

(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
2024年9月19日(19.09.2024)

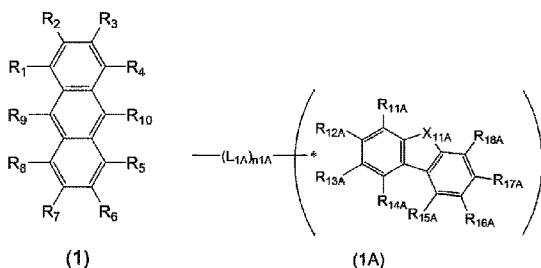


(10) 国際公開番号
WO 2024/190824 A1

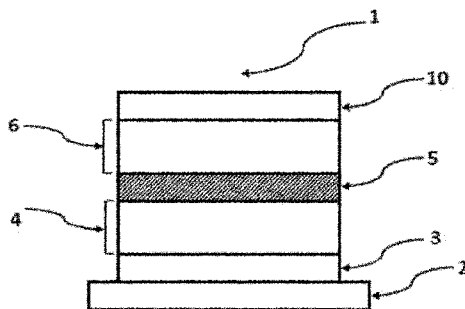
- (51) 国際特許分類:
H10K 50/165 (2023.01) *H10K 85/60* (2023.01)
C07F 1/02 (2006.01) *H10K 101/30* (2023.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2024/009774
- (22) 国際出願日: 2024年3月13日(13.03.2024)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2023-039701 2023年3月14日(14.03.2023) JP
特願 2023-039757 2023年3月14日(14.03.2023) JP
- (71) 出願人: 出光興産株式会社(IDEMITSU KOSAN CO.,LTD.) [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 高橋 良多 (TAKAHASHI, Ryota); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 中村 智則(NAKAMURA, Tomonori); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 水谷 清香(MIZUTANI, Sayaka); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 三谷 真人(MITANI, Masato); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP).

(54) Title: ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT AND ELECTRONIC DEVICE

(54) 発明の名称: 有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器



[図1]



(57) Abstract: Provided is an organic electroluminescent element having a cathode, an anode, and one or more organic layers disposed between the cathode and the anode, wherein: at least one layer among the one or more organic layers includes a first component and a second component; the first component is the compound represented by formula (1); and the second component is selected from the group consisting of alkali metals, alkali metal compounds, alkaline earth metals, alkaline earth metal compounds, rare earth metals, rare earth metal compounds, organometallic complexes including an



WO 2024/190824 A1

(74) 代理人: 弁理士法人平和国際特許事務所 (HEIWA INTERNATIONAL PATENT OFFICE); 〒1010054 東京都千代田区神田錦町一丁目16番地1 いちご神田錦町ビル5階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, 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, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, 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, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

alkali metal, organometallic complexes including an alkaline earth metal, and organometallic complexes including a rare earth metal.

(57) 要約: 陰極と、陽極と、前記陰極と前記陽極との間に配置された1又は2以上の有機層と、を有し、前記1又は2以上の有機層のうち少なくとも1層が、第1成分と、第2成分と、を含み、前記第1成分は、下記式(1)で表される化合物であり、前記第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される、有機エレクトロルミネッセンス素子。

明 細 書

発明の名称：有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器

技術分野

[0001] 本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器に関する。

背景技術

[0002] 有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、有機EL素子ともいう。）に電圧を印加すると、陽極から正孔が、また陰極から電子が、それぞれ発光層に注入される。そして、発光層において、注入された正孔と電子とが再結合し、励起子が形成される。

[0003] 従来の有機EL素子は素子性能が未だ十分ではなかった。素子性能を高めるべく有機EL素子の改良は徐々に進められているが、さらなる高性能化が求められている。

特許文献1には、有機EL素子の電子輸送層に特定の構造を有する化合物を用いることが開示されている。

先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献1：中国特許出願公開第114122299号

発明の概要

[0005] 本発明の目的は、より高性能な有機EL素子を提供することである。

[0006] 本発明者らは上記目的を達成するために鋭意研究を重ねた結果、有機EL素子の有機層のうち少なくとも1層に、特定の2つの成分を組み合わせることで、駆動電圧が低く、かつ低電流密度から高電流密度まで高効率な有機EL素子が得られることを見出し、本発明を完成した。

[0007] また、本発明者らは上記目的を達成するために鋭意研究を重ねた結果、有機EL素子の有機層のうち少なくとも1層に、特定の2つの成分を組み合わせることで、駆動電圧が低く、かつ低電流密度においても高効率な有機EL素子が得られることを見出し、本発明を完成した。

[0008] 本発明によれば以下の有機EL素子等が提供される。

1. 陰極と、

陽極と、

前記陰極と前記陽極との間に配置された1又は2以上の有機層と、

を有し、

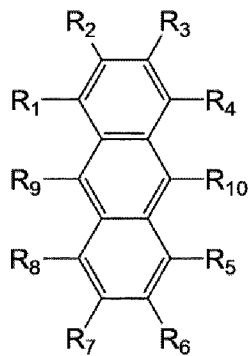
前記1又は2以上の有機層のうち少なくとも1層が、第1成分と、第2成分と、を含み、

前記第1成分は、下記式(1)で表される化合物であり、

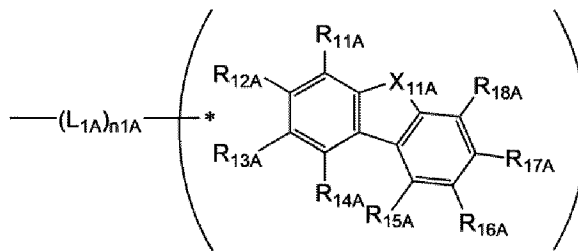
前記第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化1]



(1)



(1A)

[式(1)中、

R₁~R₁₀のうち少なくとも1つは、式(1A)で表される基である。

前記式(1A)で表される基ではないR₁~R₁₀は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基Aである。ただし、R₁~R₁₀のうち少なくとも3つは、それぞれ独立に、前記式(1A)で表される基、置換基A、又は重水素原子である水素原子である。

式(1A)中、

L_{1A} は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基である。

n_{1A} は0～3の整数である。

n_{1A} が0である場合、 $(L_{1A})_{n_{1A}}$ は単結合である。

n_{1A} が2又は3である場合、複数の L_{1A} は互いに直列状に連結し、括弧内の構造は、アントラセン骨格から最も離れた L_{1A} に結合する。複数の L_{1A} は同一でもよく、異なってもよい。

X_{11A} は、C(R_{21A})(R_{22A})、N(R_{23A})、O、又はSである。

$R_{11A} \sim R_{18A}$ のうち隣接する2つ以上からなる1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は前記環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の単環が形成される場合、当該単環を構成する原子のうち1つが L_{1A} と結合するか、又は、当該単環の形成に寄与しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 、及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

前記置換もしくは無置換の縮合環が形成される場合、当該縮合環を構成する原子のうち1つが L_{1A} と結合するか、又は、当該縮合環の形成に寄与しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 、及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

前記単環及び縮合環が形成されない場合、 $R_{11A} \sim R_{18A}$ 及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つは L_{1A} との結合を表す。

前記 L_{1A} との結合を表さず、かつ前記環を形成しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基Aである。

式(1A)で表される基が2以上存在する場合、2以上の式(1A)で表される基は互いに同一でもよく、異なってもよい。

置換基Aは、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、
 $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 、
 $-\text{O}-\text{R}_{904}$ 、
 $-\text{S}-\text{R}_{905}$ 、
 $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 、
 ハロゲン原子、ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$ は、それぞれ独立に、
 水素原子、

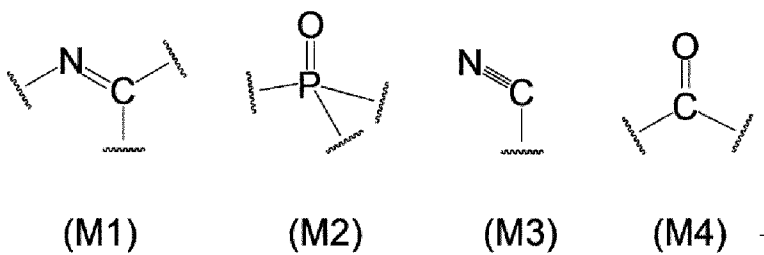
置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

置換基 A が 2 以上存在する場合、2 以上の置換基 A は互いに同一でもよく、異なってもよい。

$\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$ が 2 以上存在する場合、2 以上の $\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$ は互いに同一でもよく、異なってもよい。

ただし、前記式 (1) で表される化合物は、下記式 (M1) で表される構造、下記式 (M2) で表される構造、下記式 (M3) で表される構造、及び下記式 (M4) で表される構造を分子内に含まない。

[化2]



2. 陰極と、

陽極と、
 前記陰極と前記陽極との間に配置された 1 又は 2 以上の有機層と、
 を有し、
 前記 1 又は 2 以上の有機層のうち少なくとも 1 層が、第 1 成分と、第 2 成分と、を含み、

前記第 1 成分は、下記式 (R 1) 及び式 (R 2) を充足する化合物であつて、かつ、下記式 (M 1) ~ 式 (M 4) で表される構造を分子内に含まない化合物であり、

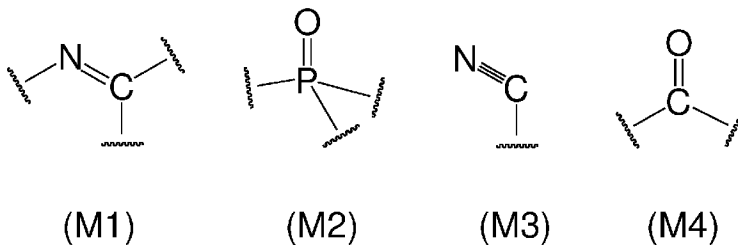
前記第 2 成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$40 \text{ mV} / \text{nm} \leq \text{GSP_slope} \dots (\text{R} 1)$$

$$-2.80 \text{ eV} < \text{LUMO} < -1.86 \text{ eV} \dots (\text{R} 2)$$

[化3]

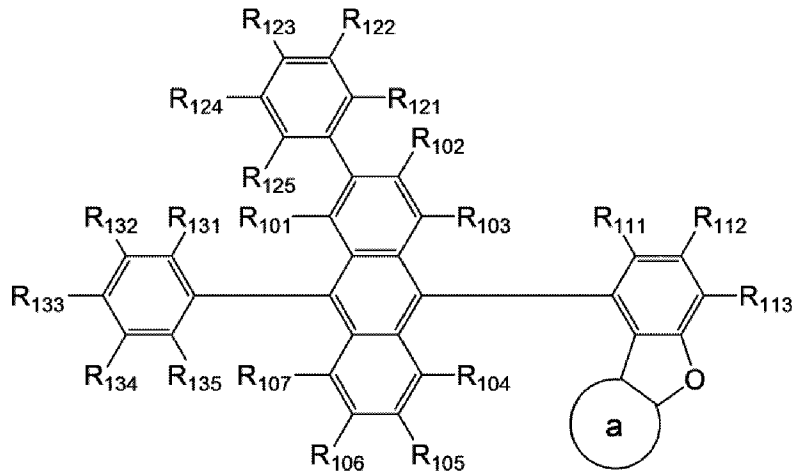


(式 (R 1) 中、GSP_slope は巨大表面電位勾配を示す。式 (R 2) 中、LUMO は最低空軌道のエネルギー準位を示す。)

3. 前記 1 又は 2 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器

4. 下記式 (2) で表される化合物。

[化4]



(2)

[式(2)中、

環 a は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 10～50 の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6～50 の複素環である。

$R_{101} \sim R_{107}$ 、 $R_{111} \sim R_{113}$ 、 $R_{121} \sim R_{125}$ 、及び $R_{131} \sim R_{135}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基 R である。

ただし、 $R_{111} \sim R_{113}$ のうち少なくとも 1 つが置換基 R であるか、又は、前記環 a が少なくとも 1 つの置換基を有する。

置換基 R は、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、

-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、-O-(R_{904})、-S-(R_{905})、-N(R_{906})(R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ が 2 個以上存在する場合、2 個以上の $R_{901} \sim R_{907}$ は同一
でもよく、異なってもよい。

置換基 R が 2 個以上存在する場合、2 個以上の置換基 R は同一でもよく、
異なってもよい。]

[0009] 本発明によれば、より高性能な有機 EL 素子が提供できる。

図面の簡単な説明

[0010] [図1]本発明の一態様に係る有機 EL 素子の概略構成を示す図である。

発明を実施するための形態

[0011] [定義]

本明細書において、水素原子とは、中性子数が異なる同位体、即ち、軽水素 (protium)、重水素 (deuterium)、及び三重水素 (tritium) を包含する。

[0012] 本明細書において、化学構造式中、「R」等の記号や重水素原子を表す「D」が明示されていない結合可能位置には、水素原子、即ち、軽水素原子、重水素原子、又は三重水素原子が結合しているものとする。

[0013] 本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物 (例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、及び複素環化合物) の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、別途記載

のない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が6であり、ナフタレン環は環形成炭素数が10であり、ピリジン環は環形成炭素数5であり、フラン環は環形成炭素数4である。また、例えば、9,9-ジフェニルフルオレニル基の環形成炭素数は13であり、9,9'-スピロビフルオレニル基の環形成炭素数は25である。

また、ベンゼン環に置換基として、例えば、アルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、ベンゼン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているベンゼン環の環形成炭素数は、6である。また、ナフタレン環に置換基として、例えば、アルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、ナフタレン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているナフタレン環の環形成炭素数は、10である。

[0014] 本明細書において、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造（例えば、単環、縮合環、及び環集合）の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、及び複素環化合物）の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子（例えば、環を構成する原子の結合を終端する水素原子）や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。以下で記される「環形成原子数」については、別途記載のない限り同様とする。例えば、ピリジン環の環形成原子数は6であり、キナゾリン環の環形成原子数は10であり、フラン環の環形成原子数は5である。例えば、ピリジン環に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子の数は、ピリジン環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているピリジン環の環形成原子数は、6である。また、例えば、キナゾリン環の炭素原子に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子については、キナゾリン環の環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているキナゾリン環の環形成原子数は10である。

[0015] 本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数 $X X \sim Y Y$ の $Z Z$ 基」

という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の炭素数を表し、置換されている場合の置換基の炭素数を含めない。ここで、「 YY 」は、「 XX 」よりも大きく、「 XX 」は、1以上の整数を意味し、「 YY 」は、2以上の整数を意味する。

[0016] 本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「原子数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の原子数を表し、置換されている場合の置換基の原子数を含めない。ここで、「 YY 」は、「 XX 」よりも大きく、「 XX 」は、1以上の整数を意味し、「 YY 」は、2以上の整数を意味する。

[0017] 本明細書において、無置換の ZZ 基とは「置換もしくは無置換の ZZ 基」が「無置換の ZZ 基」である場合を表し、置換の ZZ 基とは「置換もしくは無置換の ZZ 基」が「置換の ZZ 基」である場合を表す。

本明細書において、「置換もしくは無置換の ZZ 基」という場合における「無置換」とは、 ZZ 基における水素原子が置換基と置き換わっていないことを意味する。「無置換の ZZ 基」における水素原子は、軽水素原子、重水素原子、又は三重水素原子である。

また、本明細書において、「置換もしくは無置換の ZZ 基」という場合における「置換」とは、 ZZ 基における1つ以上の水素原子が、置換基と置き換わっていることを意味する。「 AA 基で置換された BB 基」という場合における「置換」も同様に、 BB 基における1つ以上の水素原子が、 AA 基と置き換わっていることを意味する。

[0018] 「本明細書に記載の置換基」

以下、本明細書に記載の置換基について説明する。

[0019] 本明細書に記載の「無置換のアリール基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30、より好ましくは6～18である。

本明細書に記載の「無置換の複素環基」の環形成原子数は、本明細書に別途記載のない限り、5～50であり、好ましくは5～30、より好ましくは

5～18である。

本明細書に記載の「無置換のアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～20、より好ましくは1～6である。

本明細書に記載の「無置換のアルケニル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、2～50であり、好ましくは2～20、より好ましくは2～6である。

本明細書に記載の「無置換のアルキニル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、2～50であり、好ましくは2～20、より好ましくは2～6である。

本明細書に記載の「無置換のシクロアルキル基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、3～50であり、好ましくは3～20、より好ましくは3～6である。

本明細書に記載の「無置換のアリーレン基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30、より好ましくは6～18である。

本明細書に記載の「無置換の2価の複素環基」の環形成原子数は、本明細書に別途記載のない限り、5～50であり、好ましくは5～30、より好ましくは5～18である。

本明細書に記載の「無置換のアルキレン基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～20、より好ましくは1～6である。

[0020] ・「置換もしくは無置換のアリール基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」の具体例（具体例群G1）としては、以下の無置換のアリール基（具体例群G1A）及び置換のアリール基（具体例群G1B）等が挙げられる。（ここで、無置換のアリール基とは「置換もしくは無置換のアリール基」が「無置換のアリール基」である場合を指し、置換のアリール基とは「置換もしくは無置換のアリール

基」が「置換のアリール基」である場合を指す。) 本明細書において、単に「アリール基」という場合は、「無置換のアリール基」と「置換のアリール基」の両方を含む。

「置換のアリール基」は、「無置換のアリール基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアリール基」としては、例えば、下記具体例群G 1 Aの「無置換のアリール基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び下記具体例群G 1 Bの置換のアリール基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のアリール基」の例、及び「置換のアリール基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアリール基」には、下記具体例群G 1 Bの「置換のアリール基」におけるアリール基自体の炭素原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び下記具体例群G 1 Bの「置換のアリール基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0021] ・無置換のアリール基（具体例群G 1 A）：

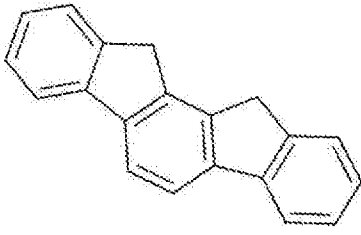
フェニル基、
p-ビフェニル基、
m-ビフェニル基、
o-ビフェニル基、
p-ターフェニル-4-イル基、
p-ターフェニル-3-イル基、
p-ターフェニル-2-イル基、
m-ターフェニル-4-イル基、
m-ターフェニル-3-イル基、
m-ターフェニル-2-イル基、
o-ターフェニル-4-イル基、
o-ターフェニル-3-イル基、
o-ターフェニル-2-イル基、
1-ナフチル基、

2-ナフチル基、
アントリル基、
ベンゾアントリル基、
フェナントリル基、
ベンゾフェナントリル基、
フェナレニル基、
ピレニル基、
クリセニル基、
ベンゾクリセニル基、
トリフェニレニル基、
ベンゾトリフェニレニル基、
テトラセニル基、
ペンタセニル基、
フルオレニル基、
9, 9'-スピロビフルオレニル基、
ベンゾフルオレニル基、
ジベンゾフルオレニル基、
フルオランテニル基、
ベンゾフルオランテニル基、
ペリレニル基、及び

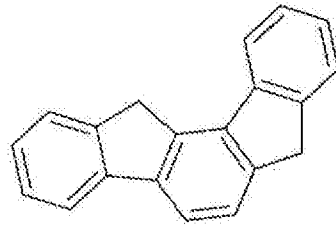
下記一般式 (TEMP-1) ~ (TEMP-15) で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価のアリール基。

[0022]

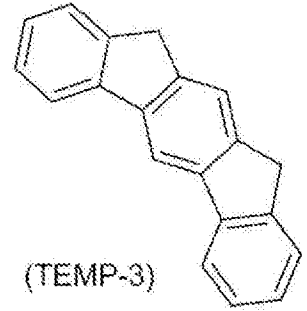
[化5]



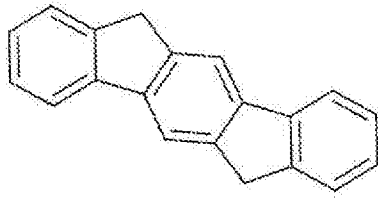
(TEMP-1)



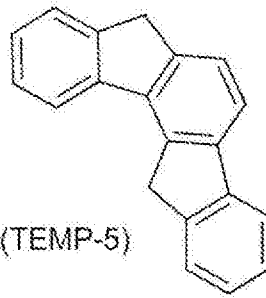
(TEMP-2)



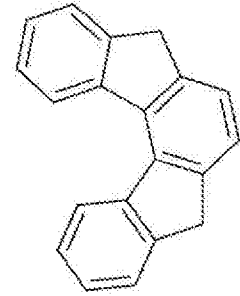
(TEMP-3)



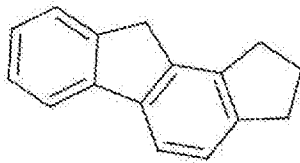
(TEMP-4)



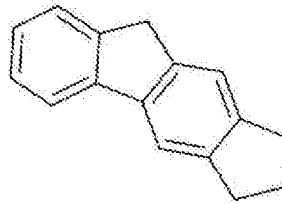
(TEMP-5)



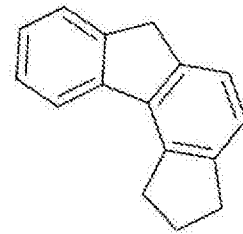
(TEMP-6)



(TEMP-7)



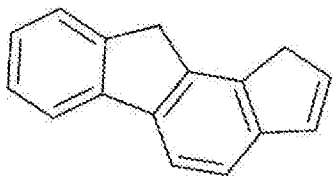
(TEMP-8)



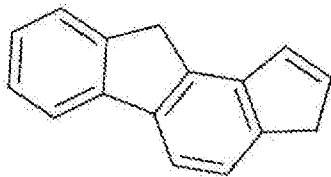
(TEMP-9)

[0023]

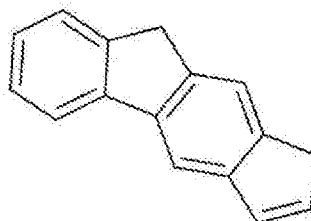
[化6]



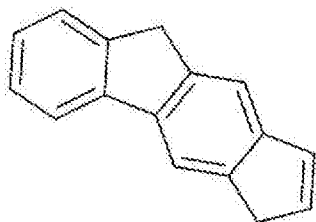
(TEMP-10)



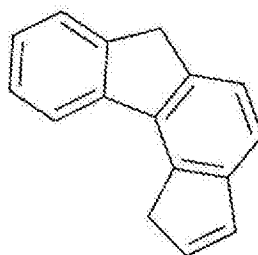
(TEMP-11)



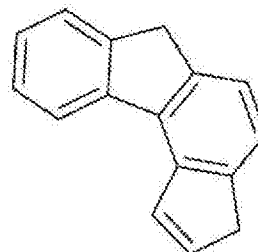
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

[0024] ・置換のアリール基（具体例群G 1 B）：

- o-トリル基、
- m-トリル基、
- p-トリル基、
- パラ-キシリル基、
- メタ-キシリル基、
- オルト-キシリル基、
- パラ-イソプロピルフェニル基、
- メタ-イソプロピルフェニル基、
- オルト-イソプロピルフェニル基、
- パラ-t-ブチルフェニル基、
- メタ-t-ブチルフェニル基、
- オルト-t-ブチルフェニル基、
- 3, 4, 5-トリメチルフェニル基、
- 9, 9-ジメチルフルオレニル基、
- 9, 9-ジフェニルフルオレニル基

9, 9-ビス(4-メチルフェニル)フルオレニル基、
9, 9-ビス(4-イソプロピルフェニル)フルオレニル基、
9, 9-ビス(4-tert-ブチルフェニル)フルオレニル基、
シアノフェニル基、
トリフェニルシリルフェニル基、
トリメチルシリルフェニル基、
フェニルナフチル基、
ナフチルフェニル基、及び

前記一般式(TEMP-1)~(TEMP-15)で表される環構造から誘導される1価の基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基。

[0025] ・「置換もしくは無置換の複素環基」

本明細書に記載の「複素環基」は、環形成原子にヘテロ原子を少なくとも1つ含む環状の基である。ヘテロ原子の具体例としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、及びホウ素原子が挙げられる。

本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基である。

本明細書に記載の「複素環基」は、芳香族複素環基であるか、又は非芳香族複素環基である。

本明細書に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」の具体例(具体例群G2)としては、以下の無置換の複素環基(具体例群G2A)、及び置換の複素環基(具体例群G2B)等が挙げられる。(ここで、無置換の複素環基とは「置換もしくは無置換の複素環基」が「無置換の複素環基」である場合を指し、置換の複素環基とは「置換もしくは無置換の複素環基」が「置換の複素環基」である場合を指す。)本明細書において、単に「複素環基」という場合は、「無置換の複素環基」と「置換の複素環基」の両方を含む。

「置換の複素環基」は、「無置換の複素環基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換の複素環基」の具体例は、下記具体例群G2Aの「無置換の複素環基」の水素原子が置き換わった基、及び下

記具体例群G 2 Bの置換の複素環基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換の複素環基」の例や「置換の複素環基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換の複素環基」には、具体例群G 2 Bの「置換の複素環基」における複素環基自体の環形成原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G 2 Bの「置換の複素環基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0026] 具体例群G 2 Aは、例えば、以下の窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 1）、酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 2）、硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 3）、及び下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群G 2 A 4）を含む。

[0027] 具体例群G 2 Bは、例えば、以下の窒素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 1）、酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 2）、硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 3）、及び下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から誘導される1価の複素環基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群G 2 B 4）を含む。

[0028] ・窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 1）：

ピロリル基、
イミダゾリル基、
ピラゾリル基、
トリアゾリル基、
テトラゾリル基、
オキサゾリル基、
イソオキサゾリル基、
オキサジアゾリル基、
チアゾリル基、

イソチアゾリル基、
チアジアゾリル基、
ピリジル基、
ピリダジニル基、
ピリミジニル基、
ピラジニル基、
トリアジニル基、
インドリル基、
イソインドリル基、
インドリジニル基、
キノリジニル基、
キノリル基、
イソキノリル基、
シンノリル基、
フタラジニル基、
キナゾリニル基、
キノキサリニル基、
ベンゾイミダゾリル基、
インダゾリル基、
フェナントロリニル基、
フェナントリジニル基、
アクリジニル基、
フェナジニル基、
カルバゾリル基、
ベンゾカルバゾリル基、
モルホリノ基、
フェノキサジニル基、
フェノチアジニル基、

アザカルバゾリル基、及びジアザカルバゾリル基。

[0029] ・酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 2）：

フリル基、
オキサゾリル基、
イソオキサゾリル基、
オキサジアゾリル基、
キサントニル基、
ベンゾフラニル基、
イソベンゾフラニル基、
ジベンゾフラニル基、
ナフトベンゾフラニル基、
ベンゾオキサゾリル基、
ベンゾイソキサゾリル基、
フェノキサジニル基、
モルホリノ基、
ジナフトフラニル基、
アザジベンゾフラニル基、
ジアザジベンゾフラニル基、
アザナフトベンゾフラニル基、及び
ジアザナフトベンゾフラニル基。

[0030] ・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 3）：

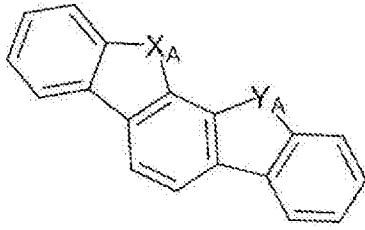
チエニル基、
チアゾリル基、
イソチアゾリル基、
チアジアゾリル基、
ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基）、
イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基）、
ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、

ナフトベンゾチオフェニル基（ナフトベンゾチエニル基）、
ベンゾチアゾリル基、
ベンゾイソチアゾリル基、
フェノチアジニル基、
ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、
アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、
ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、
アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフトベンゾチエニル基）、及び
ジアザナフトベンゾチオフェニル基（ジアザナフトベンゾチエニル基）。

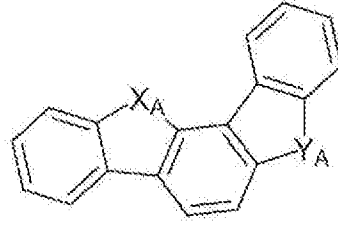
[0031] ・下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群G2A4）：

[0032]

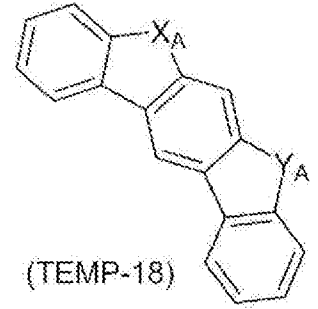
[化7]



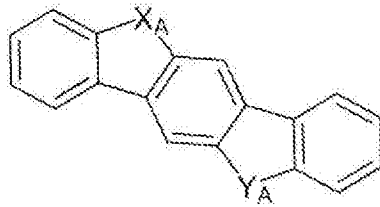
(TEMP-16)



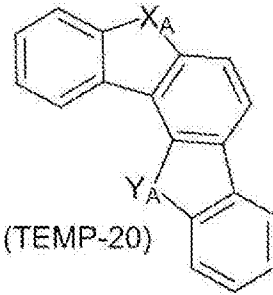
(TEMP-17)



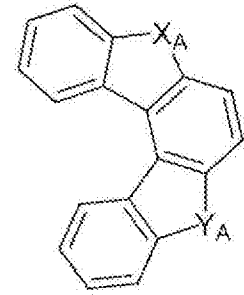
(TEMP-18)



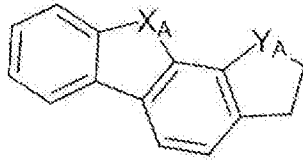
(TEMP-19)



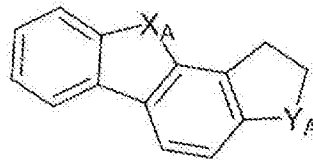
(TEMP-20)



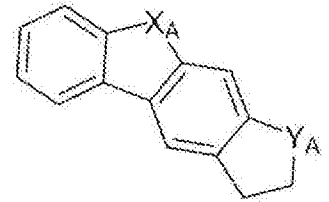
(TEMP-21)



(TEMP-22)



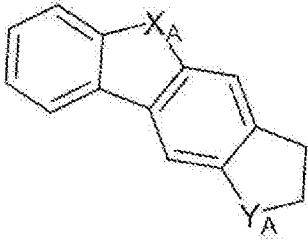
(TEMP-23)



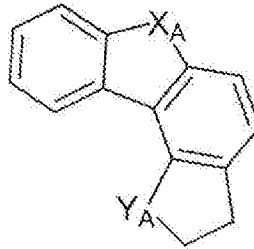
(TEMP-24)

[0033]

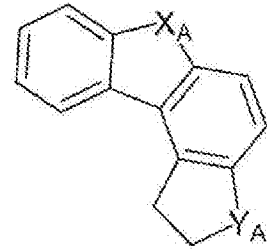
[化8]



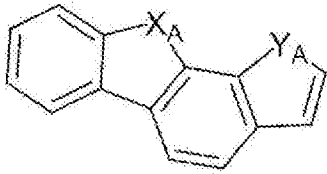
(TEMP-25)



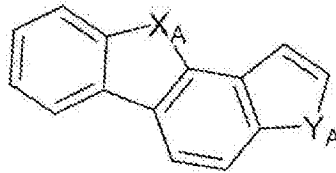
(TEMP-26)



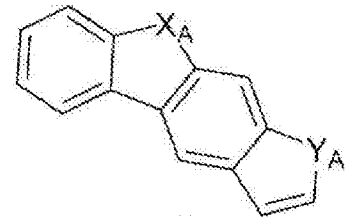
(TEMP-27)



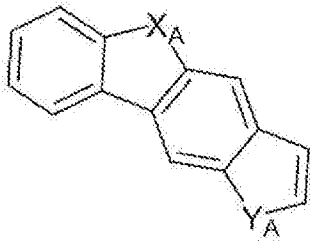
(TEMP-28)



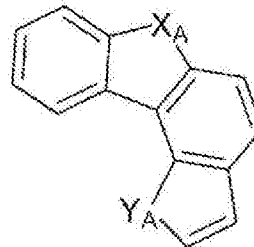
(TEMP-29)



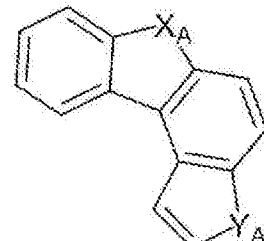
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

[0034] 前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) において、 X_A 及び Y_A は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、NH、又は CH_2 である。ただし、 X_A 及び Y_A のうち少なくとも1つは、酸素原子、硫黄原子、又はNHである。

前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) において、 X_A 及び Y_A の少なくともいずれかがNH、又は CH_2 である場合、前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) で表される環構造から誘導される1価の複素環基には、これらNH、又は CH_2 から1つの水素原子を除いて得られる1価の基が含まれる。

[0035] ・窒素原子を含む置換の複素環基 (具体例群G2B1) :

(9-フェニル)カルバゾリル基、

(9-ビフェニル)カルバゾリル基、
(9-フェニル)フェニルカルバゾリル基、
(9-ナフチル)カルバゾリル基、
ジフェニルカルバゾール-9-イル基、
フェニルカルバゾール-9-イル基、
メチルベンゾイミダゾリル基、
エチルベンゾイミダゾリル基、
フェニルトリアジニル基、
ビフェニルルトリアジニル基、
ジフェニルトリアジニル基、
フェニルキナゾリニル基、及び
ビフェニルキナゾリニル基。

[0036] ・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 2）：

フェニルジベンゾフラニル基、
メチルジベンゾフラニル基、
t-ブチルジベンゾフラニル基、及び
スピロ [9H-キサンテン-9, 9' - [9H]フルオレン] の1価の残基。
。

[0037] ・硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 3）：

フェニルジベンゾチオフェニル基、
メチルジベンゾチオフェニル基、
t-ブチルジベンゾチオフェニル基、及び
スピロ [9H-チオキサンテン-9, 9' - [9H]フルオレン] の1価の
残基。

