表す。但し、 $A_{r^{T2}}$ がA群から選ばれる場合、 n^{T2} は2である。]

A群： $-C(=O)-$ 、 $-S(=O)-$ 及び $-S(=O)_2-$

B群：電子求引性基を有する芳香族炭化水素から n^{T2} 個の水素原子を除いた基

C群： $=N-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T2} 個の水素原子を除いた基、 $-C(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T2} 個の水素原子を除いた基、 $-S(=O)-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T2} 個の水素原子を除いた基、及び、 $-S(=O)_2-$ で表される基を環内に含む複素環式化合物から n^{T2} 個の水素原子を除いた基

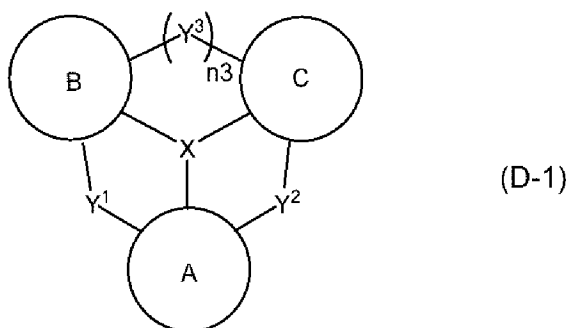
D群：ホウ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を

除いた基、リン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、アルミニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ガリウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、シリコン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ヒ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、及び、ゲルマニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基

[請求項3] $dSM1 / dSM2$ が、 $0.077 \sim 0.77$ 、又は、 $1.3 \sim 13$ である、請求項1又は2に記載の組成物。

[請求項4] 前記低分子化合物 (SM1) が、式 (D-1) で表される化合物である、請求項1～3のいずれか一項に記載の組成物。

[化3]



[式中、

A環、B環及びC環は、それぞれ独立に、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。

Xは、ホウ素原子、リン原子、 $P=O$ 、 $P=S$ 、アルミニウム原子、ガリウム原子、ヒ素原子、 $Si-R_x$ 又は $Ge-R_x$ を表す。 R_x は、アリール基又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

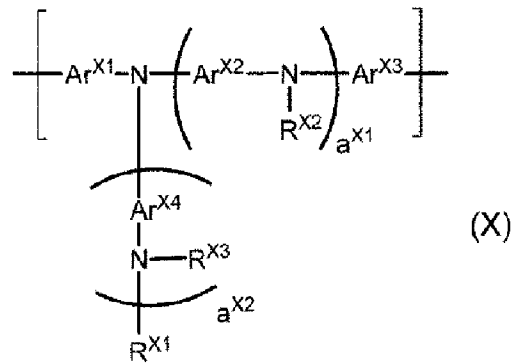
Y^1 は、 $N-R_y$ 、硫黄原子又はセレン原子を表す。 Y^2 及び Y^3 は、それぞれ独立に、酸素原子、 $N-R_y$ 、硫黄原子又はセレン原子を表す。 R_y は、水素原子、アリール基、1価の複素環基、又はアルキ

ル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。R_yが複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。R_yは、直接又は連結基を介して、前記A環、前記B環又は前記C環と結合していてもよい。

n₃は、0又は1である。n₃が0である場合、-Y³-は存在しない。]

[請求項5] 前記高分子化合物が、式(X)で表される構成単位(但し、前記構成単位(SM1)と異なる)を更に含む、請求項1~4のいずれか一項に記載の組成物。

[化4]



[式中、

a^{x1}及びa^{x2}は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す。

Ar^{x1}及びAr^{x3}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。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。

Ar^{x2}及びAr^{x4}は、それぞれ独立に、アリーレン基、2価の複素環基、又は、少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の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。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

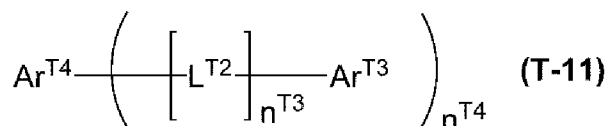
ともに環を形成していてもよい。Ar^{x2}及びAr^{x4}が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

R^{x1}、R^{x2}及びR^{x3}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。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。R^{x2}及びR^{x3}が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

[請求項6]

前記低分子化合物(SM2)が、式(T-11)で表される化合物、又は、G群から選ばれる基を有する化合物である、請求項1~5のいずれか一項に記載の組成物。

[化5]



