

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7572572号
(P7572572)

(45)発行日 令和6年10月23日(2024.10.23)

(24)登録日 令和6年10月15日(2024.10.15)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 D 307/77 (2006.01)	C 0 7 D 307/77	C S P
C 0 9 K 11/06 (2006.01)	C 0 9 K 11/06	6 9 0
H 1 0 K 50/12 (2023.01)	H 1 0 K 50/12	
H 1 0 K 50/13 (2023.01)	H 1 0 K 50/13	
H 1 0 K 50/15 (2023.01)	H 1 0 K 50/15	

請求項の数 17 (全320頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2023-571038(P2023-571038)
 (86)(22)出願日 令和4年12月26日(2022.12.26)
 (86)国際出願番号 PCT/JP2022/048062
 (87)国際公開番号 WO2023/127844
 (87)国際公開日 令和5年7月6日(2023.7.6)
 審査請求日 令和6年7月22日(2024.7.22)
 (31)優先権主張番号 特願2021-212989(P2021-212989)
 (32)優先日 令和3年12月27日(2021.12.27)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
 日本国(JP)
 (31)優先権主張番号 特願2022-125649(P2022-125649)
 (32)優先日 令和4年8月5日(2022.8.5)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
 日本国(JP)
 早期審査対象出願

(73)特許権者 000183646
 出光興産株式会社
 東京都千代田区大手町一丁目2番1号
 (74)代理人 110000637
 弁理士法人樹之下知的財産事務所
 (72)発明者 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 白崎 良尚
 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 三谷 真人
 東京都千代田区大手町一丁目2番1号
 出光興産株式会社内
 (72)発明者 橋本 土雄磨

最終頁に続く

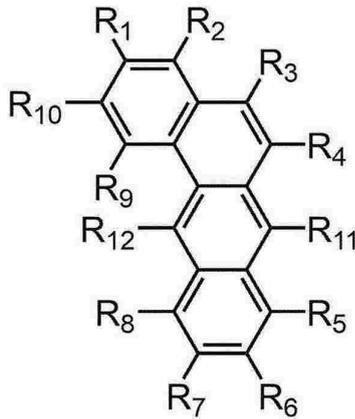
(54)【発明の名称】 化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子、及び電子機器

(57)【特許請求の範囲】

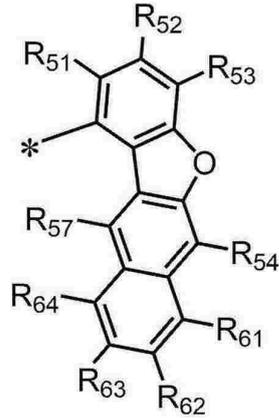
【請求項1】

下記一般式(1A-A)で表される化合物。

【化 1】

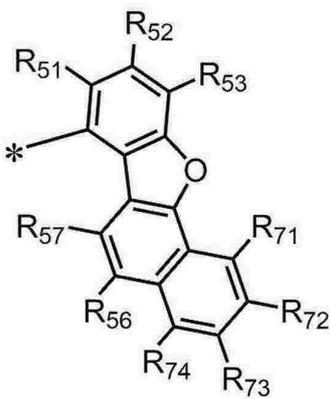


(1A-A)

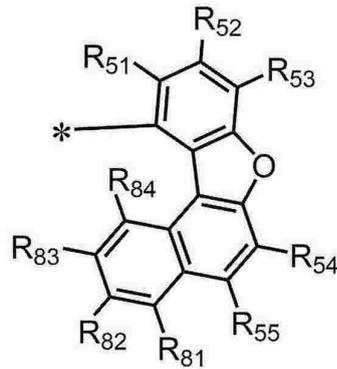


(1B-A1)

10



(1B-A2)



(1B-A3)

20

(前記一般式(1A-A)において、

R_{11} は、前記一般式(1B-A1)、(1B-A2)又は(1B-A3)で表される基であり、

30

$R_1 \sim R_3$ 、 $R_4 \sim R_8$ 、 R_9 、及び R_{10} は、それぞれ独立に、
水素原子、又は

無置換の環形成炭素数6~12のアリール基であり、

R_{12} は水素原子または無置換のフェニル基であり、

前記一般式(1B-A1)において、

$R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合せず、

$R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

無置換の環形成炭素数6~12のアリール基であり、

*は前記一般式(1A-A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式(1B-A2)において、

$R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合せず、

$R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(1B-A1)における $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ と同義であり、

*は前記一般式(1A-A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式(1B-A3)において、

$R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が

40

50

、互いに結合せず、

$R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1B - A1) に
おける $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ と同義であり、

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

【請求項 2】

請求項 1 に記載の化合物において、

前記一般式 (1B - A1)、(1B - A2) 又は (1B - A3) で表される基における
前記一般式 (1B - A1) 中の $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ の少なくとも
1 つ、前記一般式 (1B - A2) 中の $R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$
の少なくとも 1 つ、又は前記一般式 (1B - A3) 中の $R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$
の少なくとも 1 つが、無置換の環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基である、

10

化合物。

【請求項 3】

請求項 2 に記載の化合物において、前記一般式 (1B - A1)、(1B - A2) 又は (1B - A3) で表される基における前記一般式 (1B - A1) 中の $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ の少なくとも 1 つ、前記一般式 (1B - A2) 中の $R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$ の少なくとも 1 つ、又は前記一般式 (1B - A3) 中の $R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ の少なくとも 1 つが、無置換のフェニル基、無置換の p - ピフェニル基、無置換の m - ピフェニル基、無置換の o - ピフェニル基、無置換の 1 - ナフチル基、又は無置換の 2 - ナフチル基である、

20

化合物。

【請求項 4】

請求項 3 に記載の化合物において、

前記一般式 (1B - A1)、(1B - A2) 又は (1B - A3) で表される基における
前記一般式 (1B - A1) 中の $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ の少なくとも
1 つ、前記一般式 (1B - A2) 中の $R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$
の少なくとも 1 つ、又は前記一般式 (1B - A3) 中の $R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$
の少なくとも 1 つが、無置換のフェニル基である、

化合物。

【請求項 5】

請求項 1 から請求項 4 のいずれか一項に記載の化合物において、

R_{12} は水素原子である、

化合物。

30

【請求項 6】

請求項 1 から請求項 4 のいずれか一項に記載の化合物において、

分子内に、1 つ以上の重水素原子を有する、

化合物。

【請求項 7】

請求項 1 から請求項 4 のいずれか一項に記載の化合物を含有する、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 8】

請求項 7 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

陽極と、

陰極と、

前記陽極及び前記陰極の間に配置された有機層と、を有し、

前記有機層の少なくとも一層は、前記化合物を含有する、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 9】

請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

前記有機層は、発光領域を有し、

50

前記発光領域は、少なくとも1つの発光層を含み、
前記発光層は、前記化合物を含有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項10】

請求項9に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子であって、
前記発光領域は、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、第一の化合物として前記化合物を含有し、前記第二の発光層は、
第二の化合物を含有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項11】

請求項10に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第一の化合物の三重項エネルギー $T_1(H1)$ と前記第二の化合物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、
有機エレクトロルミネッセンス素子。
 $T_1(H1) > T_1(H2) \dots (数1)$

【請求項12】

請求項10に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第一の発光層と前記第二の発光層とが、直接、接している、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項13】

請求項10に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第一の発光層は、前記陽極と前記第二の発光層との間に配置されている、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項14】

請求項10に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第一の発光層は、第一の発光性化合物を含有し、
前記第二の発光層は、第二の発光性化合物を含有し、
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、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項15】

請求項9に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記陽極と、前記発光領域との間に、正孔輸送層を有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項16】

請求項9に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記陰極と、前記発光領域との間に、電子輸送層を有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項17】

請求項7に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子、及び電子機器に関する。

【背景技術】

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子(以下、「有機EL素子」という場合がある。)は、携帯電話及びテレビ等のフルカラーディスプレイへ応用されている。有機EL素子に電圧を印加すると、陽極から正孔が発光層に注入され、また陰極から電子が発光層に注入される。そして、発光層において、注入された正孔と電子とが再結合し、励起子が形成され

10

20

30

40

50

る。このとき、電子スピンの統計則により、一重項励起子が 25% の割合で生成し、及び三重項励起子が 75% の割合で生成する。

有機 EL 素子の性能向上を図るため、有機 EL 素子に用いる化合物について様々な検討がなされている（例えば、特許文献 1 及び特許文献 2 を参照）。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】

【文献】国際公開第 2021/132535 号

【文献】特開 2021-090050 号公報

10

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

本発明の目的の一つは、有機エレクトロルミネッセンス素子の寿命を向上させることができる化合物、当該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子、及び当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することである。

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

【課題を解決するための手段】

【0005】

本発明の一態様によれば、下記一般式 (1A) で表される化合物が提供される。

20

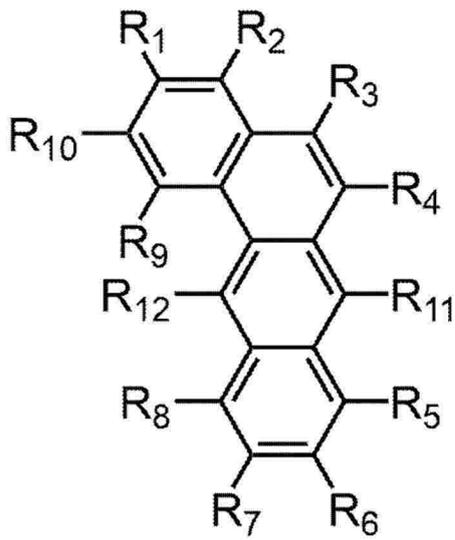
【0006】

30

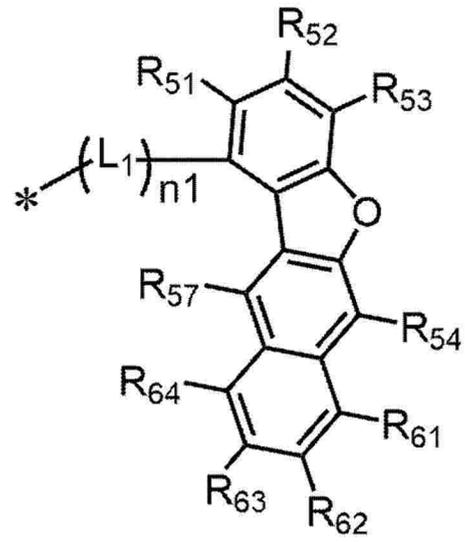
40

50

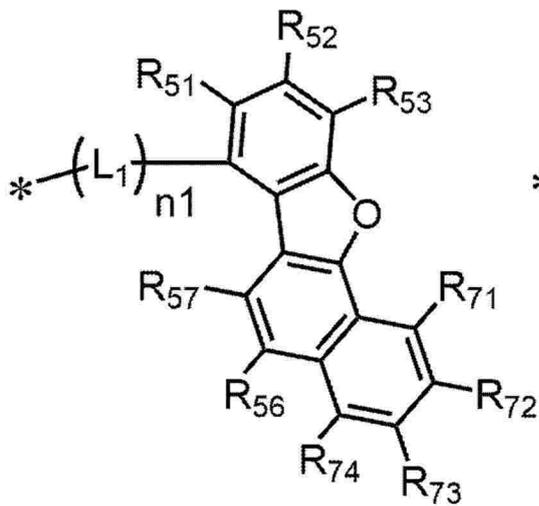
【化 1】



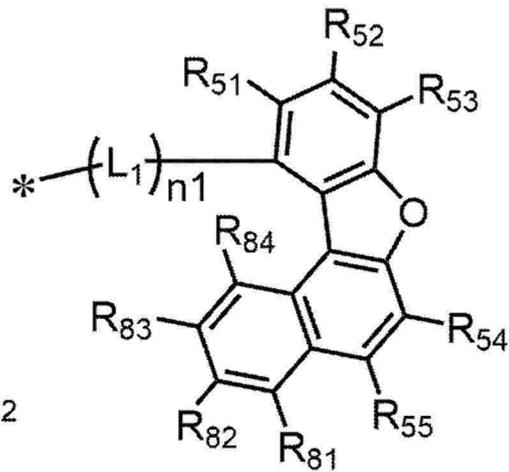
(1A)



(1B-1)



(1B-2)



(1B-3)

【0007】

(前記一般式(1A)において、

R₄ ~ R₈ 及び R₁₀ ~ R₁₂ のうちの1つは、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基であり、

R₁ ~ R₃、R₉、並びに前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基以外の R₄ ~ R₈ 及び R₁₀ ~ R₁₂ 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、

10

20

30

40

50

- 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
- 置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、
- C (= O) R₈₀₁ で表される基、
 - C O O R₈₀₂ で表される基、
- ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
R₁₁ が前記一般式 (1 B - 1)、(1 B - 2) 又は (1 B - 3) で表される基である
場合、R₁₂ は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
R₁₂ が前記一般式 (1 B - 1)、(1 B - 2) 又は (1 B - 3) で表される基である
場合、R₁₁ は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
前記一般式 (1 B - 1)、(1 B - 2) 及び (1 B - 3) で表される基において、
n₁ は 0、1、2、又は 3 であり、
n₁ が 1、2、又は 3 である場合の L₁ は、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基であり、
L₁ が 2 以上存在する場合、2 以上の L₁ は、互いに同一であるか、又は異なり、
前記一般式 (1 B - 1) において、
R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及び R₆₁ ~ R₆₄ 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 R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及び R₆₁ ~ R₆₄ は、それぞれ独立に、
- 水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
- ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
* は前記一般式 (1 A) 中のベンズ [a] アントラセン環との結合位置を示し、
前記一般式 (1 B - 2) において、
R₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及び R₇₁ ~ R₇₄ 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

10

20

30

40

50

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1B-1) における $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ と同義であり、

* は前記一般式 (1A) 中のベンズ [a] アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式 (1B-3) において、

$R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ 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、

10

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1B-1) における $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ と同義であり、

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

(前記一般式 (1A) で表される化合物において、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{906} 、 R_{907} 、 R_{801} 、及び R_{802} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

20

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

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

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

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

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

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

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

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

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

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

30

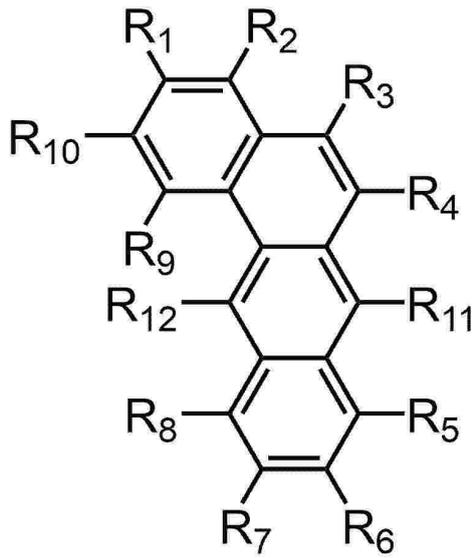
【0008】

本発明の一態様によれば、下記一般式 (1A-A) で表される化合物が提供される。

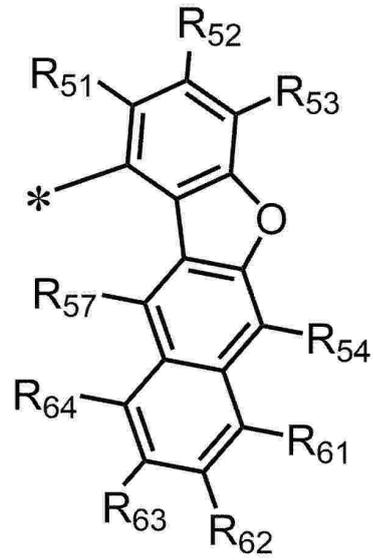
40

50

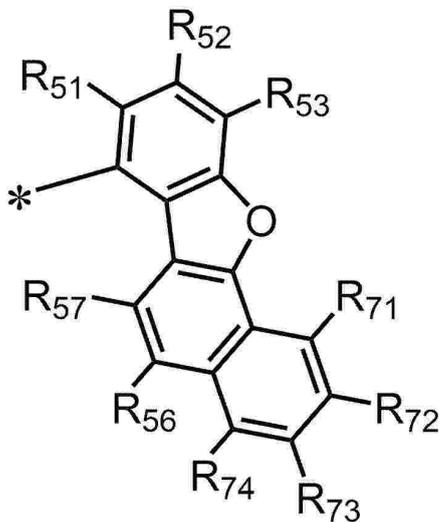
【化 2】



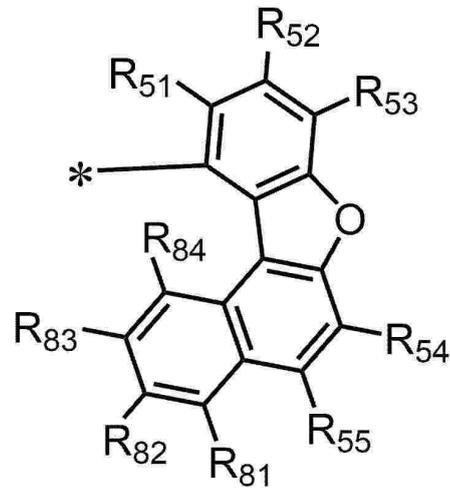
(1A-A)



(1B-A1)



(1B-A2)



(1B-A3)

【 0 0 0 9 】

(前記一般式(1A-A)において、

R₄ ~ R₈ 及び R₁₀ ~ R₁₂ のうちの1つは、前記一般式(1B-A1)、(1B-A2)又は(1B-A3)で表される基であり、

R₁ ~ R₃、R₉、並びに前記一般式(1B-A1)、(1B-A2)又は(1B-A3)で表される基以外の R₄ ~ R₈ 及び R₁₀ ~ R₁₂ 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、

10

20

30

40

50

- 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、
 - C (= O) R₈₀₁ で表される基、
 - C O O R₈₀₂ で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、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、
 R₁₁ が前記一般式 (1 B - A 1)、(1 B - A 2) 又は (1 B - A 3) で表される基
 である場合、R₁₂ は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
 R₁₂ が前記一般式 (1 B - A 1)、(1 B - A 2) 又は (1 B - A 3) で表される基
 である場合、R₁₁ は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
 前記一般式 (1 B - A 1) において、
 R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及び R₆₁ ~ R₆₄ 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 R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及び R₆₁ ~ R₆₄ は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 * は前記一般式 (1 A - A) 中のベンズ [a] アントラセン環との結合位置を示し、
 前記一般式 (1 B - A 2) において、
 R₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及び R₇₁ ~ R₇₄ 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 R₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及び R₇₁ ~ R₇₄ は、それぞれ独立に、前記一
 般式 (1 B - A 1) における R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及び R₆₁ ~ R₆₄ と同義であり、

10

20

30

40

50

*は前記一般式(1A-A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、前記一般式(1B-A3)において、

R₅₁~R₅₅、及びR₈₁~R₈₄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R₅₁~R₅₅、及びR₈₁~R₈₄は、それぞれ独立に、前記一般式(1B-A1)におけるR₅₁~R₅₄、R₅₇、及びR₆₁~R₆₄と同義であり、

*は前記一般式(1A-A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示す。) (前記一般式(1A-A)で表される化合物において、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。))

【0010】

本発明の一態様によれば、本発明の一態様に係る化合物を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

【0011】

本発明の一態様によれば、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された有機層と、を有し、前記有機層の少なくとも一層は、本発明の一態様に係る化合物を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

【0012】

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。

【0013】

本発明の一態様によれば、有機エレクトロルミネッセンス素子の寿命を向上させることができる化合物、当該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子、及び当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供できる。

また、本発明の一態様によれば、寿命が向上した有機エレクトロルミネッセンス素子、及び当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供できる。

【図面の簡単な説明】

【0014】

【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】

【0015】

[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。

【 0 0 1 6 】

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。

【 0 0 1 7 】

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。

10

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。

20

【 0 0 1 8 】

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。

30

【 0 0 1 9 】

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

40

【 0 0 2 0 】

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

【 0 0 2 1 】

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

50

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。

【0022】

「本明細書に記載の置換基」

10

以下、本明細書に記載の置換基について説明する。

【0023】

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。

20

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。

30

【0024】

・「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。

40

【0025】

・無置換のアリール基（具体例群G1A）：

50

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' - スピロピフルオレニル基、
 ベンゾフルオレニル基、
 ジベンゾフルオレニル基、
 フルオランテニル基、
 ベンゾフルオランテニル基、
 ペリレニル基、及び
 下記一般式 (TEMP - 1) ~ (TEMP - 15) で表される環構造から 1 つの水素原子
 を除くことにより誘導される 1 価のアリール基。
 【 0 0 2 6 】

10

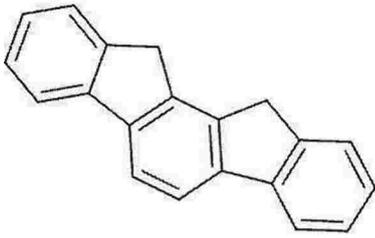
20

30

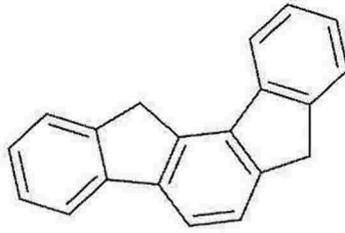
40

50

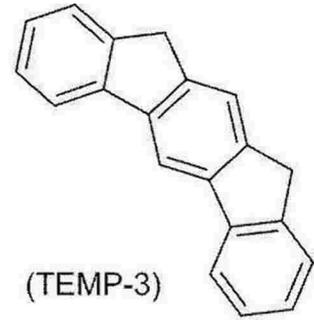
【化3】



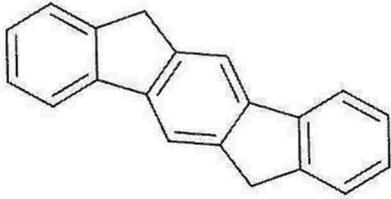
(TEMP-1)



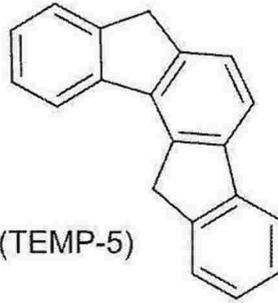
(TEMP-2)



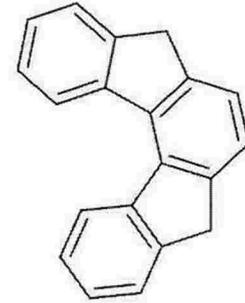
(TEMP-3)



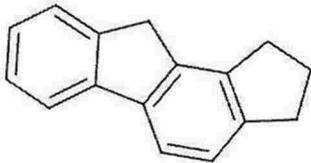
(TEMP-4)



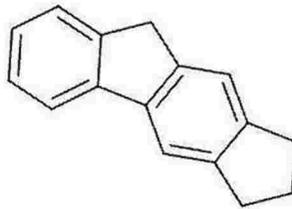
(TEMP-5)



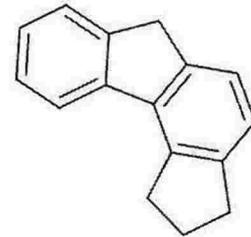
(TEMP-6)



(TEMP-7)



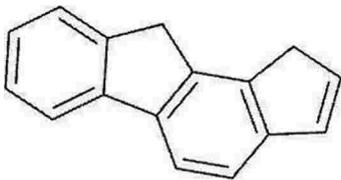
(TEMP-8)



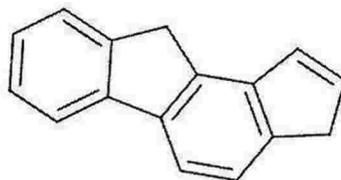
(TEMP-9)

【0027】

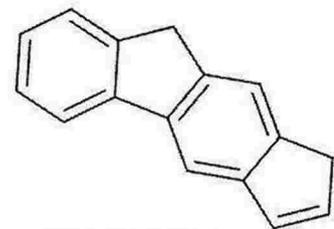
【化4】



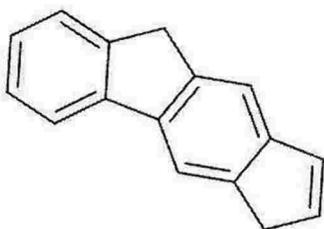
(TEMP-10)



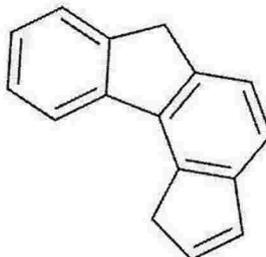
(TEMP-11)



(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

10

20

30

40

50

【 0 0 2 8 】

・置換のアリール基（具体例群 G 1 B）：

o - トリル基、

m - トリル基、

p - トリル基、

パラ - キシリル基、

メタ - キシリル基、

オルト - キシリル基、

パラ - イソプロピルフェニル基、

メタ - イソプロピルフェニル基、

オルト - イソプロピルフェニル基、

パラ - t - ブチルフェニル基、

メタ - t - ブチルフェニル基、

オルト - t - ブチルフェニル基、

3, 4, 5 - トリメチルフェニル基、

9, 9 - ジメチルフルオレニル基、

9, 9 - ジフェニルフルオレニル基、

9, 9 - ビス(4 - メチルフェニル)フルオレニル基、

9, 9 - ビス(4 - イソプロピルフェニル)フルオレニル基、

9, 9 - ビス(4 - t - ブチルフェニル)フルオレニル基、

シアノフェニル基、

トリフェニルシリルフェニル基、

トリメチルシリルフェニル基、

フェニルナフチル基、

ナフチルフェニル基、及び

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

【 0 0 2 9 】

・「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 G 2)としては、以下の無置換の複素環基(具体例群 G 2 A)、及び置換の複素環基(具体例群 G 2 B)等が挙げられる。(ここで、無置換の複素環基とは「置換もしくは無置換の複素環基」が「無置換の複素環基」である場合を指し、置換の複素環基とは「置換もしくは無置換の複素環基」が「置換の複素環基」である場合を指す。)本明細書において、単に「複素環基」という場合は、「無置換の複素環基」と「置換の複素環基」の両方を含む。

「置換の複素環基」は、「無置換の複素環基」の 1 つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換の複素環基」の具体例は、下記具体例群 G 2 A の「無置換の複素環基」の水素原子が置き換わった基、及び下記具体例群 G 2 B の置換の複素環基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換の複素環基」の例や「置換の複素環基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換の複素環基」には、具体例群 G 2 B の「置換の複素環基」における複素環基自体の環形成原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群 G 2 B の「置換の複素環基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

【 0 0 3 0 】

10

20

30

40

50

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

【 0 0 3 1 】

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

10

【 0 0 3 2 】

・窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 1）：

ピロリル基、

イミダゾリル基、

ピラゾリル基、

トリアゾリル基、

テトラゾリル基、

オキサゾリル基、

イソオキサゾリル基、

20

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、

30

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、

40

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、

50

アザカルバゾリル基、及びジアザカルバゾリル基。

【 0 0 3 3 】

・酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 2 ）：

フリル基、

オキサゾリル基、

イソオキサゾリル基、

オキサジアゾリル基、

キサントニル基、

ベンゾフラニル基、

イソベンゾフラニル基、

ジベンゾフラニル基、

ナフトベンゾフラニル基、

ベンゾオキサゾリル基、

ベンゾイソキサゾリル基、

フェノキサジニル基、

モルホリノ基、

ジナフトフラニル基、

アザジベンゾフラニル基、

ジアザジベンゾフラニル基、

アザナフトベンゾフラニル基、及び

ジアザナフトベンゾフラニル基。

10

20

【 0 0 3 4 】

・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 3 ）：

チエニル基、

チアゾリル基、

イソチアゾリル基、

チアジアゾリル基、

ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基）、

イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基）、

ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、

ナフトベンゾチオフェニル基（ナフトベンゾチエニル基）、

ベンゾチアゾリル基、

ベンゾイソチアゾリル基、

フェノチアジニル基、

ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、

アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、

ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、

アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフトベンゾチエニル基）、及び

ジアザナフトベンゾチオフェニル基（ジアザナフトベンゾチエニル基）。

30

【 0 0 3 5 】

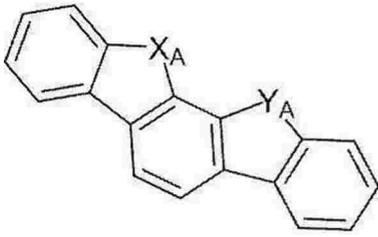
・下記一般式（TEMP - 16）～（TEMP - 33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群 G 2 A 4 ）：

【 0 0 3 6 】

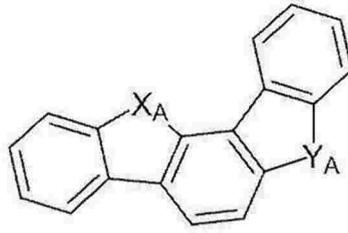
40

50

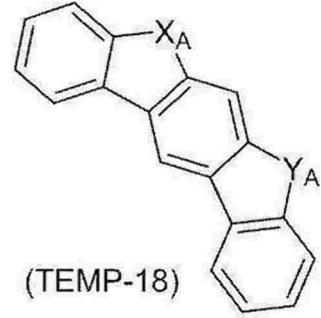
【化 5】



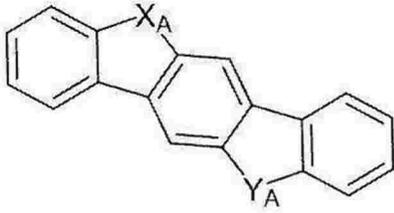
(TEMP-16)



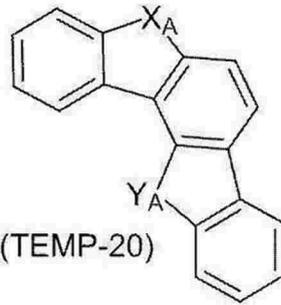
(TEMP-17)



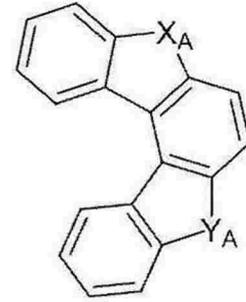
(TEMP-18)



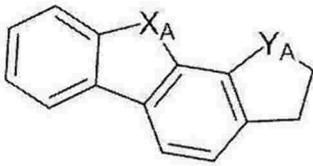
(TEMP-19)



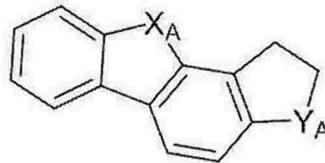
(TEMP-20)



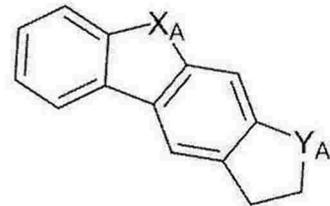
(TEMP-21)



(TEMP-22)



(TEMP-23)



(TEMP-24)

【 0 0 3 7 】

10

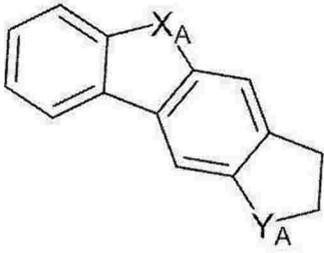
20

30

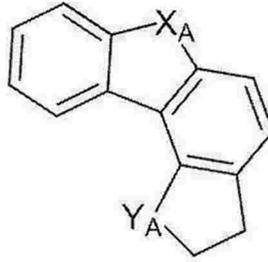
40

50

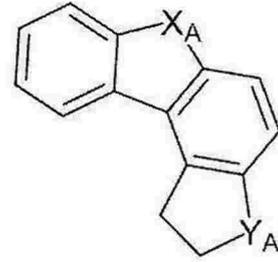
【化6】



(TEMP-25)

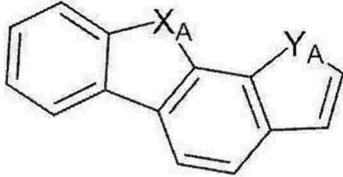


(TEMP-26)

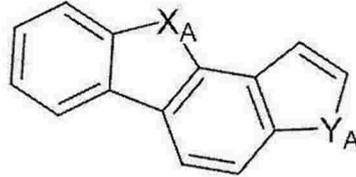


(TEMP-27)

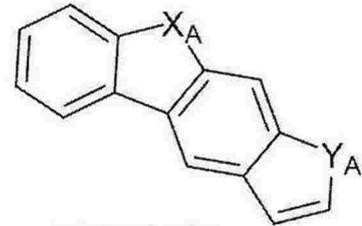
10



(TEMP-28)

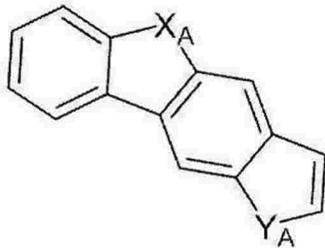


(TEMP-29)

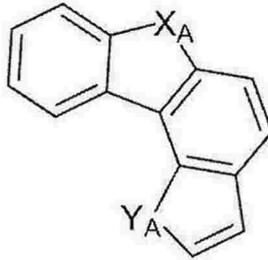


(TEMP-30)

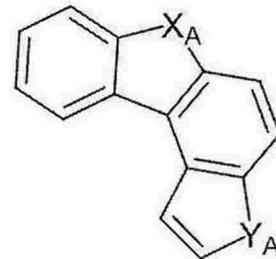
20



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

30

【0038】

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。

【0039】

・窒素原子を含む置換の複素環基(具体例群G2B1)：

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

40

50

ジフェニルトリアジニル基、
フェニルキナゾリニル基、及びピフェニルキナゾリニル基。

【 0 0 4 0 】

・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群 G 2 B 2 ）：

フェニルジベンゾフラニル基、

メチルジベンゾフラニル基、

t - ブチルジベンゾフラニル基、及び

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

【 0 0 4 1 】

・硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群 G 2 B 3 ）：

フェニルジベンゾチオフェニル基、

メチルジベンゾチオフェニル基、

t - ブチルジベンゾチオフェニル基、及び

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

【 0 0 4 2 】

・前記一般式 (T E M P - 1 6) ~ (T E M P - 3 3) で表される環構造から誘導される
1 価の複素環基の 1 つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群 G 2 B 4 ）：

【 0 0 4 3 】

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。

【 0 0 4 4 】

・「置換もしくは無置換のアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」の具体例（具体例群 G 3 ）とし
ては、以下の無置換のアルキル基（具体例群 G 3 A ）及び置換のアルキル基（具体例群 G
3 B ）が挙げられる。（ここで、無置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキ
ル基」が「無置換のアルキル基」である場合を指し、置換のアルキル基とは「置換もしく
は無置換のアルキル基」が「置換のアルキル基」である場合を指す。）以下、単に「アル
キル基」という場合は、「無置換のアルキル基」と「置換のアルキル基」の両方を含む。

「置換のアルキル基」は、「無置換のアルキル基」における 1 つ以上の水素原子が置換
基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキル基」の具体例としては、下記の「無置
換のアルキル基」（具体例群 G 3 A ）における 1 つ以上の水素原子が置換基と置き換わっ
た基、及び置換のアルキル基（具体例群 G 3 B ）の例等が挙げられる。本明細書において
、「無置換のアルキル基」におけるアルキル基は、鎖状のアルキル基を意味する。そのた
め、「無置換のアルキル基」は、直鎖である「無置換のアルキル基」、及び分岐状である
「無置換のアルキル基」が含まれる。尚、ここに列挙した「無置換のアルキル基」の例や
「置換のアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルキル基」に
は、具体例群 G 3 B の「置換のアルキル基」におけるアルキル基自体の水素原子がさらに
置換基と置き換わった基、及び具体例群 G 3 B の「置換のアルキル基」における置換基の
水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

【 0 0 4 5 】

・無置換のアルキル基（具体例群 G 3 A ）：

メチル基、

エチル基、

n - プロピル基、

イソプロピル基、

n - ブチル基、

イソブチル基、

s - ブチル基、及び

10

20

30

40

50

t - ブチル基。

【 0 0 4 6 】

・置換のアルキル基（具体例群 G 3 B）：
ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、
ペンタフルオロエチル基、
2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、及び
トリフルオロメチル基。

【 0 0 4 7 】

・「置換もしくは無置換のアルケニル基」

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

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

【 0 0 4 8 】

・無置換のアルケニル基（具体例群 G 4 A）：
ビニル基、
アリル基、
1 - ブテニル基、
2 - ブテニル基、及び
3 - ブテニル基。

【 0 0 4 9 】

・置換のアルケニル基（具体例群 G 4 B）：
1, 3 - ブタンジエニル基、
1 - メチルビニル基、
1 - メチルアリル基、
1, 1 - ジメチルアリル基、
2 - メチルアリル基、及び
1, 2 - ジメチルアリル基。

【 0 0 5 0 】

・「置換もしくは無置換のアルキニル基」

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

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

【 0 0 5 1 】

・無置換のアルキニル基（具体例群 G 5 A ）：
エチニル基。

【 0 0 5 2 】

・「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」

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

10

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

20

【 0 0 5 3 】

・無置換のシクロアルキル基（具体例群 G 6 A ）：

シクロプロピル基、

シクロブチル基、

シクロペンチル基、

シクロヘキシル基、

1 - アダマンチル基、

2 - アダマンチル基、

1 - ノルボルニル基、及び

2 - ノルボルニル基。

30

【 0 0 5 4 】

・置換のシクロアルキル基（具体例群 G 6 B ）：

4 - メチルシクロヘキシル基。

【 0 0 5 5 】

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

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

- Si (G 1) (G 1) (G 1)、

- Si (G 1) (G 2) (G 2)、

- Si (G 1) (G 1) (G 2)、

- Si (G 2) (G 2) (G 2)、

- Si (G 3) (G 3) (G 3)、及び

- Si (G 6) (G 6) (G 6)

が挙げられる。ここで、

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

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

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

40

50

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

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

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

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

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

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

10

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

【 0 0 5 6 】

・「 - O - (R 9 0 4) で表される基」

本明細書に記載の - O - (R 9 0 4) で表される基の具体例 (具体例群 G 8) としては、

- O (G 1) 、

- O (G 2) 、

- O (G 3) 、及び

- O (G 6)

20

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

【 0 0 5 7 】

・「 - S - (R 9 0 5) で表される基」

本明細書に記載の - S - (R 9 0 5) で表される基の具体例 (具体例群 G 9) としては、

- S (G 1) 、

- S (G 2) 、

- S (G 3) 、及び

- S (G 6)

30

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

【 0 0 5 8 】

40

・「 - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基」

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

- N (G 1) (G 1) 、

- N (G 2) (G 2) 、

- N (G 1) (G 2) 、

- N (G 3) (G 3) 、及び

- N (G 6) (G 6)

が挙げられる。

ここで、

50

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

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

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

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

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

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

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

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

【 0 0 5 9 】

・「ハロゲン原子」

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

【 0 0 6 0 】

・「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも 1 つの水素原子がフッ素原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がフッ素原子で置き換わった基（パーフルオロ基）も含む。「無置換のフルオロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1 ~ 50 であり、好ましくは 1 ~ 30 であり、より好ましくは 1 ~ 18 である。「置換のフルオロアルキル基」は、「フルオロアルキル基」の 1 つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のフルオロアルキル基」には、「置換のフルオロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のフルオロアルキル基」における置換基の 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のフルオロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群 G 3）における 1 つ以上の水素原子がフッ素原子と置き換わった基の例等が挙げられる。

【 0 0 6 1 】

・「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 G 3）における 1 つ以上の水素原子がハロゲン原子と置き換わった基の例等が挙げられる。ハロアルキル基をハロゲン化アルキル基と称する場合がある。

【 0 0 6 2 】

・「置換もしくは無置換のアルコキシ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルコキシ基」の具体例としては、- O (G 3) で表される基であり、ここで、G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルコキシ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1 ~ 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。

10

20

30

40

50

【 0 0 6 3 】

・「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」の具体例としては、- S (G 3) で表される基であり、ここで、G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルキルチオ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1 ~ 5 0 であり、好ましくは 1 ~ 3 0 であり、より好ましくは 1 ~ 1 8 である。

【 0 0 6 4 】

・「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」の具体例としては、- O (G 1) で表される基であり、ここで、G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールオキシ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6 ~ 5 0 であり、好ましくは 6 ~ 3 0 であり、より好ましくは 6 ~ 1 8 である。

10

【 0 0 6 5 】

・「置換もしくは無置換のアリールチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールチオ基」の具体例としては、- S (G 1) で表される基であり、ここで、G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールチオ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6 ~ 5 0 であり、好ましくは 6 ~ 3 0 であり、より好ましくは 6 ~ 1 8 である。

20

【 0 0 6 6 】

・「置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基」

本明細書に記載の「トリアルキルシリル基」の具体例としては、- S i (G 3) (G 3) (G 3) で表される基であり、ここで、G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。- S i (G 3) (G 3) (G 3) における複数の G 3 は、互いに同一であるか、又は異なる。「トリアルキルシリル基」の各アルキル基の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1 ~ 5 0 であり、好ましくは 1 ~ 2 0 であり、より好ましくは 1 ~ 6 である。

【 0 0 6 7 】

・「置換もしくは無置換のアラルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、- (G 3) - (G 1) で表される基であり、ここで、G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」であり、G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。従って、「アラルキル基」は、「アルキル基」の水素原子が置換基としての「アリール基」と置き換わった基であり、「置換のアルキル基」の一態様である。「無置換のアラルキル基」は、「無置換のアリール基」が置換した「無置換のアルキル基」であり、「無置換のアラルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、7 ~ 5 0 であり、好ましくは 7 ~ 3 0 であり、より好ましくは 7 ~ 1 8 である。

30

「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、 - ナフチルメチル基、1 - - ナフチルエチル基、2 - - ナフチルエチル基、1 - - ナフチルイソプロピル基、2 - - ナフチルイソプロピル基、 - ナフチルメチル基、1 - - ナフチルエチル基、2 - - ナフチルエチル基、1 - - ナフチルイソプロピル基、及び 2 - - ナフチルイソプロピル基等が挙げられる。

40

【 0 0 6 8 】

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 -

50

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-スピロピフルオレニル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、及び9,9-ジフェニルフルオレニル基等である。

【0069】

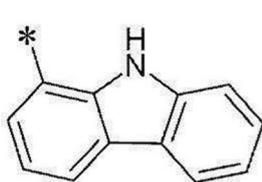
本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基、カルバゾリル基（1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、又は9-カルバゾリル基）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ナフトベンゾチオフエニル基、アザジベンゾチオフエニル基、ジアザジベンゾチオフ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

【0070】

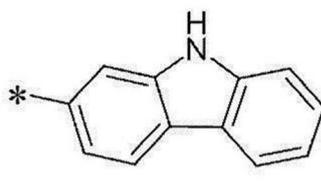
本明細書において、カルバゾリル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

【0071】

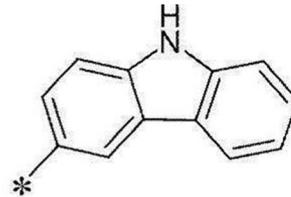
【化7】



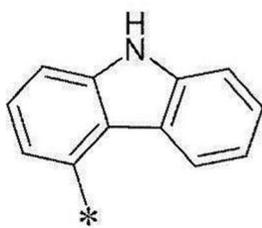
(TEMP-Cz1)



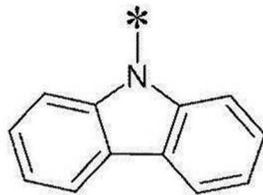
(TEMP-Cz2)



(TEMP-Cz3)



(TEMP-Cz4)



(TEMP-Cz5)

【0072】

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。

【0073】

10

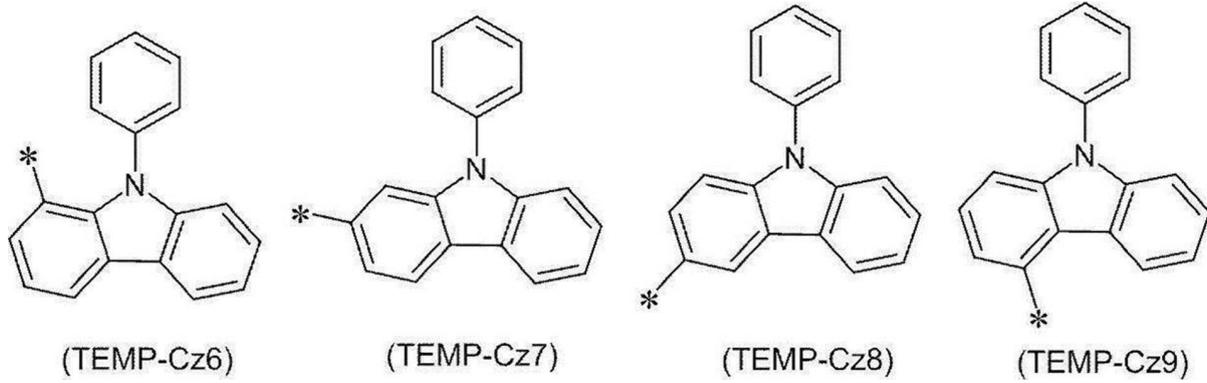
20

30

40

50

【化 8】



10

【0074】

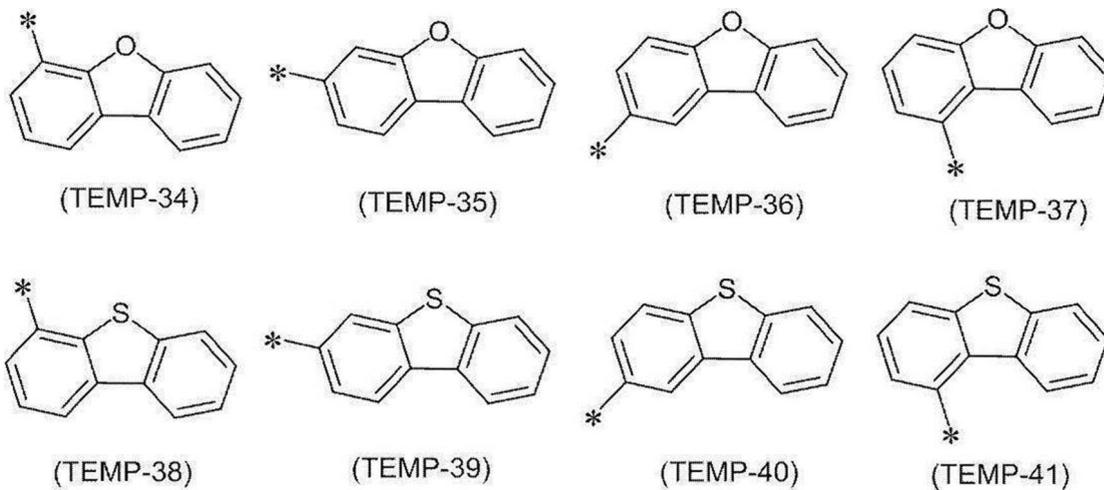
前記一般式(TEMP-Cz1)~(TEMP-Cz9)中、*は、結合位置を表す。

【0075】

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。

【0076】

【化 9】



20

【0077】

前記一般式(TEMP-34)~(TEMP-41)中、*は、結合位置を表す。

【0078】

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。

【0079】

・「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。

【0080】

・「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

40

50

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。

【0081】

・「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。

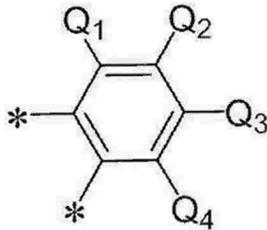
10

【0082】

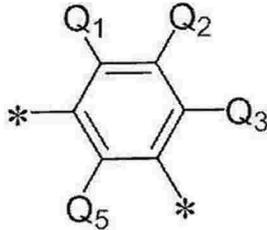
本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式(TEMP-42)~(TEMP-68)のいずれかの基である。

【0083】

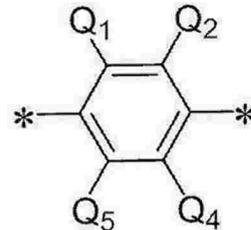
【化10】



(TEMP-42)

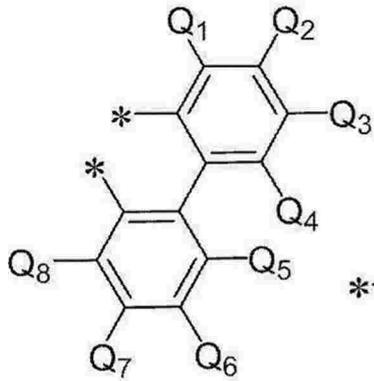


(TEMP-43)

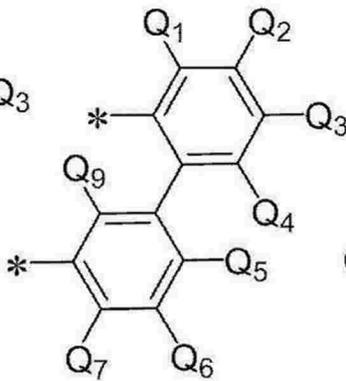


(TEMP-44)

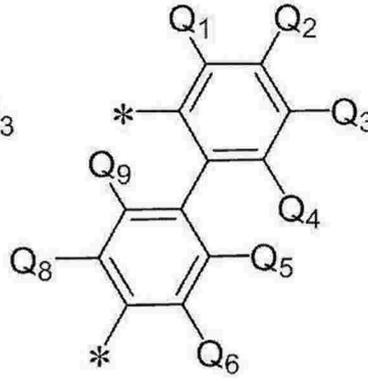
20



(TEMP-45)



(TEMP-46)



(TEMP-47)

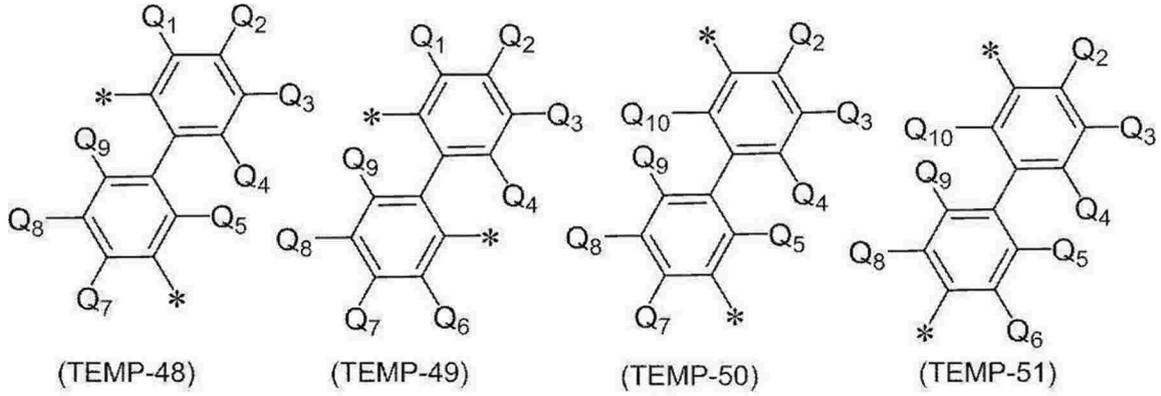
30

【0084】

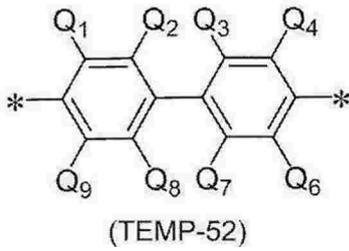
40

50

【化 1 1】



10



20

【 0 0 8 5】

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

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

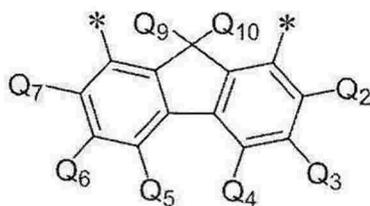
【 0 0 8 6】

30

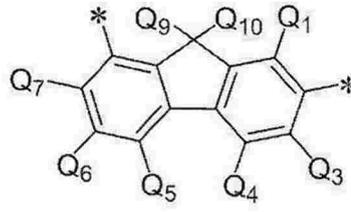
40

50

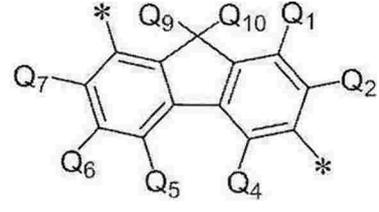
【化 1 2】



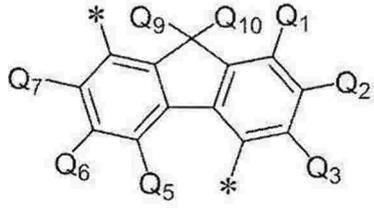
(TEMP-53)



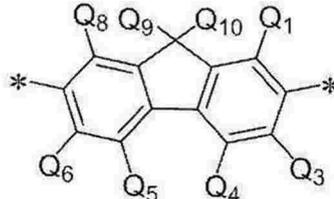
(TEMP-54)



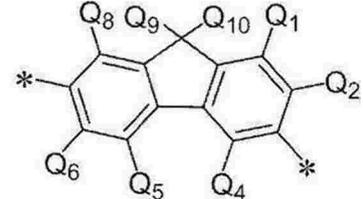
(TEMP-55)



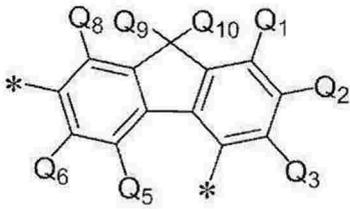
(TEMP-56)



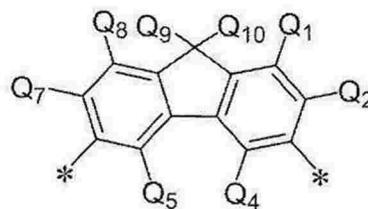
(TEMP-57)



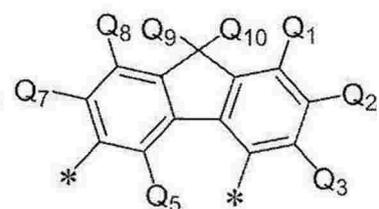
(TEMP-58)



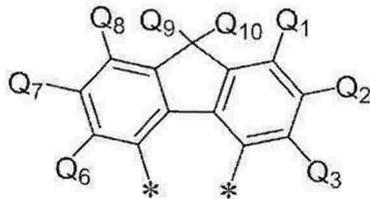
(TEMP-59)



(TEMP-60)



(TEMP-61)



(TEMP-62)

【 0 0 8 7 】

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。

【 0 0 8 8 】

10

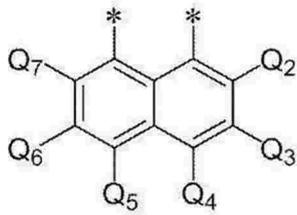
20

30

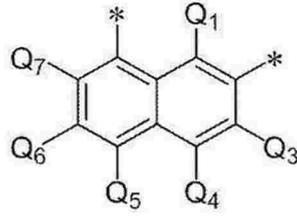
40

50

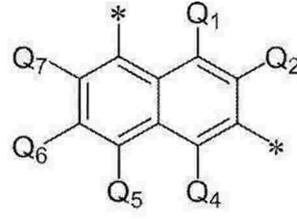
【化13】



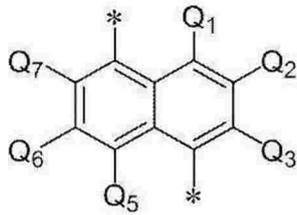
(TEMP-63)



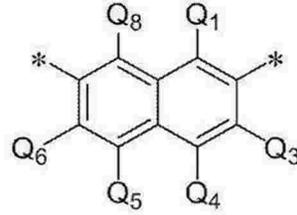
(TEMP-64)



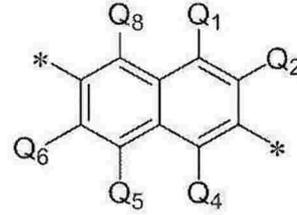
(TEMP-65)



(TEMP-66)



(TEMP-67)



(TEMP-68)

【0089】

前記一般式(TEMP-63)~(TEMP-68)中、Q1~Q8は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

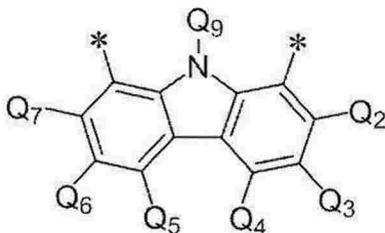
前記一般式(TEMP-63)~(TEMP-68)中、*は、結合位置を表す。

【0090】

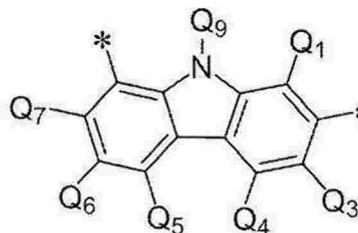
本明細書に記載の置換もしくは無置換の2価の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式(TEMP-69)~(TEMP-102)のいずれかの基である。

【0091】

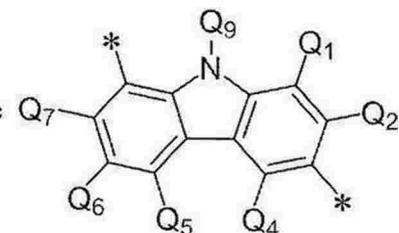
【化14】



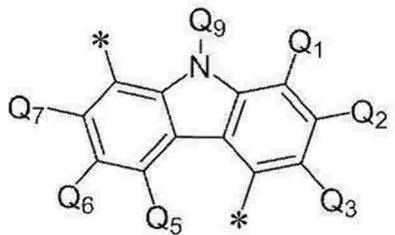
(TEMP-69)



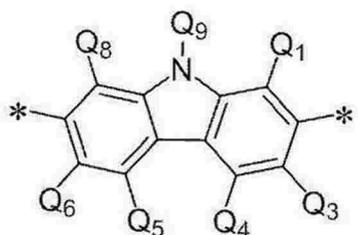
(TEMP-70)



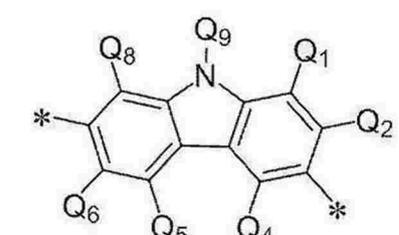
(TEMP-71)



(TEMP-72)



(TEMP-73)



(TEMP-74)

【0092】

10

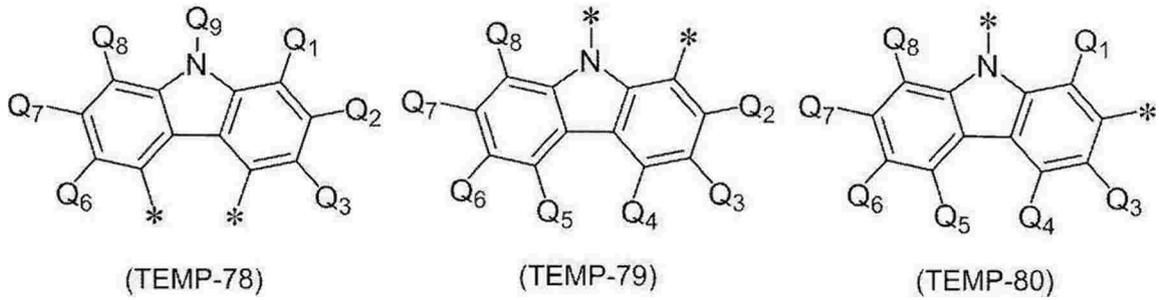
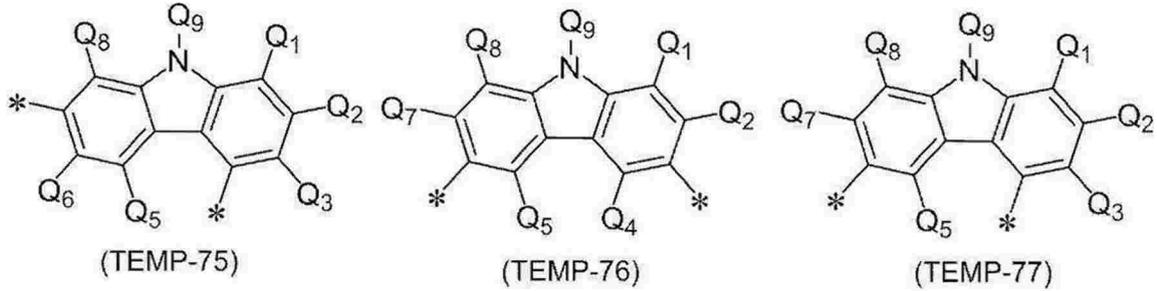
20

30

40

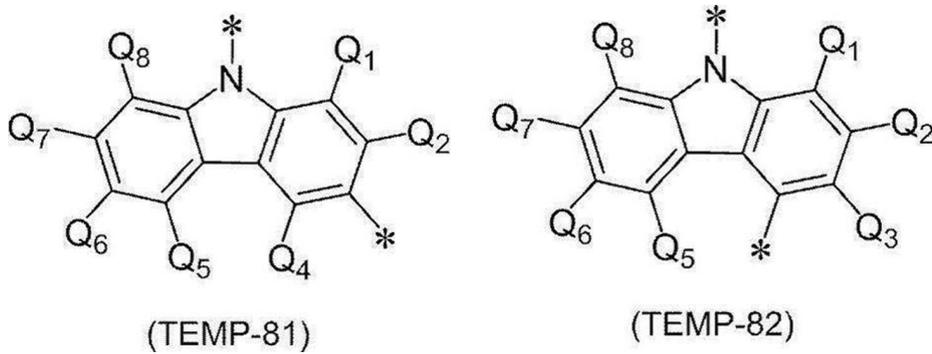
50

【化15】



【0093】

【化16】

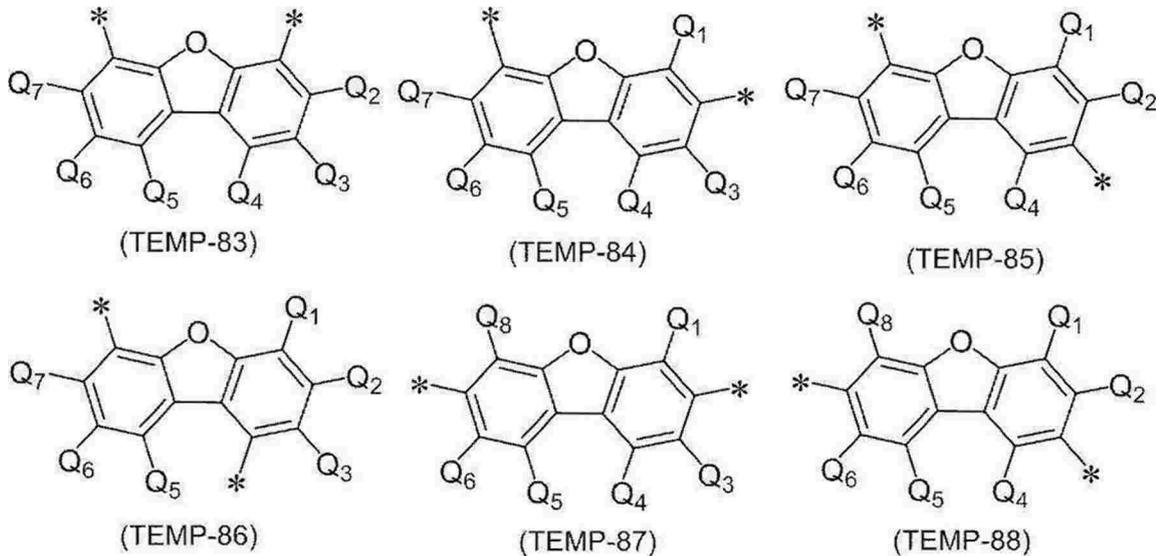


【0094】

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

【0095】

【化17】



10

20

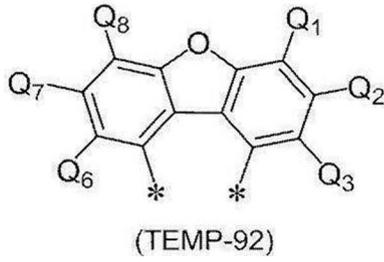
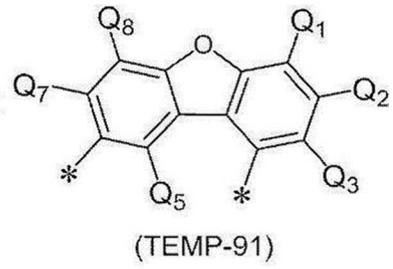
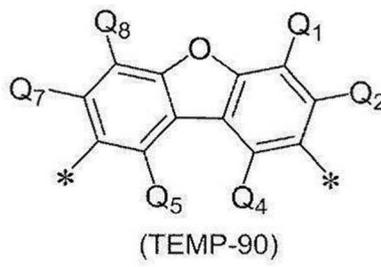
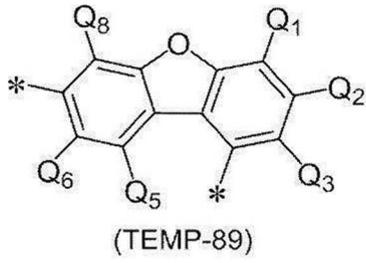
30

