

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第6827135号
(P6827135)

(45) 発行日 令和3年2月10日(2021.2.10)

(24) 登録日 令和3年1月20日(2021.1.20)

(51) Int. Cl.	F I
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14 B
C09K 11/06 (2006.01)	C09K 11/06 660
C07D 409/14 (2006.01)	C09K 11/06 690
C07D 209/82 (2006.01)	C07D 409/14
C07D 401/14 (2006.01)	C07D 209/82

請求項の数 11 (全 37 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2020-31738 (P2020-31738)	(73) 特許権者	000002093
(22) 出願日	令和2年2月27日(2020.2.27)		住友化学株式会社
(65) 公開番号	特開2020-167391 (P2020-167391A)		東京都中央区新川二丁目27番1号
(43) 公開日	令和2年10月8日(2020.10.8)	(74) 代理人	100088155
審査請求日	令和2年12月8日(2020.12.8)		弁理士 長谷川 芳樹
(31) 優先権主張番号	特願2019-66198 (P2019-66198)	(74) 代理人	100128381
(32) 優先日	平成31年3月29日(2019.3.29)		弁理士 清水 義憲
(33) 優先権主張国・地域又は機関	日本国(JP)	(74) 代理人	100124062
			弁理士 三上 敬史
早期審査対象出願		(72) 発明者	佐々田 敏明
			茨城県つくば市北原6番 住友化学株式会 社内
		(72) 発明者	松本 龍二
			茨城県つくば市北原6番 住友化学株式会 社内
			最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 発光素子及び発光素子用組成物

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

陽極と、

陰極と、

前記陽極及び前記陰極の間に設けられ、発光素子用組成物を含む有機層と、
を備え、

前記発光素子用組成物が、

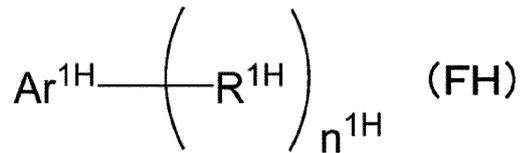
式(FH)で表される化合物、及び、式(FH)で表される化合物から水素原子1個
以上を除いた基を有する構成単位を含む高分子化合物からなる群より選択される少なくと
も2種の化合物(A)と、

ホウ素原子及び窒素原子を環内に含む縮合複素環骨格(b)を有する化合物(B)と

を含有する組成物であり、

前記発光素子用組成物が、前記化合物(A)として、少なくとも1種の前記高分子化合
物を含有する、発光素子。

【化1】



[式中、

$n^{1\text{H}}$ は、0以上の整数を表す。

$\text{Ar}^{1\text{H}}$ は、環内に窒素原子を含む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 $n^{1\text{H}}$ 個以上を除いた基を表し、こ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いてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。但し、前記複素環式化合物は、前記縮合複素環骨格 (b) を含まない複素環式化合物である。

10

$\text{R}^{1\text{H}}$ は、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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いてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。 $\text{R}^{1\text{H}}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なっていてもよく、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。但し、前記1価の複素環基は、前記縮合複素環骨格 (b) を含まない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、この基は置換基を有していてもよい。

20

$\text{Ar}^{1\text{H}}$ が有していてもよい置換基と $\text{R}^{1\text{H}}$ とは、互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよい。]

【請求項2】

前記 $\text{Ar}^{1\text{H}}$ における前記複素環式化合物が、環内に窒素原子を含む単環式の複素環式化合物、環内に窒素原子を含む2環式の複素環式化合物、又は、環内に窒素原子を含む3環式の複素環式化合物である、請求項1に記載の発光素子。

【請求項3】

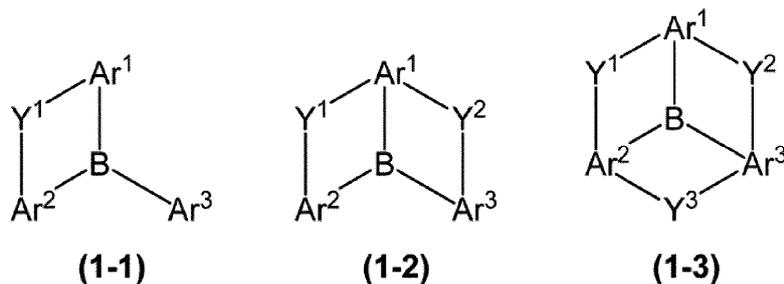
前記 $\text{Ar}^{1\text{H}}$ における前記複素環式化合物が、オキサジアゾール、チアジアゾール、ピロール、ジアゾール、トリアゾール、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、アザナフタレン、ジアザナフタレン、インドール、ベンゾジアゾール、カルバゾール、アザカルバゾール、ジアザカルバゾール、フェノキサジン、フェノチアジン、9,10-ジヒドロアクリジン、5,10-ジヒドロフェナジン、アザアントラセン、ジアザアントラセン、アザフェナントレン又はジアザフェナントレンである、請求項2に記載の発光素子。

30

【請求項4】

前記化合物 (B) が、式 (1-1) で表される化合物、式 (1-2) で表される化合物又は式 (1-3) 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発光素子。

【化2】



40

[式中、

Ar^1 、 Ar^2 及び Ar^3 は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し

50

、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。

Y^1 は、 $-N(Ry)-$ で表される基を表す。

Y^2 及び Y^3 は、それぞれ独立に、単結合、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、 $-N(Ry)-$ で表される基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、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。 Ry は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリアル基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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。 Ry が複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。 Ry は、直接結合して又は連結基を介して、 Ar^1 、 Ar^2 又は Ar^3 と結合していてもよい。]

10

【請求項5】

前記 Y^2 及び前記 Y^3 が、 $-N(Ry)-$ で表される基である、請求項4に記載の発光素子。

【請求項6】

前記発光素子用組成物が、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選ばれる少なくとも1種を更に含有する、請求項1～5のいずれか一項に記載の発光素子。

20

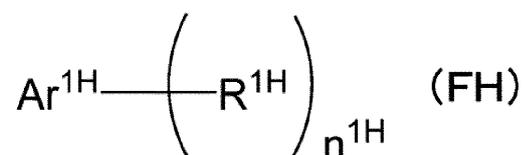
【請求項7】

式(FH)で表される化合物、及び、式(FH)で表される化合物から水素原子1個以上を除いた基を有する構成単位を含む高分子化合物からなる群より選択される少なくとも2種の化合物(A)と、

ホウ素原子及び窒素原子を環内に含む縮合複素環骨格(b)を有する化合物(B)と、
を含有する組成物であって、

前記化合物(A)として、少なくとも1種の前記高分子化合物を含有する、発光素子用組成物。

【化3】



30

[式中、

n^{1H} は、0以上の整数を表す。

Ar^{1H} は、環内に窒素原子を含む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 n^{1H} 個以上を除いた基を表し、こ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。但し、前記複素環式化合物は、前記縮合複素環骨格(b)を含まない複素環式化合物である。

40

R^{1H} は、アリアル基、1価の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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^{1H} 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。但し、前記1価の複素環基は、前記縮合複素環骨格(b)を含まない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、この基は置換基を有していてもよい。

Ar^{1H} が有していてもよい置換基と R^{1H} とは、互いに結合して、それぞれが結合す

50

る原子とともに環を形成していてもよい。]

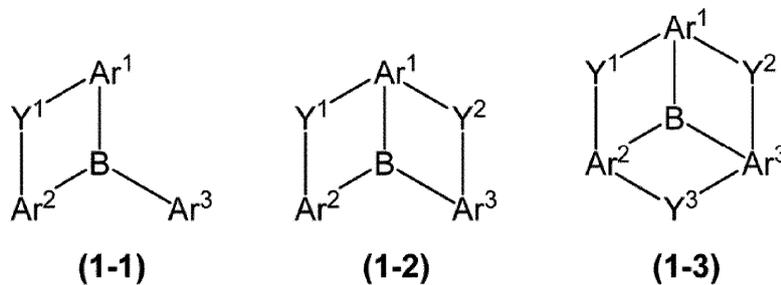
【請求項 8】

前記 Ar^1 における前記複素環式化合物が、環内に窒素原子を含む単環式の複素環式化合物、環内に窒素原子を含む 2 環式の複素環式化合物、又は、環内に窒素原子を含む 3 環式の複素環式化合物である、請求項 7 に記載の発光素子用組成物。

【請求項 9】

前記化合物 (B) が、式 (1-1) で表される化合物、式 (1-2) で表される化合物又は式 (1-3) で表される化合物である、請求項 7 又は 8 に記載の発光素子用組成物。

【化 4】



10

[式中、

Ar^1 、 Ar^2 及び Ar^3 は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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。

20

Y^1 は、 $-N(Ry)-$ で表される基を表す。

Y^2 及び Y^3 は、それぞれ独立に、単結合、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、 $-N(Ry)-$ で表される基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、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。 Ry は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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。 Ry が複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。 Ry は、直接結合して又は連結基を介して、 Ar^1 、 Ar^2 又は Ar^3 と結合していてもよい。]

30

【請求項 10】

前記 Y^2 及び前記 Y^3 が、 $-N(Ry)-$ で表される基である、請求項 9 に記載の発光素子用組成物。

【請求項 11】

正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選ばれる少なくとも 1 種を更に含有する、請求項 7 ~ 10 のいずれか一項に記載の発光素子用組成物。

40

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、発光素子及び発光素子用組成物に関する。

【背景技術】

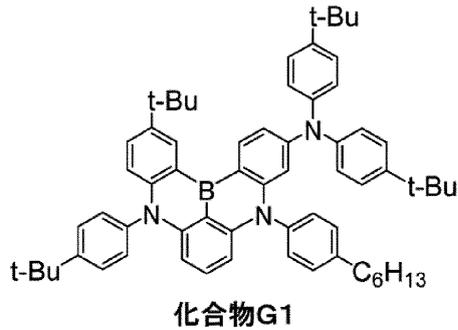
【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子等の発光素子は、例えば、ディスプレイ及び照明に好適に使用することが可能である。発光素子の発光層に用いられる発光材料として、例えば、特許文献 1 では、化合物 G 1 を含む組成物が提案されている。

【0003】

50

【化 1】



10

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【特許文献1】国際公報第2018/062278号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

しかし、上記の組成物を用いて作製される発光素子は、外部量子効率が必ずしも十分ではなかった。

そこで、本発明は、外部量子効率が優れる発光素子の製造に有用な組成物を提供すること、及び、当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。

20

【課題を解決するための手段】

【0006】

本発明者らは、上記課題を解決するために鋭意検討を行った結果、特定の化合物(A)2種以上と特定の化合物(B)とを含む発光素子用組成物により、外部量子効率が優れる発光素子が形成されることを見出し、本発明を完成するに至った。

