

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号

特許第7686816号

(P7686816)

(45)発行日 令和7年6月2日(2025.6.2)

(24)登録日 令和7年5月23日(2025.5.23)

(51)国際特許分類

F I

H 1 0 K 50/11 (2023.01)

H 1 0 K 50/11

H 1 0 K 50/12 (2023.01)

H 1 0 K 50/12

H 1 0 K 50/19 (2023.01)

H 1 0 K 50/19

H 1 0 K 50/16 (2023.01)

H 1 0 K 50/16

H 1 0 K 50/15 (2023.01)

H 1 0 K 50/15

請求項の数 54 (全369頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2024-17999(P2024-17999)

(22)出願日 令和6年2月8日(2024.2.8)

(62)分割の表示 特願2021-555131(P2021-555131)
の分割

原出願日 令和2年11月6日(2020.11.6)

(65)公開番号 特開2024-59681(P2024-59681A)

(43)公開日 令和6年5月1日(2024.5.1)

審査請求日 令和6年2月28日(2024.2.28)

(31)優先権主張番号 特願2019-203404(P2019-203404)

(32)優先日 令和1年11月8日(2019.11.8)

(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)

(73)特許権者 000183646

出光興産株式会社

東京都千代田区大手町一丁目2番1号

(74)代理人 110000637

弁理士法人樹之下知的財産事務所

(72)発明者 田崎 聡美

東京都千代田区大手町一丁目2番1号

出光興産株式会社内

(72)発明者 西村 和樹

東京都千代田区大手町一丁目2番1号

出光興産株式会社内

(72)発明者 齊藤 雅俊

東京都千代田区大手町一丁目2番1号

出光興産株式会社内

(72)発明者 増田 哲也

最終頁に続く

(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)【特許請求の範囲】

【請求項1】

陽極と、

陰極と、

前記陽極及び前記陰極の間に配置され、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発光層と、

前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第一の電子輸送層と、を有し、

前記第一の発光層は、下記一般式(1)で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有し、

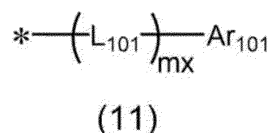
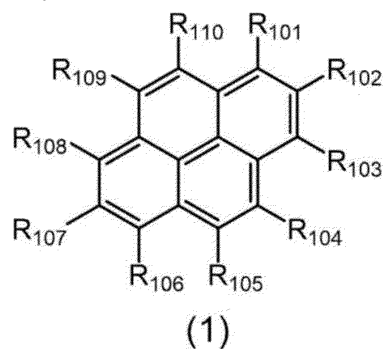
前記第一の化合物は、下記一般式(11)で表される基を少なくとも1つ有し、

前記第二の発光層は、下記一般式(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、

前記第一の電子輸送層は、下記一般式(31)で表される第三の化合物を含有する、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1】



10

(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、

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、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、

mx 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、

Ar_{101} が2以上存在する場合、2以上の Ar_{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。)

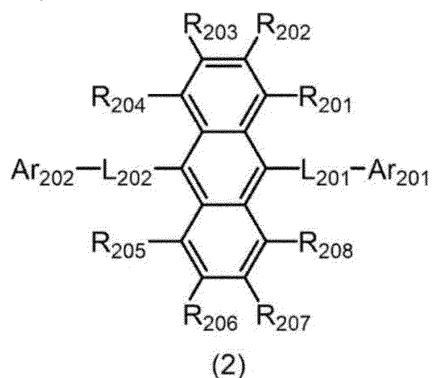
20

30

40

50

【化 2】



10

(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、

20

- $Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 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、

ニトロ基、

30

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_{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、

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、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(1)で表される第一の化合物及び前記一般式(2)で表される第二の化合物中、 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、

40

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、

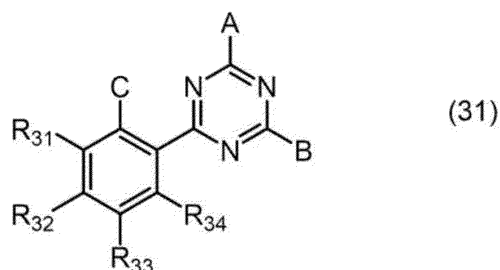
R_{902} が複数存在する場合、複数の R_{902} は、互いに同一であるか又は異なり、

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、

50

R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₅ が複数存在する場合、複数の R₉₀₅ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₆ が複数存在する場合、複数の R₉₀₆ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₇ が複数存在する場合、複数の R₉₀₇ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₁ が複数存在する場合、複数の R₈₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₂ が複数存在する場合、複数の R₈₀₂ は、互いに同一であるか又は異なる。)

【化 3】



10

(前記一般式(31)において、

A は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

B は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

C 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 ~ 60 の複素環基であり、

R₃₁ ~ R₃₄ 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 R₃₁ ~ R₃₄ は、それぞれ独立に、

20

水素原子、

シアノ基、

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環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) 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 の複素環基である。)

〔前記第三の化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃ 及び R₉₀₄ は、それぞれ独立に、

30

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、

R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なる。)

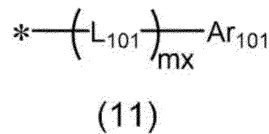
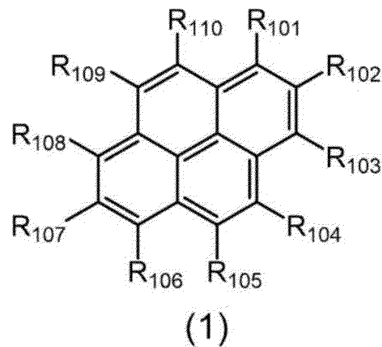
40

【請求項 2】

50

陽極と、
 陰極と、
 前記陽極及び前記陰極の間に配置され、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発光層と、
 前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第一の電子輸送層と、を有し、
 前記第一の発光層は、下記一般式(1)で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有し、
 前記第一の化合物は、下記一般式(11)で表される基を少なくとも1つ有し、
 前記第二の発光層は、下記一般式(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、
 前記第一の電子輸送層は、下記一般式(310)で表される第三の化合物を含有する、
 有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化1A】



(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、
 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、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 は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

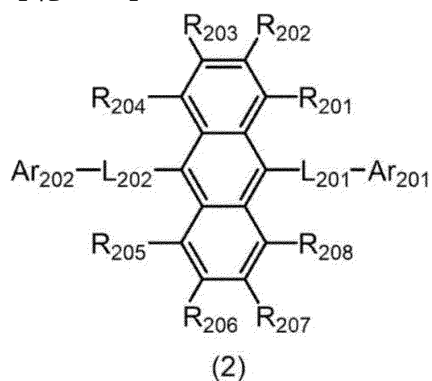
L_{101} が 2 以上存在する場合、2 以上の L_{101} は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar_{101} が 2 以上存在する場合、2 以上の Ar_{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。)

10

【化 2 A】



20

(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、

30

- $Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 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、

ニトロ基、

40

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_{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、

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、又は

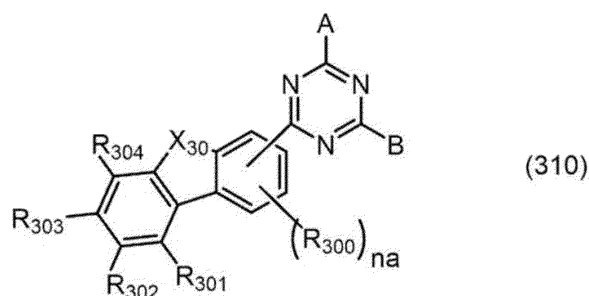
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)

(前記一般式 (1) で表される第一の化合物及び前記一般式 (2) で表される第二の化合

50

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_{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。))

【化 4】



(前記一般式 (310) において、

A は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

B は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

X_{30} は、 $CR_{51}R_{52}$ 、 NR_{53} 、酸素原子又は硫黄原子であり、

X_{30} が $CR_{51}R_{52}$ である場合、 R_{51} 及び R_{52} からなる組が、
 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、

$R_{300} \sim R_{304}$ 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_{53} 並びに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_{51} 、 R_{52} 、 $R_{300} \sim R_{304}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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、

10

20

30

40

50

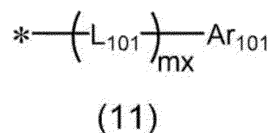
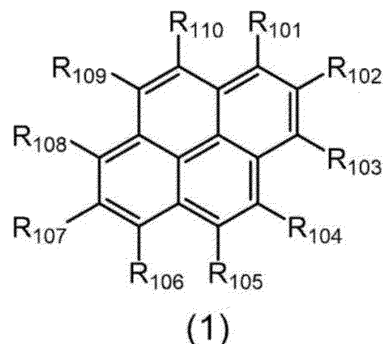
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
n a は、3 であり、3 つの R₃₀₀ は、互いに同一であるか又は異なる。) 10
(前記第三の化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃ 及び R₉₀₄ は、それぞれ独立に、
水素原子、

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、
R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なる。)

【請求項 3】

陽極と、
陰極と、
前記陽極及び前記陰極の間に配置され、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発
光層と、
前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第
一の電子輸送層と、を有し、 20
前記第一の発光層は、下記一般式 (1) で表される第一の化合物を第一のホスト材料とし
て含有し、
前記第一の化合物は、下記一般式 (11) で表される基を少なくとも 1 つ有し、
前記第二の発光層は、下記一般式 (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、
前記第一の電子輸送層は、下記一般式 (36) で表される第三の化合物を含有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 B】

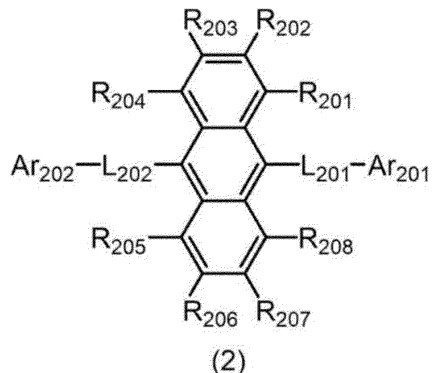


(前記一般式 (1) において、
R₁₀₁ ~ R₁₁₀ は、それぞれ独立に、
水素原子、 40

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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
- O - (R₉₀₄) で表される基、
- S - (R₉₀₅) 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、 50

- $C(=O)R_{801}$ 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、
 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、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 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、
 Ar_{101} が 2 以上存在する場合、2 以上の Ar_{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。)

【化 2 B】



(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_{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、

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、

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、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(1)で表される第一の化合物及び前記一般式(2)で表される第二の化合

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、

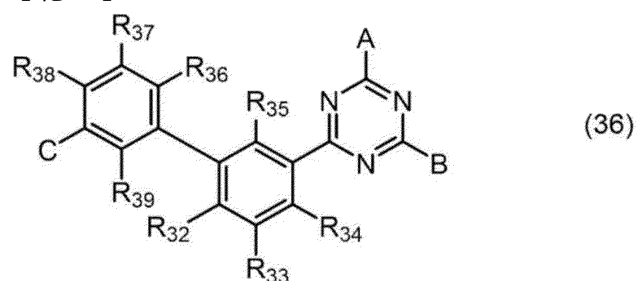
R_{906} が複数存在する場合、複数の R_{906} は、互いに同一であるか又は異なり、

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_{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。))

【化 5】



(前記一般式(36)において、

A は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

B は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

C 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 ~ 60 の複素環基であり、

$\text{R}_{32} \sim \text{R}_{39}$ 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 $R_{32} \sim R_{39}$ は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 シアノ基、
 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、
 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。))
 (前記第三の化合物中、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 及び R_{904} 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る。))

10

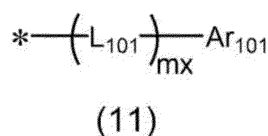
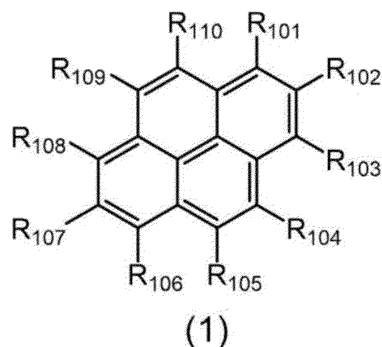
20

【請求項 4】

陽極と、
 陰極と、
 前記陽極及び前記陰極の間に配置され、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発
 光層と、
 前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第
 一の電子輸送層と、を有し、
 前記第一の発光層は、下記一般式 (1) で表される第一の化合物を第一のホスト材料とし
 て含有し、
 前記第一の化合物は、下記一般式 (1 1) で表される基を少なくとも 1 つ有し、
 前記第二の発光層は、下記一般式 (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、
 前記第一の電子輸送層は、下記一般式 (3 7) で表される第三の化合物を含有する、
 有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【化 1 C】



40

(前記一般式 (1) において、
 $R_{101} \sim R_{110}$ は、それぞれ独立に、

50

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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) 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) R₈₀₁ で表される基、

- C O O R₈₀₂ 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、R₁₀₁ ~ R₁₁₀ 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、

L₁₀₁ 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、

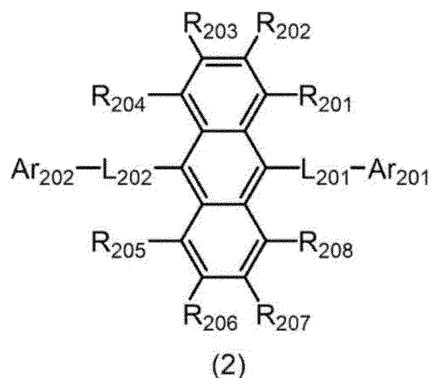
m x は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

L₁₀₁ が 2 以上存在する場合、2 以上の L₁₀₁ 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。)

【化 2 C】



(前記一般式 (2) において、

R₂₀₁ ~ R₂₀₈ 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、

10

20

30

40

50

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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) 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) R₈₀₁ で表される基、

- C O O R₈₀₂ 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、

L₂₀₁ 及び L₂₀₂ 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。))

(前記一般式 (1) で表される第一の化合物及び前記一般式 (2) で表される第二の化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₉₀₆、R₉₀₇、R₈₀₁ 及び R₈₀₂ 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、

R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₅ が複数存在する場合、複数の R₉₀₅ は、互いに同一であるか又は異なり、

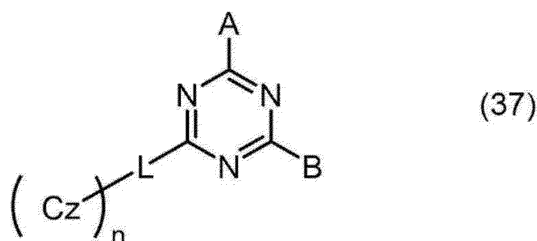
R₉₀₆ が複数存在する場合、複数の R₉₀₆ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₇ が複数存在する場合、複数の R₉₀₇ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₈₀₁ が複数存在する場合、複数の R₈₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₈₀₂ が複数存在する場合、複数の R₈₀₂ は、互いに同一であるか又は異なる。))

【化 6】



(前記一般式 (37) において、

A は、

10

20

30

40

50

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 ~ 13 の複素環基であり、
B は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

L は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 の (n + 1) 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 ~ 13 の (n + 1) 価の複素環基、又は

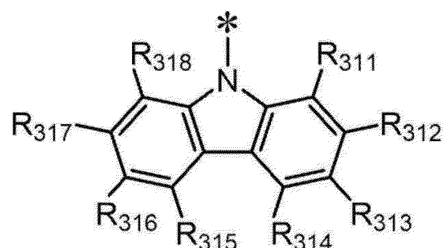
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 の芳香族炭化水素環基及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 13 の複素環基からなる群から選択される互いに異なる 2 つ又は 3 つの基が結合した構造を有する (n + 1) 価の基であり、

Cz は、下記一般式 (Cz1)、(Cz2) 又は (Cz3) で表される基であり、

n は、1、2 又は 3 であり、

n が 2 又は 3 の場合、複数の Cz は、互いに同一であるか又は異なる。))

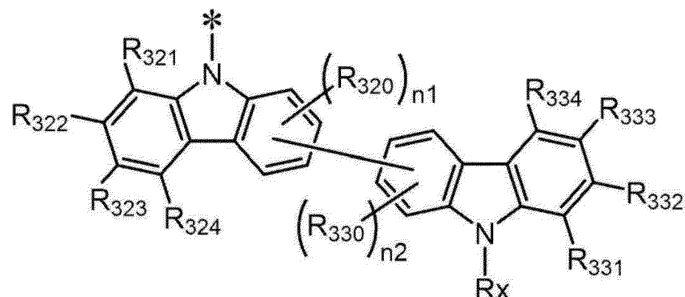
【化 7】



(Cz1)

20

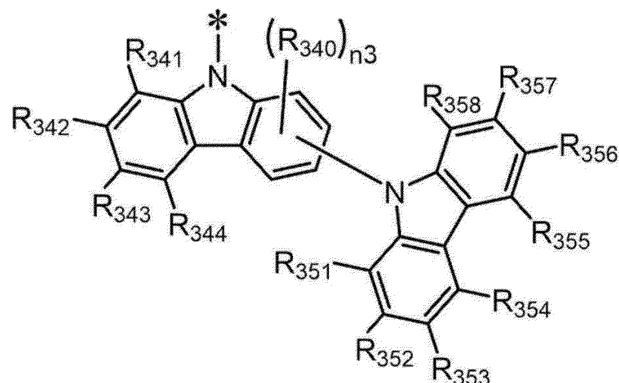
【化 8】



(Cz2)

30

【化 9】



(Cz3)

40

(前記一般式 (Cz1)、(Cz2) 及び (Cz3) において、

R311 ~ R318 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

50

互いに結合せず、

$R_{320} \sim R_{324}$ 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、

$R_{330} \sim R_{334}$ 及び R_X 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、

$R_{340} \sim R_{344}$ 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、

$R_{351} \sim R_{358}$ 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 $R_{311} \sim R_{318}$ 、 $R_{320} \sim R_{324}$ 、 $R_{330} \sim R_{334}$ 、 R_X 、 $R_{340} \sim R_{344}$ 並びに $R_{351} \sim R_{358}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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、

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、

n_1 、 n_2 及び n_3 は、3 であり、

3 つの R_{320} は、互いに同一であるか又は異なり、

3 つの R_{330} は、互いに同一であるか又は異なり、

3 つの R_{340} は、互いに同一であるか又は異なり、

前記一般式 ($Cz1$)、($Cz2$) 及び ($Cz3$) 中の * は、L と結合する。))

(前記第三の化合物中、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 及び R_{904} 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る。))

【請求項 5】

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、

前記第三の化合物は、下記一般式 (32) で表される化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

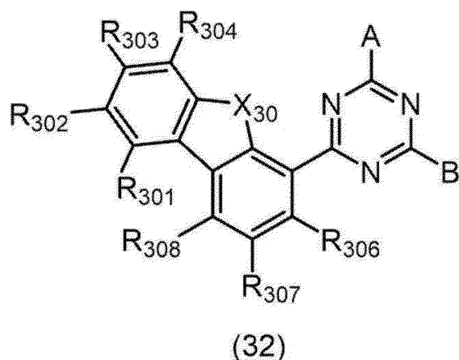
20

30

40

50

【化 1 0】



10

(前記一般式(32)において、

A及びBは、前記一般式(310)で定義したとおりであり、

X₃₀は、C R₅₁ R₅₂、N R₅₃、酸素原子又は硫黄原子であり、

X₃₀がC R₅₁ R₅₂である場合、R₅₁及びR₅₂からなる組が、

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、

R₃₀₁～R₃₀₄及びR₃₀₆～R₃₀₈のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

20

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、

R₅₃並びに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R₅₁、R₅₂、R₃₀₁～R₃₀₄及びR₃₀₆～R₃₀₈は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) 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の複素環基である。))

30

【請求項6】

陽極と、

陰極と、

前記陽極及び前記陰極の間に配置され、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発光層と、

前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第一の電子輸送層と、を有し、

40

前記第一の発光層は、前記陽極と前記第二の発光層との間に配置され、

前記第一の発光層は、下記一般式(1)で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有し、

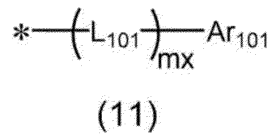
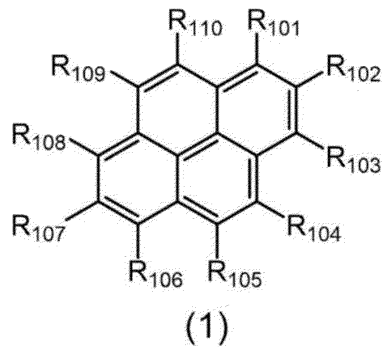
前記第一の化合物は、下記一般式(11)で表される基を少なくとも1つ有し、

前記第二の発光層は、下記一般式(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、

前記第一の電子輸送層は、下記一般式(3B)で表される第三の化合物を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子。

50

【化 1 1】



10

(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、

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、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、

mx 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、

Ar_{101} が2以上存在する場合、2以上の Ar_{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。)

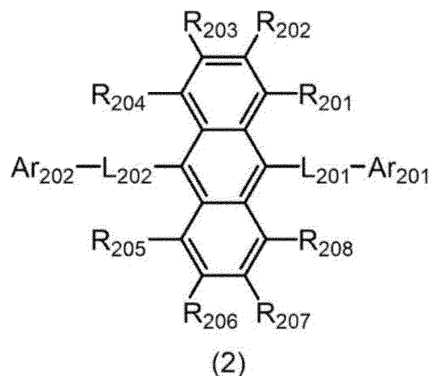
20

30

40

50

【化 1 2】



10

(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、

20

- $Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 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、

ニトロ基、

30

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_{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、

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、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(1)で表される第一の化合物及び前記一般式(2)で表される第二の化合物中、 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、

40

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、

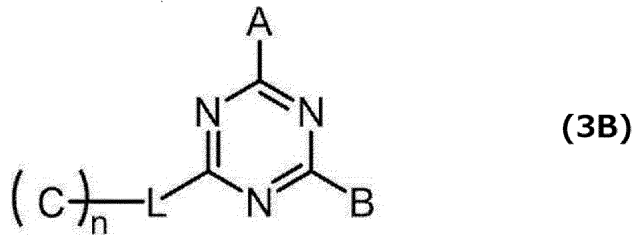
R_{902} が複数存在する場合、複数の R_{902} は、互いに同一であるか又は異なり、

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、

50

R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₅ が複数存在する場合、複数の R₉₀₅ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₆ が複数存在する場合、複数の R₉₀₆ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₇ が複数存在する場合、複数の R₉₀₇ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₁ が複数存在する場合、複数の R₈₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₂ が複数存在する場合、複数の R₈₀₂ は、互いに同一であるか又は異なる。)

【化 13】



10

(前記一般式(3B)において、

A は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

B は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

20

L は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 の (n + 1) 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 ~ 13 の (n + 1) 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 ~ 18 の芳香族炭化水素環基及び置換もしくは
 無置換の環形成原子数 5 ~ 13 の複素環基からなる群から選択される互いに異なる 2 つ又
 は 3 つの基が結合した構造を有する (n + 1) 価の基であり、

L としての環形成炭素数 6 ~ 18 の (n + 1) 価の芳香族炭化水素環基における芳香族
 炭化水素環は、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 - ターフエニル - 4 - イル基、p - ターフエニル - 3 - イル基、p - ターフエニル - 2
 - イル基、m - ターフエニル - 4 - イル基、m - ターフエニル - 3 - イル基、m - ターフ
 エニル - 2 - イル基、o - ターフエニル - 4 - イル基、o - ターフエニル - 3 - イル基、
 o - ターフエニル - 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、テトラセニル基、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、又はフルオランテニル基が水素原子によって終端された構造
 であり、

30

C 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 13 ~ 35 の複素環基であり、

40

C としての環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基は、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 - ターフエニル - 4 - イル基、p - ターフエニル
 - 3 - イル基、p - ターフエニル - 2 - イル基、m - ターフエニル - 4 - イル基、m - タ
 ーフエニル - 3 - イル基、m - ターフエニル - 2 - イル基、o - ターフエニル - 4 - イル
 基、o - ターフエニル - 3 - イル基、o - ターフエニル - 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、ベンゾ
 トリフェニレニル基、テトラセニル基、ペンタセニル基、フルオレニル基、9, 9' - スピ
 ロビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フルオランテニ

50

ル基、ベンゾフルオランテニル基、又はペリレニル基であり、

n は、1、2 又は 3 であり、

n が 2 以上の場合、複数の C は、互いに同一であるか又は異なる。）

【請求項 7】

陽極と、

陰極と、

前記陽極及び前記陰極の間に配置され、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発光層と、

前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第一の電子輸送層と、を有し、

前記第一の発光層は、前記陽極と前記第二の発光層との間に配置され、

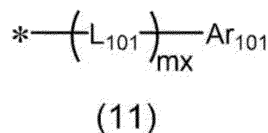
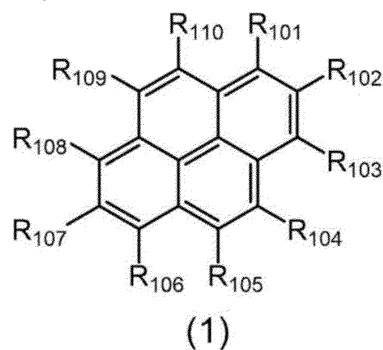
前記第一の発光層は、下記一般式 (1) で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有し、

前記第一の化合物は、下記一般式 (11) で表される基を少なくとも 1 つ有し、

前記第二の発光層は、下記一般式 (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、

前記第一の電子輸送層は、下記一般式 (38) で表される第三の化合物を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 14】



(前記一般式 (1) において、

R₁₀₁ ~ R₁₁₀ 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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) 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) R₈₀₁ で表される基、

- COO R₈₀₂ 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、R₁₀₁ ~ R₁₁₀ 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、

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、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、

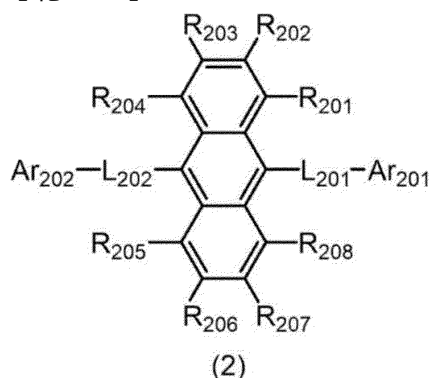
$m \times$ は、0、1、2、3、4又は5であり、

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、

Ar_{101} が2以上存在する場合、2以上の Ar_{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。)

【化15】



(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、

- 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、

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、
Ar₂₀₁ 及び Ar₂₀₂ 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。)
(前記一般式 (1) で表される第一の化合物及び前記一般式 (2) で表される第二の化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₉₀₆、R₉₀₇、R₈₀₁ 及び R₈₀₂ 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、

R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₅ が複数存在する場合、複数の R₉₀₅ は、互いに同一であるか又は異なり、

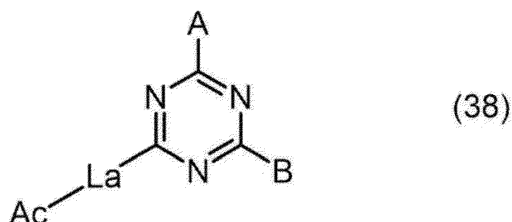
R₉₀₆ が複数存在する場合、複数の R₉₀₆ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₇ が複数存在する場合、複数の R₉₀₇ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₈₀₁ が複数存在する場合、複数の R₈₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₈₀₂ が複数存在する場合、複数の R₈₀₂ は、互いに同一であるか又は異なる。)

【化 16】



(前記一般式 (38) において、

A は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

B は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

La は、

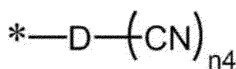
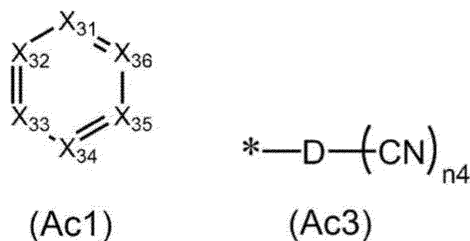
単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 の 2 価の芳香族炭化水素環基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 13 の 2 価の複素環基であり、

Ac は、下記一般式 (Ac1) 及び (Ac3) のいずれかで表される基である。)

【化 17】



10

20

30

40

50

(前記一般式 (A c 1) において、
 $X_{31} \sim X_{36}$ は、それぞれ独立に、
 窒素原子、
 La と結合する炭素原子、又は
 Ry と結合する炭素原子であり、
 $X_{31} \sim X_{36}$ のうち、1つ以上が窒素原子であり、
 $X_{31} \sim X_{36}$ のうち、1つが La と結合する炭素原子であり、
 Ry は、
 水素原子、
 シアノ基、
 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、
 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、
 Ry が複数存在する場合、複数の Ry は、互いに同一であるか又は異なる。)

10

(前記一般式 (A c 3) において、
 $n4$ は、1、2、3、4、5、6、7、8 又は 9 であり、
 D は、
 $n4$ 個のシアノ基を有する環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は
 $n4$ 個のシアノ基を有する環形成原子数 5 ~ 13 の複素環基であり、
 但し、 D は、シアノ基以外の置換基を有するか、又はシアノ基以外の置換基を有さず、
 前記一般式 (A c 3) 中の * は、 La と結合する。)

20

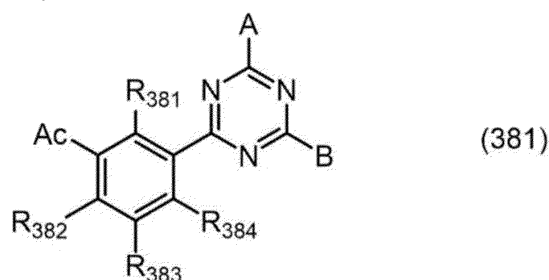
(前記第三の化合物中、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 及び R_{904} は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 R_{901} が複数存在する場合、複数の R_{901} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{902} が複数存在する場合、複数の R_{902} は、互いに同一であるか又は異なり、
 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る。)

30

【請求項 8】

請求項 7 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
 前記一般式 (38) で表される化合物が、下記一般式 (381) で表される化合物である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 18】



40

(前記一般式 (381) において、
 A 、 B 及び Ac は、前記一般式 (38) で定義したとおりであり、
 $R_{381} \sim R_{384}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

50

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 $R_{381} \sim R_{384}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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、

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、

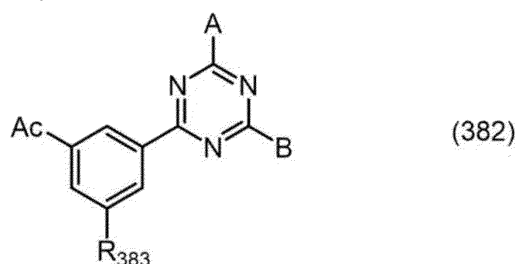
$R_{901} \sim R_{904}$ は、前記一般式 (38) で定義したとおりである。)

【請求項 9】

請求項 7 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記一般式 (38) で表される化合物は、下記一般式 (382) で表される化合物である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 19】



(前記一般式 (382) において、

A、B 及び Ac は、前記一般式 (38) で定義したとおりであり、

R_{383} は、

水素原子、

シアノ基、

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、

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、

$R_{901} \sim R_{904}$ は、前記一般式 (38) で定義したとおりである。)

【請求項 10】

陽極と、

陰極と、

前記陽極及び前記陰極の間に配置され、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発光層と、

前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第一の電子輸送層と、を有し、

前記第一の発光層は、前記陽極と前記第二の発光層との間に配置され、

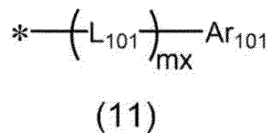
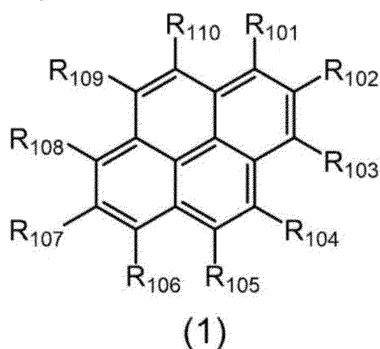
前記第一の発光層は、下記一般式 (1) で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有し、

前記第一の化合物は、下記一般式 (11) で表される基を少なくとも 1 つ有し、

前記第二の発光層は、下記一般式(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、

前記第一の電子輸送層は、下記一般式(3C)で表される第三の化合物を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化20】



10

(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、

-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、

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、

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、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、

$m \times$ 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、

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

20

30

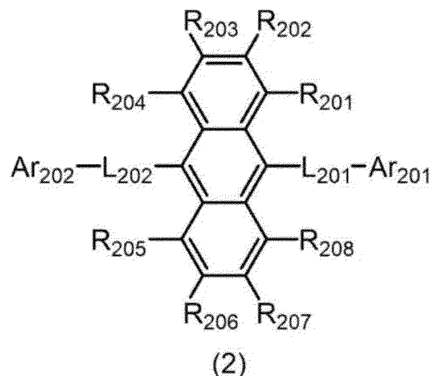
40

50

なり、

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

【化 2 1】



10

(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、

- C O O 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、

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、

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、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 (1) で表される第一の化合物及び前記一般式 (2) で表される第二の化合物中、 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、

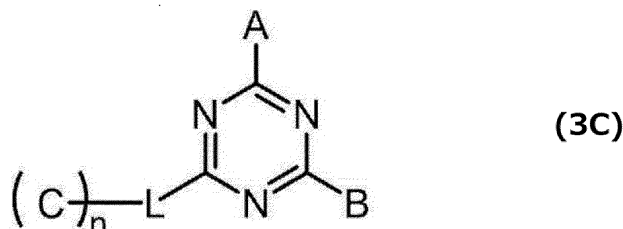
20

30

40

50

R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₅ が複数存在する場合、複数の R₉₀₅ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₆ が複数存在する場合、複数の R₉₀₆ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₇ が複数存在する場合、複数の R₉₀₇ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₁ が複数存在する場合、複数の R₈₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₂ が複数存在する場合、複数の R₈₀₂ は、互いに同一であるか又は異なる。)
 【化 2 2】



10

(前記一般式 (3 C) において、

A は、

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

20

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 13 の複素環基であり、

B は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

L は、下記一般式 (L 1) 又は (L 2) で表される芳香族炭化水素環基であり、

C 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

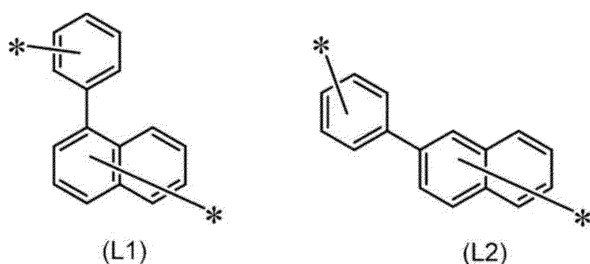
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 60 の複素環基であり、

n は、1、2 又は 3 であり、

n が 2 以上の場合、複数の C は、互いに同一であるか又は異なる。)

30

【化 2 3】



(前記一般式 (L 1) 及び (L 2) において、

40

2 つの * のうち的一方は、前記一般式 (3 C) 中に示されるトリアジン環と結合し、

2 つの * のうち他方は、(C)_n と結合し、

n が 1 の場合、(C)_n と結合する * は、1 個存在し、

n が 2 の場合、(C)_n と結合する * は、2 個存在し、

n が 3 の場合、(C)_n と結合する * は、3 個存在する。)

【請求項 1 1】

請求項 4 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

L は、

単結合、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 12 の (n + 1) 価の芳香族炭化水素環基で

50

ある、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 12】

請求項 4 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

L は、単結合である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 13】

請求項 7 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

L a は、単結合である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項 14】

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、

前記第一の発光層は、前記陽極と前記第二の発光層との間に配置されている、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 15】

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、

前記第二の発光層は、前記陽極と前記第一の発光層との間に配置されている、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【請求項 16】

請求項 1、請求項 3、請求項 6、及び請求項 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において、

C が、置換もしくは無置換の環形成原子数 13 ~ 35 の複素環基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 17】

請求項 1、請求項 3、請求項 6、及び請求項 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において、

C が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 14 ~ 24 のアリール基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【請求項 18】

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において、

A 及び B が、それぞれ独立に、

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ピフェニル基、又は

置換もしくは無置換のナフチル基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 19】

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において、

前記第三の化合物において、「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、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 20】

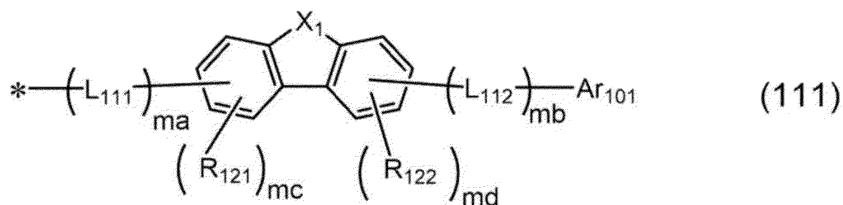
請求項 1 から請求項 19 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

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、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

50

【化 2 4】



(前記一般式(111)において、

X_1 は、 $\text{C}R_{123}R_{124}$ 、酸素原子、硫黄原子、又は $\text{N}R_{125}$ 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、

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

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、

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

- $\text{O}(R_{904})$ で表される基、

- $\text{S}(R_{905})$ 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、

- $\text{C}(=\text{O})R_{801}$ 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、

mc 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、

md 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。)

【請求項 2 1】

請求項 2 0 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

ma は、0、1又は2であり、

mb は、0、1又は2である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 2】

請求項 2 0 又は請求項 2 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

ma は、0又は1であり、

mb は、0又は1である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 3】

請求項 1 から請求項 2.2 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、

Ar₁₀₁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、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2.4】

請求項 1 から請求項 2.3 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、

Ar₁₀₁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、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

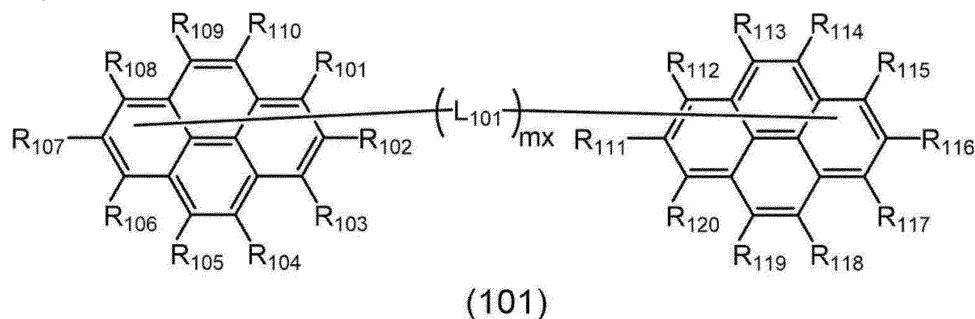
【請求項 2.5】

請求項 1 から請求項 2.4 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、

前記第一の化合物は、下記一般式 (101) で表される、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【化 2.5】



30

(前記一般式 (101) において、

R₁₀₁ ~ R₁₂₀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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
- O - (R₉₀₄) で表される基、
- S - (R₉₀₅) 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) R₈₀₁ で表される基、
- COOR₈₀₂ で表される基、

40

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、

50

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。）

【請求項26】

請求項1から請求項25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、

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、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

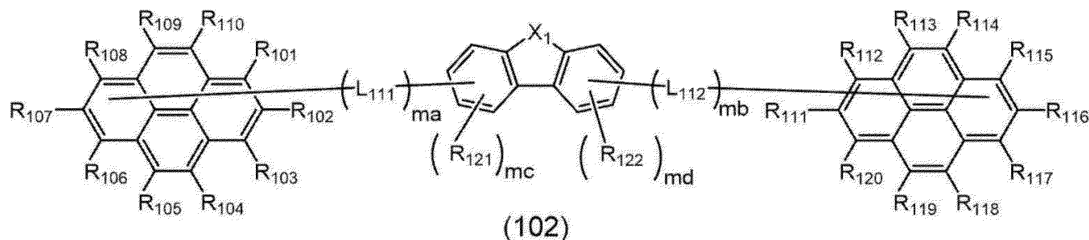
【請求項27】

請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の化合物は、下記一般式(102)で表される、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化26】



(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、

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、

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、

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

- O - (R₉₀₄) で表される基、
- S - (R₉₀₅) 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) R₈₀₁ で表される基、
- C O O R₈₀₂ 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、

10

m c は、3 であり、

3 つの R₁₂₁ 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 R₁₂₂ は、互いに同一であるか、又は異なる。)

【請求項 28】

請求項 27 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

m a は、0、1 又は 2 であり、

m b は、0、1 又は 2 である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【請求項 29】

請求項 27 又は請求項 28 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

m a は、0 又は 1 であり、

m b は、0 又は 1 である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 30】

請求項 1 から請求項 24 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、

R₁₀₁ ~ R₁₁₀ のうち 2 つ以上が、前記一般式 (11) で表される基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 31】

30

請求項 30 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

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、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 32】

請求項 31 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

A r₁₀₁ は、置換もしくは無置換のピレニル基ではなく、

L₁₀₁ 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 R₁₀₁ ~ R₁₁₀ 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、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 33】

請求項 1 から請求項 32 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、

前記一般式 (11) で表される基ではない R₁₀₁ ~ R₁₁₀ 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、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

50

【請求項 3 4】

請求項 1 から請求項 3 3 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、

前記一般式 (1 1) 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 ～ 5 0 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 ～ 5 0 のシクロアルキル基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 3 5】

請求項 1 から請求項 3 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、

前記一般式 (1 1) で表される基ではない $R_{101} \sim R_{110}$ は、水素原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 3 6】

請求項 1 から請求項 3 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、

$R_{201} \sim R_{208}$ 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 ～ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 5 0 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 5 0 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 5 0 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 5 0 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 ～ 5 0 のアラルキル基、

- C (= O) R_{801} で表される基、

- C O O R_{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 ～ 5 0 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 ～ 5 0 の 2 価の複素環基であり、

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 ～ 5 0 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 ～ 5 0 の複素環基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 3 7】

請求項 1 から請求項 3 6 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、

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 ～ 5 0 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 ～ 5 0 のアリール基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 3 8】

請求項 1 から請求項 3 7 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、

Ar₂₀₁ 及び Ar₂₀₂ 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、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項 3 9】

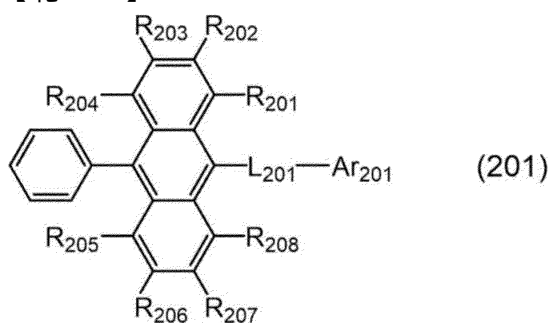
請求項 1 から請求項 3 7 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

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)、一般式 (209) 又は一般式 (210) で表される化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

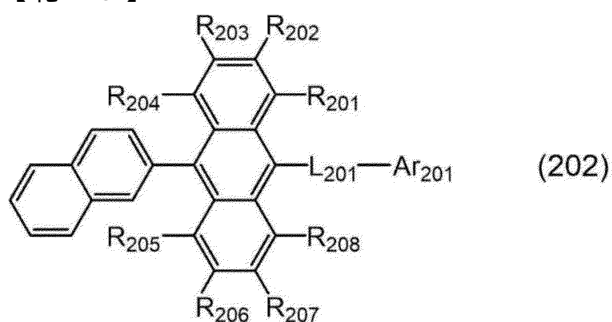
20

【化 2 7】



30

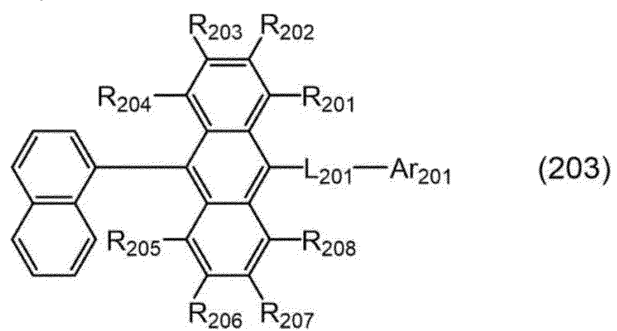
【化 2 8】



40

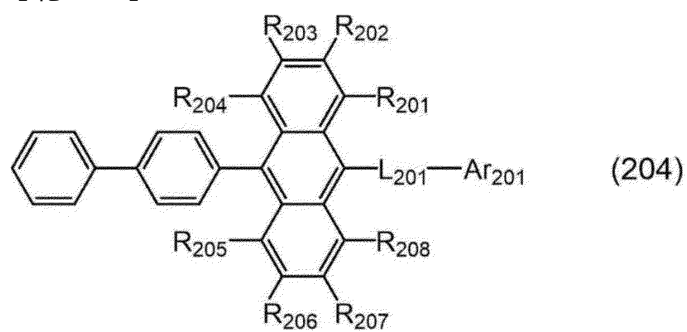
50

【化 2 9】



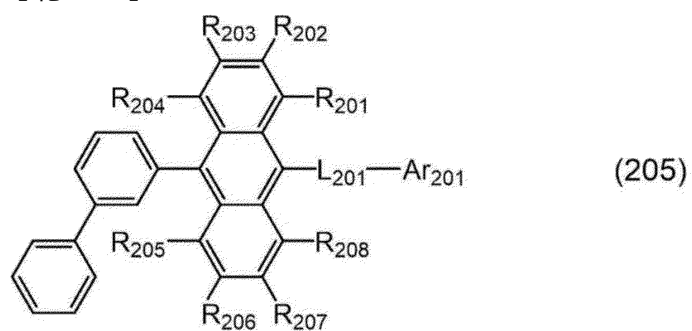
10

【化 3 0】



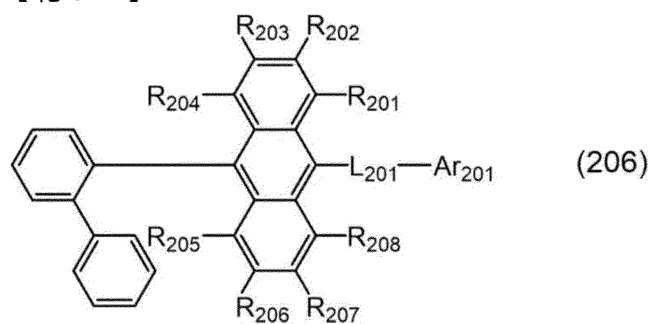
20

【化 3 1】



30

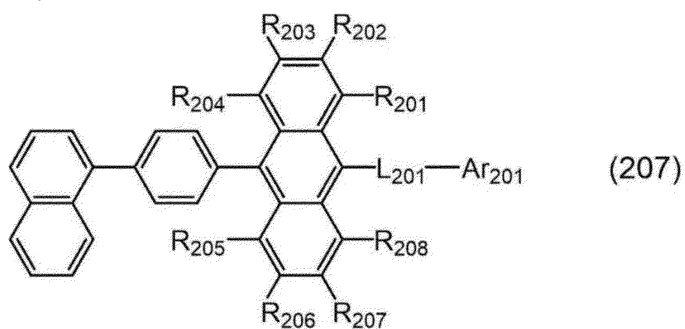
【化 3 2】



40

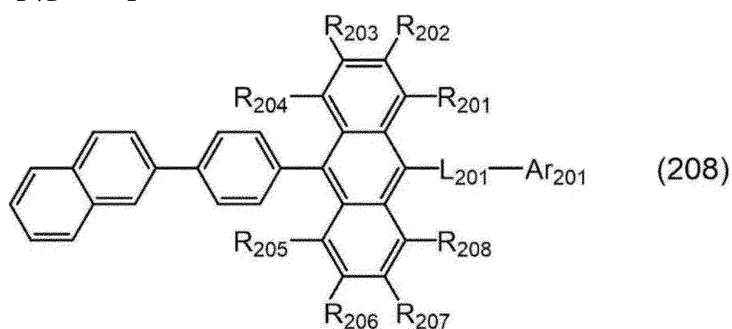
50

【化 3 3】



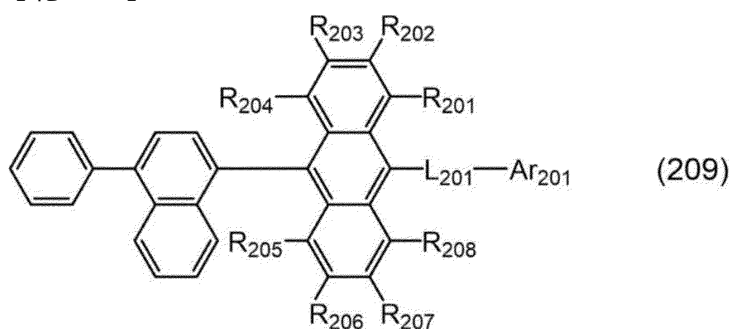
10

【化 3 4】



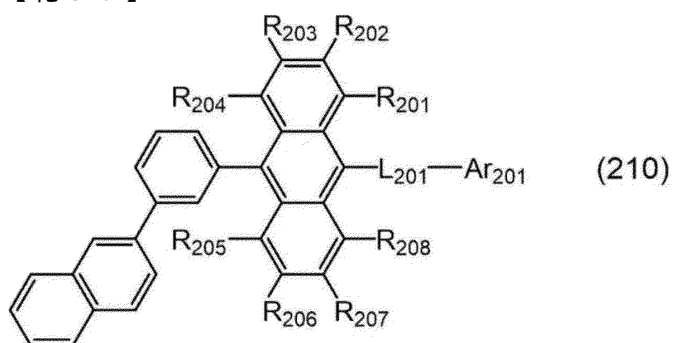
20

【化 3 5】



30

【化 3 6】



40

(前記一般式(201)～(210)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。)

【請求項 40】

50

請求項 1 から請求項 3.9 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、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 4.1】

請求項 1 から請求項 4.0 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、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 4.2】

請求項 1 から請求項 4.1 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、

前記第一の電子輸送層は、前記第一の発光層及び前記第二の発光層の内、前記陰極側に配置された発光層と、直接接する、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 4.3】

請求項 1 から請求項 4.2 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、

前記第一の電子輸送層と前記陰極との間に配置された第二の電子輸送層をさらに有する、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 4.4】

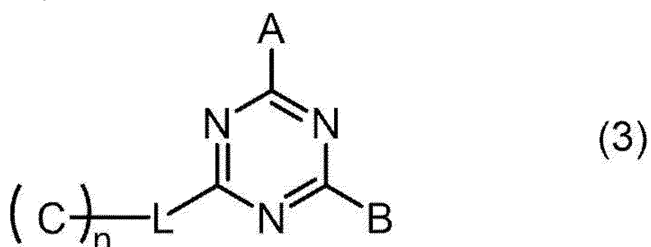
請求項 4.3 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第二の電子輸送層は、下記一般式 (3) で表される第四の化合物を含有し、

ただし、前記第一の電子輸送層が含有する第三の化合物と、前記第二の電子輸送層が含有する第四の化合物とは、互いに異なる構造である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 D】



(前記一般式 (3) において、

A は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

B は、

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 ~ 13 の複素環基であり、

L は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 の (n + 1) 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 ~ 13 の (n + 1) 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 ~ 18 の芳香族炭化水素環基及び置換もしくは無置

換の環形成原子数 5 ~ 13 の複素環基からなる群から選択される互いに異なる 2 つ又は 3 つの基が結合した構造を有する (n + 1) 価の基であり、

C 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 ~ 60 の複素環基であり、

n は、1、2 又は 3 であり、

n が 2 以上の場合、L は、単結合ではなく、

n が 2 以上の場合、複数の C は、互いに同一であるか又は異なる。))

【請求項 4 5】

請求項 4 3 又は請求項 4 4 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第一の電子輸送層と前記第二の電子輸送層とが直接接する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項 4 6】

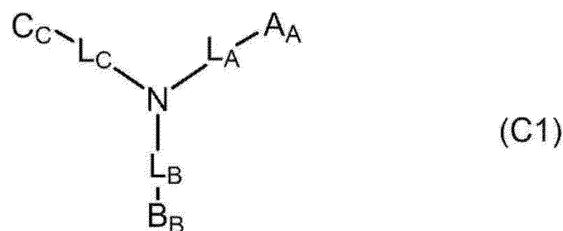
請求項 1 から請求項 4 5 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記陽極と前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層との間に配置された正孔輸送層をさらに有し、

前記正孔輸送層は、下記一般式 (C 1) 又は (D 1) で表される化合物を含有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 3 7】

20



(前記一般式 (C 1) において、

L A、L B 及び L C は、それぞれ独立に、
単結合、

30

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 ~ 13 の 2 価の複素環基であり、

A A、B B 及び C C 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 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、又は

- Si (R '9 0 1) (R '9 0 2) (R '9 0 3) で表される基である。

R '9 0 1 ~ R '9 0 3 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 ~ 30 のアリール基であり、

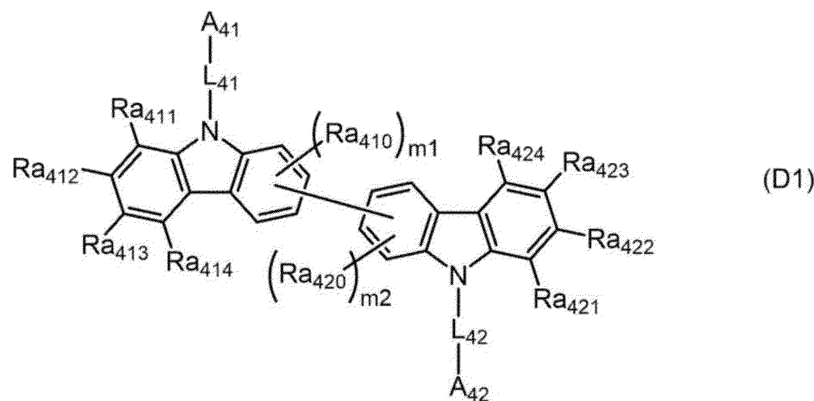
R '9 0 1 が複数存在する場合、複数の R '9 0 1 は、互いに同一であるか又は異なり、

R '9 0 2 が複数存在する場合、複数の R '9 0 2 は、互いに同一であるか又は異なり、

40

R '9 0 3 が複数存在する場合、複数の R '9 0 3 は、互いに同一であるか又は異なる。))

【化 3 8】



10

(前記一般式(D1)において、

A₄₁及びA₄₂は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であり、

L₄₁及びL₄₂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、

20

R_{a410}～R_{a414}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_{a420}～R_{a424}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_{a410}～R_{a414}並びにR_{a420}～R_{a424}は、それぞれ独立に、

30

水素原子、

シアノ基、

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(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

-O-(R₉₀₄)で表される基、

ハロゲン原子、

ニトロ基、

40

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、

m₁及びm₂は、3であり、

3つのR_{a410}は、互いに同一であるか又は異なり、

3つのR_{a420}は、互いに同一であるか又は異なり、

前記一般式(D1)で表される化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃及びR₉₀₄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、

50

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、

R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なる。))

【請求項 47】

請求項 46 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記正孔輸送層は、前記一般式 (C1) で表される化合物を含有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項 48】

請求項 1 から請求項 47 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は、素子駆動時に最大のピーク波長が 430 nm 以上 480 nm 以下の光を放射する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 49】

請求項 1 から請求項 48 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、

前記第二の発光層は、蛍光発光性の第六の化合物をさらに含有し、
前記第六の化合物は、最大のピーク波長が 430 nm 以上 480 nm 以下の発光を示す化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【請求項 50】

請求項 1 から請求項 49 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、

前記第一の発光層は、蛍光発光性の第七の化合物をさらに含有し、
前記第七の化合物は、最大のピーク波長が 430 nm 以上 480 nm 以下の発光を示す化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【請求項 51】

請求項 1 から請求項 50 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、

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、
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少なくともいずれかの基である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 52】

請求項 1 から請求項 50 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、

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1 ~ 5 のアルキル基である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 53】

請求項 1 から請求項 50 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、

50

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 5 4】

請求項 1 から請求項 5 3 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。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0 0 0 1】

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】

【0 0 0 2】

有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「有機 E L 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 E L 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 2 5 % の割合で生成し、及び三重項励起子が 7 5 % の割合で生成する。

有機 E L 素子の性能向上を図るため、有機 E L 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。有機 E L 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。

例えば、特許文献 1 には、ピレン誘導体を含有する陽極側の発光層と、アントラセン誘導体を含有する陰極側の発光層と、を備えた有機エレクトロルミネッセンス素子が記載されている。

例えば、特許文献 2 には、ホスト材料としてのアントラセン誘導体と、ドーパント材料としてのピレン誘導体とを含有する発光層を備えた有機エレクトロルミネッセンス素子が記載されている。

例えば、特許文献 3 には、ホスト材料としてのピレン誘導体を含有する陽極側の発光層と、ホスト材料としてのアントラセン誘導体を含有する陰極側の発光層と、を備えた有機エレクトロルミネッセンス素子が記載されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0 0 0 3】

【文献】特開 2 0 0 7 - 2 9 4 2 6 1 号公報

【文献】特開 2 0 1 3 - 1 5 7 5 5 2 号公報

【文献】特開 2 0 1 9 - 1 6 1 2 1 8 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0 0 0 4】

本発明は、高い発光効率かつ長い寿命で発光する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を目的とする。

【課題を解決するための手段】

【0 0 0 5】

本発明の一態様によれば、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置され、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発光層と、前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第一の電子輸送層と、を有し、前記第一の発光層は、下記一般式（1）で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有し、前記第一の化合物は、下記一般式（1 1）で表される基を少なくとも 1 つ有し、前記第二の発光層は、下記一般式（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、前記第一の電子輸送層は、下記一般式（3）で表される第三の化合物を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

10

20

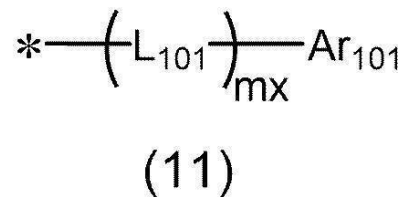
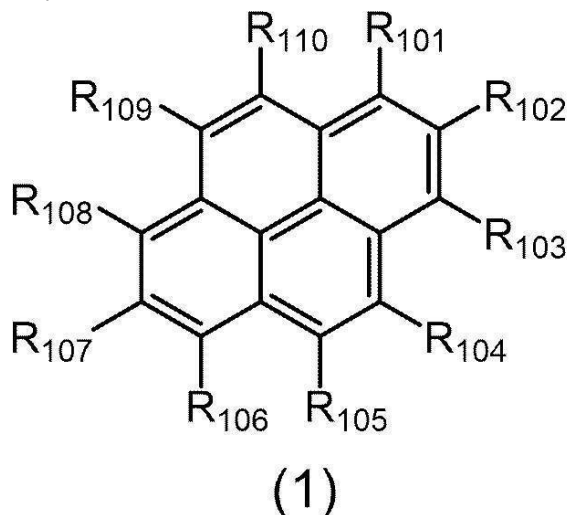
30

40

50

【 0 0 0 6 】

【 化 1 】



10

【 0 0 0 7 】

(前記一般式(1)において、

R₁₀₁ ~ R₁₁₀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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、- O - (R₉₀₄) で表される基、- S - (R₉₀₅) 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) R₈₀₁ で表される基、- C O O R₈₀₂ 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、R₁₀₁ ~ R₁₁₀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、

L₁₀₁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、

L₁₀₁が2以上存在する場合、2以上のL₁₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり

20

30

40

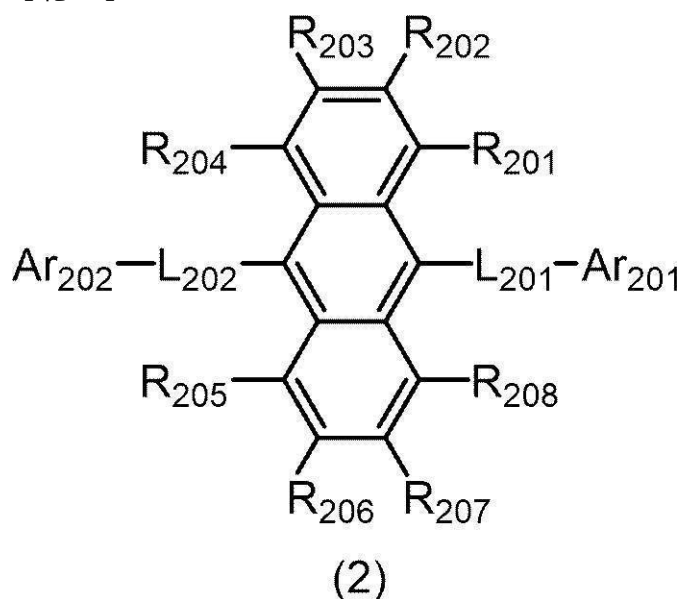
50

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

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

【 0 0 0 8 】

【 化 2 】



10

20

【 0 0 0 9 】

(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 ~ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 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 ~ 5 0 のアラルキル基、

- C (= O) R_{801} で表される基、

- C O O 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 ~ 5 0 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 ~ 5 0 の複素環基であり、

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 ~ 5 0 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 ~ 5 0 の 2 価の複素環基であり、

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 ~ 5 0 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 ~ 5 0 の複素環基である。)

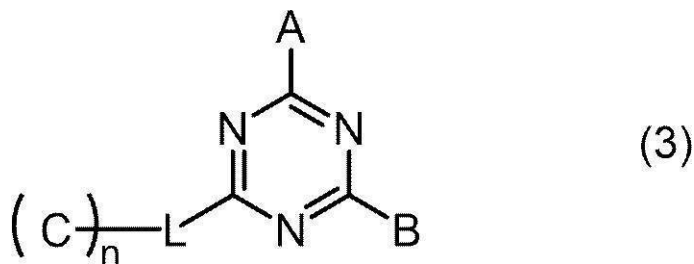
30

40

50

【 0 0 1 0 】

【 化 3 】



10

【 0 0 1 1 】

(前記一般式(3)において、

Aは、

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5～13の複素環基であり、

Bは、

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5～13の複素環基であり、

Lは、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18の(n+1)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5～13の(n+1)価の複素環基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18の芳香族炭化水素環基及び置換もしくは
無置換の環形成原子数5～13の複素環基からなる群から選択される互いに異なる2つ又は
3つの基が結合した構造を有する(n+1)価の基であり、

20

C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5～60の複素環基であり、

nは、1、2又は3であり、

nが2以上の場合、Lは、単結合ではなく、

nが2以上の場合、複数のCは、互いに同一であるか又は異なる。)

30

【 0 0 1 2 】

(前記一般式(1)で表される第一の化合物及び前記一般式(2)で表される第二の化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₉₀₆、R₉₀₇、R₈₀₁及びR₈₀₂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、

40

R₉₀₁が複数存在する場合、複数のR₉₀₁は、互いに同一であるか又は異なり、R₉₀₂が複数存在する場合、複数のR₉₀₂は、互いに同一であるか又は異なり、R₉₀₃が複数存在する場合、複数のR₉₀₃は、互いに同一であるか又は異なり、R₉₀₄が複数存在する場合、複数のR₉₀₄は、互いに同一であるか又は異なり、R₉₀₅が複数存在する場合、複数のR₉₀₅は、互いに同一であるか又は異なり、R₉₀₆が複数存在する場合、複数のR₉₀₆は、互いに同一であるか又は異なり、R₉₀₇が複数存在する場合、複数のR₉₀₇は、互いに同一であるか又は異なり、R₈₀₁が複数存在する場合、複数のR₈₀₁は、互いに同一であるか又は異なり、R₈₀₂が複数存在する場合、複数のR₈₀₂は、互いに同一であるか又は異なる。)

【 0 0 1 3 】

50

本発明の一態様によれば、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置され、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発光層と、前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第一の電子輸送層と、を有し、前記第一の発光層は、第一のホスト材料としての第一の化合物を含有し、前記第二の発光層は、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、最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物を少なくとも含み、前記第二の発光層は、最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物を少なくとも含み、前記第一の発光層が含む最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物と前記第二の発光層が含む最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物とが、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1A)の関係を満たし、前記第一の電子輸送層は、前記一般式(3)で表される第三の化合物を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

10

$$T_1(H1) > T_1(H2) \quad \dots (\text{数1A})$$

【0014】

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。

【0015】

本発明の一態様によれば、高い発光効率かつ長い寿命で発光する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。

20

【図面の簡単な説明】

【0016】

【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。

【図2】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。

【図3】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。

30

【図4】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】

【0017】

[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。

【0018】

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。

40

【0019】

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

50

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。

【0020】

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。

【0021】

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。

【0022】

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。

【0023】

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

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

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

【0024】

「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。

【0025】

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。

10

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。

【0026】

・「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。

20

「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G1B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。

30

【0027】

・無置換のアリール基（具体例群G1A）：

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、

40

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、

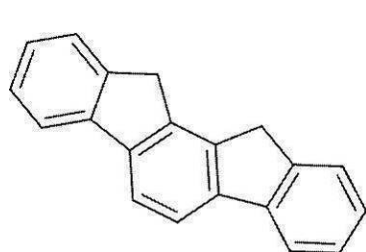
50

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

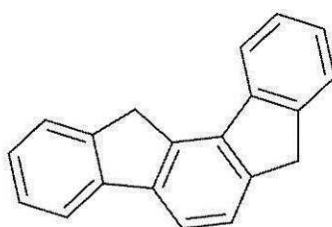
下記一般式 (TEMP-1) ~ (TEMP-15) で表される環構造から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 1 価のアリール基。

【 0 0 2 8 】

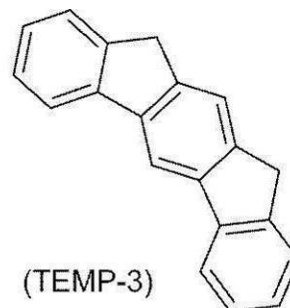
【 化 4 】



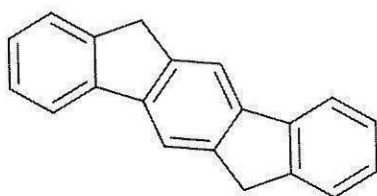
(TEMP-1)



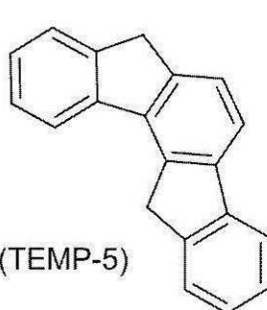
(TEMP-2)



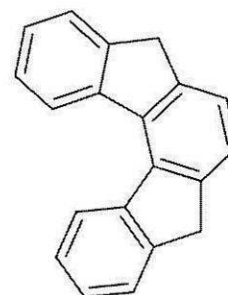
(TEMP-3)



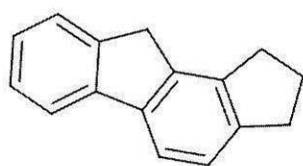
(TEMP-4)



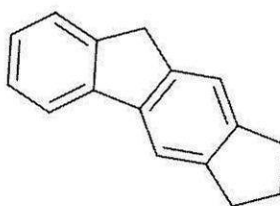
(TEMP-5)



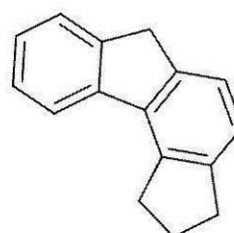
(TEMP-6)



(TEMP-7)



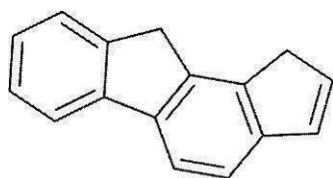
(TEMP-8)



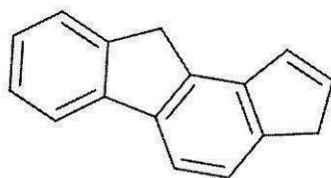
(TEMP-9)

【 0 0 2 9 】

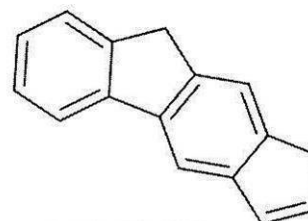
【化 5】



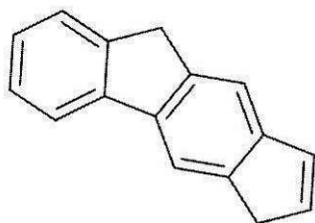
(TEMP-10)



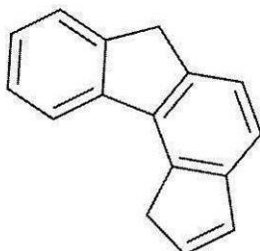
(TEMP-11)



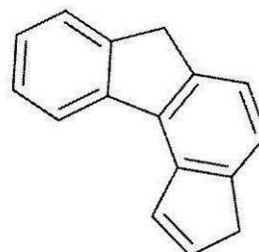
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

10

【 0 0 3 0 】

20

・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 - t - 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。

【 0 0 3 1 】

40

・「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

50

、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 G 2）としては、以下の無置換の複素環基（具体例群 G 2 A）、及び置換の複素環基（具体例群 G 2 B）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。

10

「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 G 2 A 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、ここに列举した「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。

【0032】

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。

20

【0033】

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。

30

【0034】

・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、

40

50

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。	10
【 0 0 3 5 】 ・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。	20
【 0 0 3 6 】 ・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）、	30
	40
	50

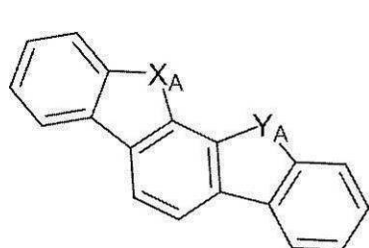
ベンゾチアゾリル基、
 ベンゾイソチアゾリル基、
 フェノチアジニル基、
 ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、
 アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、
 ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、
 アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフトベンゾチエニル基）、及び
 ジアザナフトベンゾチオフェニル基（ジアザナフトベンゾチエニル基）。

【 0 0 3 7 】

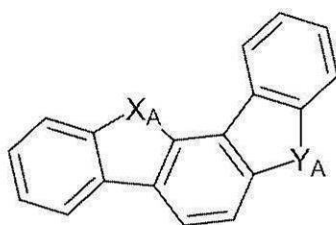
・下記一般式（TEMP - 16）～（TEMP - 33）で表される環構造から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 1 価の複素環基（具体例群 G 2 A 4）：

【 0 0 3 8 】

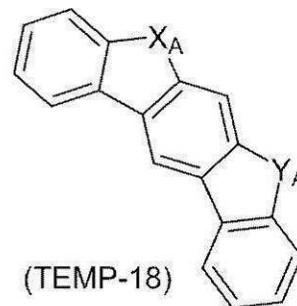
【化 6】



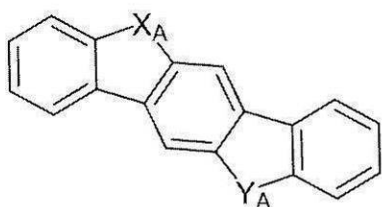
(TEMP-16)



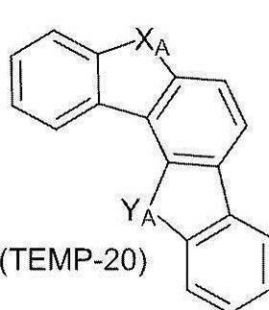
(TEMP-17)



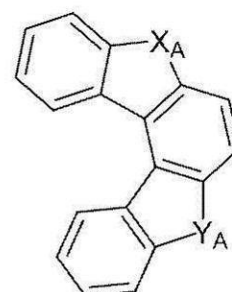
(TEMP-18)



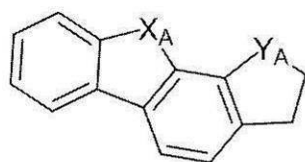
(TEMP-19)



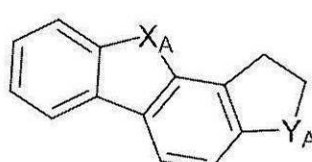
(TEMP-20)



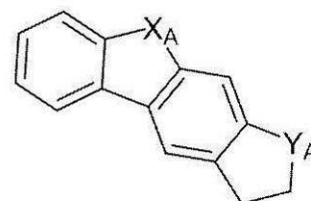
(TEMP-21)



(TEMP-22)



(TEMP-23)



(TEMP-24)

【 0 0 3 9 】

10

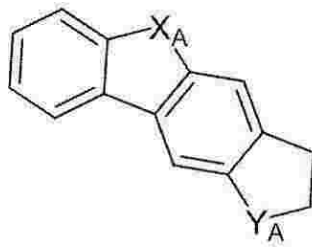
20

30

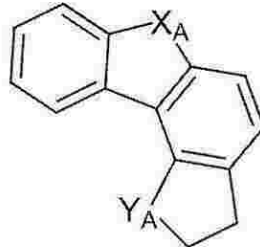
40

50

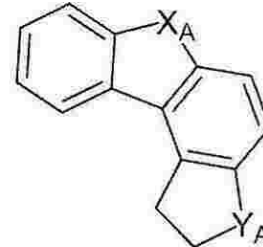
【化 7】



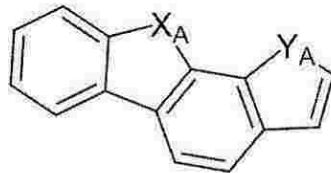
(TEMP-25)



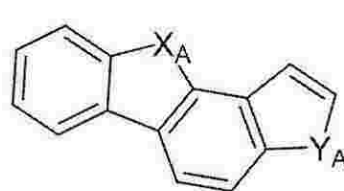
(TEMP-26)



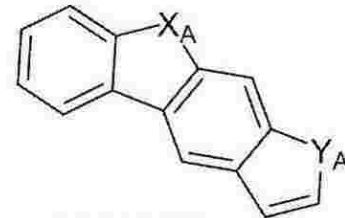
(TEMP-27)



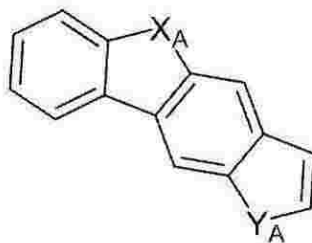
(TEMP-28)



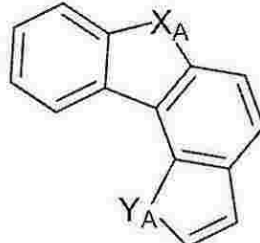
(TEMP-29)



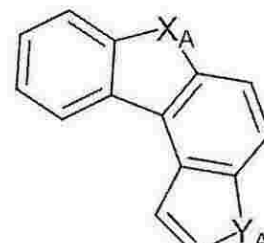
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

【 0 0 4 0 】

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。

【 0 0 4 1 】

・窒素原子を含む置換の複素環基 (具体例群 G 2 B 1) :

- (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。

【 0 0 4 2 】

・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 [9 H - キサンテン - 9 , 9 ' - [9 H] フルオレン] の 1 価の残基。

【 0 0 4 3 】

・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 [9 H - チオキサンテン - 9 , 9 ' - [9 H] フルオレン] の 1 価の残基。

【 0 0 4 4 】

・前記一般式 (T E M P - 1 6) ~ (T E M P - 3 3) 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 ）：

【 0 0 4 5 】

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 N H 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 C H 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。

【 0 0 4 6 】

・「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 G 3 ）としては、以下の無置換のアルキル基（具体例群 G 3 A ）及び置換のアルキル基（具体例群 G 3 B ）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 G 3 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、及び置換のアルキル基（具体例群 G 3 B ）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 G 3 B 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 G 3 B 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。

【 0 0 4 7 】

・無置換のアルキル基（具体例群 G 3 A ）：

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。

【 0 0 4 8 】

・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。

【 0 0 4 9 】

・「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。

【 0 0 5 0 】

・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。

【 0 0 5 1 】

・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。

【 0 0 5 2 】

・「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。

【 0 0 5 3 】

・無置換のアルキニル基（具体例群 G 5 A）：

エチニル基

【 0 0 5 4 】

・「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。

10

「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。

20

【 0 0 5 5 】

・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、

30

1 - ノルボルニル基、及び

2 - ノルボルニル基。

【 0 0 5 6 】

・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。

【 0 0 5 7 】

・「 - Si (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基」

本明細書に記載の - Si (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基の具体例（具体例群 G 7）としては、

- Si (G 1) (G 1) (G 1)、

40

- Si (G 1) (G 2) (G 2)、

- Si (G 1) (G 1) (G 2)、

- Si (G 2) (G 2) (G 2)、

- Si (G 3) (G 3) (G 3)、及び

- Si (G 6) (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。

50

- S i (G 1) (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。

- S i (G 1) (G 2) (G 2) における複数の G 2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

- S i (G 1) (G 1) (G 2) における複数の G 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

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

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

10

- 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。

【 0 0 5 8 】

・「 - O - (R 9 0 4) で表される基」

本明細書に記載の - O - (R 9 0 4) 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。

20

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。

【 0 0 5 9 】

・「 - S - (R 9 0 5) で表される基」

本明細書に記載の - S - (R 9 0 5) 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。

30

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。

【 0 0 6 0 】

・「 - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基」

本明細書に記載の - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基の具体例 (具体例群 G 1 0) 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。

40

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。

50

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。

【 0 0 6 1 】

・「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。

10

【 0 0 6 2 】

・「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 ～ 5 0 であり、好ましくは 1 ～ 3 0 であり、より好ましくは 1 ～ 1 8 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。

20

【 0 0 6 3 】

・「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 ～ 5 0 であり、好ましくは 1 ～ 3 0 であり、より好ましくは 1 ～ 1 8 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 G 3 ）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。

30

40

【 0 0 6 4 】

・「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 (G 3) で表される基であり、ここで、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。「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 ～ 5 0 であり、好ましくは 1 ～ 3 0 であり、より好ましくは 1 ～ 1 8 である。

【 0 0 6 5 】

50

・「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 (G 3) で表される基であり、ここで、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。「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 ~ 5 0 であり、好ましくは 1 ~ 3 0 であり、より好ましくは 1 ~ 1 8 である。

【 0 0 6 6 】

・「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 (G 1) で表される基であり、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。「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 ~ 5 0 であり、好ましくは 6 ~ 3 0 であり、より好ましくは 6 ~ 1 8 である。

【 0 0 6 7 】

・「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 (G 1) で表される基であり、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。「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 ~ 5 0 であり、好ましくは 6 ~ 3 0 であり、より好ましくは 6 ~ 1 8 である。

【 0 0 6 8 】

・「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、- S i (G 3) (G 3) (G 3) で表される基であり、ここで、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。- 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。「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 ~ 5 0 であり、好ましくは 1 ~ 2 0 であり、より好ましくは 1 ~ 6 である。

【 0 0 6 9 】

・「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、- (G 3) - (G 1) で表される基であり、ここで、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」であり、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。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 ~ 5 0 であり、好ましくは 7 ~ 3 0 であり、より好ましくは 7 ~ 1 8 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 - プチル基、- ナフチルメチル基、1 - - ナフチルエチル基、2 - - ナフチルエチル基、1 - - ナフチルイソプロピル基、2 - - ナフチルイソプロピル基、- ナフチルメチル基、1 - - ナフチルエチル基、2 - - ナフチルエチル基、1 - - ナフチルイソプロピル基、及び 2 - - ナフチルイソプロピル基等が挙げられる。

【 0 0 7 0 】

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

10

20

30

40

50

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、ビレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9, 9' - スピロピフルオレニル基、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。

【0071】

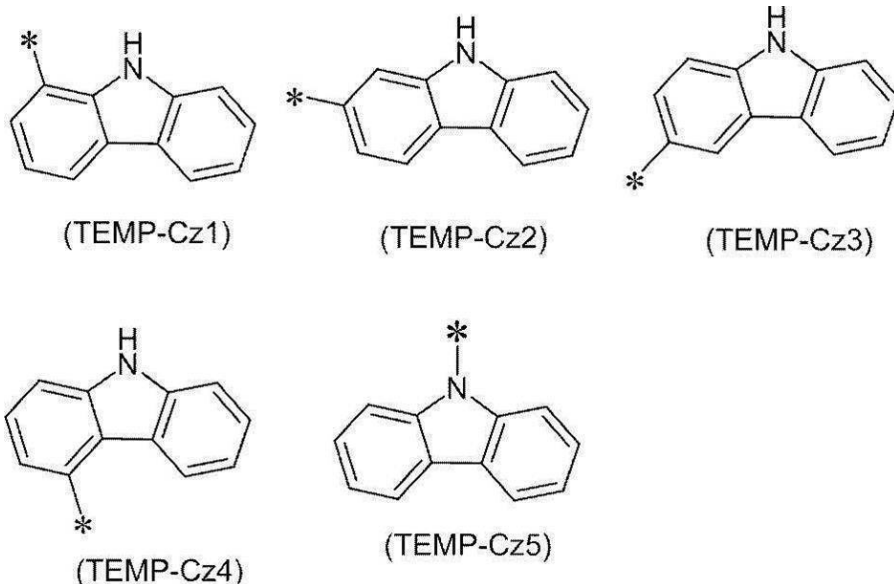
本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリル基、カルバゾリル基（1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、又は 9 - カルバゾリル基）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、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。

【0072】

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。

【0073】

【化 8】



【0074】

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。

【0075】

10

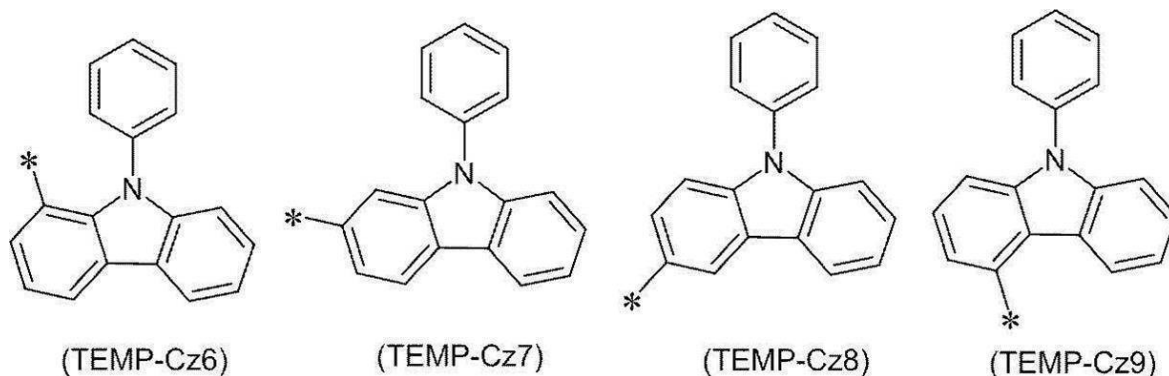
20

30

40

50

【化 9】



10

【0076】

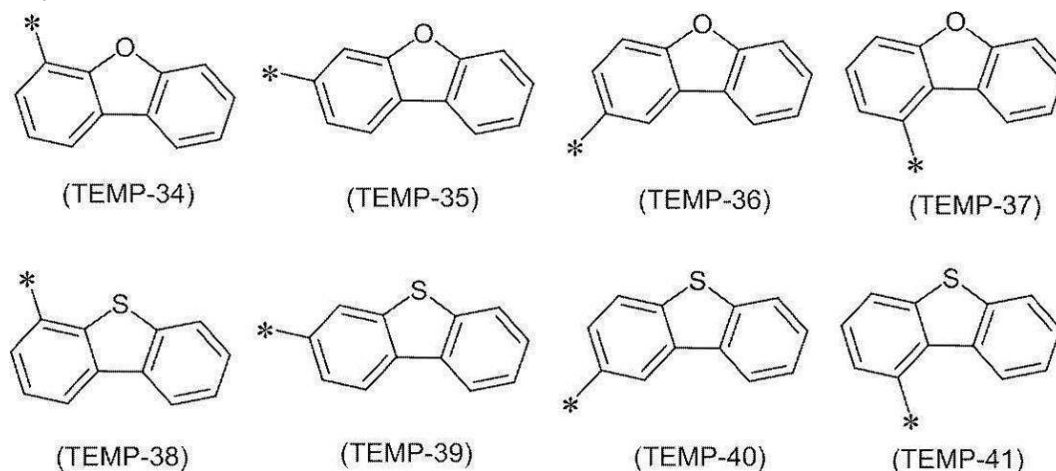
前記一般式 (TEMP-Cz1) ~ (TEMP-Cz9) 中、* は、結合位置を表す。

【0077】

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。

【0078】

【化 10】



20

30

【0079】

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

【0080】

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。

【0081】

・「置換もしくは無置換のアリーレン基」

40

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G12）としては、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」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。

【0082】

・「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

50

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。

【 0 0 8 3 】

・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

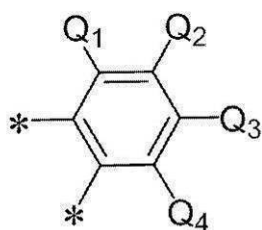
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 2 価の基である。「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群 G 1 4 ）としては、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 2 価の基等が挙げられる。

【 0 0 8 4 】

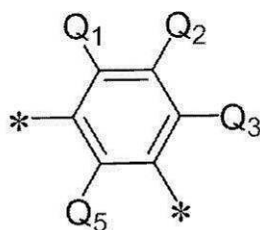
本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式 (T E M P - 4 2) ~ (T E M P - 6 8) のいずれかの基である。

【 0 0 8 5 】

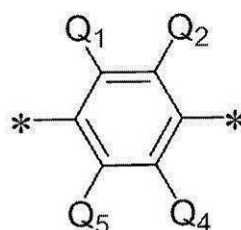
【 化 1 1 】



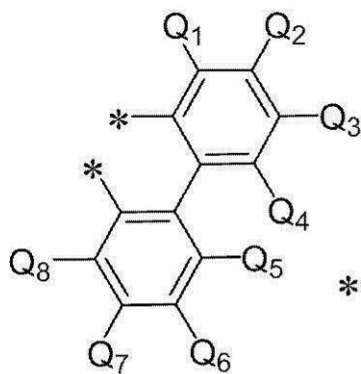
(TEMP-42)



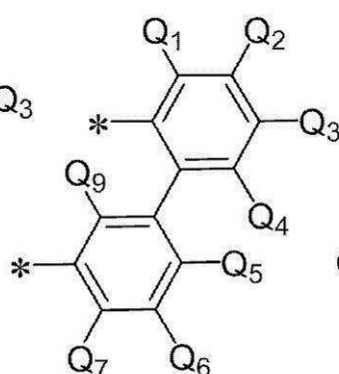
(TEMP-43)



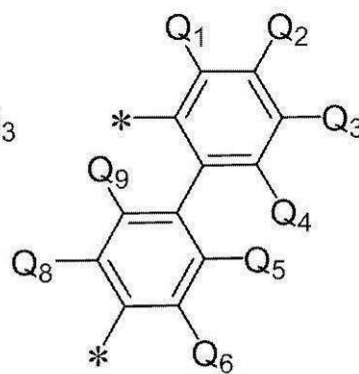
(TEMP-44)



(TEMP-45)



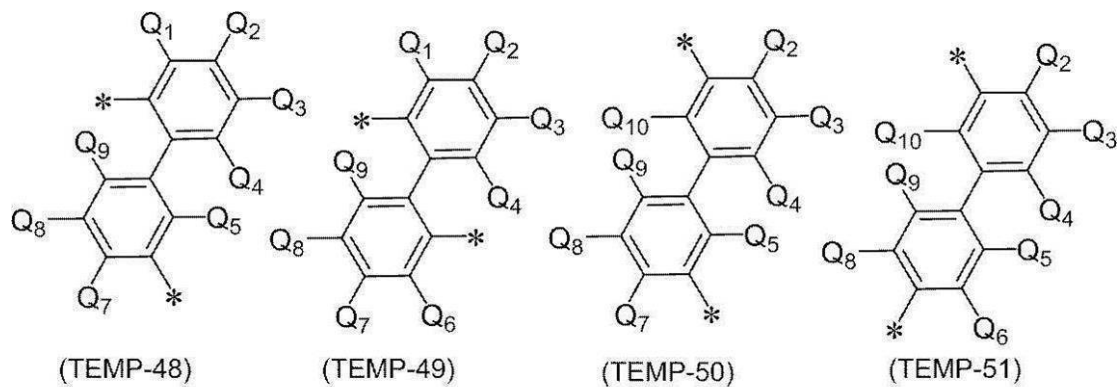
(TEMP-46)



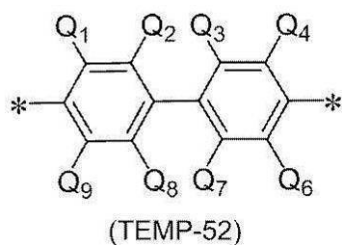
(TEMP-47)

【 0 0 8 6 】

【化 1 2】



10



【 0 0 8 7 】

20

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

前記一般式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中、* は、結合位置を表す。

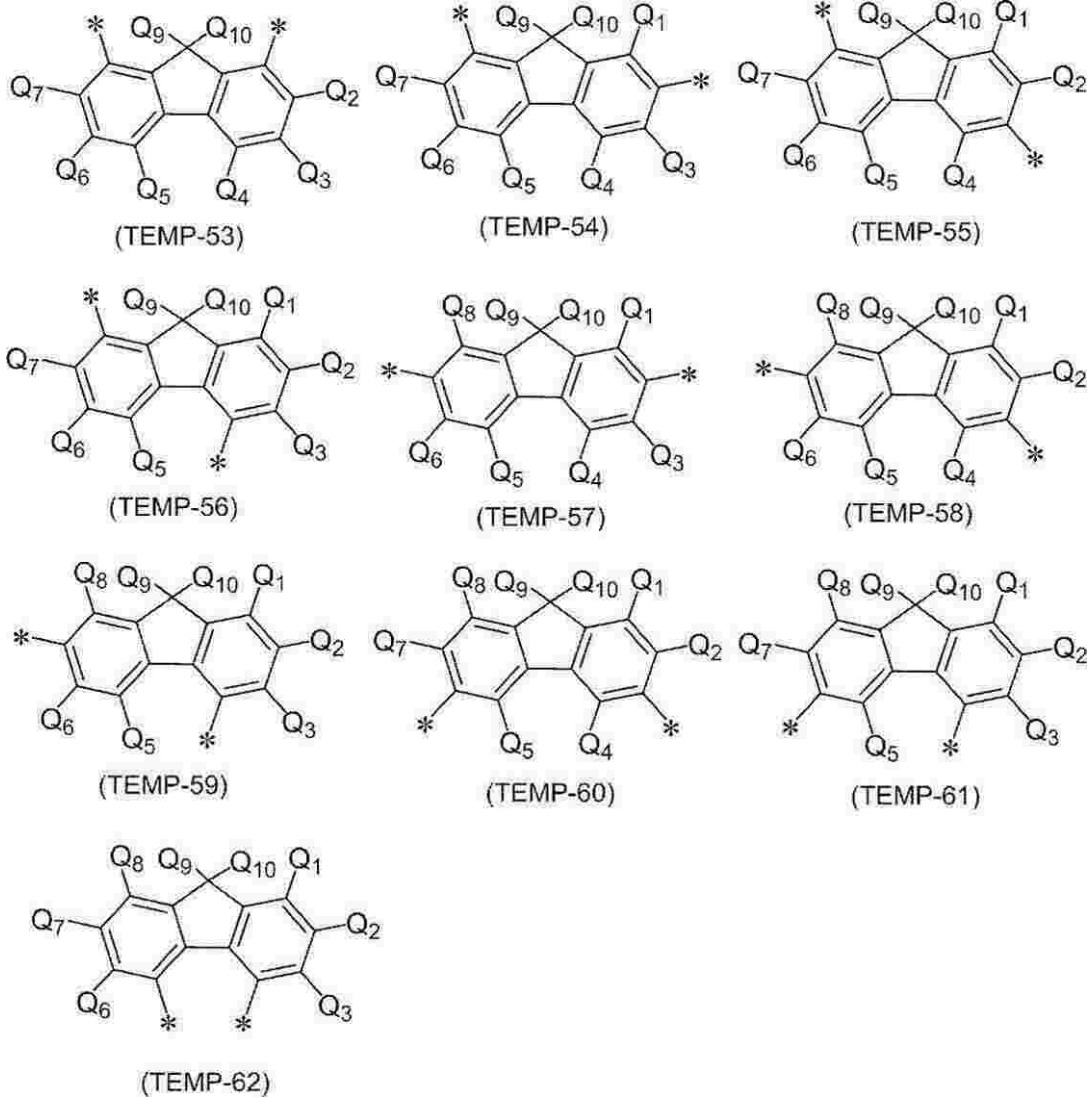
【 0 0 8 8 】

30

40

50

【化 1 3】



10

20

30

【 0 0 8 9】

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。

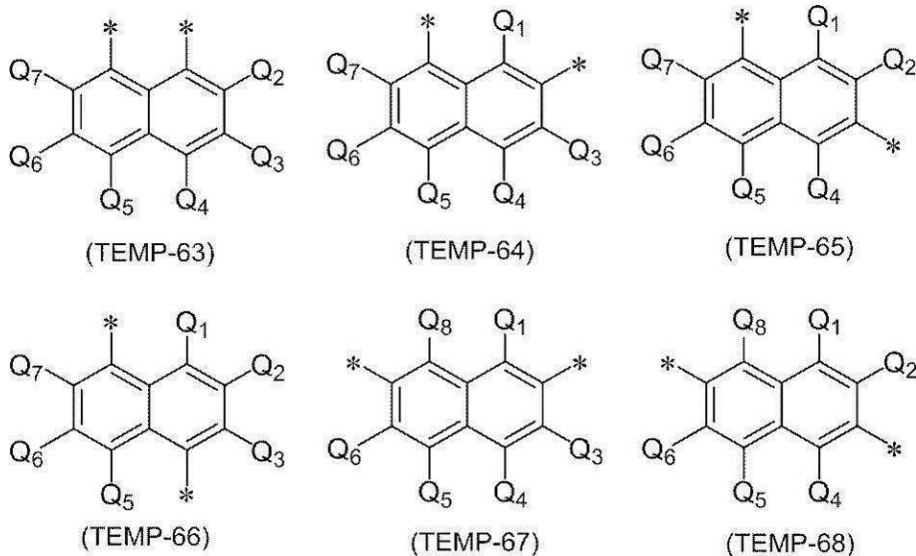
前記一般式 (TEMP - 53) ~ (TEMP - 62) 中、* は、結合位置を表す。

【 0 0 9 0】

40

50

【化 1 4】



10

【 0 0 9 1】

前記一般式 (TEMP - 63) ~ (TEMP - 68) 中、Q₁ ~ Q₈ 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。

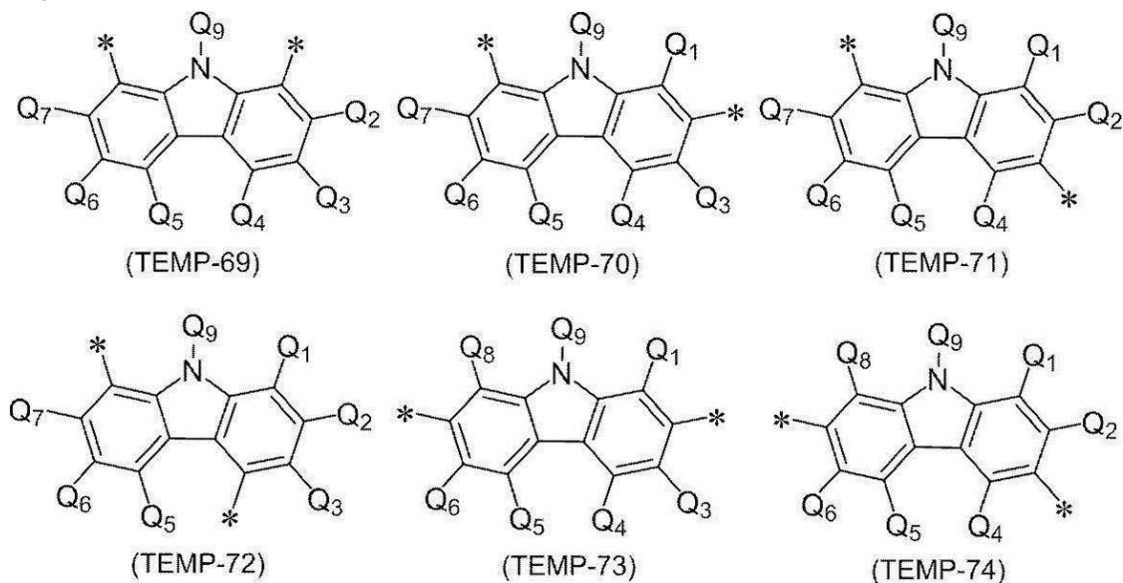
20

【 0 0 9 2】

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。

【 0 0 9 3】

【化 1 5】



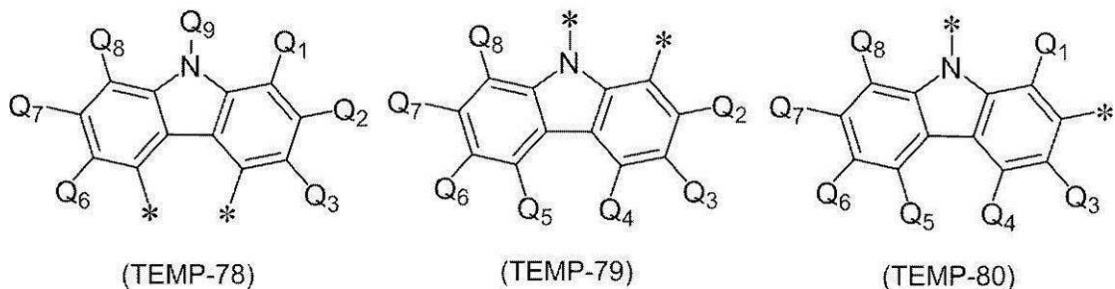
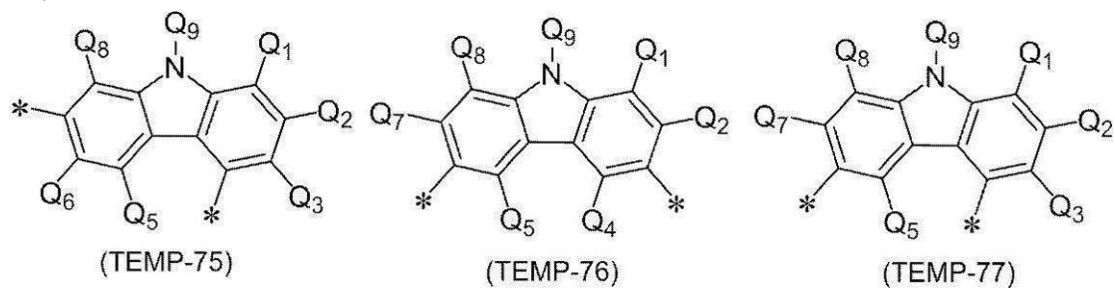
30

40

【 0 0 9 4】

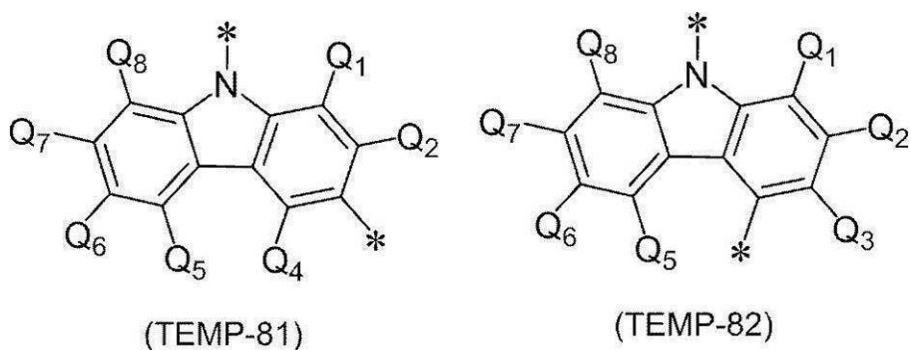
50

【化 1 6】



【 0 0 9 5】

【化 1 7】

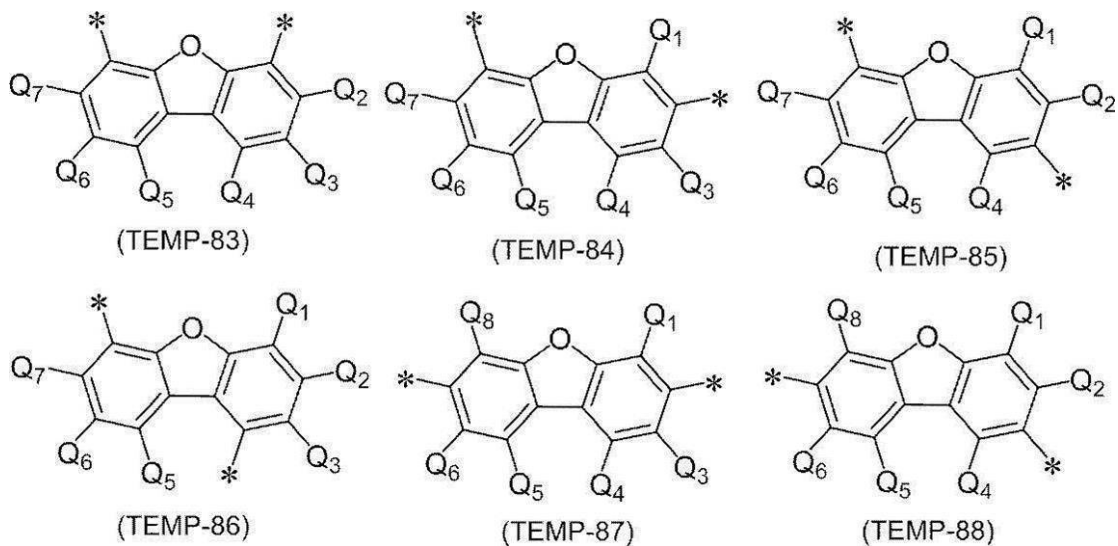


【 0 0 9 6】

前記一般式 (TEMP - 69) ~ (TEMP - 82) 中、Q₁ ~ Q₉ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

【 0 0 9 7】

【化 1 8】



10

20

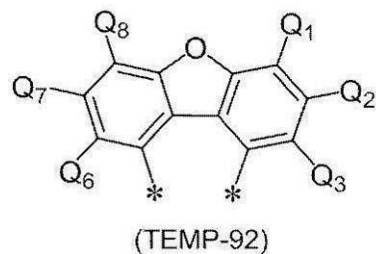
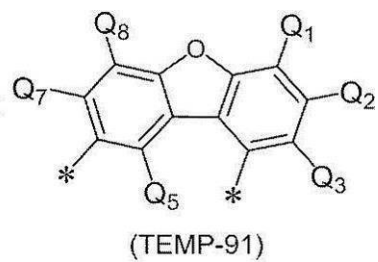
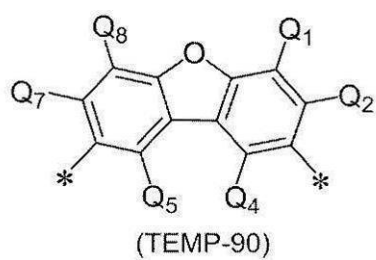
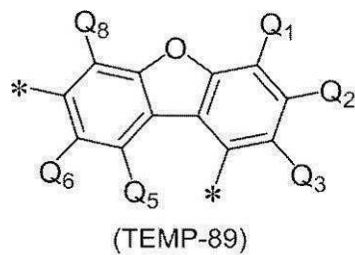
30

40

50

【 0 0 9 8 】

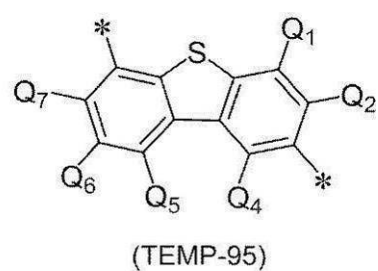
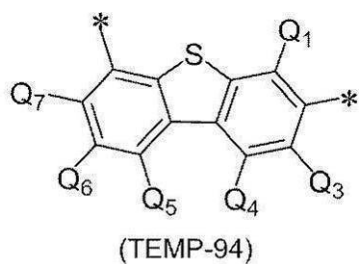
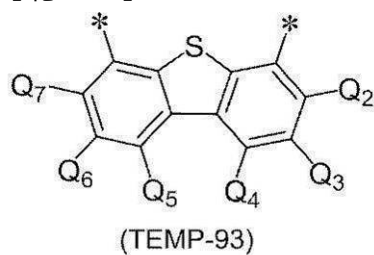
【 化 1 9 】



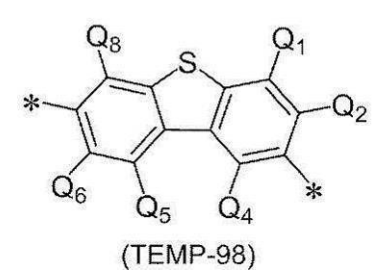
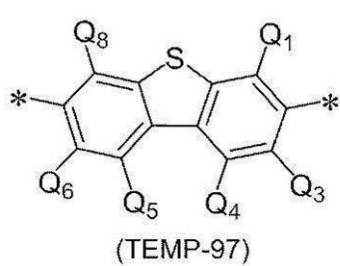
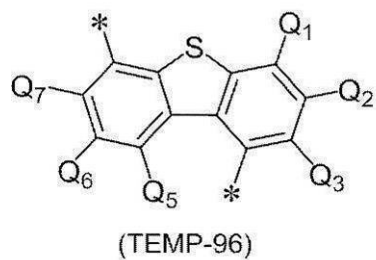
10

【 0 0 9 9 】

【 化 2 0 】



20



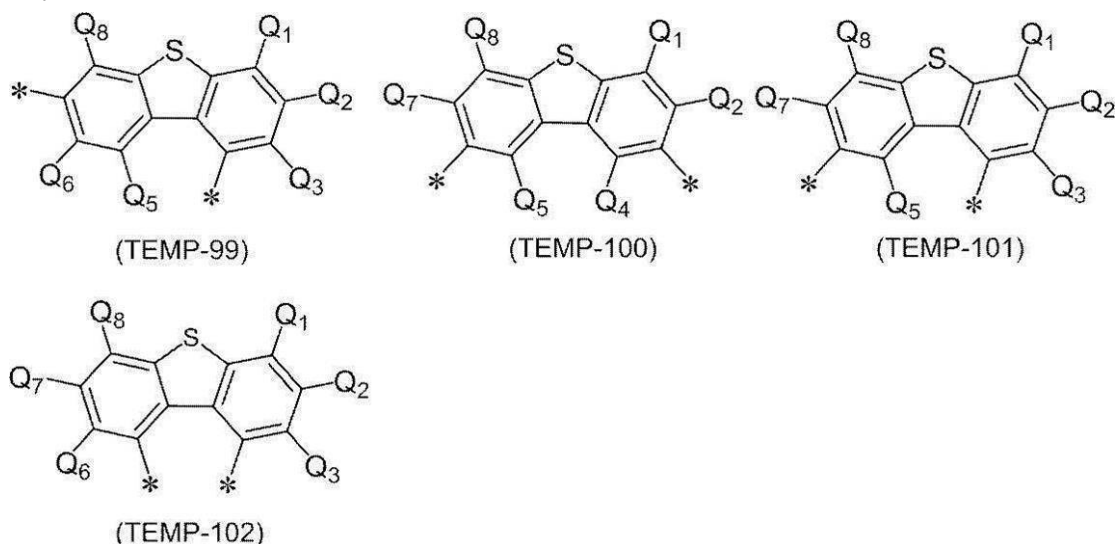
30

【 0 1 0 0 】

40

50

【化 2 1】



10

【 0 1 0 1】

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

【 0 1 0 2】

以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

20

【 0 1 0 3】

・「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。

30

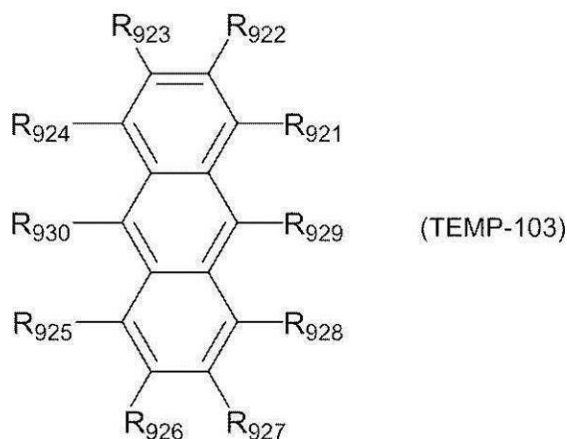
本明細書における、「隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合 (以下、これらの場合をまとめて「結合して環を形成する場合」と称する場合がある。) について、以下、説明する。母骨格がアントラセン環である下記一般式 (TEMP - 103) で表されるアントラセン化合物の場合を例として説明する。

【 0 1 0 4】

40

50

【化 2 2】



10

【0105】

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。

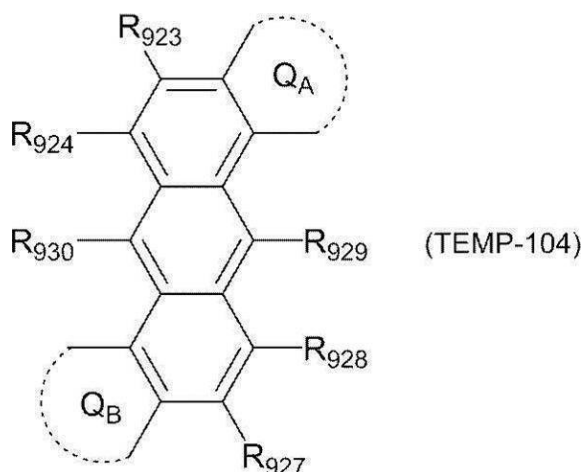
20

【0106】

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。

【0107】

【化 2 3】



30

40

【0108】

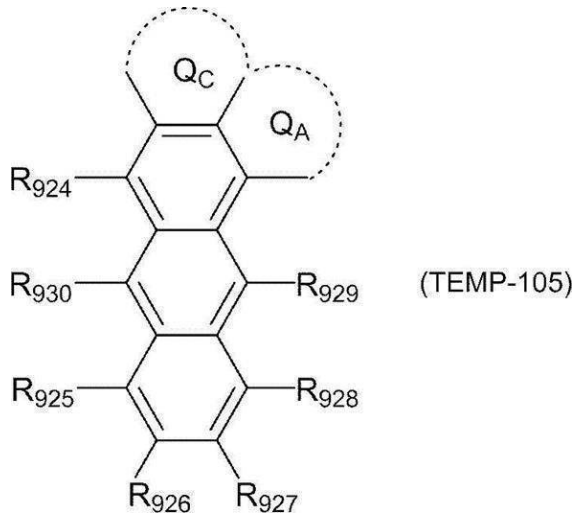
「隣接する2つ以上からなる組」が環を形成する場合とは、前述の例のように隣接する「2つ」からなる組が結合する場合だけでなく、隣接する「3つ以上」からなる組が結合する場合も含む。例えば、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して環 Q_A を形成し、かつ、 R_{922} と R_{923} とが互いに結合して環 Q_C を形成し、互いに隣接する3つ(R_{921} 、 R_{922} 及び R_{923})からなる組が互いに結合して環を形成して、アントラセン母骨格に縮合する場合を意味し、この場合、前記一般式(TEMP-103)で表されるアント

50

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。

【0109】

【化24】



10

【0110】

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

20

【0111】

「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。

30

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。

40

【0112】

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

50

合は、水素原子等で終端されてもよいし、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。

10

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。

【０１１３】

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。

20

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。

【０１１４】

・「置換もしくは無置換の」という場合の置換基

30

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、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃)、

- O - (R₉₀₄)、

- S - (R₉₀₅)、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、

40

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、及び

無置換の環形成原子数５～５０の複素環基からなる群から選択される基等であり、

ここで、R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、
水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

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

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

50

なり、

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

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

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

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

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

10

R₉₀₇が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₇は、互いに同一であるか又は異なる。

【0115】

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。

【0116】

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、

20

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。

【0117】

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。

【0118】

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。

30

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。

【0119】

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を上限値として含む範囲を意味する。

【0120】

〔第一実施形態〕

（有機エレクトロルミネッセンス素子）

40

本実施形態に係る有機EL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、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発光層と、前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第一の電子輸送層と、を有する。前記第一の発光層は、下記一般式(1)で表される第一の化合物を第一のホスト材料として含有し、前記第一の化合物は、下記一般式(11)で表される基を少なくとも1つ有する。前記第二の発光層は、下記一般式(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する。前記第一の電子輸送層は、下記一般式(3)で表される第三の化合物を含有する。

【0121】

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

50

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。また、例えば、「ホスト材料」は、層の60質量%以上、層の70質量%以上、層の80質量%以上、層の90質量%以上、又は層の95質量%以上含まれていてもよい。

【0122】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一の発光層は、前記陽極と前記第二の発光層との間に配置されていることも好ましい。

【0123】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第二の発光層は、前記陽極と前記第一の発光層との間に配置されていることも好ましい。

【0124】

本実施形態に係る有機EL素子は、第一の発光層、第二の発光層及び第一の電子輸送層以外に、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。

【0125】

本実施形態に係る有機EL素子において、有機層は、第一の発光層、第二の発光層及び第一の電子輸送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。

【0126】

(電子輸送層)

本実施形態に係る有機EL素子は、第一の電子輸送層以外に、さらなる電子輸送層として、第二の電子輸送層及び第三の電子輸送層の少なくともいずれかを有することが好ましい。

第二の電子輸送層は、第一の電子輸送層と陰極との間に配置されていることが好ましい。

第三の電子輸送層は、第一の電子輸送層と発光層との間に配置されていることが好ましい。

本実施形態に係る有機EL素子が複数の電子輸送層を含む場合、それら電子輸送層の内、発光層側に配置された電子輸送層を正孔障壁層と称する場合がある。

【0127】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一の電子輸送層は、前記第一の発光層及び前記第二の発光層の内、前記陰極側に配置された発光層と、直接接することも好ましい。

【0128】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一の電子輸送層と前記陰極との間に配置された第二の電子輸送層をさらに有することも好ましい。

【0129】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一の電子輸送層は、前記第一の発光層及び前記第二の発光層の内、前記陰極側に配置された発光層と、直接接し、かつ、前記第一の電子輸送層と前記陰極との間に配置された第二の電子輸送層をさらに有することも好ましい。

【0130】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第二の電子輸送層は、下記一般式(3)で表される第四の化合物を含有し、ただし、前記第一の電子輸送層が含有する第三の化合物と、前記第二の電子輸送層が含有する第四の化合物とは、互いに異なる構造であることが好ましい。

【0131】

10

20

30

40

50

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記第一の電子輸送層と前記第二の電子輸送層とが直接接することが好ましい。

【0132】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記第一の電子輸送層と、の間に第三の電子輸送層をさらに含むことも好ましい。

【0133】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記第三の電子輸送層は、下記一般式 (3) で表される第五の化合物を含有し、ただし、前記第一の電子輸送層が含有する第三の化合物と、前記第三の電子輸送層が含有する第五の化合物とは、互いに異なる構造であることが好ましい。

10

【0134】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記第一の電子輸送層と前記第三の電子輸送層とが直接接することが好ましい。

【0135】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記第三の電子輸送層は、前記第一の発光層及び前記第二の発光層の内、前記陰極側に配置された発光層と、直接接することが好ましい。

【0136】

(正孔輸送層)

20

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記陽極と、前記発光層との間に、正孔輸送層を有することが好ましい。

【0137】

(有機 E L 素子の概略構成)

図 1 に、本実施形態に係る有機 E L 素子の一例の概略構成を示す。

有機 E L 素子 1 は、透光性の基板 2 と、陽極 3 と、陰極 4 と、陽極 3 と陰極 4 との間に配置された有機層 10 と、を含む。有機層 10 は、陽極 3 側から順に、正孔注入層 6、正孔輸送層 7、第一の発光層 51、第二の発光層 52、第一の電子輸送層 81、第二の電子輸送層 82 及び電子注入層 9 が、この順番で積層されて構成される。

【0138】

30

図 2 に、本実施形態に係る有機 E L 素子の一例の概略構成を示す。

有機 E L 素子 1A は、透光性の基板 2 と、陽極 3 と、陰極 4 と、陽極 3 と陰極 4 との間に配置された有機層 10A と、を含む。有機層 10A は、陽極 3 側から順に、正孔注入層 6、正孔輸送層 7、第一の発光層 51、第二の発光層 52、第三の電子輸送層 83、第一の電子輸送層 81 及び電子注入層 9 が、この順番で積層されて構成される。

【0139】

図 3 に、本実施形態に係る有機 E L 素子の一例の概略構成を示す。

有機 E L 素子 1B は、透光性の基板 2 と、陽極 3 と、陰極 4 と、陽極 3 と陰極 4 との間に配置された有機層 10B と、を含む。有機層 10B は、陽極 3 側から順に、正孔注入層 6、正孔輸送層 7、第二の発光層 52、第一の発光層 51、第一の電子輸送層 81、第二の電子輸送層 82 及び電子注入層 9 が、この順番で積層されて構成される。

40

【0140】

図 4 に、本実施形態に係る有機 E L 素子の一例の概略構成を示す。

有機 E L 素子 1C は、透光性の基板 2 と、陽極 3 と、陰極 4 と、陽極 3 と陰極 4 との間に配置された有機層 10C と、を含む。有機層 10C は、陽極 3 側から順に、正孔注入層 6、正孔輸送層 7、第二の発光層 52、第一の発光層 51、第三の電子輸送層 83、第一の電子輸送層 81 及び電子注入層 9 が、この順番で積層されて構成される。

【0141】

(第一の発光層)

第一の発光層は、第二の発光層と直接接している。第一の発光層は、下記一般式 (1)

50

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。前記第一の化合物は、下記一般式(11)で表される基を少なくとも1つ有する。

【0142】

第一の発光層は、最大のピーク波長が430nm以上480nm以下の発光を示す化合物を含有することが好ましい。

【0143】

第一の発光層は、蛍光発光性の第七の化合物をさらに含有することが好ましい。

第七の化合物は、最大のピーク波長が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。

【0144】

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七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、第七の化合物は、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。

【0145】

第一の発光層は、ドーパント材料としての燐光発光性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mium錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

また、第一の発光層は、金属錯体を含まないことも好ましい。

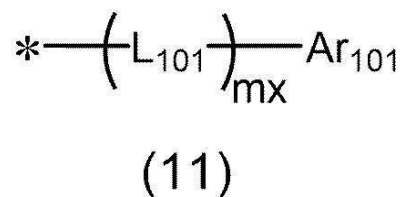
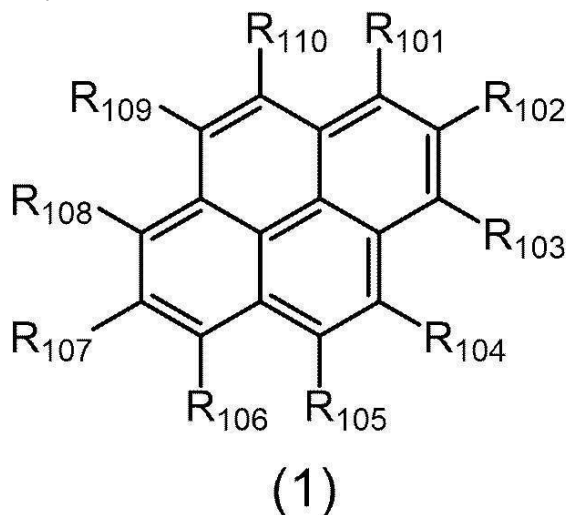
【0146】

・第一の化合物

第一の化合物は、下記一般式(1)で表される化合物である。第一の化合物は、下記一般式(11)で表される基を少なくとも1つ有する。

【0147】

【化25】



【0148】

前記一般式(1)において、

R101~R110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(R901)(R902)(R903)で表される基、

10

20

30

40

50

- O - (R₉₀₄) で表される基、
- S - (R₉₀₅) 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) R₈₀₁ で表される基、
- C O O R₈₀₂ 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、R₁₀₁ ~ R₁₁₀ 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、

L₁₀₁ 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、

L₁₀₁ が 2 以上存在する場合、2 以上の L₁₀₁ 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。

【 0149 】

前記一般式 (1) で表される第一の化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₉₀₆、R₉₀₇、R₈₀₁ 及び R₈₀₂ 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、

R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₅ が複数存在する場合、複数の R₉₀₅ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₆ が複数存在する場合、複数の R₉₀₆ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₇ が複数存在する場合、複数の R₉₀₇ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₈₀₁ が複数存在する場合、複数の R₈₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₈₀₂ が複数存在する場合、複数の R₈₀₂ は、互いに同一であるか又は異なる。

【 0150 】

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。

【 0151 】

10

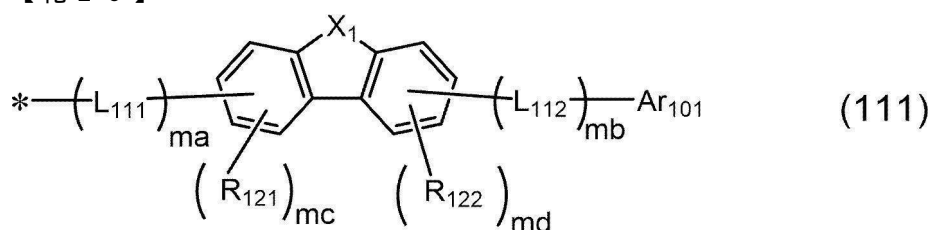
20

30

40

50

【化 2 6】



【 0 1 5 2】

(前記一般式(111)において、

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、

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

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、

- $Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 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、

mc 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、

md 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。)

【 0 1 5 3】

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。

【 0 1 5 4】

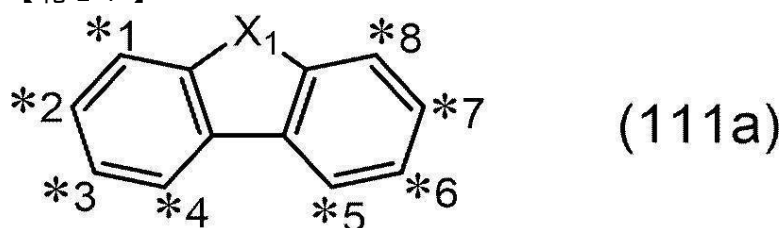
10

20

30

40

【化 2 7】

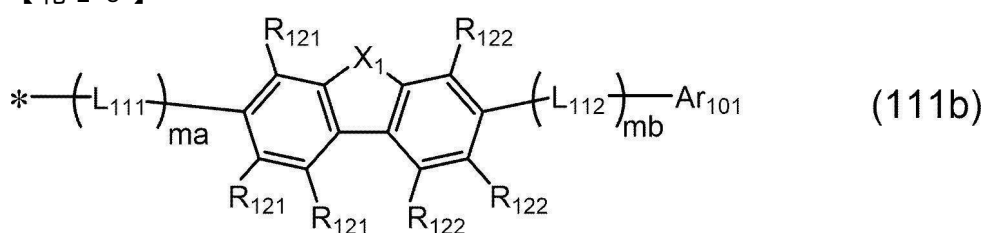


【0 1 5 5】

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。

【0 1 5 6】

【化 2 8】



【0 1 5 7】

(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。)

