

(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  
2021年8月19日(19.08.2021)



(10) 国際公開番号  
**WO 2021/162057 A1**

(51) 国際特許分類:

C07D 235/08 (2006.01)	C07D 487/22 (2006.01)
C07D 333/76 (2006.01)	C07D 519/00 (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01)	H01L 27/32 (2006.01)
C07D 405/10 (2006.01)	C07D 307/77 (2006.01)
C07D 407/10 (2006.01)	C07D 307/91 (2006.01)
C07D 409/12 (2006.01)	C07D 251/24 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)	H05B 33/12 (2006.01)
C07D 209/82 (2006.01)	H01L 51/50 (2006.01)

特願 2020-023551 2020年2月14日(14.02.2020) 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: 田崎 聡美(TASAKI Satomi); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 西村 和樹(NISHIMURA Kazuki); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 豊島 弘明(TOYOSHIMA Hiroaki); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).

(21) 国際出願番号: PCT/JP2021/005077

(22) 国際出願日: 2021年2月10日(10.02.2021)

(25) 国際出願の言語: 日本語

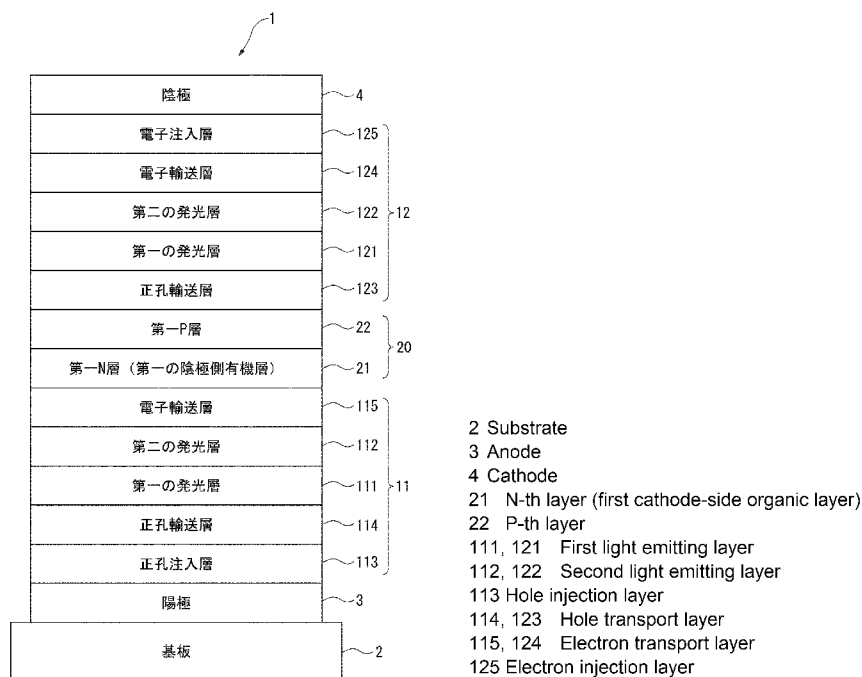
(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:

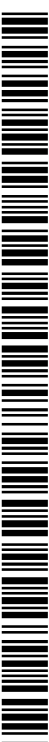
(74) 代理人: 特許業務法人樹之下知的財産事務所 (KINOSHITA & ASSOCIATES); 〒1670051 東

(54) Title: 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



(57) Abstract: This organic electroluminescent element (1) includes at least two light emitting units (11, 12) arranged between an anode (3) and a cathode (4), and a first cathode-side organic layer (21), wherein: the first cathode-side organic layer (21) containing a phenanthroline compound is arranged on the cathode (4) side of the laminated light emitting unit (11); the laminated light emitting unit (11) includes a first light emitting layer (111) containing a first host material and a second light emitting layer (112) containing a second host material;



WO 2021/162057 A1

京都杉並区荻窪五丁目26番13号3階Tokyo (JP).

- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

- 一 国際調査報告(条約第21条(3))

---

and the triplet energy  $T_1$  (H1) of the first host material and the triplet energy  $T_1$  (H2) of the second host material satisfy the relationship of a mathematical expression (Expression 3). Expression 3:  $T_1$  (H1) >  $T_1$  (H2)

(57) 要約: 陽極(3)及び陰極(4)の間に配置された2つ以上の発光ユニット(11, 12)と、第一の陰極側有機層(21)と、を有し、積層発光ユニット(11)の陰極(4)側に、フェナントロリン化合物を含有する第一の陰極側有機層(21)が配置され、積層発光ユニット(11)は、第一のホスト材料を含有する第一の発光層(111)及び第二のホスト材料を含有する第二の発光層(112)を含み、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1$ (H1)と第二のホスト材料の三重項エネルギー $T_1$ (H2)とが、数式(数3)の関係を満たす有機エレクトロルミネッセンス素子(1)。  $T_1$ (H1) >  $T_1$ (H2) … (数3)

## 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」という場合がある。）は、携帯電話及びテレビ等のフルカラーディスプレイへ応用されている。有機EL素子に電圧を印加すると、陽極から正孔が発光層に注入され、また陰極から電子が発光層に注入される。そして、発光層において、注入された正孔と電子とが再結合し、励起子が形成される。このとき、電子スピンの統計則により、一重項励起子が25%の割合で生成し、及び三重項励起子が75%の割合で生成する。

有機EL素子の性能向上を図るため、有機EL素子に用いる化合物について様々な検討がなされている（例えば、特許文献1～6参照）。例えば、特許文献6及び7においては、複数の発光層を積層させることについて検討がなされている。また、特許文献8には、有機EL素子の性能向上を図るため、2つの三重項励起子の衝突融合により一重項励起子が生成する現象（以下、Triplet-Triplet Fusion=TTF現象と称する場合がある。）が記載されている。有機EL素子の性能としては、例えば、輝度、発光波長、色度、発光効率、駆動電圧、及び寿命が挙げられる。

### 先行技術文献

#### 特許文献

- [0003] 特許文献1：特開2013-157552号公報  
特許文献2：国際公開第2004/018587号  
特許文献3：国際公開第2005/115950号  
特許文献4：国際公開第2011/077691号  
特許文献5：特開2018-125504号公報

特許文献6：米国特許出願公開2019/280209号明細書

特許文献7：特開2007-294261号公報

特許文献8：国際公開第2010/134350号

## 発明の概要

### 発明が解決しようとする課題

[0004] 例えば、特許文献7には、発光層の上に、フェナントロリン骨格を有するフェナントロリン化合物としてバソフェナントロリン（BCP）を蒸着して電子輸送層を形成し、さらにBCPとCs（セシウム）を共蒸着して電子注入層を形成し、さらにアルミニウムを蒸着して陰極を形成した有機EL素子が記載されている。

フェナントロリン化合物を、複数の発光ユニットを備えるタンデム型の有機EL素子の発光ユニット同士の間配置される中間層に用いると、素子寿命が短くなる傾向にある。

[0005] 本発明の目的の一つは、性能が向上した有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することである。また、本発明の別の目的の一つは、発光効率が向上し、長寿命化した有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、及び当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することである。

### 課題を解決するための手段

[0006] 本発明の一態様によれば、有機エレクトロルミネッセンス素子であって、  
陽極と、  
陰極と、  
前記陽極及び前記陰極の間に配置された2つ以上の発光ユニットと、  
前記陽極及び前記陰極の間に配置された第一の陰極側有機層と、を有し、  
前記2つ以上の発光ユニットのうち、少なくとも1つの発光ユニットが、  
積層発光ユニットであり、  
少なくとも1つの前記積層発光ユニットの前記陰極側に前記第一の陰極側有機層が配置され、

前記第一の陰極側有機層は、フェナントロリン骨格を有するフェナントロリン化合物を含有し、

前記積層発光ユニットは、第一の発光層及び第二の発光層を含み、

前記第一の発光層は、第一のホスト材料を含有し、

前記第二の発光層は、第二のホスト材料を含有し、

前記第一のホスト材料と前記第二のホスト材料とは互いに異なり、

前記第一の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第一の発光性化合物を少なくとも含み、

前記第二の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第二の発光性化合物を少なくとも含み、

前記第一の発光性化合物と前記第二の発光性化合物とが、互いに同一であるか、又は異なり、

前記第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ と前記第二のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ とが、下記数式(数3)の関係を満たす、

有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

$$T_1(H1) > T_1(H2) \quad \dots \text{(数3)}$$

[0007] 本発明の一態様によれば、有機エレクトロルミネッセンス素子であって、陽極と、

陰極と、

前記陽極及び前記陰極の間に配置された2つ以上の発光ユニットと、

前記陽極及び前記陰極の間に配置された第一の陰極側有機層と、を有し、

前記2つ以上の発光ユニットのうち、少なくとも1つの発光ユニットが、積層発光ユニットであり、

少なくとも1つの前記積層発光ユニットの前記陰極側に前記第一の陰極側有機層が配置され、

前記第一の陰極側有機層は、フェナントロリン骨格を有するフェナントロリン化合物を含有し、

前記積層発光ユニットは、第一の発光層及び第二の発光層を含み、  
前記第一の発光層は、第一のホスト材料を含有し、  
前記第二の発光層は、第二のホスト材料を含有し、  
前記第一のホスト材料は、分子中に、下記条件（i）の構造又は下記条件（i i）の構造を有し、  
前記第二のホスト材料は、アントラセン誘導体であり、  
前記第一のホスト材料と前記第二のホスト材料とは互いに異なり、  
前記第一の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第一の発光性化合物を少なくとも含み、  
前記第二の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第二の発光性化合物を少なくとも含み、  
前記第一の発光性化合物と前記第二の発光性化合物とが、互いに同一であるか、又は異なる、  
有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

条件（i）第一のベンゼン環と第二のベンゼン環とが単結合で連結されたビフェニル構造を有し、前記ビフェニル構造中の前記第一のベンゼン環と前記第二のベンゼン環とが、前記単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結している。

条件（i i）単結合で連結されたベンゼン環とナフタレン環とを含む連結構造を有し、前記連結構造中の前記ベンゼン環及び前記ナフタレン環には、それぞれ独立に、さらに単環又は縮合環が縮合しているか又は縮合しておらず、前記連結構造中の前記ベンゼン環と前記ナフタレン環とが、前記単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結している。

[0008] 本発明の一態様によれば、前述の本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器が提供される。

[0009] 本発明の一態様によれば、性能が向上した有機エレクトロルミネッセンス素子を提供できる。また、本発明の一態様によれば、発光効率が向上し、長寿命化した有機エレクトロルミネッセンス素子を提供できる。また、本発明

の一態様によれば、当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供できる。

### 図面の簡単な説明

[0010] [図1]本発明の一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の概略構成を示す図である。

### 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 $XX \sim YY$ の $ZZ$ 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Z Z基」である場合を表し、置換のZ Z基とは「置換もしくは無置換のZ Z基」が「置換のZ Z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Z Z基」という場合における「無置換」とは、Z Z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Z Z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Z Z基」という場合における「置換」とは、Z Z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。「A A基で置換されたB B基」という場合における「置換」も同様に、B B基における1つ以上の水素原子が、A A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G1A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G1B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G1B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）：

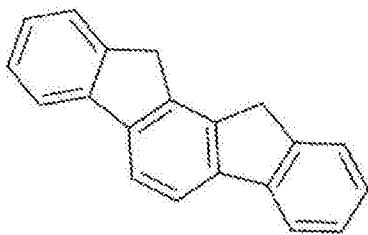
フェニル基、  
p-ビフェニル基、  
m-ビフェニル基、  
o-ビフェニル基、  
p-ターフェニル-4-イル基、  
p-ターフェニル-3-イル基、  
p-ターフェニル-2-イル基、  
m-ターフェニル-4-イル基、  
m-ターフェニル-3-イル基、  
m-ターフェニル-2-イル基、  
o-ターフェニル-4-イル基、  
o-ターフェニル-3-イル基、  
o-ターフェニル-2-イル基、  
1-ナフチル基、  
2-ナフチル基、  
アントリル基、  
ベンゾアントリル基、  
フェナントリル基、  
ベンゾフェナントリル基、  
フェナレニル基、  
ピレニル基、  
クリセニル基、  
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

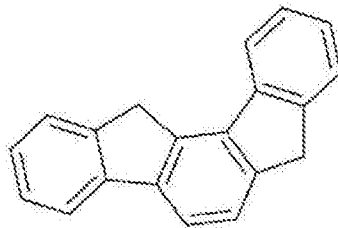
下記一般式 (TEMP-1) ~ (TEMP-15) で表される環構造から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 1 価のアリール基。

[0022]

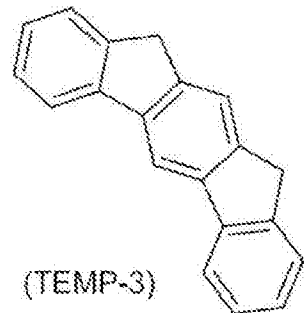
[化1]



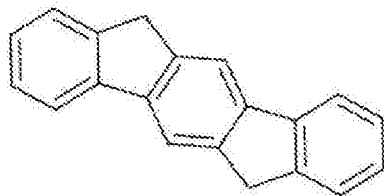
(TEMP-1)



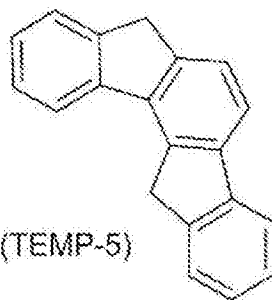
(TEMP-2)



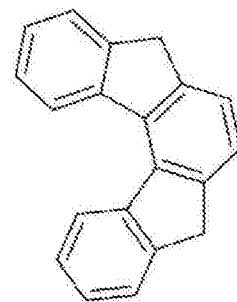
(TEMP-3)



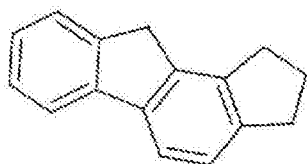
(TEMP-4)



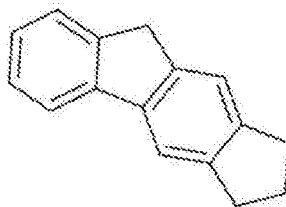
(TEMP-5)



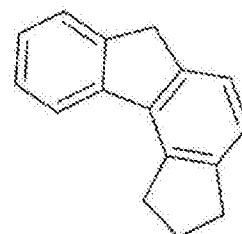
(TEMP-6)



(TEMP-7)



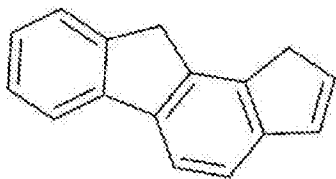
(TEMP-8)



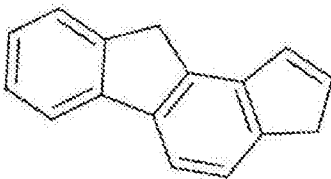
(TEMP-9)

[0023]

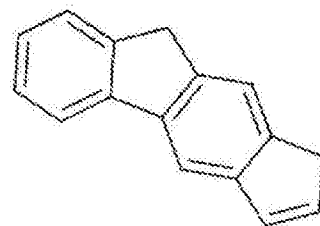
[化2]



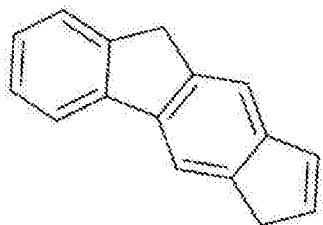
(TEMP-10)



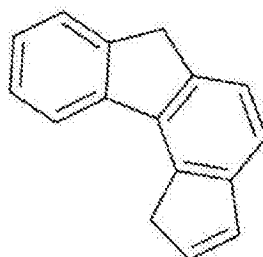
(TEMP-11)



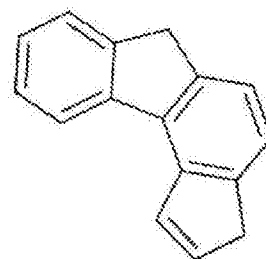
(TEMP-12)



(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）：

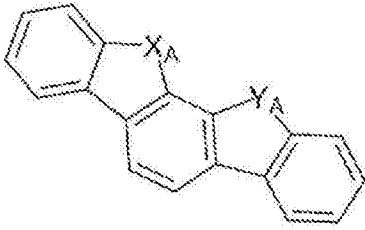
チエニル基、  
チアゾリル基、  
イソチアゾリル基、  
チアジアゾリル基、  
ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基）、  
イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基）、  
ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、

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）。

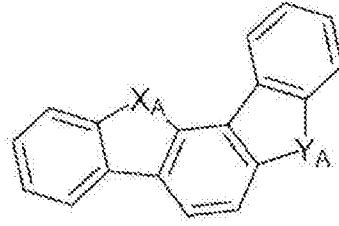
[0031] ・下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群G2A4）：

[0032]

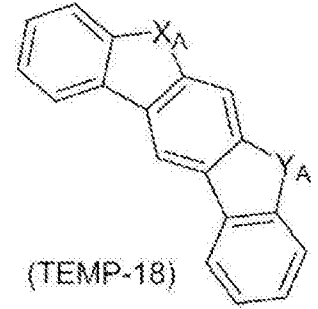
[化3]



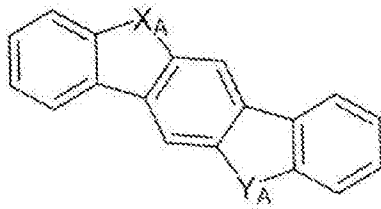
(TEMP-16)



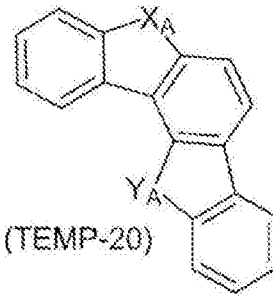
(TEMP-17)



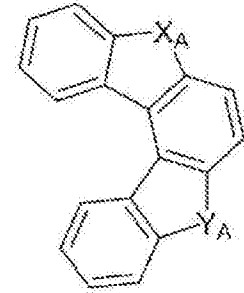
(TEMP-18)



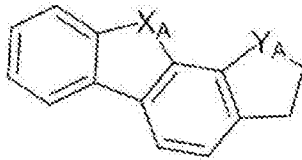
(TEMP-19)



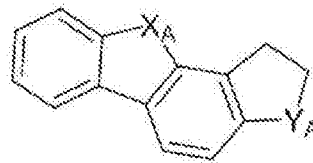
(TEMP-20)



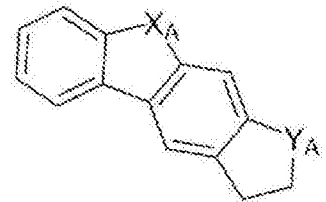
(TEMP-21)



(TEMP-22)



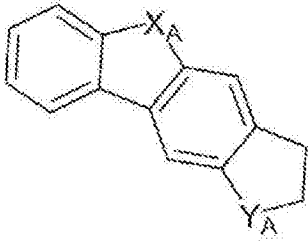
(TEMP-23)



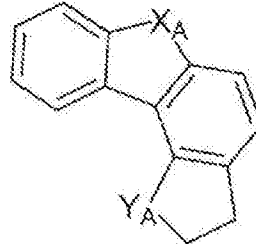
(TEMP-24)

[0033]

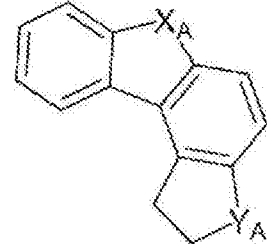
[化4]



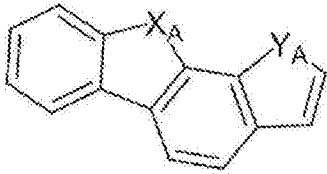
(TEMP-25)



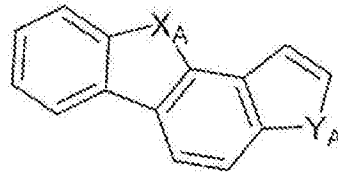
(TEMP-26)



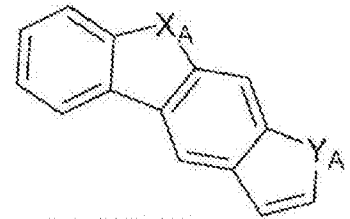
(TEMP-27)



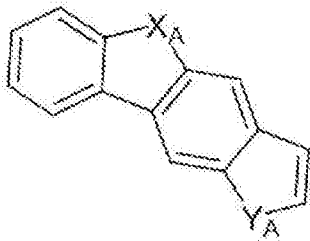
(TEMP-28)



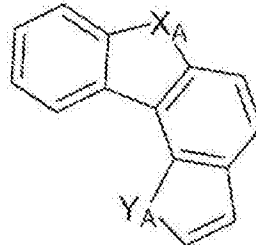
(TEMP-29)



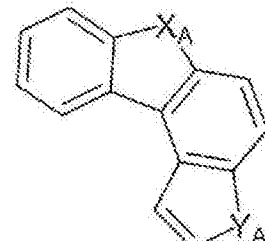
(TEMP-30)



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

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

$-S_i(G1)(G1)(G1)$ 、

$-S_i(G1)(G2)(G2)$ 、

$-S_i(G1)(G1)(G2)$ 、

$-S_i(G2)(G2)(G2)$ 、

$-S_i(G3)(G3)(G3)$ 、及び

$-S_i(G6)(G6)(G6)$

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。

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

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

$-S_i(G1)(G1)(G2)$  における複数のG 1は、互いに同一であるか、又は異なる。

$-S_i(G2)(G2)(G2)$  における複数のG 2は、互いに同一であ

るか、又は異なる。

−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− (R<sub>904</sub>) で表される基」

本明細書に記載の−O− (R<sub>904</sub>) 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− (R<sub>905</sub>) で表される基」

本明細書に記載の−S− (R<sub>905</sub>) 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 (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基」

本明細書に記載の—N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) 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G 3）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、1～50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。

[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、6～50であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

[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、6～50であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

[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、1～50であり、好ましくは1～20であり、より好ましくは1～6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G1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、 $\alpha$ -ナフチルメチル基、1- $\alpha$ -ナフチルエチル基、2- $\alpha$ -ナフチルエチル基、1- $\alpha$ -ナフチルイソプロピル基、2- $\alpha$ -ナフチルイソプロピル基、 $\beta$ -ナフチルメチル基、1- $\beta$ -ナフチルエチル基、2- $\beta$ -ナフチルエチル基、1- $\beta$ -ナフチルイソプロピル基、及び2- $\beta$ -ナフチルイソプロピル基等が挙げられる。

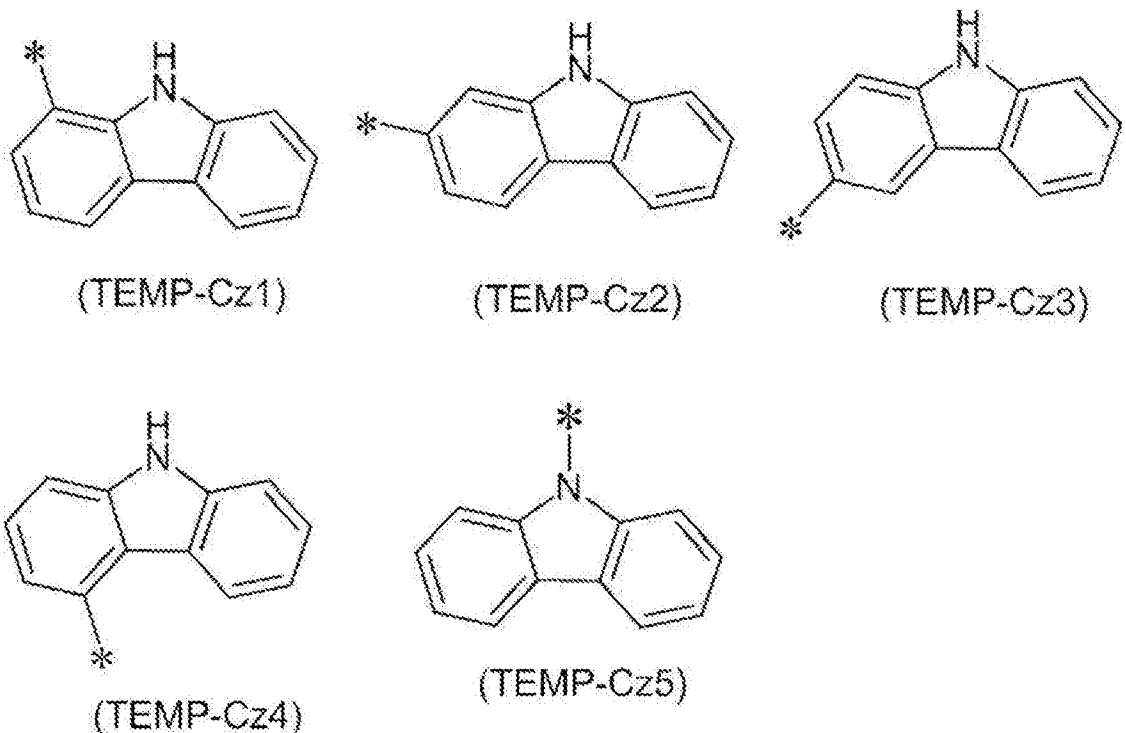
[0064] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリール基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはフェニル基、p-ビフェニル基、m-ビフェニル基、o-ビフェニル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-ターフェニル-4-イル基、o-ターフェニル-3-イル基、o-ターフェニル-2-イル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9, 9'-スピロビフルオレニル基、9,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

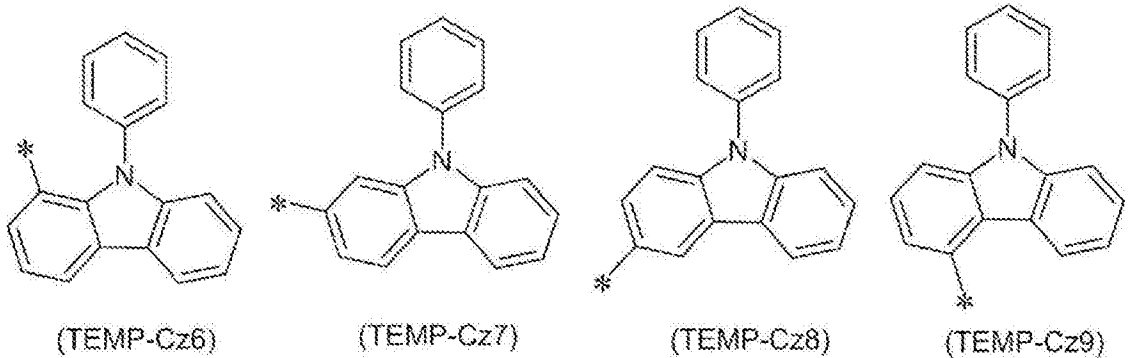
[0067] [化5]



[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。

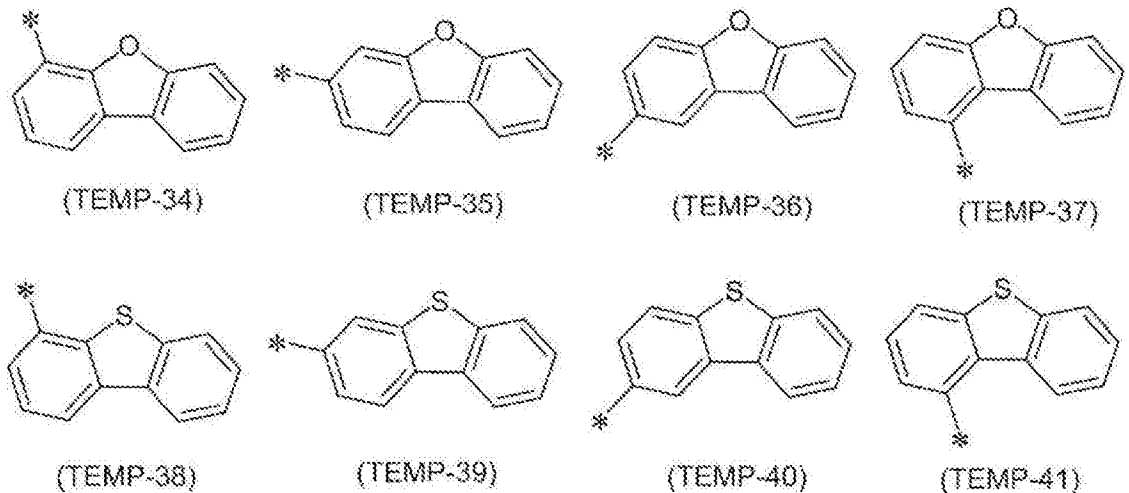
[0069] [化6]



[0070] 前記一般式 (TEMP-Cz1) ~ (TEMP-Cz9) 中、\*は、結合位置を表す。

[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7]



[0073] 前記一般式 (TEMP-34) ~ (TEMP-41) 中、\*は、結合位置を表す。

[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。

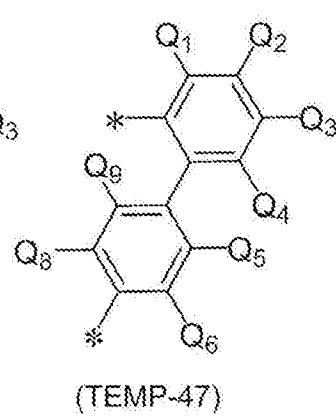
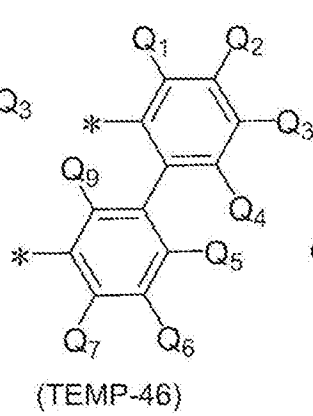
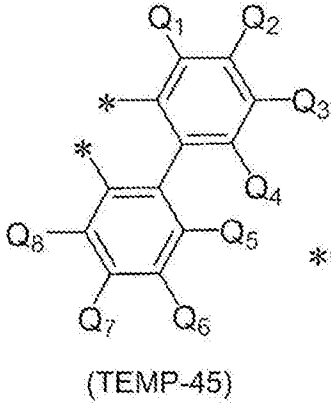
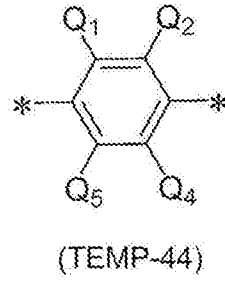
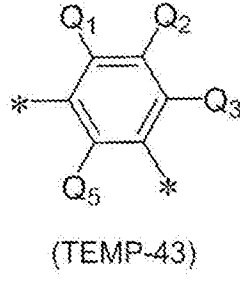
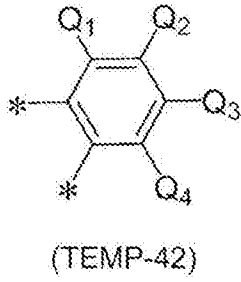
[0077] ・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

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。

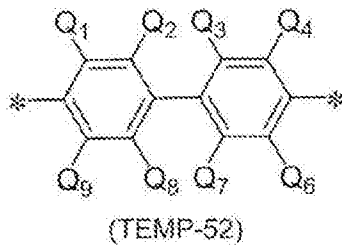
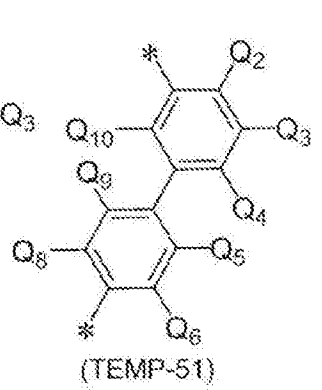
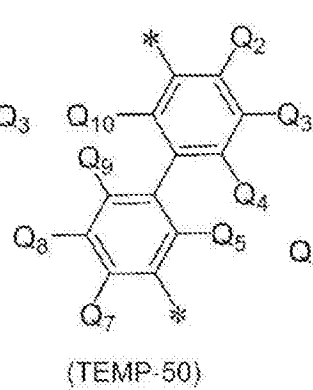
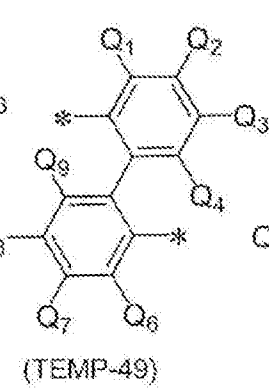
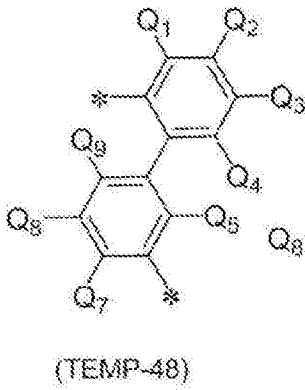
[0078] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式（TEMP-4 2）～（TEMP-6 8）のいずれかの基である。

[0079]

[化8]



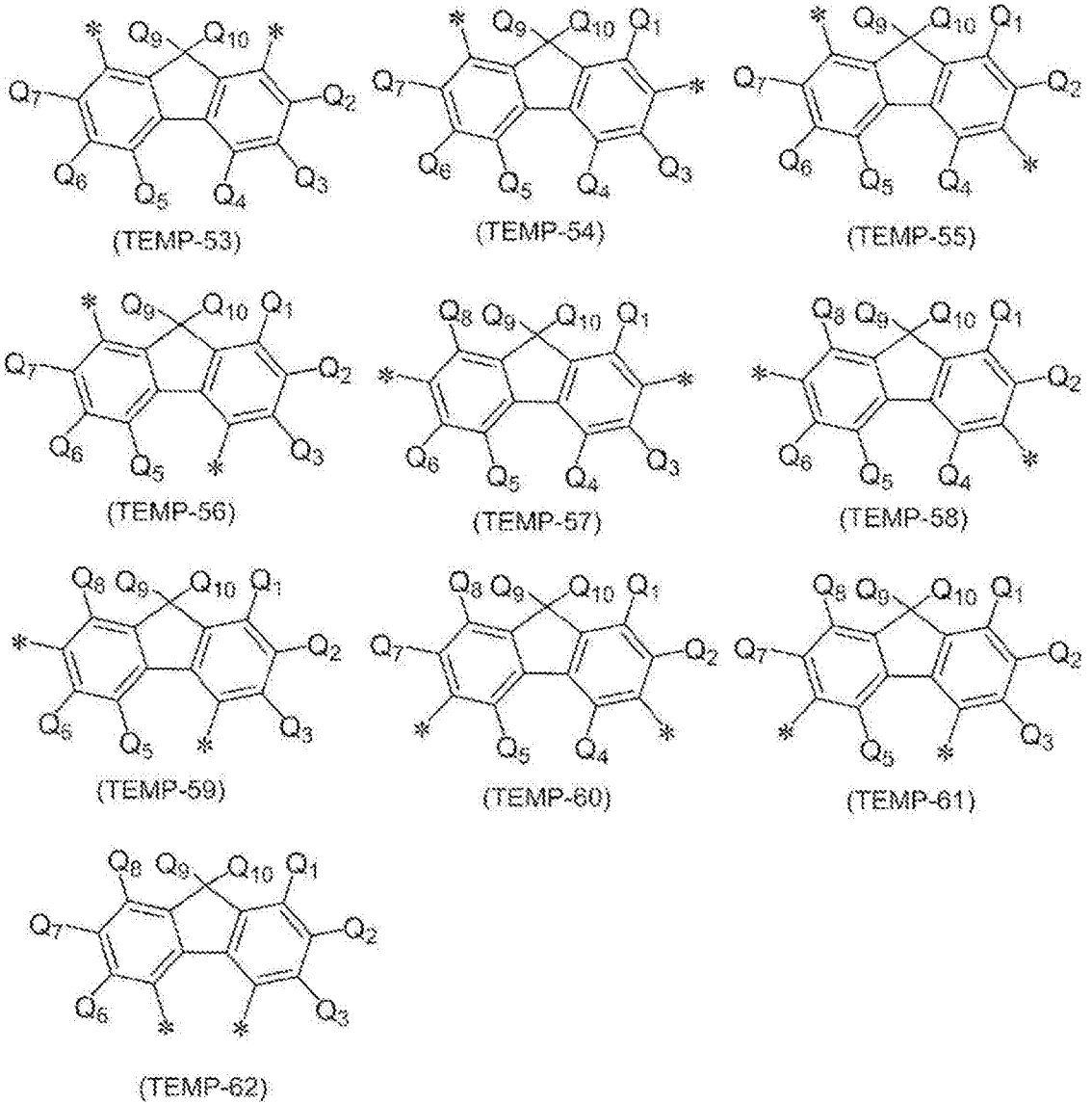
[0080] [化9]



[0081] 前記一般式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中、Q<sub>1</sub> ~ Q<sub>10</sub>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、結合位置を表す。

[0082] [化10]



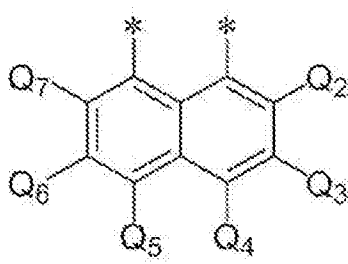
[0083] 前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、 $Q_1 \sim Q_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

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。

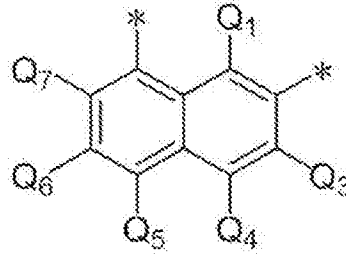
前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、\*は、結合位置を表す。

[0084]

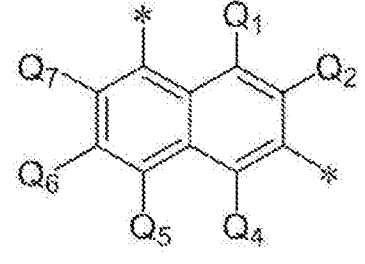
[化11]



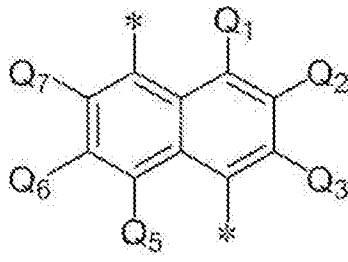
(TEMP-63)



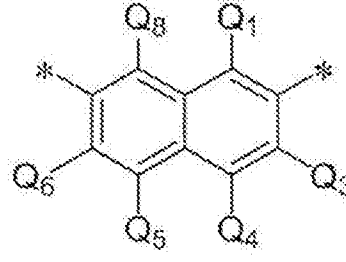
(TEMP-64)



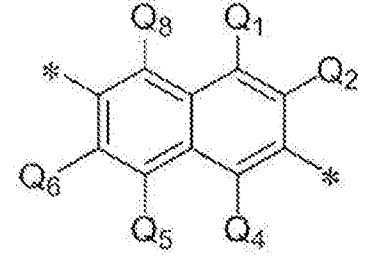
(TEMP-65)



(TEMP-66)



(TEMP-67)



(TEMP-68)

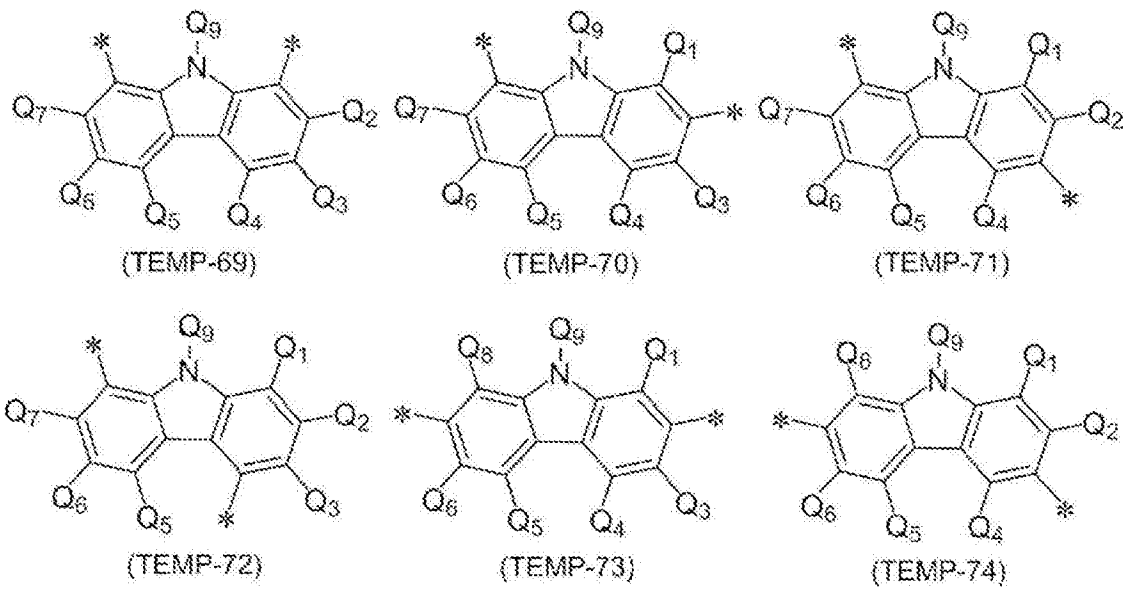
[0085] 前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、 $Q_1 \sim Q_8$  は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、\* は、結合位置を表す。

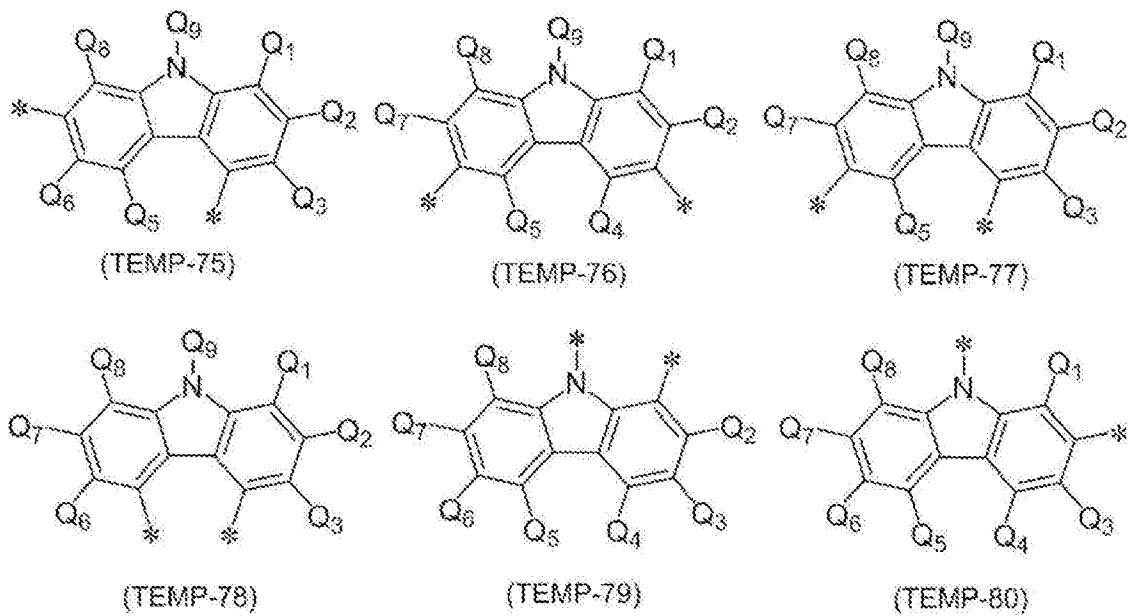
[0086] 本明細書に記載の置換もしくは無置換の2価の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-102) のいずれかの基である。

[0087]

[化12]

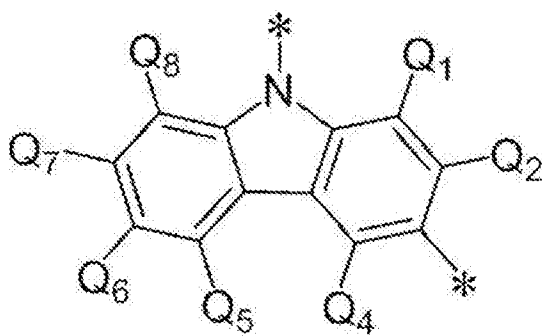


[0088] [化13]

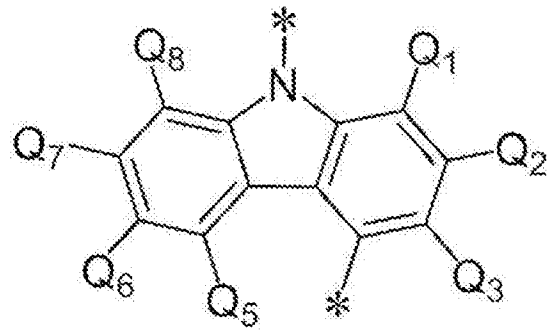


[0089]

[化14]



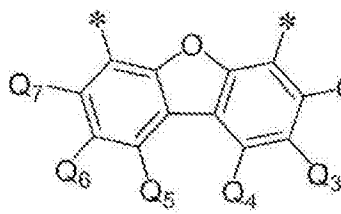
(TEMP-81)



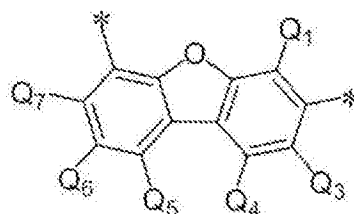
(TEMP-82)

[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。

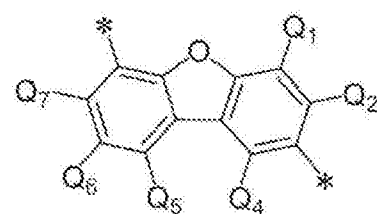
[0091] [化15]



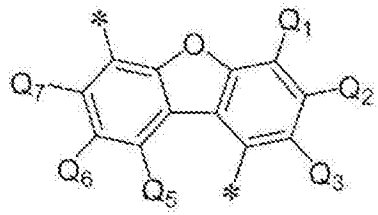
(TEMP-83)



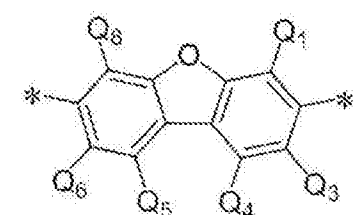
(TEMP-84)



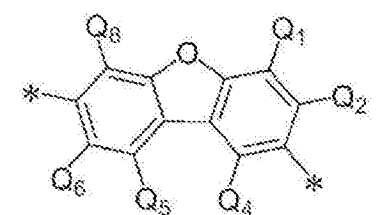
(TEMP-85)



(TEMP-86)



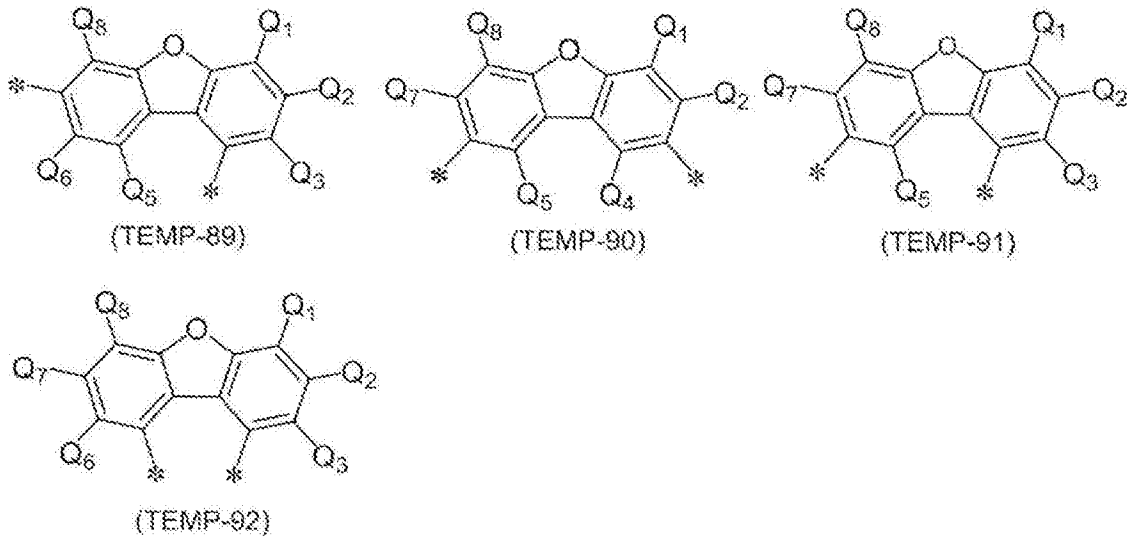
(TEMP-87)



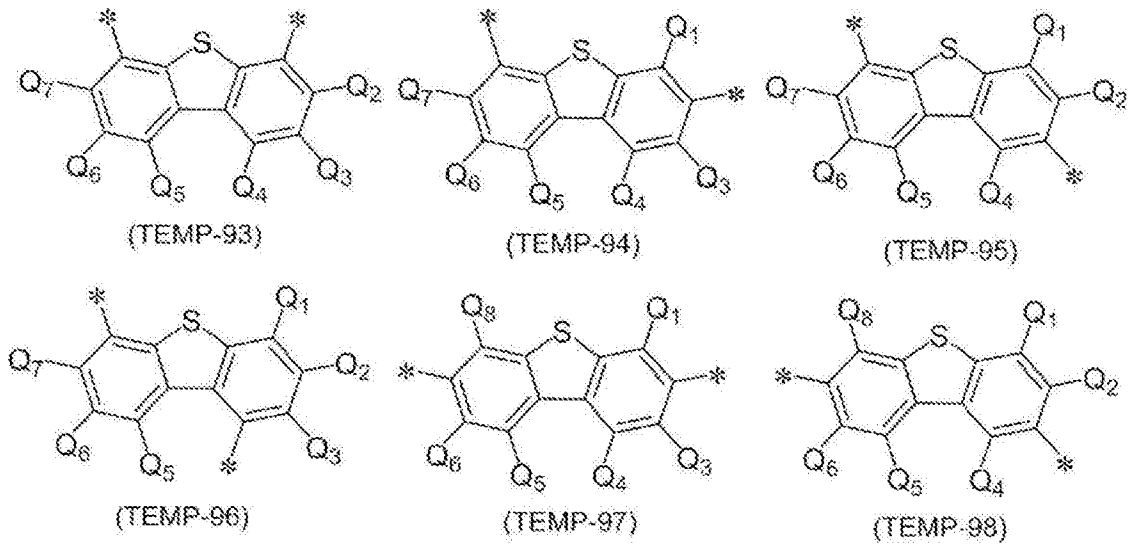
(TEMP-88)

[0092]

[化16]

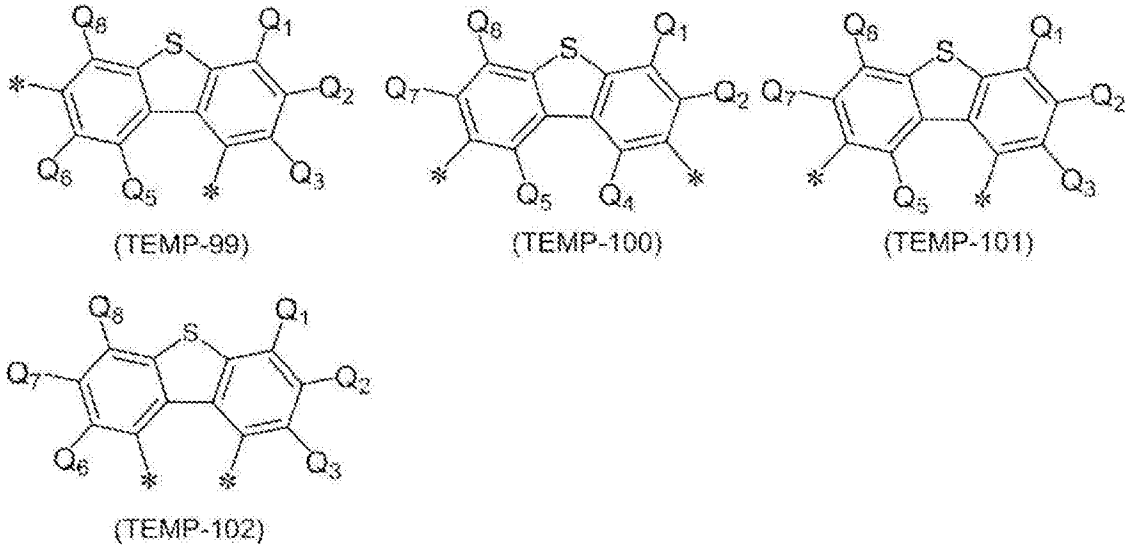


[0093] [化17]



[0094]

[化18]



[0095] 前記一般式 (TEMP-83) ~ (TEMP-102) 中、Q<sub>1</sub> ~ Q<sub>8</sub>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。

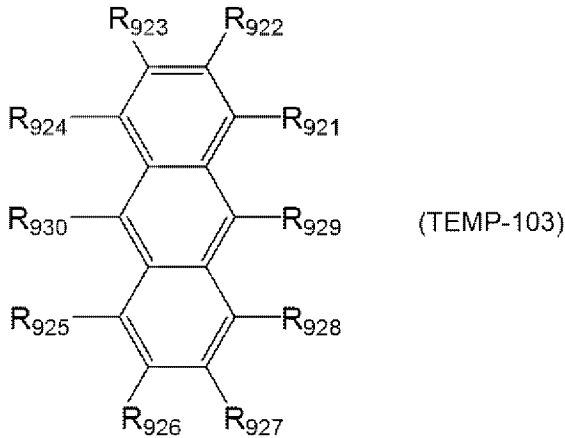
[0097] ・「結合して環を形成する場合」

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。

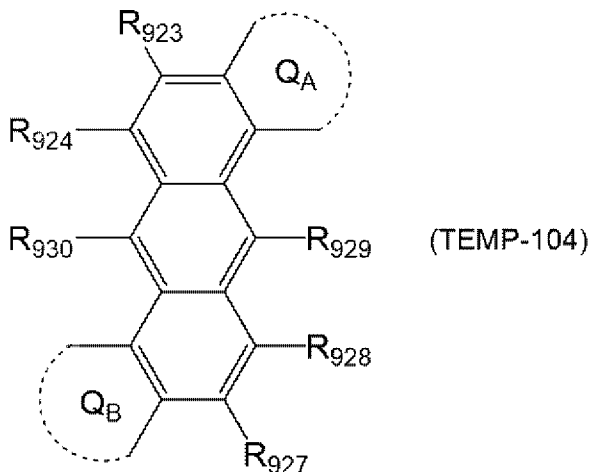
[0098] [化19]



[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。

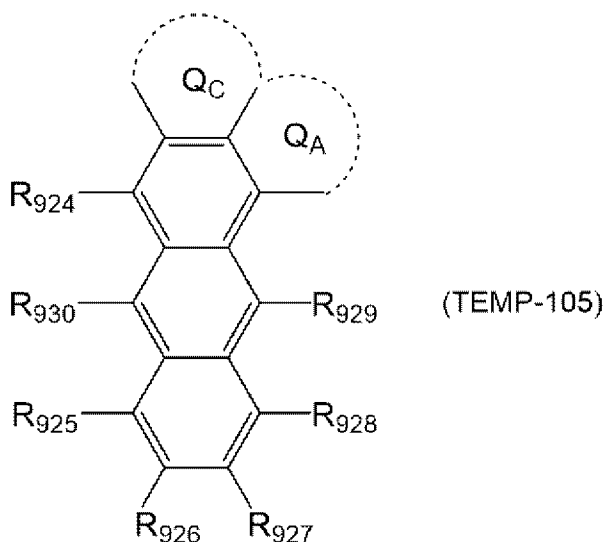
[0100] 上記「1組以上」とは、上記隣接する2つ以上からなる組の2組以上が同時に環を形成してもよいことを意味する。例えば、 $R_{921}$ と $R_{922}$ とが互いに結合して環 $Q_A$ を形成し、同時に $R_{925}$ と $R_{926}$ とが互いに結合して環 $Q_B$ を形成した場合は、前記一般式(TEMP-103)で表されるアントラセン化合物は、下記一般式(TEMP-104)で表される。

[0101] [化20]



[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21]



[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-1

04) 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」とは、芳香族炭化水素環、又は芳香族複素環を意味する。

「飽和の環」とは、脂肪族炭化水素環、又は非芳香族複素環を意味する。

芳香族炭化水素環の具体例としては、具体例群G1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G2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G6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以上の任意の元素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以上の任意の元素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、「任意の元素」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、炭素元素、窒素元素、酸素元素、及び硫黄元素からなる群から選択される少なくとも1種の元素である。任意の元素において（例えば、炭素元素、又は窒素元素の場合）、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。炭素元素以外の任意の元素を含む場合、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以上の任意の元素」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個以下の炭素元素、窒素元素、酸素元素、及び硫黄元素からなる群から選択される少なくとも1種の元素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 (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>)、

—O— (R<sub>904</sub>)、

—S— (R<sub>905</sub>)、

—N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>)、

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、R<sub>901</sub>～R<sub>907</sub>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。

R<sub>901</sub>が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>901</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>902</sub>が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>902</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>903</sub>が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>903</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{904}$ が2個以上存在する場合、2個以上の $R_{904}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{905}$ が2個以上存在する場合、2個以上の $R_{905}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{906}$ が2個以上存在する場合、2個以上の $R_{906}$ 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を下限値とし、「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] 〔第一実施形態〕

(有機エレクトロルミネッセンス素子)

本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子は、次に示す基本構成を有する。

[0115] (基本構成)

本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子は、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された2つ以上の発光ユニットと、前記陽極及び前記陰極の間に配置された第一の陰極側有機層と、を有し、前記2つ以上の発光ユニットのうち、少なくとも1つの発光ユニットが、積層発光ユニットであり、少なくとも1つの前記積層発光ユニットの前記陰極側に前記第一の陰極側有機層が配置され、前記第一の陰極側有機層は、フェナントロリン骨格を有するフェナントロリン化合物を含有し、前記積層発光ユニットは、第一の発光層及び第二の発光層を含み、前記第一の発光層は、第一の宿主材料を含有し、前記第二の発光層は、第二の宿主材料を含有し、前記第一の宿主材料と前記第二の宿主材料とは互いに異なり、前記第一の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第一の発光性化合物を少なくとも含み、前記第二の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第二の発光性化合物を少なくとも含み、前記第一の発光性化合物と前記第二の発光性化合物とが、互いに同一であるか、又は異なる。

[0116] 本実施形態に係る有機EL素子は、上記基本構成に加えてさらに、下記(要素1)及び(要素2)の少なくともいずれかの要素を含む。

[0117] (要素1)

要素1において、前記第一の宿主材料の三重項エネルギー $T_1$  (H1)と

前記第二の宿主材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ とが、下記数式(数3)の関係を満たす。

$$T_1(H1) > T_1(H2) \quad \dots \text{(数3)}$$

[0118] (要素2)

要素2において、前記第一の宿主材料は、分子中に、下記条件(i)の構造又は下記条件(ii)の構造を有し、前記ビフェニル構造中の前記第一のベンゼン環と前記第二のベンゼン環とが、前記単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結しており、前記第二の宿主材料は、アントラセン誘導体である。

条件(i) 第一のベンゼン環と第二のベンゼン環とが単結合で連結されたビフェニル構造を有し、前記ビフェニル構造中の前記第一のベンゼン環と前記第二のベンゼン環とが、前記単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結している。

条件(ii) 単結合で連結されたベンゼン環とナフタレン環とを含む連結構造を有し、前記連結構造中の前記ベンゼン環及び前記ナフタレン環には、それぞれ独立に、さらに単環又は縮合環が縮合しているか又は縮合しておらず、前記連結構造中の前記ベンゼン環と前記ナフタレン環とが、前記単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結している。

[0119] 以下、前述の基本構成と、(要素1)及び(要素2)の少なくともいずれかの要素とを含んだ本実施形態に係る有機EL素子について説明する。

[0120] 本明細書において、陽極及び陰極の間に配置された2つ以上の発光ユニットを有する有機エレクトロルミネッセンス素子をタンデム型有機エレクトロルミネッセンス素子(タンデム型有機EL素子)と称する。

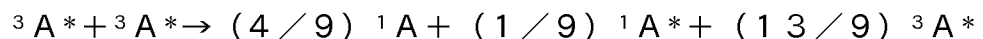
[0121] 本実施形態によれば、発光効率が向上した有機エレクトロルミネッセンス素子を提供できる。

従来、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を向上させるための技術として、Triplet-Triplet-Annihilation(TTAと称する場合がある。)が知られている。TTAは、三重項励起子と

三重項励起子とが衝突して、一重項励起子を生成するという機構（メカニズム）である。なお、TTAメカニズムは、特許文献8に記載のようにTTFメカニズムと称する場合もある。

[0122] TTF現象を説明する。陽極から注入された正孔と、陰極から注入された電子とは、発光層内で再結合し励起子を生成する。そのスピン状態は、従来から知られているように、一重項励起子が25%、三重項励起子が75%の比率である。従来知られている蛍光素子においては、25%の一重項励起子が基底状態に緩和するとき光を発するが、残りの75%の三重項励起子については光を発することなく熱的失活過程を経て基底状態に戻る。従って、従来の蛍光素子の内部量子効率の理論限界値は25%といわれていた。

一方、有機物内部で生成した三重項励起子の挙動が理論的に調べられている。S. M. Bachiloらによれば（J. Phys. Chem. A, 104, 7711（2000））、五重項等の高次の励起子がすぐに三重項に戻ると仮定すると、三重項励起子（以下、 $^3A^*$ と記載する）の密度が上がってきたとき、三重項励起子同士が衝突し下記式のような反応が起きる。ここで、 $^1A$ は、基底状態を表し、 $^1A^*$ は、最低励起一重項励起子を表す。



即ち、 $5^3A^* \rightarrow 4^1A + 1^1A^*$ となり、当初生成した75%の三重項励起子のうち、 $1/5$ 即ち20%が一重項励起子に変化することが予測されている。従って、光として寄与する一重項励起子は、当初生成する25%分に75% $\times(1/5) = 15\%$ を加えた40%ということになる。このとき、全発光強度中に占めるTTF由来の発光比率（TTF比率）は、 $15/40$ 、すなわち37.5%となる。また、当初生成した75%の三重項励起子のお互いが衝突して一重項励起子が生成した（2つの三重項励起子から1つの一重項励起子が生成した）とすると、当初生成する一重項励起子25%分に75% $\times(1/2) = 37.5\%$ を加えた62.5%という非常に高い内部量子効率を得られる。このとき、TTF比率は、 $37.5/62.5 = 60\%$ である。

[0123] 本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子によれば、積層発光ユニットにおける第一の発光層で正孔と電子との再結合によって生成した三重項励起子は、当該第一の発光層と直接に接する有機層との界面にキャリアが過剰に存在していても、第一の発光層と当該有機層との界面に存在する三重項励起子がクエンチされ難くなると考えられる。例えば、再結合領域が、第一の発光層と正孔輸送層又は電子障壁層との界面に局所的に存在する場合には、過剰な電子によるクエンチが考えられる。一方、再結合領域が、第一の発光層と電子輸送層又は正孔障壁層との界面に局所的に存在する場合には、過剰な正孔によるクエンチが考えられる。

本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子は、所定の関係を満たす、少なくとも2つの発光層（すなわち、第一の発光層及び第二の発光層）を含む積層発光ユニットを備え、第一の発光層中の第一の宿主材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ と、第二の発光層中の第二の宿主材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ とが、前記数式（数3）の関係を満たす。

前記数式（数3）の関係を満たすように第一の発光層及び第二の発光層を含む積層発光ユニットを備えることで、第一の発光層で生成した三重項励起子は、過剰キャリアによってクエンチされずに第二の発光層へと移動し、また、第二の発光層から第一の発光層へ逆移動することを抑制できる。その結果、第二の発光層において、TTFメカニズムが発現して、一重項励起子が効率良く生成され、発光効率が向上する。

このように、有機エレクトロルミネッセンス素子における積層発光ユニットが、三重項励起子を主に生成させる第一の発光層と、第一の発光層から移動してきた三重項励起子を活用してTTFメカニズムを主に発現させる第二の発光層と、を異なる領域として備え、第二の発光層中の第二の宿主材料として、第一の発光層中の第一の宿主材料よりも小さな三重項エネルギーを有する化合物を用いて、三重項エネルギーの差を設けることで、発光効率が向上する。

[0124] フェナントロリン骨格を有するフェナントロリン化合物は、電荷を発生さ

せ易いため、複数の発光ユニットを備えたいいわゆるタンデム型有機EL素子における電子輸送材料として好適に使用可能である。しかしながら、フェナントロリン化合物は、正孔に対する耐性が低く、発光層からフェナントロリン化合物を含有する有機層（例えば、電子輸送層等）へ正孔が移動してくると、フェナントロリン化合物が劣化して、素子寿命が低下する傾向にある。

本実施形態に係る有機EL素子においては、フェナントロリン化合物を含有する第一の陰極側有機層が、第一の発光層及び第二の発光層を含む積層発光ユニットの陰極側に配置されている。この積層発光ユニットが、三重項励起子を主に生成させる第一の発光層と、第一の発光層から移動してきた三重項励起子を活用してTTFメカニズムを主に発現させる第二の発光層と、を異なる領域として備えている。そのため、劣化し易いフェナントロリン化合物を含有する第一の陰極側有機層と第一の発光層（再結合層）とを離間させることができ、積層発光ユニットから第一の陰極側有機層へ移動する正孔の量を抑制し、有機EL素子が長寿命化すると考えられる。

[0125] 第一の陰極側有機層は、少なくとも1つの積層発光ユニットの陰極側に配置される有機層である。第一の陰極側有機層は、中間層と称する場合がある。

[0126] 中間層は、一般的に、中間電極、中間導電層、電荷発生層、電子引抜層、接続層、コネクタ層、又は中間絶縁層とも呼ばれる。

中間層は、当該中間層よりも陽極側に配置された層に電子を供給し、当該中間層よりも陰極側に配置された層に正孔を供給する層である。中間層は、公知の材料により形成できる。中間層は、1層であっても、2以上の層で構成されていてもよい。2以上の中間層で構成される単位を、中間ユニットと称する場合がある。中間ユニットが含む複数の中間層の組成は、互いに同一であるか又は異なる。

[0127] また、中間層又は中間ユニットと、陽極又は陰極と、の間に配置された、発光層を含む複数の層を発光ユニットと称する場合がある。複数の発光ユニットを有する有機EL素子の素子構成としては、例えば、下記（TND1）

～（TND4）のような素子構成が挙げられる。

（TND1）陽極／第一発光ユニット／中間層／第二発光ユニット／陰極

（TND2）陽極／第一発光ユニット／中間ユニット／第二発光ユニット  
／陰極

（TND3）陽極／第一発光ユニット／第一中間層／第二発光ユニット／  
第二中間層／第三発光ユニット／陰極

（TND4）陽極／第一発光ユニット／第一中間ユニット／第二発光ユニ  
ット／第二中間ユニット／第三発光ユニット／陰極

本実施形態の有機EL素子において、発光ユニット及び中間層（又は中間  
ユニット）の数は、ここに示した（TND1）～（TND4）の例に限定さ  
れない。

[0128] 前記（TND1）～（TND4）の素子構成において、第一の陰極側有機  
層は、少なくともいずれかの中間層として含まれるか、少なくともいずれか  
の中間ユニット内の中間層として含まれることも好ましい。

[0129] 第一の発光層及び第二の発光層が第一発光ユニット、第二発光ユニット及  
び第三発光ユニットの少なくともいずれかに含まれていることが好ましい。

第一の発光層及び第二の発光層が、有機EL素子が有するすべての発光ユ  
ニットに含まれていることも好ましい。

[0130] 前記（TND1）～（TND4）の素子構成において、第一の陰極側有機  
層としての中間層の陽極側に配置された発光ユニット又は第一の陰極側有機  
層を含む中間ユニットの陽極側に配置された発光ユニットが、本実施形態に  
係る積層発光ユニットであることが好ましい。

[0131] 本実施形態に係る有機EL素子の積層発光ユニットは、第一の発光層及び  
第二の発光層以外に、1以上の有機層を有していてもよい。有機層としては  
、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子注入層、電子輸送層、正  
孔障壁層及び電子障壁層からなる群から選択される少なくともいずれかの層  
が挙げられる。

[0132] 本実施形態に係る有機EL素子において、積層発光ユニットの有機層は、

第一の発光層及び第二の発光層だけで構成されていてもよいが、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、正孔障壁層、及び電子障壁層等からなる群から選択される少なくともいずれかの層をさらに有していてもよい。

[0133] 発光ユニット中の発光層の陽極側に配置される帯域を正孔輸送帯域と称する場合がある。正孔輸送帯域は、単層であっても複数層であってもよい。正孔輸送帯域を構成する層としては、正孔輸送層の他に、例えば、正孔注入層、及び電子障壁層が挙げられる。

[0134] 発光ユニットの発光層の陰極側に配置される帯域を電子輸送帯域と称する場合がある。電子輸送帯域は、単層であっても複数層であってもよい。電子輸送帯域を構成する層としては、電子輸送層の他に、例えば、電子注入層、及び正孔障壁層が挙げられる。

[0135] 本実施形態に係る有機EL素子は、積層発光ユニット以外の発光ユニットとして、少なくとも1つの発光層を有する発光ユニットを有していてもよく、積層発光ユニット以外の当該発光ユニットは、発光層以外に有機層として、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、正孔障壁層及び電子障壁層からなる群から選択される少なくともいずれかの層を有していてもよい。

[0136] 本実施形態に係る有機EL素子において、2つ以上の発光ユニットは、積層発光ユニットと、積層発光ユニットとは異なる少なくとも1つの燐光発光ユニットとを含むことが好ましい。燐光発光ユニットは、燐光発光を示す燐光発光性化合物を含有することが好ましい。燐光発光性化合物は、金属錯体であることが好ましい。燐光発光性化合物としての金属錯体は、イリジウム錯体、銅錯体、白金錯体、オスミウム錯体又は金錯体であることが好ましい。

燐光発光ユニットは、燐光発光性化合物を含有する燐光発光層を少なくとも1つ有することが好ましい。燐光発光ユニットは、燐光発光層を2つ以上有していてもよい。燐光発光ユニットが燐光発光層を2つ以上有している場

合、燐光発光層同士は、直接、接していてもよいし、接していなくてもよい。

また、燐光発光ユニットは、緑色発光性の燐光発光性化合物を含有する緑色燐光発光層と、赤色発光性の燐光発光性化合物を含有する赤色燐光発光層と、を有することが好ましい。本明細書において、緑色の発光とは、発光スペクトルの最大ピーク波長が500nm以上、550nm以下の範囲内である発光をいう。本明細書において、赤色の発光とは、発光スペクトルの最大ピーク波長が600nm以上、640nm以下の範囲内である発光をいう。

本実施形態に係る有機EL素子は、燐光発光ユニットを有する場合、積層発光ユニットを2つ以上有することも好ましい。また、本実施形態に係る有機EL素子は、1つの積層発光ユニットと1つの燐光発光ユニットとを有することも好ましい。

[0137] また、本実施形態に係る有機EL素子は、燐光発光ユニットを含まないことも好ましい。

[0138] 図1には、本実施形態に係る有機EL素子の一例として、有機EL素子1の概略構成が示されている。有機EL素子1は、タンデム型有機EL素子である。有機EL素子1は、基板2と、陰極4と、陽極3と、陰極4および陽極3の間に含まれる中間ユニット20と、中間ユニット20と陽極3との間に含まれる第一発光ユニット11と、中間ユニット20と陰極4との間に含まれる第二発光ユニット12と、を備える。

有機EL素子1において、第一発光ユニット11と第二発光ユニット12とは中間ユニット20を介して直列に連結されている。

有機EL素子1は、2つの発光ユニットとして第一発光ユニット11及び第二発光ユニット12を含んでいる。有機EL素子1における第一発光ユニット11及び第二発光ユニット12は、いずれも本実施形態に係る積層発光ユニットである。第一発光ユニット11を第一積層発光ユニットと称する場合がある。第二発光ユニット12を第二積層発光ユニットと称する場合がある。

- [0139] 第一発光ユニット11は、陽極3側から順に、正孔注入層113、正孔輸送層114、第一の発光層111、第二の発光層112及び電子輸送層115が、この順番で積層されて構成される。
- [0140] 第二発光ユニット12は、陽極3側から順に、正孔輸送層123、第一の発光層121、第二の発光層122、電子輸送層124及び電子注入層125が、この順番で積層されて構成される。
- [0141] 中間ユニット20は、陽極3側から順に、第一の陰極側有機層21（第一N層と称する場合がある。）及び第一P層22が、この順番で積層されて構成される。
- [0142] 本発明は、図1に示す有機EL素子の構成に限定されない。別の構成の有機EL素子としては、例えば、発光ユニットにおいて、陽極側から順に、第二の発光層及び第一の発光層の順番で積層されて構成される態様が挙げられる。また、発光ユニット及び中間ユニットの数も図1に示す有機EL素子の構成に限定されない。また、第一発光ユニットと第二発光ユニットとの間に、中間ユニットではなく、中間層としての第一の陰極側有機層が配置されている態様も挙げられる。
- [0143] 本実施形態に係る有機EL素子は、ボトムエミッション型の有機EL素子でもよい。また、本実施形態に係る有機EL素子は、トップエミッション型の有機EL素子でもよい。
- [0144] また、複数の発光ユニットとして、積層発光ユニットと、燐光発光ユニットとを有する有機EL素子の素子構成としては、例えば、下記（TND5）～（TND8）のような素子構成が挙げられる。
- （TND5）陽極／第一発光ユニット（積層発光ユニット）／中間層／第二発光ユニット（燐光発光ユニット）／陰極
- （TND6）陽極／第一発光ユニット（積層発光ユニット）／中間ユニット／第二発光ユニット（燐光発光ユニット）／陰極
- （TND7）陽極／第一発光ユニット（積層発光ユニット）／第一中間層／第二発光ユニット（燐光発光ユニット）／第二中間層／第三発光ユニット

(積層発光ユニット) / 陰極

(TND8) 陽極 / 第一発光ユニット (積層発光ユニット) / 第一中間ユニット / 第二発光ユニット (燐光発光ユニット) / 第二中間ユニット / 第三発光ユニット (積層発光ユニット) / 陰極

発光ユニット及び中間層 (又は中間ユニット) の数は、(TND5) ~ (TND8) に示した例に限定されない。また、積層発光ユニット及び燐光発光ユニットの配置順番も (TND5) ~ (TND8) に示した例に限定されない。

[0145] (第一の陰極側有機層)

第一の陰極側有機層は、フェナントロリン骨格を有するフェナントロリン化合物を含有する。

[0146] 第一の陰極側有機層は、フェナントロリン化合物及び電子供与性材料を含有することが好ましい。

電子供与性材料は、電子供与性を有する金属単体、金属化合物及び金属錯体からなる群から選択される少なくとも1種であることが好ましい。電子供与性材料は、具体的には、アルカリ金属、アルカリ金属化合物、アルカリ金属を含む有機金属錯体、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属化合物、アルカリ土類金属を含む有機金属錯体、希土類金属、希土類金属化合物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少なくとも1種であることが好ましく、なかでも、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属の単体、希土類金属の化合物及び希土類金属の錯体からなる群から選択される少なくとも1種であることがより好ましい。例えば、第一の陰極側有機層は、フェナントロリン化合物と、Li、Yb及びCsからなる群から選択される少なくとも1種の金属とを含有することも好ましい。

[0147] (中間ユニット)

本実施形態に係る有機EL素子は、発光ユニット同士の間で中間ユニットを含んでいてもよい。中間ユニットは、複数の有機層を含む。第一の陰極側有機層は、中間ユニットを構成する有機層であるってもよい。

本実施形態に係る有機EL素子において、少なくとも1つの積層発光ユニットの陰極側に中間ユニットが配置され、当該中間ユニットが、第一の陰極側有機層を含んでいることも好ましい。

中間ユニットは、少なくとも1つのN層と、少なくとも1つのP層とを含むことが好ましい。N層は、P層よりも陽極側に配置される。本実施形態に係る有機EL素子において、中間ユニットは、N層として、第一の陰極側有機層を含んでいることが好ましい。中間ユニットは、複数のN層として、陽極側に配置される第一N層と、第一N層よりも陰極側に配置される第二N層とを有していても良い。第一の陰極側有機層は、第一N層であってもよいし、第二N層であってもよい。第二N層が第一の陰極側有機層であれば、第一の陰極側有機層と第一の発光層とを離間させ易い。

N層は、 $\pi$ 電子欠乏性化合物と、電子供与性材料とを含むことが好ましい。 $\pi$ 電子欠乏性化合物としては、例えば、金属原子に配位可能な化合物等が挙げられる。 $\pi$ 電子欠乏性化合物としては、例えば、フェナントロリン系化合物、ベンゾイミダゾール系化合物、アジン系化合物及びキノリノール等が挙げられる。

P層は、アクセプタ材料を含む層である。P層は、アクセプタ材料がドーピングされた層（Pドーピング層）であってもよい。アクセプタ材料は、正孔注入層の項で例示した「正孔注入性の高い物質」の中から、適宜選択して用いることもできる。

[0148] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層と第一の陰極側有機層との間に、第二の陰極側有機層が配置されている構成とすることもできる。

例えば、本実施形態に係る有機EL素子において、陽極側から、第二の発光層、第一の発光層、第二の陰極側有機層及び第一の陰極側有機層をこの順序に有していてもよい。このように、陽極側から、第二の発光層及び第一の発光層をこの順序に有している場合は、第二の陰極側有機層によって、第一の発光層と第一の陰極側有機層とを離間させることができる。

また、例えば、本実施形態に係る有機EL素子において、陽極側から、第一の発光層、第二の発光層、第二の陰極側有機層及び第一の陰極側有機層をこの順序に有していてもよい。なお、陽極側から、第一の発光層及び第二の発光層をこの順序に有している場合は、第二の陰極側有機層が配置されていなくても、第一の発光層とフェナントロリン化合物を含有する第一の陰極側有機層とを離間させることができる。

[0149] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の陰極側有機層は、フェナントロリン骨格を有するフェナントロリン化合物を含有しないことが好ましい。

[0150] 第二の陰極側有機層は、中間ユニットにおける第一の陰極側有機層とは異なるN層であってもよい。例えば、第二の陰極側有機層が第一N層であって、第一の陰極側有機層が第二N層であってもよい。

また、第二の陰極側有機層は、発光ユニットにおける電子輸送層又は正孔障壁層であってもよい。

[0151] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層と第一の陰極側有機層とが30nm以上離間していることが好ましい。第一の陰極側有機層と第一の発光層とが30nm以上離間していることで、積層発光ユニットから第一の陰極側有機層へ移動する正孔の量を抑制し易くなり、有機EL素子が長寿命化し易くなると考えられる。

[0152] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の陰極側有機層と陰極との間には、少なくとも1つの発光ユニットが配置されていてもよい。

本実施形態に係る有機EL素子において、フェナントロリン化合物を含有する第一の陰極側有機層は、積層発光ユニットと、積層発光ユニットとは異なる別の発光ユニットとの間に配置されていてもよい。

[0153] フェナントロリン化合物を含有する有機層が、陰極から電子注入を受けやすい位置に配置されている場合（例えば、陰極又は電子注入層と、直接、接している場合）、フェナントロリン化合物を含有する有機層は、電子注入を受けやすいため、発光層から移動してきた正孔の注入による劣化が緩和され

る。

一方、フェナントロリン化合物を含有する有機層が、発光ユニット同士の間配置されていて、陰極（金属電極）による活性作用を受けることができず、電子注入を受けにくい場合、フェナントロリン化合物は、正孔によって劣化しやすい。

本実施形態に係る有機EL素子において、フェナントロリン化合物を含有する第一の陰極側有機層が、発光ユニット同士の間配置されていて、電子注入を受けにくい場合であっても、第一の陰極側有機層の陽極側に積層発光ユニットが配置されているため、積層発光ユニットから第一の陰極側有機層へ移動する正孔の量が抑制され、有機EL素子が長寿命化すると考えられる。

[0154] 本実施形態に係る有機EL素子において、フェナントロリン化合物を含有する有機層は、2つ以上の発光ユニットの内の最も陰極側に配置されている発光ユニットよりも陰極側に、配置されていてもよいし、配置されていなくてもよい。

[0155] （発光ユニット）

本実施形態に係る有機EL素子は、2つ以上の発光ユニットを含む。各発光ユニットは、それぞれ発光層を含む。本実施形態に係る有機EL素子は、少なくとも1つの積層発光ユニットを含み、積層発光ユニットは、前述の通り、第一の発光層及び第二の発光層を含む。

本実施形態に係る有機EL素子は、2つ以上の積層発光ユニットを含んでいてもよい。積層発光ユニットではないその他の発光ユニットは、単一の発光層を含んでいてもよいし、複数の発光層を含んでいてもよい。

[0156] 本実施形態に係る有機EL素子において、積層発光ユニットの第二の発光層が、第一の発光層と前記第一の陰極側有機層との間に配置されていることも好ましい。再結合層としての第一の発光層とフェナントロリン化合物を含有する第一の陰極側有機層との間に第二の発光層が配置されているので、第一の発光層と第一の陰極側有機層との間に他の有機層を配置しない場合でも

、第二の発光層によって、第一の発光層と第一の陰極側有機層とを離間させることができる。

[0157] 本実施形態に係る有機EL素子において、積層発光ユニットの第一の発光層が、第二の発光層と第一の陰極側有機層との間に配置されていることも好ましい。

[0158] 本実施形態に係る有機EL素子は、陽極側から、第一の発光層と第二の発光層とをこの順序に有していてもよいし、陽極側から、第二の発光層と第一の発光層とをこの順序に有していてもよい。第一の発光層と第二の発光層の順序がいずれの場合も、前記数式（数3）の関係を満たす材料の組合せを選択することにより、発光層が積層構成であることによる効果が期待できる。

[0159] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層と第二の発光層との積層順が、陽極側から、第一の発光層と第二の発光層との順序である場合、第一のホスト材料の正孔移動度 $\mu_h(H1)$ と、第二のホスト材料の正孔移動度 $\mu_h(H2)$ とが、下記数式（数31）の関係を満たすことも好ましい。第一のホスト材料及び第二のホスト材料が、下記数式（数31）の関係を満たすことにより、フェナントロリン化合物の劣化をさらに抑制することができる。

$$\mu_h(H1) > \mu_h(H2) \quad \dots \text{(数31)}$$

[0160] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層と第二の発光層との積層順が、陽極側から、第一の発光層と第二の発光層との順序である場合、第一のホスト材料の正孔移動度 $\mu_h(H1)$ と、第一のホスト材料の電子移動度 $\mu_e(H1)$ と、第二のホスト材料の正孔移動度 $\mu_h(H2)$ と、第二のホスト材料の電子移動度 $\mu_e(H2)$ とが、下記数式（数32）の関係を満たすことも好ましい。第一のホスト材料及び第二のホスト材料が、下記数式（数32）の関係を満たすことにより、フェナントロリン化合物の劣化をさらに抑制することができる。

$$\left( \mu_e(H1) / \mu_h(H1) \right) < \left( \mu_e(H2) / \mu_h(H2) \right) \quad \dots \text{(数32)}$$

[0161] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層と第二の発光層との積層順が、陽極側から、第一の発光層と第二の発光層との順序である場合、第一のホスト材料の電子移動度 $\mu_e(H1)$ と、第二のホスト材料の電子移動度 $\mu_e(H2)$ とが、下記数式(数33)の関係を満たすことも好ましい。第一のホスト材料と第二のホスト材料とが、下記数式(数33)の関係を満たすことにより、第一の発光層でのホールと電子との再結合能が向上する。

$$\mu_e(H1) < \mu_e(H2) \quad \dots \text{(数33)}$$

[0162] 電子移動度は、下記の手順で作製された移動度評価用素子を用い、インピーダンス測定を行うことで測定できる。移動度評価用素子は、例えば、下記の手順で作製される。

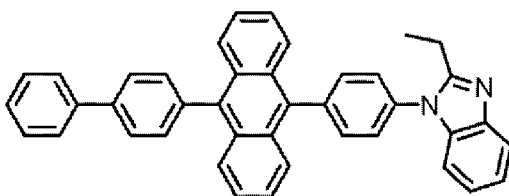
アルミニウム電極(陽極)付きガラス基板上に、アルミニウム電極を覆うようにして電子移動度の測定対象となる化合物Targetを蒸着して測定対象層を形成する。この測定対象層の上に、下記化合物ET-Aを蒸着して電子輸送層を形成する。この電子輸送層の成膜の上に、LiFを蒸着して電子注入層を形成する。この電子注入層の成膜の上に金属アルミニウム(Al)を蒸着して金属陰極を形成する。

以上の移動度評価用素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

glass/Al(50)/Target(200)/ET-A(10)/LiF(1)/Al(50)

なお、括弧内の数字は、膜厚(nm)を示す。

[0163] [化22]



**ET-A**

[0164] 電子移動度の移動度評価用素子を、インピーダンス測定装置に設置し、インピーダンス測定を行う。インピーダンス測定は、測定周波数を1Hzから1MHzまで掃引して行う。その際、素子には交流振幅0.1Vと同時に、

直流電圧  $V$  を印加する。測定されたインピーダンス  $Z$  から、下記計算式 (C 1) の関係を用いて、モジュラス  $M$  を計算する。

$$\text{計算式 (C 1)} : M = j \omega Z$$

上記計算式 (C 1) において、 $j$  は、その平方が  $-1$  になる虚数単位、 $\omega$  は、角周波数 [rad/s] である。

モジュラス  $M$  の虚部を縦軸、周波数 [Hz] を横軸にしたボーデプロットにおいて、ピークを示す周波数  $f_{max}$  から移動度評価用素子の電氣的な時間定数  $\tau$  を下記計算式 (C 2) から求める。

$$\text{計算式 (C 2)} : \tau = 1 / (2 \pi f_{max})$$

上記計算式 (C 2) の  $\pi$  は、円周率を表す記号である。

上記  $\tau$  を用いて、下記計算式 (C 3-1) の関係から電子移動度  $\mu_e$  を算出する。

$$\text{計算式 (C 3-1)} : \mu_e = d^2 / (V \tau)$$

上記計算式 (C 3-1) の  $d$  は、素子を構成する有機薄膜の総膜厚であり、電子移動度の移動度評価用素子構成の場合、 $d = 210$  [nm] である。

[0165] 正孔移動度は、下記の手順で作製された移動度評価用素子を用い、インピーダンス測定を行うことで測定できる。移動度評価用素子は、例えば、下記の手順で作製される。

ITO透明電極（陽極）付きガラス基板上に、透明電極を覆うようにして下記化合物 HA-2 を蒸着して正孔注入層を形成する。この正孔注入層の成膜の上に、下記化合物 HT-A を蒸着して正孔輸送層を形成する。続けて、正孔移動度の測定対象となる化合物 Target を蒸着して測定対象層を形成する。この測定対象層の上に、金属アルミニウム (Al) を蒸着して金属陰極を形成する。

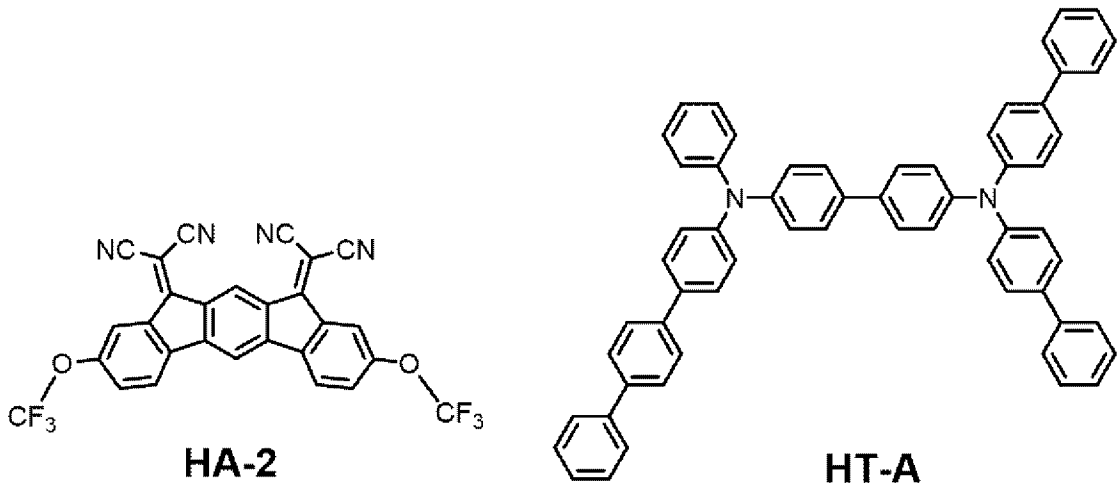
以上の移動度評価用素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HA-2(5)/HT-A(10)/Target(200)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚 (nm) を示す。

[0166]

[化23]



[0167] 正孔移動度の移動度評価用素子を、インピーダンス測定装置に設置し、インピーダンス測定を行う。インピーダンス測定は、測定周波数を1 Hzから1 MHzまで掃引して行う。その際、素子には交流振幅0.1 Vと同時に、直流電圧Vを印加する。測定されたインピーダンスZから、前記計算式(C1)の関係を用いて、モジュラスMを計算する。

モジュラスMの虚部を縦軸、周波数[Hz]を横軸にしたボーデプロットにおいて、ピークを示す周波数 $f_{max}$ から移動度評価用素子の電気的な時間定数 $\tau$ を前記計算式(C2)から求める。

前記計算式(C2)から求めた $\tau$ を用いて、下記計算式(C3-2)の関係から正孔移動度 $\mu_h$ を算出する。

$$\text{計算式 (C3-2)} : \mu_h = d^2 / (V\tau)$$

上記計算式(C3-2)のdは、素子を構成する有機薄膜の総膜厚であり、正孔移動度の移動度評価用素子構成の場合、 $d = 215$  [nm]である。

[0168] 本明細書における電子移動度及び正孔移動度は、電界強度の平方根 $E^{1/2} = 500$  [ $V^{1/2}/cm^{1/2}$ ]の際の値である。電界強度の平方根 $E^{1/2}$ は、下記計算式(C4)の関係から算出することができる。

$$\text{計算式 (C4)} : E^{1/2} = V^{1/2} / d^{1/2}$$

前記インピーダンス測定にはインピーダンス測定装置としてソーラトロン社の1260型を用い、高精度化のため、ソーラトロン社の1296型誘電

率測定インターフェイスを併せて用いることができる。

[0169] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ と第二のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ とが、下記数式(数5)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(H1) - T_1(H2) > 0.03 \text{ eV} \quad \dots \text{ (数5)}$$

[0170] (第一の発光層)

第一の発光層は、第一のホスト材料を含む。第一のホスト材料は、第二の発光層が含有する第二のホスト材料とは、異なる化合物である。

第一の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第一の発光性化合物を少なくとも含む。第一の発光性化合物は、最大ピーク波長が500nm以下の蛍光発光を示す蛍光発光性化合物であることが好ましい。

[0171] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光性化合物は、分子中にアジン環構造を含まない化合物であることが好ましい。

[0172] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光性化合物は、ホウ素含有錯体ではないことが好ましく、第一の発光性化合物は、錯体ではないことがより好ましい。

[0173] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層は、金属錯体を含有しないことが好ましい。また、本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層は、ホウ素含有錯体を含有しないことも好ましい。

[0174] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層は、燐光発光性材料(ドーパント材料)を含まないことが好ましい。

また、第一の発光層は、重金属錯体及び燐光発光性の希土類金属錯体を含まないことが好ましい。ここで、重金属錯体としては、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

[0175] 第一の発光性化合物の発光スペクトルにおいて、発光強度が最大となるピークを最大ピークとし、当該最大ピークの高さを1としたとき、当該発光スペクトルに現れる他のピークの高さは、0.6未満であることが好ましい。なお、発光スペクトルにおけるピークは、極大値とする。

また、第一の発光性化合物の発光スペクトルにおいて、ピークの数3つ未満であることが好ましい。

[0176] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層は、素子駆動時に最大ピーク波長が500nm以下の光を放射することが好ましい。

素子駆動時に発光層が放射する光の最大ピーク波長の測定は、次に記載の方法で行うことができる。

[0177] ・素子駆動時に発光層から放射される光の最大ピーク波長 $\lambda_p$

素子駆動時に第一の発光層から放射される光の最大ピーク波長 $\lambda_{p1}$ は、第二の発光層を第一の発光層と同じ材料を用いて有機EL素子を作製し、有機EL素子の電流密度が $10\text{ mA/cm}^2$ となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計CS-2000（コニカミノルタ株式会社製）で計測する。得られた分光放射輝度スペクトルから、最大ピーク波長 $\lambda_{p1}$ （単位：nm）を算出する。

素子駆動時に第二の発光層から放射される光の最大ピーク波長 $\lambda_{p2}$ は、第一の発光層を第二の発光層と同じ材料を用いて有機EL素子を作製し、有機EL素子の電流密度が $10\text{ mA/cm}^2$ となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計CS-2000（コニカミノルタ株式会社製）で計測する。得られた分光放射輝度スペクトルから、最大ピーク波長 $\lambda_{p2}$ （単位：nm）を算出する。

[0178] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の宿主材料の一重項エネルギー $S_1(H1)$ と、第一の発光性化合物の一重項エネルギー $S_1(D1)$ とが下記数式（数20）の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(H1) > S_1(D1) \quad \dots \text{ (数20)}$$

一重項エネルギー $S_1$ とは、最低励起一重項状態と基底状態とのエネルギー差を意味する。

[0179] 第一の宿主材料と第一の発光性化合物とが、数式（数20）の関係を満たすことにより、第一の宿主材料上で生成された一重項励起子は、第一の宿主材料から第一の発光性化合物へエネルギー移動し易くなり、第一の発

光性化合物の蛍光性発光に寄与する。

[0180] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ と、第一の発光性化合物の三重項エネルギー $T_1(D1)$ とが下記数式(数20A)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(D1) > T_1(H1) \quad \dots \text{(数20A)}$$

[0181] 第一のホスト材料と第一の発光性化合物とが、数式(数20A)の関係を満たす事により、第一の発光層内で生成した三重項励起子は、より高い三重項エネルギーを有する第一の発光性化合物ではなく、第一のホスト材料上を移動するため、第二の発光層へ移動し易くなる。

[0182] 本実施形態に係る有機EL素子は、下記数式(数20B)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(D1) > T_1(H1) > T_1(H2) \quad \dots \text{(数20B)}$$

[0183] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光性化合物は、第一の発光層中に、1.1質量%を超えて、含有されることが好ましい。すなわち、第一の発光層は、第一の発光性化合物を、第一の発光層の全質量の1.1質量%超、含有することが好ましく、第一の発光層の全質量の1.2質量%以上、含有することがより好ましく、第一の発光層の全質量の1.5質量%以上、含有することがさらに好ましい。

第一の発光層は、第一の発光性化合物を、第一の発光層の全質量の10質量%以下、含有することが好ましく、第一の発光層の全質量の7質量%以下、含有することがより好ましく、第一の発光層の全質量の5質量%以下、含有することがさらに好ましい。

[0184] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層は、第一のホスト材料としての第一の化合物を、第一の発光層の全質量の60質量%以上、含有することが好ましく、第一の発光層の全質量の70質量%以上、含有することがより好ましく、第一の発光層の全質量の80質量%以上、含有することがさらに好ましく、第一の発光層の全質量の90質量%以上、含有することがよりさらに好ましく、第一の発光層の全質量の95質量%以上、含有す

ることがさらになお好ましい。

第一の発光層は、第一のホスト材料を、第一の発光層の全質量の99質量%以下、含有することが好ましい。

ただし、第一の発光層が第一のホスト材料と第一の発光性化合物とを含有する場合、第一のホスト材料及び第一の発光性化合物の合計含有率の上限は、100質量%である。

[0185] なお、本実施形態は、第一の発光層に、第一のホスト材料と第一の発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

第一の発光層は、第一のホスト材料を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。第一の発光層は、第一の発光性化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

[0186] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層の膜厚は、3nm以上であることが好ましく、5nm以上であることがより好ましい。第一の発光層の膜厚が3nm以上であれば、第一の発光層において、正孔と電子との再結合を起こすのに十分な膜厚である。

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層の膜厚は、15nm以下であることが好ましく、10nm以下であることがより好ましい。第一の発光層の膜厚が15nm以下であれば、第二の発光層へ三重項励起子が移動するのに十分に薄い膜厚である。

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層の膜厚は、3nm以上、15nm以下であることがより好ましい。

[0187] (第二の発光層)

第二の発光層は、第二のホスト材料を含む。第二のホスト材料は、第一の発光層が含有する第一のホスト材料とは、異なる化合物である。

第二の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第二の発光性化合物を少なくとも含む。第二の発光性化合物は、最大ピーク波長が500nm以下の蛍光発光を示す蛍光発光性化合物であることが好ましい。

化合物の最大ピーク波長の測定方法は、前述の通りである。

[0188] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層は、素子駆動時に最大ピーク波長が500nm以下の光を放射することが好ましい。

[0189] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光性化合物の最大ピークの半値幅が、1nm以上、20nm以下であることが好ましい。

[0190] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光性化合物のストークスシフトは、7nmを超えることが好ましい。

第二の発光性化合物のストークスシフトが7nmを越えていれば、自己吸収による発光効率の低下を防止し易くなる。

自己吸収とは、放出した光を同一化合物が吸収する現象であり、発光効率の低下を引き起こす現象である。自己吸収は、ストークスシフトの小さい（すなわち、吸収スペクトルと蛍光スペクトルの重なりが大きい）化合物で顕著に観測されるため、自己吸収を抑制するには、ストークスシフトの大きい（吸収スペクトルと蛍光スペクトルの重なりが小さい）化合物を用いることが好ましい。ストークスシフトは、次に記載する方法で測定できる。

測定対象となる化合物を $2.0 \times 10^{-5} \text{ mol/L}$ の濃度でトルエンに溶解し、測定用試料を調製する。石英セルへ入れた測定用試料に室温（300K）で紫外-可視領域の連続光を照射し、吸収スペクトル（縦軸：吸光度、横軸：波長）を測定する。吸収スペクトル測定には、分光光度計を用いることができ、例えば、日立ハイテクサイエンス社の分光光度計U-3900/3900H形を用いることができる。また、測定対象となる化合物を $4.9 \times 10^{-6} \text{ mol/L}$ の濃度でトルエンに溶解し、測定用試料を調製する。石英セルへ入れた測定用試料に室温（300K）で励起光を照射し、蛍光スペクトル（縦軸：蛍光強度、横軸：波長）を測定した。蛍光スペクトル測定には、分光光度計を用いることができ、例えば、株式会社日立ハイテクサイエンス製の分光蛍光光度計F-7000形を用いることができる。

これらの吸収スペクトルと蛍光スペクトルから、吸収極大波長と蛍光極大波長の差を算出し、ストークスシフト（SS）を求める。ストークスシフトSSの単位は、nmである。

[0191] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光性化合物の三重項エネルギー $T_1(D2)$ と、第二のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ とが下記数式(数3A)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(D2) > T_1(H2) \quad \dots \text{(数3A)}$$

[0192] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光性化合物と、第二のホスト材料とが、前記数式(数3A)の関係を満たすことにより、第一の発光層で生成した三重項励起子は、第二の発光層に移動する際、より高い三重項エネルギーを有する第二の発光性化合物ではなく、第二のホスト材料の分子にエネルギー移動する。また、第二のホスト材料上で正孔及び電子が再結合して発生した三重項励起子は、より高い三重項エネルギーを持つ第二の発光性化合物には移動しない。第二の発光性化合物の分子上で再結合し発生した三重項励起子は、速やかに第二のホスト材料の分子にエネルギー移動する。

第二のホスト材料の三重項励起子が第二の発光性化合物に移動することなく、TTF現象によって第二のホスト材料上で三重項励起子同士が効率的に衝突することで、一重項励起子が生成される。

[0193] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二のホスト材料の一重項エネルギー $S_1(H2)$ と第二の発光性化合物の一重項エネルギー $S_1(D2)$ とが、下記数式(数4)の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(H2) > S_1(D2) \quad \dots \text{(数4)}$$

[0194] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光性化合物と、第二のホスト材料とが、前記数式(数4)の関係を満たすことにより、第二の発光性化合物の一重項エネルギーは、第二のホスト材料の一重項エネルギーより小さいため、TTF現象によって生成された一重項励起子は、第二のホスト材料から第二の発光性化合物へエネルギー移動し、第二の発光性化合物の蛍光性発光に寄与する。

[0195] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光性化合物は、分子中にアジン環構造を含まない化合物であることが好ましい。

[0196] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光性化合物は、ホウ素含有錯体ではないことが好ましく、第二の発光性化合物は、錯体ではないことがより好ましい。

[0197] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層は、金属錯体を含有しないことが好ましい。また、本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層は、ホウ素含有錯体を含有しないことも好ましい。

[0198] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層は、燐光発光性材料（ドーパント材料）を含まないことが好ましい。

また、第二の発光層は、重金属錯体及び燐光発光性の希土類金属錯体を含まないことが好ましい。ここで、重金属錯体としては、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

[0199] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光性化合物は、第二の発光層中に、1.1質量%を超えて、含有されることが好ましい。すなわち、第二の発光層は、第二の発光性化合物を、第二の発光層の全質量の1.1質量%超、含有することが好ましく、第二の発光層の全質量の1.2質量%以上、含有することがより好ましく、第二の発光層の全質量の1.5質量%以上、含有することがさらに好ましい。

第二の発光層は、第二の発光性化合物を、第二の発光層の全質量の10質量%以下、含有することが好ましく、第二の発光層の全質量の7質量%以下、含有することがより好ましく、第二の発光層の全質量の5質量%以下、含有することがさらに好ましい。

[0200] 第二の発光層は、第二のホスト材料としての第二の化合物を、第二の発光層の全質量の60質量%以上、含有することが好ましく、第二の発光層の全質量の70質量%以上、含有することがより好ましく、第二の発光層の全質量の80質量%以上、含有することがさらに好ましく、第二の発光層の全質量の90質量%以上、含有することがよりさらに好ましく、第二の発光層の全質量の95質量%以上、含有することがさらになお好ましい。

第二の発光層は、第二のホスト材料を、第二の発光層の全質量の99質量

%以下、含有することが好ましい。

第二の発光層が第二のホスト材料と第二の発光性化合物とを含有する場合、第二のホスト材料及び第二の発光性化合物の合計含有率の上限は、100質量%である。

[0201] なお、本実施形態は、第二の発光層に、第二のホスト材料と第二の発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

第二の発光層は、第二のホスト材料を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。第二の発光層は、第二の発光性化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

[0202] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層の膜厚は、5nm以上であることが好ましく、15nm以上であることがより好ましい。第二の発光層の膜厚が5nm以上であれば、第一の発光層から第二の発光層へ移動してきた三重項励起子が、再び第一の発光層に戻ることを抑制し易い。また、第二の発光層の膜厚が5nm以上であれば、第一の発光層における再結合部分から三重項励起子を充分離すことができる。

本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層の膜厚は、25nm以下であることが好ましく、20nm以下であることがより好ましい。第二の発光層の膜厚が25nm以下であれば、第二の発光層中の三重項励起子の密度を向上させて、TTF現象をさらに起こり易くすることができる。

本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層の膜厚は、5nm以上、25nm以下であることが好ましい。

[0203] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光性化合物又は第二の発光性化合物の三重項エネルギー $T_1(DX)$ と、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ と第二のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ とが、下記数式(数10)の関係を満たすことが好ましい。

$$2.6\text{ eV} > T_1(DX) > T_1(H1) > T_1(H2) \quad \dots (\text{数}10)$$

[0204] 第一の発光性化合物の三重項エネルギー $T_1(D1)$ は、下記数式(数10A)の関係を満たすことが好ましい。

$$2.6 \text{ eV} > T_1(D1) > T_1(H1) > T_1(H2) \dots (\text{数}10A)$$

[0205] 第二の発光性化合物の三重項エネルギー $T_1(D2)$ は、下記数式(数10B)の関係を満たすことが好ましい。

$$2.6 \text{ eV} > T_1(D2) > T_1(H1) > T_1(H2) \dots (\text{数}10B)$$

[0206] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光性化合物又は第二の発光性化合物の三重項エネルギー $T_1(DX)$ と、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ とが、下記数式(数11)の関係を満たすことが好ましい。

$$0 \text{ eV} < T_1(DX) - T_1(H1) < 0.6 \text{ eV} \dots (\text{数}11)$$

[0207] 第一の発光性化合物の三重項エネルギー $T_1(D1)$ は、下記数式(数11A)の関係を満たすことが好ましい。

$$0 \text{ eV} < T_1(D1) - T_1(H1) < 0.6 \text{ eV} \dots (\text{数}11A)$$

[0208] 第二の発光性化合物の三重項エネルギー $T_1(D2)$ は、下記数式(数11B)の関係を満たすことが好ましい。

$$0 \text{ eV} < T_1(D2) - T_1(H2) < 0.8 \text{ eV} \dots (\text{数}11B)$$

[0209] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ が、下記数式(数12)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(H1) > 2.0 \text{ eV} \dots (\text{数}12)$$

[0210] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ が、下記数式(数12A)の関係を満たすことも好ましく、下記数式(数12B)の関係を満たすことも好ましい。

$$T_1(H1) > 2.10 \text{ eV} \dots (\text{数}12A)$$

$$T_1(H1) > 2.15 \text{ eV} \dots (\text{数}12B)$$

[0211] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ が、前記数式(数12A)又は前記数式(数12B)の関係を満たすことにより、第一の発光層で生成した三重項励起子は、第二の発光層へと移動し易くなり、また、第二の発光層から第一の発光層へ逆移動することを抑制し易くなる。その結果、第二の発光層において、一重項励起子

が効率良く生成され、発光効率が向上する。

[0212] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ が、下記数式(数12C)の関係を満たすことも好ましく、下記数式(数12D)の関係を満たすことも好ましい。

$$2.08\text{ eV} > T_1(H1) > 1.87\text{ eV} \quad \dots (\text{数}12\text{C})$$

$$2.05\text{ eV} > T_1(H1) > 1.90\text{ eV} \quad \dots (\text{数}12\text{D})$$

[0213] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ が、前記数式(数12C)又は前記数式(数12D)の関係を満たすことにより、第一の発光層で生成した三重項励起子のエネルギーが小さくなり、有機EL素子の長寿命化が期待できる。

[0214] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光性化合物の三重項エネルギー $T_1(D1)$ が、下記数式(数14A)の関係を満たすことも好ましく、下記数式(数14B)の関係を満たすことも好ましい。

$$2.60\text{ eV} > T_1(D1) \quad \dots (\text{数}14\text{A})$$

$$2.50\text{ eV} > T_1(D1) \quad \dots (\text{数}14\text{B})$$

第一の発光層が、前記数式(数14A)又は(数14B)の関係を満たす第一の発光性化合物を含有することにより、有機EL素子が長寿命化する。

[0215] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光性化合物の三重項エネルギー $T_1(D2)$ が、下記数式(数14C)の関係を満たすことも好ましく、下記数式(数14D)の関係を満たすことも好ましい。

$$2.60\text{ eV} > T_1(D2) \quad \dots (\text{数}14\text{C})$$

$$2.50\text{ eV} > T_1(D2) \quad \dots (\text{数}14\text{D})$$

第二の発光層が、前記数式(数14C)又は(数14D)の関係を満たす化合物を含有することにより、有機EL素子が長寿命化する。

[0216] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ が、下記数式(数13)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(H2) \geq 1.9\text{ eV} \quad \dots (\text{数}13)$$

[0217] (第三の発光層)

本実施形態に係る有機EL素子は、第三の発光層をさらに含んでいてもよい。

第三の発光層は、第三のホスト材料を含み、第一のホスト材料と第二のホスト材料と第三のホスト材料とは、互いに異なり、第三の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第三の発光性化合物を少なくとも含み、第一の発光性化合物と、第二の発光性化合物と、第三の発光性化合物とが、互いに同一であるか、又は異なり、第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ と第三のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H3)$ とが、下記数式(数1A)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(H1) > T_1(H3) \quad \dots \text{(数1A)}$$

[0218] 本実施形態に係る有機EL素子が第三の発光層を含んでいる場合、第二のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ と第三のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H3)$ とが、下記数式(数1B)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(H2) > T_1(H3) \quad \dots \text{(数1B)}$$

[0219] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層と第二の発光層とが、直接、接していることが好ましい。

[0220] 本明細書において、「第一の発光層と第二の発光層とが、直接、接している」層構造は、例えば、以下の態様(LS1)、(LS2)及び(LS3)のいずれかの態様も含み得る。

(LS1) 第一の発光層に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で第一のホスト材料及び第二のホスト材料の両方が混在する領域が生じ、当該領域が第一の発光層と第二の発光層との界面に存在する態様。

(LS2) 第一の発光層及び第二の発光層が発光性の化合物を含む場合に、第一の発光層に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で第一のホスト材料、第二のホスト材料及び発光性の化合物が混在する領域が生じ、当該領域が第一の発光層と第二の発光層との界

面に存在する態様。

(L S 3) 第一の発光層及び第二の発光層が発光性の化合物を含む場合に、第一の発光層に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で当該発光性の化合物からなる領域、第一のホスト材料からなる領域、又は第二のホスト材料からなる領域が生じ、当該領域が第一の発光層と第二の発光層との界面に存在する態様。

[0221] 本実施形態に係る有機EL素子が第三の発光層を含んでいる場合、第一の発光層と第二の発光層とが、直接、接しており、第二の発光層と第三の発光層とが、直接、接していることが好ましい。

[0222] 本明細書において、「第二の発光層と第三の発光層とが、直接、接している」層構造は、例えば、以下の態様(L S 4)、(L S 5)及び(L S 6)のいずれかの態様も含み得る。

(L S 4) 第二の発光層に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で第二のホスト材料及び第三のホスト材料の両方が混在する領域が生じ、当該領域が第二の発光層と第三の発光層との界面に存在する態様。

(L S 5) 第二の発光層及び第三の発光層が発光性の化合物を含む場合に、第二の発光層に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で第二のホスト材料、第三のホスト材料及び発光性の化合物が混在する領域が生じ、当該領域が第二の発光層と第三の発光層との界面に存在する態様。

(L S 6) 第二の発光層及び第三の発光層が発光性の化合物を含む場合に、第二の発光層に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で当該発光性の化合物からなる領域、第二のホスト材料からなる領域、又は第三のホスト材料からなる領域が生じ、当該領域が第二の発光層と第三の発光層との界面に存在する態様。

[0223] 例えば、本実施形態に係る有機EL素子においては、前記一般式(1)等で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有する第一の発光層と

、前記一般式（２）等で表される第二の化合物を第二のホスト材料として含有する第二の発光層とが、直接、接していてもよい。第一の発光層と第二の発光層とをこのように積層させることでも、生成した一重項励起子及び三重項励起子を有効に活用でき、その結果、有機ＥＬ素子の発光効率を向上させることができる。

[0224]（発光性化合物を含有しない層）

また、本実施形態に係る有機ＥＬ素子の積層発光ユニットは、有機層同士の間配置され、発光性化合物を含有しない層（介在層と称する場合がある。）をさらに有することも好ましい。

[0225] 本実施形態に係る有機ＥＬ素子の積層発光ユニットが発光性化合物を含有しない層（介在層）を有する場合、発光性化合物を含有しない層（介在層）は、第一の発光層と第二の発光層との間に配置されていることが好ましい。

[0226] 介在層は、金属原子を含まないことが好ましい。

介在層は、有機材料を含む。介在層が含有する有機材料は、発光性化合物ではないことが好ましい。

介在層が含有する有機材料としては、例えば、１）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、２）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、３）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挙げられる。

[0227] 介在層が含有する有機材料は、第一の発光層が含有する第一のホスト材料及び第二の発光層が含有する第二のホスト材料の一方、又は両方のホスト材料であってもよい。

[0228] 介在層が複数の有機材料を含有する場合、それぞれの有機材料の含有率は、いずれも、介在層の全質量の１０質量％以上であることが好ましい。

介在層は、前記有機材料を、介在層の全質量の６０質量％以上、含有することが好ましく、介在層の全質量の７０質量％以上、含有することがより好

ましく、介在層の全質量の80質量%以上、含有することがさらに好ましく、介在層の全質量の90質量%以上、含有することがよりさらに好ましく、介在層の全質量の95質量%以上、含有することがさらになお好ましい。

介在層は、有機材料を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

介在層が有機材料を2種以上含有する場合、2種以上の有機材料の合計含有率の上限は、100質量%である。

なお、本実施形態は、介在層に、前記有機材料以外の材料が含まれることを除外しない。

[0229] 介在層は単層で構成されていてもよいし、二層以上積層されて構成されていてもよい。

[0230] 介在層の膜厚は、特に制限は無いが、1層あたり、3nm以上15nm以下であることが好ましく、5nm以上10nm以下であることがより好ましい。

[0231] 第一の化合物及び第二の化合物において、「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であることが好ましい。

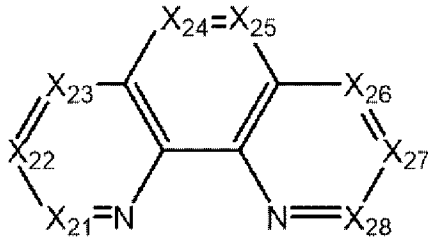
[0232] 本明細書において、「ホスト材料」とは、例えば、「層の50質量%以上」含まれる材料である。したがって、例えば、第一の発光層は、下記一般式(1)で表される第一の化合物を、第一の発光層の全質量の50質量%以上、含有する。第二の発光層は、例えば、下記一般式(2)で表される第二の化合物を、第二の発光層の全質量の50質量%以上、含有する。

[0233] (フェナントロリン化合物)

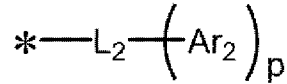
フェナントロリン化合物は、下記一般式(21)で表される基を少なくとも1つ有し、かつ下記一般式(20)で表される化合物であることが好ましい。

[0234]

[化24]



(20)



(21)

[0235] (前記一般式(20)において、

$X_{21} \sim X_{28}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、 $CR_{21}$ 、又は前記一般式(21)で表される基と結合する炭素原子であり、

$X_{21} \sim X_{28}$ のうち少なくとも1つは、前記一般式(21)で表される基と結合する炭素原子であり、

前記一般式(21)で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式(21)で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

複数の $R_{21}$ のうち隣接する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、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{21}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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、

$-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基、

$-O-(R_{904})$ で表される基、

$-S-(R_{905})$ で表される基、

$-N(R_{906})(R_{907})$  で表される基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、  
 $-C(=O)R_{931}$  で表される基、  
 $-COOR_{932}$  で表される基、  
 $-S(=O)_2R_{933}$  で表される基、  
 $-B(R_{934})(R_{935})$  で表される基、  
 $-P(=O)(R_{936})(R_{937})$  で表される基、  
 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 の複素環基である。)

[0236] (前記一般式 (21) において、

$A_{r_2}$  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、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であり、

$p$  は、1、2、3、4 又は 5 であり、

$A_{r_2}$  が 2 以上存在する場合、2 以上の  $A_{r_2}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$L_2$  は、単結合又は連結基であり、

連結基としての  $L_2$  は、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 の直鎖状、分岐鎖状もしくは環状の多価の脂肪族炭化水素基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 の多価の芳香族炭化水素基

、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の多価の複素環基、または

前記多価の芳香族炭化水素環基及び前記多価の複素環基から選ばれる 2

つ又は 3 つの基が結合してなる多価の複数連結基であり、

前記複数連結基を構成する前記芳香族炭化水素環基及び前記複素環基は、互いに同一であるか又は異なり、隣り合う基同士が互いに結合して環を形成するか、又は互いに結合せず、

$A r_2$ と連結基としての $L_2$ とが互いに結合して環を形成するか、又は互いに結合せず、

連結基としての $L_2$ と、 $L_2$ に結合した炭素原子に隣接する $X_{21} \sim X_{28}$ のいずれかの炭素原子又は $C R_{21}$ の $R_{21}$ とが、互いに結合して環を形成するか、又は互いに結合せず、

前記一般式(21)中の\*は、前記一般式(20)で表される環との結合位置を示す。)

[0237] (前記フェナントロリン化合物中、 $R_{901}$ 、 $R_{902}$ 、 $R_{903}$ 、 $R_{904}$ 、 $R_{905}$ 、 $R_{906}$ 、 $R_{907}$ 、 $R_{931}$ 、 $R_{932}$ 、 $R_{933}$ 、 $R_{934}$ 、 $R_{935}$ 、 $R_{936}$ 及び $R_{937}$ 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の複素環基であり、

$R_{901}$ が複数存在する場合、複数の $R_{901}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{902}$ が複数存在する場合、複数の $R_{902}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{903}$ が複数存在する場合、複数の $R_{903}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{904}$ が複数存在する場合、複数の $R_{904}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{905}$ が複数存在する場合、複数の $R_{905}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{906}$ が複数存在する場合、複数の $R_{906}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{907}$ が複数存在する場合、複数の $R_{907}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{931}$ が複数存在する場合、複数の $R_{931}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{932}$ が複数存在する場合、複数の $R_{932}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{933}$ が複数存在する場合、複数の $R_{933}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{934}$ が複数存在する場合、複数の $R_{934}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{935}$ が複数存在する場合、複数の $R_{935}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{936}$ が複数存在する場合、複数の $R_{936}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{937}$ が複数存在する場合、複数の $R_{937}$ は、互いに同一であるか又は異なる。) )

[0238] 本明細書において、 $-O-$  ( $R_{904}$ ) で表される基は、 $R_{904}$ が水素原子の場合、ヒドロキシ基である。

本明細書において、 $-S-$  ( $R_{905}$ ) で表される基は、 $R_{905}$ が水素原子の場合、チオール基である。

本明細書において、 $-S(=O)_2 R_{933}$ で表される基は、 $R_{933}$ が置換基の場合、置換スルホ基である。

本明細書において、 $-B(R_{934})(R_{935})$ で表される基は、 $R_{934}$ 及び $R_{935}$ が置換基の場合、置換ボリル基である。

本明細書において、 $-P(=O)(R_{936})(R_{937})$ で表される基は、 $R_{936}$ 及び $R_{937}$ が置換基の場合、置換ホスフィンオキシド基であり、 $R_{936}$ 及

び $R_{937}$ がアリール基の場合、アリールホスホリル基である。

[0239] 本明細書に記載の「無置換の直鎖状、分岐鎖状もしくは環状の多価の脂肪族炭化水素基」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であり、より好ましくは1～6である。

本明細書に記載の「無置換の多価の芳香族炭化水素基」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であり、より好ましくは6～18である。

本明細書に記載の「無置換の多価の複素環基」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。

[0240] 前記一般式(21)の $A_{r2}$ における環形成原子数5～50の複素環基として、前記一般式(20)で表される環構造から誘導される置換もしくは無置換の基を含むことが好ましい。

[0241] 前記一般式(20)の $X_{21}$ 及び $X_{28}$ が、前記一般式(21)で表される基と結合する炭素原子であることも好ましい。

前記一般式(20)の $X_{21}$ 及び $X_{28}$ の一方が、前記一般式(21)で表される基と結合する炭素原子であり、 $X_{21}$ 及び $X_{28}$ の他方が、水素原子と結合する炭素原子であることも好ましい。

[0242] 前記一般式(20)の $X_{21} \sim X_{28}$ は、それぞれ独立に、 $CR_{21}$ 又は前記一般式(21)で表される基と結合する炭素原子であることが好ましい。

前記一般式(20)の $X_{21} \sim X_{28}$ の内、前記一般式(21)で表される基と結合する炭素原子の他は、 $CR_{21}$ であることが好ましい。すなわち、前記一般式(20)で表される化合物は、1, 10-フェナントロリン誘導体であることが好ましい。

[0243] 前記一般式(21)の $A_{r2}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数8～20の縮合芳香族炭化水素基であることも好ましい。

[0244] 環形成炭素数8～20の縮合芳香族炭化水素基は、例えば、ナフタレン、アントラセン、アセフェナントリレン、アセアントリレン、ベンゾアントラ

セン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、フルオレン、フェナントレン、フルオランテン及びベンゾフルオランテンからなる群から選択されるいずれかの芳香族炭化水素から誘導される基であることも好ましい。

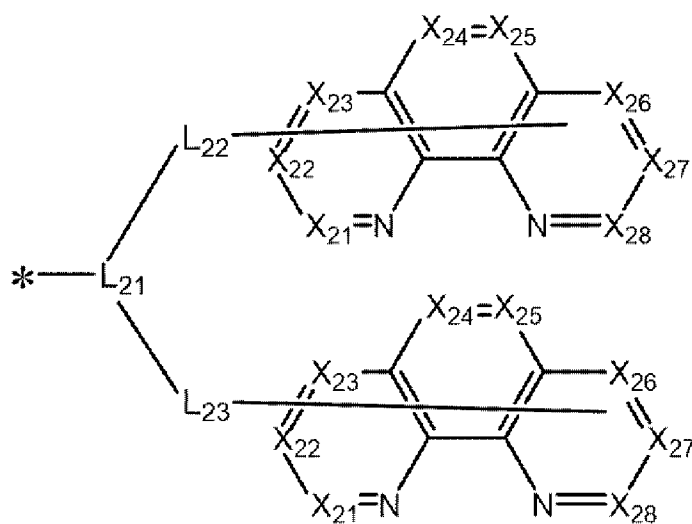
[0245] 前記一般式(21)の $A r_2$ は、置換もしくは無置換のアントリル基であることも好ましい。

[0246] 前記一般式(21)の $A r_2$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数5~40の複素環基であることも好ましい。

[0247] 前記一般式(21)の $A r_2$ は、前記一般式(20)で表される環構造から誘導される置換もしくは無置換の基であることも好ましい。

[0248] 前記一般式(21)の $A r_2$ は、下記一般式(23)で表される基であることも好ましい。

[0249] [化25]



(23)

[0250] (前記一般式(23)において、

$X_{21} \sim X_{28}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、 $CR_{21}$ 、前記一般式(21)で表される基又は $L_{22}$ もしくは $L_{23}$ に結合する炭素原子であり、

$L_{21}$ は、連結基であり、連結基としての $L_{21}$ は、置換もしくは無置換の炭素数1~50の直鎖状、分岐鎖状もしくは環状の3価の脂肪族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50の3価の芳香族炭化水素基、置

換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 3 価の複素環基であり、

$L_{22}$  及び  $L_{23}$  は、それぞれ独立に、単結合または連結基であり、連結基としての  $L_{22}$  及び  $L_{23}$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 の直鎖状、分岐鎖状もしくは環状の 2 価の脂肪族炭化水素基、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、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。)

[0251] フェナントロリン化合物の一般式中、

$X_{21}$  が複数存在する場合、複数の  $X_{21}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$X_{22}$  が複数存在する場合、複数の  $X_{22}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$X_{23}$  が複数存在する場合、複数の  $X_{23}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$X_{24}$  が複数存在する場合、複数の  $X_{24}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$X_{25}$  が複数存在する場合、複数の  $X_{25}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$X_{26}$  が複数存在する場合、複数の  $X_{26}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

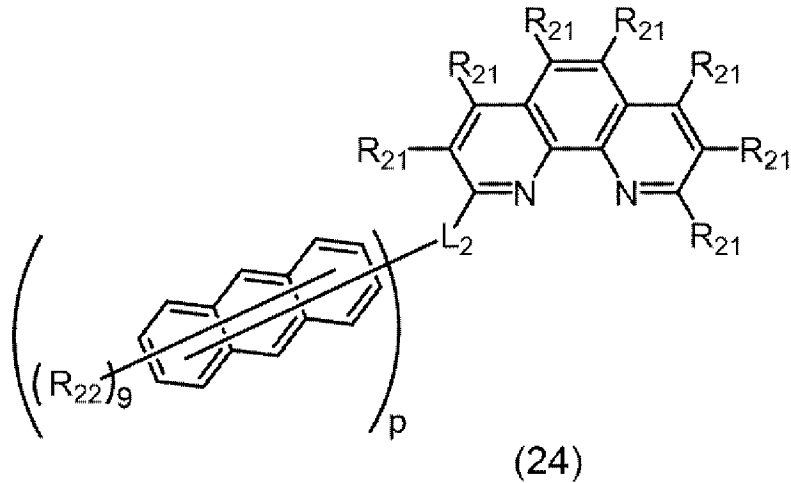
$X_{27}$  が複数存在する場合、複数の  $X_{27}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$X_{28}$  が複数存在する場合、複数の  $X_{28}$  は、互いに同一であるか又は異なる。

[0252] 前記一般式 (23) の  $X_{21} \sim X_{28}$  は、それぞれ独立に、窒素原子、 $CR_{21}$ 、又は  $L_{22}$  もしくは  $L_{23}$  に結合する炭素原子であることが好ましく、 $CR_{21}$ 、又は  $L_{22}$  もしくは  $L_{23}$  に結合する炭素原子であることがより好ましい。

[0253] フェナントロリン化合物は、下記一般式 (24) で表される化合物であることも好ましい。

[0254] [化26]



[0255] (前記一般式(24)において、

複数の $R_{21}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(20)における $R_{21}$ と同義であり、

複数の $R_{22}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(20)における $R_{21}$ と同義であり、

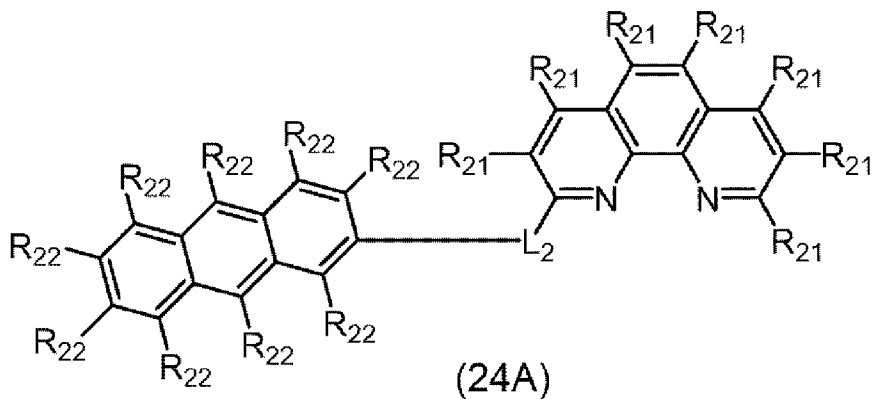
$L_2$ は、前記一般式(21)における $L_2$ と同義であり、

$p$ は、1、2、3、4又は5であり、

複数の $R_{22}$ 及び $L_2$ は、アントラセン環の1位から10位のいずれかの炭素原子に結合する。)

[0256] フェナントロリン化合物は、下記一般式(24A)で表される化合物であることも好ましい。

[0257] [化27]



[0258] (前記一般式(24A)において、

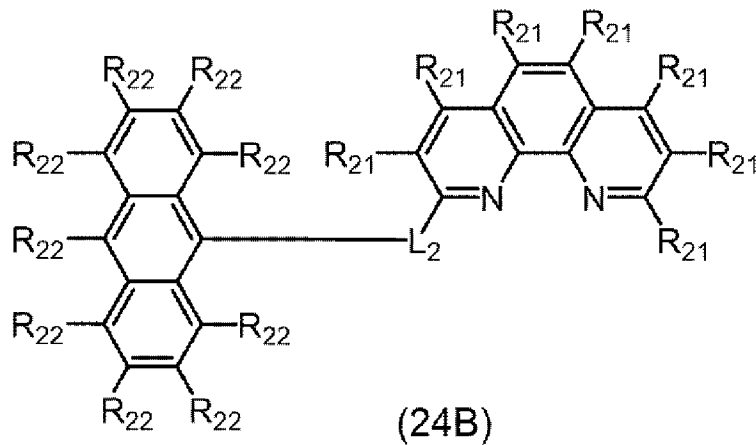
複数の $R_{21}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(20)における $R_{21}$ と同義であり、

複数の $R_{22}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(20)における $R_{21}$ と同義であり、

$L_2$ は、前記一般式(21)における $L_2$ と同義である。)

[0259] フェナントロリン化合物は、下記一般式(24B)で表される化合物であることも好ましい。

[0260] [化28]



[0261] (前記一般式(24B)において、

複数の $R_{21}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(20)における $R_{21}$ と同義であり、

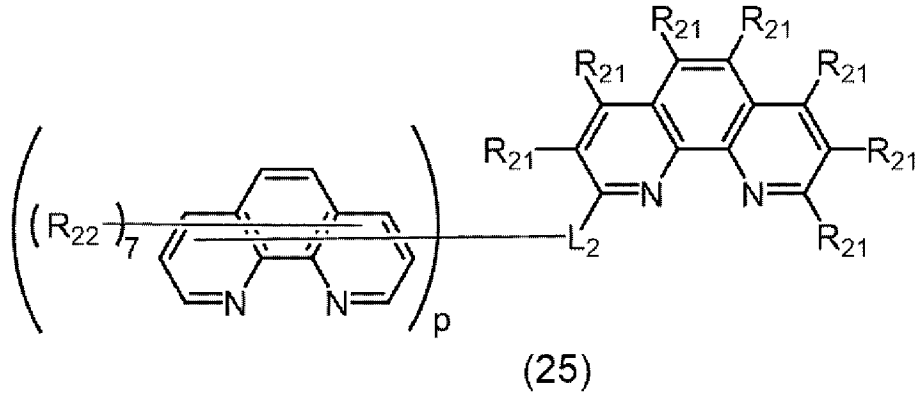
複数の $R_{22}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(20)における $R_{21}$ と同義であり、

$L_2$ は、前記一般式(21)における $L_2$ と同義である。)

[0262] フェナントロリン化合物は、下記一般式(25)で表される化合物であることも好ましい。

[0263]

[化29]



[0264] (前記一般式(25)において、

複数の $R_{21}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(20)における $R_{21}$ と同義であり、

複数の $R_{22}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(20)における $R_{21}$ と同義であり、

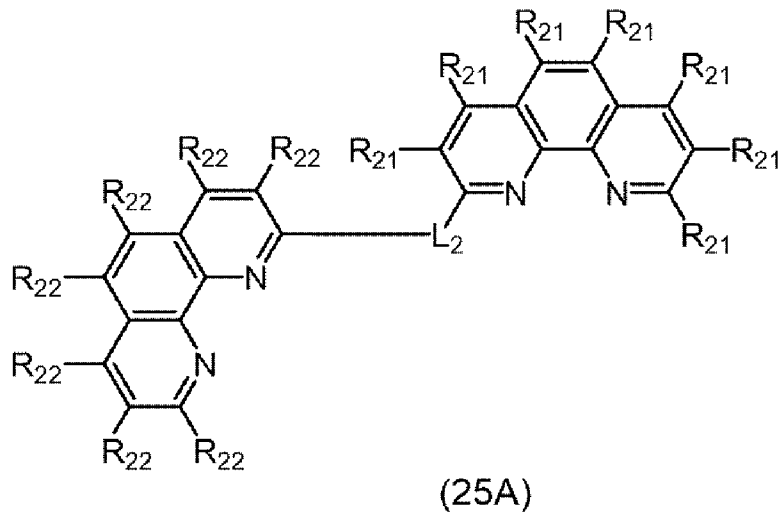
$L_2$ は、前記一般式(21)における $L_2$ と同義であり、

$p$ は、1、2、3、4又は5であり、

複数の $R_{22}$ 及び $L_2$ は、フェナントロリン環の2位から9位のいずれかの炭素原子に結合する。)

[0265] フェナントロリン化合物は、下記一般式(25A)で表される化合物であることも好ましい。

[0266] [化30]



[0267] (前記一般式 (25A) において、

複数の  $R_{21}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (20) における  $R_{21}$  と同義であり、

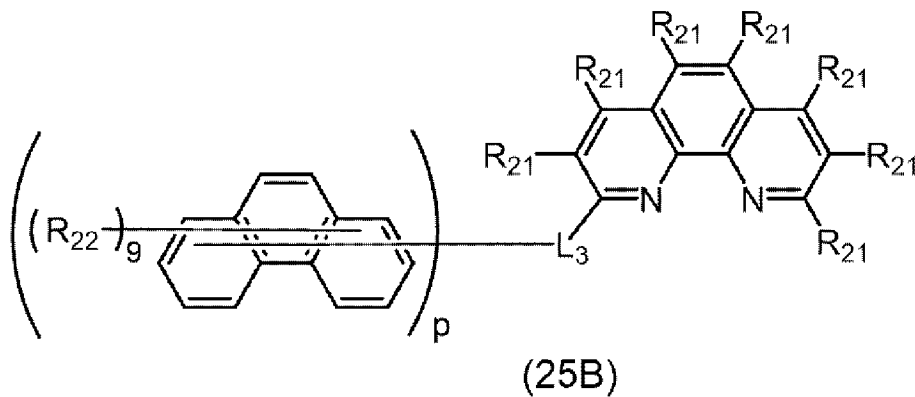
複数の  $R_{22}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (20) における  $R_{21}$  と同義であり、

$L_2$  は、前記一般式 (21) における  $L_2$  と同義である。)

[0268] 前記一般式 (24)、(24A)、(24B)、(25) 及び (25A) の  $L_2$  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ことも好ましい。

[0269] フェナントロリン化合物は、下記一般式 (25B) で表される化合物であることも好ましい。

[0270] [化31]



[0271] (前記一般式 (25B) において、

複数の  $R_{21}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (20) における  $R_{21}$  と同義であり、

複数の  $R_{22}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (20) における  $R_{21}$  と同義であり、

$L_3$  は、連結基であり、連結基としての  $L_3$  は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 の直鎖状、分岐鎖状もしくは環状の多価の脂肪族炭化水素基、

置換もしくは無置換の多価のアミノ基、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の多価の芳香族炭化水素環基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の多価の複素環基、又は  
前記多価の芳香族炭化水素環基及び前記多価の複素環基から選ばれる 2 つ  
もしくは 3 つの基が結合してなる多価の複数連結基であり、

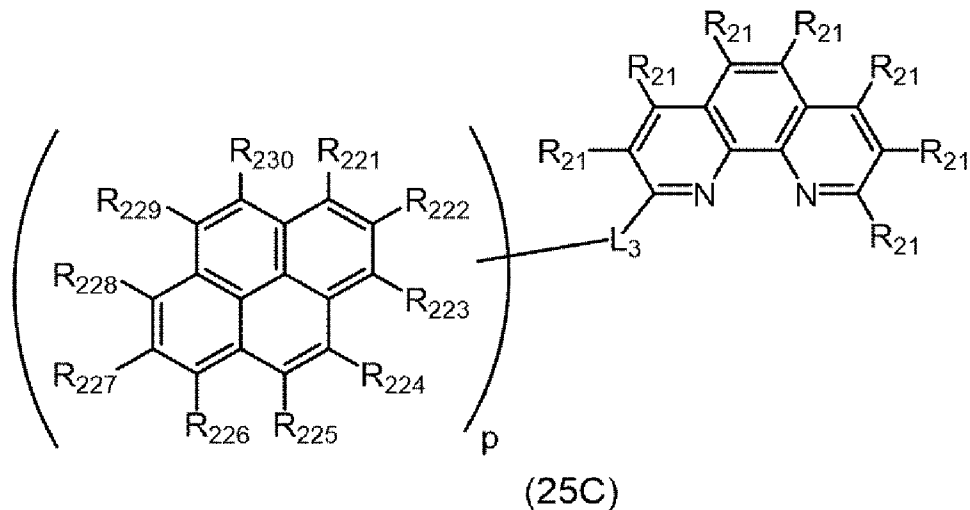
前記複数連結基としての  $L_3$  を構成する前記芳香族炭化水素環基および前記  
複素環基は、互いに同一であるか又は異なり、隣り合う基同士が互いに結合  
して環を形成するか、又は互いに結合せず、

$p$  は、1、2、3、4 又は 5 であり、

複数の  $R_{22}$  及び  $L_3$  は、フェナントレン環の 1 位から 10 位のいずれかの炭  
素原子に結合する。) )

[0272] フェナントロリン化合物は、下記一般式 (25C) で表される化合物であ  
ることも好ましい。

[0273] [化32]



[0274] (前記一般式 (25C) において、

複数の  $R_{21}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (20) における  $R_{21}$  と同義  
であり、

$R_{221} \sim R_{230}$  の内、1 つが  $L_3$  と結合する単結合であり、 $L_3$  と結合する単  
結合ではない  $R_{221} \sim R_{230}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (20) におけ

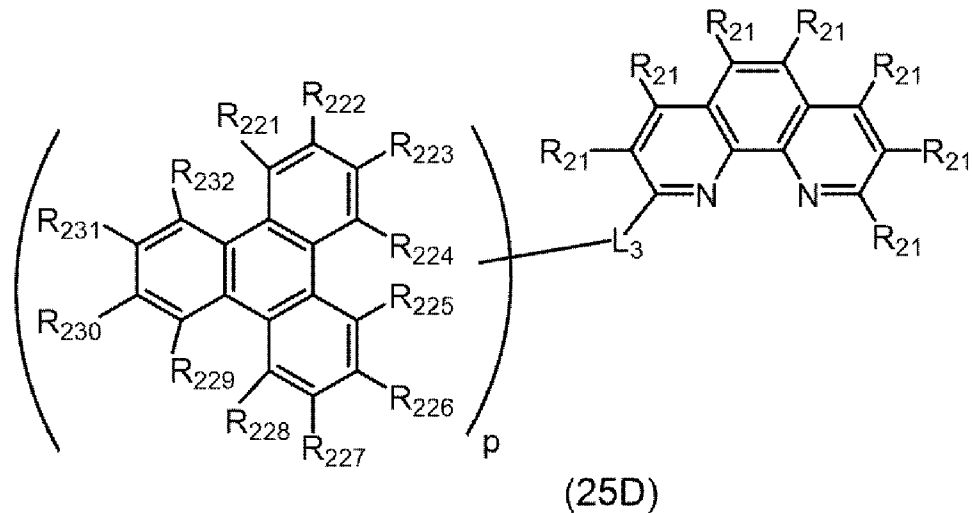
る  $R_{21}$  と同義であり、

$L_3$  は、連結基であり、連結基としての  $L_3$  は、前記一般式 (25B) における連結基としての  $L_3$  と同義であり、

$p$  は、1、2、3、4 又は 5 である。) )

[0275] フェナントロリン化合物は、下記一般式 (25D) で表される化合物であることも好ましい。

[0276] [化33]



[0277] (前記一般式 (25D) において、

複数の  $R_{21}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (20) における  $R_{21}$  と同義であり、

$R_{221} \sim R_{232}$  の内、1つが  $L_3$  と結合する単結合であり、 $L_3$  と結合する単結合ではない  $R_{221} \sim R_{232}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (20) における  $R_{21}$  と同義であり、

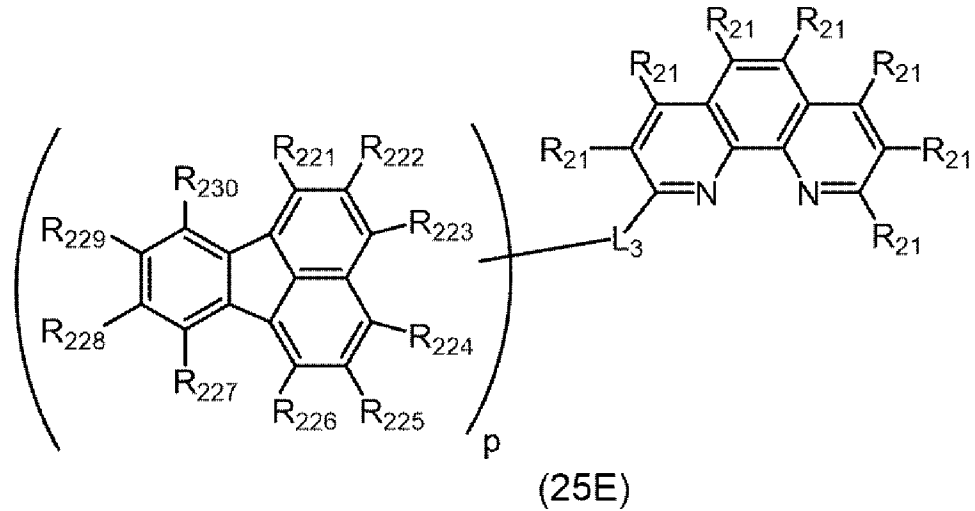
$L_3$  は、連結基であり、連結基としての  $L_3$  は、前記一般式 (25B) における連結基としての  $L_3$  と同義であり、

$p$  は、1、2、3、4 又は 5 である。) )

[0278] フェナントロリン化合物は、下記一般式 (25E) で表される化合物であることも好ましい。

[0279]

[化34]



[0280] (前記一般式(25E)において、

複数のR<sub>21</sub>は、それぞれ独立に、前記一般式(20)におけるR<sub>21</sub>と同義であり、

R<sub>221</sub>~R<sub>230</sub>の内、1つがL<sub>3</sub>と結合する単結合であり、L<sub>3</sub>と結合する単結合ではないR<sub>221</sub>~R<sub>230</sub>は、それぞれ独立に、前記一般式(20)におけるR<sub>21</sub>と同義であり、

L<sub>3</sub>は、連結基であり、連結基としてのL<sub>3</sub>は、前記一般式(25B)における連結基としてのL<sub>3</sub>と同義であり、

pは、1、2、3、4又は5である。)