[式中、

n^{T3}は、0以上の整数を表す。n^{T3}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^{T4}は、1以上の整数を表す。

Ar^{T3}は、置換アミノ基又は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。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。Ar^{T3}が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。但し、Ar^{T3}における1価の複素環基は、二重結合を形成していない窒素原子を環内に含み、且つ、=N-で表される基、-C(=O)-で表される基、-S(=O)-で表される基、及び、-S(=O)₂-で表される基を環内に含まない1価の複素環基である。

L^{T2}は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2

価の複素環基、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。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。L^{T2}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_rT⁴は、A群、E群及びF群から選ばれる基を表す。但し、A_rT⁴がA群から選ばれる基である場合、n^{T4}は2である。]

A群：-C(=O)-、-S(=O)-及び-S(=O)₂-

E群：電子求引性基を有する芳香族炭化水素からn^{T4}個の水素原子を除いた基

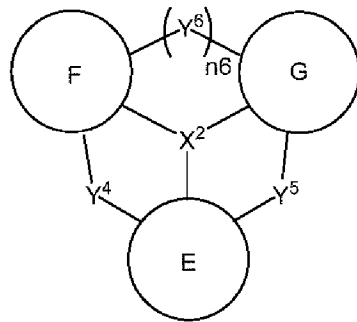
F群：=N-で表される基を環内に含む複素環式化合物からn^{T4}個の水素原子を除いた基、-C(=O)-で表される基を環内に含む複素環式化合物からn^{T4}個の水素原子を除いた基、-S(=O)-で表される基を環内に含む複素環式化合物からn^{T4}個の水素原子を除いた基、及び、-S(=O)₂-で表される基を環内に含む複素環式化合物からn^{T4}個の水素原子を除いた基

G群：ホウ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、リン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、アルミニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ガリウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、シリコン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ヒ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、及び、ゲルマニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基

[請求項7]

前記低分子化合物(SM2)が、式(D-11)で表される化合物である、請求項1~6のいずれか一項に記載の組成物。

[化6]



(D-11)

[式中、

E環、F環及びG環は、それぞれ独立に、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。

X^2 は、ホウ素原子、リン原子、 $P=O$ 、 $P=S$ 、アルミニウム原子、ガリウム原子、ヒ素原子、 $Si-R_x$ 又は $Ge-R_x$ を表す。 R_x は、アリアル基又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Y^4 は、 $N-R_y$ 、硫黄原子又はセレン原子を表す。 Y^5 及び Y^6 は、それぞれ独立に、酸素原子、 $N-R_y$ 、硫黄原子又はセレン原子を表す。 R_y は、水素原子、アリアル基、1価の複素環基、又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R_y が複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。 R_y は、直接又は連結基を介して、前記E環、前記F環又は前記G環と結合していてもよい。

n_6 は、0又は1である。 n_6 が0である場合、 $-Y^6-$ は存在しない。]

[請求項8]

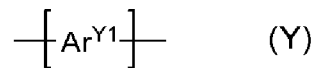
式(Y)で表される繰り返し単位、及び、最低三重項励起状態のエネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50 eV以下である低分子化合物(SM1-1)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位(SM1-1)を有する第一の高分子化合物と、

式(Y)で表される繰り返し単位、及び、最低三重項励起状態のエ

エネルギー準位と最低一重項励起状態のエネルギー準位との差の絶対値が0.50 eV以下である低分子化合物(SM1-2)から水素原子を1つ以上除いてなる構成単位(SM1-2)を有する第二の高分子化合物(但し、前記低分子化合物(SM1-1)と前記低分子化合物(SM1-2)とは異なる)と、
を含む組成物であって、

前記組成物中の前記構成単位(SM1-1)の単位質量当たりの含有数をdSM1a、前記組成物中の前記構成単位(SM1-2)の単位質量当たりの含有数をdSM1bとしたとき、dSM1a+dSM1bが 2.0×10^{19} (個/g)以上であり、且つ、dSM1a/dSM1bが0.020以上50以下である、組成物。

[化7]



[式中、Ar^{Y1}は、置換基を有していてもよいアリーレン基を表す。]

[請求項9]

前記低分子化合物(SM1-1)及び前記低分子化合物(SM1-2)が、それぞれ独立に、式(T-1)で表される化合物、又は、D群から選ばれる基を有する化合物である、請求項8に記載の組成物。

[化8]