【0 1 5 8】

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。

【0 1 5 9】

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。

【0 1 6 0】

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。

【0 1 6 1】

前記一般式(111)で表される基において、 ma が0であり、 mb が1である場合、前記一般式(111)で表される基は、下記一般式(111c)で表される。

【0 1 6 2】

10

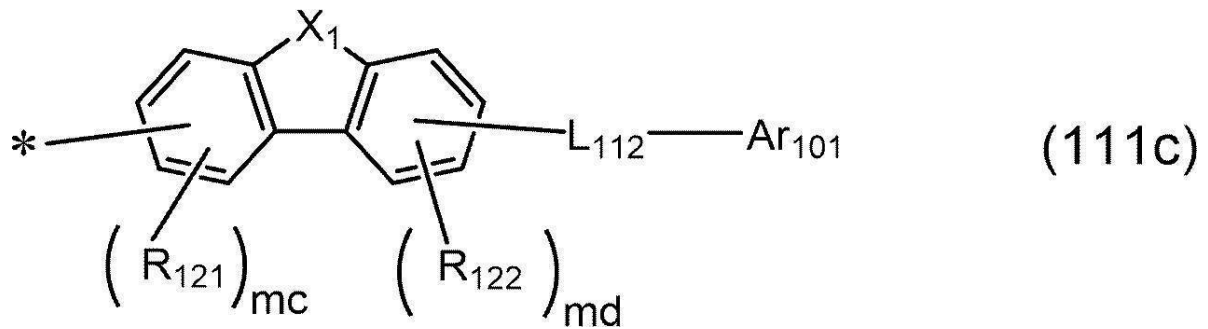
20

30

40

50

【化 2 9】



10

【0163】

(前記一般式(111c)において、 X_1 、 L_{112} 、 mc 、 md 、 Ar_{101} 、 R_{121} 及び R_{122} は、それぞれ独立に、前記一般式(111)における X_1 、 L_{112} 、 mc 、 md 、 Ar_{101} 、 R_{121} 及び R_{122} と同義である。)

【0164】

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。

【0165】

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。

20

【0166】

本実施形態に係る有機EL素子において、 Ar_{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。

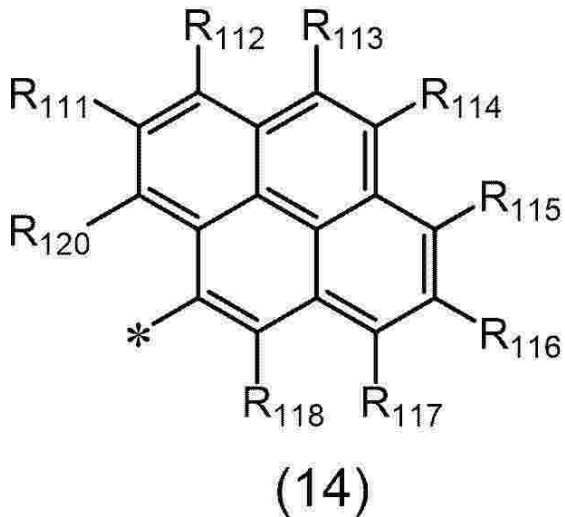
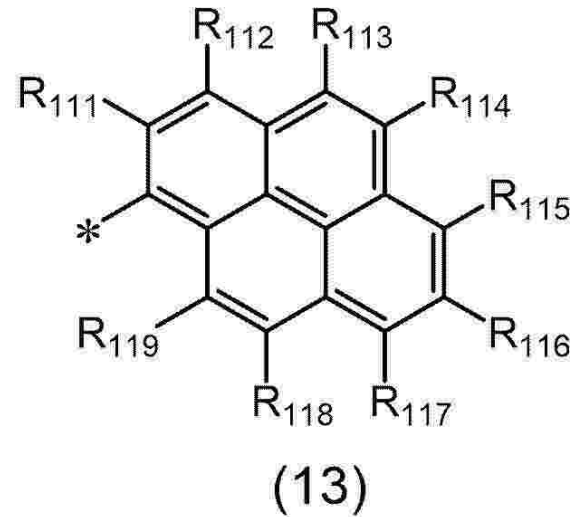
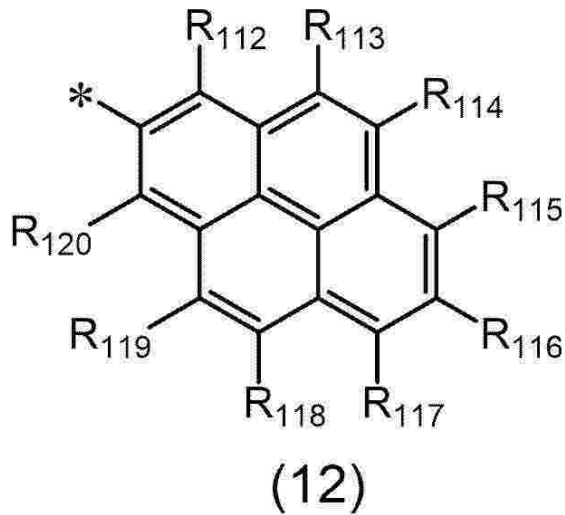
【0167】

30

40

50

【化 3 0】



【 0 1 6 8】

(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_{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_{124} で表される基、

- COOR₁₂₅で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

10

20

30

40

50

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 L₁₀₁ との結合位置、前記一般式 (111) の L₁₁₂ との結合位置、又は前記一般式 (111b) 中の L₁₁₂ との結合位置を示す。)

【0169】

前記一般式 (12)、一般式 (13) 及び一般式 (14) 中の R₁₂₄ 及び R₁₂₅ は、それぞれ独立に、前述の R₈₀₁ 及び R₈₀₂ と同義であることも好ましい。

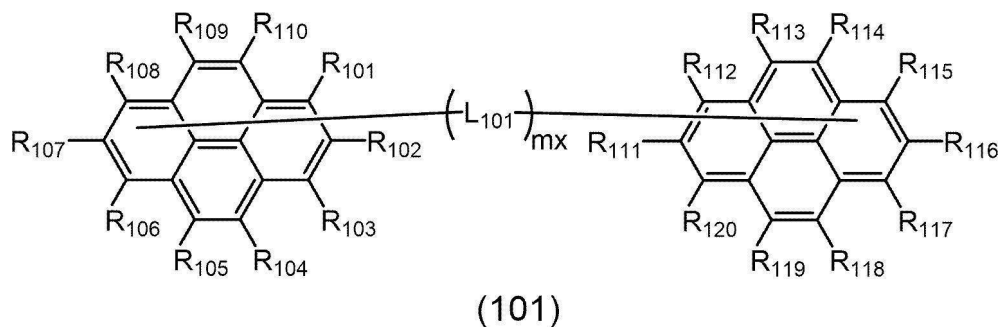
【0170】

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。

10

【0171】

【化31】



20

【0172】

(前記一般式 (101) において、

R₁₀₁ ~ R₁₂₀ 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、

30

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) 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) R₈₀₁ で表される基、

- COOR₈₀₂ 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

40

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、R₁₀₁ ~ R₁₁₀ のうち 1 つが L₁₀₁ との結合位置を示し、R₁₁₁ ~ R₁₂₀ のうち 1 つが L₁₀₁ との結合位置を示し、

L₁₀₁ 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 x は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

L₁₀₁ が 2 以上存在する場合、2 以上の L₁₀₁ は、互いに同一であるか、又は異なる。)

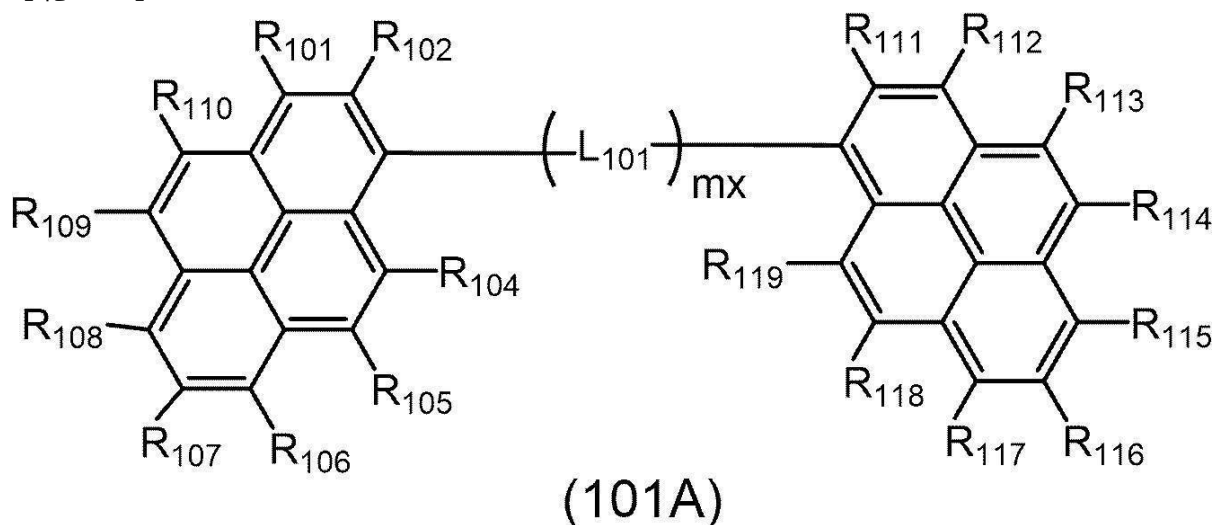
50

【 0 1 7 3 】

前記一般式 (1 0 1) において R_{103} が L_{101} との結合位置であり、 R_{120} が L_{101} との結合位置である場合、前記一般式 (1 0 1) で表される化合物は、下記一般式 (1 0 1 A) で表される。

【 0 1 7 4 】

【 化 3 2 】



【 0 1 7 5 】

(前記一般式 (1 0 1 A) において、 R_{101} 、 R_{102} 、 $R_{104} \sim R_{119}$ 、 L_{101} 及び $m \times$ は、それぞれ、前記一般式 (1 0 1) における R_{101} 、 R_{102} 、 $R_{104} \sim R_{119}$ 、 L_{101} 及び $m \times$ と同義である。)

【 0 1 7 6 】

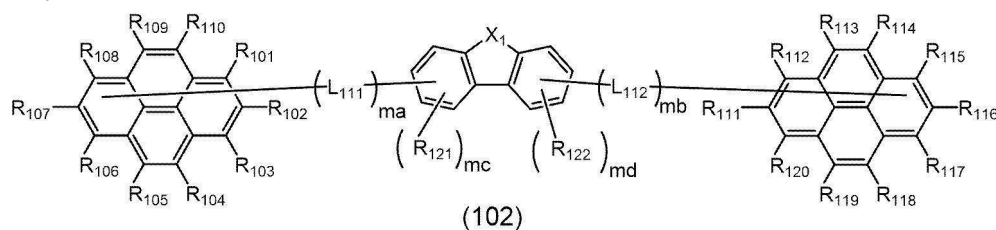
本実施形態に係る有機 EL 素子において、 L_{101} は、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基であることが好ましい。

【 0 1 7 7 】

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 0 2) で表されることが好ましい。

【 0 1 7 8 】

【 化 3 3 】



【 0 1 7 9 】

(前記一般式 (1 0 2) において、

$R_{101} \sim R_{120}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1 0 1) 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、 $C R_{123} R_{124}$ 、酸素原子、硫黄原子、又は $N R_{125}$ 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、

10

- $S i(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 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

20

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。))

【0180】

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。

【0181】

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。

30

【0182】

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。

【0183】

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、 $A r_{101}$ 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。

【0184】

本実施形態に係る有機 EL 素子において、
 $A r_{101}$ 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。

40

【0185】

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、

50

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。

【0186】

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。

10

【0187】

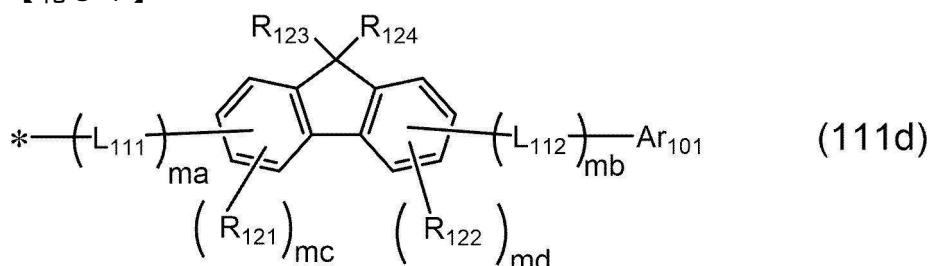
本実施形態に係る有機 EL 素子において、前記一般式 (11) で表される基ではない $R_{101} \sim R_{110}$ は、水素原子であることが好ましい。

【0188】

本実施形態に係る有機 EL 素子において、 X_1 は、 $CR_{123}R_{124}$ であることが好ましい。例えば、 X_1 が $CR_{123}R_{124}$ である場合、前記一般式 (111) で表される基は、下記一般式 (111d) で表される。

【0189】

【化34】



20

【0190】

(前記一般式 (111d) において、 L_{111} 、 L_{112} 、 ma 、 mb 、 $ma + mb$ 、 Ar_{101} 、 R_{121} 、 R_{122} 、 R_{123} 、 R_{124} 、 R_{125} 、 mc 及び md は、それぞれ、前記一般式 (111) において定義したとおりである。)

30

【0191】

本実施形態に係る有機 EL 素子において、 R_{123} と R_{124} とは、互いに結合しないことが好ましい。

【0192】

本実施形態に係る有機 EL 素子において、 L_{111} 及び L_{112} の少なくとも一方は、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が好ましい。

【0193】

第一の化合物において、「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。

40

【0194】

(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。

【0195】

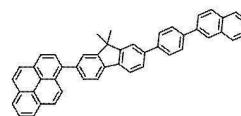
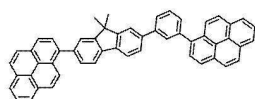
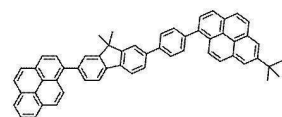
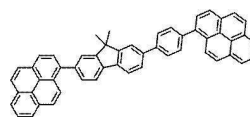
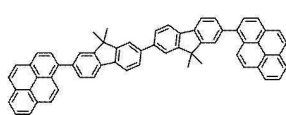
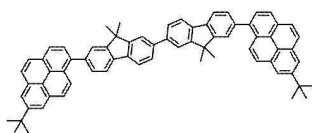
(第一の化合物の具体例)

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。

【0196】

50

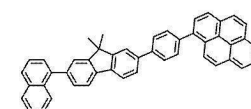
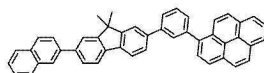
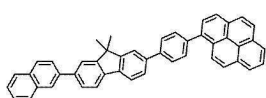
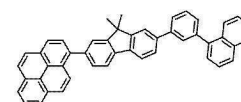
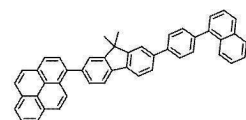
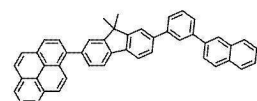
【化 3 5】



【 0 1 9 7】

10

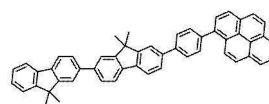
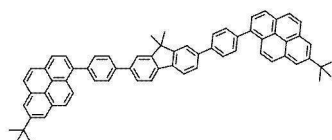
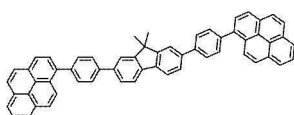
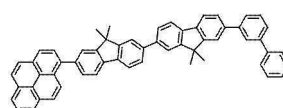
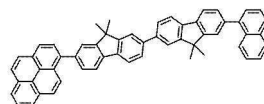
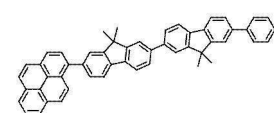
【化 3 6】



【 0 1 9 8】

20

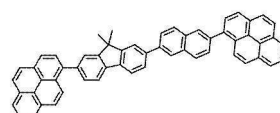
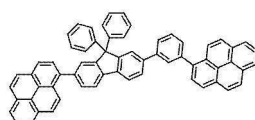
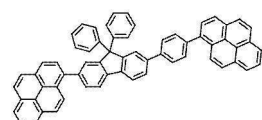
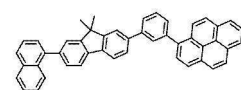
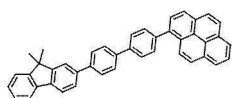
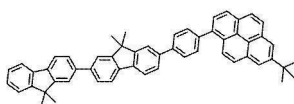
【化 3 7】



【 0 1 9 9】

30

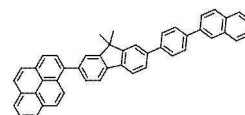
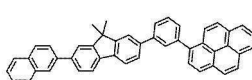
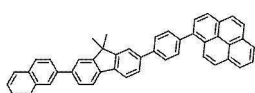
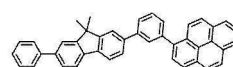
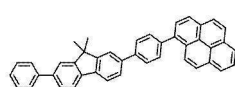
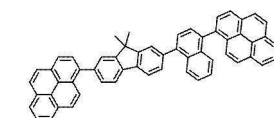
【化 3 8】



【 0 2 0 0】

40

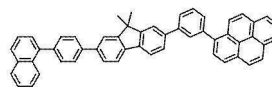
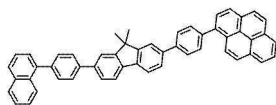
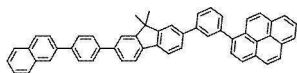
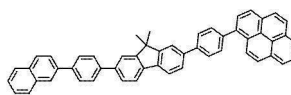
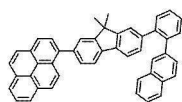
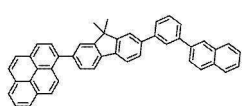
【化 3 9】



50

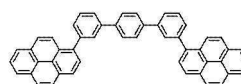
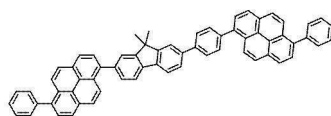
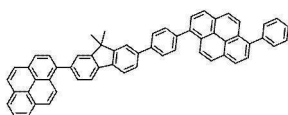
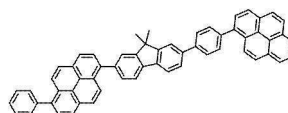
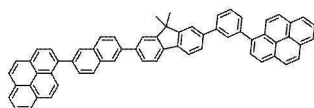
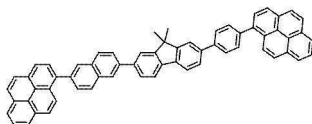
【 0 2 0 1 】

【 化 4 0 】



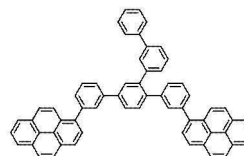
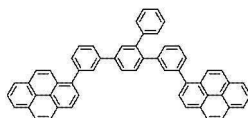
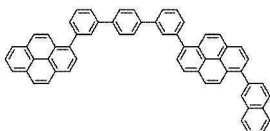
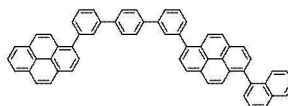
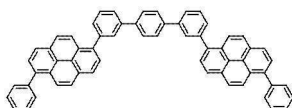
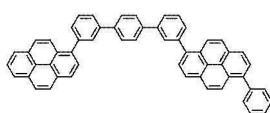
【 0 2 0 2 】

【 化 4 1 】



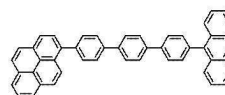
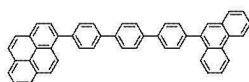
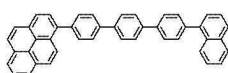
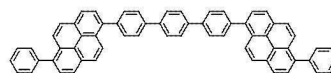
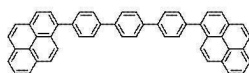
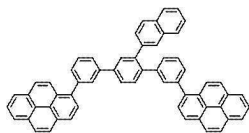
【 0 2 0 3 】

【 化 4 2 】



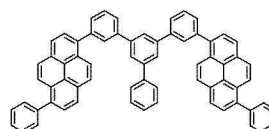
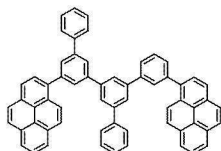
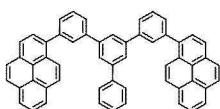
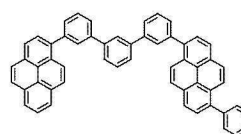
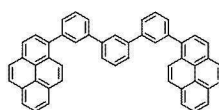
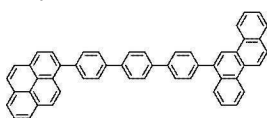
【 0 2 0 4 】

【 化 4 3 】



【 0 2 0 5 】

【 化 4 4 】



10

20

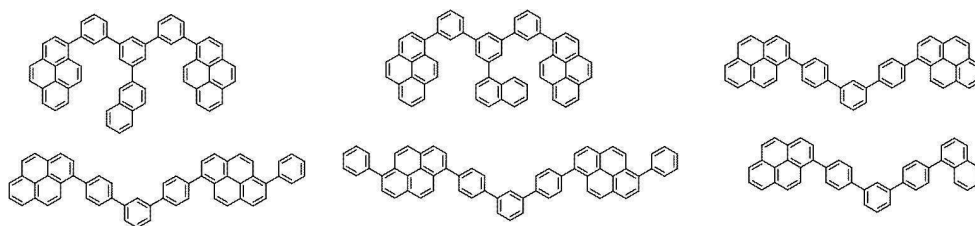
30

40

50

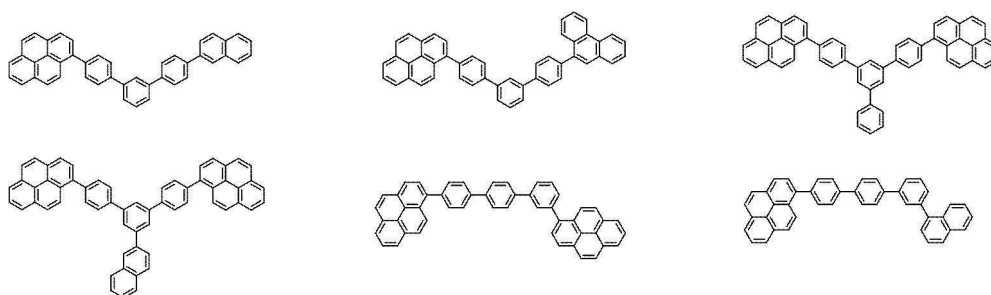
【 0 2 0 6 】

【 化 4 5 】



【 0 2 0 7 】

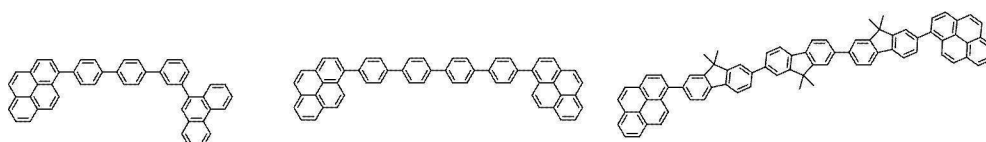
【 化 4 6 】



10

【 0 2 0 8 】

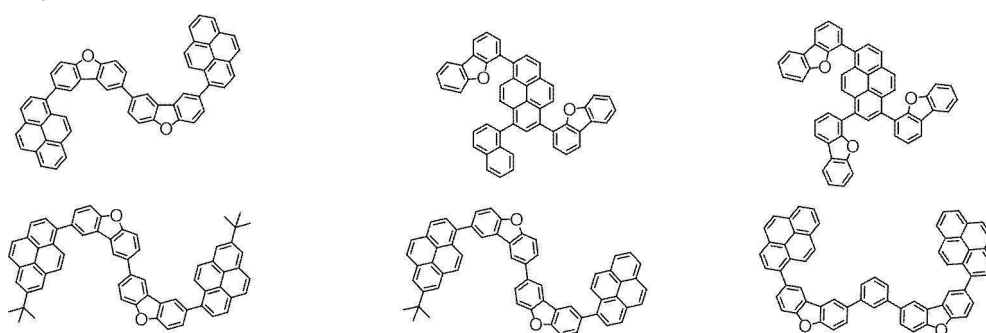
【 化 4 7 】



20

【 0 2 0 9 】

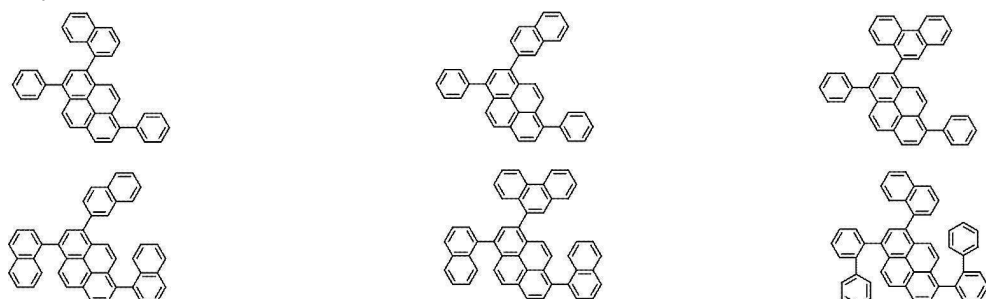
【 化 4 8 】



30

【 0 2 1 0 】

【 化 4 9 】

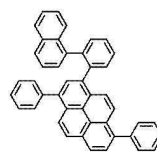
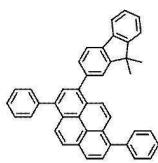
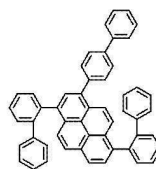
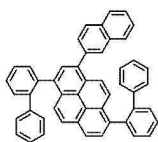


40

50

【 0 2 1 1 】

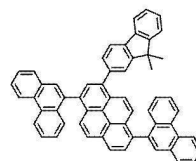
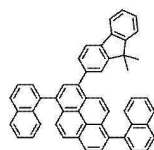
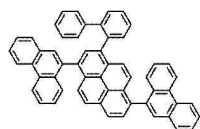
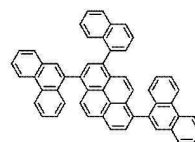
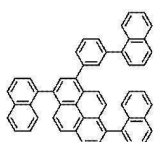
【 化 5 0 】



10

【 0 2 1 2 】

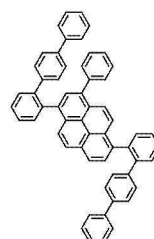
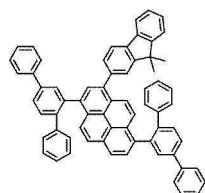
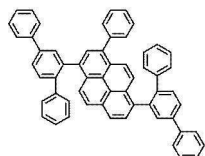
【 化 5 1 】



20

【 0 2 1 3 】

【 化 5 2 】



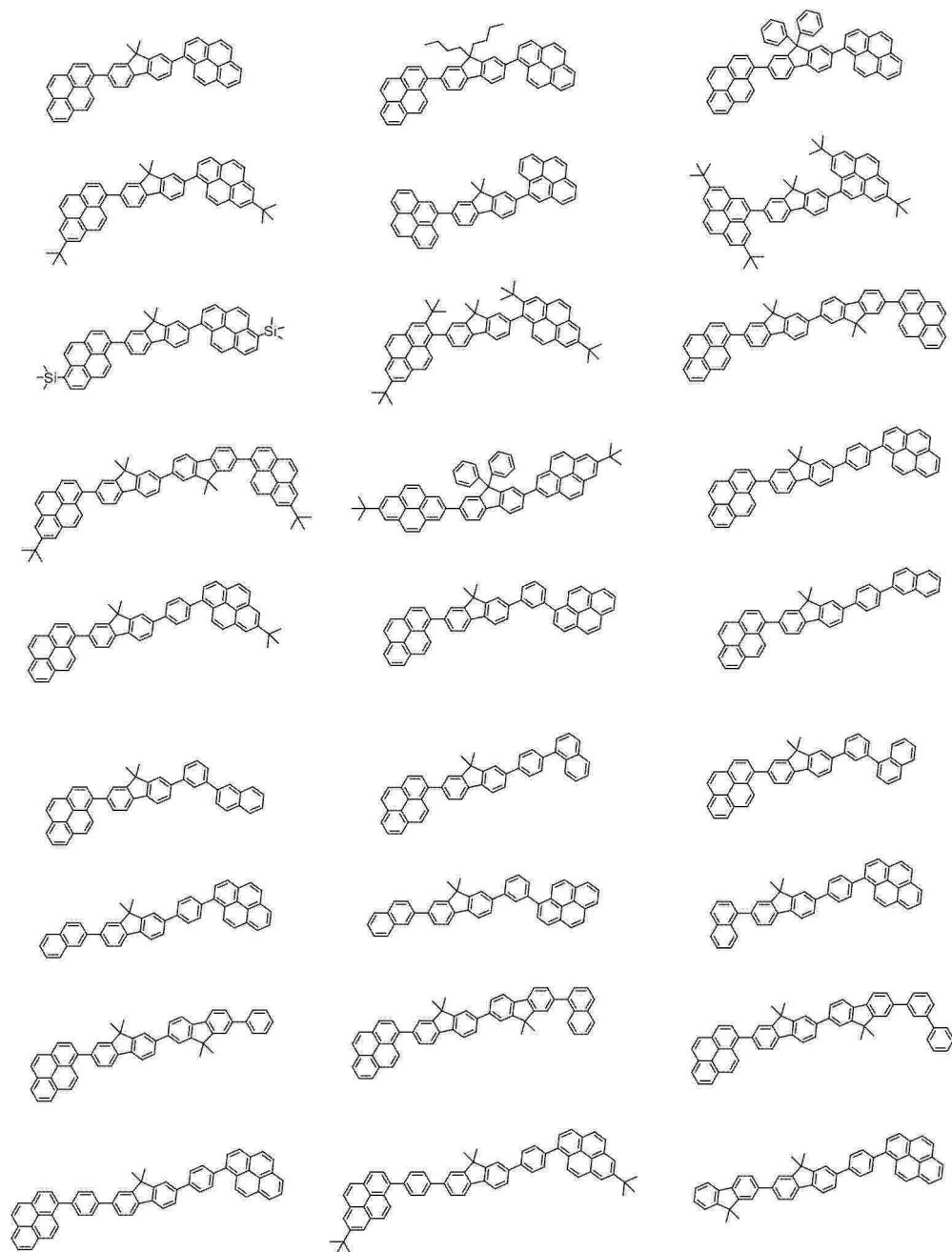
30

【 0 2 1 4 】

40

50

【化 5 3】



【 0 2 1 5】

10

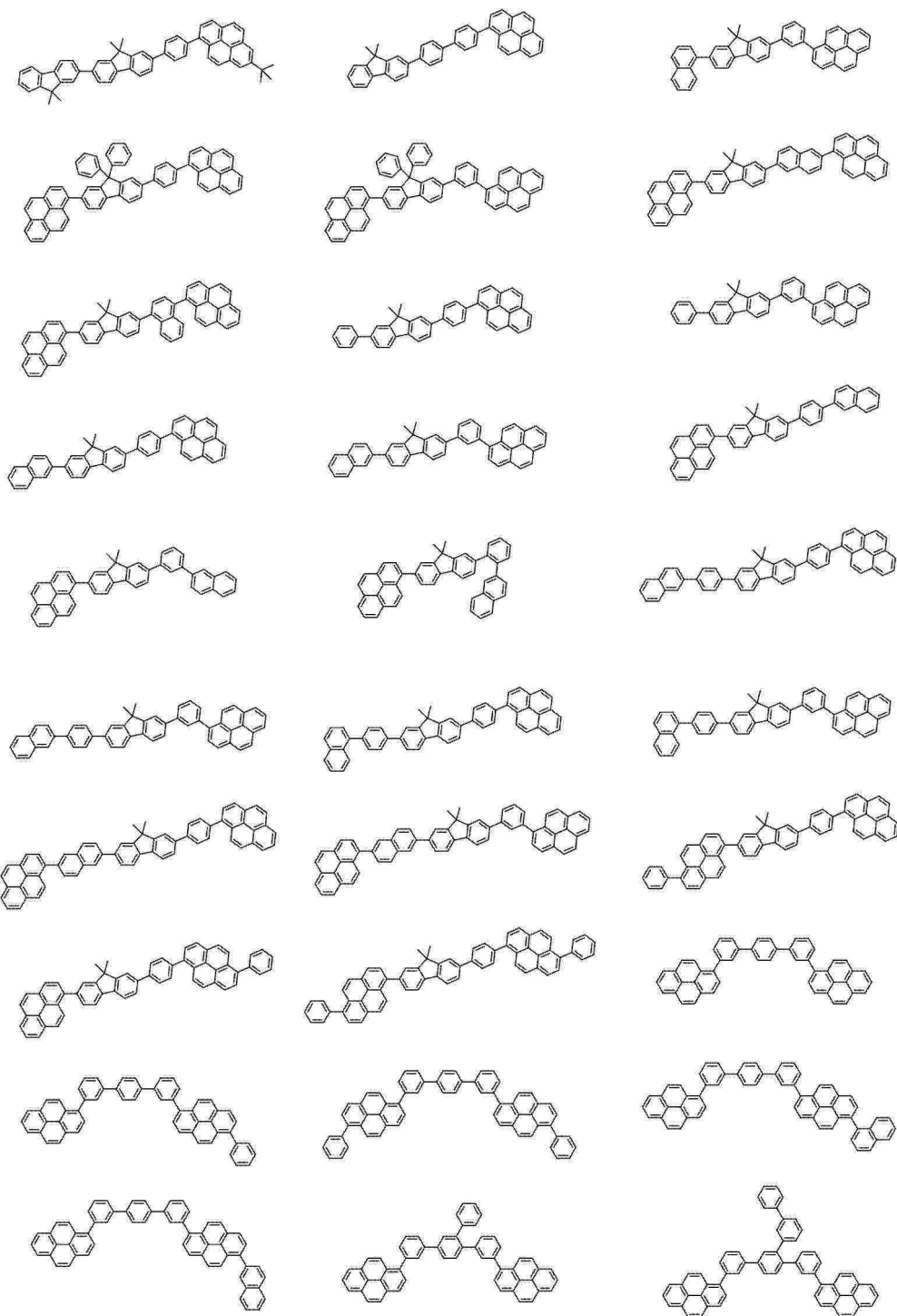
20

30

40

50

【化 5 4】



【 0 2 1 6】

10

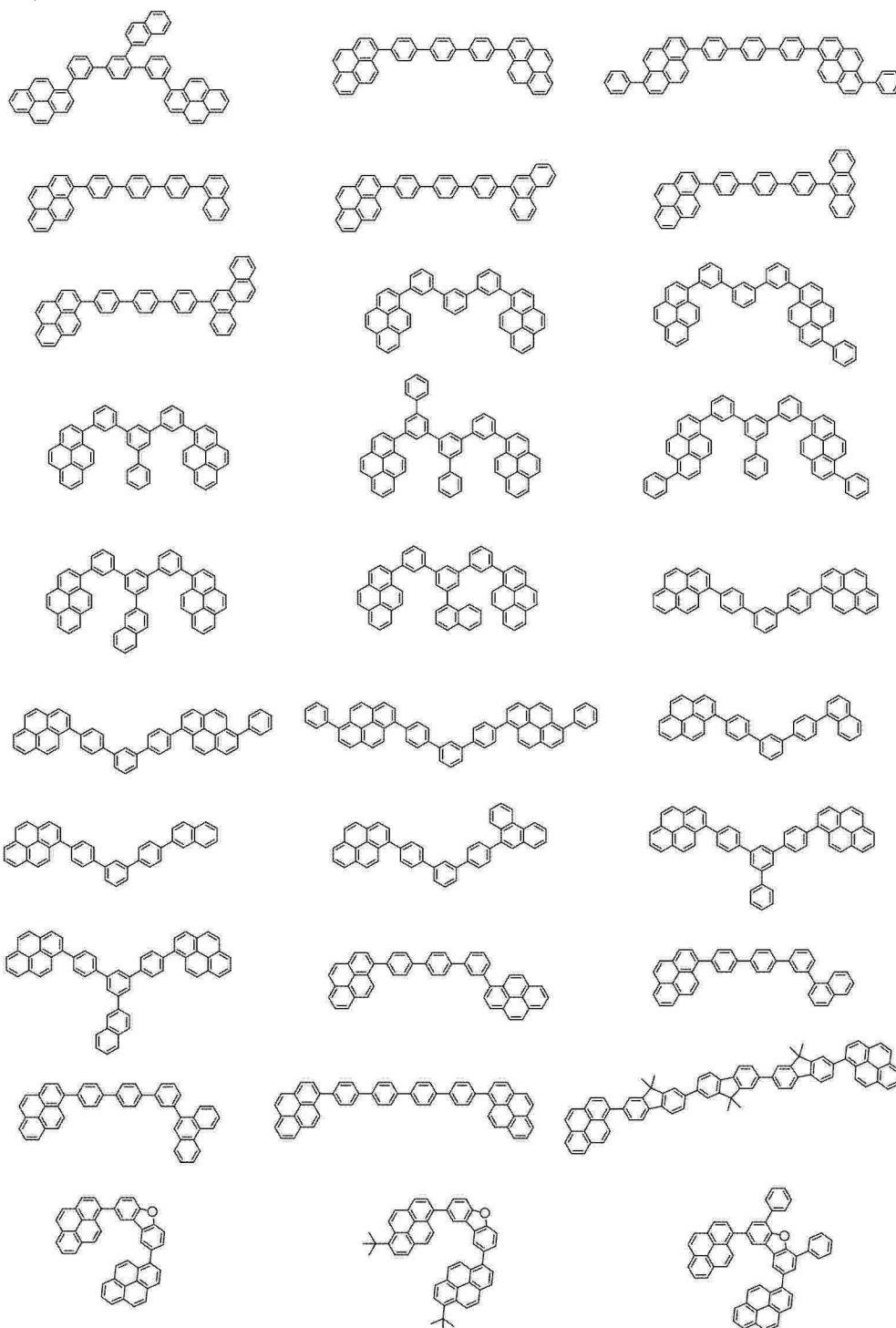
20

30

40

50

【化 5 5】



10

20

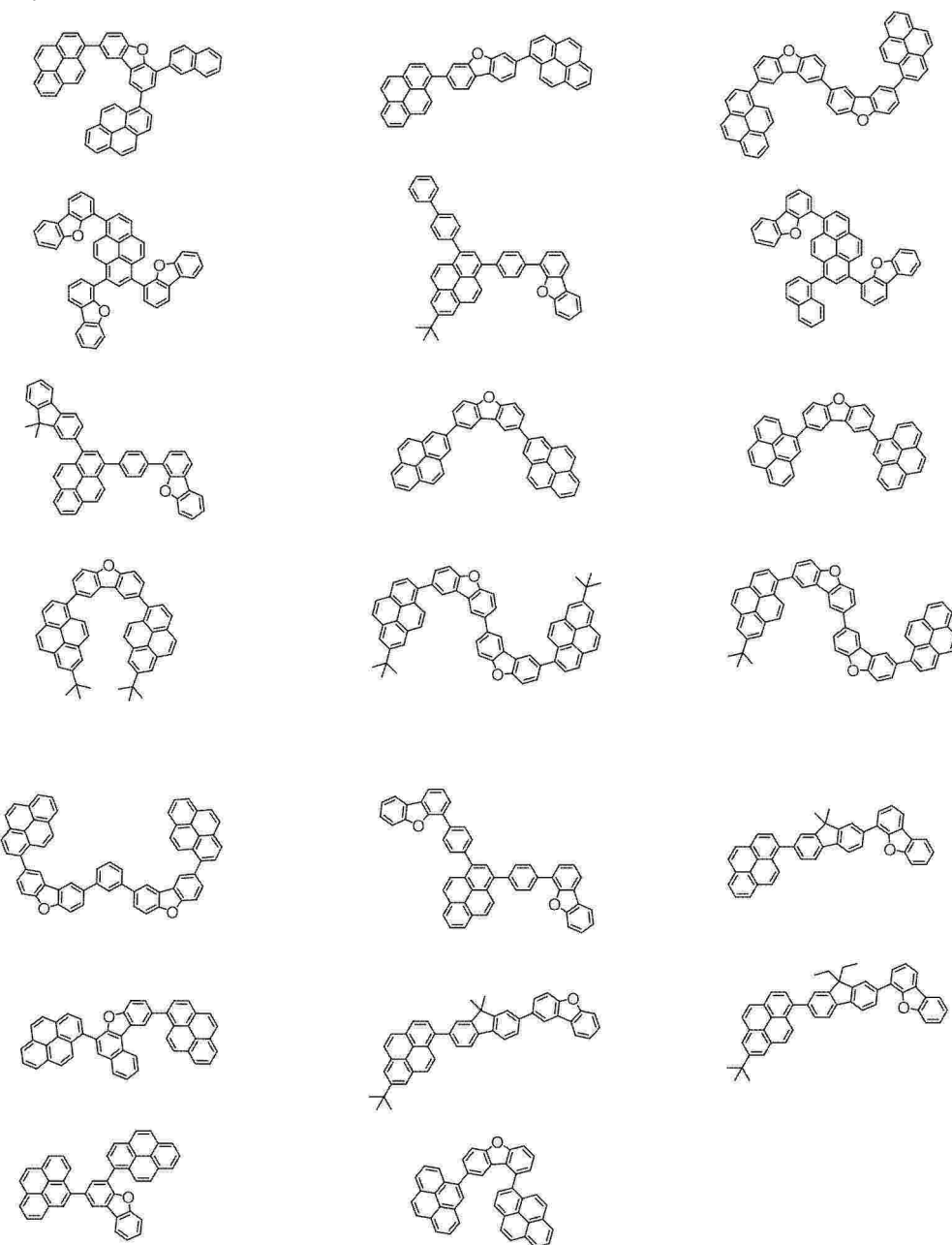
30

【 0 2 1 7 】

40

50

【化 5 6】



10

20

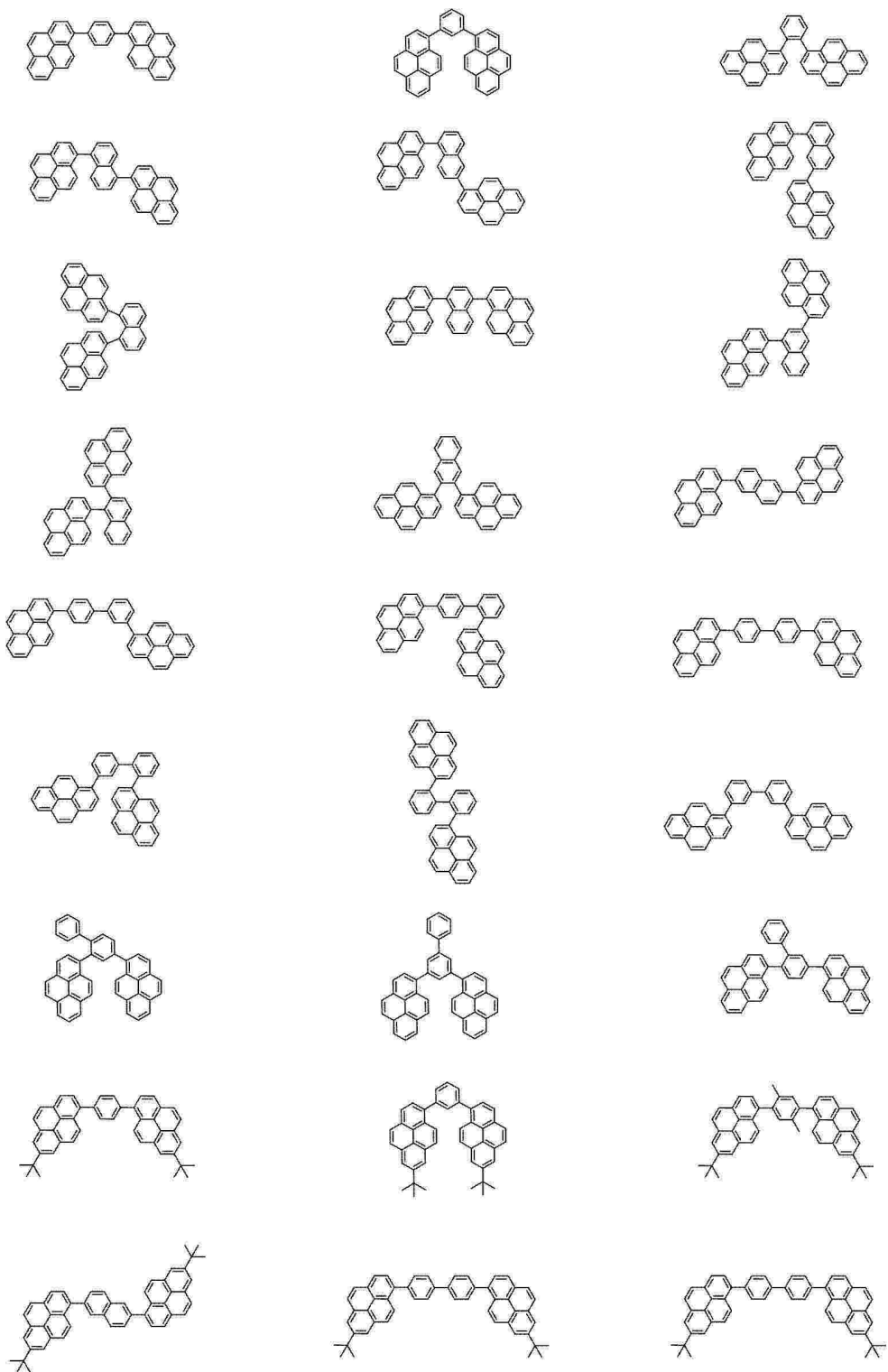
30

【 0 2 1 8 】

40

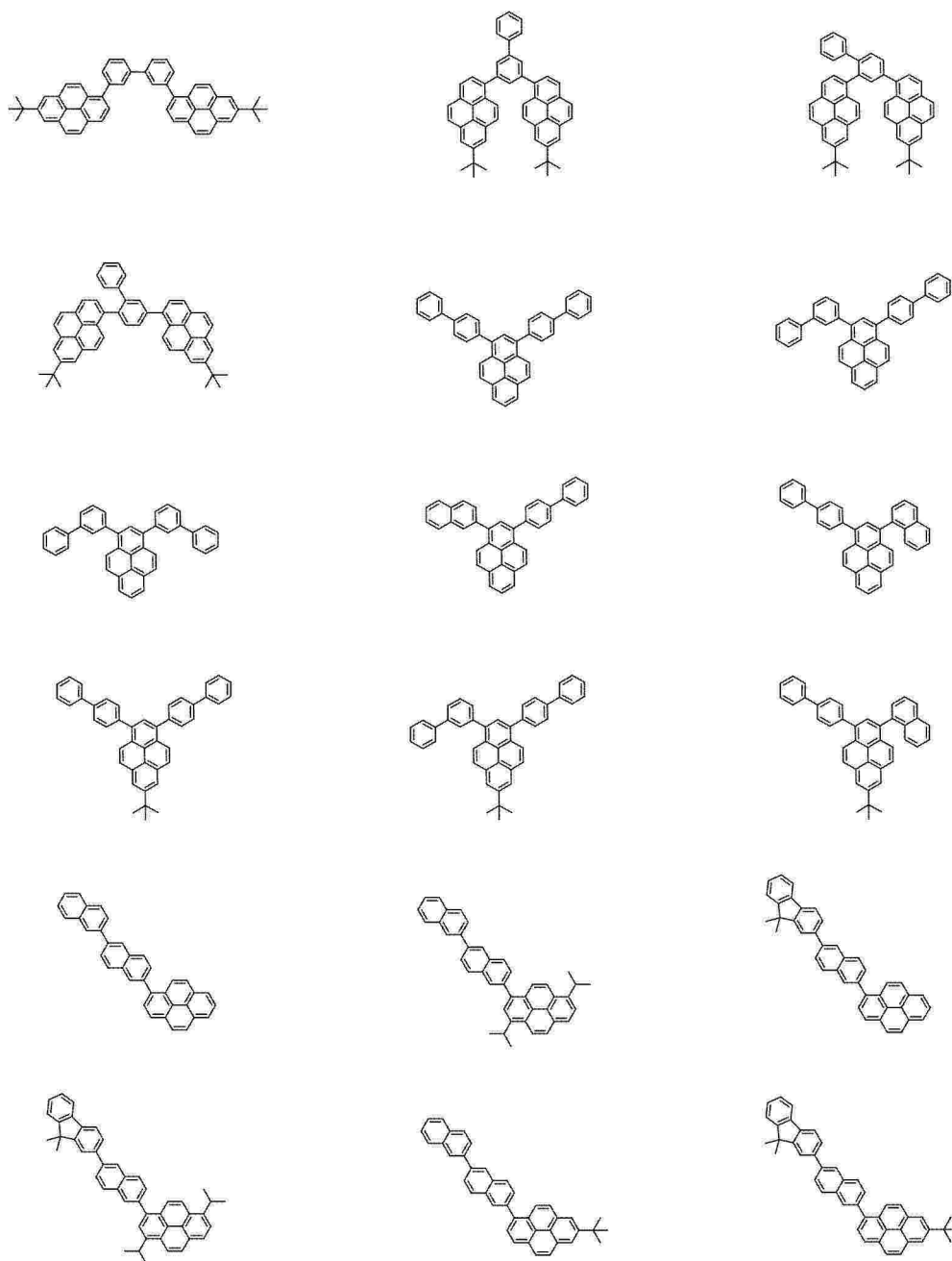
50

【化 5 7】



【 0 2 1 9 】

【化 5 8】



10

20

30

【 0 2 2 0】

(第二の発光層)

第二の発光層は、第一の発光層と直接接している。第二の発光層は、下記一般式 (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する。

40

【 0 2 2 1】

第二の発光層は、最大のピーク波長が 4 3 0 n m 以上 4 8 0 n m 以下の発光を示す化合物を含有することが好ましい。

【 0 2 2 2】

第二の発光層は、蛍光発光性の第六の化合物をさらに含有することが好ましい。

第六の化合物は、最大のピーク波長が 4 3 0 n m 以上 4 8 0 n m 以下の発光を示す化合物であることが好ましい。

【 0 2 2 3】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、第二の発光層が第二の化合物及び第六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。)

50

であることが好ましく、第六の化合物は、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。

【 0 2 2 4 】

第二の発光層は、ドーパント材料としての燐光発光性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mium錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

また、第二の発光層は、金属錯体を含まないことも好ましい。

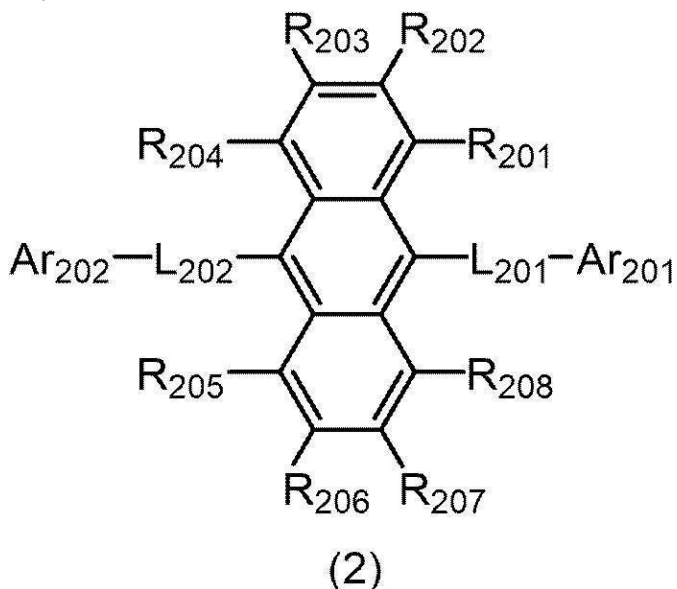
【 0 2 2 5 】

・第二の化合物

本実施形態に係る一般式（ 2 ）で表される第二の化合物について説明する。

【 0 2 2 6 】

【 化 5 9 】



【 0 2 2 7 】

（前記一般式（ 2 ）において、

R 2 0 1 ~ R 2 0 8 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 ~ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 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 9 0 4) で表される基、

- S - (R 9 0 5) で表される基、

- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 5 0 のアラルキル基、

- C (= O) R 8 0 1 で表される基、

- C O O R 8 0 2 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 ~ 5 0 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 ~ 5 0 の複素環基であり、

L₂₀₁及びL₂₀₂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、
 Ar₂₀₁及びAr₂₀₂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。)

【0228】

(本実施形態に係る第二の化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、
 R₉₀₆、R₉₀₇、R₈₀₁及びR₈₀₂は、それぞれ独立に、

10

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、

R₉₀₁が複数存在する場合、複数のR₉₀₁は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₂が複数存在する場合、複数のR₉₀₂は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₃が複数存在する場合、複数のR₉₀₃は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₄が複数存在する場合、複数のR₉₀₄は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₅が複数存在する場合、複数のR₉₀₅は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₆が複数存在する場合、複数のR₉₀₆は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₇が複数存在する場合、複数のR₉₀₇は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₁が複数存在する場合、複数のR₈₀₁は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₂が複数存在する場合、複数のR₈₀₂は、互いに同一であるか又は異なる。)

20

【0229】

本実施形態に係る有機EL素子において、R₂₀₁～R₂₀₈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(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、
 -O-(R₉₀₄)で表される基、
 -S-(R₉₀₅)で表される基、
 -N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

30

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、
 -C(=O)R₈₀₁で表される基、
 -COOR₈₀₂で表される基、

ハロゲン原子、

40

シアノ基、又は
 ニトロ基であり、

L₂₀₁及びL₂₀₂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、

Ar₂₀₁及びAr₂₀₂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。

【0230】

50

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のアリーレン基であることが好ましい。

【０２３１】

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、ピフェニル基、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。

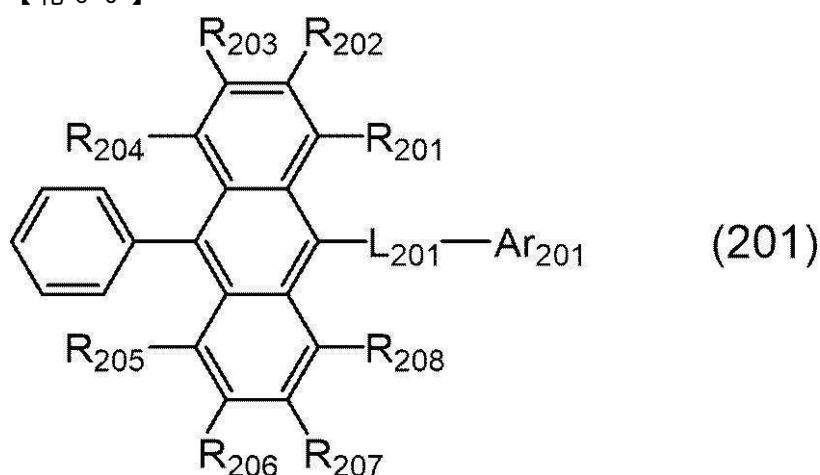
10

【０２３２】

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）、一般式（２０９）又は一般式（２１０）で表される化合物であることが好ましい。

【０２３３】

【化６０】

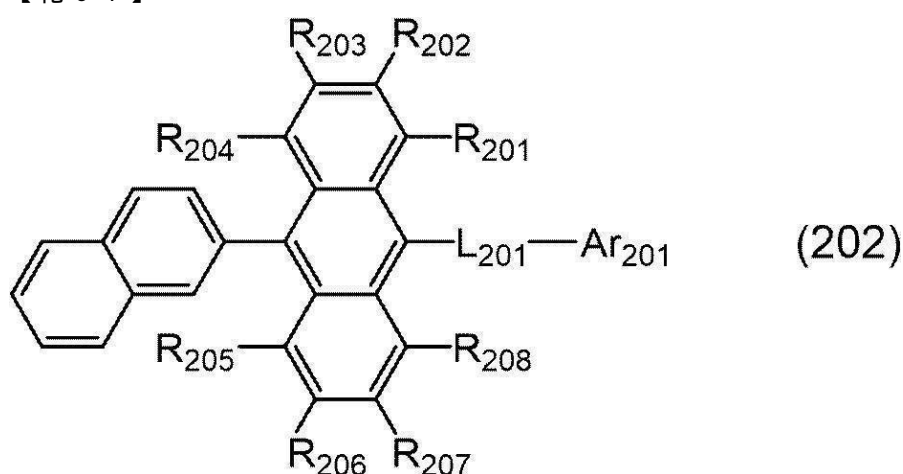


20

30

【０２３４】

【化６１】

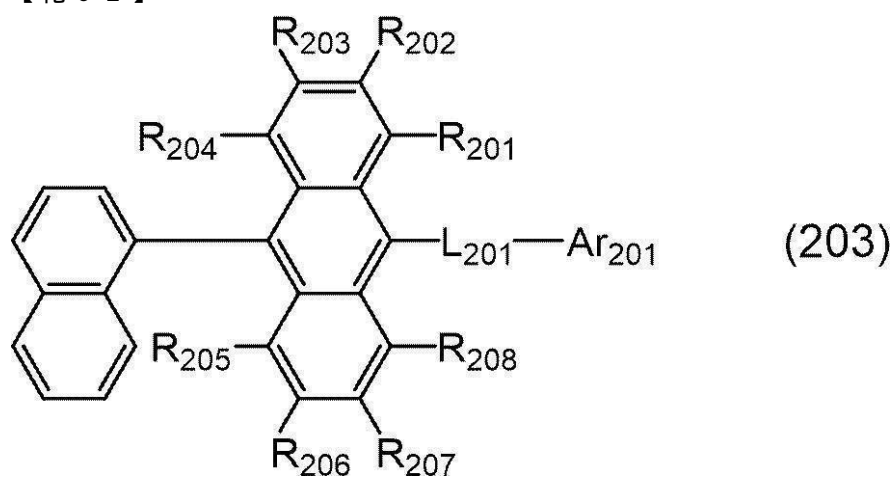


40

【０２３５】

50

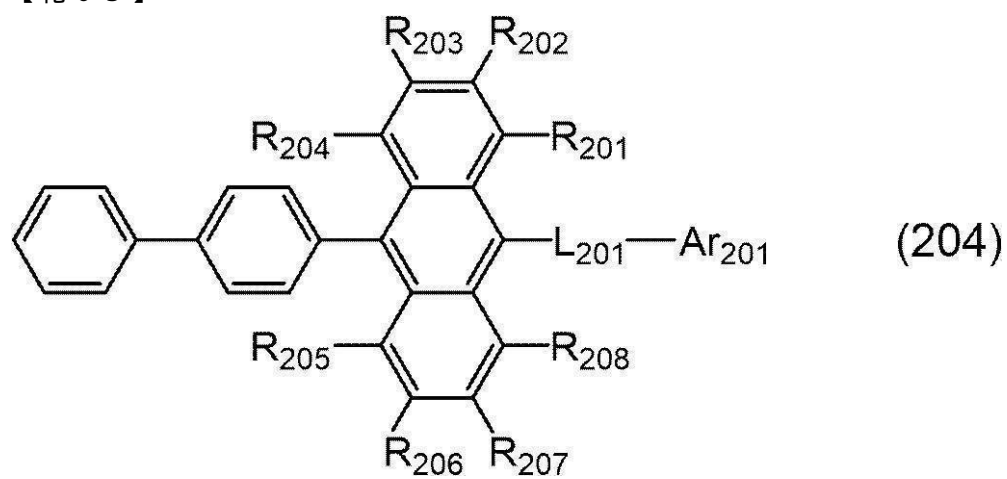
【化 6 2】



10

【 0 2 3 6】

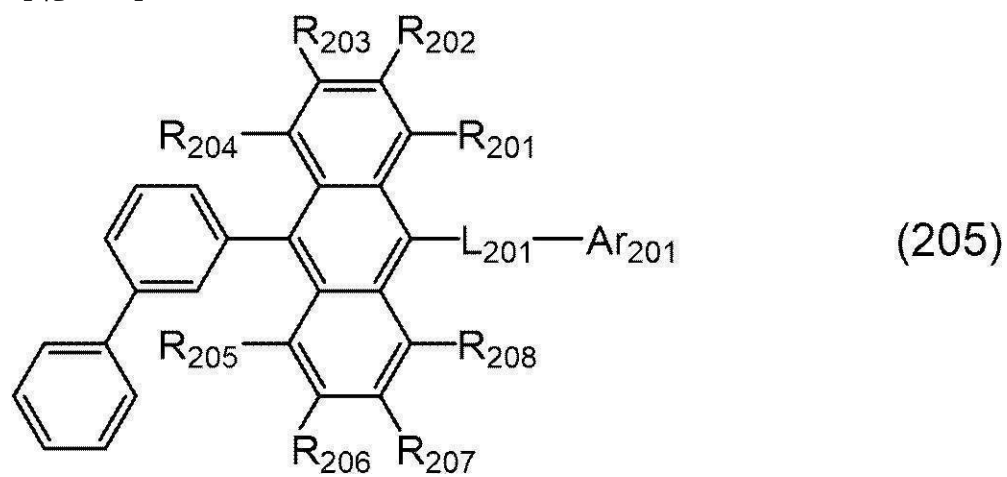
【化 6 3】



20

【 0 2 3 7】

【化 6 4】



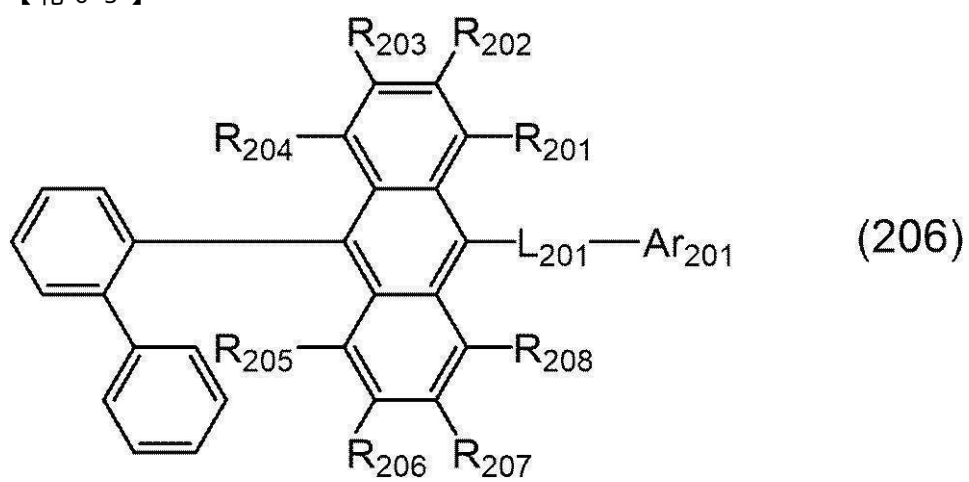
30

40

【 0 2 3 8】

50

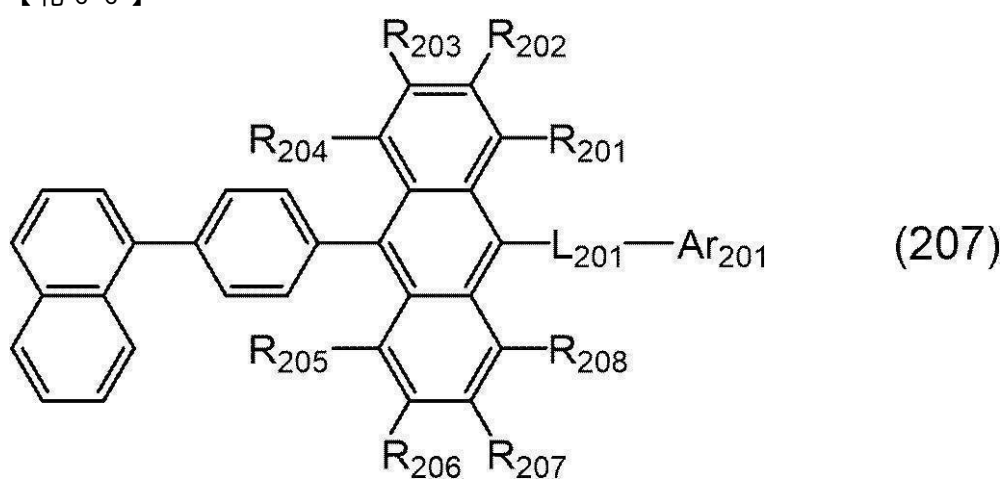
【化 6 5】



10

【 0 2 3 9】

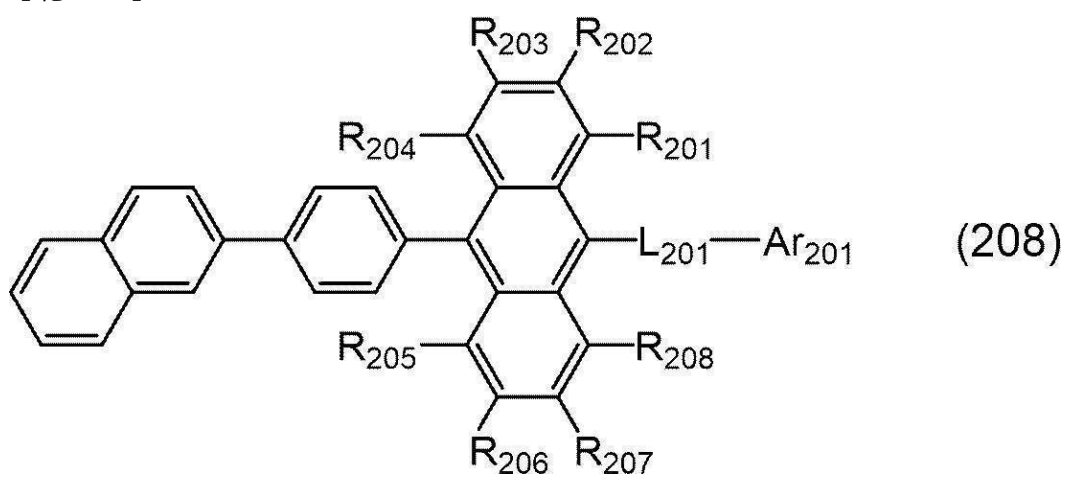
【化 6 6】



20

【 0 2 4 0】

【化 6 7】



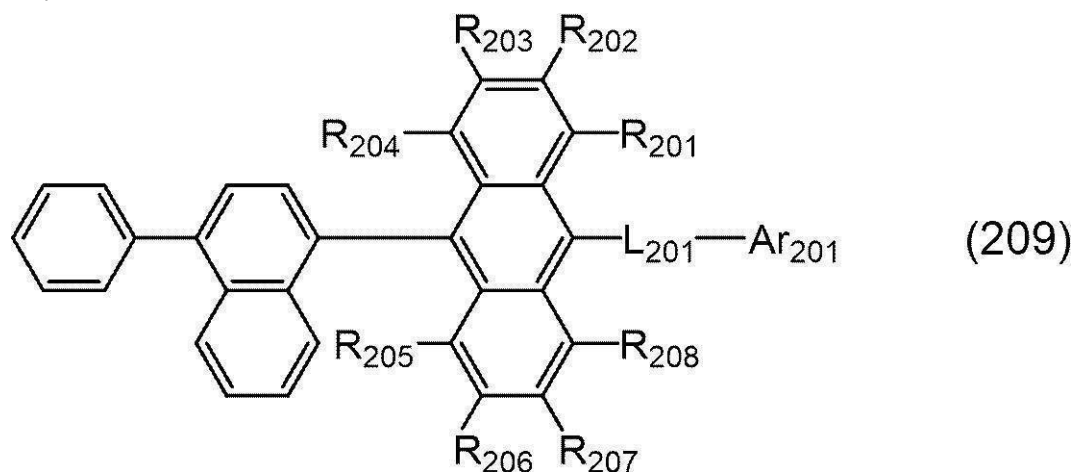
30

40

【 0 2 4 1】

50

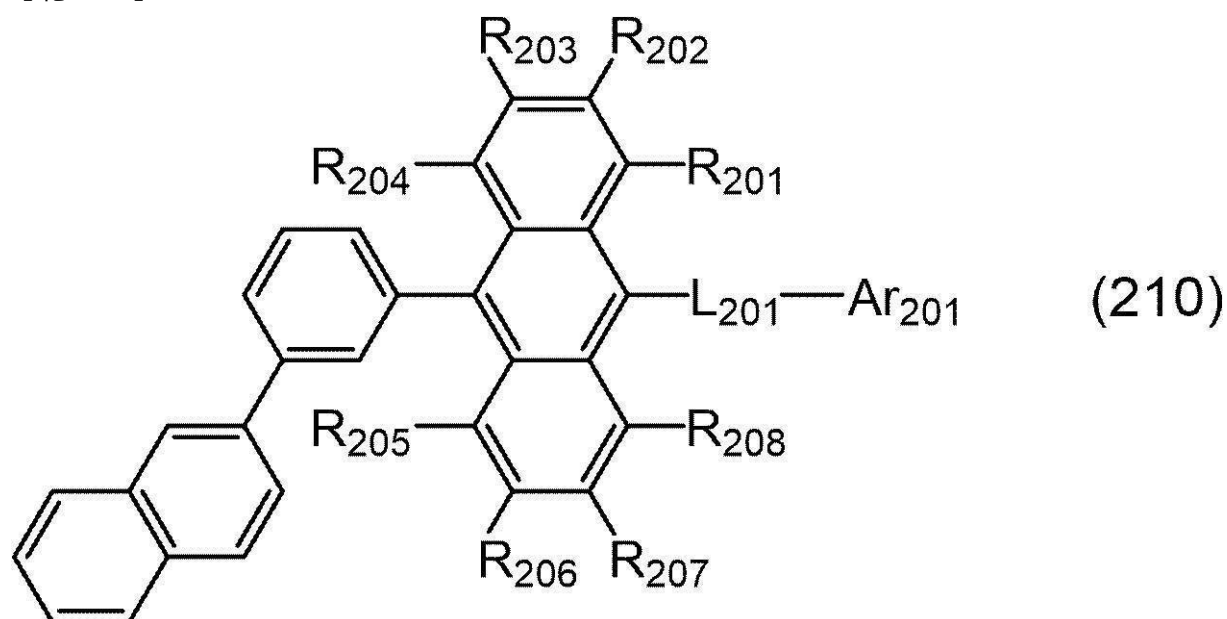
【化 6 8】



10

【 0 2 4 2】

【化 6 9】



20

30

【 0 2 4 3】

(前記一般式(201)~(210)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。)

【 0 2 4 4】

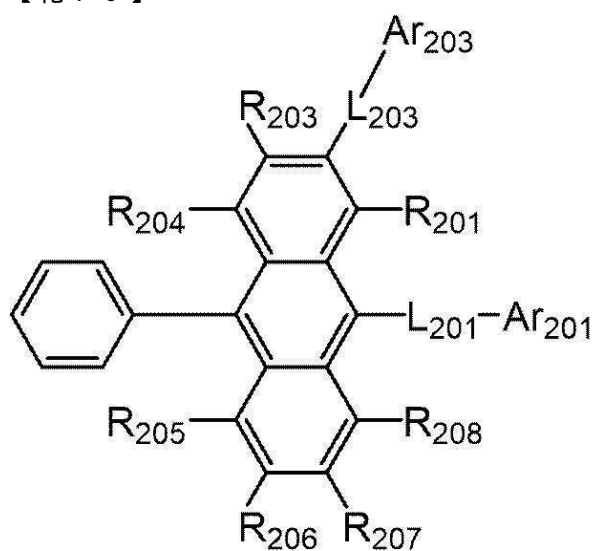
前記一般式(2)で表される第二の化合物は、下記一般式(221)、一般式(222)、一般式(223)、一般式(224)、一般式(225)、一般式(226)、一般式(227)、一般式(228)又は一般式(229)で表される化合物であることも好ましい。

【 0 2 4 5】

40

50

【化 7 0】

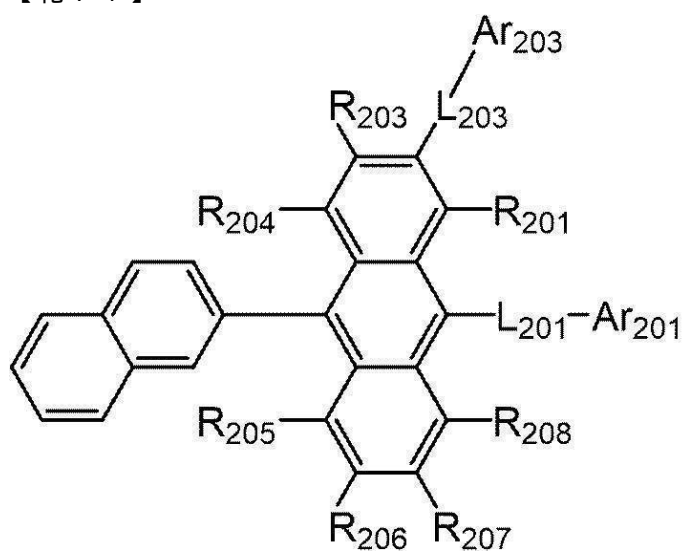


(221)

10

【 0 2 4 6】

【化 7 1】



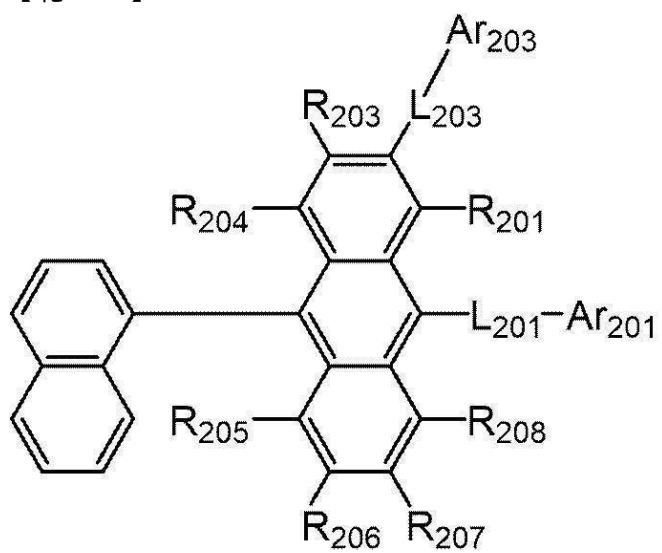
(222)

20

30

【 0 2 4 7】

【化 7 2】



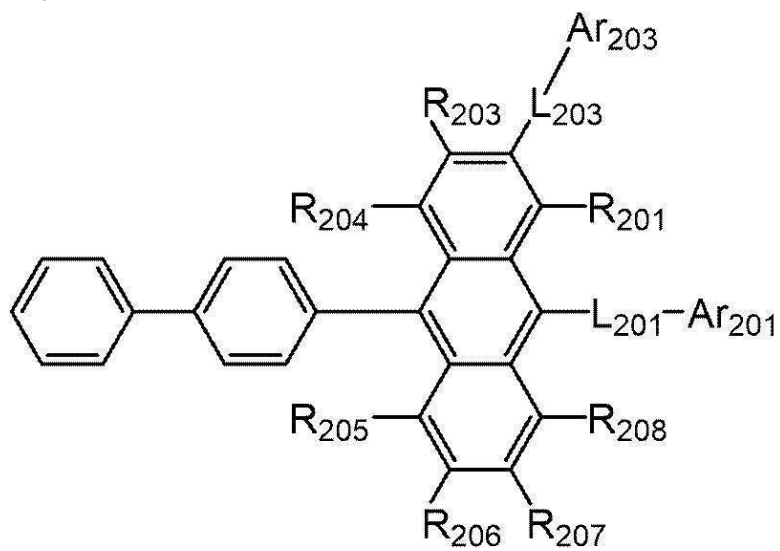
(223)

40

50

【 0 2 4 8 】

【 化 7 3 】

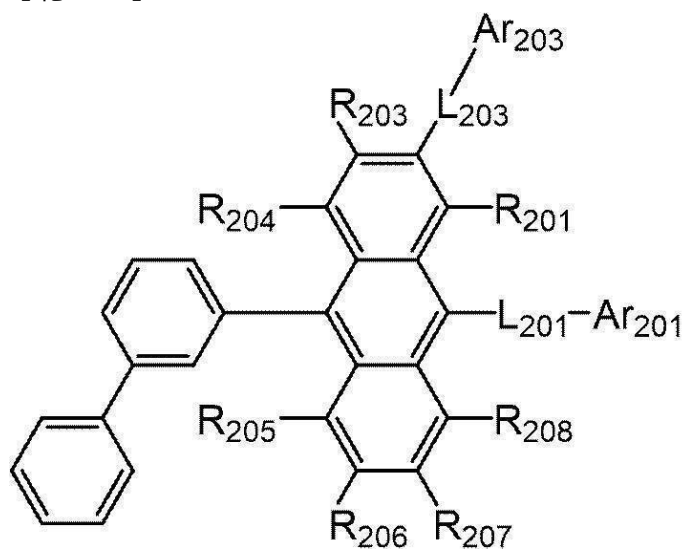


(224)

10

【 0 2 4 9 】

【 化 7 4 】



(225)

20

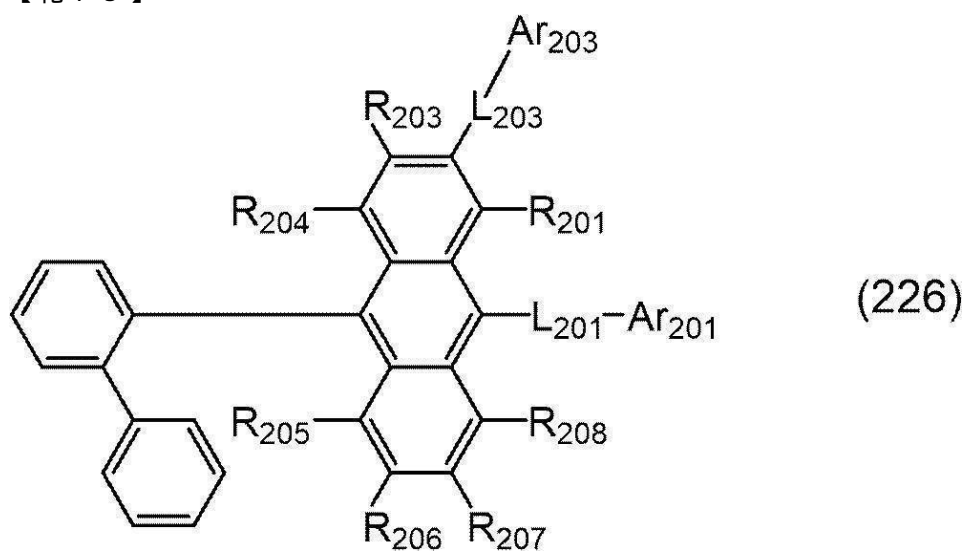
30

【 0 2 5 0 】

40

50

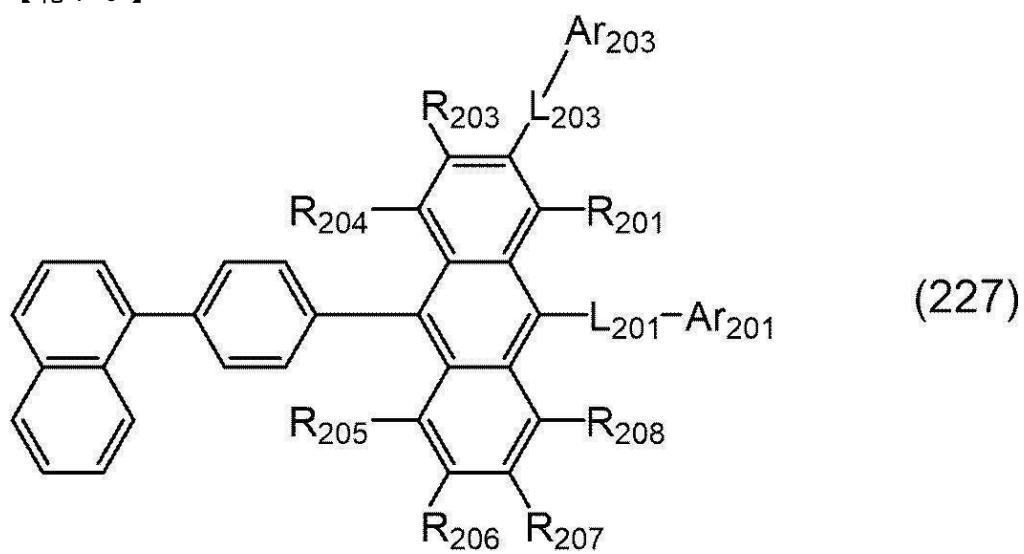
【化 7 5】



10

【 0 2 5 1】

【化 7 6】

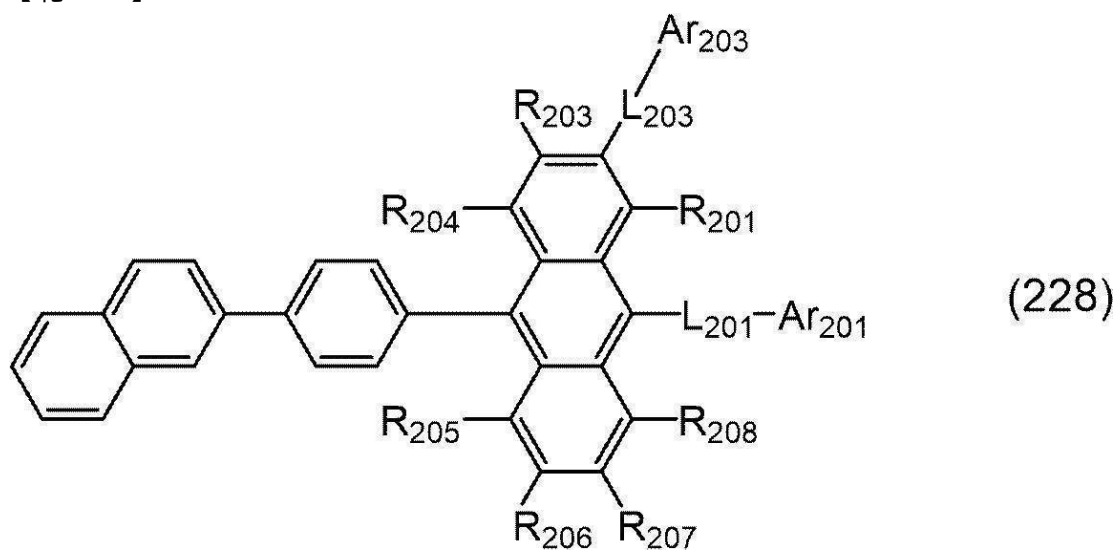


20

30

【 0 2 5 2】

【化 7 7】

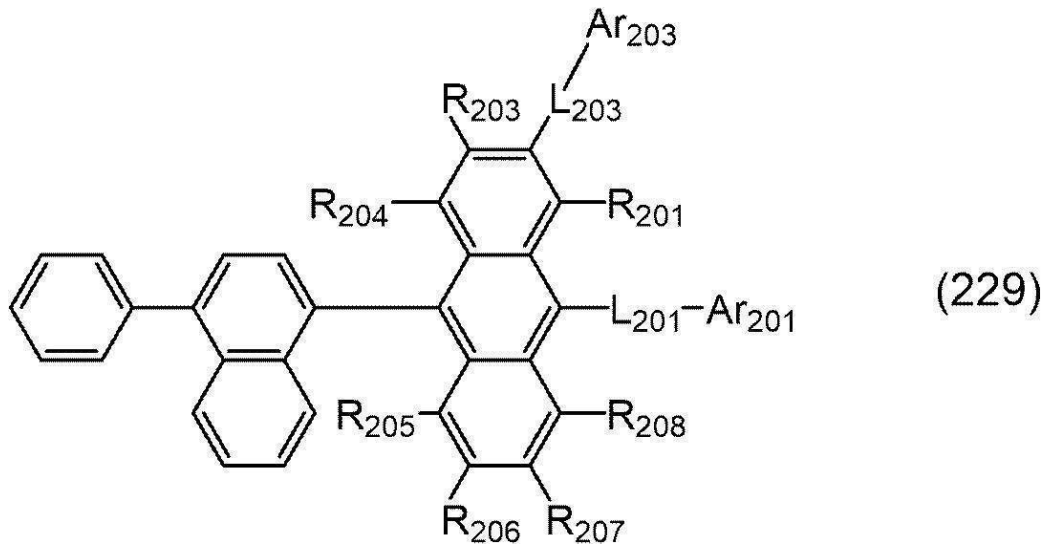


40

50

【 0 2 5 3 】

【 化 7 8 】



10

【 0 2 5 4 】

(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、

20

R₂₀₁並びにR₂₀₃～R₂₀₈は、それぞれ独立に、前記一般式(2)におけるR₂₀₁並びにR₂₀₃～R₂₀₈と同義であり、

L₂₀₁及びAr₂₀₁は、それぞれ、前記一般式(2)におけるL₂₀₁及びAr₂₀₁と同義であり、

L₂₀₃は、前記一般式(2)におけるL₂₀₁と同義であり、

L₂₀₃とL₂₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar₂₀₃は、前記一般式(2)におけるAr₂₀₁と同義であり、

Ar₂₀₃とAr₂₀₁は、互いに同一であるか、又は異なる。)

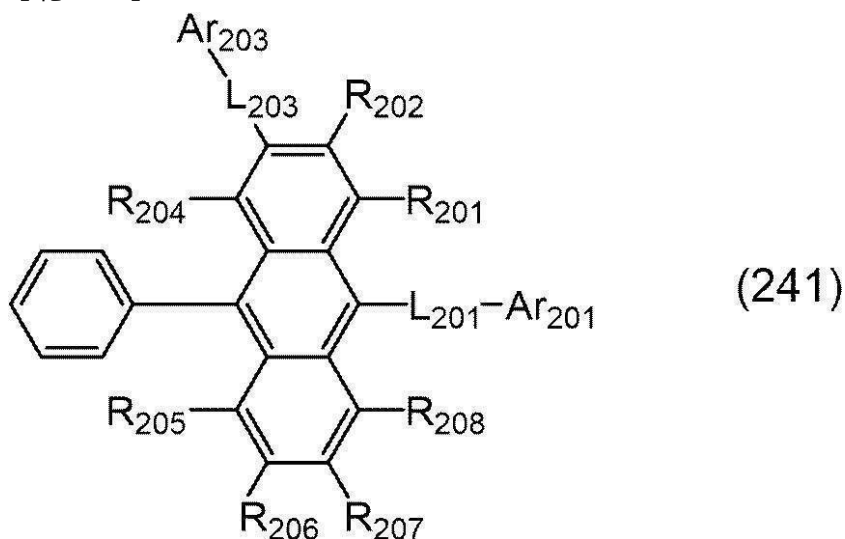
【 0 2 5 5 】

30

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。

【 0 2 5 6 】

【 化 7 9 】

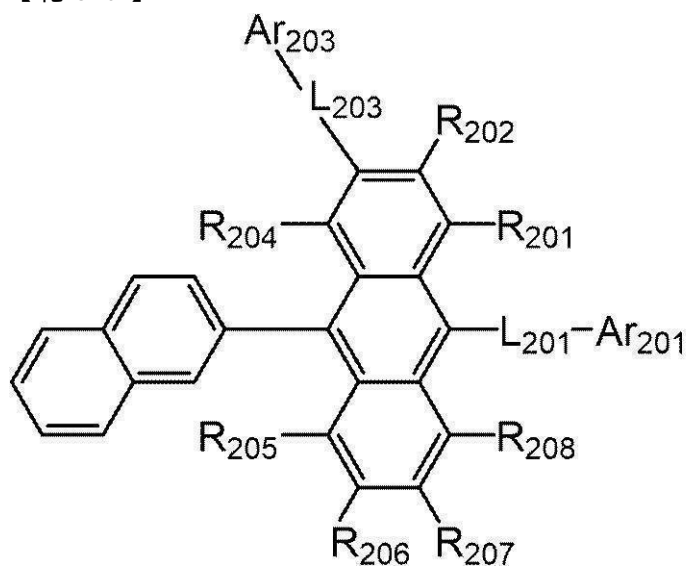


40

50

【 0 2 5 7 】

【 化 8 0 】

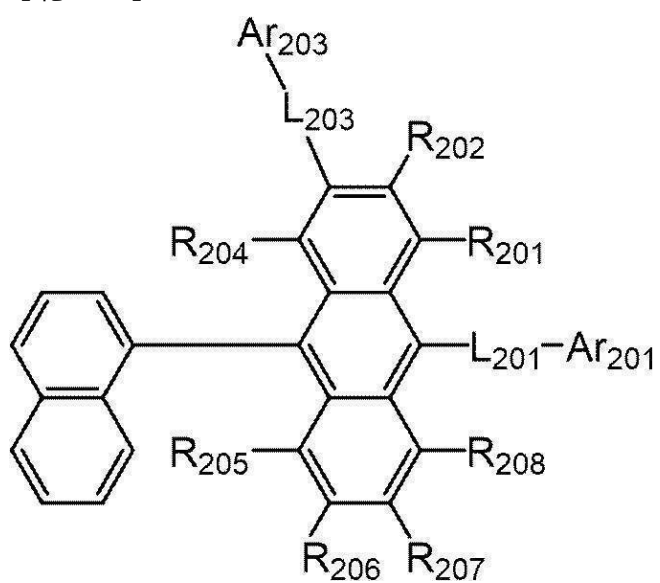


(242)

10

【 0 2 5 8 】

【 化 8 1 】



(243)

20

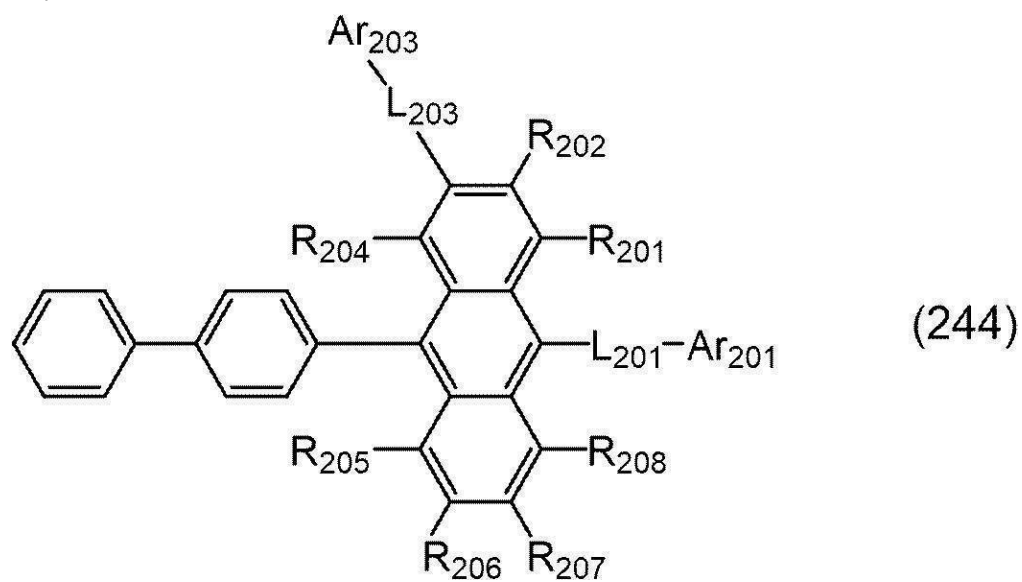
30

【 0 2 5 9 】

40

50

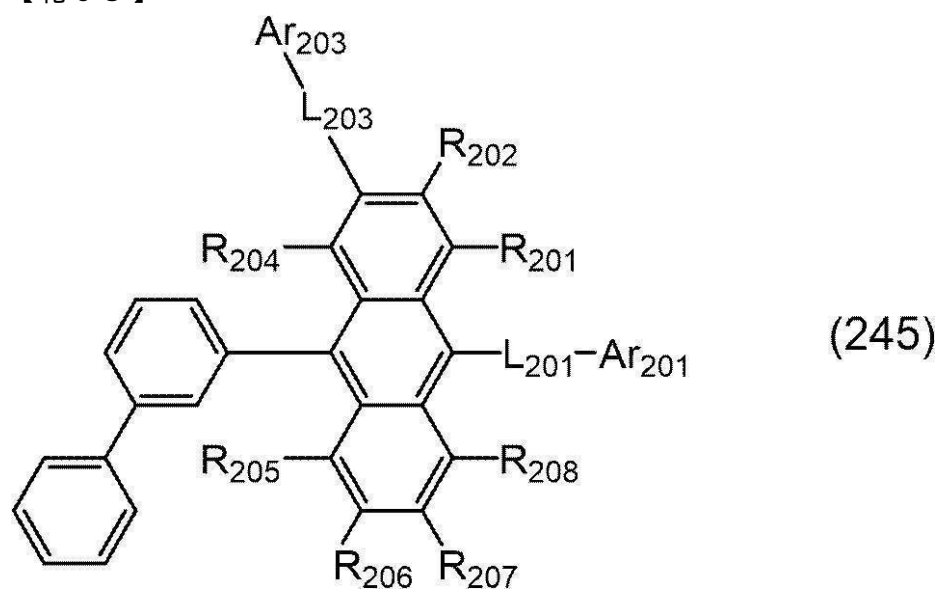
【化 8 2】



10

【 0 2 6 0】

【化 8 3】



20

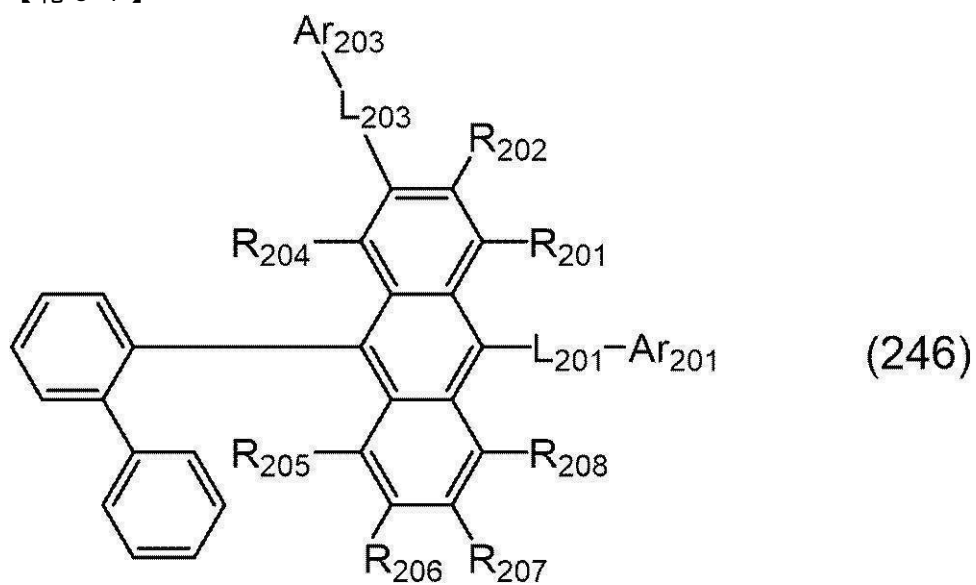
30

【 0 2 6 1】

40

50

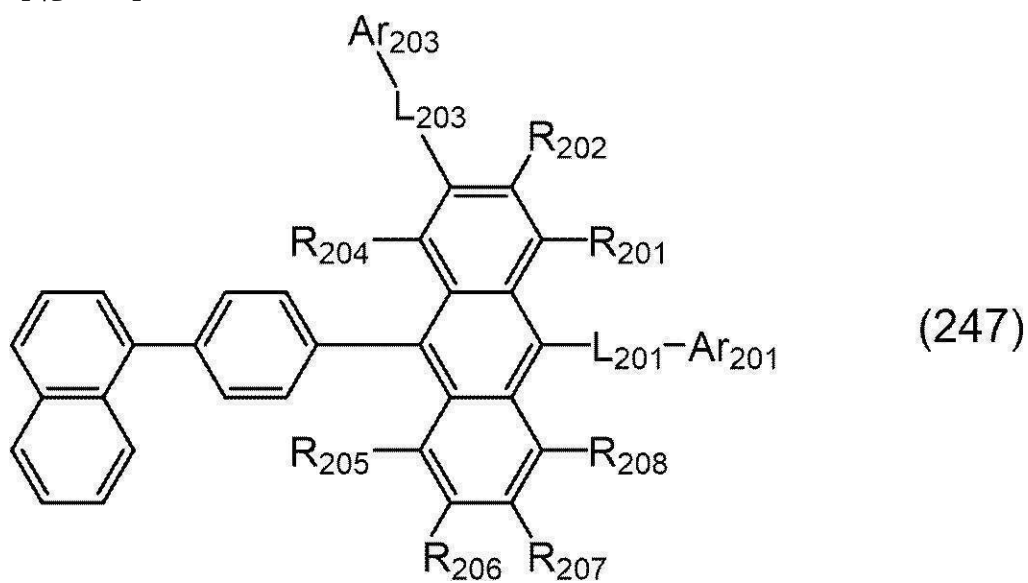
【化 8 4】



10

【 0 2 6 2 】

【化 8 5】



20

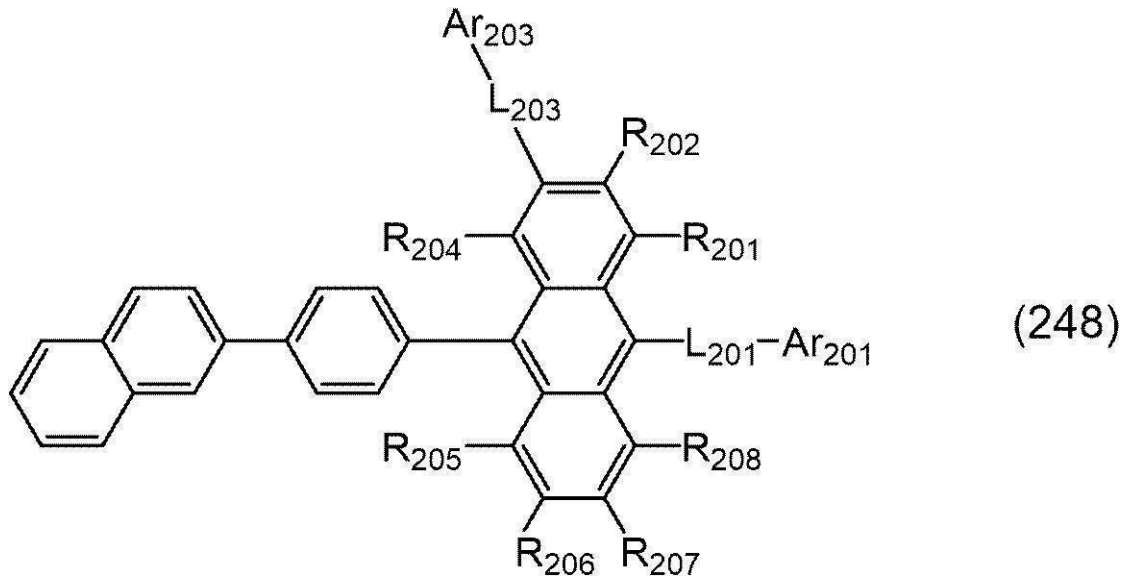
30

【 0 2 6 3 】

40

50

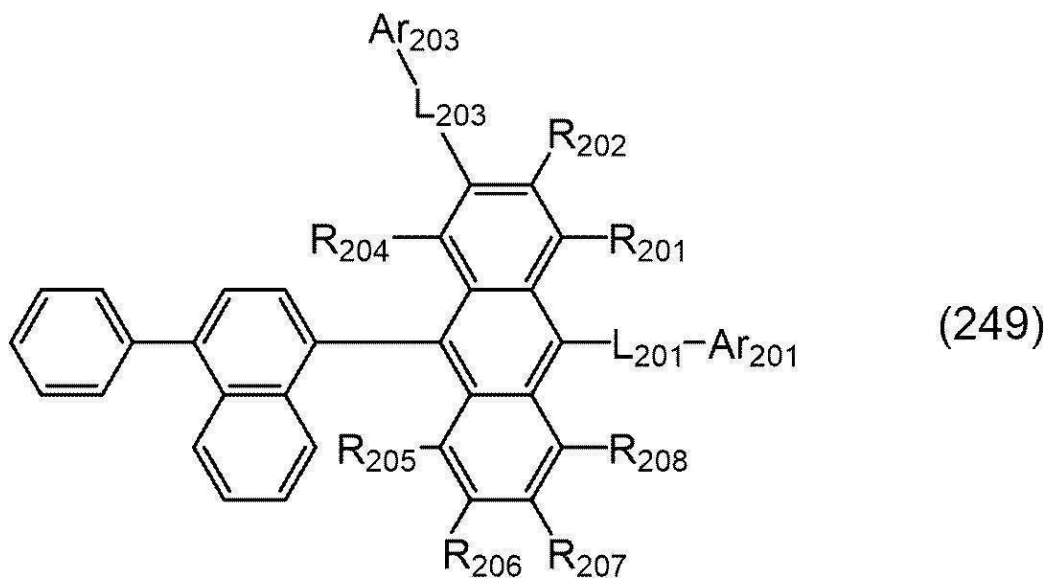
【化 8 6】



10

【 0 2 6 4】

【化 8 7】



20

30

【 0 2 6 5】

(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、

R₂₀₁、R₂₀₂並びにR₂₀₄～R₂₀₈は、それぞれ独立に、前記一般式(2)におけるR₂₀₁、R₂₀₂並びにR₂₀₄～R₂₀₈と同義であり、

L₂₀₁及びAr₂₀₁は、それぞれ、前記一般式(2)におけるL₂₀₁及びAr₂₀₁と同義であり、

L₂₀₃は、前記一般式(2)におけるL₂₀₁と同義であり、

L₂₀₃とL₂₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar₂₀₃は、前記一般式(2)におけるAr₂₀₁と同義であり、

Ar₂₀₃とAr₂₀₁は、互いに同一であるか、又は異なる。)

【 0 2 6 6】

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R₂₀₁～R₂₀₈は、それぞれ独立に、

40

50

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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基であることが好ましい。

【 0 2 6 7 】

L₁₀₁ 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、

A r₁₀₁ 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。

10

【 0 2 6 8 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、

前記一般式 (2) で表される第二の化合物中、R₂₀₁ ~ R₂₀₈ 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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基であることが好ましい。

【 0 2 6 9 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、

前記一般式 (2) で表される第二の化合物中、R₂₀₁ ~ R₂₀₈ は、水素原子であることが好ましい。

20

【 0 2 7 0 】

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。

【 0 2 7 1 】

(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。

【 0 2 7 2 】

(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。

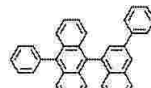
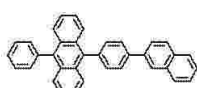
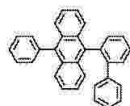
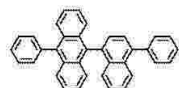
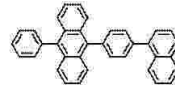
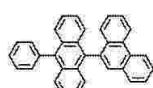
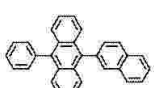
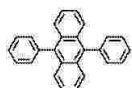
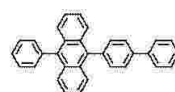
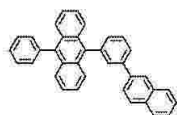
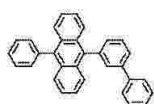
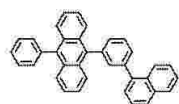
【 0 2 7 3 】

30

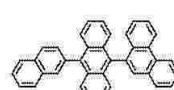
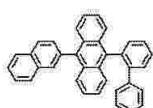
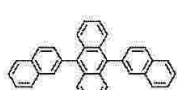
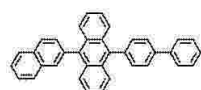
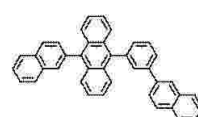
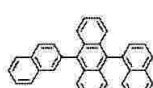
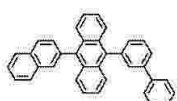
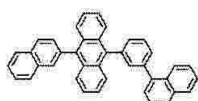
40

50

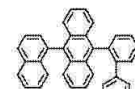
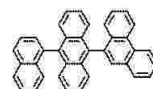
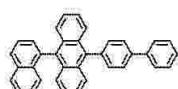
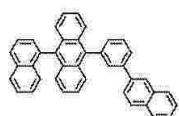
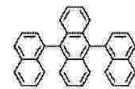
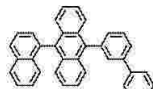
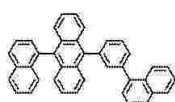
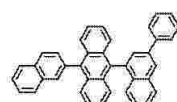
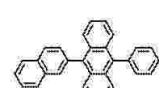
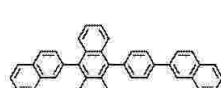
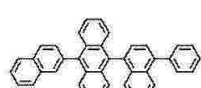
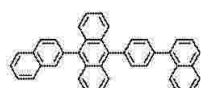
【化 8 8】



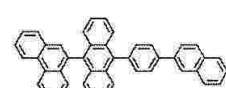
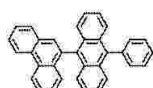
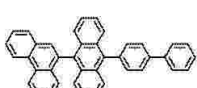
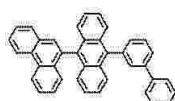
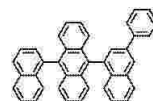
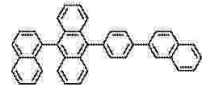
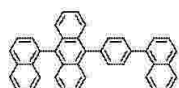
10



20



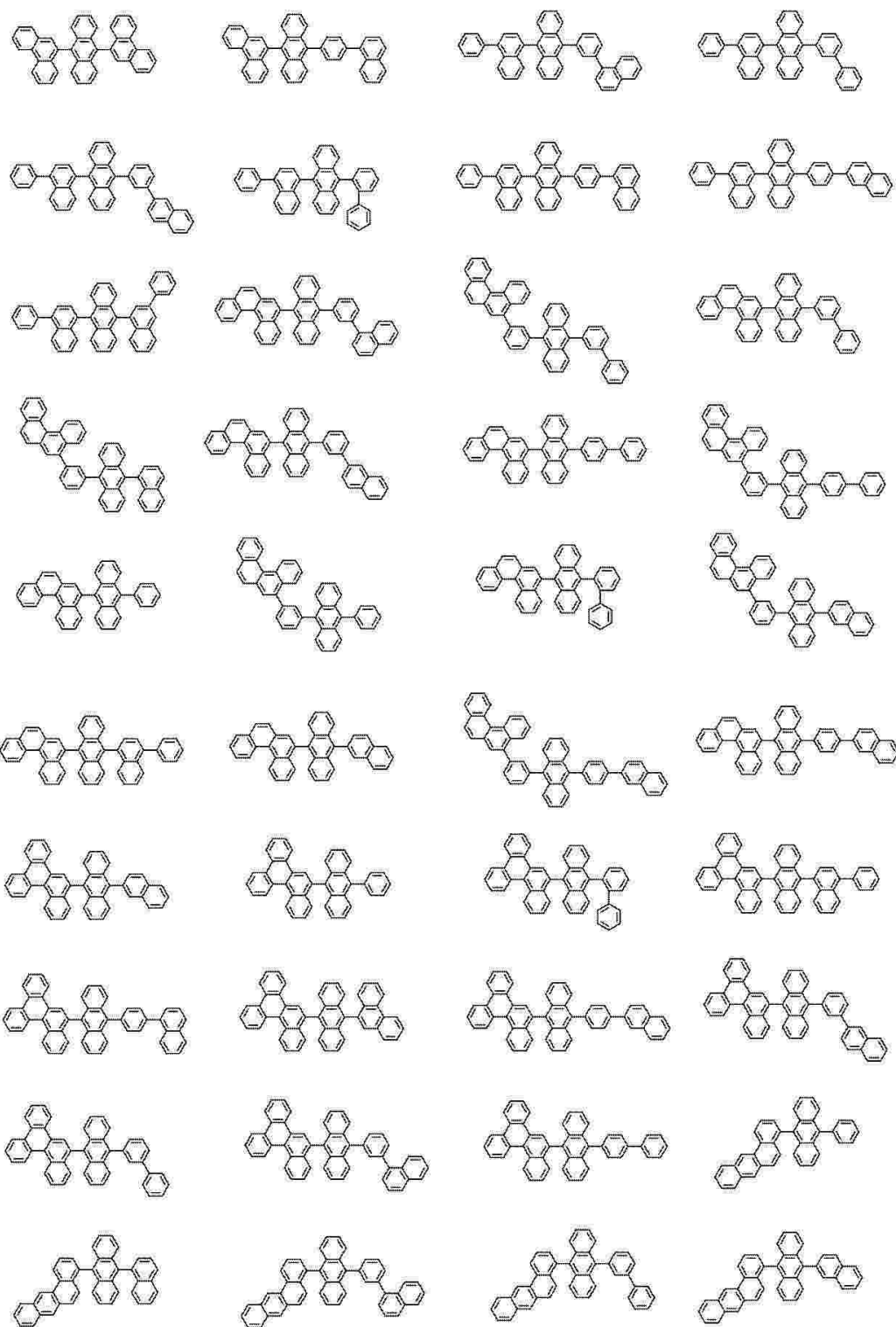
30



40

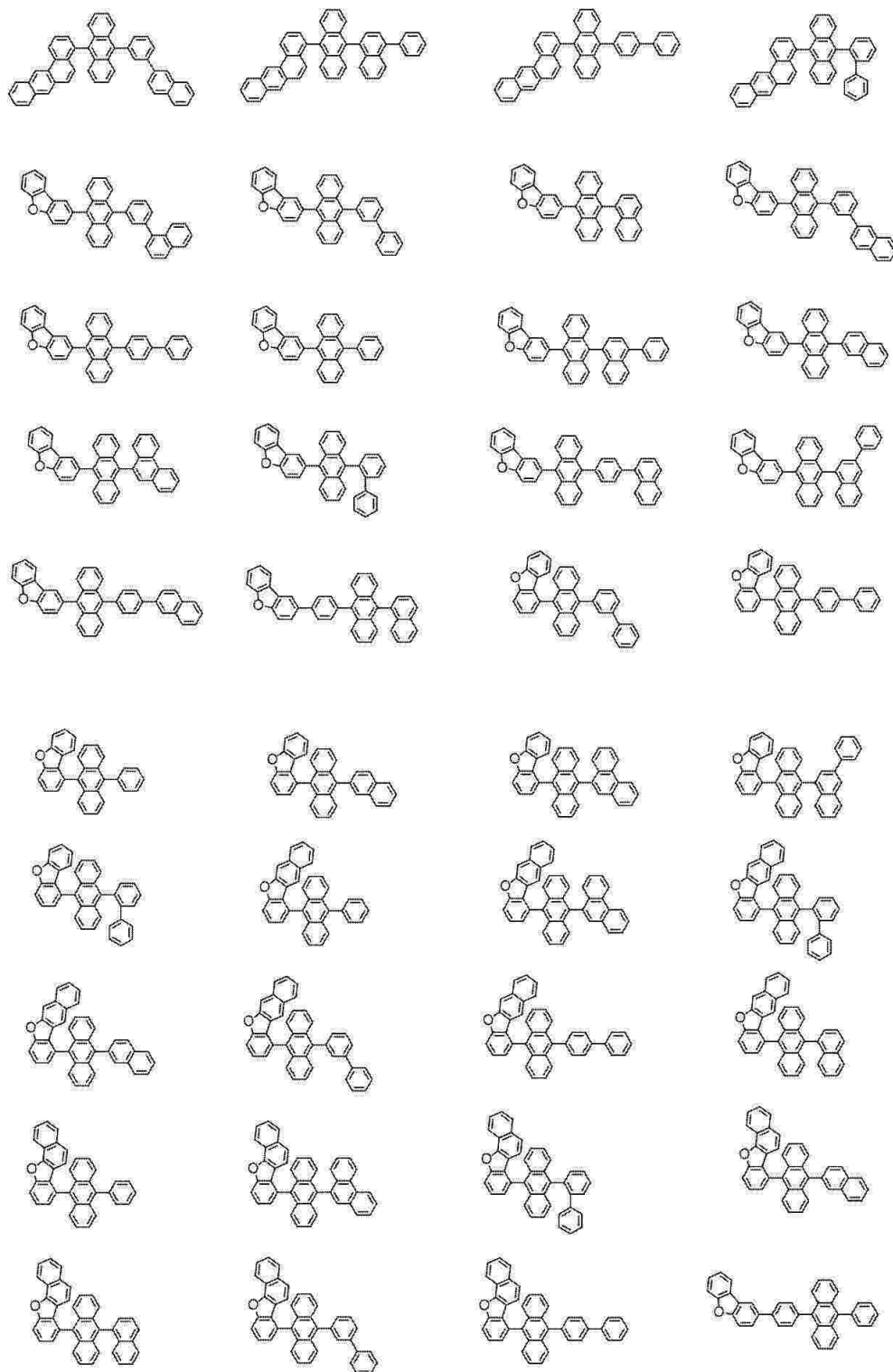
【 0 2 7 4 】

【化 8 9】



【 0 2 7 5 】

【化 9 0】



10

20

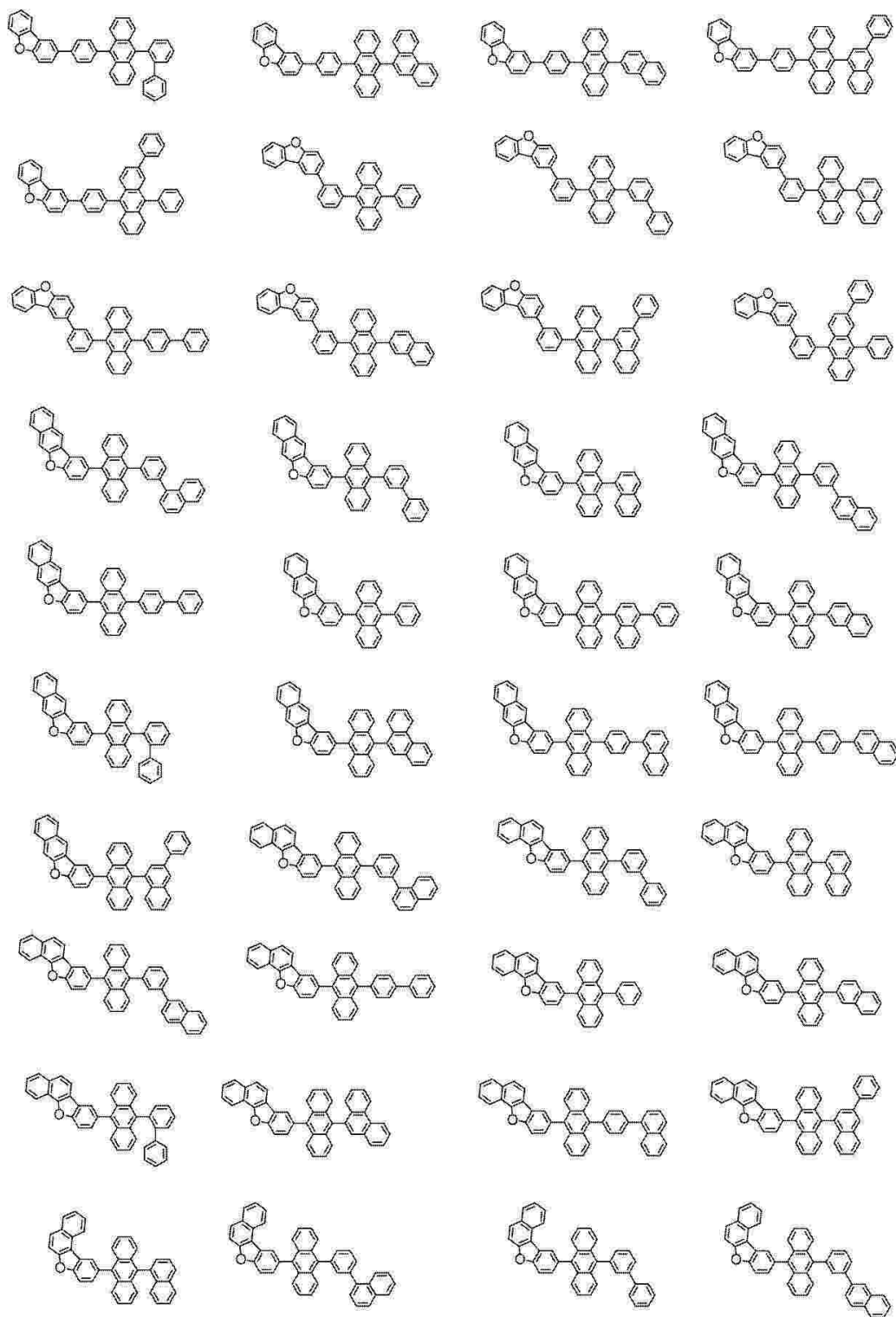
30

40

【 0 2 7 6】

50

【化 9 1】



10

20

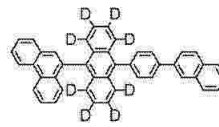
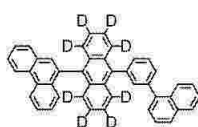
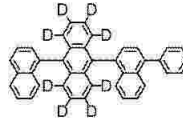
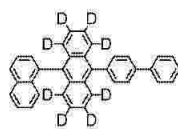
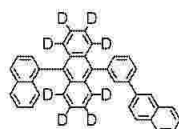
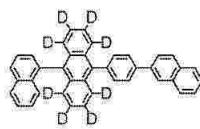
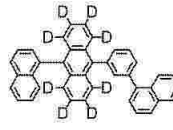
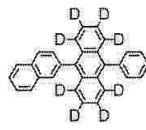
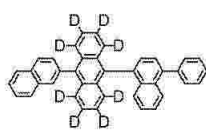
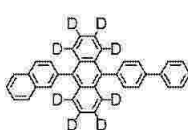
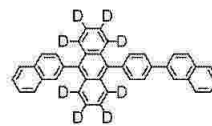
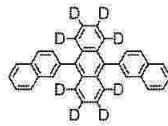
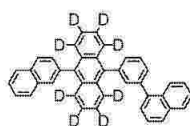
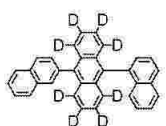
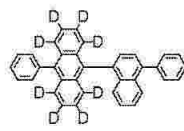
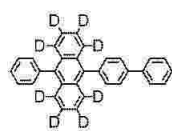
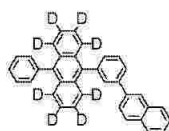
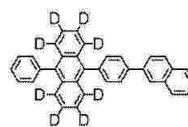
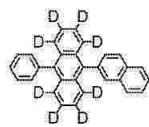
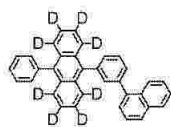
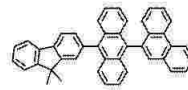
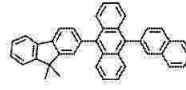
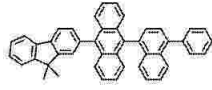
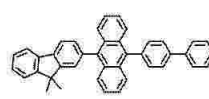
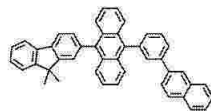
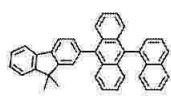
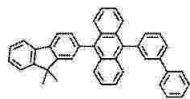
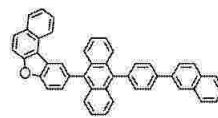
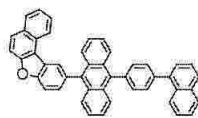
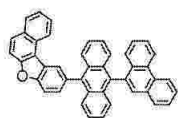
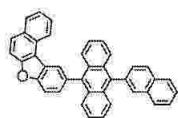
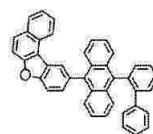
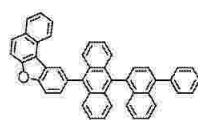
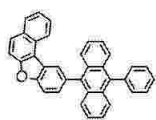
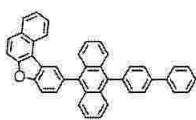
30

40

【 0 2 7 7 】

50

【化 9 2】



【 0 2 7 8 】

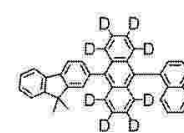
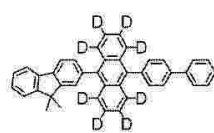
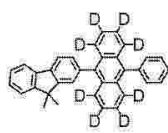
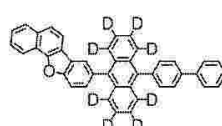
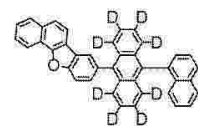
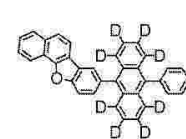
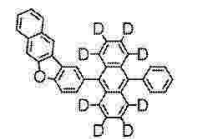
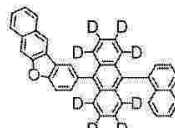
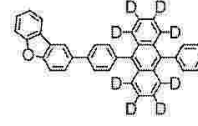
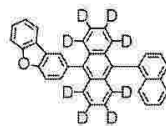
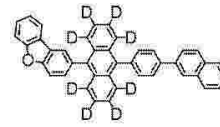
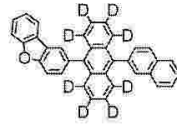
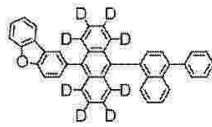
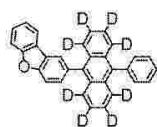
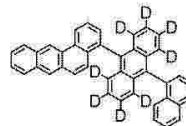
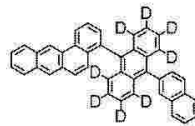
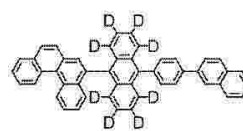
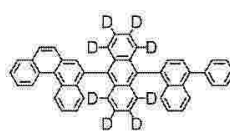
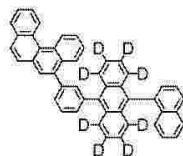
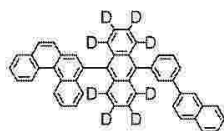
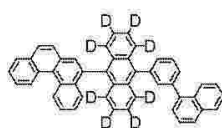
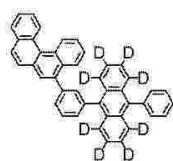
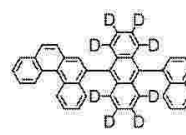
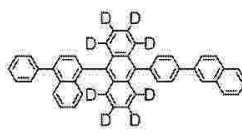
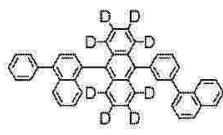
10

20

30

40

50

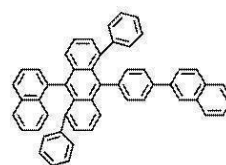
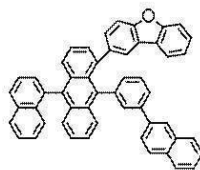
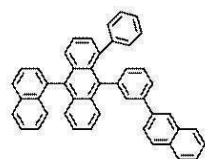
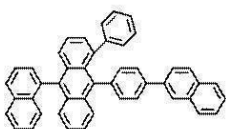
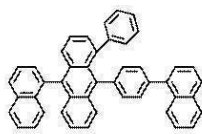
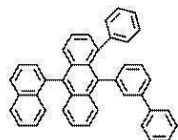
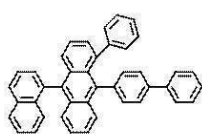