40

50

【 0 0 9 6 】

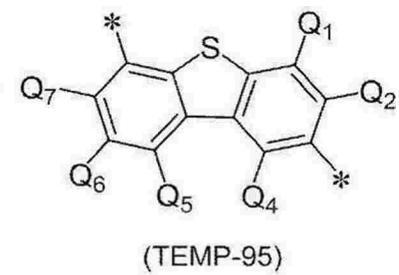
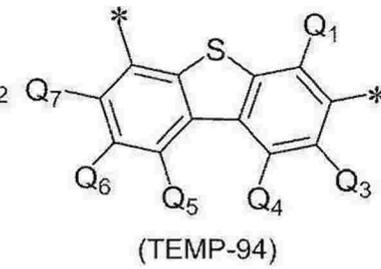
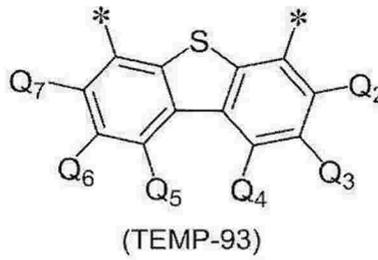
【 化 1 8 】



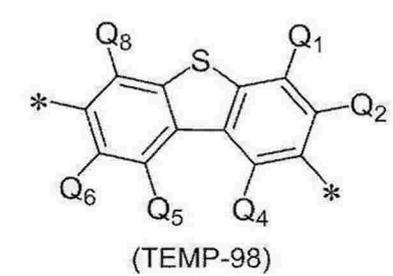
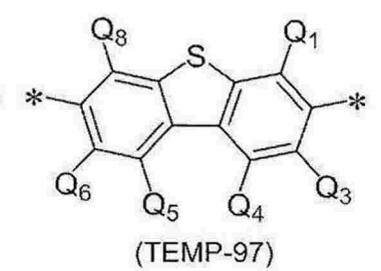
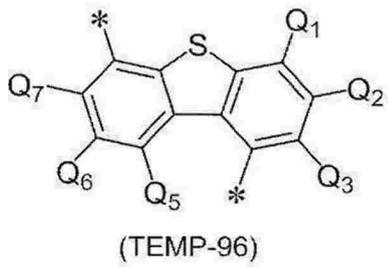
10

【 0 0 9 7 】

【 化 1 9 】



20



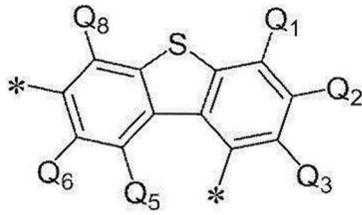
30

【 0 0 9 8 】

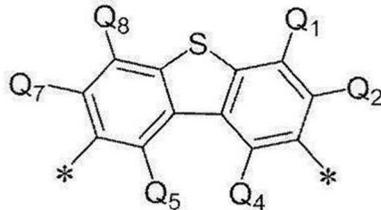
40

50

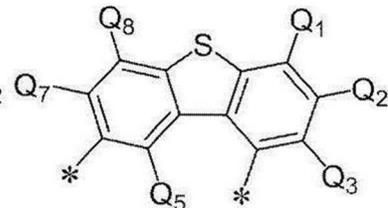
【化 2 0】



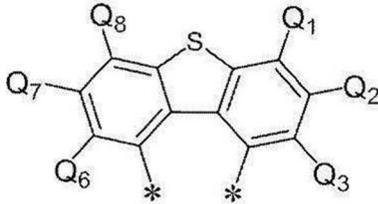
(TEMP-99)



(TEMP-100)



(TEMP-101)



(TEMP-102)

10

【0099】

前記一般式 (TEMP-83) ~ (TEMP-102) 中、Q₁ ~ Q₈ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

【0100】

以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

20

【0101】

・「結合して環を形成する場合」

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

30

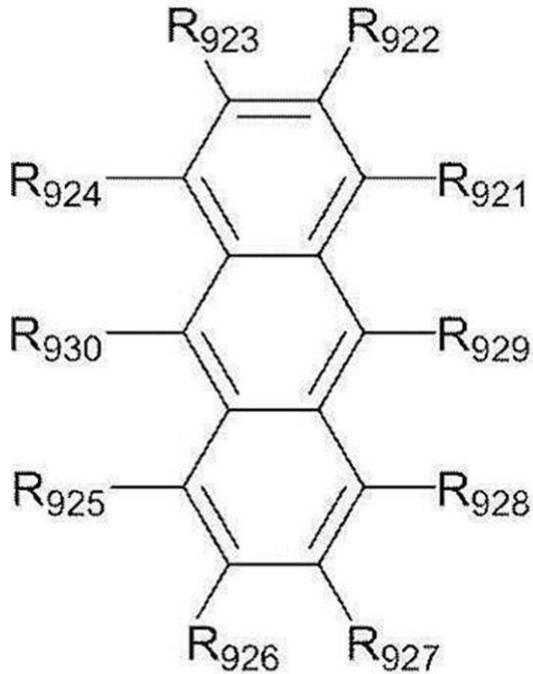
本明細書における、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合(以下、これらの場合をまとめて「結合して環を形成する場合」と称する場合がある。)について、以下、説明する。母骨格がアントラセン環である下記一般式 (TEMP-103) で表されるアントラセン化合物の場合を例として説明する。

【0102】

40

50

【化 2 1】



(TEMP-103)

10

20

【0103】

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

【0104】

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

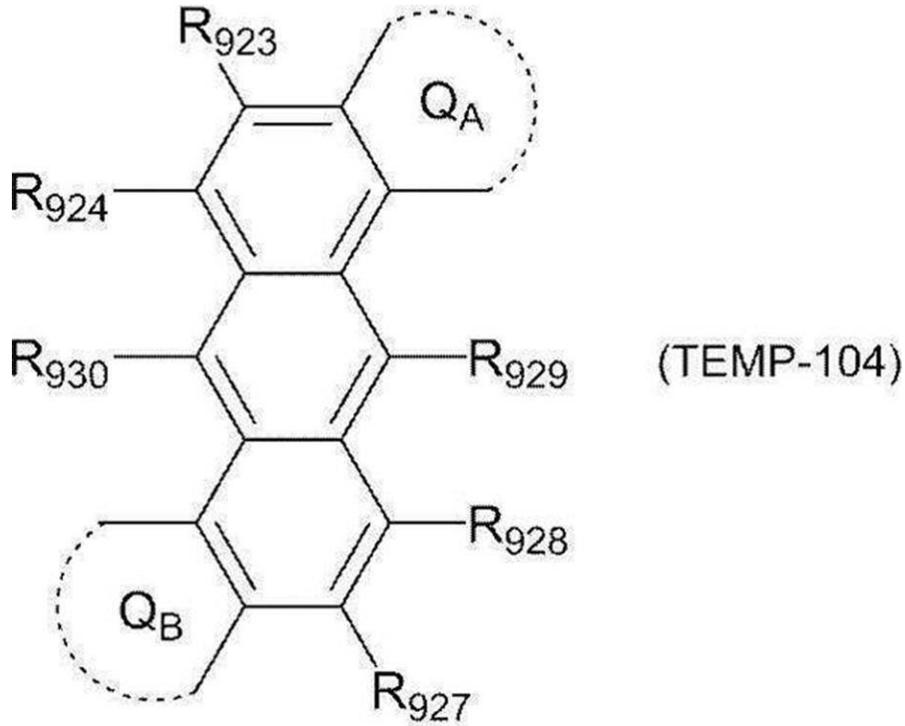
30

【0105】

40

50

【化 2 2】



10

20

【0106】

「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、R₉₂₂を共有する。

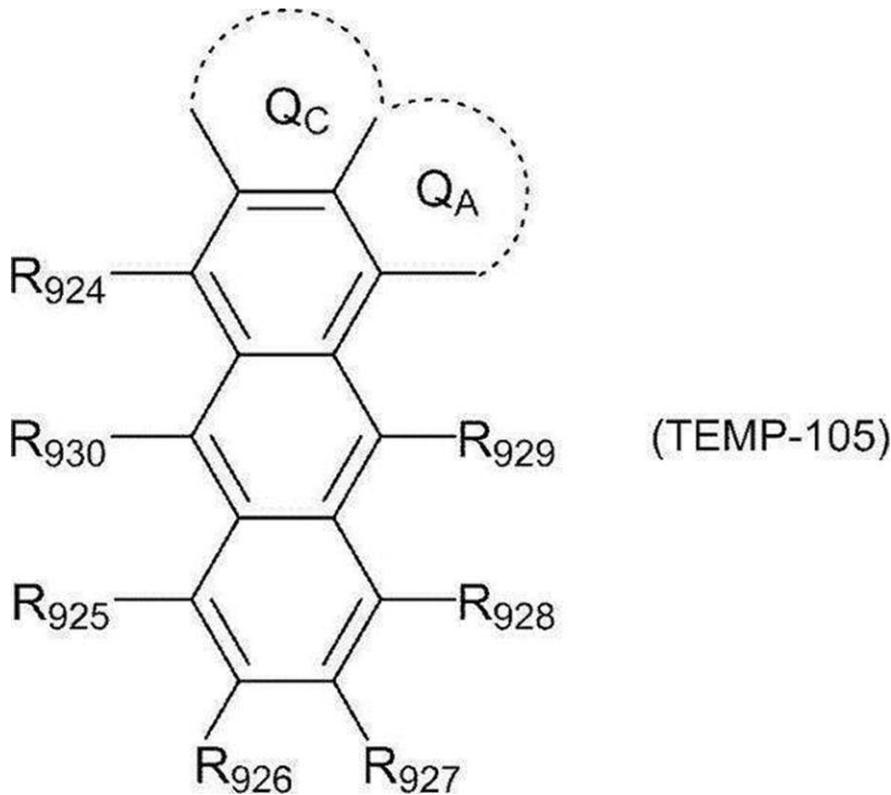
30

【0107】

40

50

【化 2 3】



10

20

【0108】

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

30

【0109】

「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。

40

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。

50

【 0 1 1 0 】

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。

10

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。

20

【 0 1 1 1 】

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。

30

【 0 1 1 2 】

・「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、

40

- Si (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3)、

- O - (R 9 0 4)、

- S - (R 9 0 5)、

- N (R 9 0 6) (R 9 0 7)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、及び

無置換の環形成原子数5～50の複素環基からなる群から選択される基等であり、

ここで、R 9 0 1 ~ R 9 0 7 は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

50

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

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、

10

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。

【0113】

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。

20

【0114】

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。

【0115】

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。

30

【0116】

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。

【0117】

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。

40

【0118】

〔第一実施形態〕

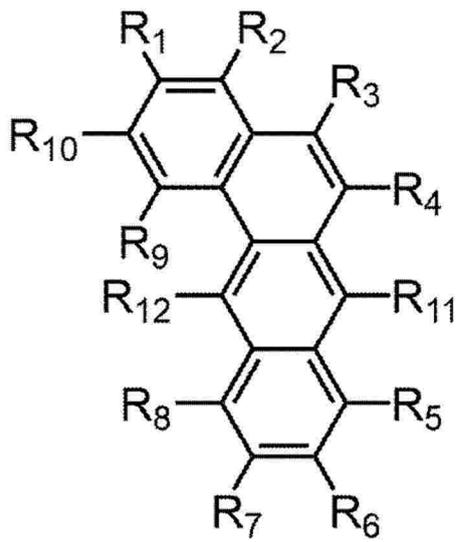
(化合物)

本実施形態に係る化合物は、下記一般式 (1A) で表される化合物である。

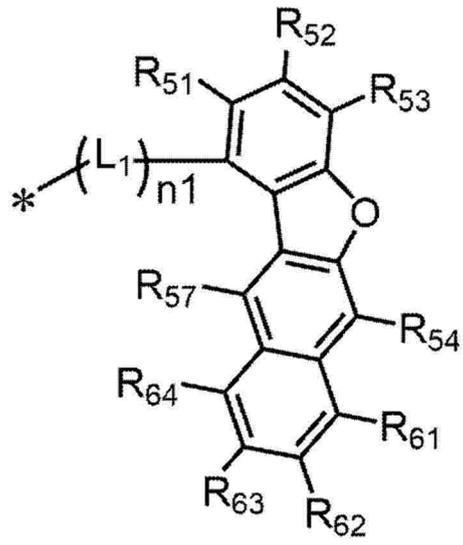
【0119】

50

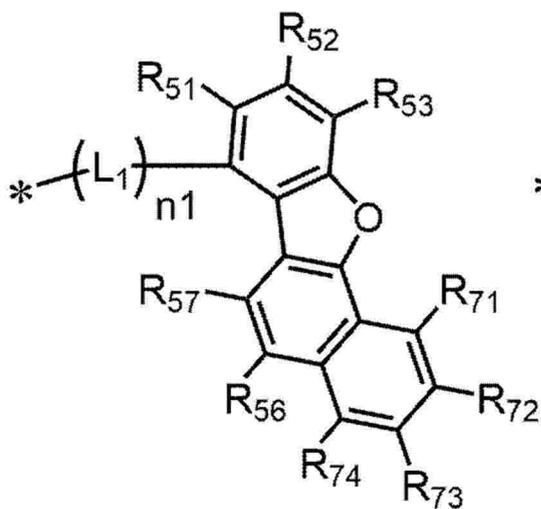
【化 2 4】



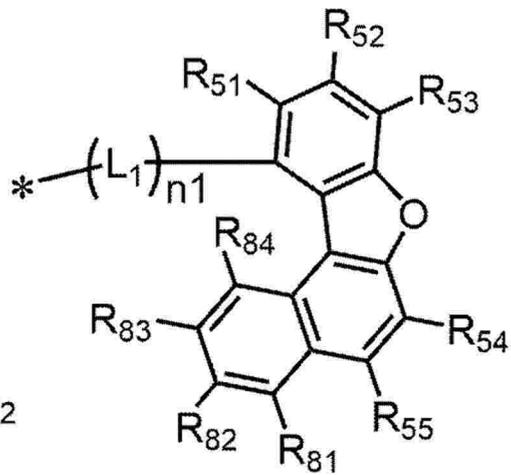
(1A)



(1B-1)



(1B-2)



(1B-3)

【 0 1 2 0】

(前記一般式(1A)において、

R₄ ~ R₈ 及び R₁₀ ~ R₁₂ のうちの1つは、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基であり、

R₁ ~ R₃、R₉、並びに前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基以外の R₄ ~ R₈ 及び R₁₀ ~ R₁₂ 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、

10

20

30

40

50

- 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - Si (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基、
 - O - (R 9 0 4) で表される基、
 - S - (R 9 0 5) で表される基、
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、
 - C (= O) R 8 0 1 で表される基、
 - C O O R 8 0 2 で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 R 1 1 が前記一般式 (1 B - 1)、(1 B - 2) 又は (1 B - 3) で表される基である
 場合、R 1 2 は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
 R 1 2 が前記一般式 (1 B - 1)、(1 B - 2) 又は (1 B - 3) で表される基である
 場合、R 1 1 は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
 前記一般式 (1 B - 1)、(1 B - 2) 及び (1 B - 3) で表される基において、
 n 1 は 0、1、2、又は 3 であり、
 n 1 が 1、2、又は 3 である場合の L 1 は、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基であり、
 L 1 が 2 以上存在する場合、2 以上の L 1 は、互いに同一であるか、又は異なり、
 前記一般式 (1 B - 1) において、
 R 5 1 ~ R 5 4、R 5 7、及び R 6 1 ~ R 6 4 のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1
 組以上が、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
 互いに結合せず、
 前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形
 成しない R 5 1 ~ R 5 4、R 5 7、及び R 6 1 ~ R 6 4 は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - Si (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基、
 - O - (R 9 0 4) で表される基、
 - S - (R 9 0 5) で表される基、
 - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 * は前記一般式 (1 A) 中のベンズ [a] アントラセン環との結合位置を示し、
 前記一般式 (1 B - 2) において、
 R 5 1 ~ R 5 3、R 5 6、R 5 7、及び R 7 1 ~ R 7 4 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

10

20

30

40

50

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(1B-1)における $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ と同義であり、

*は前記一般式(1A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式(1B-3)において、

$R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(1B-1)における $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ と同義であり、

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

(前記一般式(1A)で表される化合物において、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{906} 、 R_{907} 、 R_{801} 、及び R_{802} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

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

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

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

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

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

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

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

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

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

【0121】

本実施形態に係る化合物において、 L_1 が有する置換基は、環形成炭素数6~18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~16の複素環基であることも好ましい。

【0122】

本実施形態に係る化合物において、 L_1 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~13のアリーレン基であることも好ましい。

【0123】

本実施形態に係る化合物において、 n_1 は1、2、又は3であることも好ましい。

【0124】

本実施形態に係る化合物において、 n_1 は0であることも好ましい。

【0125】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基における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前記一般式(1B-1)中の $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ の少なくとも1つ、前記一般式(1B-2)中の $R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$ の少なくとも1つ、又は前記一般式(1B-3)中の $R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ の少なくとも1つが、水素原子以外であることも好ましい。

【0126】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B

10

20

30

40

50

- 3) で表される基における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前記一般式(1B-1)中の $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ の少なくとも1つ、前記一般式(1B-2)中の $R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$ の少なくとも1つ、又は前記一般式(1B-3)中の $R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ 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6~50のアリール基であることも好ましい。

【0127】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基における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前記一般式(1B-1)中の $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ の少なくとも1つ、前記一般式(1B-2)中の $R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$ の少なくとも1つ、又は前記一般式(1B-3)中の $R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ の少なくとも1つが、置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。

10

【0128】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基における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前記一般式(1B-1)中の $R_{51} \sim R_{54}$ 、 R_{57} 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ の少なくとも1つ、前記一般式(1B-2)中の $R_{51} \sim R_{53}$ 、 R_{56} 、 R_{57} 、及び $R_{71} \sim R_{74}$ の少なくとも1つ、又は前記一般式(1B-3)中の $R_{51} \sim R_{55}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ の少なくとも1つが、無置換のフェニル基であることも好ましい。

20

【0129】

本実施形態に係る化合物において、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_{11} 、及び R_{12} のうちの1つが、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基であることも好ましい。

【0130】

本実施形態に係る化合物において、 R_6 、 R_7 、 R_{11} 、及び R_{12} のうちの1つが、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基であることも好ましい。

30

【0131】

本実施形態に係る化合物において、 R_{11} が、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基であることも好ましい。

【0132】

本実施形態に係る化合物において、 R_{12} が、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基であることも好ましい。

【0133】

本実施形態に係る化合物において、 R_{11} が、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基である場合、 R_{12} は、水素原子であることも好ましい。

本実施形態に係る化合物において、 R_{12} が、前記一般式(1B-1)、(1B-2)又は(1B-3)で表される基である場合、 R_{11} は、水素原子であることも好ましい。

40

【0134】

本実施形態に係る化合物において、分子内に、1つ以上の重水素原子を有することも好ましい。

【0135】

本実施形態に係る化合物において、水素原子である場合の $R_1 \sim R_3$ 、 R_9 、並びに、前記一般式(1B-1)で表される基、前記一般式(1B-2)で表される基、及び前記一般式(1B-3)で表される基以外の水素原子である場合の $R_4 \sim R_8$ 、及び $R_{10} \sim R_{12}$ 、並びに、水素原子である場合の $R_{51} \sim R_{57}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 $R_{71} \sim R_{74}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ の1つ以上は、重水素原子であることも好ましい。

50

本実施形態に係る化合物において、水素原子である場合の R₁ ~ R₃、R₉、並びに、前記一般式 (1B-1) で表される基、前記一般式 (1B-2) で表される基、及び前記一般式 (1B-3) で表される基以外の水素原子である場合の R₄ ~ R₈、及び R₁₀ ~ R₁₂、並びに、水素原子である場合の R₅₁ ~ R₅₇、R₆₁ ~ R₆₄、R₇₁ ~ R₇₄、及び R₈₁ ~ R₈₄ の全ては、重水素原子であることも好ましい。

【0136】

本実施形態に係る化合物において、水素原子以外である場合の R₁ ~ R₃、R₉、並びに、前記一般式 (1B-1) で表される基、前記一般式 (1B-2) で表される基、及び前記一般式 (1B-3) で表される基以外の水素原子以外である場合の R₄ ~ R₈、及び R₁₀ ~ R₁₂、並びに、水素原子以外である場合の R₅₁ ~ R₅₇、R₆₁ ~ R₆₄、R₇₁ ~ R₇₄、及び R₈₁ ~ R₈₄ が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の1つ以上は、重水素原子であることも好ましい。

10

本実施形態に係る化合物において、水素原子以外である場合の R₁ ~ R₃、R₉、並びに、前記一般式 (1B-1) で表される基、前記一般式 (1B-2) で表される基、及び前記一般式 (1B-3) で表される基以外の水素原子以外である場合の R₄ ~ R₈、及び R₁₀ ~ R₁₂、並びに、水素原子以外である場合の R₅₁ ~ R₅₇、R₆₁ ~ R₆₄、R₇₁ ~ R₇₄、及び R₈₁ ~ R₈₄ が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の全ては、重水素原子であることも好ましい。

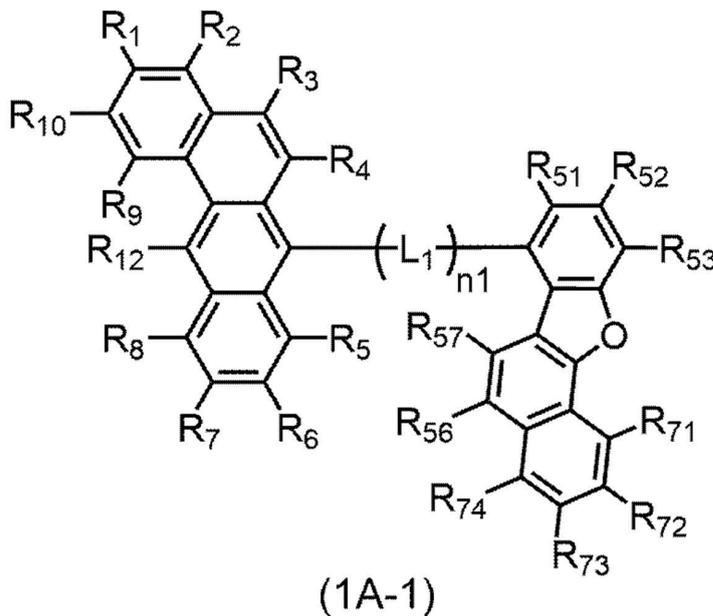
【0137】

本実施形態に係る化合物は、下記一般式 (1A-1) で表される化合物であることも好ましい。

20

【0138】

【化25】



30

(1A-1)

40

【0139】

(前記一般式 (1A-1) において、

R₁ ~ R₁₀ 及び R₁₂ 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、

50

- O - (R 9 0 4) で表される基、
 - S - (R 9 0 5) で表される基、
 - 置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 5 0 のアラルキル基、
 - C (= O) R 8 0 1 で表される基、
 - C O O R 8 0 2 で表される基、
 - ハロゲン原子、
 - シアノ基、
 - ニトロ基、
 - 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は
 - 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基であり、
- R 5 1 ~ R 5 3、R 5 6、R 5 7、及び R 7 1 ~ R 7 4 は、それぞれ独立に、
- 水素原子、
 - 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、
 - 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、
 - 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、
 - 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、
 - S i (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基、
 - O - (R 9 0 4) で表される基、
 - S - (R 9 0 5) で表される基、
 - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、
 - ハロゲン原子、
 - シアノ基、
 - ニトロ基、
 - 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は
 - 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基であり、
- L 1 及び n 1 は、それぞれ、前記一般式 (1 B - 2) における L 1 及び n 1 と同義である。))
- 【 0 1 4 0 】
- 本実施形態に係る化合物において、R 1 ~ R 3、R 9、並びに前記一般式 (1 B - 1)、(1 B - 2) 又は (1 B - 3) で表される基以外の R 4 ~ R 8 及び R 1 0 ~ R 1 2 は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基であることも好ましい。
- 【 0 1 4 1 】
- 本実施形態に係る化合物において、前記一般式 (1 B - 1) 中の、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R 5 1 ~ R 5 4、R 5 7、及び R 6 1 ~ R 6 4 は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基であることも好ましい。
- 【 0 1 4 2 】
- 本実施形態に係る化合物において、前記一般式 (1 B - 2) 中の、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R 5 1 ~ R 5 3、R 5 6、R 5 7、及び R 7 1 ~ R 7 4 は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基であることも好ましい。
- 【 0 1 4 3 】
- 本実施形態に係る化合物において、前記一般式 (1 B - 3) 中の、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R 5 1 ~ R 5 5、及び R 8 1 ~ R 8 4 は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基であることも好ましい。
- 【 0 1 4 4 】
- 本実施形態に係る化合物において、前記「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であり、前記「置換もしくは無置換」と記載された環は、いずれも

「無置換」の環であることも好ましい。

【0145】

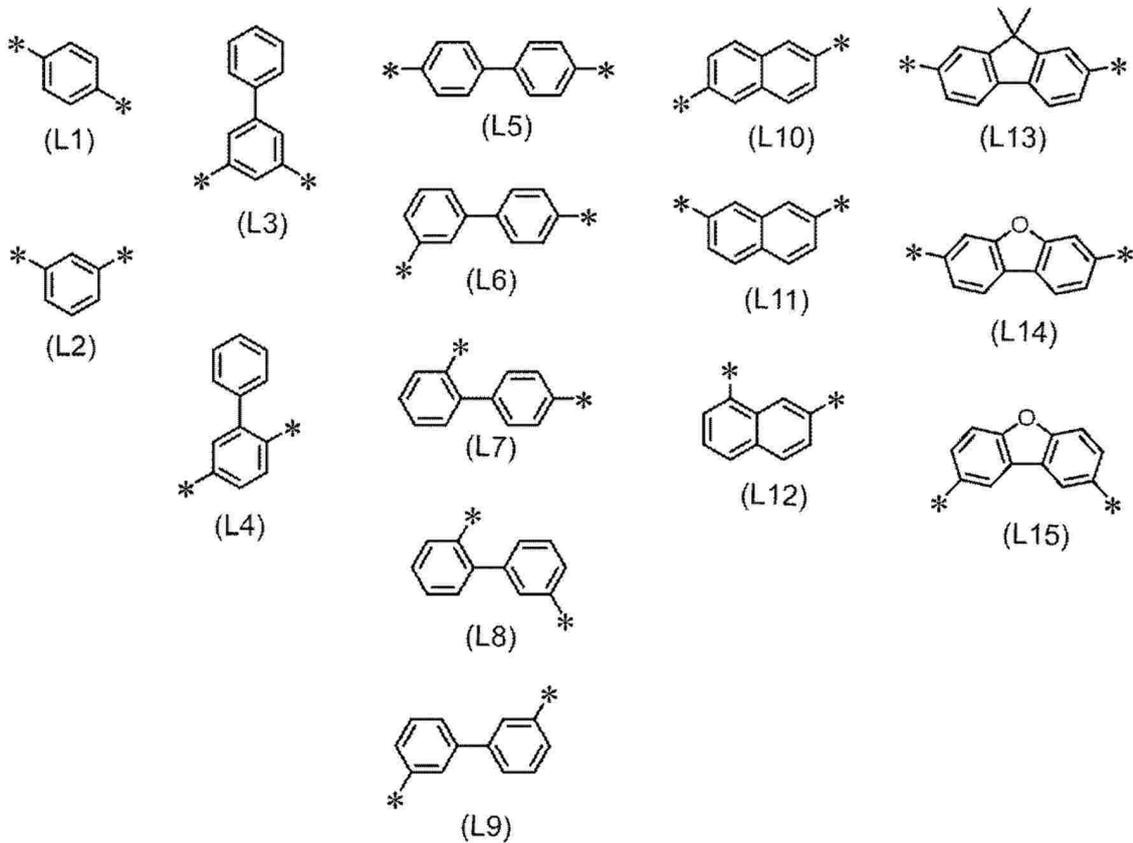
本実施形態に係る化合物において、 L_1 は無置換であることも好ましい。

【0146】

本実施形態に係る化合物において、 L_1 は、下記一般式(L1)~(L15)で表される基からなる群から選択されるいずれかの基であることも好ましい。なお、下記例示中の*は、結合位置を示す。

【0147】

【化26】



10

20

30

【0148】

前記一般式(L1)~(L15)で表される基は、それぞれ独立して、前述の「任意の置換基」を1以上有していてもよいし、有さなくてもよい。

【0149】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式(1A)中の R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_{10} 、 R_{11} 、又は R_{12} が、前記一般式(1B-1)、(1B-2)及び(1B-3)で表される基からなる群から選択されるいずれかの基である。

40

また、本実施形態に係る化合物において、後述の一般式(1A-A)中の R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_{10} 、 R_{11} 、又は R_{12} が、後述の一般式(1B-A1)、(1B-A2)及び(1B-A3)で表される基からなる群から選択されるいずれかの基である。

HOMO及びLUMOのより電子密度の大きい位置又は一重項エネルギー S_1 がより小さくなる部位である R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_{10} 、 R_{11} 、又は R_{12} が、前記一般式(1B-1)、(1B-2)及び(1B-3)で表される基からなる群から選択されるいずれかの基、並びに、後述の一般式(1B-A1)、(1B-A2)及び(1B-A3)で表される基からなる群から選択されるいずれかの基であることにより、励起耐性が向上しやすく、有機EL素子の長寿命化効果が得られやすくなる。

【0150】

50

本実施形態に係る化合物において、前記一般式(1A)中のR₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₁₀、R₁₁、又はR₁₂が、前記一般式(1B-1)、(1B-2)及び(1B-3)で表される基からなる群から選択されるいずれかの基を有すること、並びに、後述の一般式(1A-A)中のR₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₁₀、R₁₁、又はR₁₂が、後述の一般式(1B-A1)、(1B-A2)及び(1B-A3)で表される基からなる群から選択されるいずれかの基を有することで、分子間相互作用がより小さくなるため、同じドーパントを用いる場合であってもより深い青色発光を得られることを見出された。すなわち、本実施形態に係る化合物をホスト材料として用い、ドーパント(発光性化合物)と組み合わせて発光層に含有させることで、他のホスト材料と当該ドーパント(発光性化合物)とを含有させた発光層に比べて、同じドーパントを用いているにもかかわらず、より深い青色発光を得られることを見出された。

10

【0151】

本実施形態に係る化合物は、下記一般式(1A-A)で表される化合物であることも好ましい。

【0152】

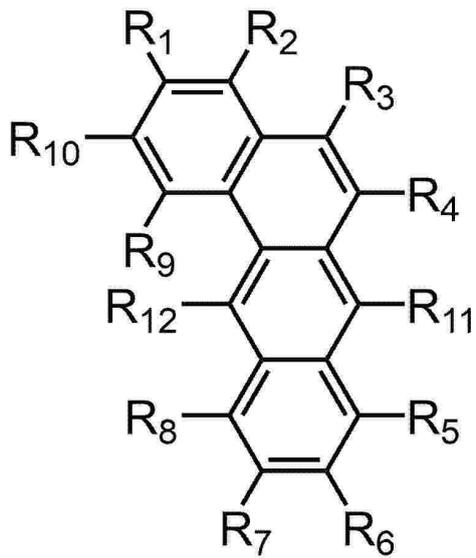
20

30

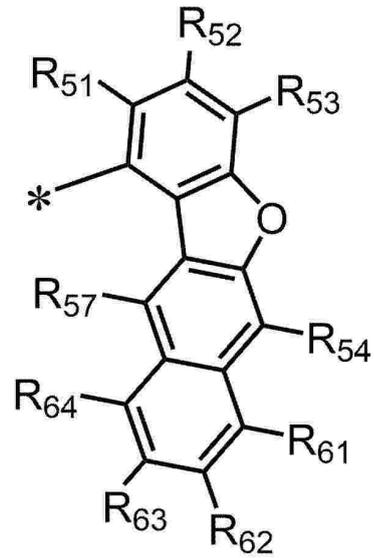
40

50

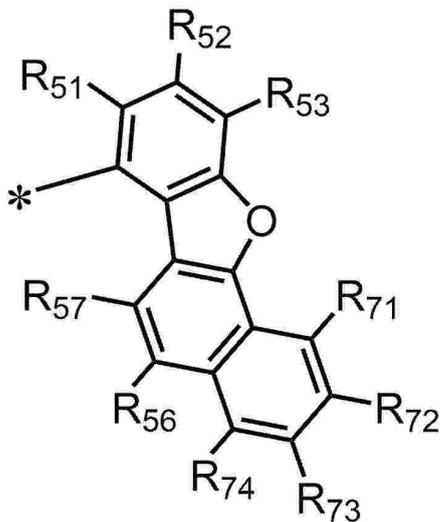
【化 2 7】



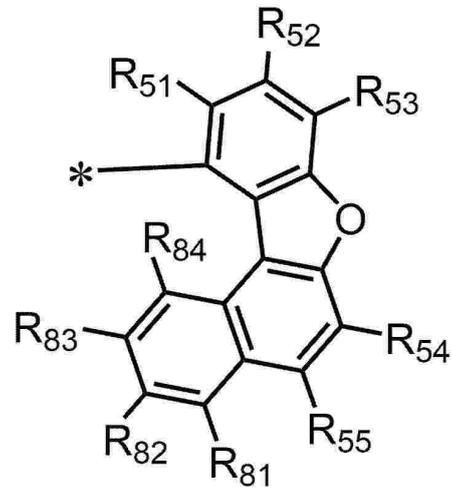
(1A-A)



(1B-A1)



(1B-A2)



(1B-A3)

【0153】

(前記一般式(1A-A)において、

R₄ ~ R₈ 及び R₁₀ ~ R₁₂ のうちの1つは、前記一般式(1B-A1)、(1B-A2)又は(1B-A3)で表される基であり、

R₁ ~ R₃、R₉、並びに前記一般式(1B-A1)、(1B-A2)又は(1B-A3)で表される基以外の R₄ ~ R₈ 及び R₁₀ ~ R₁₂ 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、

10

20

30

40

50

- 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、
 - C (= O) R₈₀₁ で表される基、
 - C O O R₈₀₂ で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、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、
 R₁₁ が前記一般式 (1 B - A 1)、(1 B - A 2) 又は (1 B - A 3) で表される基
 である場合、R₁₂ は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
 R₁₂ が前記一般式 (1 B - A 1)、(1 B - A 2) 又は (1 B - A 3) で表される基
 である場合、R₁₁ は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
 前記一般式 (1 B - A 1) において、
 R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及び R₆₁ ~ R₆₄ 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 R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及び R₆₁ ~ R₆₄ は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 * は前記一般式 (1 A - A) 中のベンズ [a] アントラセン環との結合位置を示し、
 前記一般式 (1 B - A 2) において、
 R₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及び R₇₁ ~ R₇₄ 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 R₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及び R₇₁ ~ R₇₄ は、それぞれ独立に、前記一
 般式 (1 B - A 1) における R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及び R₆₁ ~ R₆₄ と同義であり、

10

20

30

40

50

*は前記一般式(1A-A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、前記一般式(1B-A3)において、

R₅₁~R₅₅、及びR₈₁~R₈₄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R₅₁~R₅₅、及びR₈₁~R₈₄は、それぞれ独立に、前記一般式(1B-A1)におけるR₅₁~R₅₄、R₅₇、及びR₆₁~R₆₄と同義であり、

*は前記一般式(1A-A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示す。) (前記一般式(1A-A)で表される化合物において、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。))

【0154】

本実施形態に係る前記一般式(1A-A)で表される化合物において、R₅、R₆、R₇、R₈、R₁₁、及びR₁₂のうちの1つが、前記一般式(1B-A1)、(1B-A2)又は(1B-A3)で表される基であることも好ましい。

【0155】

本実施形態に係る前記一般式(1A-A)で表される化合物において、R₆、R₇、R₁₁、及びR₁₂のうちの1つが、前記一般式(1B-A1)、(1B-A2)又は(1B-A3)で表される基であることも好ましい。

【0156】

本実施形態に係る前記一般式(1A-A)で表される化合物において、R₁₁が、前記一般式(1B-A1)、(1B-A2)又は(1B-A3)で表される基であることも好ましい。

【0157】

本実施形態に係る前記一般式(1A-A)で表される化合物において、前記一般式(1B-A1)、(1B-A2)又は(1B-A3)で表される基における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前記一般式(1B-A1)中のR₅₁~R₅₄、R₅₇、及びR₆₁~R₆₄の少なくとも1つ、前記一般式(1B-A2)中のR₅₁~R₅₃、R₅₆、R₅₇、及びR₇₁~R₇₄の少なくとも1つ、又は前記一般式(1B-A3)中のR₅₁~R₅₅、及びR₈₁~R₈₄の少なくとも1つが、水素原子以外であることも好ましい。

【0158】

本実施形態に係る前記一般式(1A-A)で表される化合物において、前記一般式(1B-A1)、(1B-A2)又は(1B-A3)で表される基における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前記一般式

10

20

30

40

50

(1B - A1)中のR₅₁~R₅₄、R₅₇、及びR₆₁~R₆₄の少なくとも1つ、前記一般式(1B - A2)中のR₅₁~R₅₃、R₅₆、R₅₇、及びR₇₁~R₇₄の少なくとも1つ、又は前記一般式(1B - A3)中のR₅₁~R₅₅、及びR₈₁~R₈₄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6~50のアリール基であることも好ましい。

【0159】

本実施形態に係る前記一般式(1A - A)で表される化合物において、前記一般式(1B - A1)、(1B - A2)又は(1B - A3)で表される基における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前記一般式(1B - A1)中のR₅₁~R₅₄、R₅₇、及びR₆₁~R₆₄の少なくとも1つ、前記一般式(1B - A2)中のR₅₁~R₅₃、R₅₆、R₅₇、及びR₇₁~R₇₄の少なくとも1つ、又は前記一般式(1B - A3)中のR₅₁~R₅₅、及びR₈₁~R₈₄の少なくとも1つが、置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。

10

【0160】

本実施形態に係る前記一般式(1A - A)で表される化合物において、前記一般式(1B - A1)、(1B - A2)又は(1B - A3)で表される基における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前記一般式(1B - A1)中のR₅₁~R₅₄、R₅₇、及びR₆₁~R₆₄の少なくとも1つ、前記一般式(1B - A2)中のR₅₁~R₅₃、R₅₆、R₅₇、及びR₇₁~R₇₄の少なくとも1つ、又は前記一般式(1B - A3)中のR₅₁~R₅₅、及びR₈₁~R₈₄の少なくとも1つが、無置換のフェニル基であることも好ましい。

20

【0161】

本実施形態に係る前記一般式(1A - A)で表される化合物において、R₁₂が、前記一般式(1B - A1)、(1B - A2)又は(1B - A3)で表される基である場合、R₁₁は水素原子であることも好ましい。

【0162】

本実施形態に係る前記一般式(1A - A)で表される化合物において、R₁₁が、前記一般式(1B - A1)、(1B - A2)又は(1B - A3)で表される基である場合、R₁₂は水素原子であることも好ましい。

【0163】

本実施形態に係る前記一般式(1A - A)で表される化合物において、分子内に、1つ以上の重水素原子を有することも好ましい。

30

【0164】

本実施形態に係る前記一般式(1A - A)で表される化合物において、水素原子である場合のR₁~R₃、R₉、並びに、前記一般式(1B - A1)で表される基、前記一般式(1B - A2)で表される基、及び前記一般式(1B - A3)で表される基以外の水素原子である場合のR₄~R₈、及びR₁₀~R₁₂、並びに、水素原子である場合のR₅₁~R₅₇、R₆₁~R₆₄、R₇₁~R₇₄、及びR₈₁~R₈₄の1つ以上は、重水素原子であることも好ましい。

本実施形態に係る前記一般式(1A - A)で表される化合物において、水素原子である場合のR₁~R₃、R₉、並びに、前記一般式(1B - A1)で表される基、前記一般式(1B - A2)で表される基、及び前記一般式(1B - A3)で表される基以外の水素原子である場合のR₄~R₈、及びR₁₀~R₁₂、並びに、水素原子である場合のR₅₁~R₅₇、R₆₁~R₆₄、R₇₁~R₇₄、及びR₈₁~R₈₄の全ては、重水素原子であることも好ましい。

40

【0165】

本実施形態に係る前記一般式(1A - A)で表される化合物において、水素原子以外である場合のR₁~R₃、R₉、並びに、前記一般式(1B - A1)で表される基、前記一般式(1B - A2)で表される基、及び前記一般式(1B - A3)で表される基以外の水素原子以外である場合のR₄~R₈、及びR₁₀~R₁₂、並びに、水素原子以外である場合

50

の $R_{51} \sim R_{57}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 $R_{71} \sim R_{74}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の1つ以上は、重水素原子であることも好ましい。

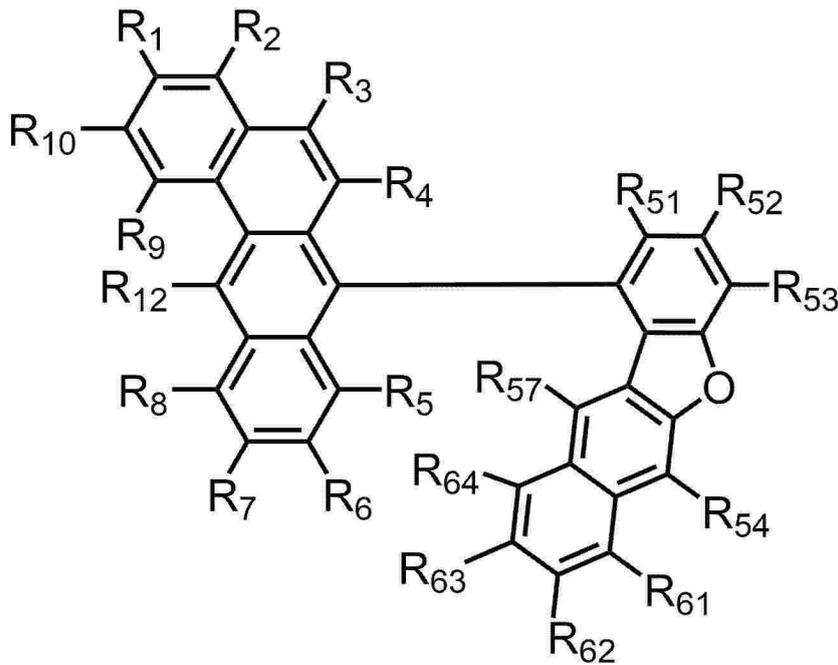
本実施形態に係る化合物において、水素原子以外である場合の $R_1 \sim R_3$ 、 R_9 、並びに、前記一般式(1B-A1)で表される基、前記一般式(1B-A2)で表される基、及び前記一般式(1B-A3)で表される基以外の水素原子以外である場合の $R_4 \sim R_8$ 、及び $R_{10} \sim R_{12}$ 、並びに、水素原子以外である場合の $R_{51} \sim R_{57}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 $R_{71} \sim R_{74}$ 、及び $R_{81} \sim R_{84}$ が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の全ては、重水素原子であることも好ましい。

【0166】

本実施形態に係る化合物は、下記一般式(1A-A-1)又は(1A-A-2)で表される化合物であることも好ましい。

【0167】

【化28】



(1A-A-1)

【0168】

10

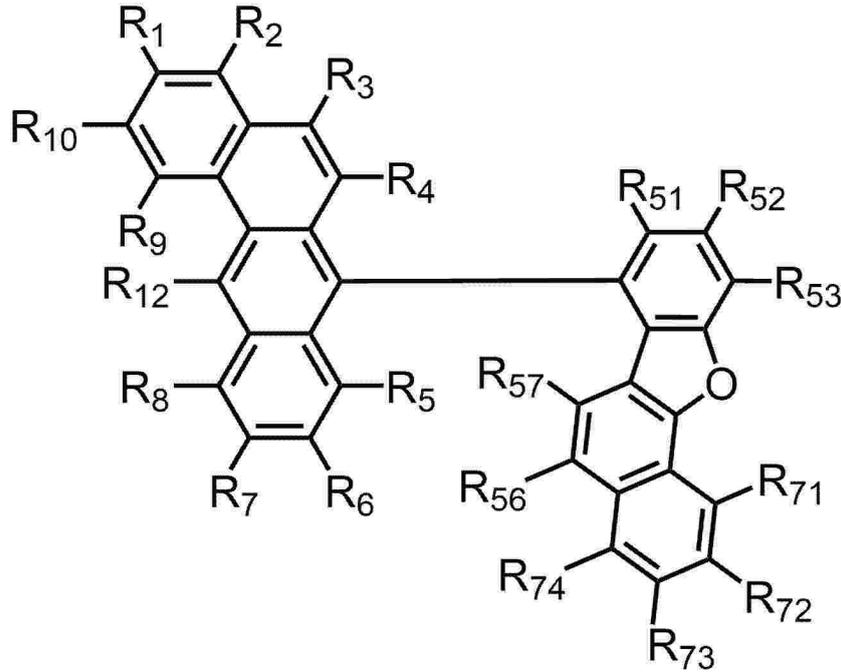
20

30

40

50

【化 2 9】



(1A-A-2)

【 0 1 6 9】

(前記一般式(1A-A-1)及び前記一般式(1A-A-2)において、

R₁ ~ R₁₀及びR₁₂は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

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

置換もしくは無置換の炭素数7~50のアラルキル基、

- C(=O)R₈₀₁で表される基、- COOR₈₀₂で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

前記一般式(1A-A-1)におけるR₅₁~R₅₃、R₅₄、R₅₇、及びR₆₁~R₆₄、並びに、前記一般式(1A-A-2)におけるR₅₁~R₅₃、R₅₇、及びR₇₁~R₇₄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、

10

20

30

40

50

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

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

- O - (R 9 0 4) で表される基、

- S - (R 9 0 5) で表される基、

- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)

10

【 0 1 7 0 】

・本実施形態に係る化合物の製造方法

本実施形態に係る化合物は、後述する実施例に記載の合成方法に従って製造できる。また、本実施形態に係る化合物は、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によっても、製造できる。

【 0 1 7 1 】

・本実施形態に係る化合物の具体例

本実施形態に係る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。

20

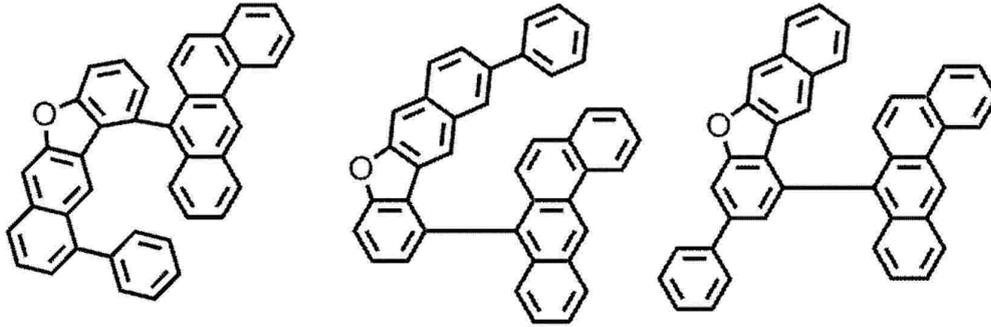
【 0 1 7 2 】

30

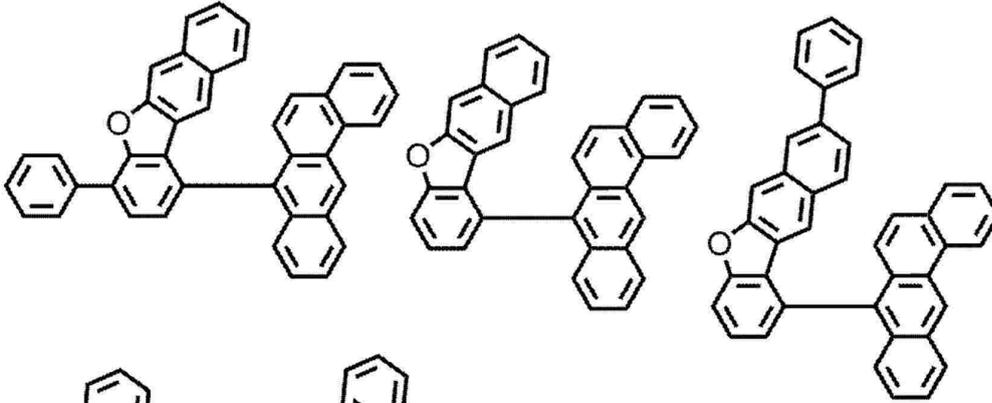
40

50

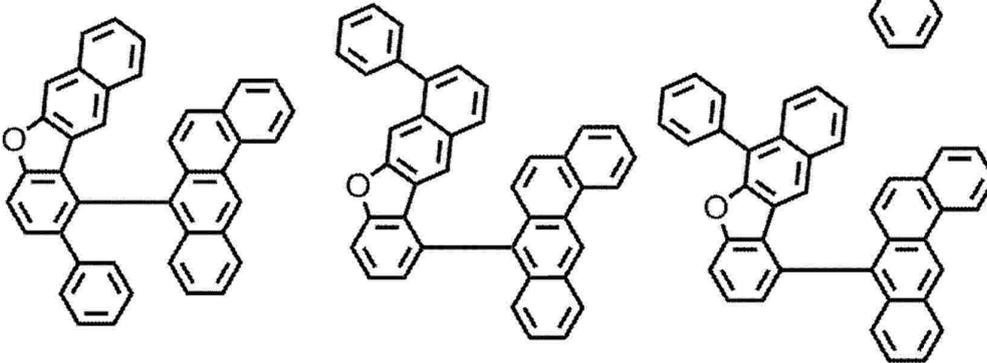
【化 3 0】



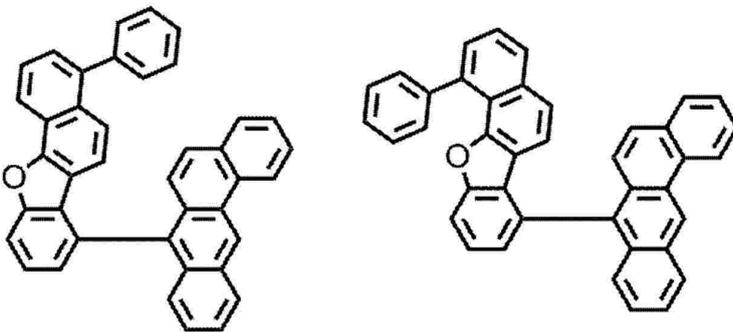
10



20



30

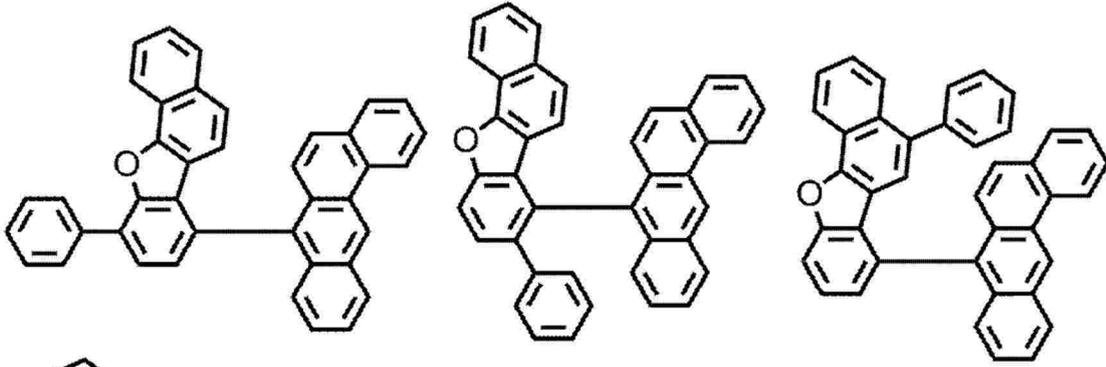


40

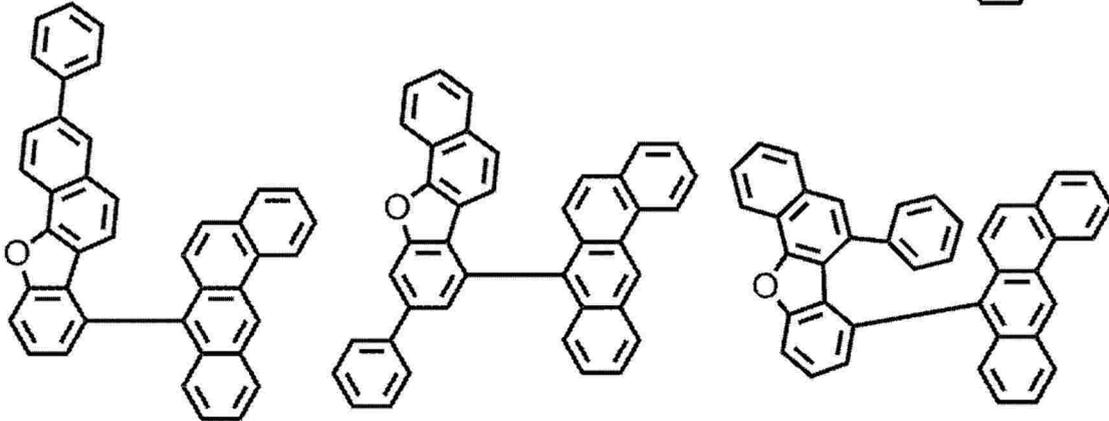
【 0 1 7 3】

50

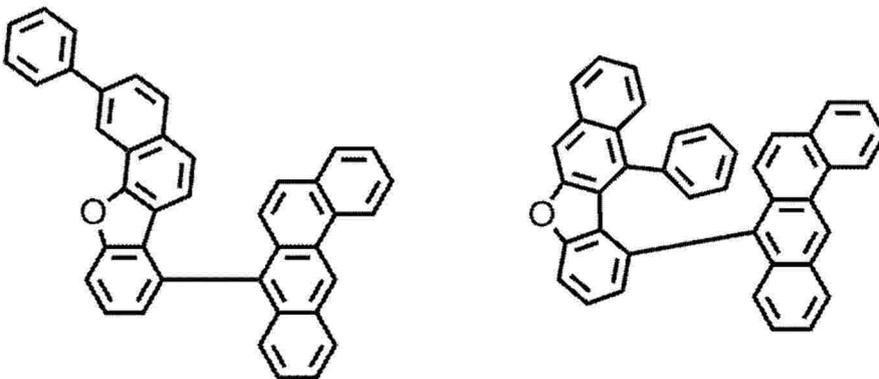
【化 3 1】



10



20



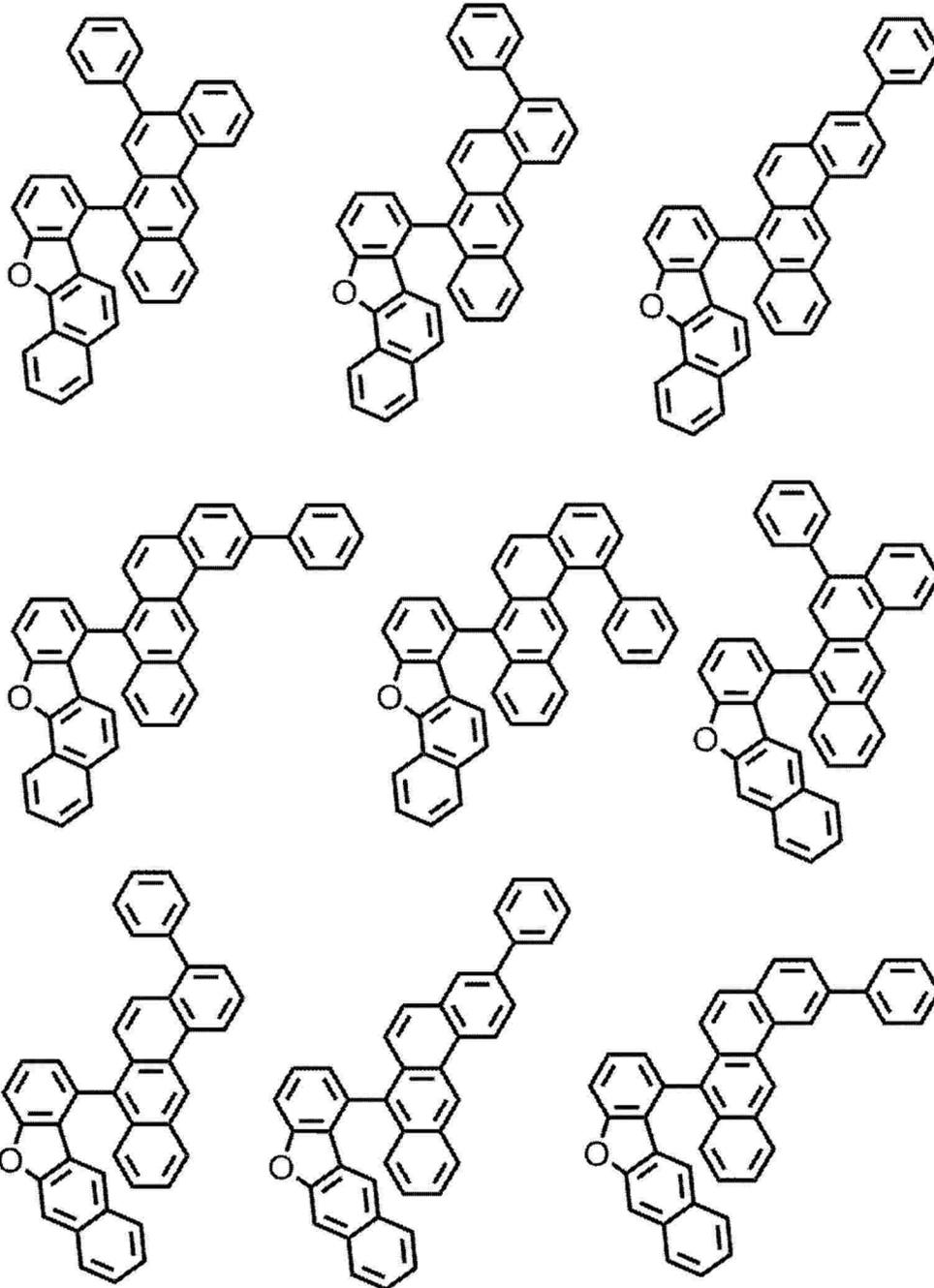
30

【 0 1 7 4 】

40

50

【化 3 2】



10

20

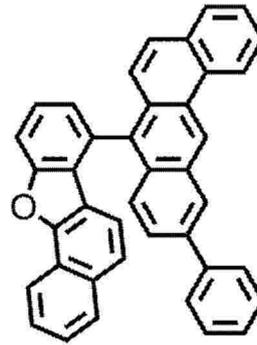
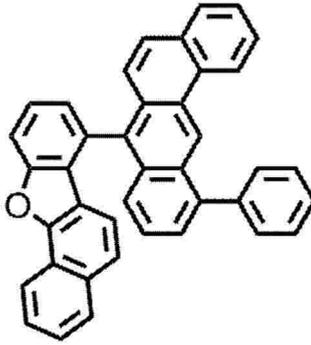
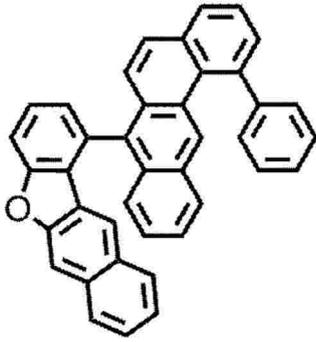
30

40

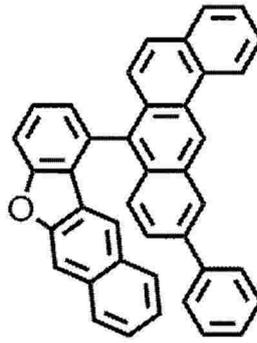
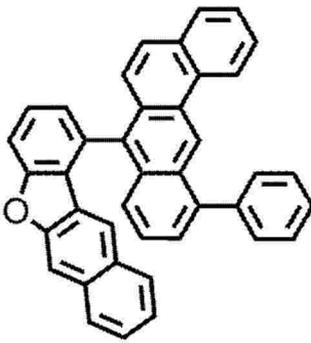
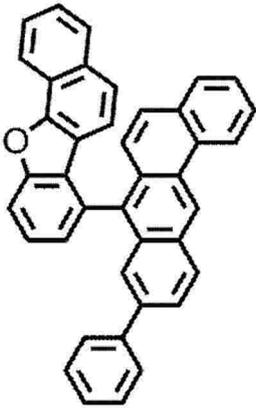
【 0 1 7 5 】

50

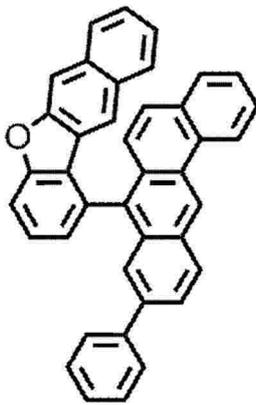
【化 3 3】



10



20



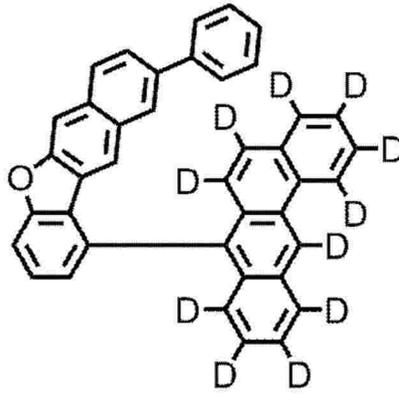
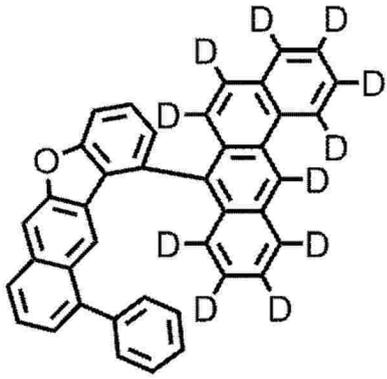
30

【 0 1 7 6】

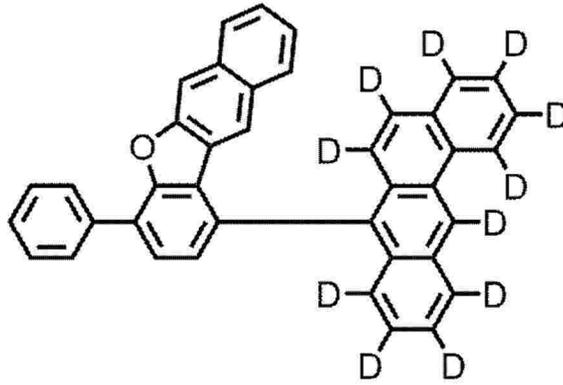
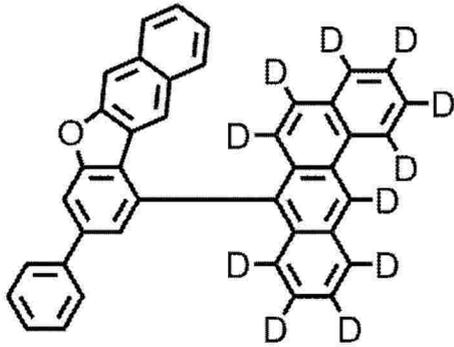
40

50

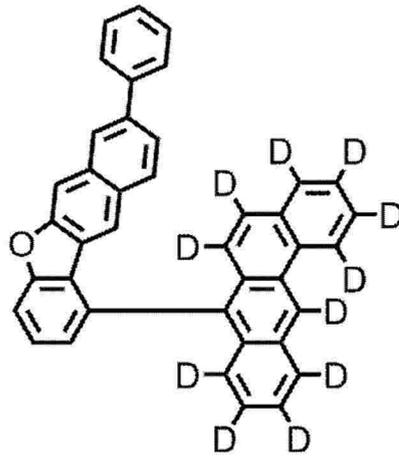
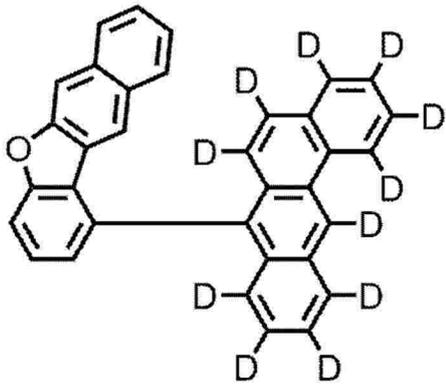
【化 3 4】