[式中、

n^{T1} は、0以上の整数を表す。 n^{T1} 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^{T2} は、0以上の整数を表す。

Ar^{T1}は、置換アミノ基又は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。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。A_r^{T1}が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。但し、A_r^{T1}における1価の複素環基は、二重結合を形成していない窒素原子を環内に含み、且つ、=N-で表される基、-C(=O)-で表される基、-S(=O)-で表される基、及び、-S(=O)₂-で表される基を環内に含まない1価の複素環基である。

L^{T1}は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2価の複素環基、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。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。L^{T1}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_r^{T2}は、A群、B群及びC群から選ばれる基を表す。但し、A_r^{T2}がA群から選ばれる場合、n^{T2}は2である。]

A群：-C(=O)-、-S(=O)-及び-S(=O)₂-

B群：電子求引性基を有する芳香族炭化水素からn^{T2}個の水素原子を除いた基

C群：=N-で表される基を環内に含む複素環式化合物からn^{T2}個の水素原子を除いた基、-C(=O)-で表される基を環内に含む複素環式化合物からn^{T2}個の水素原子を除いた基、-S(=O)-で表される基を環内に含む複素環式化合物からn^{T2}個の水素原子を除いた基、及び、-S(=O)₂-で表される基を環内に含む複素環式化合物からn^{T2}個の水素原子を除いた基

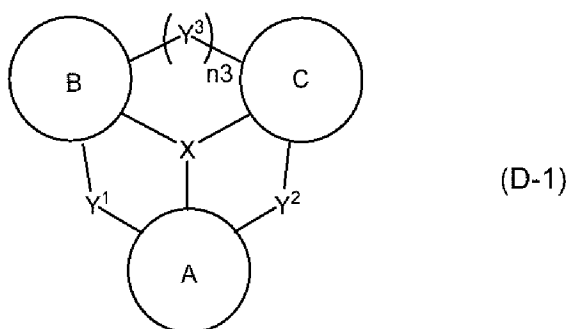
D群：ホウ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、リン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、アルミニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ガリウム原子を含む複素環式化合物から1個以上

の水素原子を除いた基、シリコン原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、ヒ素原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基、及び、ゲルマニウム原子を含む複素環式化合物から1個以上の水素原子を除いた基

[請求項10]

前記低分子化合物 (SM1-1) 及び前記低分子化合物 (SM1-2) が、それぞれ独立に、式 (D-1) で表される化合物である、請求項8又は9に記載の組成物。

[化9]



[式中、

A環、B環及びC環は、それぞれ独立に、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。

Xは、ホウ素原子、リン原子、P=O、P=S、アルミニウム原子、ガリウム原子、ヒ素原子、Si-R_x又はGe-R_xを表す。R_xは、アリール基又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Y¹は、N-R_y、硫黄原子又はセレン原子を表す。Y²及びY³は、それぞれ独立に、酸素原子、N-R_y、硫黄原子又はセレン原子を表す。R_yは、水素原子、アリール基、1価の複素環基、又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。R_yが複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。R_yは、直接又は連結基を介して、前記A環、前記B環又は前記C環と結合していてもよい。

n_3 は、0又は1である。 n_3 が0である場合、 $-Y^3-$ は存在しない。]

[請求項11] 請求項1～10のいずれか一項に記載の組成物と、溶媒と、を含有する、インク。

[請求項12] 請求項1～10のいずれか一項に記載の組成物を含有する、発光素子。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2021/025092

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER C09K 11/06(2006.01) i; H01L 51/50(2006.01) i FI: H05B33/14 B; C09K11/06 660; C09K11/06 690 According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C09K11/06; H01L51/50 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2021 Registered utility model specifications of Japan 1996-2021 Published registered utility model applications of Japan 1994-2021 Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	WO 2019/004247 A1 (SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.) 03 January 2019 (2019-01-03) paragraphs [0007], [0281], [0312], [0449], [0469], [0484], [0500], [0507]-[0531], [0546], [0548]-[0550]	1-12
Y	WO 2020/040298 A1 (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION, JNC CORPORATION) 27 February 2020 (2020-02-27) paragraphs [0048]-[0058], [0070]- [0072], [0079]-[0083], [0102]-[0147], [0336], [0380]-[0381], [0466]-[0467]	1-12
Y	JP 2018-061028 A (SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.) 12 April 2018 (2018-04-12) paragraphs [0010]-[0012], [0015], [0056]-[0057], [0295]-[0298], [0432]-[0448]	1-12
Y	JP 2018-061030 A (SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.) 12 April 2018 (2018-04-12) paragraphs [0009]-[0011], [0014], [0055]-[0056], [0294]-[0297], [0431]-[0447]	1-12
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 09 September 2021 (09.09.2021)		Date of mailing of the international search report 21 September 2021 (21.09.2021)
Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2021/025092