[0281] 前記一般式(25B)、(25C)、(25D)及び(25E)のL<sub>3</sub>は、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ことも好ましい。

[0282] (フェナントロリン化合物の製造方法)

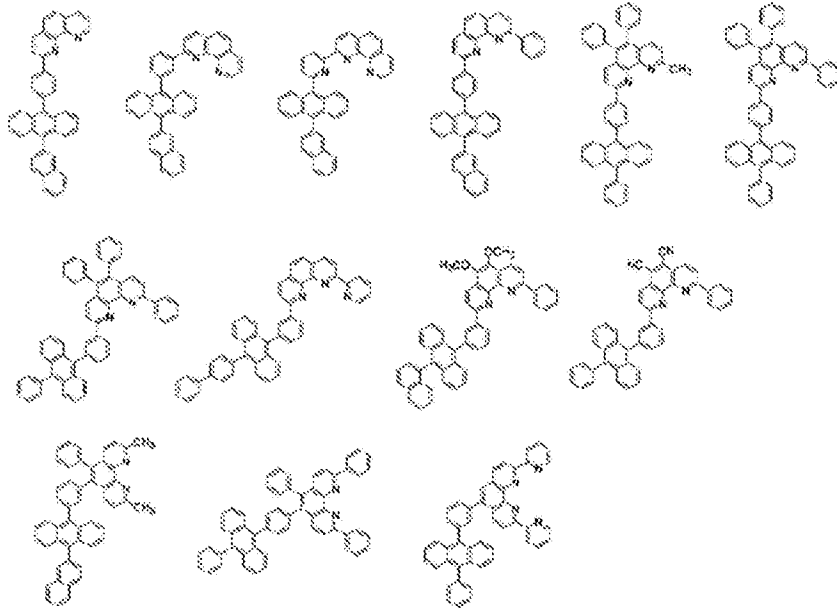
フェナントロリン化合物は、公知の方法により製造できる。また、フェナントロリン化合物は、公知の方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。

[0283] (フェナントロリン化合物の具体例)

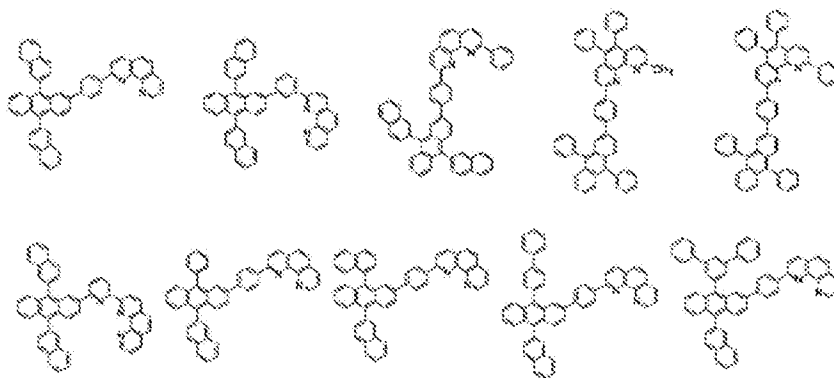
フェナントロリン化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げ

られる。ただし、本発明は、これらフェナントロリン化合物の具体例に限定されない。

[0284] [化35]

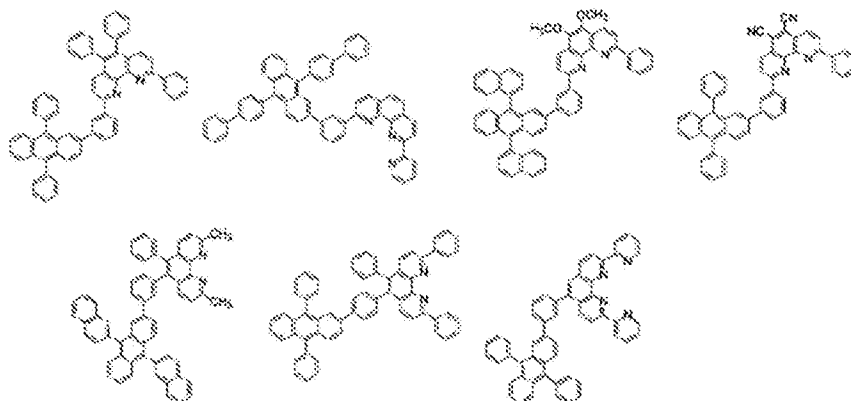


[0285] [化36]

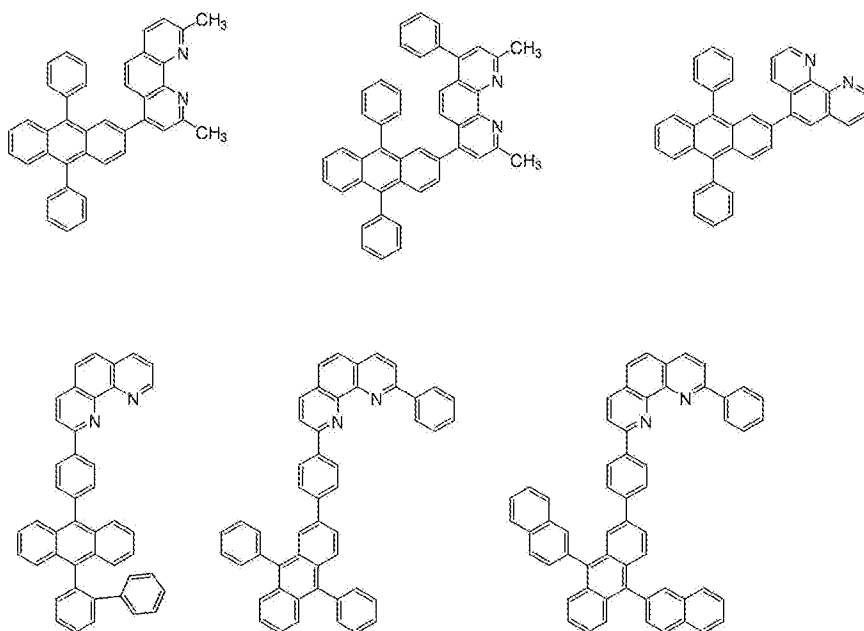


[0286]

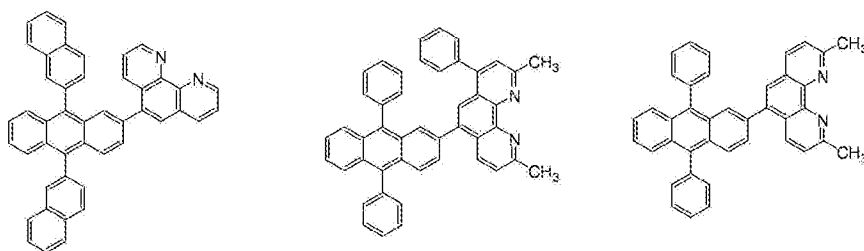
[化37]



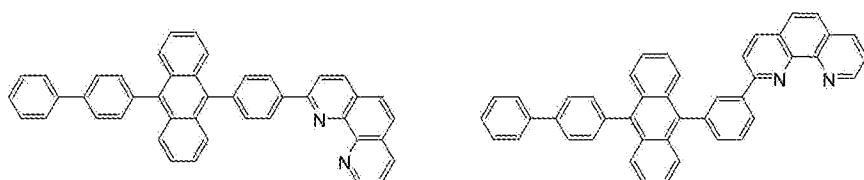
[0287] [化38]



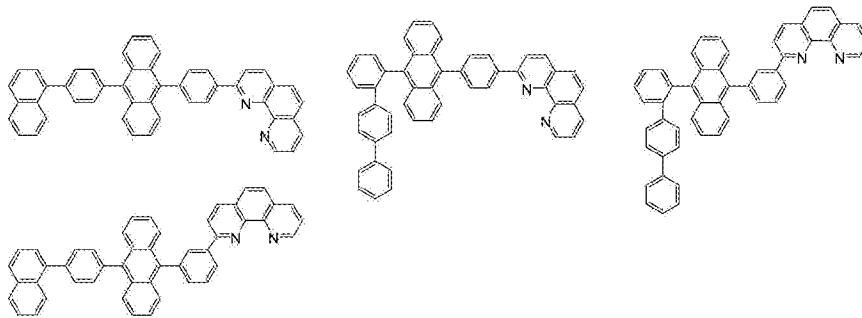
[0288] [化39]



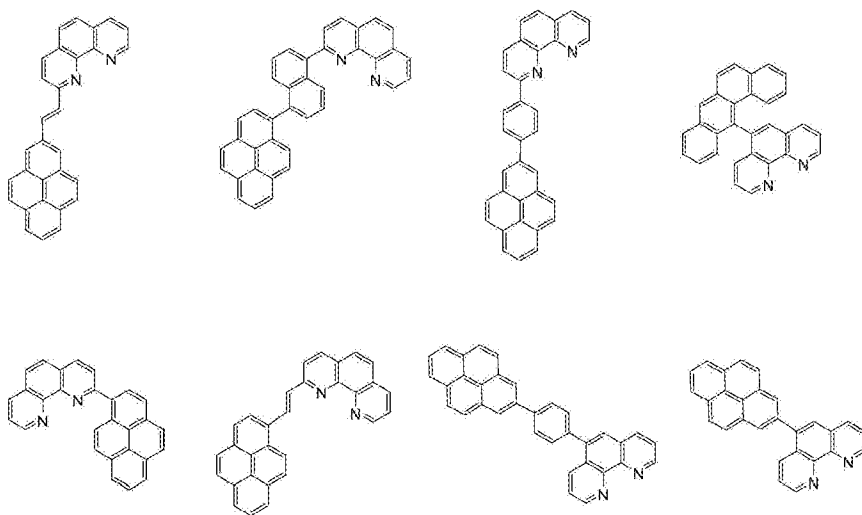
[0289] [化40]



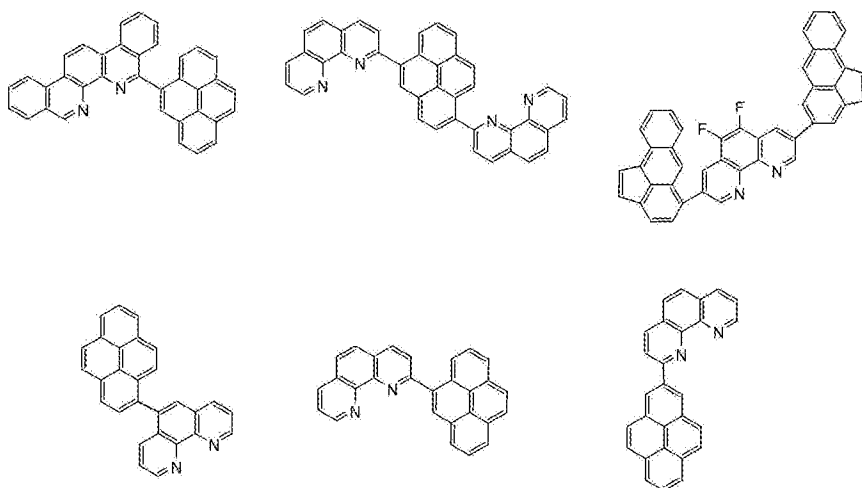
[0290] [化41]



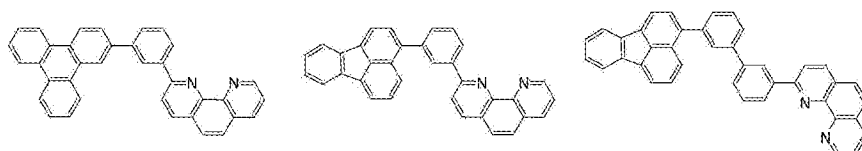
[0291] [化42]



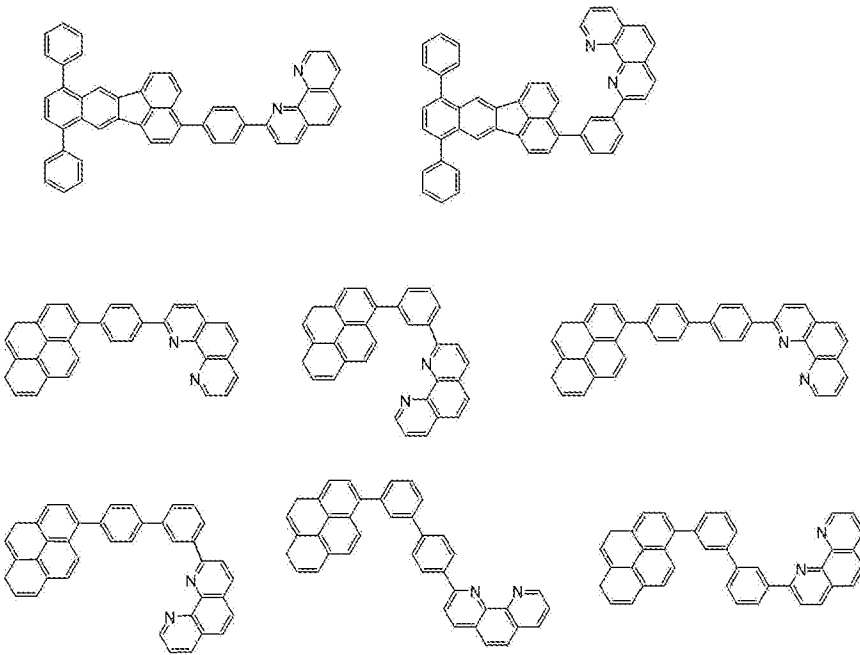
[0292] [化43]



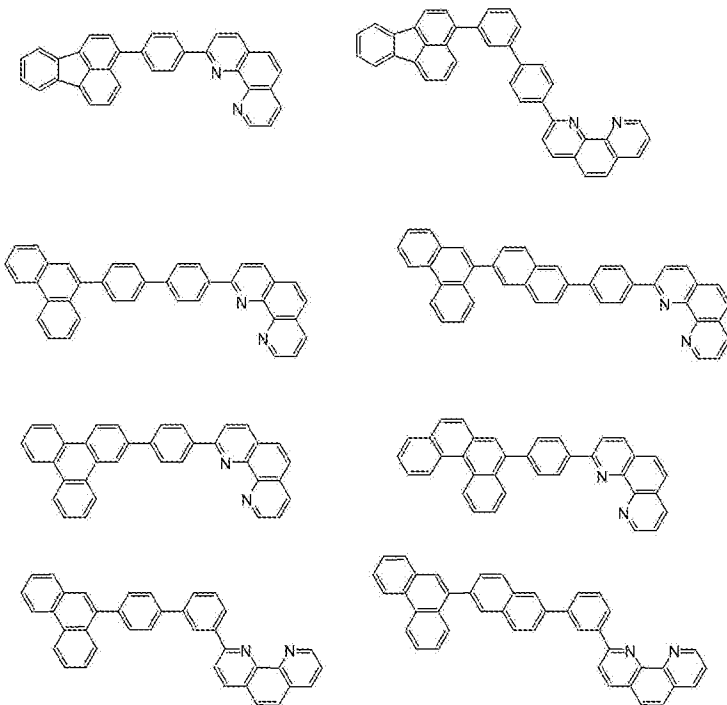
[0293] [化44]



[0294] [化45]

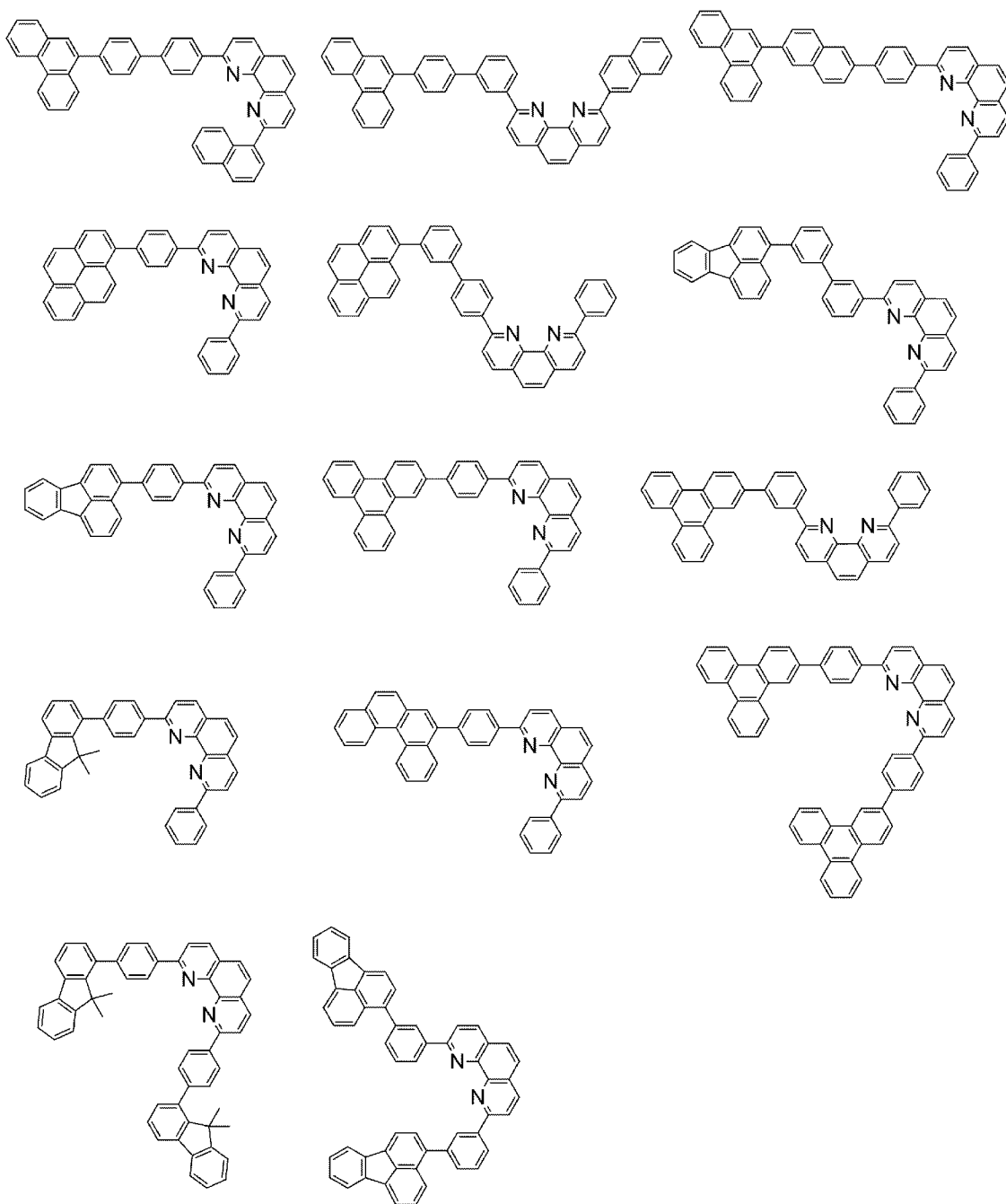


[0295] [化46]

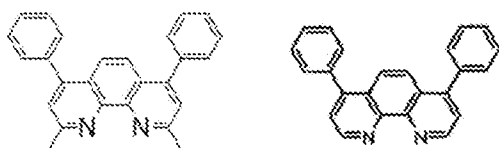


[0296]

[化47]

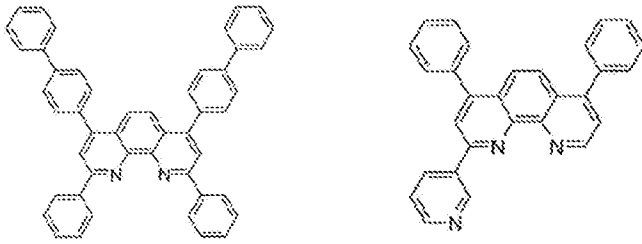


[0297] [化48]

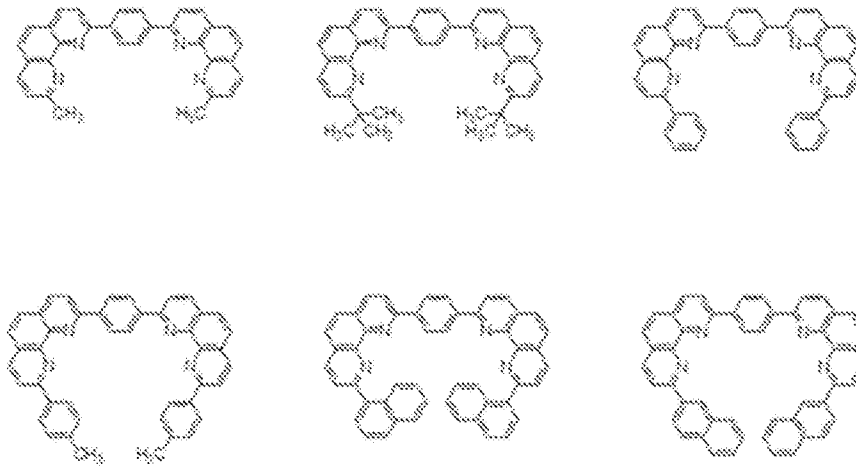


[0298]

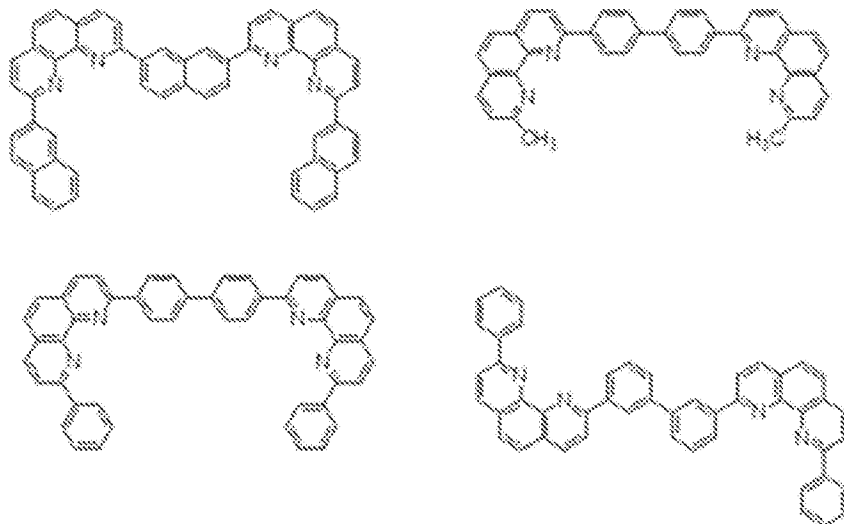
[化49]



[0299] [化50]

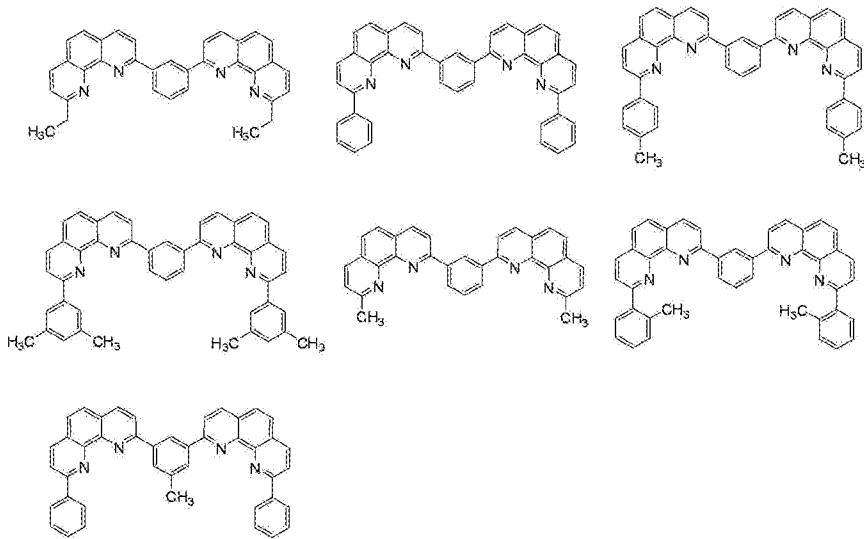


[0300] [化51]

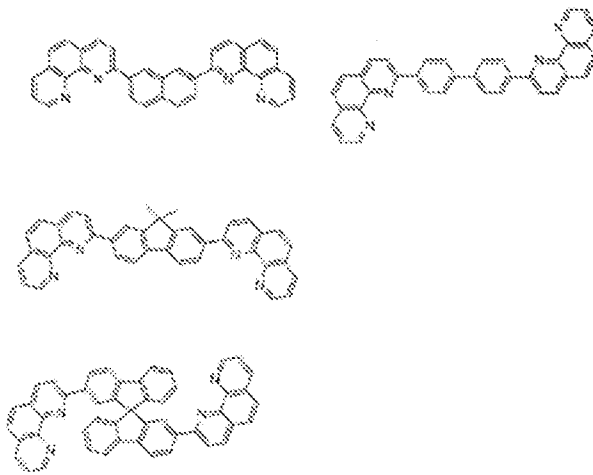


[0301]

## [化52]



## [0302] [化53]



## [0303] (第一のホスト材料、第二のホスト材料及び第三のホスト材料)

本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料、第二のホスト材料及び第三のホスト材料は、例えば、下記一般式(1)、一般式(1X)、一般式(12X)、一般式(13X)、一般式(14X)、一般式(15X)又は一般式(16X)で表される第一の化合物、及び下記一般式(2)で表される第二の化合物等が挙げられる。また、第一の化合物を第一のホスト材料及び第二のホスト材料として用いることもでき、この場合、第二のホスト材料として用いた下記一般式(1)、又は下記一般式(1X)、一般式(12X)、一般式(13X)、一般式(14X)、一般式(15X)又

は一般式 (16X) で表される化合物を、便宜的に第二の化合物と称する場合がある。

[0304] (第一のホスト材料)

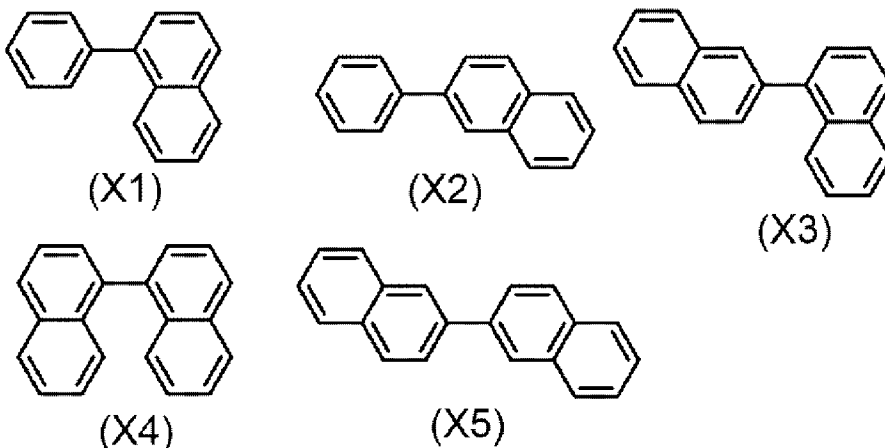
本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料は、分子中に、前記条件 (i i) の構造、すなわち、単結合で連結されたベンゼン環とナフタレン環とを含む連結構造を有し、当該連結構造中のベンゼン環及びナフタレン環には、それぞれ独立に、さらに単環又は縮合環が縮合しているか又は縮合しておらず、当該連結構造中のベンゼン環とナフタレン環とが、当該単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結していることも好ましい。

第一のホスト材料が、このような架橋を含んだ連結構造を有していることにより、有機EL素子の色度悪化の抑制が期待できる。

この場合の第一のホスト材料は、分子中に、下記式 (X1) 又は式 (X2) で表されるような、単結合で連結されたベンゼン環とナフタレン環とを含む連結構造 (ベンゼン-ナフタレン連結構造と称する場合がある。) を最小単位として有していればよく、当該ベンゼン環にさらに単環又は縮合環が縮合していてもよいし、当該ナフタレン環にさらに単環又は縮合環が縮合していてもよい。例えば、第一のホスト材料が、分子中に、下記式 (X3)、式 (X4)、又は式 (X5) で表されるような、単結合で連結されたナフタレン環とナフタレン環とを含む連結構造 (ナフタレン-ナフタレン連結構造と称する場合がある。) においても、一方のナフタレン環は、ベンゼン環を含んでいるため、ベンゼン-ナフタレン連結構造を含んでいることになる。

[0305]

[化54]



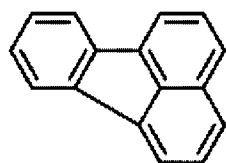
[0306] 本実施形態に係る有機EL素子において、前記架橋が二重結合を含むことも好ましい。すなわち、前記ベンゼン環と前記ナフタレン環とが、単結合以外の部分において二重結合を含む架橋構造によりさらに連結した構造を有することも好ましい。

[0307] ベンゼン-ナフタレン連結構造中のベンゼン環とナフタレン環とが、単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結すると、例えば、前記式(X1)の場合、下記式(X11)で表される連結構造(縮合環)になり、前記式(X3)の場合、下記式(X31)で表される連結構造(縮合環)になる。

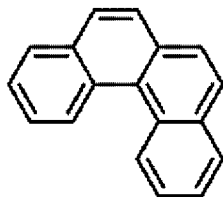
ベンゼン-ナフタレン連結構造中のベンゼン環とナフタレン環とが、単結合以外の部分において二重結合を含む架橋によりさらに連結すると、例えば、前記式(X1)の場合、下記式(X12)で表される連結構造(縮合環)になり、前記式(X2)の場合、下記式(X21)、式(X22)又は式(X23)で表される連結構造(縮合環)になり、前記式(X4)の場合、下記式(X41)で表される連結構造(縮合環)になり、前記式(X5)の場合、下記式(X51)で表される連結構造(縮合環)になる。

ベンゼン-ナフタレン連結構造中のベンゼン環とナフタレン環とが、単結合以外の少なくとも1つの部分においてヘテロ原子(例えば、酸素原子)を含む架橋によりさらに連結すると、例えば、前記式(X1)の場合、下記式(X13)で表される連結構造(縮合環)になる。

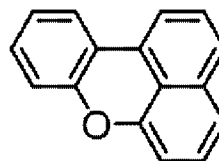
[0308] [化55]



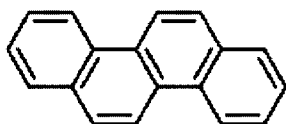
(X11)



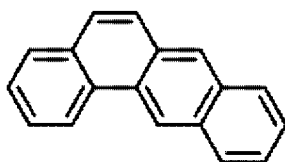
(X12)



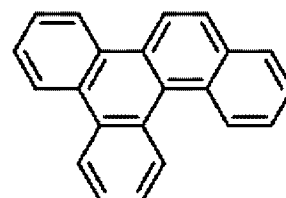
(X13)



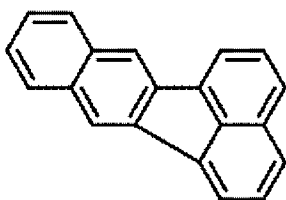
(X21)



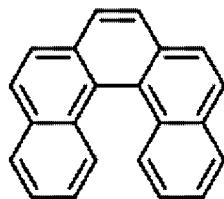
(X22)



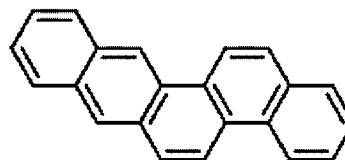
(X23)



(X31)



(X41)



(X51)

[0309] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料は、前記条件 (i) の構造、すなわち、分子中に、第一のベンゼン環と第二のベンゼン環とが単結合で連結されたビフェニル構造を有し、当該ビフェニル構造中の第一のベンゼン環と第二のベンゼン環とが、当該単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結していることも好ましい。

[0310] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料は、分子中に前記条件 (i) の構造を有し、前記ビフェニル構造中の第一のベンゼン環と第二のベンゼン環とが、前記単結合以外の1つの部分において前記架橋によりさらに連結していることも好ましい。第一のホスト材料が、このような架橋を含んだビフェニル構造を有していることにより、有機EL素子の色度悪化の抑制が期待できる。

[0311] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料は、分子中に前記条件 (i) の構造を有し、前記ビフェニル構造中の第一のベンゼン環と

第二のベンゼン環とが、前記単結合以外の2つの部分において前記架橋によりさらに連結していることも好ましい。

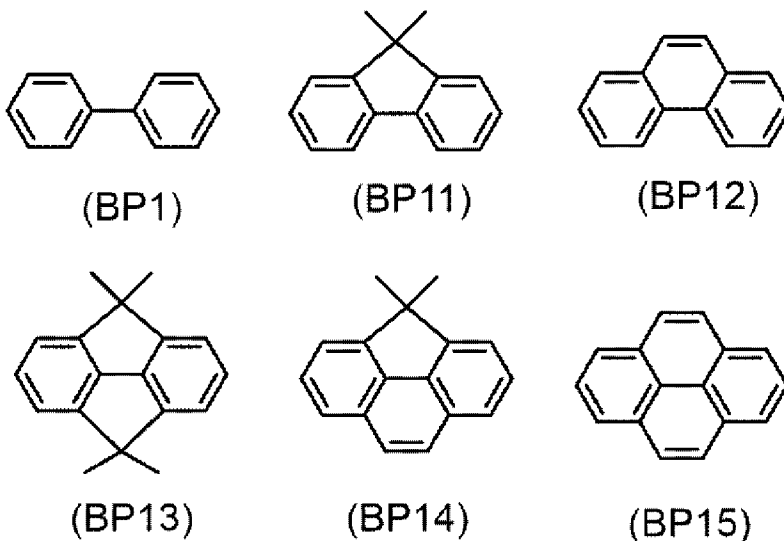
[0312] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料は、分子中に前記条件(i)の構造を有し、前記架橋が二重結合を含むことも好ましい。

本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料は、分子中に前記条件(i)の構造を有し、前記架橋が二重結合を含まないことも好ましい。

[0313] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料は、分子中に前記条件(i)の構造を有し、前記ビフェニル構造中の第一のベンゼン環と第二のベンゼン環とが、前記単結合以外の2つの部分において前記架橋によりさらに連結し、前記架橋が二重結合を含まないことも好ましい。第一のホスト材料が、このような架橋を含んだビフェニル構造を有していることにより、有機EL素子の色度悪化の抑制が期待できる。

[0314] 例えば、下記式(BP1)で表される前記ビフェニル構造中の第一のベンゼン環と第二のベンゼン環とが、単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結すると、当該ビフェニル構造は、下記式(BP11)～(BP15)等の連結構造(縮合環)になる。

[0315] [化56]



[0316] 前記式(BP11)は、前記単結合以外の1つの部分において二重結合を

含まない架橋によって連結した構造である。

前記式（BP12）は、前記単結合以外の1つの部分において二重結合を含む架橋によって連結した構造である。

前記式（BP13）は、前記単結合以外の2つの部分において二重結合を含まない架橋によって連結した構造である。

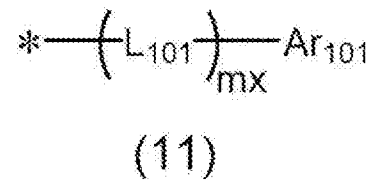
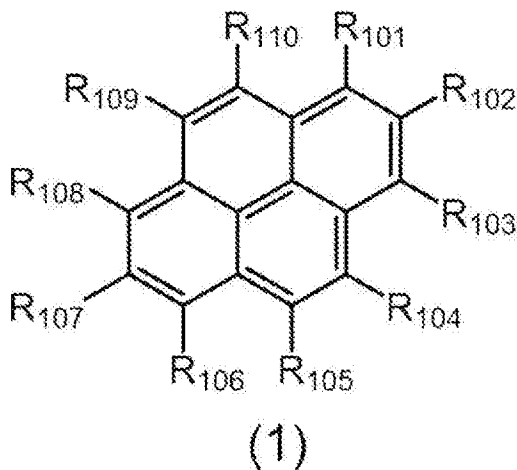
前記式（BP14）は、前記単結合以外の2つの部分の一方において二重結合を含まない架橋によって連結し、前記単結合以外の2つの部分の他方において二重結合を含む架橋によって連結した構造である。

前記式（BP15）は、前記単結合以外の2つの部分において二重結合を含む架橋によって連結した構造である。

[0317]（第一の化合物）

本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料は、下記一般式（11）で表される基を少なくとも1つ有し、かつ下記一般式（1）で表される第一の化合物であることも好ましい。

[0318] [化57]



[0319]（前記一般式（1）において、

$R_{101} \sim R_{110}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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、  
-S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、  
-O- (R<sub>904</sub>) で表される基、  
-S- (R<sub>905</sub>) で表される基、  
置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、  
-C (=O) R<sub>801</sub> で表される基、  
-COOR<sub>802</sub> で表される基、  
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、  
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基、又は  
前記一般式 (11) で表される基であり、

ただし、R<sub>101</sub> ~ R<sub>110</sub> の少なくとも 1 つは、前記一般式 (11) で表される基であり、

前記一般式 (11) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式 (11) で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

L<sub>101</sub> 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 価の複素環基であり、

A r<sub>101</sub> 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、又は  
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

m x は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

L<sub>101</sub> が 2 以上存在する場合、2 以上の L<sub>101</sub> は、互いに同一であるか、又

は異なり、

$A r_{101}$ が2以上存在する場合、2以上の $A r_{101}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

前記一般式(11)中の\*は、前記一般式(1)中のピレン環との結合位置を示す。)

[0320] (本実施形態に係る第一の化合物中、 $R_{901}$ 、 $R_{902}$ 、 $R_{903}$ 、 $R_{904}$ 、 $R_{905}$

、 $R_{906}$ 、 $R_{907}$ 、 $R_{801}$ 及び $R_{802}$ 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の複素環基であり、

$R_{901}$ が複数存在する場合、複数の $R_{901}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{902}$ が複数存在する場合、複数の $R_{902}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{903}$ が複数存在する場合、複数の $R_{903}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{904}$ が複数存在する場合、複数の $R_{904}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{905}$ が複数存在する場合、複数の $R_{905}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{906}$ が複数存在する場合、複数の $R_{906}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

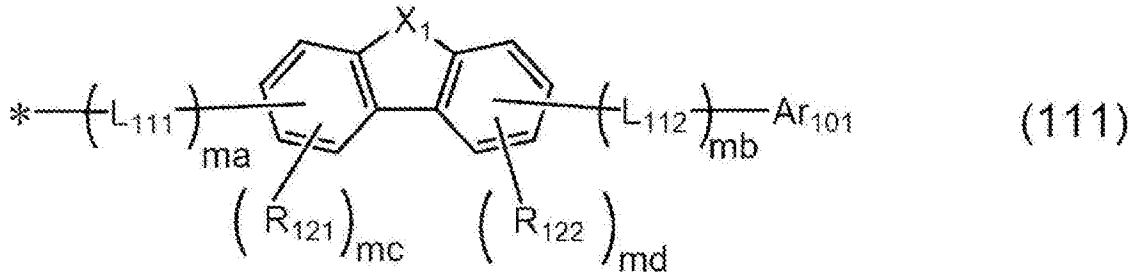
$R_{907}$ が複数存在する場合、複数の $R_{907}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{801}$ が複数存在する場合、複数の $R_{801}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

R<sub>802</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>802</sub>は、互いに同一であるか又は異なる。) )

[0321] 本実施形態に係る有機EL素子において、前記一般式(11)で表される基は、下記一般式(111)で表される基であることが好ましい。

[0322] [化58]



[0323] (前記一般式(111)において、

X<sub>1</sub>は、CR<sub>123</sub>R<sub>124</sub>、酸素原子、硫黄原子、又はNR<sub>125</sub>であり、

L<sub>111</sub>及びL<sub>112</sub>は、それぞれ独立に、

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価の複素環基であり、

maは、0、1、2、3又は4であり、

mbは、0、1、2、3又は4であり、

ma+mbは、0、1、2、3又は4であり、

Ar<sub>101</sub>は、前記一般式(11)におけるAr<sub>101</sub>と同義であり、

R<sub>121</sub>、R<sub>122</sub>、R<sub>123</sub>、R<sub>124</sub>及びR<sub>125</sub>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炭素数1～50のハロアルキル基、

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、

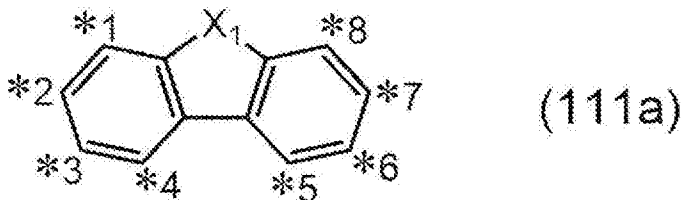
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-Si(R<sub>901</sub>)(R<sub>902</sub>)(R<sub>903</sub>)で表される基、

-O- ( $R_{904}$ ) で表される基、  
 -S- ( $R_{905}$ ) で表される基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、  
 -C(=O)  $R_{801}$  で表される基、  
 -COOR  $R_{802}$  で表される基、  
 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 の複素環基であり、  
 $m_c$  は、3 であり、  
 3 つの  $R_{121}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、  
 $m_d$  は、3 であり、  
 3 つの  $R_{122}$  は、互いに同一であるか、又は異なる。)

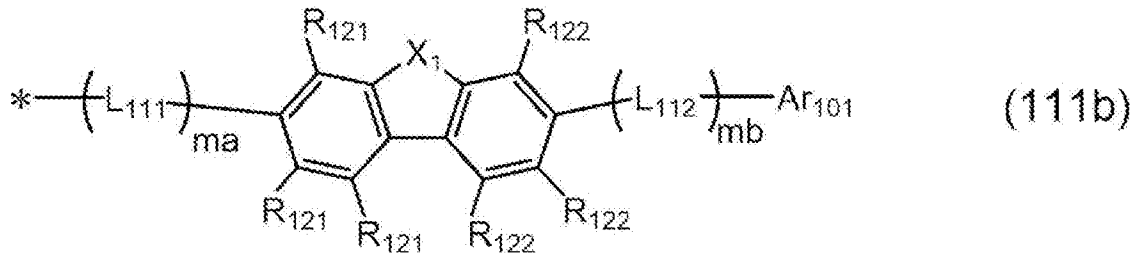
[0324] 前記一般式 (111) で表される基における下記一般式 (111a) で表される環構造中の炭素原子 \*1 ~ \*8 の位置のうち、\*1 ~ \*4 のいずれか 1 つの位置に  $L_{111}$  が結合し、\*1 ~ \*4 の残りの 3 つの位置に  $R_{121}$  が結合し、\*5 ~ \*8 のいずれか 1 つの位置に  $L_{112}$  が結合し、\*5 ~ \*8 の残りの 3 つの位置に  $R_{122}$  が結合する。

[0325] [化59]



[0326] 例えば、前記一般式 (111) で表される基において、 $L_{111}$  が前記一般式 (111a) で表される環構造中の \*2 の炭素原子の位置に結合し、 $L_{112}$  が前記一般式 (111a) で表される環構造中の \*7 の炭素原子の位置に結合する場合、前記一般式 (111) で表される基は、下記一般式 (111b) で表される。

[0327] [化60]



[0328] (前記一般式(111b)において、

$X_1$ 、 $L_{111}$ 、 $L_{112}$ 、 $ma$ 、 $mb$ 、 $Ar_{101}$ 、 $R_{121}$ 、 $R_{122}$ 、 $R_{123}$ 、 $R_{124}$ 及び $R_{125}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(111)における $X_1$ 、 $L_{111}$ 、 $L_{112}$ 、 $ma$ 、 $mb$ 、 $Ar_{101}$ 、 $R_{121}$ 、 $R_{122}$ 、 $R_{123}$ 、 $R_{124}$ 及び $R_{125}$ と同義であり、

複数の $R_{121}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

複数の $R_{122}$ は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

[0329] 本実施形態に係る有機EL素子において、前記一般式(111)で表される基は、前記一般式(111b)で表される基であることが好ましい。

[0330] 本実施形態に係る有機EL素子において、

$ma$ は、0、1又は2であり、

$mb$ は、0、1又は2である、ことが好ましい。

[0331] 本実施形態に係る有機EL素子において、

$ma$ は、0又は1であり、

$mb$ は、0又は1であることが好ましい。

[0332] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $Ar_{101}$ 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ことが好ましい。

[0333] 本実施形態に係る有機EL素子において、

$Ar_{101}$ は、

置換もしくは無置換のフェニル基、

置換もしくは無置換のナフチル基、

置換もしくは無置換のビフェニル基、

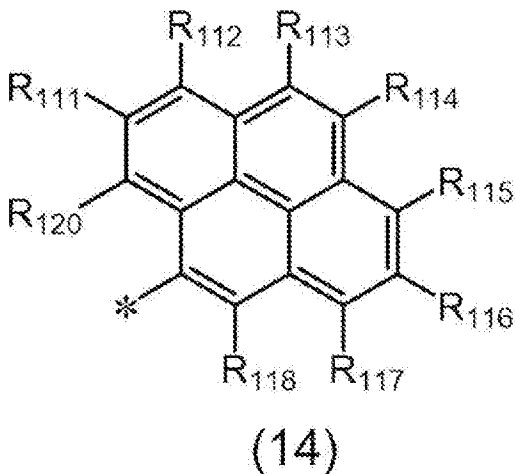
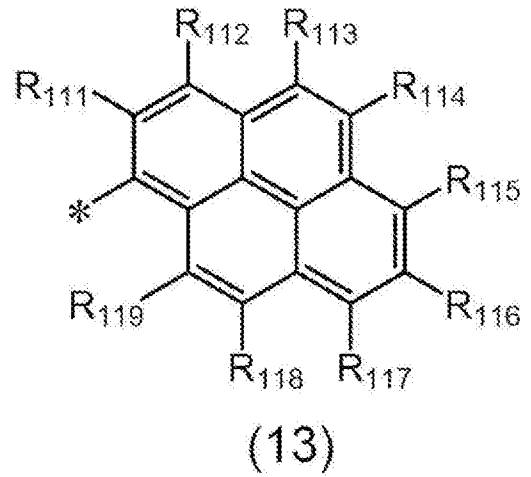
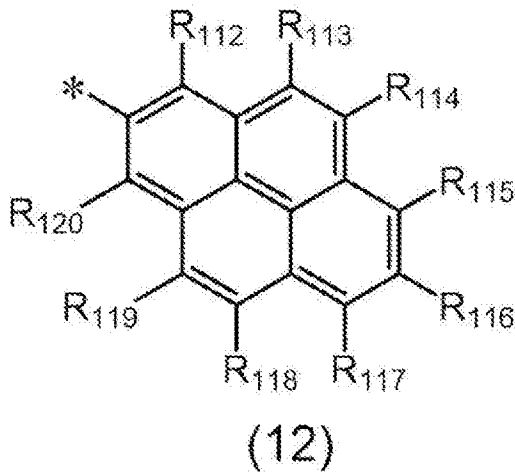
置換もしくは無置換のターフェニル基、

置換もしくは無置換のピレニル基、  
置換もしくは無置換のフェナントリル基、又は  
置換もしくは無置換のフルオレニル基であることが好ましい。

[0334] 本実施形態に係る有機EL素子において、

$A r_{101}$ は、下記一般式(12)、一般式(13)又は一般式(14)で表される基であることも好ましい。

[0335] [化61]



[0336] (前記一般式(12)、一般式(13)及び一般式(14)において、

$R_{111} \sim R_{120}$ 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、

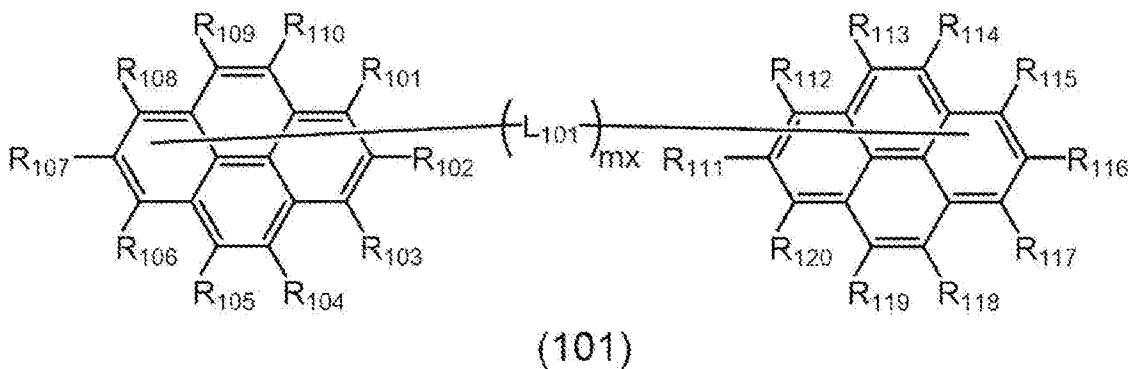
置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、

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<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、  
 -O- (R<sub>904</sub>) で表される基、  
 -S- (R<sub>905</sub>) で表される基、  
 -N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、  
 -C (=O) R<sub>124</sub> で表される基、  
 -COOR<sub>125</sub> で表される基、  
 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 の複素環基であり、

前記一般式 (12)、一般式 (13) 及び一般式 (14) 中の\*は、前記一般式 (11) 中の L<sub>101</sub> との結合位置、又は前記一般式 (111) もしくは一般式 (111b) 中の L<sub>112</sub> との結合位置を示す。) )

[0337] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、前記第一の化合物は、下記一般式 (101) で表されることが好ましい。

[0338] [化62]



[0339] (前記一般式 (101) において、

$R_{101} \sim R_{120}$ 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炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、  
 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、  
 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$  で表される基、  
 $-O-$  ( $R_{904}$ ) で表される基、  
 $-S-$  ( $R_{905}$ ) で表される基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、  
 $-C(=O)R_{801}$  で表される基、  
 $-COOR_{802}$  で表される基、  
 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 の複素環基であり、  
 ただし、 $R_{101} \sim R_{110}$ のうち 1 つが  $L_{101}$ との結合位置を示し、 $R_{111} \sim$   
 $R_{120}$ のうち 1 つが  $L_{101}$ との結合位置を示し、  
 $L_{101}$ 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 価の複素環基であり、  
 $m \times$ は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、  
 $L_{101}$ が 2 以上存在する場合、2 以上の  $L_{101}$ は、互いに同一であるか、又  
 は異なる。)

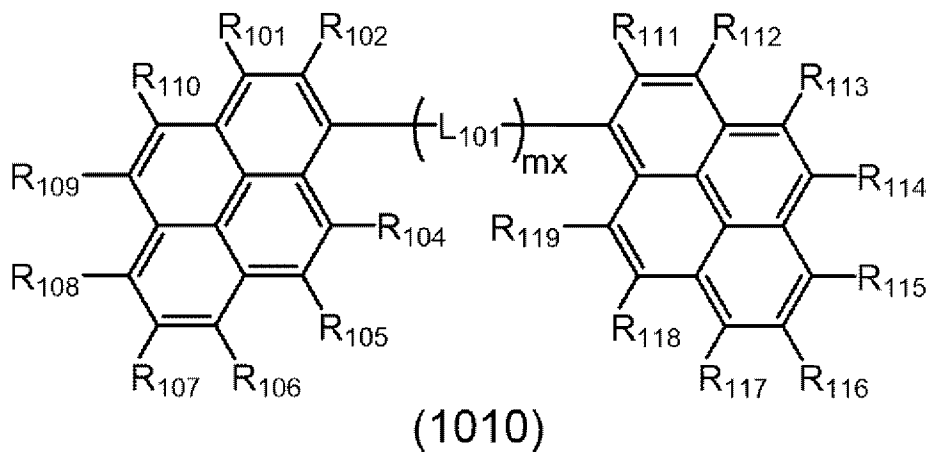
[0340] 前記一般式 (101) で表される第一の化合物において、

$R_{101} \sim R_{110}$ 、並びに  $R_{111} \sim R_{120}$  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炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、  
 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、  
 $-S_i (R_{901}) (R_{902}) (R_{903})$  で表される基、  
 $-O-$  ( $R_{904}$ ) で表される基、  
 $-S-$  ( $R_{905}$ ) で表される基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、  
 $-C(=O)R_{801}$  で表される基、  
 $-COOR_{802}$  で表される基、  
 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 の複素環基であり、  
 ただし、 $R_{101} \sim R_{110}$  のうち 1 つが  $L_{101}$  との結合位置を示し、 $R_{111} \sim R_{120}$  のうち 1 つが  $L_{101}$  との結合位置を示し、  
 $L_{101}$  は、  
 単結合、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 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 ～ 24 の 2 価の複素環基であり、  
 $m \times$  は、1、2、3、4 又は 5 であり、  
 $L_{101}$  が 2 以上存在する場合、2 以上の  $L_{101}$  は、互いに同一であるか、又は異なる、ことが好ましい。

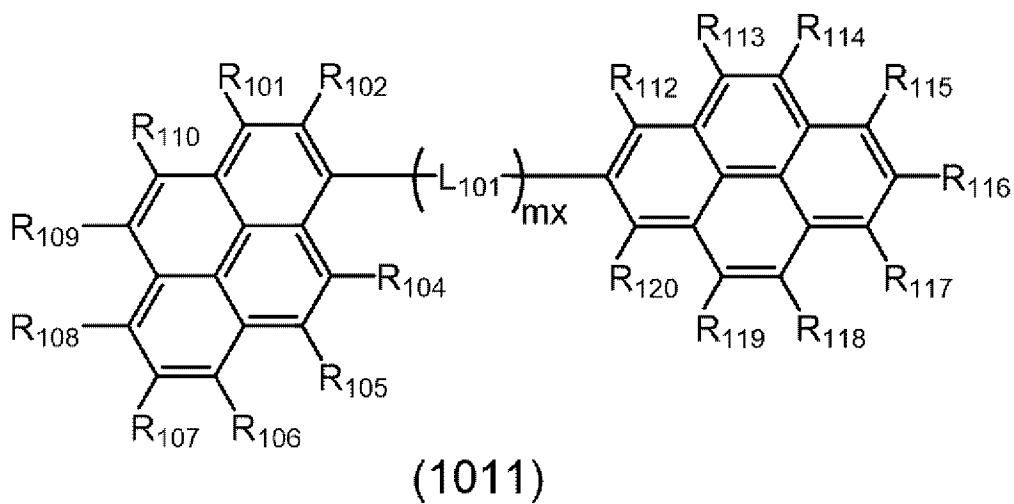
[0341] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、前記第一の化合物は、下記一般

式(1010)、一般式(1011)、一般式(1012)、一般式(1013)、一般式(1014)又は一般式(1015)で表されることが好ましい。

[0342] [化63]

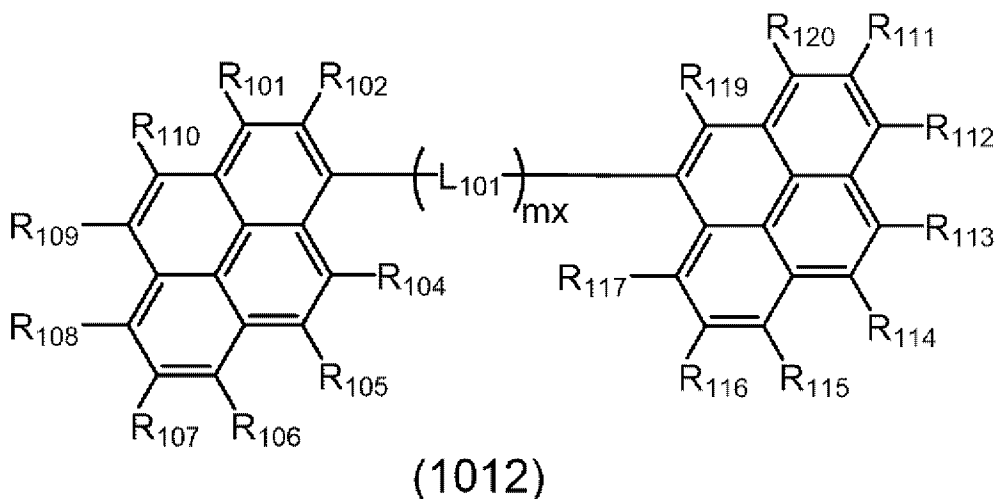


[0343] [化64]

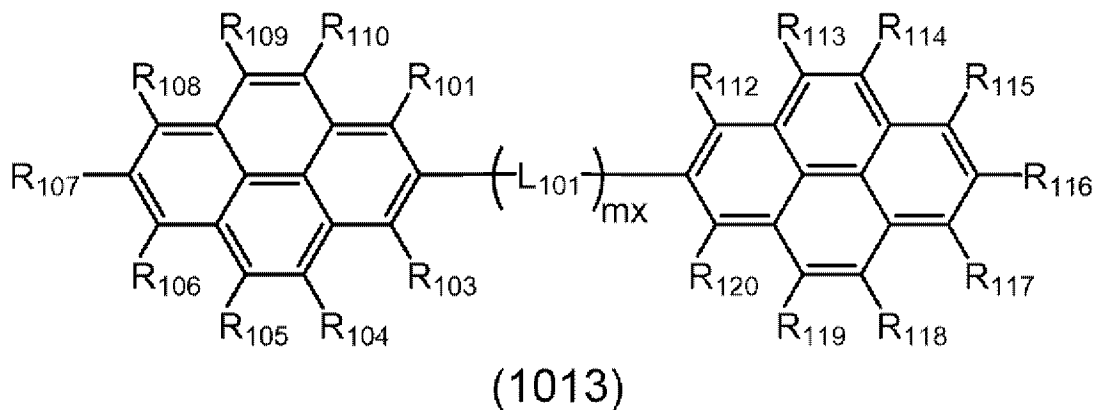


[0344]

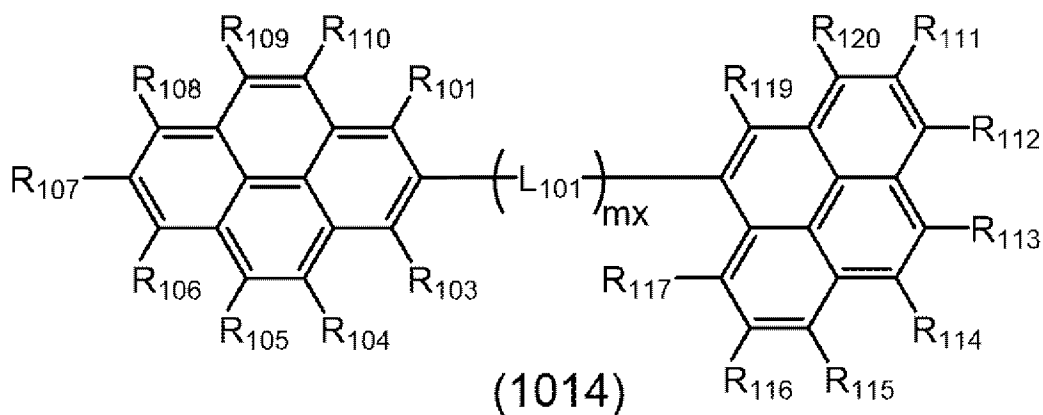
[化65]



[0345] [化66]

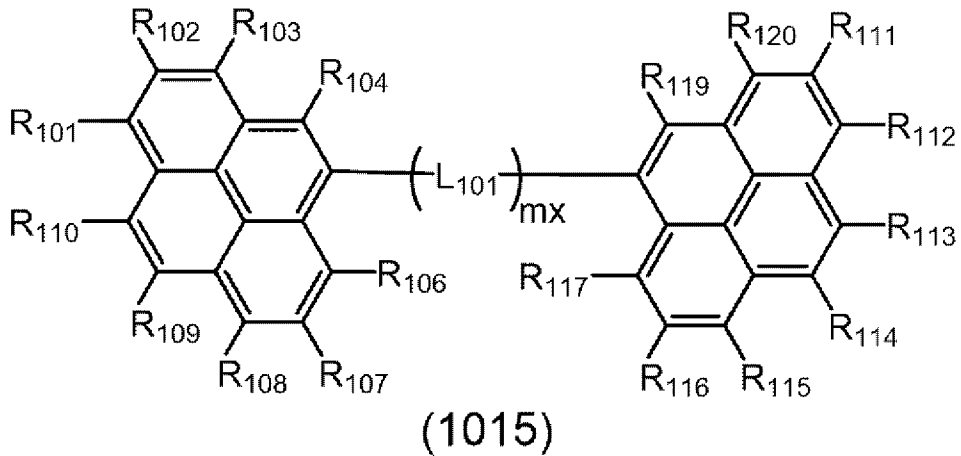


[0346] [化67]



[0347]

[化68]



[0348] (前記一般式(1010)～(1015)において、

$R_{101} \sim R_{120}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

—S—( $R_{905}$ )で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O) $R_{801}$ で表される基、

—COOR<sub>802</sub>で表される基、

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の複素環基であり、

$L_{101}$ 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 価の複素環基であり、

$m \times$  は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

$L_{101}$  が 2 以上存在する場合、2 以上の  $L_{101}$  は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

[0349] なお、前記一般式 (1010) で表される化合物は、 $R_{103}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示し、 $R_{120}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示す場合の化合物に相当する。

なお、前記一般式 (1011) で表される化合物は、 $R_{103}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示し、 $R_{111}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示す場合の化合物に相当する。

なお、前記一般式 (1012) で表される化合物は、 $R_{103}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示し、 $R_{118}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示す場合の化合物に相当する。

なお、前記一般式 (1013) で表される化合物は、 $R_{102}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示し、 $R_{111}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示す場合の化合物に相当する。

なお、前記一般式 (1014) で表される化合物は、 $R_{102}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示し、 $R_{118}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示す場合の化合物に相当する。

なお、前記一般式 (1015) で表される化合物は、 $R_{105}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示し、 $R_{118}$  が  $L_{101}$  との結合位置を示す場合の化合物に相当する。

[0350] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、前記第一の化合物は、前記一般式 (1010) で表されることが好ましい。

[0351] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、 $L_{101}$  との結合位置ではない  $R_{101} \sim R_{110}$  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 の複素環基であることが好ましい。

- [0352] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ との結合位置ではない $R_{101} \sim R_{110}$ 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、又は  
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である  
ことが好ましい。
- [0353] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ との結合位置ではない $R_{101} \sim R_{110}$ は、水素原子であることが好ましい。
- [0354] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ との結合位置ではない $R_{111} \sim R_{120}$ 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の複素環基であることが好  
ましい。
- [0355] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ との結合位置ではない $R_{111} \sim R_{120}$ 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、又は  
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である  
ことが好ましい。
- [0356] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ との結合位置ではない $R_{111} \sim R_{120}$ は、水素原子であることが好ましい。
- [0357] 本実施形態に係る有機EL素子において、  
 $L_{101}$ は、  
単結合、又は  
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基であること

が好ましい。

- [0358] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ は、  
単結合、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18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5～18の2価の複素環基であること  
とも好ましい。
- [0359] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ は、  
単結合、又は  
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリーレン基であること  
も好ましい。
- [0360] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ は、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリーレン基であること  
も好ましい。
- [0361] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ は、  
単結合、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～13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5～13の2価の複素環基であること  
とも好ましい。
- [0362] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ は、  
単結合、又は  
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～13のアリーレン基であること  
も好ましい。
- [0363] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{101}$ は、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～13のアリーレン基であること  
も好ましい。
- [0364] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $m \times$ は、1、2、または3である  
ことも好ましい。
- [0365] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $m \times$ は、1または2であること

も好ましい。

[0366] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $m \times$ は、1、2または3であり、

$L_{101}$ は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18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5～18の2価の複素環基であるこ

とも好ましい。

[0367] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $m \times$ は、1または2であり、

$L_{101}$ は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18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5～18の2価の複素環基であるこ

とも好ましい。

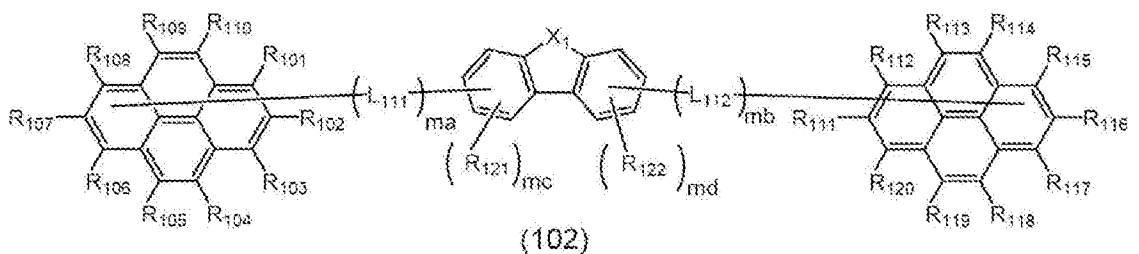
[0368] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $m \times$ は、1または2であり、

$L_{101}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリーレン基であることも好ましい。

[0369] 本実施形態に係る有機EL素子において、

前記第一の化合物は、下記一般式(102)で表されることが好ましい。

[0370] [化69]



[0371] (前記一般式(102)において、

$R_{101} \sim R_{120}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(101)における $R_{101} \sim R_{120}$ と同義であり、

ただし、 $R_{101} \sim R_{110}$ のうち1つが $L_{111}$ との結合位置を示し、 $R_{111} \sim R_{120}$ のうち1つが $L_{112}$ との結合位置を示し、

$X_1$ は、 $CR_{123}R_{124}$ 、酸素原子、硫黄原子、又は $NR_{125}$ であり、

$L_{111}$ 及び $L_{112}$ は、それぞれ独立に、  
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価の複素環基であり、  
 $m_a$ は、0、1、2、3又は4であり、  
 $m_b$ は、0、1、2、3又は4であり、  
 $m_a + m_b$ は、0、1、2、3又は4であり、  
 $R_{121}$ 、 $R_{122}$ 、 $R_{123}$ 、 $R_{124}$ 及び $R_{125}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、  
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、  
-S i ( $R_{901}$ ) ( $R_{902}$ ) ( $R_{903}$ ) で表される基、  
-O- ( $R_{904}$ ) で表される基、  
-S- ( $R_{905}$ ) で表される基、  
置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、  
-C (=O)  $R_{801}$  で表される基、  
-COO  $R_{802}$  で表される基、  
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の複素環基であり、  
 $m_c$ は、3であり、  
3つの $R_{121}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、  
 $m_d$ は、3であり、

3つの $R_{1,2,2}$ は、互いに同一であるか、又は異なる。)

[0372] 前記一般式(102)で表される化合物において、

$m_a$ は、0、1又は2であり、

$m_b$ は、0、1又は2であることが好ましい。

[0373] 前記一般式(102)で表される化合物において、

$m_a$ は、0又は1であり、

$m_b$ は、0又は1であることが好ましい。

[0374] 前記一般式(102)で表される化合物において、 $L_{1,1,1}$ 及び $L_{1,1,2}$ は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24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5～24の2価の複素環基であるこ

とが好ましい。

[0375] 前記一般式(102)で表される化合物において、

$m_a$ は、1、2、又は3であり、

$m_b$ は、1、2、又は3であり、

$m_a + m_b$ は、2、3又は4であり、

[0376] 前記一般式(102)で表される化合物において、

$m_a$ は、1又は2であり、

$m_b$ は、1又は2であることが好ましい。

[0377] 前記一般式(102)で表される化合物において、

$m_a$ は、1であり、

$m_b$ は、1であることが好ましい。

[0378] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{1,1,1}$ との結合位置ではない $R_{1,0,1} \sim R_{1,1,0}$ 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 のアリアル基、又は  
置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であることが好ましい。

[0379] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、 $L_{111}$  との結合位置ではない  $R_{101} \sim R_{110}$  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、又は

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であることが好ましい。

[0380] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、 $L_{111}$  との結合位置ではない  $R_{101} \sim R_{110}$  は、水素原子であることが好ましい。

[0381] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、 $L_{112}$  との結合位置ではない  $R_{111} \sim R_{120}$  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 のアリアル基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であることが好ましい。

[0382] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、 $L_{112}$  との結合位置ではない  $R_{111} \sim R_{120}$  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、又は

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であることが好ましい。

[0383] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、 $L_{112}$  との結合位置ではない  $R_{111} \sim R_{120}$  は、水素原子であることが好ましい。

[0384] 本実施形態に係る有機 EL 素子において、

$R_{101} \sim R_{110}$ のうち2つ以上が、前記一般式(11)で表される基であることが好ましい。

[0385] 本実施形態に係る有機EL素子において、

$R_{101} \sim R_{110}$ のうち2つ以上が、前記一般式(11)で表される基であり、かつ、 $A_{r101}$ 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ことが好ましい。

[0386] 本実施形態に係る有機EL素子において、

$A_{r101}$ は、置換もしくは無置換のピレニル基ではなく、 $L_{101}$ は、置換もしくは無置換のピレニレン基ではなく、前記一般式(11)で表される基ではない $R_{101} \sim R_{110}$ としての置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基は、置換もしくは無置換のピレニル基ではないことが好ましい。

[0387] 本実施形態に係る有機EL素子において、

前記一般式(11)で表される基ではない $R_{101} \sim R_{110}$ 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の複素環基であることが好ましい。

[0388] 本実施形態に係る有機EL素子において、

前記一般式(11)で表される基ではない $R_{101} \sim R_{110}$ 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、又は

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であることが好ましい。

- [0389] 本実施形態に係る有機EL素子において、前記一般式(11)で表される基ではない $R_{101} \sim R_{110}$ は、水素原子であることが好ましい。
- [0390] 前記第一の化合物及び前記第二の化合物において、「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であることが好ましい。
- [0391] 本実施形態に係る有機EL素子において、  
例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち2つが一般式(11)で表される基である。
- [0392] 本実施形態に係る有機EL素子において、  
例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち3つが一般式(11)で表される基である。
- [0393] 本実施形態に係る有機EL素子において、  
例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち4つが一般式(11)で表される基である。
- [0394] 本実施形態に係る有機EL素子において、  
例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち1つが一般式(11)で表される基であり、 $m_x$ が1以上である。
- [0395] 本実施形態に係る有機EL素子において、  
例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち1つが一般式(11)で表される基であり、 $m_x$ が0であり、 $Ar_{101}$ が置換もしくは無置換のアリール基である。
- [0396] 本実施形態に係る有機EL素子において、  
例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち1つが一般式(11)で表される基であり、 $m_x$ が0であり、 $Ar_{101}$ が置換もしくは無置換の窒素原子を含む複素環基である。
- [0397] 本実施形態に係る有機EL素子において、  
例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち1つが一般式(11)で表される基であり、 $m_x$ が0であり、 $Ar_{101}$ が置換もしくは無置換の硫黄原子を含む複素環基である。

[0398] 本実施形態に係る有機EL素子において、

例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち1つが一般式(11)で表される基であり、 $m_x$ が0であり、 $Ar_{101}$ が置換もしくは無置換の

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、

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である。

[0399] 本実施形態に係る有機EL素子において、

例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち1つが一般式(11)で表される基であり、 $m_x$ が0であり、 $Ar_{101}$ が無置換の

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、  
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からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

[0400] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち1つが一般式(11)で表される基であり、 $m_x$ が0であり、 $A_{r_{101}}$ が置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基である。

[0401] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(1)で表される第一の化合物中の $R_{101}$ ないし $R_{110}$ のうち1つが一般式(11)で表される基であり、 $m_x$ が0であり、 $A_{r_{101}}$ が無置換のジベンゾフラニル基である。

[0402] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(101)で表される第一の化合物中の $m_x$ が2以上である。

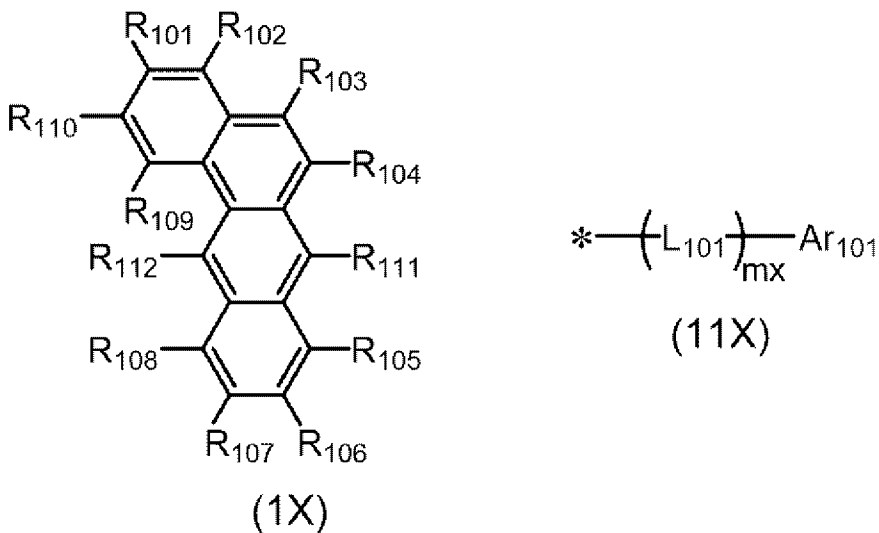
[0403] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(101)で表される第一の化合物中の $m_x$ が1以上であり、 $L_{101}$ は環形成炭素数6~24のアリーレン基、または環形成原子数5~24の2価の複素環基である。

[0404] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(101)で表される第一の化合物中の $m \times$ が1以上であり、 $L_{101}$ は環形成炭素数6~18のアリーレン基、または環形成原子数5~18の2価の複素環基である。

[0405] 一般式(1X)で表される化合物

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の化合物は、下記一般式(1X)で表される化合物であることも好ましい。

[0406] [化70]



[0407] (前記一般式(1X)において、

$R_{101} \sim R_{112}$ 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炭素数1~50のハロアルキル基、

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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

-O-( $R_{904}$ )で表される基、

—S— (R<sub>905</sub>) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、

—C(=O)R<sub>801</sub> で表される基、

—COOR<sub>802</sub> で表される基、

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、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基、又は

前記一般式 (11X) で表される基であり、

ただし、R<sub>101</sub>～R<sub>112</sub>の少なくとも1つは、前記一般式 (11X) で表される基であり、

前記一般式 (11X) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式 (11X) で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

L<sub>101</sub>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価の複素環基であり、

A<sub>r101</sub>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、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であり、

m<sub>x</sub>は、1、2、3、4又は5であり、

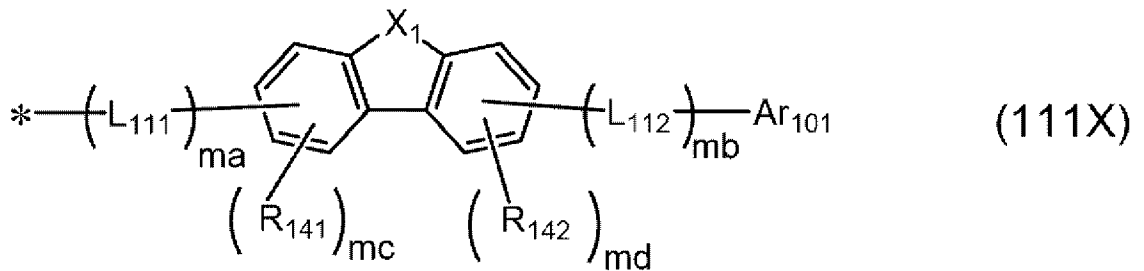
L<sub>101</sub>が2以上存在する場合、2以上のL<sub>101</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

A<sub>r101</sub>が2以上存在する場合、2以上のA<sub>r101</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

前記一般式 (11X) 中の\*は、前記一般式 (1X) 中のベンズ [a] アントラセン環との結合位置を示す。) )

[0408] 本実施形態に係る有機EL素子において、前記一般式(11X)で表される基は、下記一般式(111X)で表される基であることが好ましい。

[0409] [化71]



[0410] (前記一般式(111X)において、

$X_1$ は、 $CR_{143}R_{144}$ 、酸素原子、硫黄原子、又は $NR_{145}$ であり、

$L_{111}$ 及び $L_{112}$ は、それぞれ独立に、

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価の複素環基であり、

$m_a$ は、1、2、3又は4であり、

$m_b$ は、1、2、3又は4であり、

$m_a + m_b$ は、2、3又は4であり、

$Ar_{101}$ は、前記一般式(11)における $Ar_{101}$ と同義であり、

$R_{141}$ 、 $R_{142}$ 、 $R_{143}$ 、 $R_{144}$ 及び $R_{145}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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、

$-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基、

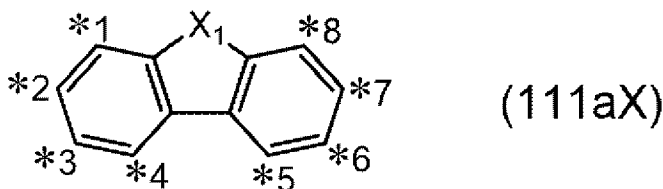
$-O-(R_{904})$ で表される基、

$-S-(R_{905})$ で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、  
 -C(=O)R<sub>801</sub> で表される基、  
 -COOR<sub>802</sub> で表される基、  
 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 の複素環基であり、  
 mc は、3 であり、  
 3 つの R<sub>141</sub> は、互いに同一であるか、又は異なり、  
 md は、3 であり、  
 3 つの R<sub>142</sub> は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

[0411] 前記一般式 (111X) で表される基における下記一般式 (111aX) で表される環構造中の炭素原子 \*1 ~ \*8 の位置のうち、\*1 ~ \*4 のいずれか 1 つの位置に L<sub>111</sub> が結合し、\*1 ~ \*4 の残りの 3 つの位置に R<sub>141</sub> が結合し、\*5 ~ \*8 のいずれか 1 つの位置に L<sub>112</sub> が結合し、\*5 ~ \*8 の残りの 3 つの位置に R<sub>142</sub> が結合する。

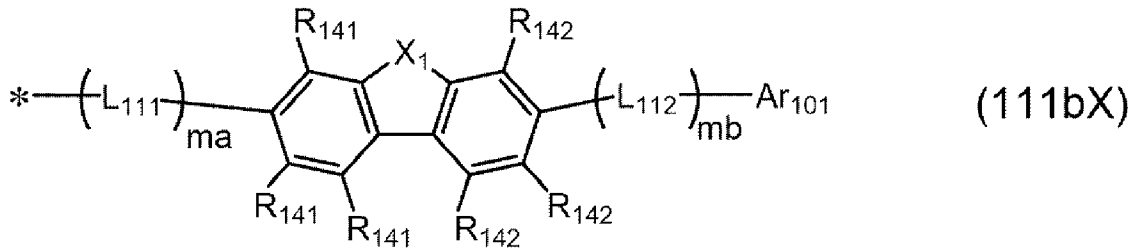
[0412] [化72]



[0413] 例えば、前記一般式 (111X) で表される基において、L<sub>111</sub> が前記一般式 (111aX) で表される環構造中の \*2 の炭素原子の位置に結合し、L<sub>112</sub> が前記一般式 (111aX) で表される環構造中の \*7 の炭素原子の位置に結合する場合、前記一般式 (111X) で表される基は、下記一般式 (111bX) で表される。

[0414]

[化73]



[0415] (前記一般式 (111bX) において、

$X_1$ 、 $L_{111}$ 、 $L_{112}$ 、 $ma$ 、 $mb$ 、 $Ar_{101}$ 、 $R_{141}$ 、 $R_{142}$ 、 $R_{143}$ 、 $R_{144}$  及び  $R_{145}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (111X) における  $X_1$ 、 $L_{111}$ 、 $L_{112}$ 、 $ma$ 、 $mb$ 、 $Ar_{101}$ 、 $R_{141}$ 、 $R_{142}$ 、 $R_{143}$ 、 $R_{144}$  及び  $R_{145}$  と同義であり、

複数の  $R_{141}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

複数の  $R_{142}$  は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

[0416] 本実施形態に係る有機EL素子において、前記一般式 (111X) で表される基は、前記一般式 (111bX) で表される基であることが好ましい。

[0417] 前記一般式 (1X) で表される化合物において、 $ma$  は、1 又は 2 であり、 $mb$  は、1 又は 2 であることが好ましい。

[0418] 前記一般式 (1X) で表される化合物において、 $ma$  は、1 であり、 $mb$  は、1 であることが好ましい。

[0419] 前記一般式 (1X) で表される化合物において、 $Ar_{101}$  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ことが好ましい。

[0420] 前記一般式 (1X) で表される化合物において、 $Ar_{101}$  は、

置換もしくは無置換のフェニル基、

置換もしくは無置換のナフチル基、

置換もしくは無置換のビフェニル基、

置換もしくは無置換のターフェニル基、

置換もしくは無置換のベンズ [a] アントリル基、

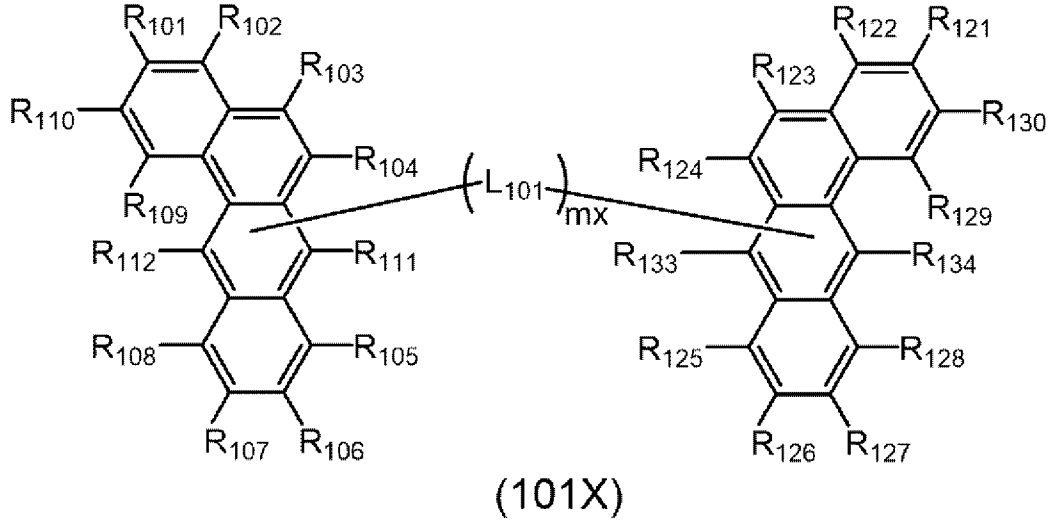
置換もしくは無置換のピレニル基、

置換もしくは無置換のフェナントリル基、又は

置換もしくは無置換のフルオレニル基であることが好ましい。

[0421] 前記一般式(1X)で表される化合物は、下記一般式(101X)で表されることも好ましい。

[0422] [化74]



[0423] (前記一般式(101X)において、

$R_{111}$ 及び $R_{112}$ のうち1つが $L_{101}$ との結合位置を示し、 $R_{133}$ 及び $R_{134}$ のうち1つが $L_{101}$ との結合位置を示し、

$R_{101} \sim R_{110}$ 、 $R_{121} \sim R_{130}$ 、 $L_{101}$ との結合位置ではない $R_{111}$ 又は $R_{112}$ 、並びに $L_{101}$ との結合位置ではない $R_{133}$ 又は $R_{134}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

—S—( $R_{905}$ )で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O)R<sub>801</sub>で表される基、

—COOR<sub>802</sub>で表される基、

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の複素環基であり、

L<sub>101</sub>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価の複素環基であり、

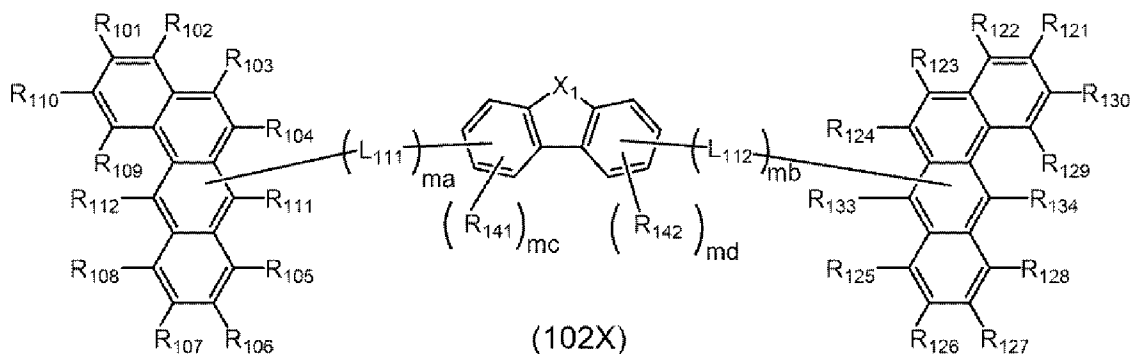
m<sub>x</sub>は、1、2、3、4又は5であり、

L<sub>101</sub>が2以上存在する場合、2以上のL<sub>101</sub>は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

[0424] 前記一般式(1X)で表される化合物において、L<sub>101</sub>は、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基であることが好ましい。

[0425] 前記一般式(1X)で表される化合物は、下記一般式(102X)で表されることも好ましい。

[0426] [化75]



[0427] (前記一般式(102X)において、

R<sub>111</sub>及びR<sub>112</sub>のうち1つがL<sub>111</sub>との結合位置を示し、R<sub>133</sub>及びR<sub>134</sub>

のうち1つが $L_{112}$ との結合位置を示し、

$R_{101} \sim R_{110}$ 、 $R_{121} \sim R_{130}$ 、 $L_{111}$ との結合位置ではない $R_{111}$ 又は $R_{112}$ 並びに $L_{112}$ との結合位置ではない $R_{133}$ 又は $R_{134}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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 ( $R_{901}$ ) ( $R_{902}$ ) ( $R_{903}$ ) で表される基、

—O— ( $R_{904}$ ) で表される基、

—S— ( $R_{905}$ ) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O)  $R_{801}$  で表される基、

—COO  $R_{802}$  で表される基、

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の複素環基であり、

$X_1$ は、 $CR_{143}R_{144}$ 、酸素原子、硫黄原子、又は $NR_{145}$ であり、

$L_{111}$ 及び $L_{112}$ は、それぞれ独立に、

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価の複素環基であり、

$ma$ は、1、2、3又は4であり、

$mb$ は、1、2、3又は4であり、

$ma + mb$  は、2、3、4又は5であり、

$R_{141}$ 、 $R_{142}$ 、 $R_{143}$ 、 $R_{144}$ 及び $R_{145}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

—S—( $R_{905}$ )で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O) $R_{801}$ で表される基、

—COO $R_{802}$ で表される基、

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の複素環基であり、

$mc$  は、3であり、

3つの $R_{141}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

$md$  は、3であり、

3つの $R_{142}$ は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

[0428] 前記一般式(1X)で表される化合物において、前記一般式(102X)

中の $ma$ は、1又は2であり、 $mb$ は、1又は2であることが好ましい。

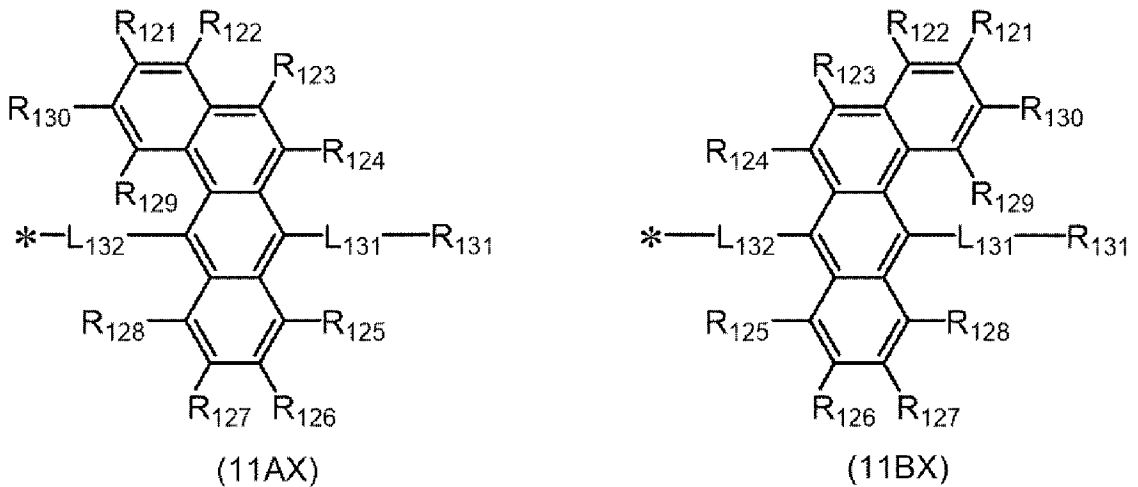
[0429] 前記一般式(1X)で表される化合物において、前記一般式(102X)

中の $ma$ は、1であり、 $mb$ は、1であることが好ましい。

[0430] 前記一般式(1X)で表される化合物において、前記一般式(11X)で

表される基は、下記一般式（11AX）で表される基、又は下記一般式（11BX）で表される基であることも好ましい。

[0431] [化76]



[0432] (前記一般式（11AX）及び前記一般式（11BX）において、

$R_{121} \sim R_{131}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

—S—( $R_{905}$ )で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O) $R_{801}$ で表される基、

—COOR $_{802}$ で表される基、

ハロゲン原子、

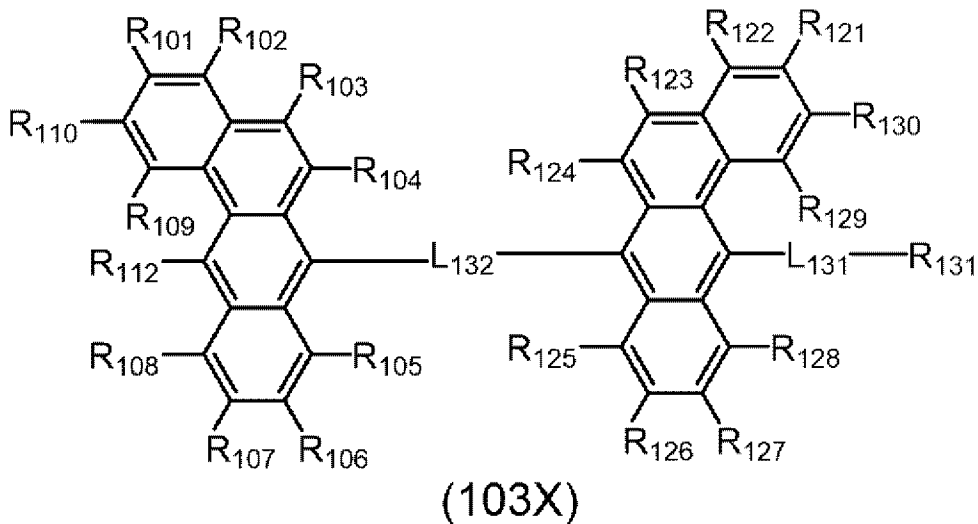
シアノ基、

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 の複素環基であり、  
 前記一般式 (11AX) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一  
 般式 (11AX) で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、  
 前記一般式 (11BX) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一  
 般式 (11BX) で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、  
 $L_{131}$  及び  $L_{132}$  は、それぞれ独立に、  
 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 価の複素環基であり、  
 前記一般式 (11AX) 及び前記一般式 (11BX) 中の \* は、それぞれ  
 、前記一般式 (1X) 中のベンズ [a] アントラセン環との結合位置を示す  
 。)

[0433] 前記一般式 (1X) で表される化合物は、下記一般式 (103X) で表さ  
 れることも好ましい。

[0434] [化77]



[0435] (前記一般式 (103X) において、

$R_{101} \sim R_{110}$  並びに  $R_{112}$  は、それぞれ、前記一般式 (1X) における  $R_{101} \sim R_{110}$  並びに  $R_{112}$  と同義であり、

$R_{121} \sim R_{131}$ 、 $L_{131}$ 及び $L_{132}$ は、それぞれ、前記一般式(11BX)における $R_{121} \sim R_{131}$ 、 $L_{131}$ 及び $L_{132}$ と同義である。) )

[0436] 前記一般式(1X)で表される化合物において、 $L_{131}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリーレン基であることも好ましい。

[0437] 前記一般式(1X)で表される化合物において、 $L_{132}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリーレン基であることも好ましい。

[0438] 前記一般式(1X)で表される化合物において、 $R_{101} \sim R_{112}$ のうち2つ以上が、前記一般式(11)で表される基であることも好ましい。

[0439] 本前記一般式(1X)で表される化合物において、 $R_{101} \sim R_{112}$ のうち2つ以上が、前記一般式(11X)で表される基であり、一般式(11X)中の $A_{r101}$ 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ことが好ましい。

[0440] 前記一般式(1X)で表される化合物において、  
 $A_{r101}$ は、置換もしくは無置換のベンズ[a]アントリル基ではなく、  
 $L_{101}$ は、置換もしくは無置換のベンズ[a]アントリレン基ではなく、  
前記一般式(11X)で表される基ではない $R_{101} \sim R_{110}$ としての置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基は、置換もしくは無置換のベンズ[a]アントリル基ではないことも好ましい。

[0441] 前記一般式(1X)で表される化合物において、前記一般式(11X)で表される基ではない $R_{101} \sim R_{112}$ 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の複素環基であることが好ましい。

[0442] 前記一般式(1X)で表される化合物において、前記一般式(11X)で表される基ではない $R_{101} \sim R_{112}$ は、

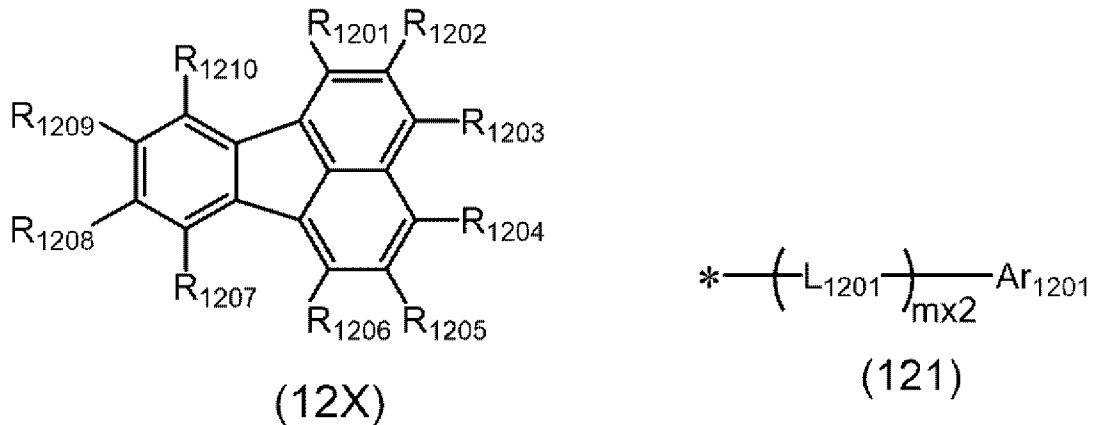
水素原子、  
置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、又は  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基である  
ことが好ましい。

[0443] 前記一般式 (1 X) で表される化合物において、前記一般式 (1 1 X) で  
表される基ではない  $R_{101} \sim R_{112}$  は、水素原子であることが好ましい。

[0444] 一般式 (1 2 X) で表される化合物

本実施形態に係る有機 EL 素子において、第一の化合物は、下記一般式 (1 2 X) で表される化合物であることも好ましい。

[0445] [化78]



[0446] (前記一般式 (1 2 X) において、

$R_{1201} \sim R_{1210}$  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、置換もしくは無置換の単環を形成するか、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し、  
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ及び前記置換もしくは無  
置換の縮合環を形成しない  $R_{1201} \sim R_{1210}$  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炭素数 1～50 のハロアルキル基、

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、

—S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、

—O— (R<sub>904</sub>) で表される基、

—S— (R<sub>905</sub>) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、

—C(=O) R<sub>801</sub> で表される基、

—COOR<sub>802</sub> で表される基、

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、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基、又は

前記一般式 (121) で表される基であり、

ただし、前記置換もしくは無置換の単環が置換基を有する場合の当該置換基、前記置換もしくは無置換の縮合環が置換基を有する場合の当該置換基、並びに R<sub>1201</sub>～R<sub>1210</sub> の少なくとも 1 つが、前記一般式 (121) で表される基であり、

前記一般式 (121) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式 (121) で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

L<sub>1201</sub> 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 価の複素環基であり、

A r<sub>1201</sub> 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、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であり、

m x 2 は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

L<sub>1201</sub> が 2 以上存在する場合、2 以上の L<sub>1201</sub> は、互いに同一であるか、

又は異なり、

$Ar_{1201}$ が2以上存在する場合、2以上の $Ar_{1201}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

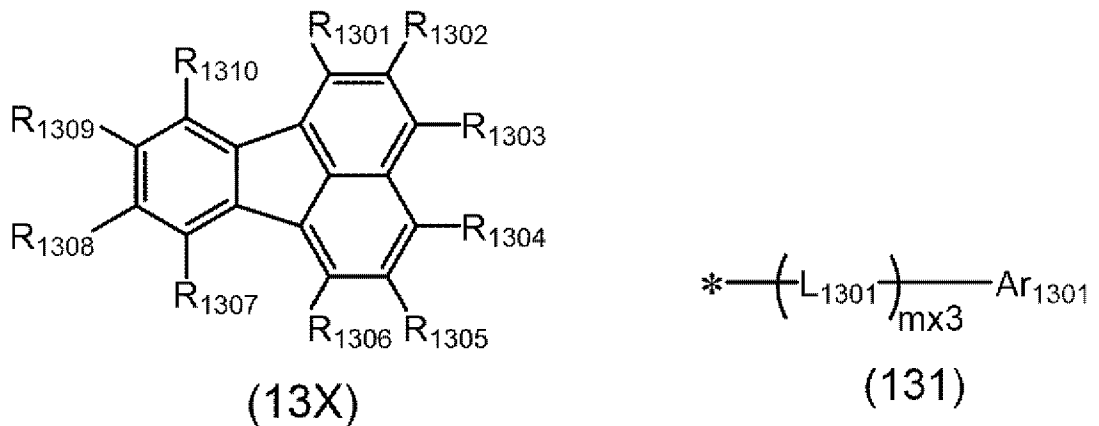
前記一般式(121)中の\*は、前記一般式(12X)で表される環との結合位置を示す。)

[0447] 前記一般式(12X)において、 $R_{1201} \sim R_{1210}$ のうちの隣接する2つからなる組とは、 $R_{1201}$ と $R_{1202}$ との組、 $R_{1202}$ と $R_{1203}$ との組、 $R_{1203}$ と $R_{1204}$ との組、 $R_{1204}$ と $R_{1205}$ との組、 $R_{1205}$ と $R_{1206}$ との組、 $R_{1207}$ と $R_{1208}$ との組、 $R_{1208}$ と $R_{1209}$ との組、並びに $R_{1209}$ と $R_{1210}$ との組である。

[0448] 一般式(13X)で表される化合物

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の化合物は、下記一般式(13X)で表される化合物であることも好ましい。

[0449] [化79]



[0450] (前記一般式(13X)において、

$R_{1301} \sim R_{1310}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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、

—S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、

—O— (R<sub>904</sub>) で表される基、

—S— (R<sub>905</sub>) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、

—C (=O) R<sub>801</sub> で表される基、

—COOR<sub>802</sub> で表される基、

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、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基、又は

前記一般式 (131) で表される基であり、

ただし、R<sub>1301</sub>～R<sub>1310</sub>の少なくとも1つは、前記一般式 (131) で表される基であり、

前記一般式 (131) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式 (131) で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

L<sub>1301</sub>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価の複素環基であり、

A r<sub>1301</sub>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、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であり、

m x 3は、0、1、2、3、4又は5であり、

L<sub>1301</sub>が2以上存在する場合、2以上のL<sub>1301</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

A r<sub>1301</sub>が2以上存在する場合、2以上のA r<sub>1301</sub>は、互いに同一である

か、又は異なり、

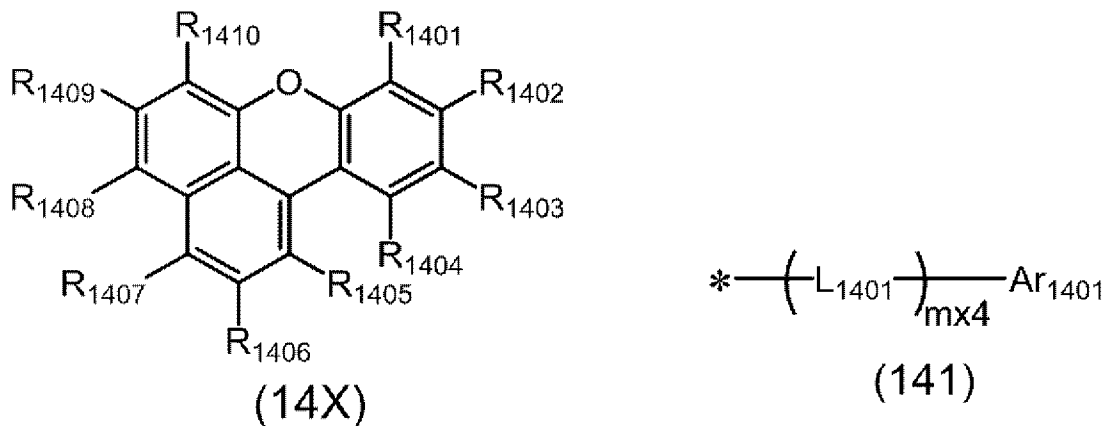
前記一般式(131)中の\*は、前記一般式(13X)中のフルオランテン環との結合位置を示す。

[0451] 本実施形態に係る有機EL素子において、前記一般式(131)で表される基ではない $R_{1301} \sim R_{1310}$ のうち隣接する2つ以上からなる組は、いずれも、互いに結合しない。前記一般式(13X)において隣接する2つからなる組とは、 $R_{1301}$ と $R_{1302}$ との組、 $R_{1302}$ と $R_{1303}$ との組、 $R_{1303}$ と $R_{1304}$ との組、 $R_{1304}$ と $R_{1305}$ との組、 $R_{1305}$ と $R_{1306}$ との組、 $R_{1307}$ と $R_{1308}$ との組、 $R_{1308}$ と $R_{1309}$ との組、並びに $R_{1309}$ と $R_{1310}$ との組である。

[0452] 一般式(14X)で表される化合物

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の化合物は、下記一般式(14X)で表される化合物であることも好ましい。

[0453] [化80]



[0454] (前記一般式(14X)において、

$R_{1401} \sim R_{1410}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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、

—S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、

—O— (R<sub>904</sub>) で表される基、

—S— (R<sub>905</sub>) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、

—C(=O) R<sub>801</sub> で表される基、

—COOR<sub>802</sub> で表される基、

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、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基、又は

前記一般式 (141) で表される基であり、

ただし、R<sub>1401</sub>～R<sub>1410</sub>の少なくとも1つは、前記一般式 (141) で表される基であり、

前記一般式 (141) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式 (141) で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

L<sub>1401</sub>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価の複素環基であり、

A r<sub>1401</sub>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、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であり、

m x 4 は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

L<sub>1401</sub>が2以上存在する場合、2以上のL<sub>1401</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

A r<sub>1401</sub>が2以上存在する場合、2以上のA r<sub>1401</sub>は、互いに同一である

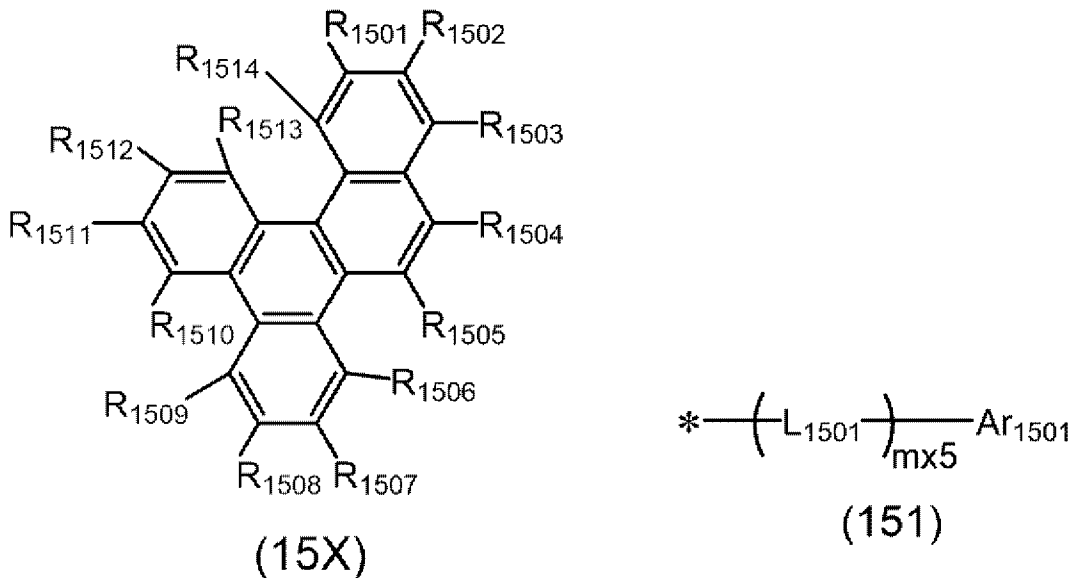
か、又は異なり、

前記一般式（141）中の\*は、前記一般式（14X）で表される環との結合位置を示す。）

[0455] ・一般式（15X）で表される化合物

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の化合物は、下記一般式（15X）で表される化合物であることも好ましい。

[0456] [化81]



[0457] （前記一般式（15X）において、

$R_{1501} \sim R_{1514}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

—S—( $R_{905}$ )で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O)R<sub>801</sub>で表される基、

—COOR<sub>802</sub>で表される基、

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、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基、又は

前記一般式(151)で表される基であり、

ただし、R<sub>1501</sub>～R<sub>1514</sub>の少なくとも1つは、前記一般式(151)で表される基であり、

前記一般式(151)で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式(151)で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

L<sub>1501</sub>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価の複素環基であり、

Ar<sub>1501</sub>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、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

m×5は、0、1、2、3、4又は5であり、

L<sub>1501</sub>が2以上存在する場合、2以上のL<sub>1501</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar<sub>1501</sub>が2以上存在する場合、2以上のAr<sub>1501</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

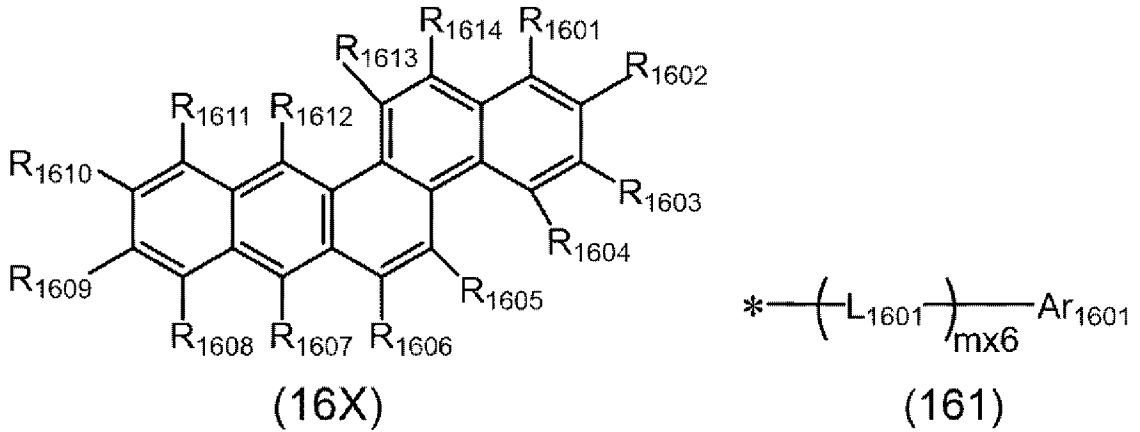
前記一般式(151)中の\*は、前記一般式(15X)で表される環との結合位置を示す。)

[0458] ・一般式(16X)で表される化合物

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の化合物は、下記一般式(

16X) で表される化合物であることも好ましい。

[0459] [化82]



[0460] (前記一般式 (16X) において、

$R_{1601} \sim R_{1614}$  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炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、

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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ ) で表される基、

-O- ( $R_{904}$ ) で表される基、

-S- ( $R_{905}$ ) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、

-C(=O)  $R_{801}$  で表される基、

-COOR<sub>802</sub> で表される基、

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、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基、又は

前記一般式 (161) で表される基であり、

ただし、 $R_{1601} \sim R_{1614}$  の少なくとも1つは、前記一般式 (161) で表される基であり、

前記一般式 (161) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式 (161) で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

$L_{1601}$  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価の複素環基であり、

$Ar_{1601}$  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、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

$m \times 6$  は、0、1、2、3、4又は5であり、

$L_{1601}$  が2以上存在する場合、2以上の $L_{1601}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$Ar_{1601}$  が2以上存在する場合、2以上の $Ar_{1601}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

前記一般式 (161) 中の\*は、前記一般式 (16X) で表される環との結合位置を示す。)

[0461] 第一の化合物及び第二の化合物において、「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であることが好ましい。

[0462] (第一の化合物の製造方法)

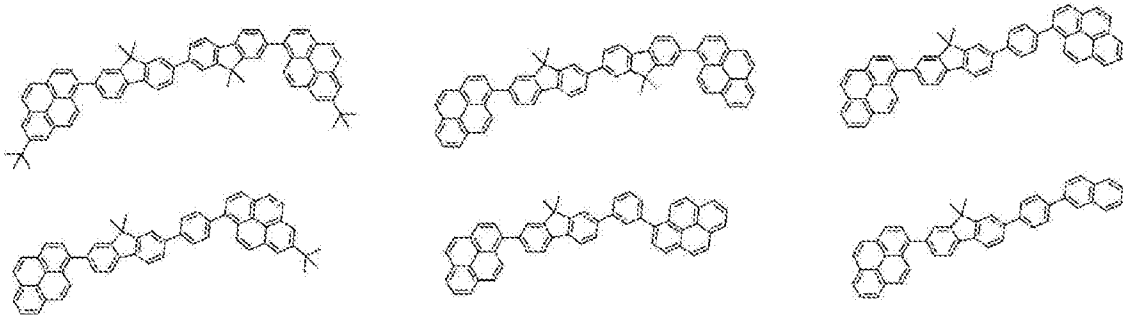
第一の化合物は、公知の方法により製造できる。また、第一の化合物は、公知の方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。

[0463] (第一の化合物の具体例)

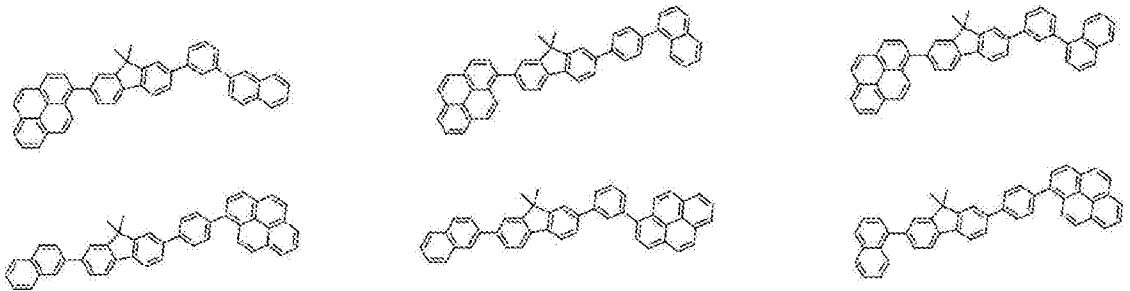
第一の化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら第一の化合物の具体例に限定されない。

本明細書において、化合物の具体例中、Dは、重水素原子を示し、Meは、メチル基を示し、tBuは、tert-ブチル基を示す。

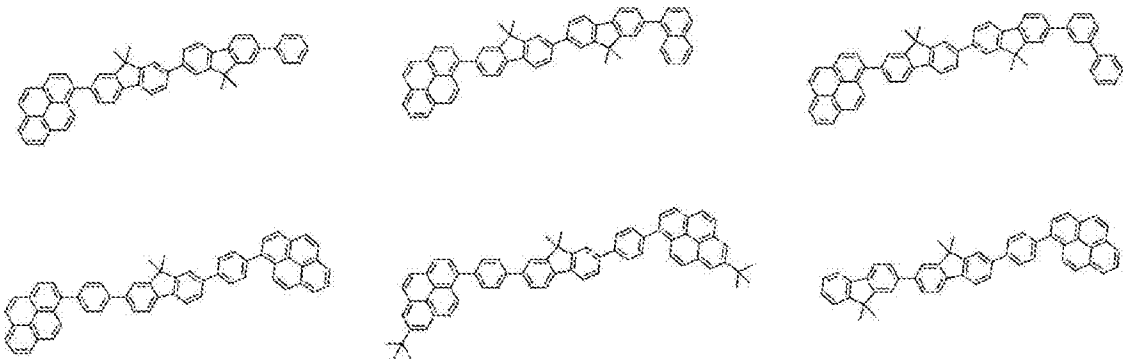
[0464] [化83]



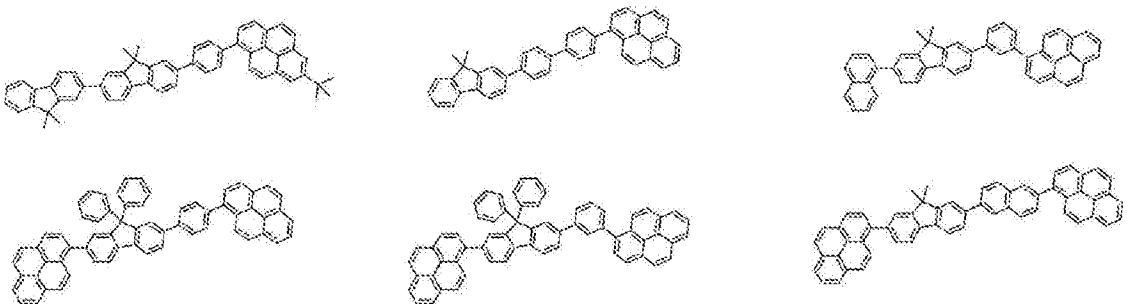
[0465] [化84]



[0466] [化85]

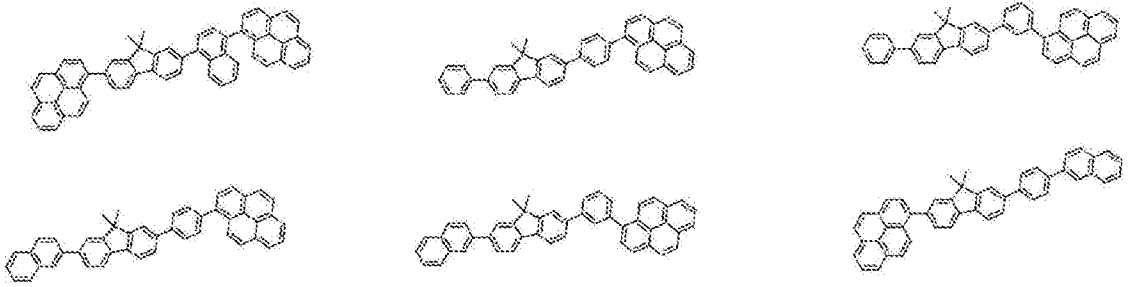


[0467] [化86]

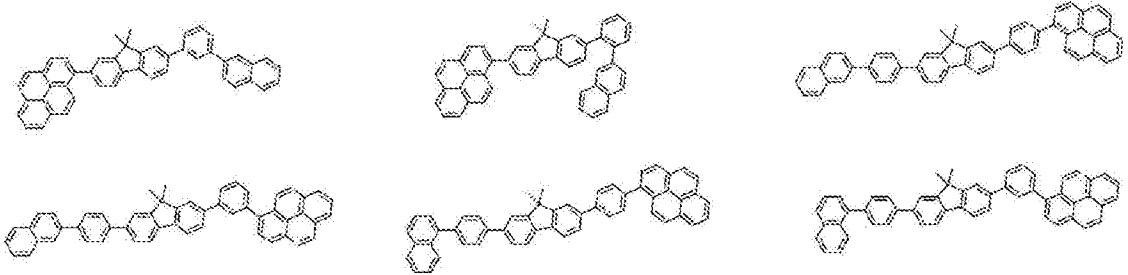


[0468]

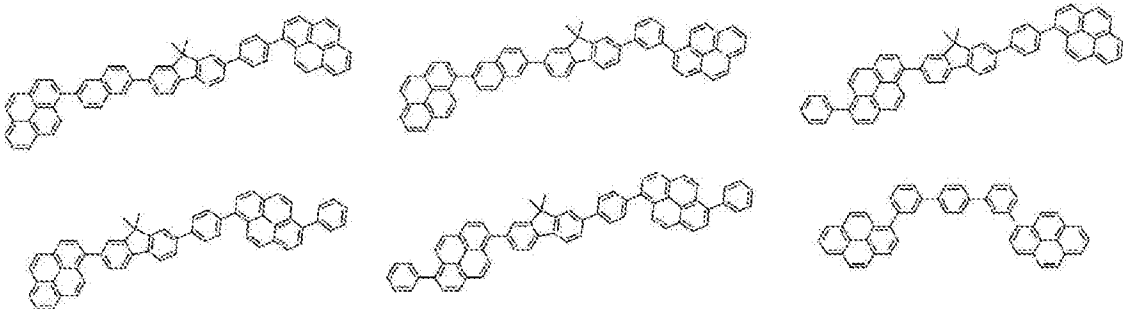
[化87]



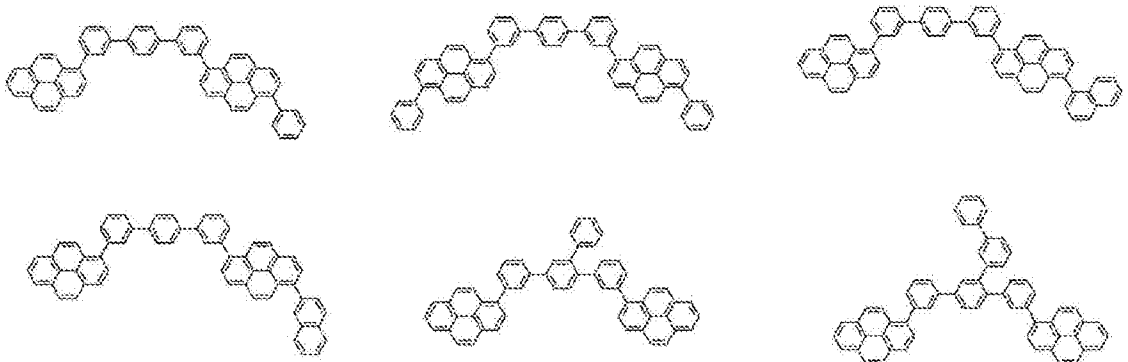
[0469] [化88]



[0470] [化89]

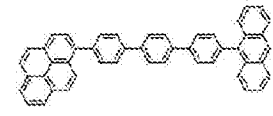
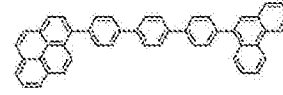
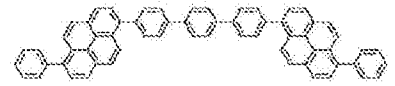
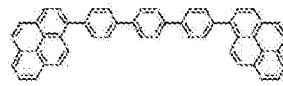
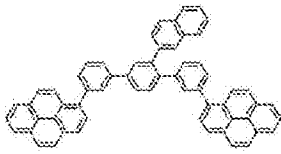


[0471] [化90]

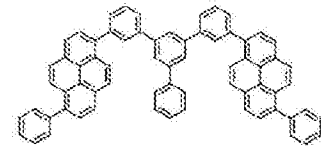
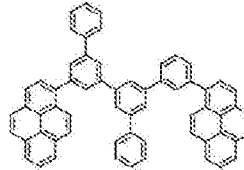
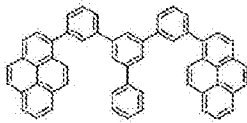
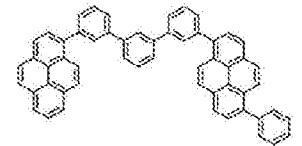
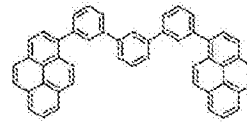
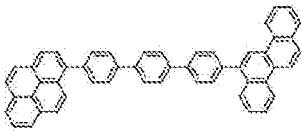


[0472]

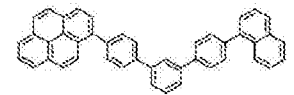
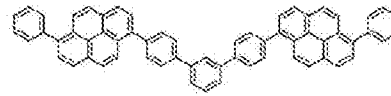
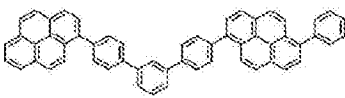
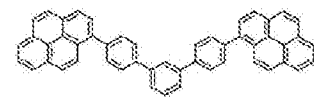
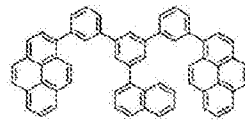
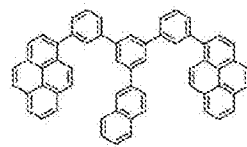
[化91]



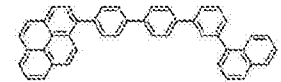
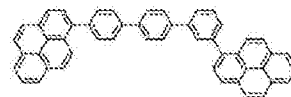
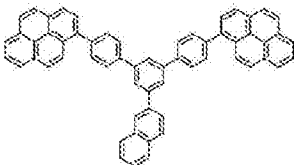
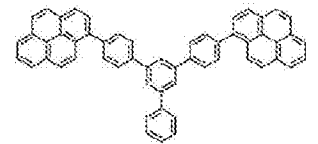
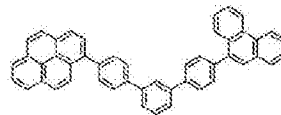
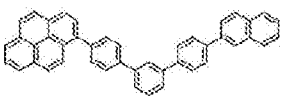
[0473] [化92]



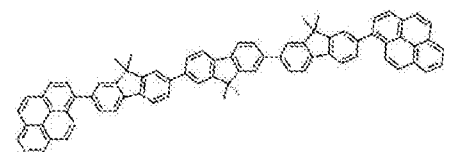
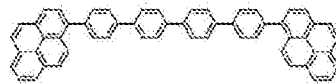
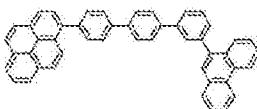
[0474] [化93]



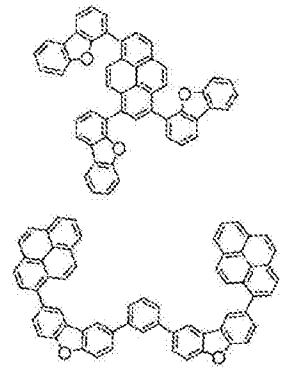
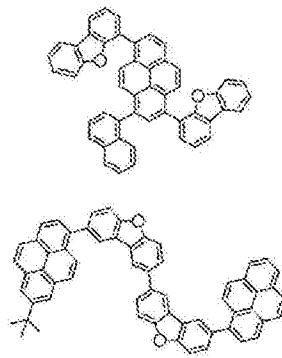
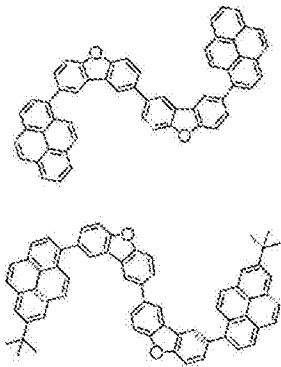
[0475] [化94]



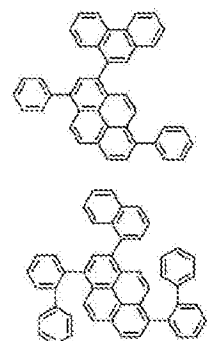
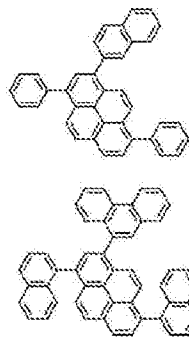
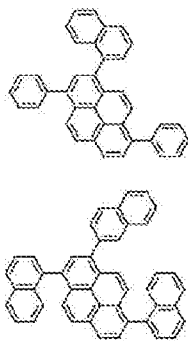
[0476] [化95]



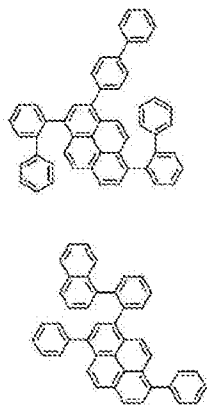
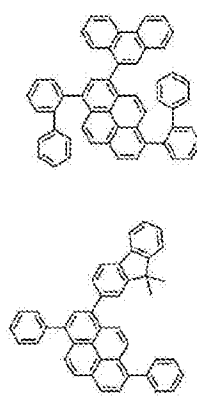
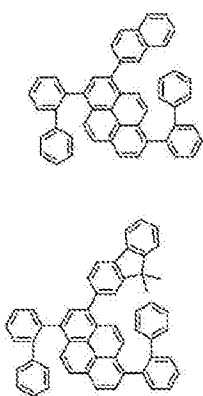
[0477] [化96]



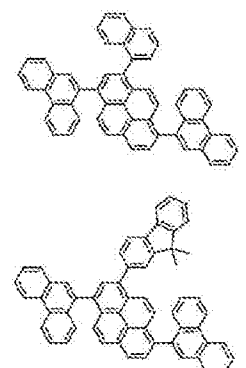
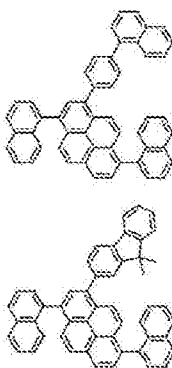
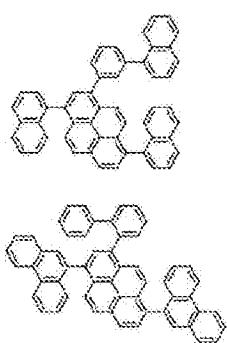
[0478] [化97]



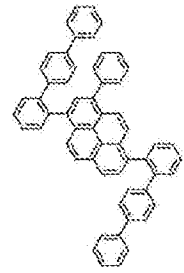
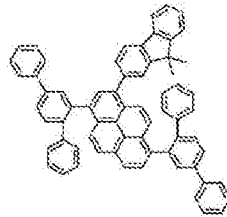
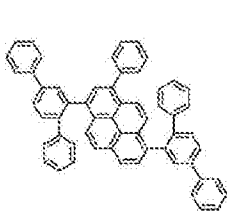
[0479] [化98]



[0480] [化99]

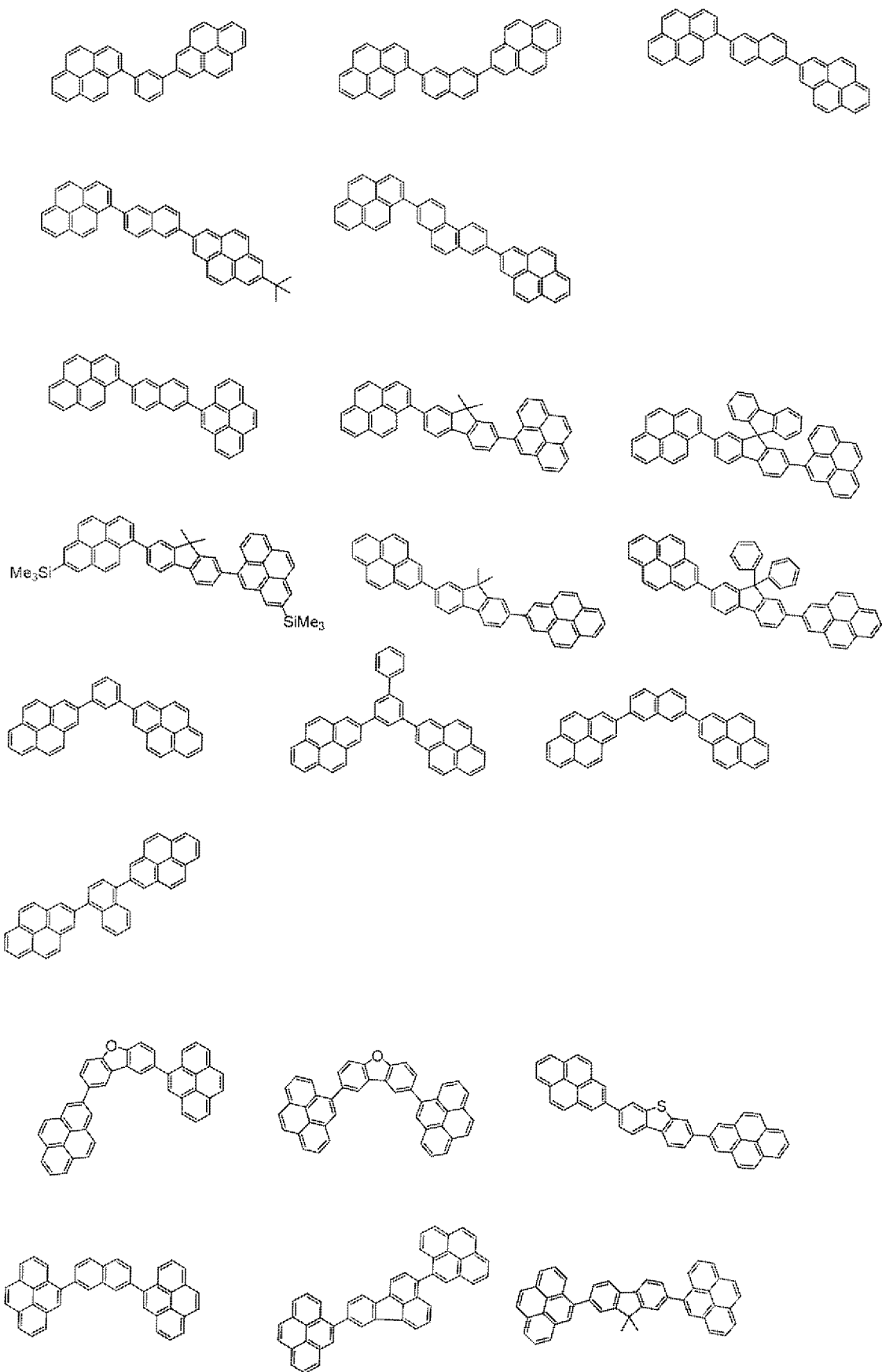


[0481] [化100]

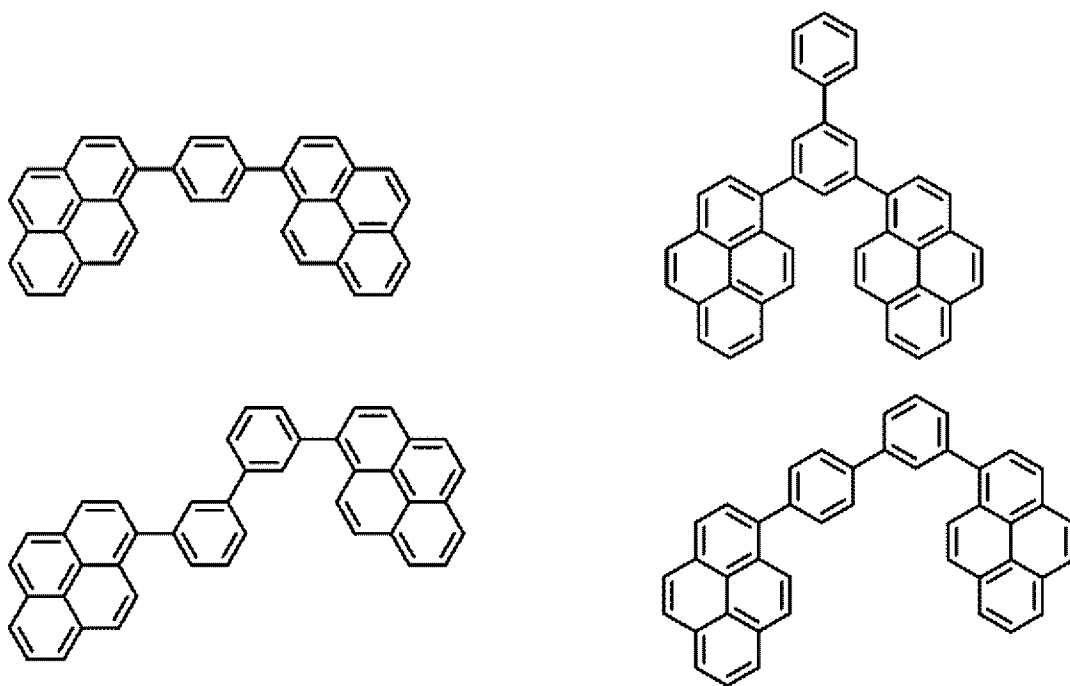


[0482]

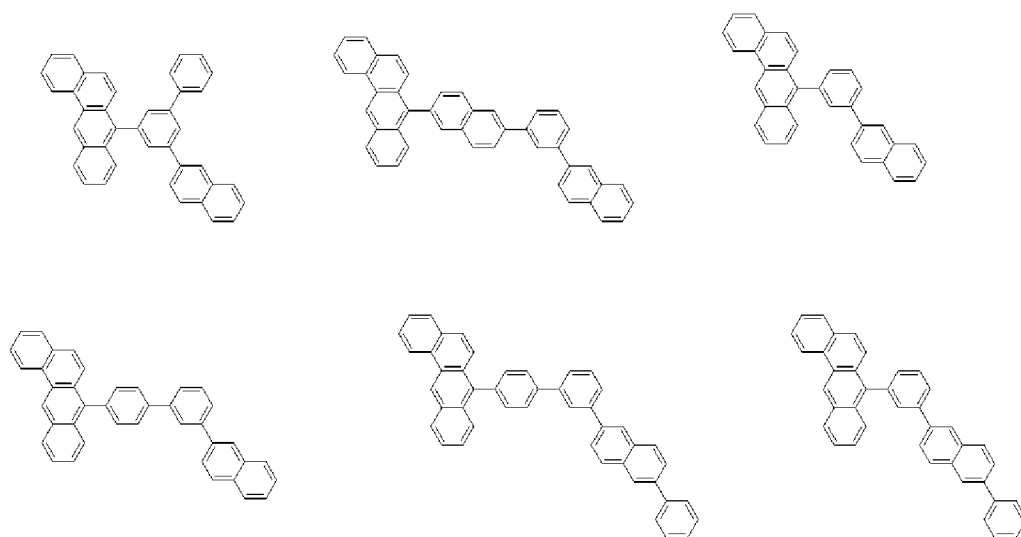
[化101]



[0483] [化102]

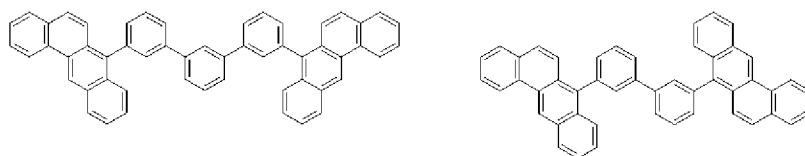
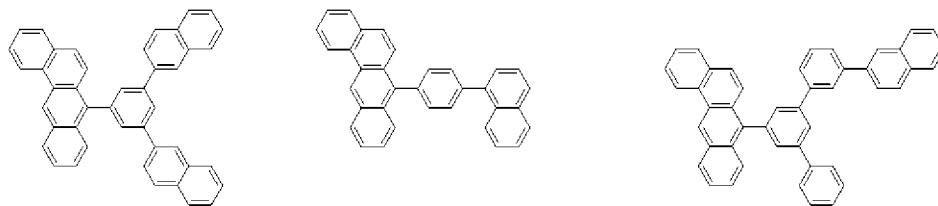


[0484] [化103]

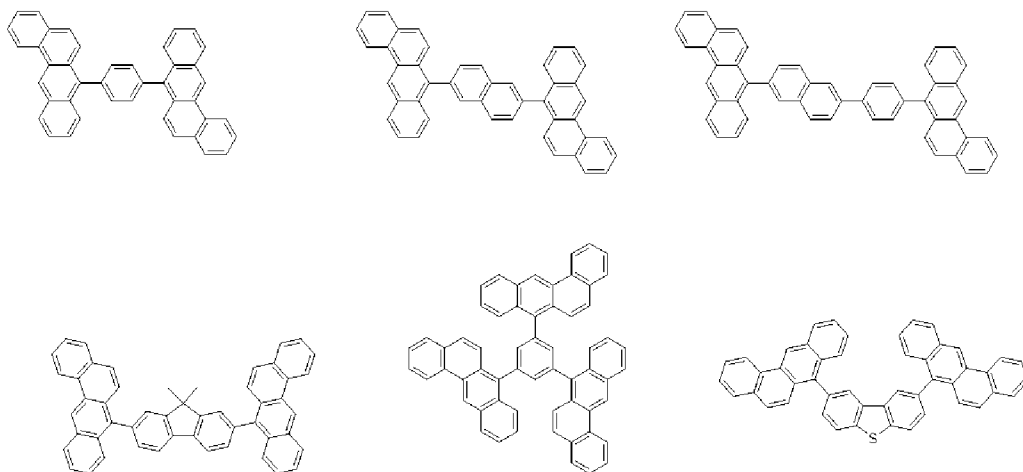


[0485]

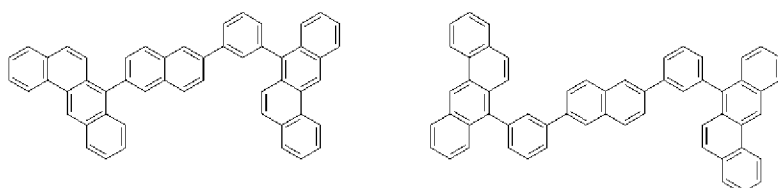
[化104]



[0486] [化105]

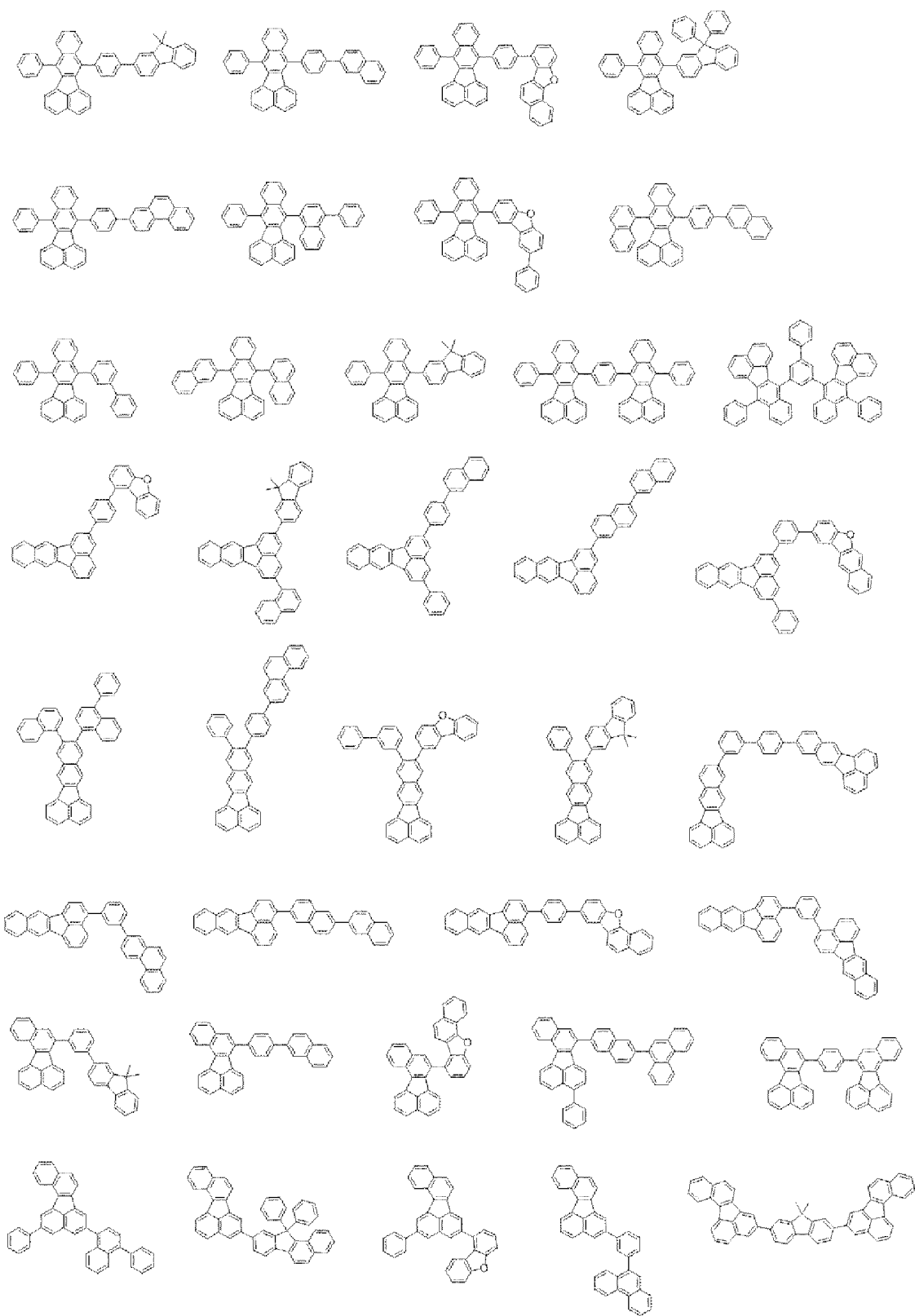


[0487] [化106]