10



20



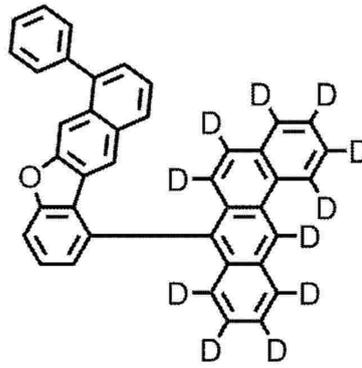
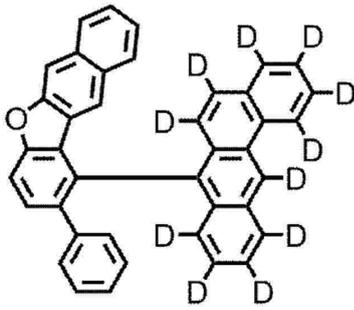
30

40

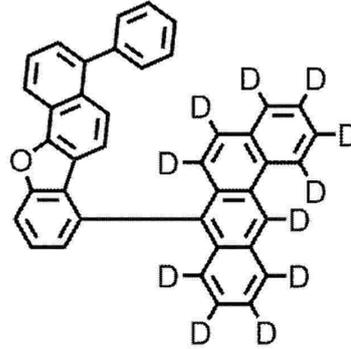
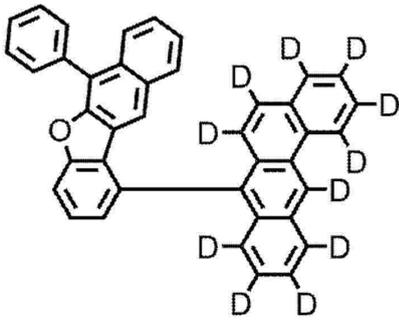
【 0 1 7 7 】

50

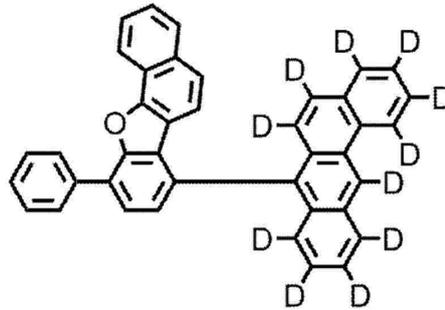
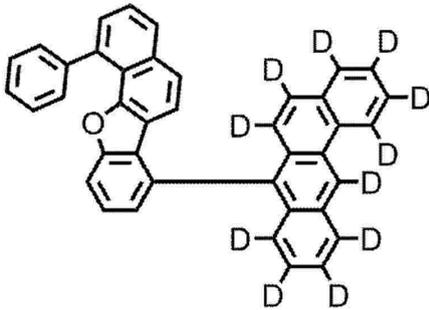
【化 3 5】



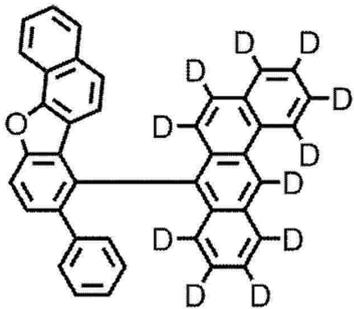
10



20



30

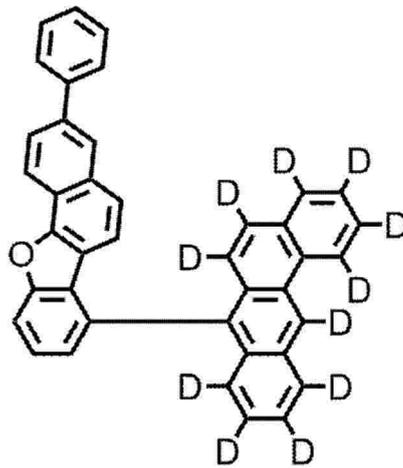
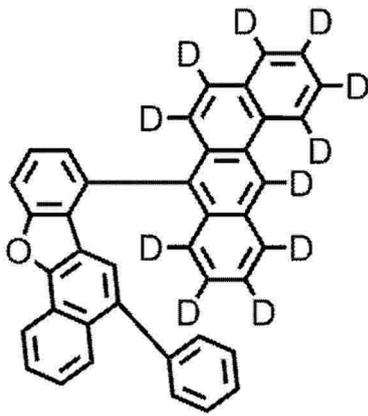


40

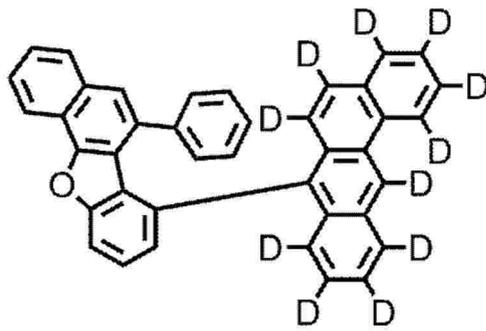
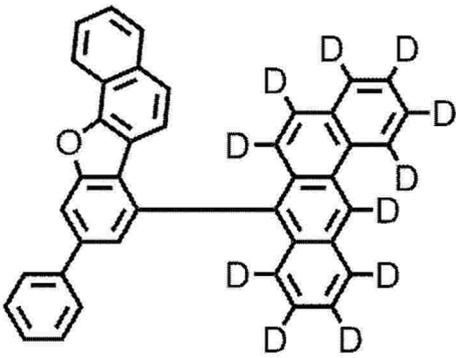
【 0 1 7 8 】

50

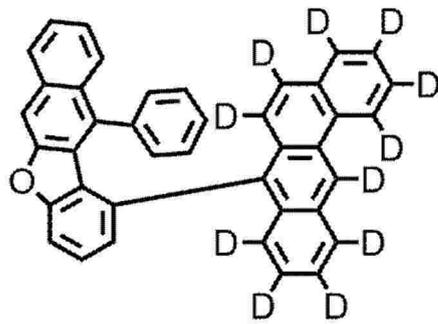
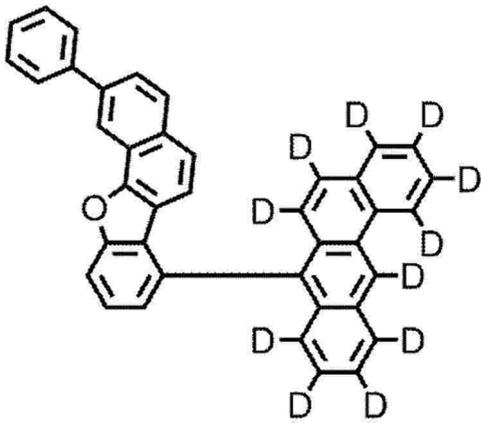
【化 3 6】



10



20



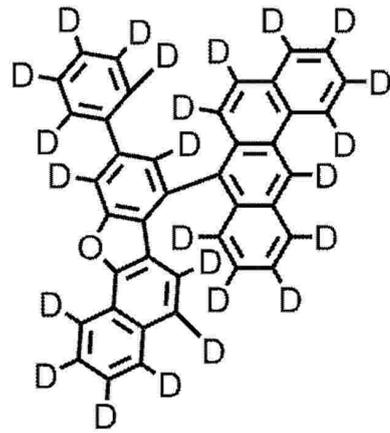
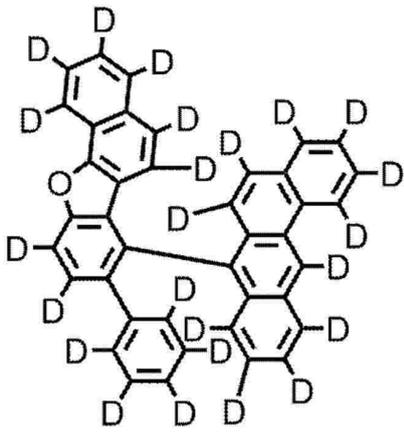
30

【 0 1 7 9】

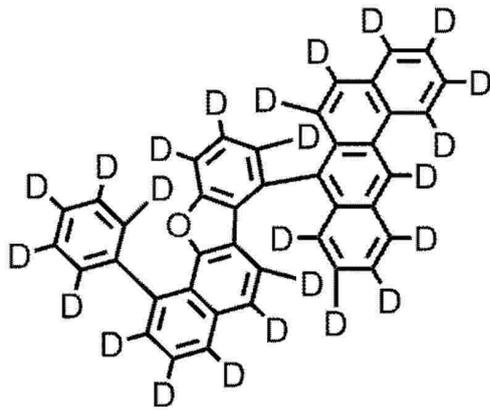
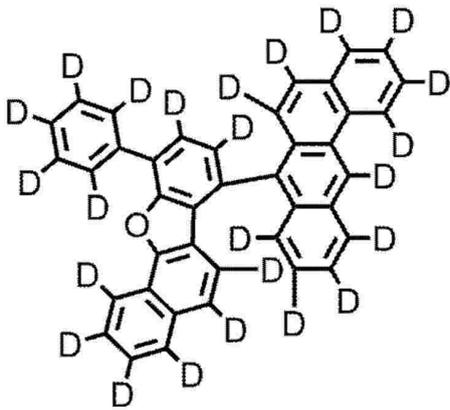
40

50

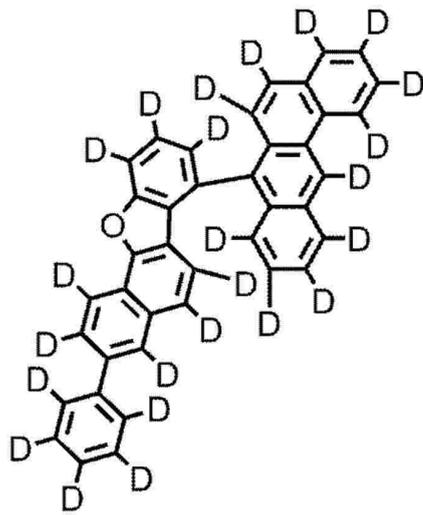
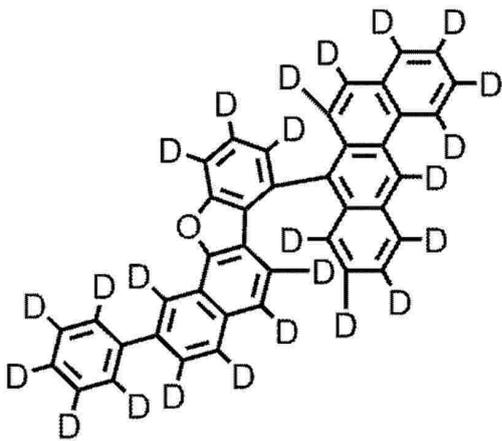
【化 3 7】



10



20



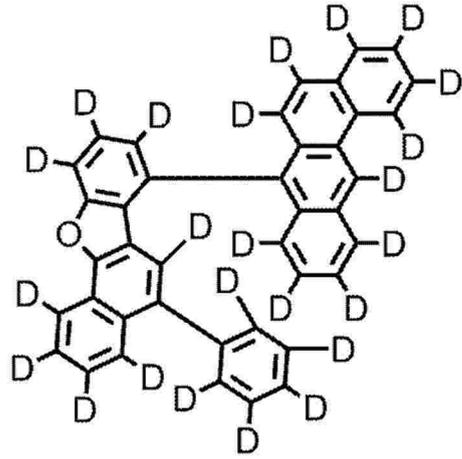
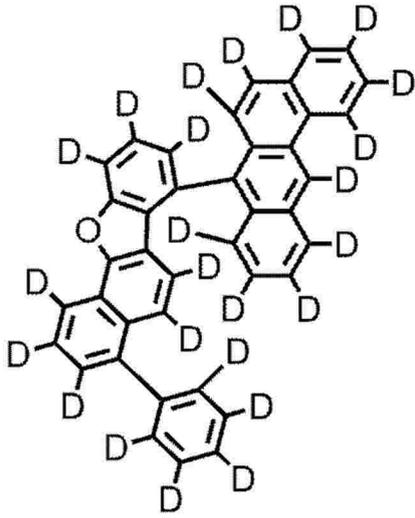
30

40

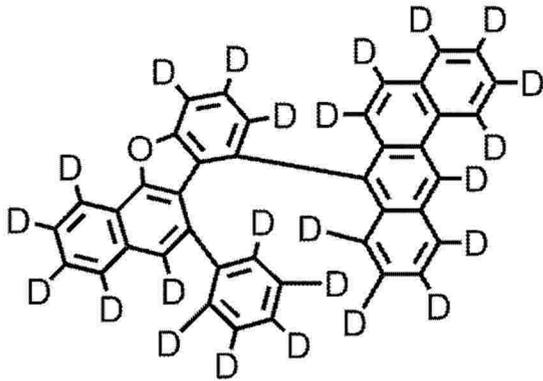
【 0 1 8 0 】

50

【化 3 8】



10



20

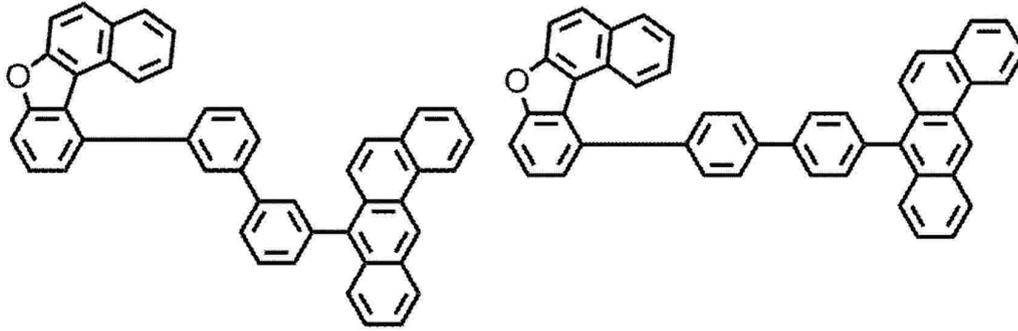
【 0 1 8 1】

30

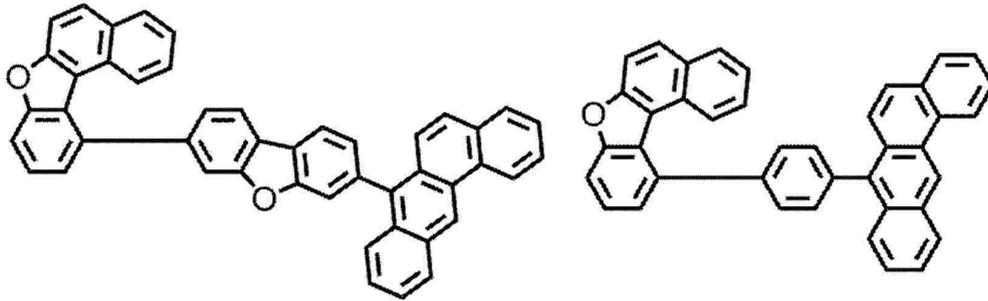
40

50

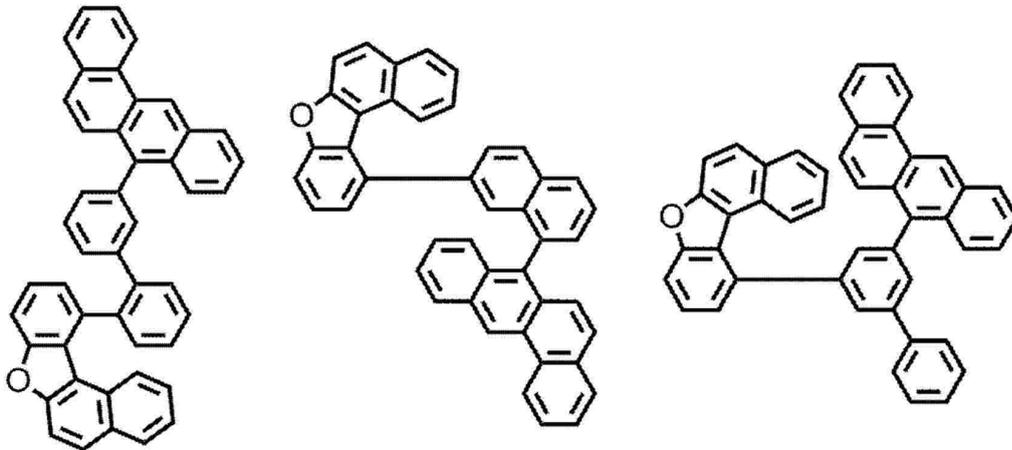
【化 3 9】



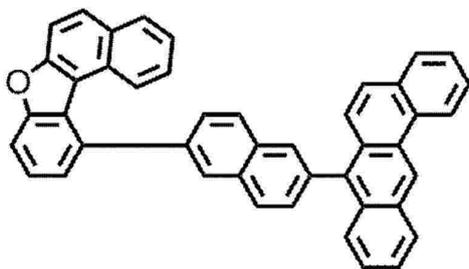
10



20



30

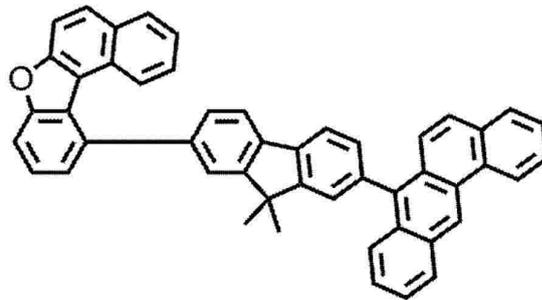
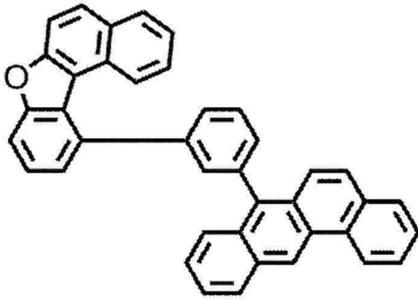


40

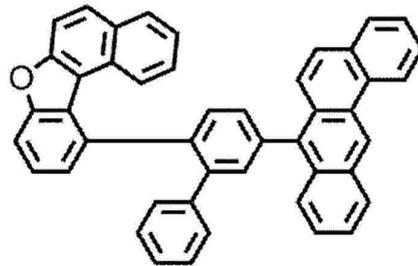
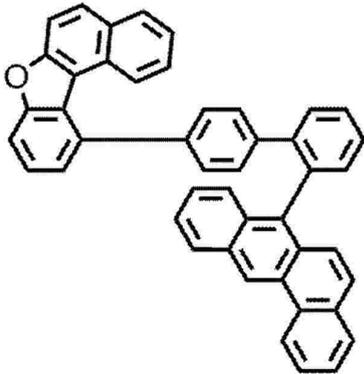
【 0 1 8 2 】

50

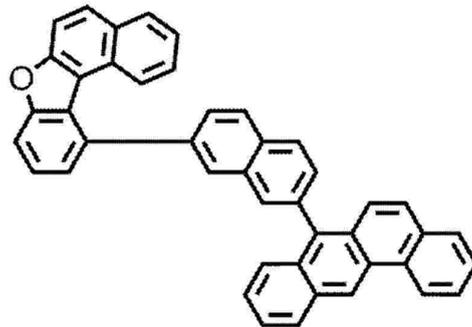
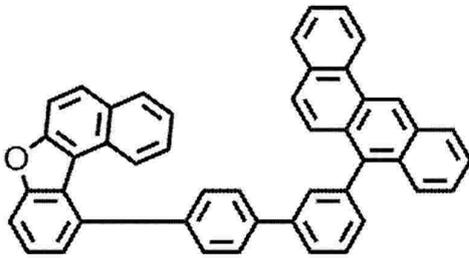
【化 4 0】



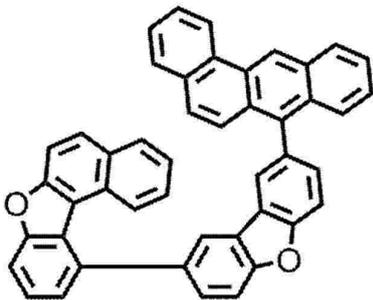
10



20



30

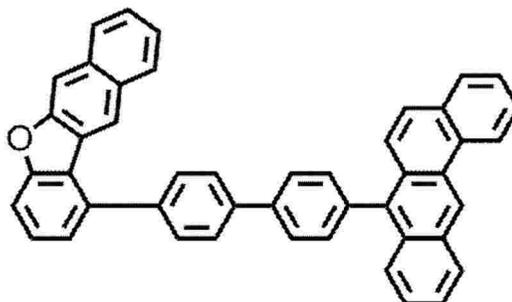
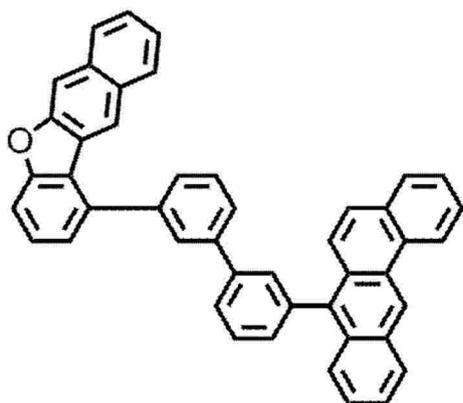


40

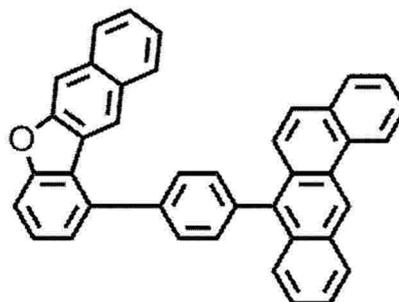
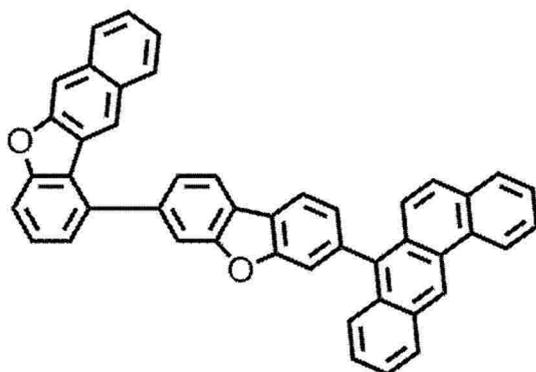
【 0 1 8 3】

50

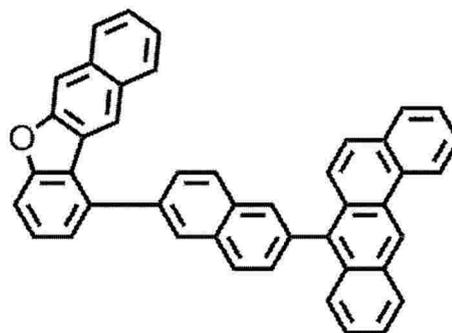
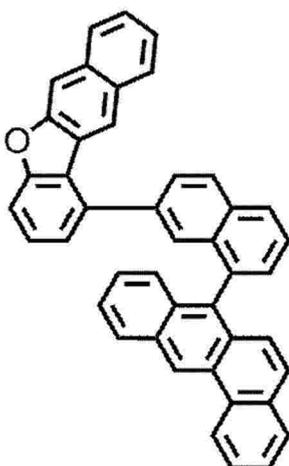
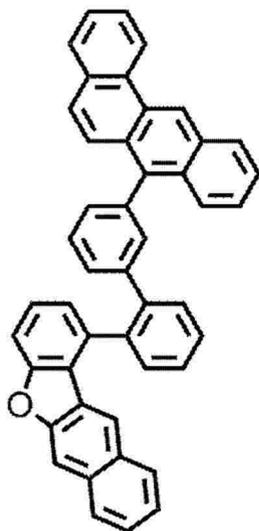
【化 4 1】



10



20



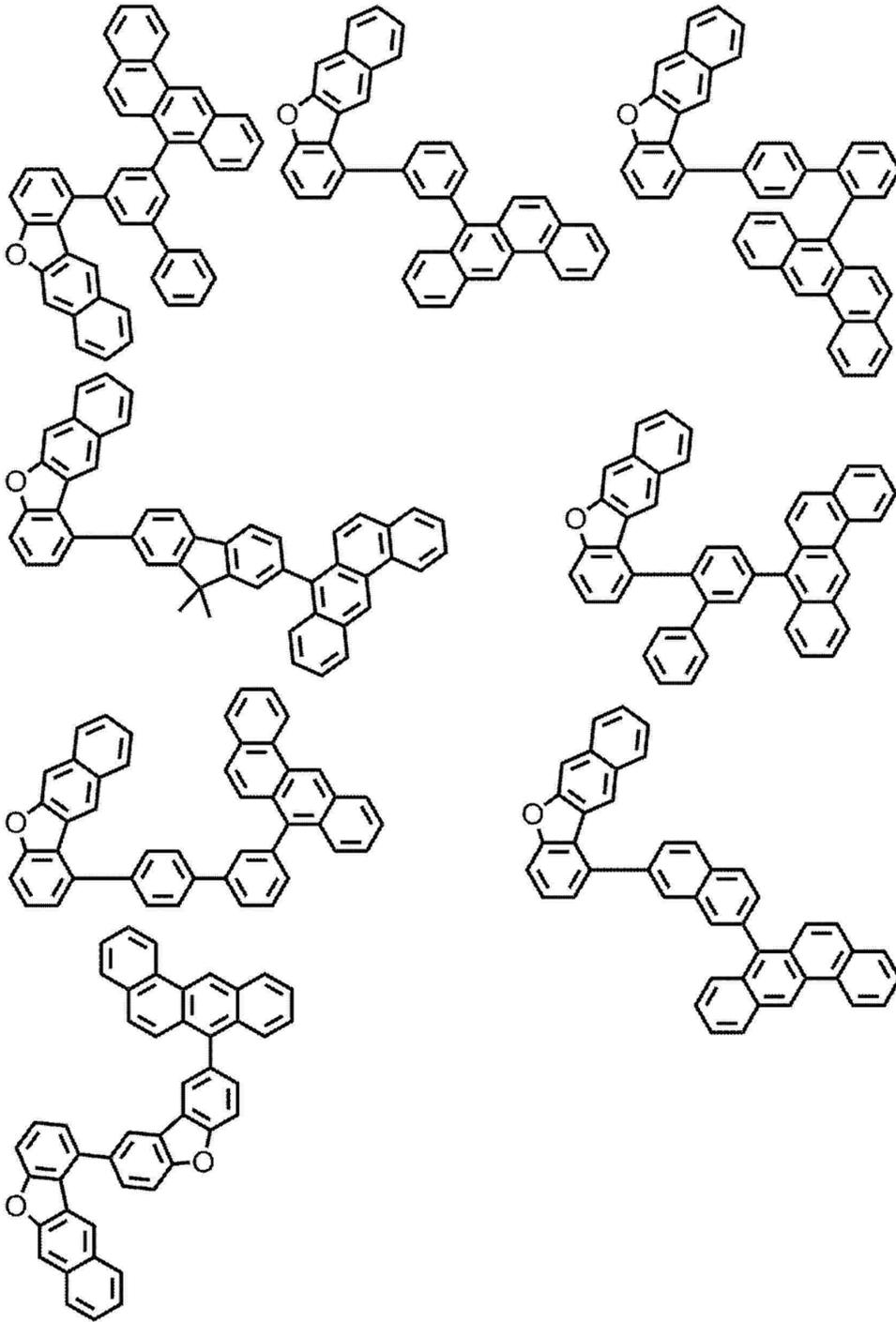
30

【 0 1 8 4 】

40

50

【化 4 2】



10

20

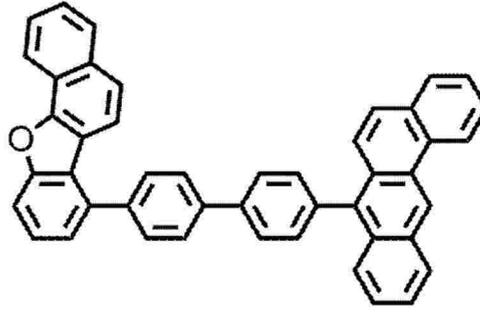
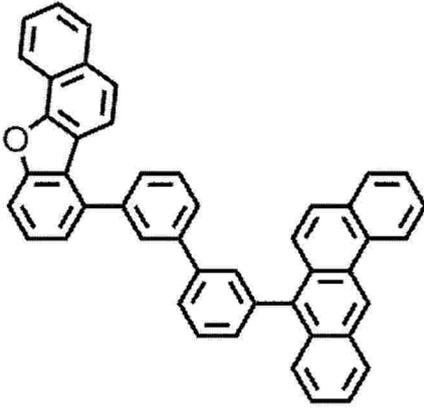
30

40

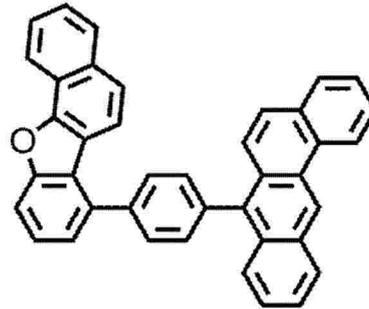
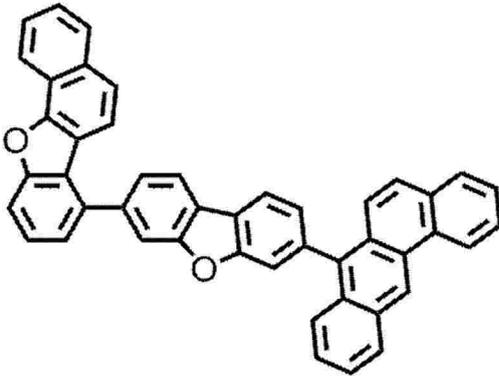
【 0 1 8 5 】

50

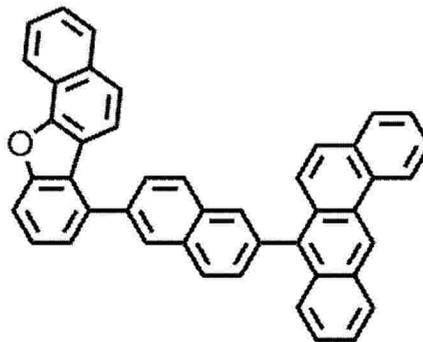
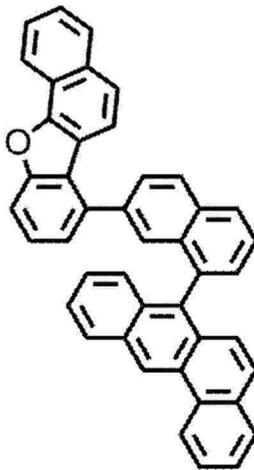
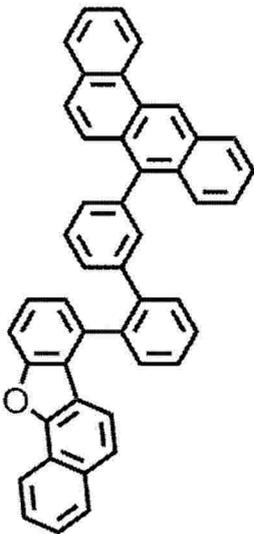
【化 4 3】



10



20



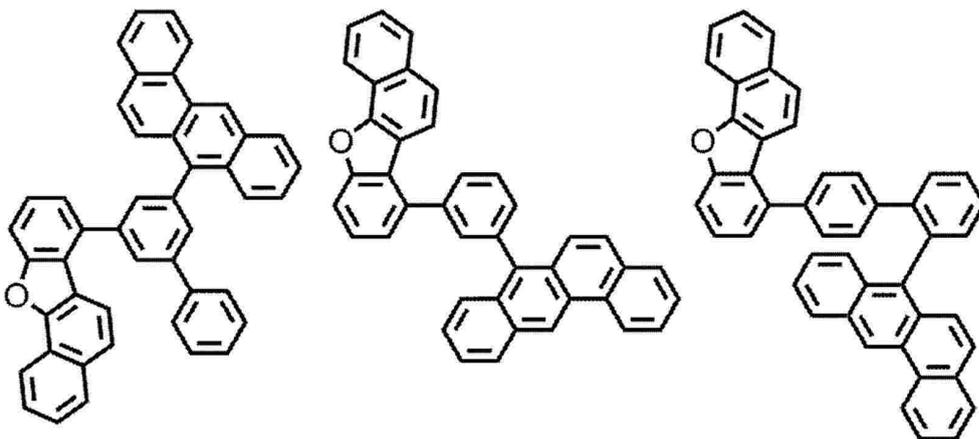
30

【 0 1 8 6 】

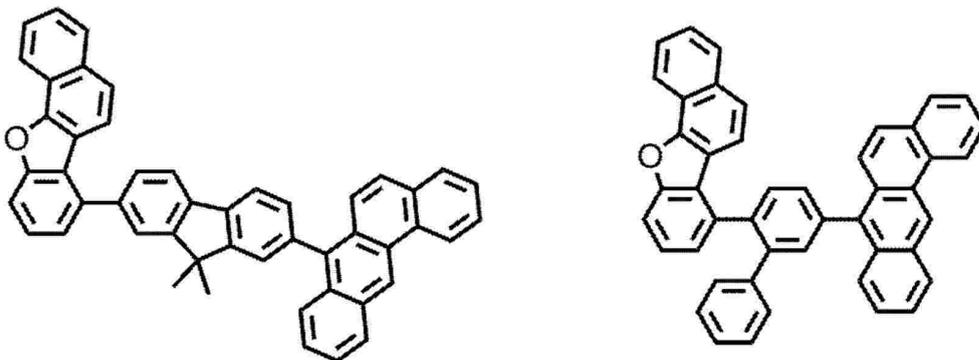
40

50

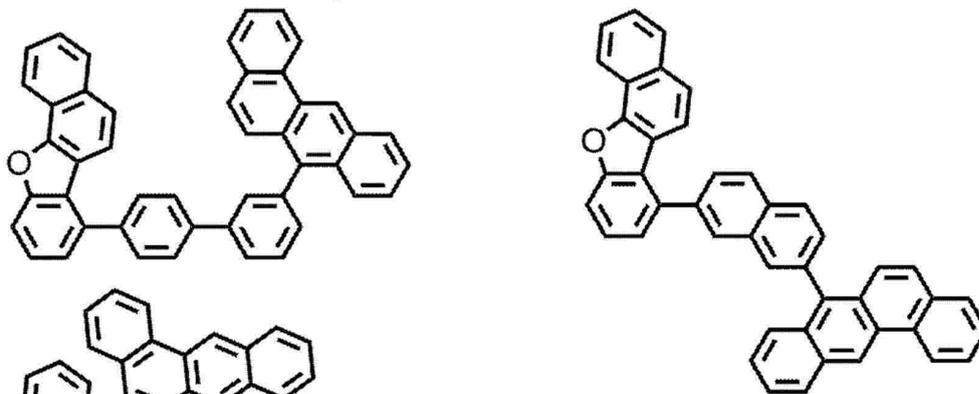
【化 4 4】



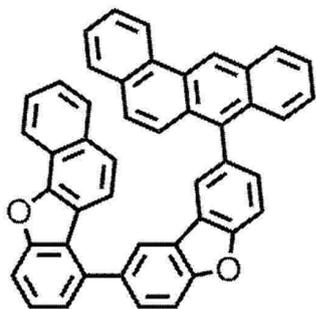
10



20



30

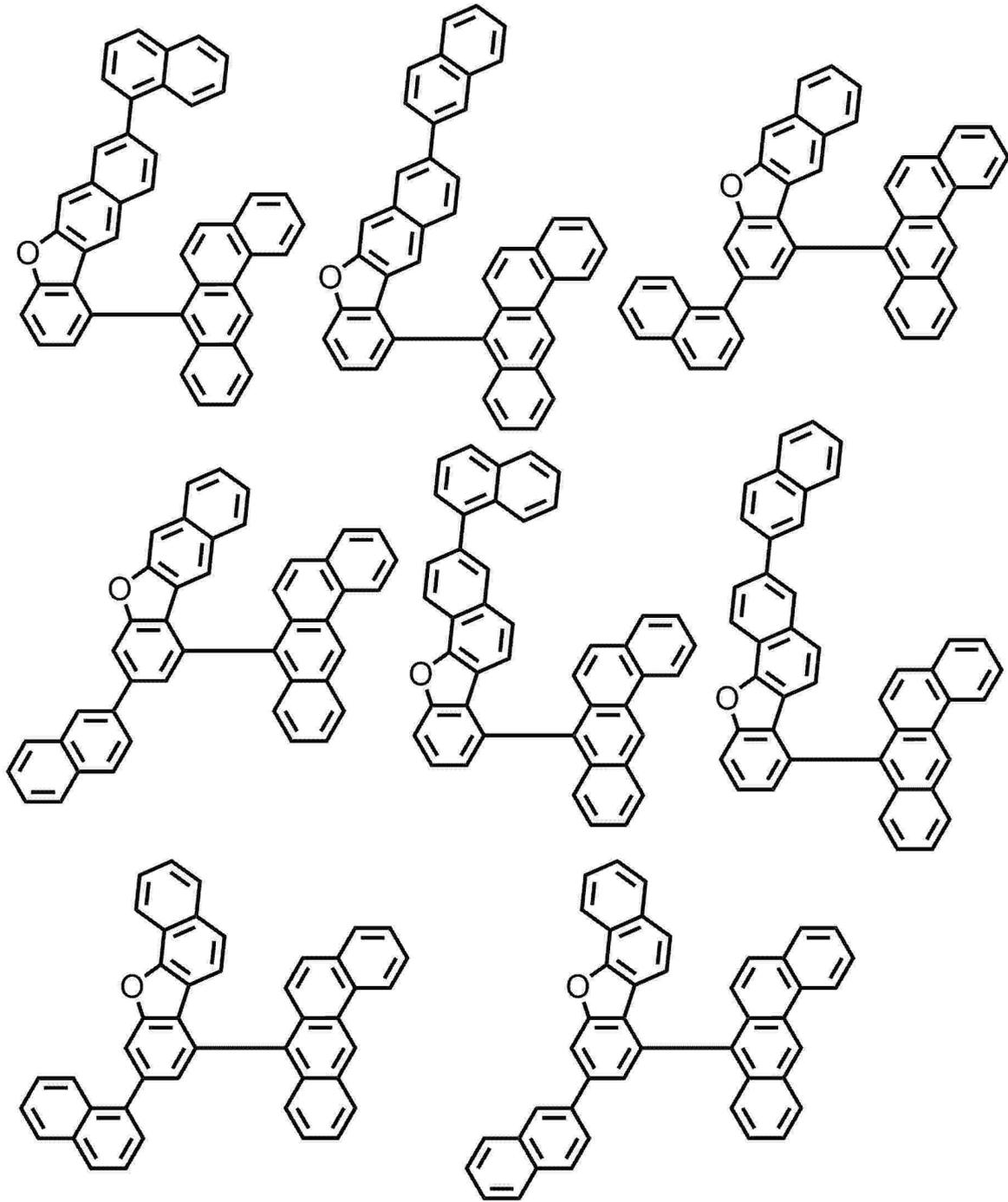


40

【 0 1 8 7 】

50

【化 4 5】



10

20

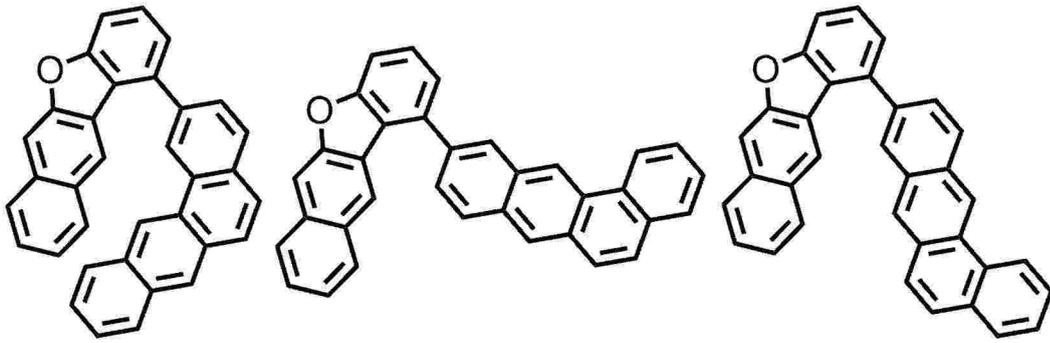
30

40

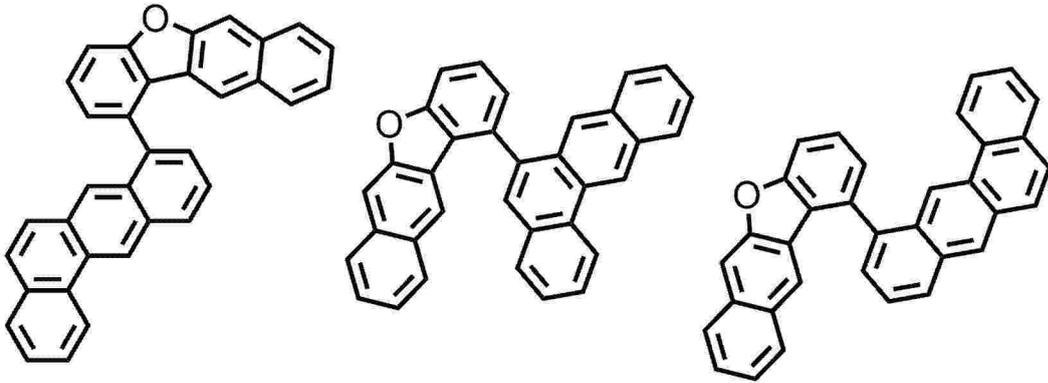
【 0 1 8 8 】

50

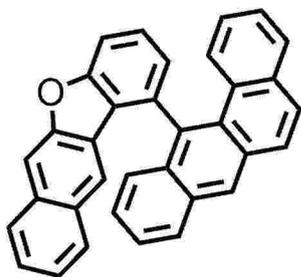
【化 4 6】



10



20



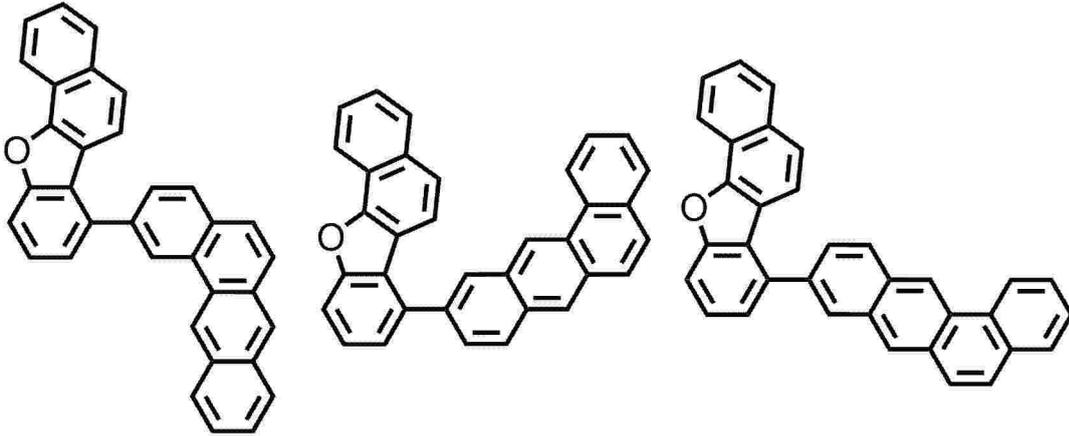
30

【 0 1 8 9】

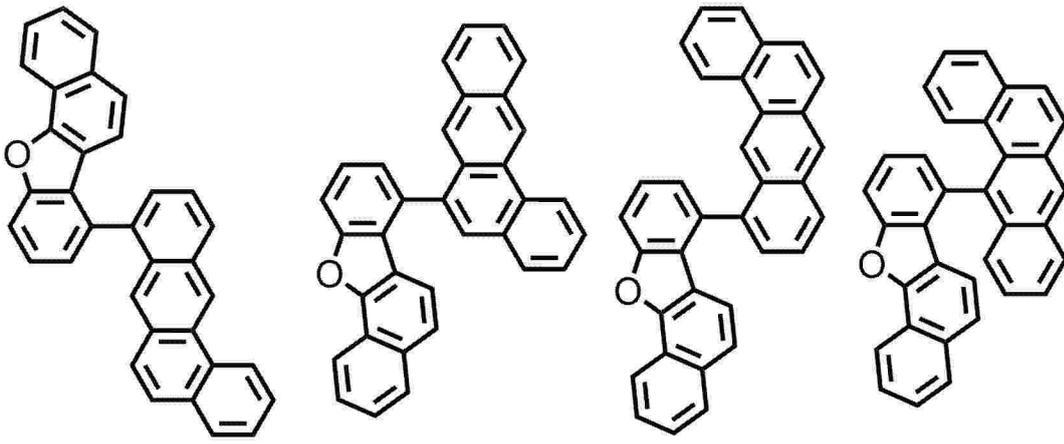
40

50

【化 4 7】



10



20

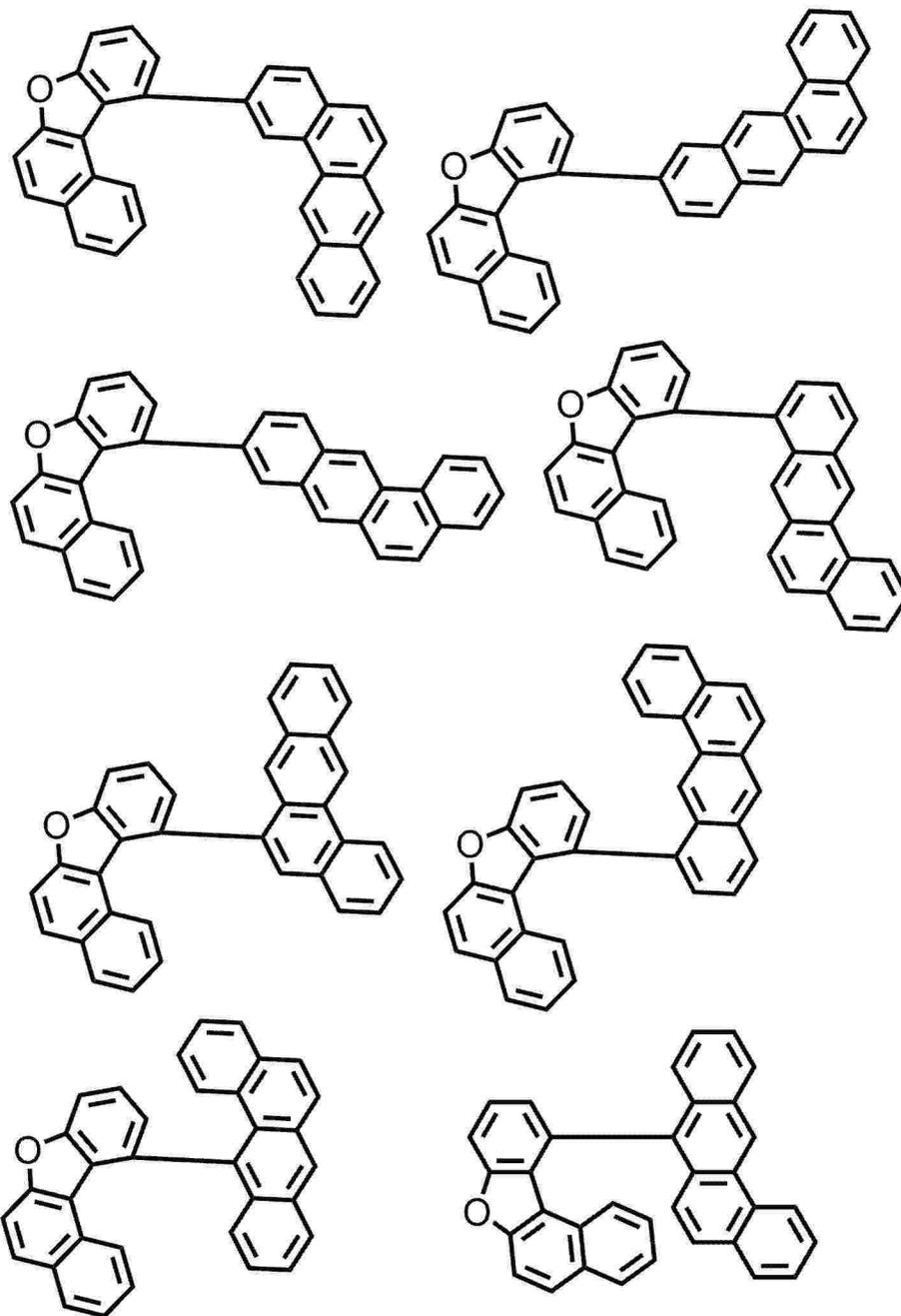
【 0 1 9 0 】

30

40

50

【化 4 8】



10

20

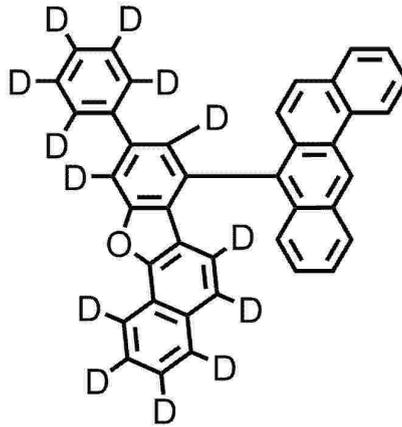
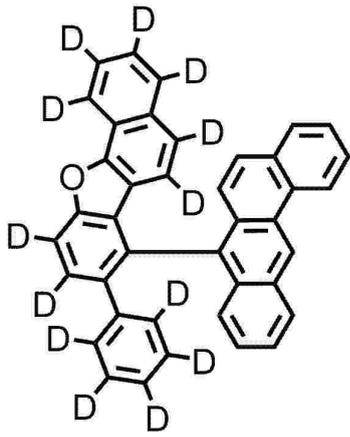
30

【 0 1 9 1】

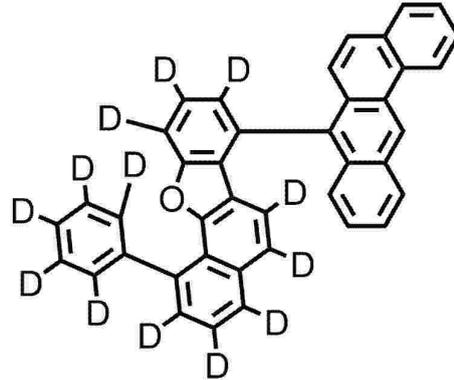
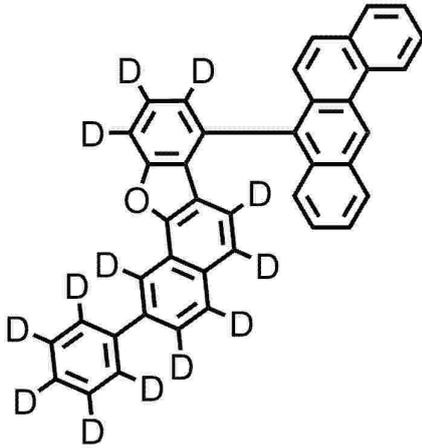
40

50

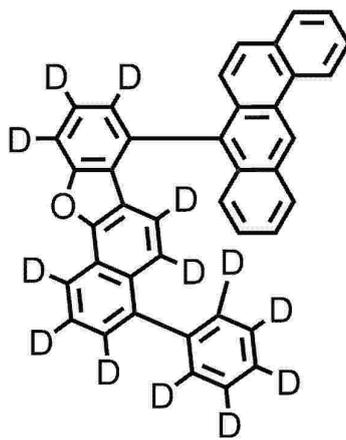
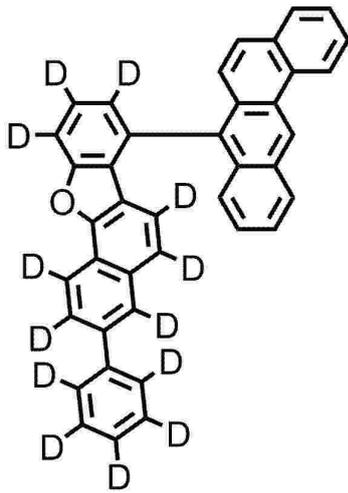
【化 4 9】



10



20



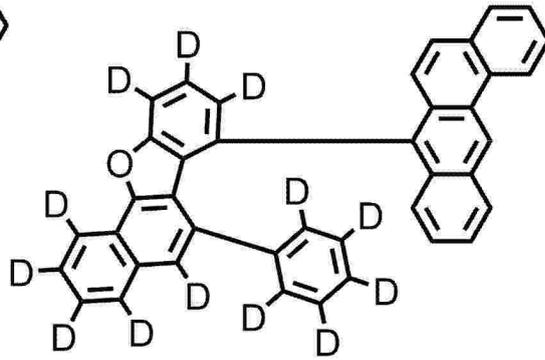
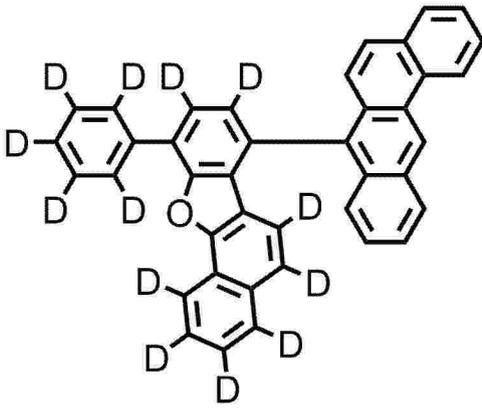
30

40

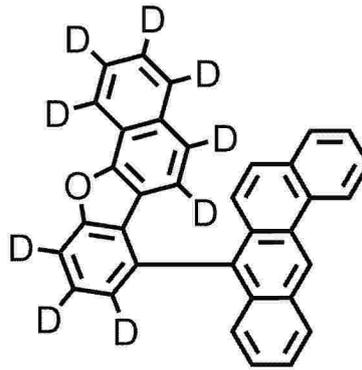
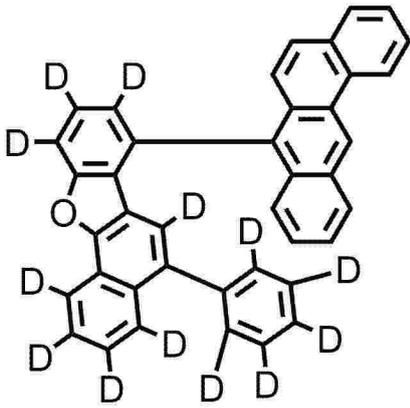
【 0 1 9 2】

50

【化 5 0】



10



20

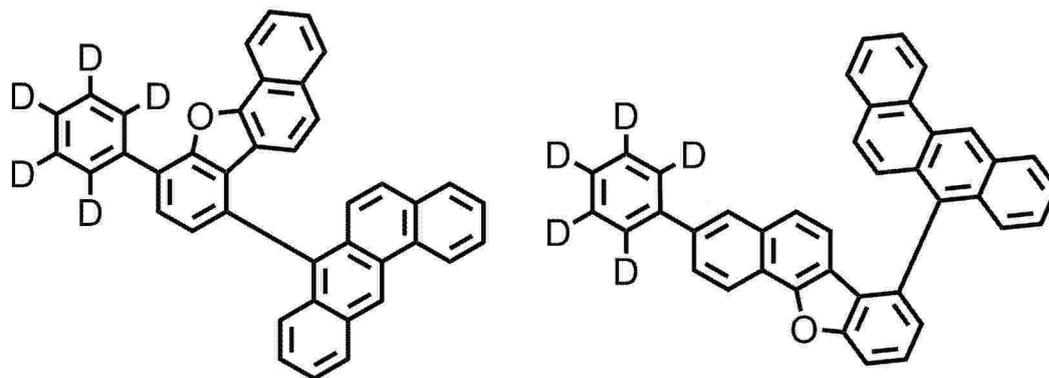
【 0 1 9 3】

30

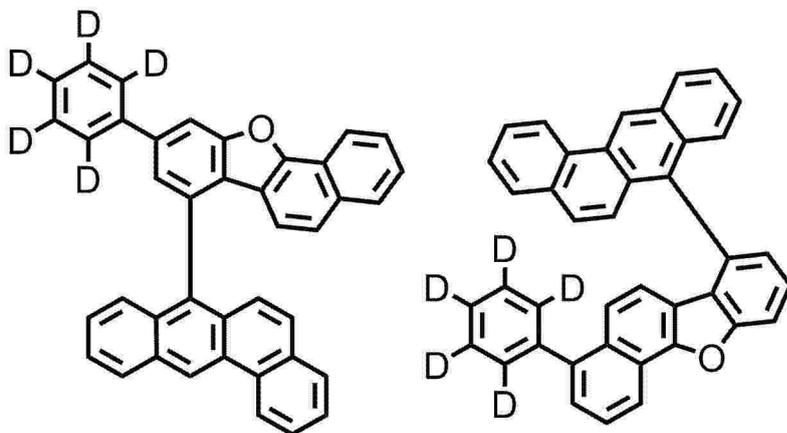
40

50

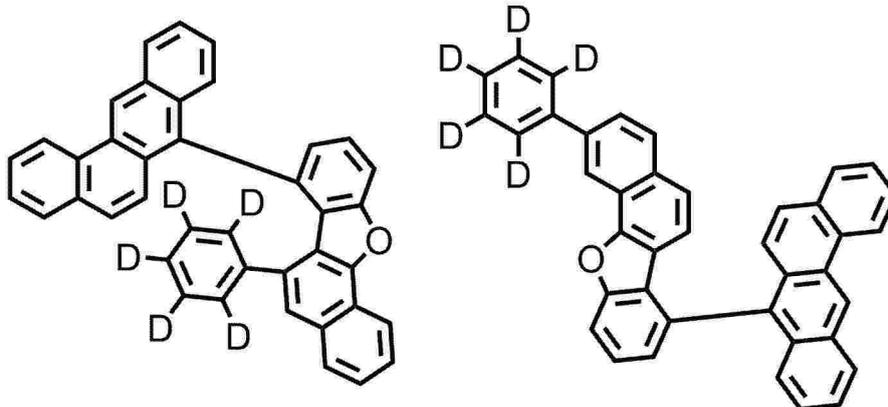
【化 5 1】



10



20



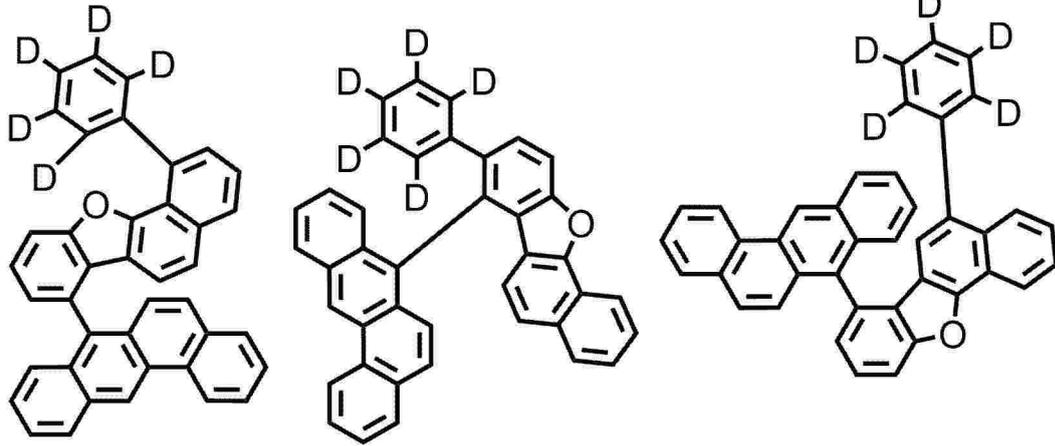
30

【 0 1 9 4 】

40

50

【化 5 2】



10

【 0 1 9 5 】

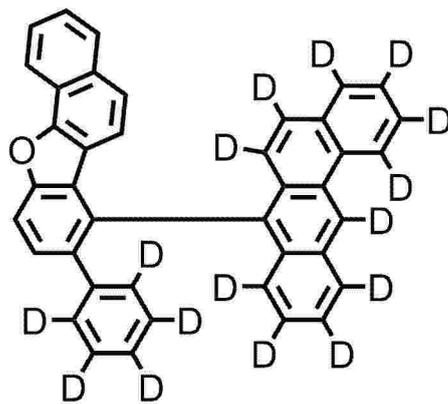
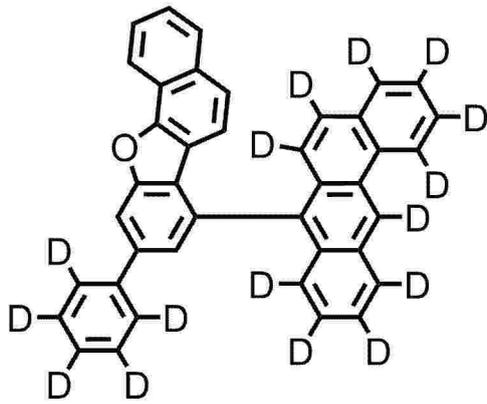
20

30

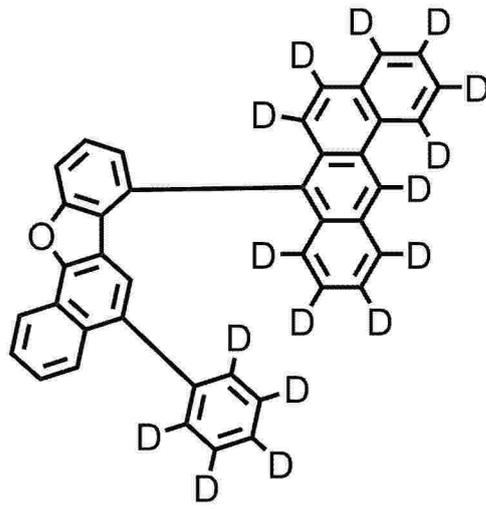
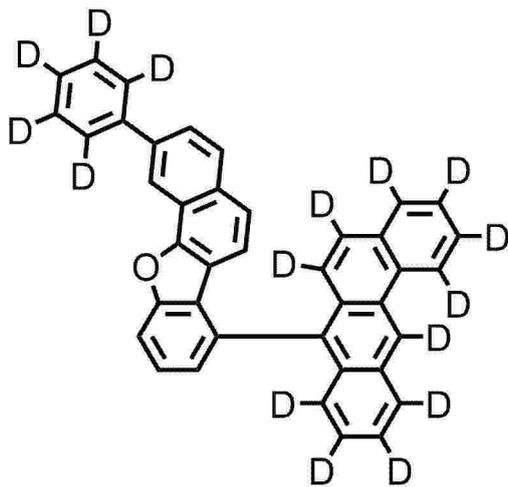
40