[0038] ・前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) で表される環構造から誘導される1価の複素環基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群G 2 B 4）：

[0039] 前記「1価の複素環基の1つ以上の水素原子」とは、該1価の複素環基の

環形成炭素原子に結合している水素原子、 X_A 及び Y_A の少なくともいずれかがNHである場合の窒素原子に結合している水素原子、及び X_A 及び Y_A の一方が CH_2 である場合のメチレン基の水素原子から選ばれる1つ以上の水素原子を意味する。

[0040] ・「置換もしくは無置換のアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」の具体例（具体例群G3）としては、以下の無置換のアルキル基（具体例群G3A）及び置換のアルキル基（具体例群G3B）が挙げられる。（ここで、無置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「無置換のアルキル基」である場合を指し、置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「置換のアルキル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキル基」という場合は、「無置換のアルキル基」と「置換のアルキル基」の両方を含む。

「置換のアルキル基」は、「無置換のアルキル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキル基」（具体例群G3A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のアルキル基（具体例群G3B）の例等が挙げられる。本明細書において、「無置換のアルキル基」におけるアルキル基は、鎖状のアルキル基を意味する。そのため、「無置換のアルキル基」は、直鎖である「無置換のアルキル基」、及び分岐状である「無置換のアルキル基」が含まれる。尚、ここに列挙した「無置換のアルキル基」の例や「置換のアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルキル基」には、具体例群G3Bの「置換のアルキル基」におけるアルキル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G3Bの「置換のアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0041] ・無置換のアルキル基（具体例群G3A）：

メチル基、

エチル基、
n-プロピル基、
イソプロピル基、
n-ブチル基、
イソブチル基、
s-ブチル基、及び
t-ブチル基。

[0042] ・置換のアルキル基（具体例群G 3 B）：

ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、
ペンタフルオロエチル基、
2, 2, 2-トリフルオロエチル基、及び
トリフルオロメチル基。

[0043] ・「置換もしくは無置換のアルケニル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルケニル基」の具体例（具体例群G 4）としては、以下の無置換のアルケニル基（具体例群G 4 A）、及び置換のアルケニル基（具体例群G 4 B）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルケニル基とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「無置換のアルケニル基」である場合を指し、「置換のアルケニル基」とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「置換のアルケニル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「アルケニル基」という場合は、「無置換のアルケニル基」と「置換のアルケニル基」の両方を含む。

「置換のアルケニル基」は、「無置換のアルケニル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルケニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルケニル基」（具体例群G 4 A）が置換基を有する基、及び置換のアルケニル基（具体例群G 4 B）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のアルケニル基」の例や「置換のアルケニル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルケニル基」には、具体例群G 4 Bの「置換のアルケニル基」におけるアルケニル基

自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G 4 Bの「置換のアルケニル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0044] ・無置換のアルケニル基（具体例群G 4 A）：

ビニル基、

アリル基、

1-ブテニル基、

2-ブテニル基、及び

3-ブテニル基。

[0045] ・置換のアルケニル基（具体例群G 4 B）：

1, 3-ブタンジエニル基、

1-メチルビニル基、

1-メチルアリル基、

1, 1-ジメチルアリル基、

2-メチルアリル基、及び

1, 2-ジメチルアリル基。

[0046] ・「置換もしくは無置換のアルキニル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキニル基」の具体例（具体例群G 5）としては、以下の無置換のアルキニル基（具体例群G 5 A）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルキニル基とは、「置換もしくは無置換のアルキニル基」が「無置換のアルキニル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキニル基」という場合は、「無置換のアルキニル基」と「置換のアルキニル基」の両方を含む。

「置換のアルキニル基」は、「無置換のアルキニル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキニル基」（具体例群G 5 A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基等が挙げられる。

[0047] ・無置換のアルキニル基（具体例群G 5 A）：

エチニル基

[0048] ・「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」の具体例（具体例群G 6）としては、以下の無置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 A）、及び置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 B）等が挙げられる。（ここで、無置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「無置換のシクロアルキル基」である場合を指し、置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「置換のシクロアルキル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「シクロアルキル基」という場合は、「無置換のシクロアルキル基」と「置換のシクロアルキル基」の両方を含む。

「置換のシクロアルキル基」は、「無置換のシクロアルキル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のシクロアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のシクロアルキル基」（具体例群G 6 A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 B）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のシクロアルキル基」の例や「置換のシクロアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のシクロアルキル基」には、具体例群G 6 Bの「置換のシクロアルキル基」におけるシクロアルキル基自体の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び具体例群G 6 Bの「置換のシクロアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0049] ・無置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 A）：

シクロプロピル基、
シクロブチル基、
シクロペンチル基、
シクロヘキシル基、
1-アダマンチル基、

2-アダマンチル基、
1-ノルボルニル基、及び
2-ノルボルニル基。

[0050] ・置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 B）：

4-メチルシクロヘキシル基。

[0051] ・「 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基」

本明細書に記載の $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基の具体例（具体例群G 7）としては、

$-Si(G1)(G1)(G1)$ 、
 $-Si(G1)(G2)(G2)$ 、
 $-Si(G1)(G1)(G2)$ 、
 $-Si(G2)(G2)(G2)$ 、
 $-Si(G3)(G3)(G3)$ 、及び
 $-Si(G6)(G6)(G6)$

が挙げられる。ここで、

G 1は、具体例群G 1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2は、具体例群G 2に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3は、具体例群G 3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6は、具体例群G 6に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

$-Si(G1)(G1)(G1)$ における複数のG 1は、互いに同一であるか、又は異なる。

$-Si(G1)(G2)(G2)$ における複数のG 2は、互いに同一であるか、又は異なる。

$-Si(G1)(G1)(G2)$ における複数のG 1は、互いに同一であ

るか、又は異なる。

−S i (G 2) (G 2) (G 2) における複数のG 2は、互いに同一であるか、又は異なる。

−S i (G 3) (G 3) (G 3) における複数のG 3は、互いに同一であるか、又は異なる。

−S i (G 6) (G 6) (G 6) における複数のG 6は、互いに同一であるか、又は異なる。

[0052] ・「−O− (R₉₀₄) で表される基」

本明細書に記載の−O− (R₉₀₄) で表される基の具体例 (具体例群G 8) としては、

−O (G 1)、
−O (G 2)、
−O (G 3)、及び
−O (G 6)

が挙げられる。

ここで、

G 1は、具体例群G 1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2は、具体例群G 2に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3は、具体例群G 3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6は、具体例群G 6に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

[0053] ・「−S− (R₉₀₅) で表される基」

本明細書に記載の−S− (R₉₀₅) で表される基の具体例 (具体例群G 9) としては、

−S (G 1)、

- S (G 2) 、
- S (G 3) 、及び
- S (G 6)

が挙げられる。

ここで、

G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2 は、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6 は、具体例群 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

[0054] ・ 「-N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基」

本明細書に記載の -N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基の具体例 (具体例群 G 10) としては、

- N (G 1) (G 1) 、
- N (G 2) (G 2) 、
- N (G 1) (G 2) 、
- N (G 3) (G 3) 、及び
- N (G 6) (G 6)

が挙げられる。

ここで、

G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2 は、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」であ

る。

G 6 は、具体例群 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

− N (G 1) (G 1) における複数の G 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

− N (G 2) (G 2) における複数の G 2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

− N (G 3) (G 3) における複数の G 3 は、互いに同一であるか、又は異なる。

− N (G 6) (G 6) における複数の G 6 は、互いに同一であるか、又は異なる。

[0055] ・ 「ハロゲン原子」

本明細書に記載の「ハロゲン原子」の具体例（具体例群 G 1 1）としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、及びヨウ素原子等が挙げられる。

[0056] ・ 「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも1つの水素原子がフッ素原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がフッ素原子で置き換わった基（パーフルオロ基）も含む。「無置換のフルオロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。「置換のフルオロアルキル基」は、「フルオロアルキル基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のフルオロアルキル基」には、「置換のフルオロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のフルオロアルキル基」における置換基の1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も

含まれる。「無置換のフルオロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群G3）における1つ以上の水素原子がフッ素原子と置き換わった基の例等が挙げられる。

[0057] ・「置換もしくは無置換のハロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のハロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも1つの水素原子がハロゲン原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がハロゲン原子で置き換わった基も含む。「無置換のハロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。「置換のハロアルキル基」は、「ハロアルキル基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のハロアルキル基」には、「置換のハロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のハロアルキル基」における置換基の1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のハロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群G3）における1つ以上の水素原子がハロゲン原子と置き換わった基の例等が挙げられる。ハロアルキル基をハロゲン化アルキル基と称する場合がある。

[0058] ・「置換もしくは無置換のアルコキシ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルコキシ基」の具体例としては、-O（G3）で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルコキシ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。

[0059] ・「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」の具体例とし

ては、 $-S(G3)$ で表される基であり、ここで、 $G3$ は、具体例群 $G3$ に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルキルチオ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、 $1\sim 50$ であり、好ましくは $1\sim 30$ であり、より好ましくは $1\sim 18$ である。

[0060] ・「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」の具体例としては、 $-O(G1)$ で表される基であり、ここで、 $G1$ は、具体例群 $G1$ に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールオキシ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、 $6\sim 50$ であり、好ましくは $6\sim 30$ であり、より好ましくは $6\sim 18$ である。

[0061] ・「置換もしくは無置換のアリールチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールチオ基」の具体例としては、 $-S(G1)$ で表される基であり、ここで、 $G1$ は、具体例群 $G1$ に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールチオ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、 $6\sim 50$ であり、好ましくは $6\sim 30$ であり、より好ましくは $6\sim 18$ である。

[0062] ・「置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基」

本明細書に記載の「トリアルキルシリル基」の具体例としては、 $-Si(G3)(G3)(G3)$ で表される基であり、ここで、 $G3$ は、具体例群 $G3$ に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。 $-Si(G3)(G3)(G3)$ における複数の $G3$ は、互いに同一であるか、又は異なる。「トリアルキルシリル基」の各アルキル基の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、 $1\sim 50$ であり、好ましくは $1\sim 20$ であり、より好ましくは $1\sim 6$ である。

[0063] ・「置換もしくは無置換のアラルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、 $-(G3)-(G1)$ で表される基であり、ここで、 $G3$ は、具体例群 $G3$ に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」であり、 $G1$ は、具体例

群G 1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。従って、「アラルキル基」は、「アルキル基」の水素原子が置換基としての「アリール基」と置き換わった基であり、「置換のアルキル基」の一態様である。「無置換のアラルキル基」は、「無置換のアリール基」が置換した「無置換のアルキル基」であり、「無置換のアラルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、7～50であり、好ましくは7～30であり、より好ましくは7～18である。

「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、ベンジル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-t-ブチル基、 α -ナフチルメチル基、1- α -ナフチルエチル基、2- α -ナフチルエチル基、1- α -ナフチルイソプロピル基、2- α -ナフチルイソプロピル基、 β -ナフチルメチル基、1- β -ナフチルエチル基、2- β -ナフチルエチル基、1- β -ナフチルイソプロピル基、及び2- β -ナフチルイソプロピル基等が挙げられる。

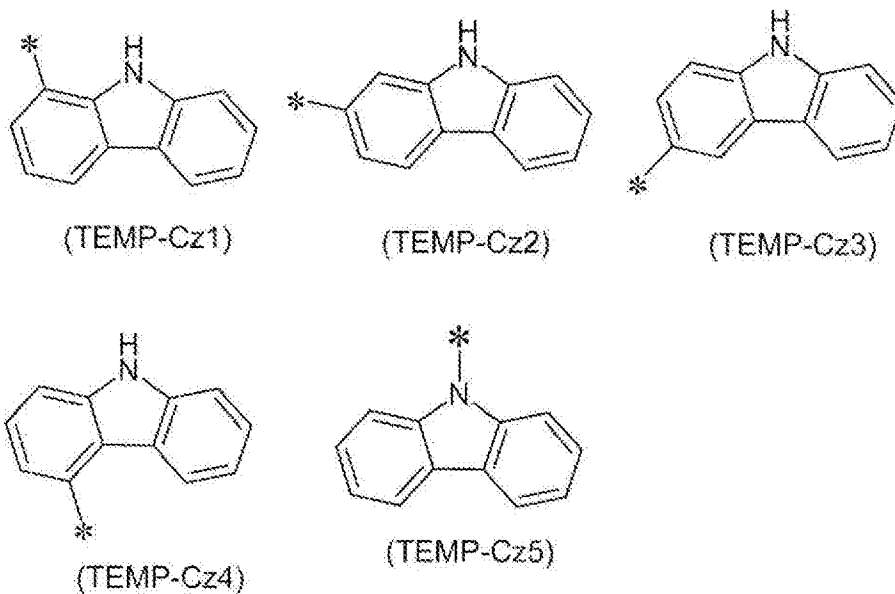
[0064] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリール基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはフェニル基、p-ビフェニル基、m-ビフェニル基、o-ビフェニル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-ターフェニル-4-イル基、o-ターフェニル-3-イル基、o-ターフェニル-2-イル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9, 9'-スピロビフルオレニル基、9, 9-ジメチルフルオレニル基、及び9, 9-ジフェニルフルオレニル基等である。

[0065] 本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェ

ナントロリニル基、カルバゾリル基（1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、又は9-カルバゾリル基）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ジアザジベンゾチオフェニル基、（9-フェニル）カルバゾリル基（（9-フェニル）カルバゾール-1-イル基、（9-フェニル）カルバゾール-2-イル基、（9-フェニル）カルバゾール-3-イル基、又は（9-フェニル）カルバゾール-4-イル基）、（9-ビフェニル）カルバゾリル基、（9-フェニル）フェニルカルバゾリル基、ジフェニルカルバゾール-9-イル基、フェニルカルバゾール-9-イル基、フェニルトリアジニル基、ビフェニルトリアジニル基、ジフェニルトリアジニル基、フェニルジベンゾフラニル基、及びフェニルジベンゾチオフェニル基等である。

[0066] 本明細書において、カルバゾリル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

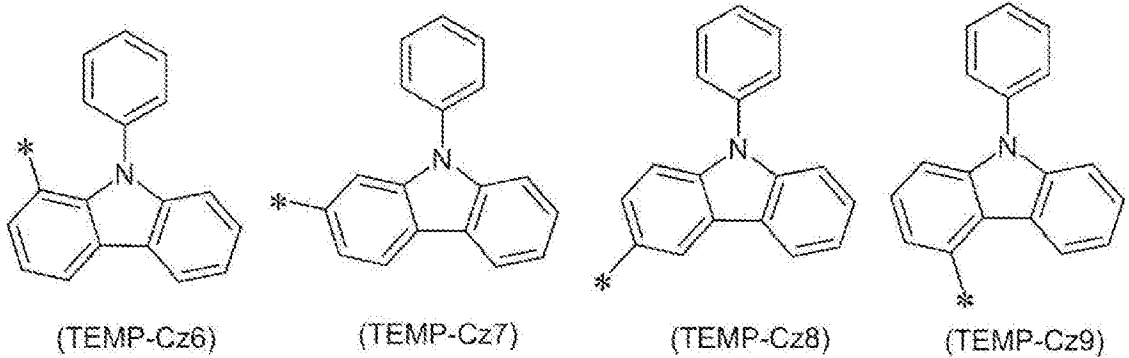
[0067] [化9]



[0068] 本明細書において、（9-フェニル）カルバゾリル基は、本明細書に別途

記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

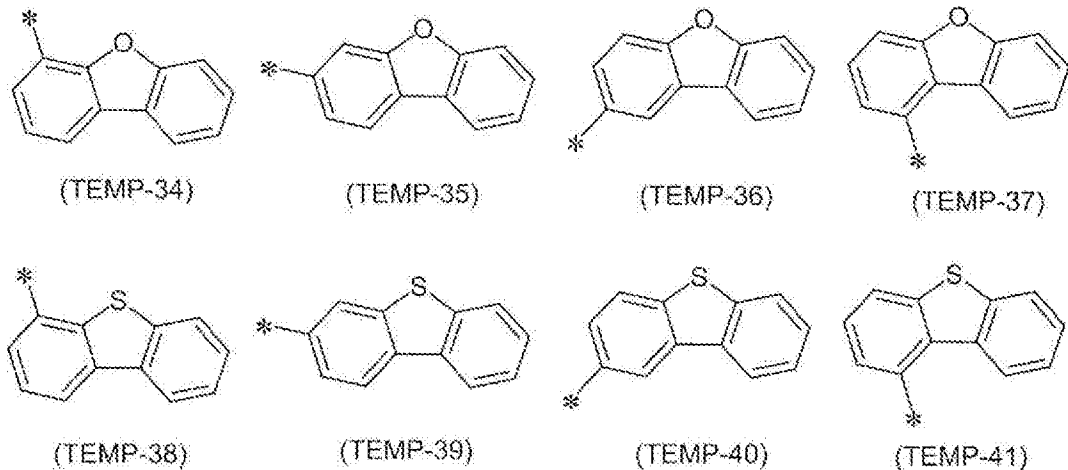
[0069] [化10]



[0070] 前記一般式 (TEMP-Cz1) ~ (TEMP-Cz9) 中、*は、結合部位を表す。

[0071] 本明細書において、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

[0072] [化11]



[0073] 前記一般式 (TEMP-34) ~ (TEMP-41) 中、*は、結合部位を表す。

[0074] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアルキル基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、及び*t*-ブチル基等である。

[0075] ・「置換もしくは無置換のアリーレン基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリーレン基」は、別途記載の

ない限り、上記「置換もしくは無置換のアリール基」からアリール環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換のアリーレン基」の具体例（具体例群G 1 2）としては、具体例群G 1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」からアリール環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

[0076] ・「置換もしくは無置換の2価の複素環基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換の2価の複素環基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換の2価の複素環基」の具体例（具体例群G 1 3）としては、具体例群G 2に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

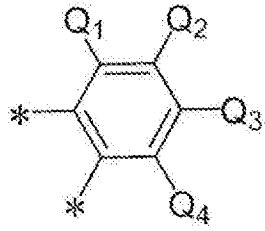
[0077] ・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群G 1 4）としては、具体例群G 3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

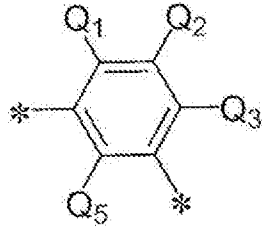
[0078] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式（TEMP-4 2）～（TEMP-6 8）のいずれかの基である。

[0079]

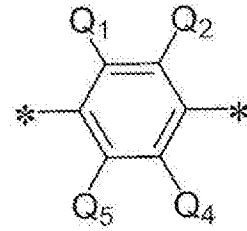
[化12]



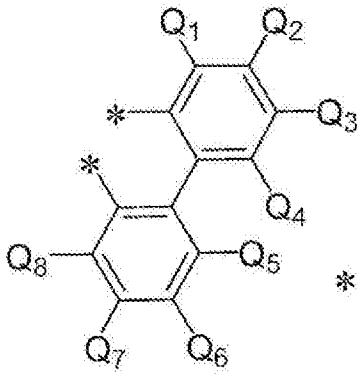
(TEMP-42)



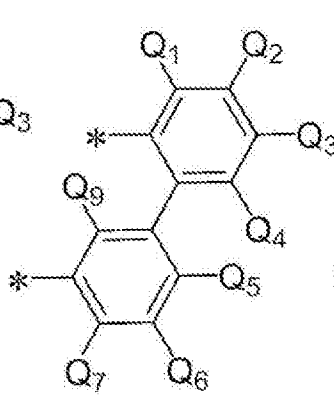
(TEMP-43)



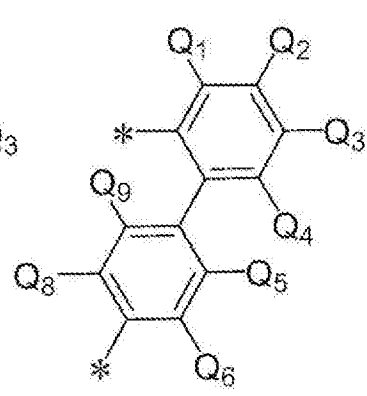
(TEMP-44)



(TEMP-45)

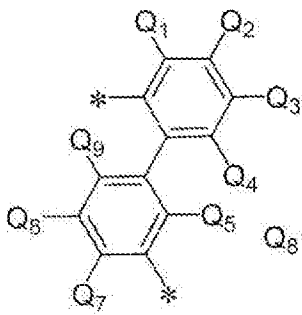


(TEMP-46)

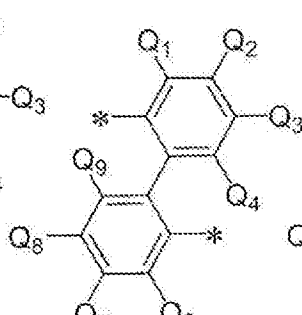


(TEMP-47)

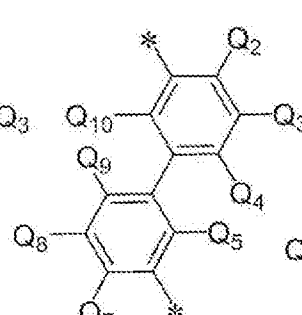
[0080] [化13]



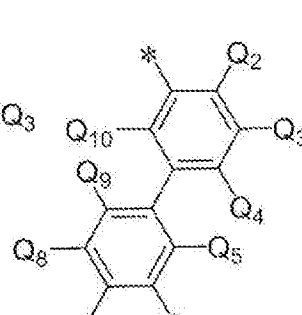
(TEMP-48)



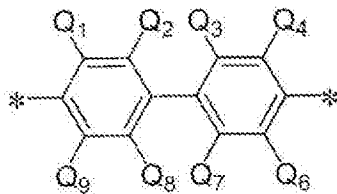
(TEMP-49)



(TEMP-50)



(TEMP-51)



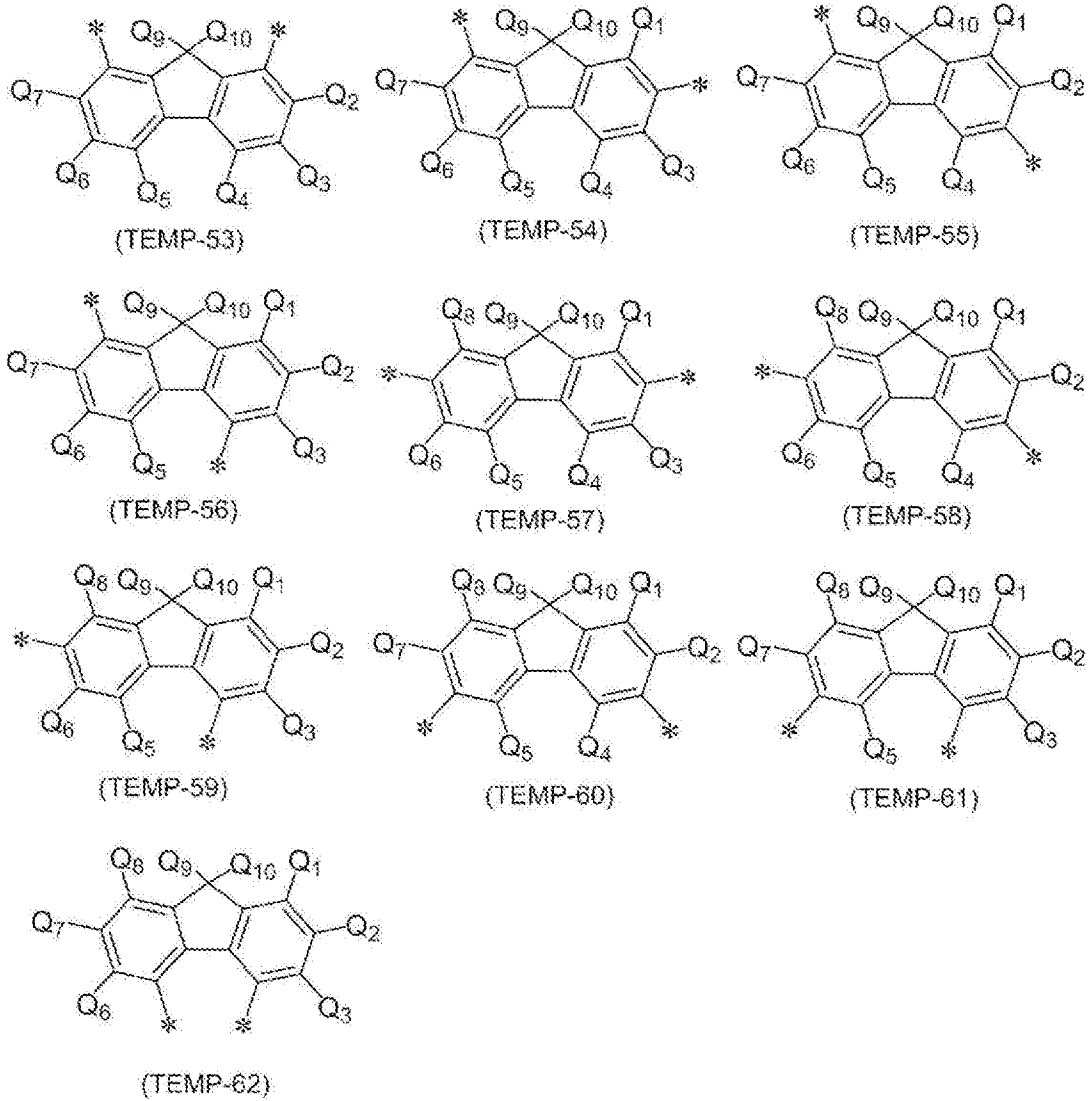
(TEMP-52)

[0081] 前記一般式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中、 $Q_1 \sim Q_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

前記一般式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中、*は、結合部位

を表す。

[0082] [化14]



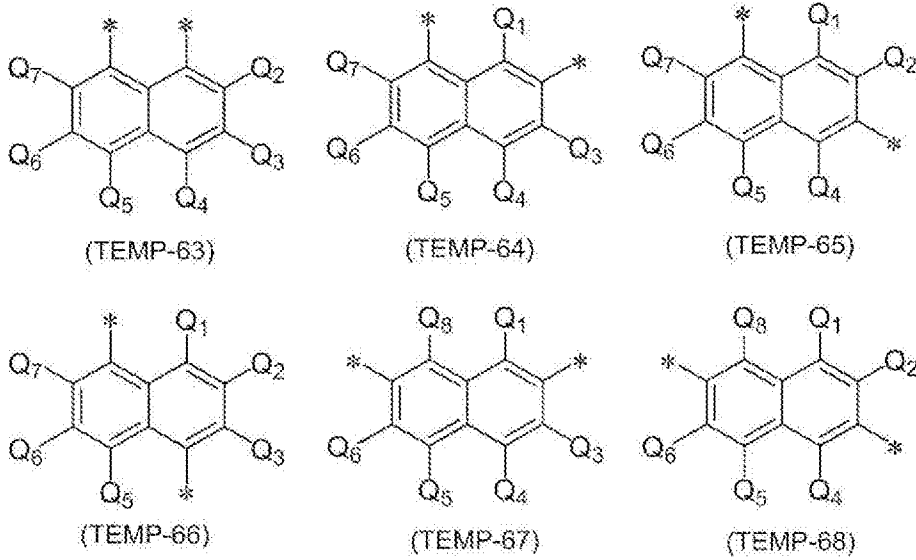
[0083] 前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、 $Q_1 \sim Q_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

式 Q_9 及び Q_{10} は、単結合を介して互いに結合して環を形成してもよい。

前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、*は、結合部位を表す。

[0084]

[化15]

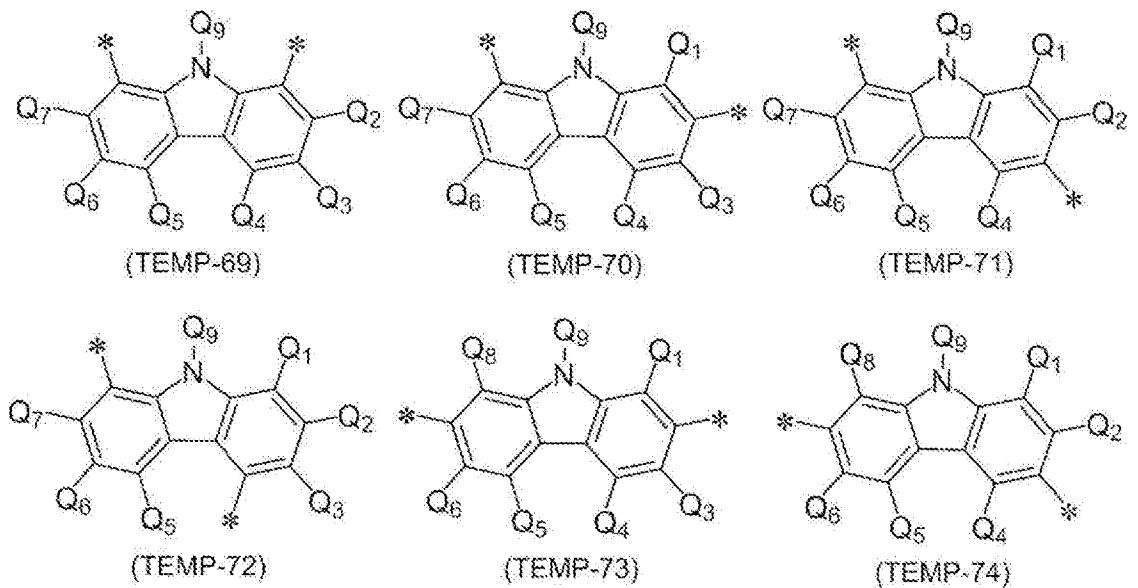


[0085] 前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、 $Q_1 \sim Q_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

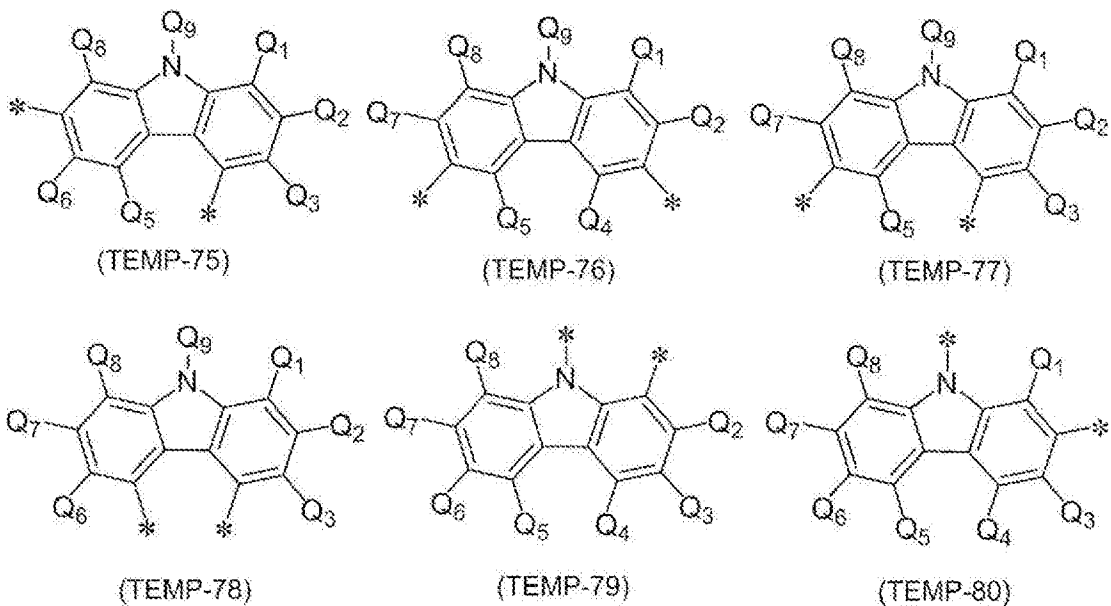
前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、* は、結合部位を表す。

[0086] 本明細書に記載の置換もしくは無置換の2価の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-102) のいずれかの基である。

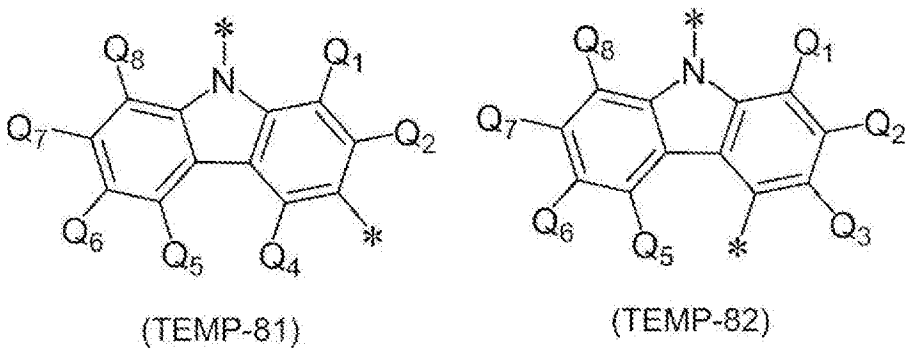
[0087] [化16]



[0088] [化17]



