(19)日本国特許庁(JP)　(12)公開特許公報(A)　(11)公開番号
特開2024-19133
(P2024-19133A)
(43)公開日　令和6年2月8日(2024.2.8)

(51)国際特許分類		FI		テーマコード（参考）
Ｈ１０Ｋ　50/13　(2023.01)		Ｈ１０Ｋ	50/13	３Ｋ１０７
Ｈ１０Ｋ　50/12　(2023.01)		Ｈ１０Ｋ	50/12	
Ｈ１０Ｋ　85/60　(2023.01)		Ｈ１０Ｋ	85/60	

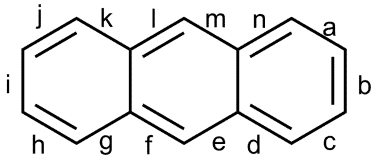
審査請求　未請求　請求項の数　32　ＯＬ　（全208頁）

(21)出願番号　特願2023-122774(P2023-122774)
(22)出願日　令和5年7月27日(2023.7.27)
(31)優先権主張番号　特願2022-121847(P2022-121847)
(32)優先日　令和4年7月29日(2022.7.29)
(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)

(71)出願人　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　橋本　士雄磨
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　工藤　裕
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　伴　慎太郎
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　白崎　良尚
最終頁に続く

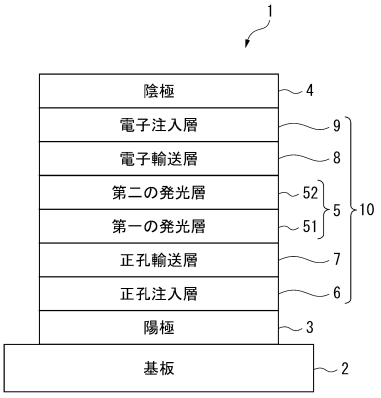
(54)【発明の名称】　有機エレクトロルミネッセンス素子、電子機器及び化合物

(57)【要約】　（修正有）
【課題】色度悪化が抑制され、かつ長寿命な有機ＥＬ素子を提供すること。
【解決手段】第一の発光層５１は、第一のホスト材料と、第一の発光性化合物と、を含有し、第一のホスト材料は、下記一般式（１）で表される環構造を少なくとも１つ有する第一の化合物であり、但し、前記第一の化合物は、分子中に、特定の式で表される環構造を有さず、第二の発光層５２は、第二のホスト材料と、第二の発光性化合物と、を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子１が提供される。一般式（１）において、ａ～ｎからなる群から選択される１以上の位置に、置換もしくは無置換のベンゼン環が２つ縮合するか、又は置換もしくは無置換のナフタレン環が１つ縮合する。）

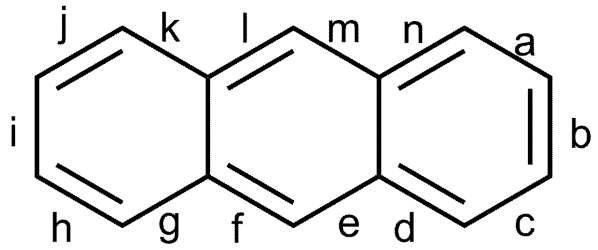


(1)

【選択図】

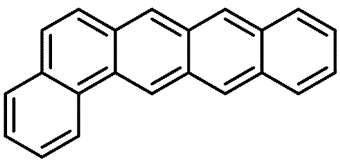


【特許請求の範囲】
【請求項１】
陽極と、
陰極と、
前記陽極及び前記陰極との間に配置された発光帯域と、を有し、
前記陽極、前記発光帯域、及び前記陰極が、この順で配置され、
前記発光帯域は、第一の発光層及び第二の発光層を含み、
前記第一の発光層は、第一のホスト材料と、第一の発光性化合物と、を含有し、
前記第一のホスト材料は、下記一般式（１）で表される環構造を少なくとも１つ有する第一の化合物であり、但し、前記第一の化合物は、分子中に、下記式（Ｘ１）、（Ｘ２）、（Ｘ３）及び（Ｘ４）で表される環構造を有さず、
前記第二の発光層は、第二のホスト材料と、第二の発光性化合物と、を含有し、
前記第一のホスト材料と前記第二のホスト材料とが、互いに異なり、
前記第一の発光性化合物と前記第二の発光性化合物とが、互いに同一であるか又は異なる、
有機エレクトロルミネッセンス素子。
【化１】

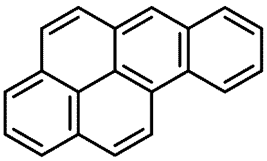


(1)

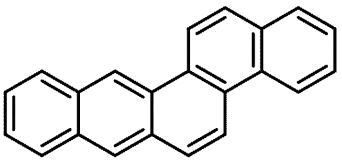
（前記一般式（１）において、ａ、ｂ、ｃ、ｄ、ｅ、ｆ、ｇ、ｈ、ｉ、ｊ、ｋ、ｌ、ｍ及びｎからなる群から選択される１以上の位置に、置換もしくは無置換のベンゼン環が２つ縮合するか、又は置換もしくは無置換のナフタレン環が１つ縮合し、
前記置換もしくは無置換のベンゼン環又は前記置換もしくは無置換のナフタレン環が縮合した環構造は、置換基を少なくとも１つ有するか、無置換である。）
【化２】



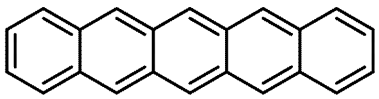
(X1)



(X2)



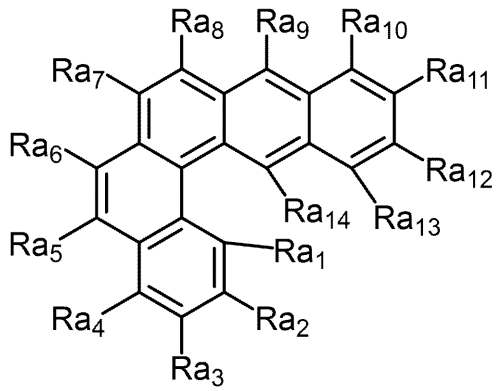
(X3)



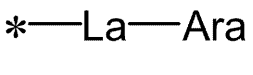
(X4)

【請求項２】
前記第一の化合物は、下記一般式（１１）で表される化合物である、
請求項１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化３】



(11)



(11a)

（前記一般式（１１）において、
Ｒａ$_{1}$～Ｒａ$_{14}$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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１１ａ）で表される基であり、
Ｒａ$_{1}$～Ｒａ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１１ａ）において、Ｌａは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒａは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）

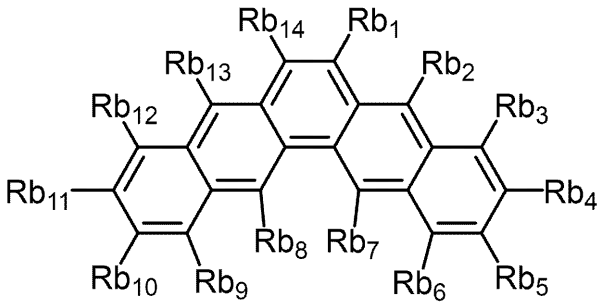
【請求項３】
Ｒａ$_{4}$及びＲａ$_{9}$の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１１ａ）で表される基である、
請求項２に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項４】
Ｒａ$_{2}$及びＲａ$_{6}$の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１１ａ）で表される基である、
請求項２又は請求項３に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

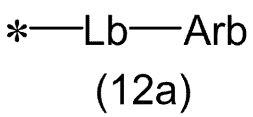
【請求項５】
Ｒａ$_{7}$が、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１１ａ）で表される基である、
請求項２から請求項４のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項６】
前記第一の化合物は、下記一般式（１２）で表される化合物である、
請求項１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化４】



(12)



(12a)

（前記一般式（１２）において、
Ｒｂ$_{1}$～Ｒｂ$_{14}$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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１２ａ）で表される基であり、
Ｒｂ$_{1}$～Ｒｂ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１２ａ）において、Ｌｂは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｂは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）

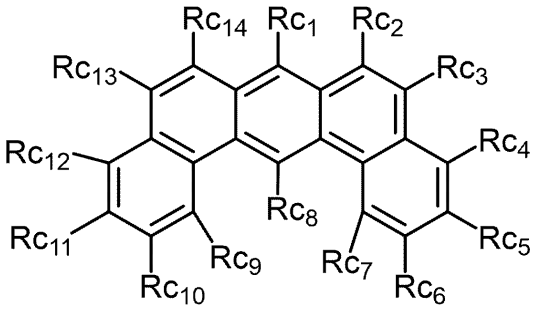
【請求項７】
Ｒｂ$_{1}$、Ｒｂ$_{2}$、Ｒｂ$_{4}$、Ｒｂ$_{11}$、Ｒｂ$_{13}$及びＲｂ$_{14}$の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１２ａ）で表される基である、
請求項６に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項８】
Ｒｂ$_{7}$及びＲｂ$_{8}$の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１２ａ）で表される基である、
請求項６又は請求項７に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

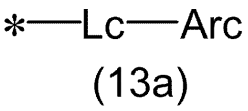
【請求項９】
Ｒｂ$_{3}$、Ｒｂ$_{5}$、Ｒｂ$_{6}$、Ｒｂ$_{9}$、Ｒｂ$_{10}$及びＲｂ$_{12}$の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１２ａ）で表される基である、
請求項６から請求項８のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項１０】
前記第一の化合物は、下記一般式（１３）で表される化合物である、
請求項１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化５】



(13)



(13a)

（前記一般式（１３）において、
Ｒｃ$_{1}$～Ｒｃ$_{14}$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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１３ａ）で表される基であり、
Ｒｃ$_{1}$～Ｒｃ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１３ａ）において、Ｌｃは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｃは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）

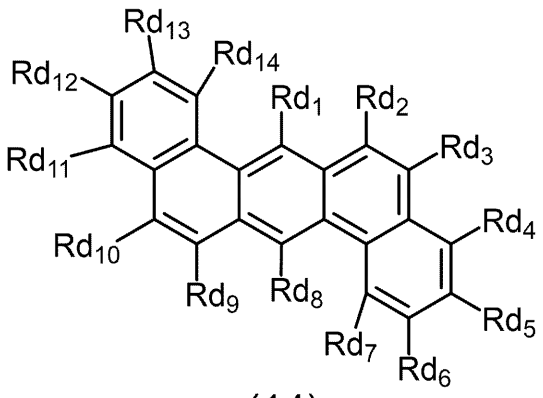
【請求項１１】
Ｒｃ$_{1}$及びＲｃ$_{8}$の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１３ａ）で表される基である、
請求項１０に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項１２】
Ｒｃ$_{4}$、Ｒｃ$_{5}$、Ｒｃ$_{6}$、Ｒｃ$_{7}$、Ｒｃ$_{9}$、Ｒｃ$_{10}$、Ｒｃ$_{11}$及びＲｃ$_{12}$の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１３ａ）で表される基である、
請求項１１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

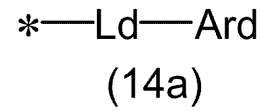
【請求項１３】
Ｒｃ$_{2}$、Ｒｃ$_{3}$、Ｒｃ$_{13}$及びＲｃ$_{14}$の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１３ａ）で表される基である、
請求項１１又は請求項１２に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項１４】
前記第一の化合物は、下記一般式（１４）で表される化合物である、
請求項１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化６】



(14)



(14a)

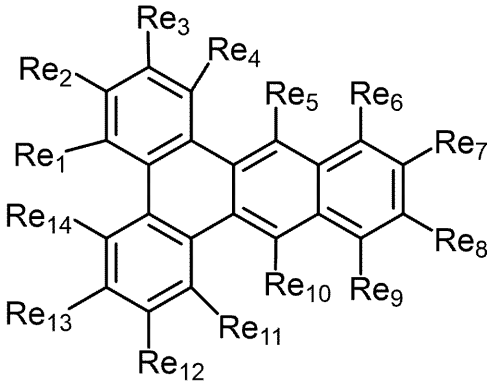
（前記一般式（１４）において、
Ｒｄ１～Ｒｄ１４は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１４ａ）で表される基であり、
Ｒｄ１～Ｒｄ１４の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１４ａ）において、Ｌｄは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｄは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）

【請求項１５】
Ｒｄ１、Ｒｄ４、Ｒｄ６、Ｒｄ７、Ｒｄ８、Ｒｄ１１、Ｒｄ１３及びＲｄ１４の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１４ａ）で表される基である、
請求項１４に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

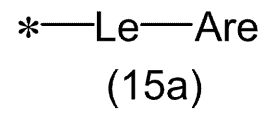
【請求項１６】
Ｒｄ２、Ｒｄ３、Ｒｄ５、Ｒｄ９、Ｒｄ１０及びＲｄ１２の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１４ａ）で表される基である、
請求項１４に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項１７】
前記第一の化合物は、下記一般式（１５）で表される化合物である、
請求項１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化７】



(15)



(15a)

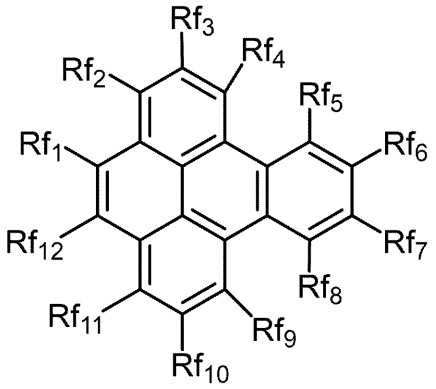
（前記一般式（１５）において、
Re_1～Re_{14}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１５ａ）で表される基であり、
Re_1～Re_{14}の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１５ａ）において、Ｌｅは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｅは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）

【請求項１８】
Re_3及びRe_{12}の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１５ａ）で表される基である、
請求項１７に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

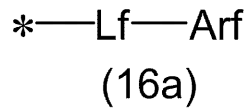
【請求項１９】
Re_1及びRe_{14}の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１５ａ）で表される基である、
請求項１７又は請求項１８に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項２０】
前記第一の化合物は、下記一般式（１６）で表される化合物である、
請求項１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化８】



(16)



(16a)

（前記一般式（１６）において、
Ｒｆ$_{1}$～Ｒｆ$_{12}$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６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１６ａ）で表される基であり、
Ｒｆ$_{1}$～Ｒｆ$_{12}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１６ａ）において、Ｌｆは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｆ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、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）

【請求項２１】
Ｒｆ$_{5}$、Ｒｆ$_{6}$、Ｒｆ$_{7}$及びＲｆ$_{8}$の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１６ａ）で表される基である、
請求項２０に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

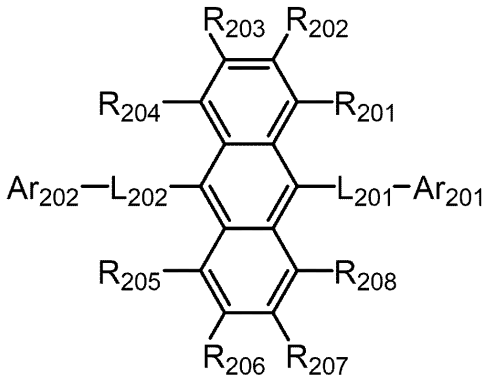
【請求項２２】
前記第一の発光性化合物及び前記第二の発光性化合物は、それぞれ独立に、最大ピーク波長が５００ｎｍ以下の発光を示す化合物である、
請求項１から請求項２１のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項２３】
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１）の関係を満たす、
請求項１から請求項２２のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
Ｔ$_{1}$（Ｈ１）＞Ｔ$_{1}$（Ｈ２）　…（数１）

【請求項２４】
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、
請求項１から請求項２３のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項２５】
前記第二のホスト材料は、下記一般式（２）で表される第二の化合物である、
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。

【化９】



(2)

（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、
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、
－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、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、
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。）
（前記第二のホスト材料中、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。）

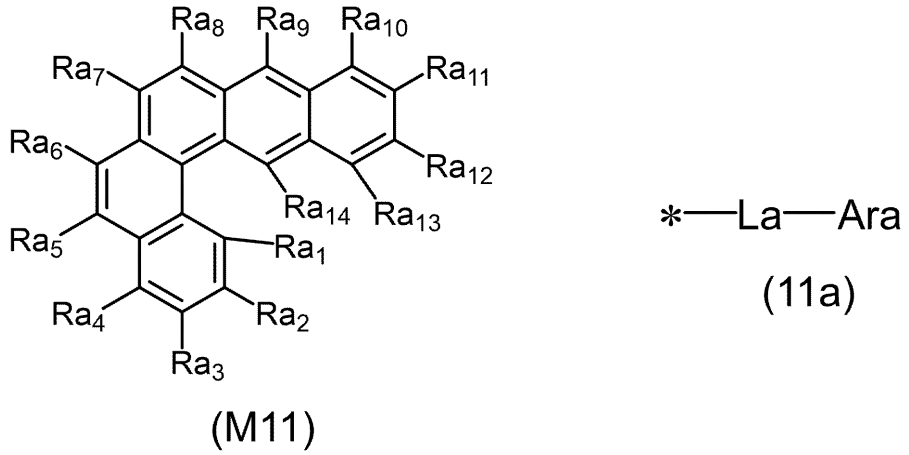
【請求項２６】

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を搭載した、電子機器。

【請求項２７】

下記一般式（Ｍ１１）で表される化合物。

【化１０】

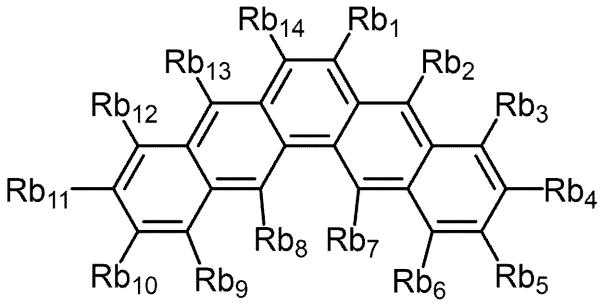


（前記一般式（Ｍ１１）において、
Ｒａ１～Ｒａ１４は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１１ａ）で表される基であり、
Ｒａ１～Ｒａ１４の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
Ｒａ１～Ｒａ１４のうち１つだけがフェニル基である場合はなく、
前記一般式（１１ａ）において、Ｌａは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒａは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）

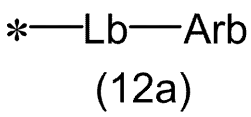
【請求項２８】

下記一般式（Ｍ１２）で表される化合物。

【化１１】



(M12)



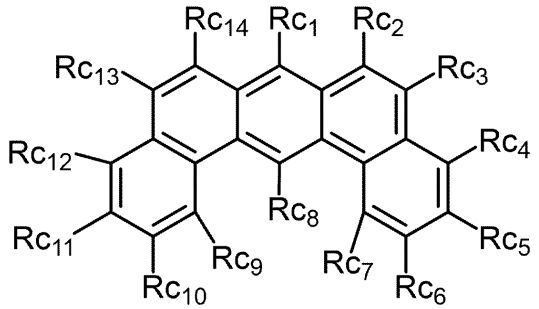
(12a)

（前記一般式（Ｍ１２）において、
Ｒｂ$_1$～Ｒｂ$_{14}$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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１２ａ）で表される基であり、
Ｒｂ$_1$～Ｒｂ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
Ｒｂ$_1$～Ｒｂ$_{14}$は、ピリジル基ではなく、
前記一般式（１２ａ）において、Ｌｂは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｂは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示し、
Ｒｂ$_1$～Ｒｂ$_{14}$、Ｌｂ及びＡｒｂにおいて「置換もしくは無置換」という場合における置換基は、アルキル基ではない。）

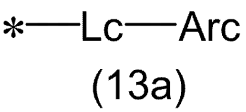
【請求項２９】

下記一般式（Ｍ１３）で表される化合物。

【化１２】



(M13)

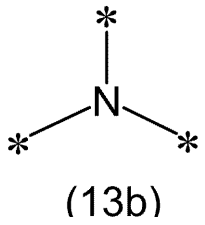


(13a)

（前記一般式（Ｍ１３）において、
Ｒｃ$_1$～Ｒｃ$_{14}$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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１３ａ）で表される基であり、
Ｒｃ$_1$及びＲｃ$_8$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１３ａ）において、Ｌｃは、

単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｃは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示し、
前記一般式（Ｍ１３）で表される化合物の分子量が１０００未満であり、
前記一般式（Ｍ１３）で表される化合物は、分子中にアントラセニル基、アルキル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、ボリル基及び下記一般式（１３ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【化１３】

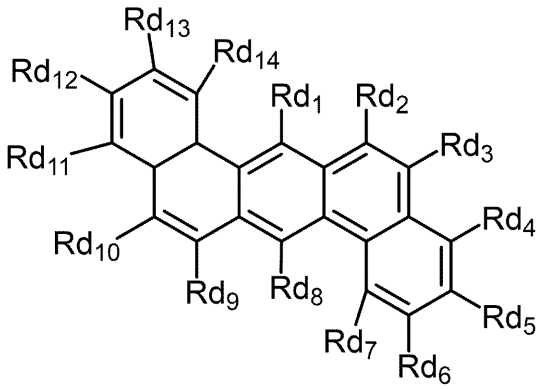


(13b)

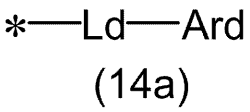
（前記一般式（１３ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）

【請求項３０】
下記一般式（Ｍ１４）で表される化合物。

【化１４】



(M14)

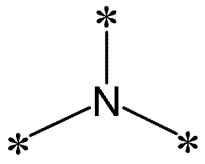


(14a)

（前記一般式（Ｍ１４）において、
Ｒｄ$_{1}$～Ｒｄ$_{14}$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６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１４ａ）で表される基であり、
Ｒｄ$_{4}$、Ｒｄ$_{7}$、Ｒｄ$_{11}$及びＲｄ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１４ａ）において、Ｌｄは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｄ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、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示し、

前記一般式（Ｍ１４）で表される化合物は、分子中にアルキル基、アルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボニル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、シアノ基及び下記一般式（１４ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【化１５】



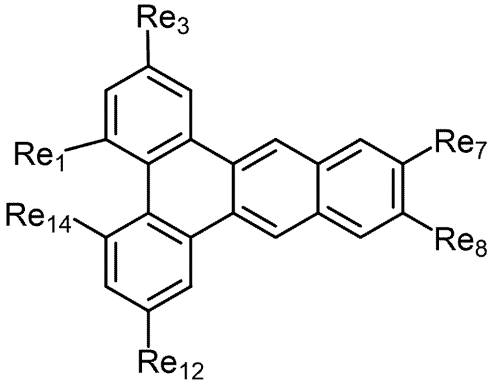
(14b)

（前記一般式（１４ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）

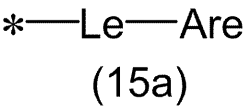
【請求項３１】

下記一般式（Ｍ１５）で表される化合物。

【化１６】



(M15)



(15a)

（前記一般式（Ｍ１５）において、

Re_1、Re_3、Re_7、Re_8、Re_{12}及びRe_{14}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６～２２のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は

前記一般式（１５ａ）で表される基であり、

Re_1、Re_3、Re_7、Re_8、Re_{12}及びRe_{14}の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、

Re_1、Re_3、Re_7、Re_8、Re_{12}及びRe_{14}は、アジン環を含まず、

Re_1、Re_3、Re_7、Re_8、Re_{12}及びRe_{14}のうち１つだけがフェニル基である場合はなく、

前記一般式（１５ａ）において、Ｌｅは、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、

Ａｒｅは、

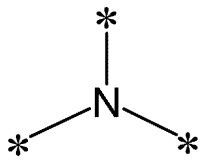
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、

＊は、結合位置を示し、

前記一般式（Ｍ１５）で表される化合物は、分子中にアルキル基、アルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボニル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ボリル基、イミダゾリル基及び下記一般式（１５ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【化１７】



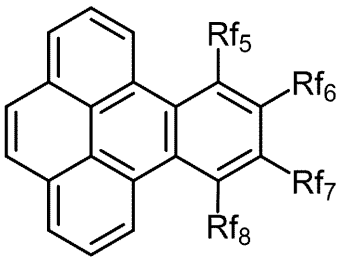
(15b)

（前記一般式（１５ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）

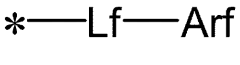
【請求項３２】

下記一般式（Ｍ１６）で表される化合物。

【化１８】



(M16)



(16a)

（前記一般式（Ｍ１６）において、

Rf_5、Rf_6、Rf_7及びRf_8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６～２２のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は

前記一般式（１６ａ）で表される基であり、

Rf_5、Rf_6、Rf_7及びRf_8の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、

Rf_5、Rf_6、Rf_7及びRf_8の全てが同時にフェニル基である場合はなく、

前記一般式（１６ａ）において、Ｌｆは、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、

Ａｒｆは、

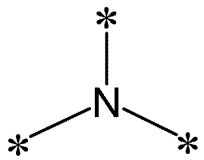
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、

＊は、結合位置を示し、

前記一般式（Ｍ１６）で表される化合物は、分子中にアルキル基、アルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボニル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ボリル基、イミダゾリル基及び下記一般式（１６ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【化１９】

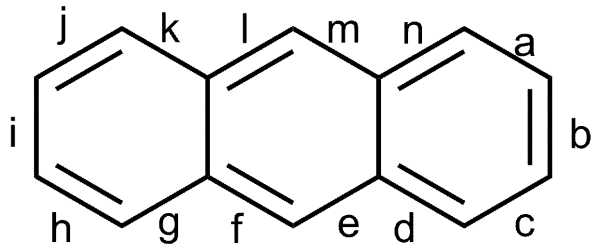


(16b)

（前記一般式（１６ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）

【発明の詳細な説明】
【技術分野】
【０００１】
本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子、電子機器及び化合物に関する。
【背景技術】
【０００２】
有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「有機ＥＬ素子」という場合がある。）は、携帯電話及びテレビ等のフルカラーディスプレイへ応用されている。有機ＥＬ素子に電圧を印加すると、陽極から正孔が発光層に注入され、また陰極から電子が発光層に注入される。そして、発光層において、注入された正孔と電子とが再結合し、励起子が形成される。このとき、電子スピンの統計則により、一重項励起子が２５％の割合で生成し、及び三重項励起子が７５％の割合で生成する。
有機ＥＬ素子の性能向上を図るため、例えば、特許文献１及び特許文献２においては、複数の発光層を積層させること、並びに積層発光層に用いる化合物（例えば、ピレン化合物等）について検討がなされている。また、特許文献３には、有機ＥＬ素子の性能向上を図るため、２つの三重項励起子の衝突融合により一重項励起子が生成する現象（以下、Ｔｒｉｐｌｅｔ－Ｔｒｉｐｌｅｔ　Ｆｕｓｉｏｎ＝ＴＴＦ現象と称する場合がある。）が記載されている。
有機ＥＬ素子の性能としては、例えば、輝度、発光波長、色度、発光効率、駆動電圧、及び寿命が挙げられる。
【先行技術文献】
【特許文献】
【０００３】
【特許文献１】特開２０１９－１６１２１８号公報
【特許文献２】国際公開第２０２２／０２５５１１号
【特許文献３】国際公開第２０１０／１３４３５０号
【発明の概要】
【発明が解決しようとする課題】
【０００４】
本発明の目的は、色度悪化が抑制され、かつ長寿命な有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することである。本発明の目的は、積層された複数の発光層を含む有機エレクトロルミネッセンス素子の色度悪化を抑制すると共に長寿命化が可能な化合物を提供することである。
【課題を解決するための手段】
【０００５】
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との間に配置された発光帯域と、を有し、前記陽極、前記発光帯域、及び前記陰極が、この順で配置され、前記発光帯域は、第一の発光層及び第二の発光層を含み、前記第一の発光層は、第一のホスト材料と、第一の発光性化合物と、を含有し、前記第一のホスト材料は、下記一般式（１）で表される環構造を少なくとも１つ有する第一の化合物であり、但し、前記第一の化合物は、分子中に、下記式（Ｘ１）、（Ｘ２）、（Ｘ３）及び（Ｘ４）で表される環構造を有さず、前記第二の発光層は、第二のホスト材料と、第二の発光性化合物と、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が、互いに異なり、前記第一の発光性化合物と前記第二の発光性化合物とが、互いに同一であるか又は異なる、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。
【０００６】

【化１】



(1)

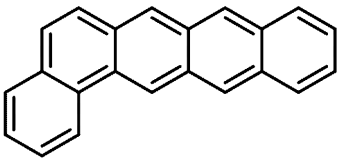
【０００７】

（前記一般式（１）において、ａ、ｂ、ｃ、ｄ、ｅ、ｆ、ｇ、ｈ、ｉ、ｊ、ｋ、ｌ、ｍ及びｎからなる群から選択される１以上の位置に、置換もしくは無置換のベンゼン環が２つ縮合するか、又は置換もしくは無置換のナフタレン環が１つ縮合し、

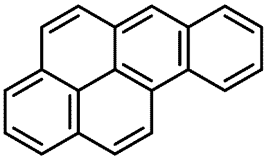
前記置換もしくは無置換のベンゼン環又は前記置換もしくは無置換のナフタレン環が縮合した環構造は、置換基を少なくとも１つ有するか、無置換である。）

【０００８】

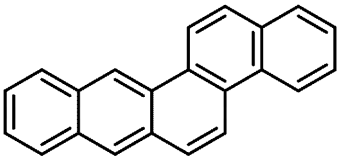
【化２】



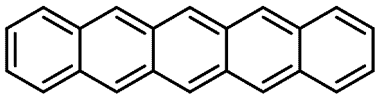
(X1)



(X2)



(X3)



(X4)

【０００９】

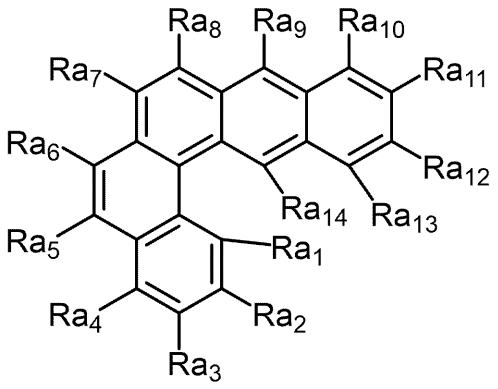
本発明の一態様によれば、本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器が提供される。

【００１０】

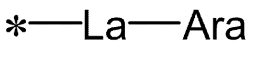
本発明の一態様によれば、下記一般式（Ｍ１１）で表される化合物が提供される。

【００１１】

【化３】

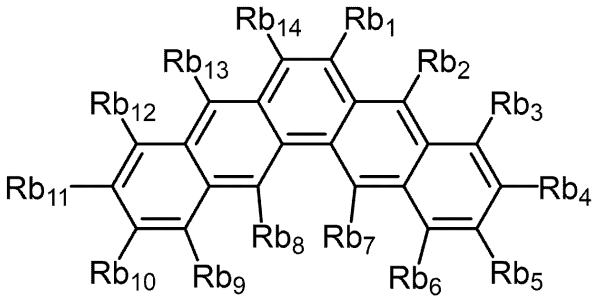


(M11)

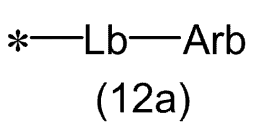


(11a)

【００１２】
（前記一般式（Ｍ１１）において、
Ｒａ$_1$～Ｒａ$_{14}$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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１１ａ）で表される基であり、
Ｒａ$_1$～Ｒａ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
Ｒａ$_1$～Ｒａ$_{14}$のうち１つだけがフェニル基である場合はなく、
前記一般式（１１ａ）において、Ｌａは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒａは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）
【００１３】
本発明の一態様によれば、下記一般式（Ｍ１２）で表される化合物が提供される。
【００１４】
【化４】



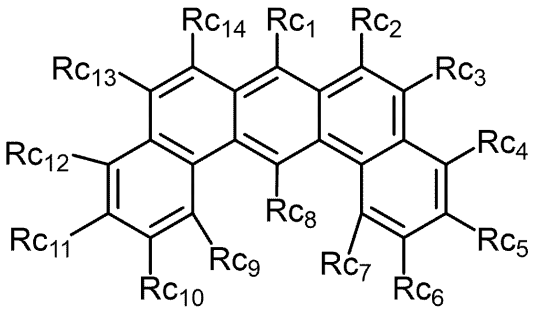
(M12)



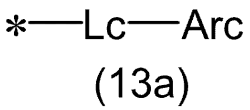
(12a)

【００１５】
（前記一般式（Ｍ１２）において、
Ｒｂ$_1$～Ｒｂ$_{14}$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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１２ａ）で表される基であり、
Ｒｂ$_1$～Ｒｂ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
Ｒｂ$_1$～Ｒｂ$_{14}$は、ピリジル基ではなく、
前記一般式（１２ａ）において、Ｌｂは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｂは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示し、
Ｒｂ$_1$～Ｒｂ$_{14}$、Ｌｂ及びＡｒｂにおいて「置換もしくは無置換」という場合における置換基は、アルキル基ではない。）

【００１６】
本発明の一態様によれば、下記一般式（Ｍ１３）で表される化合物が提供される。
【００１７】
【化５】

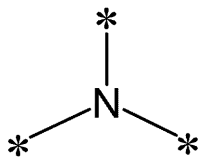


(M13)



(13a)

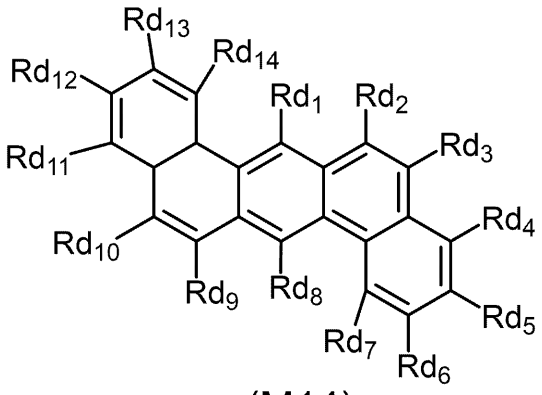
【００１８】
（前記一般式（Ｍ１３）において、
Ｒｃ$_1$～Ｒｃ$_{14}$は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１３ａ）で表される基であり、
Ｒｃ$_1$及びＲｃ$_8$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１３ａ）において、Ｌｃは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｃは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示し、
前記一般式（Ｍ１３）で表される化合物の分子量が１０００未満であり、
前記一般式（Ｍ１３）で表される化合物は、分子中にアントラセニル基、アルキル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、ボリル基及び下記一般式（１３ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）
【００１９】
【化６】



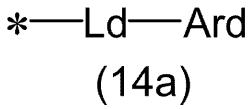
(13b)

【００２０】
（前記一般式（１３ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）
【００２１】
本発明の一態様によれば、下記一般式（Ｍ１４）で表される化合物が提供される。
【００２２】

【化７】



(M14)



(14a)

【００２３】

（前記一般式（Ｍ１４）において、

Ｒｄ$_1$～Ｒｄ$_{14}$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６～２２のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は

前記一般式（１４ａ）で表される基であり、

Ｒｄ$_4$、Ｒｄ$_7$、Ｒｄ$_{11}$及びＲｄ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、

前記一般式（１４ａ）において、Ｌｄは、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、

Ａｒｄ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、又は

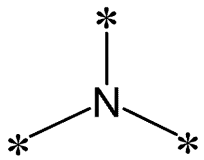
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、

＊は、結合位置を示し、

前記一般式（Ｍ１４）で表される化合物は、分子中にアルキル基、アルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボニル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、シアノ基及び下記一般式（１４ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【００２４】

【化８】



(14b)

【００２５】

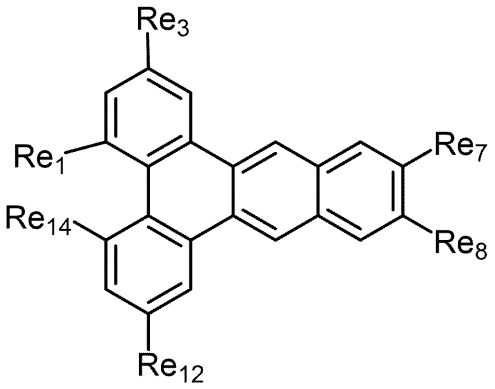
（前記一般式（１４ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）

【００２６】

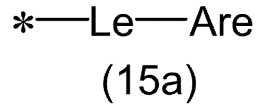
本発明の一態様によれば、下記一般式（Ｍ１５）で表される化合物が提供される。

【００２７】

【化９】



(M15)



(15a)

【００２８】

（前記一般式（Ｍ１５）において、

Ｒｅ$_1$、Ｒｅ$_3$、Ｒｅ$_7$、Ｒｅ$_8$、Ｒｅ$_{12}$及びＲｅ$_{14}$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６～２２のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は

前記一般式（１５ａ）で表される基であり、

Ｒｅ$_1$、Ｒｅ$_3$、Ｒｅ$_7$、Ｒｅ$_8$、Ｒｅ$_{12}$及びＲｅ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、

Ｒｅ$_1$、Ｒｅ$_3$、Ｒｅ$_7$、Ｒｅ$_8$、Ｒｅ$_{12}$及びＲｅ$_{14}$は、アジン環を含まず、

Ｒｅ$_1$、Ｒｅ$_3$、Ｒｅ$_7$、Ｒｅ$_8$、Ｒｅ$_{12}$及びＲｅ$_{14}$のうち１つだけがフェニル基である場合はなく、

前記一般式（１５ａ）において、Ｌｅは、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、

Ａｒｅ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、又は

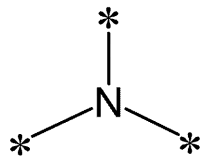
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、

＊は、結合位置を示し、

前記一般式（Ｍ１５）で表される化合物は、分子中にアルキル基、アルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボニル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ボリル基、イミダゾリル基及び下記一般式（１５ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【００２９】

【化１０】



(15b)

【００３０】

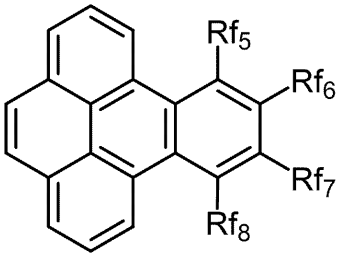
（前記一般式（１５ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）

【００３１】

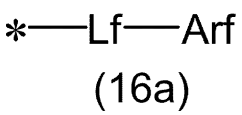
本発明の一態様によれば、下記一般式（Ｍ１６）で表される化合物が提供される。

【００３２】

【化１１】



(M16)



(16a)

【００３３】

（前記一般式（Ｍ１６）において、

Ｒｆ$_5$、Ｒｆ$_6$、Ｒｆ$_7$及びＲｆ$_8$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６～２２のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は

前記一般式（１６ａ）で表される基であり、

Ｒｆ$_5$、Ｒｆ$_6$、Ｒｆ$_7$及びＲｆ$_8$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、

Ｒｆ$_5$、Ｒｆ$_6$、Ｒｆ$_7$及びＲｆ$_8$の全てが同時にフェニル基である場合はなく、

前記一般式（１６ａ）において、Ｌｆは、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、

Ａｒｆ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、又は

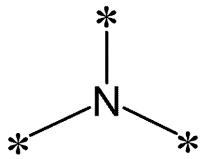
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、

＊は、結合位置を示し、

前記一般式（Ｍ１６）で表される化合物は、分子中にアルキル基、アルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボニル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ボリル基、イミダゾリル基及び下記一般式（１６ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【００３４】

【化１２】



(16b)

【００３５】

（前記一般式（１６ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）

【発明の効果】

【００３６】

本発明の一態様によれば、色度悪化が抑制され、かつ長寿命な有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに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ができる。本発明の一態様によれば、積層された複数の発光層を含む有機エレクトロルミネッセンス素子の色度悪化を抑制すると共に長寿命化が可能な化合物を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【００３７】
【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別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】
【００３８】
［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。
【００３９】
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。
【００４０】
本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、及び複素環化合物）の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、別途記載のない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が６であり、ナフタレン環は環形成炭素数が１０であり、ピリジン環は環形成炭素数５であり、フラン環は環形成炭素数４である。また、例えば、９，９－ジフェニルフルオレニル基の環形成炭素数は１３であり、９，９’－スピロビフルオレニル基の環形成炭素数は２５である。
また、ベンゼン環に置換基として、例えば、アルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、ベンゼン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているベンゼン環の環形成炭素数は、６である。また、ナフタレン環に置換基として、例えば、アルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、ナフタレン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているナフタレン環の環形成炭素数は、１０である。
【００４１】
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。
【００４２】
本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数ＸＸ～ＹＹのＺＺ基」という表現における「炭素数ＸＸ～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。
【００４３】

本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数ＸＸ～ＹＹのＺＺ基」という表現における「原子数ＸＸ～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。

【００４４】

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。

【００４５】

「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。

【００４６】

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

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

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

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

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

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

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

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

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

【００４７】

・「置換もしくは無置換のアリール基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」の具体例（具体例群Ｇ１）としては、以下の無置換のアリール基（具体例群Ｇ１Ａ）及び置換のアリール基（具体例群Ｇ１Ｂ）等が挙げられる。（ここで、無置換のアリール基とは「置換もしくは無置換のアリール基」が「無置換のアリール基」である場合を指し、置換のアリール基とは「置換もしくは無置換のアリール基」が「置換のアリール基」である場合を指す。）本明細書において、単に「アリール基」という場合は、「無置換のアリール基」と「置換のアリール基」の両方を含む。

「置換のアリール基」は、「無置換のアリール基」の１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアリール基」としては、例えば、下記具体例群Ｇ１Ａの「無置換のアリール基」の１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び下記具体例群Ｇ１Ｂの置換のアリール基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のア

リール基」の例、及び「置換のアリール基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアリール基」には、下記具体例群Ｇ１Ｂの「置換のアリール基」におけるアリール基自体の炭素原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び下記具体例群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。

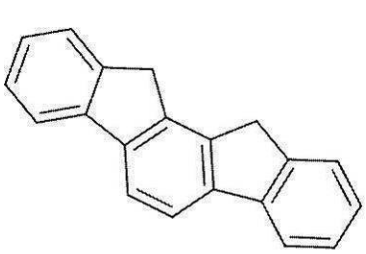
【００４８】

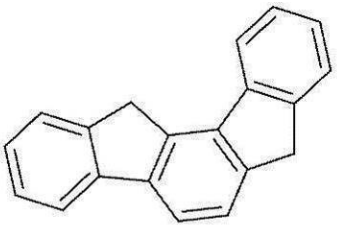
・無置換のアリール基（具体例群Ｇ１Ａ）：

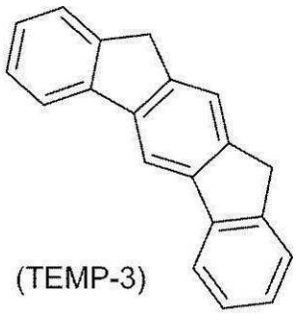
フェニル基、
ｐ－ビフェニル基、
ｍ－ビフェニル基、
ｏ－ビフェニル基、
ｐ－ターフェニル－４－イル基、
ｐ－ターフェニル－３－イル基、
ｐ－ターフェニル－２－イル基、
ｍ－ターフェニル－４－イル基、
ｍ－ターフェニル－３－イル基、
ｍ－ターフェニル－２－イル基、
ｏ－ターフェニル－４－イル基、
ｏ－ターフェニル－３－イル基、
ｏ－ターフェニル－２－イル基、
１－ナフチル基、
２－ナフチル基、
アントリル基、
ベンゾアントリル基、
フェナントリル基、
ベンゾフェナントリル基、
フェナレニル基、
ピレニル基、
クリセニル基、
ベンゾクリセニル基、
トリフェニレニル基、
ベンゾトリフェニレニル基、
テトラセニル基、
ペンタセニル基、
フルオレニル基、
９，９’－スピロビフルオレニル基、
ベンゾフルオレニル基、
ジベンゾフルオレニル基、
フルオランテニル基、
ベンゾフルオランテニル基、
ペリレニル基、及び
下記一般式（ＴＥＭＰ－１）～（ＴＥＭＰ－１５）で表される環構造から１つの水素原子を除くことにより誘導される１価のアリール基。

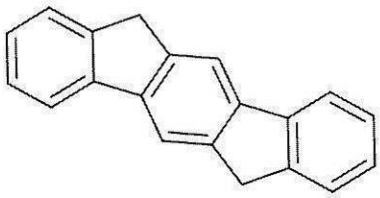
【００４９】

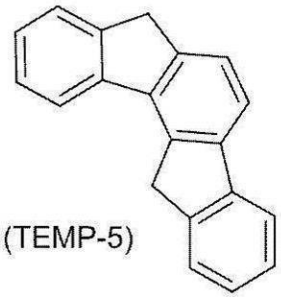
【化１３】

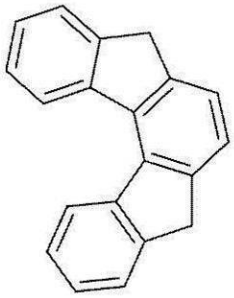

(TEMP-1)

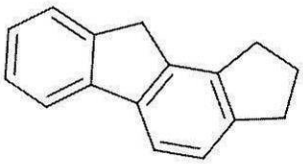

(TEMP-2)

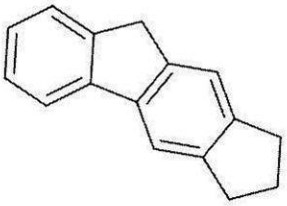

(TEMP-3)

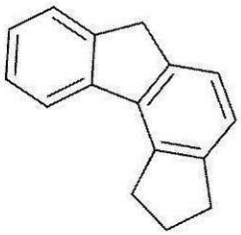

(TEMP-4)


(TEMP-5)


(TEMP-6)

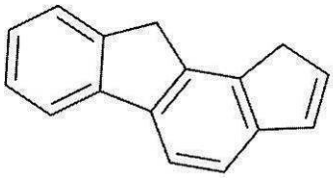

(TEMP-7)

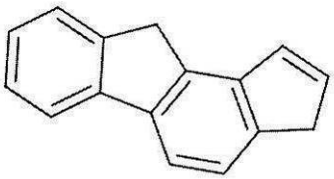

(TEMP-8)

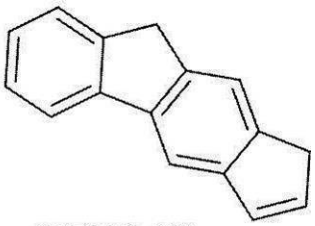

(TEMP-9)

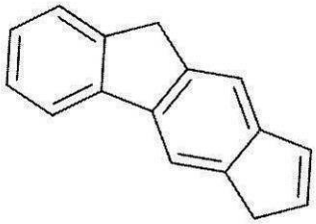
【００５０】

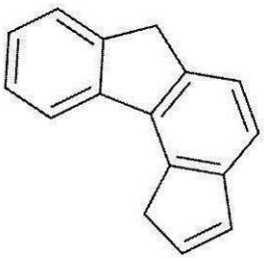
【化１４】

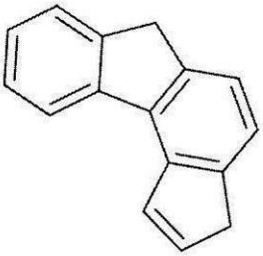

(TEMP-10)


(TEMP-11)


(TEMP-12)


(TEMP-13)


(TEMP-14)


(TEMP-15)

【００５１】

・置換のアリール基（具体例群Ｇ１Ｂ）：

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。

【００５２】

・「置換もしくは無置換の複素環基」

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

本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基である。

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

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

「置換の複素環基」は、「無置換の複素環基」の１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換の複素環基」の具体例は、下記具体例群Ｇ２Ａの「無置換の複素環基」の水素原子が置き換わった基、及び下記具体例群Ｇ２Ｂの置換の複素環基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換の複素環基」の例や「置換の複素環基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換の複素環基」には、具体例群Ｇ２Ｂ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Ｇ２Ｂ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。

【００５３】

具体例群Ｇ２Ａ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Ｇ２Ａ１）、酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ２）、硫黄原子を含む無置換の

複素環基（具体例群Ｇ２Ａ３）、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Ｇ２Ａ４）を含む。

【００５４】

具体例群Ｇ２Ｂ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Ｇ２Ｂ１）、酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ２）、硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ３）、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Ｇ２Ｂ４）を含む。

【００５５】

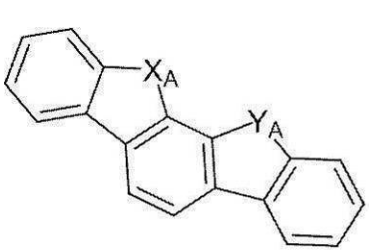
・窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ１）：

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

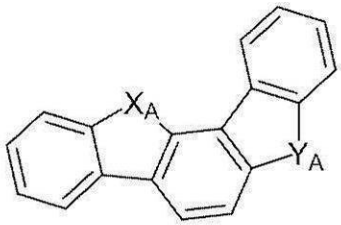
【００５６】

・酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ２）：
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、
キサンテニル基、
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。
【００５７】
・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ３）：
チエニル基、
チアゾリル基、
イソチアゾリル基、
チアジアゾリル基、
ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基）、
イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基）、
ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、
ナフトベンゾチオフェニル基（ナフトベンゾチエニル基）、
ベンゾチアゾリル基、
ベンゾイソチアゾリル基、
フェノチアジニル基、
ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、
アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、
ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、
アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフトベンゾチエニル基）、及び
ジアザナフトベンゾチオフェニル基（ジアザナフトベンゾチエニル基）。
【００５８】
・下記一般式（ＴＥＭＰ－１６）～（ＴＥＭＰ－３３）で表される環構造から１つの水素原子を除くことにより誘導される１価の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ４）：
【００５９】

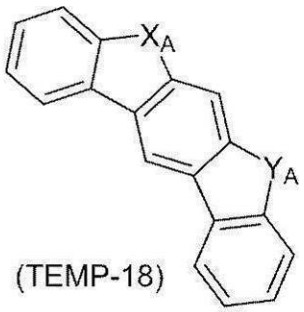
【化１５】



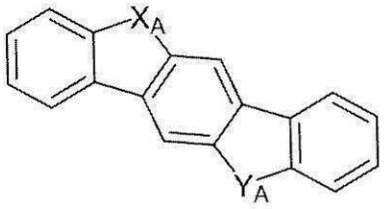
(TEMP-16)



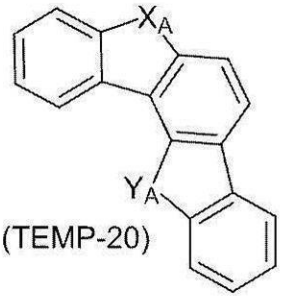
(TEMP-17)



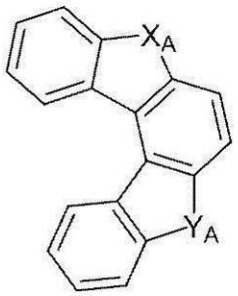
(TEMP-18)



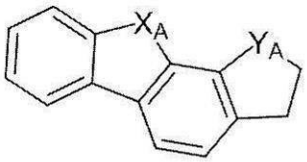
(TEMP-19)



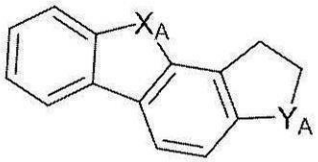
(TEMP-20)



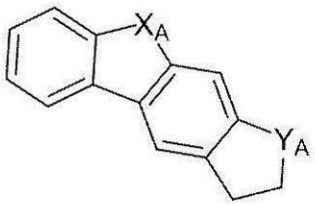
(TEMP-21)



(TEMP-22)



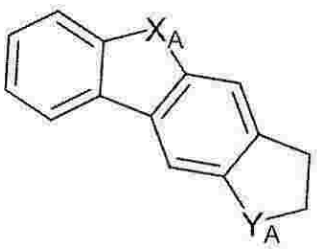
(TEMP-23)

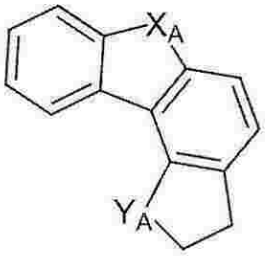


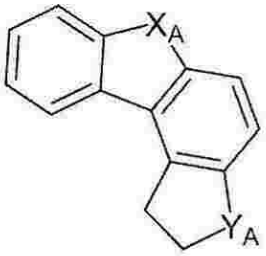
(TEMP-24)

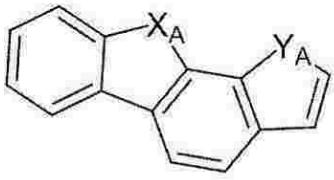
【００６０】

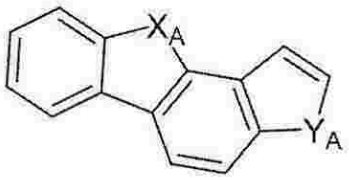
【化１６】

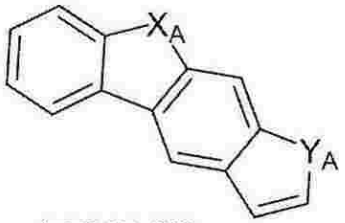

(TEMP-25)

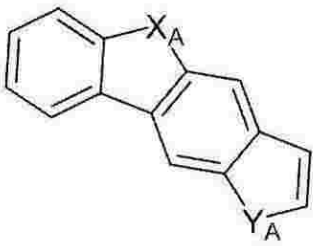

(TEMP-26)

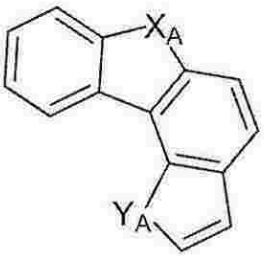

(TEMP-27)

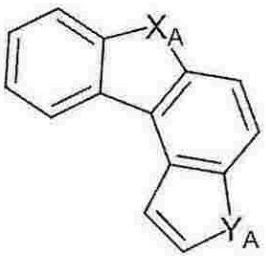

(TEMP-28)


(TEMP-29)


(TEMP-30)


(TEMP-31)


(TEMP-32)


(TEMP-33)

【００６１】

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。

【００６２】

・窒素原子を含む置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ１）：

（９－フェニル）カルバゾリル基、

（９－ビフェニリル）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、

ビフェニリルトリアジニル基、

ジフェニルトリアジニル基、

フェニルキナゾリニル基、及びビフェニリルキナゾリニル基。
【００６３】
・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ２）：
フェニルジベンゾフラニル基、
メチルジベンゾフラニル基、
ｔ－ブチルジベンゾフラニル基、及び
スピロ［９Ｈ－キサンテン－９，９’－［９Ｈ］フルオレン］の１価の残基。
【００６４】
・硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ３）：
フェニルジベンゾチオフェニル基、
メチルジベンゾチオフェニル基、
ｔ－ブチルジベンゾチオフェニル基、及び
スピロ［９Ｈ－チオキサンテン－９，９’－［９Ｈ］フルオレン］の１価の残基。
【００６５】
・前記一般式（ＴＥＭＰ－１６）～（ＴＥＭＰ－３３）で表される環構造から誘導される１価の複素環基の１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群Ｇ２Ｂ４）：
【００６６】
前記「１価の複素環基の１つ以上の水素原子」とは、該１価の複素環基の環形成炭素原子に結合している水素原子、X_A及びY_Aの少なくともいずれかがＮＨである場合の窒素原子に結合している水素原子、及びX_A及びY_Aの一方がCH_2である場合のメチレン基の水素原子から選ばれる１つ以上の水素原子を意味する。
【００６７】
・「置換もしくは無置換のアルキル基」
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」の具体例（具体例群Ｇ３）としては、以下の無置換のアルキル基（具体例群Ｇ３Ａ）及び置換のアルキル基（具体例群Ｇ３Ｂ）が挙げられる。（ここで、無置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「無置換のアルキル基」である場合を指し、置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「置換のアルキル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキル基」という場合は、「無置換のアルキル基」と「置換のアルキル基」の両方を含む。
「置換のアルキル基」は、「無置換のアルキル基」における１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキル基」（具体例群Ｇ３Ａ）における１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のアルキル基（具体例群Ｇ３Ｂ）の例等が挙げられる。本明細書において、「無置換のアルキル基」におけるアルキル基は、鎖状のアルキル基を意味する。そのため、「無置換のアルキル基」は、直鎖である「無置換のアルキル基」、及び分岐状である「無置換のアルキル基」が含まれる。尚、ここに列挙した「無置換のアルキル基」の例や「置換のアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルキル基」には、具体例群Ｇ３Ｂの「置換のアルキル基」におけるアルキル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群Ｇ３Ｂの「置換のアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。
【００６８】
・無置換のアルキル基（具体例群Ｇ３Ａ）：
メチル基、
エチル基、
ｎ－プロピル基、
イソプロピル基、
ｎ－ブチル基、
イソブチル基、
ｓ－ブチル基、及び
ｔ－ブチル基。

【００６９】
・置換のアルキル基（具体例群Ｇ３Ｂ）：
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。
【００７０】
・「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Ｇ４）としては、以下の無置換のアルケニル基（具体例群Ｇ４Ａ）、及び置換のアルケニル基（具体例群Ｇ４Ｂ）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Ｇ４Ａ）が置換基を有する基、及び置換のアルケニル基（具体例群Ｇ４Ｂ）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Ｇ４Ｂ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Ｇ４Ｂ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。
【００７１】
・無置換のアルケニル基（具体例群Ｇ４Ａ）：
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。
【００７２】
・置換のアルケニル基（具体例群Ｇ４Ｂ）：
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。
【００７３】
・「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Ｇ５）としては、以下の無置換のアルキニル基（具体例群Ｇ５Ａ）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Ｇ５Ａ）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。
【００７４】

・無置換のアルキニル基（具体例群Ｇ５Ａ）：
エチニル基。
【００７５】
・「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Ｇ６）としては、以下の無置換のシクロアルキル基（具体例群Ｇ６Ａ）、及び置換のシクロアルキル基（具体例群Ｇ６Ｂ）等が挙げられる。（ここで、無置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「無置換のシクロアルキル基」である場合を指し、置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「置換のシクロアルキル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「シクロアルキル基」という場合は、「無置換のシクロアルキル基」と「置換のシクロアルキル基」の両方を含む。
「置換のシクロアルキル基」は、「無置換のシクロアルキル基」における１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のシクロアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のシクロアルキル基」（具体例群Ｇ６Ａ）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Ｇ６Ｂ）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Ｇ６Ｂ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Ｇ６Ｂ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。
【００７６】
・無置換のシクロアルキル基（具体例群Ｇ６Ａ）：
シクロプロピル基、
シクロブチル基、
シクロペンチル基、
シクロヘキシル基、
１－アダマンチル基、
２－アダマンチル基、
１－ノルボルニル基、及び
２－ノルボルニル基。
【００７７】
・置換のシクロアルキル基（具体例群Ｇ６Ｂ）：
４－メチルシクロヘキシル基。
【００７８】
・「－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基」
本明細書に記載の－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基の具体例（具体例群Ｇ７）としては、
－Ｓｉ（Ｇ１）（Ｇ１）（Ｇ１）、
－Ｓｉ（Ｇ１）（Ｇ２）（Ｇ２）、
－Ｓｉ（Ｇ１）（Ｇ１）（Ｇ２）、
－Ｓｉ（Ｇ２）（Ｇ２）（Ｇ２）、
－Ｓｉ（Ｇ３）（Ｇ３）（Ｇ３）、及び
－Ｓｉ（Ｇ６）（Ｇ６）（Ｇ６）
が挙げられる。ここで、
Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。
Ｇ２は、具体例群Ｇ２に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。
Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。
Ｇ６は、具体例群Ｇ６に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

－Ｓｉ（Ｇ１）（Ｇ１）（Ｇ１）における複数のＧ１は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｓｉ（Ｇ１）（Ｇ２）（Ｇ２）における複数のＧ２は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｓｉ（Ｇ１）（Ｇ１）（Ｇ２）における複数のＧ１は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｓｉ（Ｇ２）（Ｇ２）（Ｇ２）における複数のＧ２は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｓｉ（Ｇ３）（Ｇ３）（Ｇ３）における複数のＧ３は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｓｉ（Ｇ６）（Ｇ６）（Ｇ６）における複数のＧ６は、互いに同一であるか、又は異なる。

【００７９】

・「－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基」

本明細書に記載の－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基の具体例（具体例群Ｇ８）としては、
－Ｏ（Ｇ１）、
－Ｏ（Ｇ２）、
－Ｏ（Ｇ３）、及び
－Ｏ（Ｇ６）
が挙げられる。

ここで、
Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。
Ｇ２は、具体例群Ｇ２に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。
Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。
Ｇ６は、具体例群Ｇ６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。

【００８０】

・「－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基」

本明細書に記載の－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基の具体例（具体例群Ｇ９）としては、
－Ｓ（Ｇ１）、
－Ｓ（Ｇ２）、
－Ｓ（Ｇ３）、及び
－Ｓ（Ｇ６）
が挙げられる。

ここで、
Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。
Ｇ２は、具体例群Ｇ２に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。
Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。
Ｇ６は、具体例群Ｇ６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。

【００８１】

・「－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基」

本明細書に記載の－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基の具体例（具体例群Ｇ１０）としては、
－Ｎ（Ｇ１）（Ｇ１）、
－Ｎ（Ｇ２）（Ｇ２）、
－Ｎ（Ｇ１）（Ｇ２）、
－Ｎ（Ｇ３）（Ｇ３）、及び
－Ｎ（Ｇ６）（Ｇ６）
が挙げられる。

ここで、
Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。
Ｇ２は、具体例群Ｇ２に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。
Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。
Ｇ６は、具体例群Ｇ６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（Ｇ１）（Ｇ１）における複数のＧ１は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｎ（Ｇ２）（Ｇ２）における複数のＧ２は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｎ（Ｇ３）（Ｇ３）における複数のＧ３は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｎ（Ｇ６）（Ｇ６）における複数のＧ６は、互いに同一であるか、又は異なる。

【００８２】

・「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Ｇ１１）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。

【００８３】

・「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」

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

【００８４】

・「置換もしくは無置換のハロアルキル基」

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

【００８５】

・「置換もしくは無置換のアルコキシ基」

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

い限り、１～５０であり、好ましくは１～３０であり、より好ましくは１～１８である。
【００８６】
・「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」の具体例としては、－Ｓ（Ｇ３）で表される基であり、ここで、Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルキルチオ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、１～５０であり、好ましくは１～３０であり、より好ましくは１～１８である。
【００８７】
・「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」の具体例としては、－Ｏ（Ｇ１）で表される基であり、ここで、Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールオキシ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、６～５０であり、好ましくは６～３０であり、より好ましくは６～１８である。
【００８８】
・「置換もしくは無置換のアリールチオ基」
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールチオ基」の具体例としては、－Ｓ（Ｇ１）で表される基であり、ここで、Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールチオ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、６～５０であり、好ましくは６～３０であり、より好ましくは６～１８である。
【００８９】
・「置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基」
本明細書に記載の「トリアルキルシリル基」の具体例としては、－Ｓｉ（Ｇ３）（Ｇ３）（Ｇ３）で表される基であり、ここで、Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。－Ｓｉ（Ｇ３）（Ｇ３）（Ｇ３）における複数のＧ３は、互いに同一であるか、又は異なる。「トリアルキルシリル基」の各アルキル基の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、１～５０であり、好ましくは１～２０であり、より好ましくは１～６である。
【００９０】
・「置換もしくは無置換のアラルキル基」
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、－（Ｇ３）－（Ｇ１）で表される基であり、ここで、Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」であり、Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。従って、「アラルキル基」は、「アルキル基」の水素原子が置換基としての「アリール基」と置き換わった基であり、「置換のアルキル基」の一態様である。「無置換のアラルキル基」は、「無置換のアリール基」が置換した「無置換のアルキル基」であり、「無置換のアラルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、７～５０であり、好ましくは７～３０であり、より好ましくは７～１８である。
「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、ベンジル基、１－フェニルエチル基、２－フェニルエチル基、１－フェニルイソプロピル基、２－フェニルイソプロピル基、フェニル－ｔ－ブチル基、α－ナフチルメチル基、１－α－ナフチルエチル基、２－α－ナフチルエチル基、１－α－ナフチルイソプロピル基、２－α－ナフチルイソプロピル基、β－ナフチルメチル基、１－β－ナフチルエチル基、２－β－ナフチルエチル基、１－β－ナフチルイソプロピル基、及び２－β－ナフチルイソプロピル基等が挙げられる。
【００９１】
本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリール基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはフェニル基、ｐ－ビフェニル基、ｍ－ビフェニル基、ｏ－ビフェニル基、ｐ

－ターフェニル－４－イル基、ｐ－ターフェニル－３－イル基、ｐ－ターフェニル－２－イル基、ｍ－ターフェニル－４－イル基、ｍ－ターフェニル－３－イル基、ｍ－ターフェニル－２－イル基、ｏ－ターフェニル－４－イル基、ｏ－ターフェニル－３－イル基、ｏ－ターフェニル－２－イル基、１－ナフチル基、２－ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、９，９’－スピロビフルオレニル基、９，９－ジメチルフルオレニル基、及び９，９－ジフェニルフルオレニル基等である。

【００９２】

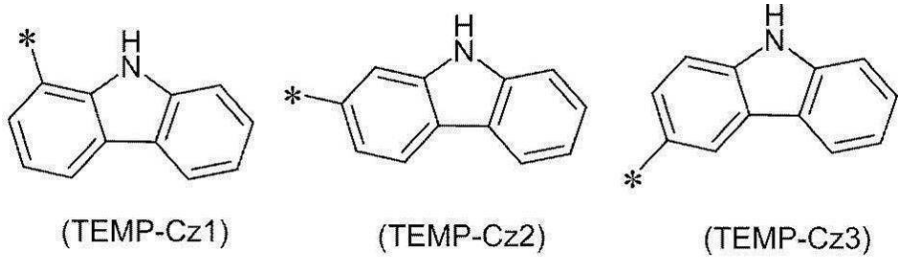
本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基、カルバゾリル基（１－カルバゾリル基、２－カルバゾリル基、３－カルバゾリル基、４－カルバゾリル基、又は９－カルバゾリル基）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ジアザジベンゾチオフ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

【００９３】

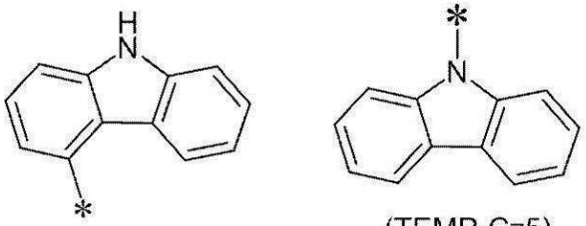
本明細書において、カルバゾリル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

【００９４】

【化１７】



(TEMP-Cz1)　(TEMP-Cz2)　(TEMP-Cz3)



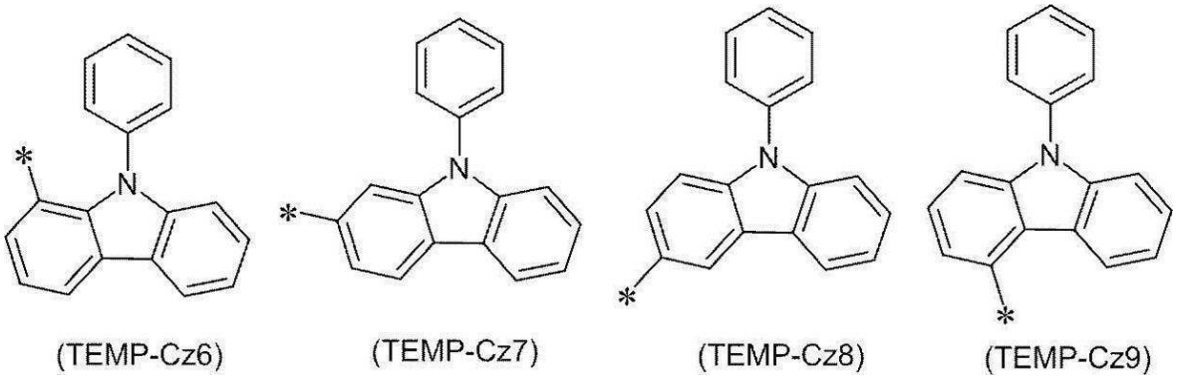
(TEMP-Cz4)　(TEMP-Cz5)

【００９５】

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。

【００９６】

【化１８】



【００９７】

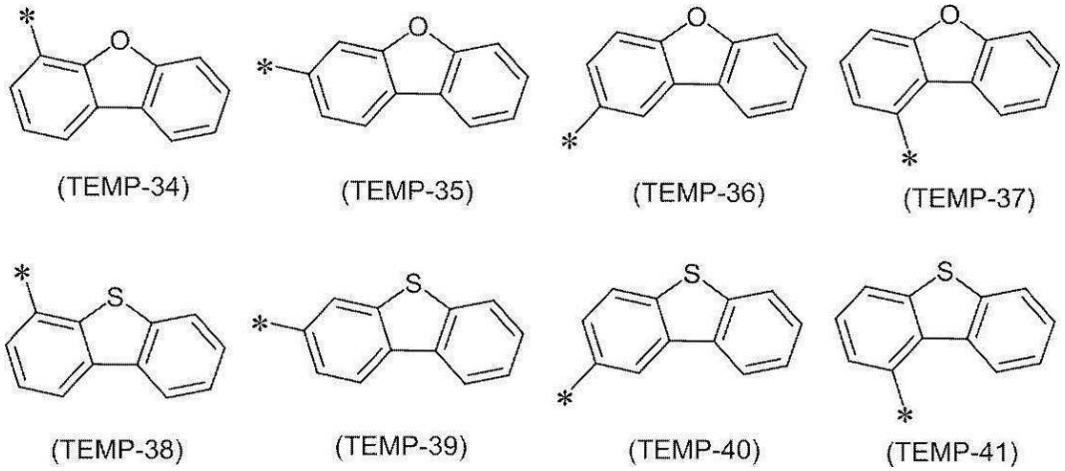
前記一般式（ＴＥＭＰ－Ｃｚ１）～（ＴＥＭＰ－Ｃｚ９）中、＊は、結合位置を表す。

【００９８】

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。

【００９９】

【化１９】



【０１００】

前記一般式（ＴＥＭＰ－３４）～（ＴＥＭＰ－４１）中、＊は、結合位置を表す。

【０１０１】

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。

【０１０２】

・「置換もしくは無置換のアリーレン基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリーレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアリール基」からアリール環上の１つの水素原子を除くことにより誘導される２価の基である。「置換もしくは無置換のアリーレン基」の具体例（具体例群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。

【０１０３】

・「置換もしくは無置換の２価の複素環基」

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

群Ｇ１３）としては、具体例群Ｇ２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。

【０１０４】

・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

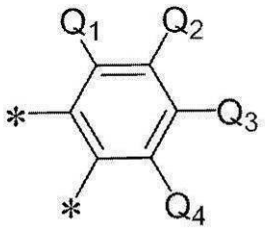
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の１つの水素原子を除くことにより誘導される２価の基である。「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群Ｇ１４）としては、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の１つの水素原子を除くことにより誘導される２価の基等が挙げられる。

【０１０５】

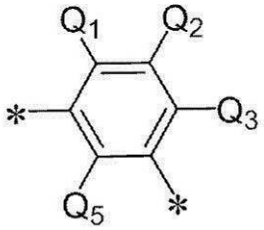
本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式（ＴＥＭＰ－４２）～（ＴＥＭＰ－６８）のいずれかの基である。

【０１０６】

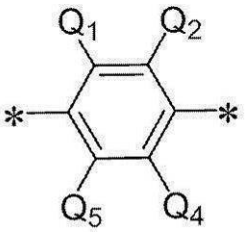
【化２０】



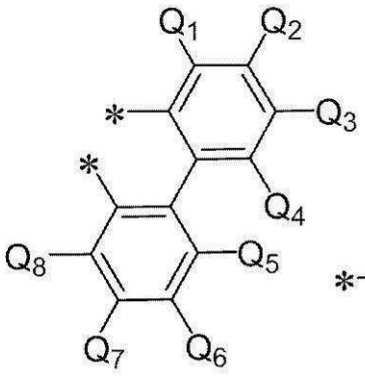
(TEMP-42)



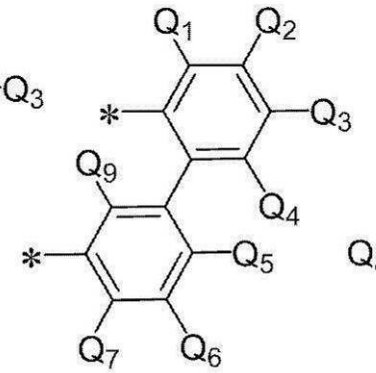
(TEMP-43)



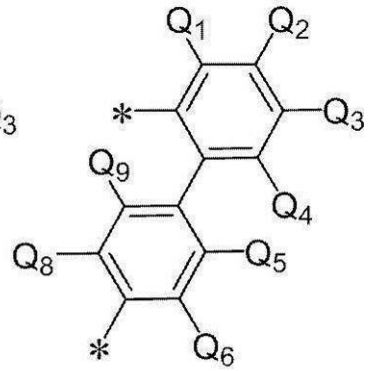
(TEMP-44)



(TEMP-45)



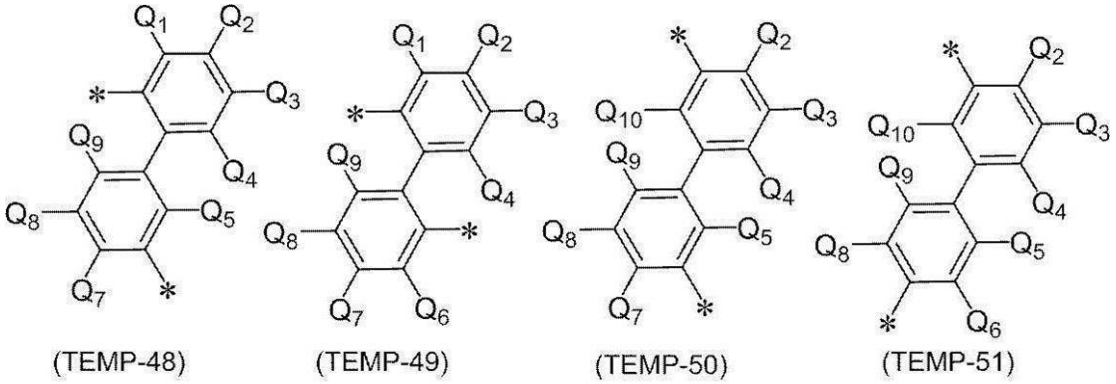
(TEMP-46)

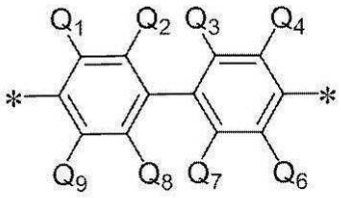


(TEMP-47)

【０１０７】

【化２１】





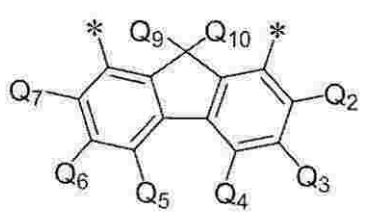
【０１０８】

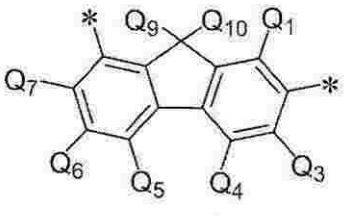
前記一般式（ＴＥＭＰ－４２）～（ＴＥＭＰ－５２）中、Q_1～Q_{10}は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

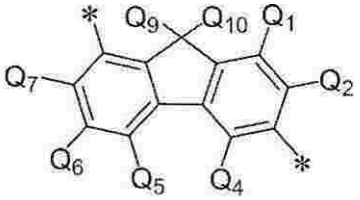
前記一般式（ＴＥＭＰ－４２）～（ＴＥＭＰ－５２）中、＊は、結合位置を表す。

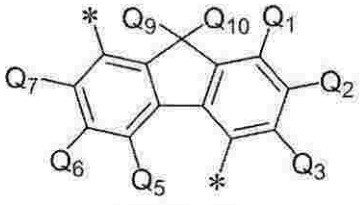
【０１０９】

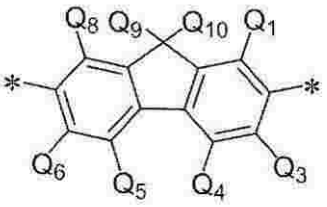
【化２２】

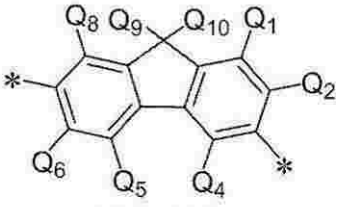

(TEMP-53)