20

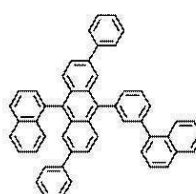
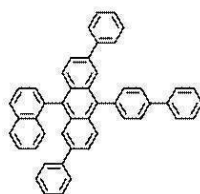
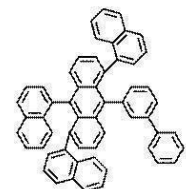
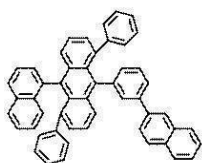
40

【 0 2 7 9 】

【化 9 4】

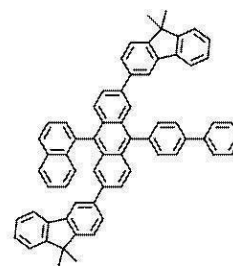
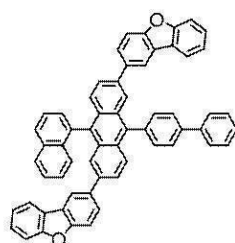
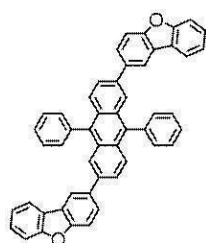
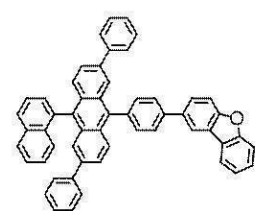


10

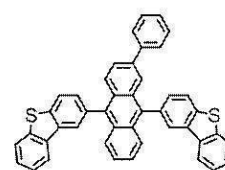
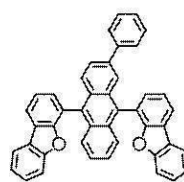
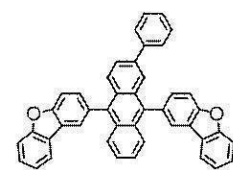
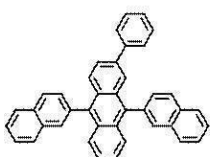


【 0 2 8 0】

【化 9 5】



20



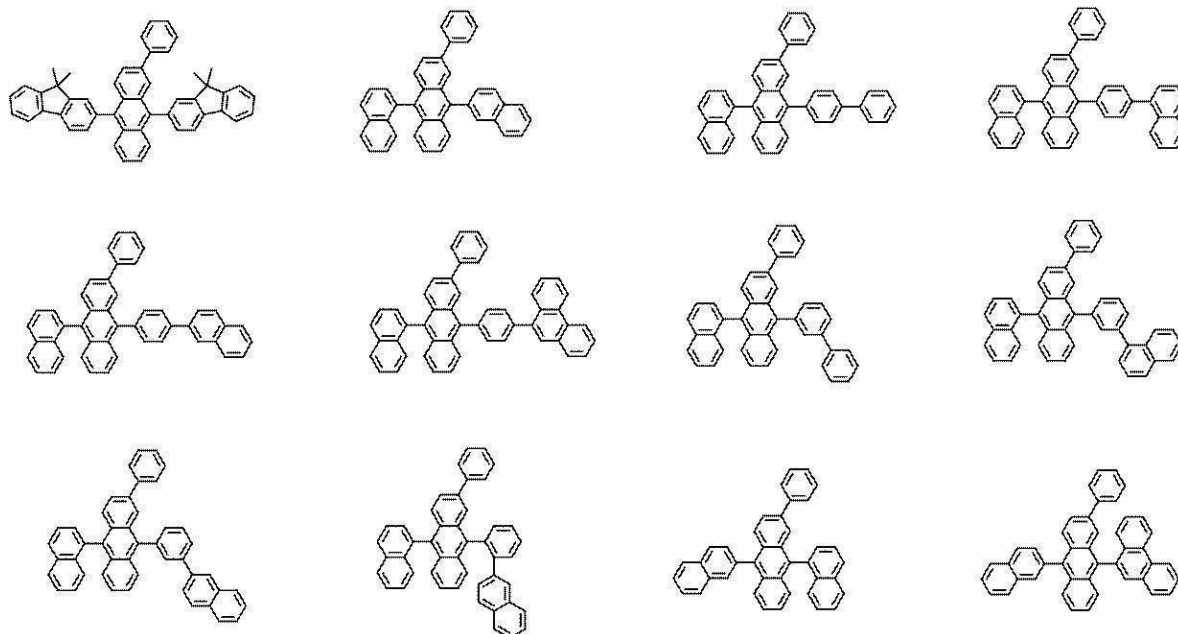
30

【 0 2 8 1】

40

50

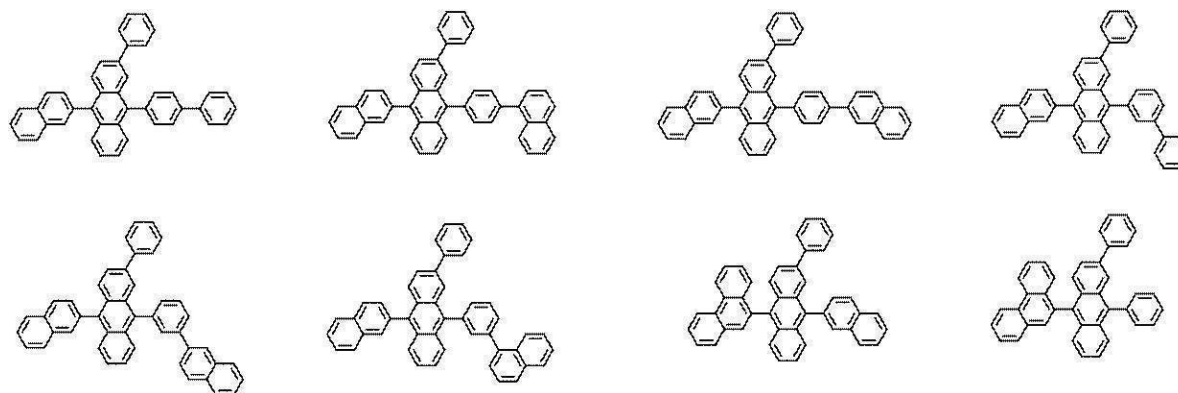
【化 9 6】



10

【 0 2 8 2】

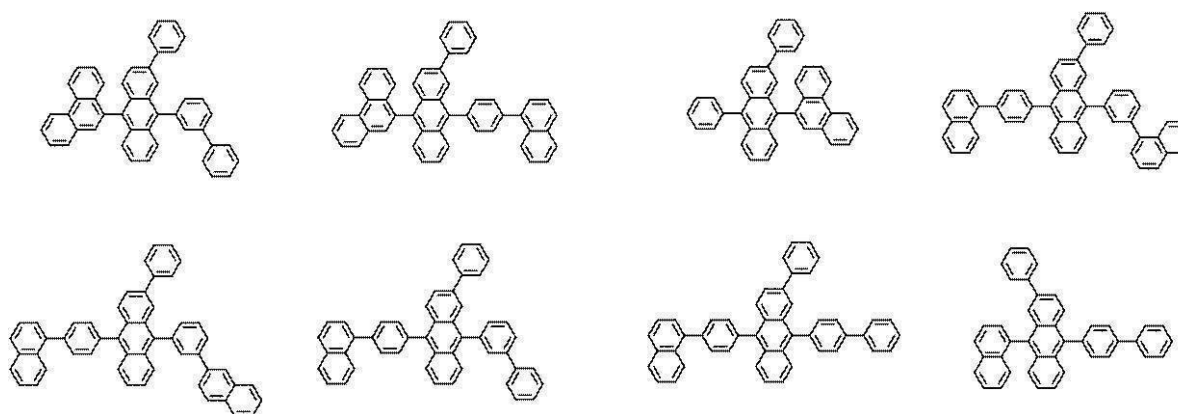
【化 9 7】



20

【 0 2 8 3】

【化 9 8】



30

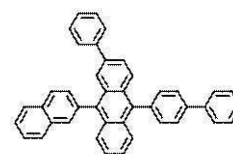
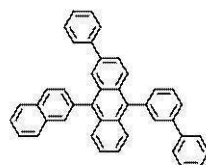
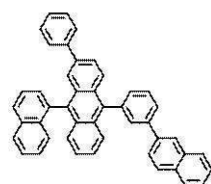
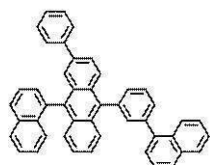
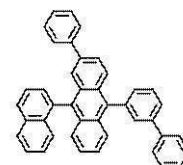
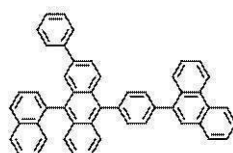
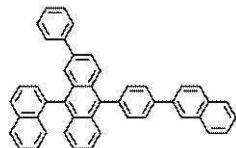
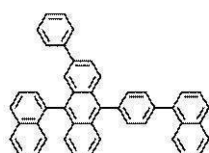
【 0 2 8 4】



40

50

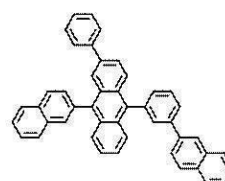
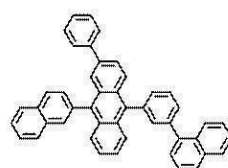
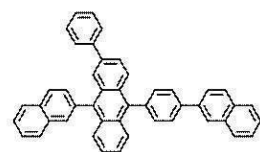
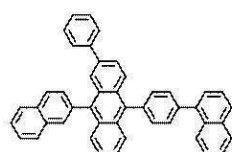
【化 9 9】



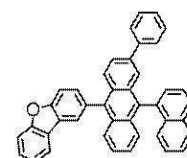
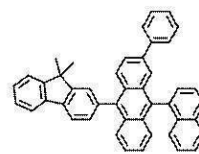
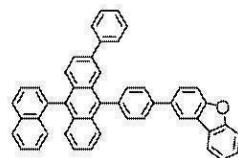
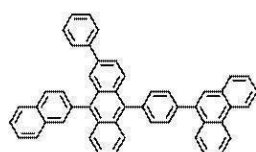
10

【 0 2 8 5】

【化 1 0 0】

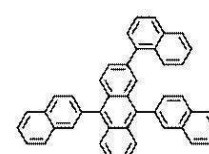
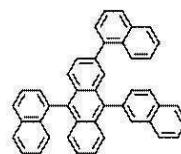
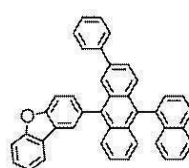
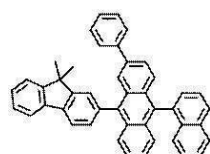


20

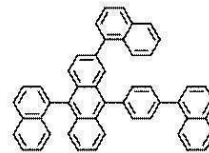
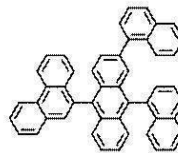
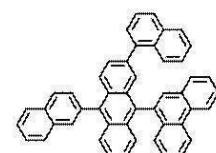
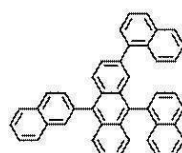


【 0 2 8 6】

【化 1 0 1】



30

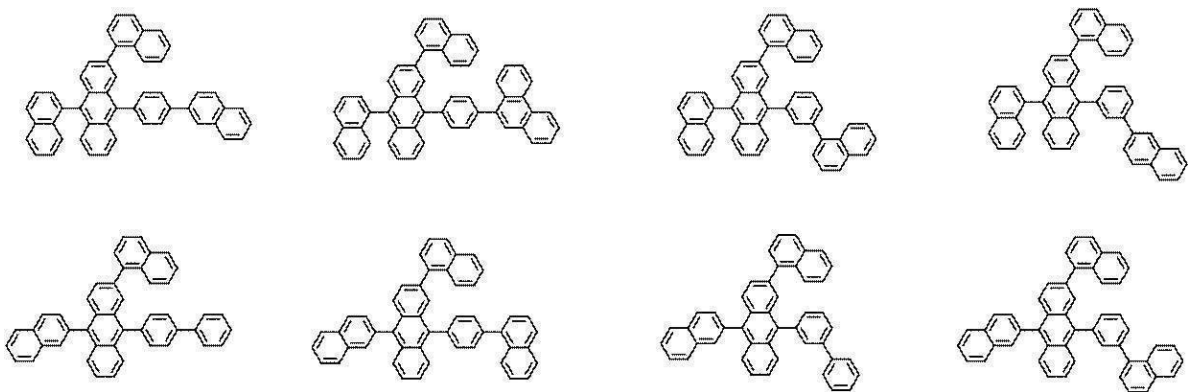


【 0 2 8 7】

40

50

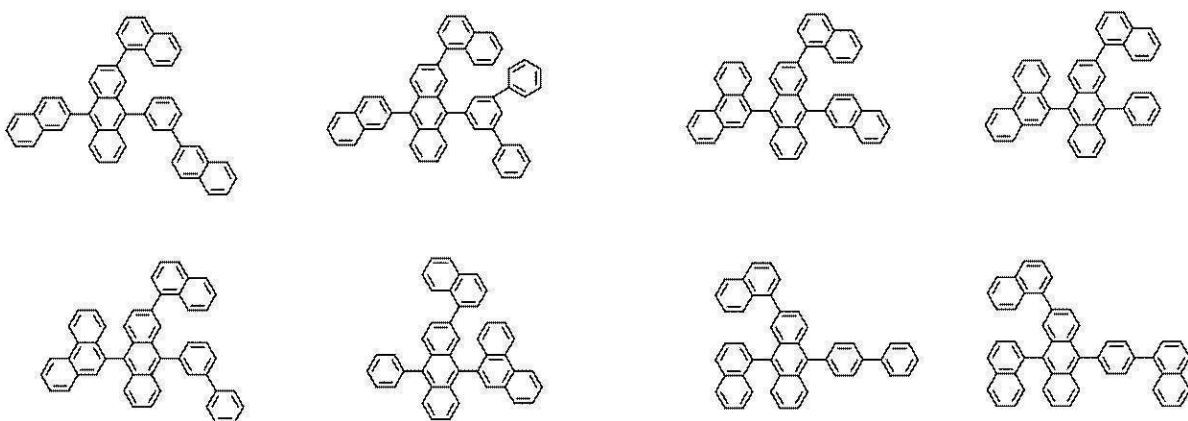
【化 1 0 2】



10

【 0 2 8 8】

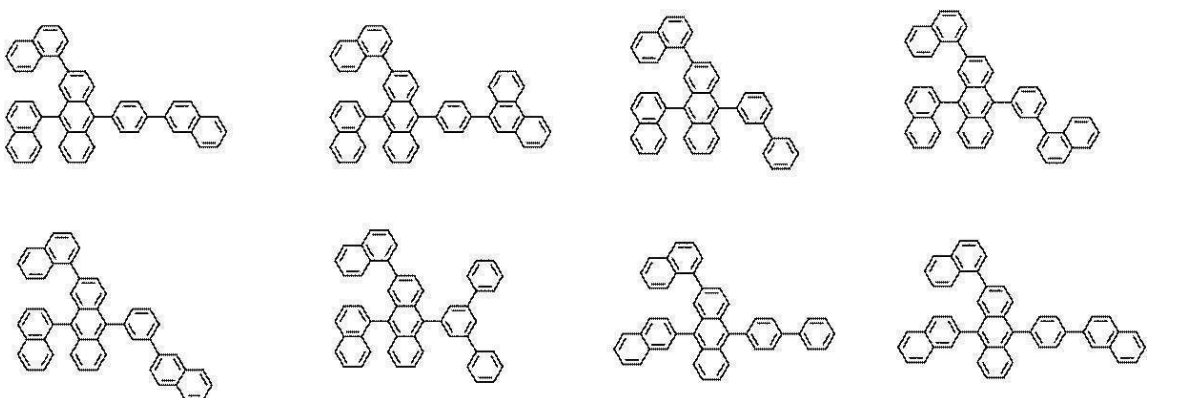
【化 1 0 3】



20

【 0 2 8 9】

【化 1 0 4】



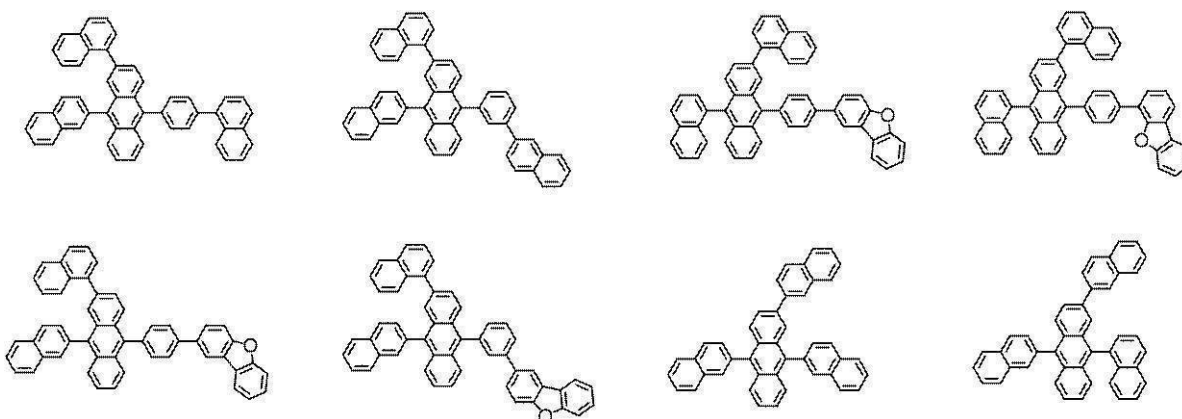
30

【 0 2 9 0】

40

50

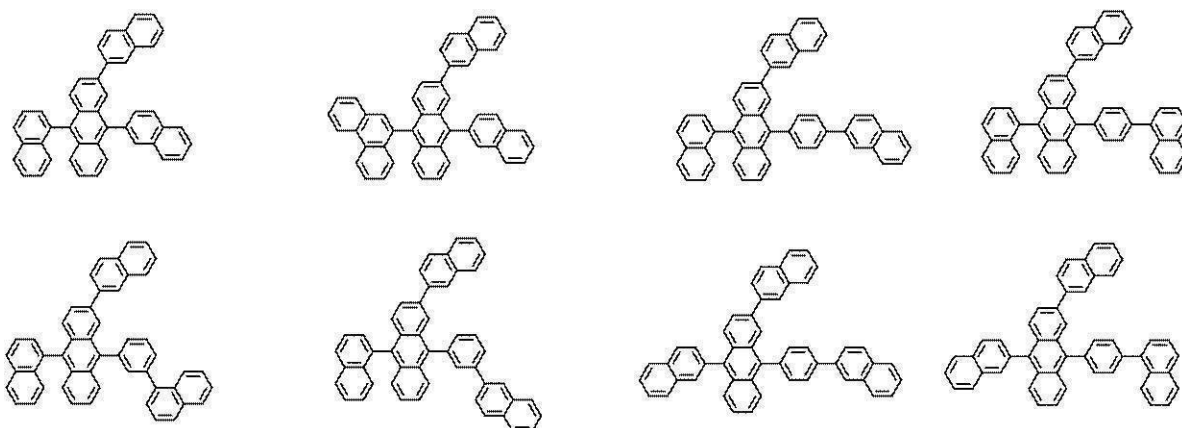
【化 1 0 5】



10

【 0 2 9 1】

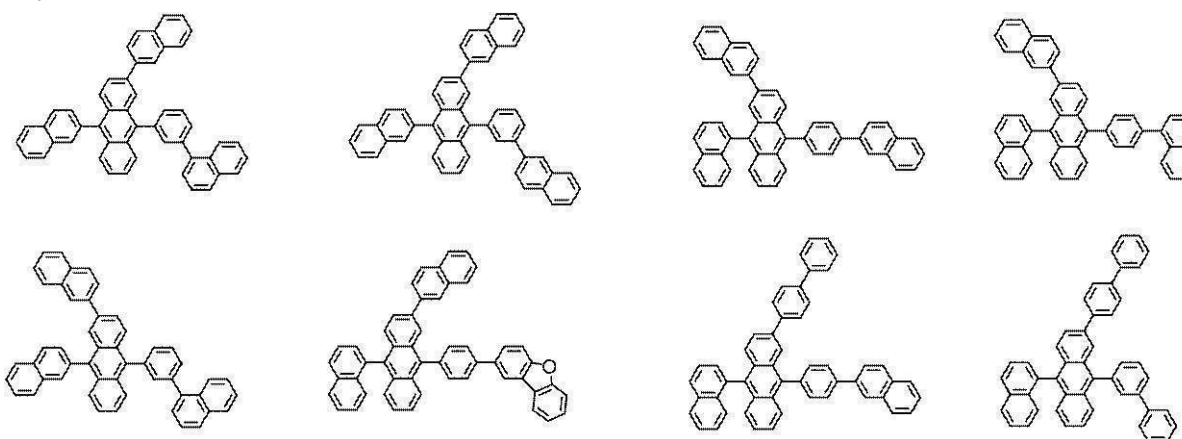
【化 1 0 6】



20

【 0 2 9 2】

【化 1 0 7】

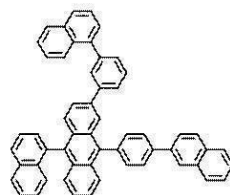
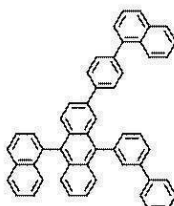
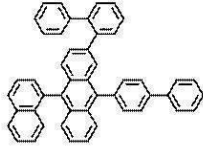
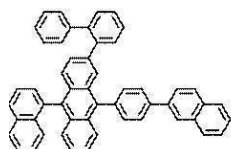
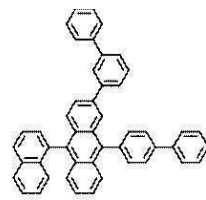
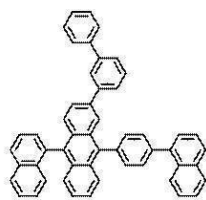
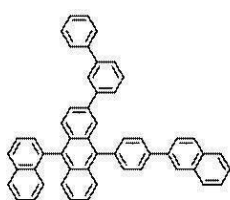
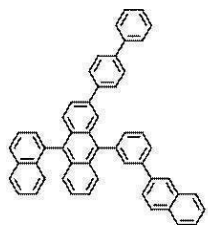


30

【 0 2 9 3】

40

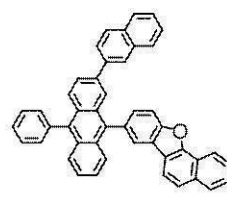
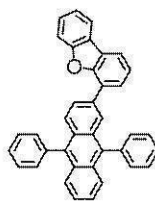
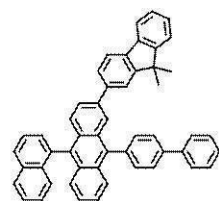
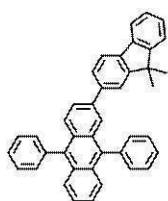
【化 1 0 8】



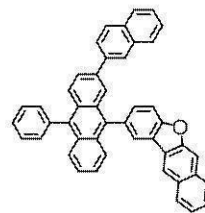
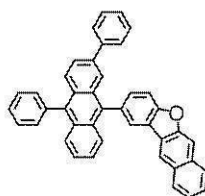
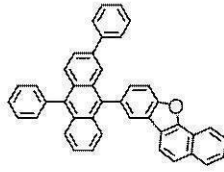
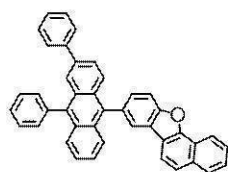
10

【 0 2 9 4】

【化 1 0 9】

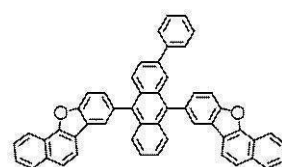
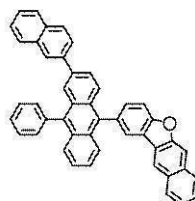
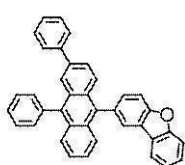
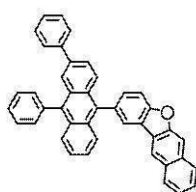


20

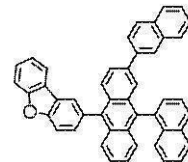
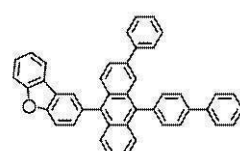
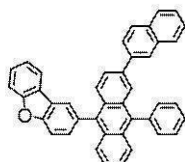
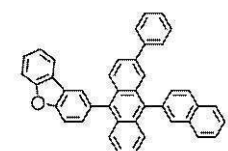


【 0 2 9 5】

【化 1 1 0】



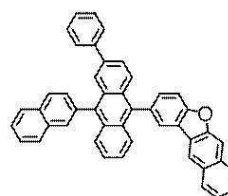
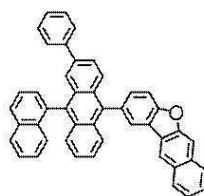
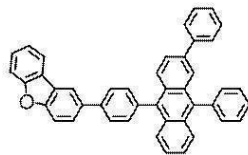
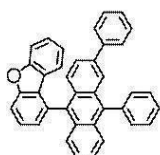
30



40

【 0 2 9 6】

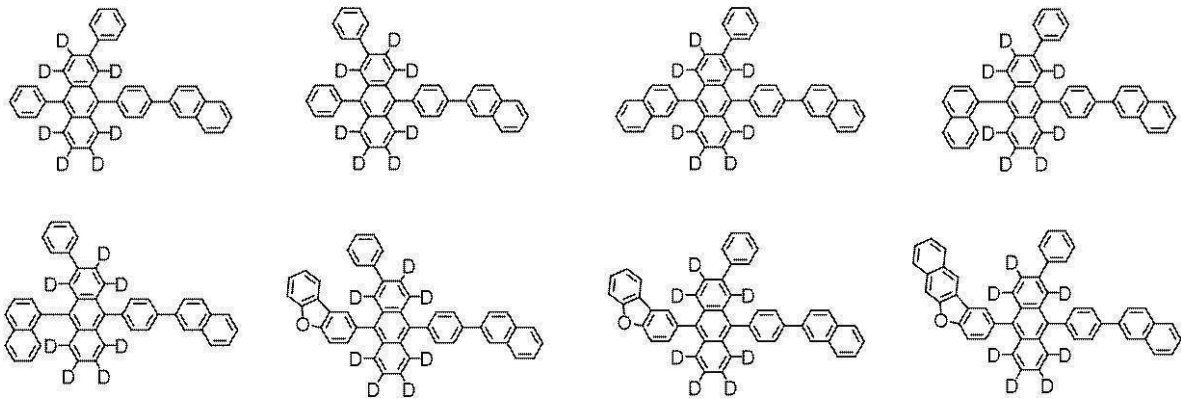
【化 1 1 1】



50

【 0 2 9 7 】

【 化 1 1 2 】



10

【 0 2 9 8 】

・ 第六の化合物及び第七の化合物

第六の化合物及び第七の化合物は、それぞれ独立に、下記一般式（ 3 A ）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（ 1 0 ）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。

20

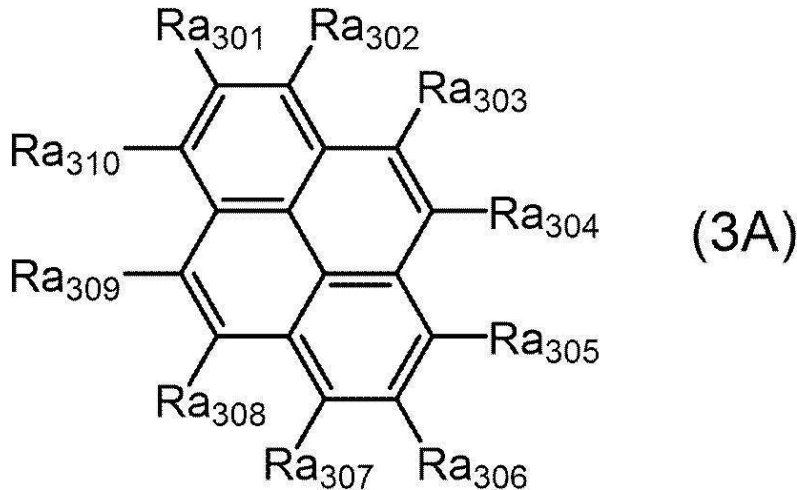
【 0 2 9 9 】

（ 一般式（ 3 A ）で表される化合物 ）

一般式（ 3 A ）で表される化合物について説明する。

【 0 3 0 0 】

【 化 1 1 3 】



30

【 0 3 0 1 】

（ 前記一般式（ 3 A ）において、

R a 3 0 1、R a 3 0 2、R a 3 0 3、R a 3 0 4、R a 3 0 5、R a 3 0 6、R a 3 0 7、R a 3 0 8、R a 3 0 9 及び R a 3 1 0 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、

40

R a 3 0 1 ~ R a 3 1 0 の少なくとも 1 つは下記一般式（ 3 1 A ）で表される 1 価の基であり、

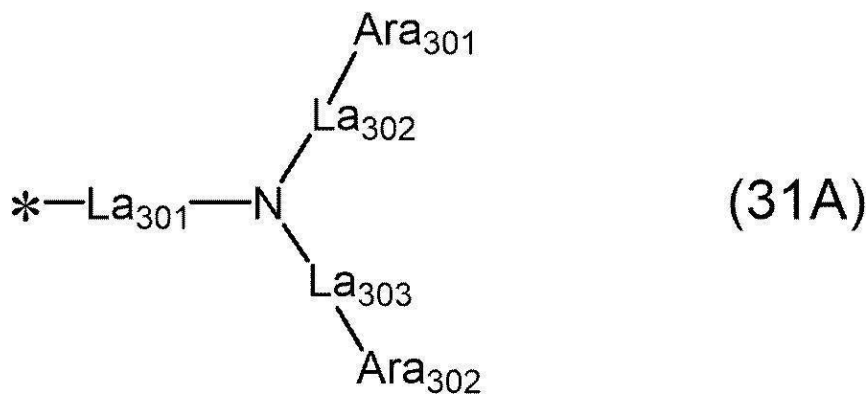
前記単環を形成せず、前記縮合環を形成せず、かつ下記一般式（ 3 1 A ）で表される 1 価の基ではない R a 3 0 1 ~ R a 3 1 0 は、それぞれ独立に、

50

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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) 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。)

【 0 3 0 2 】

【 化 1 1 4 】



【 0 3 0 3 】

(前記一般式 (3 1 A) において、

A r a₃₀₁ 及び A r a₃₀₂ 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 a₃₀₁、L a₃₀₂ 及び L a₃₀₃ 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 A) 中のピレン環における結合位置を示す。)

【 0 3 0 4 】

第六の化合物及び第七の化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、
 R₉₀₆ 及び R₉₀₇ は、それぞれ独立に、

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

R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₄が複数存在する場合、複数のR₉₀₄は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₅が複数存在する場合、複数のR₉₀₅は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₆が複数存在する場合、複数のR₉₀₆は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₇が複数存在する場合、複数のR₉₀₇は、互いに同一であるか又は異なる。

【0305】

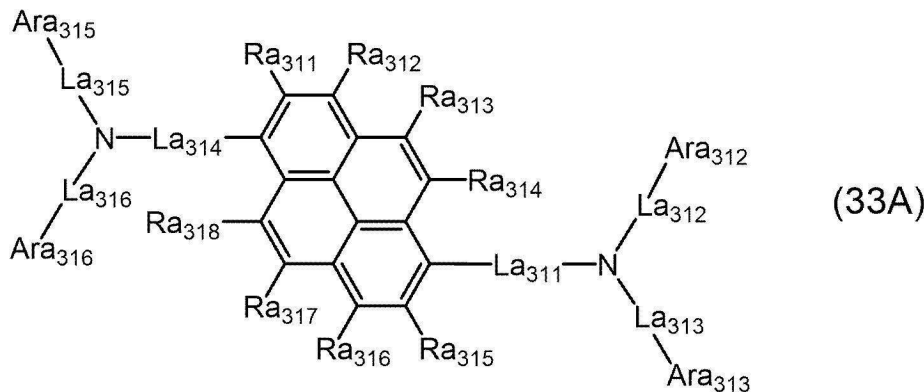
前記一般式(3A)において、Ra₃₀₁～Ra₃₁₀のうち2つが前記一般式(31A)で表される基であることが好ましい。

【0306】

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

【0307】

【化115】



【0308】

(前記一般式(33A)において、

Ra₃₁₁、Ra₃₁₂、Ra₃₁₃、Ra₃₁₄、Ra₃₁₅、Ra₃₁₆、Ra₃₁₇及びRa₃₁₈は、それぞれ独立に、前記一般式(3A)における、前記一般式(31A)で表される1価の基ではないRa₃₀₁～Ra₃₁₀と同義であり、

La₃₁₁、La₃₁₂、La₃₁₃、La₃₁₄、La₃₁₅及びLa₃₁₆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、

Ara₃₁₂、Ara₃₁₃、Ara₃₁₅及びAra₃₁₆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。)

【0309】

前記一般式(31A)において、La₃₀₁は、単結合であることが好ましく、La₃₀₂及びLa₃₀₃は単結合であることが好ましい。

【0310】

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

【0311】

10

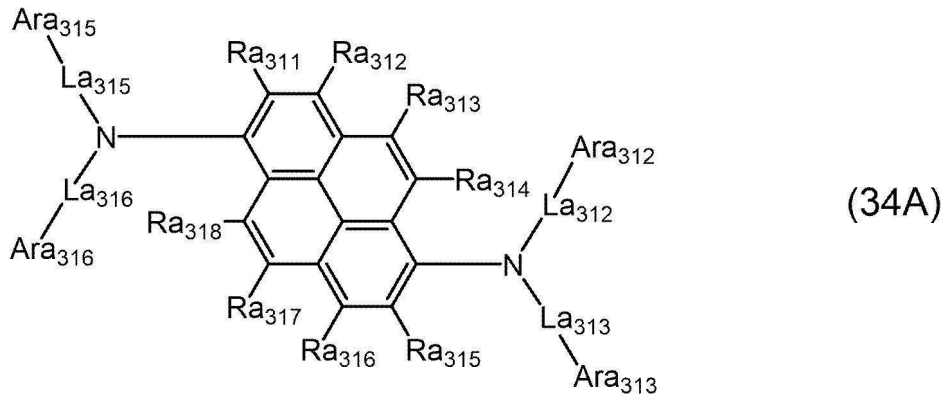
20

30

40

50

【化 1 1 6】



10

【 0 3 1 2】

(前記一般式(34A)において、

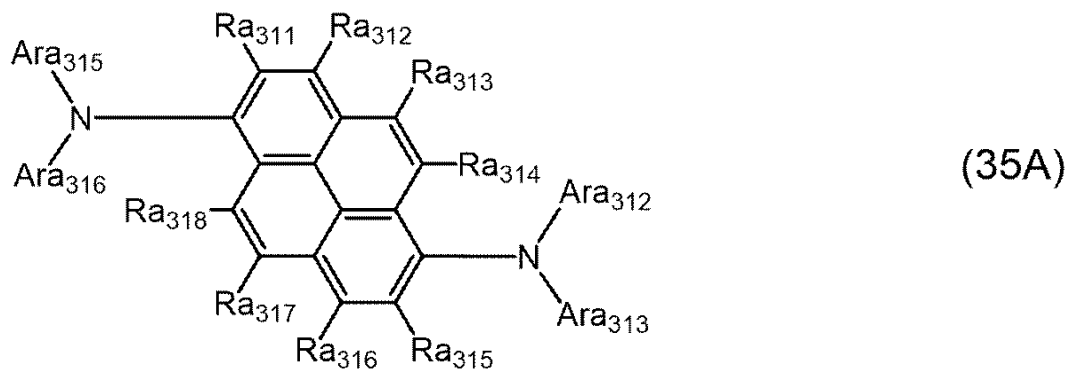
Ra311~Ra318は、それぞれ独立に、前記一般式(3A)における、前記一般式(31A)で表される1価の基ではないRa301~Ra310と同義であり、

La312、La313、La315及びLa316は、それぞれ独立に、前記一般式(33A)におけるLa312、La313、La315及びLa316と同義であり、

Ara312、Ara313、Ara315及びAra316は、それぞれ独立に、前記一般式(33A)におけるAra312、Ara313、Ara315及びAra316と同義である。) 20

【 0 3 1 3】

【化 1 1 7】



30

【 0 3 1 4】

(前記一般式(35A)において、

Ra311~Ra318は、それぞれ独立に、前記一般式(3A)における、前記一般式(31A)で表される1価の基ではないRa301~Ra310と同義であり、

Ara312、Ara313、Ara315及びAra316は、それぞれ独立に、前記一般式(33A)におけるAra312、Ara313、Ara315及びAra316と同義である。) 40

【 0 3 1 5】

前記一般式(31A)において、好ましくは、Ara301及びAra302のうち少なくとも1つが下記一般式(36A)で表される基である。

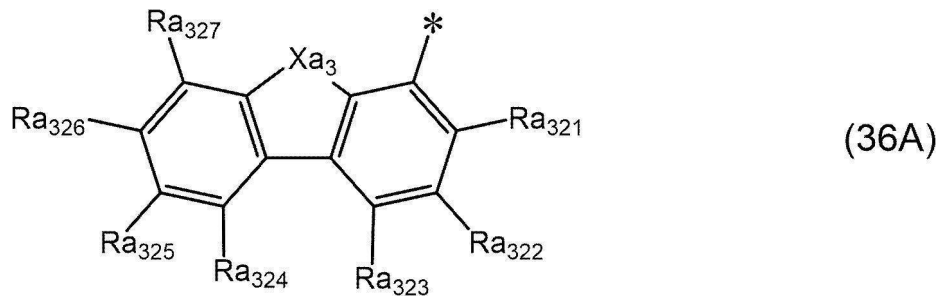
前記一般式(33A)~一般式(35A)において、好ましくは、Ara312及びAra313のうち少なくとも1つが下記一般式(36A)で表される基である。

前記一般式(33A)~一般式(35A)において、好ましくは、Ara315及びAra316のうち少なくとも1つが下記一般式(36A)で表される基である。

【 0 3 1 6】

50

【化 1 1 8】



10

【 0 3 1 7】

(前記一般式(36A)において、

Xa_3 は、酸素原子又は硫黄原子を示し、

$Ra_{321} \sim Ra_{327}$ 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 Ra_{321} 、 Ra_{322} 、 Ra_{323}

、 Ra_{324} 、 Ra_{325} 、 Ra_{326} 及び Ra_{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、

- $Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 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、

* は、 La_{302} 、 La_{303} 、 La_{312} 、 La_{313} 、 La_{315} 又は La_{316} との結合位置を示す。)

20

30

【 0 3 1 8】

Xa_3 は、酸素原子であることが好ましい。

【 0 3 1 9】

$Ra_{321} \sim Ra_{327}$ 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。

40

【 0 3 2 0】

前記一般式(31A)において、 Ar_{a301} が前記一般式(36A)で表される基であり、 Ar_{a302} 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(33A)～一般式(35A)において、 Ar_{a312} が前記一般式(36A)

50

)で表される基であり、 Ra_{313} 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。

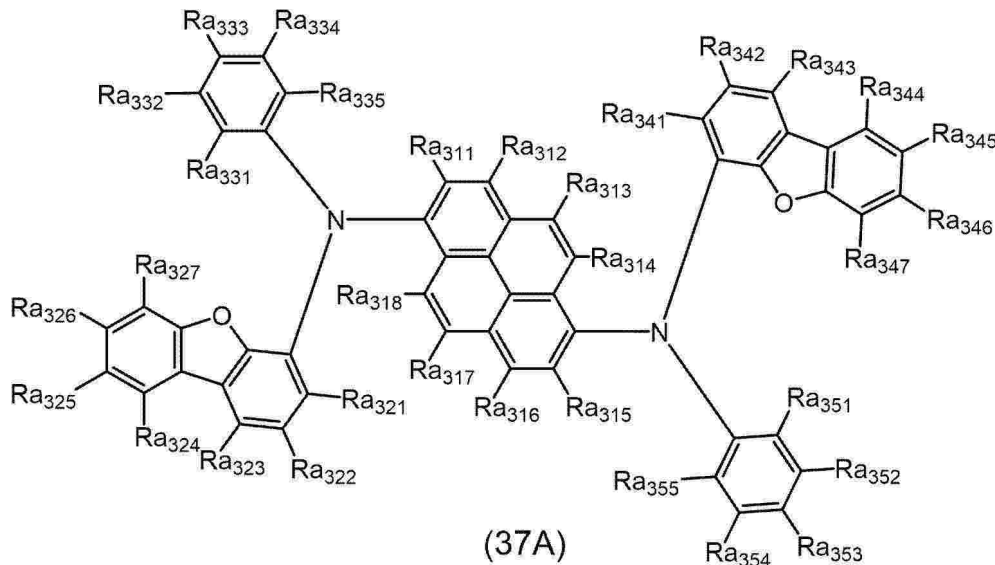
前記一般式(33A)～一般式(35A)において、 Ra_{315} が前記一般式(36A)で表される基であり、 Ra_{316} が置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であることが好ましい。

【0321】

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

【0322】

【化119】



【0323】

(前記一般式(37A)において、

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

$Ra_{321} \sim Ra_{327}$ 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、

$Ra_{341} \sim Ra_{347}$ 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 $Ra_{321} \sim Ra_{327}$ 並びに $Ra_{341} \sim Ra_{347}$ 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、

- 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、

10

20

30

40

50

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 a 3 3 1 ～ R a 3 3 5 並びに R a 3 5 1 ～ R a 3 5 5 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 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基、
 - O - (R 9 0 4) で表される基、
 - S - (R 9 0 5) で表される基、
 - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) 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。) 10

【 0 3 2 4 】
 (一般式 (3 A) で表される化合物の具体例)
 前記一般式 (3 A) 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。 20

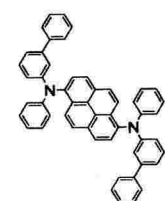
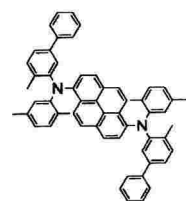
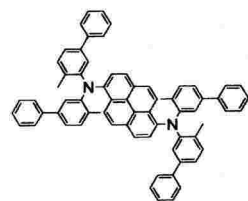
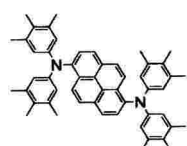
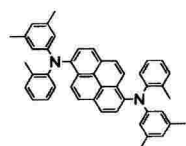
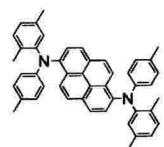
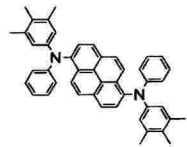
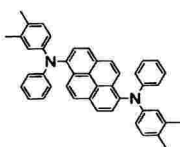
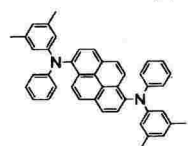
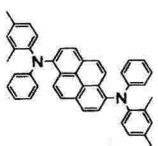
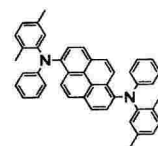
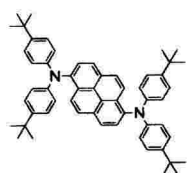
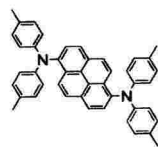
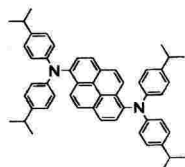
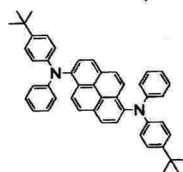
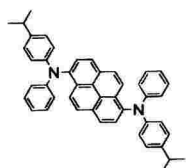
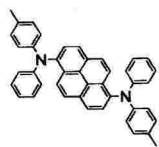
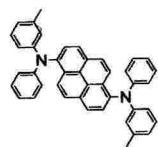
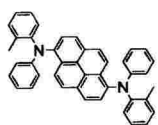
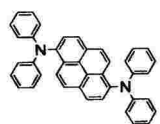
【 0 3 2 5 】

30

40

50

【化 1 2 0】



【 0 3 2 6】

10

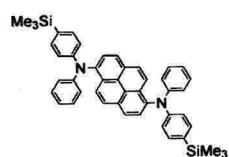
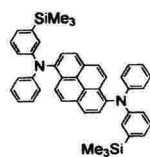
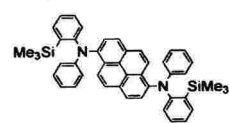
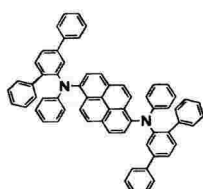
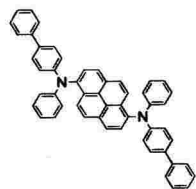
20

30

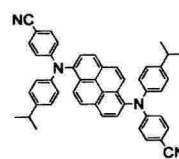
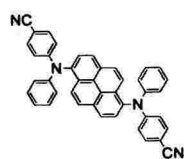
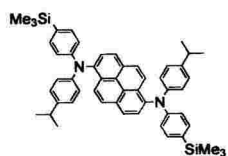
40

50

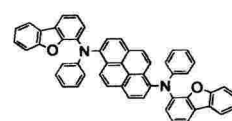
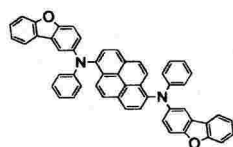
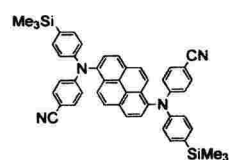
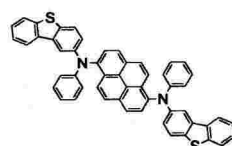
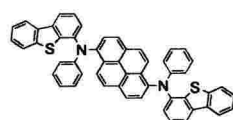
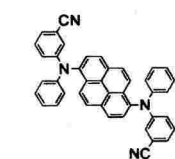
【化 1 2 1】



10



20



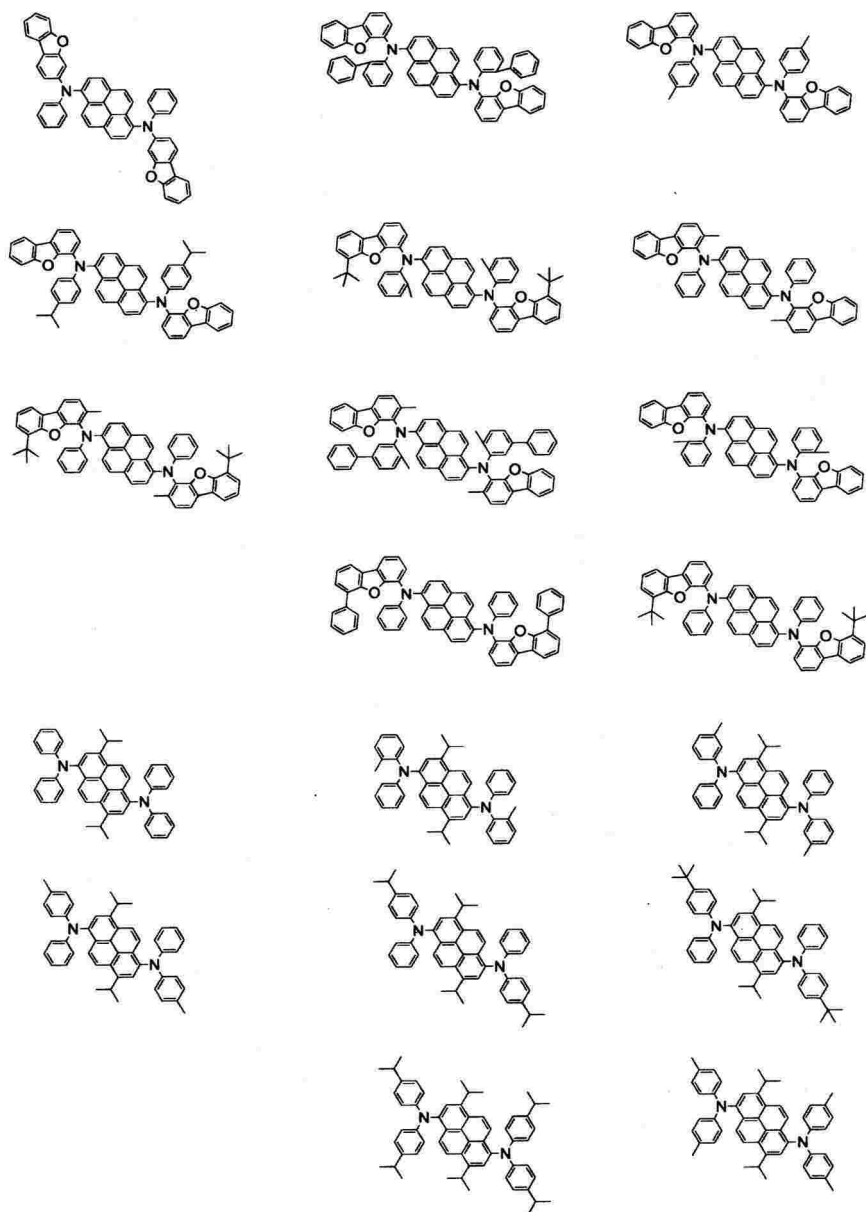
30

【 0 3 2 7 】

40

50

【化 1 2 2】



10

20

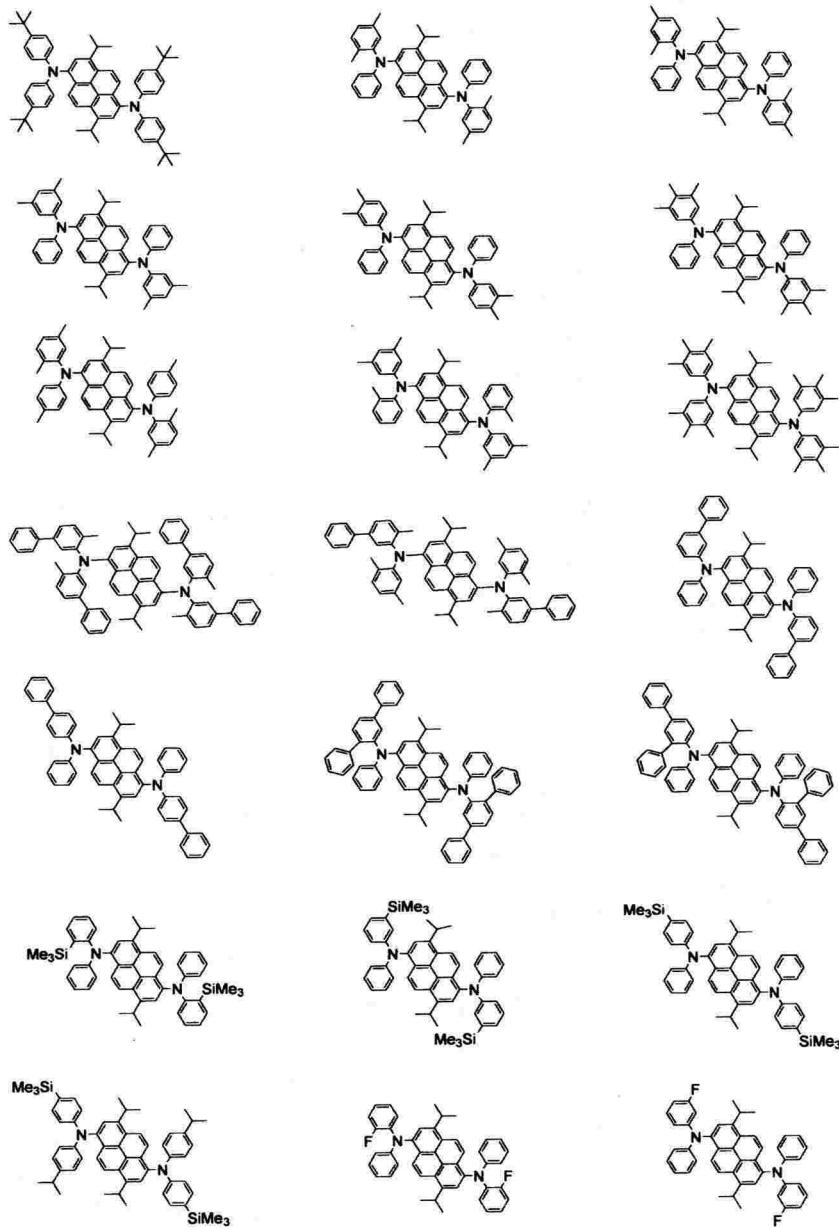
30

【 0 3 2 8】

40

50

【化 1 2 3】



【 0 3 2 9】

10

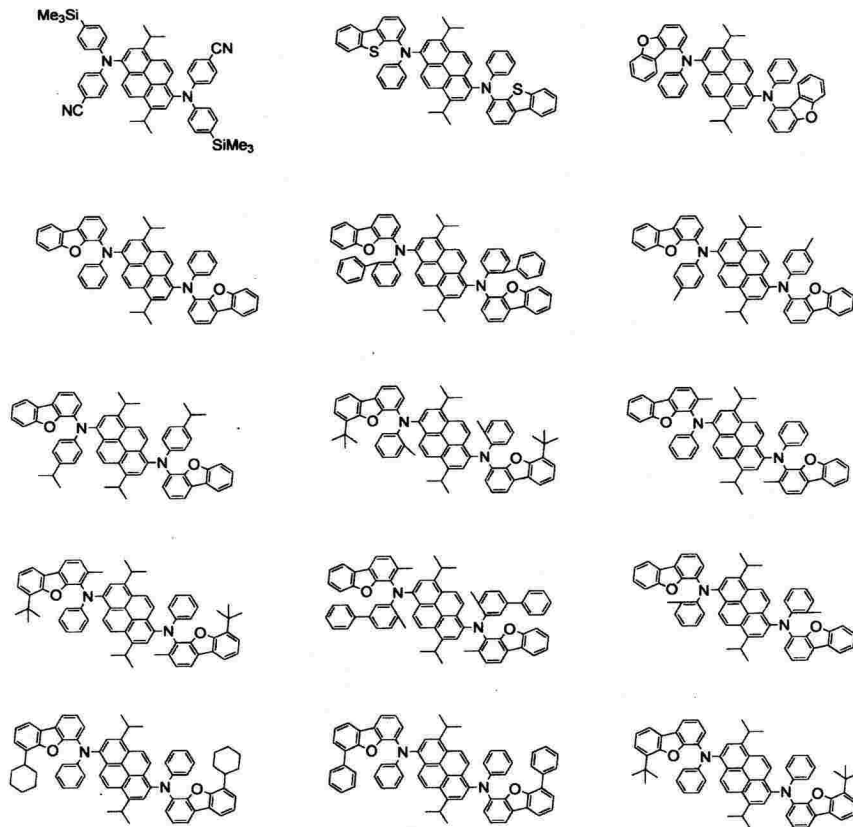
20

30

40

50

【化 1 2 4】



10

20

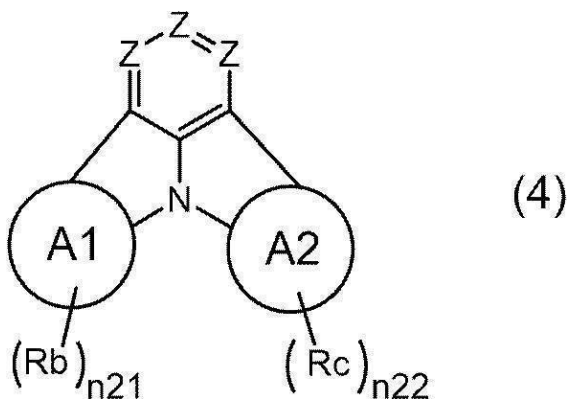
【0 3 3 0】

(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。

【0 3 3 1】

【化 1 2 5】



30

40

【0 3 3 2】

(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 ~ 5 0 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 ~ 5 0 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

50

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、
 - $Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 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。)

【0333】

A1環及びA2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。

A1環及びA2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。

【0334】

A1環及びA2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。

A1環及びA2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。

【0335】

$R b$ は、A1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、A1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。

【0336】

$R c$ は、A2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、A2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。

【0337】

$R a$ 、 $R b$ 及び $R c$ のうち、少なくとも1つが、下記一般式(4a)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(4a)で表される基であることがよ

10

20

30

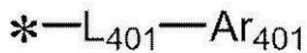
40

50

り好ましい。

【 0 3 3 8 】

【 化 1 2 6 】



(4a)

【 0 3 3 9 】

(前記一般式 (4 a) において、

L_{401} は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 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 ~ 3 0 の 2 価の複素環基であり、

Ar_{401} は、

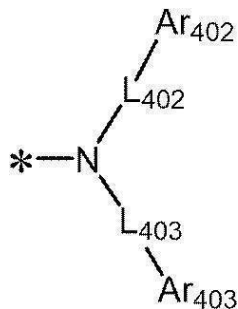
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基、又は

下記一般式 (4 b) で表される基である。)

【 0 3 4 0 】

【 化 1 2 7 】



(4b)

【 0 3 4 1 】

(前記一般式 (4 b) において、

L_{402} 及び 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 ~ 3 0 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 ~ 3 0 の 2 価の複素環基であり、

Ar_{402} 及び 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 Ar_{402} 及び Ar_{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 ~ 5 0 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 ~ 5 0 の複素環基である。)

【 0 3 4 2 】

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 (4 2) で表される。

【 0 3 4 3 】

10

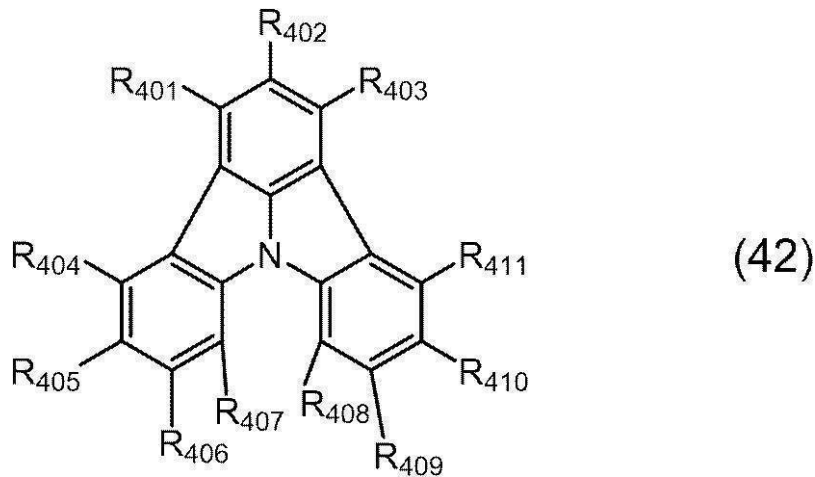
20

30

40

50

【化 1 2 8】



10

【 0 3 4 4】

(前記一般式(42)において、

R₄₀₁ ~ R₄₁₁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、

20

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₄₀₁ ~ R₄₁₁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(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、- O - (R₉₀₄)で表される基、- S - (R₉₀₅)で表される基、

30

- N(R₉₀₆)(R₉₀₇)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。)]

【 0 3 4 5】

R₄₀₁ ~ R₄₁₁のうち、少なくとも1つが、前記一般式(4a)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(4a)で表される基であることがより好ましい。

40

R₄₀₄及びR₄₁₁が前記一般式(4a)で表される基であることが好ましい。

【 0 3 4 6】

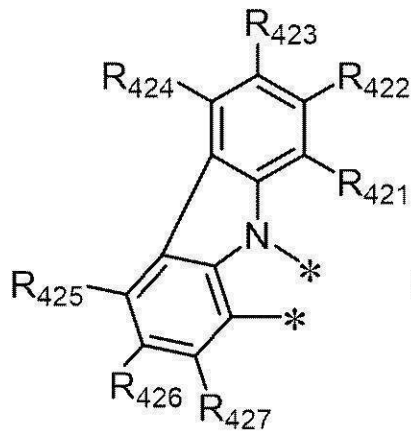
一実施形態において、前記一般式(4)で表される化合物は、A1環に下記一般式(4-1)又は一般式(4-2)で表される構造が結合した化合物である。

また、一実施形態において、前記一般式(42)で表される化合物は、R₄₀₄ ~ R₄₀₇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。

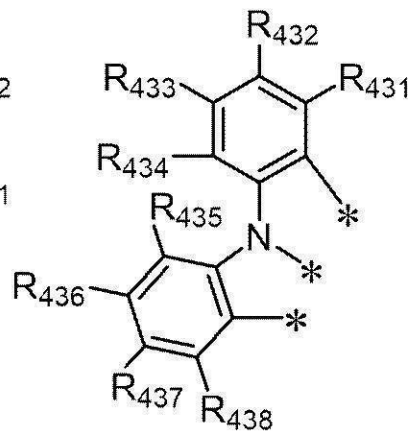
【 0 3 4 7】

50

【化 1 2 9】



(4-1)



(4-2)

10

【 0 3 4 8】

(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(4-2)のR404~R407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(4-2)のR404~R407のいずれかと結合し、

20

R421~R427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、

R431~R438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、

30

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR421~R427並びにR431~R438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(R901)(R902)(R903)で表される基、

- O-(R904)で表される基、

- S-(R905)で表される基、

- N(R906)(R907)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。))

40

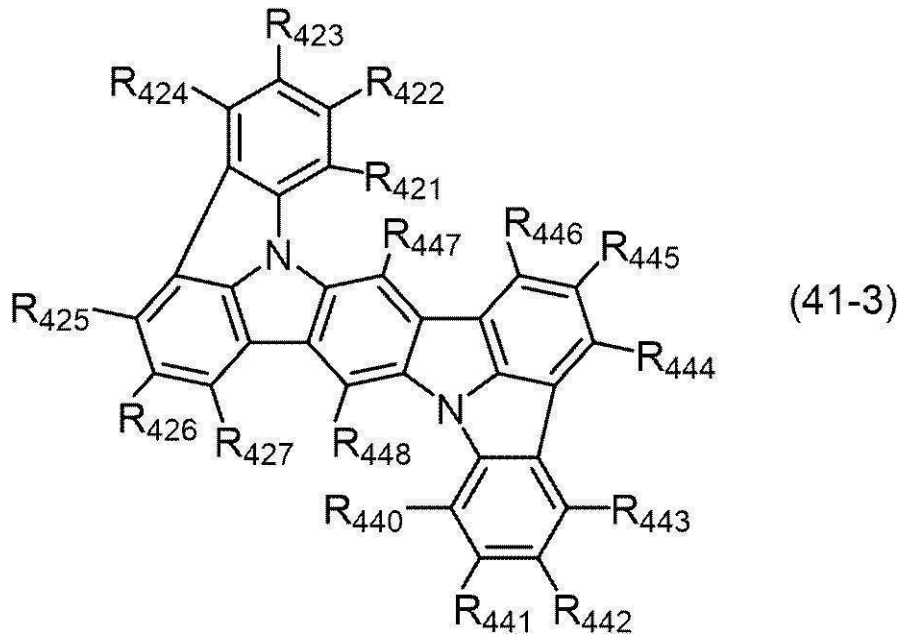
【 0 3 4 9】

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。

【 0 3 5 0】

50

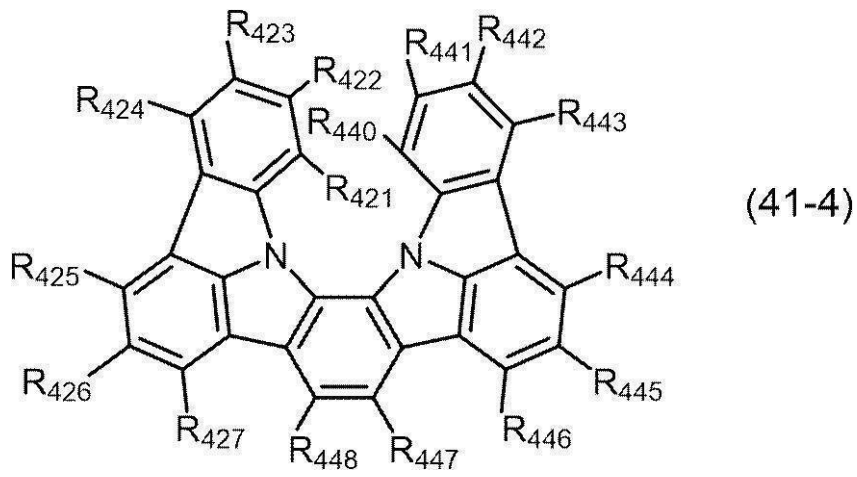
【化 1 3 0】



10

【 0 3 5 1】

【化 1 3 1】



20

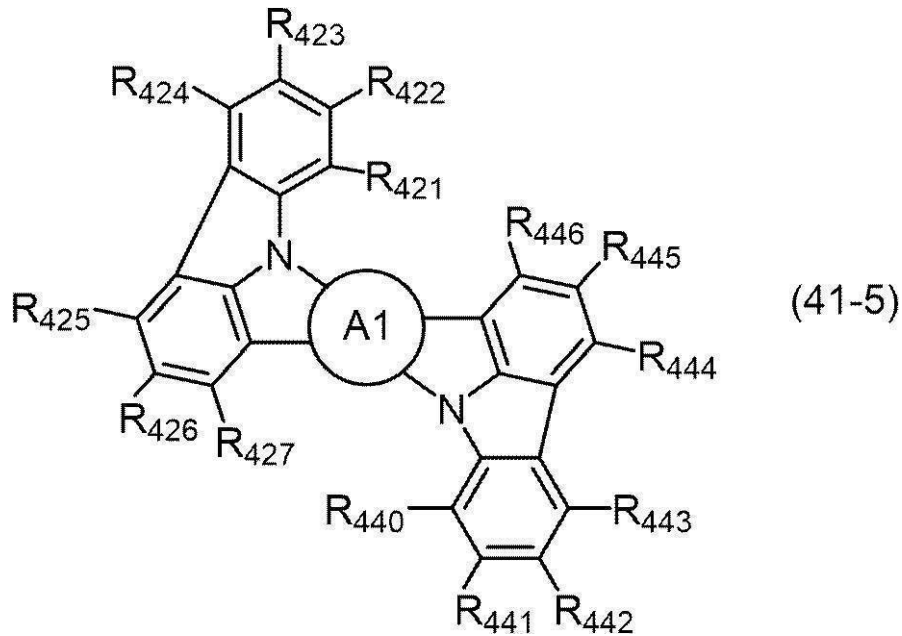
30

【 0 3 5 2】

40

50

【化 1 3 2】



10

【 0 3 5 3 】

(前記一般式(41-3)、式(41-4)及び式(41-5)中、

20

A1環は、前記一般式(4)で定義した通りであり、

R₄₂₁～R₄₂₇は、それぞれ独立に、前記一般式(4-1)におけるR₄₂₁～R₄₂₇と同義であり、

R₄₄₀～R₄₄₈は、それぞれ独立に、前記一般式(42)におけるR₄₀₁～R₄₁₁と同義である。)

【 0 3 5 4 】

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。

30

【 0 3 5 5 】

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。

【 0 3 5 6 】

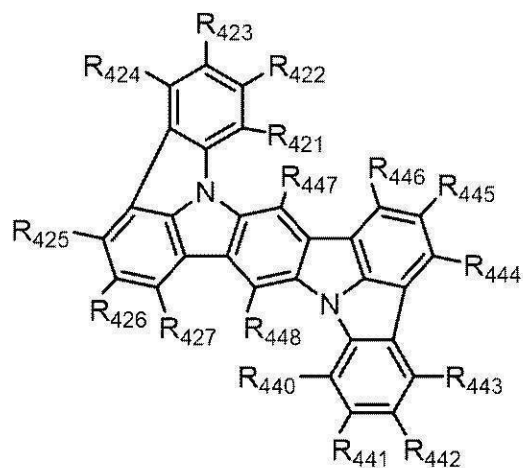
一実施形態においては、前記一般式(4)又は前記一般式(42)で表される化合物は、下記一般式(461)～一般式(467)で表される化合物からなる群から選択される。

【 0 3 5 7 】

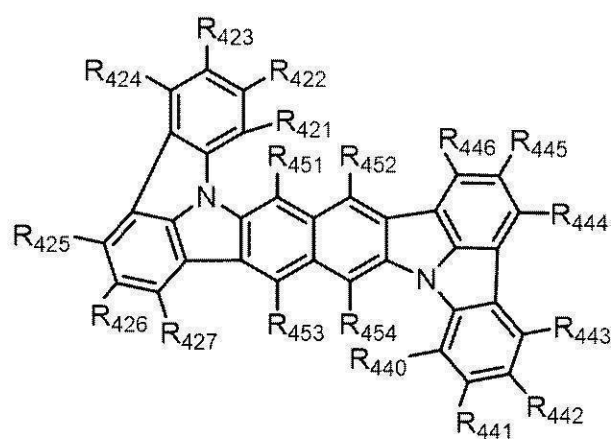
40

50

【化 1 3 3】



(461)

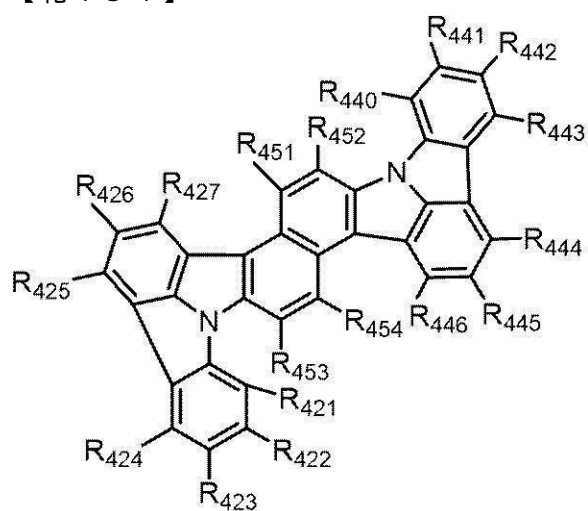


(462)

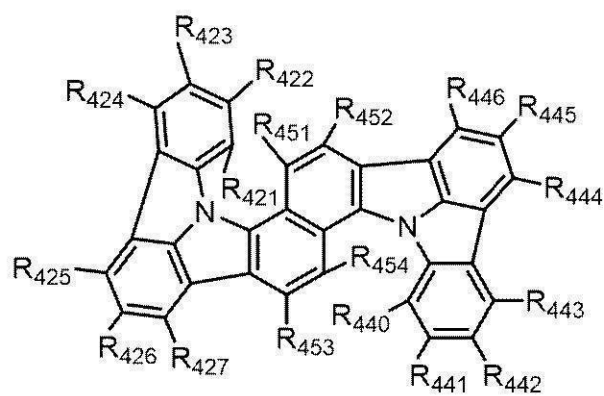
10

【 0 3 5 8】

【化 1 3 4】



(463)



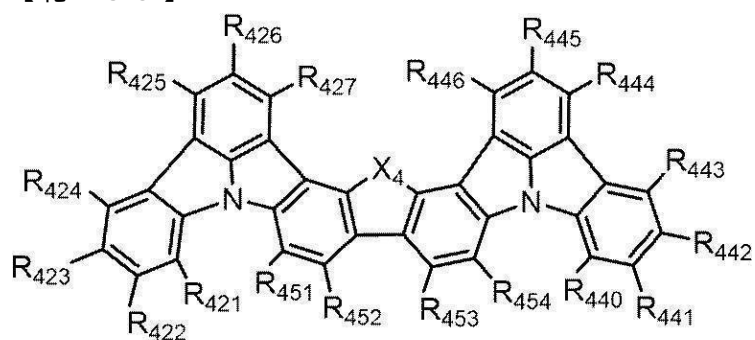
(464)

20

30

【 0 3 5 9】

【化 1 3 5】



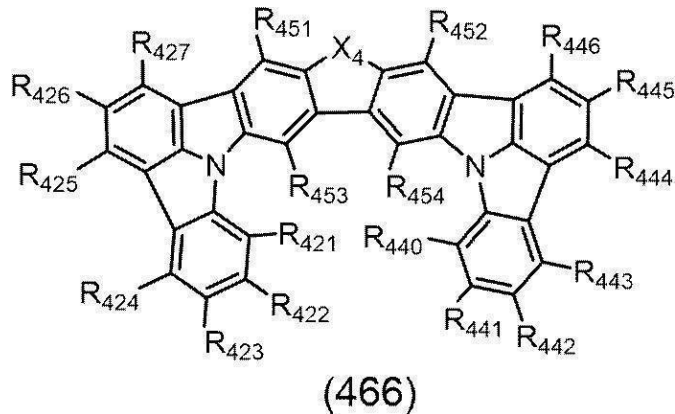
(465)

40

【 0 3 6 0】

50

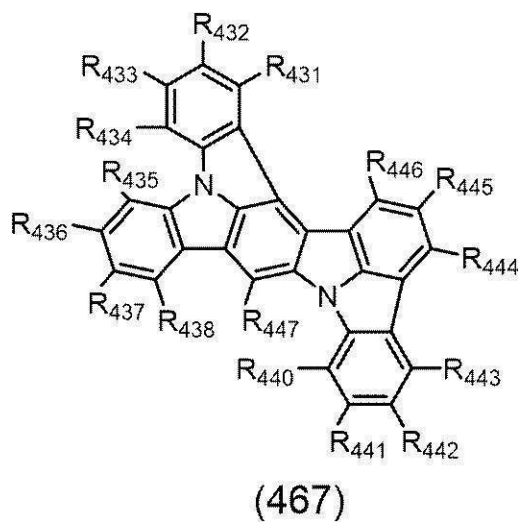
【化 1 3 6】



10

【 0 3 6 1】

【化 1 3 7】



20

【 0 3 6 2】

(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(42)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。))

30

40

50

【 0 3 6 3 】

一実施形態において、前記一般式(42)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(45)で表される化合物として詳述する。

【 0 3 6 4 】

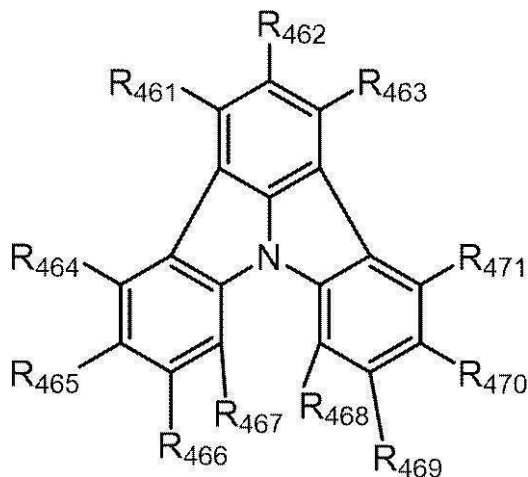
(一般式(45)で表される化合物)

一般式(45)で表される化合物について説明する。

【 0 3 6 5 】

【 化 1 3 8 】

10



(45)

20

【 0 3 6 6 】

(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、

30

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い、

$R_{461} \sim R_{471}$ 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、

40

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})、- N(R_{906})(R_{907})で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

50

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。))

【0367】

前記一般式(45)において、 R_n と R_{n+1} (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_n と R_{n+1} 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。

10

【0368】

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。

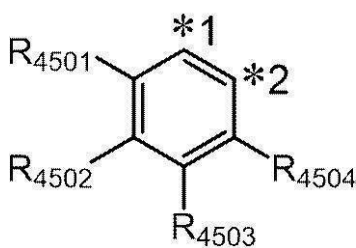
【0369】

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。

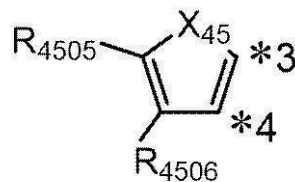
【0370】

20

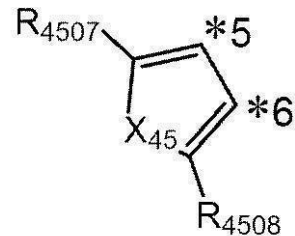
【化139】



(451)

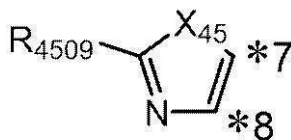


(452)

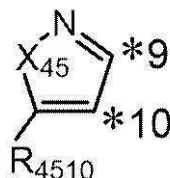


(453)

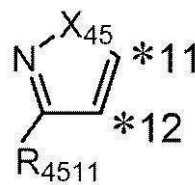
30



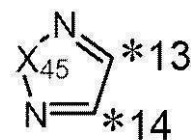
(454)



(455)



(456)



(457)

40

【0371】

(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、

50

$R_{4501} \sim R_{4506}$ 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、

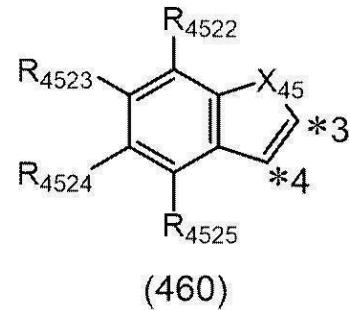
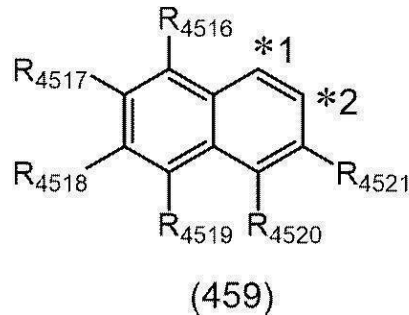
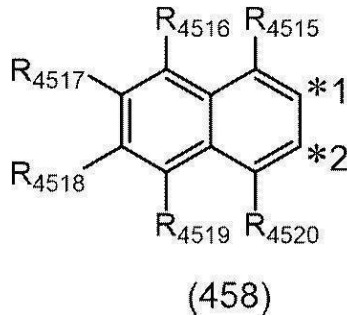
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

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。))

【0372】

【化140】



10

【0373】

(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。))

【0374】

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。

【0375】

(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、

40

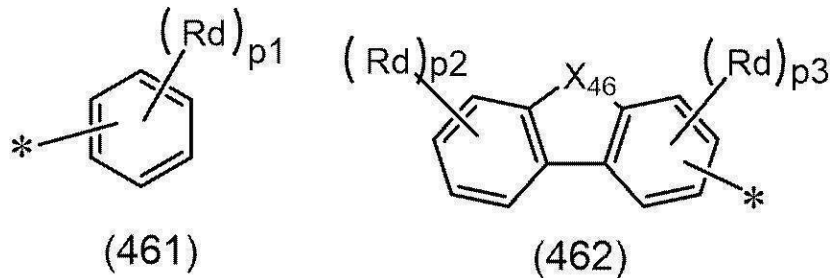
30

50

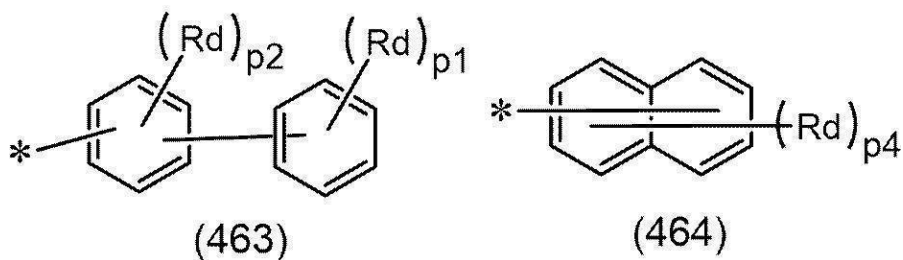
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基、又は
下記一般式 (461) ~ 一般式 (464) で表される基からなる群から選択される基
のいずれかである。

【0376】

【化141】



10



20

【0377】

(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、

- 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_{46} は、C (R_{801}) (R_{802})、N R_{803} 、酸素原子又は硫黄原子であり、

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、

30

40

50

R₈₀₂が複数存在する場合、複数のR₈₀₂は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₃が複数存在する場合、複数のR₈₀₃は、互いに同一であるか又は異なり、
 p₁は、5であり、
 p₂は、4であり、
 p₃は、3であり、
 p₄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。)

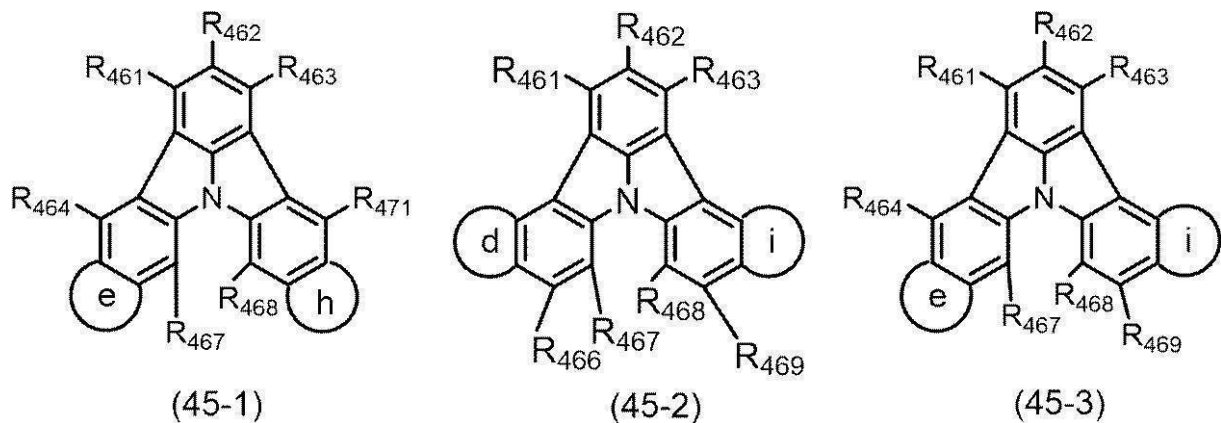
第六の化合物及び第七の化合物において、R₉₀₁～R₉₀₇は、前述のように定義した通りである。

【0378】

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。

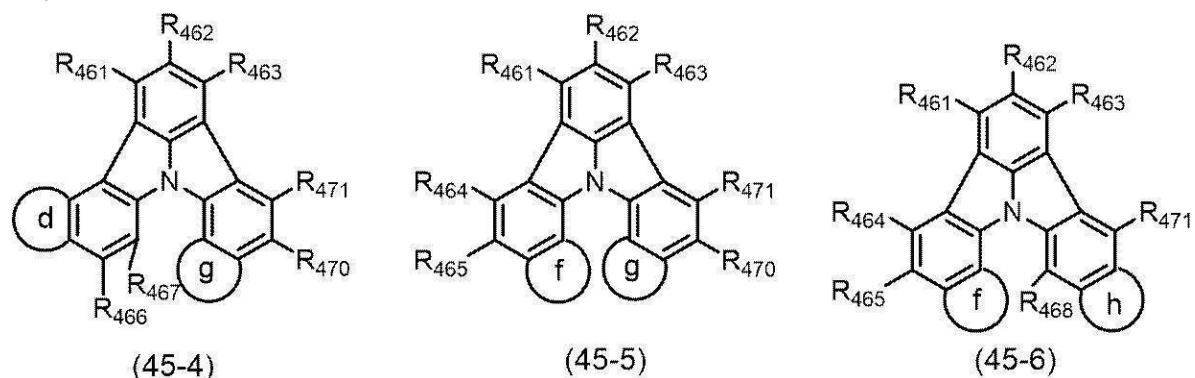
【0379】

【化142】



【0380】

【化143】



【0381】

(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無置換の縮合環であり、

R₄₆₁～R₄₇₁は、それぞれ独立に、前記一般式(45)におけるR₄₆₁～R₄₇₁と同義である。)

【0382】

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。

【0383】

10

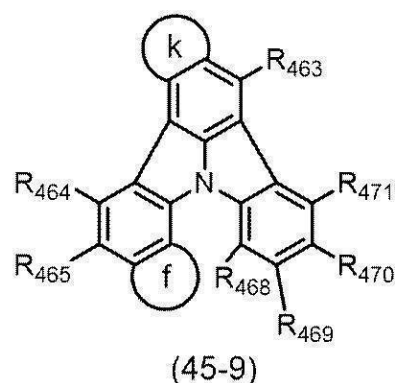
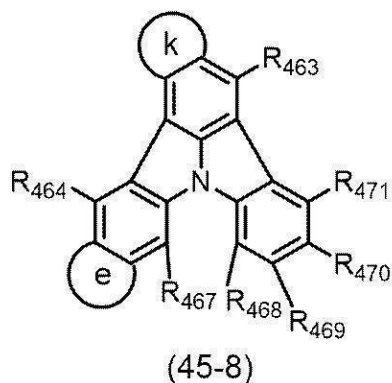
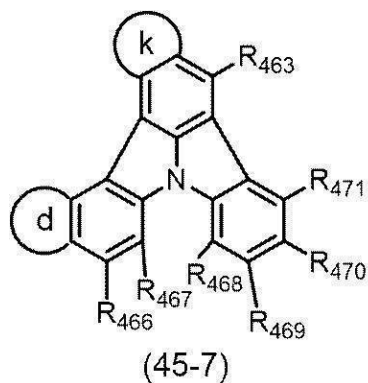
20

30

40

50

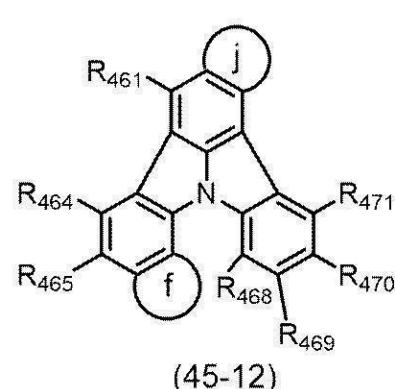
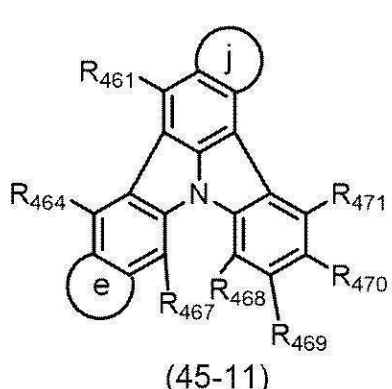
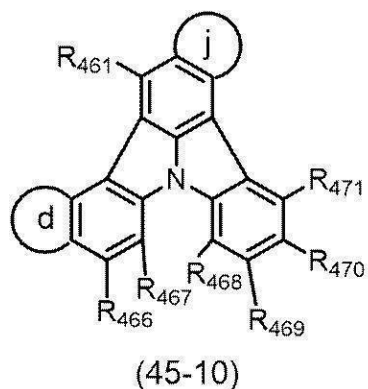
【化 1 4 4】



10

【 0 3 8 4】

【化 1 4 5】



20

【 0 3 8 5】

(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、

R₄₆₁ ~ R₄₇₁ は、それぞれ独立に、前記一般式(45)における R₄₆₁ ~ R₄₇₁ と同義である。)

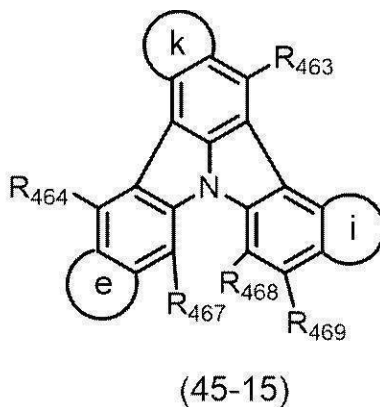
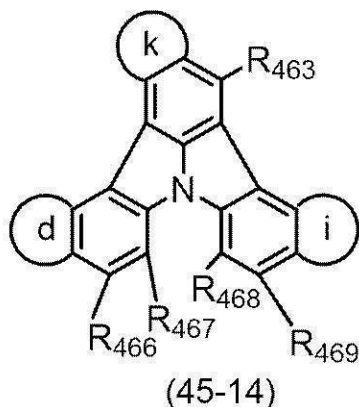
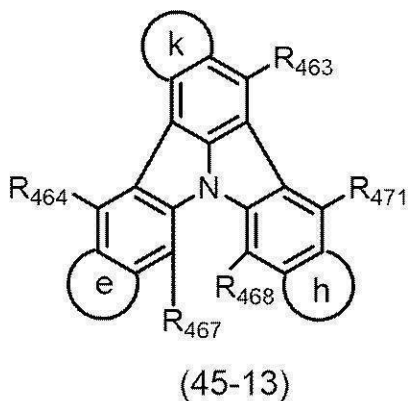
30

【 0 3 8 6】

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。

【 0 3 8 7】

【化 1 4 6】

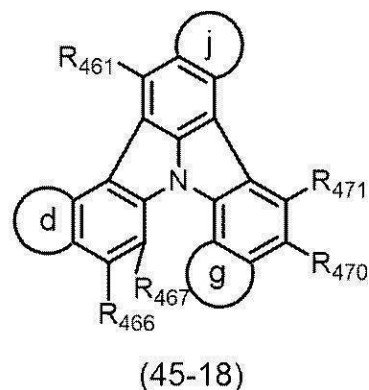
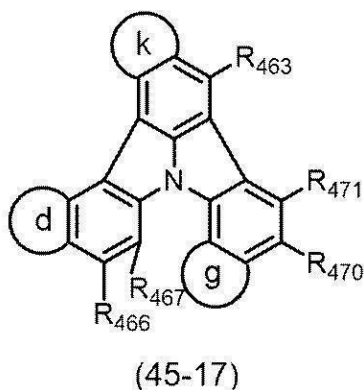
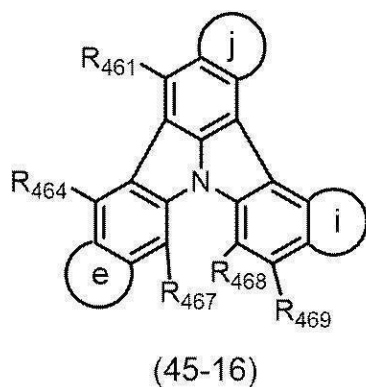


40

【 0 3 8 8】

50

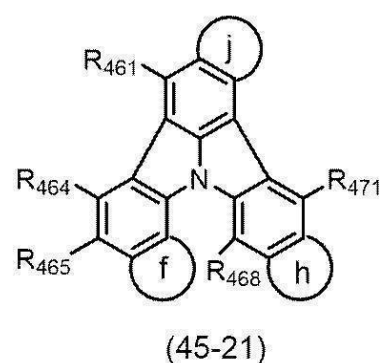
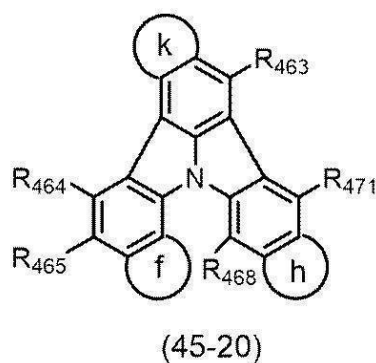
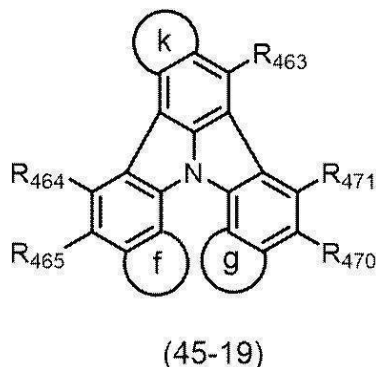
【化 1 4 7】



10

【 0 3 8 9】

【化 1 4 8】



20

【 0 3 9 0】

(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、

R₄₆₁ ~ R₄₇₁ は、それぞれ独立に、前記一般式(45)における R₄₆₁ ~ R₄₇₁ と同義である。)

30

【 0 3 9 1】

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。

【 0 3 9 2】

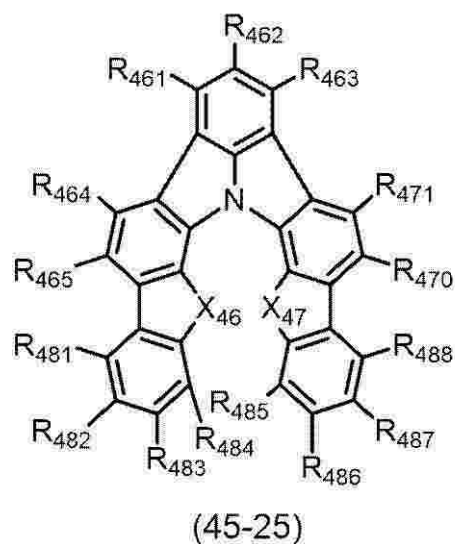
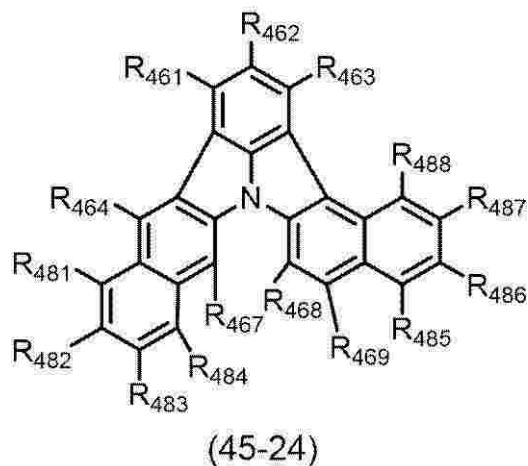
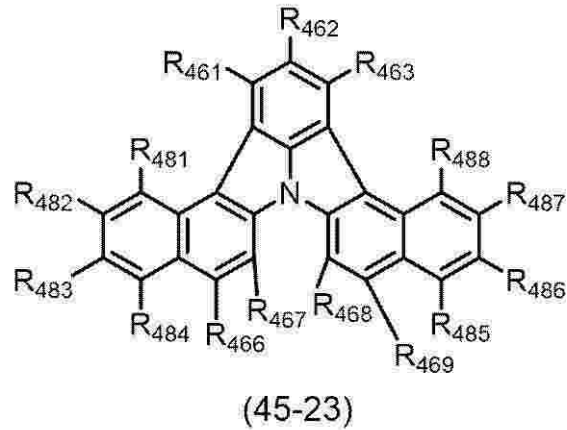
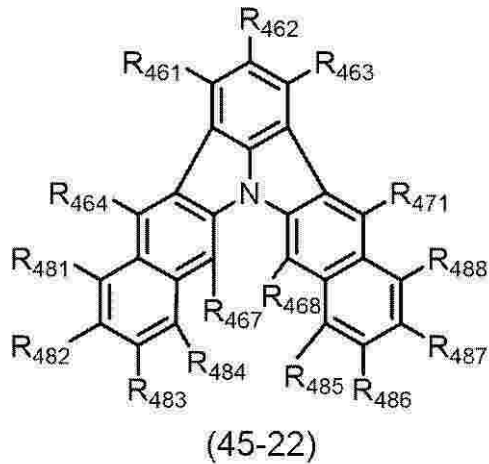
一実施形態において、前記一般式(45)で表される化合物は、下記一般式(45-22)~(45-25)のいずれかで表される。

40

【 0 3 9 3】

50

【化 1 4 9】



【 0 3 9 4】

(前記一般式(45-22)～(45-25)において、

X₄₆及びX₄₇は、それぞれ独立に、C(R₈₀₁)(R₈₀₂)、NR₈₀₃、酸素原子又は硫黄原子であり、

R₄₆₁～R₄₇₁並びにR₄₈₁～R₄₈₈は、それぞれ独立に、前記一般式(45)におけるR₄₆₁～R₄₇₁と同義である。

R₈₀₁、R₈₀₂及びR₈₀₃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、

R₈₀₁が複数存在する場合、複数のR₈₀₁は、互いに同一であるか又は異なり、

R₈₀₂が複数存在する場合、複数のR₈₀₂は、互いに同一であるか又は異なり、

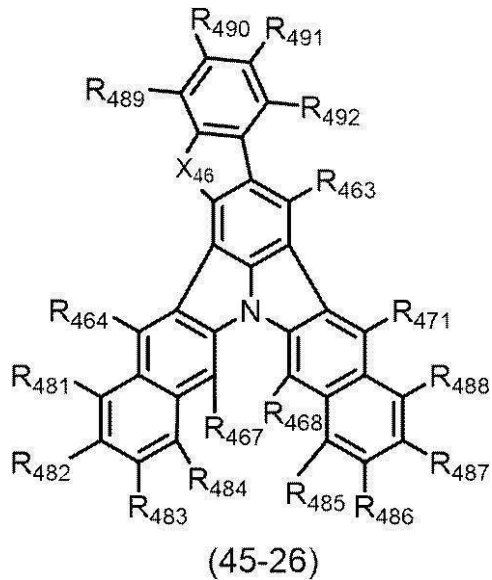
R₈₀₃が複数存在する場合、複数のR₈₀₃は、互いに同一であるか又は異なる。)

【 0 3 9 5】

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。

【 0 3 9 6】

【化 1 5 0】



10

【 0 3 9 7】

(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。

20

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、

30

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。))

【 0 3 9 8】

(一般式(4)で表される化合物の具体例)

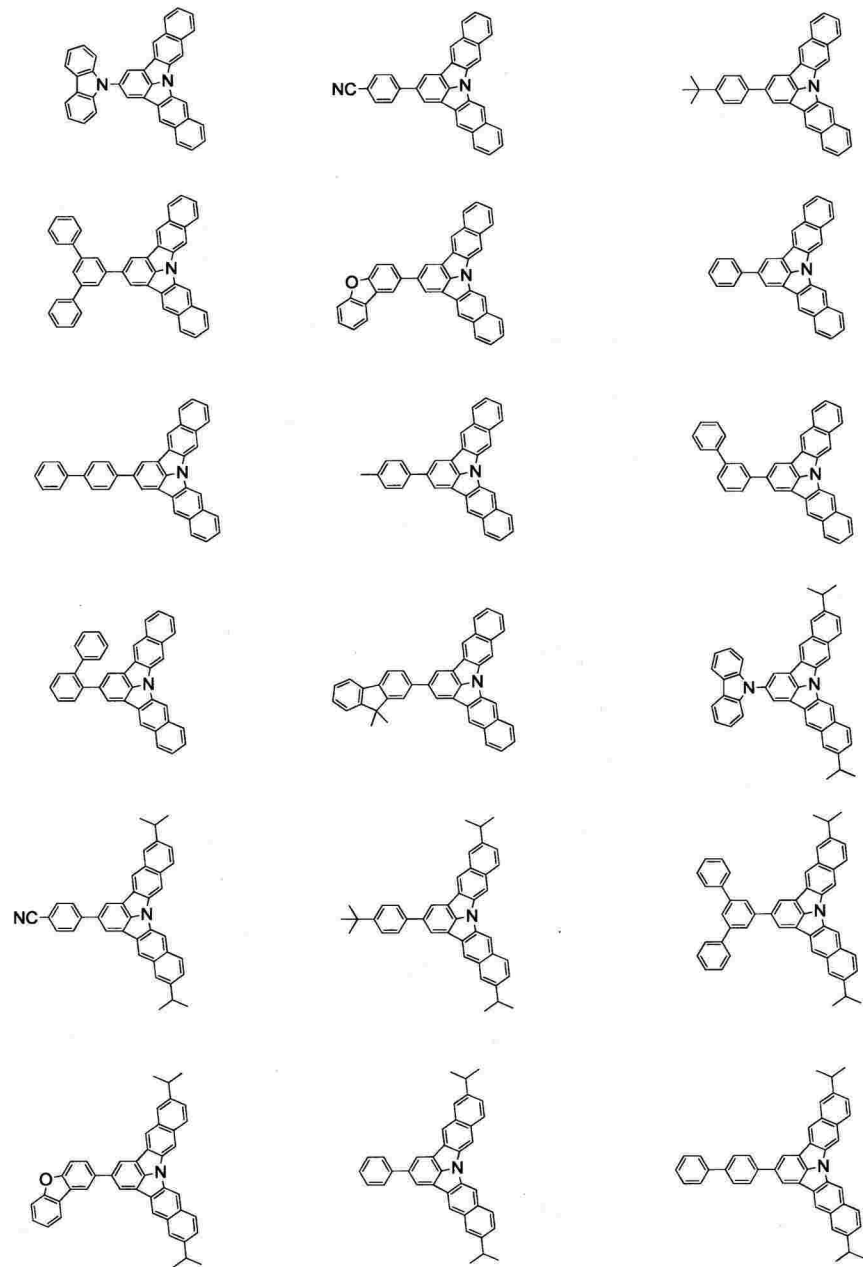
前記一般式(4)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。下記具体例中、Phは、フェニル基を示し、Dは、重水素原子を示す。

【 0 3 9 9】

40

50

【化 1 5 1】



【 0 4 0 0 】

10

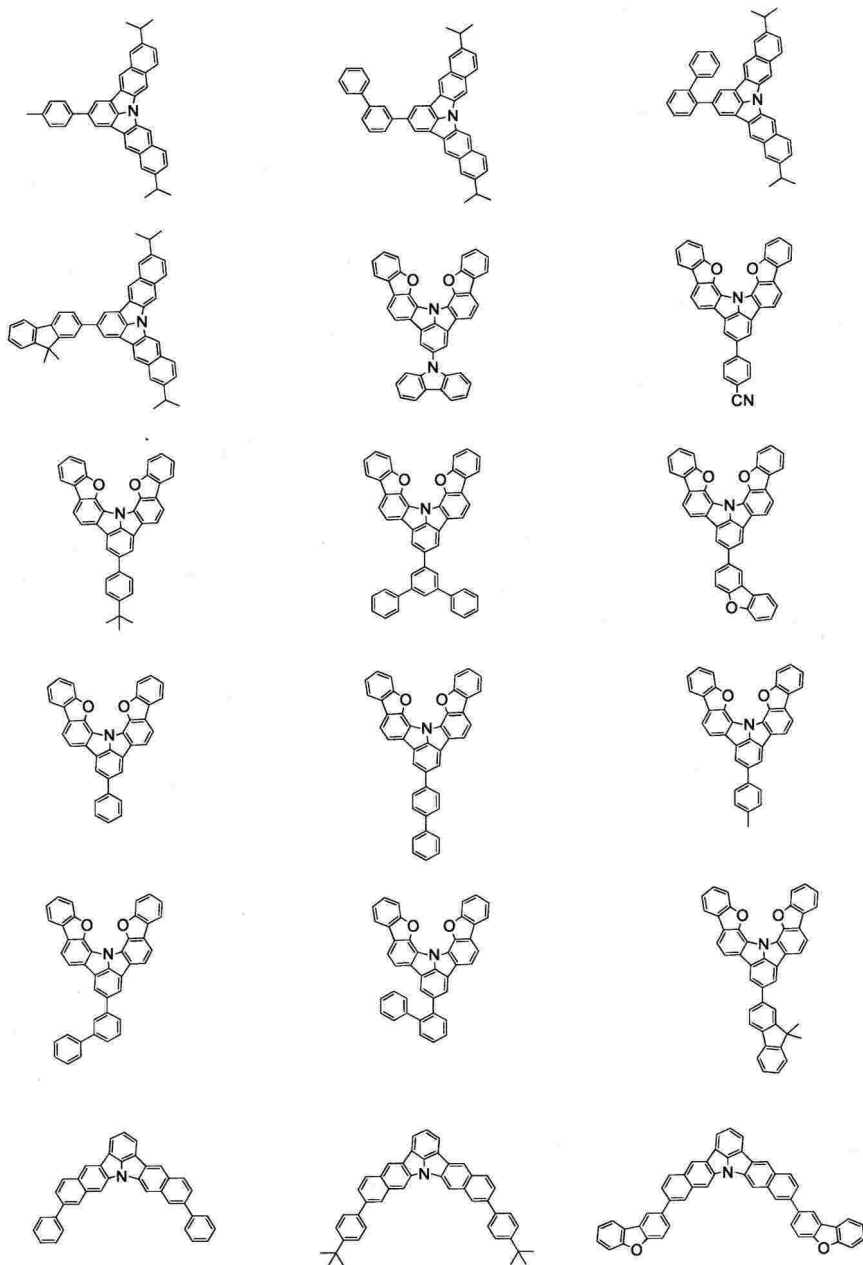
20

30

40

50

【化 1 5 2】



10

20

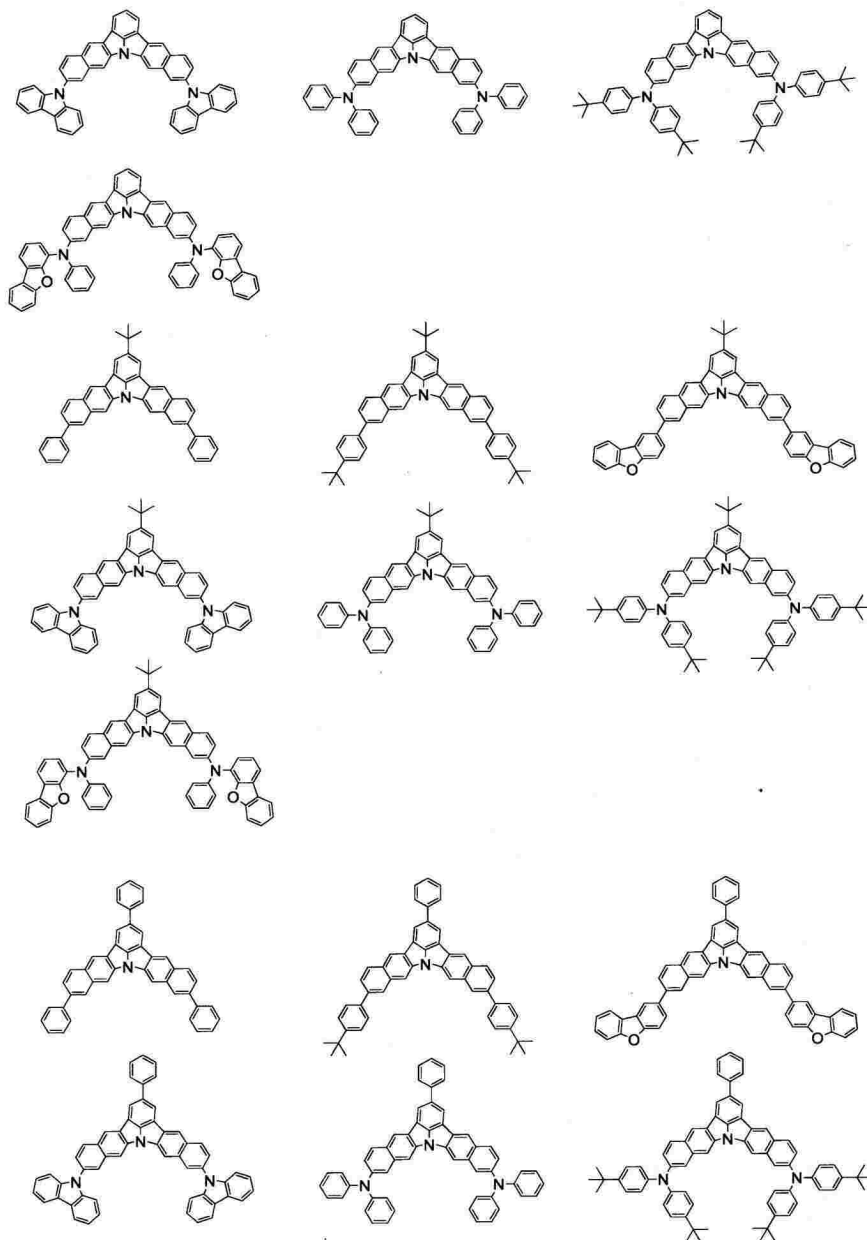
30

【 0 4 0 1】

40

50

【化 1 5 3】



10

20

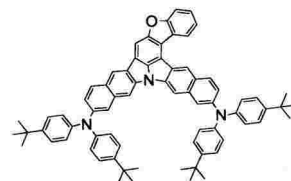
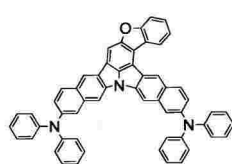
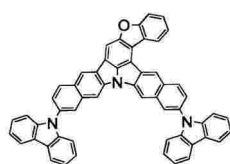
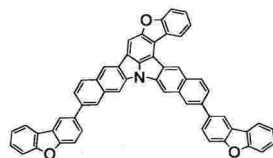
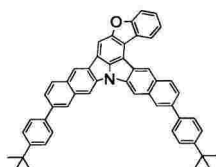
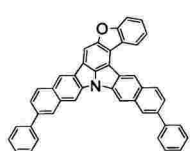
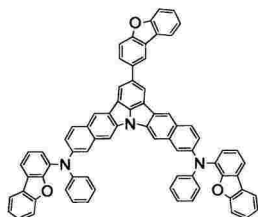
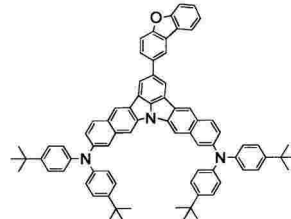
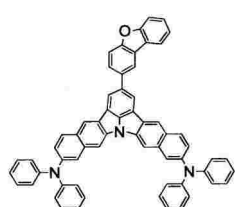
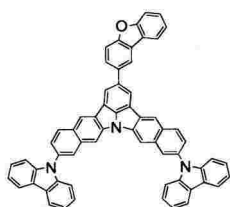
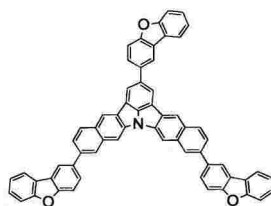
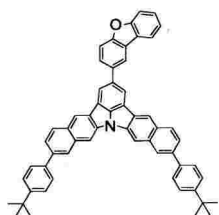
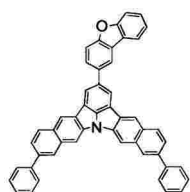
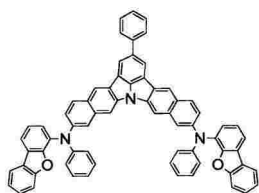
30

【 0 4 0 2 】

40

50

【化 1 5 4】



【 0 4 0 3】

10

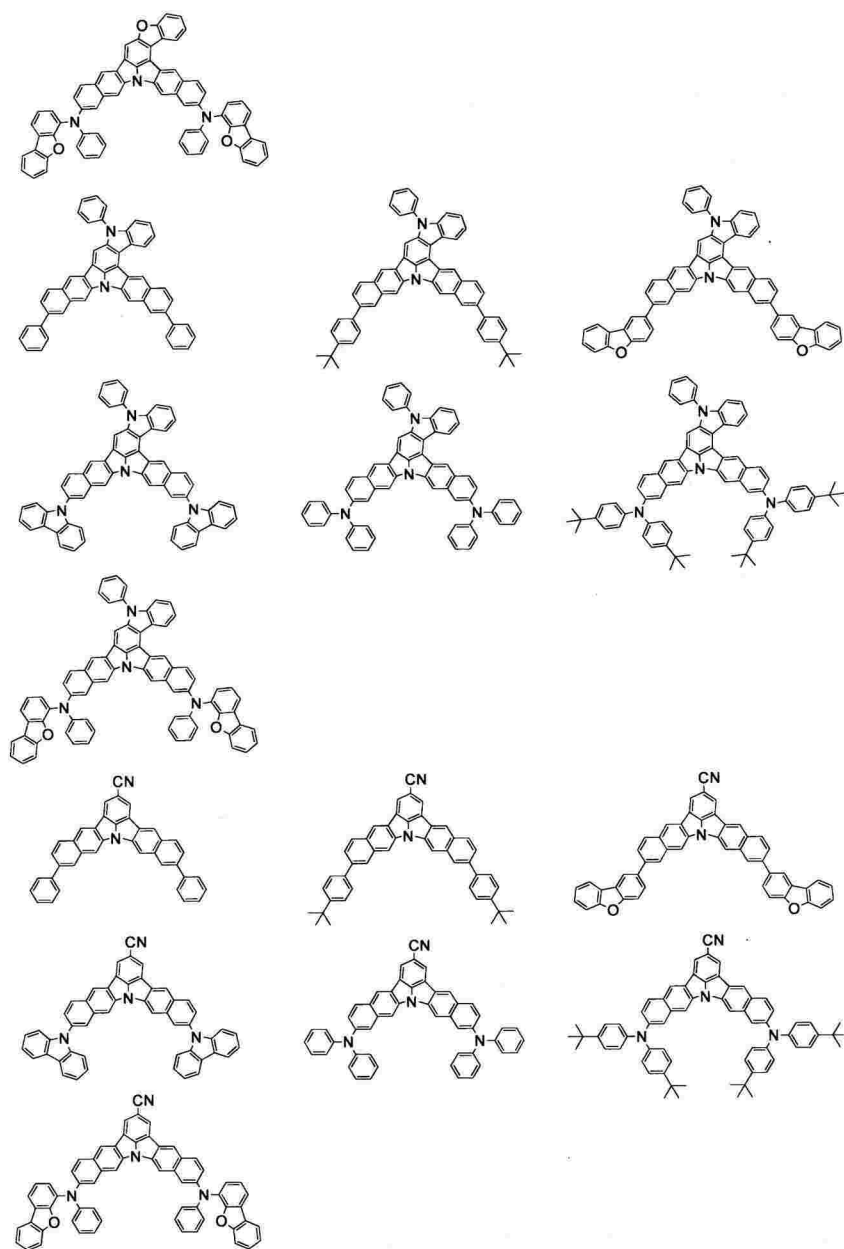
20

30

40

50

【化 1 5 5】



【 0 4 0 4】

10

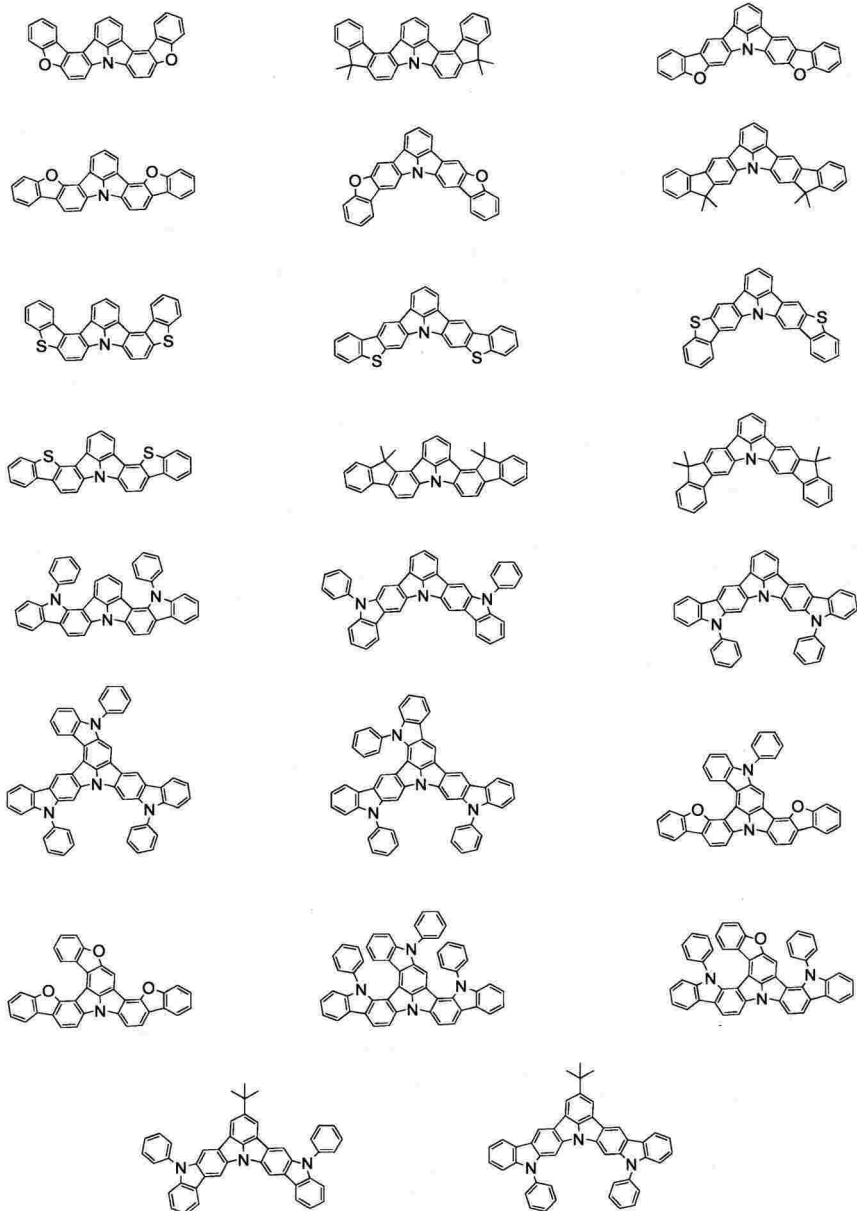
20

30

40

50

【化 1 5 6】



10

20

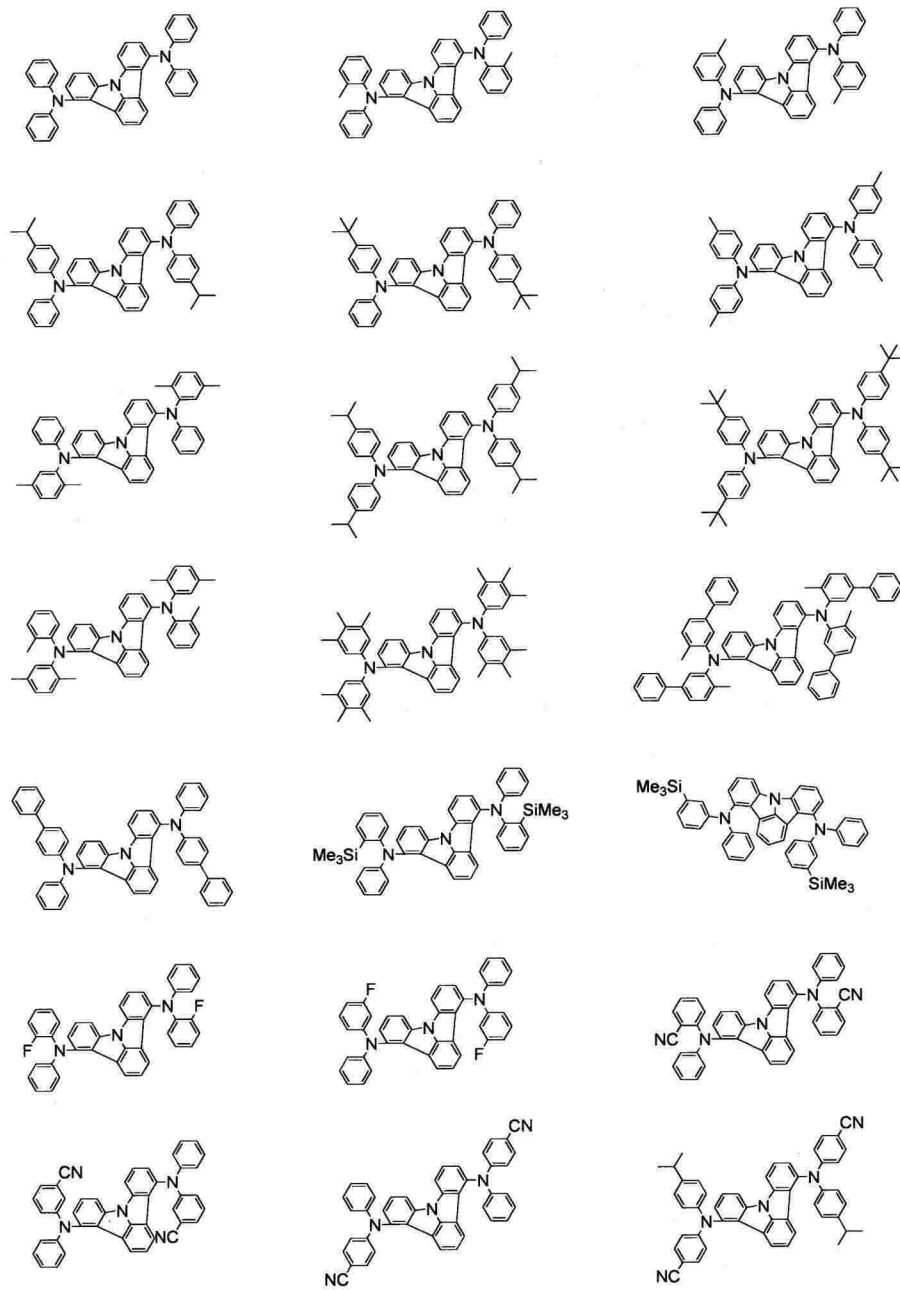
30

【 0 4 0 5】

40

50

【化 1 5 7】



10

20

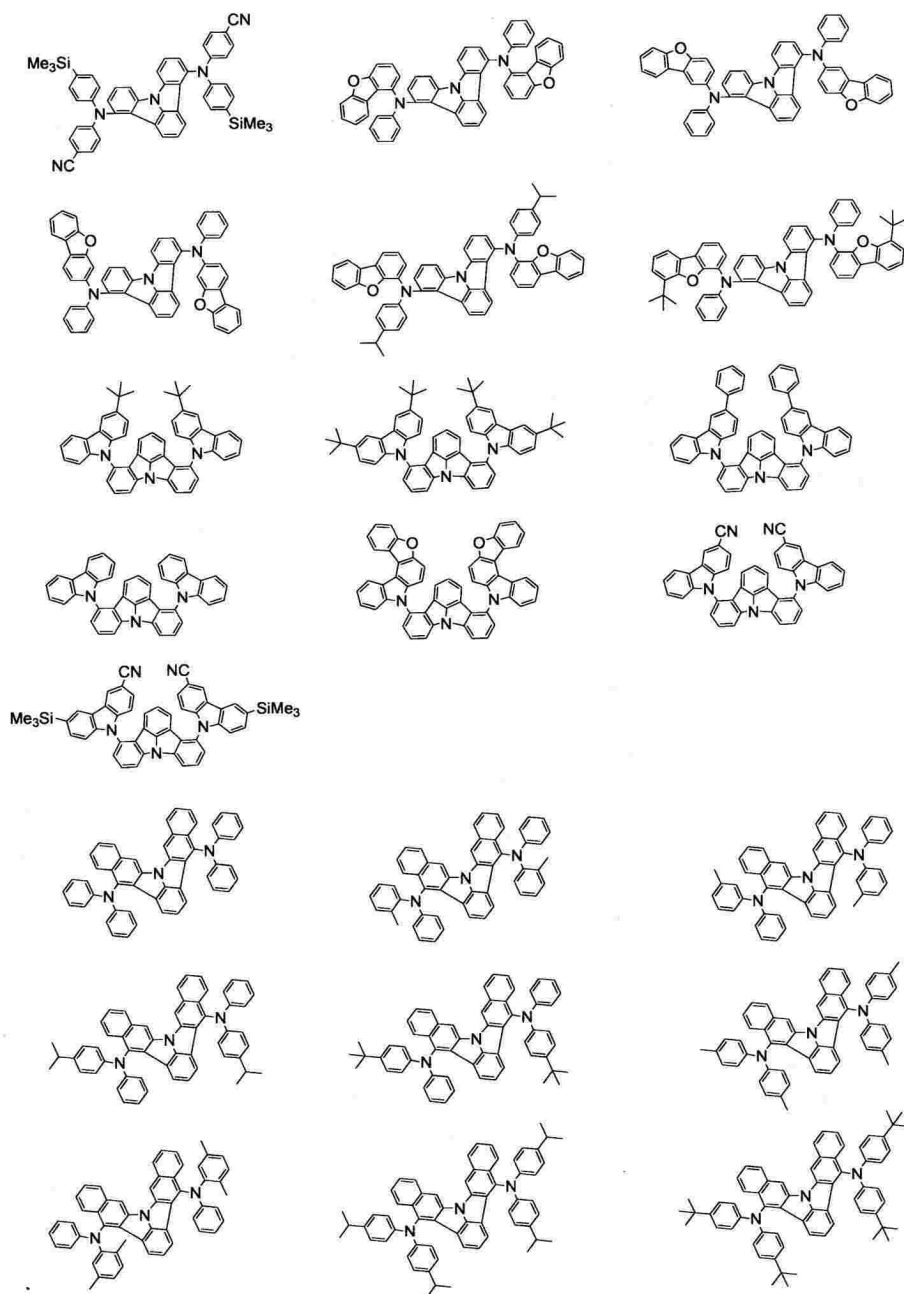
30

【 0 4 0 6 】

40

50

【化 1 5 8】



10

20

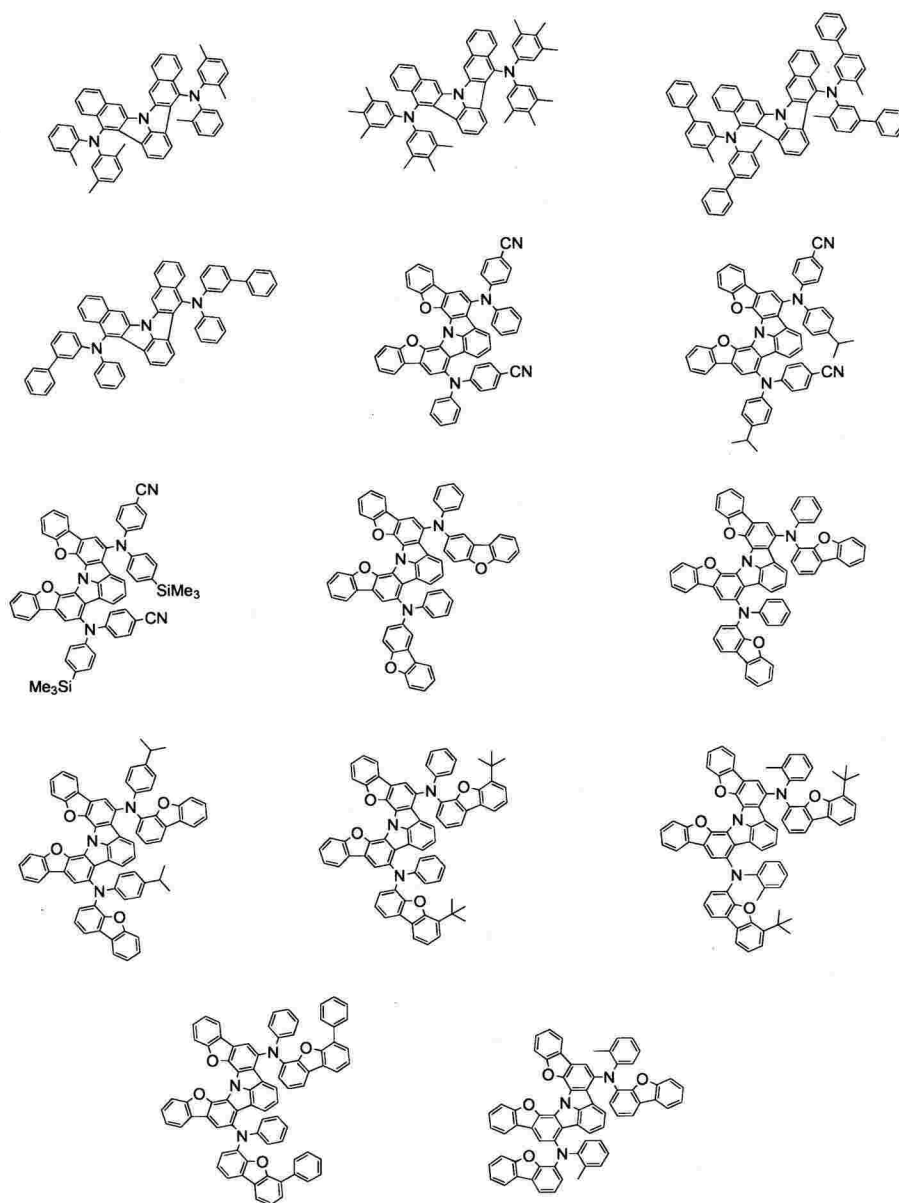
30

【 0 4 0 7 】

40

50

【化 1 5 9】



10

20

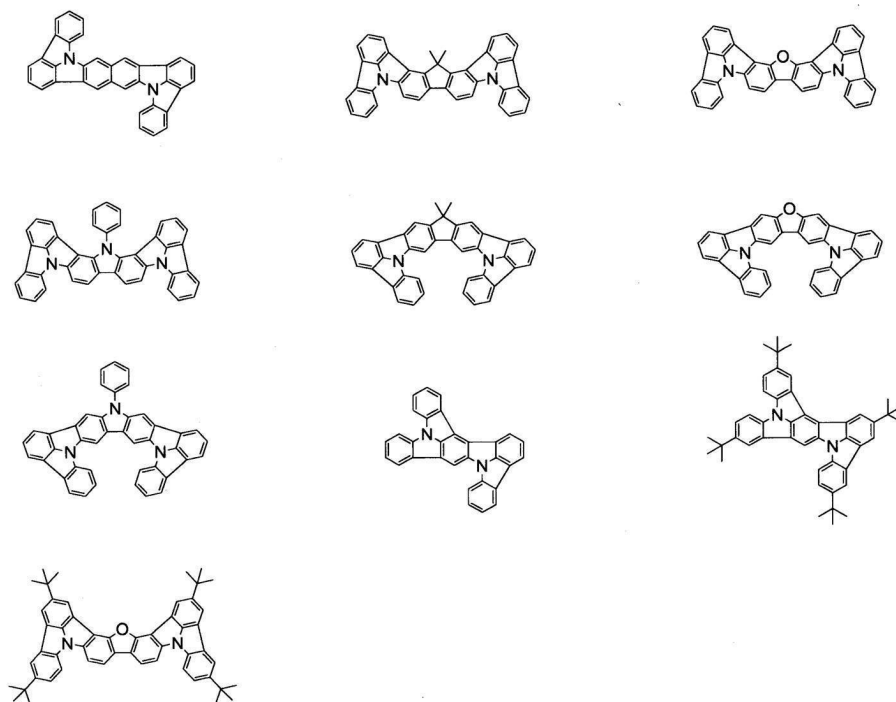
30

【 0 4 0 8 】

40

50

【化 1 6 0】



10

20

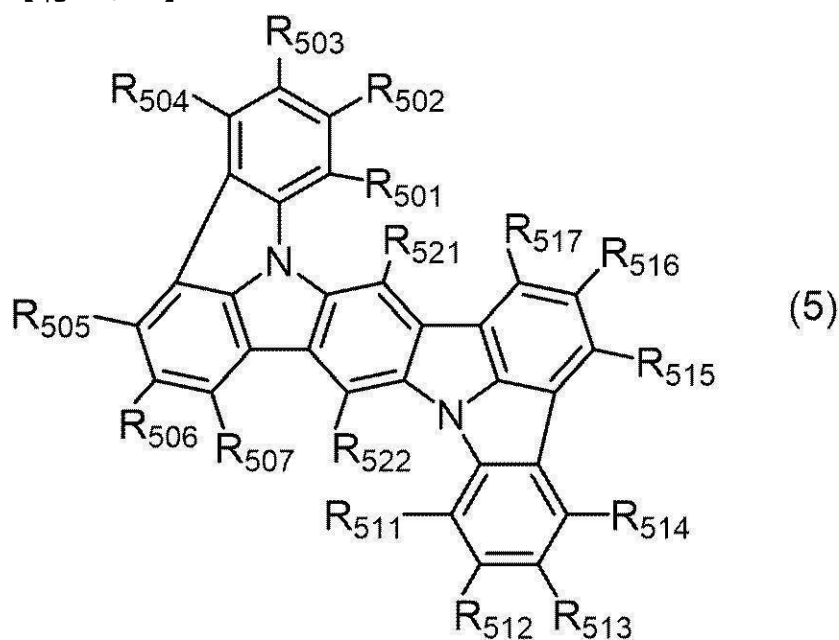
【 0 4 0 9 】

(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(41-3)で表される化合物に対応する化合物である。

【 0 4 1 0 】

【化 1 6 1】



30

40

【 0 4 1 1 】

(前記一般式(5)において、

R501~R507及びR511~R517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

50

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、

10

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。

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、

20

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。)