【0007】

すなわち、本発明は、以下の[1]~[13]を提供する。

[1]

陽極と、

陰極と、

前記陽極及び前記陰極の間に設けられ、発光素子用組成物を含む有機層と、を備え、

30

前記発光素子用組成物が、

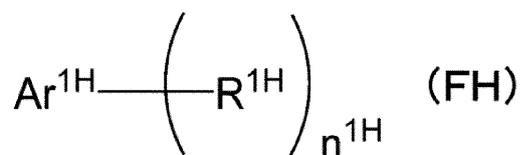
式(FH)で表される化合物、及び、式(FH)で表される化合物から水素原子1個以上を除いた基を有する構成単位を含む高分子化合物からなる群より選択される少なくとも2種の化合物(A)と、

ホウ素原子及び窒素原子を環内に含む縮合複素環骨格(b)を有する化合物(B)と、

を含有する、発光素子。

40

【化 2】



[式中、

$n^{1\text{H}}$ は、0以上の整数を表す。

$\text{Ar}^{1\text{H}}$ は、環内に窒素原子を含む複素環式化合物から、環を構成する原子に直接結合

50

する水素原子 n^{1H} 個以上を除いた基を表し、こ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。但し、前記複素環式化合物は、前記縮合複素環骨格 (b) を含まない複素環式化合物である。

R^{1H} は、アリアル基、1 価の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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^{1H} 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。但し、前記 1 価の複素環基は、前記縮合複素環骨格 (b) を含まない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、この基は置換基を有していてもよい。

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

[2]

前記化合物 (A) として、少なくとも 1 種の前記高分子化合物を含有する、[1] に記載の発光素子。

[3]

前記 Ar^{1H} における前記複素環式化合物が、環内に窒素原子を含む単環式の複素環式化合物、環内に窒素原子を含む 2 環式の複素環式化合物、又は、環内に窒素原子を含む 3 環式の複素環式化合物である、[1] 又は [2] に記載の発光素子。

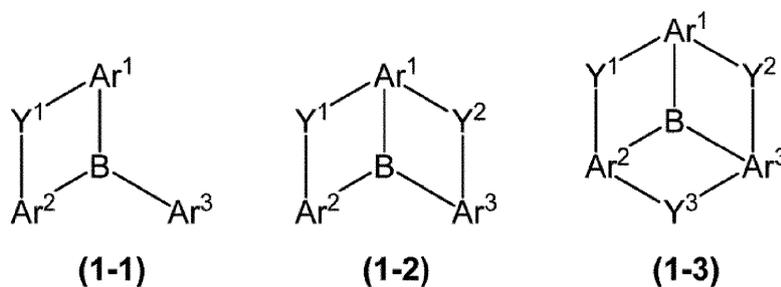
[4]

前記 Ar^{1H} における前記複素環式化合物が、オキサジアゾール、チアジアゾール、ピロール、ジアゾール、トリアゾール、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、アザナフタレン、ジアザナフタレン、インドール、ベンゾジアゾール、カルバゾール、アザカルバゾール、ジアザカルバゾール、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、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又はジアザフェナントレンである、[3] に記載の発光素子。

[5]

前記化合物 (B) が、式 (1-1) で表される化合物、式 (1-2) で表される化合物又は式 (1-3) で表される化合物である、[1] ~ [4] のいずれかに記載の発光素子。

【化 3】



[式中、

Ar^1 、 Ar^2 及び Ar^3 は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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。

Y^1 は、 $-N(Ry)-$ で表される基を表す。

Y^2 及び Y^3 は、それぞれ独立に、単結合、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、 $-N(Ry)-$ で表される基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、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

10

20

30

40

50

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^yは、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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^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、直接結合して又は連結基を介して、Ar¹、Ar²又はAr³と結合していてもよい。]

[6]

前記Y²及び前記Y³が、-N(R^y)-で表される基である、[5]に記載の発光素子。

[7]

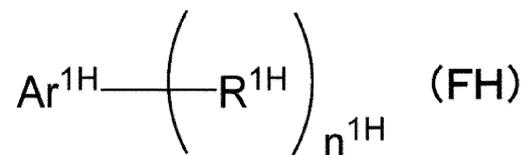
前記発光素子用組成物が、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選ばれる少なくとも1種を更に含有する、[1] ~ [6]のいずれかに記載の発光素子。

[8]

式(FH)で表される化合物、及び、式(FH)で表される化合物から水素原子1個以上を除いた基を有する構成単位を含む高分子化合物からなる群より選択される少なくとも2種の化合物(A)と、

ホウ素原子及び窒素原子を環内に含む縮合複素環骨格(b)を有する化合物(B)と、を含有する、発光素子用組成物。

【化4】



[式中、

n^{1H}は、0以上の整数を表す。

Ar^{1H}は、環内に窒素原子を含む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n^{1H}個以上を除いた基を表し、こ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。但し、前記複素環式化合物は、前記縮合複素環骨格(b)を含まない複素環式化合物である。

R^{1H}は、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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^{1H}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。但し、前記1価の複素環基は、前記縮合複素環骨格(b)を含まない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、この基は置換基を有していてもよい。

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

[9]

前記化合物(A)として、少なくとも1種の前記高分子化合物を含有する、[8]に記載の発光素子用組成物。

[10]

前記Ar^{1H}における前記複素環式化合物が、環内に窒素原子を含む単環式の複素環式化合物、環内に窒素原子を含む2環式の複素環式化合物、又は、環内に窒素原子を含む3環式の複素環式化合物である、[8]又は[9]に記載の発光素子用組成物。

[11]

10

20

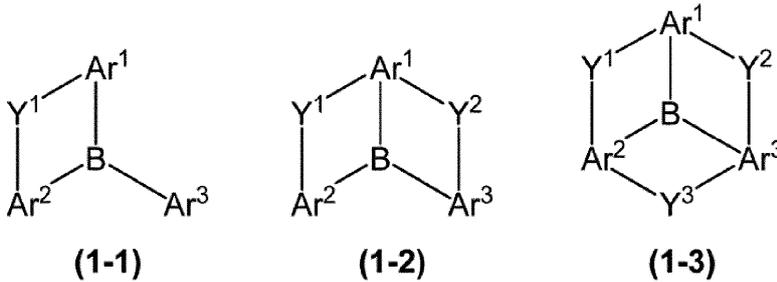
30

40

50

前記化合物 (B) が、式 (1 - 1) で表される化合物、式 (1 - 2) で表される化合物又は式 (1 - 3) で表される化合物である、 [8] ~ [1 0] のいずれかに記載の発光素子用組成物。

【化 5】



10

[式中、

Ar¹、Ar²及びAr³は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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。

Y¹は、-N(Ry)-で表される基を表す。

Y²及びY³は、それぞれ独立に、単結合、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、-N(Ry)-で表される基、アルキレン基又はシクロアルキレン基を表し、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。Ryは、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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。Ryが複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。Ryは、直接結合して又は連結基を介して、Ar¹、Ar²又はAr³と結合していてもよい。]

20

[1 2]

前記Y²及び前記Y³が、-N(Ry)-で表される基である、[1 1]に記載の発光素子用組成物。

30

[1 3]

正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選ばれる少なくとも1種を更に含有する、[8] ~ [1 2]のいずれかに記載の発光素子用組成物。

【発明の効果】

【0008】

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

40

【発明を実施するための形態】

【0009】

以下、本発明の好適な実施形態について詳細に説明する。

【0010】

< 共通する用語の説明 >

本明細書で共通して用いられる用語は、特記しない限り、以下の意味である。

「室温」とは、25 を意味する。

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

水素原子は、重水素原子であっても、軽水素原子であってもよい。

50

【0011】

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

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

「構成単位」とは、高分子化合物中に1個以上存在する単位を意味する。

【0012】

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価の複素環基と結合している基が挙げられる。

【0013】

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

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

【0014】

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

【0015】

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

【0016】

「シクロアルキレン基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3~20であり、好ましくは4~10である。シクロアルキレン基は、置換基を有していてもよい。シクロアルキレン基としては、例えば、シクロヘキシレン基が挙げられる。

【0017】

「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「アリール基」ともいう。芳香族炭化水素から環を構成する原

10

20

30

40

50

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くて、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。

10

【0018】

「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くて、通常1～40であり、好ましくは1～10である。分岐のアルコキシ基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めなくて、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、イソプロピルオキシ基、ブチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、2-エチルヘキシルオキシ基、3,7-ジメチルオクチルオキシ基、及びラウリルオキシ基が挙げられる。

20

「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くて、通常3～40であり、好ましくは4～10である。シクロアルコキシ基は、置換基を有していてもよい。シクロアルコキシ基としては、例えば、シクロヘキシルオキシ基が挙げられる。

「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くて、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。アリールオキシ基は、置換基を有していてもよい。アリールオキシ基としては、例えば、フェノキシ基、ナフチルオキシ基、アントラセニルオキシ基、及びピレニルオキシ基が挙げられる。

30

【0019】

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

「芳香族複素環式化合物」としては、例えば、アゾール、チオフェン、フラン、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、アザナフタレン、ジアザナフタレン及びカルバゾール等の複素環自体が芳香族性を示す化合物、並びに、フェノキサジン、フェノチアジン及びベンゾピラン等の複素環自体は芳香族性を示さなくとも、複素環に芳香環が縮環されている化合物が挙げられる。

40

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

複素環基としては、例えば、単環式の複素環式化合物（例えば、フラン、チオフェン、オキサジアゾール、チアジアゾール、ピロール、ジアゾール、トリアゾール、テトラゾール、ピリジン、ジアザベンゼン及びトリアジンが挙げられる。）、又は、多環式の複素環

50

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

10

【0020】

「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。

【0021】

「アミノ基」は、置換基を有していてもよく、置換アミノ基（即ち、第2級アミノ基又は第3級アミノ基、より好ましくは第3級アミノ基）が好ましい。アミノ基が有する置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は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。

20

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。

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（メチルフェニル）アミノ基、及びビス（3,5-ジ-tert-ブチルフェニル）アミノ基が挙げられる。