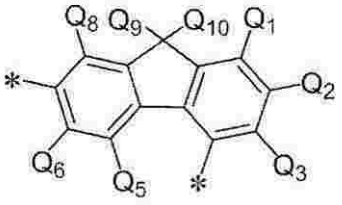

(TEMP-54)

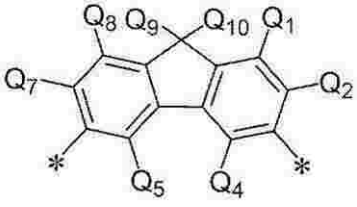

(TEMP-55)

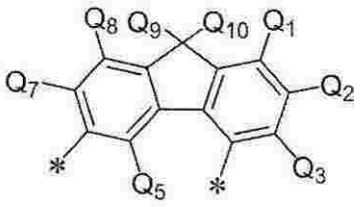

(TEMP-56)

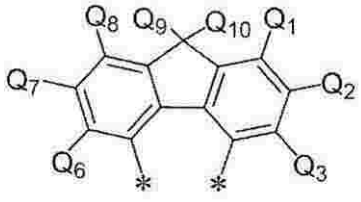

(TEMP-57)


(TEMP-58)


(TEMP-59)


(TEMP-60)


(TEMP-61)


(TEMP-62)

【０１１０】

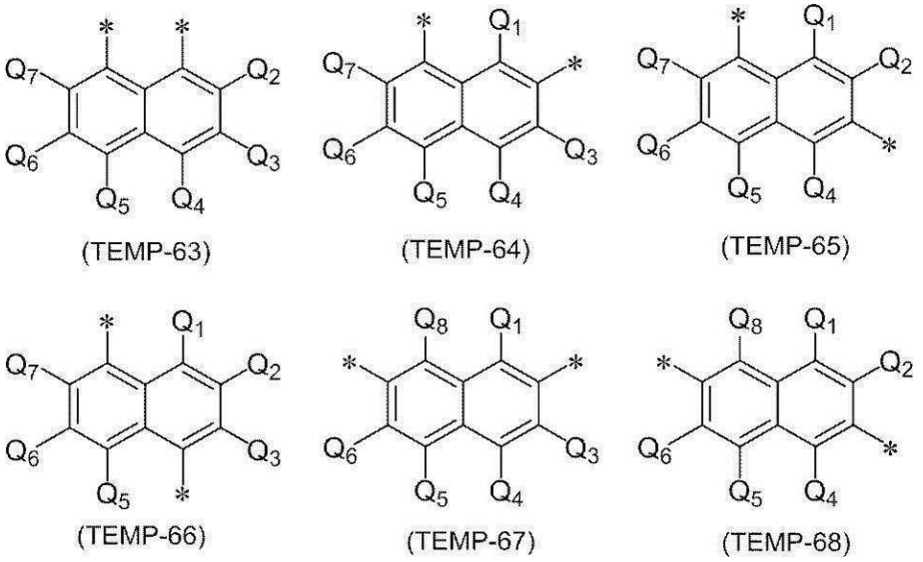
前記一般式（ＴＥＭＰ－５３）～（ＴＥＭＰ－６２）中、Ｑ１～Ｑ１０は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

式Ｑ９及びＱ１０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。

【０１１１】

【化２３】



【０１１２】

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

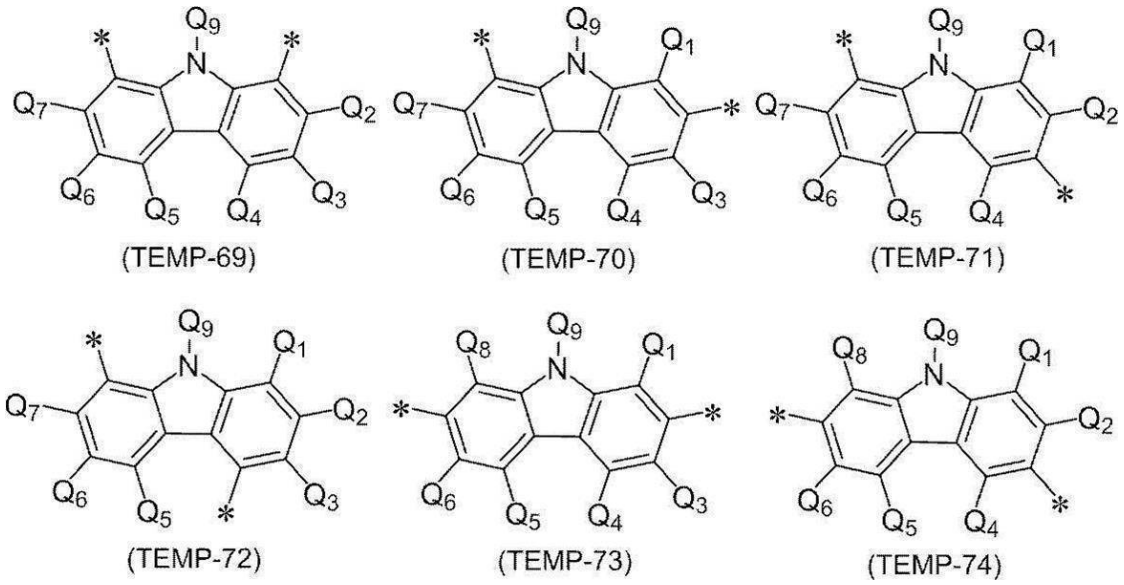
前記一般式（ＴＥＭＰ－６３）～（ＴＥＭＰ－６８）中、＊は、結合位置を表す。

【０１１３】

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。

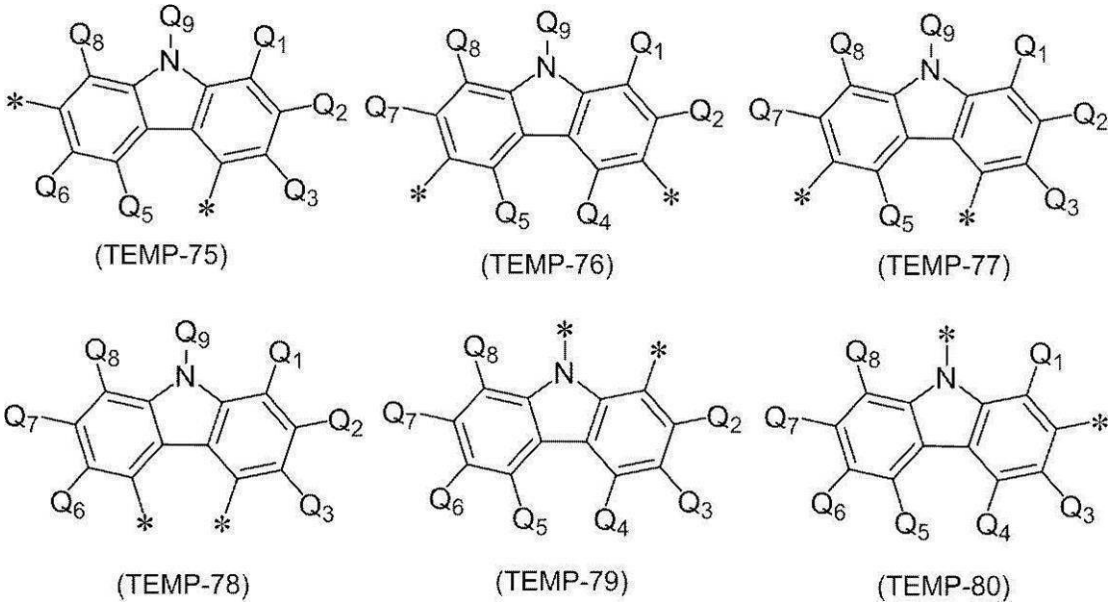
【０１１４】

【化２４】



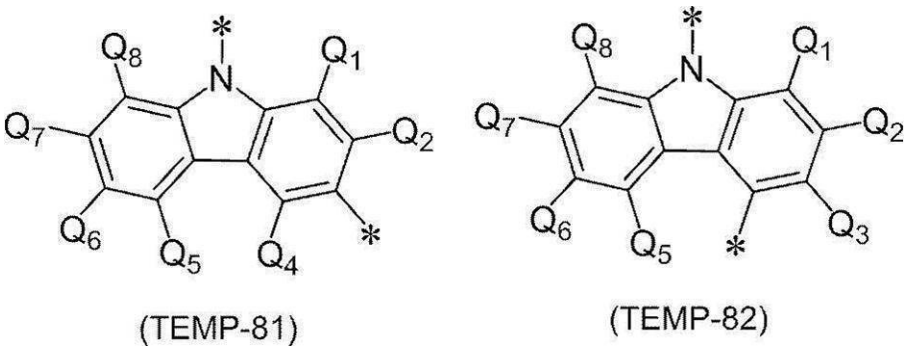
【０１１５】

【化２５】



【０１１６】

【化２６】

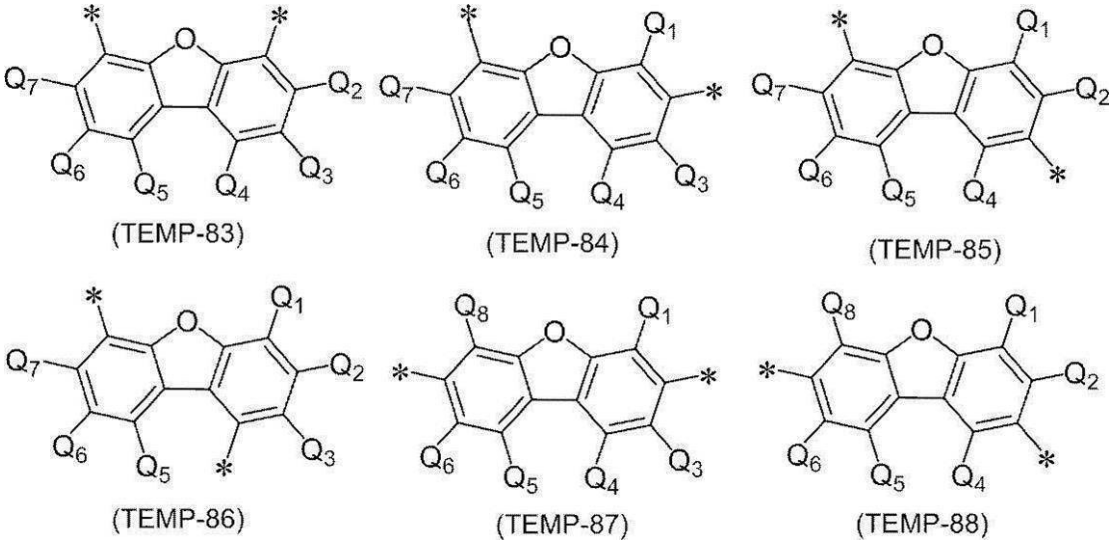


【０１１７】

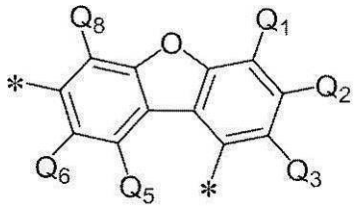
前記一般式（ＴＥＭＰ－６９）～（ＴＥＭＰ－８２）中、Q_1～Q_9は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

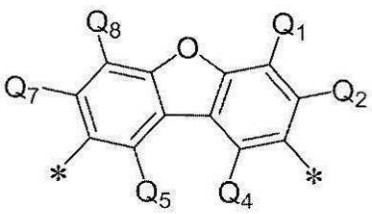
【０１１８】

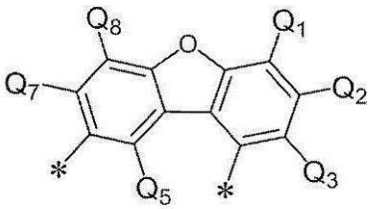
【化２７】

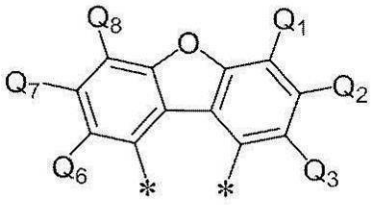


【０１１９】
【化２８】

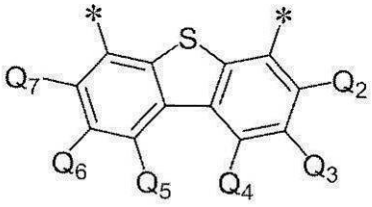

(TEMP-89)

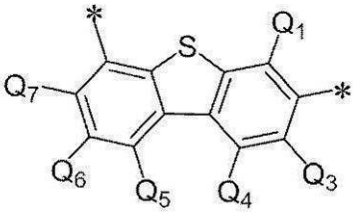

(TEMP-90)

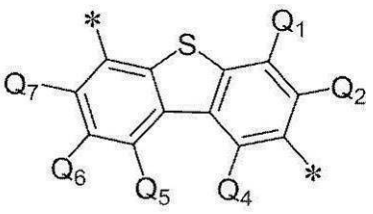

(TEMP-91)

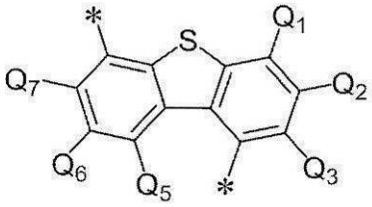

(TEMP-92)

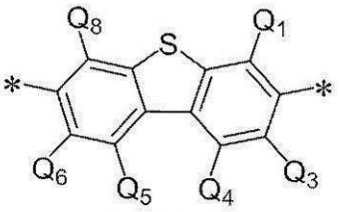
【０１２０】
【化２９】

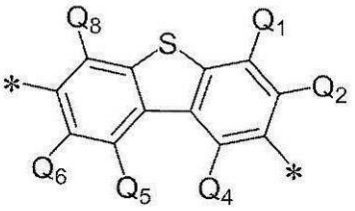

(TEMP-93)


(TEMP-94)


(TEMP-95)

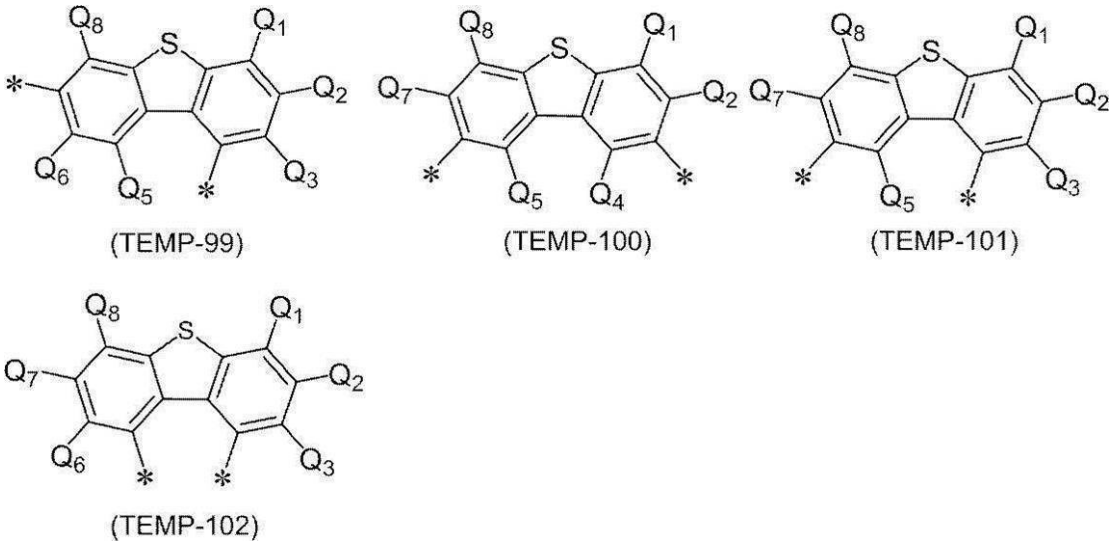

(TEMP-96)


(TEMP-97)


(TEMP-98)

【０１２１】

【化３０】



【０１２２】

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

【０１２３】

以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

【０１２４】

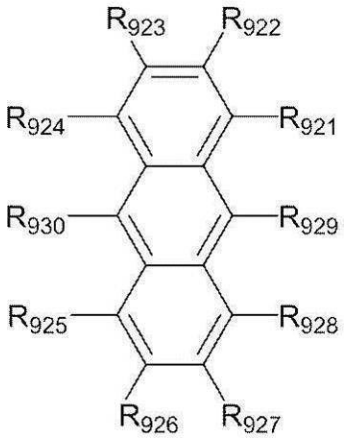
・「結合して環を形成する場合」

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

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

【０１２５】

【化３１】



(TEMP-103)

【０１２６】

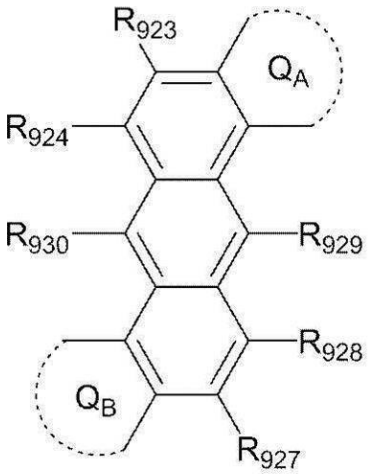
例えば、Ｒ９２１～Ｒ９３０のうちの「隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、互いに結合して、環を形成する」場合において、１組となる隣接する２つからなる組とは、Ｒ９２１とＲ９２２との組、Ｒ９２２とＲ９２３との組、Ｒ９２３とＲ９２４との組、Ｒ９２４とＲ９３０との組、Ｒ９３０とＲ９２５との組、Ｒ９２５とＲ９２６との組、Ｒ９２６とＲ９２７との組、Ｒ９２７とＲ９２８との組、Ｒ９２８とＲ９２９との組、並びにＲ９２９とＲ９２１との組である。

【０１２７】

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、Ｒ９２１とＲ９２２とが互いに結合して環Q_Aを形成し、同時にＲ９２５とＲ９２６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。

【０１２８】

【化３２】



(TEMP-104)

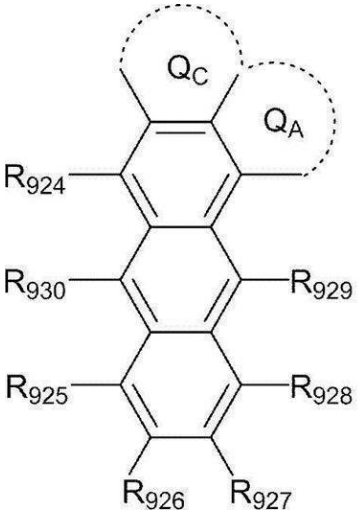
【０１２９】

「隣接する２つ以上からなる組」が環を形成する場合とは、前述の例のように隣接する「２つ」からなる組が結合する場合だけではなく、隣接する「３つ以上」からなる組が結合する場合も含む。例えば、Ｒ９２１とＲ９２２とが互いに結合して環Q_Aを形成し、かつ、Ｒ９２２とＲ９２３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（Ｒ９２１、Ｒ９２２及びＲ９２３）からなる組が互いに結合して環を形成して、アントラセン母骨格に縮合する場合を意味し、この場合、前記一般式（ＴＥＭＰ－１０３）で表されるア

ントラセン化合物は、下記一般式（ＴＥＭＰ－１０５）で表される。下記一般式（ＴＥＭＰ－１０５）において、環Q_A及び環Q_Cは、R_{922}を共有する。

【０１３０】

【化３３】



(TEMP-105)

【０１３１】

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（ＴＭＥＰ－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（ＴＭＥＰ－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。

【０１３２】

「不飽和の環」とは、芳香族炭化水素環、又は芳香族複素環を意味する。「飽和の環」とは、脂肪族炭化水素環、又は非芳香族複素環を意味する。

芳香族炭化水素環の具体例としては、具体例群Ｇ１において具体例として挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

芳香族複素環の具体例としては、具体例群Ｇ２において具体例として挙げられた芳香族複素環基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

脂肪族炭化水素環の具体例としては、具体例群Ｇ６において具体例として挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

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

【０１３３】

ここで、「任意の元素」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、炭素元素、窒素元素、酸素元素、及び硫黄元素からなる群から選択される少なくとも１種の元素である。任意の元素において（例えば、炭素元素、又は窒素元素の場合）、環を形成しない結

合は、水素原子等で終端されてもよいし、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。
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。
【０１３４】
上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基は、例えば後述する「任意の置換基」である。上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基である。
上記の「飽和の環」、又は「不飽和の環」が置換基を有する場合の置換基は、例えば後述する「任意の置換基」である。上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基である。
以上が、「隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合（「結合して環を形成する場合」）についての説明である。
【０１３５】
・「置換もしくは無置換の」という場合の置換基
本明細書における一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基（本明細書において、「任意の置換基」と呼ぶことがある。）は、例えば、
無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）、
－Ｏ－（Ｒ９０４）、
－Ｓ－（Ｒ９０５）、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）、
ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、
無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、及び
無置換の環形成原子数５～５０の複素環基からなる群から選択される基等であり、
ここで、Ｒ９０１～Ｒ９０７は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。

Ｒ９０１が２個以上存在する場合、２個以上のＲ９０１は、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０２が２個以上存在する場合、２個以上のＲ９０２は、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０３が２個以上存在する場合、２個以上のＲ９０３は、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０４が２個以上存在する場合、２個以上のＲ９０４は、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０５が２個以上存在する場合、２個以上のＲ９０５は、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０６が２個以上存在する場合、２個以上のＲ９０６は、互いに同一であるか、又は異なり、
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。

【０１３６】

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。

【０１３７】

一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、
炭素数１～１８のアルキル基、
環形成炭素数６～１８のアリール基、及び
環形成原子数５～１８の複素環基からなる群から選択される基である。

【０１３８】

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。

【０１３９】

本明細書において別途記載のない限り、隣接する任意の置換基同士で、「飽和の環」、又は「不飽和の環」を形成してもよく、好ましくは、置換もしくは無置換の飽和の５員環、置換もしくは無置換の飽和の６員環、置換もしくは無置換の不飽和の５員環、又は置換もしくは無置換の不飽和の６員環を形成し、より好ましくは、ベンゼン環を形成する。
本明細書において別途記載のない限り、任意の置換基は、さらに置換基を有してもよい。任意の置換基がさらに有する置換基としては、上記任意の置換基と同様である。

【０１４０】

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。

【０１４１】

本明細書において、「Ａ≧Ｂ」で表される数式は、Ａの値とＢの値とが等しいか、又はＡの値がＢの値よりも大きいことを意味する。
本明細書において、「Ａ≦Ｂ」で表される数式は、Ａの値とＢの値とが等しいか、又はＡの値がＢの値よりも小さいことを意味する。

【０１４２】

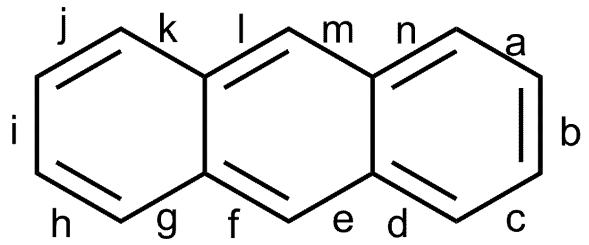
〔第一実施形態〕

（化合物）

本実施形態に係る化合物は、下記一般式（１）で表される環構造を少なくとも１つ有する第一の化合物であり、但し、前記第一の化合物は、分子中に、下記式（Ｘ１）、（Ｘ２）、（Ｘ３）及び（Ｘ４）で表される環構造を有さない。

【０１４３】

【化３４】



(1)

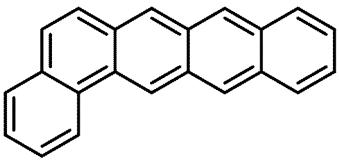
【０１４４】

（前記一般式（１）において、ａ、ｂ、ｃ、ｄ、ｅ、ｆ、ｇ、ｈ、ｉ、ｊ、ｋ、ｌ、ｍ及びｎからなる群から選択される１以上の位置に、置換もしくは無置換のベンゼン環が２つ縮合するか、又は置換もしくは無置換のナフタレン環が１つ縮合し、

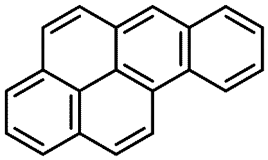
前記置換もしくは無置換のベンゼン環又は前記置換もしくは無置換のナフタレン環が縮合した環構造は、置換基を少なくとも１つ有するか、無置換である。）

【０１４５】

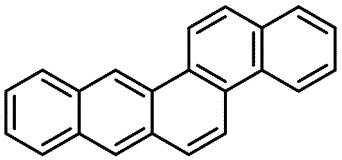
【化３５】



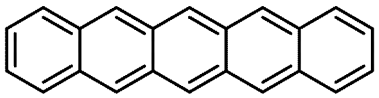
(X1)



(X2)



(X3)



(X4)

【０１４６】

積層されている複数の発光層のいずれかの発光層が、本実施形態に係る化合物（第一の化合物）をホスト材料として含有することで、有機ＥＬ素子の色度悪化を抑制すると共に長寿命化が可能になる。

【０１４７】

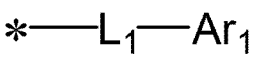
前記一般式（１）で表される環構造は、前記式（Ｘ１）、（Ｘ２）、（Ｘ３）及び（Ｘ４）で表される環構造ではない。

【０１４８】

前記一般式（１）で表される環構造は、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、及び下記一般式（１ａ）で表される基からなる群から選択される１以上の置換基を有することが好ましい。

【０１４９】

【化３６】



(1a)

【０１５０】

（前記一般式（１ａ）において、Ｌ１は、

単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ar_1は、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）

【０１５１】

前記一般式（１）で表される環構造は、下記式（Ａ１）、（Ａ２）、（Ａ３）、（Ａ４）、（Ａ５）又は（Ａ６）で表される環構造であることが好ましい。

式（Ａ１）及び（Ａ２）の環構造は、例えば、前記一般式(１)のｈの位置にナフタレン環が縮合した構造である。

式（Ａ３）の環構造は、例えば、前記一般式(１)のｃ及びｈの位置にそれぞれベンゼン環が１つずつ縮合した構造である。

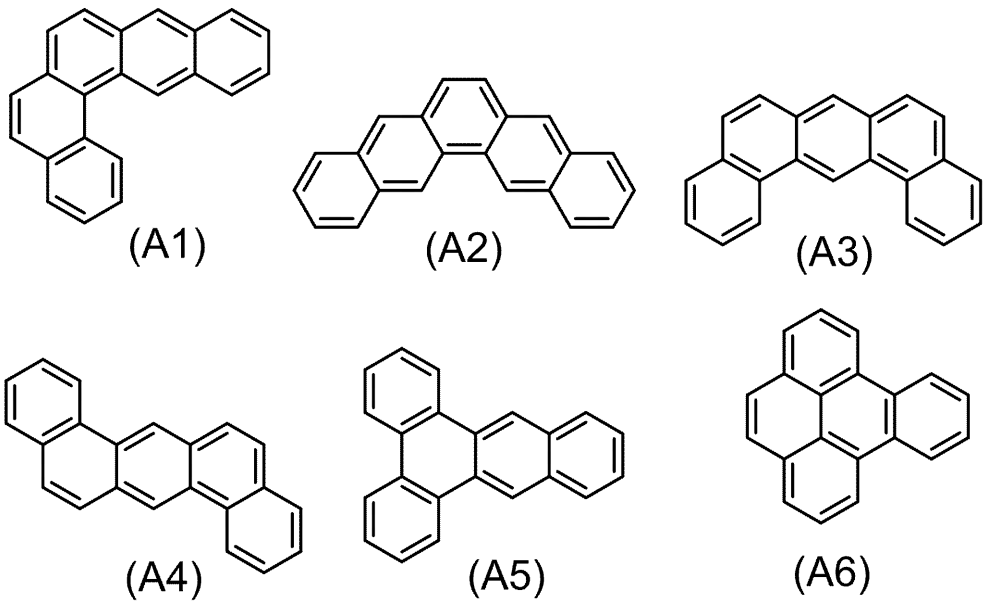
式（Ａ４）の環構造は、例えば、前記一般式(１)のｃ及びｊの位置にそれぞれベンゼン環が１つずつ縮合した構造である。

式（Ａ５）の環構造は、例えば、前記一般式(１)のｈ及びｊの位置にそれぞれベンゼン環が１つずつ縮合した構造である。

式（Ａ６）の環構造は、例えば、前記一般式(１)のｆ及びｇの位置にベンゼン環が１つ縮合し、ｋ及びｌの位置にベンゼン環が１つ縮合した構造である。

【０１５２】

【化３７】



【０１５３】

前記式（Ａ１）、（Ａ２）、（Ａ３）、（Ａ４）、（Ａ５）又は（Ａ６）で表される環構造は、置換基を少なくとも１つ有するか、無置換である。

【０１５４】

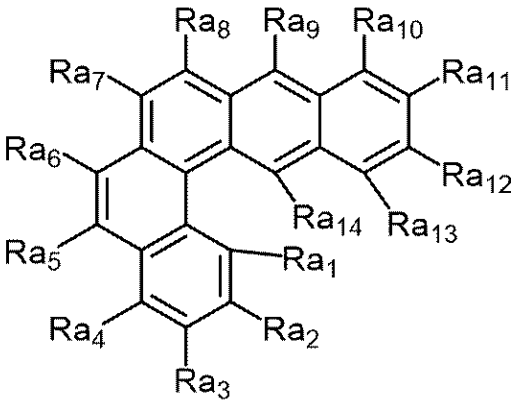
本実施形態において、第一の化合物は、前記式（Ａ１）、（Ａ２）、（Ａ３）、（Ａ４）、（Ａ５）及び（Ａ６）で表される環構造からなる群から選択される少なくとも１つを有することも好ましい。

【０１５５】

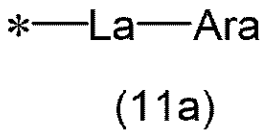
（一般式（１１）で表される化合物）

本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（１１）で表される化合物であることも好ましい。

【０１５６】
【化３８】

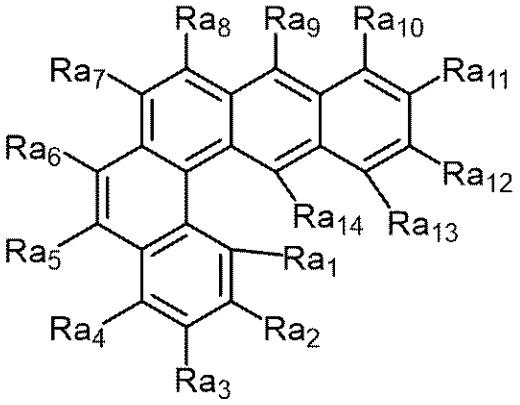


(11)

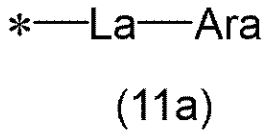


(11a)

【０１５７】
（前記一般式（１１）において、
Ｒａ$_{1}$～Ｒａ$_{14}$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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１１ａ）で表される基であり、
Ｒａ$_{1}$～Ｒａ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１１ａ）において、Ｌａは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒａは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）
【０１５８】
本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（Ｍ１１）で表される化合物であることも好ましい。
【０１５９】
【化３９】



(M11)



(11a)

【０１６０】

（前記一般式（Ｍ１１）において、
Ｒａ$_{1}$～Ｒａ$_{14}$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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１１ａ）で表される基であり、
Ｒａ$_{1}$～Ｒａ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
Ｒａ$_{1}$～Ｒａ$_{14}$のうち１つだけがフェニル基である場合はなく、
前記一般式（１１ａ）において、Ｌａは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒａは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）

【０１６１】

本実施形態に係る化合物において、Ｒａ$_{4}$及びＲａ$_{9}$の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１１ａ）で表される基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１１ａ）で表される基であることがより好ましい。Ｒａ$_{4}$及びＲａ$_{9}$の少なくとも１つが、このようなアリール基、複素環基又は前記一般式（１１ａ）で表される基であることにより、本実施形態に係る化合物を合成し易くなり、本実施形態に係る化合物の分子量も調整し易くなる。

【０１６２】

本実施形態に係る化合物において、Ｒａ$_{2}$及びＲａ$_{6}$の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１１ａ）で表される基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１１ａ）で表される基であることがより好ましい。

【０１６３】

本実施形態に係る化合物において、Ｒａ$_{7}$が、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１１ａ）で表される基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１１ａ）で表される基であることがより好ましい。

【０１６４】

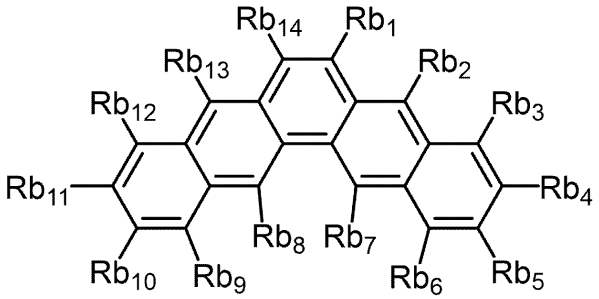
本実施形態に係る化合物において、Ｒａ$_{4}$が、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１１ａ）で表される基であり、Ｒａ$_{1}$～Ｒａ$_{3}$並びにＲａ$_{5}$～Ｒａ$_{14}$が水素原子であることが好ましい。

本実施形態に係る化合物において、Ｒａ$_{4}$が、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１１ａ）で表される基であり、Ｒａ$_{1}$～Ｒａ$_{3}$並びにＲａ$_{5}$～Ｒａ$_{14}$が水素原子であることがより好ましい。

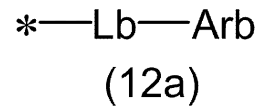
【０１６５】

前記一般式（１１）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１１）で表される化合物における環形成原子数５～２２の複素環基は、１つ以上の酸素原子を含む基であることが好ま

しい。
【０１６６】
（一般式（１２）で表される化合物）
本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（１２）で表される化合物であることも好ましい。
【０１６７】
【化４０】

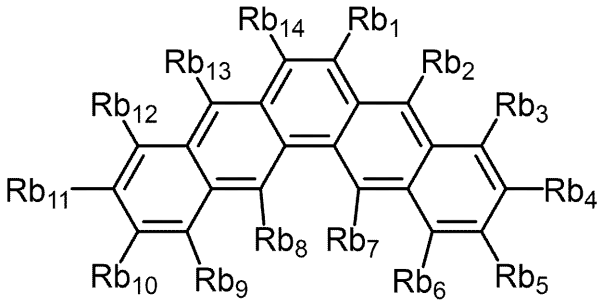


(12)

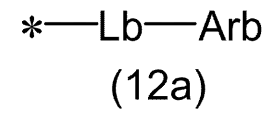


(12a)

【０１６８】
（前記一般式（１２）において、
Ｒｂ１～Ｒｂ１４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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１２ａ）で表される基であり、
Ｒｂ１～Ｒｂ１４の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１２ａ）において、Ｌｂは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｂは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）
【０１６９】
本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（Ｍ１２）で表される化合物であることも好ましい。
【０１７０】
【化４１】



(M12)



(12a)

【０１７１】
（前記一般式（Ｍ１２）において、

Rb_1～Rb_{14}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６～３３のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１２ａ）で表される基であり、
Rb_1～Rb_{14}の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
Rb_1～Rb_{14}は、ピリジル基ではなく、
前記一般式（１２ａ）において、Ｌｂは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｂは、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示し、
Rb_1～Rb_{14}、Ｌｂ及びＡｒｂにおいて「置換もしくは無置換」という場合における置換基は、アルキル基ではない。）

【０１７２】

本実施形態に係る化合物において、Rb_1、Rb_2、Rb_4、Rb_{11}、Rb_{13}及びRb_{14}の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１２ａ）で表される基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１２ａ）で表される基であることがより好ましい。

Rb_1、Rb_2、Rb_4、Rb_{11}、Rb_{13}及びRb_{14}の少なくとも１つが、このようなアリール基、複素環基又は前記一般式（１２ａ）で表される基であることにより、本実施形態に係る化合物を合成し易くなり、本実施形態に係る化合物の分子量も調整し易くなる。

【０１７３】

本実施形態に係る化合物において、Rb_7及びRb_8の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１２ａ）で表される基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１２ａ）で表される基であることがより好ましい。

Rb_7及びRb_8の少なくとも１つが、このようなアリール基、複素環基又は前記一般式（１２ａ）で表される基である場合、本実施形態に係る化合物を含有する有機ＥＬ素子は、色度悪化が抑制され易く、良好な色度で発光し易くなる。

【０１７４】

本実施形態に係る化合物において、Rb_3、Rb_5、Rb_6、Rb_9、Rb_{10}及びRb_{12}の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１２ａ）で表される基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１２ａ）で表される基であることがより好ましい。

【０１７５】

本実施形態に係る化合物において、Rb_1が、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１２ａ）で表される基であり、Rb_2～Rb_{14}が水素原子であることが好ましい。

本実施形態に係る化合物において、Rb_1が、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１２ａ）で表される基であり、Rb_2～Rb_{14}が水素原子であることがより好ましい。

【０１７６】

前記一般式（１２）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１２）で表される化合物における環形成原子数５～２２の複素環基は、１つ以上の酸素原子を含む基であることが好ましい。

【０１７７】

前記一般式（１２）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１２）で表される化合物は、分子中にピリジン環を含まないことが好ましい。

【０１７８】

Rb_4及びRb_{10}が置換基を有するフェニル基である場合は、当該置換基は、メタ位又はパラ位に結合する。

Rb_5及びRb_{11}が置換基を有するフェニル基である場合は、当該置換基は、メタ位又はパラ位に結合する。

【０１７９】

Rb_5及びRb_{11}が水素原子以外の基である場合、Rb_5及びRb_{11}は、互いに異なる基であることも好ましい。

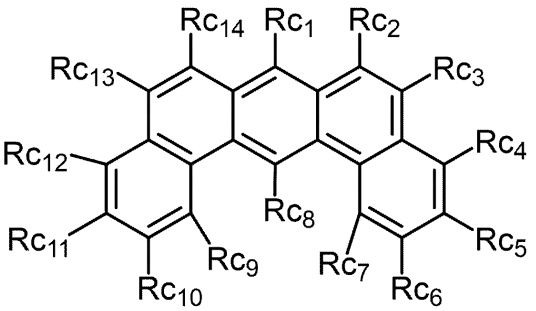
【０１８０】

（一般式（１３）で表される化合物）

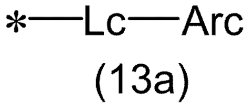
本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（１３）で表される化合物であることも好ましい。

【０１８１】

【化４２】



(13)



(13a)

【０１８２】

（前記一般式（１３）において、

Rc_1～Rc_{14}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６～３３のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は

前記一般式（１３ａ）で表される基であり、

Rc_1～Rc_{14}の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、

前記一般式（１３ａ）において、Ｌｃは、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、

Ａｒｃは、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、

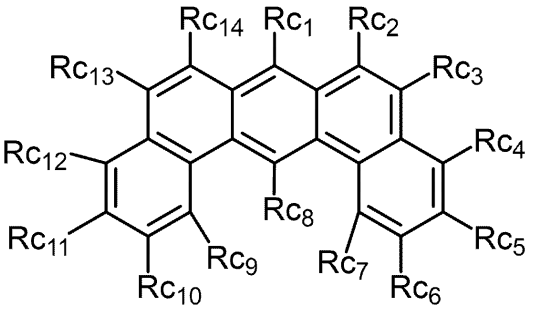
＊は、結合位置を示す。）

【０１８３】

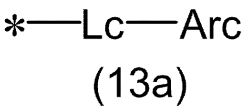
本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（Ｍ１３）で表される化合物であることも好ましい。

【０１８４】

【化４３】



(M13)



(13a)

【０１８５】

（前記一般式（Ｍ１３）において、

Ｒｃ$_1$～Ｒｃ$_{14}$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６～３３のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は

前記一般式（１３ａ）で表される基であり、

Ｒｃ$_1$及びＲｃ$_8$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、

前記一般式（１３ａ）において、Ｌｃは、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、

Ａｒｃは、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、

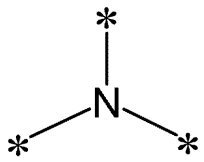
＊は、結合位置を示し、

前記一般式（Ｍ１３）で表される化合物の分子量が１０００未満であり、

前記一般式（Ｍ１３）で表される化合物は、分子中にアントラセニル基、アルキル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、ボリル基及び下記一般式（１３ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【０１８６】

【化４４】



(13b)

【０１８７】

（前記一般式（１３ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）

【０１８８】

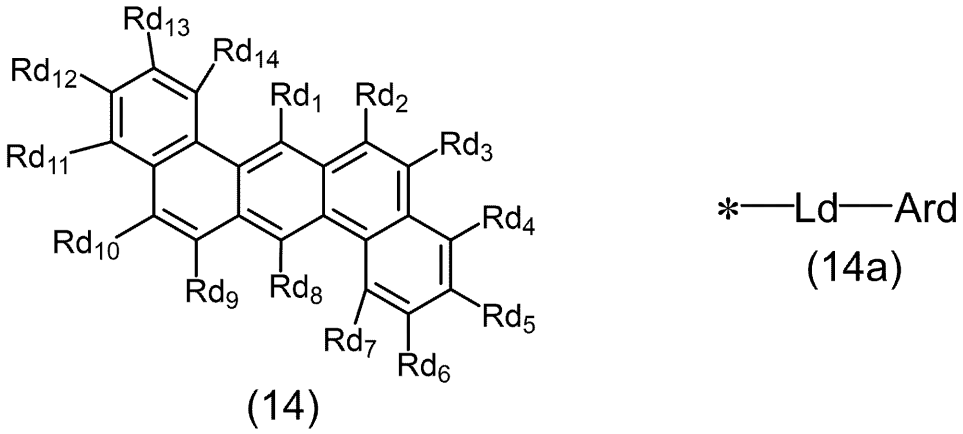
前記一般式（１３ｂ）で表される部分構造を有する基は、例えば、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基又は置換もしくは無置換のインドリル

基である。
【０１８９】
前記一般式（１３）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１３）で表される化合物は、分子中に、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基及び置換もしくは無置換のインドリル基を有さないことが好ましい。
【０１９０】
本実施形態に係る化合物において、Rc_1及びRc_8の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１３ａ）で表される基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１３ａ）で表される基であることがより好ましい。
Rc_1及びRc_8の少なくとも１つが、このようなアリール基、複素環基又は前記一般式（１３ａ）で表される基であることにより、本実施形態に係る化合物を合成し易くなり、本実施形態に係る化合物の分子量も調整し易くなる。Rc_1及びRc_8の少なくとも１つが、このようなアリール基、複素環基又は前記一般式（１３ａ）で表される基である場合、本実施形態に係る化合物を含有する有機ＥＬ素子は、色度悪化が抑制され易く、良好な色度で発光し易くなる。
【０１９１】
本実施形態に係る化合物において、Rc_4、Rc_5、Rc_6、Rc_7、Rc_9、Rc_{10}、Rc_{11}及びRc_{12}の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１３ａ）で表される基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１３ａ）で表される基であることがより好ましい。Rc_4、Rc_5、Rc_6、Rc_7、Rc_9、Rc_{10}、Rc_{11}及びRc_{12}の少なくとも１つが、このようなアリール基、複素環基又は前記一般式（１３ａ）で表される基であることにより、本実施形態に係る化合物を合成し易くなり、本実施形態に係る化合物の分子量も調整し易くなる。
【０１９２】
本実施形態に係る化合物において、Rc_2、Rc_3、Rc_{13}及びRc_{14}の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１３ａ）で表される基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１３ａ）で表される基であることがより好ましい。
【０１９３】
本実施形態に係る化合物において、Rc_1及びRc_8が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３３のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１３ａ）で表される基であり、Rc_2～Rc_7並びにRc_9～Rc_{14}が水素原子であることが好ましい。
本実施形態に係る化合物において、Rc_1及びRc_8が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１３ａ）で表される基であり、Rc_2～Rc_7並びにRc_9～Rc_{14}が水素原子であることがより好ましい。
【０１９４】
前記一般式（１３）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１３）で表される化合物における環形成原子数５～２２の複素環基は、１つ以上の酸素原子を含む基であることが好ましい。
【０１９５】
（一般式（１４）で表される化合物）

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

【０１９６】

【化４５】



(14)

【０１９７】

（前記一般式（１４）において、

Ｒｄ１～Ｒｄ１４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６～２２のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は

前記一般式（１４ａ）で表される基であり、

Ｒｄ１～Ｒｄ１４の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、

前記一般式（１４ａ）において、Ｌｄは、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、

Ａｒｄ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、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、

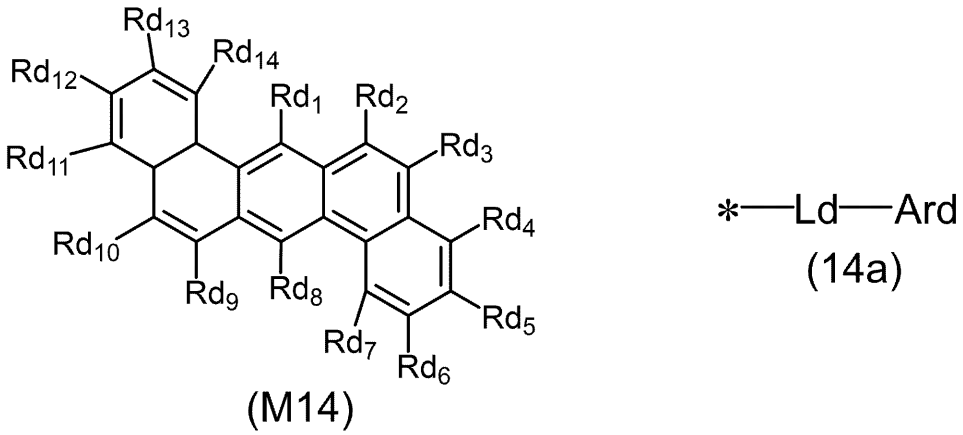
＊は、結合位置を示す。）

【０１９８】

本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（Ｍ１４）で表される化合物であることも好ましい。

【０１９９】

【化４６】



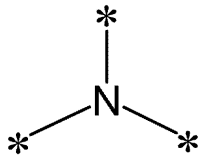
(M14)

【０２００】

（前記一般式（Ｍ１４）において、
Ｒｄ$_{1}$～Ｒｄ$_{14}$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６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１４ａ）で表される基であり、
Ｒｄ$_{4}$、Ｒｄ$_{7}$、Ｒｄ$_{11}$及びＲｄ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１４ａ）において、Ｌｄは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｄ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、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示し、
前記一般式（Ｍ１４）で表される化合物は、分子中にアルキル基、アルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボニル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、シアノ基及び下記一般式（１４ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【０２０１】

【化４７】



(14b)

【０２０２】
（前記一般式（１４ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）

【０２０３】
前記一般式（１４ｂ）で表される部分構造を有する基は、例えば、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基又は置換もしくは無置換のインドリル基である。

【０２０４】
前記一般式（１４）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１４）で表される化合物は、分子中に、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基及び置換もしくは無置換のインドリル基を有さないことが好ましい。

【０２０５】
本実施形態に係る化合物において、Ｒｄ$_{4}$、Ｒｄ$_{7}$、Ｒｄ$_{11}$及びＲｄ$_{14}$の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１４ａ）で表される基であることが好ましい。
Ｒｄ$_{4}$、Ｒｄ$_{7}$、Ｒｄ$_{11}$及びＲｄ$_{14}$の少なくとも１つが、このようなアリール基、複素環基又は前記一般式（１４ａ）で表される基であることにより、本実施形態に係る化合物を合成し易くなり、本実施形態に係る化合物の分子量も調整し易くなる。Ｒｄ$_{4}$、Ｒｄ$_{7}$、Ｒｄ$_{11}$及びＲｄ$_{14}$の少なくとも１つが、このようなアリール基、複素環基又は前記一般式（１４ａ）で表される基である場合、本実施形態に係る化合物を含有する有機ＥＬ素子は、色度悪化が抑制され易く、良好な色度で発光し易くなる。

【０２０６】
本実施形態に係る化合物において、Ｒｄ$_{1}$、Ｒｄ$_{4}$、Ｒｄ$_{6}$、Ｒｄ$_{7}$、Ｒｄ$_{8}$、Ｒｄ$_{11}$

、Ｒｄ１３及びＲｄ１４の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１４ａ）で表される基であることが好ましい。

【０２０７】

本実施形態に係る化合物において、Ｒｄ２、Ｒｄ３、Ｒｄ５、Ｒｄ９、Ｒｄ１０及びＲｄ１２の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１４ａ）で表される基であることが好ましい。

【０２０８】

本実施形態に係る化合物において、Ｒｄ４及びＲｄ７が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１４ａ）で表される基であり、Ｒｄ１～Ｒｄ３、Ｒｄ５、Ｒｄ６並びにＲｄ８～Ｒｄ１４が水素原子であることが好ましい。

【０２０９】

前記一般式（１４）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１４）で表される化合物における環形成原子数５～２２の複素環基は、１つ以上の酸素原子を含む基であることが好ましい。

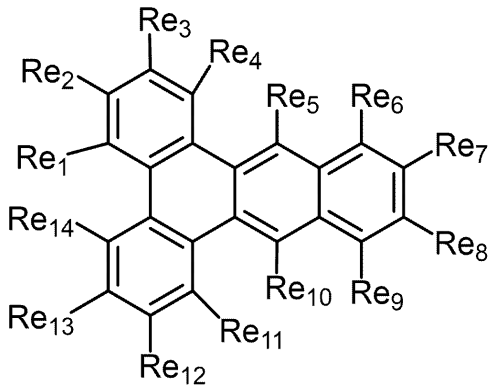
【０２１０】

（一般式（１５）で表される化合物）

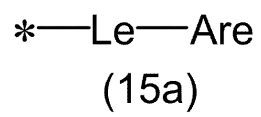
本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（１５）で表される化合物であることも好ましい。

【０２１１】

【化４８】



(15)



(15a)

【０２１２】

（前記一般式（１５）において、
Ｒｅ１～Ｒｅ１４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６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１５ａ）で表される基であり、
Ｒｅ１～Ｒｅ１４の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
前記一般式（１５ａ）において、Ｌｅは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｅは、

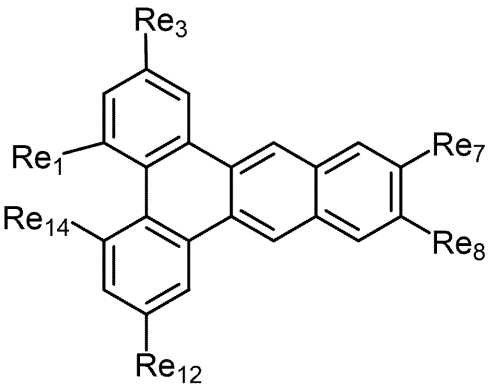
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示す。）

【０２１３】

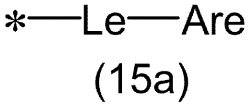
本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（Ｍ１５）で表される化合物であることも好ましい。

【０２１４】

【化４９】



(M15)



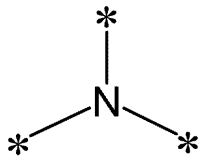
(15a)

【０２１５】

（前記一般式（Ｍ１５）において、
Ｒｅ$_1$、Ｒｅ$_3$、Ｒｅ$_7$、Ｒｅ$_8$、Ｒｅ$_{12}$及びＲｅ$_{14}$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６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１５ａ）で表される基であり、
Ｒｅ$_1$、Ｒｅ$_3$、Ｒｅ$_7$、Ｒｅ$_8$、Ｒｅ$_{12}$及びＲｅ$_{14}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
Ｒｅ$_1$、Ｒｅ$_3$、Ｒｅ$_7$、Ｒｅ$_8$、Ｒｅ$_{12}$及びＲｅ$_{14}$は、アジン環を含まず、
Ｒｅ$_1$、Ｒｅ$_3$、Ｒｅ$_7$、Ｒｅ$_8$、Ｒｅ$_{12}$及びＲｅ$_{14}$のうち１つだけがフェニル基である場合はなく、
前記一般式（１５ａ）において、Ｌｅは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｅ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、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示し、
前記一般式（Ｍ１５）で表される化合物は、分子中にアルキル基、アルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボニル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ボリル基、イミダゾリル基及び下記一般式（１５ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【０２１６】

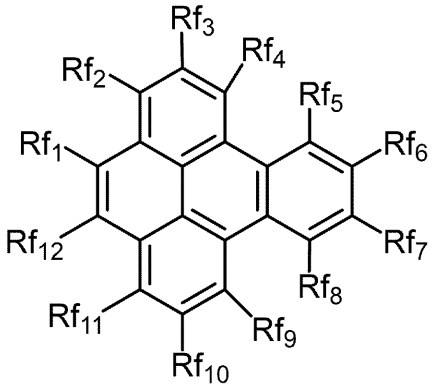
【化５０】



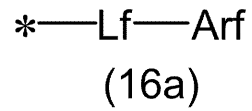
(15b)

【０２１７】
（前記一般式（１５ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）
【０２１８】
前記一般式（１５ｂ）で表される部分構造を有する基は、例えば、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基又は置換もしくは無置換のインドリル基である。
【０２１９】
前記一般式（１５）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１５）で表される化合物は、分子中に、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基及び置換もしくは無置換のインドリル基を有さないことが好ましい。
【０２２０】
本実施形態に係る化合物において、Re_3及びRe_{12}の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１５ａ）で表される基であることが好ましい。
【０２２１】
本実施形態に係る化合物において、Re_1及びRe_{14}の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１５ａ）で表される基であることが好ましい。
【０２２２】
本実施形態に係る化合物において、Re_3が、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１５ａ）で表される基であり、Re_1、Re_2並びにRe_4～Re_{14}が水素原子であることが好ましい。
【０２２３】
前記一般式（１５）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１５）で表される化合物における環形成原子数５～２２の複素環基は、１つ以上の酸素原子を含む基であることが好ましい。
【０２２４】
前記一般式（１５）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１５）で表される化合物における環形成原子数５～２２の複素環基は、アジン環を含まない基であることが好ましい。
【０２２５】
前記一般式（１５）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１５）で表される化合物は、分子中にアジン環を含まないことが好ましい。
【０２２６】
（一般式（１６）で表される化合物）
本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（１６）で表される化合物であることも好ましい。
【０２２７】

【化５１】



(16)



(16a)

【０２２８】

（前記一般式（１６）において、

Ｒｆ$_{1}$～Ｒｆ$_{12}$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６～２２のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は

前記一般式（１６ａ）で表される基であり、

Ｒｆ$_{1}$～Ｒｆ$_{12}$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、

前記一般式（１６ａ）において、Ｌｆは、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、

Ａｒｆ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、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、

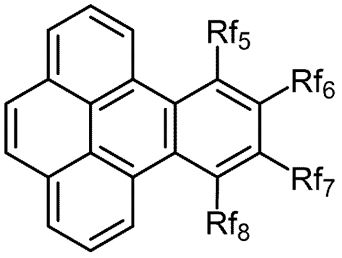
＊は、結合位置を示す。）

【０２２９】

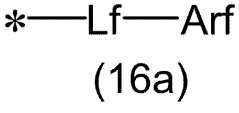
本実施形態において、第一の化合物は、下記一般式（Ｍ１６）で表される化合物であることも好ましい。

【０２３０】

【化５２】



(M16)



(16a)

【０２３１】

（前記一般式（Ｍ１６）において、

Ｒｆ$_{5}$、Ｒｆ$_{6}$、Ｒｆ$_{7}$及びＲｆ$_{8}$は、それぞれ独立に、

水素原子、

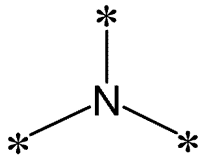
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は

前記一般式（１６ａ）で表される基であり、
Ｒｆ$_5$、Ｒｆ$_6$、Ｒｆ$_7$及びＲｆ$_8$の少なくとも１つは水素原子以外の基であり、
Ｒｆ$_5$、Ｒｆ$_6$、Ｒｆ$_7$及びＲｆ$_8$の全てが同時にフェニル基である場合はなく、
前記一般式（１６ａ）において、Ｌｆは、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２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５～２２の２価の複素環基であり、
Ａｒｆ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、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基であり、
＊は、結合位置を示し、
前記一般式（Ｍ１６）で表される化合物は、分子中にアルキル基、アルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボニル基、ホスホリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ボリル基、イミダゾリル基及び下記一般式（１６ｂ）で表される部分構造を有する基を含まない。）

【０２３２】

【化５３】



(16b)

【０２３３】
（前記一般式（１６ｂ）において、３つの＊は、それぞれ独立に、結合位置を示す。）

【０２３４】
前記一般式（１６ｂ）で表される部分構造を有する基は、例えば、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基又は置換もしくは無置換のインドリル基である。

【０２３５】
前記一般式（１６）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１６）で表される化合物は、分子中に、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基及び置換もしくは無置換のインドリル基を有さないことが好ましい。

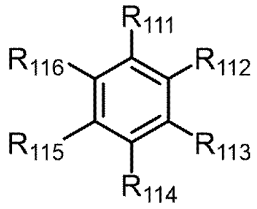
【０２３６】
本実施形態において、Ｒｆ$_5$、Ｒｆ$_6$、Ｒｆ$_7$及びＲｆ$_8$の少なくとも１つが、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は
前記一般式（１６ａ）で表される基であることが好ましい。

【０２３７】
本実施形態に係る化合物において、Ｒｆ$_5$及びＲｆ$_8$が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～２２のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基、又は前記一般式（１６ａ）で表される基であり、Ｒｆ$_1$～Ｒｆ$_4$、Ｒｆ$_6$、Ｒｆ$_7$並びにＲｆ$_9$～Ｒｆ$_{12}$が水素原子であることが好ましい。

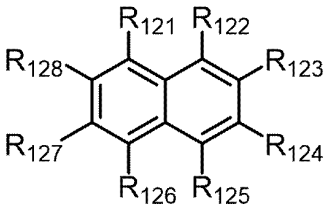
【０２３８】
前記一般式（１６）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１６）で表される化合物における環形成原子数５～２２の複素環基は、１つ以上の酸素原子を含む基であることが好ましい。

【０２３９】
前記一般式（１６）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１６）で表される化合物における環形成原子数５～２２の複素環基は、アジン環を含まない基であることが好ましい。

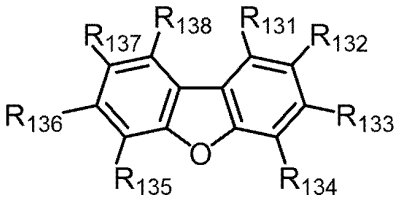
【０２４０】
前記一般式（１６）で表される化合物及び前記一般式（Ｍ１６）で表される化合物は、分子中にアジン環を含まないことが好ましい。
【０２４１】
本実施形態に係る第一の化合物は、下記一般式（Ａｒ１－１）、（Ａｒ１－２）、（Ａｒ１－３）、（Ａｒ１－４）、（Ａｒ１－５）、（Ａｒ１－６）、（Ａｒ１－７）、（Ａｒ１－８）及び（Ａｒ１－９）で表される基からなる群から選択される少なくとも１つの基を置換基として有することも好ましい。
【０２４２】
【化５４】



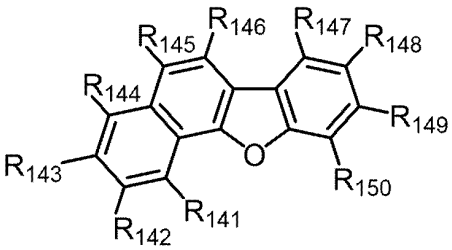
(Ar1-1)



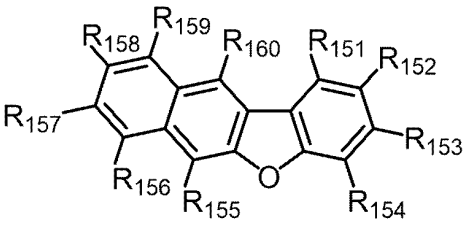
(Ar1-2)



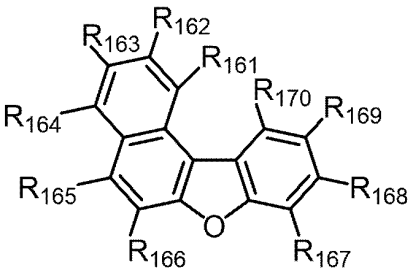
(Ar1-3)



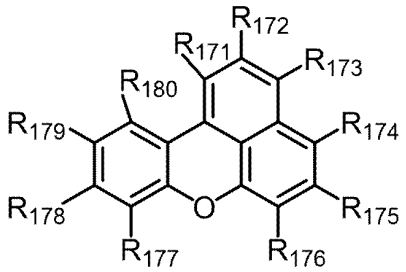
(Ar1-4)



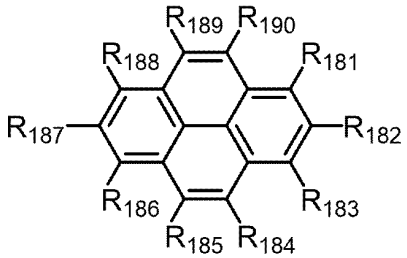
(Ar1-5)



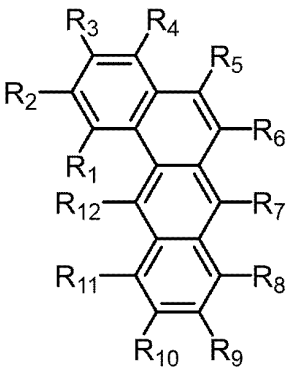
(Ar1-6)



(Ar1-7)



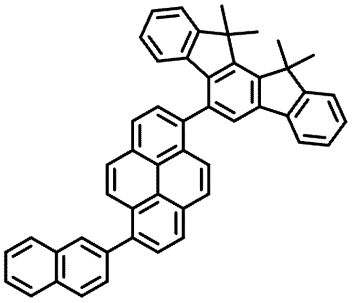
(Ar1-8)



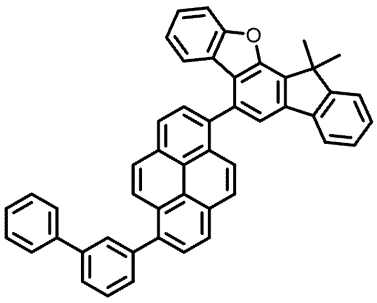
(Ar1-9)

【０２４３】
（前記一般式（Ａｒ１－１）において、R_{111}～R_{116}のうち１つが単結合であり、
前記一般式（Ａｒ１－２）において、R_{121}～R_{128}のうち１つが単結合であり、
前記一般式（Ａｒ１－３）において、R_{131}～R_{138}のうち１つが単結合であり、
前記一般式（Ａｒ１－４）において、R_{141}～R_{150}のうち１つが単結合であり、
前記一般式（Ａｒ１－５）において、R_{151}～R_{160}のうち１つが単結合であり、
前記一般式（Ａｒ１－６）において、R_{161}～R_{170}のうち１つが単結合であり、
前記一般式（Ａｒ１－７）において、R_{171}～R_{180}のうち１つが単結合であり、
前記一般式（Ａｒ１－８）において、R_{181}～R_{190}のうち１つが単結合であり、
前記一般式（Ａｒ１－９）において、R_{1}～R_{12}のうち１つが単結合であり、
単結合ではないR_{111}～R_{116}、R_{121}～R_{128}、R_{131}～R_{138}、R_{141}～R_{150}、R_{151}～R_{160}、R_{161}～R_{170}、R_{171}～R_{180}、R_{181}～R_{190}並びにR_{1}～R_{12}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１～６のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～１２のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～１３の複素環基である。）
【０２４４】
本実施形態に係る第一の化合物において、Ar_{1}、Ａｒａ、Ａｒｂ、Ａｒｃ、Ａｒｄ、Ａｒｅ及びＡｒｆは、それぞれ独立に、前記一般式（Ａｒ１－１）、（Ａｒ１－２）、（Ａｒ１－３）、（Ａｒ１－４）、（Ａｒ１－５）、（Ａｒ１－６）、（Ａｒ１－７）、（Ａｒ１－８）及び（Ａｒ１－９）で表される基からなる群から選択される基であることも好ましい。
【０２４５】
本実施形態に係る第一の化合物において、置換もしくは無置換の環形成原子数５～２２の複素環基は、前記一般式（Ａｒ１－３）～（Ａｒ１－７）で表される基からなる群から選択される基であることも好ましい。
【０２４６】
本実施形態に係る第一の化合物において、L_{1}、Ｌａ、Ｌｂ、Ｌｃ、Ｌｄ、Ｌｅ及びＬｆ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６～２２のアリーレン基であることが好ましく、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数６～１０のアリーレン基であることがより好ましく、単結合、又は置換もしくは無置換のフェニレン基であることがさらに好ましい。L_{1}、Ｌａ、Ｌｂ、Ｌｃ、Ｌｄ、Ｌｅ及びＬｆとしての置換もしくは無置換のフェニレン基は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のｐ－フェニレン基、置換もしくは無置換のｍ－フェニレン基、又はｏ－フェニレン基であり、置換もしくは無置換のｐ－フェニレン基又は置換もしくは無置換のｍ－フェニレン基であることが好ましい。
【０２４７】
化合物の三重項エネルギーは、当該化合物の分子を構成する骨格の内、最も三重項エネルギーが小さい骨格に依存する。本明細書では、最も三重項エネルギーが小さい骨格を母骨格とし、それ以外の骨格を副骨格と称する。骨格の三重項エネルギーの測定方法については、後述する実施例の項目において説明される。
例えば、下記化合物Ｒｅｆ－Ｘ１及びＲｅｆ－Ｘ２は、それぞれ、５つの単環が縮合した５環構造を有する。この５環構造は、３つの６員環（ベンゼン環）及び２つの５員環を含んでいる。
【０２４８】

【化５５】



Ref-X1



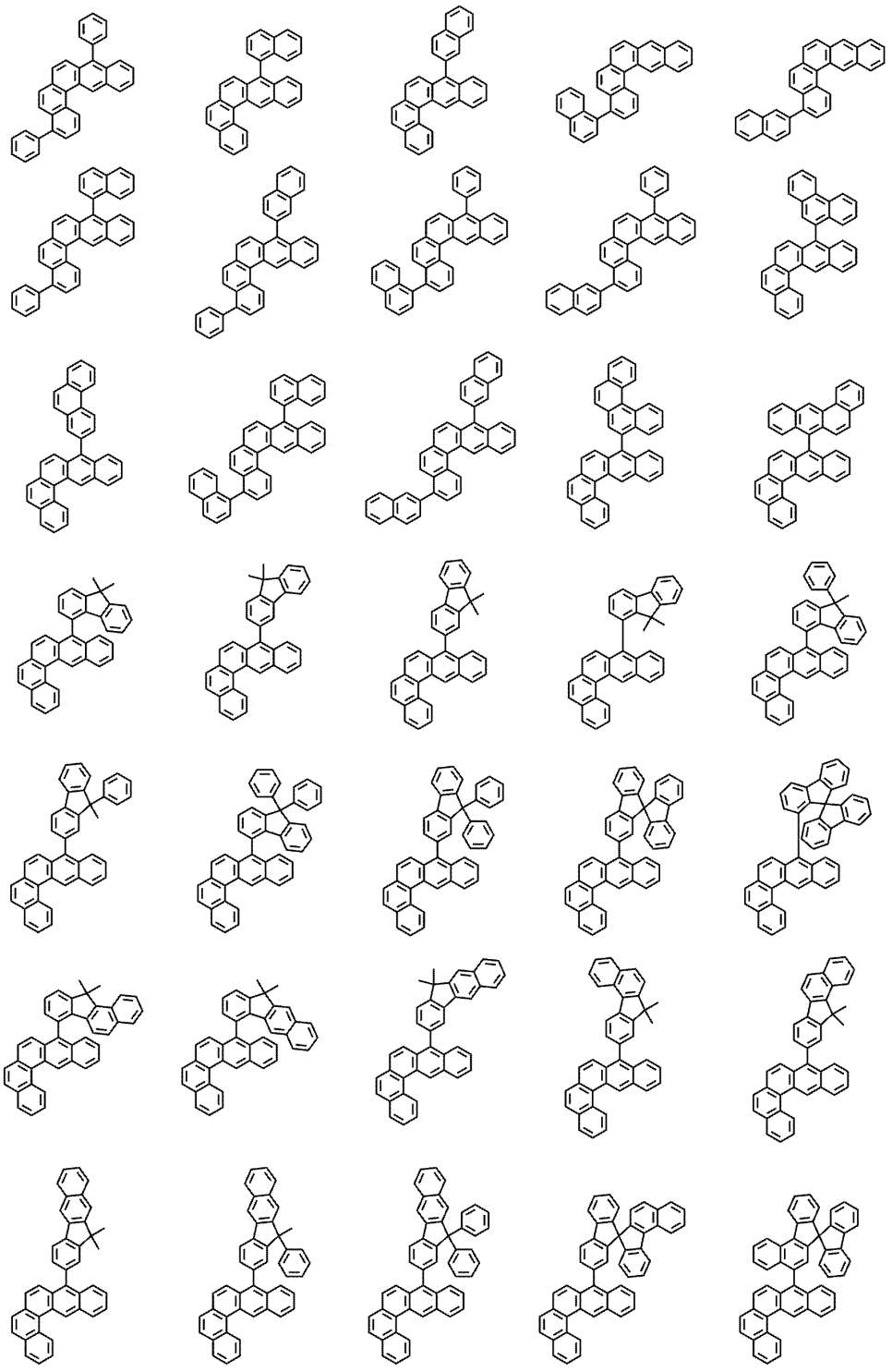
Ref-X2

【０２４９】
化合物Ｒｅｆ－Ｘ１及びＲｅｆ－Ｘ２において、５環構造は、三重項エネルギーが大きく、副骨格に相当し、４環構造であるピレン環が、分子中で最も三重項エネルギーが小さく、母骨格に相当する。そのため、化合物Ｒｅｆ－Ｘ１及びＲｅｆ－Ｘ２の分子全体としての三重項エネルギーは、母骨格であるピレン環の三重項エネルギーによって定まる。
【０２５０】
一方、本実施形態に係る第一の化合物は、５つの６員環（ベンゼン環）が縮合した５環構造（前記一般式（１）で表される環構造）を有しており、前記一般式（１）で表される環構造は、化合物Ｒｅｆ－Ｘ１及びＲｅｆ－Ｘ２が有するような５員環を含んだ５環構造とは、異なる。
【０２５１】
本実施形態に係る第一の化合物において、前記一般式（１）で表される環構造が分子中で最も三重項エネルギーが小さい骨格であることも好ましい。
【０２５２】
本実施形態に係る第一の化合物において、前記一般式（１）で表される環構造は、５員環を含まない。
【０２５３】
本実施形態に係る第一の化合物は、分子中に置換もしくは無置換のアントラセン環を含まないことも好ましい。
【０２５４】
本実施形態に係る第一の化合物は、分子中に前記一般式（１）で表される環構造を１つ又は２つ有することも好ましい。
【０２５５】
本実施形態に係る第一の化合物は、分子中に前記一般式（１）で表される環構造を１つ有することも好ましい。
【０２５６】
本実施形態に係る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」の基であることも好ましい。
【０２５７】
（第一の化合物の製造方法）
本実施形態に係る第一の化合物は、後述する実施例に記載の合成方法に従って、又は当該合成方法に倣い、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で、製造できる。
【０２５８】
（本実施形態に係る第一の化合物の具体例）
本実施形態に係る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、これら具体例に限定されない。本明細書において、重水素原子は、化学式中でＤと表記し、軽水素原子は、Ｈと表記するか又は記載を省略する。本明細書において、メチル基をＭｅと表記する場合があり、フェニル基をＰｈと表記する場合があり