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2018-061029 A (SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.) 12 April 2018 (2018-04-12) entire text	1-12
A	WO 2019/004248 A1 (SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.) 03 January 2019 (2019-01-03) entire text	1-12
A	JP 2019-050369 A (SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.) 28 March 2019 (2019-03-28) entire text	1-12
A	WO 2019/240080 A1 (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION, JNC CORPORATION) 19 December 2019 (2019-12-19) entire text, all drawings	1-12

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application no.
PCT/JP2021/025092

Patent Documents referred in the Report	Publication Date	Patent Family	Publication Date
WO 2019/004247 A1	03 Jan. 2019	(Family: none)	
WO 2020/040298 A1	27 Feb. 2020	(Family: none)	
JP 2018-061028 A	12 Apr. 2018	(Family: none)	
JP 2018-061030 A	12 Apr. 2018	(Family: none)	
JP 2018-061029 A	12 Apr. 2018	(Family: none)	
WO 2019/004248 A1	03 Jan. 2019	EP 3647338 A1 entire text CN 110799571 A KR 10-2020-0023397 A	
JP 2019-050369 A	28 Mar. 2019	(Family: none)	
WO 2019/240080 A1	19 Dec. 2019	TW 202000676 A	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） C09K 11/06(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i FI: H05B33/14 B; C09K11/06 660; C09K11/06 690		
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） C09K11/06; H01L51/50 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2021年 日本国実用新案登録公報 1996-2021年 日本国登録実用新案公報 1994-2021年		
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語） CAplus/REGISTRY (STN)		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
Y	WO 2019/004247 A1 (住友化学株式会社) 03.01.2019 (2019-01-03) 段落[0007], [0281], [0312], [0449], [0469], [0484], [0500], [0507]-[0531], [0546], [0548]-[0550]	1-12
Y	WO 2020/040298 A1 (学校法人関西学院, JNC株式会社) 27.02.2020 (2020-02-27) 段落[0048]-[0058], [0070]-[0072], [0079]-[0083], [0102]-[0147], [0336], [0380]-[0381], [0466]-[0467]	1-12
Y	JP 2018-061028 A (住友化学株式会社) 12.04.2018 (2018-04-12) 段落[0010]-[0012], [0015], [0056]-[0057], [0295]-[0298], [0432]-[0448]	1-12
Y	JP 2018-061030 A (住友化学株式会社) 12.04.2018 (2018-04-12) 段落[0009]-[0011], [0014], [0055]-[0056], [0294]-[0297], [0431]-[0447]	1-12
A	JP 2018-061029 A (住友化学株式会社) 12.04.2018 (2018-04-12) 全文	1-12
A	WO 2019/004248 A1 (住友化学株式会社) 03.01.2019 (2019-01-03) 全文	1-12
<input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー	“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献	
国際調査を完了した日	09.09.2021	国際調査報告の発送日 21.09.2021
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官） 小久保 州洋 20 1169 電話番号 03-3581-1101 内線 3271	

C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2019-050369 A (住友化学株式会社) 28.03.2019 (2019 - 03 - 28) 全文	1-12
A	WO 2019/240080 A1 (学校法人関西学院, JNC株式会社) 19.12.2019 (2019 - 12 - 19) 全文, 全図	1-12

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
 PCT/JP2021/025092

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO 2019/004247 A1	03.01.2019	(ファミリーなし)	
WO 2020/040298 A1	27.02.2020	(ファミリーなし)	
JP 2018-061028 A	12.04.2018	(ファミリーなし)	
JP 2018-061030 A	12.04.2018	(ファミリーなし)	
JP 2018-061029 A	12.04.2018	(ファミリーなし)	
WO 2019/004248 A1	03.01.2019	EP 3647338 A1 全文 CN 110799571 A KR 10-2020-0023397 A	
JP 2019-050369 A	28.03.2019	(ファミリーなし)	
WO 2019/240080 A1	19.12.2019	TW 202000676 A	