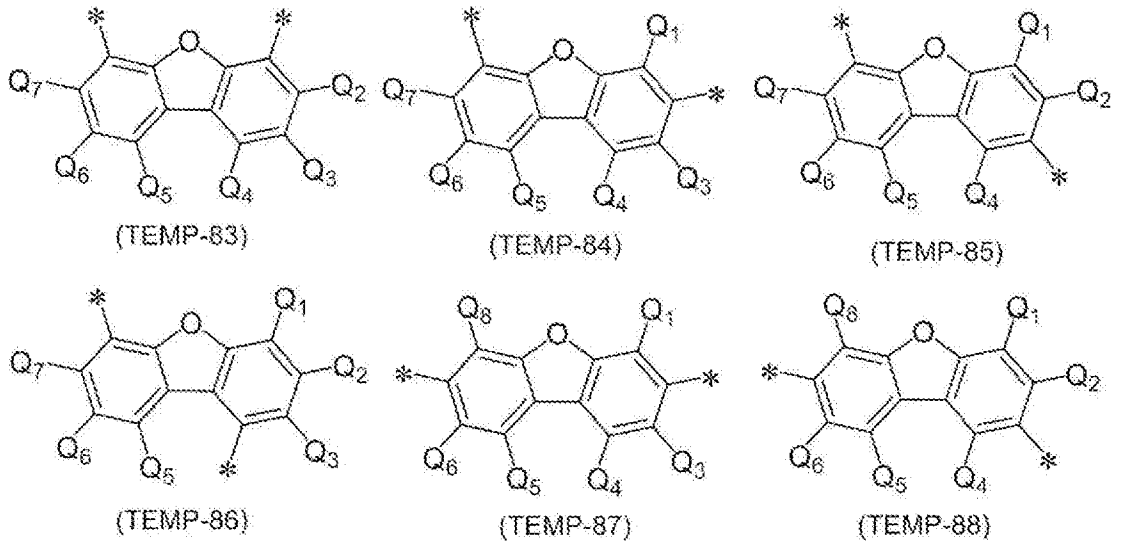
[0089] [化18]



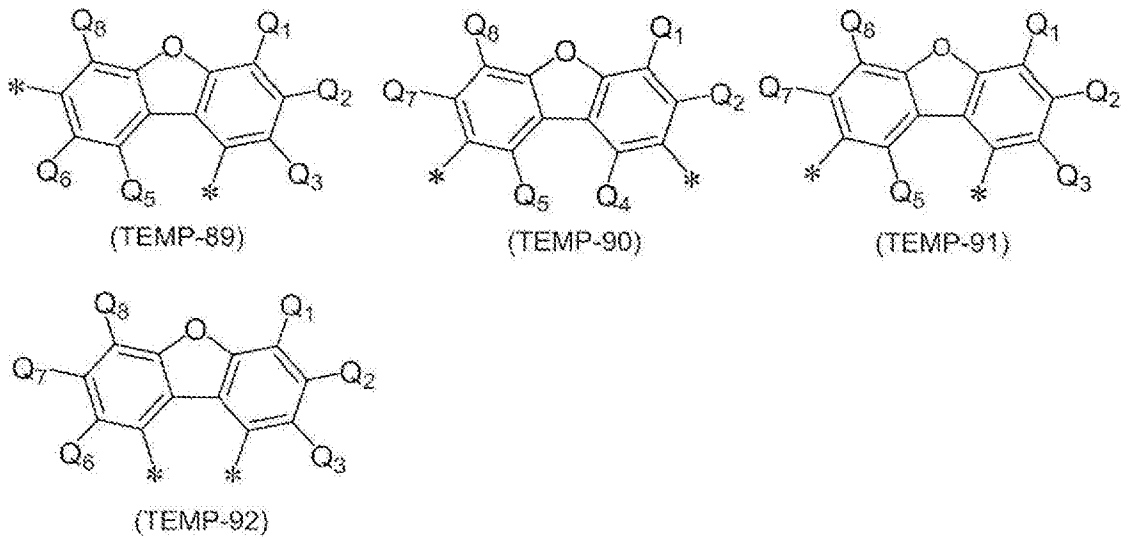
[0090] 前記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-82) 中、 $Q_1 \sim Q_9$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

[0091]

[化19]

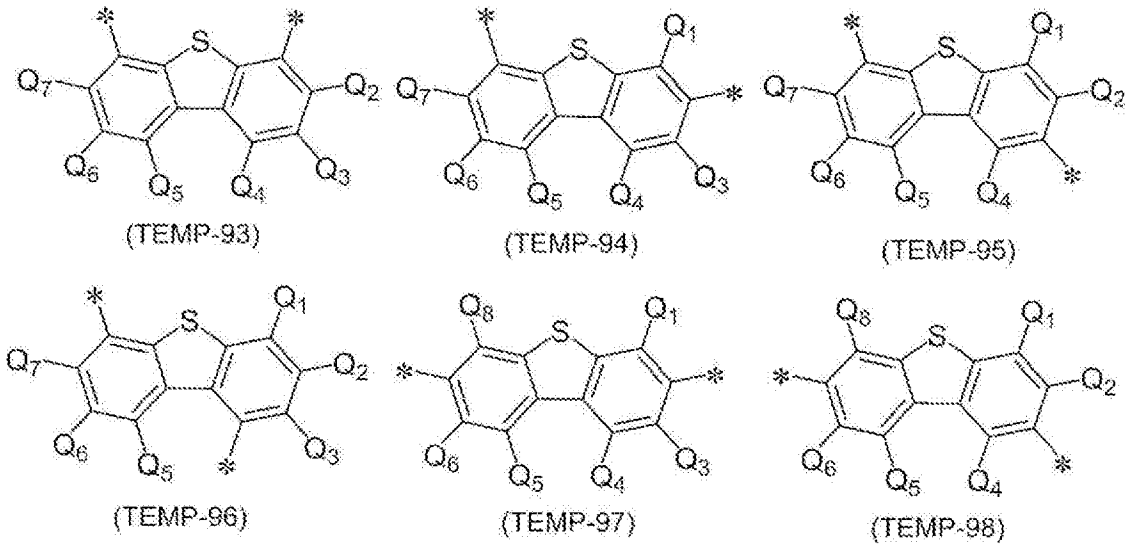


[0092] [化20]

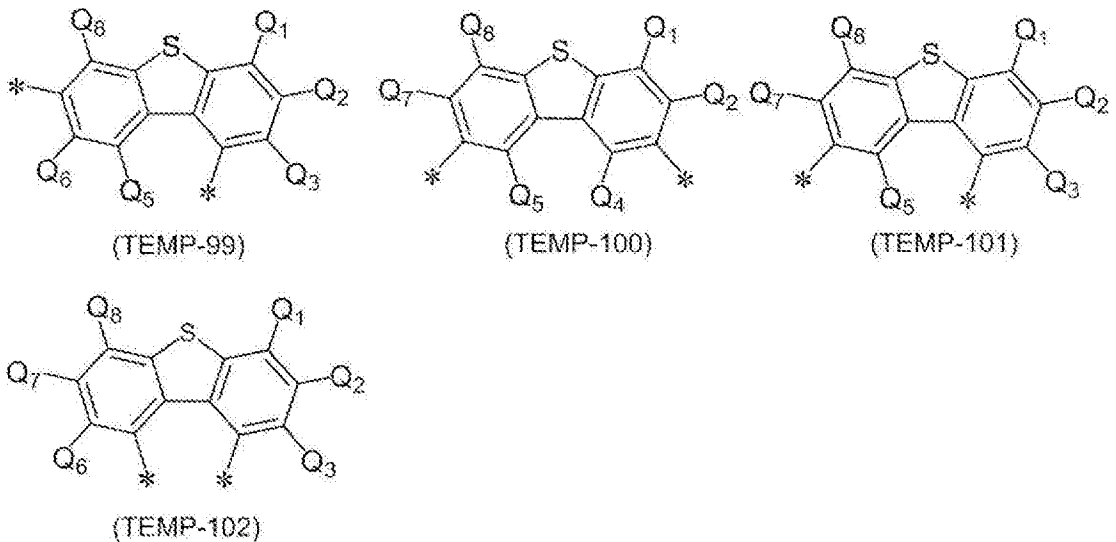


[0093]

[化21]



[0094] [化22]



[0095] 前記一般式 (TEMP-83) ~ (TEMP-102) 中、 $Q_1 \sim Q_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

[0096] 以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

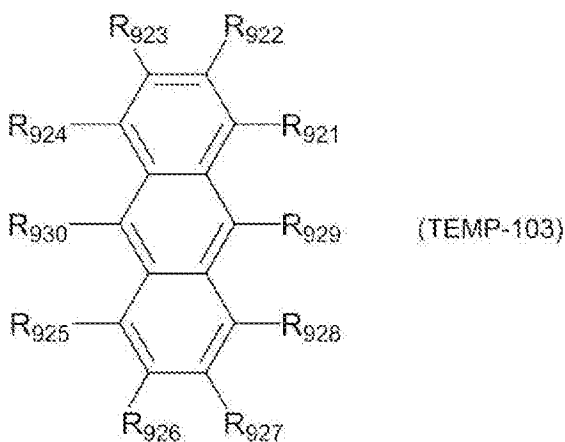
[0097] ・「結合して環を形成する場合」

本明細書において、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず」という場合は、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もし

くは無置換の単環を形成する」場合と、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合と、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合しない」場合と、を意味する。

本明細書における、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合（以下、これらの場合をまとめて「結合して環を形成する場合」と称する場合がある。）について、以下、説明する。母骨格がアントラセン環である下記一般式（TEMP-103）で表されるアントラセン化合物の場合を例として説明する。

[0098] [化23]

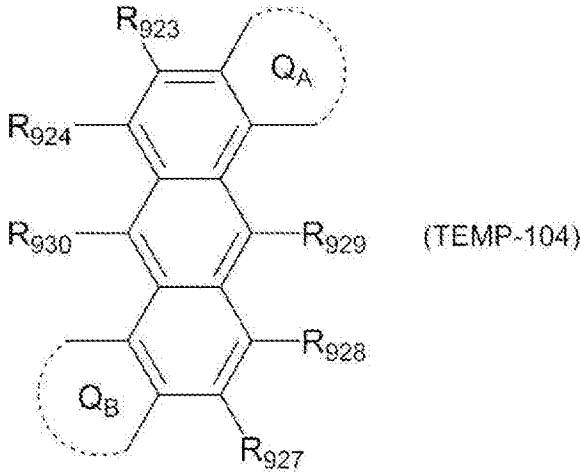


[0099] 例えば、 $R_{921} \sim R_{930}$ のうちの「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、環を形成する」場合において、1組となる隣接する2つ以上からなる組とは、 R_{921} と R_{922} との組、 R_{922} と R_{923} との組、 R_{923} と R_{924} との組、 R_{924} と R_{930} との組、 R_{930} と R_{925} との組、 R_{925} と R_{926} との組、 R_{926} と R_{927} との組、 R_{927} と R_{928} との組、 R_{928} と R_{929} との組、並びに R_{929} と R_{921} との組である。

[0100] 上記「1組以上」とは、上記隣接する2つ以上からなる組の2組以上が同時に環を形成してもよいことを意味する。例えば、 R_{921} と R_{922} とが互いに

結合して環 Q_A を形成し、同時に R_{925} と R_{926} とが互いに結合して環 Q_B を形成した場合は、前記一般式(TEMP-103)で表されるアントラセン化合物は、下記一般式(TEMP-104)で表される。

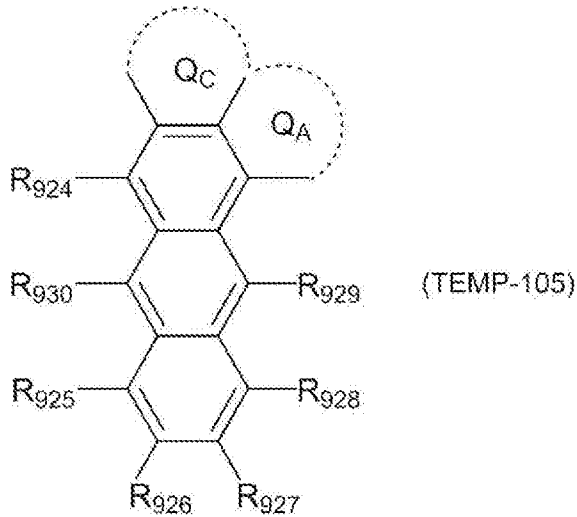
[0101] [化24]



[0102] 「隣接する2つ以上からなる組」が環を形成する場合とは、前述の例のように隣接する「2つ」からなる組が結合する場合だけではなく、隣接する「3つ以上」からなる組が結合する場合も含む。例えば、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して環 Q_A を形成し、かつ、 R_{922} と R_{923} とが互いに結合して環 Q_C を形成し、互いに隣接する3つ(R_{921} 、 R_{922} 及び R_{923})からなる組が互いに結合して環を形成して、アントラセン母骨格に縮合する場合を意味し、この場合、前記一般式(TEMP-103)で表されるアントラセン化合物は、下記一般式(TEMP-105)で表される。下記一般式(TEMP-105)において、環 Q_A 及び環 Q_C は、 R_{922} を共有する。

[0103]

[化25]



[0104] 形成される「単環」、又は「縮合環」は、形成された環のみの構造として、飽和の環であっても不飽和の環であってもよい。「隣接する2つからなる組の1組」が「単環」、又は「縮合環」を形成する場合であっても、当該「単環」、又は「縮合環」は、飽和の環、又は不飽和の環を形成することができる。例えば、前記一般式 (TEMP-104) において形成された環 Q_A 及び環 Q_B は、それぞれ、「単環」又は「縮合環」である。また、前記一般式 (TEMP-105) において形成された環 Q_A 、及び環 Q_C は、「縮合環」である。前記一般式 (TEMP-105) の環 Q_A と環 Q_C とは、環 Q_A と環 Q_C とが縮合することによって縮合環となっている。前記一般式 (TEMP-104) の環 Q_A がベンゼン環であれば、環 Q_A は、単環である。前記一般式 (TEMP-104) の環 Q_A がナフタレン環であれば、環 Q_A は、縮合環である。

[0105] 「不飽和の環」には、芳香族炭化水素環、芳香族複素環の他、環構造中に不飽和結合、即ち、二重結合及び／又は三重結合を有する脂肪族炭化水素環（例えば、シクロヘキセン、シクロヘキサジエン等）、及び不飽和結合を有する非芳香族複素環（例えば、ジヒドロピラン、イミダゾリン、ピラゾリン、キノリジン、インドリン、イソインドリン等）が含まれる。「飽和の環」には、不飽和結合を有しない脂肪族炭化水素環、又は不飽和結合を有しない非芳香族複素環が含まれる。

芳香族炭化水素環の具体例としては、具体例群G 1において具体例として挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

芳香族複素環の具体例としては、具体例群G 2において具体例として挙げられた芳香族複素環基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

脂肪族炭化水素環の具体例としては、具体例群G 6において具体例として挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

「環を形成する」とは、母骨格の複数の原子のみ、あるいは母骨格の複数の原子とさらに1以上の任意の原子で環を形成することを意味する。例えば、前記一般式(TEMP-104)に示す、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して形成された環 Q_A は、 R_{921} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、 R_{922} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、1以上の任意の原子とで形成する環を意味する。具体例としては、 R_{921} と R_{922} とで環 Q_A を形成する場合において、 R_{921} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、 R_{922} とが結合するアントラセン骨格の炭素原子と、4つの炭素原子とで単環の不飽和の環を形成する場合、 R_{921} と R_{922} とで形成する環は、ベンゼン環である。

[0106] ここで、「任意の原子」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、炭素原子、窒素原子、酸素原子、及び硫黄原子からなる群から選択される少なくとも1種の原子である。任意の原子において(例えば、炭素原子、又は窒素原子の場合)、環を形成しない結合は、水素原子等で終端されてもよい、後述する「任意の置換基」で置換されてもよい。炭素原子以外の任意の原子を含む場合、形成される環は複素環である。

単環または縮合環を構成する「1以上の任意の原子」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは2個以上15個以下であり、より好ましくは3個以上12個以下であり、さらに好ましくは3個以上5個以下である。

本明細書に別途記載のない限り、「単環」、及び「縮合環」のうち、好ましくは「単環」である。

本明細書に別途記載のない限り、「飽和の環」、及び「不飽和の環」のうち、好ましくは「不飽和の環」である。

本明細書に別途記載のない限り、「単環」は、好ましくはベンゼン環である。

本明細書に別途記載のない限り、「不飽和の環」は、好ましくはベンゼン環である。

「隣接する2つ以上からなる組の1組以上」が、「互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、又は「互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、母骨格の複数の原子と、1個以上15個以下の炭素原子、窒素原子、酸素原子、及び硫黄原子からなる群から選択される少なくとも1種の原子とからなる置換もしくは無置換の「不飽和の環」を形成する。

[0107] 上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基は、例えば後述する「任意の置換基」である。上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基である。

上記の「飽和の環」、又は「不飽和の環」が置換基を有する場合の置換基は、例えば後述する「任意の置換基」である。上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基である。

以上が、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合（「結合して環を形成する場合」）についての説明である。

[0108] ・「置換もしくは無置換の」という場合の置換基

本明細書における一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基（本明細書において、「任意の置換基」と呼ぶことがある。）は、例えば、
無置換の炭素数1～50のアルキル基、

無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、
無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、
無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、
-S i (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃)、
-O- (R₉₀₄)、
-S- (R₉₀₅)、
-N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、
ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、
無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、及び
無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基
からなる群から選択される基等であり、

ここで、R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、
水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基である。

R₉₀₁が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R₉₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₂が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R₉₀₂は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₃が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R₉₀₃は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₄が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R₉₀₄は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₅が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R₉₀₅は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₆が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R₉₀₆は、互いに同一であるか

、又は異なり、

R_{907} が2個以上存在する場合、2個以上の R_{907} は、互いに同一であるか又は異なる。

[0109] 一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、

炭素数1～50のアルキル基、
環形成炭素数6～50のアリール基、及び
環形成原子数5～50の複素環基
からなる群から選択される基である。

[0110] 一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、

炭素数1～18のアルキル基、
環形成炭素数6～18のアリール基、及び
環形成原子数5～18の複素環基
からなる群から選択される基である。

[0111] 上記任意の置換基の各基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基の具体例である。

[0112] 本明細書において別途記載のない限り、隣接する任意の置換基同士で、「飽和の環」、又は「不飽和の環」を形成してもよく、好ましくは、置換もしくは無置換の飽和の5員環、置換もしくは無置換の飽和の6員環、置換もしくは無置換の不飽和の5員環、又は置換もしくは無置換の不飽和の6員環を形成し、より好ましくは、ベンゼン環を形成する。

本明細書において別途記載のない限り、任意の置換基は、さらに置換基を有してもよい。任意の置換基がさらに有する置換基としては、上記任意の置換基と同様である。

[0113] 本明細書において、「AA～BB」を用いて表される数値範囲は、「AA～BB」の前に記載される数値AAを下限值とし、「AA～BB」の後に記載される数値BBを上限值として含む範囲を意味する。

[0114] [有機EL素子]

本発明の一態様に係る有機EL素子（以下、「本発明の有機EL素子」ともいう。）は、後述する第1の有機EL素子と、第2の有機EL素子と、第3の有機EL素子とを包含する概念である。

本発明の第1の有機EL素子は、後述する構成を備えることで、より高い素子性能を実現することが可能である。具体的には、駆動電圧が低く、かつ低電流密度から高電流密度まで高効率な有機EL素子を実現することができる。

[0115] 本発明の第2の有機EL素子は、後述する構成を備えることで、より高い素子性能を実現することが可能である。具体的には、駆動電圧が低く、かつ低電流密度においても高効率な有機EL素子を実現することができる。

[0116] 一実施形態において、本発明の一態様に係る有機EL素子は、第1の有機EL素子である。

一実施形態において、本発明の一態様に係る有機EL素子は、第2の有機EL素子である。

一実施形態において、本発明の一態様に係る有機EL素子は、第3の有機EL素子である。

[0117] [第1の有機EL素子]

本発明の一態様に係る第1の有機EL素子（以下、「本発明の第1の有機EL素子」ともいう。）は、陰極と、陽極と、前記陰極と前記陽極との間に配置された1又は2以上の有機層と、を有し、前記1又は2以上の有機層のうち少なくとも1層は、第1成分と、第2成分と、を含む。

前記第1成分は、後述する式(1)で表される化合物である。

前記第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される。

[0118] 本発明の第1の有機EL素子は、上記の構成を備えることで、より高い素

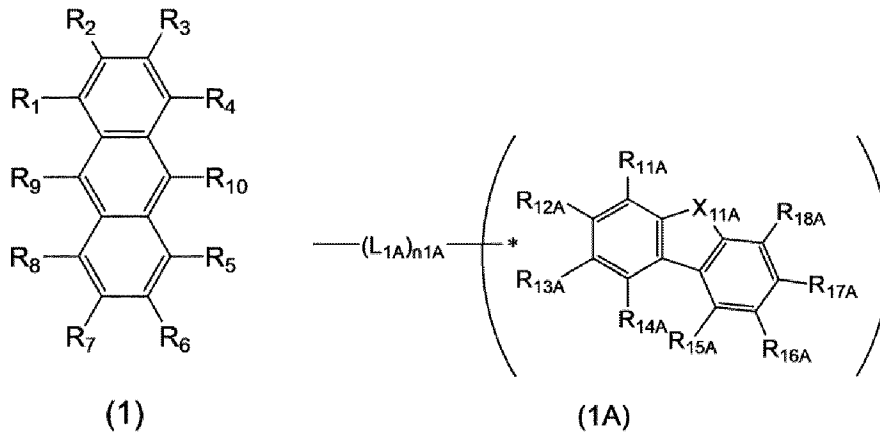
子性能を実現することが可能である。具体的には、駆動電圧が低く、かつ低電流密度から高電流密度まで高効率な有機EL素子を実現することができる。

[0119] なお、各成分の定義から自明であるが、第1成分と第2成分とは異なる。
以下、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子の各構成について説明する。

[0120] (第1成分)

本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分は、下記式(1)で表される化合物である。

[化26]



[式(1)中、

$R_1 \sim R_{10}$ のうち少なくとも1つは、式(1A)で表される基である。

前記式(1A)で表される基ではない $R_1 \sim R_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基Aである。ただし、 $R_1 \sim R_{10}$ のうち少なくとも3つは、それぞれ独立に、前記式(1A)で表される基、置換基A、又は重水素原子である水素原子である。

式(1A)中、

L_{1A} は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基である。

n_{1A} は0～3の整数である。

n_{1A} が0である場合、 $(L_{1A})_{n_{1A}}$ は単結合である。

n_{1A} が2又は3である場合、複数の L_{1A} は互いに直列状に連結し、括弧内の構造は、アントラセン骨格から最も離れた L_{1A} に結合する。複数の L_{1A} は同一でもよく、異なってもよい。

X_{11A} は、 $C(R_{21A})(R_{22A})$ 、 $N(R_{23A})$ 、 O 、又は S である。

$R_{11A} \sim R_{18A}$ のうち隣接する2つ以上からなる1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は前記環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の単環が形成される場合、当該単環を構成する原子のうち1つが L_{1A} と結合するか、又は、当該単環の形成に寄与しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 、及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

前記置換もしくは無置換の縮合環が形成される場合、当該縮合環を構成する原子のうち1つが L_{1A} と結合するか、又は、当該縮合環の形成に寄与しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 、及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

前記単環及び縮合環が形成されない場合、 $R_{11A} \sim R_{18A}$ 及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つは L_{1A} との結合を表す。

前記 L_{1A} との結合を表さず、かつ前記環を形成しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 A である。

式(1A)で表される基が2以上存在する場合、2以上の式(1A)で表される基は互いに同一でもよく、異なってもよい。

置換基 A は、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

—O—(R_{904})、

—S— (R₉₀₅)、

—N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、

ハロゲン原子、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は

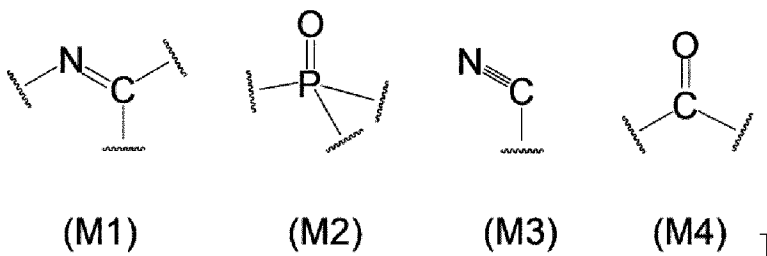
置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

置換基 A が 2 以上存在する場合、2 以上の置換基 A は互いに同一でもよく、異なってもよい。

R₉₀₁～R₉₀₇が 2 以上存在する場合、2 以上の R₉₀₁～R₉₀₇は互いに同一でもよく、異なってもよい。

ただし、前記式 (1) で表される化合物は、下記式 (M1) で表される構造、下記式 (M2) で表される構造、下記式 (M3) で表される構造、及び下記式 (M4) で表される構造を分子内に含まない。

[化27]



[0121] 式 (M1)～式 (M4) で表される構造 (電子受容性の構造) を分子内に含む、従来、有機 EL 素子の電子輸送材料等として用いられてきた化合物は、低電流密度において有機 EL 素子の外部量子効率 (EQE) を低下させてしまうものが多い。

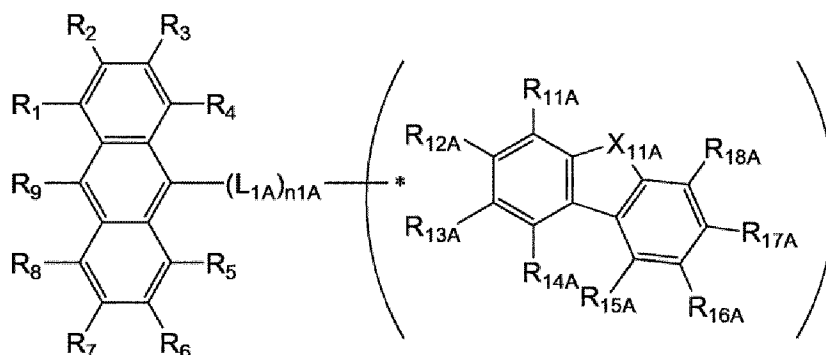
[0122] 本発明者らは、上述した従来材料とは異なる、式 (M1)～式 (M4)

で表される構造を分子内に含まない化合物であって、アントラセン骨格上に、所定の基又は重水素原子を合わせて少なくとも3つ有する化合物（本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分）を、後述する第2成分と組み合わせて用いると、電子輸送材料として有用であり、さらに、当該材料を用いた有機EL素子は、駆動電圧が低く、かつ、低電流密度から高電流密度までEQEが低下しないことを見出した。

低電流密度領域においてEQEが低下しないメカニズムの詳細は定かではないが、上述した電子受容性の構造を分子内に含む化合物を用いた場合、高電流密度領域では電圧の影響が大きく、当該構造がEQEに与える影響は小さくなるが、低電流密度領域では当該構造の影響が大きく、電子が過剰となってキャリアバランスが崩れてEQEが低下すると考えられる。逆に、上述した電子受容性の構造を分子内に含まない本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分を用いた場合は、低電流密度から高電流密度までキャリアバランスが維持され、EQEが低下しないと考えられる。

[0123] 式(1)において、 $R_1 \sim R_{10}$ のうち少なくとも1つは、式(1A)で表される基である。例えば、 R_{10} が、式(1A)で表される基である場合、式(1)で表される化合物は、下記式(E×1)で表される。

[化28]



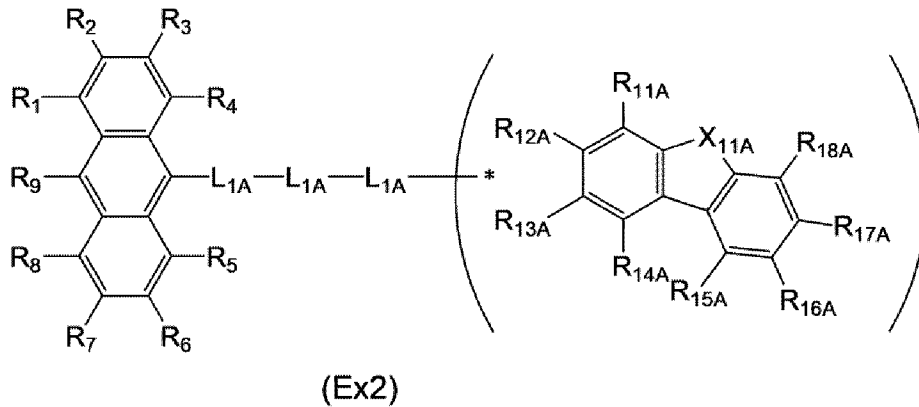
(Ex1)

[0124] 式(1)において、 $R_1 \sim R_{10}$ のうち少なくとも3つは、それぞれ独立に、前記式(1A)で表される基、置換基A、又は重水素原子である水素原子である。換言すれば、 $R_1 \sim R_{10}$ のうち、軽水素原子である水素原子は、7つ以

下である。

[0125] 次に、「 n_{1A} が2又は3である場合、複数の L_{1A} は互いに直列状に連結し、括弧内の構造は、アントラセン骨格から最も離れた L_{1A} に結合する」について説明する。例えば、 R_{10} が、式(1A)で表される基であり、 n_{1A} が3である場合、式(1)で表される化合物は、下記式(E×2)で表される。

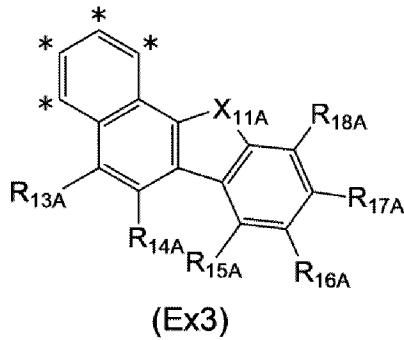
[化29]



[0126] 式(1A)において、 $R_{11A} \sim R_{18A}$ のうち隣接する2つ以上からなる1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する場合、当該単環を構成する原子のうち1つが L_{1A} と結合するか、又は、当該単環の形成に寄与しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 、及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

[0127] 「当該単環を構成する原子のうち1つが L_{1A} と結合する」場合について説明する。例えば、 R_{11A} と R_{12A} の組が、互いに結合して、無置換のベンゼン環を形成する場合、式(1A)で表される基は、下記式(E×3)で表される。式(E×3)において、当該ベンゼン環を構成する4つの炭素原子(*が付された炭素原子)のうち1つが L_{1A} と結合する。

[化30]



[0128] 次に、「当該単環の形成に寄与しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 、及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す」場合について説明する。 R_{11A} と R_{12A} の組が、互いに結合して、無置換のベンゼン環を形成する場合、上記式(E×3)において、 $R_{13A} \sim R_{18A}$ 及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

X_{11A} がC(R_{21A})(R_{22A})である場合、 $R_{13A} \sim R_{18A}$ 及び $R_{21A} \sim R_{22A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

X_{11A} がN(R_{23A})である場合、 $R_{13A} \sim R_{18A}$ 及び R_{23A} のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

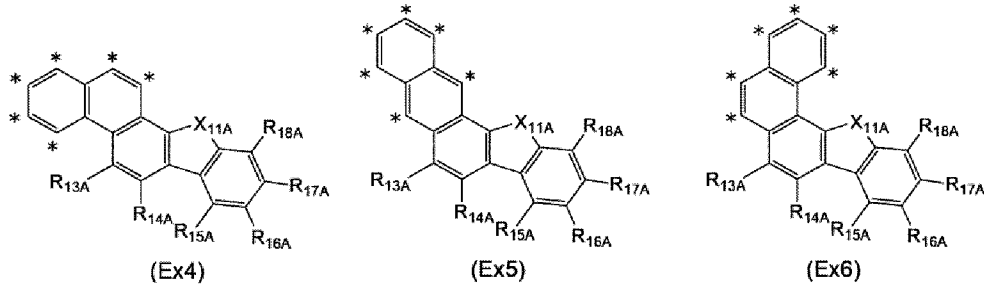
X_{11A} がO又はSである場合、 $R_{13A} \sim R_{18A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

[0129] 式(1A)において、 $R_{11A} \sim R_{18A}$ のうち隣接する2つ以上からなる1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する場合、当該縮合環を構成する原子のうち1つが L_{1A} と結合するか、又は、当該縮合環の形成に寄与しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 、及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

[0130] 「当該縮合環を構成する原子のうち1つが L_{1A} と結合する」場合について説明する。例えば、 R_{11A} と R_{12A} の組が、互いに結合して、無置換のナフタレン環を形成する場合、式(1A)で表される基は、下記式(E×4)～(E×6)で表される。式(E×4)～(E×6)において、当該ナフタレン環を構成する6つの炭素原子(*が付された炭素原子)のうち1つが L_{1A} と

結合する。

[化31]



[0131] 次に、「当該縮合環の形成に寄与しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 、及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す」場合について説明する。 R_{11A} と R_{12A} の組が、互いに結合して、無置換のナフタレン環を形成する場合、上記式(E x 4) ~ (E x 6)において、 $R_{13A} \sim R_{18A}$ 及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

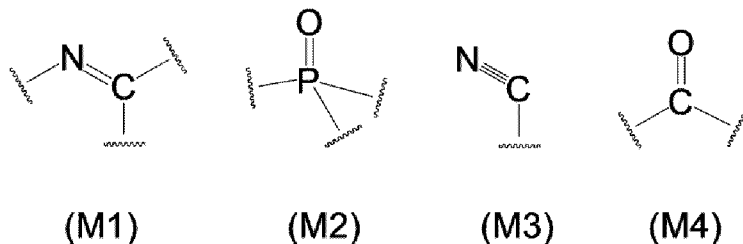
X_{11A} がC(R_{21A})(R_{22A})である場合、 $R_{13A} \sim R_{18A}$ 及び $R_{21A} \sim R_{22A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

X_{11A} がN(R_{23A})である場合、 $R_{13A} \sim R_{18A}$ 及び R_{23A} のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

X_{11A} がO又はSである場合、 $R_{13A} \sim R_{18A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

[0132] 「下記式(M1) ~ 式(M4)で表される構造を分子内に含まない」について説明する。

[化32]



[0133] 式(M1) ~ 式(M4)において、結合を終端している波線は、当該波線の先に何らかの原子が存在していることを意味している。例えば、当該結合は、水素原子で終端されていてもよく、2価以上の原子価を取り得る原子(