【0022】

「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。

30

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

40

【0023】

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

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

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

50

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が挙げられる。

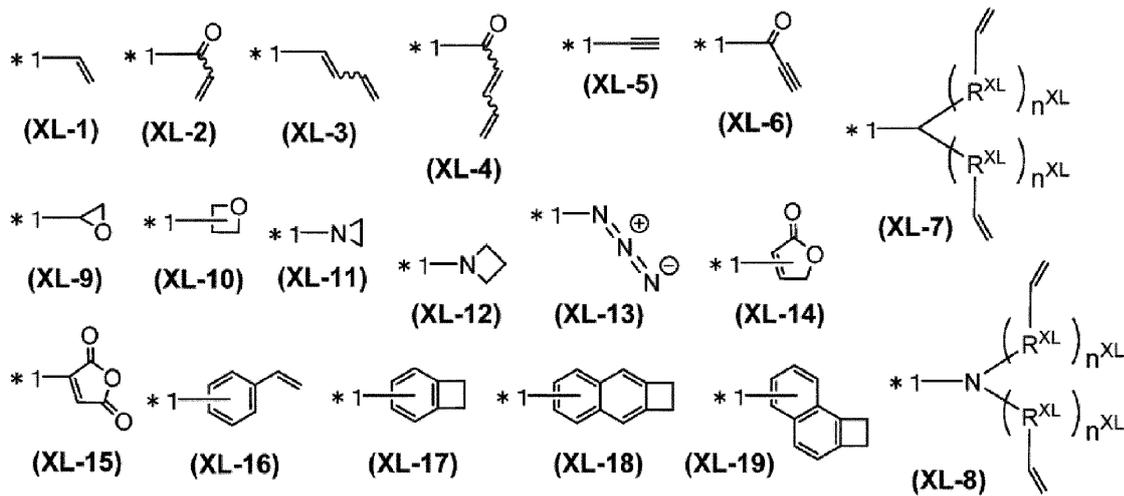
【0024】

「架橋基」とは、加熱、紫外線照射、近紫外線照射、可視光照射、赤外線照射、ラジカル反応等に従事することにより、新たな結合を生成することが可能な基である。架橋基としては、架橋基A群から選ばれる架橋基（即ち、式(XL-1)~式(XL-19)のいずれかで表される基）が好ましい。

【0025】

(架橋基A群)

【化6】



[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。複数存在する n^{XL} 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炭素原子とともに環を形成していてもよい。]

【0026】

「置換基」としては、例えば、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、アルキニル基及びシクロアルキニル基が挙げられる。置換基は架橋基であってもよい。なお、置換基が複数存在する場合、それらは互いに結合して、それぞれが結合する原子とともに環を形成していてもよいが、環を形成しないことが好ましい。

【0027】

本明細書中、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（以下、「 E_{ST} 」ともいう。）の値の算出は、以下の方法で求められる。まず、B3LYPレベルの密度汎関数法により、化合物の基底状態を構造最適化する。その際、基底関数としては、6-31G*を用いる。そして、得られた構造最適化された構造を用いて、B3LYPレベルの時間依存密度汎関数法により、化合物の E_{ST} を算出する。但し、6-31G*が使用できない原子を含む場合は、該原子に対してはLANL2DZを用いる。なお、量子化学計算プログラムとしては、Gaussian 09を用いて計算する。

【0028】

10

20

30

40

50

< 発光素子用組成物 >

本実施形態の発光素子用組成物は、2種以上の化合物(A)と化合物(B)と、を含有する。

本実施形態の発光素子用組成物は、化合物(A)を2種のみ含有していてもよく、3種以上含有していてもよい。また、本実施形態の発光素子用組成物は、化合物(B)を1種のみ含有していてもよく、2種以上含有していてもよい。

【0029】

本実施形態の発光素子用組成物において、化合物(A)はホスト材料であることが好ましく、化合物(B)はゲスト材料であることが好ましい。本実施形態において、ホスト材料は、ゲスト材料と物理的、化学的又は電氣的に相互作用する材料である。この相互作用により、例えば、本実施形態の発光素子用組成物の発光特性、電荷輸送特性又は電荷注入特性を向上又は調整することが可能となる。

10

本実施形態の発光素子用組成物において、発光材料を一例として説明すれば、ホスト材料とゲスト材料とが電氣的に相互作用し、ホスト材料からゲスト材料へ効率的に電気エネルギーを渡すことで、ゲスト材料をより効率的に発光させることができ、本実施形態の発光素子の外部量子効率がより優れる。

【0030】

化合物(B)を発光材料として用いる場合、化合物(B)の25における発光スペクトルの最大ピーク波長は可視光領域であることが好ましい。この場合、化合物(B)の25における発光スペクトルの最大ピーク波長は、好ましくは380nm以上であり、より好ましくは400nm以上であり、更に好ましくは420nm以上であり、特に好ましくは440nm以上である。化合物(B)の25における発光スペクトルの最大ピーク波長は、好ましくは750nm以下であり、より好ましくは620nm以下であり、更に好ましくは570nm以下であり、特に好ましくは495nm以下であり、とりわけ好ましくは480nm以下である。

20

また、化合物(B)を発光材料として用いる場合、化合物(B)の25における発光スペクトルの最大ピークの半値幅は、好ましくは50nm以下であり、より好ましくは40nm以下であり、更に好ましくは30nm以下であり、特に好ましくは25nm以下である。

化合物の室温における発光スペクトルの最大ピーク波長は、化合物を、キシレン、トルエン、クロロホルム、テトラヒドロフラン等の有機溶媒に溶解させ、希薄溶液を調製し(1×10⁻⁶質量%~1×10⁻³質量%)、該希薄溶液のPLスペクトルを室温で測定することで評価することができる。化合物を溶解させる有機溶媒としては、キシレンが好ましい。

30

【0031】

本実施形態の発光素子用組成物において、化合物(B)の含有量は、化合物(A)及び化合物(B)の合計を100質量部とした場合、通常、0.001~99質量部であり、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、0.005~70質量部であることが好ましく、0.01~50質量部であることがより好ましく、0.05~30質量部であることが更に好ましく、0.1~10質量部であることが特に好ましく、0.5~5質量部であることがとりわけ好ましい。

40

【0032】

本実施形態の発光素子用組成物において、化合物(A)の合計を100質量部とした場合、化合物(A)のうち少なくとも1種の含有量は、通常、0.01~99質量部であり、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、0.05~90質量部であることが好ましく、0.1~70質量部であることがより好ましく、0.5~50質量部であることが更に好ましく、1~30質量部であることが特に好ましく、3~10質量部であることがとりわけ好ましい。

【0033】

(化合物(A))

50

化合物(A)は、式(FH)で表される化合物、又は、式(FH)で表される化合物から水素原子1個以上を除いた基を有する構成単位(以下、「構成単位(A)」ともいう。)を含む高分子化合物(以下、「高分子化合物(A)」ともいう。)である。なお、化合物(A)は、化合物(B)と異なる化合物であり、例えば、縮合複素環骨格(b)を有さない化合物であってよい。

【0034】

本実施形態の発光素子用組成物は、少なくとも2種の化合物(A)を含有する。本実施形態の発光素子用組成物は、2種以上の式(FH)で表される化合物を含有していてもよく、1種以上の式(FH)で表される化合物と1種以上の高分子化合物(A)とを含有していてもよく、2種以上の高分子化合物(A)を含有していてもよい。本実施形態の発光素子用組成物は、発光素子の外部量子効率により優れるので、化合物(A)として少なくとも1種の高分子化合物(A)を含有することが好ましい。すなわち、本実施形態の発光素子用組成物は、1種以上の式(FH)で表される化合物と1種以上の高分子化合物(A)とを含有する、又は、2種以上の高分子化合物(A)を含有することが好ましい。

10

【0035】

[式(FH)で表される化合物]

n^{1H} は、通常、10以下の整数であり、式(FH)で表される化合物の合成が容易であるので、好ましくは7以下の整数であり、より好ましくは5以下の整数であり、更に好ましくは3以下の整数である。また、 n^{1H} は、本実施形態の発光素子の外部量子効率により優れるので、1以上の整数であることが好ましい。

20

【0036】

Ar^{1H} は、環内に窒素原子を含む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 n^{1H} 個以上を除いた基(以下、「含窒素複素環基」ともいう。)であり、この基は置換基を有していてもよい。

Ar^{1H} における複素環式化合物は、縮合複素環骨格(b)を含まない複素環式化合物である。すなわち、 Ar^{1H} における複素環式化合物は、環内に窒素原子を含み、且つ、環内にホウ素原子を含まない複素環式化合物である。 Ar^{1H} における複素環式化合物としては、例えば、前述の複素環基の項で説明した複素環式化合物の中で、環内に窒素原子を含み、且つ、環内にホウ素原子を含まない複素環式化合物が挙げられる。

Ar^{1H} において、含窒素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、好ましくは1~60であり、より好ましくは1~40であり、更に好ましくは2~20である。

30

Ar^{1H} において、含窒素複素環基の窒素原子数は、置換基の窒素原子数を含めないで、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。 Ar^{1H} において、含窒素複素環基のヘテロ原子数は、置換基のヘテロ原子数を含めないで、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。

Ar^{1H} における複素環式化合物は、本実施形態の発光素子の外部量子効率により優れるので、好ましくは、環内に窒素原子を含み、且つ、環内にホウ素原子を含まない、単環式又は2~7環式の複素環式化合物であり、より好ましくは、環内に窒素原子を含み、且つ、環内にホウ素原子を含まない、単環式又は2~5環式の複素環式化合物であり、更に好ましくは、環内に窒素原子を含み、且つ、環内にホウ素原子を含まない、単環式、2環式又は3環式の複素環式化合物であり、特に好ましくは、オキサジアゾール、チアジアゾール、ピロール、ジアゾール、トリアゾール、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、アザナフタレン、ジアザナフタレン、インドール、ベンゾジアゾール、カルバゾール、アザカルバゾール、ジアザカルバゾール、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、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又はジアザフェナントレンであり、とりわけ好ましくは、ピロール、ジアゾール、トリアゾール、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、カルバゾール、アザカルバゾール、ジアザカルバゾール、フェノキサジン、フェノチアジン、9,1

40

50

0 - ジヒドロアクリジン又は 5 , 10 - ジヒドロフェナジンであり、とりわけより好ましくは、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、カルバゾール、フェノキサジン又はフェノチアジンである。

R^{1H} が有していてもよい置換基としては、例えば、アリール基、1 価の複素環基及び置換アミノ基以外の置換基が挙げられ、好ましくは、ハロゲン原子、シアノ基、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アルケニル基又はシクロアルケニル基であり、より好ましくは、シアノ基、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基又はシクロアルコキシ基であり、更に好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基又はシクロアルコキシ基であり、特に好ましくは、アルキル基又はシクロアルキル基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

10

R^{1H} が有していてもよい置換基が更に有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、後述の R^{1A} 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。