30

【 0 4 1 2 】

「 $R_{501} \sim R_{507}$ 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。

【 0 4 1 3 】

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。

40

【 0 4 1 4 】

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。

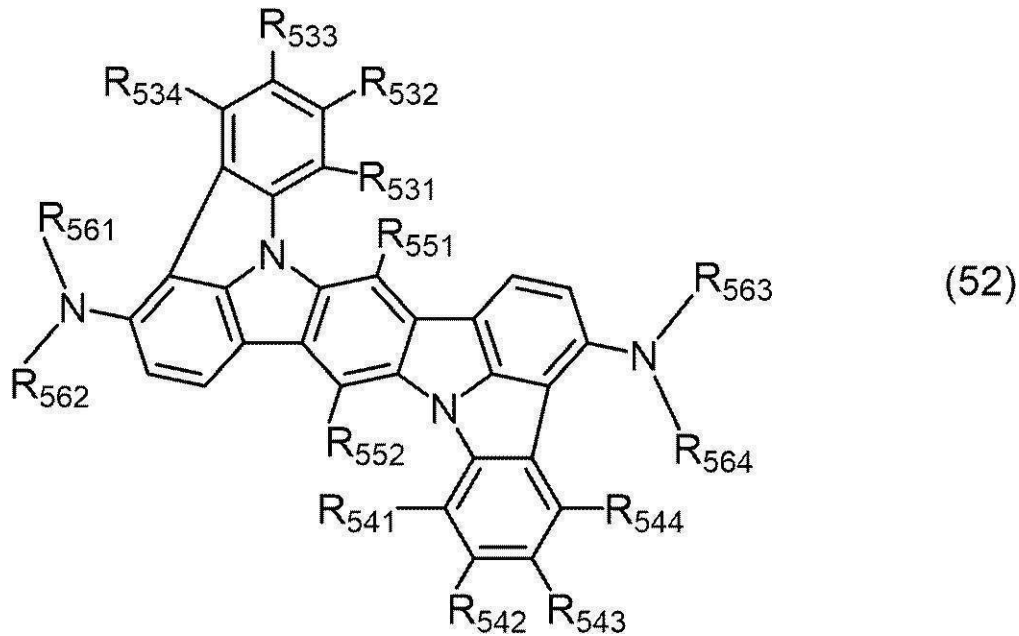
【 0 4 1 5 】

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 (5 2) で表される化合物である。

【 0 4 1 6 】

50

【化 1 6 2】



10

【 0 4 1 7 】

(前記一般式(52)において、

20

R₅₃₁ ~ R₅₃₄ 及び R₅₄₁ ~ R₅₄₄ 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 R₅₃₁ ~ R₅₃₄、R₅₄₁ ~ R₅₄₄、並びに R₅₅₁ 及び R₅₅₂ 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、

30

R₅₆₁ ~ R₅₆₄ 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。))

【 0 4 1 8 】

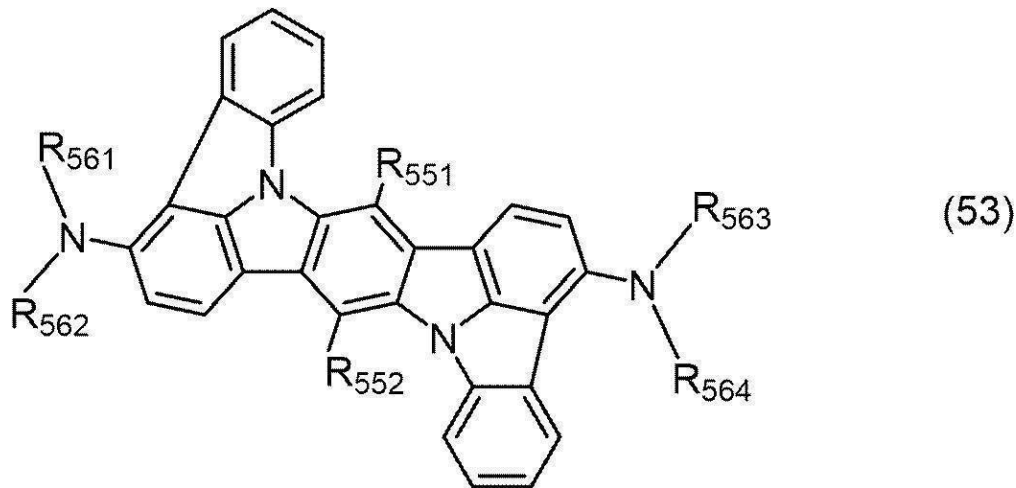
一実施形態においては、前記一般式(5)で表される化合物は、下記一般式(53)で表される化合物である。

【 0 4 1 9 】

40

50

【化 1 6 3】



10

【 0 4 2 0 】

(前記一般式(53)において、R₅₅₁、R₅₅₂及びR₅₆₁～R₅₆₄は、それぞれ独立に、前記一般式(52)におけるR₅₅₁、R₅₅₂及びR₅₆₁～R₅₆₄と同義である。)

【 0 4 2 1 】

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R₅₆₁～R₅₆₄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。

20

【 0 4 2 2 】

一実施形態においては、前記一般式(5)におけるR₅₂₁及びR₅₂₂、前記一般式(52)及び一般式(53)におけるR₅₅₁及びR₅₅₂は、水素原子である。

【 0 4 2 3 】

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。

30

【 0 4 2 4 】

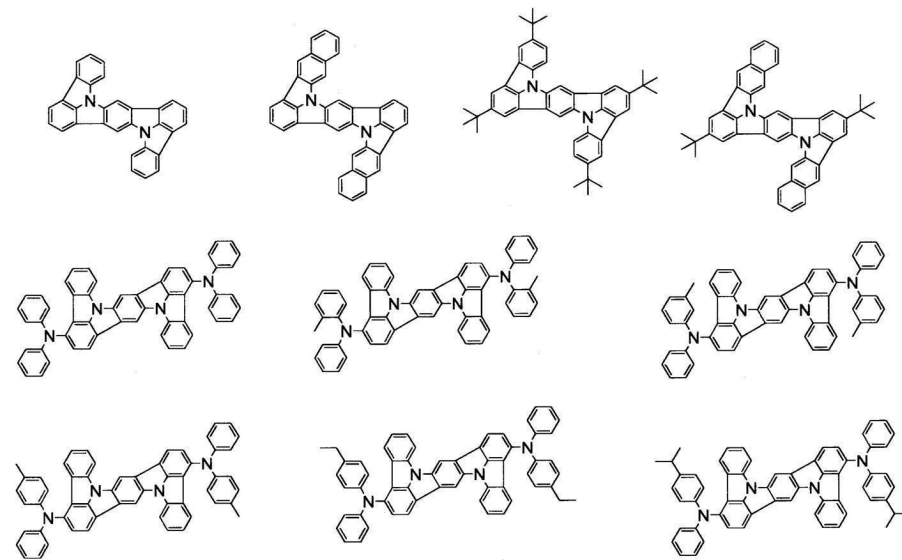
(一般式(5)で表される化合物の具体例)

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。

【 0 4 2 5 】

40

【化 1 6 4】



10

【 0 4 2 6 】

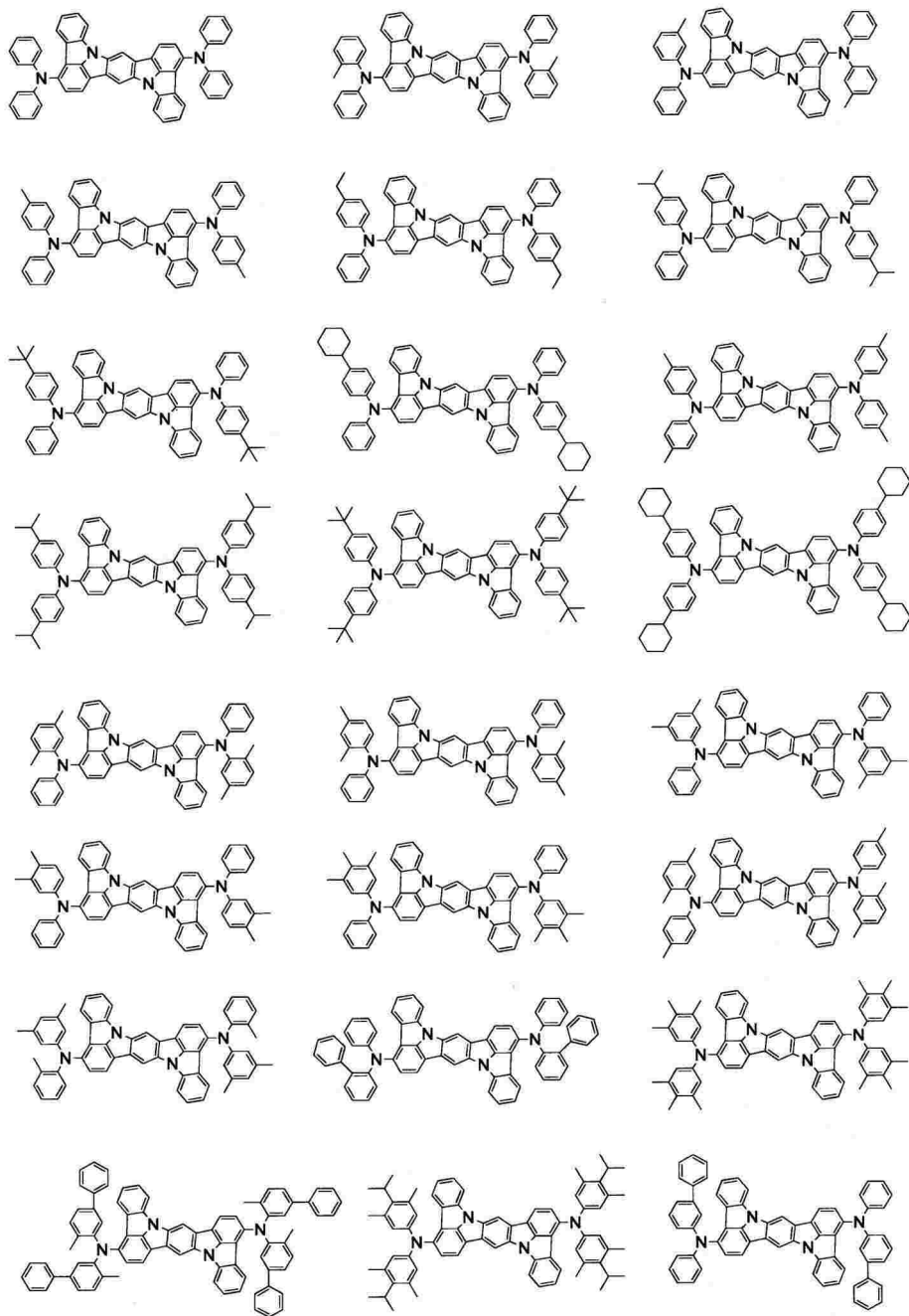
20

30

40

50

【化 1 6 5】



10

20

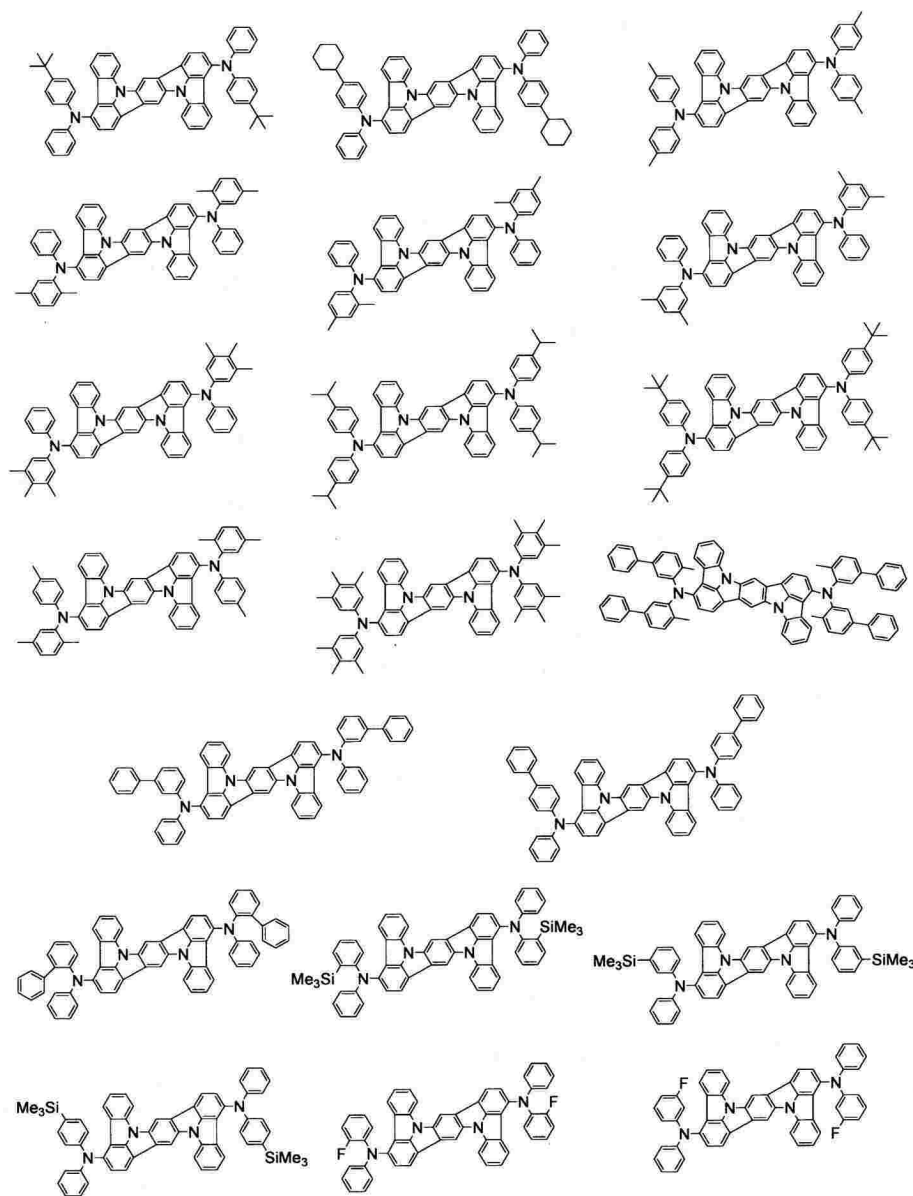
30

【 0 4 2 7】

40

50

【化 1 6 6】



【 0 4 2 8 】

10

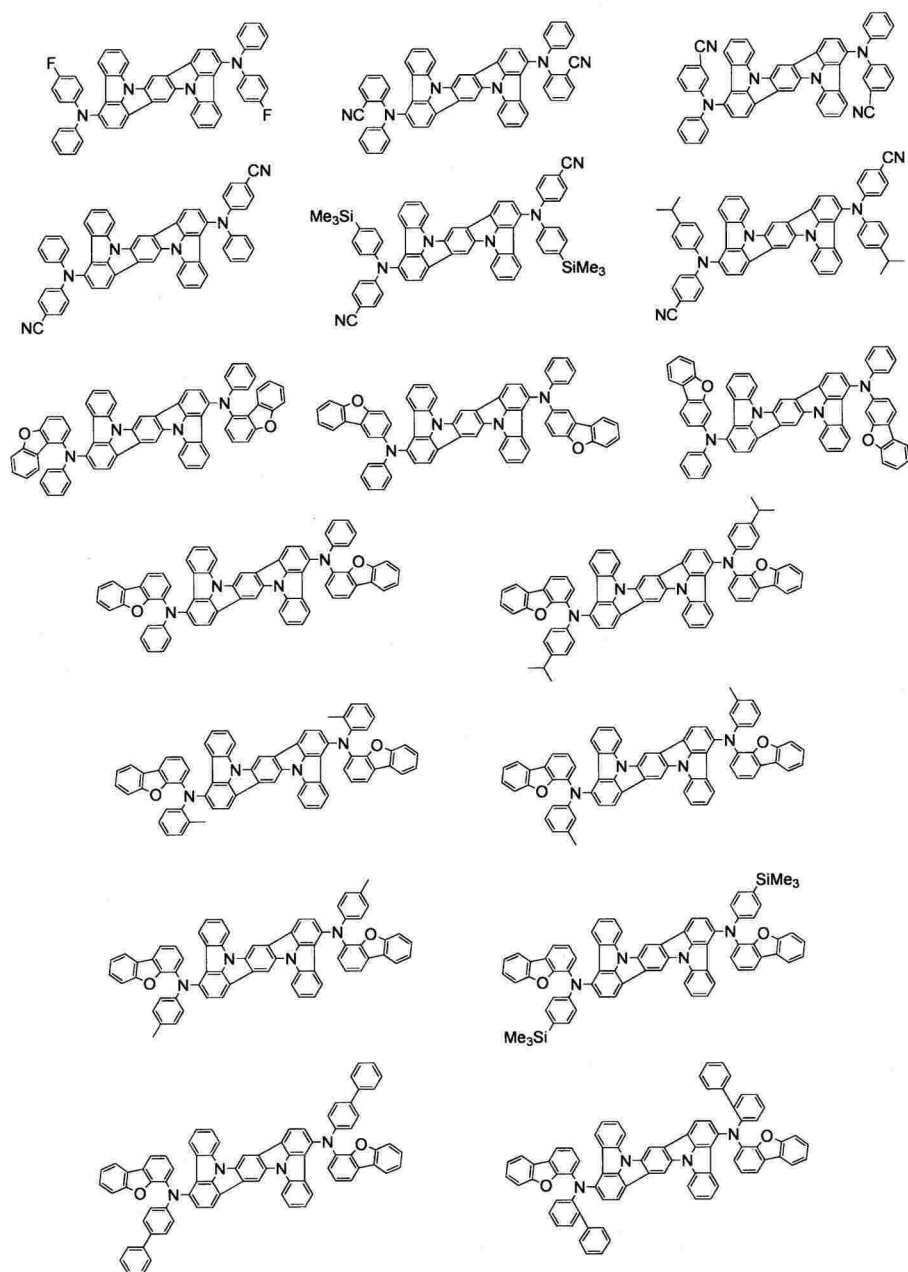
20

30

40

50

【化 1 6 7】



【 0 4 2 9 】

10

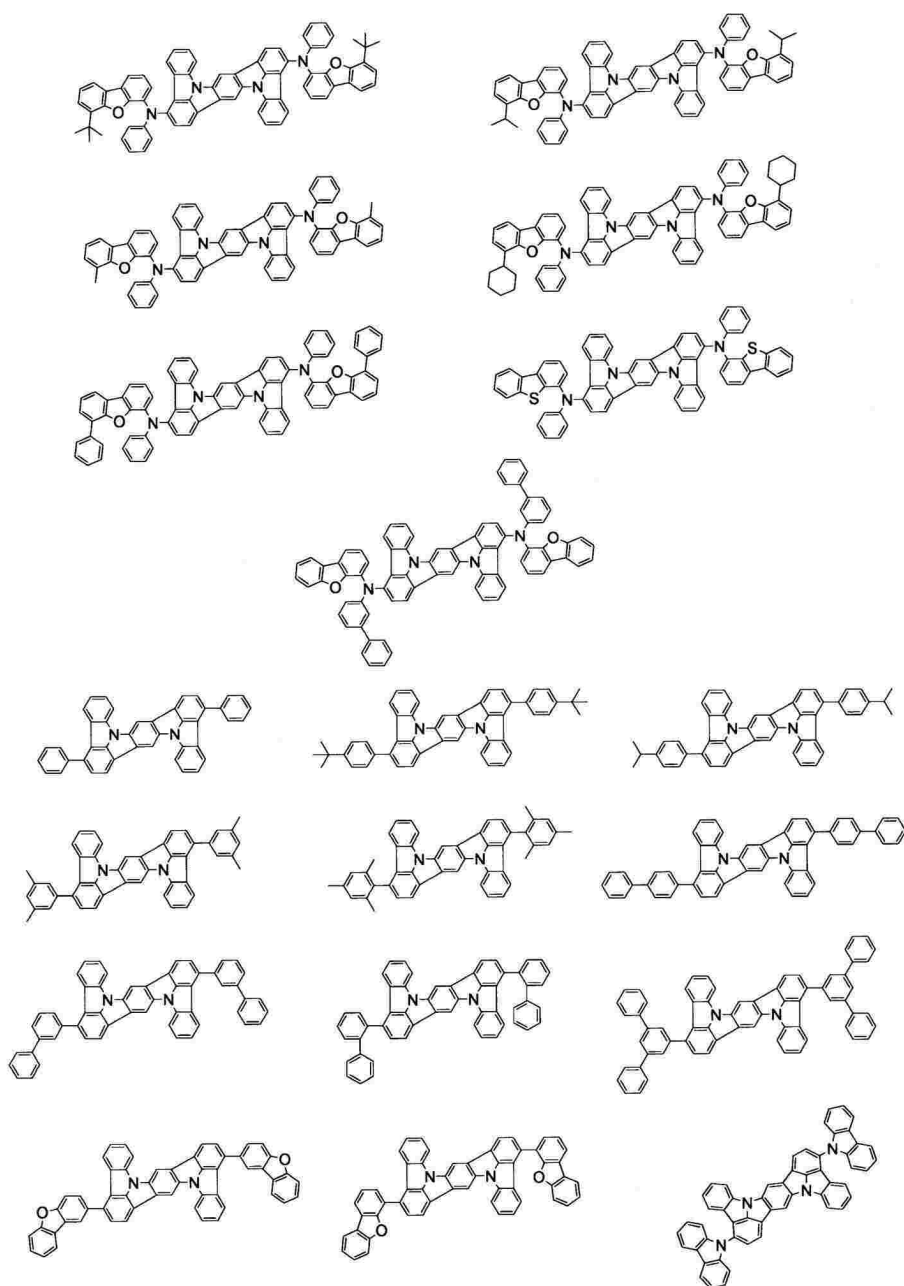
20

30

40

50

【化 1 6 8】



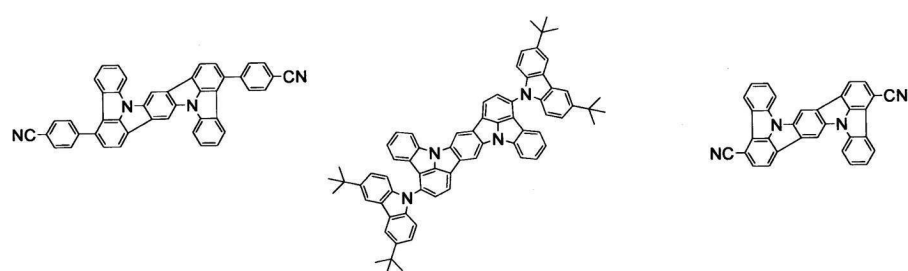
10

20

30

【 0 4 3 0】

【化 1 6 9】

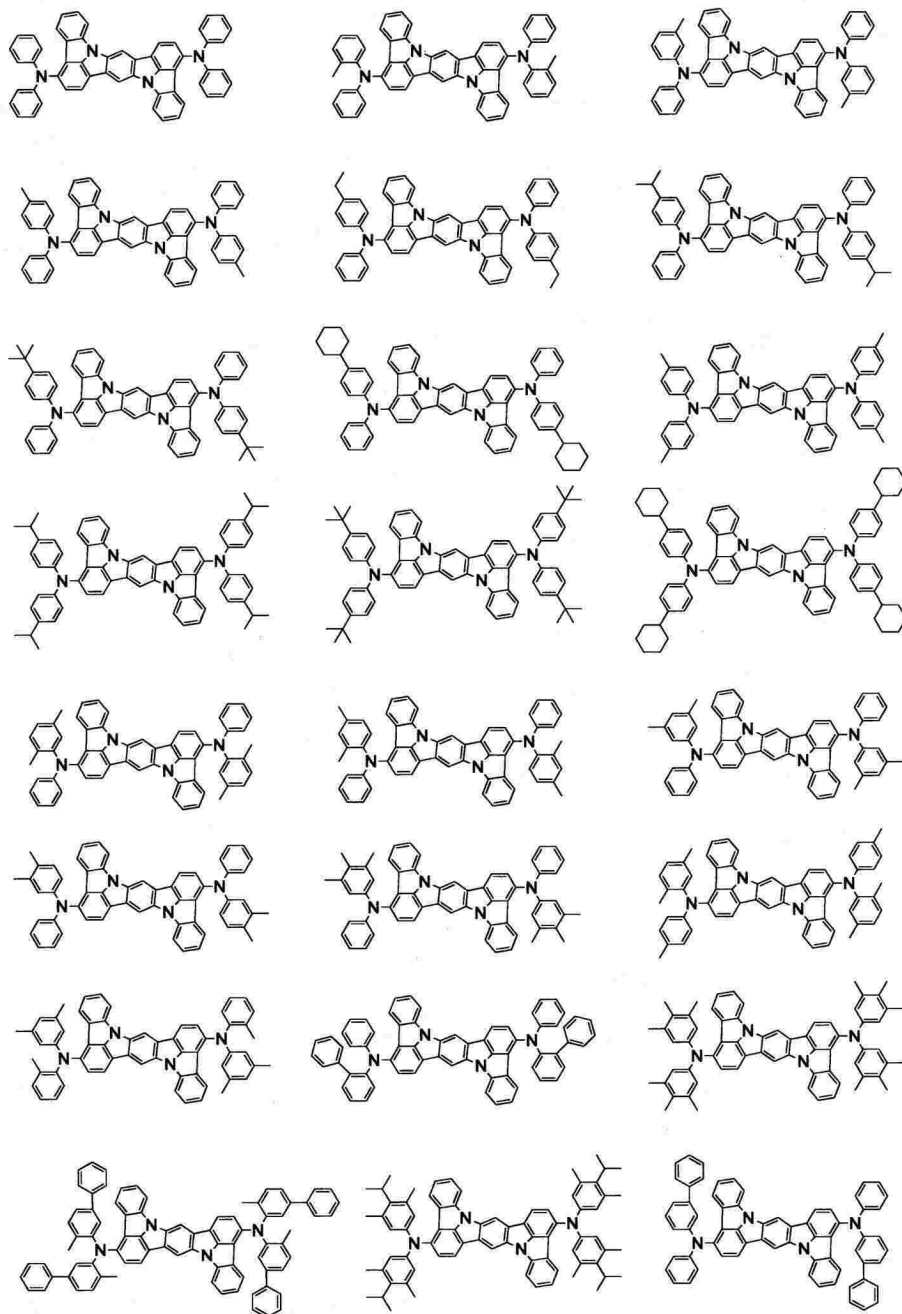


40

【 0 4 3 1】

50

【化 1 7 0】



10

20

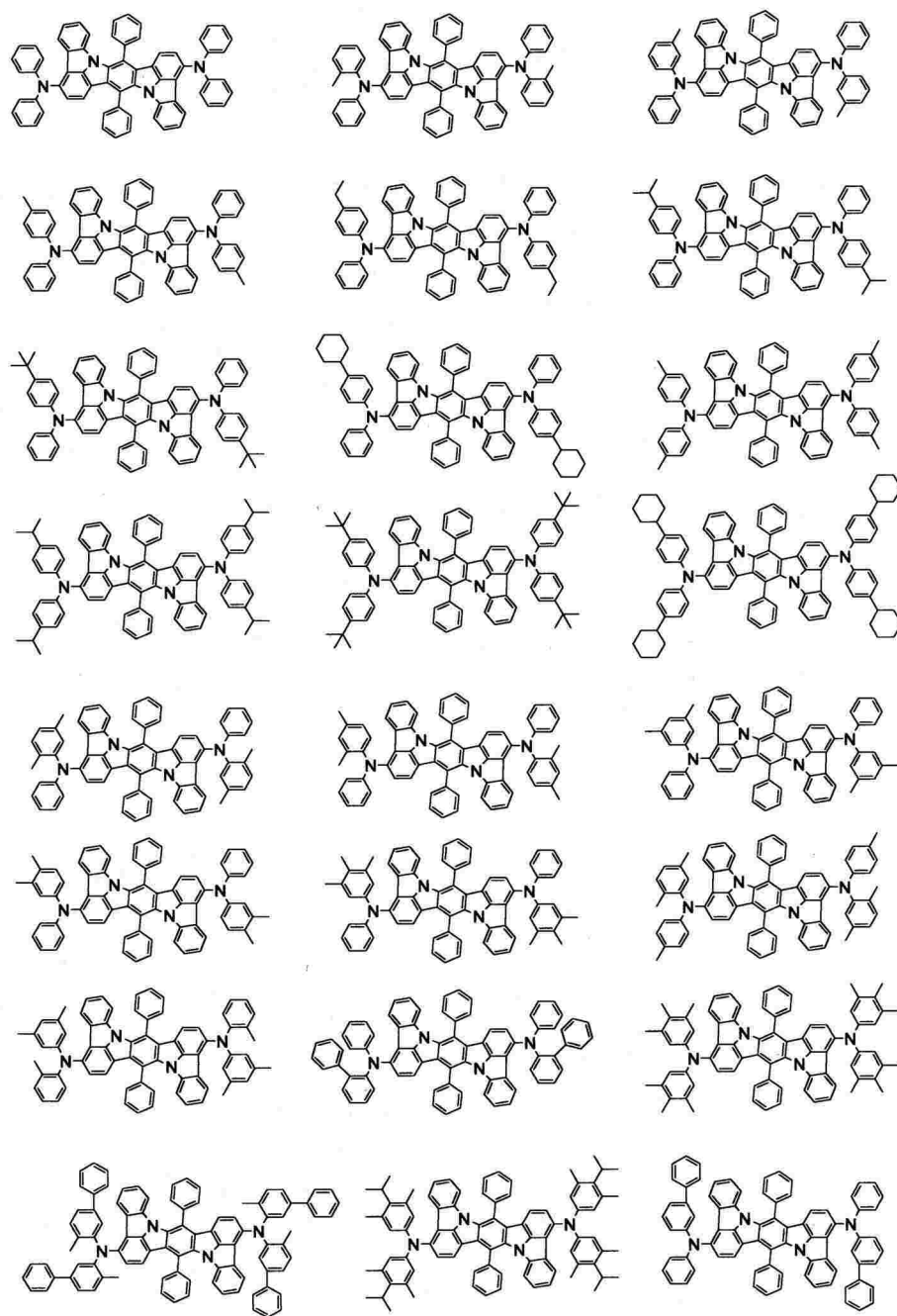
30

【 0 4 3 2】

40

50

【化 1 7 1】



10

20

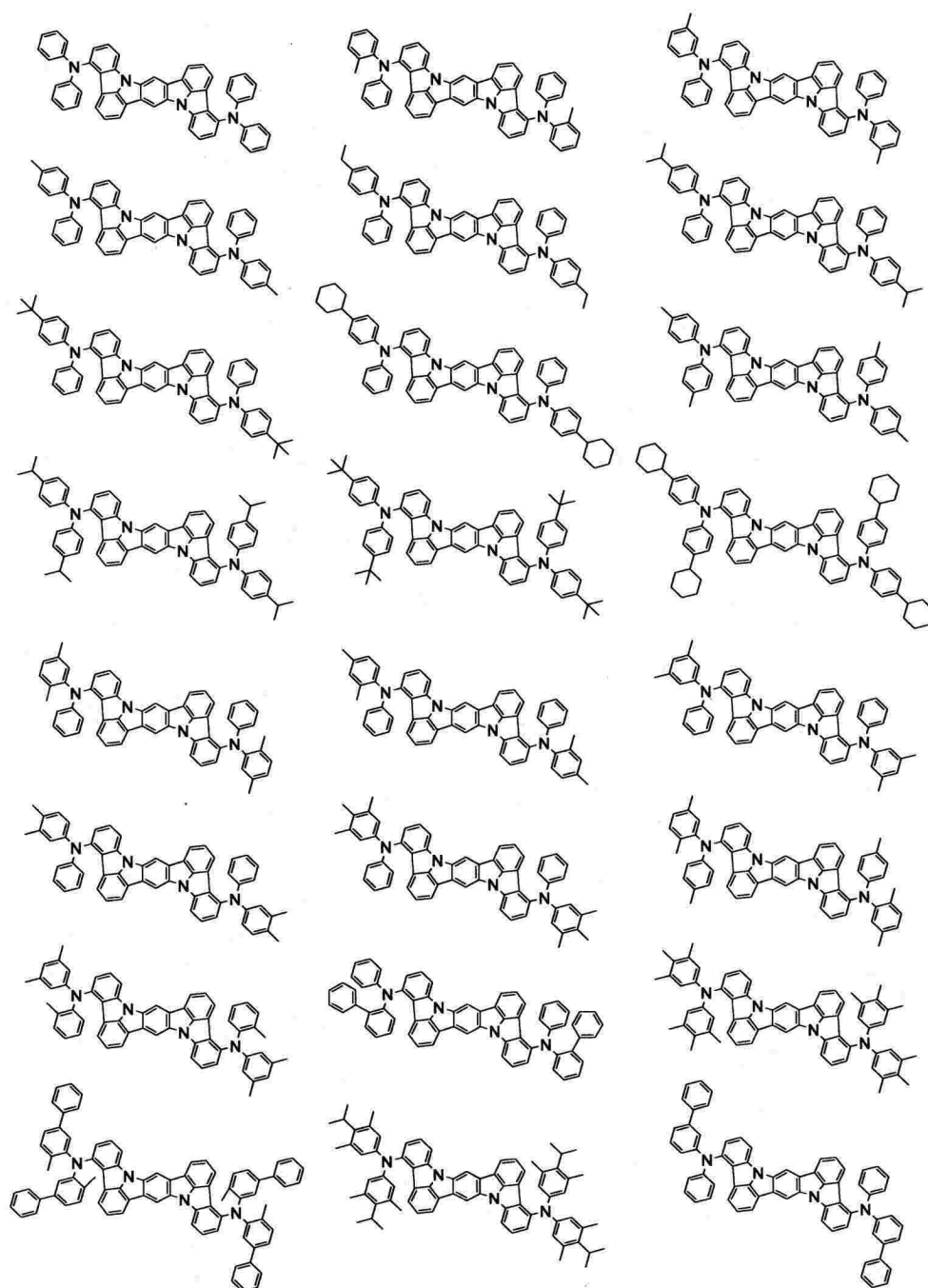
30

【 0 4 3 3 】

40

50

【化 1 7 2】



10

20

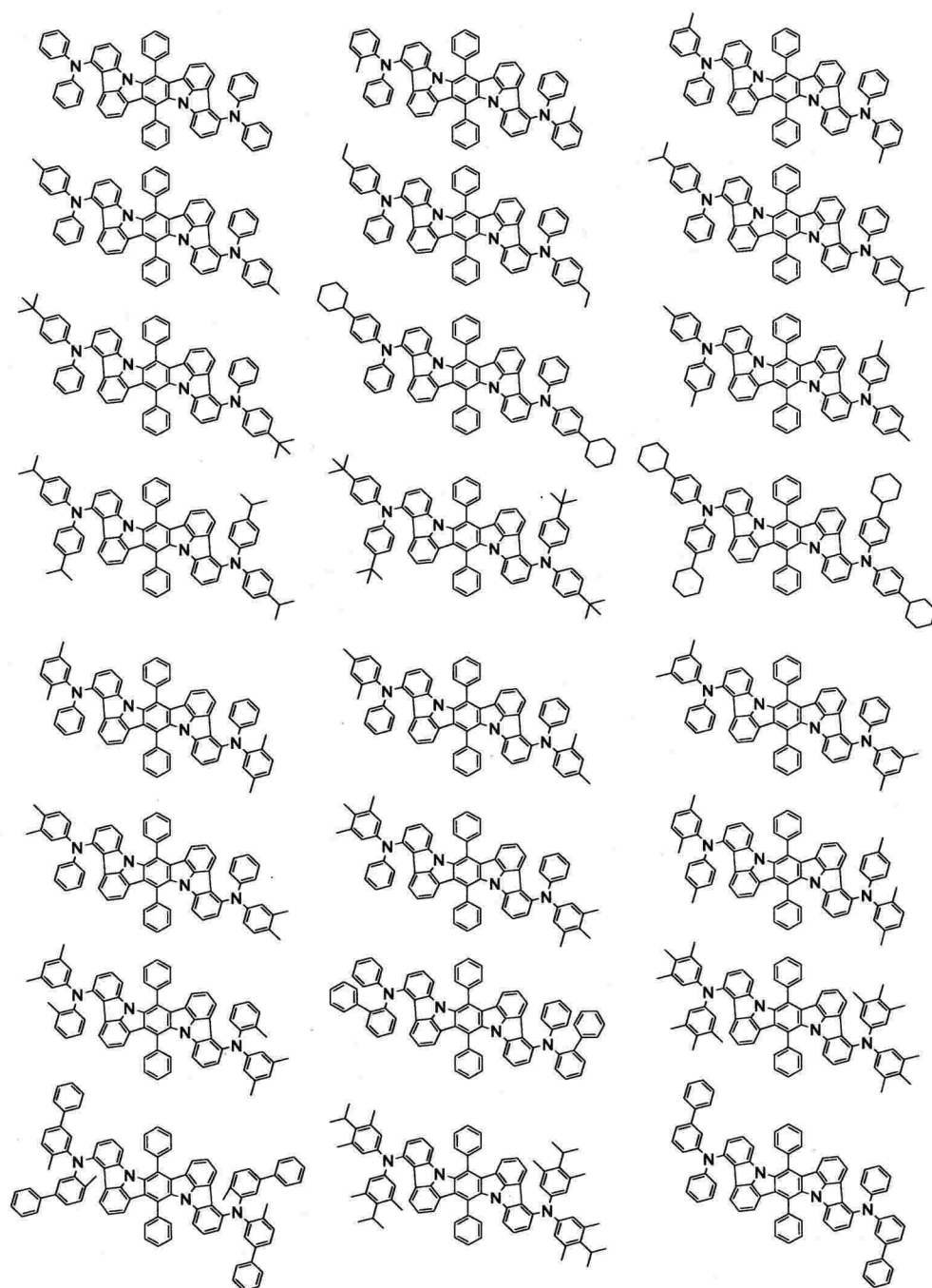
30

【 0 4 3 4】

40

50

【化 1 7 3】



10

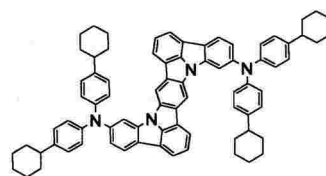
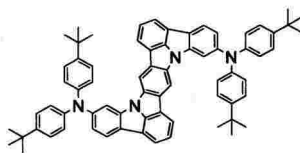
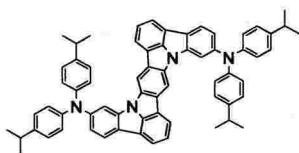
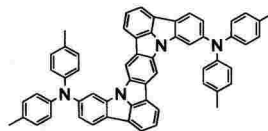
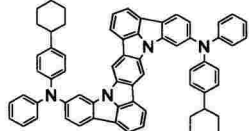
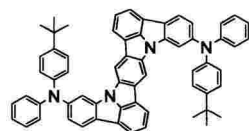
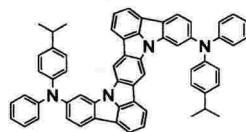
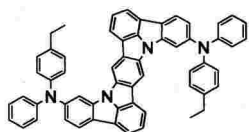
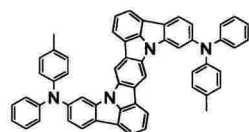
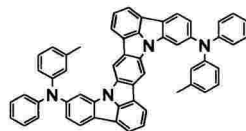
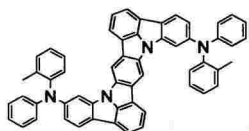
20

30

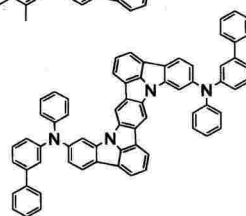
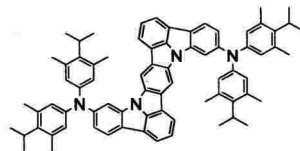
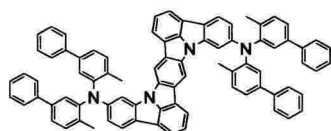
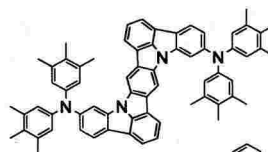
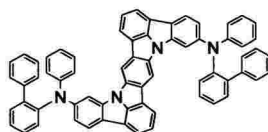
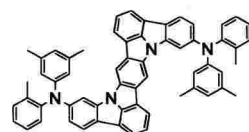
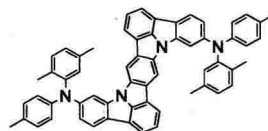
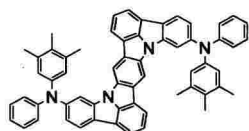
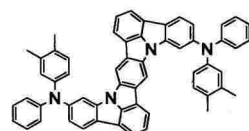
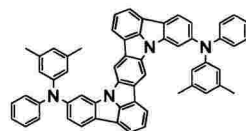
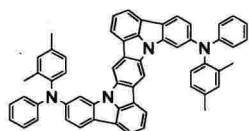
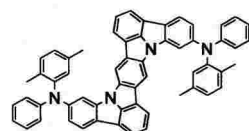
【 0 4 3 5】

40

50

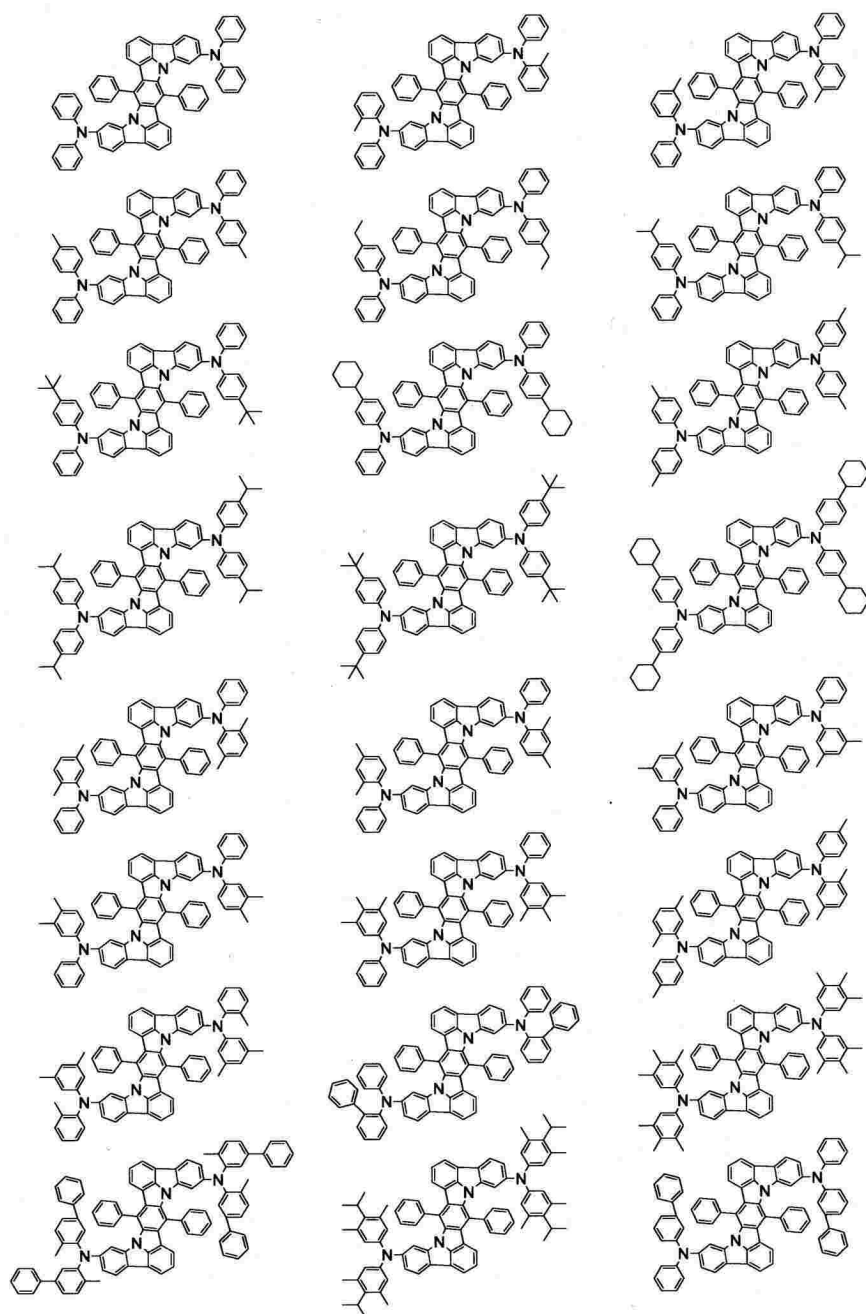


20



40

【化 1 7 5】



10

20

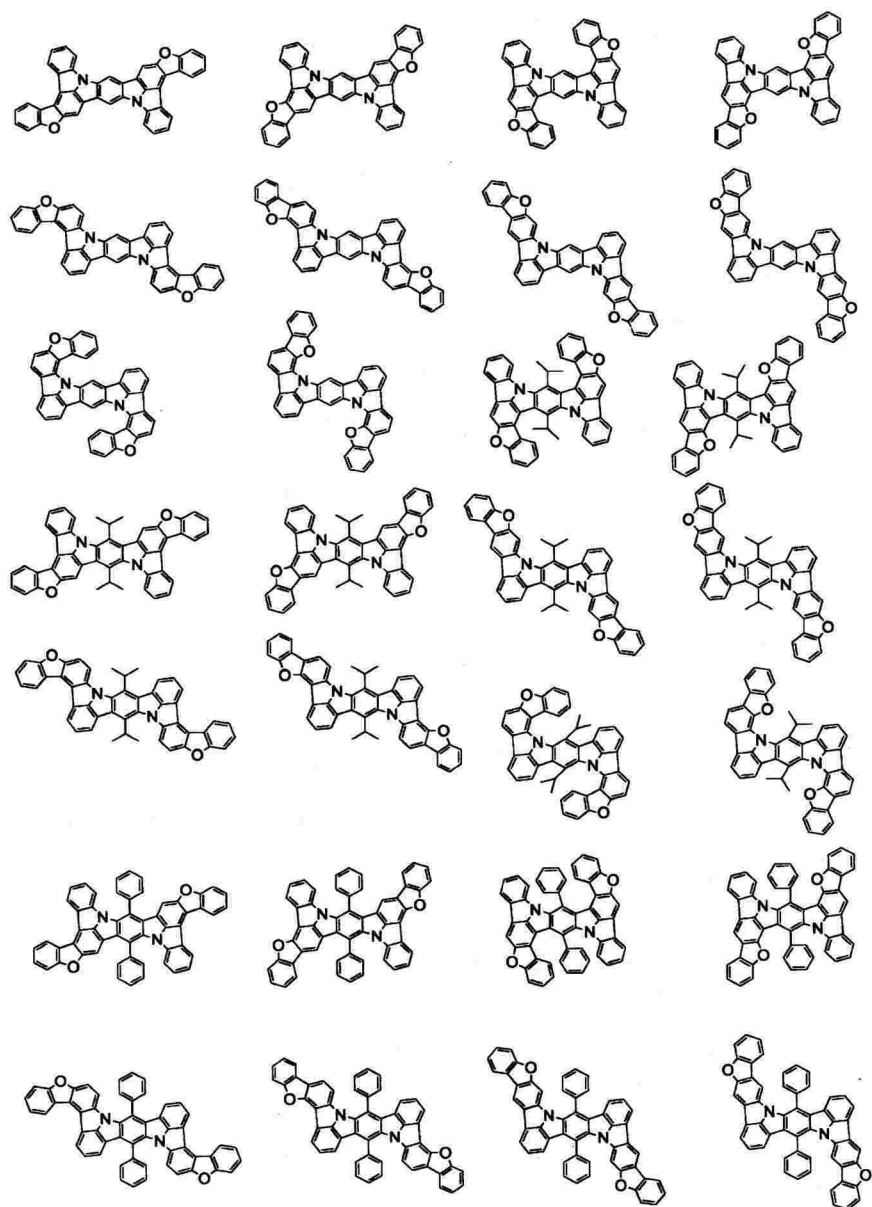
30

【 0 4 3 7 】

40

50

【化 1 7 6】



10

20

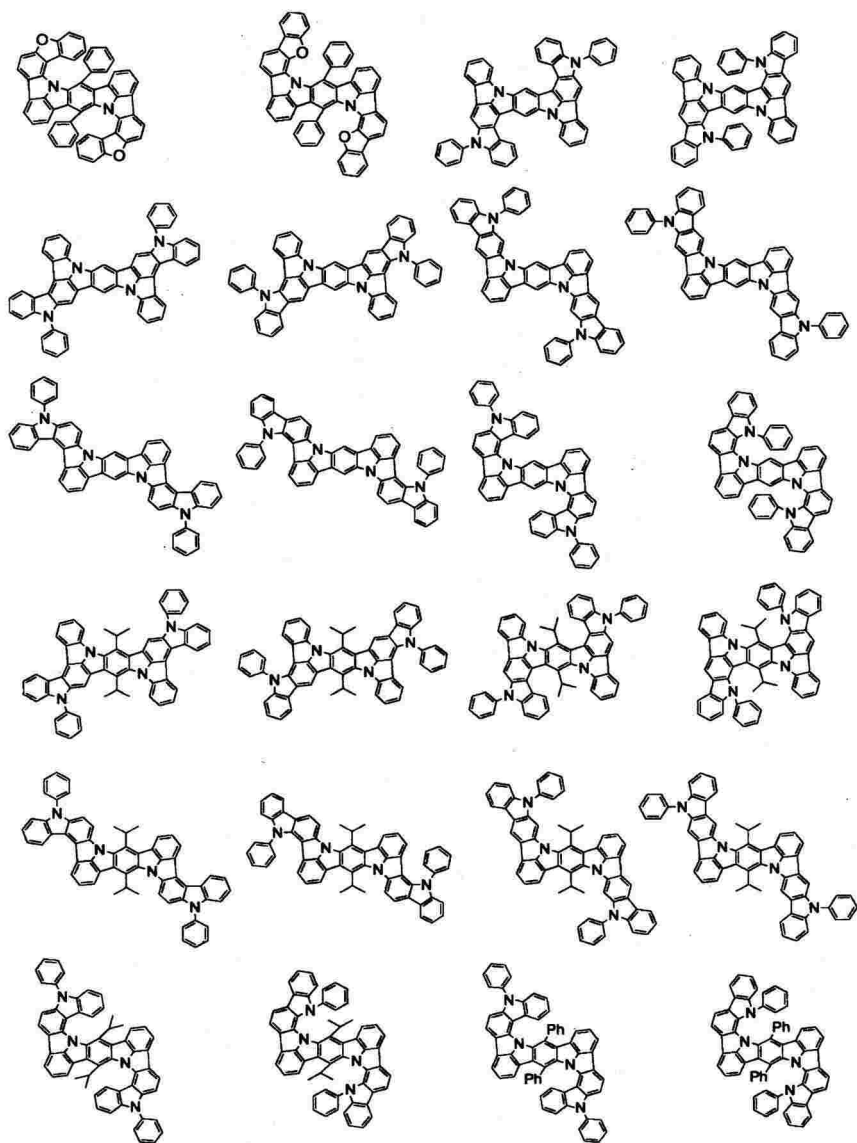
30

【 0 4 3 8】

40

50

【化 1 7 7】



(式中、Phはフェニル基である)

【 0 4 3 9 】

10

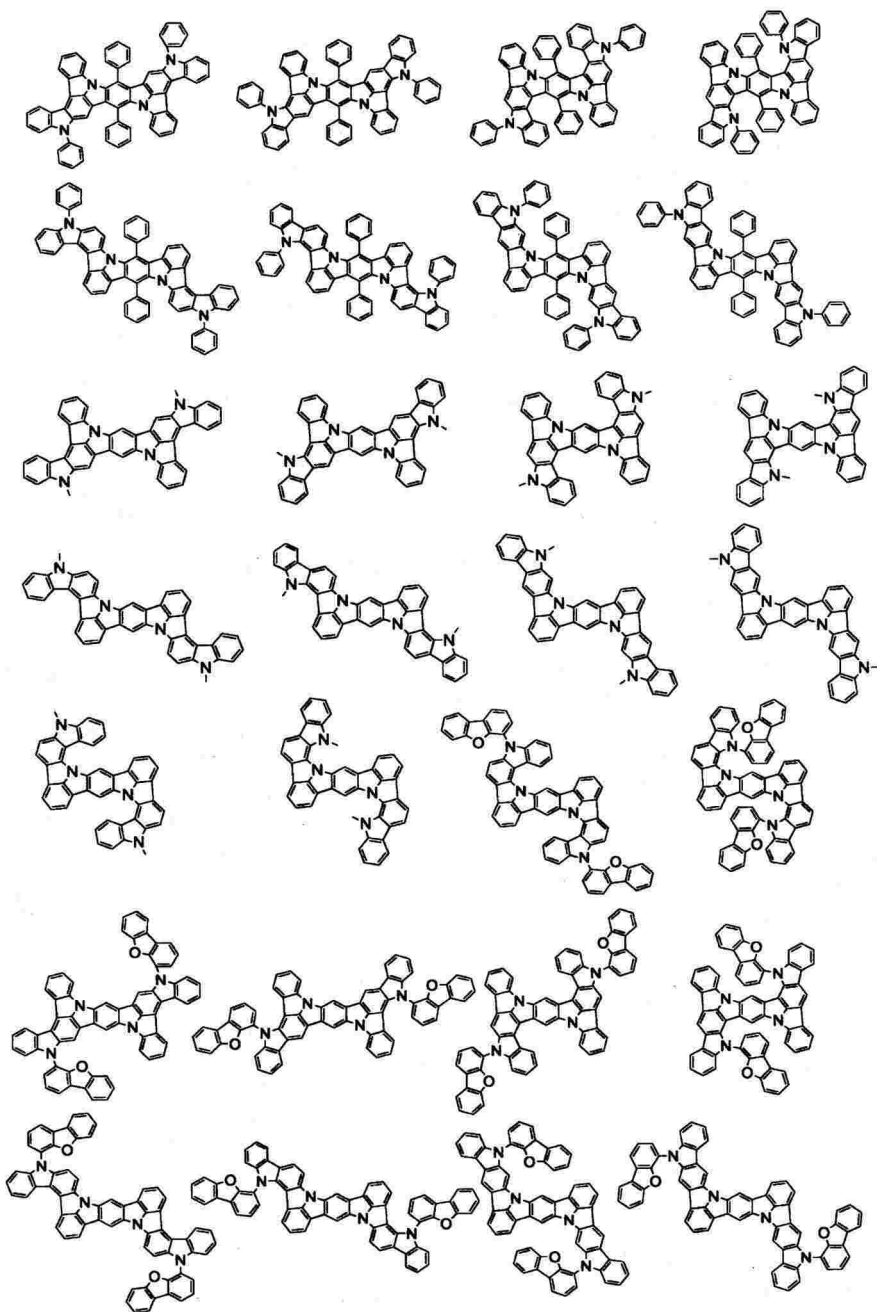
20

30

40

50

【化 1 7 8】



【 0 4 4 0 】

10

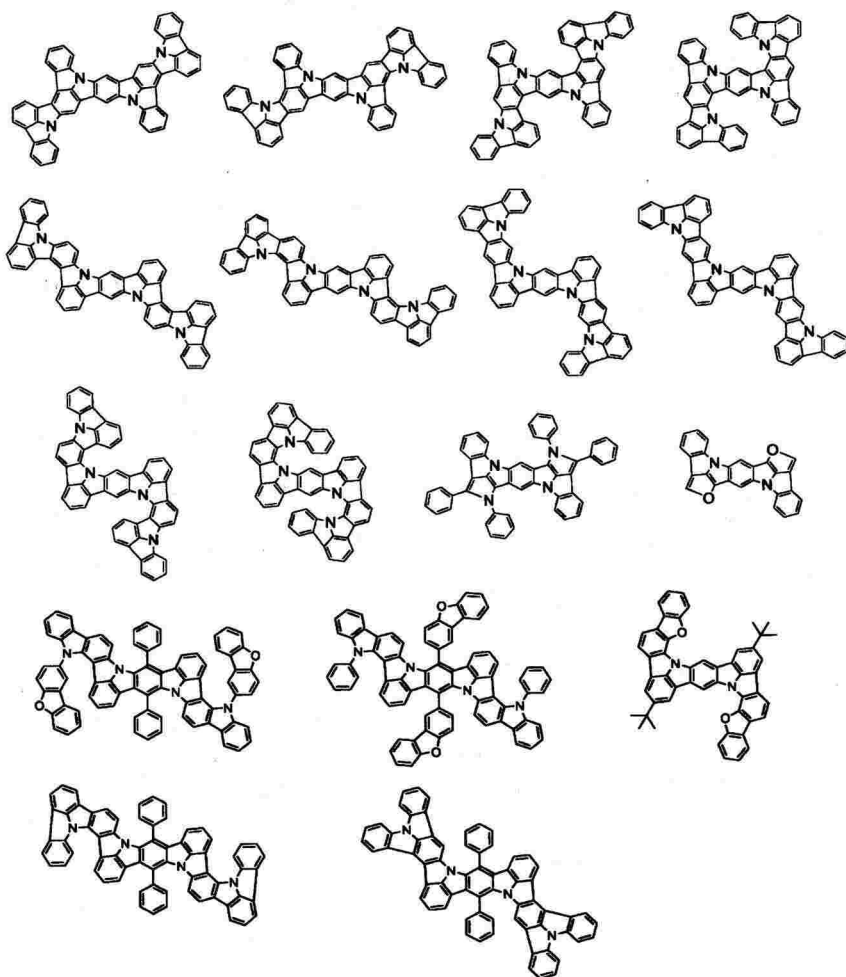
20

30

40

50

【化 1 7 9】

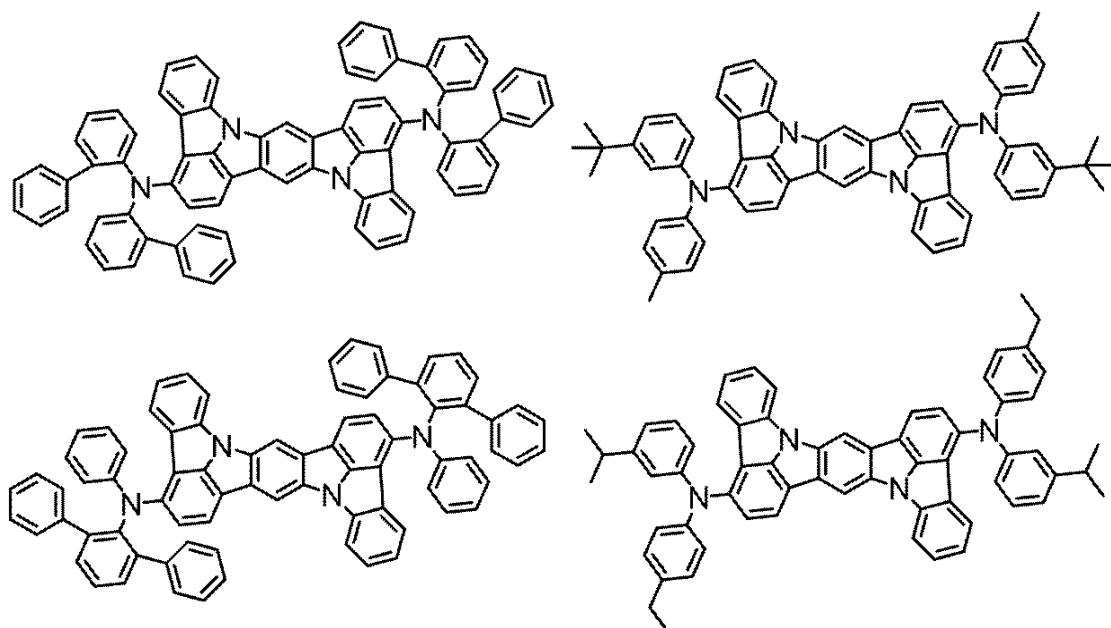


10

20

【 0 4 4 1】

【化 1 8 0】



30

40

【 0 4 4 2】

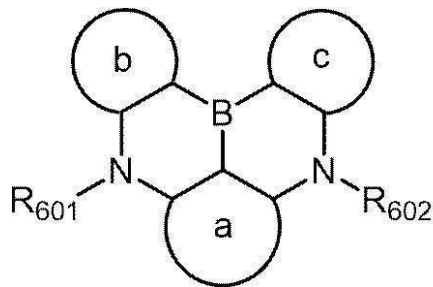
(一般式(6)で表される化合物)

一般式(6)で表される化合物について説明する。

50

【 0 4 4 3 】

【 化 1 8 1 】



(6)

10

【 0 4 4 4 】

(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、

R₆₀₁及びR₆₀₂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R₆₀₁及びR₆₀₂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。)

20

【 0 4 4 5 】

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。

【 0 4 4 6 】

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。

【 0 4 4 7 】

「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。

【 0 4 4 8 】

R₆₀₁及びR₆₀₂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

30

40

50

原子を含んでいてもよい。R₆₀₁及びR₆₀₂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R₆₀₁及びR₆₀₂を構成する原子が結合することを意味する。例えば、R₆₀₁がa環と結合して、R₆₀₁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。

R₆₀₁がb環と結合する場合、R₆₀₂がa環と結合する場合、及びR₆₀₂がc環と結合する場合も上記と同じである。

【0449】

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。

10

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。

【0450】

一実施形態において、前記一般式(6)におけるR₆₀₁及びR₆₀₂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。

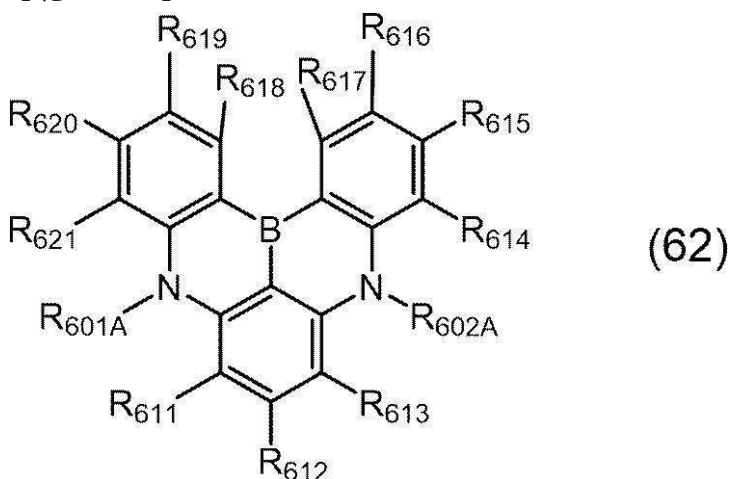
【0451】

20

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。

【0452】

【化182】



30

【0453】

(前記一般式(62)において、

R_{601A}は、R₆₁₁及びR₆₂₁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、

40

R_{602A}は、R₆₁₃及びR₆₁₄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

50

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、
 - $Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 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。))

【0454】

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。

【0455】

$R_{611} \sim R_{621}$ 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。

【0456】

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。

【0457】

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。

【0458】

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。

【0459】

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、

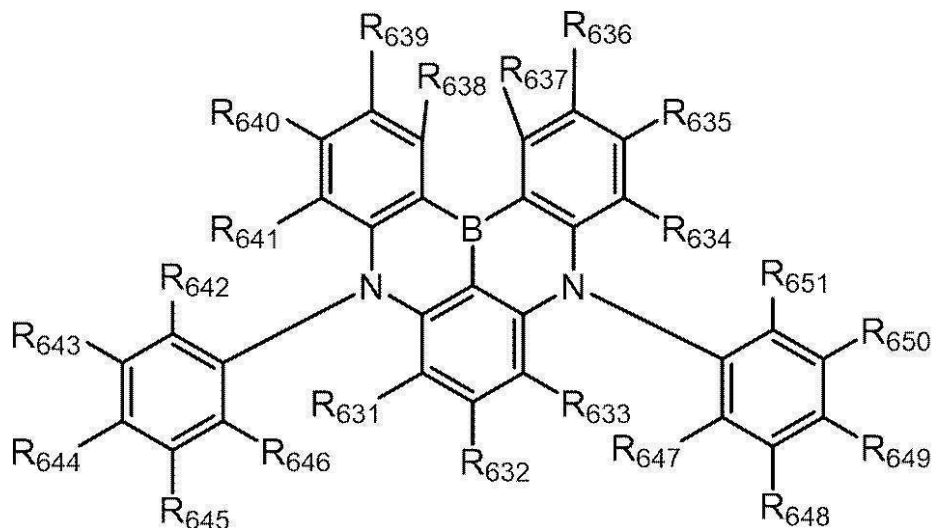
$R_{611} \sim R_{621}$ のうち少なくとも 1 つは、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基である。

【0460】

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。

【0461】

【化183】



(63)

【0462】

(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、

10

20

30

40

50

- O - (R₉₀₄) で表される基、
- S - (R₉₀₅) で表される基、
- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) 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。)

【 0 4 6 3 】

R₆₃₁ は、R₆₄₆ 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、R₆₃₁ と R₆₄₆ が結合して、R₆₄₆ 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。R₆₃₃ と R₆₄₇ が結合する場合、R₆₃₄ と R₆₅₁ が結合する場合、及び R₆₄₁ と R₆₄₂ が結合する場合も上記と同じである。

10

【 0 4 6 4 】

- 一実施形態において、環形成に寄与しない R₆₃₁ ~ R₆₅₁ 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。

20

【 0 4 6 5 】

- 一実施形態において、環形成に寄与しない R₆₃₁ ~ R₆₅₁ 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。

【 0 4 6 6 】

- 一実施形態において、環形成に寄与しない R₆₃₁ ~ R₆₅₁ 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。

30

【 0 4 6 7 】

- 一実施形態において、環形成に寄与しない R₆₃₁ ~ R₆₅₁ 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、

R₆₃₁ ~ R₆₅₁ 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。

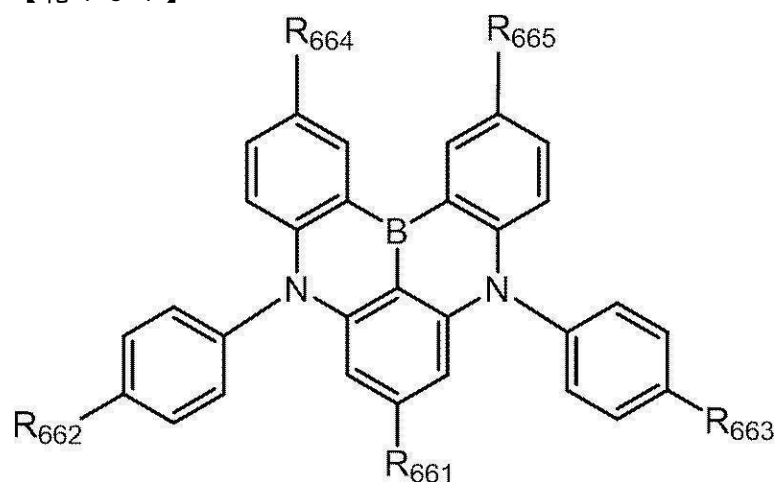
【 0 4 6 8 】

一実施形態において、前記一般式 (6 3) で表される化合物は、下記一般式 (6 3 A) で表される化合物である。

【 0 4 6 9 】

40

【化 1 8 4】



(63A)

10

【 0 4 7 0】

(前記一般式(63A)において、

R₆₆₁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、

R₆₆₂～R₆₆₅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。)

20

【 0 4 7 1】

一実施形態において、R₆₆₁～R₆₆₅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。

30

【 0 4 7 2】

一実施形態において、R₆₆₁～R₆₆₅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。

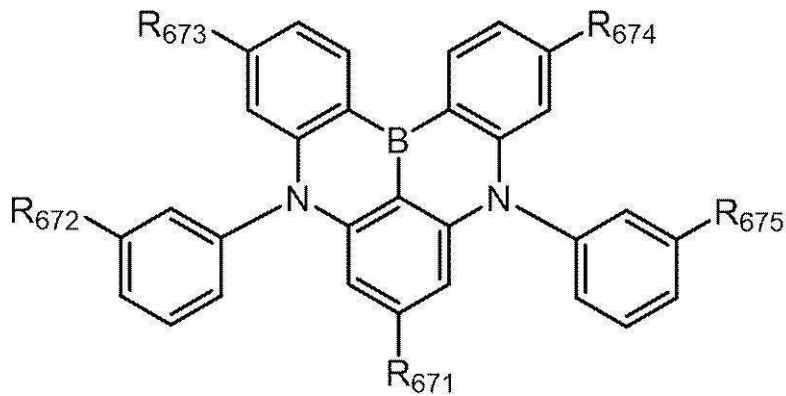
【 0 4 7 3】

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。

【 0 4 7 4】

40

【化 1 8 5】



(63B)

10

【 0 4 7 5】

(前記一般式(63B)において、

R₆₇₁及びR₆₇₂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(R₉₀₆)(R₉₀₇)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、

20

R₆₇₃～R₆₇₅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(R₉₀₆)(R₉₀₇)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。))

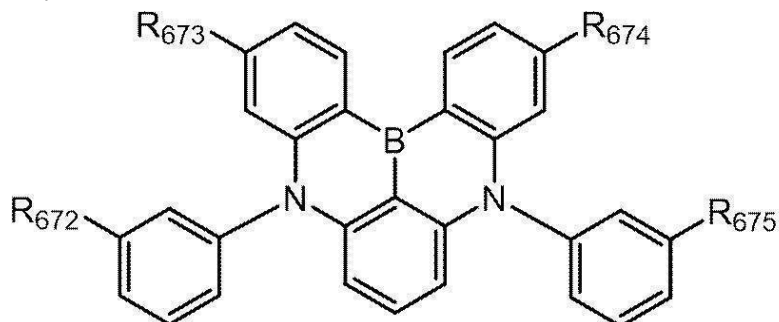
【 0 4 7 6】

30

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。

【 0 4 7 7】

【化 1 8 6】



(63B')

40

【 0 4 7 8】

(前記一般式(63B')において、R₆₇₂～R₆₇₅は、それぞれ独立に、前記一般式(63B)におけるR₆₇₂～R₆₇₅と同義である。)

【 0 4 7 9】

一実施形態において、R₆₇₁～R₆₇₅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、

50

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 (R₉₀₆) (R₉₀₇) 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。

【 0 4 8 0 】

一実施形態において、

R₆₇₂ 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 (R₉₀₆) (R₉₀₇) 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、

R₆₇₁ 及び R₆₇₃ ～ R₆₇₅ 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 (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、又は

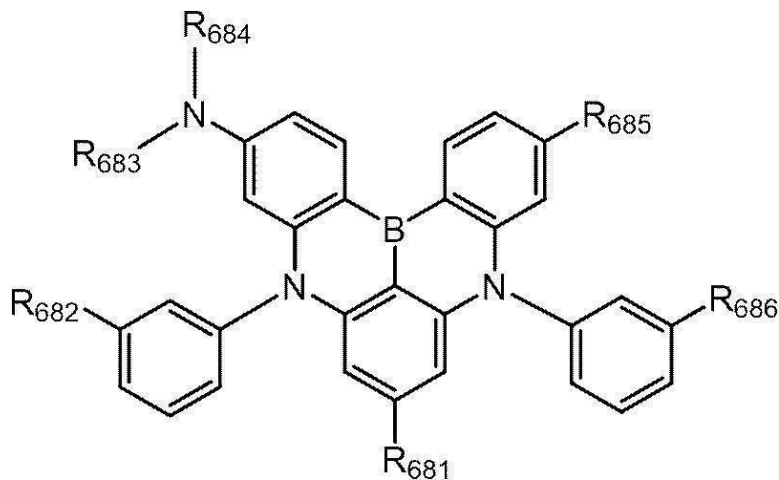
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

【 0 4 8 1 】

一実施形態において、前記一般式 (6 3) で表される化合物は、下記一般式 (6 3 C) で表される化合物である。

【 0 4 8 2 】

【 化 1 8 7 】



(63C)

【 0 4 8 3 】

(前記一般式 (6 3 C) において、

R₆₈₁ 及び R₆₈₂ 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。

R₆₈₃ ～ R₆₈₆ 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。)

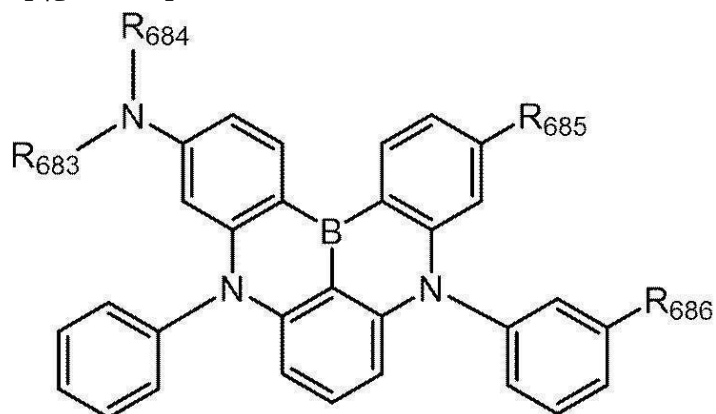
【 0 4 8 4 】

一実施形態において、前記一般式 (6 3) で表される化合物は、下記一般式 (6 3 C ')

で表される化合物である。

【 0 4 8 5 】

【 化 1 8 8 】



(63C')

10

【 0 4 8 6 】

(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。)

【 0 4 8 7 】

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。

20

【 0 4 8 8 】

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。

【 0 4 8 9 】

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-R601を含む基及びN-R602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-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。

30

【 0 4 9 0 】

(一般式(6)で表される化合物の具体例)

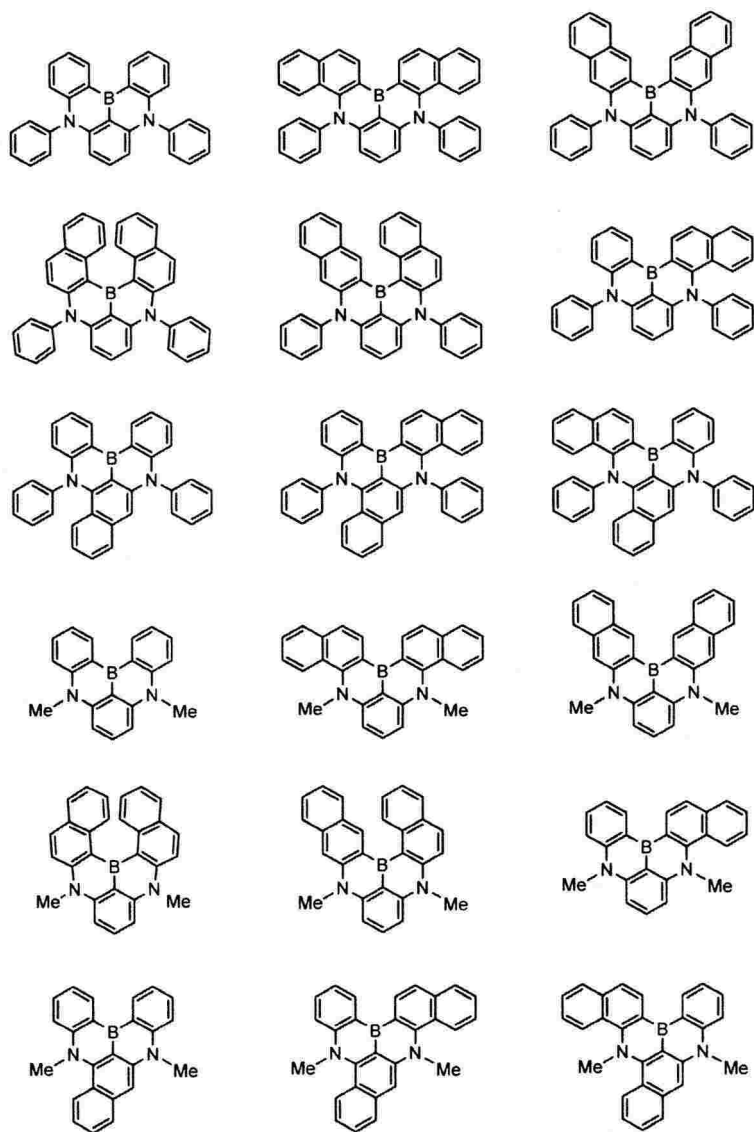
以下に、前記一般式(6)で表される化合物の具体例を記載するが、これらは例示に過ぎず、前記一般式(6)で表される化合物は下記具体例に限定されない。

【 0 4 9 1 】

40

50

【化 1 8 9】



10

20

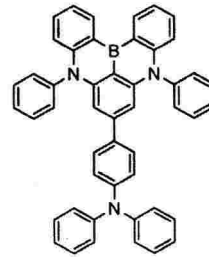
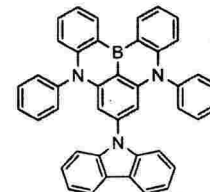
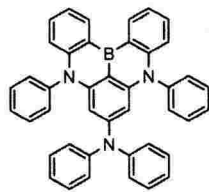
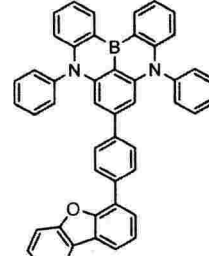
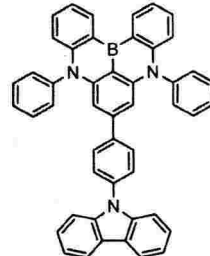
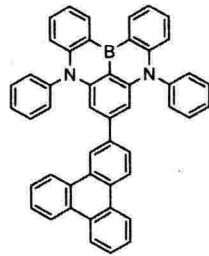
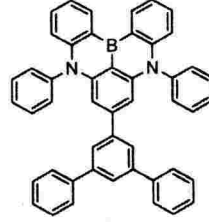
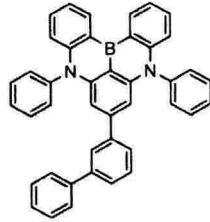
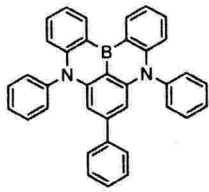
30

【 0 4 9 2】

40

50

【化 1 9 0】



【 0 4 9 3】

10

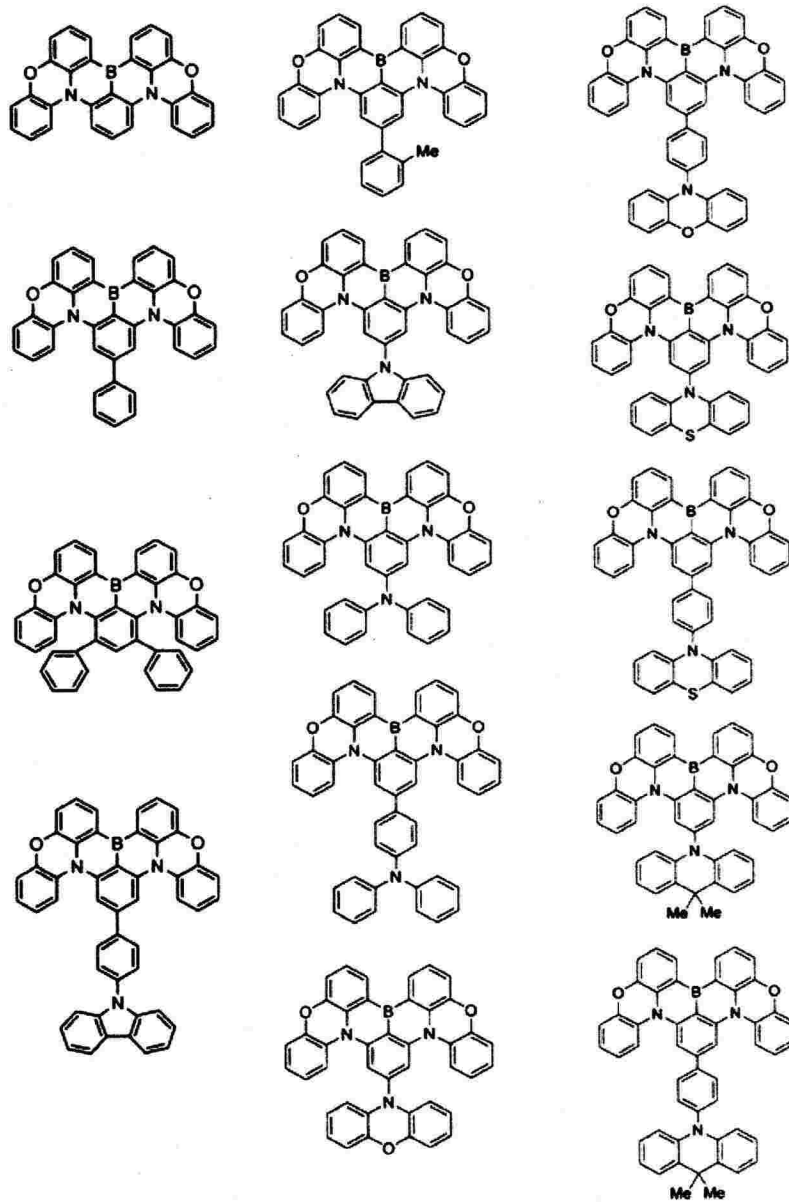
20

30

40

50

【化 1 9 1】



10

20

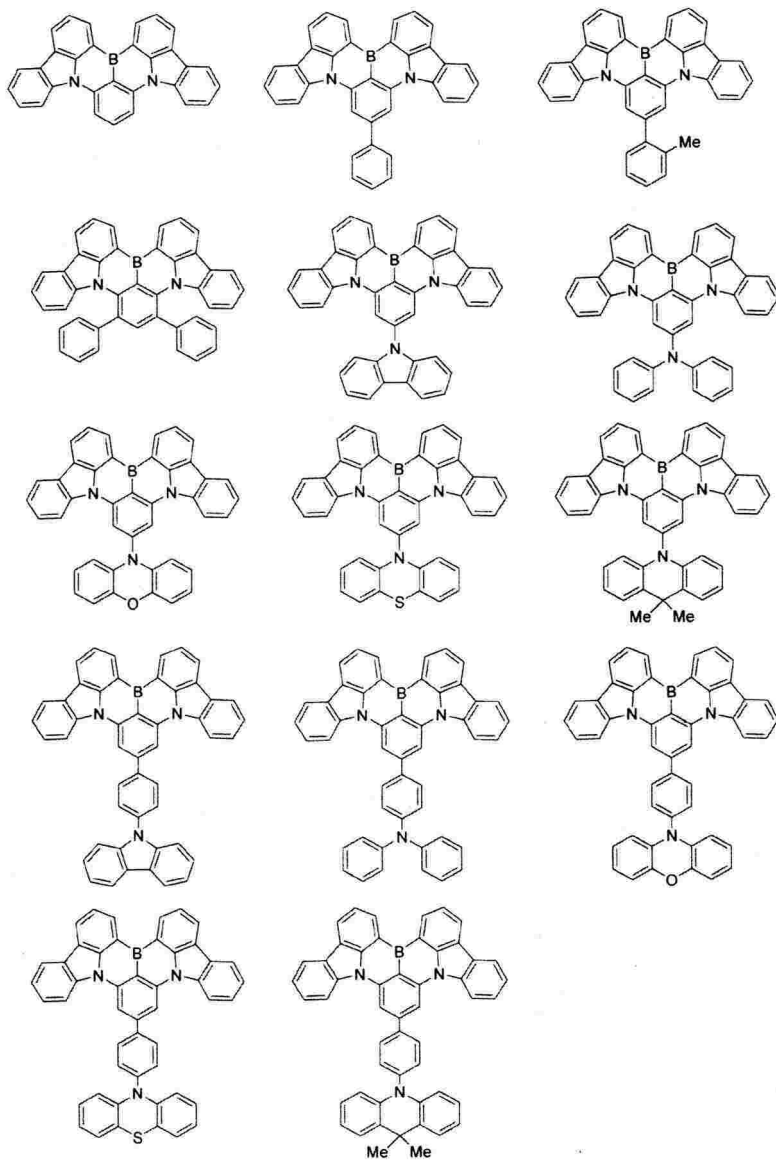
30

【 0 4 9 4】

40

50

【化 1 9 2】



10

20

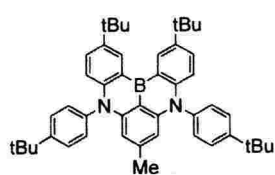
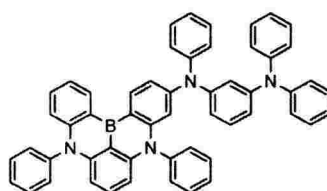
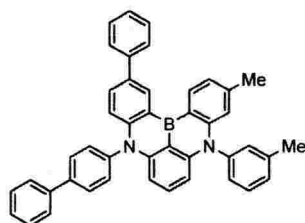
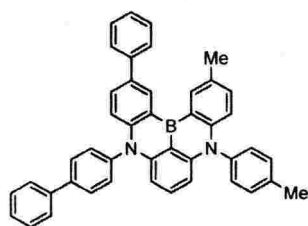
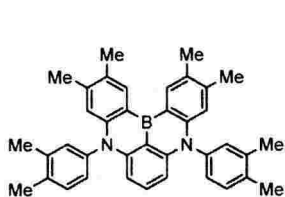
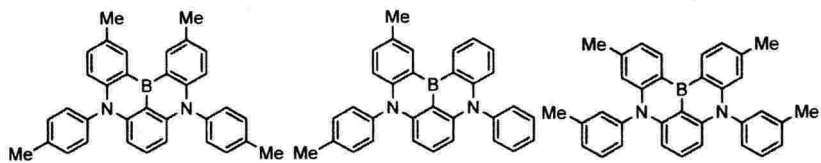
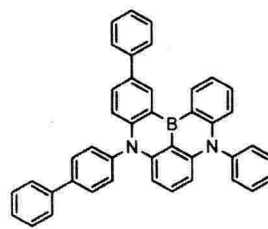
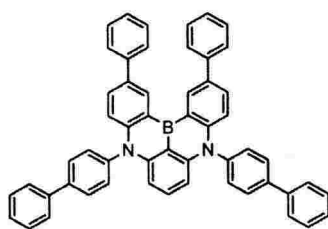
30

【 0 4 9 5 】

40

50

【化 1 9 3】



【 0 4 9 6 】

10

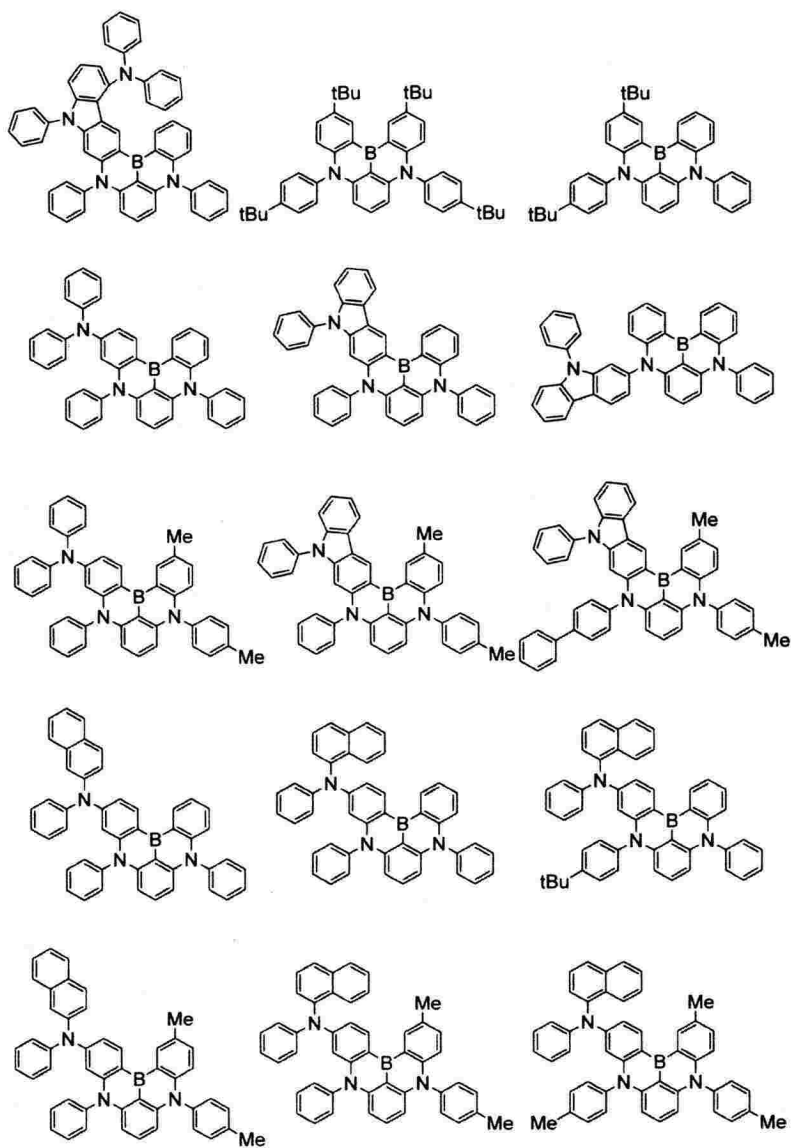
20

30

40

50

【化 1 9 4】



10

20

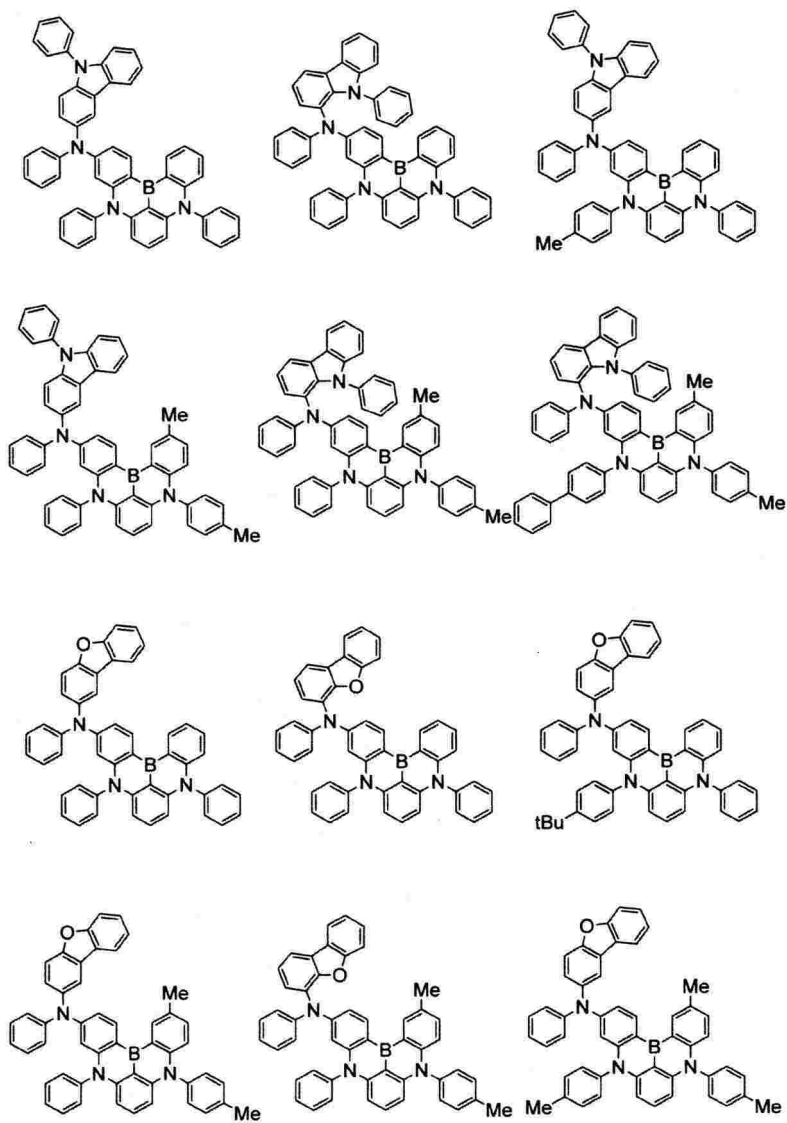
30

【 0 4 9 7 】

40

50

【化 1 9 5】



10

20

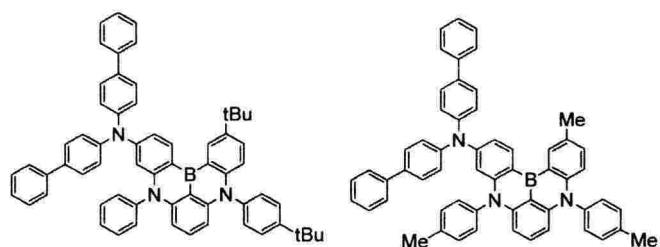
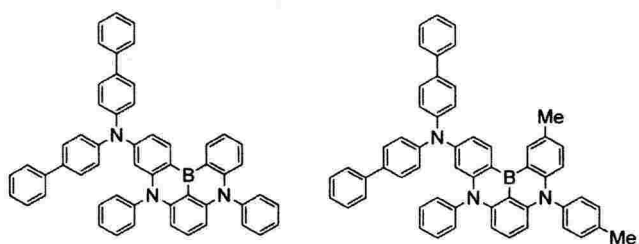
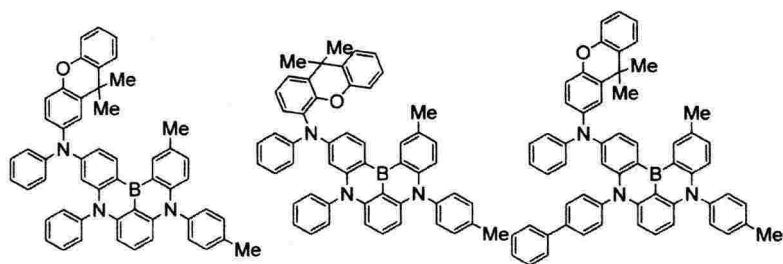
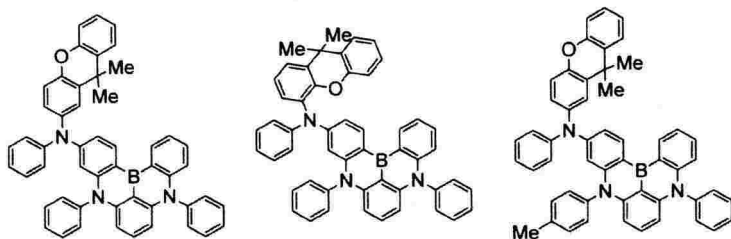
30

【 0 4 9 8 】

40

50

【化 1 9 6】



【 0 4 9 9 】

10

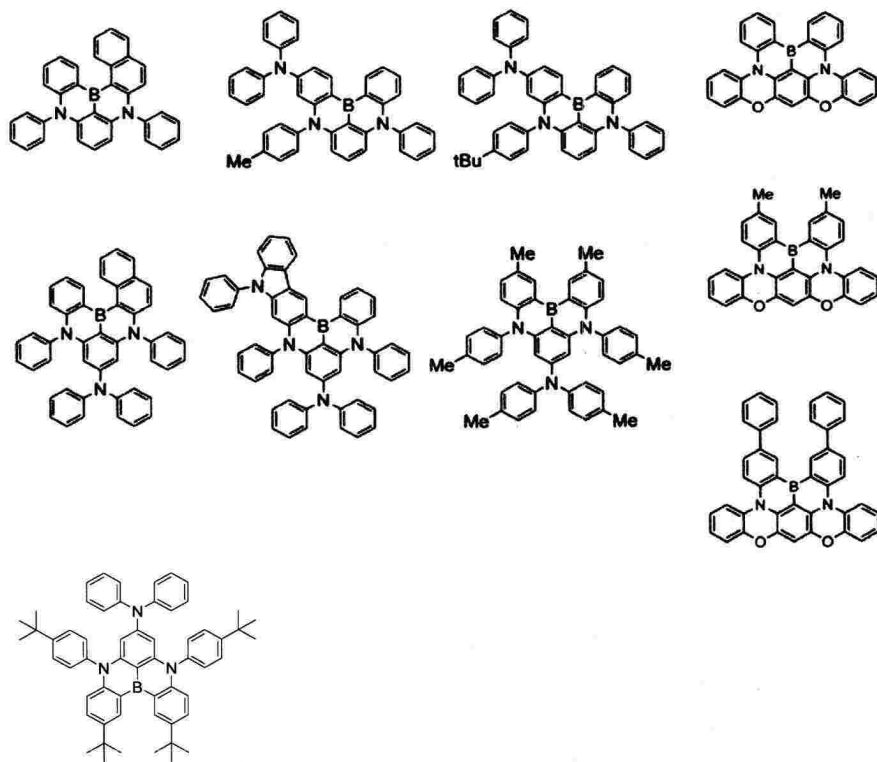
20

30

40

50

【化 1 9 7】



10

20

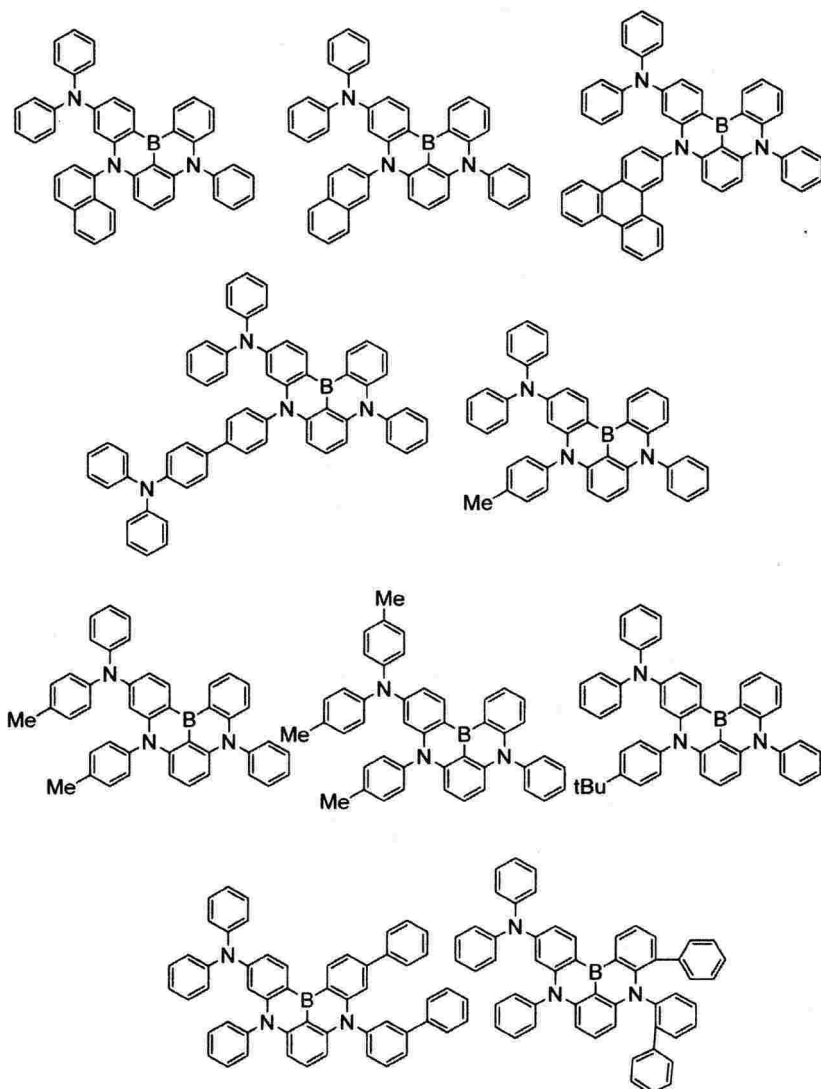
【 0 5 0 0】

30

40

50

【化 1 9 8】



【 0 5 0 1】

10

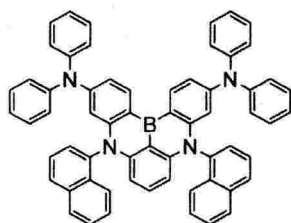
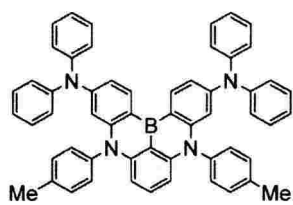
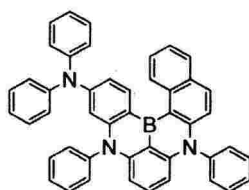
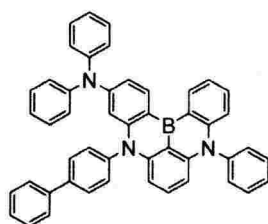
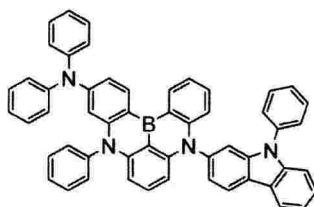
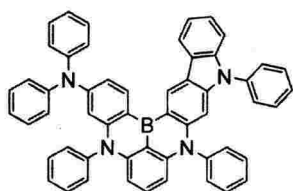
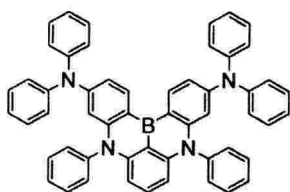
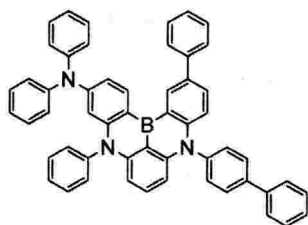
20

30

40

50

【化 1 9 9】



【 0 5 0 2】

10

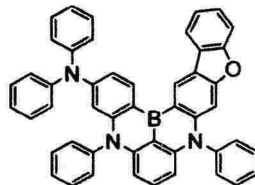
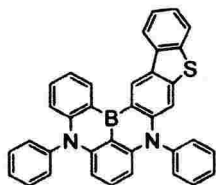
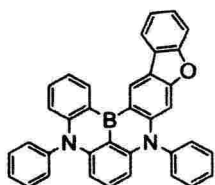
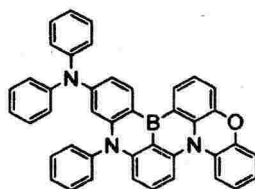
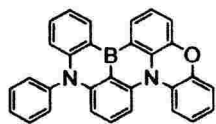
20

30

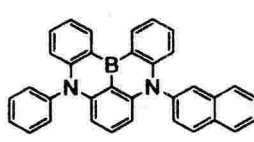
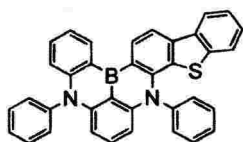
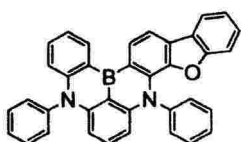
40

50

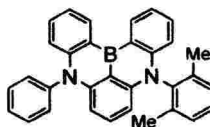
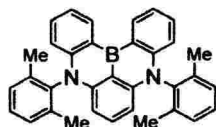
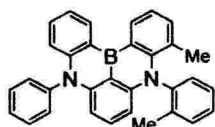
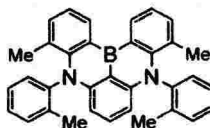
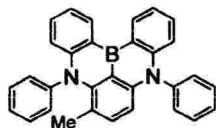
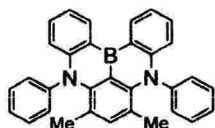
【化 2 0 0】



10



20



30

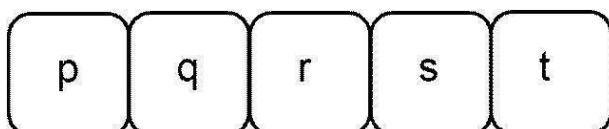
【 0 5 0 3】

(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。

【 0 5 0 4】

【化 2 0 1】



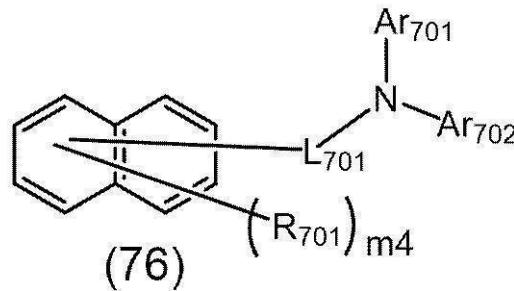
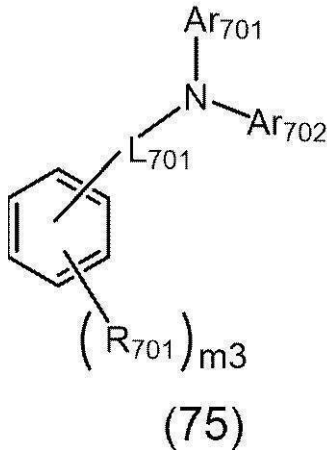
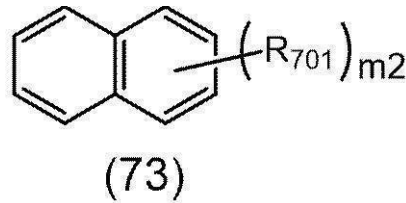
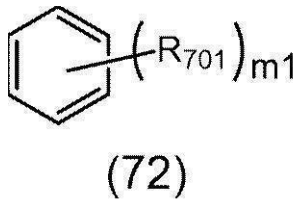
(7)

40

【 0 5 0 5】

50

【化 2 0 2】



【 0 5 0 6】

(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、

X₇は、酸素原子、硫黄原子、又はNR₇₀₂である。

R₇₀₁が複数存在する場合、隣接する複数のR₇₀₁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R₇₀₁及びR₇₀₂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、

- Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

- O-(R₉₀₄)で表される基、

- S-(R₉₀₅)で表される基、

- N(R₉₀₆)(R₉₀₇)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、

Ar₇₀₁及びAr₇₀₂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、

10

20

30

40

50

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、

L₇₀₁ 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、

10

m₁ は、0、1 又は 2 であり、

m₂ は、0、1、2、3 又は 4 であり、

m₃ は、それぞれ独立に、0、1、2 又は 3 であり、

m₄ は、それぞれ独立に、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

R₇₀₁ が複数存在する場合、複数の R₇₀₁ は、互いに同一であるか、又は異なり、

X₇ が複数存在する場合、複数の X₇ は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₇₀₂ が複数存在する場合、複数の R₇₀₂ は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar₇₀₁ が複数存在する場合、複数の Ar₇₀₁ は、互いに同一であるか、又は異なり

20

Ar₇₀₂ が複数存在する場合、複数の Ar₇₀₂ は、互いに同一であるか、又は異なり

L₇₀₁ が複数存在する場合、複数の L₇₀₁ は、互いに同一であるか、又は異なる。)

【0507】

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。

【0508】

一実施形態において、r 環としての前記一般式 (72) 又は一般式 (73) において、m₁ = 0 又は m₂ = 0 である。

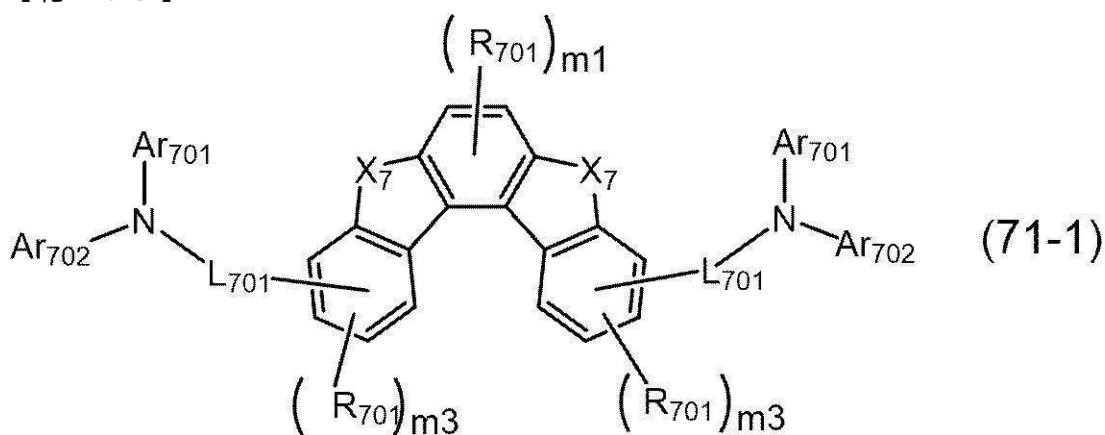
30

【0509】

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 (71-1) ~ (71-6) のいずれかで表される。

【0510】

【化203】

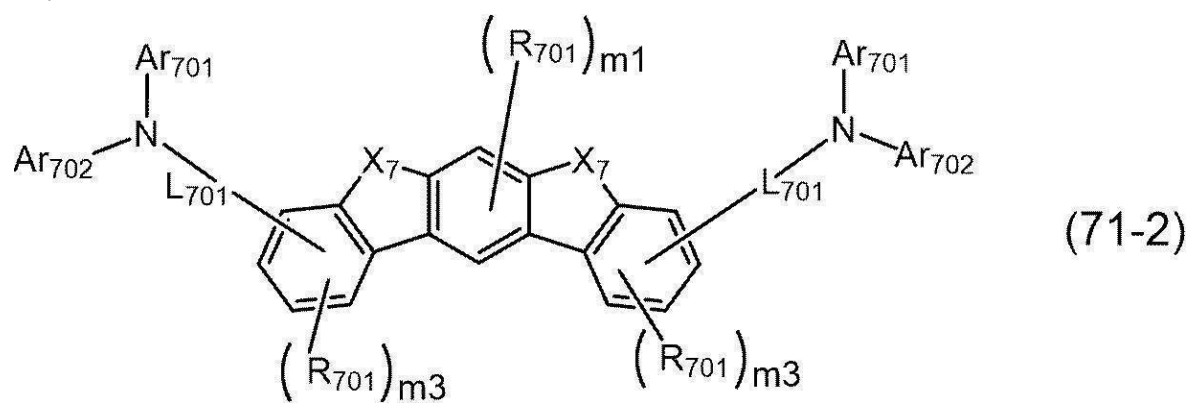


40

【0511】

50

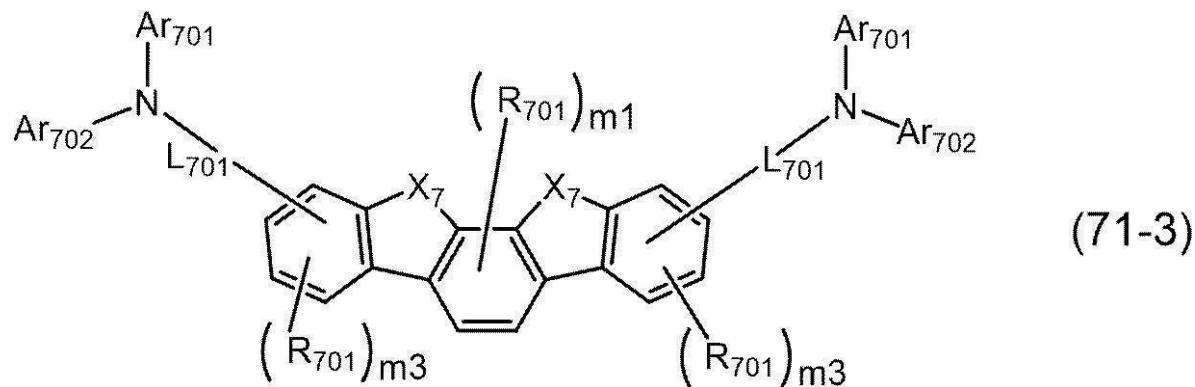
【化 2 0 4】



10

【 0 5 1 2】

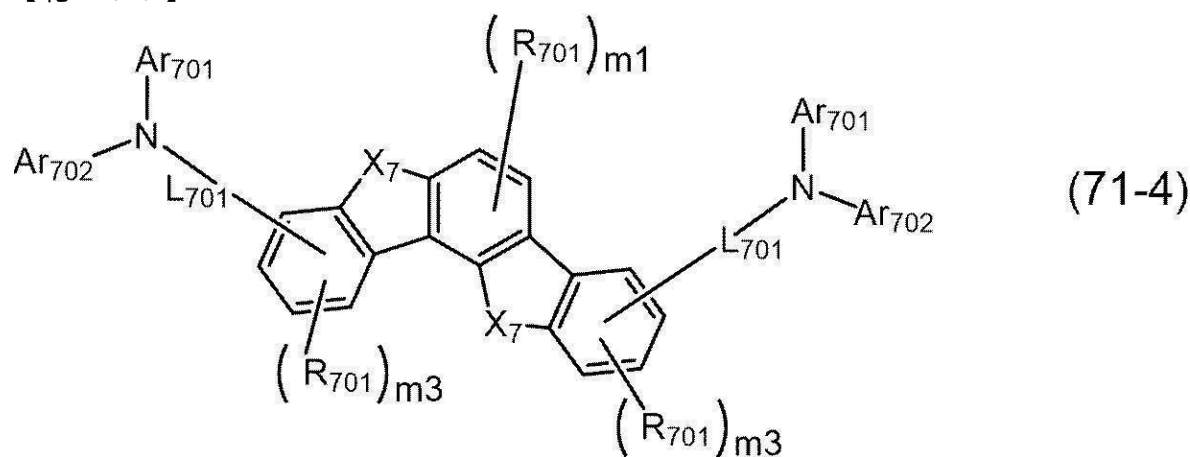
【化 2 0 5】



20

【 0 5 1 3】

【化 2 0 6】



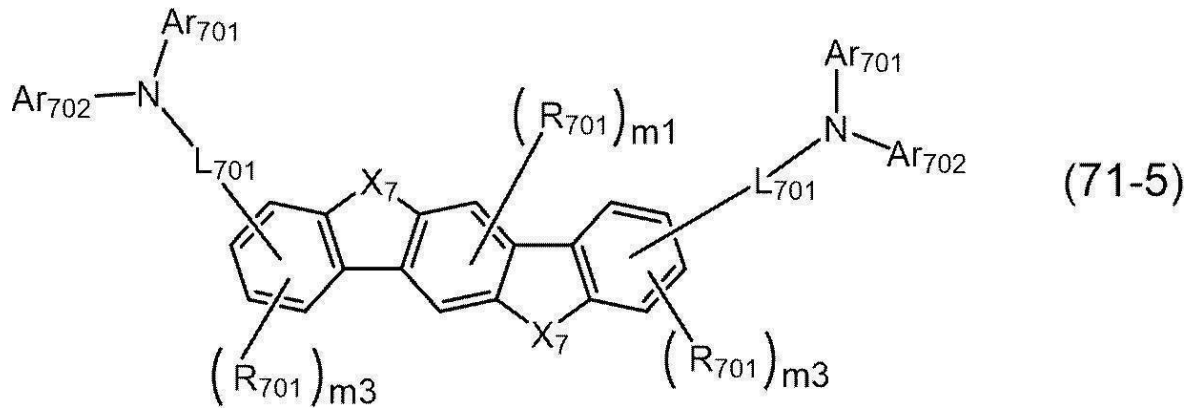
30

【 0 5 1 4】

40

50

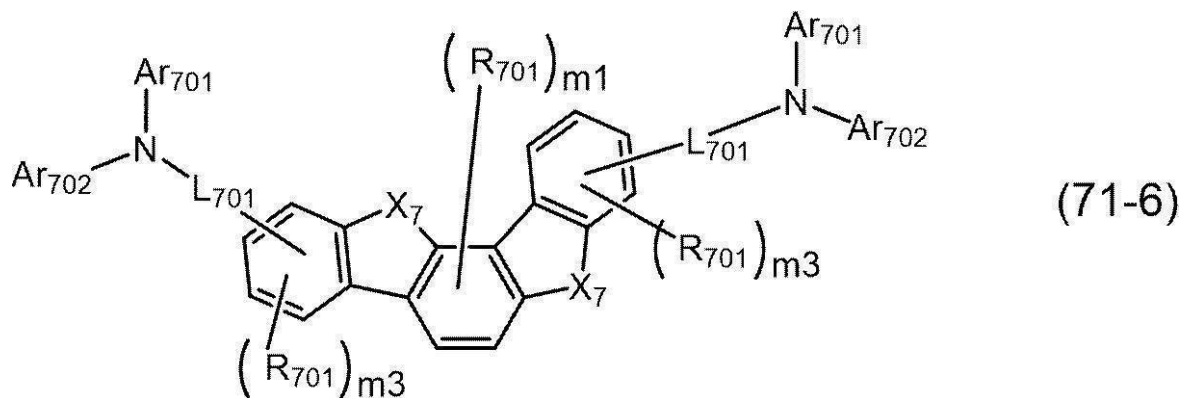
【化 2 0 7】



10

【 0 5 1 5】

【化 2 0 8】



20

【 0 5 1 6】

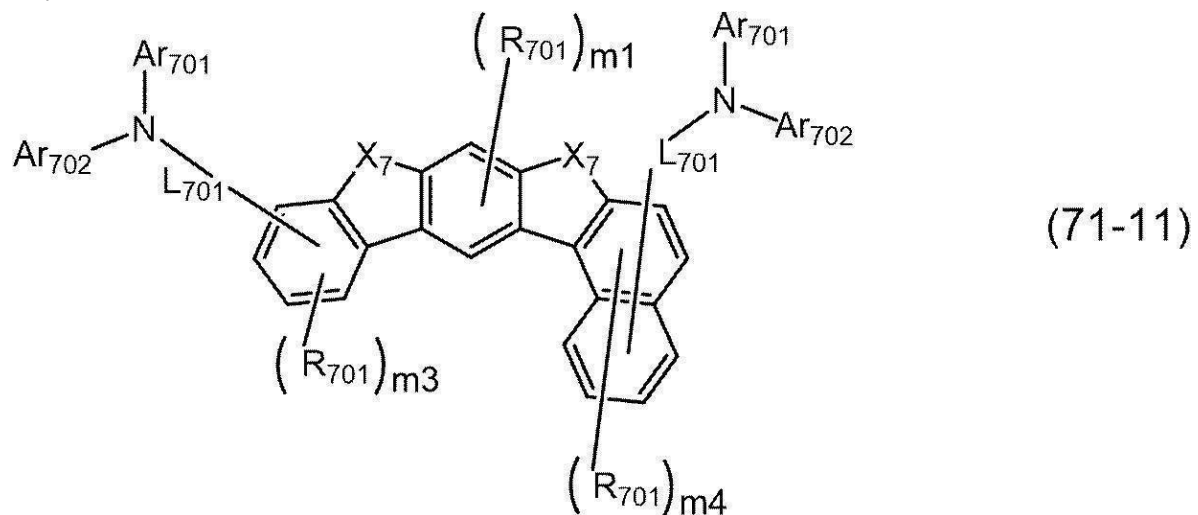
(前記一般式(71-1)~一般式(71-6)において、 R_{701} 、 X_7 、 Ar_{701} 、 Ar_{702} 、 L_{701} 、 m_1 及び m_3 は、それぞれ、前記一般式(7)における R_{701} 、 X_7 、 Ar_{701} 、 Ar_{702} 、 L_{701} 、 m_1 及び m_3 と同義である。)