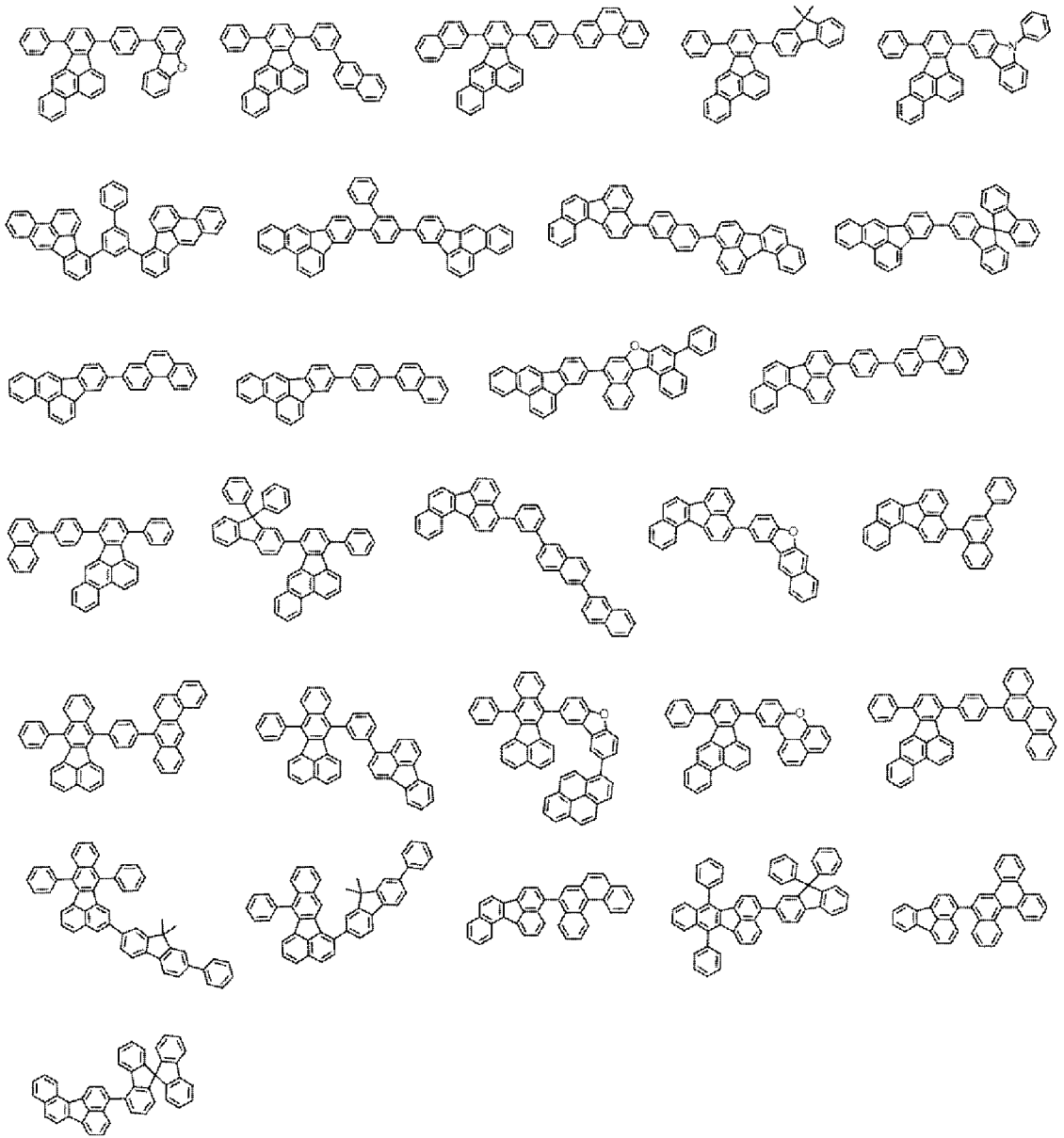
[0488]

[化107]



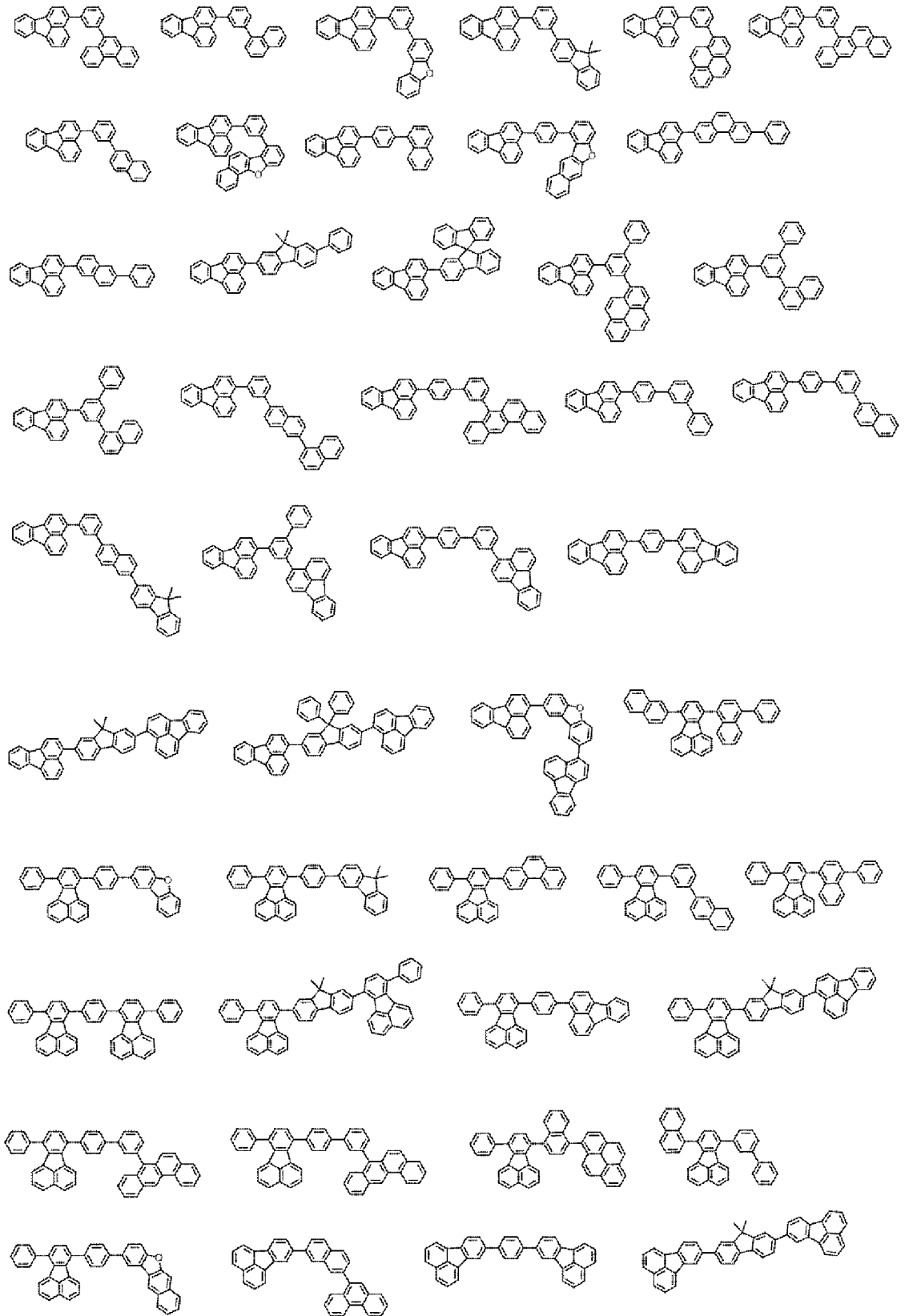
[0489]

[化108]



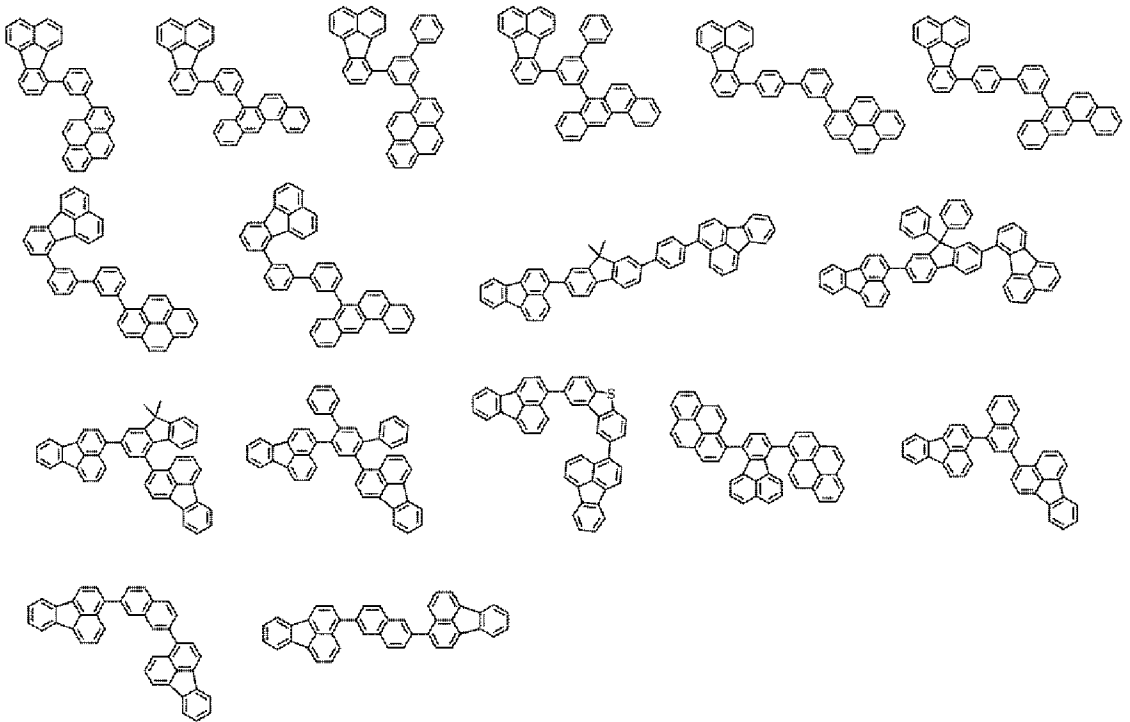
[0490]

[化109]

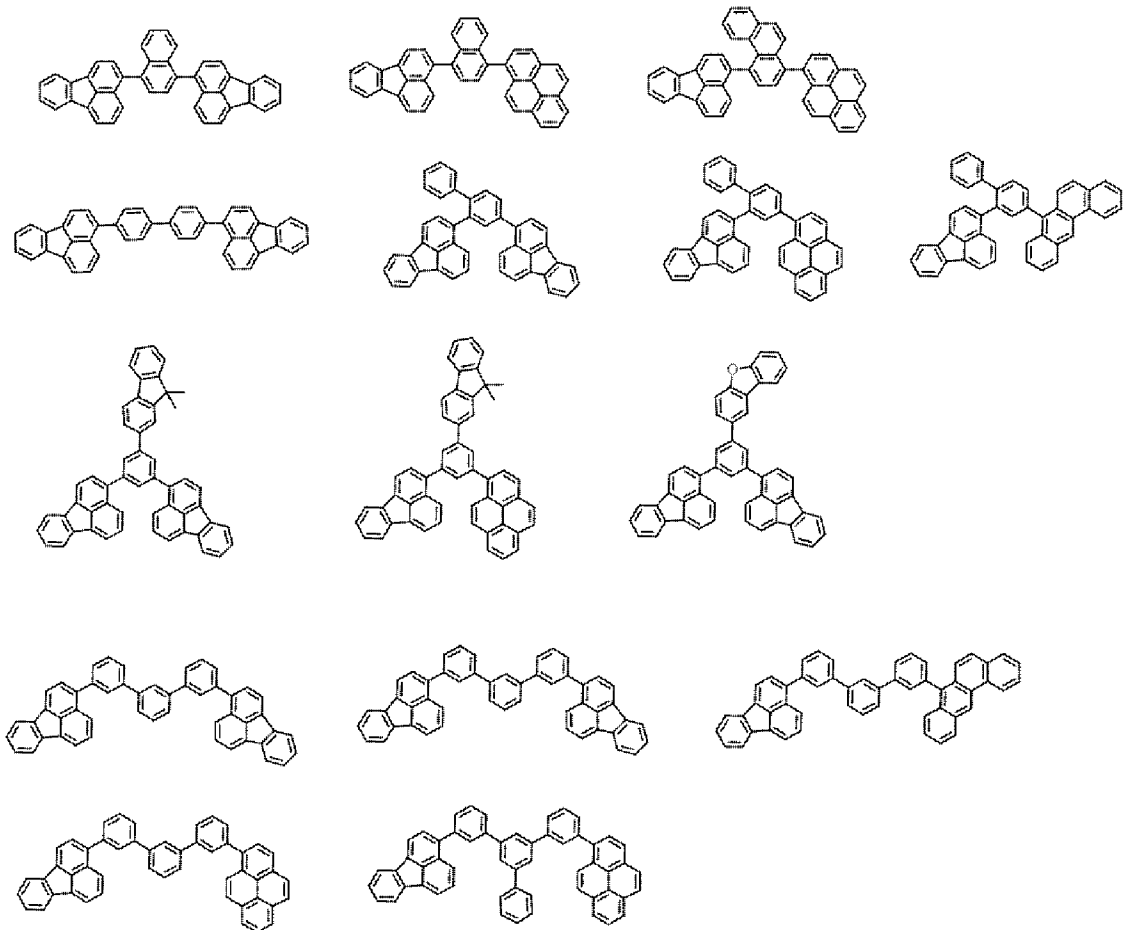


[0491]

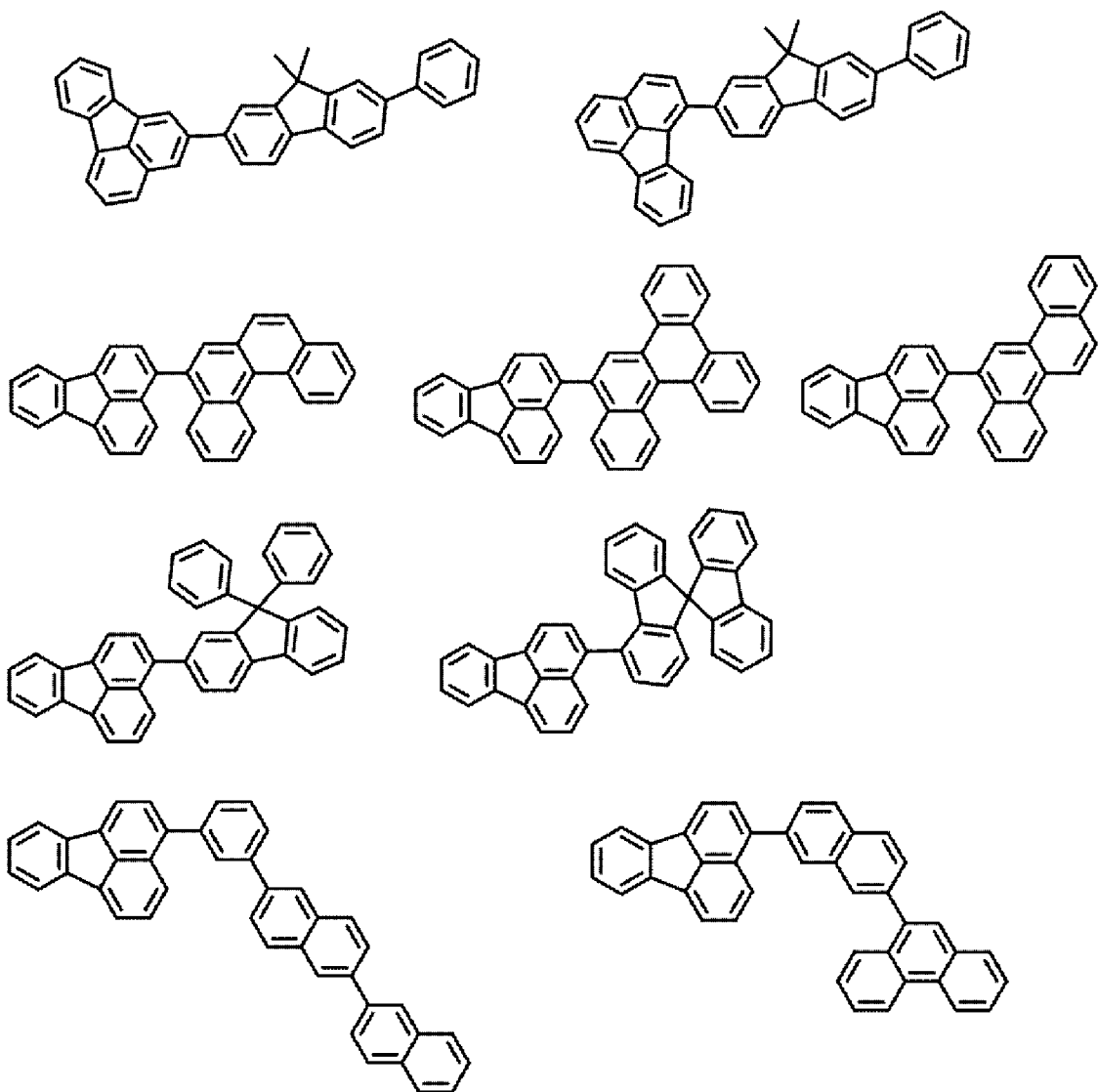
[化110]



[0492] [化111]

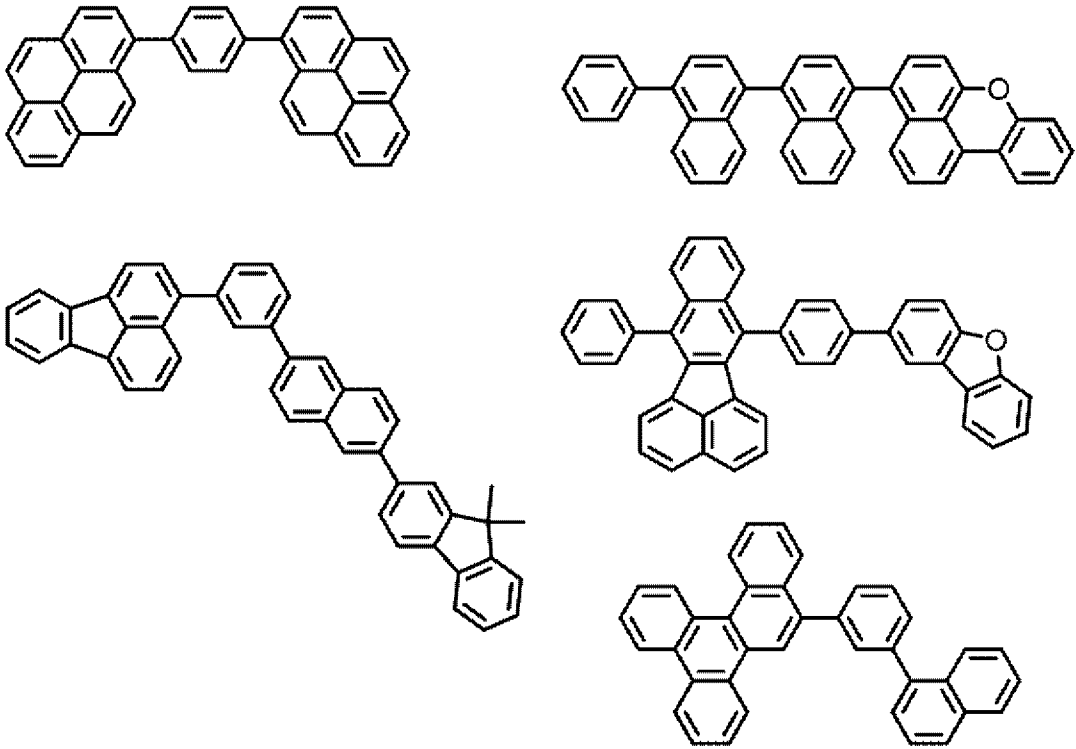


[0493] [化112]

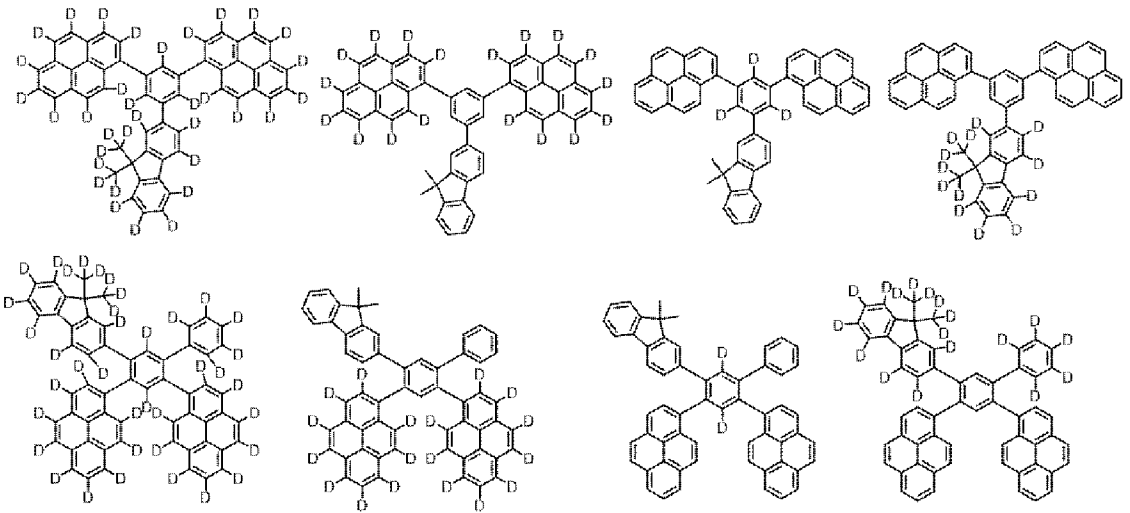


[0494]

[化113]

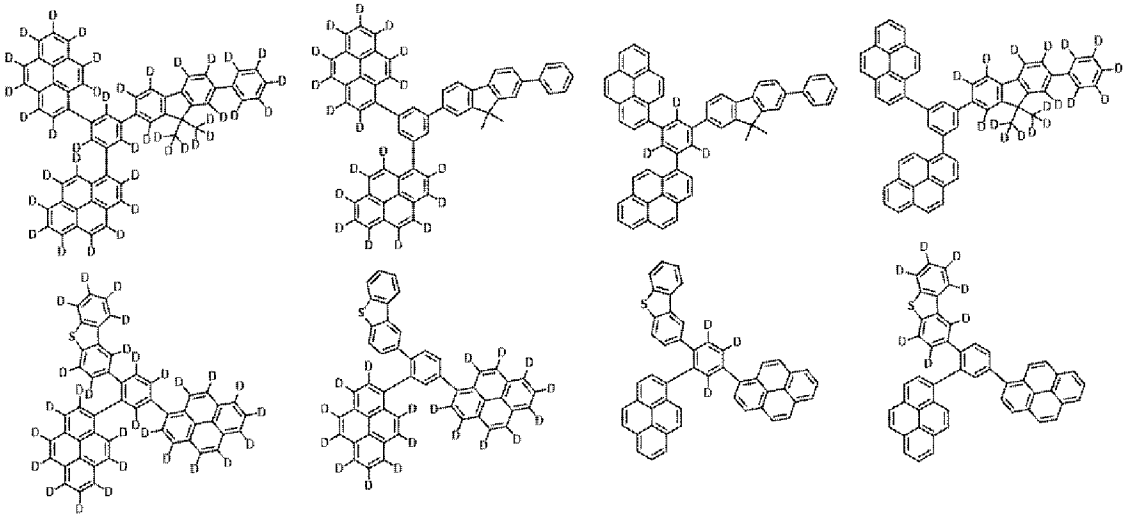


[0495] [化114]

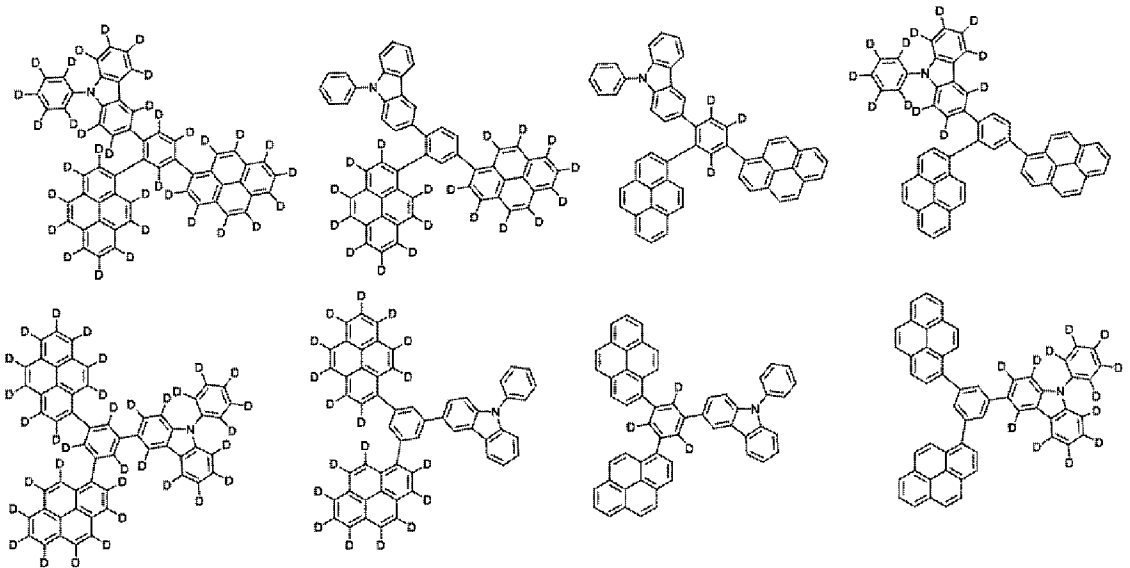


[0496]

[化115]

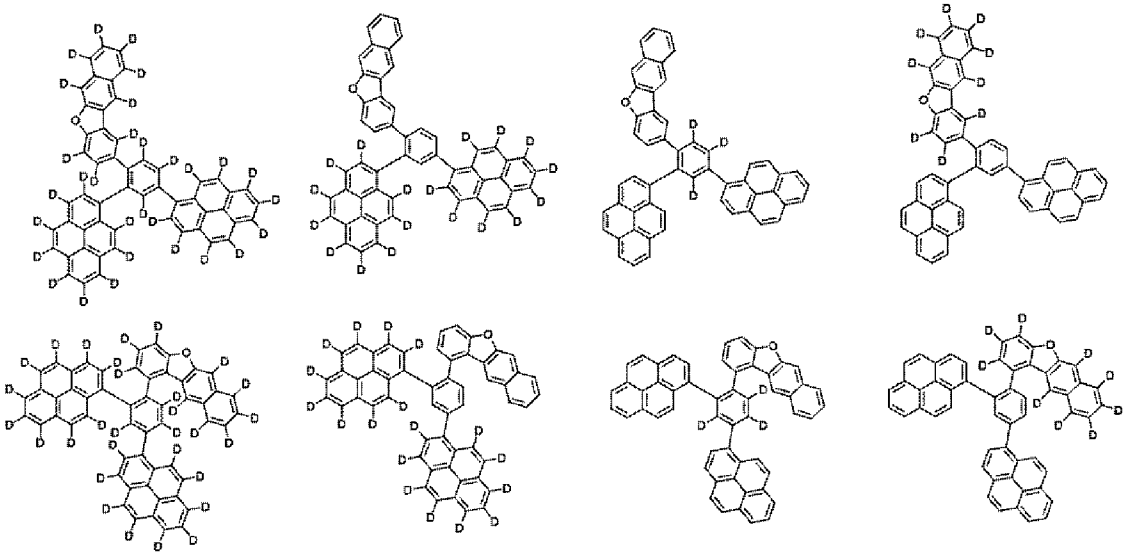


[0497] [化116]

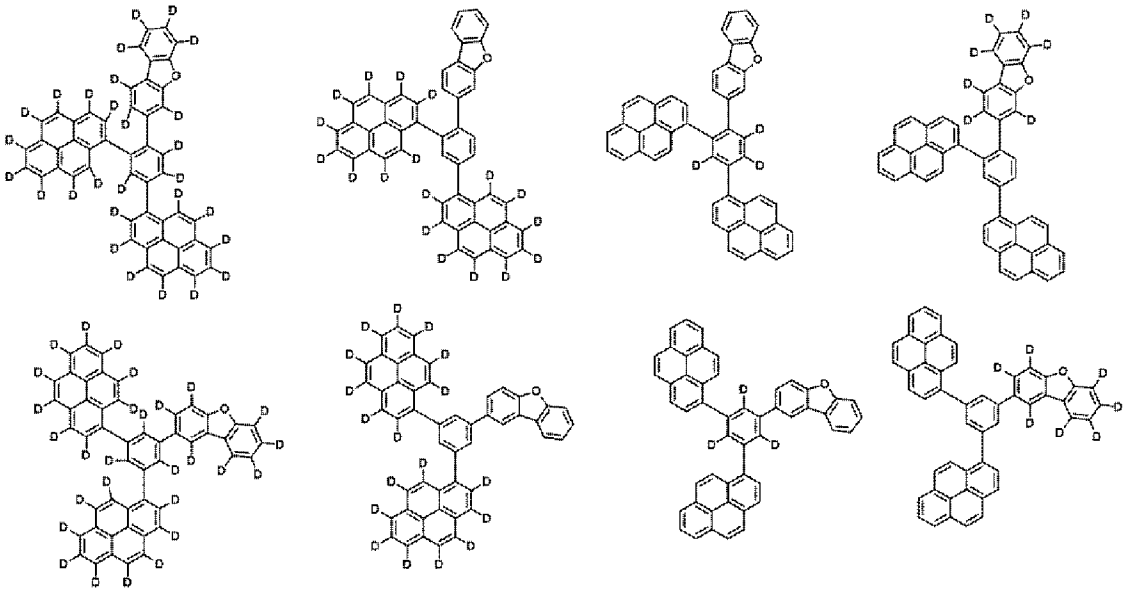


[0498]

[化117]

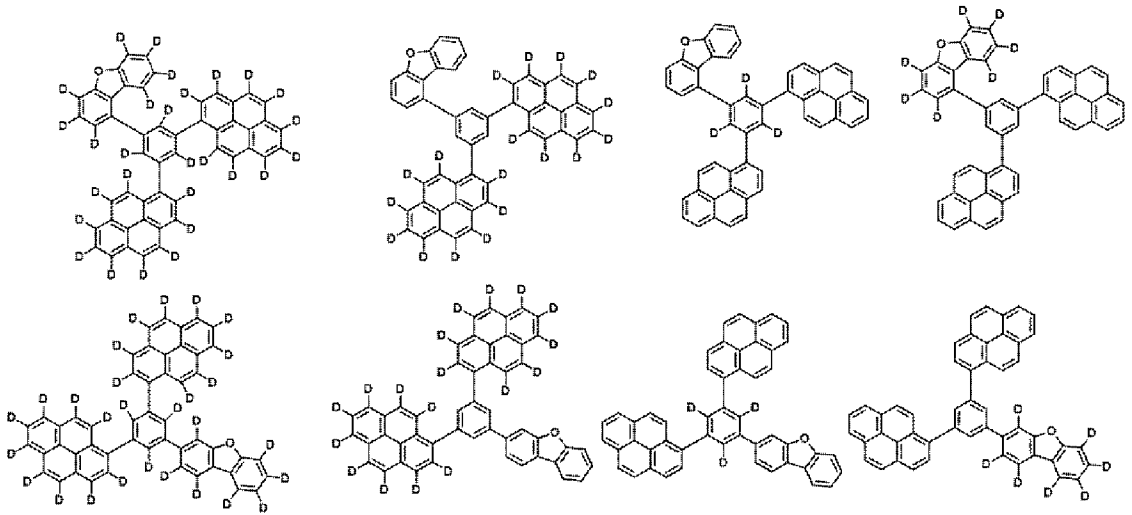


[0499] [化118]

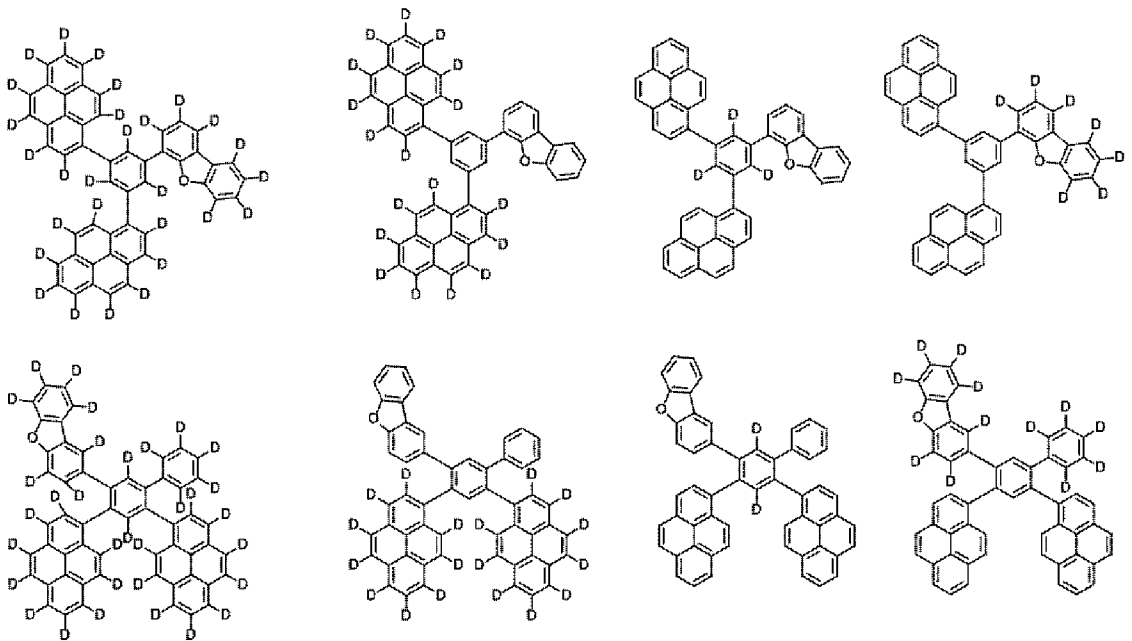


[0500]

[化119]

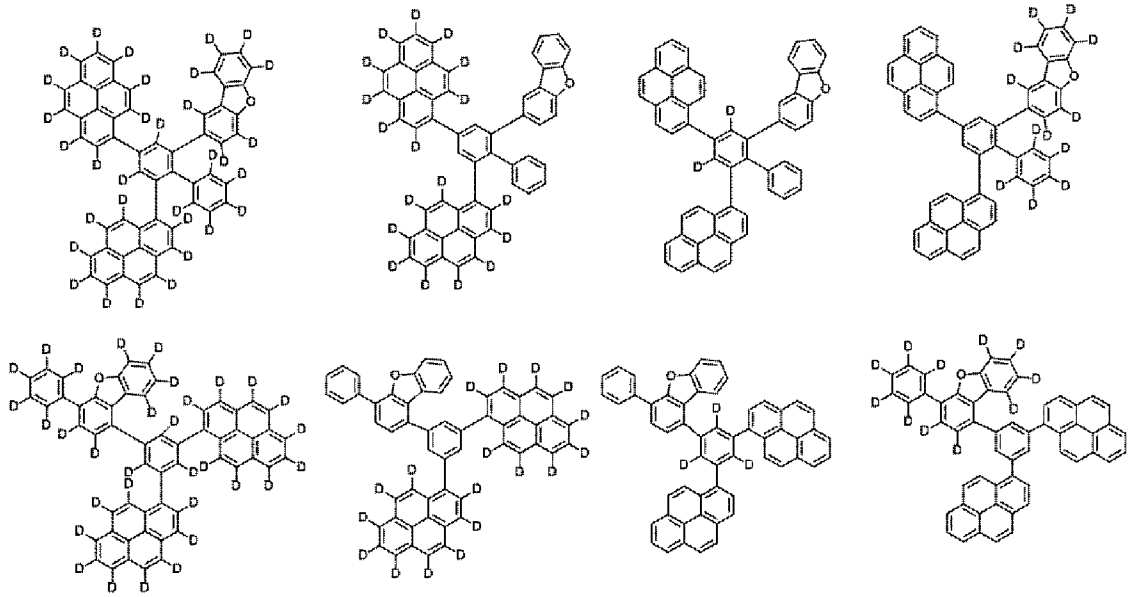


[0501] [化120]

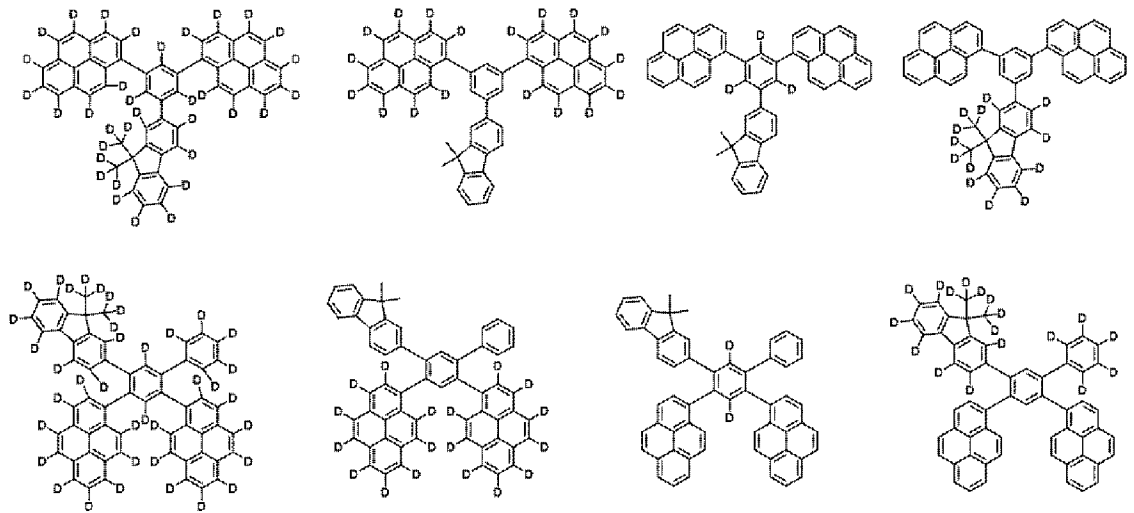


[0502]

[化121]

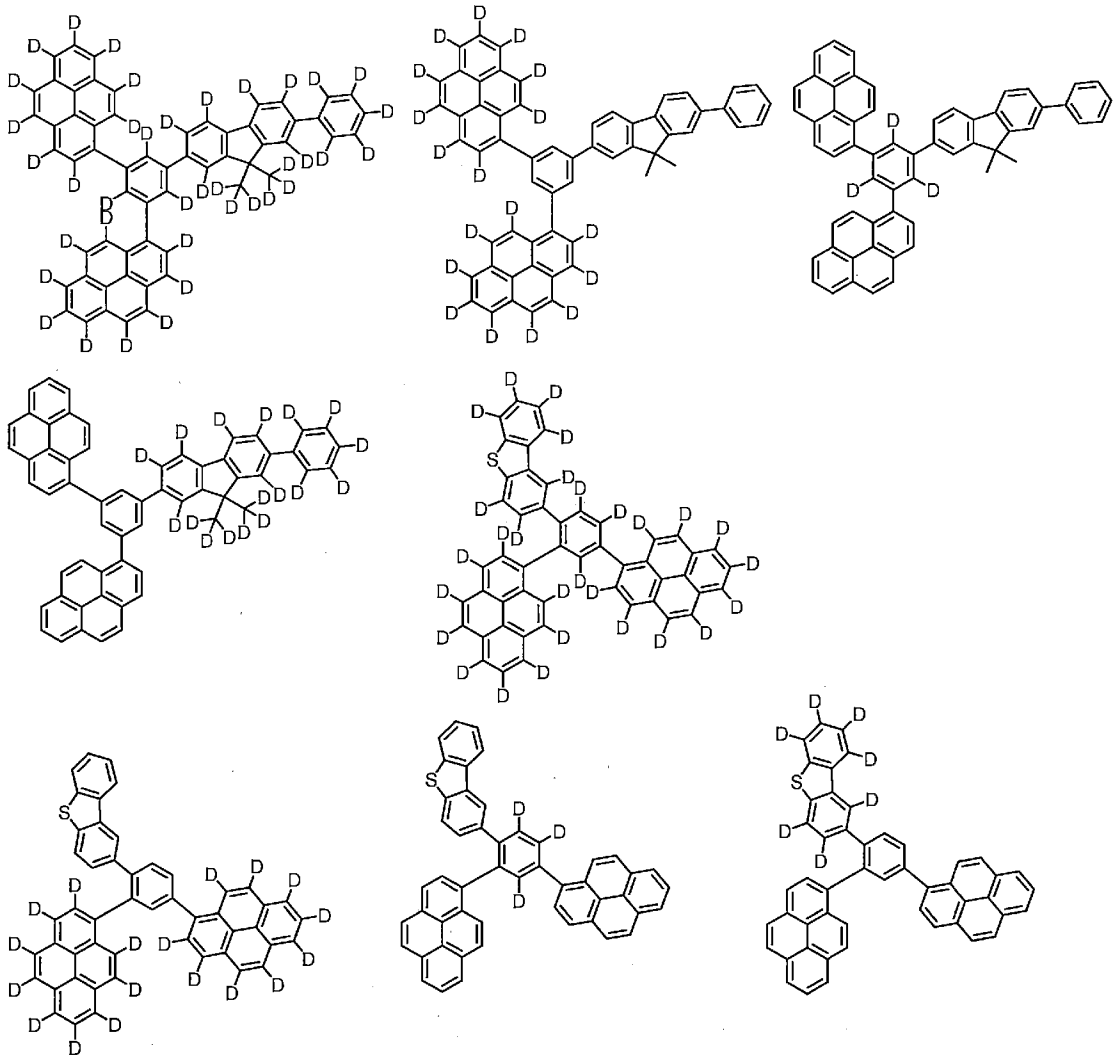


[0503] [化122]



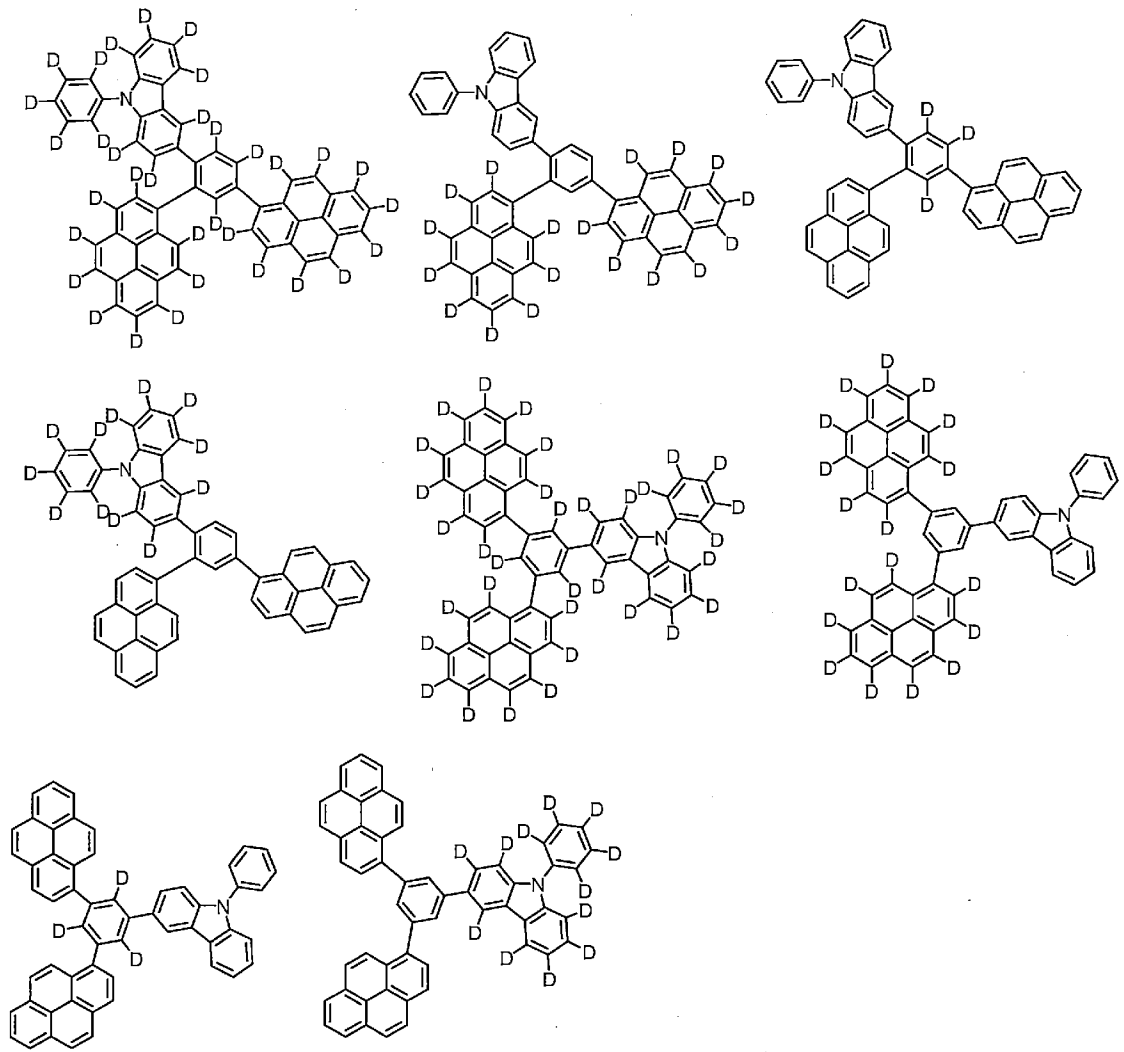
[0504]

[化123]

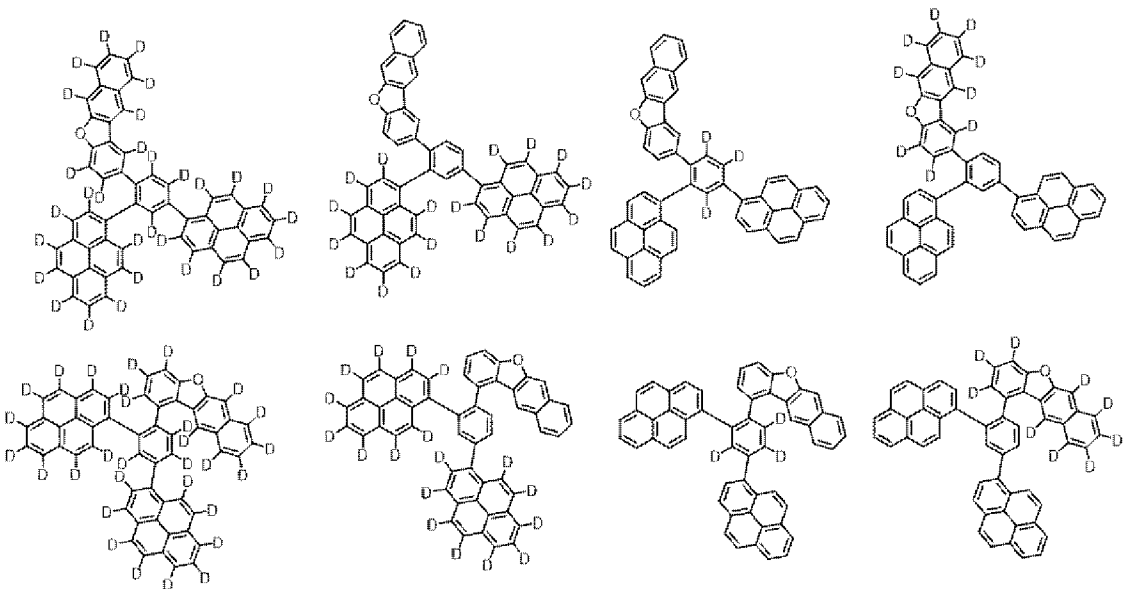


[0505]

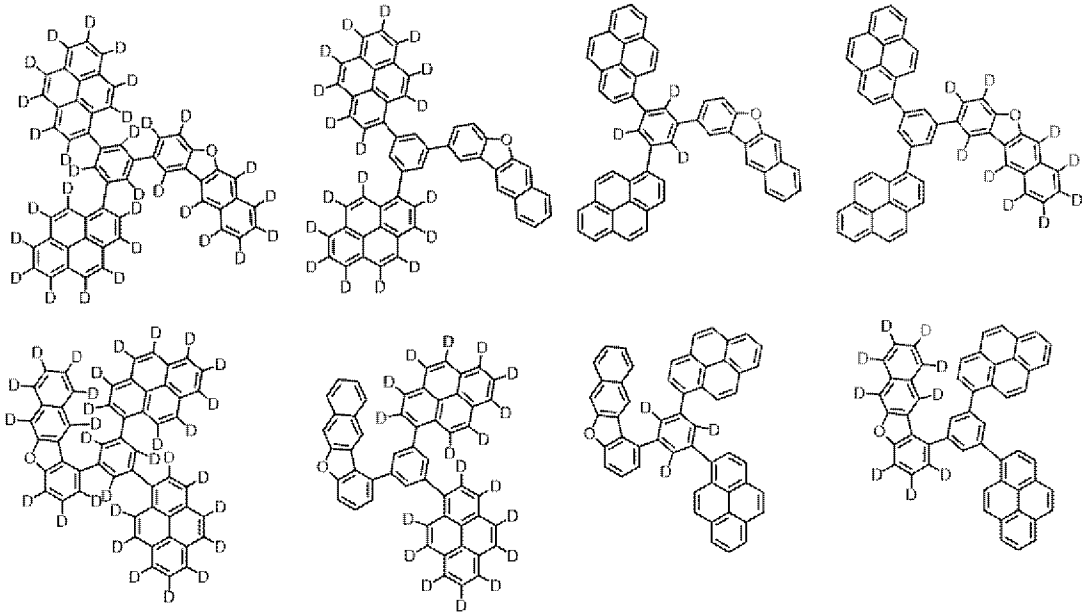
[化124]



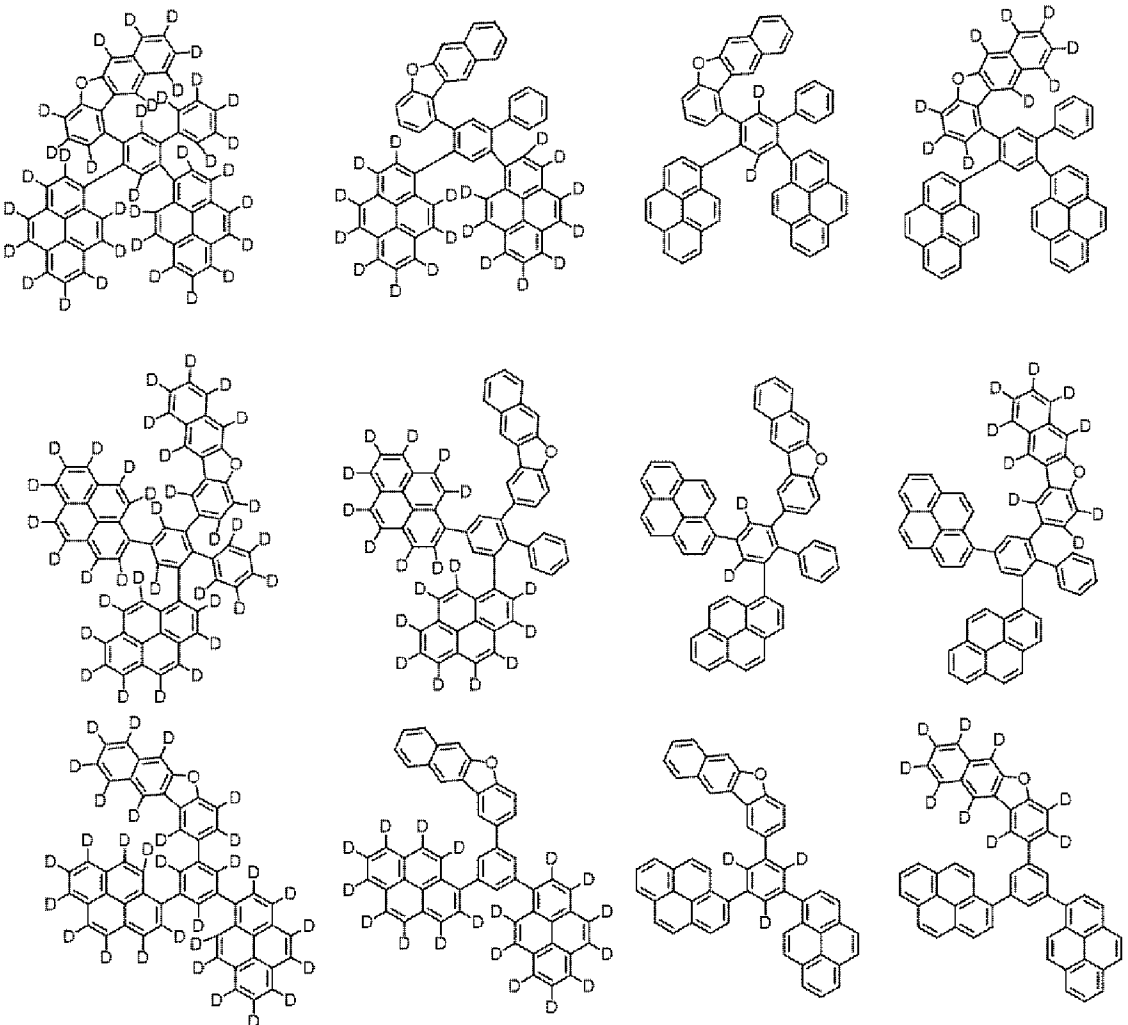
[0506] [化125]



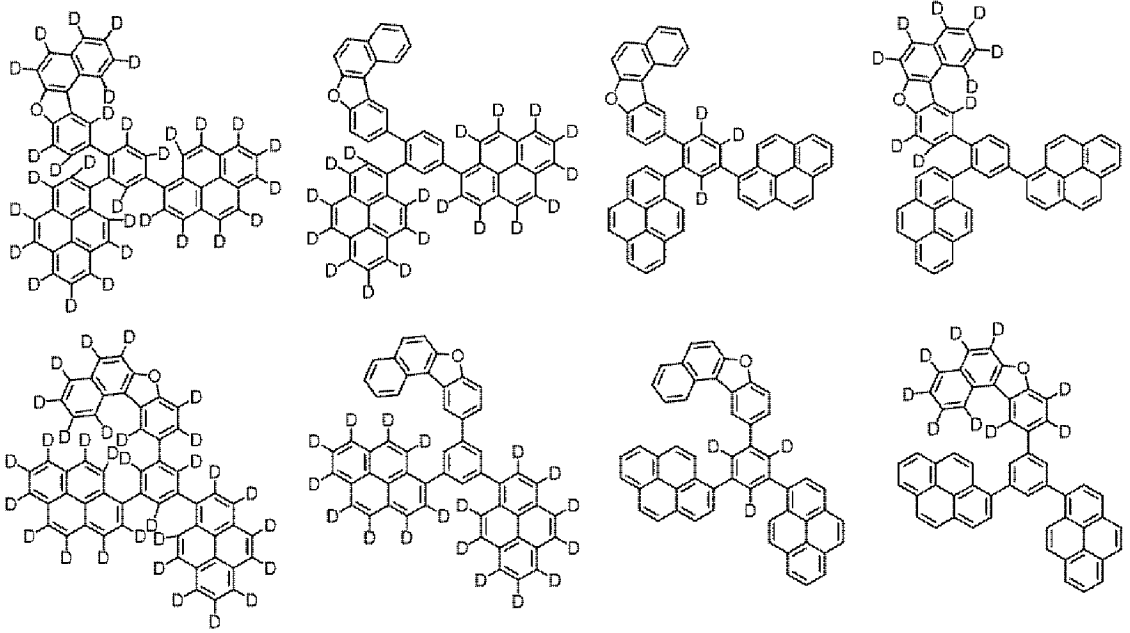
[0507] [化126]



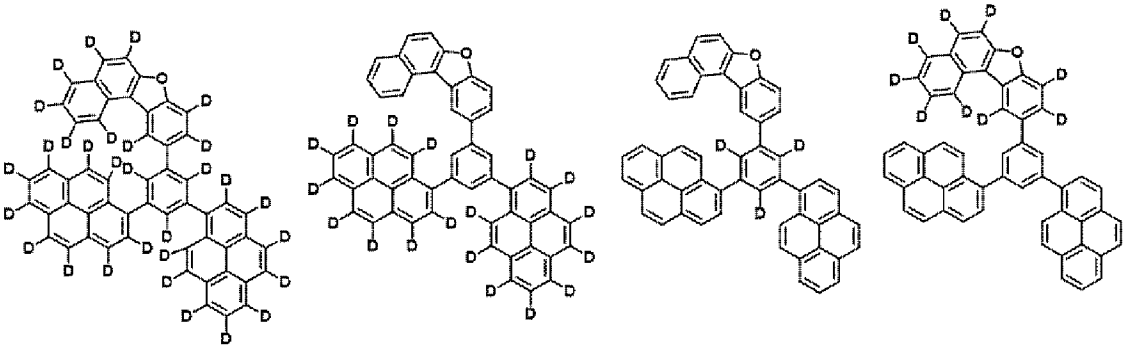
[0508] [化127]



[0509] [化128]

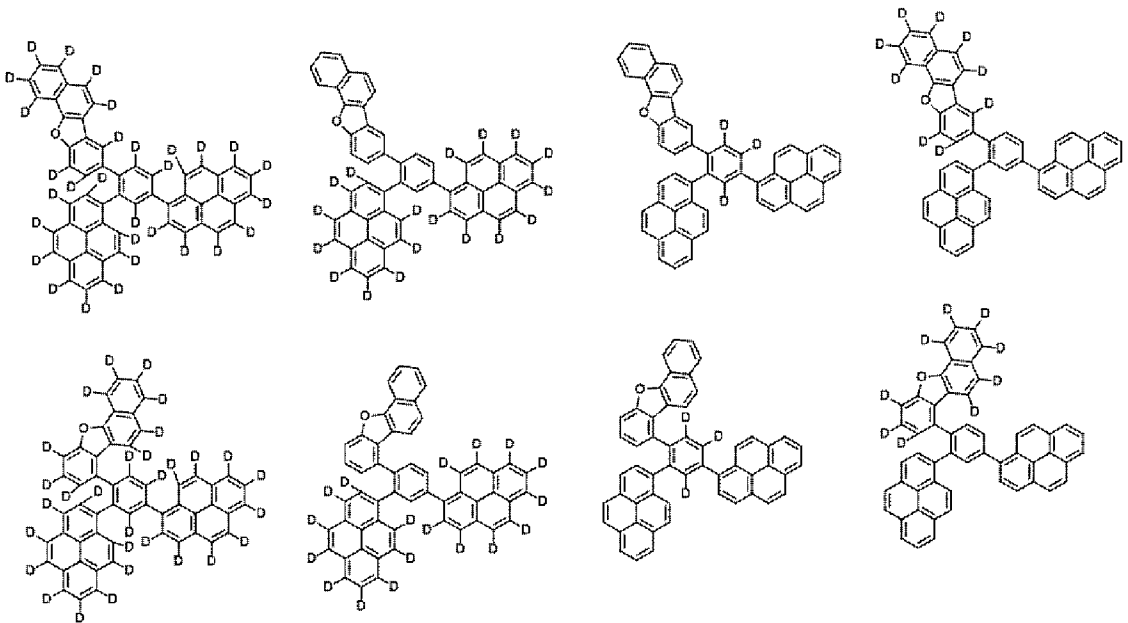


[0510] [化129]

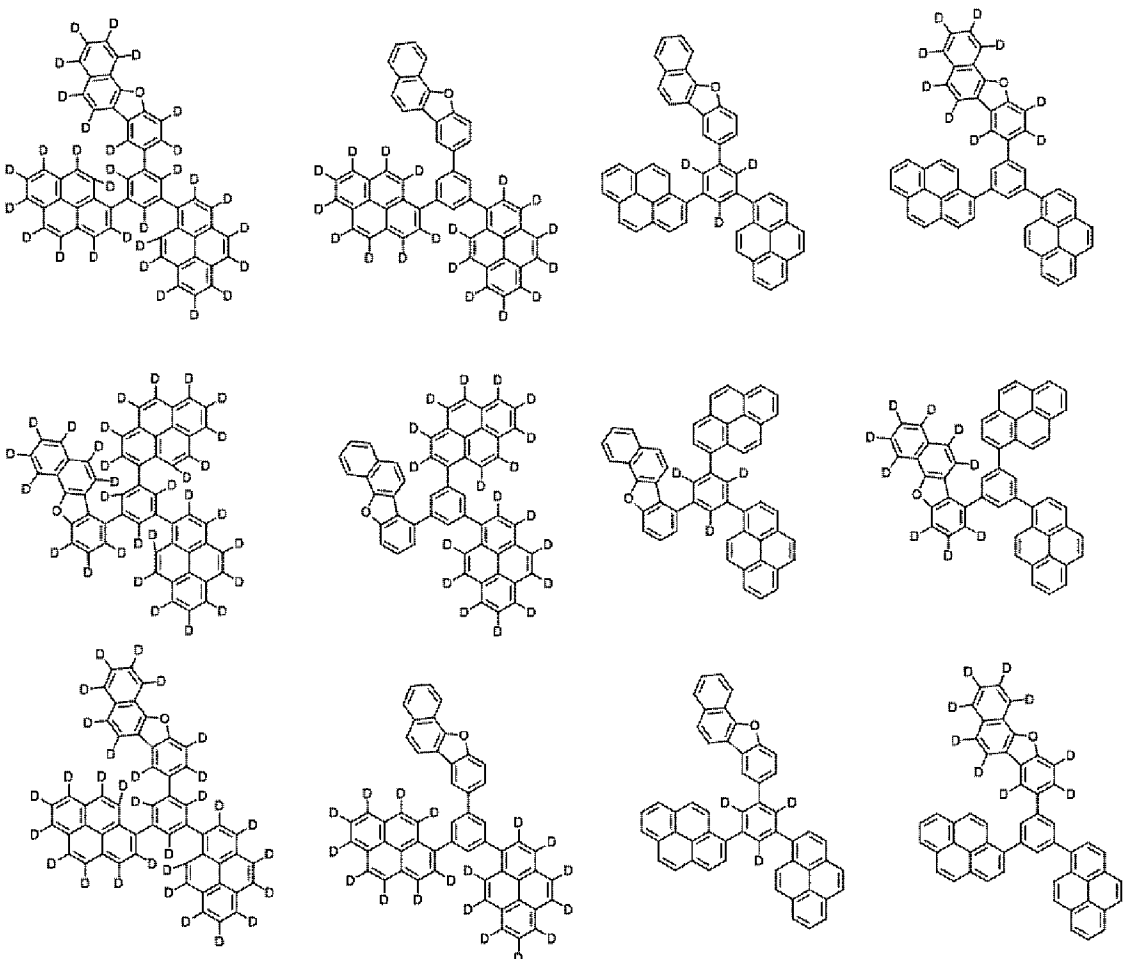


[0511]

[化130]

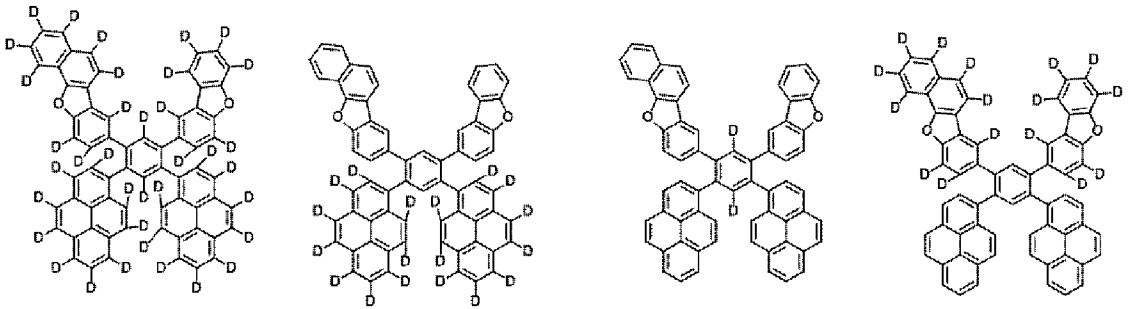


[0512] [化131]

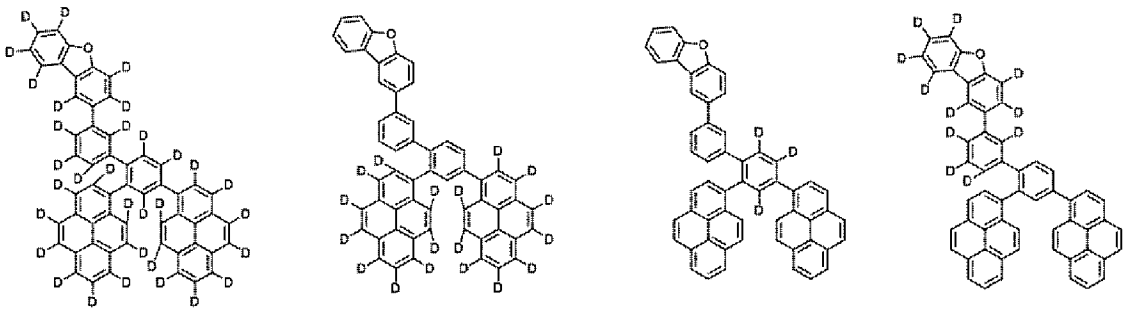


[0513]

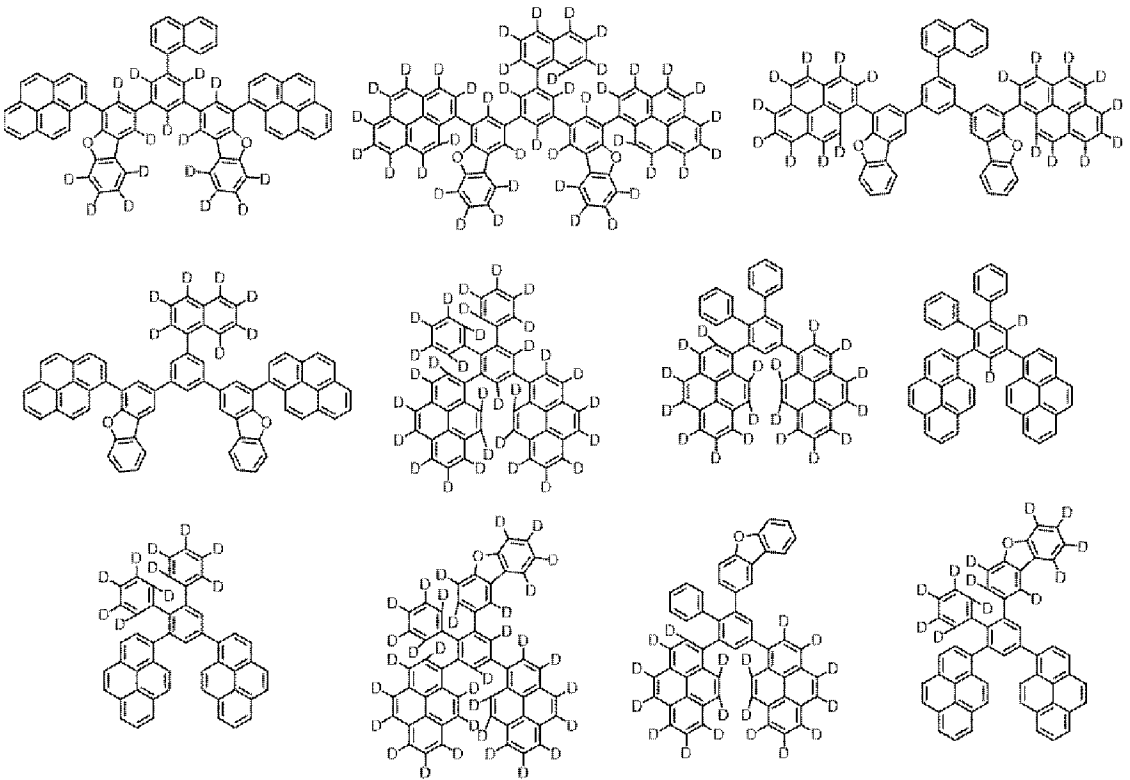
[化132]



[0514] [化133]

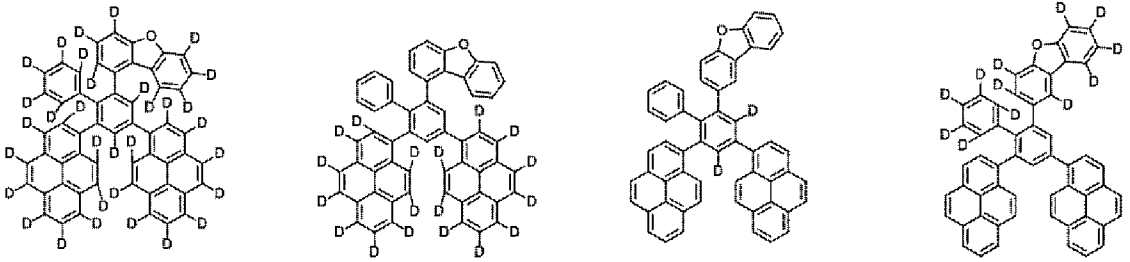


[0515] [化134]

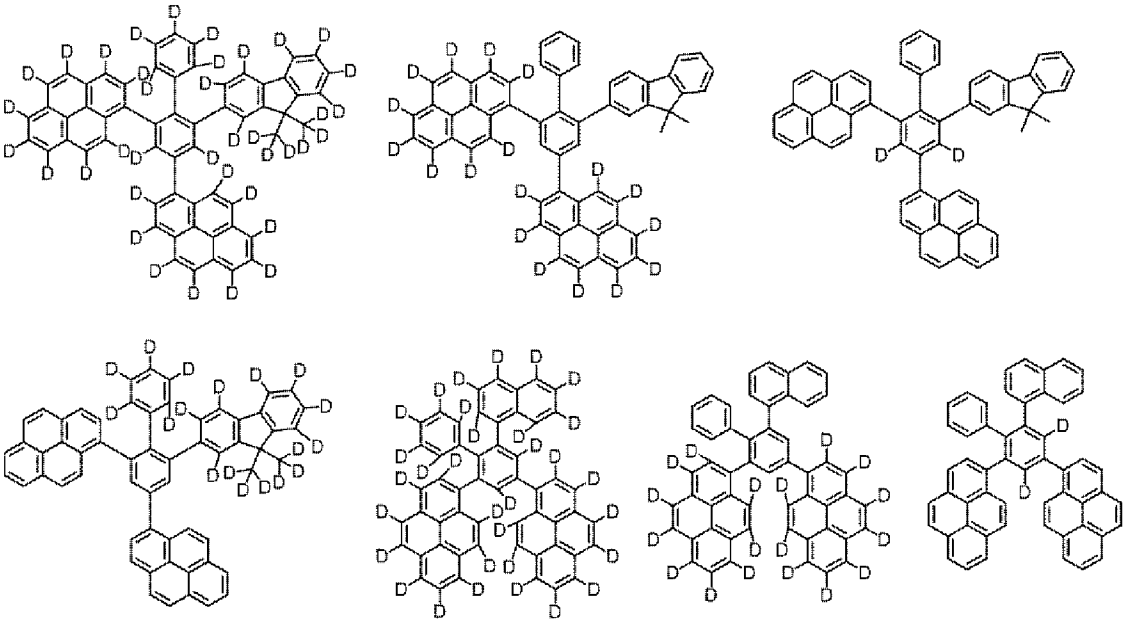


[0516]

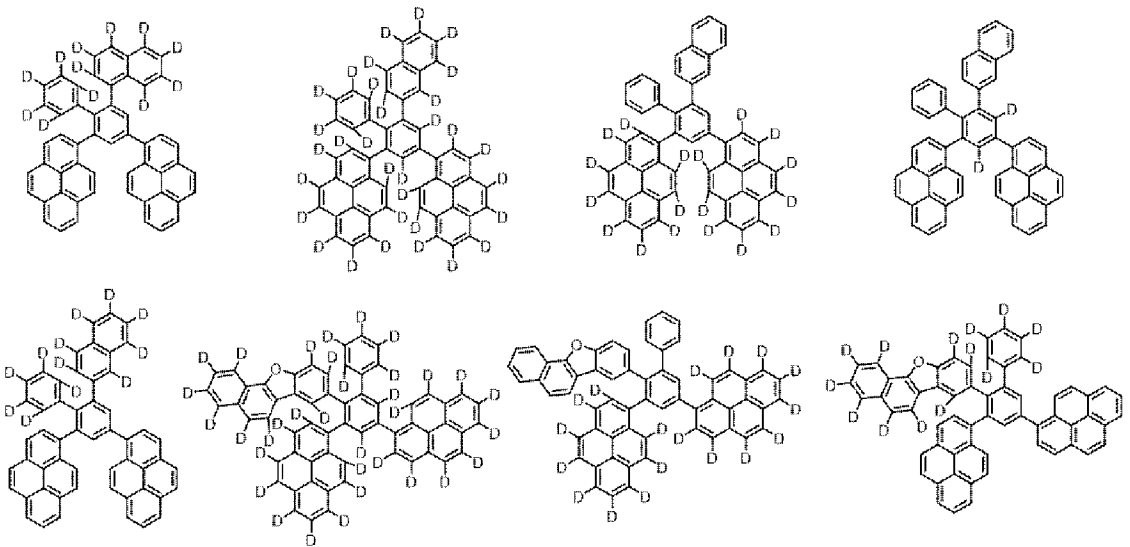
[化135]



[0517] [化136]

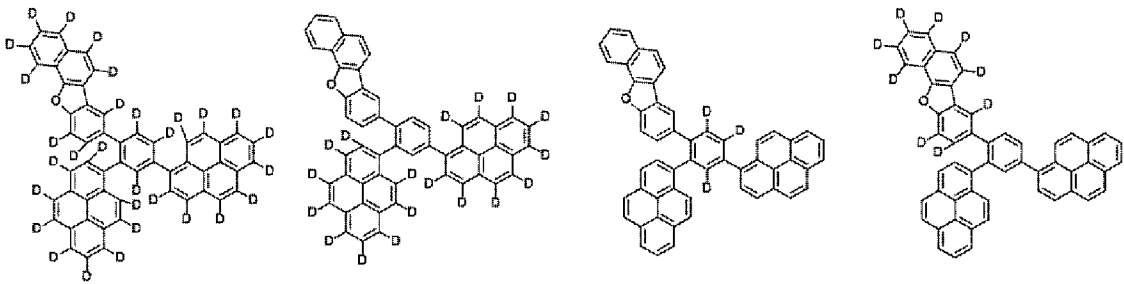


[0518] [化137]

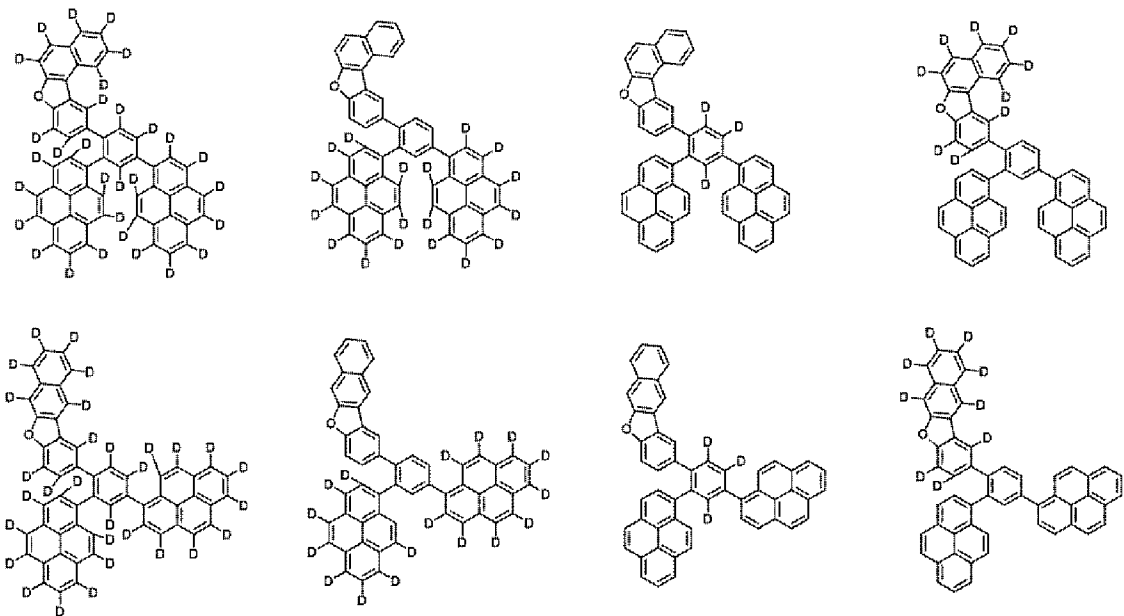


[0519]

[化138]

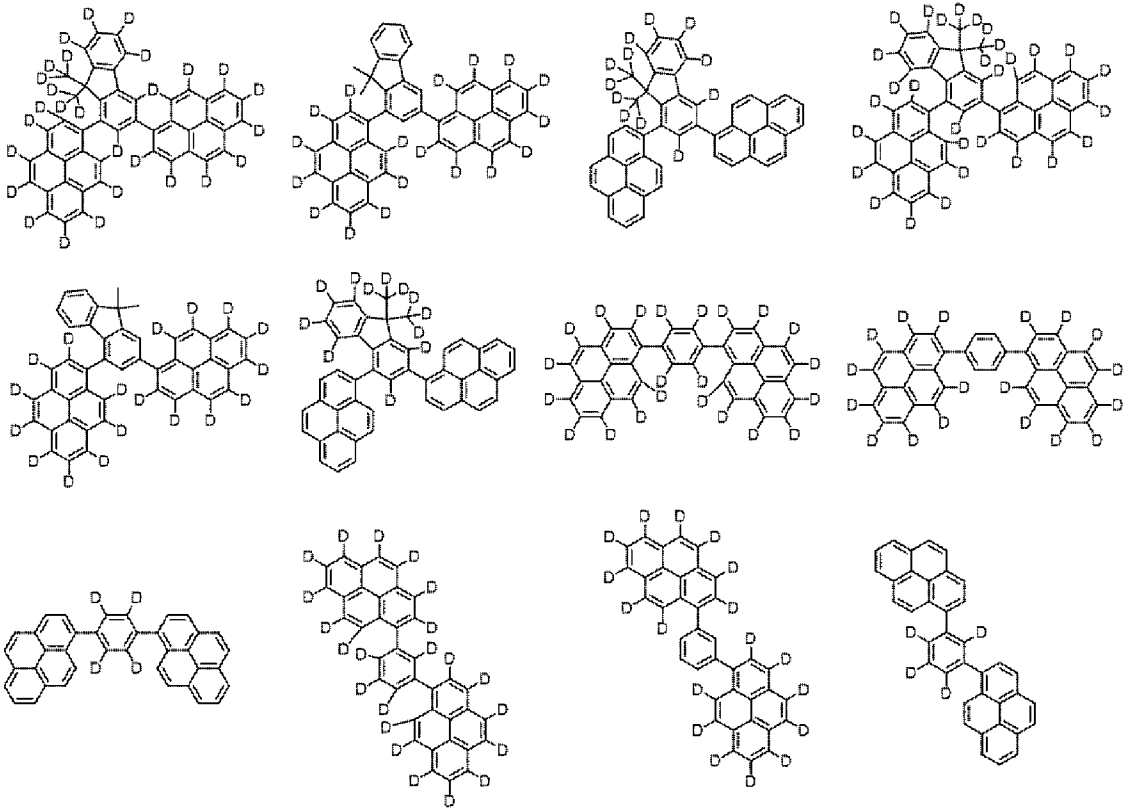


[0520] [化139]

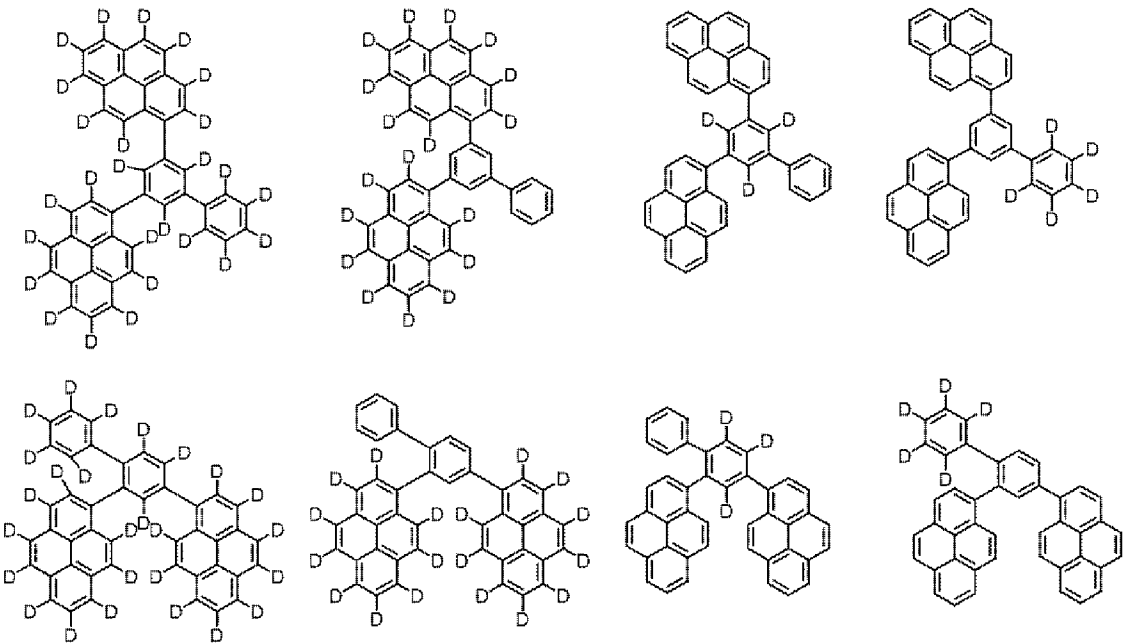


[0521]

[化140]

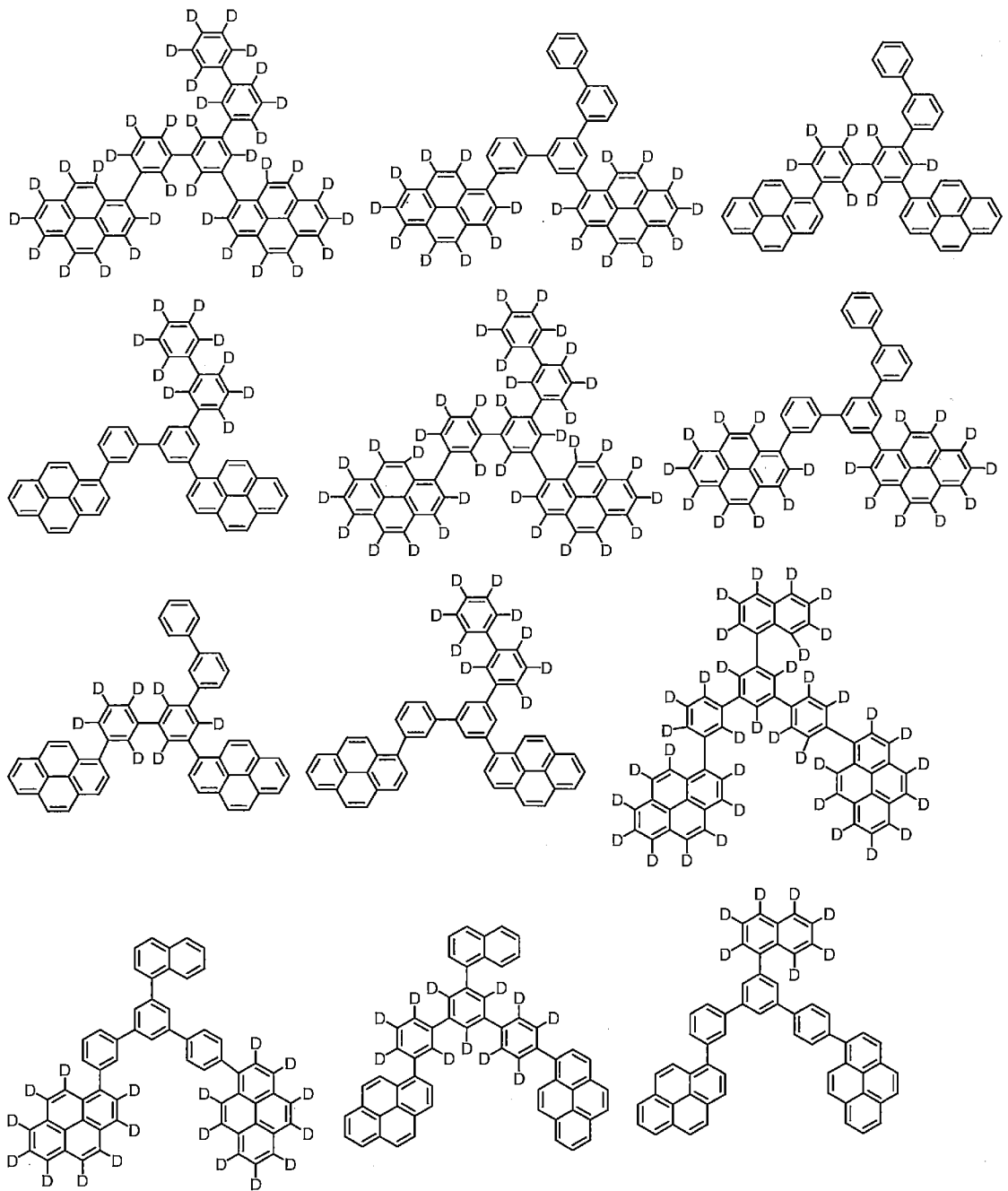


[0522] [化141]



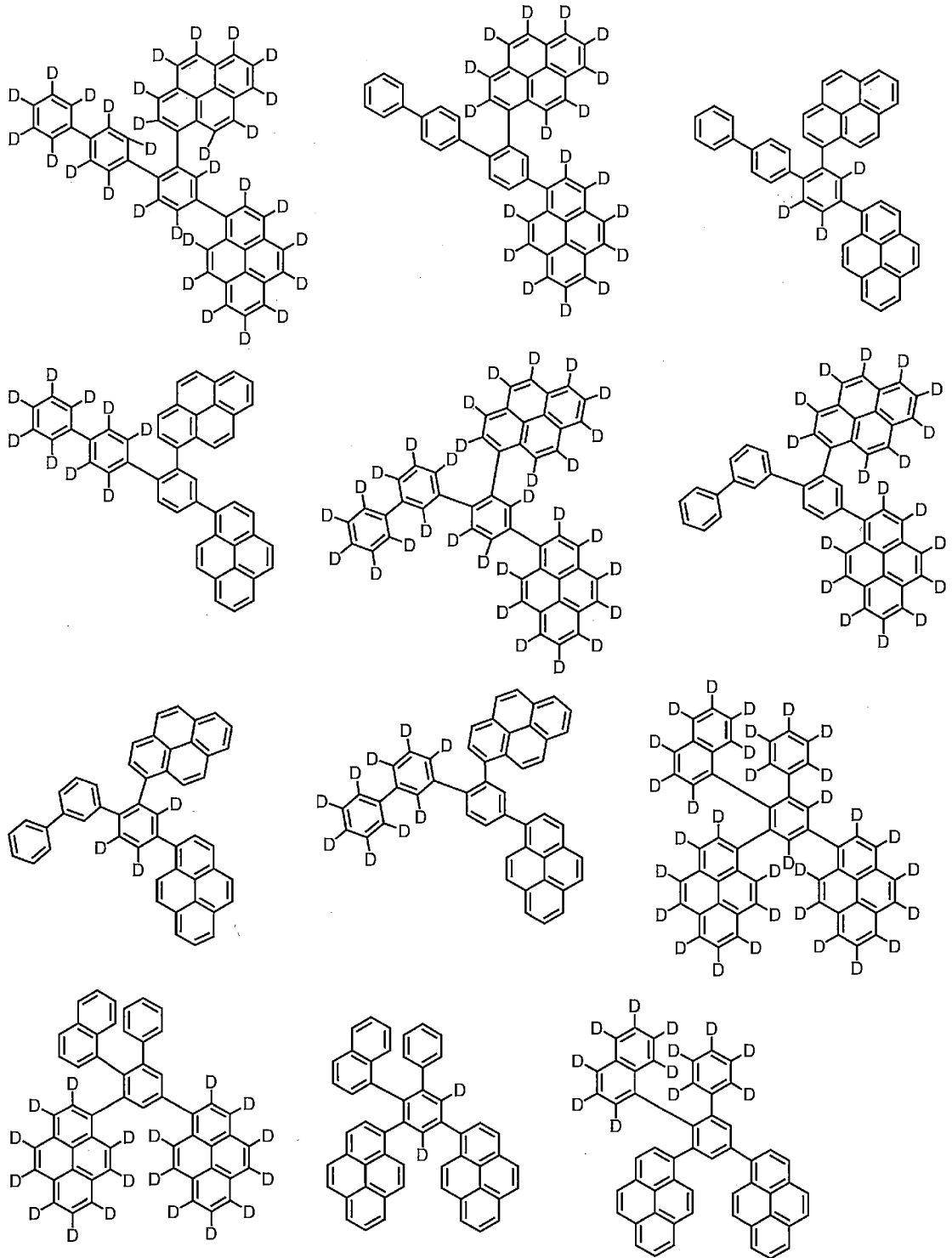
[0523]

[化142]



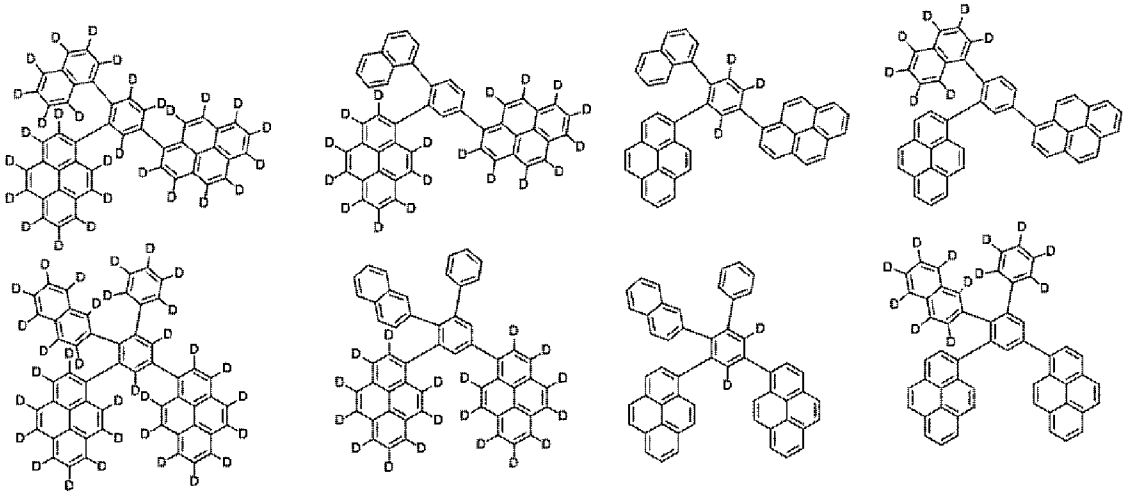
[0524]

[化143]

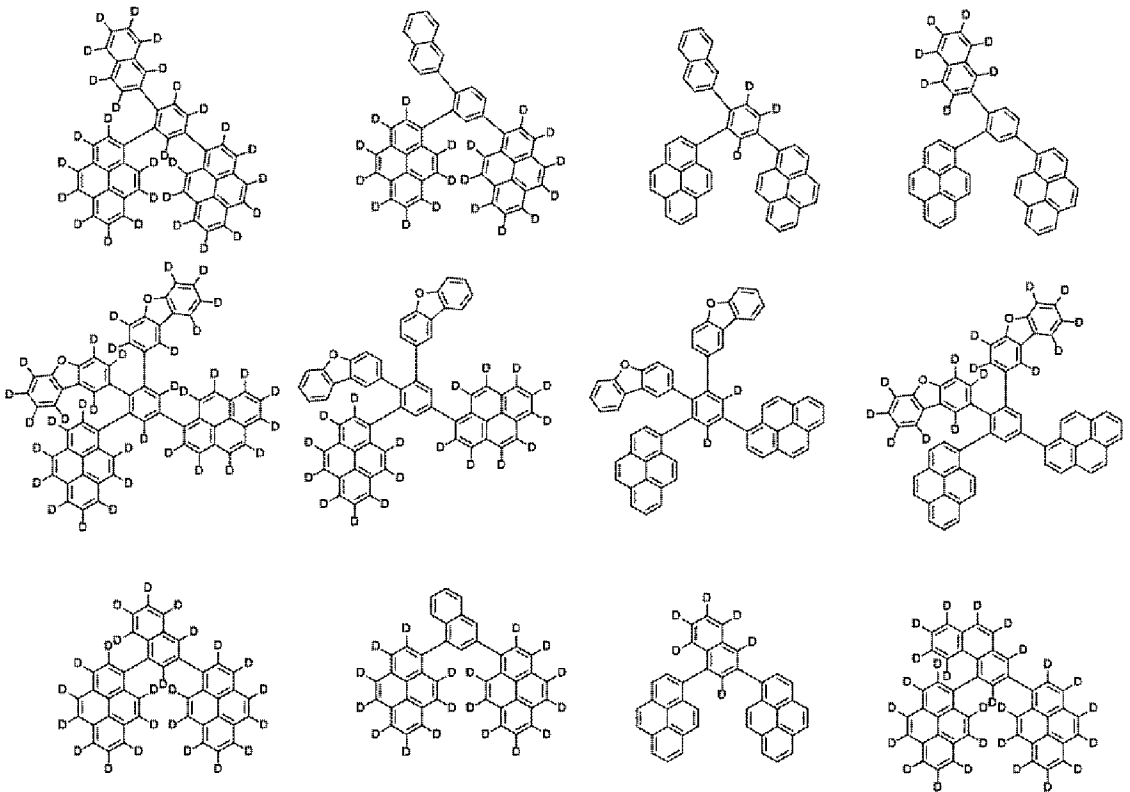


[0525]

[化144]

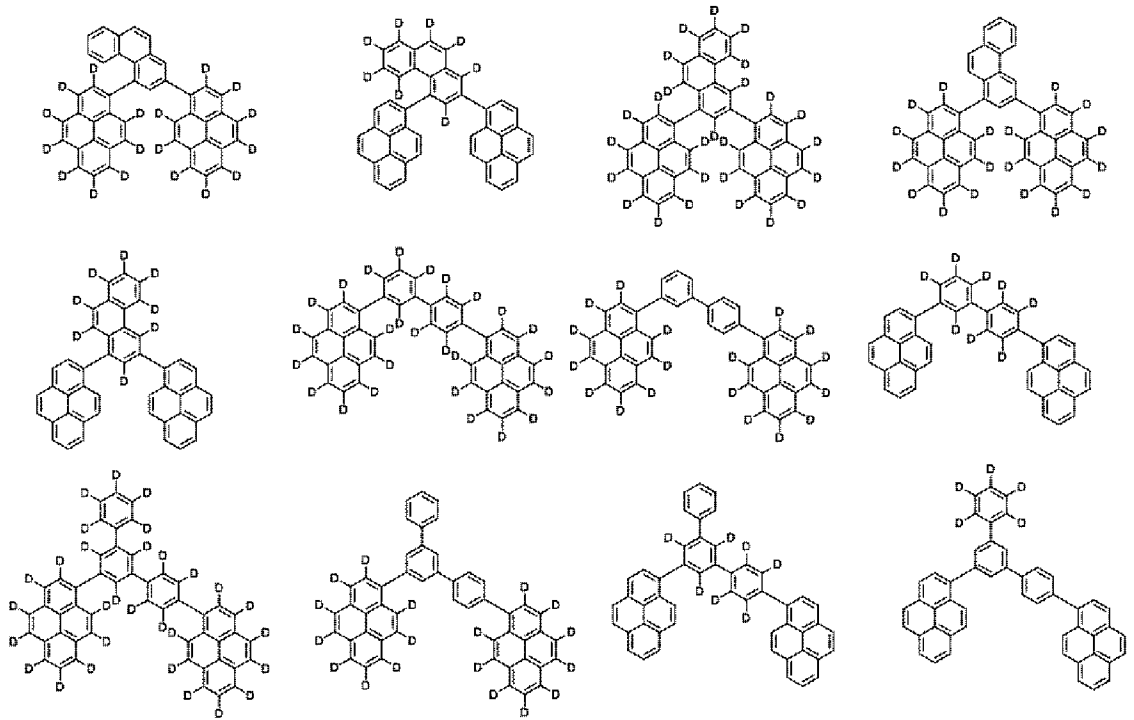


[0526] [化145]

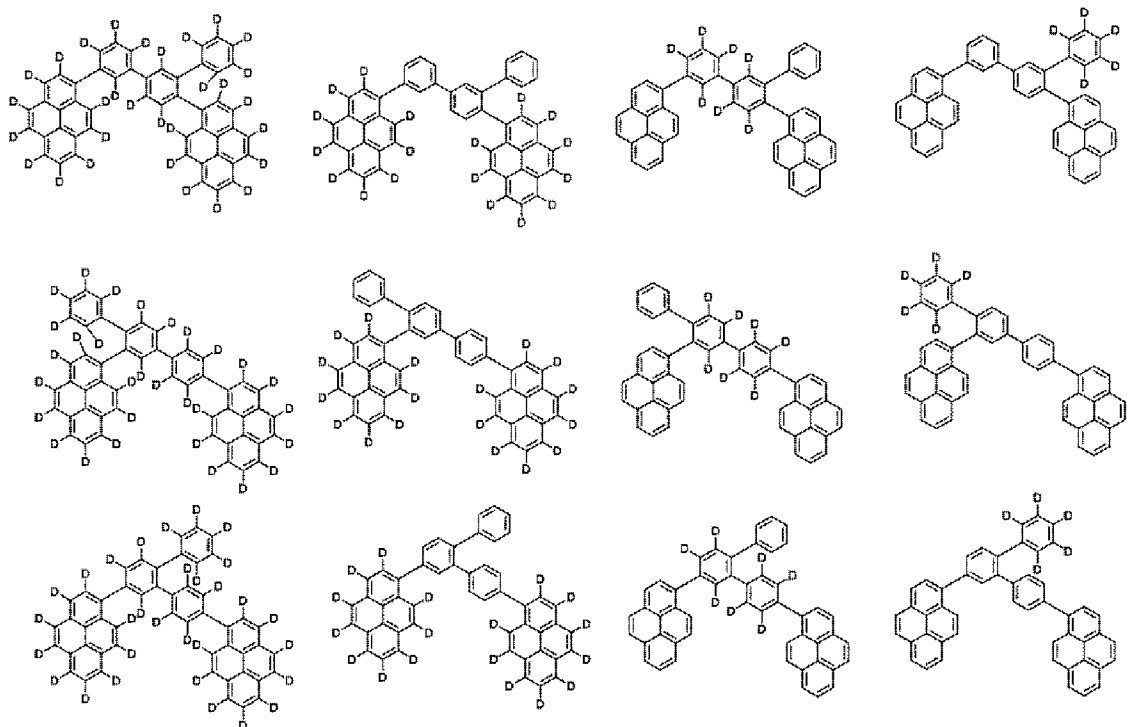


[0527]

[化146]

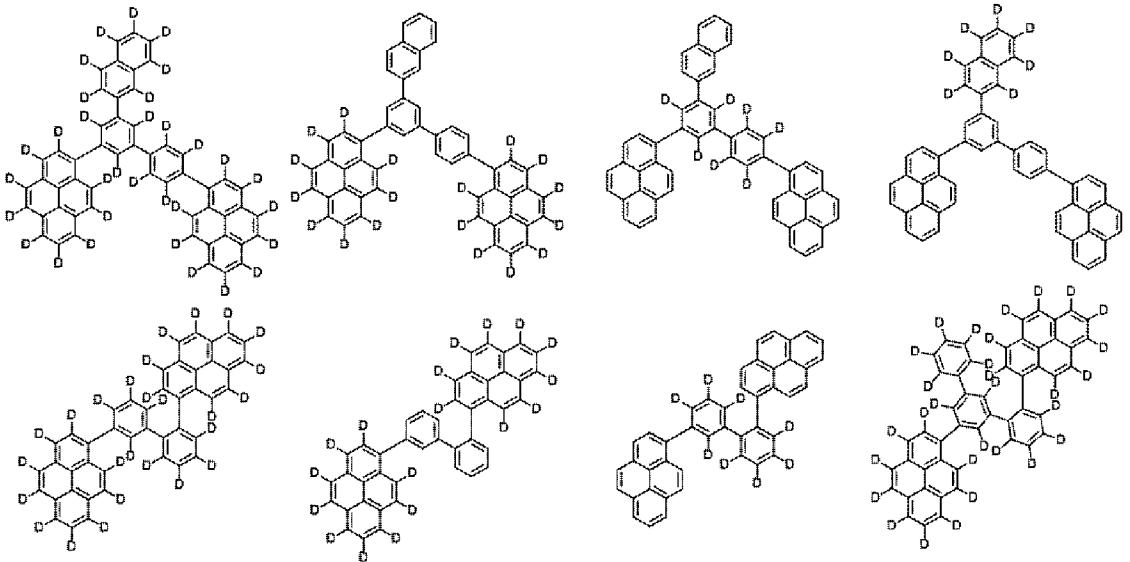


[0528] [化147]

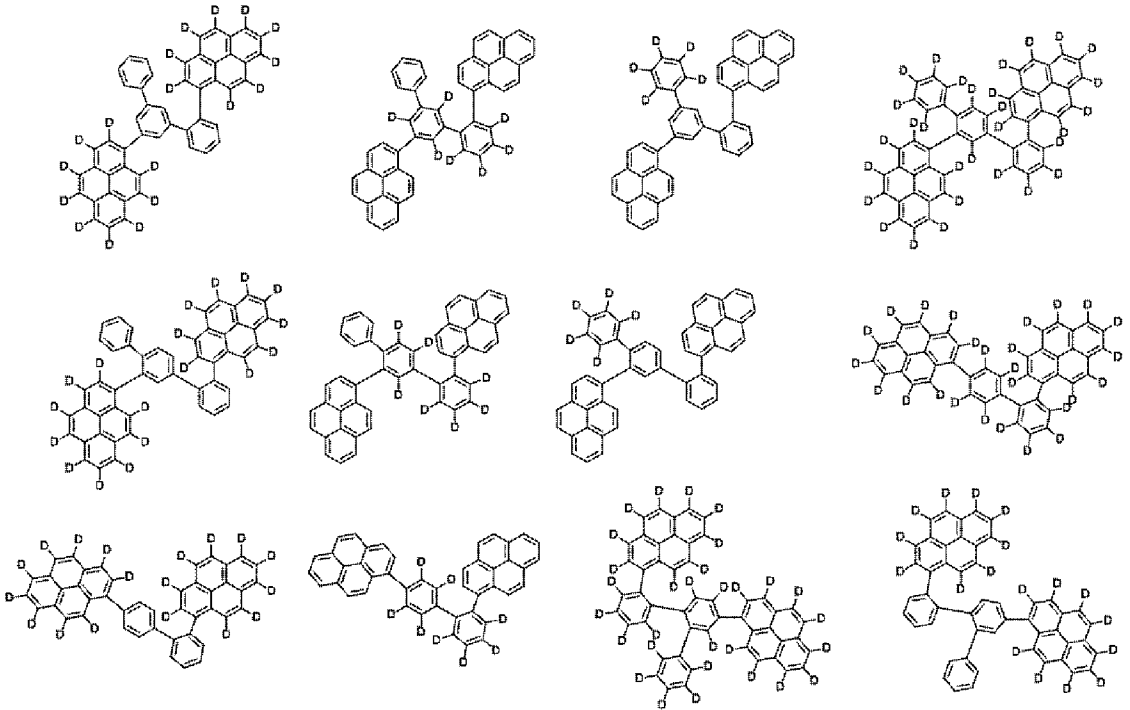


[0529]

[化148]

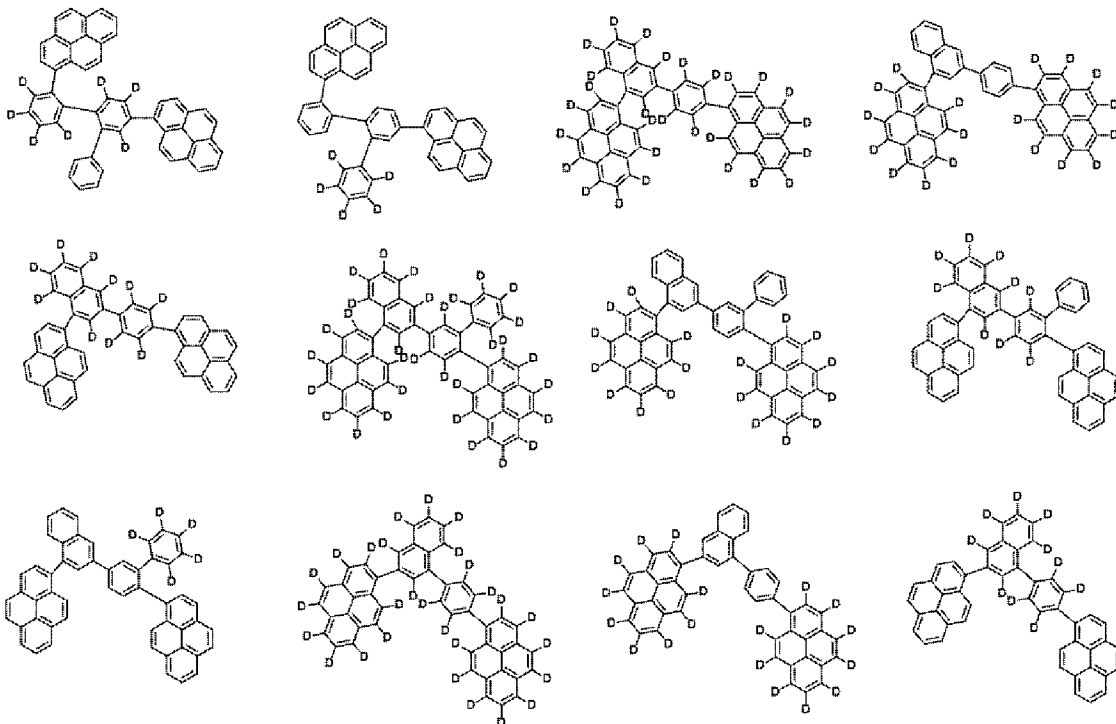


[0530] [化149]

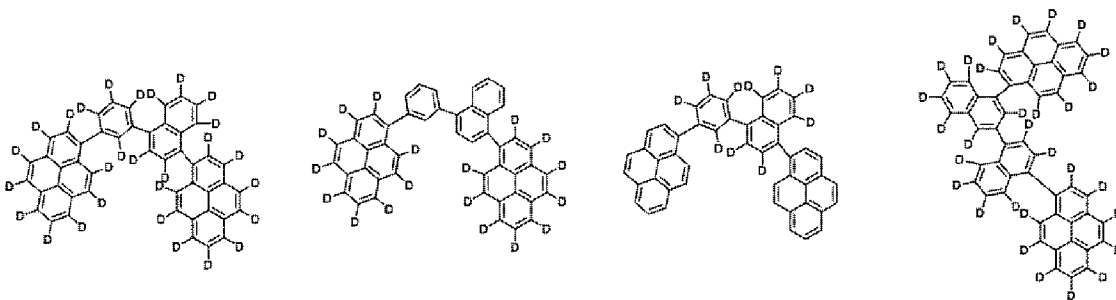


[0531]

[化150]

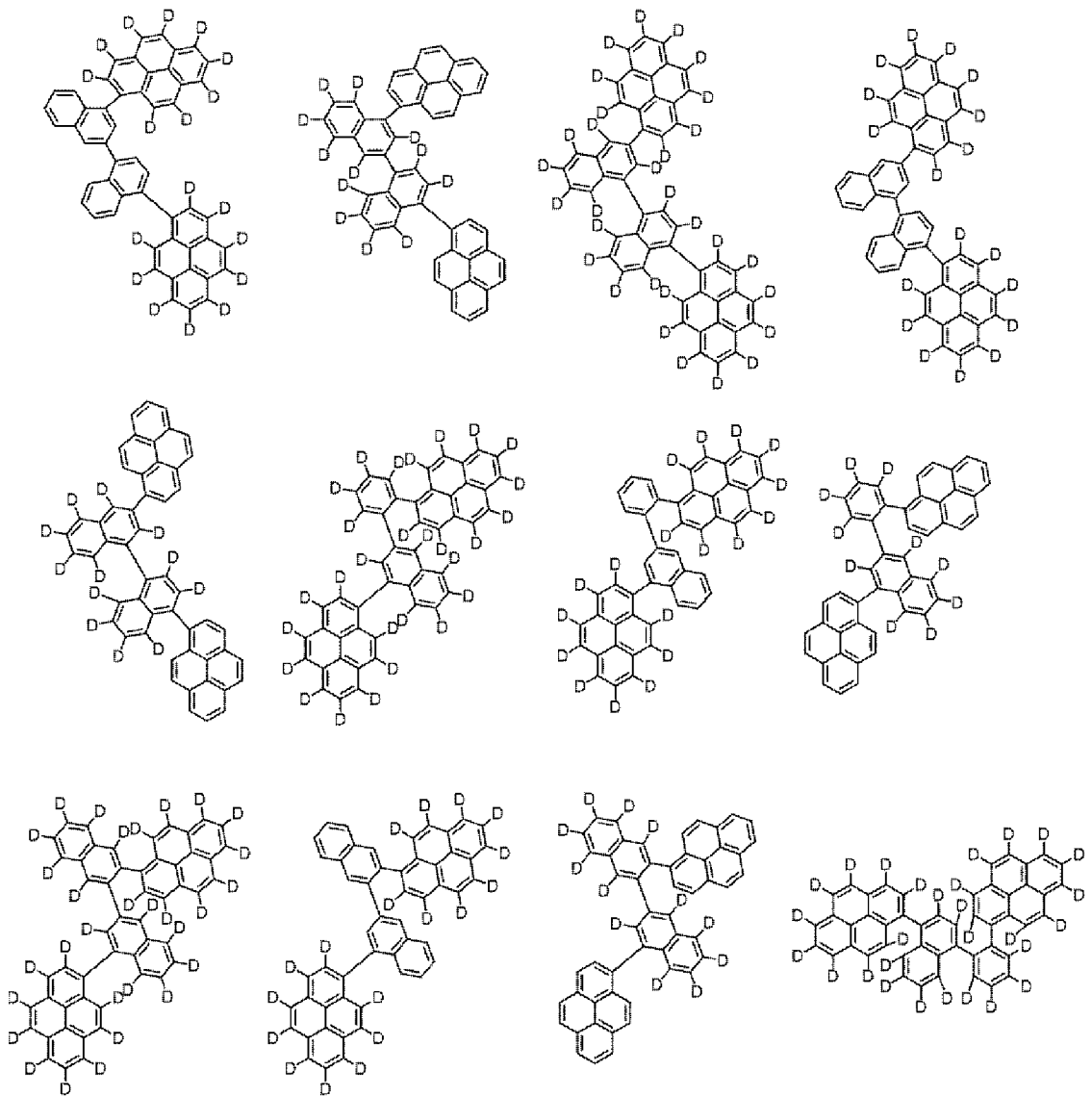


[0532] [化151]



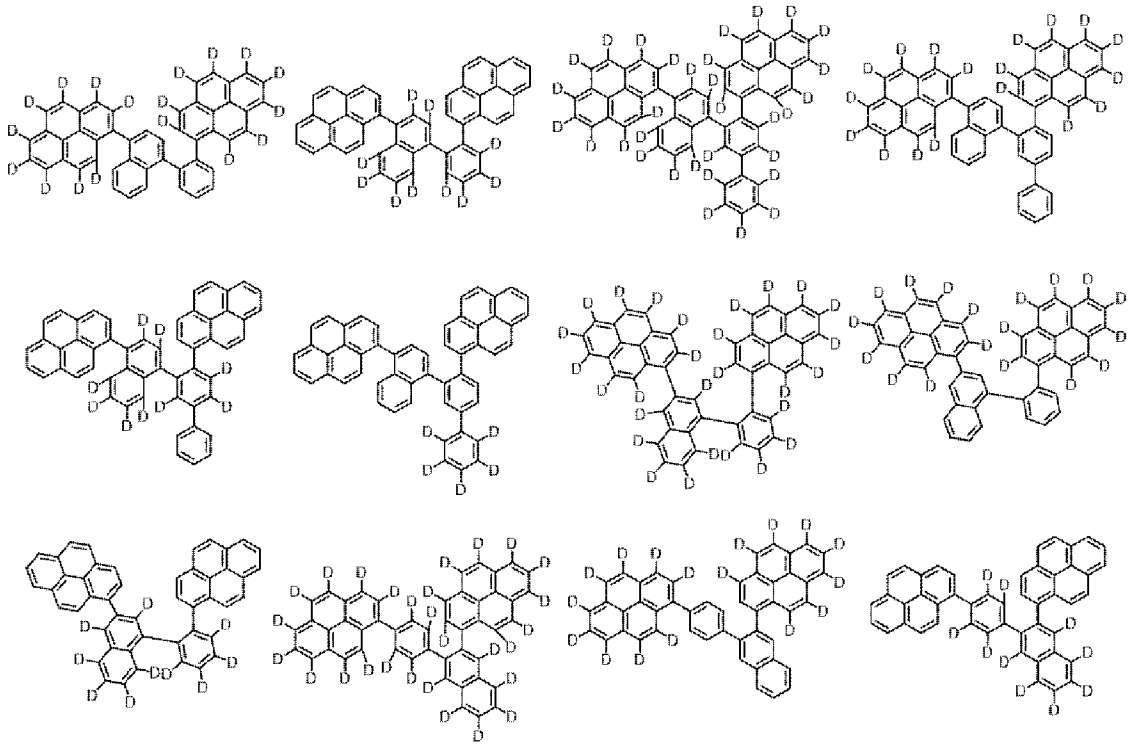
[0533]

[化152]

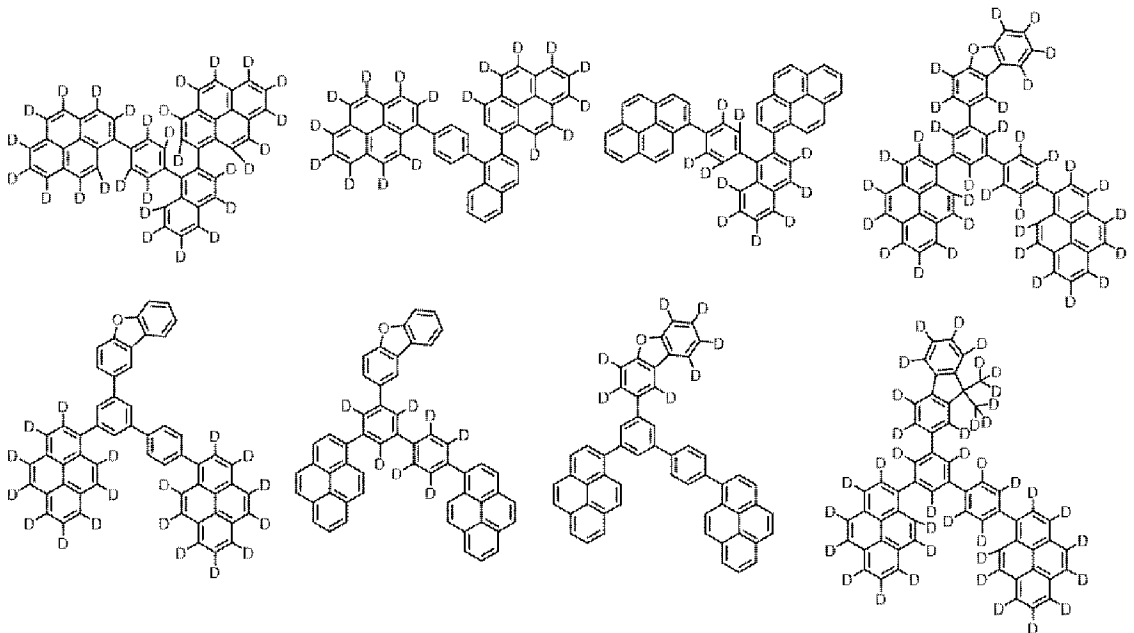


[0534]

[化153]

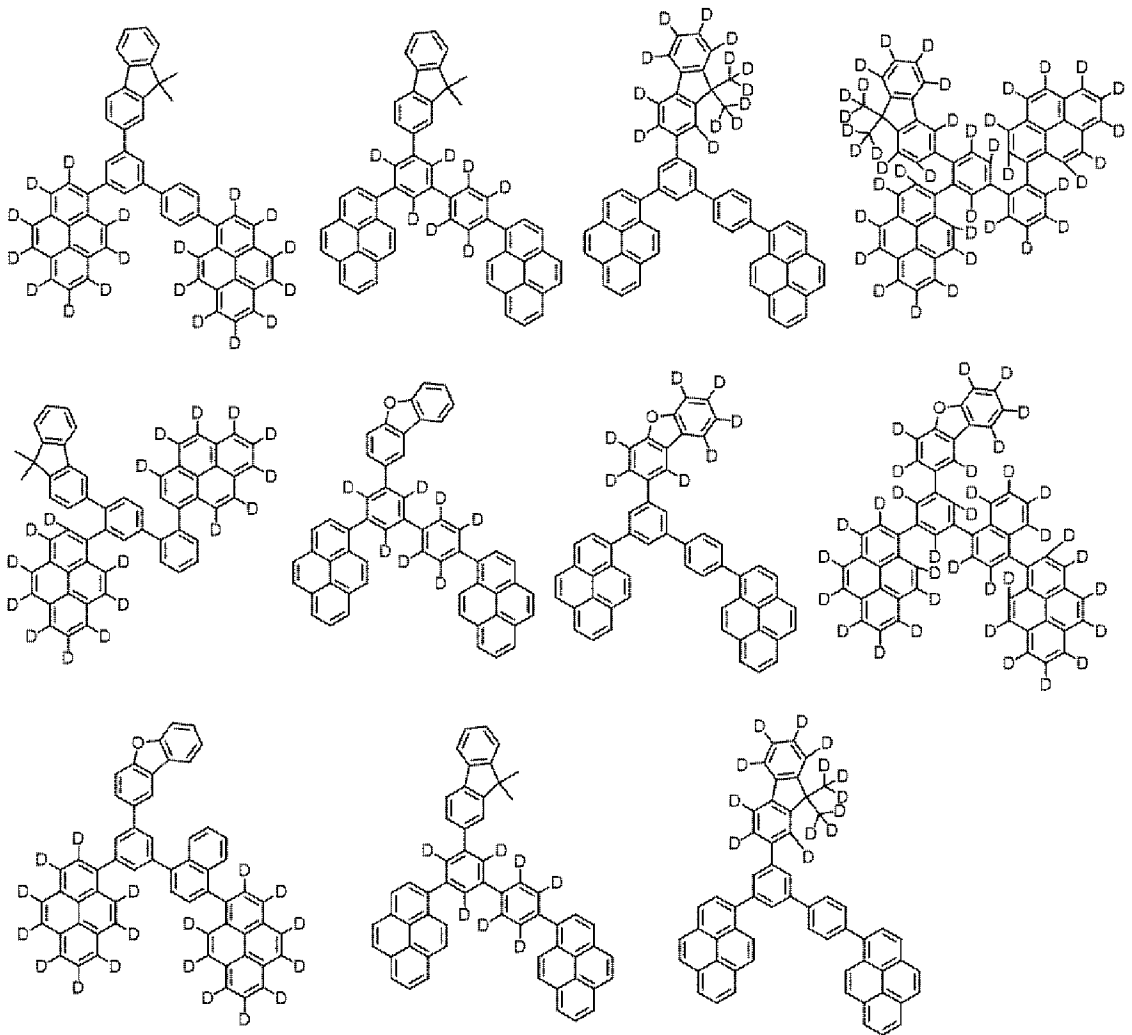


[0535] [化154]



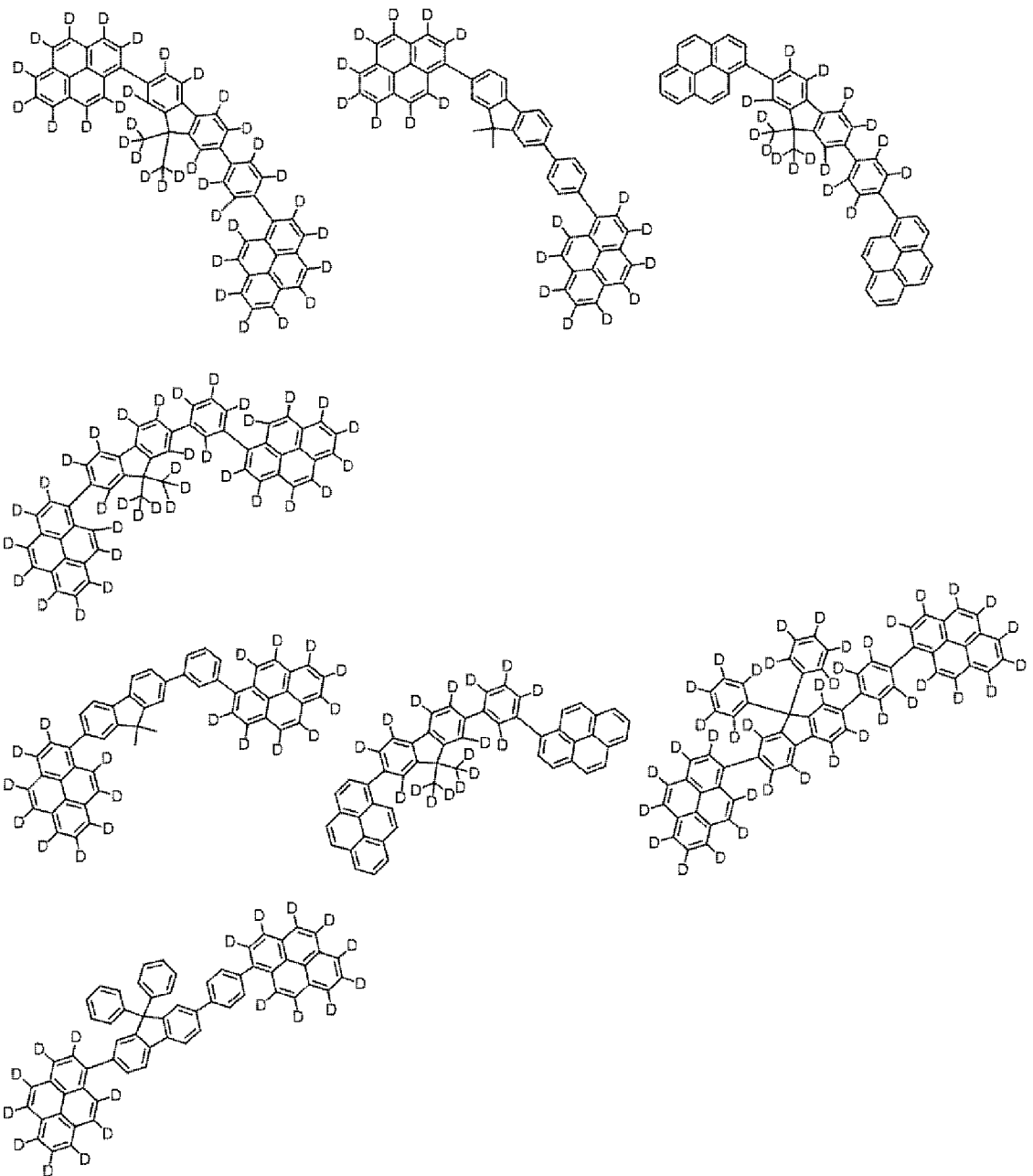
[0536]

[化155]



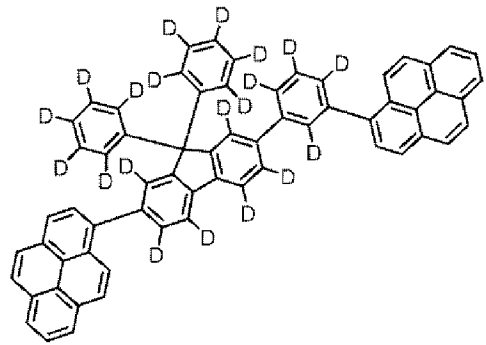
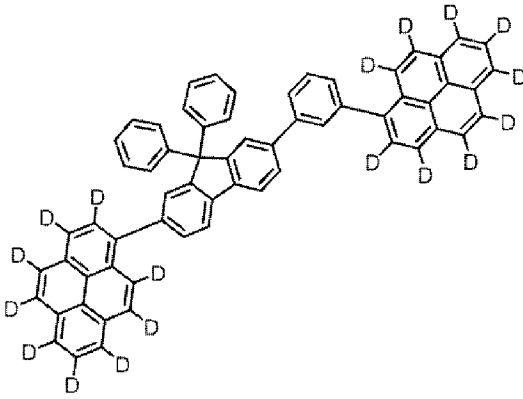
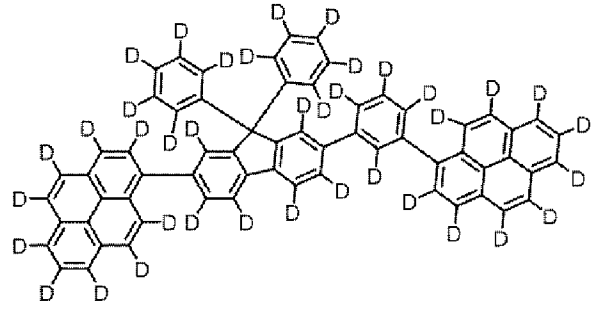
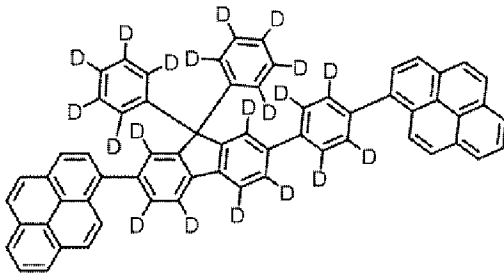
[0537]

[化156]

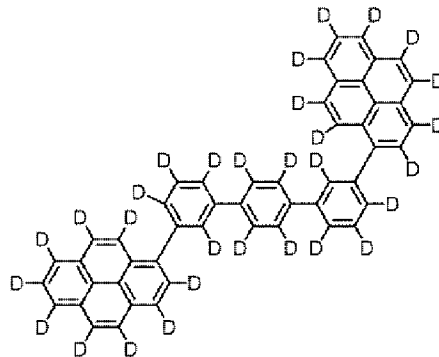
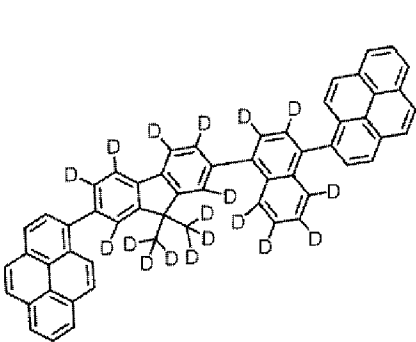
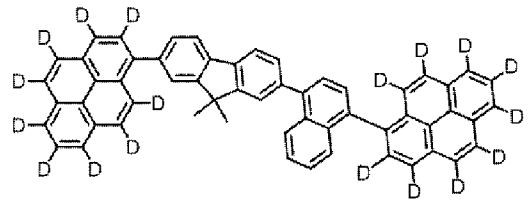
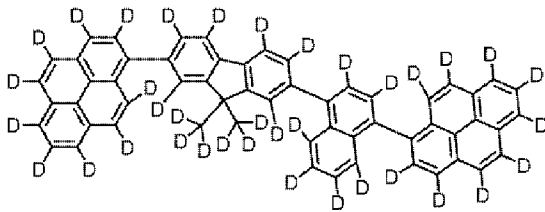


[0538]

[化157]

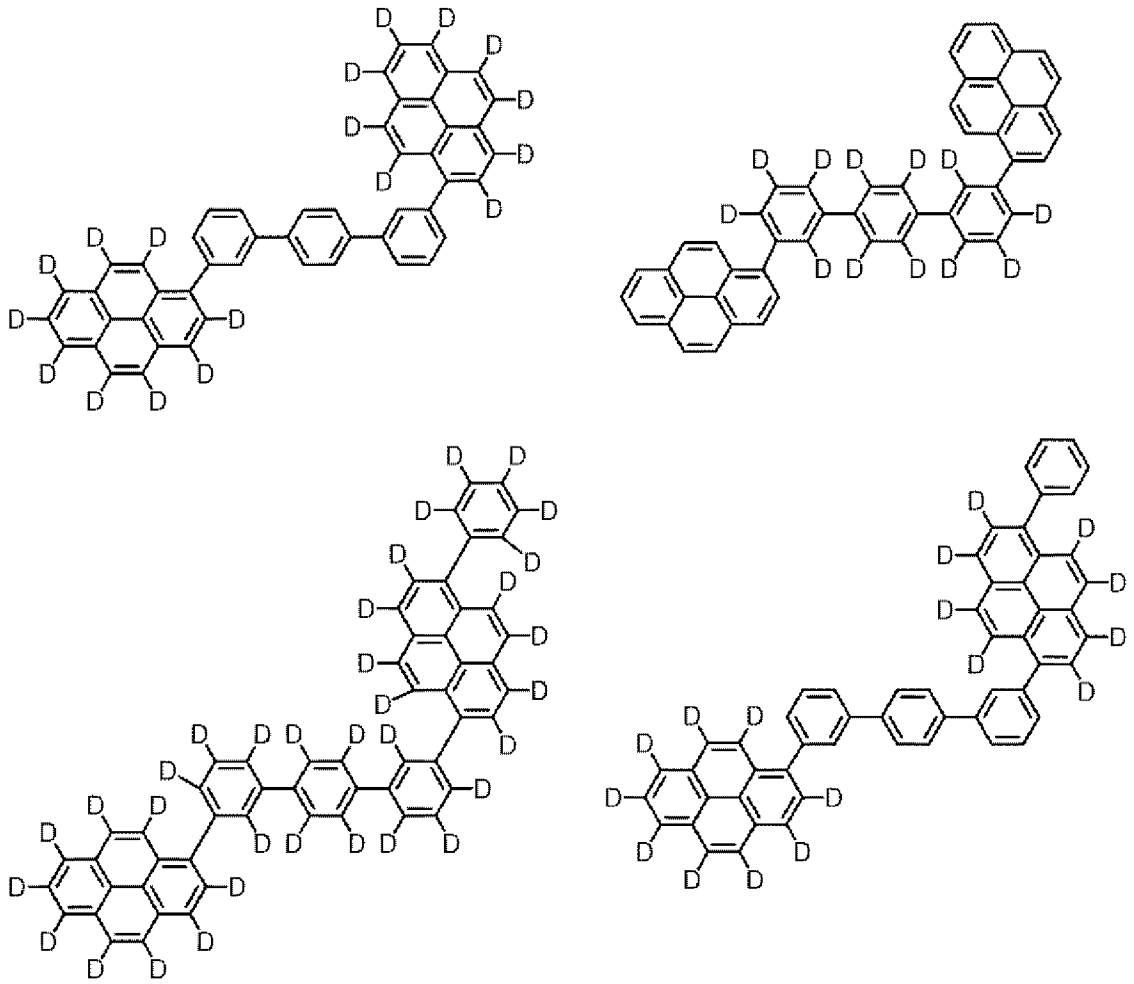


[0539] [化158]

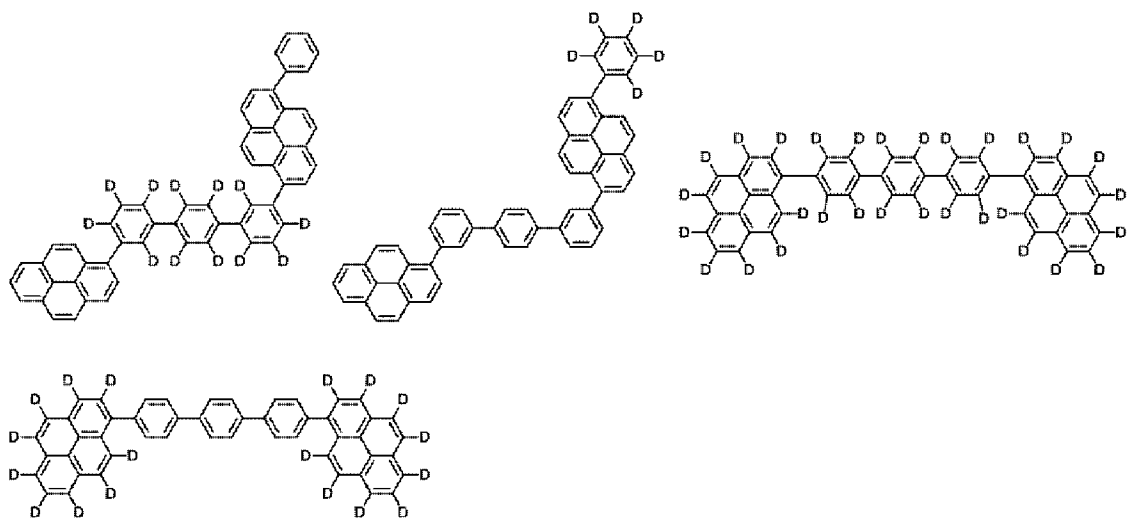


[0540]

[化159]

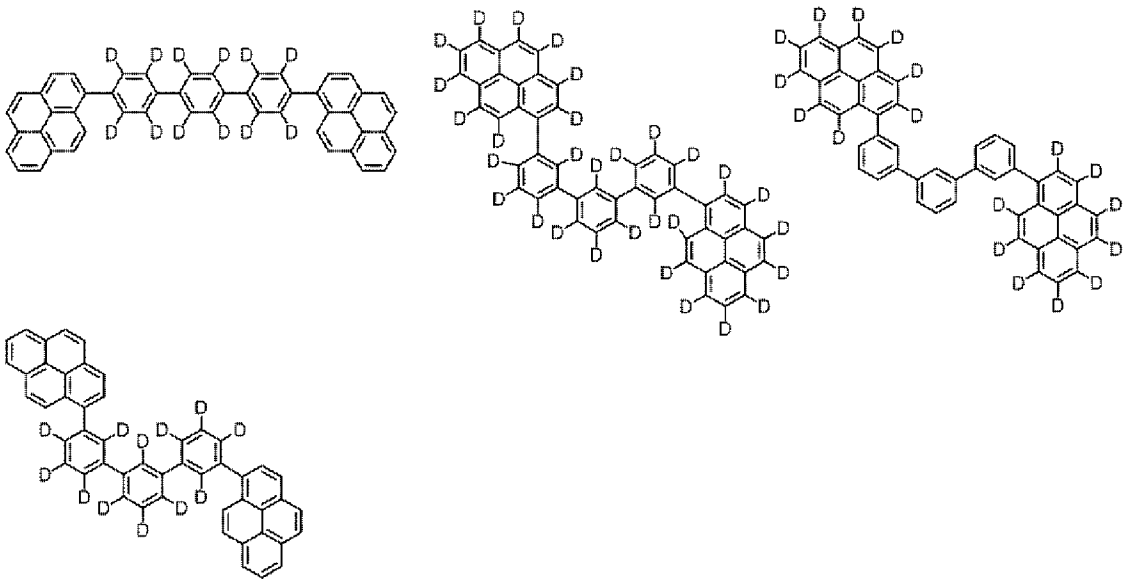


[0541] [化160]

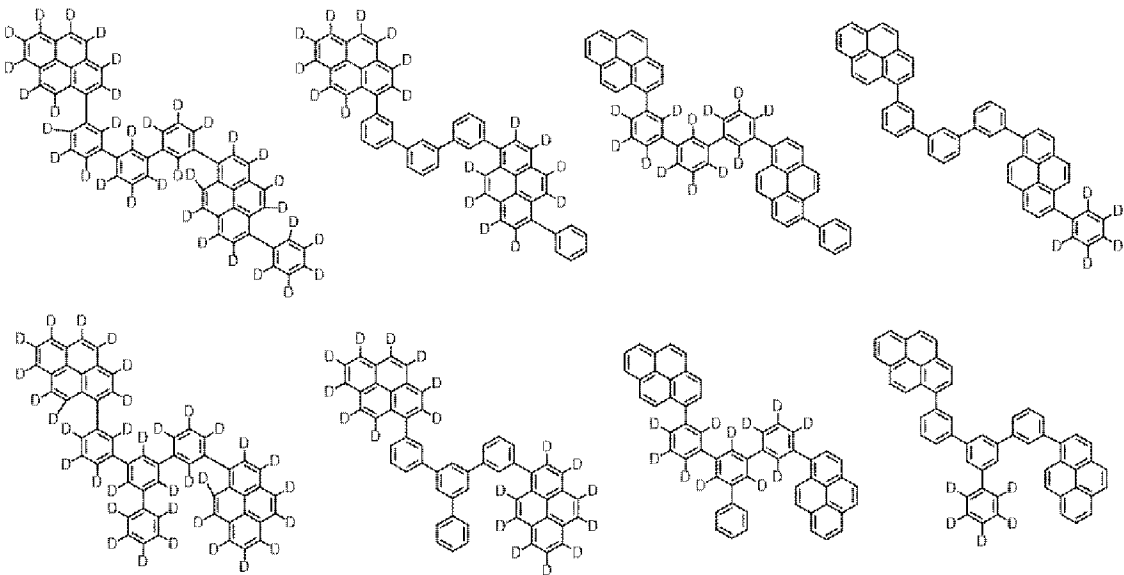


[0542]

[化161]

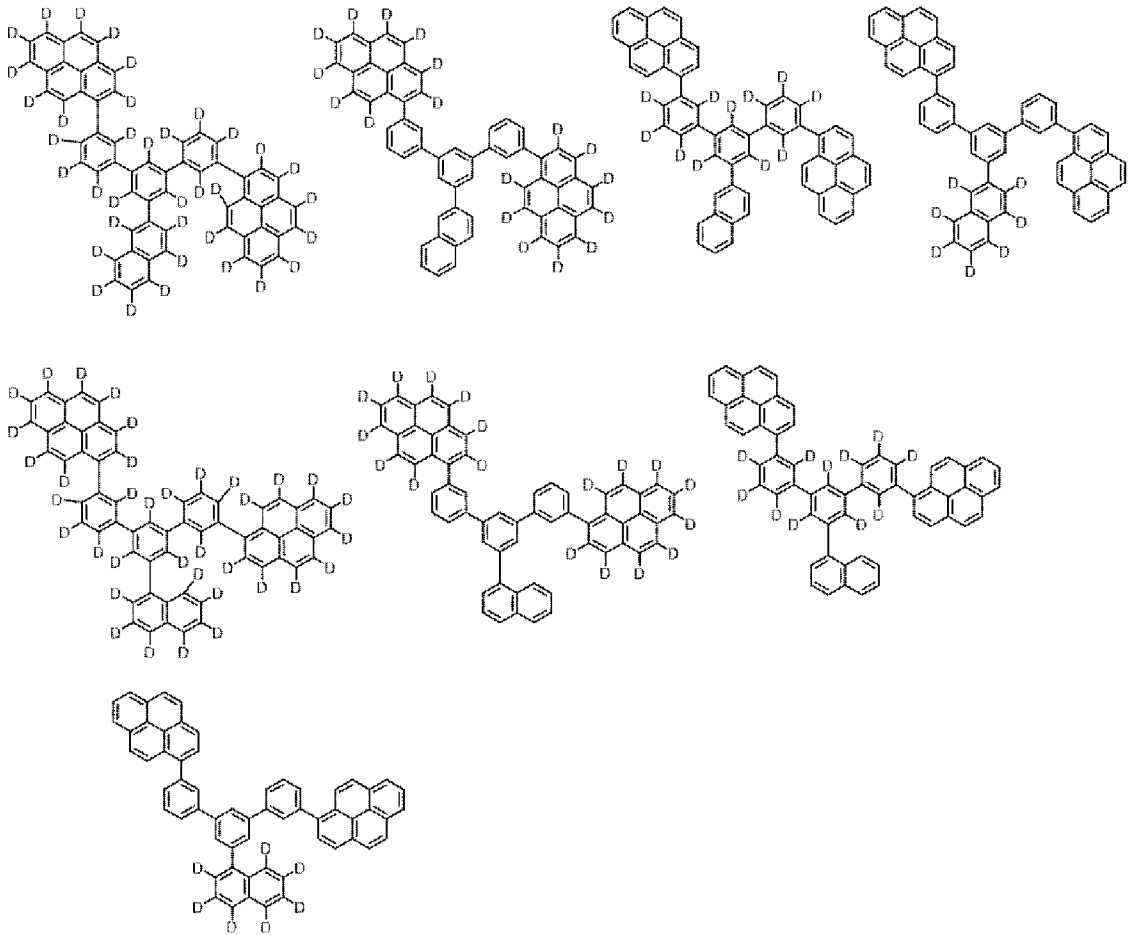


[0543] [化162]