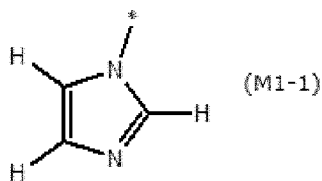
例えば、炭素原子、窒素原子、酸素原子、又は硫黄原子等)との結合であってもよい。

[0134] 「式 (M1) ~ 式 (M4) で表される構造を分子内に含まない」とは、分子内のあらゆる部位において、式 (M1) で表される構造を含まず、式 (M2) で表される構造を含まず、式 (M3) で表される構造を含まず、かつ式 (M4) で表される構造を含まないことを意味し、例えば当該構造を置換基として有さず、また、母骨格中にも当該構造を含まない。

また、式 (M1) で表される構造、式 (M2) で表される構造、式 (M3) で表される構造、及び式 (M4) で表される構造のいずれか1つでも含む化合物は、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分には該当しない。

[0135] 式 (M1) で表される構造を含む置換基としては、例えば、下記式 (M1-1) で表される置換基 (無置換のイミダゾリル基) が挙げられる。

[化33]



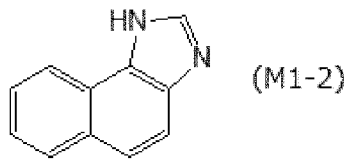
式 (M1-1) 中、*は、当該置換基の結合位置を表す。

[0136] 式 (M1-1) 中、式 (M1) における炭素原子は、式 (M1-1) のイミダゾール骨格の2位の炭素原子に対応し、式 (M1) における窒素原子は、式 (M1-1) のイミダゾール骨格の3位の窒素原子に対応する。すなわち、式 (M1) における炭素原子から伸びる2本の結合を終端している2本の波線は、式 (M1-1) において当該炭素原子に結合する水素原子と、式 (M1-1) のイミダゾール骨格の1位の窒素原子とを表し、式 (M1) における窒素原子から伸びる結合を終端している波線は、式 (M1-1) のイミダゾール骨格の4位の炭素原子を表す。

[0137] 従って、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分は、イミダゾリル基及びイミダゾリル骨格を有する基を有さない。

[0138] また、式 (M1) で表される構造を母骨格に含む化合物としては、例えば、下記式 (M1-2) で表される化合物が挙げられる。

[化34]



[0139] 式 (M1-2) 中、式 (M1) における炭素原子は、式 (M1-2) の 1H-ナフト [1, 2-d] イミダゾール骨格の 2 位の炭素原子に対応し、式 (M1) における窒素原子は、式 (M1-2) の 1H-ナフト [1, 2-d] イミダゾール骨格の 3 位の窒素原子に対応する。すなわち、式 (M1) における炭素原子から伸びる 2 本の結合を終端している 2 本の波線は、式 (M1-2) において当該炭素原子に結合する水素原子 (上記式 (M1-2) では省略) と、式 (M1-2) の 1H-ナフト [1, 2-d] イミダゾール骨格の 1 位の窒素原子とを表し、式 (M1) における窒素原子から伸びる結合を終端している波線は、(M1-2) の 1H-ナフト [1, 2-d] イミダゾール骨格の 4 位の炭素原子を表す。

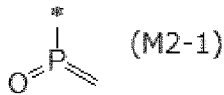
[0140] 従って、本発明の一態様に係る第 1 の有機 EL 素子における第 1 成分は、イミダゾール骨格を有さない。

[0141] ここで、式 (M1) から自明であるが、窒素原子から伸びる結合と炭素原子から伸びる結合の先にはそれぞれ別個の原子が存在し、当該窒素原子から伸びる結合と当該炭素原子から伸びる結合が単一 (同一) になることはない。換言すれば、窒素原子から伸びる結合を終端している波線の先に存在する原子は、当該窒素原子と二重結合で結合している炭素原子にはなりえず、炭素原子から伸びる結合を終端している波線の先に存在する原子は、当該炭素原子と二重結合で結合している窒素原子にはなりえない。すなわち、窒素原子と炭素原子とが三重結合で結合しているシアノ基は、式 (M1) で表される構造には該当しない。なお、定義から自明であるが、シアノ基は、式 (M3) で表される構造に該当する。

[0142] 式 (M2) で表される構造はホスフィンオキシド基に由来するものであり、すなわち、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分は、ホスフィンオキシド基を含まない。

[0143] ここで、式 (M2) から自明であるが、リン原子から伸びる結合を終端している2以上の波線は、当該2以上の波線の先に共通する1つの原子が存在していることを意味することはない。例えば、リン原子が1つの炭素原子と二重結合で結合する場合を含まない。すなわち、下記 (M2-1) で表される基 (メチリデンホスホリルに由来する1価の基) は、式 (M2) で表される構造には該当しないため、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分は、式 (M2-1) で表される構造を有してもよい。

[化35]



式 (M2-1) 中、*は、当該置換基の結合位置を表す。

[0144] 式 (M3) で表される構造はシアノ基に由来するものであり、すなわち、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分は、シアノ基を含まない。

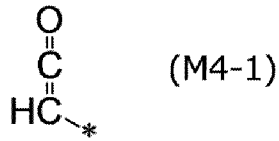
[0145] ここで、式 (M3) から自明であるが、炭素原子から伸びる結合を終端している波線は、当該波線の先に1つの原子が存在していることを意味する。

[0146] 式 (M4) で表される構造はカルボニル基に由来するものであり、すなわち、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分は、カルボニル基を含まない。

[0147] ここで、式 (M4) から自明であるが、1つの炭素原子から伸びる結合を終端している2つの波線は、当該2つの波線の先に共通する1つの原子が存在していることを意味することはない。例えば、1つの炭素原子が1つの炭素原子と二重結合で結合する場合を含まない。すなわち、下記 (M4-1) で表される基 (エテノンに由来する1価の基) は、式 (M4) で表される構造には該当しないため、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における

第1成分は、式(M4-1)で表される構造を有してもよい。

[化36]



式(M4-1)中、*は、当該置換基の結合位置を表す。

[0148] なお、定義から自明であるが、式(1)において、「置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基」である置換基A及び $R_{901} \sim R_{907}$ は、式(M1)～式(M4)で表される構造を含まない。

式(1)において、「置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基」である L_{1A} は、式(M1)～式(M4)で表される構造を含まない。

式(1A)において、「 $R_{11A} \sim R_{18A}$ のうち隣接する2つ以上からなる1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合、当該単環又は縮合環は、式(M1)～式(M4)で表される構造を含まない。

式(1)及び式(1A)において、「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、式(M1)～式(M4)で表される構造を含まない。

[0149] 一実施形態において、 $R_1 \sim R_{10}$ のうち少なくとも3つは、それぞれ独立に、前記式(1A)で表される基、又は置換基Aである。

[0150] 一実施形態において、 $R_1 \sim R_{10}$ のうち2つは、それぞれ独立に、置換基Aであり、他の $R_1 \sim R_{10}$ のうち1つは、前記式(1A)で表される基である。

[0151] 一実施形態において、 R_9 及び R_{10} は、それぞれ独立に、前記式(1A)で表される基、又は置換基Aである。

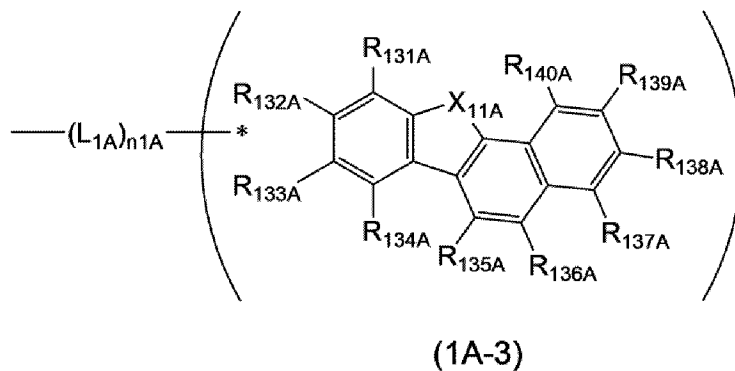
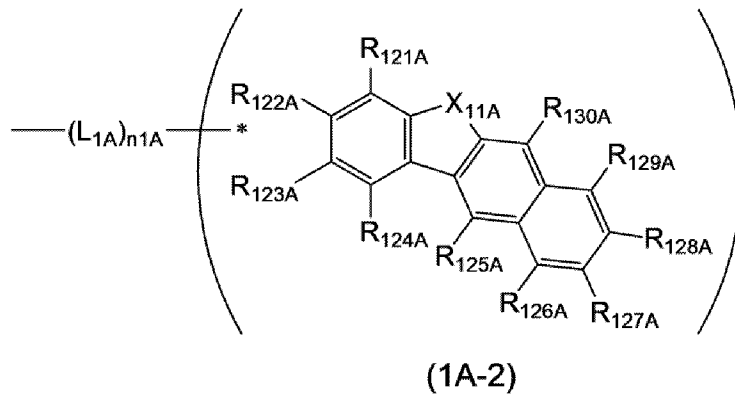
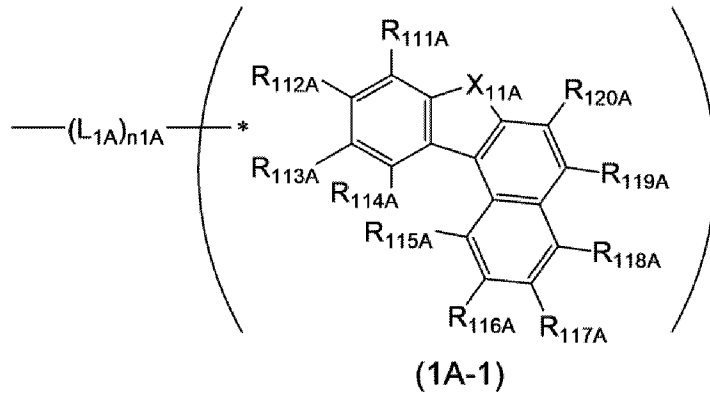
[0152] 一実施形態において、 R_9 及び R_{10} の一方は、前記式(1A)で表される基であり、 R_9 及び R_{10} の他方は、置換基Aである。

[0153] 一実施形態において、 R_2 、 R_9 、及び R_{10} は、それぞれ独立に、前記式(1A)で表される基、又は置換基Aである。

[0154] 一実施形態において、 R_9 及び R_{10} の一方は、前記式(1A)で表される基であり、 R_9 及び R_{10} の他方及び R_2 は、それぞれ独立に、置換基Aである。

[0155] 一実施形態において、前記式(1A)で表される基は、下記式(1A-1)～(1A-3)のいずれかで表される基である。

[化37]



[式(1A-1)～(1A-3)中、 L_{1A} 及び n_{1A} は、式(1)で定義した通りである。

X_{11A} は、 $C(R_{21A})(R_{22A})$ 、 $N(R_{23A})$ 、 O 、又は S である。

$R_{21A} \sim R_{23A}$ 、 $R_{111A} \sim R_{120A}$ 、 $R_{121A} \sim R_{130A}$ 、及び $R_{131A} \sim R_{140A}$

A のうち1つは、 L_{1A} との結合を表す。

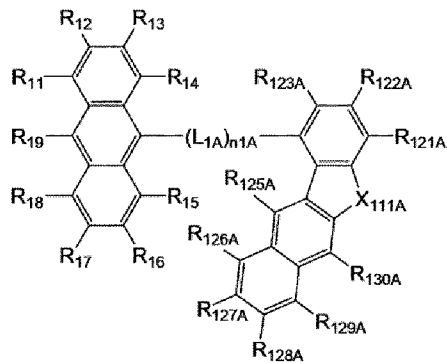
前記 L_{1A} との結合を表さない $R_{21A} \sim R_{23A}$ 、 $R_{111A} \sim R_{120A}$ 、 $R_{121A} \sim R_{130A}$ 、及び $R_{131A} \sim R_{140A}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基 A である。

置換基 A は、式(1)で定義した通りである。]

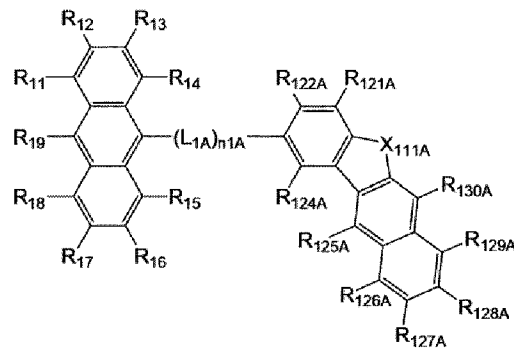
[0156] 一実施形態において、 X_{11A} は、 O 又は S である。

[0157] 一実施形態において、前記式(1)で表される化合物は、下記式(1-1) ~ (1-3)のいずれかで表される化合物である。

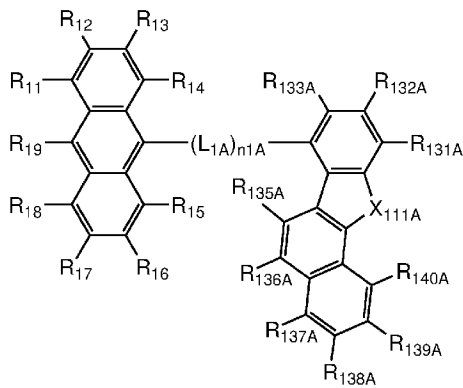
[化38]



(1-1)



(1-2)



(1-3)

[式(1-1) ~ (1-3)中、 L_{1A} 及び n_{1A} は、式(1)で定義した通りである。

X_{111A} は、 O 又は S である。

R_{12} 及び R_{19} は、それぞれ独立に、置換基 A である。

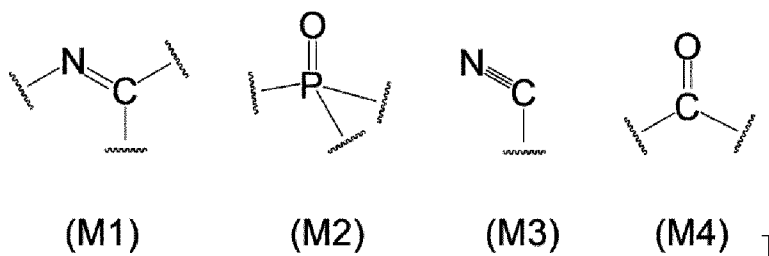
R_{11} 、 $R_{13} \sim R_{18}$ 、 $R_{121A} \sim R_{140A}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は

置換基Aである。

置換基Aは、式(1)で定義した通りである。

ただし、前記式(1-1)～(1-3)のいずれかで表される化合物は、下記式(M1)で表される構造、下記式(M2)で表される構造、下記式(M3)で表される構造、及び下記式(M4)で表される構造を分子内に含まない。

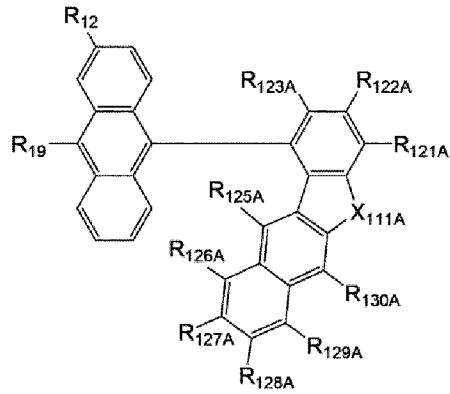
[化39]



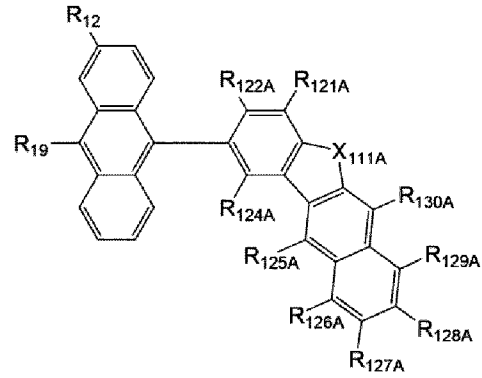
[0158] 一実施形態において、 L_{1A} は、単結合である。

[0159] 一実施形態において、前記式(1)で表される化合物は、下記式(1-1)～(1-41)のいずれかで表される化合物である。

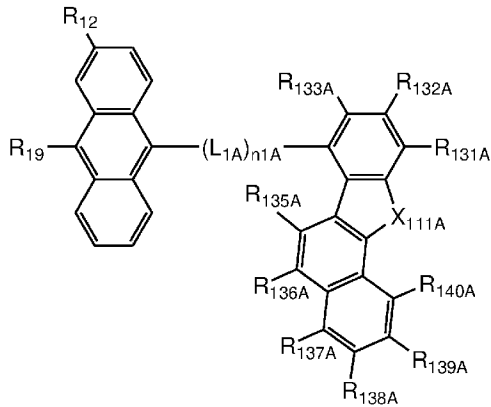
[化40]



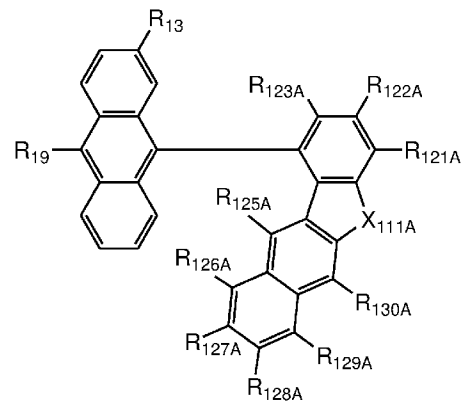
(1-11)



(1-21)



(1-31)



(1-41)

[式(1-11)～(1-41)中、

X_{111A} は、O又はSである。

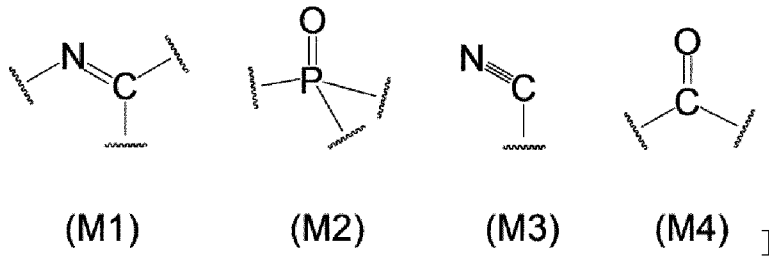
R_{12} 、 R_{13} 、及び R_{19} は、それぞれ独立に、置換基Aである。

$R_{121A} \sim R_{140A}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基Aである。

置換基Aは、式(1)で定義した通りである。

ただし、前記式(1-11)～(1-41)のいずれかで表される化合物は、下記式(M1)で表される構造、下記式(M2)で表される構造、下記式(M3)で表される構造、及び下記式(M4)で表される構造を分子内に含まない。

[化41]



[0160] 一実施形態において、式(1)における「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、

炭素数1～50のアルキル基、

炭素数1～50のハロアルキル基、

炭素数2～50のアルケニル基、

炭素数2～50のアルキニル基、

環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

炭素数1～50のアルコキシ基、

炭素数1～50のアルキルチオ基、

環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、

環形成炭素数6～50のアリールチオ基、

炭素数7～50のアラルキル基、

—Si(R₄₁)(R₄₂)(R₄₃)、

—S(=O)₂R₄₆、

—Ge(R₄₉)(R₅₀)(R₅₁)、

—N(R₅₂)(R₅₃)、

ヒドロキシ基、

ハロゲン原子、

ニトロ基、

環形成炭素数6～50のアリール基、及び

環形成原子数5～50の1価の複素環基からなる群から選択される。

R₄₁～R₄₃、R₄₆、及びR₄₉～R₅₃は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数1～50のアルキル基、環形成炭素数6～50のアリール基、又は環形成

原子数5～50の1価の複素環基である。R₄₁～R₄₃、R₄₆、及びR₄₉～R₅₃が2以上存在する場合、2以上のR₄₁～R₄₃、R₄₆、及びR₄₉～R₅₃のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。

[0161] 一実施形態において、式(1)における「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、

炭素数1～50のアルキル基、

環形成炭素数6～50のアリール基、及び

環形成原子数5～50の1価の複素環基からなる群から選択される。

[0162] 一実施形態において、式(1)における「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、

炭素数1～18のアルキル基、

環形成炭素数6～18のアリール基、及び

環形成原子数5～18の1価の複素環基からなる群から選択される。

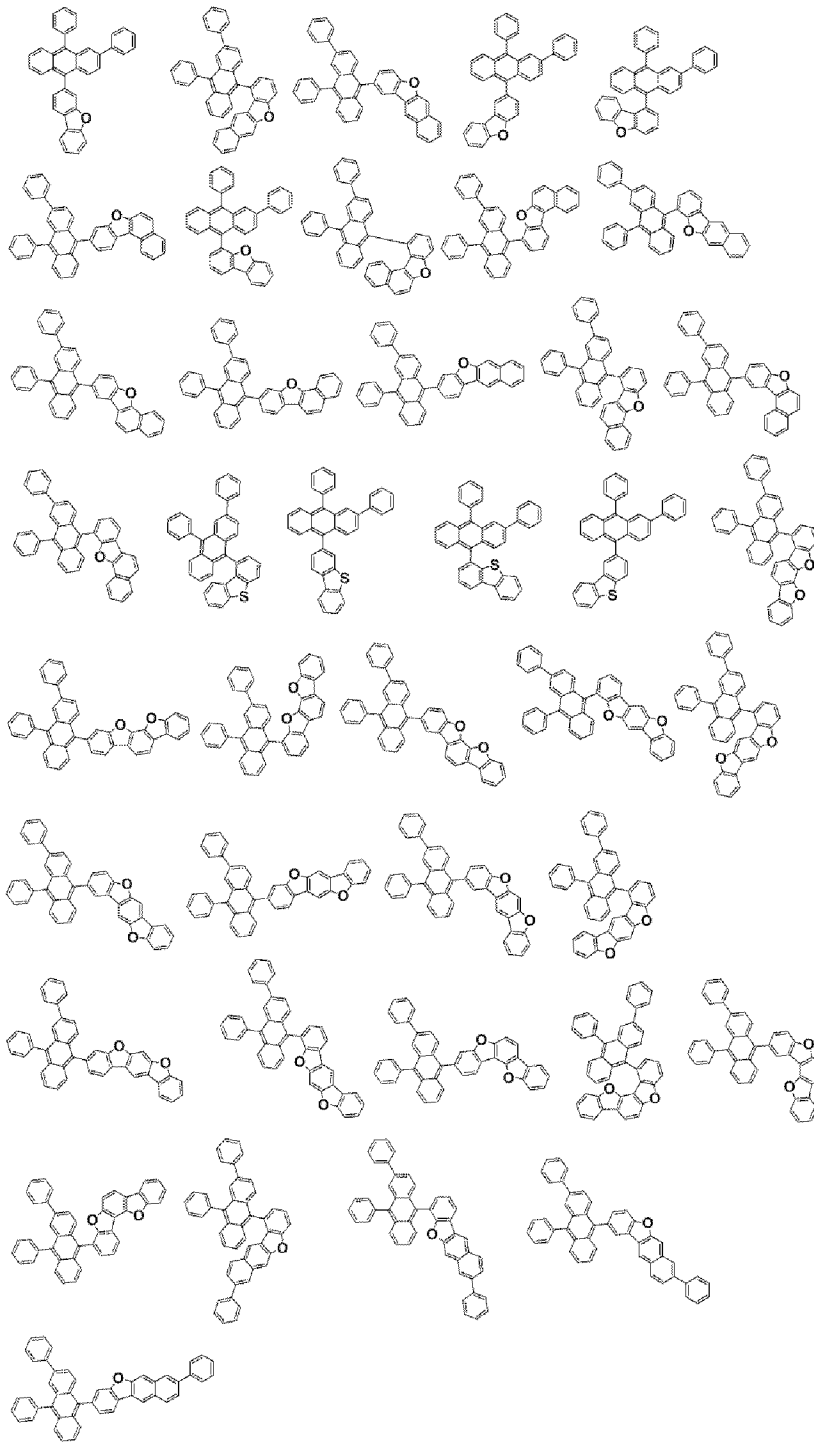
[0163] 本明細書において、水素原子が重水素原子であるとは、当該水素原子において、軽水素原子と重水素原子の合計に対して、重水素原子の割合が天然存在比より多いことを意味する。軽水素原子と重水素原子の合計に対して、重水素原子の割合が天然存在比より多いことは、核磁気共鳴装置により確認することができる。

[0164] 式(1)で表される化合物は、目的物に合わせた既知の反応や原料を用いることで合成することができる。

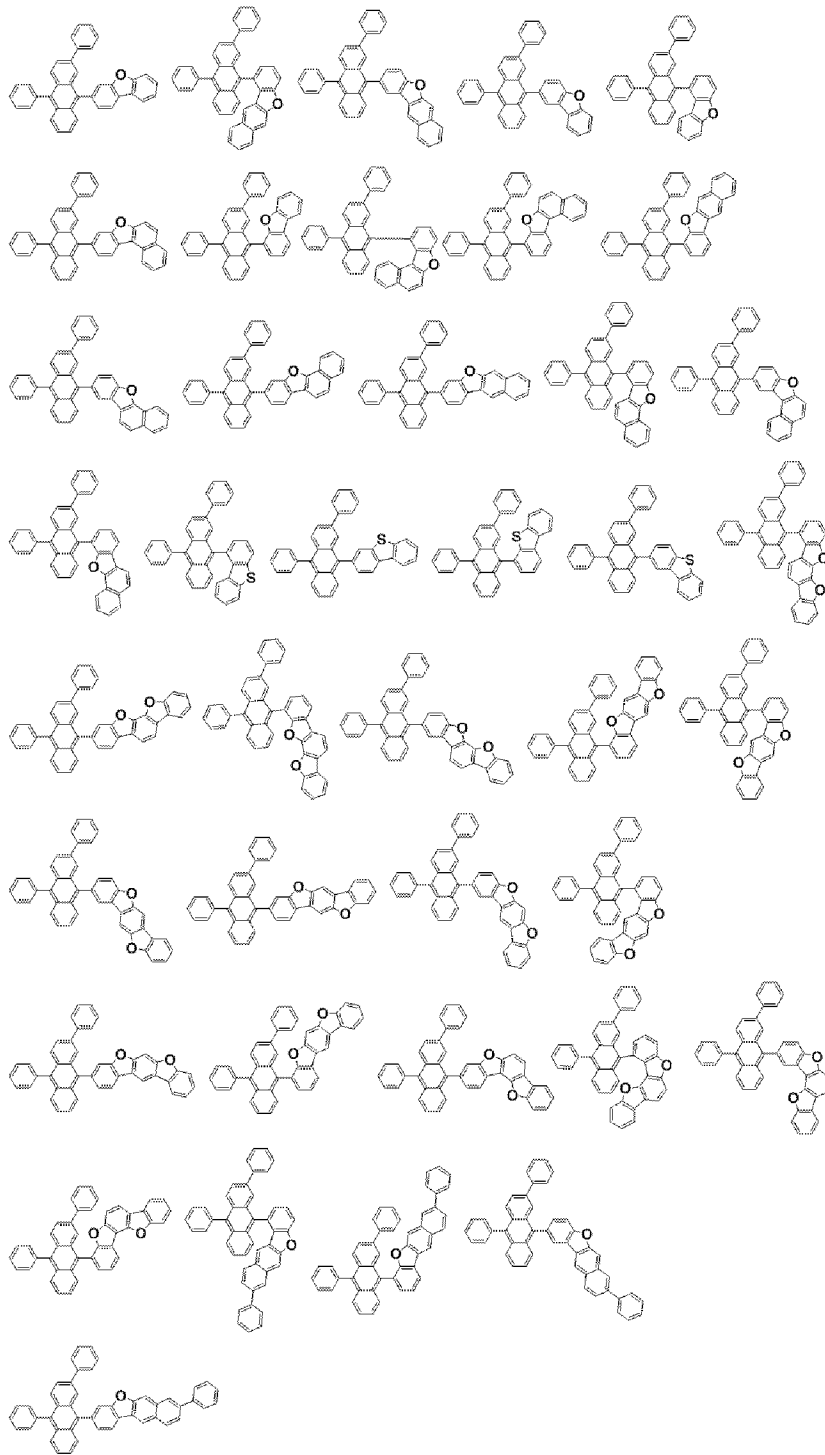
[0165] 以下に、式(1)で表される化合物の具体例を記載するが、これらは例示に過ぎず、本発明の一態様に係る化合物は下記具体例に限定されるものではない。

[0166]

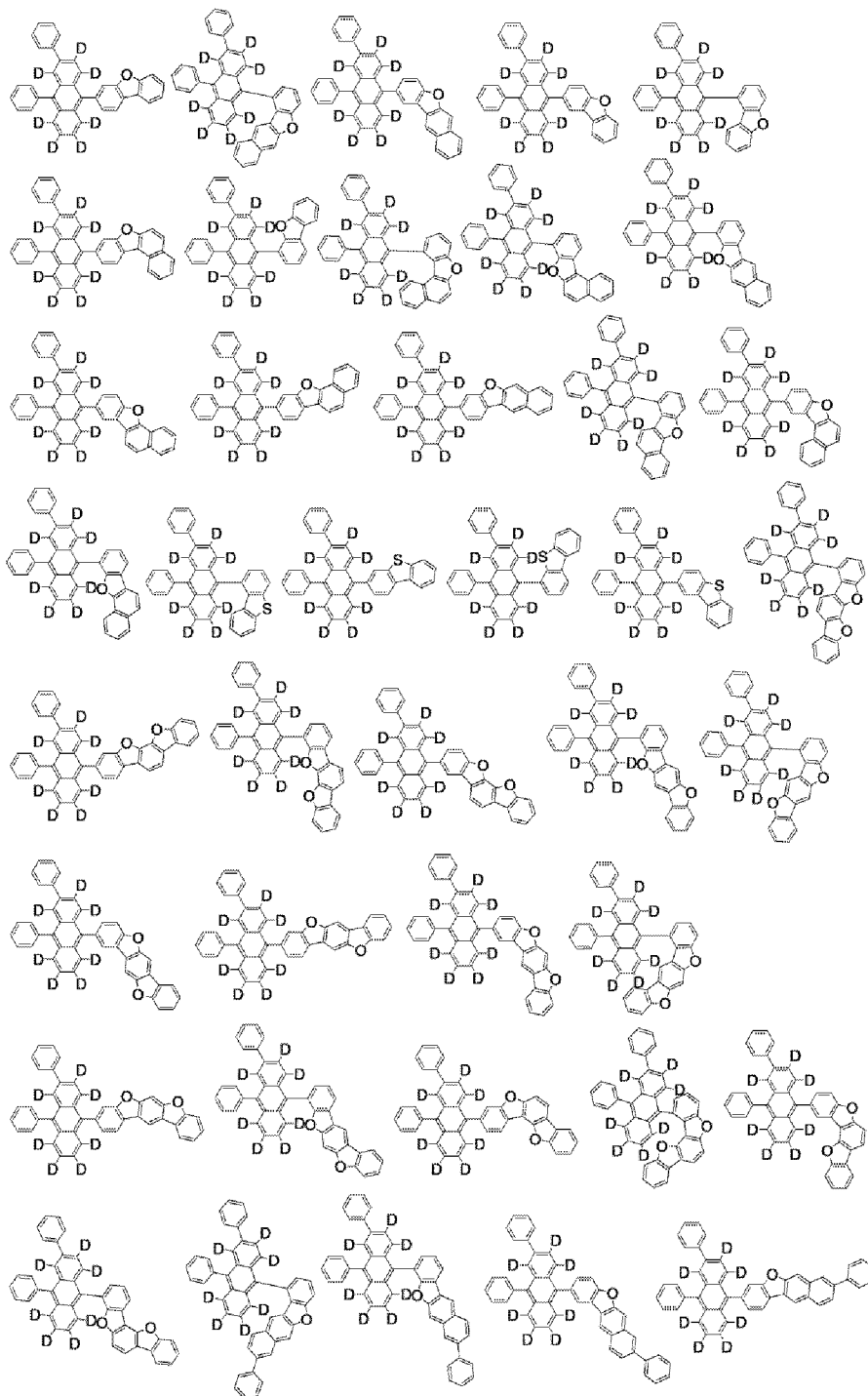
[化42]