、ｔｅｒｔ－ブチル基をｔＢｕと表記する場合があり、ｔｅｒｔ－アミル基をｔＡｍと表記する場合がある。

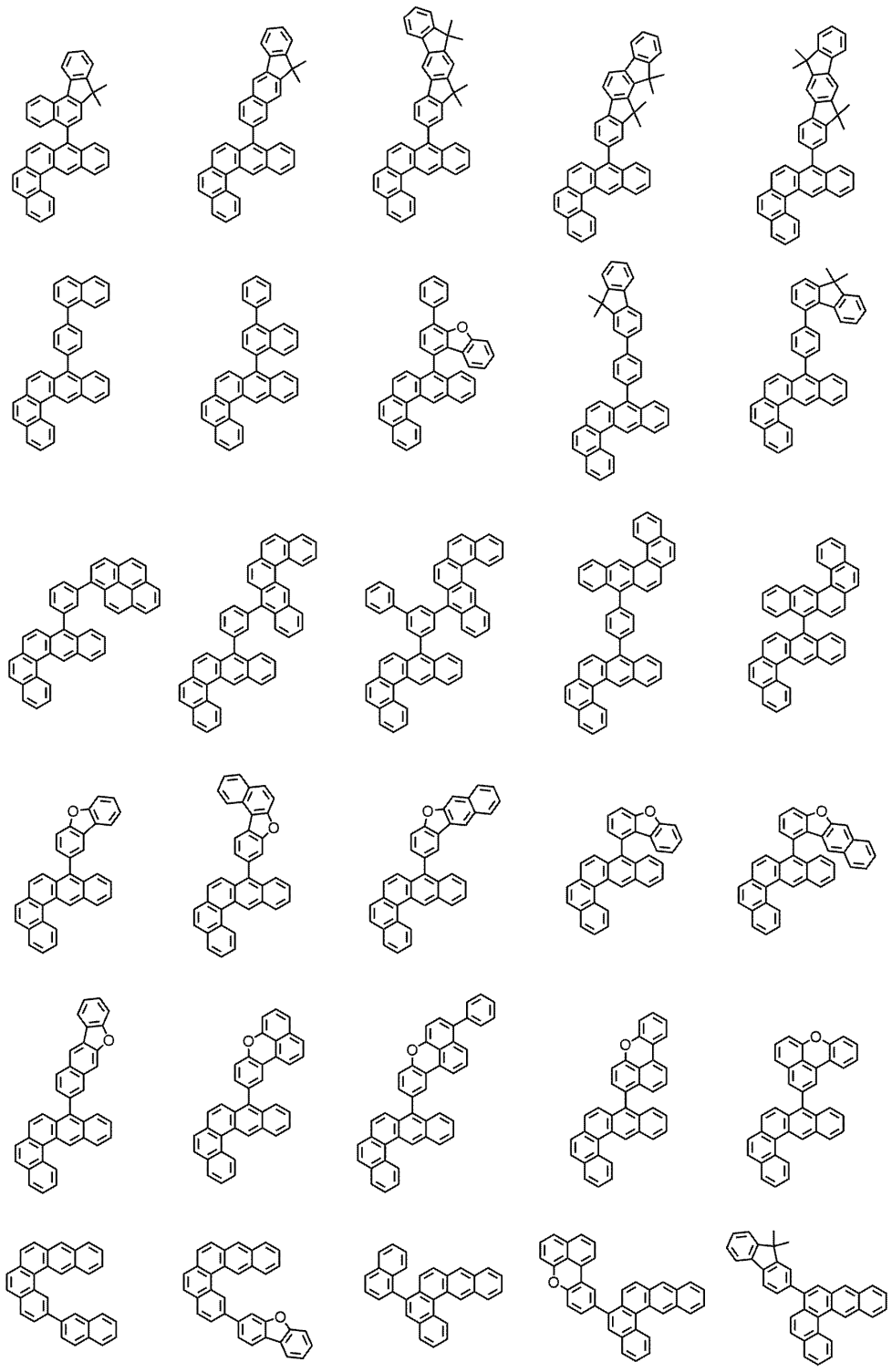
【０２５９】

【化５６】



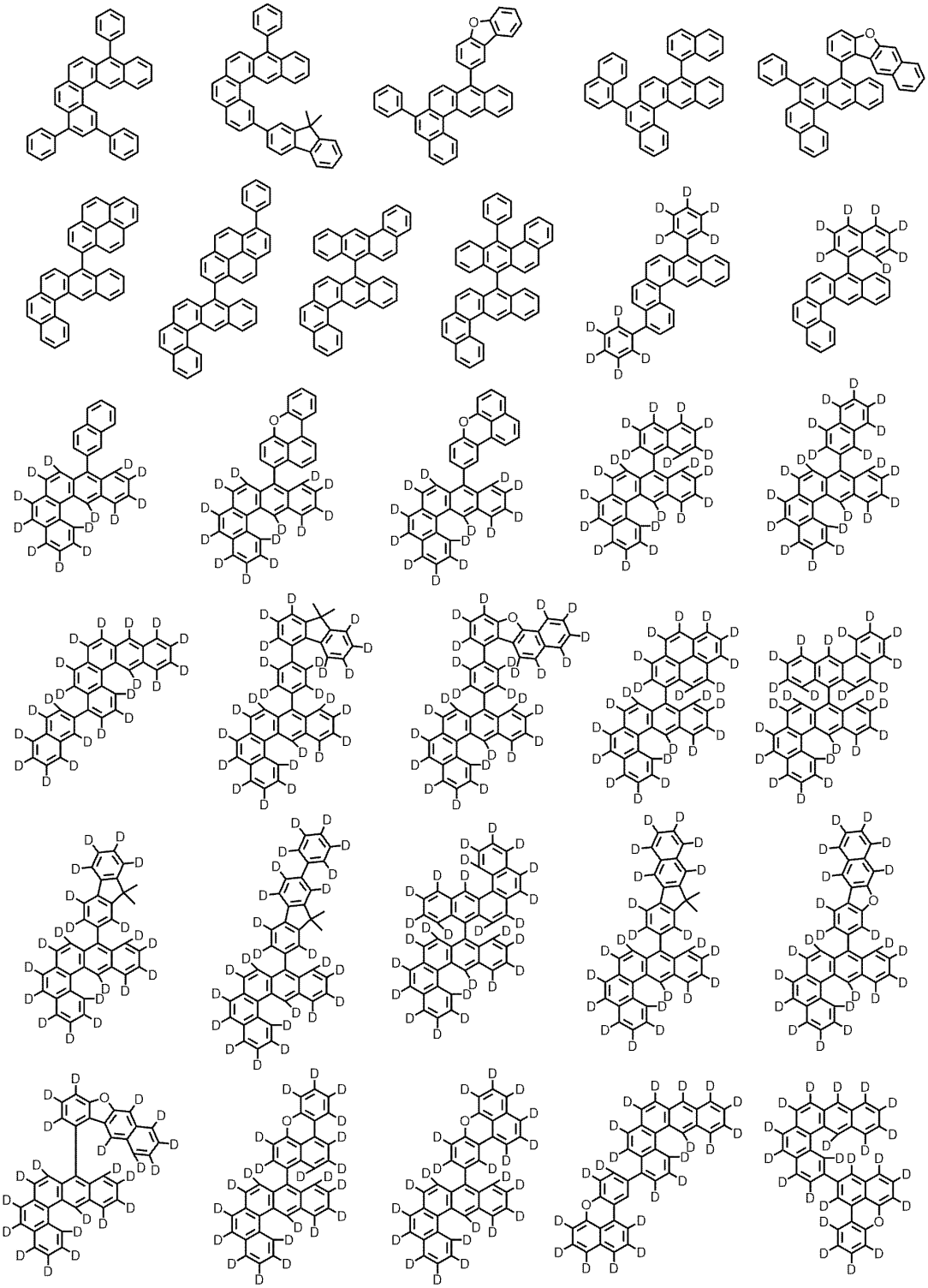
【０２６０】

【化５７】



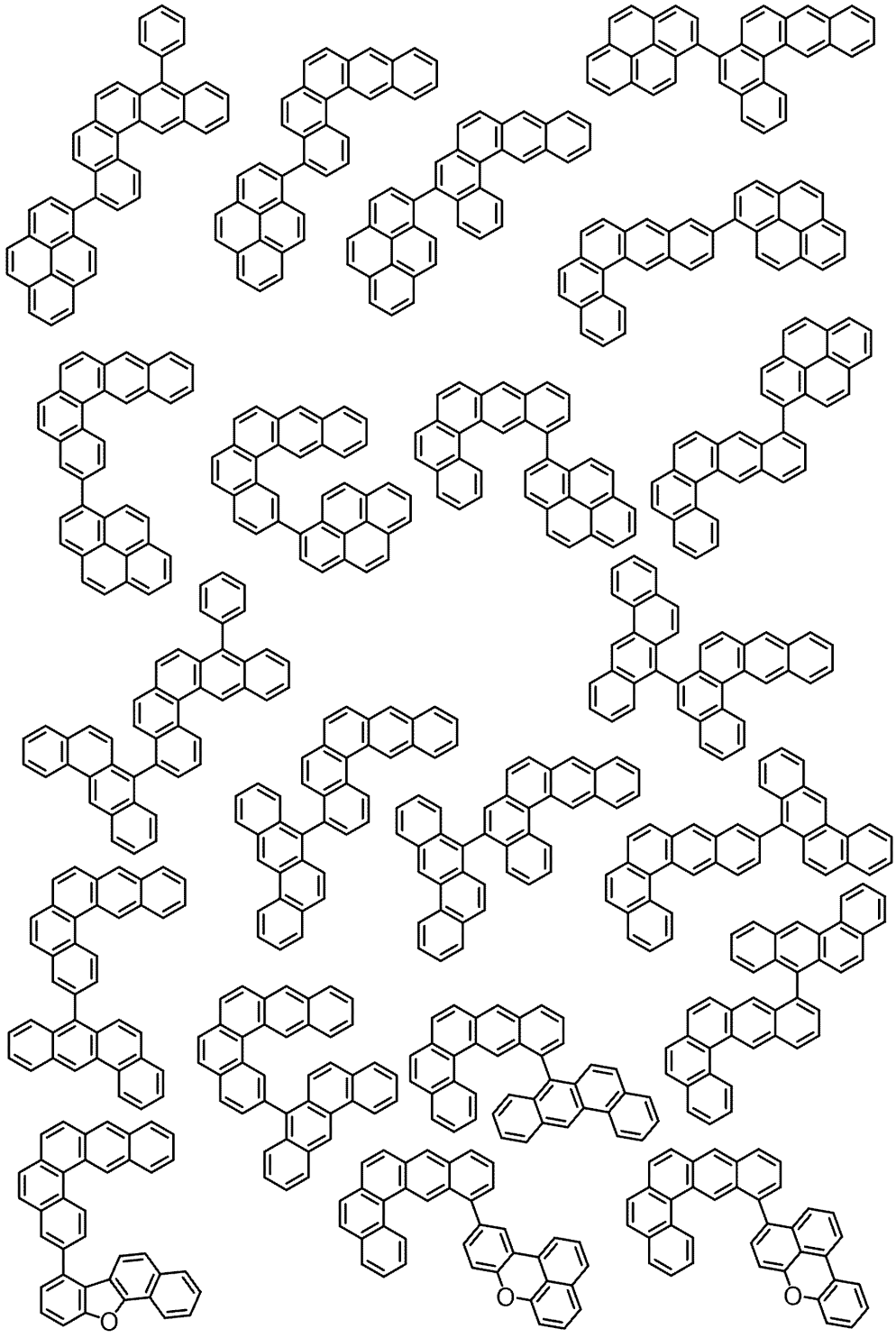
【０２６１】

【化５８】



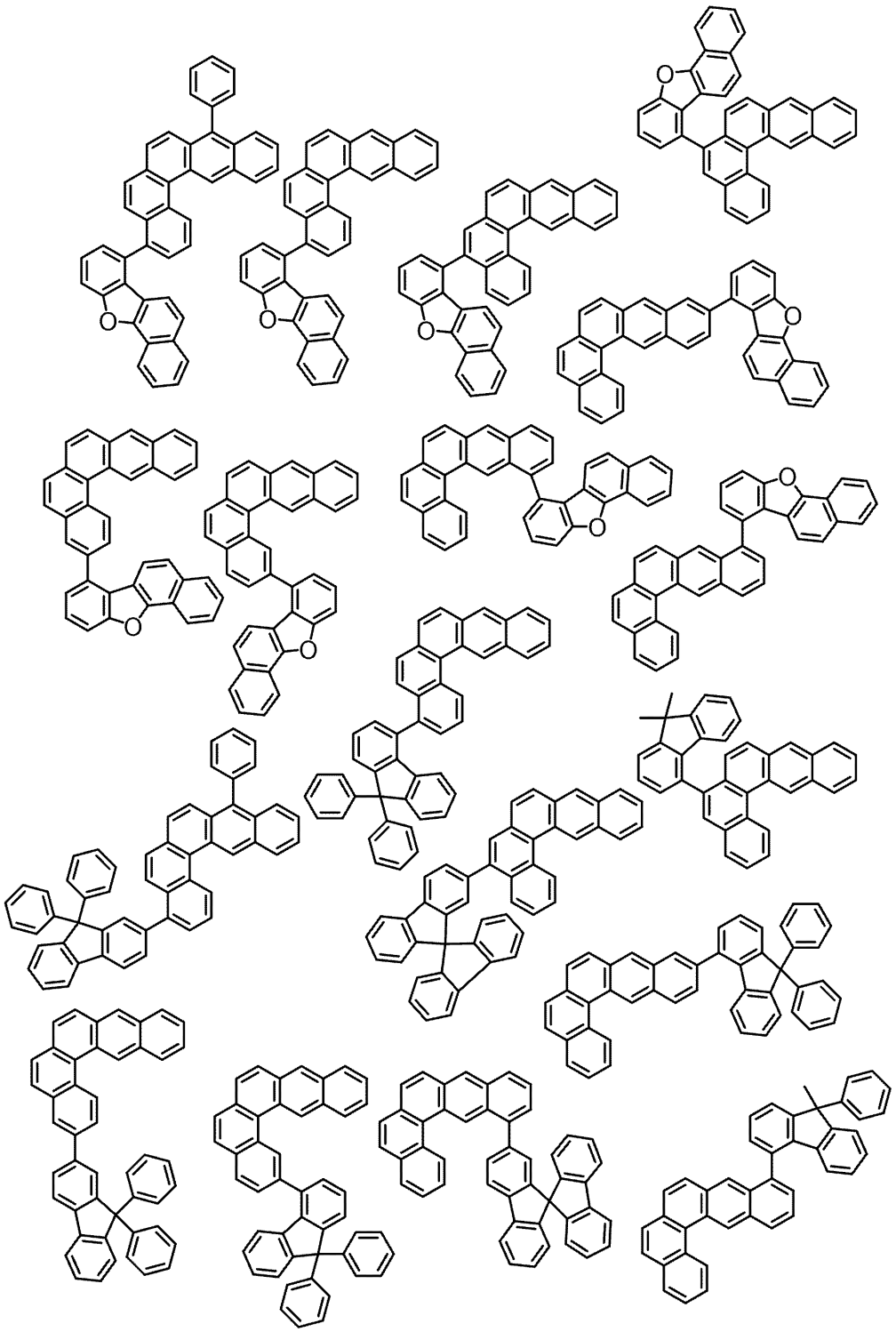
【０２６２】

【化５９】



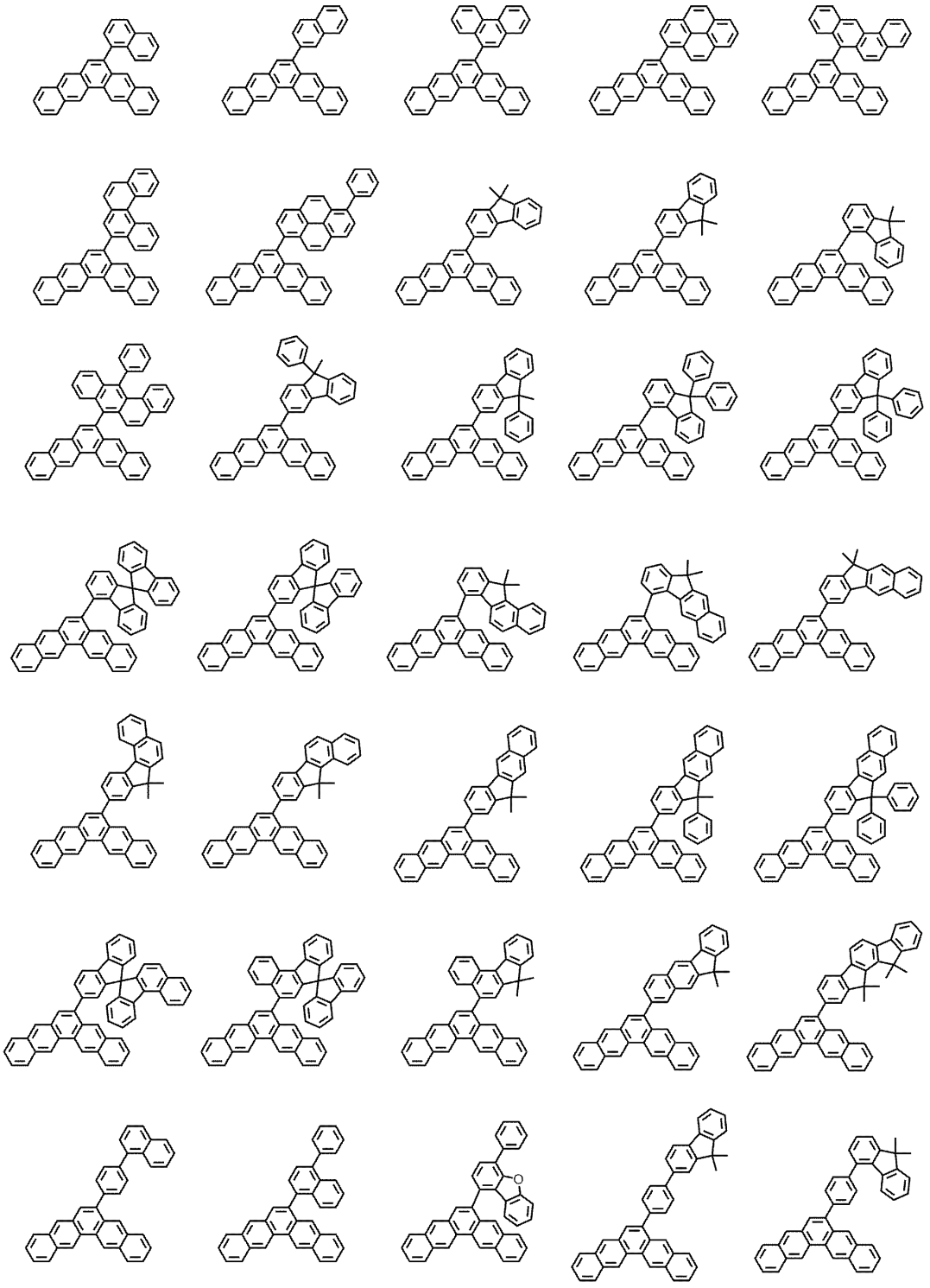
【０２６３】

【化６０】



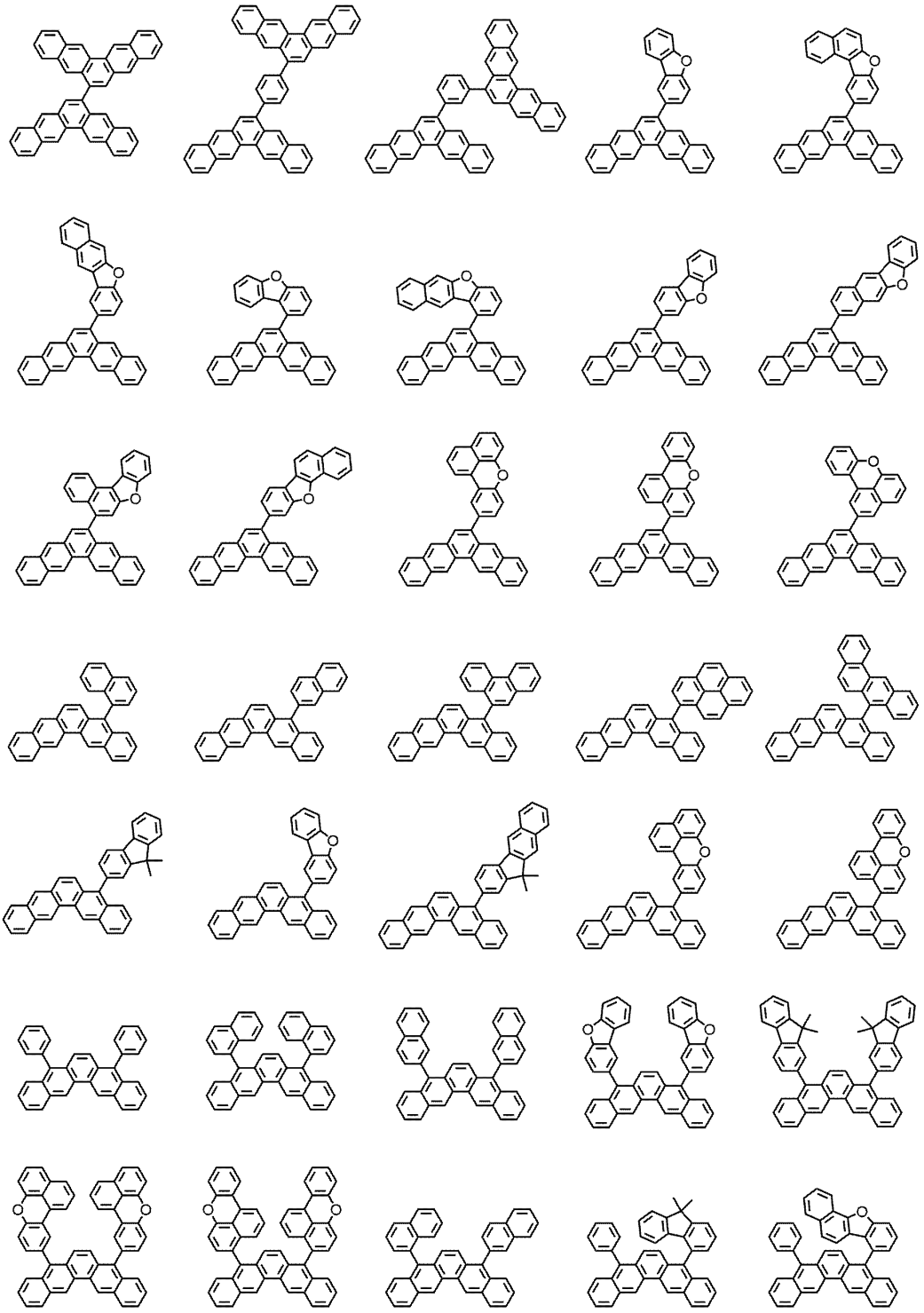
【０２６４】

【化６１】



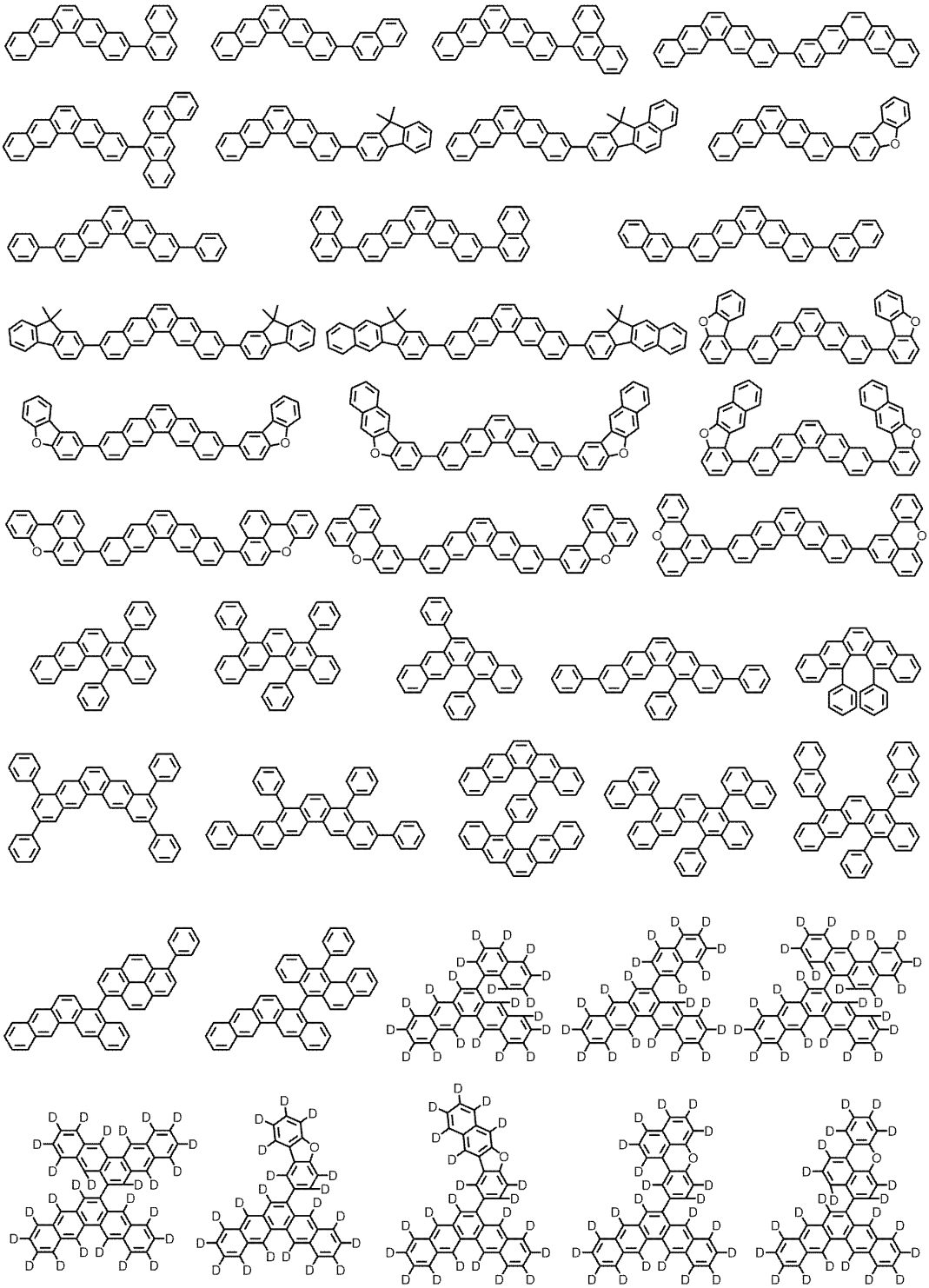
【０２６５】

【化６２】



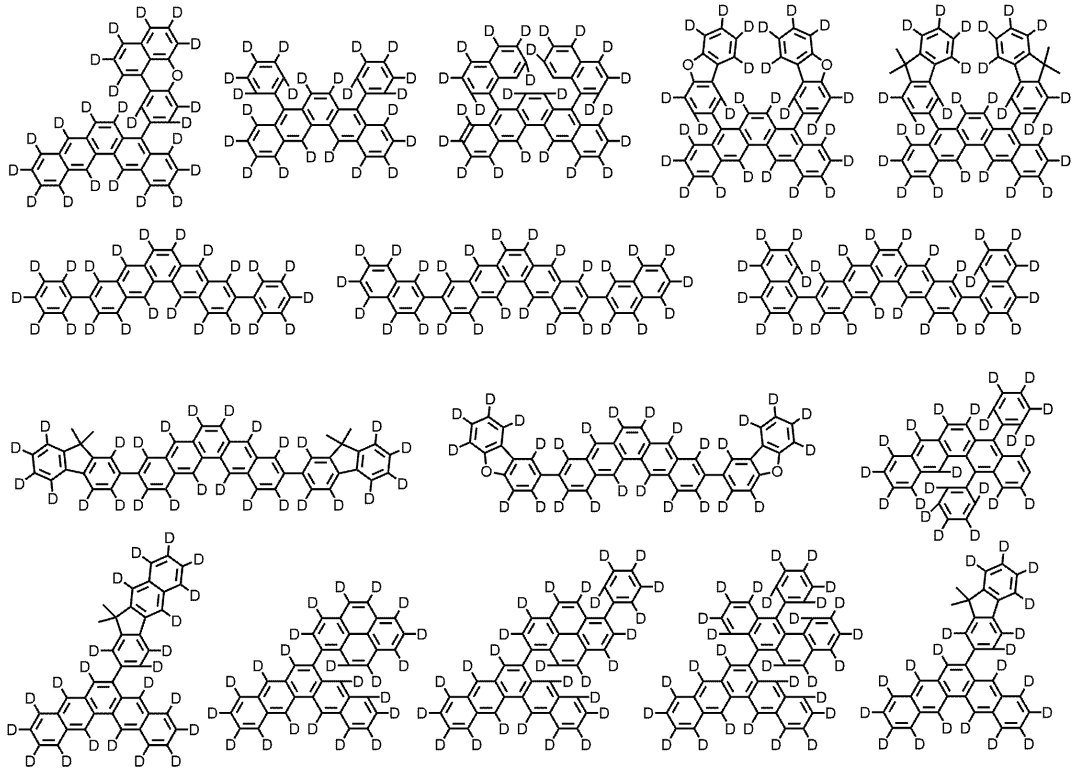
【０２６６】

【化６３】



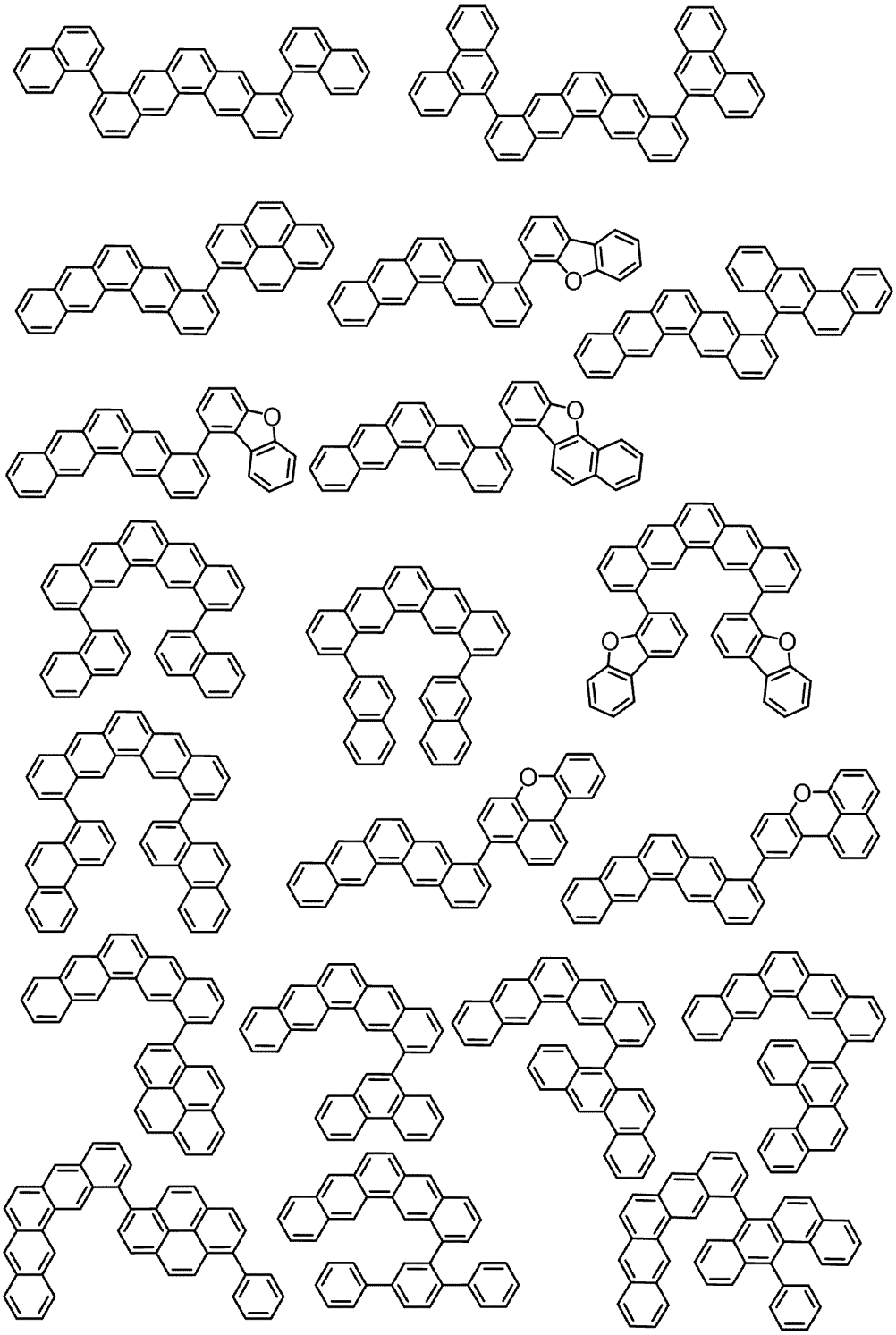
【０２６７】

【化６４】



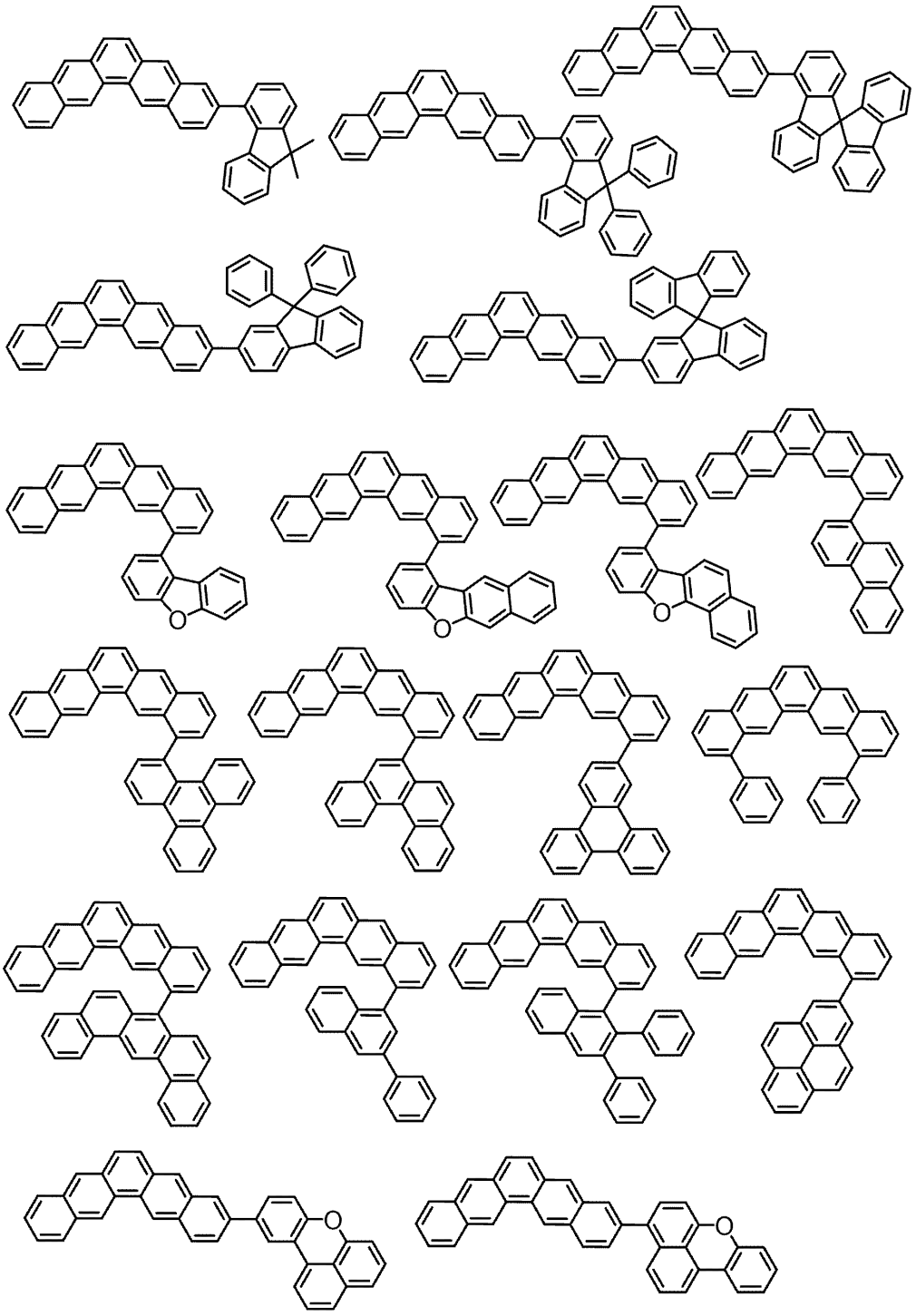
【０２６８】

【化６５】



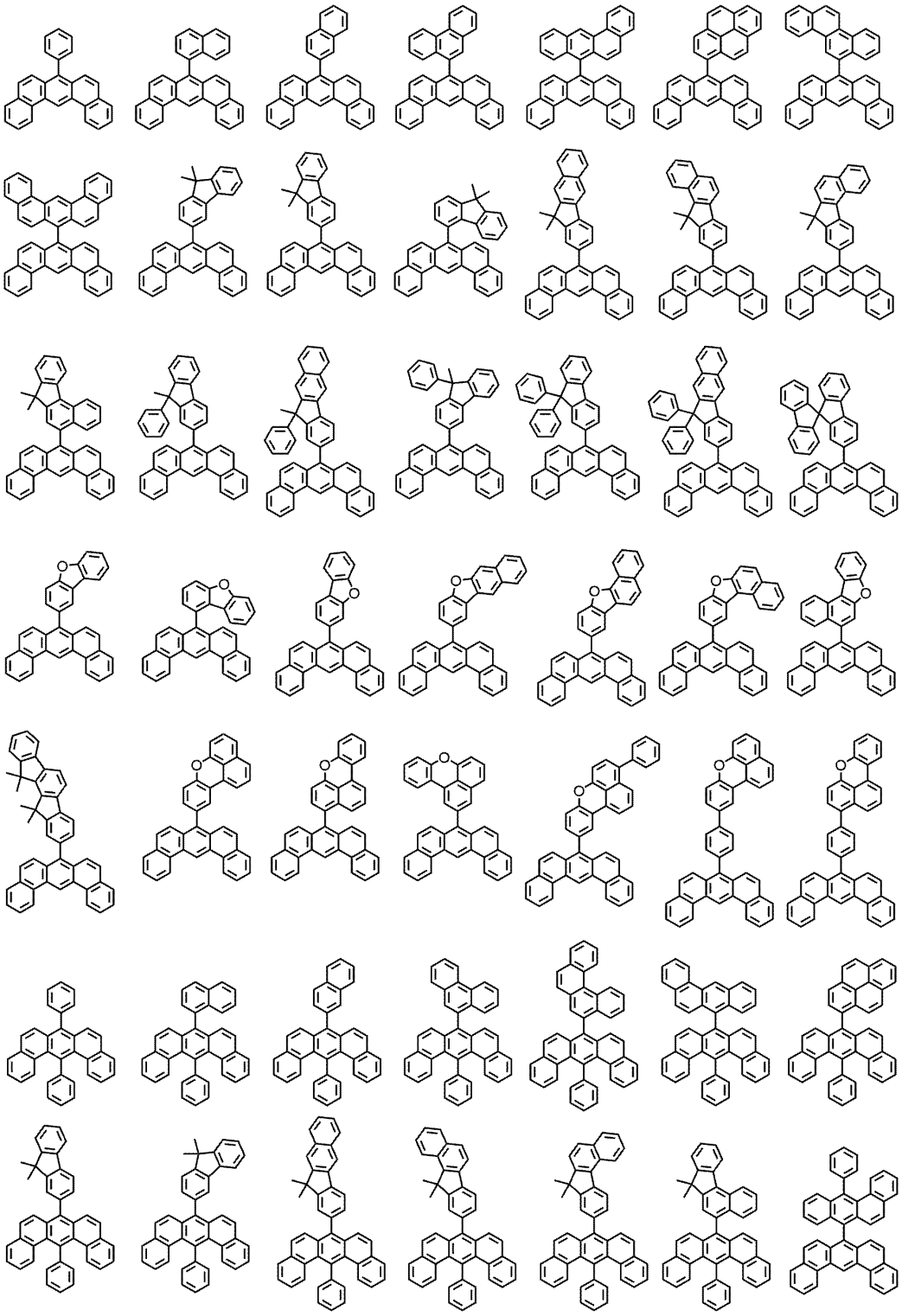
【０２６９】

【化６６】



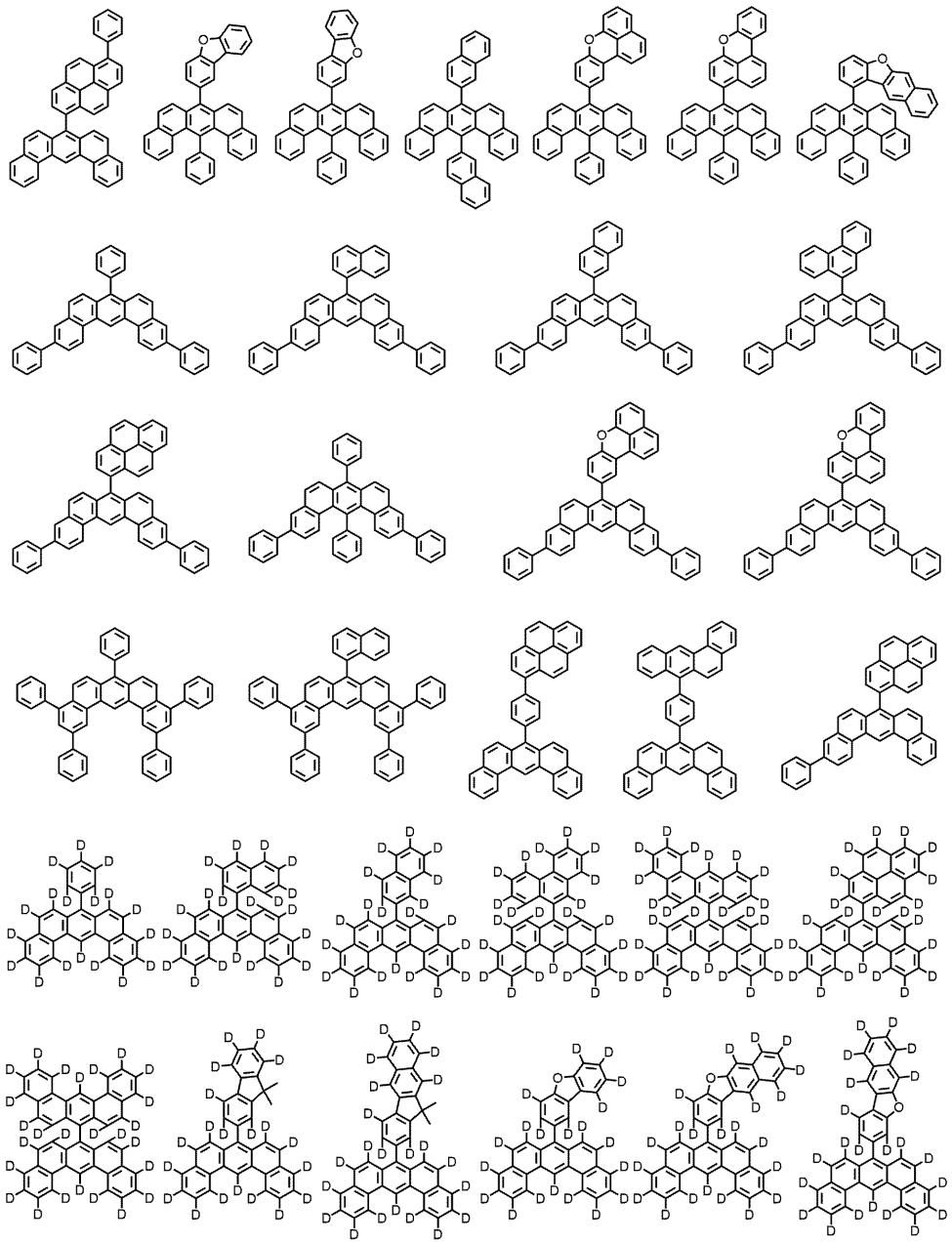
【０２７０】

【化６７】



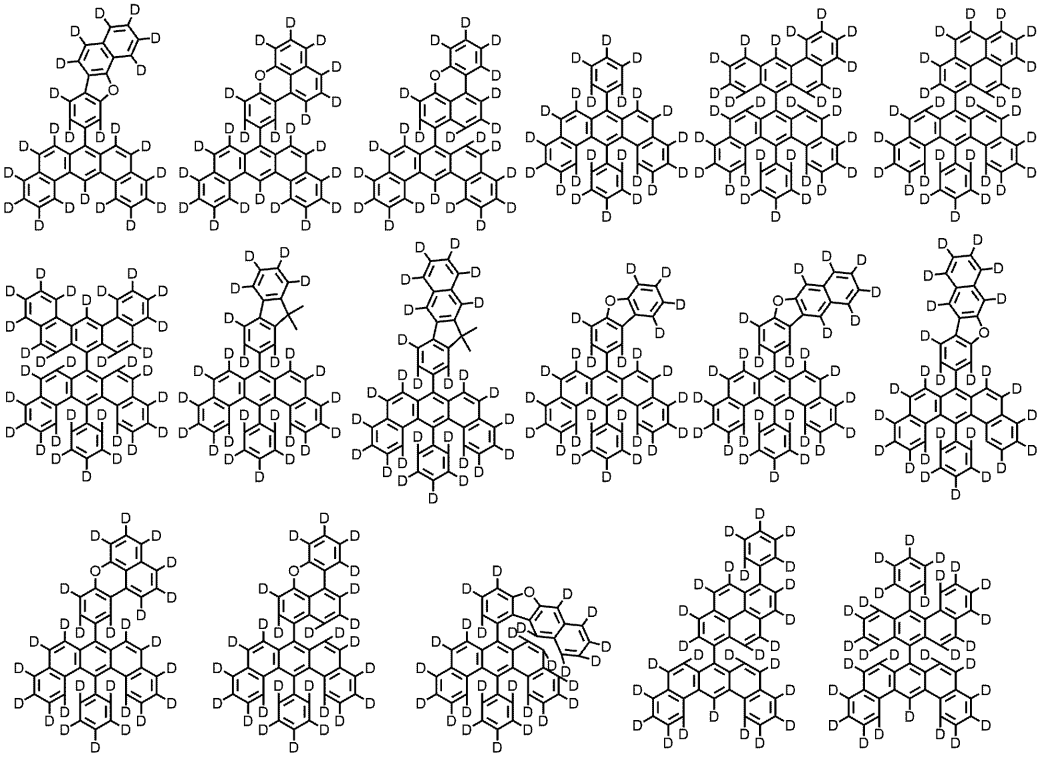
【０２７１】

【化６８】



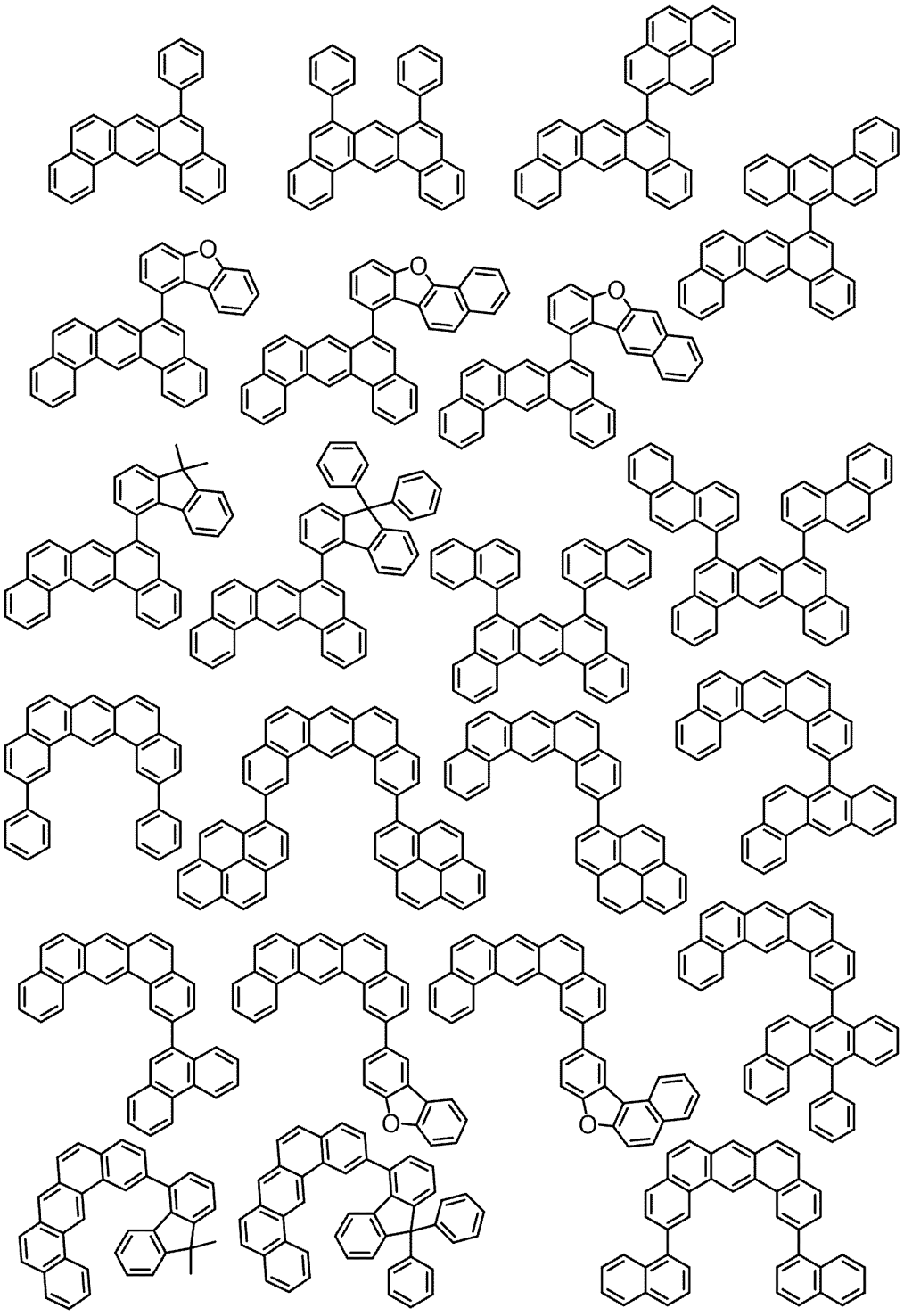
【０２７２】

【化６９】



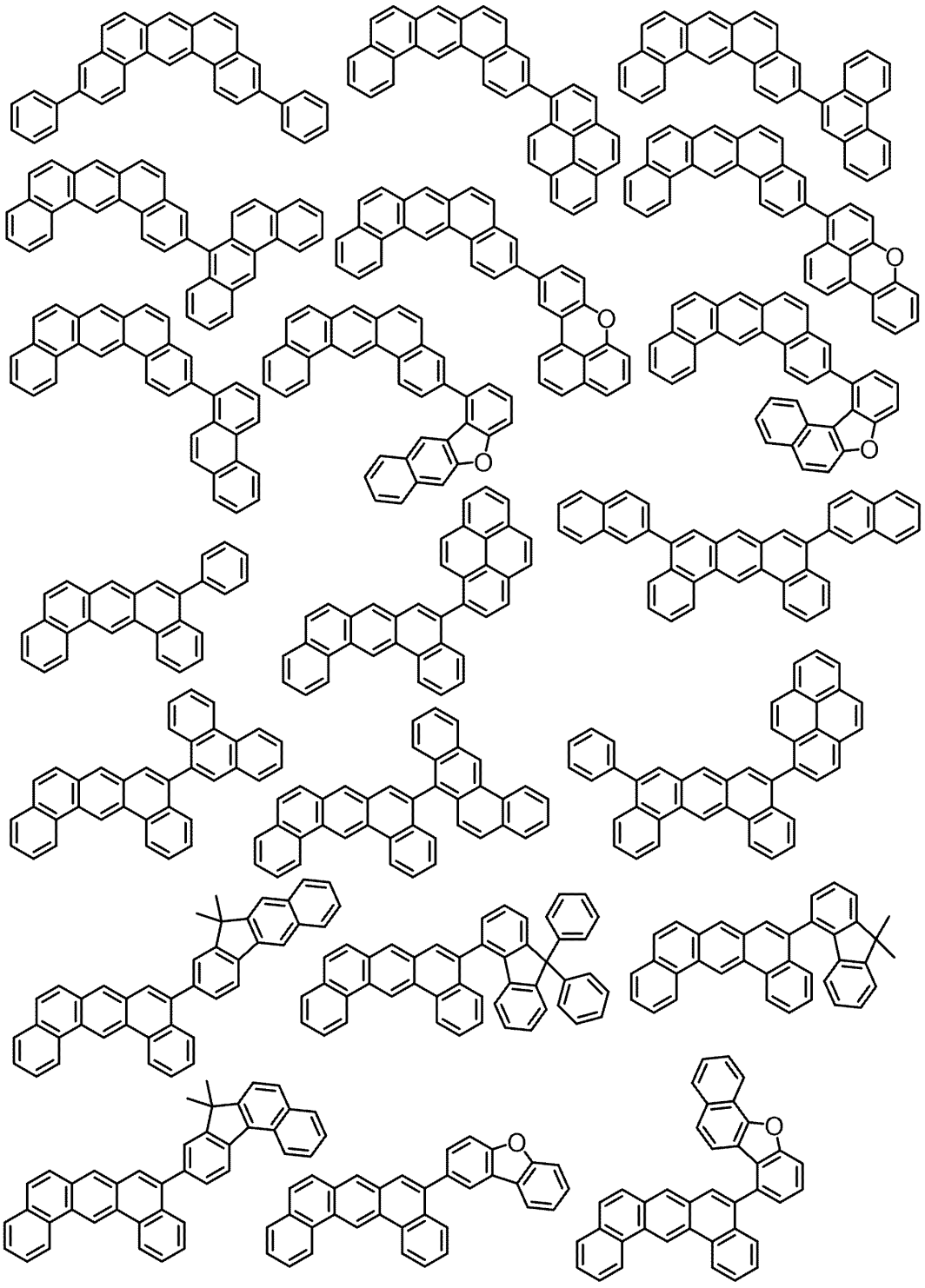
【０２７３】

【化７０】



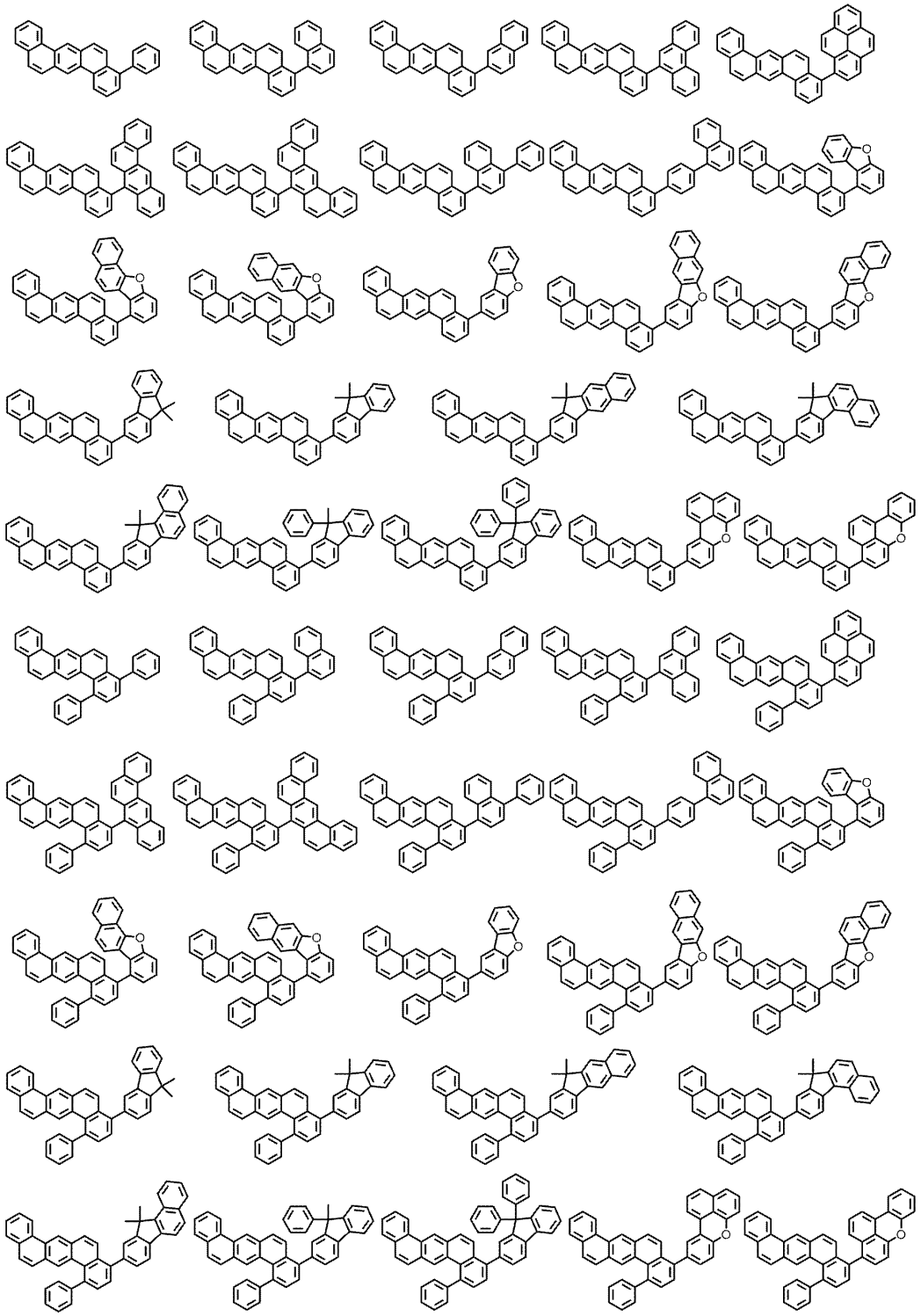
【０２７４】

【化７１】



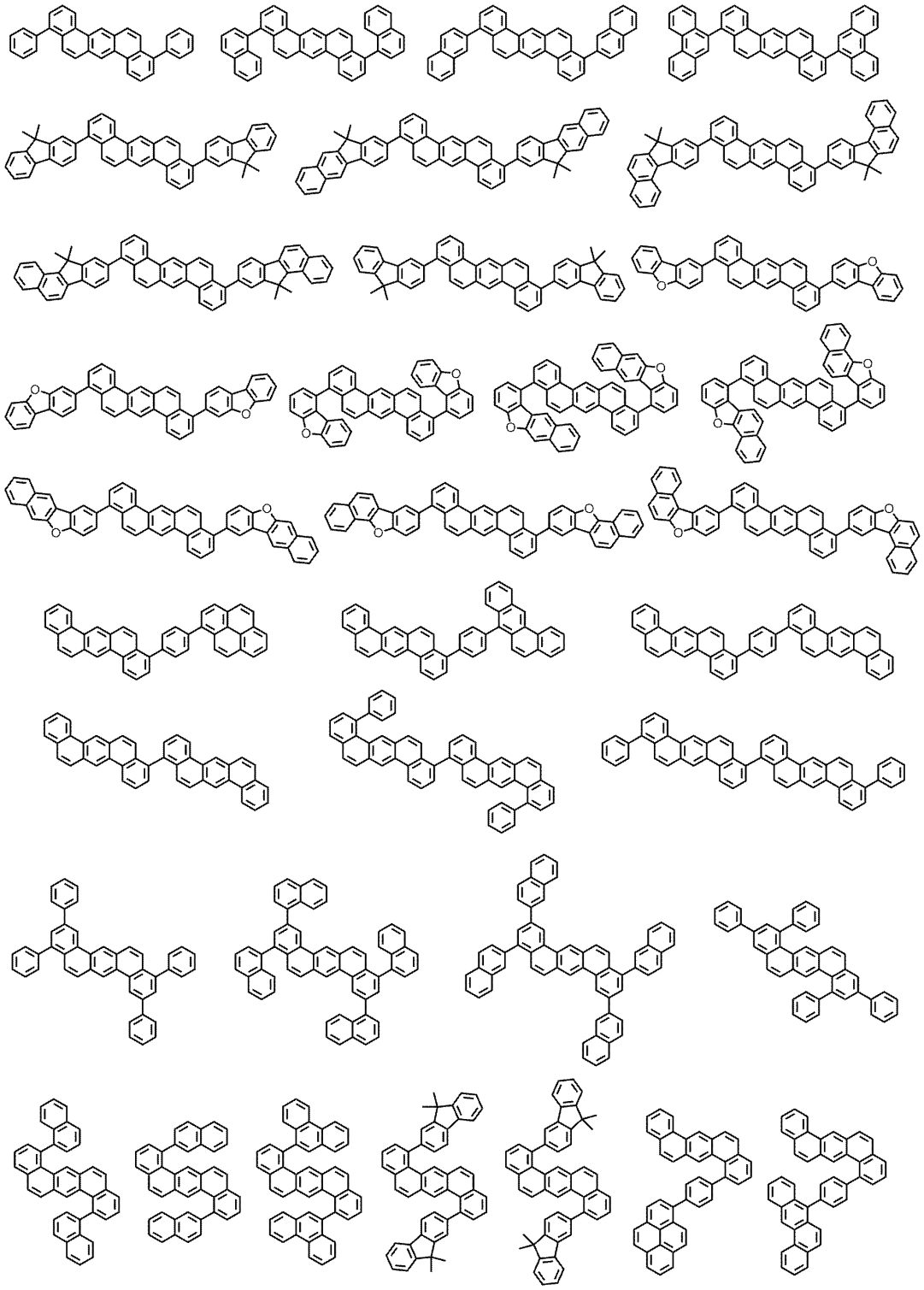
【０２７５】

【化７２】



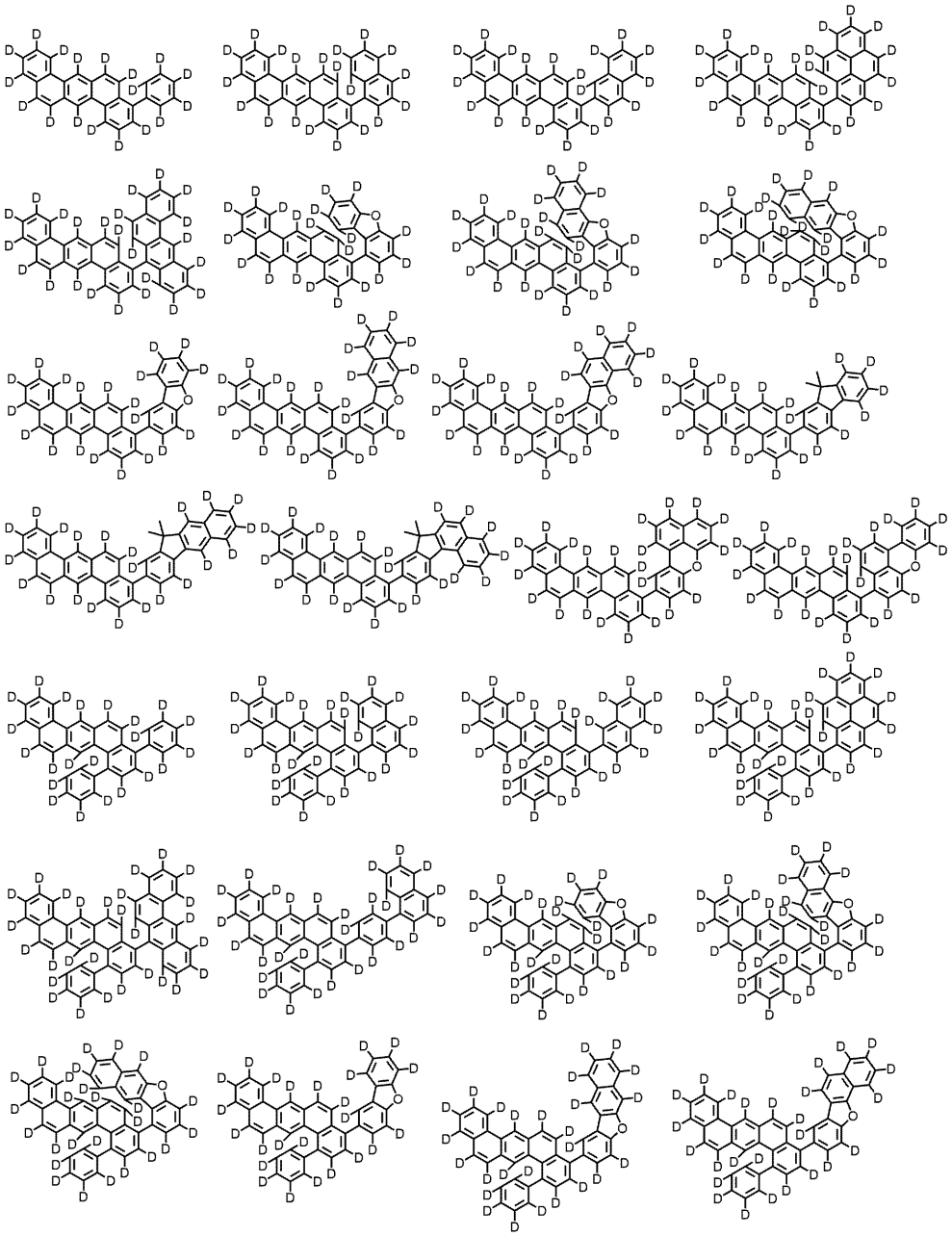
【０２７６】

【化７３】



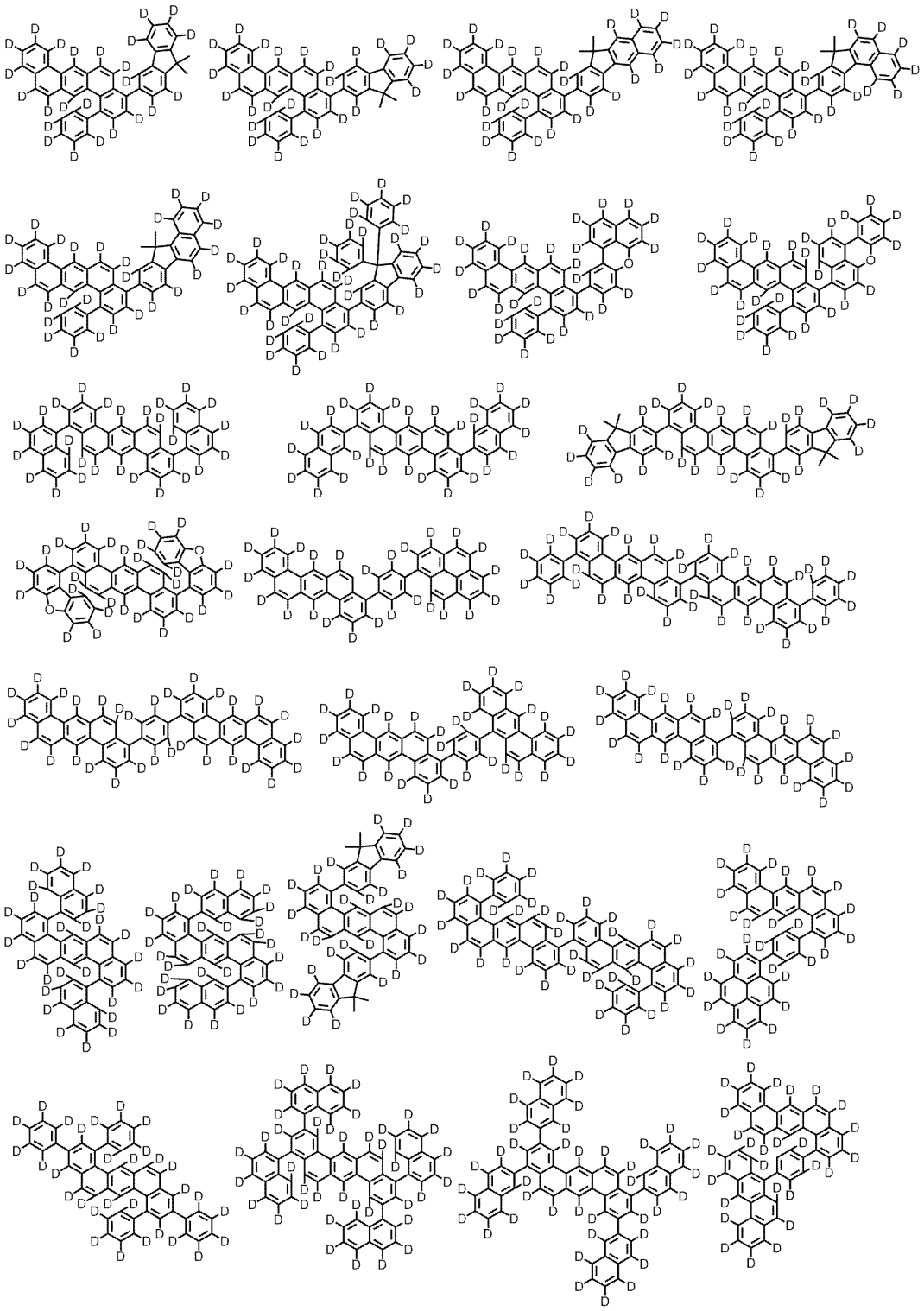
【０２７７】

【化７４】



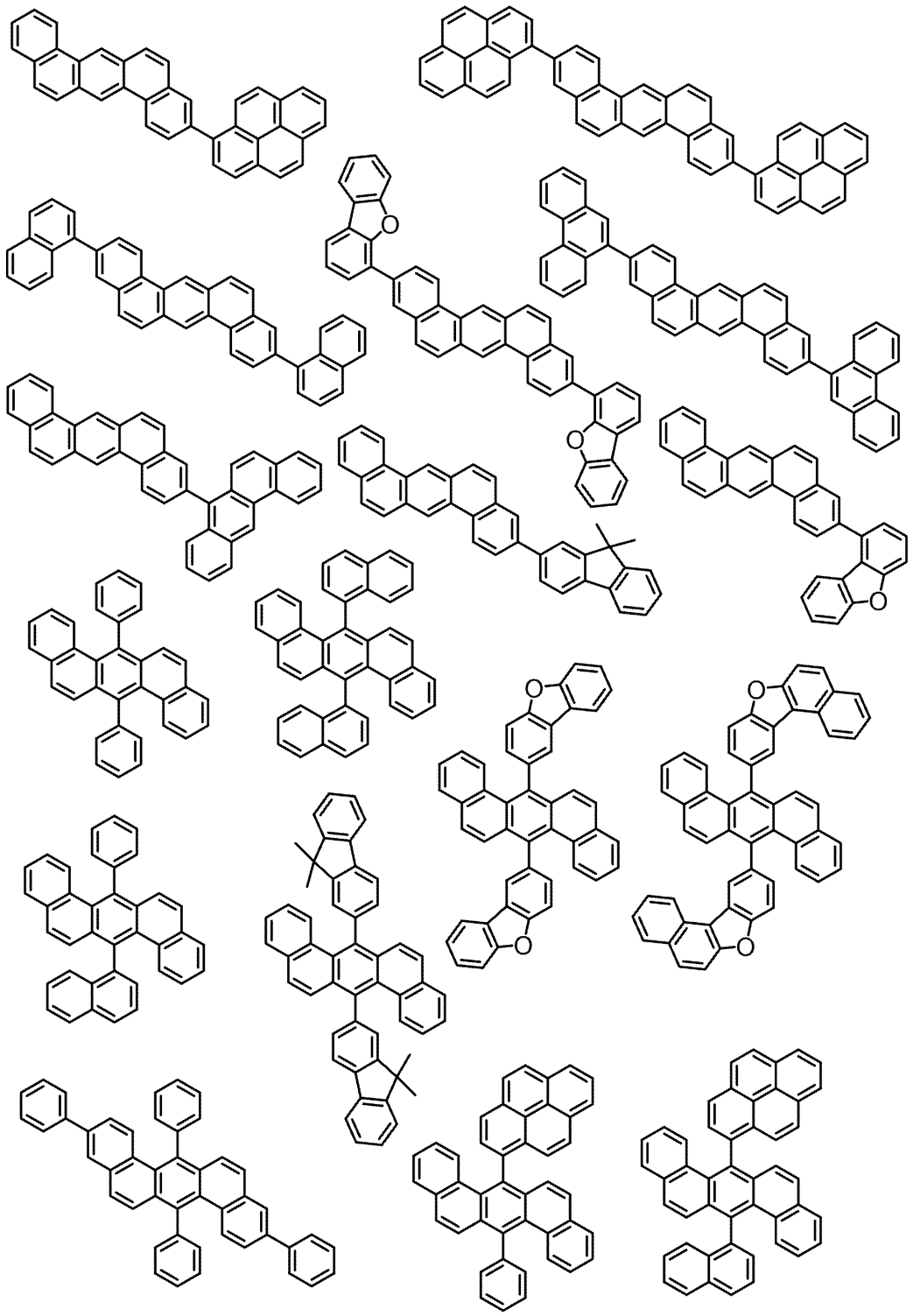
【０２７８】

【化７５】



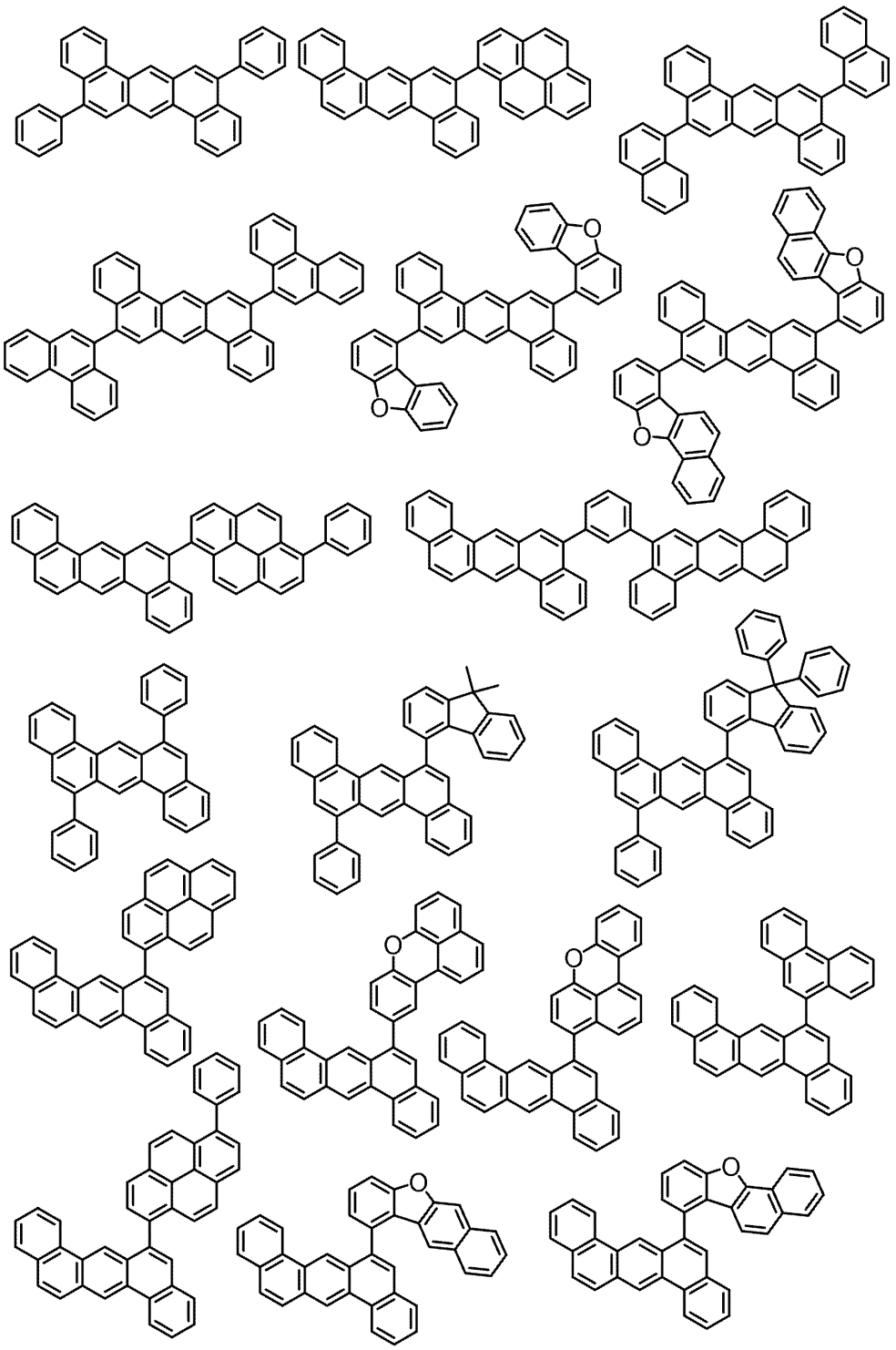
【０２７９】

【化７６】



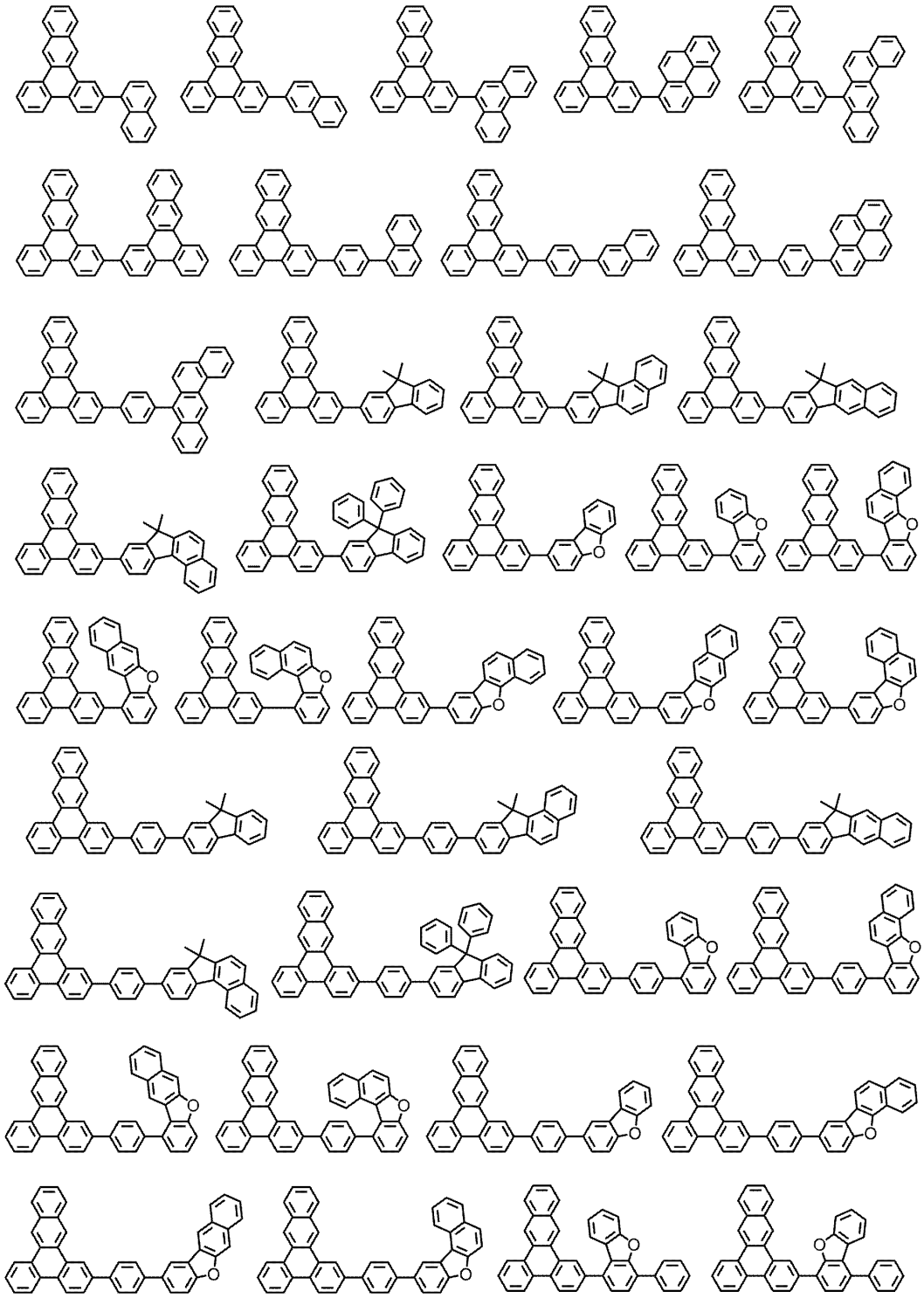
【０２８０】

【化７７】



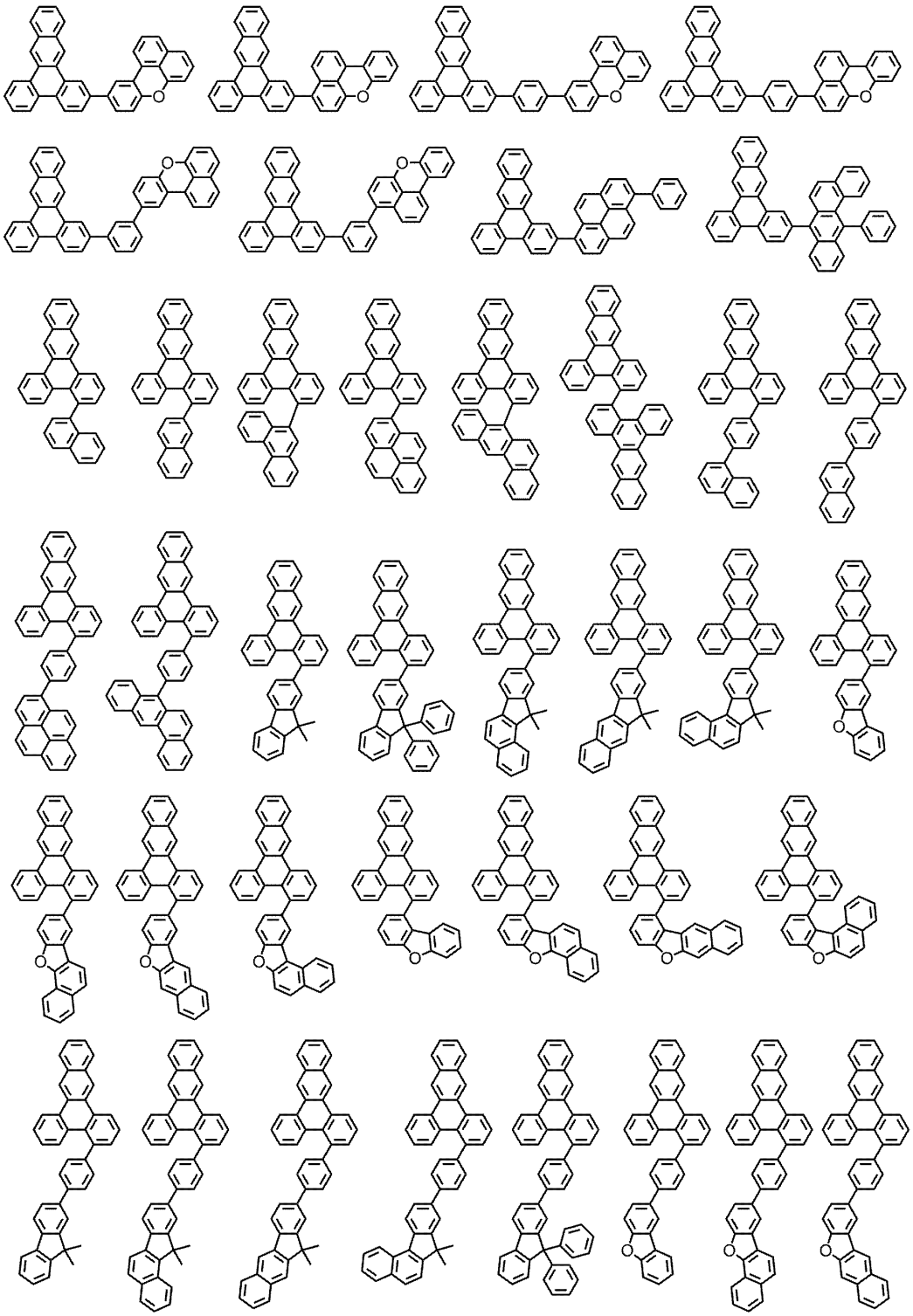
【０２８１】

【化７８】



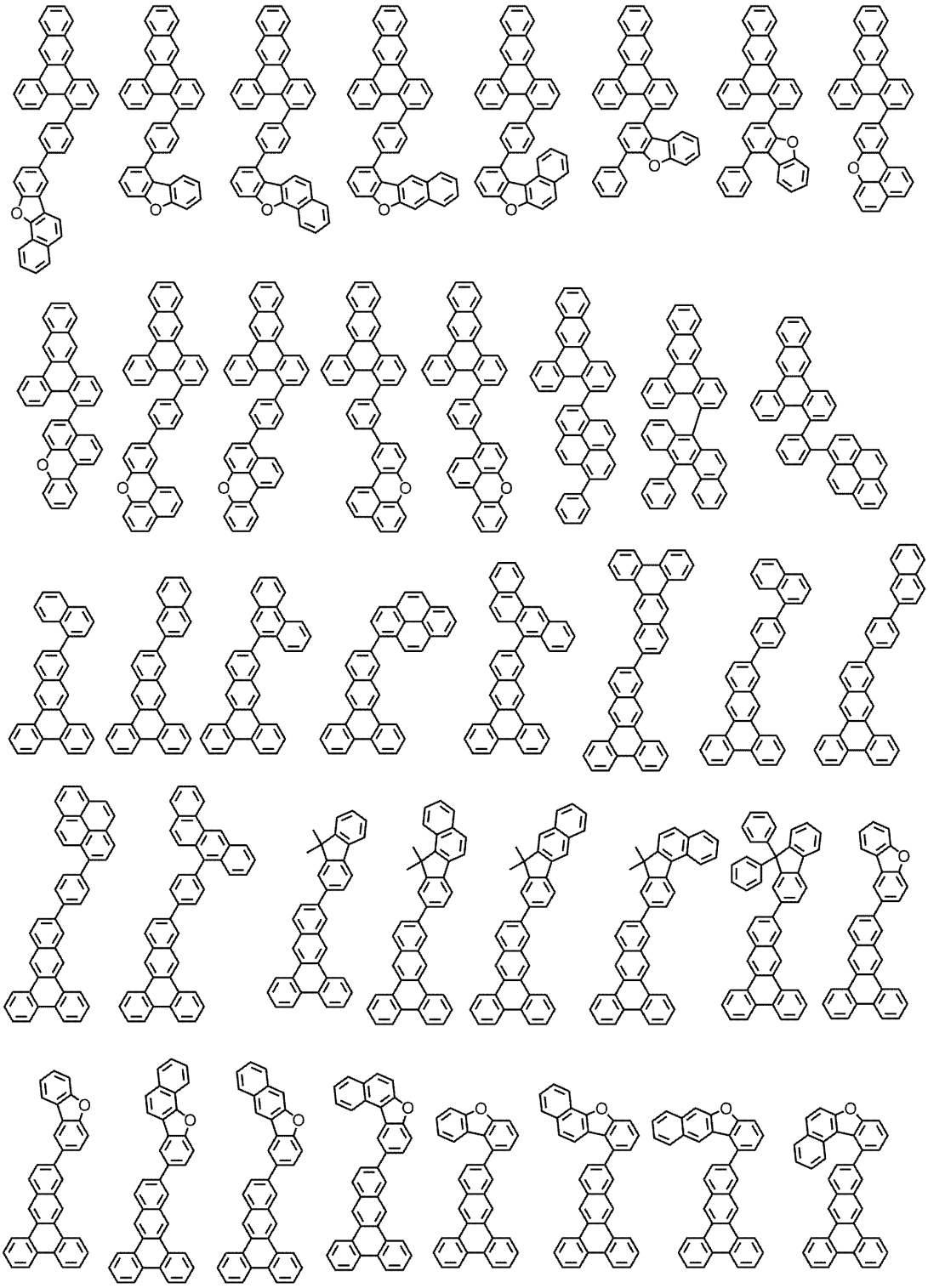
【０２８２】

【化７９】



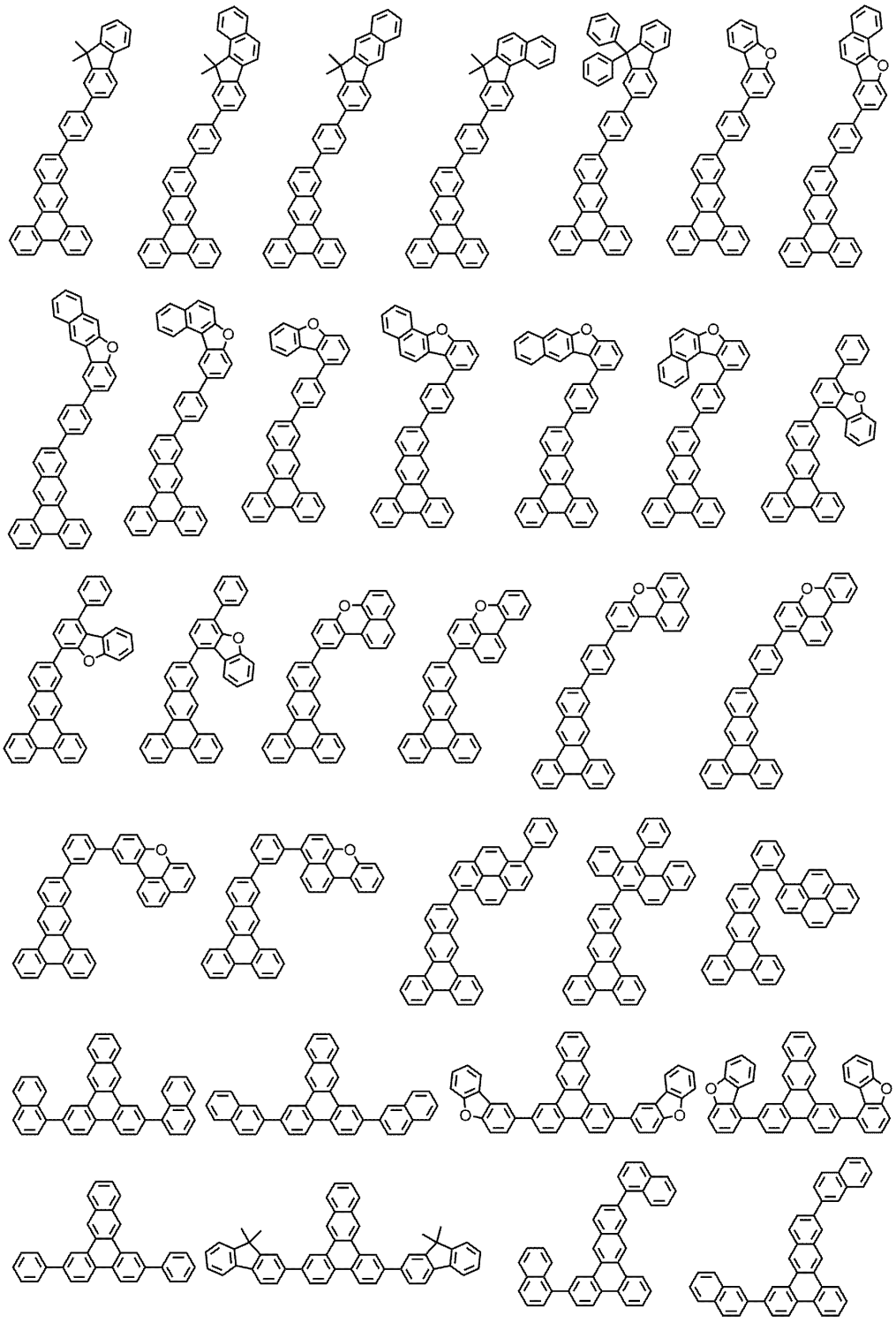
【０２８３】

【化８０】



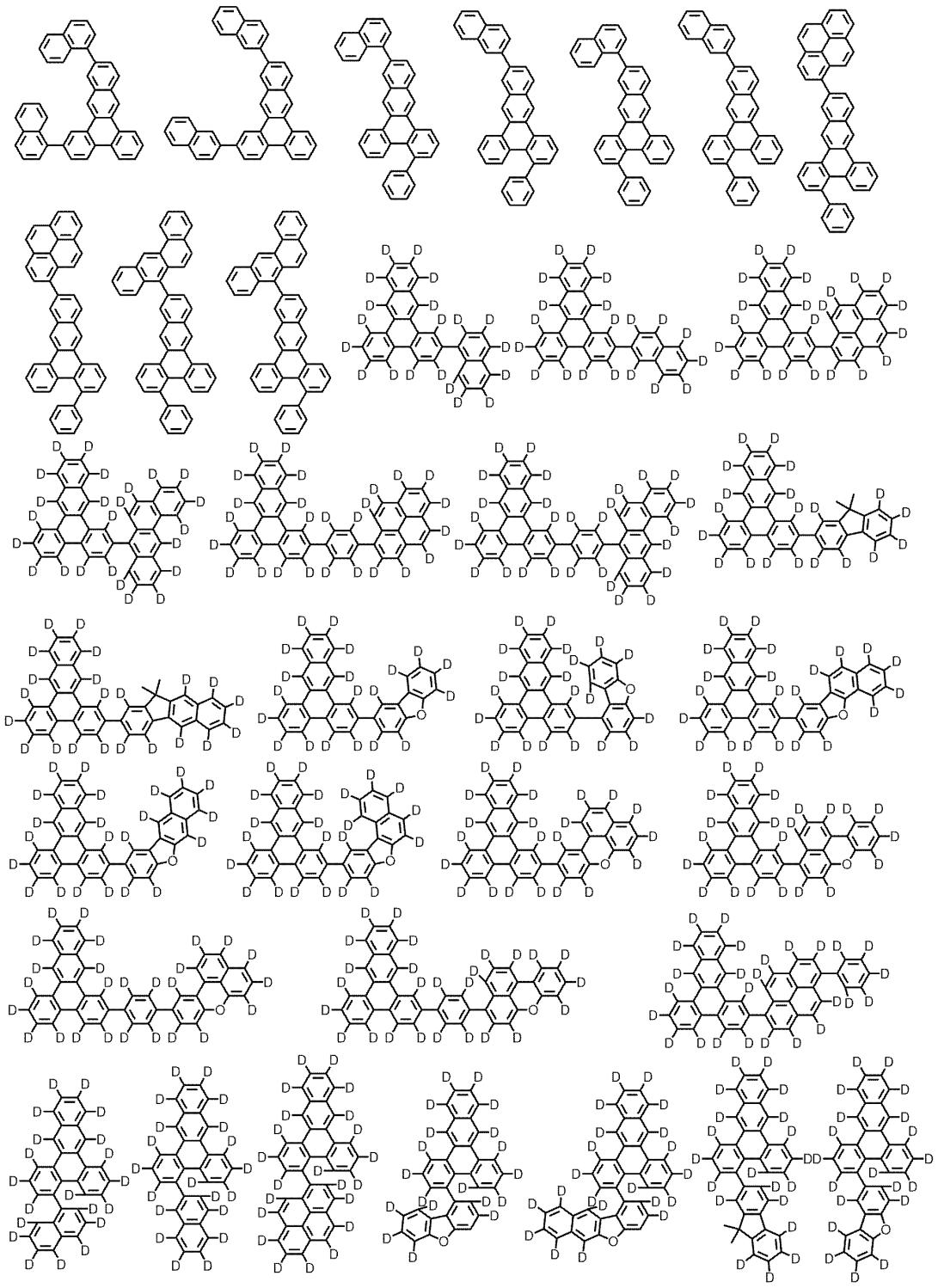
【０２８４】

【化８１】



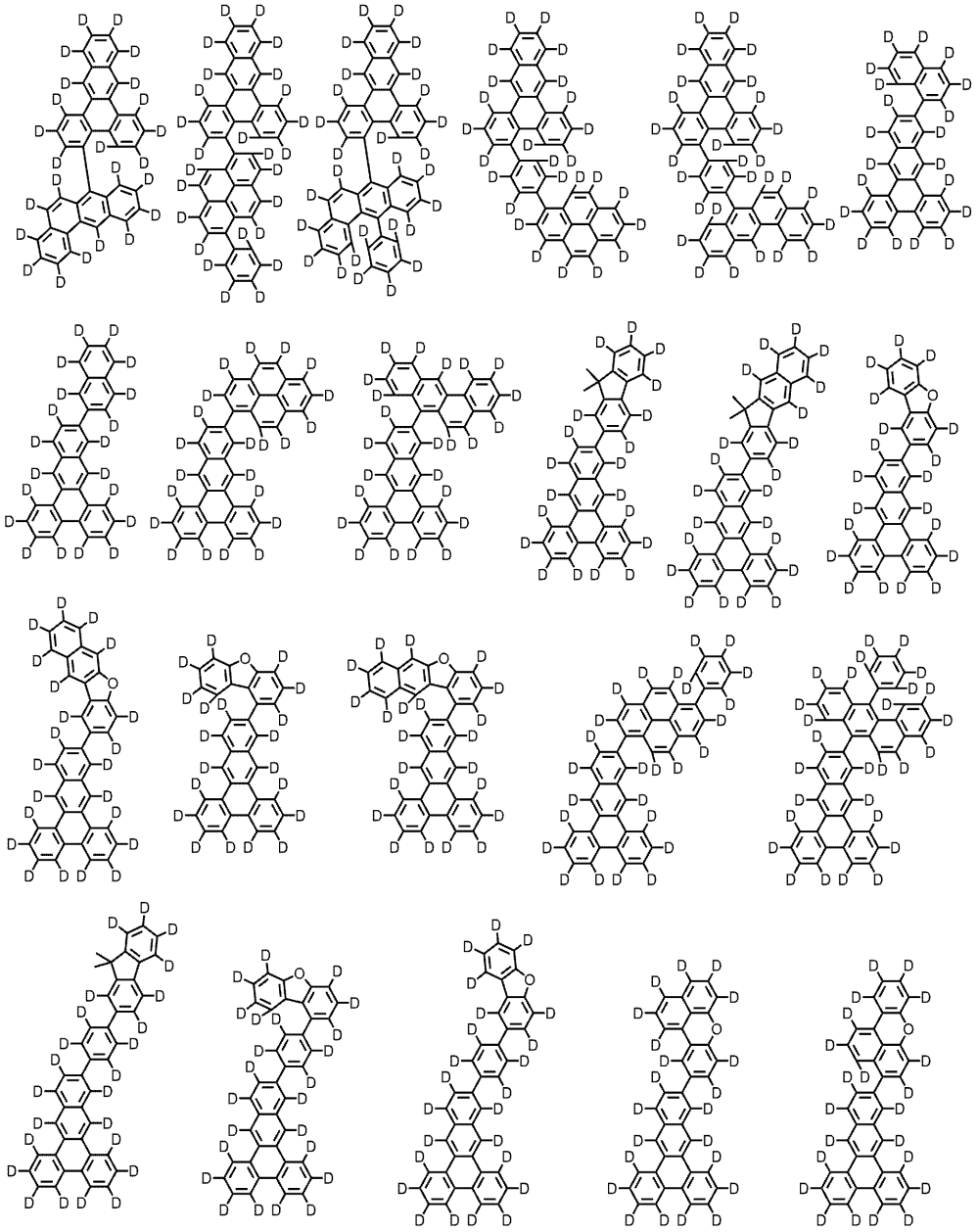
【０２８５】

【化８２】



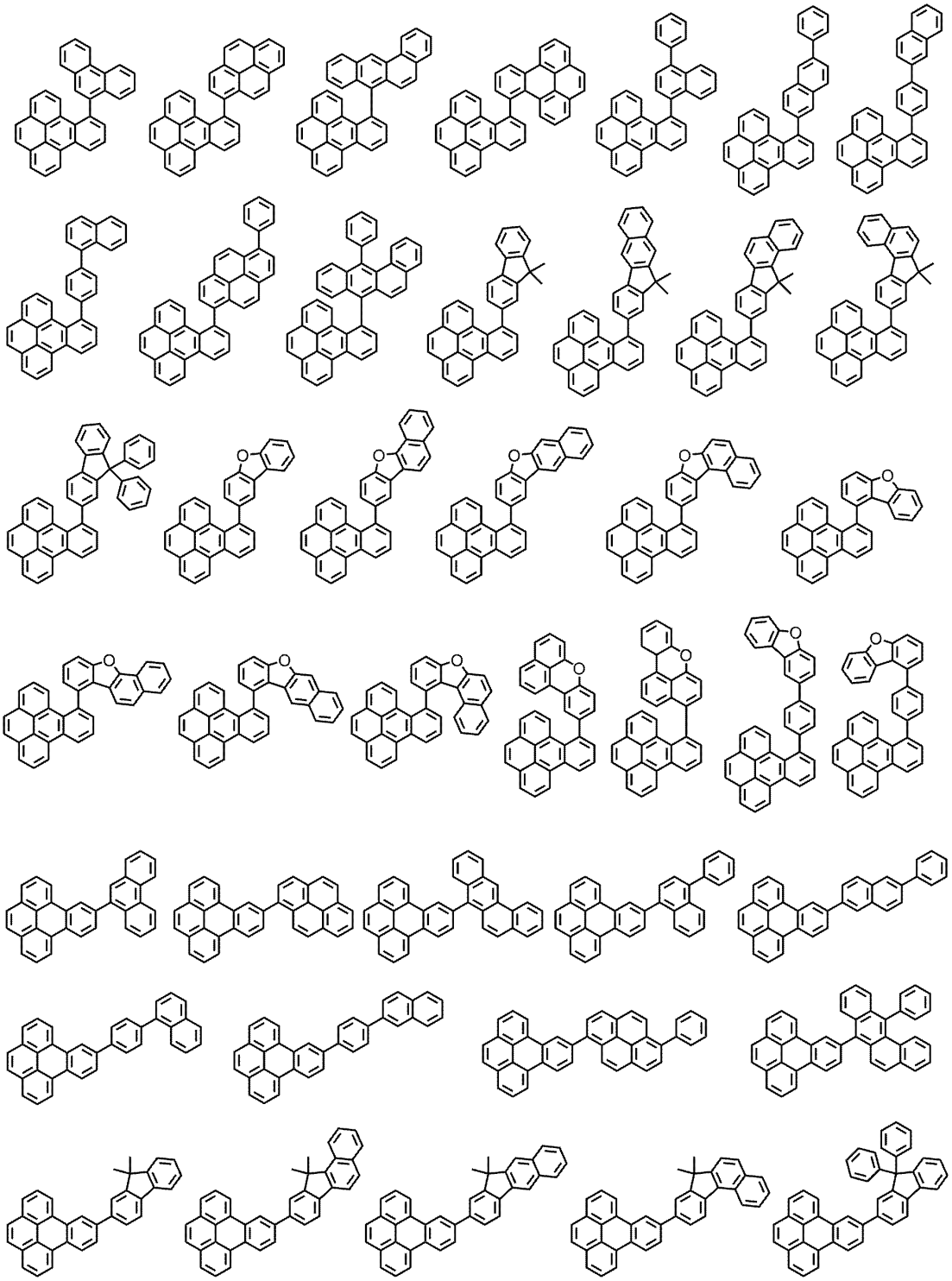
【０２８６】

【化８３】



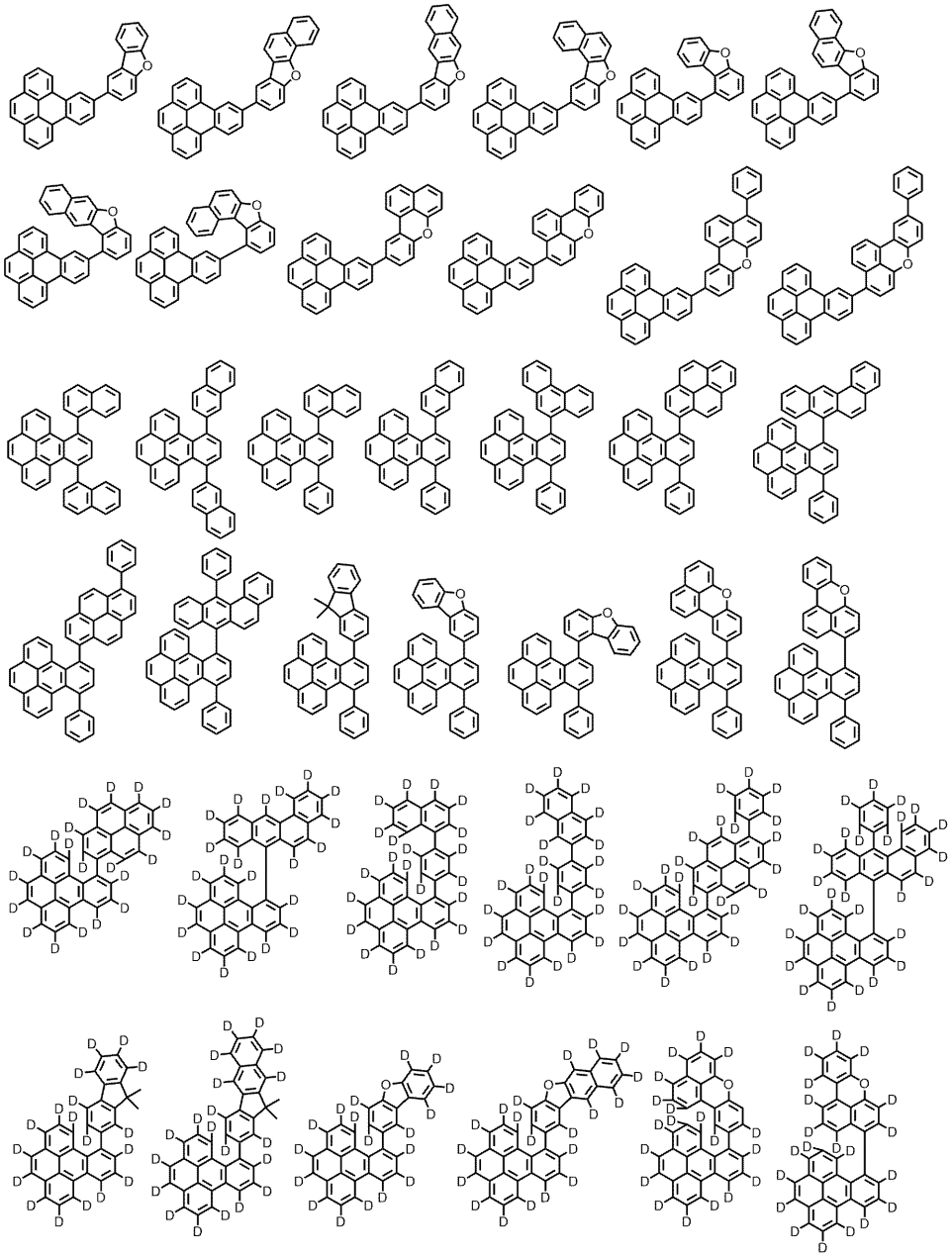
【０２８７】

【化８４】



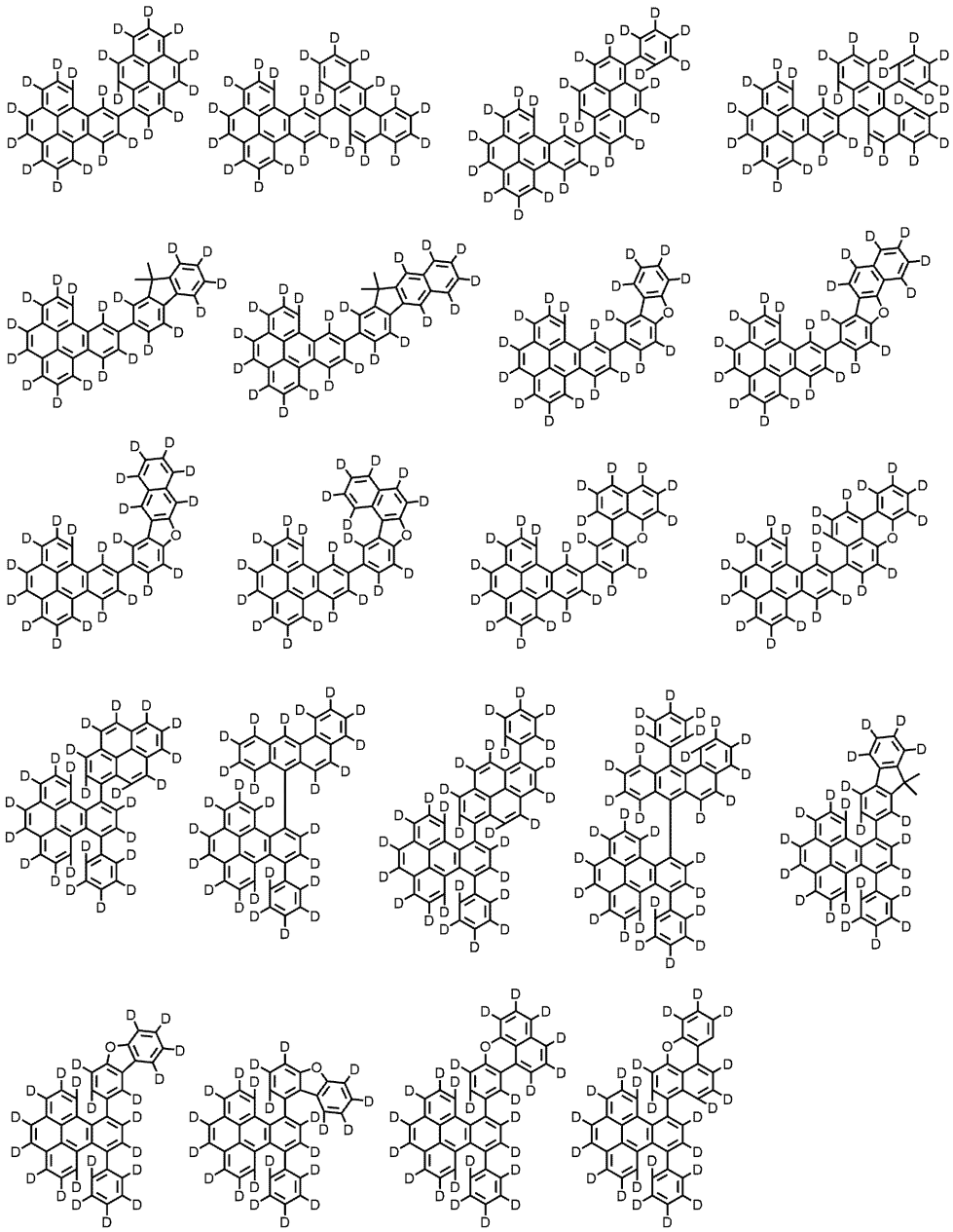
【０２８８】

【化８５】



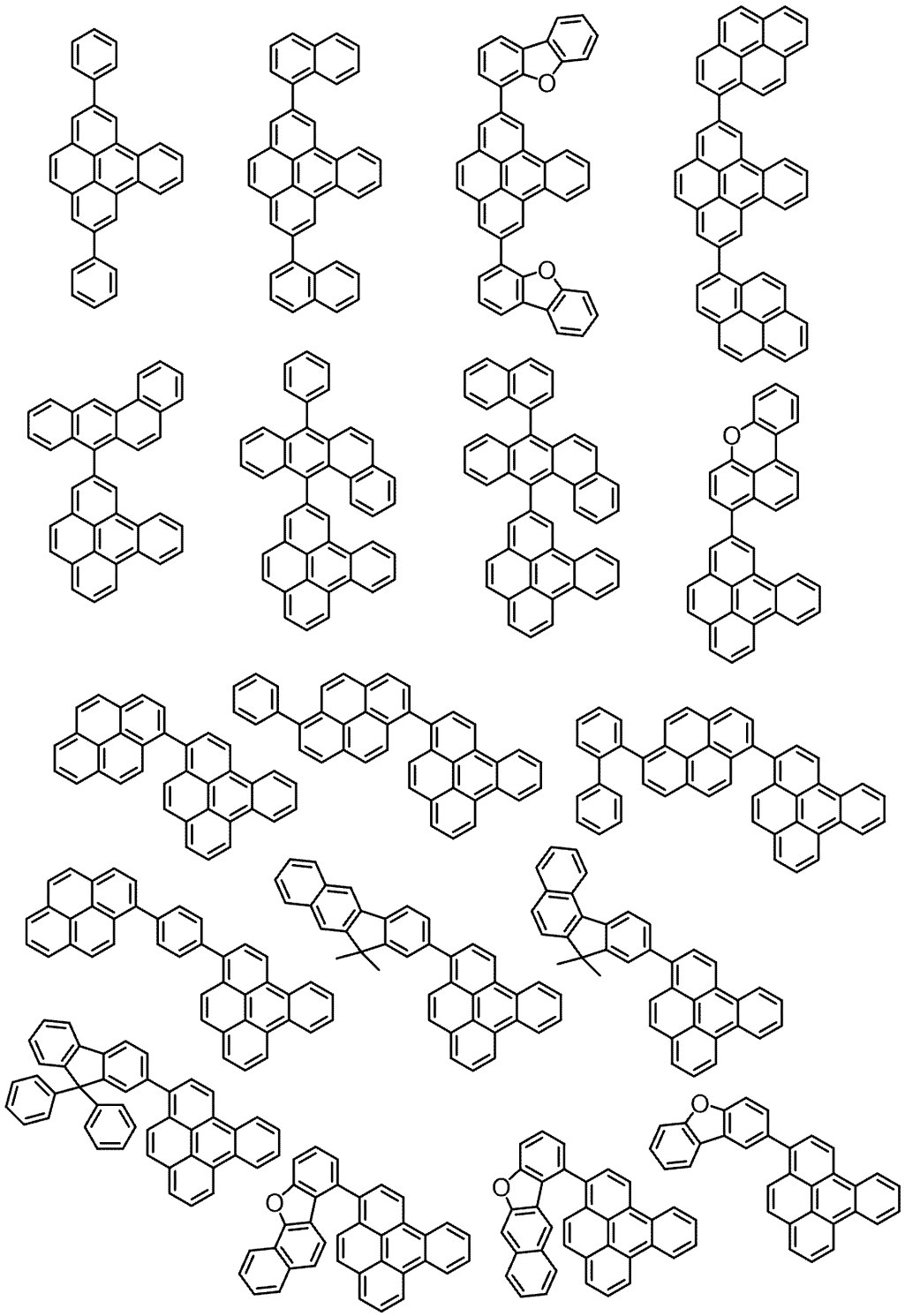
【０２８９】

【化８６】



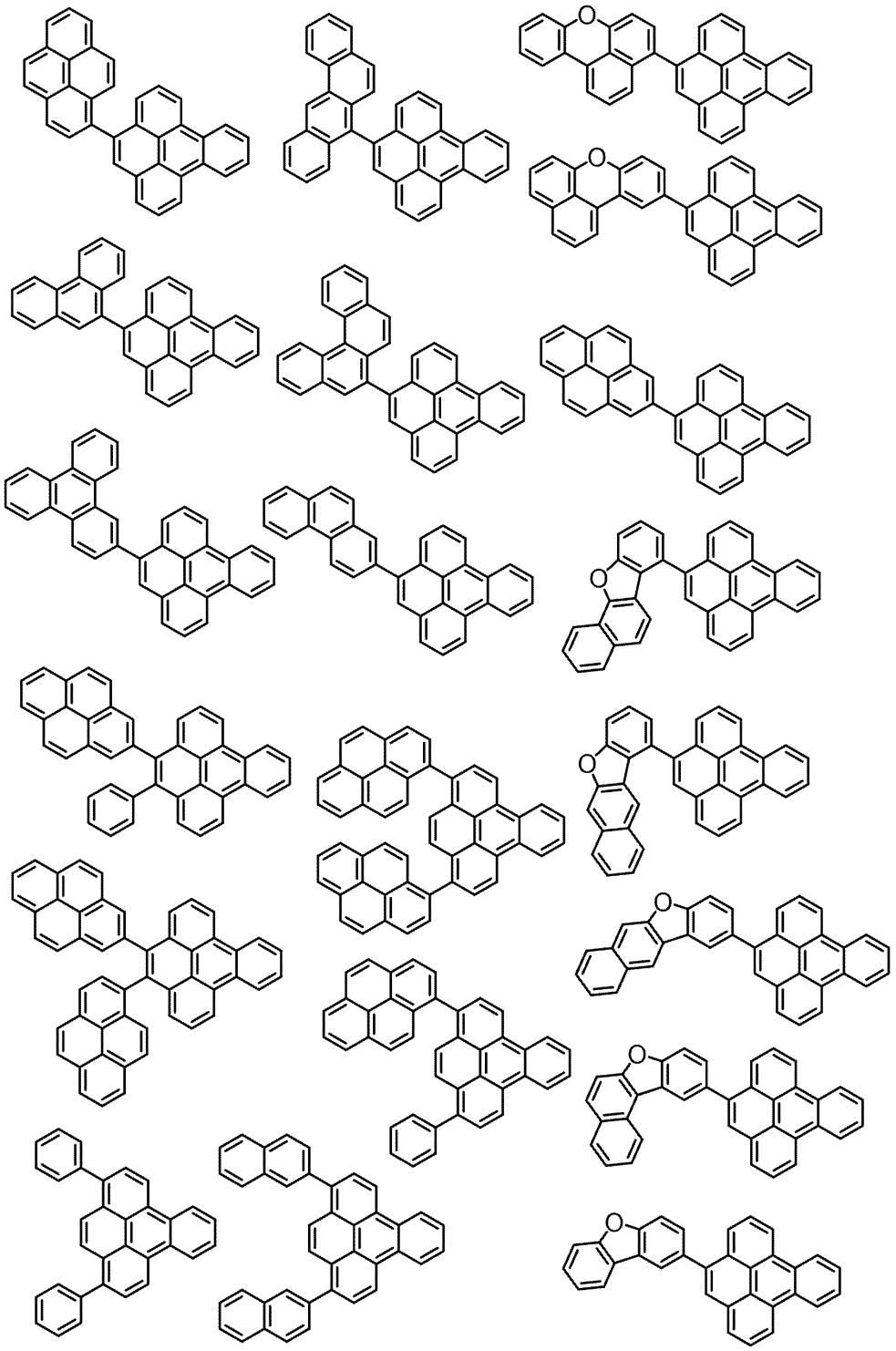
【０２９０】

【化８７】



【０２９１】

【化８８】



【０２９２】

〔第二実施形態〕

（有機エレクトロルミネッセンス素子）

本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極との間に配置された発光帯域と、を有し、前記陽極、前記発光帯域、及び前記陰極が、この順で配置され、前記発光帯域は、第一の発光層及び第二の発光層を含み、前記第一の発光層は、第一のホスト材料と、第一の発光性化合物と、を含有し、前記第一のホスト材料は、第一実施形態に係る化合物（第一の化合物）であり、前記第二の発光層は、第二のホスト材料と、第二の発光性化合物と、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が

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

【０２９３】

本実施形態によれば、色度悪化が抑制され、かつ長寿命な有機ＥＬ素子を提供することができる。

【０２９４】

（発光帯域）

発光帯域は、陽極及び陰極の間に配置されている。本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、発光帯域は、第一の発光層及び第二の発光層を含む。

【０２９５】

本実施形態の有機ＥＬ素子において、第一のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と第二のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ２）とが、下記数式（数１）の関係を満たすことが好ましい。

T_1（Ｈ１）＞T_1（Ｈ２）　…（数１）

【０２９６】

前記数式（数１）の関係を満たすことにより、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ことができる。

従来、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を向上させるための技術として、Ｔｒｉｐｌｅｔ－Ｔｒｉｐｌｅｔ－Ａｎｎｉｈｉｌａｔｉｏｎ（ＴＴＡと称する場合がある。）が知られている。ＴＴＡは、三重項励起子と三重項励起子とが衝突して、一重項励起子を生成するという機構（メカニズム）である。なお、ＴＴＡメカニズムは、特許文献３に記載のようにＴＴＦメカニズムと称する場合もある。

【０２９７】

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、$5\,{}^3A^* \rightarrow 4\,{}^1A + 1\,A^*$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％×（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％×（１／２）＝３７．５％を加えた６２．５％という非常に高い内部量子効率が得られる。このとき、ＴＴＦ比率は、３７．５／６２．５＝６０％である。

【０２９８】

本実施形態の一態様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。

本実施形態の一態様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）の関係を満たす。

前記数式（数１）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。

【０２９９】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と第二のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ２）とが、下記数式（数１Ｂ）の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1(\mathrm{H1}) - T_1(\mathrm{H2}) > 0.03\ \mathrm{eV} \quad \cdots (\text{数１Ｂ})$$

【０３００】

本明細書において、「ホスト材料」とは、例えば「層の５０質量％以上」含まれる材料である。したがって、第一の発光層は、例えば、第一のホスト材料を、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、第二のホスト材料を、第二の発光層の全質量の５０質量％以上、含有する。

【０３０１】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物及び第二の発光性化合物は、それぞれ独立に、最大ピーク波長が５００ｎｍ以下の発光を示す化合物であることが好ましい。

【０３０２】

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

【０３０３】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層は、陰極と第二の発光層との間に配置されていてもよい。

【０３０４】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層及び第二の発光層の一方が、発光帯域が有する複数の層の内、最も陽極側に配置された層であることが好ましい。

【０３０５】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層及び第二の発光層の一方が、発光帯域が有する複数の層の内、最も陰極側に配置された層であることが好ましい。

【０３０６】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、陽極と、第一の発光層と、第二の発光層と、陰極とをこの順に有していてもよいし、第一の発光層と第二の発光層の順序が逆であってもよい。すなわち、陽極と、第二の発光層と、第一の発光層と、陰極とをこの順に有していてもよい。第一の発光層と第二の発光層の順序がいずれの場合も、前記数式（数１）の関係を満たす材料の組合せを選択することにより、第一の発光層と第二の発光層との積層構成で

あることによる効果が期待できる。
【０３０７】
（第一の発光層）
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層は、第一のホスト材料及び第一の発光性化合物を含むことが好ましい。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。
【０３０８】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物は、最大ピーク波長が５００ｎｍ以下の発光を示すことが好ましく、最大ピーク波長が４８０ｎｍ以下の発光を示すことがより好ましく、４６０ｎｍ以下の発光を示すことがさらに好ましく、４５５ｎｍ以下の発光を示すことがよりさらに好ましい。
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物は、最大ピーク波長が４３０ｎｍ以上の発光を示すことが好ましく、４４０ｎｍ以上の発光を示すことがより好ましく、４４５ｎｍ以上の発光を示すことがさらに好ましい。
【０３０９】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物は、蛍光発光性の化合物であることが好ましい。
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物は、最大ピーク波長が５００ｎｍ以下の蛍光発光を示すことが好ましく、最大ピーク波長が４８０ｎｍ以下の蛍光発光を示すことがより好ましく、４６０ｎｍ以下の蛍光発光を示すことがさらに好ましく、４５５ｎｍ以下の蛍光発光を示すことがよりさらに好ましい。
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物は、最大ピーク波長が４３０ｎｍ以上の蛍光発光を示すことが好ましく、４４０ｎｍ以上の蛍光発光を示すことがより好ましく、４４５ｎｍ以上の蛍光発光を示すことがさらに好ましい。
【０３１０】
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５μｍｏｌ／Ｌトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（３００Ｋ）でこの試料の発光スペクトル（縦軸：発光強度、横軸：波長とする。）を測定する。発光スペクトルは、株式会社日立ハイテクサイエンス製の分光蛍光光度計（装置名：Ｆ－７０００）により測定できる。なお、発光スペクトル測定装置は、ここで用いた装置に限定されない。
発光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を最大ピーク波長とする。なお、本明細書において、蛍光発光の最大ピーク波長を蛍光発光最大ピーク波長（ＦＬ－ｐｅａｋ）と称する場合がある。
【０３１１】
第一の発光性化合物の発光スペクトルにおいて、発光強度が最大となるピークを最大のピークとし、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。
また、第一の発光性化合物の発光スペクトルにおいて、ピークの数が３つ未満であることが好ましい。
【０３１２】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物は、分子中にアジン環構造を含まない化合物であることが好ましい。
【０３１３】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物は、ホウ素含有錯体ではないことが好ましく、第一の発光性化合物は、錯体ではないことがより好ましい。
【０３１４】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層は、金属錯体を含有しないことが好ましい。また、本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層は、ホウ素含有錯体を含有しないことも好ましい。

【０３１５】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層は、燐光発光性材料（ドーパント材料）を含まないことが好ましい。
また、第一の発光層は、重金属錯体及び燐光発光性の希土類金属錯体を含まないことが好ましい。ここで、重金属錯体としては、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、及び白金錯体等が挙げられる。
【０３１６】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物は、第一の発光層中に、０．５質量％以上、含有されることが好ましい。すなわち、第一の発光層は、第一の発光性化合物を、第一の発光層の全質量の０．５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１．０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１．２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１．５質量％以上、含有することがよりさらに好ましい。
第一の発光層は、第一の発光性化合物を、第一の発光層の全質量の１０質量％以下、含有することが好ましく、第一の発光層の全質量の７質量％以下、含有することがより好ましく、第一の発光層の全質量の５質量％以下、含有することがさらに好ましい。
【０３１７】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層は、第一のホスト材料としての第一の化合物を、第一の発光層の全質量の６０質量％以上、含有することが好ましく、第一の発光層の全質量の７０質量％以上、含有することがより好ましく、第一の発光層の全質量の８０質量％以上、含有することがさらに好ましく、第一の発光層の全質量の９０質量％以上、含有することがよりさらに好ましく、第一の発光層の全質量の９５質量％以上、含有することがさらになお好ましい。
第一の発光層は、第一のホスト材料を、第一の発光層の全質量の９９質量％以下、含有することが好ましい。
ただし、第一の発光層が第一のホスト材料と第一の発光性化合物とを含有する場合、第一のホスト材料及び第一の発光性化合物の合計含有率の上限は、１００質量％である。
【０３１８】