【0037】

R^{1H} は、本実施形態の発光素子の外部量子効率により優れるので、好ましくはアリール基又は 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。

R^{1H} におけるアリール基は、好ましくは、単環式又は 2 環式 ~ 5 環式の芳香族炭化水素から、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、より好ましくは、単環式、2 環式又は 3 環式の芳香族炭化水素から、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、更に好ましくは、ベンゼン、ナフタレン、ジヒドロフェナントレン又はフルオレンから、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、特に好ましくはフェニル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

20

R^{1H} における 1 価の複素環基は、縮合複素環骨格 (b) を含まない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、この基は置換基を有していてもよい。 R^{1H} における 1 価の複素環基において、縮合複素環骨格 (b) を含まない複素環式化合物としては、前述の複素環基の項で説明した複素環式化合物の中で、ホウ素原子及び窒素原子を環内に含まない複素環式化合物が挙げられる。 R^{1H} における 1 価の複素環基は、好ましくは、縮合複素環骨格 (b) を含まない、単環式又は 2 環式 ~ 5 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、縮合複素環骨格 (b) を含まない、単環式、2 環式又は 3 環式の複素環式化合物から、環を構成する原子に直接結合する水素原子 1 個を除いた基であり、ピロール、ジアゾール、トリアゾール、ピリジン、ジアザベンゼン、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、アザカルバゾール、ジアザカルバゾール、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、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又はジアザフェナントレンから、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、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 個を除いた基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

30

40

R^{1H} 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であるアリール基の例及び好ましい範囲は、 R^{1H} 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である 1 価の複素環基の例及び好ましい範囲は、 R^{1H} 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。

R^{1H} が有していてもよい置換基としては、好ましくは、ハロゲン原子、シアノ基、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、1 価の複素環基又は置換アミノ基であり、より好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アリ

50

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。

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

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

10

R^{1H} 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、 R^{1H} 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。

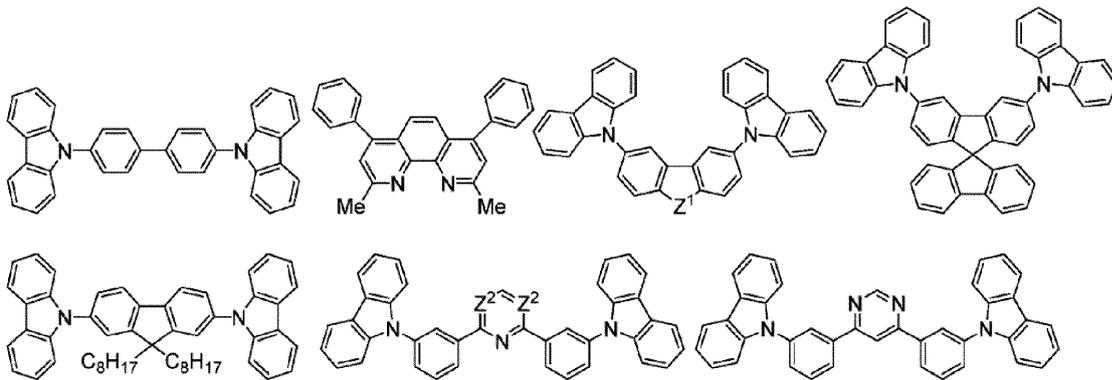
【0038】

化合物(A)としては、下記式で表される化合物及び後述の化合物H2~H8が例示される。なお、式中、 Z^1 は、酸素原子又は硫黄原子を表す。式中、 Z^2 は、 $-CH=$ で表される基又は $-N=$ で表される基を表す。

【0039】

【化7】

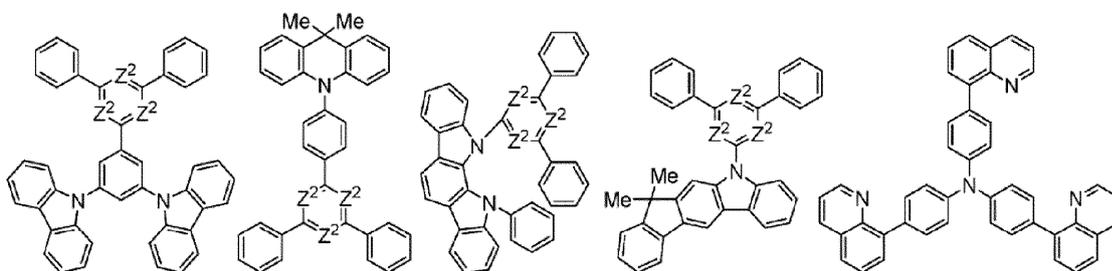
20



30

【0040】

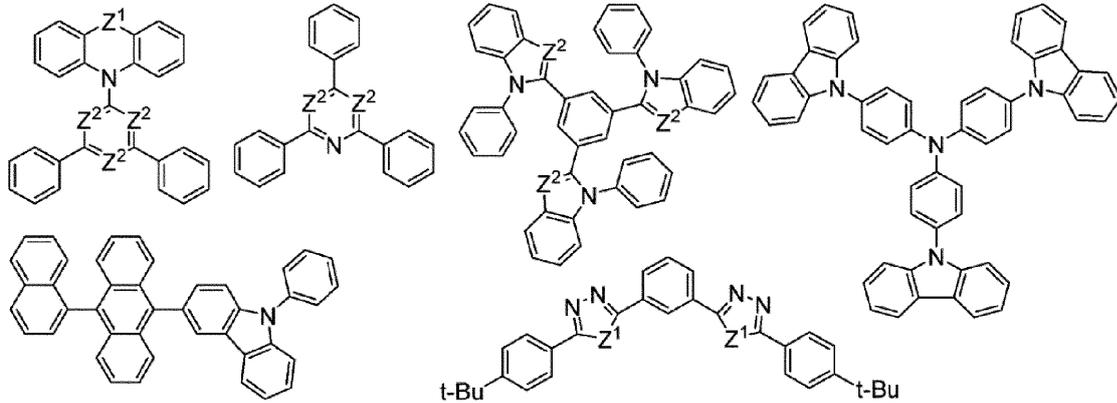
【化8】



40

【0041】

【化9】



10

【0042】

[高分子化合物(A)]

高分子化合物(A)のポリスチレン換算の重量平均分子量は、好ましくは $1 \times 10^4 \sim 1 \times 10^7$ であり、より好ましくは $2 \times 10^4 \sim 5 \times 10^6$ であり、更に好ましくは $1 \times 10^5 \sim 2 \times 10^5$ である。

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

20

【0043】

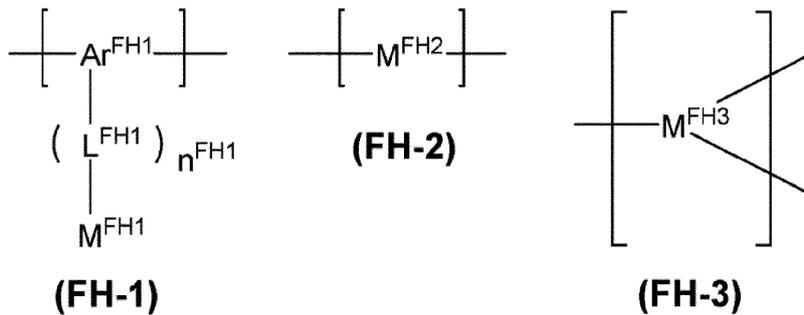
構成単位(A)は、高分子化合物(A)の合成が容易なので、好ましくは、式(FH)で表される化合物から水素原子1個以上5個以下を除いた基を有する構成単位であり、より好ましくは、式(FH)で表される化合物から水素原子1個以上3個以下を除いた基を有する構成単位であり、更に好ましくは、式(FH)で表される化合物から水素原子1個又は2個を除いた基を有する構成単位である。

構成単位(A)は、高分子化合物(A)の合成が容易であり、且つ、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、式(FH-1)、式(FH-2)又は式(FH-3)で表される構成単位であり、より好ましくは、式(FH-1)又は式(FH-2)で表される構成単位である。

30

【0044】

【化10】



40

【0045】

式中、

M^{FH1} は、式(FH)で表される化合物から水素原子1個を除いた基を表す。

M^{FH2} は、式(FH)で表される化合物から水素原子2個を除いた基を表す。

M^{FH3} は、式(FH)で表される化合物から水素原子3個を除いた基を表す。

L^{FH1} は、それぞれ独立に、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、 $-N(R^{FH1})-$ で表される基、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

50

よい。R^{F H 1}は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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^{F H 1}が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

n^{F H 1}は、0以上10以下の整数を表す。

A r^{F H 1}は、炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。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。

【0046】

L^{F H 1}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価の複素環基であることが好ましく、アルキレン基又はアリーレン基であることがより好ましく、これらの基は置換基を有していてもよい。

L^{F H 1}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、A r^{Y 1}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と同じである。

R^{F H 1}の例及び好ましい範囲は、後述のR^{X 1}の例及び好ましい範囲と同じである。

【0047】

n^{F H 1}は、好ましくは0~5の整数であり、好ましくは0~3の整数であり、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。

【0048】

A r^{F H 1}において、炭化水素基は、脂肪族炭化水素又は芳香族炭化水素から水素原子3個を除いた基であり、この基は置換基を有していてもよい。

A r^{F H 1}において、炭化水素基が、脂肪族炭化水素から水素原子3個を除いた基である場合、当該炭化水素基としては、前述のアルキレン基の項で説明したアルキレン基から水素原子1個を除いた基、及び、前述のシクロアルキレン基の項で説明したシクロアルキレン基から水素原子1個を除いた基が挙げられる。

A r^{F H 1}において、炭化水素基が、芳香族炭化水素から水素原子3個を除いた基である場合、当該炭化水素基としては、後述のA r^{Y 1}におけるアリーレン基として説明した基から水素原子1個を除いた基が挙げられる。

A r^{F H 1}における複素環基としては、後述のA r^{Y 1}における2価の複素環基として説明した基から水素原子1個を除いた基が挙げられる。

【0049】

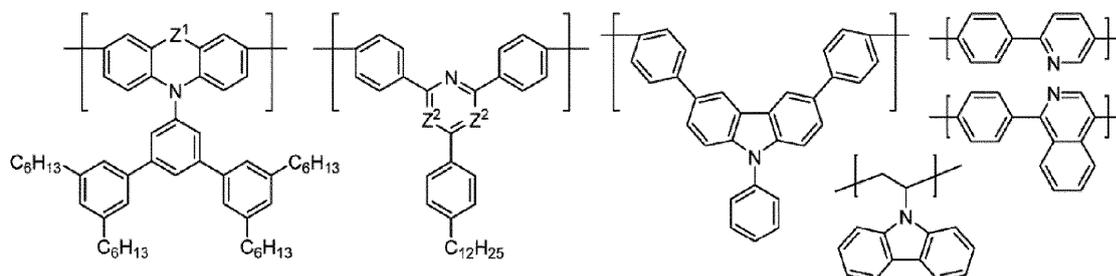
L^{F H 1}及びA r^{F H 1}が有していてもよい置換基の例及び好ましい例は、後述のA r^{Y 1}で表される基が有してもよい置換基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0050】