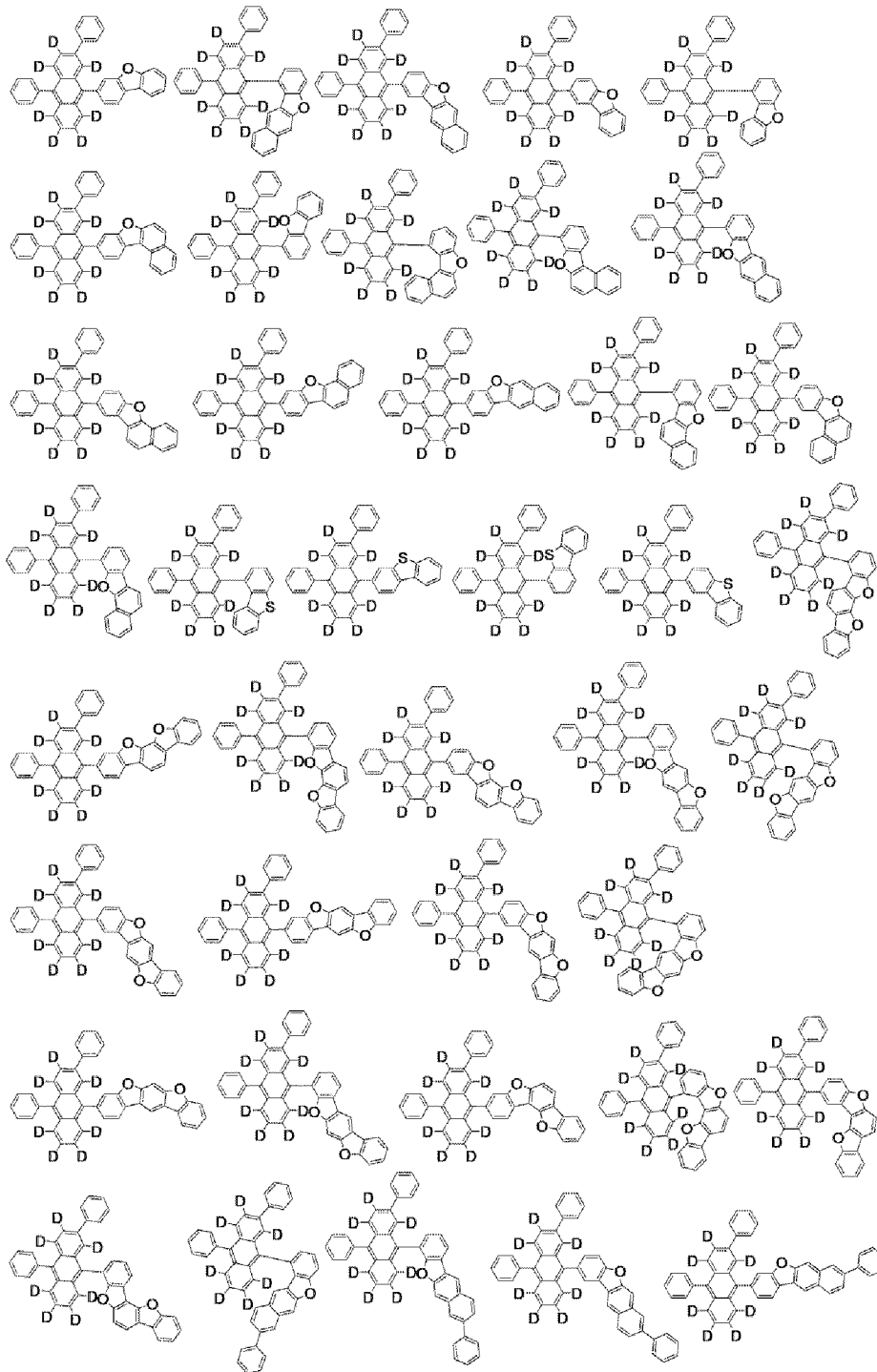
[化43]



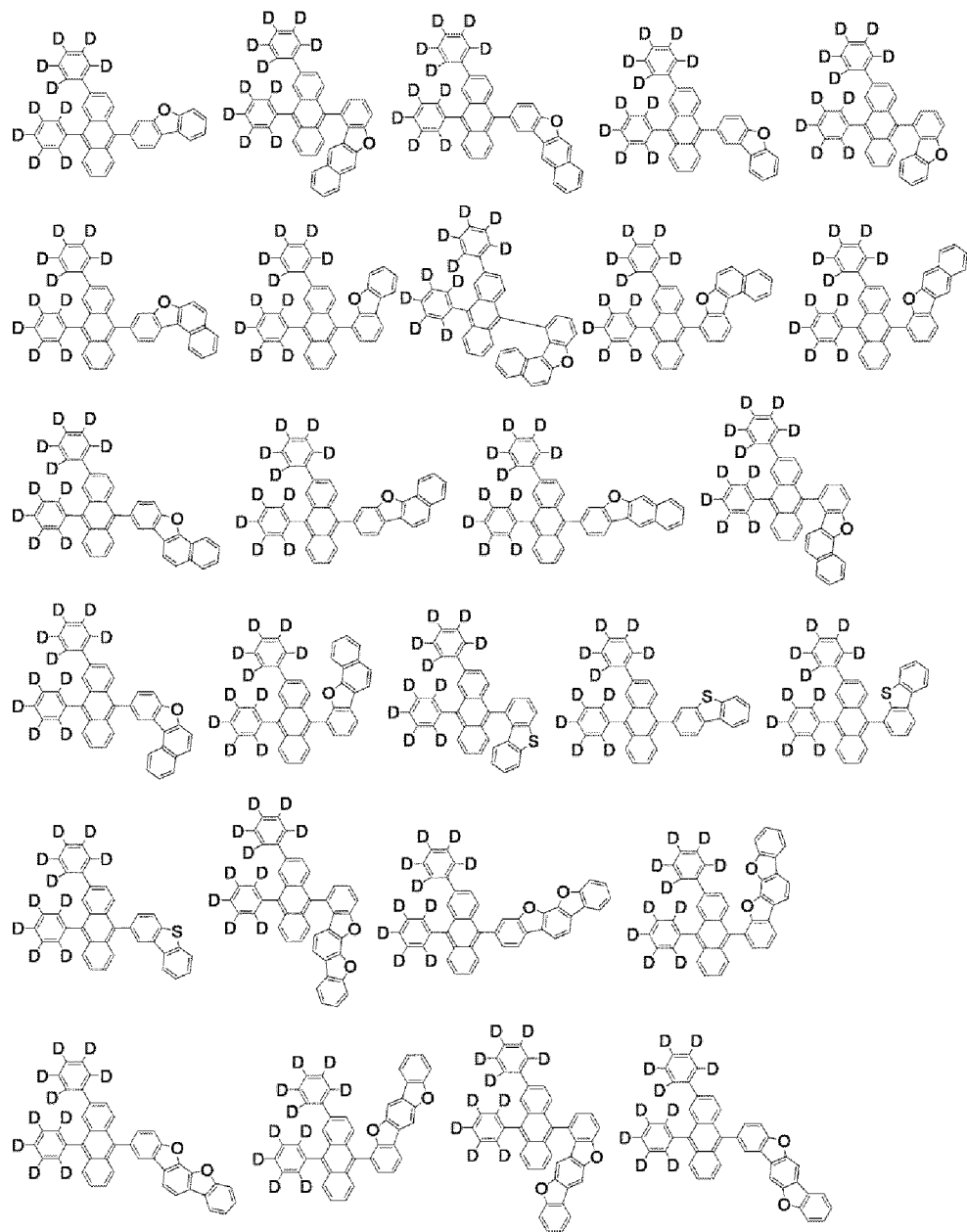
[化44]



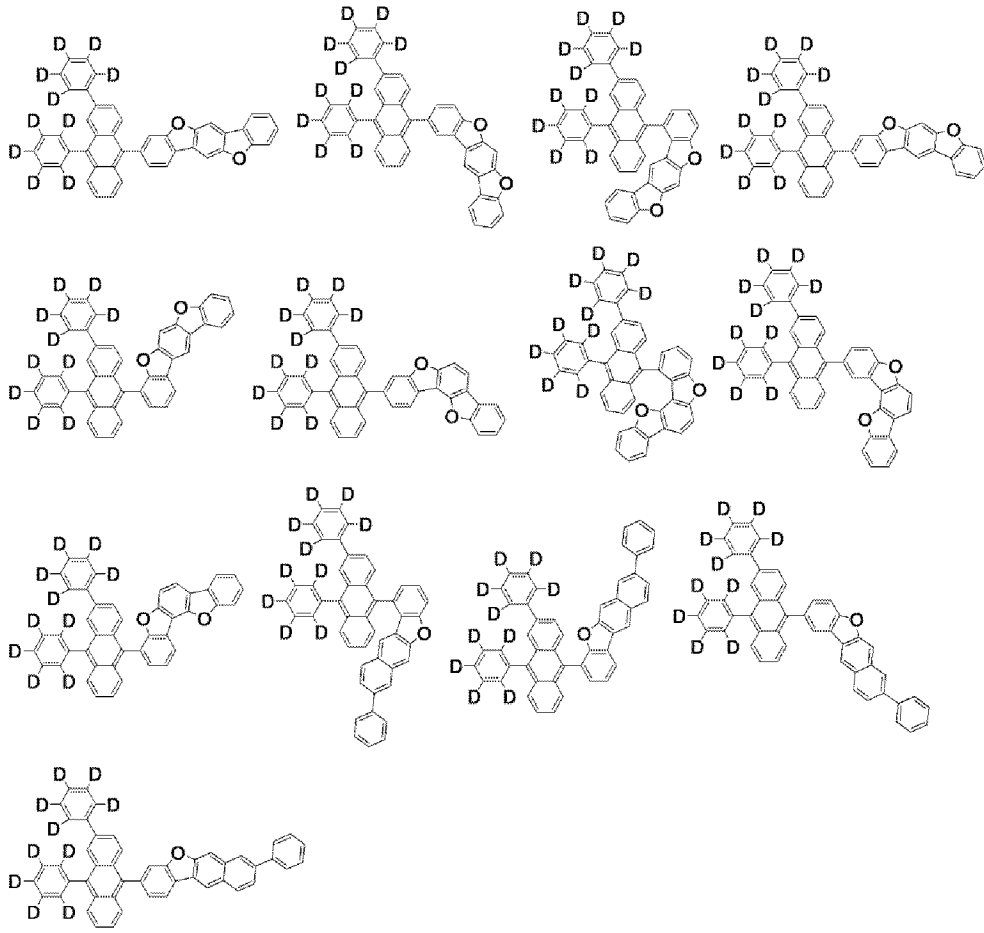
[化45]



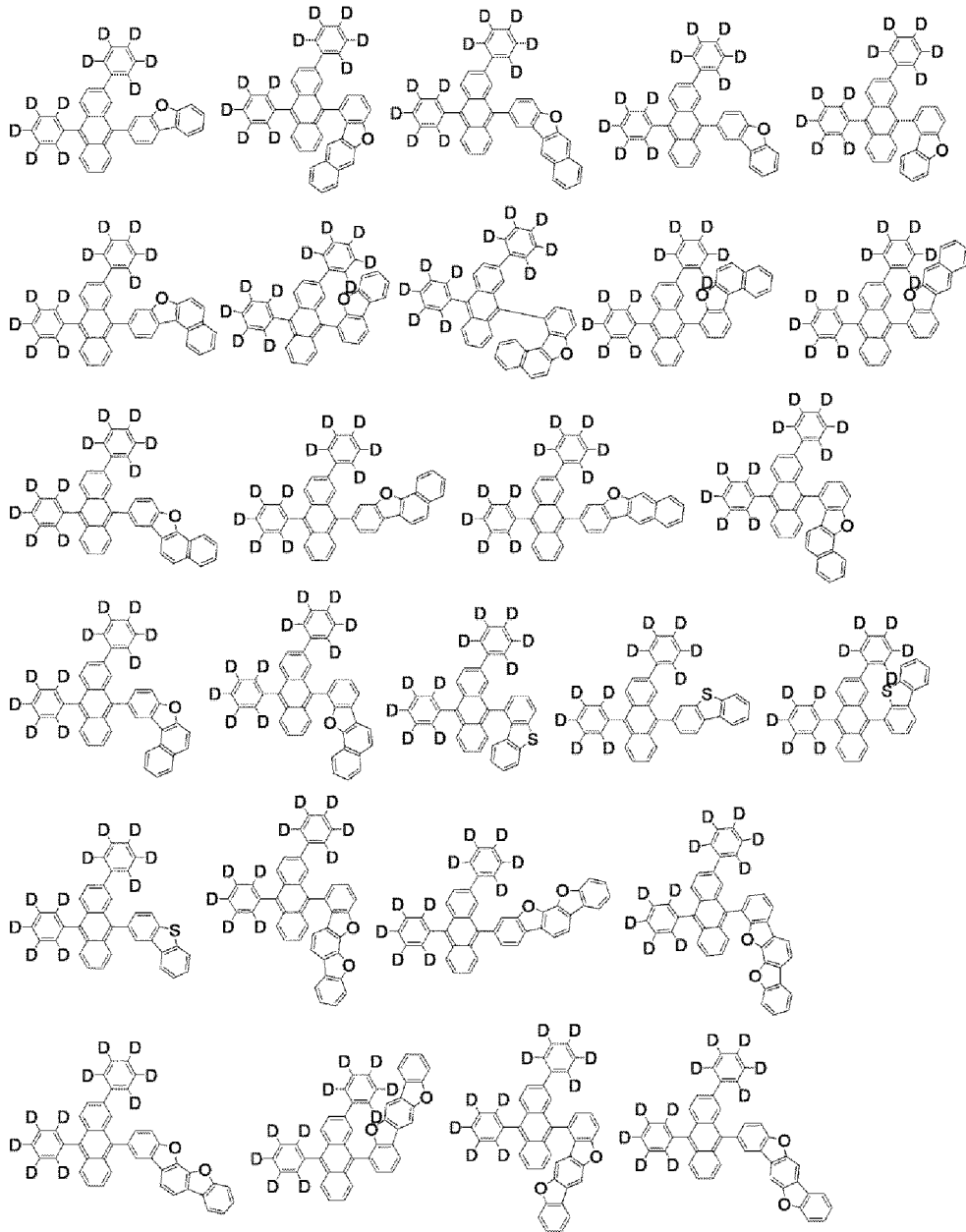
[化46]



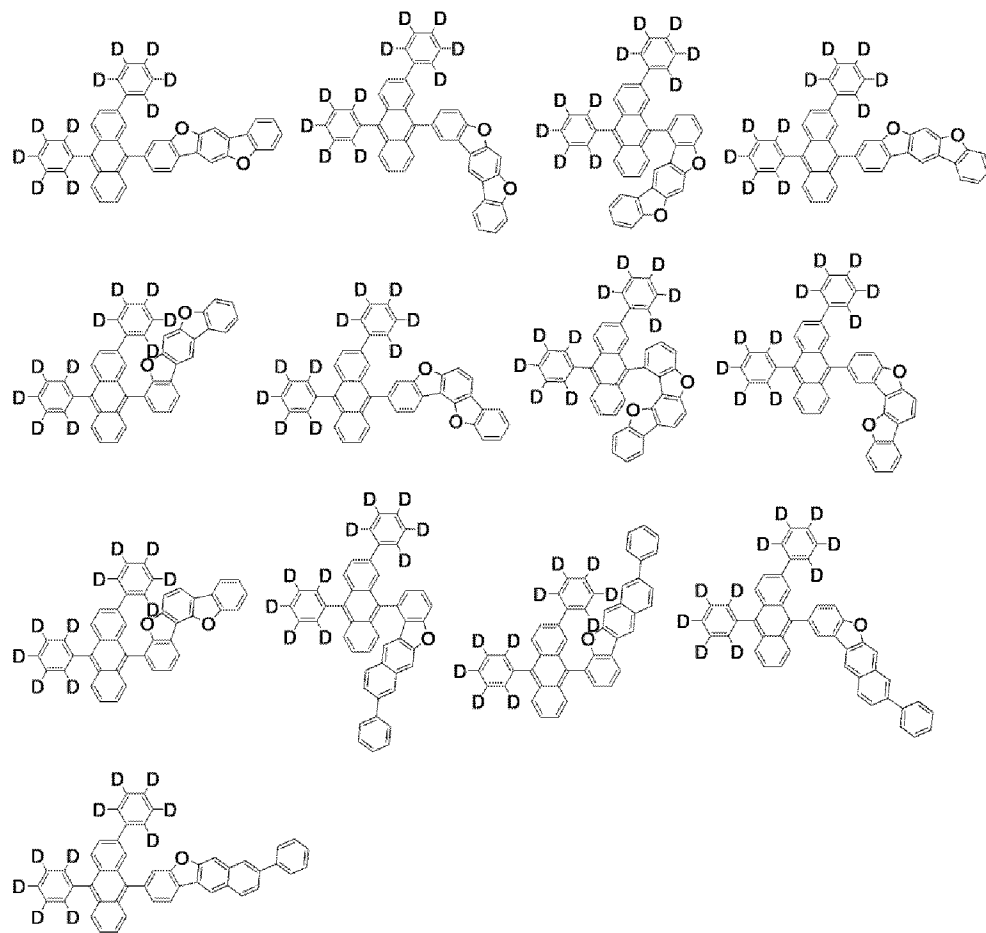
[化47]



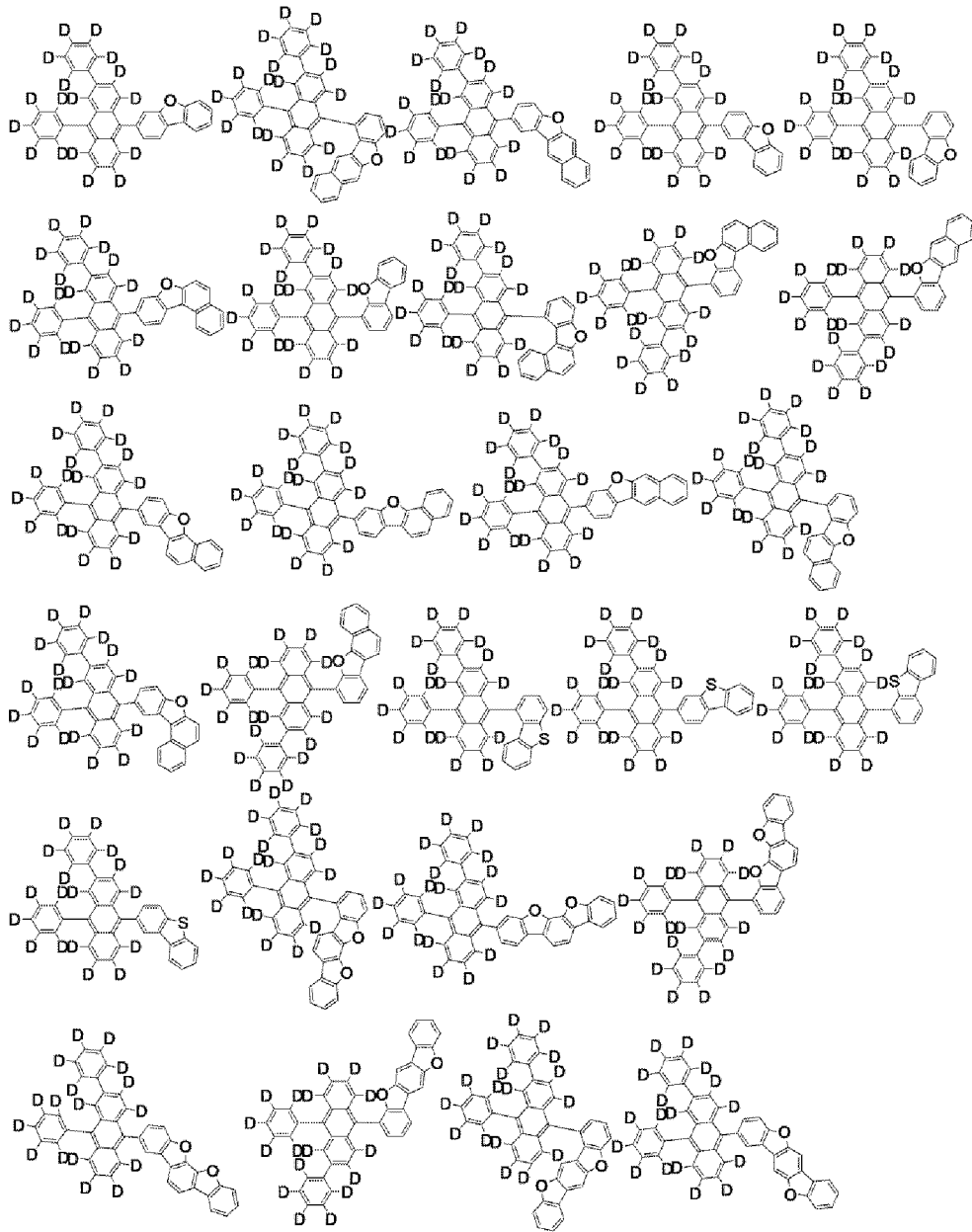
[化48]



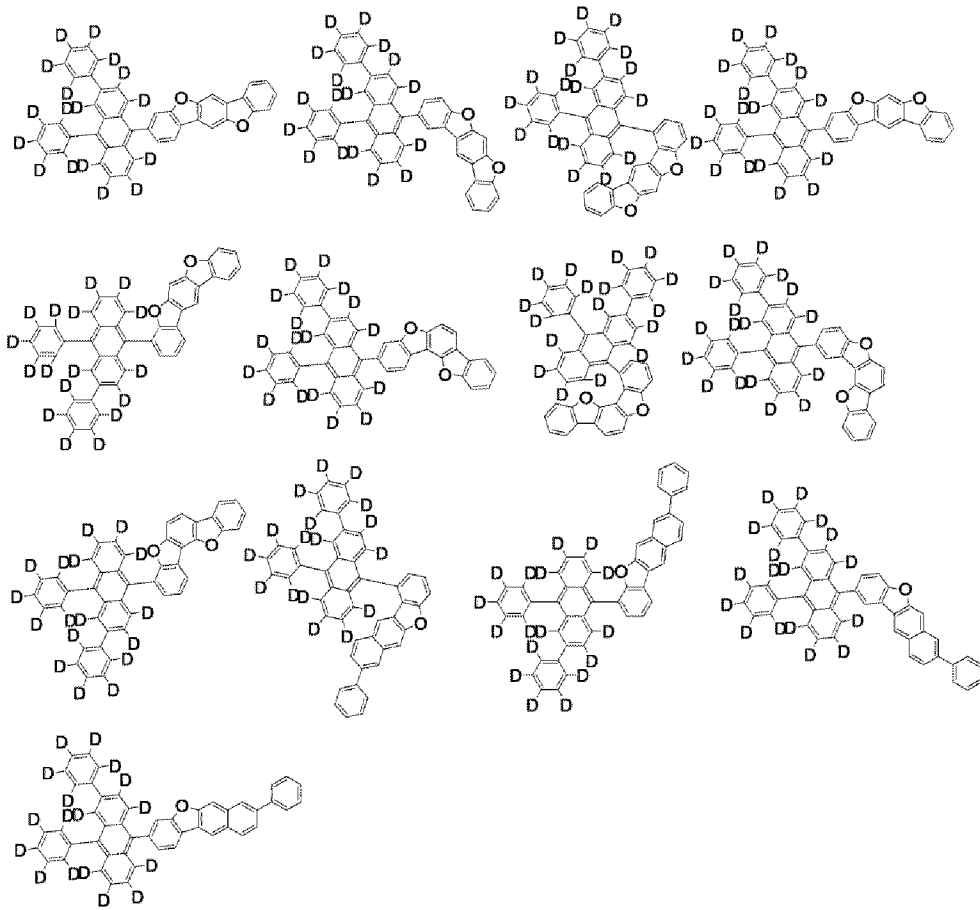
[化49]



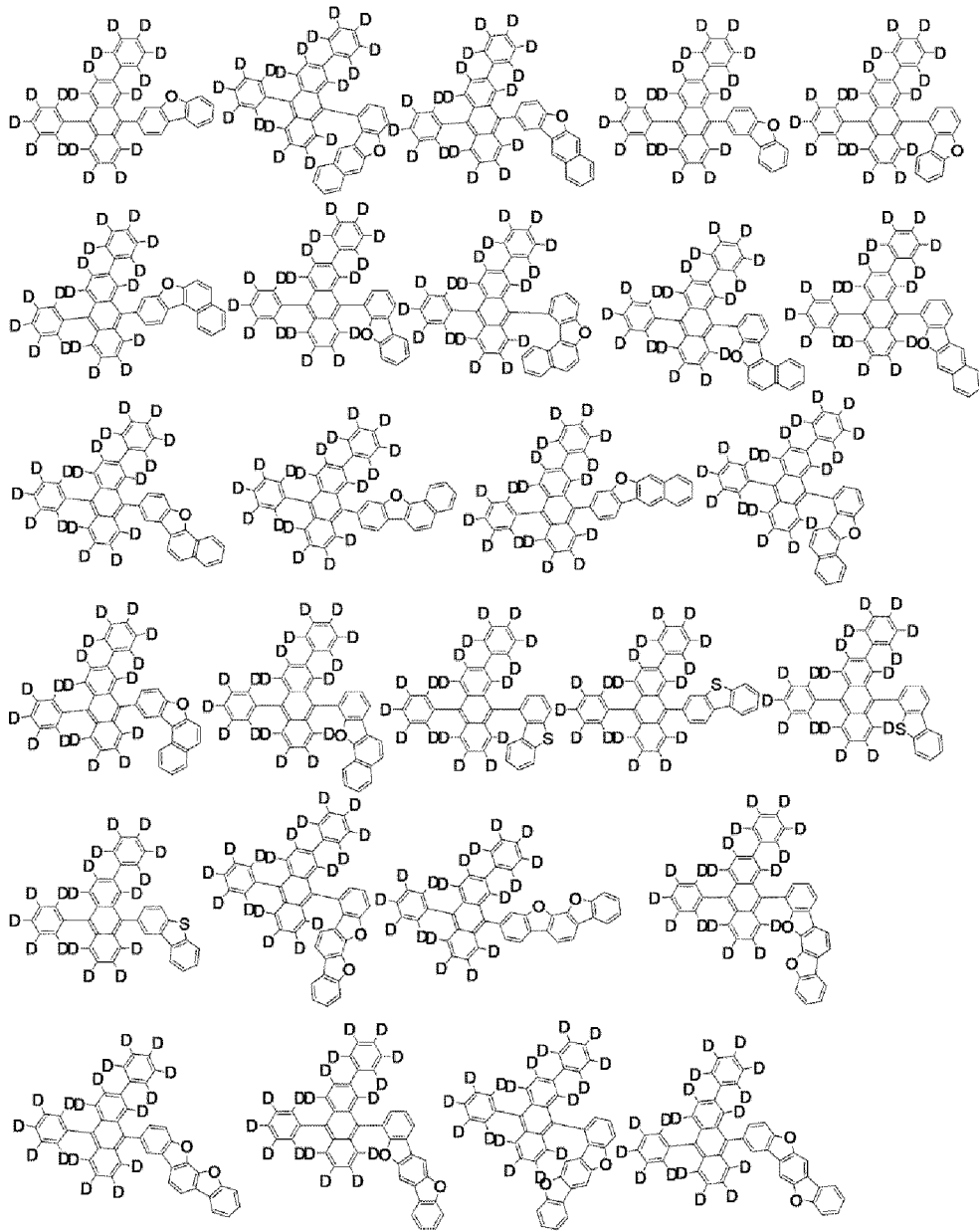
[化50]



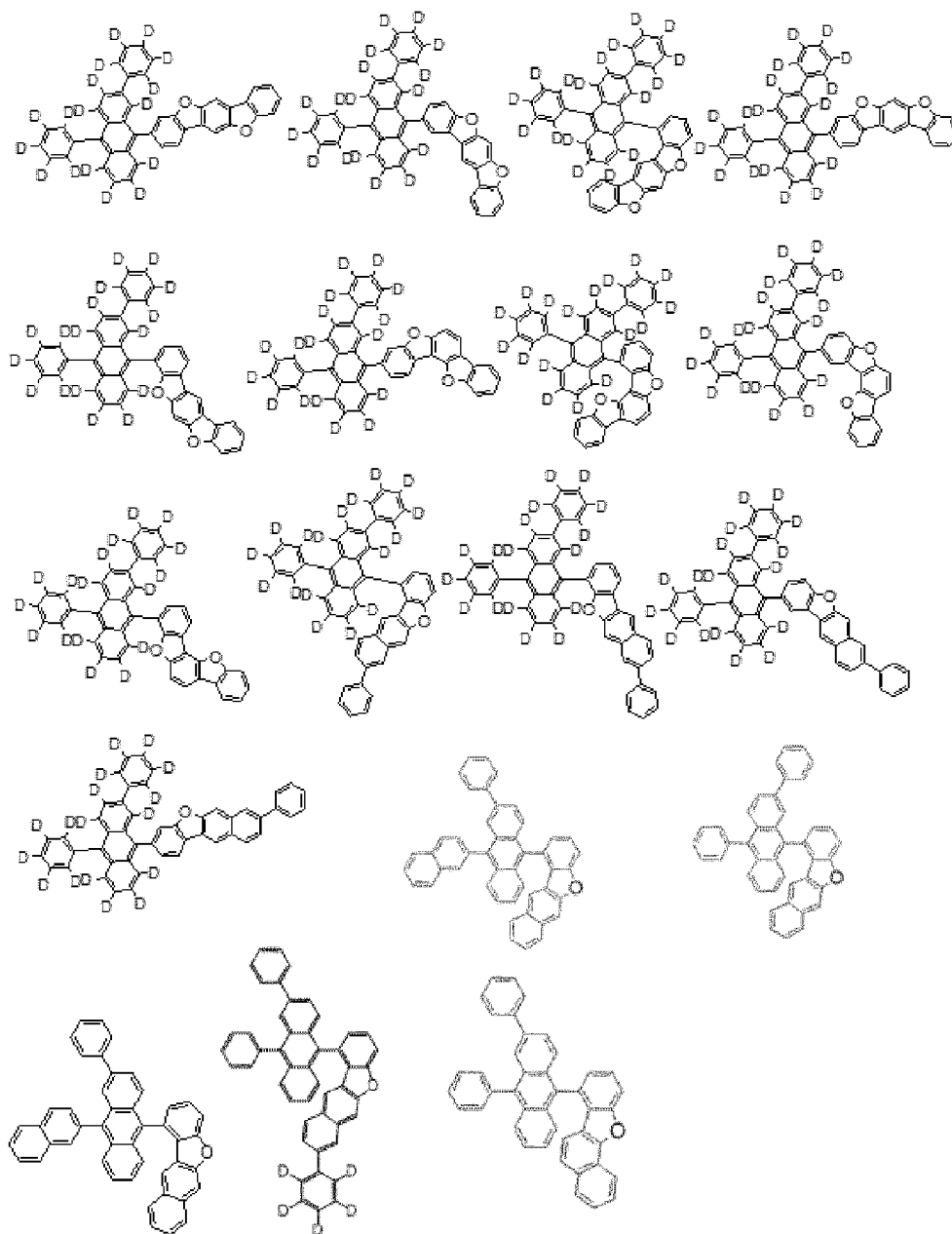
[化51]



[化52]



[化53]



[0167] (第2成分)

本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される。

[0168] アルカリ金属としては、リチウム、ナトリウム、カリウム、ルビジウム、

セシウム、及びフランシウムが挙げられる。

アルカリ土類金属としては、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、及びラジウムが挙げられる。一実施形態において、アルカリ土類金属は、カルシウム、ストロンチウム、バリウム、及びラジウムからなる群から選択される1以上の金属である。

希土類金属としては、スカンジウム、イットリウム、ランタン、セリウム、プラセオジウム、ネオジウム、プロメチウム、サマリウム、ユウロピウム、ガドリニウム、テルビウム、ジスプロシウム、ホルミウム、エルビウム、ツリウム、イッテルビウム、及びルテチウムが挙げられる。

アルカリ金属化合物としては、 Li_2O 、 Cs_2O 、 K_2O などのアルカリ酸化物、 LiF 、 NaF 、 CsF 、 KF 等のアルカリハロゲン化物などが挙げられる。

アルカリ土類金属化合物としては、 BaO 、 SrO 、 CaO 及びこれらを混合した $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$)、 $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$)等が挙げられる。

希土類金属化合物としては、 YbF_3 、 ScF_3 、 ScO_3 、 Y_2O_3 、 Ce_2O_3 、 GdF_3 、 TbF_3 などが挙げられる。

[0169] アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、希土類金属を含む有機金属錯体としては、それぞれ金属イオンとしてアルカリ金属イオン、アルカリ土類金属イオン、希土類金属イオンを少なくとも一つ含有するものであれば特に限定はない。また、配位子にはキノリノール、ベンゾキノリノール、アクリジノール、フェナントリジノール、ヒドロキシフェニルオキサゾール、ヒドロキシフェニルチアゾール、ヒドロキシジアリールオキサジアゾール、ヒドロキシジアリールチアジアゾール、ヒドロキシフェニルピリジン、ヒドロキシフェニルベンゾイミダゾール、ヒドロキシベンゾトリアゾール、ヒドロキシフルボラン、ビピリジル、フェナントロリン、フタロシアニン、ポルフィリン、シクロペンタジエン、 β -ジケトン類、アゾメチン類、及びそれらの誘導体などが挙げられる。

アルカリ金属を含む有機金属錯体として、例えば、8-ヒドロキシキノリノラト-リチウム (Li q) が挙げられる。

[0170] 一実施形態において、前記第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、及びアルカリ金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される。

[0171] 一実施形態において、前記第2成分は、リチウム (Li)、イッテルビウム (Yb)、フッ化リチウム (LiF)、フッ化セシウム (CsF)、フッ化カルシウム (CaF₂)、8-ヒドロキシキノリノラト-リチウム (Li q)、又はリチウム酸化物 (LiO_x) である。

[0172] 第1成分と第2成分とを含む層 (以下、「層A」とも言う) における第1成分と第2成分との割合は特に制限はないが、一実施形態において、前記第1成分と前記第2成分との合計に対する前記第1成分の割合が30~70質量%であり、40~60質量%であってもよい。

[0173] 層Aは、第1成分と第2成分以外の他成分を含んでもよいし、含まなくてもよい。

[0174] 一実施形態において、層Aは実質的に第1成分と第2成分のみからなる。

「実質的に第1成分と第2成分のみからなる」とは、層A中に他の成分が全く含まれないか、又は、他の成分が本発明の効果を損なわない範囲で微量含まれることを言う。例えば、他の成分が不可避不純物として混入している場合は本状態である。

一実施形態において、層Aは、80質量%以上、90質量%以上、95質量%以上、99質量%以上、99.5質量%以上、99.9質量%以上、99.99質量%以上又は100質量%が、第1成分及び第2成分である。

一実施形態において、層Aは、80モル%以上、90モル%以上、95モル%以上、99モル%以上、99.5モル%以上、99.9モル%以上、99.99モル%以上又は100モル%が、第1成分及び第2成分である。

一実施形態において、層Aは、第1成分と第2成分のみからなる。

[0175] [第2の有機EL素子]