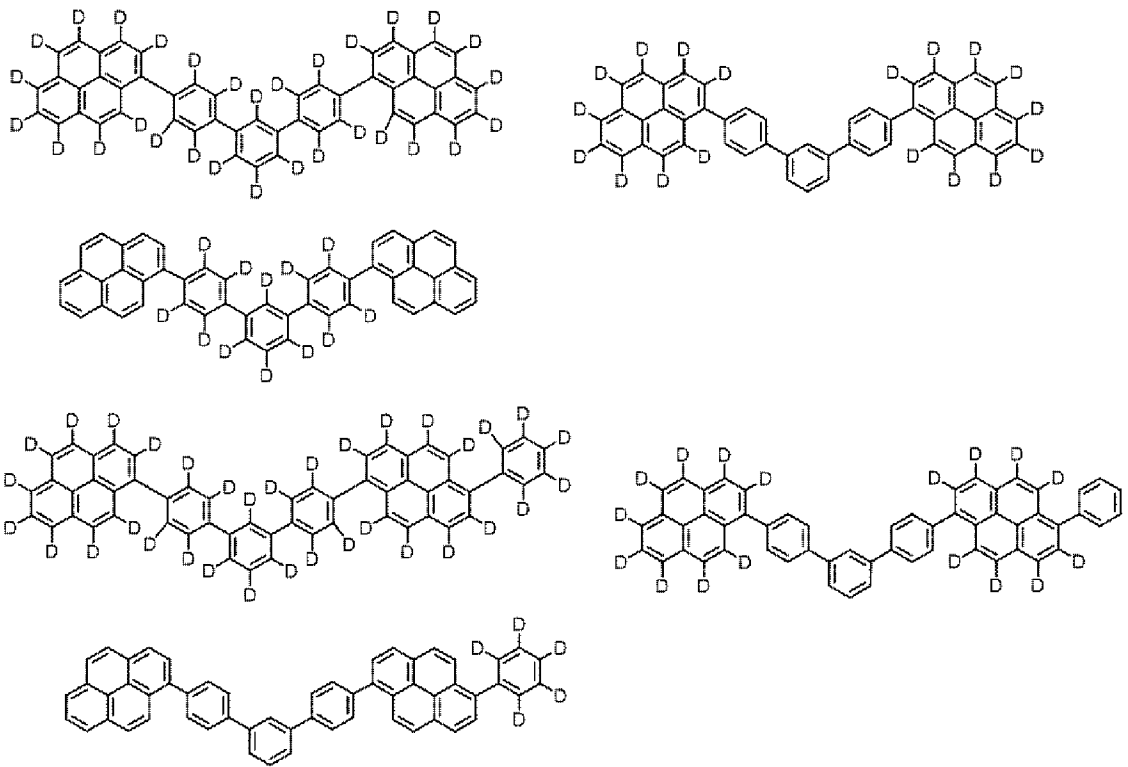
[0544]

[化163]



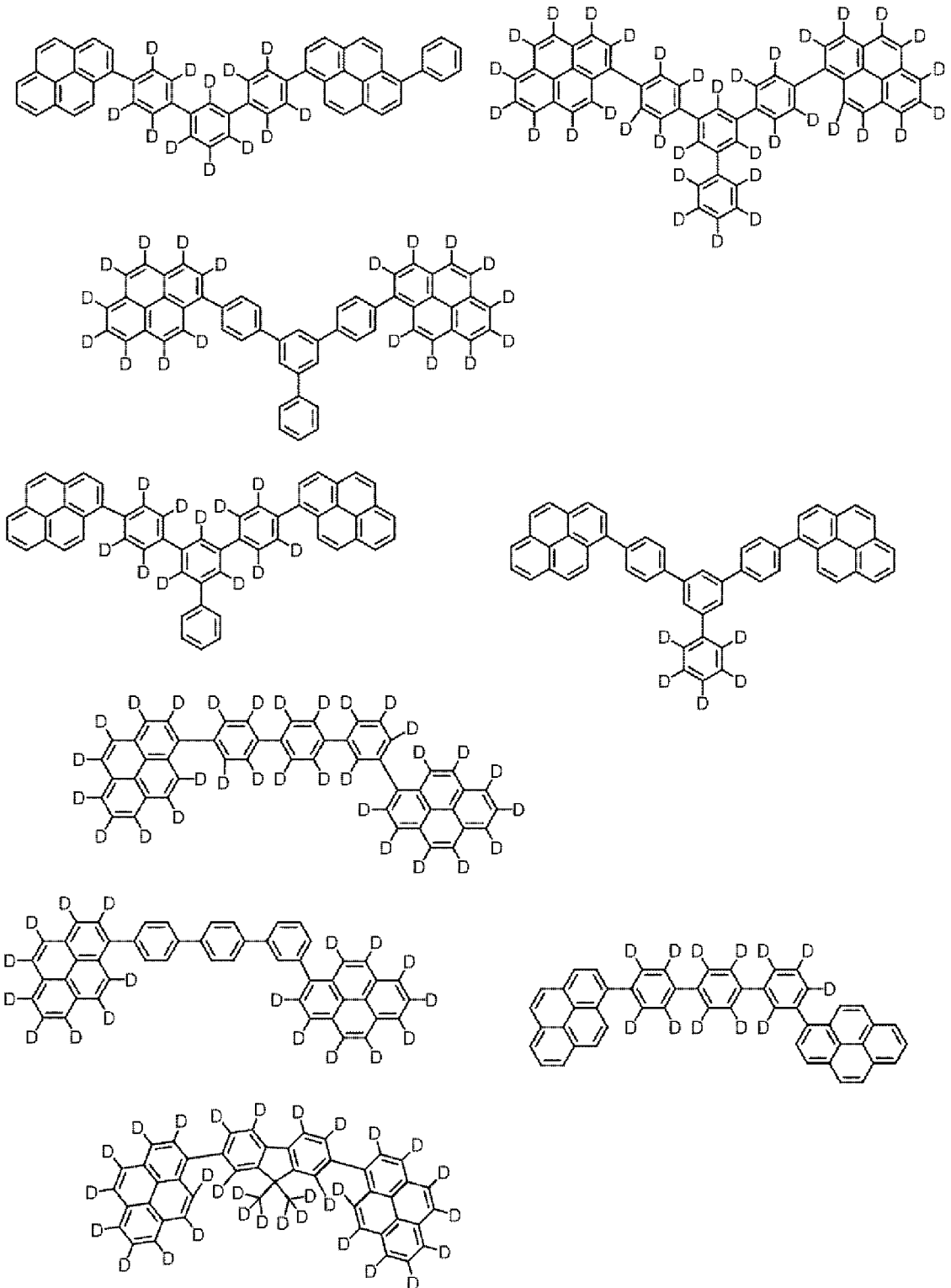
[0545]

[化164]



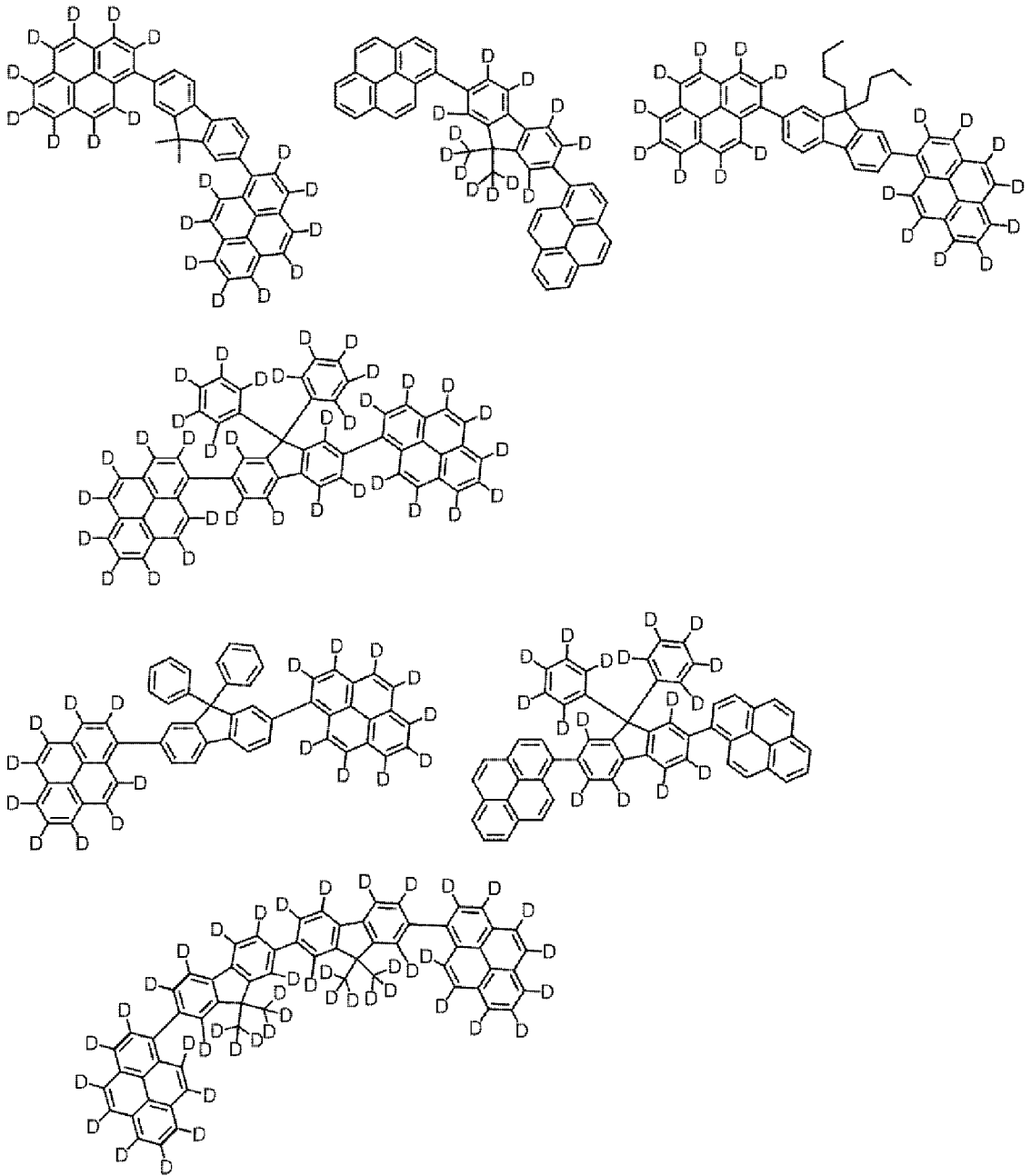
[0546]

[化165]



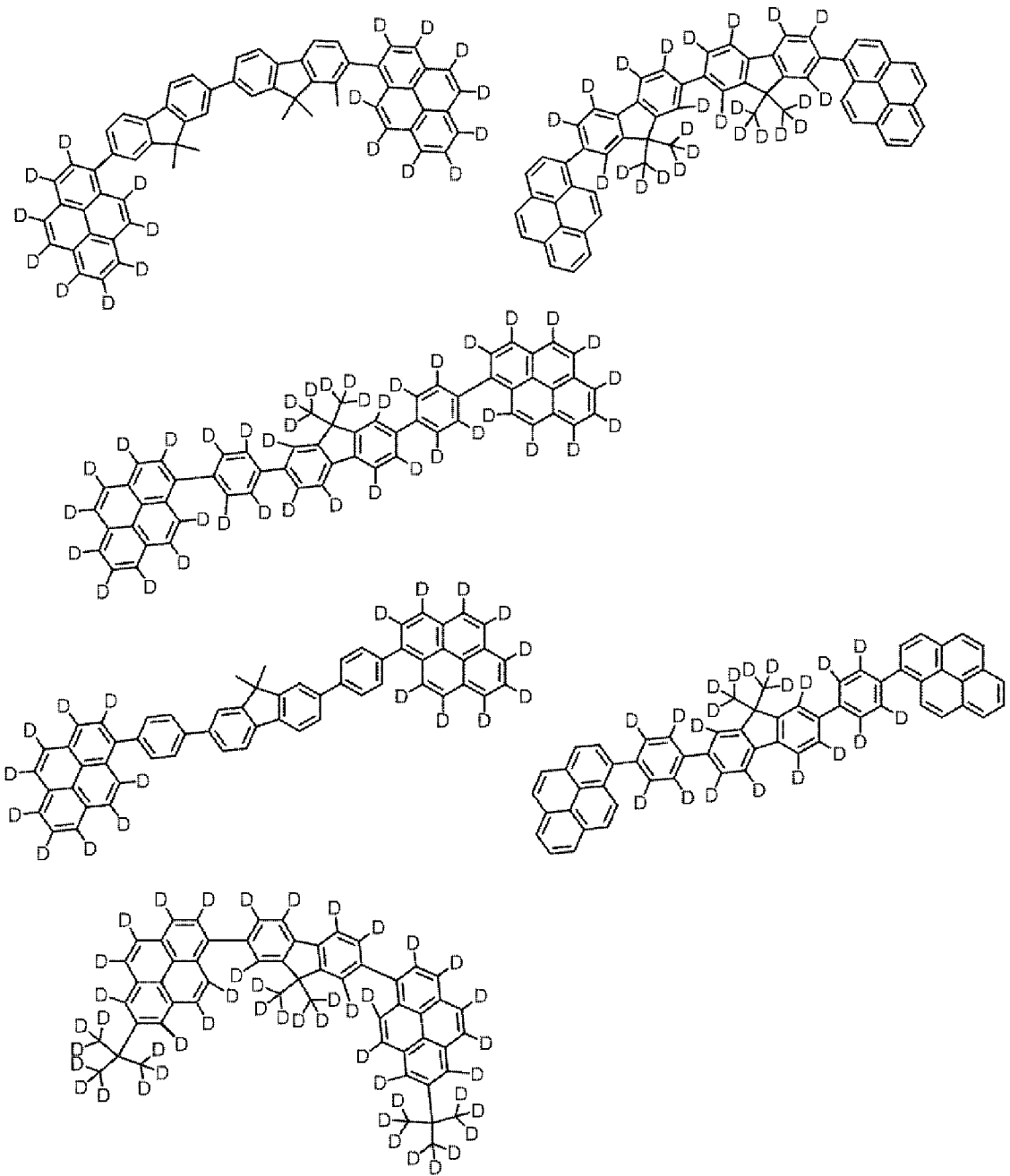
[0547]

[化166]



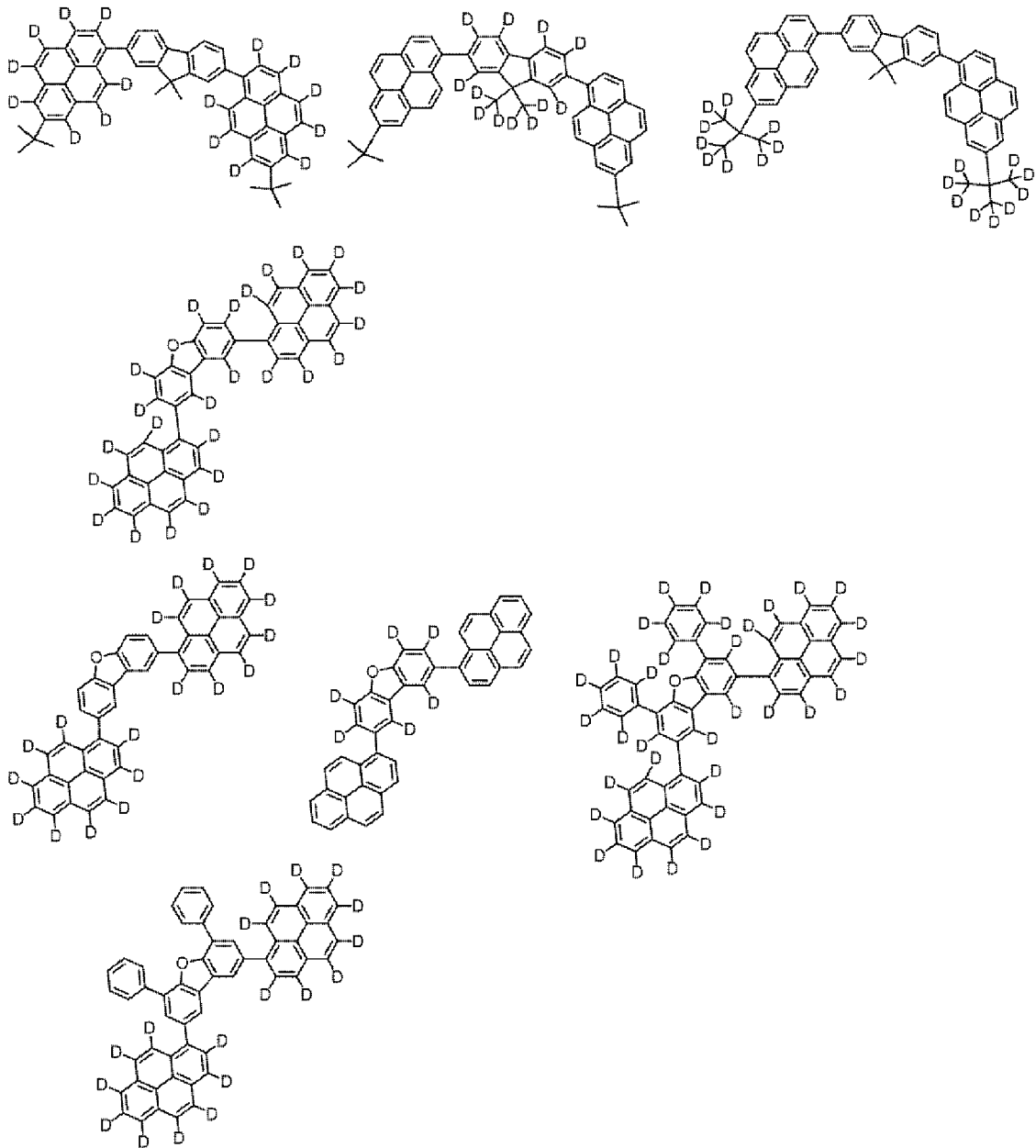
[0548]

[化167]



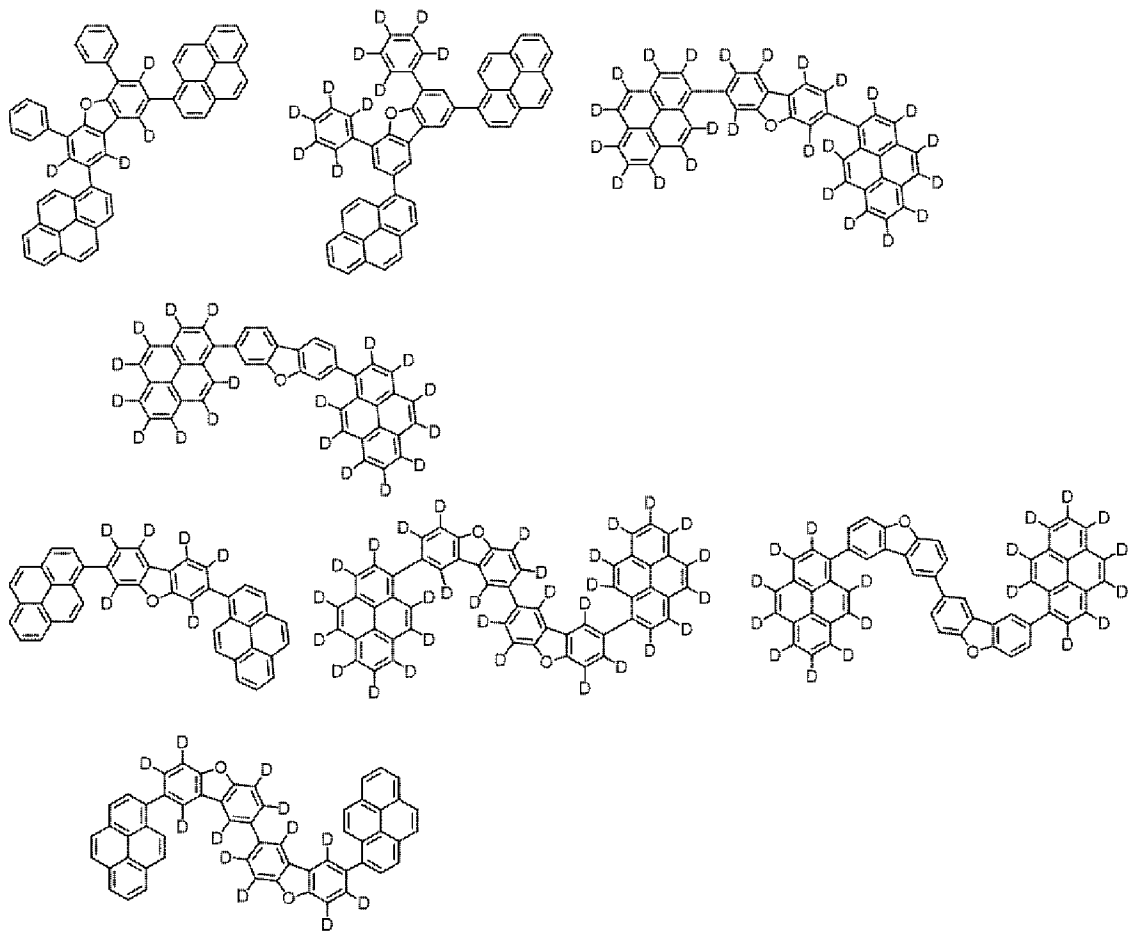
[0549]

[化168]



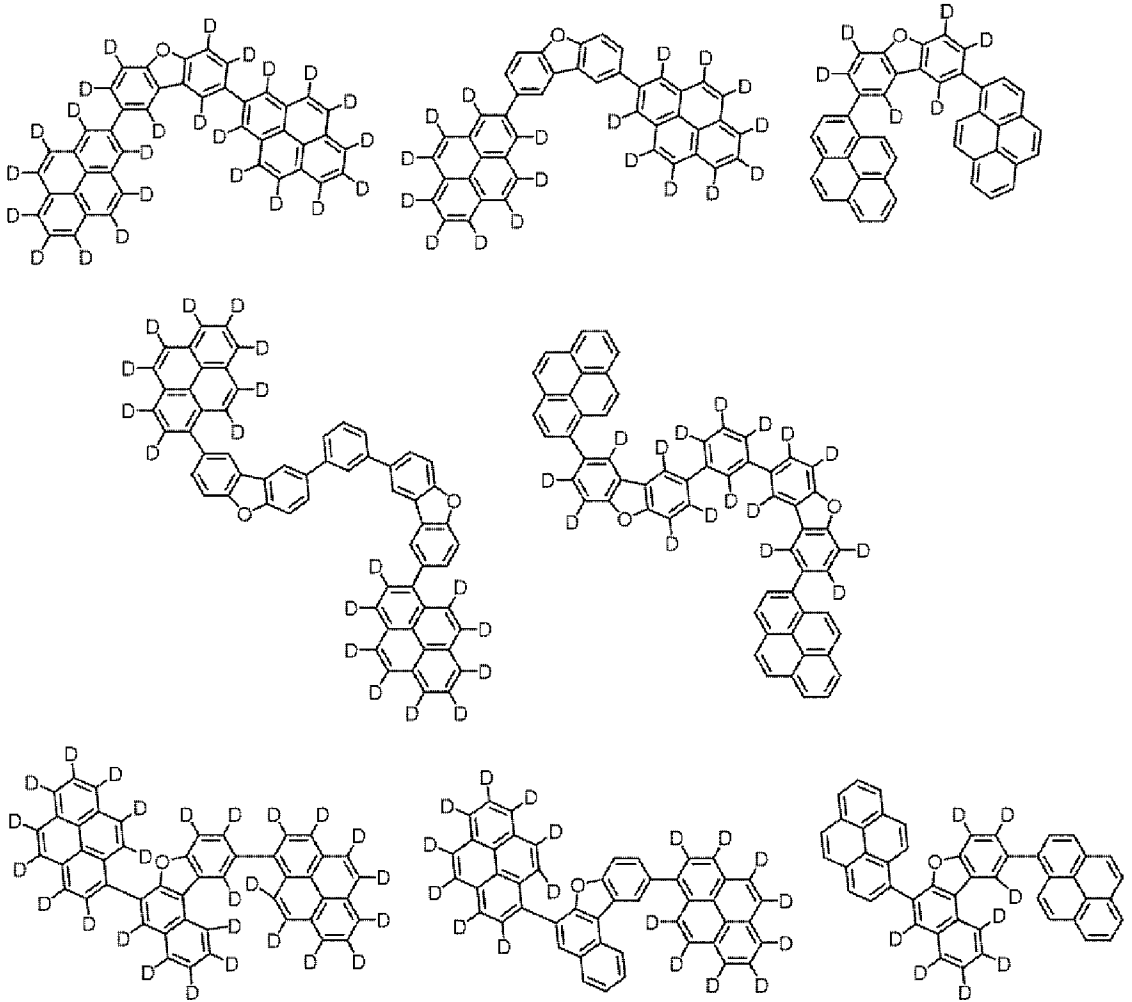
[0550]

[化169]

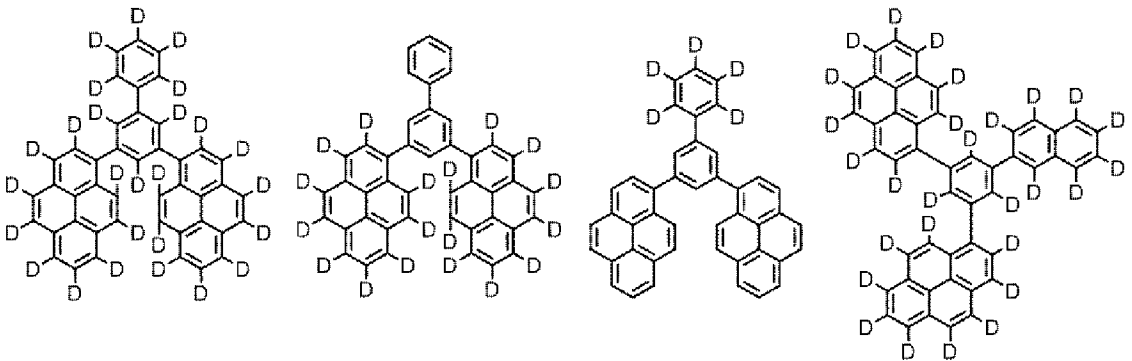


[0551]

[化170]

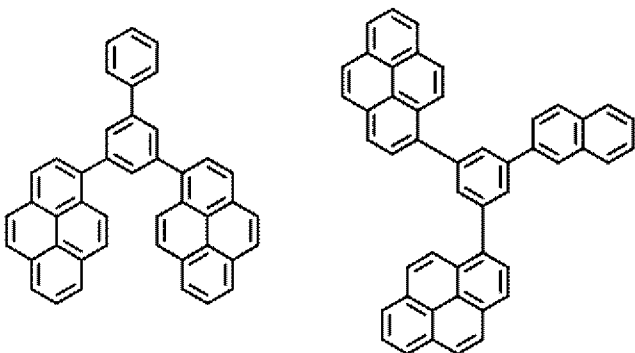


[0552] [化171]

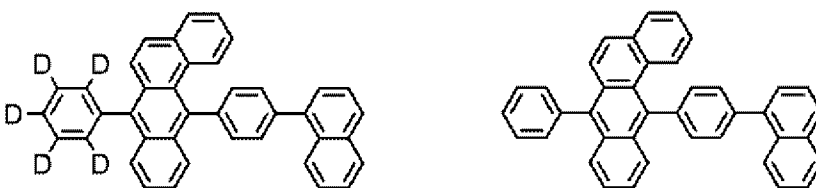


[0553]

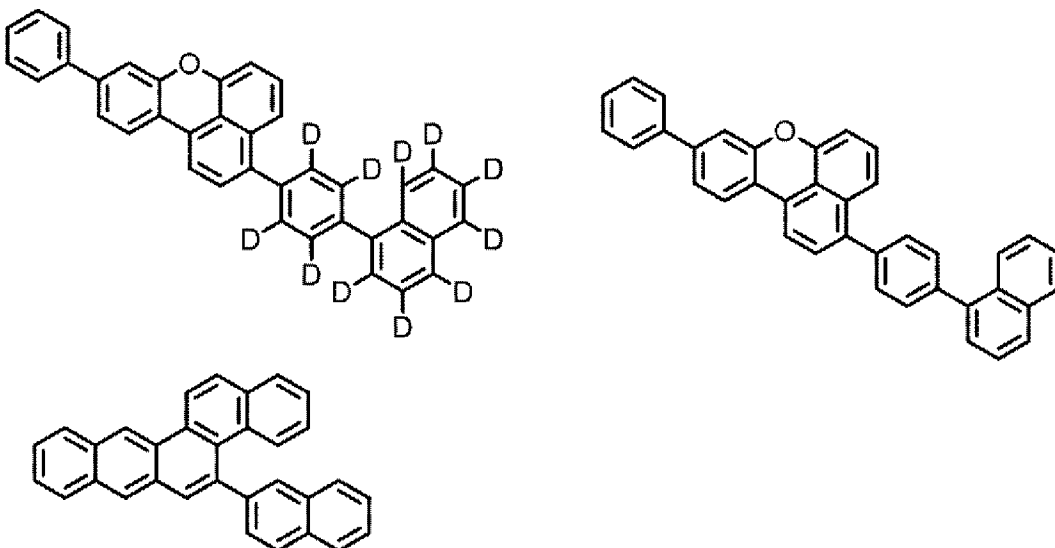
[化172]



[0554] [化173]



[0555] [化174]



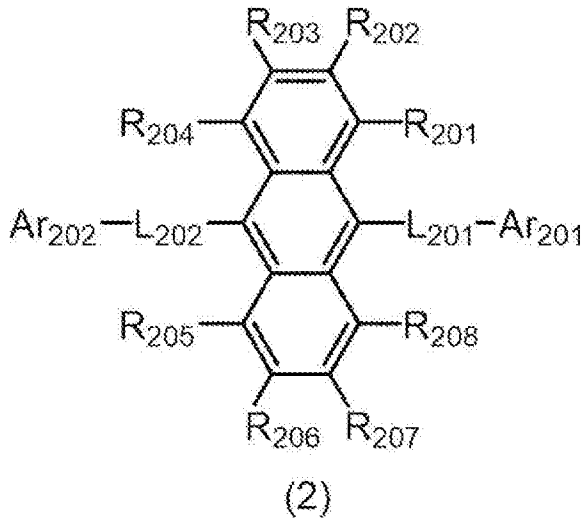
[0556] (第二のホスト材料)

本実施形態に係る有機EL素子において、第二のホスト材料は、アントラセン誘導体であることも好ましい。

[0557] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二のホスト材料は、下記一般式(2)で表される第二の化合物であることも好ましい。

[0558]

[化175]



[0559] (前記一般式(2)において、

$R_{201} \sim R_{208}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

—S—( $R_{905}$ )で表される基、

—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O) $R_{801}$ で表される基、

—COOR<sub>802</sub>で表される基、

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 の複素環基であり、  
L<sub>201</sub> 及び L<sub>202</sub> は、それぞれ独立に、  
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 価の複素環基であり、  
A<sub>r201</sub> 及び A<sub>r202</sub> は、それぞれ独立に、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 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。)

[0560] (本実施形態に係る第二の化合物中、R<sub>901</sub>、R<sub>902</sub>、R<sub>903</sub>、R<sub>904</sub>、R<sub>905</sub>、  
R<sub>906</sub>、R<sub>907</sub>、R<sub>801</sub> 及び R<sub>802</sub> 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 の複素環基であり、  
R<sub>901</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>901</sub> は、互いに同一であるか又は異なり、  
R<sub>902</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>902</sub> は、互いに同一であるか又は異なり、  
R<sub>903</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>903</sub> は、互いに同一であるか又は異なり、  
R<sub>904</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>904</sub> は、互いに同一であるか又は異なり、  
R<sub>905</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>905</sub> は、互いに同一であるか又は異なり、  
R<sub>906</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>906</sub> は、互いに同一であるか又は異なり、  
R<sub>907</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>907</sub> は、互いに同一であるか又は異なり、

り、

$R_{801}$ が複数存在する場合、複数の $R_{801}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

り、

$R_{802}$ が複数存在する場合、複数の $R_{802}$ は、互いに同一であるか又は異なる。) )

[0561] 本実施形態に係る有機EL素子において、

$R_{201} \sim R_{208}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

—S—( $R_{905}$ )で表される基、

—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O) $R_{801}$ で表される基、

—COOR $_{802}$ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、又は

ニトロ基であり、

$L_{201}$ 及び $L_{202}$ は、それぞれ独立に、

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価の複素環基であり、

$A_{r201}$ 及び $A_{r202}$ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50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の複素環基であることが好ましい。

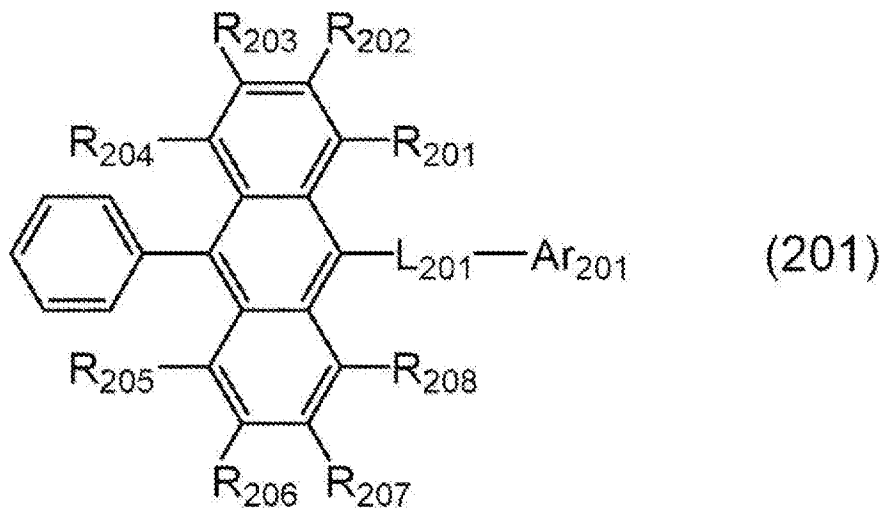
[0562] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $L_{201}$ 及び $L_{202}$ は、それぞれ独立に、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基であり、 $Ar_{201}$ 及び $Ar_{202}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であることが好ましい。

[0563] 本実施形態に係る有機EL素子において、 $Ar_{201}$ 及び $Ar_{202}$ は、それぞれ独立に、フェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ジフェニルフルオレニル基、ジメチルフルオレニル基、ベンゾジフェニルフルオレニル基、ベンゾジメチルフルオレニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ナフトベンゾフラニル基、又はナフトベンゾチエニル基であることが好ましい。

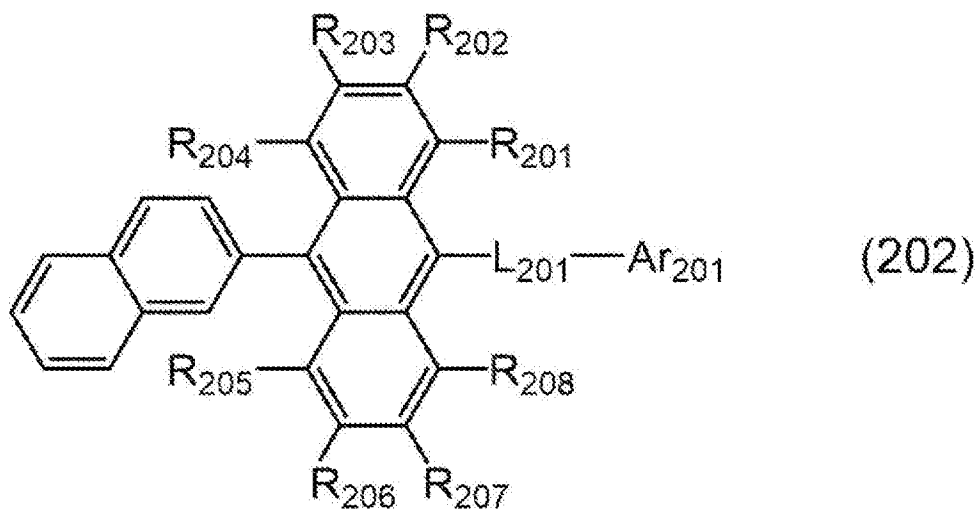
[0564] 本実施形態に係る有機EL素子において、前記一般式(2)で表される第二の化合物は、下記一般式(201)、一般式(202)、一般式(203)、一般式(204)、一般式(205)、一般式(206)、一般式(207)、一般式(208)又は一般式(209)で表される化合物であるこ

とが好ましい。

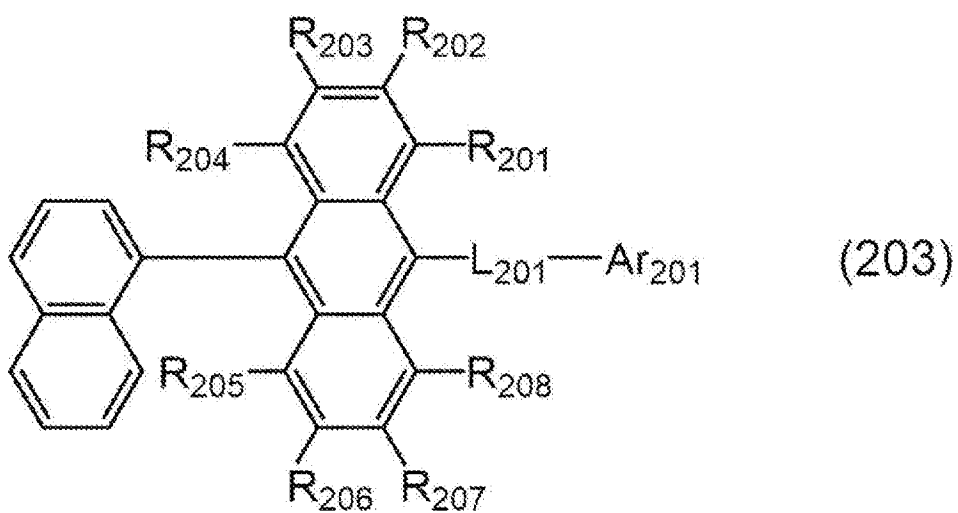
[0565] [化176]



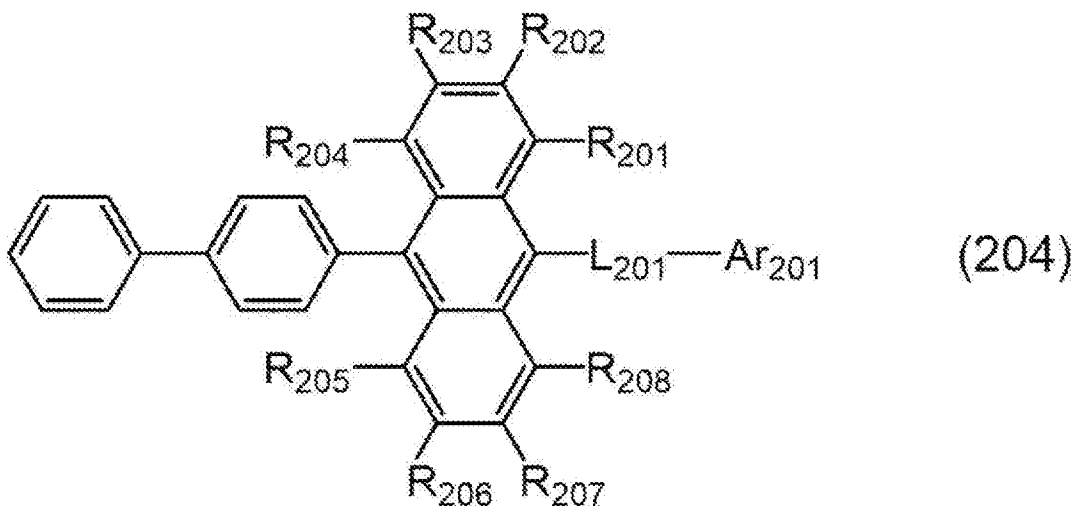
[0566] [化177]



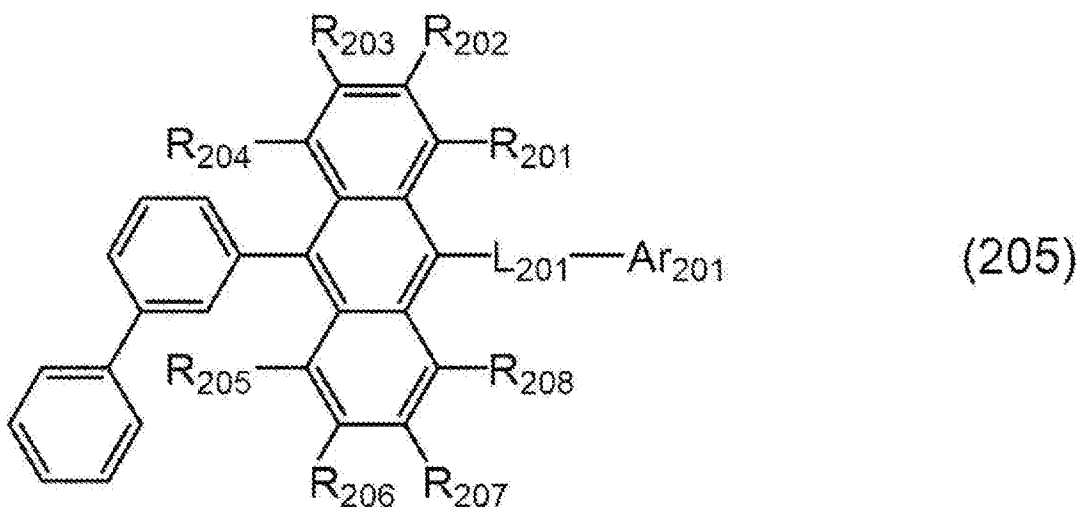
[0567] [化178]



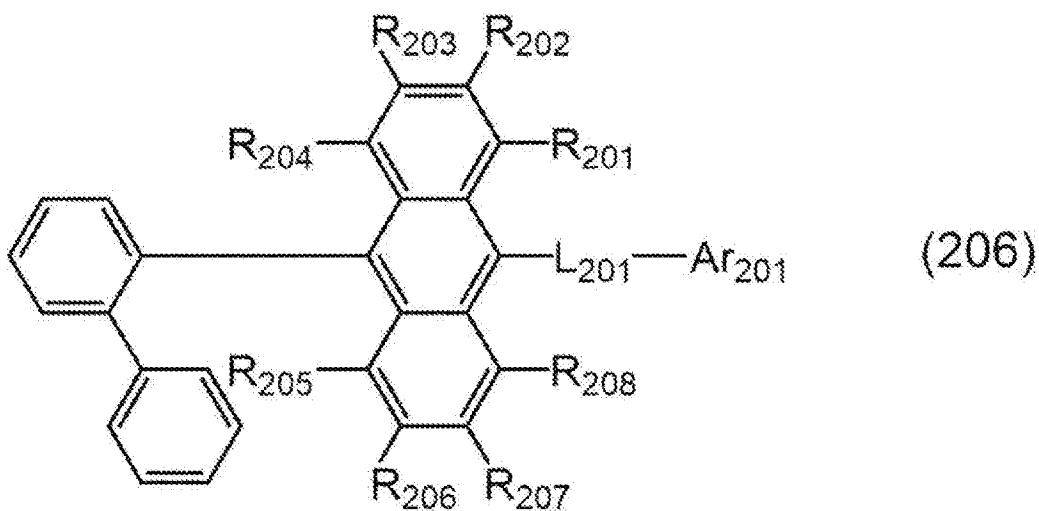
[0568] [化179]



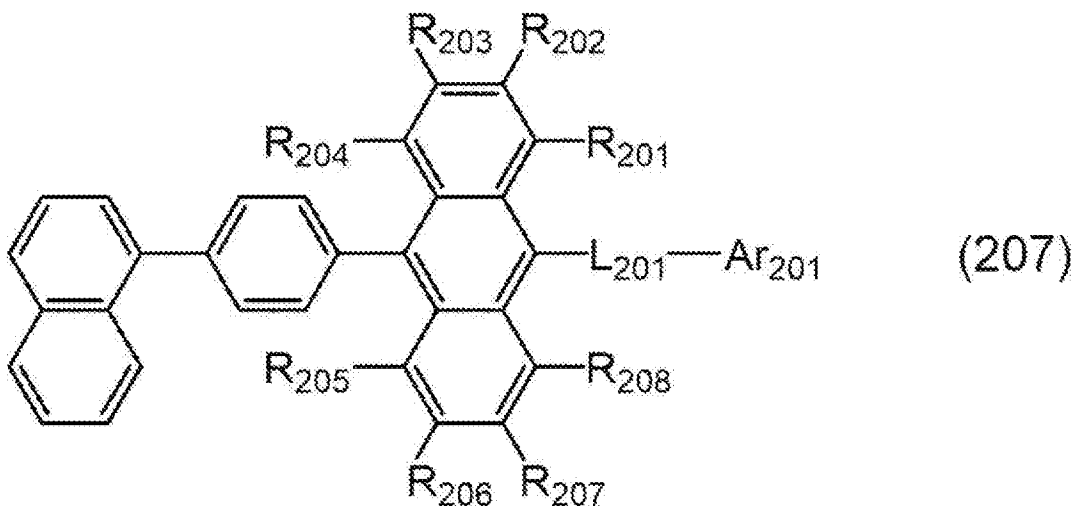
[0569] [化180]



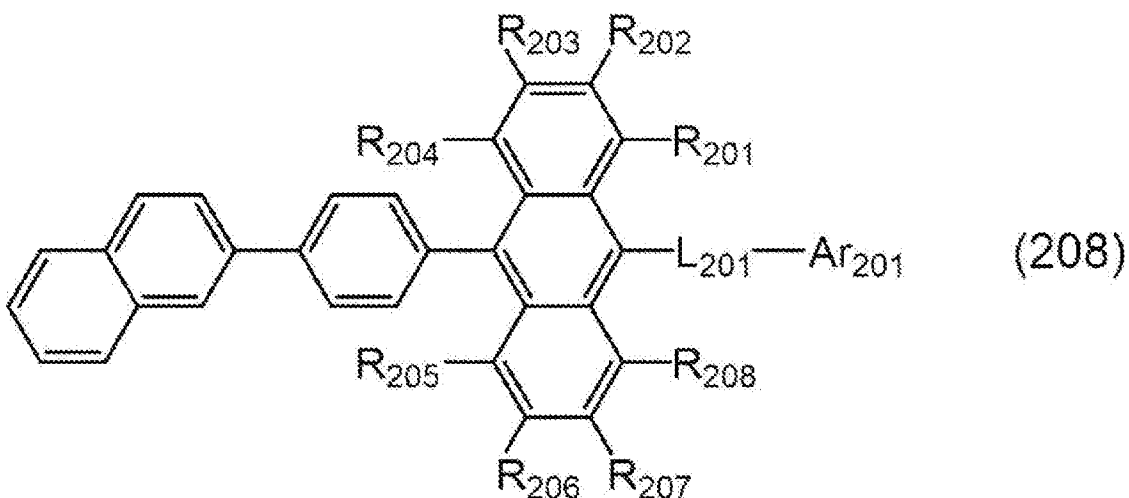
[0570] [化181]



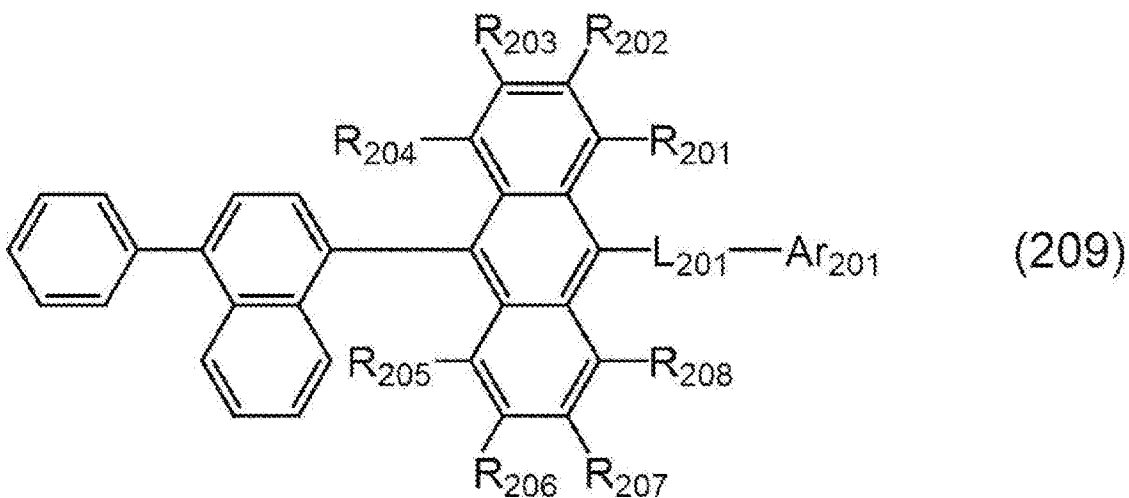
[0571] [化182]



[0572] [化183]



[0573] [化184]



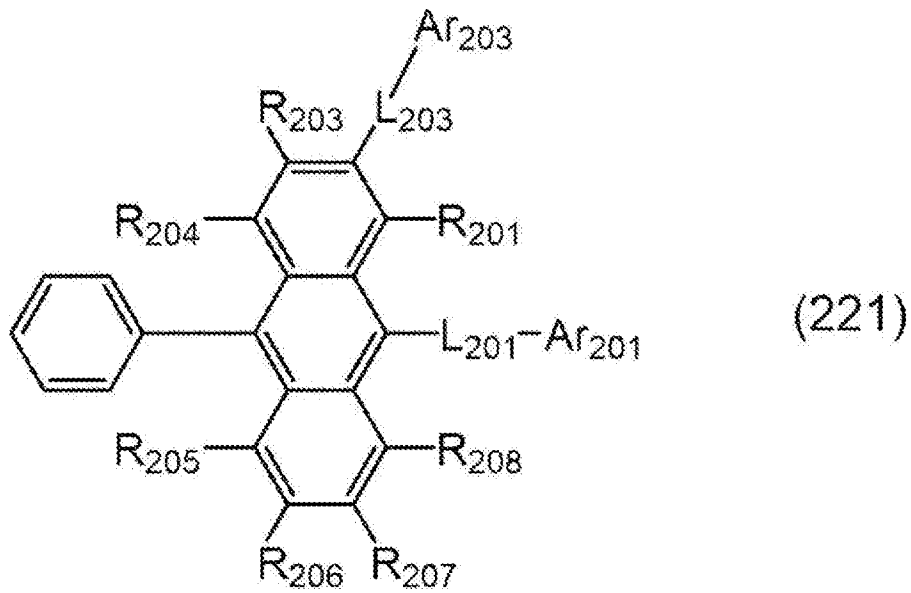
[0574] (前記一般式(201)~(209)中、

$L_{201}$ 及び $Ar_{201}$ は、前記一般式(2)における $L_{201}$ 及び $Ar_{201}$ と同義であり、

$R_{201} \sim R_{208}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における $R_{201} \sim R_{208}$ と同義である。) )

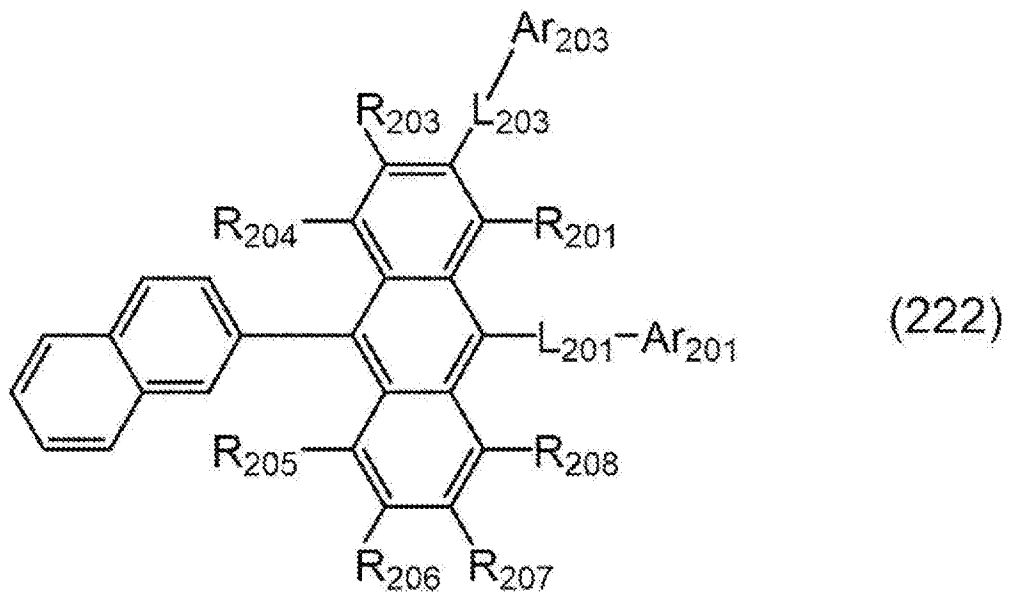
[0575] 前記一般式(2)で表される第二の化合物は、下記一般式(221)、一般式(222)、一般式(223)、一般式(224)、一般式(225)、一般式(226)、一般式(227)、一般式(228)又は一般式(229)で表される化合物であることも好ましい。

[0576] [化185]

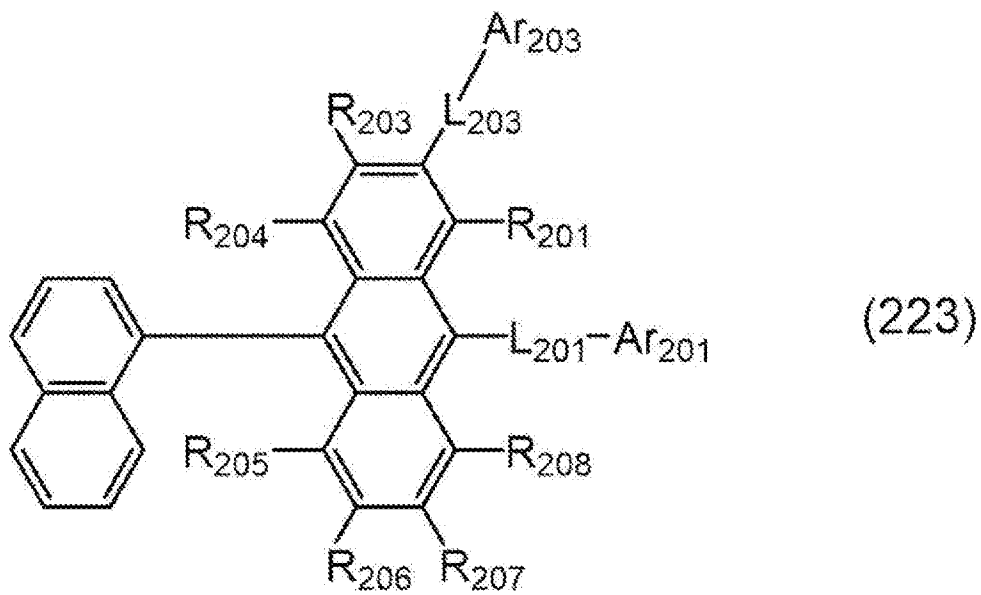


[0577]

[化186]

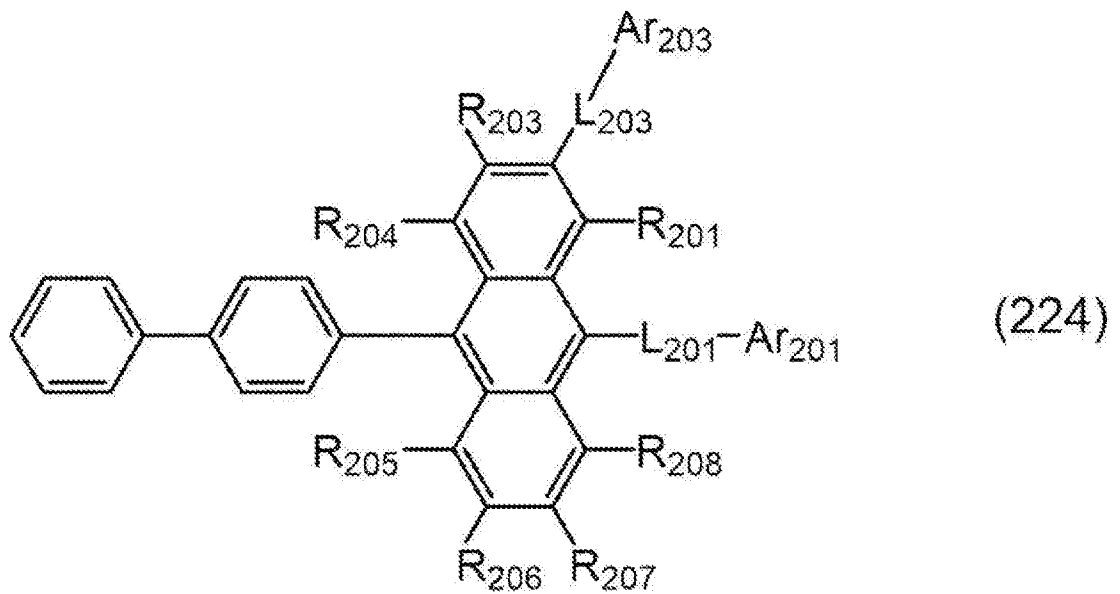


[0578] [化187]

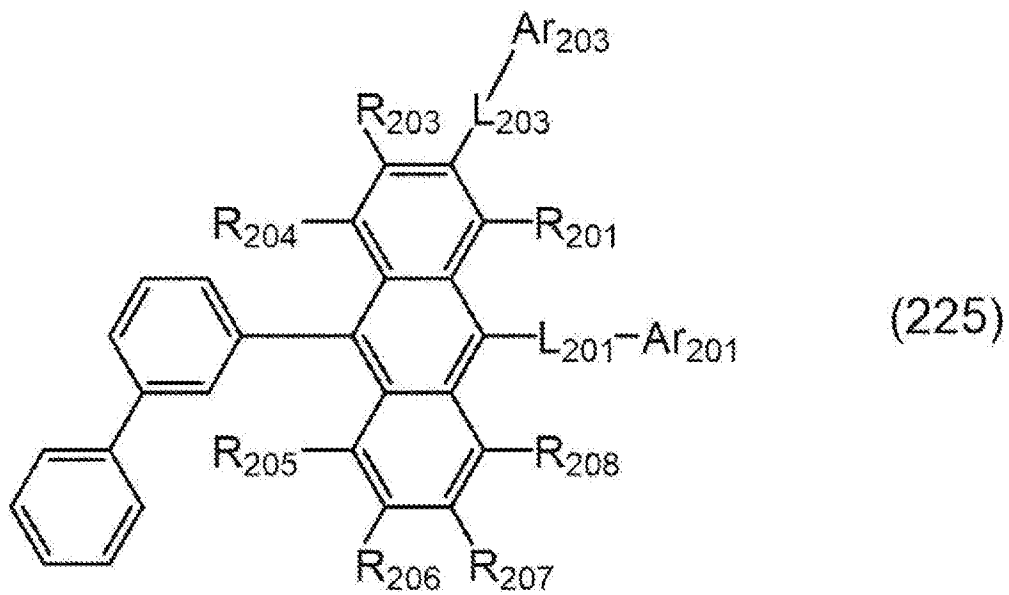


[0579]

[化188]

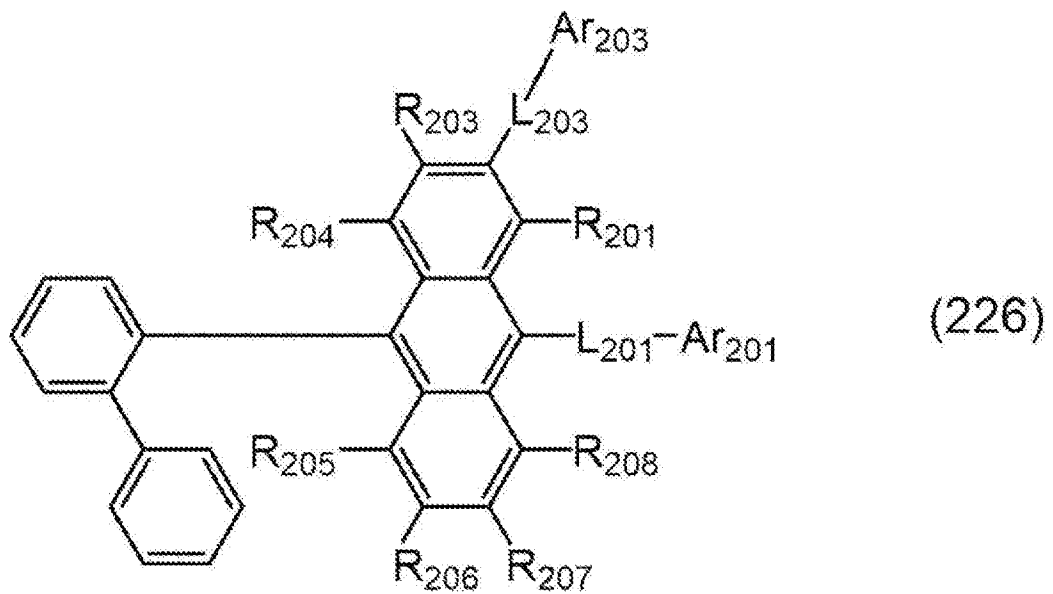


[0580] [化189]

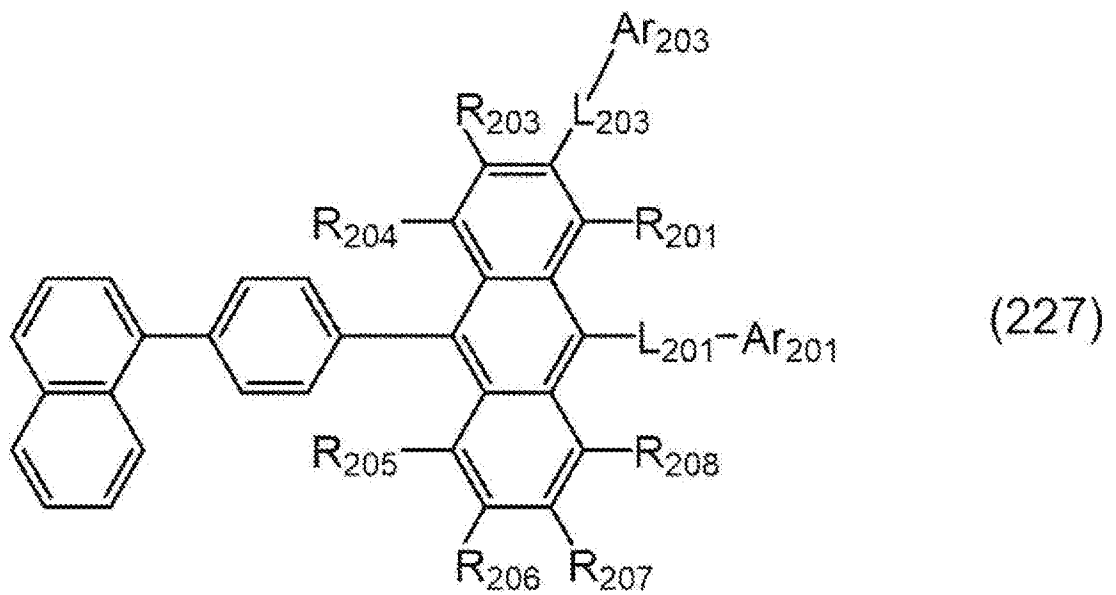


[0581]

[化190]

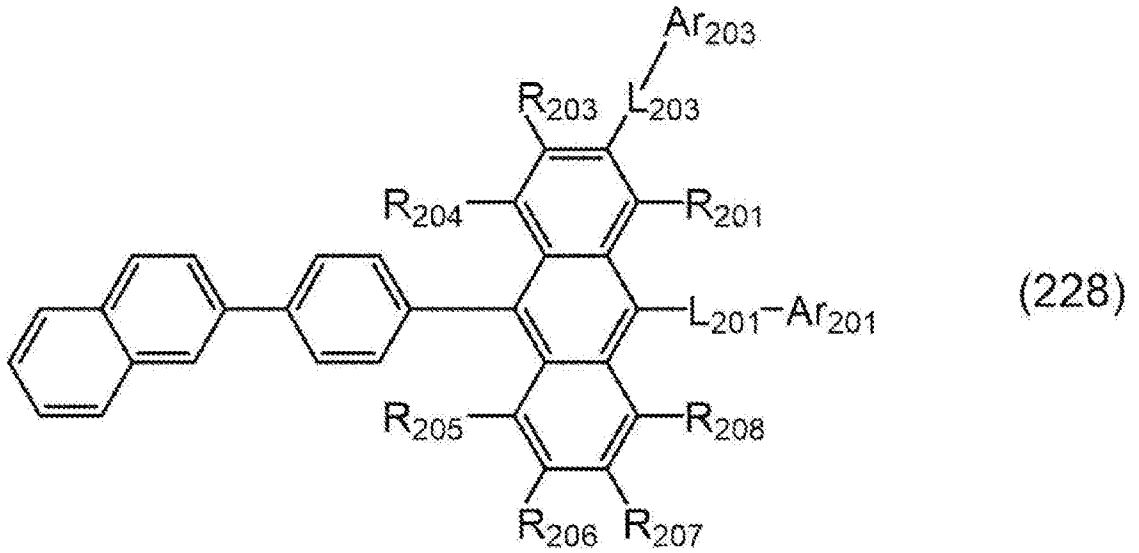


[0582] [化191]

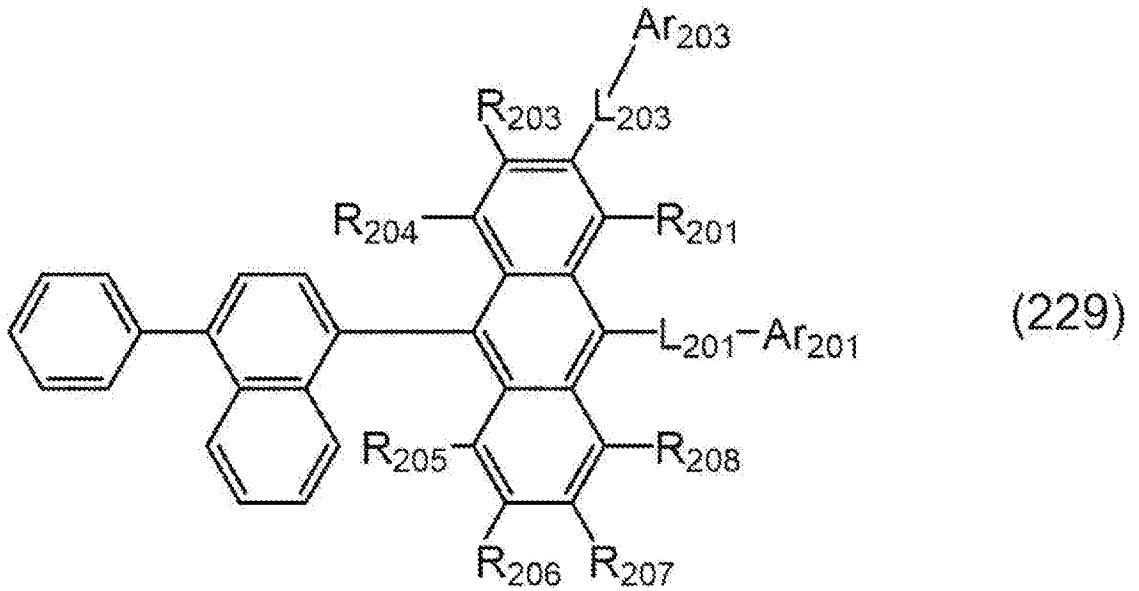


[0583]

[化192]



[0584] [化193]



[0585] (前記一般式(221)、一般式(222)、一般式(223)、一般式(224)、一般式(225)、一般式(226)、一般式(227)、一般式(228)及び一般式(229)において、

$R_{201}$ 並びに $R_{203} \sim R_{208}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における $R_{201}$ 並びに $R_{203} \sim R_{208}$ と同義であり、

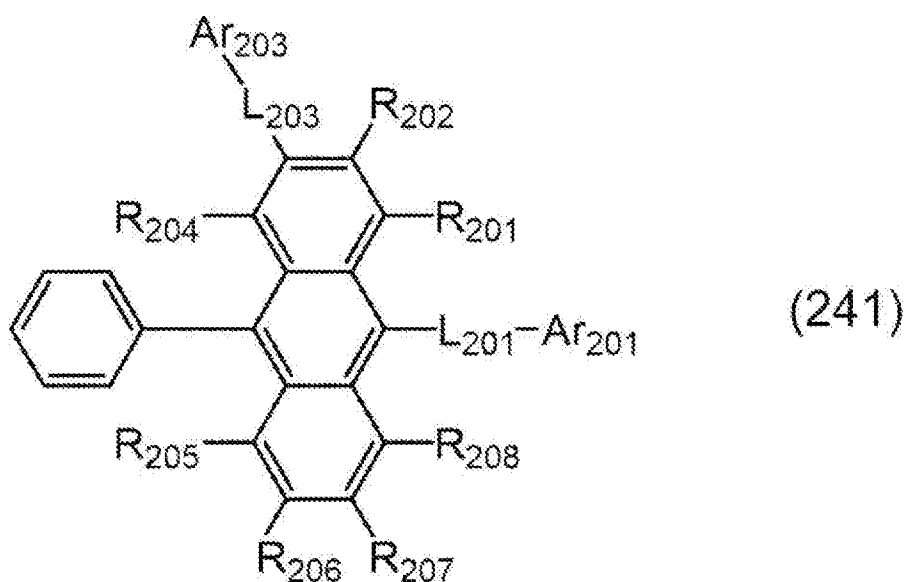
$L_{201}$ 及び $Ar_{201}$ は、それぞれ、前記一般式(2)における $L_{201}$ 及び $Ar_{201}$ と同義であり、

$L_{203}$ は、前記一般式(2)における $L_{201}$ と同義であり、

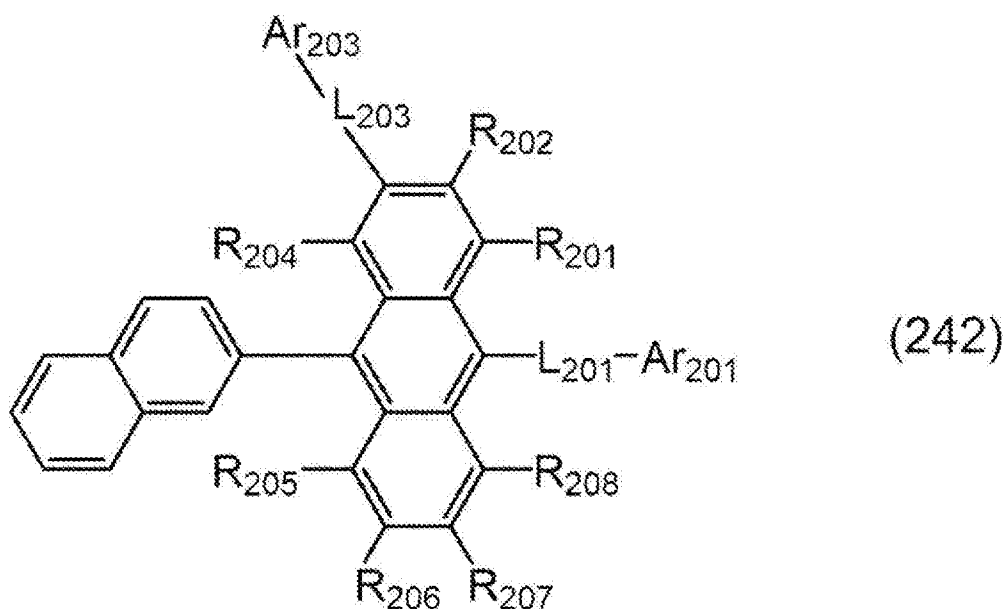
$L_{203}$ と $L_{201}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、  
 $Ar_{203}$ は、前記一般式(2)における $Ar_{201}$ と同義であり、  
 $Ar_{203}$ と $Ar_{201}$ は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

[0586] 前記一般式(2)で表される第二の化合物は、下記一般式(241)、一般式(242)、一般式(243)、一般式(244)、一般式(245)、一般式(246)、一般式(247)、一般式(248)又は一般式(249)で表される化合物であることも好ましい。

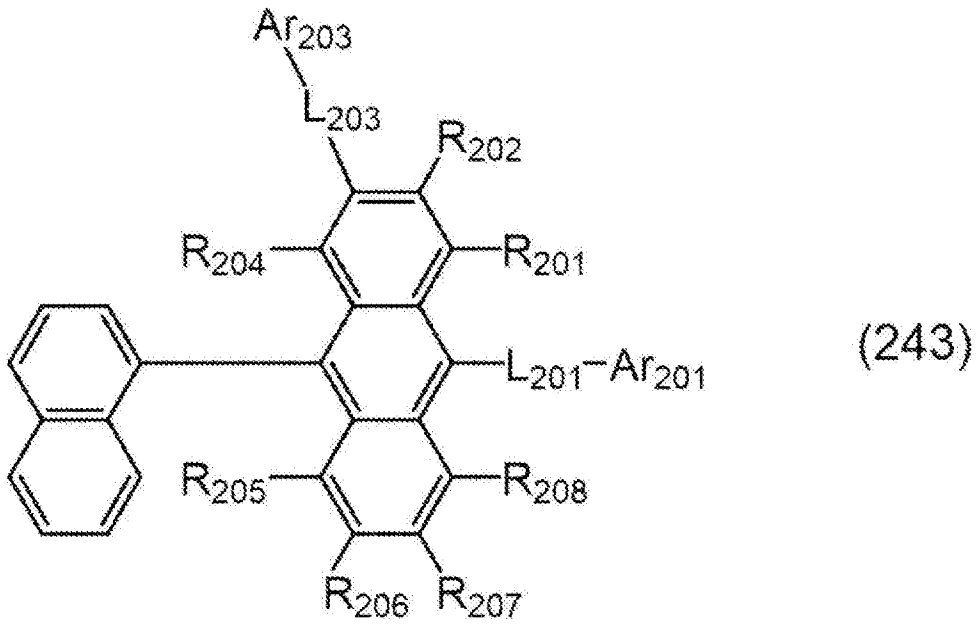
[0587] [化194]



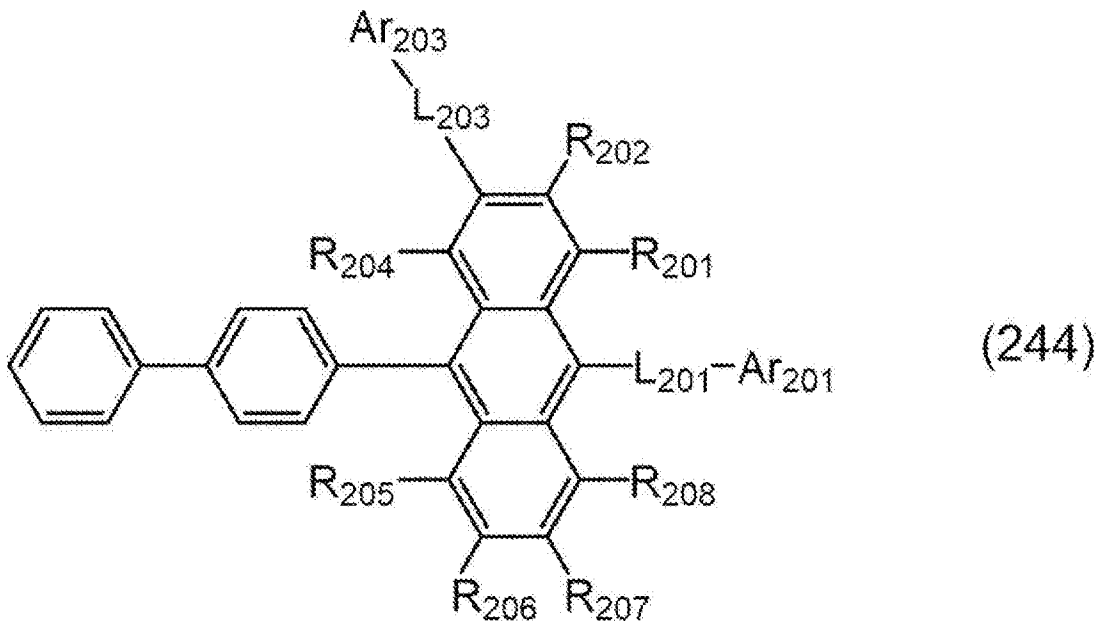
[0588] [化195]



[0589] [化196]

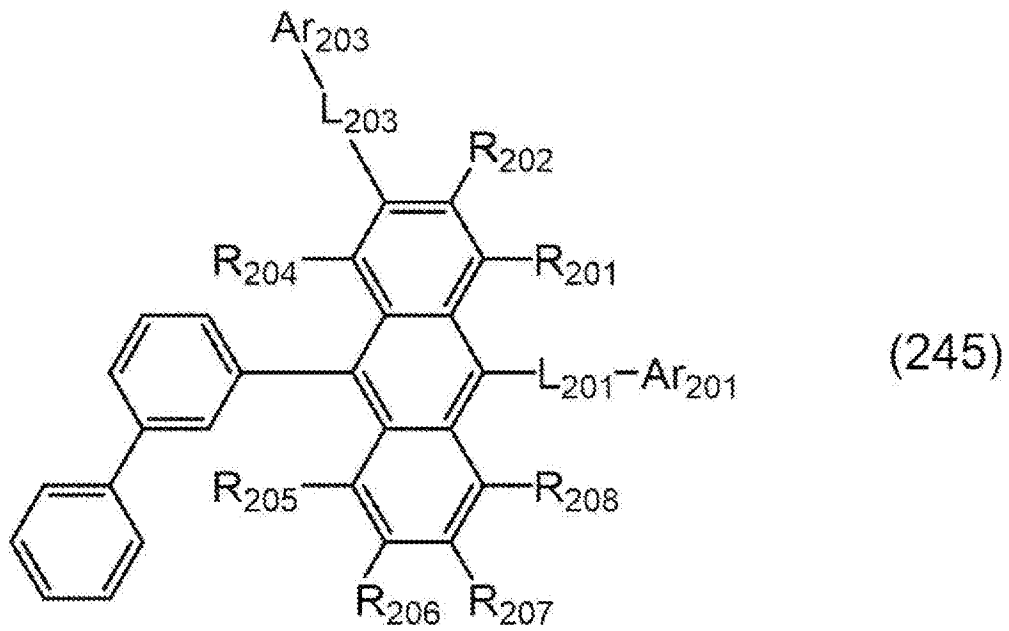


[0590] [化197]

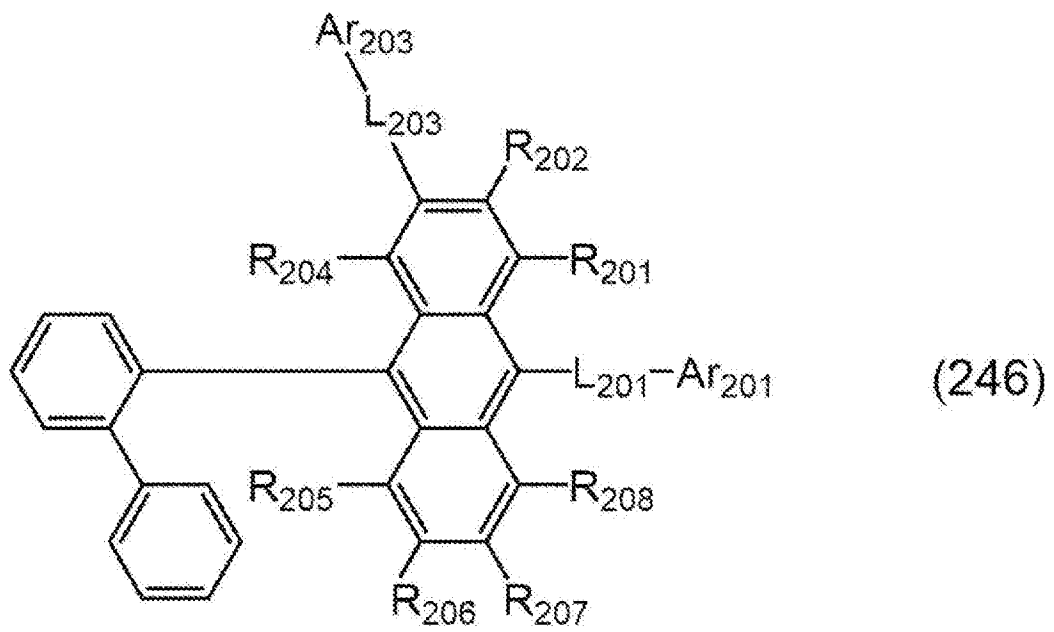


[0591]

[化198]

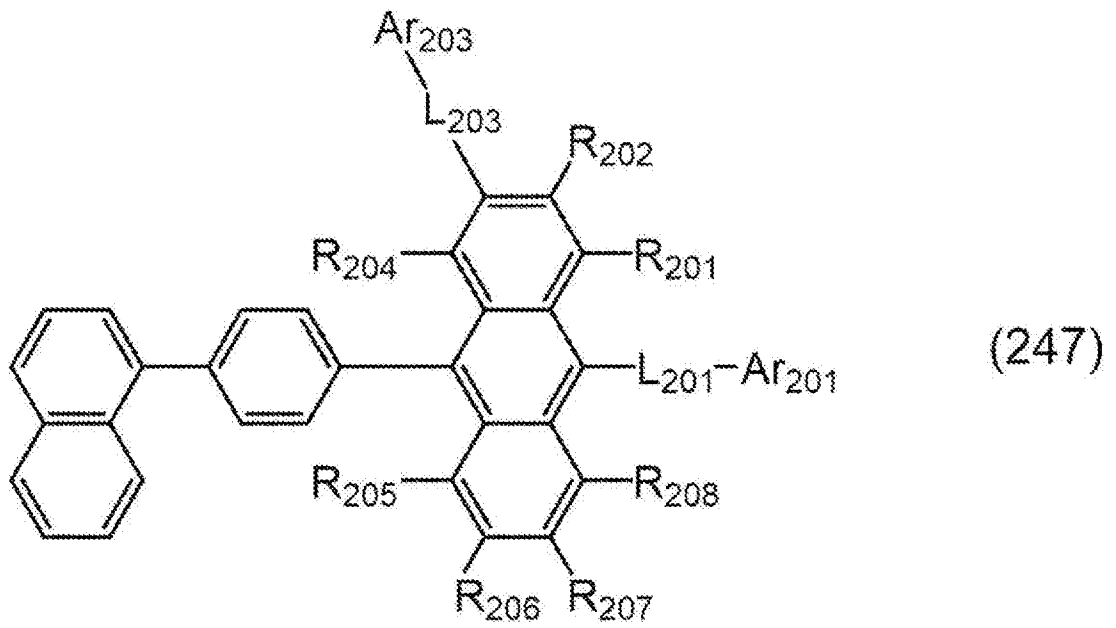


[0592] [化199]

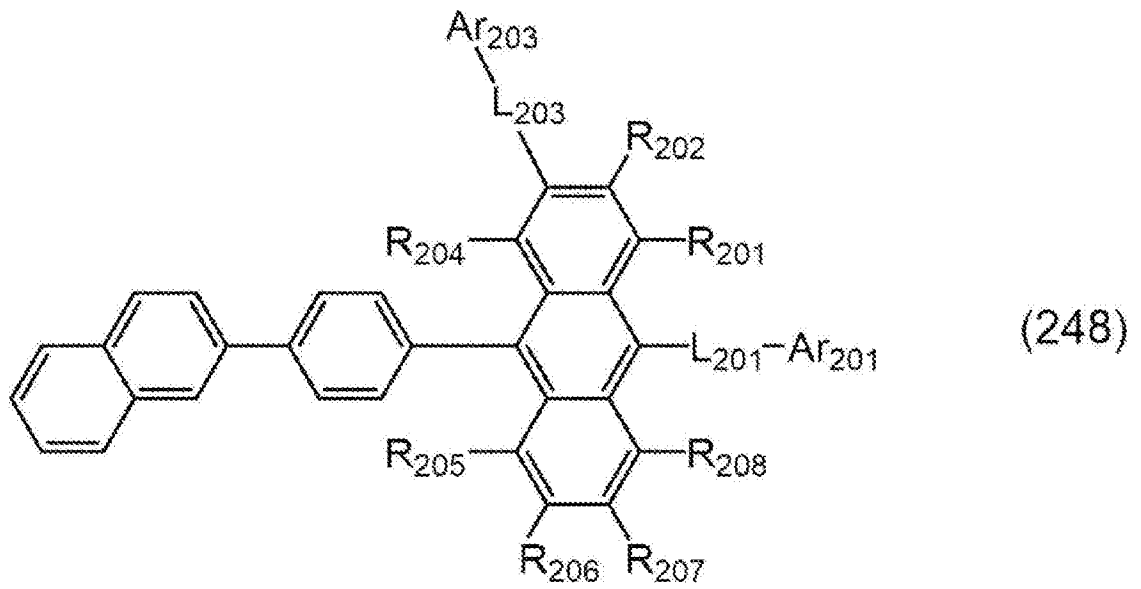


[0593]

[化200]

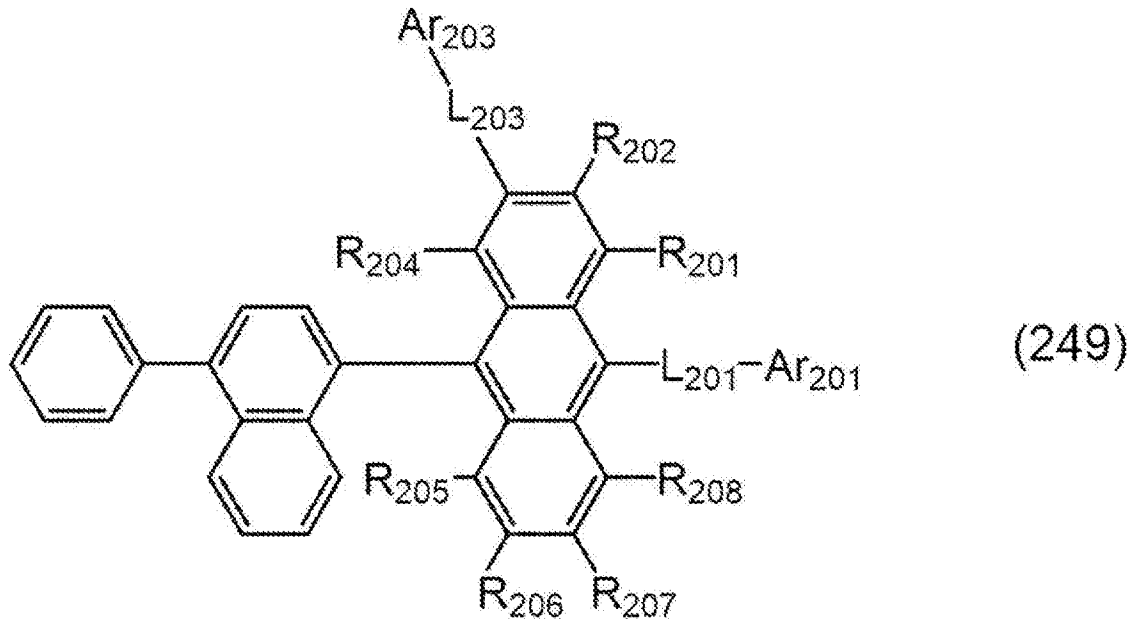


[0594] [化201]



[0595]

[化202]



[0596] (前記一般式(241)、一般式(242)、一般式(243)、一般式(244)、一般式(245)、一般式(246)、一般式(247)、一般式(248)及び一般式(249)において、

$R_{201}$ 、 $R_{202}$ 並びに $R_{204} \sim R_{208}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における $R_{201}$ 、 $R_{202}$ 並びに $R_{204} \sim R_{208}$ と同義であり、

$L_{201}$ 及び $Ar_{201}$ は、それぞれ、前記一般式(2)における $L_{201}$ 及び $Ar_{201}$ と同義であり、

$L_{203}$ は、前記一般式(2)における $L_{201}$ と同義であり、

$L_{203}$ と $L_{201}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

$Ar_{203}$ は、前記一般式(2)における $Ar_{201}$ と同義であり、

$Ar_{203}$ と $Ar_{201}$ は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

[0597] 前記一般式(2)で表される第二の化合物中、前記一般式(21)で表される基ではない $R_{201} \sim R_{208}$ 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、又は

$-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基であることが好まし

い。

[0598]  $L_{101}$ は、

単結合、又は

無置換の環形成炭素数6～22のアリーレン基であり、

$Ar_{101}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～22のアリール基であることが好ましい。

[0599] 本実施形態に係る有機EL素子において、前記一般式(2)で表される第二の化合物中、アントラセン骨格の置換基である $R_{201} \sim R_{208}$ は、分子間の相互作用が抑制されることを防ぎ、電子移動度の低下を抑制する点から、水素原子であることが好ましいが、 $R_{201} \sim R_{208}$ 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、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基でもよい。

$R_{201} \sim R_{208}$ がアルキル基及びシクロアルキル基等のかさ高い置換基となった場合、分子間の相互作用が抑制され、第一のホスト材料に対し電子移動度が低下し、前記数式(数33)に記載の $\mu_e(H1) < \mu_e(H2)$ の関係を満たさなくなるおそれがある。第二の化合物を第二の発光層に用いた場合には、 $\mu_e(H1) < \mu_e(H2)$ の関係を満たす事で第一の発光層でのホールと電子との再結合能の低下、及び発光効率の低下を抑制することが期待できる。なお、置換基としては、ハロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基、 $-O-(R_{904})$ で表される基、 $-S-(R_{905})$ で表される基、 $-N(R_{906})(R_{907})$ で表される基、アラルキル基、 $-C(=O)R_{801}$ で表される基、 $-COOR_{802}$ で表される基、ハロゲン原子、シアノ基、及びニトロ基がかさ高くなるおそれがあり、アルキル基、及びシクロアルキル基がさらにかさ高くなるおそれがある。

前記一般式(2)で表される第二の化合物中、アントラセン骨格の置換基である $R_{201} \sim R_{208}$ は、かさ高い置換基ではないことが好ましく、アルキル基及びシクロアルキル基ではないことが好ましく、アルキル基、シクロアル

キル基、ハロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$  で表される基、 $-O-(R_{904})$  で表される基、 $-S-(R_{905})$  で表される基、 $-N(R_{906})(R_{907})$  で表される基、アラルキル基、 $-C(=O)R_{801}$  で表される基、 $-COOR_{802}$  で表される基、ハロゲン原子、シアノ基、及びニトロ基ではないことがより好ましい。

[0600] 本実施形態に係る有機EL素子において、

前記一般式(2)で表される第二の化合物中、 $R_{201} \sim R_{208}$ 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、又は

$-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$  で表される基であることが好まし

い。

[0601] 本実施形態に係る有機EL素子において、前記一般式(2)で表される第二の化合物中、 $R_{201} \sim R_{208}$ は、水素原子であることが好ましい。

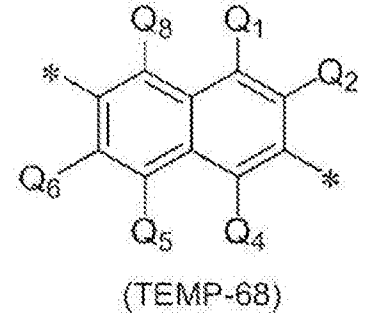
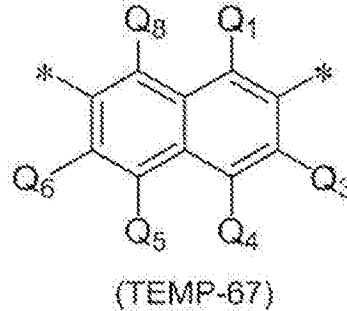
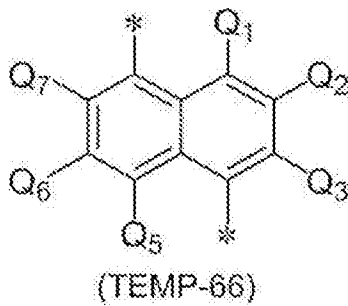
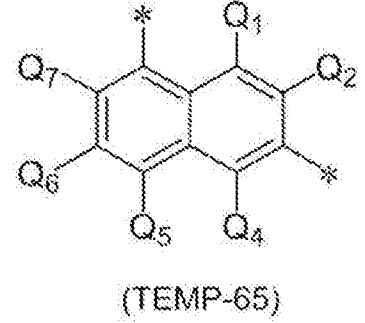
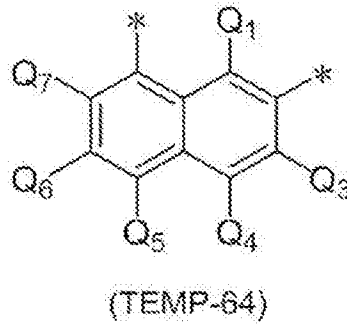
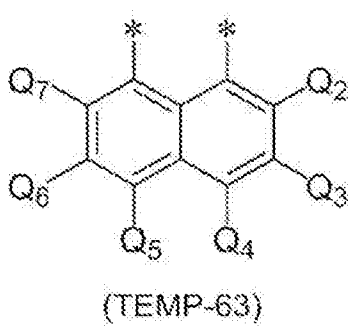
[0602] 第二の化合物中、 $R_{201} \sim R_{208}$ における「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、前述のかさ高くなるおそれのある置換基、特に置換もしくは無置換のアルキル基、及び置換もしくは無置換のシクロアルキル基を含まないことも好ましい。 $R_{201} \sim R_{208}$ における「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、置換もしくは無置換のアルキル基、及び置換もしくは無置換のシクロアルキル基を含まないことにより、アルキル基及びシクロアルキル基等のかさ高い置換基が存在する事による分子間の相互作用が抑制されるのを防ぎ、電子移動度の低下を防ぐことができ、また、このような第二の化合物を第二の発光層に用いた場合には、第一の発光層でのホールと電子との再結合能の低下、及び発光効率の低下を抑制できる。

[0603] アントラセン骨格の置換基である $R_{201} \sim R_{208}$ がかさ高い置換基ではなく、置換基としての $R_{201} \sim R_{208}$ は、無置換であることがさらに好ましい。また、アントラセン骨格の置換基である $R_{201} \sim R_{208}$ がかさ高い置換基ではな

い場合において、かさ高くない置換基としての $R_{201} \sim R_{208}$ に置換基が結合する場合、当該置換基もかさ高い置換基ではないことが好ましく、置換基としての $R_{201} \sim R_{208}$ に結合する当該置換基は、アルキル基及びシクロアルキル基ではないことが好ましく、アルキル基、シクロアルキル基、ハロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基、 $-O-(R_{904})$ で表される基、 $-S-(R_{905})$ で表される基、 $-N(R_{906})(R_{907})$ で表される基、アラルキル基、 $-C(=O)R_{801}$ で表される基、 $-COOR_{802}$ で表される基、ハロゲン原子、シアノ基、及びニトロ基ではないことがより好ましい。

- [0604] 前記第二の化合物において、「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であることが好ましい。
- [0605] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中の $A_{r201}$ は置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基である。
- [0606] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中の $A_{r201}$ は無置換のジベンゾフラニル基である。
- [0607] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中は少なくとも1つの水素を有し、前記水素のうち少なくとも1つが重水素である。
- [0608] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中の $L_{201}$ はTEMP-63ないしTEMP-68である。
- [0609]

[化203]



[0610] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中の $A_{r201}$ は置換もしくは無置換のアントリル基、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、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基、及び

ペリレニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

[0611] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中の $A r_{201}$ は置換もしくは無置換のフルオレニル基である。

[0612] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中の $A r_{201}$ は置換もしくは無置換のキサントニル基である。

[0613] 本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中の $A r_{201}$ はベンゾキサントニル基である。

[0614] (第二の化合物の製造方法)

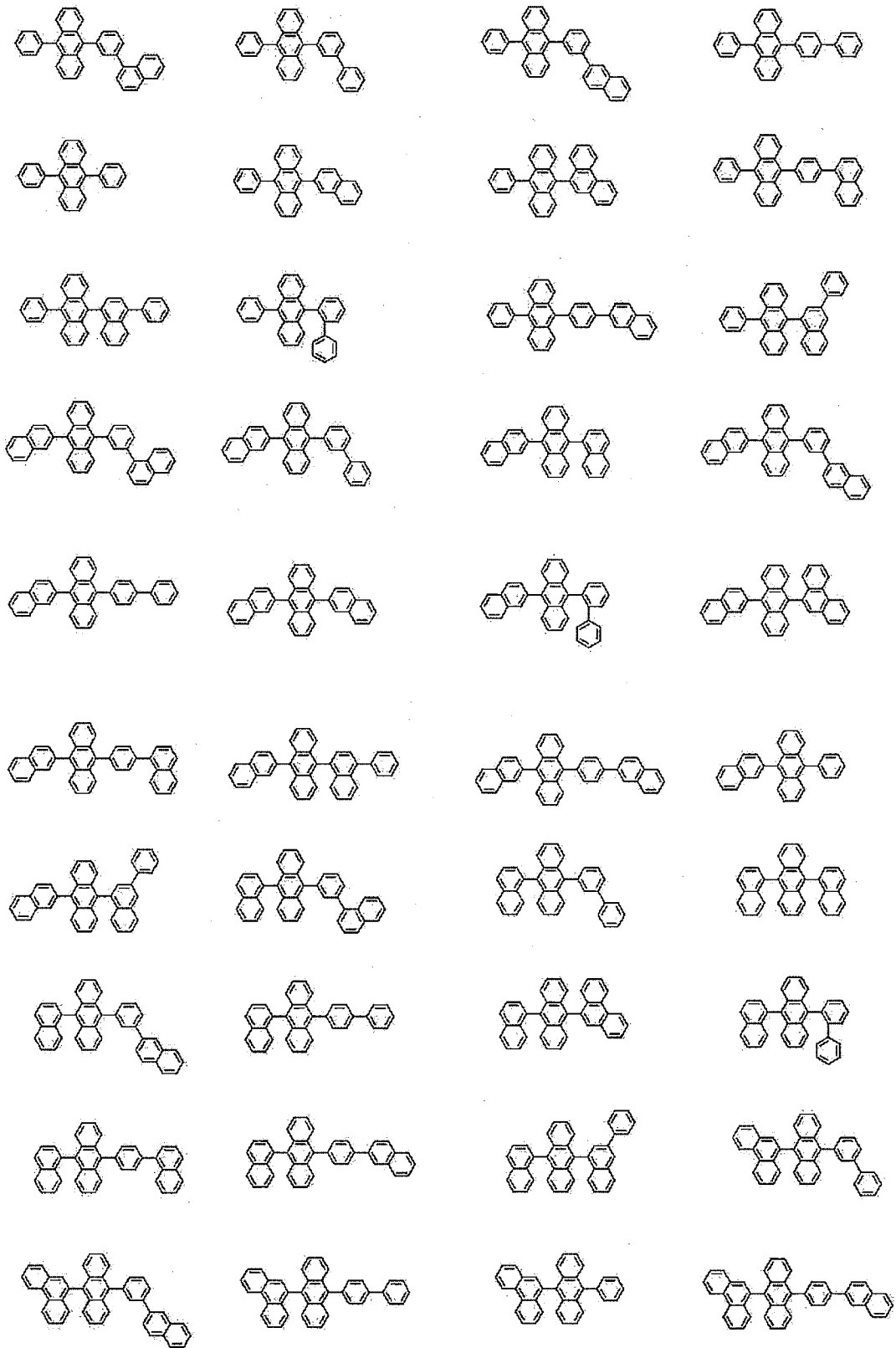
第二の化合物は、公知の方法により製造できる。また、第二の化合物は、公知の方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。

[0615] (第二の化合物の具体例)

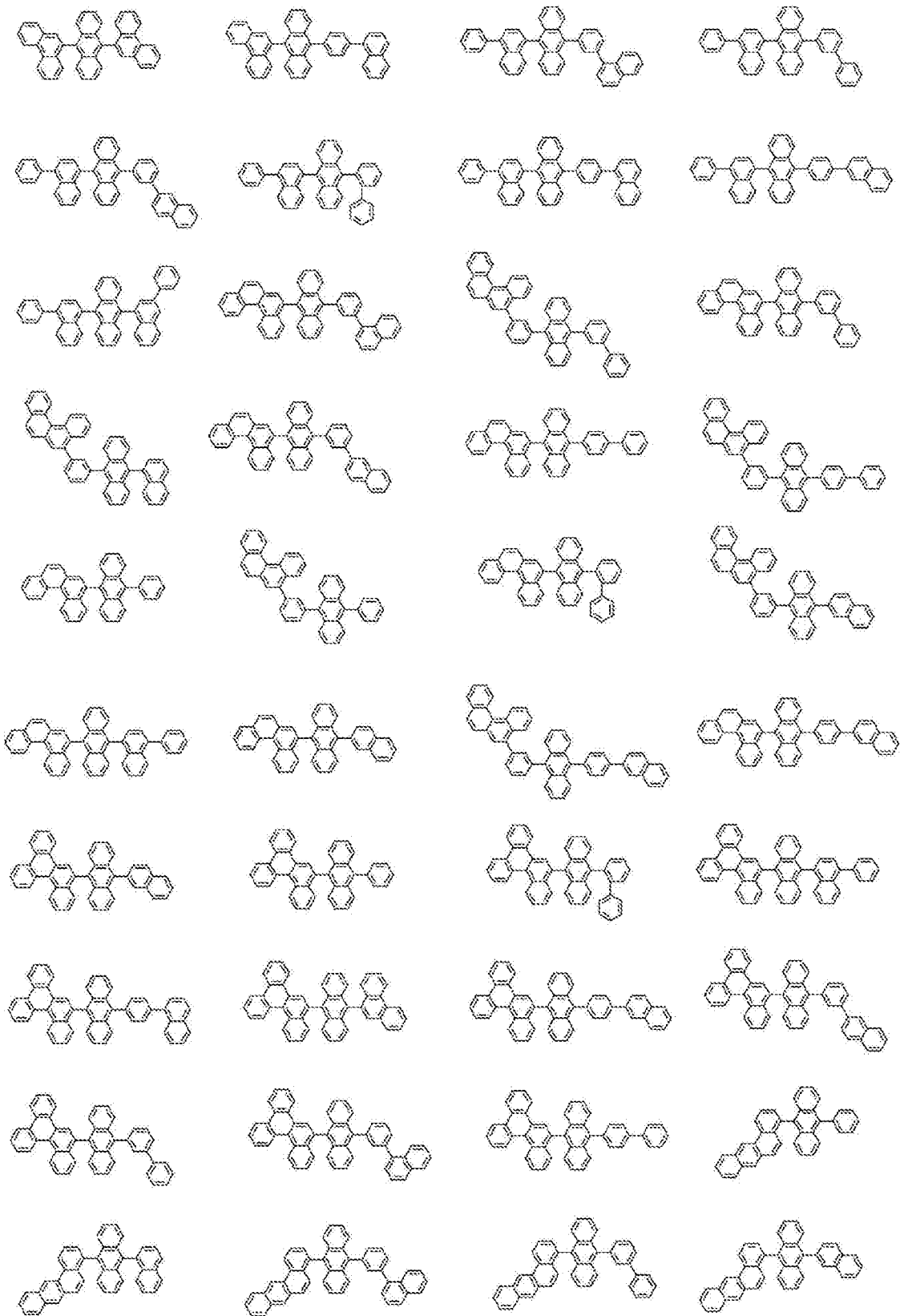
第二の化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら第二の化合物の具体例に限定されない。

[0616]

[化204]

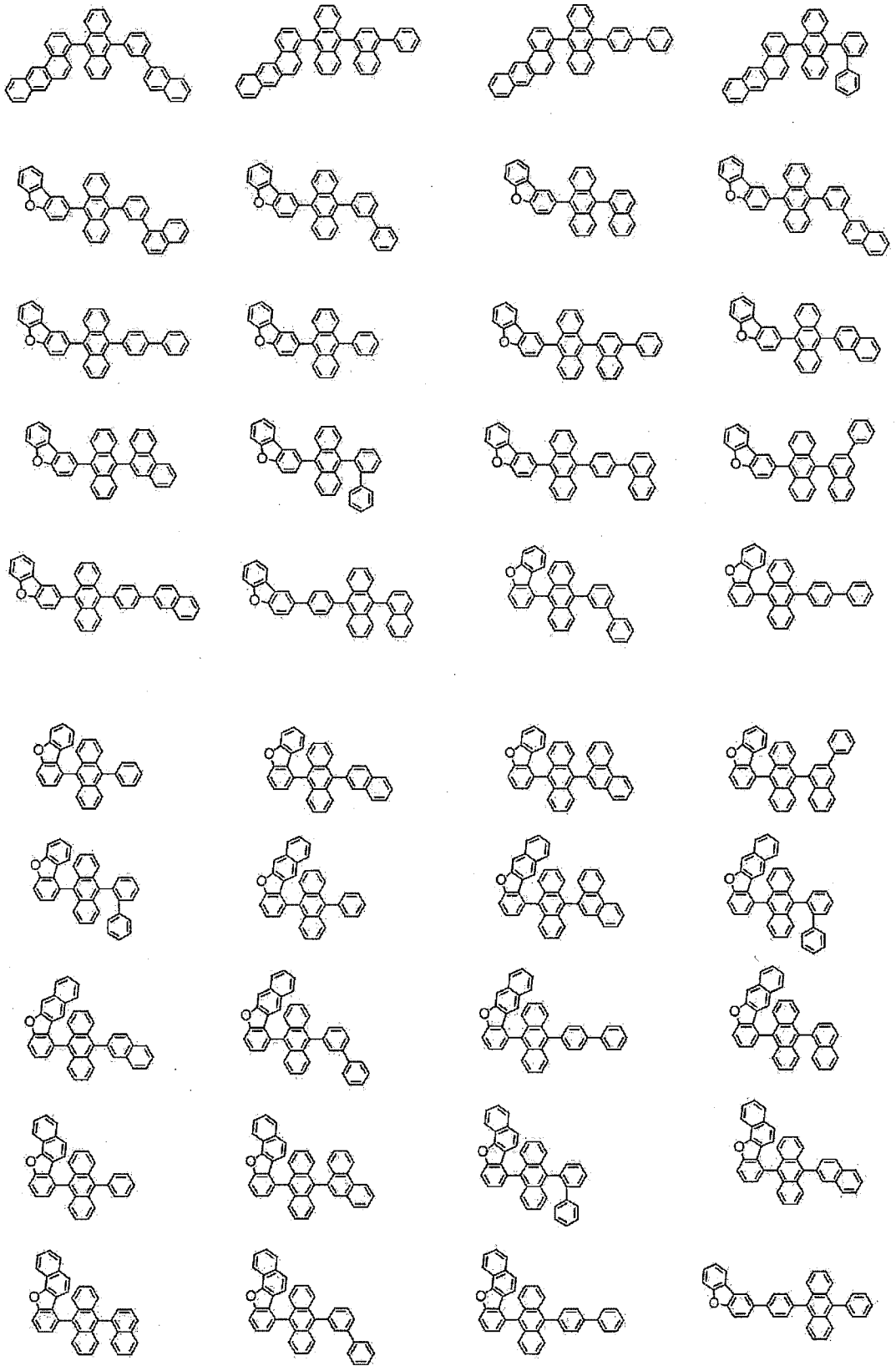


[0617] [化205]

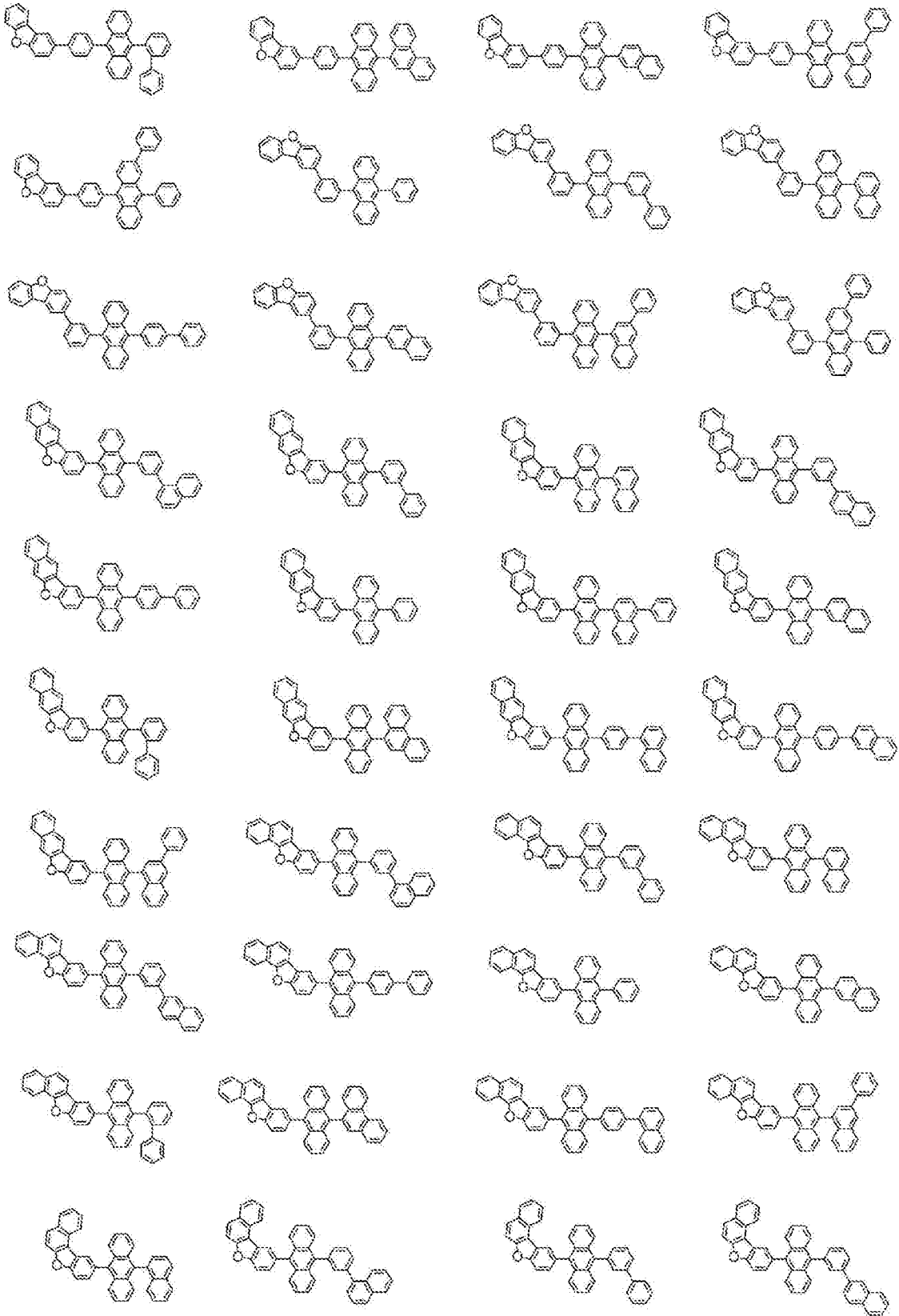


[0618]

[化206]

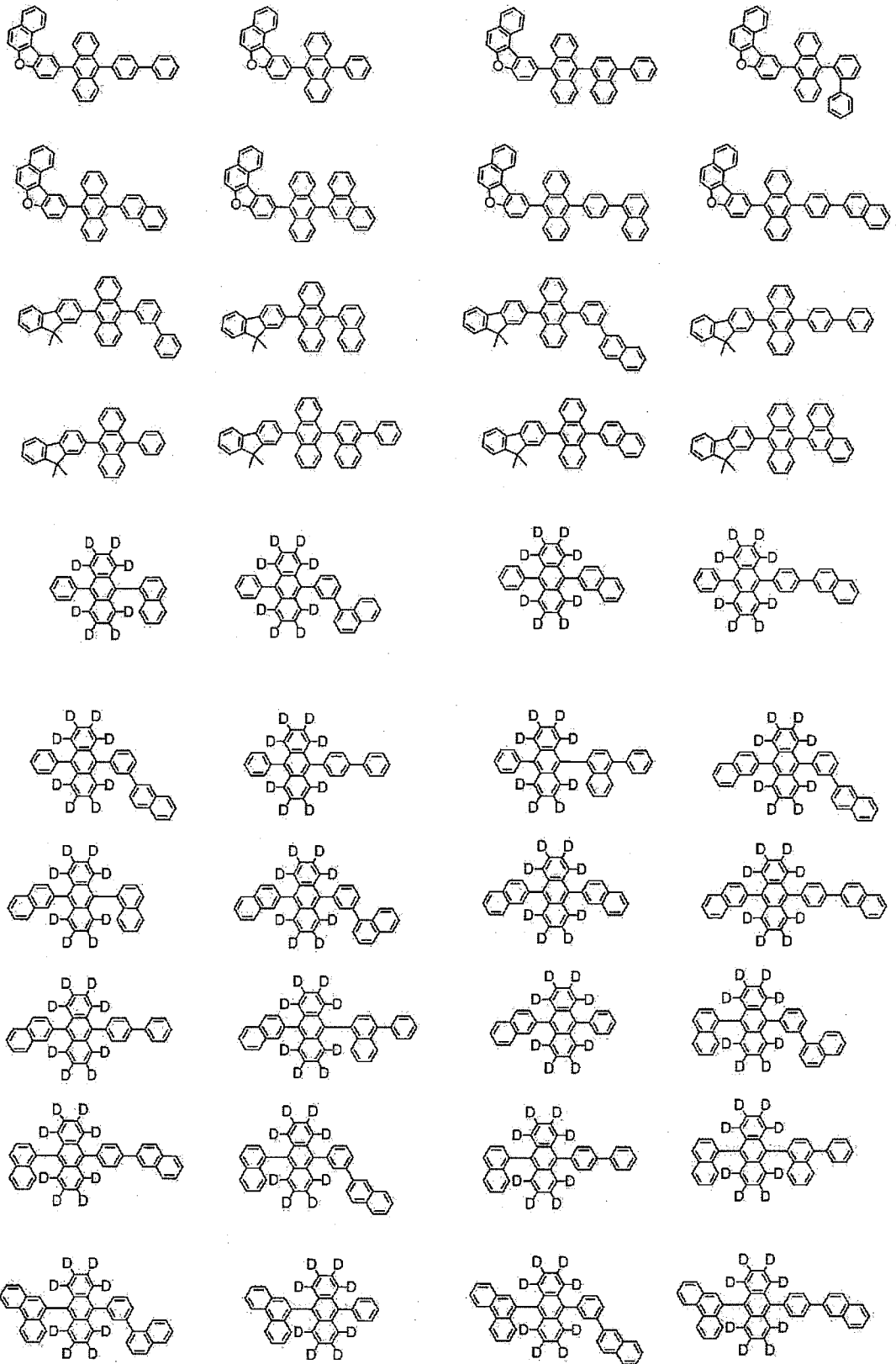


[0619] [化207]



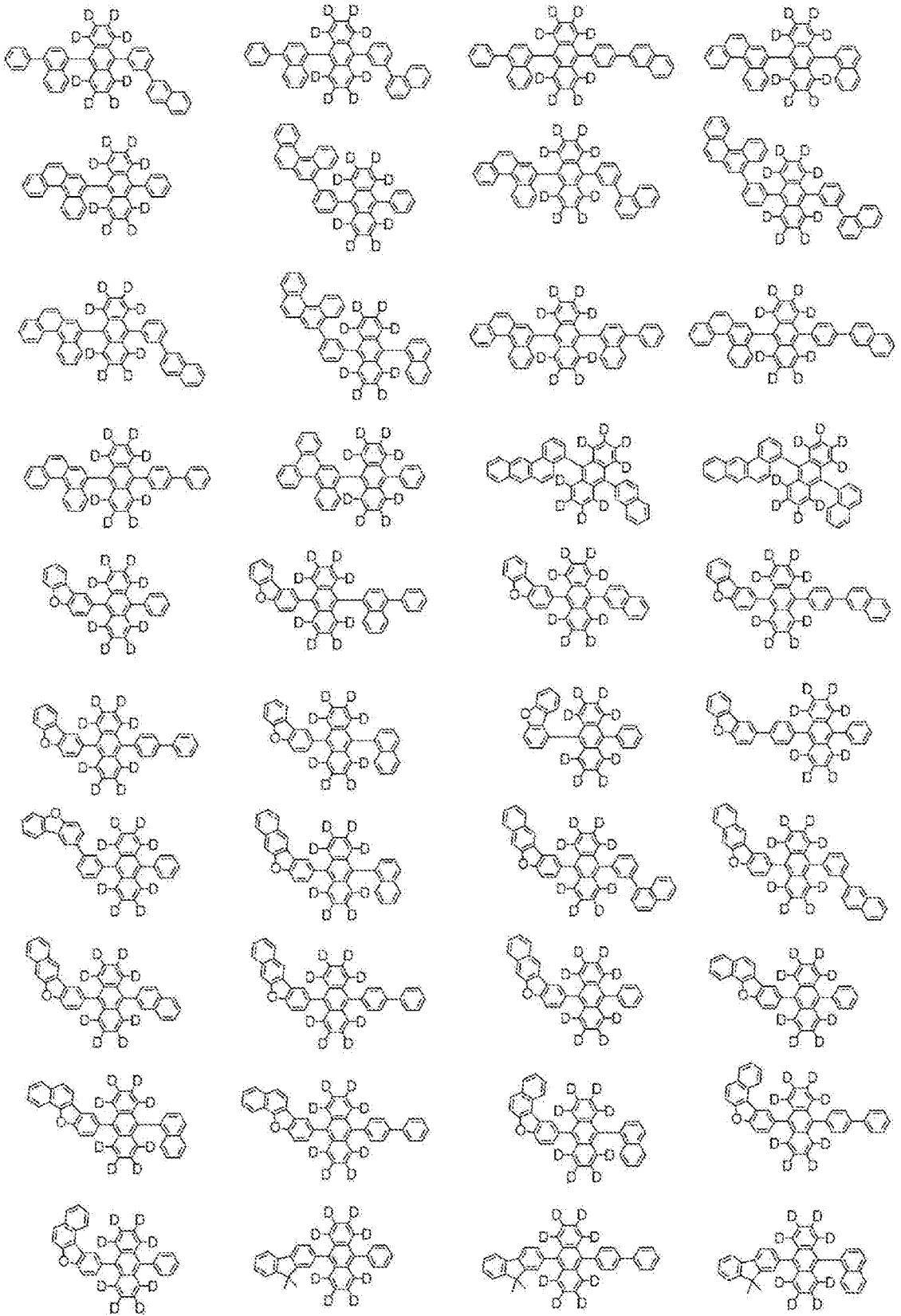
[0620]

[化208]



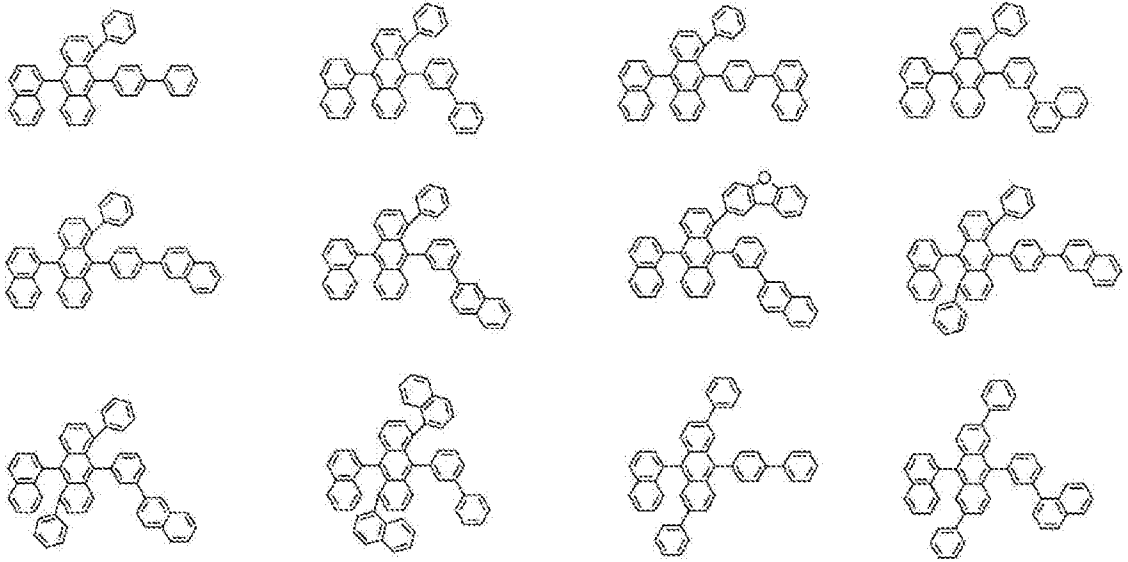
[0621]

[化209]

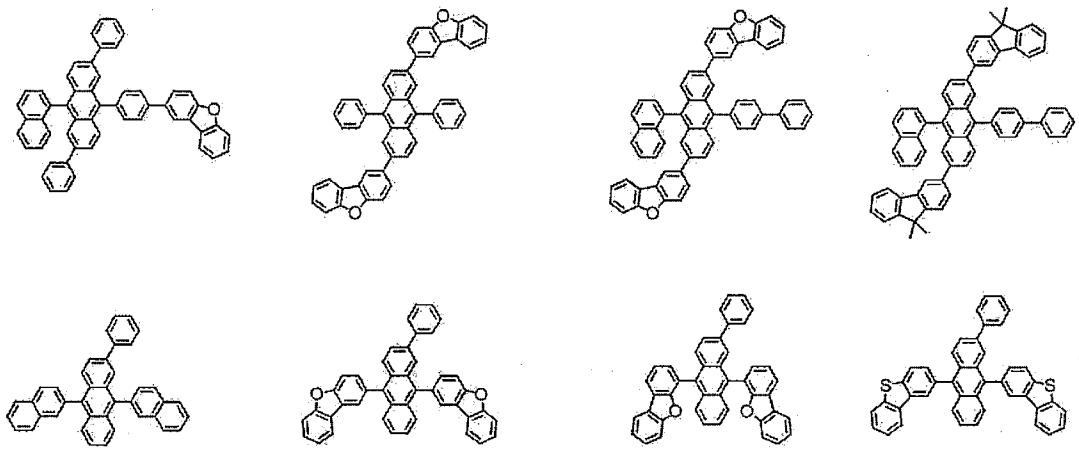


[0622]

[化210]

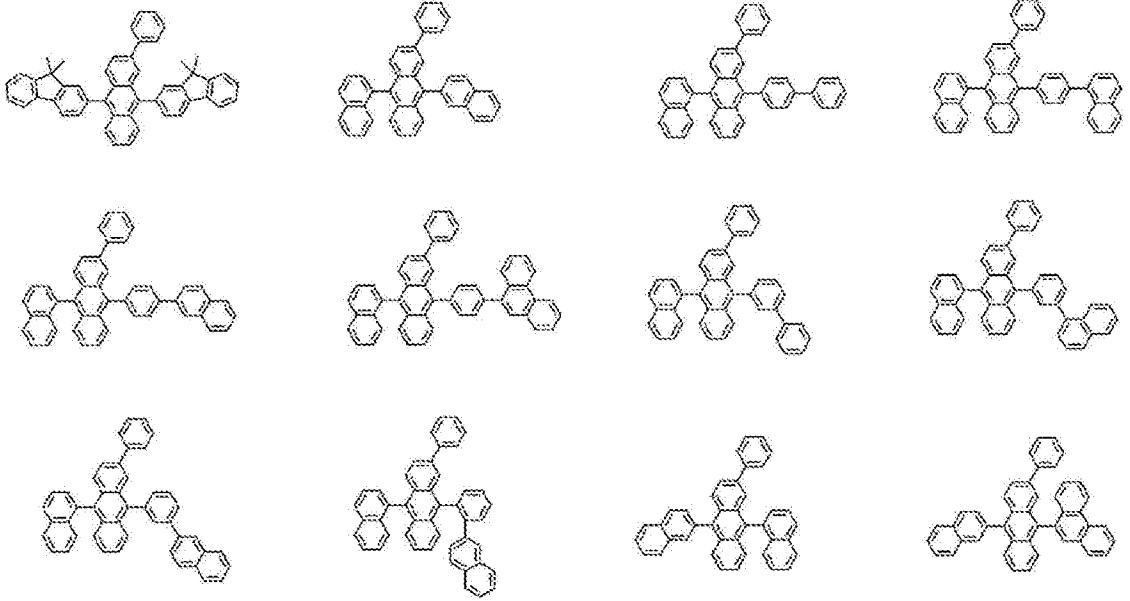


[0623] [化211]

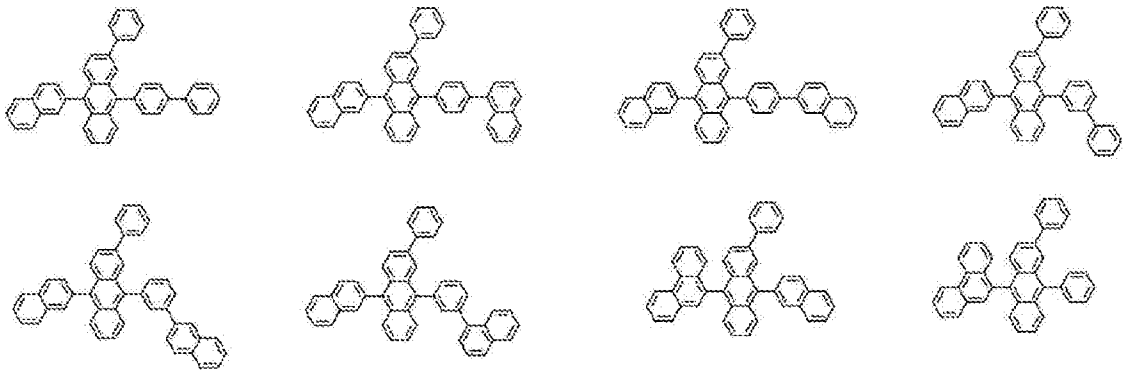


[0624]

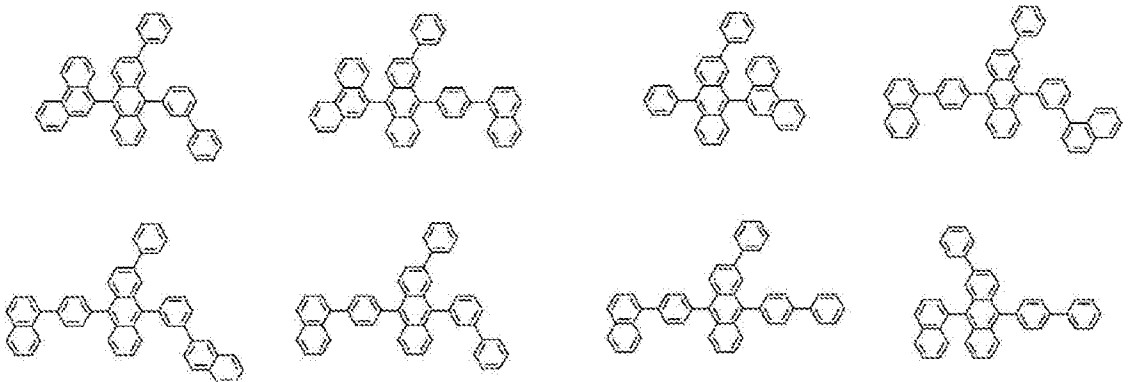
[化212]



[0625] [化213]

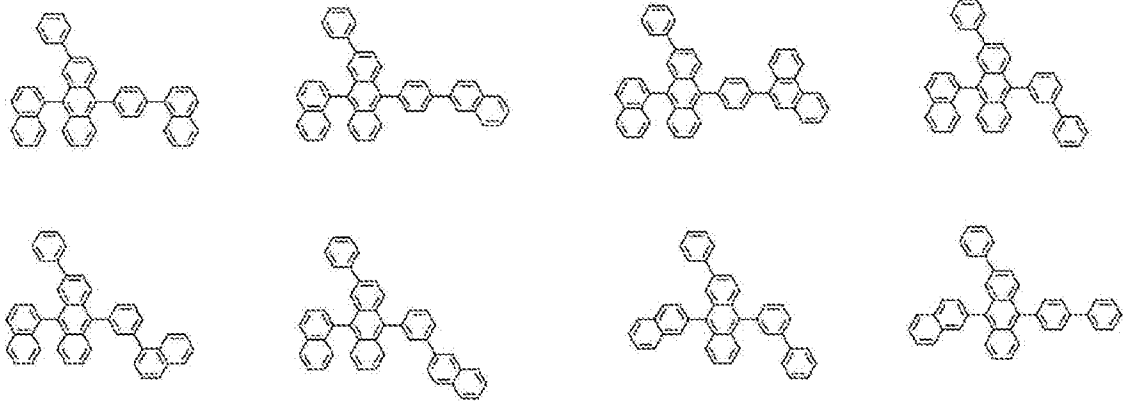


[0626] [化214]

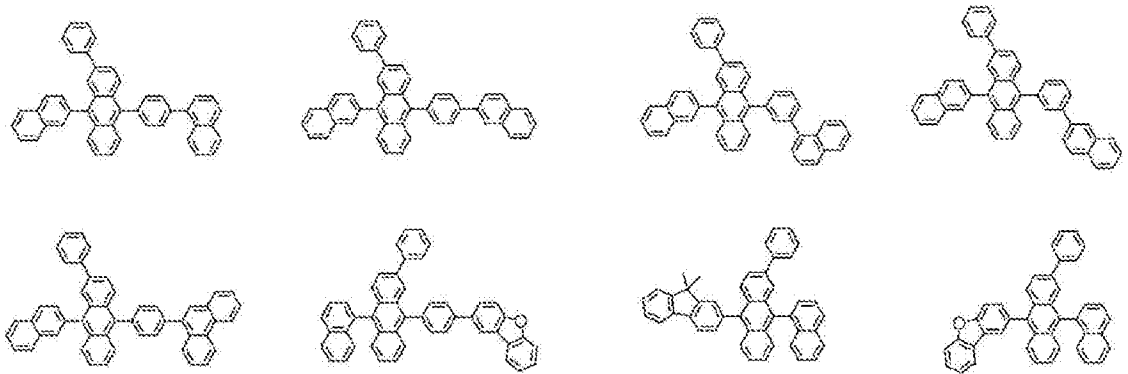


[0627]

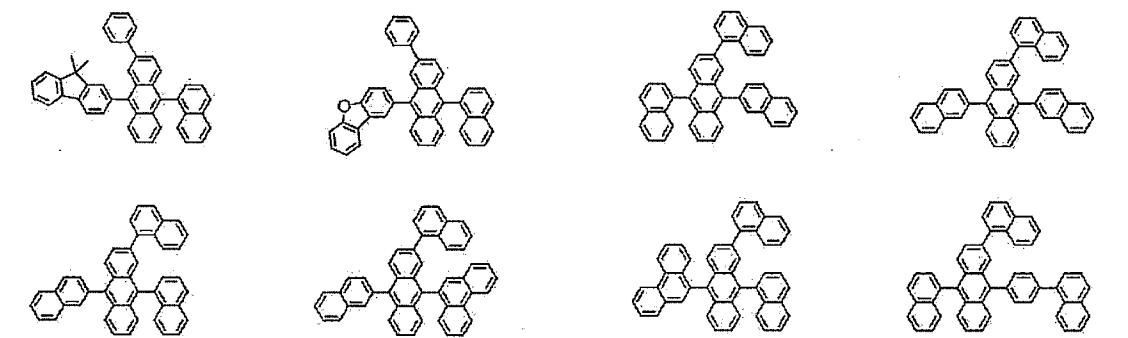
[化215]



[0628] [化216]

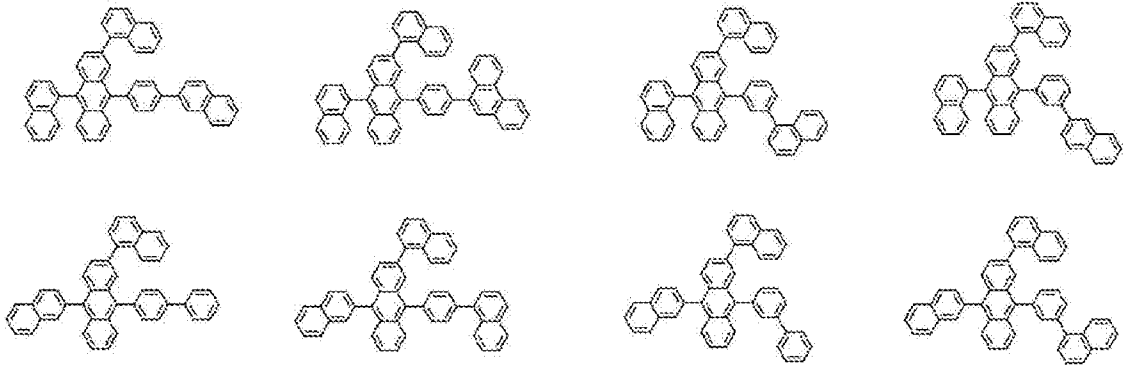


[0629] [化217]

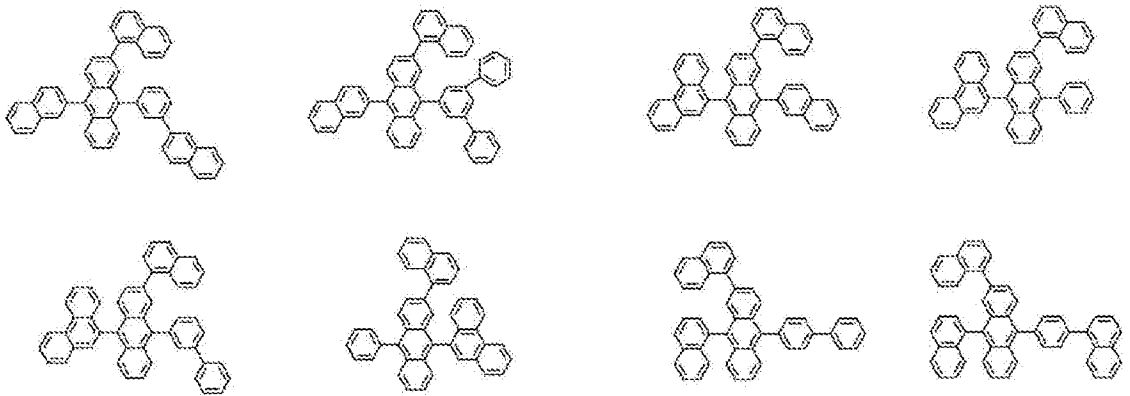


[0630]

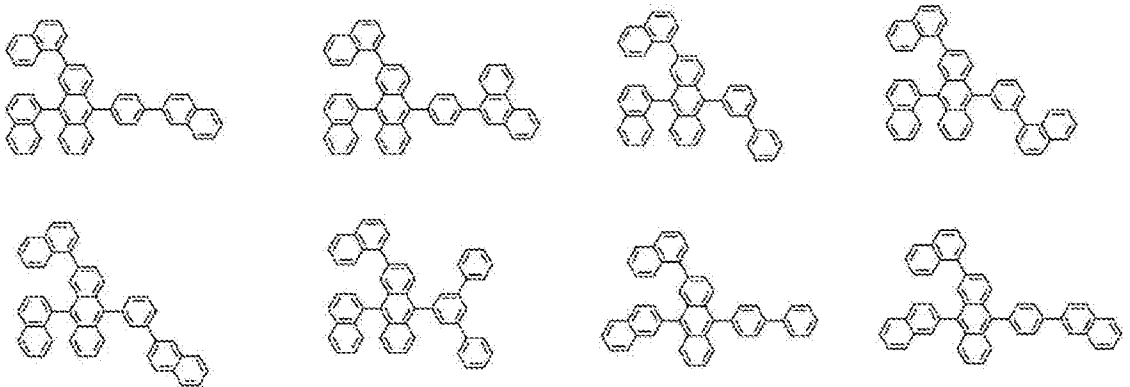
[化218]



[0631] [化219]

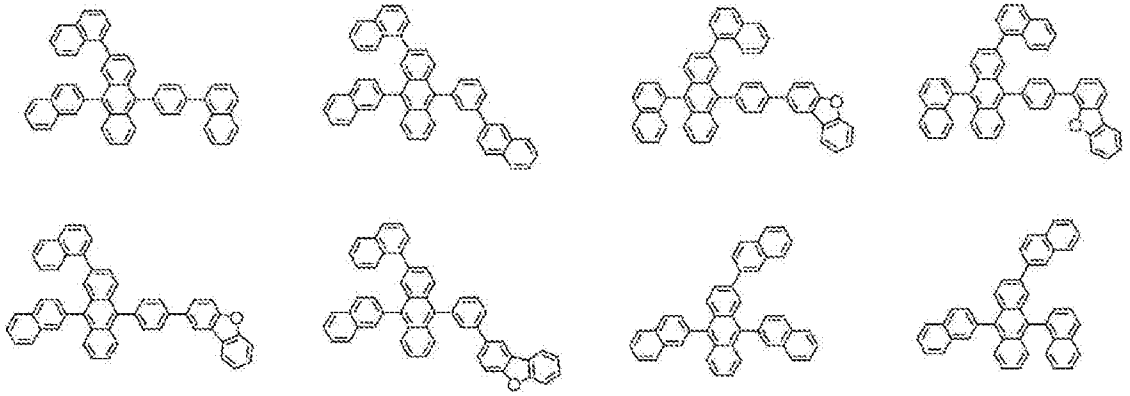


[0632] [化220]

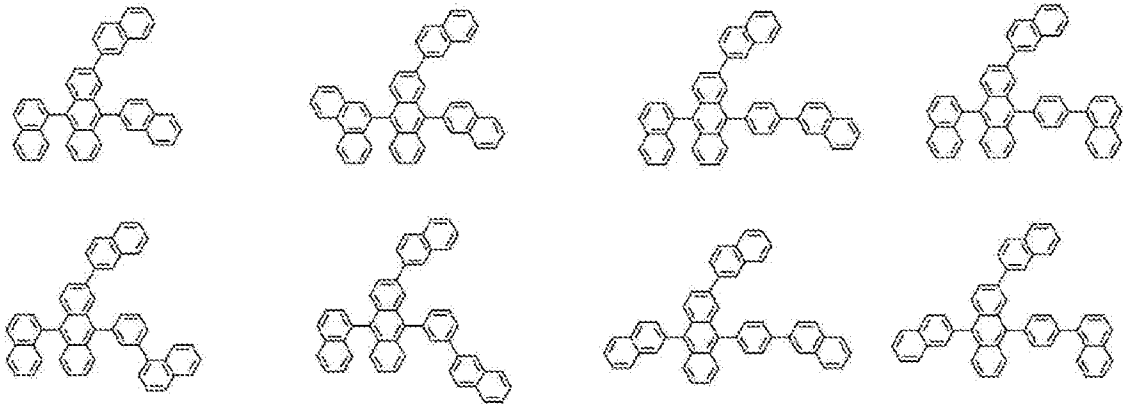


[0633]

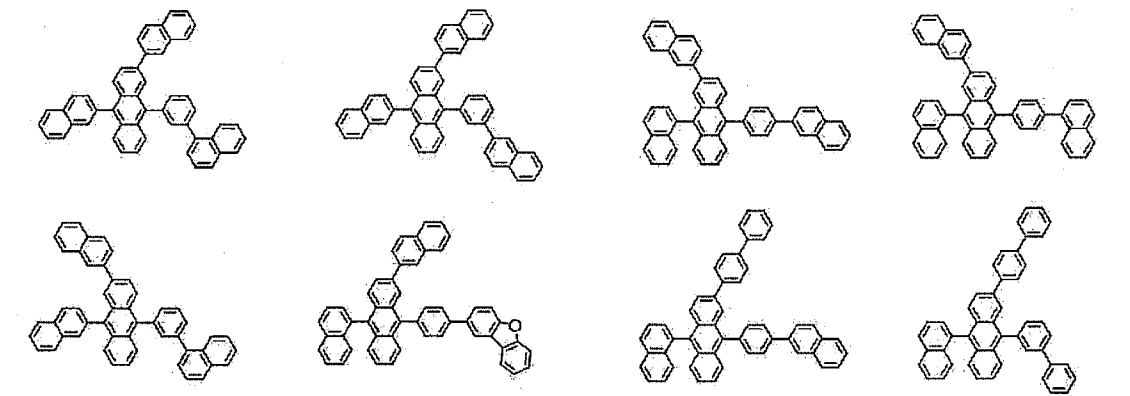
[化221]



[0634] [化222]