構成単位(A)としては、例えば、下記式で表される構成単位、並びに、後述の化合物H1~H8及び化合物M6から誘導される構成単位が挙げられる。なお、式中、Z¹は、酸素原子又は硫黄原子を表す。式中、Z²は、-CH=で表される基又は-N=で表される基を表す。

【0051】

【化11】



10

20

30

40

50

【0052】

構成単位(A)の含有量は、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、高分子化合物(A)に含まれる構成単位の合計量に対して、好ましくは0.1~100モル%であり、より好ましくは1~100モル%であり、更に好ましくは10~100モル%であり、特に好ましくは20~100モル%である。構成単位(A)は、高分子化合物(A)中に、1種のみ含まれていてもよく、2種以上含まれていてもよい。

【0053】

高分子化合物(A)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、後述の式(Y)で表される構成単位を更に含むことが好ましい。

高分子化合物(A)は、後述の式(X)で表される構成単位を更に含んでいてもよい。

高分子化合物(A)は、式(X)で表される構成単位及び式(Y)で表される構成単位を更に含んでいてもよい。

【0054】

高分子化合物(A)が式(X)で表される構成単位を含む場合、式(X)で表される構成単位の含有量は、正孔輸送性が優れるので、高分子化合物(A)に含まれる構成単位の合計量に対して、好ましくは0.1~99モル%であり、より好ましくは1~50モル%であり、更に好ましくは、3~30モル%である。

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

【0055】

高分子化合物(A)が式(Y)で表される構成単位を含み、 Ar^{Y1} がアリーレン基である場合、式(Y)で表される構成単位の含有量は、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、高分子化合物(A)の合計量に対して、好ましくは1~99モル%であり、より好ましくは10~95モル%であり、更に好ましくは30~90モル%であり、特に好ましくは50~80モル%である。

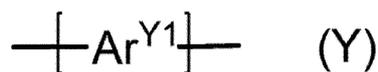
高分子化合物(A)が式(Y)で表される構成単位を含み、 Ar^{Y1} が2価の複素環基、又は、少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基である場合、式(Y)で表される構成単位の含有量は、高分子化合物(A)の電荷輸送性が優れるので、高分子化合物(A)に含まれる構成単位の合計量に対して、好ましくは0.1~99モル%であり、より好ましくは1~50モル%であり、更に好ましくは、3~30モル%である。

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

【0056】

<式(Y)で表される構成単位>

【化12】



【0057】

式中、 Ar^{Y1} は、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。

【0058】

Ar^{Y1} におけるアリーレン基は、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、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、ジヒド

10

20

30

40

50

ロ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、ベンゼン、フェナントレン、ジヒドロ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、これらは置換基を有していてもよい。

【0059】

Ar^{Y1} における2価の複素環基は、好ましくは、環内に窒素原子を含まない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、この基は置換基を有していてもよい。

環内に窒素原子を含まない複素環式化合物としては、例えば、前述の複素環基の項で説明した複素環式化合物の中で、環内に窒素原子を含まない複素環式化合物が挙げられる。環内に窒素原子を含まない複素環式化合物としては、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、環内に窒素原子を含まない単環式又は2環式~6環式の複素環式化合物であり、より好ましくは、環内に窒素原子を含まない単環式、2環式又は3環式の複素環式化合物であり、更に好ましくは、フラン、チオフェン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンである。

【0060】

Ar^{Y1} における少なくとも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価の複素環基の好ましい範囲は、それぞれ、 Ar^{Y1} におけるアリーレン基及び2価の複素環基の好ましい範囲と同じである。

【0061】

Ar^{Y1} 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、置換基を有していてもよいアリーレン基であることが好ましい。

【0062】

Ar^{Y1} で表される基が有してもよい置換基は、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、置換アミノ基又はフッ素原子であり、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、特に好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

【0063】

Ar^{Y1} で表される基が有してもよい置換基におけるアリール基は、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、単環式又は2環式~6環式の芳香族炭化水素から、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個を除いた基であり、より好ましくは、単環式、2環式又は3環式の芳香族炭化水素から、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個を除いた基であり、更に好ましくは、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、ジヒドロ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、ベンゼン、フェナントレン、ジヒドロ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、これらは更に置換基を有していてもよい。

Ar^{Y1} で表される基が有してもよい置換基における1価の複素環基は、好ましくは、環内に窒素原子を含まない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1個を除いた基であり、この基は置換基を有していてもよい。

Ar^{Y1} で表される基が有してもよい置換基における1価の複素環基における、環内に窒素原子を含まない複素環式化合物の例及び好ましい範囲は、 Ar^{Y1} における2価の複素環基の項で説明した環内に窒素原子を含まない複素環式化合物の例及び好ましい範囲と同じである。

Ar^{Y1} で表される基が有し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

10

20

30

40

50

が有する置換基としては、アリール基又は1価の複素環基が好ましく、アリール基がより好ましく、これらの基は更に置換基を有していてもよい。アミノ基が有する置換基におけるアリール基及び1価の複素環基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 Ar^{Y1} で表される基が有してもよい置換基におけるアリール基及び1価の複素環基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0064】

Ar^{Y1} で表される基が有し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、置換アミノ基又はフッ素原子であり、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、アルキル基又はシクロアルキル基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよいが、更に置換基を有さないことが好ましい。

10

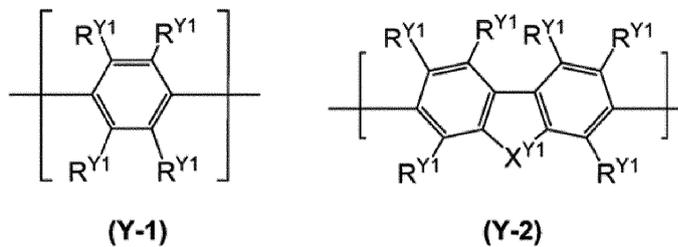
Ar^{Y1} で表される基が有してもよい置換基が更に有していてもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 Ar^{Y1} で表される基が有してもよい置換基におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0065】

式(Y)で表される構成単位は、本実施形態の発光素子の外部量子効率により優れるので、好ましくは、式(Y-1)又は式(Y-2)で表される構成単位である。

【0066】

【化13】



(Y-1)

(Y-2)

【0067】

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、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、置換アミノ基又はフッ素原子を表し、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。複数存在する R^{Y1} は、同一でも異なってもよく、互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子とともに環を形成していてもよい。

30

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、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、置換アミノ基又はフッ素原子を表し、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。複数存在する R^{Y2} 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。

40

【0068】

R^{Y1} は、好ましくは、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基又は置換アミノ基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であり、更に好ましくは、水素原子又はアルキル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

R^{Y2} 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

50

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

R^{Y1} 及び R^{Y2} におけるアリール基、1価の複素環基及び置換アミノ基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 Ar^{Y1} で表される基が有し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。

R^{Y1} 及び R^{Y2} が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、 Ar^{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。

【0069】

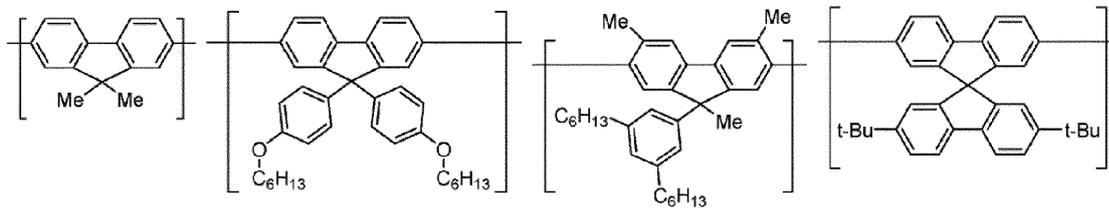
X^{Y1} は、本実施形態の発光素子の外部量子効率により優れるので、好ましくは、 $-C(R^{Y2})_2-$ 又は $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基であり、より好ましくは、 $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基である。

【0070】

式(Y)で表される構成単位としては、例えば、下記式で表される構成単位、並びに、後述の化合物M1、M2、M4及びM5から誘導される構成単位が挙げられる。なお、下記式中、 Z^1 は、酸素原子又は硫黄原子を表す。 Z^2 は、 $-CH=$ で表される基又は $-N=$ で表される基を表す。

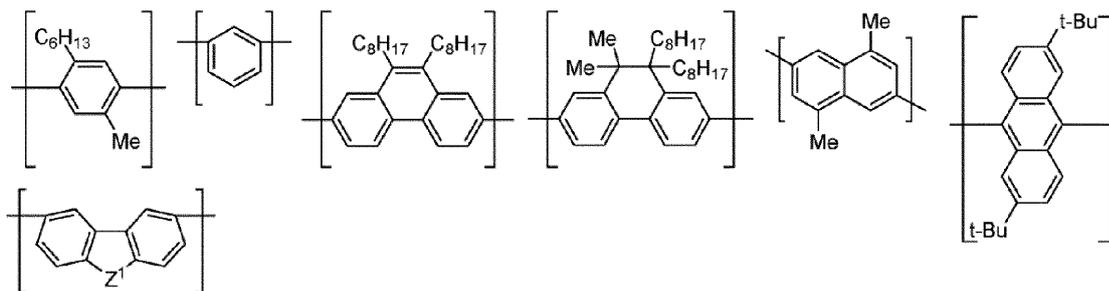
【0071】

【化14】



【0072】

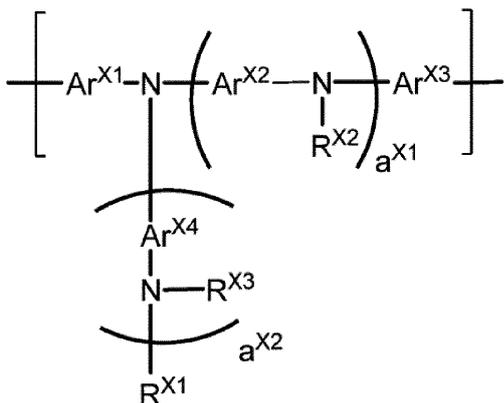
【化15】



【0073】

<式(X)で表される構成単位>

【化16】



(X)