なお、本実施形態は、第一の発光層に、第一のホスト材料と第一の発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。
第一の発光層は、第一のホスト材料を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。第一の発光層は、第一の発光性化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。
【０３１９】
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一重項エネルギーS_1（Ｈ１）と、第一の発光性化合物の一重項エネルギーS_1（Ｄ１）とが下記数式（数５）の関係を満たすことが好ましい。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。
S_1（Ｈ１）＞S_1（Ｄ１）　…（数５）
【０３２０】
第一のホスト材料と第一の発光性化合物とが、数式（数５）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発光性化合物へエネルギー移動し易くなり、第一の発光性化合物の蛍光性発光に寄与する。
【０３２１】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と、第一の発光性化合物の三重項エネルギーT_1（Ｄ１）とが下記数式（数６）の関係を満たすことが好ましい。
T_1（Ｄ１）＞T_1（Ｈ１）　…（数６）
【０３２２】
第一のホスト材料と第一の発光性化合物とが、数式（数６）の関係を満たす事により、

第一の発光層内で生成した三重項励起子は、より高い三重項エネルギーを有する第一の発光性化合物ではなく、第一のホスト材料上を移動するため、第二の発光層へ移動し易くなる。

【０３２３】

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

$T_1(D1) > T_1(H1) > T_1(H2)$ …（数２０Ｂ）

【０３２４】

＜第一のホスト材料＞

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一のホスト材料は、第一実施形態に係る第一の化合物である。したがって、本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、第一実施形態に記載された第一の化合物の群から選択される少なくとも１つの化合物を第一のホスト材料として用いることが好ましい。

【０３２５】

（第二の発光層）

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の発光層は、第二のホスト材料及び第二の発光性化合物を含むことが好ましい。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。本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物と第二の発光性化合物とは、互いに同一であるか又は異なる。

【０３２６】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の発光性化合物は、最大ピーク波長が５００ｎｍ以下の発光を示すことが好ましく、最大ピーク波長が４８０ｎｍ以下の発光を示すことがより好ましく、４６０ｎｍ以下の発光を示すことがさらに好ましく、４５５ｎｍ以下の発光を示すことがよりさらに好ましい。

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の発光性化合物は、最大ピーク波長が４３０ｎｍ以上の発光を示すことが好ましく、４４０ｎｍ以上の発光を示すことがより好ましく、４４５ｎｍ以上の発光を示すことがさらに好ましい。

【０３２７】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の発光性化合物は、蛍光発光性の化合物であることが好ましい。

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の発光性化合物は、最大のピーク波長が５００ｎｍ以下の蛍光発光を示すことが好ましく、最大ピーク波長が４８０ｎｍ以下の蛍光発光を示すことがより好ましく、４６０ｎｍ以下の蛍光発光を示すことがさらに好ましく、４５５ｎｍ以下の蛍光発光を示すことがよりさらに好ましい。

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の発光性化合物は、最大ピーク波長が４３０ｎｍ以上の蛍光発光を示すことが好ましく、４４０ｎｍ以上の蛍光発光を示すことがより好ましく、４４５ｎｍ以上の蛍光発光を示すことがさらに好ましい。

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。

【０３２８】

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

【０３２９】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二のホスト材料の一重項エネルギーS_1（Ｈ２）と第二の発光性化合物の一重項エネルギーS_1（Ｄ２）とが、下記数式（数７）の関係を満たすことが好ましい。

$S_1(H2) > S_1(D2)$ …（数７）

【０３３０】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の発光性化合物と、第二のホスト材料とが、前記数式（数７）の関係を満たすことにより、第二の発光性化合物の一重項エネルギーは、第二のホスト材料の一重項エネルギーより小さいため、ＴＴＦ現象によって生成さ

れた一重項励起子は、第二のホスト材料から第二の発光性化合物へエネルギー移動し、第二の発光性化合物の蛍光性発光に寄与する。

【０３３１】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の発光性化合物の三重項エネルギーT_1（Ｄ２）と、第二のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ２）とが下記数式（数８）の関係を満たすことが好ましい。

T_1（Ｄ２）＞T_1（Ｈ２）　…（数８）

【０３３２】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の発光性化合物と、第二のホスト材料とが、前記数式（数８）の関係を満たすことにより、第一の発光層で生成した三重項励起子は、第二の発光層に移動する際、より高い三重項エネルギーを有する第二の発光性化合物ではなく、第二のホスト材料の分子にエネルギー移動する。また、第二のホスト材料上で正孔及び電子が再結合して発生した三重項励起子は、より高い三重項エネルギーを持つ第二の発光性化合物には移動しない。第二の発光性化合物の分子上で再結合し発生した三重項励起子は、速やかに第二のホスト材料の分子にエネルギー移動する。

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

【０３３３】

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

【０３３４】

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

【０３３５】

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

【０３３６】

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

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

【０３３７】

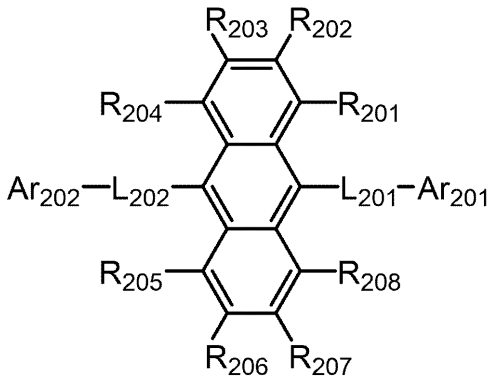
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の発光性化合物は、第二の発光層中に、０．５質量％以上、含有されることが好ましい。すなわち、第二の発光層は、第二の発光性化合物を、第二の発光層の全質量の０．５質量％以上、含有することが好ましく、第二の発光層の全質量の１．０質量％以上、含有することがより好ましく、第二の発光層の全質量の１．２質量％以上、含有することがさらに好ましく、第二の発光層の全質量の１．５質量％以上、含有することがよりさらに好ましい。

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

【０３３８】

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

第二の発光層は、第二のホスト材料を、第二の発光層の全質量の９９質量％以下、含有することが好ましい。
第二の発光層が第二のホスト材料と第二の発光性化合物とを含有する場合、第二のホスト材料及び第二の発光性化合物の合計含有率の上限は、１００質量％である。
【０３３９】
なお、本実施形態は、第二の発光層に、第二のホスト材料と第二の発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。
第二の発光層は、第二のホスト材料を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。第二の発光層は、第二の発光性化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。
【０３４０】
＜第二のホスト材料＞
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二のホスト材料は、特に限定されないが、例えば、下記一般式（２）で表される第二の化合物等が挙げられる。
【０３４１】
（第二の化合物）
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第二の化合物は、下記一般式（２）で表される化合物であることが好ましい。第二のホスト材料は、下記一般式（２）で表される第二の化合物であることが好ましい。
【０３４２】
【化８９】



(2)

【０３４３】
（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、
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、
－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、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、
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。）
（前記第二のホスト材料中、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。）
【０３４４】
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、
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、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。

【０３４５】

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

【０３４６】

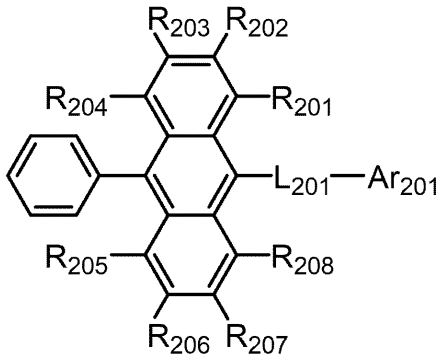
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、Ar_{201}及びAr_{202}は、それぞれ独立に、フェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ジフェニルフルオレニル基、ジメチルフルオレニル基、ベンゾジフェニルフルオレニル基、ベンゾジメチルフルオレニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ナフトベンゾフラニル基、又はナフトベンゾチエニル基であることが好ましい。

【０３４７】

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

【０３４８】

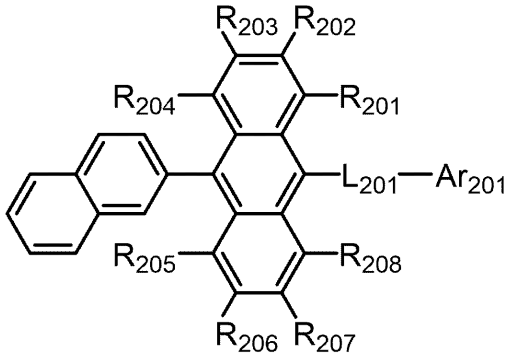
【化９０】



(201)

【０３４９】

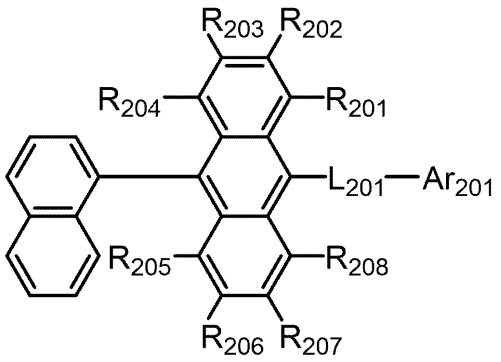
【化９１】



(202)

【０３５０】

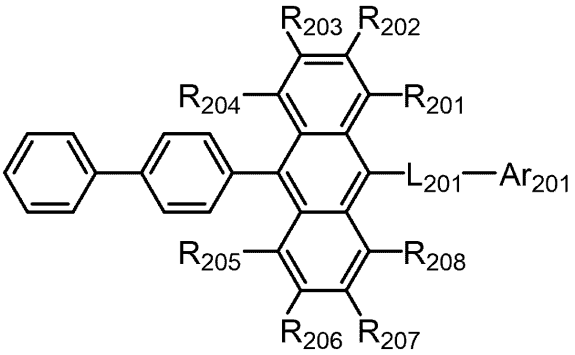
【化９２】



(203)

【０３５１】

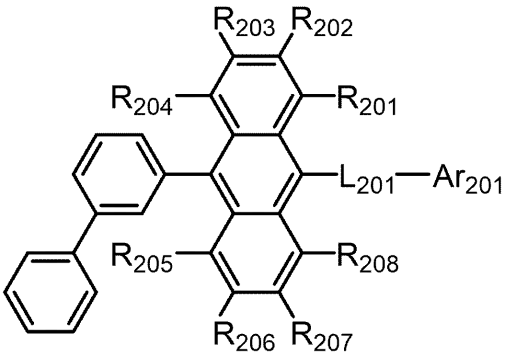
【化９３】



(204)

【０３５２】

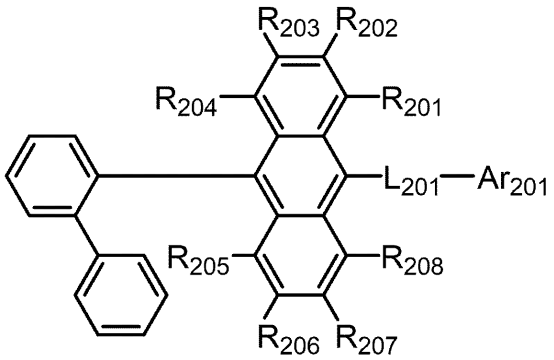
【化９４】



(205)

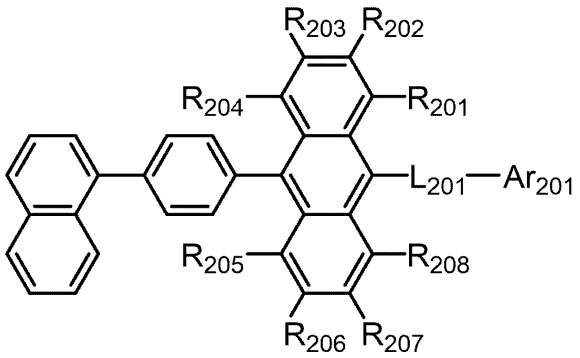
【０３５３】

【化９５】



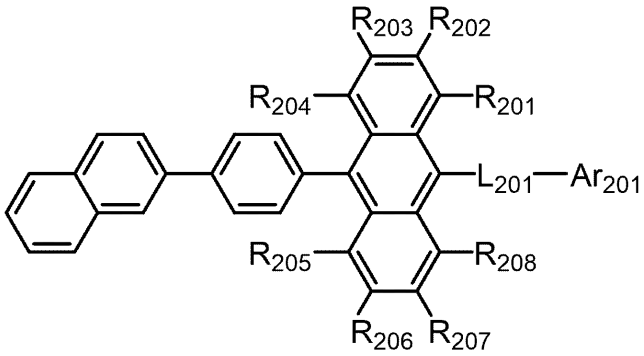
(206)

【０３５４】
【化９６】



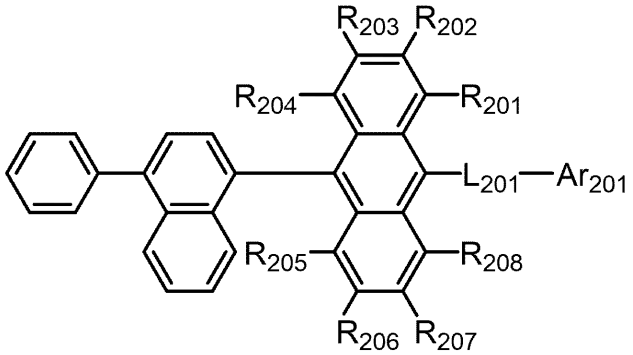
(207)

【０３５５】
【化９７】



(208)

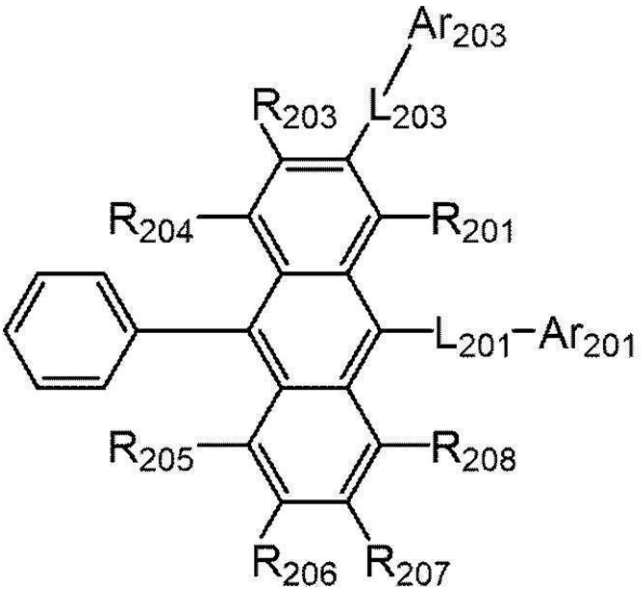
【０３５６】
【化９８】



(209)

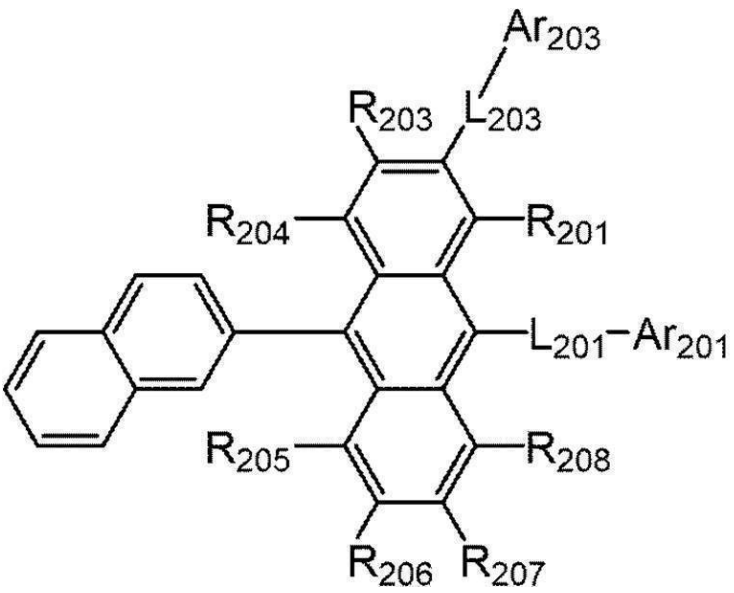
【０３５７】
（前記一般式（２０１）～（２０９）中、
Ｌ２０１及びＡｒ２０１は、前記一般式（２）におけるＬ２０１及びＡｒ２０１と同義であり、
Ｒ２０１～Ｒ２０８は、それぞれ独立に、前記一般式（２）におけるＲ２０１～Ｒ２０８と同義である。）
【０３５８】
前記一般式（２）で表される第二の化合物は、下記一般式（２２１）、一般式（２２２）、一般式（２２３）、一般式（２２４）、一般式（２２５）、一般式（２２６）、一般式（２２７）、一般式（２２８）又は一般式（２２９）で表される化合物であることも好ましい。

【０３５９】
【化９９】



(221)

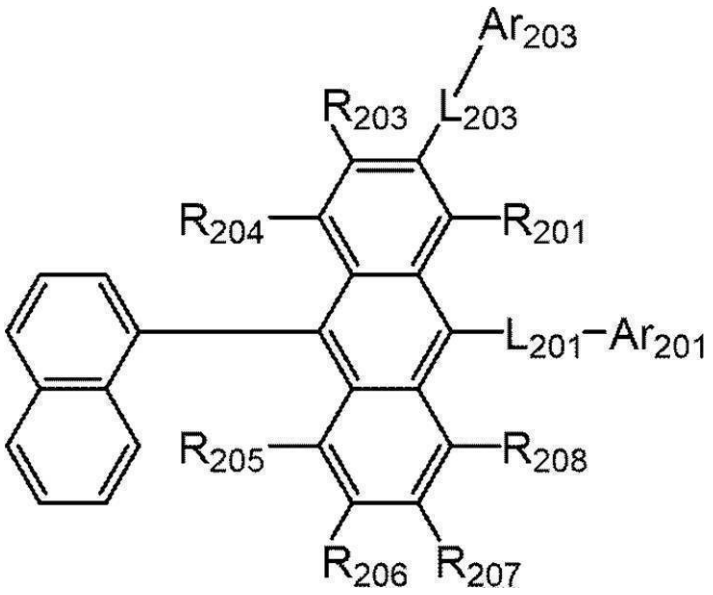
【０３６０】
【化１００】



(222)

【０３６１】

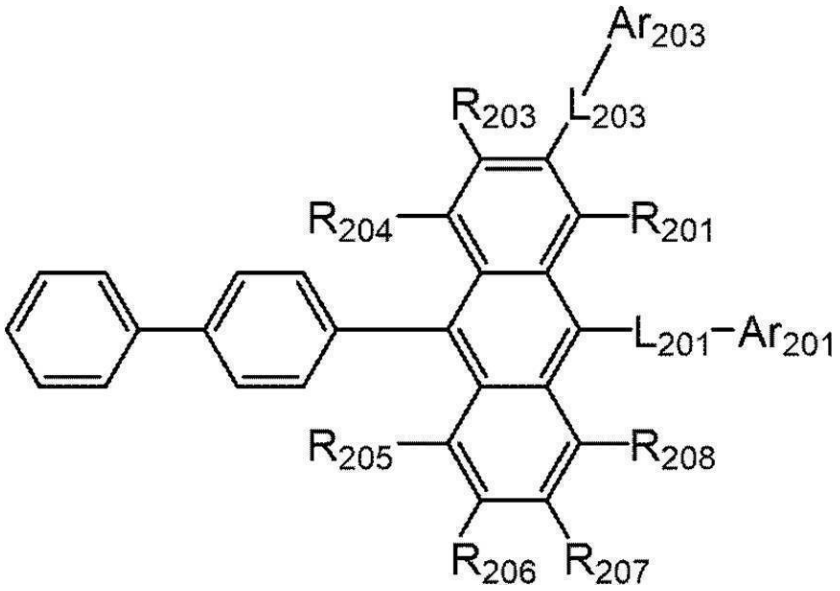
【化１０１】



(223)

【０３６２】

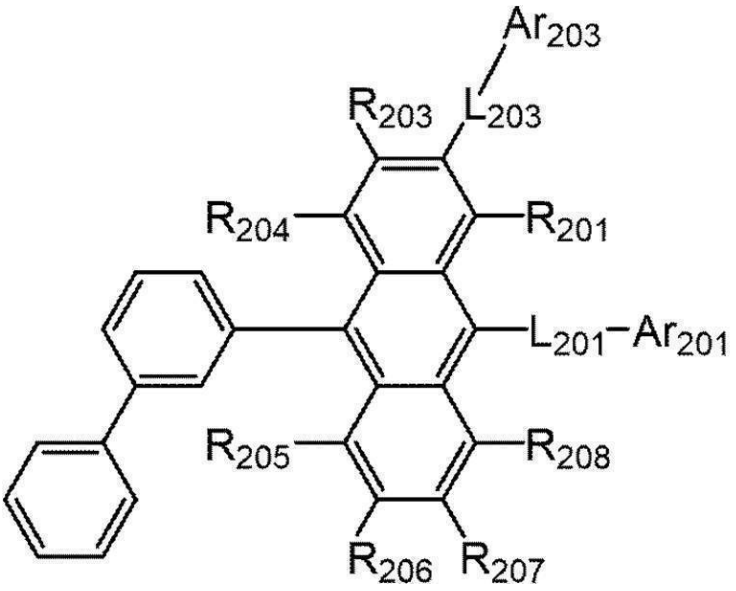
【化１０２】



(224)

【０３６３】

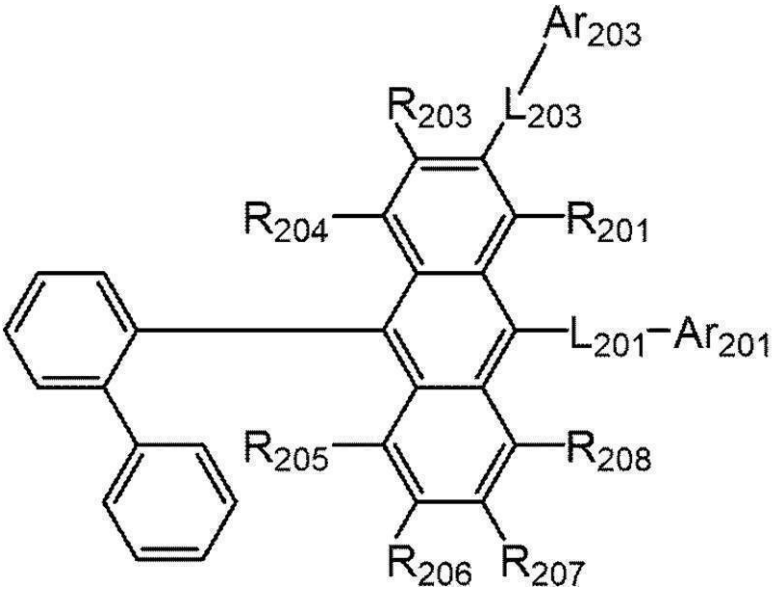
【化１０３】



(225)

【０３６４】

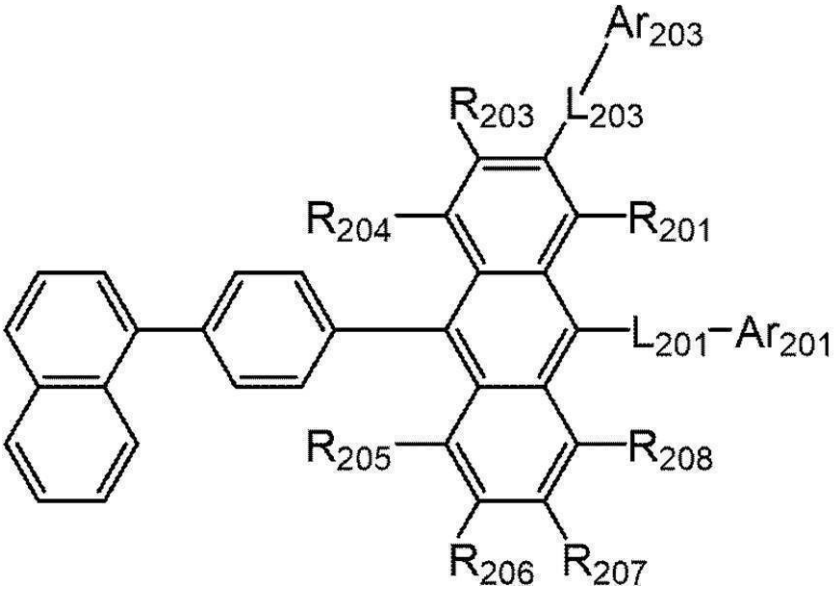
【化１０４】



(226)

【０３６５】

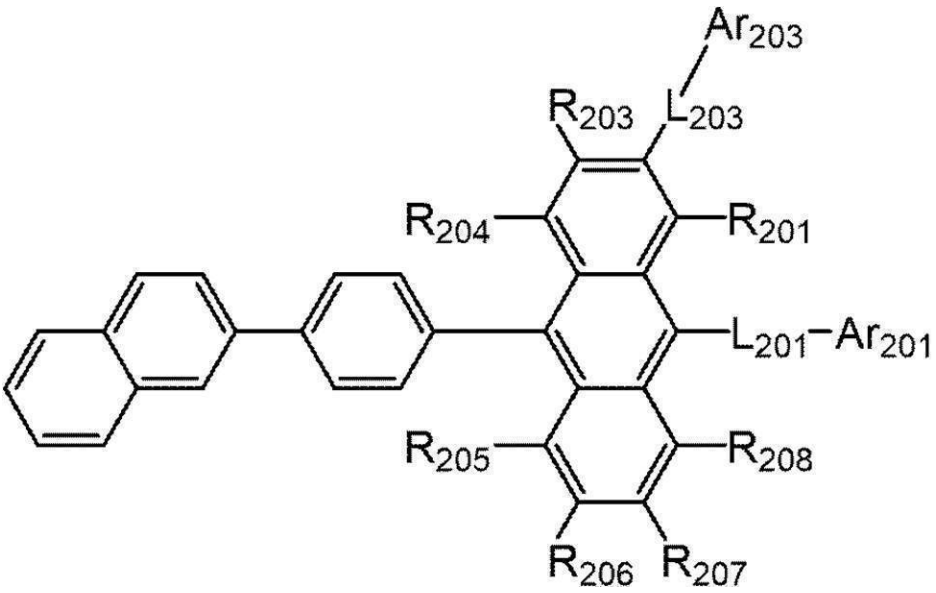
【化１０５】



(227)

【０３６６】

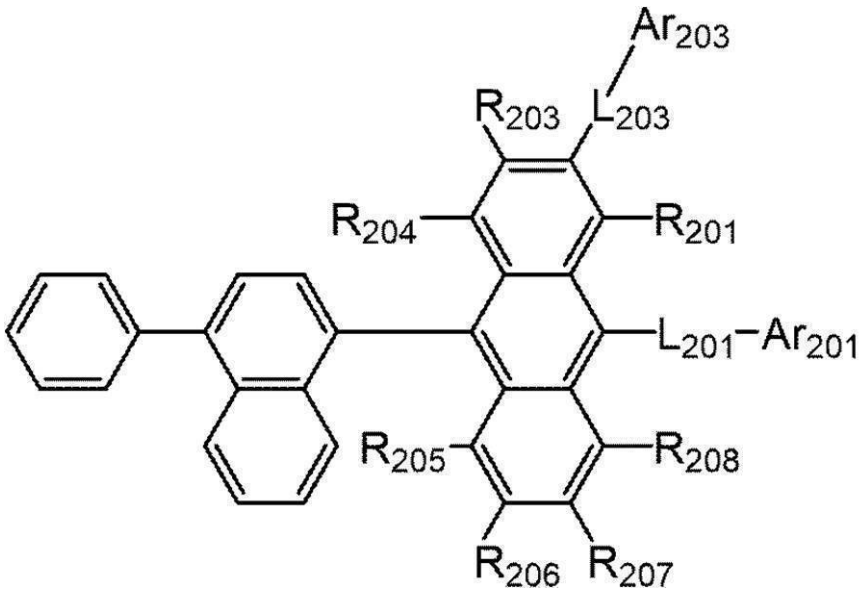
【化１０６】



(228)

【０３６７】

【化１０７】



(229)

【０３６８】

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

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

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

L_{203}は、前記一般式（２）におけるL_{201}と同義であり、

L_{203}とL_{201}は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar_{203}は、前記一般式（２）におけるAr_{201}と同義であり、

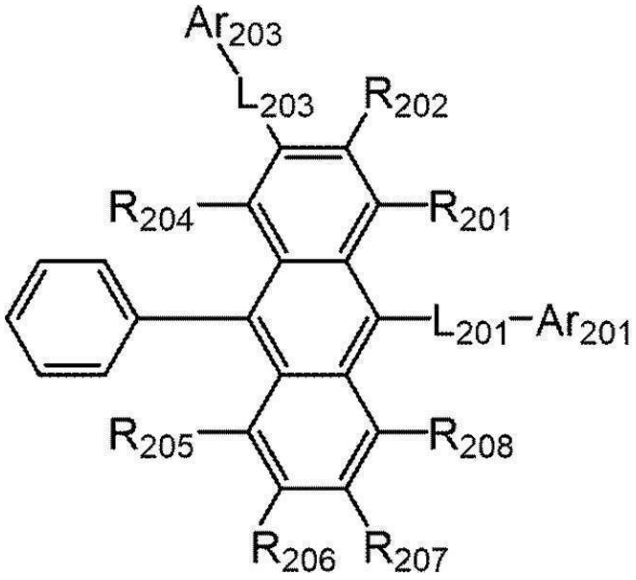
Ar_{203}とAr_{201}は、互いに同一であるか、又は異なる。）

【０３６９】

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。

【０３７０】

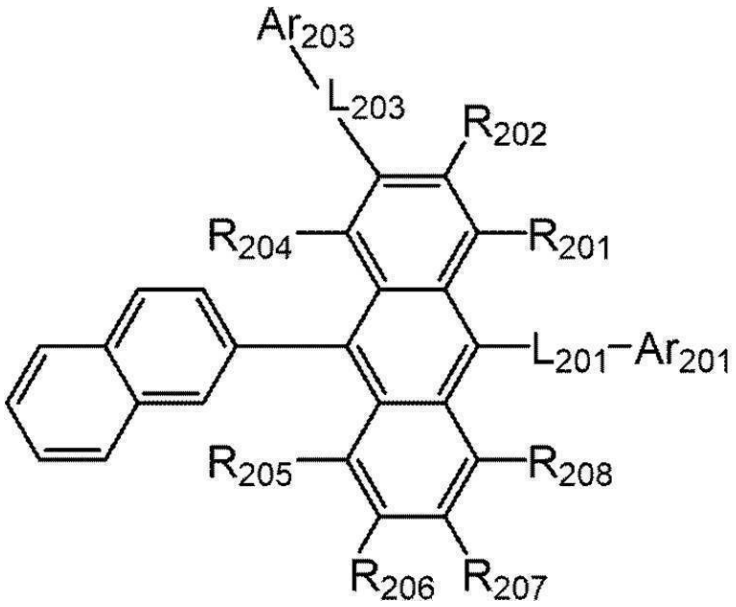
【化１０８】



(241)