本発明の一態様に係る第2の有機EL素子は、陰極と、陽極と、前記陰極

と前記陽極との間に配置された1又は2以上の有機層と、を有し、前記1又は2以上の有機層のうち少なくとも1層が、第1成分と、第2成分と、を含む。

前記第1成分は、後述する式(R1)及び式(R2)を充足する化合物であって、かつ、式(M1)～式(M4)で表される構造を分子内に含まない化合物である。

前記第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される。

[0176] 本発明の一態様に係る第2の有機EL素子は、上記の構成を備えることで、より高い素子性能を実現することが可能である。具体的には、駆動電圧が低く、かつ低電流密度においても高効率な有機EL素子を実現することができる。

[0177] なお、各成分の定義から自明であるが、第1成分と第2成分とは異なる。

以下、本発明の一態様に係る第2の有機EL素子の各構成について説明する。

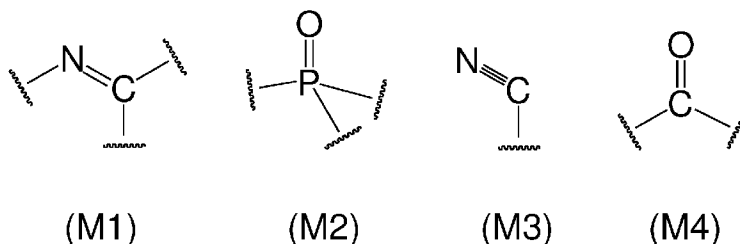
[0178] <第1成分>

本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第1成分は、下記式(R1)及び式(R2)を充足する化合物であって、かつ、下記式(M1)～式(M4)で表される構造を分子内に含まない化合物である。

$$40\text{ mV/nm} \leq \text{GSP_slope} \dots (\text{R1})$$

$$-2.80\text{ eV} < \text{LUMO} < -1.86\text{ eV} \dots (\text{R2})$$

[化54]



(式 (R 1) 中、G S P__s l o p e は巨大表面電位勾配を示す。式 (R 2) 中、L U M O は最低空軌道のエネルギー準位を示す。)

[0179] (式 (R 1) : G S P__s l o p e)

G S P は、巨大表面電位 (G i a n t S u r f a c e P o l a r i z a t i o n) を意味する。後述の通り、G S P は原則として膜厚に比例する。膜厚に依存しない数値として扱うために、式 (R 1) 中では G S P を膜厚で除した値である G S P__s l o p e (巨大表面電位勾配、G S P 勾配) を用いる。G S P__s l o p e は、実施例に記載の方法により測定する。

[0180] G S P は、有機 E L 素子を構成する有機層等の膜 (層) において、有機分子の双極子モーメントがわずかに配向することにより膜表面に生じる電位であり、原則として膜厚に比例することが知られている。膜表面に電位があると、それを打ち消すために反対の電荷が注入されるため、G S P は電荷注入量に直接影響を与える物性値と言える。

電荷注入量は、有機 E L 素子の各層における電子と正孔のキャリアバランスを最適化し、素子を高性能化するための重要な指標の一つである。従来、有機 E L 素子の各層について、隣接層との L U M O (最低空軌道のエネルギー準位) のエネルギー差に基づいて、電荷注入のしやすさを予測してきたが、L U M O だけでは説明できない場合があった。

これに対して、G S P は電荷注入量に直接影響を与えることから、G S P とキャリアバランスとの間には相関関係が存在すると考えられる。そこで、本発明者らは、先述の G S P__s l o p e をキャリアバランスに関係する新しい物性値として導入して検討した結果、一定以上の G S P__s l o p e を示す化合物を有機 E L 素子に用いると、陽極側にマイナスの分極が生じて正孔注入量が改善されることを見出した。また、これにより、低電流密度領域におけるキャリアバランスが改善し、E Q E の低下が抑制されるとの知見も得た。

[0181] 式 (M 1) ~ 式 (M 4) で表される構造 (電子受容性の構造) を分子内に含む、従来、有機 E L 素子の電子輸送材料等として用いられてきた化合物は

、低電流密度においてEQEを低下させてしまうものが多い。その原因として、本発明者らの検討によれば、当該化合物は低電流密度領域での電子注入量が過剰であり、注入された電子と結合する正孔が不足することになるため、キャリアバランス因子が小さくなり、EQEが低下することが考えられた。なお、キャリアバランスと、有機EL素子の外部量子効率（EQE）との関係は下記式で表される。

$$EQE = \gamma \times \chi \times \Phi \times \eta$$

（式中、 γ はキャリアバランス因子を表し、 χ は励起子生成確率（TTF効率）を表し、 Φ はドーパント材料の発光量子収率を表し、 η は光取り出し効率を表す。）

[0182] 一方、上述した従来の材料とは異なる、一定以上のGSP_slopeを示す化合物（式（R1）を満たす化合物）を用いると、その優れた正孔注入能力によって、低電流密度から十分な正孔注入量を確保でき、上記のEQE低下の問題を解消することが可能となる。

[0183] GSP_slopeの上限は、特に限定されないが、GSP_slopeが大きすぎると、キャリアの注入量が増えすぎて、結果的にEQEの低下を招く可能性がある。

[0184] 一実施形態において、前記第1成分は、下記式（R1-1）を充足する。

$$GSP_slope \leq 60 \text{ mV/nm} \dots (R1-1)$$

（式（R1-1）中、GSP_slopeは前記式（R1）で定義した通りである。）

[0185] 一実施形態において、前記第1成分は、下記式（R1-2）を充足する。

$$41 \text{ mV/nm} \leq GSP_slope \dots (R1-2)$$

（式（R1-2）中、GSP_slopeは前記式（R1）で定義した通りである。）

[0186] 一実施形態において、前記第1成分は、下記式（R1-3）を充足する。

$$41 \text{ mV/nm} \leq GSP_slope \leq 60 \text{ mV/nm} \dots (R1-3)$$

（式（R1-3）中、GSP_slopeは前記式（R1）で定義した通り

である。)

[0187] 一実施形態において、前記第1成分は、下記式 (R1-4) を充足する。
$$42 \text{ mV/nm} \leq \text{GSP_slope} \leq 51 \text{ mV/nm} \cdots (\text{R1-4})$$

(式 (R1-4) 中、GSP_slope は前記式 (R1) で定義した通りである。)

[0188] 一実施形態において、第1成分のGSP_slopeは、 41 mV/nm 以上、又は 42 mV/nm 以上である。

[0189] 一実施形態において、第1成分のGSP_slopeは、 58 mV/nm 以下、 56 mV/nm 以下、 54 mV/nm 以下、又は 52 mV/nm 以下である。

[0190] (式 (R2) : LUMO)

LUMOは、最低空軌道のエネルギー準位 (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) を意味する。LUMOは、実施例に記載の方法により測定する。

[0191] 有機EL素子の有機層のうち少なくとも1層に式 (R2) を充足する化合物を用いることで、当該層に隣接する層への電子注入の際のエネルギー障壁を小さくすることができる。これにより、駆動電圧が低い有機EL素子を実現できる。

[0192] 一実施形態において、前記第1成分は、下記式 (R2-1) を充足する。
$$-2.60 \text{ eV} \leq \text{LUMO} \leq -2.00 \text{ eV} \cdots (\text{R2-1})$$

(式 (R2-1) 中、LUMOは前記式 (R2) で定義した通りである。)

[0193] 一実施形態において、前記第1成分は、下記式 (R2-2) を充足する。
$$-2.26 \text{ eV} \leq \text{LUMO} \leq -2.09 \text{ eV} \cdots (\text{R2-2})$$

(式 (R2-2) 中、LUMOは前記式 (R2) で定義した通りである。)

[0194] 一実施形態において、第1成分のLUMOは、 -1.90 eV 以下、 -1.95 eV 以下、 -2.00 eV 以下、 -2.05 eV 以下、又は -2.09 eV 以下である。

一実施形態において、第1成分のLUMOは、 -2.80 eV 以上、 -2

、 7.0 eV 以上、 -2.60 eV 以上、 -2.50 eV 以上、 -2.40 eV 以上、 -2.30 eV 以上、又は -2.26 eV 以上である。

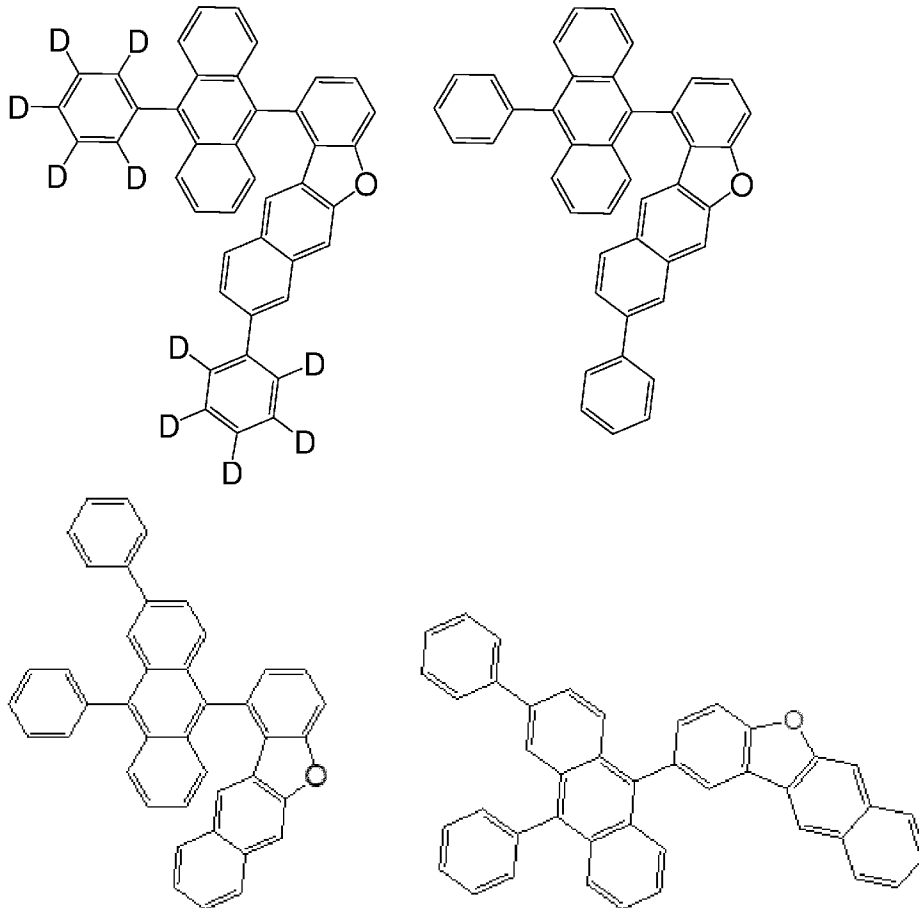
[0195] 一実施形態において、前記第1成分は、前記式(R1-3)及び前記式(R2-2)を充足する。

[0196] 「下記式(M1)～式(M4)で表される構造を分子内に含まない」については、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子において説明した事項を適用できる。

[0197] 本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第1成分は、目的物に合わせた既知の反応や原料を用いることで合成することができる。

[0198] 以下に、本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第1成分の具体例を記載するが、これらは例示に過ぎず、第1成分は下記具体例に限定されるものではない。

[化55]



[0199] <第2成分>

本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される。

[0200] 本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第2成分については、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第2成分において説明した事項を適用できる。

[0201] 第1成分と第2成分とを含む層（以下、「層A」とも言う）における第1成分と第2成分との割合は特に制限はない。層Aについては、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子において説明した事項を適用できる。

[0202] 本発明の一態様に係る有機EL素子（第1の有機EL素子及び第2の有機EL素子）の概略構成を、図1を参照して説明する。

本発明の一態様に係る有機EL素子1は、基板2と、陽極3と、有機層である発光層5と、陰極10と、陽極3と発光層5との間にある有機層4と、発光層5と陰極10との間にある有機層6とを有する。

有機層4及び有機層6は、それぞれ、単一の層であってもよく、又は、複数の層からなってもよい。

[0203] 一実施形態において、本発明の一態様に係る有機EL素子は、陽極と、発光層と、電子輸送帯域と、陰極と、をこの順に含み、前記電子輸送帯域における少なくとも1層が、前記第1成分と、前記第2成分と、を含む（本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分と、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第2成分との組合せを含むか、あるいは本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第1成分と、本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第2成分との組合せを含む）。

[0204] （電子輸送帯域）

電子輸送帯域とは、発光層と陰極の間に配置された1又は2以上の層の総

称である。電子輸送帯域は、例えば、発光層側から、後述する正孔阻止層、電子輸送層、及び電子注入層と呼ばれる各層から構成され、これら全てを含む積層構造であってもよいし、これらのうち一部のみの層構成であってもよい。また、上記各層のそれぞれについて、2種以上の層を用いてもよく、例えば、組成の異なる2種の電子輸送層を積層してもよい。

各層は、1種のみを用いて形成してもよいし、2種以上の材料を併用して形成してもよい。

[0205] 本発明の一態様に係る有機EL素子における電子輸送帯域の積層構造を以下に例示する。

(a) (発光層／) 第1の層(電子輸送層)／第2の層(電子注入層) (／陰極)

(b) (発光層／) 第3の層(正孔阻止層)／第1の層(電子輸送層)／第2の層(電子注入層) (／陰極)

(c) (発光層／) 第3の層(正孔阻止層)／第4の層(第1の電子輸送層)／第1の層(第2の電子輸送層)／第2の層(電子注入層) (／陰極)

[0206] 一実施形態において、前記電子輸送帯域は、前記発光層の側から少なくとも第1の層と第2の層とをこの順に有し、

前記第2の層が、前記第1成分と、前記第2成分と、を含む(本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分と、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第2成分との組合せを含むか、あるいは本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第1成分と、本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第2成分との組合せを含む)。

[0207] 一実施形態において、前記第2の層は、前記式(M1)で表される構造を分子内に含む化合物、前記式(M2)で表される構造を分子内に含む化合物、前記式(M3)で表される構造を分子内に含む化合物、及び前記式(M4)で表される構造を分子内に含む化合物を実質的に含まない。

[0208] 「実質的に含まない」とは、第2の層中に他の成分が全く含まれないか、又は、他の成分が本発明の効果を損なわない範囲で微量含まれることを言う

。例えば、不可避不純物として混入している場合は本状態である。

[0209] 一実施形態において、前記第2の層は、実質的に、前記第1成分と、前記第2成分と、のみからなる（実質的に、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第1成分と、本発明の一態様に係る第1の有機EL素子における第2成分との組合せのみからなるか、あるいは実質的に、本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第1成分と、本発明の一態様に係る第2の有機EL素子における第2成分との組合せのみからなる）。

「実質的に第1成分と第2成分のみからなる」とは、第2の層中に他の成分が全く含まれないか、又は、他の成分が本発明の効果を損なわない範囲で微量含まれることを言う。例えば、他の成分が不可避不純物として混入している場合は本状態である。

[0210] （有機EL素子の他の構成）

本発明の一態様に係る有機EL素子は、前記陰極と前記陽極との間に配置された1又は2以上の有機層が上述した条件を満たす限り、本発明の効果を損なわない限りにおいて、従来公知の材料及び素子構成を適用することができる。

以下、本発明の一態様に係る有機EL素子の素子構成や各層を構成する材料等について説明する。

[0211] 当該有機EL素子の代表的な素子構成としては、基板上に、以下の構造を積層した構造が例示される。

（1）陽極／発光層／電子輸送帯域／陰極

（2）陽極／正孔輸送帯域／発光層／電子輸送帯域／陰極

（「／」は各層が隣接して積層されていることを示す。）

[0212] （正孔輸送帯域）

正孔輸送帯域とは、陽極と発光層の間に配置された1又は2以上の層の総称である。正孔輸送帯域は、例えば、発光層側から、後述する電子阻止層、正孔輸送層及び正孔注入層と呼ばれる各層から構成され、これら全てを含む積層構造であってもよいし、これらのうち一部のみの層構成であってもよい

。また、上記各層のそれぞれについて、2種以上の層を用いてもよく、例えば、組成の異なる2種の正孔輸送層を積層してもよい。

各層は、1種のみを用いて形成してもよいし、2種以上の材料を併用して形成してもよい。

[0213] 以下、本発明の一態様に係る有機EL素子の各層について説明する。

[0214] (基板)

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

[0215] (陽極)

基板上に形成される陽極には、仕事関数の大きい(具体的には4.0 eV以上)金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物等を用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム-酸化スズ(I TO : I ndium Tin Oxide)、珪素若しくは酸化珪素を含有した酸化インジウム-酸化スズ、酸化インジウム-酸化亜鉛、酸化タングステン、酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、及びグラフェン等が挙げられる。その他、金(Au)、白金(Pt)、又は金属材料の窒化物(例えば、窒化チタン)等が挙げられる。

[0216] (正孔注入層)

正孔注入層は、正孔注入性の高い物質を含む層である。正孔注入性の高い物質としては、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、マンガン酸化物、芳香族アミン化合物、又は高分子化合物(オリゴマー、 dendリマー、ポリマー等)等も使用できる。

[0217] (正孔輸送層)

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層には、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用することができる。ポリ（N-ビニルカルバゾール）（略称：PVK）やポリ（4-ビニルトリフェニルアミン）（略称：PVTPA）等の高分子化合物を用いることもできる。但し、電子よりも正孔の輸送性の高い物質であれば、これら以外のものを用いてもよい。尚、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。

[0218]（発光層のゲスト（ドーパント）材料）

発光層は、発光性の高い物質を含む層であり、種々の材料を用いることができる。例えば、発光性の高い物質としては、蛍光を発光する蛍光性化合物や燐光を発光する燐光性化合物を用いることができる。蛍光性化合物は一重項励起状態から発光可能な化合物であり、燐光性化合物は三重項励起状態から発光可能な化合物である。

発光層に用いることができる青色系の蛍光発光材料として、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、トリアリールアミン誘導体等が使用できる。発光層に用いることができる緑色系の蛍光発光材料として、芳香族アミン誘導体等を使用できる。発光層に用いることができる赤色系の蛍光発光材料として、テトラセン誘導体、ジアミン誘導体等が使用できる。

発光層に用いることができる青色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体が使用される。発光層に用いることができる緑色系の燐光発光材料としてイリジウム錯体等が使用される。発光層に用いることができる赤色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、白金錯体、テルビウム錯体、ユーロピウム錯体等の金属錯体が使用される。

[0219]（発光層のホスト材料）

発光層としては、上述した発光性の高い物質（ゲスト材料）を他の物質（

ホスト材料)に分散させた構成としてもよい。発光性の高い物質を分散させるための物質としては、各種のものを用いることができ、発光性の高い物質よりも最低空軌道準位(LUMO準位)が高く、最高被占有軌道準位(HOMO準位)が低い物質を用いることが好ましい。

発光性の高い物質を分散させるための物質(ホスト材料)としては、1)アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、若しくは亜鉛錯体等の金属錯体、2)オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、若しくはフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、3)カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、若しくはクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、4)トリアリールアミン誘導体、若しくは縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族アミン化合物が使用される。

また、ホスト材料として遅延蛍光性(熱活性化遅延蛍光性)の化合物を用いることもできる。発光層が、上記で説明した本発明で用いる材料と、遅延蛍光性のホスト化合物と、を含むことも好ましい。

[0220] (電子阻止層、正孔阻止層、励起子阻止層)

発光層に隣接して、電子阻止層、正孔阻止層、励起子(トリプレット)阻止層等を設けてもよい。

電子阻止層とは、発光層から正孔輸送層へ電子が漏出することを阻止する機能を有する層である。正孔阻止層とは、発光層から電子輸送層へ正孔が漏出することを阻止する機能を有する層である。励起子阻止層は、発光層で生成した励起子が隣接する層へ拡散することを阻止し、励起子を発光層内に閉じ込める機能を有する層である。

[0221] (電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層には、1)アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、2)イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、3)高分子化合物を使用することができる。

[0222] (電子注入層)

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層には、リチウム (Li)、イッテルビウム (Yb)、フッ化リチウム (LiF)、フッ化セシウム (CsF)、フッ化カルシウム (CaF₂)、8-ヒドロキシキノリノラト-リチウム (Li_q) 等の金属錯体化合物、リチウム酸化物 (LiO_x) 等のアルカリ金属、アルカリ土類金属、又はそれらの化合物を用いることができる。

[0223] (陰極)

陰極には、仕事関数の小さい (具体的には 3.8 eV 以下) 金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物等を用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第 1 族又は第 2 族に属する元素、すなわち、リチウム (Li) やセシウム (Cs) 等のアルカリ金属、及びマグネシウム (Mg)、カルシウム (Ca)、ストロンチウム (Sr) 等のアルカリ土類金属、及びこれらを含む合金 (例えば、MgAg、AlLi)、ユーロピウム (Eu)、イッテルビウム (Yb) 等の希土類金属及びこれらを含む合金等が挙げられる。

[0224] 本発明の一態様に係る有機 EL 素子において、各層の膜厚は特に制限されないが、一般にピンホール等の欠陥を抑制し、印加電圧を低く抑え、発光効率をよくするため、通常は数 nm から 1 μm の範囲が好ましい。

[0225] [有機 EL 素子の製造方法]

本発明の一態様に係る有機 EL 素子において、各層の形成方法は特に限定されない。従来公知の真空蒸着法、スピコーティング法等による形成方法を用いることができる。発光層等の各層は、真空蒸着法、分子線蒸着法 (MBE 法) あるいは溶媒に溶かした溶液のディッピング法、スピコーティング法、キャスト法、バーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

[0226] [第 1 の組成物]

本発明の一態様に係る第 1 の組成物は、第 1 成分と、第 2 成分と、を含む

。

前記第1成分は、上述した式(1)で表される化合物である。

前記第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される。

[0227] 本発明の一態様に係る第1の組成物における第1成分と第2成分は、上述した本発明の一態様に係る第1の有機EL素子で説明した通りである。

[0228] 組成物の形態は特に限定されず、例えば、固体、溶液、及び膜(層)等が挙げられる。膜(層)としては、例えば、有機EL素子を構成する有機層(例えば正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層)が挙げられる。

[0229] [第2の組成物]

本発明の一態様に係る第2の組成物は、第1成分と、第2成分と、を含む。

前記第1成分は、上述した式(R1)及び式(R2)を充足する化合物であって、かつ、上述した式(M1)～式(M4)で表される構造を分子内に含まない化合物である。

前記第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される。

[0230] 本発明の一態様に係る第2の組成物における第1成分と第2成分は、上述した本発明の一態様に係る第2の有機EL素子で説明した通りである。

[0231] 組成物の形態は特に限定されず、例えば、固体、溶液、及び膜(層)等が挙げられる。膜(層)としては、例えば、有機EL素子を構成する有機層(例えば正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層)が挙げられる。

[0232] [電子機器]

本発明の一態様に係る電子機器は、本発明の一態様に係る有機EL素子又

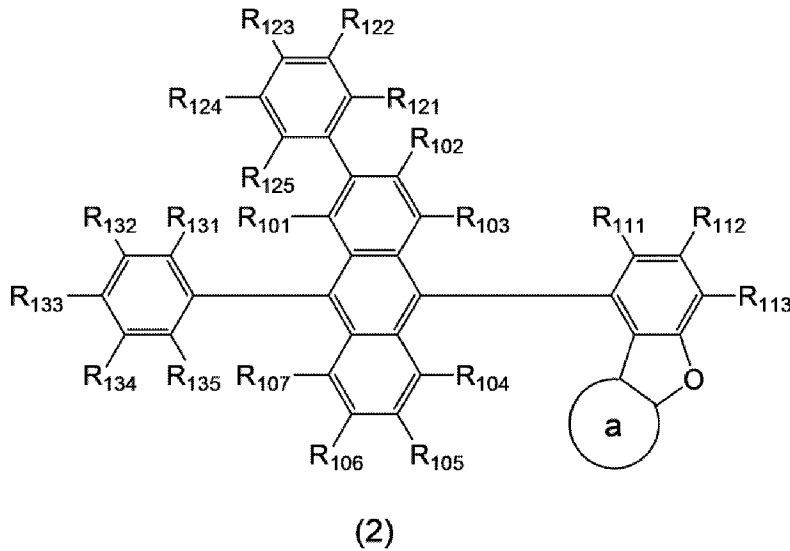
は後述する第3の有機EL素子を備えることを特徴とする。

電子機器の具体例としては、有機ELパネルモジュール等の表示部品、テレビ、携帯電話、又はパーソナルコンピュータ等の表示装置、及び、照明、又は車両用灯具等の発光装置等が挙げられる。

[0233] [新規な化合物]

本発明の一態様に係る化合物は、下記式(2)で表される化合物である。

[化56]



[式(2)中、

環aは、

置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数6～50の複素環である。

$R_{101} \sim R_{107}$ 、 $R_{111} \sim R_{113}$ 、 $R_{121} \sim R_{125}$ 、及び $R_{131} \sim R_{135}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基Rである。

ただし、 $R_{111} \sim R_{113}$ のうち少なくとも1つが置換基Rであるか、又は、前記環aが少なくとも1つの置換基を有する。

置換基Rは、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、
-Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃)、
-O- (R₉₀₄)、
-S- (R₉₀₅)、
-N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、
ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、
水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R₉₀₁～R₉₀₇は同一
でもよく、異なってもよい。

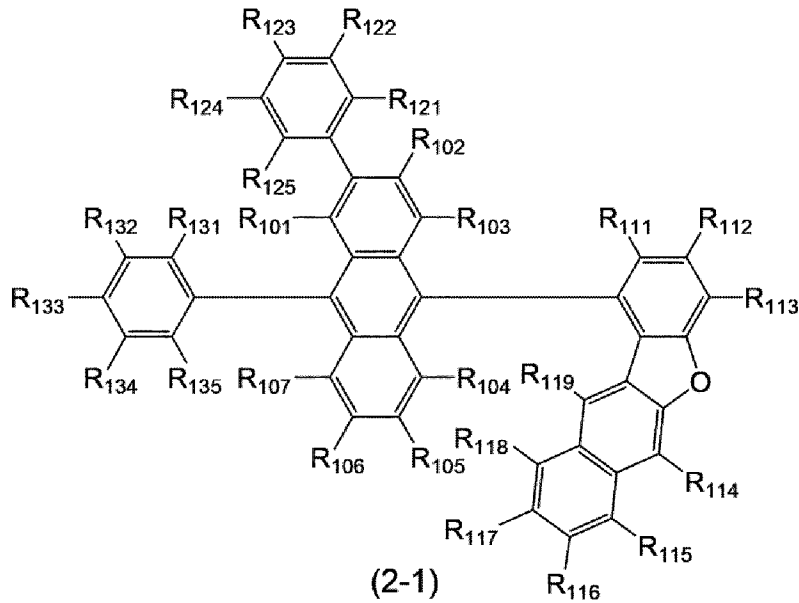
置換基 R が 2 個以上存在する場合、2 個以上の置換基 R は同一でもよく、
異なってもよい。]

[0234] 式 (2) において、環 a は、ベンゾフラン骨格と縮合環を形成する。すな
わち、環 a は、少なくとも 1 つの炭素炭素結合を有し、当該炭素炭素結合を
、ベンゾフラン骨格と共有する。

一実施形態において、環 a は、少なくとも 1 つの炭素炭素結合を有する六
員環構造を含み、当該炭素炭素結合を、ベンゾフラン骨格と共有する。

[0235] 一実施形態において、前記式 (2) で表される化合物は、下記式 (2-1
) で表される化合物である。

[化57]



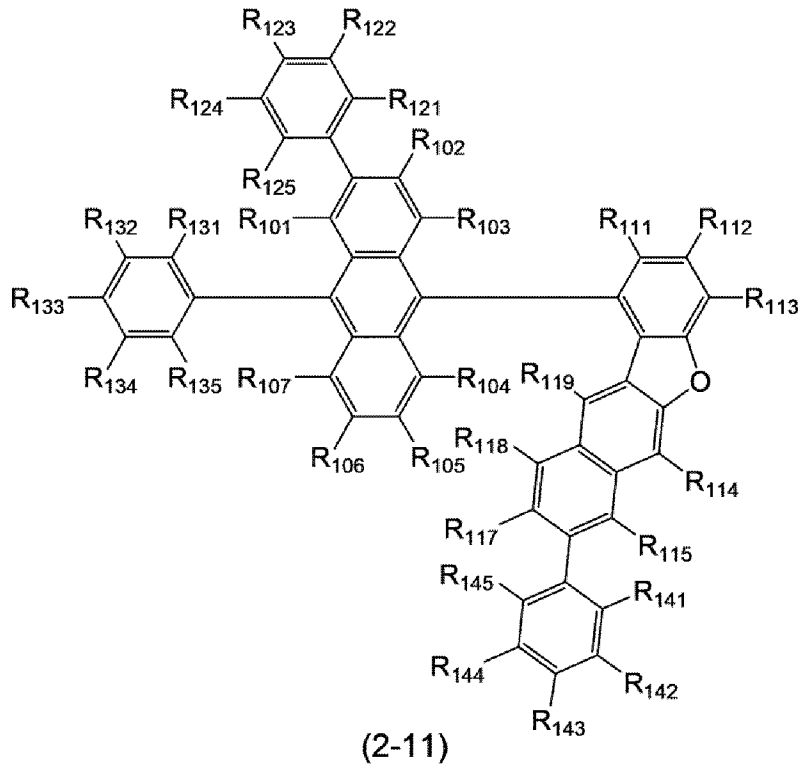
[式(2-1)中、

$R_{101} \sim R_{107}$ 、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{121} \sim R_{125}$ 、及び $R_{131} \sim R_{135}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基Rである。ただし、 $R_{111} \sim R_{119}$ のうち少なくとも1つが置換基Rである。

置換基Rは、前記式(2)で定義した通りである。]

[0236] 一実施形態において、前記式(2)で表される化合物は、下記式(2-1)で表される化合物である。

[化58]



[式 (2-11) 中、

$R_{101} \sim R_{107}$ 、 $R_{111} \sim R_{115}$ 、 $R_{117} \sim R_{119}$ 、 $R_{121} \sim R_{125}$ 、 $R_{131} \sim R_{135}$ 、及び $R_{141} \sim R_{145}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基Rである。

置換基Rは、前記式(2)で定義した通りである。]

[0237] 一実施形態において、置換基Rは、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

一実施形態において、置換基Rは、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

[0238] 一実施形態において、 $R_{101} \sim R_{107}$ 、 $R_{111} \sim R_{115}$ 、 $R_{117} \sim R_{119}$ 、 $R_{121} \sim R_{125}$ 、 $R_{131} \sim R_{135}$ 、及び $R_{141} \sim R_{145}$ が水素原子である。

[0239] 一実施形態において、前記式(2)で表される化合物は、少なくとも1つの重水素原子を含む。

[0240] 一実施形態において、水素原子である $R_{101} \sim R_{107}$ 、

置換基 R である $R_{101} \sim R_{107}$ が有する水素原子、
 水素原子である $R_{111} \sim R_{113}$ 、
 置換基 R である $R_{111} \sim R_{113}$ が有する水素原子、
 水素原子である $R_{121} \sim R_{125}$ 、
 置換基 R である $R_{125} \sim R_{125}$ が有する水素原子、
 水素原子である $R_{131} \sim R_{135}$ 、
 置換基 R である $R_{131} \sim R_{135}$ が有する水素原子、
 環 a が有する水素原子（環 a が有する置換基が有する水素原子を含む）、
 からなる群から選択される 1 以上の水素原子は、重水素原子である。

[0241] 一実施形態において、式 (2) における「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、

炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
 炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、
 炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、
 炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、
 環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、
 炭素数 1 ～ 50 のアルコキシ基、
 炭素数 1 ～ 50 のアルキルチオ基、
 環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールオキシ基、
 環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールチオ基、
 炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、
 $-Si(R_{41})(R_{42})(R_{43})$ 、
 $-C(=O)R_{44}$ 、 $-COOR_{45}$ 、
 $-S(=O)_2R_{46}$ 、
 $-P(=O)(R_{47})(R_{48})$ 、
 $-Ge(R_{49})(R_{50})(R_{51})$ 、
 $-N(R_{52})(R_{53})$ 、
 ヒドロキシ基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

環形成炭素数 6～50 のアリール基、及び

環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基からなる群から選択される。

$R_{41} \sim R_{43}$ 、 R_{46} 、及び $R_{49} \sim R_{53}$ は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数 1～50 のアルキル基、環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。 $R_{41} \sim R_{43}$ 、 R_{46} 、及び $R_{49} \sim R_{53}$ が 2 以上存在する場合、2 以上の $R_{41} \sim R_{43}$ 、 R_{46} 、及び $R_{49} \sim R_{53}$ のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。

[0242] 一実施形態において、式 (2) における「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、

炭素数 1～50 のアルキル基、

環形成炭素数 6～50 のアリール基、及び

環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基からなる群から選択される。

[0243] 一実施形態において、式 (2) における「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、

炭素数 1～18 のアルキル基、

環形成炭素数 6～18 のアリール基、及び

環形成原子数 5～18 の 1 価の複素環基からなる群から選択される。

[0244] 本発明の一態様に係る化合物は、目的物に合わせた既知の反応や原料を用いることで合成することができる。

[0245] 式 (2) で表される化合物の具体例は、上述した式 (1) で表される化合物の具体例のうち、式 (2) を満たすものが挙げられる。

[0246] [第 3 の有機 EL 素子]

本発明の一態様に係る第 3 の有機 EL 素子は、陰極と、陽極と、前記陰極と前記陽極との間に配置された 1 又は 2 以上の有機層と、を有し、前記 1 又は 2 以上の有機層のうち少なくとも 1 層は、式 (2) で表される化合物を含

む。

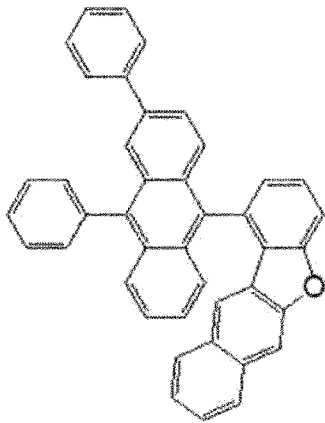
[0247] 第3の有機EL素子のその他の構成については、前記1又は2以上の有機層のうち少なくとも1層が、式(1)で表される化合物の代わりに式(2)で表される化合物を含む以外は、「本発明の一態様に係る第1の有機EL素子」について説明した内容を適用できる。