10

20

30

40

50

【0074】

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。

10

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。

【0075】

a^{X1} 及び a^{X2} は、通常0~5の整数であり、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0~3の整数であり、より好ましくは0~2の整数であり、より好ましくは0又は1である。

20

【0076】

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又は1価の複素環基であり、更に好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

R^{X1} 、 R^{X2} 及び R^{X3} におけるアリール基及び1価の複素環基の例及び好ましい範囲は、それぞれ、 Ar^{Y1} で表される基が有してもよい置換基におけるアリール基及び1価の複素環基の例及び好ましい範囲と同じである。

【0077】

Ar^{X1} 、 Ar^{X2} 、 Ar^{X3} 及び Ar^{X4} 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} 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と同じである。

30

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} 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と同じである。

Ar^{X2} 及び Ar^{X4} における少なくとも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、 Ar^{Y1} における少なくとも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価の基と同様のものが挙げられる。

40

Ar^{X1} 、 Ar^{X2} 、 Ar^{X3} 及び Ar^{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。

【0078】

Ar^{X1} ~ Ar^{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、 Ar^{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。

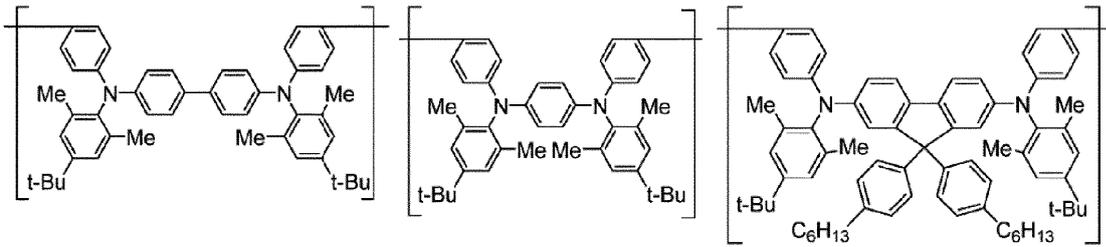
【0079】

式(X)で表される構成単位としては、例えば、下記式で表される構成単位及び後述の化合物M3から誘導される構成単位が挙げられる。

50

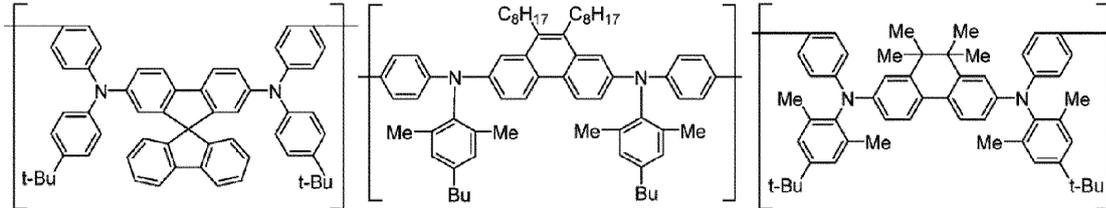
【0080】

【化17】



【0081】

【化18】



【0082】

高分子化合物(A)としては、例えば、高分子化合物P-1~P-4が挙げられる。ここで、「その他」とは、構成単位(A)、式(X)で表される構成単位及び式(Y)で表される構成単位以外の構成単位を意味する。

【0083】

【表1】

高分子化合物	構成単位とそのモル比率			
	構成単位A	式(X)	式(Y)	その他
	p'	q'	r'	s'
P-1	0.1~100	0	0	0~30
P-2	0.1~99.9	0.1~99.9	0	0~30
P-3	0.1~99.9	0	0.1~99.9	0~30
P-4	0.1~99.8	0.1~99.8	0.1~99.8	0~30

【0084】

表1中、p'、q'、r'及びs'は、各構成単位のモル比率(モル%)を表す。p'+q'+r'+s'=100であり、且つ、70 ≤ p'+q'+r' ≤ 100である。

【0085】

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

高分子化合物(A)のポリスチレン換算の重量平均分子量は、好ましくは $1 \times 10^4 \sim 1 \times 10^7$ であり、より好ましくは $2 \times 10^4 \sim 5 \times 10^6$ であり、更に好ましくは $1 \times 10^5 \sim 2 \times 10^5$ である。

【0086】

[高分子化合物(A)の製造方法]

高分子化合物(A)は、ケミカルレピュー(Chem. Rev.), 第109巻, 897-1091頁(2009年)等に記載の公知の重合方法を用いて製造することができ、Suzuki反応、Yamamoto反応、Buchwald反応、Stille反応、Negishi反応及びKumada反応等の遷移金属触媒を用いるカップリング反応により重合させる方法が例示される。

【0087】

10

20

30

40

50

上記重合方法において、単量体を仕込む方法としては、単量体全量を反応系に一括して仕込む方法、単量体の一部を仕込んで反応させた後、残りの単量体を一括、連続又は分割して仕込む方法、単量体を連続又は分割して仕込む方法等が挙げられる。

【0088】

遷移金属触媒としては、パラジウム触媒、ニッケル触媒等が挙げられる。

【0089】

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(A)の純度が低い場合、例えば、再結晶、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。

10

【0090】

[化合物(B)]

化合物(B)は、ホウ素原子及び窒素原子を環内に含む縮合複素環骨格(b)を有する化合物である。

化合物(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。

【0091】

20

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くて、通常1~60であり、好ましくは5~40であり、より好ましくは10~25である。

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

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

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くて、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。

30

縮合複素環骨格(b)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。

【0092】

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

【0093】

複素環基(b')は、ホウ素原子及び窒素原子を環内に含む、多環式の複素環式化合物から、環を構成する原子に直接結合する水素原子1個以上を除いた基であってよく、該基は置換基を有していてもよい。

40

【0094】

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

【0095】

複素環基(b')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

50

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

【0096】

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

10

【0097】

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

20

【0098】

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

30

【0099】

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

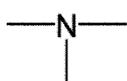
【0100】

「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：

40

【化19】



で表される基を含むことを意味する。

【0101】

化合物(B)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、熱活性化遅延蛍光(TADF)性化合物であることが好ましい。

化合物(B)の E_{S-T}は、2.0 eV以下であってもよく、1.5 eV以下であって

50

もよく、 1.0 eV 以下であってもよく、 0.80 eV 以下であってもよく、 0.60 eV 以下であってもよいが、本実施形態の発光素子の外部量子効率により優れるので、好ましくは 0.50 eV 以下である。また、化合物(B)の E_{ST} は、 0.001 eV 以上であってもよく、 0.01 eV 以上であってもよく、 0.10 eV 以上であってもよく、 0.20 eV 以上であってもよく、 0.30 eV 以上であってもよく、 0.40 eV 以上であってもよい。

【0102】

化合物(B)は、低分子化合物であることが好ましい。

化合物(B)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。

10

【0103】

化合物(B)は、本実施形態の発光素子の外部量子効率により優れるので、式(1-1)、式(1-2)又は式(1-3)で表される化合物であることが好ましく、式(1-2)又は式(1-3)で表される化合物であることがより好ましく、式(1-2)で表される化合物であることが更に好ましい。

【0104】

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

20

Ar^1 、 Ar^2 及び Ar^3 が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、複素環基(b')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。

【0105】

Y^2 及び Y^3 は、好ましくは、単結合、酸素原子、硫黄原子、 $-N(Ry)-$ で表される基又はメチレン基であり、より好ましくは、単結合、酸素原子、硫黄原子又は $-N(Ry)-$ で表される基であり、更に好ましくは、酸素原子、硫黄原子又は $-N(Ry)-$ で表される基であり、特に好ましくは、 $-N(Ry)-$ で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

30

Y^1 、 Y^2 及び Y^3 が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、複素環基(b')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。

【0106】

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

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

40

Ry が有していてもよい置換基の例及び好ましい範囲は、複素環基(b')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。

【0107】

Ry は、直接結合して又は連結基を介して、 Ar^1 、 Ar^2 又は Ar^3 と結合していてもよいが、結合していないことが好ましい。連結基としては、例えば、 $-O-$ で表される基、 $-S-$ で表される基、 $-N(Ry)-$ で表される基、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基及び2価の複素環基が挙げられ、好ましくは、 $-O-$ で表される基、 $-S-$ で表される基、 $-N(Ry)-$ で表される基又はメチレン基であり、これらの基は

50

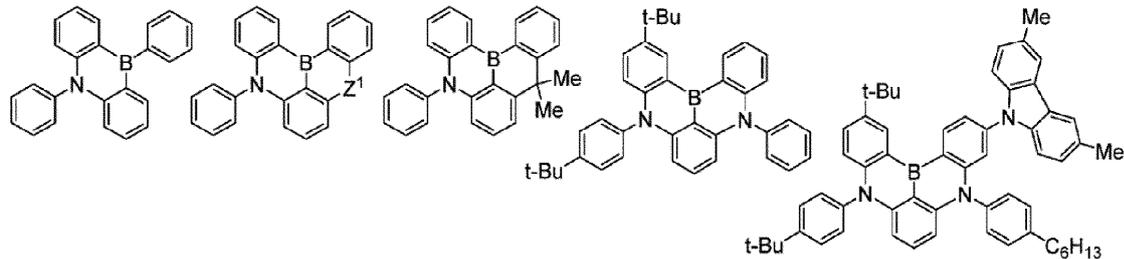
置換基を有していてもよい。

【0108】

化合物Bとしては、下記式で表される化合物、並びに、後述の化合物B1及びB2が例示される。

【0109】

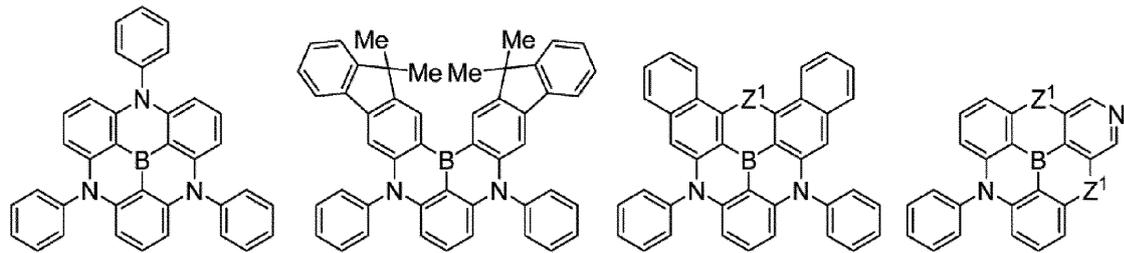
【化20】



10

【0110】

【化21】



20

【0111】

式中、Z¹は、酸素原子又は硫黄原子を表す。

【0112】

[その他の成分]