【０３７１】

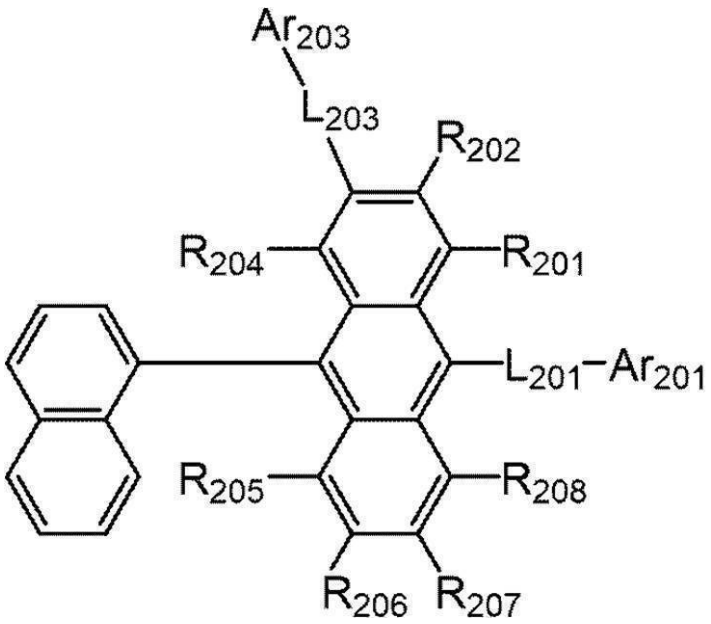
【化１０９】



(242)

【０３７２】

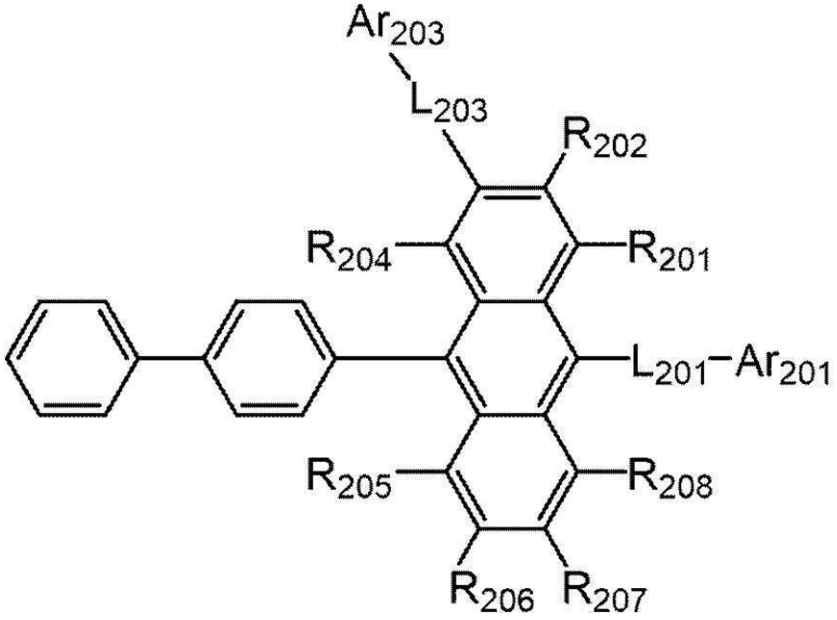
【化１１０】



(243)

【０３７３】

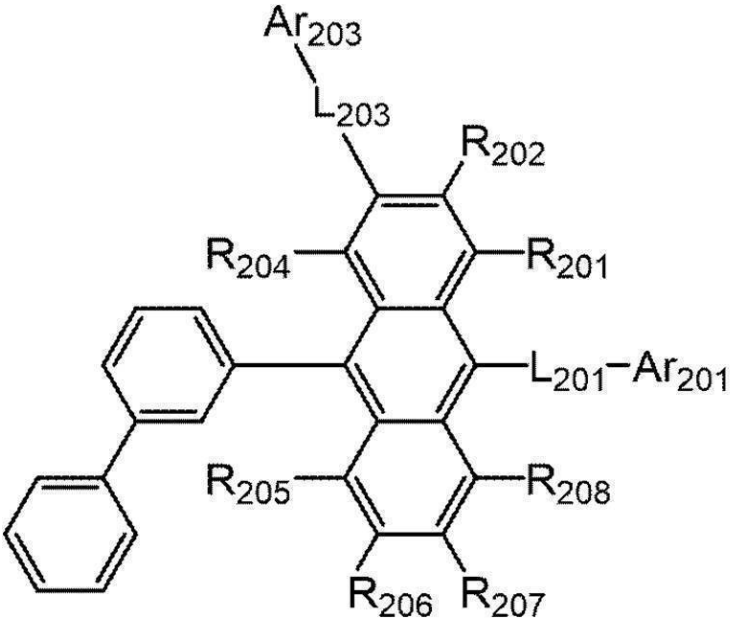
【化１１１】



(244)

【０３７４】

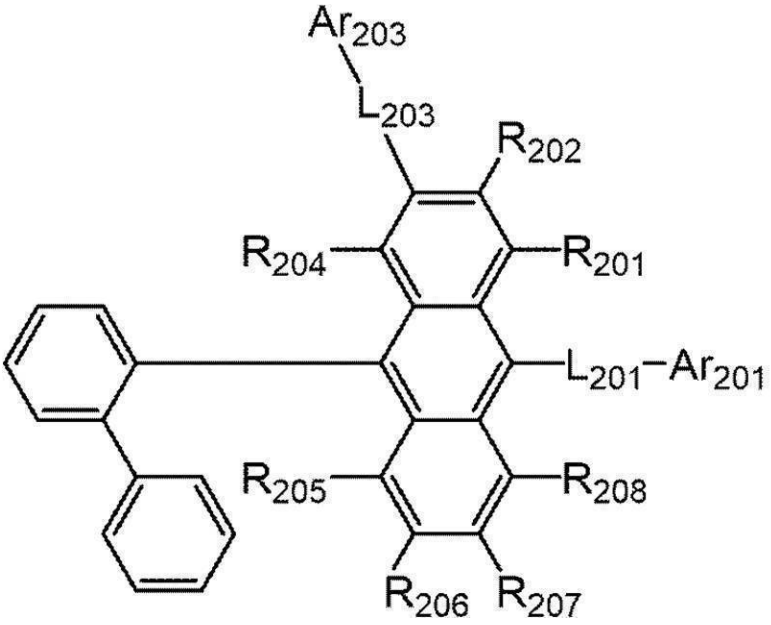
【化１１２】



(245)

【０３７５】

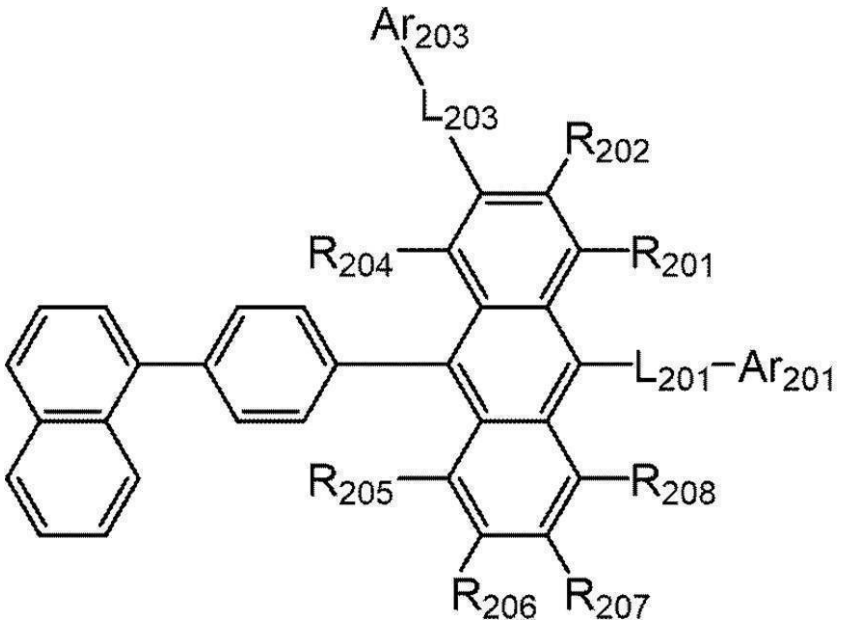
【化１１３】



(246)

【０３７６】

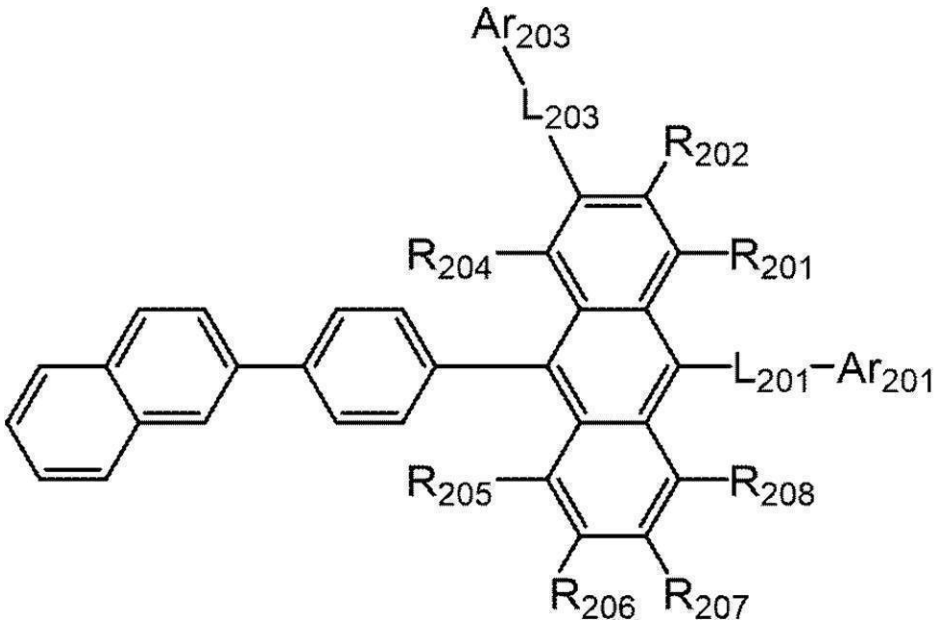
【化１１４】



(247)

【０３７７】

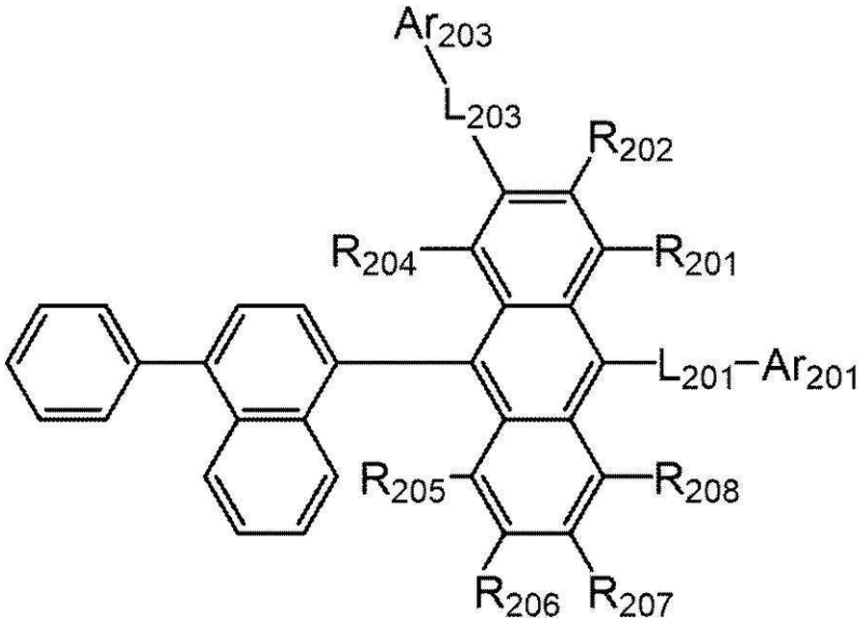
【化１１５】



(248)

【０３７８】

【化１１６】



(249)

【０３７９】

（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。）

【０３８０】

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。

【０３８１】

Ｌ２０１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、Ａｒ２０１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。

【０３８２】

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Ｒ２０１～Ｒ２０８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、Ｒ２０１～Ｒ２０８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。

Ｒ２０１～Ｒ２０８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、下記数式（数３０）に記載のμｅ（Ｈ２）＞μｅ（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、μｅ（Ｈ２）＞μｅ（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、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（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、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、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Ｒ２０１～Ｒ２０８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（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、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、及びニトロ基ではないことがより好ましい。

【０３８３】

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、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も好ましい。

【０３８４】

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、Ｒ２０１～Ｒ２０８は、水素原子であることが好ましい。

【０３８５】

第二の化合物中、Ｒ２０１～Ｒ２０８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。Ｒ２０１～Ｒ２０８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。

【０３８６】

アントラセン骨格の置換基であるＲ２０１～Ｒ２０８がかさ高い置換基ではなく、置換基としてのＲ２０１～Ｒ２０８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Ｒ２０１～Ｒ２０８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Ｒ２０１～Ｒ２０８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Ｒ２０１～Ｒ２０８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（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、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、及びニトロ基ではないことがより好ましい。

【０３８７】

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。

【０３８８】

（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。

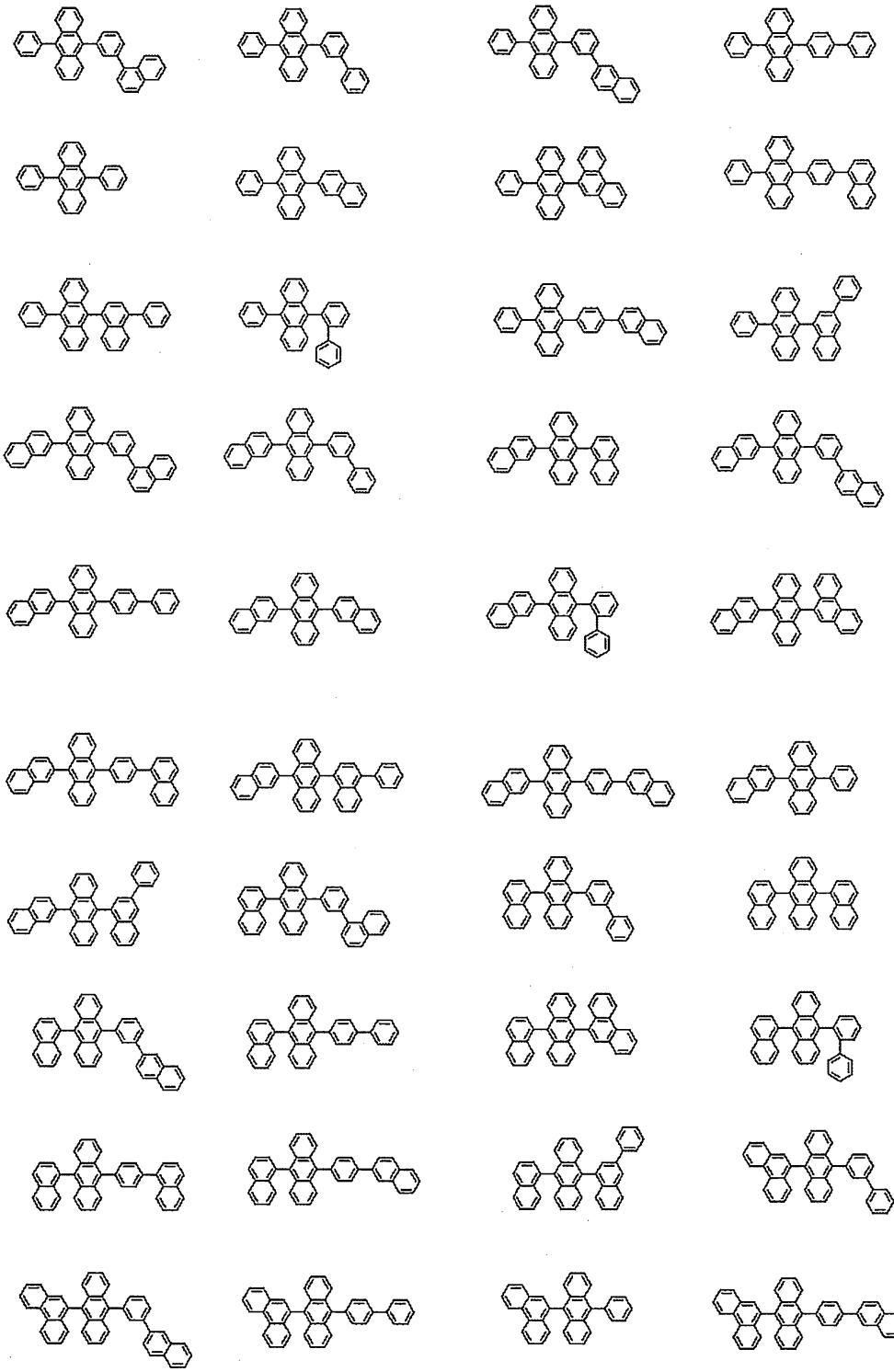
【０３８９】

（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。

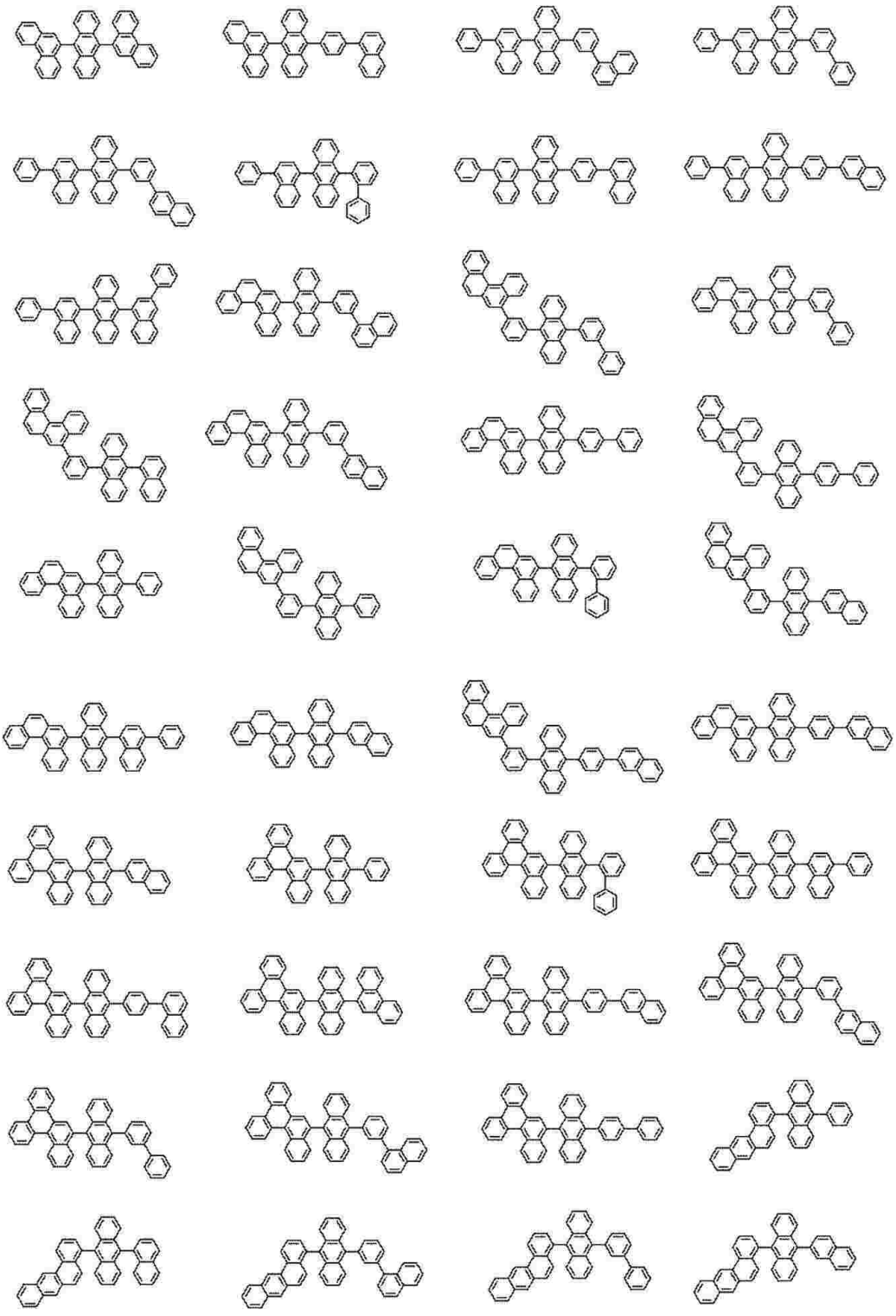
【０３９０】

【化１１７】



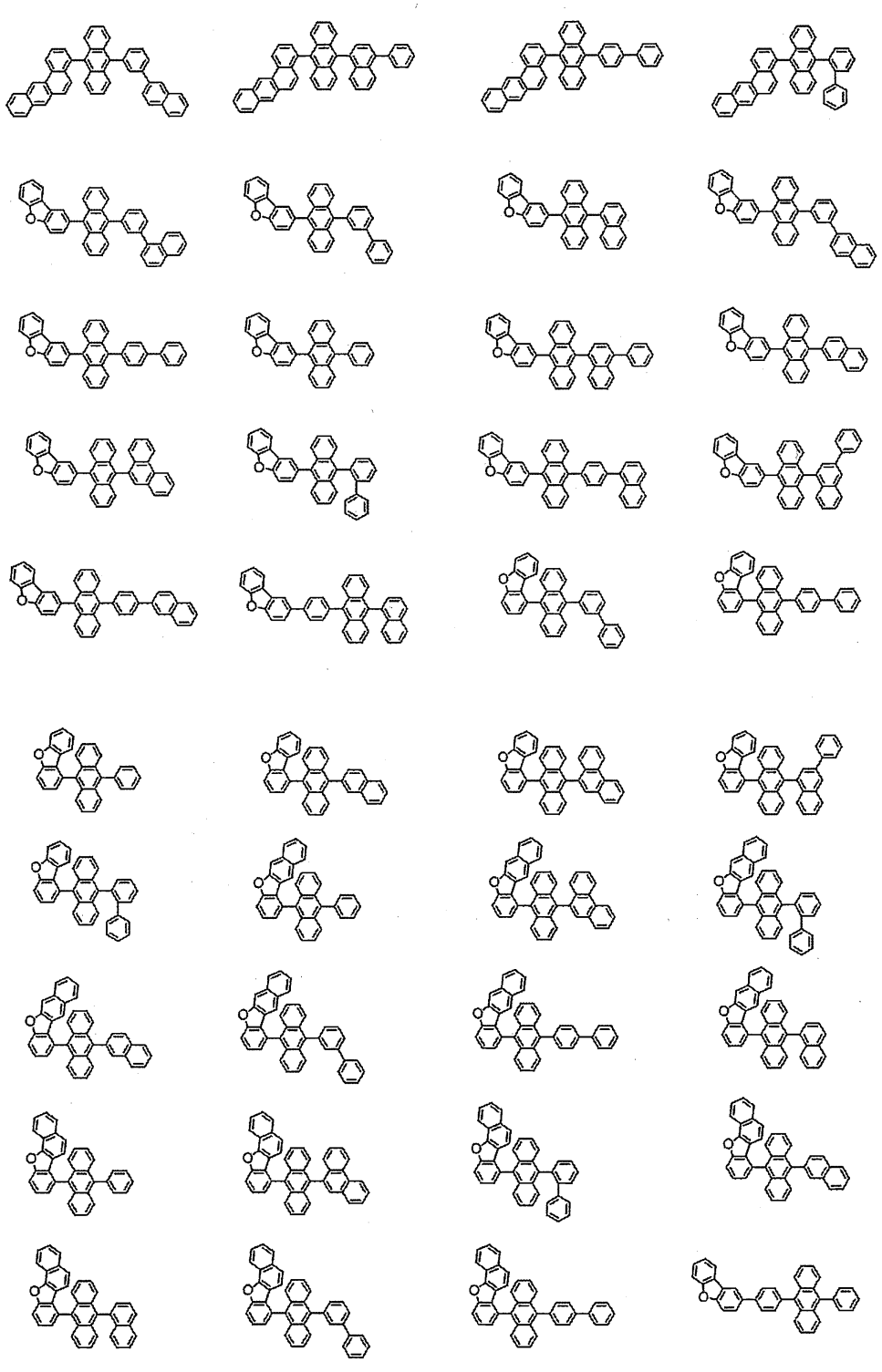
【０３９１】

【化１１８】



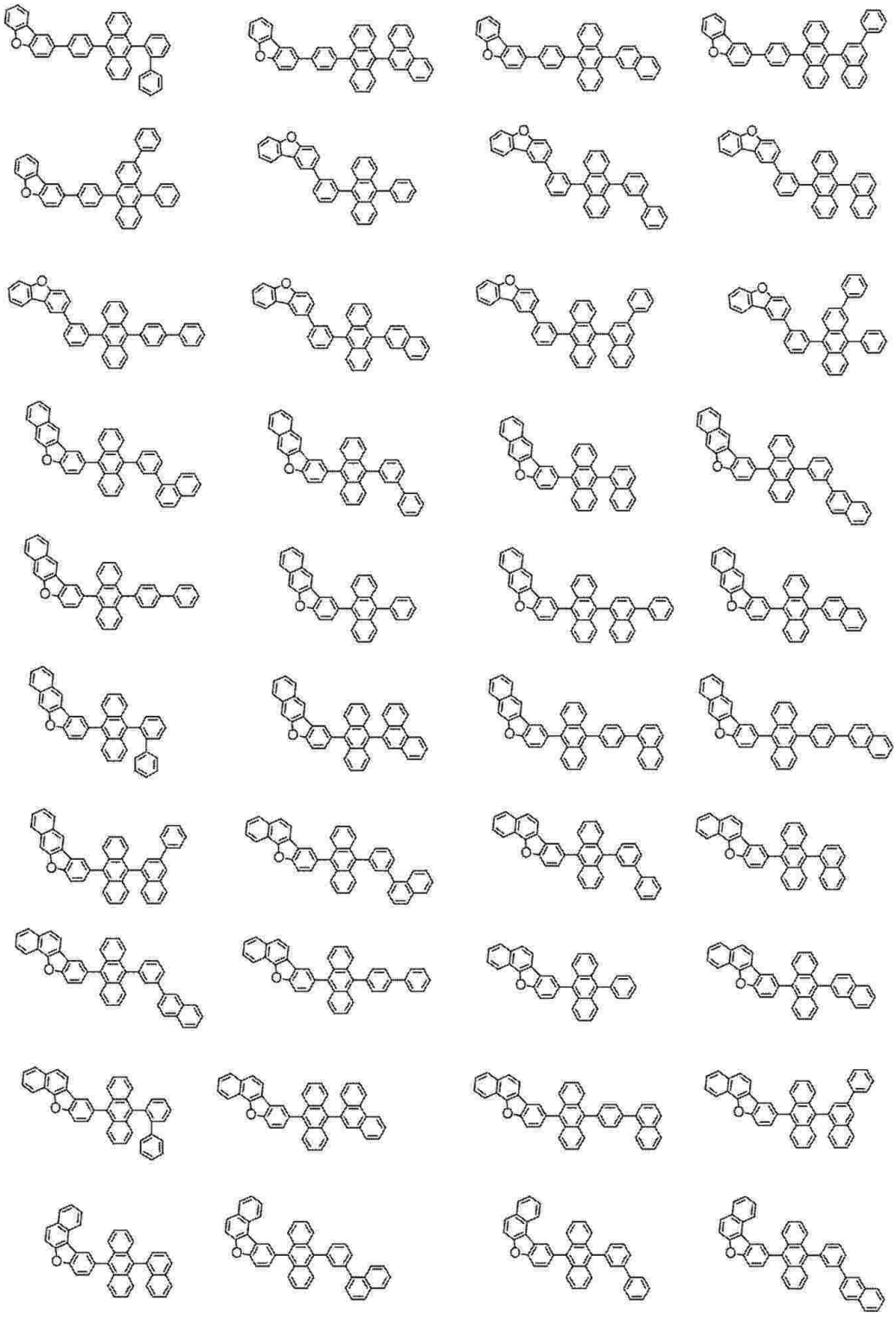
【０３９２】

【化１１９】



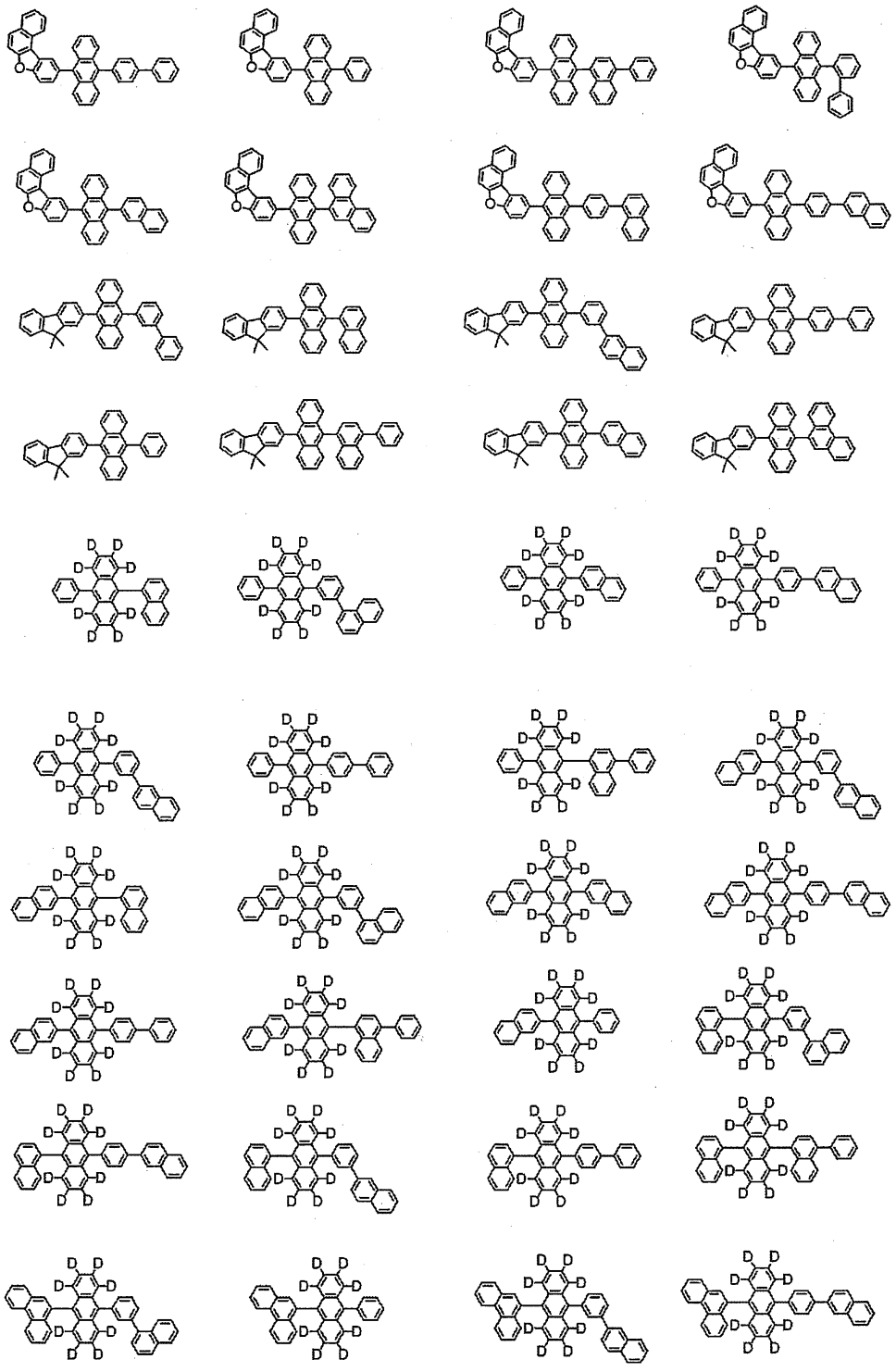
【０３９３】

【化１２０】



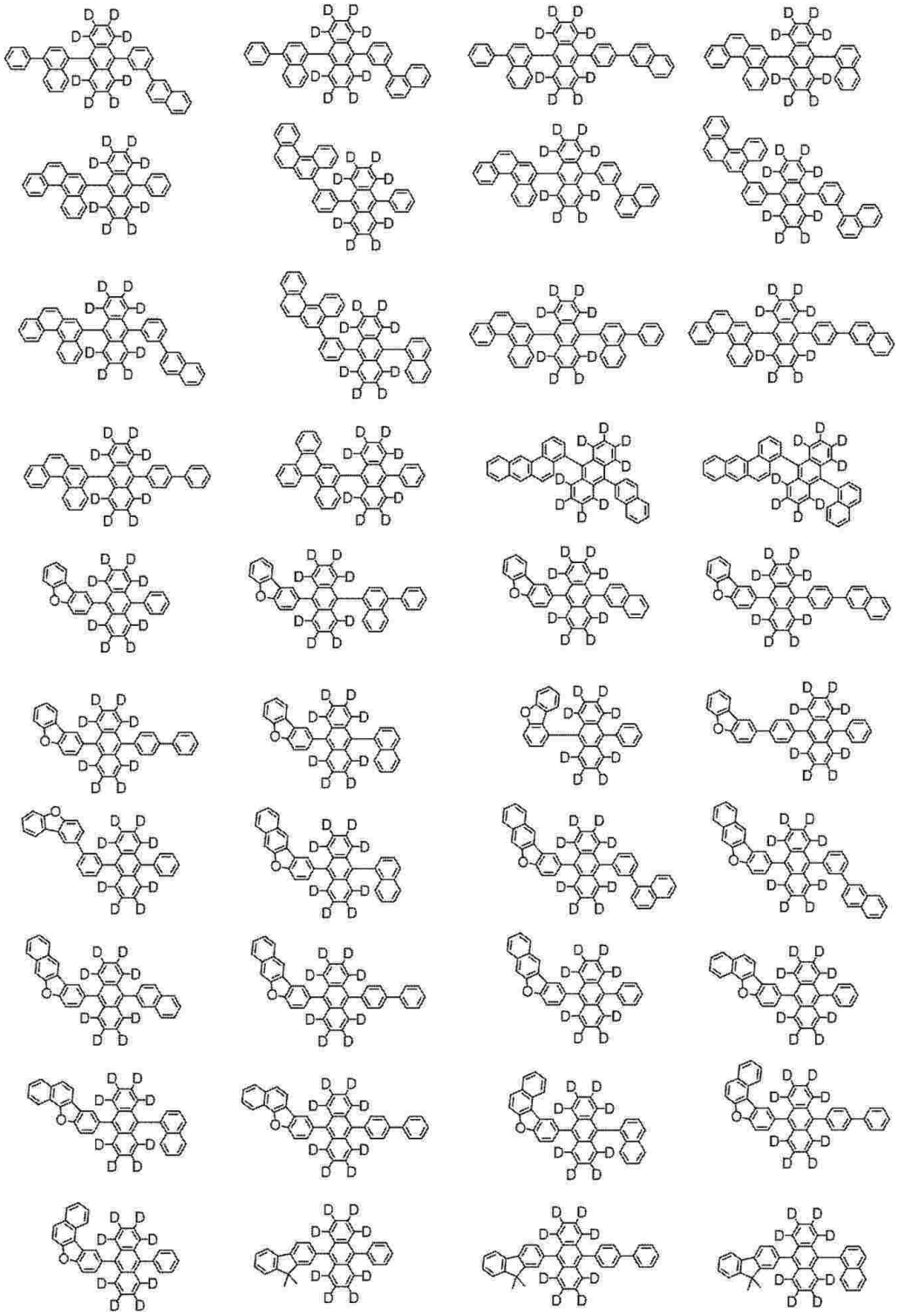
【０３９４】

【化１２１】



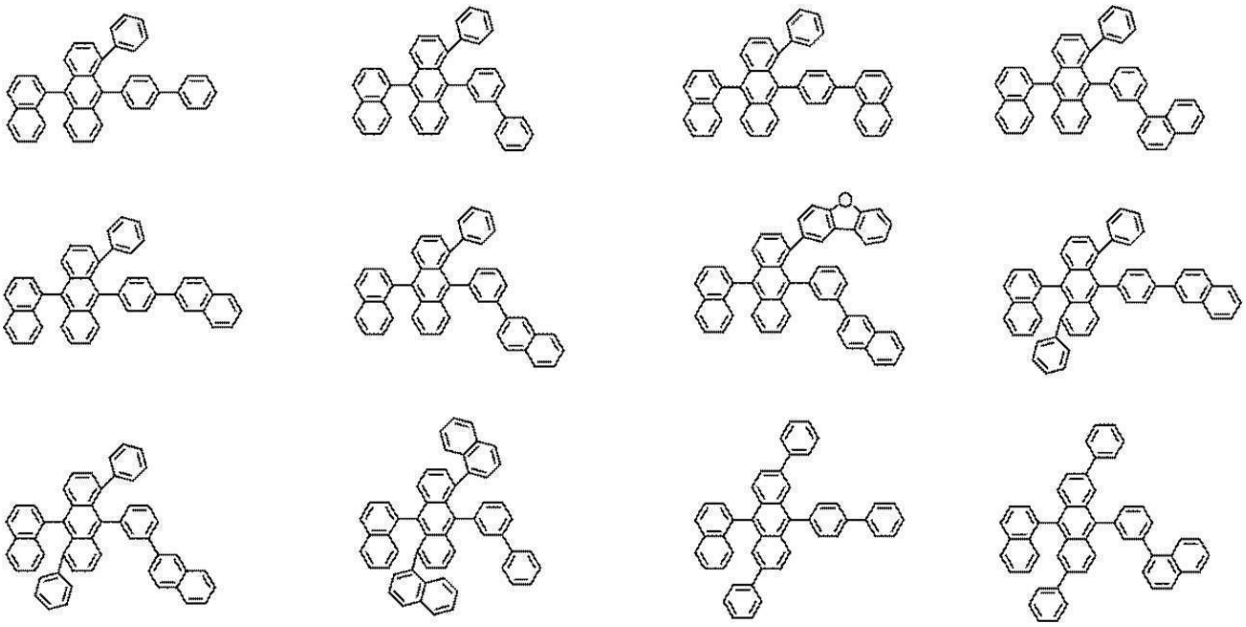
【０３９５】

【化１２２】



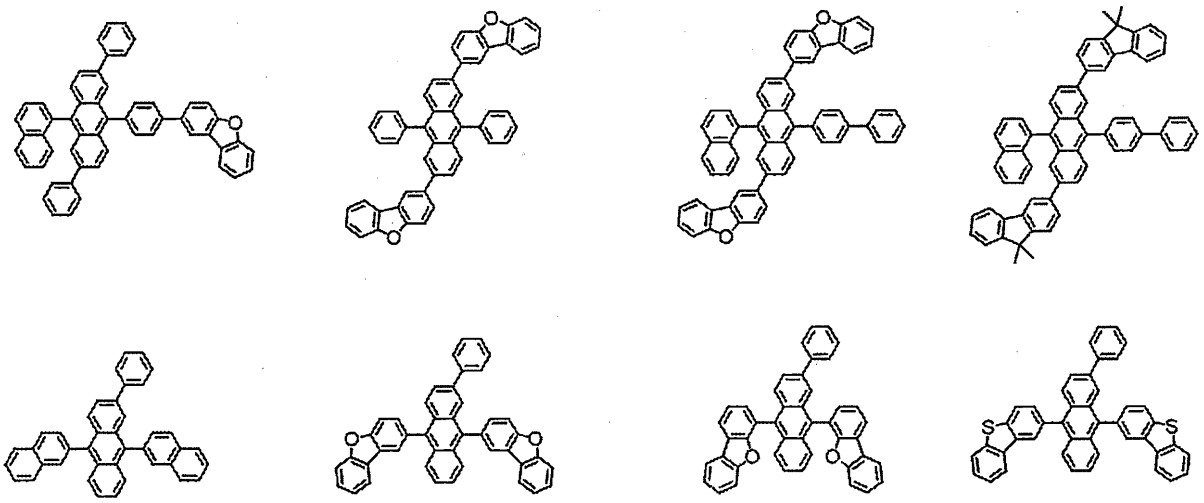
【０３９６】

【化１２３】



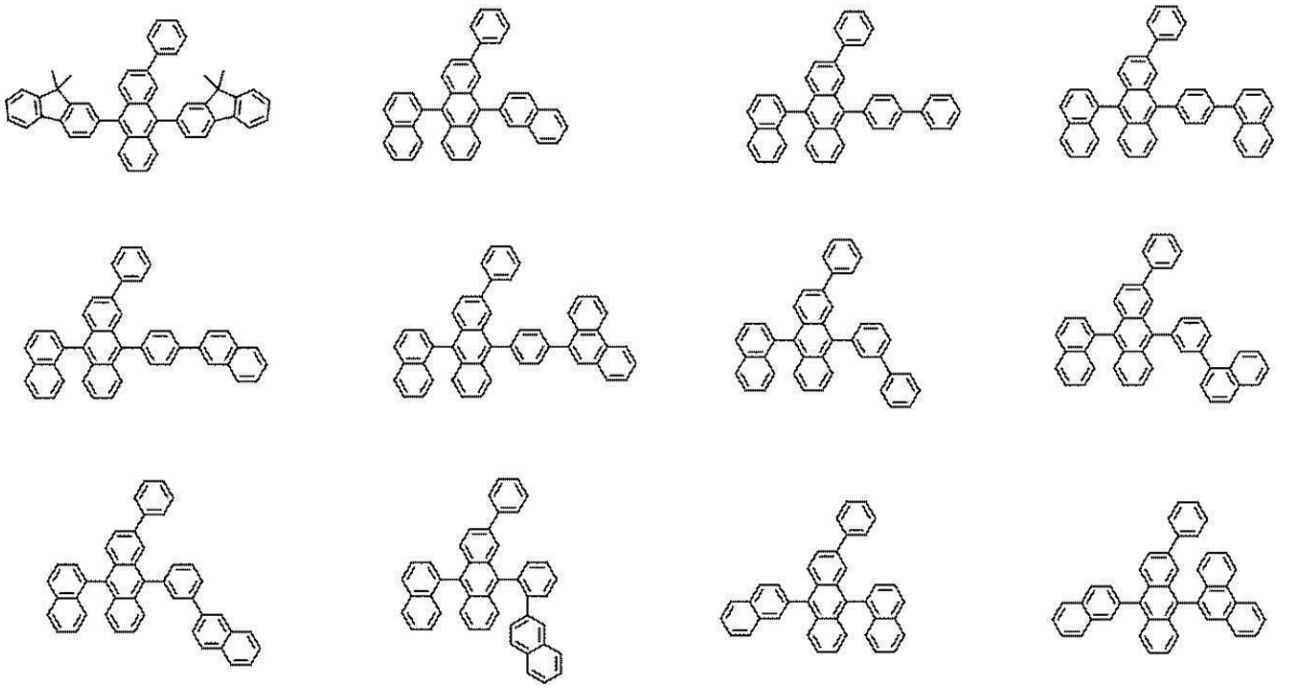
【０３９７】

【化１２４】



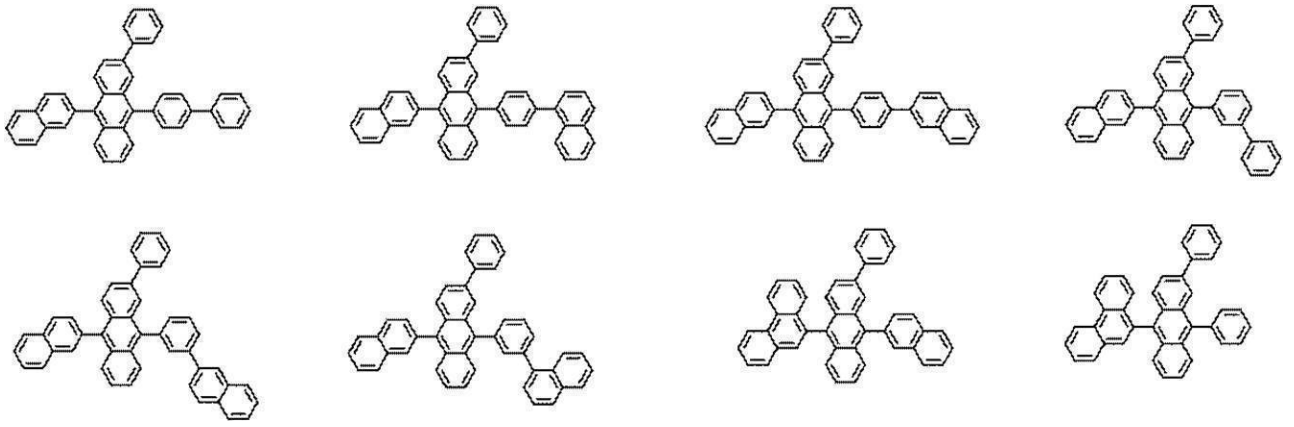
【０３９８】

【化１２５】



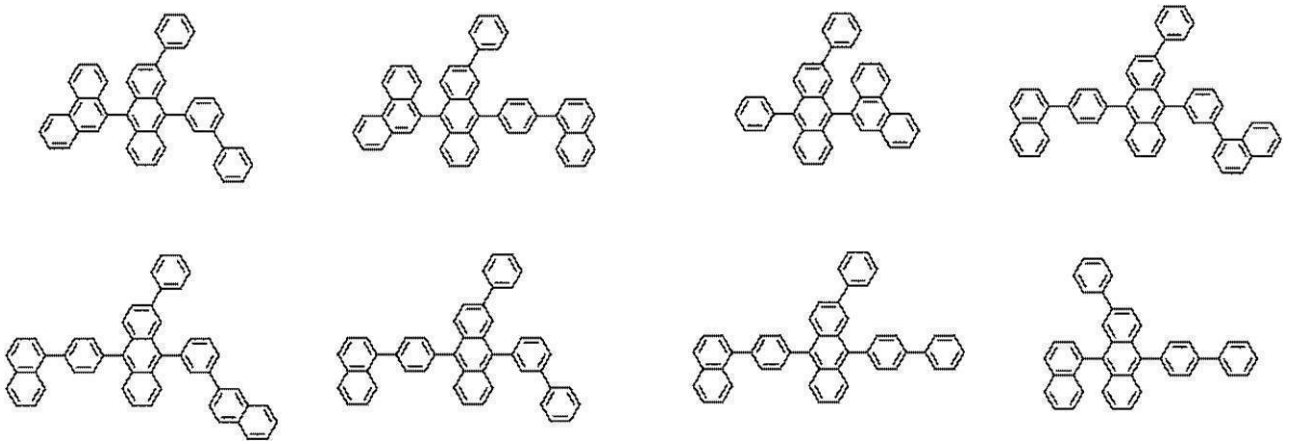
【０３９９】

【化１２６】



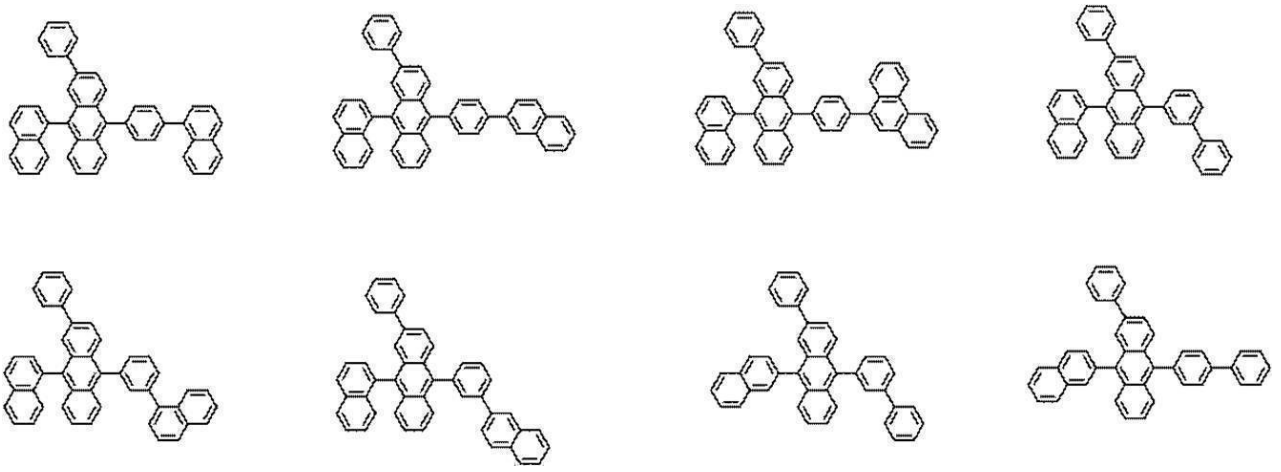
【０４００】

【化１２７】



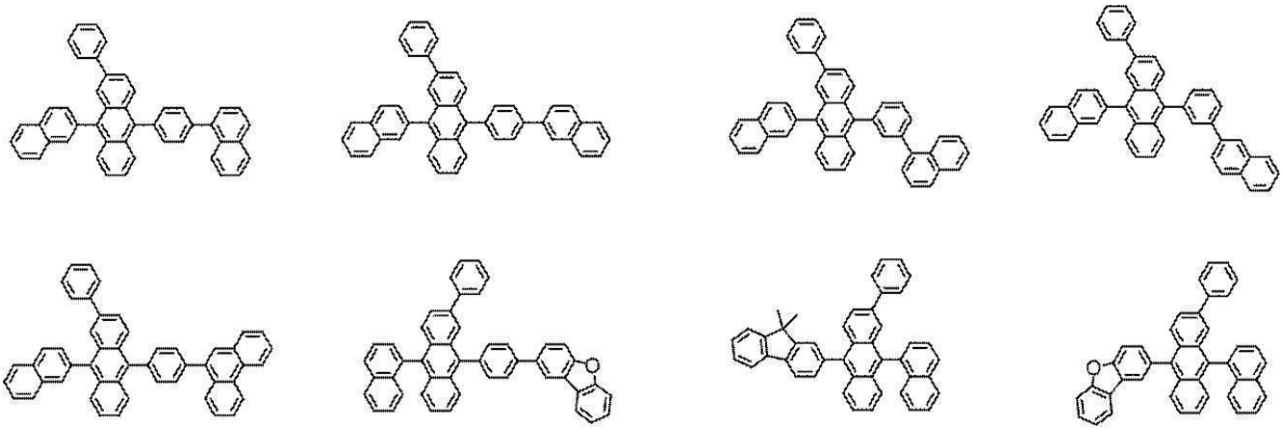
【０４０１】

【化１２８】



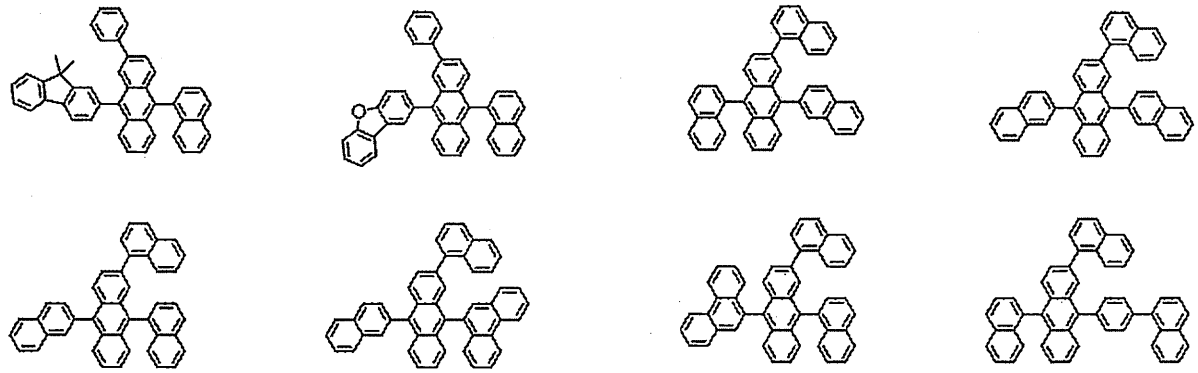
【０４０２】

【化１２９】



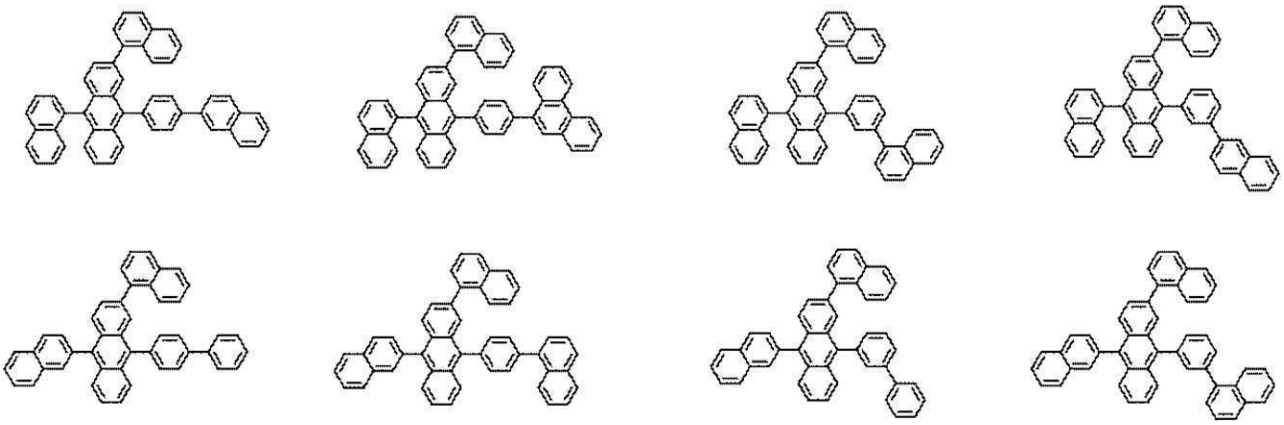
【０４０３】

【化１３０】



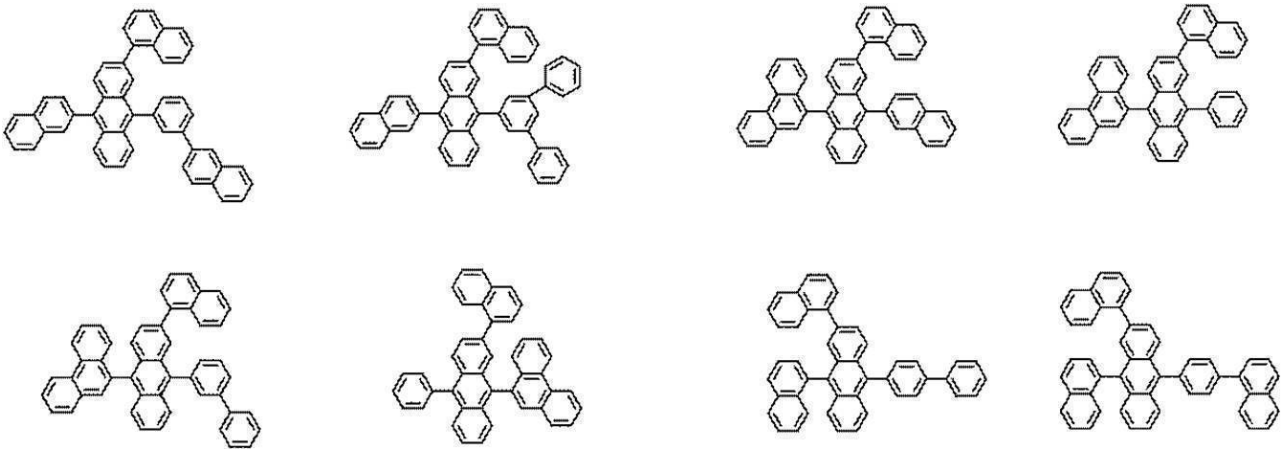
【０４０４】

【化１３１】



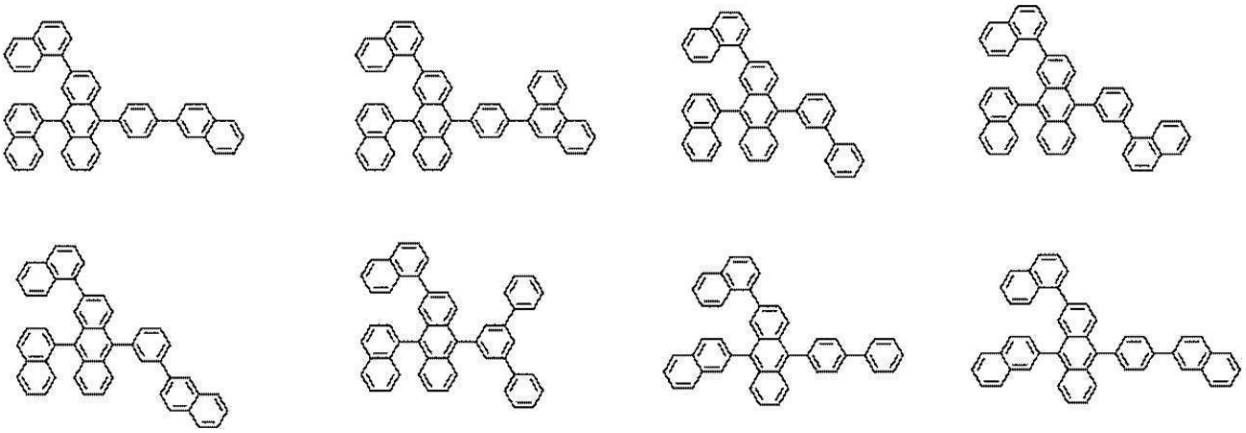
【０４０５】

【化１３２】



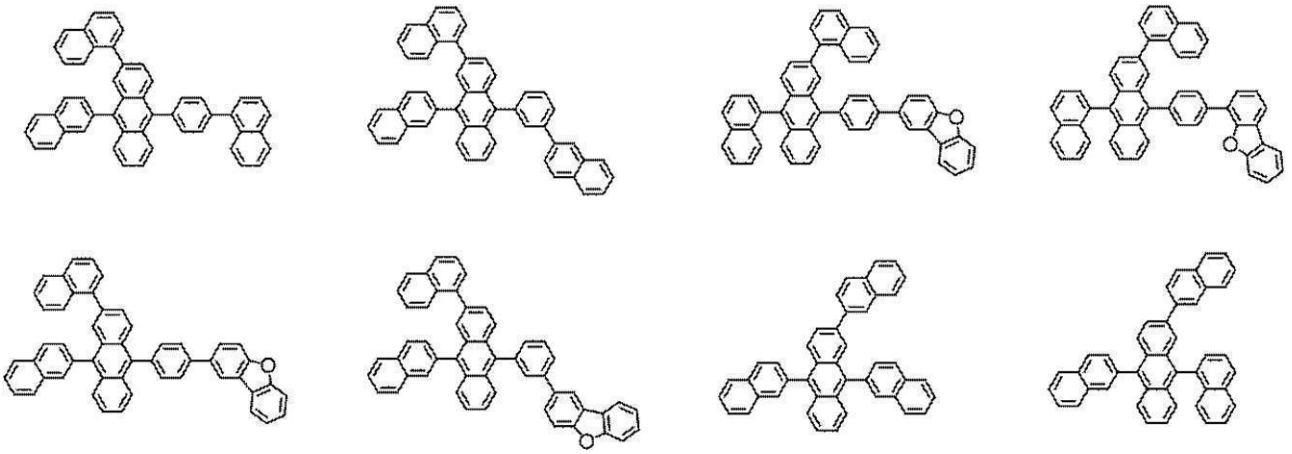
【０４０６】

【化１３３】



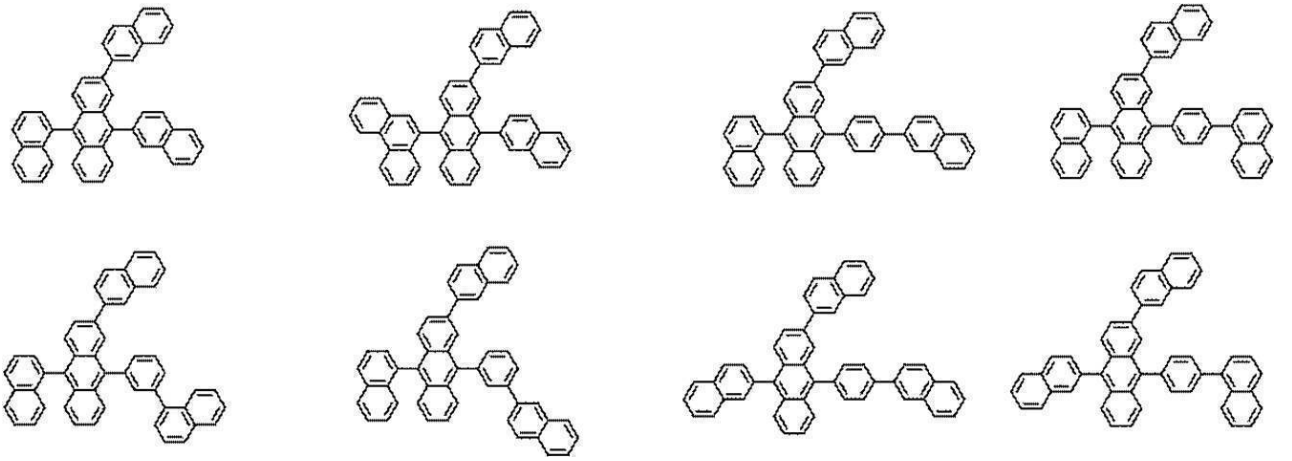
【０４０７】

【化１３４】



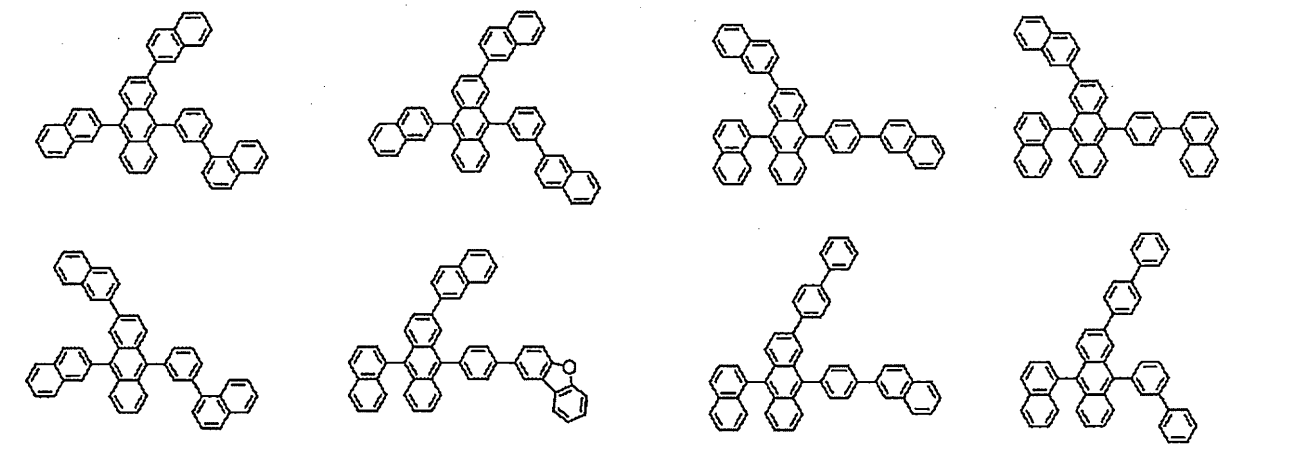
【０４０８】

【化１３５】



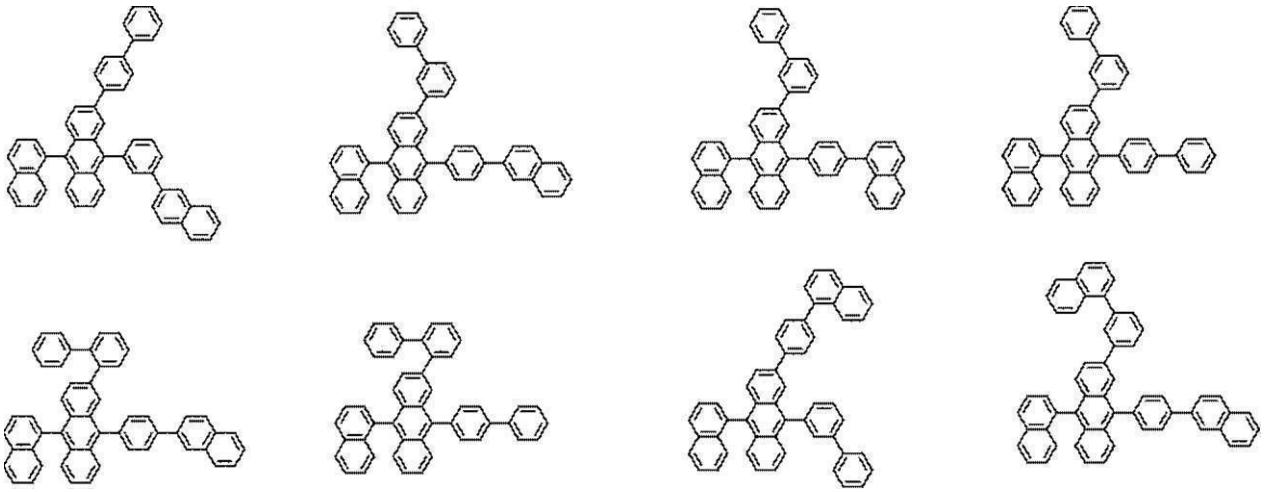
【０４０９】

【化１３６】



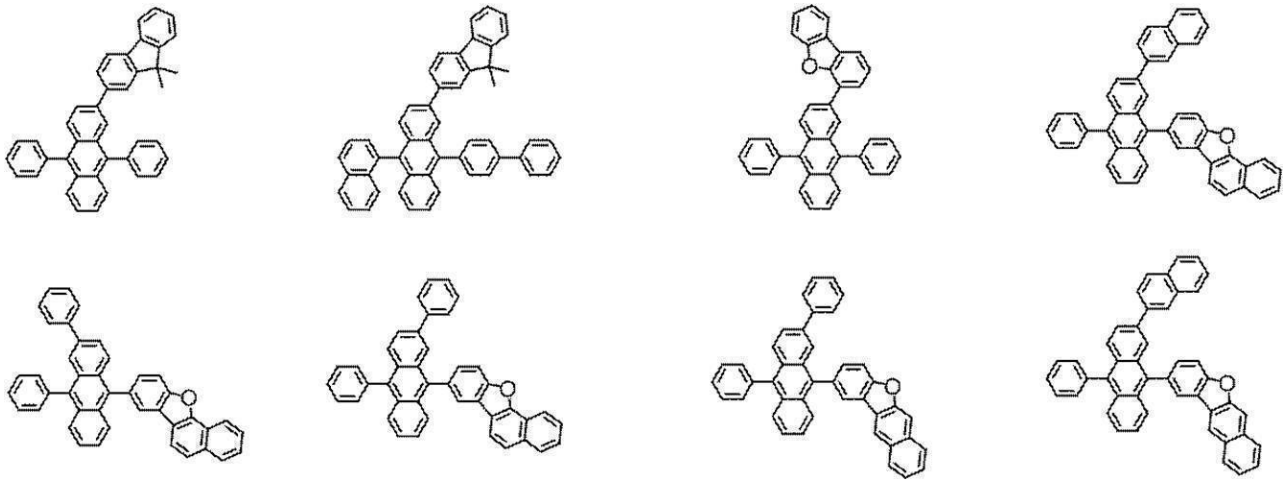
【０４１０】

【化１３７】



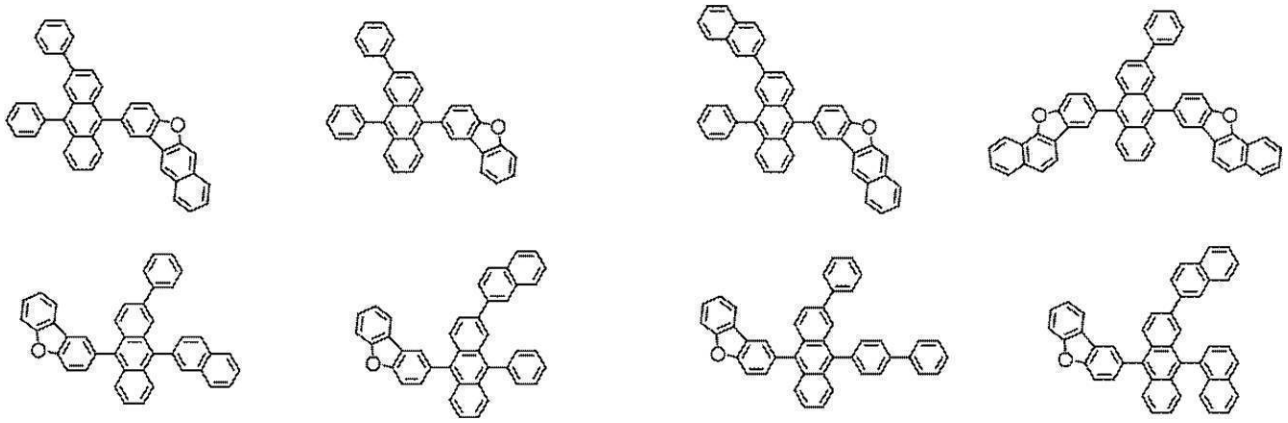
【０４１１】

【化１３８】



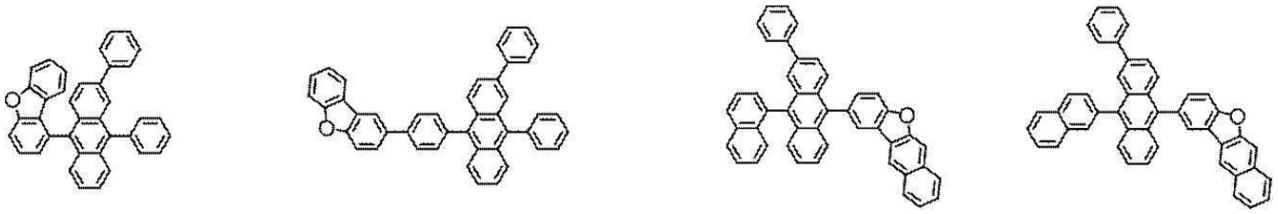
【０４１２】

【化１３９】



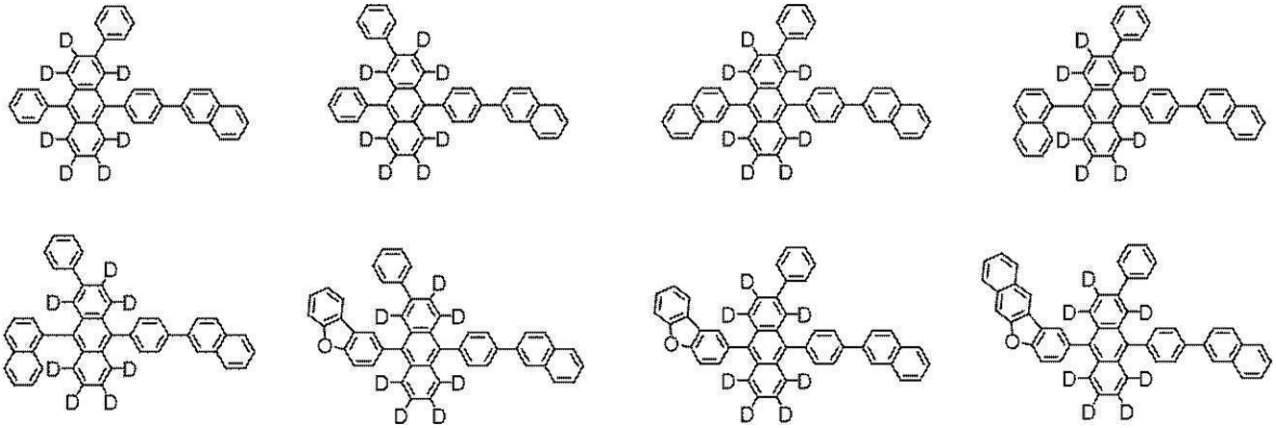
【０４１３】

【化１４０】



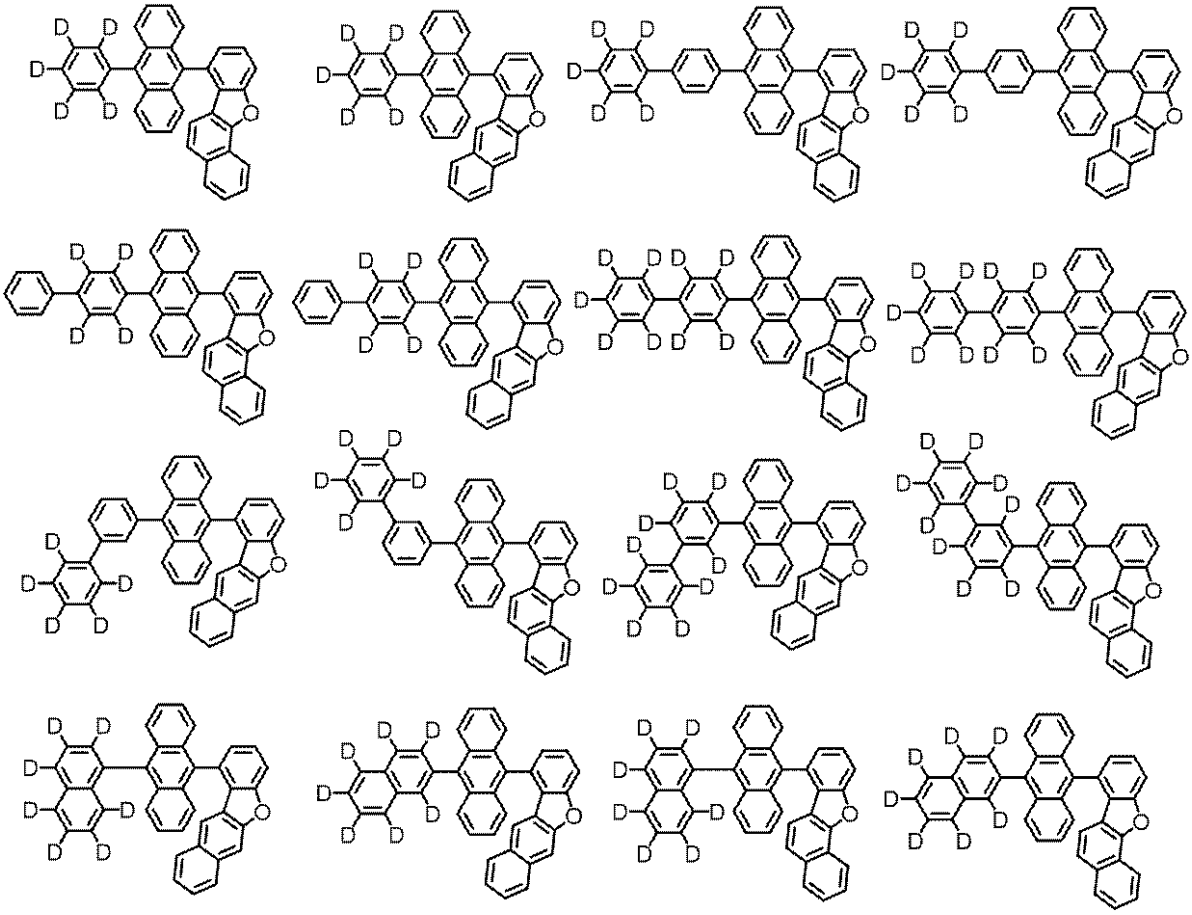
【０４１４】

【化１４１】



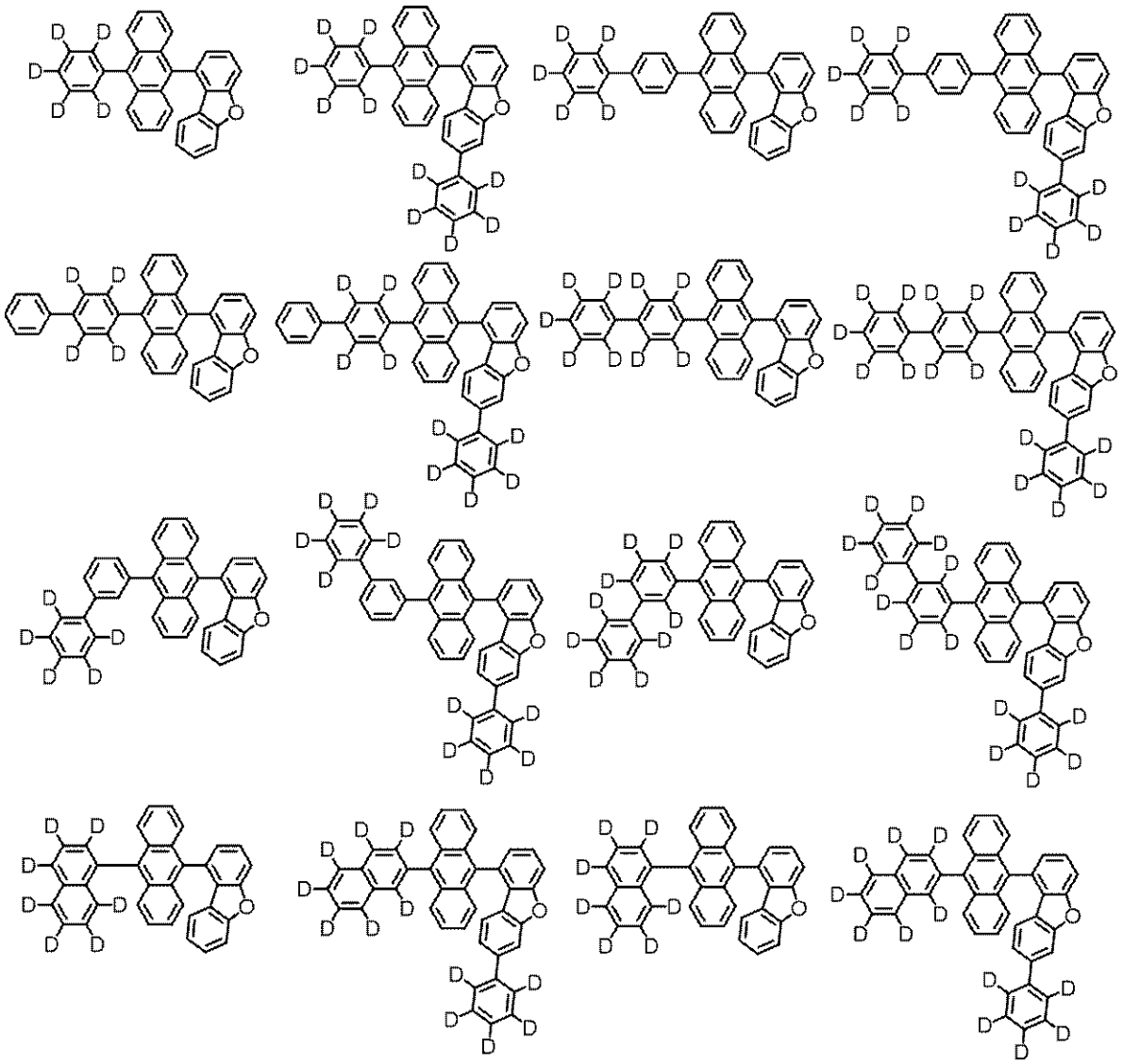
【０４１５】

【化１４２】



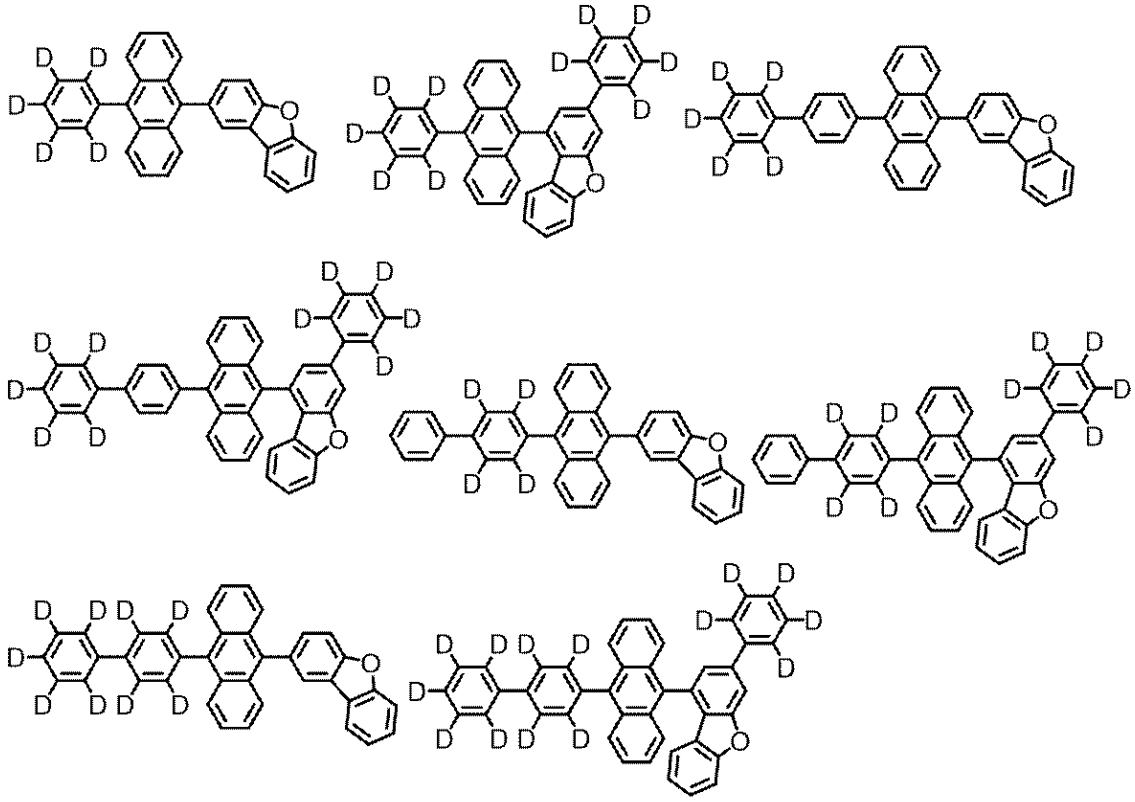
【０４１６】

【化１４３】



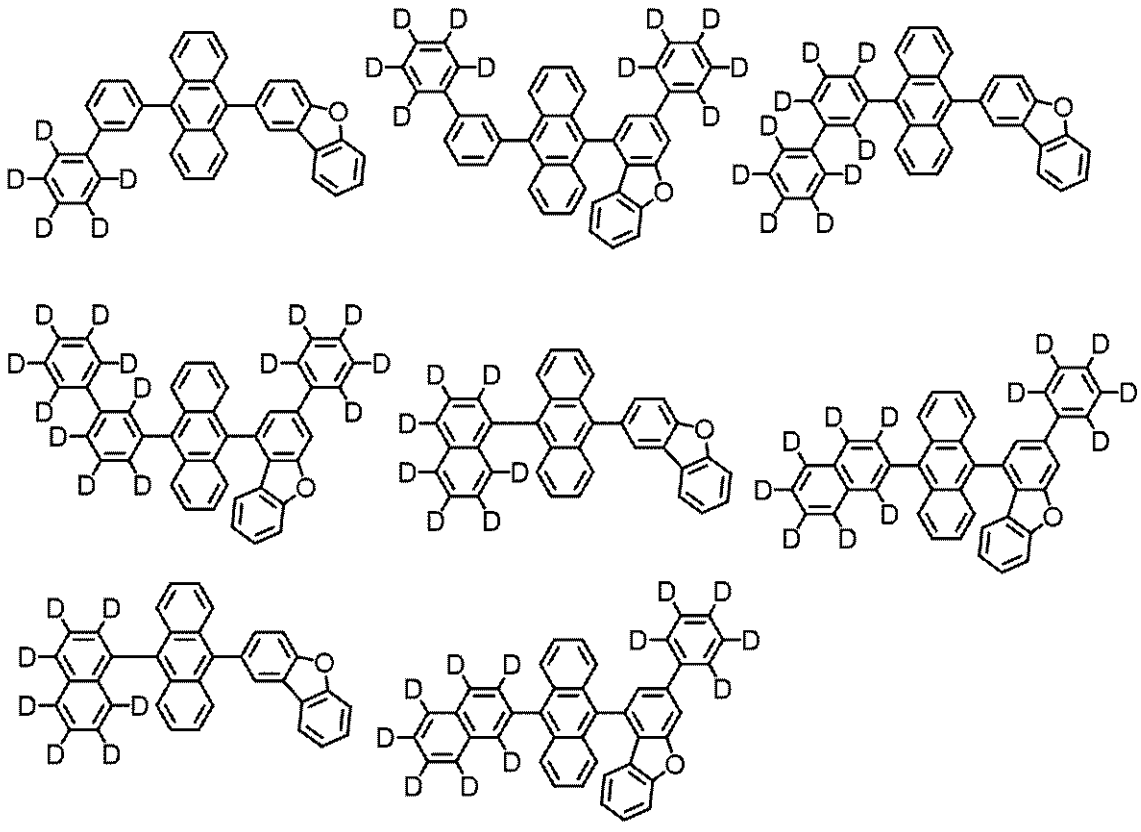
【０４１７】

【化１４４】



【０４１８】

【化１４５】



【０４１９】

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

$2.6eV > T_1(DX) > T_1(H1) > T_1(H2)$ …（数１０）

【０４２０】

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

$2.6eV > T_1(D1) > T_1(H1) > T_1(H2)$ …（数１０Ａ）

【０４２１】

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

$2.6eV > T_1(D2) > T_1(H1) > T_1(H2)$ …（数１０Ｂ）

【０４２２】

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

$0eV < T_1(DX) - T_1(H1) < 0.6eV$ …（数１１）

【０４２３】

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

$0eV < T_1(D1) - T_1(H1) < 0.6eV$ …（数１１Ａ）

【０４２４】

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

$0eV < T_1(D2) - T_1(H2) < 0.8eV$ …（数１１Ｂ）

【０４２５】

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。

$T_1(H1) > 2.0eV$ …（数１２）

【０４２６】

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。

$T_1(H1) > 2.10eV$ …（数１２Ａ）

$T_1(H1) > 2.15eV$ …（数１２Ｂ）

【０４２７】

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。

【０４２８】

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

$2.08eV > T_1(H1) > 1.87eV$ …（数１２Ｃ）

$2.05eV > T_1(H1) > 1.90eV$ …（数１２Ｄ）

【０４２９】

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。

【０４３０】

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

２．６０ｅＶ＞T_1（Ｄ１）　…（数１４Ａ）

２．５０ｅＶ＞T_1（Ｄ１）　…（数１４Ｂ）

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

【０４３１】

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

２．６０ｅＶ＞T_1（Ｄ２）　…（数１４Ｃ）

２．５０ｅＶ＞T_1（Ｄ２）　…（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。

【０４３２】

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も好ましい。

T_1（Ｈ２）＞１．９ｅＶ　…（数１３）

【０４３３】

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１３Ａ）の関係を満たすことも好ましい。

１．９ｅＶ≧T_1（Ｈ２）≧１．８ｅＶ　…（数１３Ａ）

【０４３４】

（発光性化合物）

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光性化合物及び第二の発光性化合物等の発光性化合物は、特に限定されないが、例えば、それぞれ独立に、下記一般式（４）で表される化合物、下記一般式（５）で表される化合物及び下記一般式（６）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ことも好ましい。