実施例

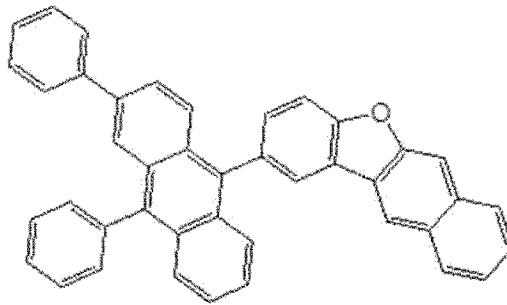
[0248] <化合物>

実施例の有機EL素子の製造に用いた第1成分を以下に示す。

[化59]

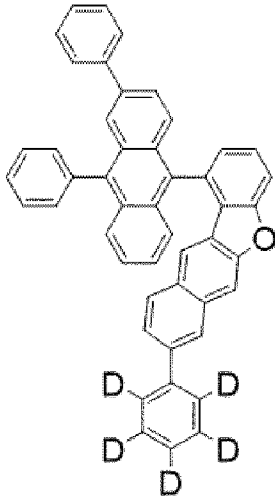


化合物1-1

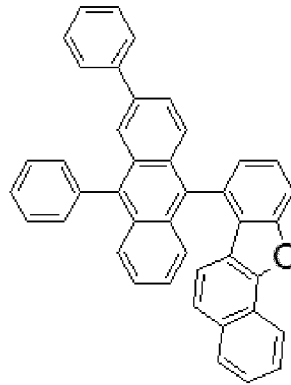


化合物1-2

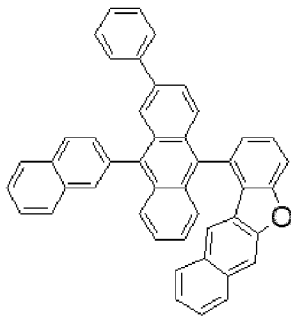
[化60]



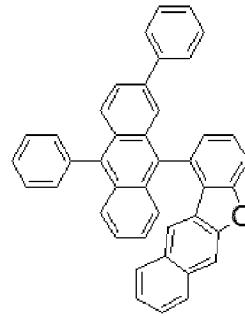
化合物 1 - 3



化合物 1 - 4



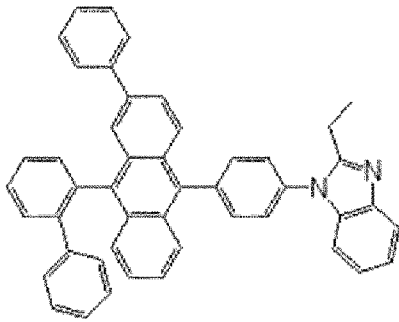
化合物 1 - 5



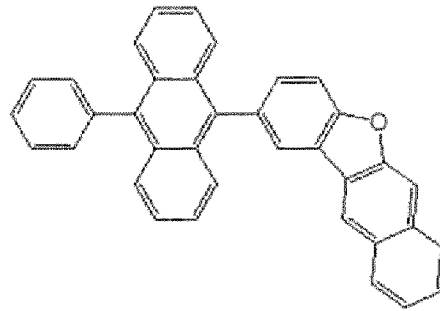
化合物 1 - 6

[0249] 比較例の有機EL素子の製造に用いた比較例化合物を以下に示す。

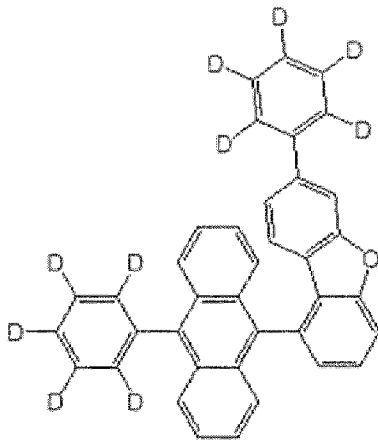
[化61]



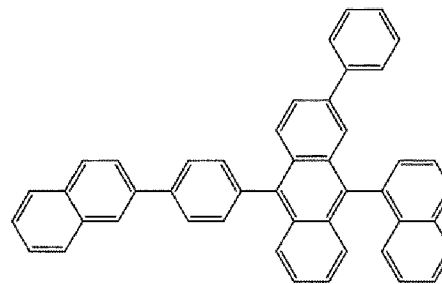
Ref 1-1



Ref 1-2

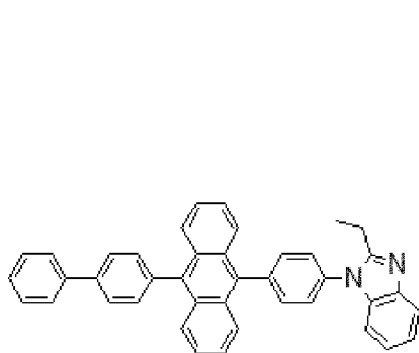


Ref 1-3

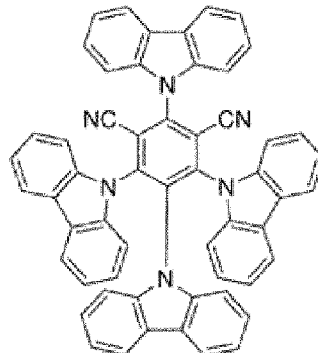


Ref 1-4

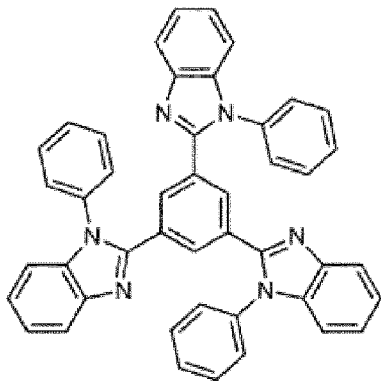
[化62]



Ref 1-5



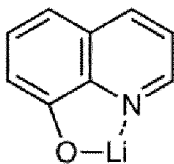
Ref 1-6



Ref 1-7

[0250] 実施例及び比較例の有機EL素子の製造に用いた第2成分を以下に示す。

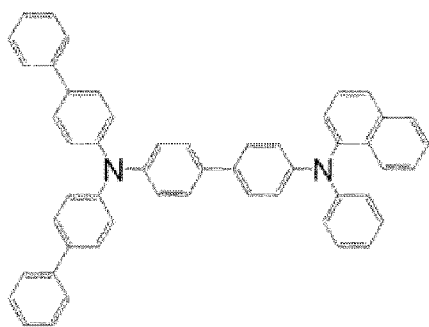
[化63]



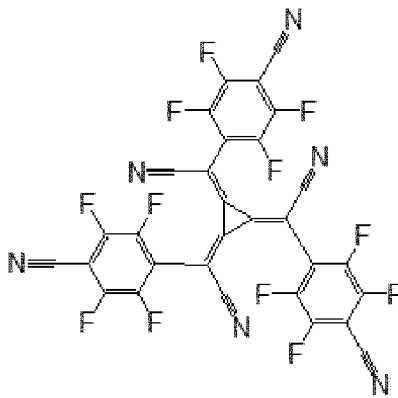
8-ヒドロキシキノリノラト-リチウム (Liq)

[0251] 実施例及び比較例の有機EL素子の製造に用いた他の化合物の構造を以下に示す。

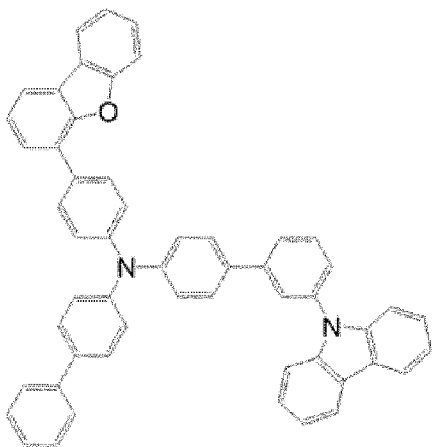
[化64]



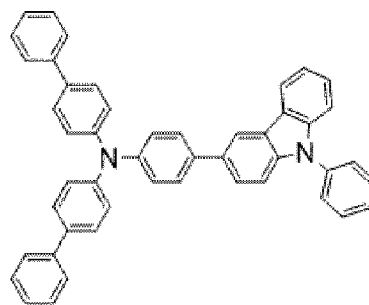
HT-1



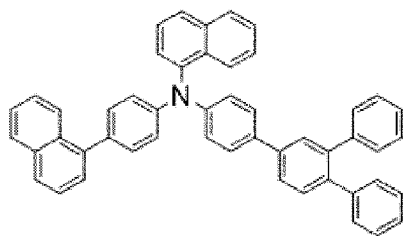
HA



HT-2

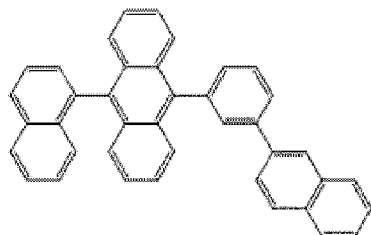


HT-3

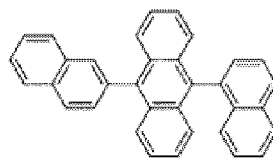


HT-4

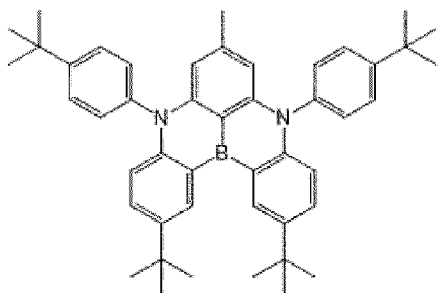
[化65]



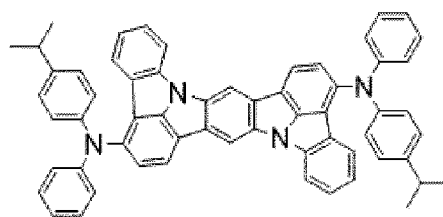
BH-1



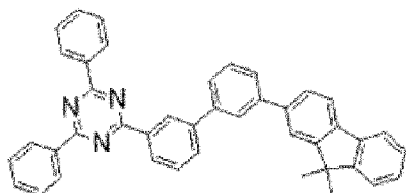
BH-2



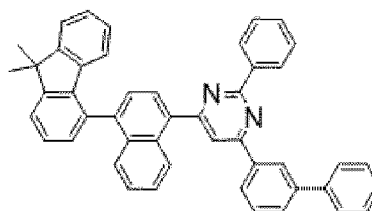
BD-1



BD-2



ET-1



ET-2

[0252] 実施例 1

<有機EL素子の作製>

有機EL素子を以下のように作製した。

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマティック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。ITOの膜厚は130nmとした。

洗浄後の透明電極付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-1及びHAを化合物HAの割合が3質量%となるように共蒸着し、

膜厚 10 nm の第 1 正孔輸送層を成膜した。

第 1 正孔輸送層上に、化合物 HT-1 を蒸着し、膜厚 80 nm の第 2 正孔輸送層を成膜した。

第 2 正孔輸送層上に、化合物 HT-2 を蒸着し、膜厚 5 nm の第 3 正孔輸送層を成膜した。

第 3 正孔輸送層上に化合物 BH-1 (ホスト材料) 及び化合物 BD-1 (ドーパント材料) を、化合物 BD-1 の割合が 1 質量%となるように共蒸着し、膜厚 20 nm の発光層を成膜した。

発光層上に、化合物 ET-1 を蒸着し、膜厚 5 nm の第 1 電子輸送層を形成した。

第 1 電子輸送層上に、化合物 1-1 及び 8-ヒドロキシキノリノラトリチウム (Liq) を、Liq の割合が 50 質量%となるように共蒸着し、膜厚 25 nm の第 2 電子輸送層を形成した。

第 2 電子輸送層上に、金属 Yb を蒸着して、膜厚 1 nm の電子注入層を形成した。

電子注入層上に、金属 Al を蒸着し、膜厚 50 nm の陰極を成膜した。

[0253] 実施例 1 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次の通りである。
ITO(130)/HT-1:HA(10:3%)/HT-1(80)/HT-2(5)/BH-1:BD-1 (20:1%)/ET-1(5)/化合物1-1:Liq(25:50%)/Yb(1)/Al(50)

括弧内の数字は膜厚 (単位: nm) を表す。また、括弧内においてパーセント表示された数字は、当該層における後者の化合物の割合 (質量%) を示す。

[0254] <有機 EL 素子の評価>

作製した有機 EL 素子について以下の評価を行った。結果を表 1 に示す。

・ 駆動電圧

有機 EL 素子の初期特性を、室温下、DC (直流) 定電流 10 mA/cm² 駆動で測定した。

・ EQE

電流密度が 10 mA/cm^2 となるように有機 EL 素子に電圧を印加し、EL 発光スペクトルを分光放射輝度計 CS-2000（コニカミノルタ株式会社製）にて計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、外部量子効率（EQE）（%）を算出した。以下、「 10 mA/cm^2 におけるEQE」とする。

次に、電流密度が 0.1 mA/cm^2 となるように有機 EL 素子に電圧を印加した以外は同様にして、EQE（%）を算出した。以下、「 0.1 mA/cm^2 におけるEQE」とする。

下記関係式に基づいて、EQE比率を求めた。

EQE比率 = (0.1 mA/cm^2 におけるEQE) / (10 mA/cm^2 におけるEQE)

[0255] 実施例 2～3

第2電子輸送層の形成において、化合物1-1の代わりに表1に示す化合物を用いた以外は実施例1と同じ方法で有機EL素子を作製し、評価した。結果を表1に示す。

[0256] 比較例 1～5

第2電子輸送層の形成において、化合物1-1の代わりに表1に示す化合物を用いた以外は実施例1と同じ方法で有機EL素子を作製し、評価した。結果を表1に示す。

[0257]

[表1]

	第2電子輸送層の 第1成分	電圧 [V]	EQE [%] (10 mA/cm ²)	EQE [%] (0.1 mA/cm ²)	EQE比率
実施例1	化合物1-1	3.60	10.3	10.3	1.00
実施例2	化合物1-2	3.60	10.3	10.3	1.00
実施例3	化合物1-3	3.60	8.3	7.8	0.94
比較例1	Ref1-1	3.60	10.3	8.9	0.86
比較例2	Ref1-2	3.60	10.2	7.2	0.70
比較例3	Ref1-3	3.65	10.2	7.2	0.70
比較例4	Ref1-4	3.50	10.3	7.3	0.70
比較例5	Ref1-5	3.60	8.4	5.4	0.64

[0258] 比較例1は、式(M1)で表される構造(電子受容性の構造)を分子内に含む、従来、有機EL素子の電子輸送材料等として用いられてきた化合物(化合物Ref1-1)を用いた有機EL素子であり、EQE比率が低く、低電流密度においてEQEが低下した。これは、低電流密度領域では、高電流密度領域と比較して電子受容性の構造の影響が大きく、電子過剰となってキャリアバランスが崩れたことに起因すると考えられる。

また、特定の構造条件を満たさない化合物を用いた比較例2~5の有機EL素子もEQE比率が低かった。

特定の構造条件を充足する化合物を用いた本発明の第1の有機EL素子(実施例1~3)は、比較例1~5の有機EL素子と比較して、同等程度の駆動電圧を示し、かつ高電流密度(10 mA/cm²)において同等程度のEQEを示した。一方で、低電流密度(0.1 mA/cm²)においては、実施例1及び2の有機EL素子が高電流密度(10 mA/cm²)におけるEQEと同等程度のEQEを示したのに対し、比較例1~5の有機EL素子は低いEQEを示した。

[0259] 実施例4

<有機EL素子の作製>

有機EL素子を以下のように作製した。

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマティック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。ITOの膜厚は130nmとした。

洗浄後の透明電極付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-3及びHAを化合物HAの割合が3質量%となるように共蒸着し、膜厚10nmの第1正孔輸送層を成膜した。

第1正孔輸送層上に、化合物HT-3を蒸着し、膜厚80nmの第2正孔輸送層を成膜した。

第2正孔輸送層上に、化合物HT-4を蒸着し、膜厚5nmの第3正孔輸送層を成膜した。

第3正孔輸送層上に化合物BH-2（ホスト材料）及び化合物BD-2（ドーパント材料）を、化合物BD-1の割合が1質量%となるように共蒸着し、膜厚20nmの発光層を成膜した。

発光層上に、化合物ET-2を蒸着し、膜厚5nmの第1電子輸送層を形成した。

第1電子輸送層上に、化合物1-4及び8-ヒドロキシキノリノラトーチウム（Liq）を、Liqの割合が50質量%となるように共蒸着し、膜厚25nmの第2電子輸送層を形成した。

第2電子輸送層上に、金属Ybを蒸着して、膜厚1nmの電子注入層を形成した。

電子注入層上に、金属Alを蒸着し、膜厚50nmの陰極を成膜した。

[0260] 実施例4の有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次の通りである。
ITO(130)/HT-3:HA(10:3%)/HT-3(80)/HT-4(5)/BH-2:BD-2 (20:1%)/ET-2(5)/化合物1-4:Liq(25:50%)/Yb(1)/Al(50)

括弧内の数字は膜厚（単位：nm）を表す。また、括弧内においてパーセント表示された数字は、当該層における後者の化合物の割合（質量％）を示す。

[0261] 実施例 5 ～ 6

第 2 電子輸送層の形成において、化合物 1 - 4 の代わりに表 2 に示す化合物を用いた以外は実施例 4 と同じ方法で有機 EL 素子を作製し、評価した。結果を表 2 に示す。

[0262] [表2]

	第 2 電子輸送層の 第 1 成分	電圧 [V]	EQE [%] (10 mA/cm ²)	EQE [%] (0.1 mA/cm ²)	EQE比率
実施例4	化合物1-4	3.61	10.5	9.5	0.90
実施例5	化合物1-5	3.61	10.7	9.7	0.91
実施例6	化合物1-6	3.58	10.6	9.8	0.92

[0263] <化合物の物性評価>

第 1 成分と比較例化合物について、下記の測定方法により、GSP（巨大表面電位）勾配（GSP__slope）及び最低空軌道のエネルギー準位（LUMO）を測定した。結果を表 3 に示す。

[0264] ・ GSP（巨大表面電位）勾配

巨大表面電位（GSP: Giant Surface Polarization）勾配（GSP__slope）は、表面電位の膜厚依存性を測定することで求めた。

チャンバー内の測定対象物に光が当たらないように遮光し、真空度 10^{-5} Pa 下で、ITO 基板上に測定対象物を蒸着レート $2 \text{ \AA} / \text{s}$ で 20 nm 蒸着し、蒸着膜の表面電位（単位：mV）を測定した。これを 5 回繰り返し、縦軸を表面電位（単位：mV）、横軸を膜厚（単位：nm）としてプロットした図の傾きの値を、各プロットを最小二乗法で直線にフィッティングして求め、GSP__slope（単位：mV/nm）とした。真空中での表面電位の測定は、ケルビンプローブ装置（株式会社東京インスツルメンツ社製、「

超高真空ケルビンプローブ」)を用いた。

[0265] なお、蒸着と表面電位測定は、いずれも遮光かつ真空下で行った。また、蒸着と測定とを繰り返す間を通じて、試料は同じチェンバー内（遮光かつ真空下）においた。「これを5回繰り返す」とは、試料（ITO基板）上に20nm蒸着し、表面電位を測定し、同じ試料に追加で20nm（すなわち、蒸着膜の厚さが合計40nmとなるように）蒸着し、表面電位を測定し、同じ試料に追加で20nm（すなわち、蒸着膜の厚さが合計60nmとなるように）蒸着し、表面電位を測定し、同じ試料に追加で20nm（すなわち、蒸着膜の厚さが合計80nmとなるように）蒸着し、表面電位を測定し、同じ試料に追加で20nm（すなわち、蒸着膜の厚さが合計100nmとなるように）蒸着し、表面電位を測定することを意味する。

（参考文献）Y. Noguchi, Y. Miyazaki, Y. Tanaka, N. Sato, Y. Nakayama, T. D. Schmidt, W. Brutting, H. Ishii, Charge accumulation at organic semiconductor interfaces due to a permanent dipole moment and its orientational order in bilayer devices. J. Appl. Phys. 111, 114508 (2012).

[0266] ・最低空軌道のエネルギー準位（LUMO）

最低空軌道のエネルギー準位（LUMO: Lowest Unoccupied Molecular Orbital）は、微分パルスボルタンメトリー法を用いて、次の数式（数1Y）により算出した（単位: eV）。

$$LUMO = -1.19 \times (E_{re} - E_{fc}) - 4.78 \text{ eV} \quad (\text{数1Y})$$

[0267] 数式（数1Y）において、 E_{re} 及び E_{fc} は、次の通りである。

E_{re} : 測定対象物の第一還元電位（DPV, Negativescan）

E_{fc} : フェロセンの第一酸化電位（DPV, Positivescan）

, (ca. +0.55 V vs Ag/AgCl)

[0268] 酸化還元電位は、電気化学アナライザー（ALS社製: CHI852D）を用いて微分パルスボルタンメトリー（DPV）法で測定した。測定に用いた試料溶液は、溶媒としてN,N-ジメチルホルムアミド（DMF）を用い

、測定対象物を、その濃度が1.0 mmol/Lとなるように溶解させた。支持電解質として、テトラブチルアンモニウムヘキサフルオロホスフェート (TBHP) を、その濃度が100 mmol/Lとなるように溶解させて調製した。

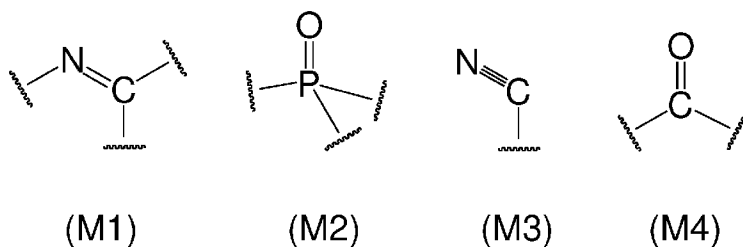
作用電極としては、グラッシーカーボン電極を用いた。対向電極としては、白金 (Pt) 電極を用いた。

(参考文献) M. E. Thompson, et. al., *Organic Electronics*, 6 (2005), p. 11-20, *Organic Electronics*, 10 (2009), p. 515-520

[0269] <化合物の構造条件>

第1成分と比較例化合物について、「式(M1)～式(M4)で表される構造を分子内に含まない」という構造条件を充足するか否かを表3に示す。

[化66]



[0270] 実施例7

実施例1と同じ方法で有機EL素子を作製し、評価した。結果を表3に示す。

[0271] 実施例8

第2電子輸送層の形成において、化合物1-1の代わりに化合物1-2を用いた以外は実施例7と同じ方法で有機EL素子を作製し、評価した。結果を表3に示す。

[0272] 比較例6～10

第2電子輸送層の形成において、化合物1-1の代わりに表3に示す化合物を用いた以外は実施例7と同じ方法で有機EL素子を作製し、評価した。結果を表3に示す。

[0273]

[表3]

	第2電子輸送層の 第1成分	第1成分の GSP_slope [mV/nm]	第1成分の LUMO [eV]	構造条件	電圧 [V]	EQE比率
実施例7	化合物1-1	51	-2.19	充足	3.60	1.00
実施例8	化合物1-2	42	-2.13	充足	3.60	1.00
比較例6	Ref1-1	47	-2.26	非充足	3.60	0.86
比較例7	Ref1-2	37	-2.07	充足	3.60	0.70
比較例8	Ref1-3	35	-2.09	充足	3.65	0.70
比較例9	Ref1-5	51	-2.80	非充足	6.30	0.45
比較例10	Ref1-6	43	-1.86	非充足	4.80	0.88

[0274] 表3より、GSP_slopeとLUMOが所定の範囲内にあり、かつ、特定の構造条件を充足する化合物を用いた本発明の第2の有機EL素子（実施例3及び4）は、駆動電圧が低く、かつEQE比率が高く、低電流密度（ 0.1 mA/cm^2 ）においてもEQEが維持されたことが分かった。

Ref1-1は、GSP_slopeとLUMOが所定の範囲内にあるが、上述した構造条件を充足しない（式（M1）で表される構造を分子内に含む）。Ref1-1を用いた比較例6は、EQE比率が低く、低電流密度においてEQEが低下したことが分かった。

Ref1-2及びRef1-3は、LUMOが所定の範囲内にあり、上述した構造条件を充足するが、GSP_slopeが所定の範囲外である。これらの化合物を用いた比較例7及び8は、LUMOが所定の範囲内にあることから電圧は実施例7及び8と同等程度であったが、EQE比率が低く、低電流密度においてEQEが低下したことが分かった。

Ref1-5は、GSP_slopeが所定の範囲内にあるが、LUMOが所定の範囲外であり、また上述した構造条件を充足しない（式（M3）で表される構造を分子内に含む）。Ref1-6は、GSP_slopeが所定の範囲内にあるが、LUMOが所定の範囲外であり、また上述した構造条

件を充足しない（式（M1）で表される構造を分子内に含む）。これらの化合物を用いた比較例9及び10は、LUMOが所定の範囲外であることから駆動電圧が非常に高く、また、EQE比率が低く、低電流密度においてEQEが低下したことが分かった。

[0275] <化合物の合成>

（合成例1）化合物1-3の合成

下記合成経路で、化合物1-3を合成した。

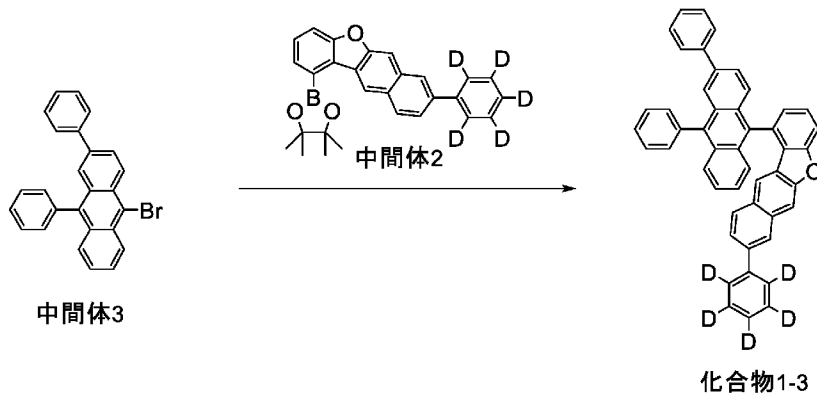
[化67]



[0276] (1) 中間体2の合成

中間体1（36.3g）、ビス（ピナコラート）ジボロン（55.2g）、及び酢酸カリウム（32.0g）に、NMP（360mL）を加えて105℃に昇温し、30分アルゴンでバブリングした。PCy₃（2.4g）及びPd₂（dba）₃（4.0g）を加えて、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら2.5時間、105℃で加熱した。反応溶液を室温まで放冷後、セライトろ過し、酢酸エチルにて洗浄した。ろ液を水で3回洗浄し、有機相を濃縮して得られた残渣をカラムクロマトグラフィに付し、中間体2（34.7g、収率75%）を白色固体として得た。

[0277] [化68]



[0278] (2) 化合物 1-3 の合成

中間体 3 (9.2 g)、Pd(PPh₃)₄ (0.5 g)、及び Aliquat 336 (0.9 g) に、トルエン (180 mL) 及び 2 M 炭酸カリウム水溶液 (22 mL) を加え、30 分アルゴンでバブリングした。85°C に昇温し、中間体 2 (8.9 g) を加えて 19 時間加熱攪拌した。反応溶液を室温まで放冷後、水を加えて析出した固体をろ取して得られた粗生成物をシリカゲルクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで再結晶する事で化合物 1-3 を白色固体 (6.3 g、収率 46%) として得た。

マススペクトル分析の結果、分子量 627.80 に対して $m/e = 628$ であり、目的物の化合物 1-3 であると同定した。

[0279] 上記に本発明の実施形態及び／又は実施例を幾つか詳細に説明したが、当業者は、本発明の新規な教示及び効果から実質的に離れることなく、これら例示である実施形態及び／又は実施例に多くの変更を加えることが容易である。従って、これらの多くの変更は本発明の範囲に含まれる。

この明細書に記載の文献、及び本願のパリ条約による優先権の基礎となる出願の内容を全て援用する。

請求の範囲

[請求項1]

陰極と、

陽極と、

前記陰極と前記陽極との間に配置された1又は2以上の有機層と、
を有し、

前記1又は2以上の有機層のうち少なくとも1層が、第1成分と、
第2成分と、を含み、

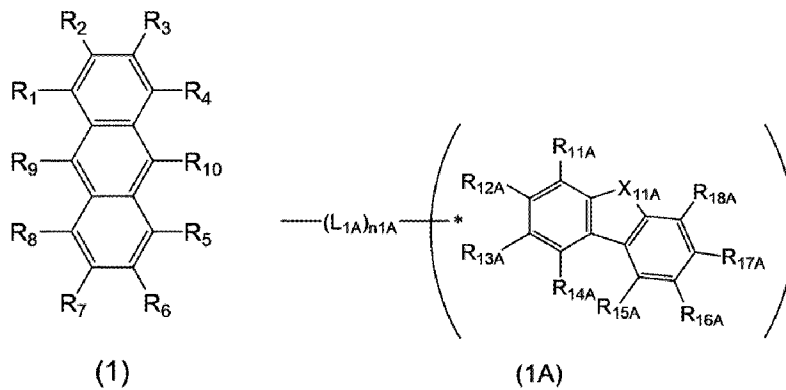
前記第1成分は、下記式(1)で表される化合物であり、

前記第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土
類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、
アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属
錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される

、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化69]



[式(1)中、

$R_1 \sim R_{10}$ のうち少なくとも1つは、式(1A)で表される基である。

前記式(1A)で表される基ではない $R_1 \sim R_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基Aである。ただし、 $R_1 \sim R_{10}$ のうち少なくとも3つは、それぞれ独立に、前記式(1A)で表される基、置換

基A、又は重水素原子である水素原子である。

式(1A)中、

L_{1A} は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基である。

。

n_{1A} は0～3の整数である。

n_{1A} が0である場合、 $(L_{1A})_{n_{1A}}$ は単結合である。

n_{1A} が2又は3である場合、複数の L_{1A} は互いに直列状に連結し、括弧内の構造は、アントラセン骨格から最も離れた L_{1A} に結合する。複数の L_{1A} は同一でもよく、異なってもよい。

X_{11A} は、C(R_{21A})(R_{22A})、N(R_{23A})、O、又はSである。

$R_{11A} \sim R_{18A}$ のうち隣接する2つ以上からなる1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は前記環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の単環が形成される場合、当該単環を構成する原子のうち1つが L_{1A} と結合するか、又は、当該単環の形成に寄与しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 、及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

前記置換もしくは無置換の縮合環が形成される場合、当該縮合環を構成する原子のうち1つが L_{1A} と結合するか、又は、当該縮合環の形成に寄与しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 、及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つが L_{1A} との結合を表す。

前記単環及び縮合環が形成されない場合、 $R_{11A} \sim R_{18A}$ 及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ のうち1つは L_{1A} との結合を表す。

前記 L_{1A} との結合を表さず、かつ前記環を形成しない $R_{11A} \sim R_{18A}$ 及び $R_{21A} \sim R_{23A}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 A である。

式(1A)で表される基が2以上存在する場合、2以上の式(1A)で表される基は互いに同一でもよく、異なってもよい。

置換基 A は、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

—O—(R_{904})、

—S—(R_{905})、

—N(R_{906})(R_{907})、

ハロゲン原子、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

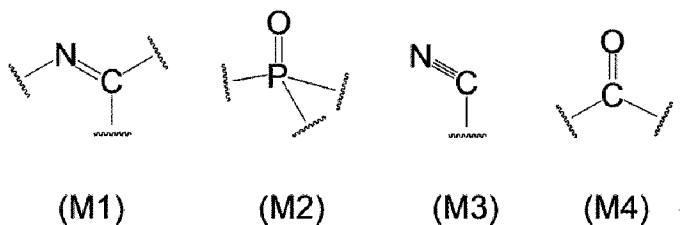
置換基 A が2以上存在する場合、2以上の置換基 A は互いに同一でもよく、異なってもよい。

$R_{901} \sim R_{907}$ が2以上存在する場合、2以上の $R_{901} \sim R_{907}$ は互

いに同一でもよく、異なってもよい。

ただし、前記式(1)で表される化合物は、下記式(M1)で表される構造、下記式(M2)で表される構造、下記式(M3)で表される構造、及び下記式(M4)で表される構造を分子内に含まない。

[化70]



[請求項2] $R_1 \sim R_{10}$ のうち少なくとも3つが、それぞれ独立に、前記式(1A)で表される基、又は置換基Aである、請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項3] $R_1 \sim R_{10}$ のうち2つが、それぞれ独立に、置換基Aであり、他の $R_1 \sim R_{10}$ のうち1つが、前記式(1A)で表される基である、請求項1又は2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項4] R_9 及び R_{10} が、それぞれ独立に、前記式(1A)で表される基、又は置換基Aである、請求項1～3のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項5] R_9 及び R_{10} の一方が、前記式(1A)で表される基であり、 R_9 及び R_{10} の他方が、置換基Aである、請求項1～4のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