本実施形態の発光素子用組成物は、2種以上の化合物(A)と、化合物(B)と、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選ばれる少なくとも1種とを含有する組成物であってもよい。但し、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料及び発光材料は、化合物(A)及び化合物(B)とは異なる。

30

【0113】

[インク]

2種以上の化合物(A)と、化合物(B)と、溶媒とを含有する組成物(以下、「インク」と言う。)は、例えば、スピコート法、キャスト法、マイクログラビアコート法、グラビアコート法、パーコート法、ロールコート法、ワイヤーパーコート法、ディップコート法、スプレーコート法、スクリーン印刷法、フレキソ印刷法、オフセット印刷法、インクジェット印刷法、キャピラリコート法、ノズルコート法等の湿式法を用いた発光素子の作製に好適である。インクの粘度は、印刷法の種類によって調整すればよいが、好ましくは25において1mPa・s~20mPa・sである。

40

インクに含まれる溶媒は、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、塩素系溶媒、エーテル系溶媒、芳香族炭化水素系溶媒、脂肪族炭化水素系溶媒、ケトン系溶媒、エステル系溶媒、多価アルコール系溶媒、アルコール系溶媒、スルホキッド系溶媒、アミド系溶媒が挙げられる。

インクにおいて、溶媒の配合量は、化合物(A)及び化合物(B)の合計を100質量部とした場合、通常、1000質量部~10000質量部である。

溶媒は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【0114】

・正孔輸送材料

50

正孔輸送材料は、低分子化合物と高分子化合物とに分類され、好ましくは架橋基を有する高分子化合物である。

高分子化合物としては、例えば、ポリビニルカルバゾール及びその誘導体；側鎖又は主鎖に芳香族アミン構造を有するポリアリーレン及びその誘導体が挙げられる。高分子化合物は、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及びトリニトロフルオレノン等の電子受容性部位が結合された化合物でもよい。

本実施形態の発光素子用組成物において、正孔輸送材料が含まれる場合、正孔輸送材料の配合量は、化合物(A)及び化合物(B)の合計を100質量部とした場合、通常、1質量部～1000質量部である。

正孔輸送材料は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

10

【0115】

・電子輸送材料

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

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。

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

20

本実施形態の発光素子用組成物において、電子輸送材料が含まれる場合、電子輸送材料の配合量は、化合物(A)及び化合物(B)の合計を100質量部とした場合、通常、1質量部～1000質量部である。

電子輸送材料は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【0116】

・正孔注入材料及び電子注入材料

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

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。

30

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。

本実施形態の発光素子用組成物において、正孔注入材料及び/又は電子注入材料が含まれる場合、正孔注入材料及び電子注入材料の配合量は、各々、化合物(A)及び化合物(B)の合計を100質量部とした場合、通常、1質量部～1000質量部である。

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

40

【0117】

・イオンドープ

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

50

ドーブするイオンは、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【0118】

・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る。発光材料は、架橋基を有していてもよい。

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、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三重項発光錯体が挙げられる。

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、アントラセンジイル基及びピレンジイル基等のアリーレン基；芳香族アミンから2個の水素原子を取り除いてなる基等の芳香族アミン残基；並びに、カルバゾールジイル基、フェノキサジンジイル基及びフェノチアジンジイル基等の2価の複素環基を含む高分子化合物が挙げられる。

10

【0119】

本実施形態の発光素子用組成物において、発光材料が含まれる場合、発光材料の含有量は、化合物(A)及び化合物(B)の合計を100質量部とした場合、通常、1質量部～1000質量部である。

発光材料は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【0120】

・酸化防止剤

酸化防止剤は、化合物(A)及び化合物(B)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。

本実施形態の発光素子用組成物において、酸化防止剤が含まれる場合、酸化防止剤の配合量は、化合物(A)及び化合物(B)の合計を100質量部とした場合、通常、0.001質量部～10質量部である。

酸化防止剤は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

【0121】

<膜>

本実施形態の膜は、上述の発光素子用組成物を含有する。本実施形態の膜は、発光素子における発光層として好適である。本実施形態の膜は、例えば、インクを用いて、湿式法により作製することができる。また、本実施形態の膜は、例えば、真空蒸着法等の乾式法により作製することができる。本実施形態の膜を乾式法により作製する方法としては、例えば、上述の発光素子用組成物を蒸着する方法、及び、化合物(A)及び化合物(B)を共蒸着する方法が挙げられる。

30

膜の厚さは、通常、1nm～10μmである。

【0122】

<発光素子>

本実施形態の発光素子は、上述の発光素子用組成物を含有する。

本実施形態の発光素子は、例えば、陽極と、陰極と、陽極及び陰極の間に設けられた上述の発光素子用組成物を含有する有機層と、を備えるものであってよい。

40

【0123】

[層構成]

本実施形態の発光素子用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、電子輸送層及び電子注入層からなる群から選ばれる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、電子注入材料を含む。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、上述した膜の作製と同様の方法を用いて形成することができる。

【0124】

50

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

【0125】

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

【0126】

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

10

【0127】

本実施形態の発光素子において、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等の乾式法、溶液又は熔融状態からの成膜による方法等の湿式法が挙げられ、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等の湿式法が挙げられる。積層する層の順番、数及び厚さは、例えば、発光効率、駆動電圧及び輝度寿命を勘案して調整する。

20

【0128】

[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。

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・オキシド（ITO）、インジウム・亜鉛・オキシド等の導電性化合物；銀とパラジウムと銅との複合体（APC）；NE SA、金、白金、銀、銅である。

30

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。

陽極及び陰極は、各々、2層以上の積層構造としてもよい。

40

【0129】

[用途]

本実施形態の発光素子は、液晶表示装置のバックライト用の光源、照明用の光源、有機EL照明、コンピュータ、テレビ及び携帯端末等の表示装置（例えば、有機ELディスプレイ及び有機ELテレビ）として好適に用いることができる。

【0130】

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

【実施例】

【0131】

50

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。

【0132】

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

測定する高分子化合物を約 0.05 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、1.0 mL / 分の流量で流した。カラムとして、PLGel MIXED-B (ポリマーラポラトリーズ製) 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。

10

【0133】

化合物の E_{ST} の値の算出は、B3LYPレベルの密度汎関数法により、化合物の基底状態を構造最適化し、その際、基底関数としては、6-31G*を用いた。そして、量子化学計算プログラムとして Gaussian 09 を用いて、B3LYPレベルの時間依存密度汎関数法により、化合物の E_{ST} を算出した。

【0134】

実施例において、化合物の室温における発光スペクトルの最大ピーク波長は、分光光度計 (日本分光株式会社製、FP-6500) により室温にて測定した。化合物をキシレンに、約 8×10^{-4} 質量% の濃度で溶解させたキシレン溶液を試料として用いた。励起光としては、波長 325 nm の紫外 (UV) 光を用いた。

20

【0135】

<合成例 M1> 化合物 M1 ~ M6 の合成

化合物 M1 は国際公開第 2015 / 145871 号に記載の方法に従って合成した。

化合物 M2 は国際公開第 2013 / 146806 号に記載の方法に従って合成した。

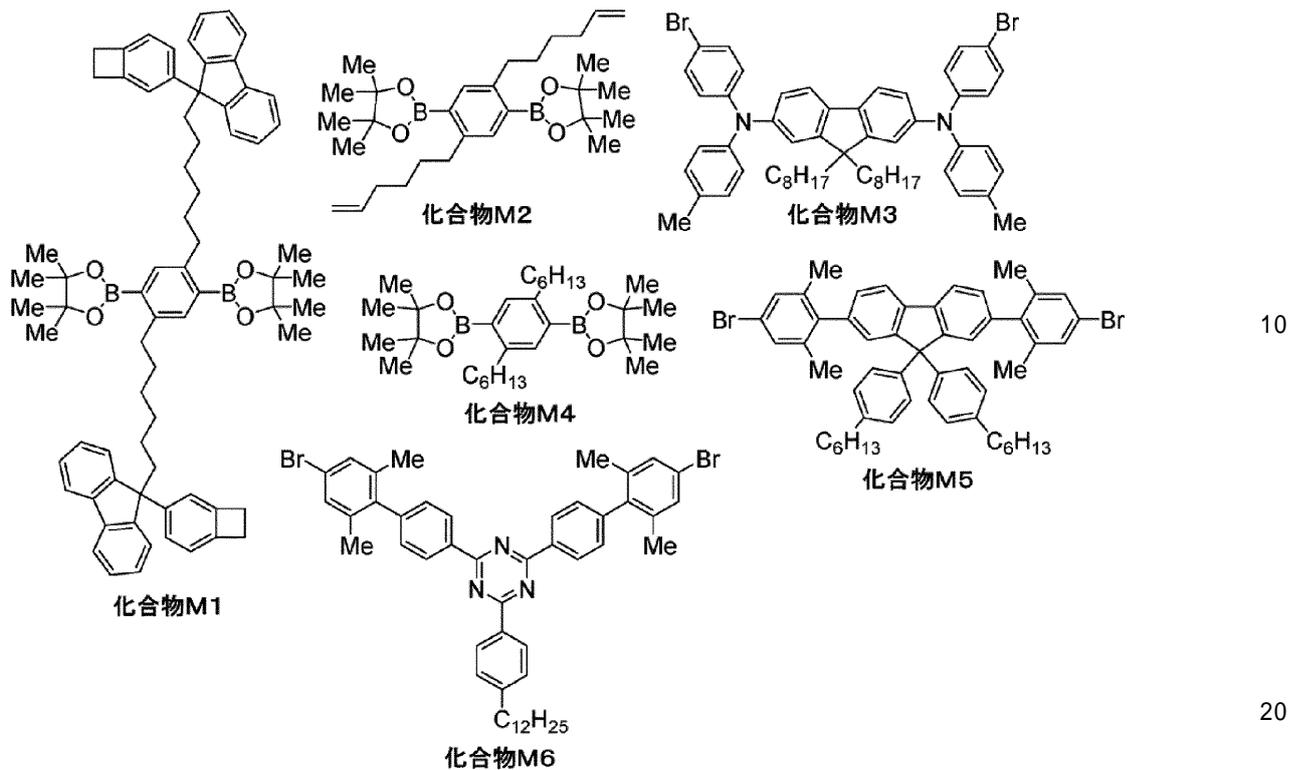
化合物 M3 は国際公開第 2005 / 049546 号に記載の方法に従って合成した。