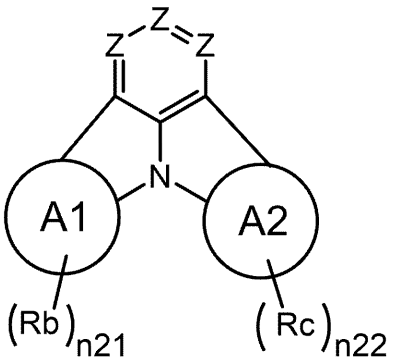
【０４３５】

（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。

【０４３６】

【化１４６】



(4)

【０４３７】

（前記一般式（４）において、
Ｚは、それぞれ独立に、ＣＲａ又は窒素原子であり、
Ａ１環及びＡ２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、
Ｒａが複数存在する場合、複数のＲａ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、
ｎ２１及びｎ２２は、それぞれ独立に、０、１、２、３又は４であり、
Ｒｂが複数存在する場合、複数のＲｂ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、
Ｒｃが複数存在する場合、複数のＲｃ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Ｒａ、Ｒｂ及びＲｃ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の複素環基である。）

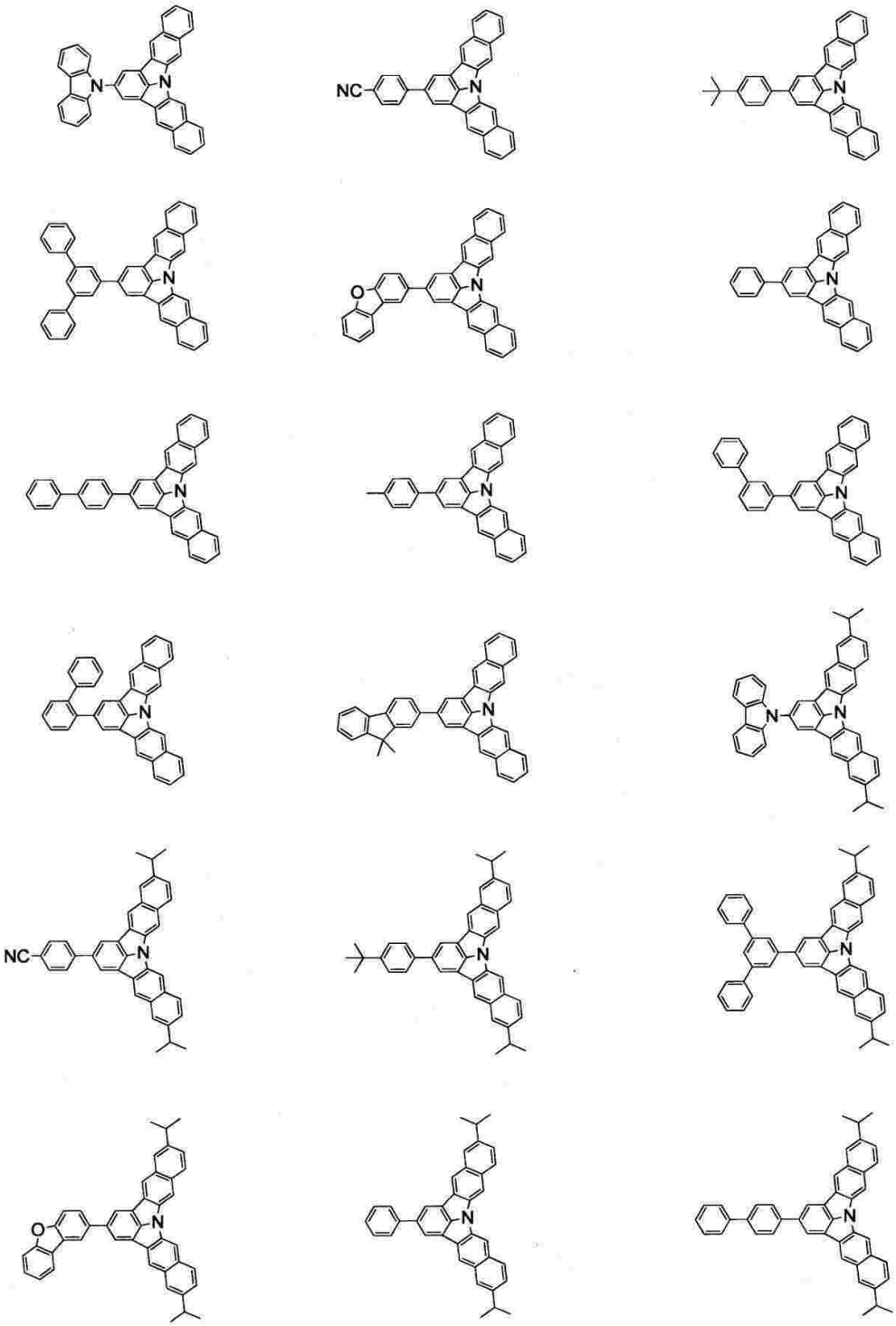
【０４３８】

（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。

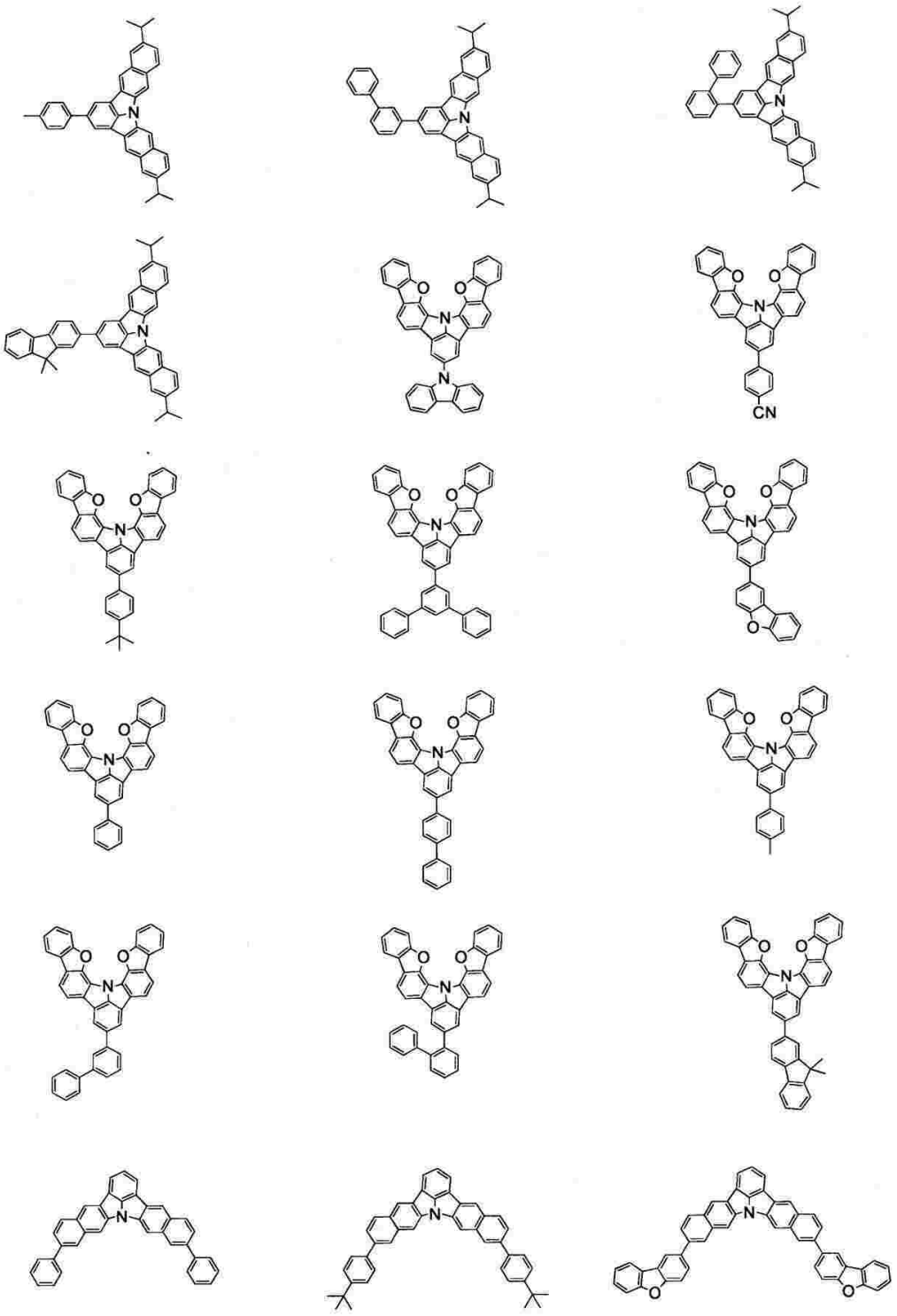
【０４３９】

【化１４７】



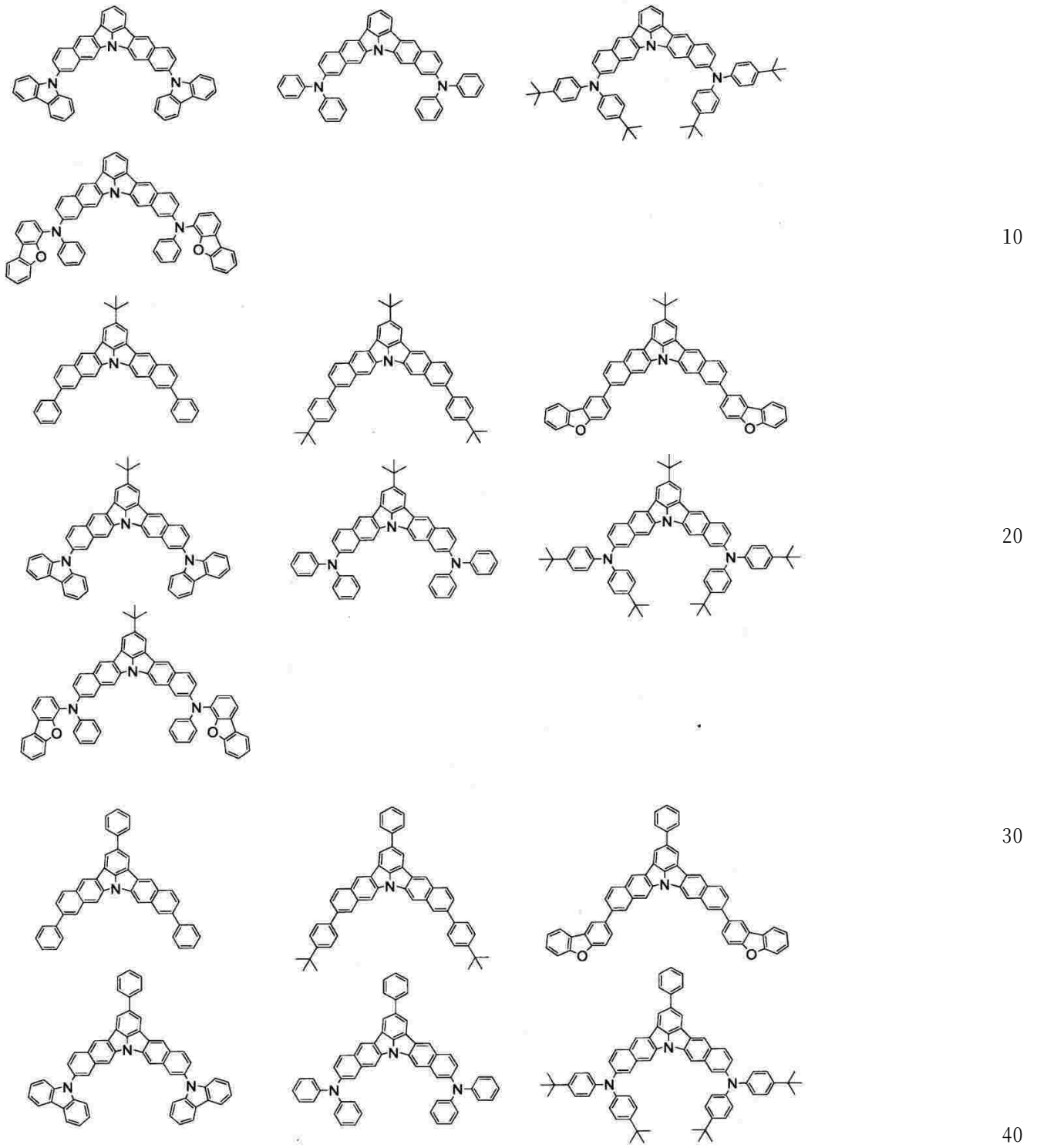
【０４４０】

【化１４８】



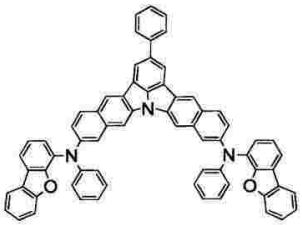
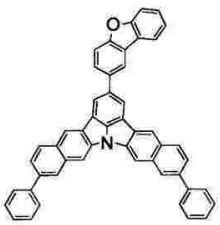
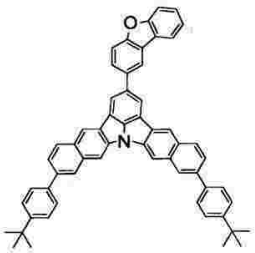
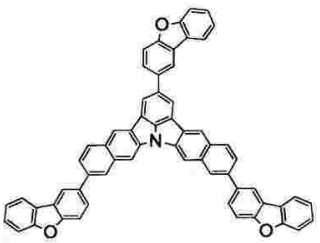
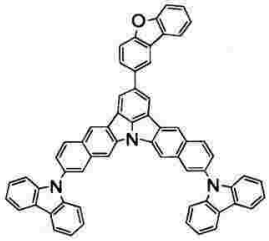
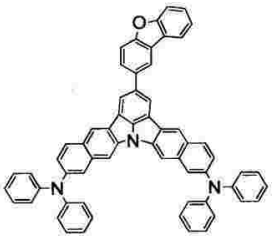
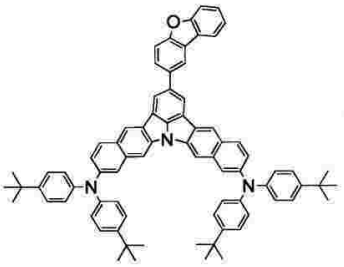
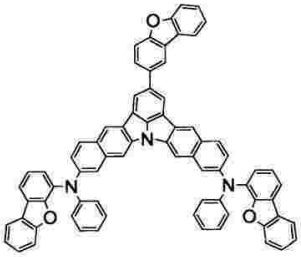
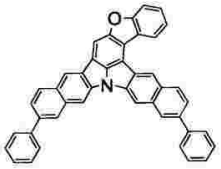
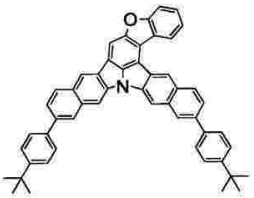
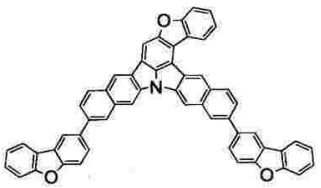
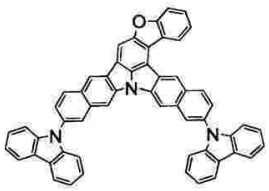
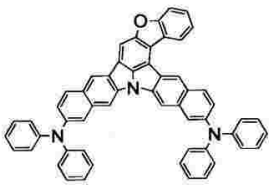
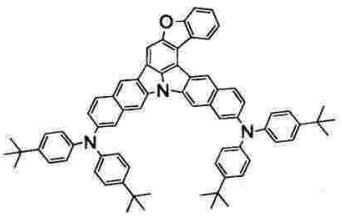
【０４４１】

【化１４９】



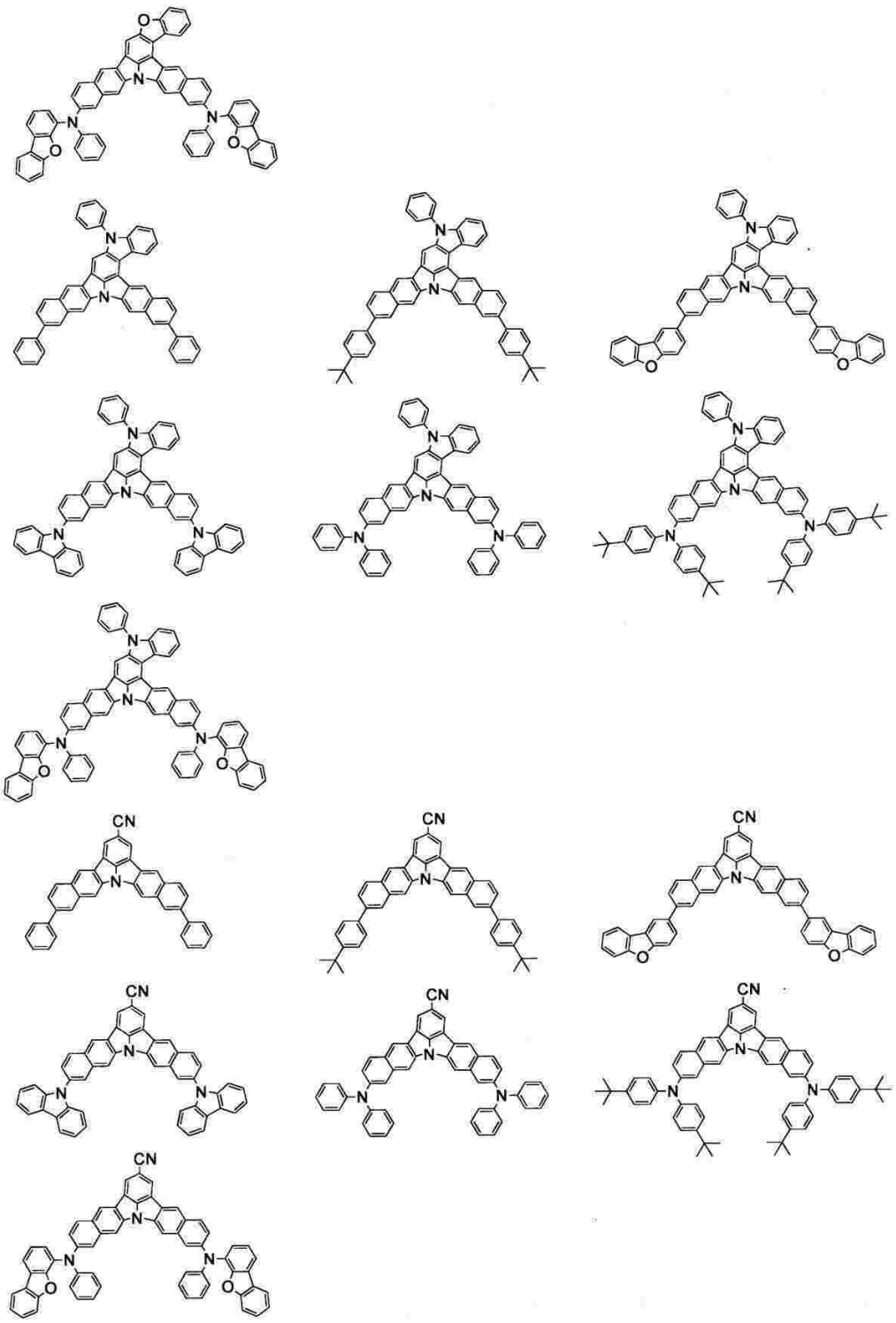
【０４４２】

【化１５０】

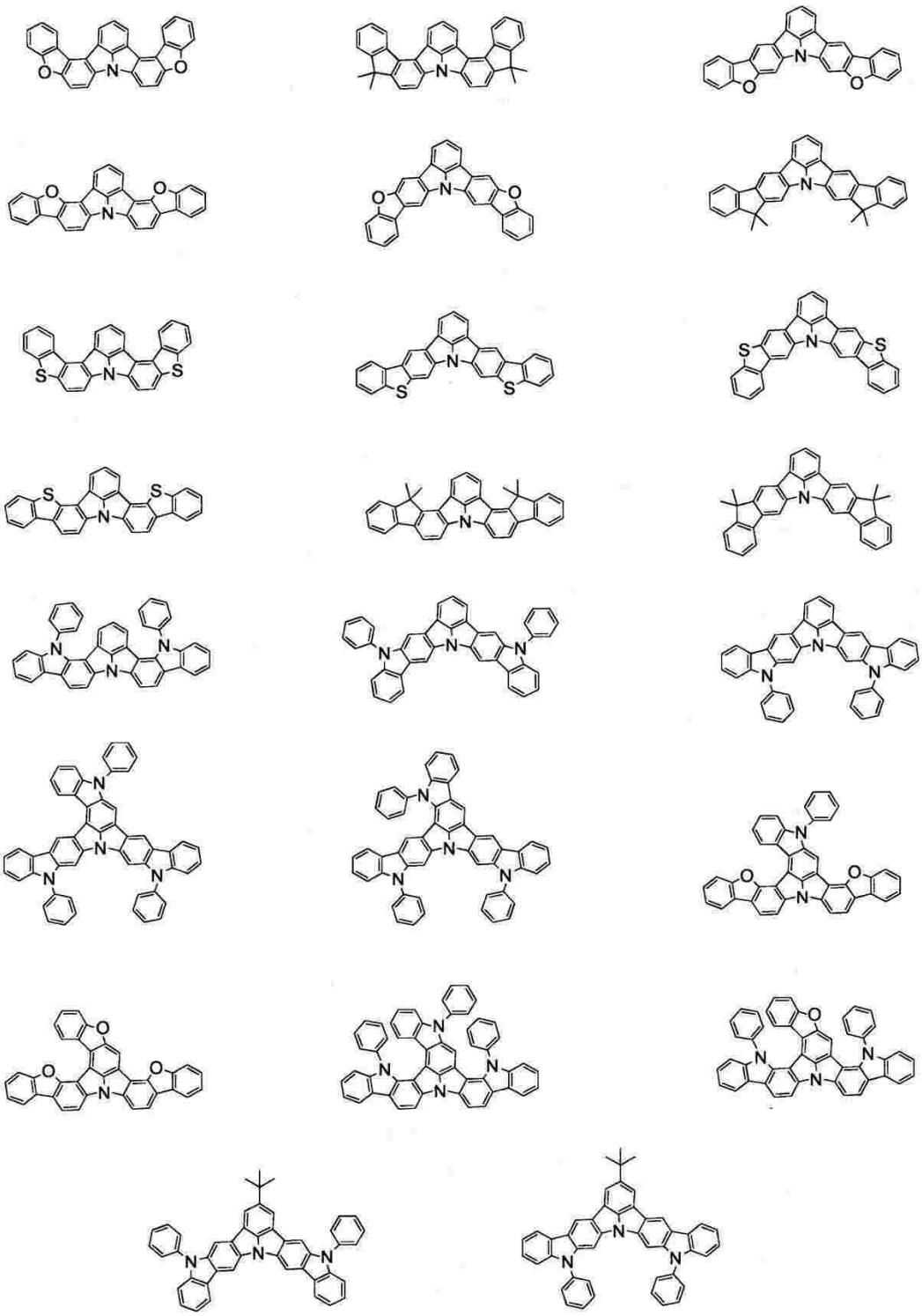
【０４４３】

【化１５１】



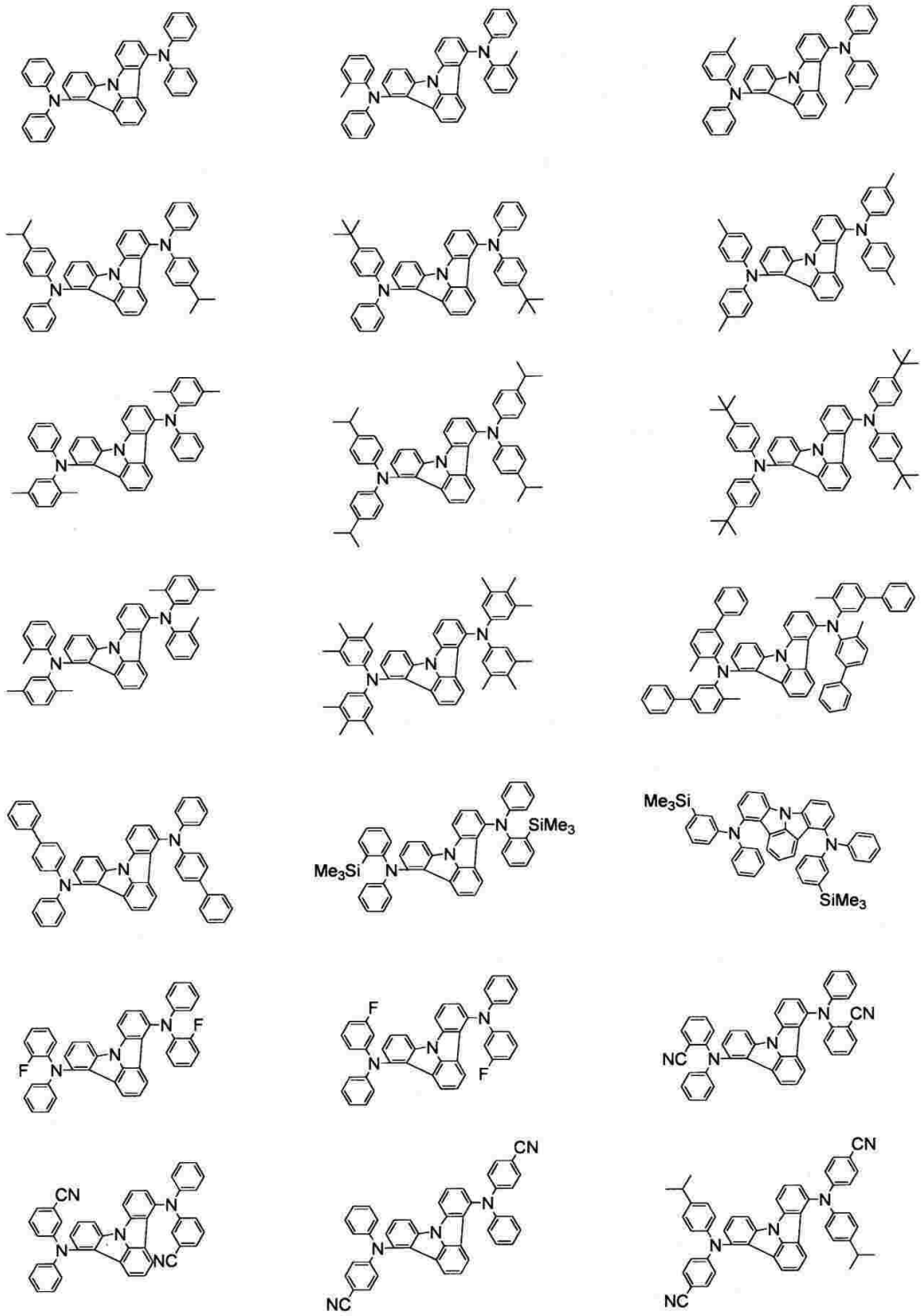
【０４４４】

【化１５２】



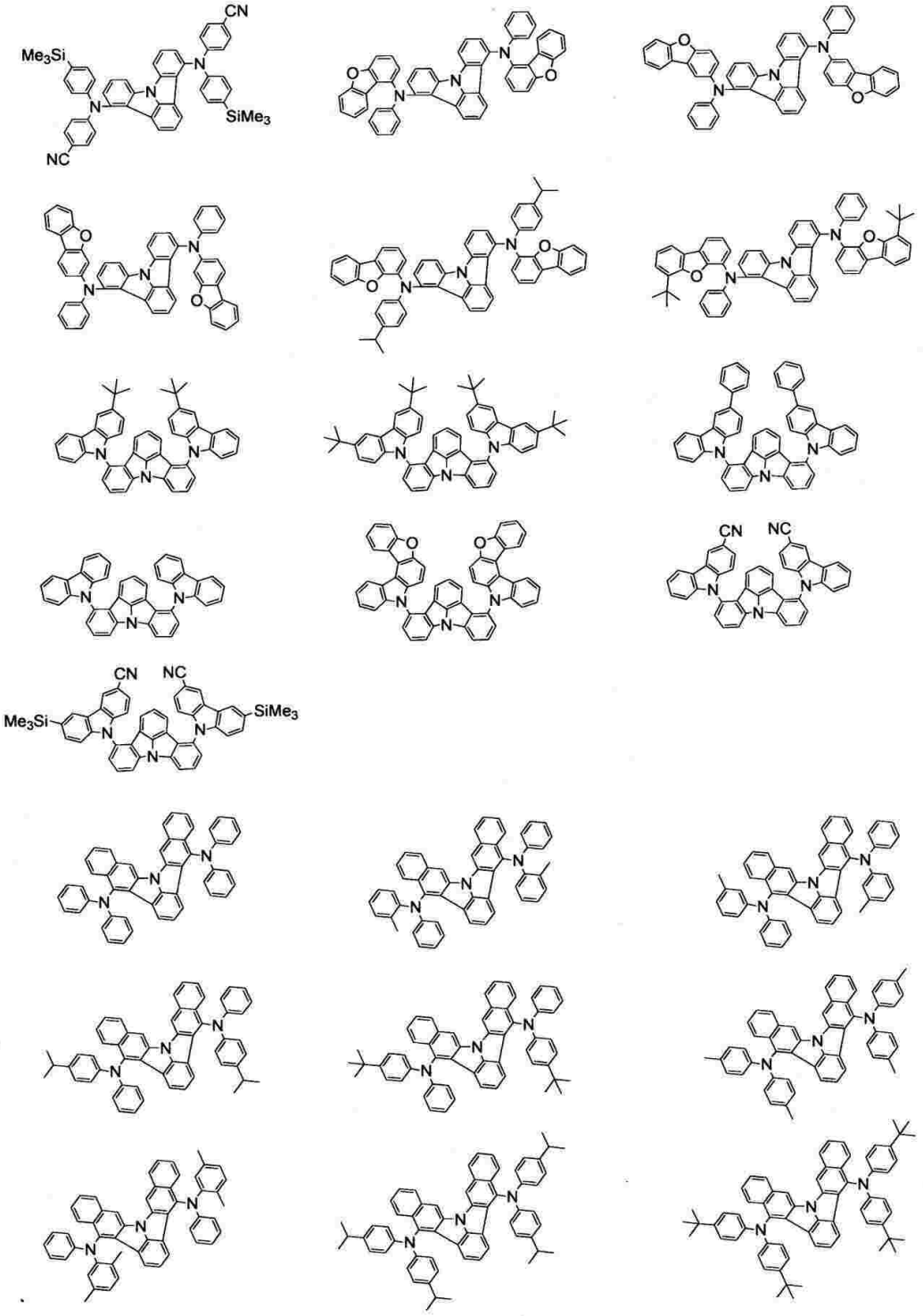
【０４４５】

【化１５３】



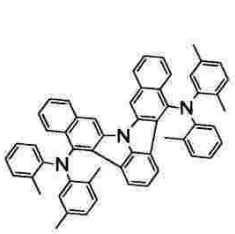
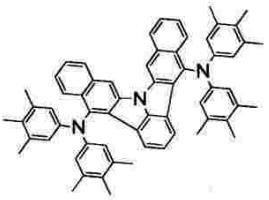
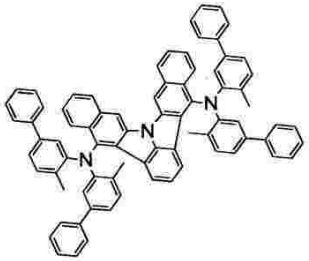
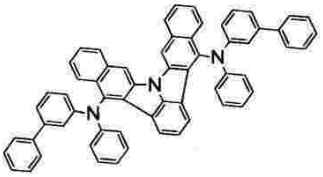
【０４４６】

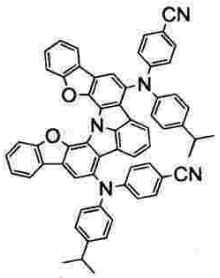
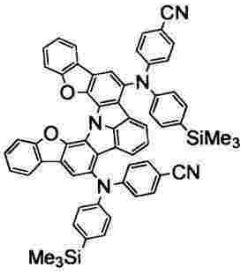
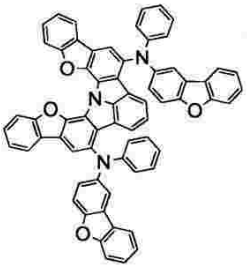
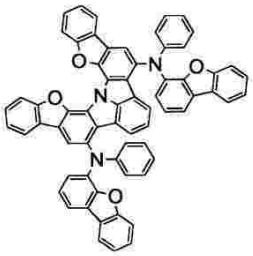
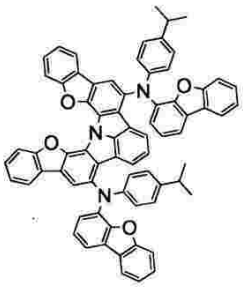
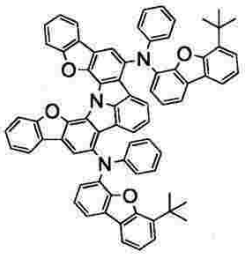
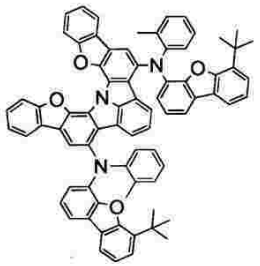
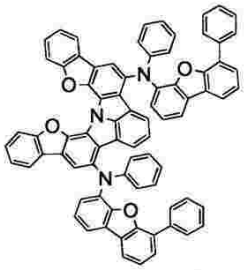
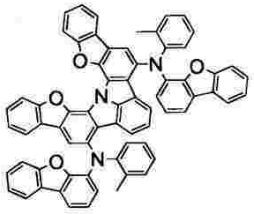
【化１５４】



【０４４７】

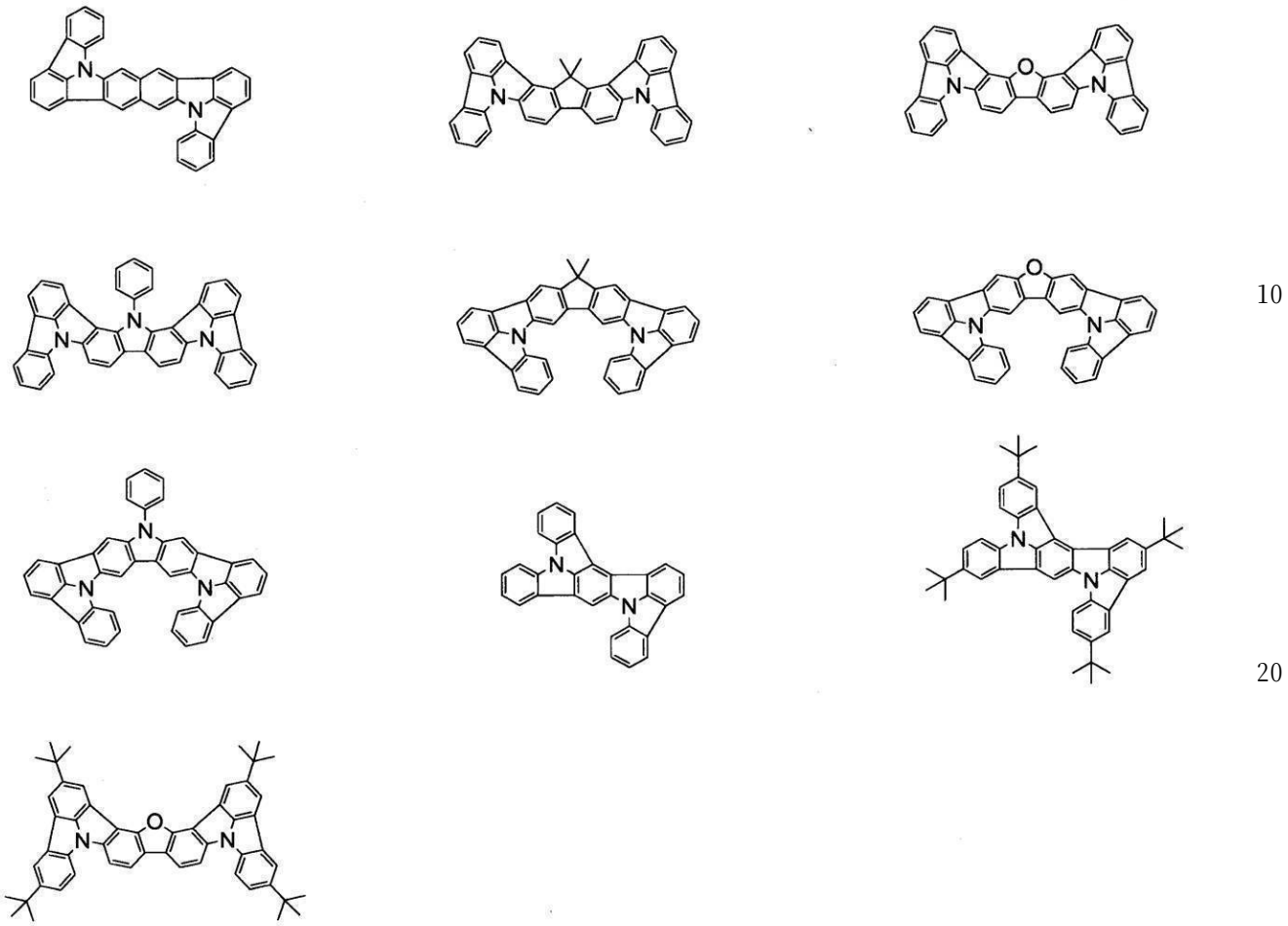
【化１５５】

【０４４８】

【化１５６】



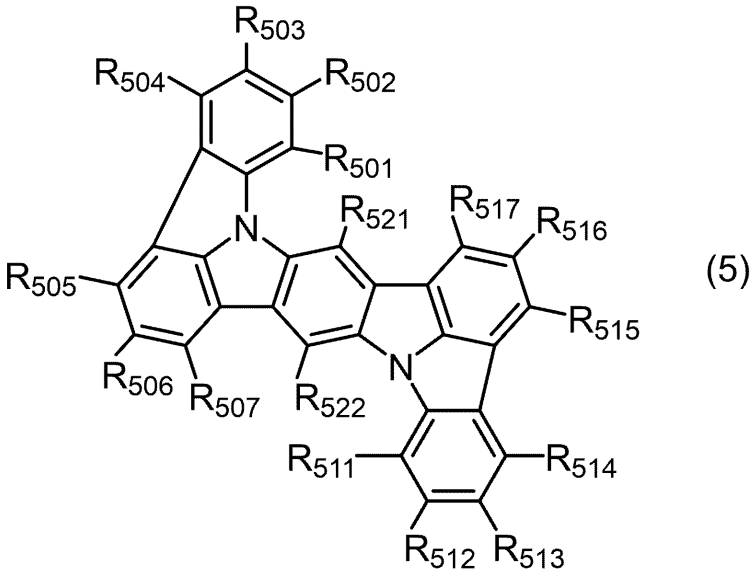
【０４４９】

（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。

【０４５０】

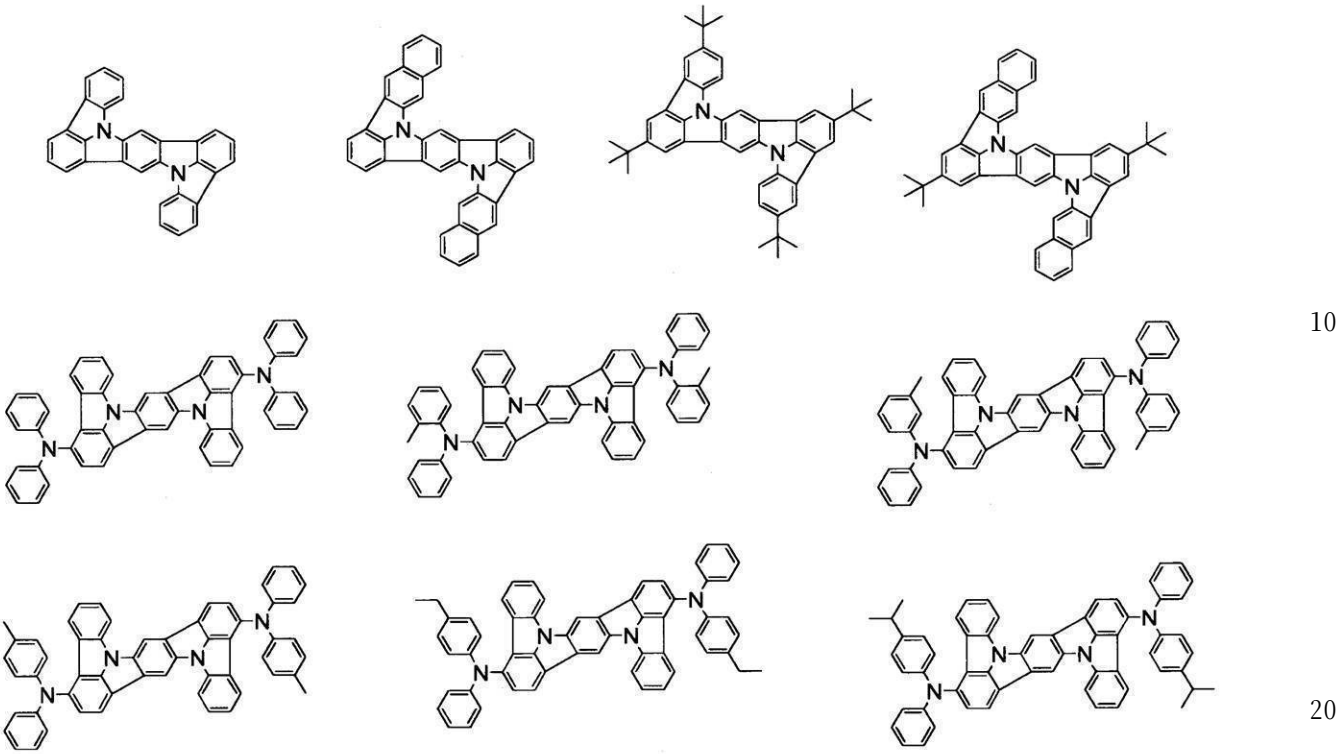
【化１５７】



(5)

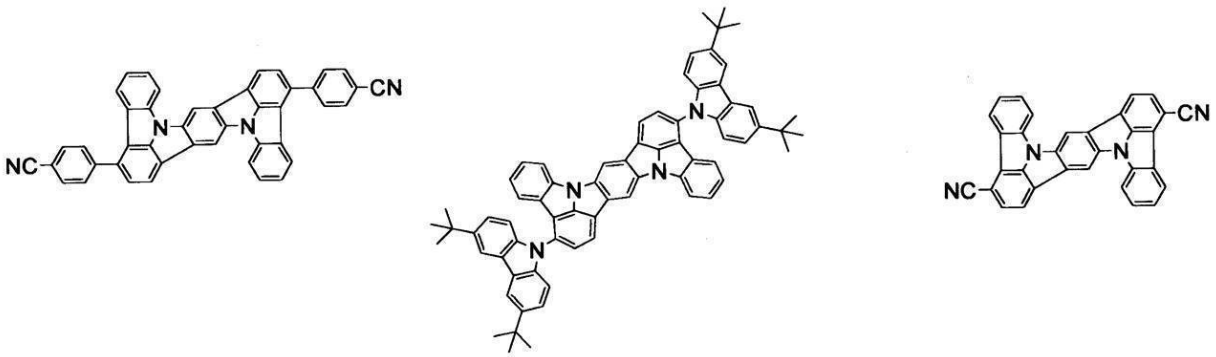
【０４５１】
（前記一般式（５）中、
　Ｒ５０１～Ｒ５０７及びＲ５１１～Ｒ５１７のうち隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
　　互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
　　互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
　　互いに結合せず、
　Ｒ５２１、Ｒ５２２、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないＲ５０１～Ｒ５０７及びＲ５１１～Ｒ５１７は、それぞれ独立に、
　　水素原子、
　　置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
　　置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
　　置換もしくは無置換の炭素数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。）
【０４５２】
（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。
【０４５３】