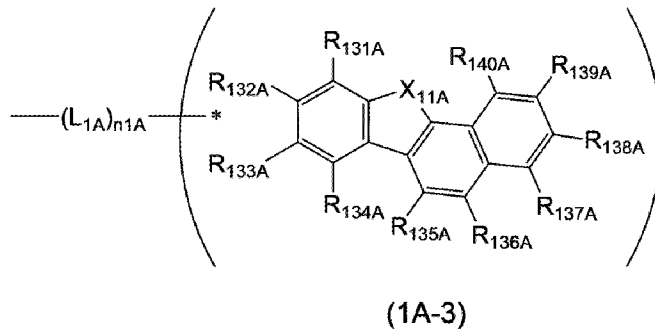
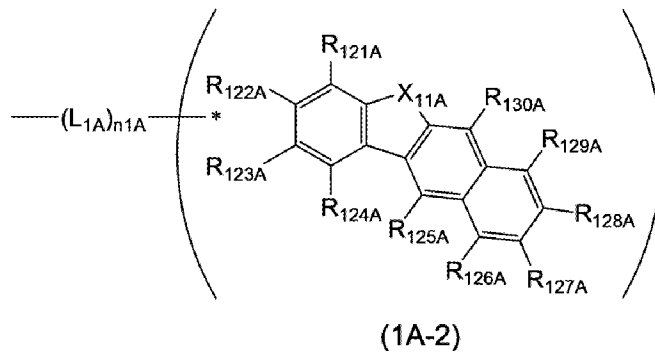
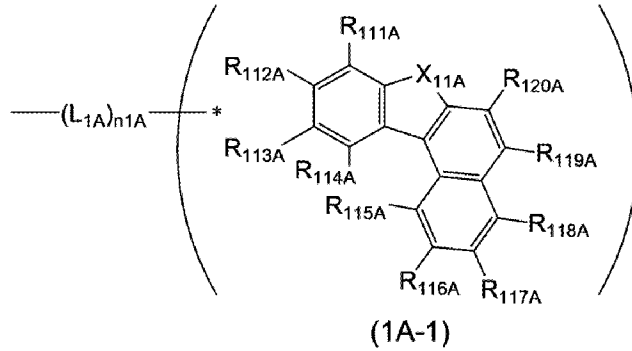
[請求項6] R_2 、 R_9 、及び R_{10} が、それぞれ独立に、前記式(1A)で表される基、又は置換基Aである、請求項1又は2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項7] R_9 及び R_{10} の一方が、前記式(1A)で表される基であり、 R_9 及び R_{10} の他方及び R_2 が、それぞれ独立に、置換基Aである、請求項6に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項8] 前記式(1A)で表される基が、下記式(1A-1)～(1A-3

) のいずれかで表される基である、請求項 1～7 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化71]



[式 (1A-1) ~ (1A-3) 中、 L_{1A} 及び n_{1A} は、式 (1) で定義した通りである。

X_{11A} は、 $C(R_{21A})(R_{22A})$ 、 $N(R_{23A})$ 、 O 、又は S である。

$R_{21A} \sim R_{23A}$ 、 $R_{111A} \sim R_{120A}$ 、 $R_{121A} \sim R_{130A}$ 、及び $R_{131A} \sim R_{140A}$ のうち 1 つは、 L_{1A} との結合を表す。

前記 L_{1A} との結合を表さない $R_{21A} \sim R_{23A}$ 、 $R_{111A} \sim R_{120A}$ 、 $R_{121A} \sim R_{130A}$ 、及び $R_{131A} \sim R_{140A}$ は、それぞれ独立に、水素

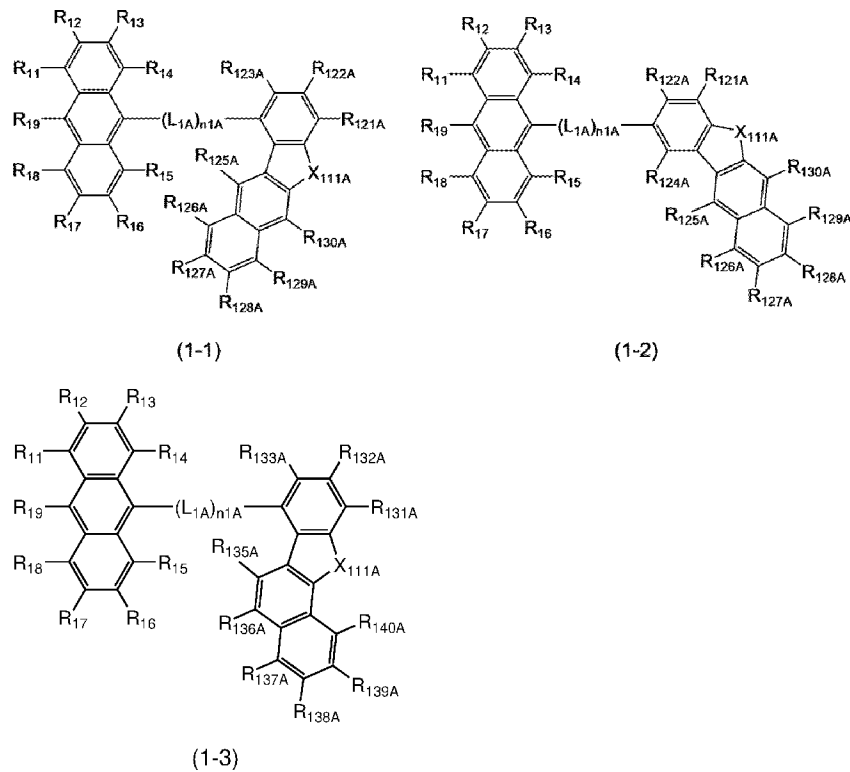
原子、又は置換基Aである。

置換基Aは、式(1)で定義した通りである。]

[請求項9] X_{111A} が、O又はSである、請求項1～8のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項10] 前記式(1)で表される化合物が、下記式(1-1)～(1-3)のいずれかで表される化合物である、請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化72]



[式(1-1)～(1-3)中、 L_{1A} 及び n_{1A} は、式(1)で定義した通りである。

X_{111A} は、O又はSである。

R_{12} 及び R_{19} は、それぞれ独立に、置換基Aである。

R_{11} 、 R_{13} ～ R_{18} 、 R_{121A} ～ R_{140A} は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基Aである。

置換基Aは、式(1)で定義した通りである。

ただし、前記式(1-1)～(1-3)のいずれかで表される化合

X_{111A} は、O又はSである。

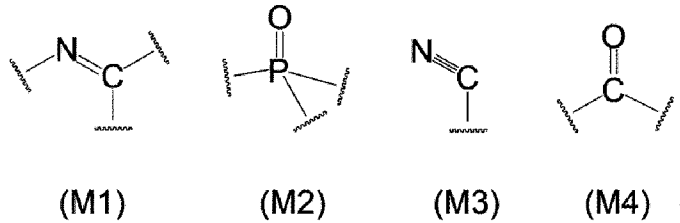
R_{12} 、 R_{13} 、及び R_{19} は、それぞれ独立に、置換基Aである。

$R_{121A} \sim R_{140A}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基Aである。

置換基Aは、式(1)で定義した通りである。

ただし、前記式(1-11)～(1-41)のいずれかで表される化合物は、下記式(M1)で表される構造、下記式(M2)で表される構造、下記式(M3)で表される構造、及び下記式(M4)で表される構造を分子内に含まない。

[化75]



[請求項13]

陰極と、

陽極と、

前記陰極と前記陽極との間に配置された1又は2以上の有機層と、
を有し、

前記1又は2以上の有機層のうち少なくとも1層が、第1成分と、
第2成分と、を含み、

前記第1成分は、下記式(R1)及び式(R2)を充足する化合物
であって、かつ、下記式(M1)～式(M4)で表される構造を分子
内に含まない化合物であり、

前記第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土
類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、
アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属
錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される

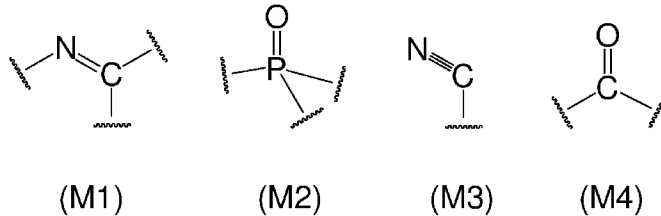
、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$40 \text{ mV/nm} \leq \text{GSP_slope} \dots (\text{R1})$$

$$-2.80 \text{ eV} < \text{LUMO} < -1.86 \text{ eV} \dots (\text{R2})$$

[化76]



(式 (R1) 中、GSP_slope は巨大表面電位勾配を示す。式 (R2) 中、LUMO は最低空軌道のエネルギー準位を示す。)

[請求項14] 前記第1成分が、下記式 (R1-1) を充足する、請求項13に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$\text{GSP_slope} \leq 60 \text{ mV/nm} \dots (\text{R1-1})$$

(式 (R1-1) 中、GSP_slope は前記式 (R1) で定義した通りである。)

[請求項15] 前記第1成分が、下記式 (R1-2) を充足する、請求項13又は14に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$41 \text{ mV/nm} \leq \text{GSP_slope} \dots (\text{R1-2})$$

(式 (R1-2) 中、GSP_slope は前記式 (R1) で定義した通りである。)

[請求項16] 前記第1成分が、下記式 (R1-3) を充足する、請求項13に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$41 \text{ mV/nm} \leq \text{GSP_slope} \leq 60 \text{ mV/nm} \dots (\text{R1-3})$$

(式 (R1-3) 中、GSP_slope は前記式 (R1) で定義した通りである。)

[請求項17] 前記第1成分が、下記式 (R1-4) を充足する、請求項13に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$42 \text{ mV/nm} \leq \text{GSP_slope} \leq 51 \text{ mV/nm} \dots (\text{R}1-4)$$

(式 (R1-4) 中、GSP_slope は前記式 (R1) で定義した通りである。)

[請求項18] 前記第1成分が、下記式 (R2-1) を充足する、請求項13~17のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$-2.60 \text{ eV} \leq \text{LUMO} \leq -2.00 \text{ eV} \dots (\text{R}2-1)$$

(式 (R2-1) 中、LUMO は前記式 (R2) で定義した通りである。)

[請求項19] 前記第1成分が、下記式 (R2-2) を充足する、請求項13~17のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$-2.26 \text{ eV} \leq \text{LUMO} \leq -2.09 \text{ eV} \dots (\text{R}2-2)$$

(式 (R2-2) 中、LUMO は前記式 (R2) で定義した通りである。)

[請求項20] 前記第1成分が、下記式 (R1-3) 及び下記式 (R2-2) を充足する、請求項13に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$41 \text{ mV/nm} \leq \text{GSP_slope} \leq 60 \text{ mV/nm} \dots (\text{R}1-3)$$

$$-2.26 \text{ eV} \leq \text{LUMO} \leq -2.09 \text{ eV} \dots (\text{R}2-2)$$

(式 (R1-3) 中、GSP_slope は前記式 (R1) で定義した通りである。式 (R2-2) 中、LUMO は前記式 (R2) で定義した通りである。)

[請求項21] 前記第2成分が、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、及びアルカリ金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される、請求項1~20のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項22] 前記第1成分と前記第2成分との合計に対する前記第1成分の割合が30~70質量%である、請求項1~21のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項23] 陽極と、発光層と、電子輸送帯域と、陰極と、をこの順に含み、前記電子輸送帯域における少なくとも1層が、前記第1成分と、前記第2成分と、を含む、請求項1～22のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項24] 前記電子輸送帯域が、前記発光層の側から少なくとも第1の層と第2の層とをこの順に有し、

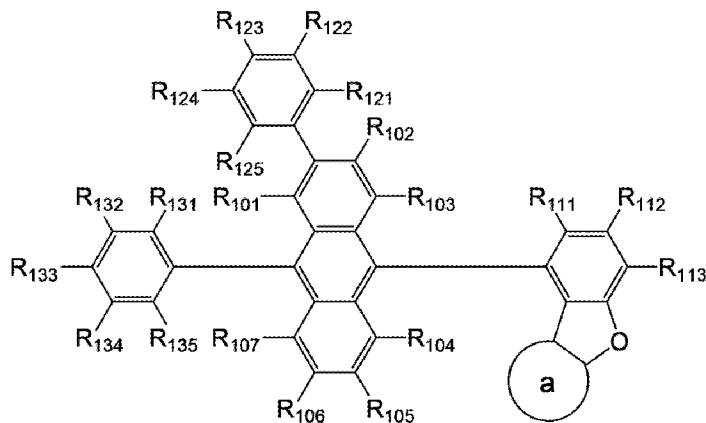
前記第2の層が、前記第1成分と、前記第2成分と、を含む、請求項23に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項25] 前記第2の層が、実質的に、前記第1成分と、前記第2成分と、のみからなる、請求項24に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項26] 請求項1～25のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器。

[請求項27] 下記式(2)で表される化合物。

[化77]



(2)

[式(2)中、

環aは、

置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の芳香族炭化水素環、

又は

置換もしくは無置換の環形成原子数6～50の複素環である。

$R_{101} \sim R_{107}$ 、 $R_{111} \sim R_{113}$ 、 $R_{121} \sim R_{125}$ 、及び $R_{131} \sim R_{135}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基Rである。

ただし、 $R_{111} \sim R_{113}$ のうち少なくとも1つが置換基Rであるか、又は、前記環aが少なくとも1つの置換基を有する。

置換基Rは、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

—O—(R_{904})、

—S—(R_{905})、

—N(R_{906})(R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

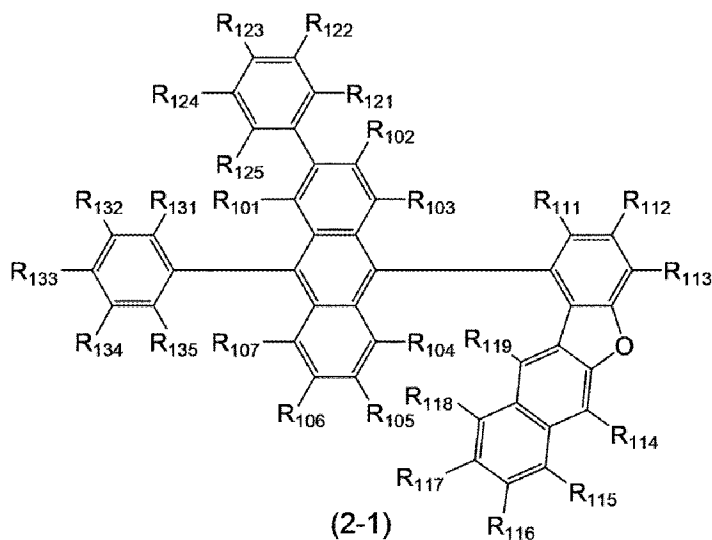
。

$R_{901} \sim R_{907}$ が2個以上存在する場合、2個以上の $R_{901} \sim R_{907}$ は同一でもよく、異なってもよい。

置換基Rが2個以上存在する場合、2個以上の置換基Rは同一でもよく、異なってもよい。]

[請求項28] 前記式(2)で表される化合物が、下記式(2-1)で表される化合物である、請求項27に記載の化合物。

[化78]



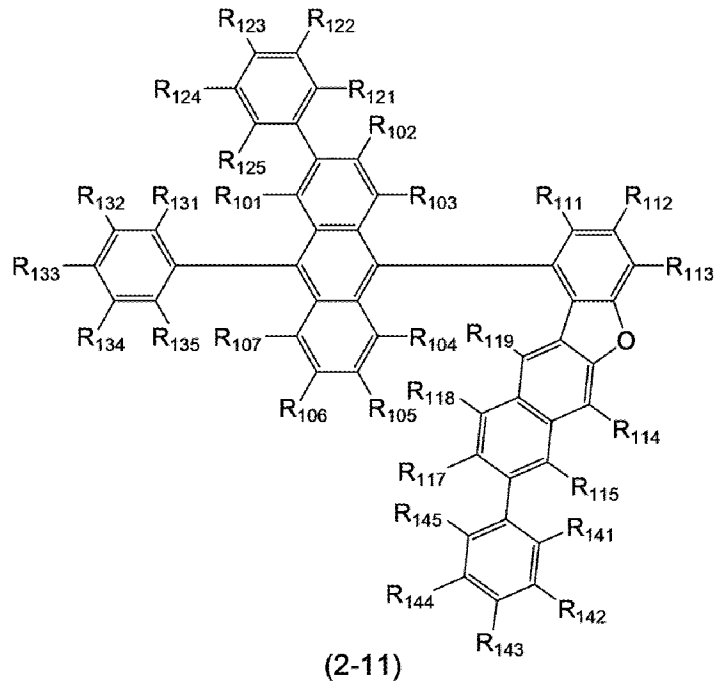
[式(2-1)中、

$R_{101} \sim R_{107}$ 、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{121} \sim R_{125}$ 、及び $R_{131} \sim R_{135}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基Rである。ただし、 $R_{111} \sim R_{119}$ のうち少なくとも1つが置換基Rである。

置換基Rは、前記式(2)で定義した通りである。]

[請求項29] 前記式(2)で表される化合物が、下記式(2-11)で表される化合物である、請求項27に記載の化合物。

[化79]

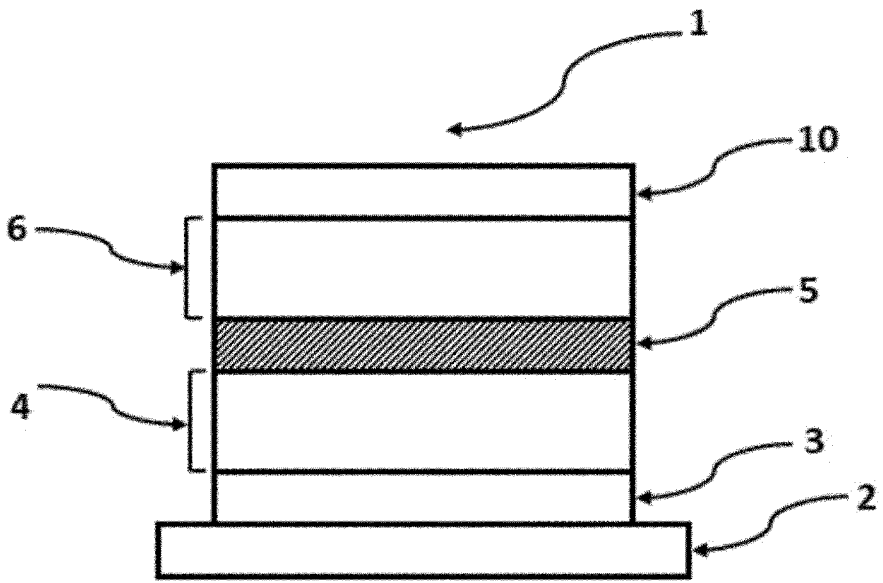


[式(2-11)中、

$R_{101} \sim R_{107}$ 、 $R_{111} \sim R_{115}$ 、 $R_{117} \sim R_{119}$ 、 $R_{121} \sim R_{125}$ 、 $R_{131} \sim R_{135}$ 、及び $R_{141} \sim R_{145}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基Rである。

置換基Rは、前記式(2)で定義した通りである。]

[図1]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/009774

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER		
<i>H10K 50/165</i> (2023.01)i; <i>C07F 1/02</i> (2006.01)i; <i>H10K 85/60</i> (2023.01)i; <i>H10K 101/30</i> (2023.01)n FI: H10K50/165; C07F1/02; H10K85/60; H10K101:30		
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) H10K50/165; C07F1/02; H10K85/60; H10K101/30		
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 1971-2024 Registered utility model specifications of Japan 1996-2024 Published registered utility model applications of Japan 1994-2024		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	CN 114122299 A (JIANGSU MARCH SCIENCE AND TECHNOLOGY CO., LTD.) 01 March 2022 (2022-03-01) claims (in particular, claims 1, 6-7), general formula (I-1), compounds I-2, I-3, I-4, I-5, general formula 2-5, compound II-1 to II-52, device examples, paragraph [0182]	1-12, 21-26
Y		1-12, 21-26
A		13-20, 27-29
X	CN 110330472 A (JILIN OPTICAL AND ELECTRONIC MATERIALS CO., LTD.) 15 October 2019 (2019-10-15) claims (in particular, claims 1, 5, 9), chemical formula 1, compounds 1-72 (in particular, compound 6)	27-29
Y		1-12, 21-26
A		13-20
<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 "D" document cited by the applicant in the international application "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 25 April 2024		Date of mailing of the international search report 14 May 2024
Name and mailing address of the ISA/JP Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/009774

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2022/0384733 A1 (LG CHEM, LTD.) 01 December 2022 (2022-12-01) claims (chemical formula 1), paragraph [0131] (in particular, p. 264, 3rd row and left column, compound)	27-29
A		1-26

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

(Invention 1) Claims 1-12 and 21-26

(Invention 2) Claims 13-20

(Invention 3) Claims 27-29

(Invention 1) Claims 1-12 and 21-26

Claims 1-12 and 21-26 have the special technical feature of an “organic electroluminescence element comprising a negative electrode, a positive electrode, and one or more organic layers disposed between the positive electrode and the negative electrode, wherein at least one of the one or more organic layers comprises a first component and a second component, wherein the first component is a compound represented by formula (1)(1A), and the second component is selected from the group consisting of alkali metal, an alkali metal compound, alkaline earth metal, an alkaline earth metal compound, rare earth metal, a rare earth metal compound, an organometallic complex containing alkali metal, an organometallic complex containing alkaline earth metal, and an organometallic complex containing rare earth metal” and are thus classified as invention 1.

(Invention 2) Claims 13-20

Claims 13-20 share, with claim 1 classified as invention 1, the common technical feature of an “organic electroluminescence element comprising a negative electrode, a positive electrode, and one or more organic layers disposed between the positive electrode and the negative electrode, wherein at least one of the one or more organic layers comprises a first component and a second component, and the second component is selected from the group consisting of alkali metal, an alkali metal compound, alkaline earth metal, an alkaline earth metal compound, rare earth metal, a rare earth metal compound, an organometallic complex containing alkali metal, an organometallic complex containing alkaline earth metal, and an organometallic complex containing rare earth metal.” However, said technical feature does not make a contribution over the prior art in light of the disclosure of document 1 and thus cannot be said to be a special technical feature. Also, there are no other same or corresponding special technical features between these inventions.

In addition, claims 13-20 are not dependent on claim 1. Furthermore, claims 13-20 are not substantially identical to or similarly closely related to any of the claims classified as inventions 1.

Accordingly, claims 13-20 cannot be classified as invention 1.

Also, claims 13-20 have the special technical feature of an “organic electroluminescence element comprising a negative electrode, a positive electrode, and one or more organic layers disposed between the positive electrode and the negative electrode, wherein at least one of the one or more organic layers comprises a first component and a second component, the first component is a compound that satisfies formula (R1) and formula (R2) and does not contain, in molecules, any of the structures represented by formulas (M1) to (M4), and the second component is selected from the group consisting of alkali metal, an alkali metal compound, alkaline earth metal, an alkaline earth metal compound, rare earth metal, a rare earth metal compound, an organometallic complex containing alkali metal, an organometallic complex containing alkaline earth metal, and an organometallic complex containing rare earth metal” and are thus classified as invention 2.

(Invention 3) Claims 27-29

Claims 27-29 share, with claim 1 classified as invention 1, the common technical feature of a “compound represented by formula (1) (1A).” However, said technical feature does not make a contribution over the prior art in light of the disclosure of document 1 and thus cannot be said to be a special technical feature. Also, there are no other same or corresponding special technical features between these inventions.

In addition, claims 27-29 are not dependent on claim 1 or claim 13. Furthermore, claims 27-29 are not substantially identical to or similarly closely related to any of the claims classified as invention 1 or 2.

Therefore, claim 27-29 cannot be classified as either invention 1 or 2.

Also, claims 27-29 have the special technical feature of a “compound represented by formula (2)” and are thus classified as invention 3.

Document 1: CN 114122299 A (JIANGSU MARCH SCIENCE AND TECHNOLOGY CO., LTD.) 01 March 2022 (2022-03-01) claims (in particular, claims 1, 6-7), general formula (I-1), compounds I-2, I-3, I-4, I-5, general formula 2-5, compound II-1 to II-52, device examples, paragraph [0182] (Family: none)

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

1. As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2. As all searchable claims could be searched without effort justifying additional fees, this Authority did not invite payment of additional fees.
3. As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:
4. No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:

- Remark on Protest**
- The additional search fees were accompanied by the applicant's protest and, where applicable, the payment of a protest fee.
 - The additional search fees were accompanied by the applicant's protest but the applicable protest fee was not paid within the time limit specified in the invitation.
 - No protest accompanied the payment of additional search fees.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No. PCT/JP2024/009774

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
CN 114122299 A	01 March 2022	(Family: none)	
CN 110330472 A	15 October 2019	(Family: none)	
US 2022/0384733 A1	01 December 2022	WO 2021/107741 A1	
		KR 10-2021-0067976 A	
		CN 113812015 A	

<p>A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） H10K 50/165(2023.01)i; C07F 1/02(2006.01)i; H10K 85/60(2023.01)i; H10K 101/30(2023.01)n FI: H10K50/165; C07F1/02; H10K85/60; H10K101:30</p>														
<p>B. 調査を行った分野</p> <p>調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） H10K50/165; C07F1/02; H10K85/60; H10K101/30</p> <p>最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの</p> <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922 - 1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971 - 2024年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996 - 2024年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994 - 2024年</td> </tr> </table> <p>国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語） CAplus/REGISTRY (STN)</p>			日本国実用新案公報	1922 - 1996年	日本国公開実用新案公報	1971 - 2024年	日本国実用新案登録公報	1996 - 2024年	日本国登録実用新案公報	1994 - 2024年				
日本国実用新案公報	1922 - 1996年													
日本国公開実用新案公報	1971 - 2024年													
日本国実用新案登録公報	1996 - 2024年													
日本国登録実用新案公報	1994 - 2024年													
<p>C. 関連すると認められる文献</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>引用文献の カテゴリー*</th> <th>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</th> <th>関連する 請求項の番号</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>X Y A</td> <td>CN 114122299 A (JIANGSU MARCH SCIENCE AND TECHNOLOGY CO., LTD.) 01.03.2022 (2022 - 03 - 01) 請求の範囲(特に請求項1,6-7),一般式(I-1),化合物I-2, I-3, I-4, I-5, 一般式(2)~(5),化合物II-1~II-52, デバイス実施例[0182]</td> <td>1-12, 21-26 1-12, 21-26 13-20, 27-29</td> </tr> <tr> <td>X Y A</td> <td>CN 110330472 A (JILIN OPTICAL AND ELECTRONIC MATERIALS CO., LTD.) 15.10.2019 (2019 - 10 - 15) 請求の範囲(特に請求項1,5,9),化学式1,化合物1~72(特に化合物6)</td> <td>27-29 1-12, 21-26 13-20</td> </tr> <tr> <td>X A</td> <td>US 2022/0384733 A1 (LG CHEM, LTD.) 01.12.2022 (2022 - 12 - 01) 請求の範囲(化学式1)、[0131](特に、第264頁第3段目左側化合物)</td> <td>27-29 1-26</td> </tr> </tbody> </table> <p><input 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。</p> <p>* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献 “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と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 “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</p>			引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号	X Y A	CN 114122299 A (JIANGSU MARCH SCIENCE AND TECHNOLOGY CO., LTD.) 01.03.2022 (2022 - 03 - 01) 請求の範囲(特に請求項1,6-7),一般式(I-1),化合物I-2, I-3, I-4, I-5, 一般式(2)~(5),化合物II-1~II-52, デバイス実施例[0182]	1-12, 21-26 1-12, 21-26 13-20, 27-29	X Y A	CN 110330472 A (JILIN OPTICAL AND ELECTRONIC MATERIALS CO., LTD.) 15.10.2019 (2019 - 10 - 15) 請求の範囲(特に請求項1,5,9),化学式1,化合物1~72(特に化合物6)	27-29 1-12, 21-26 13-20	X A	US 2022/0384733 A1 (LG CHEM, LTD.) 01.12.2022 (2022 - 12 - 01) 請求の範囲(化学式1)、[0131](特に、第264頁第3段目左側化合物)	27-29 1-26
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号												
X Y A	CN 114122299 A (JIANGSU MARCH SCIENCE AND TECHNOLOGY CO., LTD.) 01.03.2022 (2022 - 03 - 01) 請求の範囲(特に請求項1,6-7),一般式(I-1),化合物I-2, I-3, I-4, I-5, 一般式(2)~(5),化合物II-1~II-52, デバイス実施例[0182]	1-12, 21-26 1-12, 21-26 13-20, 27-29												
X Y A	CN 110330472 A (JILIN OPTICAL AND ELECTRONIC MATERIALS CO., LTD.) 15.10.2019 (2019 - 10 - 15) 請求の範囲(特に請求項1,5,9),化学式1,化合物1~72(特に化合物6)	27-29 1-12, 21-26 13-20												
X A	US 2022/0384733 A1 (LG CHEM, LTD.) 01.12.2022 (2022 - 12 - 01) 請求の範囲(化学式1)、[0131](特に、第264頁第3段目左側化合物)	27-29 1-26												
<p>国際調査を完了した日</p> <p>25. 04. 2024</p>	<p>国際調査報告の発送日</p> <p>14. 05. 2024</p>													
<p>名称及びあて先</p> <p>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</p>	<p>権限のある職員（特許庁審査官）</p> <p>岩井 好子 2K 4160</p> <p>電話番号 03-3581-1101 内線 3255</p>													

国際調査報告
特許ファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2024/009774

引用文献	公表日	特許ファミリー文献	公表日
CN 114122299 A	01.03.2022	(ファミリーなし)	
CN 110330472 A	15.10.2019	(ファミリーなし)	
US 2022/0384733 A1	01.12.2022	WO 2021/107741 A1	
		KR 10-2021-0067976 A	
		CN 113812015 A	

第III欄 発明の単一性が欠如しているときの意見（第1ページの3の続き）

次に述べるようにこの国際出願に二以上の発明があるとこの国際調査機関は認めた。

（発明1）請求項1-12、21-26

（発明2）請求項13-20

（発明3）請求項27-29

（発明1）請求項1-12、21-26

請求項1-12、21-26は、[陰極と、陽極と、陰極と陽極との間に配置された1又は2以上の有機層と、を有し、1又は2以上の有機層のうち少なくとも1層が、第1成分と、第2成分と、を含み、第1成分は、式(1)(1A)で表される化合物であり、第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される、有機エレクトロルミネッセンス素子。]という特別な技術的特徴を有しているため、発明1に区分する。

（発明2）請求項13-20

請求項13-20は、発明1に区分された請求項1と、[陰極と、陽極と、陰極と陽極との間に配置された1又は2以上の有機層と、を有し、1又は2以上の有機層のうち少なくとも1層が、第1成分と、第2成分と、を含み、第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される、有機エレクトロルミネッセンス素子。]という共通の技術的特徴を有している。しかしながら、当該技術的特徴は、文献1の開示内容に照らして、先行技術に対する貢献をもたらすものではないから、当該技術的特徴は、特別な技術的特徴であるとはいえない。また、これらの発明の間には、他に同一の又は対応する特別な技術的特徴は存在しない。

さらに、請求項13-20は、請求項1の従属請求項ではない。また、請求項13-20は、発明1に区分されたいずれの請求項に対しても実質同一又はそれに準ずる関係にはない。

したがって、請求項13-20は発明1に区分できない。

そして、請求項13-20は、[陰極と、陽極と、陰極と陽極との間に配置された1又は2以上の有機層と、を有し、1又は2以上の有機層のうち少なくとも1層が、第1成分と、第2成分と、を含み、第1成分は、式(R1)及び式(R2)を充足する化合物であって、かつ、式(M1)～式(M4)で表される構造を分子内に含まない化合物であり、第2成分は、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、及び希土類金属を含む有機金属錯体からなる群から選択される、有機エレクトロルミネッセンス素子。]という特別な技術的特徴を有しているため、発明2に区分する。

（発明3）請求項27-29

請求項27-29は、発明1に区分された請求項1と、[式(1)(1A)で表される化合物]という共通の技術的特徴を有している。しかしながら、当該技術的特徴は、文献1の開示内容に照らして、先行技術に対する貢献をもたらすものではないから、当該技術的特徴は、特別な技術的特徴であるとはいえない。また、これらの発明の間には、他に同一の又は対応する特別な技術的特徴は存在しない。

さらに、請求項27-29は、請求項1及び請求項13の従属請求項ではない。また、請求項27-29は、発明1又は2に区分されたいずれの請求項に対しても実質同一又はそれに準ずる関係にはない。

したがって、請求項27-29は発明1又は2のいずれにも区分できない。

そして、請求項27-29は、[式(2)で表される化合物。]という特別な技術的特徴を有しているため、発明3に区分する。

文献1：CN 114122299 A (JIANGSU MARCH SCIENCE AND TECHNOLOGY CO., LTD.)

01.03.2022(2022-03-01)請求の範囲(特に請求項1,6-7),一般式(I-1),化合物I-2, I-3, I-4, I-5, 一般式(2)～(5), 化合物II-1～II-52, デバイス実施例[0182] (ファミリーなし)

第III欄 発明の単一性が欠如しているときの意見（第1ページの3の続き）

1. 出願人が必要な追加調査手数料をすべて期間内に納付したので、この国際調査報告は、すべての調査可能な請求項について作成した。
2. 追加調査手数料を要求するまでもなく、すべての調査可能な請求項について調査することができたので、追加調査手数料の納付を求めなかった。
3. 出願人が必要な追加調査手数料を一部のみしか期間内に納付しなかったため、この国際調査報告は、手数料の納付のあった次の請求項のみについて作成した。
4. 出願人が必要な追加調査手数料を期間内に納付しなかったため、この国際調査報告は、請求の範囲の最初に記載されている発明に係る次の請求項について作成した。

追加調査手数料の異議の
申立てに関する注意

- 追加調査手数料及び、該当する場合には、異議申立手数料の納付と共に、出願人から異議申立てがあった。
- 追加調査手数料の納付と共に出願人から異議申立てがあったが、異議申立手数料が納付命令書に示した期間内に支払われなかった。
- 追加調査手数料の納付はあったが、異議申立てはなかった。