50

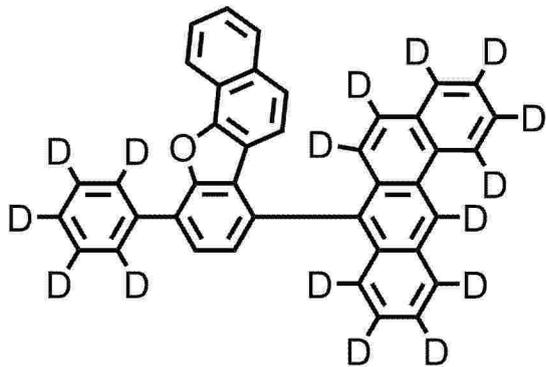
【化 5 3】



10



20



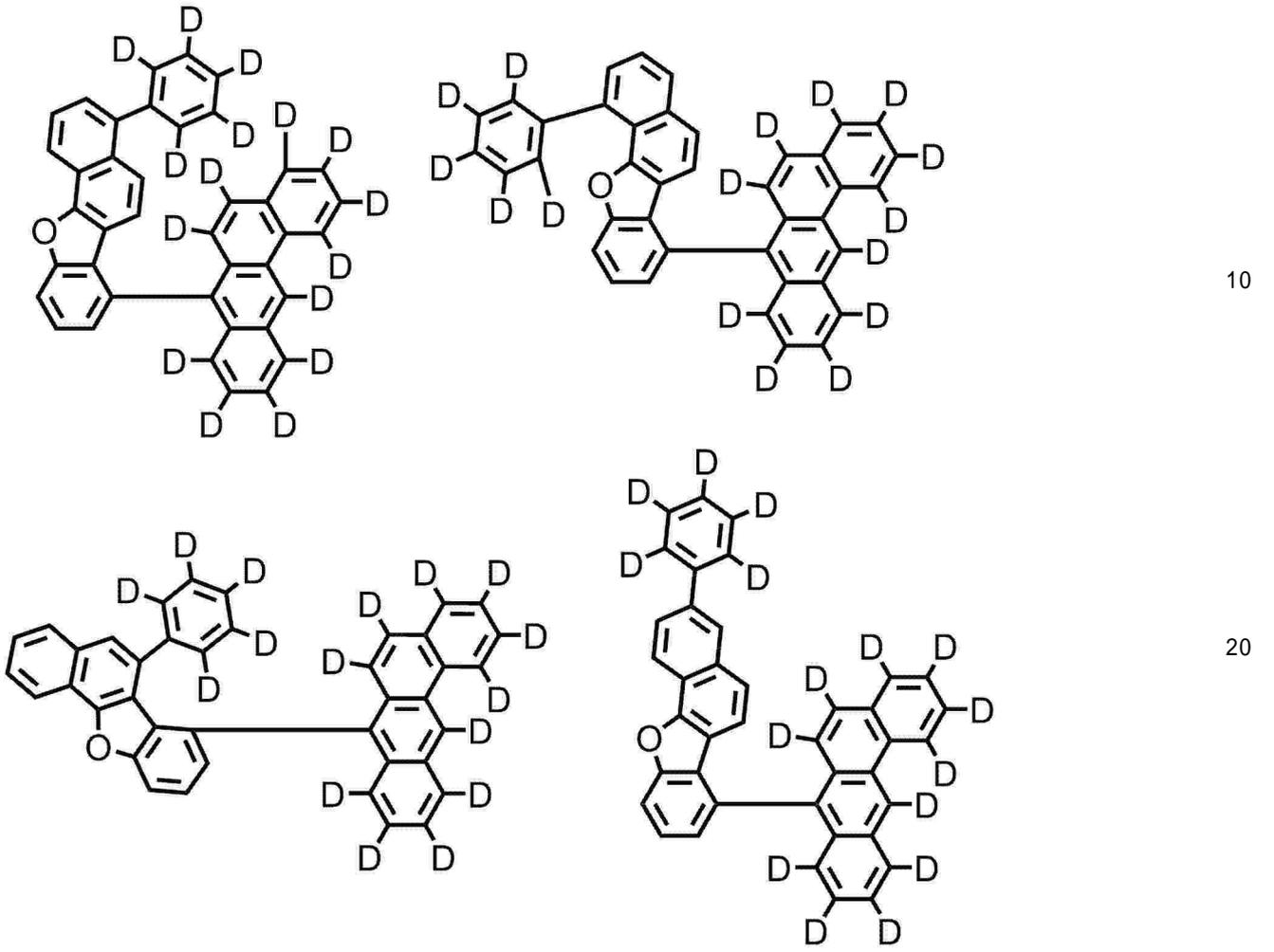
30

【 0 1 9 6】

40

50

【化 5 4】



【 0 1 9 7 】

10

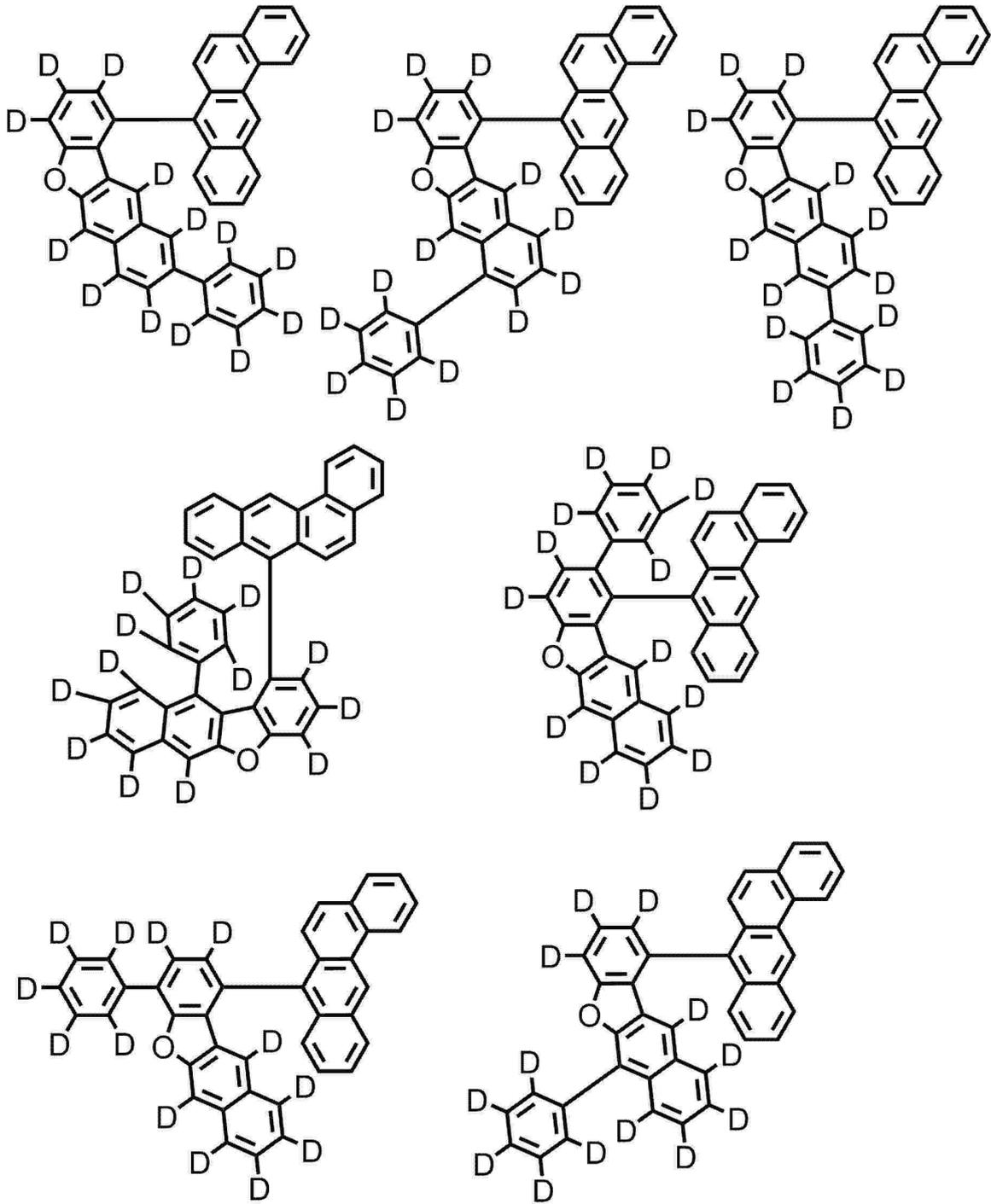
20

30

40

50

【化 5 5】



10

20

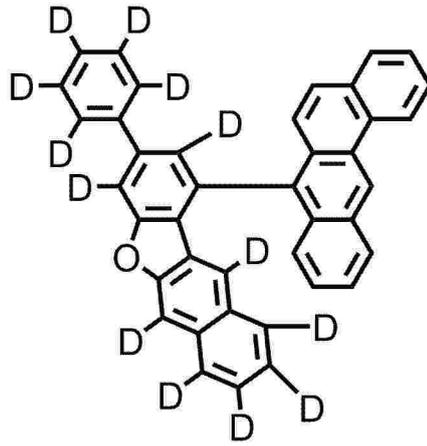
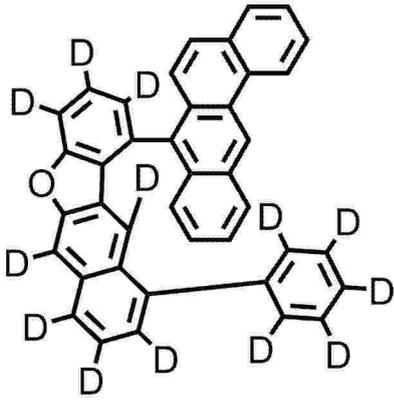
30

40

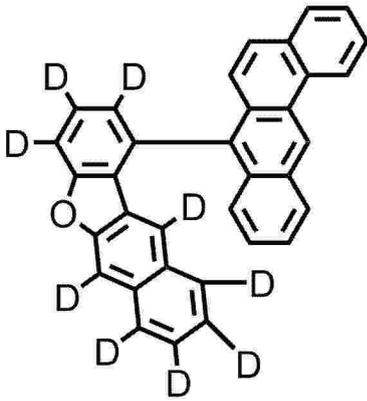
【 0 1 9 8 】

50

【化 5 6】



10



20

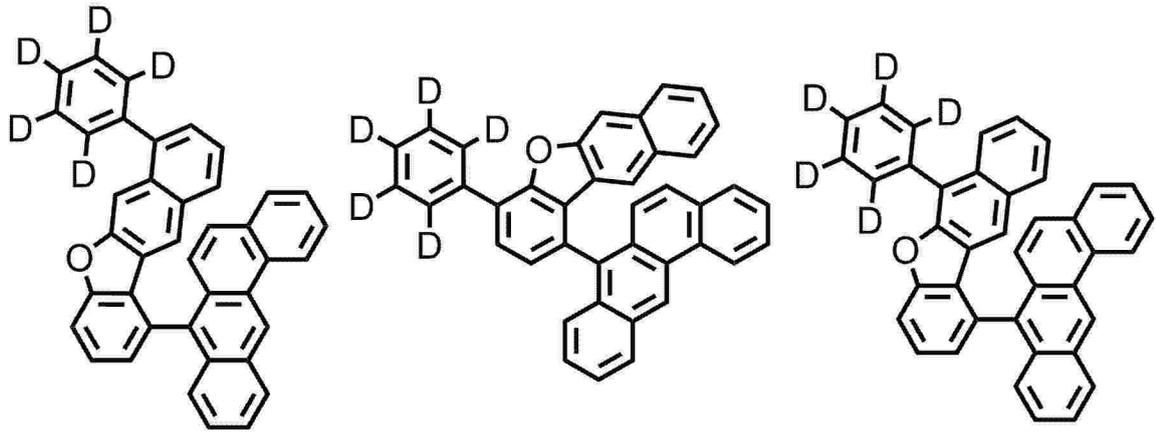
【 0 1 9 9 】

30

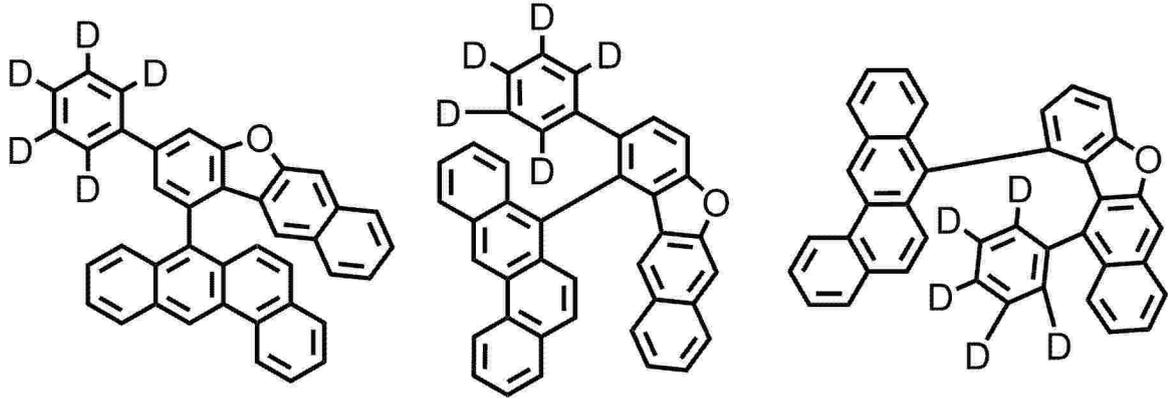
40

50

【化 5 7】



10



20

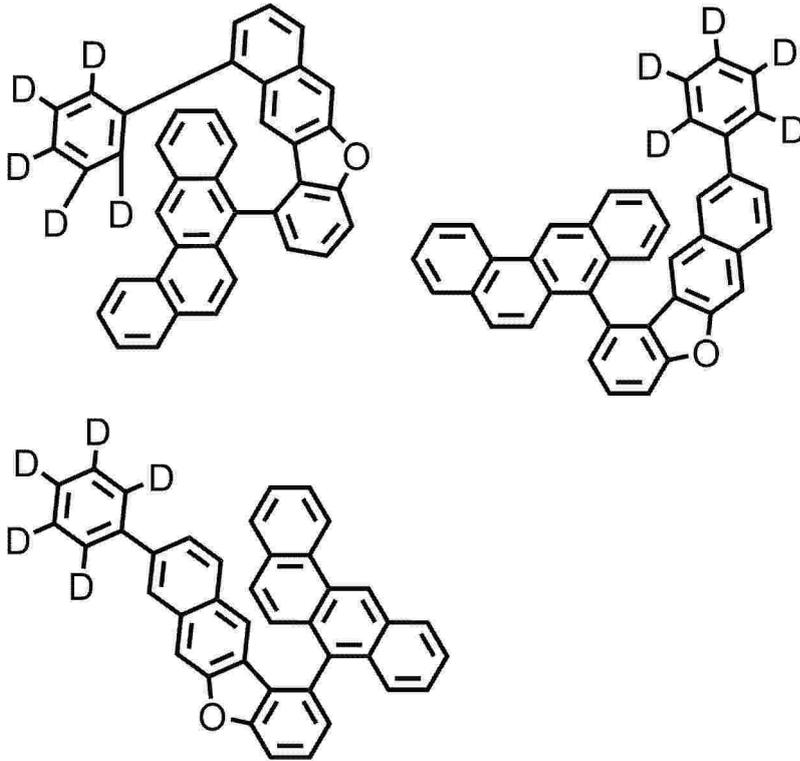
【 0 2 0 0 】

30

40

50

【化 5 8】



10

20

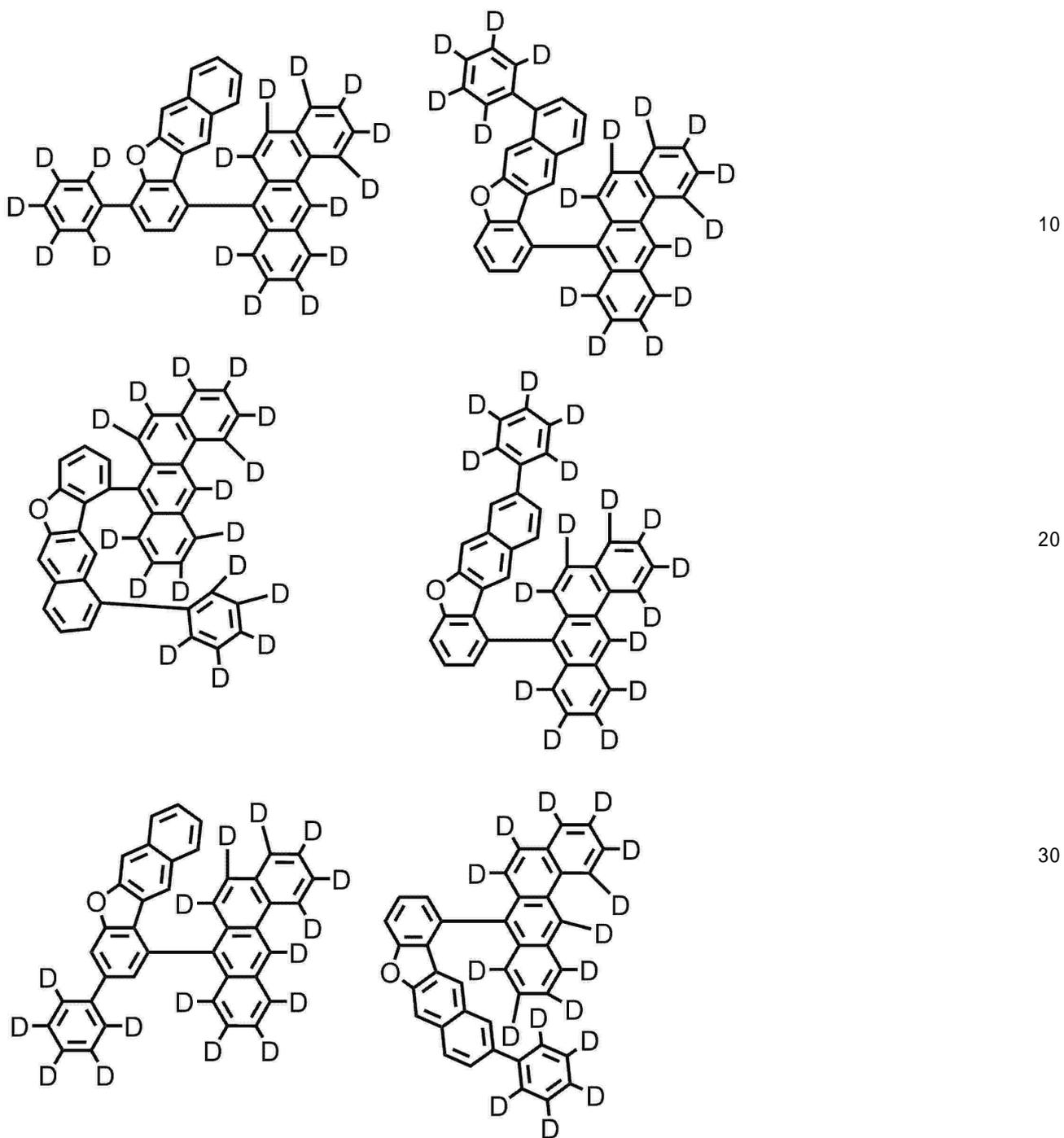
【 0 2 0 1】

30

40

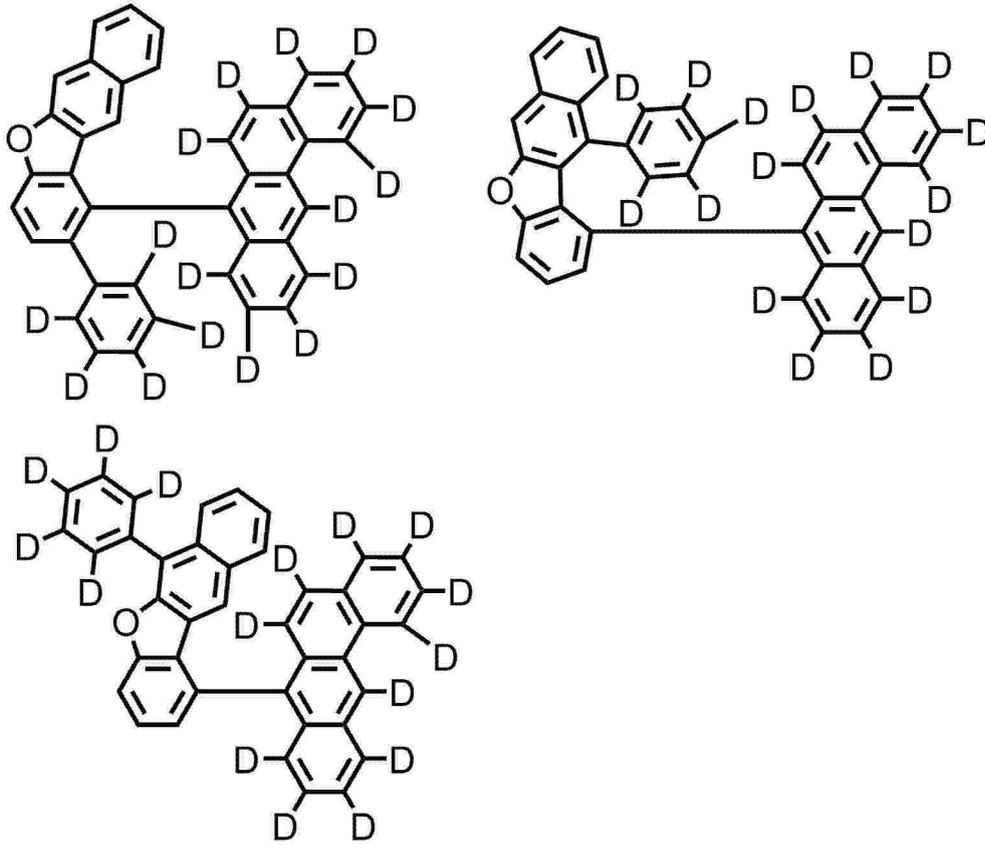
50

【化 5 9】



【 0 2 0 2】

【化 6 0】



10

20

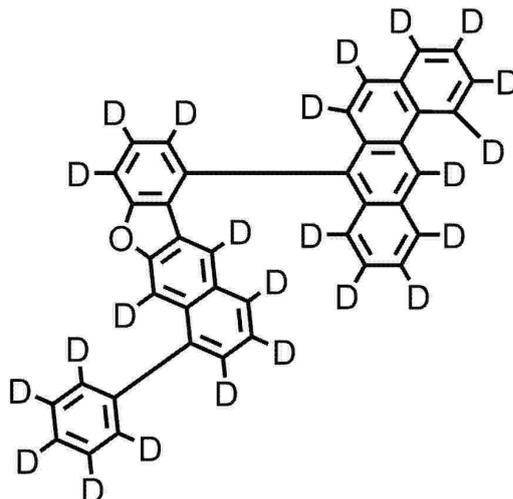
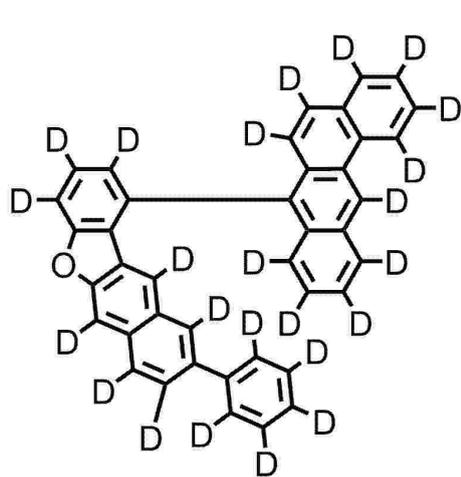
【 0 2 0 3】

30

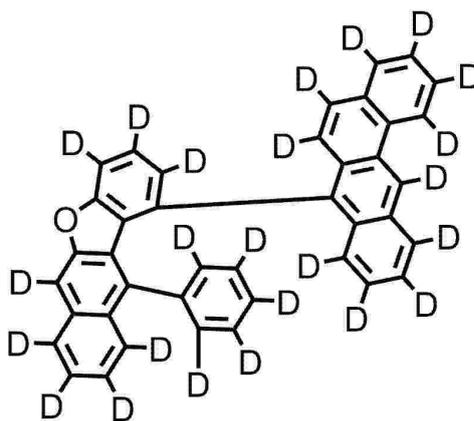
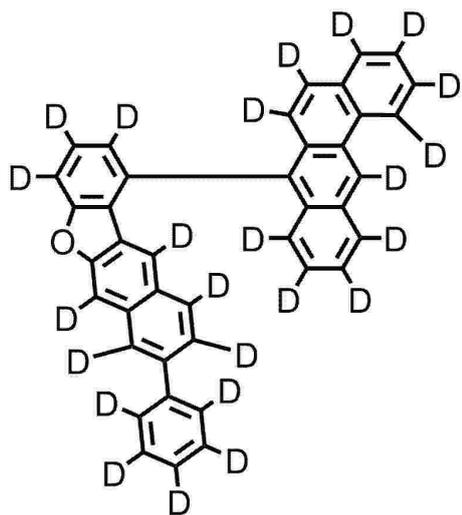
40

50

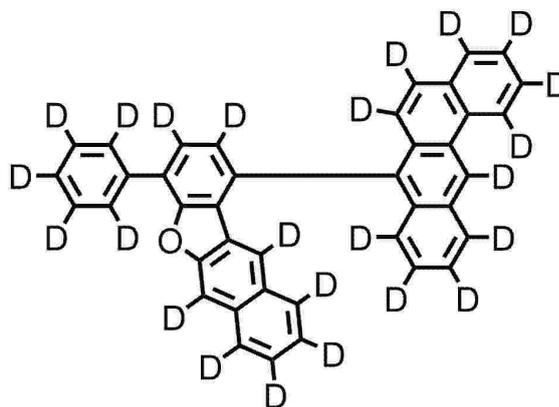
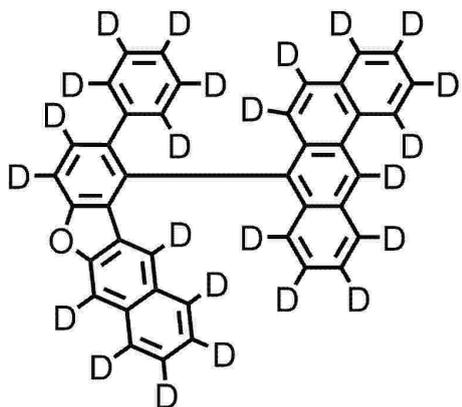
【化 6 1】



10



20



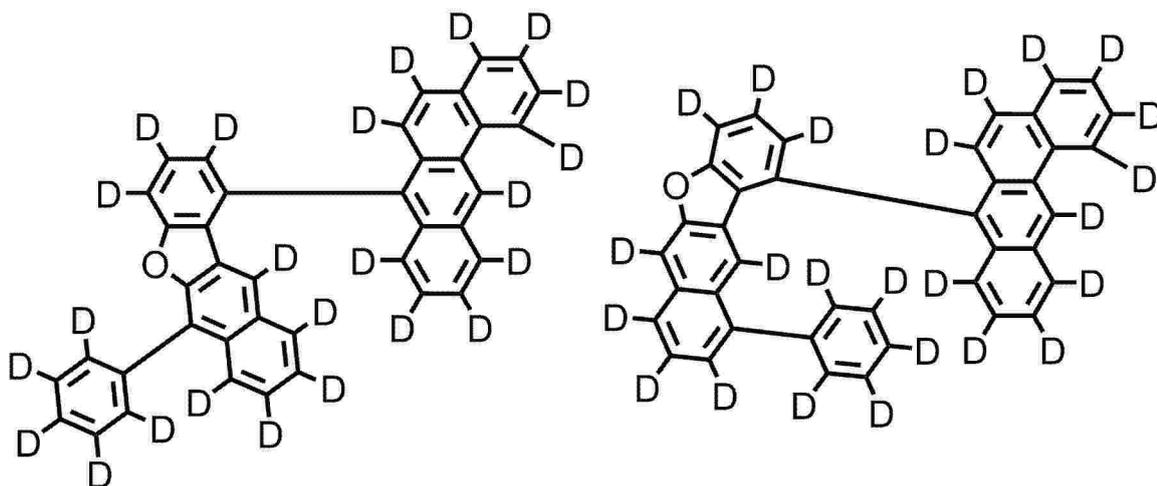
30

40

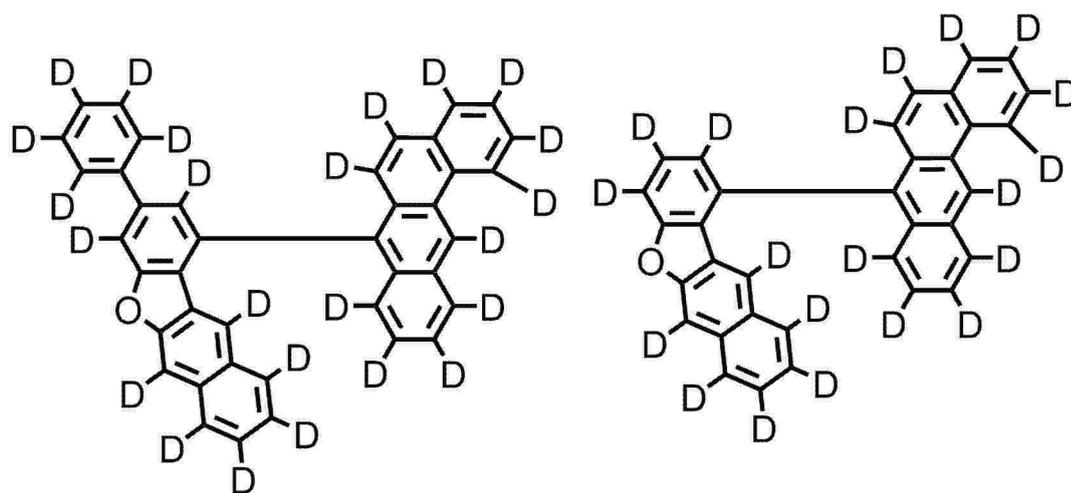
【 0 2 0 4】

50

【化 6 2】



10



20

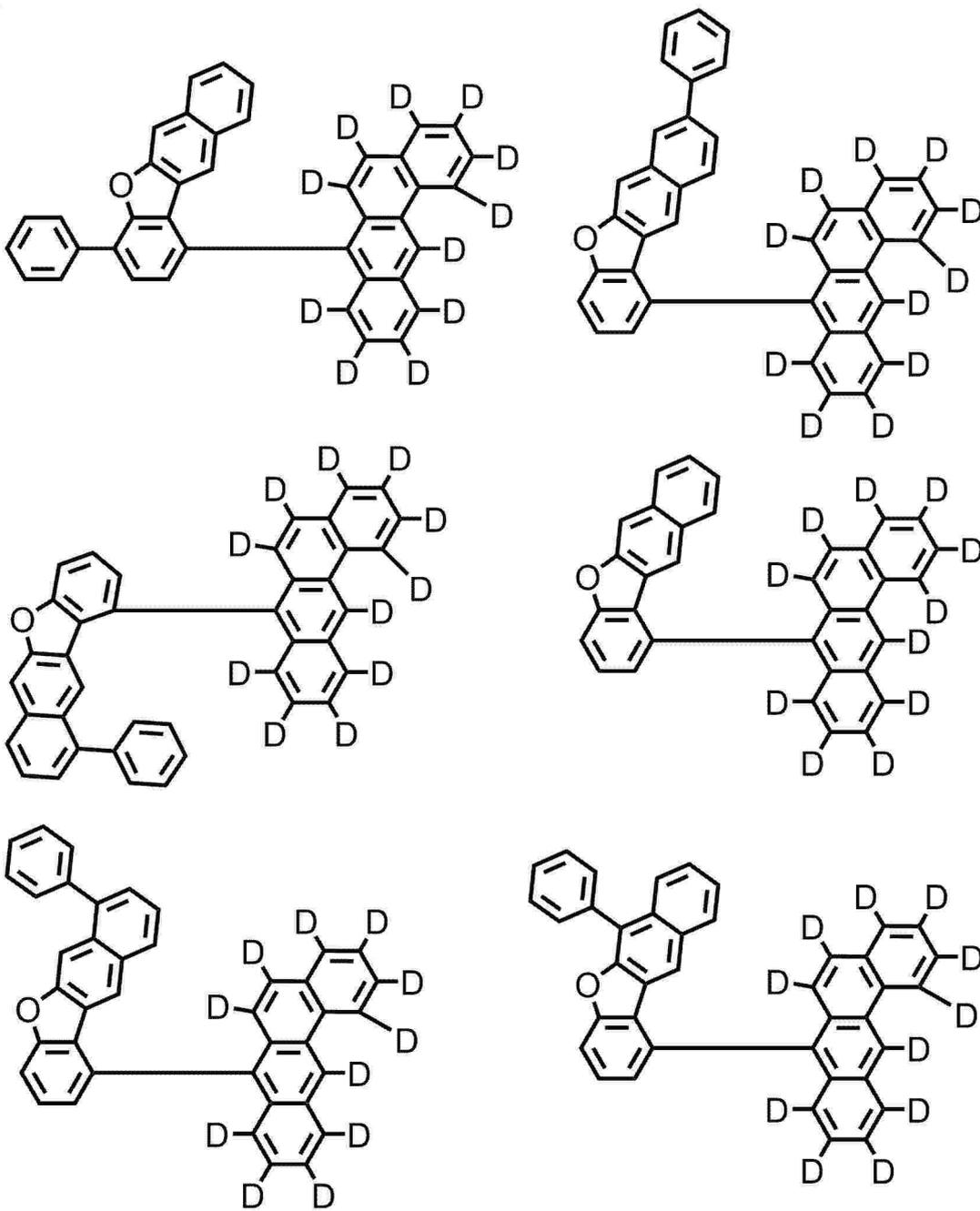
【 0 2 0 5】

30

40

50

【化 6 3】



10

20

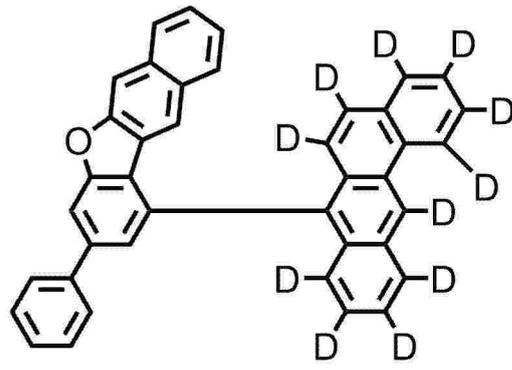
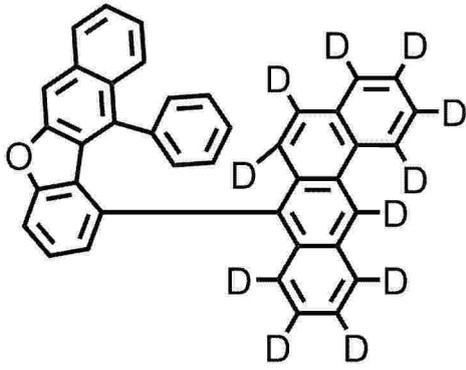
30

【 0 2 0 6】

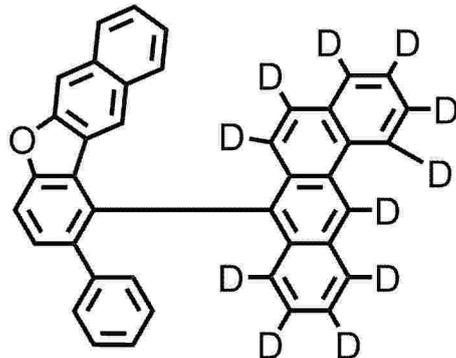
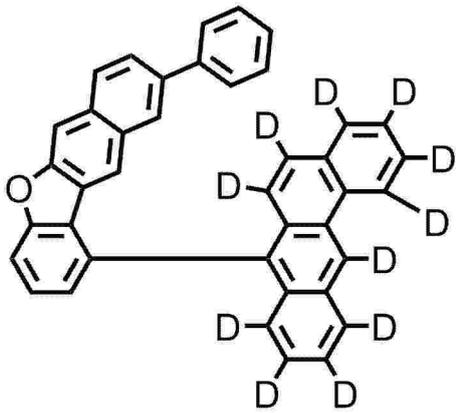
40

50

【化 6 4】



10



20

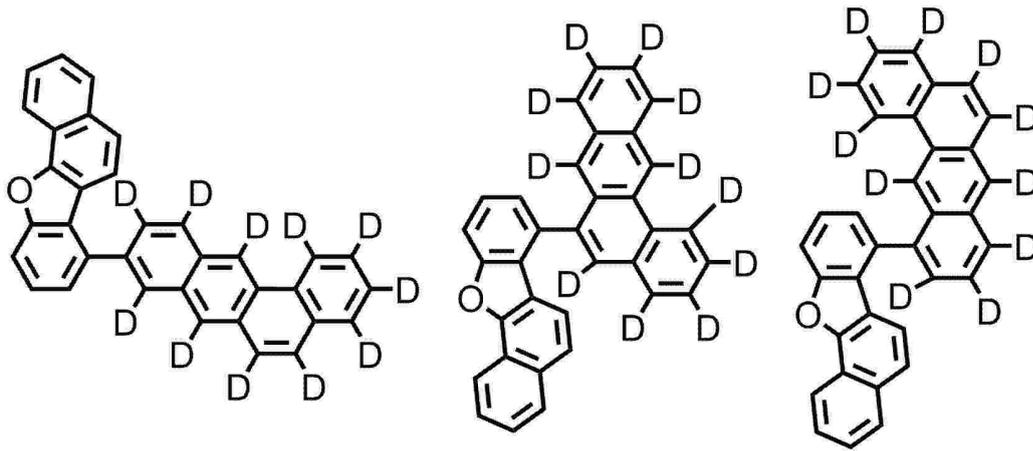
【 0 2 0 7 】

30

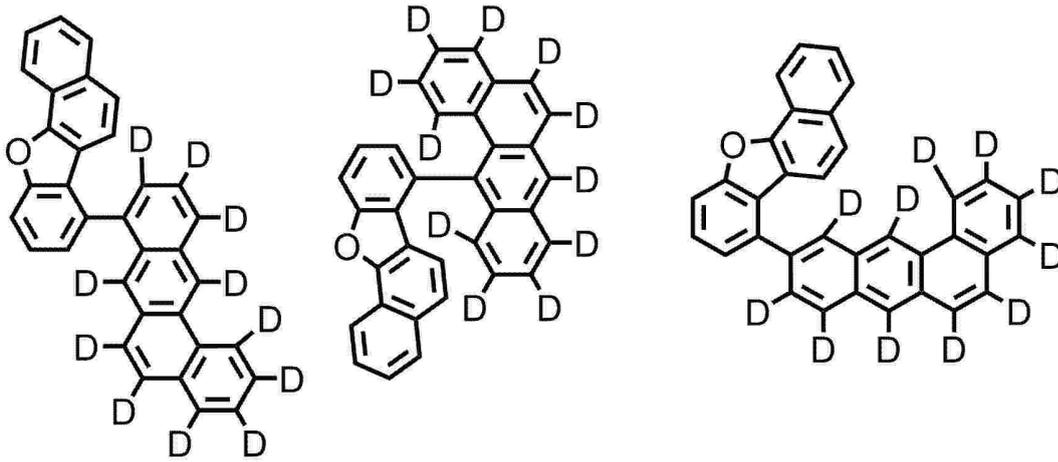
40

50

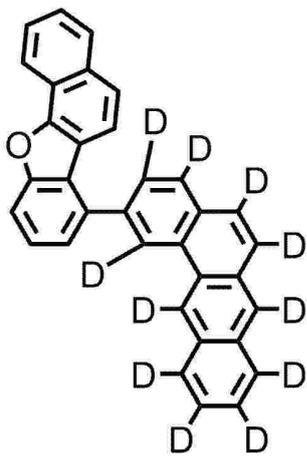
【化 6 5】



10



20



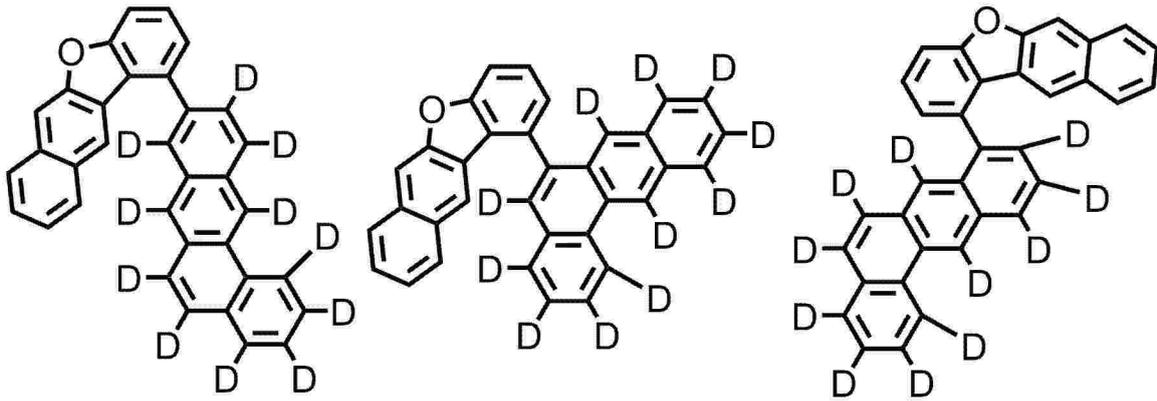
30

40

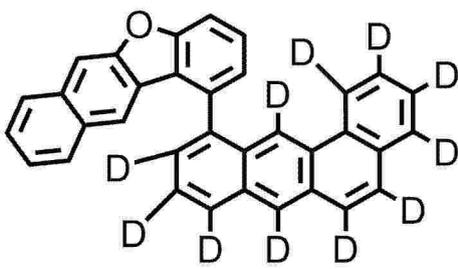
【 0 2 0 8 】

50

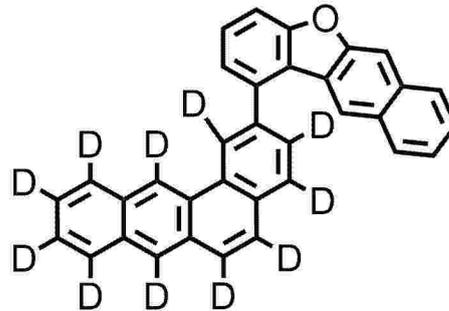
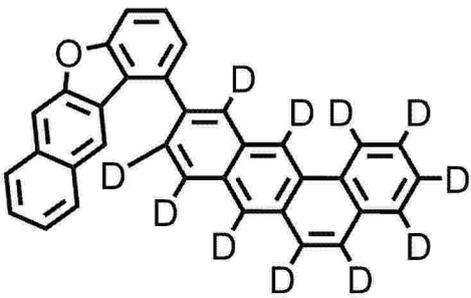
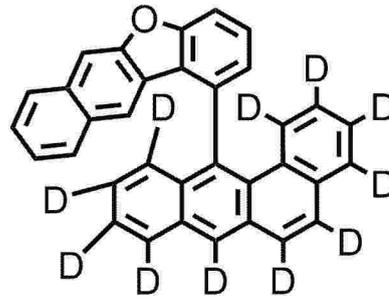
【化 6 6】



10



20



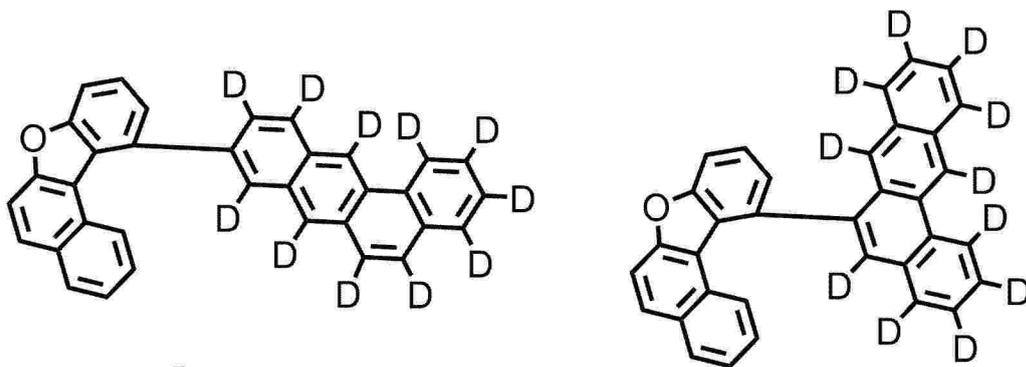
30

【 0 2 0 9 】

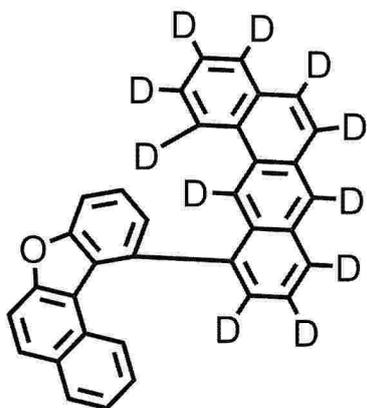
40

50

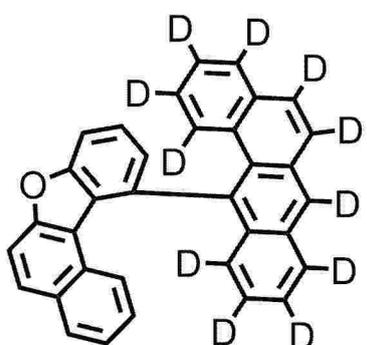
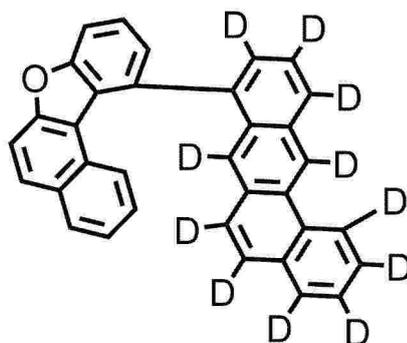
【化 6 7】



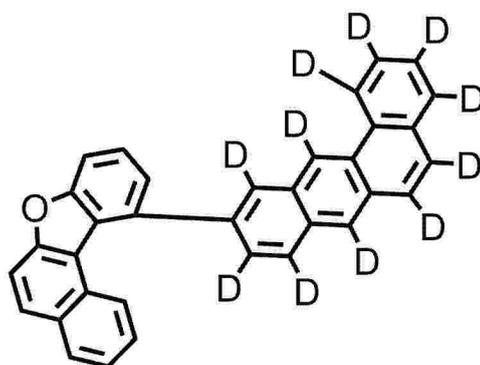
10



20

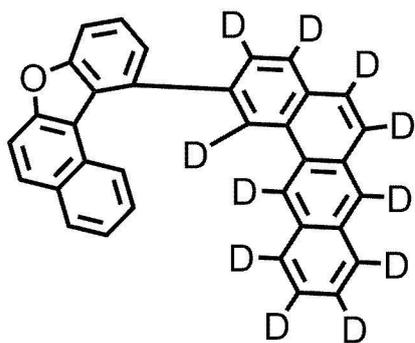


30

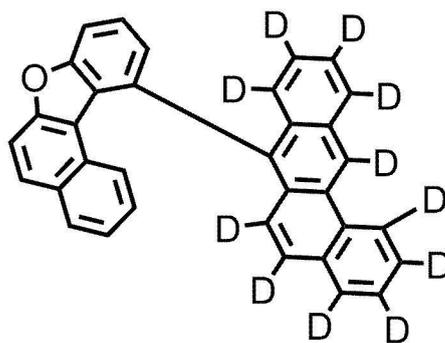


【 0 2 1 0】

【化 6 8】



40



【 0 2 1 1】

50

〔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素子について説明する。

本実施形態に係る有機EL素子は、第一実施形態に係る化合物を含有する。

本実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、陽極および陰極の間に配置された有機層と、を有する。この有機層は、有機化合物で構成される層を少なくとも一つ含む。あるいは、この有機層は、有機化合物で構成される複数の層が積層されてなる。有機層は、無機化合物をさらに含んでいてもよい。

【0212】

本実施形態に係る有機EL素子の一態様において、有機層の少なくとも一層が、第一実施形態に係る化合物を含有する。

10

【0213】

本実施形態の有機EL素子において、有機層のうち少なくとも一層は、発光領域を有することが好ましい。本実施形態の有機EL素子において、発光領域は、少なくとも一つの発光層を含有することが好ましい。一実施形態において、発光層は、前記一般式(1A)で表される化合物を含有する。一実施形態において、発光層は、前記一般式(1A-A)で表される化合物を含有する。

【0214】

本実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された発光領域と、を有し、前記発光領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、第一の化合物として前記一般式(1A)で表される化合物を含有し、前記第二の発光層は、第二の化合物を含有することも好ましい。

20

本実施形態の有機EL素子において、前記一般式(1A)で表される化合物と第二の化合物とは、互いに異なる化合物である。

【0215】

本実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された発光領域と、を有し、前記発光領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、第一の化合物として前記一般式(1A-A)で表される化合物を含有し、前記第二の発光層は、第二の化合物を含有することも好ましい。

本実施形態の有機EL素子において、前記一般式(1A-A)で表される化合物と第二の化合物とは、互いに異なる化合物である。

30

【0216】

発光領域が第一の発光層及び第二の発光層を含む場合、本実施形態に係る有機EL素子は、例えば、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ることもできるが、第一の発光層と第二の発光層の順序を逆にし、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することもできる。

【0217】

発光領域が第一の発光層及び第二の発光層を含む場合、本実施形態に係る有機EL素子は、陽極と陰極との間に第二の発光層を含み、陽極と第二の発光層との間に第一の発光層が配置されていることも好ましい。

40

発光領域が第一の発光層及び第二の発光層を含む場合、本実施形態に係る有機EL素子は、陽極と陰極との間に第一の発光層を含み、陽極と第一の発光層との間に第二の発光層が配置されていることも好ましい。

【0218】

(有機EL素子の発光波長)

本実施形態に係る有機EL素子は、素子駆動時に最大ピーク波長が500nm以下の光を放射することが好ましく、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/cm²となるように有機EL素子に電圧を印加した時の分光

50

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、これを最大ピーク波長(単位: nm)とする。

【0219】

本明細書における化合物の最大ピーク波長の測定方法は、次の通りである。測定対象となる化合物の 10^{-6} mol/L以上 10^{-5} mol/L以下のトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温(300 K)でこの試料の発光スペクトル(縦軸: 発光強度、横軸: 波長とする。)を測定する。発光スペクトルは、株式会社日立ハイテクサイエンス製の分光蛍光光度計(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。

10

発光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を発光最大ピーク波長とする。なお、本明細書において、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。

【0220】

本実施形態に係る有機EL素子において、有機層は、発光層だけで構成されていてもよいが、有機層として、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、正孔障壁層、及び電子障壁層等からなる群から選択される少なくともいずれかの層をさらに有していてもよい。

【0221】

本実施形態に係る有機EL素子において、陽極と、発光領域との間に、正孔輸送層を有することが好ましい。

20

本実施形態に係る有機EL素子において、発光領域が第一の発光層及び第二の発光層を含み、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、陽極と、第一の発光層との間に、正孔輸送層を有することが好ましい。また、第一の発光層と第二の発光層との積層順が、陽極側から、第二の発光層と第一の発光層との順序である場合、陽極と、第二の発光層との間に、正孔輸送層を有することが好ましい。

【0222】

本実施形態に係る有機EL素子において、陰極と、発光領域との間に、電子輸送層を有することが好ましい。

30

本実施形態に係る有機EL素子において、発光領域が第一の発光層及び第二の発光層を含み、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、前記陰極と、前記第二の発光層との間に、電子輸送層を有することが好ましい。また、第一の発光層と第二の発光層との積層順が、陽極側から、第二の発光層と第一の発光層との順序である場合、前記陰極と、前記第一の発光層との間に、電子輸送層を有することが好ましい。

【0223】

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。

図1に示す有機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、正孔輸送帯域6、発光領域5A、及び電子輸送帯域7を含む。正孔輸送帯域6は、陽極3側から順に、正孔注入層61及び正孔輸送層62を含む。発光領域5Aは、1つの発光層5を含む。電子輸送帯域7は、発光領域5A側から順に、電子輸送層71及び電子注入層72を含む。

40

【0224】

(発光層)

発光層5は、第一実施形態に係る化合物を含有する。

有機EL素子1Aにおいて、発光層5が含有する化合物は、前記一般式(1A)で表される化合物であることが好ましい。

有機EL素子1Aにおいて、発光層5が含有する化合物は、前記一般式(1A-A)で

50

表される化合物であることが好ましい。

【0225】

(発光性化合物)

有機EL素子1Aにおいて、発光層5は、発光性化合物(好ましくは蛍光発光性の化合物)をさらに含有することも好ましい。

【0226】

発光層5が含有する発光性化合物は、

下記一般式(3)で表される化合物、

下記一般式(4)で表される化合物、

下記一般式(5)で表される化合物、

下記一般式(6)で表される化合物、

下記一般式(7)で表される化合物、

下記一般式(8)で表される化合物、

下記一般式(9)で表される化合物、及び

下記一般式(10)で表される化合物からなる群から選択される1以上の化合物が挙げられる。

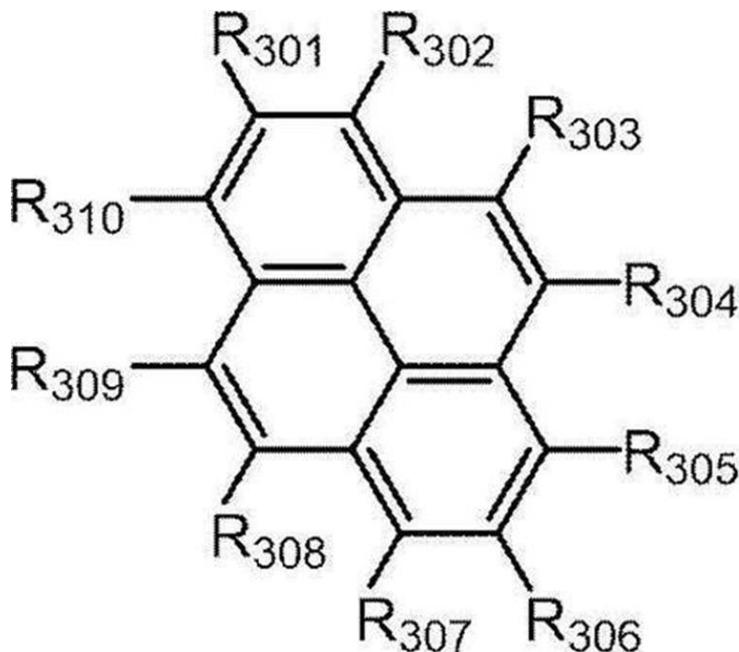
【0227】

(一般式(3)で表される化合物)

一般式(3)で表される化合物について説明する。

【0228】

【化69】



(3)

【0229】

(前記一般式(3)において、

R301~R310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、

R301~R310の少なくとも1つは下記一般式(31)で表される1価の基であり、

前記単環を形成せず、前記縮合環を形成せず、かつ下記一般式(31)で表される1価の基ではないR301~R310は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

10

20

30

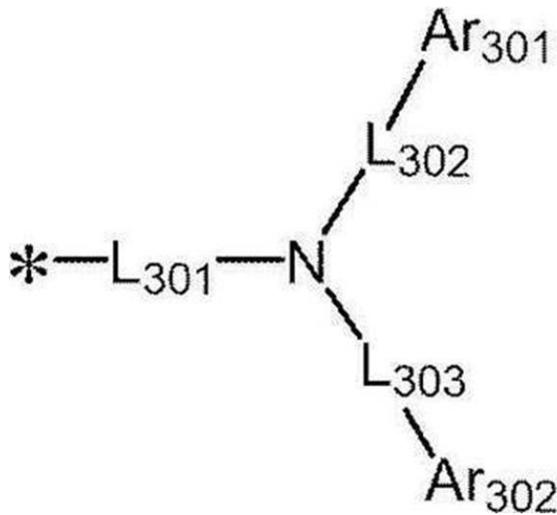
40

50

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - Si (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基、
 - O - (R 9 0 4) で表される基、
 - S - (R 9 0 5) で表される基、
 - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)

【 0 2 3 0 】

【 化 7 0 】



(31)

【 0 2 3 1 】

(前記一般式 (3 1) において、

A r 3 0 1 及び A r 3 0 2 は、それぞれ独立に、

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

L 3 0 1 ~ L 3 0 3 は、それぞれ独立に、
 単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の 2 価の複素環基であり、

* は、前記一般式 (3) 中のピレン環における結合位置を示す。)

【 0 2 3 2 】

発光性化合物中、R 9 0 1、R 9 0 2、R 9 0 3、R 9 0 4、R 9 0 5、R 9 0 6 及び R 9 0 7 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、

好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

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

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

10

20

30

40

50

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。

【0233】

前記一般式(3)において、R₃₀₁~R₃₁₀のうち2つが前記一般式(31)で表される基であることが好ましい。

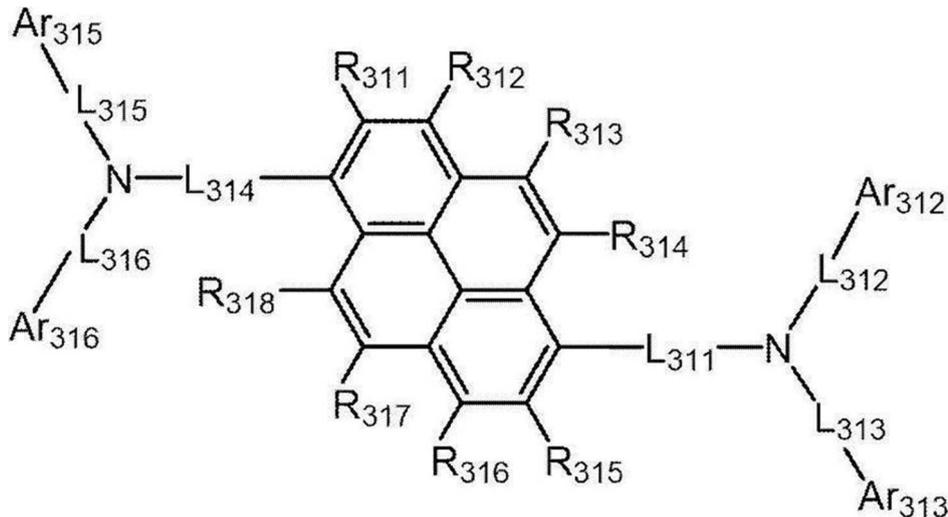
【0234】

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

10

【0235】

【化71】



(33)

20

【0236】

(前記一般式(33)において、

R₃₁₁~R₃₁₈は、それぞれ独立に、前記一般式(3)における、前記一般式(31)で表される1価の基ではないR₃₀₁~R₃₁₀と同義であり、

30

L₃₁₁~L₃₁₆は、それぞれ独立に、
 単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリーレン基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の2価の複素環基であり、

Ar₃₁₂、Ar₃₁₃、Ar₃₁₅及びAr₃₁₆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。)

【0237】

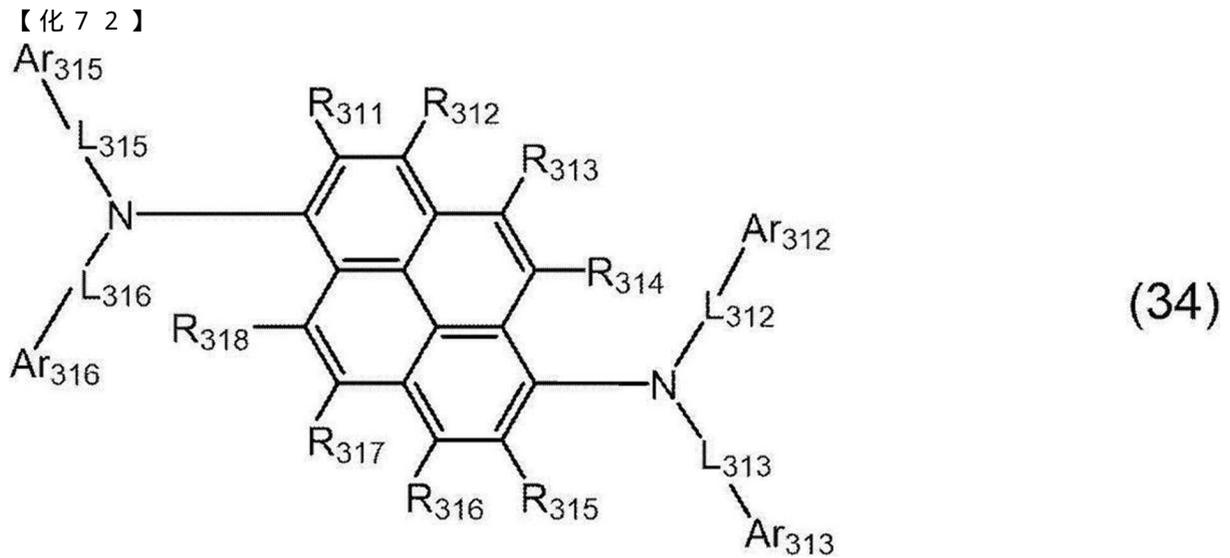
前記一般式(31)において、L₃₀₁は、単結合であることが好ましく、L₃₀₂及びL₃₀₃は単結合であることが好ましい。

40

【0238】

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

【0239】



10

【0240】

(前記一般式(34)において、

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

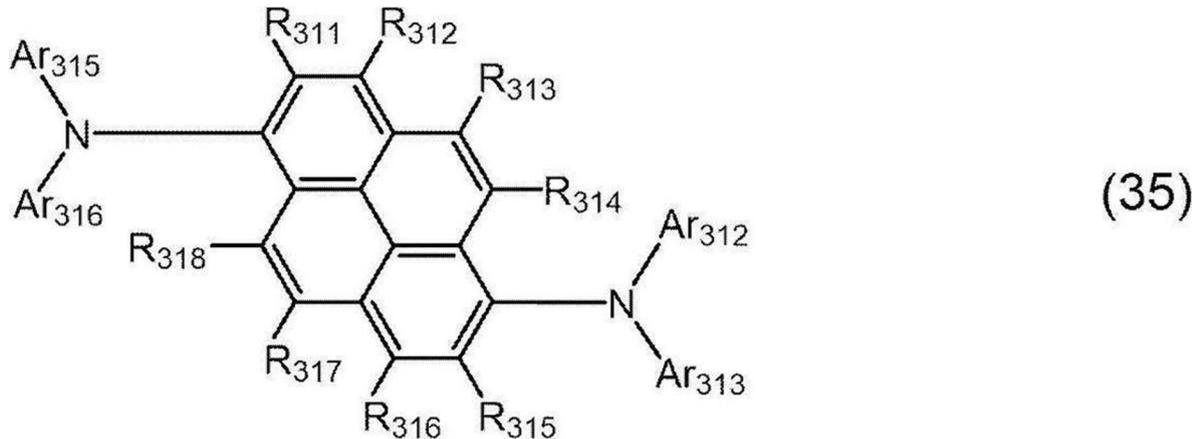
L_{312} 、 L_{313} 、 L_{315} 及び L_{316} は、それぞれ独立に、前記一般式(33)における L_{312} 、 L_{313} 、 L_{315} 及び L_{316} と同義であり、

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

20

【0241】

【化73】



30

【0242】

(前記一般式(35)において、

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

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

40

【0243】

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

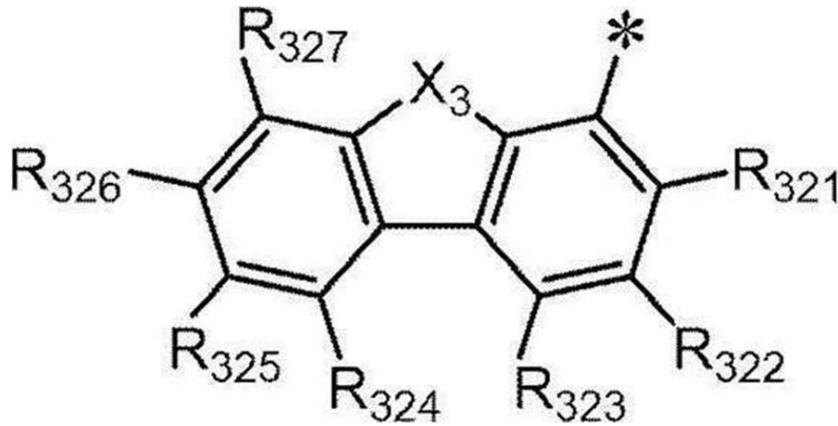
前記一般式(33)～一般式(35)において、好ましくは、 Ar_{312} 及び Ar_{313} のうち少なくとも1つが下記一般式(36)で表される基である。

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

50

【0244】

【化74】



(36)

10

【0245】

(前記一般式(36)において、

 X_3 は、酸素原子又は硫黄原子を示し、

$R_{321} \sim R_{327}$ のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず、

20

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

- Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})で表される基、- O - (R_{904})で表される基、- S - (R_{905})で表される基、- N(R_{906})(R_{907})で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

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

)

30

【0246】

 X_3 は、酸素原子であることが好ましい。

40

【0247】

 $R_{321} \sim R_{327}$ のうち少なくとも1つは、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であることが好ましい。

【0248】

50

前記一般式(31)において、 Ar_{301} が前記一般式(36)で表される基であり、 Ar_{302} が置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基であることが好ましい。

前記一般式(33)~一般式(35)において、 Ar_{312} が前記一般式(36)で表される基であり、 Ar_{313} が置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基であることが好ましい。