化合物 M4 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 M5 及び化合物 M6 は、国際公開第 2013 / 191088 号に記載の方法に従って合成した。

【0136】

【化22】



【0137】

<合成例HTL-1> 高分子化合物HTL-1の合成

高分子化合物HTL-1は、化合物M1、化合物M2及び化合物M3を用いて、国際公開第2015/145871号に記載の方法に従って合成した。高分子化合物HTL-1のMnは 2.3×10^4 であり、Mwは 1.2×10^5 であった。

高分子化合物HTL-1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を、45:5:50のモル比で有する共重合体である。

【0138】

<合成例HP1> 高分子化合物HP-1の合成

高分子化合物HP-1は、化合物M4、化合物M5及び化合物M6を用いて、国際公開第2015/008851号に記載の方法に従って合成した。高分子化合物HP-2のMnは 8.5×10^4 であり、Mwは 2.2×10^5 であった。

高分子化合物HP-1は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物M4から誘導される構成単位と、化合物M5から誘導される構成単位と、化合物M6から誘導される構成単位とを、50:26:24のモル比で有する共重合体である。

【0139】

<化合物H1~H8、B1~B2及び高分子化合物PVKの入手及び合成>

化合物H1~化合物H7は、Luminescence Technology社製を用いた。

化合物H8は、特開2010-031259号公報に記載の方法に従って合成した。

ポリ(9-ビニルカルbazol)(高分子化合物PVK)は、Sigma-Aldrich社製(重量平均分子量: 1.1×10^6 、粉末状)を用いた。

化合物B1及び化合物B2は、国際公開第2015/102118号に記載の方法に準じて合成した。

【0140】

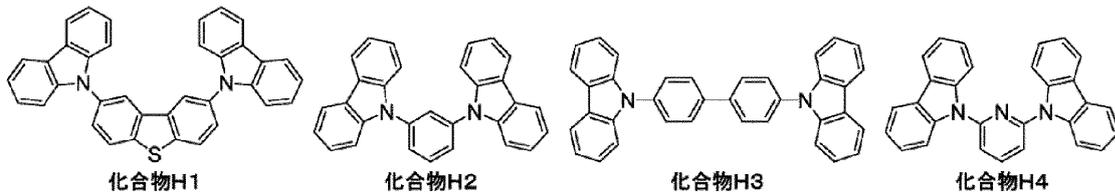
10

20

30

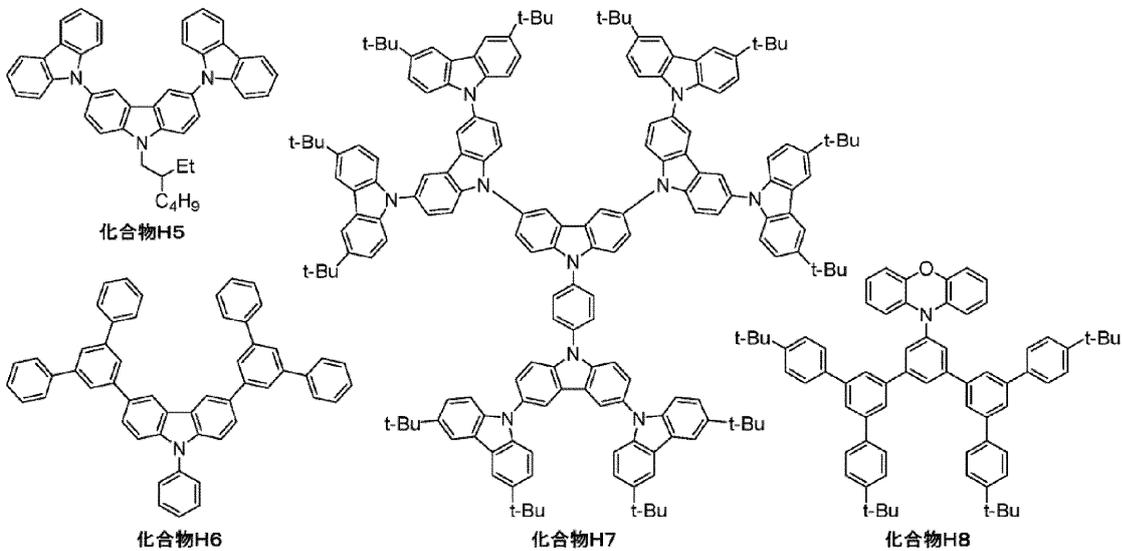
40

【化23】



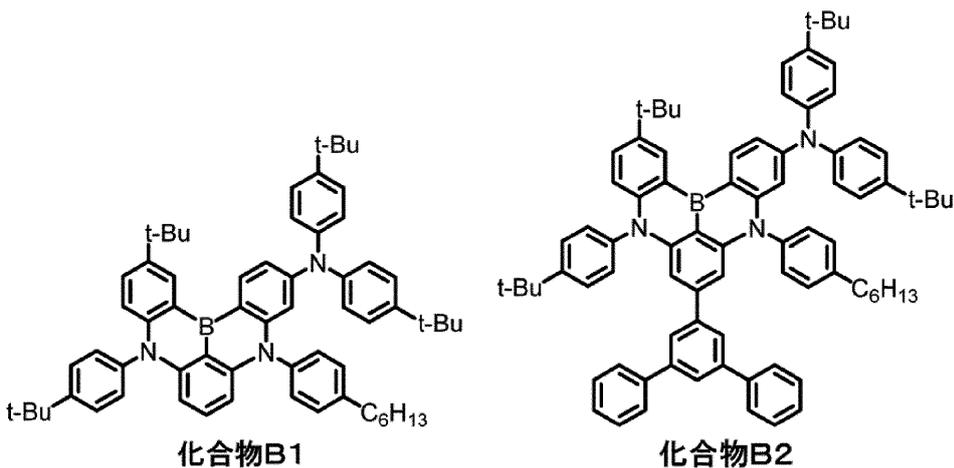
【0141】

【化24】



【0142】

【化25】



【0143】

化合物B1の室温における発光スペクトルの最大ピーク波長は453nmであった。化合物B1の室温における発光スペクトルの最大ピークの半値幅は、22nmであった。化合物B1の E_{ST} は、0.457eVであった。

化合物B2の室温における発光スペクトルの最大ピーク波長は467nmであった。化合物B2の室温における発光スペクトルの最大ピークの半値幅は、20nmであった。化合物B2の E_{ST} は、0.457eVであった。

【0144】

<実施例D1> 発光素子D1の作製と評価
(陽極及び正孔注入層の形成)

ガラス基板にスパッタ法により45nmの厚さでITO膜を付けることにより、陽極を

10

20

30

40

50

形成した。該陽極上に、正孔注入材料であるND-3202（日産化学工業製）をスピコート法により35nmの厚さで成膜した。正孔注入層を積層した基板を大気雰囲気下において、ホットプレート上で50℃、3分間加熱し、更に230℃、15分間加熱することにより正孔注入層を形成した。

【0145】

（正孔輸送層の形成）

キシレンに高分子化合物HTL-1を0.7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180℃、60分間加熱させることにより正孔輸送層を形成した。

10

【0146】

（発光層の形成）

トルエンに、高分子化合物HP-1、化合物H2及び化合物B1（高分子化合物HP-1 / 化合物H2 / 化合物B1 = 94質量% / 5質量% / 1質量%）を2質量%の濃度で溶解させた。得られたトルエン溶液を用いて、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、130℃、10分間加熱させることにより発光層を形成した。

【0147】

（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。

20

【0148】

（発光素子の評価）

発光素子D1に電圧を印加することによりEL発光が観測された。0.2mA/cm²における外部量子効率[%]を測定した。

【0149】

<実施例D2～D16及び比較例CD1> 発光素子D2～D16及びCD1の作製と評価

30

実施例D1の（発光層の形成）における「高分子化合物HP-1、化合物H2及び化合物B1（高分子化合物HP-1 / 化合物H2 / 化合物B1 = 94質量% / 5質量% / 1質量%）」に代えて、表2に記載の材料を用いた以外は、実施例D1と同様にして、発光素子D2～D16及びCD1を作製した。

発光素子D2～D16及びCD1に電圧を印加することによりEL発光が観測された。0.2mA/cm²における外部量子効率[%]を測定した。

【0150】

実施例D1～D16及び比較例CD1の結果を表2に示す。発光素子CD1の外部量子効率を1.0としたときの発光素子D1～D16の外部量子効率の相対値を示す。

【0151】

40

【表 2】

	発光素子	発光層		外部量子効率 (相対値)
		材料	組成比(質量%)	
実施例 D1	D1	HP-1/H2/B1	94/5/1	2.3
実施例 D2	D2	HP-1/H3/B1	94/5/1	1.7
実施例 D3	D3	HP-1/H4/B1	94/5/1	2.2
実施例 D4	D4	HP-1/H5/B1	94/5/1	1.7
実施例 D5	D5	HP-1/H7/B1	94/5/1	1.6
実施例 D6	D6	HP-1/H8/B1	94/5/1	1.6
実施例 D7	D7	HP-1/PVK/B1	94/5/1	1.6
実施例 D8	D8	HP-1/H1/B2	94/5/1	1.6
実施例 D9	D9	HP-1/H2/B2	94/5/1	1.8
実施例 D10	D10	HP-1/H3/B2	94/5/1	1.8
実施例 D11	D11	HP-1/H4/B2	94/5/1	2.0
実施例 D12	D12	HP-1/H5/B2	94/5/1	2.0
実施例 D14	D14	HP-1/H6/B2	94/5/1	1.5
実施例 D13	D13	HP-1/H7/B2	94/5/1	1.4
実施例 D15	D15	HP-1/H8/B2	94/5/1	1.6
実施例 D16	D16	HP-1/PVK/B2	94/5/1	1.3
比較例 CD1	CD1	HP-1/B1	99/1	1.0

10

20

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I
C 0 7 D 265/38	(2006.01)	C 0 7 D 401/14
C 0 8 G 61/10	(2006.01)	C 0 7 D 265/38
		C 0 8 G 61/10

審査官 横川 美穂

(56)参考文献 国際公開第2018/181188(WO,A1)
中国特許出願公開第109411634(CN,A)
中国特許出願公開第109346614(CN,A)
中国特許出願公開第109192874(CN,A)
国際公開第2019/035268(WO,A1)
国際公開第2020/040298(WO,A1)
国際公開第2020/039930(WO,A1)

(58)調査した分野(Int.Cl.,DB名)
H 0 1 L 5 1 / 5 0
C 0 8 G 6 1 / 1 0
C 0 9 K 1 1 / 0 6
C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)