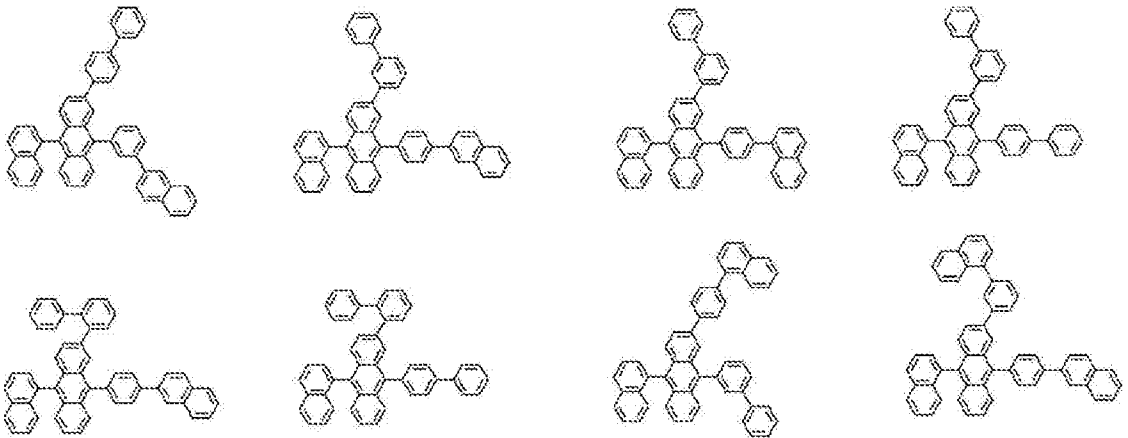


[0635] [化223]

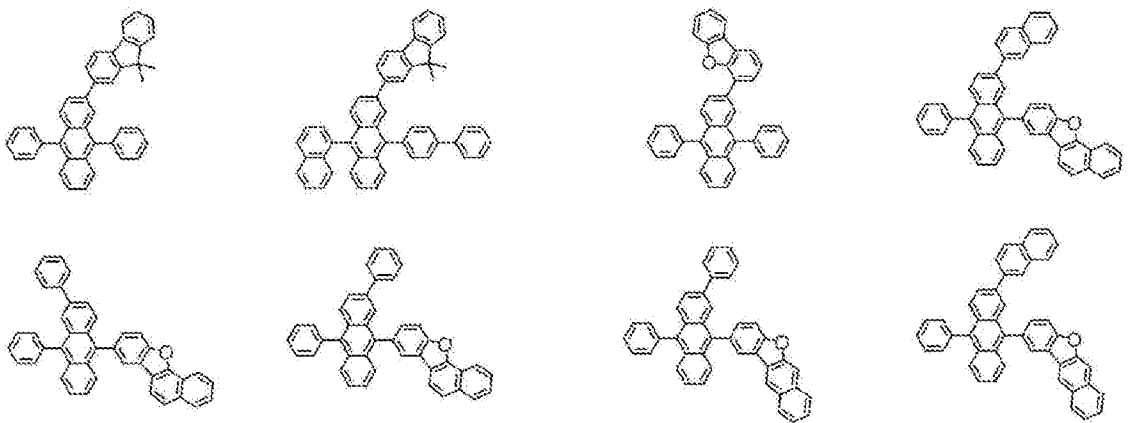


[0636]

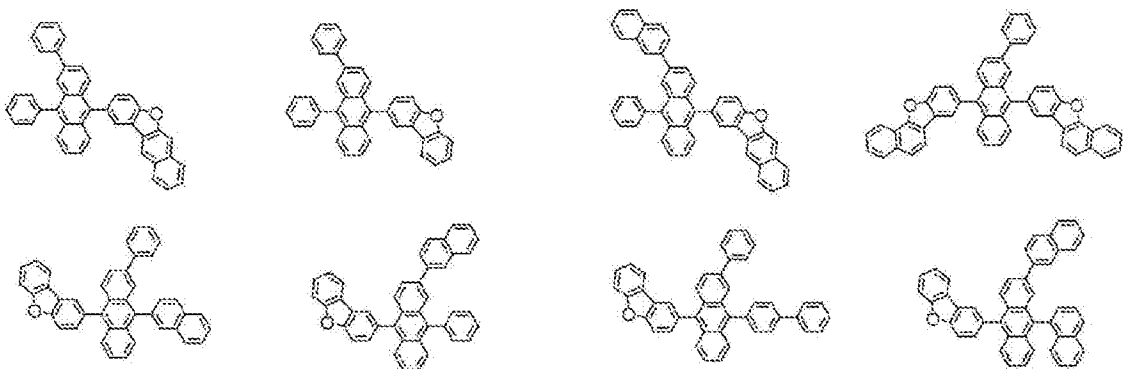
[化224]



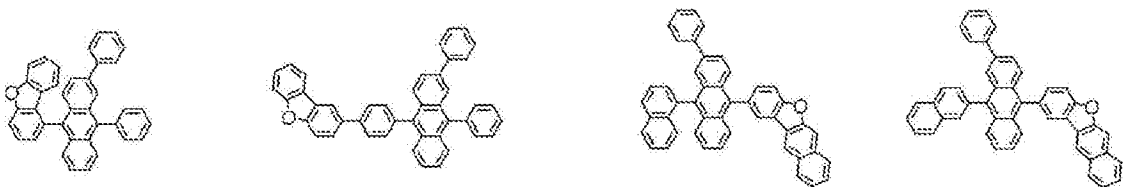
[0637] [化225]



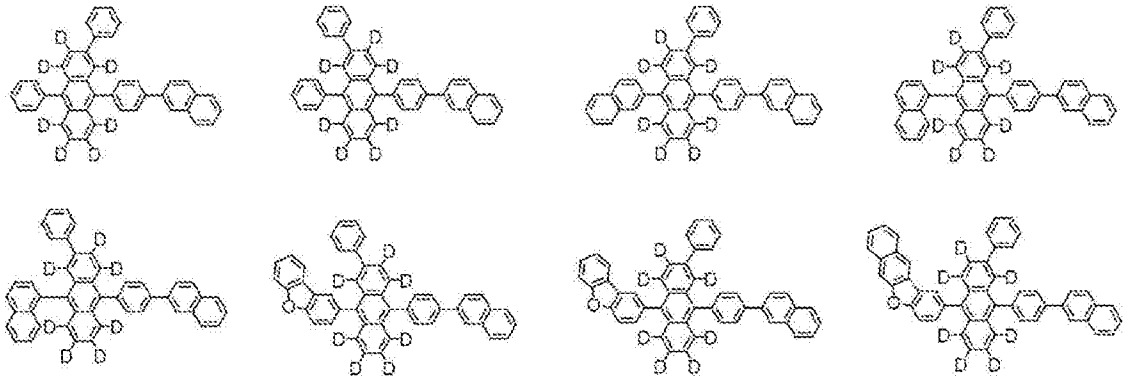
[0638] [化226]



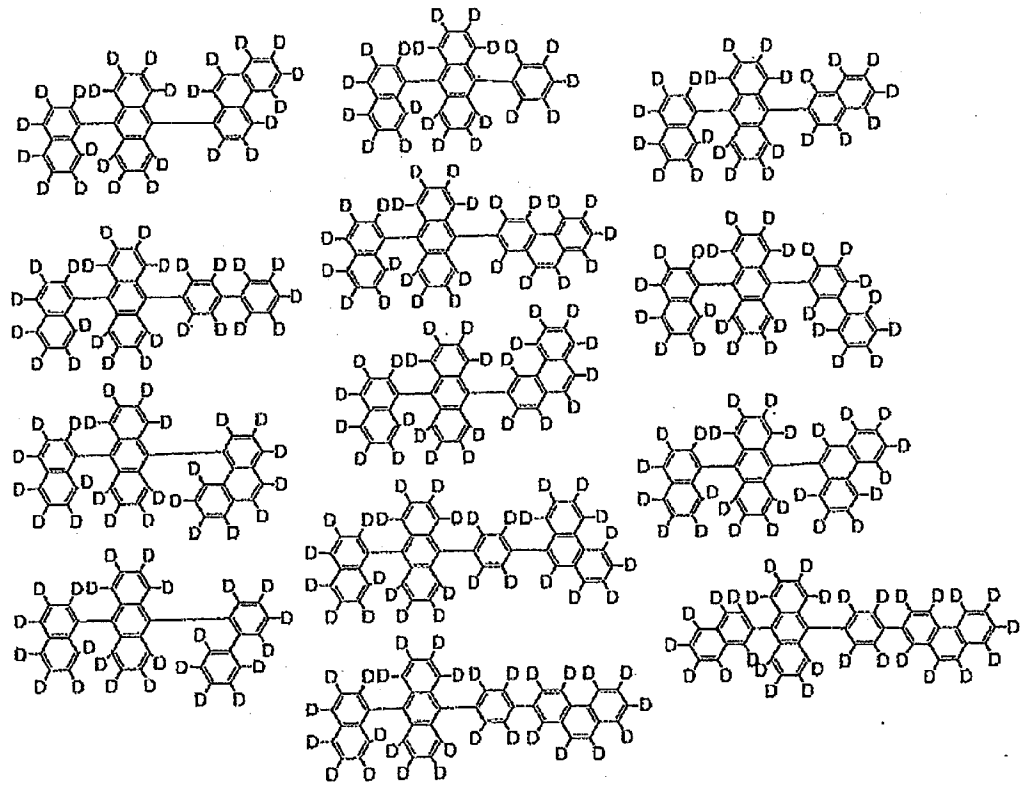
[0639] [化227]



[0640] [化228]

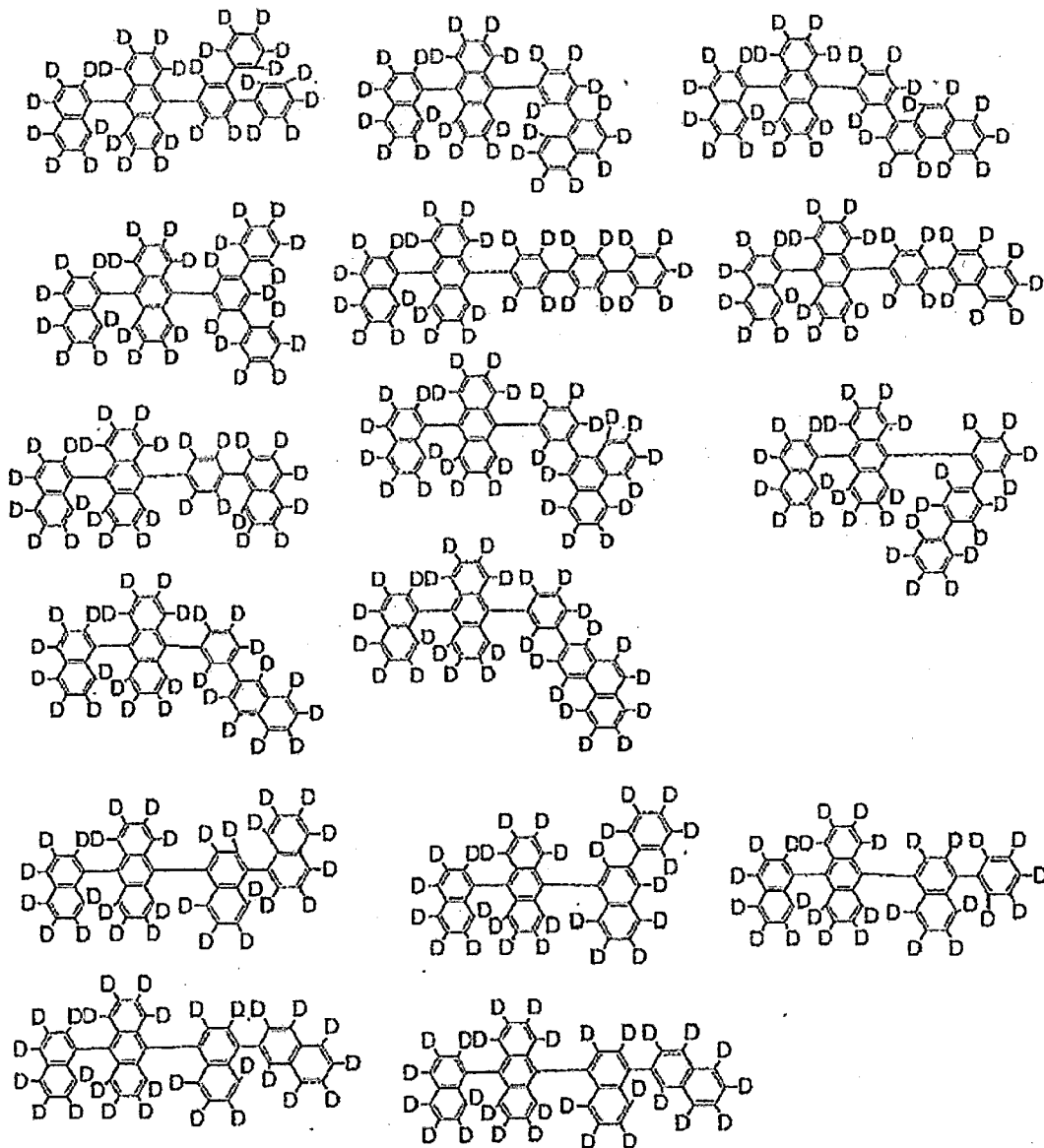


[0641] [化229]



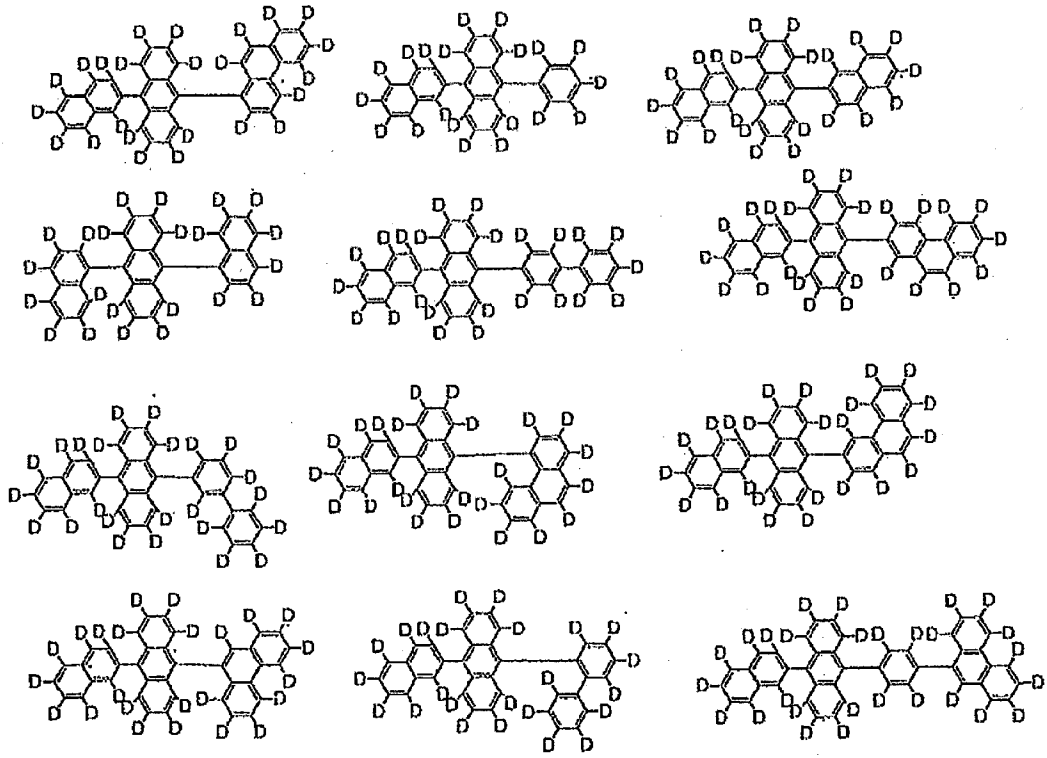
[0642]

[化230]



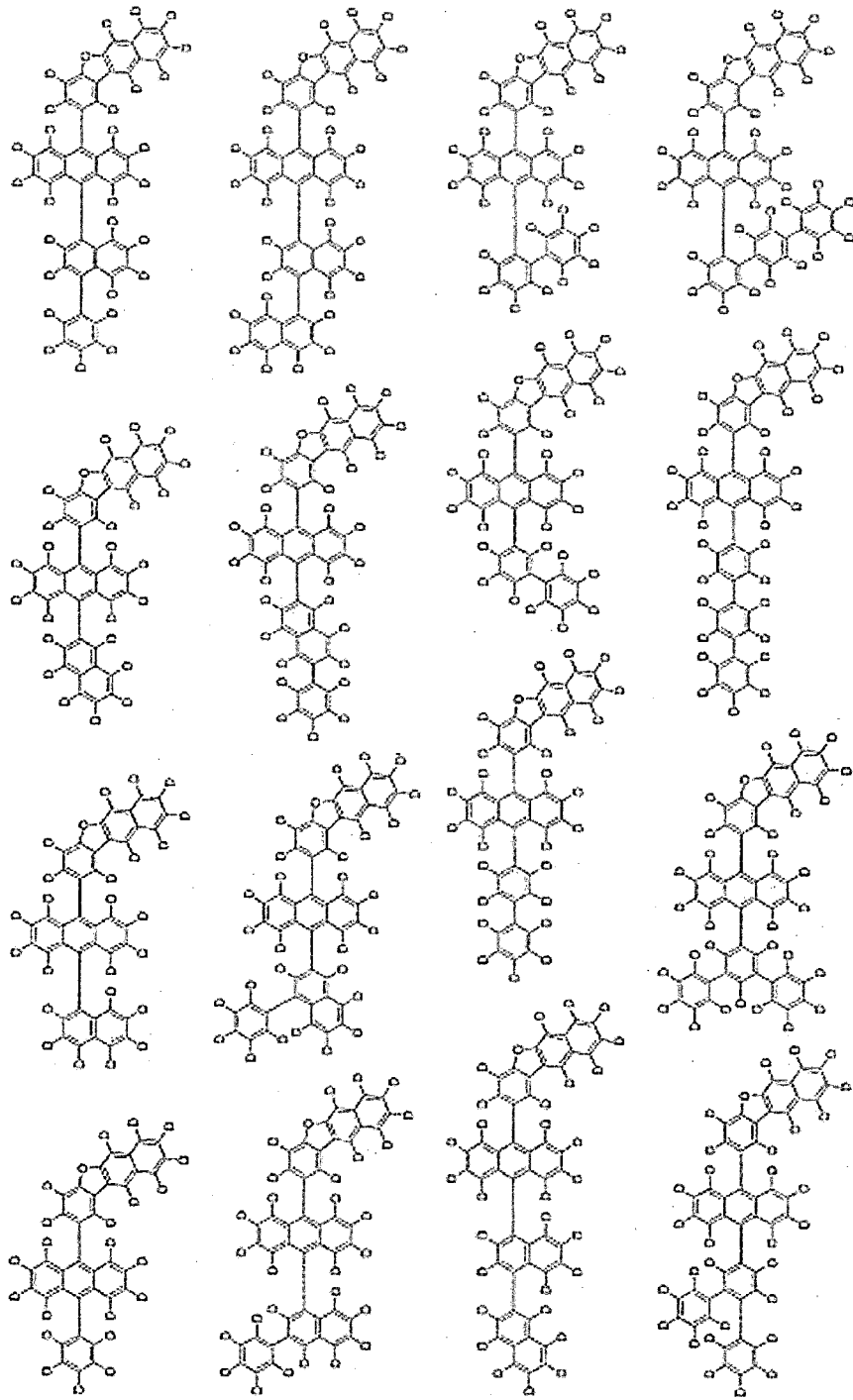
[0643]

[化231]



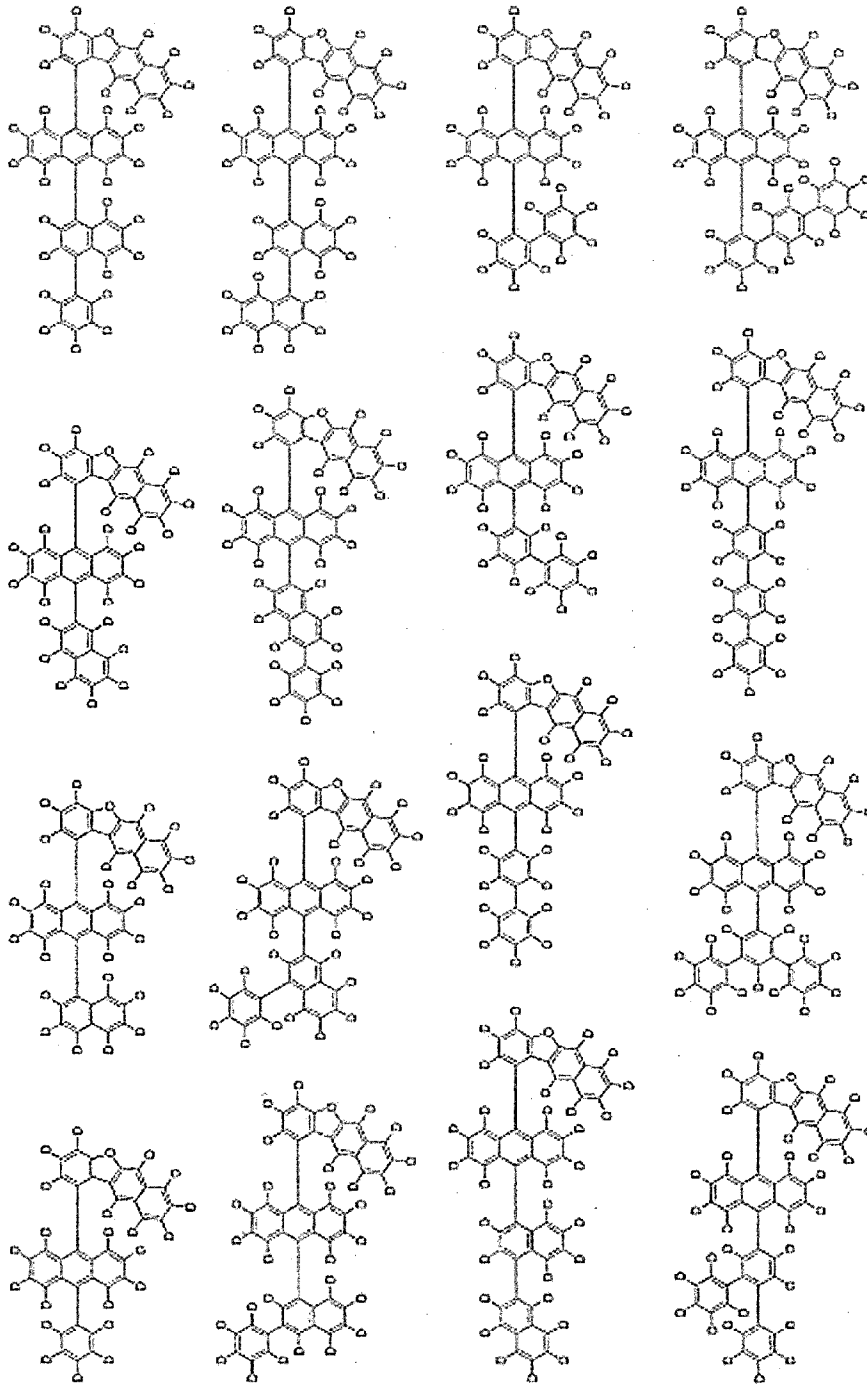
[0644]

[化232]



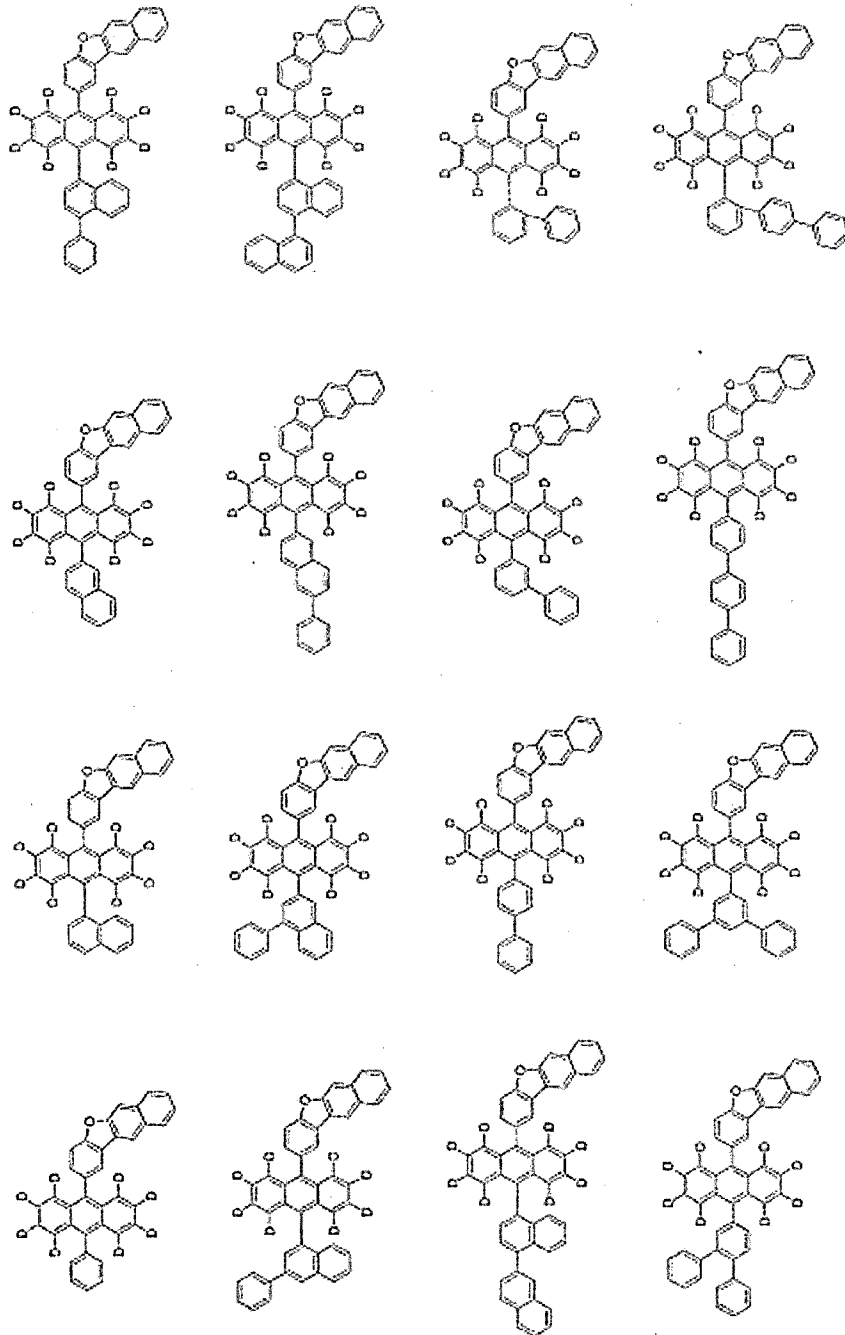
[0645]

[化233]



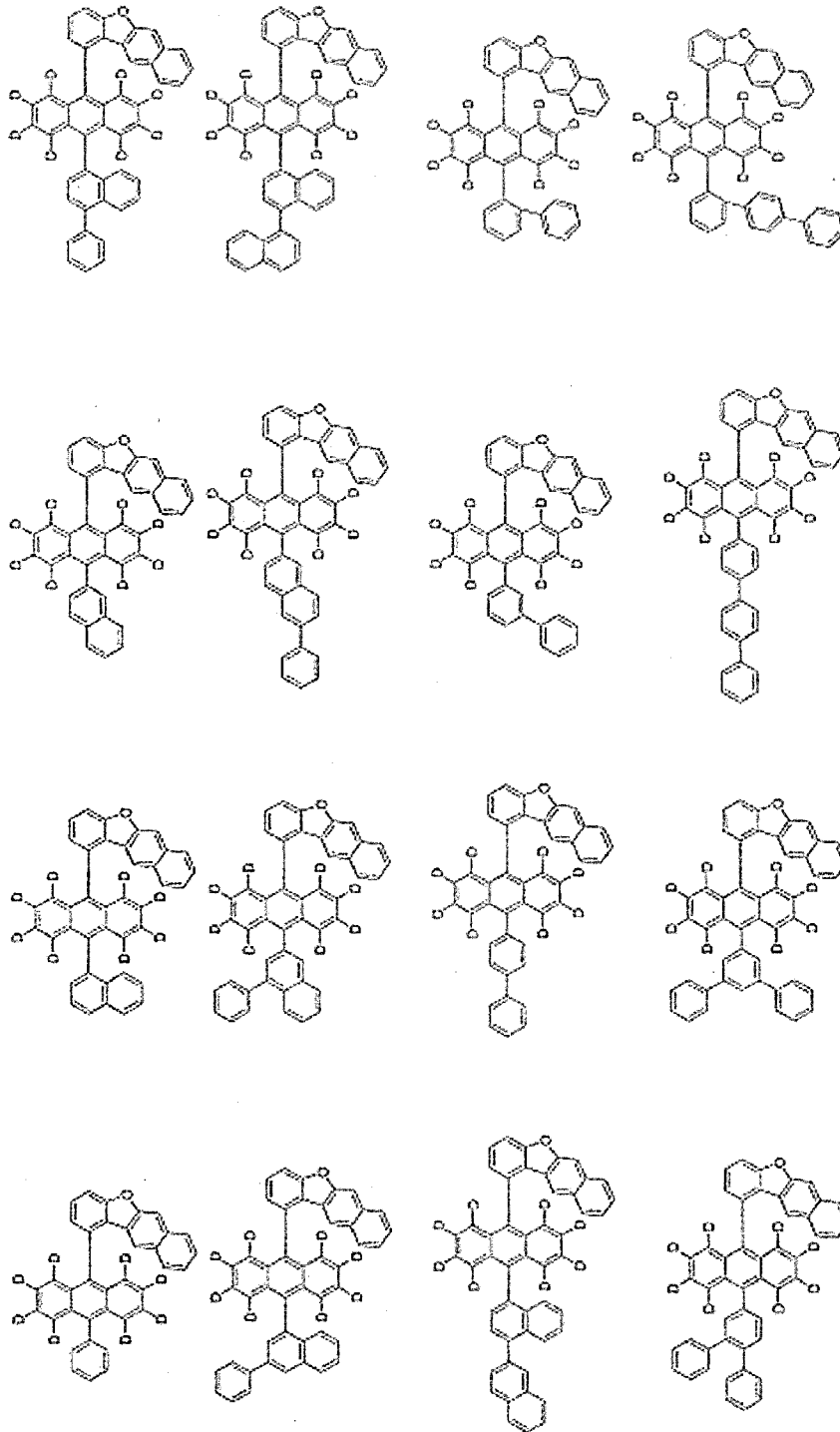
[0646]

[化234]



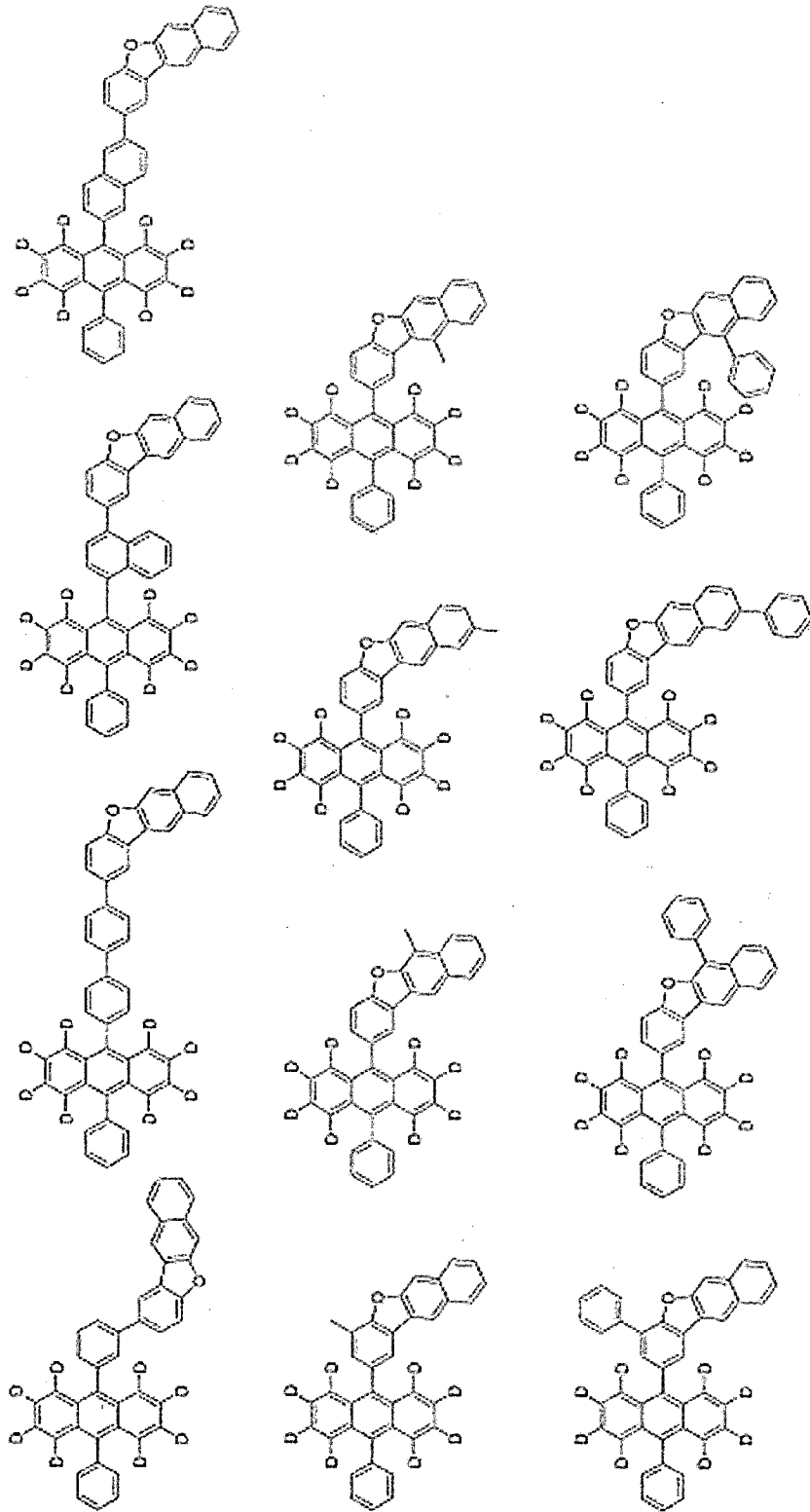
[0647]

[化235]



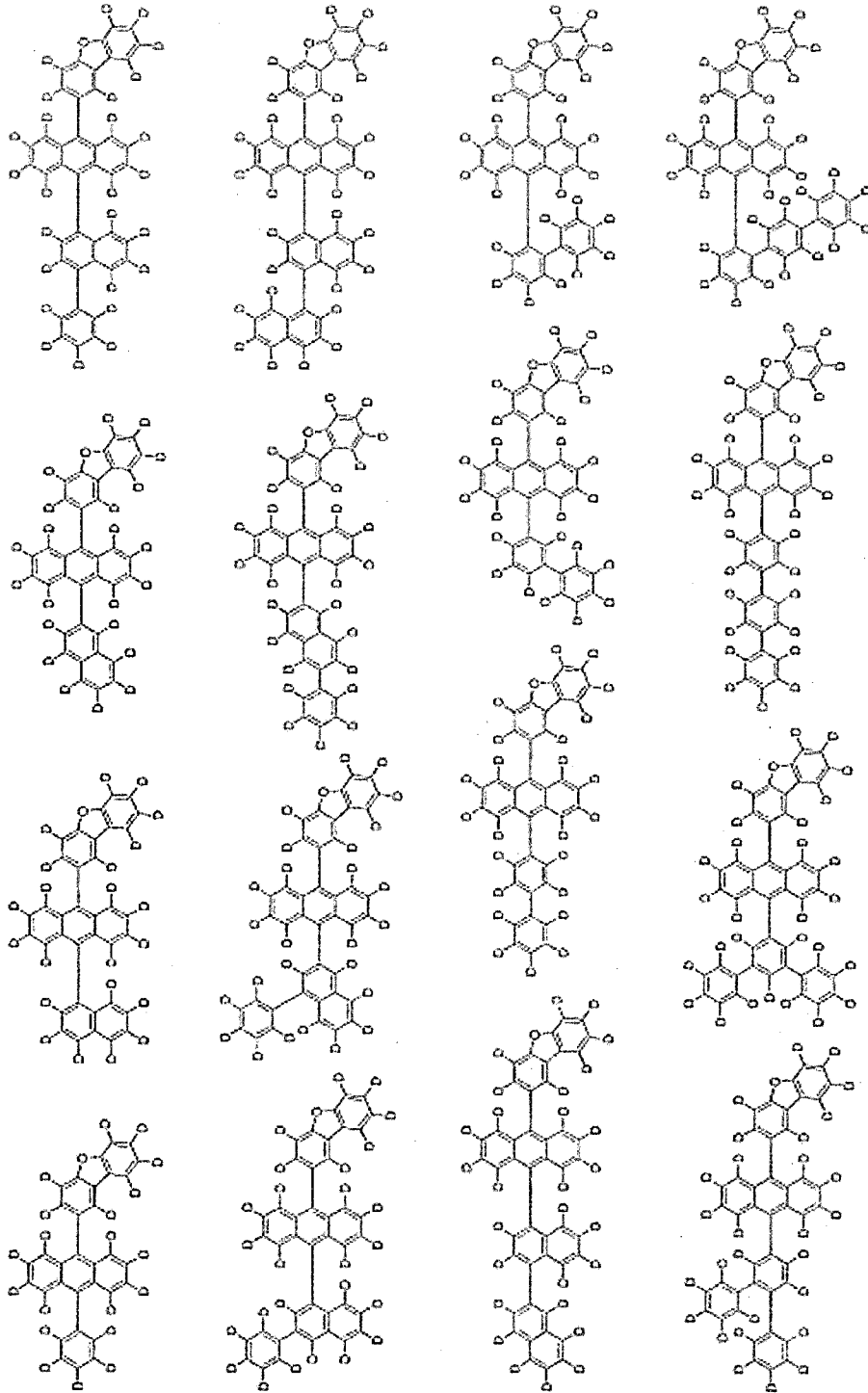
[0648]

[化236]



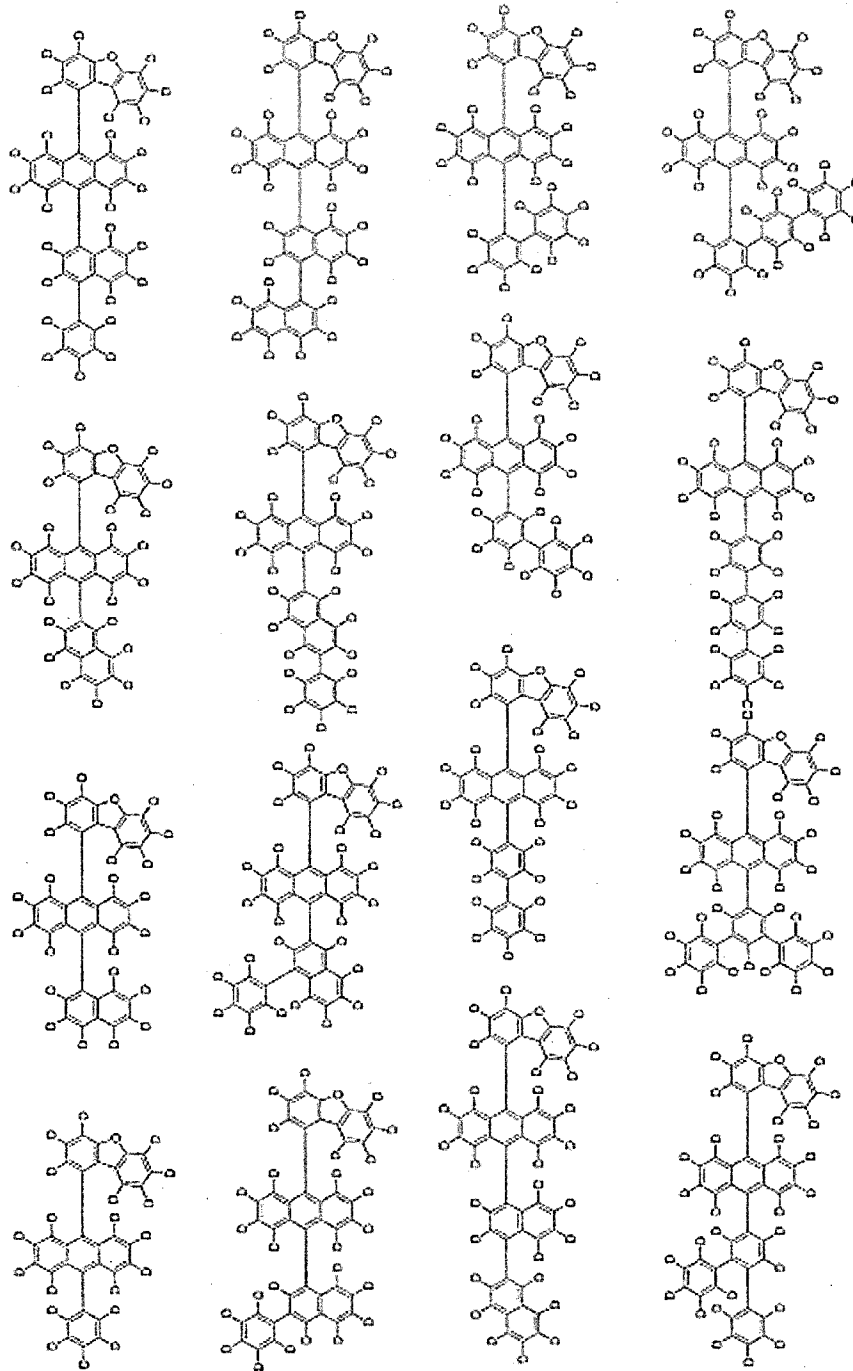
[0649]

[化237]



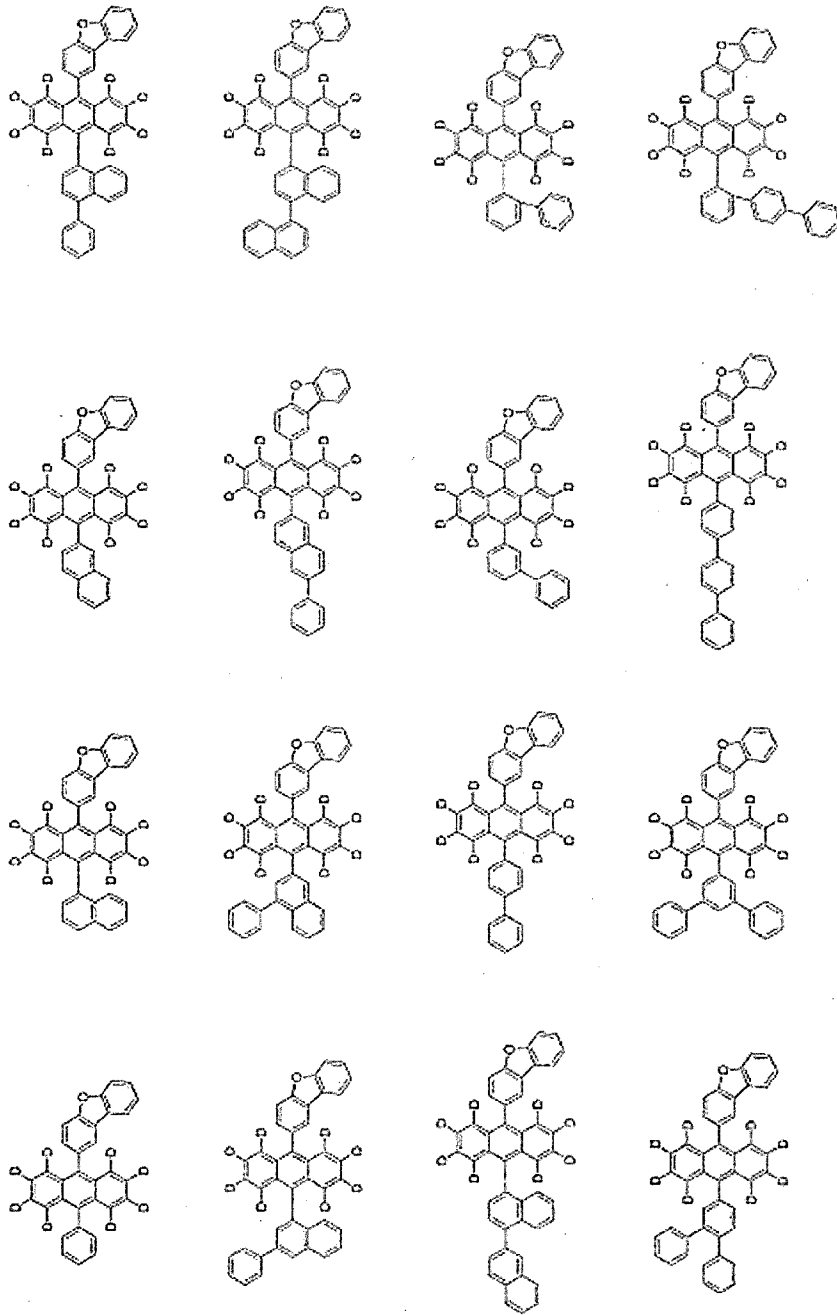
[0650]

[化238]



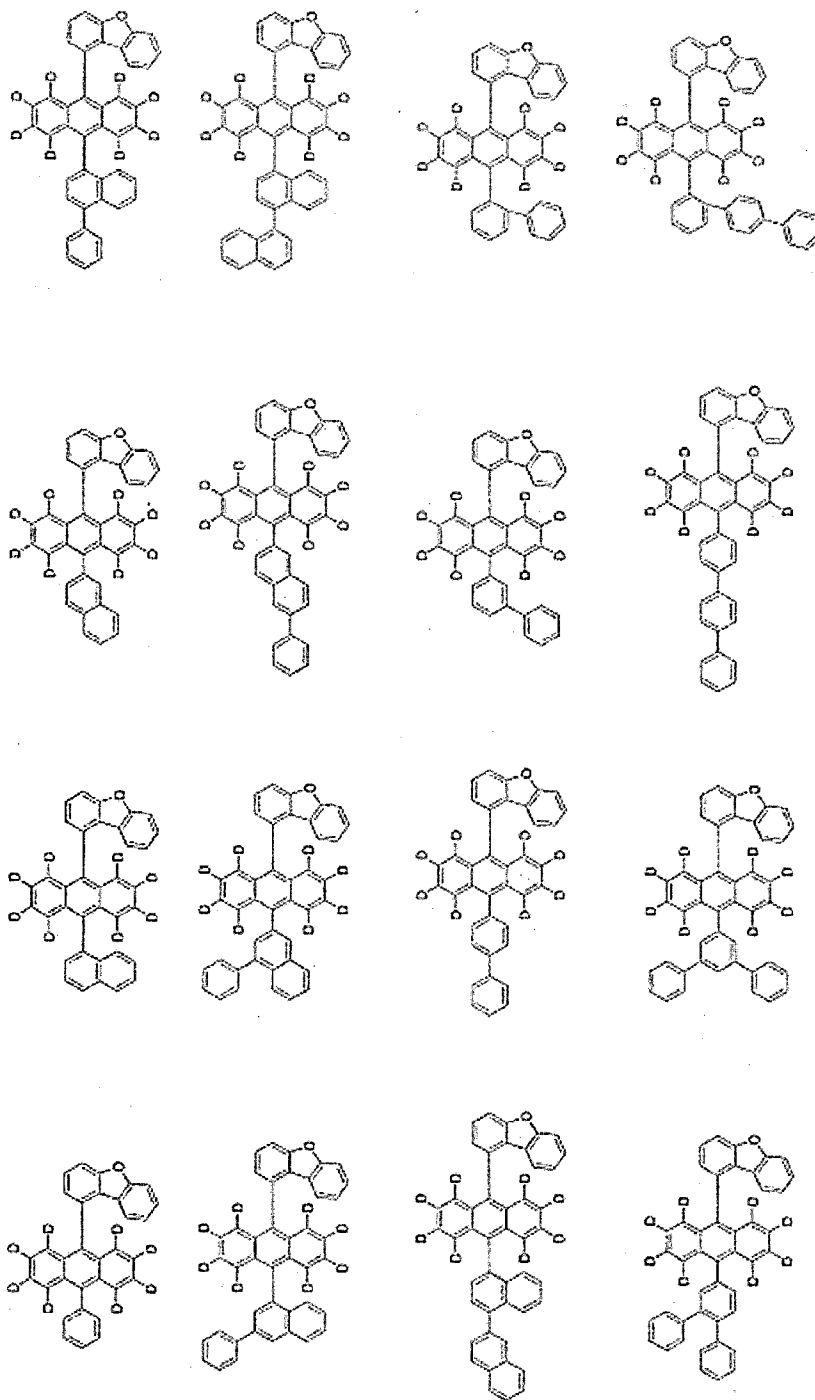
[0651]

[化239]



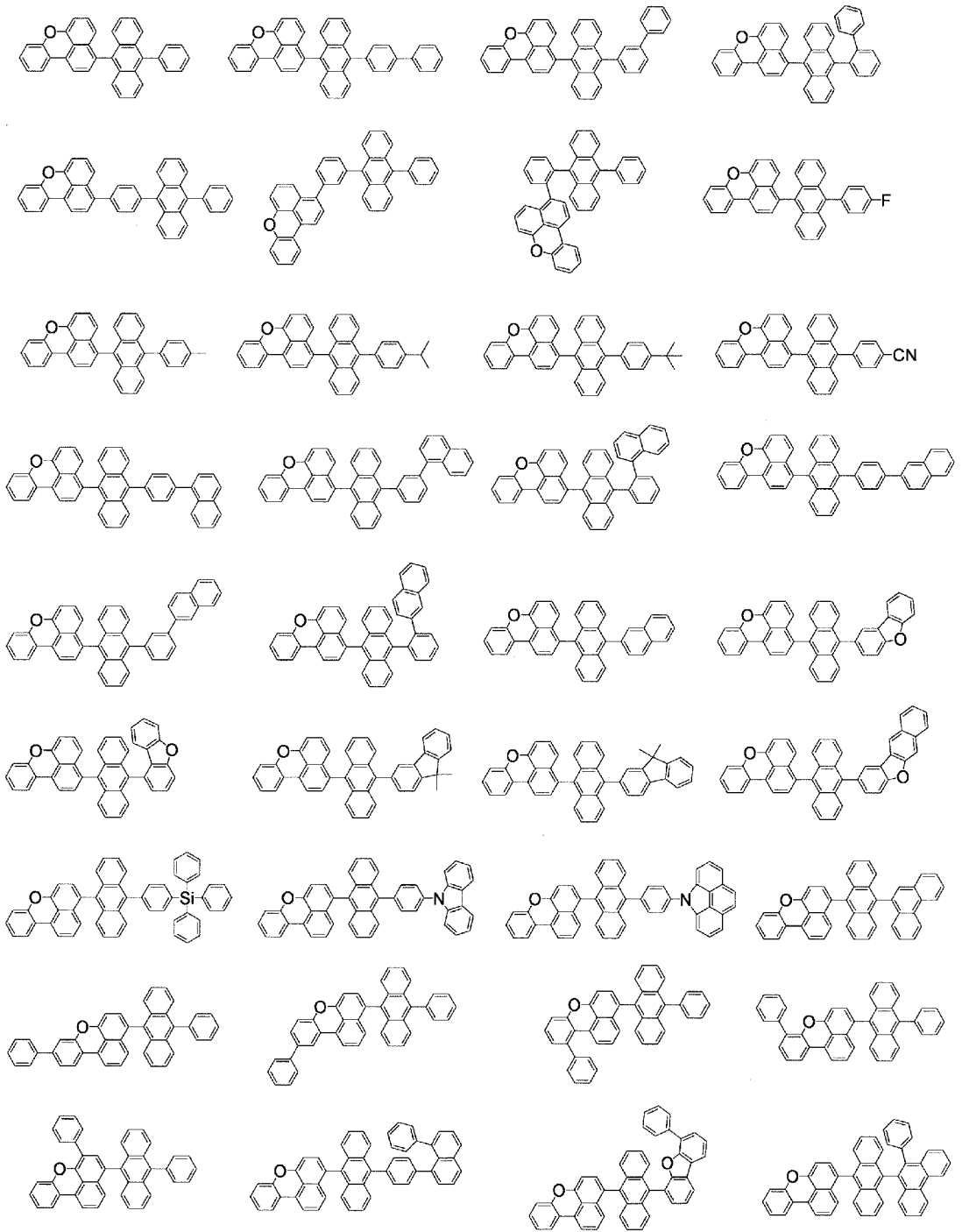
[0652]

[化240]



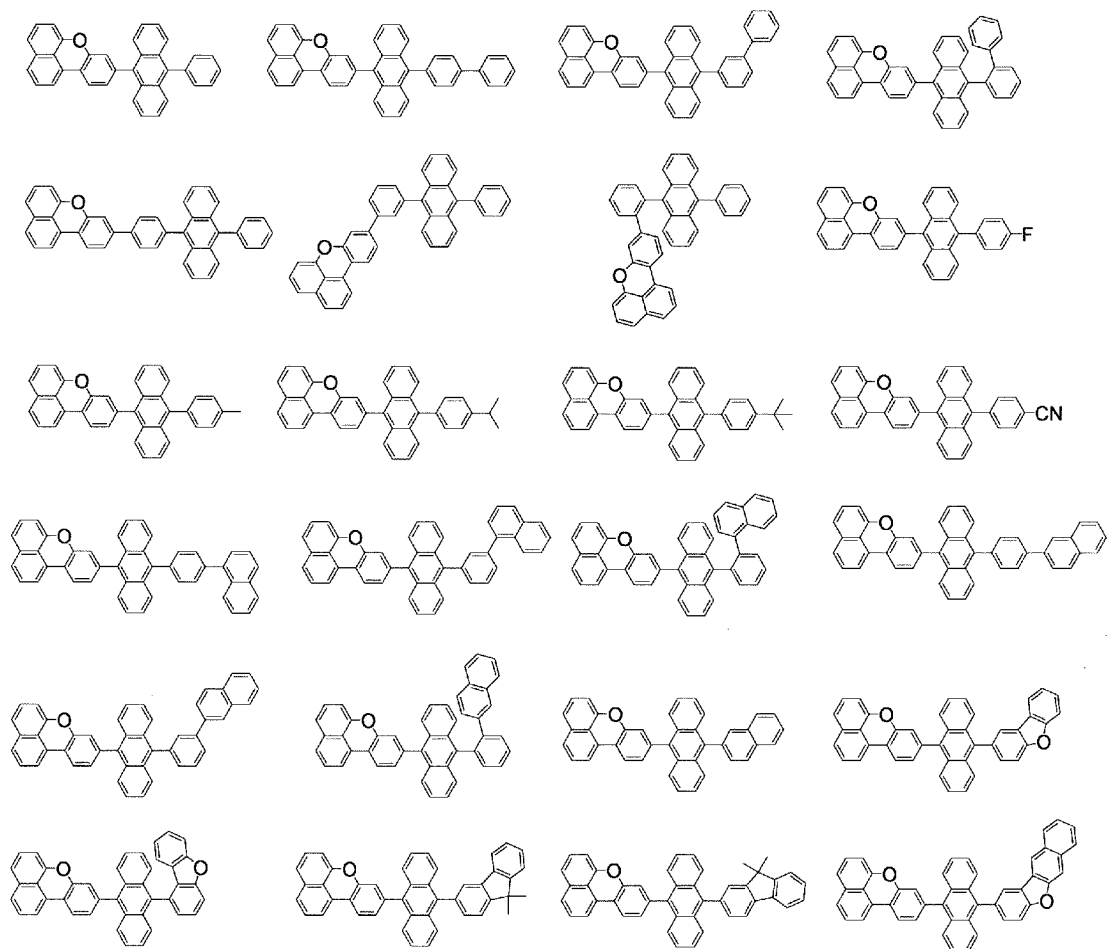
[0653]

[化241]



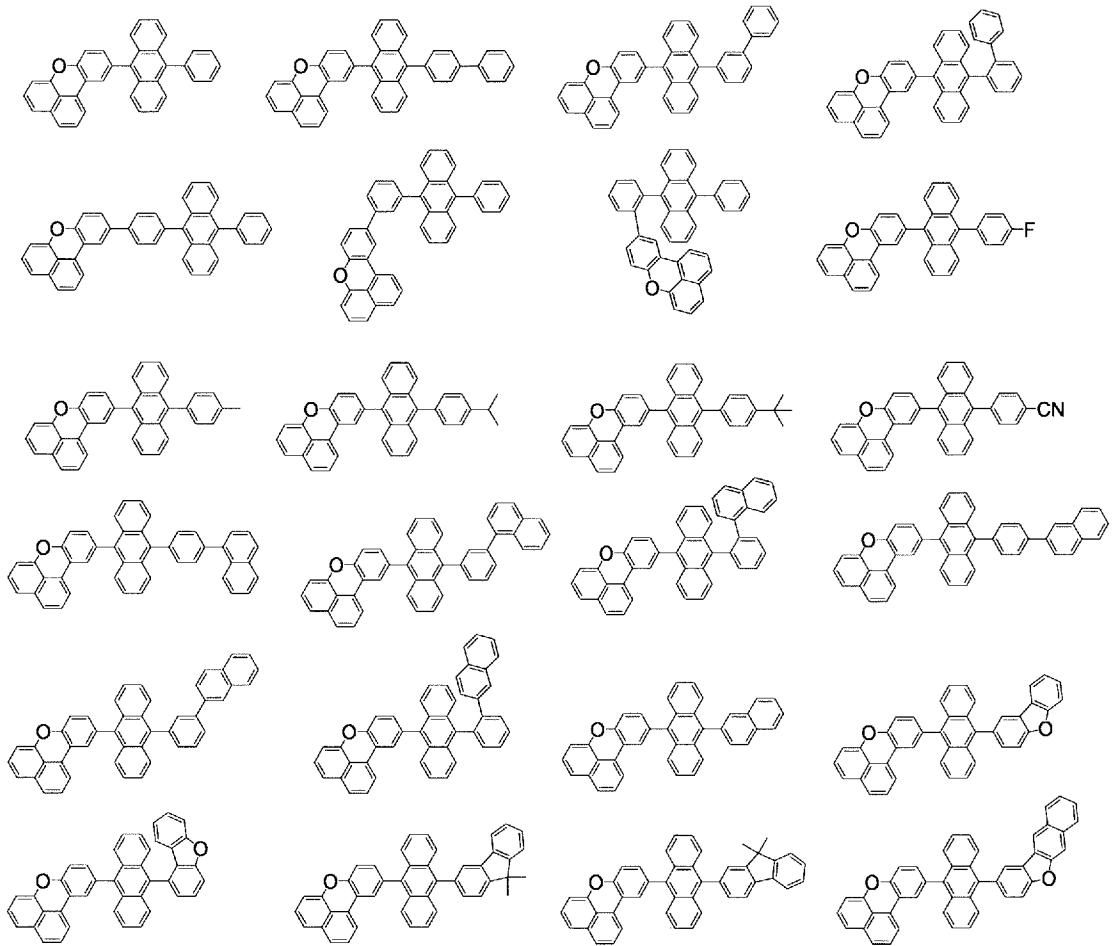
[0654]

[化242]



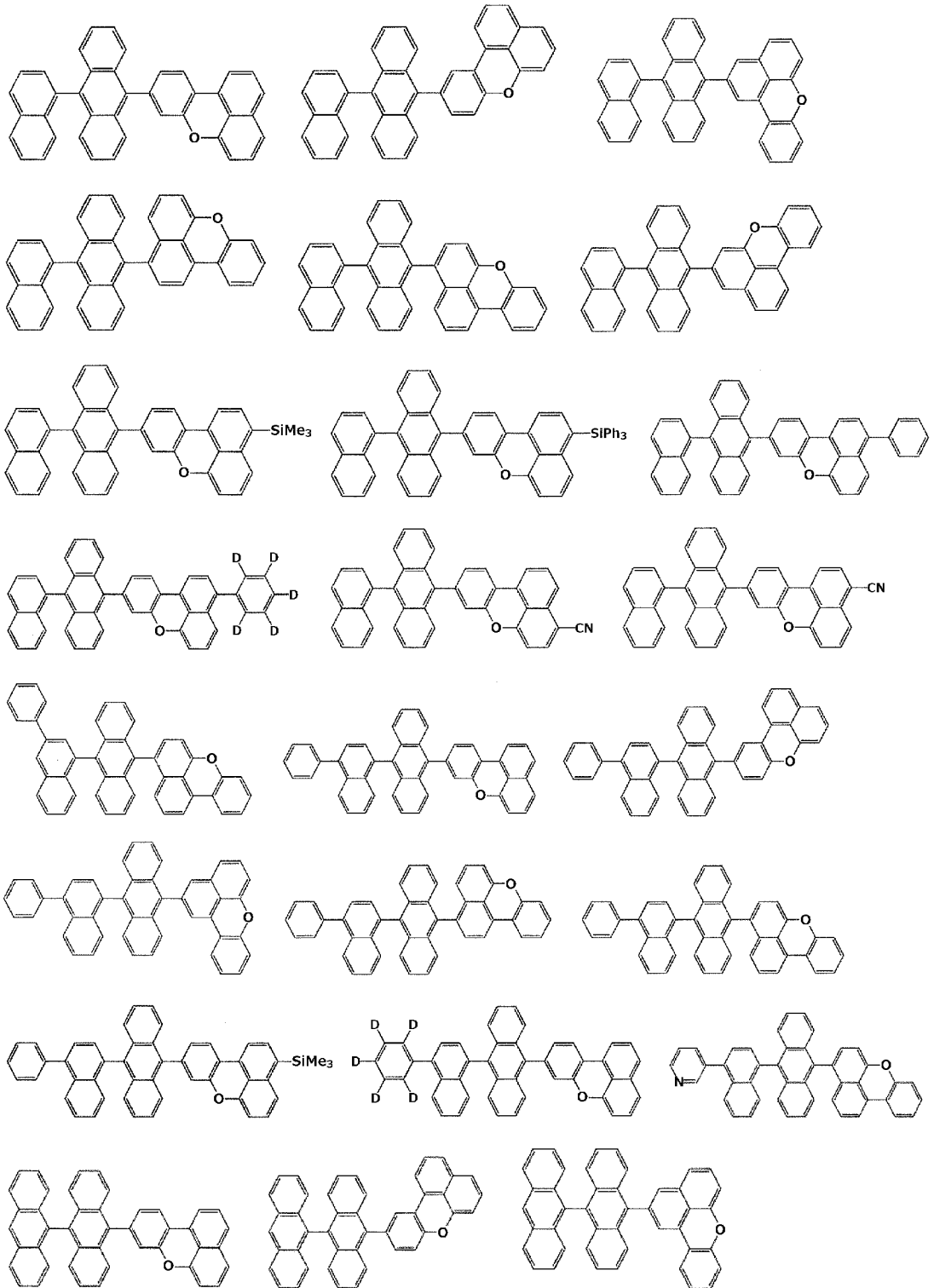
[0655]

[化243]



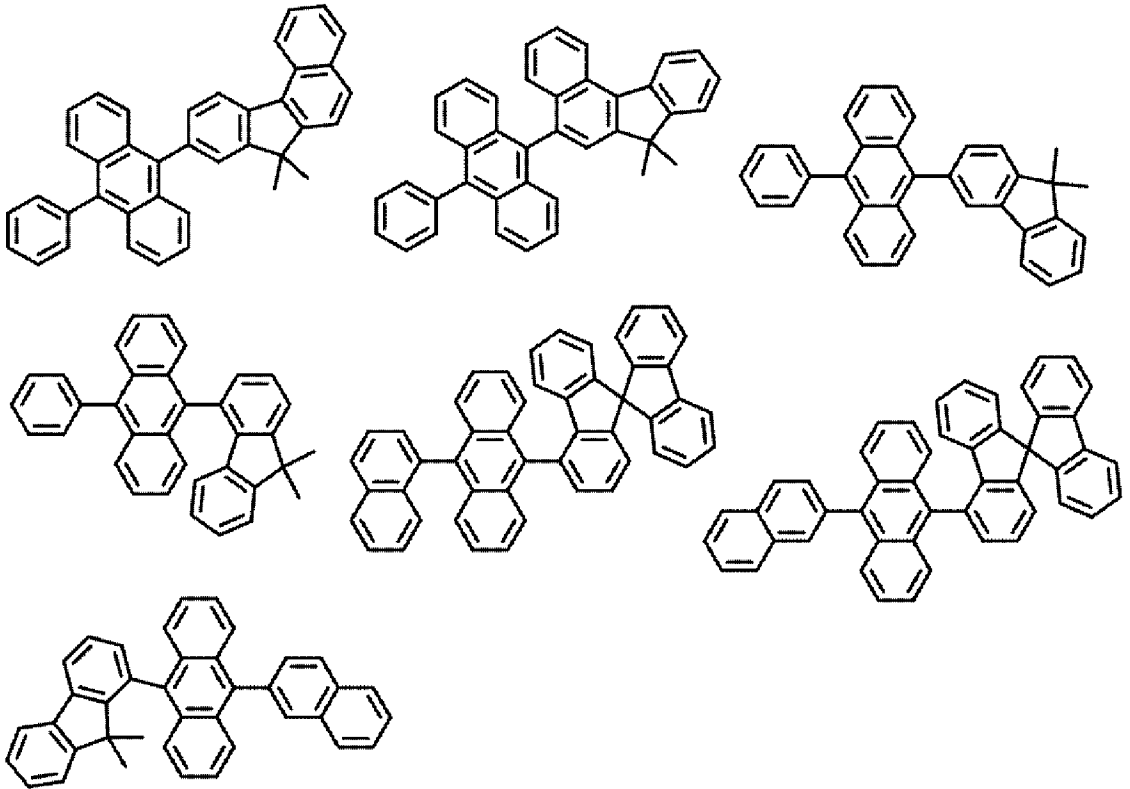
[0656]

[化244]

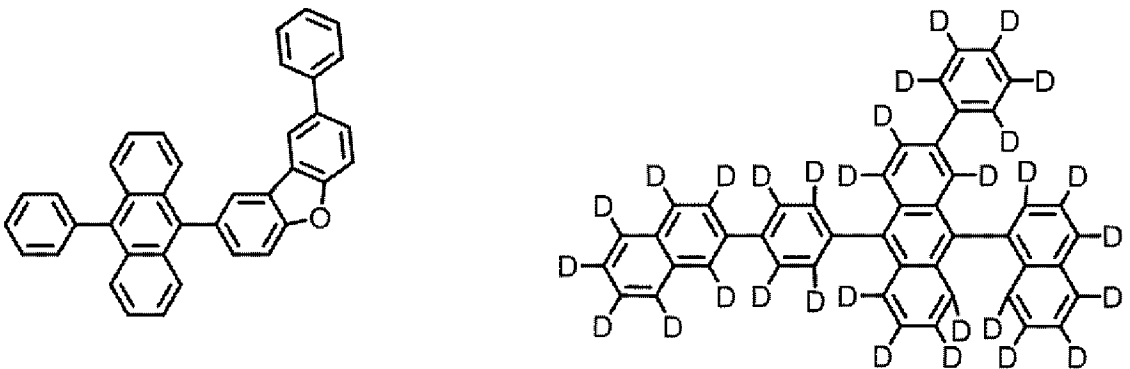


[0657]

[化245]



[0658] [化246]



[0659] (第一の発光性化合物、第二の発光性化合物及び第三の発光性化合物)

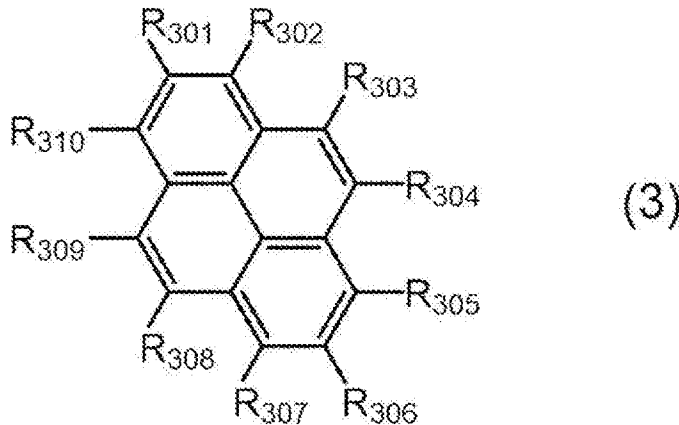
本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光性化合物、第二の発光性化合物及び第三の発光性化合物としては、例えば、下記第三の化合物、及び下記第四の化合物等が挙げられる。第三の化合物及び第四の化合物は、それぞれ独立に、下記一般式(3)で表される化合物、下記一般式(4)で表される化合物、下記一般式(5)で表される化合物、下記一般式(6)で表される化合物、下記一般式(7)で表される化合物、下記一般式(8)で

表される化合物、下記一般式（9）で表される化合物、及び下記一般式（10）で表される化合物からなる群から選択される1以上の化合物である。

[0660]（一般式（3）で表される化合物）

一般式（3）で表される化合物について説明する。

[0661] [化247]



[0662]（前記一般式（3）において、

$R_{301} \sim R_{310}$ 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、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、

$R_{301} \sim R_{310}$ の少なくとも1つは下記一般式（31）で表される1価の基であり、

前記単環を形成せず、前記縮合環を形成せず、かつ下記一般式（31）で表される1価の基ではない $R_{301} \sim R_{310}$ 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、

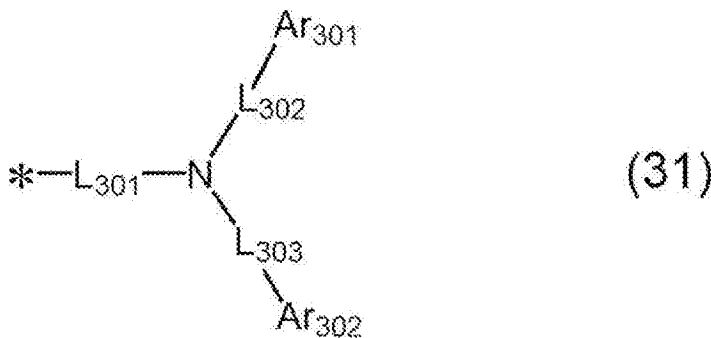
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

-S- ( $R_{905}$ ) で表される基、  
 -N ( $R_{906}$ ) ( $R_{907}$ ) で表される基、  
 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 の複素環基である。)

[0663] [化248]



[0664] (前記一般式 (31) において、

$Ar_{301}$  及び  $Ar_{302}$  は、それぞれ独立に、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 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 の複素環基であり、  
 $L_{301} \sim L_{303}$  は、それぞれ独立に、  
 単結合、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 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 ~ 30 の 2 価の複素環基であり、  
 \* は、前記一般式 (3) 中のピレン環における結合位置を示す。)

[0665] 第三の化合物及び第四の化合物中、 $R_{901}$ 、 $R_{902}$ 、 $R_{903}$ 、 $R_{904}$ 、 $R_{905}$

、 $R_{906}$  及び  $R_{907}$  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 の複素環基であり、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

$R_{901}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{901}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{902}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{902}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{903}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{903}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{904}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{904}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{905}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{905}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{906}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{906}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

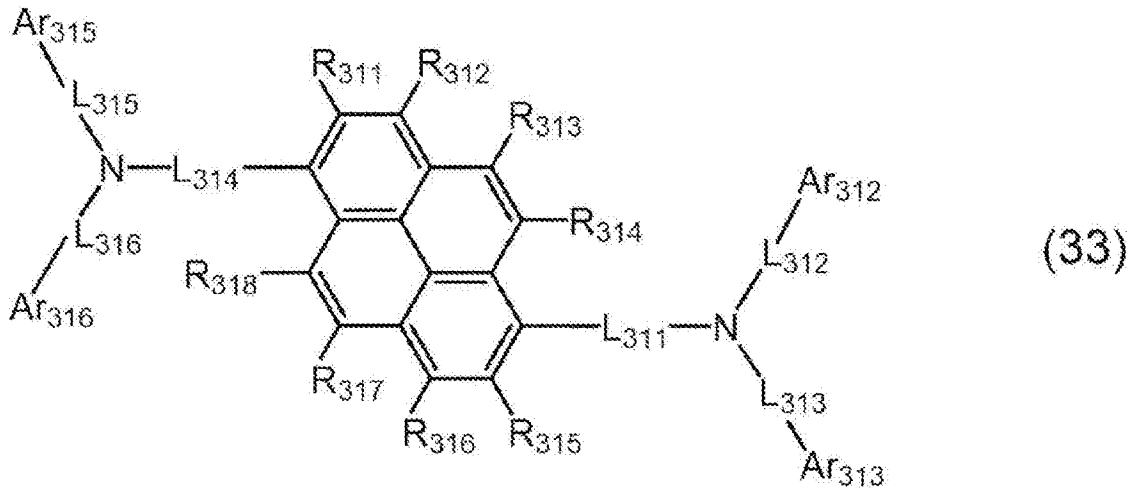
$R_{907}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{907}$  は、互いに同一であるか又は異なる。

[0666] 前記一般式 (3) において、 $R_{301} \sim R_{310}$  のうち 2 つが前記一般式 (31) で表される基であることが好ましい。

[0667] 一実施形態において、前記一般式 (3) で表される化合物は、下記一般式 (33) で表される化合物である。

[0668]

[化249]



[0669] (前記一般式(33)において、

$R_{311} \sim R_{318}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(3)における、前記一般式(31)で表される1価の基ではない $R_{301} \sim R_{310}$ と同義であり、

$L_{311} \sim L_{316}$ は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30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5~30の2価の複素環基であり、

$Ar_{312}$ 、 $Ar_{313}$ 、 $Ar_{315}$ 及び $Ar_{316}$ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

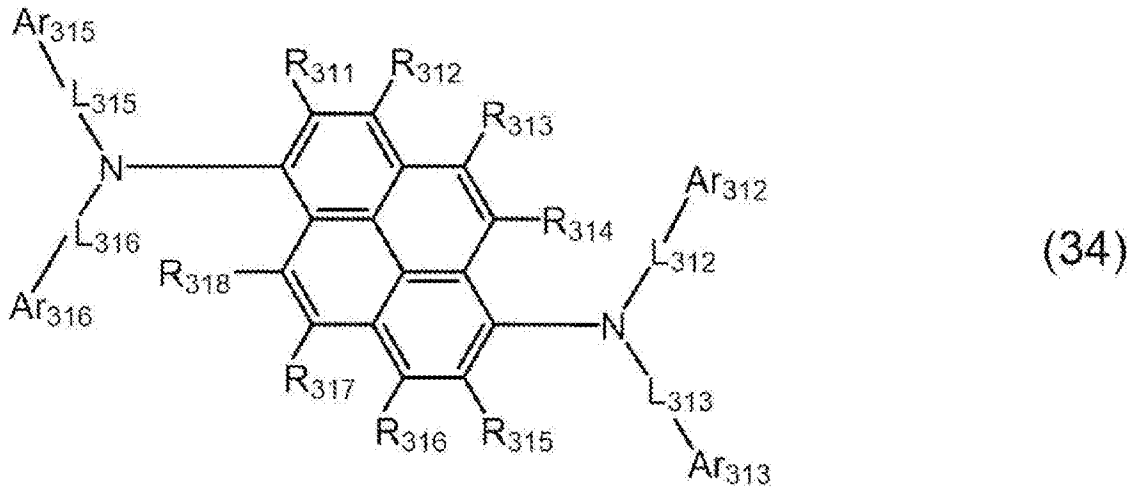
置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基である。)

[0670] 前記一般式(31)において、 $L_{301}$ は、単結合であることが好ましく、 $L_{302}$ 及び $L_{303}$ は単結合であることが好ましい。

[0671] 一実施形態において、前記一般式(3)で表される化合物は、下記一般式(34)又は一般式(35)で表される。

[0672]

[化250]



[0673] (前記一般式 (34) において、

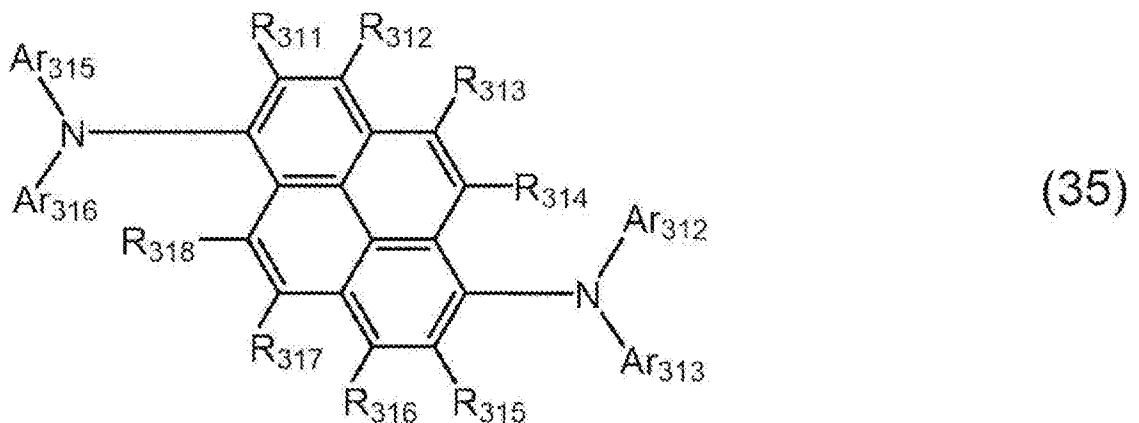
$R_{311} \sim R_{318}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (3) における、前記一般式 (31) で表される1価の基ではない $R_{301} \sim R_{310}$ と同義であり、

$L_{312}$ 、 $L_{313}$ 、 $L_{315}$ 及び $L_{316}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (33) における $L_{312}$ 、 $L_{313}$ 、 $L_{315}$ 及び $L_{316}$ と同義であり、

$Ar_{312}$ 、 $Ar_{313}$ 、 $Ar_{315}$ 及び $Ar_{316}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (33) における $Ar_{312}$ 、 $Ar_{313}$ 、 $Ar_{315}$ 及び $Ar_{316}$ と同義である

。)

[0674] [化251]



[0675] (前記一般式 (35) において、

$R_{311} \sim R_{318}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (3) における、前記一般式 (31) で表される1価の基ではない $R_{301} \sim R_{310}$ と同義であり、

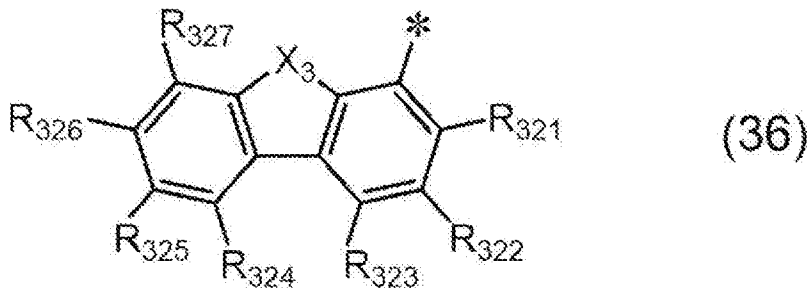
$A r_{312}$ 、 $A r_{313}$ 、 $A r_{315}$ 及び $A r_{316}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(33)における $A r_{312}$ 、 $A r_{313}$ 、 $A r_{315}$ 及び $A r_{316}$ と同義である。) )

[0676] 前記一般式(31)において、好ましくは、 $A r_{301}$ 及び $A r_{302}$ のうち少なくとも1つが下記一般式(36)で表される基である。

前記一般式(33)～一般式(35)において、好ましくは、 $A r_{312}$ 及び $A r_{313}$ のうち少なくとも1つが下記一般式(36)で表される基である。

前記一般式(33)～一般式(35)において、好ましくは、 $A r_{315}$ 及び $A r_{316}$ のうち少なくとも1つが下記一般式(36)で表される基である。

[0677] [化252]



[0678] (前記一般式(36)において、

$X_3$ は、酸素原子又は硫黄原子を示し、

$R_{321} \sim R_{327}$ のうち隣接する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、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{321} \sim R_{327}$ 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、

—S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、

—O— (R<sub>904</sub>) で表される基、

—S— (R<sub>905</sub>) で表される基、

—N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基、

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 の複素環基であり、

\*は、L<sub>302</sub>、L<sub>303</sub>、L<sub>312</sub>、L<sub>313</sub>、L<sub>315</sub>又はL<sub>316</sub>との結合位置を示す。)

[0679] X<sub>3</sub>は、酸素原子であることが好ましい。

[0680] R<sub>321</sub>～R<sub>327</sub>のうち少なくとも1つは、

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、

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 の複素環基であることが好ましい。

[0681] 前記一般式 (31) において、A<sub>r301</sub>が前記一般式 (36) で表される基であり、A<sub>r302</sub>が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ことが好ましい。

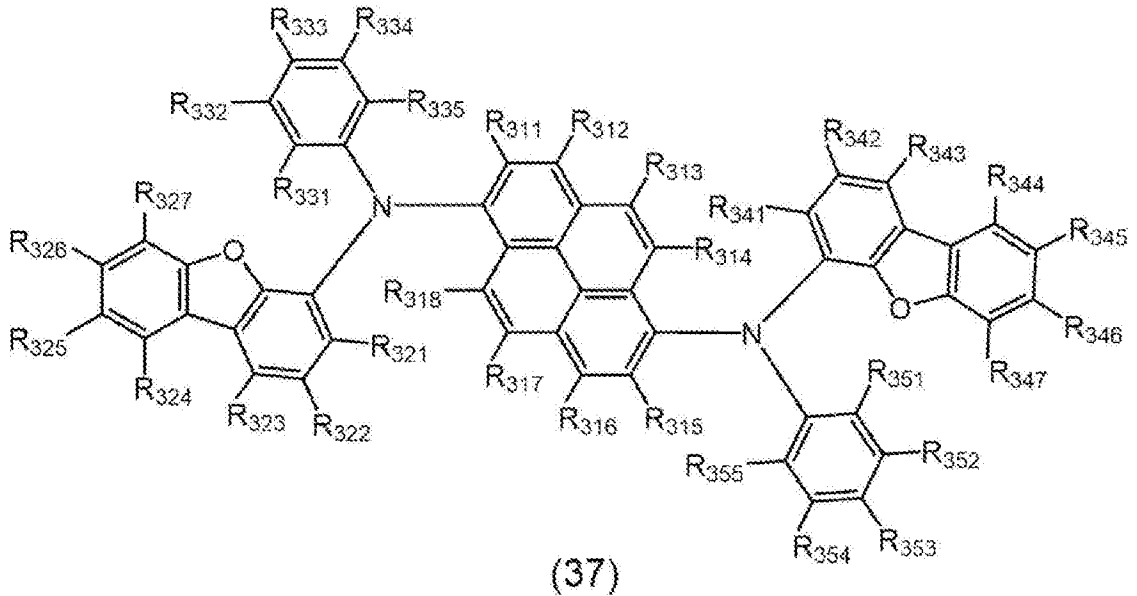
前記一般式 (33) ～一般式 (35) において、A<sub>r312</sub>が前記一般式 (36) で表される基であり、A<sub>r313</sub>が置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基であることが好ましい。

前記一般式 (33) ～一般式 (35) において、A<sub>r315</sub>が前記一般式 (36) で表される基であり、A<sub>r316</sub>が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ことが好ましい。

[0682] 一実施形態において、前記一般式(3)で表される化合物は、下記一般式(37)で表される。

[0683] [化253]



[0684] (前記一般式(37)において、

$R_{311} \sim R_{318}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(3)における、前記一般式(31)で表される1価の基ではない $R_{301} \sim R_{310}$ と同義であり、

$R_{321} \sim R_{327}$ のうち隣接する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、

$R_{341} \sim R_{347}$ のうち隣接する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、

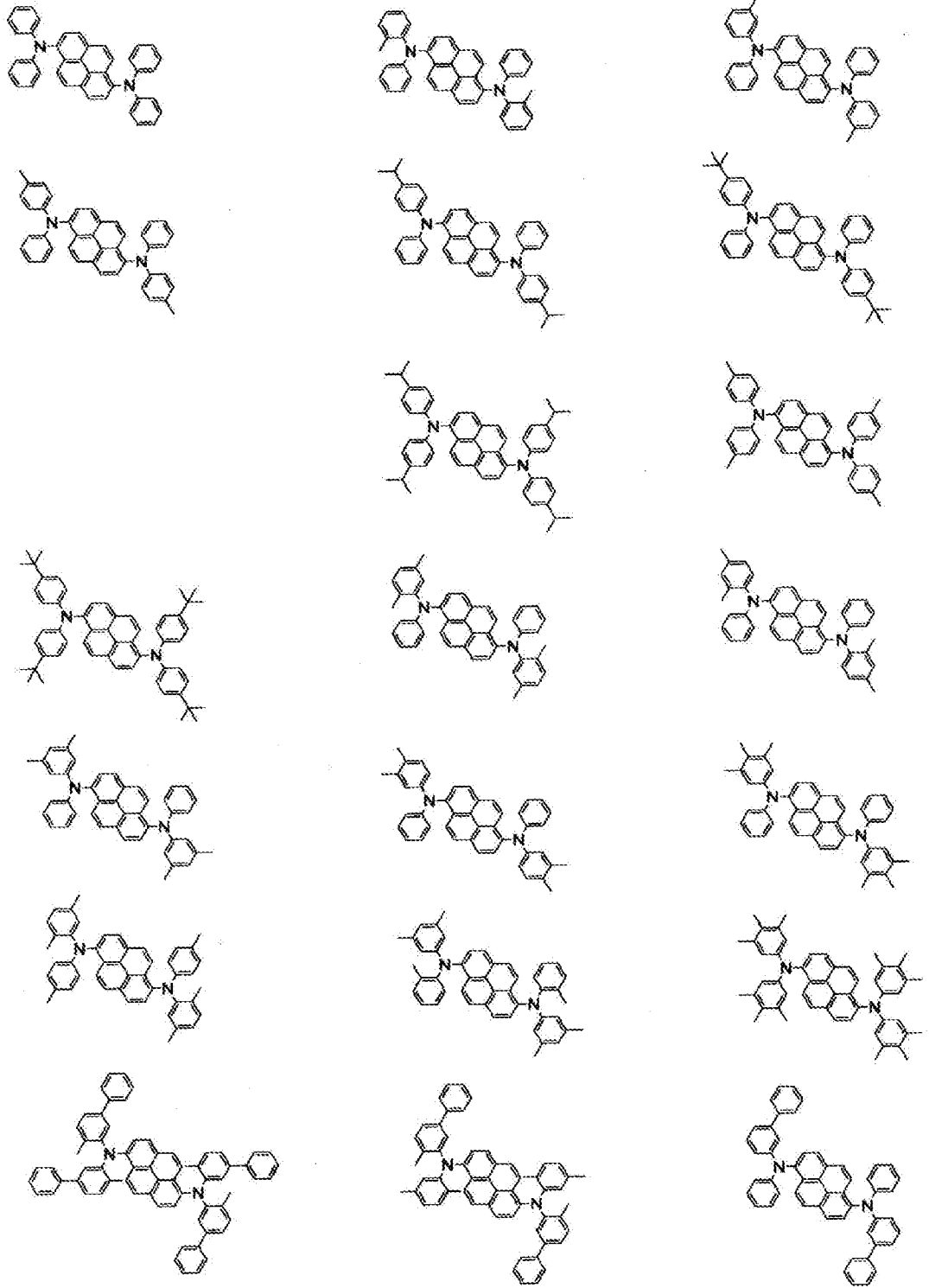
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{321} \sim R_{327}$ 並びに $R_{341} \sim R_{347}$ は、それぞれ独立に、

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、  
 -S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、  
 -O- (R<sub>904</sub>) で表される基、  
 -S- (R<sub>905</sub>) で表される基、  
 -N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基、  
 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 の複素環基であり、  
 R<sub>331</sub>～R<sub>335</sub>並びに R<sub>351</sub>～R<sub>355</sub>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、  
 -S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、  
 -O- (R<sub>904</sub>) で表される基、  
 -S- (R<sub>905</sub>) で表される基、  
 -N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基、  
 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 の複素環基である。)

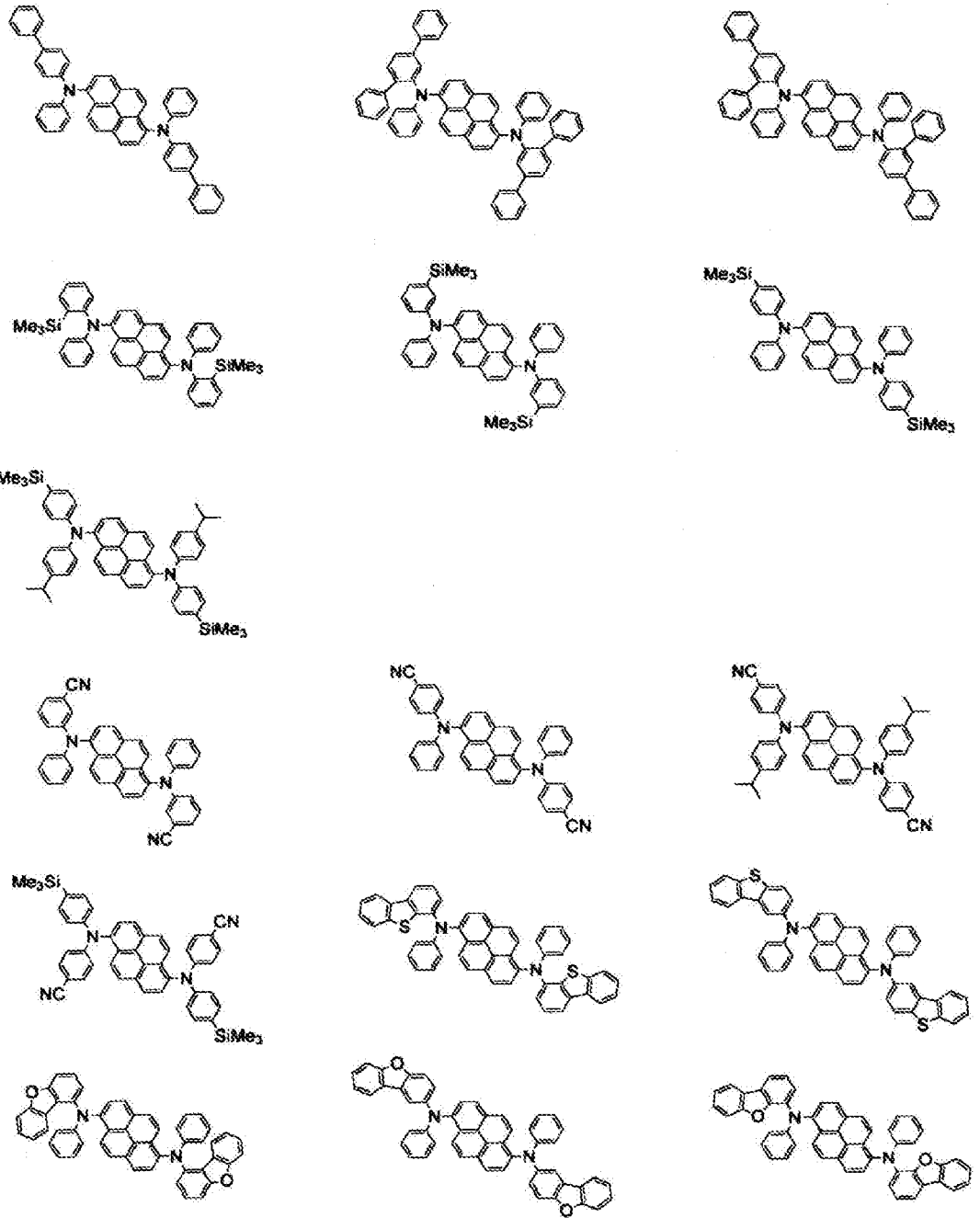
[0685] 前記一般式 (3) で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

[0686] [化254]



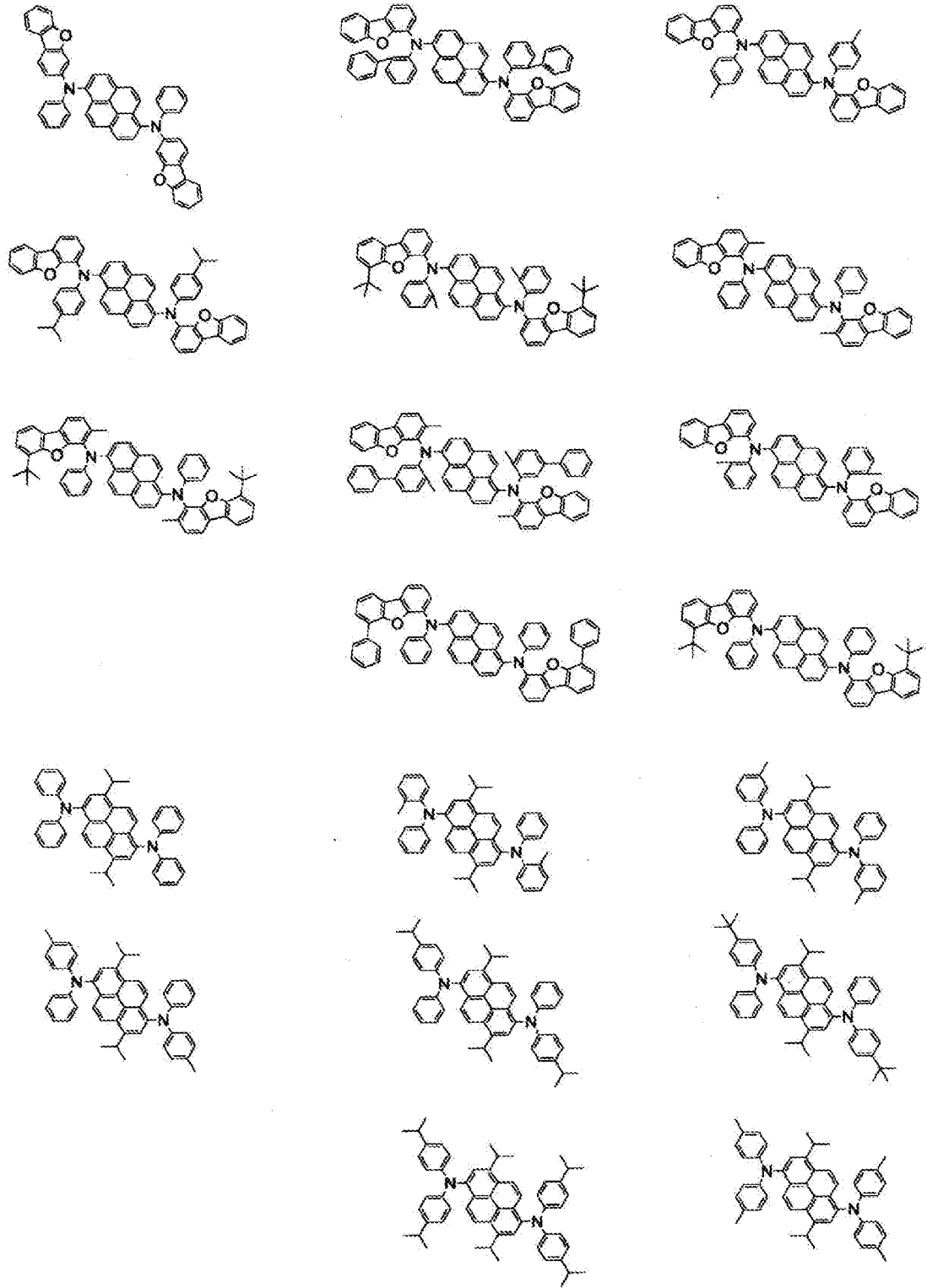
[0687]

[化255]



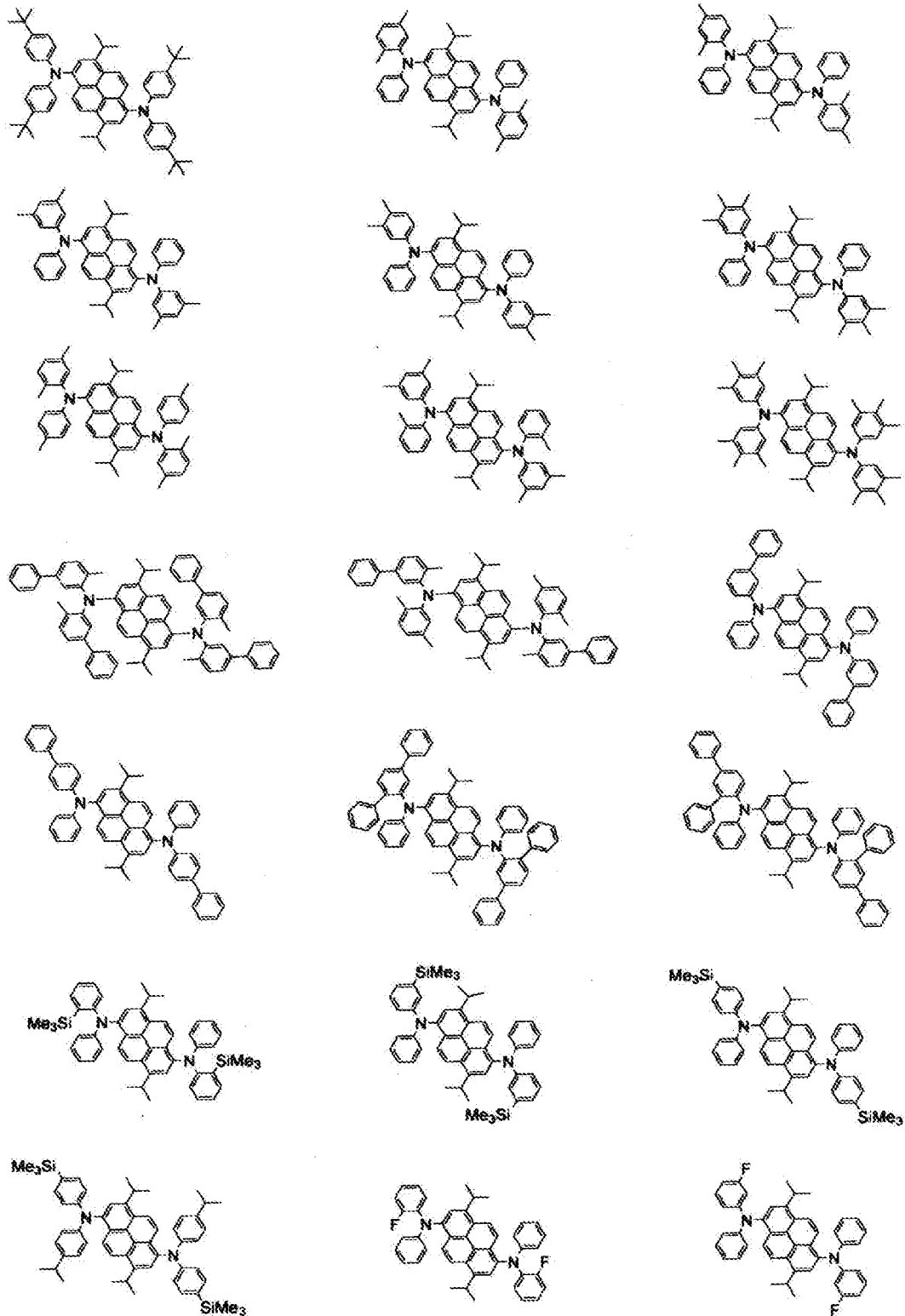
[0688]

[化256]



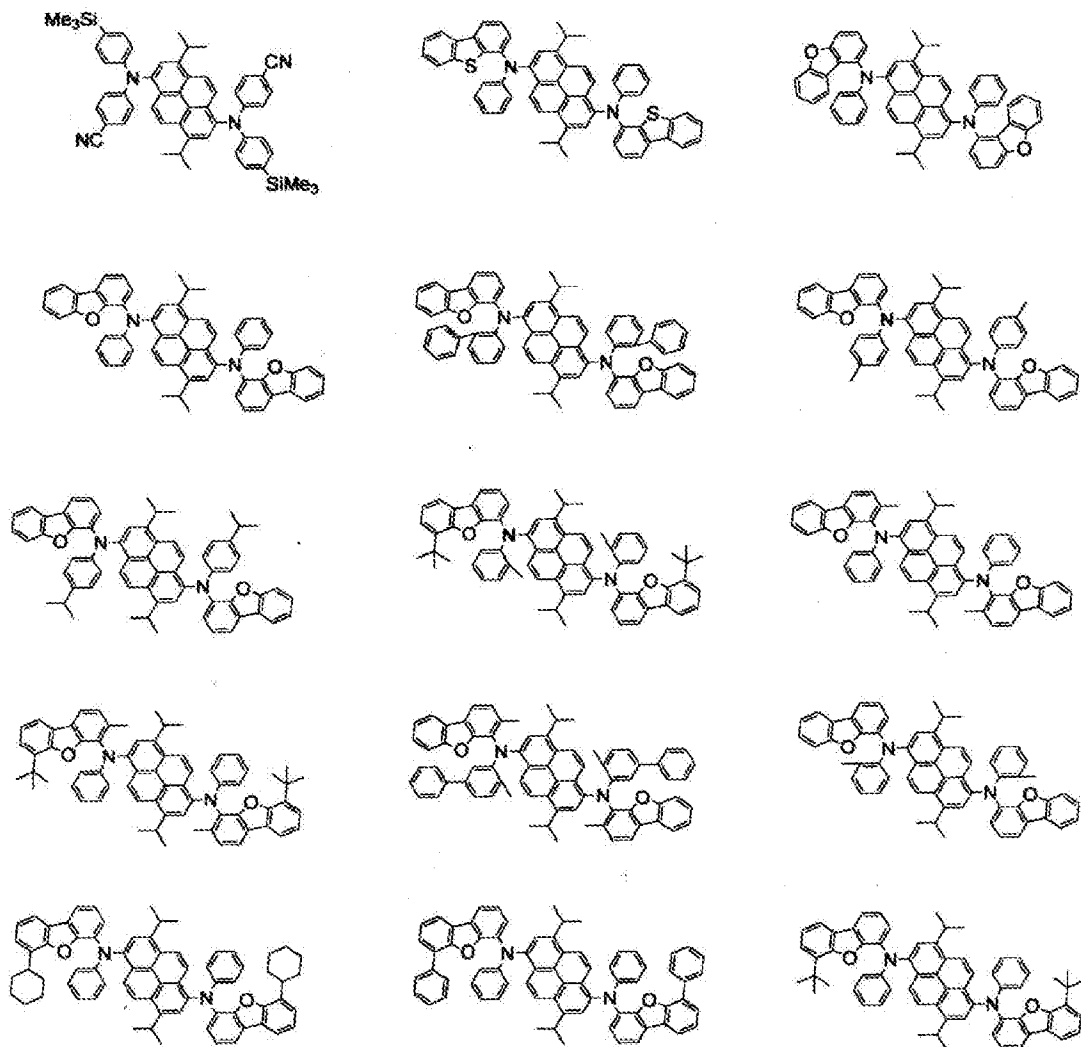
[0689]

[化257]



[0690]

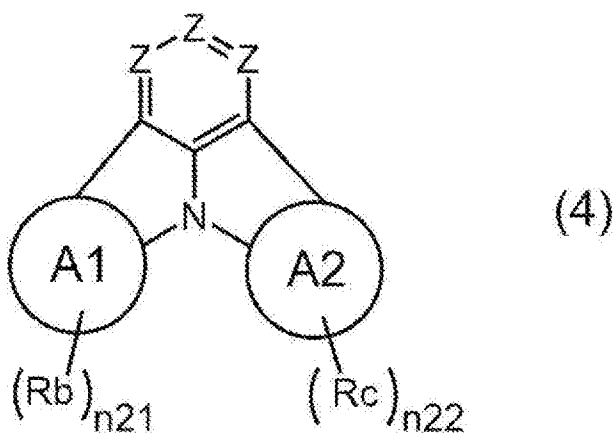
[化258]



[0691] (一般式(4)で表される化合物)

一般式(4)で表される化合物について説明する。

[0692] [化259]



[0693] (前記一般式(4)において、

Zは、それぞれ独立に、C R a又は窒素原子であり、

A 1環及びA 2環は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50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5～50の複素環であり、

R aが複数存在する場合、複数のR a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、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、

n 2 1及びn 2 2は、それぞれ独立に、0、1、2、3又は4であり、

R bが複数存在する場合、複数のR b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、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、

R cが複数存在する場合、複数のR c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、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、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR a、R b及びR cは、それぞれ独立に、

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、

—S i (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基、

—O— (R<sub>904</sub>) で表される基、  
—S— (R<sub>905</sub>) で表される基、  
—N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基、  
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 の複素環基である。)

[0694] A 1 環及び A 2 環の「芳香族炭化水素環」は、上述した「アリール基」に水素原子を導入した化合物と同じ構造である。

A 1 環及び A 2 環の「芳香族炭化水素環」は、前記一般式 (4) 中央の縮合 2 環構造上の炭素原子 2 つを環形成原子として含む。

「置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 の芳香族炭化水素環」の具体例としては、具体例群 G 1 に記載の「アリール基」に水素原子を導入した化合物等が挙げられる。

[0695] A 1 環及び A 2 環の「複素環」は、上述した「複素環基」に水素原子を導入した化合物と同じ構造である。

A 1 環及び A 2 環の「複素環」は、前記一般式 (4) 中央の縮合 2 環構造上の炭素原子 2 つを環形成原子として含む。

「置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環」の具体例としては、具体例群 G 2 に記載の「複素環基」に水素原子を導入した化合物等が挙げられる。

[0696] R b は、A 1 環としての芳香族炭化水素環を形成する炭素原子のいずれか、又は、A 1 環としての複素環を形成する原子のいずれかに結合する。

[0697] R c は、A 2 環としての芳香族炭化水素環を形成する炭素原子のいずれか、又は、A 2 環としての複素環を形成する原子のいずれかに結合する。

[0698] R a、R b 及び R c のうち、少なくとも 1 つが、下記一般式 (4 a) で表される基であることが好ましく、少なくとも 2 つが、下記一般式 (4 a) で

表される基であることがより好ましい。

[0699] [化260]



[0700] (前記一般式 (4 a) において、

$\text{L}_{401}$  は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 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 ~ 30 の 2 価の複素環基であり、

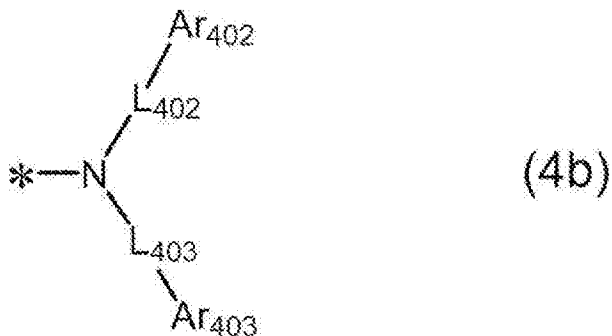
$\text{Ar}_{401}$  は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基、又は

下記一般式 (4 b) で表される基である。)

[0701] [化261]



[0702] (前記一般式 (4 b) において、

$\text{L}_{402}$  及び  $\text{L}_{403}$  は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 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 ~ 30 の 2 価の複素環基であり、

$\text{Ar}_{402}$  及び  $\text{Ar}_{403}$  からなる組は、

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

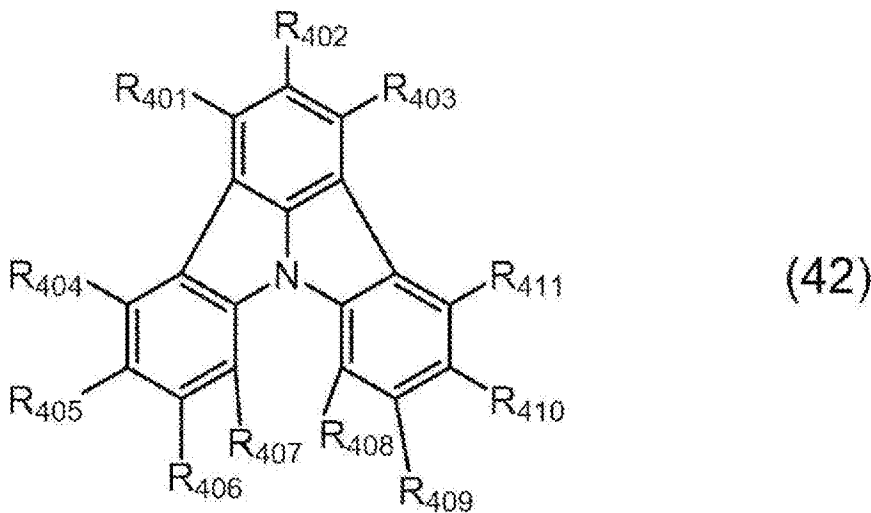
互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない  $A_{r_{402}}$  及び  $A_{r_{403}}$  は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 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。）

[0703] 一実施形態において、前記一般式 (4) で表される化合物は下記一般式 (42) で表される。

[0704] [化262]



[0705] (前記一般式 (42) において、

$R_{401} \sim R_{411}$  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、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、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない  $R_{401} \sim R_{411}$  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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ ) で表される基、

-O- ( $R_{904}$ ) で表される基、  
 -S- ( $R_{905}$ ) で表される基、  
 -N ( $R_{906}$ ) ( $R_{907}$ ) で表される基、  
 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 の複素環基である。)

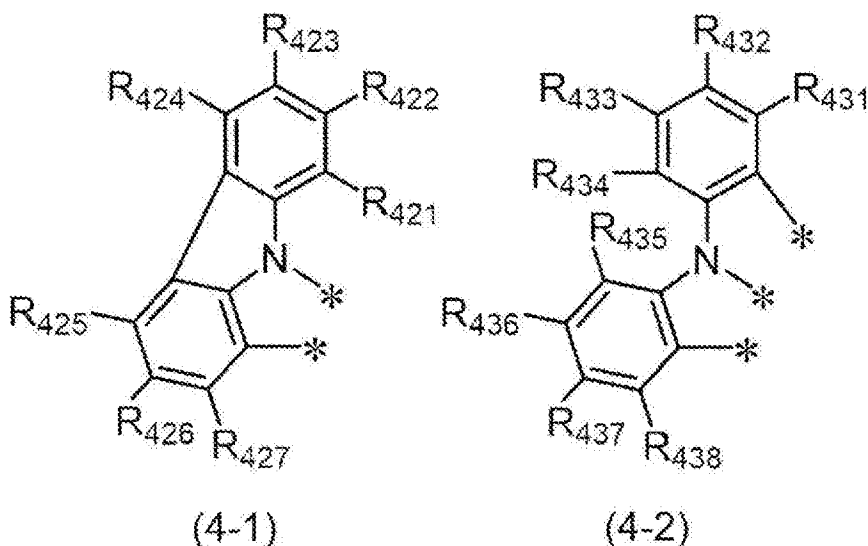
[0706]  $R_{401}$  ~  $R_{411}$  のうち、少なくとも 1 つが、前記一般式 (4 a) で表される基であることが好ましく、少なくとも 2 つ前記一般式 (4 a) で表される基であることがより好ましい。

$R_{404}$  及び  $R_{411}$  が前記一般式 (4 a) で表される基であることが好ましい。

[0707] 一実施形態において、前記一般式 (4) で表される化合物は、A 1 環に下記一般式 (4-1) 又は一般式 (4-2) で表される構造が結合した化合物である。

また、一実施形態において、前記一般式 (4 2) で表される化合物は、 $R_{404}$  ~  $R_{407}$  が結合する環に下記一般式 (4-1) 又は一般式 (4-2) で表される構造が結合した化合物である。

[0708] [化263]



[0709] (前記一般式(4-1)において、2つの\*は、それぞれ独立に、前記一般式(4)のA1環としての芳香族炭化水素環の環形成炭素原子もしくは複素環の環形成原子と結合するか、又は前記一般式(42)の $R_{404} \sim R_{407}$ のいずれかと結合し、

前記一般式(4-2)の3つの\*は、それぞれ独立に、前記一般式(4)のA1環としての芳香族炭化水素環の環形成炭素原子もしくは複素環の環形成原子と結合するか、又は前記一般式(42)の $R_{404} \sim R_{407}$ のいずれかと結合し、

$R_{421} \sim R_{427}$ 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、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、

$R_{431} \sim R_{438}$ 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、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、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{421} \sim R_{427}$ 並びに $R_{431} \sim R_{438}$ 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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

-O-( $R_{904}$ )で表される基、

-S-( $R_{905}$ )で表される基、

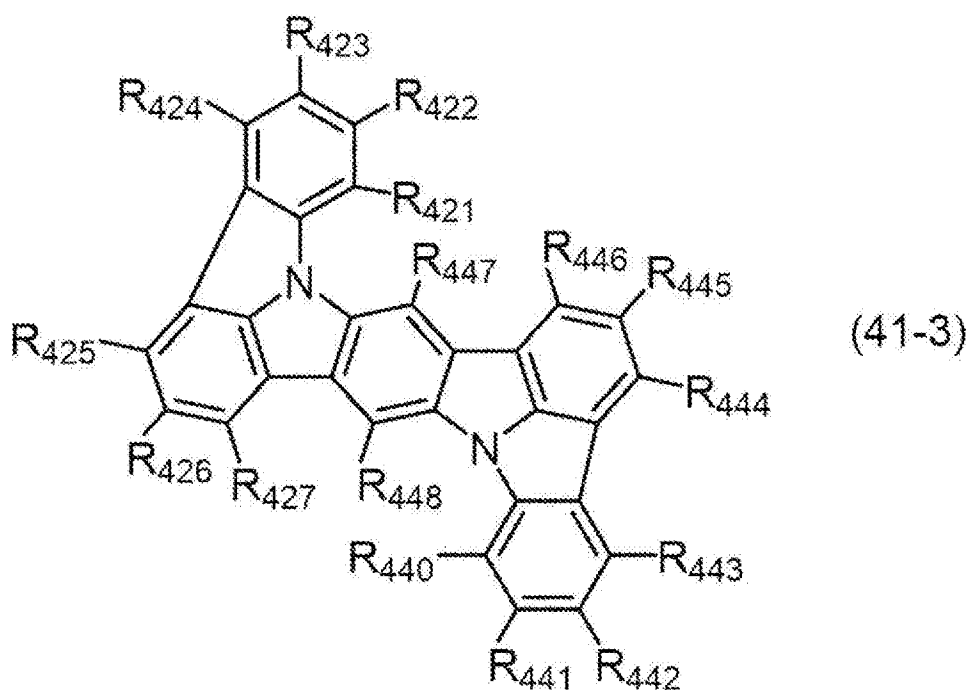
-N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )で表される基、

ハロゲン原子、

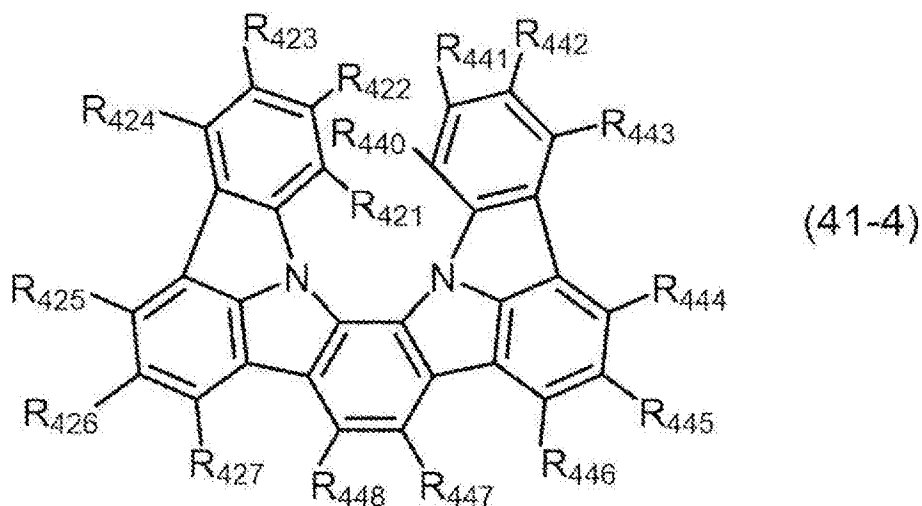
シアノ基、  
 ニトロ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基である。)

[0710] 一実施形態においては、前記一般式 (4) で表される化合物は、下記一般式 (41-3)、一般式 (41-4) 又は一般式 (41-5) で表される化合物である。

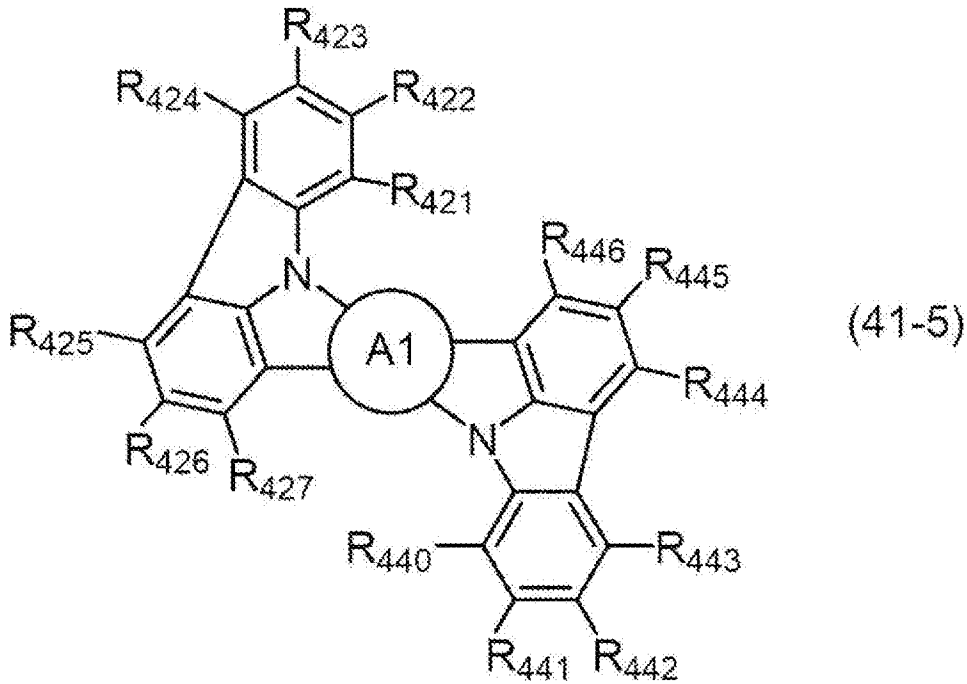
[0711] [化264]



[0712] [化265]



[0713] [化266]



[0714] (前記一般式(41-3)、式(41-4)及び式(41-5)中、  
 A1環は、前記一般式(4)で定義した通りであり、  
 $R_{421} \sim R_{427}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(4-1)における $R_{421} \sim R_{427}$ と同義であり、  
 $R_{440} \sim R_{448}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(42)における $R_{401} \sim R_{411}$ と同義である。)

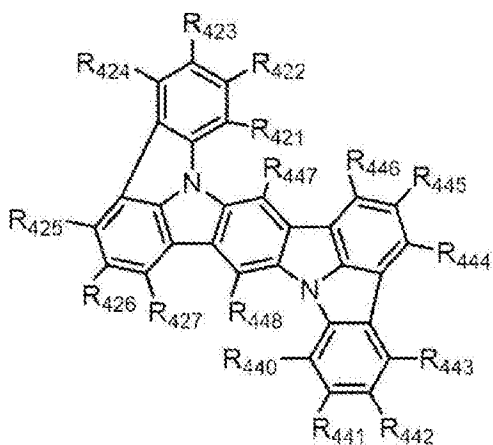
[0715] 一実施形態においては、前記一般式(41-5)のA1環としての置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50の芳香族炭化水素環は、  
 置換もしくは無置換のナフタレン環、又は  
 置換もしくは無置換のフルオレン環である。

[0716] 一実施形態においては、前記一般式(41-5)のA1環としての置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環は、  
 置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、  
 置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は  
 置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

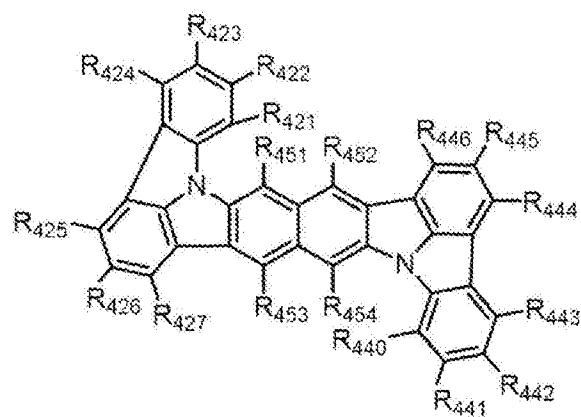
[0717] 一実施形態においては、前記一般式(4)又は前記一般式(42)で表さ

れる化合物は、下記一般式(461)～一般式(467)で表される化合物からなる群から選択される。

[0718] [化267]

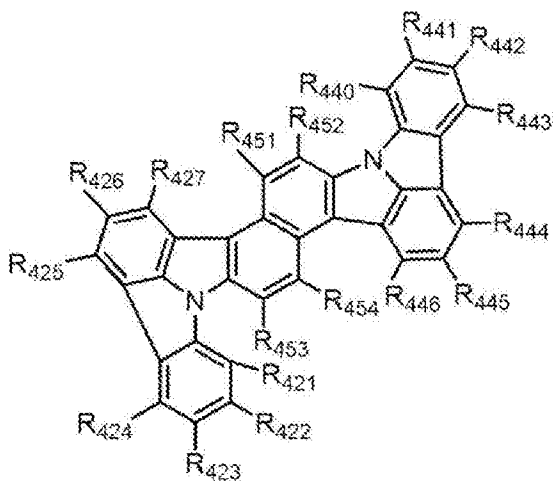


(461)

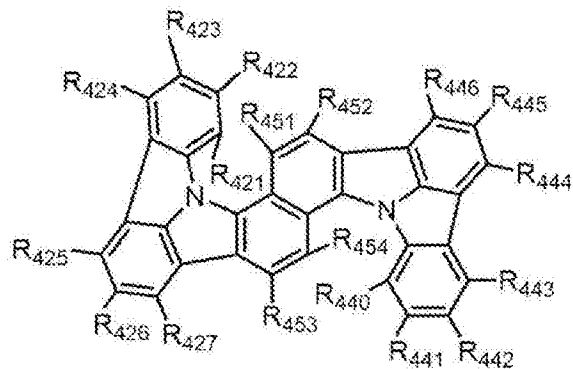


(462)

[0719] [化268]

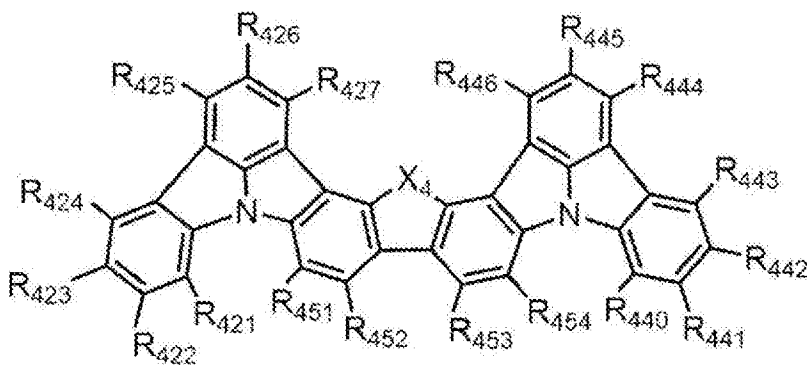


(463)



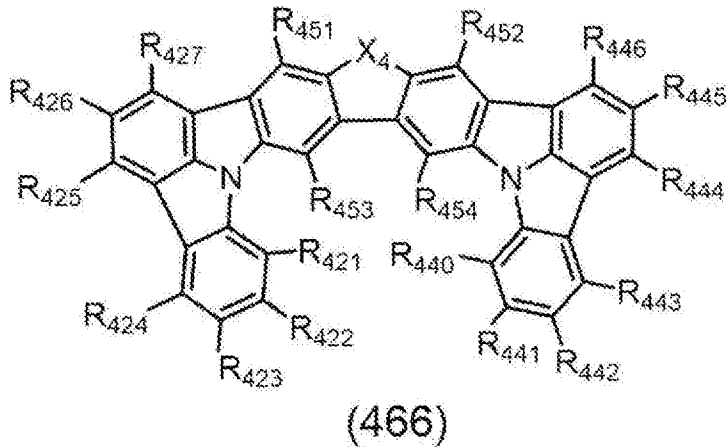
(464)

[0720] [化269]

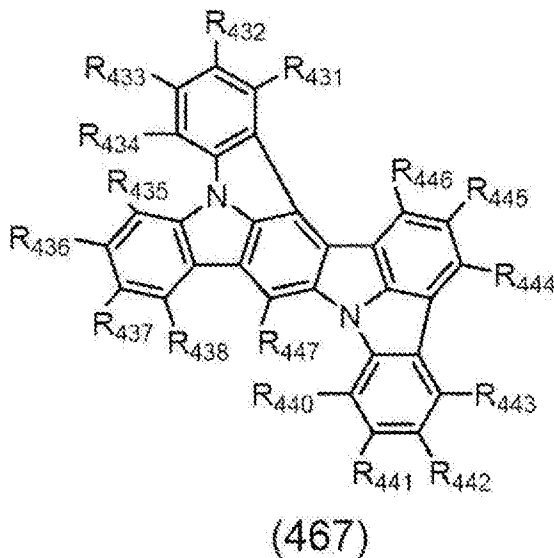


(465)

[0721] [化270]



[0722] [化271]



[0723] (前記一般式(461)、一般式(462)、一般式(463)、一般式(464)、一般式(465)、一般式(466)及び一般式(467)中、

$R_{421} \sim R_{427}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(4-1)における $R_{421} \sim R_{427}$ と同義であり、

$R_{431} \sim R_{438}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(4-2)における $R_{431} \sim R_{438}$ と同義であり、

$R_{440} \sim R_{448}$ 並びに $R_{451} \sim R_{454}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(4-2)における $R_{401} \sim R_{411}$ と同義であり、

$X_4$ は、酸素原子、 $NR_{801}$ 、又は $C(R_{802})(R_{803})$ であり、

$R_{801}$ 、 $R_{802}$ 及び $R_{803}$ 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 の複素環基であり、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

$R_{801}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{801}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{802}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{802}$  は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{803}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{803}$  は、互いに同一であるか又は異なる。) )

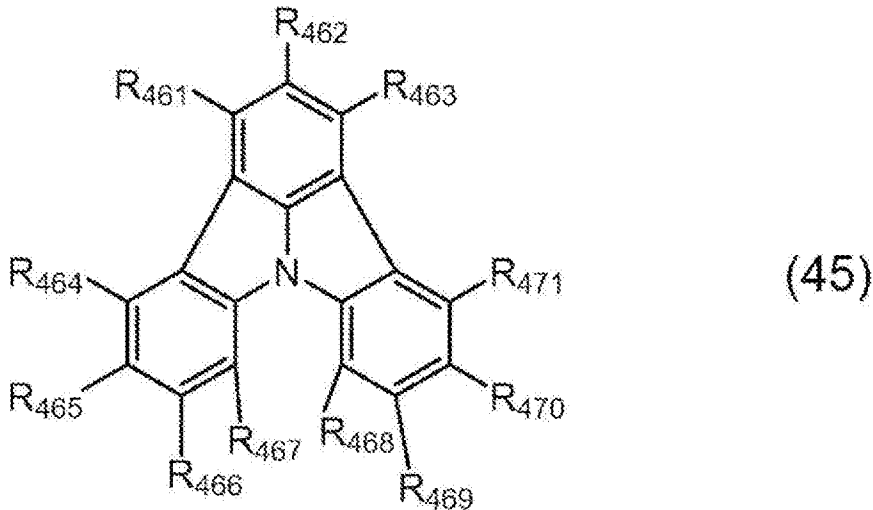
[0724] 一実施形態において、前記一般式 (4 2) で表される化合物は、 $R_{401} \sim R_{411}$  のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、又は互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成し、当該実施形態について、以下一般式 (4 5) で表される化合物として詳述する。

[0725] (一般式 (4 5) で表される化合物)

一般式 (4 5) で表される化合物について説明する。

[0726]

[化272]



[0727] (前記一般式(45)において、

$R_{461}$ と $R_{462}$ とからなる組、 $R_{462}$ と $R_{463}$ とからなる組、 $R_{464}$ と $R_{465}$ とからなる組、 $R_{465}$ と $R_{466}$ とからなる組、 $R_{466}$ と $R_{467}$ とからなる組、 $R_{468}$ と $R_{469}$ とからなる組、 $R_{469}$ と $R_{470}$ とからなる組、及び、 $R_{470}$ と $R_{471}$ とからなる組からなる群から選択される組のうち2以上は、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環又は置換もしくは無置換の縮合環を形成し、ただし、

$R_{461}$ と $R_{462}$ とからなる組及び $R_{462}$ と $R_{463}$ とからなる組；

$R_{464}$ と $R_{465}$ とからなる組及び $R_{465}$ と $R_{466}$ とからなる組；

$R_{465}$ と $R_{466}$ とからなる組及び $R_{466}$ と $R_{467}$ とからなる組；

$R_{468}$ と $R_{469}$ とからなる組及び $R_{469}$ と $R_{470}$ とからなる組；並びに

$R_{469}$ と $R_{470}$ とからなる組及び $R_{470}$ と $R_{471}$ とからなる組が、同時に

環を形成することはなく、

$R_{461} \sim R_{471}$ が形成する2つ以上の環は、互いに同一であるか、又は異なり、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{461} \sim R_{471}$ 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、  
-S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、  
-O- (R<sub>904</sub>) で表される基、  
-S- (R<sub>905</sub>)、-N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基、  
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 の複素環基である。)

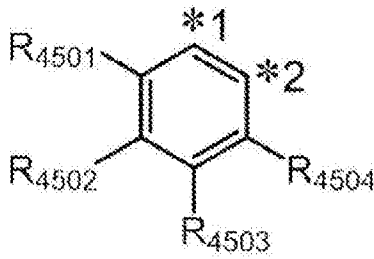
[0728] 前記一般式 (45) において、R<sub>n</sub>とR<sub>n+1</sub> (nは461、462、464～466、及び468～470から選ばれる整数を表す) は互いに結合して、R<sub>n</sub>とR<sub>n+1</sub>が結合する2つの環形成炭素原子と共に、置換もしくは無置換の単環又は置換もしくは無置換の縮合環を形成する。当該環は、好ましくは、炭素原子、酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群から選択される原子で構成され、当該環の原子数は、好ましくは3～7であり、より好ましくは5又は6である。

[0729] 前記一般式 (45) で表される化合物における上記の環構造の数は、例えば、2つ、3つ、又は4つである。2つ以上の環構造は、それぞれ前記一般式 (45) の母骨格上の同一のベンゼン環上に存在してもよいし、異なるベンゼン環上に存在してもよい。例えば、環構造を3つ有する場合、前記一般式 (45) の3つのベンゼン環のそれぞれに1つずつ環構造が存在してもよい。

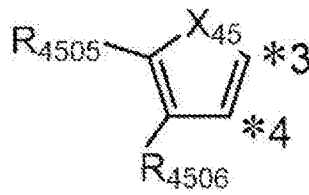
[0730] 前記一般式 (45) で表される化合物における上記の環構造としては、例えば、下記一般式 (451)～(460) で表される構造等が挙げられる。

[0731]

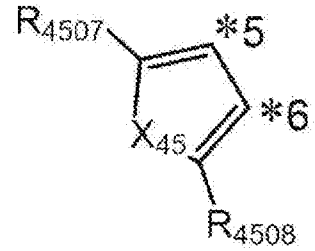
[化273]



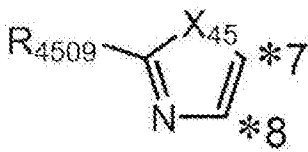
(451)



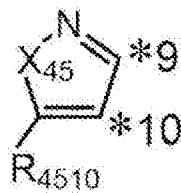
(452)



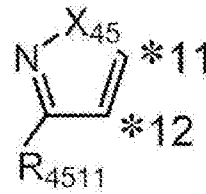
(453)



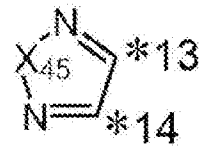
(454)



(455)



(456)



(457)

[0732] (前記一般式(451)～(457)において、

\*1と\*2、\*3と\*4、\*5と\*6、\*7と\*8、\*9と\*10、\*11と\*12及び\*13と\*14のそれぞれは、 $R_n$ と $R_{n+1}$ が結合する前記2つの環形成炭素原子を表し、

$R_n$ が結合する環形成炭素原子は、\*1と\*2、\*3と\*4、\*5と\*6、\*7と\*8、\*9と\*10、\*11と\*12及び\*13と\*14が表す2つの環形成炭素原子のどちらであってもよく、

$X_{45}$ は、 $C(R_{4512})(R_{4513})$ 、 $NR_{4514}$ 、酸素原子又は硫黄原子であり、

$R_{4501} \sim R_{4506}$ 及び $R_{4512} \sim R_{4513}$ 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、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

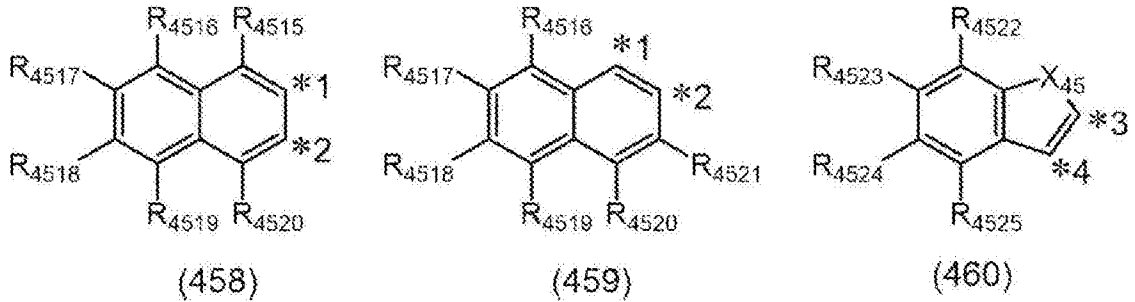
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{4501} \sim R_{4514}$ は、そ

れぞれ独立に、前記一般式（45）における $R_{461} \sim R_{471}$ と同義である。）

[0733] [化274]



[0734] （前記一般式（458）～（460）において、

\*1と\*2、及び\*3と\*4のそれぞれは、 $R_n$ と $R_{n+1}$ が結合する前記2つの環形成炭素原子を表し、

$R_n$ が結合する環形成炭素原子は、\*1と\*2、又は\*3と\*4が表す2つの環形成炭素原子のどちらであってもよく、

$X_{45}$ は、 $C(R_{4512})(R_{4513})$ 、 $NR_{4514}$ 、酸素原子又は硫黄原子であり、

$R_{4512} \sim R_{4513}$ 及び $R_{4515} \sim R_{4525}$ 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、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、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{4512} \sim R_{4513}$ 、 $R_{4515} \sim R_{4521}$ 及び $R_{4522} \sim R_{4525}$ 、並びに $R_{4514}$ は、それぞれ独立に、前記一般式（45）における $R_{461} \sim R_{471}$ と同義である。）

[0735] 前記一般式（45）において、 $R_{462}$ 、 $R_{464}$ 、 $R_{465}$ 、 $R_{470}$ 及び $R_{471}$ の少なくとも1つ（好ましくは、 $R_{462}$ 、 $R_{465}$ 及び $R_{470}$ の少なくとも1つ、さらに好ましくは $R_{462}$ ）が、環構造を形成しない基であると好ましい。

[0736] (i) 前記一般式（45）において、 $R_n$ と $R_{n+1}$ により形成される環構造が置換基を有する場合の置換基、

(ii) 前記一般式（45）において、環構造を形成しない $R_{461} \sim R_{471}$

、及び

(iii) 式(451)～(460)における $R_{4501} \sim R_{4514}$ 、 $R_{4515} \sim R_{4525}$ は、好ましくは、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、

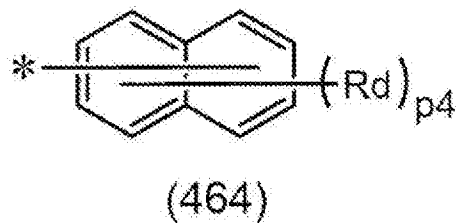
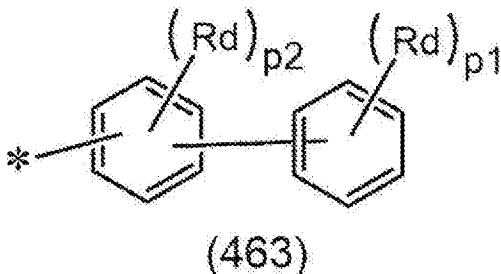
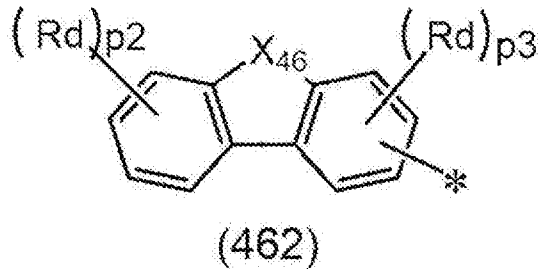
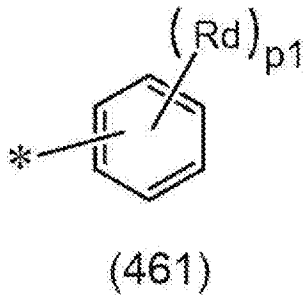
$-N(R_{906})(R_{907})$ で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基、又は

下記一般式(461)～一般式(464)で表される基からなる群から選択される基のいずれかである。

[0737] [化275]



[0738] (前記一般式(461)～(464)中、

$R_d$ 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、  
 -S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、  
 -O- (R<sub>904</sub>) で表される基、  
 -S- (R<sub>905</sub>) で表される基、  
 -N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基、  
 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 の複素環基であり、  
 X<sub>46</sub>は、C (R<sub>801</sub>) (R<sub>802</sub>)、NR<sub>803</sub>、酸素原子又は硫黄原子であり、

R<sub>801</sub>、R<sub>802</sub>及びR<sub>803</sub>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 の複素環基であり、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基であり、  
 R<sub>801</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>801</sub>は、互いに同一であるか又は異なり、  
 R<sub>802</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>802</sub>は、互いに同一であるか又は異なり、  
 R<sub>803</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>803</sub>は、互いに同一であるか又は異なり、

り、

p 1 は、5 であり、

p 2 は、4 であり、

p 3 は、3 であり、

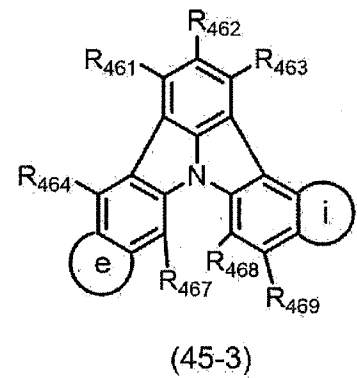
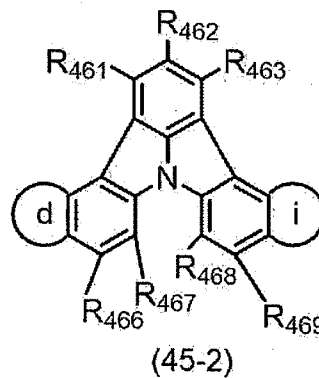
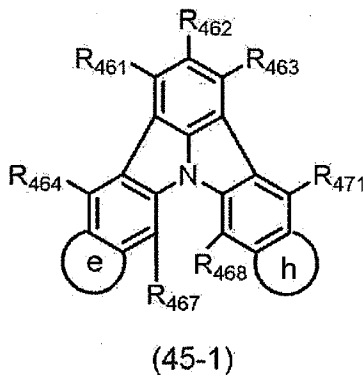
p 4 は、7 であり、

前記一般式 (461) ~ (464) 中の\*は、それぞれ独立に、環構造との結合位置を示す。)

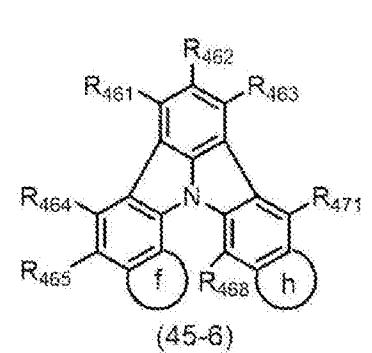
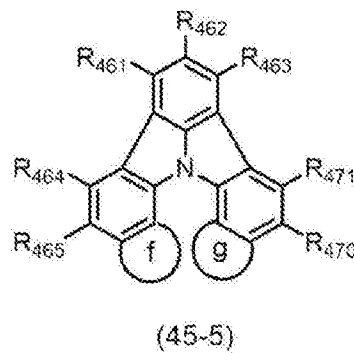
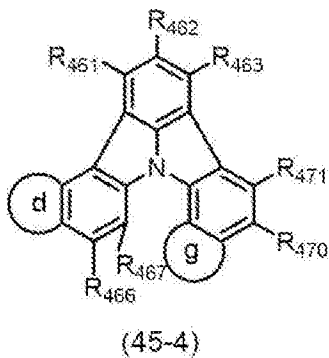
第三の化合物及び第四の化合物において、R<sub>901</sub>~R<sub>907</sub>は、前述のように定義した通りである。