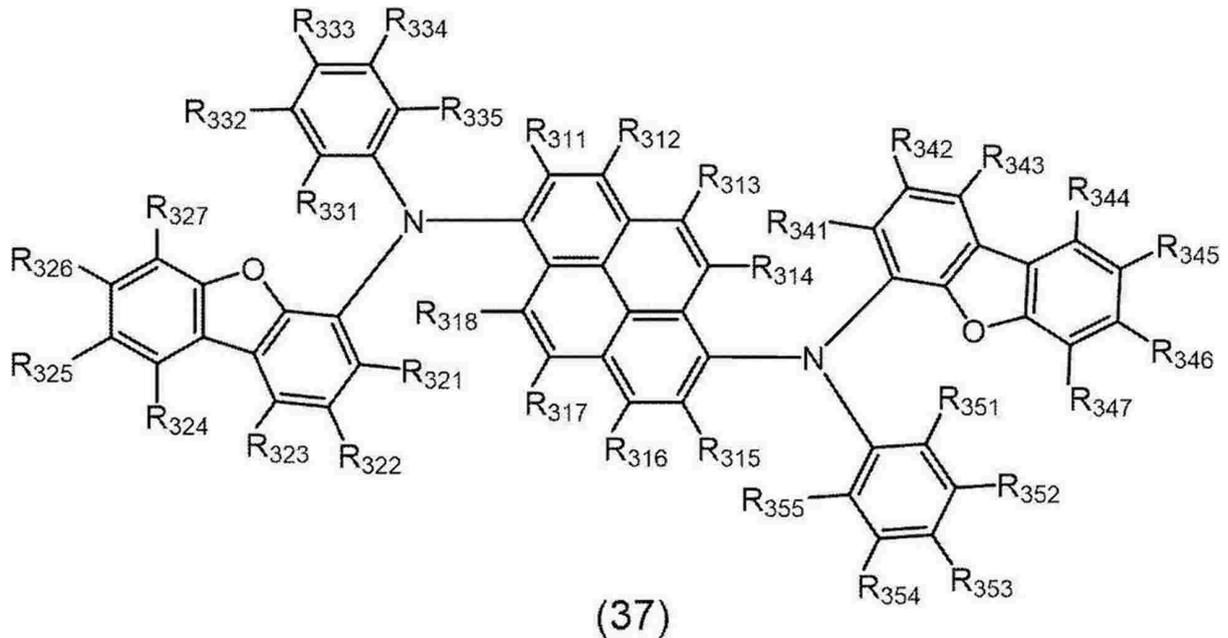
前記一般式(33)~一般式(35)において、 Ar_{315} が前記一般式(36)で表される基であり、 Ar_{316} が置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基であることが好ましい。

【0249】

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

【0250】

【化75】



【0251】

(前記一般式(37)において、

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

R_{321} ~ R_{327} のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず、

R_{341} ~ R_{347} のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

10

20

30

40

50

- Si (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基、
 - O - (R 9 0 4) で表される基、
 - S - (R 9 0 5) で表される基、
 - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、
 - ハロゲン原子、
 - シアノ基、
 - ニトロ基、
 - 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は
 - 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基であり、
 - R 3 3 1 ~ R 3 3 5 並びに R 3 5 1 ~ R 3 5 5 は、それぞれ独立に、
 - 水素原子、
 - 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、
 - 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、
 - 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、
 - 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、
 - Si (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) で表される基、
 - O - (R 9 0 4) で表される基、
 - S - (R 9 0 5) で表される基、
 - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、
 - ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、
 - 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は
 - 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。)
- 【 0 2 5 2 】
- 前記一般式 (3) で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。
- 【 0 2 5 3 】

10

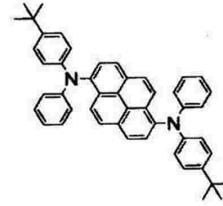
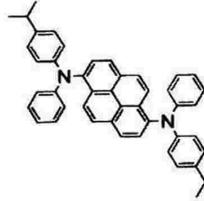
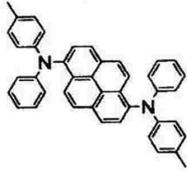
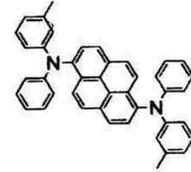
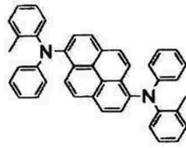
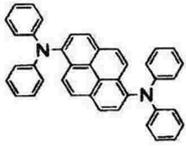
20

30

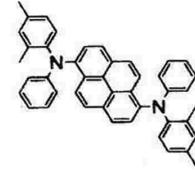
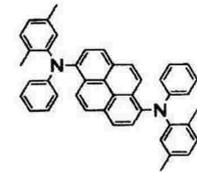
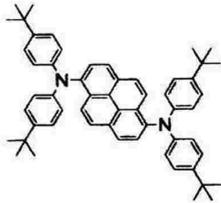
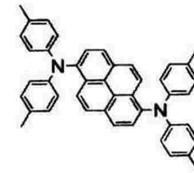
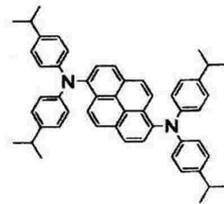
40

50

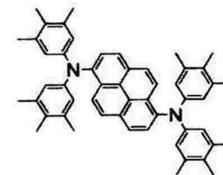
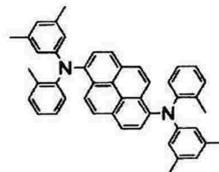
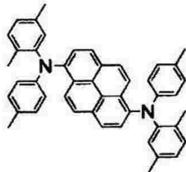
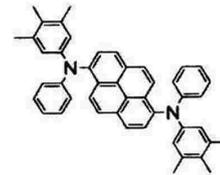
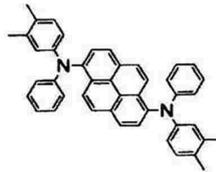
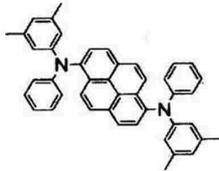
【化 7 6】



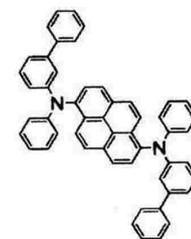
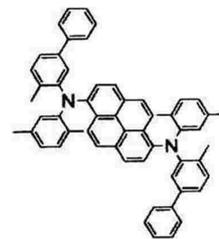
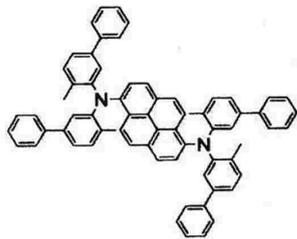
10



20



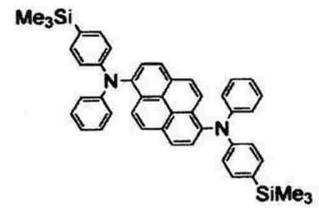
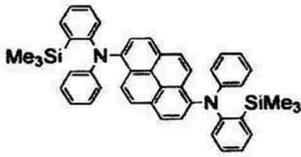
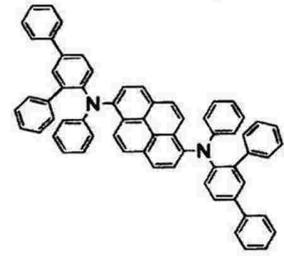
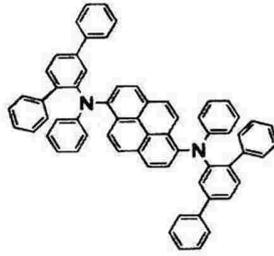
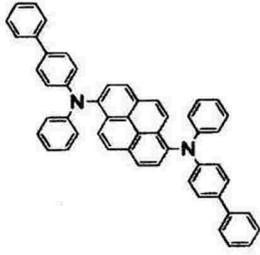
30



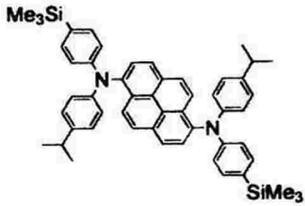
40

【 0 2 5 4】

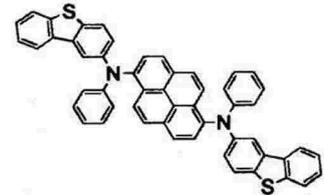
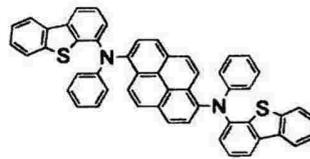
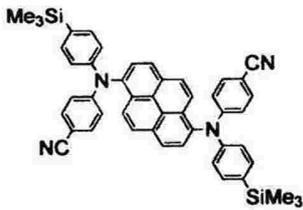
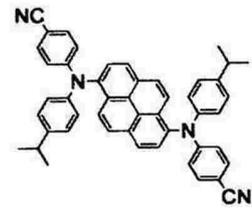
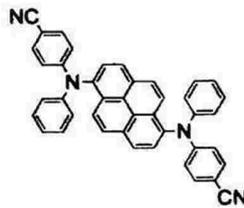
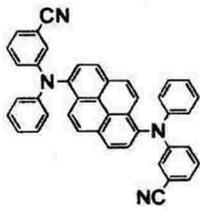
【化 7 7】



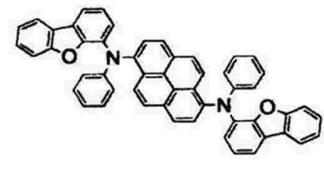
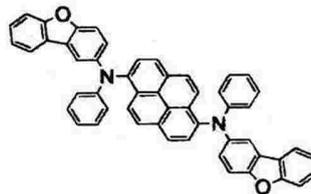
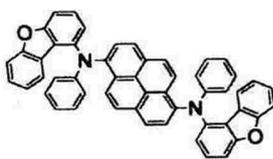
10



20



30

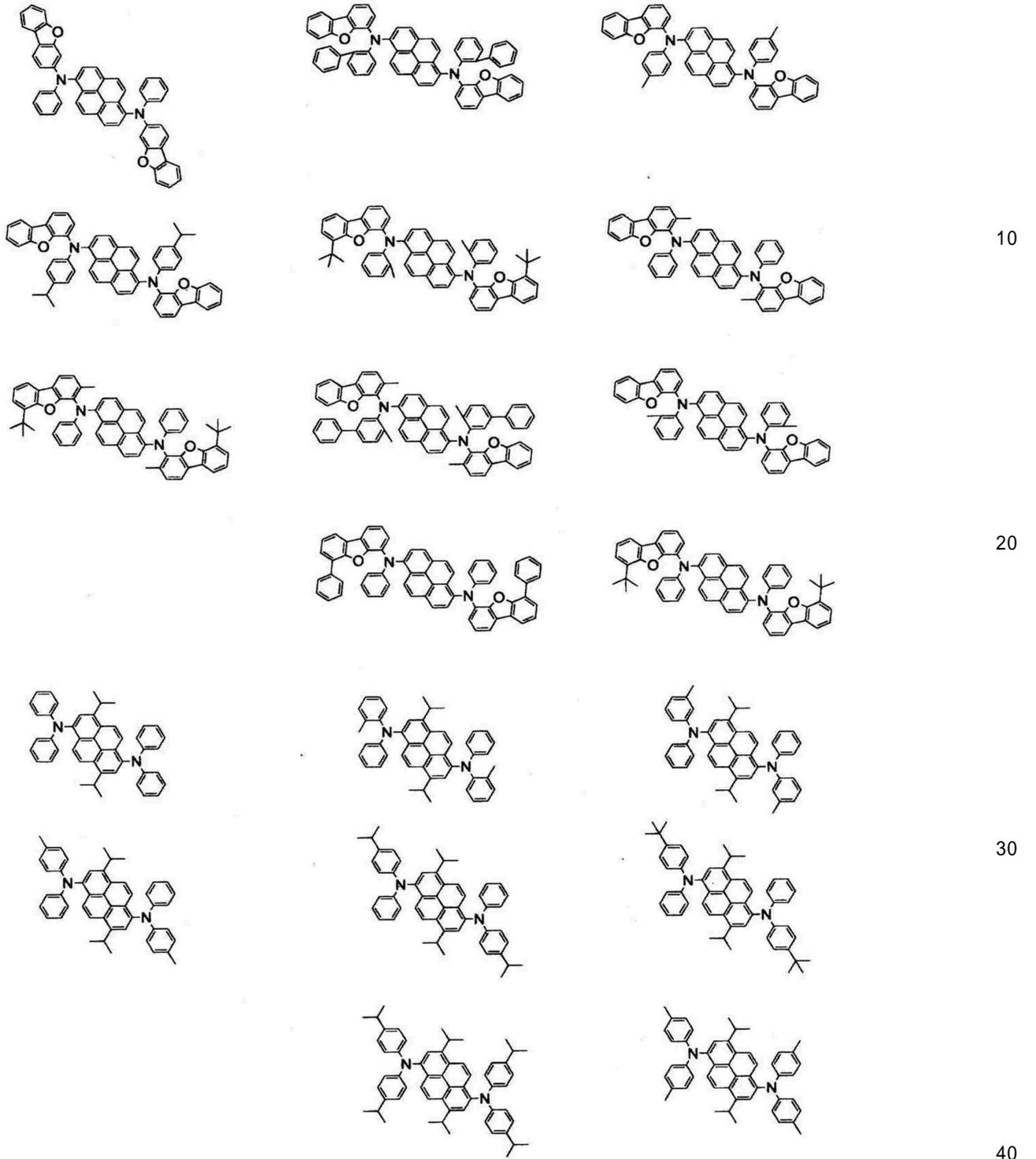


40

【 0 2 5 5 】

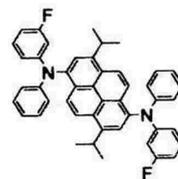
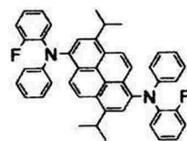
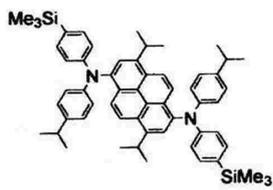
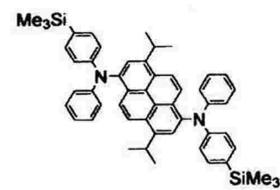
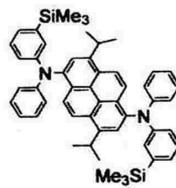
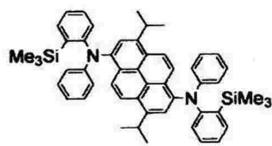
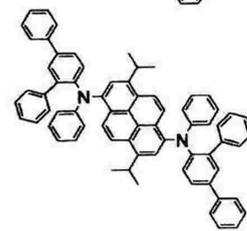
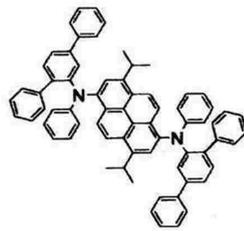
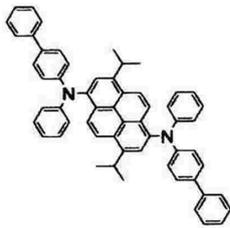
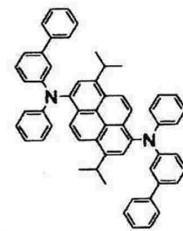
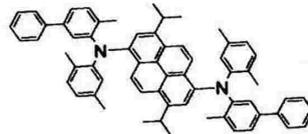
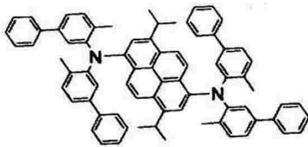
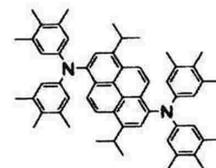
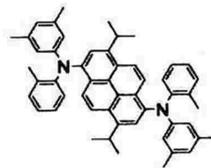
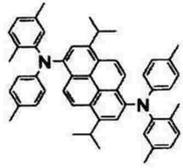
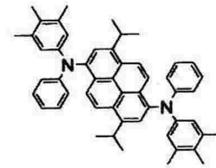
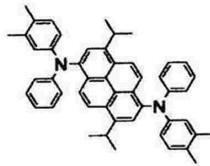
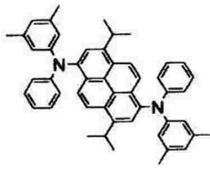
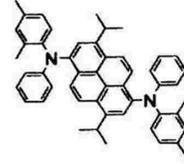
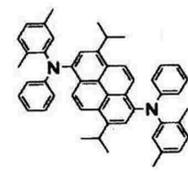
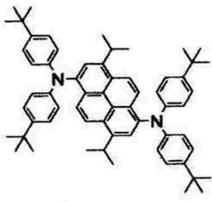
50

【化 7 8】



【 0 2 5 6】

【化 7 9】



10

20

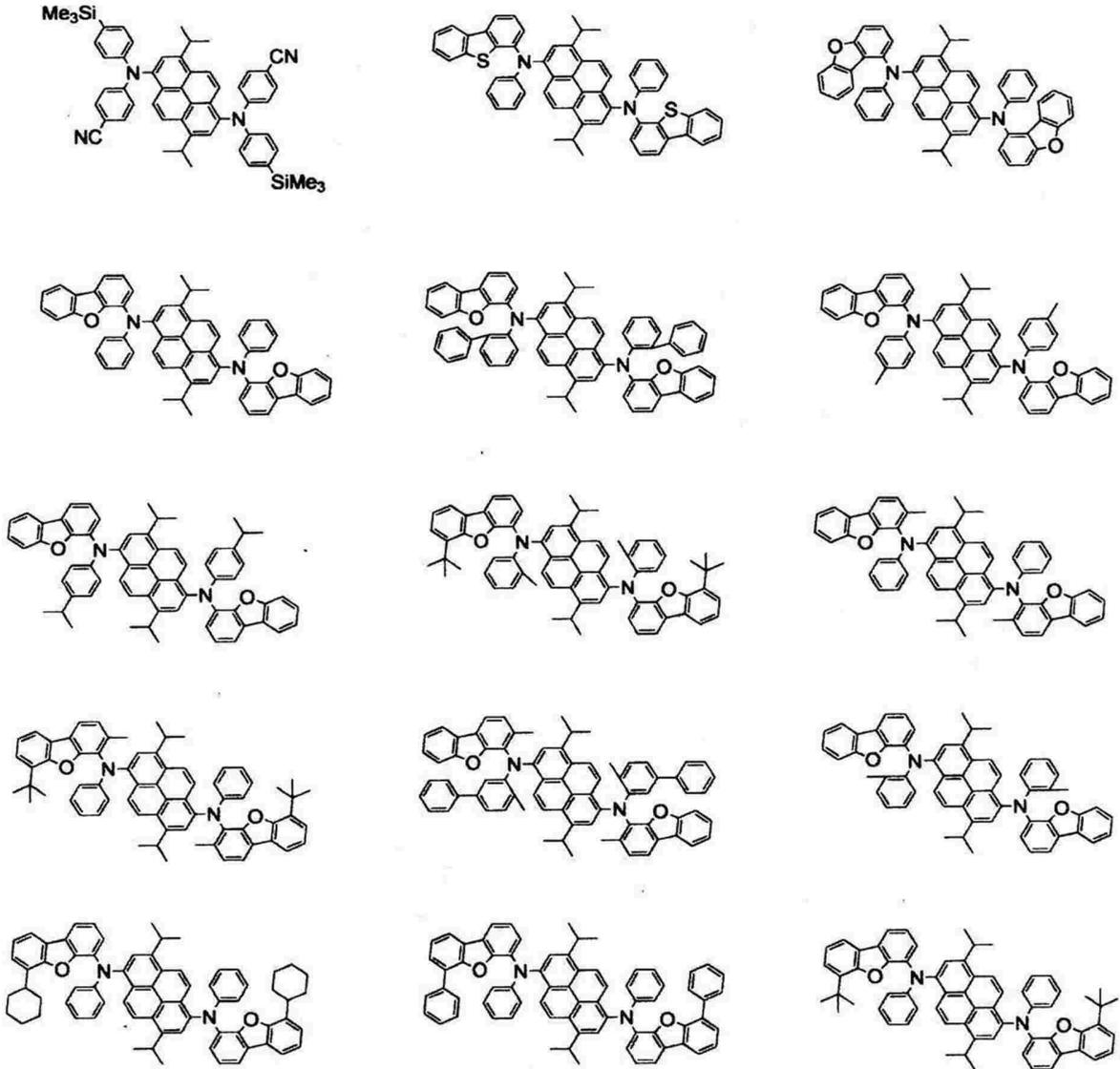
30

40

【 0 2 5 7 】

50

【化 8 0】



10

20

30

【 0 2 5 8】

(一般式(4)で表される化合物)

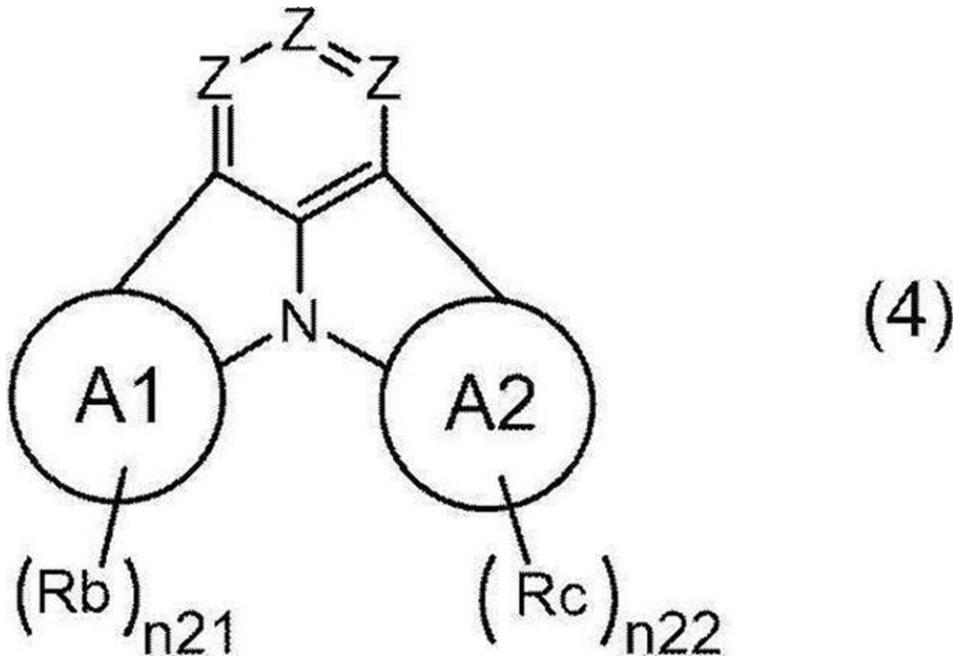
一般式(4)で表される化合物について説明する。

【 0 2 5 9】

40

50

【化 8 1】



10

【 0 2 6 0】

20

(前記一般式(4)において、

Zは、それぞれ独立に、C R a又は窒素原子であり、

A 1環及びA 2環は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環であり、

R aが複数存在する場合、複数のR aのうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

30

n 2 1及びn 2 2は、それぞれ独立に、0、1、2、3又は4であり、

R bが複数存在する場合、複数のR bのうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

R cが複数存在する場合、複数のR cのうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

40

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

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

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

- O - (R 9 0 4) で表される基、

- S - (R 9 0 5) で表される基、

50

- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。)

【 0 2 6 1 】

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

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

10

「置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 の芳香族炭化水素環」の具体例としては、具体例群 G 1 に記載の「アリール基」に水素原子を導入した化合物等が挙げられる。

【 0 2 6 2 】

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

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

「置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環」の具体例としては、具体例群 G 2 に記載の「複素環基」に水素原子を導入した化合物等が挙げられる。

20

【 0 2 6 3 】

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

【 0 2 6 4 】

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

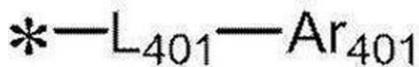
【 0 2 6 5 】

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

30

【 0 2 6 6 】

【 化 8 2 】



(4a)

【 0 2 6 7 】

(前記一般式 (4 a) において、

L 4 0 1 は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリーレン基、又は

40

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 3 0 の 2 価の複素環基であり、

A r 4 0 1 は、

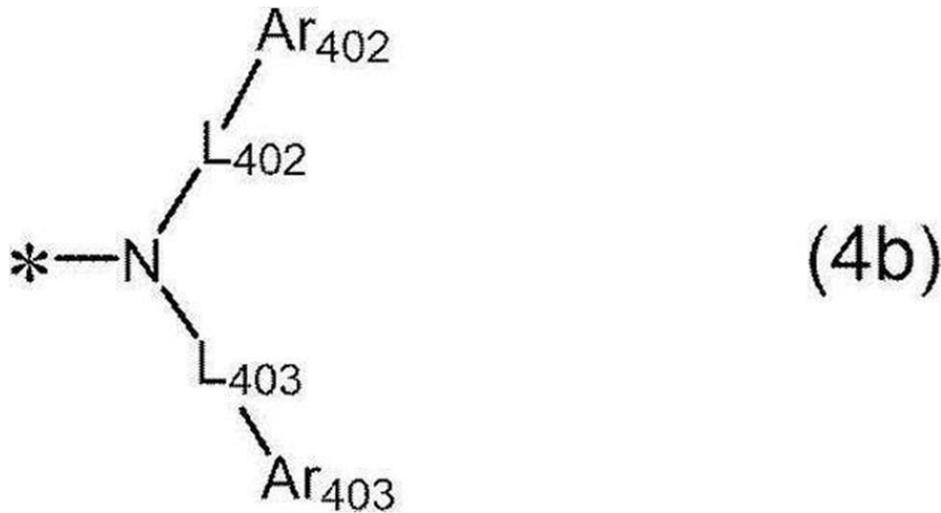
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基、又は

下記一般式 (4 b) で表される基である。)

【 0 2 6 8 】

【化 8 3】



10

【 0 2 6 9 】

(前記一般式(4b)において、

L₄₀₂及びL₄₀₃は、それぞれ独立に、
単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基であり、

20

A_r₄₀₂及びA_r₄₀₃からなる組は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないA_r₄₀₂及びA_r₄₀₃は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。))

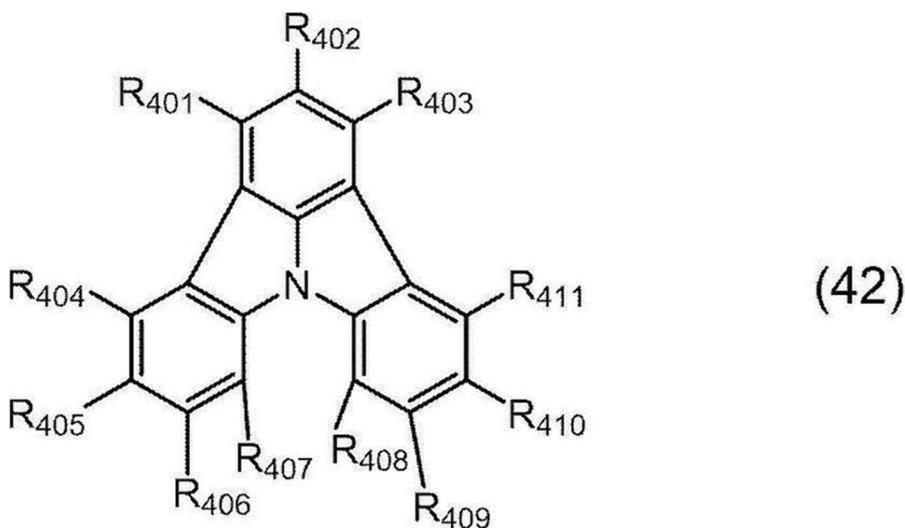
【 0 2 7 0 】

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

30

【 0 2 7 1 】

【化 8 4】



40

【 0 2 7 2 】

50

(前記一般式(42)において、

R₄₀₁ ~ R₄₁₁のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₄₀₁ ~ R₄₁₁は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 50の複素環基である。) 10

【0273】

R₄₀₁ ~ R₄₁₁のうち、少なくとも1つが、前記一般式(4a)で表される基であることが好ましく、少なくとも2つ前記一般式(4a)で表される基であることがより好ましい。

R₄₀₄及びR₄₁₁が前記一般式(4a)で表される基であることが好ましい。

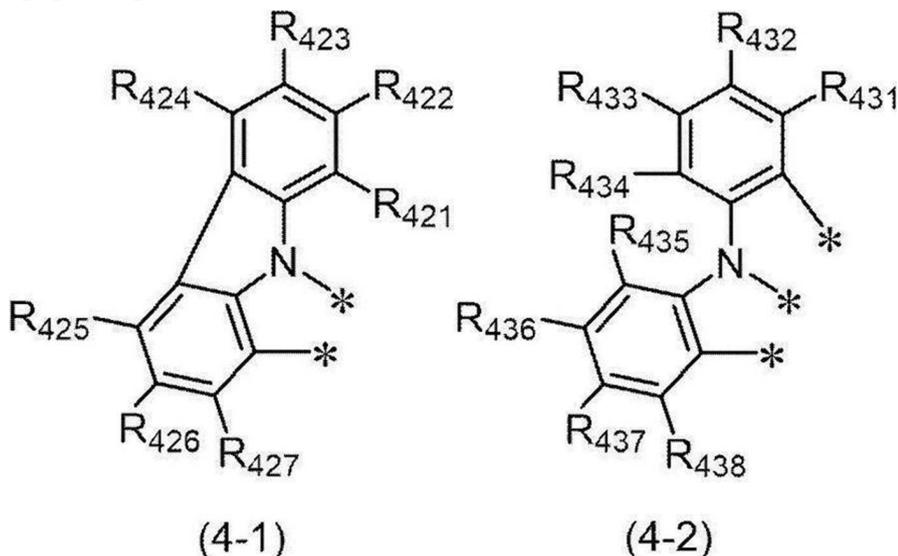
【0274】

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

また、一実施形態において、前記一般式(42)で表される化合物は、R₄₀₄ ~ R₄₀₇が結合する環に下記一般式(4-1)又は一般式(4-2)で表される構造が結合した化合物である。 30

【0275】

【化85】



【0276】

10

20

40

50

(前記一般式(4-1)において、2つの*は、それぞれ独立に、前記一般式(4)のA1環としての芳香族炭化水素環の環形成炭素原子もしくは複素環の環形成原子と結合するか、又は前記一般式(42)のR₄₀₄~R₄₀₇のいずれかと結合し、

前記一般式(4-2)の3つの*は、それぞれ独立に、前記一般式(4)のA1環としての芳香族炭化水素環の環形成炭素原子もしくは複素環の環形成原子と結合するか、又は前記一般式(42)のR₄₀₄~R₄₀₇のいずれかと結合し、

R₄₂₁~R₄₂₇のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず、

R₄₃₁~R₄₃₈のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₄₂₁~R₄₂₇並びにR₄₃₁~R₄₃₈は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基である。))

【0277】

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

【0278】

10

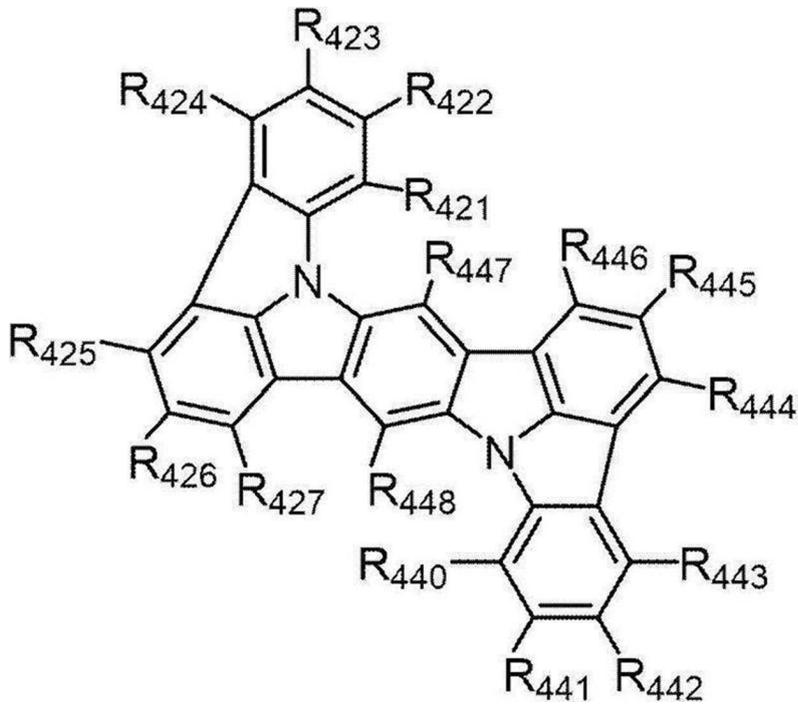
20

30

40

50

【化 8 6】



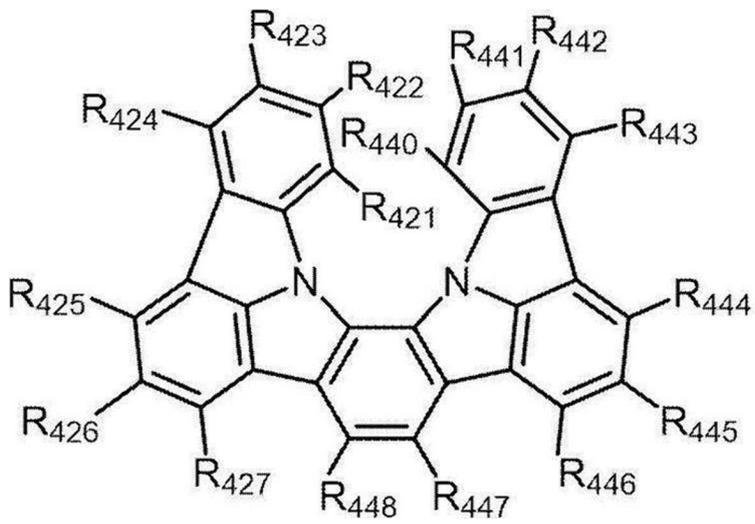
(41-3)

10

20

【 0 2 7 9】

【化 8 7】



(41-4)

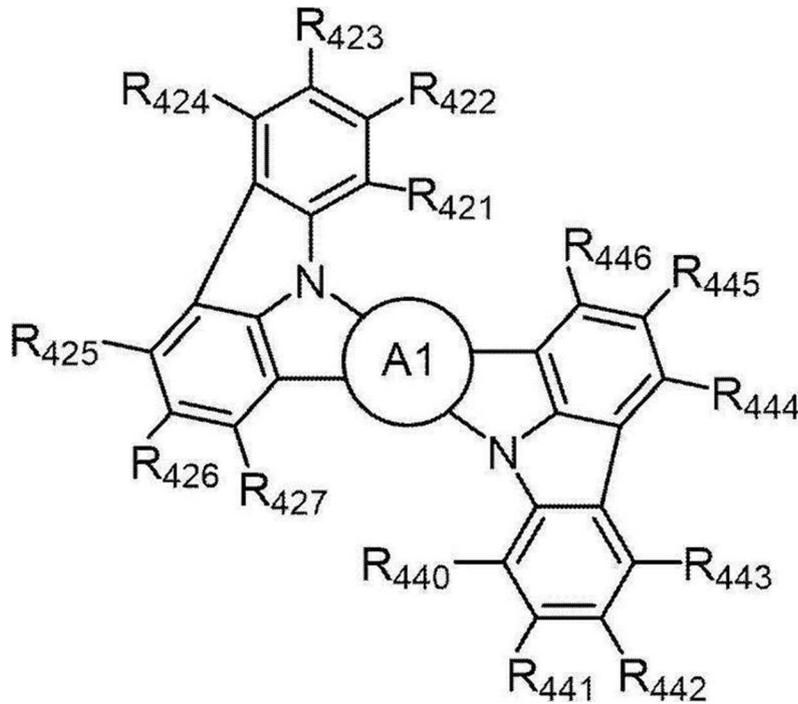
30

【 0 2 8 0】

40

50

【化 8 8】



10

20

【0281】

(前記一般式(41-3)、一般式(41-4)及び一般式(41-5)中、

A1環は、前記一般式(4)で定義した通りであり、

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

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

【0282】

一実施形態においては、前記一般式(41-5)のA1環としての置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50の芳香族炭化水素環は、

置換もしくは無置換のナフタレン環、又は

置換もしくは無置換のフルオレン環である。

30

【0283】

一実施形態においては、前記一般式(41-5)のA1環としての置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環は、

置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、

置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は

置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

【0284】

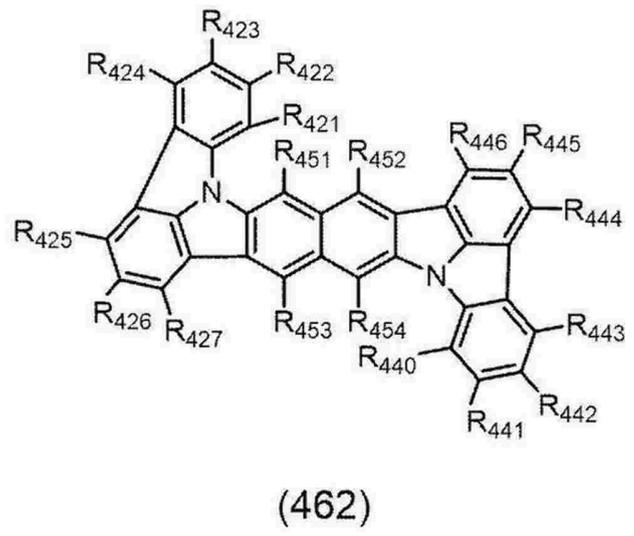
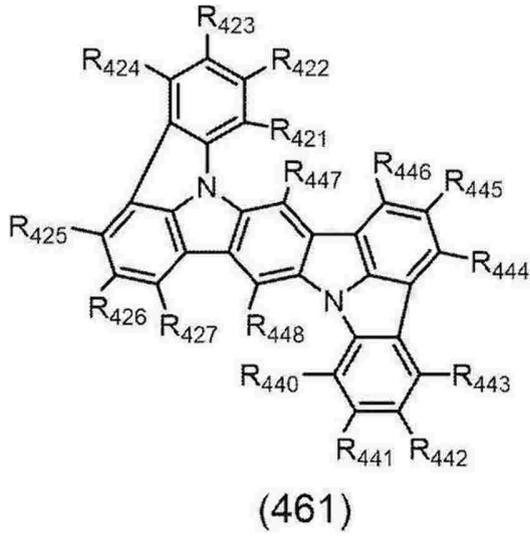
一実施形態においては、前記一般式(4)又は前記一般式(42)で表される化合物は、下記一般式(461)~一般式(467)で表される化合物からなる群から選択される。

40

【0285】

50

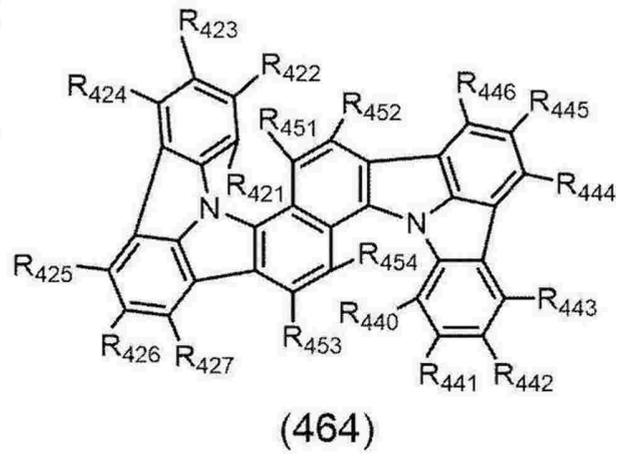
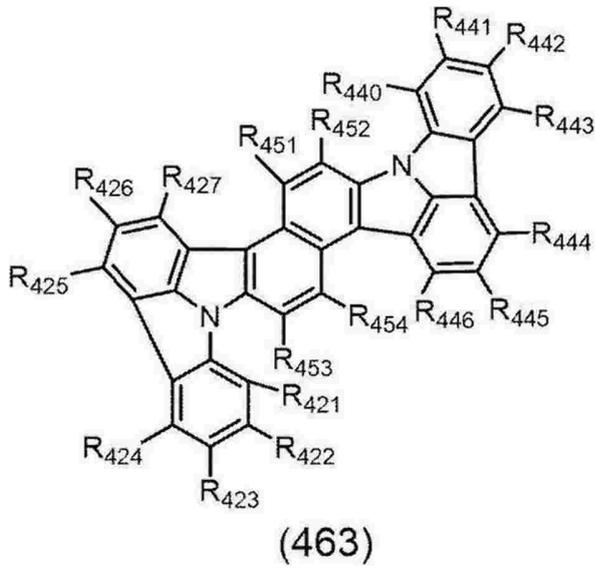
【化 8 9】



10

【 0 2 8 6】

【化 9 0】



20

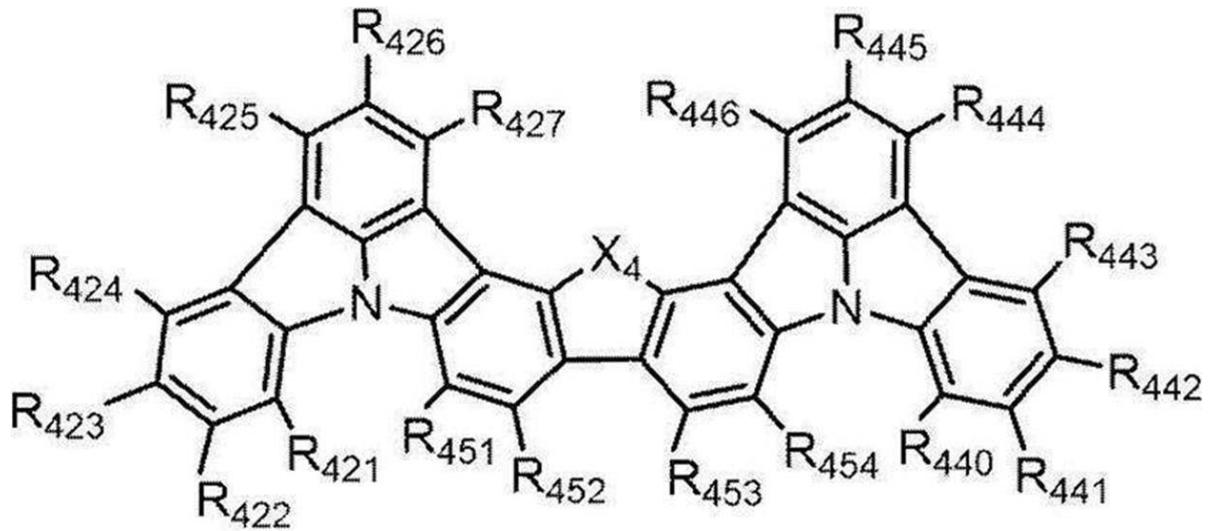
30

【 0 2 8 7】

40

50

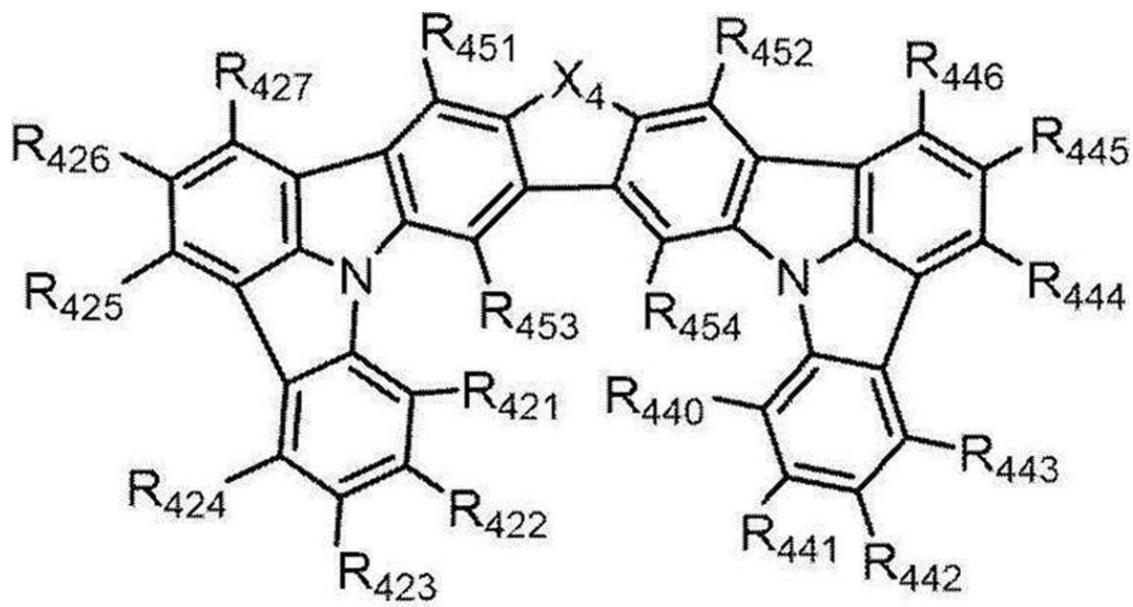
【化91】



(465)

【0288】

【化92】



(466)

【0289】

10

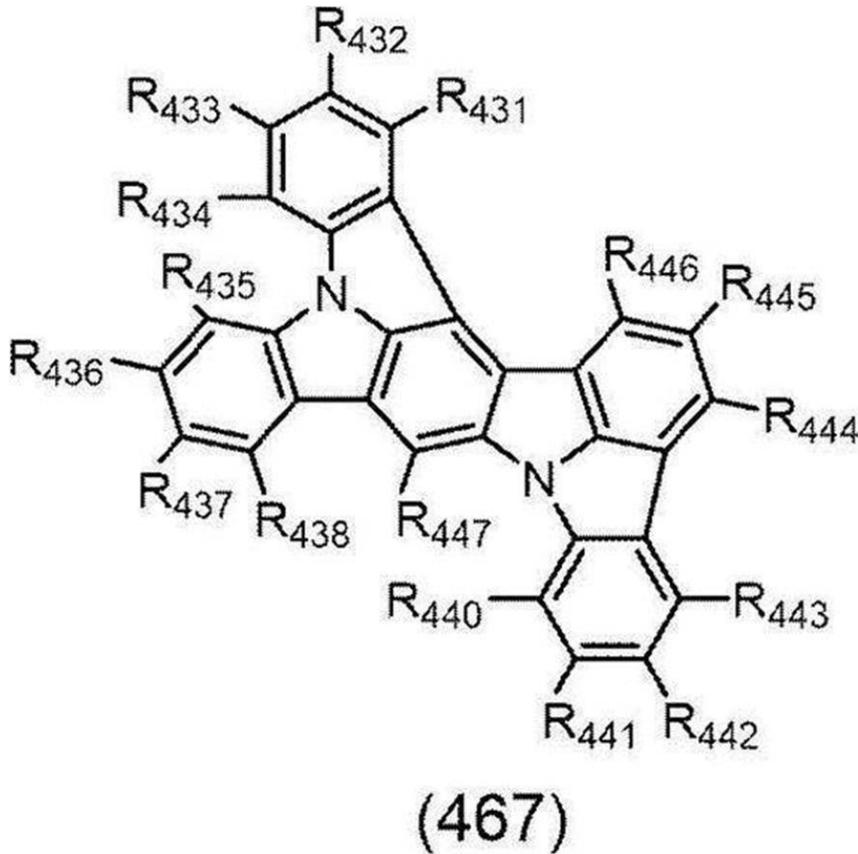
20

30

40

50

【化 9 3】



10

20

【0290】

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

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

R₄₃₁ ~ R₄₃₈は、それぞれ独立に、前記一般式(4-2)におけるR₄₃₁ ~ R₄₃₈と同義であり、

R₄₄₀ ~ R₄₄₈並びにR₄₅₁ ~ R₄₅₄は、それぞれ独立に、前記一般式(42)におけるR₄₀₁ ~ R₄₁₁と同義であり、

X₄は、酸素原子、NR₈₀₁、又はC(R₈₀₂)(R₈₀₃)であり、

R₈₀₁、R₈₀₂及びR₈₀₃は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 50の複素環基であり、

好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリール基であり、

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

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

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

【0291】

一実施形態において、前記一般式(42)で表される化合物は、R₄₀₁ ~ R₄₁₁のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、又は互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成し、当該実施形態について、以下一般式(45)で表される化合物として詳述する。

50

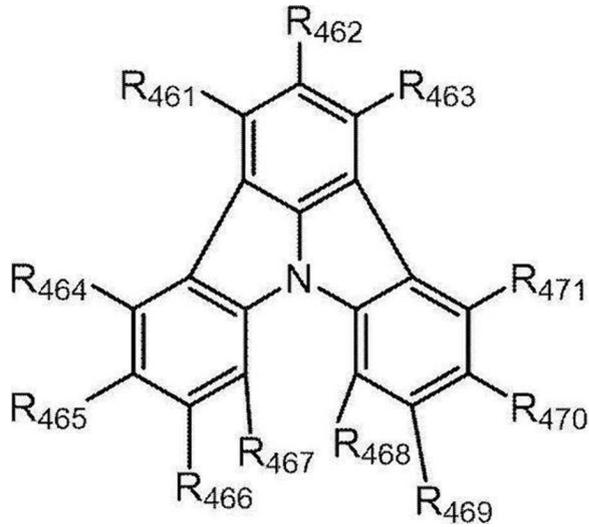
【 0 2 9 2 】

(一般式(45)で表される化合物)

一般式(45)で表される化合物について説明する。

【 0 2 9 3 】

【化94】



(45)

10

20

【 0 2 9 4 】

(前記一般式(45)において、

R₄₆₁とR₄₆₂とからなる組、R₄₆₂とR₄₆₃とからなる組、R₄₆₄とR₄₆₅とからなる組、R₄₆₅とR₄₆₆とからなる組、R₄₆₆とR₄₆₇とからなる組、R₄₆₈とR₄₆₉とからなる組、R₄₆₉とR₄₇₀とからなる組、及び、R₄₇₀とR₄₇₁とからなる組からなる群から選択される組のうち2以上は、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環又は置換もしくは無置換の縮合環を形成し、

ただし、

R₄₆₁とR₄₆₂とからなる組及びR₄₆₂とR₄₆₃とからなる組；R₄₆₄とR₄₆₅とからなる組及びR₄₆₅とR₄₆₆とからなる組；R₄₆₅とR₄₆₆とからなる組及びR₄₆₆とR₄₆₇とからなる組；R₄₆₈とR₄₆₉とからなる組及びR₄₆₉とR₄₇₀とからなる組；並びにR₄₆₉とR₄₇₀とからなる組及びR₄₇₀とR₄₇₁とからなる組が、同時に環を形成することはなく、

R₄₆₁～R₄₇₁が形成する2つ以上の環は、互いに同一であるか、又は異なり、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₄₆₁～R₄₇₁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

30

40

50

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)

【0295】

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

【0296】

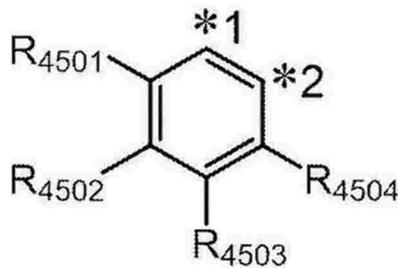
前記一般式(45)で表される化合物における上記の環構造の数は、例えば、2つ、3つ、又は4つである。2つ以上の環構造は、それぞれ前記一般式(45)の母骨格上の同一のベンゼン環上に存在してもよいし、異なるベンゼン環上に存在してもよい。例えば、環構造を3つ有する場合、前記一般式(45)の3つのベンゼン環のそれぞれに1つずつ環構造が存在してもよい。

【0297】

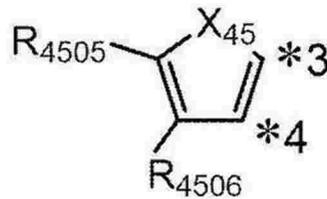
前記一般式(45)で表される化合物における上記の環構造としては、例えば、下記一般式(451)~(460)で表される構造等が挙げられる。

【0298】

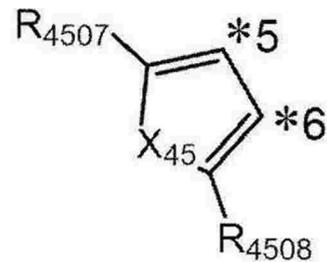
【化95】



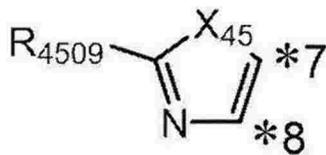
(451)



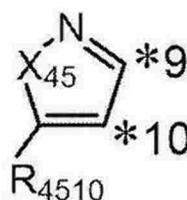
(452)



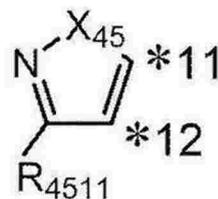
(453)



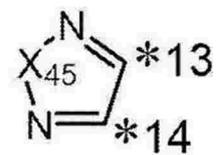
(454)



(455)



(456)



(457)

【0299】

(前記一般式(451)~(457)において、

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

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

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

10

20

30

40

50

R₄₅₀₁ ~ R₄₅₀₆ 及び R₄₅₁₂ ~ R₄₅₁₃ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

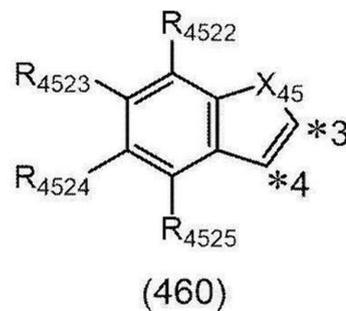
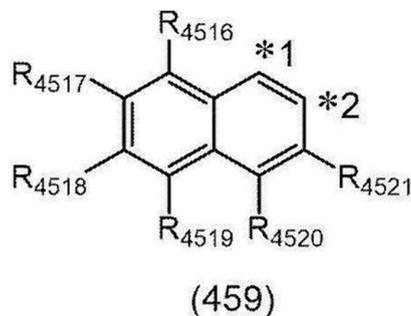
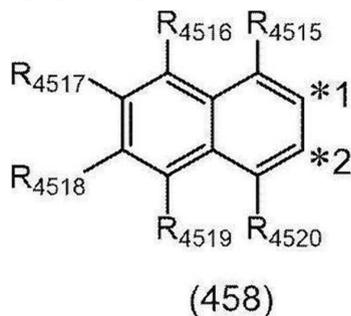
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない R₄₅₀₁ ~ R₄₅₁₄ は、それぞれ独立に、前記一般式 (45) における R₄₆₁ ~ R₄₇₁ と同義である。))

【0300】

【化96】



10

【0301】

(前記一般式 (458) ~ (460) において、

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

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

X₄₅ は、C(R₄₅₁₂)(R₄₅₁₃)、NR₄₅₁₄、酸素原子又は硫黄原子であり、

R₄₅₁₂ ~ R₄₅₁₃ 及び R₄₅₁₅ ~ R₄₅₂₅ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない R₄₅₁₂ ~ R₄₅₁₃、R₄₅₁₅ ~ R₄₅₂₁ 及び R₄₅₂₂ ~ R₄₅₂₅、並びに R₄₅₁₄ は、それぞれ独立に、前記一般式 (45) における R₄₆₁ ~ R₄₇₁ と同義である。))

【0302】

前記一般式 (45) において、R₄₆₂、R₄₆₄、R₄₆₅、R₄₇₀ 及び R₄₇₁ の少なくとも 1 つ (好ましくは、R₄₆₂、R₄₆₅ 及び R₄₇₀ の少なくとも 1 つ、さらに好ましくは R₄₆₂) が、環構造を形成しない基であると好ましい。

【0303】

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

(ii) 前記一般式 (45) において、環構造を形成しない R₄₆₁ ~ R₄₇₁、及び

(iii) 前記一般式 (451) ~ (460) における R₄₅₀₁ ~ R₄₅₁₄、R₄₅₁₅ ~ R₄₅₂₅ は、好ましくは、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

-N(R₉₀₆)(R₉₀₇) で表される基、

20

30

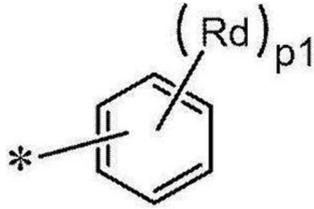
40

50

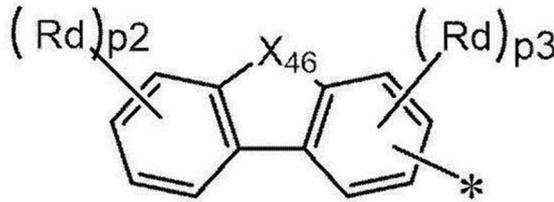
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基、又は
下記一般式 (461) ~ 一般式 (464) で表される基からなる群から選択される基
のいずれかである。

【0304】

【化97】

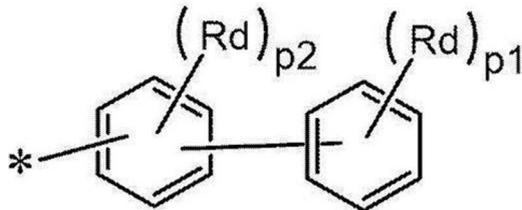


(461)

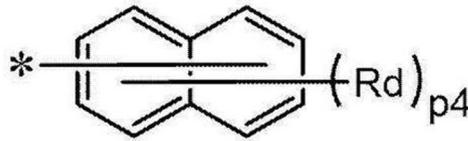


(462)

10



(463)



(464)

20

【0305】

(前記一般式 (461) ~ (464) 中、

R_d は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

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

- O - (R_{904}) で表される基、

- S - (R_{905}) で表される基、

- N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

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

R_{801} 、 R_{802} 及び R_{803} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

30

40

50

R₈₀₁が複数存在する場合、複数のR₈₀₁は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₂が複数存在する場合、複数のR₈₀₂は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₃が複数存在する場合、複数のR₈₀₃は、互いに同一であるか又は異なり、
 p₁は、5であり、
 p₂は、4であり、
 p₃は、3であり、
 p₄は、7であり、

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

発光性化合物において、R₉₀₁~R₉₀₇は、前述のように定義した通りである。

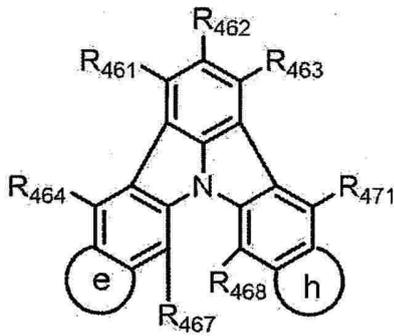
10

【0306】

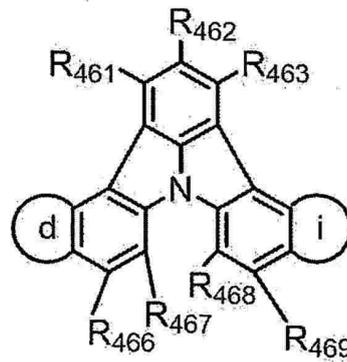
一実施形態において、前記一般式(45)で表される化合物は、下記一般式(45-1)~(45-6)のいずれかで表される。

【0307】

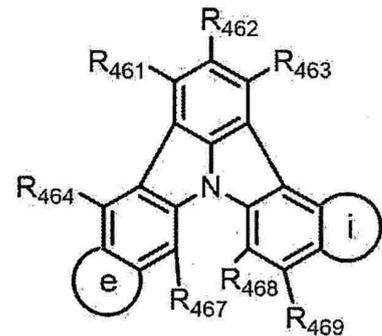
【化98】



(45-1)



(45-2)

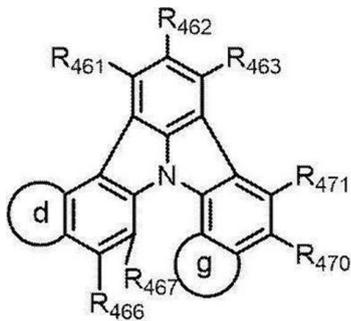


(45-3)

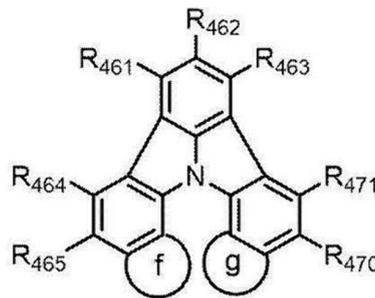
20

【0308】

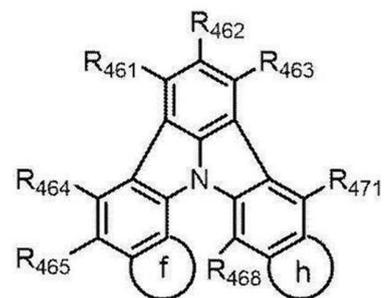
【化99】



(45-4)



(45-5)



(45-6)

30

40

【0309】

(前記一般式(45-1)~(45-6)において、

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

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

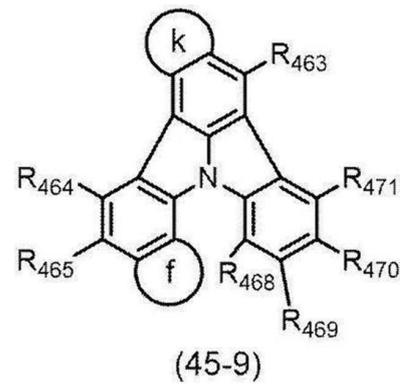
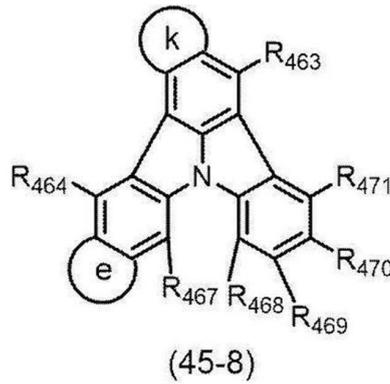
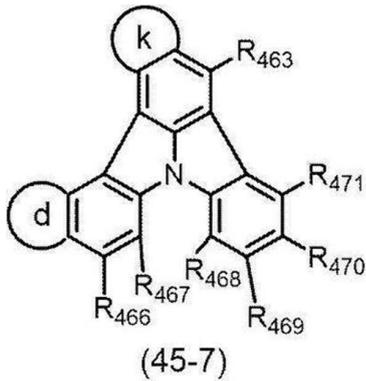
【0310】

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

50

【 0 3 1 1 】

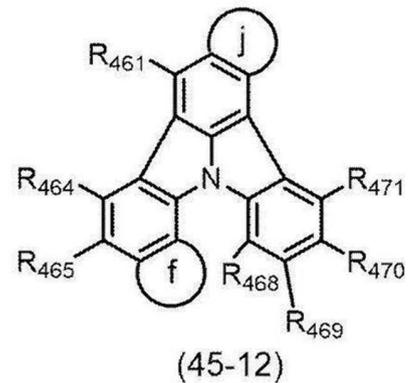
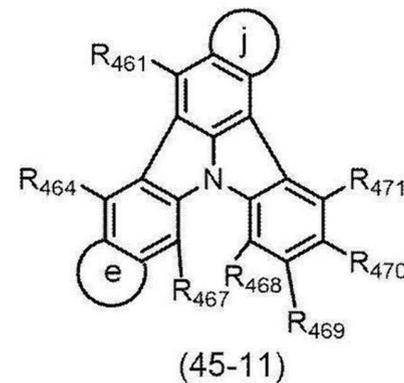
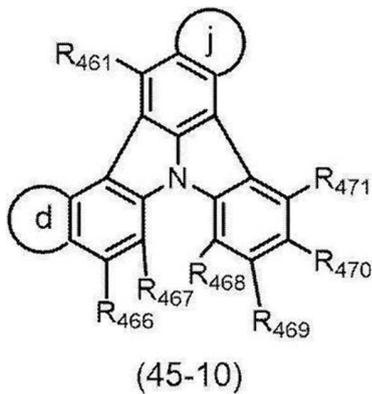
【 化 1 0 0 】