【 0 5 1 7】

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。

【 0 5 1 8】

【化 2 0 9】

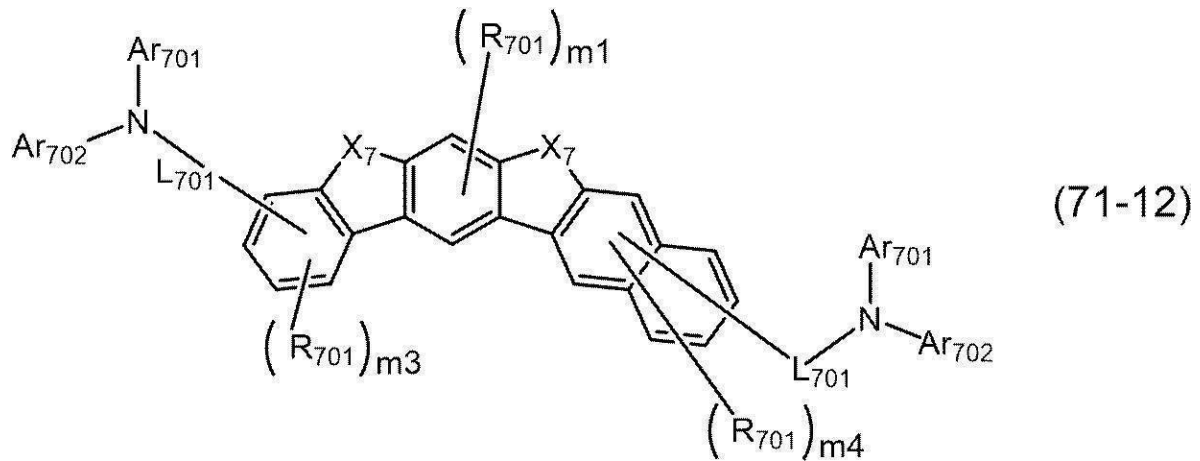


40

【 0 5 1 9】

50

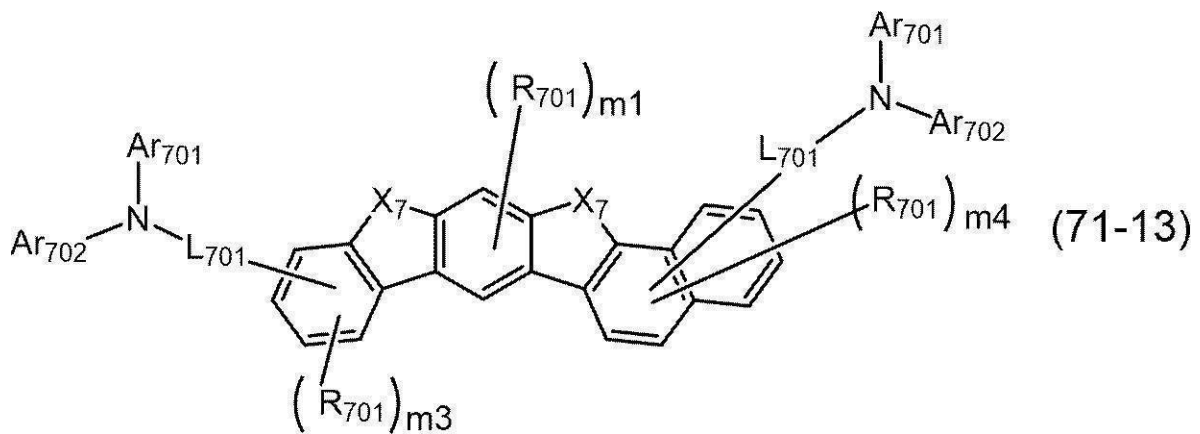
【化 2 1 0】



10

【 0 5 2 0】

【化 2 1 1】



20

【 0 5 2 1】

(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} 、 $m1$ 、 $m3$ 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} 、 $m1$ 、 $m3$ 及び $m4$ と同義である。)

30

【 0 5 2 2】

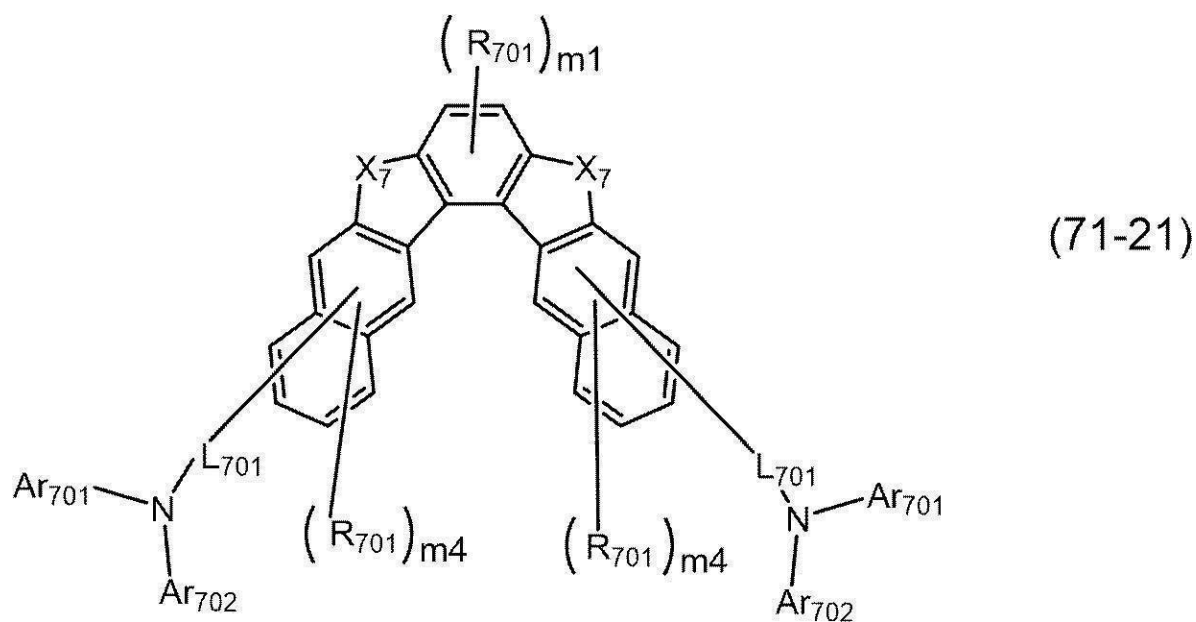
一実施形態において、前記一般式(7)で表される化合物は下記一般式(71-21)~(71-25)のいずれかで表される。

【 0 5 2 3】

40

50

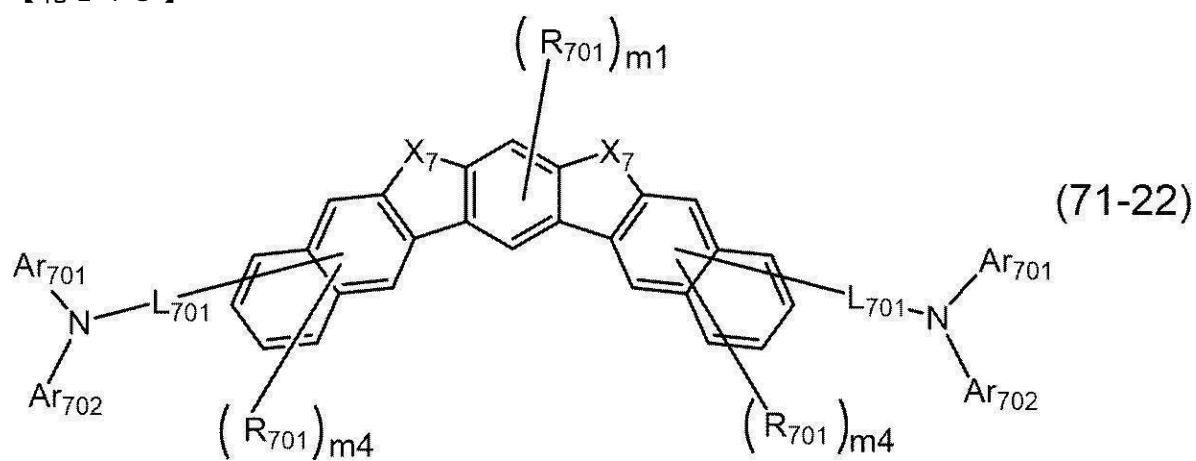
【化 2 1 2】



10

【 0 5 2 4】

【化 2 1 3】

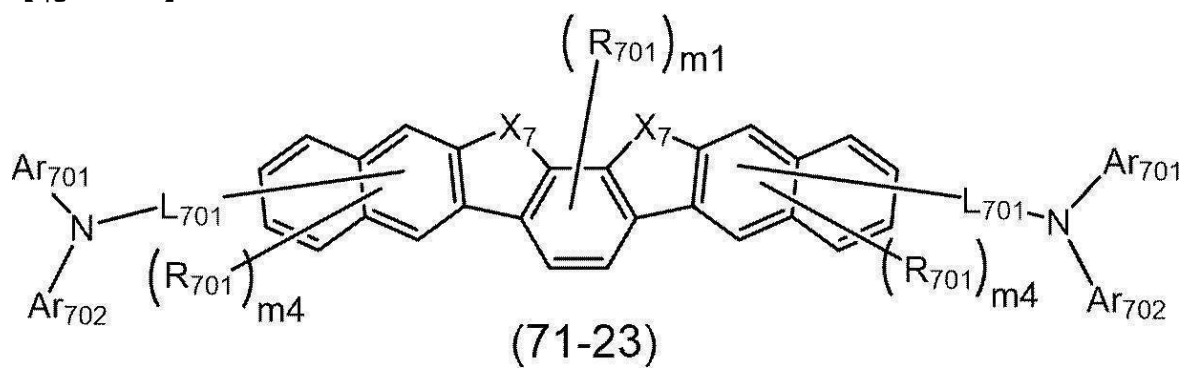


20

30

【 0 5 2 5】

【化 2 1 4】

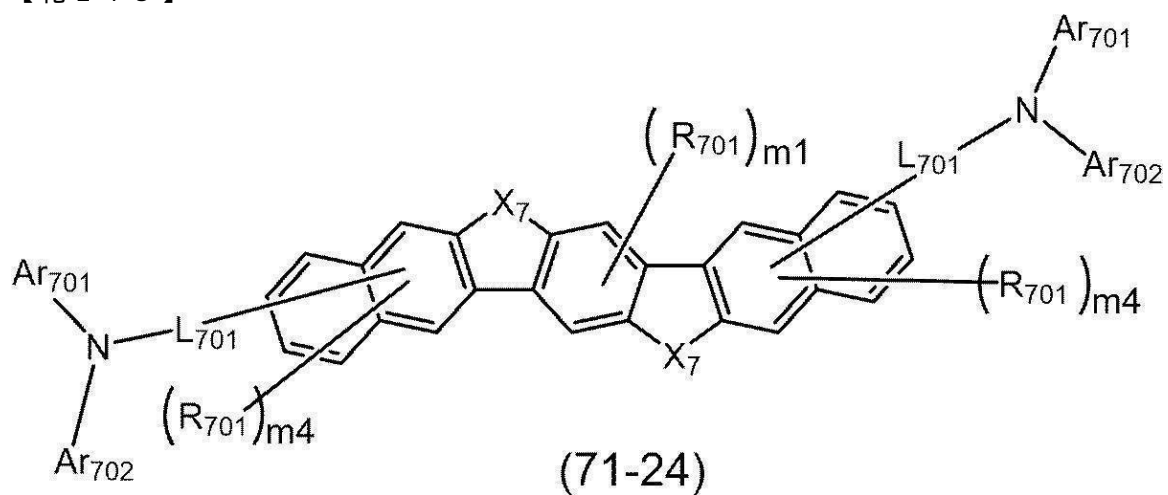


40

【 0 5 2 6】

50

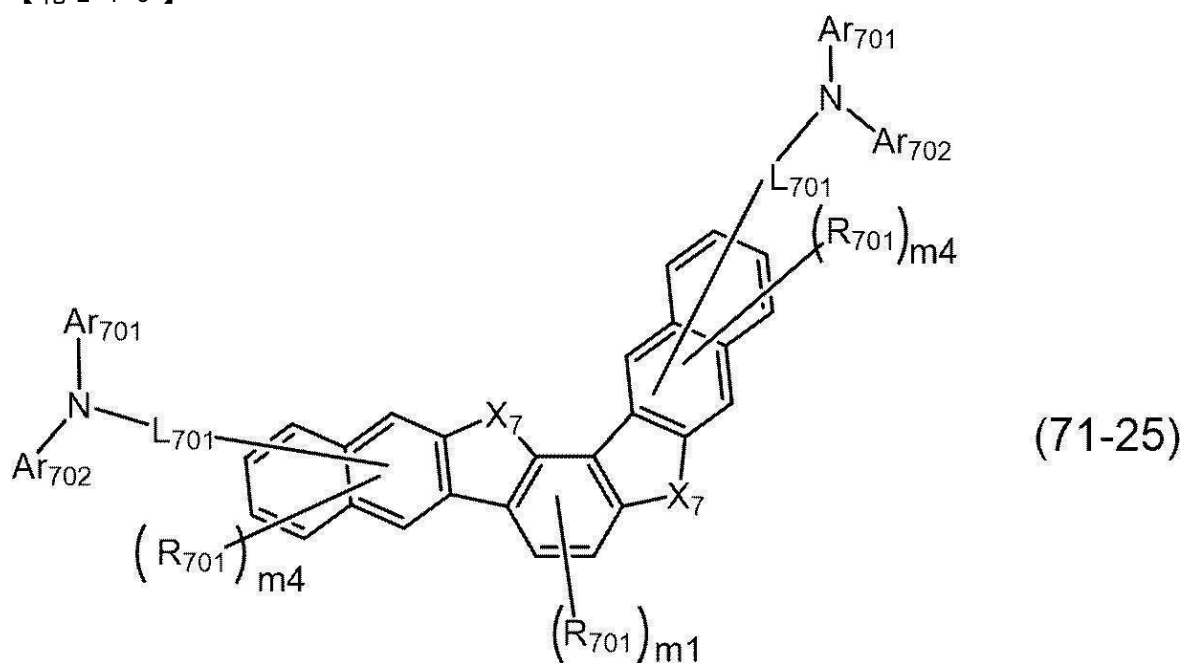
【化 2 1 5】



10

【 0 5 2 7】

【化 2 1 6】



20

30

【 0 5 2 8】

(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} 、 m_1 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} 、 m_1 及び m_4 と同義である。)

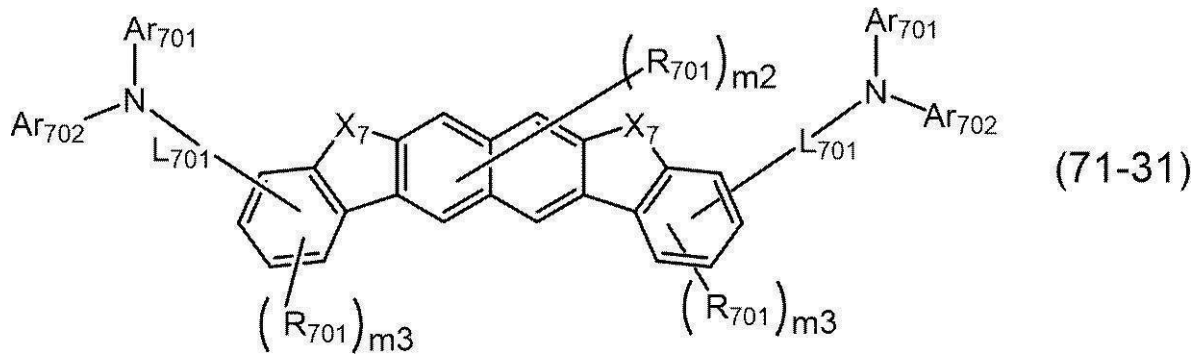
【 0 5 2 9】

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。

【 0 5 3 0】

40

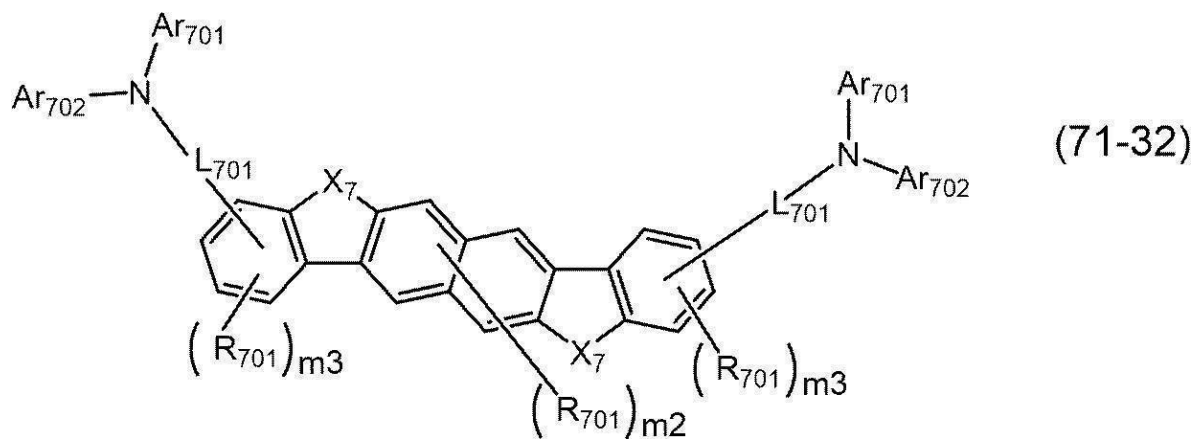
【化 2 1 7】



10

【 0 5 3 1】

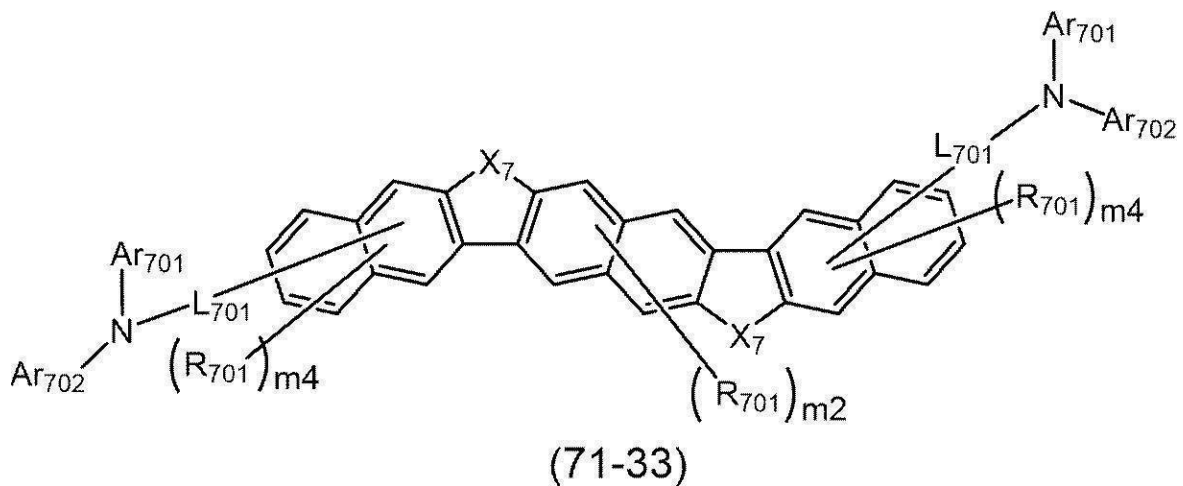
【化 2 1 8】



20

【 0 5 3 2】

【化 2 1 9】



30

【 0 5 3 3】

(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} 、 $m_2 \sim m_4$ 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} 、 $m_2 \sim m_4$ と同義である。)

【 0 5 3 4】

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。

【 0 5 3 5】

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

40

50

換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

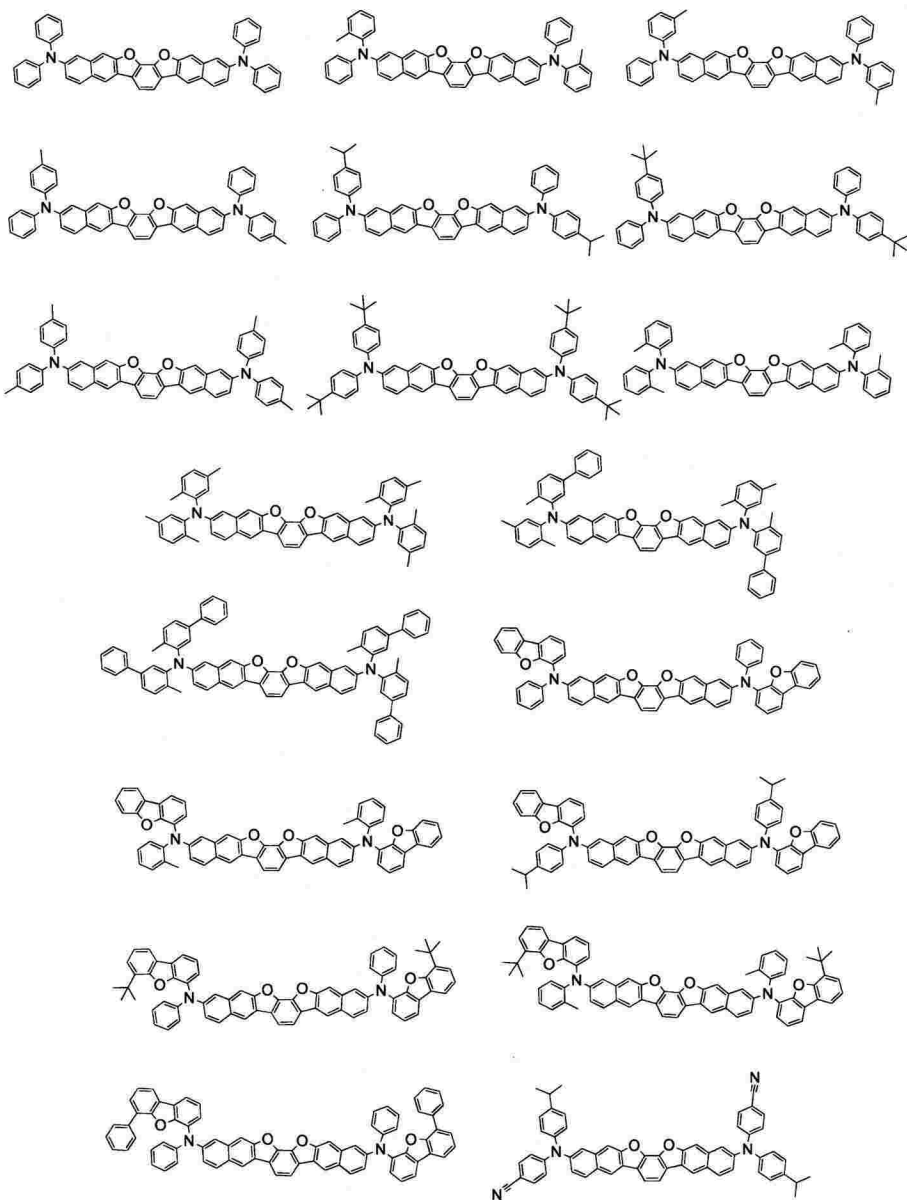
【 0 5 3 6 】

(一般式 (7) で表される化合物の具体例)

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。

【 0 5 3 7 】

【化 2 2 0】



10

20

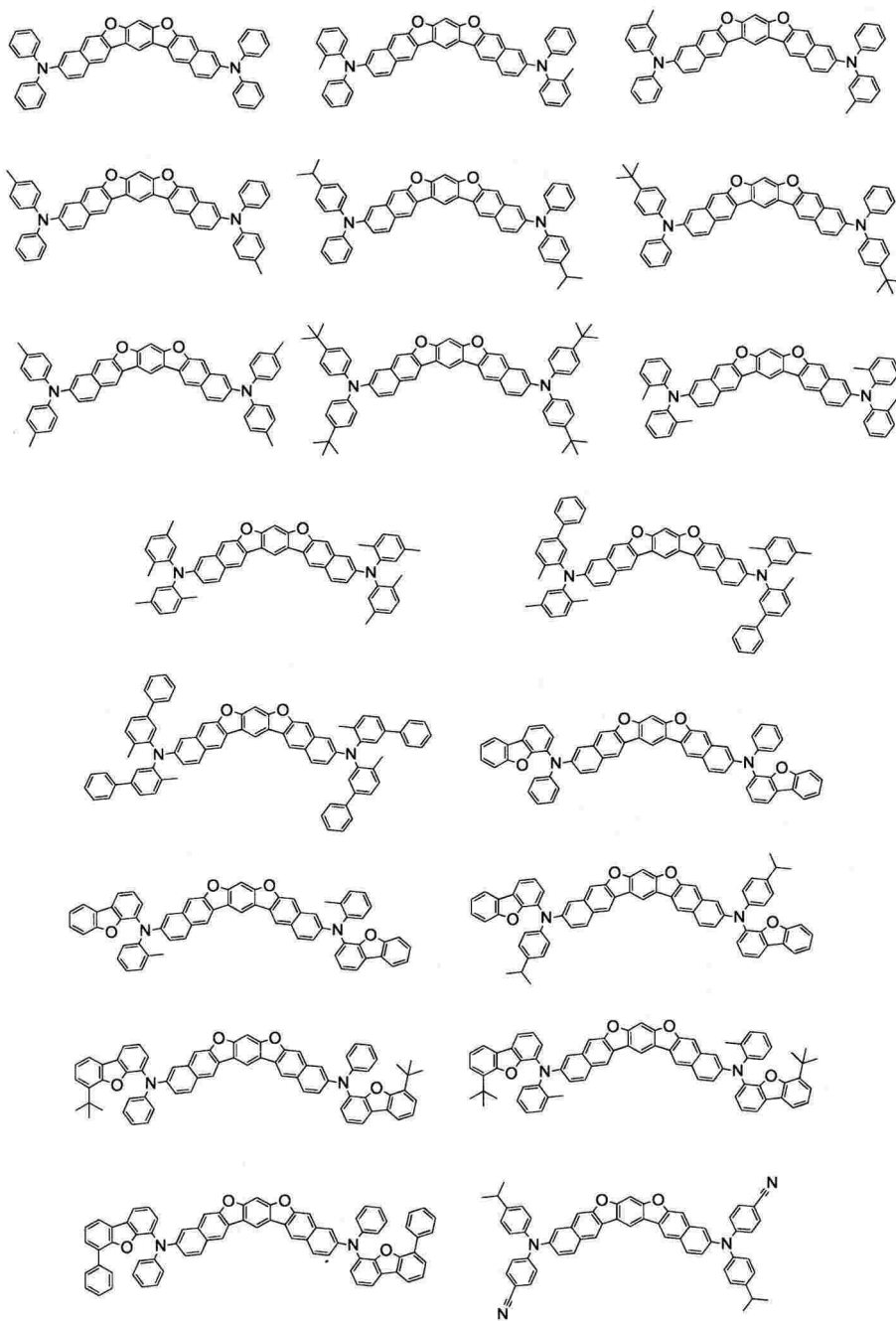
30

40

【 0 5 3 8 】

50

【化 2 2 1】



【 0 5 3 9】

10

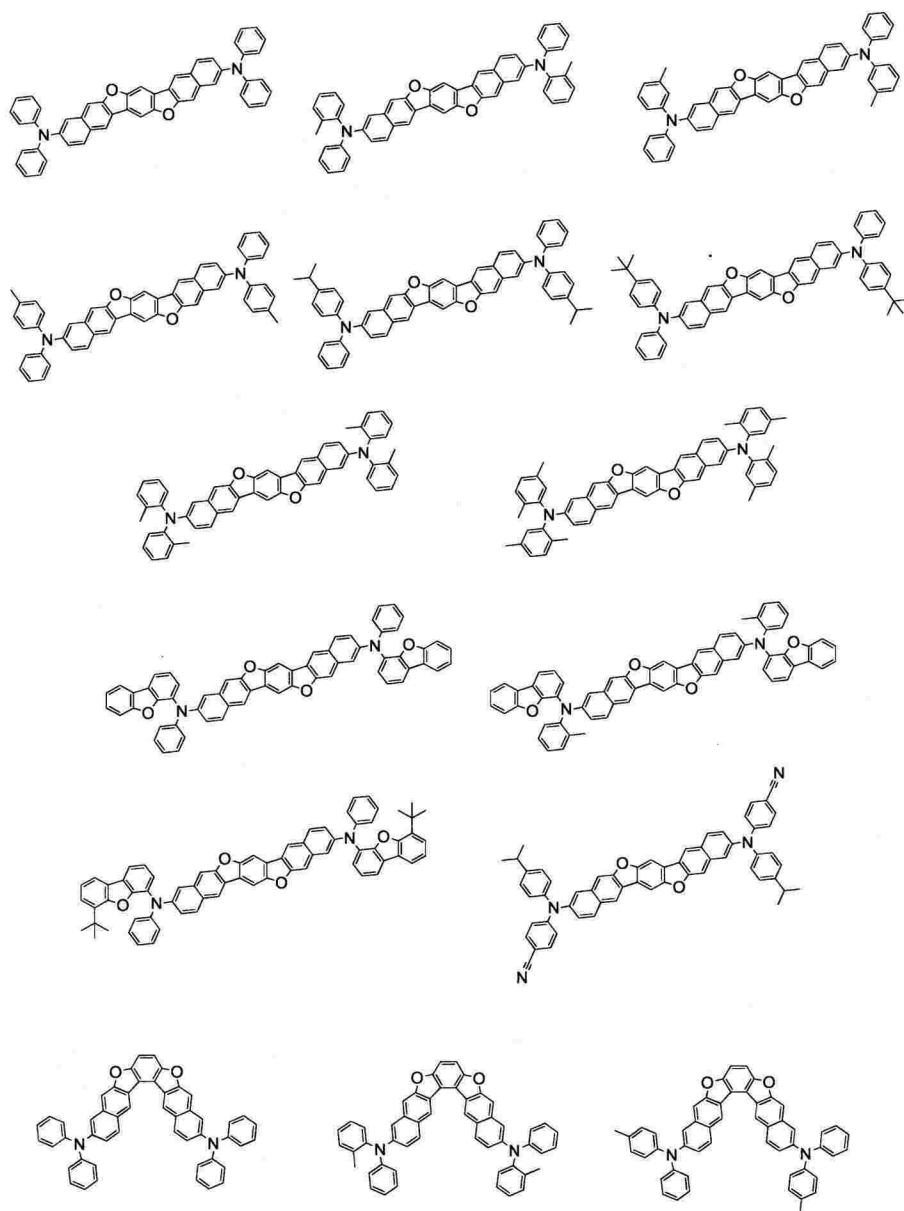
20

30

40

50

【化 2 2 2】



【 0 5 4 0 】

10

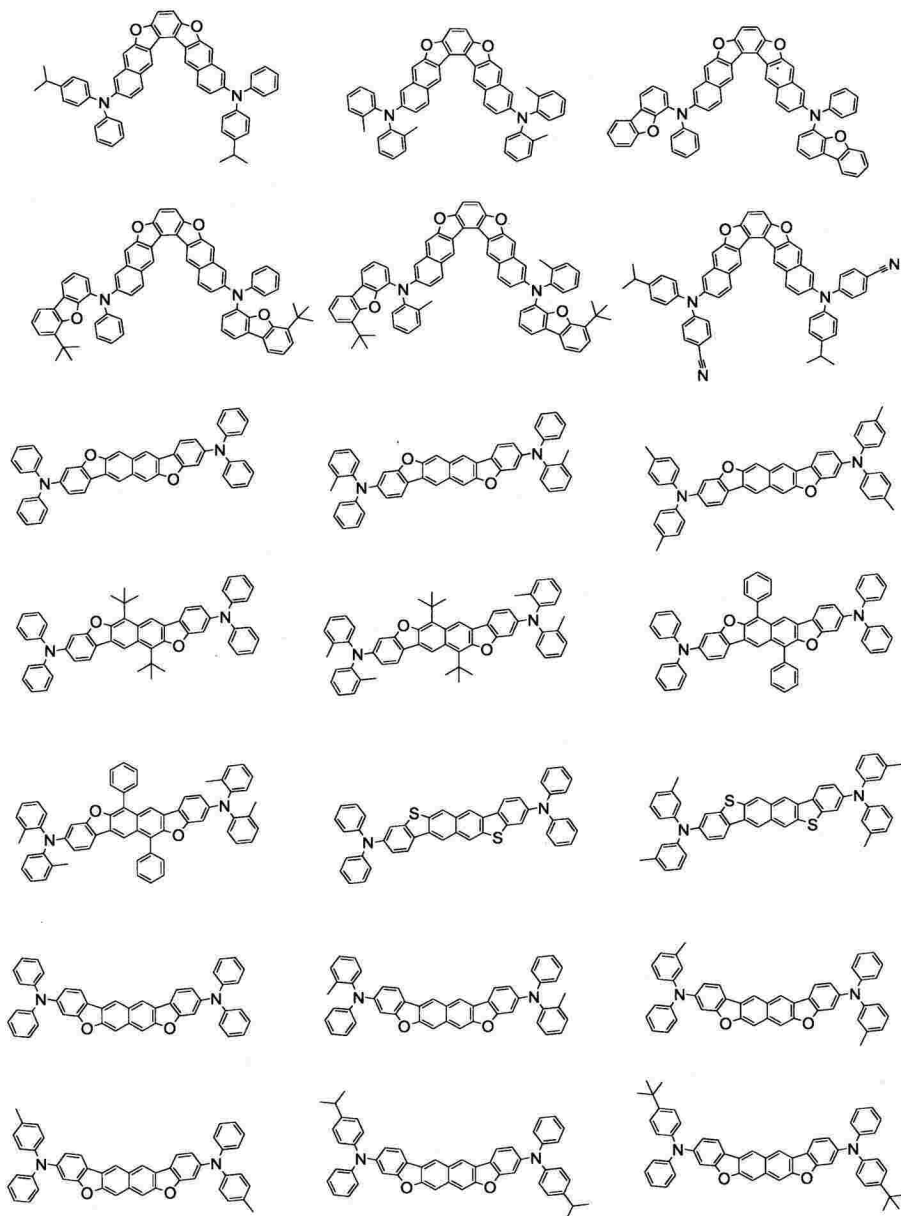
20

30

40

50

【化 2 2 3】



【 0 5 4 1 】

10

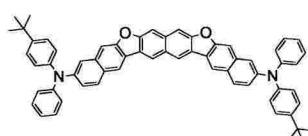
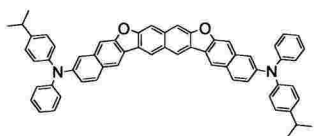
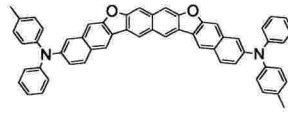
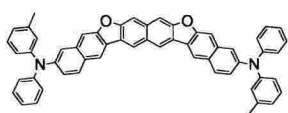
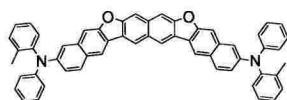
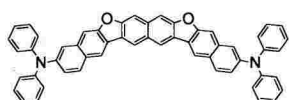
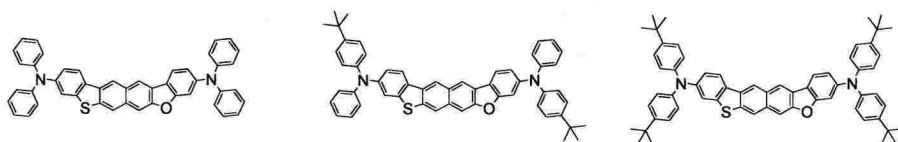
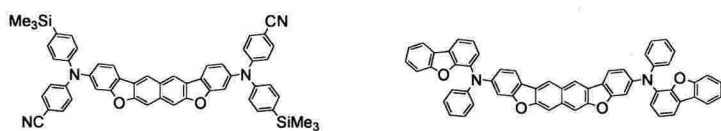
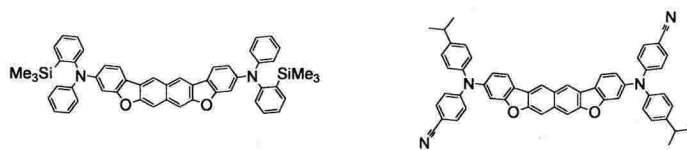
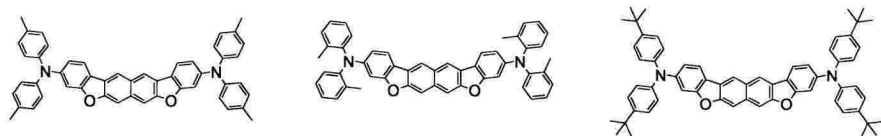
20

30

40

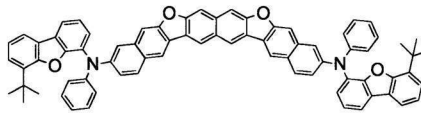
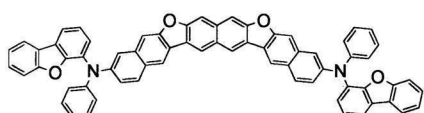
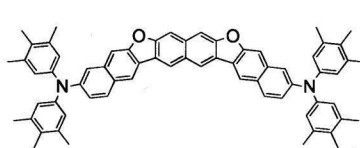
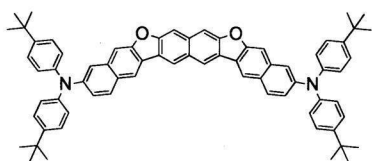
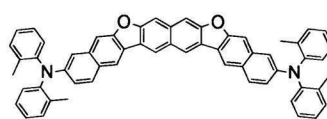
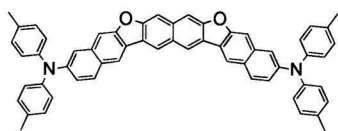
50

【化 2 2 4】



【 0 5 4 2 】

【化 2 2 5】



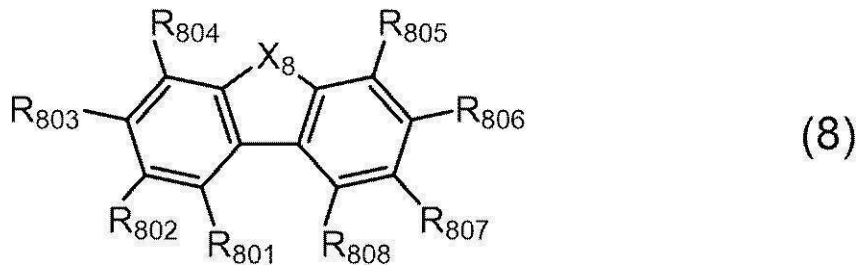
【 0 5 4 3 】

(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。

【0544】

【化226】



10

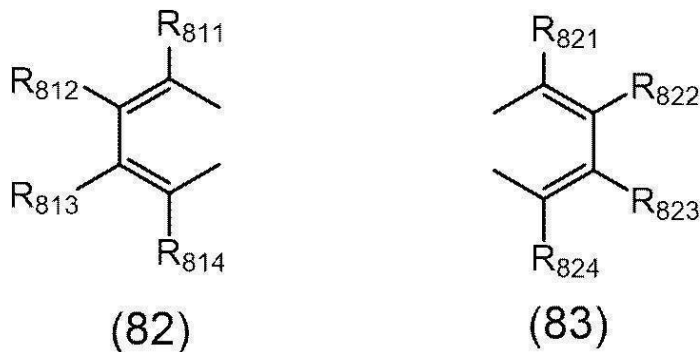
【0545】

(前記一般式(8)において、

R801とR802、R802とR803、及びR803とR804の少なくとも一組は、互いに結合して下記一般式(82)で示される2価の基を形成するか、又は互いに結合せず、R805とR806、R806とR807、及びR807とR808の少なくとも一組は、互いに結合して下記一般式(83)で示される2価の基を形成するか、又は互いに結合しない。)

【0546】

【化227】



20

30

【0547】

(前記一般式(82)で示される2価の基を形成しないR801~R804、及びR811~R814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R805~R808、及びR821~R824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、

X8は、CR81R82、酸素原子、硫黄原子、又はNR809であり、

R81及びR82からなる組が、

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、

40

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R801~R808、前記一般式(84)で表される1価の基ではないR811~R814及びR821~R824、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R81及びR82、並びにR809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、

50

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

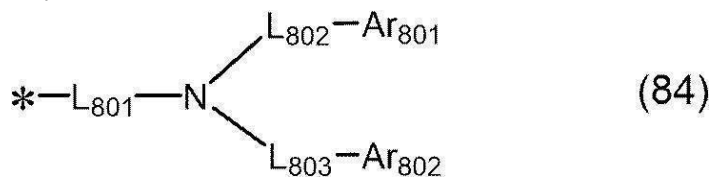
ニトロ基、

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。) 10

【 0 5 4 8 】

【 化 2 2 8 】



【 0 5 4 9 】

(前記一般式 (8 4) において、

A r₈₀₁ 及び A r₈₀₂ は、それぞれ独立に、 20

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、

L₈₀₁ ~ L₈₀₃ 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 (8 4) 中の * は、前記一般式 (8) で表される環構造、一般式 (8 2) 又は一般式 (8 3) で表される基との結合位置を示す。) 30

【 0 5 5 0 】

R₈₀₁ と R₈₀₂、R₈₀₂ と R₈₀₃、及び R₈₀₃ と R₈₀₄ の少なくとも一組が互いに結合し、かつ R₈₀₅ と R₈₀₆、R₈₀₆ と R₈₀₇、及び R₈₀₇ と R₈₀₈ が互いに結合しないことも好ましい。

【 0 5 5 1 】

R₈₀₁ と R₈₀₂、R₈₀₂ と R₈₀₃、及び R₈₀₃ と R₈₀₄ が互いに結合せず、かつ R₈₀₅ と R₈₀₆、R₈₀₆ と R₈₀₇、及び R₈₀₇ と R₈₀₈ の少なくとも一組が互いに結することも好ましい。

【 0 5 5 2 】 40

R₈₀₁ と R₈₀₂、R₈₀₂ と R₈₀₃、及び R₈₀₃ と R₈₀₄ の少なくとも一組が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、かつ R₈₀₅ と R₈₀₆、R₈₀₆ と R₈₀₇、及び R₈₀₇ と R₈₀₈ の少なくとも一組が互いに結合して下記一般式 (8 3) で示される 2 価の基を形成することも好ましい。

【 0 5 5 3 】

前記一般式 (8) において、前記一般式 (8 2) で示される 2 価の基及び一般式 (8 3) 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、R₈₀₁ ~ R₈₀₈ の可能な位置において当該基を形成し得る。

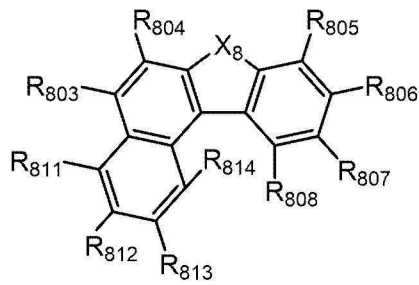
【 0 5 5 4 】

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 (8 1 A - 1

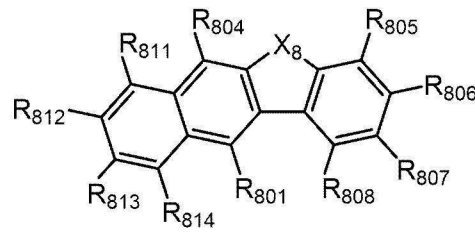
) ~ (8 1 A - 3) のいずれかで表される。

【 0 5 5 5 】

【 化 2 2 9 】



(81A-1)

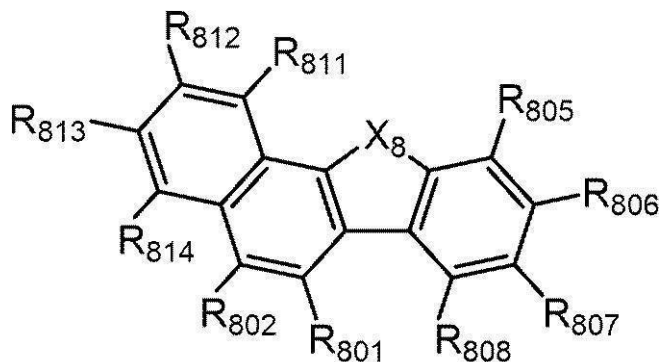


(81A-2)

10

【 0 5 5 6 】

【 化 2 3 0 】



(81A-3)

20

【 0 5 5 7 】

(前記一般式 (8 1 A - 1) ~ 一般式 (8 1 A - 3) において、

X₈ は、前記一般式 (8) における X₈ と同義であり、

前記一般式 (8 1 A - 1) における R₈₀₃、R₈₀₄、並びに R₈₁₁ ~ R₈₁₄ のうち少なくとも一つが、前記一般式 (8 4) で表される 1 価の基であり、

前記一般式 (8 1 A - 2) における R₈₀₁、R₈₀₄、並びに R₈₁₁ ~ R₈₁₄ のうち少なくとも一つが、前記一般式 (8 4) で表される 1 価の基であり、

前記一般式 (8 1 A - 3) における R₈₀₁、R₈₀₂、並びに R₈₁₁ ~ R₈₁₄ のうち少なくとも一つが、前記一般式 (8 4) で表される 1 価の基であり、

前記一般式 (8 1 A - 1) ~ 一般式 (8 1 A - 3) における R₈₀₅ ~ R₈₀₈ のうち少なくとも一つが、前記一般式 (8 4) で表される 1 価の基であり、

前記一般式 (8 4) で表される 1 価の基ではない R₈₀₁ ~ R₈₀₈ 及び R₈₁₁ ~ R₈₁₄ 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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

30

40

50

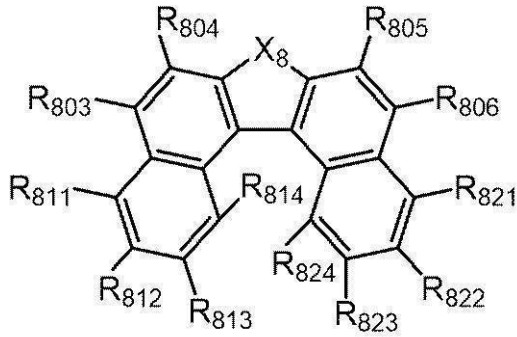
シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)

【0558】

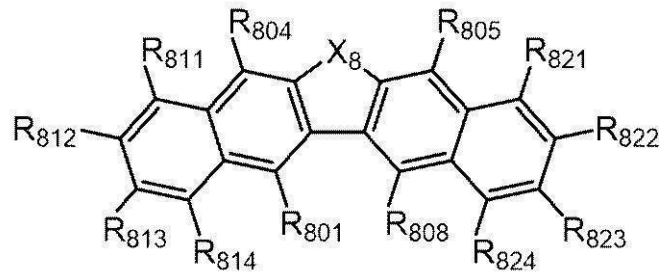
一実施形態において、前記一般式(8)で表される化合物は、下記一般式(81-1) ~ (81-6)のいずれかで表される。

【0559】

【化231】



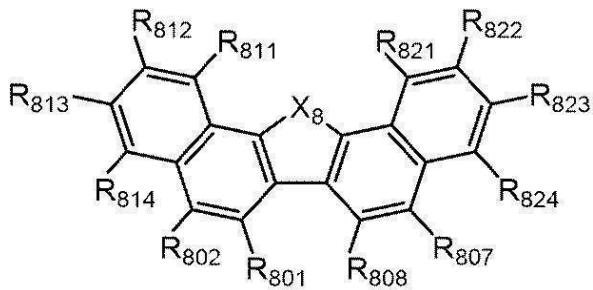
(81-1)



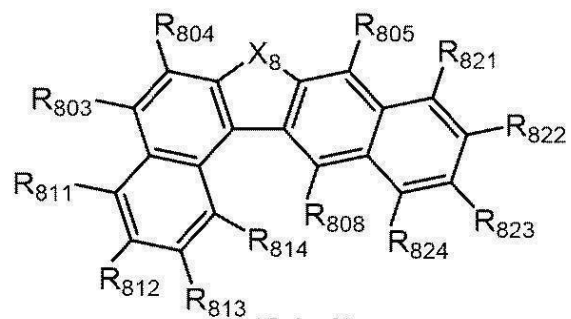
(81-2)

【0560】

【化232】



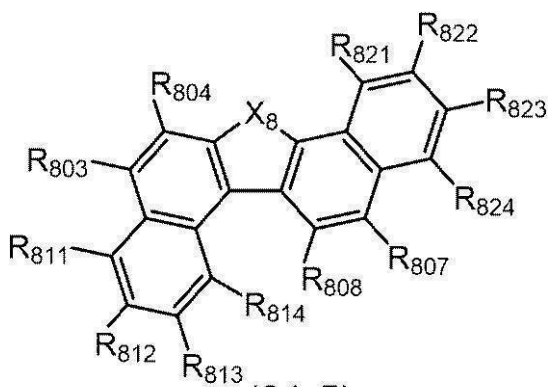
(81-3)



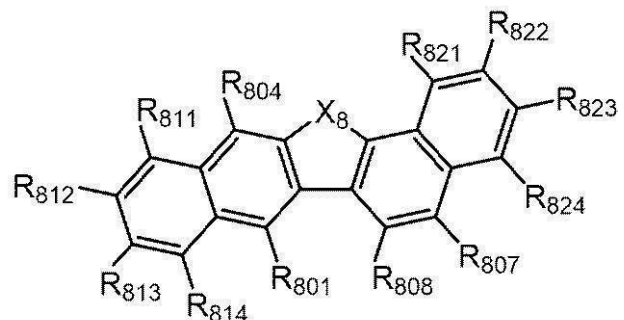
(81-4)

【0561】

【化233】



(81-5)



(81-6)

【0562】

(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

10

20

30

40

50

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_{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

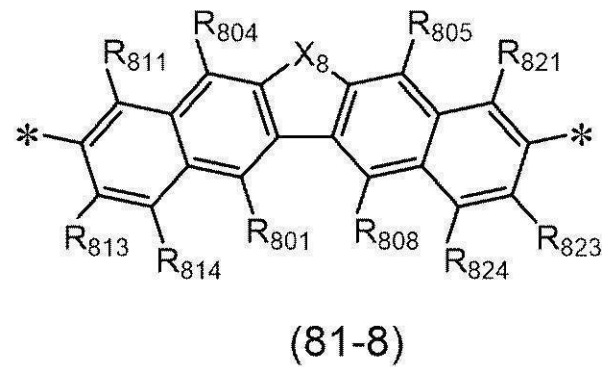
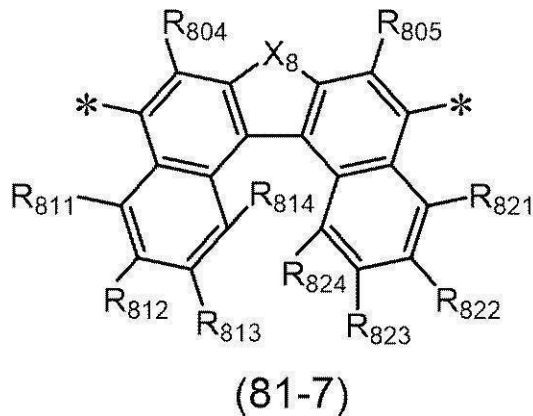
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。))

【0563】

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。

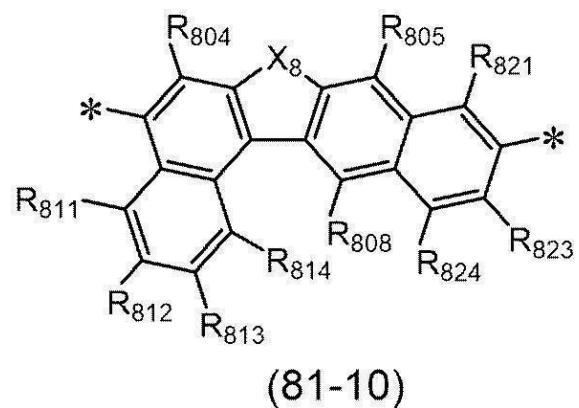
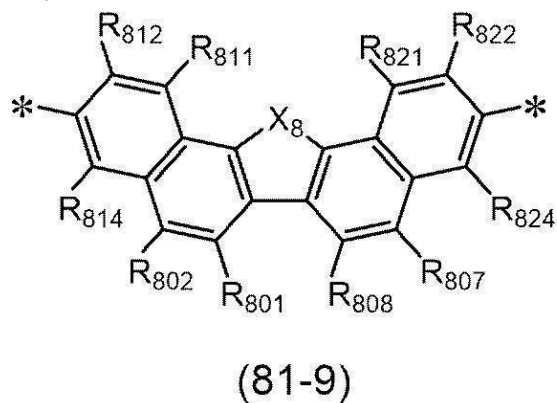
【0564】

【化234】



【0565】

【化235】



【0566】

10

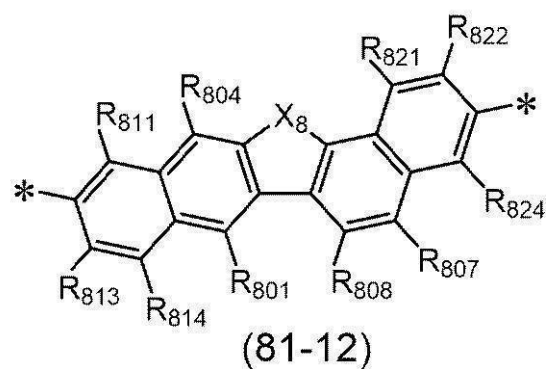
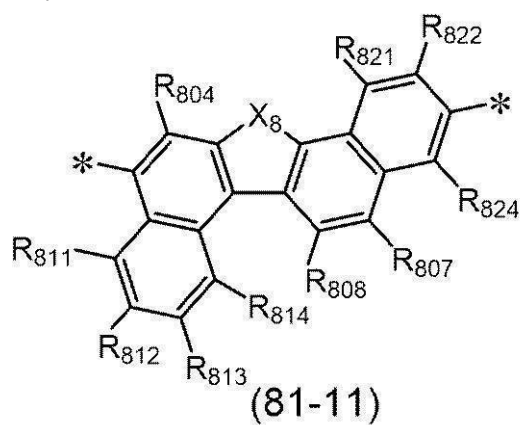
20

30

40

50

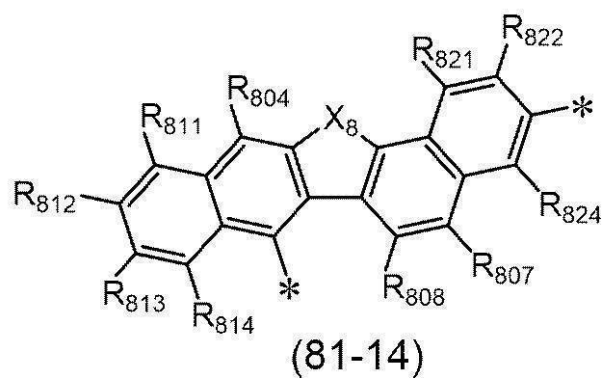
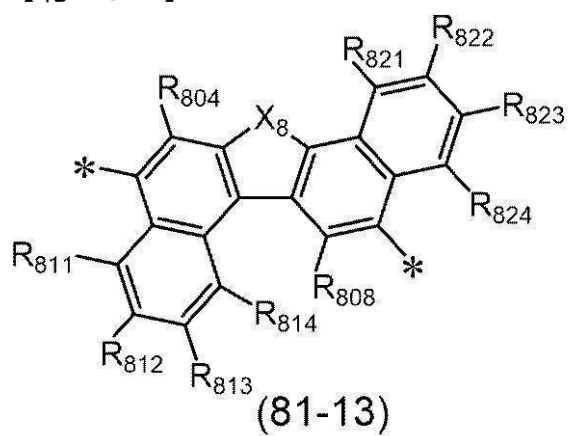
【化 2 3 6】



10

【 0 5 6 7】

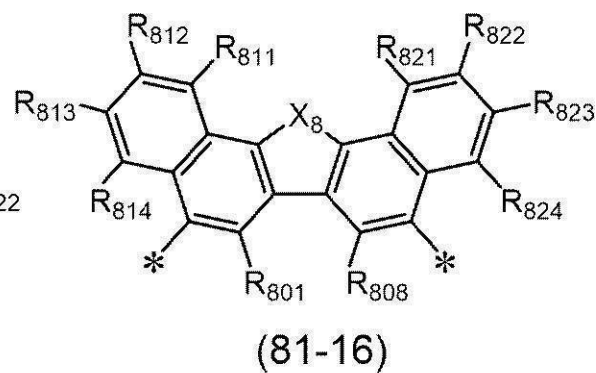
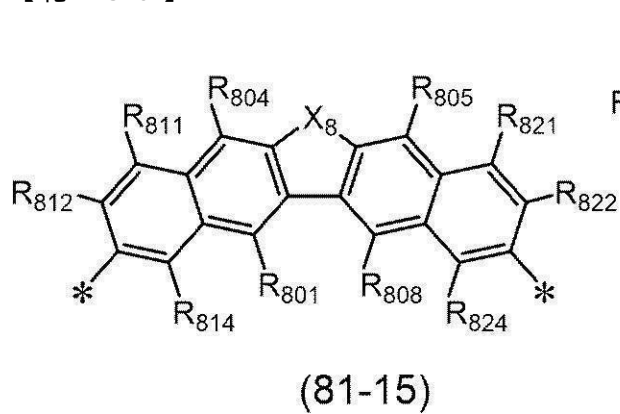
【化 2 3 7】



20

【 0 5 6 8】

【化 2 3 8】



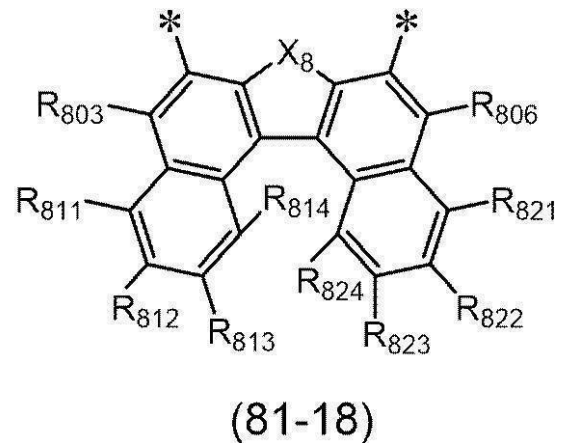
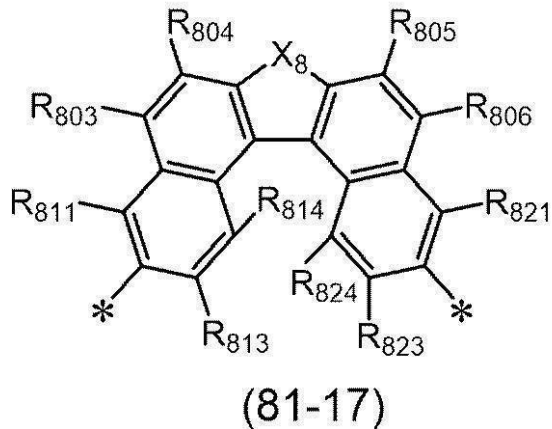
30

【 0 5 6 9】

40

50

【化 2 3 9】



10

【 0 5 7 0】

(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。)

20

【 0 5 7 1】

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。

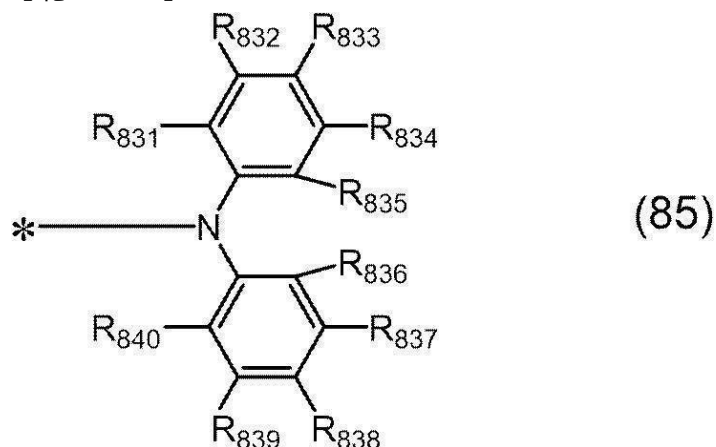
30

【 0 5 7 2】

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。

【 0 5 7 3】

【化 2 4 0】



40

【 0 5 7 4】

50

(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、

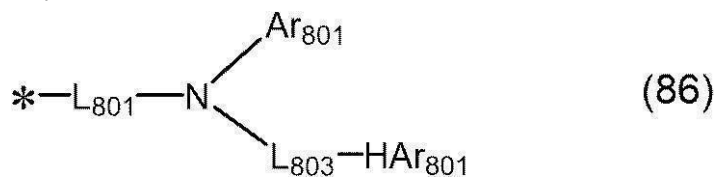
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

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。)

【0575】

【化241】



【0576】

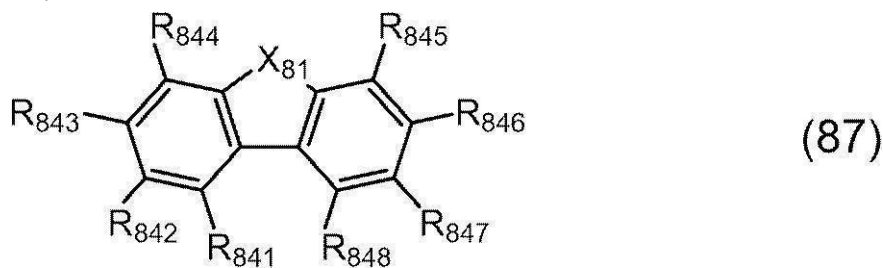
(前記一般式(86)において、

Ar_{801} 、 L_{801} 及び L_{803} は、前記一般式(84)における Ar_{801} 、 L_{801} 及び L_{803} と同義であり、

HAr_{801} は、下記一般式(87)で表される構造である。)

【0577】

【化242】



【0578】

(前記一般式(87)において、

X_{81} は、酸素原子又は硫黄原子であり、

$R_{841} \sim R_{848}$ のいずれか1つは、 L_{803} に結合する単結合であり、単結合ではない $R_{841} \sim R_{848}$ 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_{901})(R_{902})(R_{903})で表される基、

10

20

30

40

50

- O - (R 9 0 4) で表される基、
- S - (R 9 0 5) で表される基、
- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) 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 ~ 5 0 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 ~ 5 0 の複素環基である。)

【 0 5 7 9 】

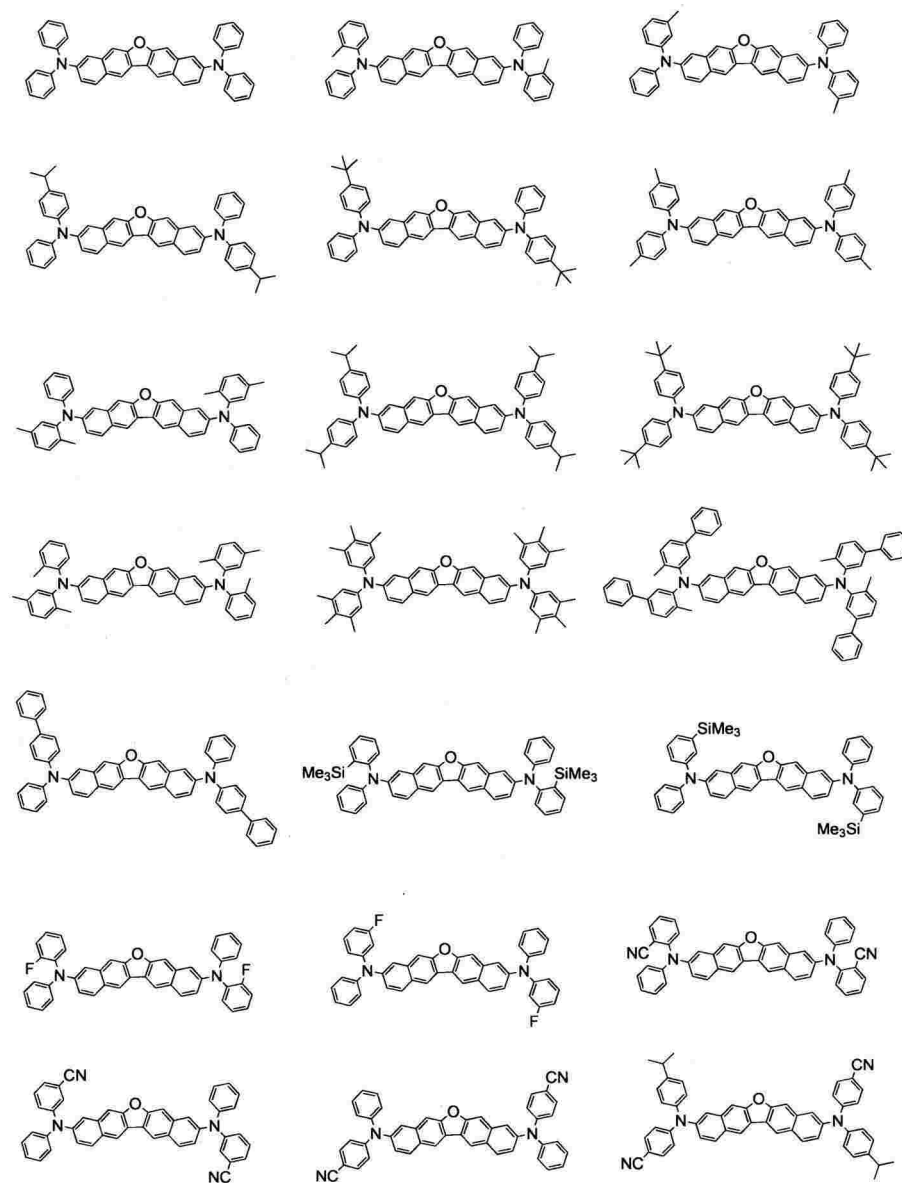
(一般式 (8) で表される化合物の具体例)

10

前記一般式 (8) で表される化合物としては、国際公開第 2 0 1 4 / 1 0 4 1 4 4 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。

【 0 5 8 0 】

【 化 2 4 3 】



20

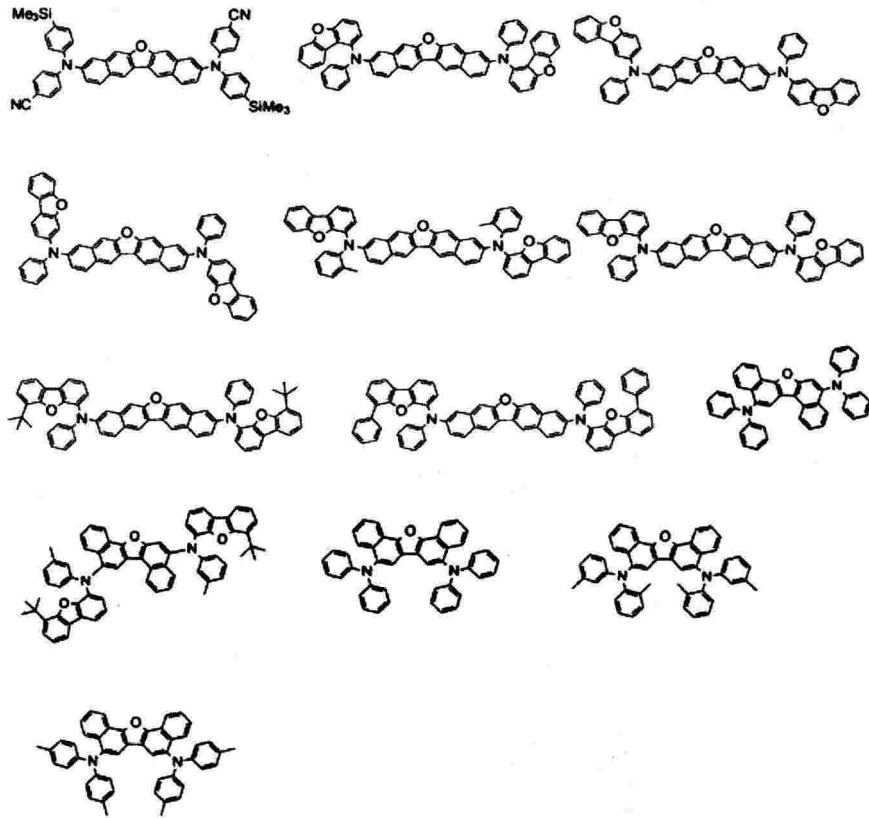
30

40

【 0 5 8 1 】

50

【化 2 4 4】



10

20

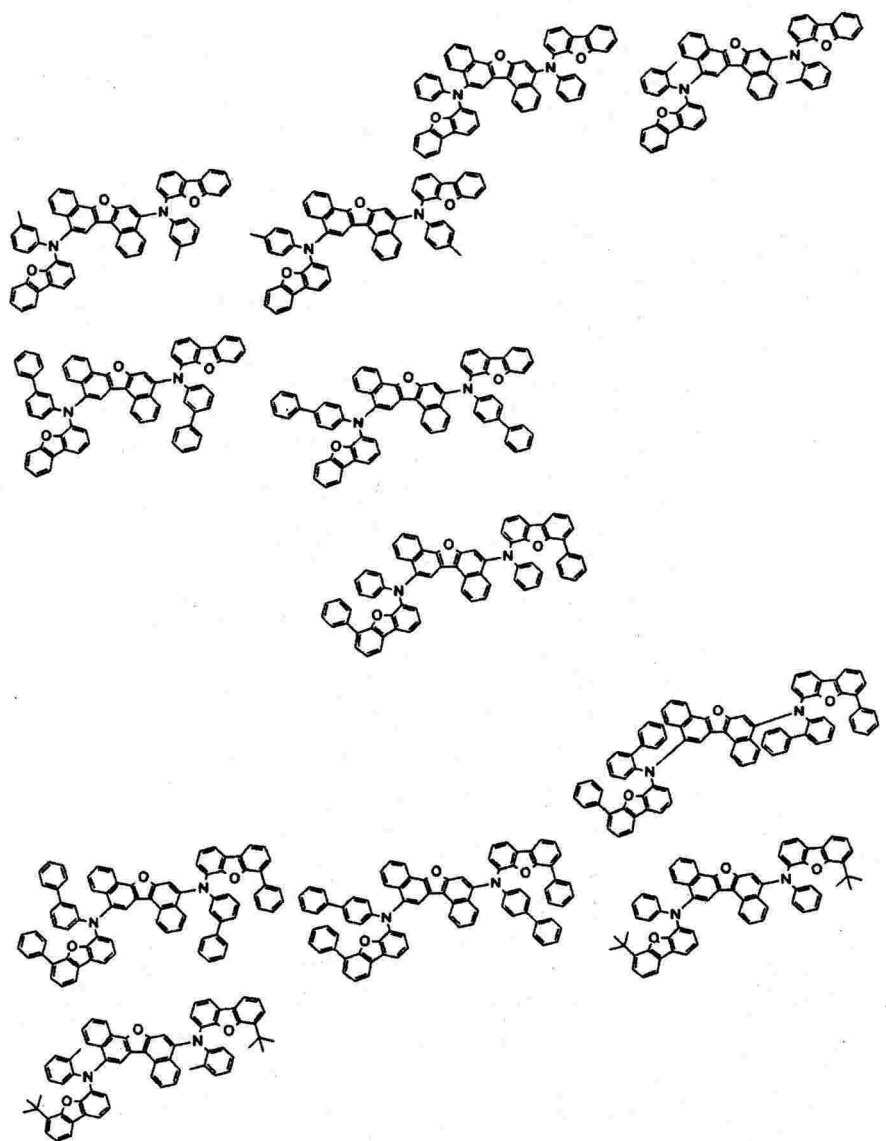
【 0 5 8 2】

30

40

50

【化 2 4 5】



10

20

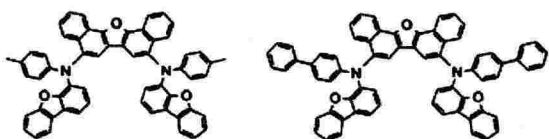
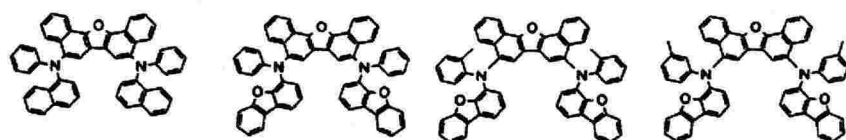
30

【 0 5 8 3】

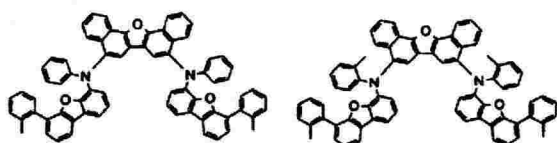
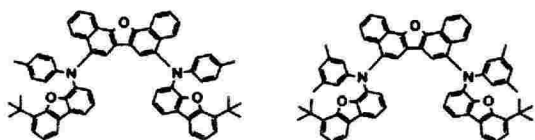
40

50

【化 2 4 6】



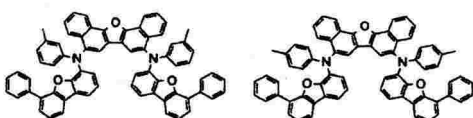
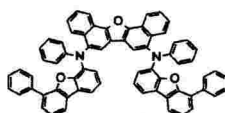
10



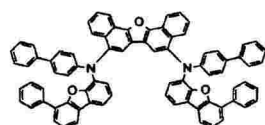
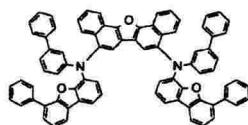
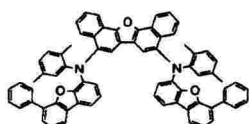
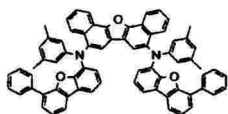
20

【 0 5 8 4 】

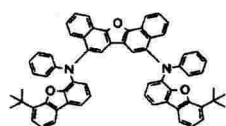
【化 2 4 7】



30



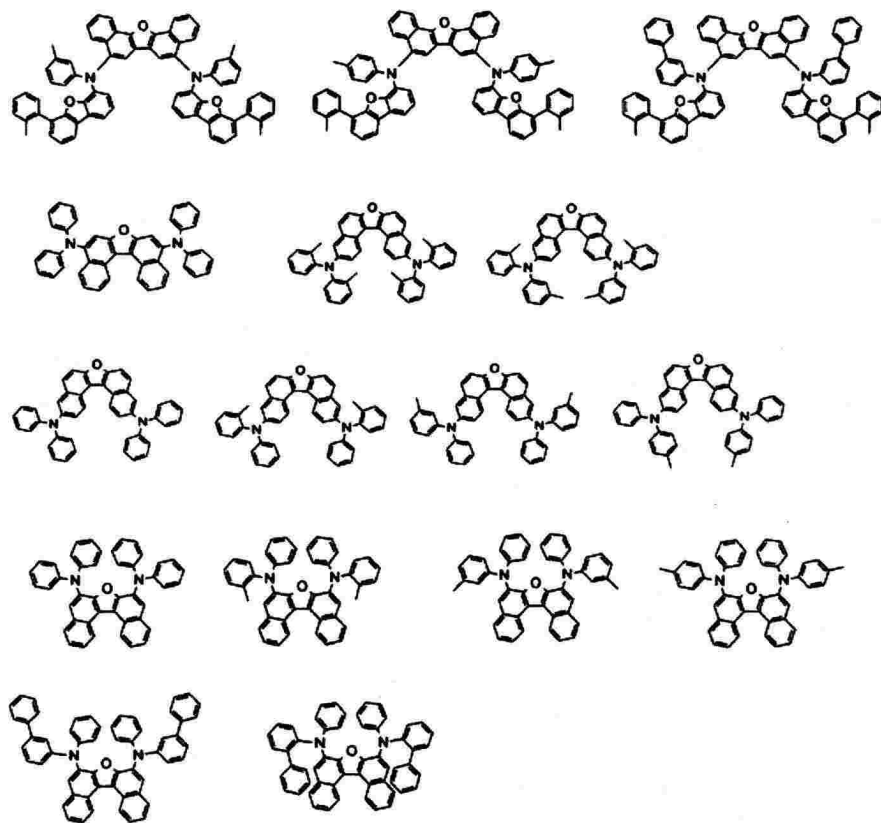
40



【 0 5 8 5 】

50

【化 2 4 8】

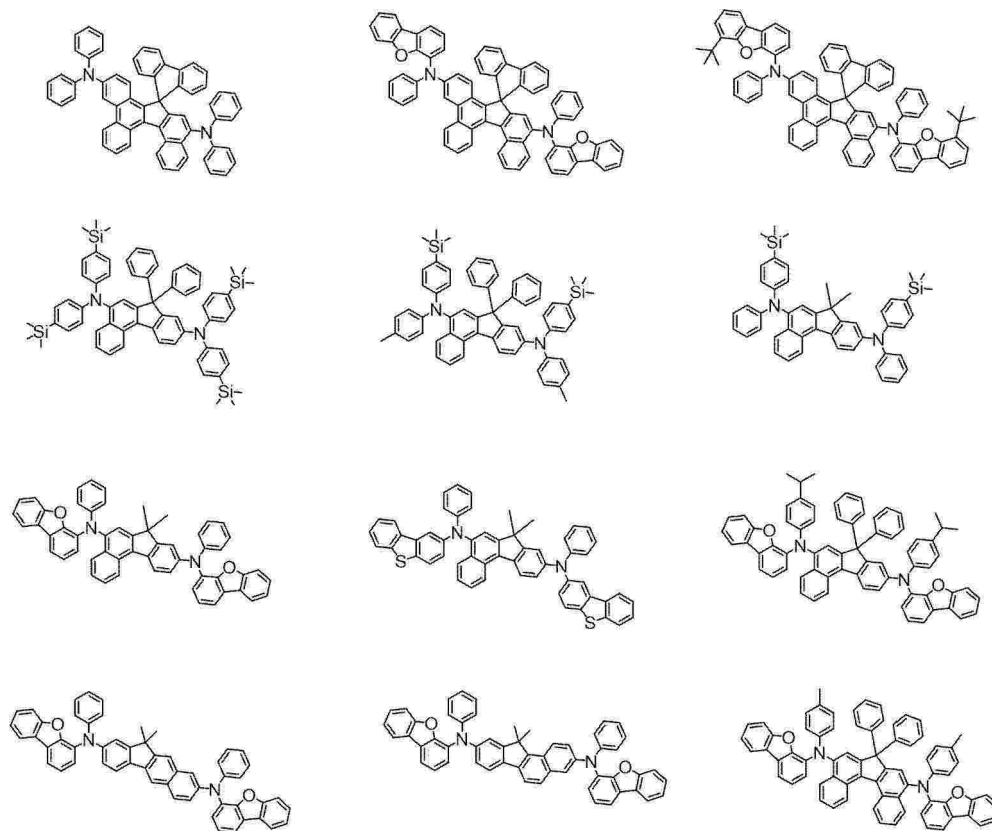


10

20

【 0 5 8 6】

【化 2 4 9】



30

40

【 0 5 8 7】

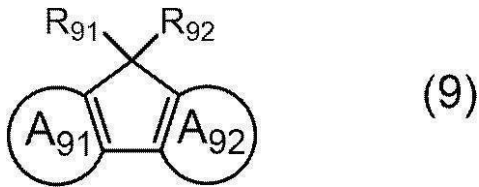
(一般式(9)で表される化合物)

50

一般式(9)で表される化合物について説明する。

【0588】

【化250】



【0589】

10

(前記一般式(9)において、

A₉₁環及びA₉₂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、

A₉₁環及びA₉₂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。)

【0590】

【化251】



20

【0591】

(前記一般式(92)において、

A₉₃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、

X₉は、N(R₉₃)、C(R₉₄)(R₉₅)、Si(R₉₆)(R₉₇)、Ge(R₉₈)

(R₉₉)、酸素原子、硫黄原子又はセレン原子であり、

30

R₉₁及びR₉₂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R₉₁及びR₉₂、並びにR₉₃～R₉₉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、

40

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

- Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

- O-(R₉₀₄)で表される基、

- S-(R₉₀₅)で表される基、

- N(R₉₀₆)(R₉₀₇)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。)

50

【 0 5 9 2 】

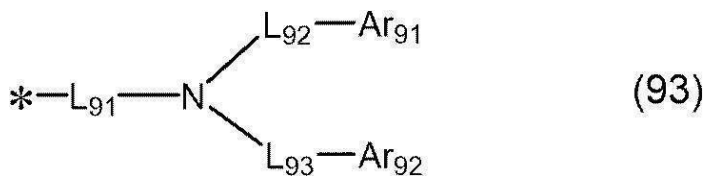
A₉₁ 環及び A₉₂ 環からなる群から選択される 1 以上の環は、前記一般式 (9 2) で表される構造の * と結合する。即ち、一実施形態において、A₉₁ 環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式 (9 2) で表される構造の * と結合する。また、一実施形態において、A₉₂ 環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式 (9 2) で表される構造の * と結合する。

【 0 5 9 3 】

一実施形態において、A₉₁ 環及び A₉₂ 環のいずれか又は両方に下記一般式 (9 3) で表される基が結合する。

【 0 5 9 4 】

【 化 2 5 2 】



【 0 5 9 5 】

(前記一般式 (9 3) において、

A r₉₁ 及び A r₉₂ 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 ~ 5 0 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 ~ 5 0 の複素環基であり、

L₉₁ ~ L₉₃ 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 ~ 3 0 のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 3 0 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 ~ 3 0 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 ~ 3 0 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 (9 3) 中の * は、A₉₁ 環及び A₉₂ 環のいずれかとの結合位置を示す。)

【 0 5 9 6 】

一実施形態において、A₉₁ 環に加えて、A₉₂ 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 (9 2) で表される構造の * と結合する。この場合、前記一般式 (9 2) 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。

【 0 5 9 7 】

一実施形態において、R₉₁ 及び R₉₂ 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 ~ 5 0 のアリール基である。

一実施形態において、R₉₁ 及び R₉₂ は、互いに結合してフルオレン構造を形成する。

【 0 5 9 8 】

一実施形態において、環 A₉₁ 及び環 A₉₂ 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 ~ 5 0 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。

【 0 5 9 9 】

一実施形態において、環 A₉₃ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 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、X₉ は、酸素原子又は硫黄原子である。

【 0 6 0 0 】

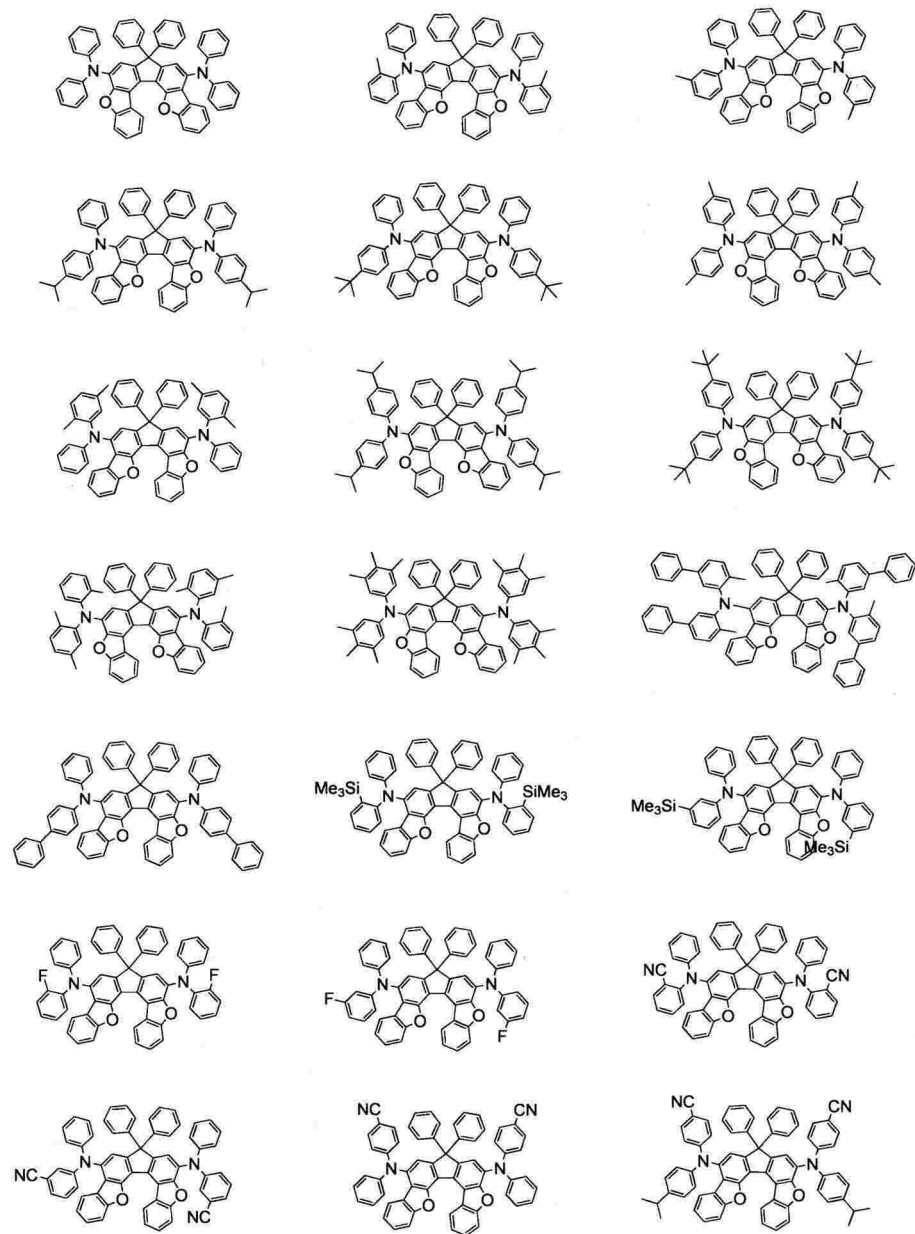
(一般式 (9) で表される化合物の具体例)

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。

【 0 6 0 1 】

【 化 2 5 3 】

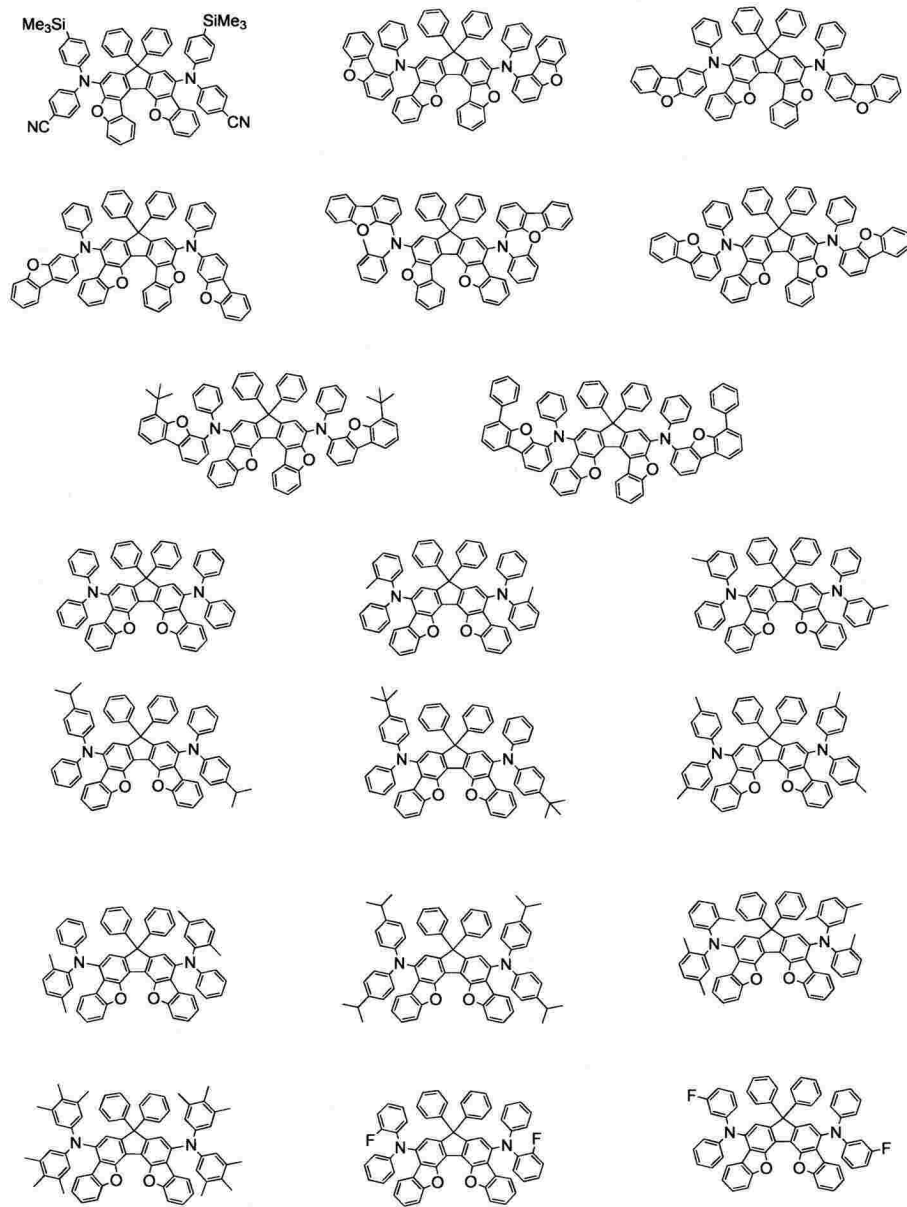


【 0 6 0 2 】

40

50

【化 2 5 4】



10

20

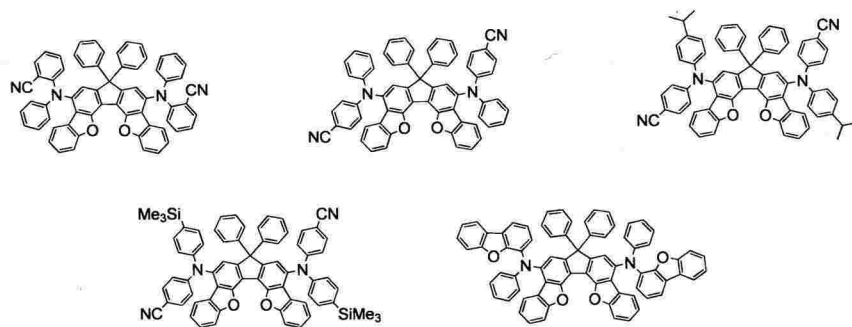
30

【 0 6 0 3 】

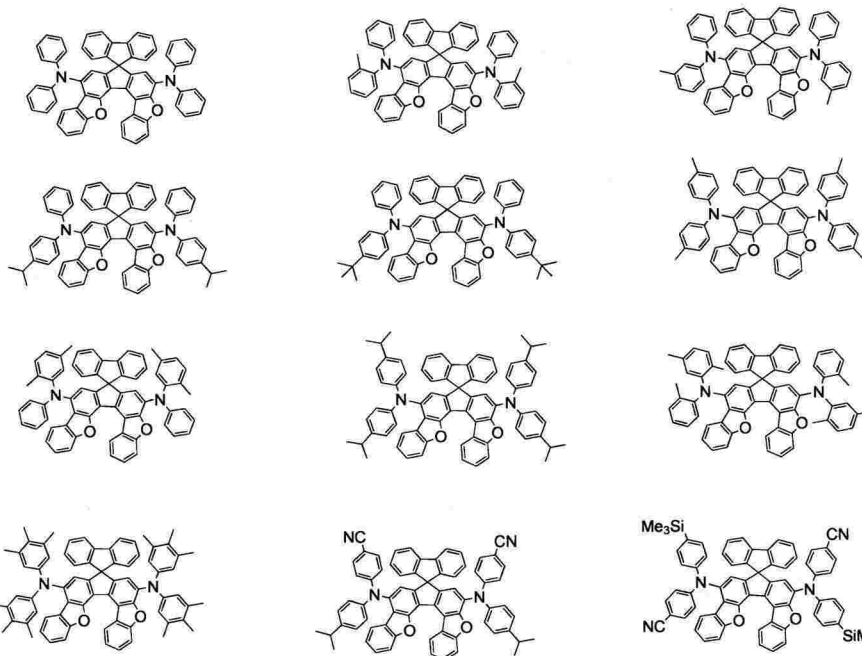
40

50

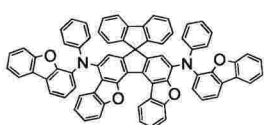
【化 2 5 5】



10



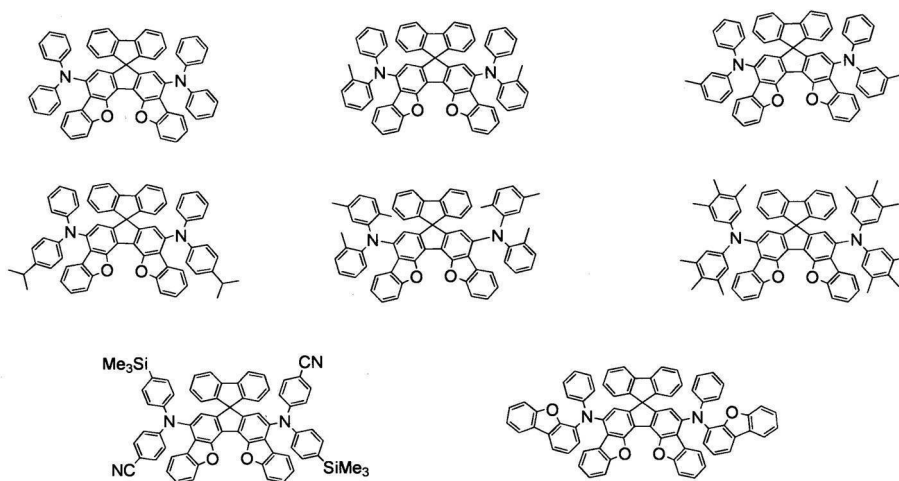
20



30

【 0 6 0 4】

【化 2 5 6】



40

50

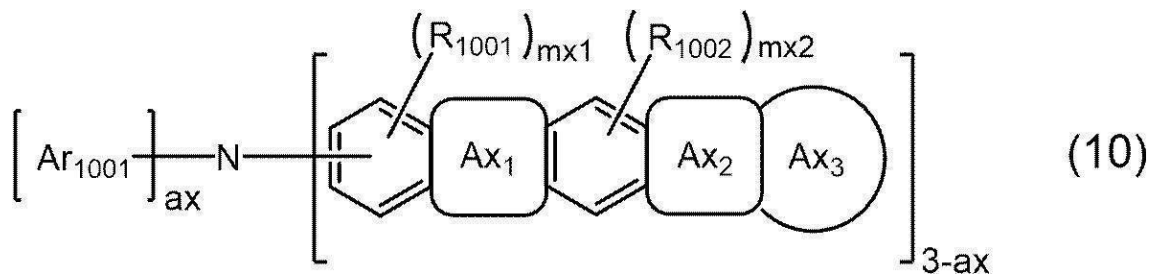
【 0 6 0 5 】

(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。

【 0 6 0 6 】

【化257】



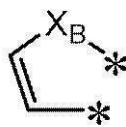
10

【 0 6 0 7 】

【化258】



(10a)



(10b)

20

【 0 6 0 8 】

(前記一般式(10)において、

Ax₁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、Ax₂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、Ax₃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(R₁₀₀₃)(R₁₀₀₄)、Si(R₁₀₀₅)(R₁₀₀₆)、酸素原子又は硫黄原子であり、Ax₃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、

Ar₁₀₀₁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、

R₁₀₀₁～R₁₀₀₆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(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、- O-(R₉₀₄)で表される基、- S-(R₉₀₅)で表される基、- N(R₉₀₆)(R₉₀₇)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、

mx₁は、3であり、mx₂は、2であり、

30

40

50

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_x は、0、1 又は 2 であり、
 a_x が 0 又は 1 の場合、「3 - a_x 」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_x が 2 の場合、複数の A_{r1001} は、互いに同一であるか、又は異なる。))

【0609】

一実施形態において、 A_{r1001} 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。

【0610】

一実施形態において、 A_{x3} 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。

【0611】

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。

【0612】

一実施形態において、 a_x は 1 である。

【0613】

(一般式 (10) で表される化合物の具体例)

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。

【0614】

10

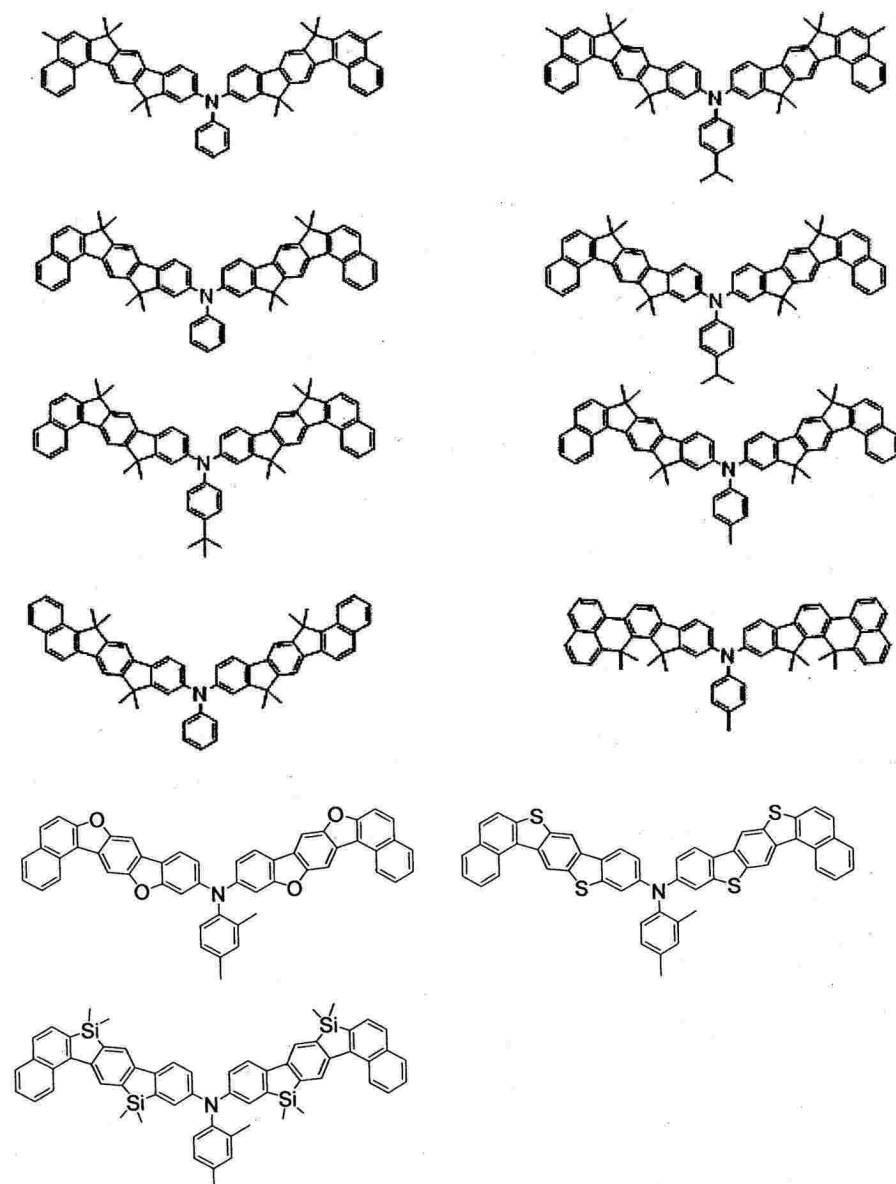
20

30

40

50

【化 2 5 9】



10

20

30

【0615】

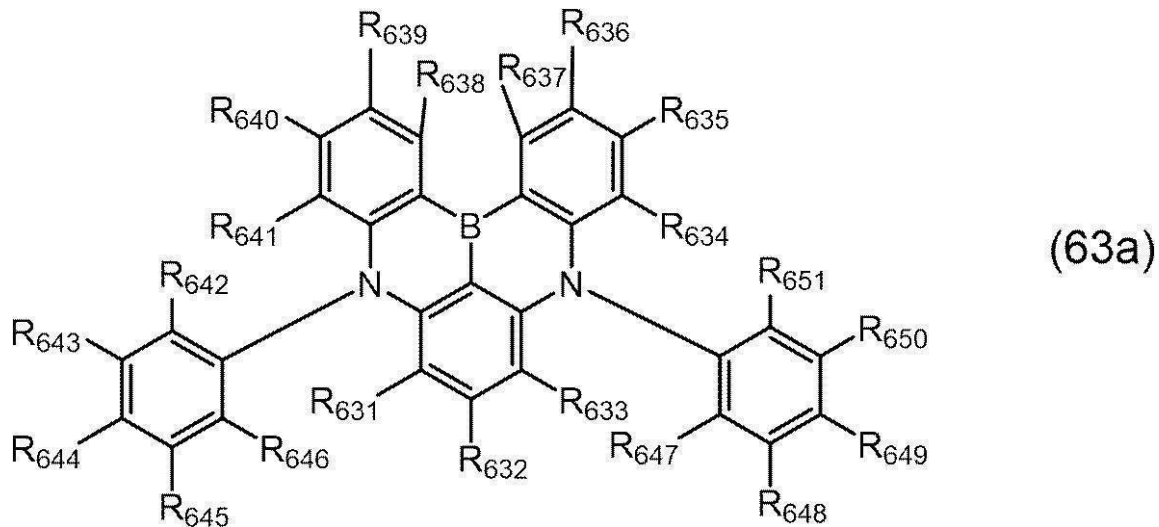
一実施形態においては、前記発光層が、第六の化合物及び第七の化合物として、前記一般式(4)で表される化合物、前記一般式(5)で表される化合物、前記一般式(7)で表される化合物、前記一般式(8)で表される化合物、前記一般式(9)で表される化合物及び下記一般式(63a)で表される化合物からなる群から選択される1以上の化合物を含有する。

【0616】

40

50

【化 2 6 0】



10

【 0 6 1 7】

(前記一般式(63a)において、

R₆₃₁は、R₆₄₆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。

20

R₆₃₃は、R₆₄₇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。

R₆₃₄は、R₆₅₁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。

R₆₄₁は、R₆₄₂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。

R₆₃₁ ~ R₆₅₁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、

30

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R₆₃₁ ~ R₆₅₁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、

40

- Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

- O-(R₉₀₄)で表される基、

- S-(R₉₀₅)で表される基、

- N(R₉₀₆)(R₉₀₇)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R₆₃₁ ~ R₆₅₁のうちの少なくとも1つは、

ハロゲン原子、

シアノ基、

50

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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
- O - (R₉₀₄) で表される基、
- S - (R₉₀₅) で表される基、
- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
ハロゲン原子、

10

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。)

【 0 6 1 8 】

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。

【 0 6 1 9 】

20

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エン環である。

30

【 0 6 2 0 】

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エン環である。

40

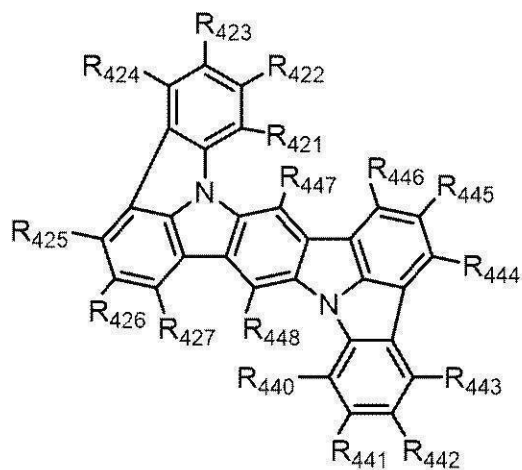
【 0 6 2 1 】

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 (4 6 1) で表される化合物、
下記一般式 (4 6 2) で表される化合物、
下記一般式 (4 6 3) で表される化合物、
下記一般式 (4 6 4) で表される化合物、
下記一般式 (4 6 5) で表される化合物、
下記一般式 (4 6 6) で表される化合物、及び
下記一般式 (4 6 7) で表される化合物からなる群から選択される。

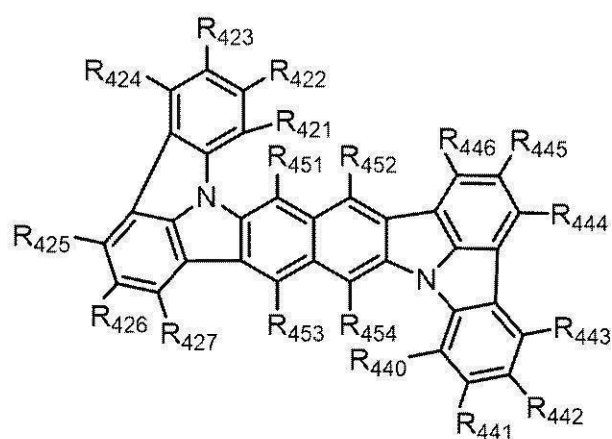
【 0 6 2 2 】

50

【化 2 6 1】



(461)

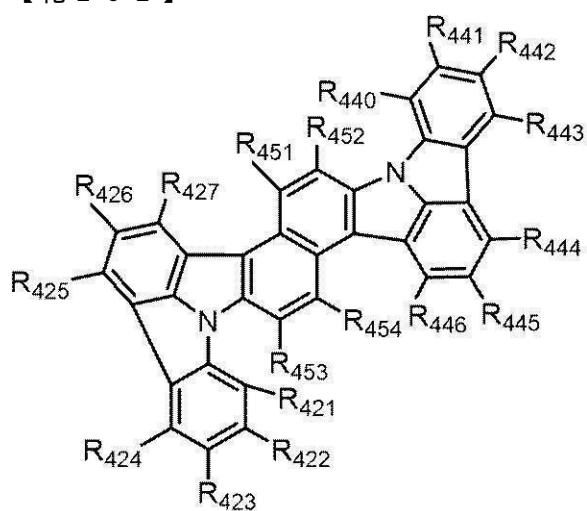


(462)

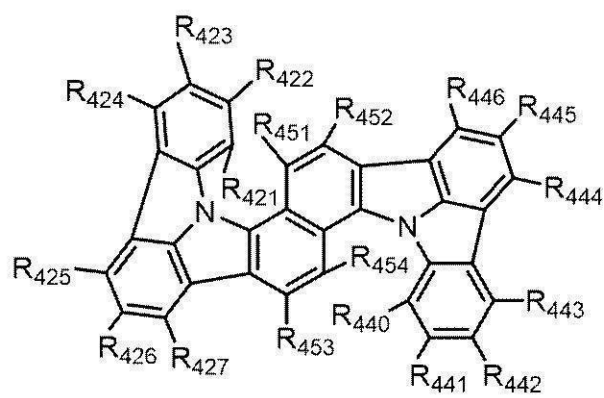
10

【 0 6 2 3】

【化 2 6 2】



(463)



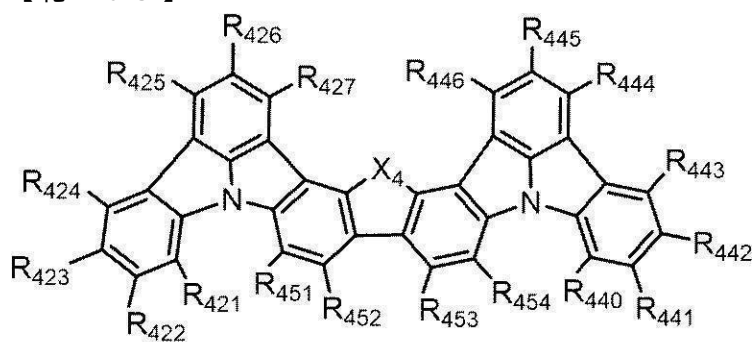
(464)

20

30

【 0 6 2 4】

【化 2 6 3】



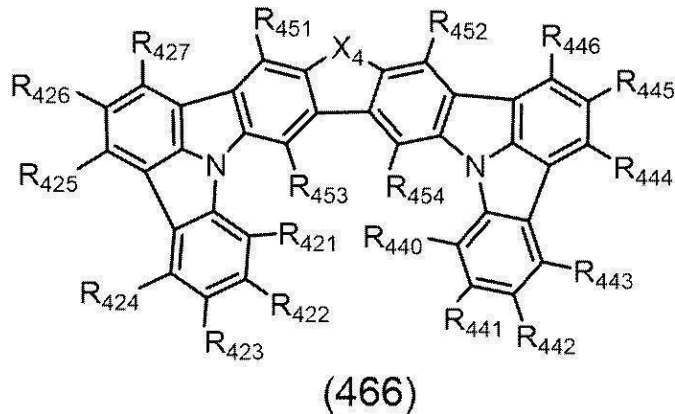
(465)

40

【 0 6 2 5】

50

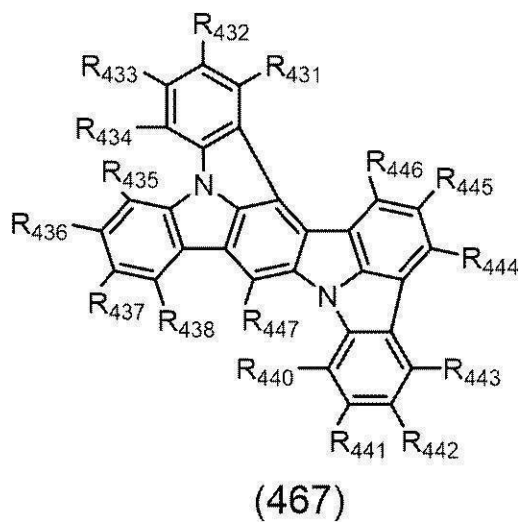
【化 2 6 4】



10

【 0 6 2 6】

【化 2 6 5】



20

【 0 6 2 7】

(前記一般式(461)~(467)中、

R421~R427、R431~R436、R440~R448及びR451~R454のうち
 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、

R437、R438、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R421
 ~R427、R431~R436、R440~R448及びR451~R454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(R901)(R902)(R903)で表される基、

- O-(R904)で表される基、

- S-(R905)で表される基、

- N(R906)(R907)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

30

40

50

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、
X₄ は、酸素原子、NR₈₀₁、又は C(R₈₀₂)(R₈₀₃) であり、
R₈₀₁、R₈₀₂ 及び R₈₀₃ 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、

R₈₀₁ が複数存在する場合、複数の R₈₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₈₀₂ が複数存在する場合、複数の R₈₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₈₀₃ が複数存在する場合、複数の R₈₀₃ は、互いに同一であるか又は異なる。))

【0628】

一実施形態においては、R₄₂₁ ~ R₄₂₇ 及び R₄₄₀ ~ R₄₄₈ 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。

【0629】

一実施形態においては、R₄₂₁ ~ R₄₂₇ 及び R₄₄₀ ~ R₄₄₇ が、それぞれ独立に、
水素原子、

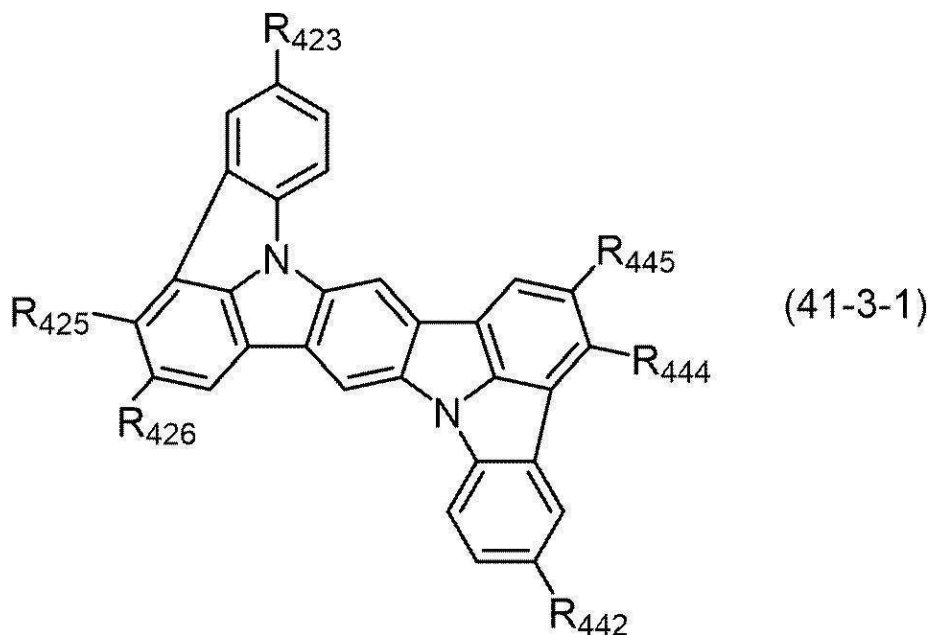
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、及び
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 18 の複素環基からなる群から選択される。

【0630】

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。

【0631】

【化266】



【0632】

(前記一般式 (41-3-1) 中、R₄₂₃、R₄₂₅、R₄₂₆、R₄₄₂、R₄₄₄ 及び
R₄₄₅ は、それぞれ独立に、前記一般式 (41-3) における R₄₂₃、R₄₂₅、R₄₂

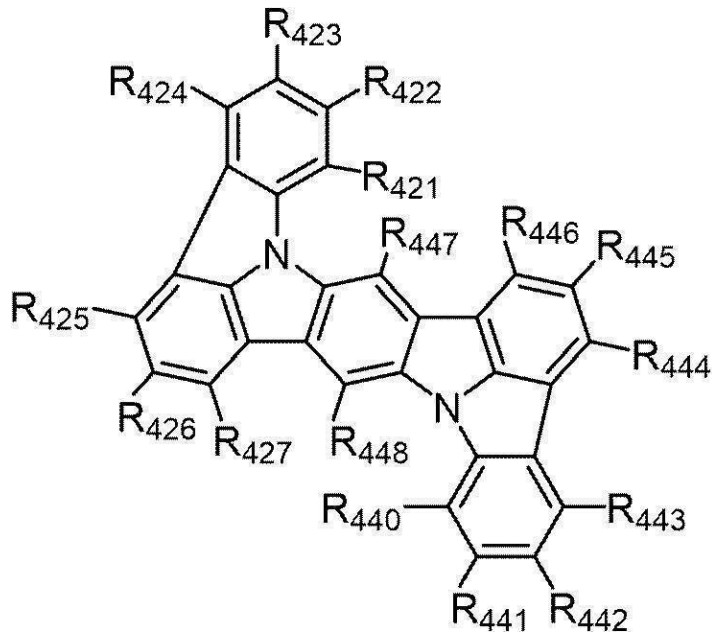
6、 R_{442} 、 R_{444} 及び R_{445} と同義である。)

【0633】

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。

【0634】

【化267】



(41-3-2)

【0635】

(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。)

【0636】

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。

【0637】

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。

【0638】

10

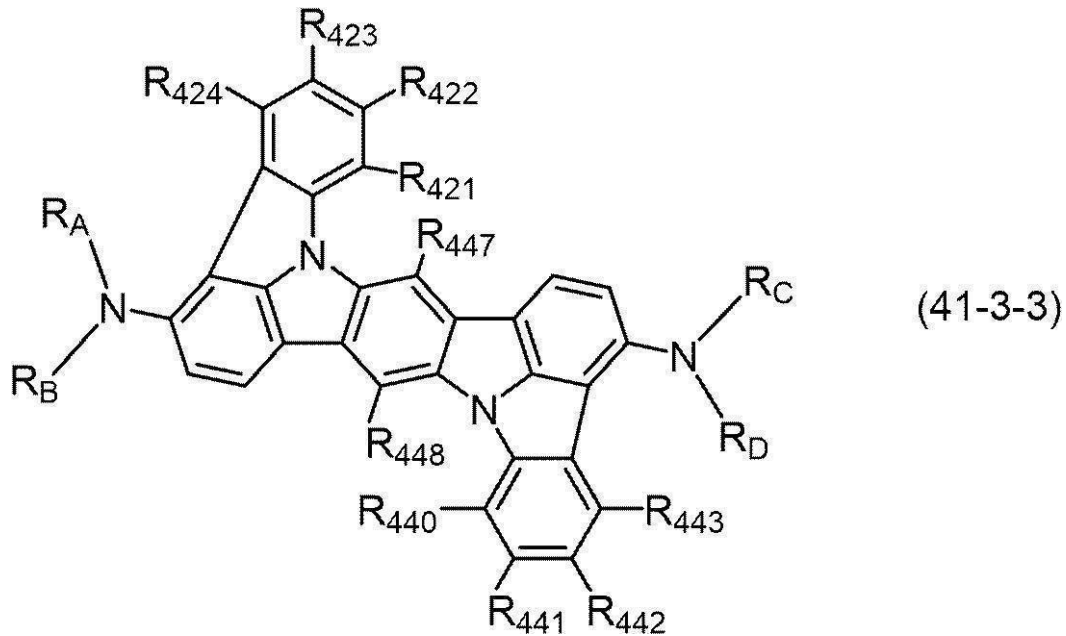
20

30

40

50

【化 2 6 8】



10

【 0 6 3 9 】

(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、

20

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。)

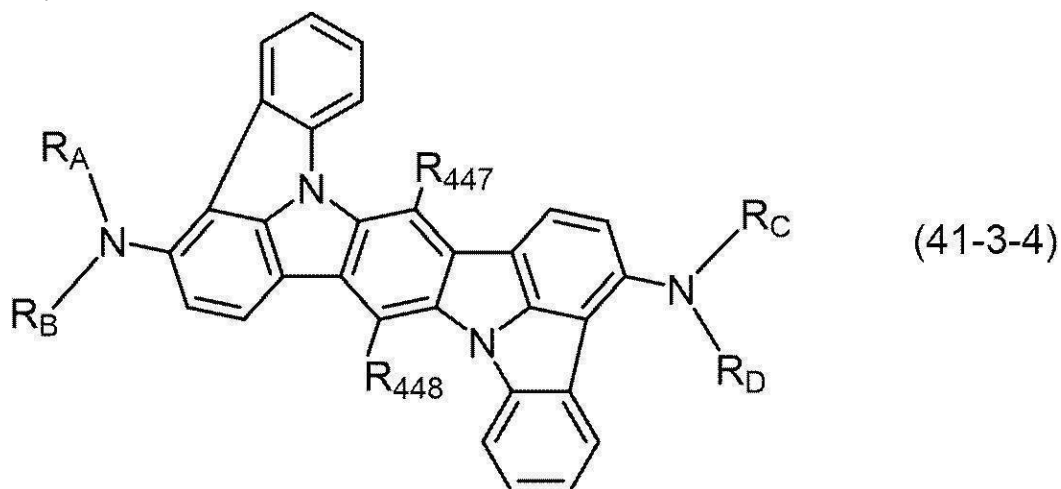
【 0 6 4 0 】

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。

【 0 6 4 1 】

【化 2 6 9】

30



40

【 0 6 4 2 】

(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。)