【化１５８】



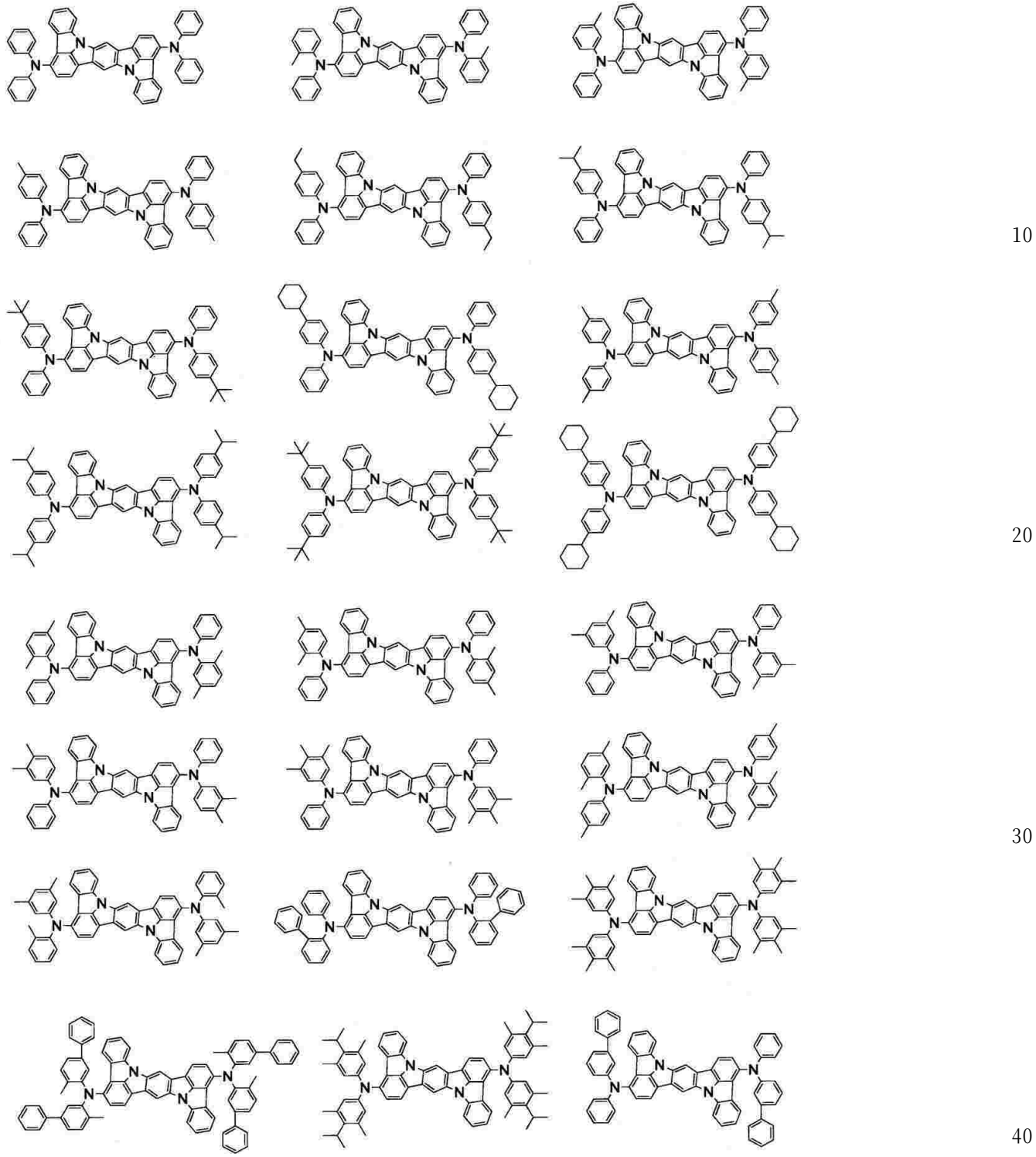
【０４５４】

【化１５９】



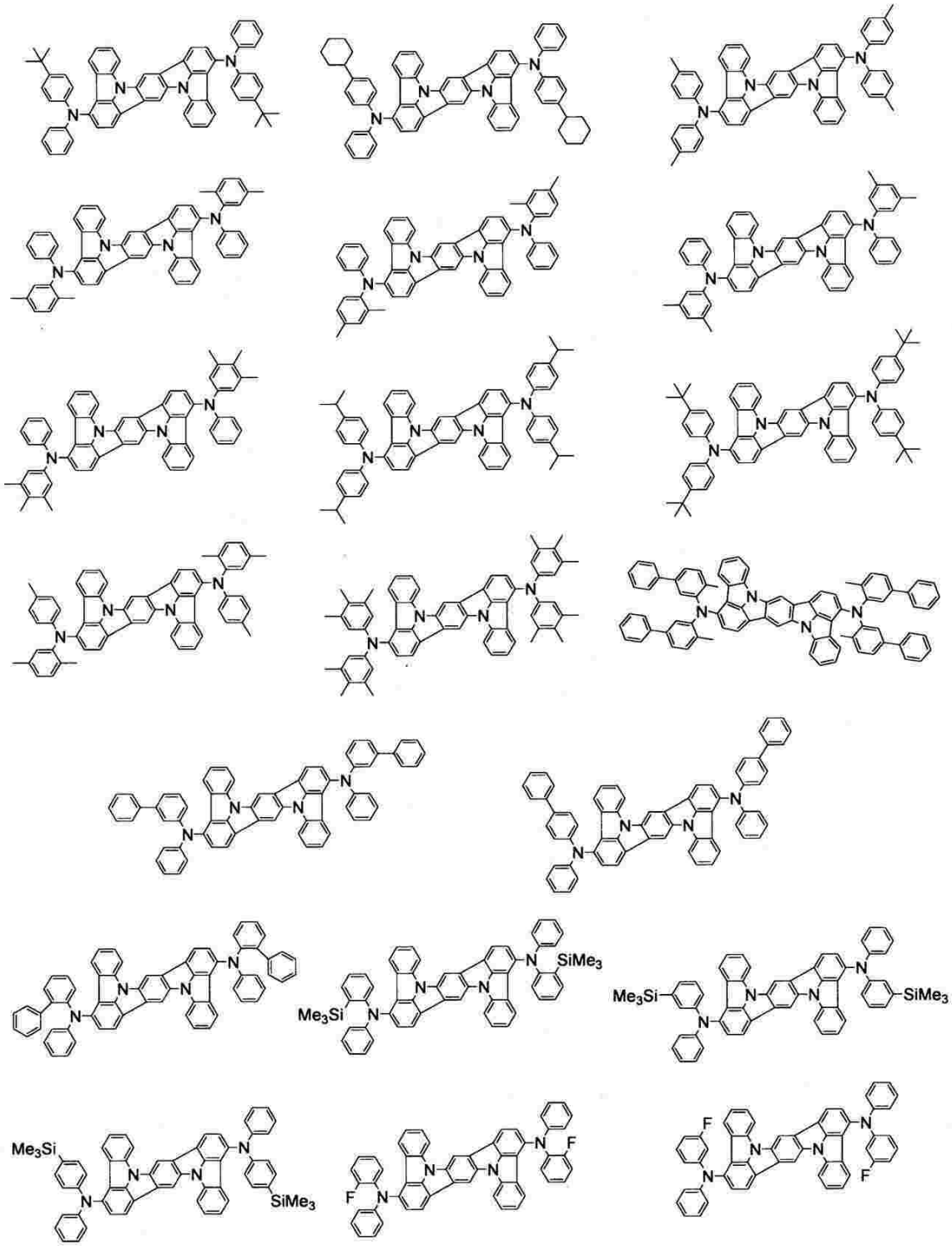
【０４５５】

【化１６０】



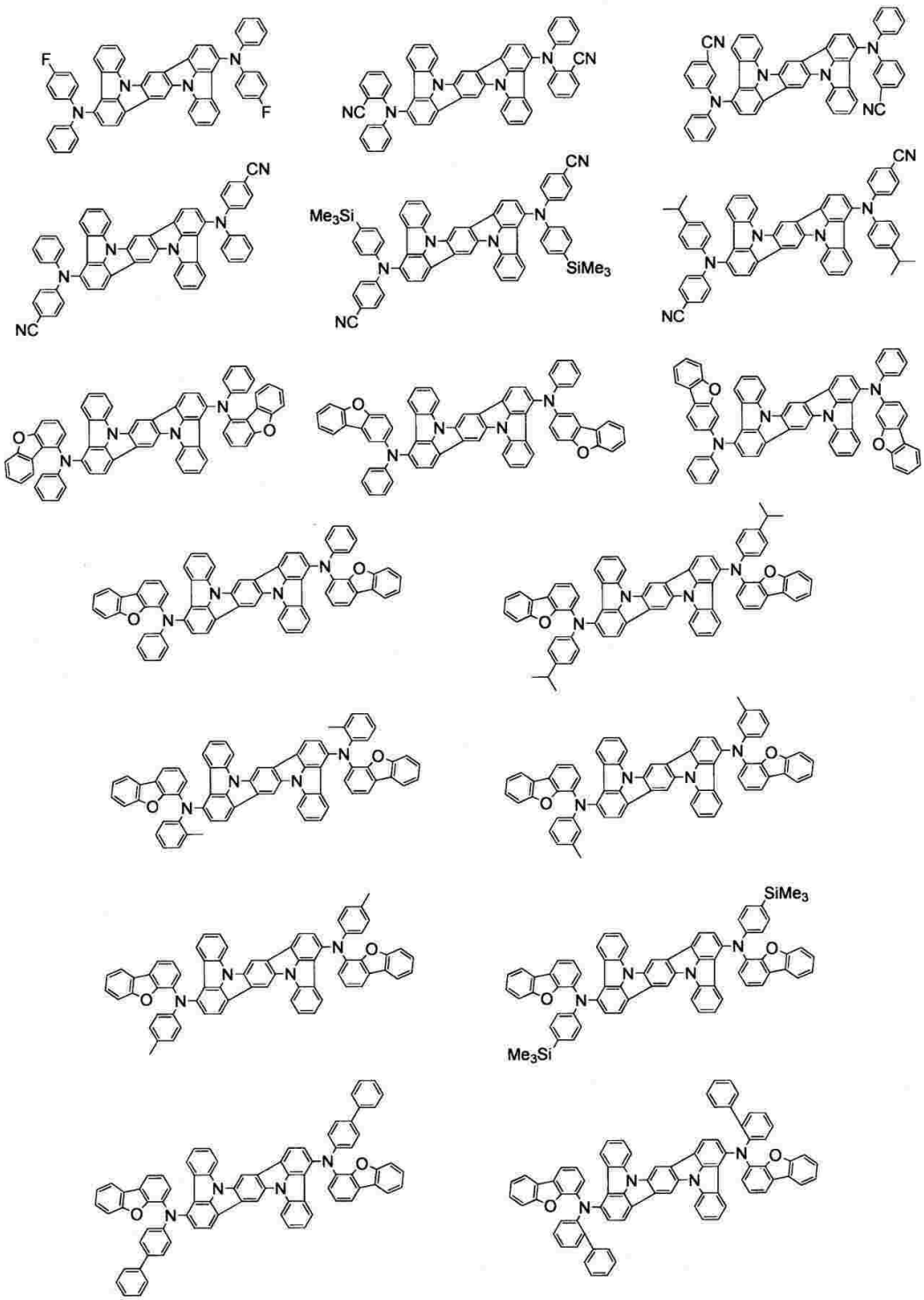
【０４５６】

【化１６１】



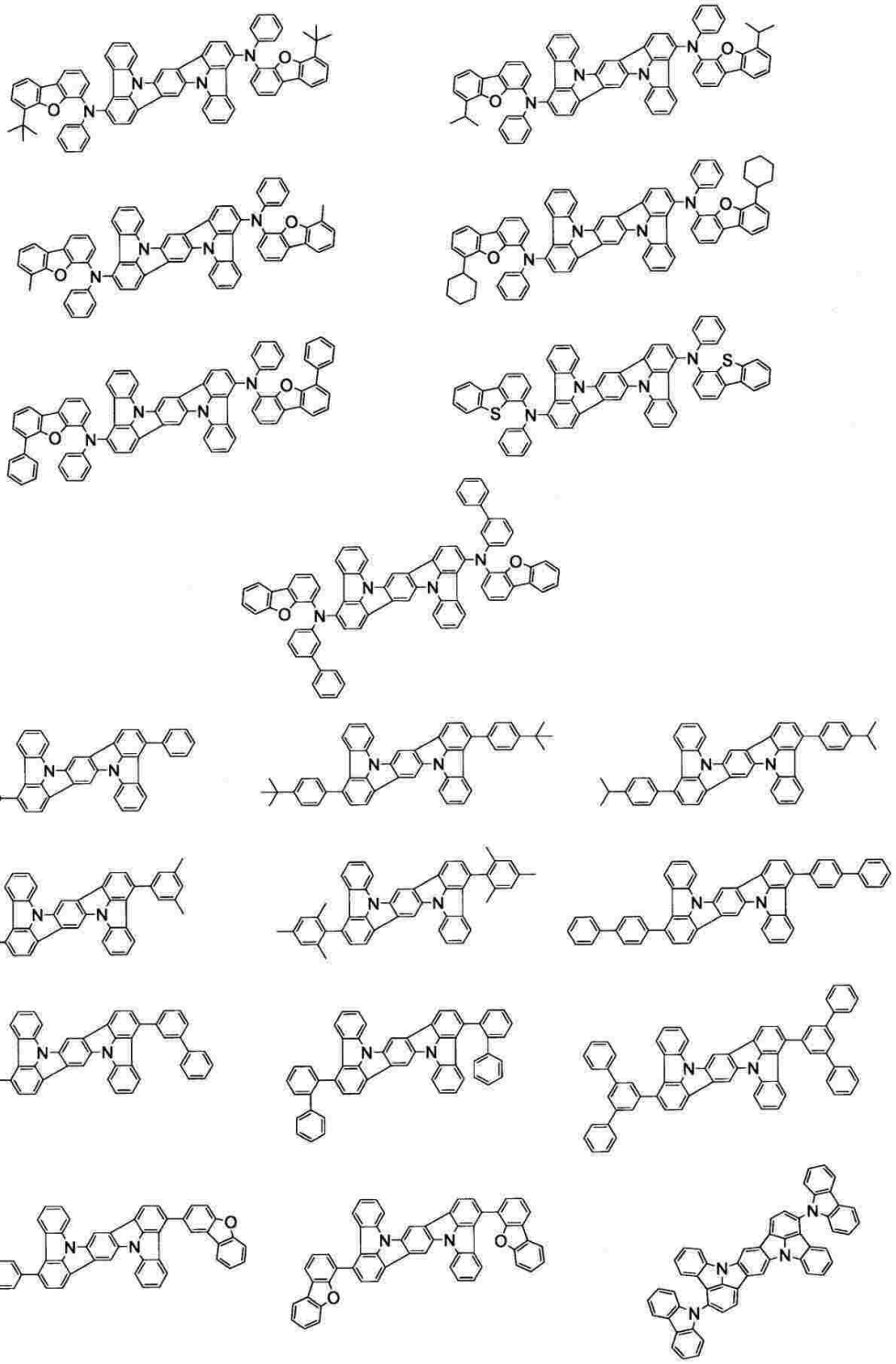
【０４５７】

【化１６２】



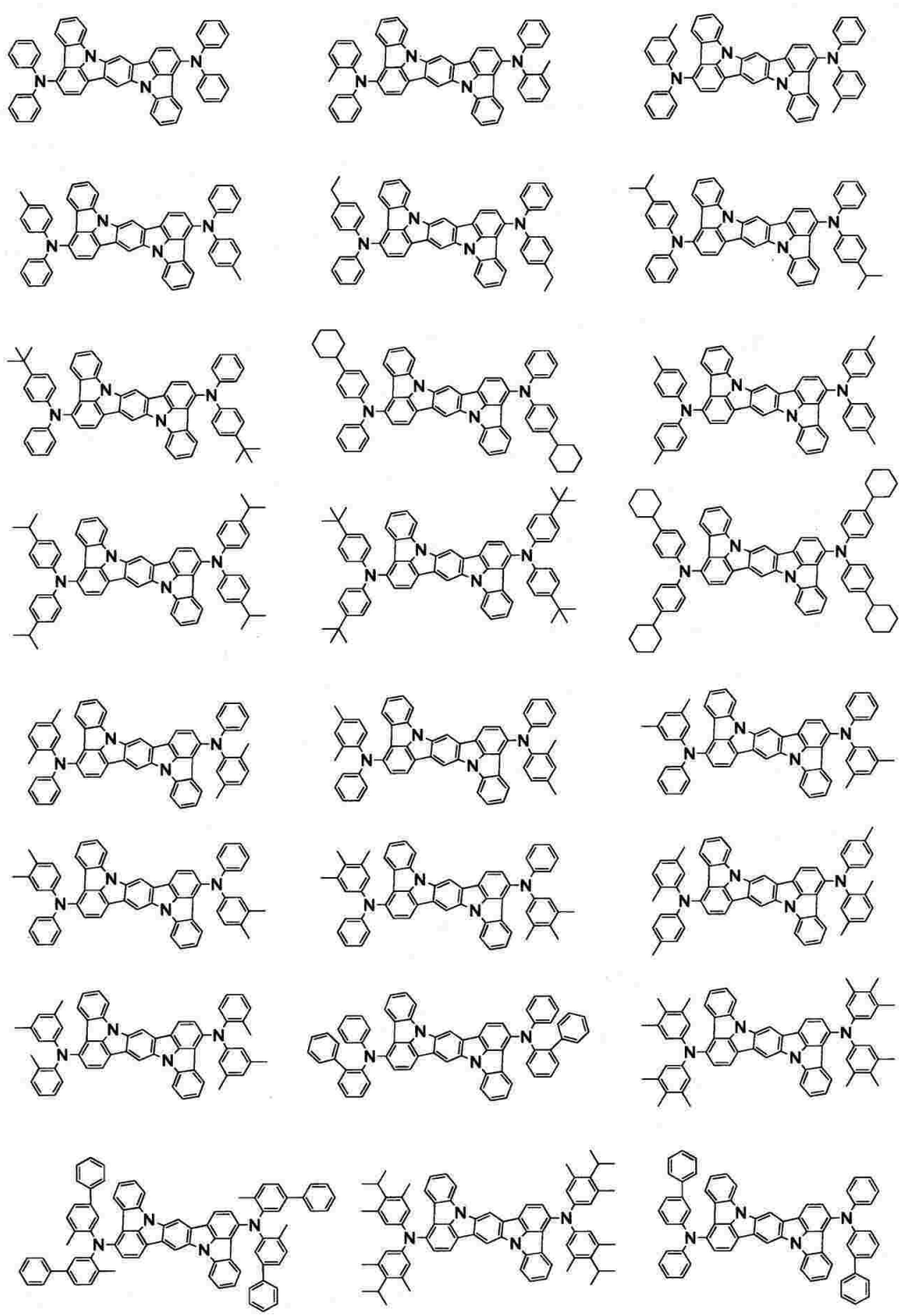
【０４５８】

【化１６３】



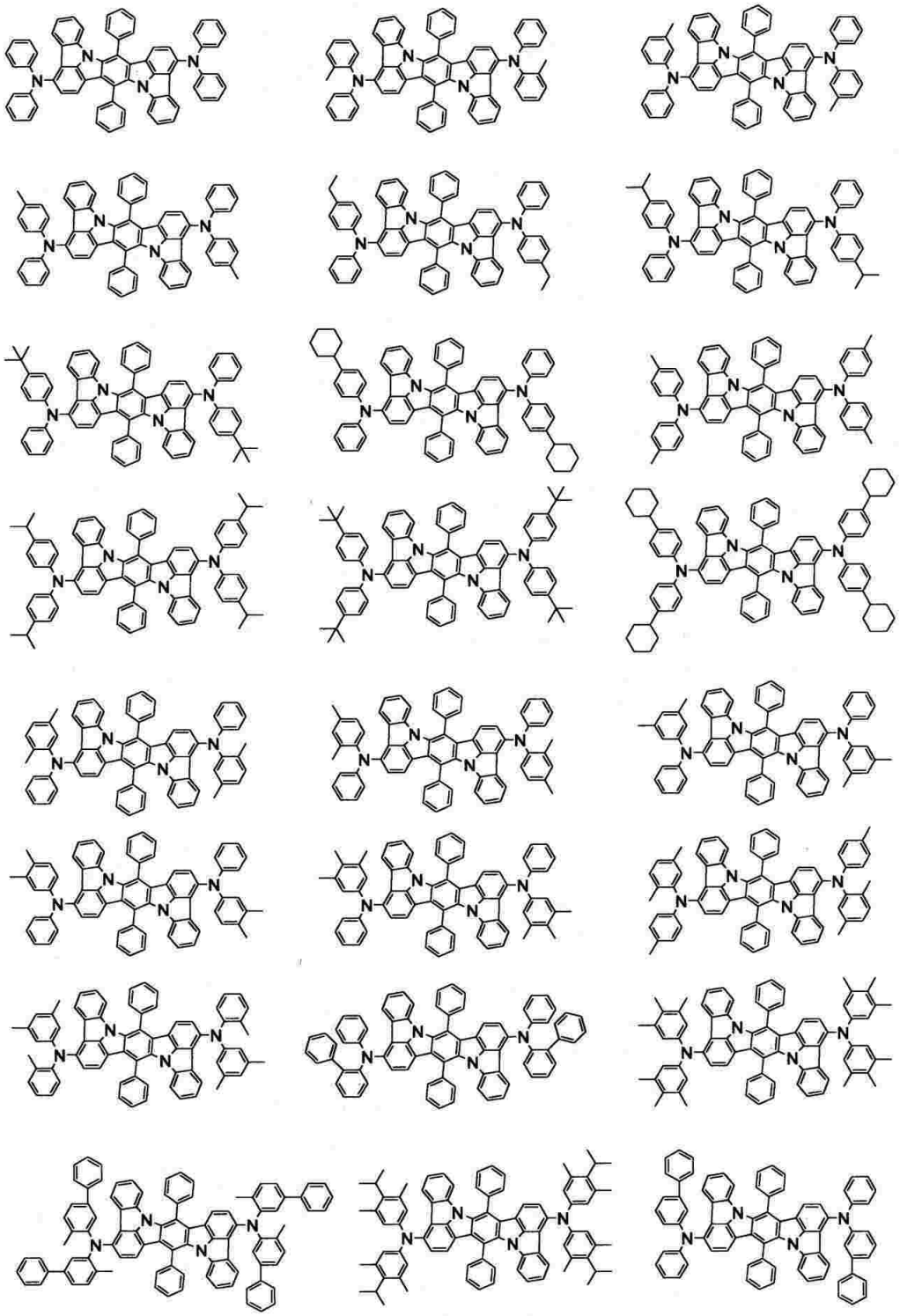
【０４５９】

【化１６４】



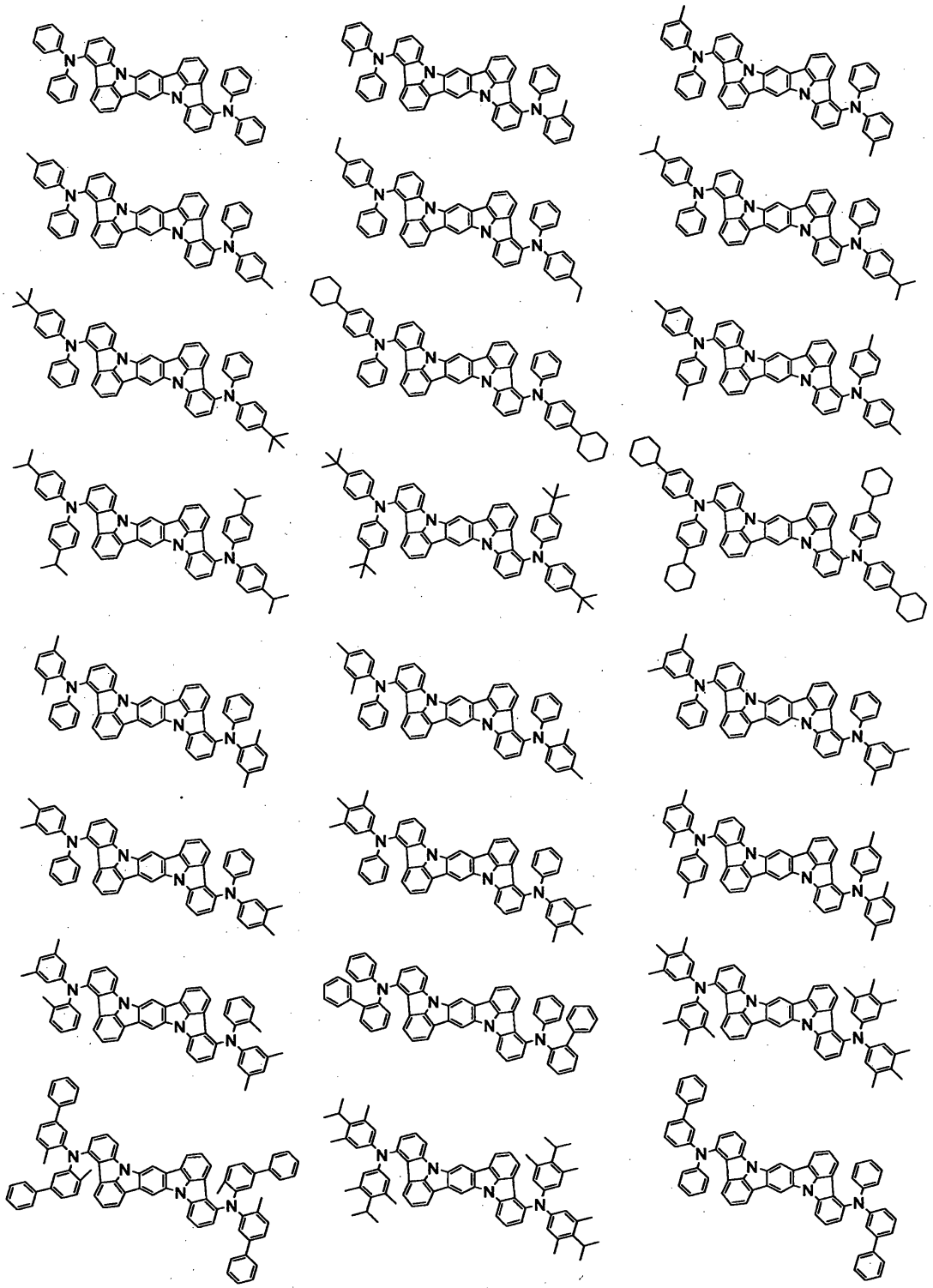
【０４６０】

【化１６５】



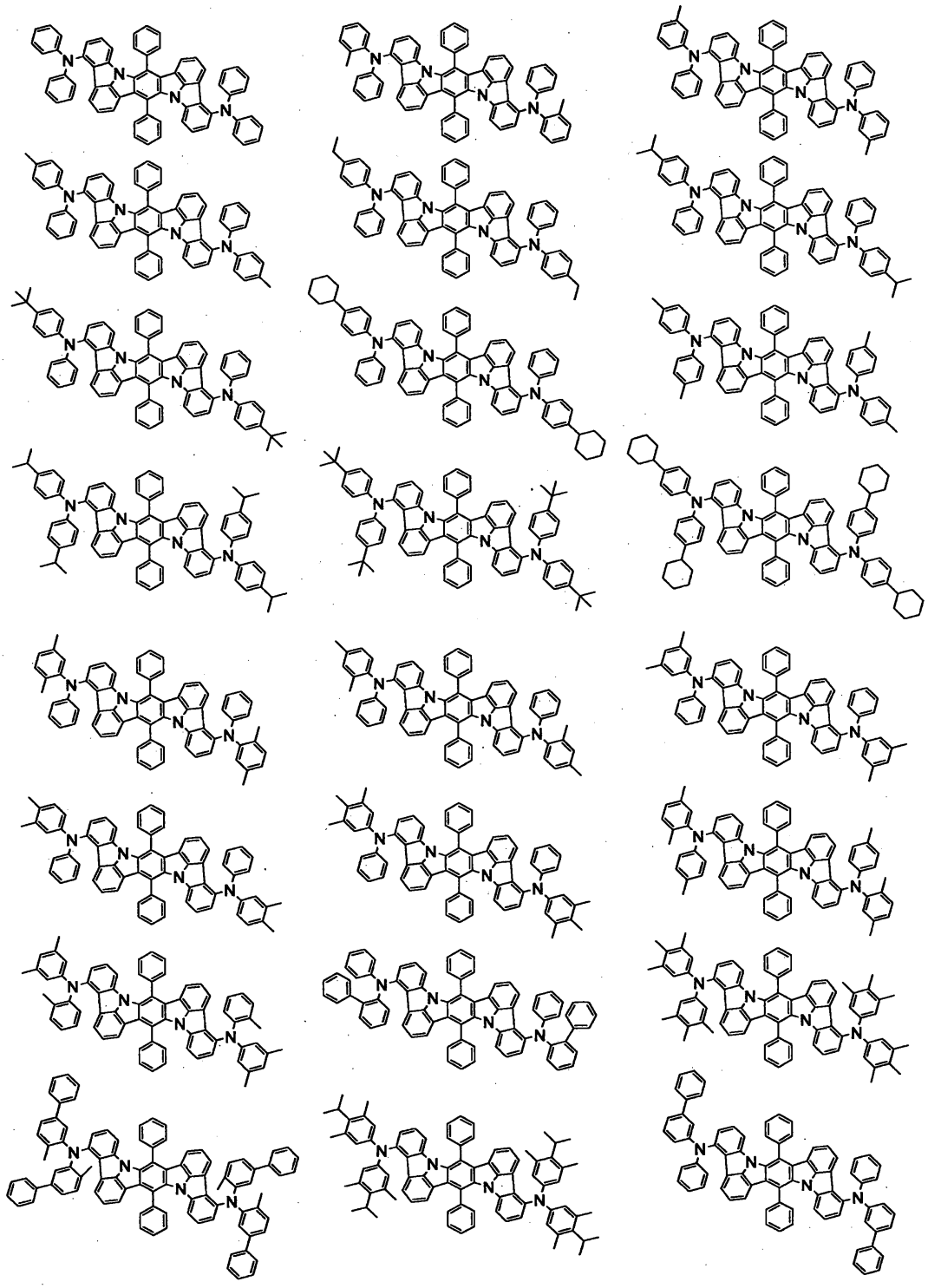
【０４６１】

【化１６６】



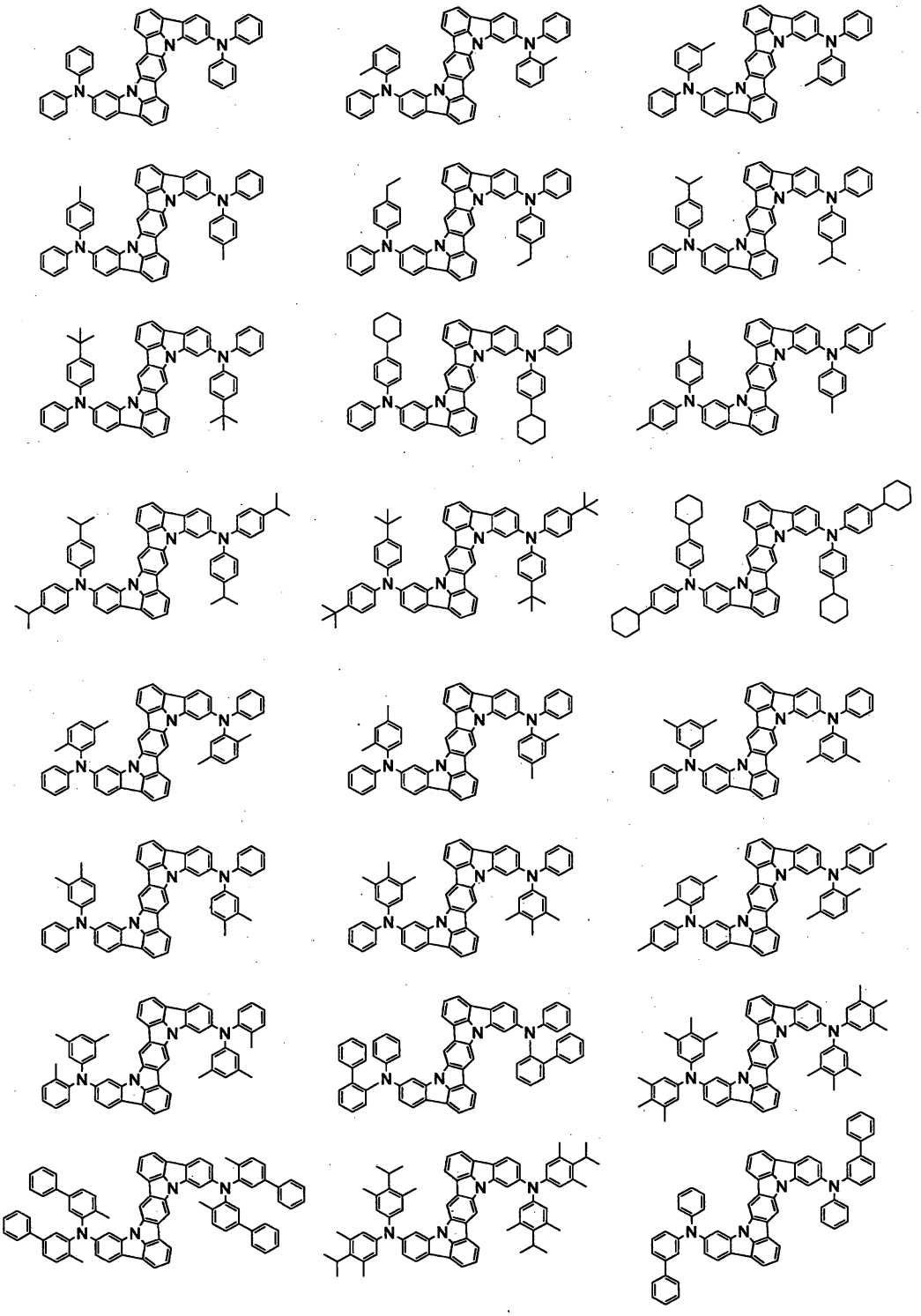
【０４６２】

【化１６７】



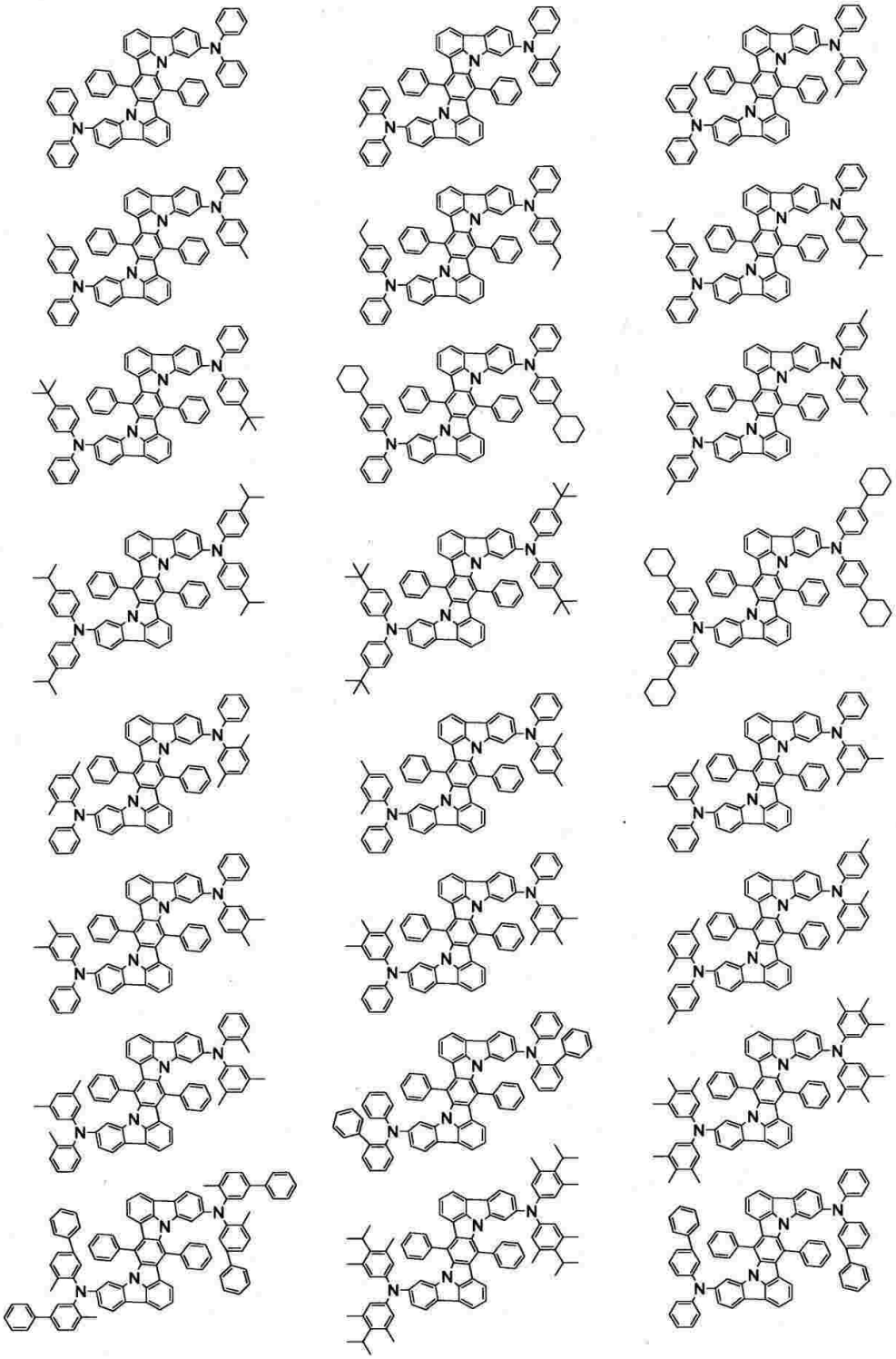
【０４６３】

【化１６８】



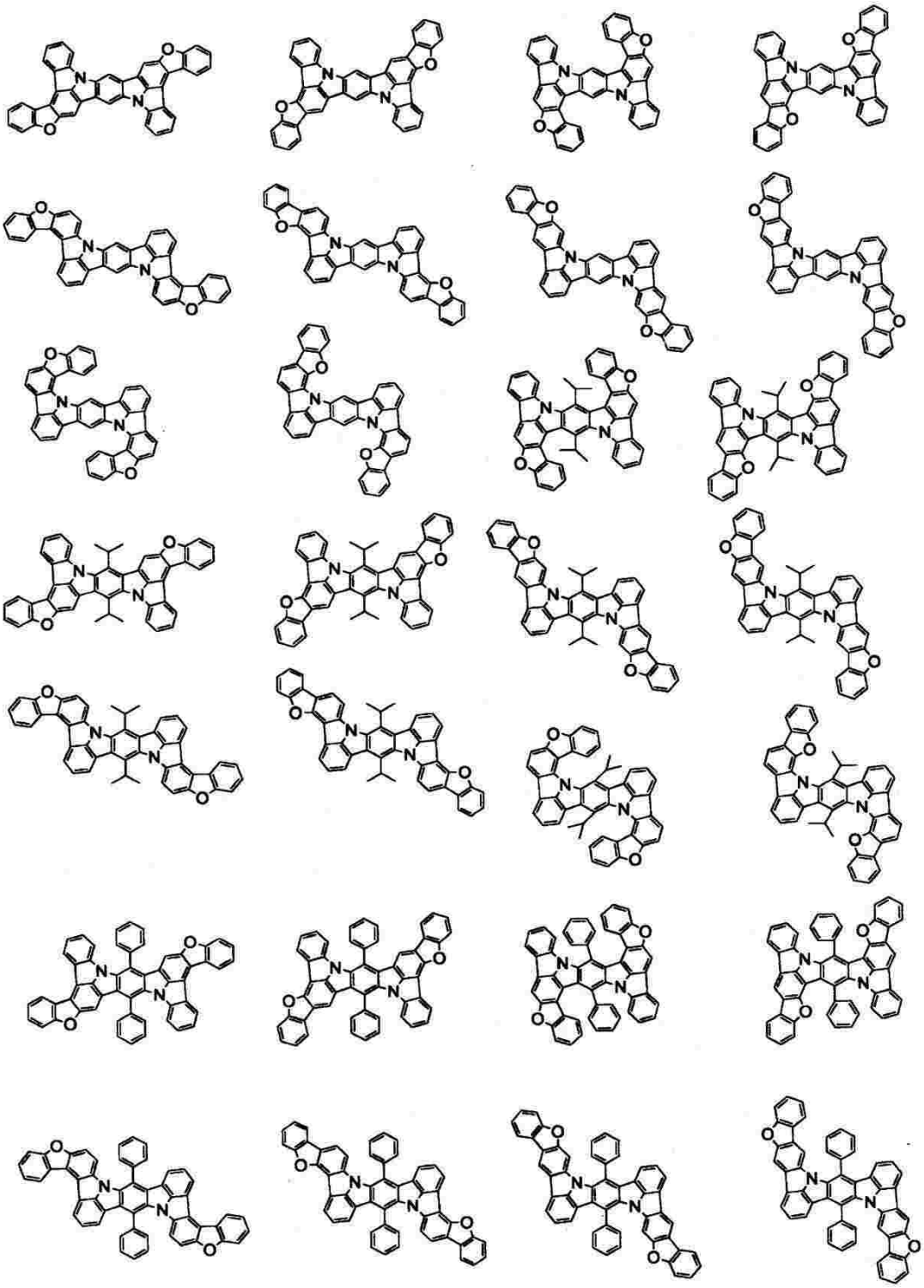
【０４６４】

【化１６９】



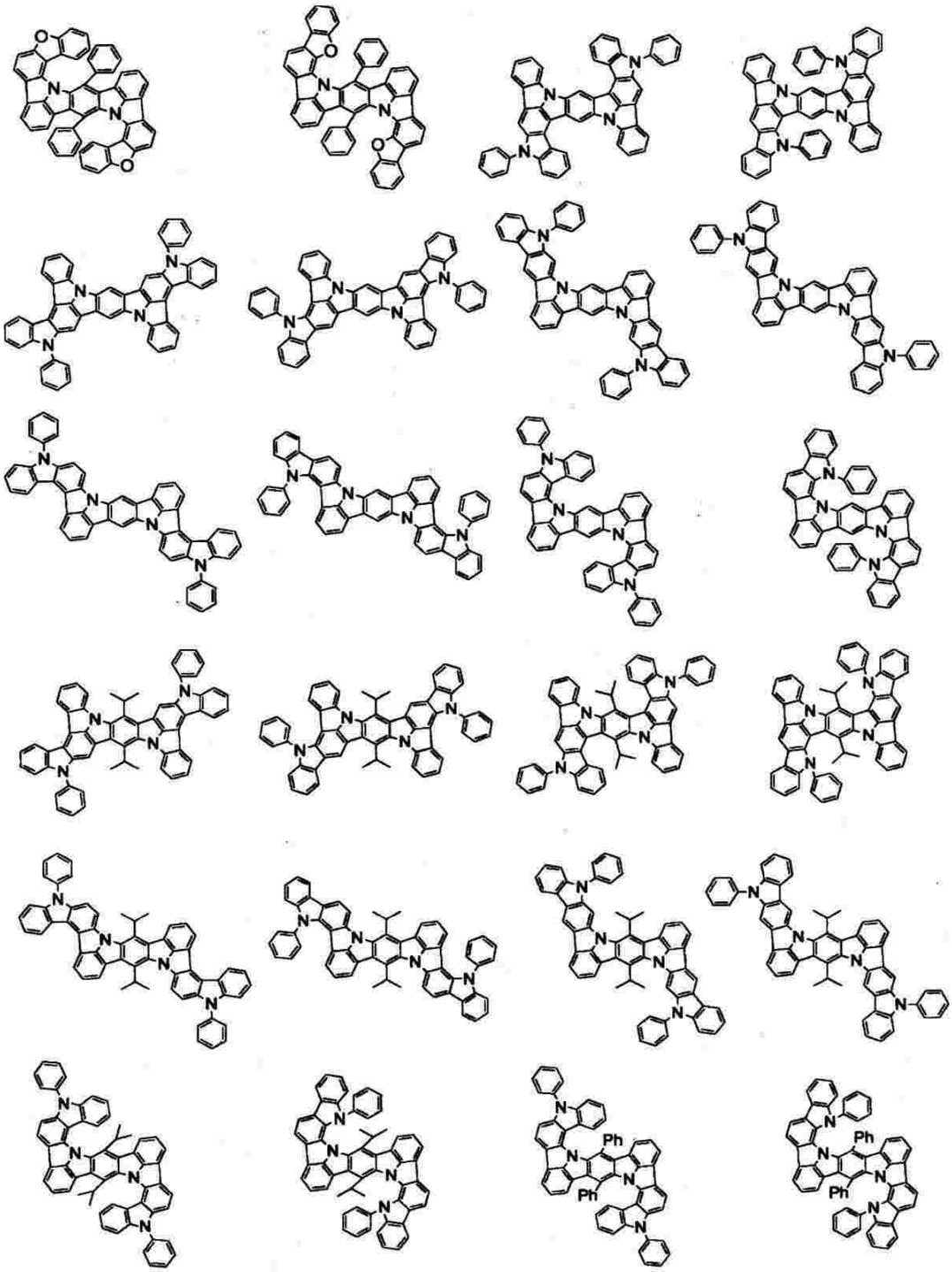
【０４６５】

【化１７０】



【０４６６】

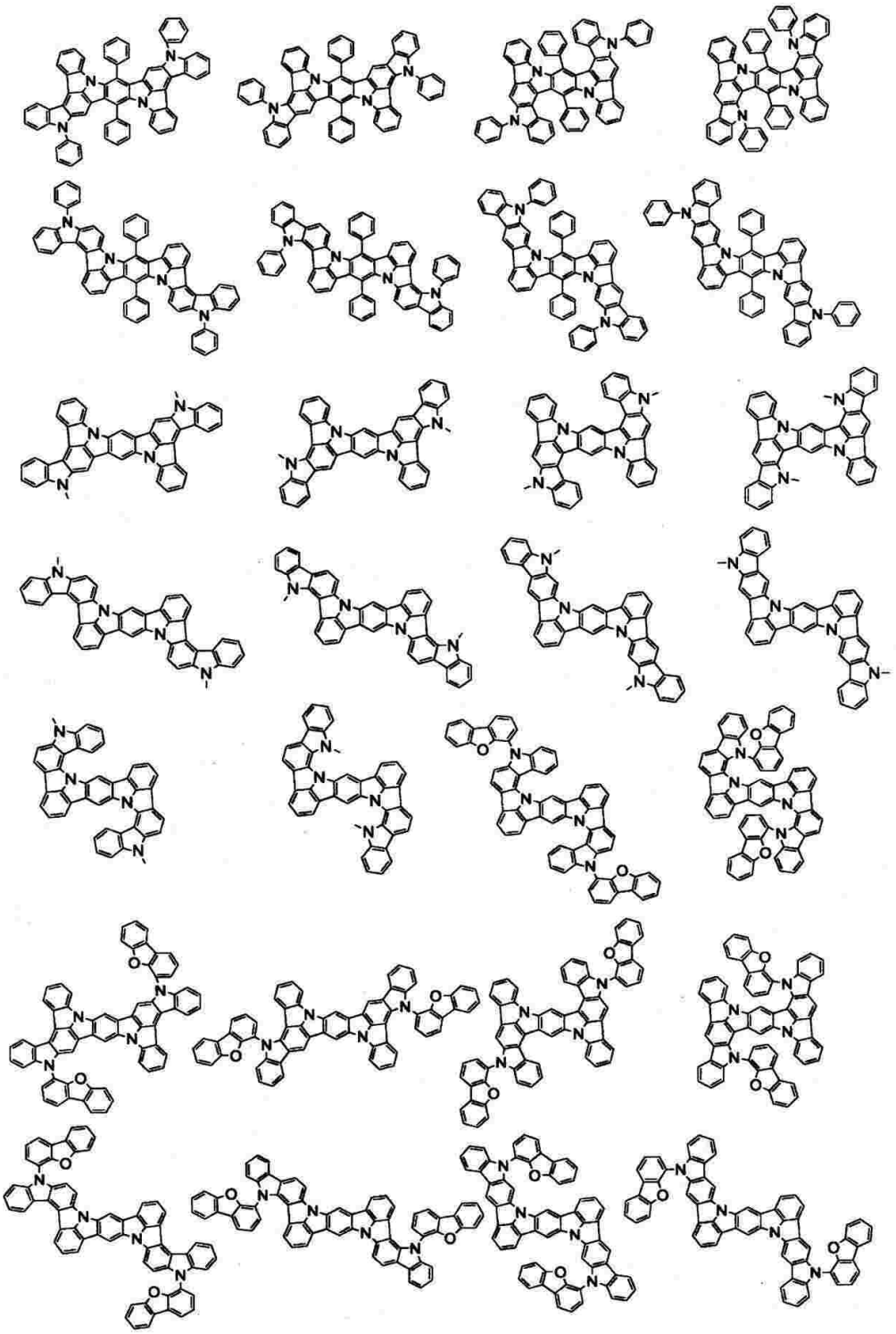
【化１７１】



（式中、Ｐｈはフェニル基である）

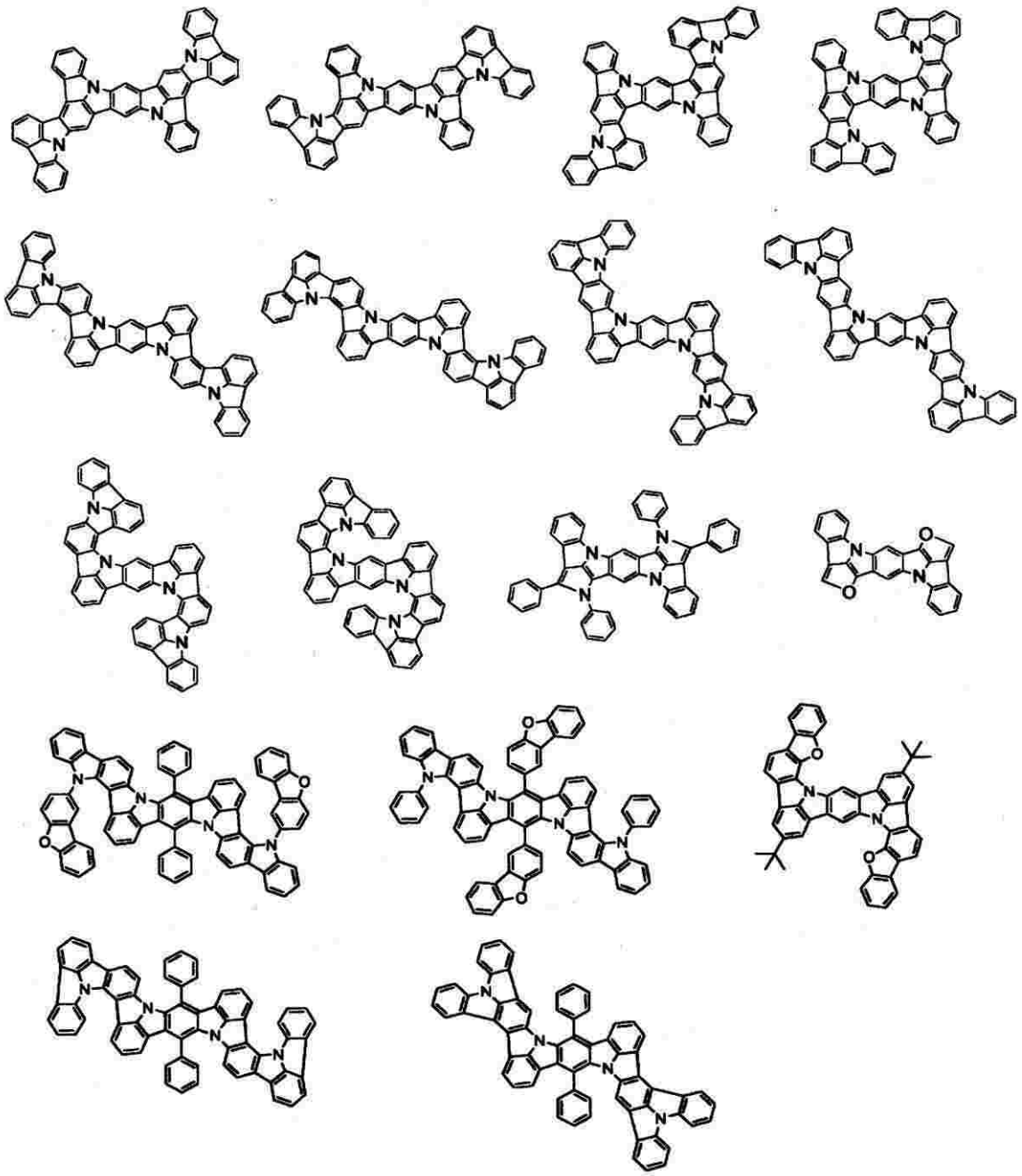
【０４６７】

【化１７２】



【０４６８】

【化１７３】



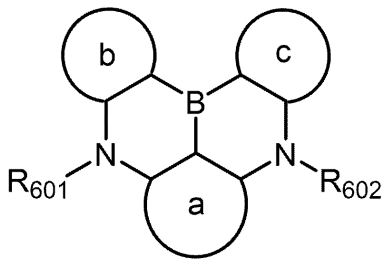
【０４６９】

（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。

【０４７０】

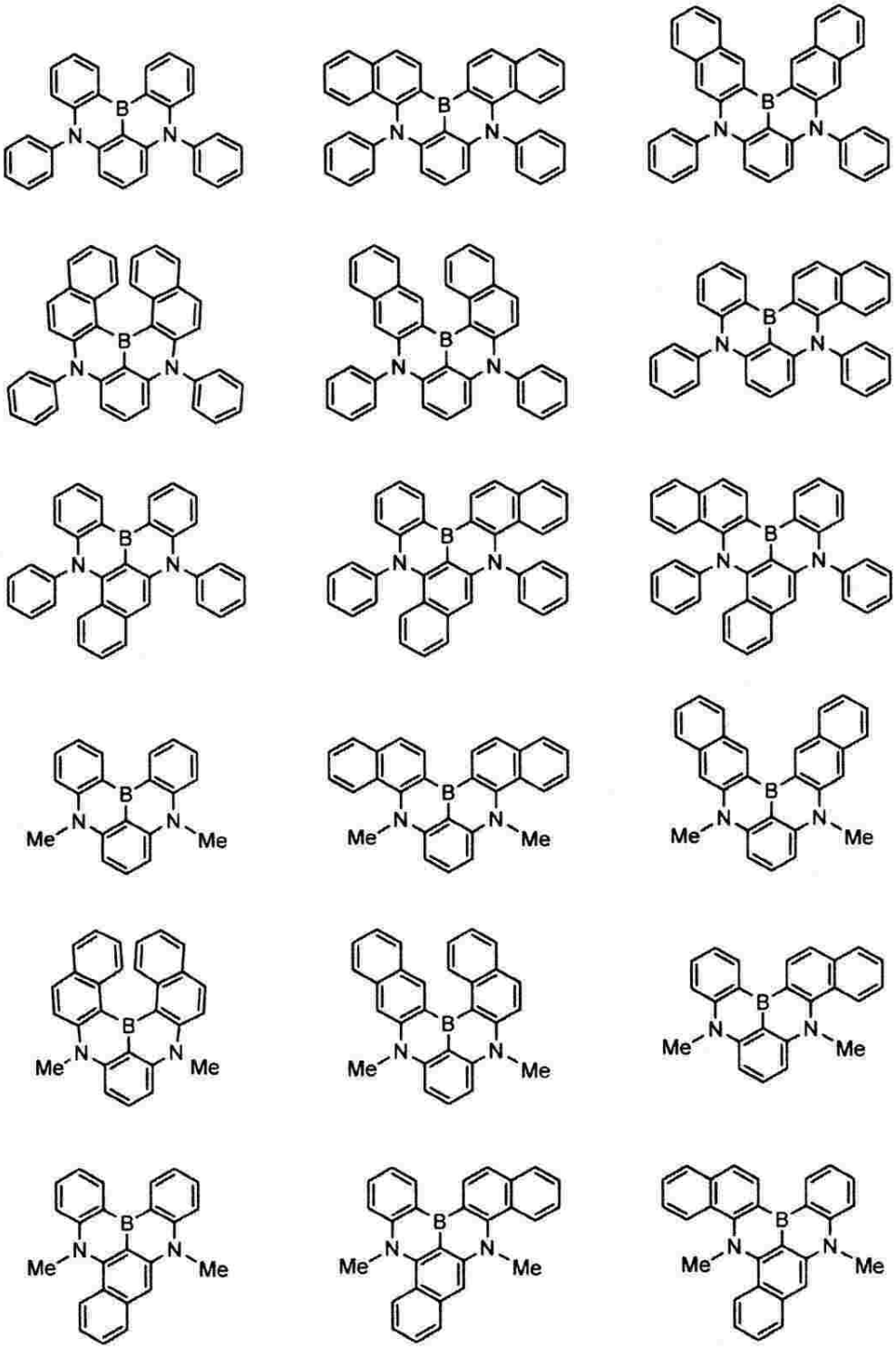
【化１７４】



(6)

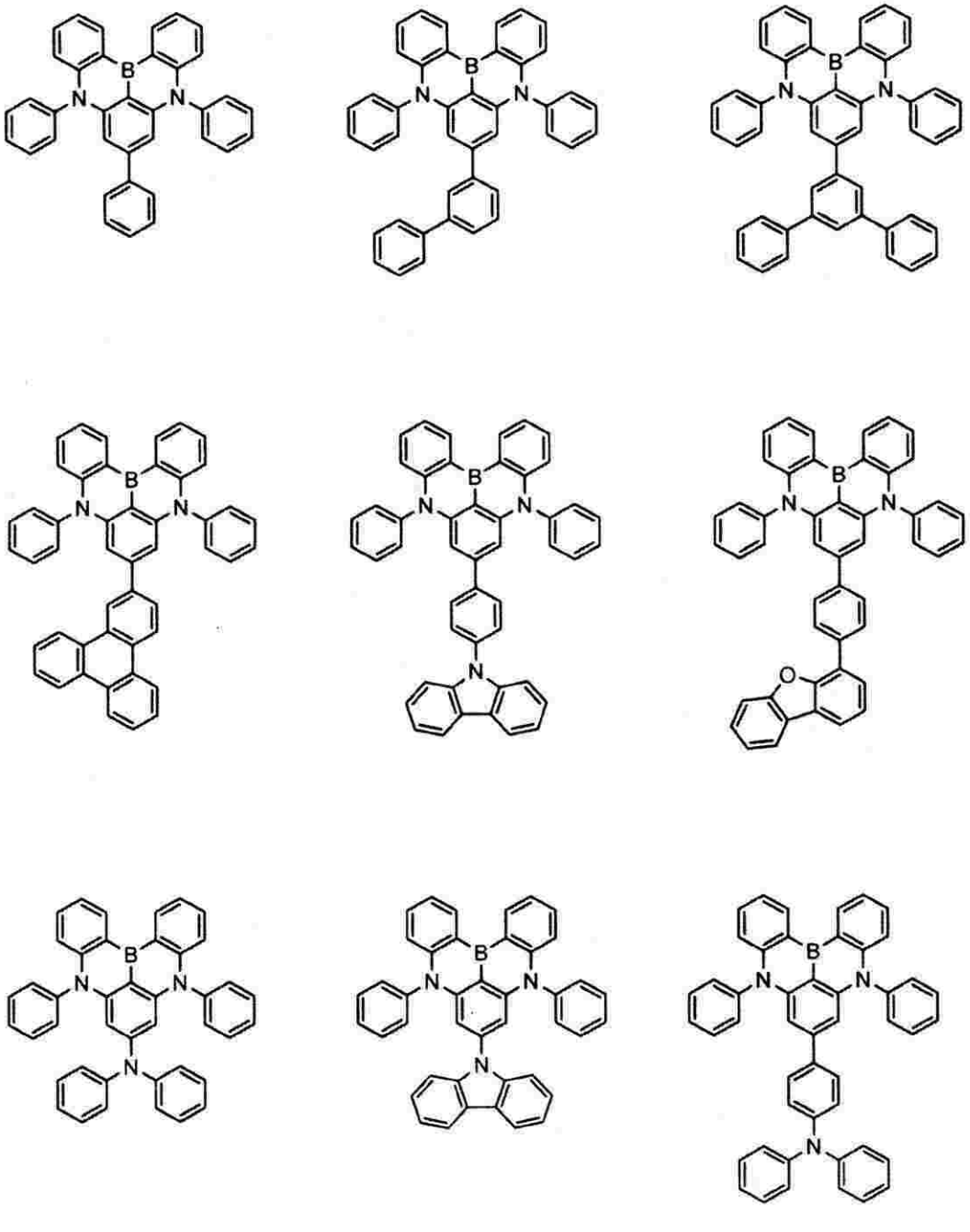
【０４７１】
（前記一般式（６）において、
ａ環、ｂ環及びｃ環は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０の芳香族炭化水素環、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環であり、
Ｒ６０１及びＲ６０２は、それぞれ独立に、前記ａ環、ｂ環又はｃ環と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、
前記置換もしくは無置換の複素環を形成しないＲ６０１及びＲ６０２は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
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。）
【０４７２】
（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。
【０４７３】

【化１７５】



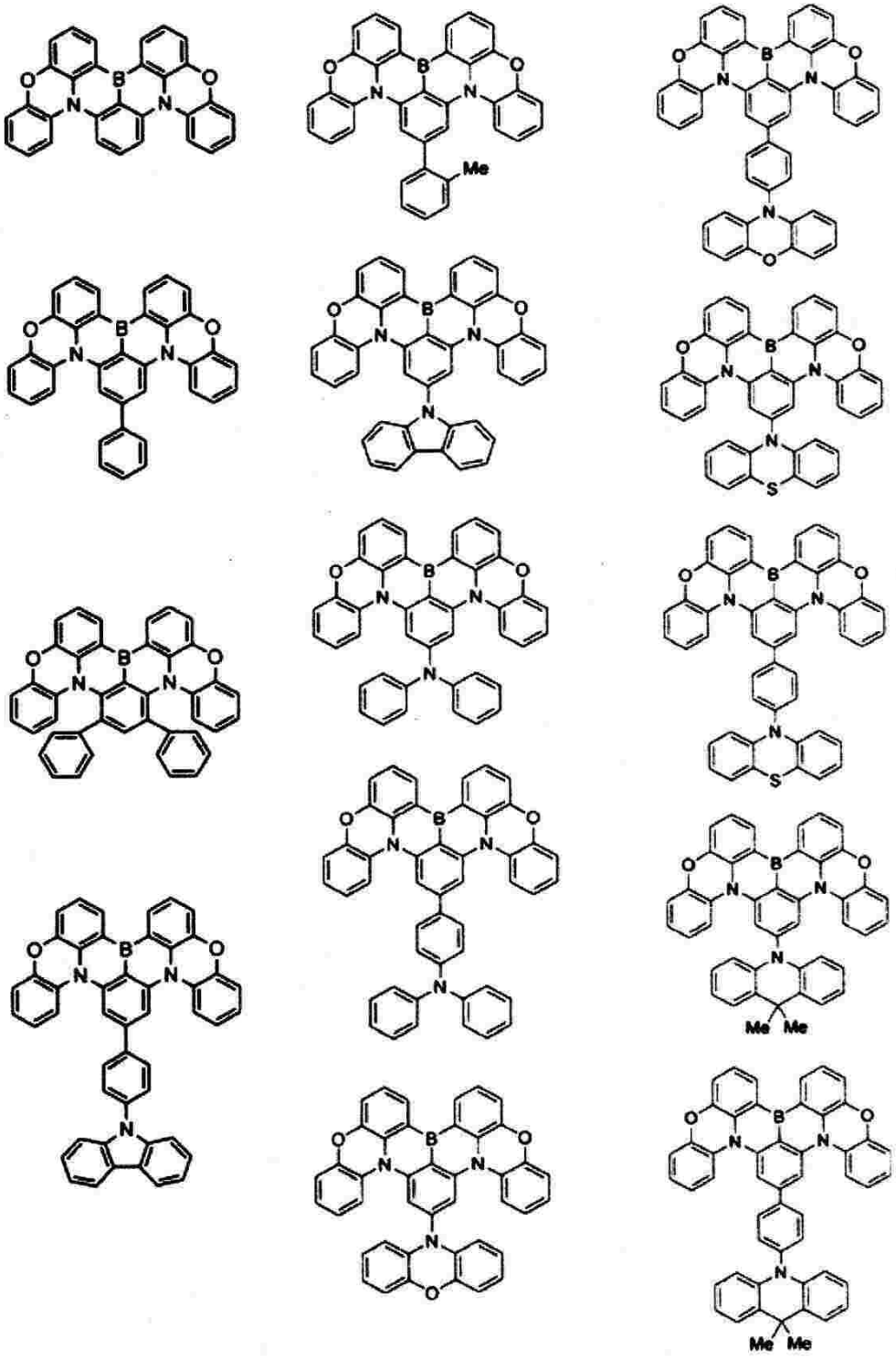
【０４７４】

【化１７６】



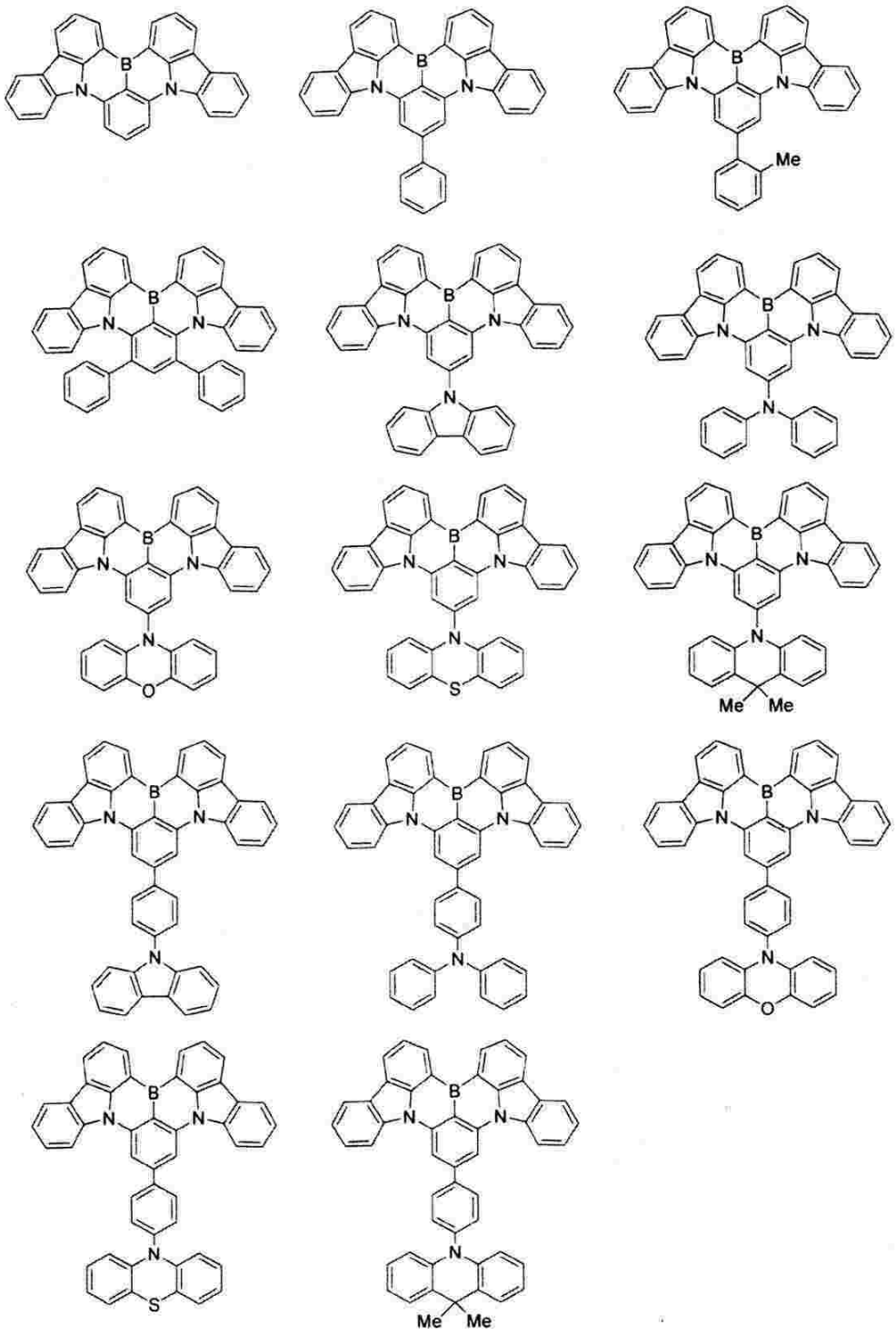
【０４７５】

【化１７７】



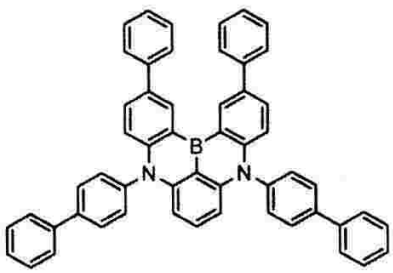
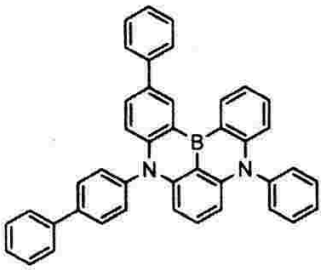
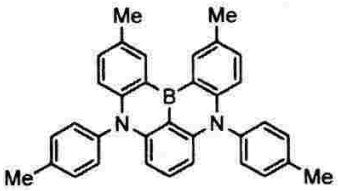
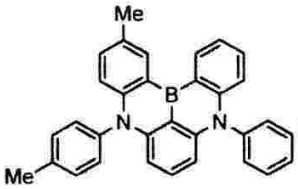
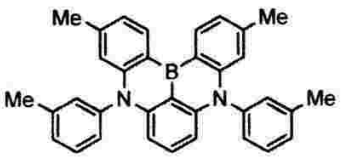
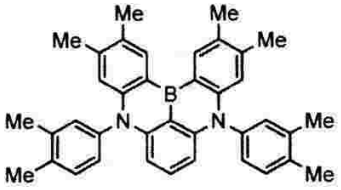
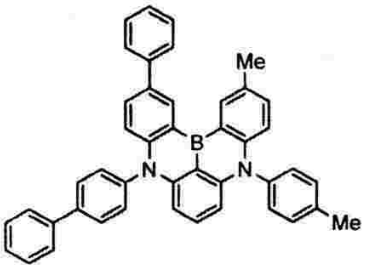
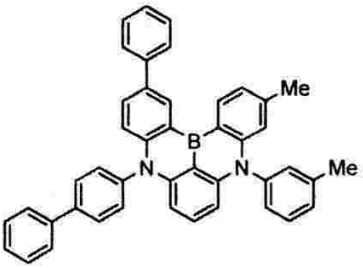
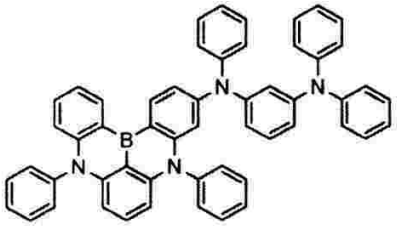
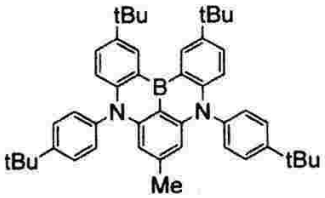
【０４７６】

【化１７８】



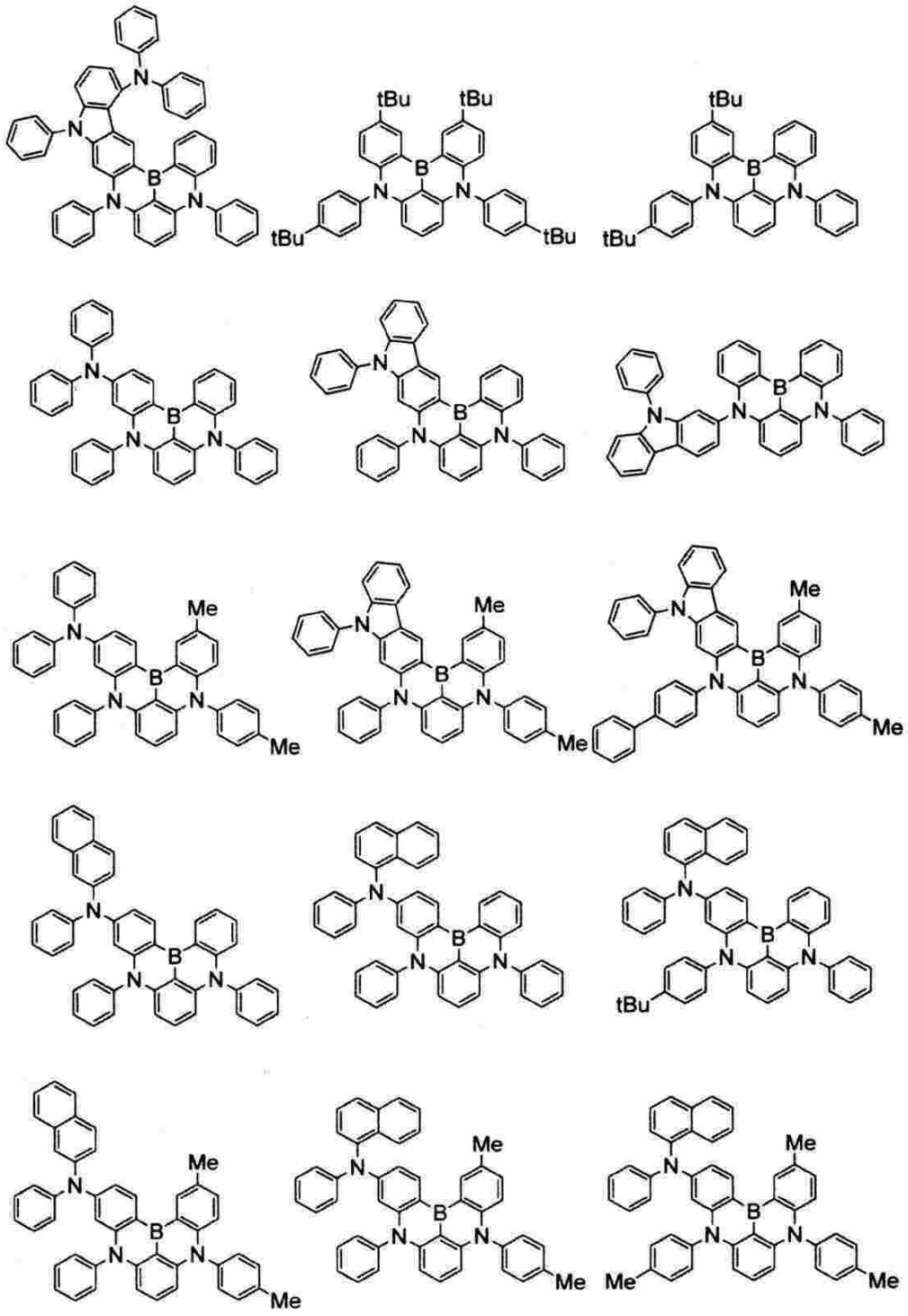
【０４７７】

【化１７９】

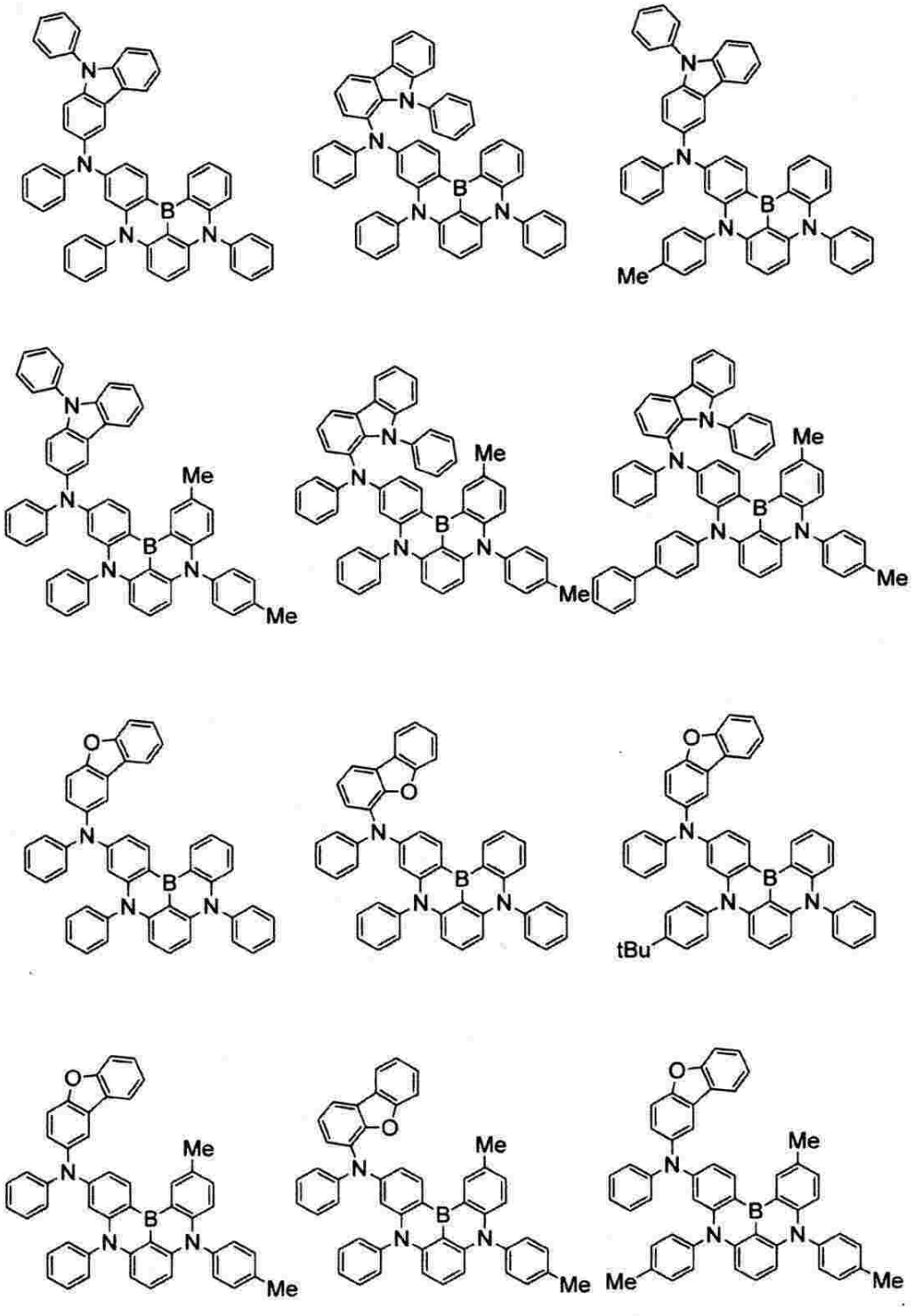
【０４７８】

【化１８０】



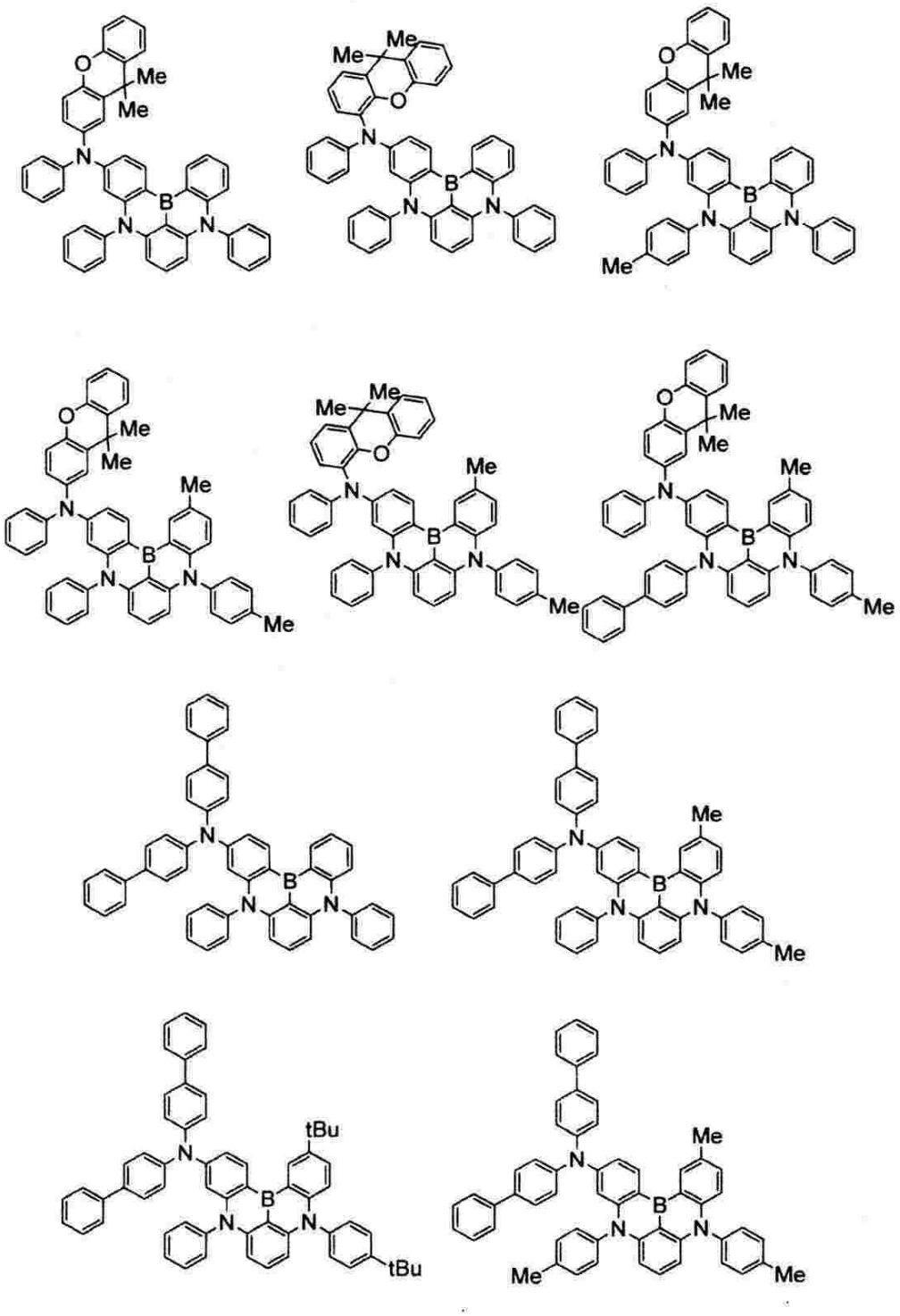
【０４７９】

【化１８１】



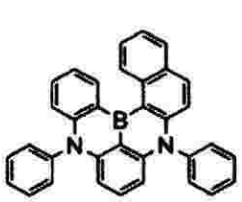
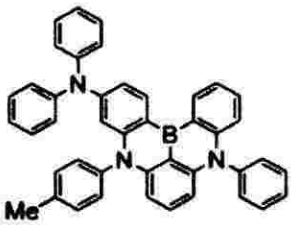
【０４８０】

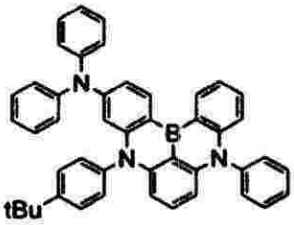
【化１８２】

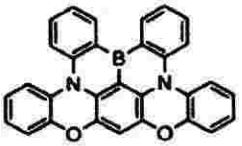
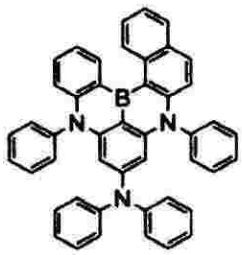
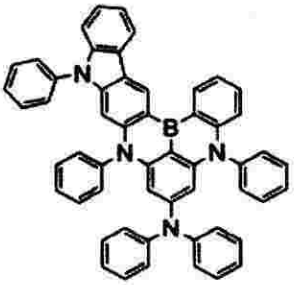
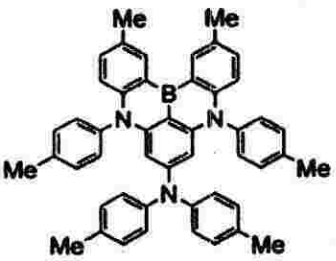


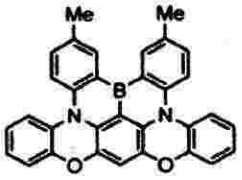
【０４８１】

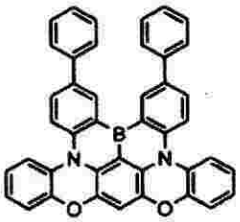
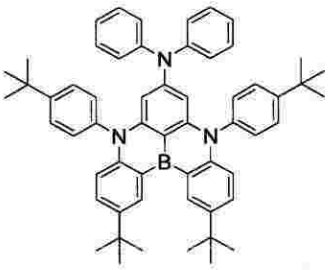
【化１８３】



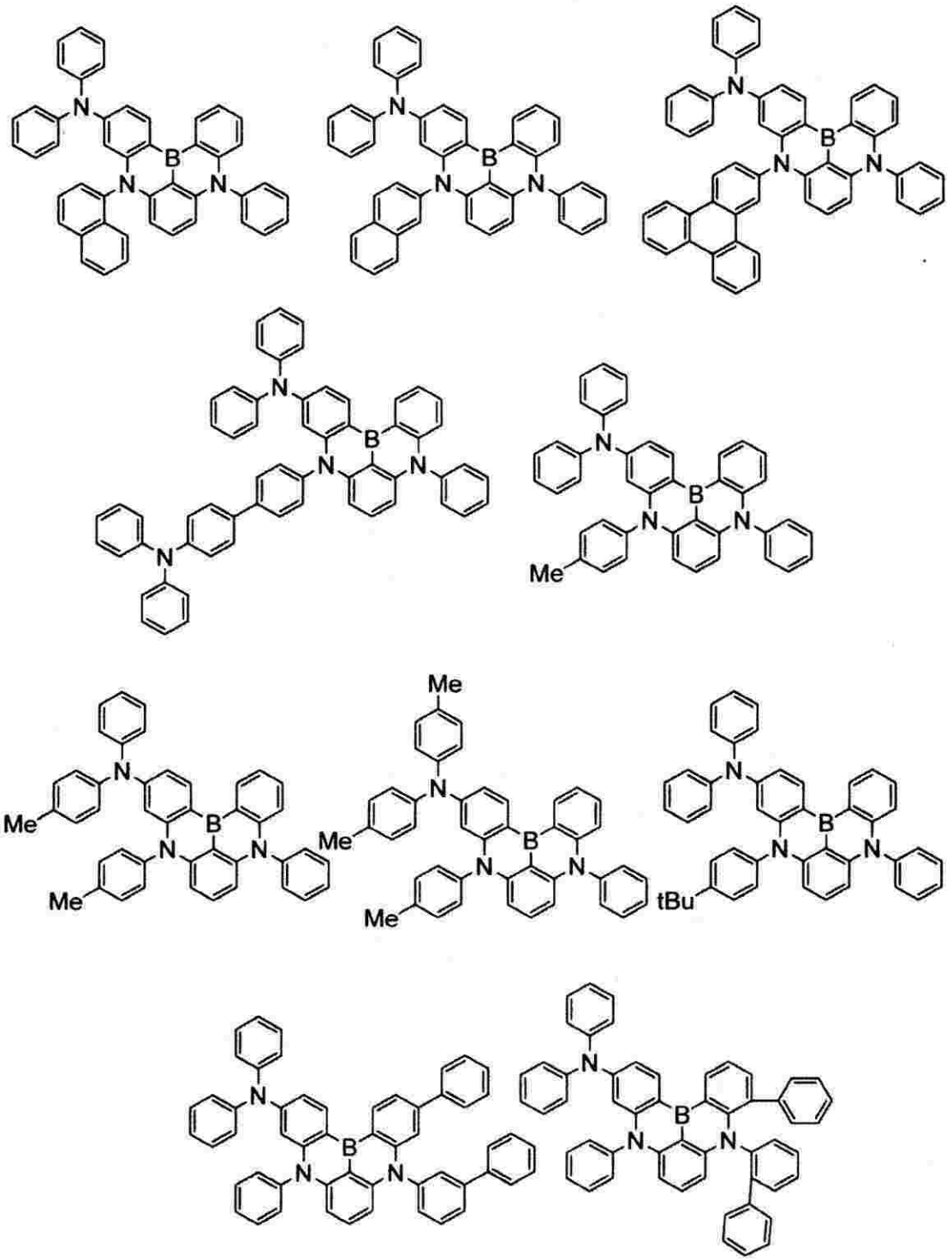







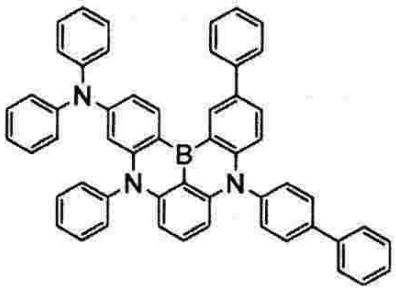
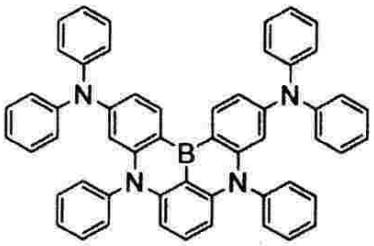
【０４８２】

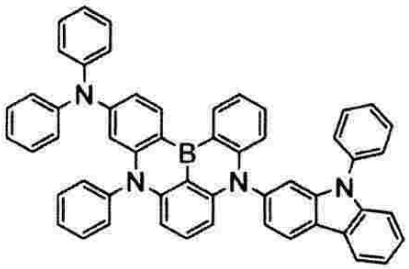
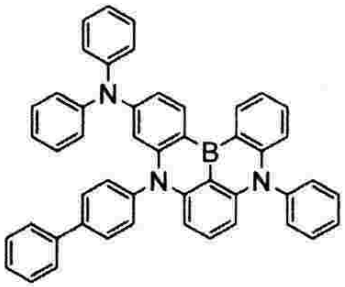
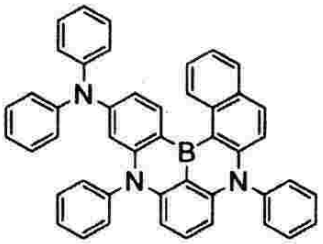
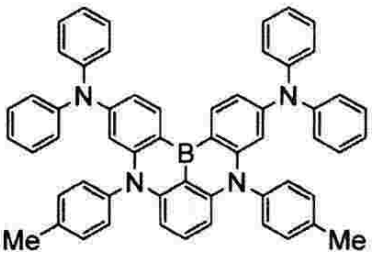
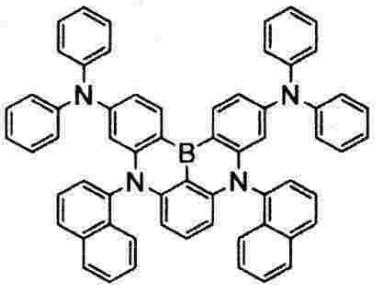
【化１８４】



【０４８３】

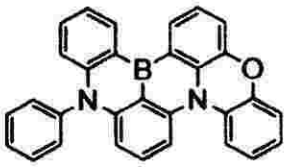
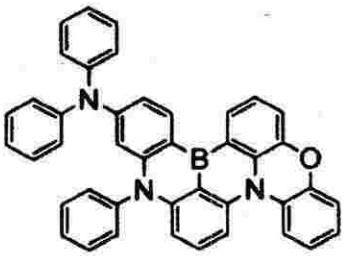
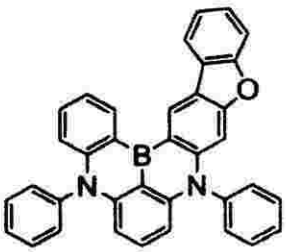
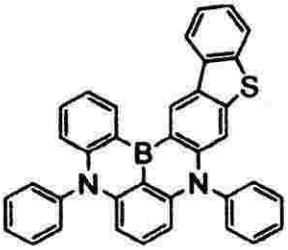
【化１８５】

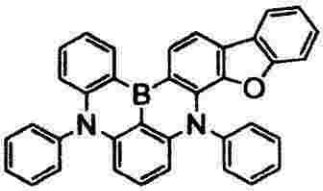



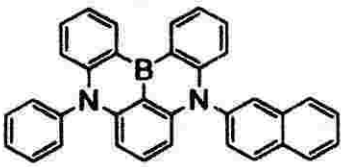






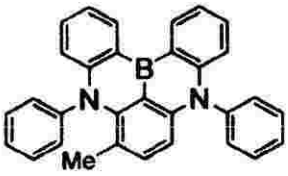
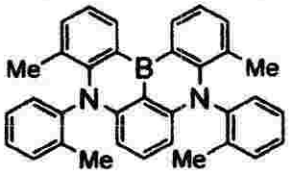
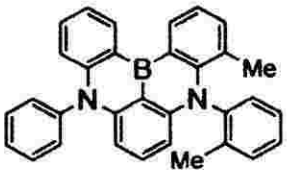
【０４８４】

【化１８６】

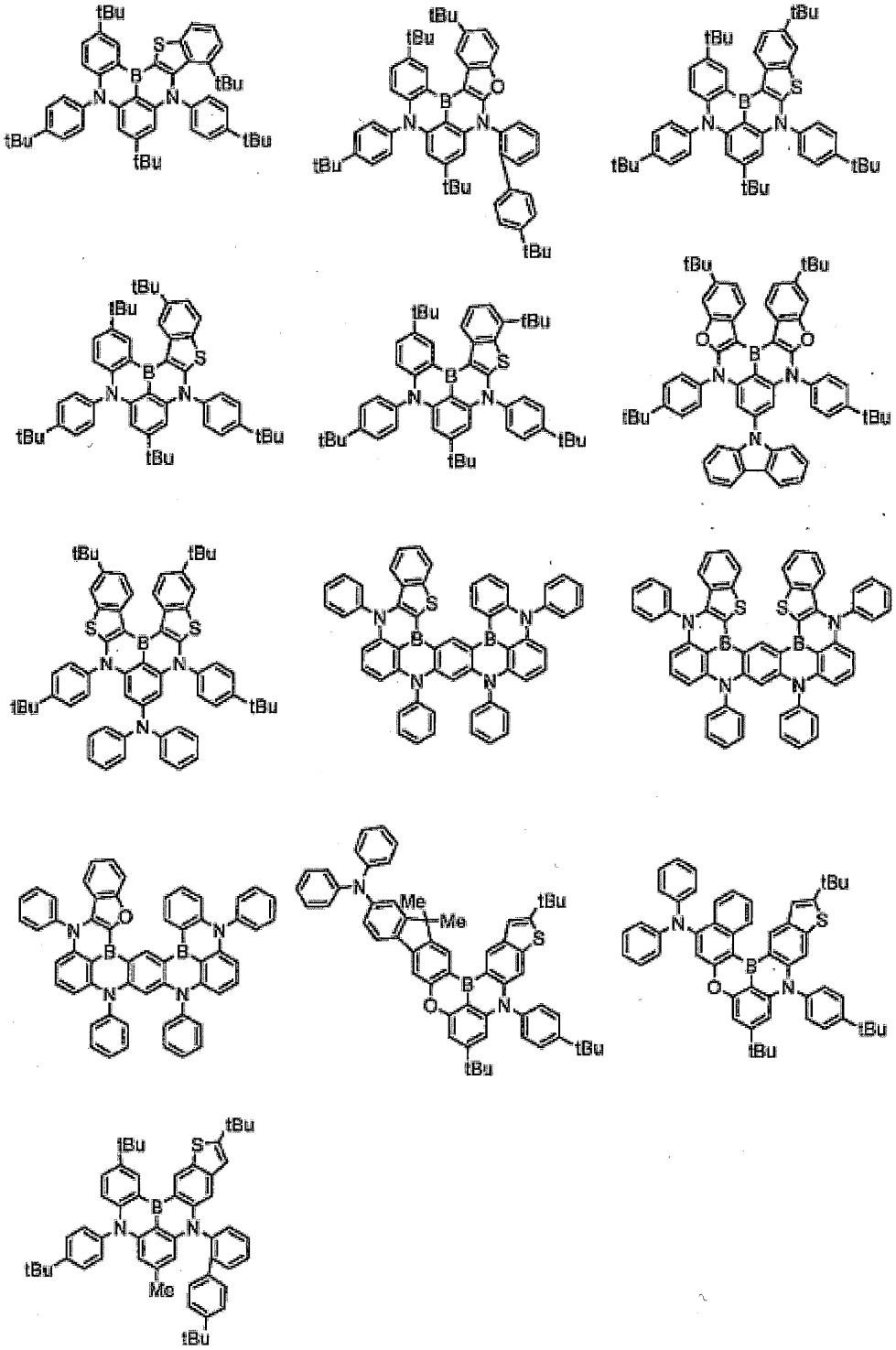




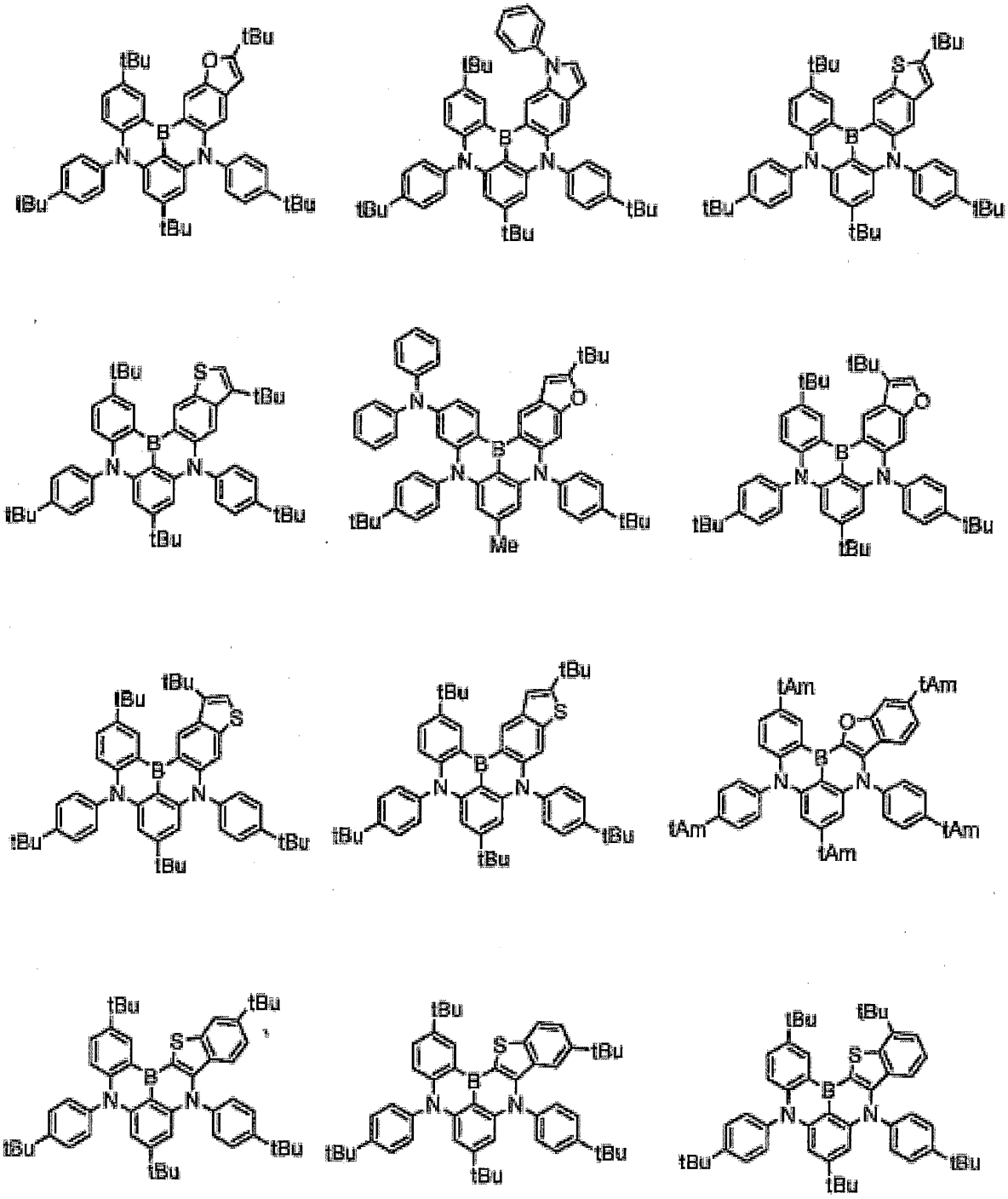
【０４８５】

【化１８７】



【０４８６】

【化１８８】



【０４８７】

第一の発光性化合物及び第二の発光性化合物等の発光性化合物中、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。