[0739] 一実施形態において、前記一般式 (45) で表される化合物は、下記一般式 (45-1) ~ (45-6) のいずれかで表される。

[0740] [化276]



[0741] [化277]



[0742] (前記一般式 (45-1) ~ (45-6) において、

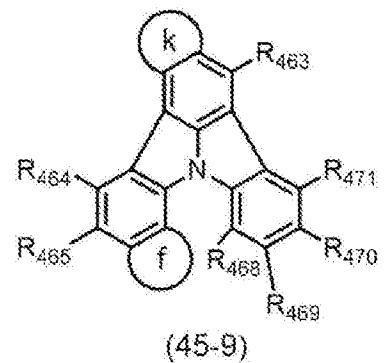
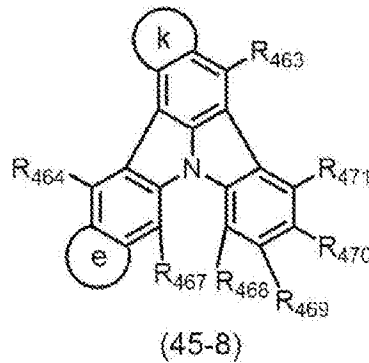
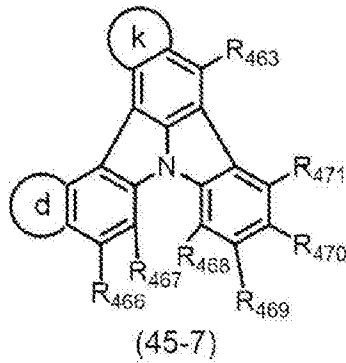
環 d ~ i は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の単環又は置換もしくは

は無置換の縮合環であり、

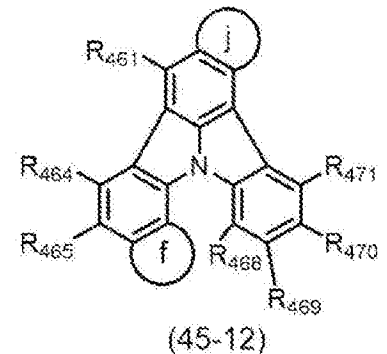
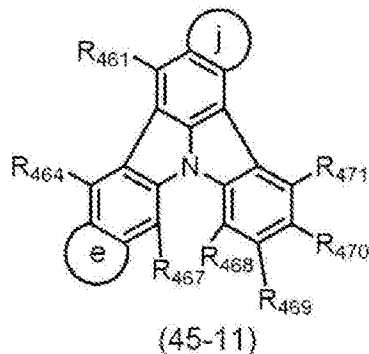
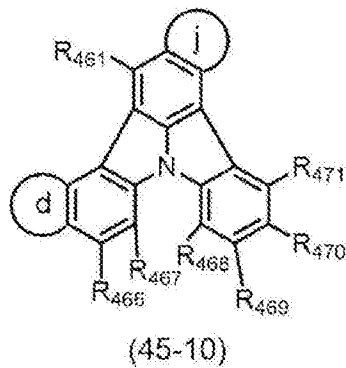
$R_{461} \sim R_{471}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(45)における $R_{461} \sim R_{471}$ と同義である。)

[0743] 一実施形態において、前記一般式(45)で表される化合物は、下記一般式(45-7)～(45-12)のいずれかで表される。

[0744] [化278]



[0745] [化279]



[0746] (前記一般式(45-7)～(45-12)において、

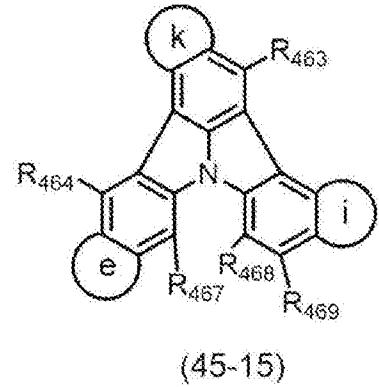
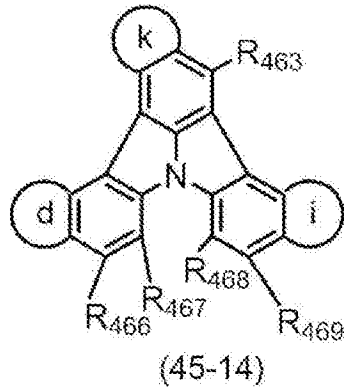
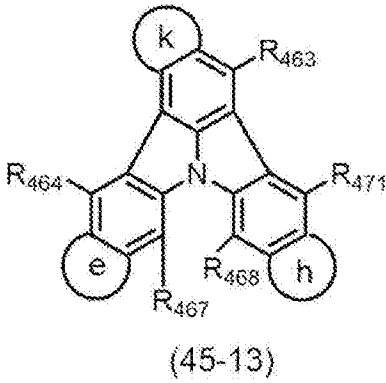
環d～f、k、jは、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の単環又は置換もしくは無置換の縮合環であり、

$R_{461} \sim R_{471}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(45)における $R_{461} \sim R_{471}$ と同義である。)

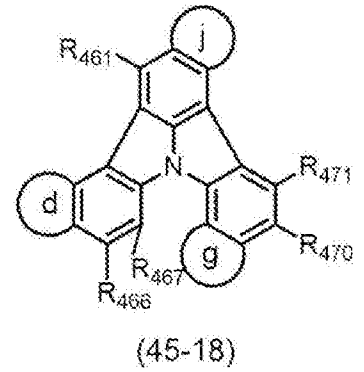
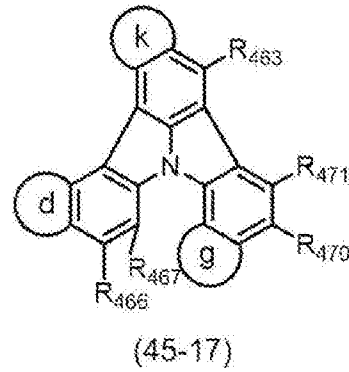
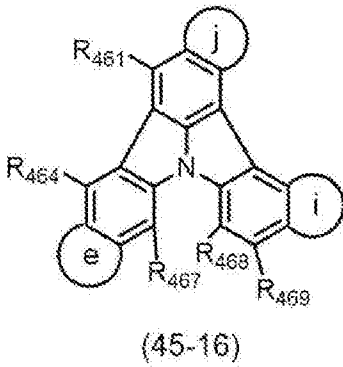
[0747] 一実施形態において、前記一般式(45)で表される化合物は、下記一般式(45-13)～(45-21)のいずれかで表される。

[0748]

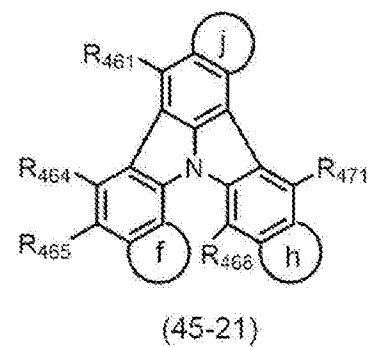
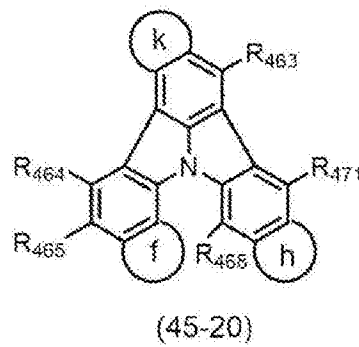
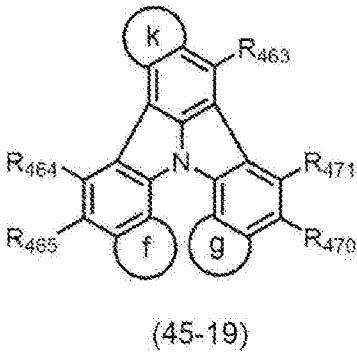
[化280]



[0749] [化281]



[0750] [化282]



[0751] (前記一般式(45-13)～(45-21)において、

環d～kは、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の単環又は置換もしくは無置換の縮合環であり、

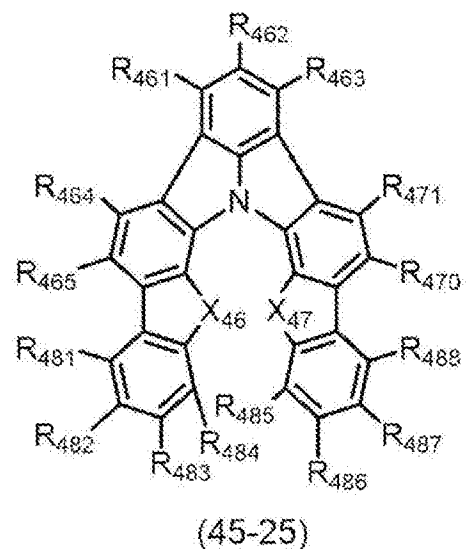
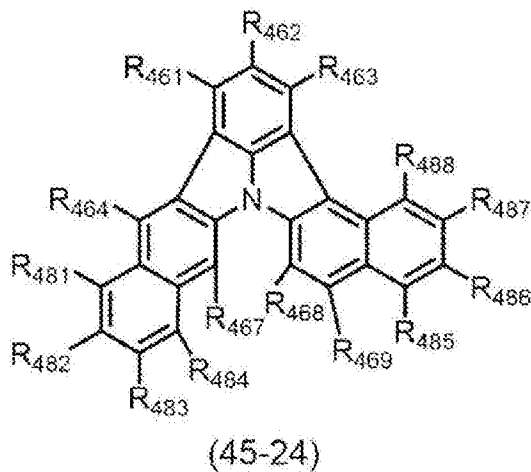
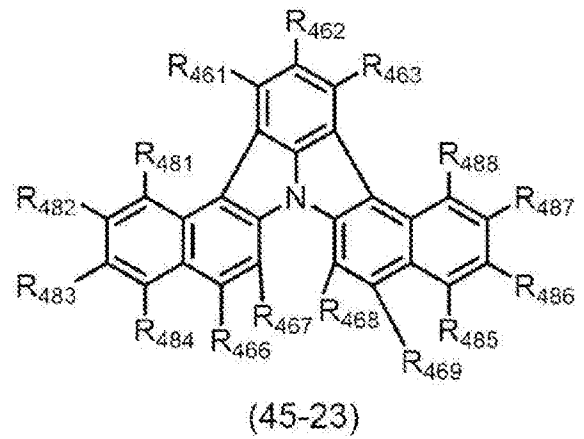
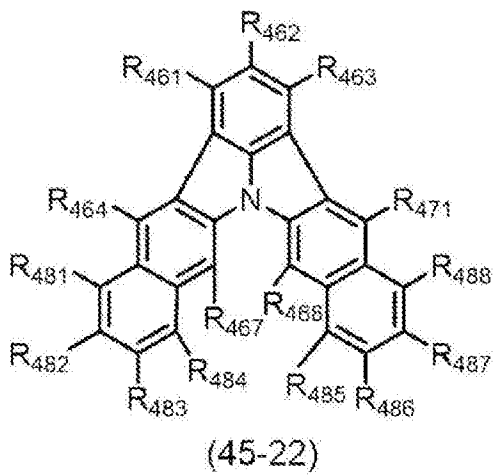
R<sub>461</sub>～R<sub>471</sub>は、それぞれ独立に、前記一般式(45)におけるR<sub>461</sub>～R<sub>471</sub>と同義である。)

[0752] 前記環g又は前記環hがさらに置換基を有する場合の置換基としては、例えば、

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 6～50 のアリール基、  
 前記一般式 (461) で表される基、  
 前記一般式 (463) で表される基、又は  
 前記一般式 (464) で表される基が挙げられる。

[0753] 一実施形態において、前記一般式 (45) で表される化合物は、下記一般式 (45-22)～(45-25) のいずれかで表される。

[0754] [化283]



[0755] (前記一般式 (45-22)～(45-25) において、

$X_{46}$  及び  $X_{47}$  は、それぞれ独立に、 $C(R_{801})(R_{802})$ 、 $NR_{803}$ 、酸素原子又は硫黄原子であり、

$R_{461} \sim R_{471}$ 並びに $R_{481} \sim R_{488}$ は、それぞれ独立に、前記一般式（45）における $R_{461} \sim R_{471}$ と同義である。

$R_{801}$ 、 $R_{802}$ 及び $R_{803}$ 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の複素環基であり、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、

$R_{801}$ が複数存在する場合、複数の $R_{801}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

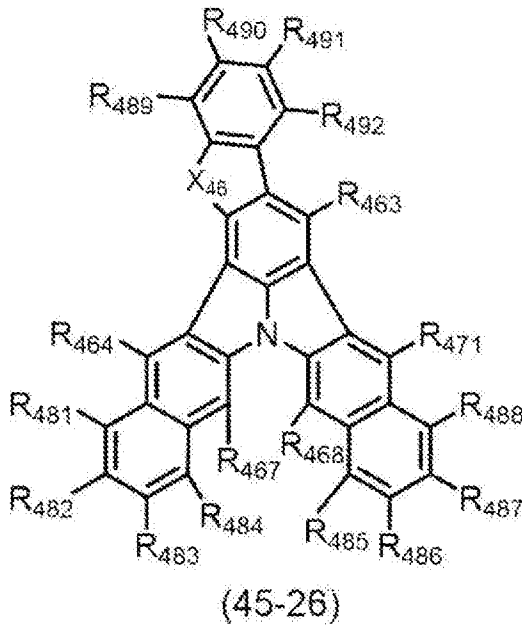
$R_{802}$ が複数存在する場合、複数の $R_{802}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{803}$ が複数存在する場合、複数の $R_{803}$ は、互いに同一であるか又は異なる。）

[0756] 一実施形態において、前記一般式（45）で表される化合物は、下記一般式（45-26）で表される。

[0757]

[化284]



[0758] (前記一般式 (45-26) において、

$X_{46}$  は、 $C(R_{801})(R_{802})$ 、 $NR_{803}$ 、酸素原子又は硫黄原子であり、

$R_{463}$ 、 $R_{464}$ 、 $R_{467}$ 、 $R_{468}$ 、 $R_{471}$ 、及び $R_{481} \sim R_{492}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (45) における $R_{461} \sim R_{471}$ と同義である。

$R_{801}$ 、 $R_{802}$ 及び $R_{803}$ 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の複素環基であり、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、

$R_{801}$ が複数存在する場合、複数の $R_{801}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

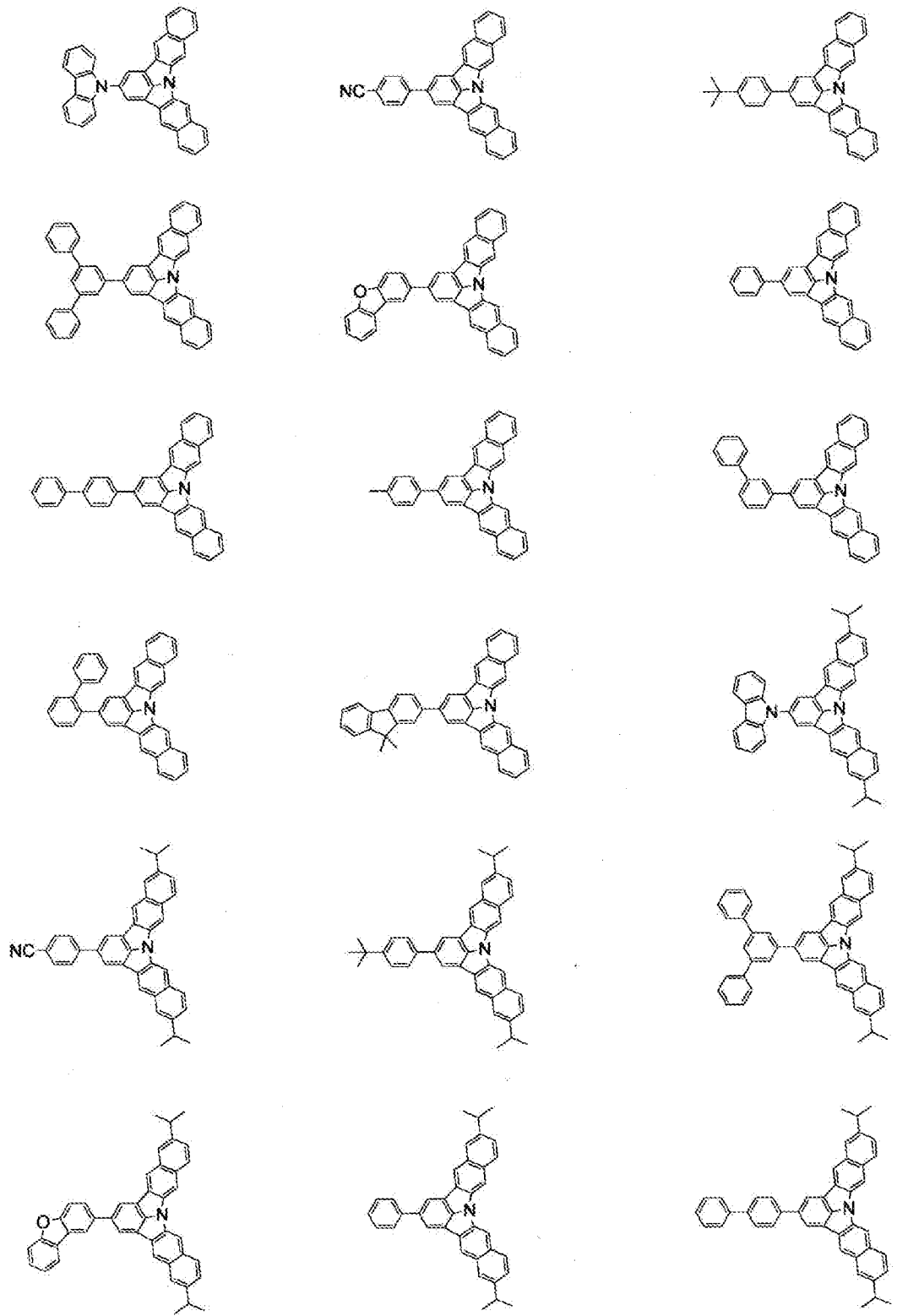
$R_{802}$ が複数存在する場合、複数の $R_{802}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

R<sub>803</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>803</sub>は、互いに同一であるか又は異なる。) )

[0759] 前記一般式(4)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。下記具体例中、Phは、フェニル基を示し、Dは、重水素原子を示す。

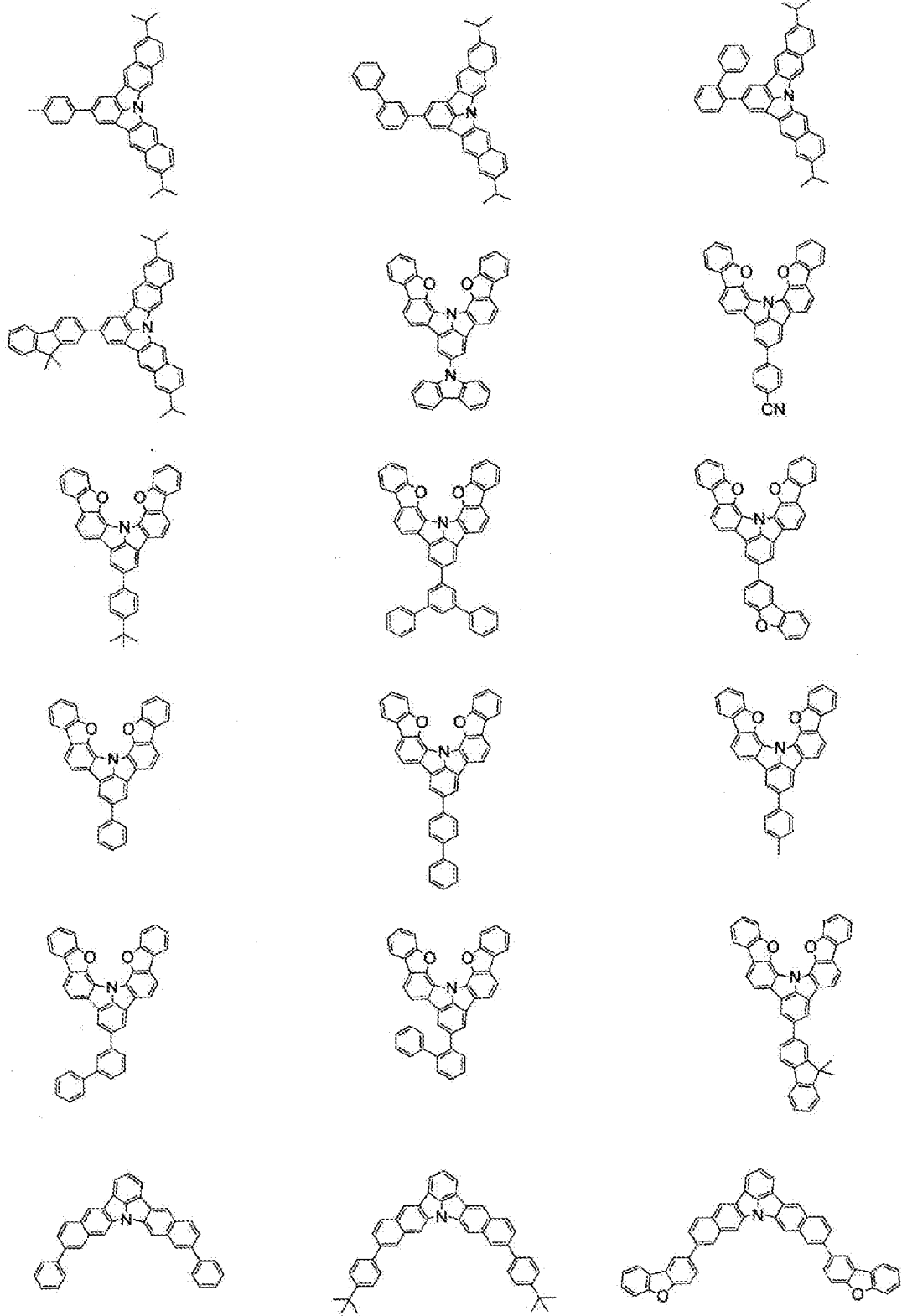
[0760]

[化285]



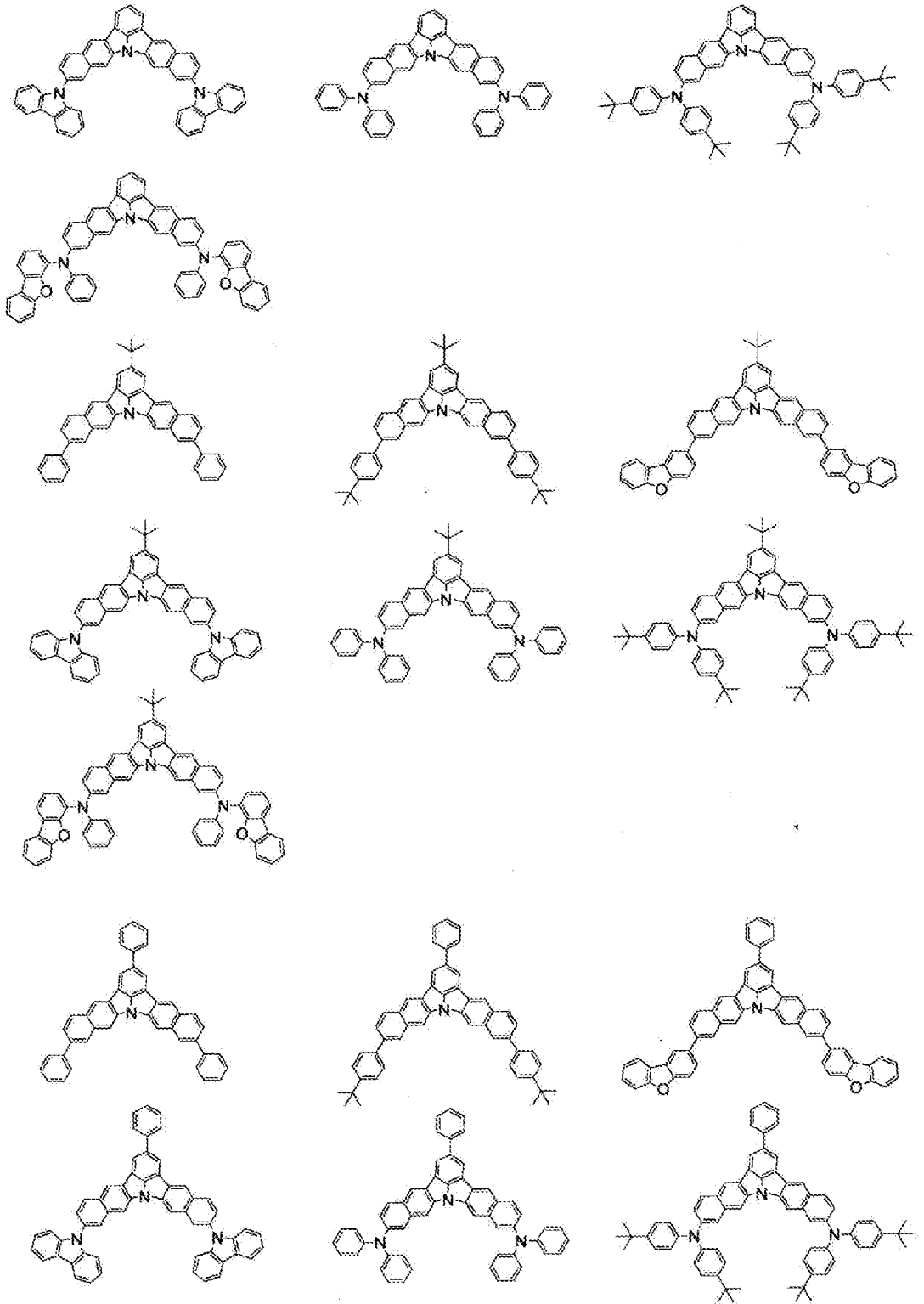
[0761]

[化286]



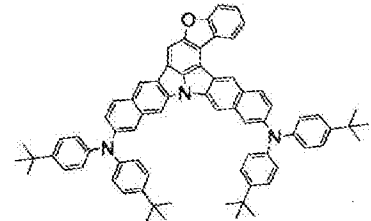
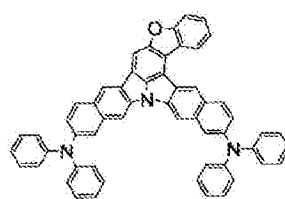
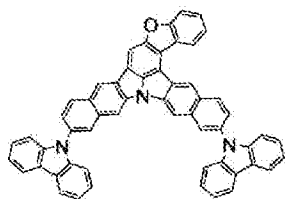
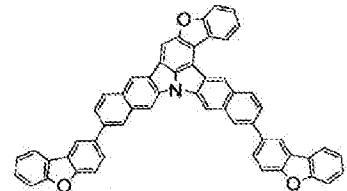
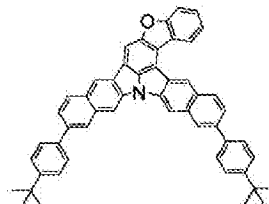
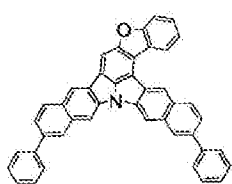
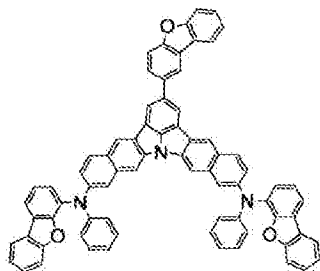
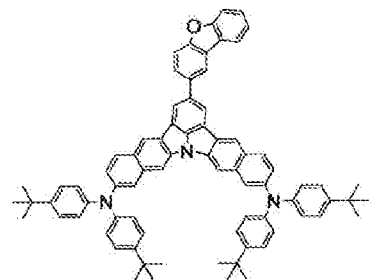
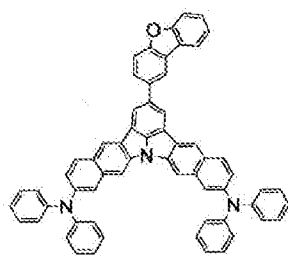
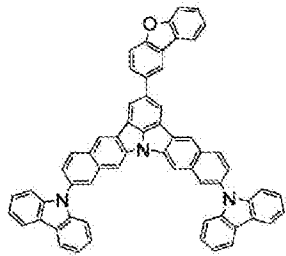
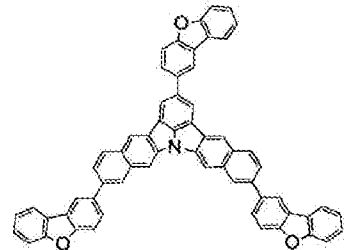
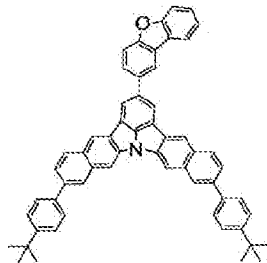
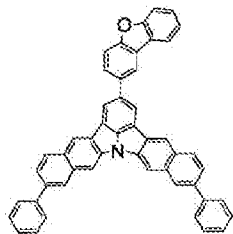
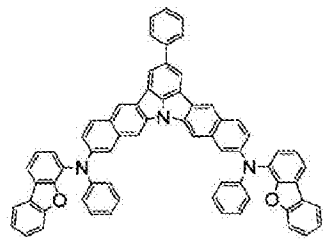
[0762]

[化287]



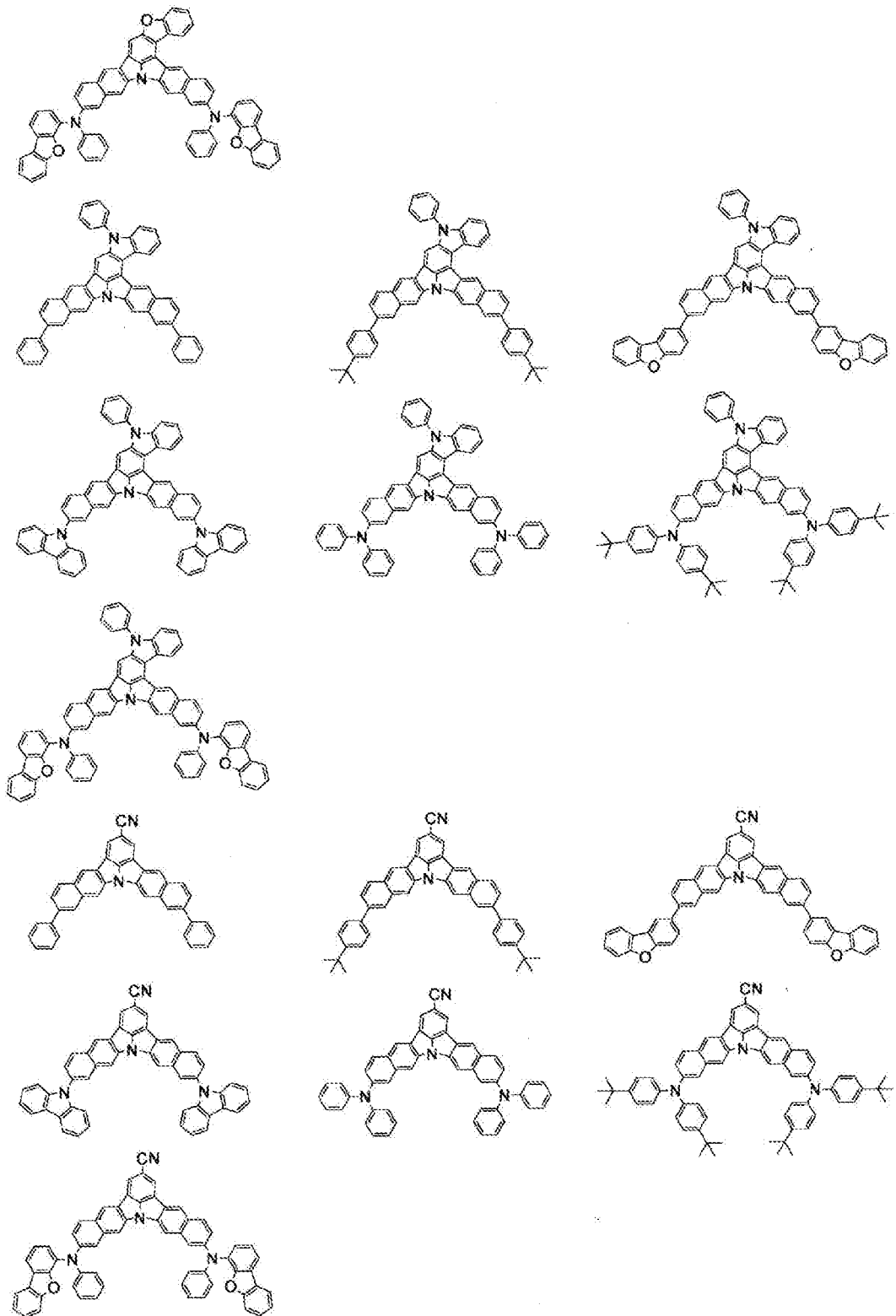
[0763]

[化288]



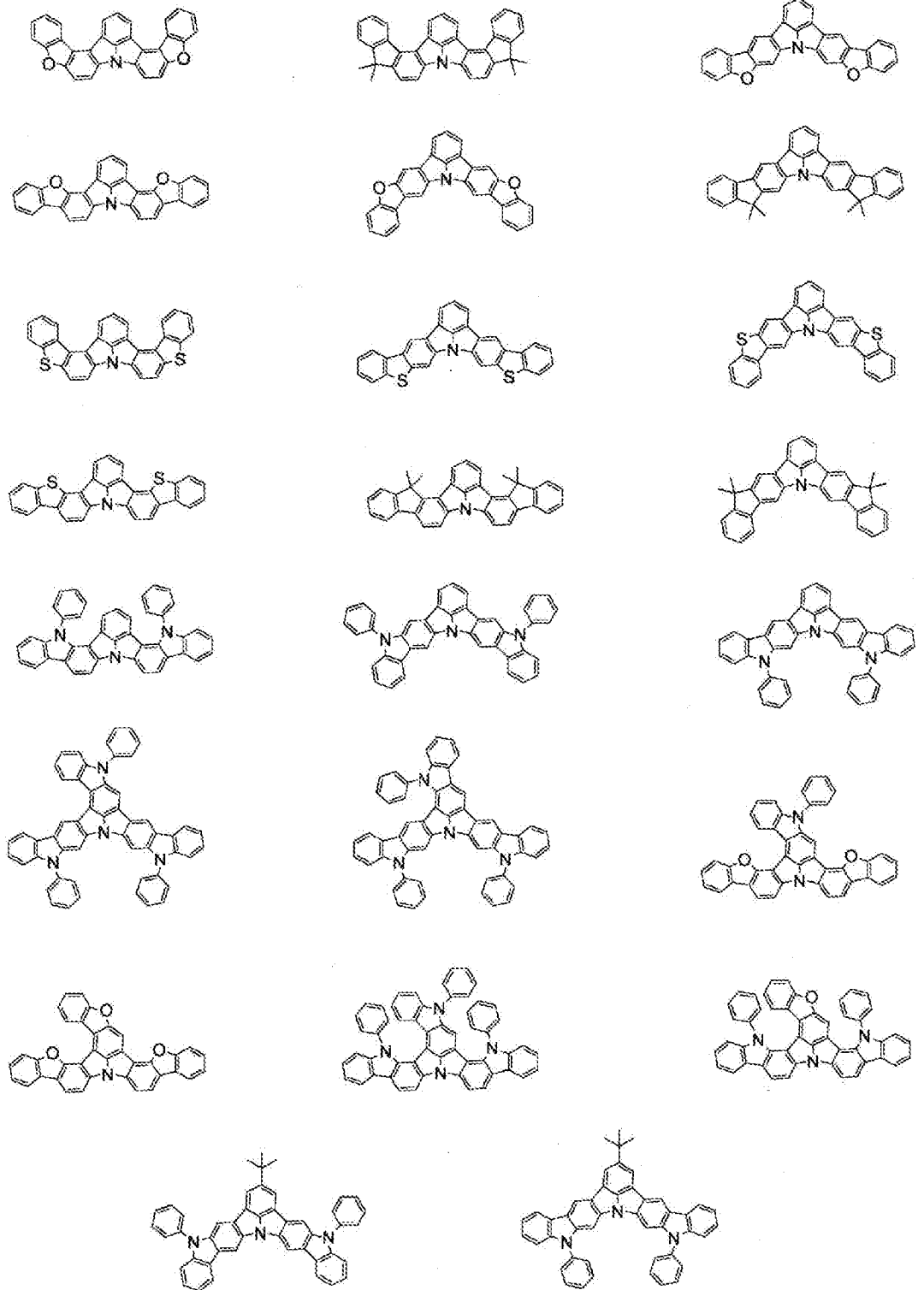
[0764]

[化289]



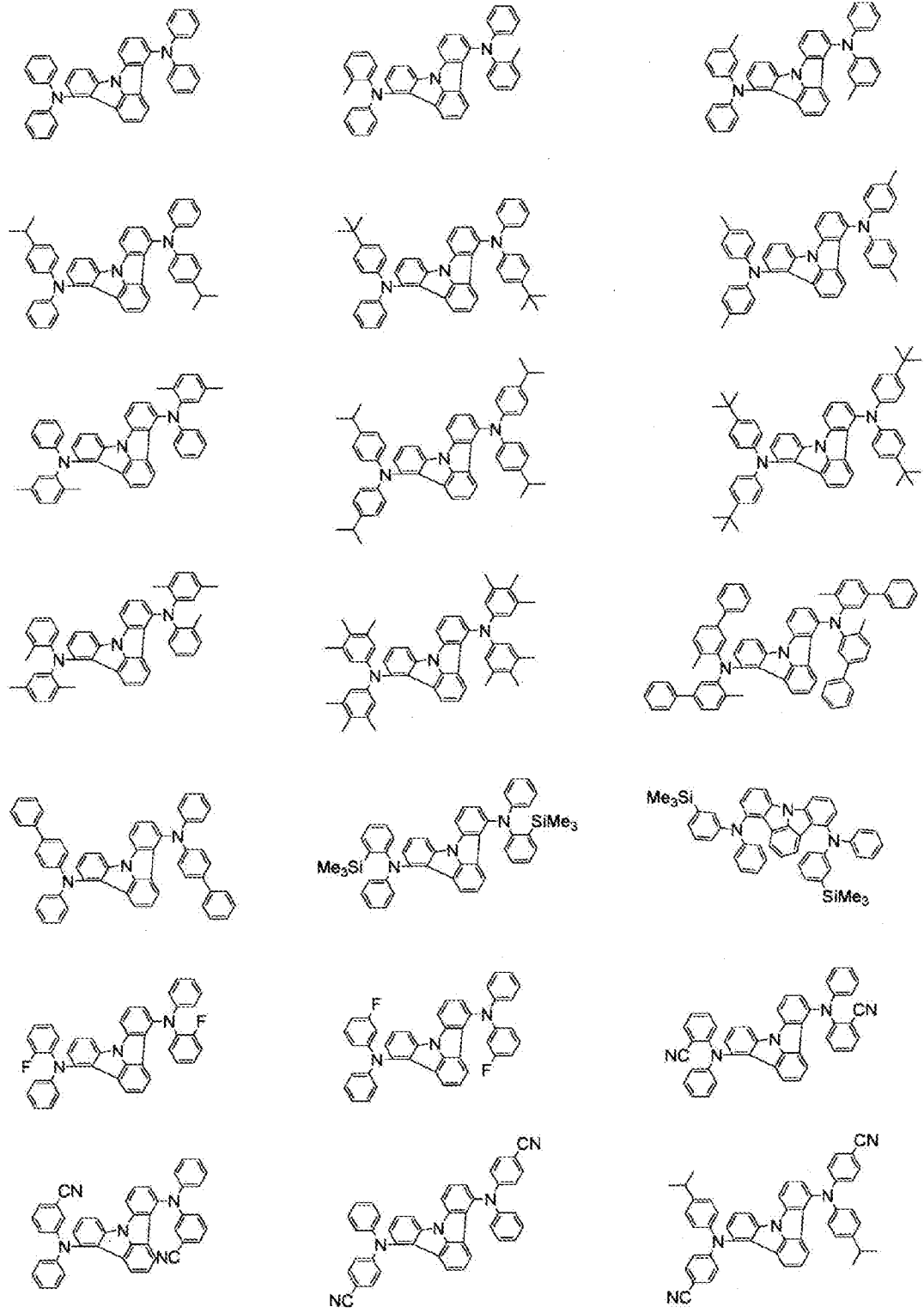
[0765]

[化290]



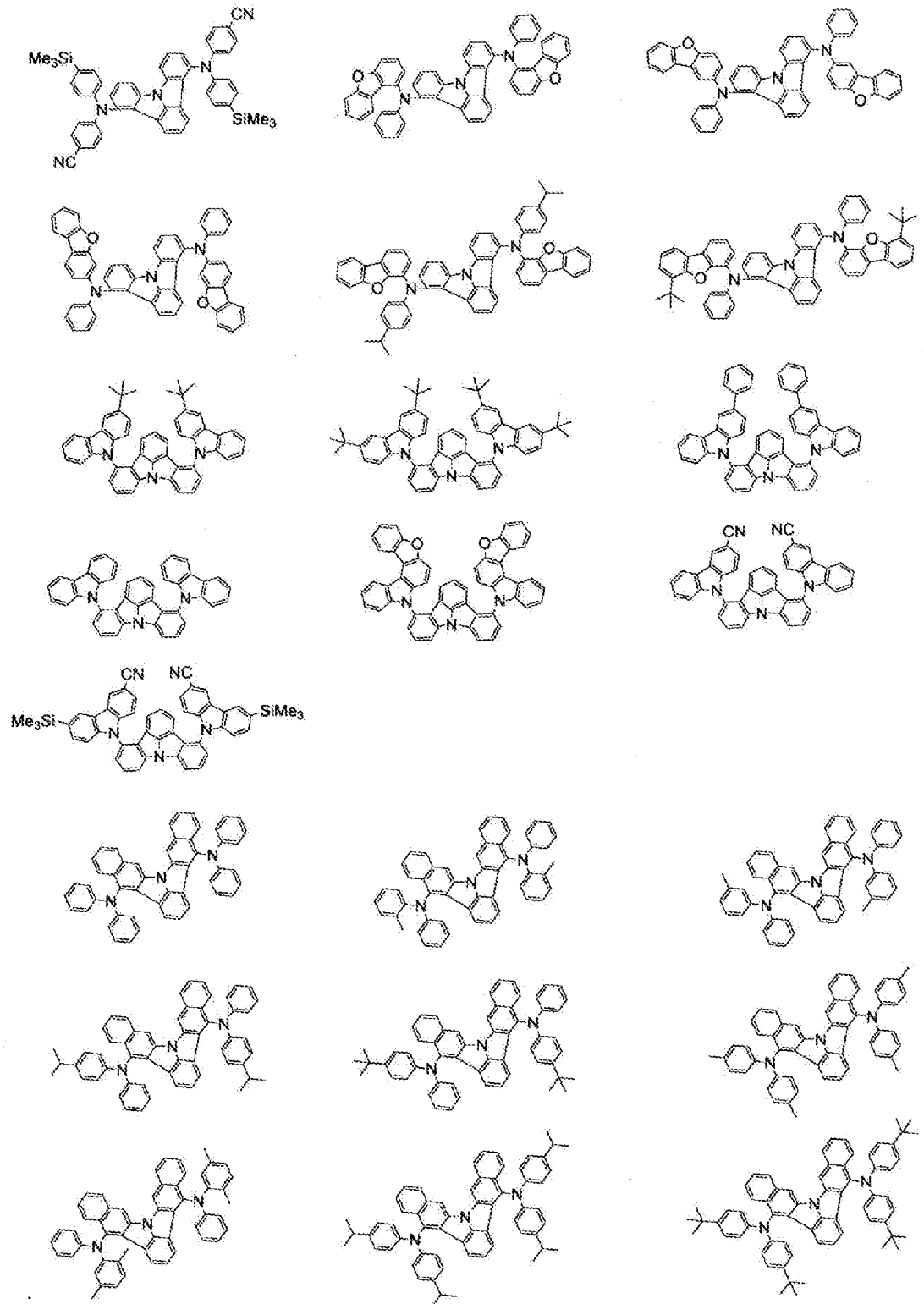
[0766]

[化291]



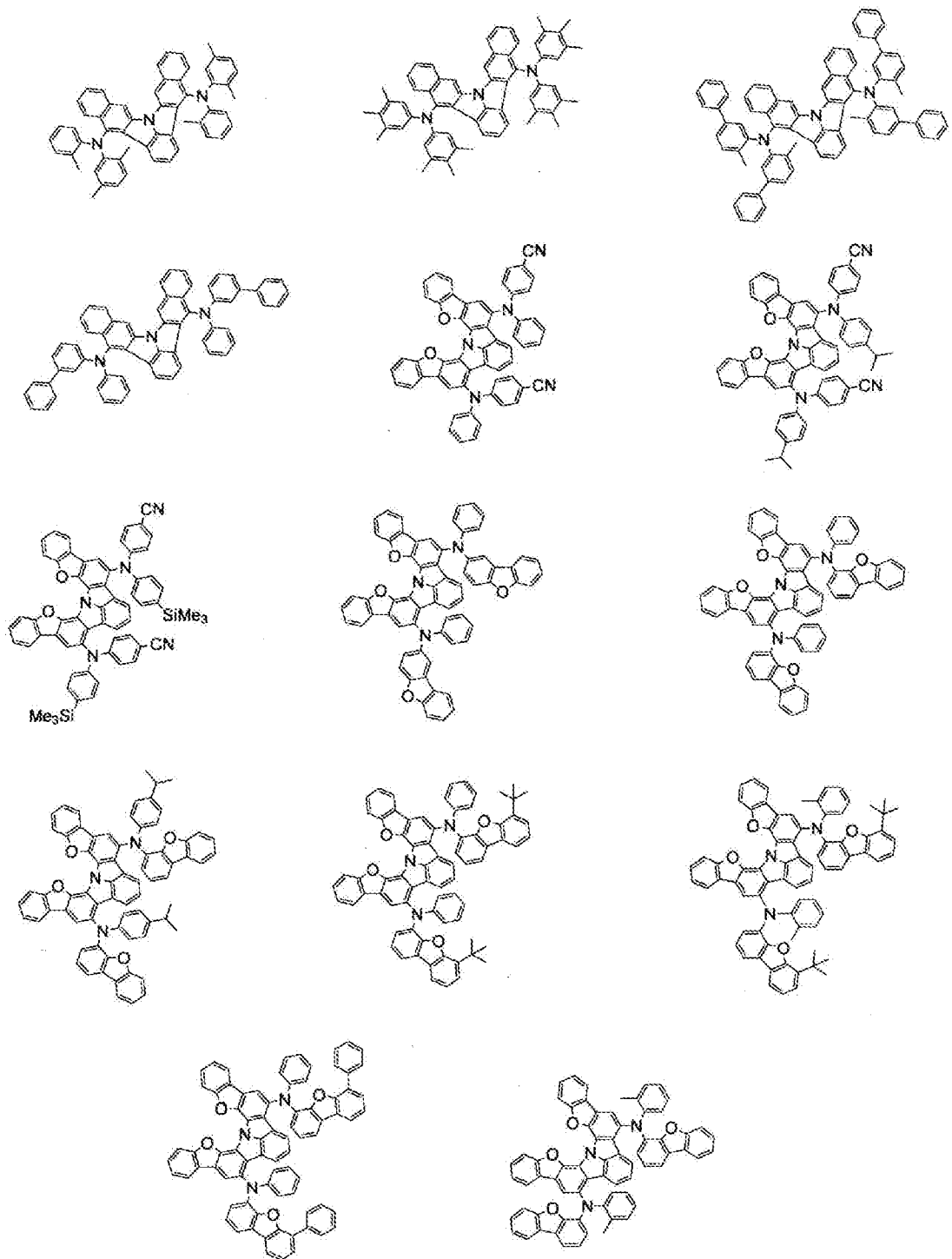
[0767]

[化292]



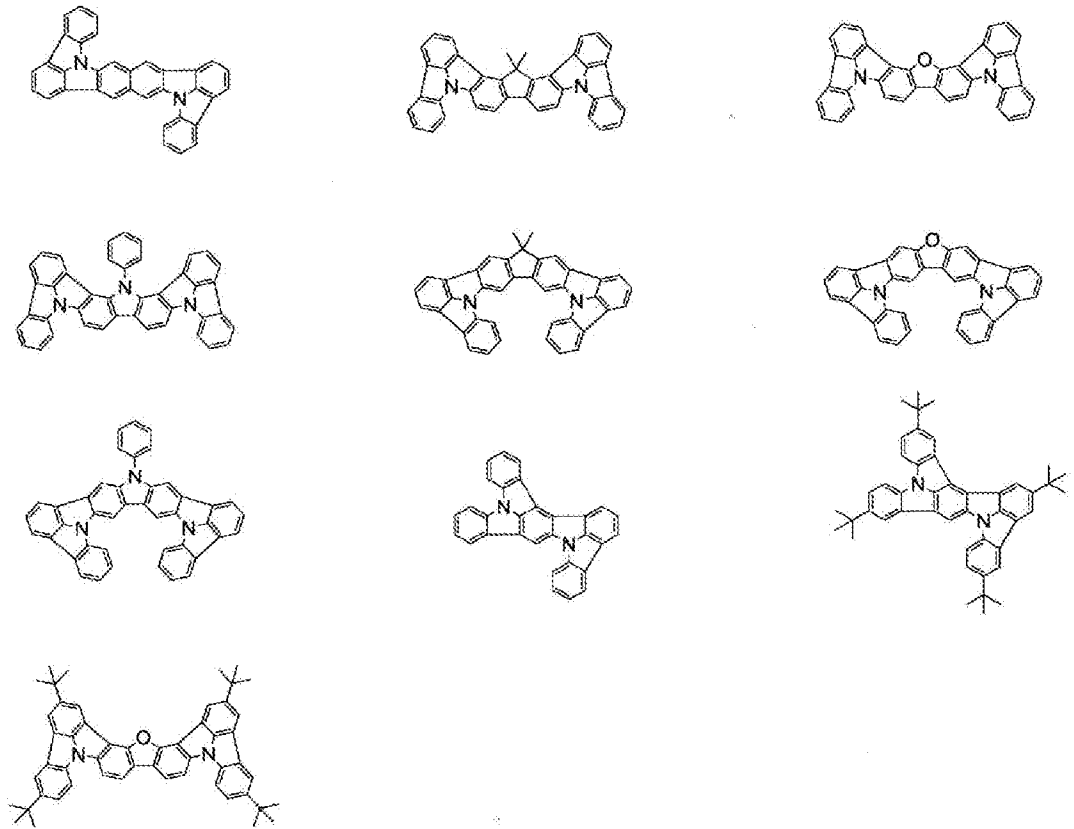
[0768]

[化293]



[0769]

[化294]

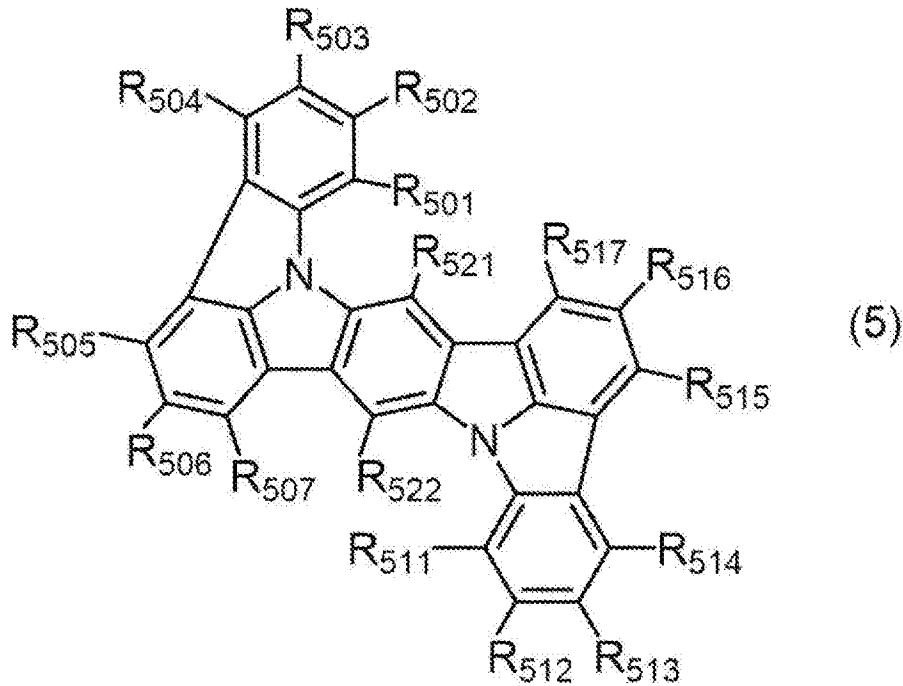


[0770] (一般式 (5) で表される化合物)

一般式 (5) で表される化合物について説明する。一般式 (5) で表される化合物は、上述した一般式 (4 1 - 3) で表される化合物に対応する化合物である。

[0771]

[化295]



[0772] (前記一般式 (5) において、

$R_{501} \sim R_{507}$  及び  $R_{511} \sim R_{517}$  のうち隣接する 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、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない  $R_{501} \sim R_{507}$  及び  $R_{511} \sim R_{517}$  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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ ) で表される基、

—O—( $R_{904}$ ) で表される基、

—S—( $R_{905}$ ) で表される基、

$-N(R_{906})(R_{907})$  で表される基、  
 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 のアリアル基、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。

$R_{521}$  及び  $R_{522}$  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、  
 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$  で表される基、  
 $-O-$  ( $R_{904}$ ) で表される基、  
 $-S-$  ( $R_{905}$ ) で表される基、  
 $-N(R_{906})(R_{907})$  で表される基、  
 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 のアリアル基、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。)

[0773] 「 $R_{501} \sim R_{507}$  及び  $R_{511} \sim R_{517}$  のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組」は、例えば、 $R_{501}$  と  $R_{502}$  からなる組、 $R_{502}$  と  $R_{503}$  からなる組、 $R_{503}$  と  $R_{504}$  からなる組、 $R_{505}$  と  $R_{506}$  からなる組、 $R_{506}$  と  $R_{507}$  からなる組、 $R_{501}$  と  $R_{502}$  と  $R_{503}$  からなる組等の組合せである。

[0774] 一実施形態において、 $R_{501} \sim R_{507}$  及び  $R_{511} \sim R_{517}$  の少なくとも 1 つ、好ましくは 2 つが  $-N(R_{906})(R_{907})$  で表される基である。

[0775] 一実施形態においては、 $R_{501} \sim R_{507}$  及び  $R_{511} \sim R_{517}$  は、それぞれ独

立に、

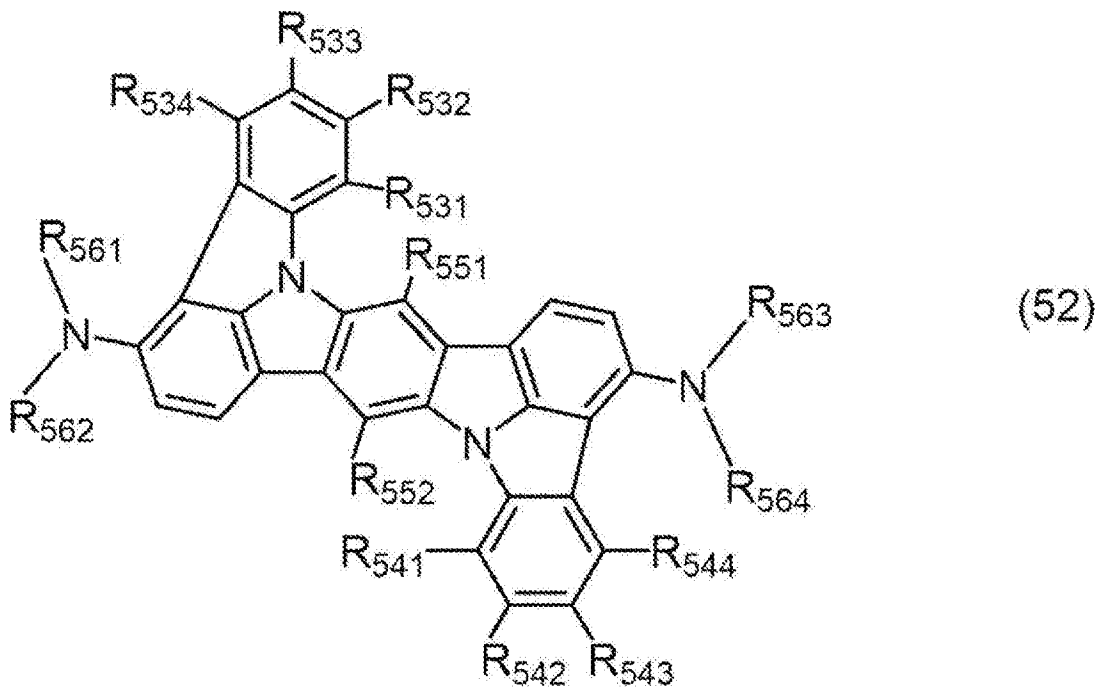
水素原子、

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。

[0776] 一実施形態においては、前記一般式 (5) で表される化合物は、下記一般式 (52) で表される化合物である。

[0777] [化296]



[0778] (前記一般式 (52) において、

$R_{531} \sim R_{534}$  及び  $R_{541} \sim R_{544}$  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、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、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない  $R_{531} \sim R_{534}$ 、 $R_{541} \sim R_{544}$ 、並びに  $R_{551}$  及び  $R_{552}$  は、それぞれ独立に、

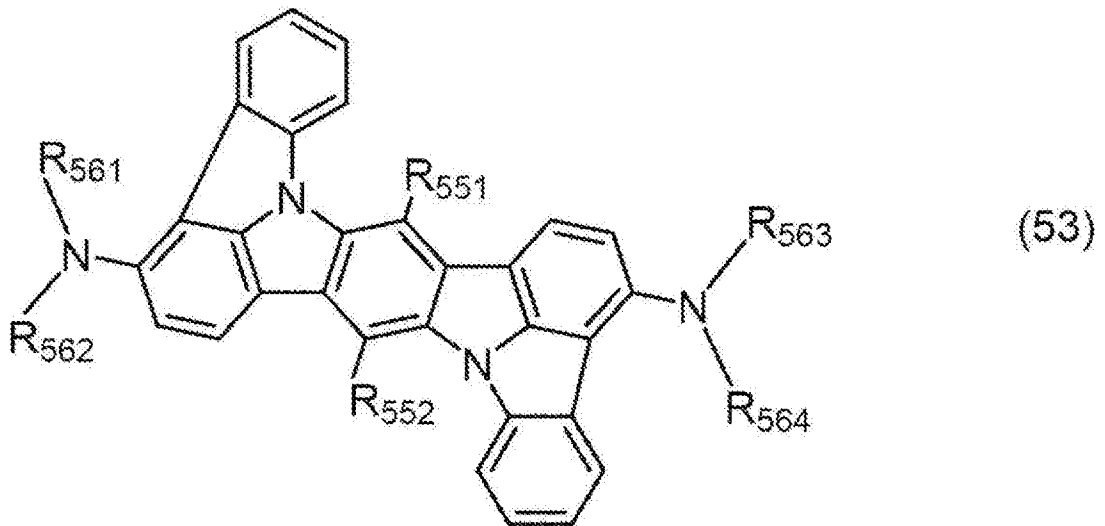
水素原子、

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 の複素環基であり、  
 $R_{561} \sim R_{564}$  は、それぞれ独立に、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 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。)

[0779] 一実施形態においては、前記一般式 (5) で表される化合物は、下記一般式 (53) で表される化合物である。

[0780] [化297]



[0781] (前記一般式 (53) において、 $R_{551}$ 、 $R_{552}$  及び  $R_{561} \sim R_{564}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (52) における  $R_{551}$ 、 $R_{552}$  及び  $R_{561} \sim R_{564}$  と同義である。)

[0782] 一実施形態においては、前記一般式 (52) 及び一般式 (53) における  $R_{561} \sim R_{564}$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基 (好ましくはフェニル基) である。

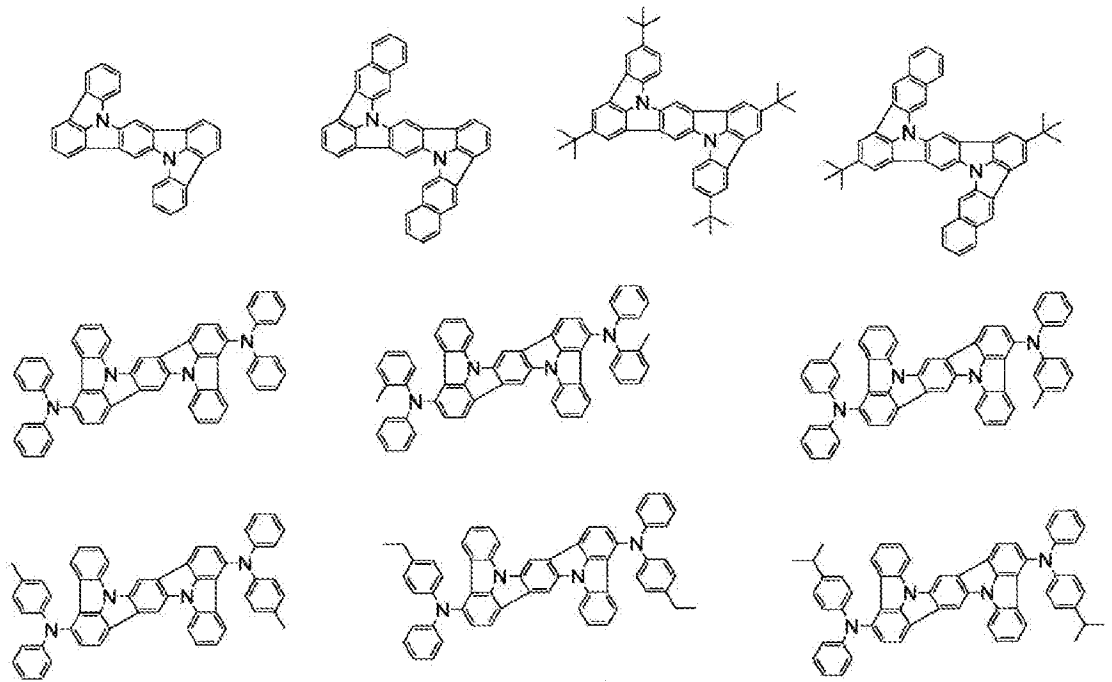
[0783] 一実施形態においては、前記一般式 (5) における  $R_{521}$  及び  $R_{522}$ 、前記一般式 (52) 及び一般式 (53) における  $R_{551}$  及び  $R_{552}$  は、水素原子である。

[0784] 一実施形態においては、前記一般式 (5)、一般式 (52) 及び一般式 (53) 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、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、  
 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。

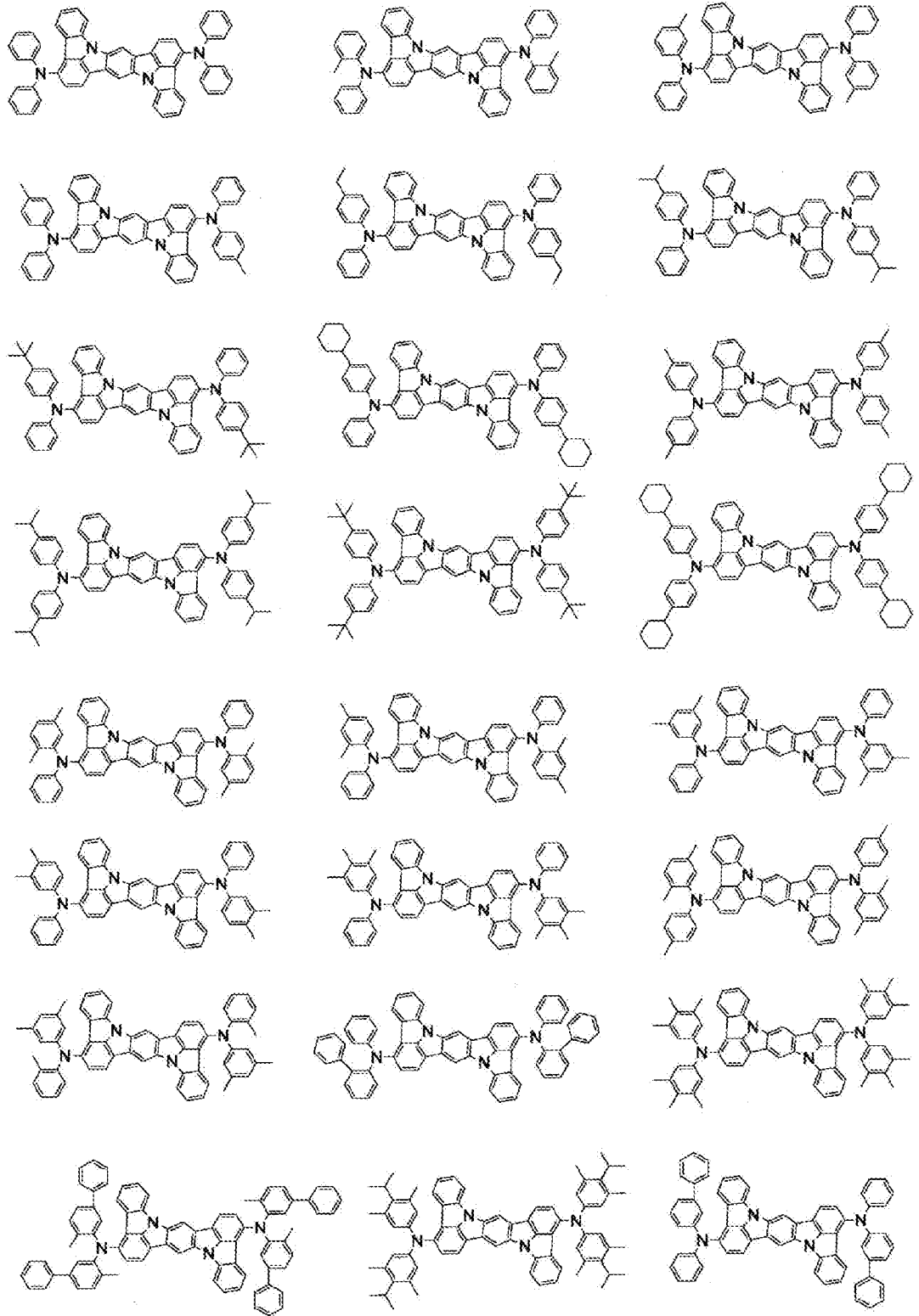
[0785] 前記一般式 (5) で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物  
 が具体例として挙げられる。

[0786] [化298]



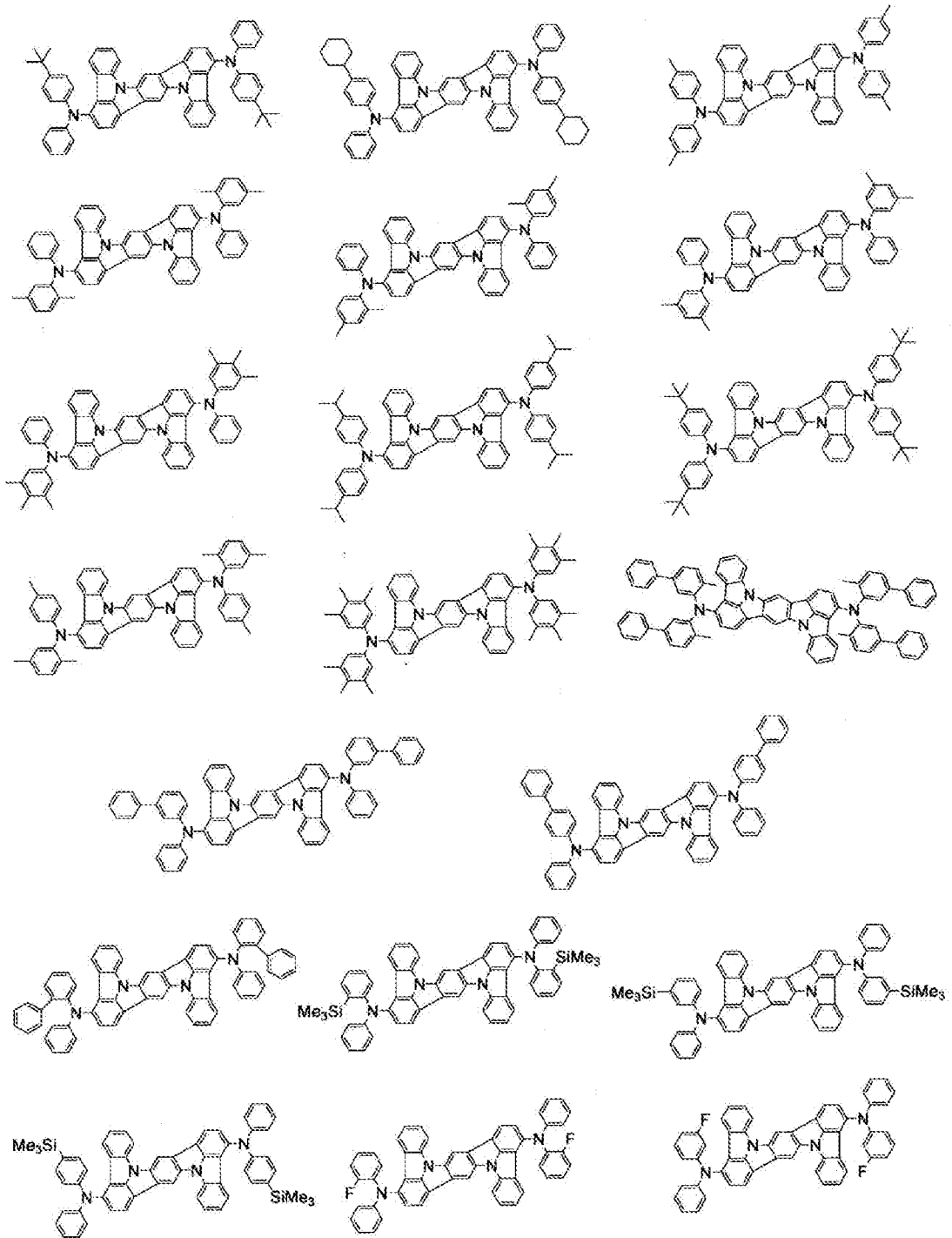
[0787]

[化299]



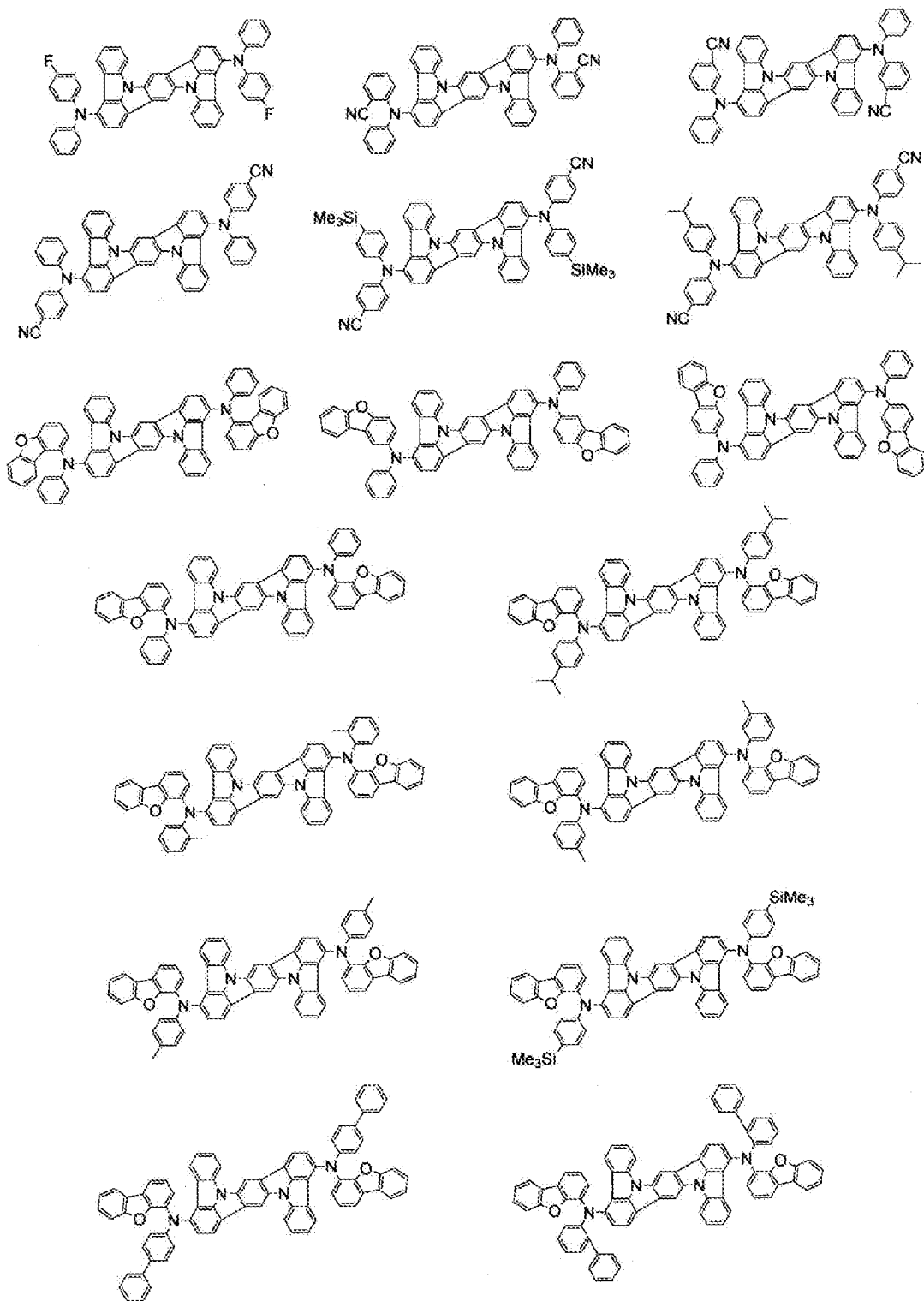
[0788]

[化300]



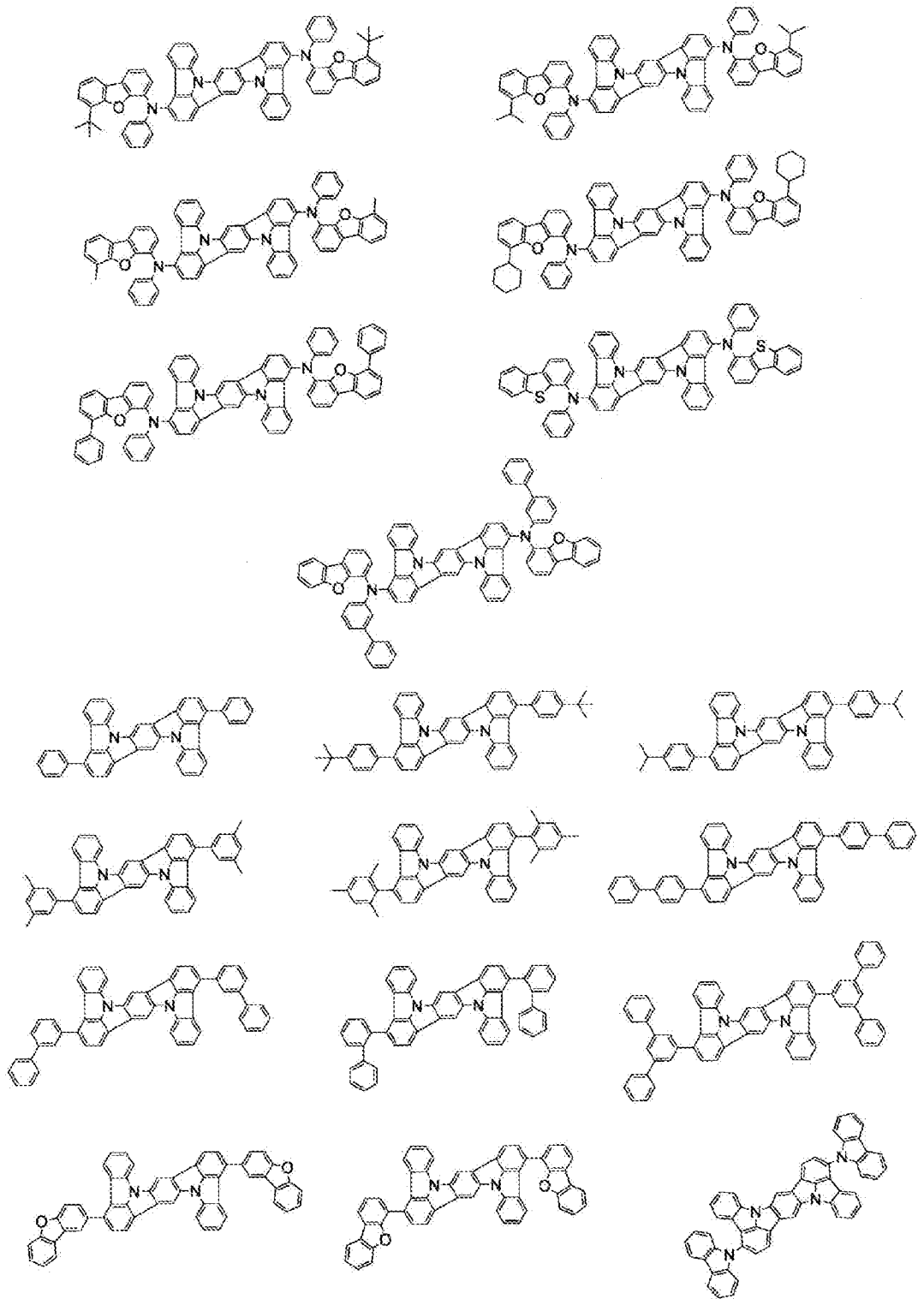
[0789]

[化301]



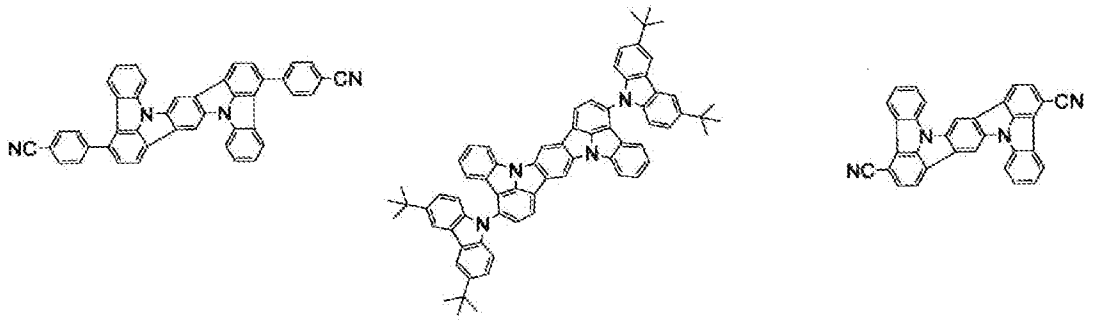
[0790]

[化302]



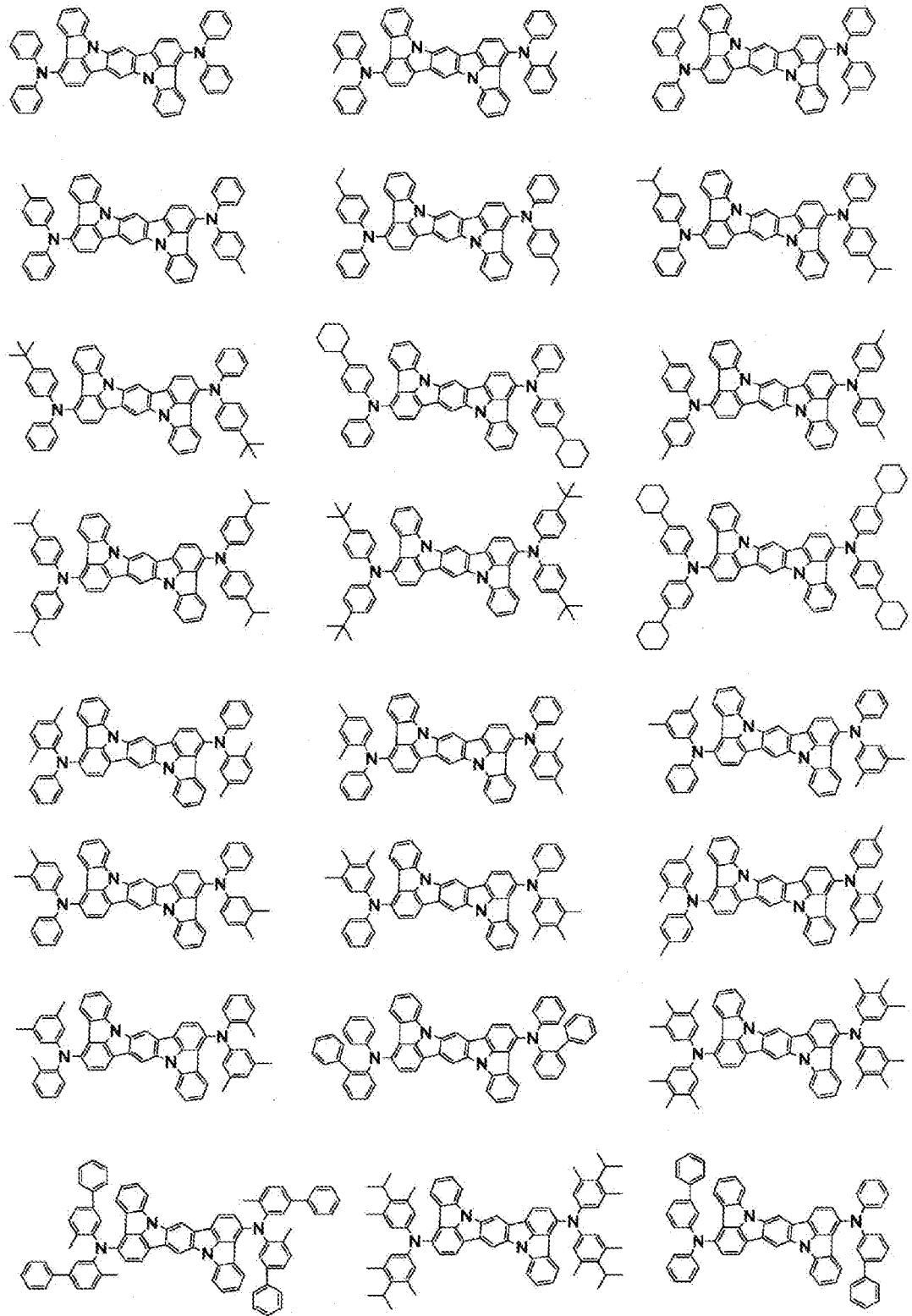
[0791]

[化303]



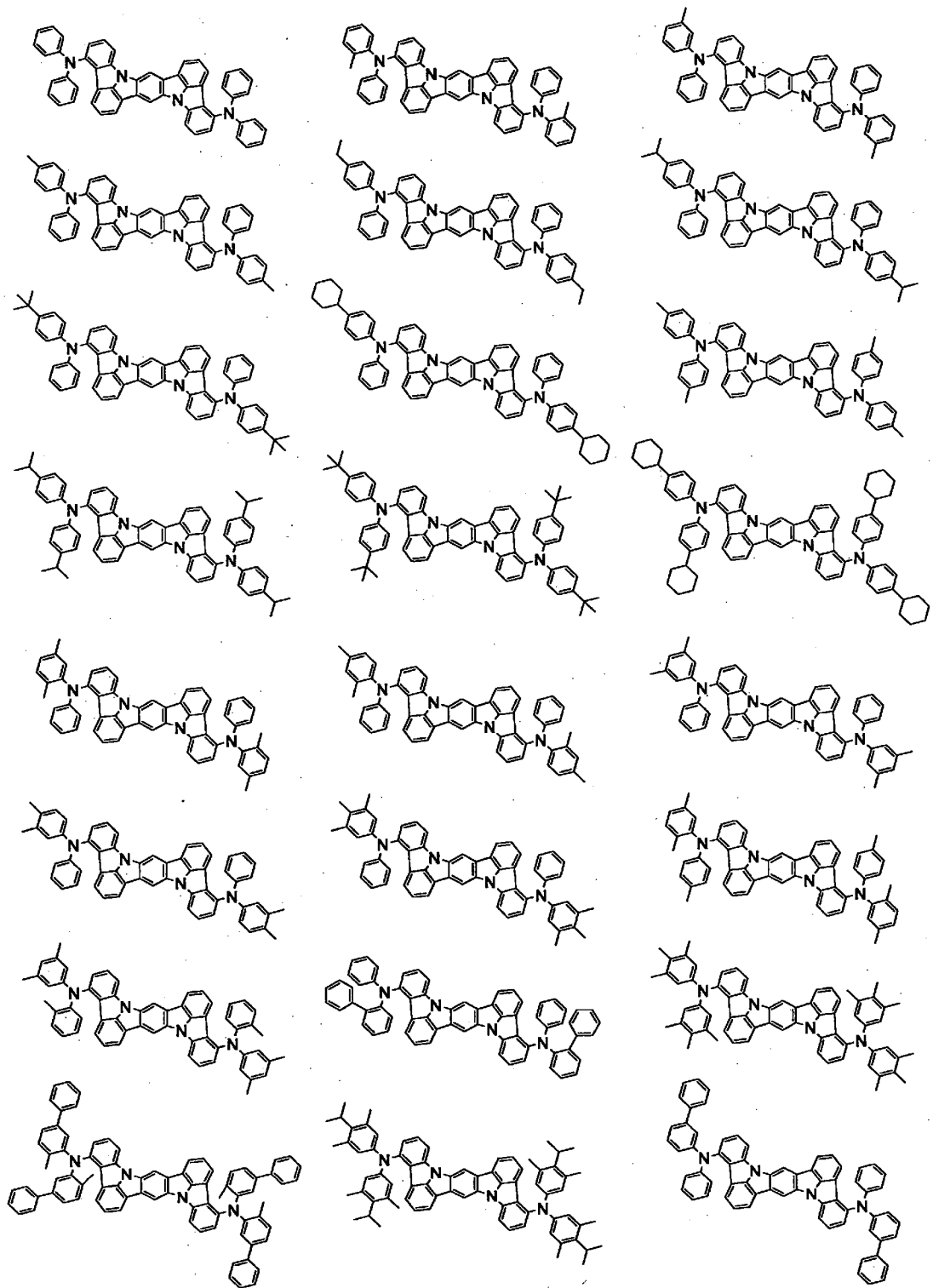
[0792]

[化304]



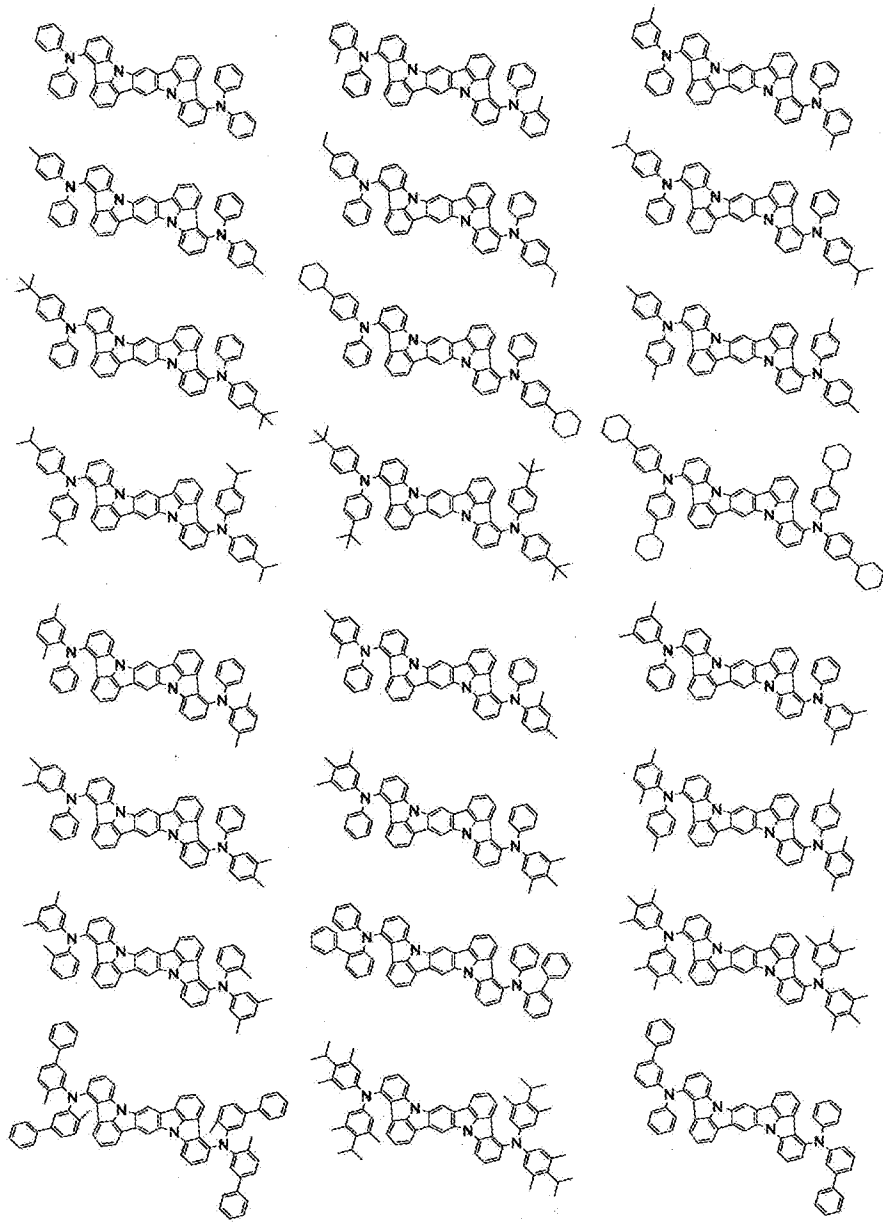
[0793]

[化305]



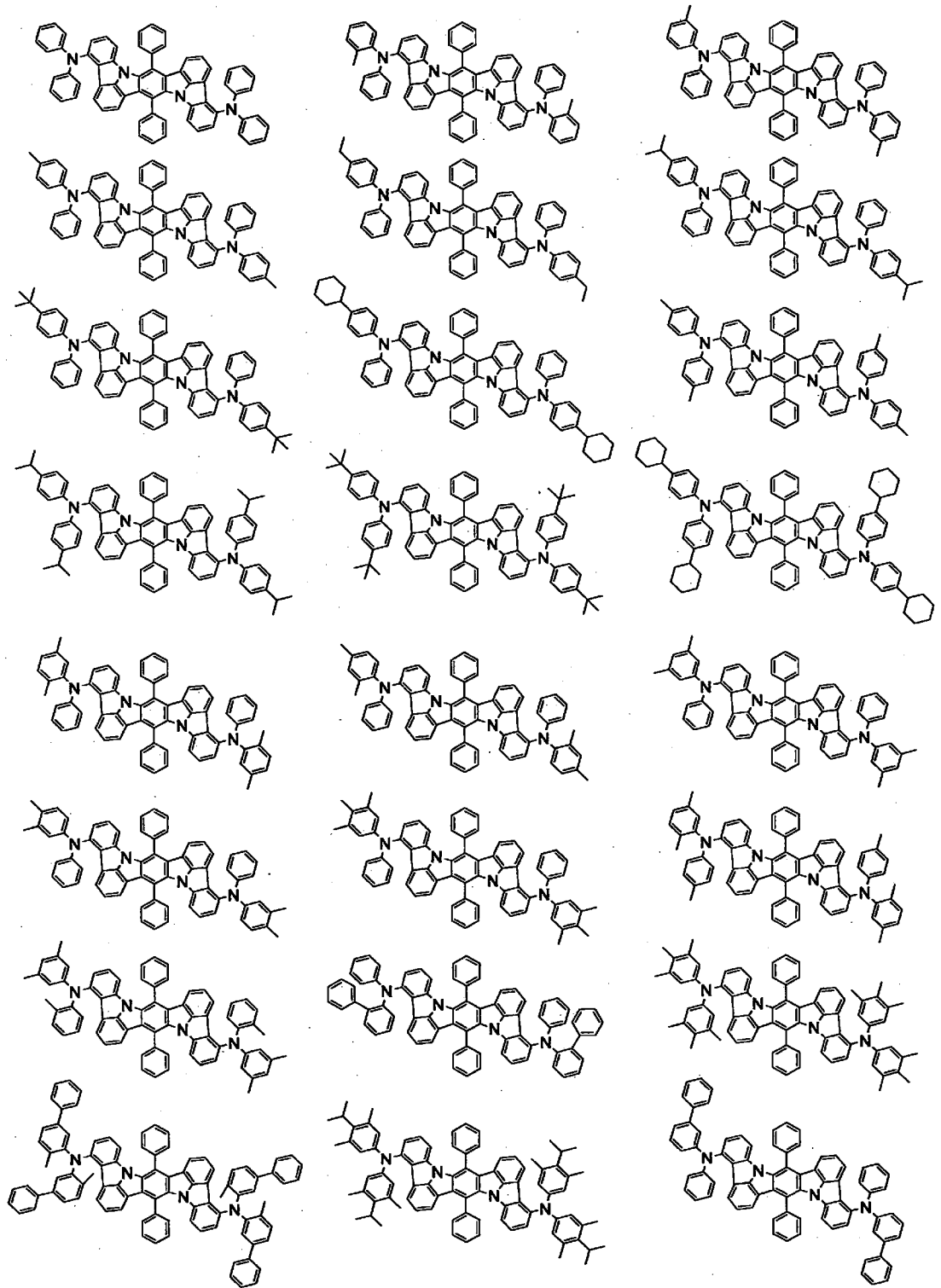
[0794]

[化306]



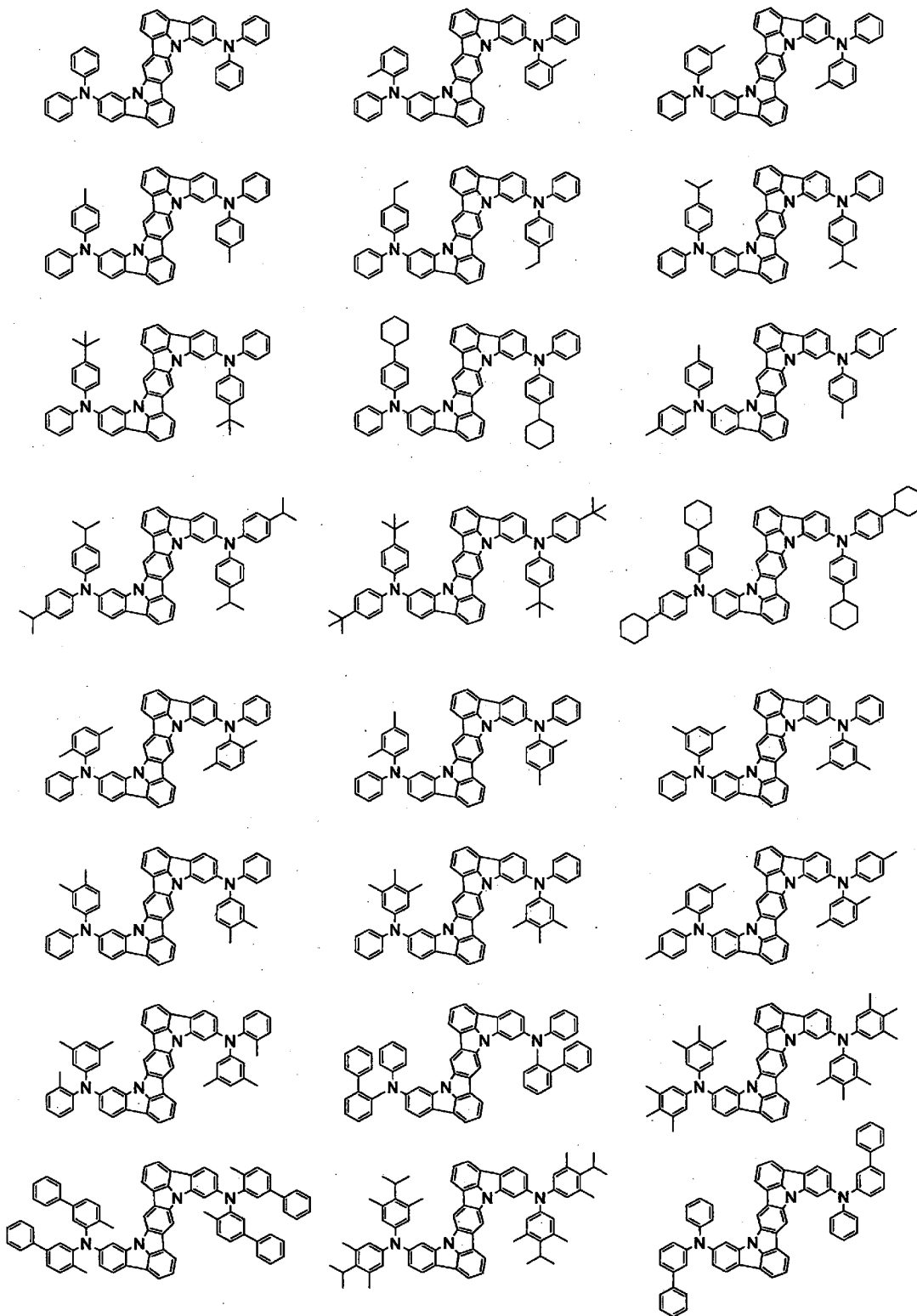
[0795]

[化307]



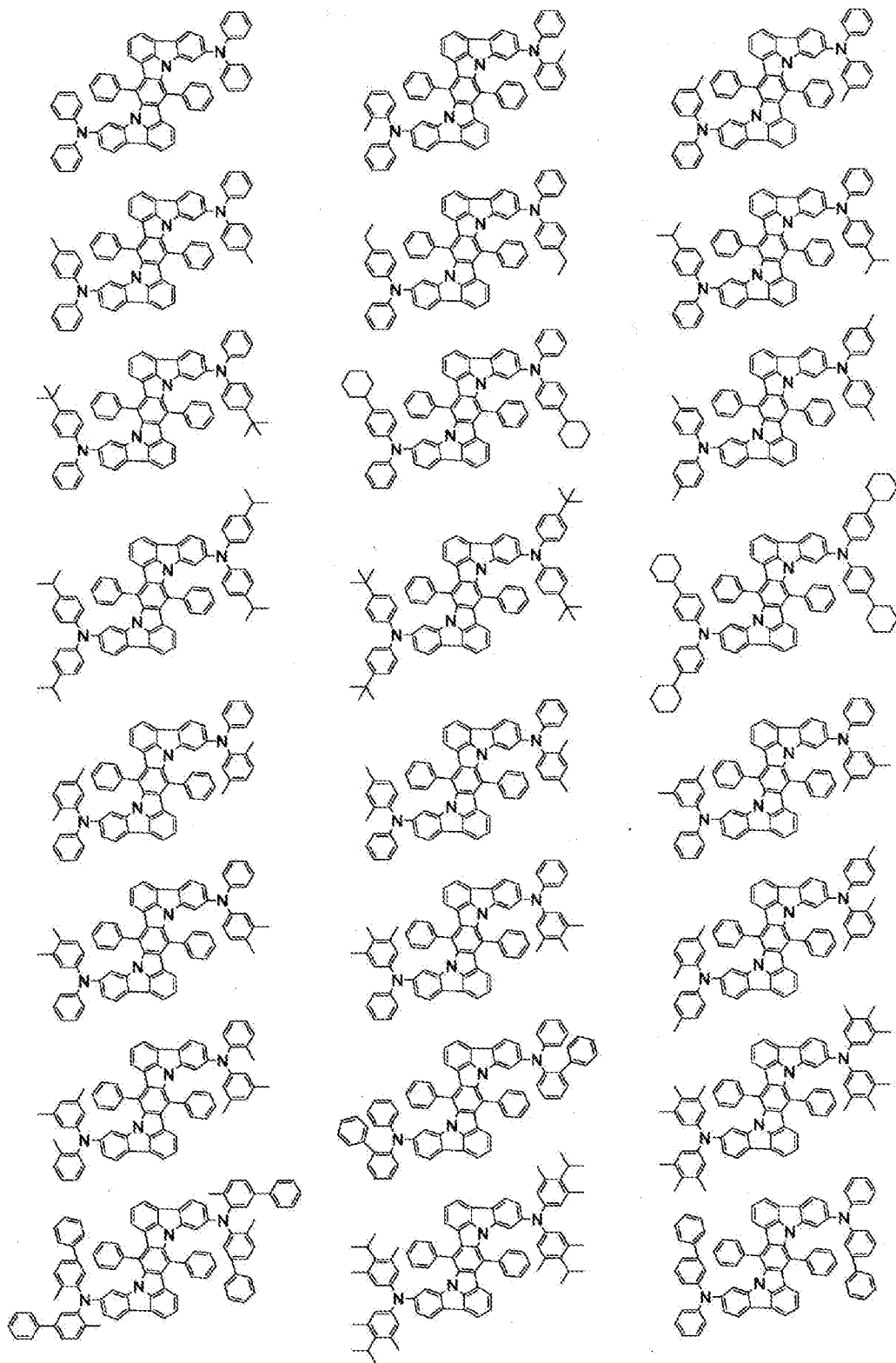
[0796]

[化308]



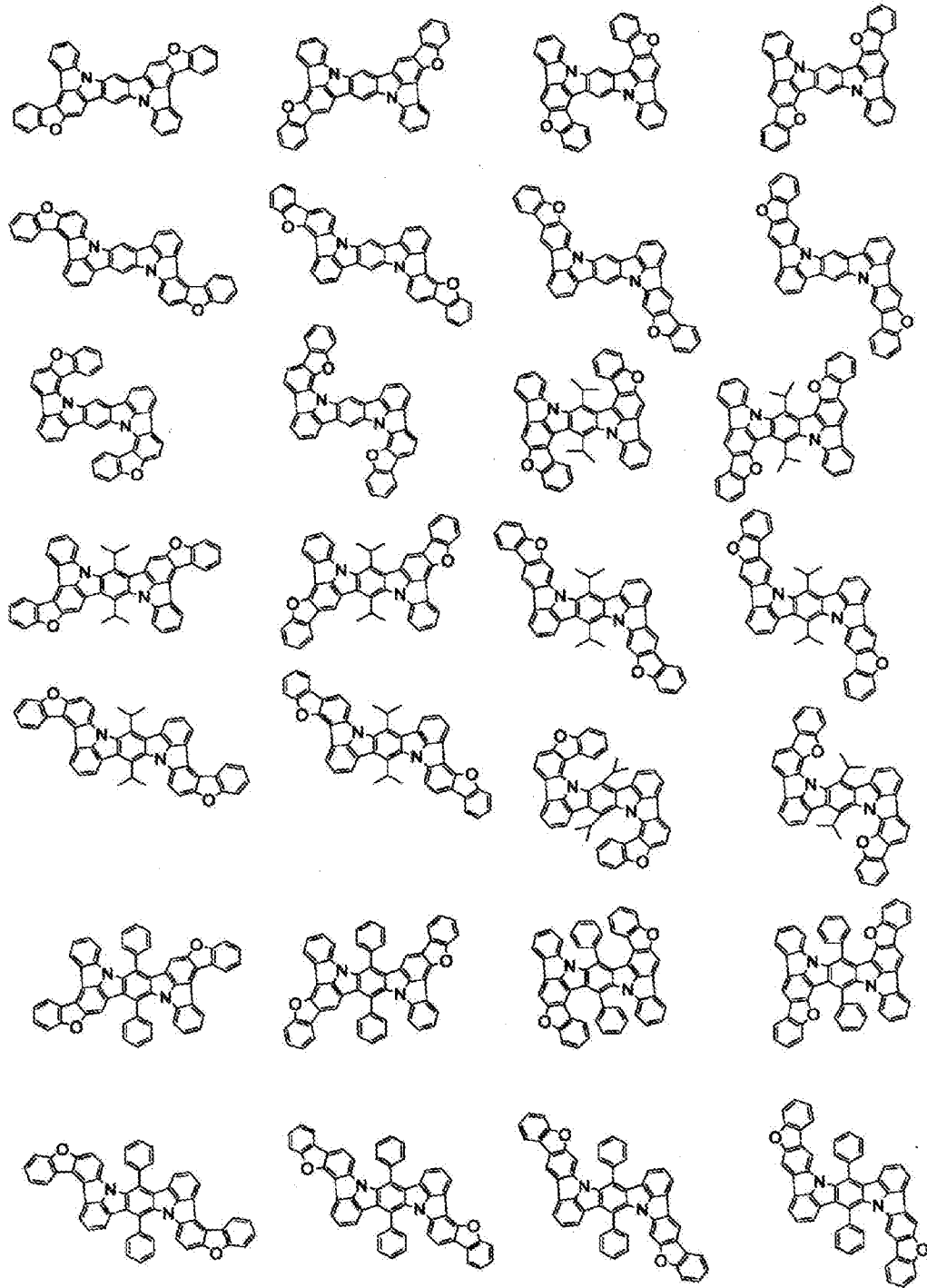
[0797]

[化309]



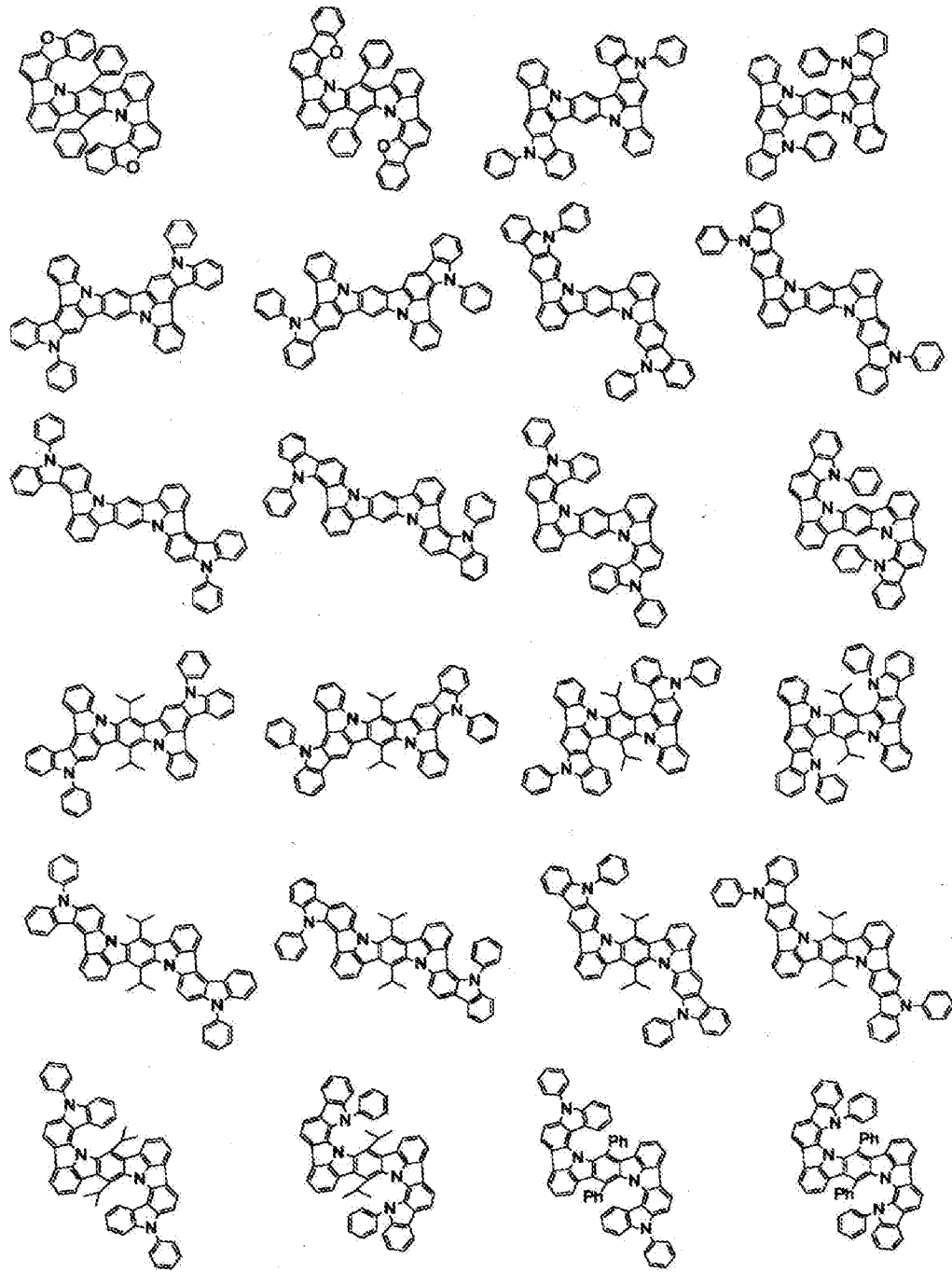
[0798]

[化310]



[0799]

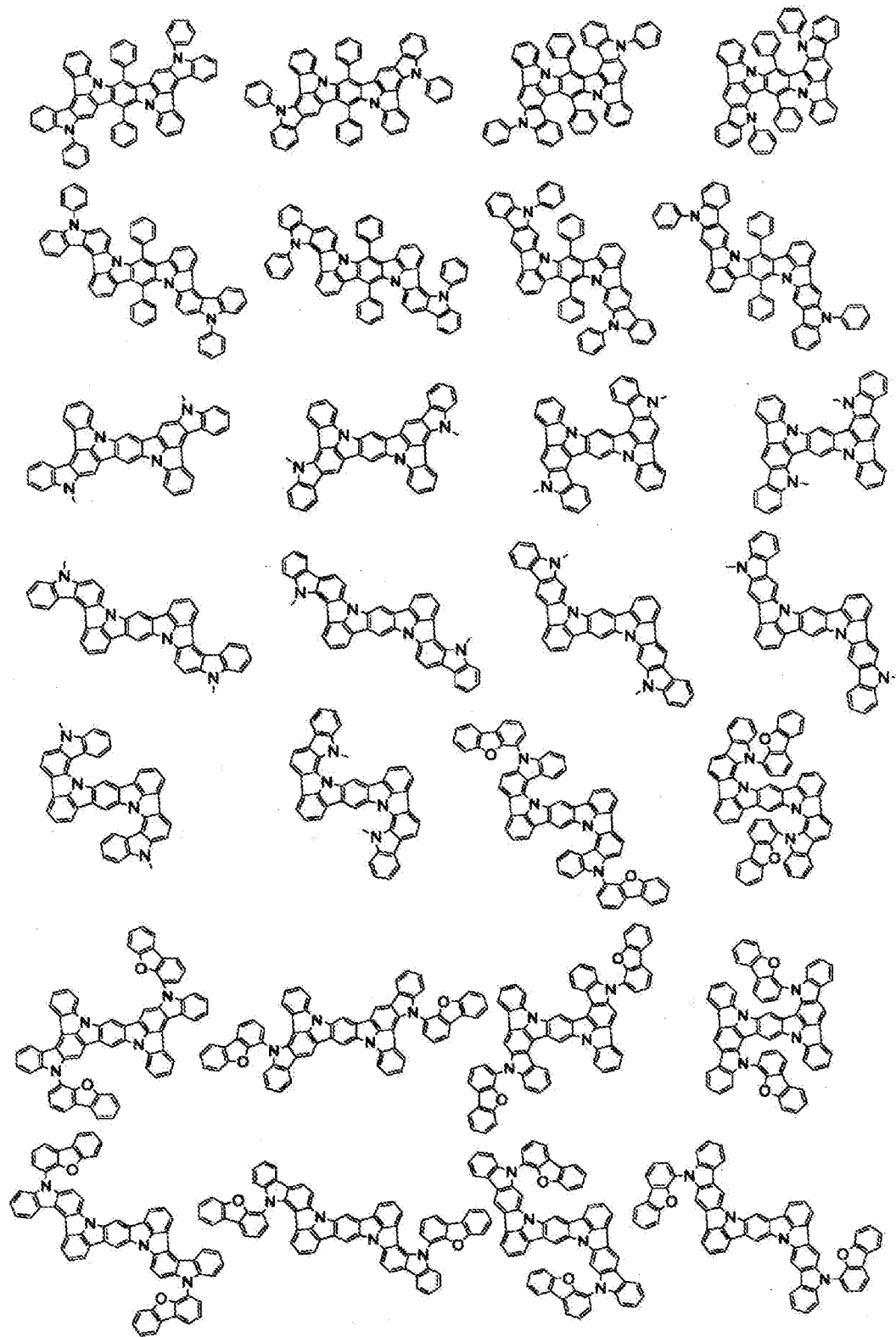
[化311]



(式中、Phはフェニル基である)

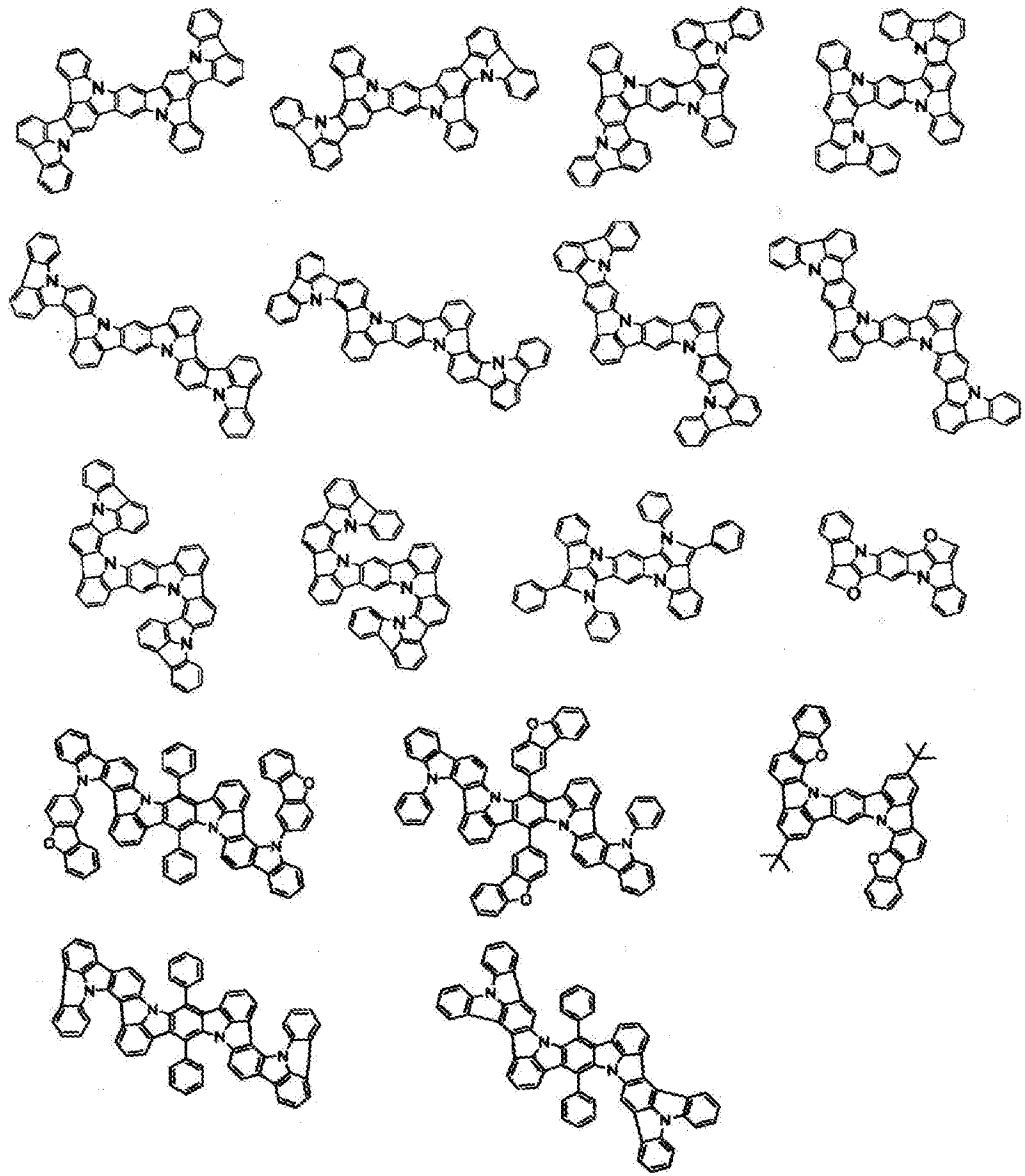
[0800]

[化312]

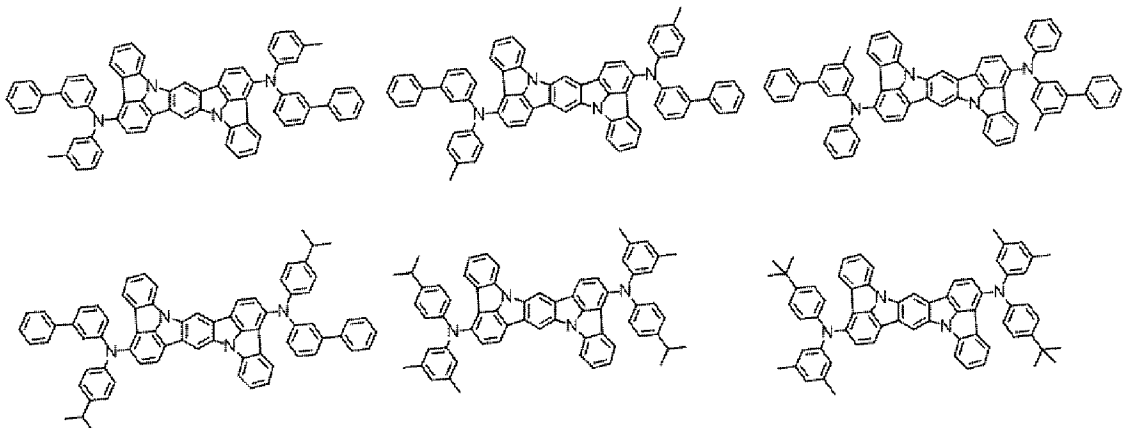


[0801]

[化313]



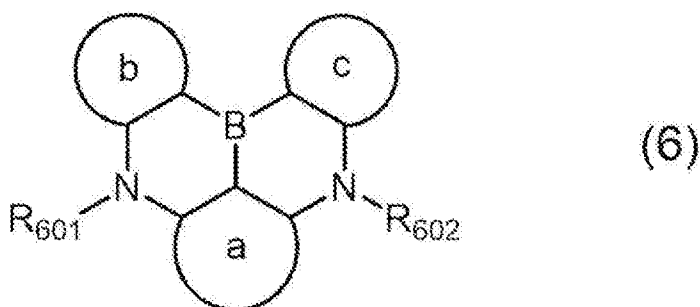
[0802] [化314]



[0803] (一般式 (6) で表される化合物)

一般式 (6) で表される化合物について説明する。

[0804] [化315]



[0805] (前記一般式 (6) において、

a 環、b 環及び c 環は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 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 5 ~ 50 の複素環であり、

$R_{601}$  及び  $R_{602}$  は、それぞれ独立に、前記 a 環、b 環又は c 環と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

前記置換もしくは無置換の複素環を形成しない  $R_{601}$  及び  $R_{602}$  は、それぞれ独立に、

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、

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。) )

[0806] a 環、b 環及び c 環は、ホウ素原子及び 2 つの窒素原子から構成される前記一般式 (6) 中央の縮合 2 環構造に縮合する環 (置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 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 5 ~ 50 の複素環) である。

[0807] a 環、b 環及び c 環の「芳香族炭化水素環」は、上述した「アリール基」

に水素原子を導入した化合物と同じ構造である。

a環の「芳香族炭化水素環」は、前記一般式(6)中央の縮合2環構造上の炭素原子3つを環形成原子として含む。

b環及びc環の「芳香族炭化水素環」は、前記一般式(6)中央の縮合2環構造上の炭素原子2つを環形成原子として含む。

[0808] 「置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環」の具体例としては、具体例群G1に記載の「アリール基」に水素原子を導入した化合物等が挙げられる。

a環、b環及びc環の「複素環」は、上述した「複素環基」に水素原子を導入した化合物と同じ構造である。

a環の「複素環」は、前記一般式(6)中央の縮合2環構造上の炭素原子3つを環形成原子として含む。b環及びc環の「複素環」は、前記一般式(6)中央の縮合2環構造上の炭素原子2つを環形成原子として含む。「置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環」の具体例としては、具体例群G2に記載の「複素環基」に水素原子を導入した化合物等が挙げられる。

[0809]  $R_{601}$ 及び $R_{602}$ は、それぞれ独立に、a環、b環又はc環と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成してもよい。この場合における複素環は、前記一般式(6)中央の縮合2環構造上の窒素原子を含む。この場合における複素環は、窒素原子以外のヘテロ原子を含んでもよい。 $R_{601}$ 及び $R_{602}$ がa環、b環又はc環と結合するとは、具体的には、a環、b環又はc環を構成する原子と $R_{601}$ 及び $R_{602}$ を構成する原子が結合することを意味する。例えば、 $R_{601}$ がa環と結合して、 $R_{601}$ を含む環とa環が縮合した2環縮合(又は3環縮合以上)の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群G2のうち、窒素を含む2環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。

$R_{601}$ がb環と結合する場合、 $R_{602}$ がa環と結合する場合、及び $R_{602}$ がc環と結合する場合も上記と同じである。

[0810] 一実施形態において、前記一般式（6）におけるa環、b環及びc環は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環である。

一実施形態において、前記一般式（6）におけるa環、b環及びc環は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のベンゼン環又はナフタレン環である。

[0811] 一実施形態において、前記一般式（6）における $R_{601}$ 及び $R_{602}$ は、それぞれ独立に、

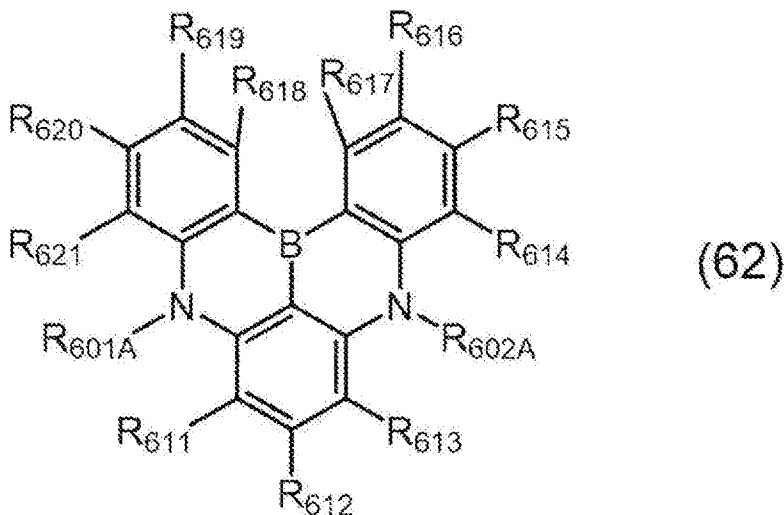
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

好ましく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。

[0812] 一実施形態において、前記一般式（6）で表される化合物は下記一般式（62）で表される化合物である。

[0813] [化316]



[0814] （前記一般式（62）において、

$R_{601A}$ は、 $R_{611}$ 及び $R_{621}$ からなる群から選択される1以上と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

$R_{602A}$ は、 $R_{613}$ 及び $R_{614}$ からなる群から選択される1以上と結合して、

置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

前記置換もしくは無置換の複素環を形成しない  $R_{601A}$  及び  $R_{602A}$  は、それぞれ独立に、

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、  
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 の複素環基であり、

$R_{611} \sim R_{621}$  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、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、

前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない  $R_{611} \sim R_{621}$  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、  
—S i ( $R_{901}$ ) ( $R_{902}$ ) ( $R_{903}$ ) で表される基、  
—O— ( $R_{904}$ ) で表される基、  
—S— ( $R_{905}$ ) で表される基、  
—N ( $R_{906}$ ) ( $R_{907}$ ) で表される基、  
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 の複素環基である。)

[0815] 前記一般式 (62) の  $R_{601A}$  及び  $R_{602A}$  は、それぞれ、前記一般式 (6) の  $R_{601}$  及び  $R_{602}$  に対応する基である。

例えば、 $R_{601A}$  と  $R_{611}$  が結合して、これらを含む環と a 環に対応するベンゼン環が縮合した 2 環縮合 (又は 3 環縮合以上) の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群 G2 のうち、窒素を含む 2 環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。 $R_{601A}$  と  $R_{621}$  が結合する場合、 $R_{602A}$  と  $R_{613}$  が結合する場合、及び  $R_{602A}$  と  $R_{614}$  が結合する場合も上記と同じである。

[0816]  $R_{611} \sim R_{621}$  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、置換もしくは無置換の単環を形成するか、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してもよい。

例えば、 $R_{611}$  と  $R_{612}$  が結合して、これらが結合する 6 員環に対して、ベンゼン環、インドール環、ピロール環、ベンゾフラン環又はベンゾチオフェン環等が縮合した構造を形成してもよく、形成された縮合環は、ナフタレン環、カルバゾール環、インドール環、ジベンゾフラン環又はジベンゾチオフェン環となる。

[0817] 一実施形態において、環形成に寄与しない  $R_{611} \sim R_{621}$  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 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。

[0818] 一実施形態において、環形成に寄与しない  $R_{611} \sim R_{621}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、

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。

[0819] 一実施形態において、環形成に寄与しない  $R_{611} \sim R_{621}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基である。

[0820] 一実施形態において、環形成に寄与しない  $R_{611} \sim R_{621}$  は、それぞれ独立に、

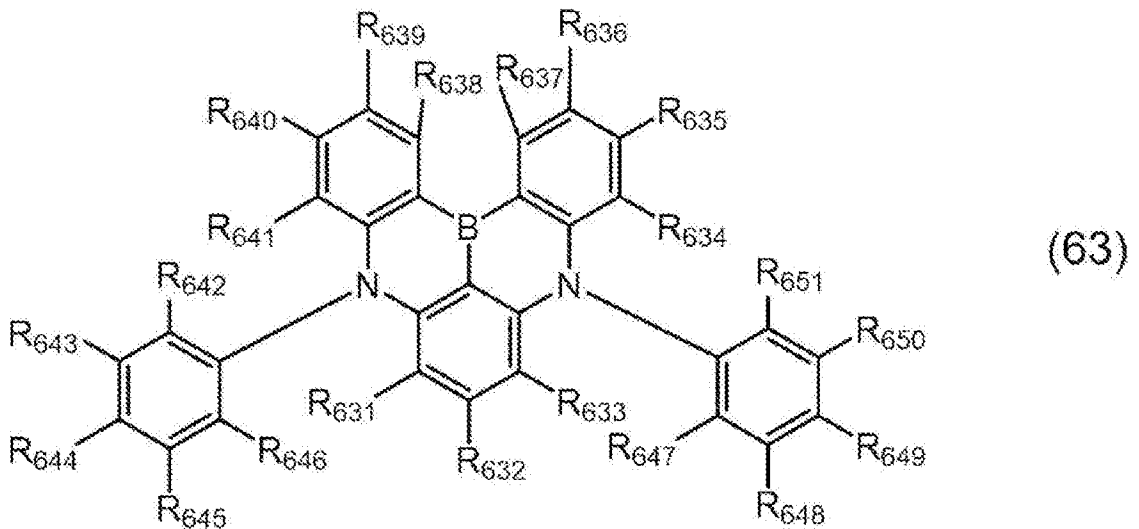
水素原子、又は

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基であり、

$R_{611} \sim R_{621}$  のうち少なくとも 1 つは、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基である。

[0821] 一実施形態において、前記一般式 (62) で表される化合物は、下記一般式 (63) で表される化合物である。

[0822] [化317]



[0823] (前記一般式 (63) において、

$R_{631}$  は、 $R_{646}$  と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

$R_{633}$  は、 $R_{647}$  と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

$R_{634}$ は、 $R_{651}$ と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

$R_{641}$ は、 $R_{642}$ と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

$R_{631} \sim R_{651}$ 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、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、

前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{631} \sim R_{651}$ 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 ( $R_{901}$ ) ( $R_{902}$ ) ( $R_{903}$ ) で表される基、

—O— ( $R_{904}$ ) で表される基、

—S— ( $R_{905}$ ) で表される基、

—N ( $R_{906}$ ) ( $R_{907}$ ) で表される基、

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の複素環基である。) )

[0824]  $R_{631}$ は、 $R_{646}$ と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成してもよい。例えば、 $R_{631}$ と $R_{646}$ が結合して、 $R_{646}$ が結合するベンゼン環と、Nを含む環と、a環に対応するベンゼン環とが縮合した3環縮合以上の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群G

2のうち、窒素を含む3環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。 $R_{633}$ と $R_{647}$ が結合する場合、 $R_{634}$ と $R_{651}$ が結合する場合、及び $R_{641}$ と $R_{642}$ が結合する場合も上記と同じである。

[0825] 一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{631} \sim R_{651}$ 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。

[0826] 一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{631} \sim R_{651}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

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。

[0827] 一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{631} \sim R_{651}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基である。

[0828] 一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{631} \sim R_{651}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

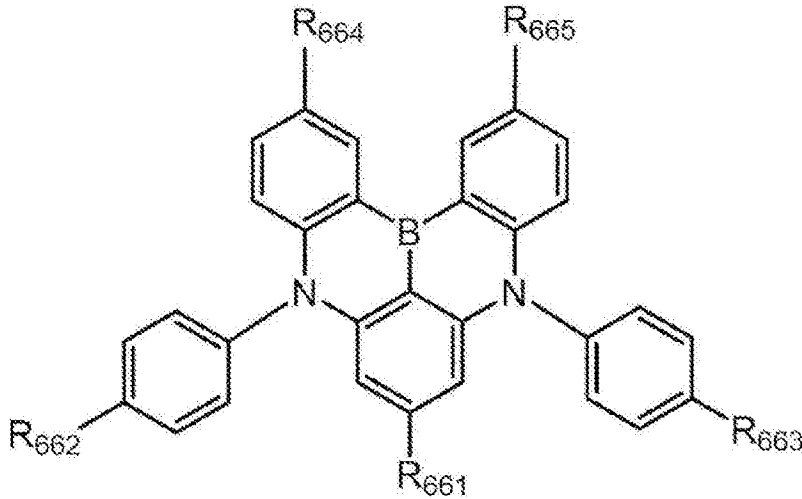
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基であり、

$R_{631} \sim R_{651}$ のうち少なくとも1つは置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基である。

[0829] 一実施形態において、前記一般式(63)で表される化合物は、下記一般式(63A)で表される化合物である。

[0830]

[化318]



(63A)

[0831] (前記一般式(63A)において、

R<sub>661</sub>は、

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、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、

R<sub>662</sub>～R<sub>665</sub>は、それぞれ独立に、

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、又は

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。)

[0832] 一実施形態において、R<sub>661</sub>～R<sub>665</sub>は、それぞれ独立に、

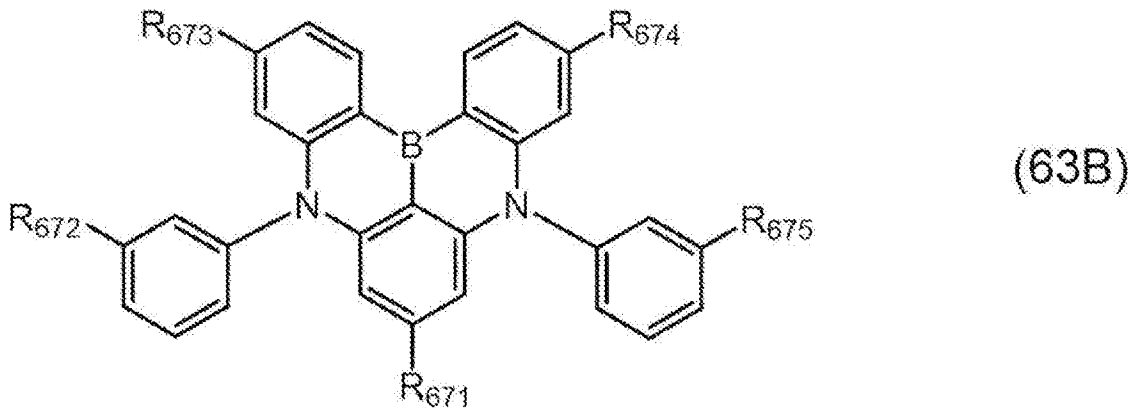
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は

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。

[0833] 一実施形態において、R<sub>661</sub>～R<sub>665</sub>は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基である。

[0834] 一実施形態において、前記一般式(63)で表される化合物は、下記一般式(63B)で表される化合物である。

[0835] [化319]



[0836] (前記一般式(63B)において、

$R_{671}$ 及び $R_{672}$ 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、

-N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )で表される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基であり、

$R_{673}$ ~ $R_{675}$ は、それぞれ独立に、

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、

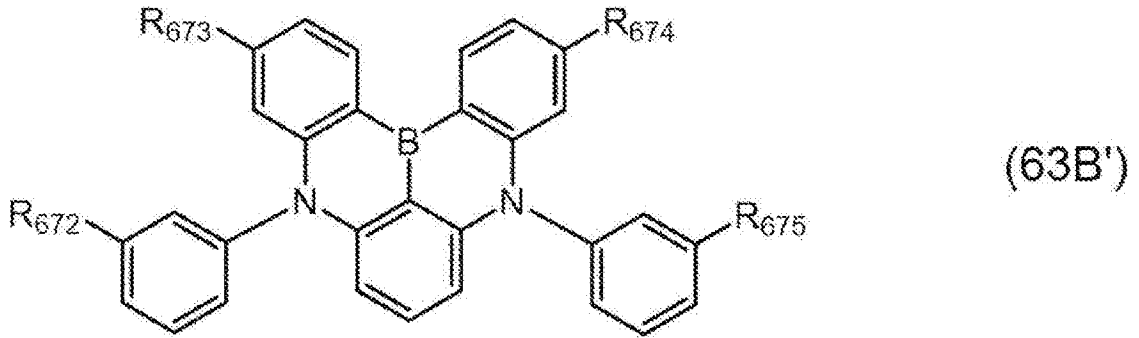
置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

-N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )で表される基、又は

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。)

[0837] 一実施形態において、前記一般式(63)で表される化合物は、下記一般式(63B')で表される化合物である。

[0838] [化320]



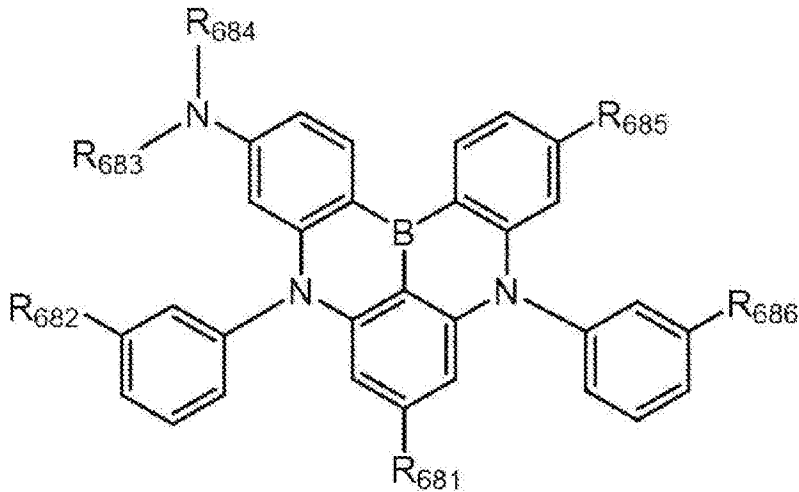
[0839] (前記一般式(63B')において、 $R_{672} \sim R_{675}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(63B)における $R_{672} \sim R_{675}$ と同義である。)

[0840] 一実施形態において、 $R_{671} \sim R_{675}$ のうち少なくとも1つは、  
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、  
—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )で表される基、又は  
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。

[0841] 一実施形態において、  
 $R_{672}$ は、  
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、  
—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )で表される基、又は  
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、  
 $R_{671}$ 及び $R_{673} \sim R_{675}$ は、それぞれ独立に、  
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、  
—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )で表される基、又は  
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。

[0842] 一実施形態において、前記一般式(63)で表される化合物は、下記一般式(63C)で表される化合物である。

[0843] [化321]



(63C)

[0844] (前記一般式 (63C) において、

$R_{681}$  及び  $R_{682}$  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、又は

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。

$R_{683} \sim R_{686}$  は、それぞれ独立に、

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、

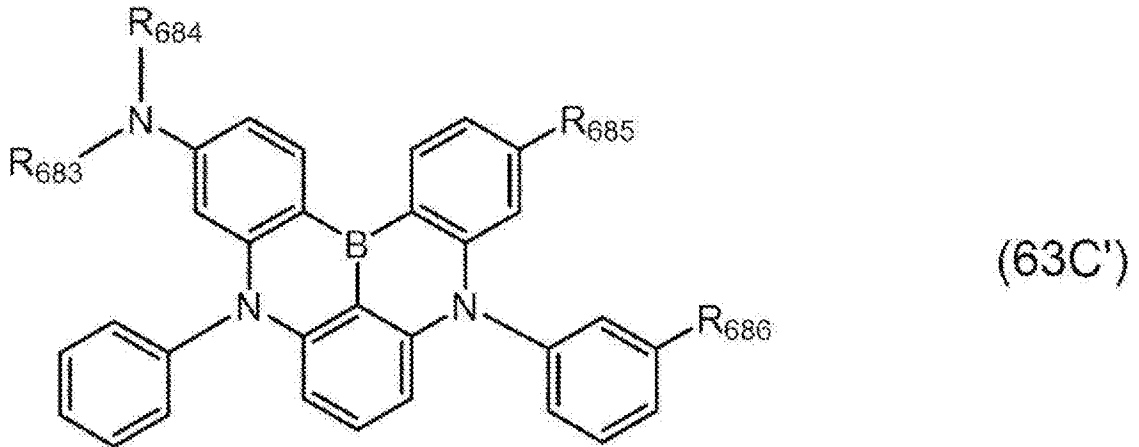
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、又は

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。)

[0845] 一実施形態において、前記一般式 (63) で表される化合物は、下記一般式 (63C') で表される化合物である。

[0846]

[化322]



[0847] (前記一般式(63C')において、 $R_{683} \sim R_{686}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(63C)における $R_{683} \sim R_{686}$ と同義である。)

[0848] 一実施形態において、 $R_{681} \sim R_{686}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又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。

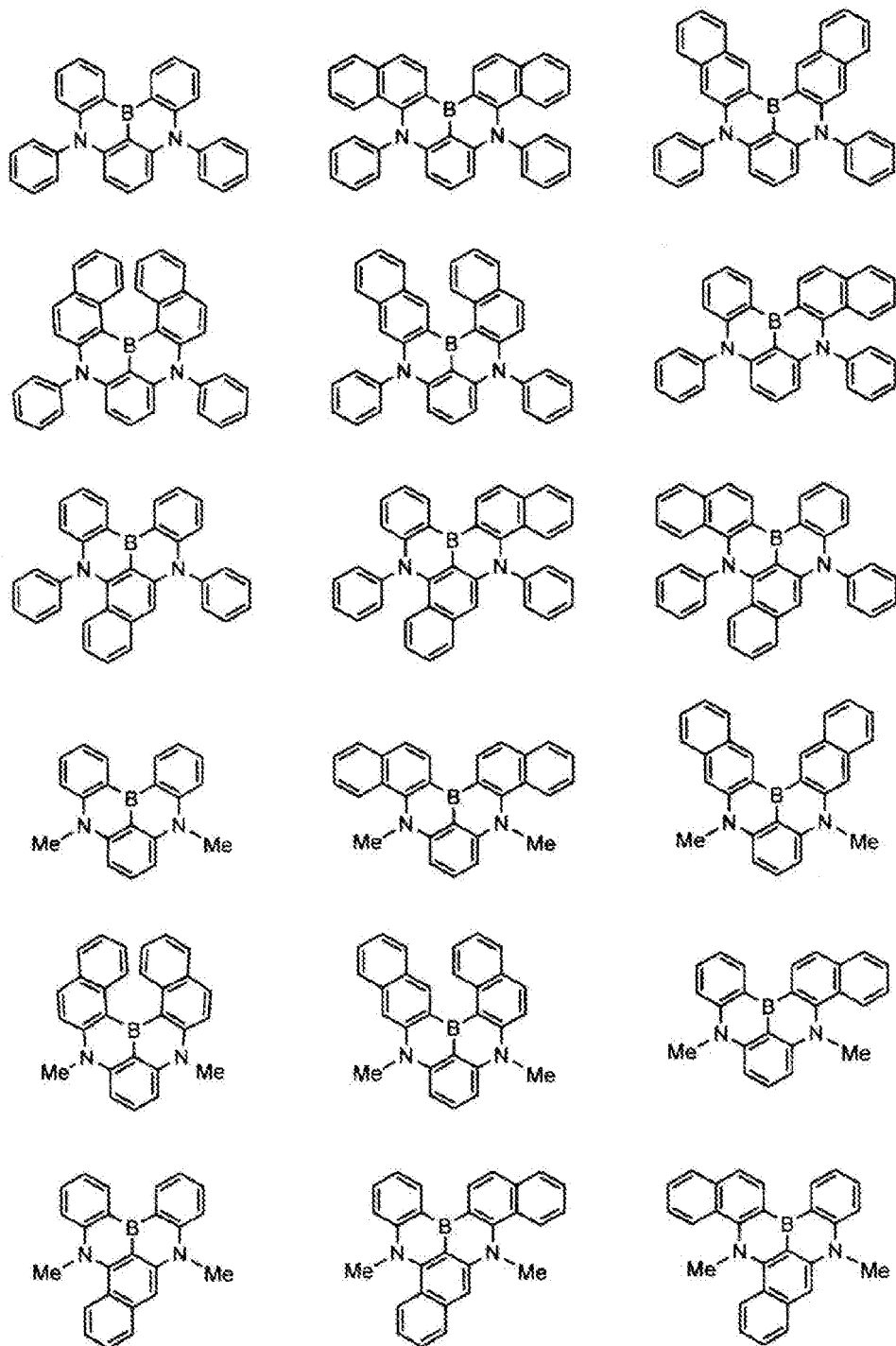
[0849] 一実施形態において、 $R_{681} \sim R_{686}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