【 0 6 4 3 】

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

50

置換の環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基である。

【0644】

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。

【0645】

一実施形態においては、 R_{447} 及び R_{448} が、水素原子である。

【0646】

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。

【0647】

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。

【0648】

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、

10

20

30

40

50

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。

【0649】

第六の化合物及び第七の化合物において、「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。

【0650】

本実施形態に係る有機 EL 素子において、第六の化合物は、主ピーク波長が 430 nm 以上 480 nm 以下の発光を示す化合物であることが好ましい。

【0651】

本実施形態に係る有機 EL 素子において、第七の化合物は、主ピーク波長が 430 nm 以上 480 nm 以下の発光を示す化合物であることが好ましい。

【0652】

化合物の最大の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 (300 K) 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、蛍光発光の最大の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。

【0653】

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七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、第七の化合物の一重項エネルギー $S_1(D7)$ とが、下記数式 (数 1) の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(H1) > S_1(D7) \dots (\text{数 1})$$

【0654】

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六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、第六の化合物の一重項エネルギー $S_1(D6)$ とが、下記数式 (数 2) の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(H2) > S_1(D6) \dots (\text{数 2})$$

【0655】

(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 10^{-5} mol/L 以上 10^{-4} 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 (300 K) 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 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する。

$$\text{換算式 (F2)} : S_1 [\text{eV}] = 1239.85 / \text{edge}$$

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。

【0656】

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

10

20

30

40

50

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。

【0657】

(発光層の膜厚)

本実施形態に係る有機 EL 素子の第一発光層及び第二の発光層の膜厚は、それぞれ独立に、5 nm 以上 50 nm 以下であることが好ましく、7 nm 以上 50 nm 以下であることがより好ましく、10 nm 以上 50 nm 以下であることがさらに好ましい。第一の発光層及び第二の発光層の膜厚が 5 nm 以上であると、発光層を形成し易く、色度を調整し易い。第一の発光層及び第二の発光層の膜厚が 50 nm 以下であると、駆動電圧の上昇を抑制し易い。

10

【0658】

(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七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七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が好ましい。

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% 以下であることがより好ましく、95 質量% 以上 99 質量% 以下であることがさらに好ましい。

第七の化合物の含有率は、1 質量% 以上 10 質量% 以下であることが好ましく、1 質量% 以上 7 質量% 以下であることがより好ましく、1 質量% 以上 5 質量% 以下であることがさらに好ましい。

20

ただし、第一の発光層における第一の化合物及び第七の化合物の合計含有率の上限は、100 質量% である。

【0659】

なお、本実施形態は、第一の発光層に、第一の化合物及び第七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、第七の化合物を 1 種のみ含んでもよいし、2 種以上含んでもよい。

【0660】

第二の発光層が第二の化合物及び第六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六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が好ましい。

30

第二の化合物の含有率は、80 質量% 以上 99 質量% 以下であることが好ましく、90 質量% 以上 99 質量% 以下であることがより好ましく、95 質量% 以上 99 質量% 以下であることがさらに好ましい。

第六の化合物の含有率は、1 質量% 以上 10 質量% 以下であることが好ましく、1 質量% 以上 7 質量% 以下であることがより好ましく、1 質量% 以上 5 質量% 以下であることがさらに好ましい。

ただし、第二の発光層における第二の化合物及び第六の化合物の合計含有率の上限は、100 質量% である。

40

【0661】

なお、本実施形態は、第二の発光層に、第二の化合物及び第六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、第六の化合物を 1 種のみ含んでもよいし、2 種以上含んでもよい。

【0662】

(第一の電子輸送層)

本実施形態に係る有機 EL 素子において、第一の電子輸送層は、下記一般式 (3) で表される第三の化合物を含む。

【0663】

50

本実施形態に係る有機 E L 素子において、第一の電子輸送層は、第三の化合物のみからなることが好ましい。

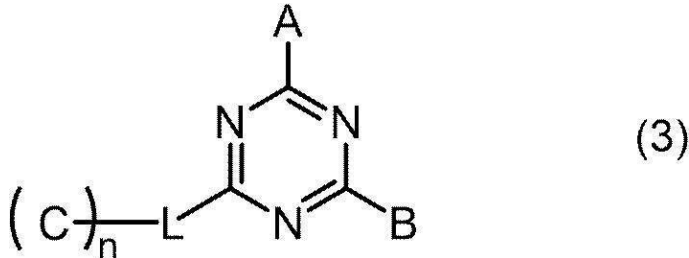
【 0 6 6 4 】

(第三の化合物)

一般式 (3) で表される第三の化合物について、説明する。なお、第二の電子輸送層が含有する第四の化合物及び第三の電子輸送層が含有する第五の化合物も、下記一般式 (3) で表される場合もある。

【 0 6 6 5 】

【 化 2 7 0 】



10

【 0 6 6 6 】

(前記一般式 (3) において、

A は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 8 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 ~ 1 3 の複素環基であり、

B は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 8 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 ~ 1 3 の複素環基であり、

L は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 8 の (n + 1) 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 ~ 1 3 の (n + 1) 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 ~ 1 8 の芳香族炭化水素環基及び置換もしくは
無置換の環形成原子数 5 ~ 1 3 の複素環基からなる群から選択される互いに異なる 2 つ又は 3 つの基が結合した構造を有する (n + 1) 価の基であり、

C は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 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 ~ 6 0 の複素環基であり、

n は、 1、 2 又は 3 であり、

n が 2 以上の場合、 L は、単結合ではなく、

n が 2 以上の場合、複数の C は、互いに同一であるか又は異なる。)

【 0 6 6 7 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、

第三の化合物は、下記一般式 (3 1) 又は一般式 (3 1 0) で表される化合物であることが好ましい。

【 0 6 6 8 】

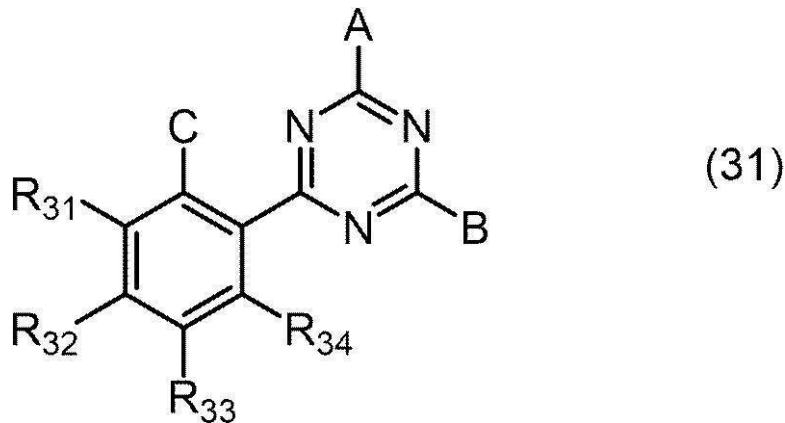
20

30

40

50

【化 2 7 1】



10

【 0 6 6 9 】

(前記一般式(31)において、

A、B及びCは、前記一般式(3)で定義したとおりであり、

R₃₁ ~ R₃₄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、

20

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R₃₁ ~ R₃₄は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、

- Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、- O - (R₉₀₄)で表される基、

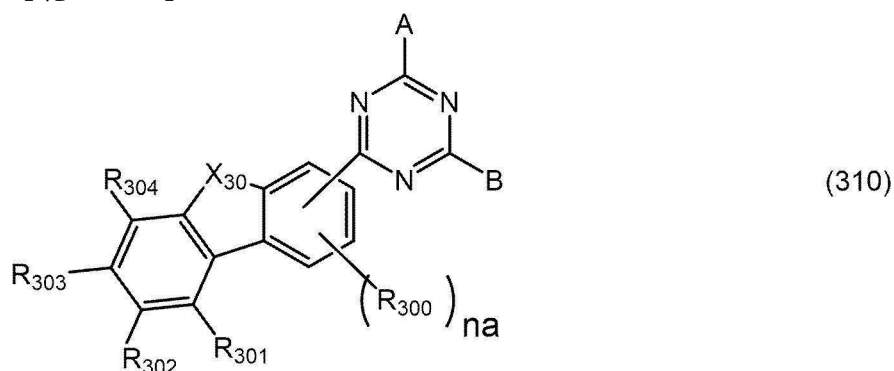
置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 50の複素環基である。))

30

【 0 6 7 0 】

【化 2 7 2】



40

【 0 6 7 1 】

(前記一般式(310)において、

A及びBは、前記一般式(3)で定義したとおりであり、

X₃₀は、C R₅₁ R₅₂、N R₅₃、酸素原子又は硫黄原子であり、X₃₀がC R₅₁ R₅₂である場合、R₅₁及びR₅₂からなる組が、

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、

50

R₃₀₀ ~ R₃₀₄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、

R₅₃並びに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R₅₁、R₅₂、R₃₀₀ ~ R₃₀₄は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) 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、

n_aは、3であり、3つのR₃₀₀は、互いに同一であるか又は異なる。)

【0672】

(前記第三の化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃及びR₉₀₄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、

R₉₀₁が複数存在する場合、複数のR₉₀₁は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₂が複数存在する場合、複数のR₉₀₂は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₃が複数存在する場合、複数のR₉₀₃は、互いに同一であるか又は異なり、

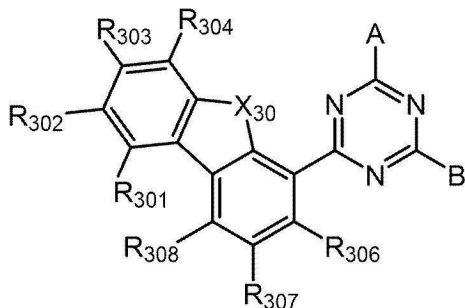
R₉₀₄が複数存在する場合、複数のR₉₀₄は、互いに同一であるか又は異なる。)

【0673】

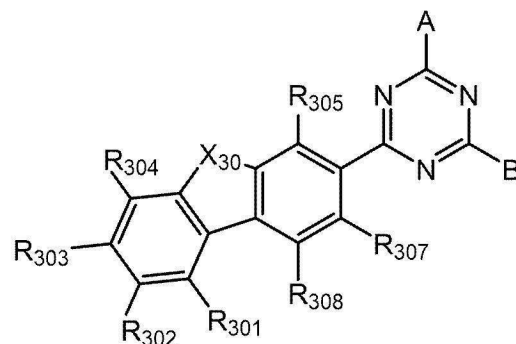
本実施形態に係る有機EL素子において、第三の化合物は、下記一般式(32)、下記
一般式(33)、下記一般式(34)又は下記一般式(35)で表される化合物であるこ
とが好ましい。

【0674】

【化273】



(32)



(33)

【0675】

10

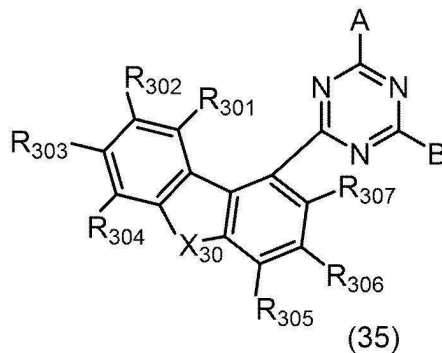
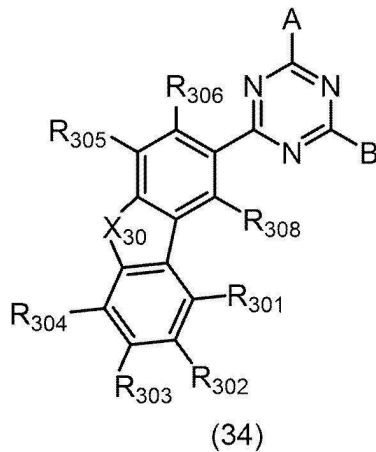
20

30

40

50

【化 2 7 4】



10

【 0 6 7 6】

(前記一般式(32)～(35)において、

A 及び B は、前記一般式(3)で定義したとおりであり、

X₃₀ は、C R₅₁ R₅₂、N R₅₃、酸素原子又は硫黄原子であり、

X₃₀ が C R₅₁ R₅₂ である場合、R₅₁ 及び R₅₂ からなる組が、

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、

R₃₀₁～R₃₀₈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、

R₅₃ 並びに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R₅₁、R₅₂、R₃₀₁～R₃₀₈は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) 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の複素環基である。)

20

30

【 0 6 7 7】

本実施形態に係る有機EL素子において、第三の化合物は、前記一般式(32)で表される化合物であることも好ましい。

【 0 6 7 8】

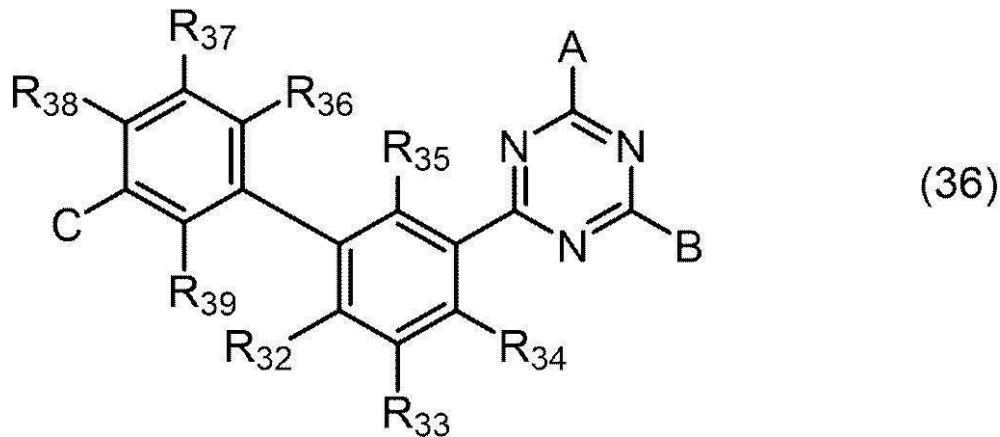
本実施形態に係る有機EL素子において、第三の化合物は、下記一般式(36)で表される化合物であることも好ましい。

40

【 0 6 7 9】

50

【化 2 7 5】



10

【 0 6 8 0 】

(前記一般式(36)において、

A、B及びCは、前記一般式(3)で定義したとおりであり、

R₃₂ ~ R₃₉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、

20

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R₃₂ ~ R₃₉は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、

- Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、- O - (R₉₀₄)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、

30

前記第三の化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃及びR₉₀₄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、

R₉₀₁が複数存在する場合、複数のR₉₀₁は、互いに同一であるか又は異なり、R₉₀₂が複数存在する場合、複数のR₉₀₂は、互いに同一であるか又は異なり、R₉₀₃が複数存在する場合、複数のR₉₀₃は、互いに同一であるか又は異なり、R₉₀₄が複数存在する場合、複数のR₉₀₄は、互いに同一であるか又は異なる。)

40

【 0 6 8 1 】

本実施形態に係る有機EL素子の第三の化合物において、Cが、置換もしくは無置換の環形成原子数13 ~ 35の複素環基であることが好ましい。

【 0 6 8 2 】

本実施形態に係る有機EL素子の第三の化合物において、Cが、置換もしくは無置換の環形成炭素数14 ~ 24のアリール基であることが好ましい。

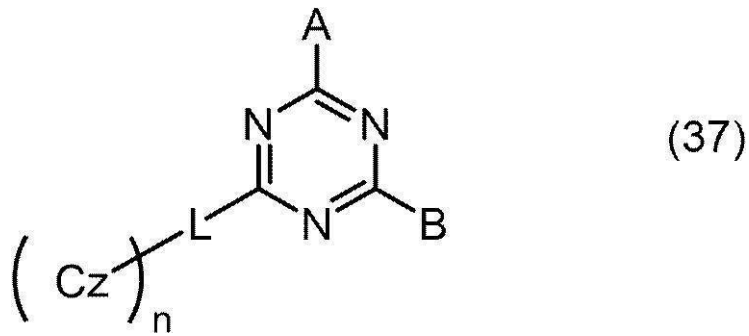
【 0 6 8 3 】

本実施形態に係る有機EL素子において、第三の化合物は、下記一般式(37)で表される化合物であることが好ましい。

【 0 6 8 4 】

50

【化 2 7 6】



10

【 0 6 8 5】

(前記一般式(37)において、

A、B及びLは、前記一般式(3)で定義したとおりであり、

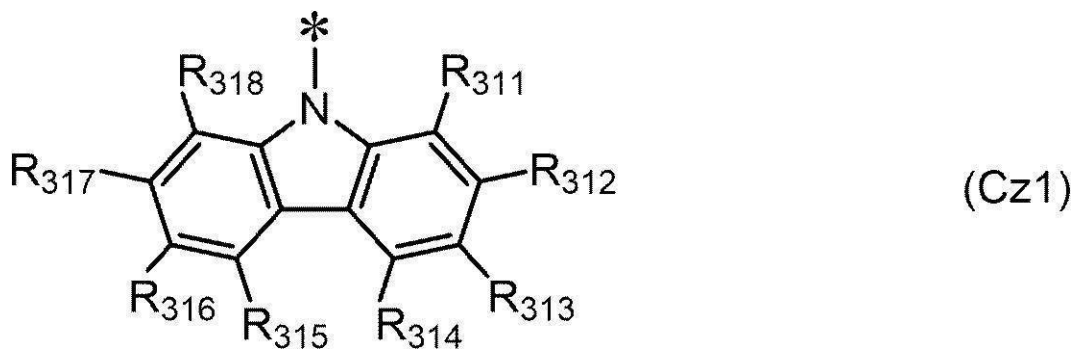
Czは、下記一般式(Cz1)、(Cz2)又は(Cz3)で表される基であり、

nは、1、2又は3であり、

nが2又は3の場合、複数のCzは、互いに同一であるか又は異なる。)

【 0 6 8 6】

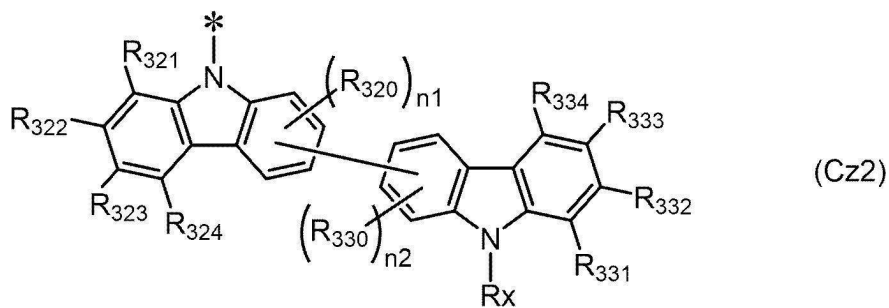
【化 2 7 7】



20

【 0 6 8 7】

【化 2 7 8】



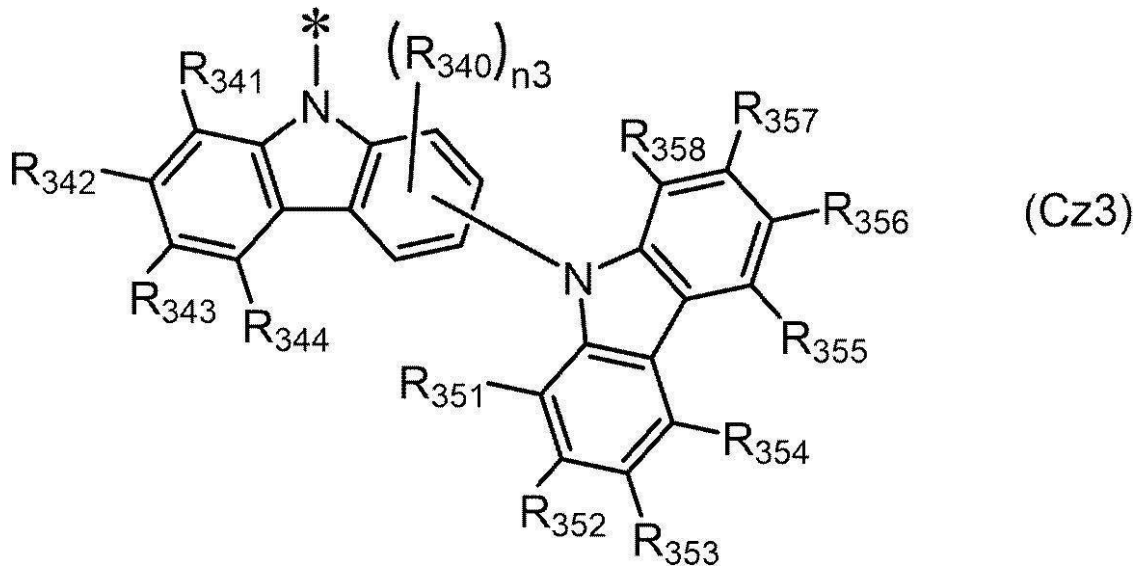
30

【 0 6 8 8】

40

50

【化 2 7 9】



10

【 0 6 8 9】

(前記一般式 (Cz1)、(Cz2) 及び (Cz3) において、

R₃₁₁ ~ R₃₁₈ 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、

20

R₃₂₀ ~ R₃₂₄ 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、

R₃₃₀ ~ R₃₃₄ 及び R_x 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、

30

R₃₄₀ ~ R₃₄₄ 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、

R₃₅₁ ~ R₃₅₈ 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 R₃₁₁ ~ R₃₁₈、R₃₂₀ ~ R₃₂₄、R₃₃₀ ~ R₃₃₄、R_x、R₃₄₀ ~ R₃₄₄ 並びに R₃₅₁ ~ R₃₅₈ は、それぞれ独立に、

40

水素原子、

シアノ基、

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環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、- O - (R₉₀₄) 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、

50

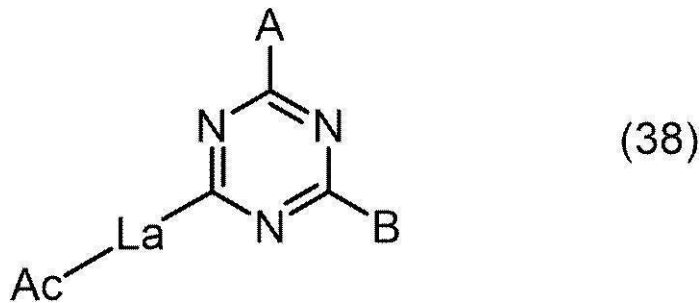
n_1 、 n_2 及び n_3 は、3 であり、
 3 つの R_{320} は、互いに同一であるか又は異なり、
 3 つの R_{330} は、互いに同一であるか又は異なり、
 3 つの R_{340} は、互いに同一であるか又は異なり、
 前記一般式 (Cz1)、(Cz2) 及び (Cz3) 中の * は、L と結合し、
 前記第三の化合物中、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 及び R_{904} は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 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る。)

【0690】

本実施形態に係る有機 EL 素子において、前記一般式 (3) で表される化合物は、下記一般式 (38) で表される化合物であることが好ましい。

【0691】

【化280】



【0692】

(前記一般式 (38) において、

A 及び B は、前記一般式 (3) で定義したとおりであり、

La は、

単結合、

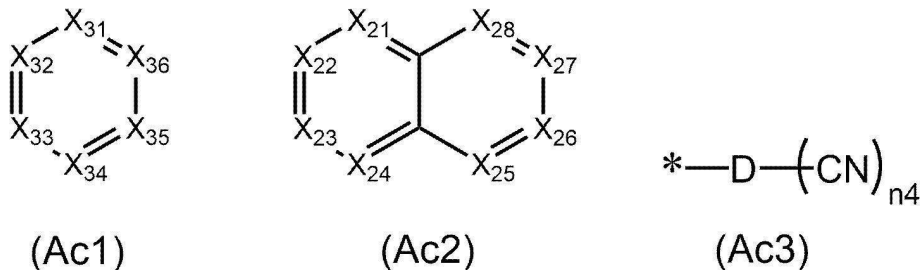
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 の 2 価の芳香族炭化水素環基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 13 の 2 価の複素環基であり、

Ac は、下記一般式 (Ac1)、(Ac2) 及び (Ac3) のいずれかで表される基である。)

【0693】

【化281】



【0694】

(前記一般式 (Ac1) において、

10

20

30

40

50

$X_{31} \sim X_{36}$ は、それぞれ独立に、
窒素原子、

L_a と結合する炭素原子、又は

R_y と結合する炭素原子であり、

$X_{31} \sim X_{36}$ のうち、1つ以上が窒素原子であり、

$X_{31} \sim X_{36}$ のうち、1つが L_a と結合する炭素原子であり、

R_y は、

水素原子、

シアノ基、

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、

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_y が複数存在する場合、複数の R_y は、互いに同一であるか又は異なる。))

【0695】

(前記一般式 (Ac2) において、

$X_{21} \sim X_{28}$ は、それぞれ独立に、

窒素原子、

L_a と結合する炭素原子、又は

R_z と結合する炭素原子であり、

$X_{21} \sim X_{28}$ のうち、1つ以上が窒素原子であり、

$X_{21} \sim X_{28}$ のうち、1つが L_a と結合する炭素原子であり、

R_z が複数存在する場合、複数の R_z 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_z は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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、

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。))

【0696】

(前記一般式 (Ac3) において、

n_4 は、1、2、3、4、5、6、7、8 又は 9 であり、

D は、

n_4 個のシアノ基を有する環形成炭素数 6 ～ 18 のアリール基、又は

n_4 個のシアノ基を有する環形成原子数 5 ～ 13 の複素環基であり、

但し、D は、シアノ基以外の置換基を有するか、又はシアノ基以外の置換基を有さず、

前記一般式 (Ac3) 中の * は、 L_a と結合する。))

【0697】

(前記第三の化合物中、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 及び R_{904} は、それぞれ独立に、

水素原子、

10

20

30

40

50

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、

R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なる。)

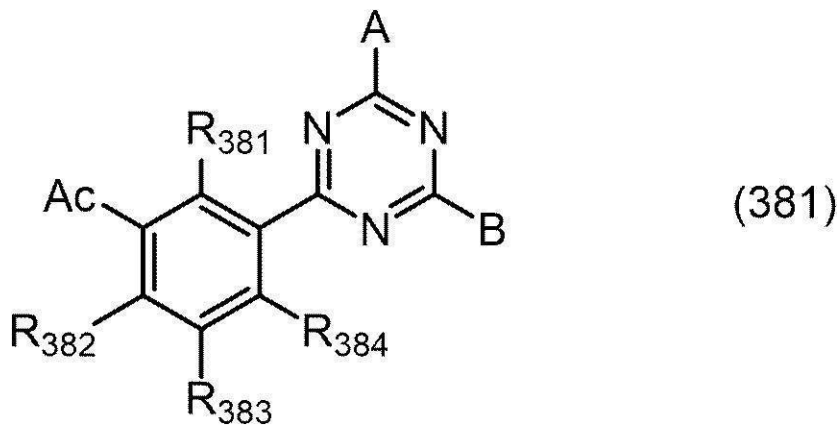
【0698】

本実施形態に係る有機 EL 素子において、前記一般式 (38) で表される化合物は、下記一般式 (381) で表される化合物であることが好ましい。

10

【0699】

【化282】



20

【0700】

(前記一般式 (381) において、

A、B 及び Ac は、前記一般式 (38) で定義したとおりであり、
R₃₈₁ ~ R₃₈₄ 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、

30

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 R₃₈₁ ~ R₃₈₄ は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

40

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、

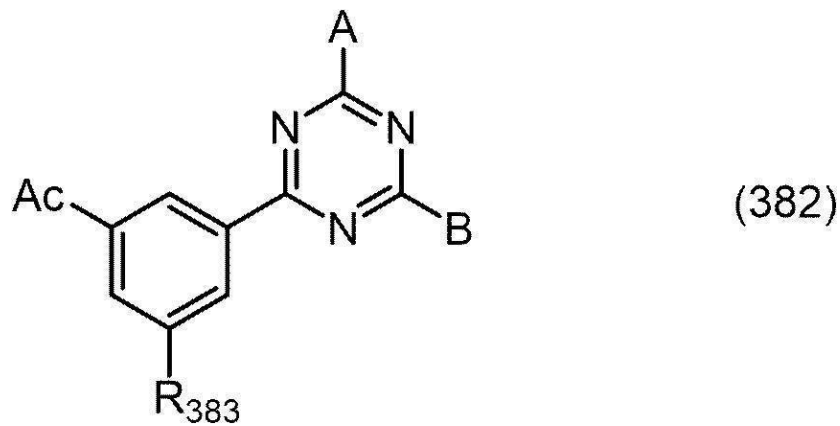
R₉₀₁ ~ R₉₀₄ は、前記一般式 (38) で定義したとおりである。)

【0701】

本実施形態に係る有機 EL 素子において、前記一般式 (38) で表される化合物は、下記一般式 (382) で表される化合物であることが好ましい。

【0702】

【化 2 8 3】



10

【 0 7 0 3】

(前記一般式(382)において、

A、B及びAcは、前記一般式(38)で定義したとおりであり、

R₃₈₃は、

水素原子、

シアノ基、

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環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、-O-(R₉₀₄)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、

R₉₀₁～R₉₀₄は、前記一般式(38)で定義したとおりである。)

20

【 0 7 0 4】

本実施形態に係る有機EL素子において、Lは、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12の(n+1)価の芳香族炭化水素環基であることが好ましい。

【 0 7 0 5】

本実施形態に係る有機EL素子において、L又はLaは、単結合であることが好ましい。

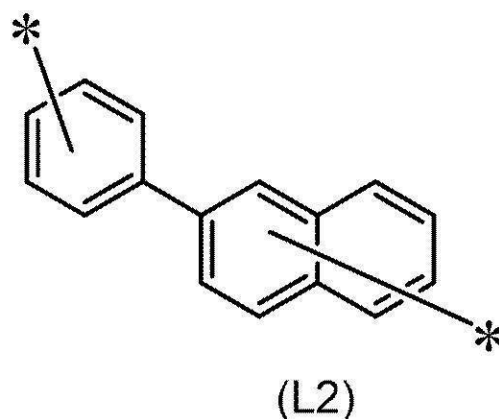
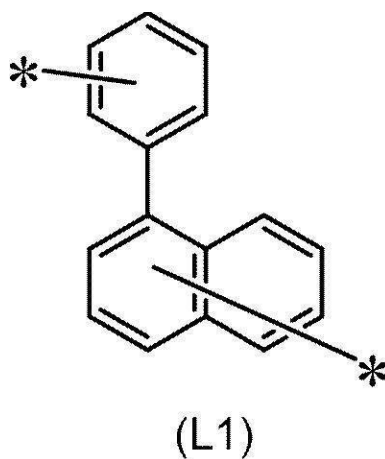
30

【 0 7 0 6】

本実施形態に係る有機EL素子において、L又はLaが、下記一般式(L1)又は(L2)で表される芳香族炭化水素環基であることが好ましい。

【 0 7 0 7】

【化 2 8 4】



40

【 0 7 0 8】

50

(前記一般式(L 1) 及び(L 2) において、
2つの*のうちの一方は、前記一般式(3) 中に示されるトリアジン環と結合し、
2つの*のうちの他方は、(C) n、(C z) n又はA cと結合し、
nが1の場合、(C) n又は(C z) nと結合する*は、1個存在し、
nが2の場合、(C) n又は(C z) nと結合する*は、2個存在し、
nが3の場合、(C) n又は(C z) nと結合する*は、3個存在する。)

【 0 7 0 9 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、A は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 2 のアリール基であることが好ましい。

【 0 7 1 0 】

本実施形態に係る有機 E L 素子の第三の化合物において、A 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ビフェニル基、又は
置換もしくは無置換のナフチル基であることが好ましい。

【 0 7 1 1 】

本実施形態に係る有機 E L 素子の第三の化合物において、A は、
フェニル基、
ビフェニル基、又は
ナフチル基であることが好ましい。

【 0 7 1 2 】

本実施形態に係る有機 E L 素子の第三の化合物において、B は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 2 のアリール基であることが好ましい。

【 0 7 1 3 】

本実施形態に係る有機 E L 素子の第三の化合物において、B 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ビフェニル基、又は
置換もしくは無置換のナフチル基であることが好ましい。

【 0 7 1 4 】

本実施形態に係る有機 E L 素子の第三の化合物において、A 及び B が、それぞれ独立に、
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ビフェニル基、又は
置換もしくは無置換のナフチル基であることが好ましい。

【 0 7 1 5 】

第三の化合物において、「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。

【 0 7 1 6 】

(第三の化合物の製造方法)

第三の化合物は、公知の方法により製造できる。また、第三の化合物は、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。

【 0 7 1 7 】

(第三の化合物の具体例)

第三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、これら第三の化合物の具体例に限定されない。

【 0 7 1 8 】

10

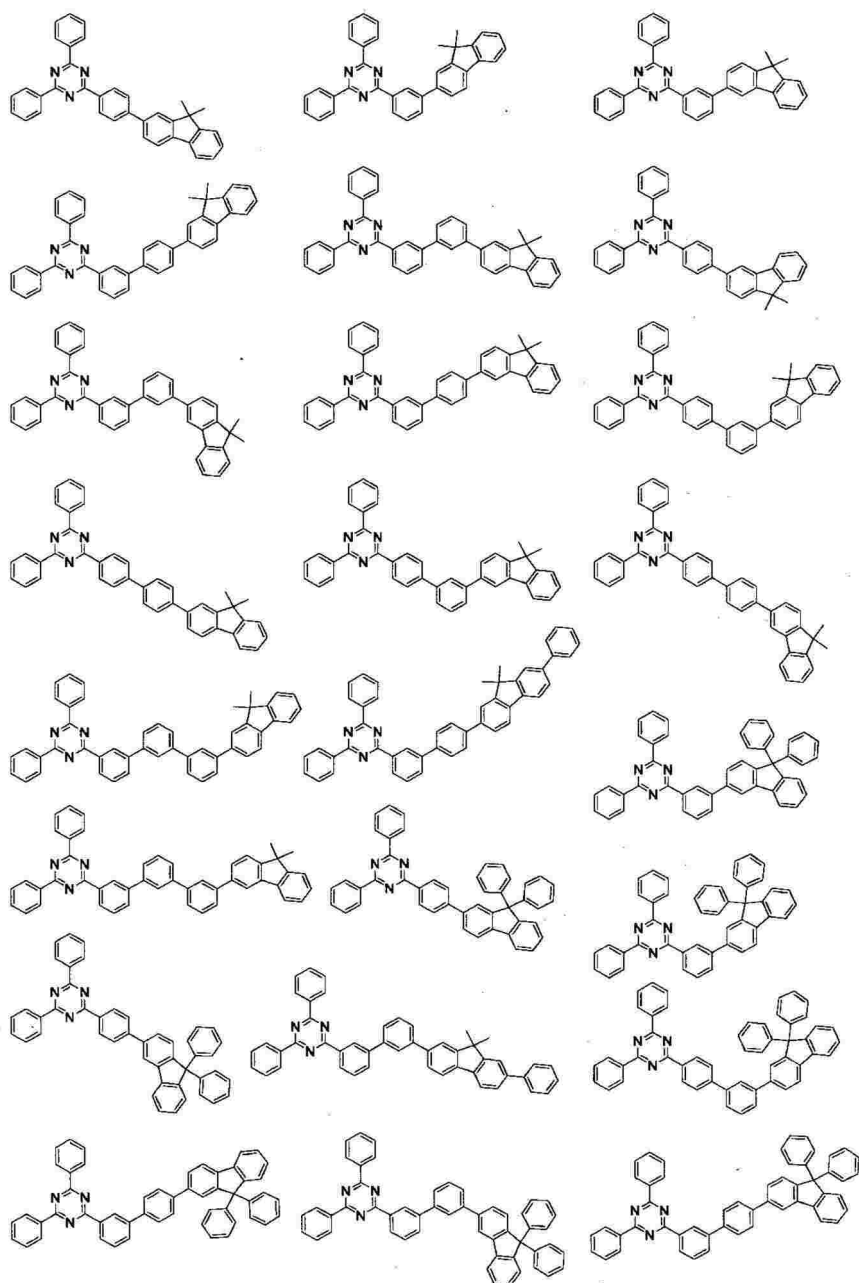
20

30

40

50

【化 2 8 5】



【 0 7 1 9】

10

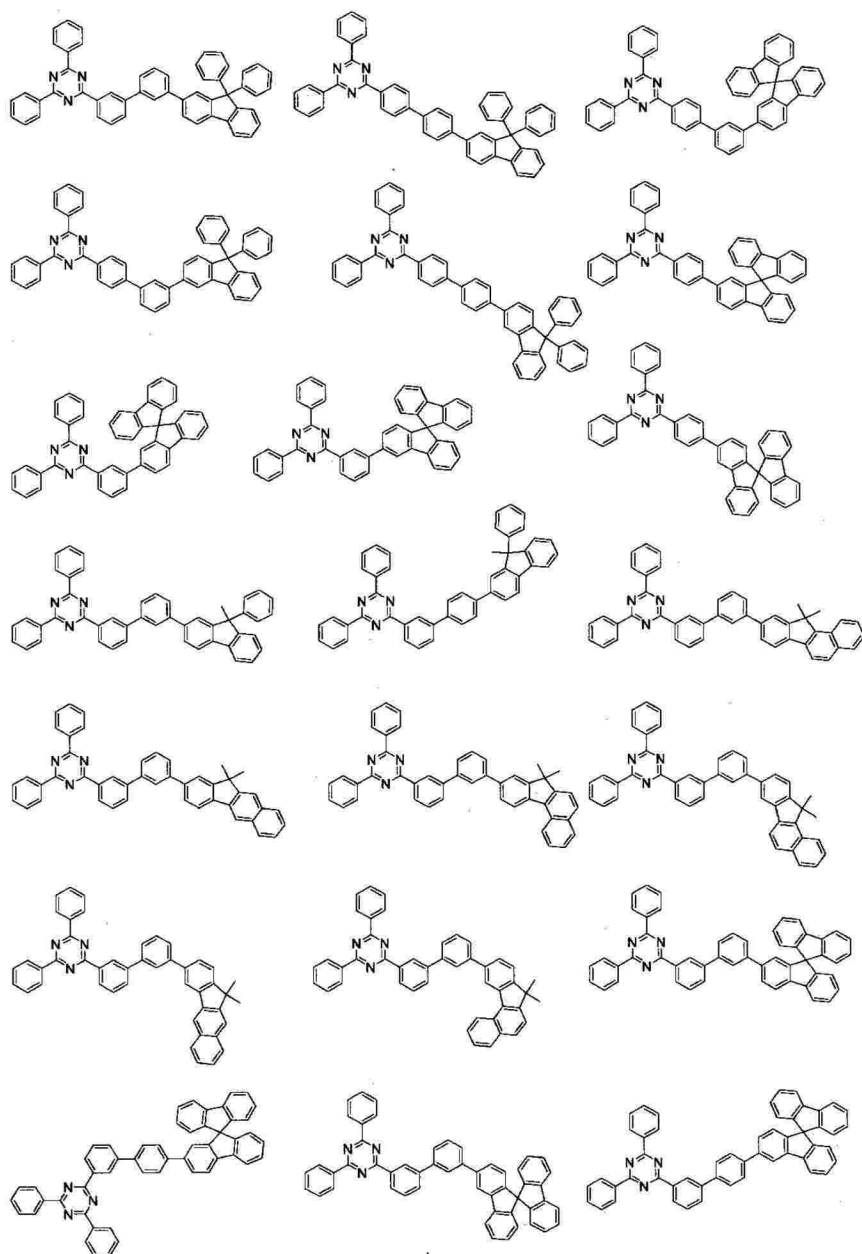
20

30

40

50

【化 2 8 6】



10

20

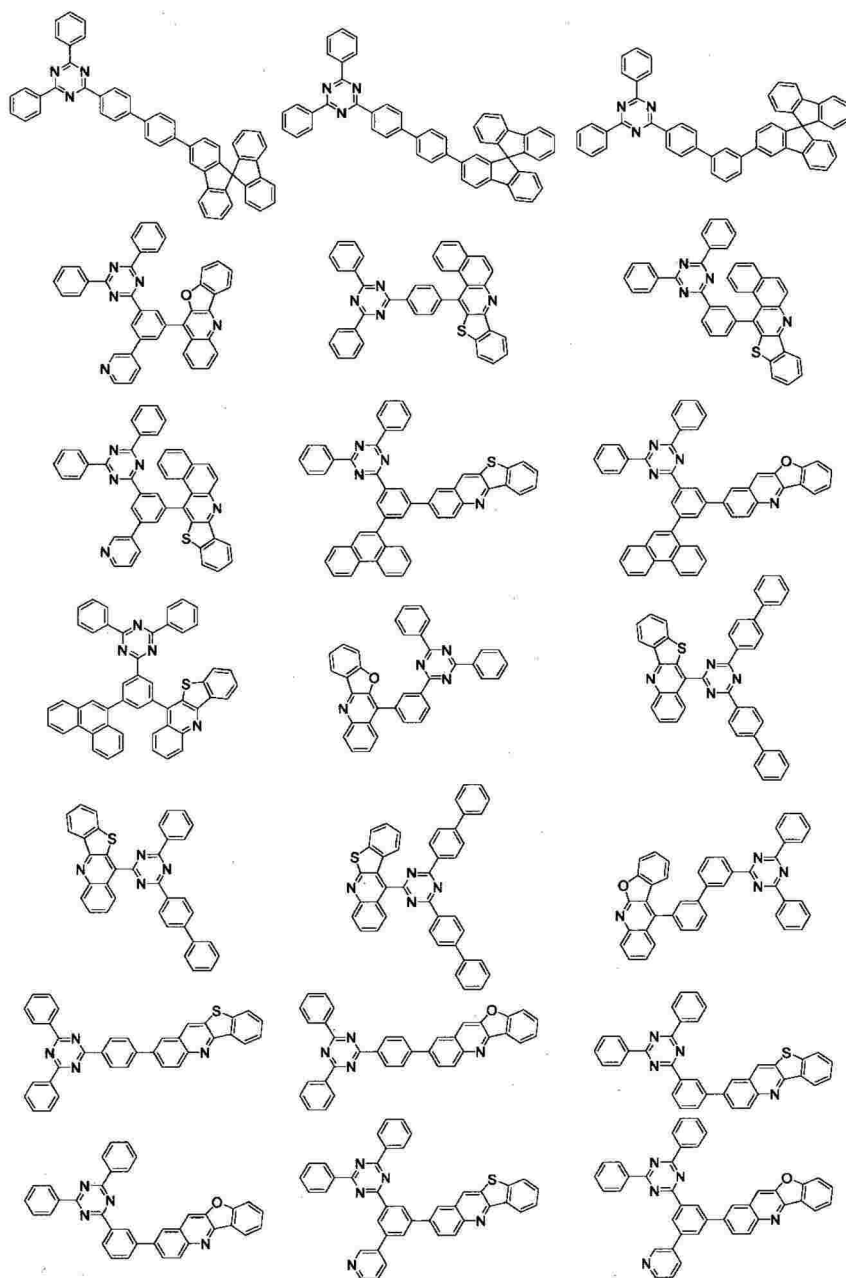
30

【 0 7 2 0】

40

50

【化 2 8 7】



10

20

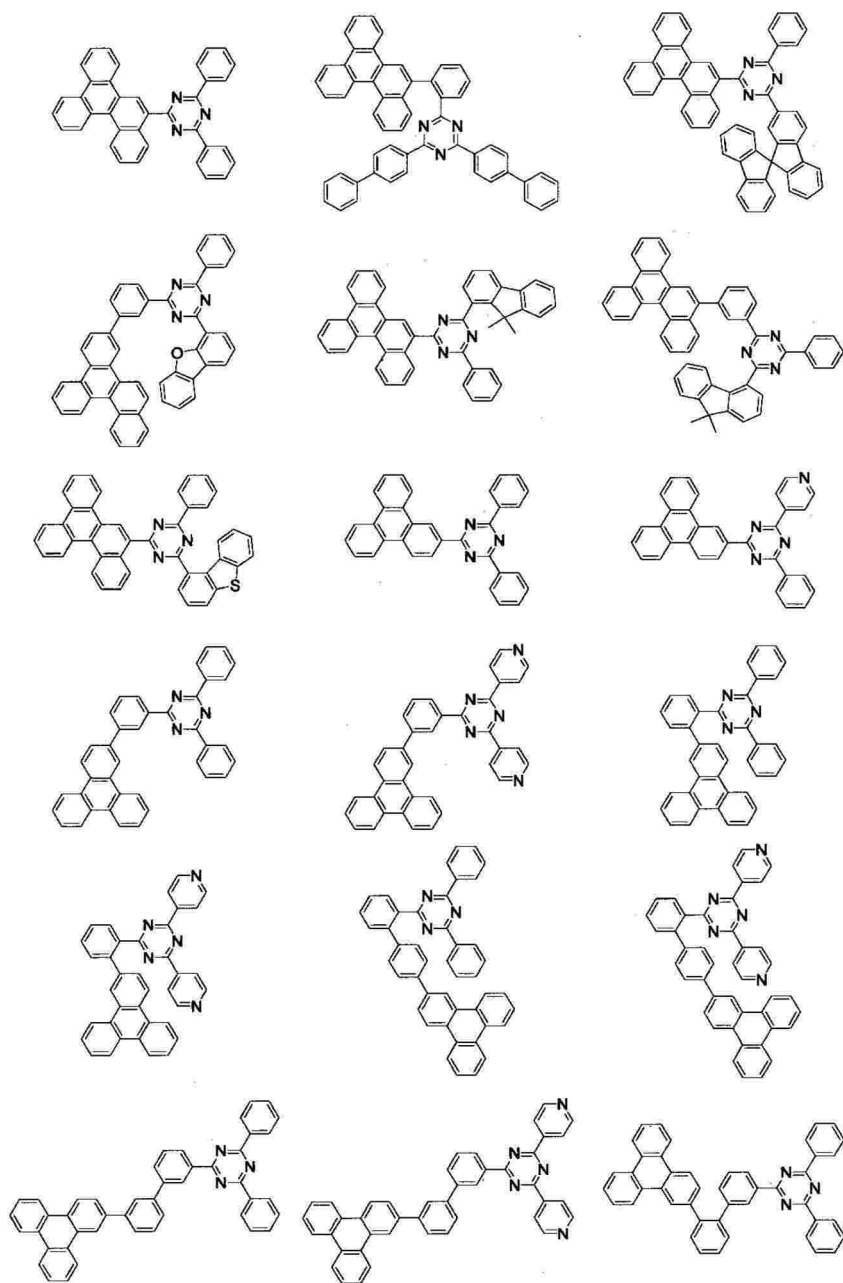
30

【 0 7 2 1】

40

50

【化 2 8 8】



【 0 7 2 2】

10

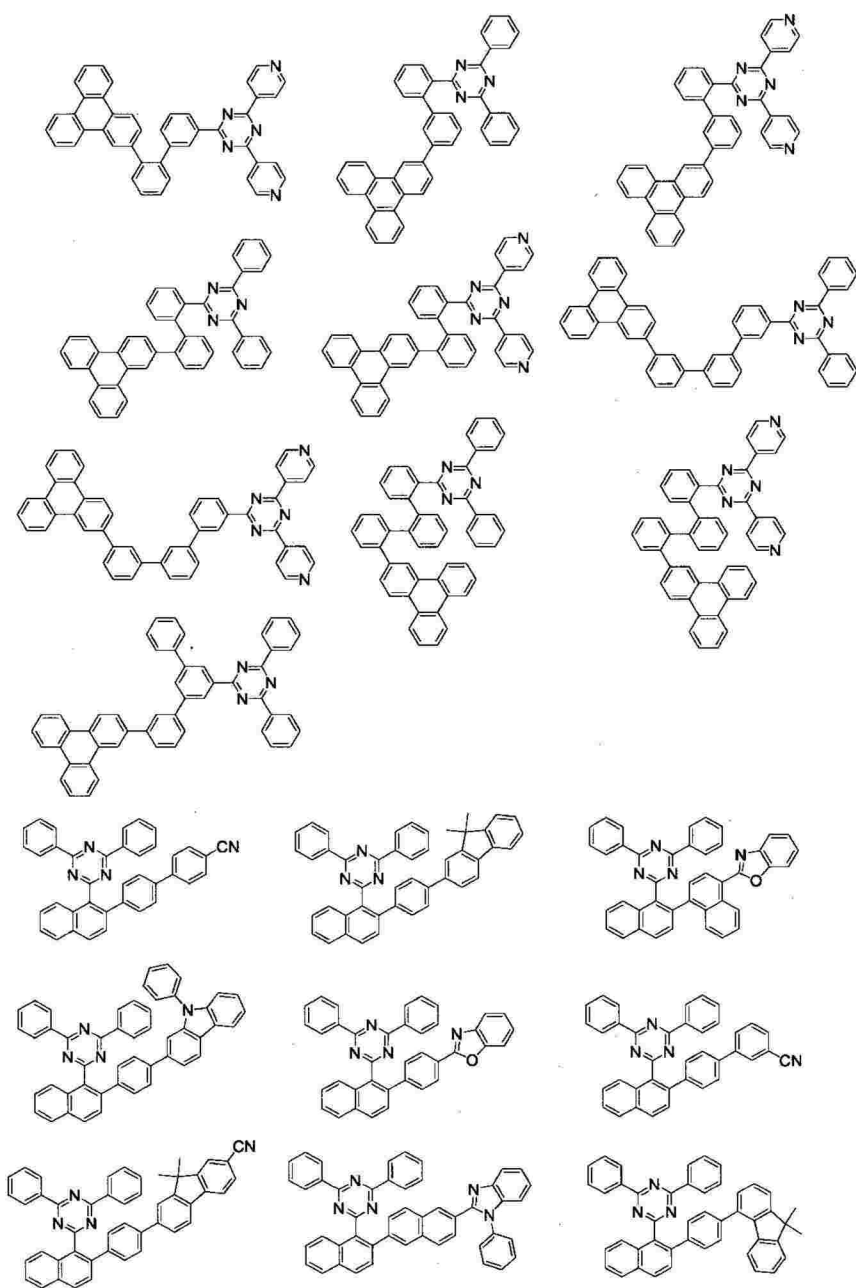
20

30

40

50

【化 2 8 9】



10

20

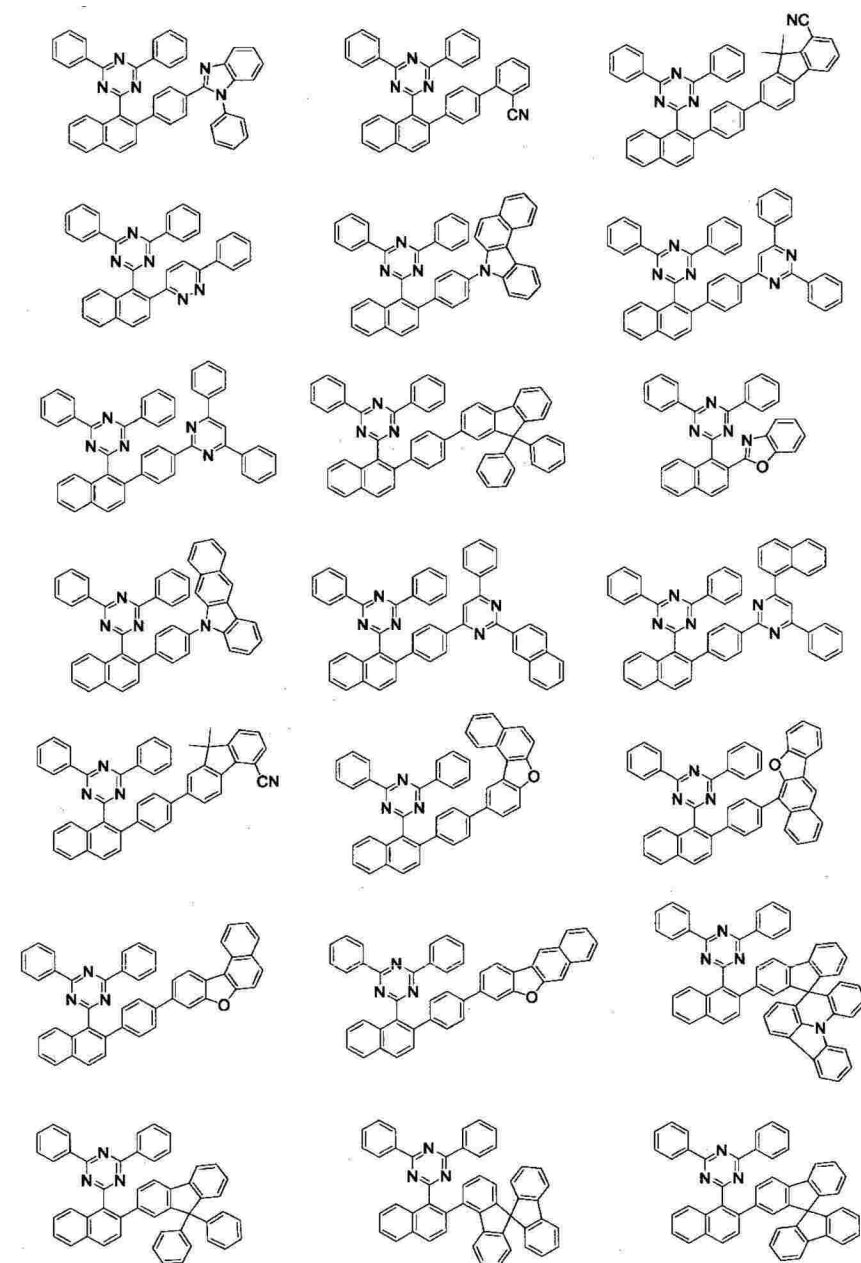
30

【 0 7 2 3 】

40

50

【化 2 9 0】



【 0 7 2 4】

10

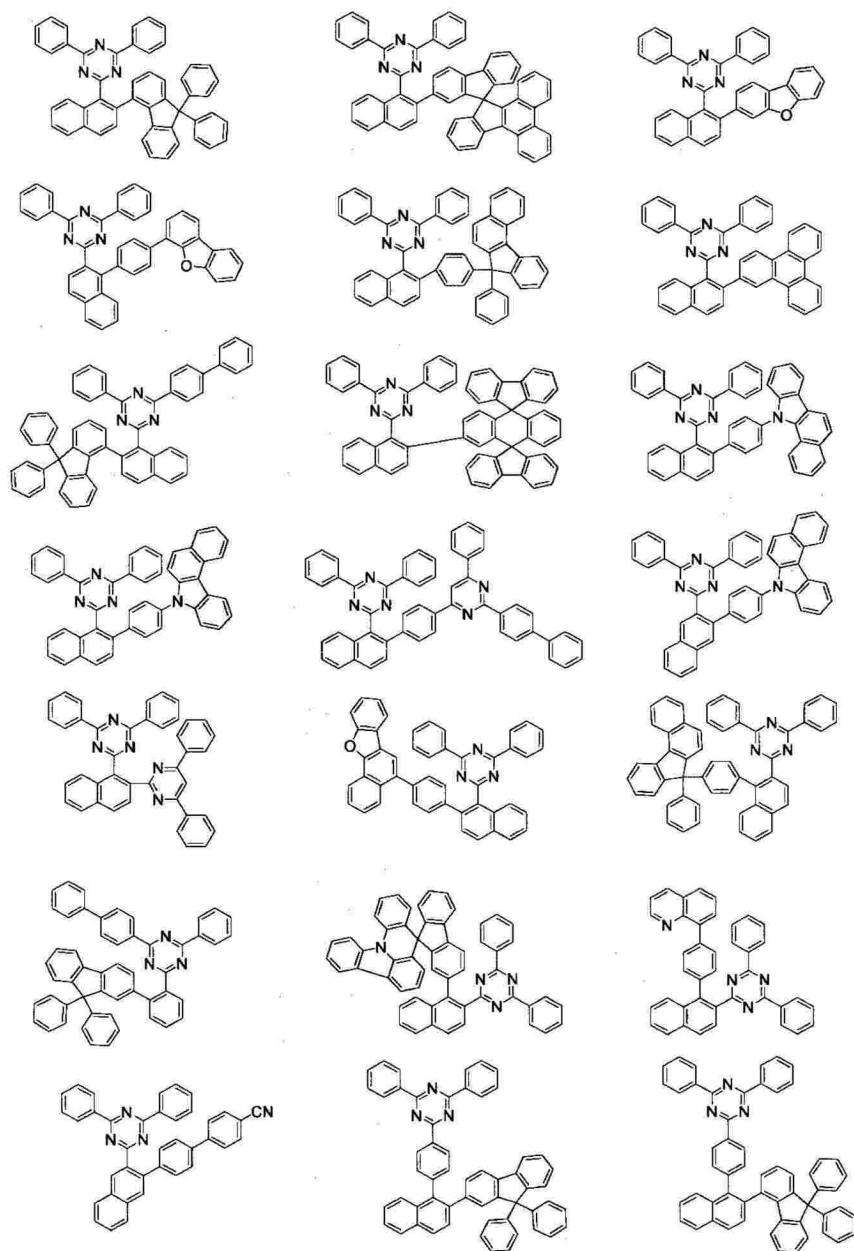
20

30

40

50

【化 2 9 1】



10

20

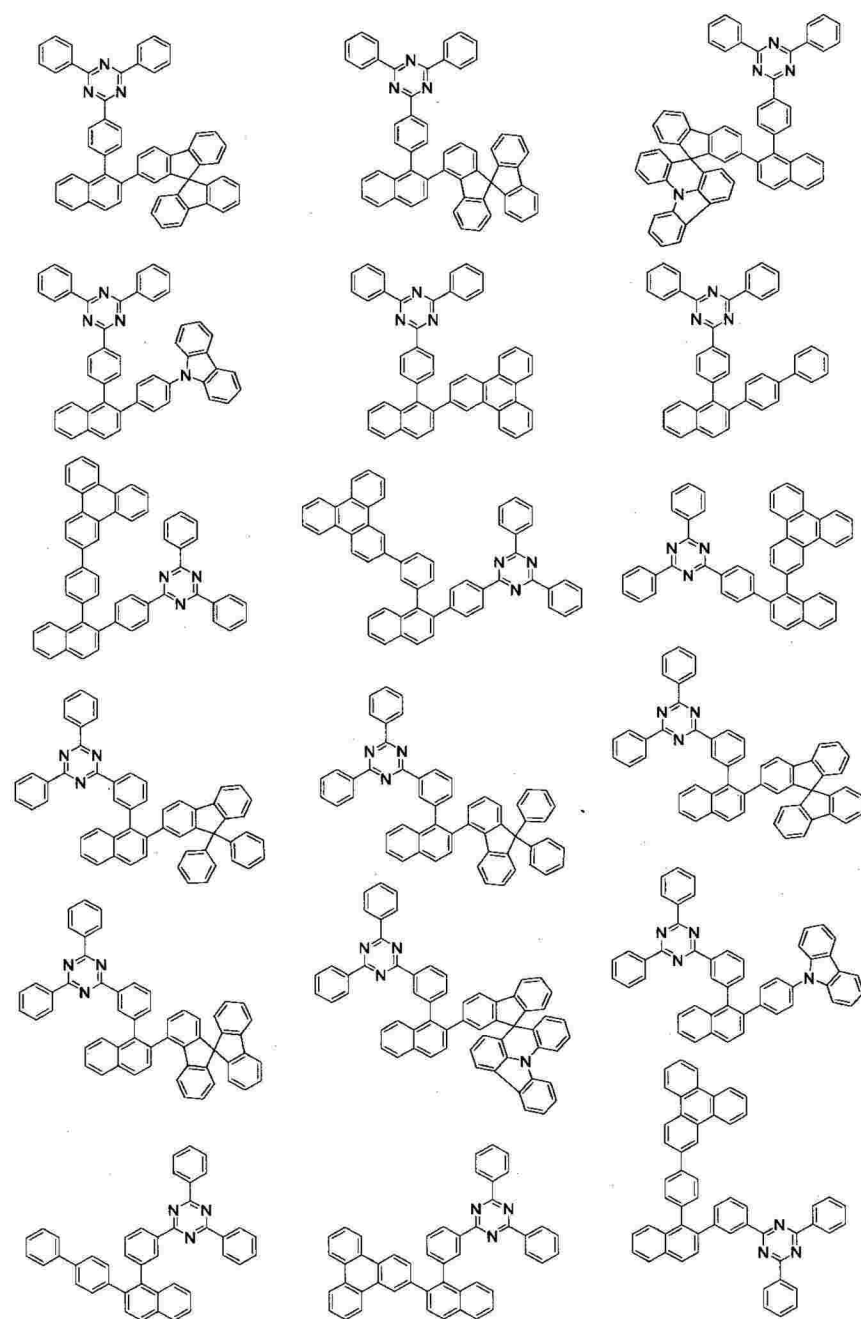
30

【 0 7 2 5】

40

50

【化 2 9 2】



【 0 7 2 6 】

10

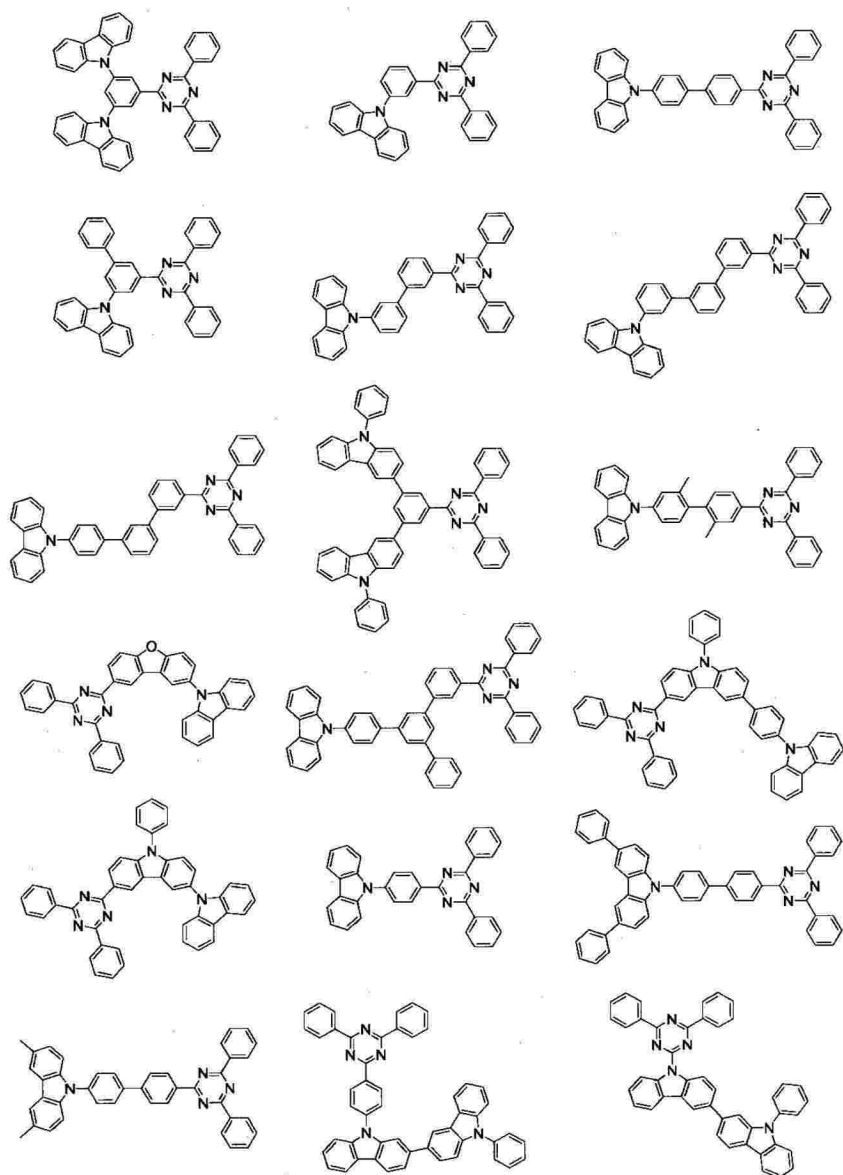
20

30

40

50

【化 2 9 3】



【 0 7 2 7 】

10

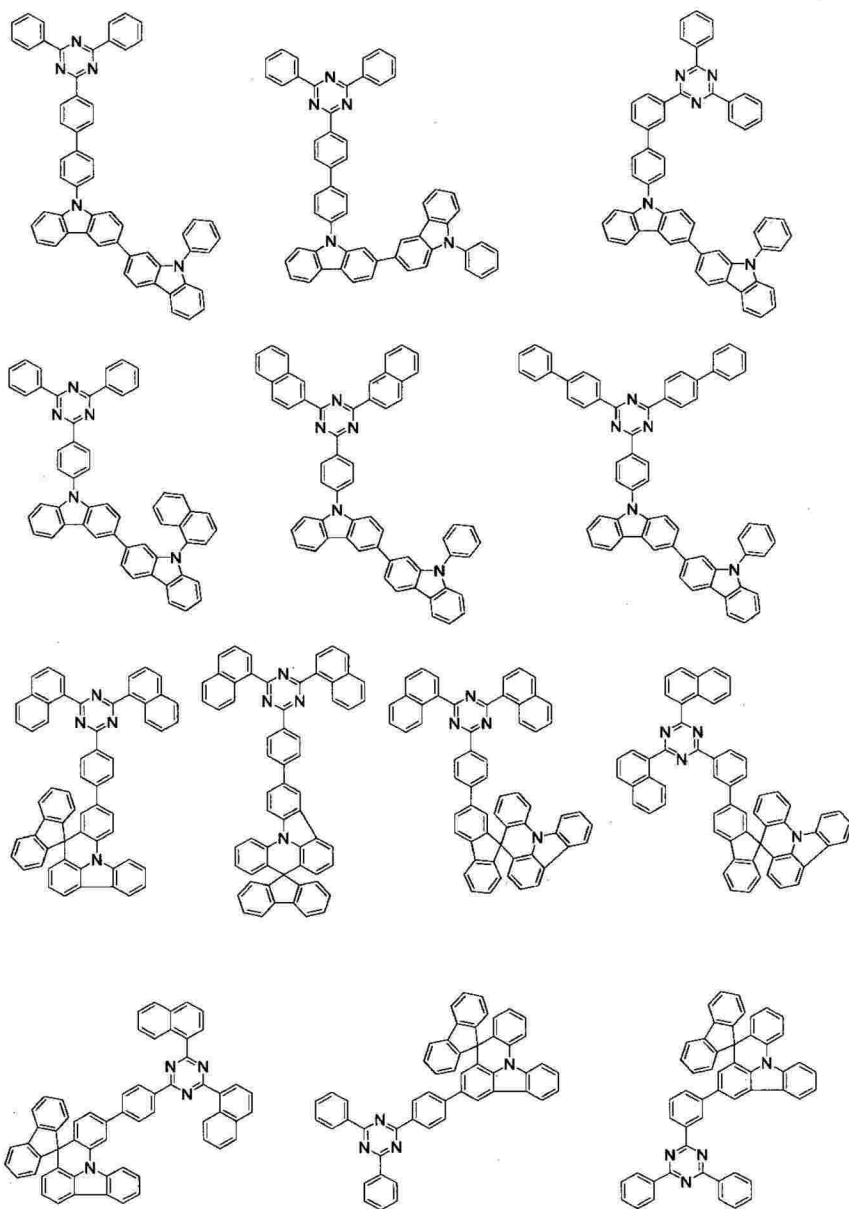
20

30

40

50

【化 2 9 4】



【 0 7 2 8】

10

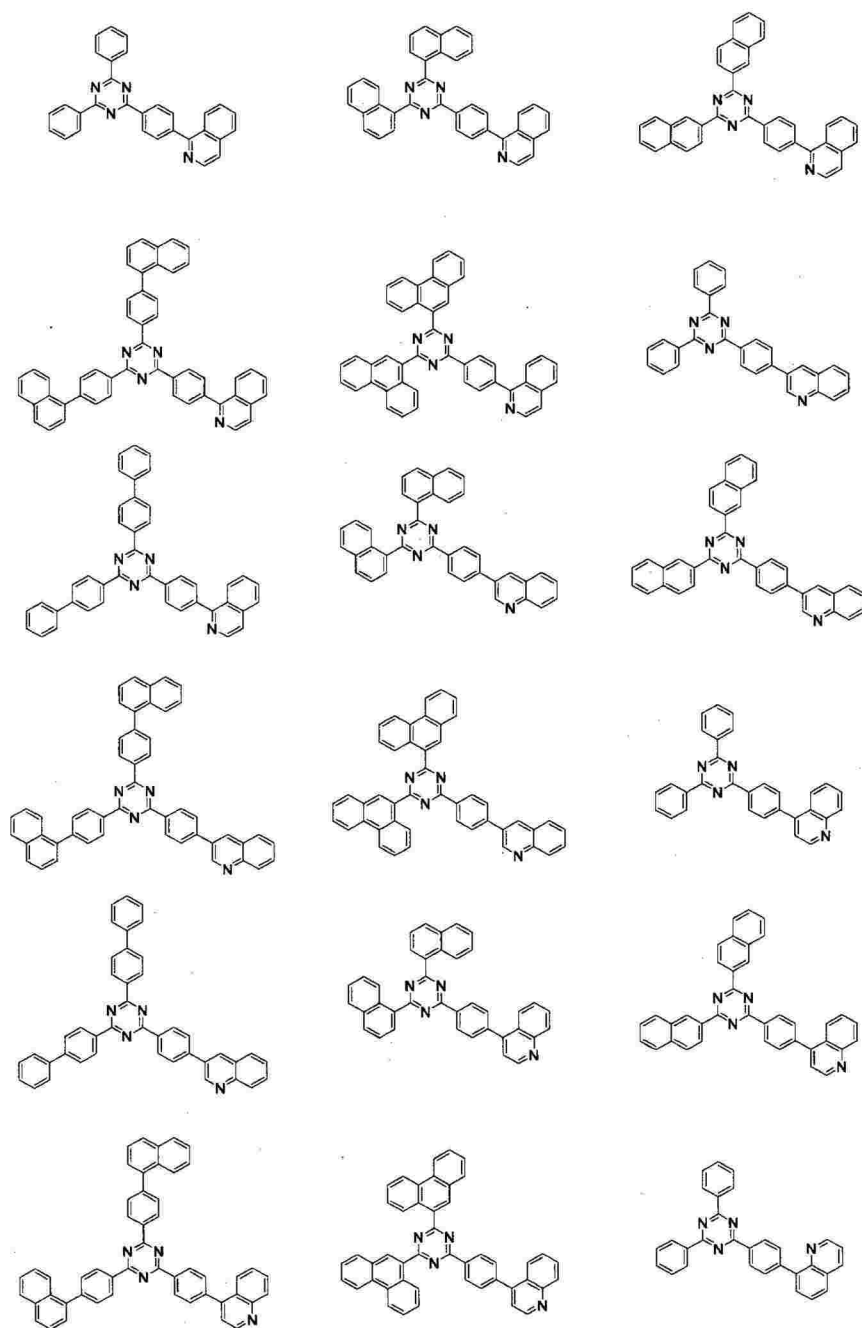
20

30

40

50

【化 2 9 5】



10

20

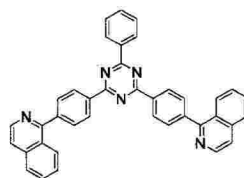
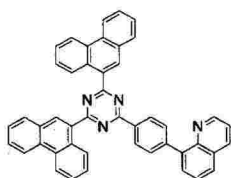
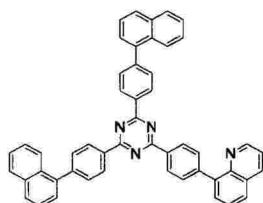
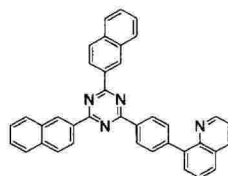
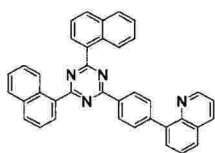
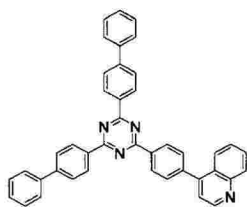
30

【 0 7 2 9 】

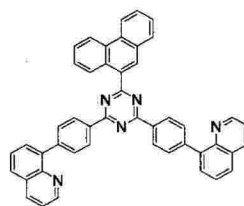
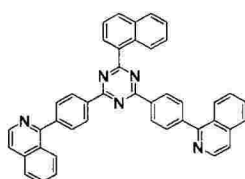
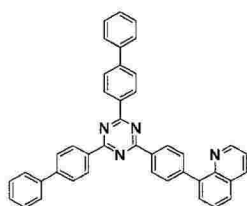
40

50

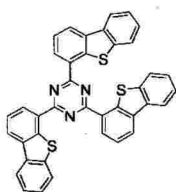
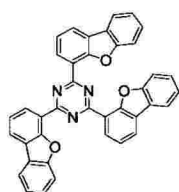
【化 2 9 6】



10



20



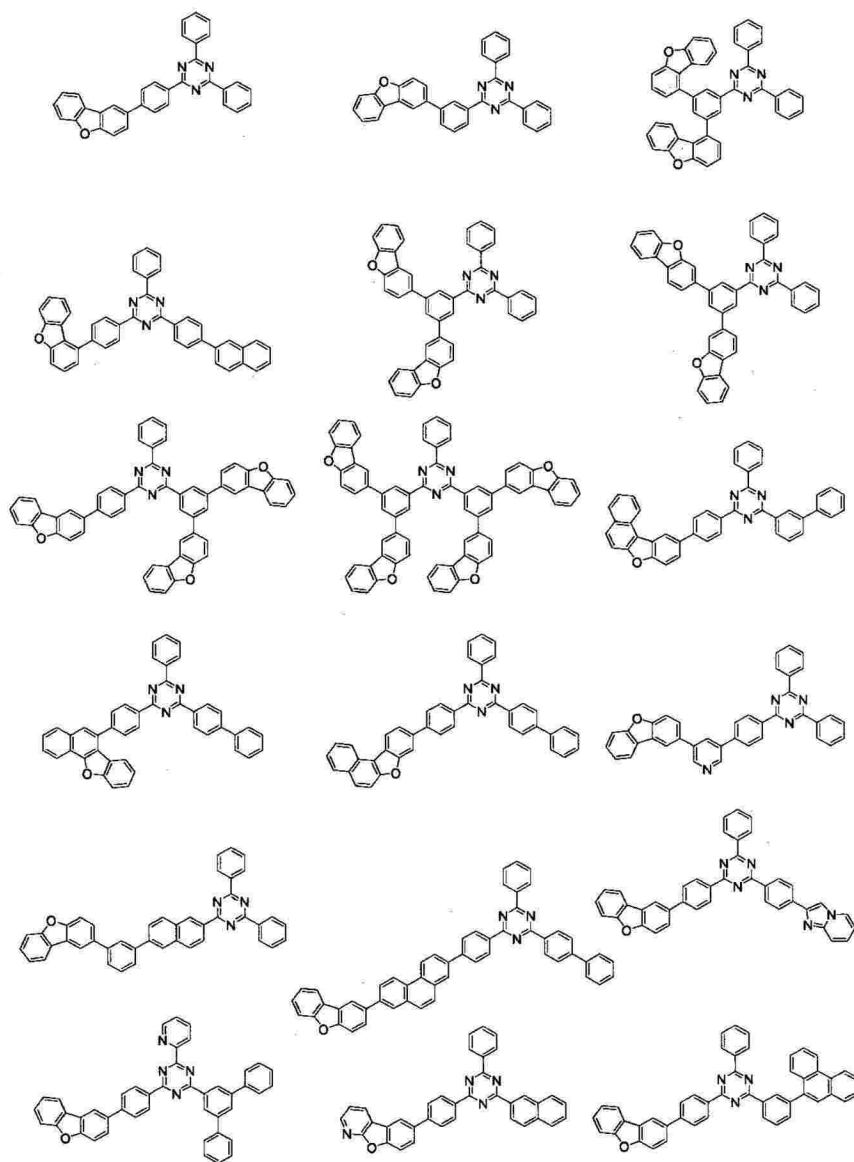
【 0 7 3 0】

30

40

50

【化 2 9 7】



10

20

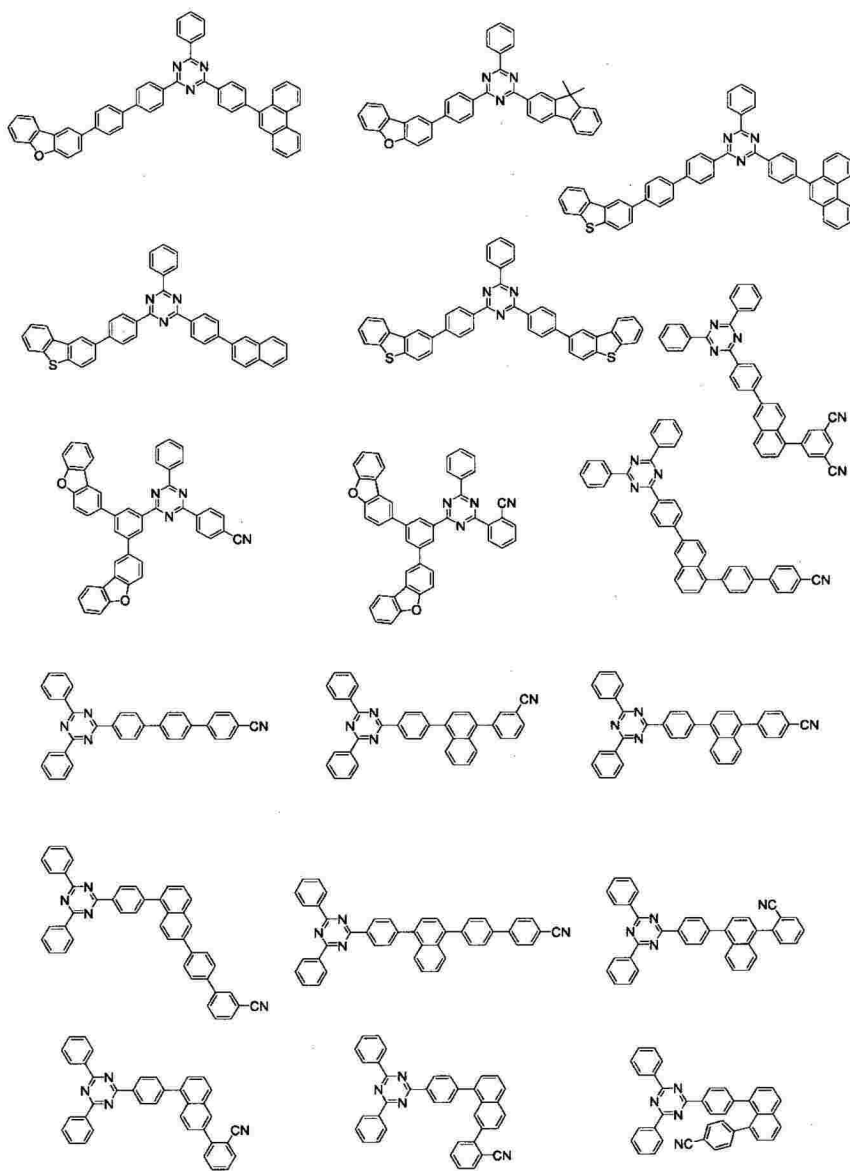
30

【 0 7 3 1】

40

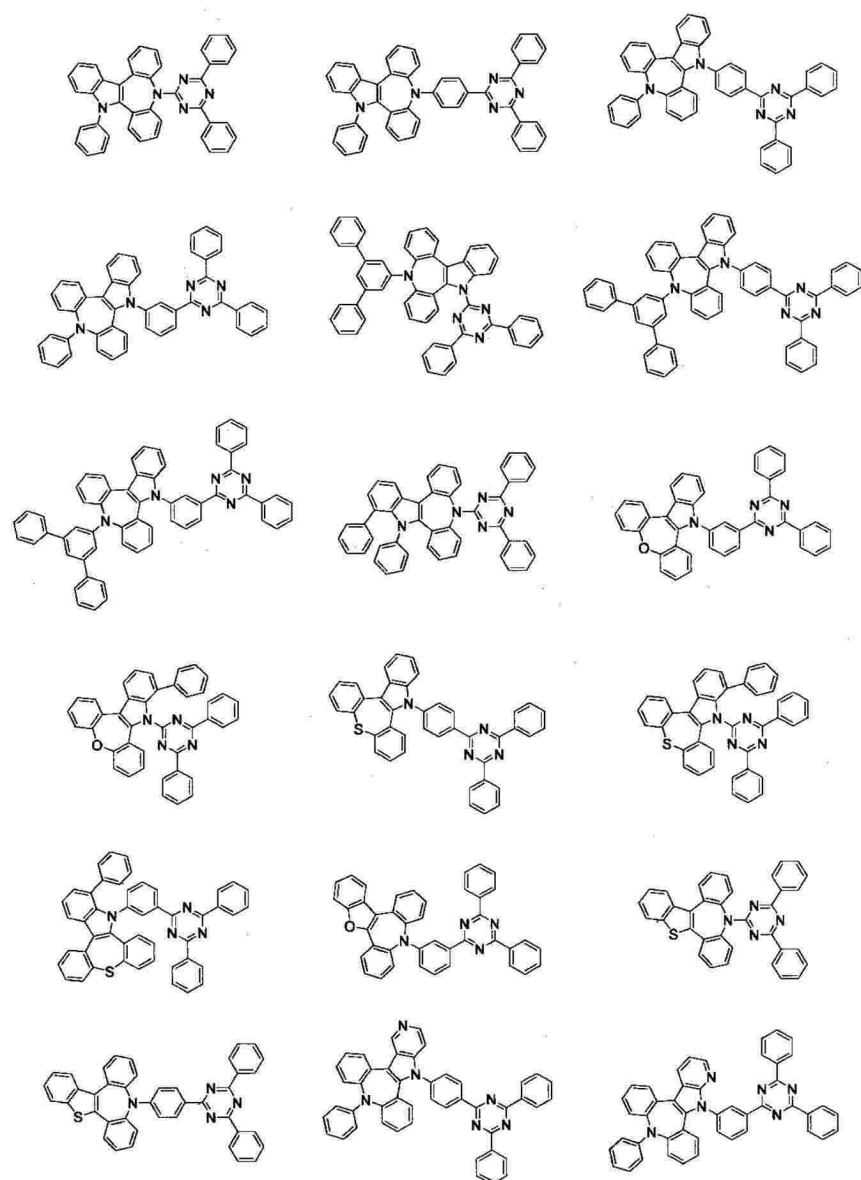
50

【化 2 9 8】



【 0 7 3 2】

【化 2 9 9】



10

20

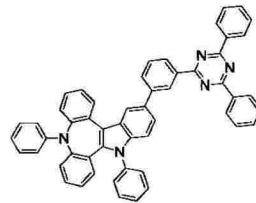
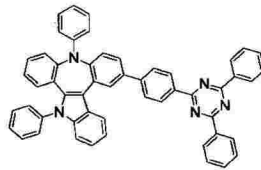
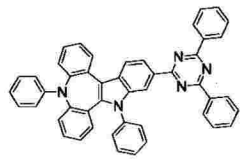
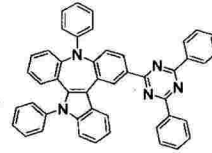
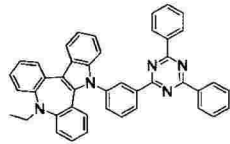
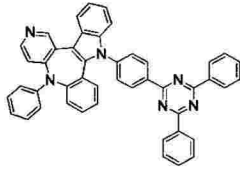
30

【 0 7 3 3】

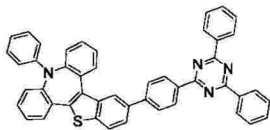
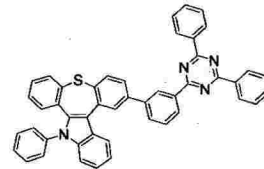
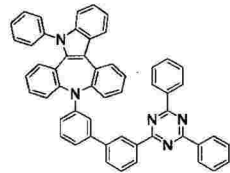
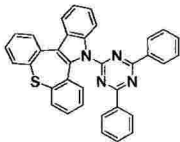
40

50

【化 3 0 0】



10



20

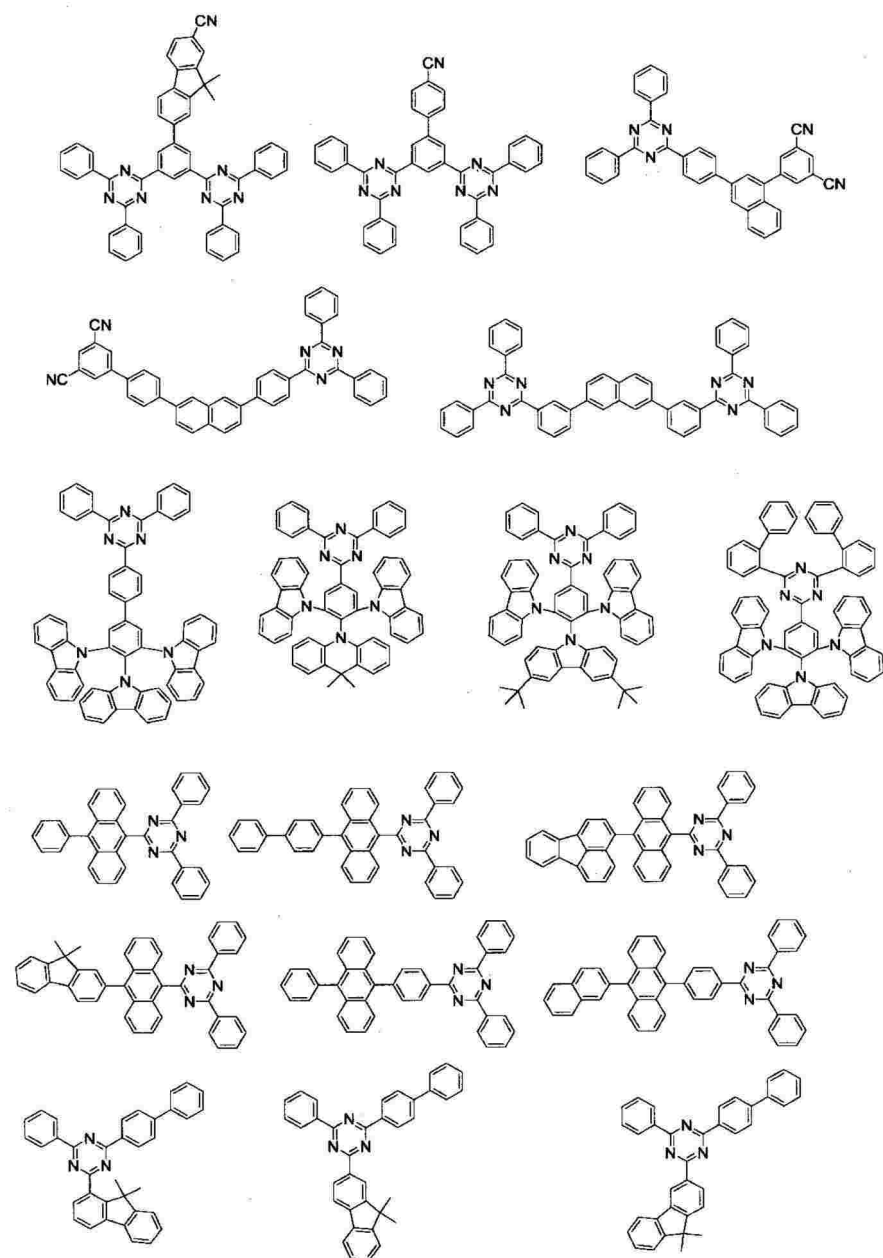
【 0 7 3 4】

30

40

50

【化 3 0 1】



【 0 7 3 5】

10

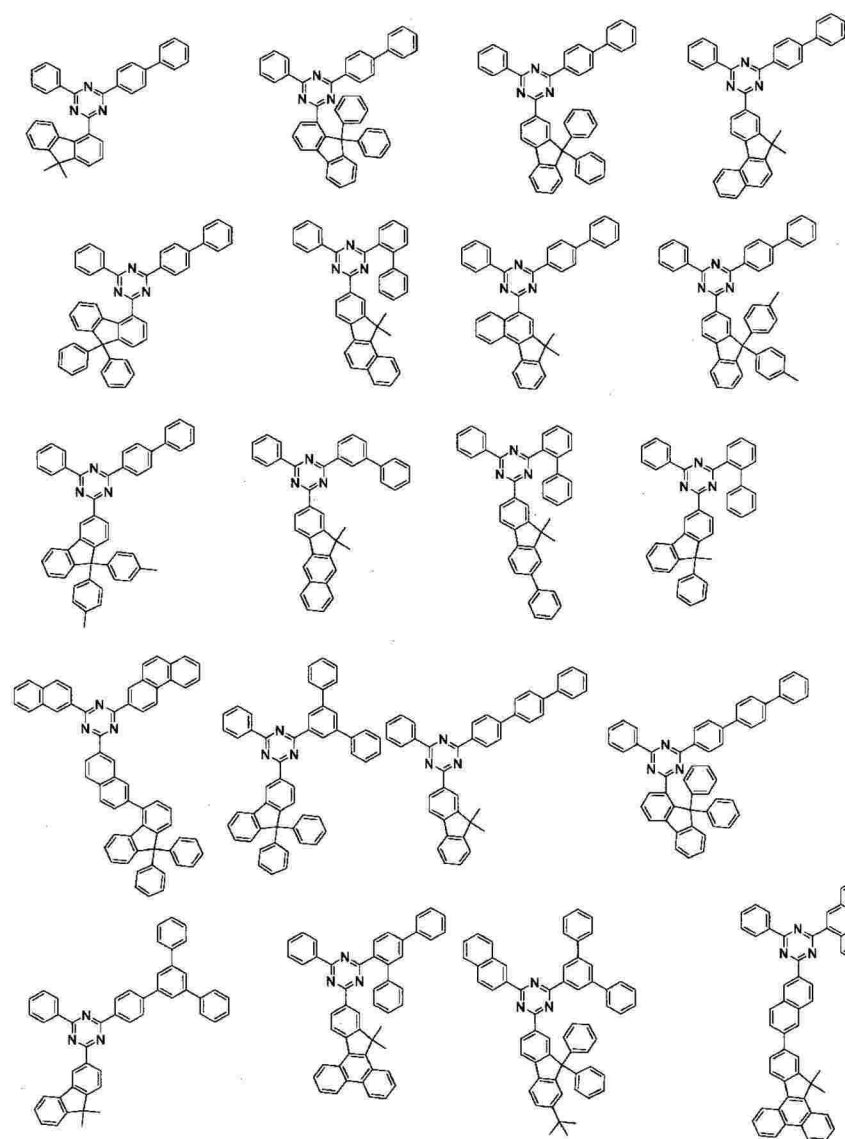
20

30

40

50

【化 3 0 2】



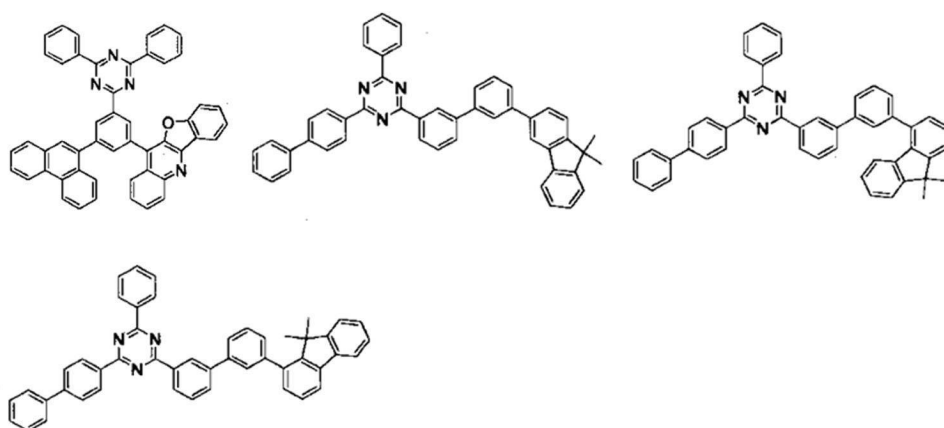
10

20

30

【 0 7 3 6】

【化 3 0 3】

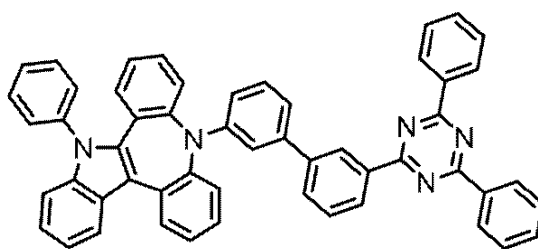
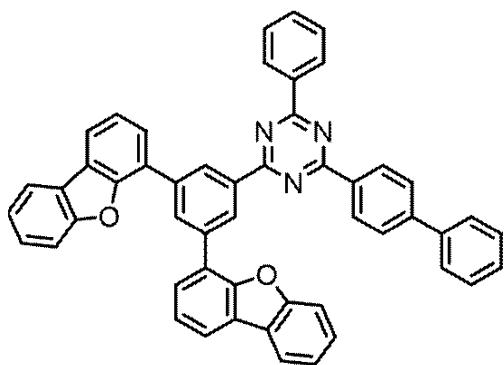


40

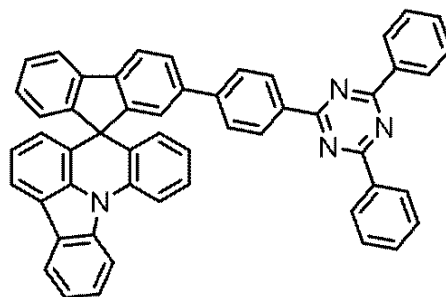
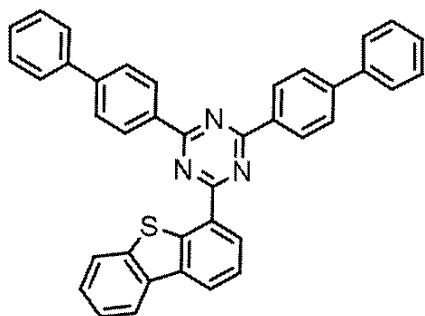
【 0 7 3 7】

50

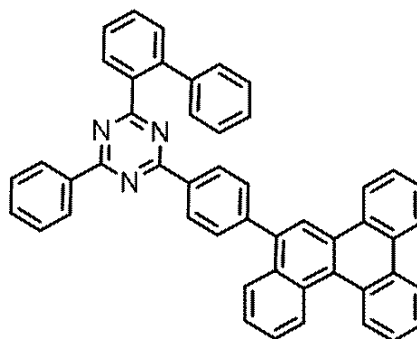
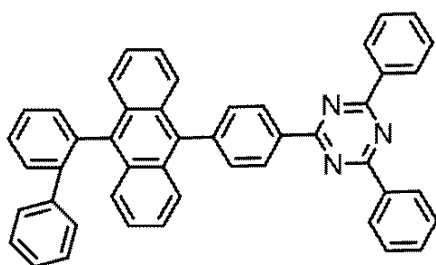
【化 3 0 4】



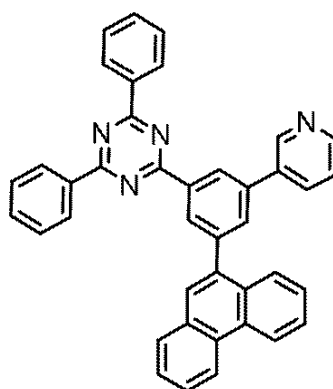
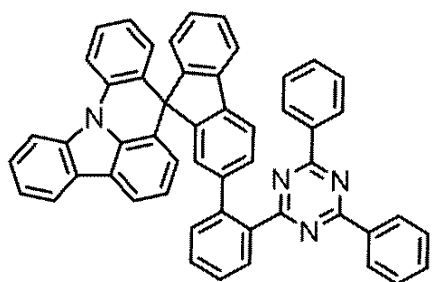
10



20



30

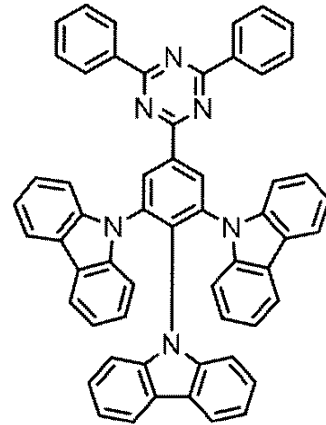
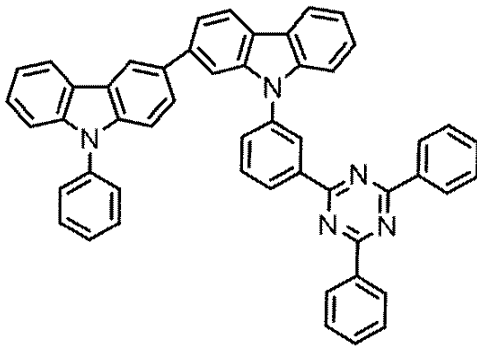


40

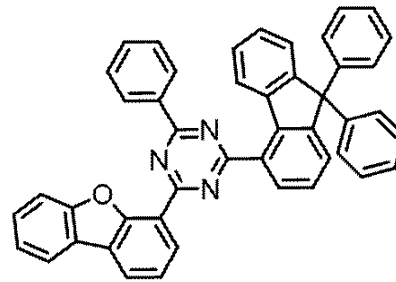
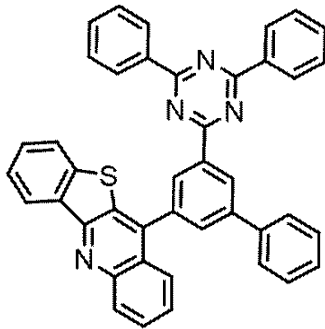
【 0 7 3 8】

50

【化 3 0 5】



10



20

【 0 7 3 9】

本実施形態に係る有機 E L 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ある。

【 0 7 4 0】

(基板)

基板は、有機 E L 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、ポリエーテルスルホン、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。

30

【 0 7 4 1】

(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 e V 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。

40

【 0 7 4 2】

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 1 0 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

50

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、スピンコート法などにより作製してもよい。

【0743】

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。

【0744】

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。

【0745】

（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。

【0746】

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。

【0747】

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 - 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、スピンコート法等を用いて成膜することができる。

【0748】

（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。

【0749】

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）

10

20

30

40

50

- N - フェニルアミノ] ベンゼン (略称 : D P A 3 B) 、 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 : P C z P C A 1) 、 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 : P C z P C A 2) 、 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 : P C z P C N 1) 等の芳香族アミン化合物等やジピラジノ [2 , 3 - f : 2 0 , 3 0 - h] キノキサリン - 2 , 3 , 6 , 7 , 1 0 , 1 1 - ヘキサカルボニトリル (H A T - C N) も挙げられる。

【 0 7 5 0 】

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、デンドリマー、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 : P V K) 、ポリ (4 - ビニルトリフェニルアミン) (略称 : P V T P A) 、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 : P T P D M A) 、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 : P o l y - T P D) 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) (P E D O T / P S S) 、ポリアニリン / ポリ (スチレンスルホン酸) (P A n i / P S S) 等の酸を添加した高分子化合物を用いることもできる。

【 0 7 5 1 】

(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事ができる。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 : N P B) 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 : T P D) 、 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 : B A F L P) 、 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 : D F L D P B i) 、 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 : T D A T A) 、 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 : M T D A T A) 、 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 : B S P B) 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 $1 0^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の正孔移動度を有する物質である。

【 0 7 5 2 】

正孔輸送層には、C B P 、 9 - [4 - (N - カルバゾリル)] フェニル - 1 0 - フェニルアントラセン (C z P A) 、 9 - フェニル - 3 - [4 - (1 0 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 9 H - カルバゾール (P C z P A) のようなカルバゾール誘導体や、t - B u D N A 、 D N A 、 D P A n t h 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 : P V K) やポリ (4 - ビニルトリフェニルアミン) (略称 : P V T P A) 等の高分子化合物を用いることもできる。

【 0 7 5 3 】

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。

【 0 7 5 4 】

本実施形態に係る有機 E L 素子は、前記陽極と前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層との間に配置された正孔輸送層をさらに有することも好ましく、前記正孔輸送層は、下記一般式 (C 1) 又は (D 1) で表される化合物を含有することが好ましい。

【 0 7 5 5 】

10

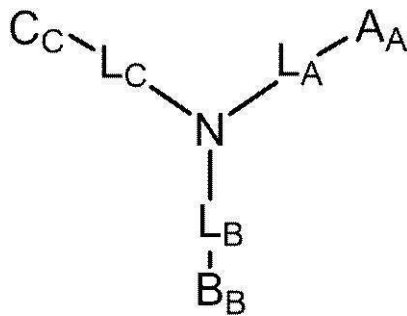
20

30

40

50

【化 3 0 6】



(C1)

10

【 0 7 5 6】

(前記一般式 (C1) において、

LA、LB 及び LC 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 ~ 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 ~ 13 の 2 価の複素環基であり、

AA、BB 及び CC 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 ~ 30 のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、又は

- Si(R'01)(R'02)(R'03) で表される基である。

20

R'01 ~ R'03 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 ~ 30
のアリール基であり、

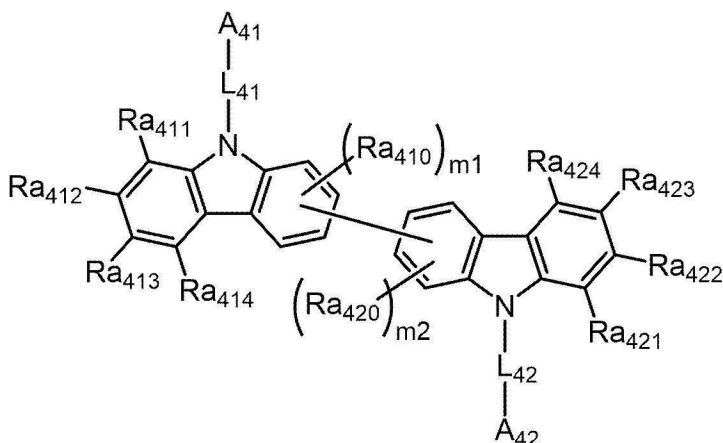
R'01 が複数存在する場合、複数の R'01 は、互いに同一であるか又は異なり、

R'02 が複数存在する場合、複数の R'02 は、互いに同一であるか又は異なり、

R'03 が複数存在する場合、複数の R'03 は、互いに同一であるか又は異なる。))

【 0 7 5 7】

【化 3 0 7】



(D1)

30

【 0 7 5 8】

(前記一般式 (D1) において、

A41 及び A42 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 ~ 30 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 ~ 30 の複素環基であり、

L41 及び L42 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、

Ra410 ~ Ra414 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、

50

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 a₄₂₀ ~ R a₄₂₄ 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 a₄₁₀ ~ R a₄₁₄ 並びに R a₄₂₀ ~ R a₄₂₄ は、それぞれ独立に、

水素原子、

シアノ基、

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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

ハロゲン原子、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

m₁ 及び m₂ は、3 であり、

3 つの R a₄₁₀ は、互いに同一であるか又は異なり、

3 つの R a₄₂₀ は、互いに同一であるか又は異なり、

前記一般式 (D 1) で表される化合物中、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃ 及び R₉₀₄ 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、

R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なる。)

【 0 7 5 9 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記正孔輸送層は、前記一般式 (C 1) で表される化合物を含有することが好ましい。

【 0 7 6 0 】

前記一般式 (C 1) で表される化合物において、「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。

【 0 7 6 1 】

(電子輸送層)

本実施形態に係る有機 E L 素子は、第一の発光層及び第二の発光層と、陰極との間にさらに追加の電子輸送層 (例えば、第二の電子輸送層及び第三の電子輸送層) を含んでいてもよい。

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 : A

10

20

30

40

50

1mq₃)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(略称: BeBq₂)、BA1q、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-ピフェニル)-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-ピフェニル)-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-ピフェニル)-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、追加の電子輸送層には、例えば、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。

【0762】

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)-co-(ピリジン-3,5-ジイル)](略称: PF-Py)、ポリ[(9,9-ジオクチルフルオレン-2,7-ジイル)-co-(2,2'-ビピリジン-6,6'-ジイル)](略称: PF-BPy)などを用いることができる。

【0763】

(電子注入層)

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層には、リチウム(Li)、セシウム(Cs)、カルシウム(Ca)、フッ化リチウム(LiF)、フッ化セシウム(CsF)、フッ化カルシウム(CaF₂)、リチウム酸化物(LiOx)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Alq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。

【0764】

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。

【0765】

本実施形態に係る有機EL素子において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

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少なくともいずれかの基であることが好ましい。

10

20

30

40

50

【 0 7 6 6 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1 ~ 5 のアルキル基であることが好ましい。

【 0 7 6 7 】

(層形成方法)

本実施形態の有機 E L 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、スピンドーティング法、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。

【 0 7 6 8 】

(膜厚)

本実施形態の有機 E L 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 E L 素子の各有機層の膜厚は、数 nm から 1 μ m の範囲が好ましい。

【 0 7 6 9 】

(有機 E L 素子の発光波長)

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、素子駆動時に最大のピーク波長が 430 nm 以上 480 nm 以下の光を放射することが好ましい。

素子駆動時に有機 E L 素子が放射する光の最大のピーク波長の測定は、以下のようにして行う。電流密度が 10 mA / cm² となるように有機 E L 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 (コニカミノルタ社製) で計測する。得られた分光放射輝度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測定し、これを最大のピーク波長 (単位: nm) とする。

【 0 7 7 0 】

本実施形態によれば、高い発光効率でかつ長い寿命で発光する有機エレクトロルミネッセンス素子を提供できる。

【 0 7 7 1 】

(第二実施形態)

(有機エレクトロルミネッセンス素子)

第二実施形態に係る有機 E L 素子の構成について説明する。

第二実施形態に係る有機 E L 素子は、第一の発光層及び第二の発光層に関して、第一実施形態に係る有機 E L 素子と相違する点を有するが、その他は、第一実施形態に係る有機 E L 素子と同様である。そのため、第二実施形態の説明において第一実施形態と同一の構成要素は、同一符号や名称を付す等して説明を省略もしくは簡略化する。また、第二実施形態では、特に言及されない素子構成、材料、及び化合物については、第一実施形態で説明した素子構成、材料、及び化合物と同様の素子構成、材料及び化合物を用いることができる。

【 0 7 7 2 】

本実施形態に係る有機 E L 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、互いに直接接している第一の発光層及び第二の発光層と、前記互いに直接接した第一の発光層および第二の発光層と、前記陰極の間に配置された第一の電子輸送層と、を有し、前記第一の発光層は、第一のホスト材料としての第一の化合物を含有し、前記第二の発光層は、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、最大のピーク波長が 500 nm 以下の発光を示す化合物を少なくとも含み、前記第二の発光層は、最大のピーク波長が 500 nm 以下の発光を示す化合物を少なくとも含み、前記第一の発光層が含む最大のピーク波長が 500 nm 以下の発光を示す化合物と前記第二の発光層が含む最大のピーク波長が 500 nm 以下の発光を示す化合物とが、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

10

20

30

40

50

ルギー $T_1(H2)$ とが、下記数式 (数 1 A) の関係を満たし、前記第一の電子輸送層は、第三の化合物を含有する。

$$T_1(H1) > T_1(H2) \quad \dots (\text{数 1 A})$$

【0773】

本実施形態に係る有機 EL 素子の第一の電子輸送層が含有する第三の化合物は、第一実施形態において説明した第三の化合物と同様の化合物である。

【0774】

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、TTF メカニズムと称する場合もある。TTF は、Triplet-Triplet Fusion の略称である。

【0775】

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に光を発するが、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。

$$^3A^* + ^3A^* \rightarrow (4/9) ^1A + (1/9) ^1A^* + (13/9) ^3A^*$$

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。

【0776】

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、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) を備え、第一の発光層中の第一のホスト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ホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ とが、前記数式 (数 1 A) の関係を満たす。

前記数式 (数 1 A) 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ホスト材料として、第一の発光層中の第一のホスト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。

【0777】

本実施形態に係る有機EL素子において、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。

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

【0778】

(有機EL素子の発光波長)

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、素子駆動時に最大のピーク波長が500nm以下の光を放射することが好ましい。

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、素子駆動時に最大のピーク波長が、430nm以上480nm以下の光を放射することがより好ましい。

素子駆動時に有機EL素子が放射する光の最大のピーク波長は、前述した方法で測定することができる。

【0779】

(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、最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物を少なくとも含む。この「最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物」は、第一のホスト材料であってもよく、第一のホスト材料とは異なる化合物でもよい。第一の発光層が含有する最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物は、最大のピーク波長が500nm以下の蛍光発光を示す化合物であることが好ましい。

【0780】

本実施形態において、最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物は、最大のピーク波長が500nm以下の蛍光発光を示す化合物であることが好ましい。

【0781】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一の発光層は、さらに、第一のドーパント材料を含み、前記第一のドーパント材料は、蛍光発光性化合物であることが好ましい。

【0782】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一のドーパント材料は、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。

【0783】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一のドーパント材料は、ホウ素含有錯体ではないことが好ましく、前記第一のドーパント材料は、錯体ではないことがより好ましい。

【0784】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一の発光層は、金属錯体を含むことが好ましい。また、本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一の発光層は、ホウ素含有錯体を含むことが好ましい。

【0785】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一の発光層は、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。

10

20

30

40

50

また、前記第一の発光層は、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mium錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

【0786】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一のドーパント材料が、前記最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物であることが好ましく、最大のピーク波長が500nm以下の蛍光発光を示す化合物であることがより好ましい。化合物の最大のピーク波長の測定方法は、前述の通りである。

【0787】

前記第一のドーパント材料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のピークとし、当該最大のピークの高さを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。

10

また、前記第一のドーパント材料の発光スペクトルにおいて、ピークの数3未満であることが好ましい。

【0788】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一の発光層は、素子駆動時に最大のピーク波長が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の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。

20

【0789】

・素子駆動時に発光層から放射される光の最大のピーク波長 p

素子駆動時に第一の発光層から放射される光の最大のピーク波長 p_1 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 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、最大のピーク波長 p_1 （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のピーク波長 p_2 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 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、最大のピーク波長 p_2 （単位：nm）を算出する。

30

【0790】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一のホスト材料の一重項エネルギー $S_1(H1)$ と、前記第一のドーパント材料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。

【0791】

40

第一のホスト材料と第一のドーパント材料とが、前記数式（数20）の関係を満たすことにより、第一のホスト材料上で生成された一重項励起子は、第一のホスト材料から第一のドーパント材料へエネルギー移動し易くなり、第一のドーパント材料の蛍光性発光に寄与する。

【0792】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H1)$ と、前記第一のドーパント材料の三重項エネルギー $T_1(D1)$ とが下記数式（数2A）の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(D1) > T_1(H1) \quad \dots (\text{数} 2A)$$

【0793】

50

第一のホスト材料と第一のドーパント材料とが、前記数式（数 2 A）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ドーパント材料ではなく、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。

【0794】

本実施形態に係る有機 EL 素子は、下記数式（数 2 B）の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(D1) > T_1(H1) > T_1(H2) \dots (\text{数 2 B})$$

【0795】

（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。

10

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} mol/L 以上 10^{-4} 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 edge [nm] に基づいて、次の換算式（F 1）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。

$$\text{換算式 (F 1)} : T_1 [\text{eV}] = 1239.85 / \text{edge}$$

【0796】

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。

20

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。

30

【0797】

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電子移動度 μ_{H1} と、第二のホスト材料の電子移動度 μ_{H2} とが、下記数式（数 6）の関係を満たすことも好ましい。

$$\mu_{H2} > \mu_{H1} \dots (\text{数 6})$$

【0798】

第一のホスト材料と第二のホスト材料とが、前記数式（数 6）の関係を満たすことで、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。

40

【0799】

電子移動度は、インピーダンス分光法を用い、以下の方法で測定できる。

陽極及び陰極で厚さ $100 \text{ nm} \sim 200 \text{ nm}$ の測定対象層を挟み、バイアス DC 電圧を印加しながら 100 mV 以下の微小交流電圧を印加する。このときに流れる交流電流値（絶対値と位相）を測定する。交流電圧の周波数を変えながら本測定を行い、電流値と電圧値とから、複素インピーダンス（ Z ）を算出する。このときモジュラス $M = |Z|$ （ i : 虚数単位、 ω : 角周波数）の虚数部（ $\text{Im} M$ ）の周波数依存性を求め、 $\text{Im} M$ が最大値となる周波数 ω_{max} の逆数を、測定対象層内を伝導する電子の応答時間と定義する。そして以下の式により電子移動度を算出する。

$$\text{電子移動度} = (\text{測定対象層の膜厚})^2 / (\text{応答時間} \cdot \text{電圧})$$

50

【0800】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第一のドーパント材料は、前記第一の発光層中に、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、第一のドーパント材料を、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、第一のドーパント材料を、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。

【0801】

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ドーパント材料とを含有する場合、第一のホスト材料及び第一のドーパント材料の合計含有率の上限は、100質量%である。

【0802】

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ドーパント材料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、第一のドーパント材料を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

【0803】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記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。前記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、前記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。前記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、前記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。

【0804】

(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、最大のピーク波長が500nm以下の蛍光発光を示す化合物を少なくとも含む。この「最大のピーク波長が500nm以下の蛍光発光を示す化合物」は、第二のホスト材料であってもよく、第二のホスト材料とは異なる化合物でもよい。第二の発光層が含有する最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物は、最大のピーク波長が500nm以下の蛍光発光を示す化合物であることが好ましい。

化合物の最大のピーク波長の測定方法は、前述の通りである。

【0805】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第二の発光層は、さらに、第二のドーパント材料を含み、前記第二のドーパント材料は、蛍光発光性化合物であることが好ましい。

【 0 8 0 6 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記第二のドーパント材料が、最大のピーク波長が 5 0 0 n m 以下の発光を示す化合物であることが好ましく、最大のピーク波長が 5 0 0 n m 以下の蛍光発光を示す化合物であることがより好ましい。

【 0 8 0 7 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記第二の発光層は、素子駆動時に最大のピーク波長が 5 0 0 n m 以下の光を放射することが好ましい。

【 0 8 0 8 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記第二のドーパント材料の最大のピークの半値幅が、1 n m 以上、2 0 n m 以下であることが好ましい。

10

【 0 8 0 9 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記第二のドーパント材料のストークスシフトは、7 n m を超えることが好ましい。

第二のドーパント材料のストークスシフトが 7 n m 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、実施例に記載の方法で測定できる。

20

【 0 8 1 0 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記第二のドーパント材料の三重項エネルギー $T_1(D2)$ 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）の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(D2) > T_1(H2) \quad \dots (数 3)$$

【 0 8 1 1 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、第二のドーパント材料と、第二のホスト材料とが、前記数式（数 3）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ドーパント材料ではなく、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ドーパント材料には移動しない。第二のドーパント材料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。

30

第二のホスト材料の三重項励起子が第二のドーパント材料に移動することなく、T T F 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。

【 0 8 1 2 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記第二のホスト材料の一重項エネルギー $S_1(H2)$ と前記第二のドーパント材料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。

40

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

【 0 8 1 3 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、第二のドーパント材料と、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、第二のドーパント材料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、T T F 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ドーパント材料へエネルギー移動し、第二のドーパント材料の蛍光性発光に寄与する。

【 0 8 1 4 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、第二のドーパント材料は、分子中にアジン環

50

構造を含まない化合物であることが好ましい。

【0815】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第二のドーパント材料は、ホウ素含有錯体ではないことが好ましく、前記第二のドーパント材料は、錯体ではないことがより好ましい。

【0816】

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

【0817】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第二の発光層は、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、前記第二の発光層は、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mium錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

【0818】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記第二のドーパント材料は、前記第二の発光層中に、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、第二のドーパント材料を、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、第二のドーパント材料を、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。

【0819】

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ドーパント材料とを含有する場合、第二のホスト材料及び第二のドーパント材料の合計含有率の上限は、100質量%である。

【0820】

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ドーパント材料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、第二のドーパント材料を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

【0821】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記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。前記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、前記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、前記第二の発光層の膜厚は、20nm以下であることが好ましい。前記第二の発光層の膜厚が20nm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、前記第二の発光層の膜厚は、5nm以上、2

10

20

30

40

50

0 nm以下であることが好ましい。

【0822】

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層が含む最大のピーク波長が500 nm以下の発光を示す化合物又は第二の発光層が含む最大のピーク波長が500 nm以下の発光を示す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。

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

【0823】

第一の発光層が第一のドーパント材料を含有する場合、第一のドーパント材料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。

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

【0824】

第二の発光層が第二のドーパント材料を含有する場合、第二のドーパント材料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。

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

【0825】

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層が含む最大のピーク波長が500 nm以下の発光を示す化合物又は第二の発光層が含む最大のピーク波長が500 nm以下の発光を示す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。

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

【0826】

第一の発光層が第一のドーパント材料を含有する場合、第一のドーパント材料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。

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

【0827】

第二の発光層が第二のドーパント材料を含有する場合、第二のドーパント材料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。

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

【0828】

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。

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

【0829】

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。

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

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

【0830】

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。

【0831】

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。

10

20

30

40

50

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

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

【0832】

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。

【0833】

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の発光層が含む前記最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物の三重項エネルギー $T_1(F1)$ 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。

$$2.60 \text{ eV} > T_1(F1) \quad \dots (\text{数} 14A)$$

$$2.50 \text{ eV} > T_1(F1) \quad \dots (\text{数} 14B)$$

第一の発光層が、前記数式(数14A)又は(数14B)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。

【0834】

本実施形態に係る有機EL素子において、第二の発光層が含む前記最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物の三重項エネルギー $T_1(F2)$ 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。

$$2.60 \text{ eV} > T_1(F2) \quad \dots (\text{数} 14C)$$

$$2.50 \text{ eV} > T_1(F2) \quad \dots (\text{数} 14D)$$

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。

【0835】

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。

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

【0836】

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

【0837】

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。

(LS3) 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。

【0838】

(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もよい。

前記第三の発光層は、第三のホスト材料を含み、前記第一のホスト材料と前記第二のホスト材料と前記第三のホスト材料とは、互いに異なり、前記第三の発光層は、最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物を少なくとも含み、前記第一の発光層が含む最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物と、前記第二の発光層が含む最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物と、前記第三の発光層が含む最大のピーク波長が500nm以下の発光を示す化合物とが、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30A)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(H1) > T_1(H3) \quad \dots (\text{数 } 30A)$$

【0839】

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、前記第二のホスト材料の三重項エネルギー $T_1(H2)$ と前記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30B)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(H2) > T_1(H3) \quad \dots (\text{数 } 30B)$$

【0840】

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、前記第一の発光層と前記第二の発光層とが、直接、接しており、前記第二の発光層と前記第三の発光層とが、直接、接していることが好ましい。

【0841】

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(LS4)、(LS5)及び(LS6)のいずれかの態様も含み得る。

(LS4) 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。

(LS5) 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。

(LS6) 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。

【0842】

また、本実施形態に係る有機EL素子は、拡散層をさらに有することも好ましい。

【0843】

本実施形態に係る有機EL素子が拡散層を有する場合、前記拡散層は、前記第一の発光層と前記第二の発光層との間に配置されていることが好ましい。

【0844】

(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、前記一般式(1)で表される第一の化合物、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)で表される第一の化合物、及び前記一般式(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前記一般式(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。

【0845】

10

20

30

40

50

・第一の化合物

本実施形態に係る有機EL素子において、第一実施形態で説明した第一の化合物の他に、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)で表される化合物も第一の化合物として使用することもできる。

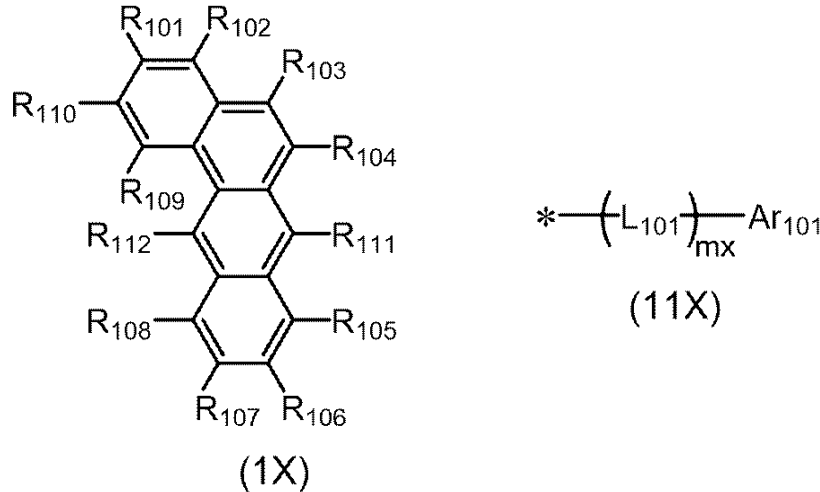
【0846】

・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。

【0847】

【化308】



【0848】

(前記一般式(1X)において、

R₁₀₁ ~ R₁₁₂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(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

- O-(R₉₀₄)で表される基、

- S-(R₉₀₅)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)R₈₀₁で表される基、

- COOR₈₀₂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、R₁₀₁ ~ R₁₁₂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、

L₁₀₁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、

Ar₁₀₁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、1、2、3、4又は5であり、

L₁₀₁が2以上存在する場合、2以上のL₁₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり

、

Ar₁₀₁が2以上存在する場合、2以上のAr₁₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり、

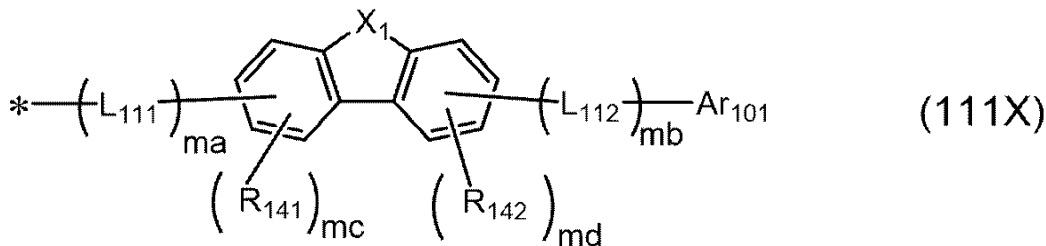
前記一般式(11X)中の*は、前記一般式(1X)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示す。)

【0849】

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。

【0850】

【化309】



【0851】

(前記一般式(111X)において、

X₁は、C_{R143}R₁₄₄、酸素原子、硫黄原子、又はN_{R145}であり、

L₁₁₁及びL₁₁₂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又は4であり、

Ar₁₀₁は、前記一般式(11)におけるAr₁₀₁と同義であり、

R₁₄₁、R₁₄₂、R₁₄₃、R₁₄₄及びR₁₄₅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(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