10

【 0 3 1 2 】

【 化 1 0 1 】



20

【 0 3 1 3 】

(前記一般式(45-7)~(45-12)において、

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

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

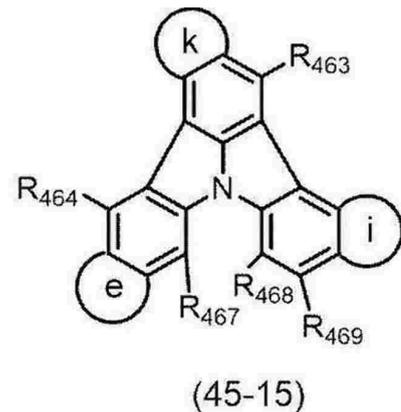
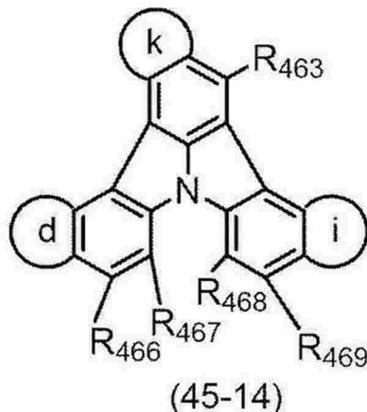
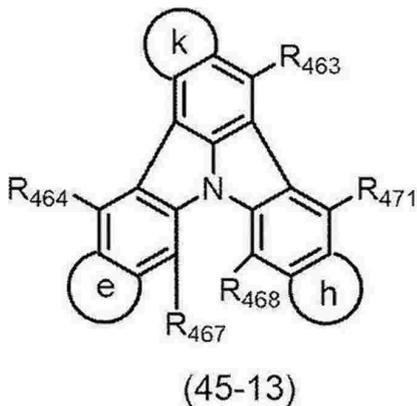
30

【 0 3 1 4 】

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

【 0 3 1 5 】

【 化 1 0 2 】

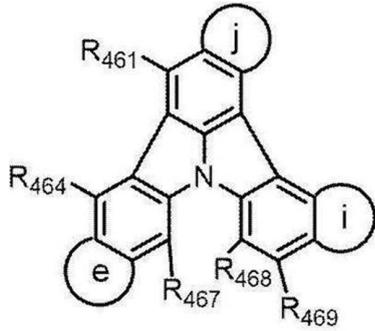


40

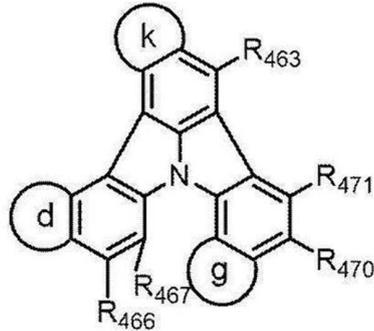
【 0 3 1 6 】

50

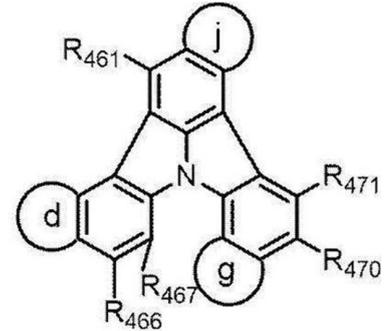
【化103】



(45-16)



(45-17)

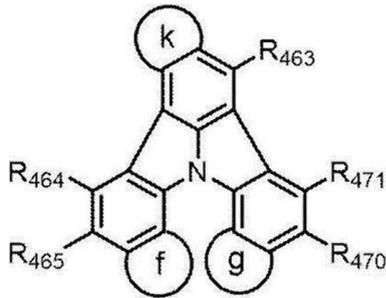


(45-18)

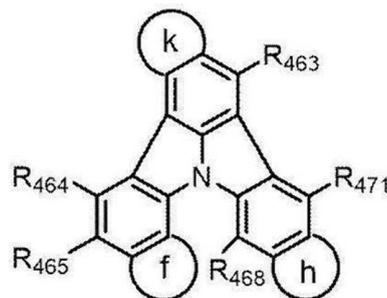
10

【0317】

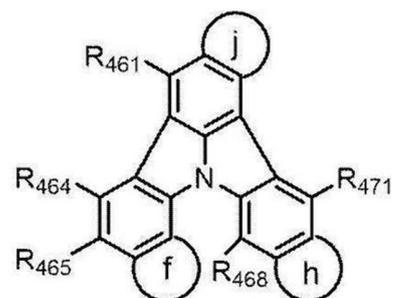
【化104】



(45-19)



(45-20)



(45-21)

20

【0318】

(前記一般式(45-13)~(45-21)において、

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

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

30

【0319】

前記環g又は前記環hがさらに置換基を有する場合の置換基としては、例えば、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、

前記一般式(461)で表される基、

前記一般式(463)で表される基、又は

前記一般式(464)で表される基が挙げられる。

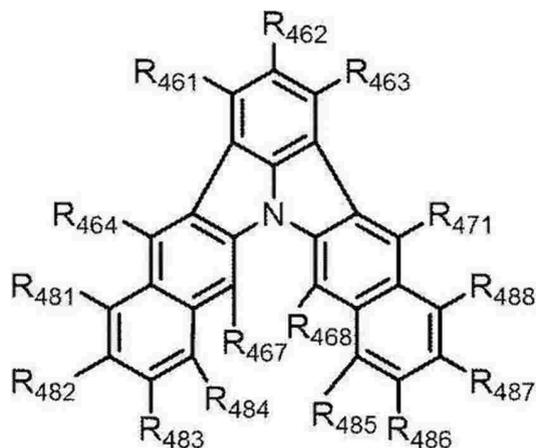
【0320】

一実施形態において、前記一般式(45)で表される化合物は、下記一般式(45-2)~(45-25)のいずれかで表される。

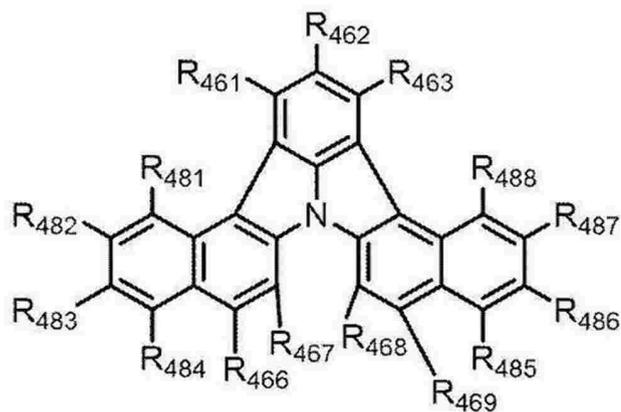
40

【0321】

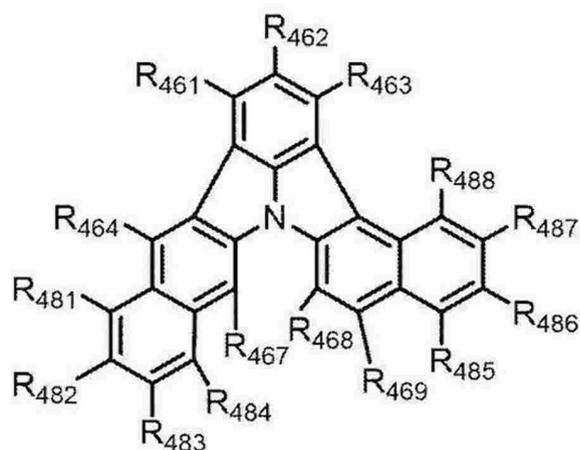
【化 1 0 5】



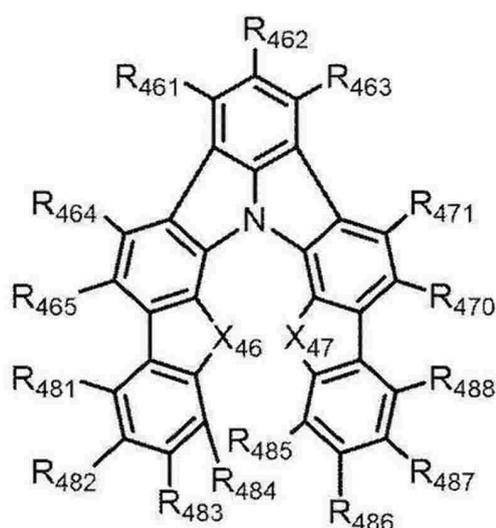
(45-22)



(45-23)



(45-24)



(45-25)

【 0 3 2 2】

(前記一般式(45-22)~(45-25)において、

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

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

R_{801} 、 R_{802} 及び R_{803} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基であり、

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

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

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

【 0 3 2 3】

10

20

30

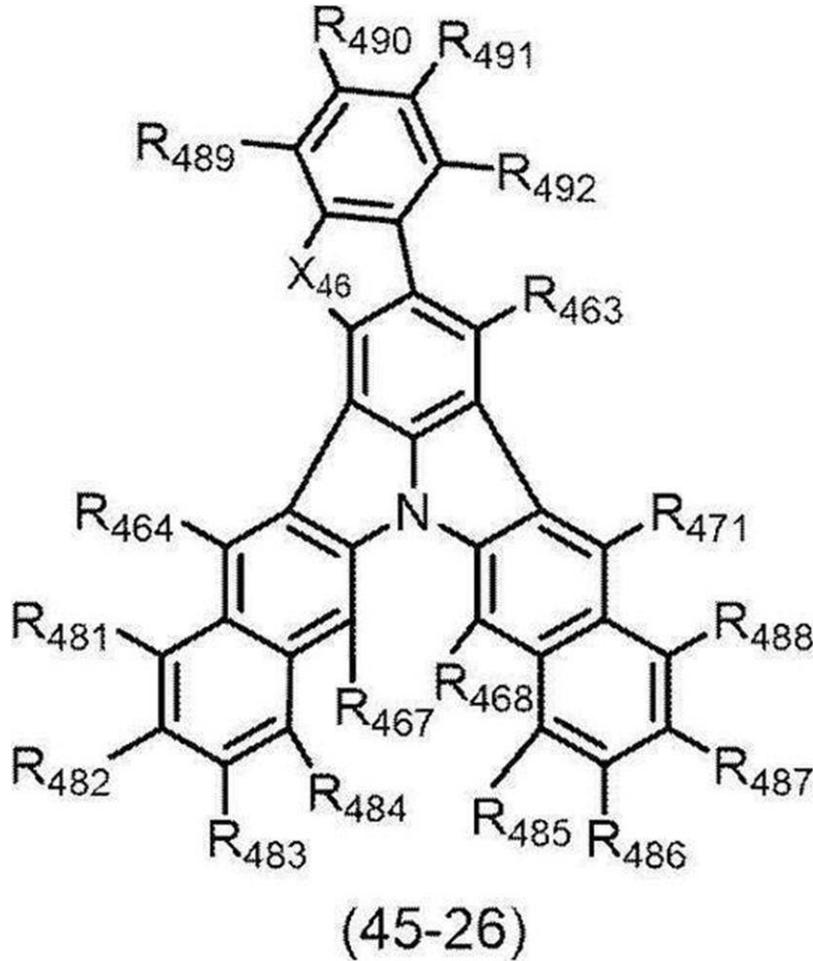
40

50

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

【0324】

【化106】



【0325】

(前記一般式(45-26)において、

X_{46} は、 $C(R_{801})(R_{802})$ 、 NR_{803} 、酸素原子又は硫黄原子であり、
 R_{463} 、 R_{464} 、 R_{467} 、 R_{468} 、 R_{471} 、及び $R_{481} \sim R_{492}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(45)における $R_{461} \sim R_{471}$ と同義である。

R_{801} 、 R_{802} 及び R_{803} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基であり、

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

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

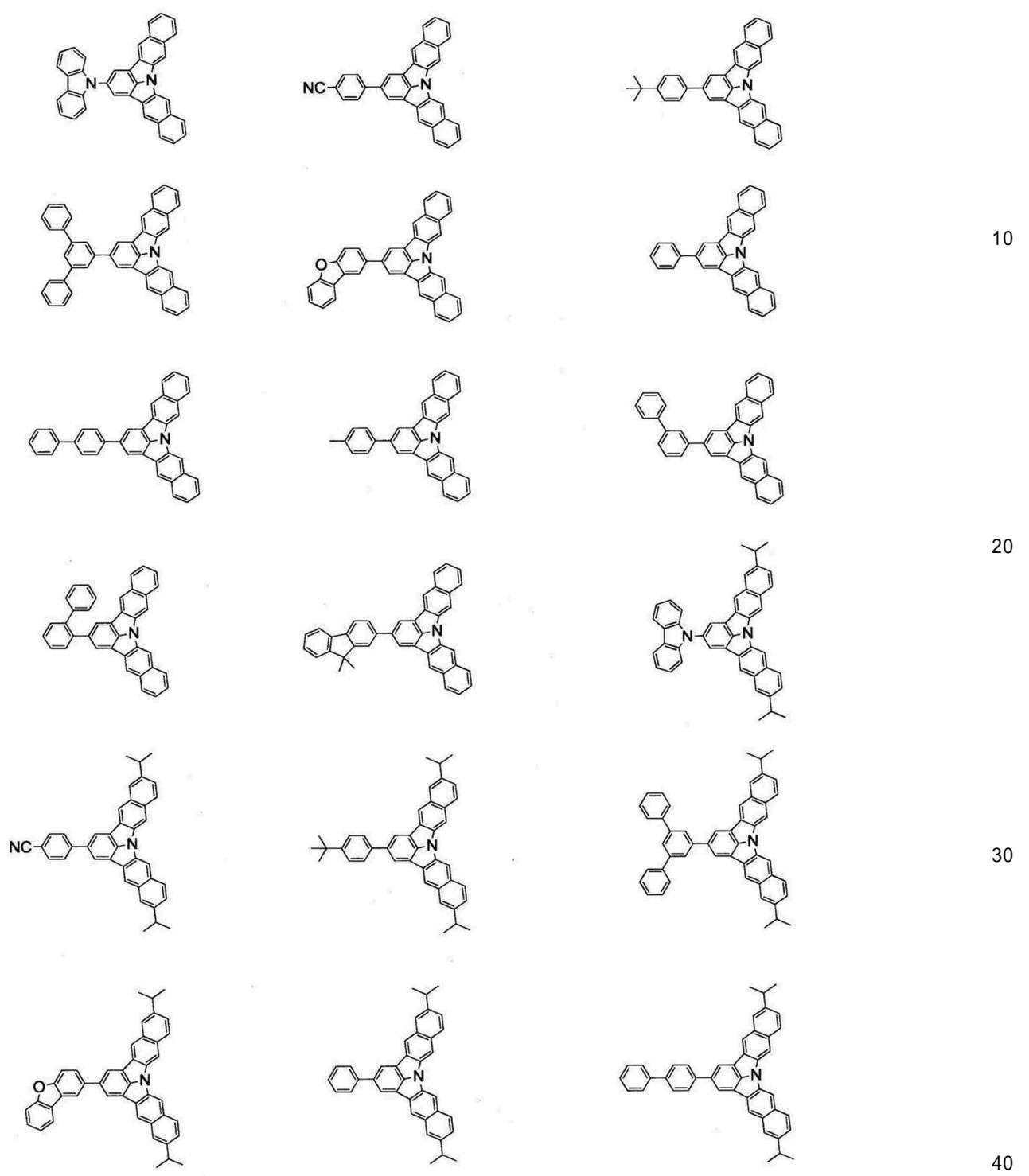
R_{803} が複数存在する場合、複数の R_{803} は、互いに同一であるか又は異なる。))

【0326】

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。

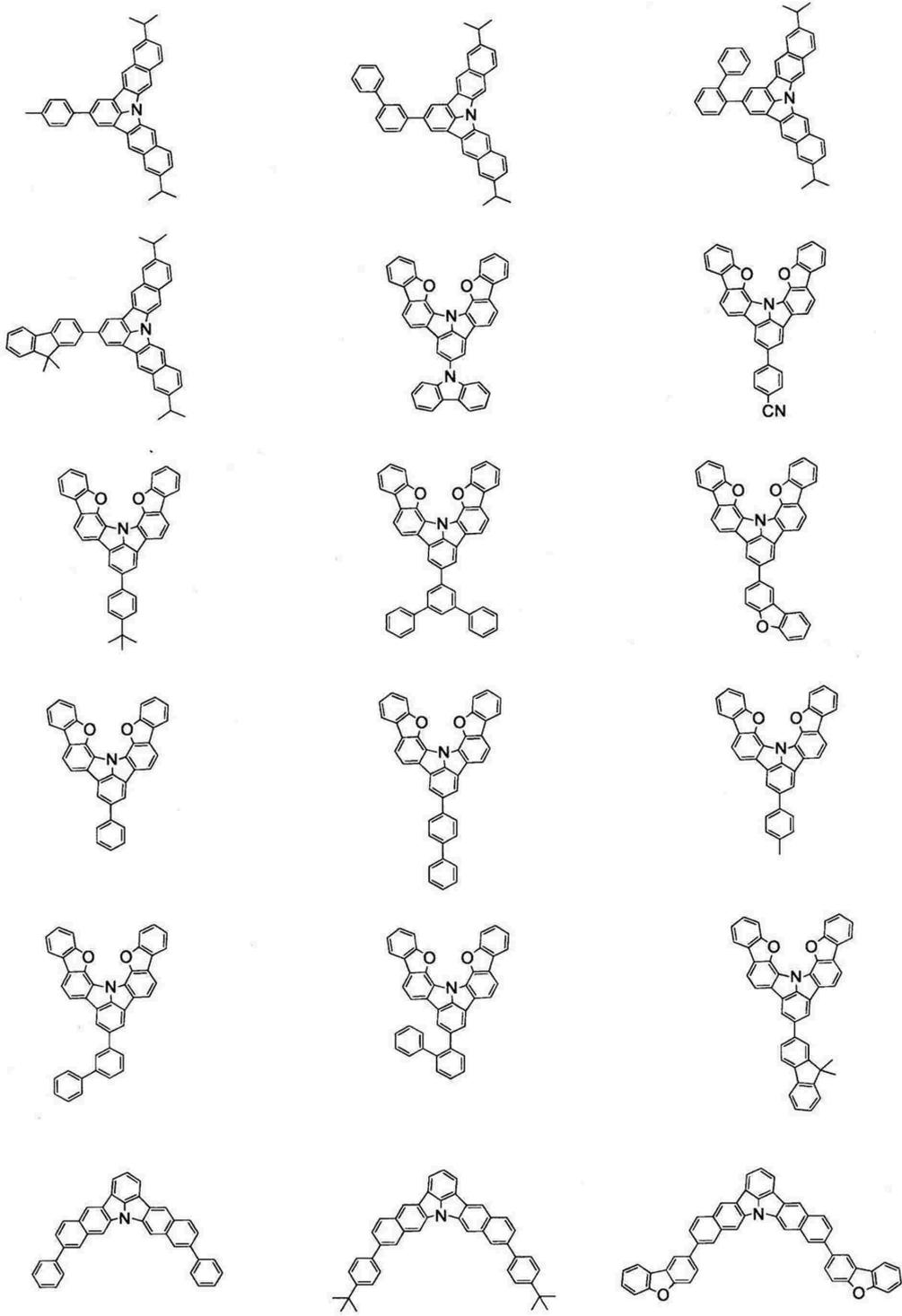
【0327】

【化 1 0 7】



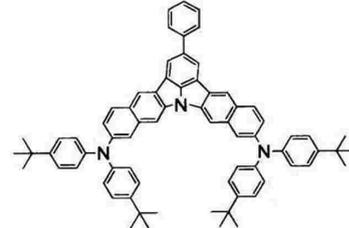
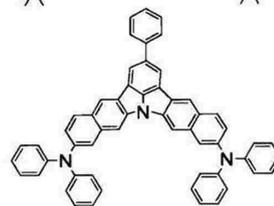
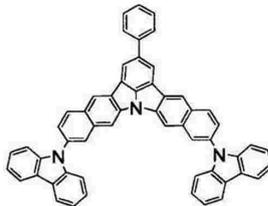
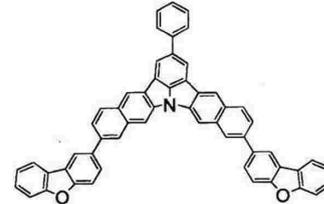
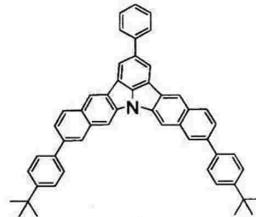
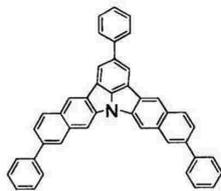
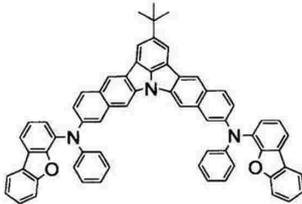
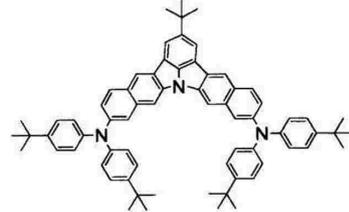
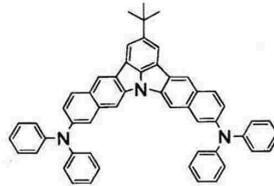
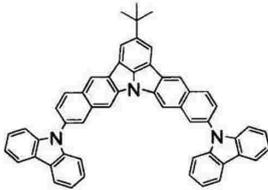
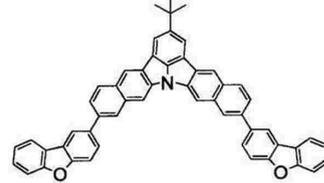
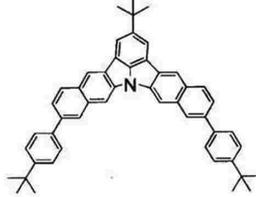
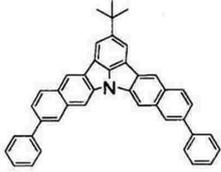
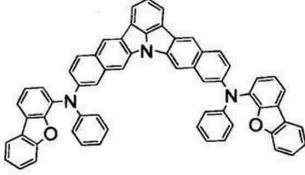
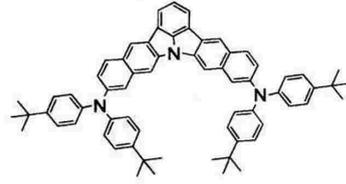
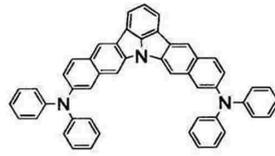
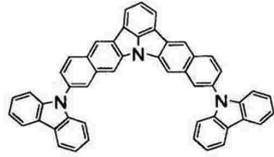
【 0 3 2 8】

【化 1 0 8】



【 0 3 2 9】

【化 1 0 9】



【 0 3 3 0】

10

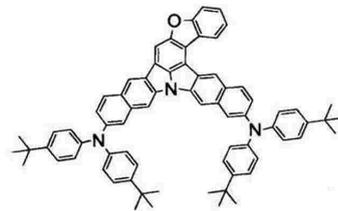
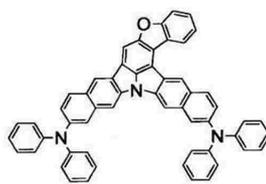
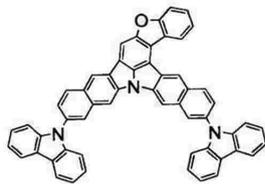
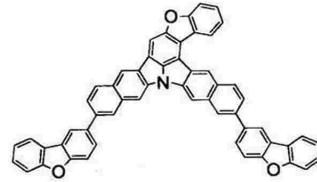
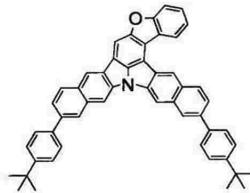
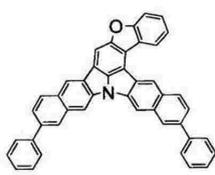
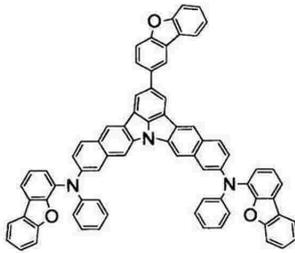
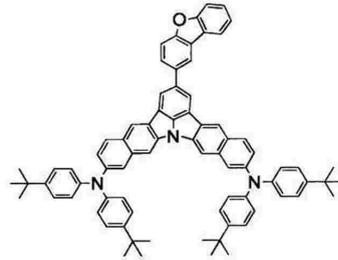
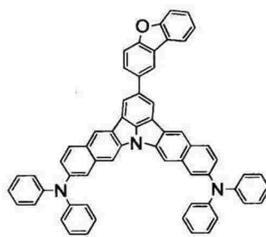
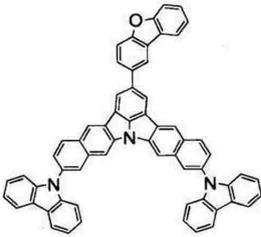
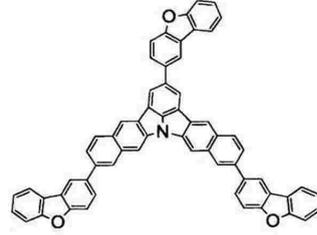
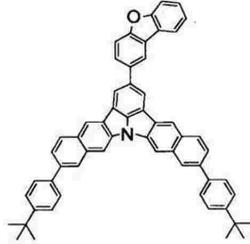
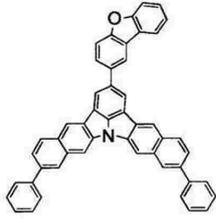
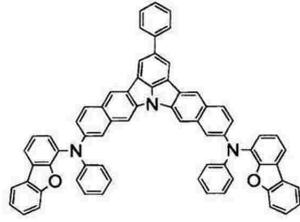
20

30

40

50

【化 1 1 0】



【 0 3 3 1】

10

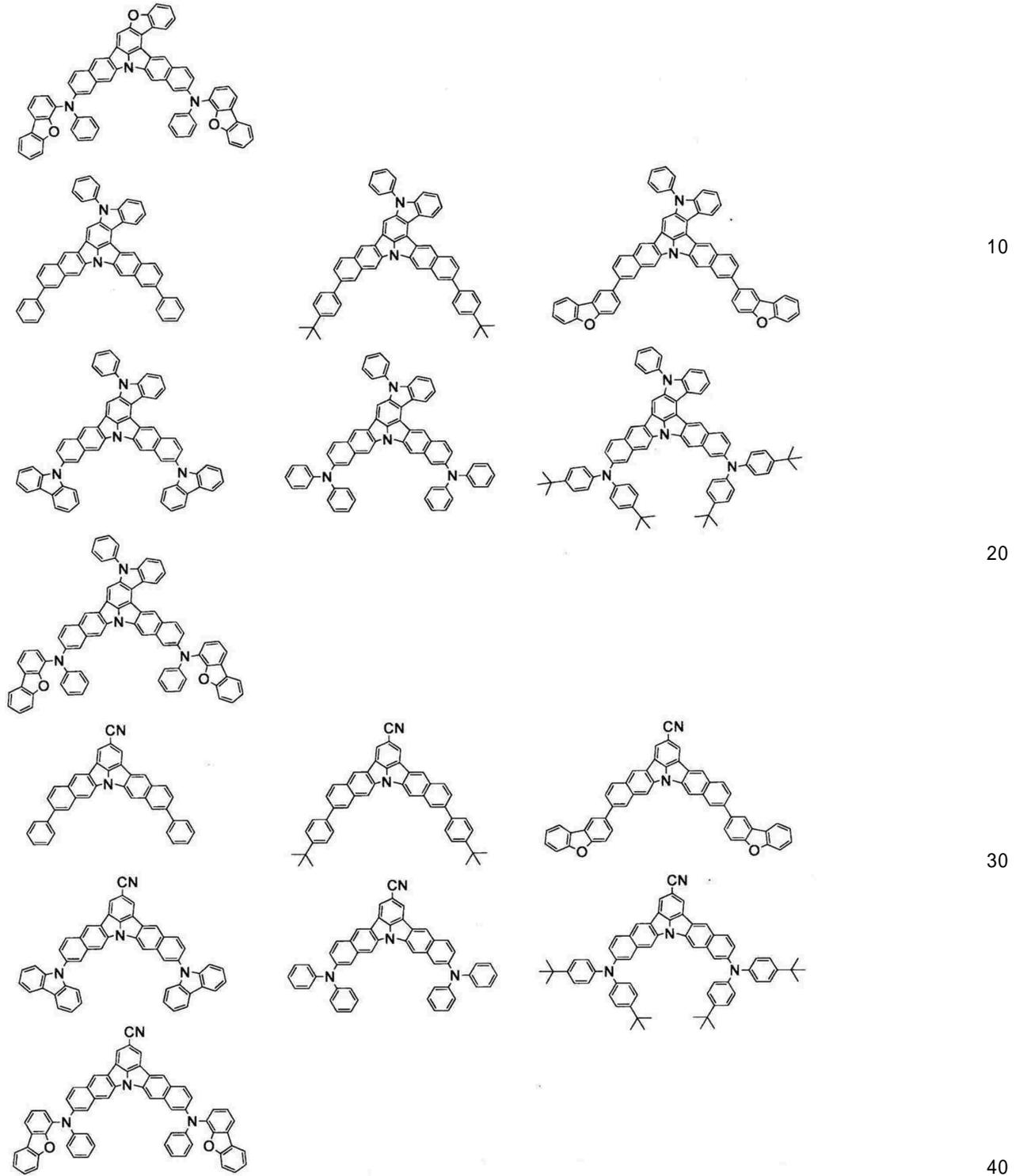
20

30

40

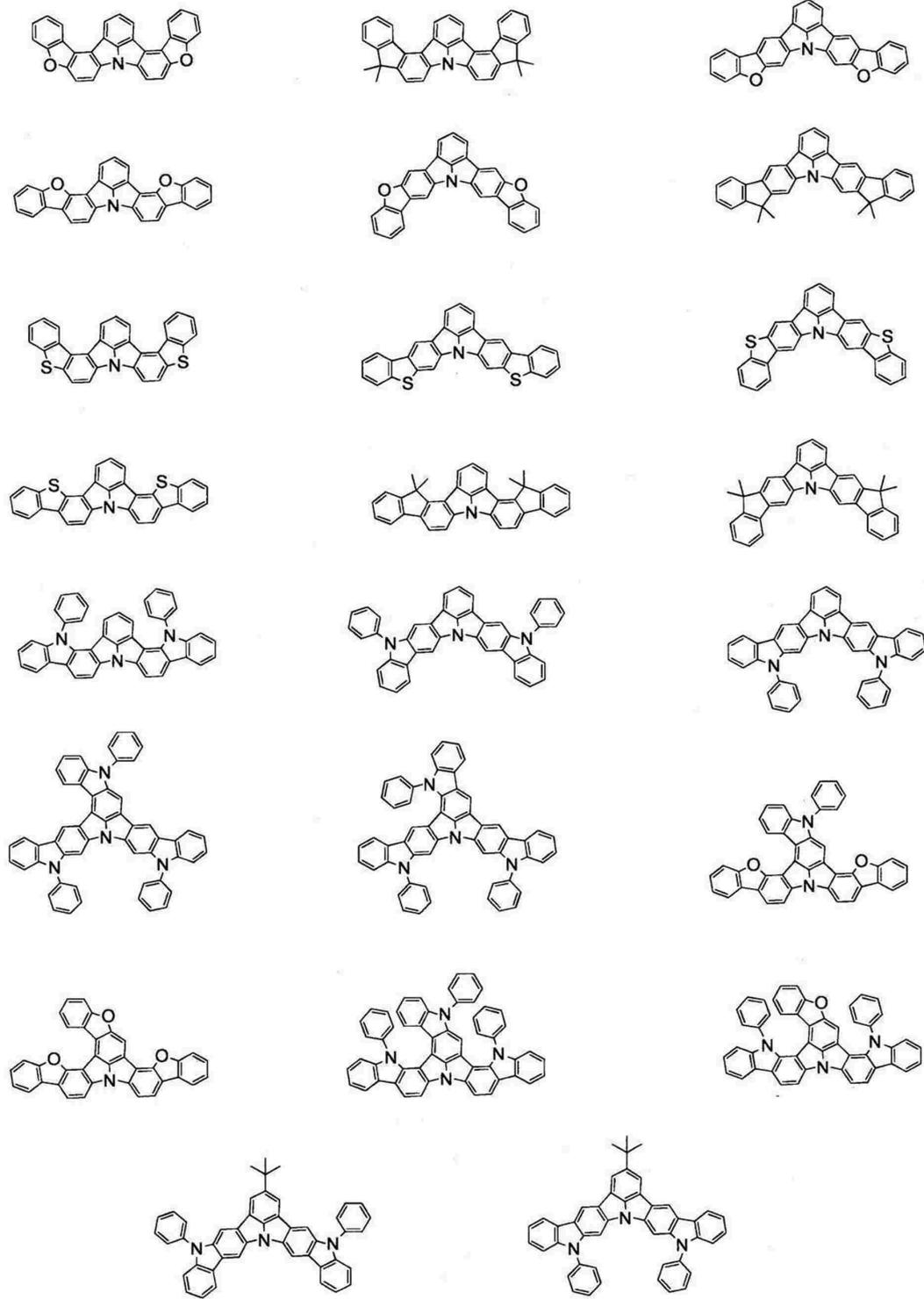
50

【化 1 1 1】



【 0 3 3 2】

【化 1 1 2】



10

20

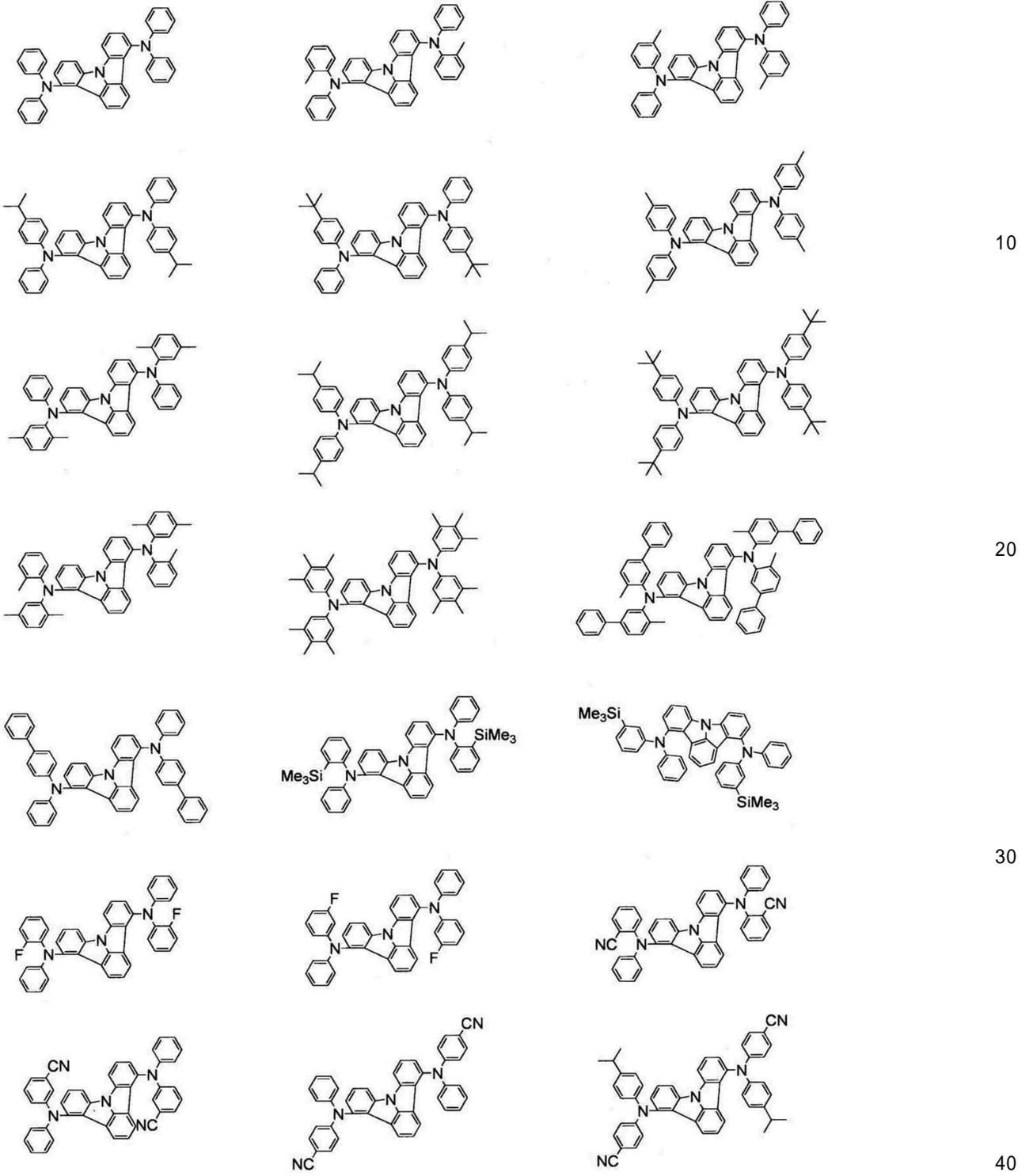
30

40

【 0 3 3 3】

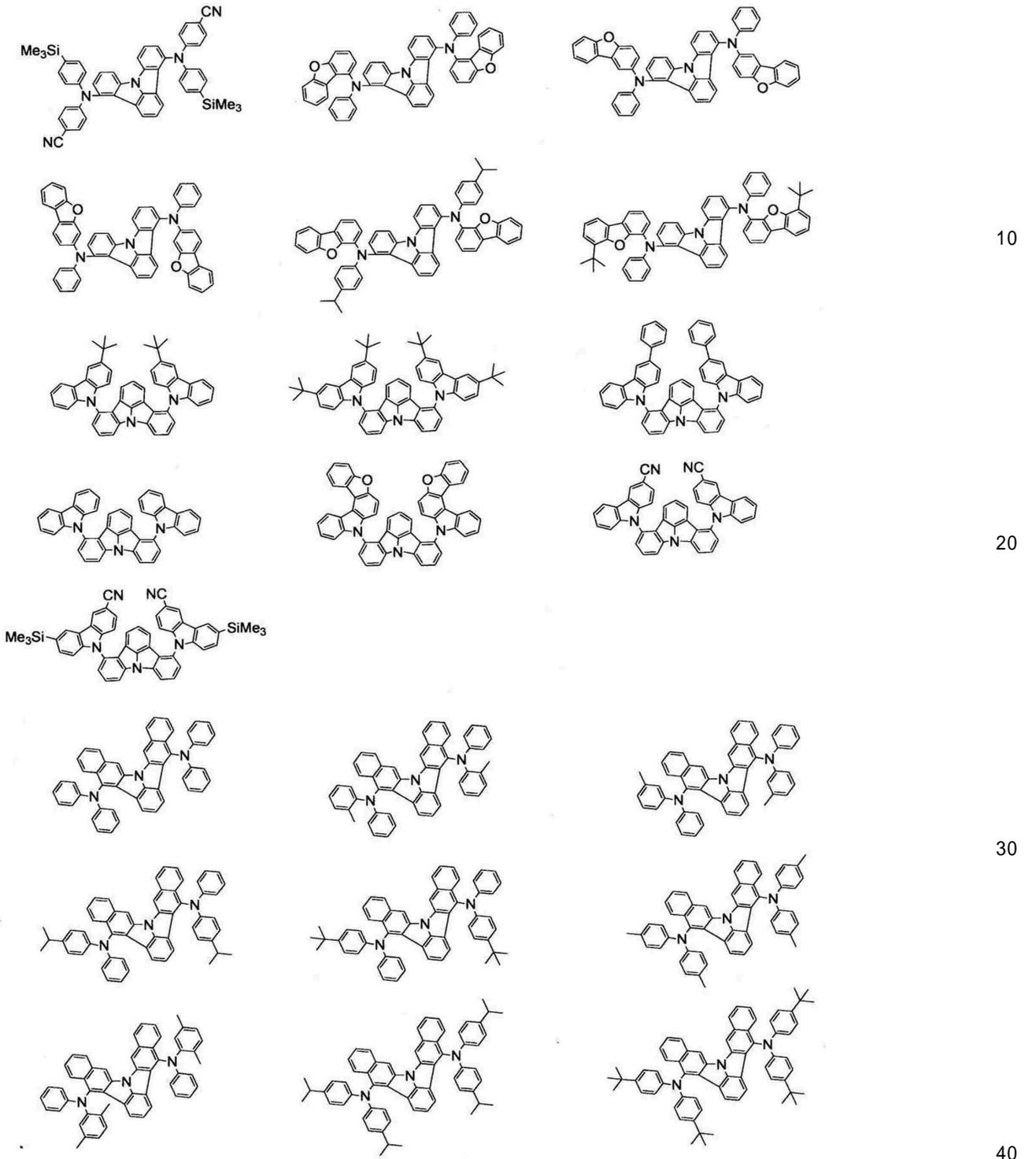
50

【化 1 1 3】



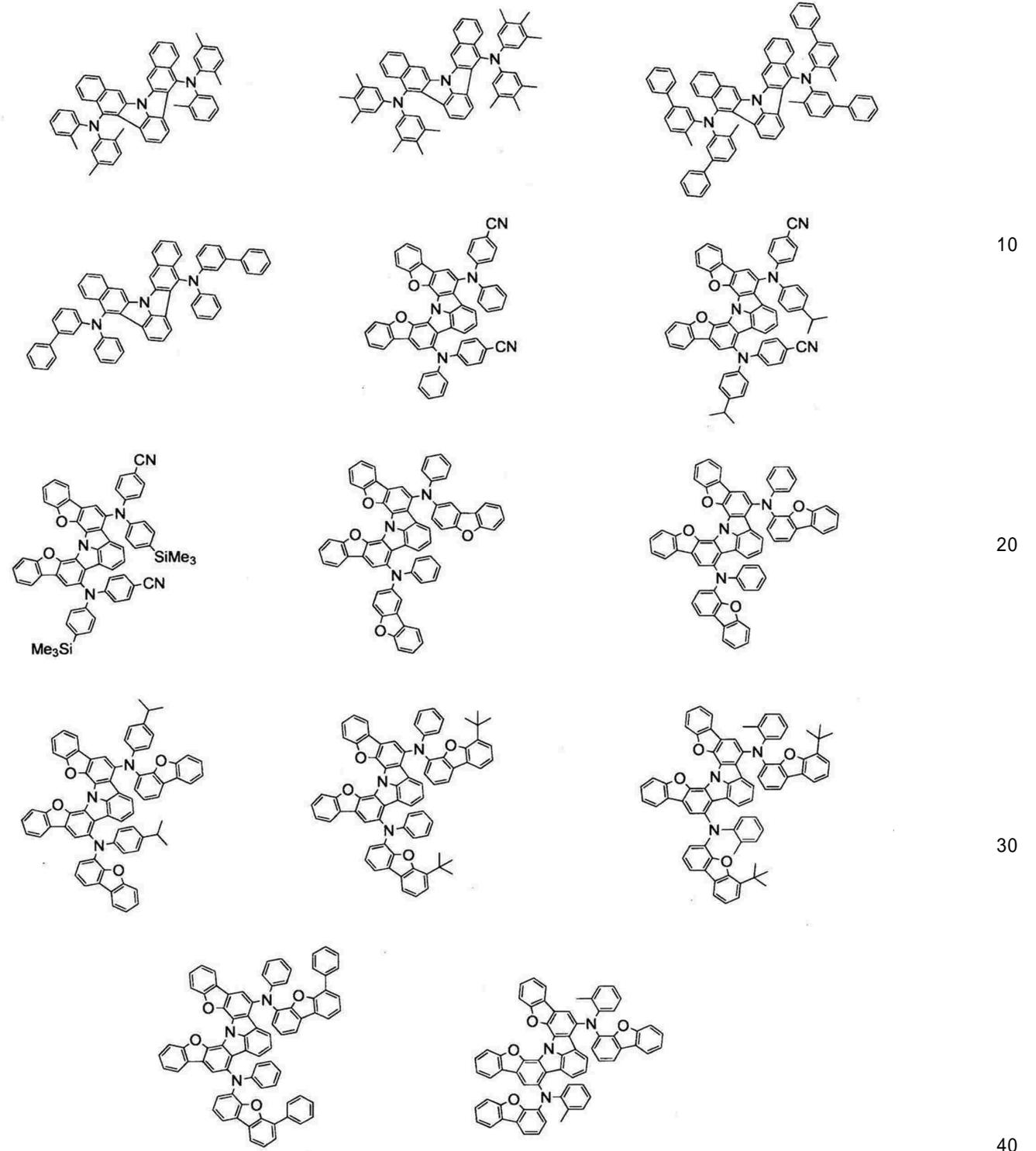
【 0 3 3 4】

【化 1 1 4】



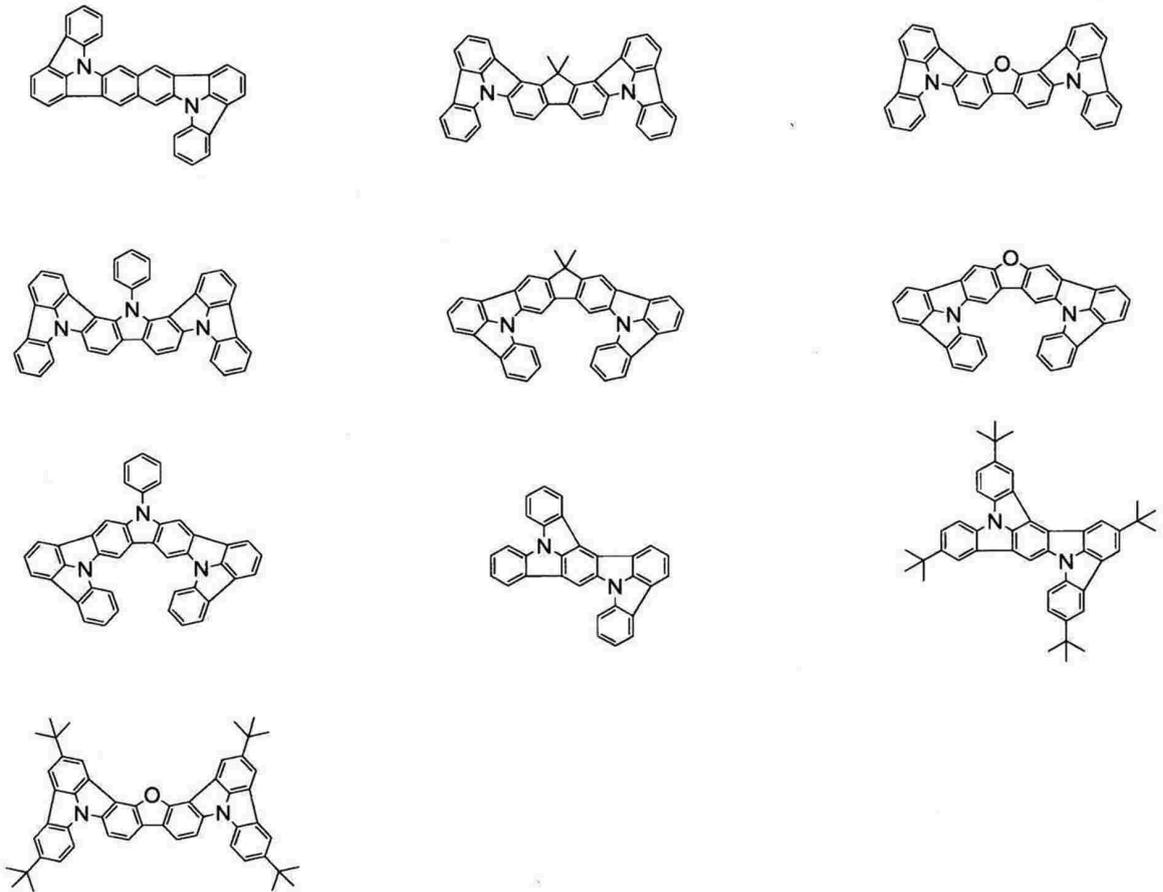
【 0 3 3 5】

【化 1 1 5】



【 0 3 3 6 】

【化 1 1 6】



10

20

【0 3 3 7】

(一般式(5)で表される化合物)

一般式(5)で表される化合物について説明する。一般式(5)で表される化合物は、上述した一般式(41-3)で表される化合物に対応する化合物である。

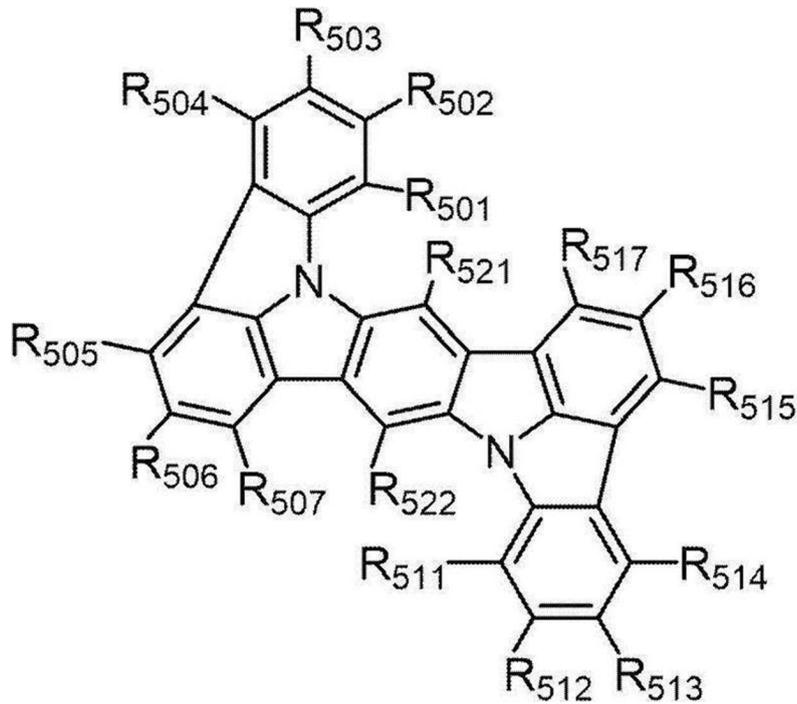
30

【0 3 3 8】

40

50

【化 1 1 7】



(5)

10

20

【 0 3 3 9 】

(前記一般式(5)において、

R501~R507及びR511~R517のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない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。

R521及びR522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、

30

40

50

- O - (R 9 0 4) で表される基、
- S - (R 9 0 5) で表される基、
- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、
- ハロゲン原子、
- シアノ基、
- ニトロ基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は
- 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。)

【 0 3 4 0 】

「 R 5 0 1 ~ R 5 0 7 及び R 5 1 1 ~ R 5 1 7 のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組」は、例えば、 R 5 0 1 と R 5 0 2 からなる組、 R 5 0 2 と R 5 0 3 からなる組、 R 5 0 3 と R 5 0 4 からなる組、 R 5 0 5 と R 5 0 6 からなる組、 R 5 0 6 と R 5 0 7 からなる組、 R 5 0 1 と R 5 0 2 と R 5 0 3 からなる組等の組合せである。

10

【 0 3 4 1 】

一実施形態において、 R 5 0 1 ~ R 5 0 7 及び R 5 1 1 ~ R 5 1 7 の少なくとも 1 つ、好ましくは 2 つが - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基である。

【 0 3 4 2 】

一実施形態においては、 R 5 0 1 ~ R 5 0 7 及び R 5 1 1 ~ R 5 1 7 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 ~ 5 0 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。

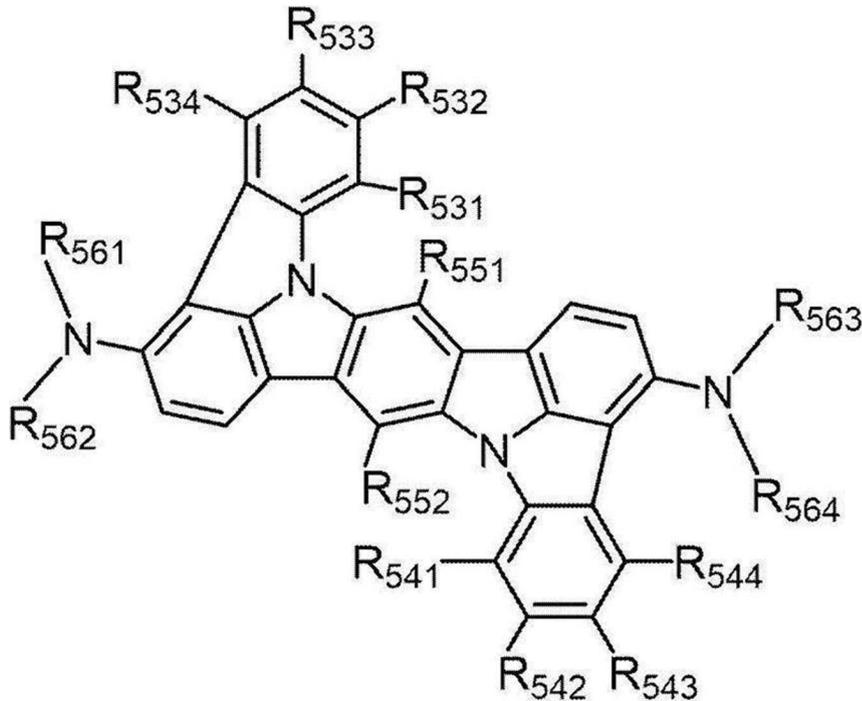
20

【 0 3 4 3 】

一実施形態においては、前記一般式 (5) で表される化合物は、下記一般式 (5 2) で表される化合物である。

【 0 3 4 4 】

【 化 1 1 8 】



30

(52)

40

【 0 3 4 5 】

(前記一般式 (5 2) において、

R 5 3 1 ~ R 5 3 4 及び R 5 4 1 ~ R 5 4 4 のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

50

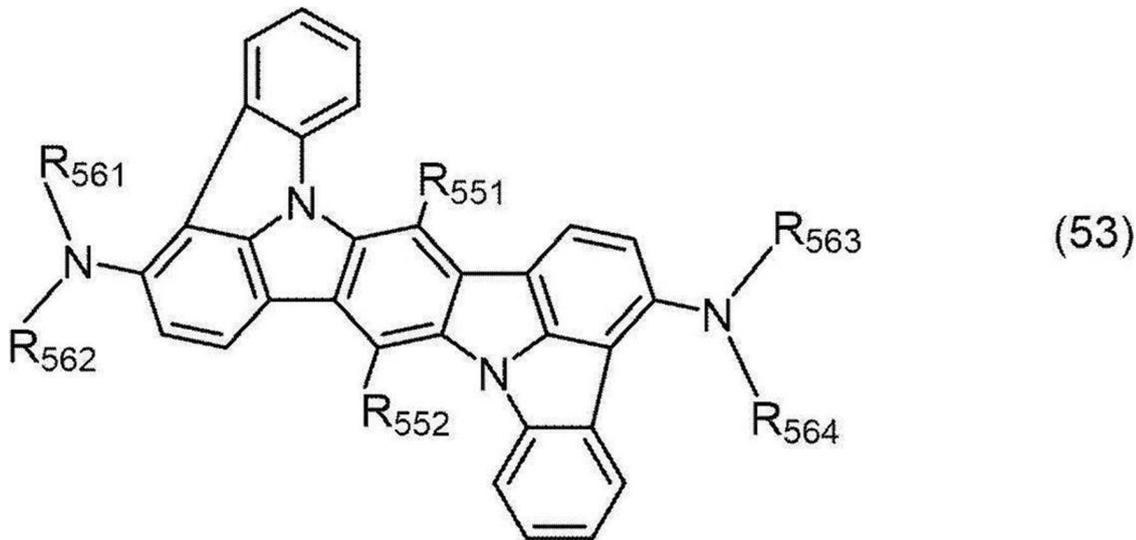
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず、
 前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{531} \sim R_{534}$ 、 $R_{541} \sim R_{544}$ 、並びに R_{551} 及び R_{552} は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 $R_{561} \sim R_{564}$ は、それぞれ独立に、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。) 10

【0346】

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

【0347】

【化119】



【0348】

(前記一般式(53)において、 R_{551} 、 R_{552} 及び $R_{561} \sim R_{564}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(52)における R_{551} 、 R_{552} 及び $R_{561} \sim R_{564}$ と同義である。)

【0349】

一実施形態においては、前記一般式(52)及び一般式(53)における $R_{561} \sim R_{564}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基(好ましくはフェニル基)である。

【0350】

一実施形態においては、前記一般式(5)における R_{521} 及び R_{522} 、前記一般式(52)及び一般式(53)における R_{551} 及び R_{552} は、水素原子である。 40

【0351】

一実施形態においては、前記一般式(5)、一般式(52)及び一般式(53)における、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、

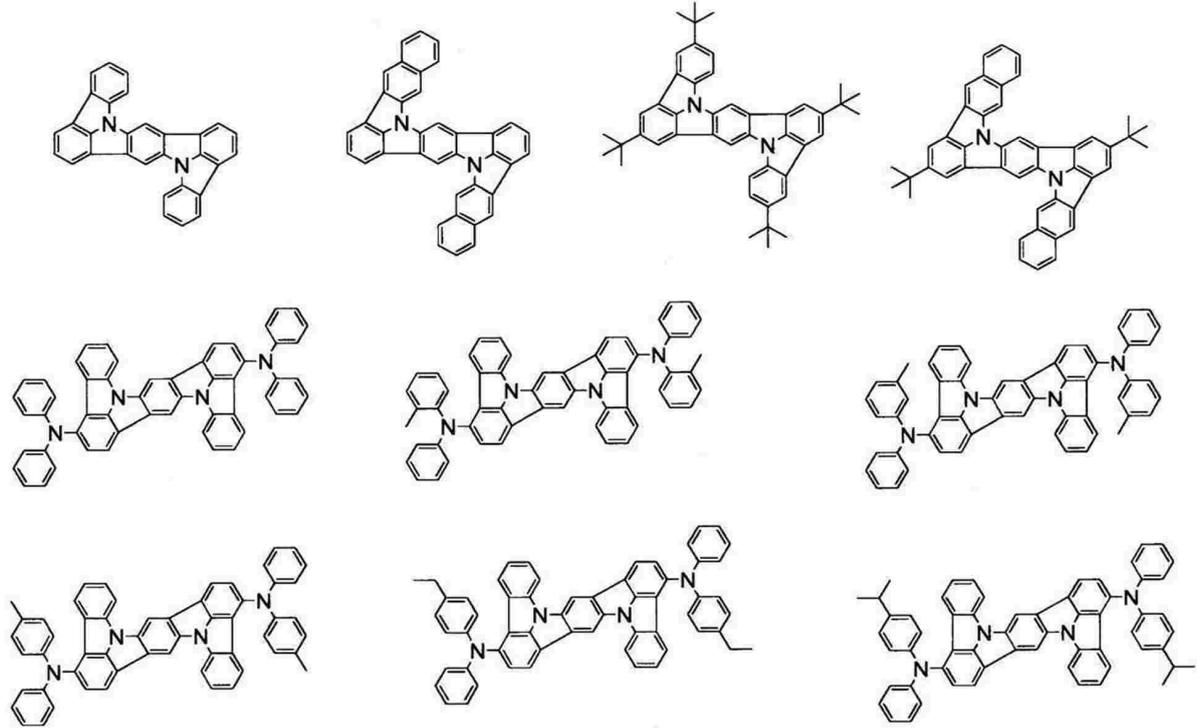
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。 50

【 0 3 5 2 】

前記一般式(5)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

【 0 3 5 3 】

【 化 1 2 0 】



10

20

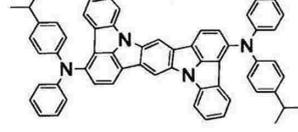
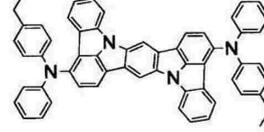
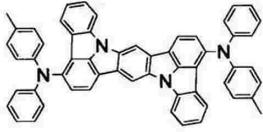
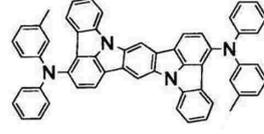
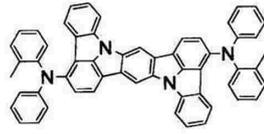
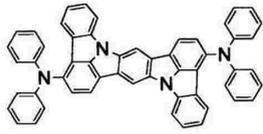
【 0 3 5 4 】

30

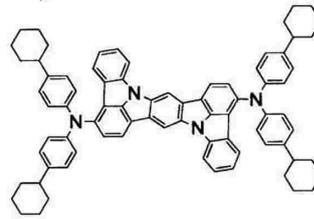
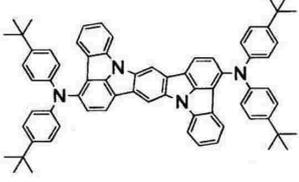
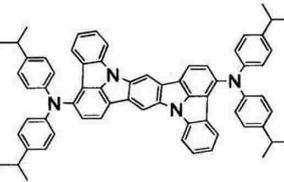
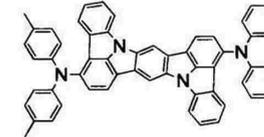
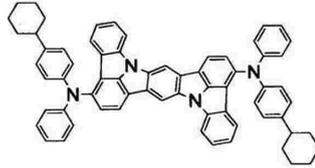
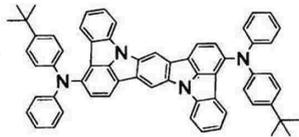
40

50

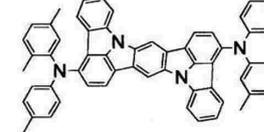
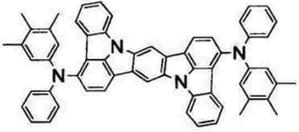
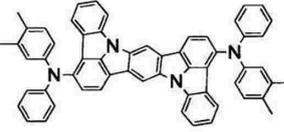
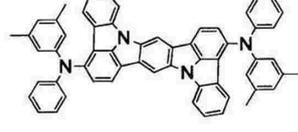
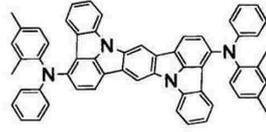
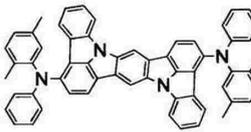
【化 1 2 1】



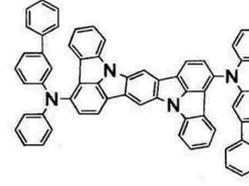
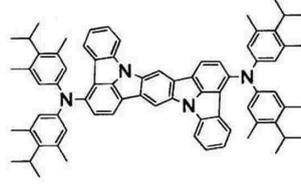
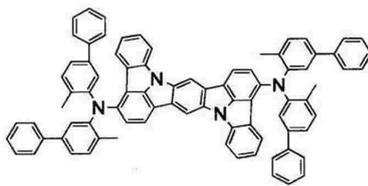
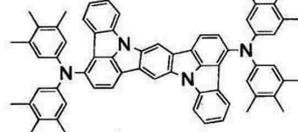
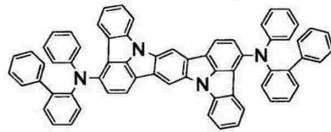
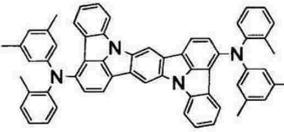
10