[0850] 前記一般式(6)で表される化合物は、まずa環、b環及びc環を連結基( $N-R_{601}$ を含む基及び $N-R_{602}$ を含む基)で結合させることで中間体を製造し(第1反応)、a環、b環及びc環を連結基(ホウ素原子を含む基)で結合させることで最終生成物を製造することができる(第2反応)。第1反応ではバツハブルトーハートウィッグ反応等のアミノ化反応を適用できる。第2反応では、タンデムヘテロフリーデルクラフツ反応等を適用できる。

[0851] 以下に、前記一般式(6)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、前記一般式(6)で表される化合物は下記具体例に限定されない。

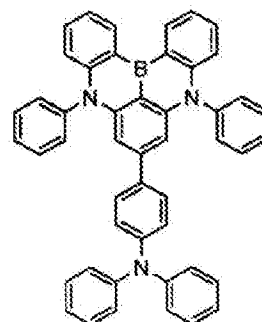
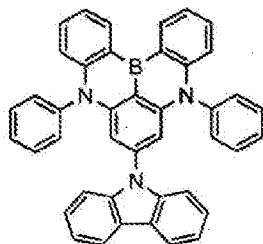
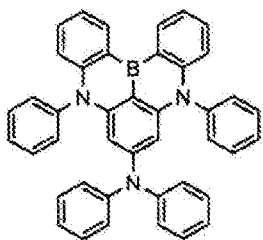
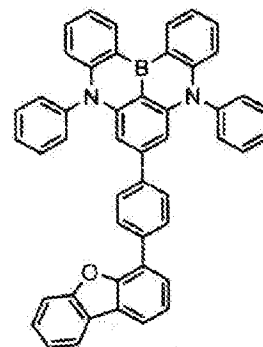
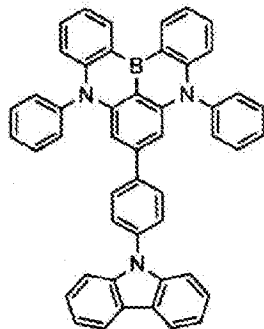
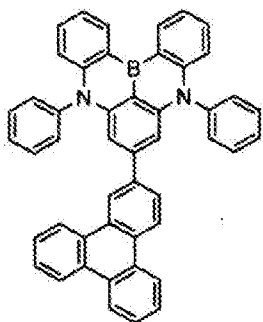
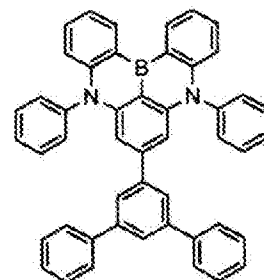
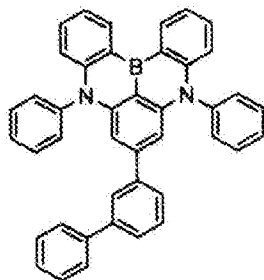
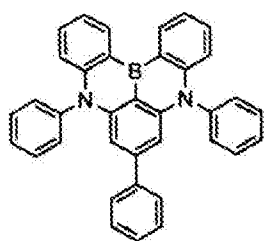
[0852]

[化323]



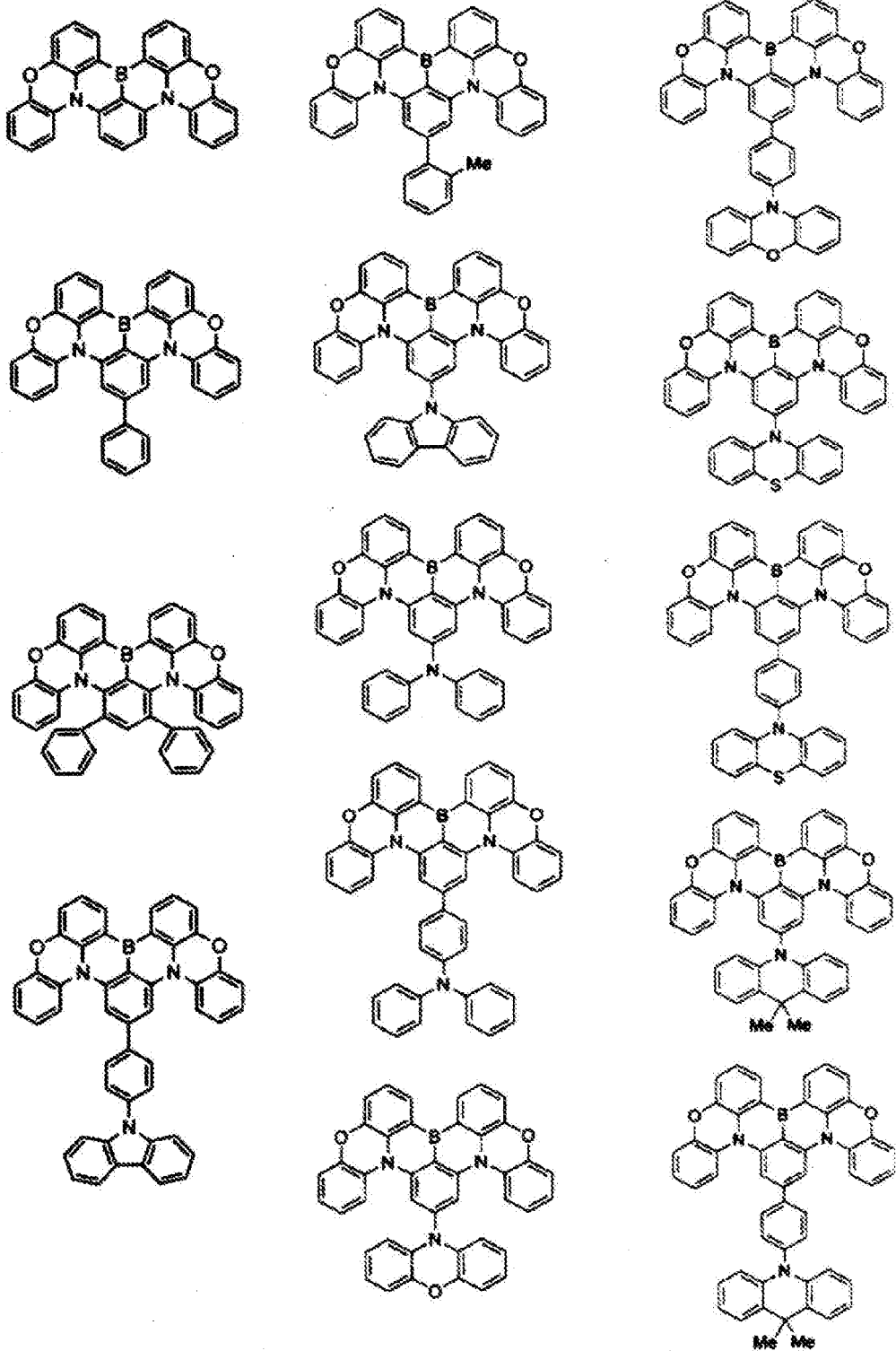
[0853]

[化324]



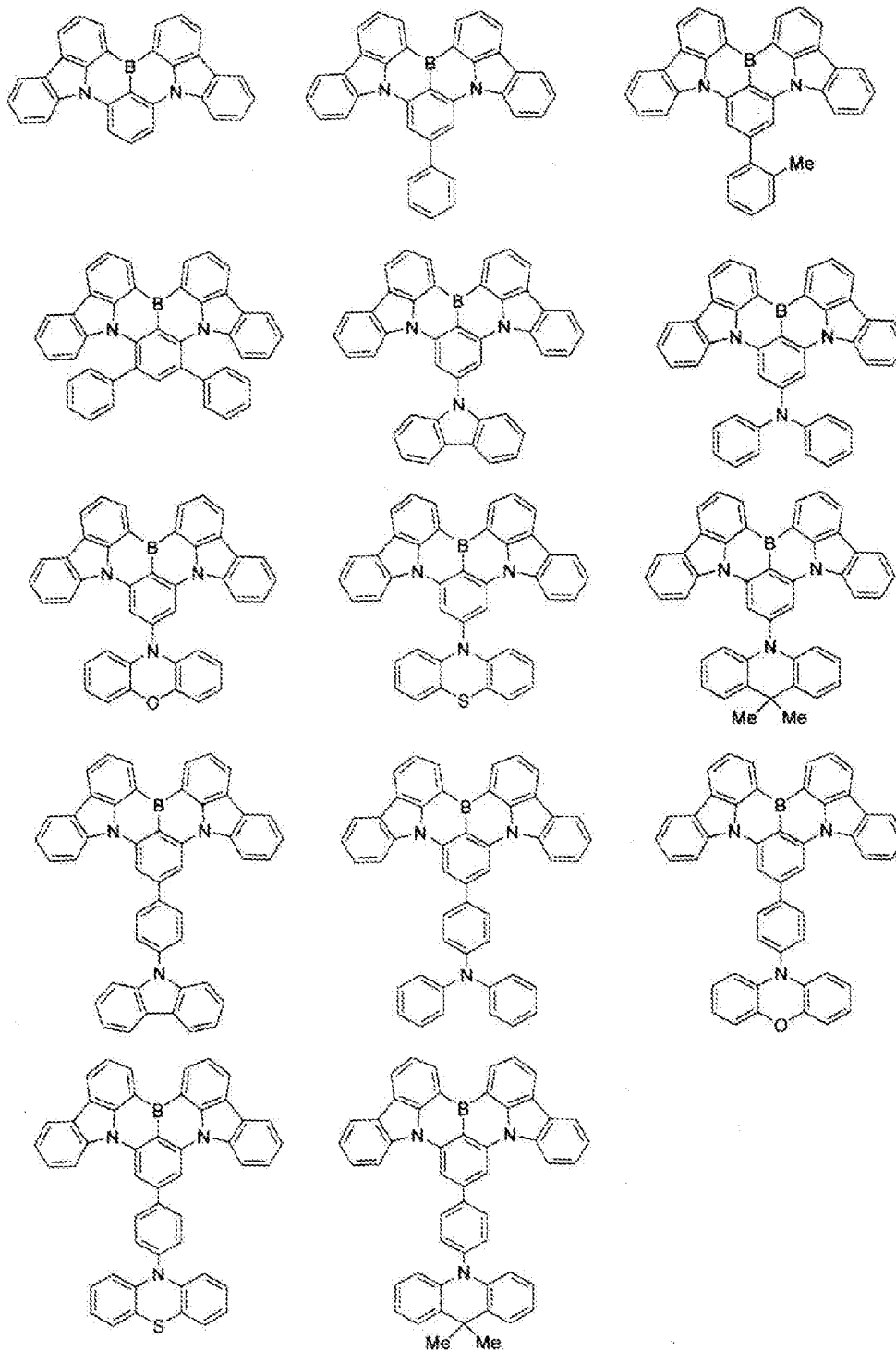
[0854]

[化325]



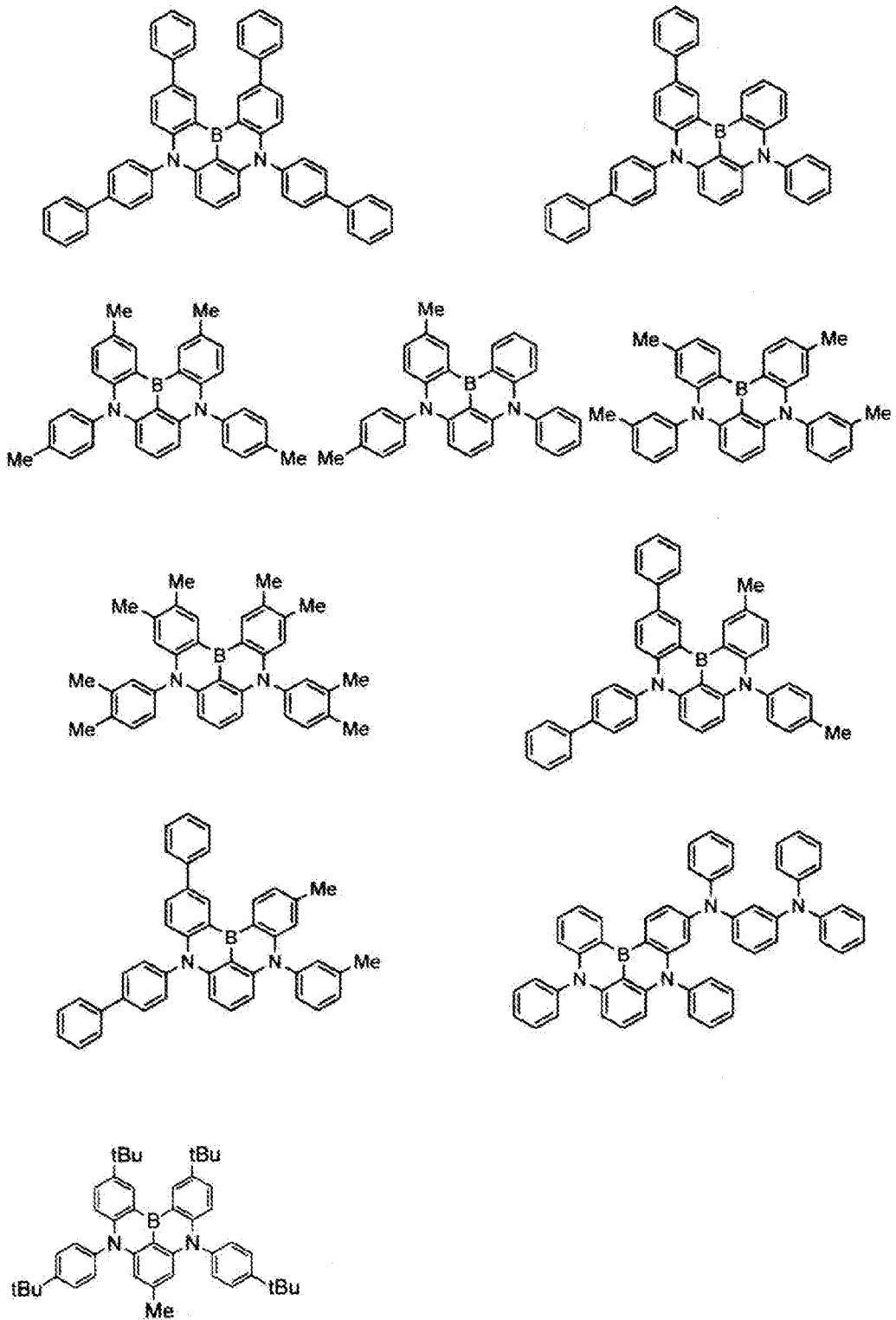
[0855]

[化326]



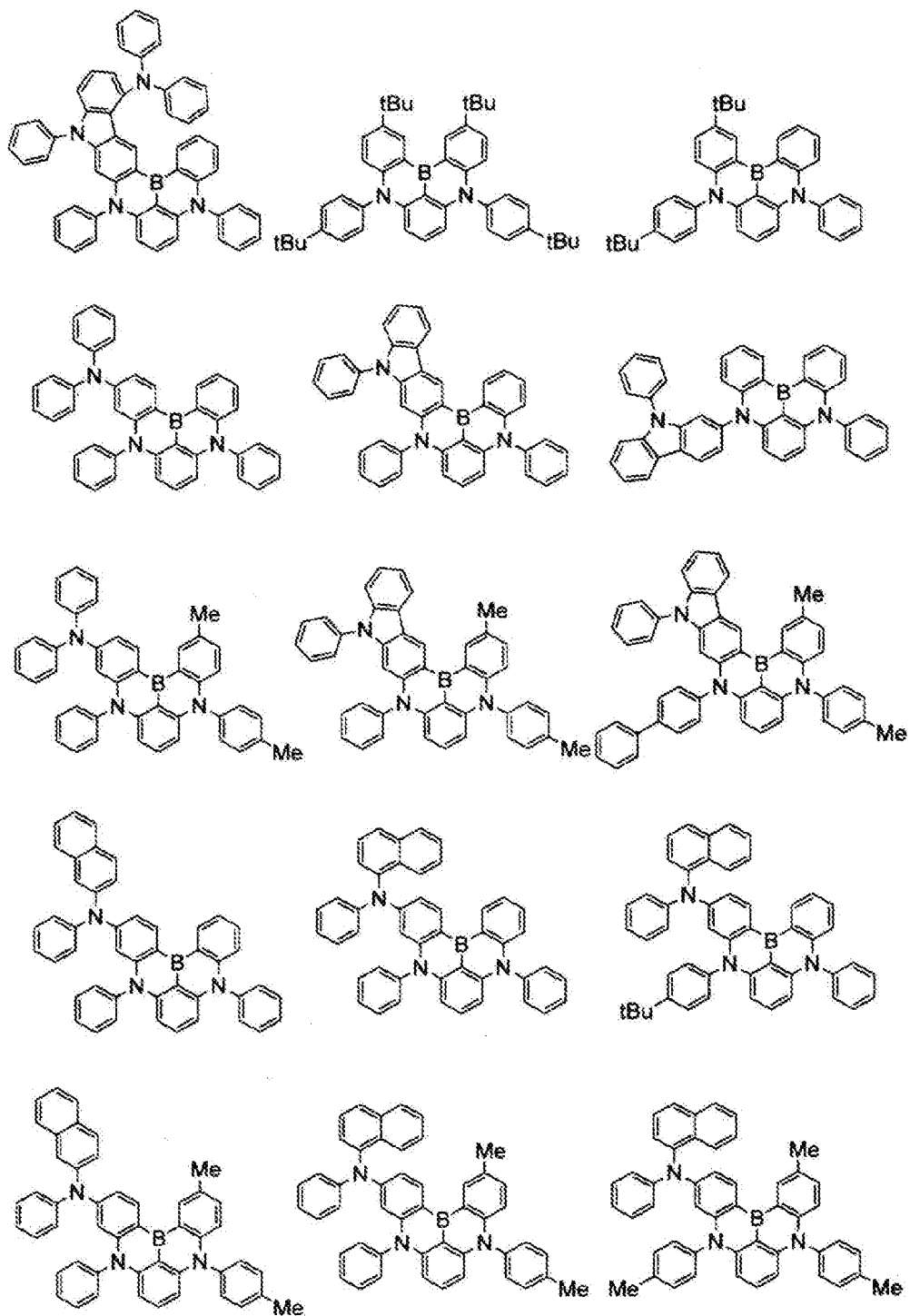
[0856]

[化327]



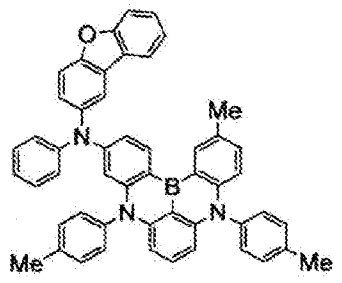
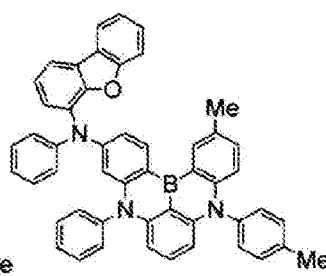
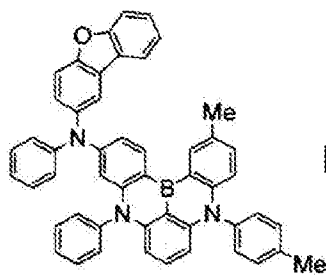
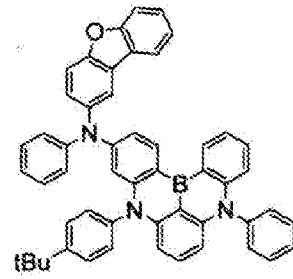
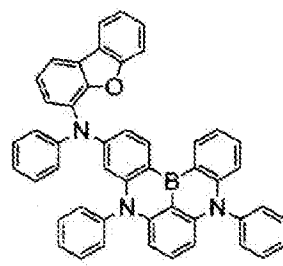
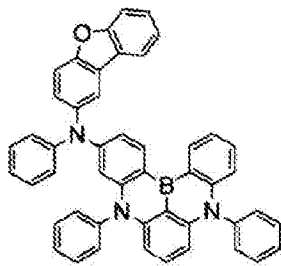
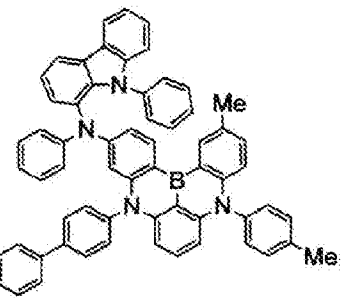
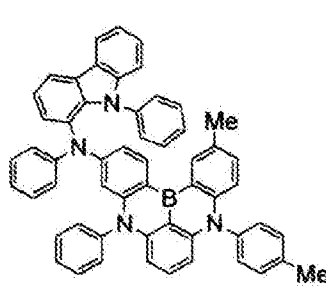
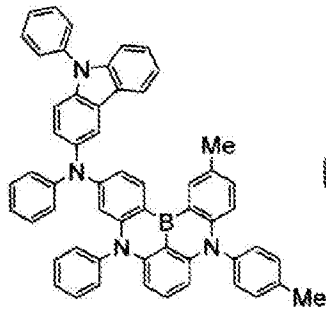
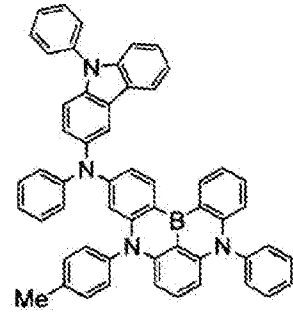
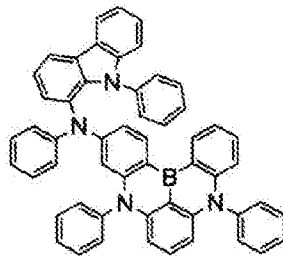
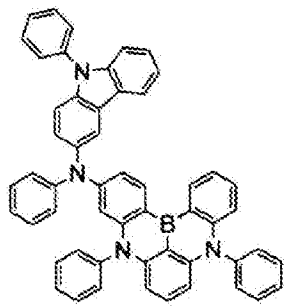
[0857]

[化328]



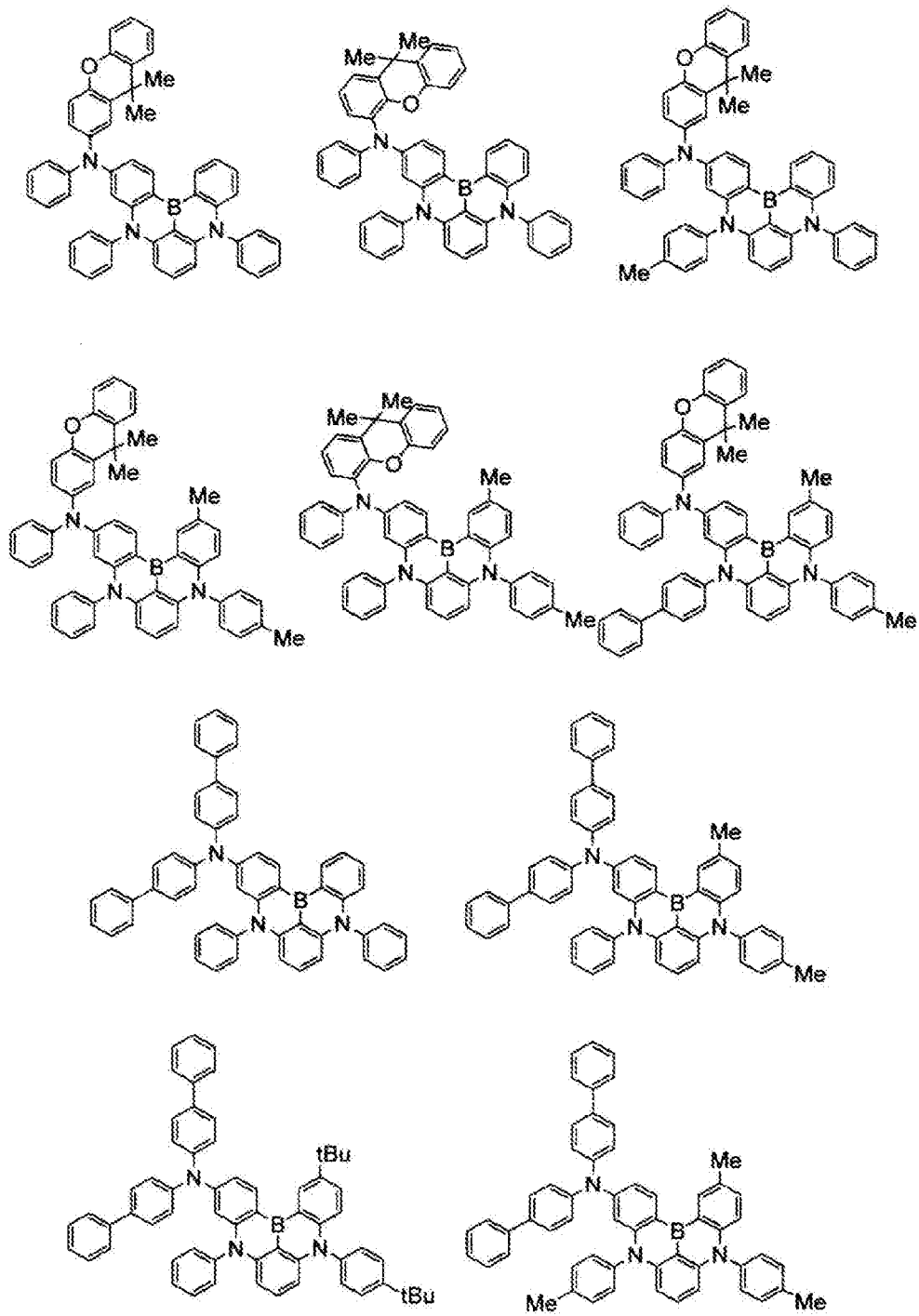
[0858]

[化329]



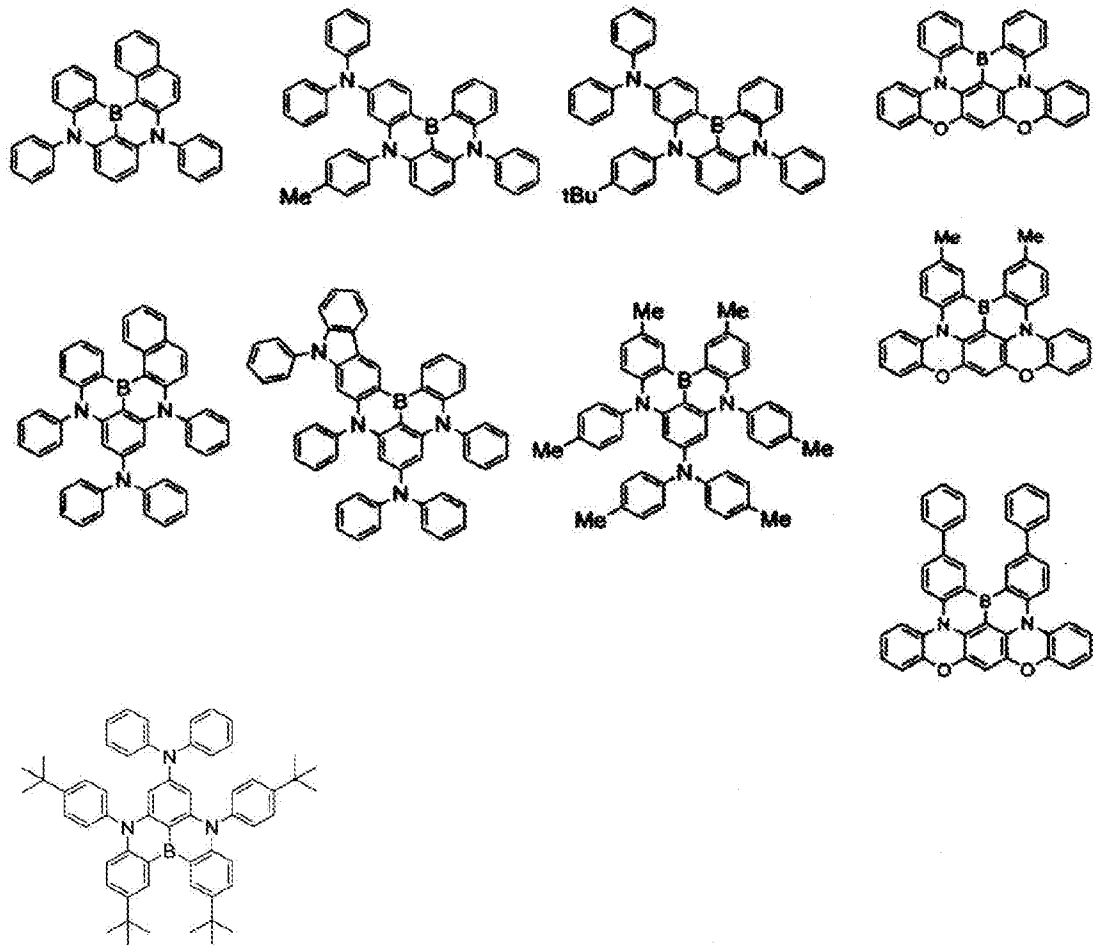
[0859]

[化330]



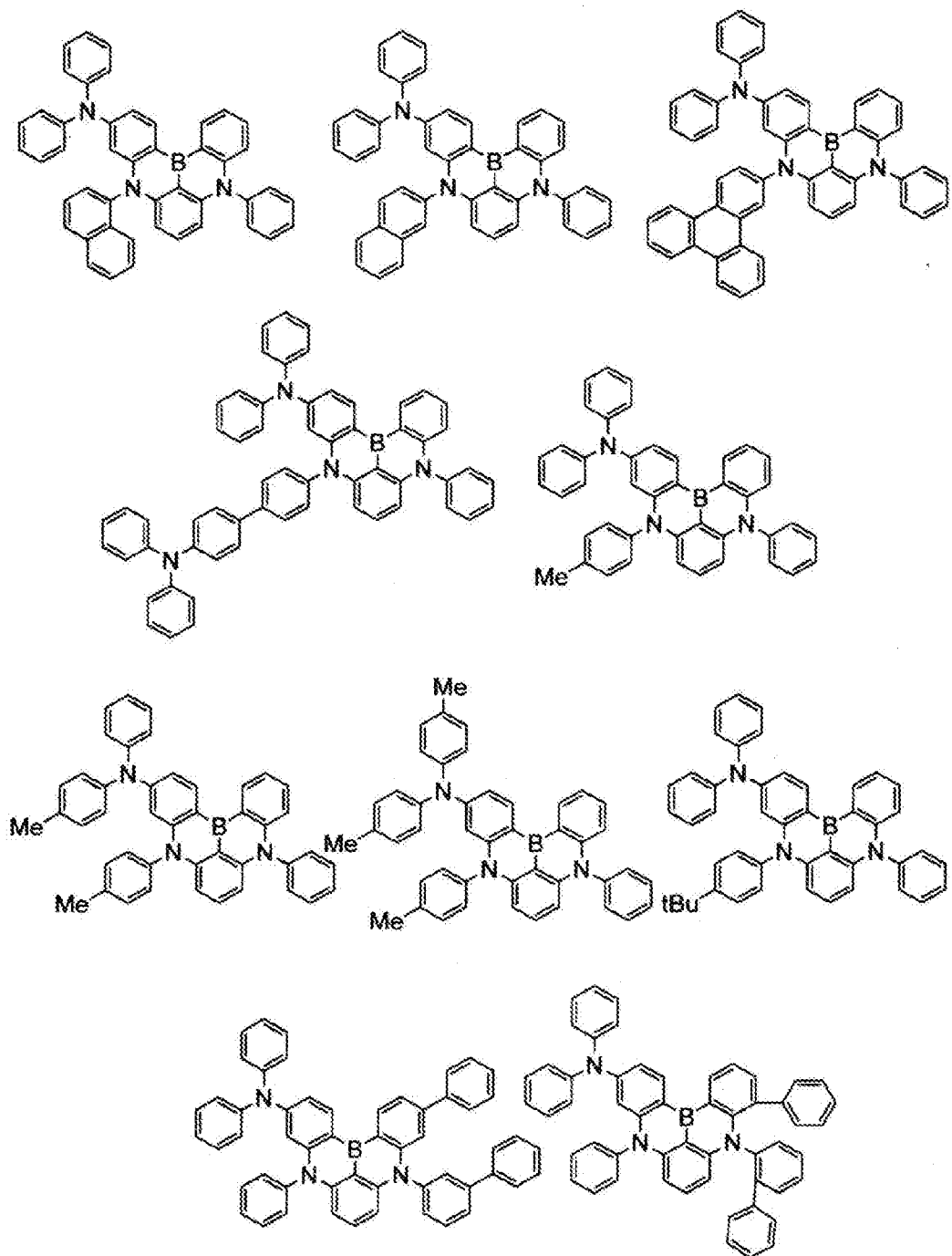
[0860]

[化331]



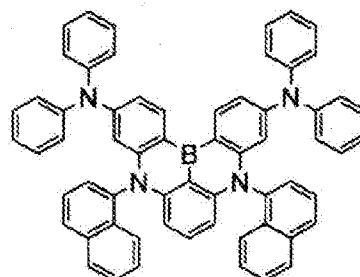
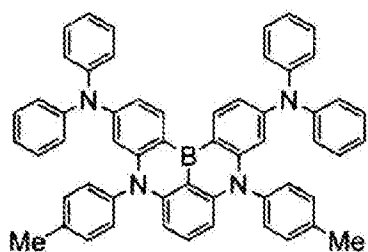
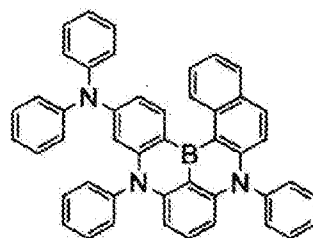
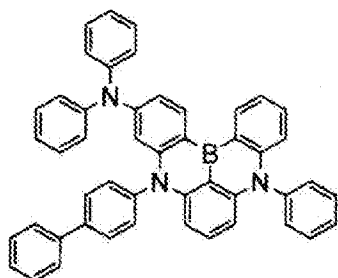
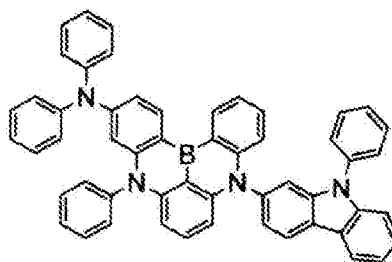
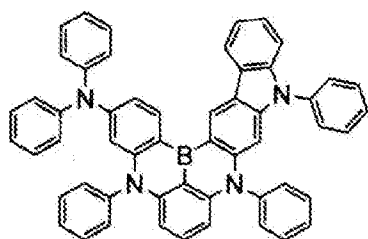
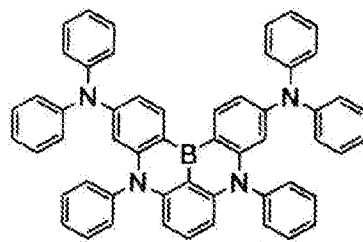
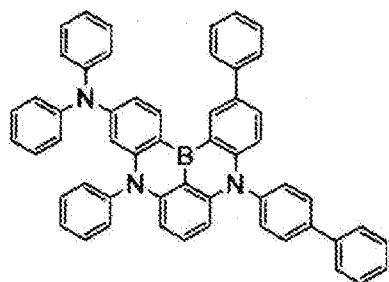
[0861]

[化332]



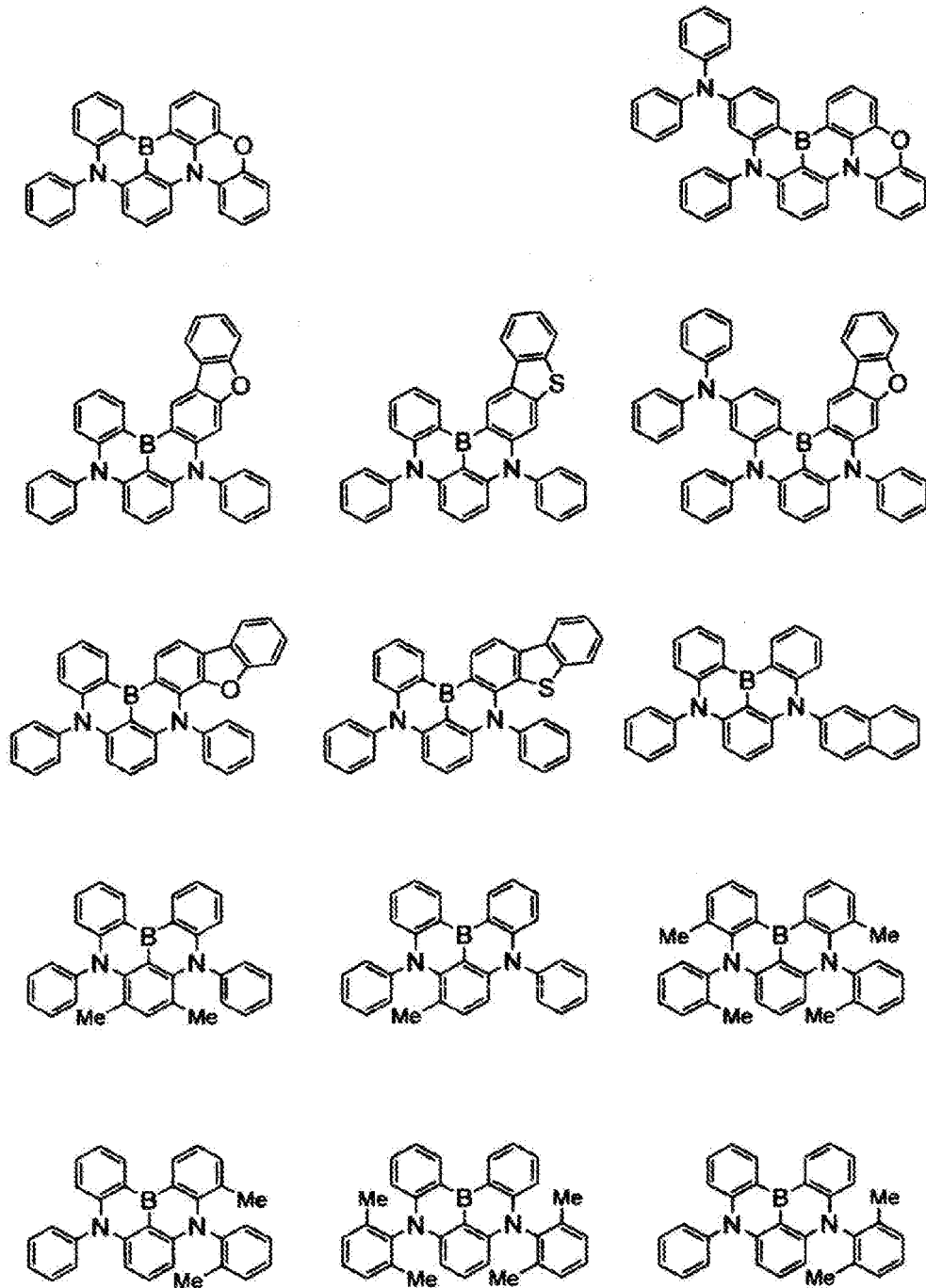
[0862]

[化333]



[0863]

[化334]



[0864] (一般式 (7) で表される化合物)

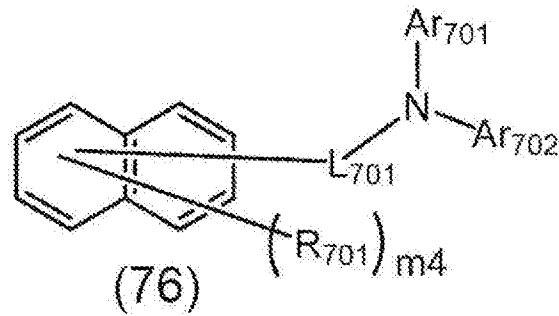
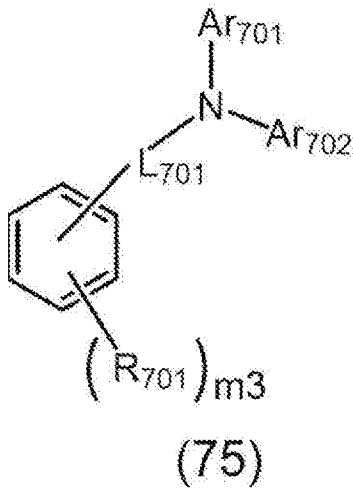
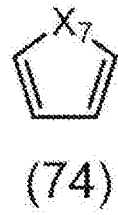
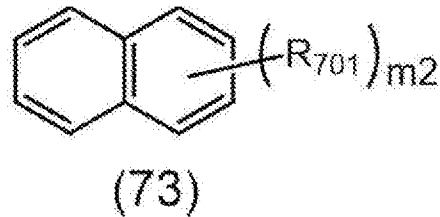
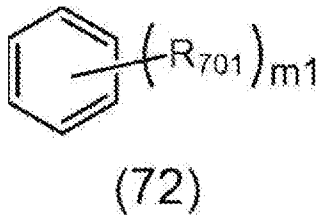
一般式 (7) で表される化合物について説明する。

[0865] [化335]



(7)

[0866] [化336]



[0867] (前記一般式 (7) において、

r 環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式 (72) 又は一般式 (73) で表される環であり、

q 環及び s 環は、それぞれ独立に、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式 (74) で表される環であり、

p 環及び t 環は、それぞれ独立に、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式 (75) 又は一般式 (76) で表される構造であり、

X<sub>7</sub> は、酸素原子、硫黄原子、又は N R<sub>702</sub> である。

R<sub>701</sub> が複数存在する場合、隣接する複数の R<sub>701</sub> は、

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、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない R<sub>701</sub> 及び R<sub>702</sub> は、それぞれ独立に、

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、  
—S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、  
—O— (R<sub>904</sub>) で表される基、  
—S— (R<sub>905</sub>) で表される基、  
—N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基、  
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 の複素環基であり、  
A r<sub>701</sub> 及び A r<sub>702</sub> は、それぞれ独立に、  
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、  
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 の複素環基であり、  
L<sub>701</sub> は、  
置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキレン基、  
置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニレン基、  
置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニレン基、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキレン基、  
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 価の複素環基であり、  
m<sub>1</sub> は、0、1 又は 2 であり、  
m<sub>2</sub> は、0、1、2、3 又は 4 であり、

$m_3$  は、それぞれ独立に、0、1、2又は3であり、

$m_4$  は、それぞれ独立に、0、1、2、3、4又は5であり、

$R_{701}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{701}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$X_7$  が複数存在する場合、複数の  $X_7$  は、互いに同一であるか、又は異なり

、  
 $R_{702}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{702}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$A_{r701}$  が複数存在する場合、複数の  $A_{r701}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$A_{r702}$  が複数存在する場合、複数の  $A_{r702}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$L_{701}$  が複数存在する場合、複数の  $L_{701}$  は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

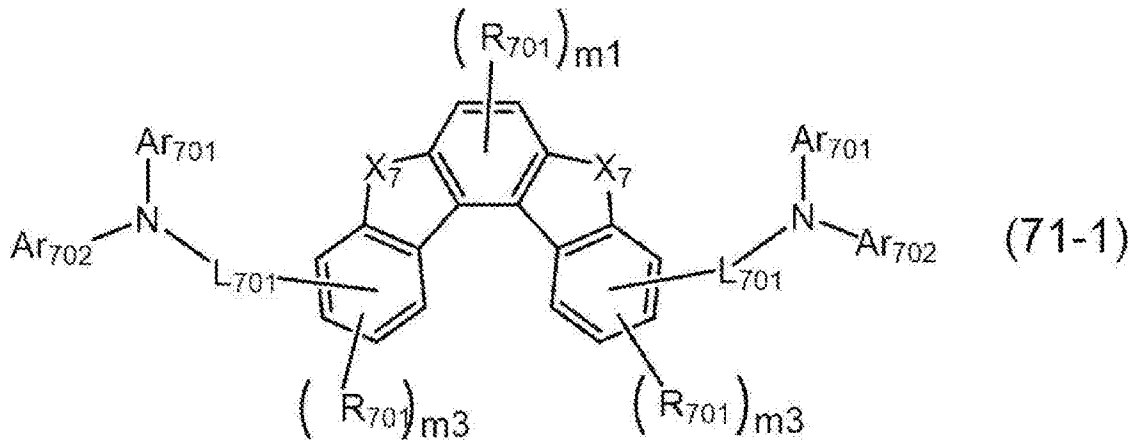
[0868] 前記一般式 (7) において、p環、q環、r環、s環及びt環の各環は、隣接環と炭素原子2つを共有して縮合する。縮合する位置及び向きは限定されず、任意の位置及び向きで縮合可能である。

[0869] 一実施形態において、r環としての前記一般式 (7 2) 又は一般式 (7 3) において、 $m_1 = 0$  又は  $m_2 = 0$  である。

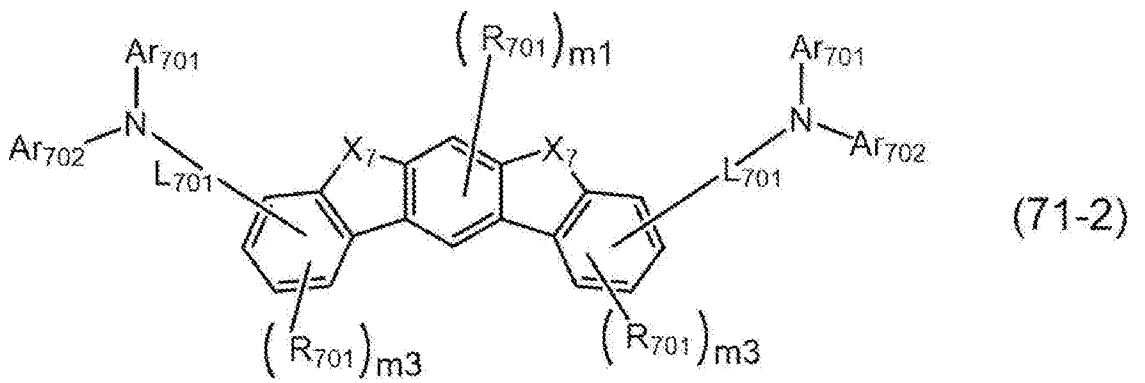
[0870] 一実施形態において、前記一般式 (7) で表される化合物は、下記一般式 (7 1 - 1) ~ (7 1 - 6) のいずれかで表される。

[0871]

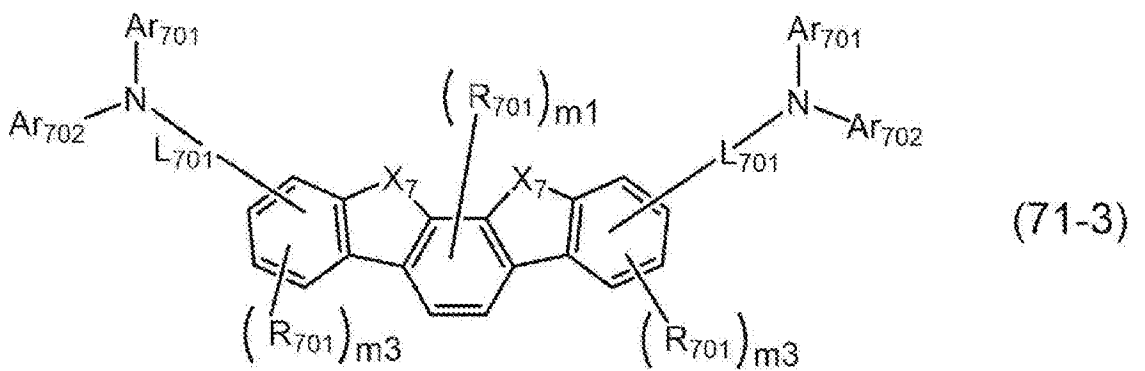
[化337]



[0872] [化338]

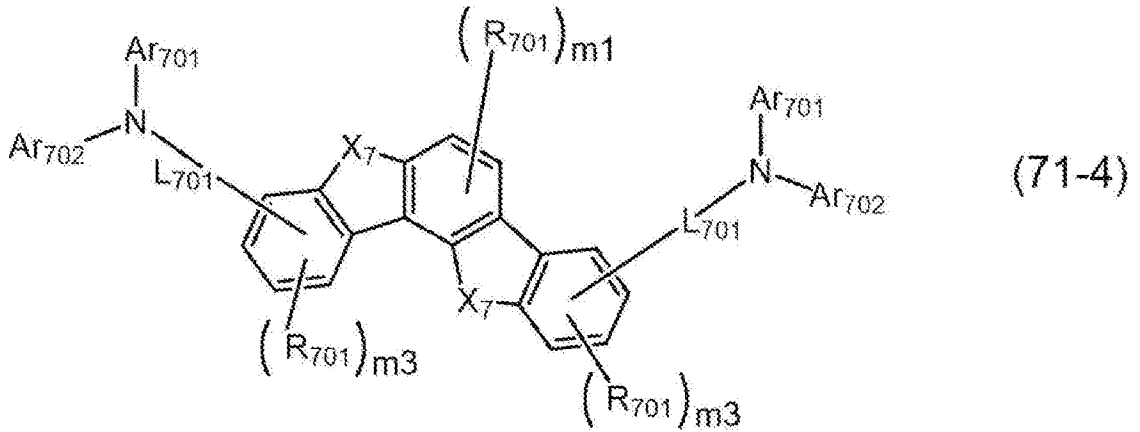


[0873] [化339]

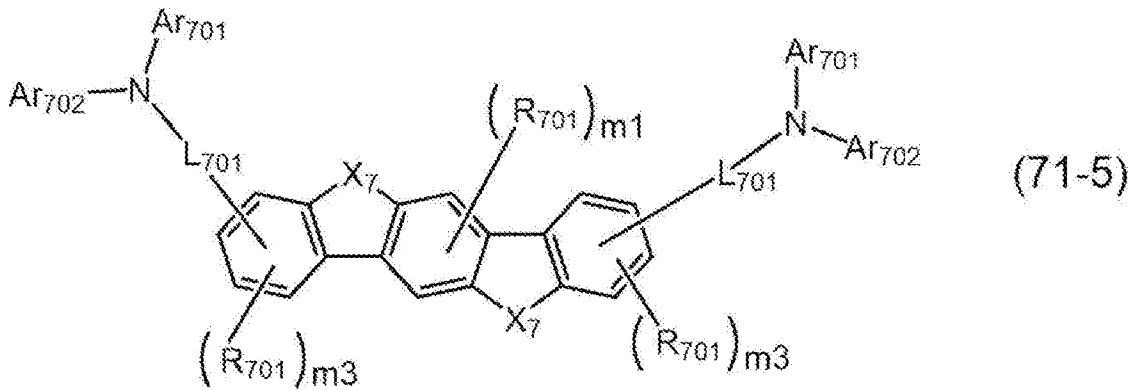


[0874]

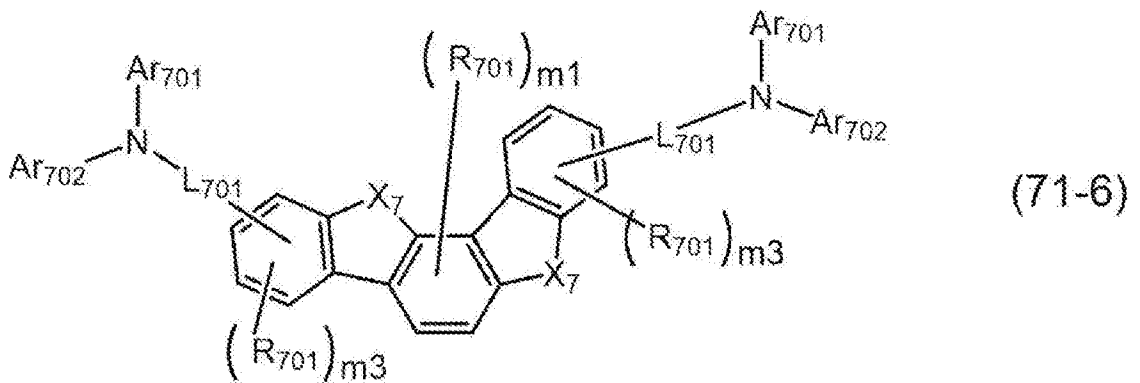
[化340]



[0875] [化341]



[0876] [化342]

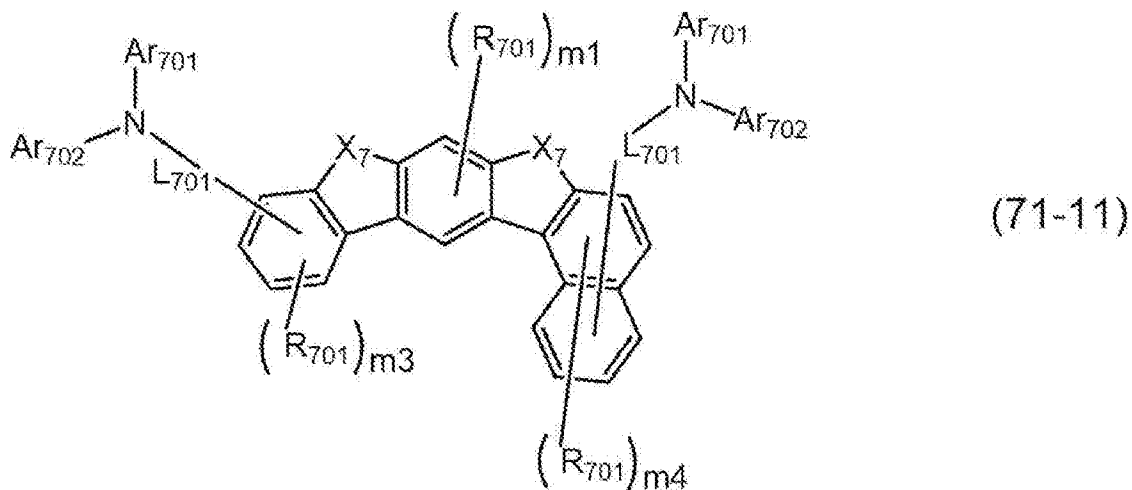


[0877] (前記一般式(71-1)~一般式(71-6)において、 $R_{701}$ 、 $X_7$ 、 $A_{r701}$ 、 $A_{r702}$ 、 $L_{701}$ 、 $m_1$ 及び $m_3$ は、それぞれ、前記一般式(7)における $R_{701}$ 、 $X_7$ 、 $A_{r701}$ 、 $A_{r702}$ 、 $L_{701}$ 、 $m_1$ 及び $m_3$ と同義である。)

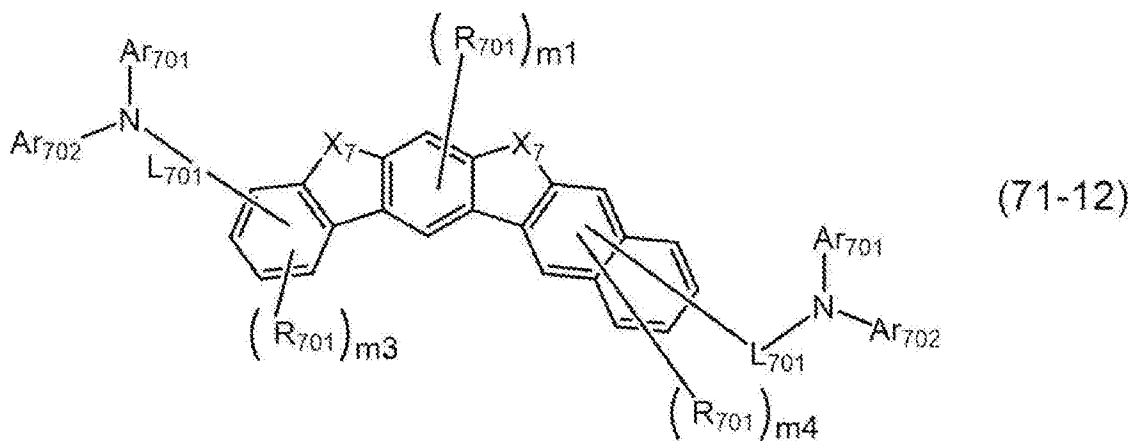
[0878] 一実施形態において、前記一般式(7)で表される化合物は下記一般式(

71-11) ~ 一般式 (71-13) のいずれかで表される。

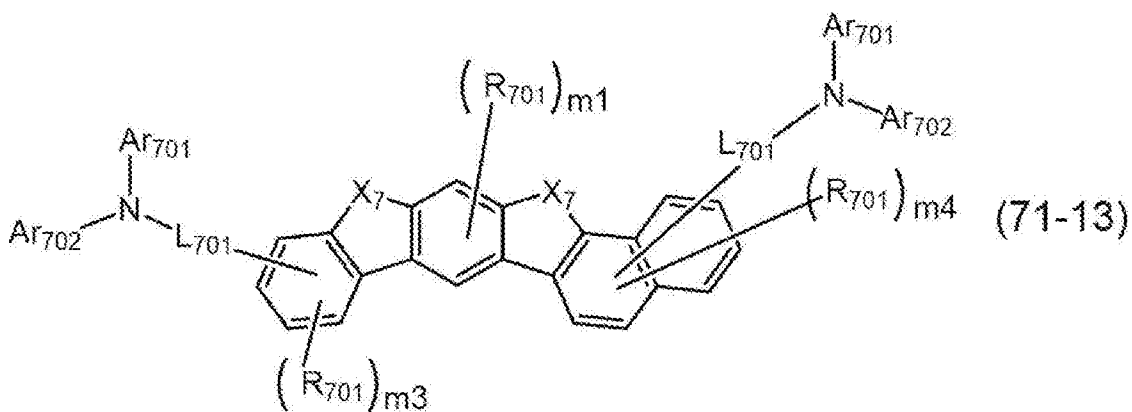
[0879] [化343]



[0880] [化344]



[0881] [化345]

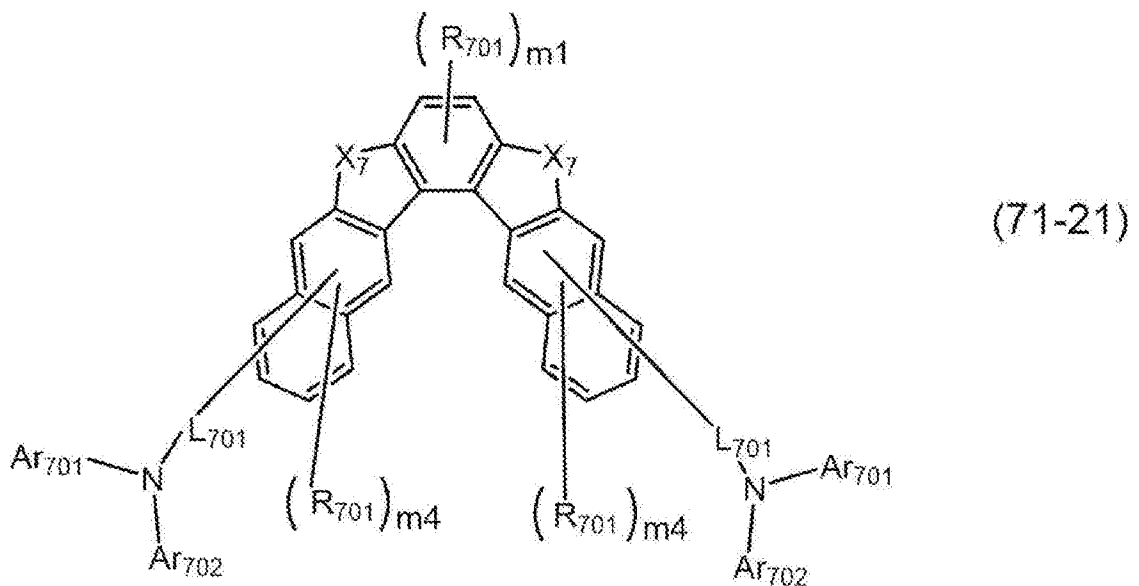


[0882] (前記一般式 (71-11) ~ 一般式 (71-13) において、 $R_{701}$ 、 $X_7$ 、 $Ar_{701}$ 、 $Ar_{702}$ 、 $L_{701}$ 、 $m_1$ 、 $m_3$  及び  $m_4$  は、それぞれ、前記一般

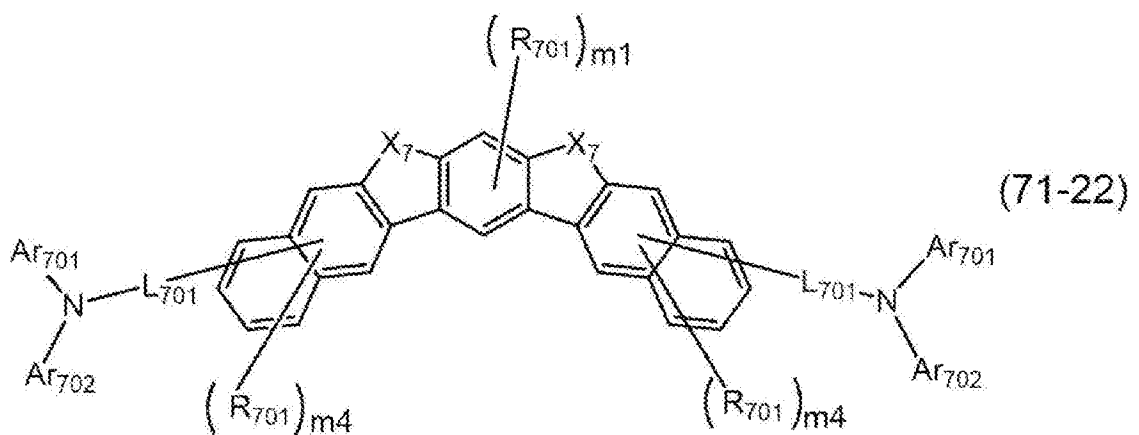
式(7)における $R_{701}$ 、 $X_7$ 、 $Ar_{701}$ 、 $Ar_{702}$ 、 $L_{701}$ 、 $m1$ 、 $m3$ 及び $m4$ と同義である。)

[0883] 一実施形態において、前記一般式(7)で表される化合物は下記一般式(71-21)～(71-25)のいずれかで表される。

[0884] [化346]

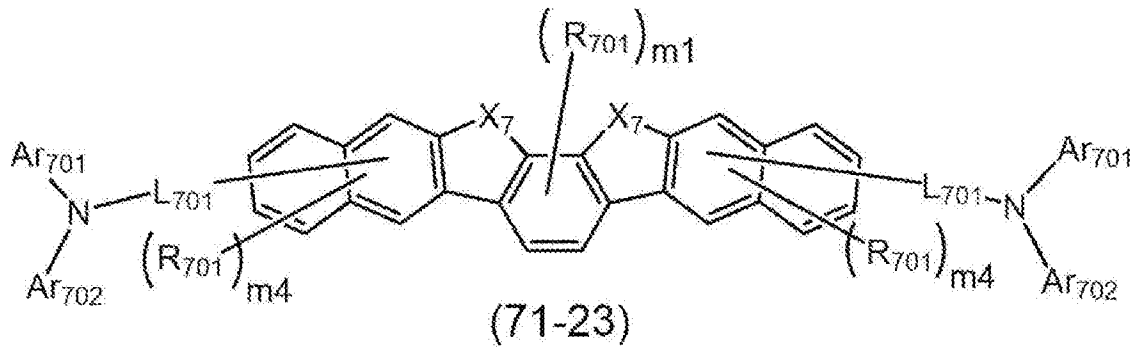


[0885] [化347]

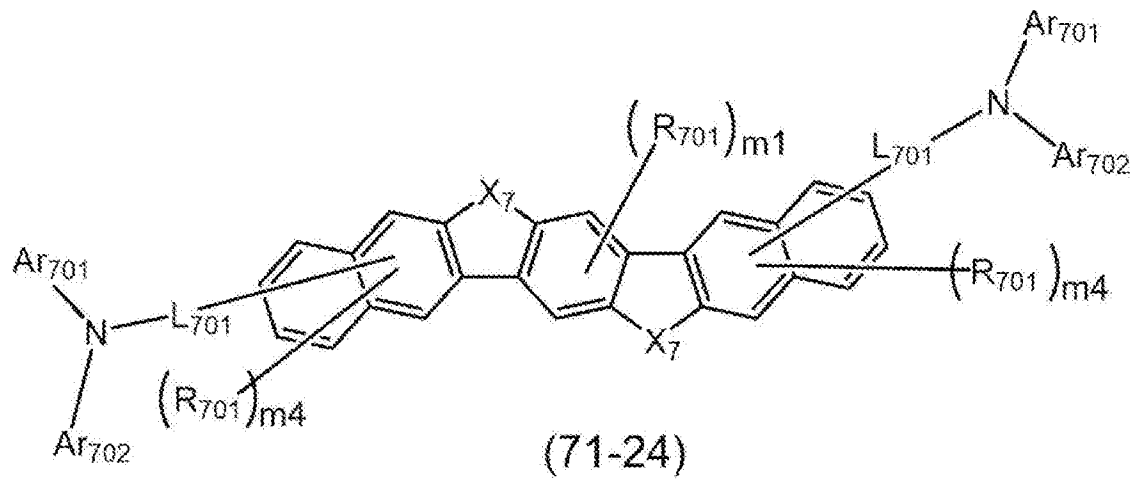


[0886]

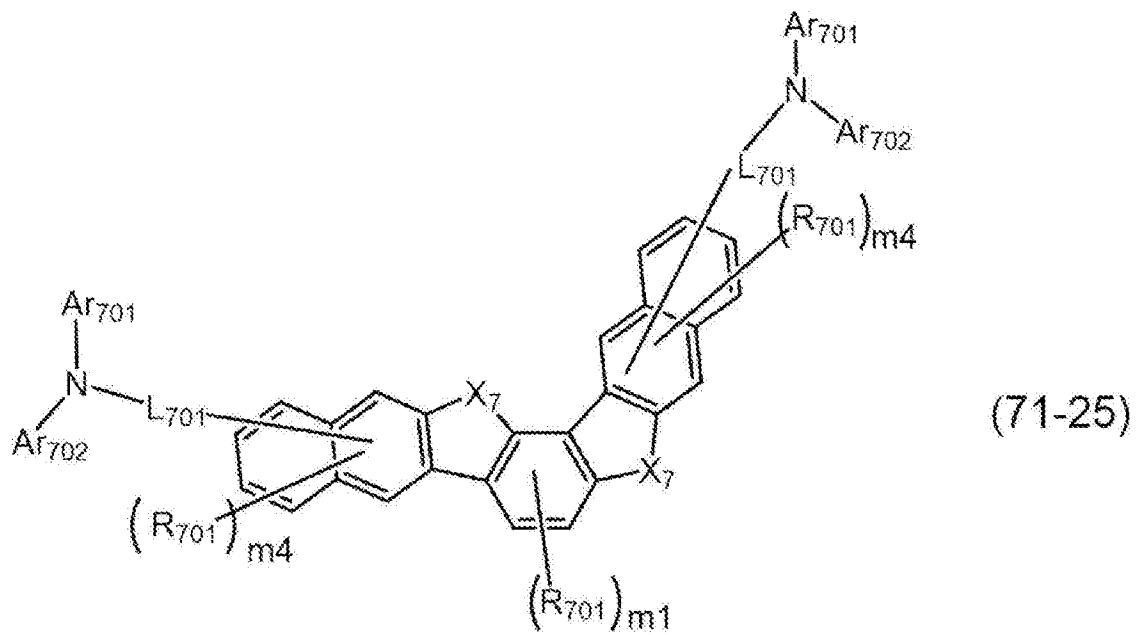
[化348]



[0887] [化349]



[0888] [化350]

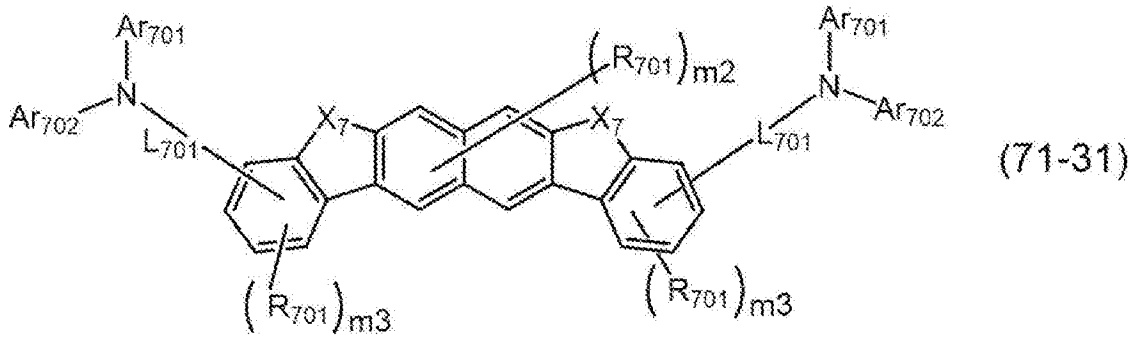


[0889] (前記一般式(71-21)~一般式(71-25)において、 $R_{701}$ 、 $X_7$

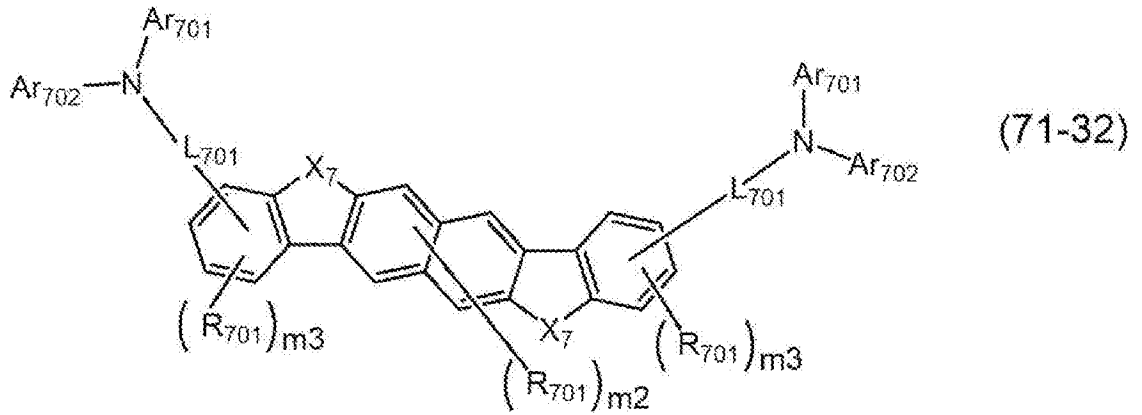
、 $Ar_{701}$ 、 $Ar_{702}$ 、 $L_{701}$ 、 $m1$ 及び $m4$ は、それぞれ、前記一般式(7)における $R_{701}$ 、 $X_7$ 、 $Ar_{701}$ 、 $Ar_{702}$ 、 $L_{701}$ 、 $m1$ 及び $m4$ と同義である。)

[0890] 一実施形態において、前記一般式(7)で表される化合物は下記一般式(71-31)～一般式(71-33)のいずれかで表される。

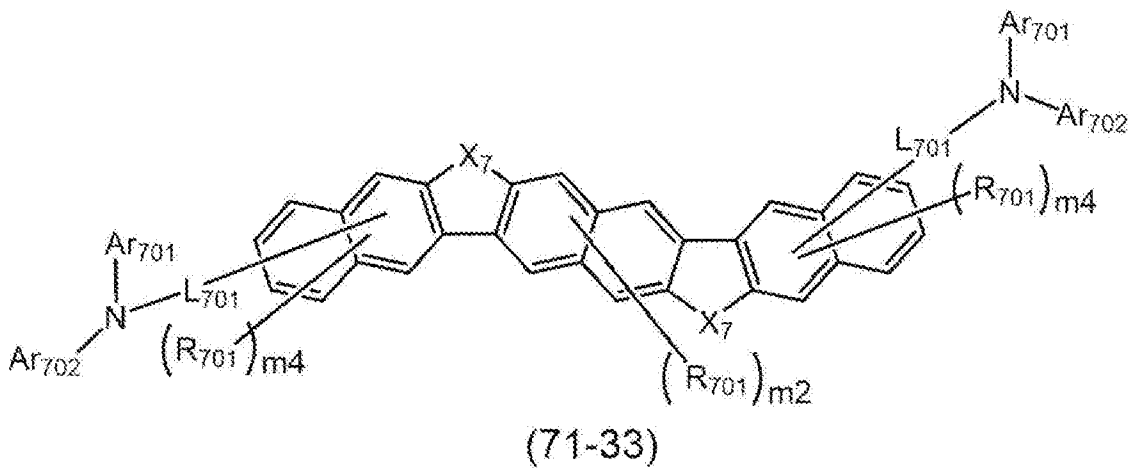
[0891] [化351]



[0892] [化352]

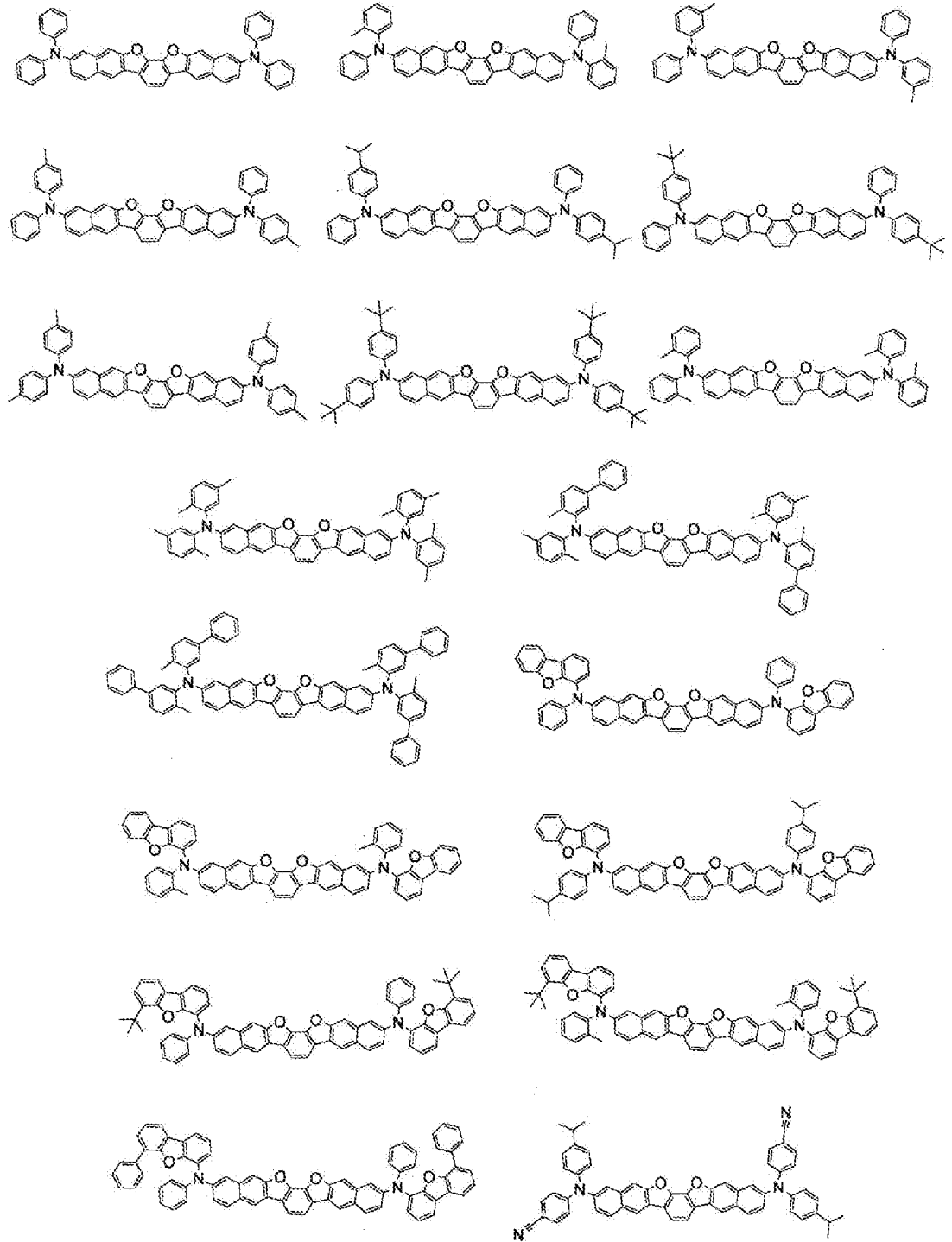


[0893] [化353]



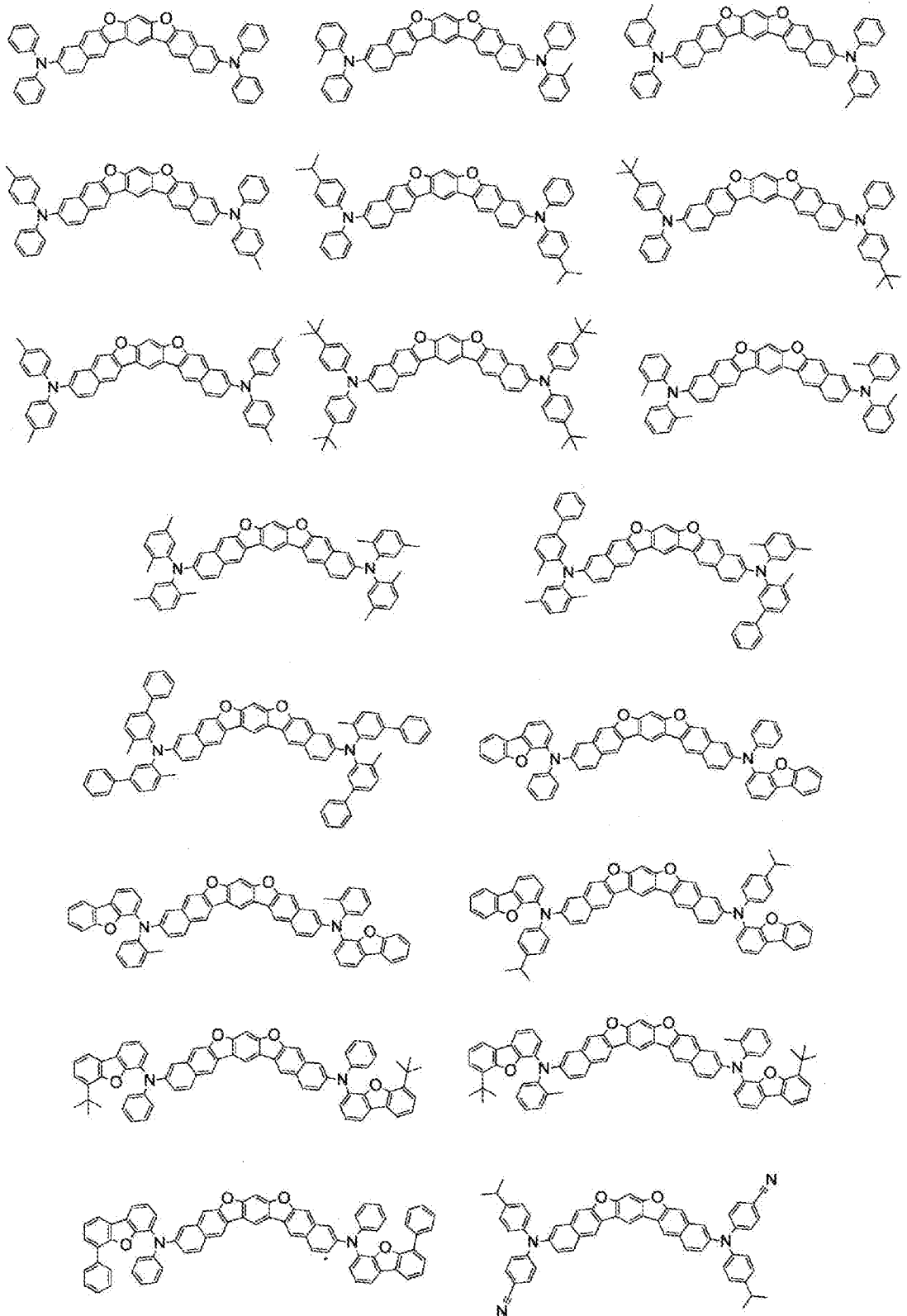
- [0894] (前記一般式(71-31)～一般式(71-33)において、 $R_{701}$ 、 $X_7$ 、 $Ar_{701}$ 、 $Ar_{702}$ 、 $L_{701}$ 、 $m_2$ ～ $m_4$ は、それぞれ、前記一般式(7)における $R_{701}$ 、 $X_7$ 、 $Ar_{701}$ 、 $Ar_{702}$ 、 $L_{701}$ 、 $m_2$ ～ $m_4$ と同義である。)
- [0895] 一実施形態においては、 $Ar_{701}$ 及び $Ar_{702}$ が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。
- [0896] 一実施形態においては、 $Ar_{701}$ 及び $Ar_{702}$ の一方が置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、 $Ar_{701}$ 及び $Ar_{702}$ の他方が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。
- [0897] 前記一般式(7)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。
- [0898]

[化354]



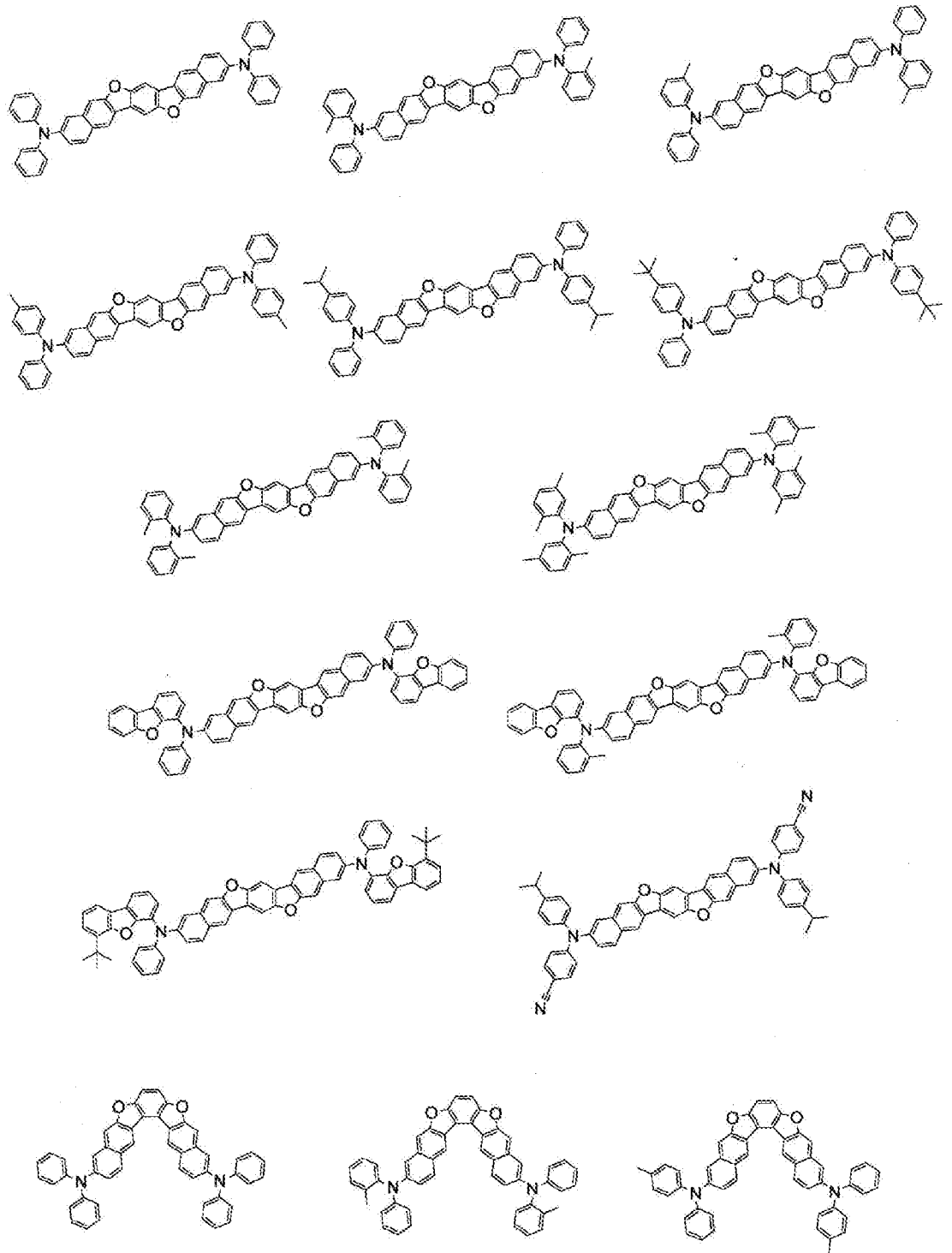
[0899]

[化355]



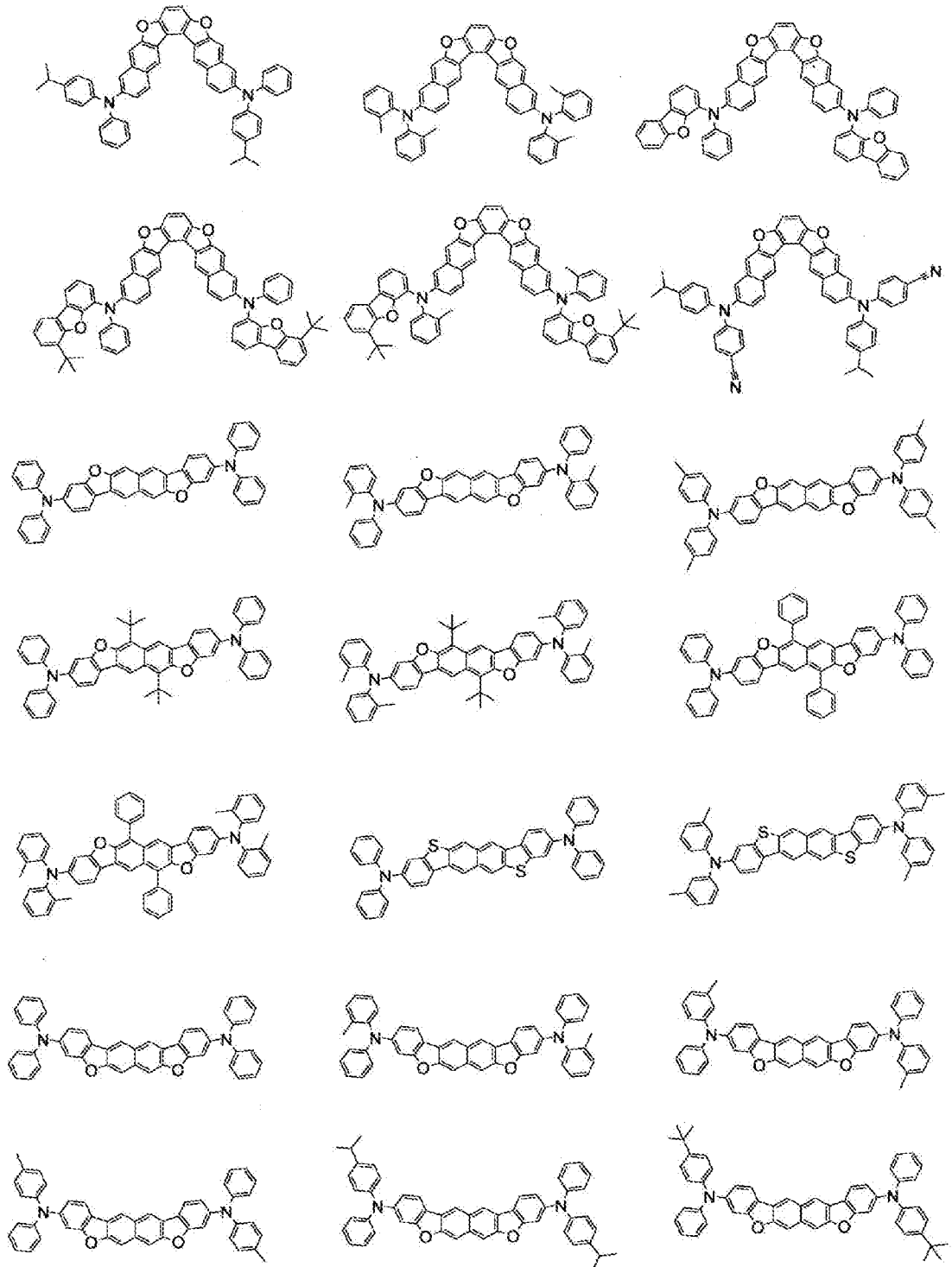
[0900]

[化356]



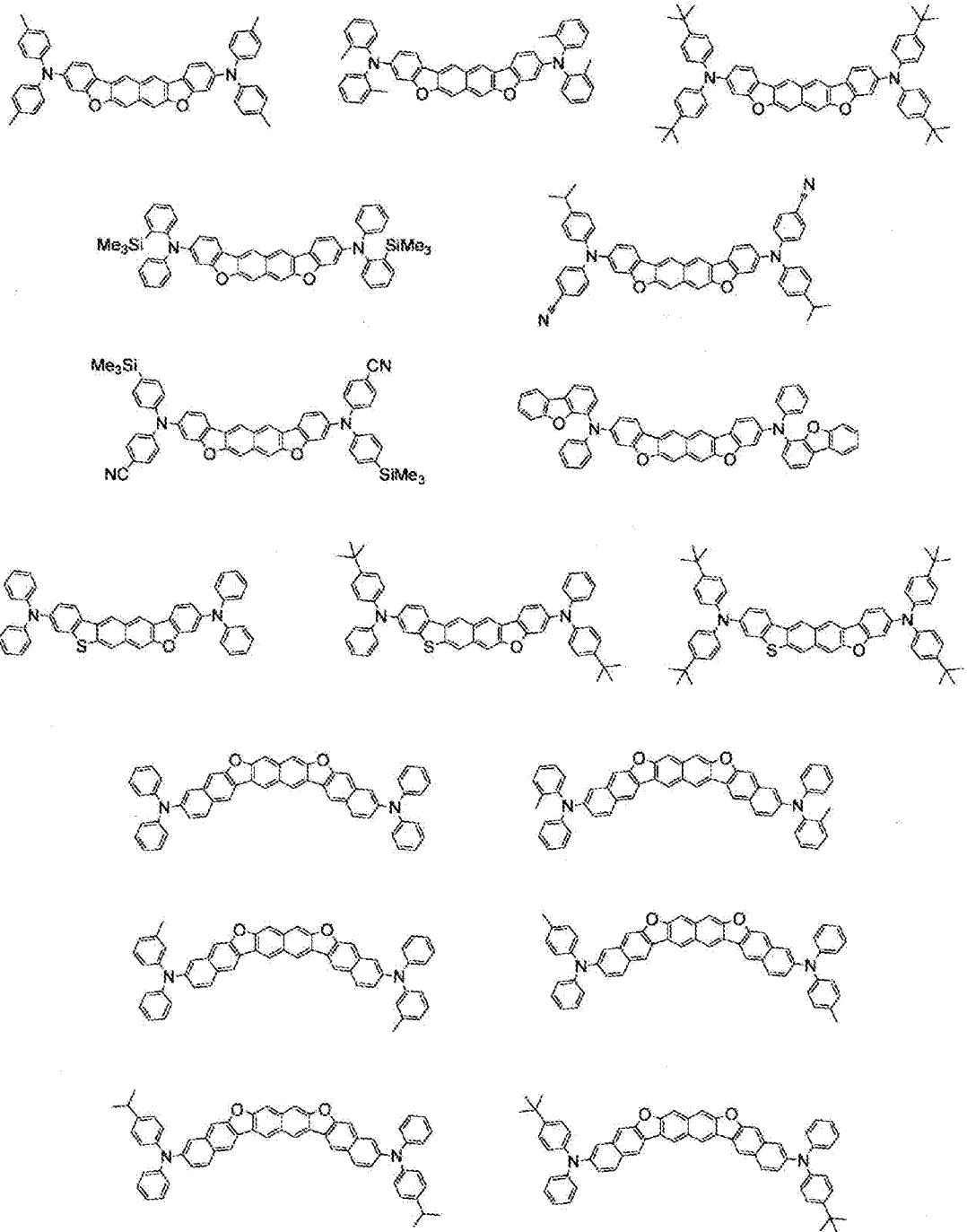
[0901]

[化357]



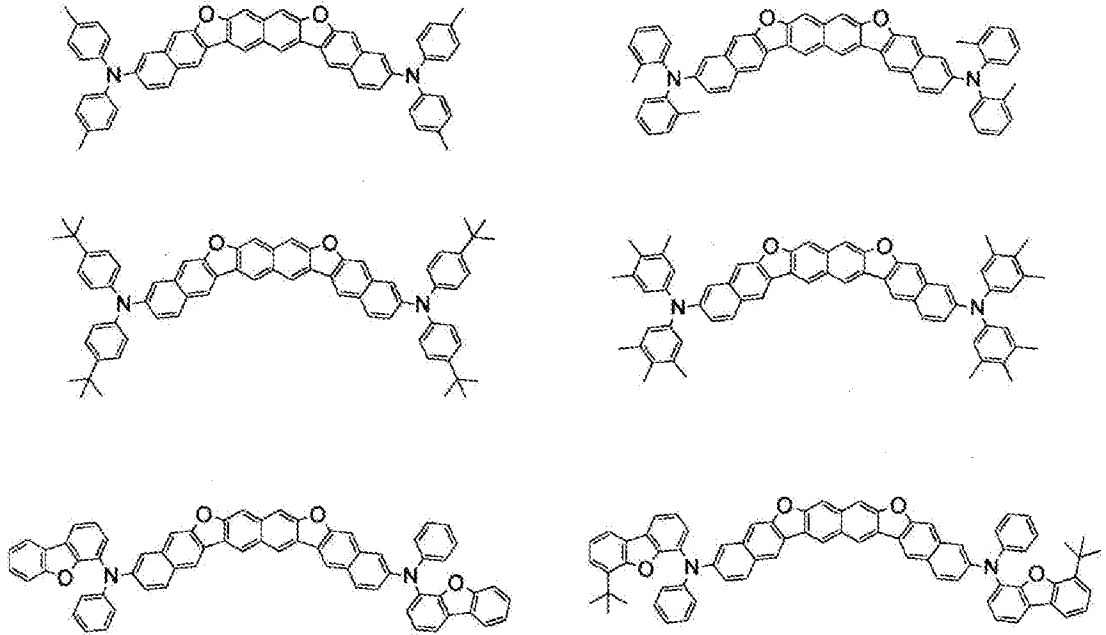
[0902]

[化358]



[0903]

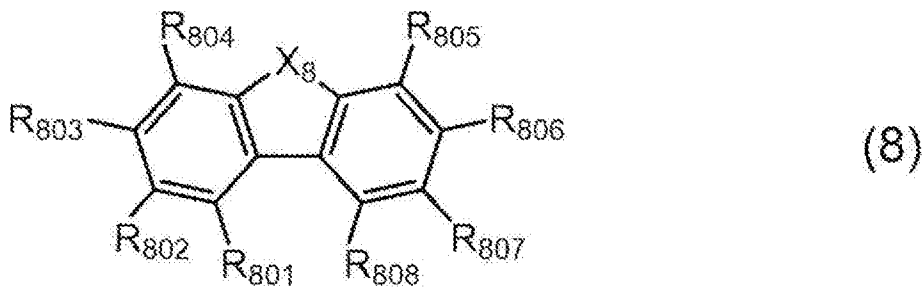
[化359]



[0904] (一般式 (8) で表される化合物)

一般式 (8) で表される化合物について説明する。

[0905] [化360]



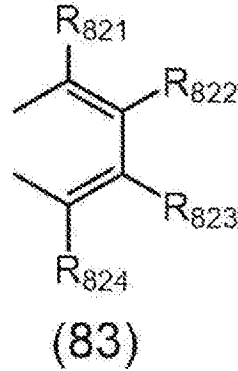
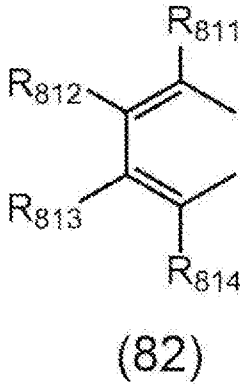
[0906] (前記一般式 (8) において、

R<sub>801</sub>とR<sub>802</sub>、R<sub>802</sub>とR<sub>803</sub>、及びR<sub>803</sub>とR<sub>804</sub>の少なくとも一組は、互いに結合して下記一般式 (8 2) で示される 2 価の基を形成し、

R<sub>805</sub>とR<sub>806</sub>、R<sub>806</sub>とR<sub>807</sub>、及びR<sub>807</sub>とR<sub>808</sub>の少なくとも一組は、互いに結合して下記一般式 (8 3) で示される 2 価の基を形成する。)

[0907]

[化361]



[0908] (前記一般式(82)で示される2価の基を形成しない $R_{801} \sim R_{804}$ 、及び $R_{811} \sim R_{814}$ の少なくとも1つは下記一般式(84)で表される1価の基であり、

前記一般式(83)で示される2価の基を形成しない $R_{805} \sim R_{808}$ 、及び $R_{821} \sim R_{824}$ の少なくとも1つは下記一般式(84)で表される1価の基であり、

$X_8$ は、酸素原子、硫黄原子、又は $NR_{809}$ であり、

前記一般式(82)及び一般式(83)で表される2価の基を形成せず、かつ、前記一般式(84)で表される1価の基ではない $R_{801} \sim R_{808}$ 、前記一般式(84)で表される1価の基ではない $R_{811} \sim R_{814}$ 及び $R_{821} \sim R_{824}$ 、並びに $R_{809}$ 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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

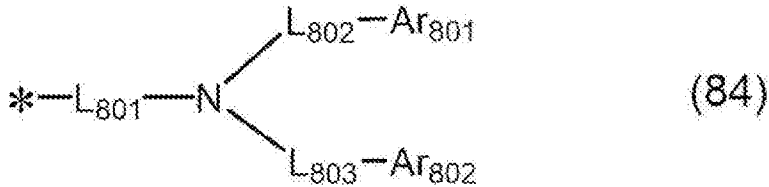
—S—( $R_{905}$ )で表される基、

—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )で表される基、

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 の複素環基である。)

[0909] [化362]



[0910] (前記一般式 (84) において、

$\text{Ar}_{801}$  及び  $\text{Ar}_{802}$  は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 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 の複素環基であり、

$\text{L}_{801} \sim \text{L}_{803}$  は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 の 2 価の複素環基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリーレン基及び置換も  
 しくは無置換の環形成原子数 5～30 の 2 価の複素環基からなる群から選択  
 される 2～4 個の基が結合して形成される 2 価の連結基であり、

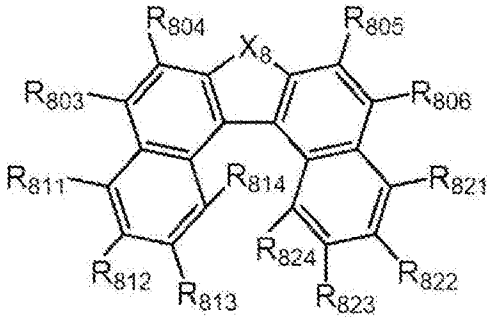
前記一般式 (84) 中の \* は、前記一般式 (8) で表される環構造、一般  
 式 (82) 又は一般式 (83) で表される基との結合位置を示す。)

[0911] 前記一般式 (8) において、前記一般式 (82) で示される 2 価の基及び  
 一般式 (83) で示される 2 価の基が形成される位置は特に限定されず、 $\text{R}_{801} \sim \text{R}_{808}$   
 の可能な位置において当該基を形成し得る。

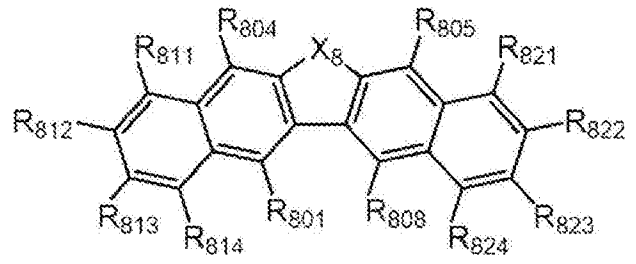
[0912] 一実施形態において、前記一般式 (8) で表される化合物は、下記一般式  
 (81-1)～(81-6) のいずれかで表される。

[0913]

[化363]

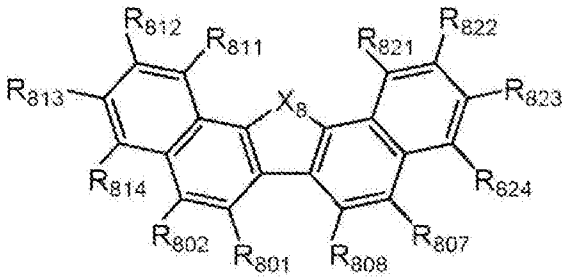


(81-1)

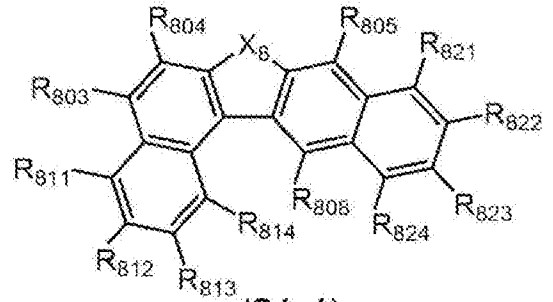


(81-2)

[0914] [化364]

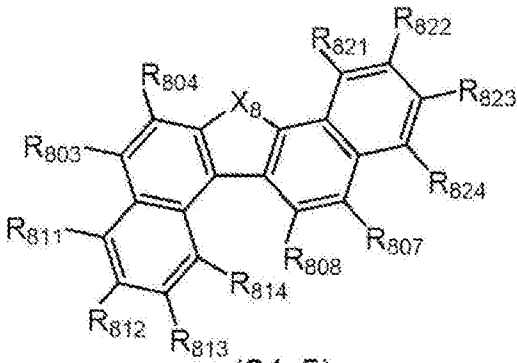


(81-3)

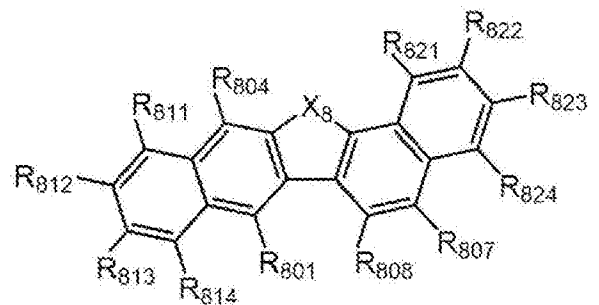


(81-4)

[0915] [化365]



(81-5)



(81-6)

[0916] (前記一般式(81-1)～一般式(81-6)において、

$X_8$ は、前記一般式(8)における $X_8$ と同義であり、

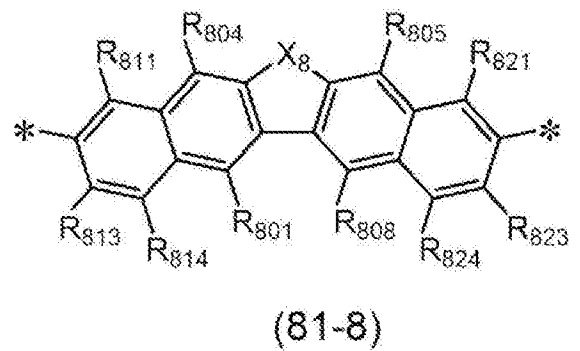
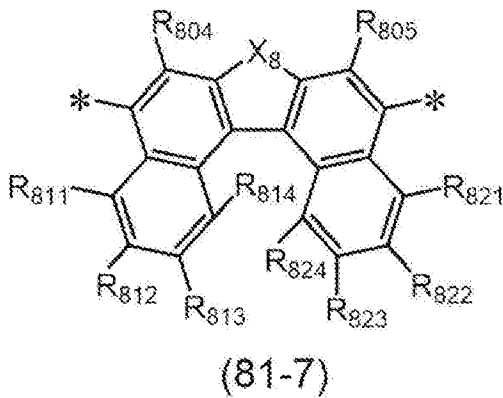
$R_{801} \sim R_{824}$ のうち少なくとも2つは、前記一般式(84)で表される1価の基であり、

前記一般式(84)で表される1価の基ではない $R_{801} \sim R_{824}$ 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<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、  
 -O- (R<sub>904</sub>) で表される基、  
 -S- (R<sub>905</sub>) で表される基、  
 -N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基、  
 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 の複素環基である。)

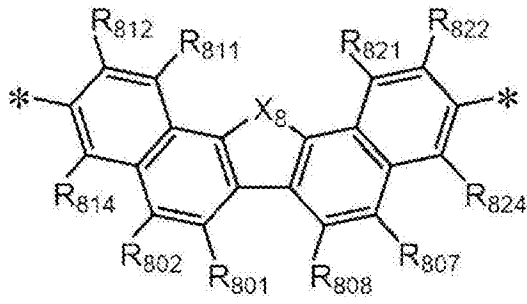
[0917] 一実施形態において、前記一般式 (8) で表される化合物は、下記一般式 (81-7) ~ (81-18) のいずれかで表される。

[0918] [化366]

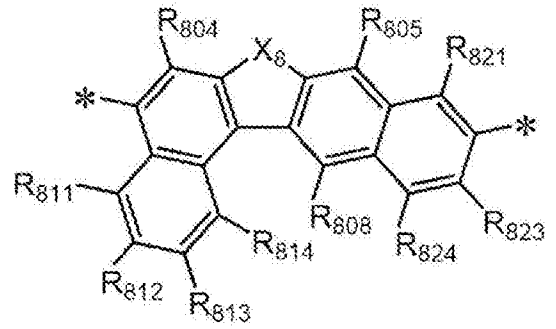


[0919]

[化367]

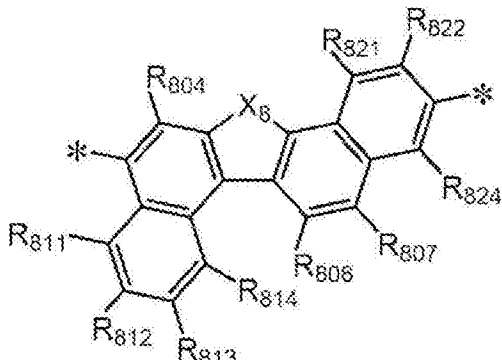


(81-9)

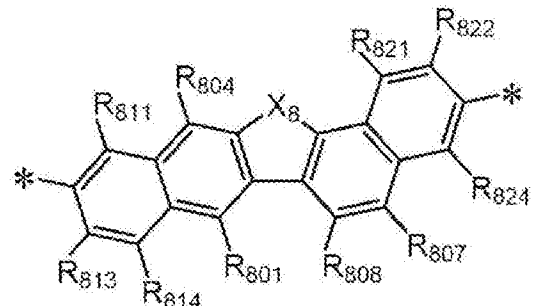


(81-10)

[0920] [化368]

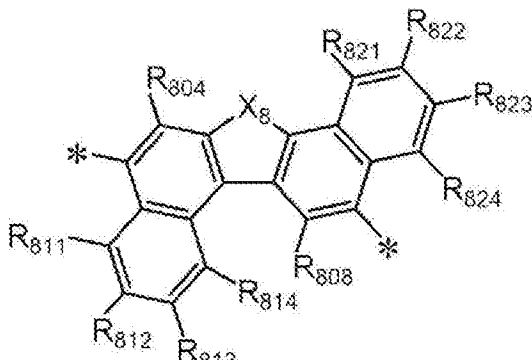


(81-11)

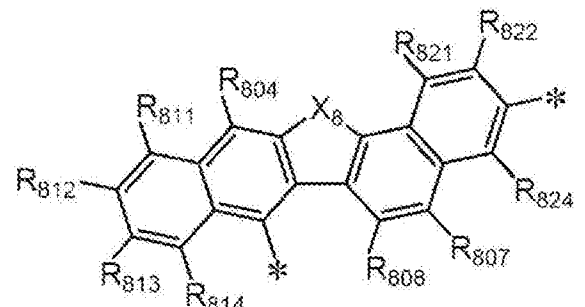


(81-12)

[0921] [化369]



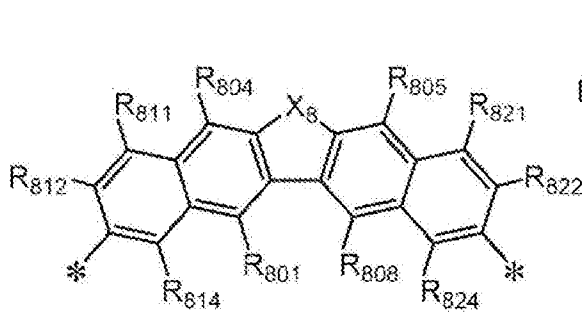
(81-13)



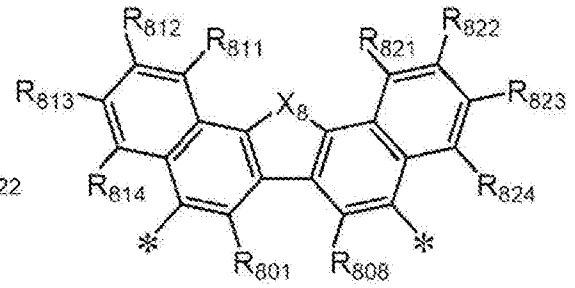
(81-14)

[0922]

[化370]

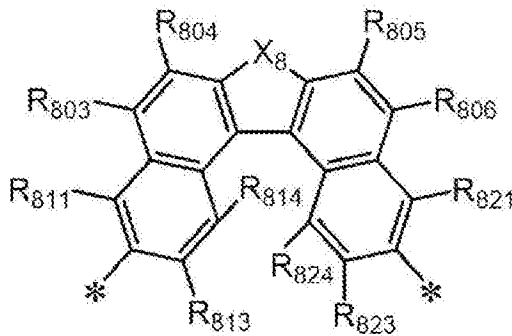


(81-15)

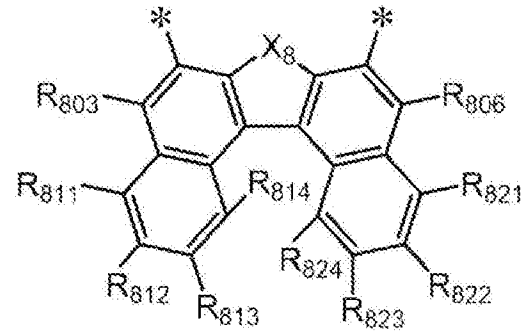


(81-16)

[0923] [化371]



(81-17)



(81-18)

[0924] (前記一般式(81-7)～一般式(81-18)において、

$X_8$ は、前記一般式(8)における $X_8$ と同義であり、

\*は、前記一般式(84)で表される1価の基と結合する単結合であり、

$R_{801} \sim R_{824}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(81-1)～一般式(81-6)における前記一般式(84)で表される1価の基ではない $R_{801} \sim R_{824}$ と同一義である。)

[0925] 前記一般式(82)及び一般式(83)で表される2価の基を形成せず、かつ、前記一般式(84)で表される1価の基ではない $R_{801} \sim R_{808}$ 、及び、前記一般式(84)で表される1価の基ではない $R_{811} \sim R_{814}$ 及び $R_{821} \sim R_{824}$ は、好ましくは、それぞれ独立に、

水素原子、

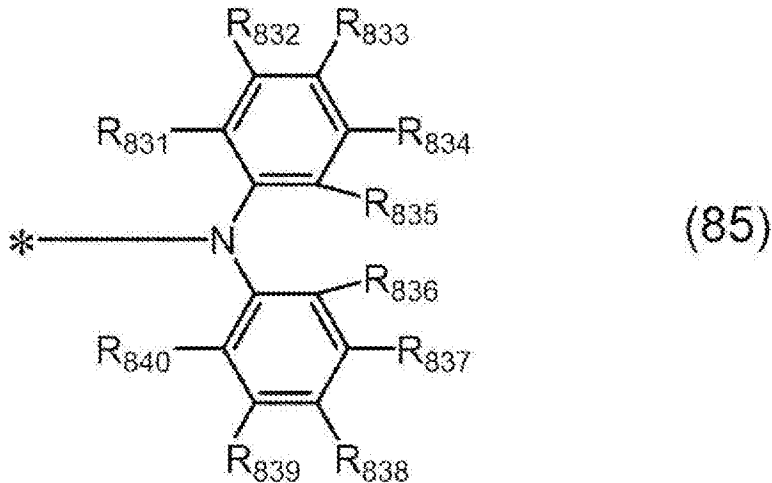
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

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、  
 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。

[0926] 前記一般式 (84) で表される 1 価の基は、好ましくは下記一般式 (85) 又は一般式 (86) で表される。

[0927] [化372]



[0928] (前記一般式 (85) において、

$R_{831} \sim R_{840}$  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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ ) で表される基、

—O—( $R_{904}$ ) で表される基、

—S—( $R_{905}$ ) で表される基、

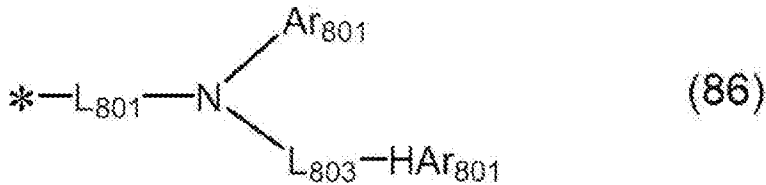
—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ ) で表される基、

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 の複素環基であり、  
前記一般式 (85) 中の \* は、前記一般式 (84) 中の \* と同義である。  
)

[0929] [化373]

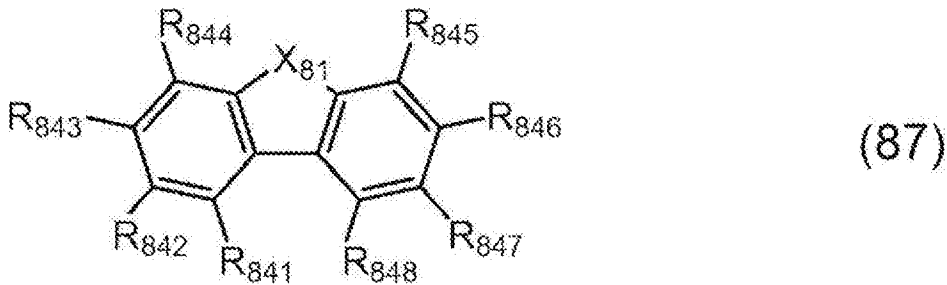


[0930] (前記一般式 (86) において、

$\text{Ar}_{801}$ 、 $\text{L}_{801}$  及び  $\text{L}_{803}$  は、前記一般式 (84) における  $\text{Ar}_{801}$ 、 $\text{L}_{801}$  及び  $\text{L}_{803}$  と同義であり、

$\text{HAr}_{801}$  は、下記一般式 (87) で表される構造である。)

[0931] [化374]



[0932] (前記一般式 (87) において、

$\text{X}_{81}$  は、酸素原子又は硫黄原子であり、

$\text{R}_{841} \sim \text{R}_{848}$  のいずれか 1 つは、 $\text{L}_{803}$  に結合する単結合であり、  
単結合ではない  $\text{R}_{841} \sim \text{R}_{848}$  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<sub>901</sub>)(R<sub>902</sub>)(R<sub>903</sub>)で表される基、

—O—(R<sub>904</sub>)で表される基、

—S—(R<sub>905</sub>)で表される基、

—N(R<sub>906</sub>)(R<sub>907</sub>)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

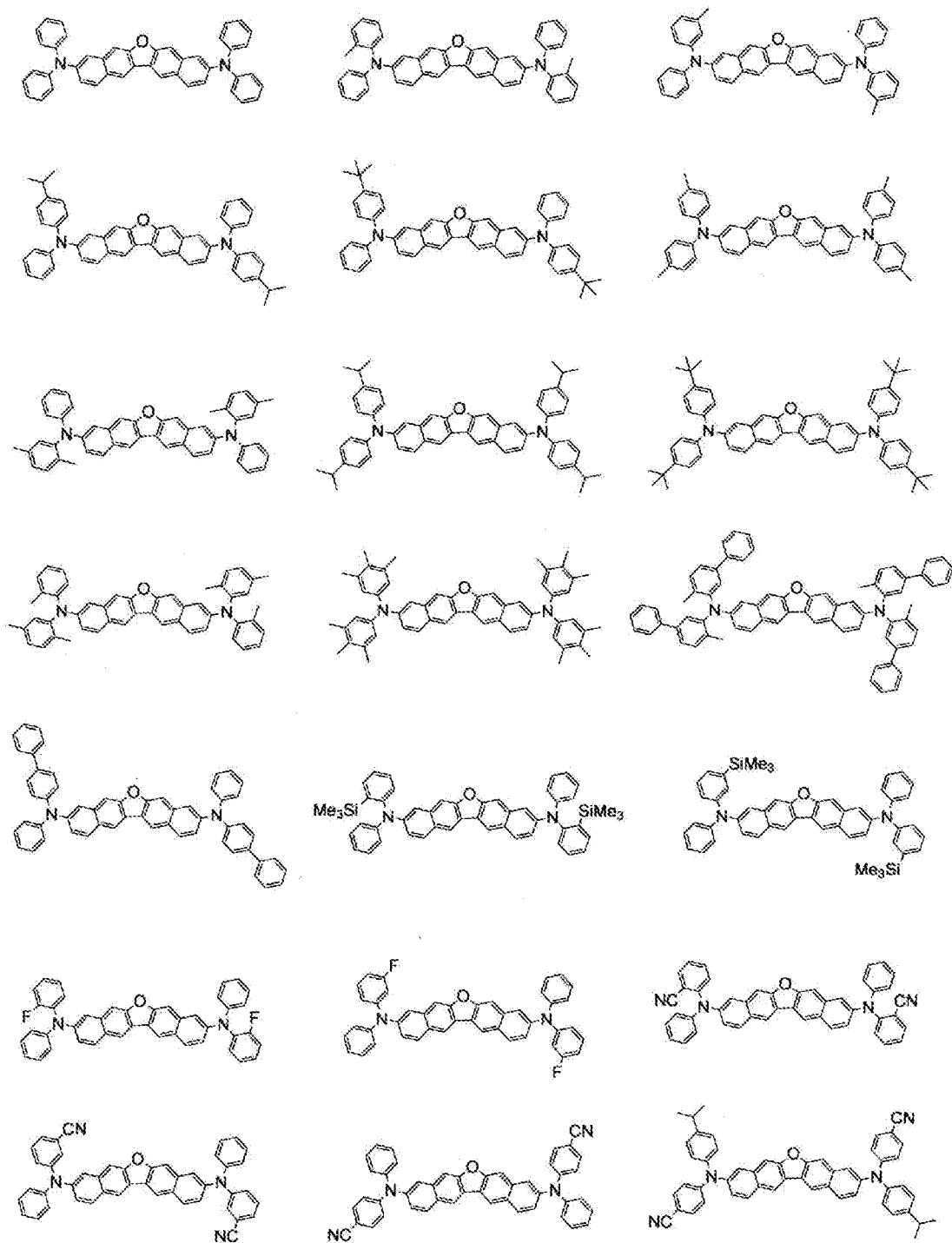
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

[0933] 前記一般式(8)で表される化合物としては、国際公開第2014/104144号に記載の化合物の他、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

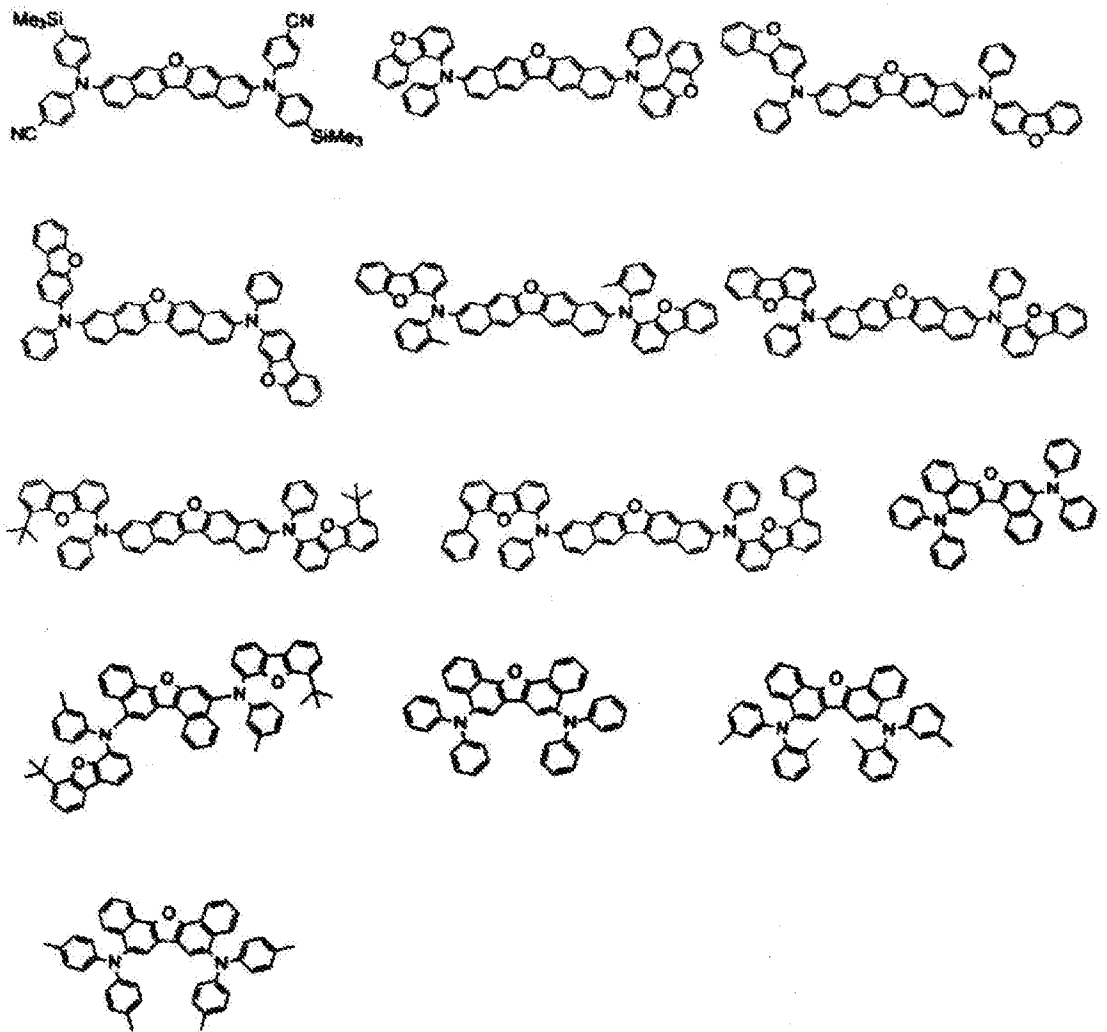
[0934]

[化375]



[0935]

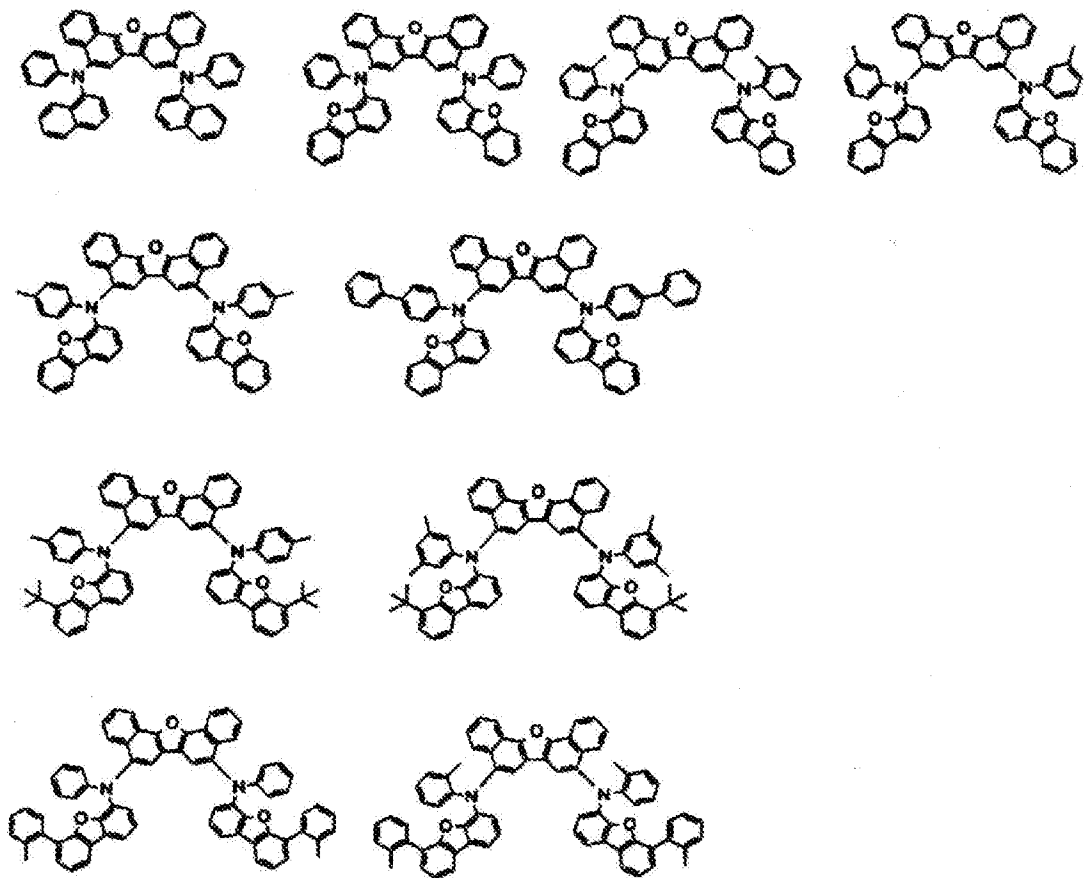
[化376]



[0936]

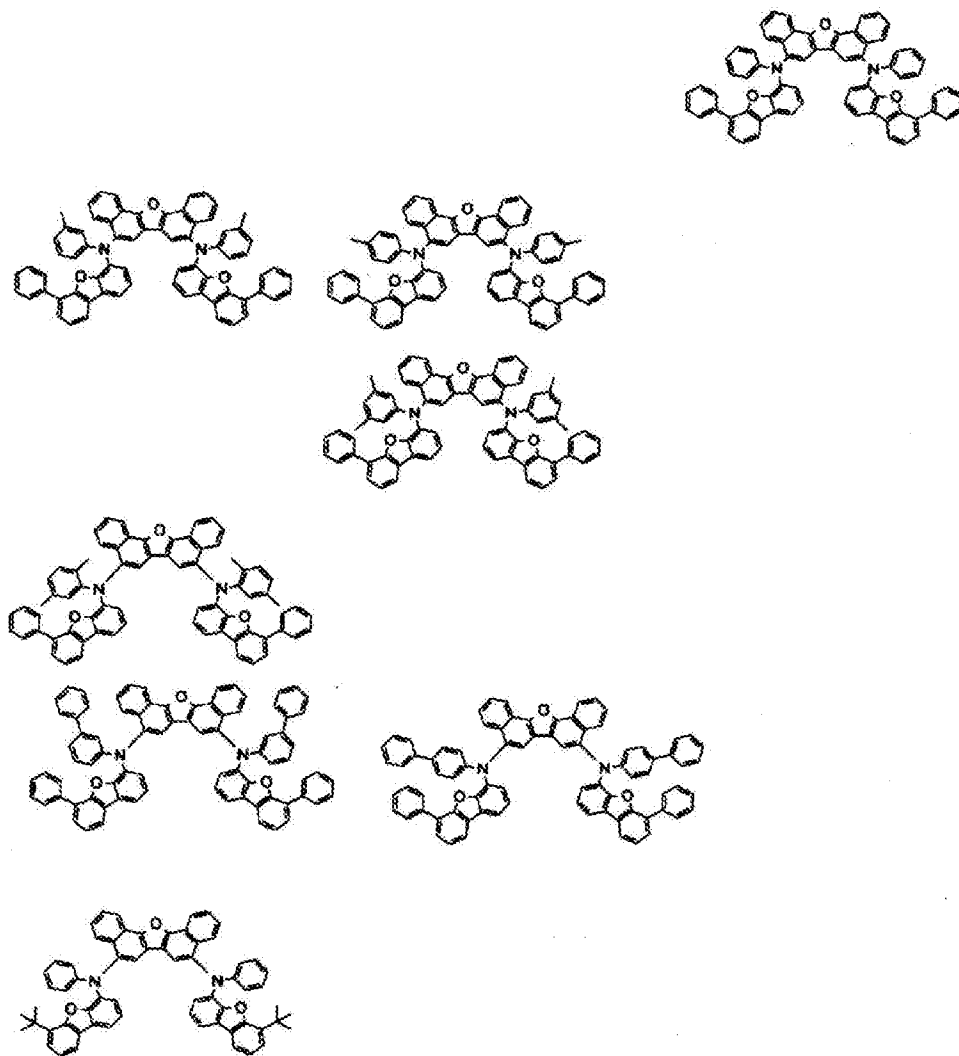


[化378]



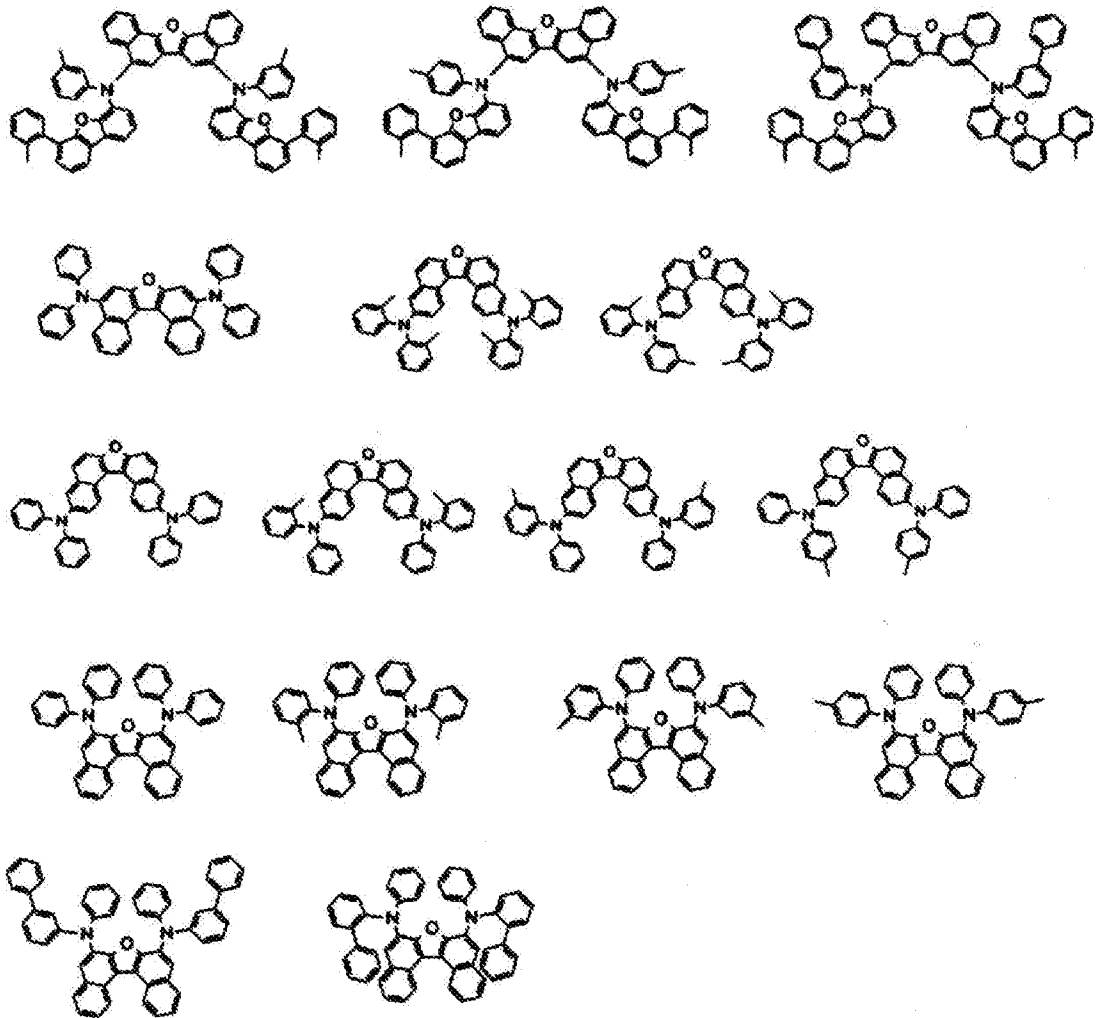
[0938]

[化379]



[0939]

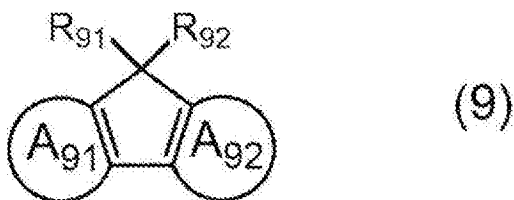
[化380]



[0940] (一般式 (9) で表される化合物)

一般式 (9) で表される化合物について説明する。

[0941] [化381]



[0942] (前記一般式 (9) において、

A<sub>91</sub> 環及び A<sub>92</sub> 環は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 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 5～50 の複素環であり、  
 $A_{91}$  環及び  $A_{92}$  環からなる群から選択される 1 以上の環は、  
 下記一般式 (92) で表される構造の \* と結合する。)

[0943] [化382]



[0944] (前記一般式 (92) において、

$A_{93}$  環は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 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 5～50 の複素環であり、  
 $X_9$  は、 $NR_{93}$ 、 $C(R_{94})(R_{95})$ 、 $Si(R_{96})(R_{97})$ 、 $Ge(R_{98})(R_{99})$ 、酸素原子、硫黄原子又はセレン原子であり、

$R_{91}$  及び  $R_{92}$  は、

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、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない  $R_{91}$  及び  $R_{92}$ 、並びに  
 $R_{93} \sim R_{99}$  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、

— $Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$  で表される基、

— $O$ —( $R_{904}$ ) で表される基、

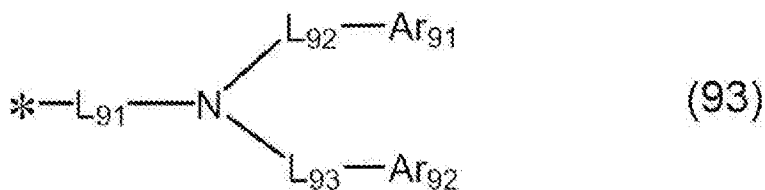
— $S$ —( $R_{905}$ ) で表される基、

$-N(R_{906})(R_{907})$  で表される基、  
 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 の複素環基である。)

[0945]  $A_{91}$  環及び  $A_{92}$  環からなる群から選択される 1 以上の環は、前記一般式 (92) で表される構造の \* と結合する。即ち、一実施形態において、 $A_{91}$  環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式 (92) で表される構造の \* と結合する。また、一実施形態において、 $A_{92}$  環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式 (92) で表される構造の \* と結合する。

[0946] 一実施形態において、 $A_{91}$  環及び  $A_{92}$  環のいずれか又は両方に下記一般式 (93) で表される基が結合する。

[0947] [化383]



[0948] (前記一般式 (93) において、

$\text{Ar}_{91}$  及び  $\text{Ar}_{92}$  は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 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 の複素環基であり、

$\text{L}_{91} \sim \text{L}_{93}$  は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 の 2 価の複素環基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリーレン基及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 の 2 価の複素環基からなる群から選択

される2～4個結合して形成される2価の連結基であり、

前記一般式(93)中の\*は、 $A_{91}$ 環及び $A_{92}$ 環のいずれかとの結合位置を示す。)

[0949] 一実施形態において、 $A_{91}$ 環に加えて、 $A_{92}$ 環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式(92)で表される構造の\*と結合する。この場合、前記一般式(92)で表される構造は、互いに同一でもよいし異なってもよい。

[0950] 一実施形態において、 $R_{91}$ 及び $R_{92}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

一実施形態において、 $R_{91}$ 及び $R_{92}$ は、互いに結合してフルオレン構造を形成する。

[0951] 一実施形態において、環 $A_{91}$ 及び環 $A_{92}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環であり、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン環である。

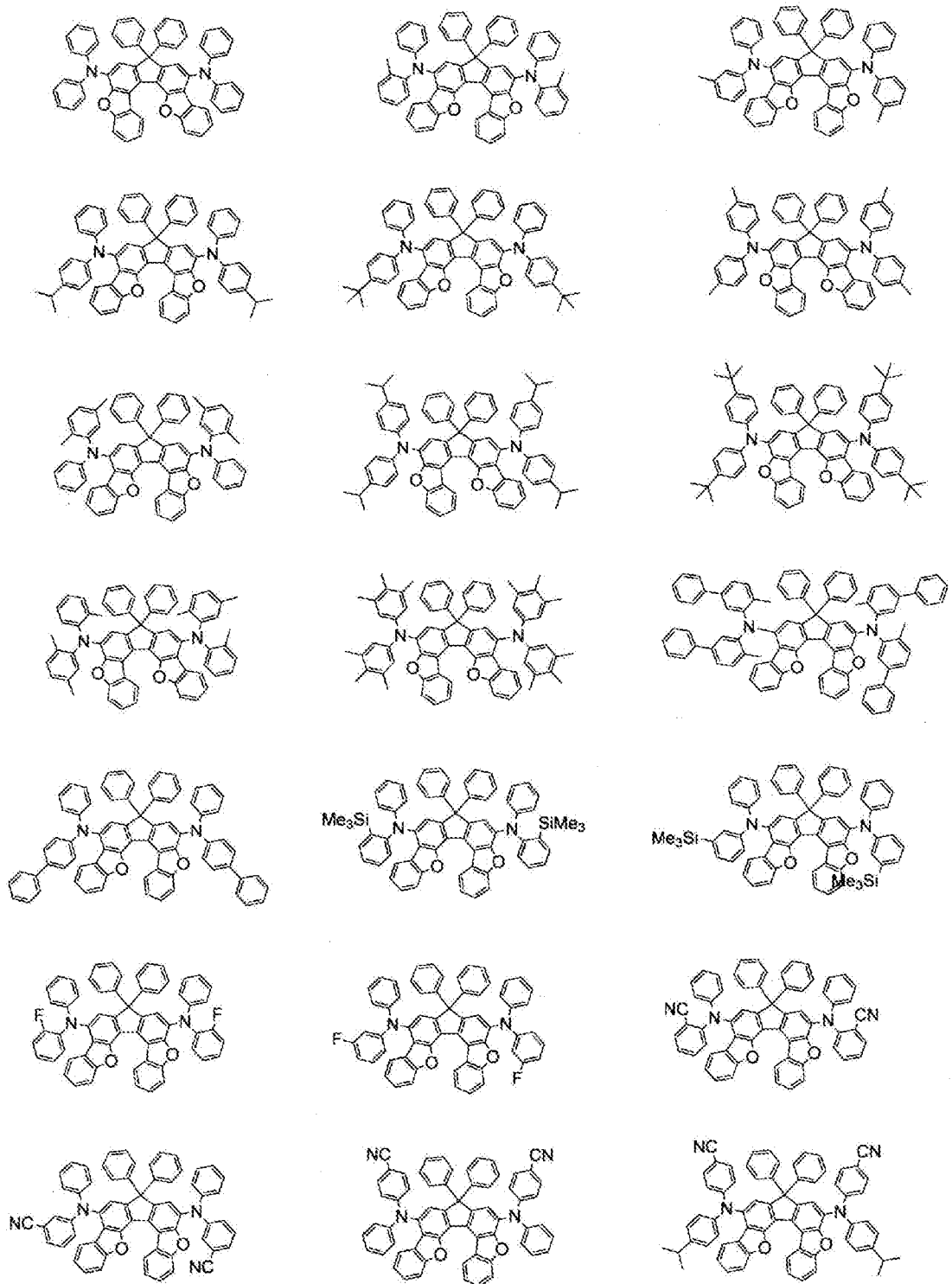
[0952] 一実施形態において、環 $A_{93}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環であり、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン環である。