- O-(R₉₀₄)で表される基、

- S-(R₉₀₅)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)R₈₀₁で表される基、

- COOR₈₀₂で表される基、

10

20

30

40

50

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 R₁₄₁ は、互いに同一であるか、又は異なり、

m d は、3 であり、

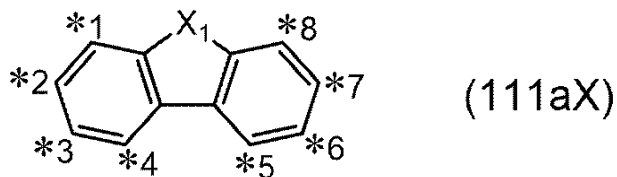
3 つの R₁₄₂ は、互いに同一であるか、又は異なる。))

【0852】

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 L₁₁₁ が結合し、*1 ~ *4 の残りの 3 つの位置に R₁₄₁ が結合し、*5 ~ *8 のいずれか 1 つの位置に L₁₁₂ が結合し、*5 ~ *8 の残りの 3 つの位置に R₁₄₂ が結合する。

【0853】

【化310】

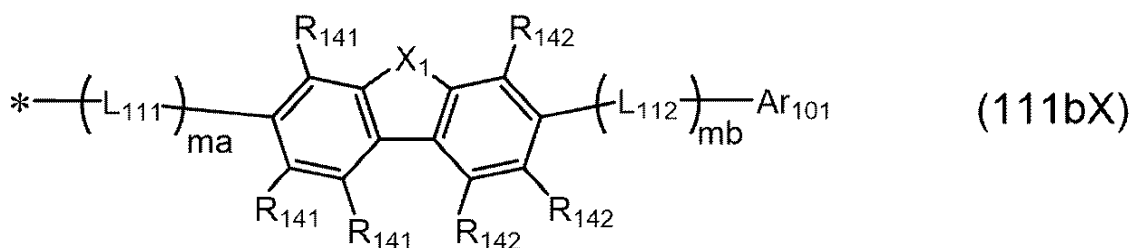


【0854】

例えば、前記一般式 (111X) で表される基において、L₁₁₁ 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、L₁₁₂ 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。

【0855】

【化311】



【0856】

(前記一般式 (111bX) において、

X₁、L₁₁₁、L₁₁₂、m a、m b、A r₁₀₁、R₁₄₁、R₁₄₂、R₁₄₃、R₁₄₄ 及び R₁₄₅ は、それぞれ独立に、前記一般式 (111X) における X₁、L₁₁₁、L₁₁₂、m a、m b、A r₁₀₁、R₁₄₁、R₁₄₂、R₁₄₃、R₁₄₄ 及び R₁₄₅ と同義であり、

複数の R₁₄₁ は、互いに同一であるか、又は異なり、

複数の R₁₄₂ は、互いに同一であるか、又は異なる。))

【0857】

本実施形態に係る有機 E L 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。

【0858】

前記一般式 (1X) 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。

10

20

30

40

50

【 0 8 5 9 】

前記一般式 (1 X) 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。

【 0 8 6 0 】

前記一般式 (1 X) で表される化合物において、 $A r_{101}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基であることが好ましい。

【 0 8 6 1 】

前記一般式 (1 X) で表される化合物において、 $A r_{101}$ 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。

10

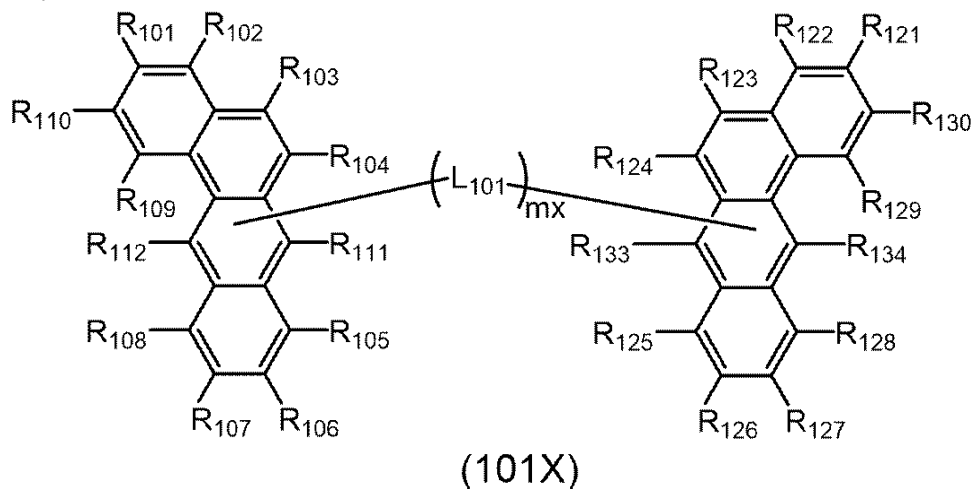
【 0 8 6 2 】

前記一般式 (1 X) で表される化合物は、下記一般式 (1 0 1 X) で表されることも好ましい。

【 0 8 6 3 】

20

【 化 3 1 2 】



30

【 0 8 6 4 】

(前記一般式 (1 0 1 X) 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、

40

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のハロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 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、

50

置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、

- C (= O) R₈₀₁ で表される基、

- C O O R₈₀₂ 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、

L₁₀₁ 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 x は、1、2、3、4 又は 5 であり、

L₁₀₁ が 2 以上存在する場合、2 以上の L₁₀₁ は、互いに同一であるか、又は異なる。
)

【0865】

前記一般式 (1 X) で表される化合物において、L₁₀₁ は、

単結合、又は

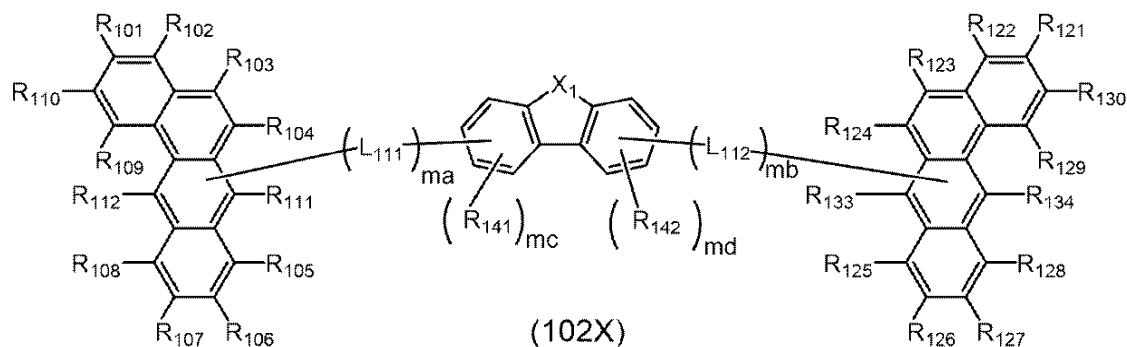
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基であることが好ましい。

【0866】

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

【0867】

【化313】



【0868】

(前記一般式 (102 X) において、

R₁₁₁ 及び R₁₁₂ のうち 1 つが L₁₁₁ との結合位置を示し、R₁₃₃ 及び R₁₃₄ のうち 1 つが L₁₁₂ との結合位置を示し、

R₁₀₁ ~ R₁₁₀、R₁₂₁ ~ R₁₃₀、L₁₁₁ との結合位置ではない R₁₁₁ 又は R₁₁₂ 並びに L₁₁₂ との結合位置ではない R₁₃₃ 又は R₁₃₄ 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 (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) 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、
 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、
 - $COOR_{802}$ 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、
 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。)

10

20

30

【0869】

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。

40

【0870】

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。

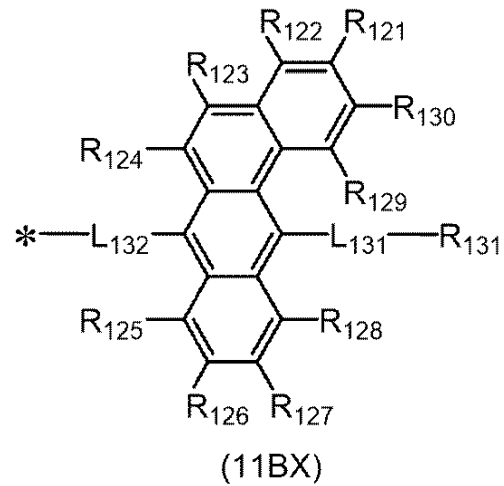
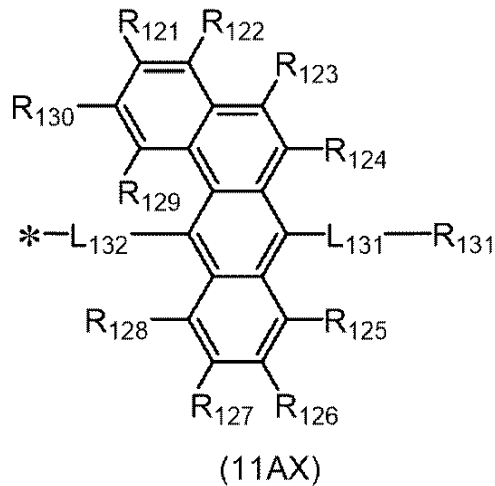
【0871】

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。

【0872】

50

【化 3 1 4】



10

【 0 8 7 3】

(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、

- 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、

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。)

【 0 8 7 4】

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。

【 0 8 7 5】

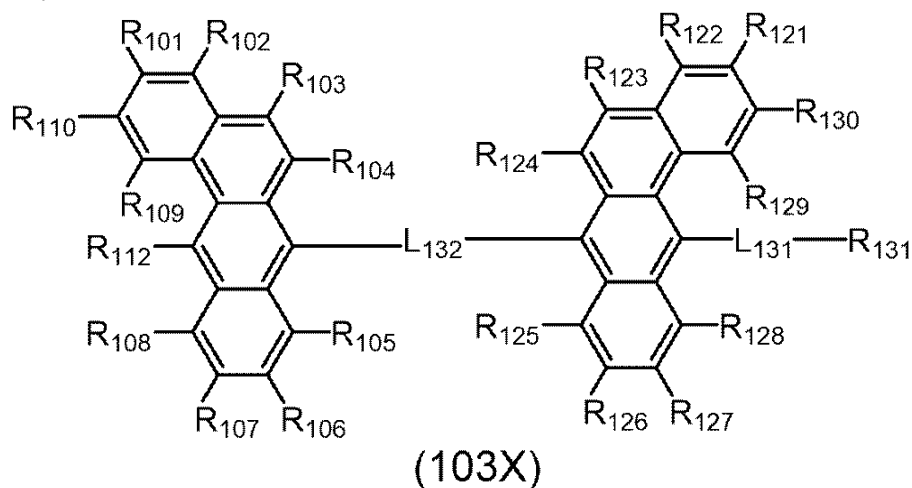
20

30

40

50

【化 3 1 5】



10

【 0 8 7 6】

(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。) 20

【 0 8 7 7】

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。

【 0 8 7 8】

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。

【 0 8 7 9】

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。 30

【 0 8 8 0】

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 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。

【 0 8 8 1】

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。 40

【 0 8 8 2】

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。

【 0 8 8 3】

50

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R₁₀₁～R₁₁₂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。

【0884】

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R₁₀₁～R₁₁₂は、水素原子であることが好ましい。

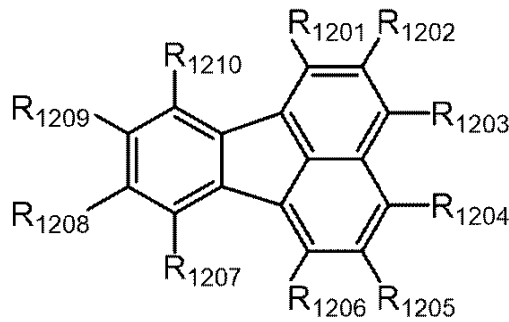
【0885】

・一般式(12X)で表される化合物

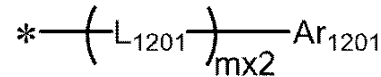
本実施形態に係る有機EL素子において、第一の化合物は、下記一般式(12X)で表される化合物であることも好ましい。

【0886】

【化316】



(12X)



(121)

【0887】

(前記一般式(12X)において、

R₁₂₀₁～R₁₂₁₀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R₁₂₀₁～R₁₂₁₀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(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

- O-(R₉₀₄)で表される基、

- S-(R₉₀₅)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)R₈₀₁で表される基、

- COOR₈₀₂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

10

20

30

40

50

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 $R_{1201} \sim R_{1210}$ 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_{1201} 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、

10

Ar_{1201} 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、

$m \times 2$ は、0、1、2、3、4又は5であり、

L_{1201} が2以上存在する場合、2以上の L_{1201} 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。)

20

【0888】

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。

【0889】

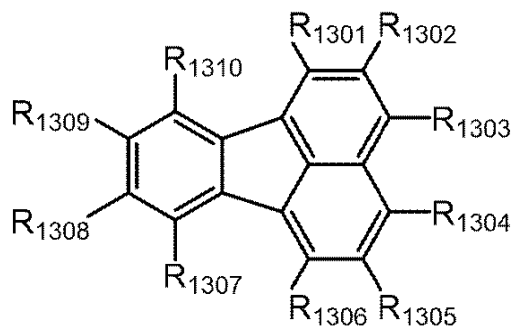
・一般式(13X)で表される化合物

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。

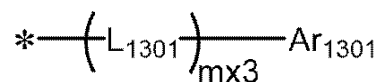
30

【0890】

【化317】



(13X)



(131)

40

【0891】

(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、

50

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- $\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ で表される基、
- $\text{O}(\text{R}_{904})$ で表される基、
- $\text{S}(\text{R}_{905})$ 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、

- $\text{C}(=\text{O})\text{R}_{801}$ 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 のアリアル基、

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、 $\text{R}_{1301} \sim \text{R}_{1310}$ 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_{1301} 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_{1301} は、

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 の複素環基であり、

$m \times 3$ は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

L_{1301} が 2 以上存在する場合、2 以上の L_{1301} は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar_{1301} が 2 以上存在する場合、2 以上の Ar_{1301} 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。))

【0892】

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 $\text{R}_{1301} \sim \text{R}_{1310}$ 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。

【0893】

・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。

【0894】

10

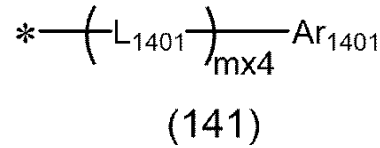
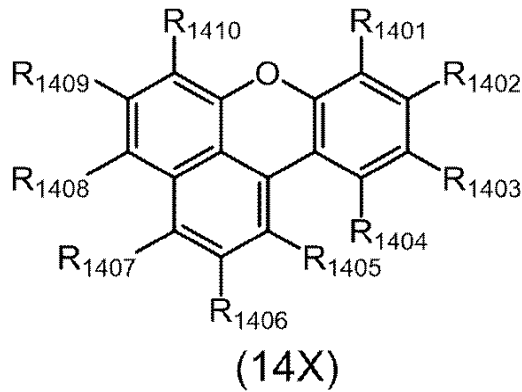
20

30

40

50

【化 3 1 8】



10

【 0 8 9 5】

(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、

-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(141)で表される基であり、

ただし、 $R_{1401} \sim R_{1410}$ 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_{1401} 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_{1401} 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、

$m \times 4$ は、0、1、2、3、4又は5であり、

L_{1401} が2以上存在する場合、2以上の L_{1401} は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar_{1401} が2以上存在する場合、2以上の Ar_{1401} 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

50

す。)

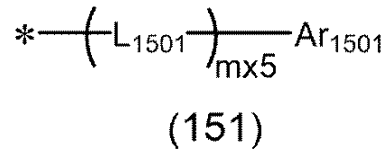
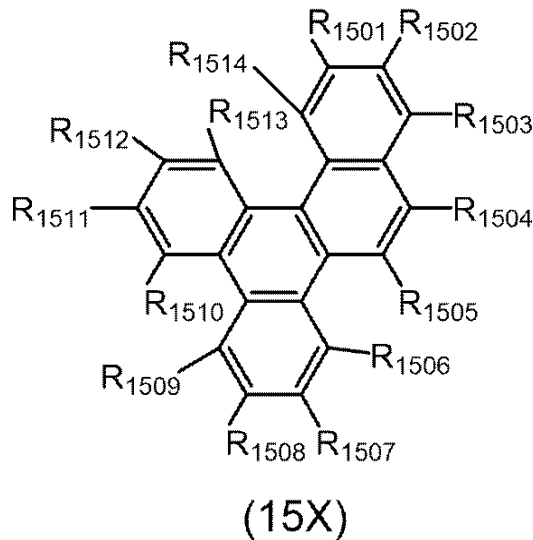
【 0 8 9 6 】

・一般式 (1 5 X) で表される化合物

本実施形態に係る有機 E L 素子において、第一の化合物は、下記一般式 (1 5 X) で表される化合物であることも好ましい。

【 0 8 9 7 】

【 化 3 1 9 】



【 0 8 9 8 】

(前記一般式 (1 5 X) において、

R 1 5 0 1 ~ R 1 5 1 4 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 ~ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、

- Si (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基、

- O - (R 9 0 4) で表される基、

- S - (R 9 0 5) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 5 0 のアラルキル基、

- C (= O) R 8 0 1 で表される基、

- C O O R 8 0 2 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 ~ 5 0 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基、又は

前記一般式 (1 5 1) で表される基であり、

ただし、R 1 5 0 1 ~ R 1 5 1 4 の少なくとも 1 つは、前記一般式 (1 5 1) で表される基であり、

前記一般式 (1 5 1) で表される基が複数存在する場合、複数の前記一般式 (1 5 1) で表される基は、互いに同一であるか又は異なり、

L 1 5 0 1 は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 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 1 5 0 1 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、

$m \times 5$ は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

L₁₅₀₁が2以上存在する場合、2以上のL₁₅₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり、

A_{r1501} が 2 以上存在する場合、2 以上の A_{r1501} は、互いに同一であるか、又は異なり、

前記一般式 (1 5 1) 中の * は、前記一般式 (1 5 X) で表される環との結合位置を示す。)

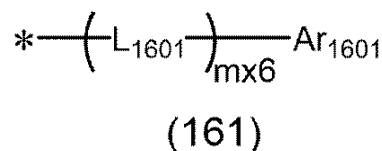
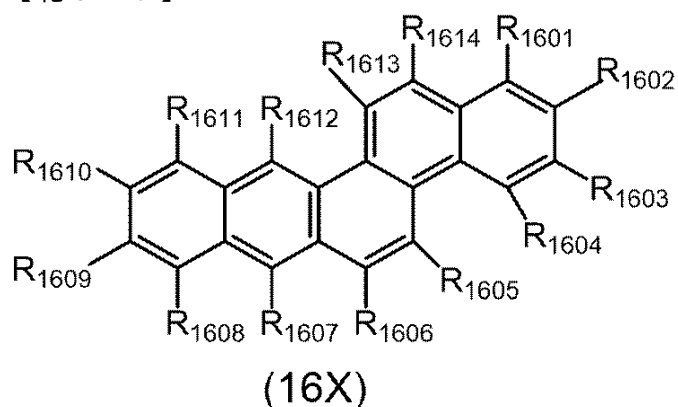
【 0 8 9 9 】

・一般式 (16 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（１６Ｘ）で表される化合物であることも好ましい。

【 0 9 0 0 】

【化 3 2 0】



【 0 9 0 1 】

(前記一般式(16X)において、

R₁₆₀₁ ~ R₁₆₁₄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、

- $S i (R _ { 9 0 1 }) (R _ { 9 0 2 }) (R _ { 9 0 3 })$ で表される基、

- O - (R 9 0 4) で表される基、

- S - (R 9 0 5) 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) R₈₀₁ で表される基、

- COOR₈₀₂で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

二卜口基、

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 (1 6 1) 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。)

【0902】

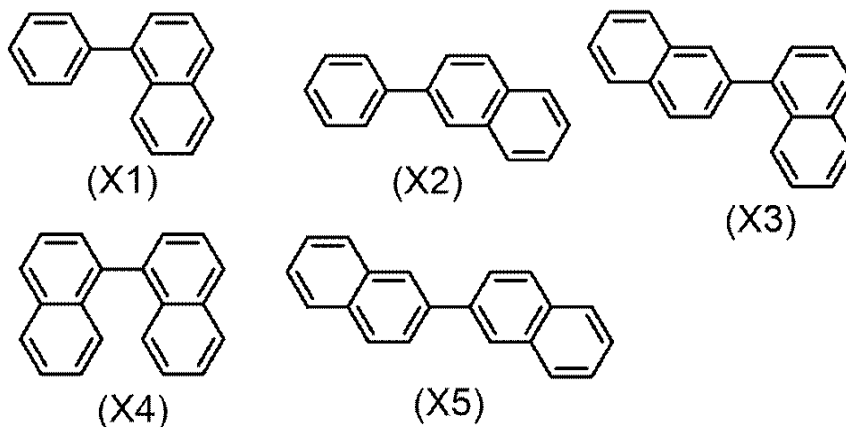
本実施形態に係る有機EL素子において、第一のホスト材料は、分子中に、単結合で連結されたベンゼン環とナフタレン環とを含む連結構造を有し、当該連結構造中のベンゼン環及びナフタレン環には、それぞれ独立に、さらに単環又は縮合環が縮合しているか又は縮合しておらず、当該連結構造中のベンゼン環とナフタレン環とが、当該単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結していることも好ましい。

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。

【0903】

【化321】



【0904】

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。

【 0 9 0 5 】

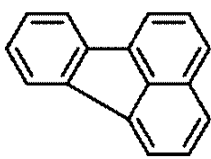
ベンゼン - ナフタレン連結構造中のベンゼン環とナフタレン環とが、単結合以外の少なくとも1つの部分において架橋によりさらに連結すると、例えば、前記式 (X 1) の場合、下記式 (X 1 1) で表される連結構造 (縮合環) になり、前記式 (X 3) の場合、下記式 (X 3 1) で表される連結構造 (縮合環) になる。

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 (X 1) の場合、下記式 (X 1 2) で表される連結構造 (縮合環) になり、前記式 (X 2) の場合、下記式 (X 2 1) 又は式 (X 2 2) で表される連結構造 (縮合環) になり、前記式 (X 4) の場合、下記式 (X 4 1) で表される連結構造 (縮合環) になり、前記式 (X 5) の場合、下記式 (X 5 1) で表される連結構造 (縮合環) になる。

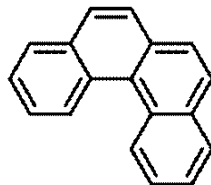
ベンゼン - ナフタレン連結構造中のベンゼン環とナフタレン環とが、単結合以外の少なくとも1つの部分においてヘテロ原子 (例えば、酸素原子) を含む架橋によりさらに連結すると、例えば、前記式 (X 1) の場合、下記式 (X 1 3) で表される連結構造 (縮合環) になる。

【 0 9 0 6 】

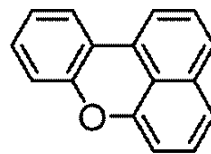
【 化 3 2 2 】



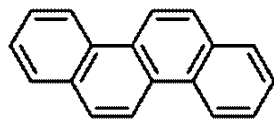
(X11)



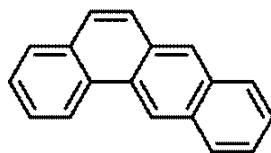
(X12)



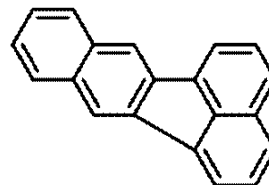
(X13)



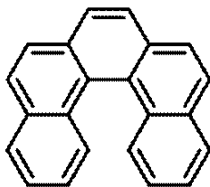
(X21)



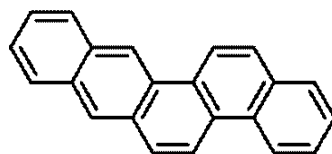
(X22)



(X31)



(X41)



(X51)

【 0 9 0 7 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、第一のホスト材料は、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。

【 0 9 0 8 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、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。

【０９０９】

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。

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まないことも好ましい。

【０９１０】

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。

【０９１１】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、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。

10

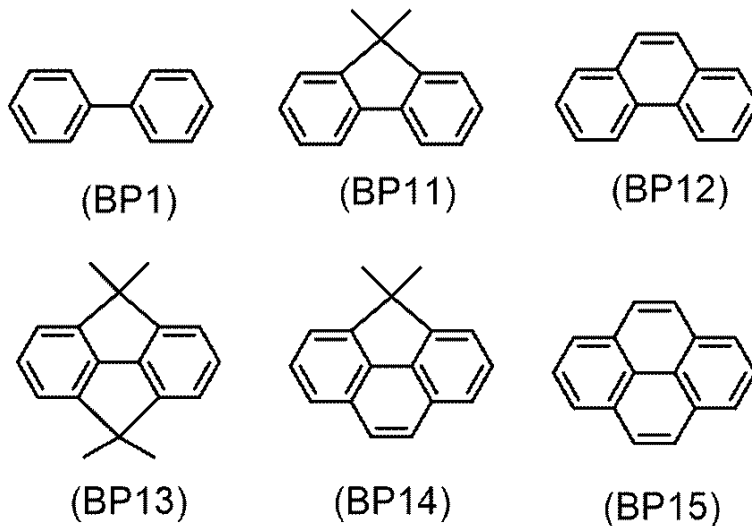
【０９１２】

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。

【０９１３】

20

【化３２３】



30

【０９１４】

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。

40

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。

【０９１５】

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

50

た基は、いずれも「無置換」の基であることが好ましい。

【 0 9 1 6 】

(第一の化合物の製造方法)

本実施形態に係る有機 E L 素子に使用できる第一の化合物は、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。

【 0 9 1 7 】

(第一の化合物の具体例)

本実施形態に係る有機 E L 素子に使用できる第一の化合物の具体例としては、例えば、第一実施形態で説明した第一の化合物の具体例、並びに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。

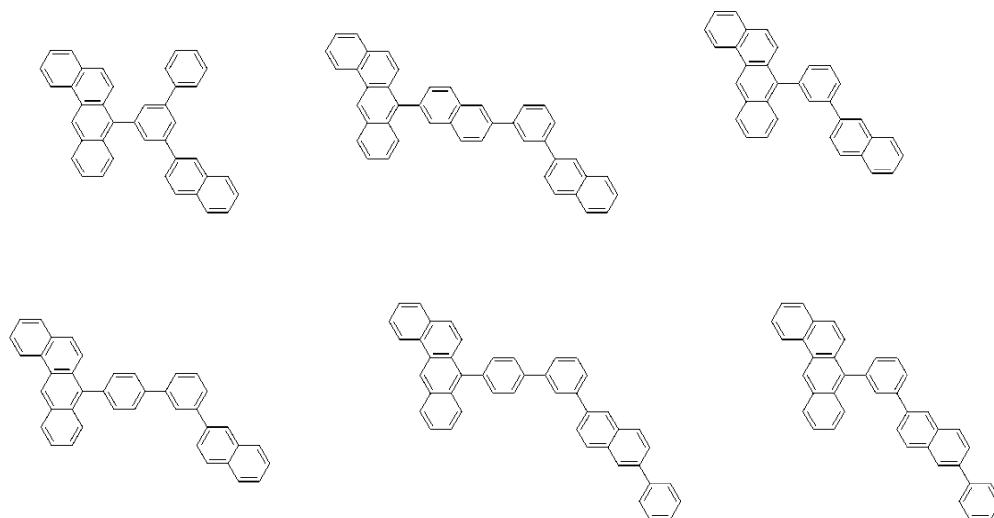
10

また、以下に示す第一の化合物の具体例の内、第一実施形態の一般式 (1) で表される化合物の定義の範囲内の化合物であれば、第一実施形態に係る有機 E L 素子にも使用できる。

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、t Bu は、tert - ブチル基を示す。

【 0 9 1 8 】

【 化 3 2 4 】

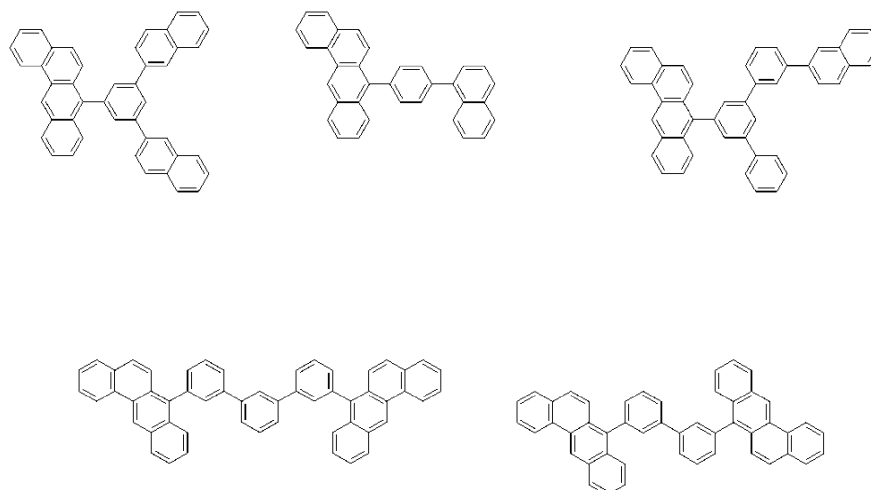


20

30

【 0 9 1 9 】

【 化 3 2 5 】

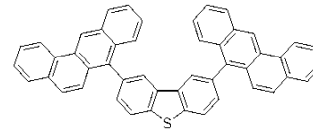
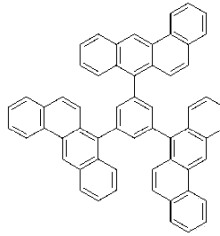
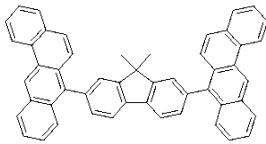
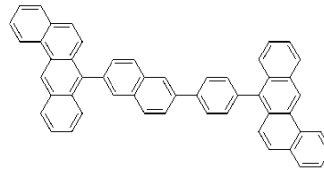
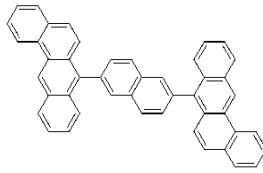
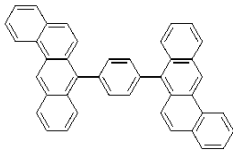


40

【 0 9 2 0 】

50

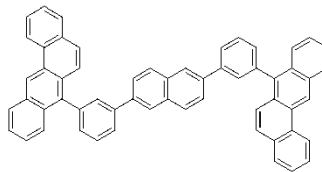
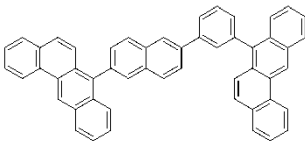
【化 3 2 6】



10

【 0 9 2 1】

【化 3 2 7】



20

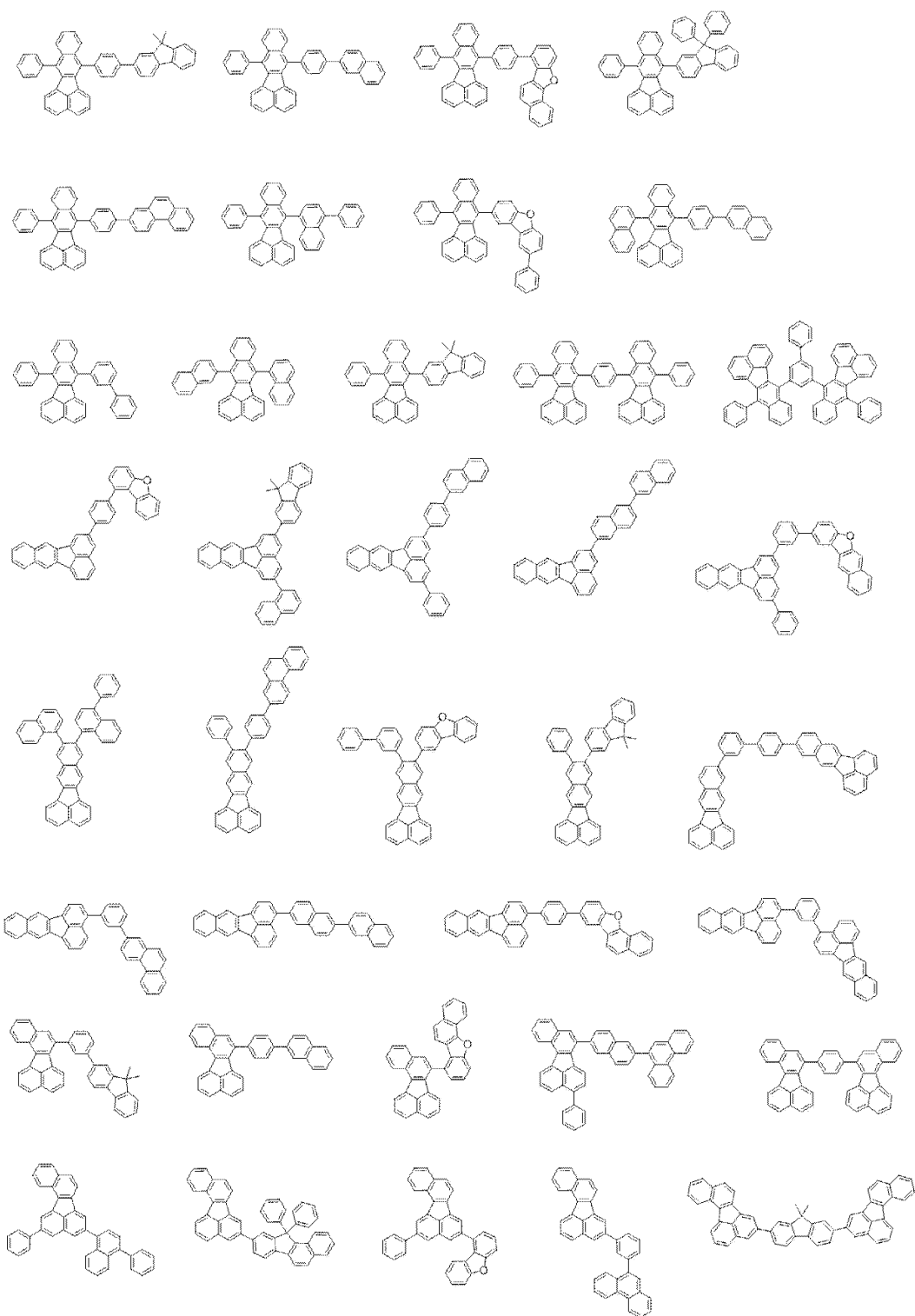
【 0 9 2 2】

30

40

50

【化 3 2 8】



10

20

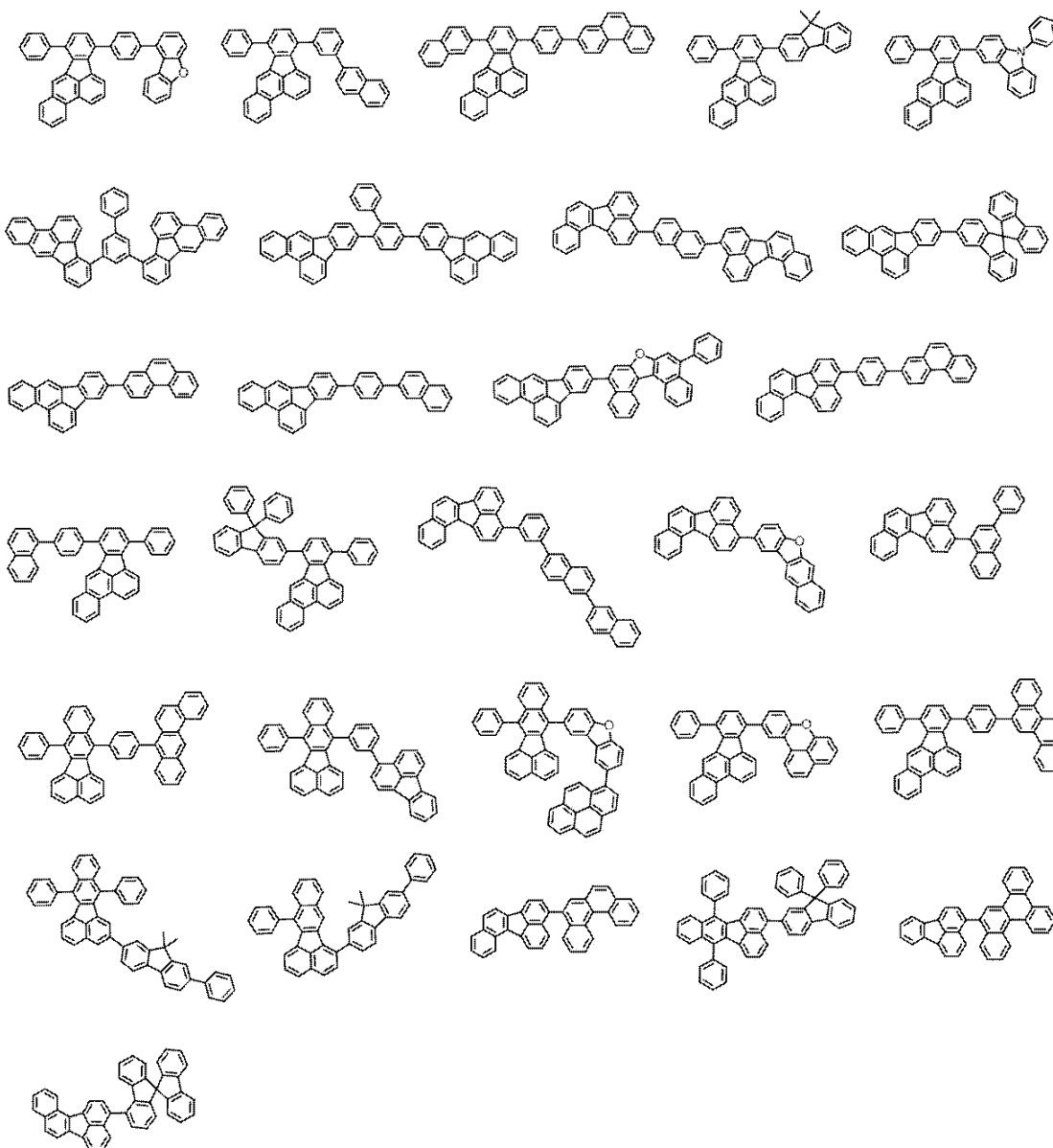
30

40

【 0 9 2 3】

50

【化 3 2 9】



10

20

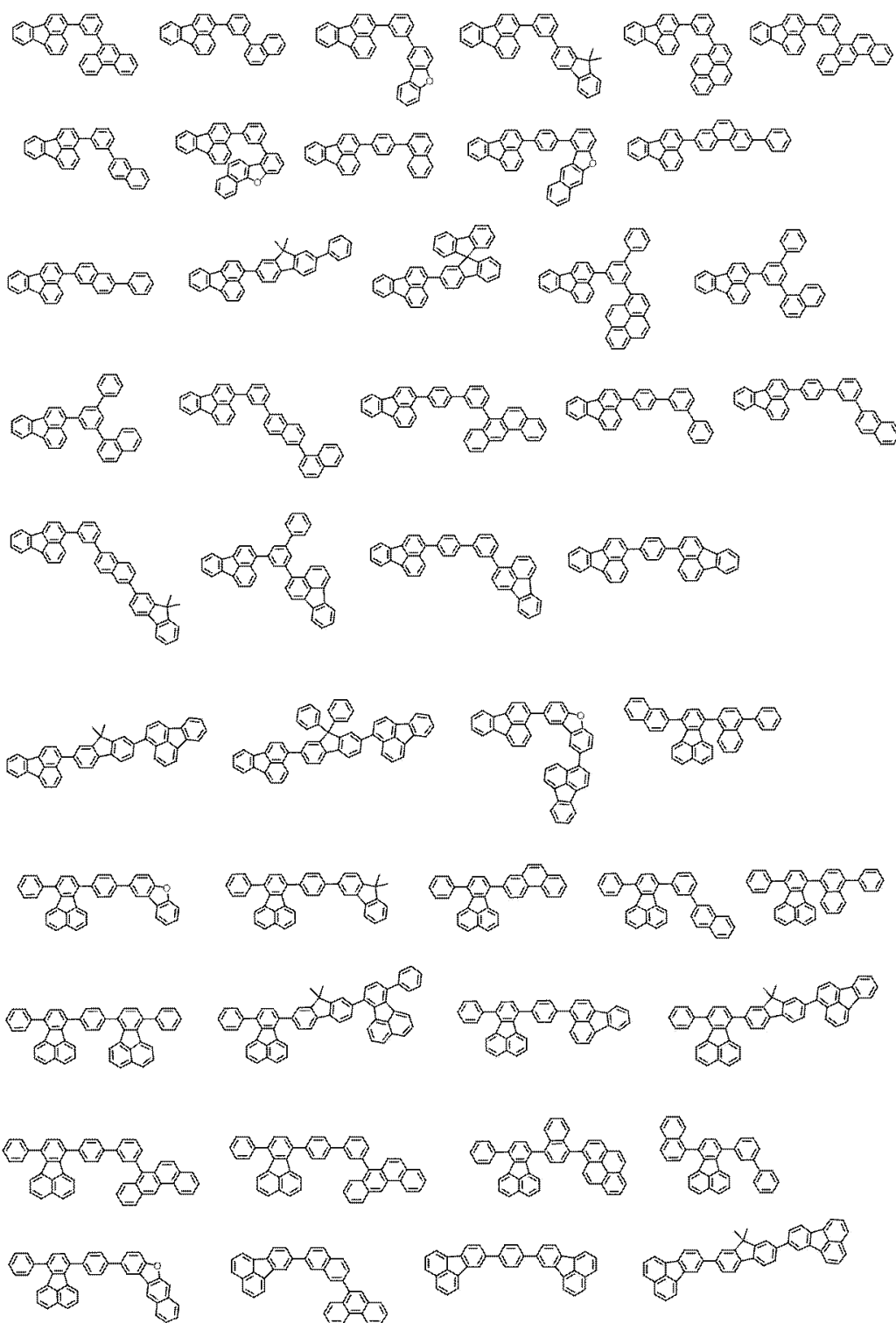
30

【 0 9 2 4】

40

50

【化 3 3 0】



10

20

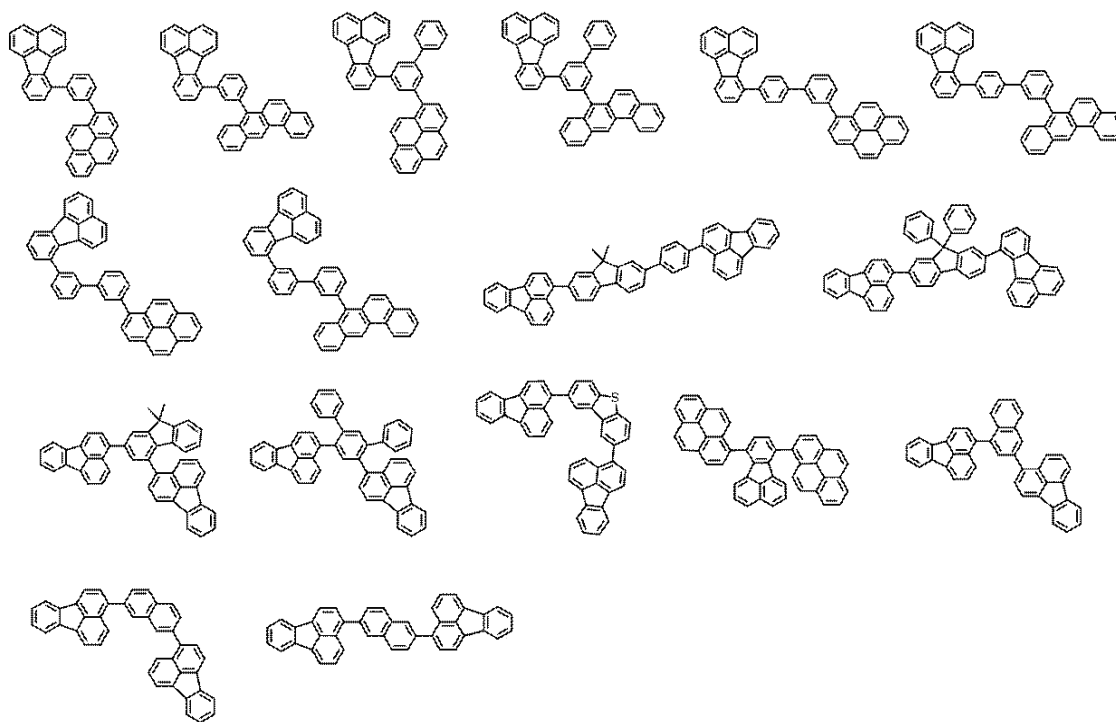
30

40

【 0 9 2 5】

50

【化 3 3 1】

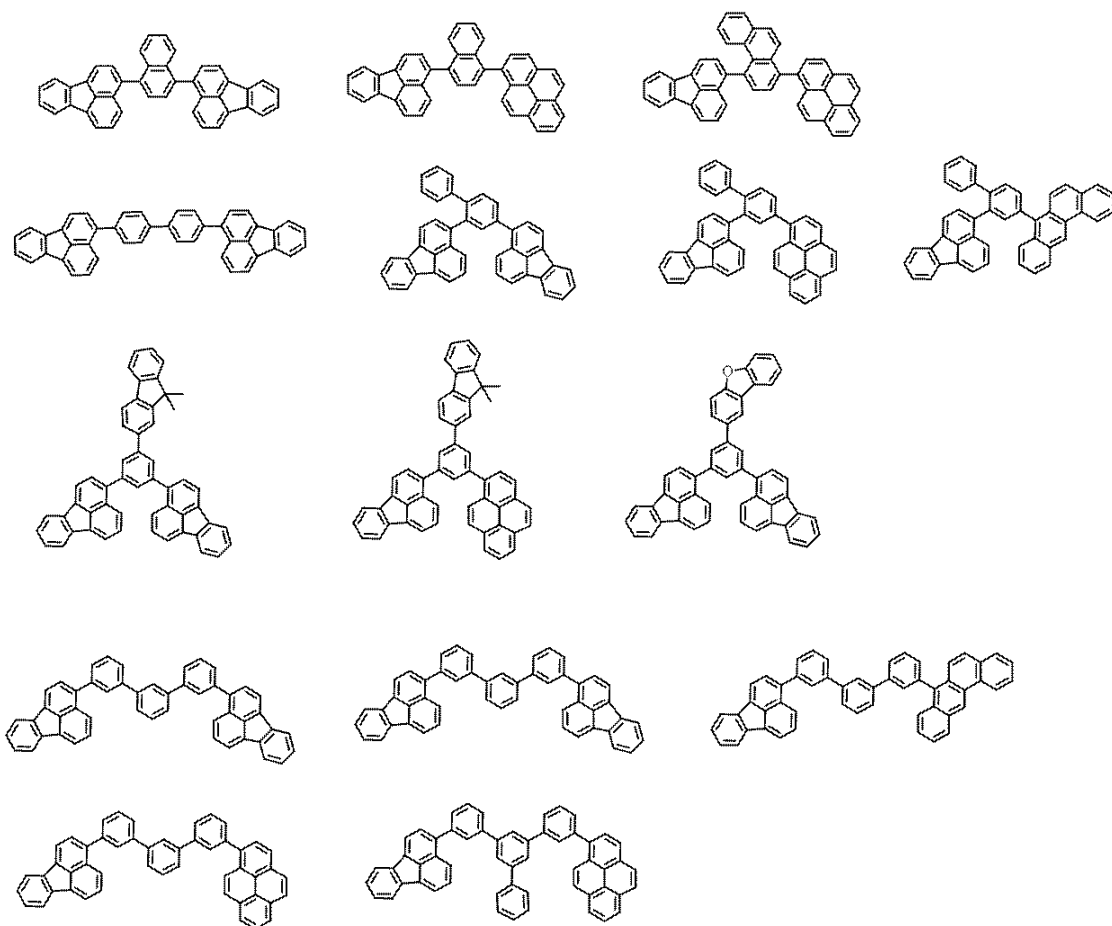


10

20

【 0 9 2 6 】

【化 3 3 2】



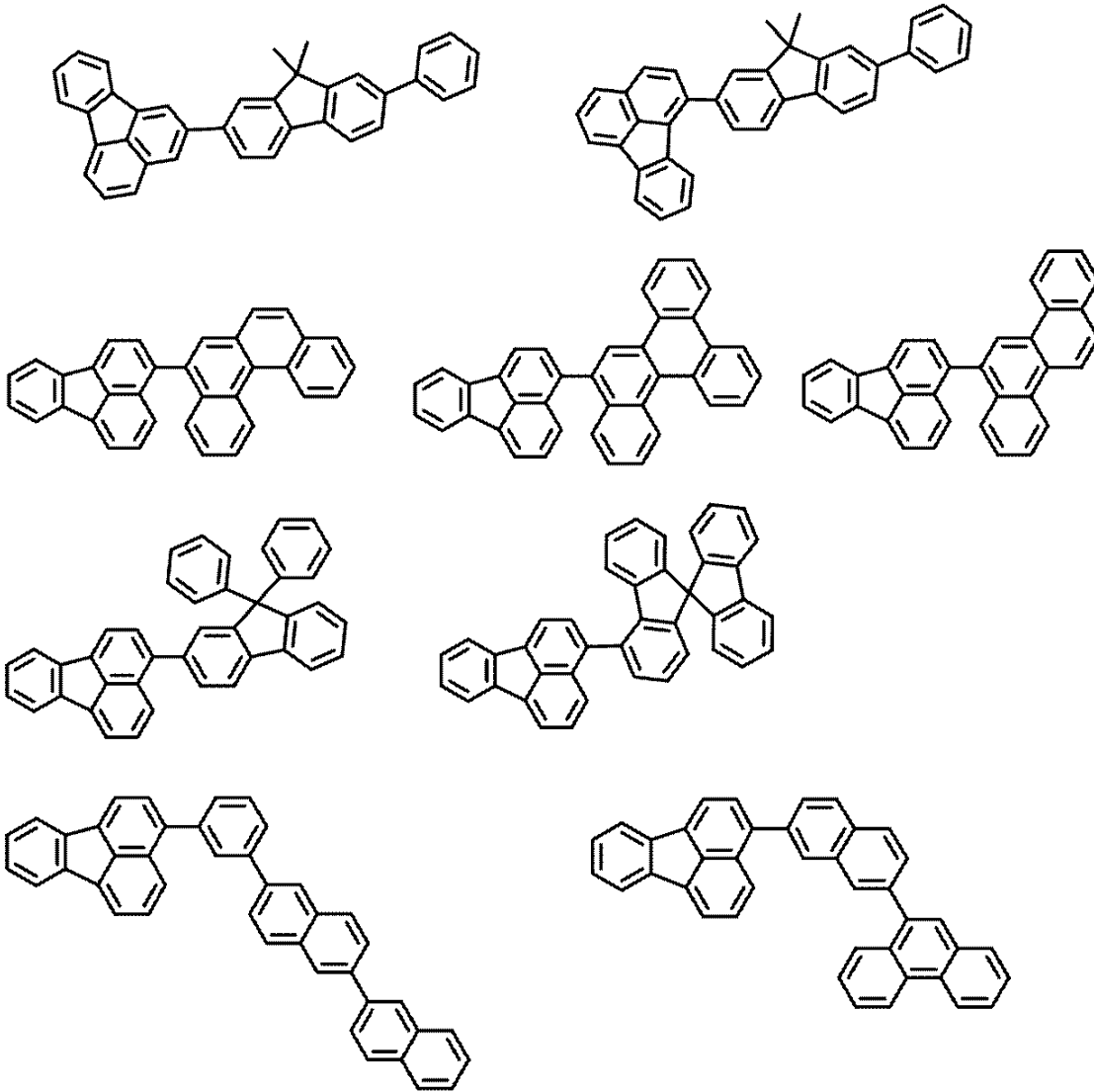
30

40

【 0 9 2 7 】

50

【化 3 3 3】



10

20

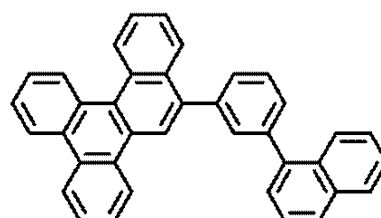
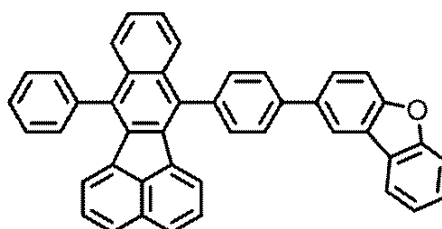
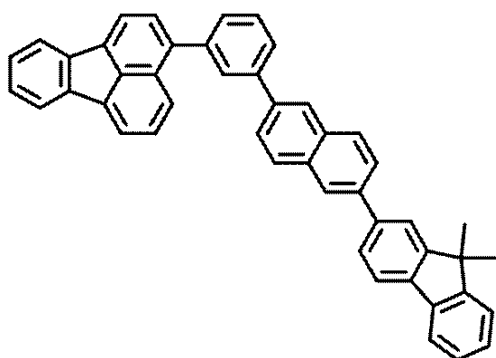
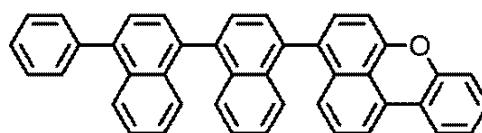
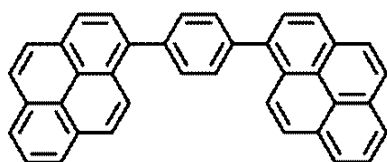
30

【 0 9 2 8 】

40

50

【化 3 3 4】

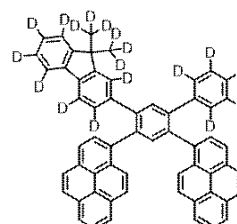
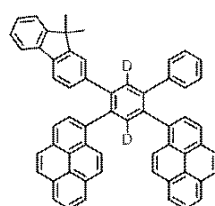
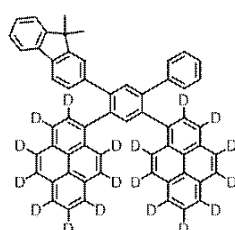
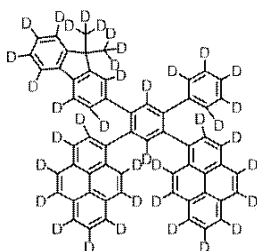
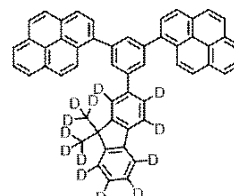
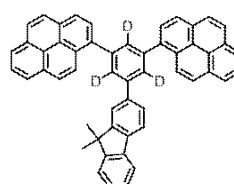
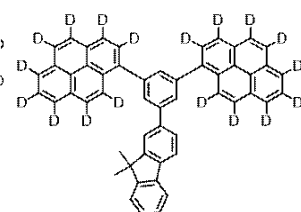
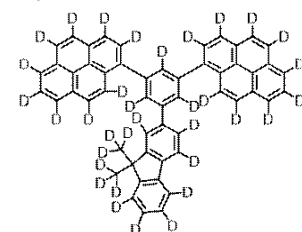


10

20

【 0 9 2 9】

【化 3 3 5】



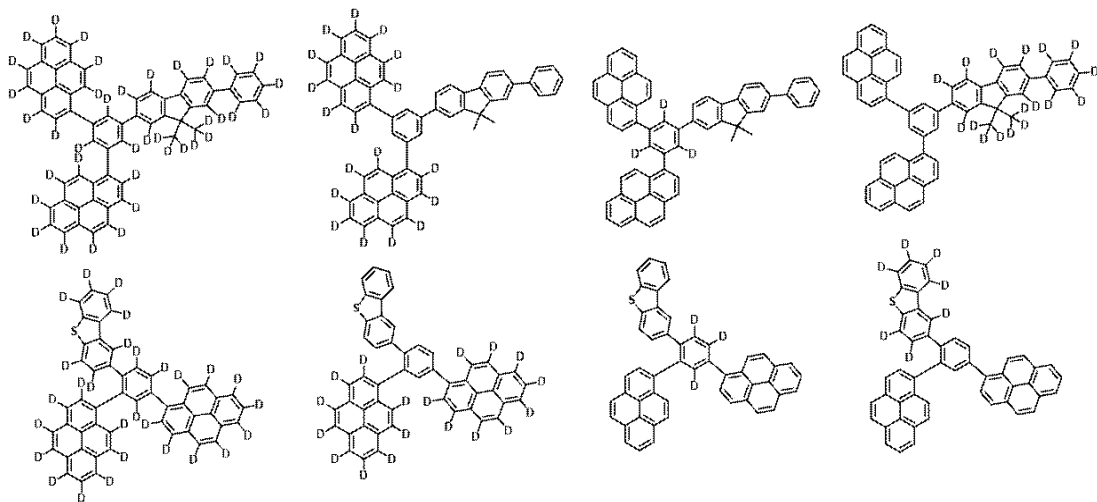
30

【 0 9 3 0】

40

50

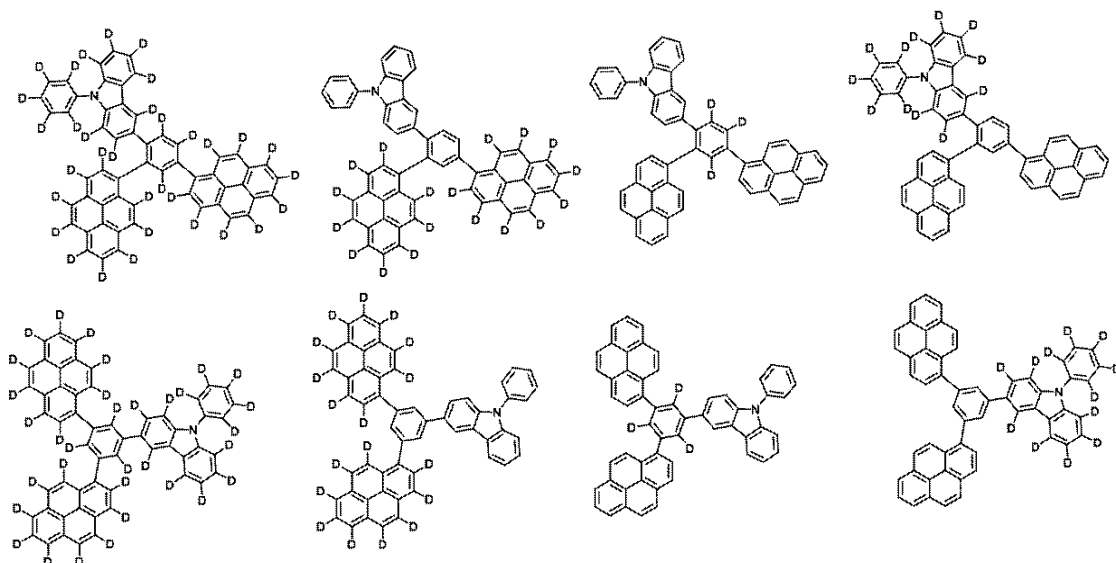
【化 3 3 6】



10

【 0 9 3 1】

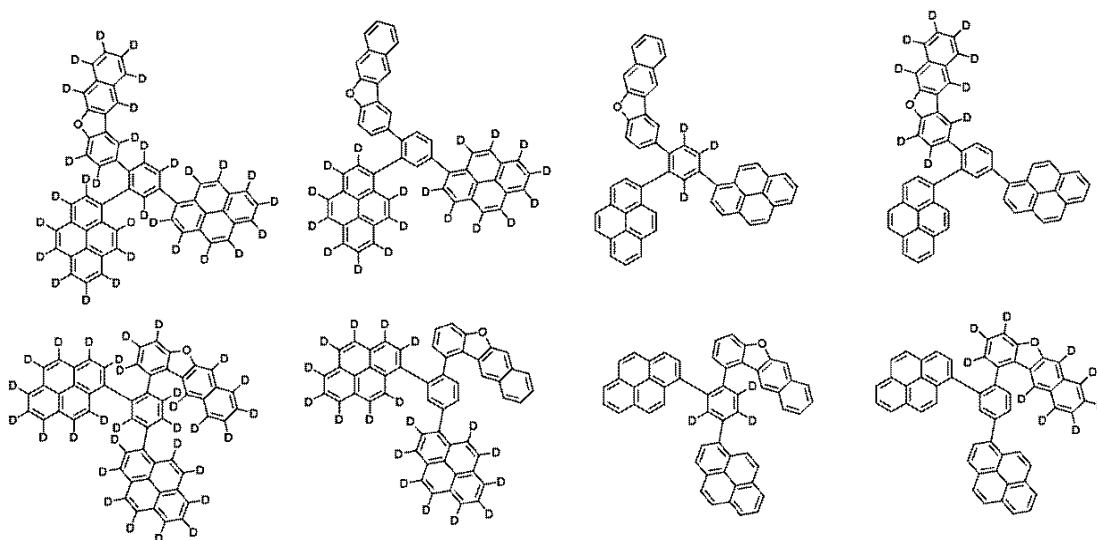
【化 3 3 7】



20

【 0 9 3 2】

【化 3 3 8】

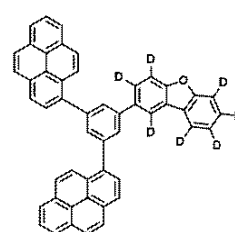
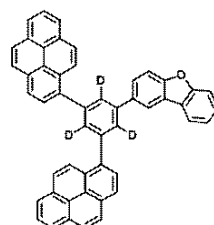
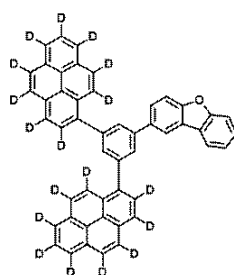
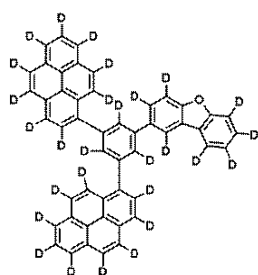
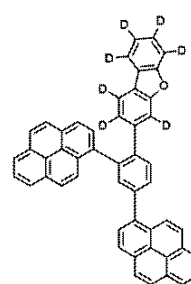
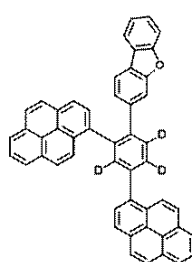
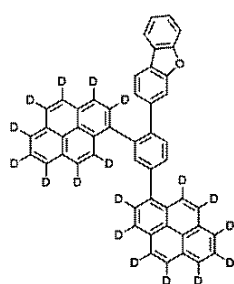
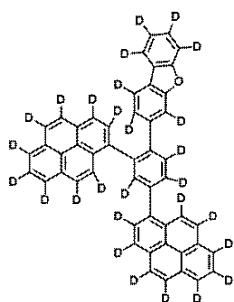


40

50

【 0 9 3 3 】

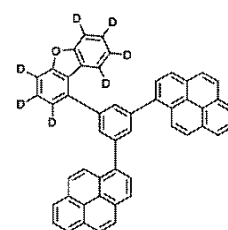
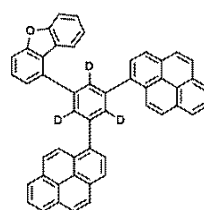
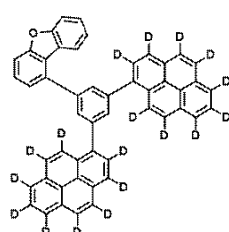
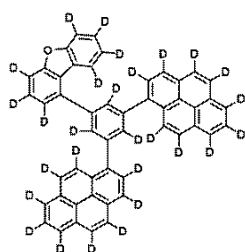
【 化 3 3 9 】



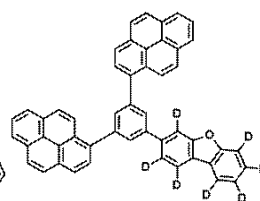
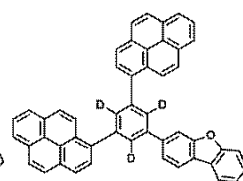
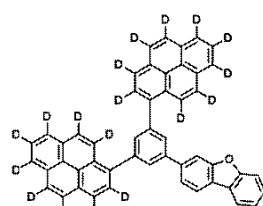
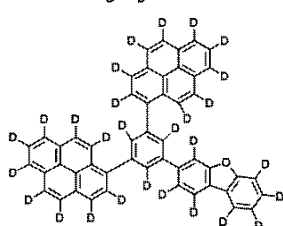
10

【 0 9 3 4 】

【 化 3 4 0 】



20



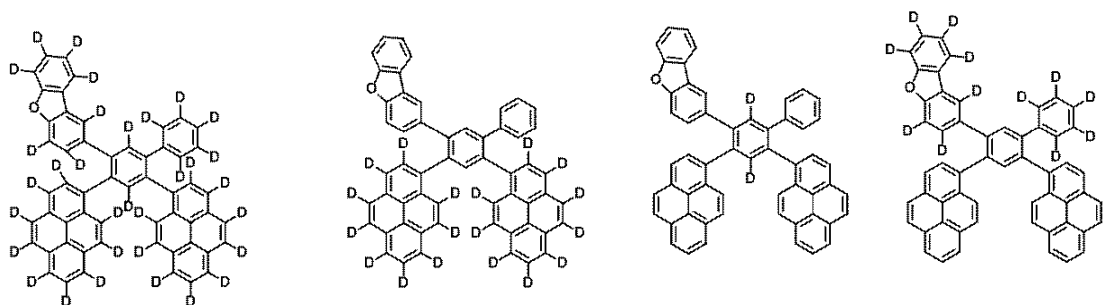
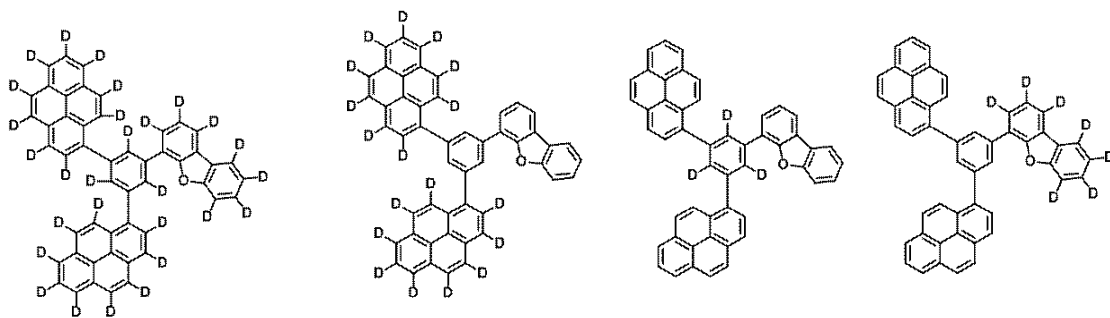
30

【 0 9 3 5 】

40

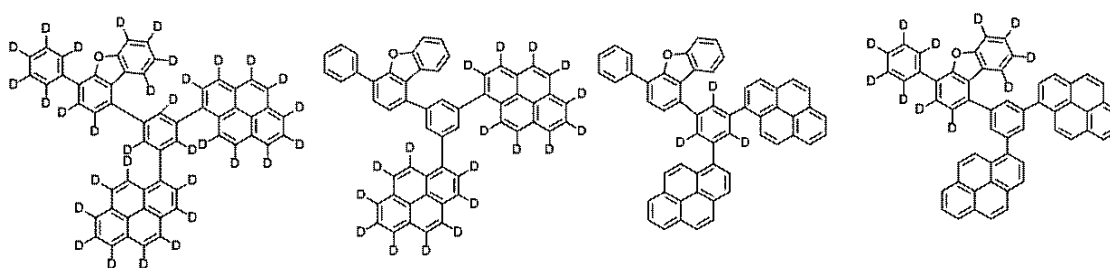
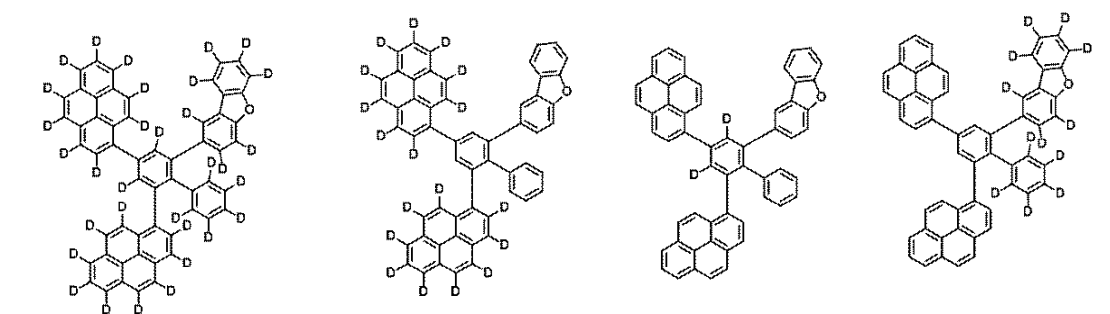
50

【化 3 4 1】



【 0 9 3 6】

【化 3 4 2】



【 0 9 3 7】

10

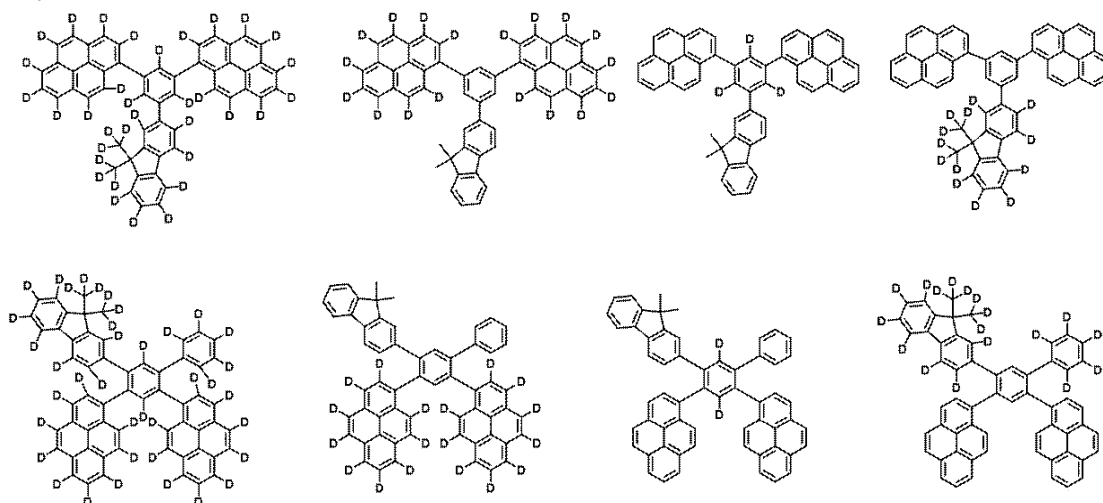
20

30

40

50

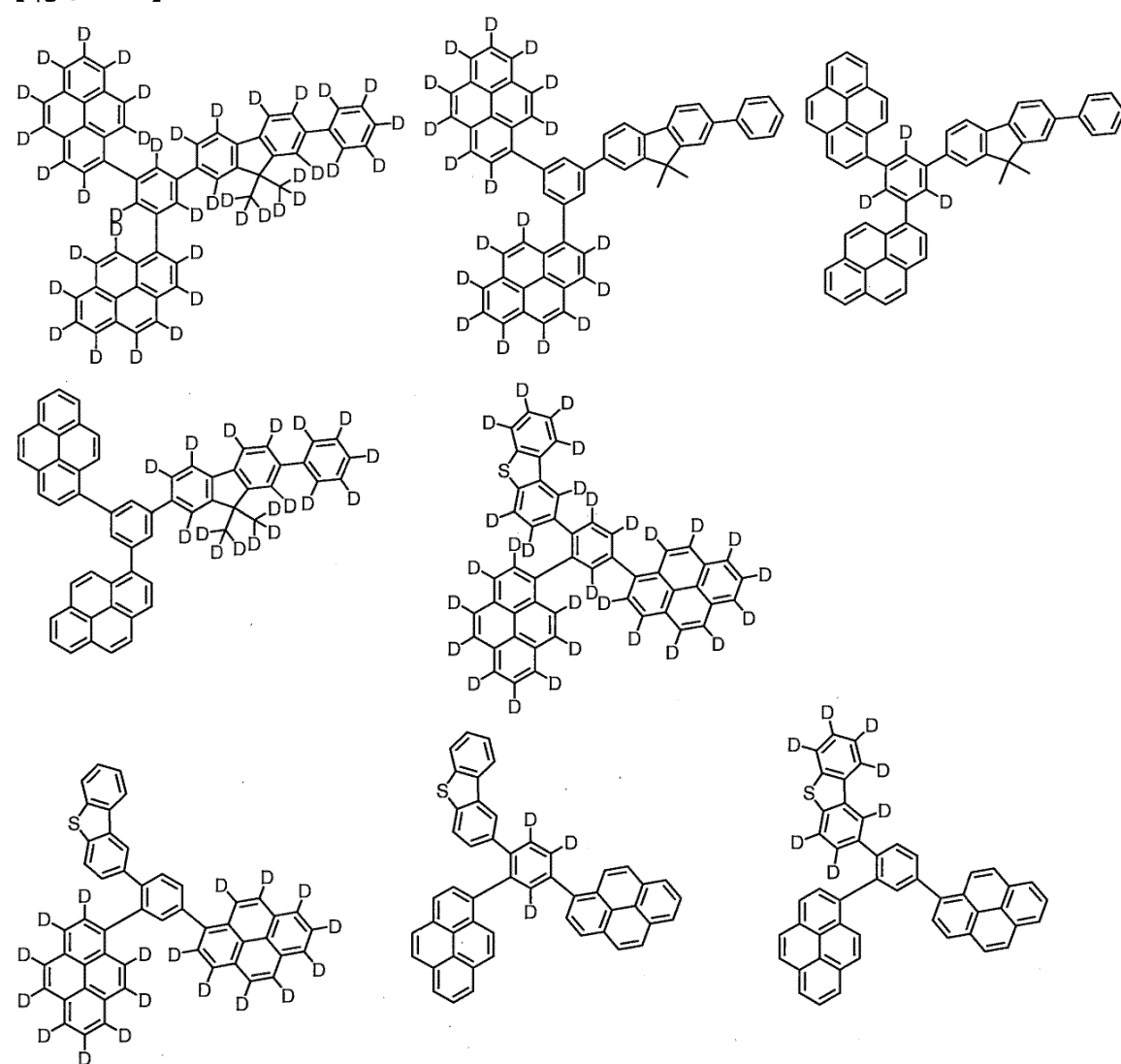
【化 3 4 3】



10

【 0 9 3 8】

【化 3 4 4】



20

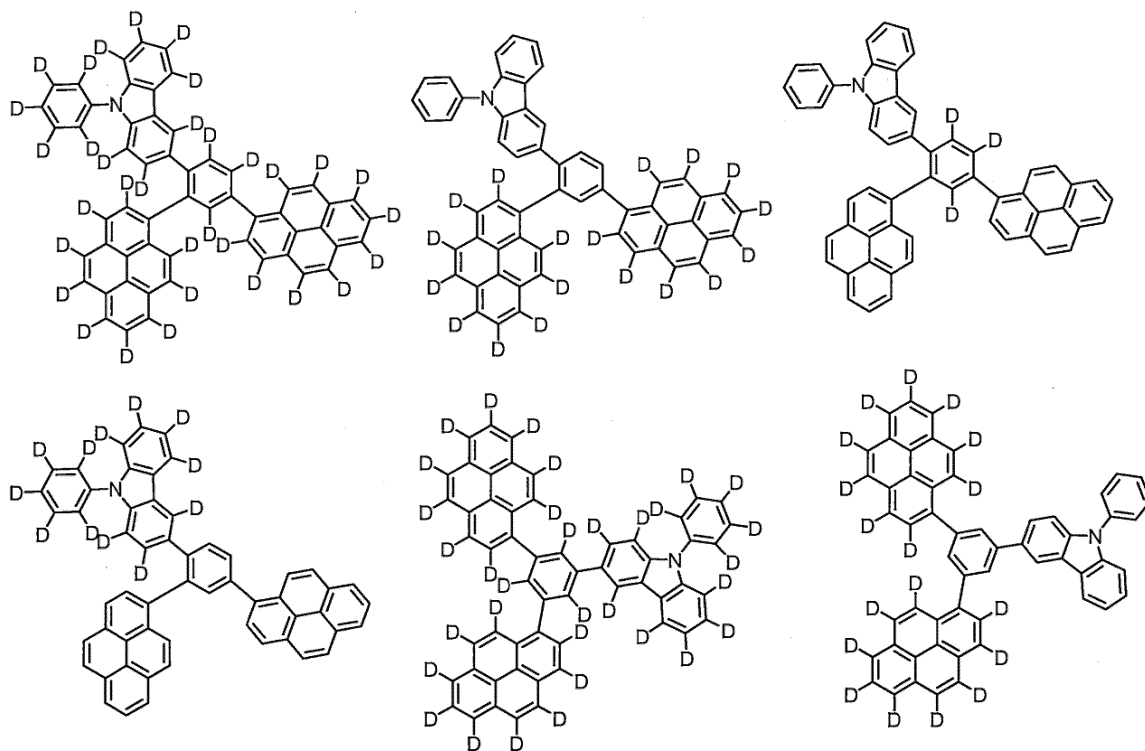
30

40

【 0 9 3 9】

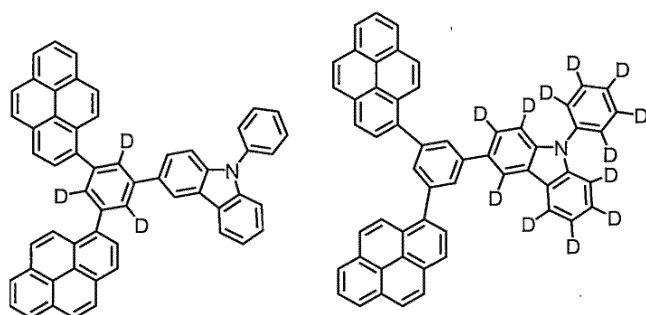
50

【化 3 4 5】



10

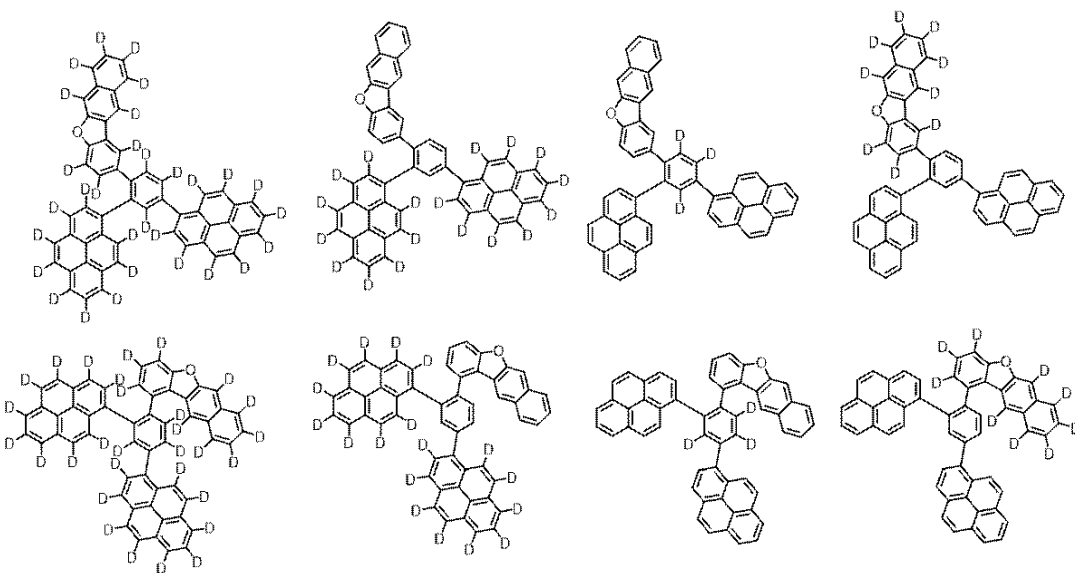
20



30

【 0 9 4 0】

【化 3 4 6】

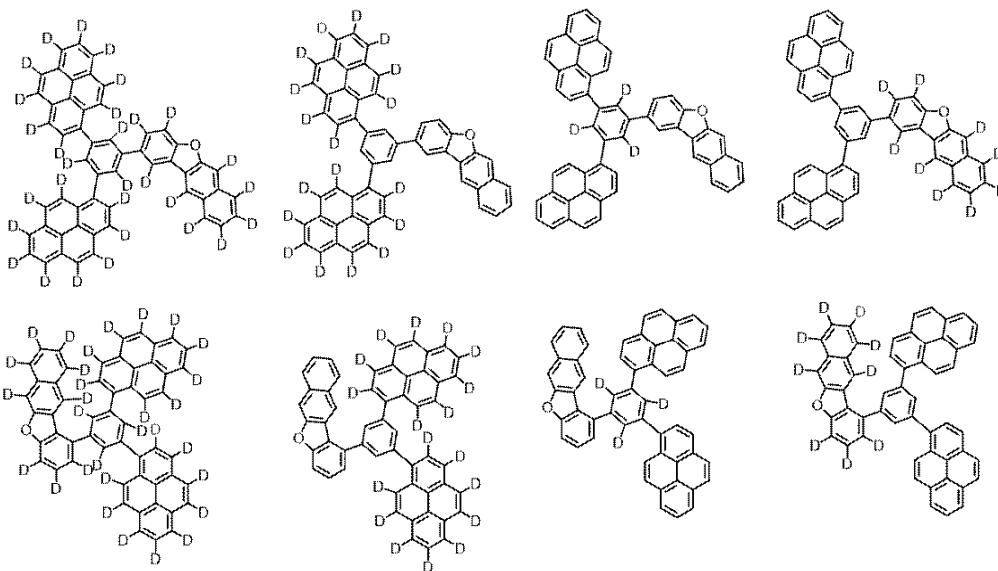


40

【 0 9 4 1】

50

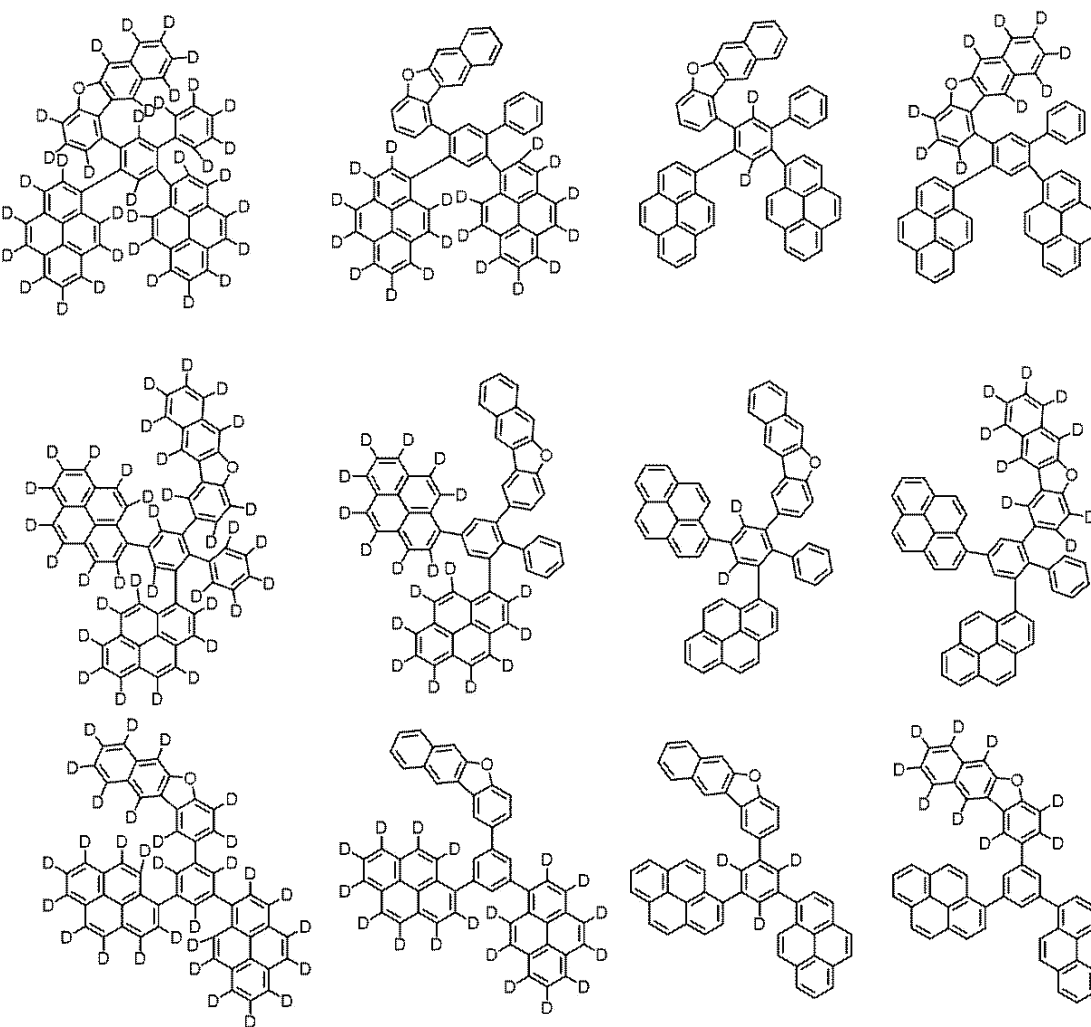
【化 3 4 7】



10

【 0 9 4 2】

【化 3 4 8】



20

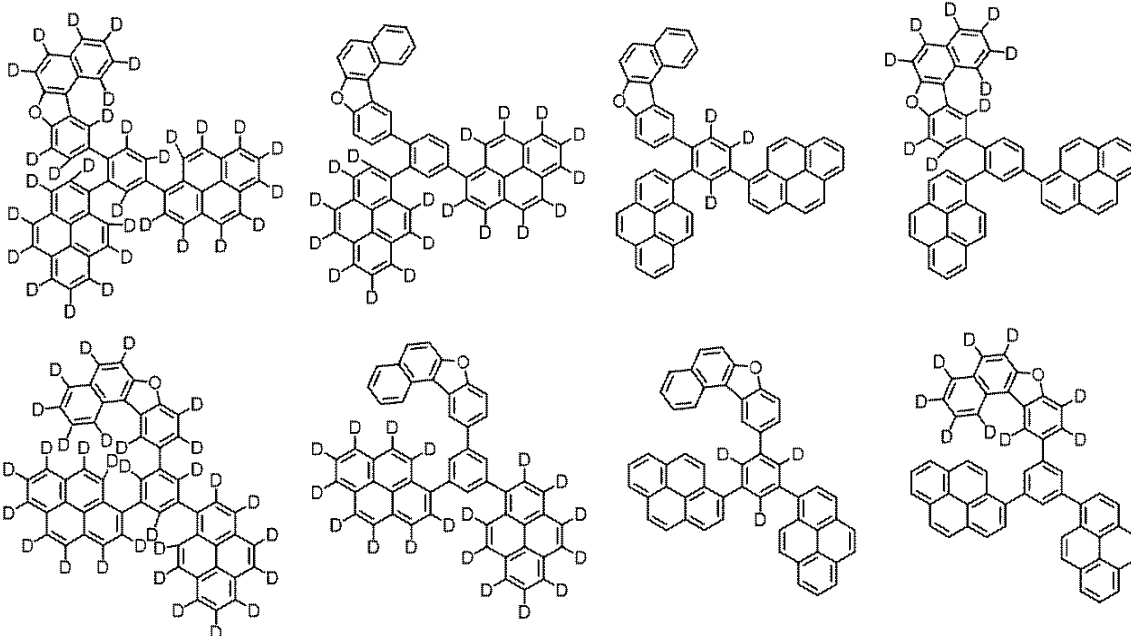
30

40

【 0 9 4 3】

50

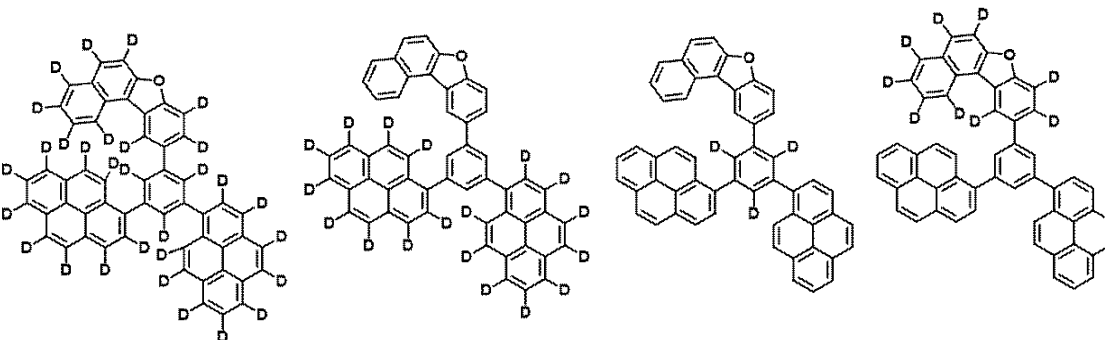
【化 3 4 9】



10

【 0 9 4 4】

【化 3 5 0】

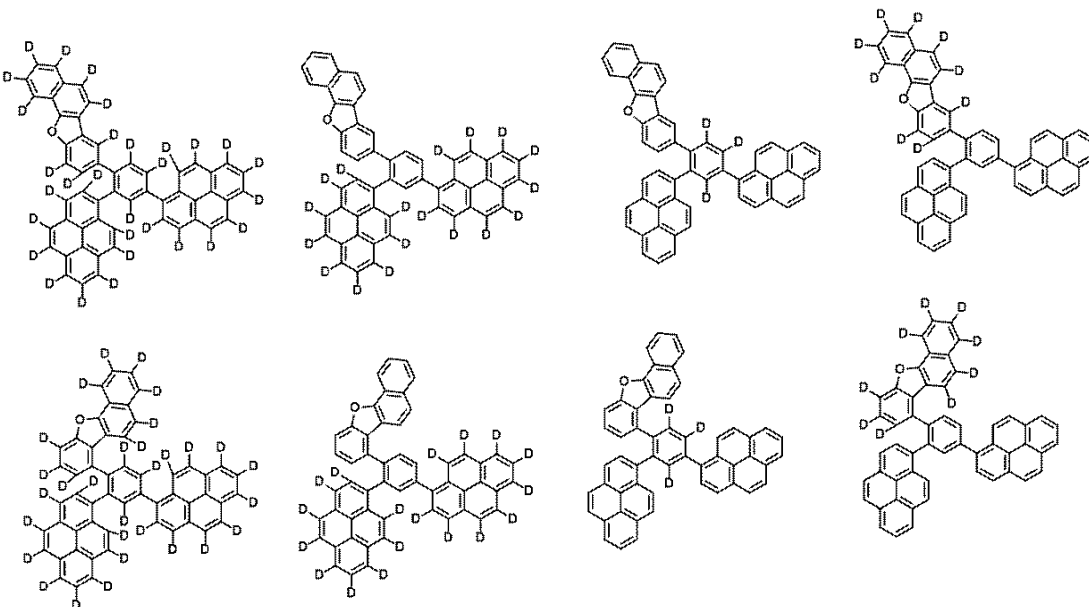


20

30

【 0 9 4 5】

【化 3 5 1】

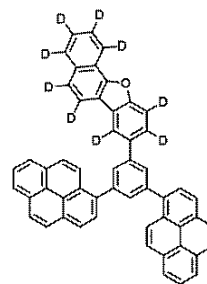
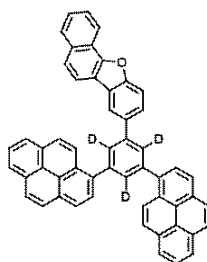
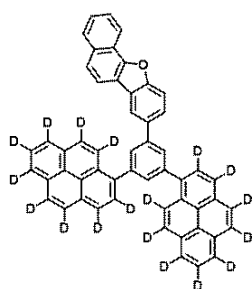
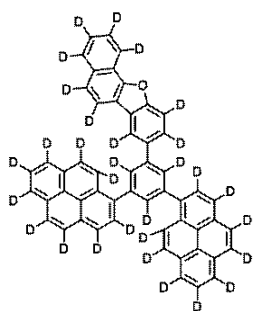


40

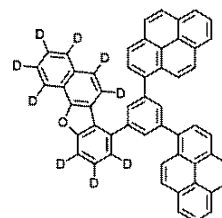
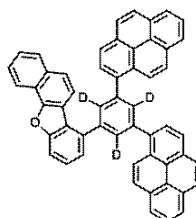
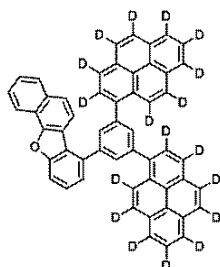
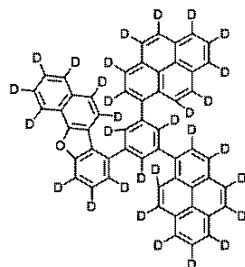
50

【 0 9 4 6 】

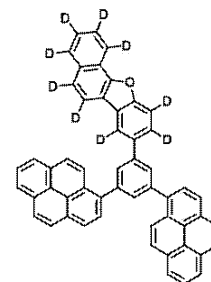
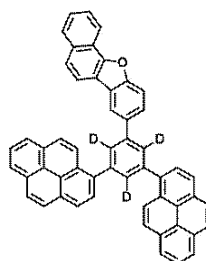
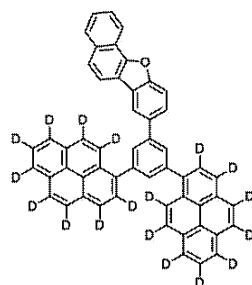
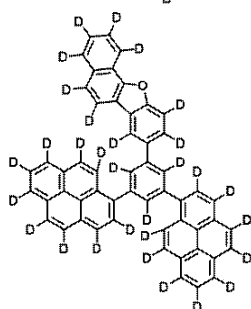
【 化 3 5 2 】



10

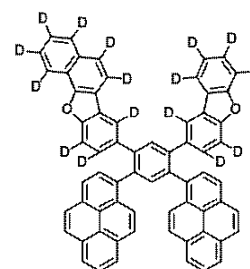
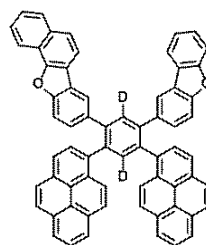
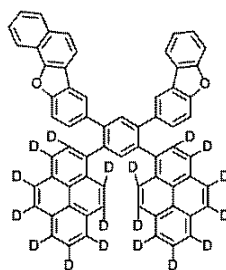
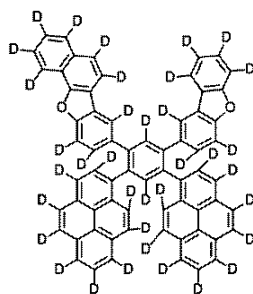


20



【 0 9 4 7 】

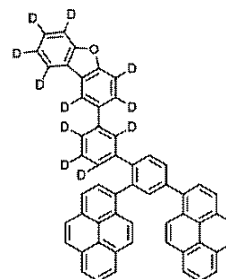
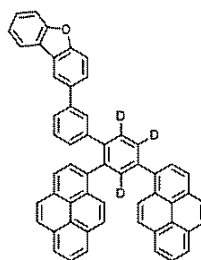
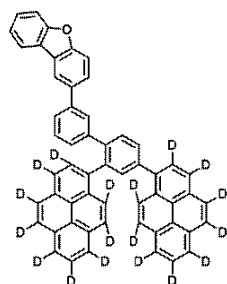
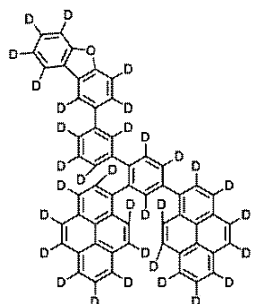
【 化 3 5 3 】



30

【 0 9 4 8 】

【 化 3 5 4 】

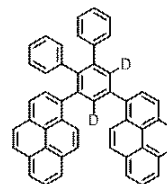
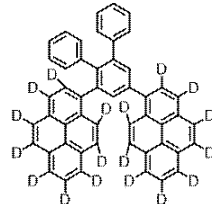
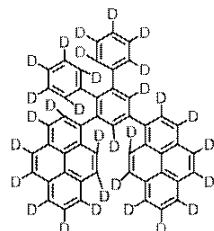
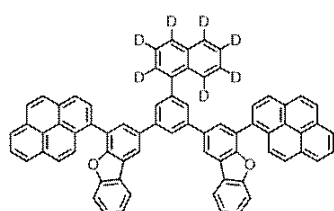
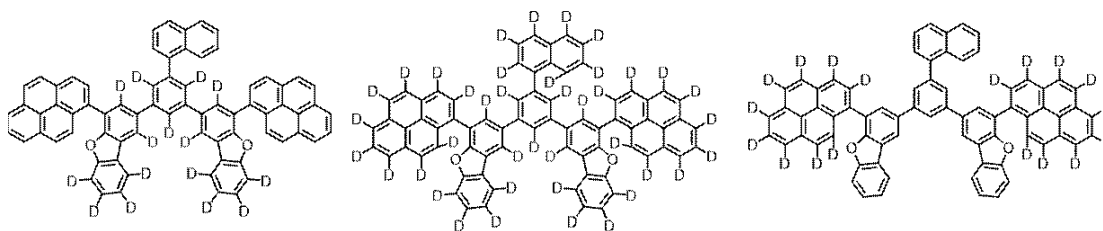


40

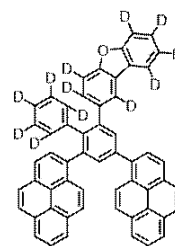
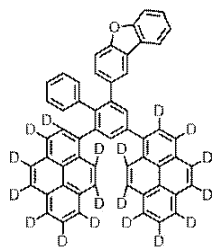
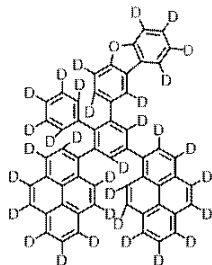
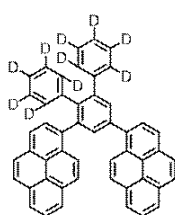
50

【 0 9 4 9 】

【 化 3 5 5 】



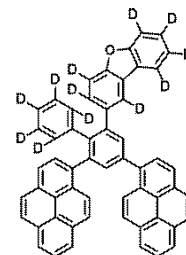
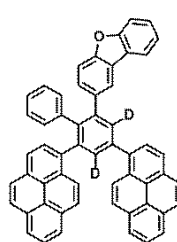
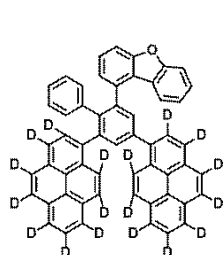
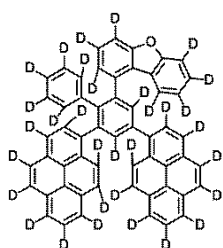
10



20

【 0 9 5 0 】

【 化 3 5 6 】



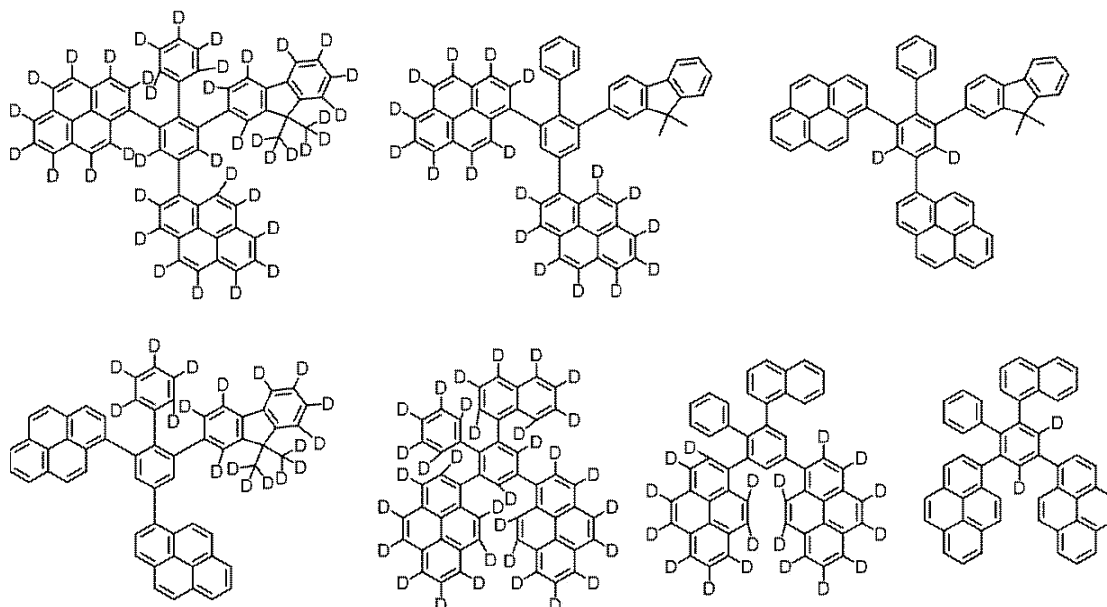
30

【 0 9 5 1 】

40

50

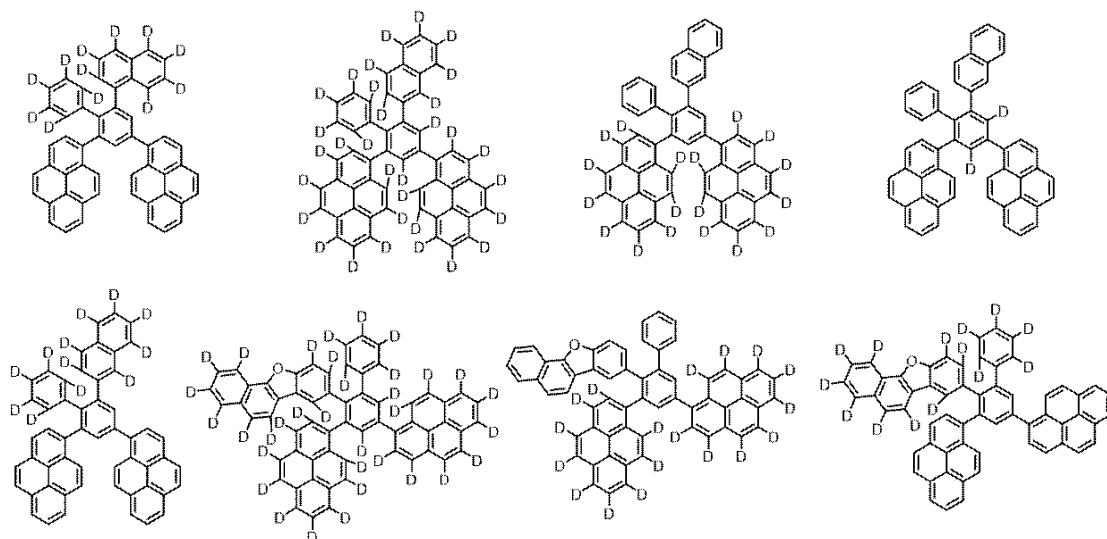
【化 3 5 7】



10

【 0 9 5 2】

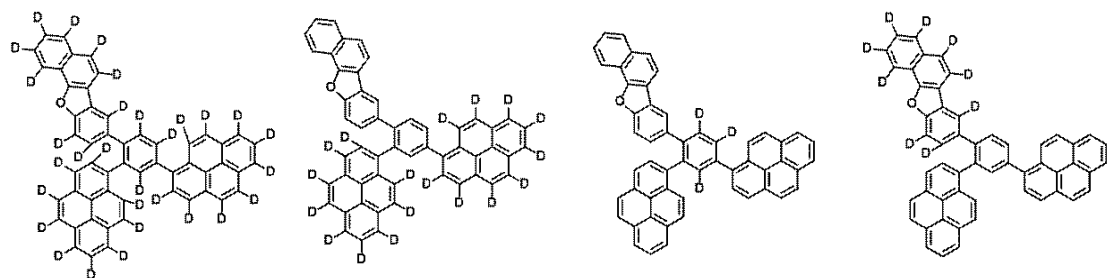
【化 3 5 8】



20

【 0 9 5 3】

【化 3 5 9】

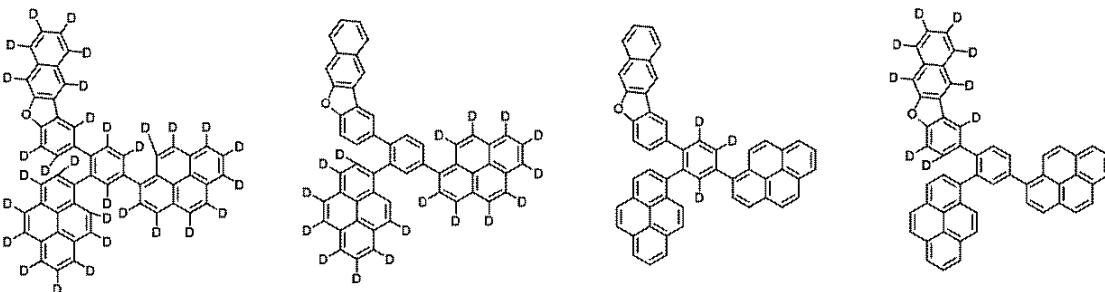
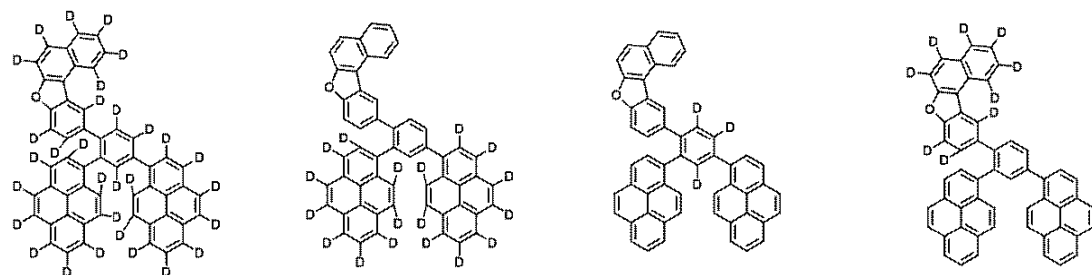


40

【 0 9 5 4】

50

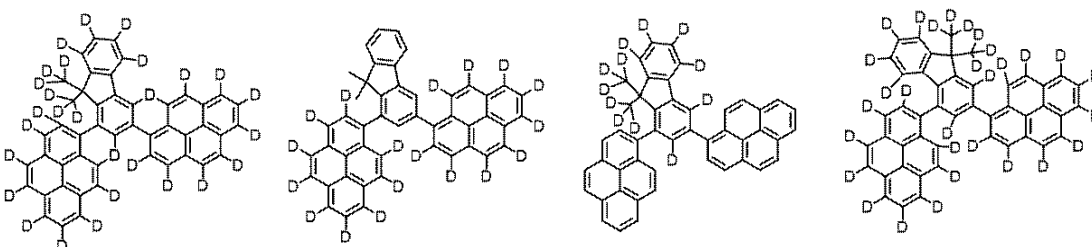
【化 3 6 0】



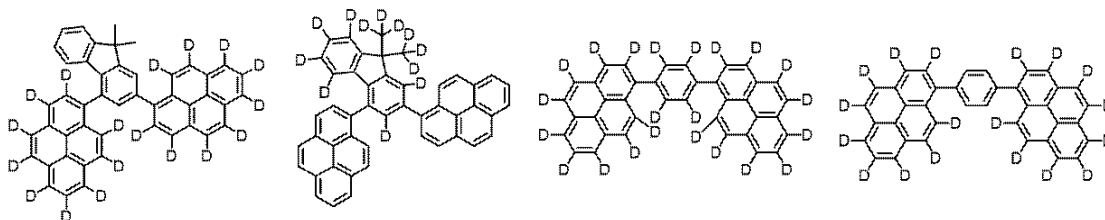
10

【 0 9 5 5】

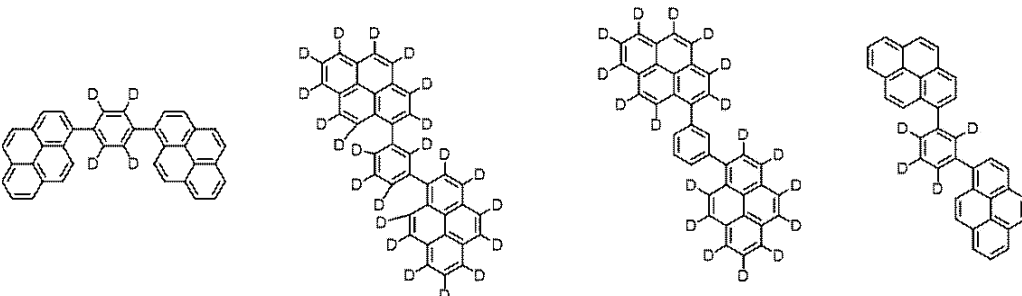
【化 3 6 1】



20



30

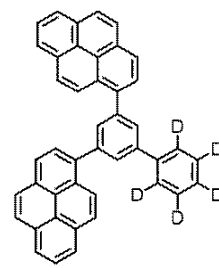
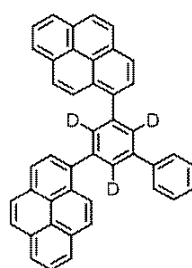
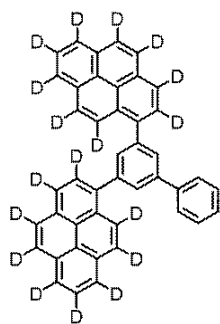
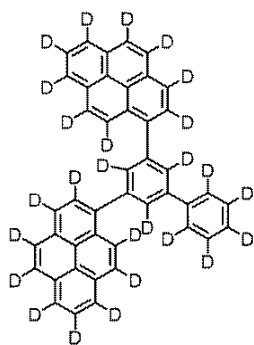


40

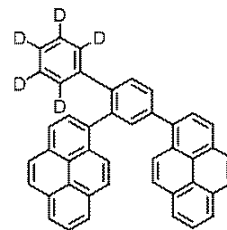
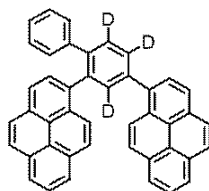
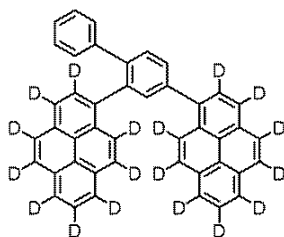
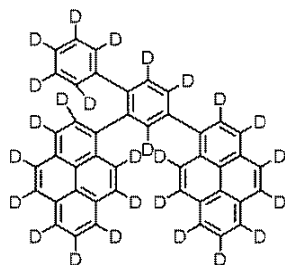
【 0 9 5 6】

50

【化 3 6 2】



10



【 0 9 5 7 】

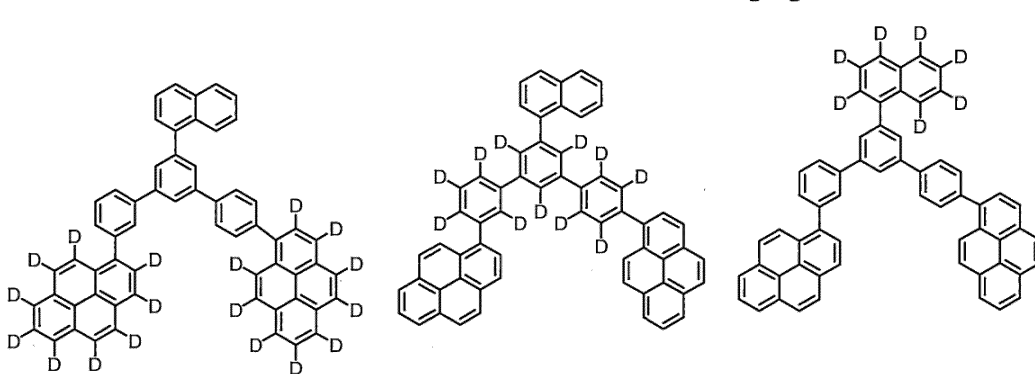
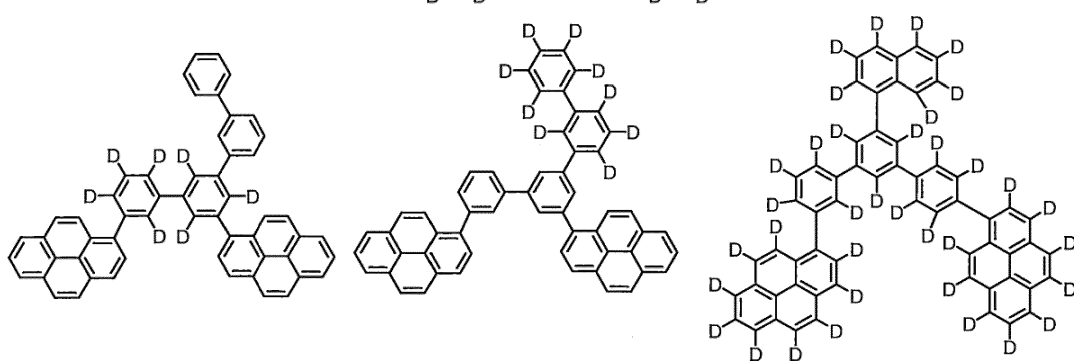
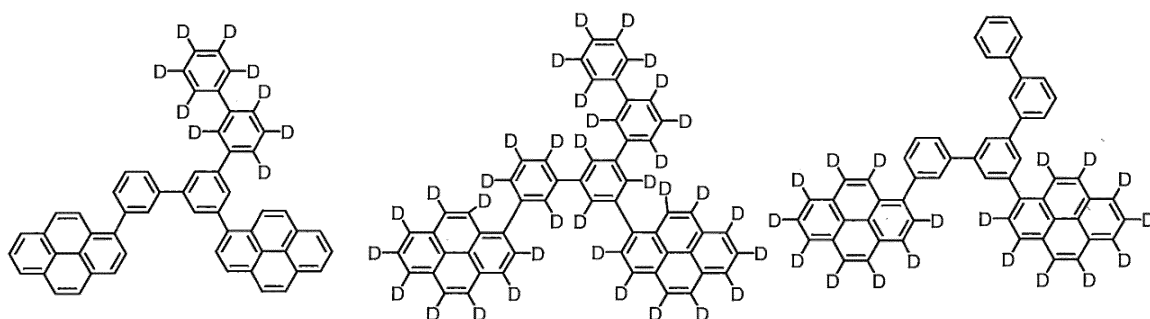
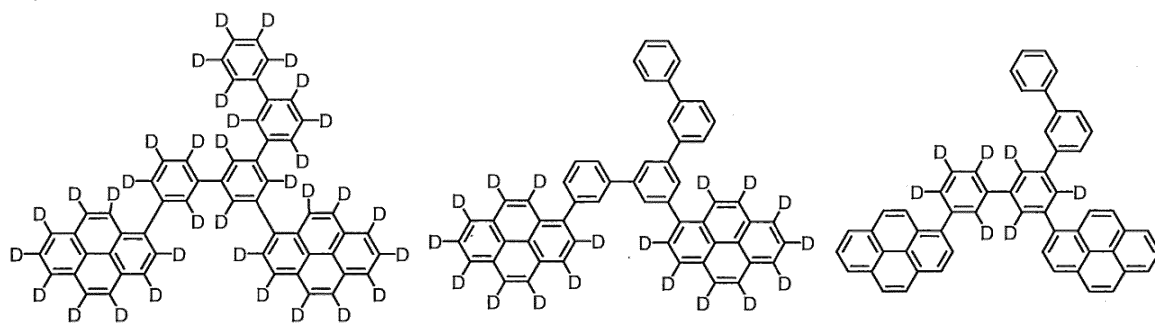
20