20



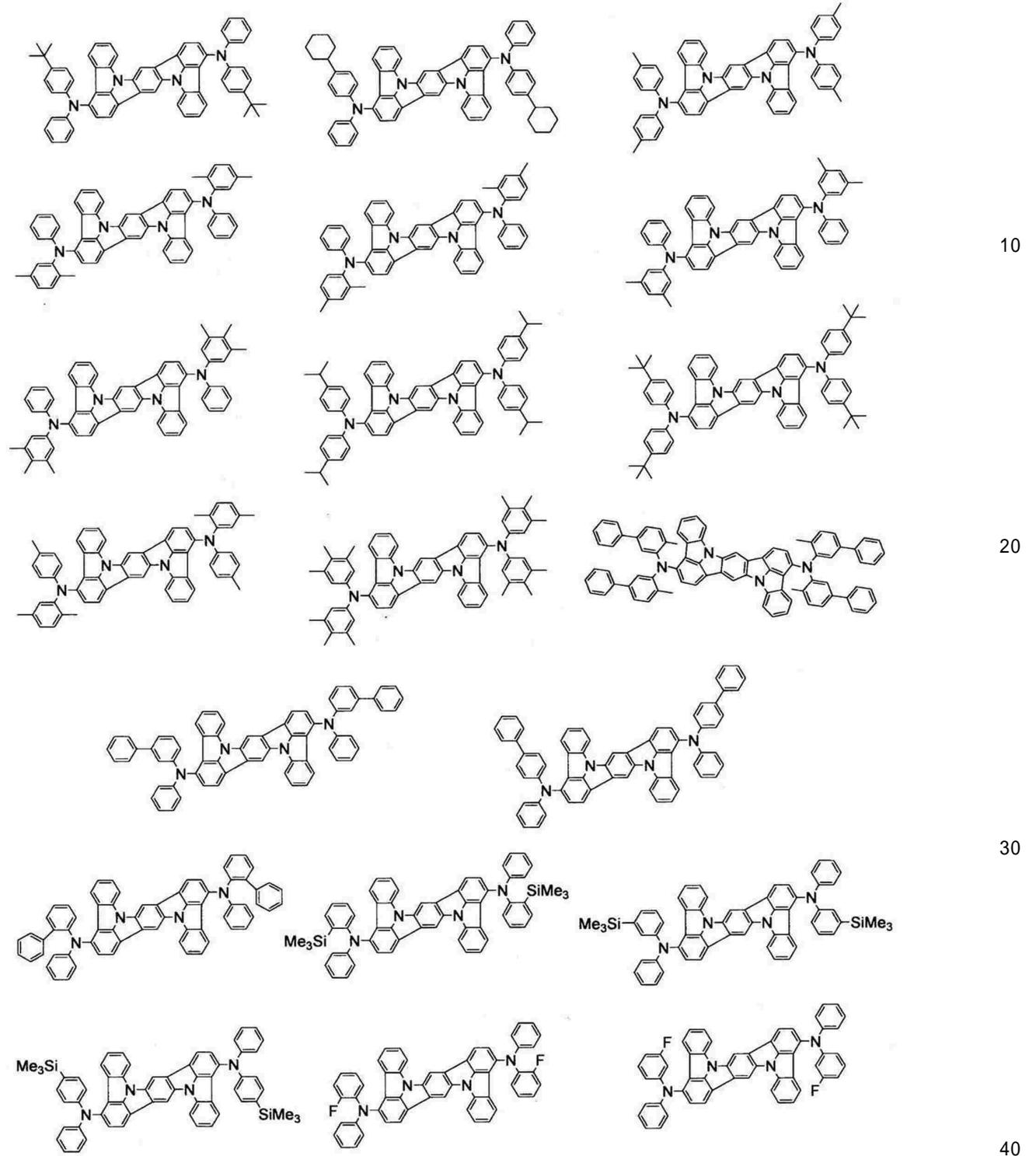
30



40

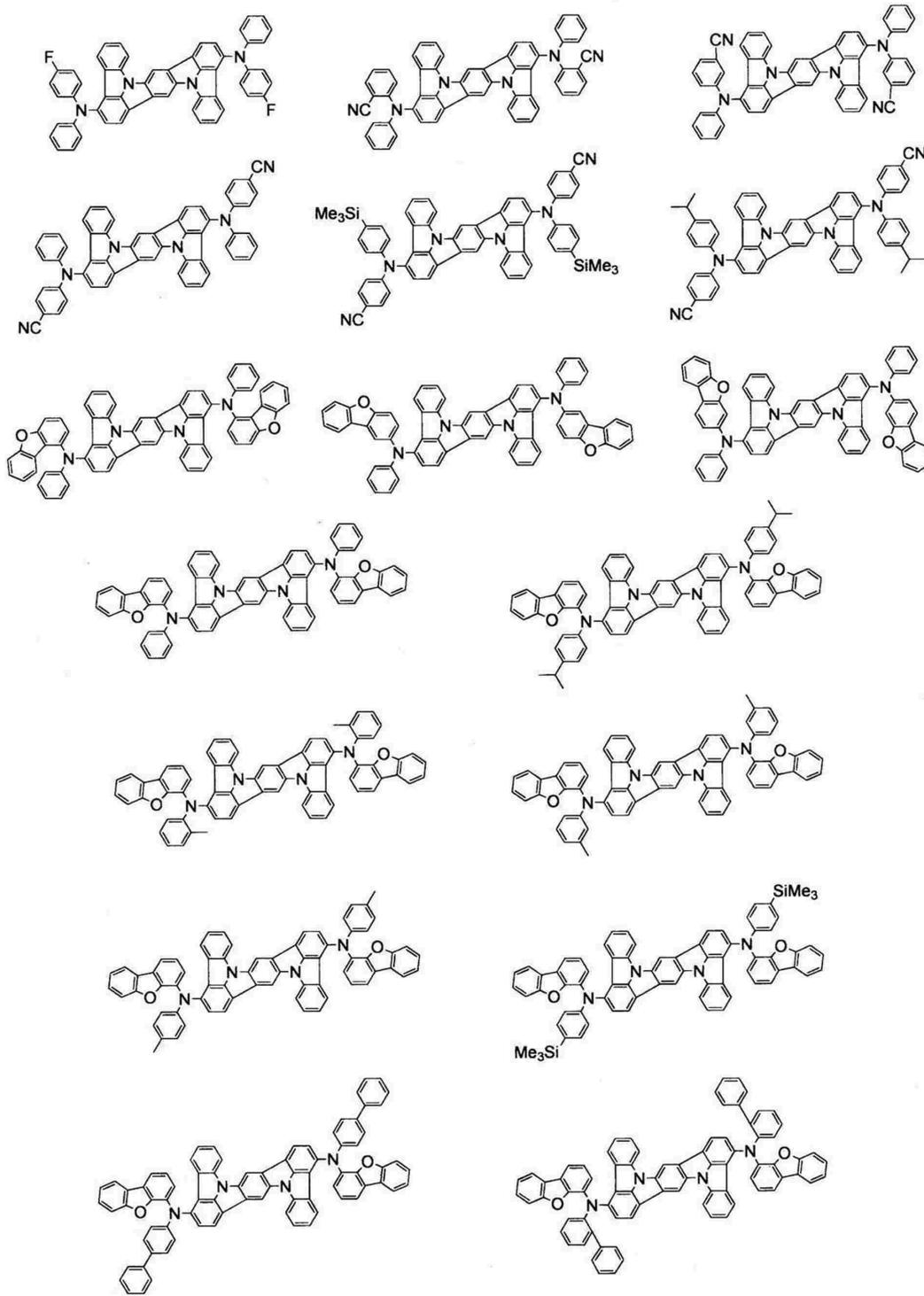
【 0 3 5 5】

【化 1 2 2】



【 0 3 5 6】

【化 1 2 3】



【 0 3 5 7】

10

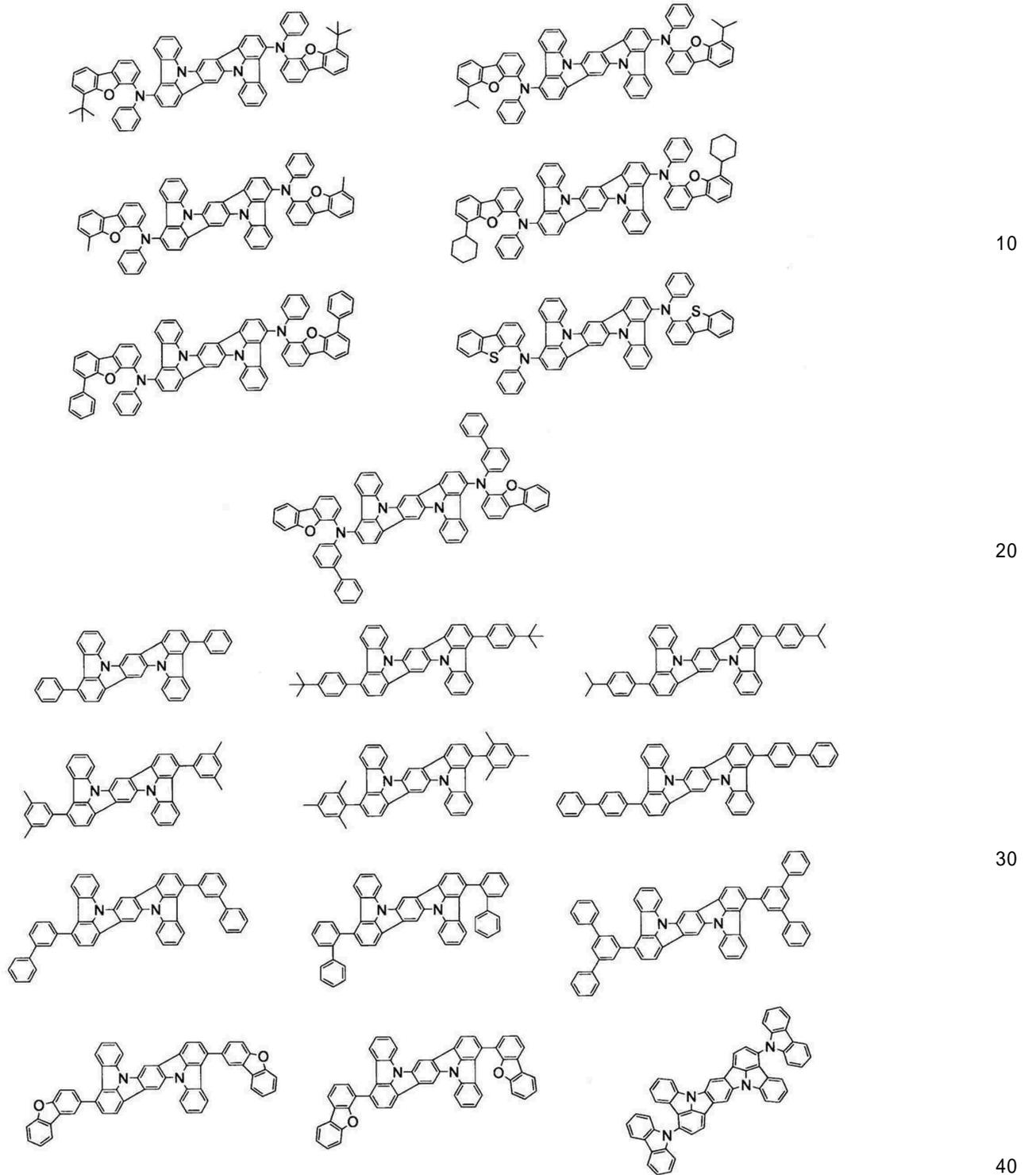
20

30

40

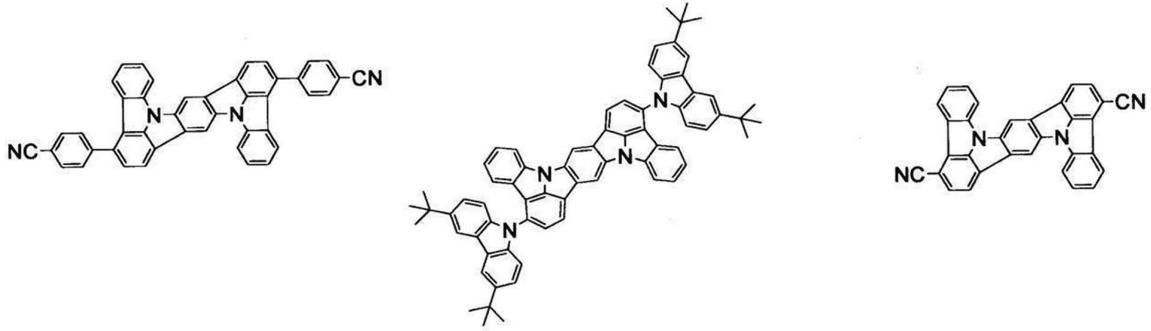
50

【化 1 2 4】



【 0 3 5 8】

【化 1 2 5】



10

【 0 3 5 9】

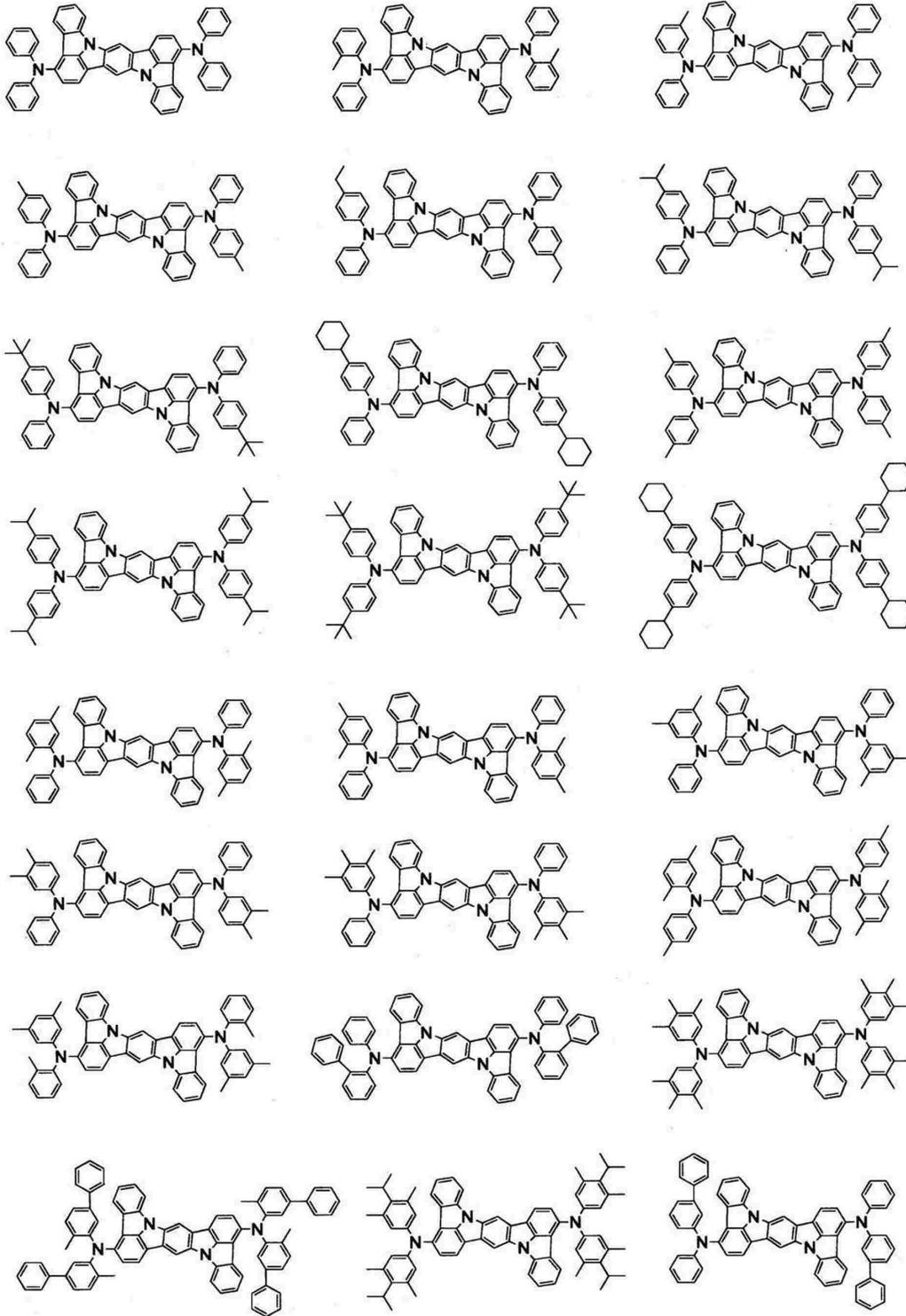
20

30

40

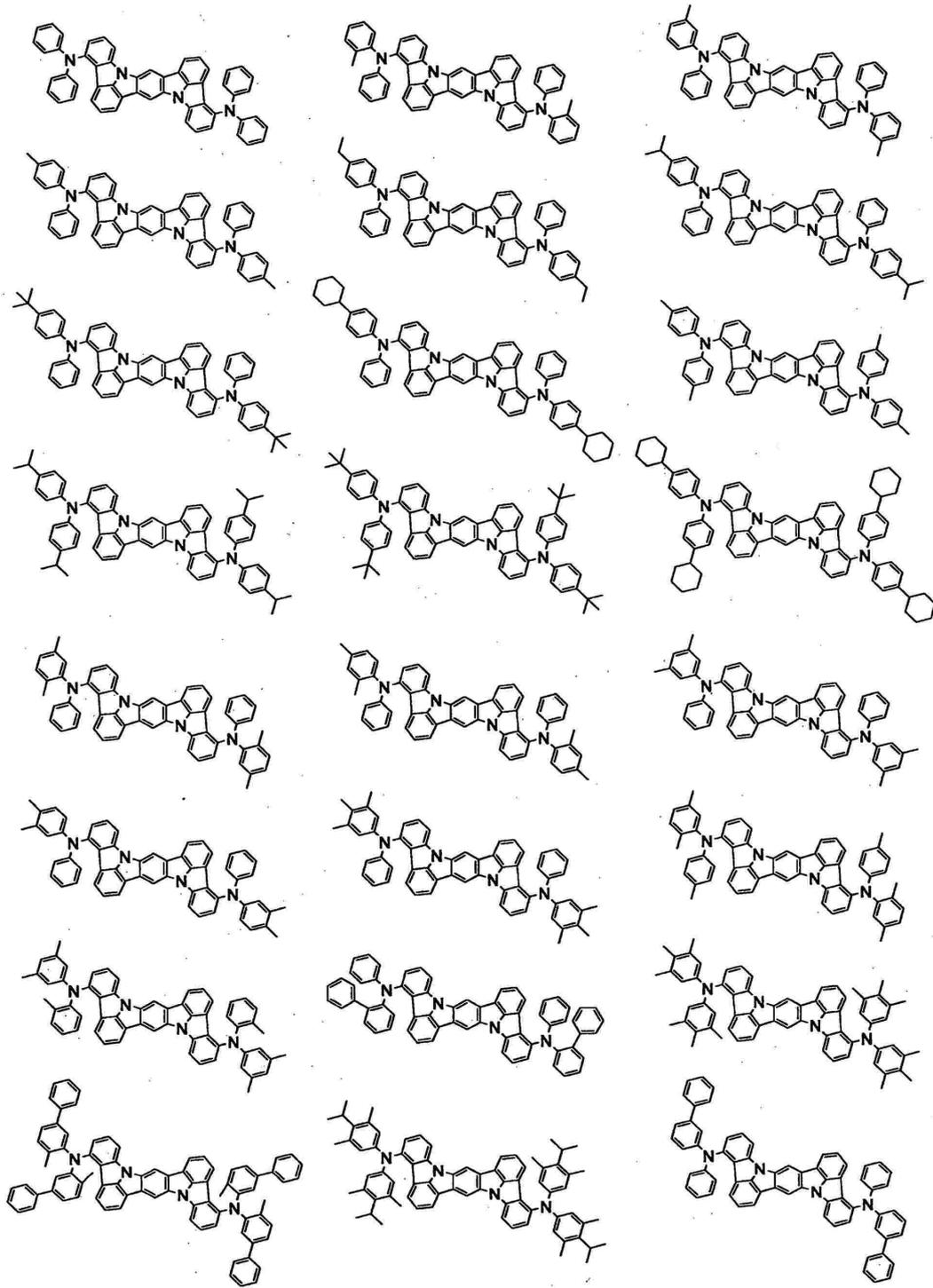
50

【化 1 2 6】



【 0 3 6 0】

【化 1 2 7】



10

20

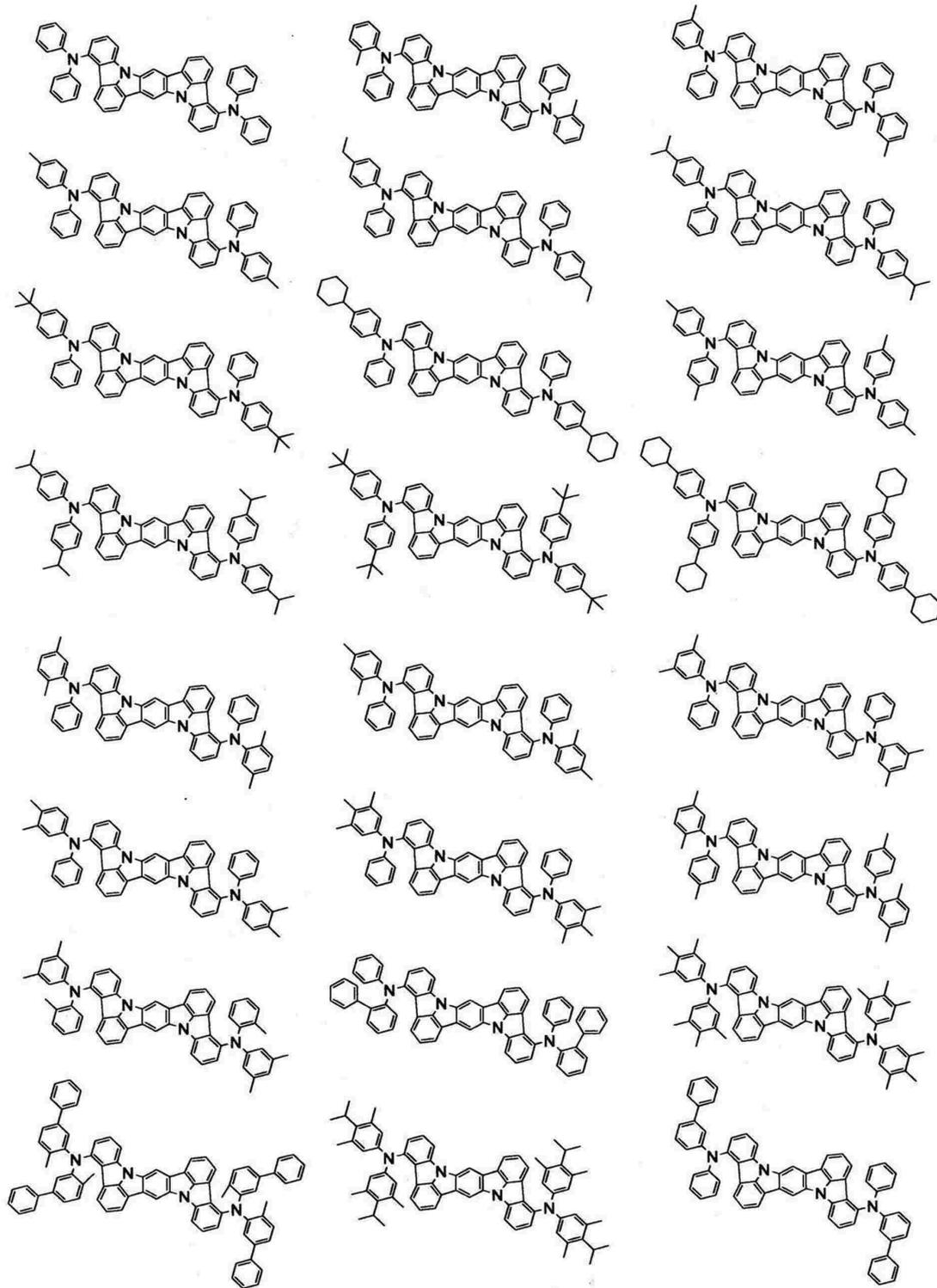
30

40

【 0 3 6 1 】

50

【化 1 2 8】



【 0 3 6 2】

10

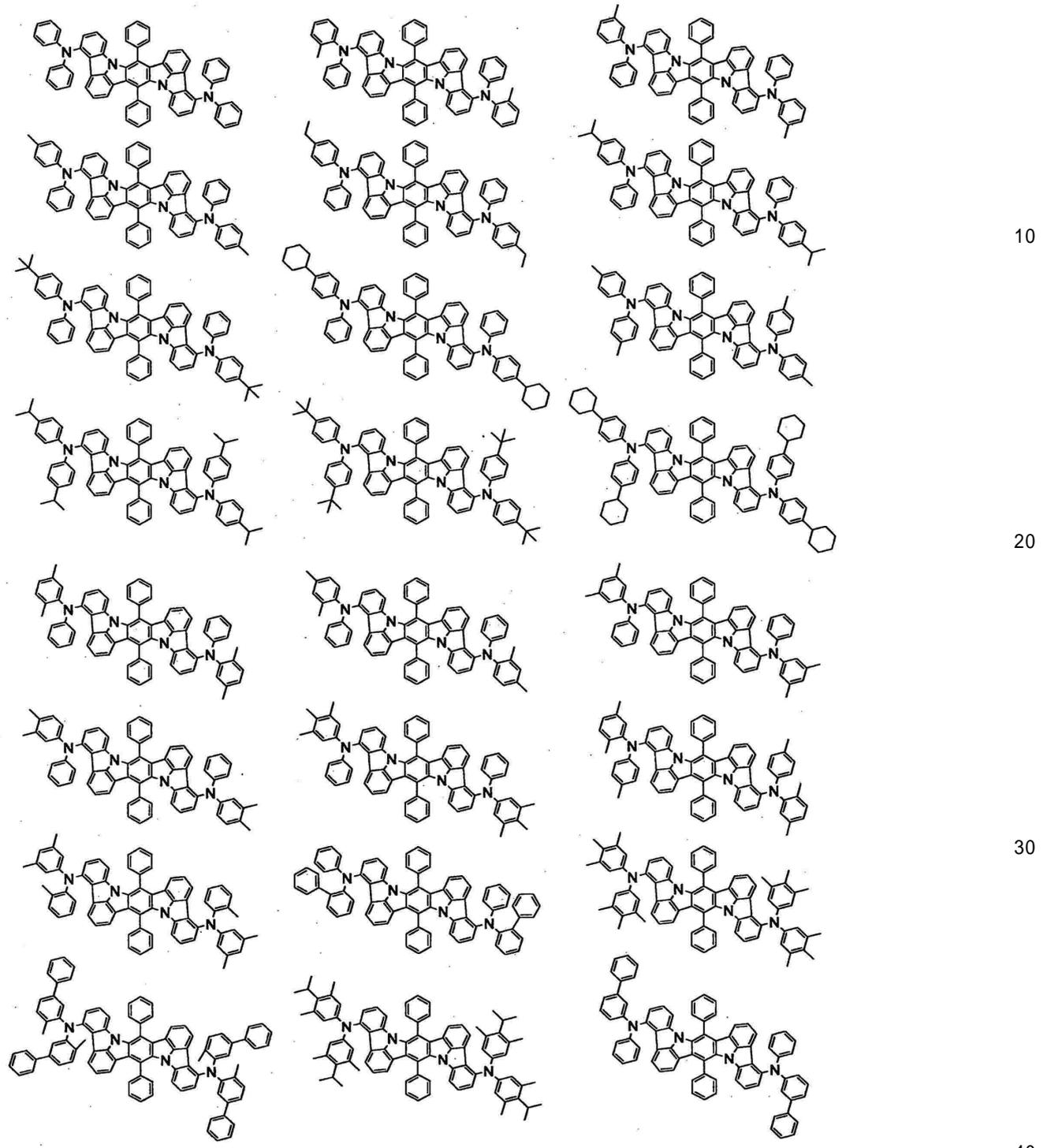
20

30

40

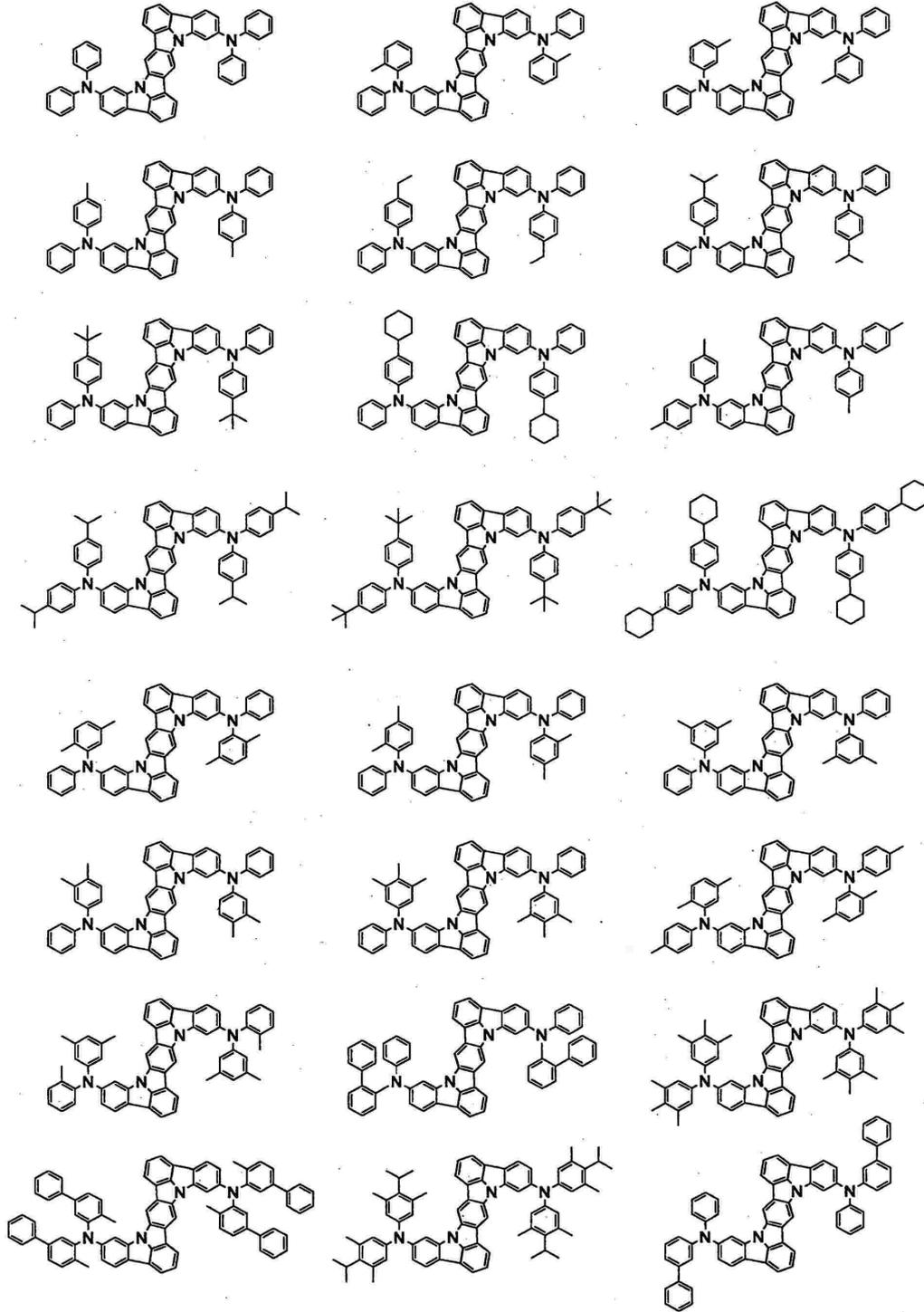
50

【化 1 2 9】



【 0 3 6 3】

【化 1 3 0】



10

20

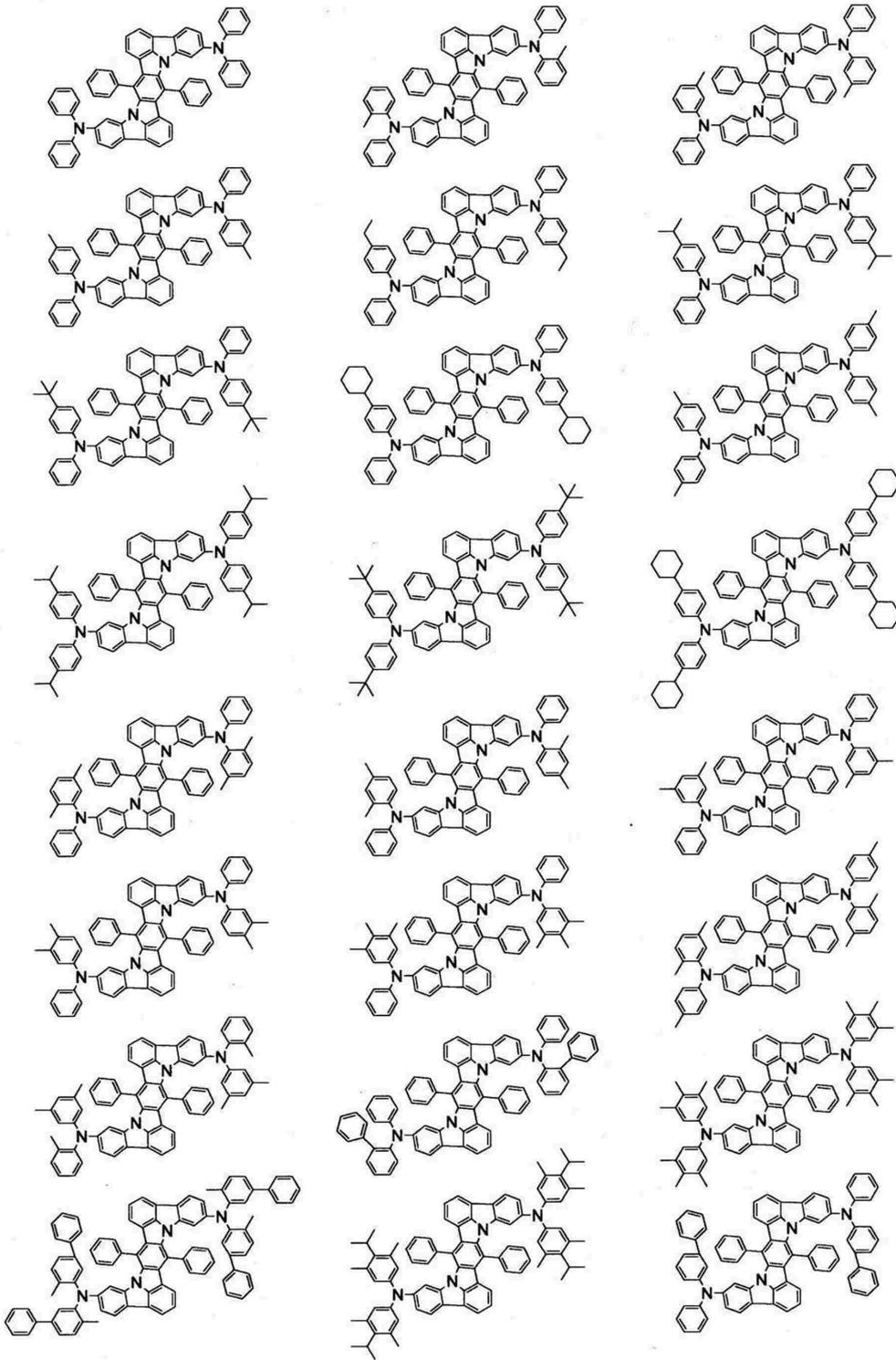
30

40

【 0 3 6 4】

50

【化 1 3 1】



【 0 3 6 5 】

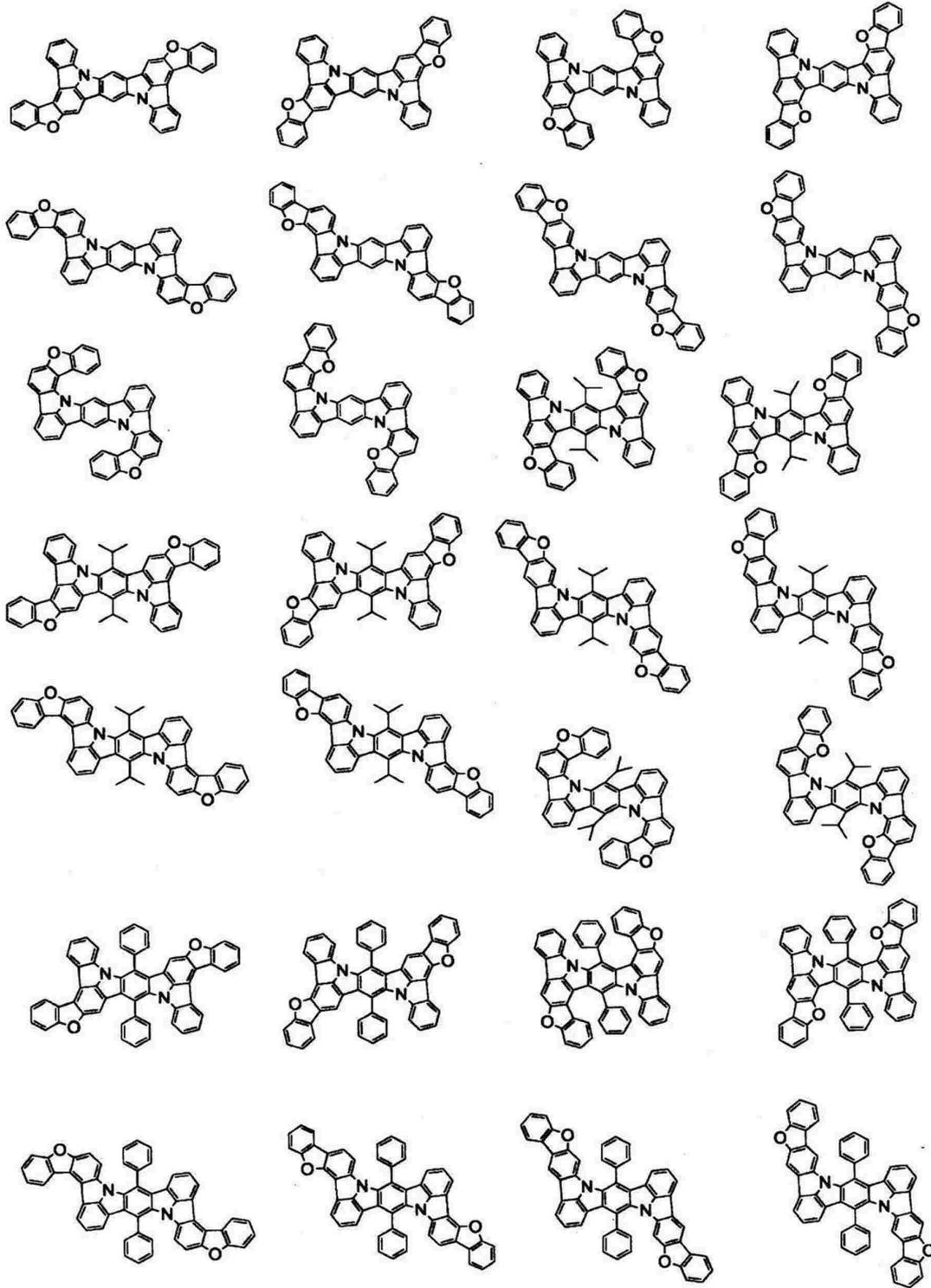
10

20

30

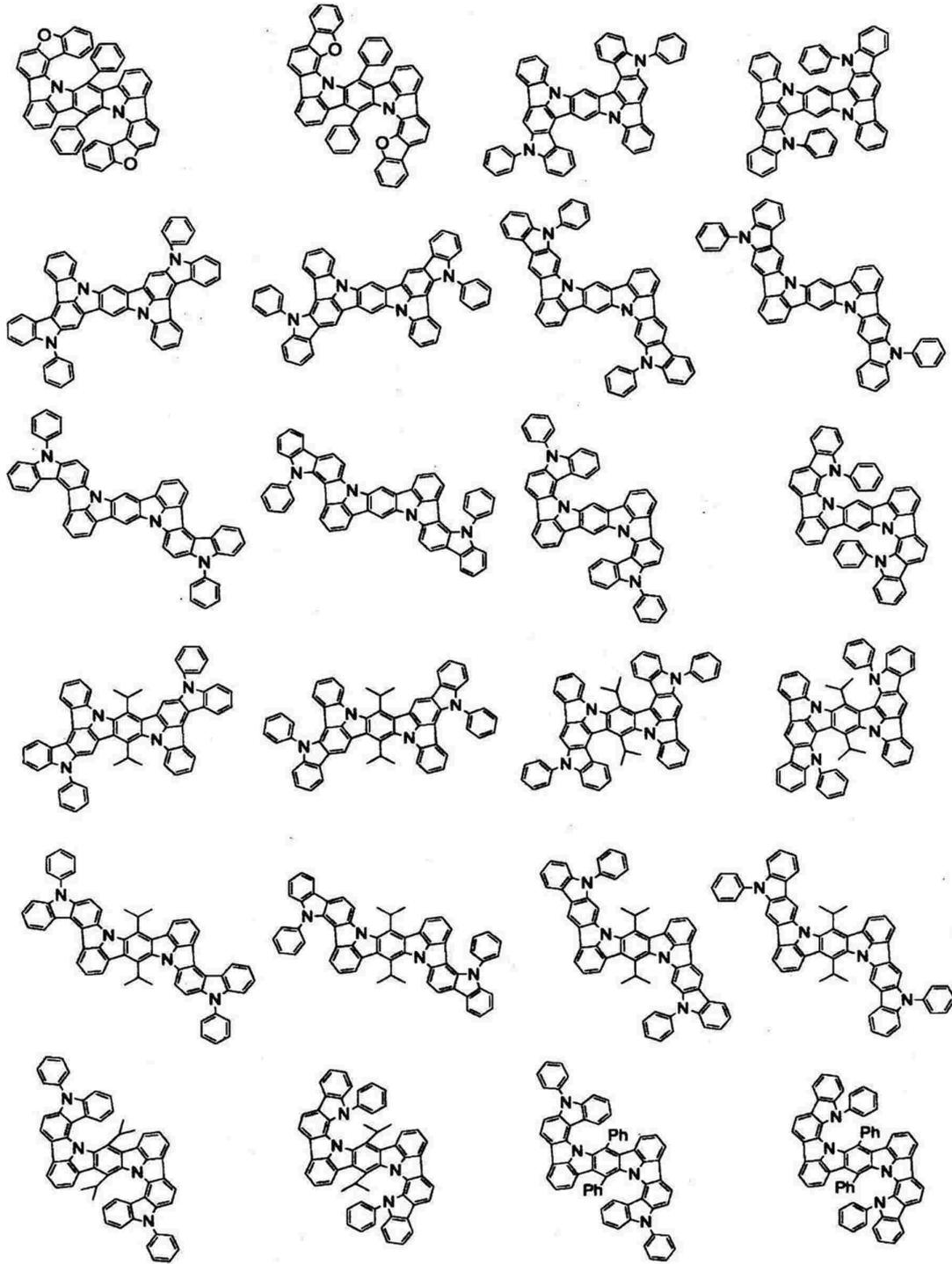
40

【化 1 3 2】



【 0 3 6 6 】

【化 1 3 3】



(式中、Phはフェニル基である)

【 0 3 6 7】

10

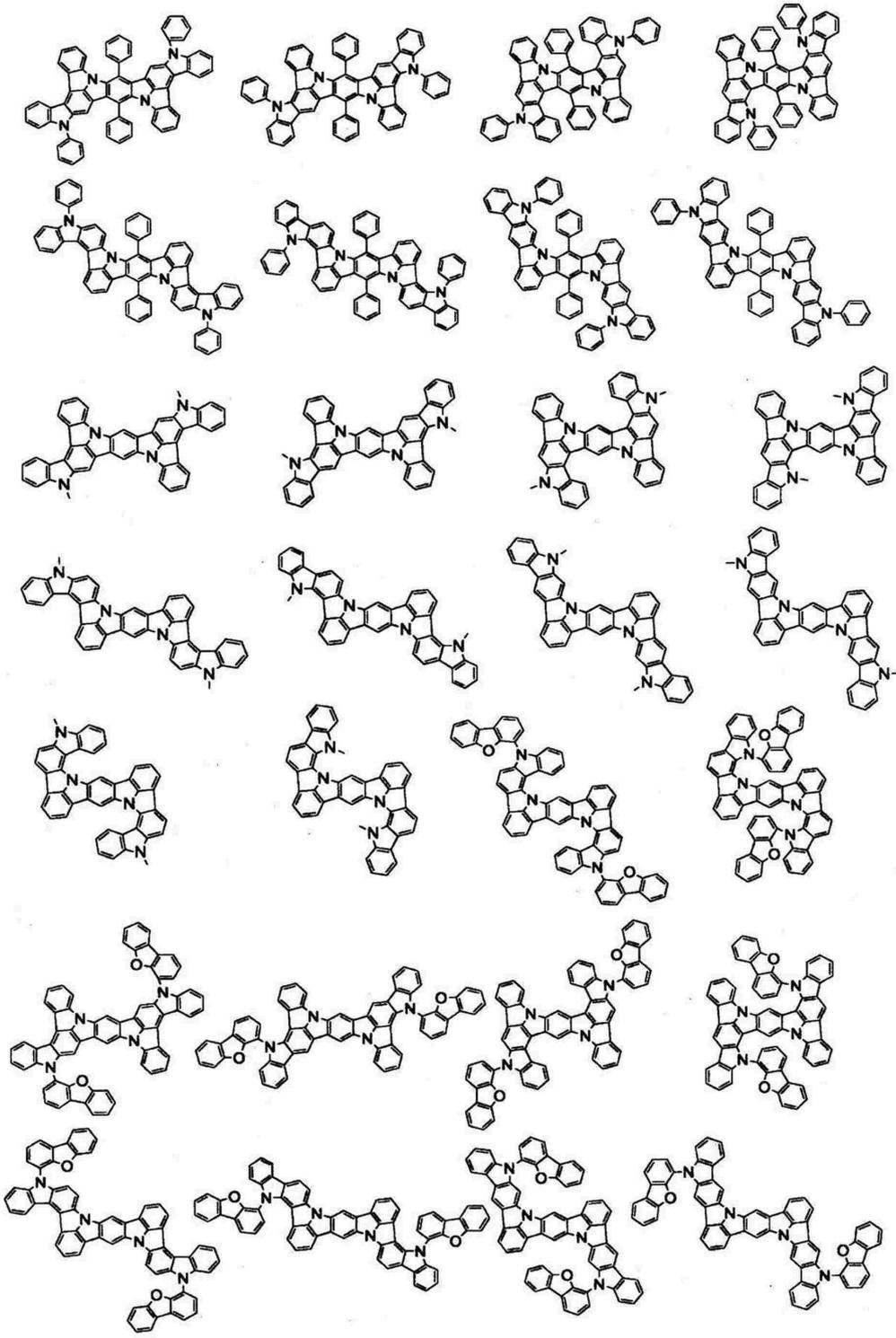
20

30

40

50

【化 1 3 4】



10

20

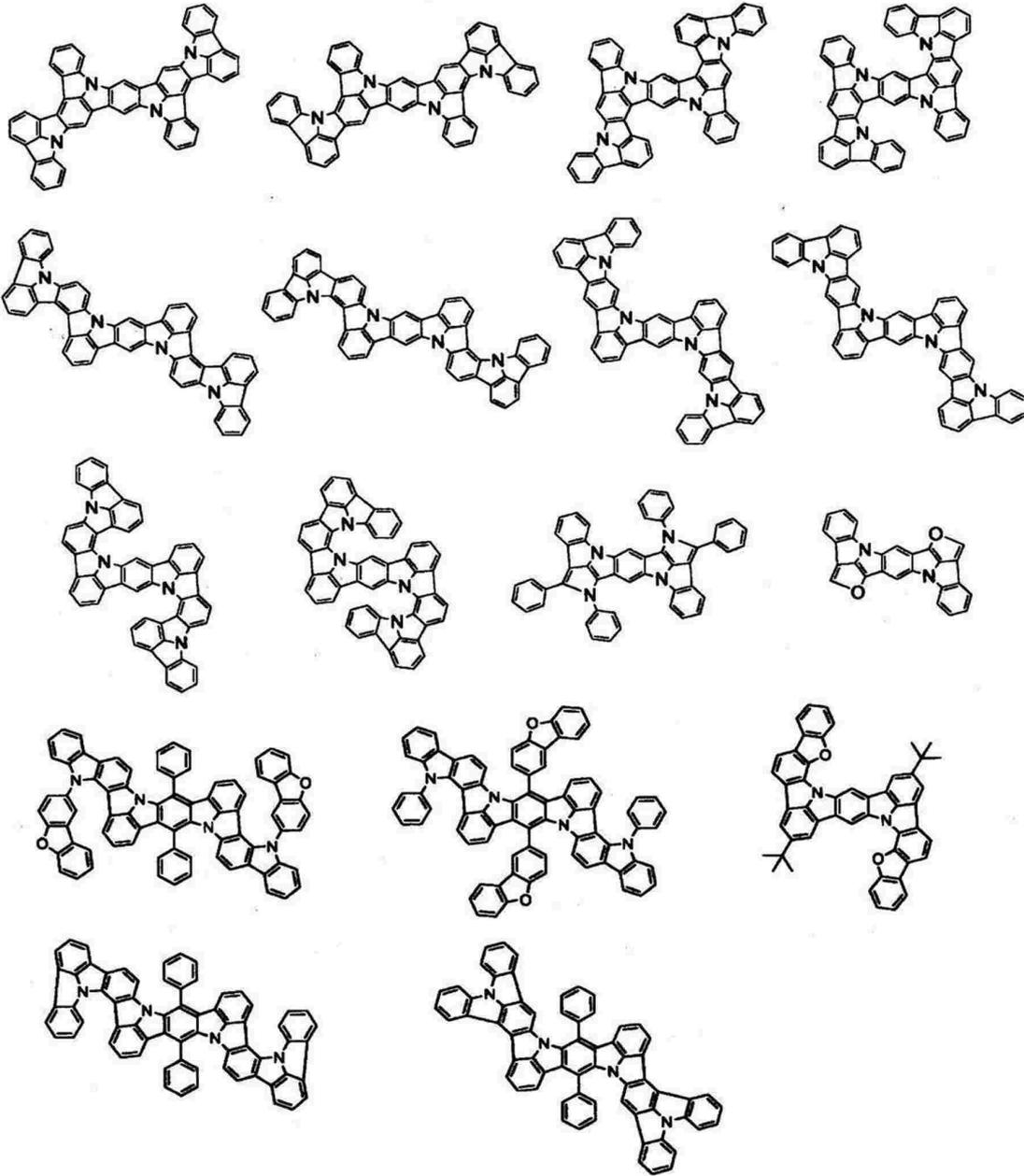
30

40

【 0 3 6 8】

50

【化 1 3 5】



10

20

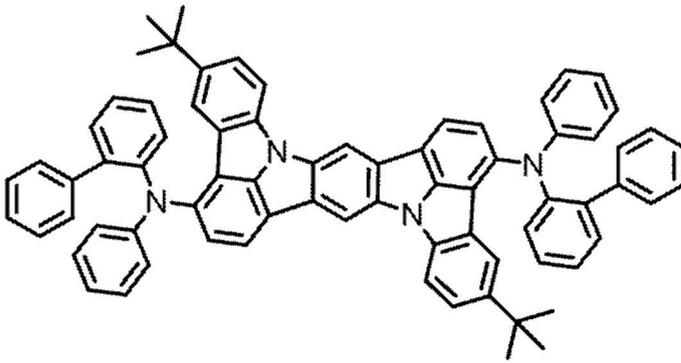
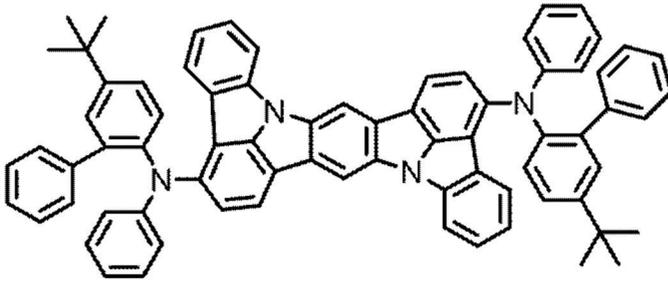
30

【 0 3 6 9】

40

50

【化 1 3 6】



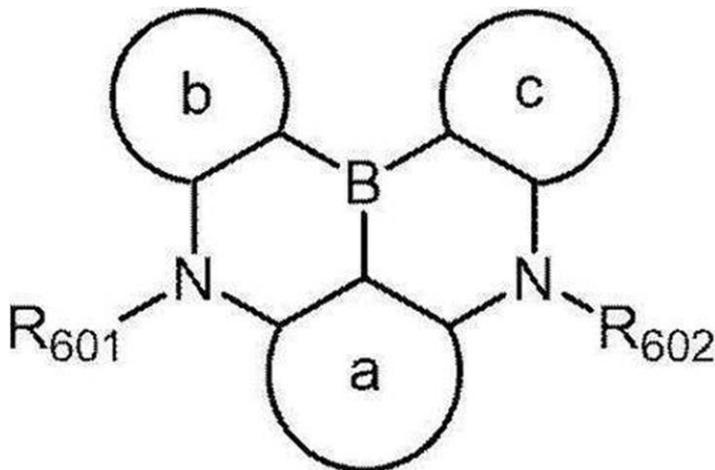
【 0 3 7 0】

(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。

【 0 3 7 1】

【化 1 3 7】



(6)

【 0 3 7 2】

(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、

10

20

30

40

50

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

【0373】

a 環、b 環及び c 環は、ホウ素原子及び 2 つの窒素原子から構成される前記一般式 (6) 中央の縮合 2 環構造に縮合する環 (置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環) である。

【0374】

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

a 環の「芳香族炭化水素環」は、前記一般式 (6) 中央の縮合 2 環構造上の炭素原子 3 つを環形成原子として含む。

b 環及び c 環の「芳香族炭化水素環」は、前記一般式 (6) 中央の縮合 2 環構造上の炭素原子 2 つを環形成原子として含む。

【0375】

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

a 環、b 環及び c 環の「複素環」は、上述した「複素環基」に水素原子を導入した化合物と同じ構造である。

a 環の「複素環」は、前記一般式 (6) 中央の縮合 2 環構造上の炭素原子 3 つを環形成原子として含む。b 環及び c 環の「複素環」は、前記一般式 (6) 中央の縮合 2 環構造上の炭素原子 2 つを環形成原子として含む。「置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環」の具体例としては、具体例群 G 2 に記載の「複素環基」に水素原子を導入した化合物等が挙げられる。

【0376】

R₆₀₁ 及び R₆₀₂ は、それぞれ独立に、a 環、b 環又は c 環と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成してもよい。この場合における複素環は、前記一般式 (6) 中央の縮合 2 環構造上の窒素原子を含む。この場合における複素環は、窒素原子以外のヘテロ原子を含んでいてもよい。R₆₀₁ 及び R₆₀₂ が a 環、b 環又は c 環と結合するとは、具体的には、a 環、b 環又は c 環を構成する原子と R₆₀₁ 及び R₆₀₂ を構成する原子が結合することを意味する。例えば、R₆₀₁ が a 環と結合して、R₆₀₁ を含む環と a 環が縮合した 2 環縮合 (又は 3 環縮合以上) の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群 G 2 のうち、窒素を含む 2 環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。

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

【0377】

一実施形態において、前記一般式 (6) における a 環、b 環及び c 環は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環である。

一実施形態において、前記一般式 (6) における a 環、b 環及び c 環は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のベンゼン環又はナフタレン環である。

【0378】

一実施形態において、前記一般式 (6) における R₆₀₁ 及び R₆₀₂ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。

【0379】

一実施形態において、前記一般式 (6) で表される化合物は下記一般式 (62) で表される化合物である。

10

20

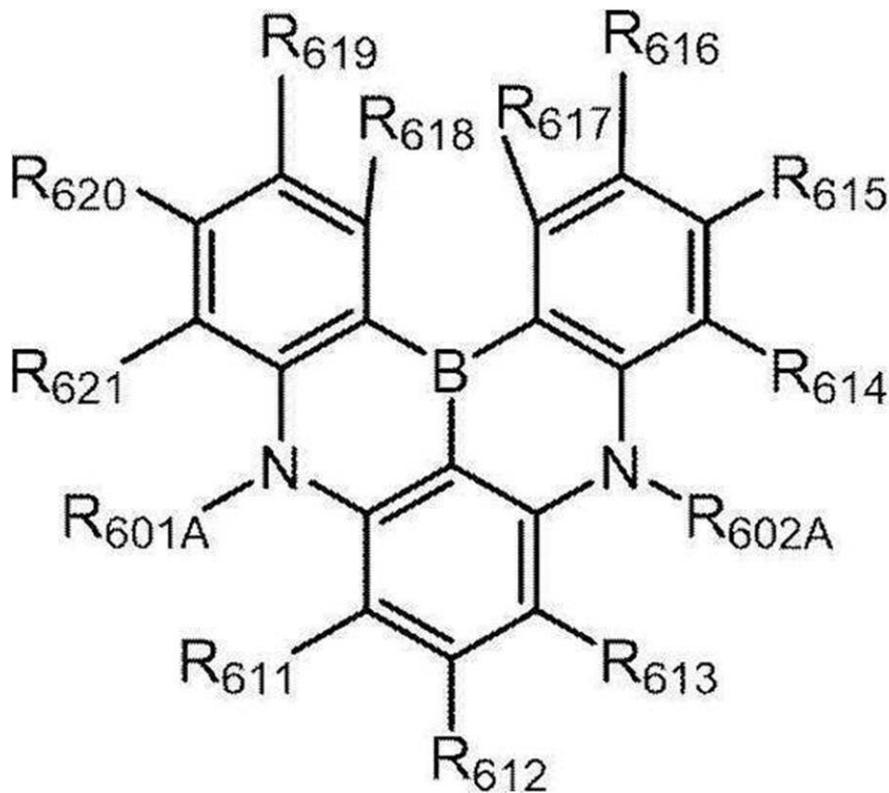
30

40

50

【 0 3 8 0 】

【 化 1 3 8 】



(62)

【 0 3 8 1 】

(前記一般式(62)において、

R_{601A}は、R₆₁₁及びR₆₂₁からなる群から選択される1以上と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

R_{602A}は、R₆₁₃及びR₆₁₄からなる群から選択される1以上と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

前記置換もしくは無置換の複素環を形成しないR_{601A}及びR_{602A}は、それぞれ独立に、

- 置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、
- 置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、
- 置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は
- 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、

R₆₁₁～R₆₂₁のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

- 互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
- 互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
- 互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₆₁₁～R₆₂₁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、

10

20

30

40

50

- S - (R 9 0 5) で表される基、
- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、
- ハロゲン原子、
- シアノ基、
- ニトロ基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は
- 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。)

【 0 3 8 2 】

前記一般式 (6 2) の R 6 0 1 A 及び R 6 0 2 A は、それぞれ、前記一般式 (6) の R 6 0 1 及び R 6 0 2 に対応する基である。

例えば、R 6 0 1 A と R 6 1 1 が結合して、これらを含む環と a 環に対応するベンゼン環が縮合した 2 環縮合 (又は 3 環縮合以上) の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群 G 2 のうち、窒素を含む 2 環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。R 6 0 1 A と R 6 2 1 が結合する場合、R 6 0 2 A と R 6 1 3 が結合する場合、及び R 6 0 2 A と R 6 1 4 が結合する場合も上記と同じである。

【 0 3 8 3 】

R 6 1 1 ~ R 6 2 1 のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、又は互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成してもよい。

例えば、R 6 1 1 と R 6 1 2 が結合して、これらが結合する 6 員環に対して、ベンゼン環、インドール環、ピロール環、ベンゾフラン環又はベンゾチオフエン環等が縮合した構造を形成してもよく、形成された縮合環は、ナフタレン環、カルバゾール環、インドール環、ジベンゾフラン環又はジベンゾチオフエン環となる。

【 0 3 8 4 】

一実施形態において、環形成に寄与しない R 6 1 1 ~ R 6 2 1 は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。

【 0 3 8 5 】

一実施形態において、環形成に寄与しない R 6 1 1 ~ R 6 2 1 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 ~ 5 0 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。

【 0 3 8 6 】

一実施形態において、環形成に寄与しない R 6 1 1 ~ R 6 2 1 は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基である。

【 0 3 8 7 】

一実施形態において、環形成に寄与しない R 6 1 1 ~ R 6 2 1 は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基であり、

R 6 1 1 ~ R 6 2 1 のうち少なくとも 1 つは、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基である。

【 0 3 8 8 】

一実施形態において、前記一般式 (6 2) で表される化合物は、下記一般式 (6 3) で表される化合物である。

【 0 3 8 9 】

10

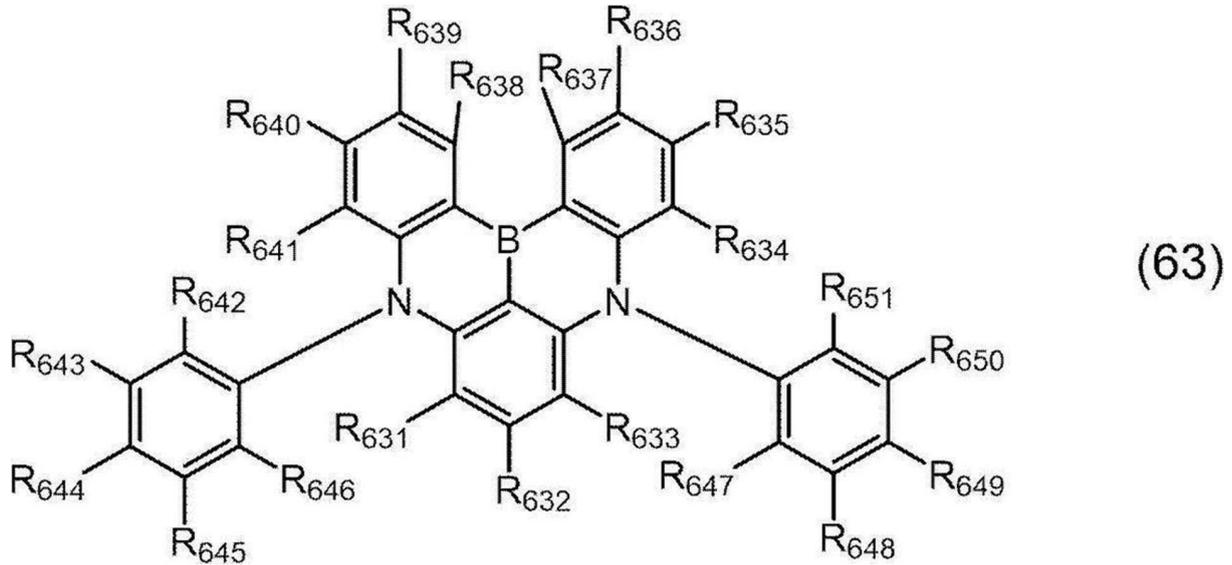
20

30

40

50

【化 1 3 9】



10

【 0 3 9 0】

(前記一般式(63)において、

R₆₃₁は、R₆₄₆と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

20

R₆₃₃は、R₆₄₇と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

R₆₃₄は、R₆₅₁と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

R₆₄₁は、R₆₄₂と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

R₆₃₁ ~ R₆₅₁のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

30

前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₆₃₁ ~ R₆₅₁は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 50の複素環基である。))

40

【 0 3 9 1】

R₆₃₁は、R₆₄₆と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成してもよい。例えば、R₆₃₁とR₆₄₆が結合して、R₆₄₆が結合するベンゼン環と、Nを含む環と、 a

50

環に対応するベンゼン環とが縮合した3環縮合以上の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群G2のうち、窒素を含む3環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。R₆₃₃とR₆₄₇が結合する場合、R₆₃₄とR₆₅₁が結合する場合、及びR₆₄₁とR₆₄₂が結合する場合も上記と同じである。

【0392】

一実施形態において、環形成に寄与しないR₆₃₁～R₆₅₁は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

10

【0393】

一実施形態において、環形成に寄与しないR₆₃₁～R₆₅₁は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

【0394】

一実施形態において、環形成に寄与しないR₆₃₁～R₆₅₁は、それぞれ独立に、
水素原子、又は
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基である。

【0395】

一実施形態において、環形成に寄与しないR₆₃₁～R₆₅₁は、それぞれ独立に、
水素原子、又は
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基であり、
R₆₃₁～R₆₅₁のうち少なくとも1つは置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基である。

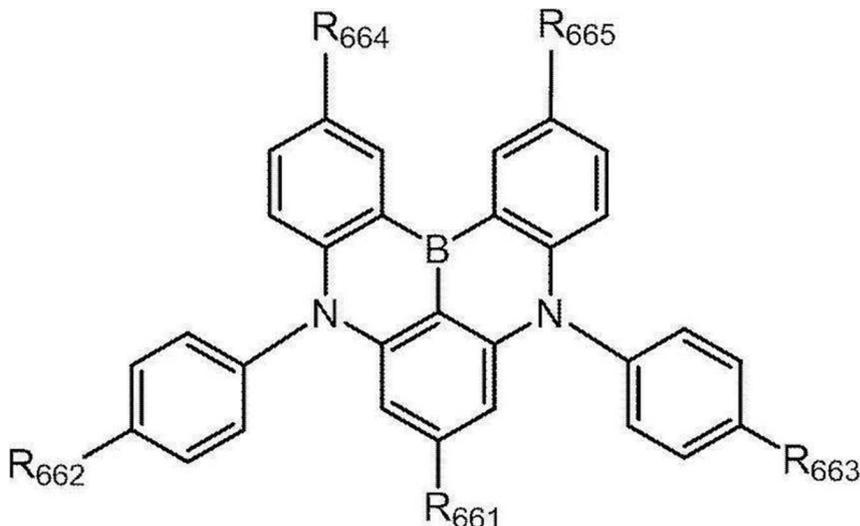
20

【0396】

一実施形態において、前記一般式(63)で表される化合物は、下記一般式(63A)で表される化合物である。

【0397】

【化140】



(63A)

30

40

【0398】

(前記一般式(63A)において、

R₆₆₁は、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

50

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

R₆₆₂ ~ R₆₆₅ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。)