【０４８８】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層と第二の発光層との積層順が、陽極側から、第一の発光層と第二の発光層との順序である場合、第一のホスト材料の電子移動度μｅ（Ｈ１）と、第二のホスト材料の電子移動度μｅ（Ｈ２）とが、下記数式（数３０）の関係を満たす。

μｅ（Ｈ２）＞μｅ（Ｈ１）　…（数３０）

第一のホスト材料と第二のホスト材料とが、前記数式（数３０）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。

【０４８９】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層と第二の発光層との積層順が、陽極側から、第一の発光層と第二の発光層との順序である場合、第一のホスト材料の正孔移動度μｈ（Ｈ１）と、第二のホスト材料の正孔移動度μｈ（Ｈ２）とが、下記数式（数３１）の関係を満たすことも好ましい。

μｈ（Ｈ１）＞μｈ（Ｈ２）　…（数３１）

【０４９０】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層と第二の発光層との積層順が、陽極側から、第一の発光層と第二の発光層との順序である場合、第一のホスト材料の正孔移動度μｈ（Ｈ１）と、第一のホスト材料の電子移動度μｅ（Ｈ１）と、第二のホスト材料の正孔移動度μｈ（Ｈ２）と、第二のホスト材料の電子移動度μｅ（Ｈ２）とが、下記数式（数３２）の関係を満たすことも好ましい。

（μｅ（Ｈ２）／μｈ（Ｈ２））＞（μｅ（Ｈ１）／μｈ（Ｈ１））　…（数３２）

【０４９１】

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

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

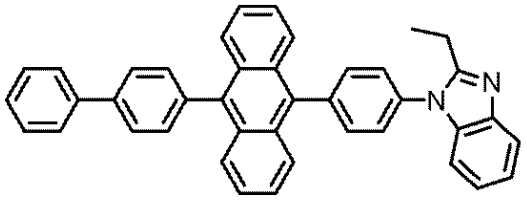
以上の移動度評価用素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

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

なお、括弧内の数字は、膜厚（ｎｍ）を示す。

【０４９２】

【化１８９】



ET-A

【０４９３】

電子移動度の移動度評価用素子を、インピーダンス測定装置に設置し、インピーダンス

測定を行う。インピーダンス測定は、測定周波数を１Ｈｚから１ＭＨｚまで掃引して行う。その際、素子には交流振幅０．１Ｖと同時に、直流電圧Ｖを印加する。測定されたインピーダンスＺから、下記計算式（Ｃ１）の関係を用いて、モジュラスＭを計算する。

計算式（Ｃ１）：Ｍ＝ｊωＺ

上記計算式（Ｃ１）において、ｊは、その平方が－１になる虚数単位、ωは、角周波数［ｒａｄ／ｓ］である。

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

計算式（Ｃ２）：$\tau = 1/(2\pi f_{max})$

上記計算式（Ｃ２）のπは、円周率を表す記号である。

上記τを用いて、下記計算式（Ｃ３－１）の関係から電子移動度μｅを算出する。

計算式（Ｃ３－１）：$\mu_e = d^2/(V\tau)$

上記計算式（Ｃ３－１）のｄは、素子を構成する有機薄膜の総膜厚であり、電子移動度の移動度評価用素子構成の場合、ｄ＝２１０［ｎｍ］である。

【０４９４】

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

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

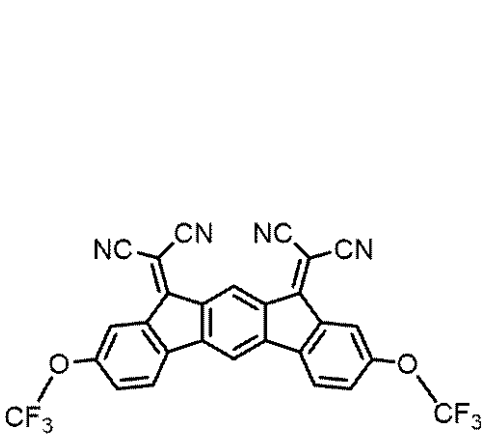
以上の移動度評価用素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

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

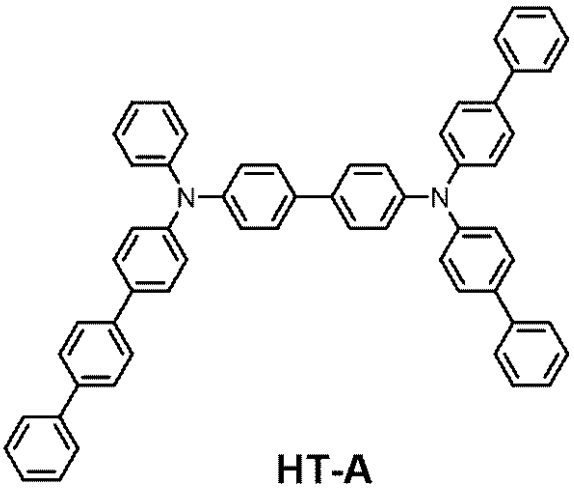
なお、括弧内の数字は、膜厚（ｎｍ）を示す。

【０４９５】

【化１９０】



HA-2



HT-A

【０４９６】

正孔移動度の移動度評価用素子を、インピーダンス測定装置に設置し、インピーダンス測定を行う。インピーダンス測定は、測定周波数を１Ｈｚから１ＭＨｚまで掃引して行う。その際、素子には交流振幅０．１Ｖと同時に、直流電圧Ｖを印加する。測定されたインピーダンスＺから、前記計算式（Ｃ１）の関係を用いて、モジュラスＭを計算する。

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

前記計算式（Ｃ２）から求めたτを用いて、下記計算式（Ｃ３－２）の関係から正孔移

動度μｈを算出する。
　計算式（Ｃ３－２）：μｈ＝ｄ^{2}／（Ｖτ）
　上記計算式（Ｃ３－２）のｄは、素子を構成する有機薄膜の総膜厚であり、正孔移動度の移動度評価用素子構成の場合、ｄ＝２１５［ｎｍ］である。
【０４９７】
　本明細書における電子移動度及び正孔移動度は、電界強度の平方根Ｅ$^{1/2}$＝５００［Ｖ$^{1/2}$／ｃｍ$^{1/2}$］の際の値である。電界強度の平方根Ｅ$^{1/2}$は、下記計算式（Ｃ４）の関係から算出することができる。
　計算式（Ｃ４）：Ｅ$^{1/2}$＝Ｖ$^{1/2}$／ｄ$^{1/2}$
　前記インピーダンス測定にはインピーダンス測定装置としてソーラトロン社の１２６０型を用い、高精度化のため、ソーラトロン社の１２９６型誘電率測定インターフェイスを併せて用いることができる。
【０４９８】
　本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層と第二の発光層とが、直接、接していることが好ましい。
【０４９９】
　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。
【０５００】
（有機ＥＬ素子のその他の層）
　本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、第一の発光層及び第二の発光層以外に、１以上の有機層を有していてもよい。有機層としては、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子障壁層、正孔障壁層、電子注入層及び電子輸送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。
【０５０１】
　本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層及び第二の発光層だけで構成されていてもよいが、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子障壁層、正孔障壁層、電子注入層及び電子輸送層からなる群から選択される少なくともいずれかの層をさらに有していてもよい。
【０５０２】
（有機ＥＬ素子の概略構成）
　図１に、本実施形態に係る有機ＥＬ素子の一例の概略構成を示す。
　有機ＥＬ素子１は、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、電子輸送層８、及び電子注入層９が、この順番で積層されて構成される。有機ＥＬ素子１の発光帯域５は、陽極３側に第一の発光層５１を含み、陰極４側に第二の発光層５２を含む。
【０５０３】

図２に、本実施形態に係る有機ＥＬ素子の別の一例の概略構成を示す。
有機ＥＬ素子１Ａは、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、第二の発光層５２、第一の発光層５１、電子輸送層８、及び電子注入層９が、この順番で積層されて構成される。有機ＥＬ素子１Ａの発光帯域５Ａは、陽極３側に第二の発光層５２を含み、陰極４側に第一の発光層５１を含む。

【０５０４】
本発明は、図１及び図２に示す有機ＥＬ素子の構成に限定されない。

【０５０５】
有機ＥＬ素子の構成についてさらに説明する。以下、符号の記載は省略することがある。

【０５０６】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、第一の発光層と第二の発光層との間に有機層が配置されていてもよい。

【０５０７】
（介在層）
本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、第一の発光層と第二の発光層との間に配置される有機層として、介在層を有することもできる。
本実施形態において、Ｓｉｎｇｌｅｔ発光領域とＴＴＦ発光領域とが重ならない様にする為、それを実現できる程度に介在層は発光性化合物を含まない。
例えば、発光性化合物の介在層における含有率が、０質量％だけでなく、例えば、製造の工程で意図せずに混入した成分、又は原材料に不純物として含まれる成分が発光性化合物である場合、介在層は、これらの成分を含むことを許容することである。
例えば、介在層を構成する全ての材料が、材料Ａ、材料Ｂ及び材料Ｃである場合、材料Ａ、材料Ｂ及び材料Ｃの介在層における各々の含有率は、いずれも１０質量％以上であり、材料Ａ、材料Ｂ及び材料Ｃの合計含有率は１００質量％である。
以下では、介在層を「ノンドープ層」と称することがある。また、発光性化合物を含む層を「ドープ層」と称することがある。

【０５０８】
一般的に、発光層を積層構成とした場合、Ｓｉｎｇｌｅｔ発光領域とＴＴＦ発光領域とが分離され易くなるため、発光効率を改善できるとされている。
本実施形態の有機ＥＬ素子において、発光帯域中の第一の発光層と第二の発光層との間に介在層（ノンドープ層）が配置されている場合、Ｓｉｎｇｌｅｔ発光領域とＴＴＦ発光領域とが重なる領域が低減し、三重項励起子とキャリアとの衝突に起因するＴＴＦ効率の低下が抑制されることが期待される。つまり、発光層間への介在層（ノンドープ層）の挿入は、ＴＴＦ発光の効率向上に寄与すると考えられる。

【０５０９】
介在層は、ノンドープ層である。
介在層は、金属原子を含まない。そのため、介在層は、金属錯体を含有しない。
介在層は、介在層材料を含む。介在層材料は、発光性化合物ではない。
介在層材料としては、発光性化合物以外の材料であれば、特に限定されない。
介在層材料としては、例えば、１）オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、若しくはフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、２）カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、若しくはクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、３）トリアリールアミン誘導体、若しくは縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族アミン化合物が挙げられる。

【０５１０】
介在層材料は、第一のホスト材料及び第二のホスト材料の一方、又は両方のホスト材料を用いる事もできるが、Ｓｉｎｇｌｅｔ発光領域とＴＴＦ発光領域とを離間させ、Ｓｉｎｇｌｅｔ発光とＴＴＦ発光とを阻害しない材料であれば、特に制限されない。

【０５１１】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、介在層は、当該介在層を構成する全ての材料の前記介在層における各々の含有率が、いずれも１０質量％以上である。
介在層は、当該介在層を構成する材料として前記介在層材料を含む。
介在層は、前記介在層材料を、介在層の全質量の６０質量％以上、含有することが好ましく、介在層の全質量の７０質量％以上、含有することがより好ましく、介在層の全質量の８０質量％以上、含有することがさらに好ましく、介在層の全質量の９０質量％以上、含有することがよりさらに好ましく、介在層の全質量の９５質量％以上、含有することがさらになお好ましい。
介在層は、介在層材料を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。
介在層が介在層材料を２種以上含有する場合、２種以上の介在層材料の合計含有率の上限は、１００質量％である。
なお、本実施形態は、介在層に、介在層材料以外の材料が含まれることを除外しない。
【０５１２】
介在層は単層で構成されていてもよいし、二層以上積層されて構成されていてもよい。
【０５１３】
介在層の膜厚は、Ｓｉｎｇｌｅｔ発光領域とＴＴＦ発光領域とが重なることを抑制できる形態であれば特に制限は無いが、１層あたり、３ｎｍ以上１５ｎｍ以下であることが好ましく、５ｎｍ以上１０ｎｍ以下であることがより好ましい。
介在層の膜厚が３ｎｍ以上であれば、Ｓｉｎｇｌｅｔ発光領域とＴＴＦ由来の発光領域とを分離しやすくなる。
介在層の膜厚が１５ｎｍ以下であれば、介在層のホスト材料が発光してしまう現象を抑制しやすくなる。
【０５１４】
介在層は、当該介在層を構成する材料として介在層材料を含み、第一のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と、第二のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ２）と、少なくとも１つの介在層材料の三重項エネルギーT_1（M_{mid}）が、下記数式（数２１）の関係を満たすことが好ましい。
$$T_1(H1) \geqq T_1(M_{mid}) \geqq T_1(H2) \quad \cdots(数21)$$
【０５１５】
介在層が、当該介在層を構成する材料として介在層材料を２以上含む場合、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、各々の介在層材料の三重項エネルギーT_1（M_{EA}）とが、下記数式（数２１Ａ）の関係を満たすことがより好ましい。
$$T_1(H1) \geqq T_1(M_{EA}) \geqq T_1(H2) \quad \cdots(数21A)$$
【０５１６】
（基板）
基板は、有機ＥＬ素子の支持体として用いられる。基板としては、例えば、ガラス、石英、及びプラスチック等を用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブル）基板のことであり、例えば、プラスチック基板等が挙げられる。プラスチック基板を形成する材料としては、例えば、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエーテルスルフォン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニル、ポリイミド、及びポリエチレンナフタレート等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。
【０５１７】
（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４．０ｅＶ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。

【０５１８】

これらの材料は、通常、スパッタリング法により成膜される。例えば、酸化インジウム－酸化亜鉛は、酸化インジウムに対し１質量％以上１０質量％以下の酸化亜鉛を加えたターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。また、例えば、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウムは、酸化インジウムに対し酸化タングステンを０．５質量％以上５質量％以下、酸化亜鉛を０．１質量％以上１質量％以下含有したターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。その他、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、スピンコート法などにより作製してもよい。

【０５１９】

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。

【０５２０】

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。

【０５２１】

有機ＥＬ素子がボトムエミッション型である場合、陽極は、光透過性を有する光透過性電極である。光透過性電極は、発光層から発する光を透過する光透過性もしくは半透過性を有する金属材料で形成されることが好ましい。本明細書において、光透過性もしくは半透過性とは、発光層から発する光を５０％以上（好ましくは８０％以上）透過する性質を意味する。光透過性もしくは半透過性を有する金属材料は、前記陽極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。光透過性もしくは半透過性を有する金属材料は、後述の導電層（又は透明導電層）に用いる材料として挙げた材料でもよい。

【０５２２】

有機ＥＬ素子がトップエミッション型である場合、陽極は、光反射層を有する光反射性電極である。光反射層は、光反射性を有する金属材料で形成されることが好ましい。本明細書において、光反射性とは、発光層から発する光を５０％以上（好ましくは８０％以上）反射する性質を意味する。光反射性を有する金属材料は、前記陽極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。

光反射層に用いる金属材料としては、例えば、Ａｌ、Ａｇ、Ｔａ、Ｚｎ、Ｍｏ、Ｗ、Ｎｉ、及びＣｒ等からなる群から選択されるいずれかの金属の単体材料、もしくは、この群から選択されるいずれかの金属を主成分（好ましくは全体の５０質量％以上）とした合金材料；ＮｉＰ、ＮｉＢ、ＣｒＰ、及びＣｒＢ等からなる群から選択されるアモルファス合金；ＮｉＡｌ及び銀合金等からなる群から選択される微結晶性合金；等が挙げられる。

また、光反射層に用いる金属材料として、ＡＰＣ（銀、パラジウム及び銅の合金）、ＡＲＡ（銀、ルビジウム及び金の合金）、ＭｏＣｒ（モリブデン及びクロムの合金）、及び

ＮｉＣｒ（ニッケル及びクロムの合金）からなる群から選択される少なくとも１種の合金等を用いてもよい。
光反射層は、単層であっても複数層であってもよい。
【０５２３】
光反射性電極としての陽極は、光反射層のみで構成されていてもよいが、光反射層と、導電層（好ましくは透明導電層）とを有する多層構造であってもよい。陽極が光反射層及び導電層を有する場合、反射層と、正孔輸送帯域が含む層（例えば、正孔注入層又は正孔輸送層）との間に当該導電層が配置されることが好ましい。また、陽極は、２つの導電層（第一の導電層及び第二の導電層）の間に、光反射層が配置された多層構造であってもよい。このような多層構造の場合、第一の導電層及び第二の導電層は、同じ材料で形成されていてもよいし、互いに異なる材料で形成されていてもよい。
導電層に用いる材料は、前記陽極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することができる。また、透明電極としての導電層（透明導電層）には、仕事関数の大きい（具体的には４．０ｅＶ以上）金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物などを用いることもできる。
また、導電層には、例えば、リチウム（Ｌｉ）及びセシウム（Ｃｓ）等のアルカリ金属、マグネシウム（Ｍｇ）、カルシウム（Ｃａ）及びストロンチウム（Ｓｒ）等のアルカリ土類金属、アルカリ金属及びアルカリ土類金属からなる群から選択される少なくとも１種を含む合金（例えば、ＭｇＡｇ及びＡｌＬｉ）、ユーロピウム（Ｅｕ）及びイッテルビウム（Ｙｂ）等の希土類金属、並びに希土類金属から選択される少なくとも１種を含む合金等を用いることもできる。
【０５２４】
（陰極）
陰極には、仕事関数の小さい（具体的には３．８ｅＶ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。
【０５２５】
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。
【０５２６】
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。
【０５２７】
有機ＥＬ素子がボトムエミッション型である場合、陰極は、光反射性電極である。光反射性電極は、光反射性を有する金属材料で形成されることが好ましい。光反射性を有する金属材料は、前記陰極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することもできる。また、光反射性を有する金属材料は、前述の光反射層に用いる金属材料として挙げた材料でもよい。
【０５２８】
有機ＥＬ素子がトップエミッション型である場合、陰極は、光透過性を有する光透過性電極である。光透過性電極は、発光層から発する光を透過する光透過性もしくは半透過性を有する金属材料で形成されることが好ましい。光透過性もしくは半透過性とは、発光層から発する光を５０％以上（好ましくは８０％以上）透過する性質を意味する。光透過性

もしくは半透過性を有する金属材料は、前記陰極の項で列挙した材料から適宜選択して使用することもできる。光透過性もしくは半透過性を有する金属材料は、前述の導電層（又は透明導電層）に用いる材料として挙げた材料でもよい。

【０５２９】

（キャッピング層）

トップエミッション型の有機ＥＬ素子は、陰極の上部にキャッピング層を備えていてもよい。キャッピング層は、陰極の陽極と対向する面とは反対側の面に配置されていてもよい。

キャッピング層は、例えば、高分子化合物、金属酸化物、金属フッ化物、金属ホウ化物、窒化ケイ素、及びシリコン化合物（酸化ケイ素等）からなる群から選択される少なくとも１種の化合物を含有していてもよい。

また、キャッピング層は、例えば、芳香族アミン誘導体、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、フルオレン誘導体、又はジベンゾフラン誘導体からなる群から選択される少なくとも１種の化合物を含有していてもよい。

また、これらのキャッピング層に用い得る化合物を含む層を２以上積層させた積層体も、キャッピング層として用いることができる。

【０５３０】

（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。

【０５３１】

また、正孔注入性の高い物質としては、低分子の有機化合物である４，４’，４’’－トリス（Ｎ，Ｎ－ジフェニルアミノ）トリフェニルアミン（略称：ＴＤＡＴＡ）、４，４’，４’’－トリス［Ｎ－（３－メチルフェニル）－Ｎ－フェニルアミノ］トリフェニルアミン（略称：ＭＴＤＡＴＡ）、４，４’－ビス［Ｎ－（４－ジフェニルアミノフェニル）－Ｎ－フェニルアミノ］ビフェニル（略称：ＤＰＡＢ）、４，４’－ビス（Ｎ－｛４－［Ｎ’－（３－メチルフェニル）－Ｎ’－フェニルアミノ］フェニル｝－Ｎ－フェニルアミノ）ビフェニル（略称：ＤＮＴＰＤ）、１，３，５－トリス［Ｎ－（４－ジフェニルアミノフェニル）－Ｎ－フェニルアミノ］ベンゼン（略称：ＤＰＡ３Ｂ）、３－［Ｎ－（９－フェニルカルバゾール－３－イル）－Ｎ－フェニルアミノ］－９－フェニルカルバゾール（略称：ＰＣｚＰＣＡ１）、３，６－ビス［Ｎ－（９－フェニルカルバゾール－３－イル）－Ｎ－フェニルアミノ］－９－フェニルカルバゾール（略称：ＰＣｚＰＣＡ２）、３－［Ｎ－（１－ナフチル）－Ｎ－（９－フェニルカルバゾール－３－イル）アミノ］－９－フェニルカルバゾール（略称：ＰＣｚＰＣＮ１）等の芳香族アミン化合物等やジピラジノ［２，３－ｆ：２０，３０－ｈ］キノキサリン－２，３，６，７，１０，１１－ヘキサカルボニトリル（ＨＡＴ－ＣＮ）も挙げられる。

【０５３２】

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：ＰＶＫ）、ポリ（４－ビニルトリフェニルアミン）（略称：ＰＶＴＰＡ）、ポリ［Ｎ－（４－｛Ｎ’－［４－（４－ジフェニルアミノ）フェニル］フェニル－Ｎ’－フェニルアミノ｝フェニル）メタクリルアミド］（略称：ＰＴＰＤＭＡ）、ポリ［Ｎ，Ｎ’－ビス（４－ブチルフェニル）－Ｎ，Ｎ’－ビス（フェニル）ベンジジン］（略称：Ｐｏｌｙ－ＴＰＤ）などの高分子化合物が挙げられる。また、ポリ（３，４－エチレンジオキシチオフェン）／ポリ（スチレンスルホン酸）（ＰＥＤＯＴ／ＰＳＳ）、ポリアニリン／ポリ（スチレンスルホン酸）（ＰＡｎｉ／ＰＳＳ）等の酸を添加した高分子化合物を用いることもできる。

【０５３３】

（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。
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、陽極と発光帯域との間に、正孔輸送層が配置されていることが好ましい。
【０５３４】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、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：ＮＰＢ）やＮ，Ｎ’－ビス（３－メチルフェニル）－Ｎ，Ｎ’－ジフェニル－［１，１’－ビフェニル］－４，４’－ジアミン（略称：ＴＰＤ）、４－フェニル－４’－（９－フェニルフルオレン－９－イル）トリフェニルアミン（略称：ＢＡＦＬＰ）、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：ＤＦＬＤＰＢｉ）、４，４’，４’’－トリス（Ｎ，Ｎ－ジフェニルアミノ）トリフェニルアミン（略称：ＴＤＡＴＡ）、４，４’，４’’－トリス［Ｎ－（３－メチルフェニル）－Ｎ－フェニルアミノ］トリフェニルアミン（略称：ＭＴＤＡＴＡ）、４，４’－ビス［Ｎ－（スピロ－９，９’－ビフルオレン－２－イル）－Ｎ―フェニルアミノ］ビフェニル（略称：ＢＳＰＢ）などの芳香族アミン化合物等を用いることができる。ここに述べた物質は、主に１０$^{-6}$ｃｍ^{2}／（Ｖ・ｓ）以上の正孔移動度を有する物質である。
【０５３５】
正孔輸送層には、ＣＢＰ、９－［４－（Ｎ－カルバゾリル）］フェニル－１０－フェニルアントラセン（ＣｚＰＡ）、９－フェニル－３－［４－（１０－フェニル－９－アントリル）フェニル］－９Ｈ－カルバゾール（ＰＣｚＰＡ）のようなカルバゾール誘導体や、ｔ－ＢｕＤＮＡ、ＤＮＡ、ＤＰＡｎｔｈのようなアントラセン誘導体を用いても良い。ポリ（Ｎ－ビニルカルバゾール）（略称：ＰＶＫ）やポリ（４－ビニルトリフェニルアミン）（略称：ＰＶＴＰＡ）等の高分子化合物を用いることもできる。
【０５３６】
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。
【０５３７】
（電子障壁層）
電子障壁層は、正孔を輸送し、かつ電子が当該電子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層であることが好ましい。電子障壁層が含有する化合物は、例えば、公知の電子障壁層に用いられている化合物であり、芳香族アミン化合物及びカルバゾール誘導体からなる群から選択される少なくともいずれかの化合物であることが好ましい。また、電子障壁層が含有する化合物は、置換もしくは無置換のアミノ基を分子中に１つだけ有するモノアミン化合物でもよい。また、電子障壁層が含有する化合物は、置換もしくは無置換のカルバゾリル基と、１つの置換もしくは無置換のアミノ基とを分子中に有する化合物でもよい。
電子障壁層は、励起エネルギーが発光層から周辺層に漏れ出さないように、発光層で生成した励起子が、電子障壁層よりも陽極側の層（例えば、正孔輸送層及び正孔注入層等）に移動することを阻止する層であってもよい。
【０５３８】
（正孔障壁層）
正孔障壁層は、電子を輸送し、かつ正孔が当該正孔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層であることが好ましい。正孔障壁層が含有する化合物は、例えば、公知の正孔障壁層に用いられている化合物である。正孔障壁層が含有する化合物は、例えば、後述する電子輸送層に使用することができる化合物と同様、金属錯体、複素芳香族化合物及び高分子化合物からなる群から選択される少なくともいずれかの化合物であることが好ましい。また、正孔障壁層が含有する化合物は、例えば、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及びフェナントロリン誘導体からなる群から選択される少なくともいずれかの化合物でもよい。
正孔障壁層は、励起エネルギーが発光層から周辺層に漏れ出さないように、発光層で生成した励起子が、当該正孔障壁層よりも陰極側の層（例えば、電子輸送層及び電子注入層等）に移動することを阻止する層であることも好ましい。
【０５３９】
（電子輸送層）
電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、発光帯域及び陰極の間に、電子輸送層が配置されていることが好ましい。
【０５４０】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、電子輸送層には、１）アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、２）イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、３）高分子化合物を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、Ａｌｑ、トリス（４－メチル－８－キノリノラト）アルミニウム（略称：Ａｌｍｑ$_3$）、ビス（１０－ヒドロキシベンゾ［ｈ］キノリナト）ベリリウム（略称：ＢｅＢｑ$_2$）、ＢＡｌｑ、Ｚｎｑ、ＺｎＰＢＯ、ＺｎＢＴＺなどの金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、２－（４－ビフェニリル）－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－（ｐｔｅｒｔ－ブチルフェニル）－１，３，４－オキサジアゾール－２－イル］ベンゼン（略称：ＯＸＤ－７）、３－（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）－４－フェニル－５－（４－ビフェニリル）－１，２，４－トリアゾール（略称：ＴＡＺ）、３－（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）－４－（４－エチルフェニル）－５－（４－ビフェニリル）－１，２，４－トリアゾール（略称：ｐ－ＥｔＴＡＺ）、バソフェナントロリン（略称：ＢＰｈｅｎ）、バソキュプロイン（略称：ＢＣＰ）、４，４’－ビス（５－メチルベンゾオキサゾール－２－イル）スチルベン（略称：ＢｚＯｓ）などの複素芳香族化合物も用いることができる。本実施態様においては、ベンゾイミダゾール化合物を好適に用いることができる。ここに述べた物質は、主に10^{-6}ｃｍ^2／（Ｖ・ｓ）以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層で構成されていてもよいし、上記物質からなる層が二層以上積層されて構成されていてもよい。
【０５４１】
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。
【０５４２】
（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。
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、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（ＣａＦ$_2$）、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。
【０５４３】
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。

【０５４４】

（層形成方法）

本実施形態の有機ＥＬ素子の各層の形成方法としては、上記で特に言及した以外には制限されないが、真空蒸着法、スパッタリング法、プラズマ法、イオンプレーティング法などの乾式成膜法や、スピンコーティング法、ディッピング法、フローコーティング法、インクジェット法などの湿式成膜法などの公知の方法を採用することができる。

【０５４５】

（膜厚）

本実施形態の有機ＥＬ素子の各有機層の膜厚は、上記で特に言及した場合を除いて限定されない。一般に、膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、膜厚が厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常、有機ＥＬ素子の各有機層の膜厚は、数ｎｍから１μｍの範囲が好ましい。

【０５４６】

（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の測定は、以下のようにして行う。電流密度が１０ｍＡ／ｃｍ^{2}となるように有機ＥＬ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。

【０５４７】

〔第三実施形態〕

（有機エレクトロルミネッセンス素子）

本実施形態に係る有機ＥＬ素子について説明する。

【０５４８】

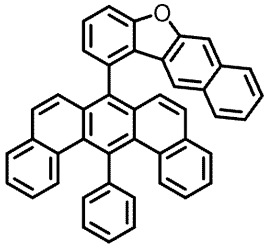
本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極との間に配置された発光帯域と、を有し、前記陽極、前記発光帯域、及び前記陰極が、この順で配置され、前記発光帯域は、第一の発光層及び第二の発光層を含み、前記第一の発光層は、第一のホスト材料及び第一の発光性化合物を含有し、前記第二の発光層は、第二のホスト材料及び第二の発光性化合物を含有し、前記第一のホスト材料及び前記第二のホスト材料は、互いに異なり、前記第一の発光性化合物及び前記第二の発光性化合物は、互いに同一であるか又は異なり、前記第一のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と前記第二のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ２）とが、前記数式（数１）の関係を満たし、前記第一のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と前記第一の発光性化合物の三重項エネルギーT_1（Ｄ）とが、下記数式（数２）の関係を満たす。

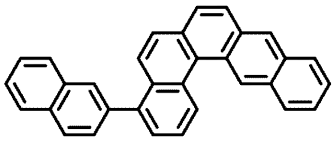
$$0.00\,eV \leqq T_1(H1) - T_1(D1) \leqq 0.15\,eV \quad \cdots(数2)$$

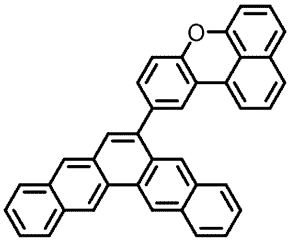
【０５４９】
第一のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と第一の発光性化合物の三重項エネルギーT_1（Ｄ１）との差が、０．００ｅＶ以上であることにより、トリプレットエネルギーが効率的に第二の発光層へ移動し、０．１５ｅＶ以下であることにより、第一の発光性化合物上で失活するトリプレットエネルギーを最小限に抑える事ができる。
【０５５０】
本実施形態において、第一のホスト材料、第一の発光性化合物及び第二のホスト材料が、前記数式（数１）及び（数２）の関係を同時に満たすため、本実施形態によれば、色度悪化が抑制され、かつ長寿命な有機ＥＬ素子を提供することができる。
【０５５１】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子の一態様において、前記数式（数２）の関係を満たす場合、第一のホスト材料と第一の発光性化合物と第二のホスト材料とが、下記数式（数２Ａ）の関係を満たす。
T_1（Ｈ１）≧T_1（Ｄ１）＞T_1（Ｈ２）　…（数２Ａ）
【０５５２】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子の一態様において、第一のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と第一の発光性化合物の三重項エネルギーT_1（Ｄ）とが、下記数式（数２Ｂ）又は（数２Ｃ）の関係を満たす。
０．００ｅＶ≦T_1（Ｈ１）－T_1（Ｄ１）≦０．１０ｅＶ　…（数２Ｂ）
０．００ｅＶ≦T_1（Ｈ１）－T_1（Ｄ１）≦０．０５ｅＶ　…（数２Ｃ）
【０５５３】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子においても、第一のホスト材料が、第一実施形態に係る化合物（第一の化合物）であることが好ましい。
【０５５４】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、少なくとも２以上の発光層を有している点で、第二実施形態に係る有機ＥＬ素子と同様である。ただし、第二実施形態に係る有機ＥＬ素子の一態様においては、前記数式（数６）の関係、すなわち、第一の発光性化合物の三重項エネルギーT_1（Ｄ１）が第一のホスト材料の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）よりも大きいという関係を満たす場合があるのに対して、本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、前記数式（数２）の関係、すなわち、T_1（Ｈ１）とT_1（Ｄ１）とが同じであるという関係を満たすか、又はT_1（Ｈ１）がT_1（Ｄ１）よりも大きいという関係を満たすという点で、本実施形態と第二実施形態とが相違する。その他の点では、本実施形態と第二実施形態とでは、同様であるため、第二実施形態の説明は、本実施形態の説明にも適用される。本実施形態の説明において第二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、本実施形態では、特に言及されない材料や化合物については、第一実施形態及び第二実施形態で説明した材料や化合物と同様の材料や化合物を用いることができる。
【０５５５】
〔第四実施形態〕
（電子機器）
本実施形態に係る電子機器は、上述の実施形態のいずれかの有機ＥＬ素子を搭載している。電子機器としては、例えば、表示装置及び発光装置等が挙げられる。表示装置としては、例えば、表示部品（例えば、有機ＥＬ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。発光装置は、表示装置に用いることもでき、例えば、表示装置のバックライトとして用いることもできる。
【０５５６】
〔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。

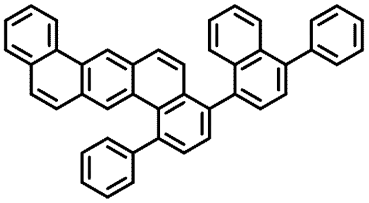
【０５５７】
例えば、有機ＥＬ素子が有する発光層の数は、２層に限られず、３層以上の発光層が積層されていてもよい。有機ＥＬ素子が３層以上の複数の発光層を有する場合、少なくとも２つの発光層（第一の発光層及び第二の発光層）が上記実施形態で説明した条件を満たしていればよい。例えば、その他の発光層が、蛍光発光型の発光層であっても、三重項励起状態から直接基底状態への電子遷移による発光を利用した燐光発光型の発光層であってもよい。
【０５５８】
また、有機ＥＬ素子が複数の発光層を有する場合、これらの発光層が互いに隣接して設けられていてもよいし、中間層を介して複数の発光ユニットが積層された、いわゆるタンデム型の有機ＥＬ素子であってもよい。
【０５５９】
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】
【０５６０】
以下、実施例を挙げて本発明をさらに詳細に説明する。本発明はこれら実施例に何ら限定されない。
【０５６１】
＜化合物＞
実施例１～８に係る有機ＥＬ素子の製造に用いた一般式（１）で表される環構造を有する化合物（第一の化合物）の構造を以下に示す。
【０５６２】

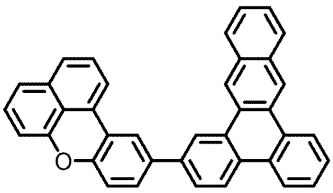
【化１９１】

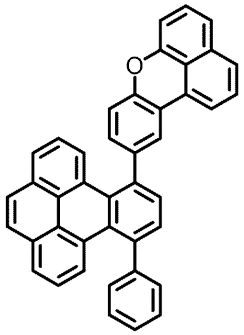

BH1-1

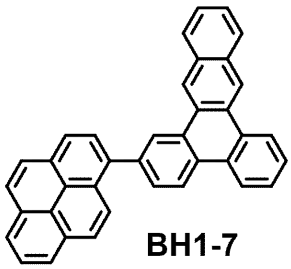

BH1-2

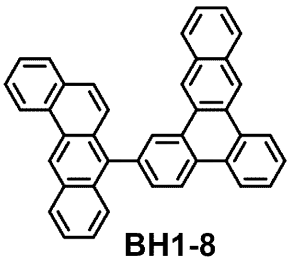

BH1-3


BH1-4


BH1-5


BH1-6

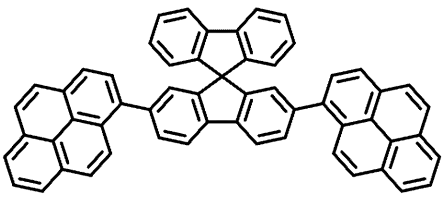

BH1-7

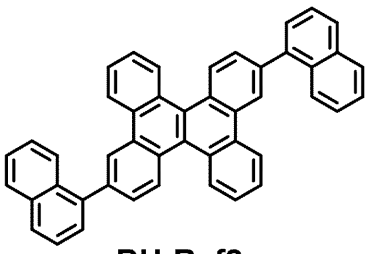

BH1-8

【０５６３】

比較例１～２に係る有機ＥＬ素子の製造に用いた比較化合物の構造を以下に示す。

【化１９２】


BH-Ref1

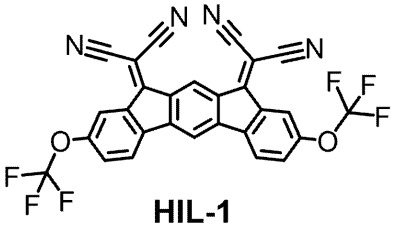

BH-Ref2

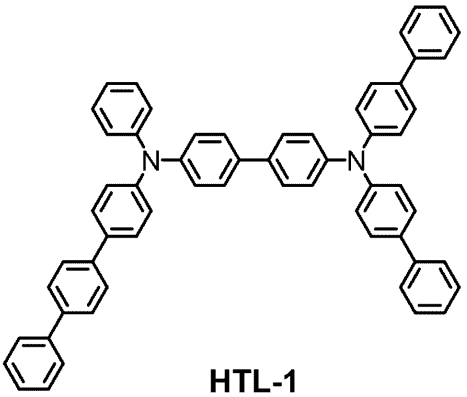
【０５６４】

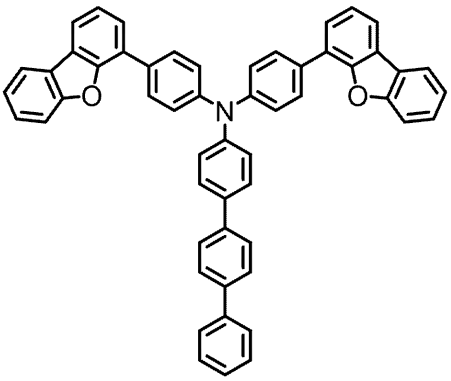
実施例１～８及び比較例１～２に係る有機ＥＬ素子の製造に用いた化合物の構造を以下に示す。

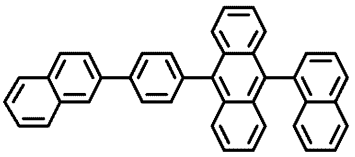
【０５６５】

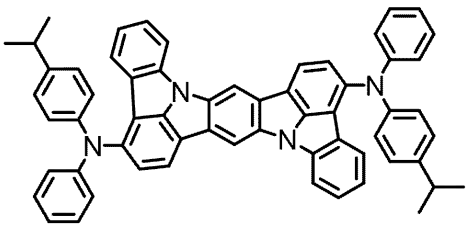
【化１９３】

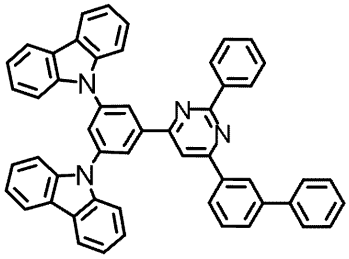

HIL-1

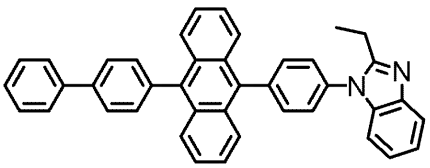

HTL-1


EBL-1


BH-2


BD-1


aET-1


bET-1

【０５６６】

＜有機ＥＬ素子の作製＞

有機ＥＬ素子を以下のように作製し、評価した。

【０５６７】

（実施例１）

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ＨＩＬ－１を蒸着し、膜厚５ｎｍの正孔注入層を形成した。

次に、この正孔注入層の上に、化合物ＨＴＬ－１を蒸着し、膜厚８０ｎｍの第一の正孔輸送層を形成した。

次に、この第一の正孔輸送層の上に、化合物ＥＢＬ－１を蒸着し、膜厚１０ｎｍの第二の正孔輸送層（電子障壁層と称する場合もある。）を形成した。
次に、この第二の正孔輸送層の上に、化合物ＢＨ１－１（第一のホスト材料）及び化合物ＢＤ－１（第一の発光性化合物）を共蒸着し、膜厚１２．５ｎｍの第一の発光層を形成した。第一の発光層における化合物ＢＨ１－１の割合を９８質量％とし、化合物ＢＤ－１の割合を２質量％とした。
次に、第一の発光層の上に化合物ＢＨ－２（第二のホスト材料）及び化合物ＢＤ－１（第二の発光性化合物）を共蒸着し、膜厚１２．５ｎｍの第二の発光層を形成した。第二の発光層における化合物ＢＨ－２の割合を９８質量％とし、化合物ＢＤ－１の割合を２質量％とした。
次に、第二の発光層の上に化合物ａＥＴ－１を蒸着し、膜厚１０ｎｍの第一の電子輸送層（正孔障壁層と称する場合もある。）を形成した。
次に、第一の電子輸送層の上に化合物ｂＥＴ－１を蒸着し、膜厚１５ｎｍの第二の電子輸送層を形成した。
次に、第二の電子輸送層の上に化合物ＬｉＦを蒸着して膜厚１ｎｍの電子注入層を形成した。
次に、電子注入層の上に金属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)/HIL-1(5)/HTL-1(80)/EBL-1(10)/BH1-1:BD-1(12.5,98%:2%)/BH-2:BD-1(12.5,98%:2%)/aET-1(10)/bET-1(15)/LiF(1)/Al(80)
なお、略式的に示された素子構成において、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（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ＢＨ１－１又はＢＨ－２）及び発光性化合物（化合物ＢＤ－１）の割合（質量％）を示す。以下、同様の表記とする。
【０５６８】
（実施例２～８）
実施例２～８の有機ＥＬ素子は、それぞれ、第一の発光層の形成に用いた第一のホスト材料としての化合物ＢＨ１－１を表１に示す化合物に変更したこと以外、実施例１の有機ＥＬ素子と同様にして作製した。
【０５６９】
（比較例１～２）
比較例１～２の有機ＥＬ素子は、それぞれ、第一の発光層の形成に用いた第一のホスト材料としての化合物ＢＨ１－１を表１に示す化合物に変更したこと以外、実施例１の有機ＥＬ素子と同様にして作製した。
【０５７０】
＜有機ＥＬ素子の評価＞
作製した有機ＥＬ素子について、以下の評価を行った。評価結果を表１に示す。また、各実施例の発光層で使用した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も表１に示す。
【０５７１】
（最大ピーク波長λ_p）
電流密度が１０ｍＡ／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）で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、最大ピーク波長λ_p（単位：ｎｍ）を求めた。
【０５７２】
（ＣＩＥ１９３１色度）
電流密度が１０ｍＡ／ｃｍ^{2}となるように有機ＥＬ素子に電圧を印加した時のＣＩＥ１９３１色度座標（ｘ、ｙ）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。
【０５７３】

（寿命ＬＴ９５）
作製した有機ＥＬ素子に、電流密度が５０ｍＡ／ｃｍ^{2}となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が９５％となるまでの時間（ＬＴ９５（単位：時間））を寿命として測定した。輝度は、分光放射輝度計ＣＳ－２０００（コニカミノルタ株式会社製）を用いて測定した。
【０５７４】
【表１】

	第一の発光層						第二の発光層				素子評価結果		
	第一のホスト材料			第一の発光性化合物			第二のホスト材料			第二の発光性化合物	λp (nm)	色度(x, y)	LT95 (h)
	名称	S_1 (eV)	T_1 (eV)	名称	S_1 (eV)	T_1 (eV)	名称	S_1 (eV)	T_1 (eV)	名称			
実施例1	BH1-1	3.12	2.28	BD-1	2.73	2.29	BH-2	3.01	1.87	BD-1	461	(0.134, 0.108)	47
実施例2	BH1-2	3.02	2.01	BD-1	2.73	2.29	BH-2	3.01	1.87	BD-1	461	(0.133, 0.108)	51
実施例3	BH1-3	3.07	2.12	BD-1	2.73	2.29	BH-2	3.01	1.87	BD-1	461	(0.136, 0.110)	56
実施例4	BH1-4	3.24	2.32	BD-1	2.73	2.29	BH-2	3.01	1.87	BD-1	461	(0.134, 0.109)	48
実施例5	BH1-5	3.11	2.31	BD-1	2.73	2.29	BH-2	3.01	1.87	BD-1	461	(0.133, 0.110)	55
実施例6	BH1-6	3.14	2.33	BD-1	2.73	2.29	BH-2	3.01	1.87	BD-1	461	(0.134, 0.109)	46
実施例7	BH1-7	3.18	2.07	BD-1	2.73	2.29	BH-2	3.01	1.87	BD-1	461	(0.134, 0.110)	48
実施例8	BH1-8	3.12	2.05	BD-1	2.73	2.29	BH-2	3.01	1.87	BD-1	461	(0.133, 0.109)	46
比較例1	BH-Ref1	3.09	2.08	BD-1	2.73	2.29	BH-2	3.01	1.87	BD-1	462	(0.133, 0.116)	45
比較例2	BH-Ref2	3.25	2.45	BD-1	2.73	2.29	BH-2	3.01	1.87	BD-1	462	(0.133, 0.114)	39

【０５７５】
表１によれば、一般式（１）で表される環構造を有する第一の化合物を第一のホスト材料として用いた実施例１～８の有機ＥＬ素子によれば、一般式（１）で表される環構造を持たない化合物ＢＨ－Ｒｅｆ１を用いた比較例１の有機ＥＬ素子に比べて、色度悪化が抑制された。
また、実施例１～８の有機ＥＬ素子は、一般式（１）で表される環構造を持たない化合物ＢＨ－Ｒｅｆ２を用いた比較例２の有機ＥＬ素子に比べて、色度悪化が抑制されると共に長寿命化した。
【０５７６】
＜化合物の評価＞
（三重項エネルギーT_1）
測定対象となる化合物をＥＰＡ（ジエチルエーテル：イソペンタン：エタノール＝５：５：２（容積比））中に、濃度が１０μｍｏｌ／Ｌとなるように溶解して溶液を得て、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λ_{edge}［ｎｍ］に基づいて、次の換算式（Ｆ１）から算出されるエネルギー量を三重項エネルギーT_1とした。なお、三重項エネルギーT_1は、測定条件によっては上下０．０２ｅＶ程度の誤差が生じ得る。
換算式（Ｆ１）：T_1［ｅＶ］＝１２３９．８５／λ_{edge}
【０５７７】
燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線

は、曲線が立ち上がるにつれ（つまり縦軸が増加するにつれ）、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線（すなわち変曲点における接線）が、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

なお、スペクトルの最大ピーク強度の１５％以下のピーク強度をもつ極大点は、上述の最も短波長側の極大値には含めず、最も短波長側の極大値に最も近い、傾きの値が極大値をとる点において引いた接線を当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

燐光の測定には、（株）日立ハイテクノロジー製のＦ－４５００形分光蛍光光度計本体を用いた。

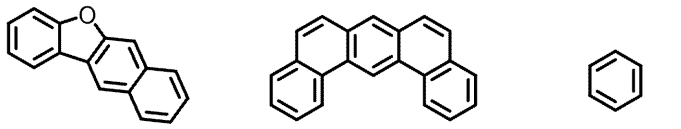
【０５７８】

本明細書において、それぞれの骨格の三重項エネルギーは、骨格同士を繋ぐ単結合を水素原子に置き換えた化合物について測定した三重項エネルギーである。

例えば、化合物ＢＨ１－１の場合、化合物ＢＨ１－１を構成する３つの骨格同士を繋ぐ単結合を水素原子に置き換えた下記化合物ＢＨ１－１ａ、ＢＨ１－１ｂ及びＢＨ１－１ｃの三重項エネルギーが、化合物ＢＨ１－１が有する各骨格の三重項エネルギーである。

【０５７９】

【化１９４】



BH1-1a　　BH1-1b　　BH1-1c

【０５８０】

（一重項エネルギーＳ$_1$）

測定対象となる化合物の１０μｍｏｌ／Ｌトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（３００Ｋ）でこの試料の吸収スペクトル（縦軸：吸収強度、横軸：波長とする。）を測定した。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値λｅｄｇｅ［ｎｍ］を次に示す換算式（Ｆ２）に代入して一重項エネルギーを算出した。

換算式（Ｆ２）：Ｓ$_1$［ｅＶ］＝１２３９．８５／λｅｄｇｅ

吸収スペクトル測定装置としては、日立社製の分光光度計（装置名：Ｕ３３１０）を用いた。

【０５８１】

吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ（つまり縦軸の値が減少するにつれ）、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側（ただし、吸光度が０．１以下となる場合は除く）で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

なお、吸光度の値が０．２以下の極大点は、上記最も長波長側の極大値には含めない。

【０５８２】

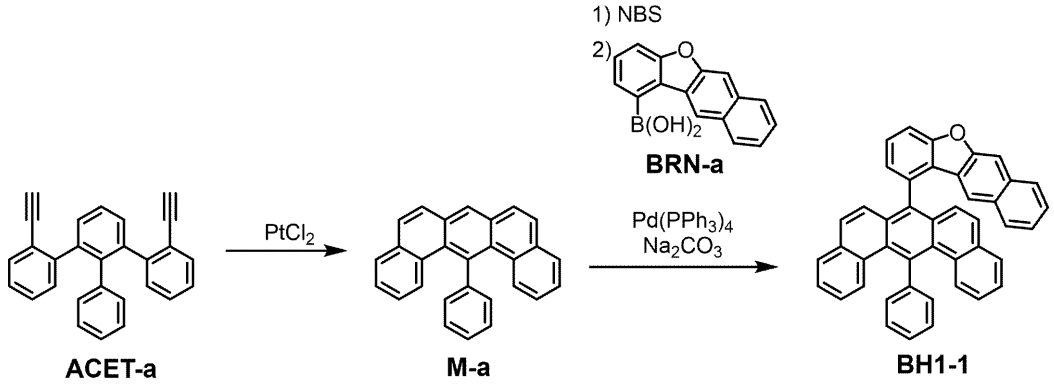
（蛍光発光最大ピーク波長（ＦＬ－ｐｅａｋ）の測定）

測定対象となる化合物を、４．９×１０$^{-6}$ｍｏｌ／Ｌの濃度でトルエンに溶解し、トルエン溶液を調製した。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、トルエン溶液を３９０ｎｍで励起した場合の蛍光発光最大ピーク波長λ（単位：ｎｍ）を測定した。

化合物ＢＤ－１の蛍光発光最大ピーク波長λは、４５２ｎｍであった。

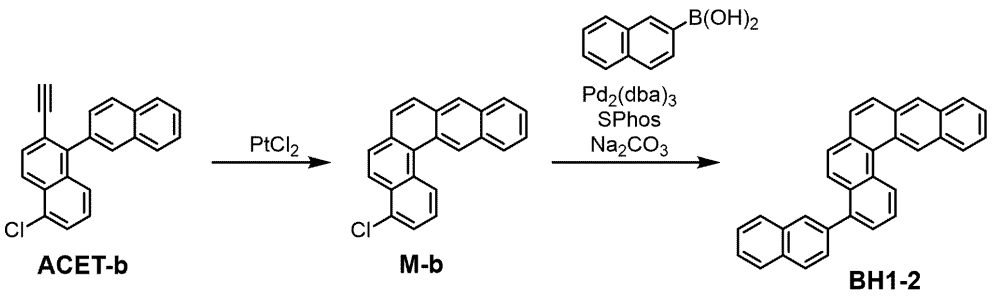
【０５８３】

＜合成例＞
（合成例１：ＢＨ１－１の合成）
化合物ＢＨ１－１の合成方法を以下に説明する。
【０５８４】
【化１９５】



【０５８５】
（１）中間体Ｍ－ａの合成
アルゴン雰囲気下、アリールアセチレンＡＣＥＴ－ａ　３．５４ｇ（１０ｍｍｏｌ）及び塩化白金０．１３３ｇ（０．５０ｍｍｏｌ）をトルエン２００ｍＬに溶かして１００℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体２．１２ｇを得た。得られた固体は目的物である中間体Ｍ－ａであり、マススペクトル分析の結果、分子量３５４．４５に対し、ｍ／ｚ＝３５４であった。中間体Ｍ－ａの収率は、６０％であった。
【０５８６】
（２）化合物ＢＨ１－１の合成
アルゴン雰囲気下、中間体Ｍ－ａ　１．７７ｇ（５．０ｍｍｏｌ）及びＮ－ブロモスクシンイミド０．８９０ｇ（５．０ｍｍｏｌ）をＤＭＦ５０ｍＬに溶かして２５℃で６時間撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出し、カラムクロマトグラフィーで精製して得られた淡黄色固体を、そのまま次の反応に使用した。アリールボロン酸ＢＲＮ－ａ　１．３１ｇ（５．０ｍｍｏｌ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム３４７ｍｇ（０．３０ｍｍｏｌ）及び炭酸ナトリウム１．０６ｇ（１０ｍｍｏｌ）をＤＭＥ／水（１０：１）混合溶媒５０ｍＬに溶かして１００℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体２．１４ｇを得た。得られた固体は目的物である化合物ＢＨ１－１であり、マススペクトル分析の結果、分子量５７０．６９に対し、ｍ／ｚ＝５７１であった。化合物ＢＨ１－１の収率は、７５％であった。ＤＭＦは、Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミドの略称である。ＤＭＥは、１，２－ジメトキシエタンの略称である。Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_4$は、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウムの略称である。
【０５８７】
（合成例２：ＢＨ１－２の合成）
化合物ＢＨ１－２の合成方法を以下に説明する。
【０５８８】

【化１９６】



【０５８９】

（１）中間体Ｍ－ｂの合成

アルゴン雰囲気下、アリールアセチレンＡＣＥＴ－ｂ　３．１３ｇ（１０ｍｍｏｌ）及び塩化白金０．１３３ｇ（０．５０ｍｍｏｌ）をトルエン２００ｍＬに溶かして１００℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体１．７５ｇを得た。得られた固体は、目的物である中間体Ｍ－ｂであり、マススペクトル分析の結果、分子量３１２．８０に対し、ｍ／ｚ＝３１３であった。中間体Ｍ－ｂの収率は、５６％であった。

【０５９０】

（２）化合物ＢＨ１－２の合成

アルゴン雰囲気下、中間体Ｍ－ｂ　１．５６ｇ（５．０ｍｍｏｌ）、２－ナフチルボロン酸０．９４６ｇ（５．５ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム０．２７５ｇ（０．３０ｍｍｏｌ）、ＳＰｈｏｓ　０．２４６ｇ（０．６０ｍｍｏｌ）及び炭酸ナトリウム１．０６ｇ（１０ｍｍｏｌ）をＤＭＥ／水（１０：１）混合溶媒５０ｍＬに溶かして１００℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体１．３６ｇを得た。得られた固体は、目的物である化合物ＢＨ１－２であり、マススペクトル分析の結果、分子量４０４．５１に対し、ｍ／ｚ＝４０５であった。化合物ＢＨ１－２の収率は、６７％であった。

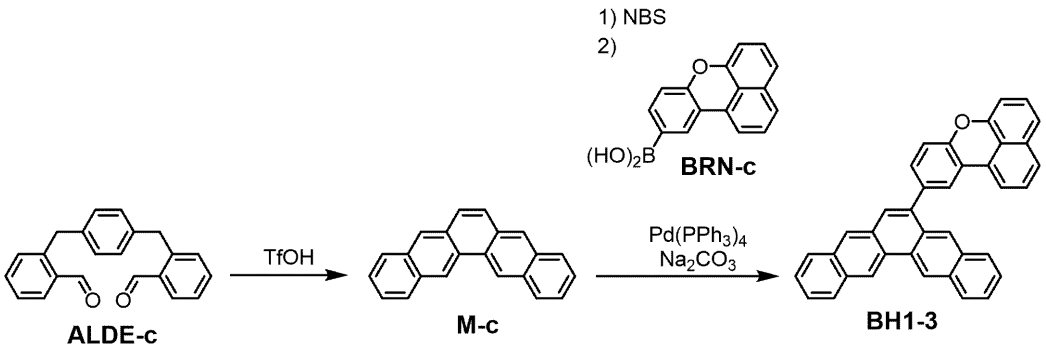
【０５９１】

（合成例３：ＢＨ１－３の合成）

化合物ＢＨ１－３の合成方法を以下に説明する。

【０５９２】

【化１９７】



【０５９３】

（１）中間体Ｍ－ｃの合成

大気下、アリールアルデヒドＡＬＤＥ－ｃ　２．５２ｇ（８．０ｍｍｏｌ）及びトリフルオロメタンスルホン酸０．０６０ｇ（０．４０ｍｍｏｌ）をクロロホルム８０ｍＬに溶かして２５℃で２４時間撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して

得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体１．４５ｇを得た。得られた固体は、目的物である中間体Ｍ－ｃであり、マススペクトル分析の結果、分子量２７８．３５に対し、ｍ／ｚ＝２７８であった。中間体Ｍ－ｃの収率は、６０％であった。ＴｆＯＨは、トリフルオロメタンスルホン酸の略称である。

【０５９４】

（２）化合物ＢＨ１－３の合成

アルゴン雰囲気下、中間体Ｍ－ｃ　１．１１ｇ（４．０ｍｍｏｌ）及びＮ－ブロモスクシンイミド０．７１２ｇ（４．０ｍｍｏｌ）をＤＭＦ４０ｍＬに溶かして２５℃で６時間撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出し、カラムクロマトグラフィーで精製して得られた淡褐色固体を、そのまま次の反応に使用した。アリールボロン酸ＢＲＮ－ｃ　１．０５ｇ（４．０ｍｍｏｌ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム２３１ｍｇ（０．２０ｍｍｏｌ）及び炭酸ナトリウム０．８４８ｇ（８．０ｍｍｏｌ）をＤＭＥ／水（１０：１）混合溶媒５０ｍＬに溶かして１００℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体１．２４ｇを得た。得られた固体は、目的物である化合物ＢＨ１－３であり、マススペクトル分析の結果、分子量４９４．５９に対し、ｍ／ｚ＝４９５であった。化合物ＢＨ１－３の収率は、６３％であった。

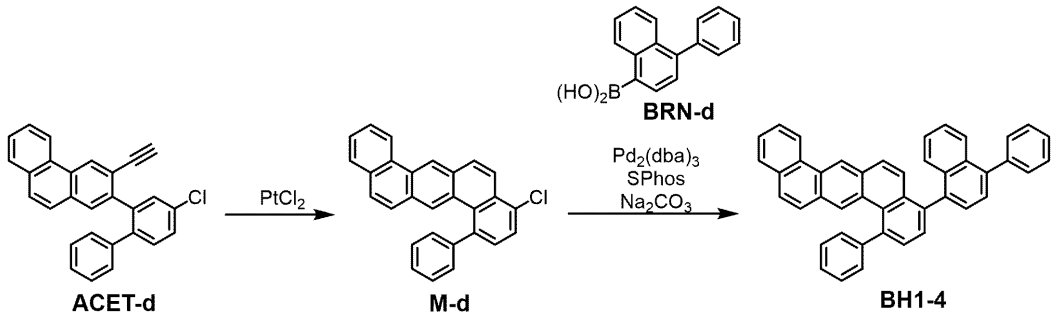
【０５９５】

（合成例４：ＢＨ１－４の合成）

化合物ＢＨ１－４の合成方法を以下に説明する。

【０５９６】

【化１９８】



【０５９７】

（１）中間体Ｍ－ｄの合成

アルゴン雰囲気下、アリールアセチレンＡＣＥＴ－ｄ　２．３３ｇ（６．０ｍｍｏｌ）及び塩化白金０．０８０ｇ（０．３ｍｍｏｌ）をトルエン１２０ｍＬに溶かして１００℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体１．５４ｇを得た。得られた固体は、目的物である中間体Ｍ－ｄであり、マススペクトル分析の結果、分子量３８８．８９に対し、ｍ／ｚ＝３８９であった。中間体Ｍ－ｄの収率は、６６％であった。

【０５９８】

（２）化合物ＢＨ１－４の合成

アルゴン雰囲気下、中間体Ｍ－ｄ　１．５６ｇ（４．０ｍｍｏｌ）、アリールボロン酸ＢＲＮ－ｄ　１．１９ｇ（４．８ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム　０．１８３ｇ（０．２０ｍｍｏｌ）、ＳＰｈｏｓ　０．１６４ｇ（０．４０ｍｍｏｌ）及び炭酸ナトリウム１．０６ｇ（１０ｍｍｏｌ）をＤＭＥ／水（１０：１）混合溶媒４０ｍＬに溶かして１００℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体１．３４ｇを得た。得られた固体は、目的物である化合物ＢＨ１－４

であり、マススペクトル分析の結果、分子量５５６．７１に対し、ｍ／ｚ＝５５７であった。化合物ＢＨ１－４の収率は、６０％であった。Ｐｄ$_2$（ｄｂａ）$_3$は、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウムの略称である。

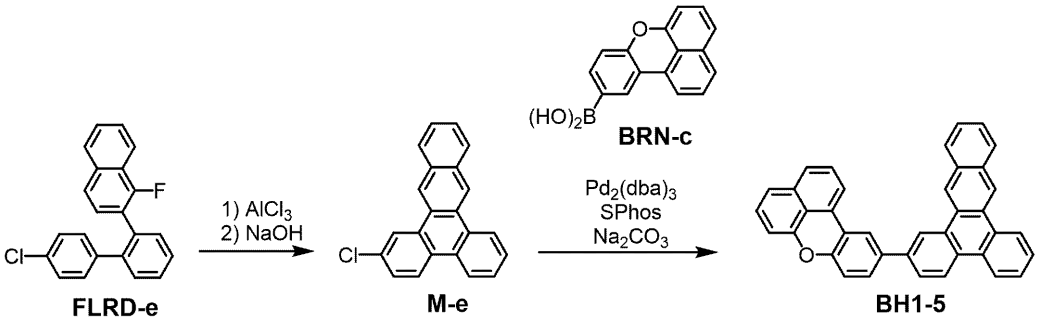
【０５９９】

（合成例５：ＢＨ１－５の合成）

化合物ＢＨ１－５の合成方法を以下に説明する。

【０６００】

【化１９９】



【０６０１】

（１）中間体Ｍ－ｅの合成アルゴン雰囲気下、アリールフルオリドＦＬＲＤ－ｅ　１．３４ｇ（４．０ｍｍｏｌ）及び塩化アルミニウム０．８００ｇ（６．０ｍｍｏｌ）をクロロベンゼン２０ｍＬに溶かして６０℃で３時間加熱撹拌した。反応溶液に水酸化ナトリウム水溶液を加えた後、有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体０．６２６ｇを得た。得られた固体は、目的物である中間体Ｍ－ｅであり、マススペクトル分析の結果、分子量３１２．８０に対し、ｍ／ｚ＝３１３であった。中間体Ｍ－ｅの収率は、５０％であった。

【０６０２】

（２）化合物ＢＨ１－５の合成

アルゴン雰囲気下、中間体Ｍ－ｅ　０．６２６ｇ（２．０ｍｍｏｌ）、アリールボロン酸ＢＲＮ－ｃ　０．６２９ｇ（２．４ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム０．０９２ｇ（０．１０ｍｍｏｌ）、ＳＰｈｏｓ　０．０８２ｇ（０．２０ｍｍｏｌ）及び炭酸ナトリウム０．５３０ｇ（５．０ｍｍｏｌ）をＤＭＥ／水（１０：１）混合溶媒４０ｍＬに溶かして１００℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体０．５８４ｇを得た。得られた固体は、目的物である化合物ＢＨ１－５であり、マススペクトル分析の結果、分子量４９４．５９に対し、ｍ／ｚ＝４９５であった。化合物ＢＨ１－５の収率は、５９％であった。

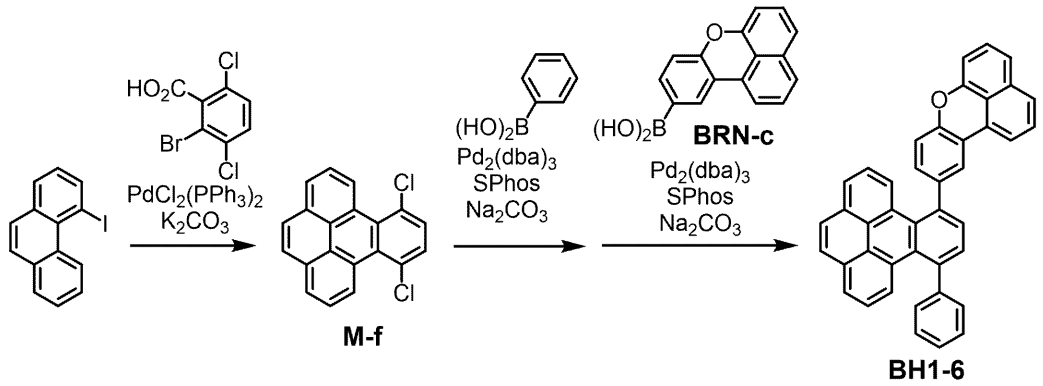
【０６０３】

（合成例６：ＢＨ１－６の合成）

化合物ＢＨ１－６の合成方法を以下に説明する。

【０６０４】

【化２００】



【０６０５】

（１）中間体Ｍ－ｆの合成

アルゴン雰囲気下、４－ヨードフェナントレン１．５２ｇ（５．０ｍｍｏｌ）、２－ブロモ－３，６－ジクロロ安息香酸１．４８ｇ（５．５ｍｍｏｌ）、ジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム０．１７５ｇ（０．２５ｍｍｏｌ）及び炭酸カリウム２．０７ｇ（１５ｍｍｏｌ）をＤＭＳＯ　２５ｍＬに溶かして１４０℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体０．８８３ｇを得た。得られた固体は、目的物である中間体Ｍ－ｆであり、マススペクトル分析の結果、分子量３２１．２０に対し、ｍ／ｚ＝３２１であった。中間体Ｍ－ｆの収率は、５５％であった。ＤＭＳＯは、ジメチルスルホキシドの略称である。

【０６０６】

（２）化合物ＢＨ１－６の合成

アルゴン雰囲気下、中間体Ｍ－ｆ　０．８０３ｇ（２．５ｍｍｏｌ）、フェニルボロン酸０．３０５ｇ（２．５ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム０．０６９ｇ（０．０７５ｍｍｏｌ）、ＳＰｈｏｓ　０．０６２ｇ（０．１５ｍｍｏｌ）及び炭酸ナトリウム０．５３０ｇ（５．０ｍｍｏｌ）をＤＭＥ／水（１０：１）混合溶媒２５ｍＬに溶かして１００℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出しカラムクロマトグラフィーで精製して得られた固体に対し、アルゴン雰囲気下、アリールボロン酸ＢＲＮ－ｃ　０．６５５ｇ（２．５ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム０．０６９ｇ（０．０７５ｍｍｏｌ）、ＳＰｈｏｓ　０．０６２ｇ（０．１５ｍｍｏｌ）及び炭酸ナトリウム０．５３０ｇ（５．０ｍｍｏｌ）をＤＭＥ／水（１０：１）混合溶媒２５ｍＬに溶かして１００℃で２４時間加熱撹拌した。反応終了後、反応溶液に水を加えて有機層を抽出して得られた粗生成物を、カラムクロマトグラフィーを用いて精製したところ、淡黄色固体０．５７２ｇを得た。得られた固体は、目的物である化合物ＢＨ１－６であり、マススペクトル分析の結果、分子量５４４．６５に対し、ｍ／ｚ＝５４５であった。化合物ＢＨ１－６の収率は、４２％であった。

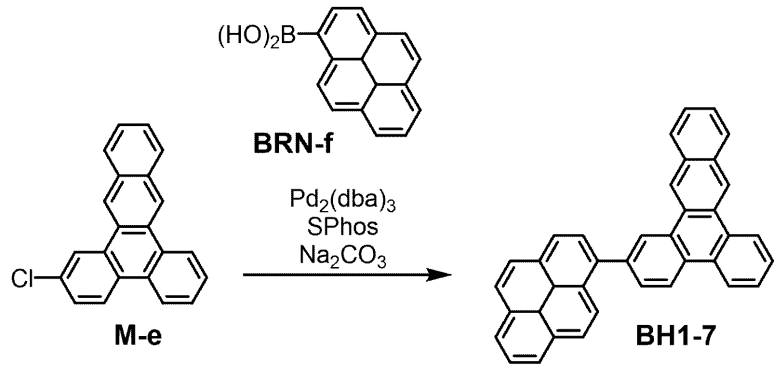
【０６０７】

（合成例７：ＢＨ１－７の合成）

化合物ＢＨ１－７の合成方法を以下に説明する。

【０６０８】

【化２０１】



【０６０９】

合成例７は、化合物ＢＨ１－５の合成におけるアリールボロン酸ＢＲＮ－ｃの代わりにアリールボロン酸ＢＲＮ－ｆを用いた以外は化合物ＢＨ１－５の合成と同様の手法で行い、淡黄色固体０．４９６ｇを得た。得られた固体は、目的物である化合物ＢＨ１－７であり、マススペクトル分析の結果、分子量４８０．６１に対し、ｍ／ｚ＝４８１であった。化合物ＢＨ１－７の収率は、６５％であった。

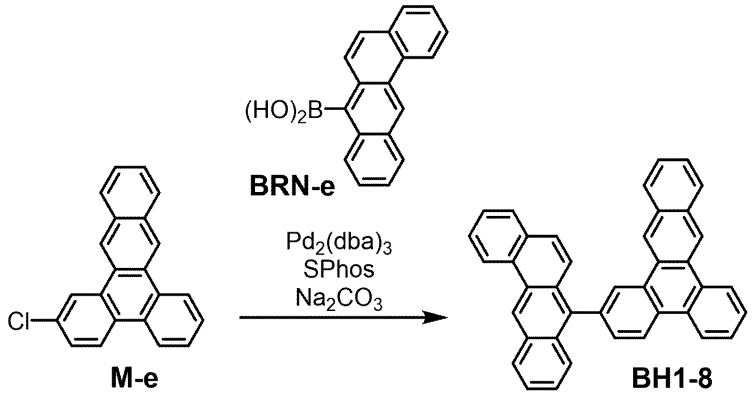
【０６１０】

（合成例８：ＢＨ１－８の合成）

化合物ＢＨ１－８の合成方法を以下に説明する。

【０６１１】

【化２０２】



【０６１２】

合成例８は、化合物１－５の合成におけるアリールボロン酸ＢＲＮ－ｃの代わりにアリールボロン酸ＢＲＮ－ｅを用いた以外は化合物ＢＨ１－５の合成と同様の手法で行い、淡黄色固体０．７７１ｇを得た。得られた固体は、目的物である化合物ＢＨ１－８であり、マススペクトル分析の結果、分子量５０４．６３に対し、ｍ／ｚ＝５０５であった。化合物ＢＨ１－８の収率は、４７％であった。

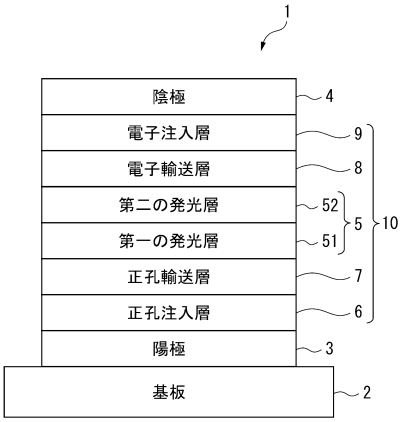
【符号の説明】

【０６１３】

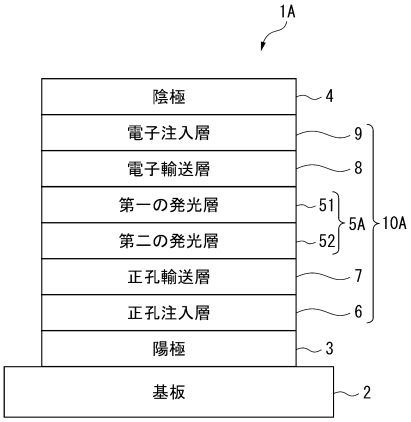
１，１Ａ…有機エレクトロルミネッセンス素子、１０，１０Ａ…有機層、２…基板、３…陽極、４…陰極、５，５Ａ…発光帯域、５１…第一の発光層、５２…第二の発光層、６…正孔注入層、７…正孔輸送層、８…電子輸送層、９…電子注入層。

【図面】

【図１】


1
陰極
4
電子注入層
9
電子輸送層
8
第二の発光層
52
第一の発光層
51
5
10
正孔輸送層
7
正孔注入層
6
陽極
3
基板
2

【図２】


1A
陰極
4
電子注入層
9
電子輸送層
8
第一の発光層
51
第二の発光層
52
5A
10A
正孔輸送層
7
正孔注入層
6
陽極
3
基板
2

フロントページの続き

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 吉田 圭
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

Ｆターム（参考） 3K107 AA01 BB01 BB02 BB03 BB08 CC07 CC21 DD51 DD59 DD66
DD68 DD69 FF13 FF20

【要約の続き】
図１