30

40

50

【化 3 6 3】



【 0 9 5 8 】

10

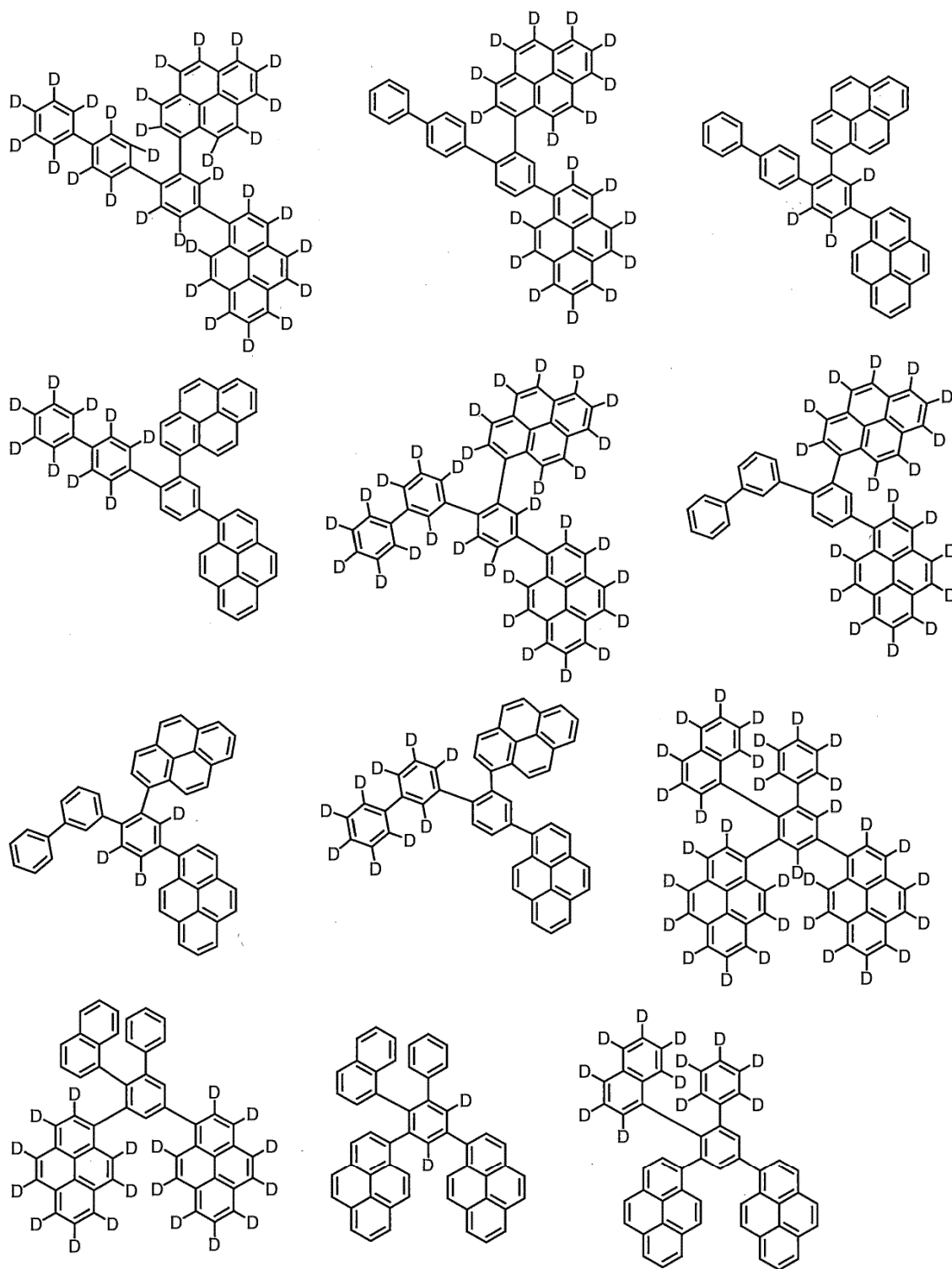
20

30

40

50

【化 3 6 4】



10

20

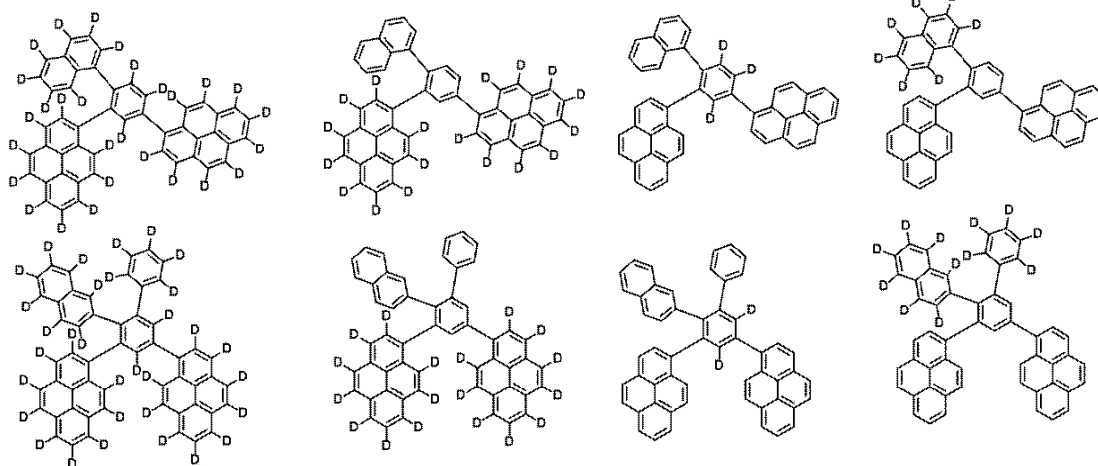
30

40

【 0 9 5 9 】

50

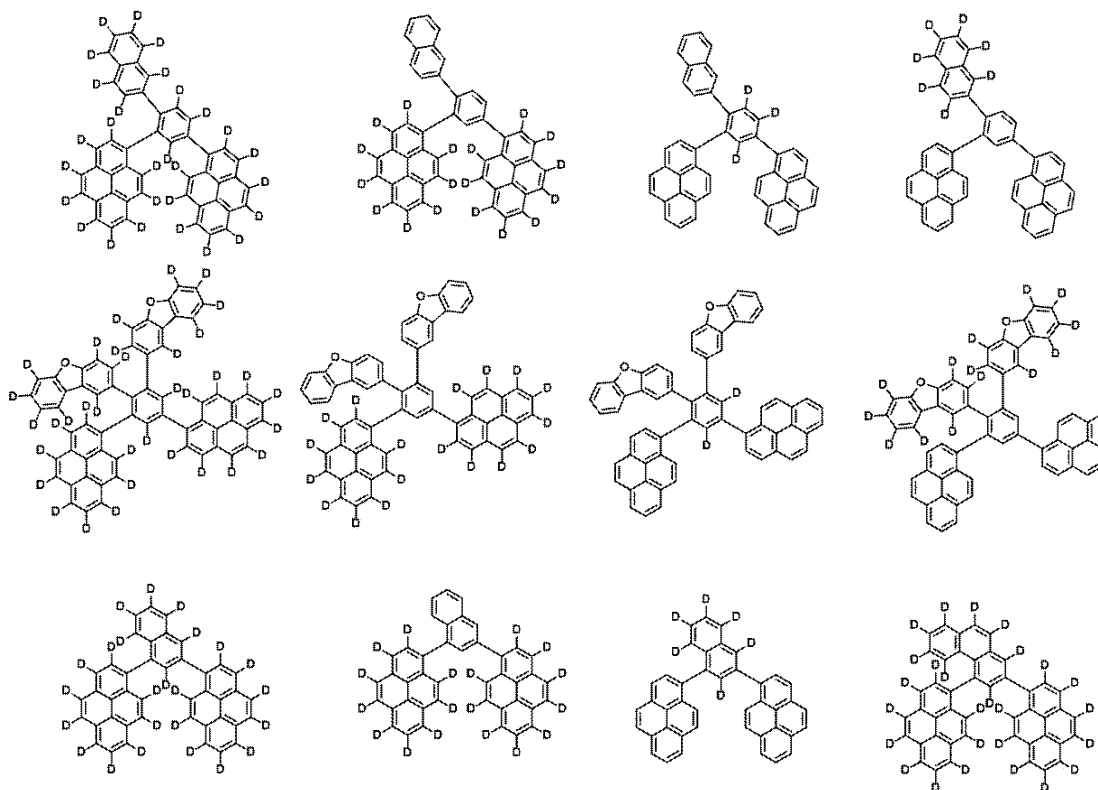
【化 3 6 5】



10

【 0 9 6 0】

【化 3 6 6】



20

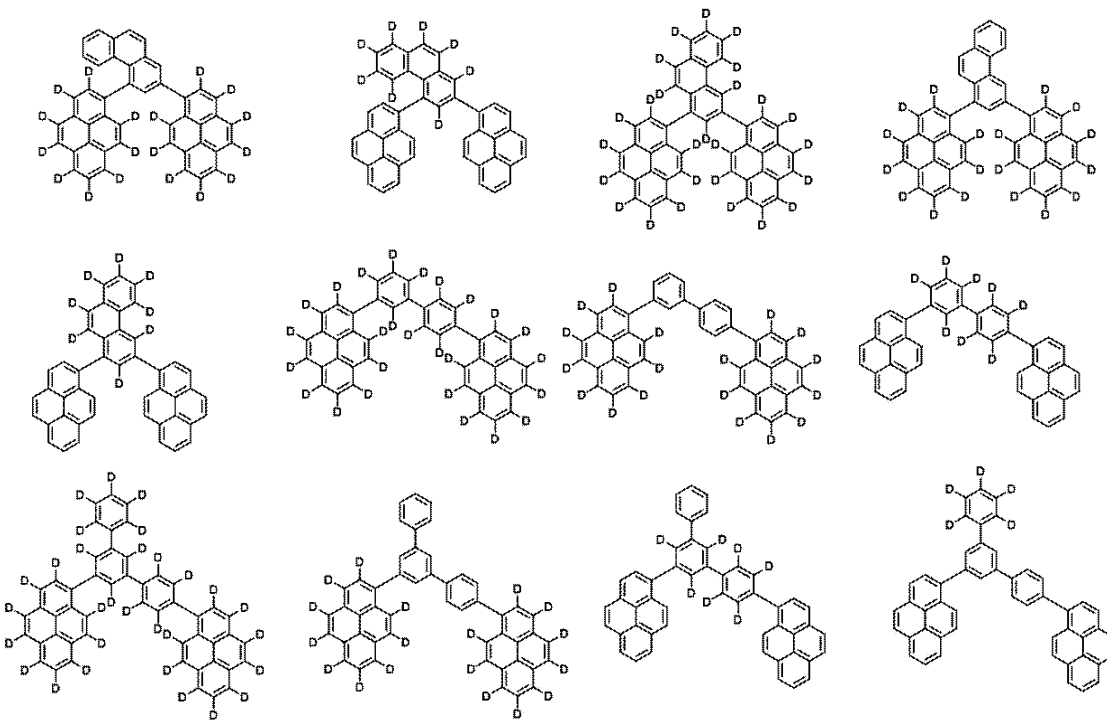
30

【 0 9 6 1】

40

50

【化 3 6 7】

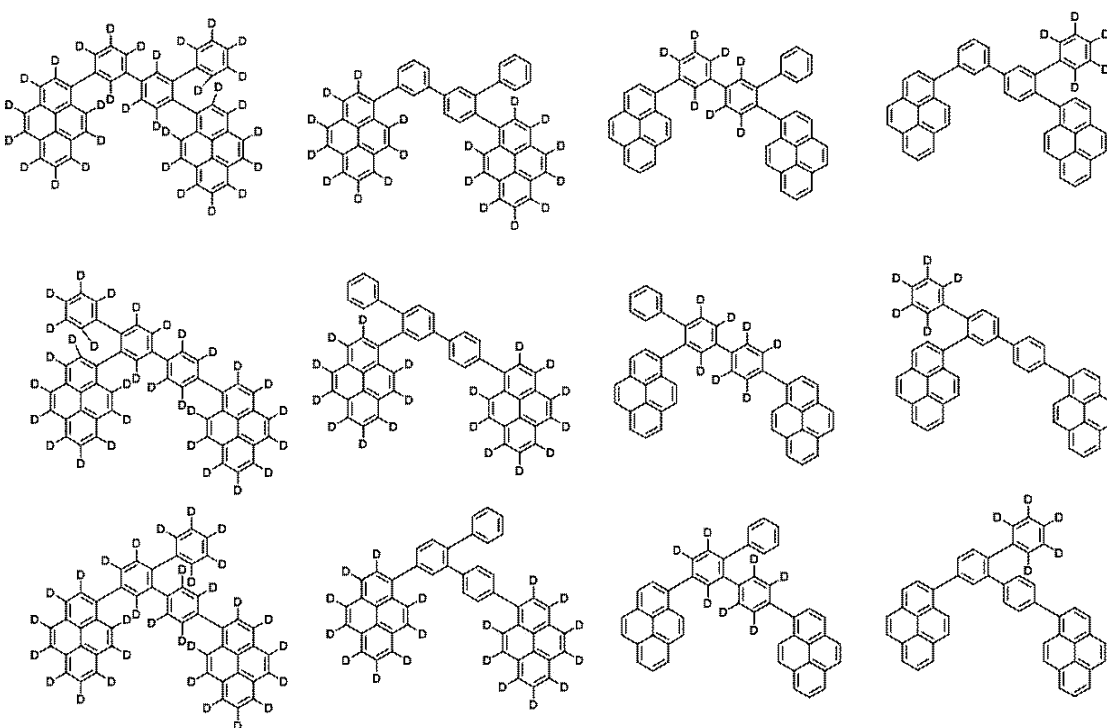


10

20

【 0 9 6 2】

【化 3 6 8】



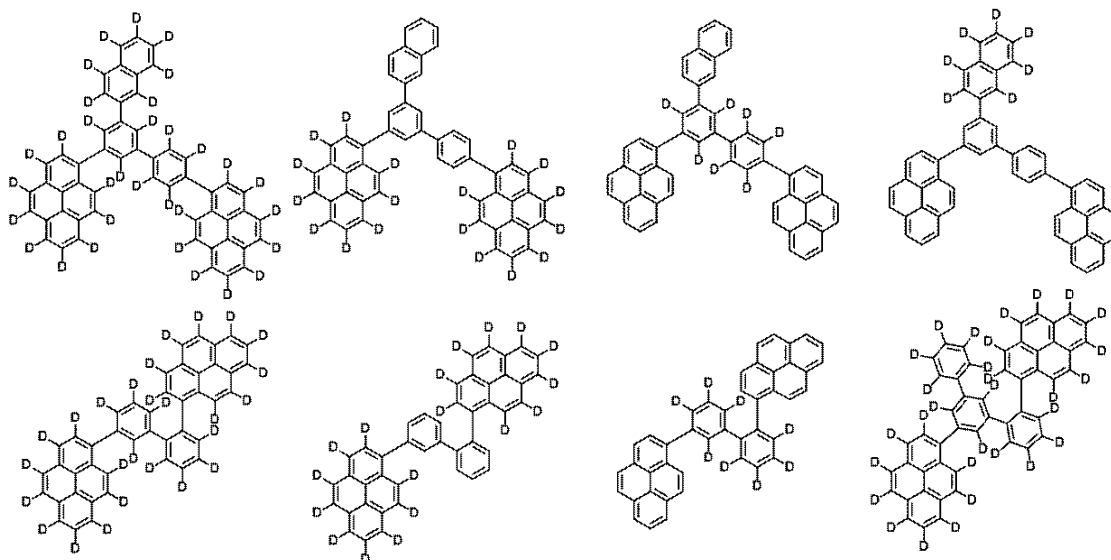
30

40

【 0 9 6 3】

50

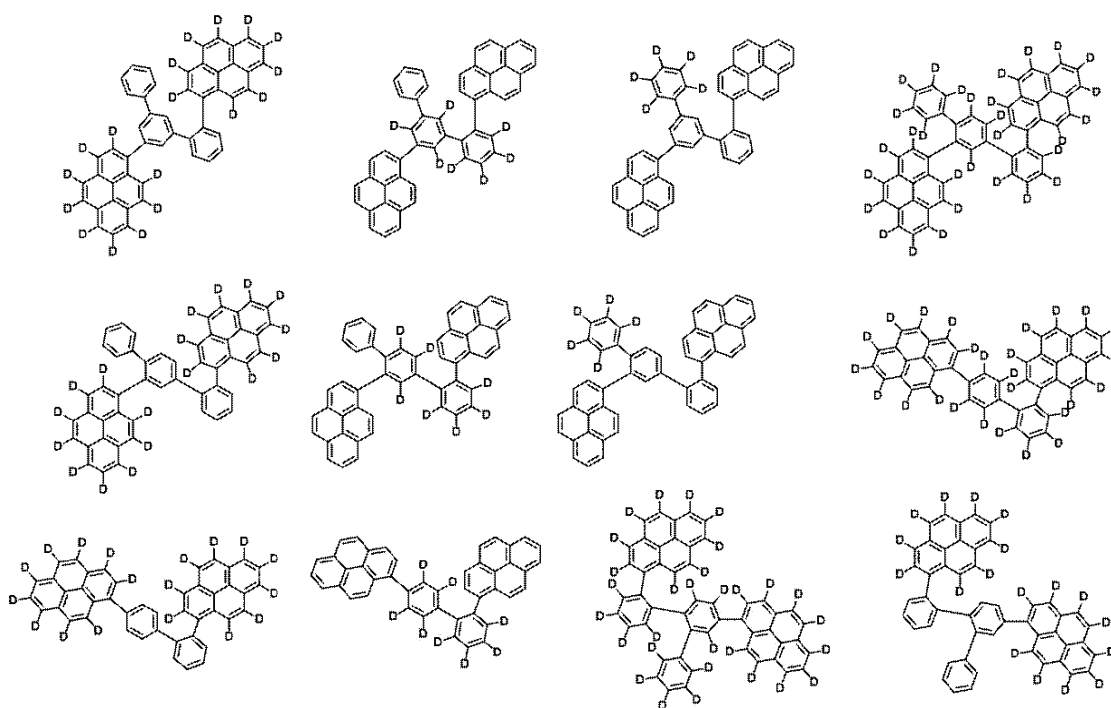
【化 3 6 9】



10

【 0 9 6 4】

【化 3 7 0】



20

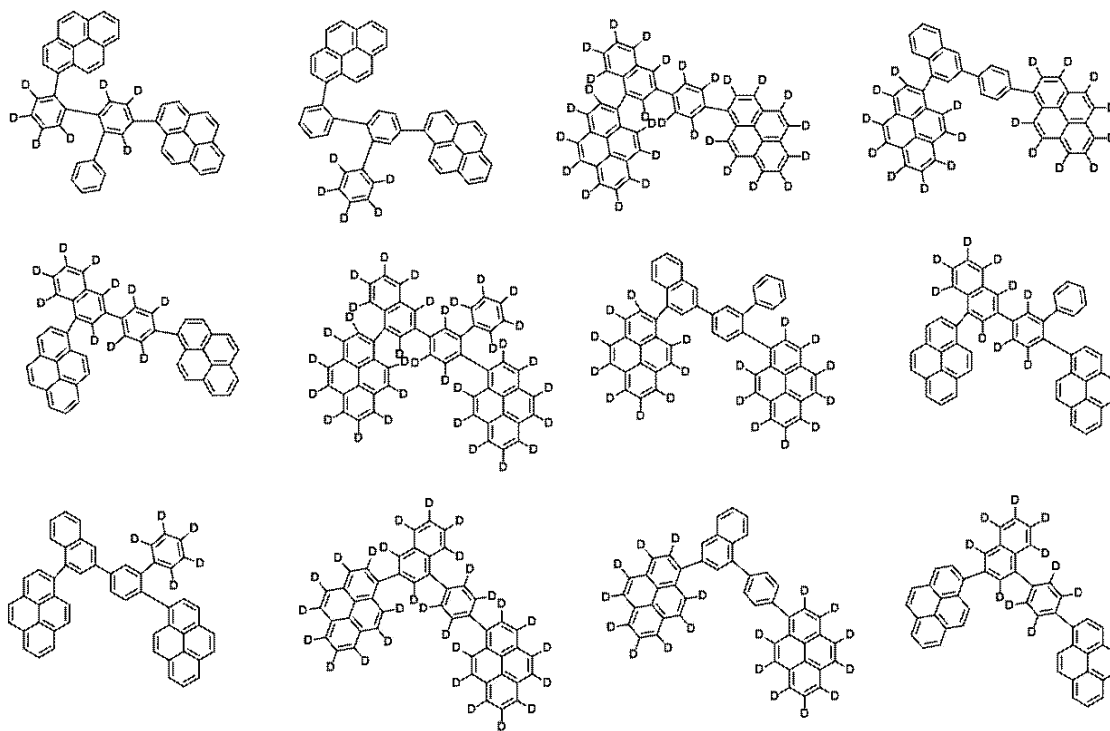
30

【 0 9 6 5】

40

50

【化 3 7 1】

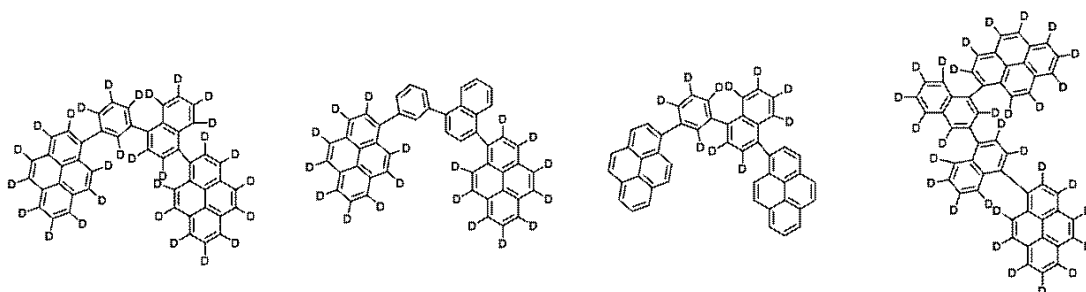


10

20

【 0 9 6 6 】

【化 3 7 2】



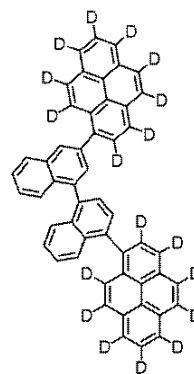
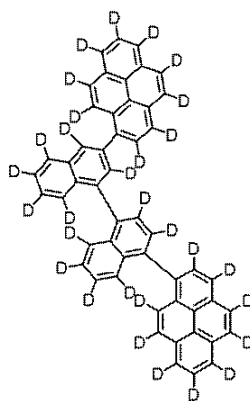
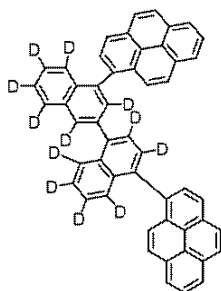
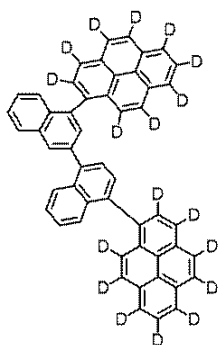
30

【 0 9 6 7 】

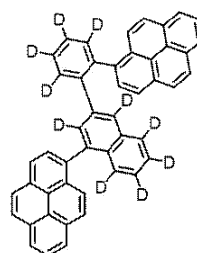
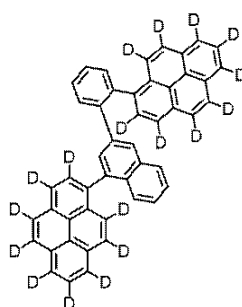
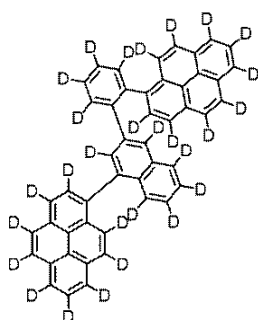
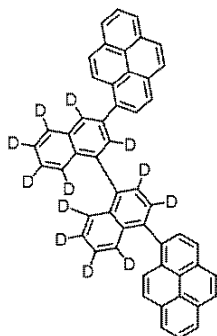
40

50

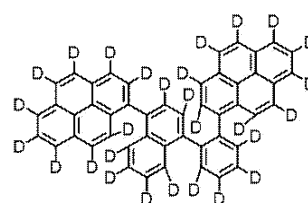
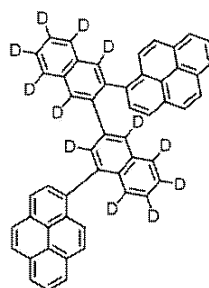
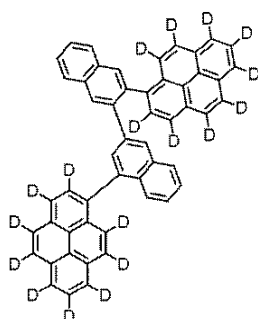
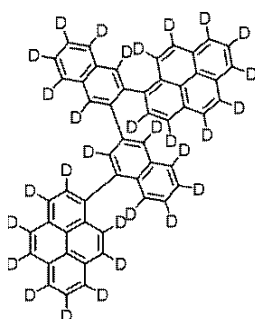
【化 3 7 3】



10



20



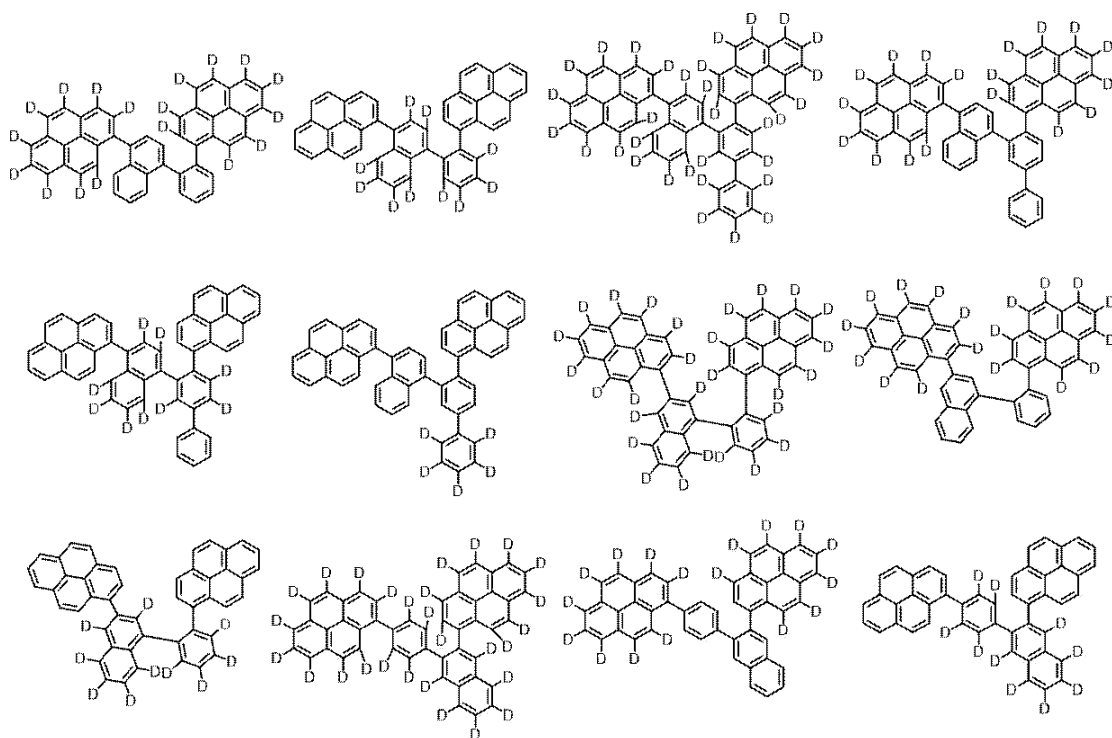
30

【 0 9 6 8 】

40

50

【化 3 7 4】

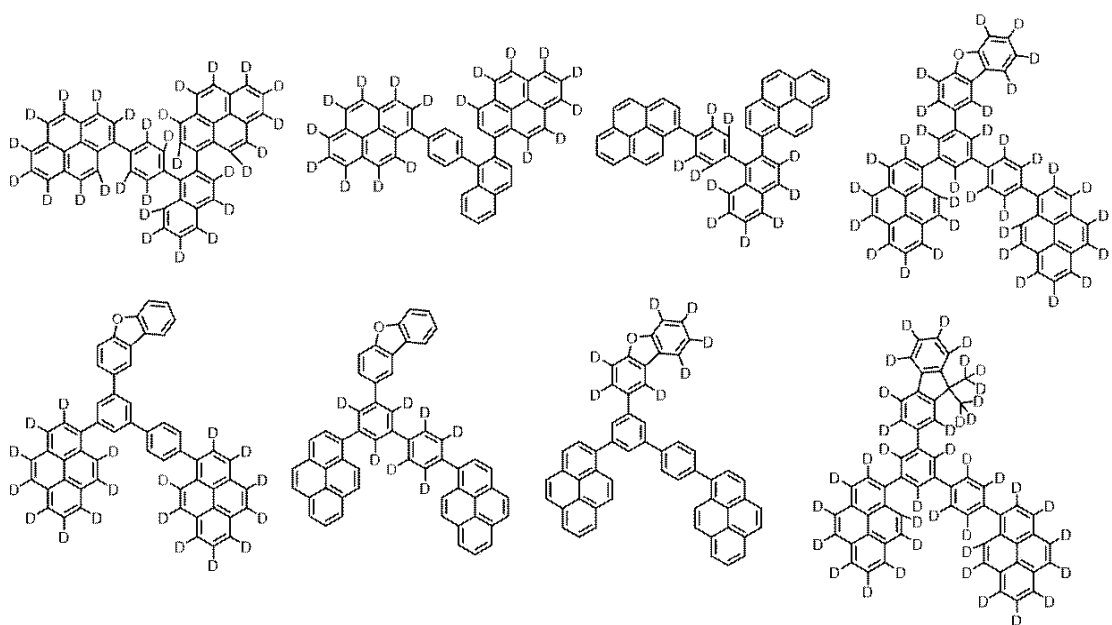


10

20

【 0 9 6 9 】

【化 3 7 5】



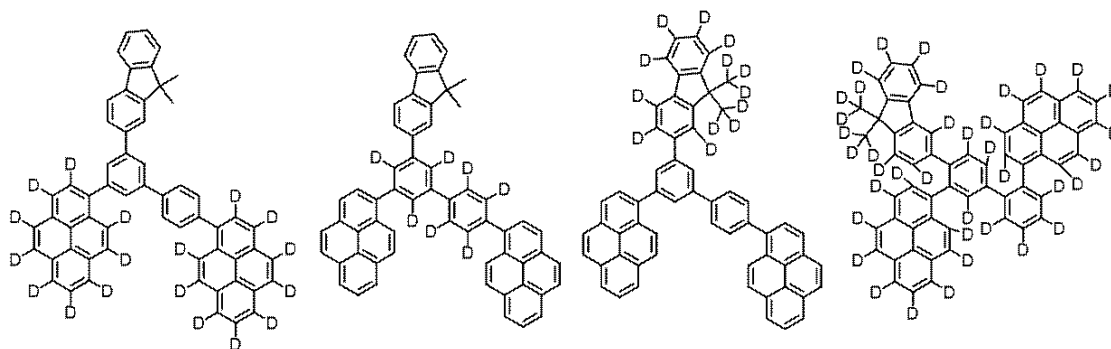
30

40

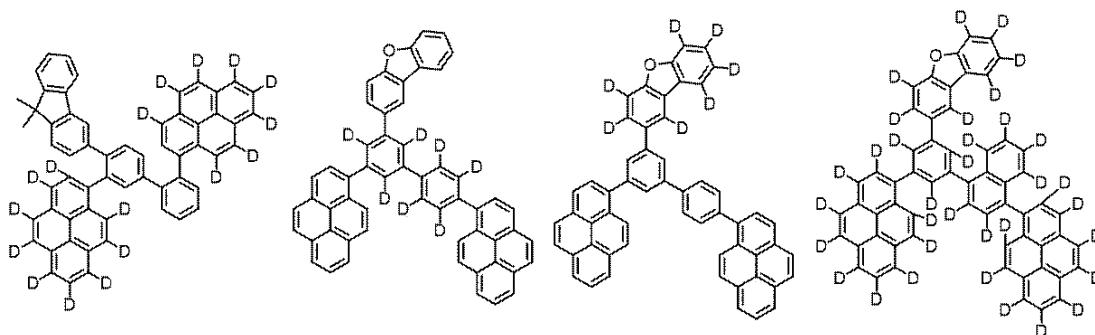
【 0 9 7 0 】

50

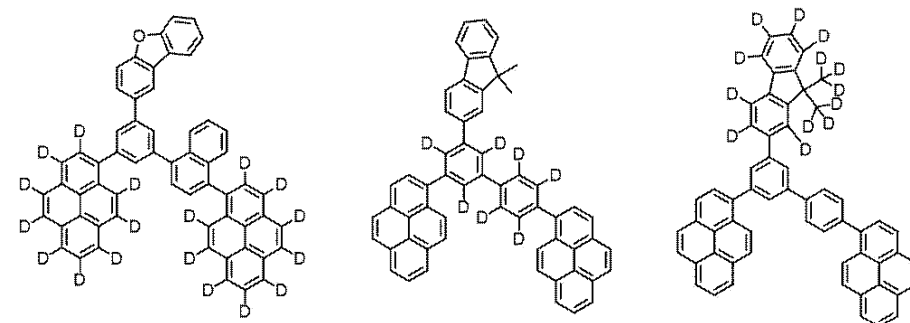
【化 3 7 6】



10



20



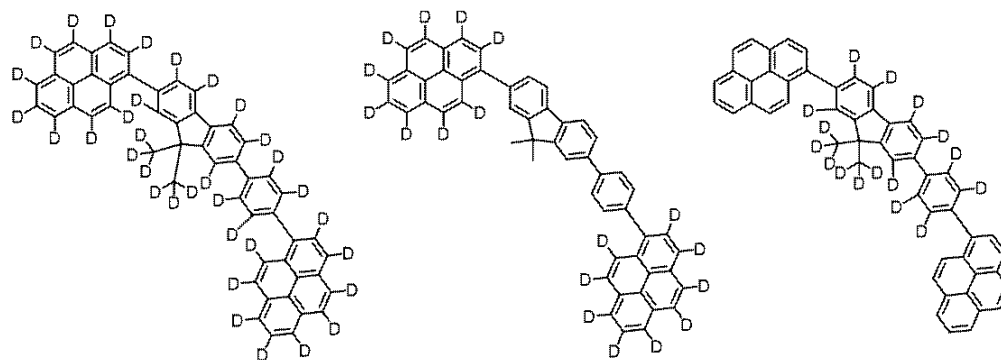
【 0 9 7 1 】

30

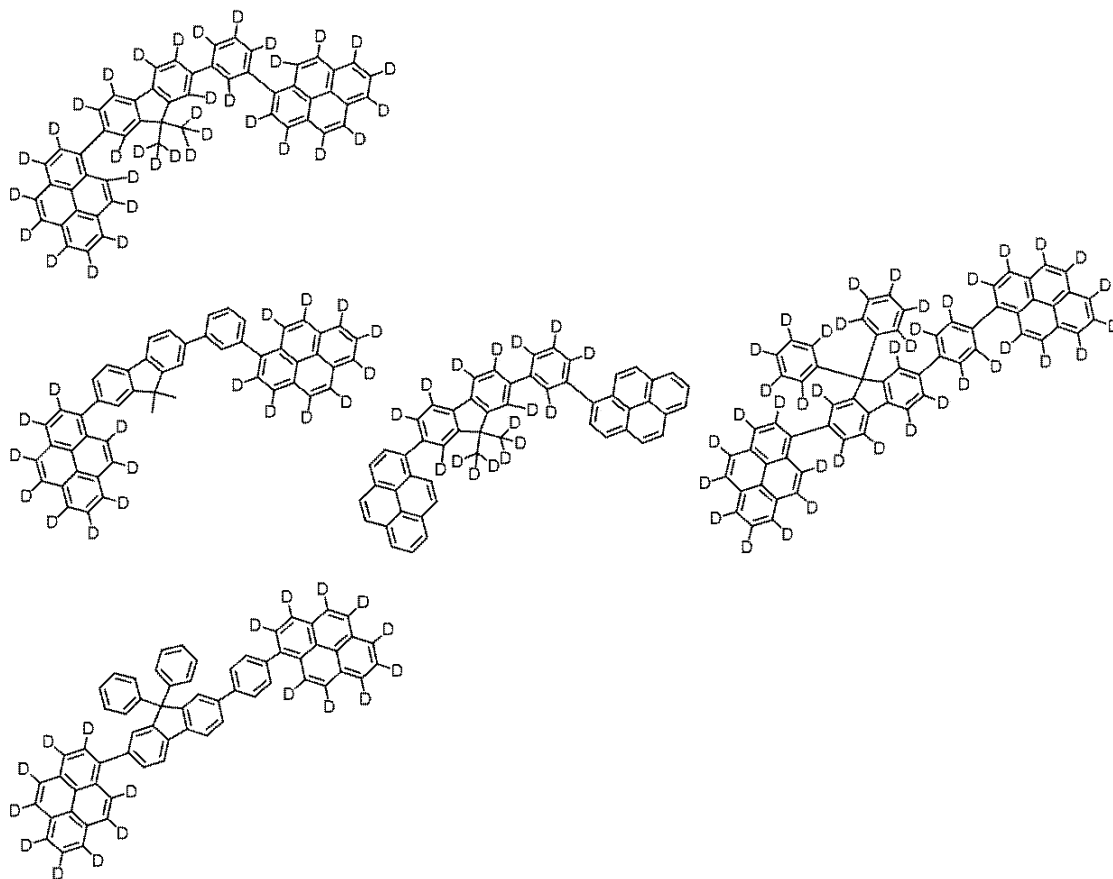
40

50

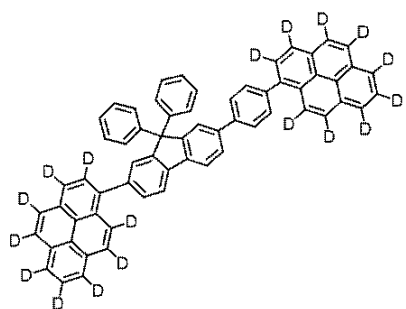
【化 3 7 7】



10



20



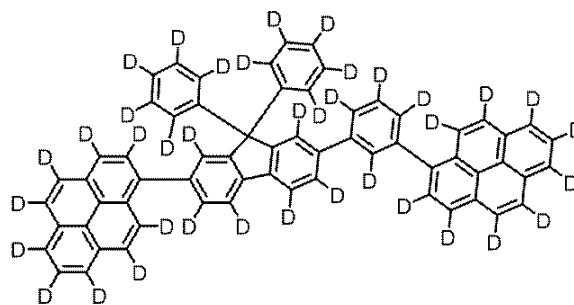
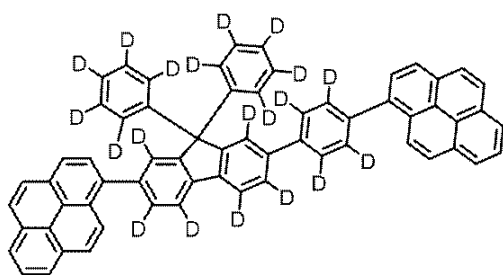
30

【 0 9 7 2 】

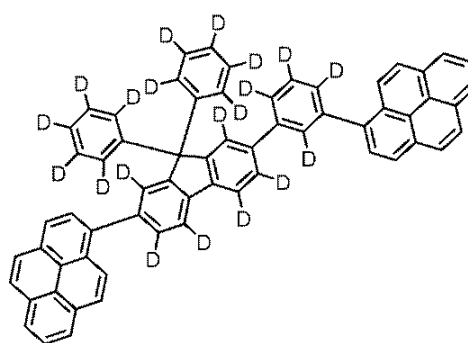
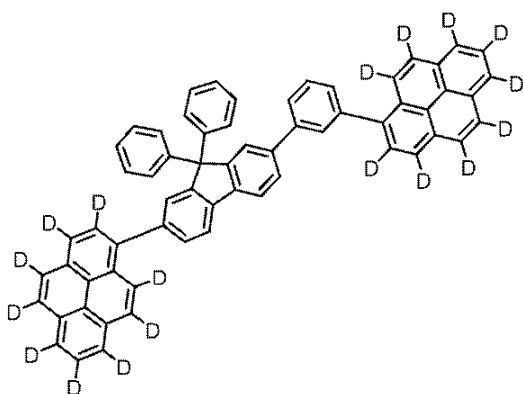
40

50

【化 3 7 8】



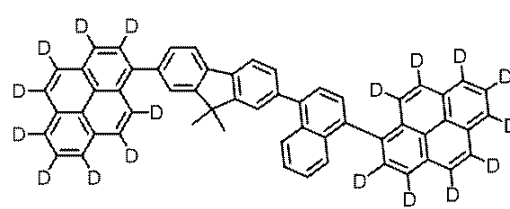
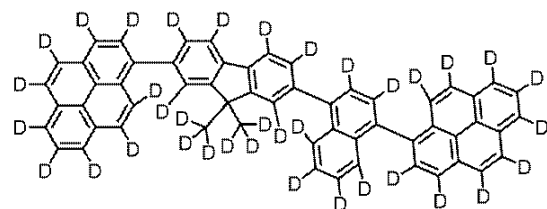
10



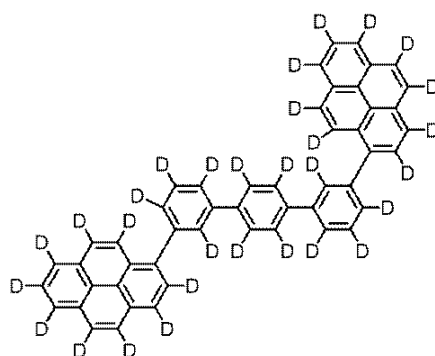
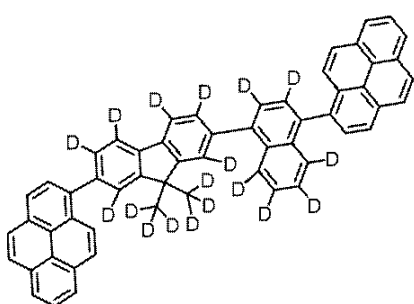
20

【 0 9 7 3】

【化 3 7 9】



30

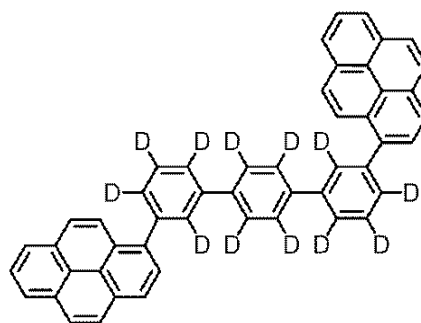
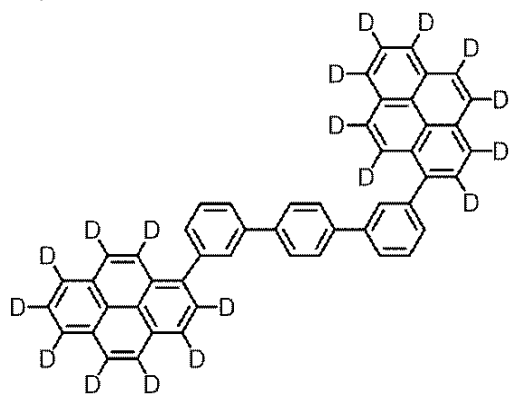


40

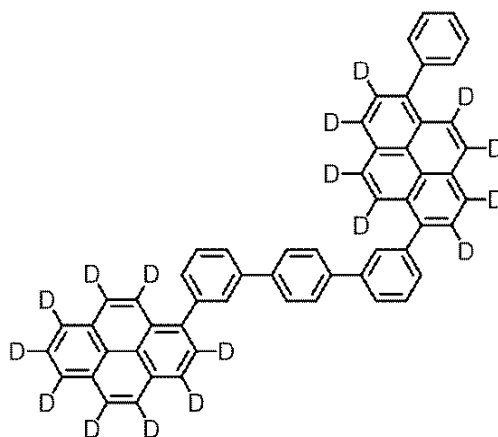
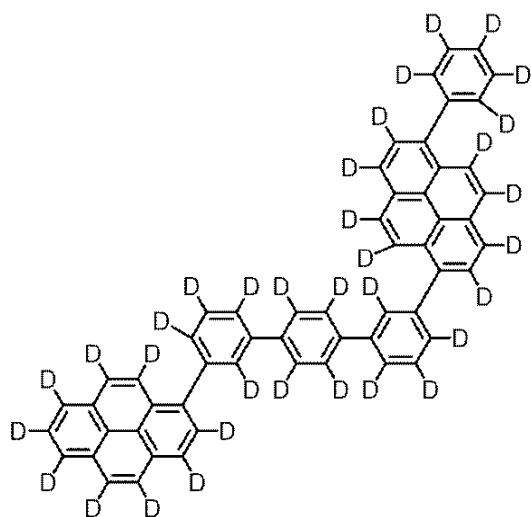
【 0 9 7 4】

50

【化 3 8 0】



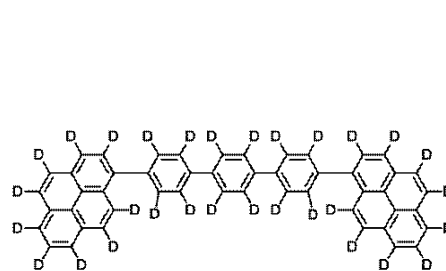
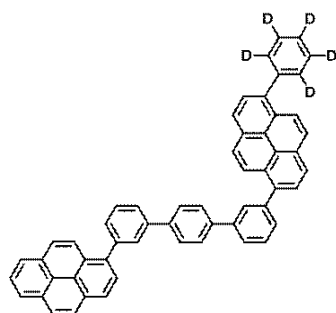
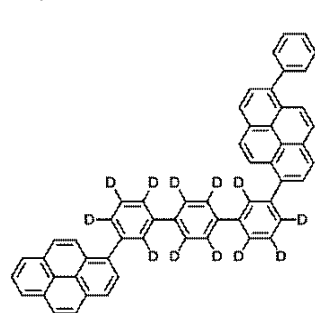
10



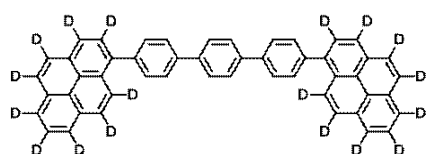
20

【 0 9 7 5】

【化 3 8 1】



30

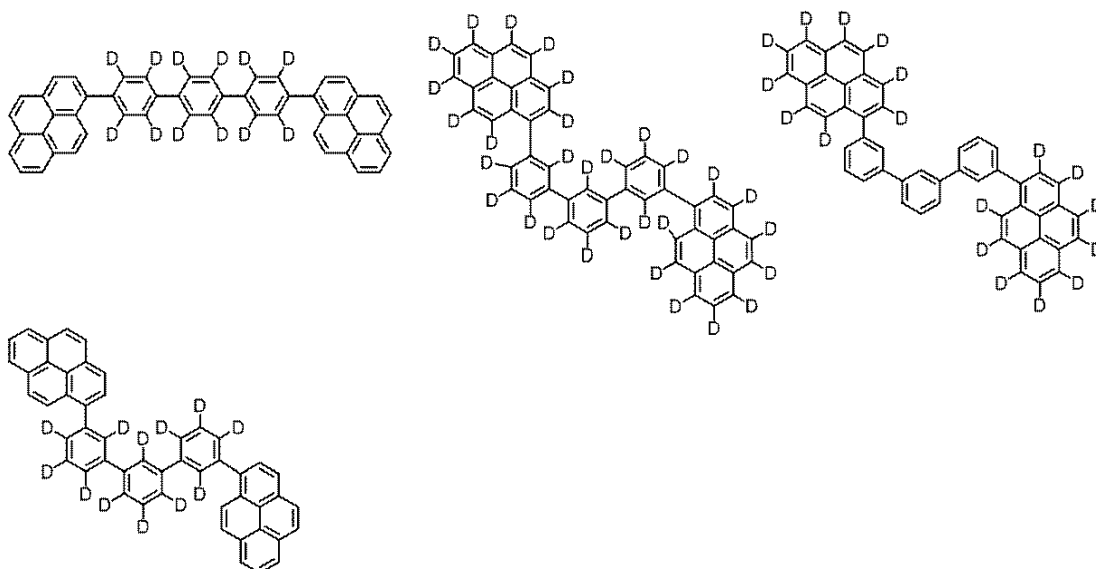


40

【 0 9 7 6】

50

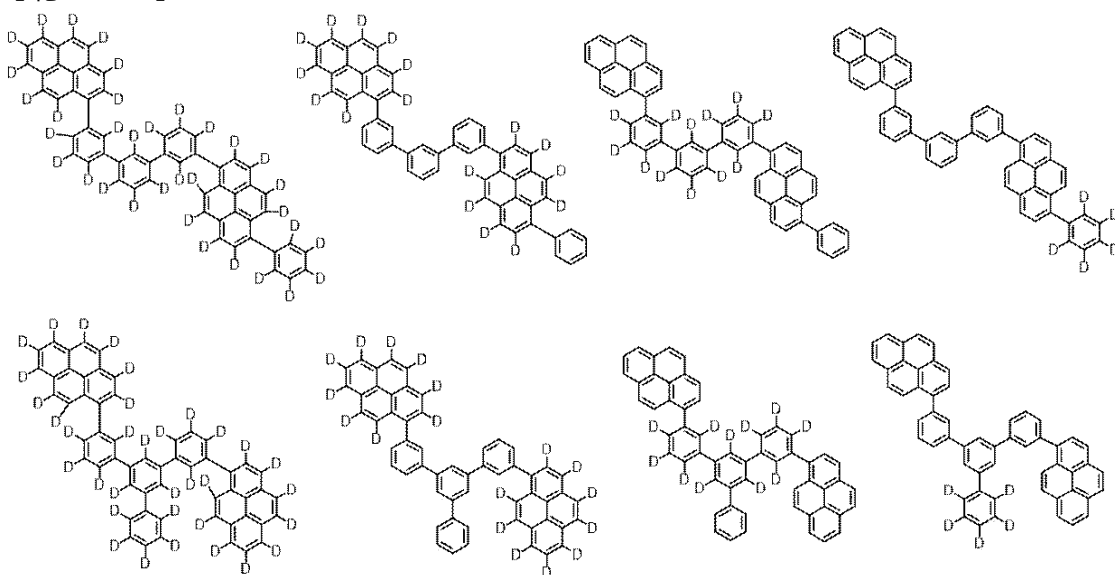
【化 3 8 2】



10

【 0 9 7 7】

【化 3 8 3】



20

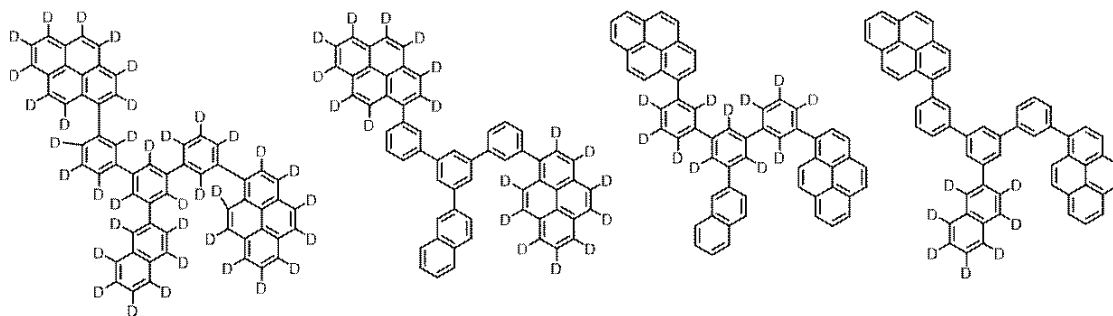
30

【 0 9 7 8】

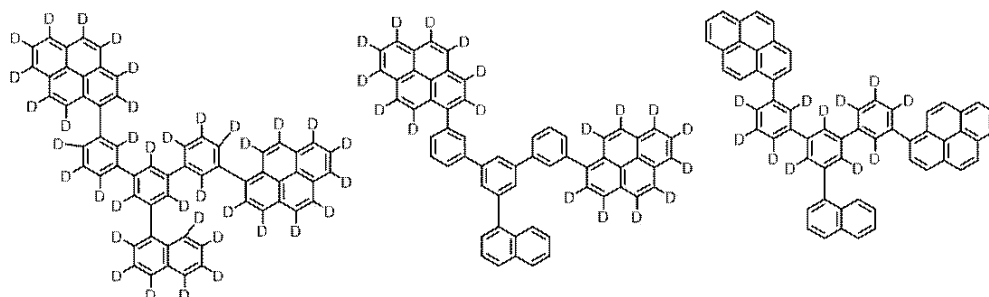
40

50

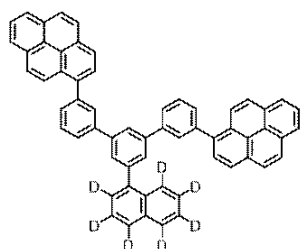
【化 3 8 4】



10

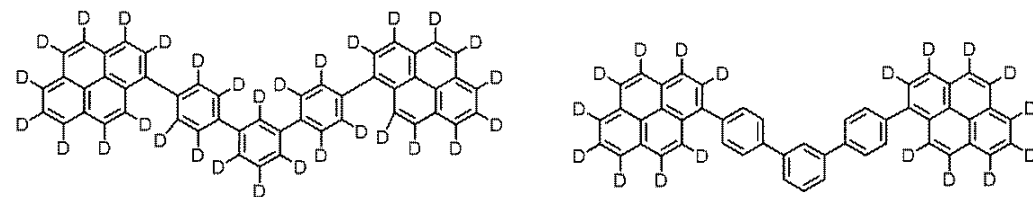


20

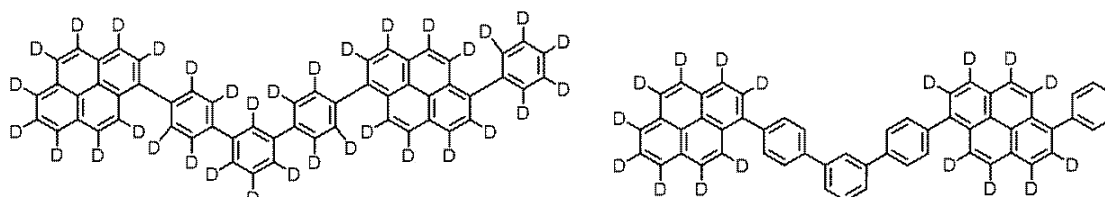
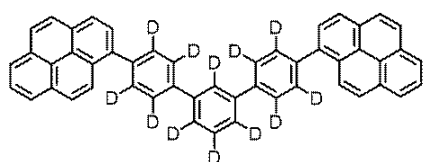


【 0 9 7 9】

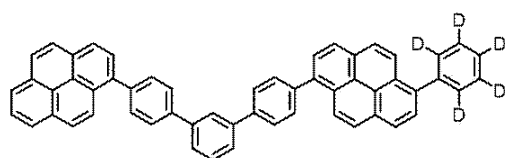
【化 3 8 5】



30



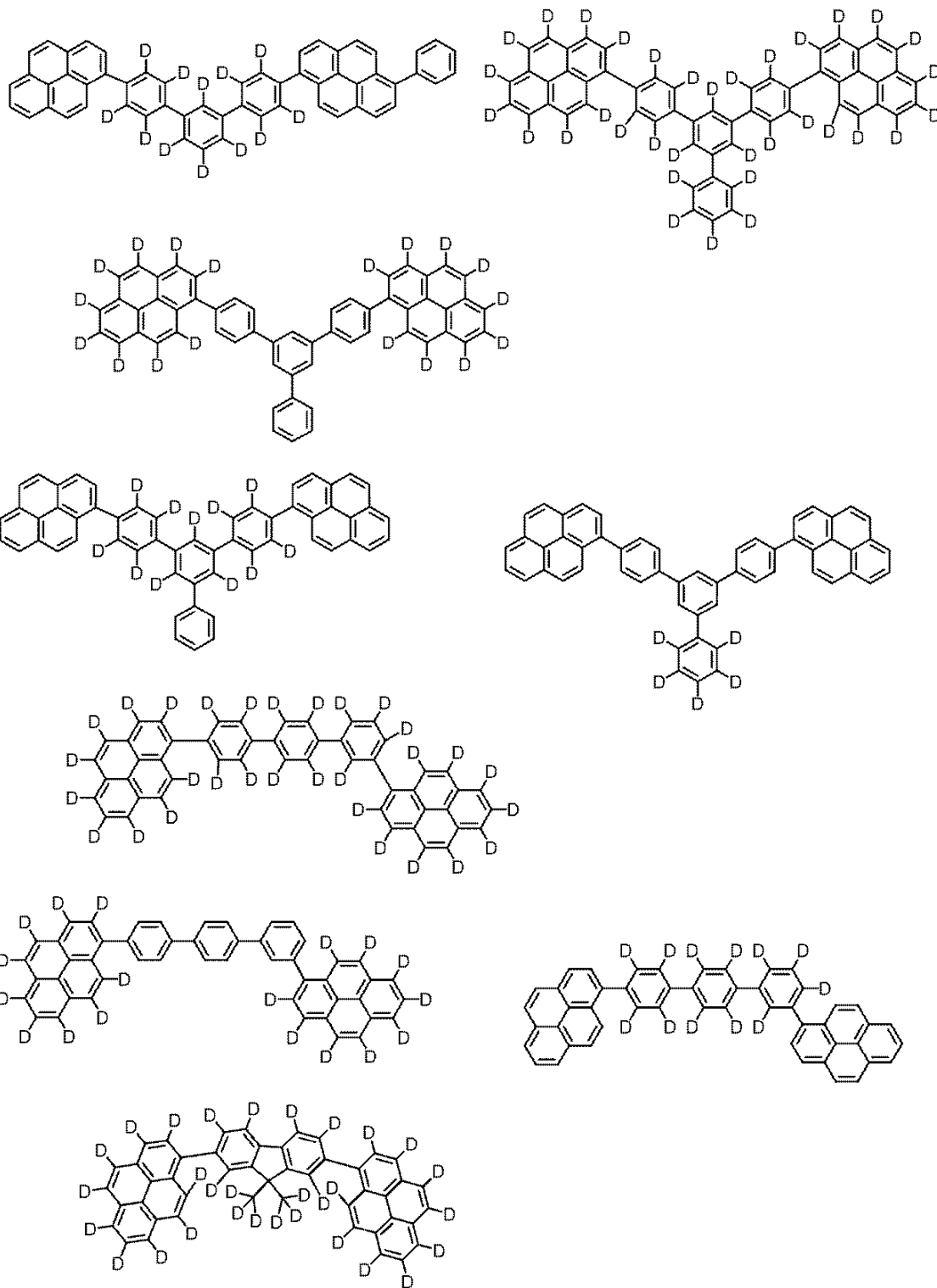
40



【 0 9 8 0】

50

【化 3 8 6】



10

20

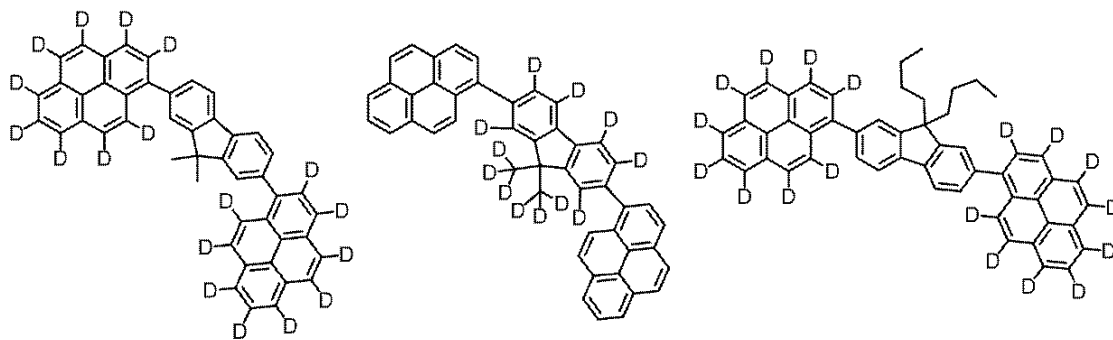
30

40

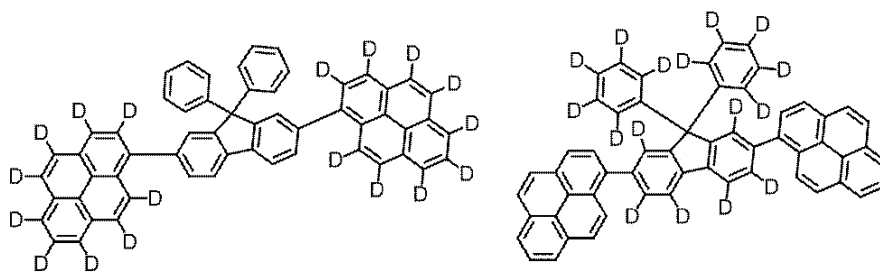
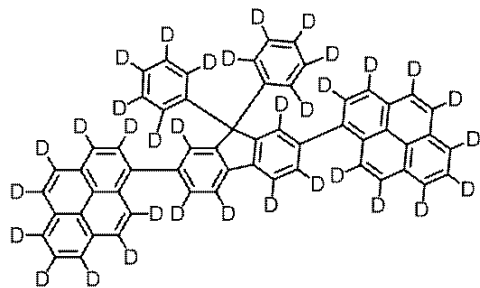
【 0 9 8 1】

50

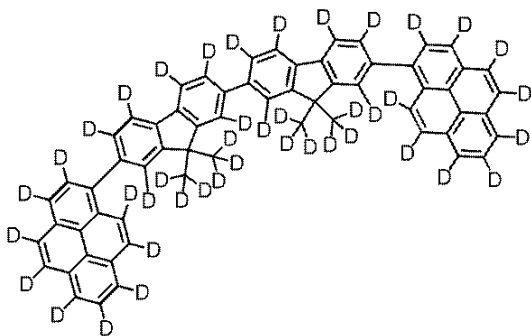
【化 3 8 7】



10



20



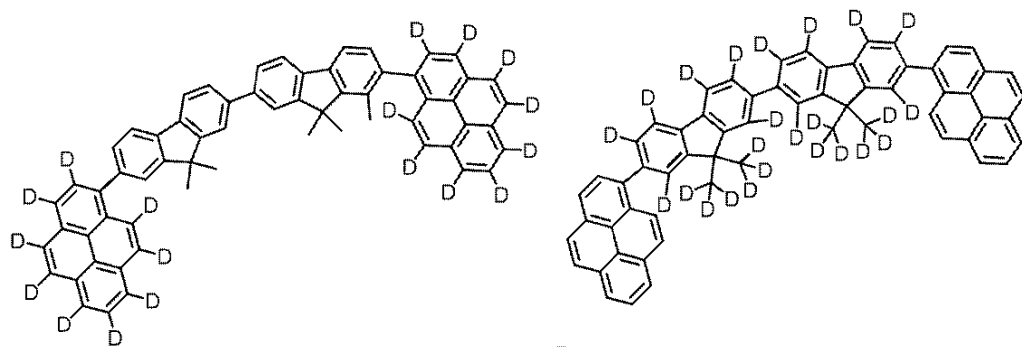
30

【 0 9 8 2 】

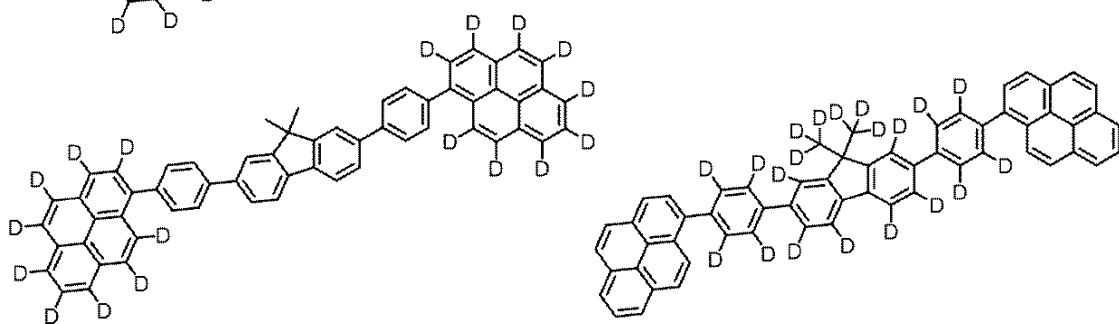
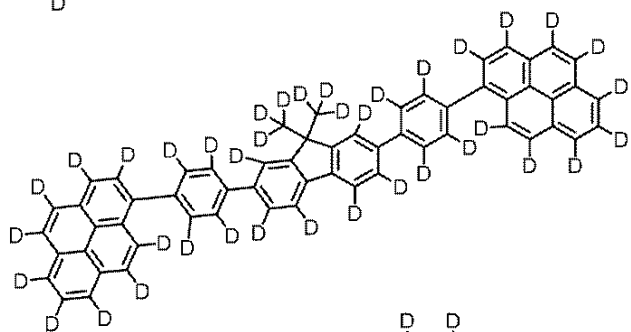
40

50

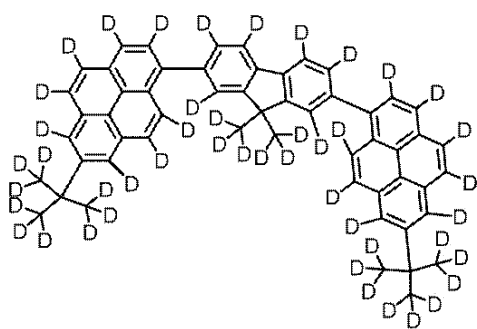
【化 3 8 8】



10



20



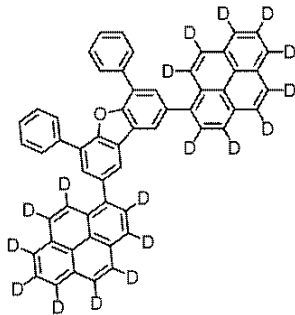
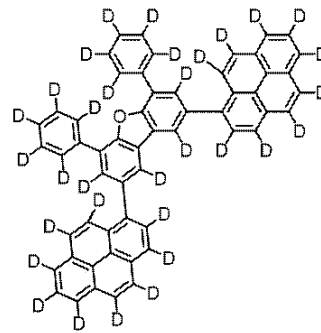
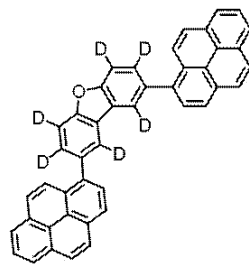
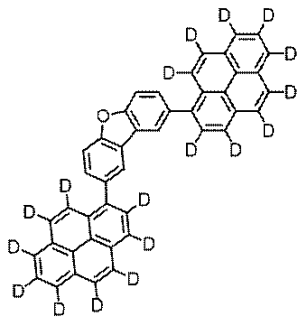
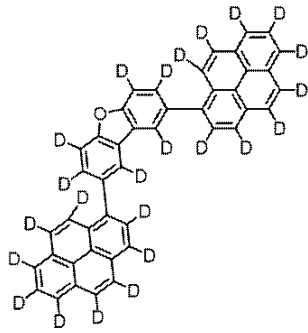
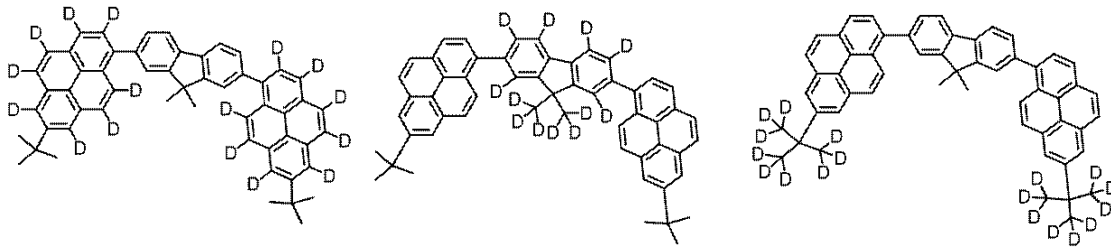
30

【 0 9 8 3】

40

50

【化 3 8 9】



【 0 9 8 4】

10

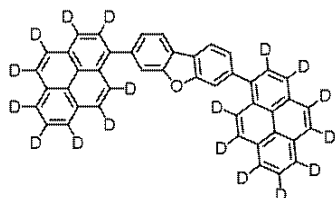
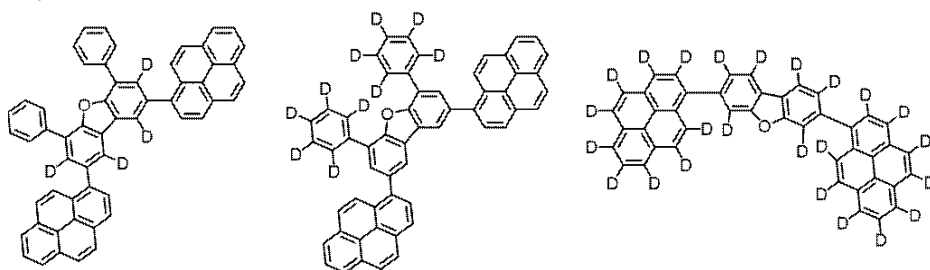
20

30

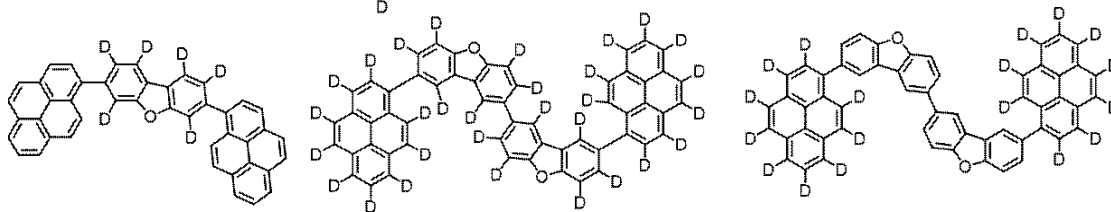
40

50

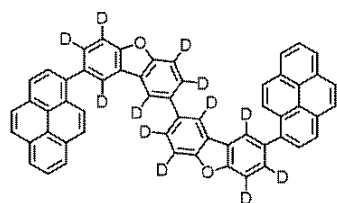
【化 3 9 0】



10



20



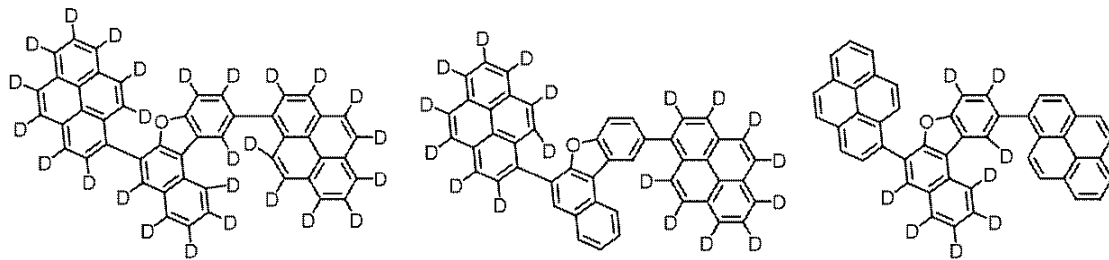
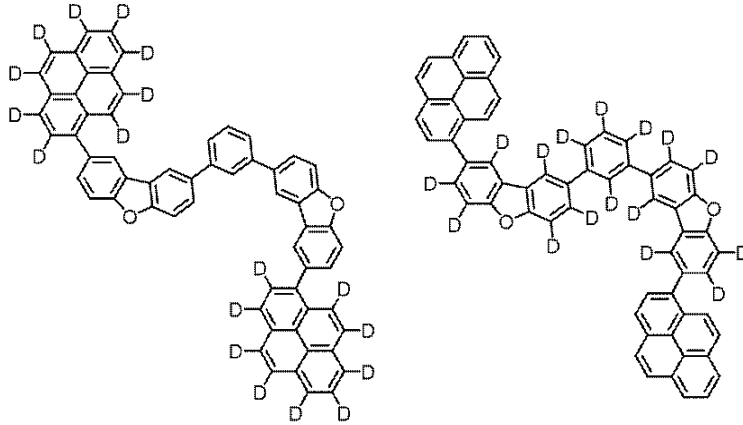
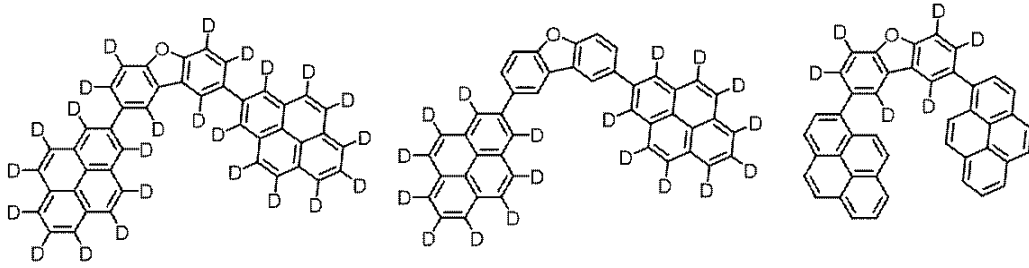
【 0 9 8 5】

30

40

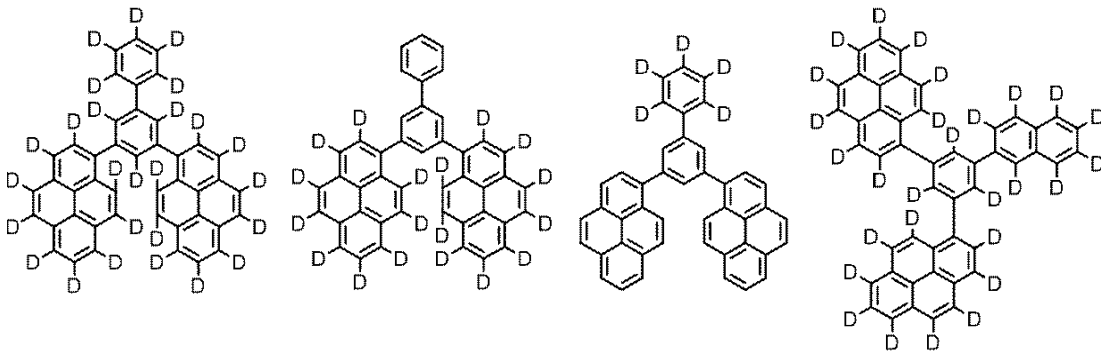
50

【化 3 9 1】



【 0 9 8 6】

【化 3 9 2】



【 0 9 8 7】

10

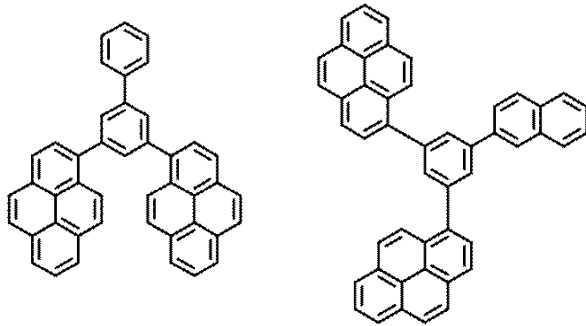
20

30

40

50

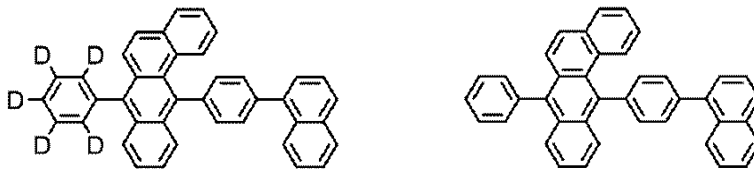
【化 3 9 3】



10

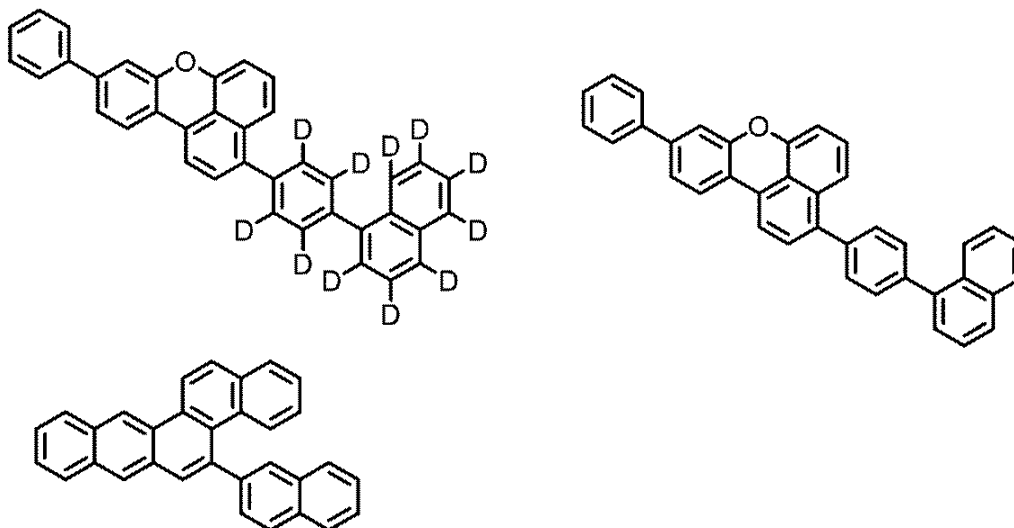
【 0 9 8 8】

【化 3 9 4】



【 0 9 8 9】

【化 3 9 5】



20

30

【 0 9 9 0】

・第二の化合物

第一実施形態で説明した第二の化合物を本実施形態に係る有機 EL 素子にも使用することもできる。

【 0 9 9 1】

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 6) に記載の $\mu_{H2} > \mu_{H1}$ 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、 $\mu_{H2} > \mu_{H1}$ 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

40

50

、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。

10

【0992】

前記第二の化合物中、 $R_{201} \sim R_{208}$ 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。

20

【0993】

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。

30

【0994】

(第二の化合物の製造方法)

本実施形態に係る有機EL素子に使用できる第二の化合物は、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、製造できる。

40

【0995】

(第二の化合物の具体例)

本実施形態に係る有機EL素子に使用できる第二の化合物の具体例としては、例えば、第一実施形態で説明した第二の化合物の具体例が挙げられる。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。

【0996】

(第一のドーパント材料、第二のドーパント材料及び第三のドーパント材料)

本実施形態に係る有機EL素子において、第一のドーパント材料、第二のドーパント材料及び第三のドーパント材料は、例えば、第一実施形態で説明した第六の化合物及び第七の化合物等が挙げられる。

50

【 0 9 9 7 】

本実施形態によれば、一般式（ 3 ）で表される第三の化合物を含有する第一の電子輸送層が、第一の発光層及び第二の発光層の陰極側に配置されており、高い発光効率でかつ長い寿命で発光する有機エレクトロルミネッセンス素子を提供できる。

【 0 9 9 8 】

〔 第三実施形態 〕

（ 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 E L 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、表示部品（例えば、有機 E L パネルモジュール等）、テレビ、携帯電話、タブ
レット、及びパーソナルコンピュータ等が挙げられる。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。

10

【 0 9 9 9 】

〔 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。

【 1 0 0 0 】

例えば、発光層は、2層に限られず、3以上の複数の発光層が積層されていてもよい。有機 E L 素子が3以上の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。

20

また、有機 E L 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 E L 素子であってもよい。

【 1 0 0 1 】

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 E L 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。

30

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 E L 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。

40

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

【 1 0 0 2 】

また、第一実施形態に係る有機 E L 素子の別の態様として、例えば、第二実施形態で説
明した第一の化合物を第一の発光層に含んだ有機 E L 素子が挙げられる。

【 1 0 0 3 】

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 】

【 1 0 0 4 】

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

50

定されない。

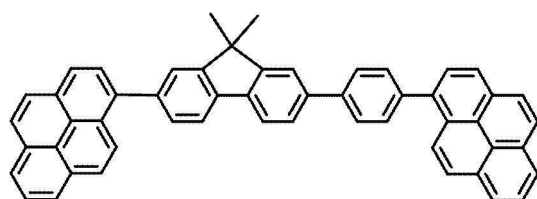
【 1 0 0 5 】

< 化合物 >

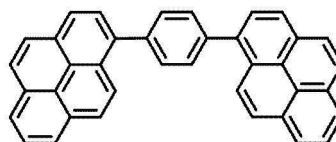
実施例 1 ～ 2 6 及び 3 3 に係る有機 E L 素子の製造に用いた一般式 (1) で表される化合物の構造を以下に示す。

【 1 0 0 6 】

【 化 3 9 6 】



BH1

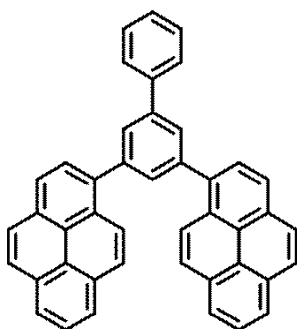


BH3

10

【 1 0 0 7 】

【 化 3 9 7 】



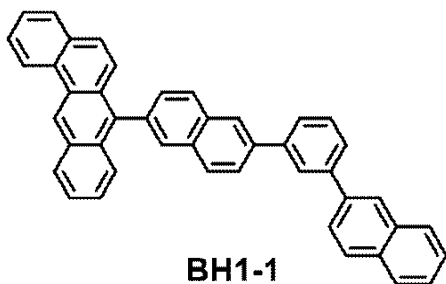
BH1-5

20

【 1 0 0 8 】

実施例 2 7 に係る有機 E L 素子の製造に用いた一般式 (1 X) で表される化合物の構造を以下に示す。

【 化 3 9 8 】



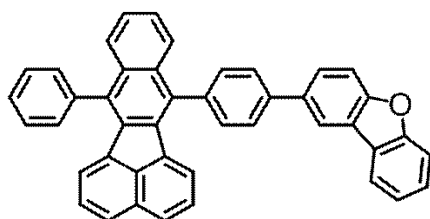
BH1-1

30

【 1 0 0 9 】

実施例 2 8、3 0 及び 3 2 に係る有機 E L 素子の製造に用いた一般式 (1 2 X) で表される化合物の構造を以下に示す。

【 化 3 9 9 】



BH1-2

40

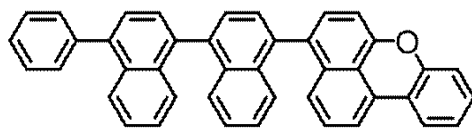
50

【 1 0 1 0 】

実施例 2 9 及び 3 0 に係る有機 E L 素子の製造に用いた一般式 (1 4 X) で表される化合物の構造を以下に示す。

【 1 0 1 1 】

【化 4 0 0】

**BH1-3**

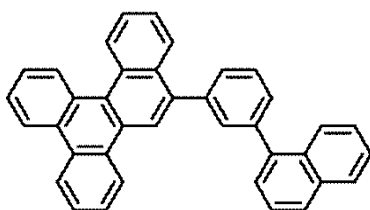
10

【 1 0 1 2 】

実施例 3 1 及び 3 2 に係る有機 E L 素子の製造に用いた一般式 (1 5 X) で表される化合物の構造を以下に示す。

【 1 0 1 3 】

【化 4 0 1】

**BH1-4**

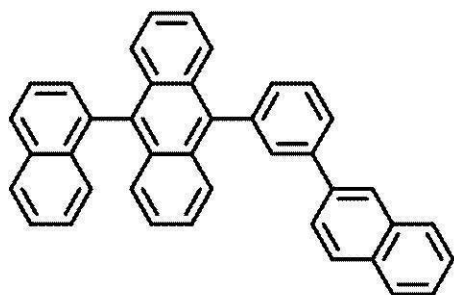
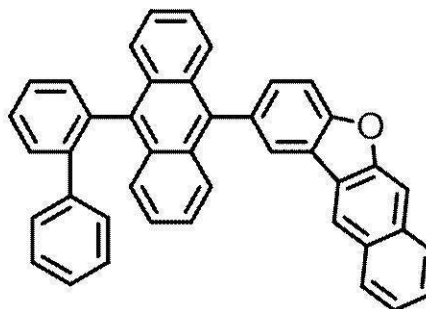
20

【 1 0 1 4 】

実施例 1 ~ 3 3 に係る有機 E L 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。

【 1 0 1 5 】

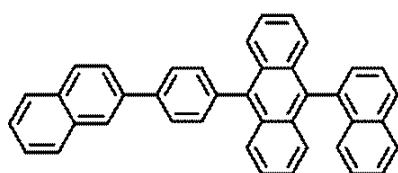
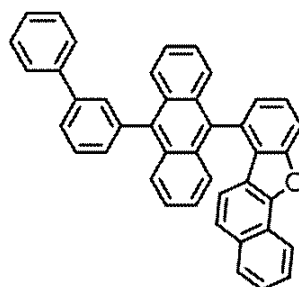
【化 4 0 2】

**BH2****BH4**

30

【 1 0 1 6 】

【化 4 0 3】

**BH2-1****BH2-2**

40

【 1 0 1 7 】

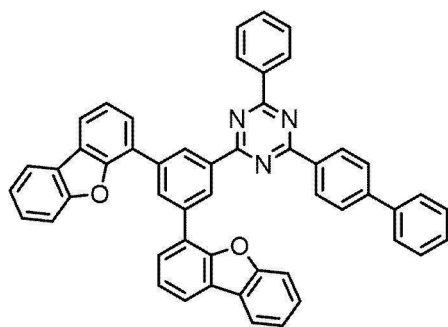
実施例 1 ~ 3 3 に係る有機 E L 素子の製造に用いた一般式 (3) で表される化合物の構造を以下に示す。

50

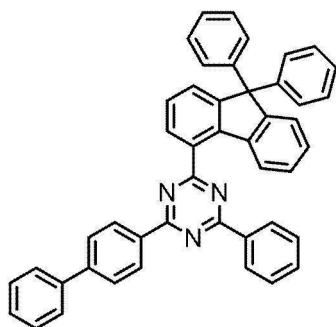
造を以下に示す。

【 1 0 1 8 】

【 化 4 0 4 】



ET1

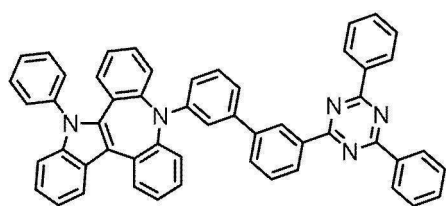


ET2

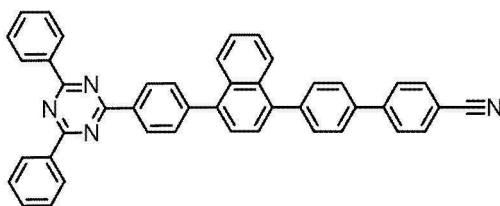
10

【 1 0 1 9 】

【 化 4 0 5 】



ET3

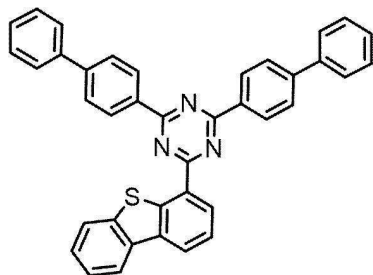


ET4

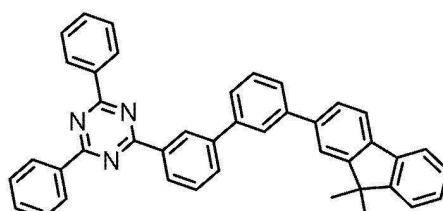
20

【 1 0 2 0 】

【 化 4 0 6 】



ET5

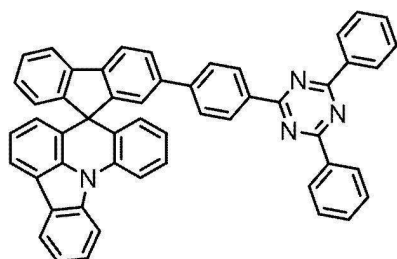


ET6

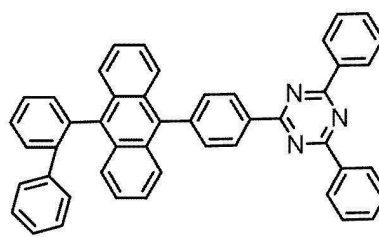
30

【 1 0 2 1 】

【 化 4 0 7 】



ET7



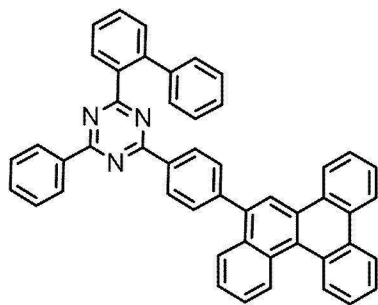
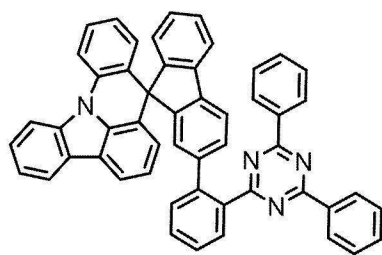
ET8

40

【 1 0 2 2 】

50

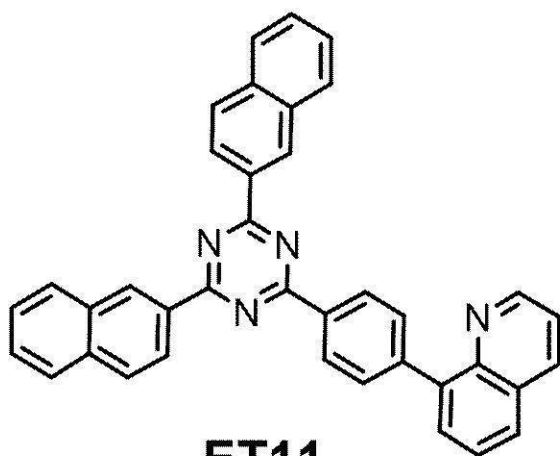
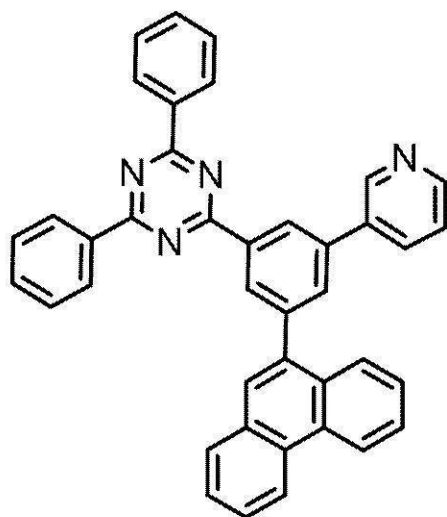
【化 4 0 8】

**ET9****ET10**

10

【 1 0 2 3】

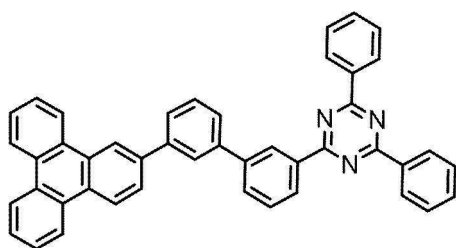
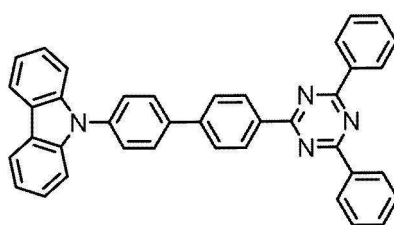
【化 4 0 9】

**ET11****ET12**

20

【 1 0 2 4】

【化 4 1 0】

**ET14****ET15**

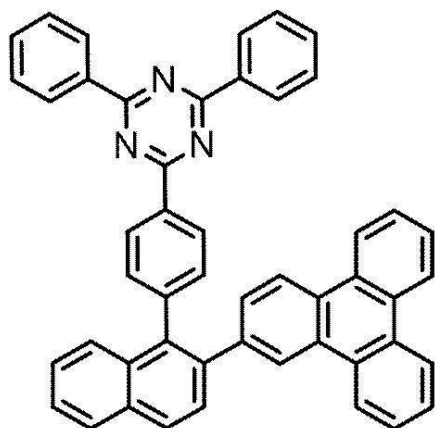
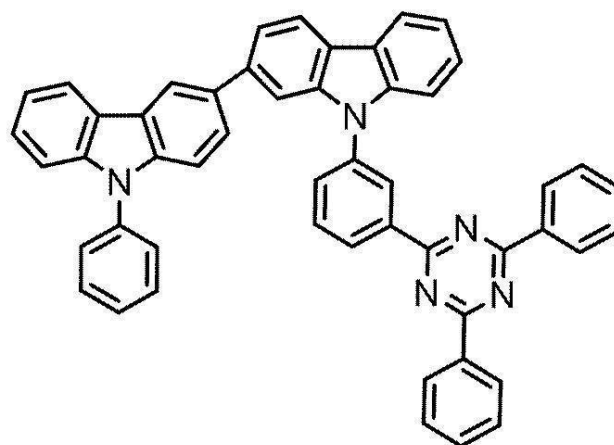
30

【 1 0 2 5】

40

50

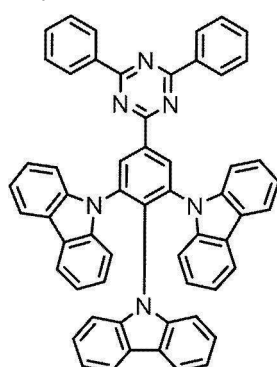
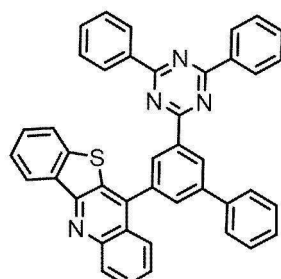
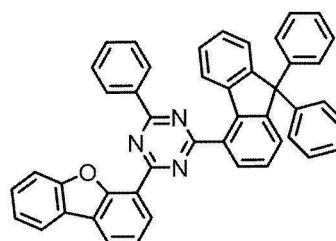
【化 4 1 1】

**ET16****ET17**

10

【 1 0 2 6】

【化 4 1 2】

**ET18****ET19****ET20**

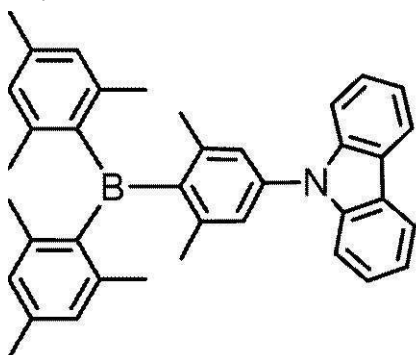
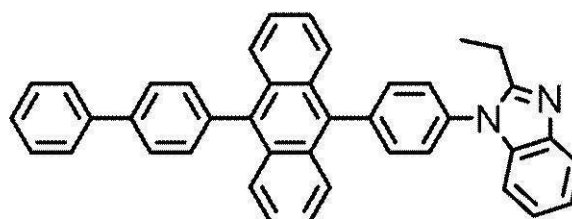
20

【 1 0 2 7】

比較例 1 ~ 3 に係る有機 E L 素子の製造に用いた化合物の構造を以下に示す。

【 1 0 2 8】

【化 4 1 3】

**Ref-ET-B****Ref-ET-C**

40

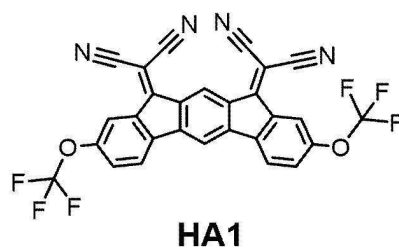
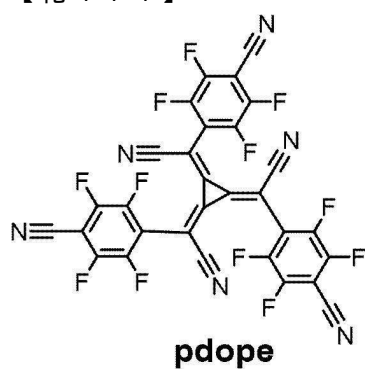
【 1 0 2 9】

実施例 1 ~ 3 並びに比較例 1 ~ 3 に係る有機 E L 素子の製造に用いた、他の化合物の構造を以下に示す。

【 1 0 3 0】

50

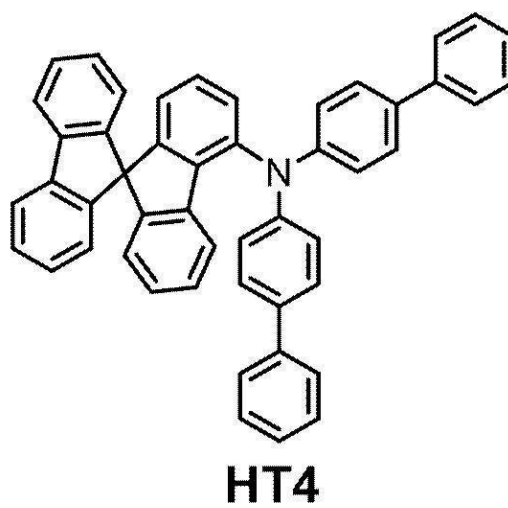
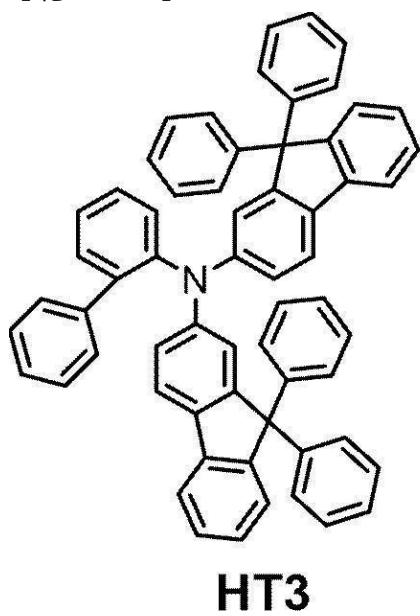
【化 4 1 4】



10

【 1 0 3 1】

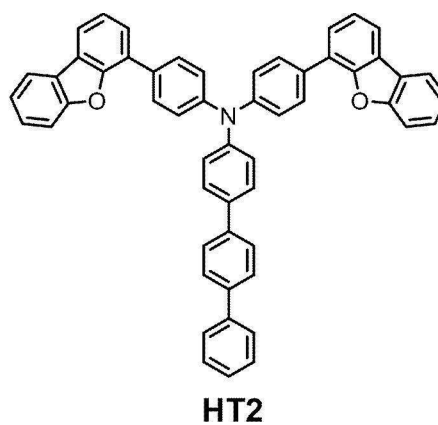
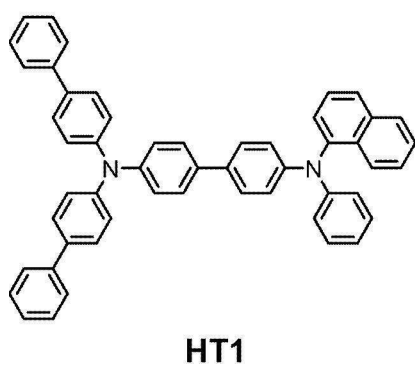
【化 4 1 5】



20

【 1 0 3 2】

【化 4 1 6】



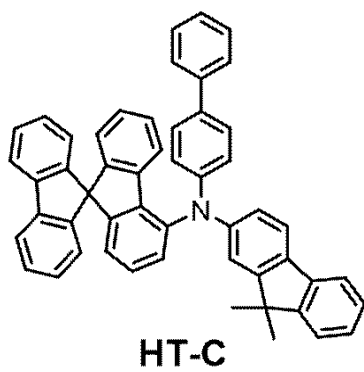
30

40

【 1 0 3 3】

50

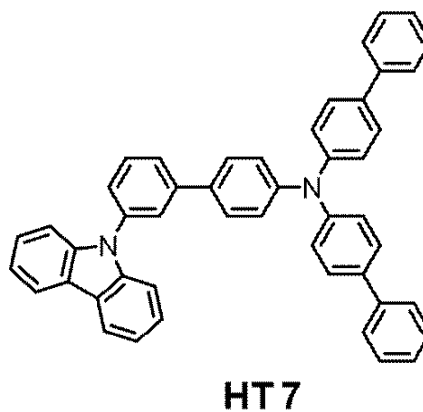
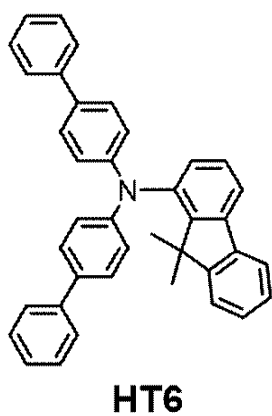
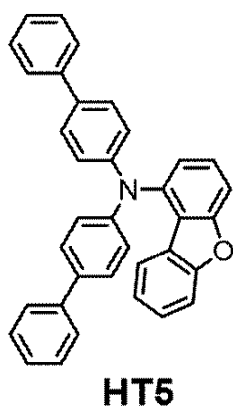
【化 4 1 7】



10

【 1 0 3 4 】

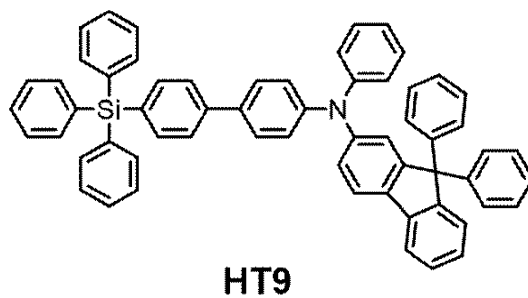
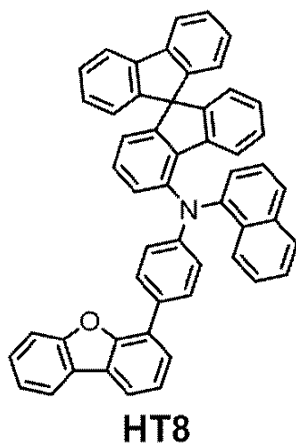
【化 4 1 8】



20

【 1 0 3 5 】

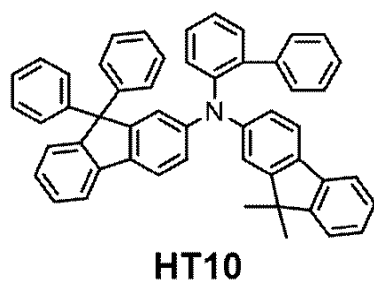
【化 4 1 9】



30

【 1 0 3 6 】

【化 4 2 0】

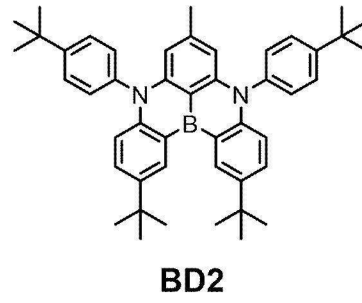
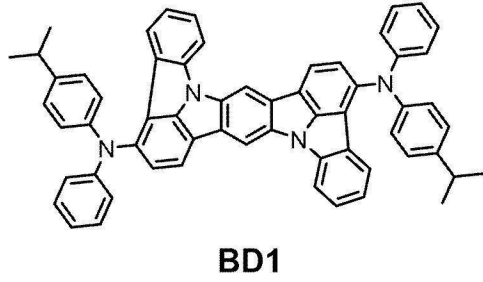


40

【 1 0 3 7 】

50

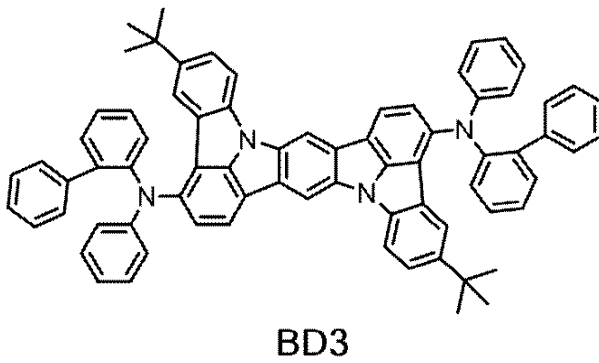
【化 4 2 1】



10

【 1 0 3 8 】

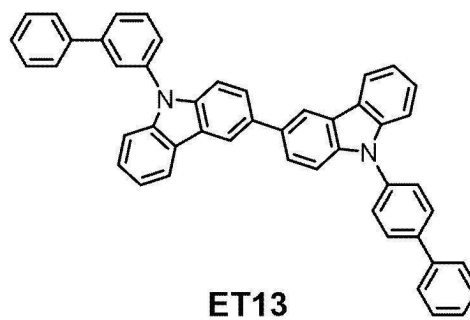
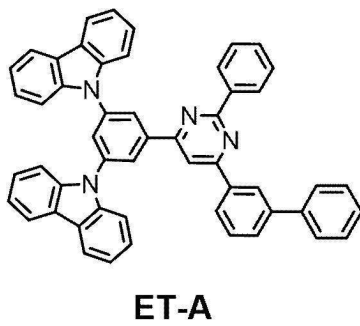
【化 4 2 2】



20

【 1 0 3 9 】

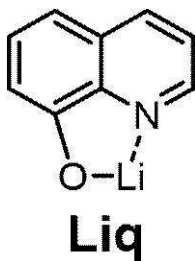
【化 4 2 3】



30

【 1 0 4 0 】

【化 4 2 4】



40

【 1 0 4 1 】

< 有機 E L 素子の作製 >

有機 E L 素子を以下のように作製し、評価した。

【 1 0 4 2 】

(実施例 1)

25 mm × 75 mm × 1 . 1 mm 厚の I T O (I n d i u m T i n O x i d e) 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

50

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。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして、化合物ＨＴ３及び化合物ｐｄｏｐｅを共蒸着し、膜厚５ｎｍの正孔注入層を形成した。この正孔注入層中の化合物ＨＴ３の割合を９７質量％とし、化合物ｐｄｏｐｅの割合を３質量％とした。

正孔注入層の成膜に続けて化合物ＨＴ３を蒸着し、膜厚８０ｎｍの第二の正孔輸送層を成膜した。

第二の正孔輸送層の成膜に続けて化合物ＨＴ４を蒸着し、膜厚１０ｎｍの第一の正孔輸送層を成膜した。

10

第一の正孔輸送層上に化合物ＢＨ３（ホスト材料）及び化合物ＢＤ２（ドーパント材料）を、化合物ＢＤ２の割合が２質量％となるように共蒸着し、膜厚５ｎｍの第一の発光層を成膜した。

第一の発光層上に化合物ＢＨ４（ホスト材料）及び化合物ＢＤ２（ドーパント材料）を、化合物ＢＤ２の割合が２質量％となるように共蒸着し、膜厚２０ｎｍの第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物ＥＴ６を蒸着し、膜厚５ｎｍの電子輸送層（正孔障壁層ともいう）（ＨＢＬ）を形成した。

前記電子輸送層（ＨＢＬ）上に化合物ＥＴ１及び化合物Ｌｉｑを共蒸着し、膜厚２０ｎｍの電子輸送層（ＥＴ）を形成した。この電子輸送層（ＥＴ）の化合物ＥＴ１の割合を５０質量％とし、化合物Ｌｉｑの割合を５０質量％とした。なお、Ｌｉｑは、（８－キノリノラト）リチウム（（８－Ｑｕｉｎｏｌｉｎｏｌａｔｏ）ｌｉｔｈｉｕｍ）の略称である。

20

電子輸送層（ＥＴ）上にＬｉＦを蒸着して膜厚１ｎｍの電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属Ａｌを蒸着して膜厚８０ｎｍの陰極を形成した。

実施例１の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HT3:pdope(5,97%:3%)/HT3(80)/HT4(10)/BH3:BD2(5,98%:2%)/BH4:BD2(20,98%:2%)/ET6(5)/ET1:Liq(20,50%:50%)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：ｎｍ）を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（９７％：３％）は、正孔注入層における化合物ＨＴ３及び化合物ｐｄｏｐｅの割合（質量％）を示し、パーセント表示された数字（９８％：２％）は、第一の発光層又は第二の発光層におけるホスト材料（化合物ＢＨ３又はＢＨ４）及びドーパント材料（化合物ＢＤ２）の割合（質量％）を示し、パーセント表示された数字（５０％：５０％）は、電子輸送層（ＥＴ）における化合物ＥＴ１及び化合物Ｌｉｑの割合（質量％）を示す。以下、同様の表記とする。

30

【１０４３】

（実施例２～１２）

実施例２～１２の有機ＥＬ素子は、電子輸送層（ＥＴ）の成膜に用いた化合物を表１に示す化合物に変更して電子輸送層（ＥＴ）を成膜したこと以外、実施例１と同様にして作製した。

【１０４４】

40

（実施例１３）

実施例１３の有機ＥＬ素子は、第二の発光層上に化合物ＥＴ－Ａを蒸着し、膜厚５ｎｍの電子輸送層（正孔障壁層ともいう）（ＨＢＬ）を形成したこと、電子輸送層（ＨＢＬ）上に化合物ＥＴ６及び化合物Ｌｉｑを共蒸着し、膜厚２０ｎｍの電子輸送層（ＥＴ）を形成したこと以外は、実施例１と同様にして作製した。実施例１３において、電子輸送層（ＥＴ）の化合物ＥＴ６の割合を５０質量％とし、化合物Ｌｉｑの割合を５０質量％とした。

【１０４５】

（比較例１）

比較例１の有機ＥＬ素子は、第二の発光層上に、電子輸送層（ＨＢＬ）及び電子輸送層（ＥＴ）の代わりに、化合物Ｒｅｆ－ＥＴ－Ｂ及び化合物Ｌｉｑを共蒸着し、膜厚２５ｎ

50

mの電子輸送層（ET）を形成したこと以外は、実施例1と同様にして作製した。比較例1において、電子輸送層の化合物Ref-ET-Bの割合を50質量%とし、化合物Liqの割合を50質量%とした。

【1046】

【表1】

	HBL			ET			EQE	寿命 LT90
	化合物		膜厚 [nm]	化合物		膜厚 [nm]	[%]	[hr]
実施例1	ET6	-	5	ET1	Liq	20	9.0	100
実施例2	ET6	-	5	ET2	Liq	20	9.1	100
実施例3	ET6	-	5	ET4	Liq	20	8.9	100
実施例4	ET6	-	5	ET5	Liq	20	9.1	100
実施例5	ET6	-	5	ET8	Liq	20	9.0	100
実施例6	ET6	-	5	ET9	Liq	20	9.0	100
実施例7	ET6	-	5	ET11	Liq	20	8.5	150
実施例8	ET6	-	5	ET12	Liq	20	8.9	110
実施例9	ET6	-	5	ET15	Liq	20	9.0	100
実施例10	ET6	-	5	ET17	Liq	20	8.7	125
実施例11	ET6	-	5	ET18	Liq	20	8.4	155
実施例12	ET6	-	5	ET19	Liq	20	9.0	100
比較例1	-	-	-	Ref-ET-B	Liq	25	8.0	80

【1047】

【表2】

	HBL			ET			EQE	寿命 LT90
	化合物		膜厚 [nm]	化合物		膜厚 [nm]	[%]	[hr]
実施例13	ET-A	-	5	ET6	Liq	20	9.0	90
比較例1	-	-	0	Ref-ET-B	Liq	25	8.0	80

【1048】

（実施例14）

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。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HA1を蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層を形成した。

正孔注入層の成膜に続けて化合物HT1を蒸着し、膜厚80nmの第二の正孔輸送層を成膜した。

第二の正孔輸送層の成膜に続けて化合物HT2を蒸着し、膜厚10nmの第一の正孔輸

送層を成膜した。

第一の正孔輸送層上に化合物 B H 1 (ホスト材料) 及び化合物 B D 1 (ドーパント材料) を、化合物 B D 1 の割合が 2 質量% となるように共蒸着し、膜厚 5 n m の第一の発光層を成膜した。

第一の発光層上に化合物 B H 2 (ホスト材料) 及び化合物 B D 1 (ドーパント材料) を、化合物 B D 1 の割合が 2 質量% となるように共蒸着し、膜厚 2 0 n m の第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物 E T 3 を蒸着し、膜厚 1 0 n m の電子輸送層 (正孔障壁層ともいう) (H B L) を形成した。

電子輸送層 (H B L) 上に化合物 R e f - E T - C を蒸着し、膜厚 1 5 n m の電子輸送層 (E T) を形成した。

10

電子輸送層 (E T) 上に L i F を蒸着して膜厚 1 n m の電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属 A l を蒸着して膜厚 8 0 n m の陰極を形成した。

実施例 1 4 の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HA1(5)/HT1(80)/HT2(10)/BH1:BD1(5,98%:2%)/BH2:BD1(20,98%:2%)/ET3(10)/Ref-ET-C(15)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚 (単位: n m) を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字 (9 8 % : 2 %) は、第一の発光層又は第二の発光層におけるホスト材料 (化合物 B H 1 又は B H 2) 及びドーパント材料 (化合物 B D 1) の割合 (質量%) を示す。以下、同様の表記とする。

20

【 1 0 4 9 】

(実施例 1 5 ~ 2 0 、 2 2 ~ 2 6)

実施例 1 5 ~ 2 0 、 2 2 ~ 2 6 の有機 E L 素子は、電子輸送層 (H B L) の成膜に用いた化合物を表 3 に示す化合物に変更して電子輸送層 (H B L) を成膜したこと以外、実施例 1 4 と同様にして作製した。

【 1 0 5 0 】

(実施例 2 1)

実施例 2 1 の有機 E L 素子は、電子輸送層 (H B L) について、化合物 E T 1 4 及び化合物 E T 1 3 を共蒸着して成膜したこと以外、実施例 1 4 と同様にして作製した。実施例 2 1 において、電子輸送層 (H B L) の化合物 E T 1 4 の割合を 5 0 質量% とし、化合物 E T 1 3 の割合を 5 0 質量% とした。

30

【 1 0 5 1 】

(比較例 2)

比較例 2 の有機 E L 素子は、第二の発光層上に化合物 E T - A を蒸着して、膜厚 1 0 n m の電子輸送層 (H B L) を形成したこと、電子輸送層 (H B L) 上に電子輸送層 (E T) を形成したこと以外、実施例 1 4 と同様にして作製した。

【 1 0 5 2 】

40

【表 3】

	HBL		ET		EQE	寿命 LT90
	化合物	膜厚 [nm]	化合物	膜厚 [nm]	[%]	[hr]
実施例14	ET3	10	Ref-ET-C	15	11.5	150
実施例15	ET4	10	Ref-ET-C	15	10.5	220
実施例16	ET5	10	Ref-ET-C	15	10.6	200
実施例17	ET6	10	Ref-ET-C	15	11.3	170
実施例18	ET7	10	Ref-ET-C	15	11.2	180
実施例19	ET10	10	Ref-ET-C	15	11.0	190
実施例20	ET14	10	Ref-ET-C	15	11.3	180
実施例21	ET14及びET13	10	Ref-ET-C	15	10.5	220
実施例22	ET15	10	Ref-ET-C	15	10.9	190
実施例23	ET16	10	Ref-ET-C	15	11.5	160
実施例24	ET17	10	Ref-ET-C	15	10.6	210
実施例25	ET18	10	Ref-ET-C	15	10.7	180
実施例26	ET20	10	Ref-ET-C	15	10.5	210
比較例2	ET-A	10	Ref-ET-C	15	9.5	130

【1053】

(実施例27)

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。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして、化合物HT-C及び化合物pdopeを共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層を形成した。この正孔注入層中の化合物HT-Cの割合を90質量%とし、化合物pdopeの割合を10質量%とした。

正孔注入層の成膜に続けて化合物HT-Cを蒸着し、膜厚80nmの第二の正孔輸送層を成膜した。

第二の正孔輸送層の成膜に続けて化合物HT4を蒸着し、膜厚10nmの第一の正孔輸送層を成膜した。

第一の正孔輸送層上に化合物BH1-1(ホスト材料)及び化合物BD2(ドーパント材料)を、化合物BD2の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚5nmの第一の発光層を成膜した。

第一の発光層上に化合物BH2-1(ホスト材料)及び化合物BD2(ドーパント材料)を、化合物BD2の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚20nmの第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物ET3を蒸着し、膜厚8nmの電子輸送層(正孔障壁層ともいう)(HBL)を形成した。

電子輸送層(HBL)上に化合物Ref-ET-Cを蒸着し、膜厚22nmの電子輸送層(ET)を形成した。

電子輸送層(ET)上にLiFを蒸着して膜厚1nmの電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属 A l を蒸着して膜厚 8 0 n m の陰極を形成した。

実施例 2 7 の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HT-C:pdope(10,90%:10%)/HT-C(80)/HT4(10)/BH1-1:BD2(5,98%:2%)/BH2-1:BD2(20,98%:2%)/ET3(8)/Ref-ET-C(22)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：n m）を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（9 0 % : 1 0 %）は、正孔注入層における化合物 H T - C 及び化合物 p d o p e の割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（9 8 % : 2 %）は、第一の発光層又は第二の発光層におけるホスト材料（化合物 B H 1 - 1 又は B H 2 - 1）及びドーパント材料（化合物 B D 2）の割合（質量%）を示す。以下、同様の表記とする。

【 1 0 5 4 】

（実施例 2 8 ~ 3 2）

実施例 2 8 ~ 3 2 の有機 E L 素子は、第一の正孔輸送層、第一の発光層、第二の発光層及び電子輸送層（H B L）の成膜に用いた化合物を表 4 に示す化合物に変更したこと以外、実施例 2 7 と同様にして作製した。

【 1 0 5 5 】

（比較例 3）

比較例 3 の有機 E L 素子は、電子輸送層（H B L）の成膜に用いた化合物を表 4 に示す化合物に変更したこと以外、実施例 3 1 と同様にして作製した。

【 1 0 5 6 】

【表 4】

	第一の 正孔輸送層	第一の 発光層	第二の 発光層	HBL		ET		EQE	LT90
	化合物	化合物	化合物	化合物	膜厚 [nm]	化合物	膜厚 [nm]	[%]	[hr]
実施例27	HT4	BH1-1及びBD2	BH2-1及びBD2	ET3	8	Ref-ET-C	22	9.8	150
実施例28	HT5	BH1-2及びBD2	BH2-1及びBD2	ET6	8	Ref-ET-C	22	9.7	180
実施例29	HT6	BH1-3及びBD2	BH2-1及びBD2	ET5	8	Ref-ET-C	22	10.3	100
実施例30	HT7	BH1-3及びBD2	BH1-2及びBD2	ET17	8	Ref-ET-C	22	9.5	220
実施例31	HT8	BH1-4及びBD2	BH2-1及びBD2	ET20	8	Ref-ET-C	22	10.3	90
実施例32	HT9	BH1-4及びBD2	BH1-2及びBD2	ET12	8	Ref-ET-C	22	10.1	95
比較例3	HT8	BH1-4及びBD2	BH2-1及びBD2	Ref-ET-B	8	Ref-ET-C	22	9.1	48

【 1 0 5 7 】

（実施例 3 3）

2 5 m m × 7 5 m m × 1 . 1 m m 厚の I T O（I n d i u m T i n O x i d e）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、U V オゾン洗浄を 3 0 分間行なった。I T O 透明電極の膜厚は、1 3 0 n m とした。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして、化合物 H T 1 0 及び化合物 p d o p e を共蒸着し、膜厚 1 0 n m の正孔注入層を形成した。この正孔注入層中の化合物 H T 1 0 の割合を 9 0 質量%とし、化合物 p d o p e の割合を 1 0 質量%とした。

正孔注入層の成膜に続けて化合物 H T 1 0 を蒸着し、膜厚 8 5 n m の第二の正孔輸送層を成膜した。

第二の正孔輸送層の成膜に続けて化合物 H T 9 を蒸着し、膜厚 5 n m の第一の正孔輸送層を成膜した。

第一の正孔輸送層上に化合物 B H 1 - 5（ホスト材料）及び化合物 B D 3（ドーパント材料）を、化合物 B D 3 の割合が 2 質量%となるように共蒸着し、膜厚 5 n m の第一の発

光層を成膜した。

第一の発光層上に化合物BH2-2（ホスト材料）及び化合物BD3（ドーパント材料）を、化合物BD3の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚15nmの第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物ET6を蒸着し、膜厚5nmの電子輸送層（正孔障壁層ともいう）（HBL）を形成した。

電子輸送層（HBL）上に化合物ET2及び化合物Liqを共蒸着し、膜厚25nmの電子輸送層（ET）を形成した。この電子輸送層（ET）の化合物ET2の割合を50質量%とし、化合物Liqの割合を50質量%とした。

電子輸送層（ET）上にLiFを蒸着して膜厚1nmの電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属Alを蒸着して膜厚80nmの陰極を形成した。

実施例33の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HT10:pdope(10,90%:10%)/HT10(85)/HT9(5)/BH1-5:BD3(5,98%:2%)/BH2-2:BD3(15,98%:2%)/ET6(5)/ET2:Liq(25,50%:50%)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（90%：10%）は、正孔注入層における化合物HT10及び化合物pdopeの割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（98%：2%）は、第一の発光層又は第二の発光層におけるホスト材料（化合物BH1-5又はBH2-2）及びドーパント材料（化合物BD3）の割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（50%：50%）は、電子輸送層（ET）における化合物ET2及び化合物Liqの割合（質量%）を示す。以下、同様の表記とする。

【1058】

【表5】

	第一の 正孔輸送層	第一の 発光層	第二の 発光層	HBL		ET		EQE	LT90
	化合物	化合物	化合物	化合物	膜厚 [nm]	化合物	膜厚 [nm]	[%]	[hr]
実施例33	HT9	BH1-5及びBD3	BH2-2及びBD3	ET6	5	ET2及びLiq	25	10.9	106

【1059】

<有機EL素子の評価>

実施例1～33、並びに比較例1～3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、表2、表3、表4及び表5に示す。

【1060】

・外部量子効率（EQE）

電流密度が10mA/cm²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。

【1061】

・寿命（LT90）

得られた有機EL素子に、電流密度が50mA/cm²となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が90%となるまでの時間（LT90（単位：時間））を測定した。

【1062】

表1、表2、表3、表4及び表5に示すように、一般式（3）で表される第三の化合物を含有する第一の電子輸送層が、第一の発光層及び第二の発光層の陰極側に配置された実施例1～33に係る有機EL素子によれば、高い発光効率でかつ長い寿命で発光した。

【1063】

<化合物の評価>

【1064】

10

20

30

40

50

(トルエン溶液の調製)

化合物 B D 1 を、 $4.9 \times 10^{-6} \text{ mol/L}$ の濃度でトルエンに溶解し、化合物 B D 1 のトルエン溶液を調製した。

化合物 B D 2 のトルエン溶液を、化合物 B D 1 と同様にして、調製した。

化合物 B D 3 のトルエン溶液を、化合物 B D 1 と同様にして、調製した。

【1065】

(蛍光発光最大ピーク波長 (F L - p e a k) 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 B D 1 のトルエン溶液、化合物 B D 2 のトルエン溶液又は化合物 B D 3 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。

10

化合物 B D 1 の蛍光発光最大ピーク波長は、453 nm であった。

化合物 B D 2 の蛍光発光最大ピーク波長は、455 nm であった。

化合物 B D 3 の蛍光発光最大ピーク波長は、444 nm であった。

【1066】

(三重項エネルギー T_1)

測定対象となる化合物を E P A (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 $e d g e [nm]$ に基づいて、次の換算式 (F 1) 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。

20

換算式 (F 1) : $T_1 [eV] = 1239.85 / e d g e$

【1067】

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。

30

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た。

【1068】

(一重項エネルギー S_1)

40

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 (300 K) 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 $e d g e [nm]$ を次に示す換算式 (F 2) に代入して一重項エネルギーを算出した。

換算式 (F 2) : $S_1 [eV] = 1239.85 / e d g e$

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 : U 3310) を用いた。

【1069】

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

50

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。

【1070】

各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 を表6に示す。

【1071】

【表6】

	S_1 [eV]	T_1 [eV]
BH1	3.12	2.10
BH2	3.04	1.86
BH3	3.19	2.08
BH4	2.98	1.87
BH1-1	3.11	2.11
BH1-2	2.95	2.20
BH1-3	3.22	2.27
BH1-4	3.31	2.35
BH1-5	3.31	2.09
BH2-1	3.01	1.87
BH2-2	3.01	1.82
BD1	2.73	2.29
BD2	2.71	2.60
BD3	2.78	2.32

【符号の説明】

【1072】

1...有機EL素子、1A...有機EL素子、1B...有機EL素子、1C...有機EL素子、
2...基板、3...陽極、4...陰極、51...第一の発光層、52...第二の発光層、6...正孔注入層、7...正孔輸送層、81...第一の電子輸送層、82...第二の電子輸送層、83...第三の電子輸送層、9...電子注入層、10...有機層、10A...有機層、10B...有機層、10C...有機層。

10

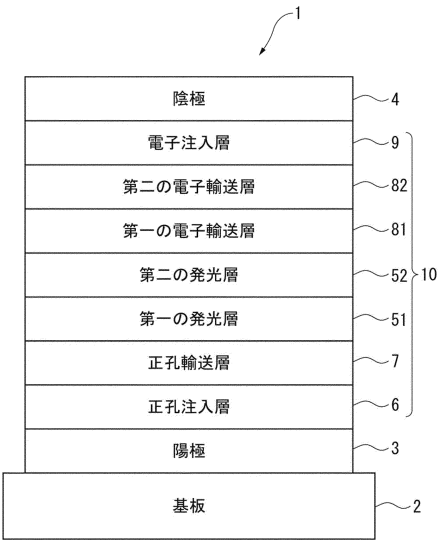
20

30

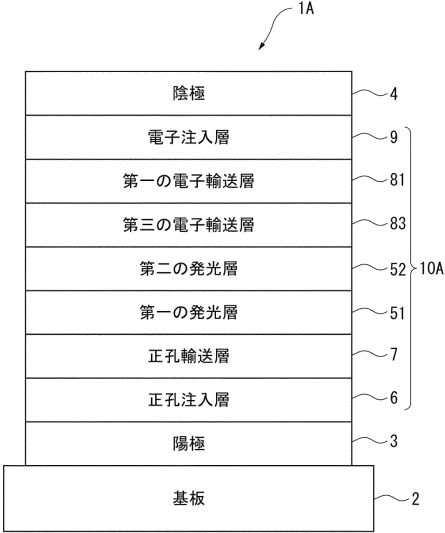
40

50

【図面】
【図 1】

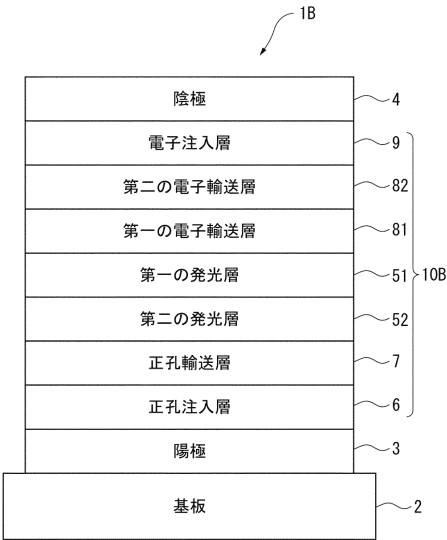


【図 2】

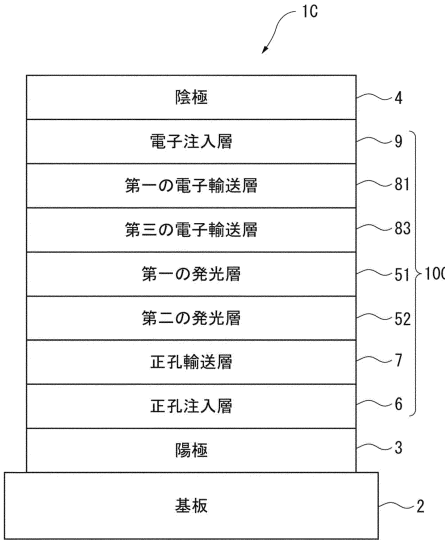


10

【図 3】



【図 4】



20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

H 1 0 K	85/60	(2023.01)	H 1 0 K	85/60	
H 1 0 K	59/10	(2023.01)	H 1 0 K	59/10	
C 0 9 K	11/06	(2006.01)	C 0 9 K	11/06	6 9 0
H 1 0 K	101/30	(2023.01)	H 1 0 K	101:30	

東京都千代田区大手町一丁目 2 番 1 号 出光興産株式会社内

(72)発明者 中野 裕基

東京都千代田区大手町一丁目 2 番 1 号 出光興産株式会社内

(72)発明者 中村 雅人

東京都千代田区大手町一丁目 2 番 1 号 出光興産株式会社内

審査官 岩井 好子

(56)参考文献 米国特許出願公開第 2 0 1 9 / 0 2 8 0 2 0 9 (U S , A 1)

特開 2 0 0 9 - 0 1 6 6 9 3 (J P , A)

特開 2 0 1 4 - 0 2 2 2 0 5 (J P , A)

米国特許出願公開第 2 0 1 9 / 0 2 2 1 7 5 1 (U S , A 1)

米国特許出願公開第 2 0 1 8 / 0 0 9 0 6 8 6 (U S , A 1)

(58)調査した分野 (Int.Cl. , D B 名)

H 1 0 K 5 0 / 1 1

H 1 0 K 5 0 / 1 2

H 1 0 K 5 0 / 1 9

H 1 0 K 5 0 / 1 6

H 1 0 K 5 0 / 1 5

H 1 0 K 8 5 / 6 0

H 1 0 K 5 9 / 1 0

C 0 9 K 1 1 / 0 6

H 1 0 K 1 0 1 / 3 0

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)