一実施形態において、 $X_9$ は、酸素原子又は硫黄原子である。

[0953] 前記一般式(9)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

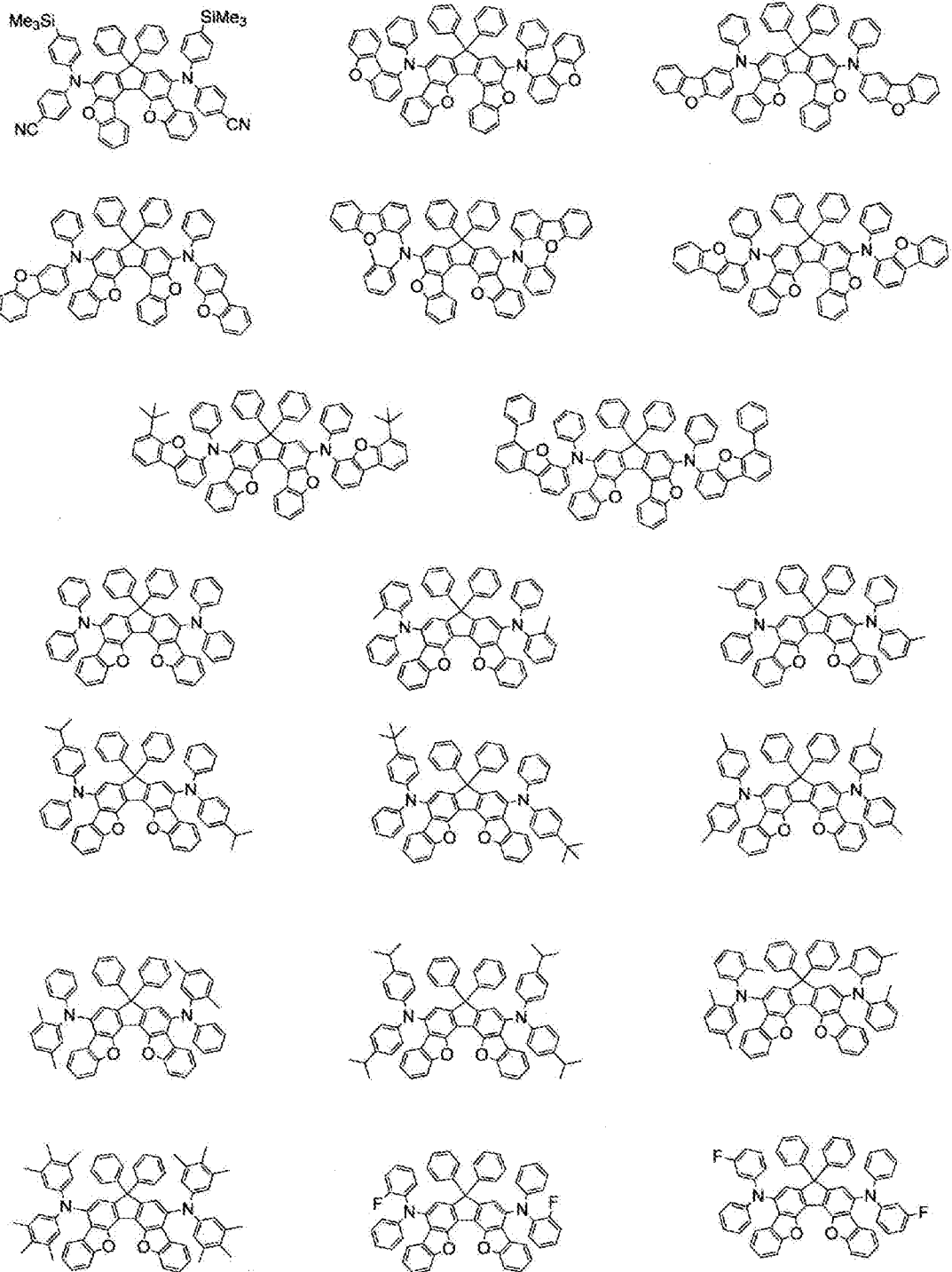
[0954]

[化384]



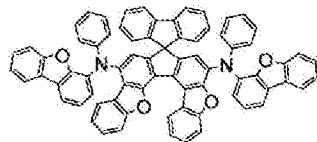
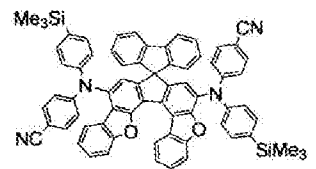
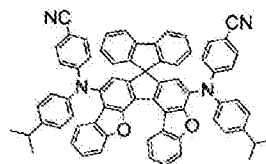
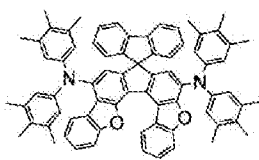
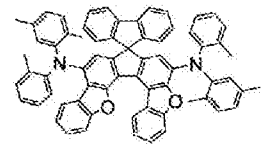
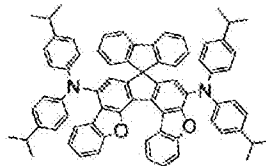
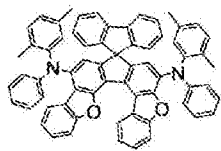
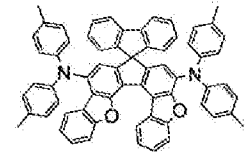
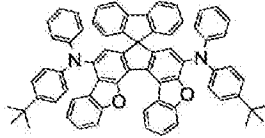
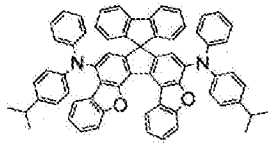
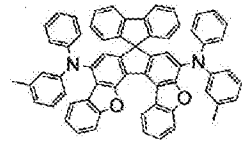
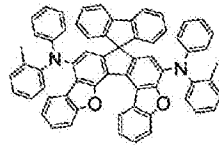
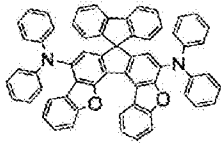
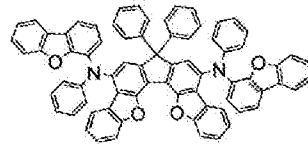
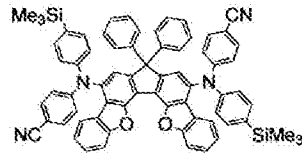
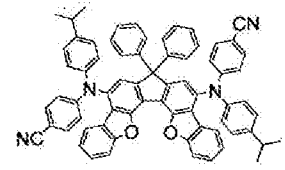
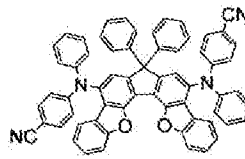
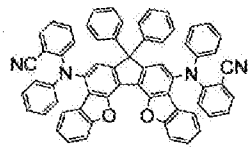
[0955]

[化385]



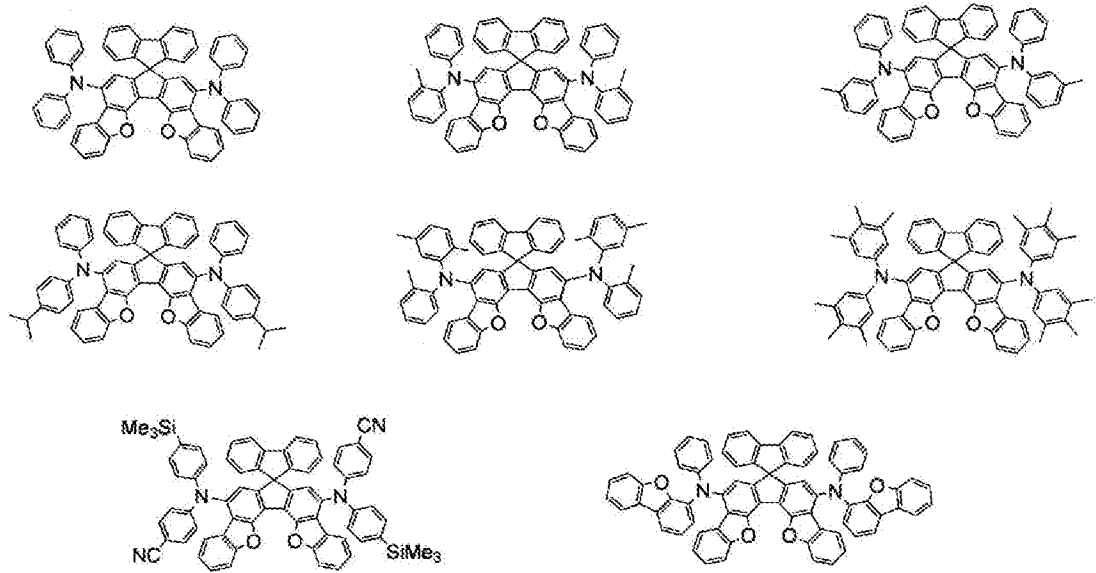
[0956]

[化386]



[0957]

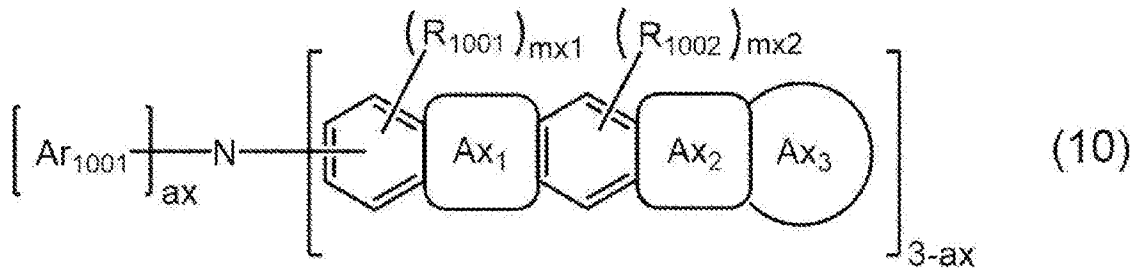
[化387]



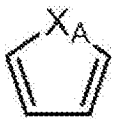
[0958] (一般式(10)で表される化合物)

一般式(10)で表される化合物について説明する。

[0959] [化388]



[0960] [化389]



(10a)



(10b)

[0961] (前記一般式(10)において、

A<sub>x1</sub>環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式(10a)で表される環であり、

A<sub>x2</sub>環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式(10b)で表される環であり、

前記一般式 (10b) 中の2つの\*は、 $A \times_3$ 環の任意の位置と結合し、  
 $X_A$ 及び $X_B$ は、それぞれ独立に、 $C (R_{1003}) (R_{1004})$ 、 $Si (R_{1005}) (R_{1006})$ 、酸素原子又は硫黄原子であり、

$A \times_3$ 環は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50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5～50の複素環であり、

$Ar_{1001}$ 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、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

$R_{1001} \sim R_{1006}$ 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、

$-Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903})$ で表される基、

$-O-$  ( $R_{904}$ )で表される基、

$-S-$  ( $R_{905}$ )で表される基、

$-N (R_{906}) (R_{907})$ で表される基、

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の複素環基であり、

$m \times 1$ は、3であり、 $m \times 2$ は、2であり、

複数の $R_{1001}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

複数の $R_{1002}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

$a \times$ は、0、1又は2であり、

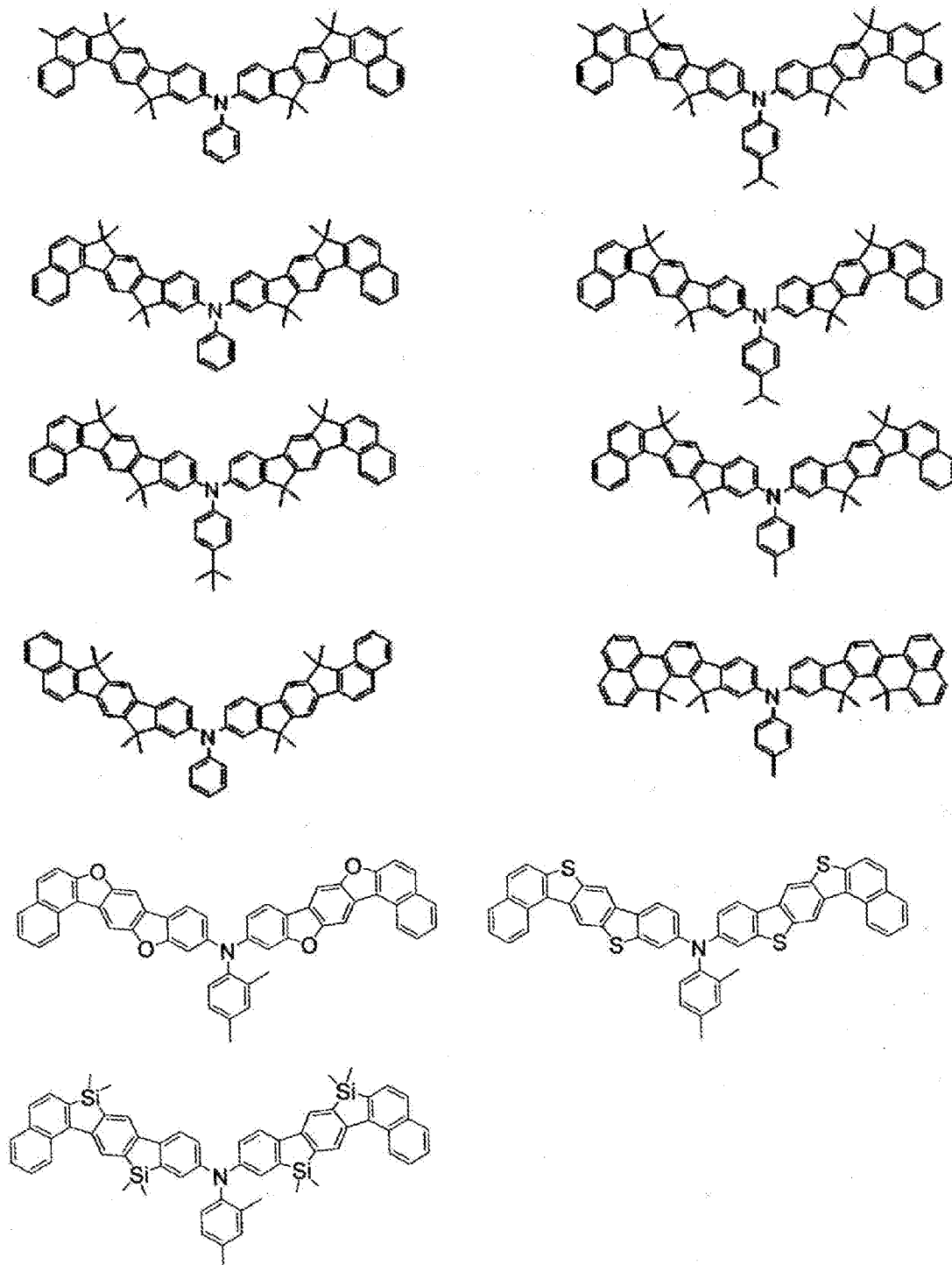
$a \times$ が0又は1の場合、「 $3 - a \times$ 」で示されるカッコ内の構造は、互いに同一であるか、又は異なり、

$a \times$ が2の場合、複数の $A r_{1001}$ は、互いに同一であるか、又は異なる。

)

- [0962] 一実施形態において、 $A r_{1001}$ 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。
- [0963] 一実施形態において、 $A \times_3$ 環は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環であり、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン環、置換もしくは無置換のナフタレン環、又は置換もしくは無置換のアントラセン環である。
- [0964] 一実施形態において、 $R_{1003}$ 及び $R_{1004}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基である。
- [0965] 一実施形態において、 $a \times$ は1である。
- [0966] 前記一般式(10)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。
- [0967]

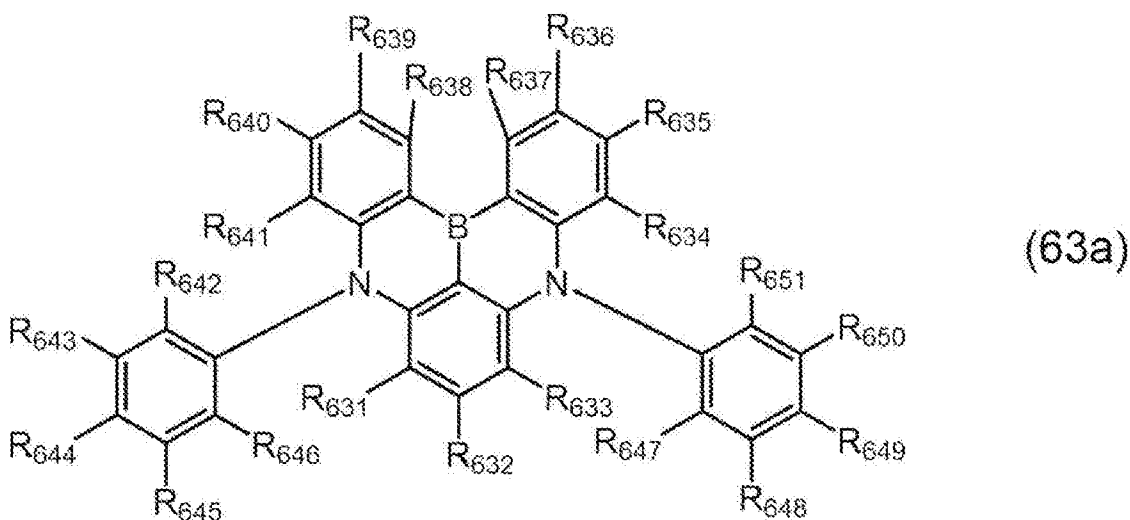
[化390]



[0968] 一実施形態においては、前記発光層が、第三の化合物及び第四の化合物の少なくともいずれかの化合物として、  
 前記一般式（４）で表される化合物、  
 前記一般式（５）で表される化合物、

前記一般式（7）で表される化合物、  
 前記一般式（8）で表される化合物、  
 前記一般式（9）で表される化合物及び  
 下記一般式（63a）で表される化合物からなる群から選択される1以上の化合物を含有する。

[0969] [化391]



[0970] (前記一般式（63a）において、

$R_{631}$ は、 $R_{646}$ と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成しない。

$R_{633}$ は、 $R_{647}$ と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成しない。

$R_{634}$ は、 $R_{651}$ と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成しない。

$R_{641}$ は、 $R_{642}$ と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成しない。

$R_{631} \sim R_{651}$ のうちの隣接する2つ以上の1組以上は、

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、

前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ

前記縮合環を形成しない  $R_{631} \sim R_{651}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

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 ( $R_{901}$ ) ( $R_{902}$ ) ( $R_{903}$ ) で表される基、

—O— ( $R_{904}$ ) で表される基、

—S— ( $R_{905}$ ) で表される基、

—N ( $R_{906}$ ) ( $R_{907}$ ) で表される基、

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 の複素環基であり、

但し、前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない  $R_{631} \sim R_{651}$  のうちの少なくとも 1 つは、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

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 ( $R_{901}$ ) ( $R_{902}$ ) ( $R_{903}$ ) で表される基、

—O— ( $R_{904}$ ) で表される基、

—S— ( $R_{905}$ ) で表される基、

—N ( $R_{906}$ ) ( $R_{907}$ ) で表される基、

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 の複素環基である。)

[0971] 一実施形態においては、前記一般式 (4) で表される化合物が、前記一般式 (4 1 - 3)、一般式 (4 1 - 4) 又は一般式 (4 1 - 5) で表される化合物であり、前記一般式 (4 1 - 5) 中の A 1 環が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合複素環である。

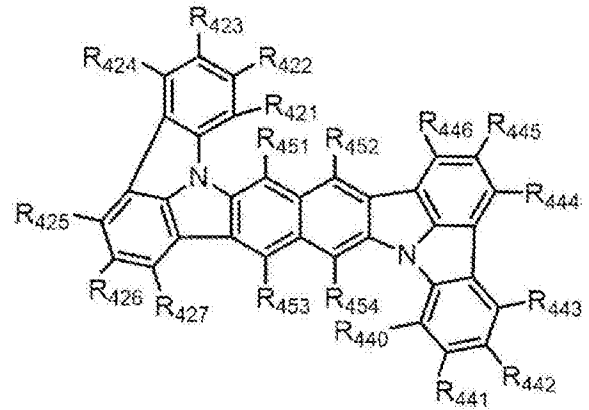
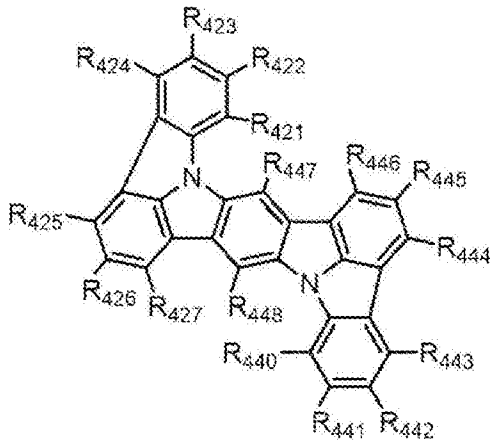
[0972] 一実施形態においては、前記一般式 (4 1 - 3)、一般式 (4 1 - 4)、及び一般式 (4 1 - 5) における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合芳香族炭化水素環が、  
置換もしくは無置換のナフタレン環、  
置換もしくは無置換のアントラセン環、又は  
置換もしくは無置換のフルオレン環であり、  
前記置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合複素環が、  
置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、  
置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は  
置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

[0973] 一実施形態においては、前記一般式 (4 1 - 3)、一般式 (4 1 - 4) 又は一般式 (4 1 - 5) における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合芳香族炭化水素環が、  
置換もしくは無置換のナフタレン環、又は  
置換もしくは無置換のフルオレン環であり、  
前記置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合複素環が、  
置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、  
置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は

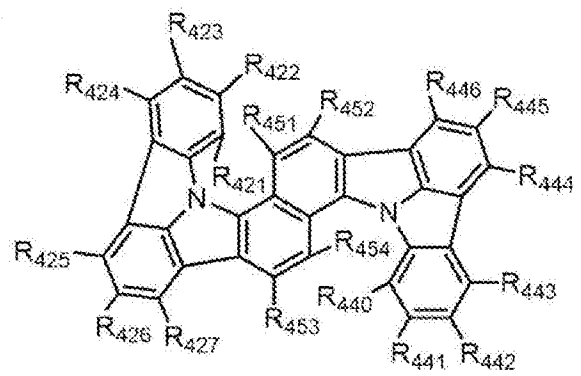
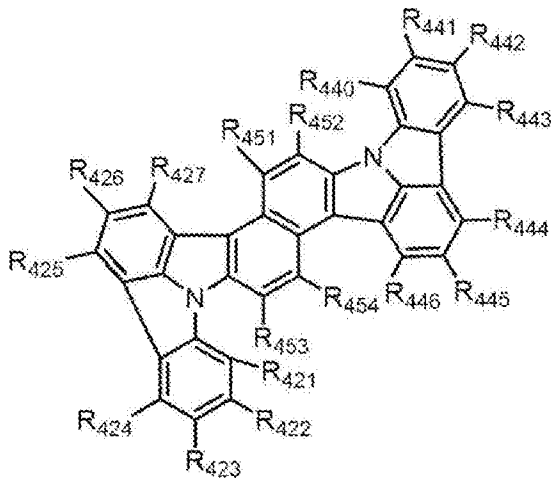
置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

- [0974] 一実施形態においては、前記一般式（４）で表される化合物が、  
 下記一般式（４６１）で表される化合物、  
 下記一般式（４６２）で表される化合物、  
 下記一般式（４６３）で表される化合物、  
 下記一般式（４６４）で表される化合物、  
 下記一般式（４６５）で表される化合物、  
 下記一般式（４６６）で表される化合物、及び  
 下記一般式（４６７）で表される化合物からなる群から選択される。

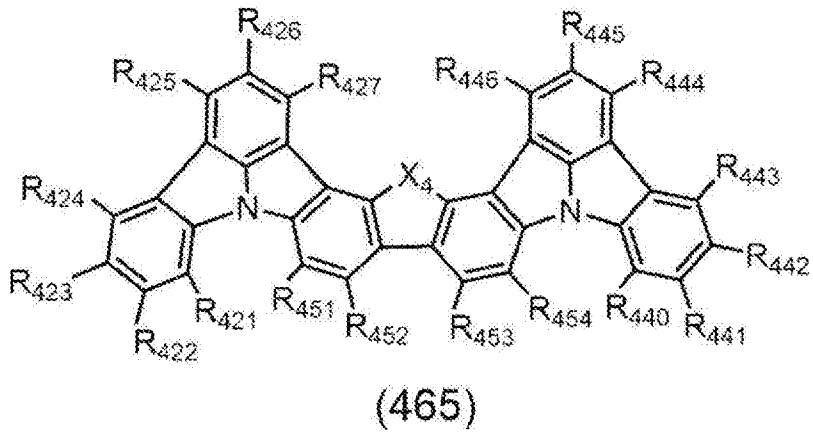
[0975] [化392]



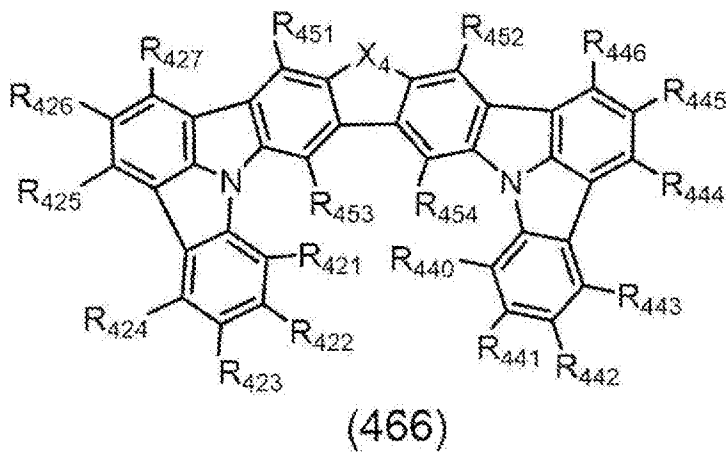
[0976] [化393]



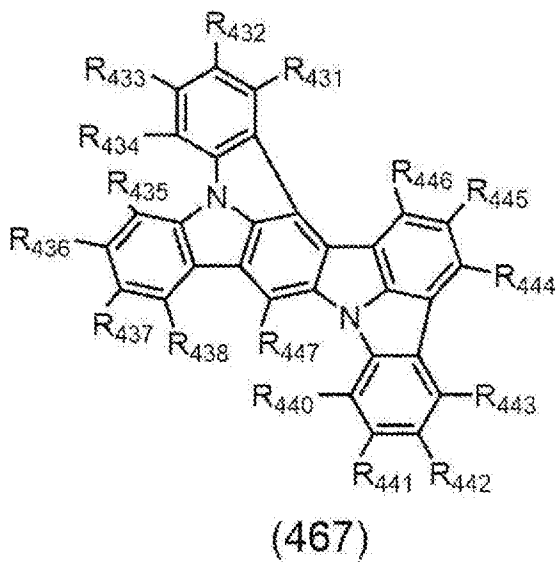
[0977] [化394]



[0978] [化395]



[0979] [化396]



[0980] (前記一般式(461)~(467)中、

$R_{421} \sim R_{427}$ 、 $R_{431} \sim R_{436}$ 、 $R_{440} \sim R_{448}$ 及び $R_{451} \sim R_{454}$ 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、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、

$R_{437}$ 、 $R_{438}$ 、並びに前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{421} \sim R_{427}$ 、 $R_{431} \sim R_{436}$ 、 $R_{440} \sim R_{448}$ 及び $R_{451} \sim R_{454}$ 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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

—S—( $R_{905}$ )で表される基、

—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )で表される基、

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の複素環基であり、

$X_4$ は、酸素原子、 $NR_{801}$ 、又は $C(R_{802})(R_{803})$ であり、

$R_{801}$ 、 $R_{802}$ 及び $R_{803}$ 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 の複素環基であり、  
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、  
 $R_{801}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{801}$  は、互いに同一であるか又は異なり、  
 $R_{802}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{802}$  は、互いに同一であるか又は異なり、  
 $R_{803}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{803}$  は、互いに同一であるか又は異なる。) )

[0981] 一実施形態においては、 $R_{421} \sim R_{427}$  及び  $R_{440} \sim R_{448}$  が、それぞれ独立に、

水素原子、

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。

[0982] 一実施形態においては、 $R_{421} \sim R_{427}$  及び  $R_{440} \sim R_{447}$  が、それぞれ独立に、

水素原子、

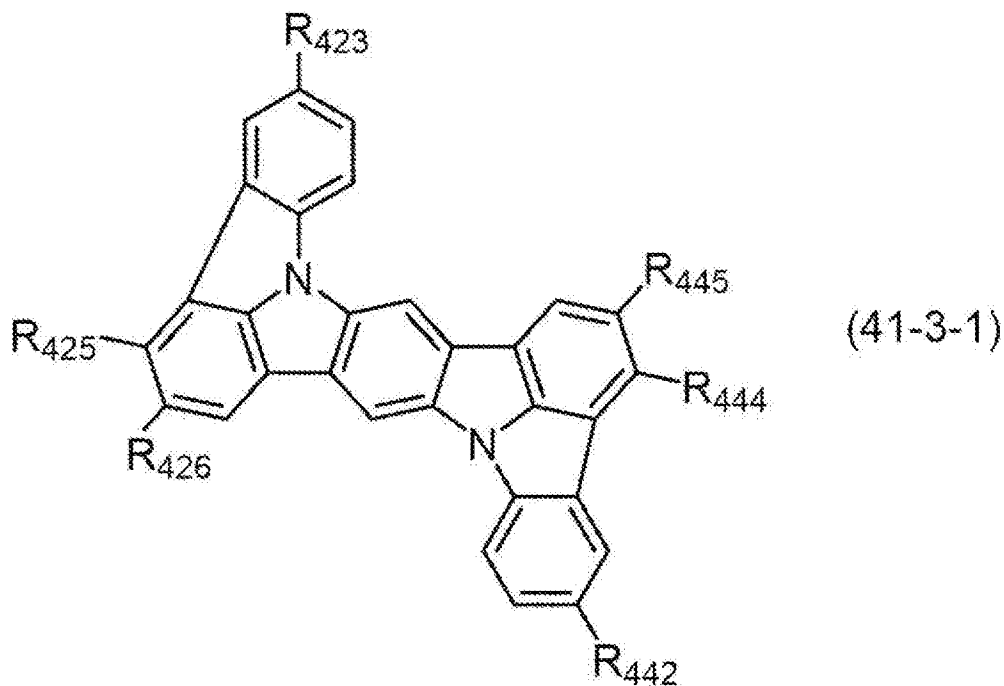
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、及び

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 18 の複素環基からなる群から選択される。

[0983] 一実施形態においては、前記一般式 (41-3) で表される化合物が、下記一般式 (41-3-1) で表される化合物である。

[0984]

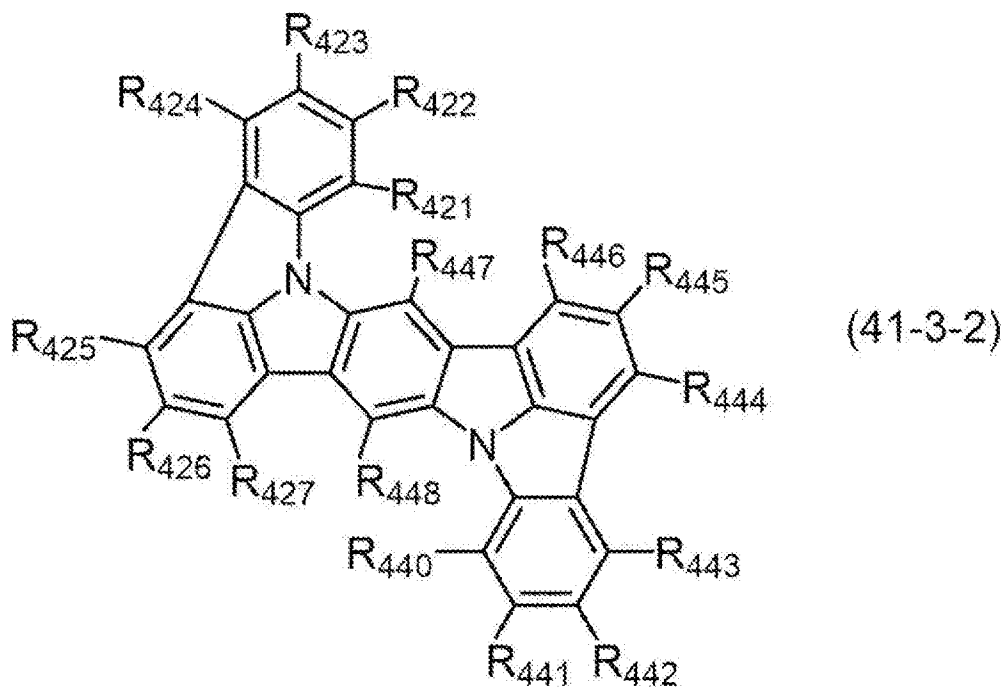
[化397]



[0985] (前記一般式(41-3-1)中、 $R_{423}$ 、 $R_{425}$ 、 $R_{426}$ 、 $R_{442}$ 、 $R_{444}$ 及び $R_{445}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(41-3)における $R_{423}$ 、 $R_{425}$ 、 $R_{426}$ 、 $R_{442}$ 、 $R_{444}$ 及び $R_{445}$ と同義である。)

[0986] 一実施形態においては、前記一般式(41-3)で表される化合物が、下記一般式(41-3-2)で表される化合物である。

[0987] [化398]



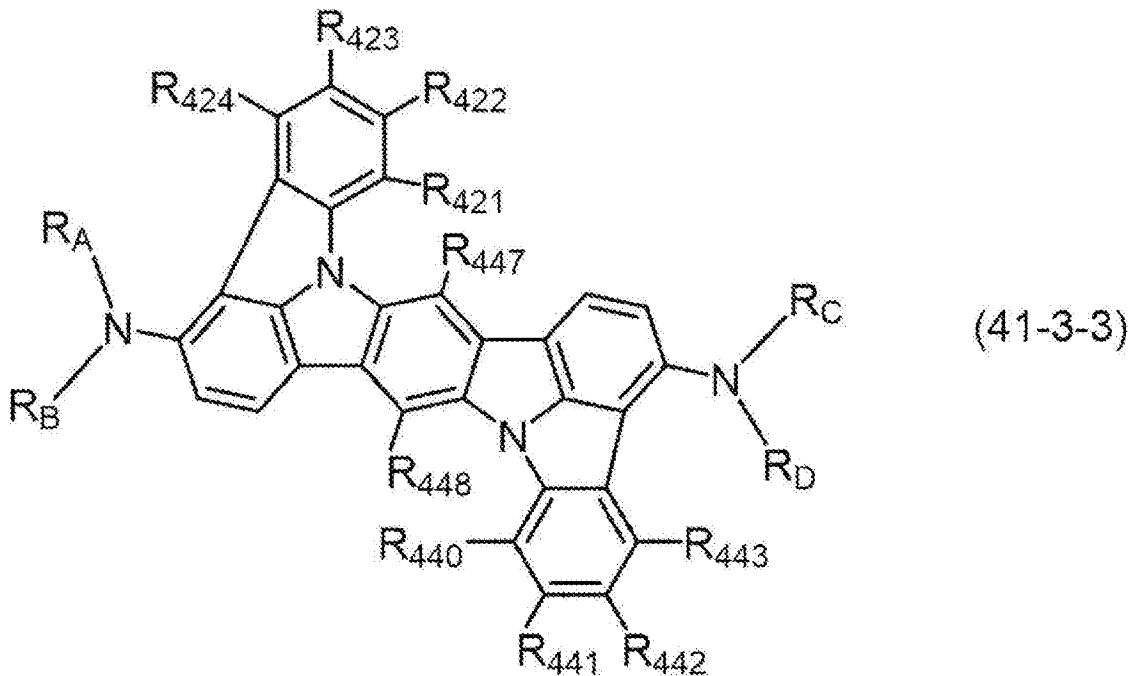
[0988] (前記一般式(41-3-2)中、 $R_{421} \sim R_{427}$ 及び $R_{440} \sim R_{448}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(41-3)における $R_{421} \sim R_{427}$ 及び $R_{440} \sim R_{448}$ と同義であり、

但し、 $R_{421} \sim R_{427}$ 及び $R_{440} \sim R_{446}$ の少なくとも1つは、 $-N(R_{906})(R_{907})$ で表される基である。)

[0989] 一実施形態においては、前記式(41-3-2)における、 $R_{421} \sim R_{427}$ 及び $R_{440} \sim R_{446}$ のいずれか2つが、 $-N(R_{906})(R_{907})$ で表される基である。

[0990] 一実施形態においては、前記式(41-3-2)で表される化合物が、下記式(41-3-3)で表される化合物である。

[0991] [化399]



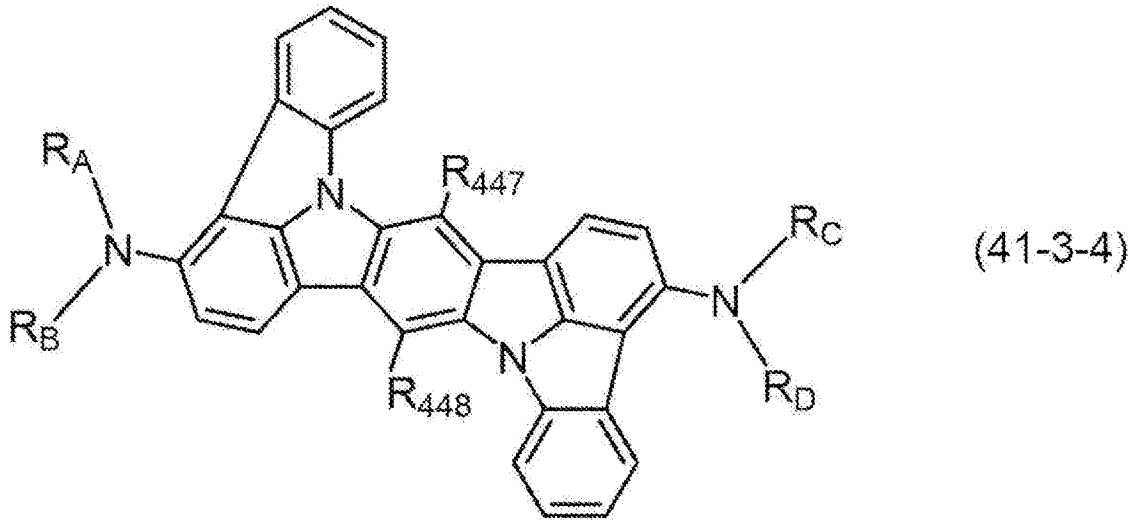
[0992] (前記一般式(41-3-3)中、 $R_{421} \sim R_{424}$ 、 $R_{440} \sim R_{443}$ 、 $R_{447}$ 及び $R_{448}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(41-3)における $R_{421} \sim R_{424}$ 、 $R_{440} \sim R_{443}$ 、 $R_{447}$ 及び $R_{448}$ と同義であり、

$R_A$ 、 $R_B$ 、 $R_C$ 及び $R_D$ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~18の複素環基である。)

[0993] 一実施形態においては、前記式(41-3-3)で表される化合物が、下記式(41-3-4)で表される化合物である。

[0994] [化400]



[0995] (前記一般式(41-3-4)中、 $R_{447}$ 、 $R_{448}$ 、 $R_A$ 、 $R_B$ 、 $R_C$ 及び $R_D$ は、それぞれ独立に、前記式(41-3-3)における $R_{447}$ 、 $R_{448}$ 、 $R_A$ 、 $R_B$ 、 $R_C$ 及び $R_D$ と同義である。)

[0996] 一実施形態においては、 $R_A$ 、 $R_B$ 、 $R_C$ 及び $R_D$ が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~18のアリール基である。

[0997] 一実施形態においては、 $R_A$ 、 $R_B$ 、 $R_C$ 及び $R_D$ が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である。

[0998] 一実施形態においては、 $R_{447}$ 及び $R_{448}$ が、水素原子である。

[0999] 一実施形態においては、前記各式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

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、

-Si( $R_{901a}$ )( $R_{902a}$ )( $R_{903a}$ )、

-O-( $R_{904a}$ )、

-S-( $R_{905a}$ )、

$-N(R_{906a})(R_{907a})$ 、

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、又は

無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であり、

$R_{901a} \sim R_{907a}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、

無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であり、

$R_{901a}$  が 2 以上存在する場合、2 以上の  $R_{901a}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{902a}$  が 2 以上存在する場合、2 以上の  $R_{902a}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{903a}$  が 2 以上存在する場合、2 以上の  $R_{903a}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{904a}$  が 2 以上存在する場合、2 以上の  $R_{904a}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{905a}$  が 2 以上存在する場合、2 以上の  $R_{905a}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{906a}$  が 2 以上存在する場合、2 以上の  $R_{906a}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

[1000] 一実施形態においては、前記各式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、

無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は  
無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

[1001] 一実施形態においては、前記各式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

無置換の炭素数1～18のアルキル基、  
無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は  
無置換の環形成原子数5～18の複素環基である。

[1002] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層は、第二の発光性化合物として、蛍光発光性の第四の化合物を含有し、第四の化合物は、最大ピーク波長が430nm以上480nm以下の発光を示す化合物であることが好ましい。

[1003] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層は、第一の発光性化合物として、蛍光発光性の第三の化合物を含有し、第三の化合物は、最大ピーク波長が430nm以上480nm以下の発光を示す化合物であることが好ましい。

[1004] 化合物の最大ピーク波長の測定方法は、次の通りである。測定対象となる化合物の $10^{-6}$ mol/L以上 $10^{-5}$ mol/L以下のトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温(300K)でこの試料の発光スペクトル(縦軸:発光強度、横軸:波長とする。)を測定する。発光スペクトルは、株式会社日立ハイテクサイエンス製の分光蛍光光度計(装置名:F-7000)により測定できる。なお、発光スペクトル測定装置は、ここで用いた装置に限定されない。

発光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を発光最大ピーク波長とする。なお、本明細書において、蛍光発光の最大ピーク波長を蛍光発光最大ピーク波長(FL-peak)と称する場合がある。

[1005] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層が第一の化合物及び第三の化合物を含む場合、第一の化合物は、ホスト材料(マトリックス材

料と称する場合もある。)であることが好ましく、第三の化合物は、ドーパント材料(ゲスト材料、エミッター、又は発光材料と称する場合もある。)であることが好ましい。

- [1006] 本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層が、第一の化合物及び第一の発光性化合物としての第三の化合物を含む場合、第一の化合物の一重項エネルギー $S_1(H1)$ と、第三の化合物の一重項エネルギー $S_1(D3)$ とが、下記数式(数1)の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(H1) > S_1(D3) \dots (\text{数1})$$

- [1007] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層が、第二の化合物及び第二の発光性化合物としての第四の化合物を含む場合、第二の化合物は、ホスト材料(マトリックス材料と称する場合もある。)であることが好ましく、第四の化合物は、ドーパント材料(ゲスト材料、エミッター、又は発光材料と称する場合もある。)であることが好ましい。

- [1008] 本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層が第二の化合物及び第四の化合物を含む場合、第二の化合物の一重項エネルギー $S_1(H2)$ と、第四の化合物の一重項エネルギー $S_1(D4)$ とが、下記数式(数2)の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(H2) > S_1(D4) \dots (\text{数2})$$

- [1009] (一重項エネルギー $S_1$ )

溶液を用いた一重項エネルギー $S_1$ の測定方法(溶液法と称する場合がある。)としては、下記の方法が挙げられる。

測定対象となる化合物の $1.0 \times 10^{-5} \text{ mol/L}$ 以上 $1.0 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$ 以下のトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温(300K)でこの試料の吸収スペクトル(縦軸:吸収強度、横軸:波長とする。)を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $\lambda_{edge} [\text{nm}]$ を次に示す換算式(F2)に代入して一重項エネルギーを算出する。

$$\text{換算式 (F2)} : S_1 [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{edge}$$

吸収スペクトル測定装置としては、例えば、日立社製の分光光度計（装置名：U3310）が挙げられるが、これに限定されない。

- [1010] 吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ（つまり縦軸の値が減少するにつれ）、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側（ただし、吸光度が0.1以下となる場合は除く）で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

なお、吸光度の値が0.2以下の極大点は、上記最も長波長側の極大値には含めない。

- [1011] （三重項エネルギー  $T_1$ ）

三重項エネルギー  $T_1$  の測定方法としては、下記の方法が挙げられる。

測定対象となる化合物をEPA（ジエチルエーテル：イソペンタン：エタノール＝5：5：2（容積比））中に、 $10^{-5} \text{ mol/L}$ 以上 $10^{-4} \text{ mol/L}$ 以下となるように溶解し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とする。この測定試料について、低温（77 [K]）で燐光スペクトル（縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。）を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値  $\lambda_{\text{dge}}$  [nm] に基づいて、次の換算式（F1）から算出されるエネルギー量を三重項エネルギー  $T_1$  とする。

$$\text{換算式 (F1)} : T_1 [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{dge}}$$

- [1012] 燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ（つまり縦軸が増加するにつれ）、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる

点において引いた接線（すなわち変曲点における接線）が、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

なお、スペクトルの最大ピーク強度の15%以下のピーク強度をもつ極大点は、上述の最も短波長側の極大値には含めず、最も短波長側の極大値に最も近い、傾きの値が極大値をとる点において引いた接線を当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

燐光の測定には、（株）日立ハイテクノロジー製のF-4500形分光蛍光光度計本体を用いることができる。なお、測定装置はこの限りではなく、冷却装置、及び低温用容器と、励起光源と、受光装置とを組み合わせることにより、測定してもよい。

[1013] 第一の発光層及び第二の発光層は、燐光発光性材料（ドーパント材料）を含まないことが好ましい。

また、第一の発光層及び第二の発光層は、重金属錯体及び燐光発光性の希土類金属錯体を含まないことが好ましい。ここで、重金属錯体としては、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

また、第一の発光層及び第二の発光層は、金属錯体を含まないことも好ましい。

[1014] （発光層の膜厚）

本実施形態に係る有機EL素子の発光層の膜厚は、上記で特に言及した場合（例えば、積層発光ユニットの第一の発光層及び第二の発光層の膜厚）以外において、5nm以上50nm以下であることが好ましく、7nm以上50nm以下であることがより好ましく、10nm以上50nm以下であることがさらに好ましい。発光層の膜厚が5nm以上であると、発光層を形成し易く、色度を調整し易い。発光層の膜厚が50nm以下であると、駆動電圧の上昇を抑制し易い。

[1015] （発光層における化合物の含有率）

第一の発光層が第一の化合物及び第三の化合物を含有する場合、第一の発光層における第一の化合物及び第三の化合物の含有率は、例えば、それぞれ

、以下の範囲であることも好ましい。

第一の化合物の含有率は、80質量%以上99質量%以下であることが好ましく、90質量%以上99質量%以下であることも好ましく、95質量%以上99質量%以下であることも好ましい。

第三の化合物の含有率は、1質量%以上10質量%以下であることも好ましく、1質量%以上7質量%以下であることも好ましく、1質量%以上5質量%以下であることも好ましい。

ただし、第一の発光層における第一の化合物及び第三の化合物の合計含有率の上限は、100質量%である。

[1016] なお、本実施形態は、第一の発光層に、第一の化合物及び第三の化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

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

[1017] 第一の発光層が、互いに異なる2種以上の第一の化合物を含有する有機EL素子の一態様として、例えば、次の有機EL素子が挙げられる。

[1018] 陽極と、  
陰極と、  
前記陽極及び前記陰極の間に配置された第一の発光層と、  
前記第一の発光層と前記陰極との間に配置された第二の発光層と、を有し

、

前記第一の発光層は、前記一般式(11)で表される基を少なくとも1つ有し、かつ前記一般式(1)で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有し、

前記第一の発光層は、互いに異なる2種以上の前記第一の化合物を含有し

、

前記第二の発光層は、前記一般式(2)で表される第二の化合物を第二のホスト材料として含有し、

前記第一の発光層と前記第二の発光層とが、直接、接している、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[1019] 第二の発光層が第二の化合物及び第四の化合物を含有する場合、第二の発光層における第二の化合物及び第四の化合物の含有率は、例えば、それぞれ、以下の範囲であることも好ましい。

第二の化合物の含有率は、80質量%以上99質量%以下であることも好ましく、90質量%以上99質量%以下であることも好ましく、95質量%以上99質量%以下であることも好ましい。

第四の化合物の含有率は、1質量%以上10質量%以下であることも好ましく、1質量%以上7質量%以下であることも好ましく、1質量%以上5質量%以下であることも好ましい。

ただし、第二の発光層における第二の化合物及び第四の化合物の合計含有率の上限は、100質量%である。

[1020] なお、本実施形態は、第二の発光層に、第二の化合物及び第四の化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

第二の発光層は、第二の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。第二の発光層は、第四の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

[1021] 第二の発光層が、互いに異なる2種以上の第二の化合物を含有する有機EL素子の一態様として、例えば、次の有機EL素子が挙げられる。

[1022] 陽極と、  
陰極と、  
前記陽極及び前記陰極の間に配置された第一の発光層と、  
前記第一の発光層と前記陰極との間に配置された第二の発光層と、を有し、  
前記第一の発光層は、前記一般式(11)で表される基を少なくとも1つ有し、かつ前記一般式(1)で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有し、

前記第二の発光層は、前記一般式（２）で表される第二の化合物を第二のホスト材料として含有し、

前記第二の発光層は、互いに異なる２種以上の前記第二の化合物を含有し、

前記第一の発光層と前記第二の発光層とが、直接、接している、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[1023] 有機EL素子の構成についてさらに説明する。以下、符号の記載は省略することができる。

[1024] （基板）

基板は、有機EL素子の支持体として用いられる。基板としては、例えば、ガラス、石英、及びプラスチック等を用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブル）基板のことであり、例えば、プラスチック基板等が挙げられる。プラスチック基板を形成する材料としては、例えば、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエーテルスルフォン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニル、ポリイミド、及びポリエチレンナフタレート等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。

[1025] （陽極）

基板上に形成される陽極には、仕事関数の大きい（具体的には4.0 eV以上）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム－酸化スズ（ITO：Indium Tin Oxide）、珪素もしくは酸化珪素を含有した酸化インジウム－酸化スズ、酸化インジウム－酸化亜鉛、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。この他、金（Au）、白金（Pt）、ニッケル（Ni）、タングステン（W）、クロム（Cr）、モリブデン（Mo）、鉄（Fe）、コバルト（Co）、銅（Cu）、パラジウム（Pd）、チタン（Ti）、または金属材料の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

- [1026] これらの材料は、通常、スパッタリング法により成膜される。例えば、酸化インジウム-酸化亜鉛は、酸化インジウムに対し1質量%以上10質量%以下の酸化亜鉛を加えたターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。また、例えば、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウムは、酸化インジウムに対し酸化タングステンを0.5質量%以上5質量%以下、酸化亜鉛を0.1質量%以上1質量%以下含有したターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。その他、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、スピコート法などにより作製してもよい。
- [1027] 陽極上に形成されるEL層のうち、陽極に接して形成される正孔注入層は、陽極の仕事関数に関係なく正孔（ホール）注入が容易である複合材料を用いて形成されるため、電極材料として可能な材料（例えば、金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物、その他、元素周期表の第1族または第2族に属する元素も含む）を用いることができる。
- [1028] 仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム（Li）やセシウム（Cs）等のアルカリ金属、およびマグネシウム（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、およ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）等の希土類金属およびこれらを含む合金等を用いることもできる。なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、およびこれらを含む合金を用いて陽極を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。さらに、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。
- [1029] 有機EL素子がボトムエミッション型である場合、陽極は、発光層からの光を透過する光透過性もしくは半透過性を有する金属材料で形成されることが好ましい。本明細書において、光透過性もしくは半透過性とは、発光層から発光される光を50%以上（好ましくは80%以上）透過する性質を意味

する。光透過性もしくは半透過性を有する金属材料は、前記陽極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。

有機EL素子がトップエミッション型である場合、陽極は反射層を有する反射性電極である。反射層は、光反射性を有する金属材料で形成されることが好ましい。本明細書において、光反射性とは、発光層から発光される光を50%以上（好ましくは80%以上）反射する性質を意味する。光反射性を有する金属材料は、前記陽極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。

陽極は反射層のみで構成されていてもよいが、反射層と、導電層（好ましくは透明導電層）とを有する多層構造であってもよい。陽極が反射層及び導電層を有する場合、反射層と正孔輸送帯域との間に当該導電層が配置されることが好ましい。導電層は、前記陽極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。

[1030] （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、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム（Li）やセシウム（Cs）等のアルカリ金属、およびマグネシウム（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、およ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）等の希土類金属およびこれらを含む合金等が挙げられる。

[1031] なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、これらを含む合金を用いて陰極を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。また、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

[1032] なお、電子注入層を設けることにより、仕事関数の大小に関わらず、Al、Ag、ITO、グラフェン、珪素もしくは酸化珪素を含有した酸化インジ

ウムー酸化スズ等様々な導電性材料を用いて陰極を形成することができる。これらの導電性材料は、スパッタリング法やインクジェット法、スピコート法等を用いて成膜することができる。

[1033] 有機EL素子がボトムエミッション型である場合、陰極は、反射性電極である。反射性電極は、光反射性を有する金属材料で形成されることが好ましい。光反射性を有する金属材料は、前記陰極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。

有機EL素子がトップエミッション型である場合、陰極は、発光層からの光を透過する光透過性もしくは半透過性を有する金属材料で形成されることが好ましい。光透過性もしくは半透過性を有する金属材料は、前記陰極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。

[1034] (キャッピング層)

有機EL素子がトップエミッション型である場合、有機EL素子は、通常、陰極の上部にキャッピング層を備える。

キャッピング層は、例えば、高分子化合物、金属酸化物、金属フッ化物、金属ホウ化物、窒化ケイ素、及びシリコン化合物（酸化ケイ素等）からなる群から選択される少なくともいずれかの化合物を含有していてもよい。

また、キャッピング層は、例えば、芳香族アミン誘導体、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、フルオレン誘導体、又はジベンゾフラン誘導体からなる群から選択される少なくともいずれかの化合物を含有していてもよい。

また、これらの物質を含む層を積層させた積層体も、キャッピング層として用いることができる。

[1035] (正孔注入層)

正孔注入層は、正孔注入性の高い物質を含む層である。正孔注入性の高い物質としては、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、マンガン酸化物等を用いることができる。

[1036] また、正孔注入性の高い物質としては、低分子の有機化合物である4, 4', 4''-トリス(N, N-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン(略称: TDATA)、4, 4', 4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称: MTDATA)、4, 4'-ビス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称: DPAB)、4, 4'-ビス(N-{4-[N'-(3-メチルフェニル)-N'-フェニルアミノ]フェニル}-N-フェニルアミノ)ビフェニル(略称: DNTPD)、1, 3, 5-トリス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ベンゼン(略称: DPA3B)、3-[N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称: PCzPCA1)、3, 6-ビス[N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称: PCzPCA2)、3-[N-(1-ナフチル)-N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)アミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称: PCzPCN1)等の芳香族アミン化合物等やジピラジノ[2, 3-f: 20, 30-h]キノキサリン-2, 3, 6, 7, 10, 11-ヘキサカルボニトリル(HAT-CN)も挙げられる。

[1037] また、正孔注入性の高い物質としては、高分子化合物(オリゴマー、 dendrimer、ポリマー等)を用いることもできる。例えば、ポリ(N-ビニルカルバゾール)(略称: PVK)、ポリ(4-ビニルトリフェニルアミン)(略称: PVTPA)、ポリ[N-(4-{N'-[4-(4-ジフェニルアミノ)フェニル]フェニル-N'-フェニルアミノ}フェニル)メタクリルアミド](略称: PTPDMA)、ポリ[N, N'-ビス(4-ブチルフェニル)-N, N'-ビス(フェニル)ベンジジン](略称: Poly-TPD)などの高分子化合物が挙げられる。また、ポリ(3, 4-エチレンジオキシチオフェン)/ポリ(スチレンスルホン酸)(PEDOT/PSS)、ポリアニリン/ポリ(スチレンスルホン酸)(PAni/PSS)等の酸

を添加した高分子化合物を用いることもできる。

[1038] (正孔輸送層)

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層には、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用することができる。具体的には、4, 4'-ビス [N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: NPB) や N, N'-ビス (3-メチルフェニル)-N, N'-ジフェニル-[1, 1'-ビフェニル]-4, 4'-ジアミン (略称: TPD)、4-フェニル-4'-(9-フェニルフルオレン-9-イル) トリフェニルアミン (略称: BAFAP)、4, 4'-ビス [N-(9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: DF LDPBi)、4, 4', 4''-トリス (N, N'-ジフェニルアミノ) トリフェニルアミン (略称: TDATA)、4, 4', 4''-トリス [N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ] トリフェニルアミン (略称: MTDATA)、4, 4'-ビス [N-(スピロ-9, 9'-ビフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: BSPB) などの芳香族アミン化合物等を用いることができる。ここに述べた物質は、主に  $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$  以上の正孔移動度を有する物質である。

[1039] 正孔輸送層には、CBP、9-[4-(N-カルバゾリル)]フェニル-10-フェニルアントラセン (CzPA)、9-フェニル-3-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール (PCzPA) のようなカルバゾール誘導体や、t-BuDNA、DNA、DPAnth のようなアントラセン誘導体を用いても良い。ポリ (N-ビニルカルバゾール) (略称: PVK) やポリ (4-ビニルトリフェニルアミン) (略称: PVTPA) 等の高分子化合物を用いることもできる。

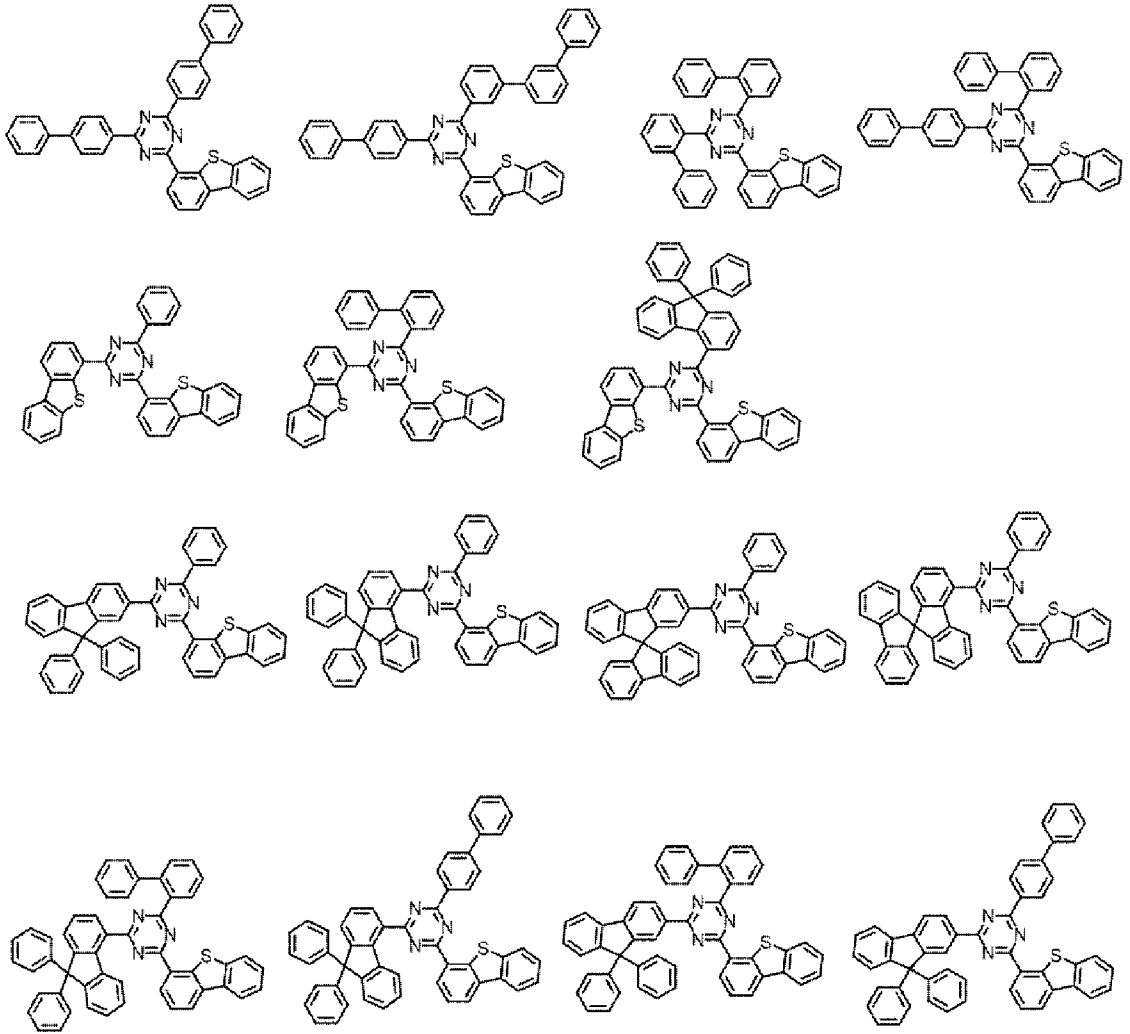
[1040] 但し、電子よりも正孔の輸送性の高い物質であれば、これら以外のものを用いてもよい。なお、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。

## [1041] (電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層には、1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、2) イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、3) 高分子化合物を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、Alq、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(略称: Almq<sub>3</sub>)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(略称: BeBq<sub>2</sub>)、BAIq、Znq、ZnPBO、ZnBTZなどの金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、2-(4-ビフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称: PBD)、1,3-ビス[5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称: OXD-7)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称: TAZ)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-(4-エチルフェニル)-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称: p-EtTAZ)、バソフェナントロリン(略称: BPhen)、バソキュプロイン(略称: BCP)、4,4'-ビス(5-メチルベンゾオキサゾール-2-イル)スチルベン(略称: BzOs)などの複素芳香族化合物も用いることができる。本実施態様においては、ベンゾイミダゾール化合物を好適に用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層で構成されていてもよいし、上記物質からなる層が二層以上積層されて構成されていてもよい。

[1042] 電子輸送層に用い得る化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物挙げられる。ただし、本発明は、これら化合物の具体例に限定されない。

## [1043] [化401]



[1044] また、電子輸送層には、高分子化合物を用いることもできる。例えば、ポリ [ ( 9 , 9 - ジヘキシルフルオレン - 2 , 7 - ジイル ) - c o - ( ピリジン - 3 , 5 - ジイル ) ] ( 略称 : P F - P y ) 、ポリ [ ( 9 , 9 - ジオクチルフルオレン - 2 , 7 - ジイル ) - c o - ( 2 , 2 ' - ビピリジン - 6 , 6 ' - ジイル ) ] ( 略称 : P F - B P y ) などを用いることができる。

## [1045] (電子注入層)

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層には、リチウム ( L i ) 、セシウム ( C s ) 、カルシウム ( C a ) 、フッ化リチウム ( L i F ) 、フッ化セシウム ( C s F ) 、フッ化カルシウム ( C a F <sub>2</sub> ) 、リチウム酸化物 ( L i O <sub>x</sub> ) 等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができる。その他、電子輸送性を有する

物質にアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を含有させたもの、具体的にはA | q中にマグネシウム (Mg) を含有させたもの等を用いてもよい。なお、この場合には、陰極からの電子注入をより効率良く行うことができる。

[1046] あるいは、電子注入層に、有機化合物と電子供与体 (ドナー) とを混合してなる複合材料を用いてもよい。このような複合材料は、電子供与体によって有機化合物に電子が発生するため、電子注入性および電子輸送性に優れている。この場合、有機化合物としては、発生した電子の輸送に優れた材料であることが好ましく、具体的には、例えば上述した電子輸送層を構成する物質 (金属錯体や複素芳香族化合物等) を用いることができる。電子供与体としては、有機化合物に対し電子供与性を示す物質であればよい。具体的には、アルカリ金属やアルカリ土類金属や希土類金属が好ましく、リチウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、エルビウム、イッテルビウム等が挙げられる。また、アルカリ金属酸化物やアルカリ土類金属酸化物が好ましく、リチウム酸化物、カルシウム酸化物、バリウム酸化物等が挙げられる。また、酸化マグネシウムのようなルイス塩基を用いることもできる。また、テトラチアフルバレン (略称: TTF) 等の有機化合物を用いることもできる。

[1047] (層形成方法)

本実施形態の有機EL素子の各層の形成方法としては、上記で特に言及した以外には制限されないが、真空蒸着法、スパッタリング法、プラズマ法、イオンプレーティング法などの乾式成膜法や、スピコーティング法、ディッピング法、フローコーティング法、インクジェット法などの湿式成膜法などの公知の方法を採用することができる。

[1048] (膜厚)

本実施形態の有機EL素子の各有機層の膜厚は、上記で特に言及した場合を除いて限定されない。一般に、膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、膜厚が厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常、有機EL素子の各有機層の膜厚は、数nmから1 $\mu$ mの範囲が好ま

しい。

[1049] (色変換部)

本実施形態に係る有機EL素子は、有機EL素子の光取り出し側に配置された色変換部を有することが好ましい。色変換部としては、特に制限は無いが、例えば、カラーフィルター、及び量子ドット等が挙げられる。有機EL素子の光取り出し側は、陽極側であってもよく、陰極側であってもよい。

色変換部は、光取り出し側に設けられ、光取り出し側から取り出された光を、所望の色光に変換する役割を果たす。

色変換部は、陽極および陰極のうち、光取り出し側に配された電極（透明電極）上に配置されていることが好ましい。

また、有機EL素子の陽極側が光取り出し側である場合、色変換部は、基板と陽極との間に配置させていてもよいし、基板の陽極側とは反対側に配置されていてもよい。

また、有機EL素子の陰極側が光取り出し側である場合、色変換部は、陰極の上に配置されていてもよい。

[1050] 色変換部としては、例えば、カラーフィルター、及び量子ドットを含む材料等が挙げられる。

[1051] ・カラーフィルター

カラーフィルターの材料としては、例えば、下記色素、または当該色素をバインダー樹脂中に溶解もしくは分散させた固体状態のものを挙げることができる。

[1052] 赤色（R）色素：

ペリレン系顔料、レーキ顔料、アゾ系顔料、キナクリドン系顔料、アントラキノン系顔料、アントラセン系顔料、イソインドリン系顔料、イソインドリノン系顔料等の単品および少なくとも二種類以上の混合物が使用可能である。

[1053] 緑色（G）色素：

ハロゲン多置換フタロシアニン系顔料、ハロゲン多置換銅フタロシアニン

系顔料、トリフェルメタン系塩基性染料、イソインドリン系顔料、イソインドリノン系顔料等の単品および少なくとも二種類以上の混合物が使用可能である。

[1054] 青色（B）色素：

銅フタロシアニン系顔料、インダンスロン系顔料、インドフェノール系顔料、シアニン系顔料、ジオキサジン系顔料等の単品および少なくとも二種類以上の混合物が使用可能である。

[1055] カラーフィルターの材料に用いられるバインダー樹脂としては、透明な材料を使用することが好ましく、例えば、可視光領域における透過率が50%以上である材料を使用することが好ましい。

カラーフィルターの材料に用いられるバインダー樹脂としては、例えば、ポリメチルメタクリレート、ポリアクリレート、ポリカーボネート、ポリビニルアルコール、ポリビニルピロリドン、ヒドロキシエチルセルロース、カルボキシメチルセルロース等の透明樹脂（高分子）等が挙げられ、これらの1種または2種以上の混合使用が可能である。

[1056] ・量子ドット

量子ドットを含む材料としては、例えば量子ドットを樹脂に分散させた材料等が挙げられる。量子ドットとしては、CdSe、ZnSe、CdS、CdSeS/ZnS、InP、InP/ZnS、CdS/CdSe、CdS/ZnS、PbS、及びCdTe等を用いることができる。

色変換部には、カラーフィルターと、量子ドットを含む材料とを併用してもよい。

[1057] 本実施形態に係る有機EL素子は、表示装置用の有機EL素子であることも好ましい。タンデム型有機EL素子は、特に長寿命化の点から、表示装置に好適に使用されている。タンデム型有機EL素子が使用される表示装置としては、テレビ、パーソナルコンピュータ、タブレット（タブレットコンピュータと称する場合がある。）、移動体に搭載される移動体用ディスプレイ、表示部品（例えば、有機ELパネルモジュール等）、携帯電話（セル

フォンと称する場合がある。)及びスマートフォン(モバイルフォンと称する場合がある。)が挙げられる。タンデム型有機EL素子は、より長寿命であることが重視されるテレビ、パーソナルコンピュータ、タブレット及び移動体用ディスプレイ等の中型又は大型パネルとして好適に使用され得る。表示装置が搭載される移動体としては、例えば、自動車及び航空機等が挙げられる。

タンデム型有機EL素子を改良する本発明の素子は、タンデム型有機EL素子が好適に使用され得る表示装置全般に好適に使用される。

[1058] 本実施形態によれば、発光効率が向上し、長寿命化した有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することができる。

[1059] 〔第二実施形態〕

(電子機器)

本実施形態に係る電子機器は、上述の実施形態のいずれかの有機EL素子を搭載している。電子機器としては、例えば、表示装置及び発光装置等が挙げられる。表示装置としては、例えば、テレビ、パーソナルコンピュータ、タブレット、移動体用ディスプレイ、表示部品(例えば、有機ELパネルモジュール等)、携帯電話及びスマートフォン等が挙げられる。上述の実施形態のいずれかの有機EL素子が搭載される表示装置は、テレビ、パーソナルコンピュータ、タブレット及び移動体用ディスプレイであることが好ましい。発光装置としては、例えば、照明及び車両用灯具等が挙げられる。

[1060] 〔実施形態の変形〕

なお、本発明は、上述の実施形態に限定されず、本発明の目的を達成できる範囲での変更、改良等は、本発明に含まれる。

[1061] 例えば、発光層は、2層に限られず、2を超える複数の発光層が積層されていてもよい。有機EL素子が2を超える複数の発光層を有する場合、少なくとも2つの発光層が上記実施形態で説明した条件を満たしていればよい。例えば、その他の発光層が、蛍光発光型の発光層であっても、三重項励起状態から直接基底状態への電子遷移による発光を利用した燐光発光型の発光層

であってもよい。

また、有機EL素子が複数の発光層を有する場合、これらの発光層が互いに隣接して設けられていてもよいし、中間層を介して複数の発光ユニットが積層された、いわゆるタンデム型の有機EL素子であってもよい。

[1062] 3以上の発光層を有する有機EL素子の一態様として、例えば、次の有機EL素子が挙げられる。

[1063] 陽極と、

陰極と、

前記陽極及び前記陰極の間に配置された第一の発光層と、

前記第一の発光層と前記陰極との間に配置された第二の発光層と、

前記陽極及び前記陰極の間に配置され、前記第一の発光層及び前記第二の発光層のいずれにも直接接していない第四の発光層と、を有し、

前記第一の発光層は、前記一般式(1)で表される基を少なくとも1つ有し、かつ前記一般式(1)で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有し、

前記第二の発光層は、前記一般式(2)で表される第二の化合物を第二のホスト材料として含有し、

前記第一の発光層と前記第二の発光層とが、直接、接している、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[1064] 前記第四の発光層は、前記第一の化合物を含有することも好ましい。

前記第四の発光層は、前記第二の化合物を含有することも好ましい。

[1065] 前記有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記第四の発光層と、前記第一の発光層及び前記第二の発光層との間に、中間層を含むことが好ましい。

[1066] また、例えば、発光層の陽極側、及び陰極側の少なくとも一方に障壁層を隣接させて設けてもよい。障壁層は、発光層に接して配置され、正孔、電子、及び励起子の少なくともいずれかを阻止することが好ましい。

例えば、発光層の陰極側で接して障壁層が配置された場合、当該障壁層は

、電子を輸送し、かつ正孔が当該障壁層よりも陰極側の層（例えば、電子輸送層）に到達することを阻止する。有機EL素子が、電子輸送層を含む場合は、発光層と電子輸送層との間に当該障壁層を含むことが好ましい。

また、発光層の陽極側で接して障壁層が配置された場合、当該障壁層は、正孔を輸送し、かつ電子が当該障壁層よりも陽極側の層（例えば、正孔輸送層）に到達することを阻止する。有機EL素子が、正孔輸送層を含む場合は、発光層と正孔輸送層との間に当該障壁層を含むことが好ましい。

また、励起エネルギーが発光層からその周辺層に漏れ出さないように、障壁層を発光層に隣接させて設けてもよい。発光層で生成した励起子が、当該障壁層よりも電極側の層（例えば、電子輸送層及び正孔輸送層等）に移動することを阻止する。

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

[1067] その他、本発明の実施における具体的な構造、及び形状等は、本発明の目的を達成できる範囲で他の構造等としてもよい。

### 実施例

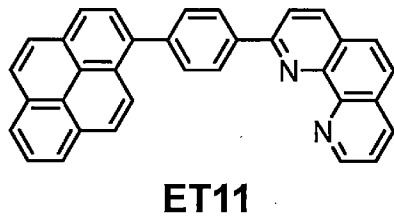
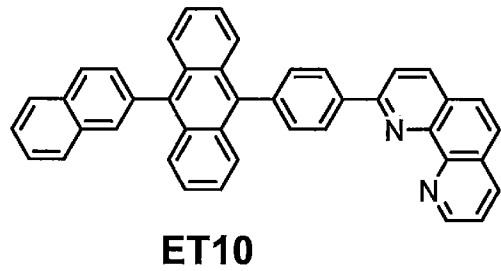
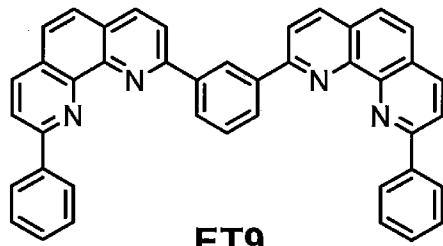
[1068] 以下、実施例を挙げて本発明をさらに詳細に説明する。本発明はこれら実施例に何ら限定されない。

[1069] <化合物>

実施例及び比較例に係る有機EL素子の製造に用いた一般式（20）で表される化合物の構造を以下に示す。

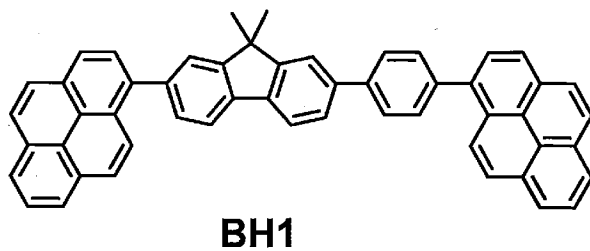
[1070]

[化402]



[1071] 実施例及び比較例に係る有機EL素子の製造に用いた一般式(1)で表される化合物の構造を以下に示す。

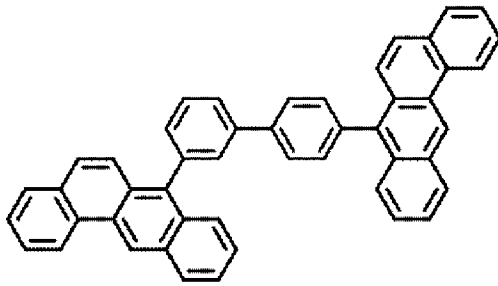
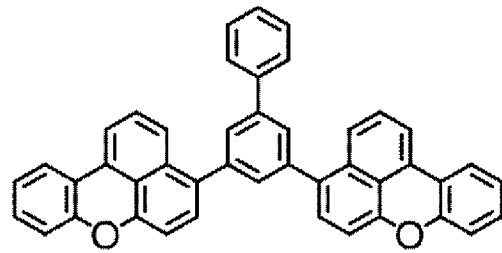
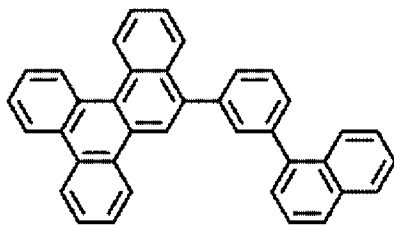
[1072] [化403]



[1073] 実施例及び比較例に係る有機EL素子の製造に用いた一般式(1X)、(14X)又は(15X)で表される化合物の構造を以下に示す。

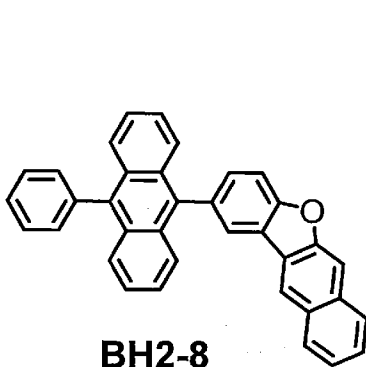
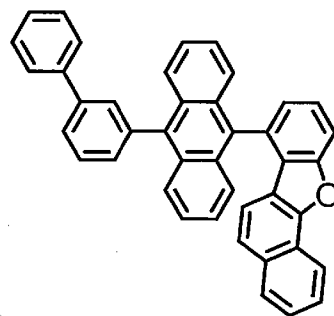
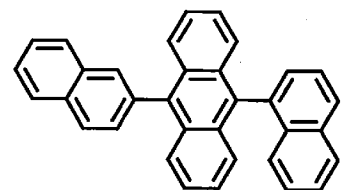
[1074]

[化404]

**BH1-2****BH1-3****BH1-4**

[1075] 実施例及び比較例に係る有機EL素子の製造に用いた一般式(2)で表される化合物の構造を以下に示す。

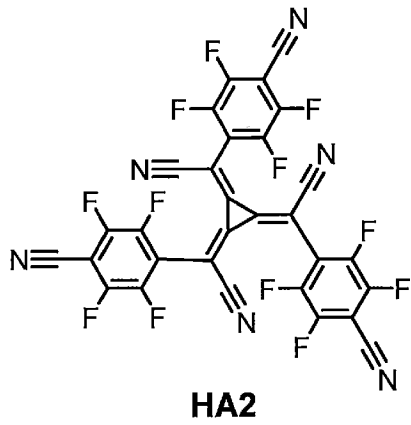
[1076] [化405]

**BH2-8****BH2-19****BH2-30**

[1077] 実施例及び比較例に係る有機EL素子の製造に用いた、他の化合物の構造を以下に示す。

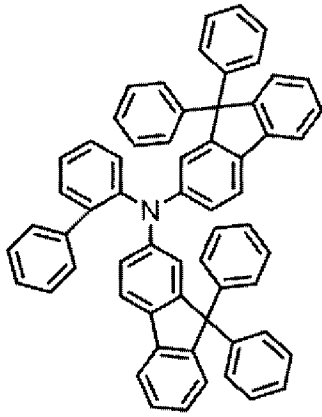
[1078]

[化406]

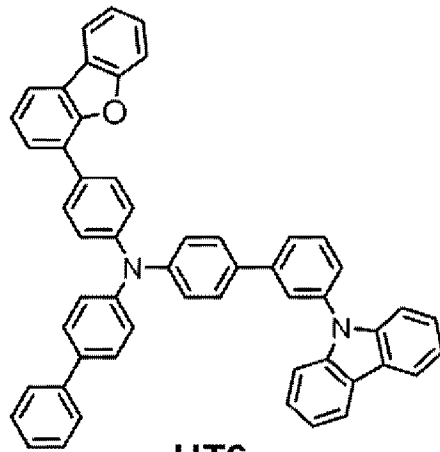


[1079]

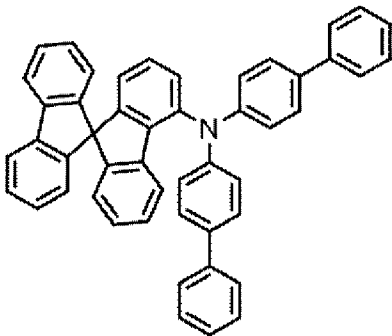
[化407]



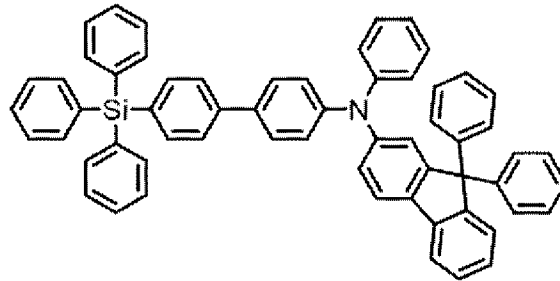
HT3



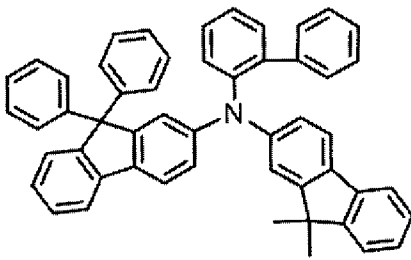
HT6



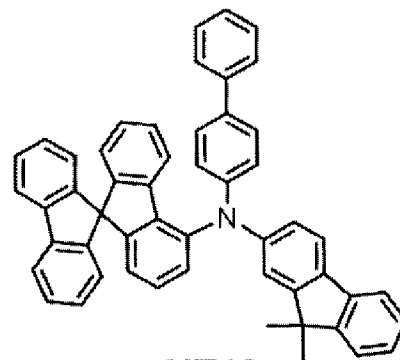
HT7



HT8



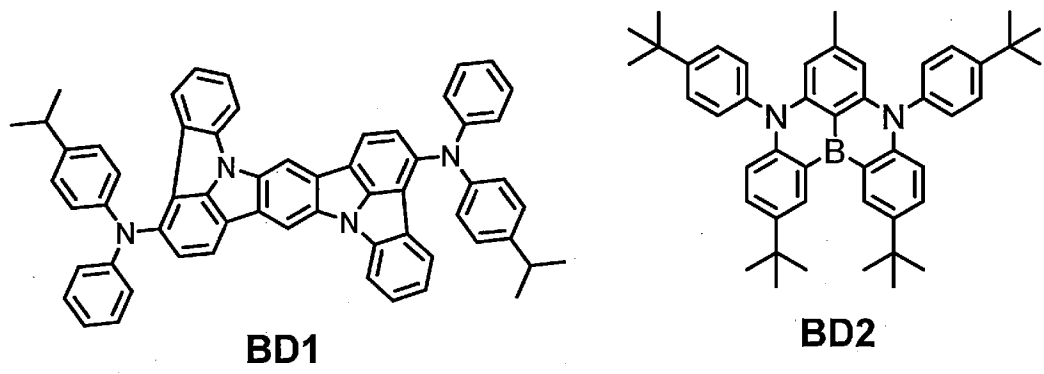
HT9



HT10

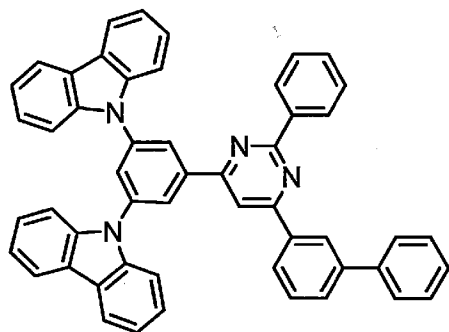
[1080]

[化408]

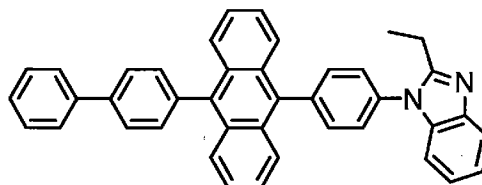


[1081]

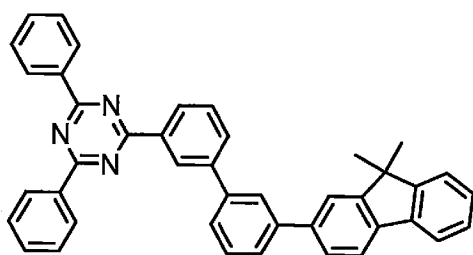
[化409]



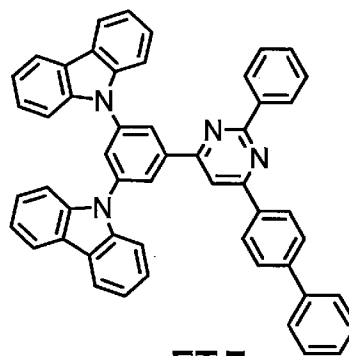
ET1



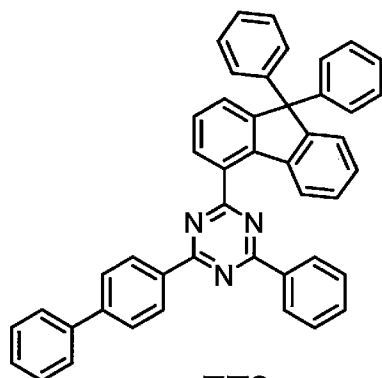
ET2



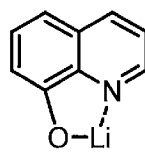
ET3



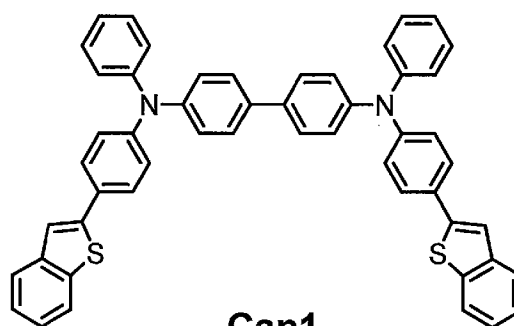
ET7



ET8



Liq



Cap1

[1082] &lt;有機EL素子の作製1&gt;

〔実施例1〕

素子作製用基板となるガラス基板（25mm×75mm×0.7mm厚）の上に、膜厚100nmの銀合金層であるAPC（Ag-Pd-Cu）層（反射層）と、膜厚10nmの酸化インジウム-酸化亜鉛（IZO：登録商標）膜（透明導電層）とを順にスパッタリング法により成膜した。これにより

、A P C層とI Z O膜とからなる導電材料層を得た。

続いて通常のリソグラフィ技術を用いて、レジストパターンをマスクに用いたエッチングにより、この導電材料層をパターンニングし、下部電極（陽極）を形成した。

[1083] ・第一発光ユニットの形成

次に、下部電極の上に、真空蒸着法を用いて、化合物H T 9と、化合物H A 2とを共蒸着し、膜厚10 nmの正孔注入層を形成した。正孔注入層における化合物H T 9の濃度を90質量%とし、化合物H A 2の濃度を10質量%とした。

次に、正孔注入層上に、化合物H T 9を蒸着し、正孔注入層上に膜厚22 nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物H T 8を蒸着し、膜厚5 nmの第二の正孔輸送層を形成した。

次に、この第二の正孔輸送層上に、化合物B H 1（第一のホスト材料（B H））と、化合物B D 2（ドーパント材料（B D））とを共蒸着し、膜厚3.5 nmの第一発光ユニットにおける第一の発光層（U T 1 - E M 1）を形成した。第一の発光層（U T 1 - E M 1）における化合物B H 1の濃度を99質量%とし、化合物B D 2の濃度を1質量%とした。

次に、第一の発光層（U T 1 - E M 1）上に、化合物B H 2 - 1 9（第二のホスト材料（B H））と化合物B D 2（ドーパント材料（B D））とを共蒸着し、膜厚13.5 nmの第一発光ユニットにおける第二の発光層（U T 1 - E M 2）を形成した。第二の発光層（U T 1 - E M 2）における化合物B H 2 - 1 9の濃度を99質量%とし、化合物B D 2の濃度を1質量%とした。

次に、第二の発光層（U T 1 - E M 2）上に化合物E T 1を蒸着し、膜厚5 nmの第1の電子輸送層（正孔障壁層ともいう）（H B L）を形成した。

[1084] ・中間ユニット（第一電荷発生層）の形成

次に、この第一発光ユニットにおける第1の電子輸送層上に、化合物E T

8と、Li qとを共蒸着し、膜厚25 nmの第一N層を形成した。第一N層における化合物ET 8の濃度を50質量%とし、Li qの濃度を50質量%とした。なお、Li qは、(8-キノリノラト)リチウム((8-Quinololato)lithium)の略称である。

次に、この第一N層上に、化合物ET 9と、リチウム(Li)とを共蒸着し、膜厚15 nmの第二N層を形成した。第二N層における化合物ET 9の濃度を96質量%とし、Liの濃度を4質量%とした。

次に、この第二N層上に、化合物HT 9と、化合物HA 2とを共蒸着し、膜厚10 nmの第一P層を形成した。第一P層における化合物HT 9の濃度を90質量%とし、化合物HA 2の濃度を10質量%とした。

[1085] ・第二発光ユニットの形成

次に、この第一P層上に、化合物HT 9を蒸着し、膜厚45 nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物HT 8を蒸着し、膜厚5 nmの第二の正孔輸送層を形成した。

次に、この第二の正孔輸送層上に、化合物BH 1と、化合物BD 2とを共蒸着し、膜厚3.5 nmの第二発光ユニットにおける第一の発光層(UT 2-EM 1)を形成した。第一の発光層(UT 2-EM 1)における化合物BH 1の濃度を99質量%とし、化合物BD 2の濃度を1質量%とした。

次に、第一の発光層(UT 2-EM 1)上に、化合物BH 2-19(第二のホスト材料(BH))と化合物BD 2(ドーパント材料(BD))とを共蒸着し、膜厚13.5 nmの第二発光ユニットにおける第二の発光層(UT 2-EM 2)を形成した。第二の発光層(UT 2-EM 2)における化合物BH 2-19の濃度を99質量%とし、化合物BD 2の濃度を1質量%とした。

次に、第二の発光層(UT 2-EM 2)上に化合物ET 1を蒸着し、膜厚5 nmの第1の電子輸送層(正孔障壁層ともいう)(HBL)を形成した。

[1086] ・中間ユニット(第二電荷発生層)の形成

次に、この第二発光ユニットにおける第1の電子輸送層上に、化合物ET8と、Liqとを共蒸着し、膜厚25nmの第三N層を形成した。第三N層における化合物ET8の濃度を50質量%とし、Liqの濃度を50質量%とした。

次に、この第三N層上に、化合物ET9と、リチウム(Li)とを共蒸着し、膜厚15nmの第四N層を形成した。第四N層における化合物ET9の濃度を96質量%とし、Liの濃度を4質量%とした。

次に、この第四N層上に、化合物HT9と、化合物HA2とを共蒸着し、膜厚10nmの第二P層を形成した。第二P層における化合物HT9の濃度を90質量%とし、化合物HA2の濃度を10質量%とした。

[1087] ・第三発光ユニットの形成

次に、この第二P層上に、化合物HT9を蒸着し、第二P層上に膜厚35nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物HT8を蒸着し、膜厚5nmの第二の正孔輸送層を形成した。

次に、この第二の正孔輸送層上に、化合物BH1と、化合物BD2とを共蒸着し、膜厚3.5nmの第三発光ユニットにおける第一の発光層(UT3-EM1)を形成した。第一の発光層(UT3-EM1)における化合物BH1の濃度を99質量%とし、化合物BD2の濃度を1質量%とした。

次に、第一の発光層(UT3-EM1)上に、化合物BH2-19(第二のホスト材料(BH))と化合物BD2(ドーパント材料(BD))とを共蒸着し、膜厚13.5nmの第三発光ユニットにおける第二の発光層(UT3-EM2)を形成した。第二の発光層(UT3-EM2)における化合物BH2-19の濃度を99質量%とし、化合物BD2の濃度を1質量%とした。

次に、第二の発光層(UT3-EM2)上に化合物ET1を蒸着し、膜厚5nmの第1の電子輸送層(正孔障壁層ともいう)(HBL)を形成した。

次に、この第三発光ユニットにおける第1の電子輸送層上に、化合物ET

8と、Li qとを共蒸着し、膜厚38nmの第2の電子輸送層を形成した。第2の電子輸送層における化合物ET8の濃度を50質量%とし、Li qの濃度を50質量%とした。

次に、この第三発光ユニットにおける第2の電子輸送層上に、イッテルビウム(Yb)を蒸着し、膜厚1.5nmの電子注入層を形成した。

[1088] そして、この第三発光ユニットにおける電子注入層上に、MgとAgとを混合比(質量%比)が15%:85%となるように共蒸着し、合計膜厚12nmの半透過性のMgAg合金からなる上部電極(陰極)を形成した。

次に、上部電極の上に、化合物Cap1を全面に成膜し、膜厚50nmのキャッピング層を形成した。

以上のようにして、実施例1に係るトップエミッション型の有機EL素子を作製した。

実施例1の有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである

。 APC(100)/IZO(10)/HT9:HA2(10,90%:10%)/HT9(22)/HT8(5)/BH1:BD2(3.5,99%:1%)/BH2-19:BD2(13.5,99%:1%)/ET1(5)/ET8:Li q(25,50%:50%)/ET9:Li(15,96%:4%)/HT9:HA2(10,90%:10%)/HT9(45)/HT8(5)/BH1:BD2(3.5,99%:1%)/BH2-19:BD2(13.5,99%:1%)/ET1(5)/ET8:Li q(25,50%:50%)/ET9:Li(15,96%:4%)/HT9:HA2(10,90%:10%)/HT9(35)/HT8(5)/BH1:BD2(3.5,99%:1%)/BH2-19:BD2(13.5,99%:1%)/ET1(5)/ET8:Li q(38,50%:50%)/Yb(1.5)/Mg:Ag(12,15%:85%)/Cap1(50)

[1089] [比較例1]

比較例1のトップエミッション型の有機EL素子は、表1に記載のとおり、第一発光ユニット、第二発光ユニット及び第三発光ユニットにおいて、第一の発光層を形成せずに、第二の正孔輸送層の上に膜厚17nmの第二の発光層を形成したこと以外、実施例1と同様にして作製した。

[1090]

[表1]

	発光 ユニット	第一の発光層			第二の発光層			第1の 電子輸送層	電圧 [V]	EQE [%]	LT95 [hr]
		第一の 化合物	第三の 化合物	膜厚 [nm]	第二の 化合物	第四の 化合物	膜厚 [nm]				
実施例1	第一	BH1	BD2	3.5	BH2-19	BD2	13.5	ET1	9.67	29.6	102
	第二	BH1	BD2	3.5	BH2-19	BD2	13.5	ET1			
	第三	BH1	BD2	3.5	BH2-19	BD2	13.5	ET1			
比較例1	第一	-	-	-	BH2-19	BD2	17.0	ET1	10.09	24.7	42
	第二	-	-	-	BH2-19	BD2	17.0	ET1			
	第三	-	-	-	BH2-19	BD2	17.0	ET1			

[1091] [実施例2]

実施例2のトップエミッション型の有機EL素子は、第一発光ユニット、第二発光ユニット及び第三発光ユニットにおいて、第二の発光層における化合物BH2-19（第二のホスト材料）を表2に記載の第二の化合物に変更し、さらに、第1の電子輸送層における化合物ET1を表2に記載の化合物ET3に変更したこと以外、実施例1と同様にして作製した。

[1092] [比較例2]

比較例2のトップエミッション型の有機EL素子は、表2に記載のとおり、第一発光ユニット、第二発光ユニット及び第三発光ユニットにおいて、第一の発光層を形成せずに、第二の正孔輸送層の上に膜厚17nmの第二の発光層を形成したこと以外、実施例2と同様にして作製した。

[1093] [表2]

	発光 ユニット	第一の発光層			第二の発光層			第1の 電子輸送層	電圧 [V]	EQE [%]	LT95 [hr]
		第一の 化合物	第三の 化合物	膜厚 [nm]	第二の 化合物	第四の 化合物	膜厚 [nm]				
実施例2	第一	BH1	BD2	3.5	BH2-8	BD2	13.5	ET3	9.33	29.8	85
	第二	BH1	BD2	3.5	BH2-8	BD2	13.5	ET3			
	第三	BH1	BD2	3.5	BH2-8	BD2	13.5	ET3			
比較例2	第一	-	-	-	BH2-8	BD2	17.0	ET3	9.43	26.2	49
	第二	-	-	-	BH2-8	BD2	17.0	ET3			
	第三	-	-	-	BH2-8	BD2	17.0	ET3			

[1094] 表1、表2、表3及び表4に示す電圧、EQE及びLT95は、各発光ユニットについて測定して得た値ではなく、第一発光ユニット、第二発光ユニット及び第三発光ユニットを含む有機EL素子全体について測定して得た値

である。

[1095] [実施例3]

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

[1096] ・第一発光ユニットの形成

次に、ITO透明電極の上に、真空蒸着法を用いて、化合物HT9と、化合物HA2とを共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層を形成した。正孔注入層における化合物HT9の濃度を90質量%とし、化合物HA2の濃度を10質量%とした。

次に、正孔注入層上に、化合物HT9を蒸着し、正孔注入層上に膜厚80nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物HT7を蒸着し、膜厚10nmの第二の正孔輸送層を形成した。

次に、この第二の正孔輸送層上に、化合物BH1-2 (第一のホスト材料 (BH)) と、化合物BD1 (ドーパント材料 (BD)) とを共蒸着し、膜厚5nmの第一発光ユニットにおける第一の発光層 (UT1-EM1) を形成した。第一の発光層 (UT1-EM1) における化合物BH1-2の濃度を98質量%とし、化合物BD1の濃度を2質量%とした。

次に、第一の発光層 (UT1-EM1) 上に、化合物BH2-30 (第二のホスト材料 (BH)) と化合物BD1 (ドーパント材料 (BD)) とを共蒸着し、膜厚20nmの第一発光ユニットにおける第二の発光層 (UT1-EM2) を形成した。第二の発光層 (UT1-EM2) における化合物BH2-30の濃度を98質量%とし、化合物BD1の濃度を2質量%とした。

次に、第二の発光層 (UT1-EM2) 上に化合物ET1を蒸着し、膜厚10nmの第1の電子輸送層 (正孔障壁層ともいう) (HBL) を形成した。

## [1097] ・中間ユニット（第一電荷発生層）の形成

次に、この第一発光ユニットにおける第1の電子輸送層上に、化合物ET10と、リチウム(Li)とを共蒸着し、膜厚20nmの第一N層を形成した。第一N層における化合物ET10の濃度を97質量%とし、Liの濃度を3質量%とした。

次に、この第一N層上に、化合物HT10と、化合物HA2とを共蒸着し、膜厚10nmの第一P層を形成した。第一P層における化合物HT10の濃度を90質量%とし、化合物HA2の濃度を10質量%とした。

## [1098] ・第二発光ユニットの形成

次に、この第一P層上に、化合物HT10を蒸着し、膜厚80nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物HT7を蒸着し、膜厚10nmの第二の正孔輸送層を形成した。

次に、この第二の正孔輸送層上に、化合物BH1-2（第一のホスト材料(BH)）と、化合物BD1（ドーパント材料(BD)）とを共蒸着し、膜厚5nmの第二発光ユニットにおける第一の発光層(UT2-EM1)を形成した。第一の発光層(UT2-EM1)における化合物BH1-2の濃度を98質量%とし、化合物BD1の濃度を2質量%とした。

次に、第一の発光層(UT2-EM1)上に、化合物BH2-30（第二のホスト材料(BH)）と化合物BD1（ドーパント材料(BD)）とを共蒸着し、膜厚20nmの第二発光ユニットにおける第二の発光層(UT2-EM2)を形成した。第二の発光層(UT2-EM2)における化合物BH2-30の濃度を98質量%とし、化合物BD1の濃度を2質量%とした。

次に、第二の発光層(UT2-EM2)上に化合物ET1を蒸着し、膜厚10nmの第1の電子輸送層（正孔障壁層ともいう）(HBL)を形成した。

次に、この第二発光ユニットにおける第1の電子輸送層上に、化合物ET2を蒸着し、膜厚20nmの第2の電子輸送層を形成した。

次に、この第二発光ユニットにおける第2の電子輸送層上にLiFを蒸着して膜厚1nmの電子注入層を形成した。

[1099] そして、この第二発光ユニットにおける電子注入層上に金属Alを蒸着して膜厚80nmの陰極を形成した。

以上のようにして、実施例3に係るボトムエミッション型の有機EL素子を作製した。

実施例3の有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである

。

ITO(130)/HT9:HA2(10, 97%:3%)/HT9(80)/HT7(10)/BH1-2:BD1(5, 98%:2%)/BH2-30:BD1(20, 98%:2%)/ET1(10)/ET10:Li(20, 97%:3%)/HT10:HA2(10, 90%:10%)/HT10(80)/HT7(10)/BH1-2:BD1(5, 98%:2%)/BH2-30:BD1(20, 98%:2%)/ET1(10)/ET2(20)/LiF(1)/Al(80)

[1100] [実施例4]

実施例4のボトムエミッション型の有機EL素子は、表3に記載のとおり、第一発光ユニット及び第二発光ユニットにおいて、第一の発光層の化合物BH1-2を化合物BH1-3に変更したこと以外、実施例3と同様にして作製した。

[1101] [比較例3]

比較例3のボトムエミッション型の有機EL素子は、表3に記載のとおり、第一発光ユニット及び第二発光ユニットにおいて、第一の発光層を形成せずに、第二の正孔輸送層の上に膜厚25nmの第二の発光層を形成したこと以外、実施例3と同様にして作製した。

[1102]

[表3]

	発光 ユニット	第一の発光層			第二の発光層			EQE [%]	LT95 [hr]
		第一の 化合物	第三の 化合物	膜厚 [nm]	第二の 化合物	第四の 化合物	膜厚 [nm]		
実施例3	第一	BH1-2	BD1	5	BH2-30	BD1	20	19.2	150
	第二	BH1-2	BD1	5	BH2-30	BD1	20		
実施例4	第一	BH1-3	BD1	5	BH2-30	BD1	20	17.8	180
	第二	BH1-3	BD1	5	BH2-30	BD1	20		
比較例3	第一	-	-	-	BH2-30	BD1	25	17.5	80
	第二	-	-	-	BH2-30	BD1	25		

[1103] [実施例5]

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

[1104] ・第一発光ユニットの形成

次に、ITO透明電極の上に、真空蒸着法を用いて、化合物HT3と、化合物HA2とを共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層を形成した。正孔注入層における化合物HT3の濃度を97質量%とし、化合物HA2の濃度を3質量%とした。

次に、正孔注入層上に、化合物HT3を蒸着し、正孔注入層上に膜厚80nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物HT6を蒸着し、膜厚10nmの第二の正孔輸送層を形成した。

次に、この第二の正孔輸送層上に、化合物BH1-4 (第一のホスト材料 (BH)) と、化合物BD2 (ドーパント材料 (BD)) とを共蒸着し、膜厚5nmの第一発光ユニットにおける第一の発光層 (UT1-EM1) を形成した。第一の発光層 (UT1-EM1) における化合物BH1-4の濃度を98質量%とし、化合物BD2の濃度を2質量%とした。

次に、第一の発光層 (UT1-EM1) 上に、化合物BH2-30 (第二

のホスト材料（BH））と化合物BD2（ドーパント材料（BD））とを共蒸着し、膜厚20nmの第一発光ユニットにおける第二の発光層（UT1-EM2）を形成した。第二の発光層（UT1-EM2）における化合物BH2-30の濃度を98質量%とし、化合物BD2の濃度を2質量%とした。

次に、第二の発光層（UT1-EM2）上に化合物ET7を蒸着し、膜厚10nmの第1の電子輸送層（正孔障壁層ともいう）（HBL）を形成した。

[1105] ・中間ユニット（第一電荷発生層）の形成

次に、この第一発光ユニットにおける第1の電子輸送層上に、化合物ET11と、リチウム（Li）とを共蒸着し、膜厚20nmの第一N層を形成した。第一N層における化合物ET11の濃度を97質量%とし、Liの濃度を3質量%とした。

次に、この第一N層上に、化合物HT3と、化合物HA2とを共蒸着し、膜厚10nmの第一P層を形成した。第一P層における化合物HT3の濃度を90質量%とし、化合物HA2の濃度を10質量%とした。

[1106] ・第二発光ユニットの形成

次に、この第一P層上に、化合物HT3を蒸着し、膜厚80nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物HT6を蒸着し、膜厚10nmの第二の正孔輸送層を形成した。

次に、この第二の正孔輸送層上に、化合物BH1-4（第一のホスト材料（BH））と、化合物BD2（ドーパント材料（BD））とを共蒸着し、膜厚5nmの第二発光ユニットにおける第一の発光層（UT2-EM1）を形成した。第一の発光層（UT2-EM1）における化合物BH1-4の濃度を98質量%とし、化合物BD2の濃度を2質量%とした。

次に、第一の発光層（UT2-EM1）上に、化合物BH2-30（第二のホスト材料（BH））と化合物BD2（ドーパント材料（BD））とを共蒸着し、膜厚20nmの第二発光ユニットにおける第二の発光層（UT2-

EM2)を形成した。第二の発光層(UT2-EM2)における化合物BH2-30の濃度を98質量%とし、化合物BD2の濃度を2質量%とした。

次に、第二の発光層(UT2-EM2)上に化合物ET7を蒸着し、膜厚10nmの第1の電子輸送層(正孔障壁層ともいう)(HBL)を形成した。

次に、この第二発光ユニットにおける第1の電子輸送層上に、化合物ET2を蒸着し、膜厚20nmの第2の電子輸送層を形成した。

次に、この第二発光ユニットにおける第2の電子輸送層上にLiFを蒸着して膜厚1nmの電子注入層を形成した。

[1107] そして、この第二発光ユニットにおける電子注入層上に金属Alを蒸着して膜厚80nmの陰極を形成した。

以上のようにして、実施例5に係るボトムエミッション型の有機EL素子を作製した。

実施例5の有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HT3:HA2(10, 97%:3%)/HT3(80)/HT6(10)/BH1-4:BD2(5, 98%:2%)/BH2-30:BD2(20, 98%:2%)/ET7(10)/ET11:Li(20, 97%:3%)/HT3:HA2(10, 90%:10%)/HT3(80)/HT6(10)/BH1-4:BD2(5, 98%:2%)/BH2-30:BD2(20, 98%:2%)/ET7(10)/ET2(20)/LiF(1)/Al(80)

[1108] [比較例4]

比較例4のボトムエミッション型の有機EL素子は、表4に記載のとおり、第一発光ユニット及び第二発光ユニットにおいて、第一の発光層を形成せずに、第二の正孔輸送層の上に膜厚25nmの第二の発光層を形成したこと以外、実施例5と同様にして作製した。

[1109]

[表4]

	発光 ユニット	第一の発光層			第二の発光層			EQE [%]	LT95 [hr]
		第一の 化合物	第三の 化合物	膜厚	第二の 化合物	第四の 化合物	膜厚		
				[nm]			[nm]		
実施例5	第一	BH1-4	BD2	5	BH2-30	BD2	20	18.6	100
	第二	BH1-4	BD2	5	BH2-30	BD2	20		
比較例4	第一	-	-	-	BH2-30	BD2	25	15.5	40
	第二	-	-	-	BH2-30	BD2	25		

[1110] <有機EL素子の評価>

実施例及び比較例で作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。評価結果を表1～4に示す。

[1111] ・外部量子効率EQE

電流密度が10mA/cm<sup>2</sup>となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計CS-2000（コニカミノルタ株式会社製）で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、ランバシアン放射を行ったと仮定し外部量子効率EQE（単位：%）を算出した。

[1112] ・寿命LT95

得られた有機EL素子に、電流密度が50mA/cm<sup>2</sup>となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が95%となるまでの時間（LT95（単位：時間））を測定した。

[1113] ・駆動電圧

電流密度が10mA/cm<sup>2</sup>となるように陽極と陰極との間に通電したときの電圧（単位：V）を計測した。

[1114] <化合物の評価>

（トルエン溶液の調製）

化合物BD1を、4.9×10<sup>-6</sup>mol/Lの濃度でトルエンに溶解し、化合物BD1のトルエン溶液を調製した。これと同様に、化合物BD2のトルエン溶液を調製した。

[1115] （蛍光発光最大ピーク波長（FL-peak）の測定）

蛍光スペクトル測定装置（分光蛍光光度計 F-7000（株式会社日立ハイテクサイエンス製））を用いて、化合物 BD1 のトルエン溶液を 390 nm で励起した場合の蛍光発光最大ピーク波長を測定した。化合物 BD2 のトルエン溶液についても、化合物 BD1 と同様に蛍光発光最大ピーク波長を測定した。

化合物 BD1 の蛍光発光最大ピーク波長は、453 nm であった。

化合物 BD2 の蛍光発光最大ピーク波長は、455 nm であった。

[1116] （三重項エネルギー  $T_1$ ）

測定対象となる化合物を EPA（ジエチルエーテル：イソペンタン：エタノール = 5 : 5 : 2（容積比））中に、濃度が  $10 \mu\text{mol/L}$  となるように溶解し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とした。この測定試料について、低温（77 [K]）で燐光スペクトル（縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。）を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値  $\lambda_{\text{edge}}$  [nm] に基づいて、次の換算式（F1）から算出されるエネルギー量を三重項エネルギー  $T_1$  とした。なお、三重項エネルギー  $T_1$  は、測定条件によっては上下 0.02 eV 程度の誤差が生じ得る。

$$\text{換算式 (F1)} : T_1 [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

[1117] 燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ（つまり縦軸が増加するにつれ）、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線（すなわち変曲点における接線）が、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

なお、スペクトルの最大ピーク強度の 15% 以下のピーク強度をもつ極大点は、上述の最も短波長側の極大値には含めず、最も短波長側の極大値に最も近い、傾きの値が極大値をとる点において引いた接線を当該燐光スペクトル

ルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

燐光の測定には、(株)日立ハイテクノロジー製のF-4500形分光蛍光光度計本体を用いた。

[1118] (一重項エネルギー  $S_1$ )

測定対象となる化合物の  $10 \mu\text{mol/L}$  トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温 (300K) でこの試料の吸収スペクトル (縦軸: 吸収強度、横軸: 波長とする。) を測定した。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値  $\lambda_{\text{edge}}$  [nm] を次に示す換算式 (F2) に代入して一重項エネルギーを算出した。

$$\text{換算式 (F2)} : S_1 [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

吸収スペクトル測定装置としては、日立社製の分光光度計 (装置名: U3310) を用いた。

[1119] 吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ (つまり縦軸の値が減少するにつれ)、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側 (ただし、吸光度が 0.1 以下となる場合は除く) で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

なお、吸光度の値が 0.2 以下の極大点は、上記最も長波長側の極大値には含めない。

[1120] 化合物の一重項エネルギー  $S_1$  及び三重項エネルギー  $T_1$  の測定値を表中に示す。

[1121]

[表5]

	$S_1$ [eV]	$T_1$ [eV]
BH1	3.12	2.10
BH1-2	3.20	2.07
BH1-3	3.03	2.16
BH1-4	3.13	2.35
BH2-19	3.01	1.82
BH2-8	3.02	1.89
BH2-30	3.01	1.80
BD1	2.73	2.29
BD2	2.71	2.64

### 符号の説明

[1122] 1…有機EL素子、11…第一の発光ユニット（積層発光ユニット）、111…第一の発光層、112…第二の発光層、113…正孔注入層、114…正孔輸送層、115…電子輸送層、12…第二発光ユニット、121…第一の発光層、122…第二の発光層、123…正孔輸送層、124…電子輸送層、125…電子注入層、2…基板、20…中間ユニット、21…第一N層（第一の陰極側有機層）、22…第一P層、3…陽極、4…陰極。

## 請求の範囲

[請求項1]

有機エレクトロルミネッセンス素子であって、  
陽極と、  
陰極と、  
前記陽極及び前記陰極の間に配置された2つ以上の発光ユニットと、  
、  
前記陽極及び前記陰極の間に配置された第一の陰極側有機層と、を  
有し、  
前記2つ以上の発光ユニットのうち、少なくとも1つの発光ユニットが、積層発光ユニットであり、  
少なくとも1つの前記積層発光ユニットの前記陰極側に前記第一の陰極側有機層が配置され、  
前記第一の陰極側有機層は、フェナントロリン骨格を有するフェナントロリン化合物を含有し、  
前記積層発光ユニットは、第一の発光層及び第二の発光層を含み、  
前記第一の発光層は、第一のホスト材料を含有し、  
前記第二の発光層は、第二のホスト材料を含有し、  
前記第一のホスト材料と前記第二のホスト材料とは互いに異なり、  
前記第一の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第一の発光性化合物を少なくとも含み、  
前記第二の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示す第二の発光性化合物を少なくとも含み、  
前記第一の発光性化合物と前記第二の発光性化合物とが、互いに同一であるか、又は異なり、  
前記第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ と前記第二のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ とが、下記数式(数3)の関係を満たす、  
有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$T_1(H1) > T_1(H2) \quad \dots \text{(数3)}$$

[請求項2]

有機エレクトロルミネッセンス素子であって、  
陽極と、  
陰極と、  
前記陽極及び前記陰極の間に配置された2つ以上の発光ユニットと  
、  
前記陽極及び前記陰極の間に配置された第一の陰極側有機層と、を  
有し、  
前記2つ以上の発光ユニットのうち、少なくとも1つの発光ユニッ  
トが、積層発光ユニットであり、  
少なくとも1つの前記積層発光ユニットの前記陰極側に前記第一の  
陰極側有機層が配置され、  
前記第一の陰極側有機層は、フェナントロリン骨格を有するフェナ  
ントロリン化合物を含有し、  
前記積層発光ユニットは、第一の発光層及び第二の発光層を含み、  
前記第一の発光層は、第一のホスト材料を含有し、  
前記第二の発光層は、第二のホスト材料を含有し、  
前記第一のホスト材料は、分子中に、下記条件(i)の構造又は下  
記条件(ii)の構造を有し、  
前記第二のホスト材料は、アントラセン誘導体であり、  
前記第一のホスト材料と前記第二のホスト材料とは互いに異なり、  
前記第一の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示  
す第一の発光性化合物を少なくとも含み、  
前記第二の発光層は、最大ピーク波長が500nm以下の発光を示  
す第二の発光性化合物を少なくとも含み、  
前記第一の発光性化合物と前記第二の発光性化合物とが、互いに同  
一であるか、又は異なる、  
有機エレクトロルミネッセンス素子。

条件 (i) 第一のベンゼン環と第二のベンゼン環とが単結合で連結されたビフェニル構造を有し、前記ビフェニル構造中の前記第一のベンゼン環と前記第二のベンゼン環とが、前記単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結している。

条件 (ii) 単結合で連結されたベンゼン環とナフタレン環とを含む連結構造を有し、前記連結構造中の前記ベンゼン環及び前記ナフタレン環には、それぞれ独立に、さらに単環又は縮合環が縮合しているか又は縮合しておらず、前記連結構造中の前記ベンゼン環と前記ナフタレン環とが、前記単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結している。

[請求項3] 請求項2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記第一の宿主材料は、分子中に前記条件 (i) の構造を有し、前記ビフェニル構造中の前記第一のベンゼン環と前記第二のベンゼン環とが、前記単結合以外の1つの部分において前記架橋によりさらに連結している、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項4] 請求項2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記第一の宿主材料は、分子中に前記条件 (i) の構造を有し、前記ビフェニル構造中の前記第一のベンゼン環と前記第二のベンゼン環とが、前記単結合以外の2つの部分において前記架橋によりさらに連結している、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項5] 請求項2から請求項4のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記架橋が二重結合を含む、

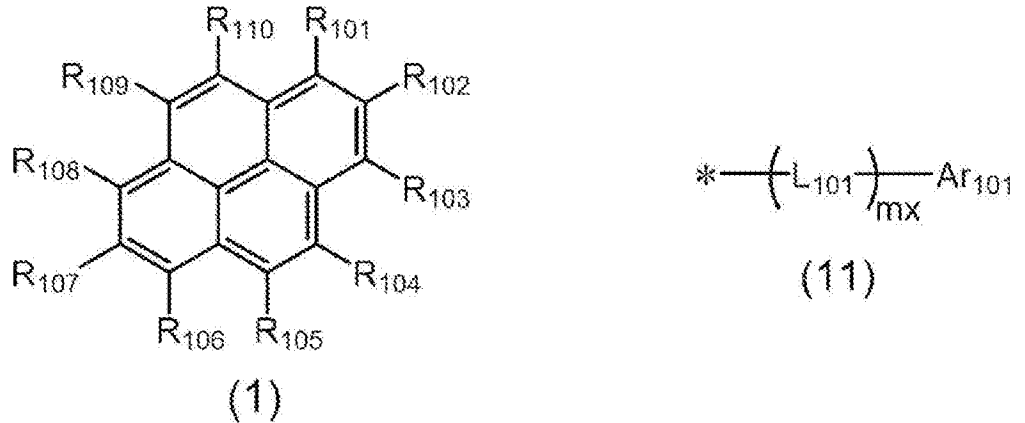
有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項6] 請求項1から請求項5のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一のホスト材料は、下記一般式（11）で表される基を少なくとも1つ有し、かつ下記一般式（1）で表される第一の化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化1]



（前記一般式（1）において、

$R_{101} \sim R_{110}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )で表される基、

—O—( $R_{904}$ )で表される基、

—S—( $R_{905}$ )で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O) $R_{801}$ で表される基、

—COOR $_{802}$ で表される基、

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、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基、又は

前記一般式(11)で表される基であり、

ただし、 $R_{101} \sim R_{110}$ の少なくとも1つは、前記一般式(11)で表される基であり、

前記一般式(11)で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式(11)で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

$L_{101}$ 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価の複素環基であり、

$A_{r101}$ 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、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

$m_x$ は、0、1、2、3、4又は5であり、

$L_{101}$ が2以上存在する場合、2以上の $L_{101}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

$A_{r101}$ が2以上存在する場合、2以上の $A_{r101}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

前記一般式(11)中の\*は、前記一般式(1)中のピレン環との結合位置を示す。)

(前記第一の化合物中、 $R_{901}$ 、 $R_{902}$ 、 $R_{903}$ 、 $R_{904}$ 、 $R_{905}$ 、 $R_{801}$ 及び $R_{802}$ 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 の複素環基であり、  
 $R_{901}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{901}$  は、互いに同一であるか  
又は異なり、  
 $R_{902}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{902}$  は、互いに同一であるか  
又は異なり、  
 $R_{903}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{903}$  は、互いに同一であるか  
又は異なり、  
 $R_{904}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{904}$  は、互いに同一であるか  
又は異なり、  
 $R_{905}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{905}$  は、互いに同一であるか  
又は異なり、  
 $R_{801}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{801}$  は、互いに同一であるか  
又は異なり、  
 $R_{802}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{802}$  は、互いに同一であるか  
又は異なる。) )

## [請求項7]

請求項2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、  
前記第一のホスト材料は、分子中に前記条件 ( i ) の構造を有し、  
前記ビフェニル構造中の前記第一のベンゼン環と前記第二のベンゼ  
ン環とが、前記単結合以外の2つの部分において前記架橋によりさら  
に連結し、  
前記架橋が二重結合を含まない、  
有機エレクトロルミネッセンス素子。

## [請求項8]

請求項2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、  
前記第一のホスト材料は、分子中に前記条件 ( i i ) の構造を有す

る、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項9]

請求項8に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記架橋が二重結合を含む、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

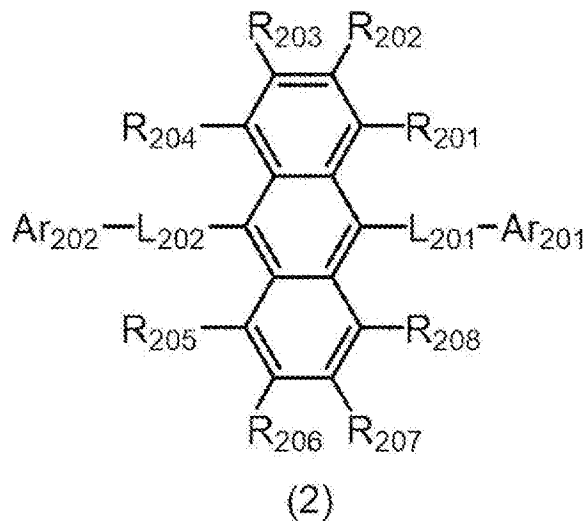
[請求項10]

請求項1から請求項9のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第二のホスト材料は、下記一般式(2)で表される第二の化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化2]



(前記一般式(2)において、

$R_{201} \sim R_{208}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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

、

- S i (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>) で表される基、  
 - O - (R<sub>904</sub>) で表される基、  
 - S - (R<sub>905</sub>) で表される基、  
 - N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、  
 - C (=O) R<sub>801</sub> で表される基、  
 - C O O R<sub>802</sub> で表される基、  
 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 の複素環基であり、  
 L<sub>201</sub> 及び L<sub>202</sub> は、それぞれ独立に、  
 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  
 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  
 あり、  
 A r<sub>201</sub> 及び A r<sub>202</sub> は、それぞれ独立に、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 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。  
 )  
 (前記第二の化合物中、R<sub>901</sub>、R<sub>902</sub>、R<sub>903</sub>、R<sub>904</sub>、R<sub>905</sub>、R<sub>906</sub>、  
 R<sub>907</sub>、R<sub>801</sub> 及び R<sub>802</sub> 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の複素環基であり、 $R_{901}$ が複数存在する場合、複数の $R_{901}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{902}$ が複数存在する場合、複数の $R_{902}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{903}$ が複数存在する場合、複数の $R_{903}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{904}$ が複数存在する場合、複数の $R_{904}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{905}$ が複数存在する場合、複数の $R_{905}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{906}$ が複数存在する場合、複数の $R_{906}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{907}$ が複数存在する場合、複数の $R_{907}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{801}$ が複数存在する場合、複数の $R_{801}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

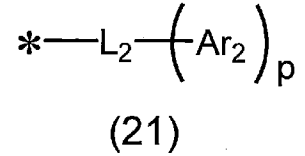
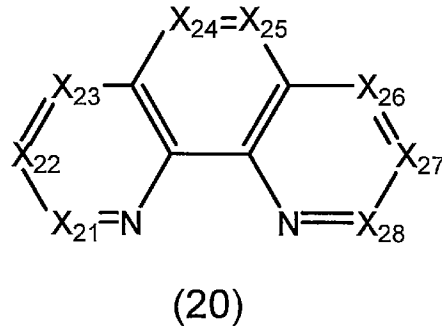
$R_{802}$ が複数存在する場合、複数の $R_{802}$ は、互いに同一であるか又は異なる。) )

[請求項11]

前記フェナントロリン化合物は、下記一般式(21)で表される基を少なくとも1つ有し、かつ下記一般式(20)で表される化合物である、

請求項1から請求項10のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化3]



(前記一般式 (20) において、

$X_{21} \sim X_{28}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、 $\text{CR}_{21}$ 、又は前記一般式 (21) で表される基と結合する炭素原子であり、

$X_{21} \sim X_{28}$ のうち少なくとも1つは、前記一般式 (21) で表される基と結合する炭素原子であり、

前記一般式 (21) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式 (21) で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

複数の $R_{21}$ のうち隣接する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

は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{21}$ 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炭素数1～50のハロアルキル基、

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

$-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$  で表される基、  
 $-O-$  ( $R_{904}$ ) で表される基、  
 $-S-$  ( $R_{905}$ ) で表される基、  
 $-N(R_{906})(R_{907})$  で表される基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、  
 $-C(=O)R_{931}$  で表される基、  
 $-COOR_{932}$  で表される基、  
 $-S(=O)_2R_{933}$  で表される基、  
 $-B(R_{934})(R_{935})$  で表される基、  
 $-P(=O)(R_{936})(R_{937})$  で表される基、  
 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 の複素環基である。

)

(前記一般式 (21) において、

$A_{r_2}$  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、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

$p$  は、1、2、3、4 又は 5 であり、

$A_{r_2}$  が 2 以上存在する場合、2 以上の  $A_{r_2}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$L_2$  は、単結合又は連結基であり、

連結基としての  $L_2$  は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 の直鎖状、分岐鎖状もしくは環状の多価の脂肪族炭化水素基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の多価の芳香族炭化

水素基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の多価の複素環基、  
又は

前記多価の芳香族炭化水素環基及び前記多価の複素環基から選ばれる2つもしくは3つの基が結合してなる多価の複数連結基であり、

前記複数連結基としての $L_2$ を構成する前記芳香族炭化水素環基及び前記複素環基は、互いに同一であるか又は異なり、隣り合う基同士が互いに結合して環を形成するか、又は互いに結合せず、

$A_{r_2}$ と連結基としての $L_2$ とが互いに結合して環を形成するか、又は互いに結合せず、

連結基としての $L_2$ と、 $L_2$ に結合した炭素原子に隣接する $X_{21} \sim X_{28}$ のいずれかの炭素原子又は $CR_{21}$ の $R_{21}$ とが、互いに結合して環を形成するか、又は互いに結合せず、

前記一般式(21)中の\*は、前記一般式(20)で表される環との結合位置を示す。)

(前記フェナントロリン化合物中、 $R_{901}$ 、 $R_{902}$ 、 $R_{903}$ 、 $R_{904}$ 、 $R_{905}$ 、 $R_{906}$ 、 $R_{907}$ 、 $R_{931}$ 、 $R_{932}$ 、 $R_{933}$ 、 $R_{934}$ 、 $R_{935}$ 、 $R_{936}$ 及び $R_{937}$ 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の複素環基であり、

$R_{901}$ が複数存在する場合、複数の $R_{901}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{902}$ が複数存在する場合、複数の $R_{902}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{903}$ が複数存在する場合、複数の $R_{903}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{904}$ が複数存在する場合、複数の $R_{904}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{905}$ が複数存在する場合、複数の $R_{905}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{906}$ が複数存在する場合、複数の $R_{906}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{907}$ が複数存在する場合、複数の $R_{907}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{931}$ が複数存在する場合、複数の $R_{931}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{932}$ が複数存在する場合、複数の $R_{932}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{933}$ が複数存在する場合、複数の $R_{933}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{934}$ が複数存在する場合、複数の $R_{934}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{935}$ が複数存在する場合、複数の $R_{935}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{936}$ が複数存在する場合、複数の $R_{936}$ は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{937}$ が複数存在する場合、複数の $R_{937}$ は、互いに同一であるか又は異なる。) )

[請求項12] 前記積層発光ユニットの前記第二の発光層が、前記第一の発光層と前記第一の陰極側有機層との間に配置されている、

請求項1から請求項11のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

- [請求項13] 前記積層発光ユニットの前記第一の発光層が、前記第二の発光層と前記第一の陰極側有機層との間に配置されている、  
請求項1から請求項11のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項14] 前記第一の発光層と前記第一の陰極側有機層との間に、第二の陰極側有機層が配置されている、  
請求項13に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項15] 前記第二の陰極側有機層は、フェナントロリン骨格を有するフェナントロリン化合物を含有しない、  
請求項14に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項16] 前記第一の発光層と前記第一の陰極側有機層とが30nm以上離間している、  
請求項1から請求項15のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項17] 前記2つ以上の発光ユニットは、前記積層発光ユニットと、前記積層発光ユニットとは異なる少なくとも1つの燐光発光ユニットとを含み、  
前記燐光発光ユニットは、燐光発光を示す燐光発光性化合物を含有する、  
請求項1から請求項16のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項18] 前記第一の陰極側有機層は、前記積層発光ユニットと、前記積層発光ユニットとは異なる別の発光ユニットとの間に配置されている、  
請求項1から請求項17のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項19] 前記第一のホスト材料の正孔移動度 $\mu_h(H1)$ と、前記第二のホスト材料の正孔移動度 $\mu_h(H2)$ とが、下記数式(数31)の関係を満たす、

請求項 1 から請求項 18 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$\mu_h(H1) > \mu_h(H2) \quad \dots \text{(数31)}$$

[請求項20] 前記第一のホスト材料の正孔移動度  $\mu_h(H1)$  と、前記第一のホスト材料の電子移動度  $\mu_e(H1)$  と、前記第二のホスト材料の正孔移動度  $\mu_h(H2)$  と、前記第二のホスト材料の電子移動度  $\mu_e(H2)$  とが、下記数式 (数32) の関係を満たす、

請求項 1 から請求項 19 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$\left( \frac{\mu_e(H1)}{\mu_h(H1)} \right) < \left( \frac{\mu_e(H2)}{\mu_h(H2)} \right) \quad \dots \text{(数32)}$$

[請求項21] 前記第一のホスト材料の電子移動度  $\mu_e(H1)$  と、前記第二のホスト材料の電子移動度  $\mu_e(H2)$  とが、下記数式 (数33) の関係を満たす、

請求項 1 から請求項 20 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$\mu_e(H1) < \mu_e(H2) \quad \dots \text{(数33)}$$

[請求項22] 請求項 1 から請求項 21 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記有機エレクトロルミネッセンス素子の光取り出し側に配置された色変換部を有する、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

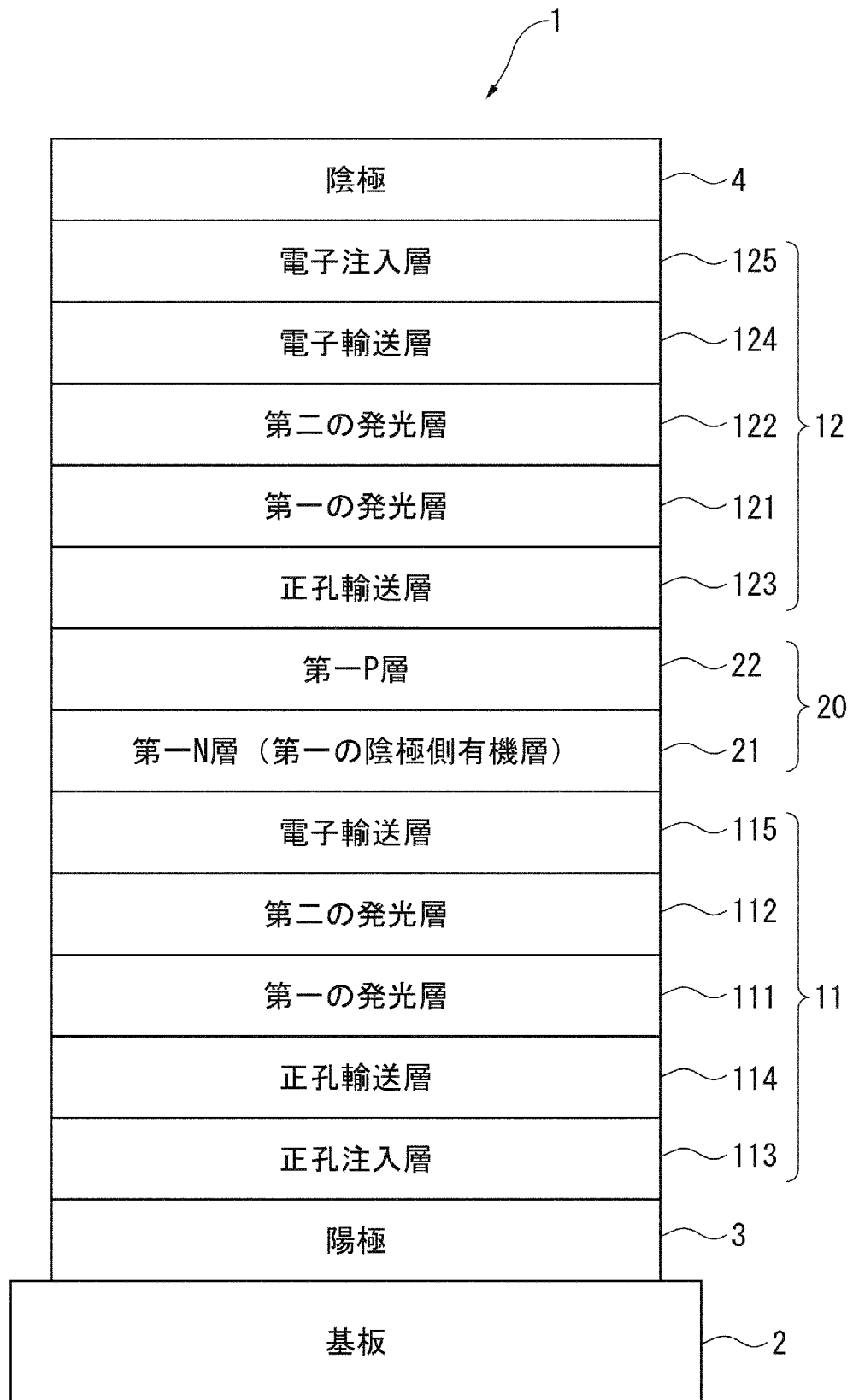
[請求項23] テレビ、パーソナルコンピュータ、タブレット又は移動体用ディスプレイに使用される、請求項 1 から請求項 22 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項24] 請求項 1 から請求項 23 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。

[請求項25] テレビ、パーソナルコンピュータ、タブレット又は移動体用ディスプレイ

プレイである、請求項 2 4 に記載の電子機器。

[図1]



**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**

International application No.

PCT/JP2021/005077

**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER**

Int.Cl. C07D235/08(2006.01)i, C07D333/76(2006.01)i, C07D403/10(2006.01)i, C07D405/10(2006.01)i, C07D407/10(2006.01)i, C07D409/12(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, C07D209/82(2006.01)i, C07D487/22(2006.01)i, C07D519/00(2006.01)i, H01L27/32(2006.01)i, C07D307/77(2006.01)i, C07D307/91(2006.01)i, C07D251/24(2006.01)i, H05B33/12(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

FI: H05B33/14B, H05B33/12C, C09K11/06690, C07D307/91, C07D307/77, C07D333/76, C07D209/82, C07D407/10, C07D405/10, C07D487/22, C07D403/10, C07D235/08, C07D251/24, C07D519/00311, C07D409/12, H05B33/22B, H05B33/12E, H01L27/32

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

**B. FIELDS SEARCHED**

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int.Cl. C07D235/08, C07D333/76, C07D403/10, C07D405/10, C07D407/10, C07D409/12, C09K11/06, C07D209/82, C07D487/22, C07D519/00, H01L27/32, C07D307/77, C07D307/91, C07D251/24, H05B33/12, H01L51/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan	1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan	1971-2021
Registered utility model specifications of Japan	1996-2021
Published registered utility model applications of Japan	1994-2021

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

**C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT**

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y A	JP 2019-161218 A (JNC CORPORATION) 19 September 2019 (2019-09-19), claim 9, paragraphs [0006], [0007], [0075], [0128], [0231], [0394], [0395], [0399], [0432], [0447]-[0450], [0453]-[0462]	2-25 1
Y A	JP 2016-111134 A (SONY CORPORATION) 20 June 2016 (2016-06-20), paragraphs [0013], [0038], [0064], [0106], [0107]	2-25 1
Y A	WO 2009/066600 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 28 May 2009 (2009-05-28), paragraphs [0020], [0027], [0109], [0141], [0154]	9, 13-15, 19-21 1

Further documents are listed in the continuation of Box C.

See patent family annex.

\* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search  
23 March 2021

Date of mailing of the international search report  
06 April 2021

Name and mailing address of the ISA/  
Japan Patent Office  
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,  
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**

International application No.  
PCT/JP2021/005077

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y A	WO 2011/148909 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 01 December 2011 (2011-12-01), paragraphs [0063], [0064]	19-21 1

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2021/005077

JP 2019-161218 A	19 September 2019	US 2019/0280209 A1 claim 9, paragraphs [0008], [0009], [0140], [0177], [0249], [0449], [0450], [0454], [0494], [0518]-[0527], tables 1-4 KR 10-2019-0106706 A
JP 2016-111134 A	20 June 2016	US 2017/0271609 A1 paragraphs [0033], [0057], [0064], [0106] CN 107004772 A
WO 2009/066600 A1	28 May 2009	US 2010/0327266 A1 paragraphs [0063], [0075], [0199], [0231], table 1 EP 2213639 A1 KR 10-2010-0088681 A CN 101861292 A
WO 2011/148909 A1	01 December 2011	US 2012/0119197 A1 paragraphs [0086]-[0094] KR 10-2013-0021350 A

<p>A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））</p> <p>C07D 235/08(2006.01)i; C07D 333/76(2006.01)i; C07D 403/10(2006.01)i; C07D 405/10(2006.01)i;                  C07D 407/10(2006.01)i; C07D 409/12(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; C07D 209/82(2006.01)i;                  C07D 487/22(2006.01)i; C07D 519/00(2006.01)i; H01L 27/32(2006.01)i; C07D 307/77(2006.01)i;                  C07D 307/91(2006.01)i; C07D 251/24(2006.01)i; H05B 33/12(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i                  FI: H05B33/14 B; H05B33/12 C; C09K11/06 690; C07D307/91; C07D307/77; C07D333/76; C07D209/82;                  C07D407/10; C07D405/10; C07D487/22; C07D403/10; C07D235/08; C07D251/24; C07D519/00 311;                  C07D409/12; H05B33/22 B; H05B33/12 E; H01L27/32</p>																										
<p>B. 調査を行った分野</p> <p>調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））</p> <p>C07D235/08; C07D333/76; C07D403/10; C07D405/10; C07D407/10; C07D409/12; C09K11/06; C07D209/82;                  C07D487/22; C07D519/00; H01L27/32; C07D307/77; C07D307/91; C07D251/24; H05B33/12; H01L51/50</p> <p>最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの</p> <table 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 - 2021年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996 - 2021年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994 - 2021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）</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 - 2021年	日本国実用新案登録公報	1996 - 2021年	日本国登録実用新案公報	1994 - 2021年																
日本国実用新案公報	1922 - 1996年																									
日本国公開実用新案公報	1971 - 2021年																									
日本国実用新案登録公報	1996 - 2021年																									
日本国登録実用新案公報	1994 - 2021年																									
<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>Y A</td> <td>JP 2019-161218 A (JNC株式会社) 19.09.2019 (2019-09-19) 請求項9, [0006]-[0007], [0075], [0128], [0231], [0394]-[0395], [0399], [0432], [0447]-[0450], [0453]-[0462]</td> <td>2-25 1</td> </tr> <tr> <td>Y A</td> <td>JP 2016-111134 A (ソニー株式会社) 20.06.2016 (2016-06-20) [0013], [0038], [0064], [0106]-[0107]</td> <td>2-25 1</td> </tr> <tr> <td>Y A</td> <td>WO 2009/066600 A1 (出光興産株式会社) 28.05.2009 (2009-05-28) [0020], [0027], [0109], [0141], [0154]</td> <td>9, 13-15, 19-21 1</td> </tr> </tbody> </table> <p><input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。</p> <table border="0"> <tr> <td>* 引用文献のカテゴリー</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“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</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“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）</td> <td>“&amp;” 同一パテントファミリー文献</td> </tr> <tr> <td>“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献</td> <td></td> </tr> <tr> <td>“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</td> <td></td> </tr> </table>			引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号	Y A	JP 2019-161218 A (JNC株式会社) 19.09.2019 (2019-09-19) 請求項9, [0006]-[0007], [0075], [0128], [0231], [0394]-[0395], [0399], [0432], [0447]-[0450], [0453]-[0462]	2-25 1	Y A	JP 2016-111134 A (ソニー株式会社) 20.06.2016 (2016-06-20) [0013], [0038], [0064], [0106]-[0107]	2-25 1	Y A	WO 2009/066600 A1 (出光興産株式会社) 28.05.2009 (2009-05-28) [0020], [0027], [0109], [0141], [0154]	9, 13-15, 19-21 1	* 引用文献のカテゴリー	“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの	“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの	“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	“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	“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	“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）	“&” 同一パテントファミリー文献	“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	
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号																								
Y A	JP 2019-161218 A (JNC株式会社) 19.09.2019 (2019-09-19) 請求項9, [0006]-[0007], [0075], [0128], [0231], [0394]-[0395], [0399], [0432], [0447]-[0450], [0453]-[0462]	2-25 1																								
Y A	JP 2016-111134 A (ソニー株式会社) 20.06.2016 (2016-06-20) [0013], [0038], [0064], [0106]-[0107]	2-25 1																								
Y A	WO 2009/066600 A1 (出光興産株式会社) 28.05.2009 (2009-05-28) [0020], [0027], [0109], [0141], [0154]	9, 13-15, 19-21 1																								
* 引用文献のカテゴリー	“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの																									
“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの	“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																									
“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	“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																									
“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）	“&” 同一パテントファミリー文献																									
“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																										
<p>国際調査を完了した日</p> <p>23.03.2021</p>	<p>国際調査報告の発送日</p> <p>06.04.2021</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>渡邊 吉喜 20 3406</p> <p>電話番号 03-3581-1101 内線 3271</p>																									

C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
Y	WO 2011/148909 A1 (出光興産株式会社) 01.12.2011 (2011 - 12 - 01)	19-21
A	[0063]-[0064]	1

国際調査報告  
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2021/005077

引用文献			公表日	パテントファミリー文献		公表日
JP	2019-161218	A	19.09.2019	US 2019/0280209 A1	請求項9, [0008]-[0009], [0140], [0177], [0249], [0449]-[0450], [0454], [0494], Table 1-4, [0518]- [0527]	
				KR 10-2019-0106706	A	
JP	2016-111134	A	20.06.2016	US 2017/0271609 A1	[0033], [0057], [0064], [0106]	
				CN 107004772	A	
WO	2009/066600	A1	28.05.2009	US 2010/0327266 A1	[0063], [0075], [0199], [0231], Table 1	
				EP 2213639	A1	
				KR 10-2010-0088681	A	
				CN 101861292	A	
WO	2011/148909	A1	01.12.2011	US 2012/0119197 A1	[0086]-[0094]	
				KR 10-2013-0021350	A	