10

【0399】

一実施形態において、R₆₆₁ ~ R₆₆₅ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。

【0400】

一実施形態において、R₆₆₁ ~ R₆₆₅ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基である。

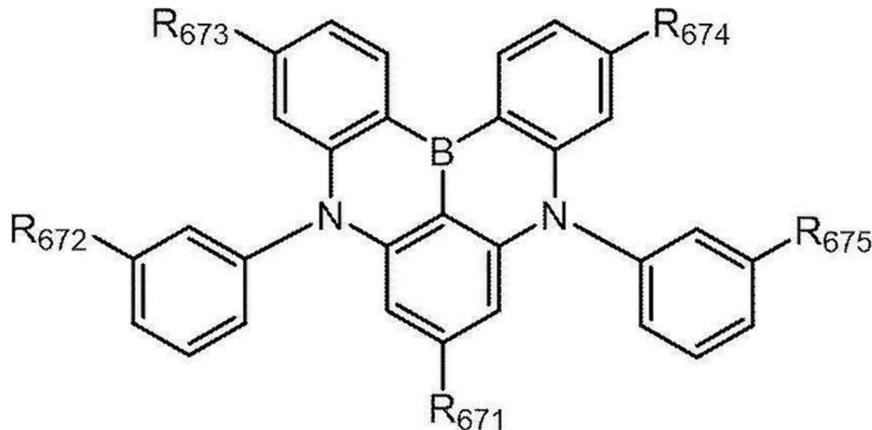
【0401】

一実施形態において、前記一般式(63)で表される化合物は、下記一般式(63B)で表される化合物である。

20

【0402】

【化141】



(63B)

30

【0403】

(前記一般式(63B)において、

R₆₇₁ 及び R₆₇₂ は、それぞれ独立に、

水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
- N(R₉₀₆)(R₉₀₇) で表される基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

40

R₆₇₃ ~ R₆₇₅ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
- N(R₉₀₆)(R₉₀₇) で表される基、又は

50

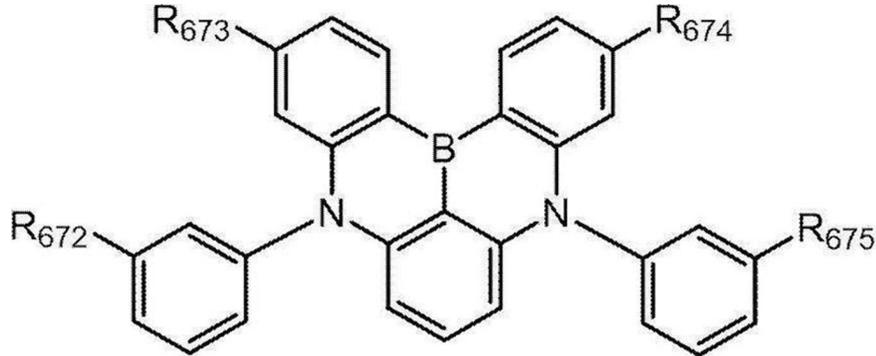
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。)

【0404】

一実施形態において、前記一般式(63)で表される化合物は、下記一般式(63B')で表される化合物である。

【0405】

【化142】



(63B')

10

【0406】

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

【0407】

一実施形態において、R₆₇₁ ~ R₆₇₅のうち少なくとも1つは、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
- N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。

20

【0408】

一実施形態において、

R₆₇₂は、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

- N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

R₆₇₁及びR₆₇₃ ~ R₆₇₅は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

- N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。

30

【0409】

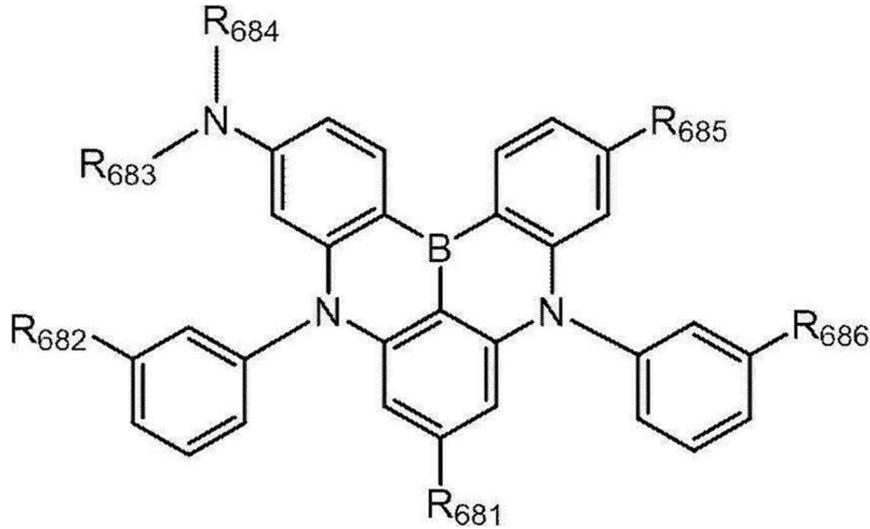
一実施形態において、前記一般式(63)で表される化合物は、下記一般式(63C)で表される化合物である。

40

【0410】

50

【化 1 4 3】



(63C)

10

【 0 4 1 1】

(前記一般式(63C)において、

R₆₈₁及びR₆₈₂は、それぞれ独立に、
水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

20

R₆₈₃～R₆₈₆は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。))

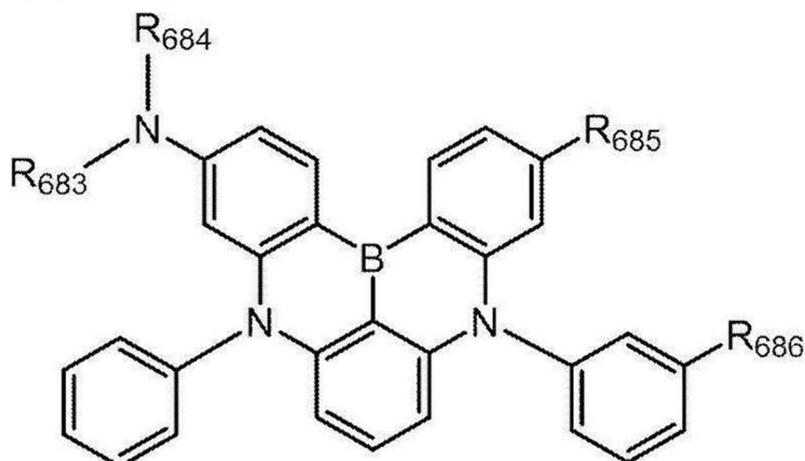
30

【 0 4 1 2】

一実施形態において、前記一般式(63)で表される化合物は、下記一般式(63C')
で表される化合物である。

【 0 4 1 3】

【化 1 4 4】



(63C')

40

【 0 4 1 4】

50

(前記一般式(63C')において、R₆₈₃ ~ R₆₈₆は、それぞれ独立に、前記一般式(63C)におけるR₆₈₃ ~ R₆₈₆と同義である。)

【0415】

一実施形態において、R₆₈₁ ~ R₆₈₆は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリール基である。

【0416】

一実施形態において、R₆₈₁ ~ R₆₈₆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。

【0417】

前記一般式(6)で表される化合物は、まずa環、b環及びc環を連結基(N - R₆₀₁を含む基及びN - R₆₀₂を含む基)で結合させることで中間体を製造し(第1反応)、a環、b環及びc環を連結基(ホウ素原子を含む基)で結合させることで最終生成物を製造することができる(第2反応)。第1反応ではバツハプルト - ハートウィッグ反応等のアミノ化反応を適用できる。第2反応では、タンデムヘテロフリーデルクラフツ反応等を適用できる。

【0418】

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。

【0419】

10

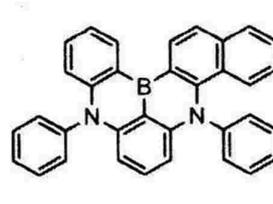
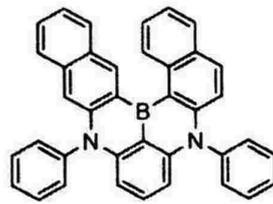
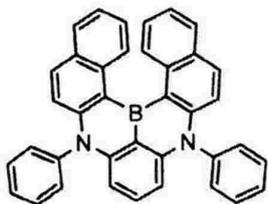
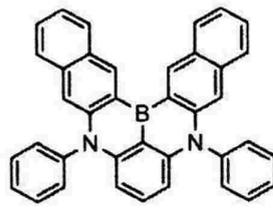
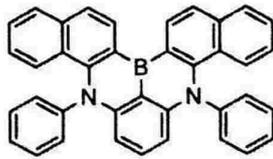
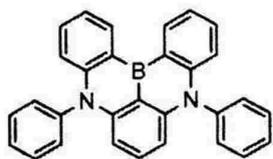
20

30

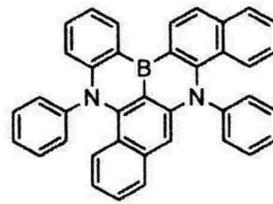
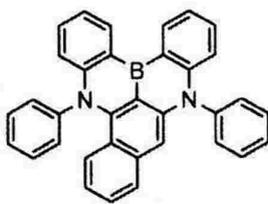
40

50

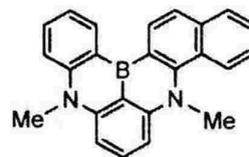
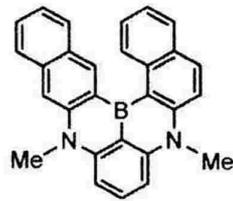
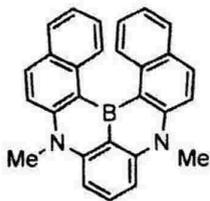
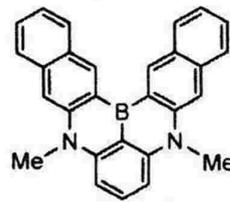
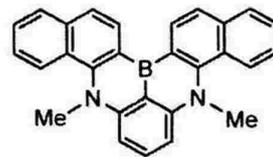
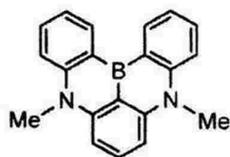
【化 1 4 5】



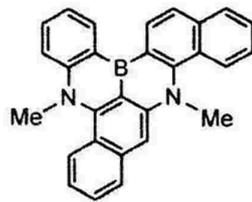
10



20



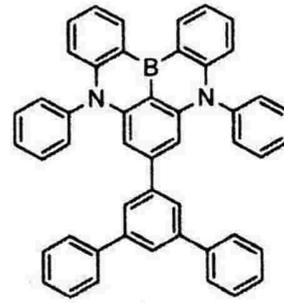
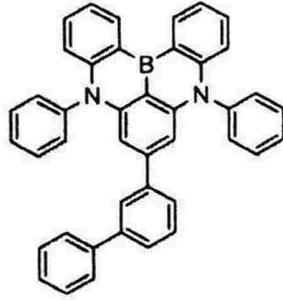
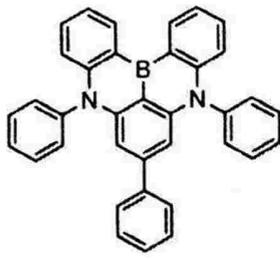
30



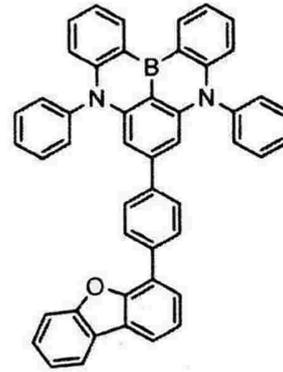
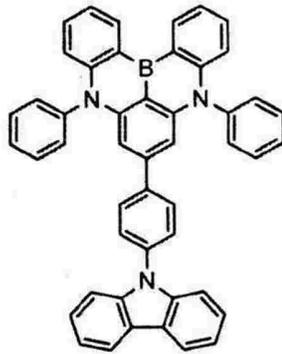
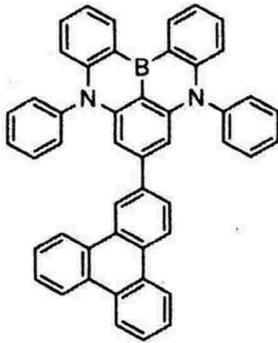
40

【 0 4 2 0】

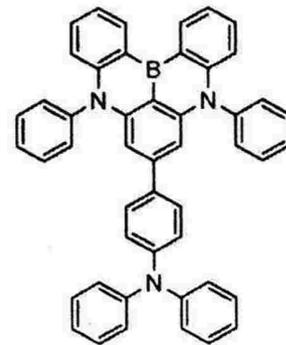
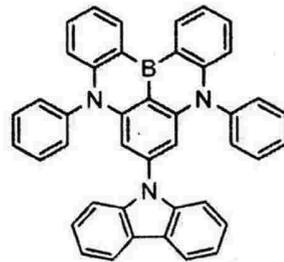
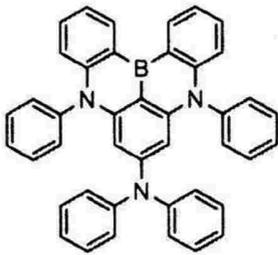
【化 1 4 6】



10



20



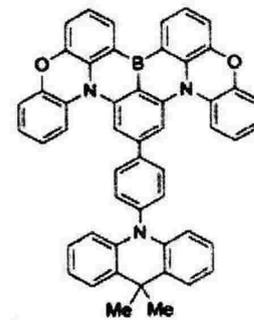
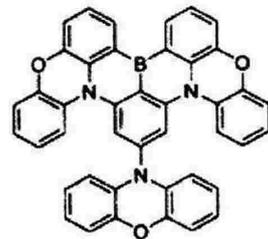
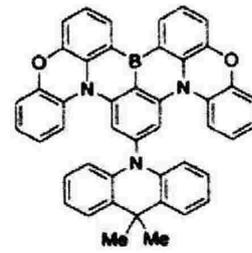
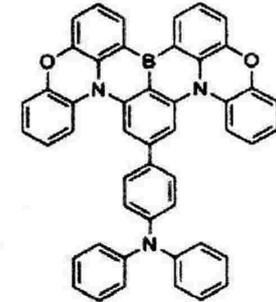
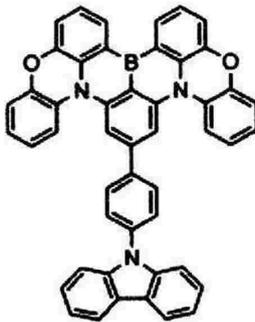
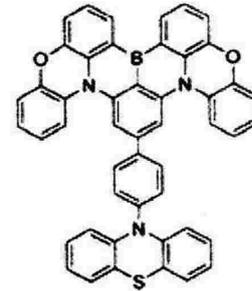
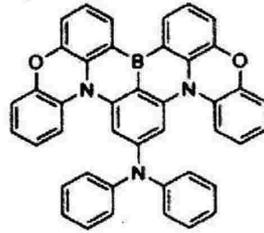
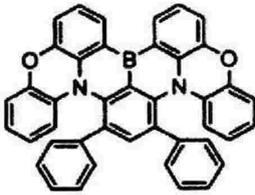
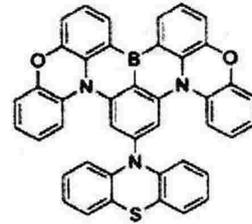
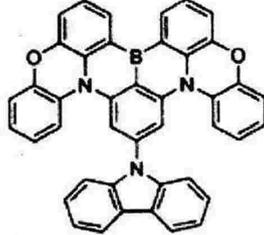
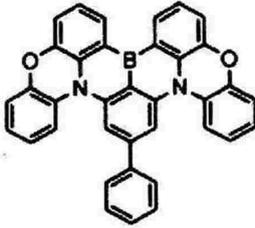
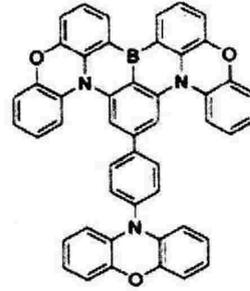
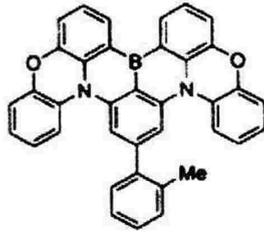
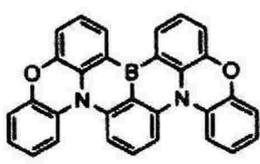
30

【 0 4 2 1】

40

50

【化 1 4 7】



【 0 4 2 2 】

10

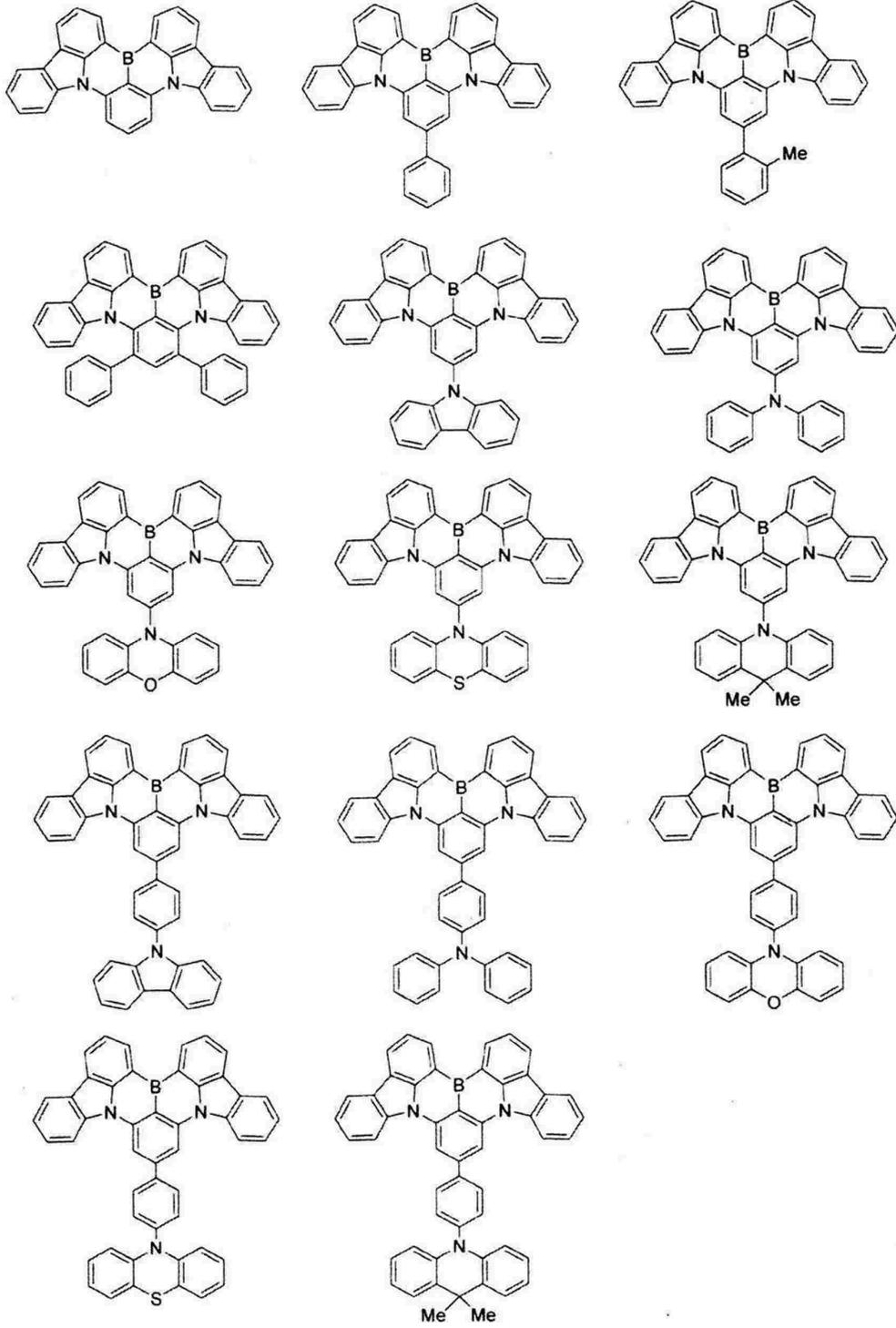
20

30

40

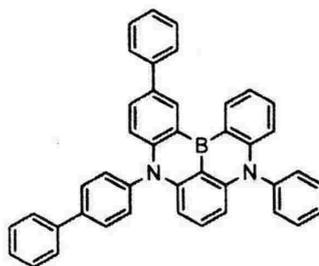
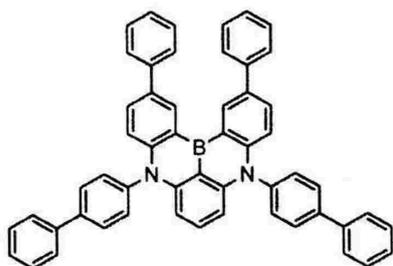
50

【化 1 4 8】

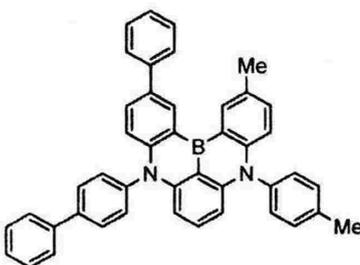
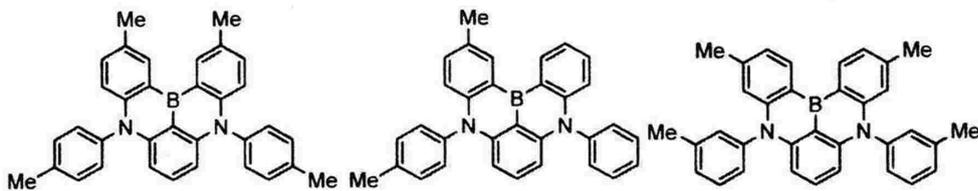


【 0 4 2 3】

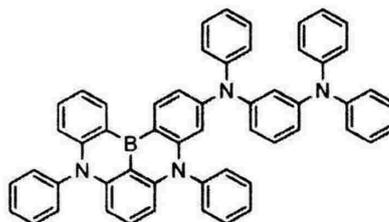
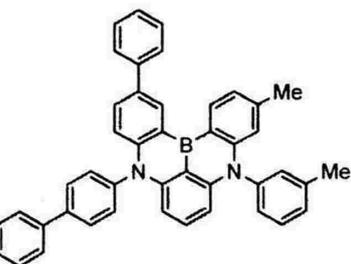
【化 1 4 9】



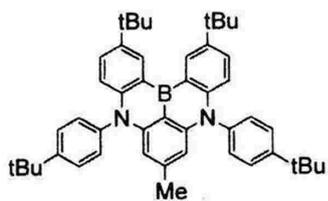
10



20



30

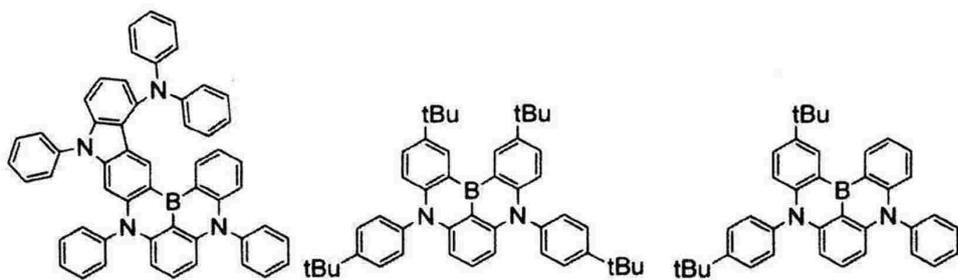


40

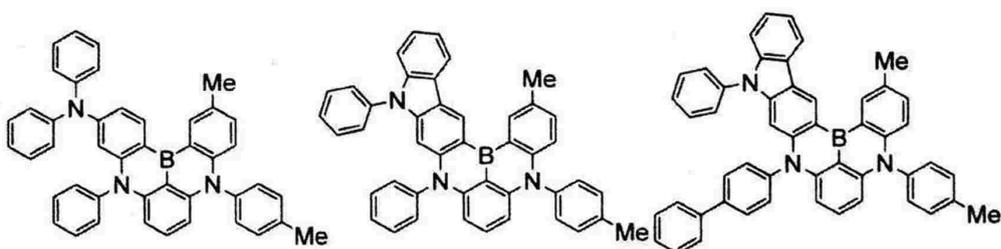
【 0 4 2 4 】

50

【化 1 5 0】



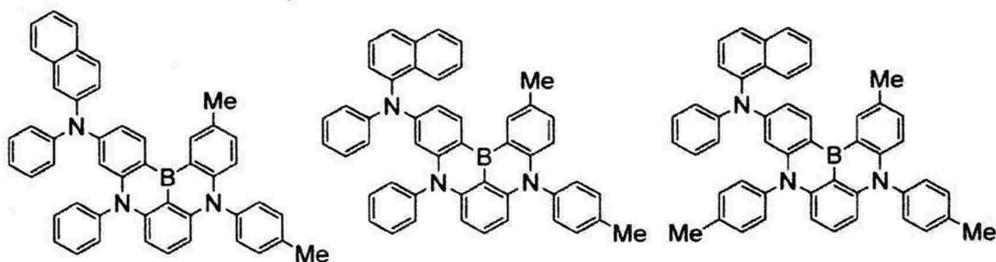
10



20



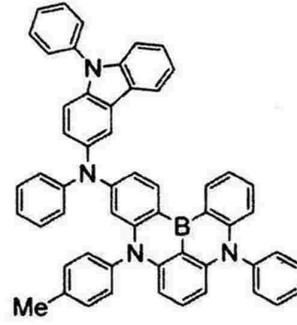
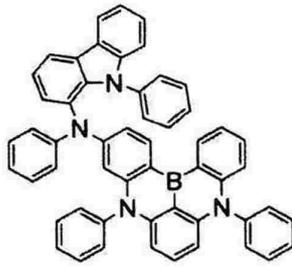
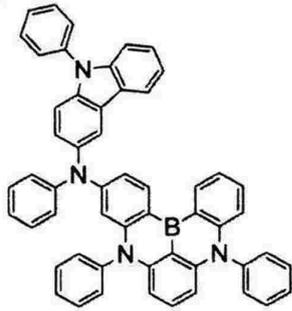
30



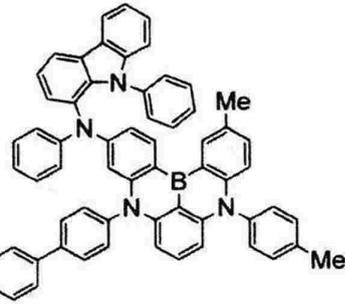
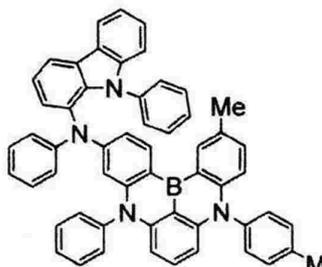
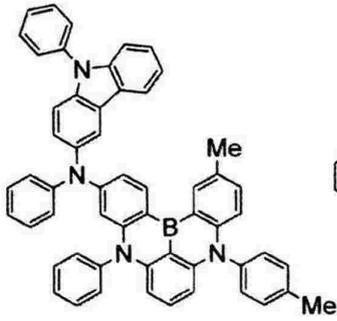
40

【 0 4 2 5】

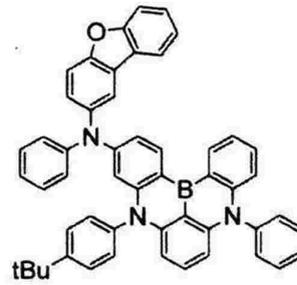
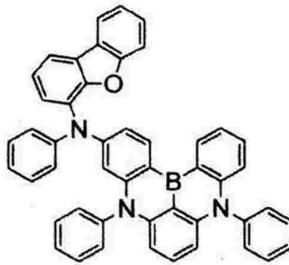
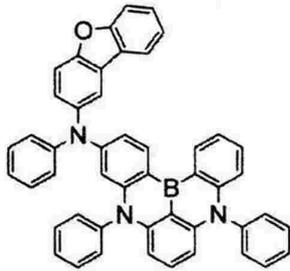
【化 1 5 1】



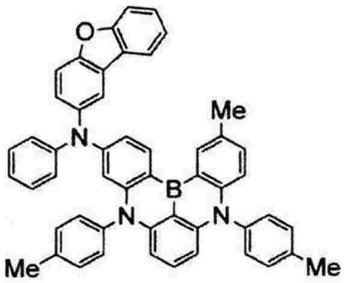
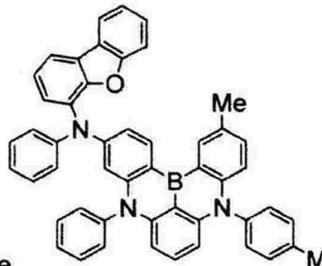
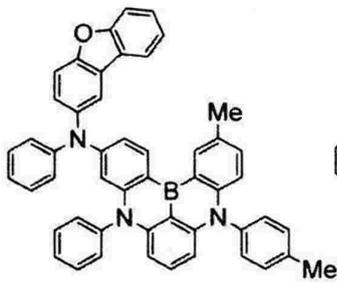
10



20



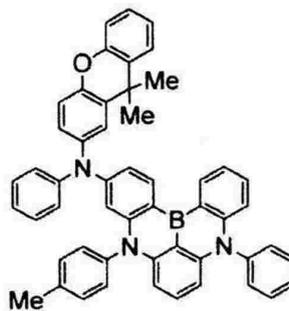
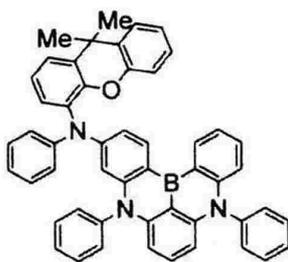
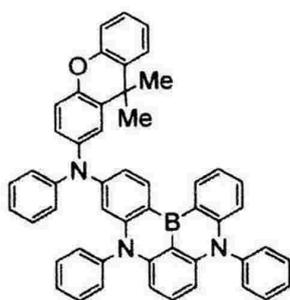
30



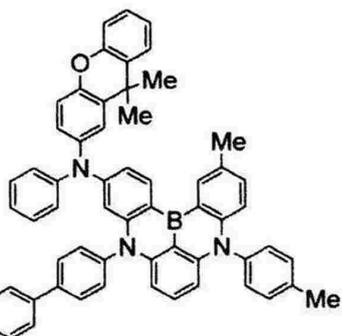
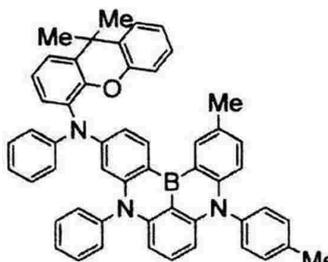
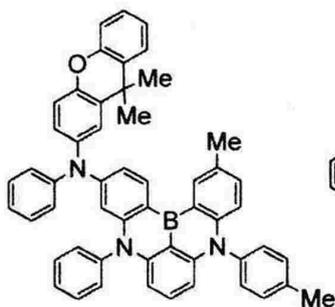
40

【 0 4 2 6 】

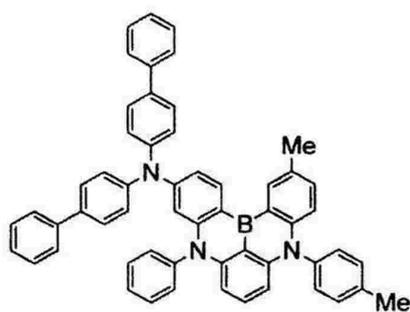
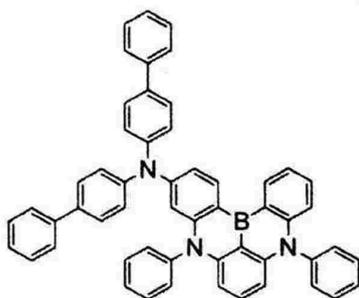
【化 1 5 2】



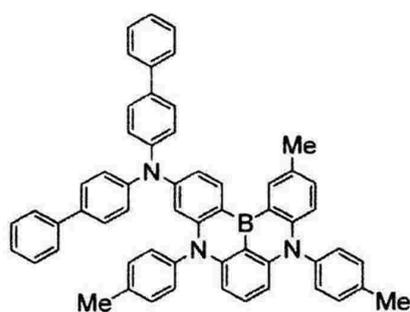
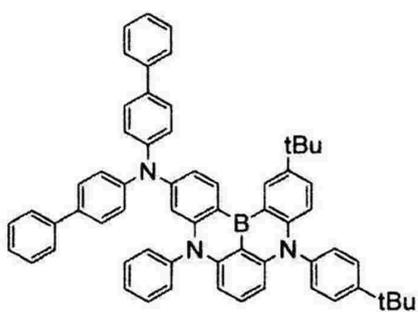
10



20



30

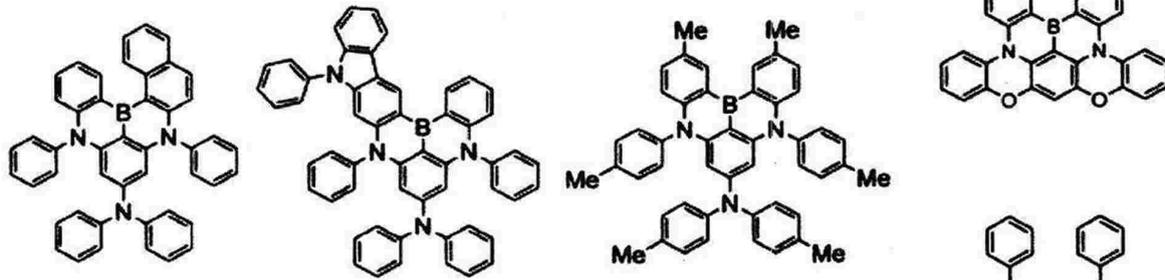
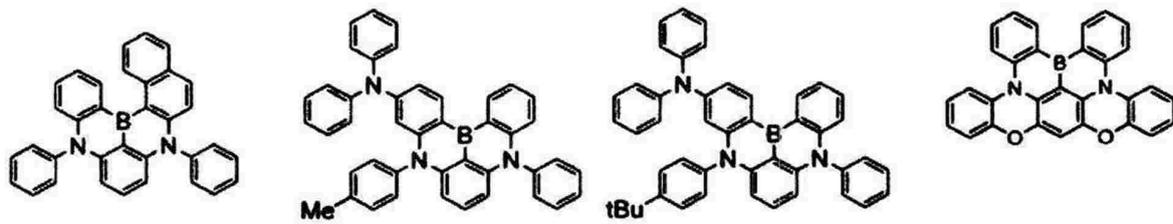


40

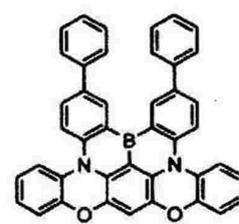
【 0 4 2 7 】

50

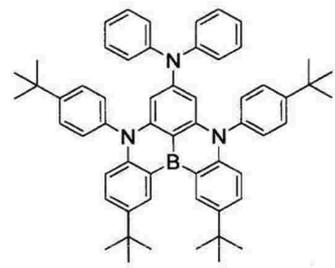
【化 1 5 3】



10



20



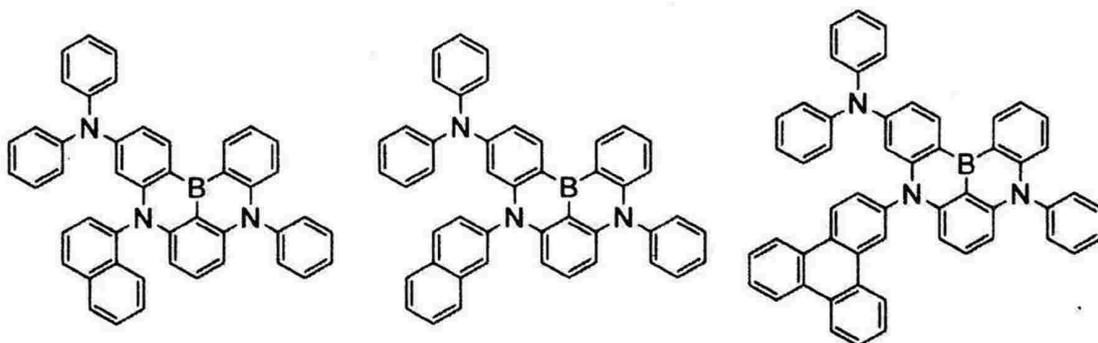
【 0 4 2 8 】

30

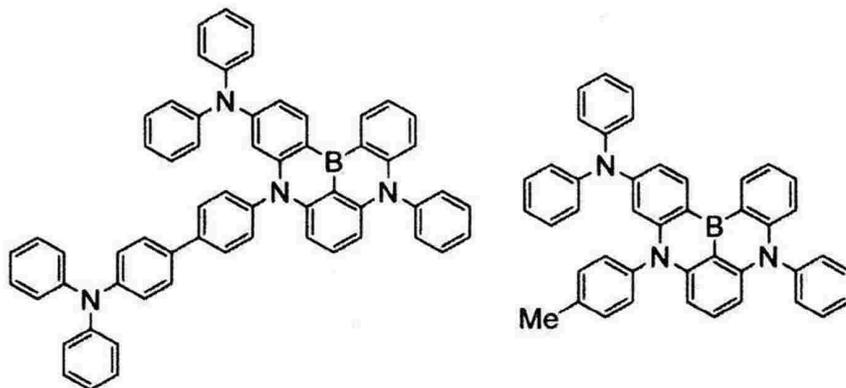
40

50

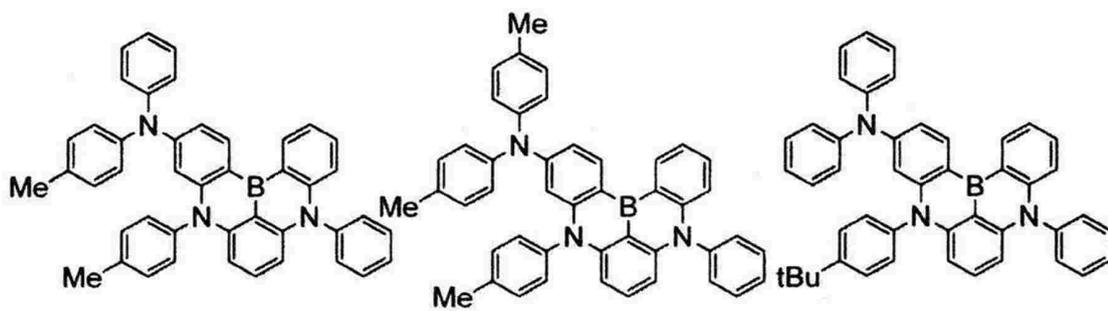
【化 1 5 4】



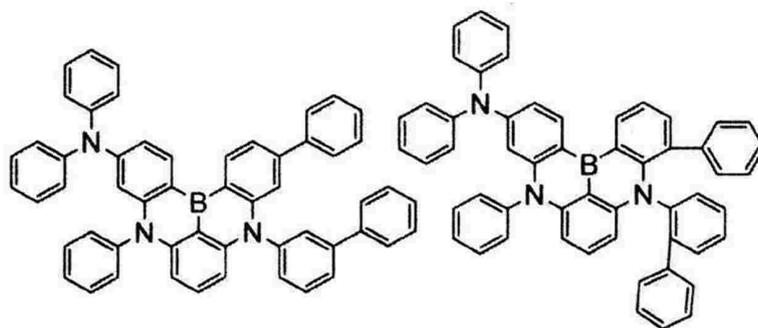
10



20



30

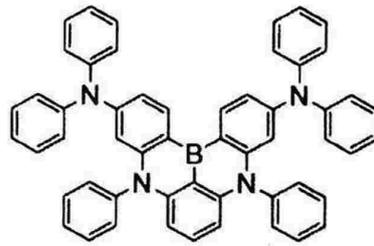
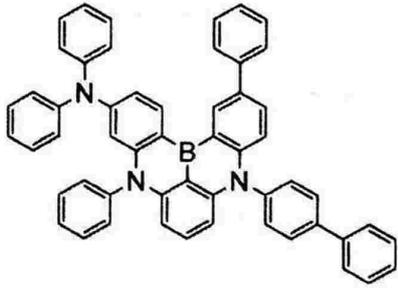


40

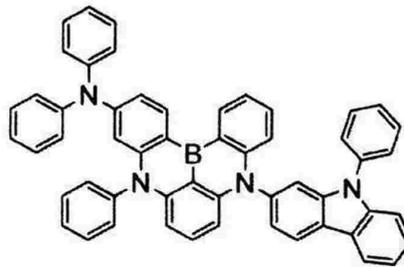
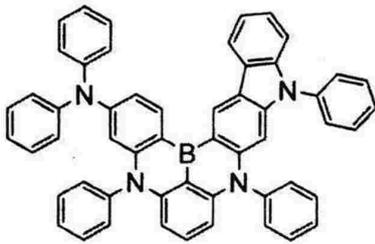
【 0 4 2 9 】

50

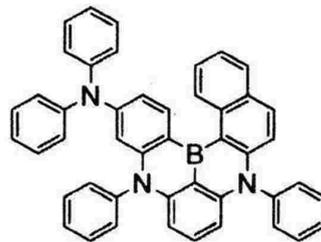
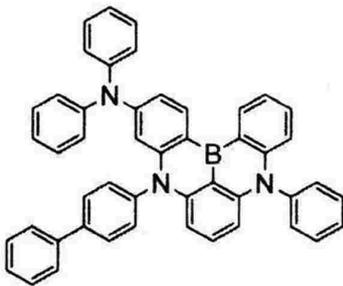
【化 1 5 5】



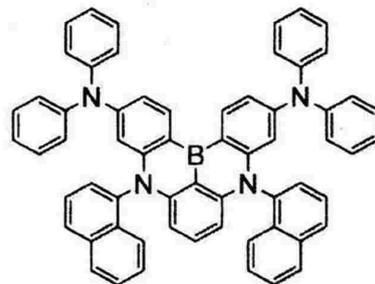
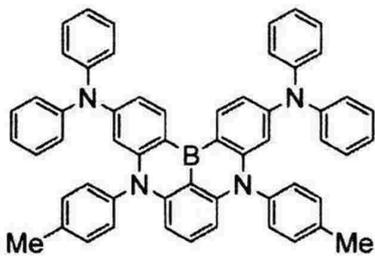
10



20



30

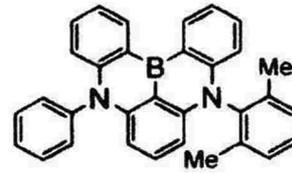
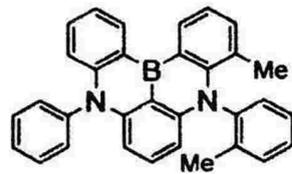
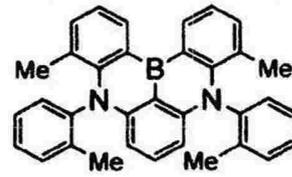
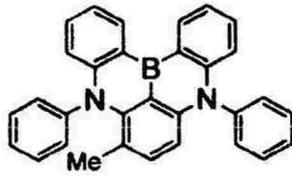
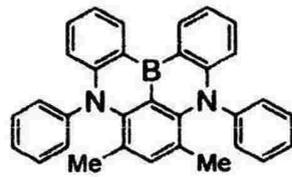
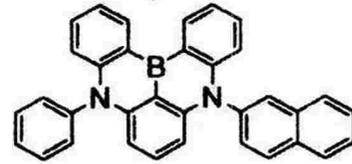
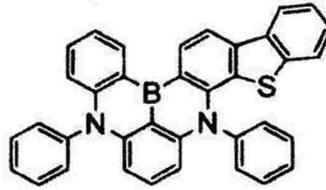
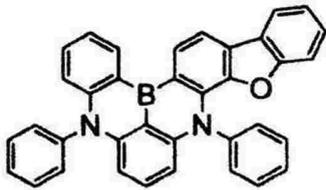
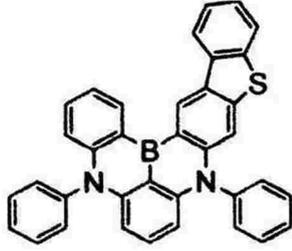
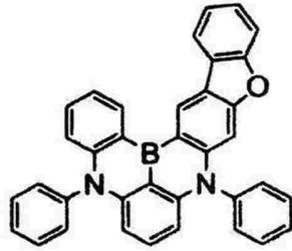
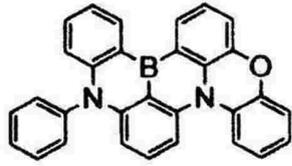


40

【 0 4 3 0】

50

【化 1 5 6】



【 0 4 3 1】

10

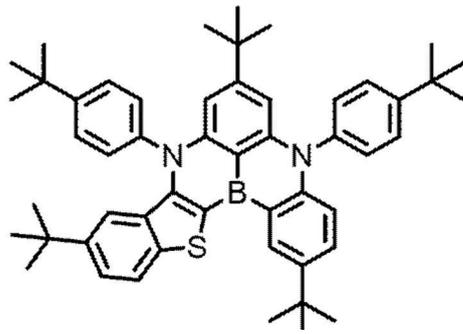
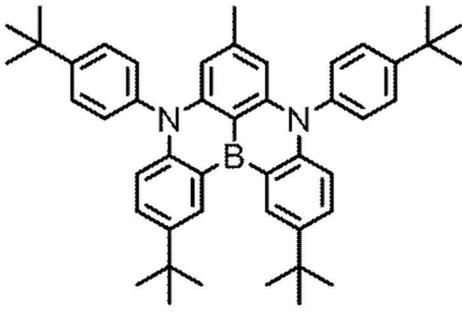
20

30

40

50

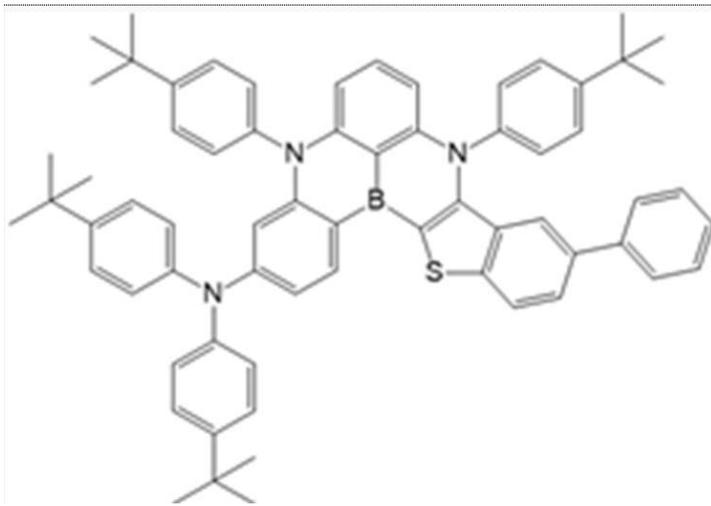
【化 1 5 7】



10

【 0 4 3 2】

【化 1 5 8】



20

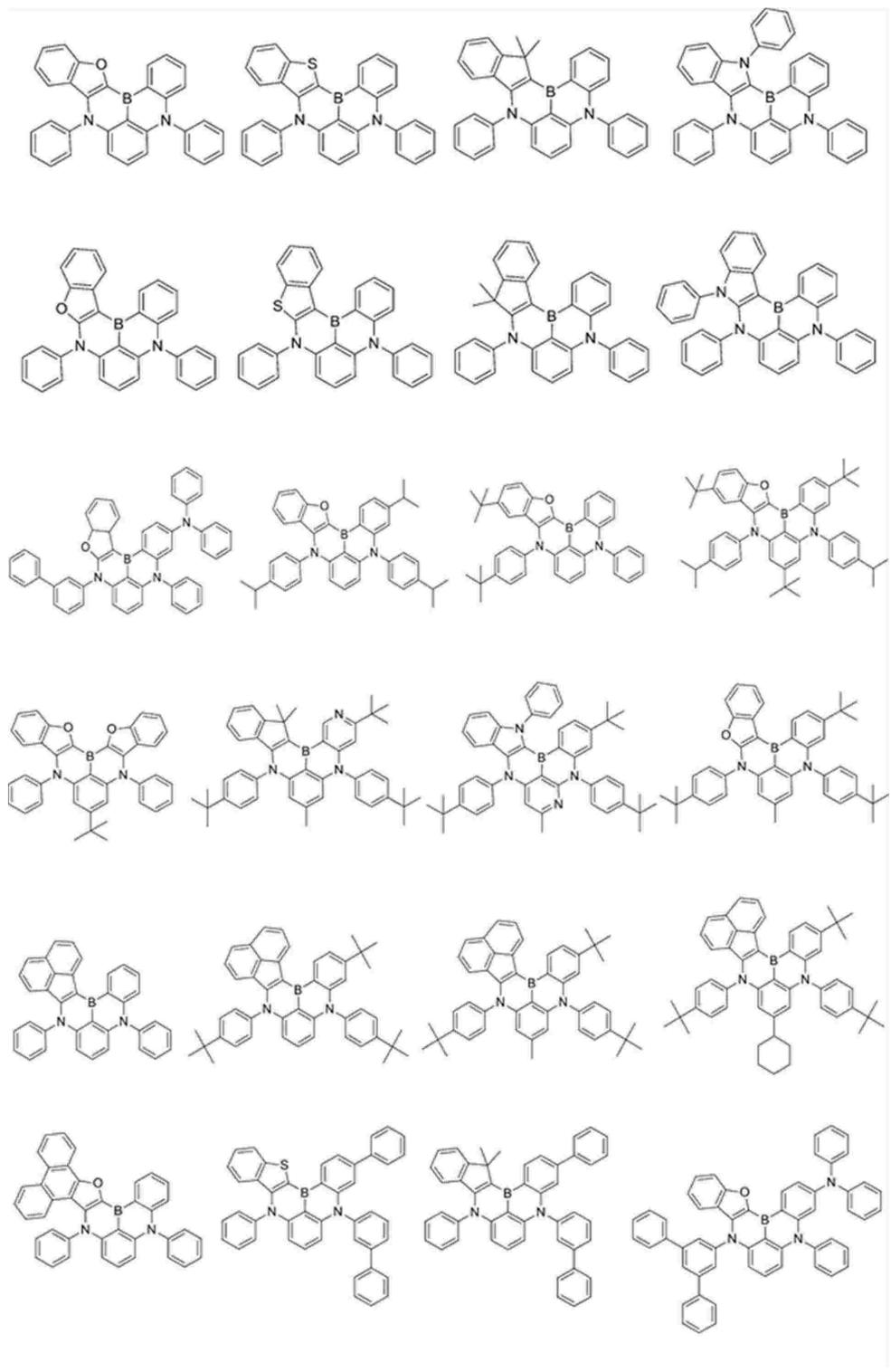
【 0 4 3 3】

30

40

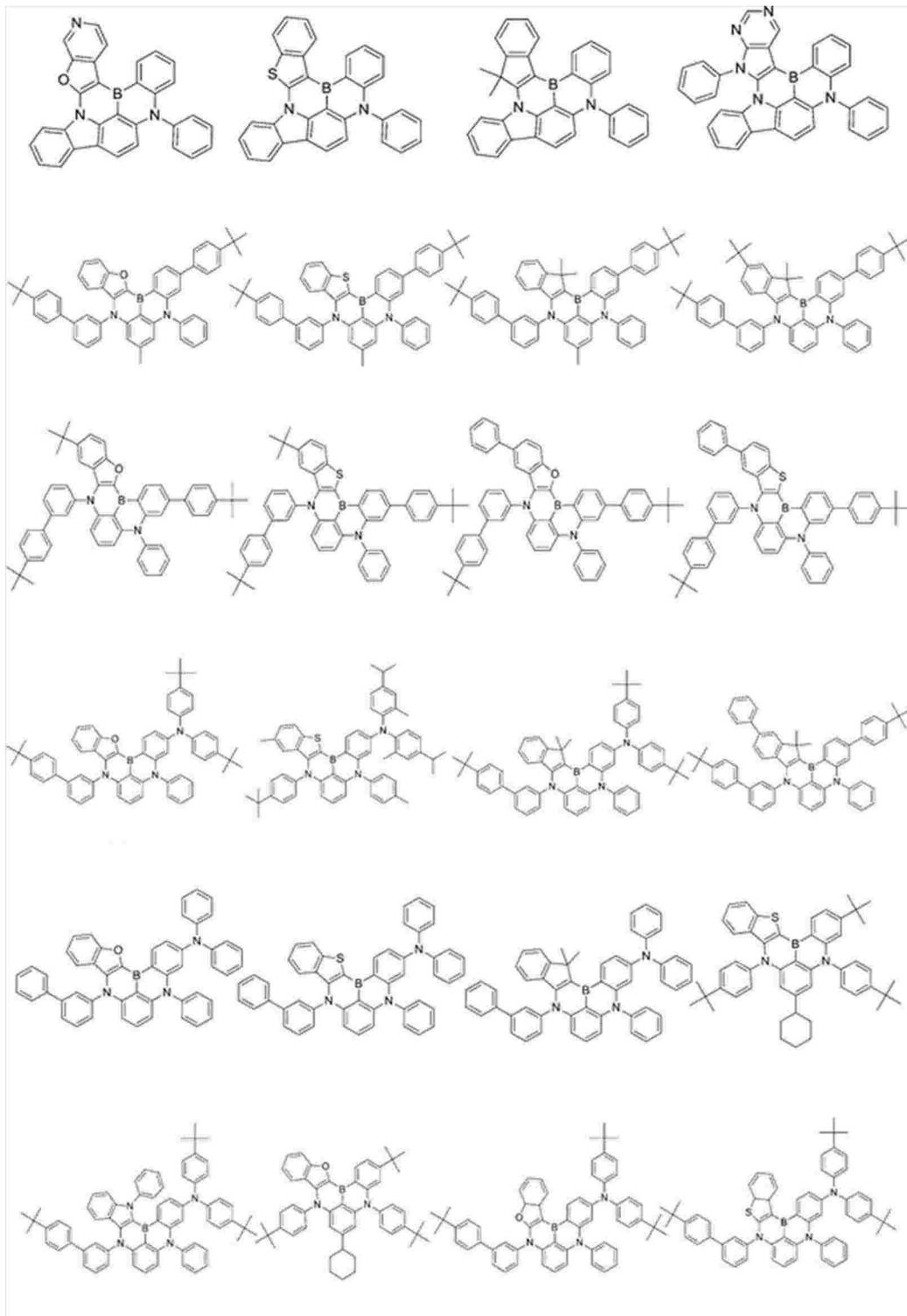
50

【化 1 5 9】



【 0 4 3 4 】

【化 1 6 0】



10

20

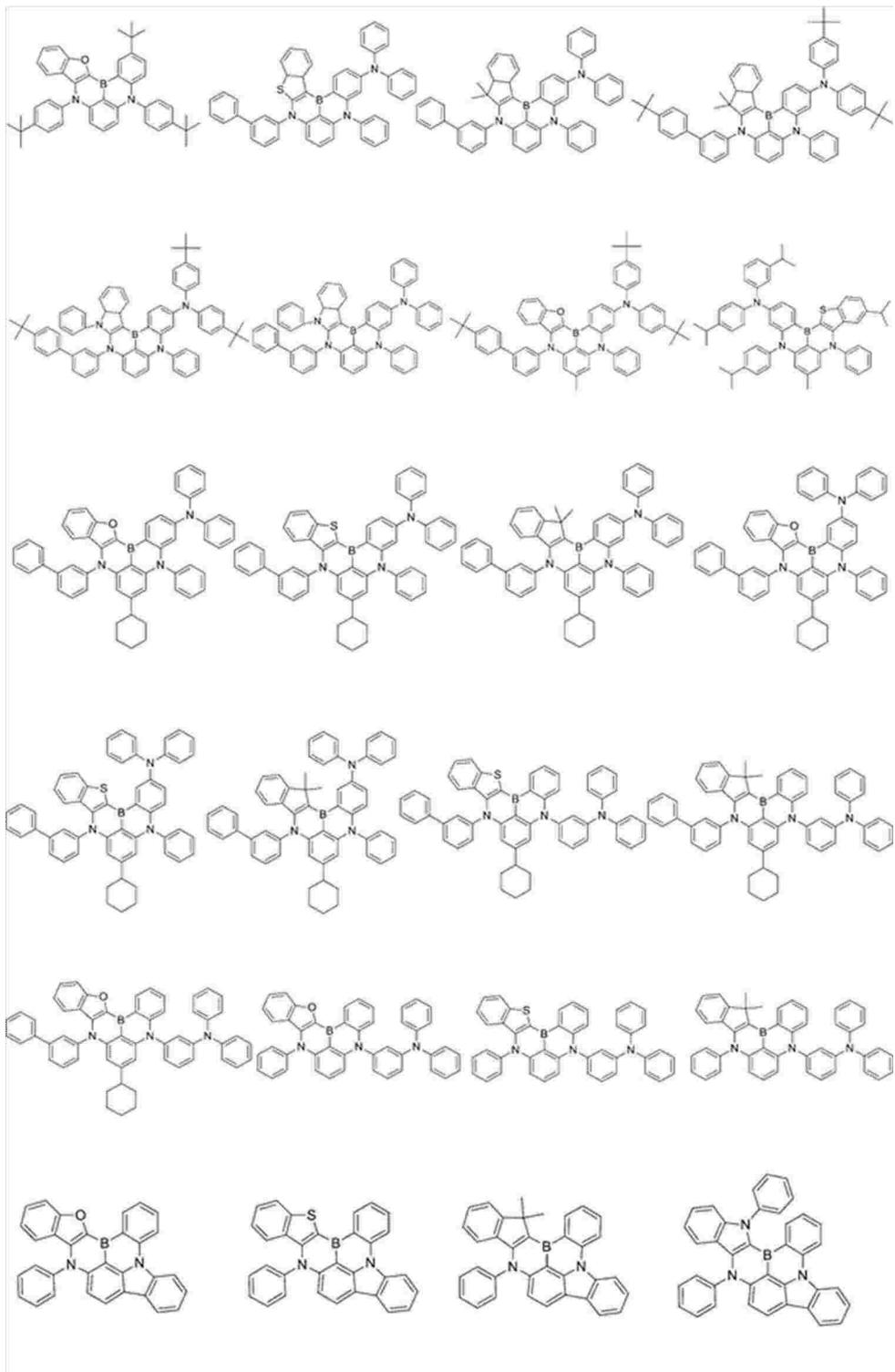
30

40

【 0 4 3 5】

50

【化 1 6 1】



10

20

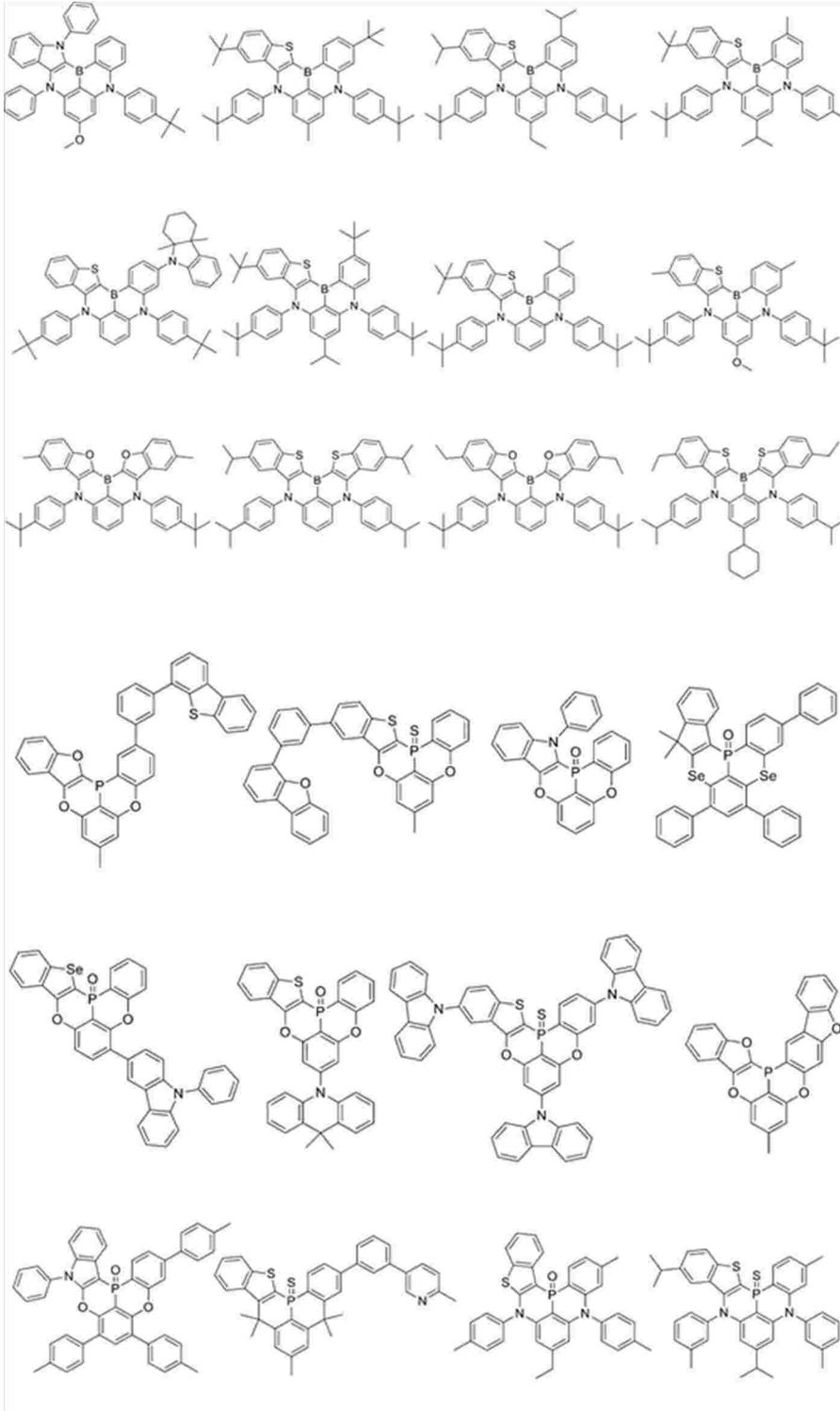
30

40

【 0 4 3 6 】

50

【化 1 6 2】



10

20

30

40

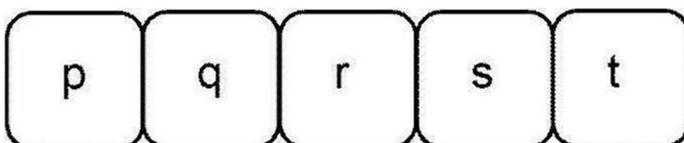
【 0 4 3 7】

(一般式(7)で表される化合物)

一般式(7)で表される化合物について説明する。

【 0 4 3 8】

【化 1 6 3】

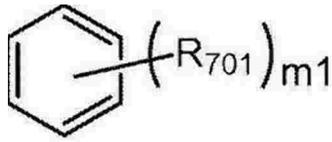


(7)

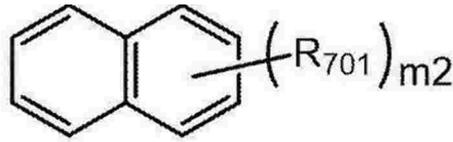
50

【 0 4 3 9 】

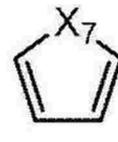
【 化 1 6 4 】



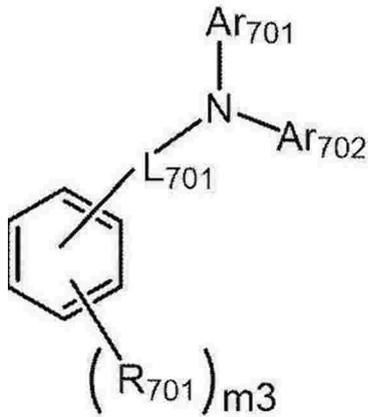
(72)



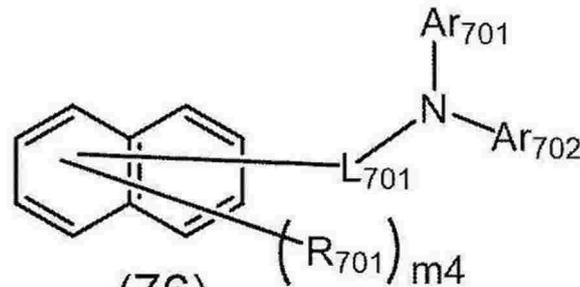
(73)



(74)



(75)



(76)

【 0 4 4 0 】

(前記一般式(7)において、

r環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式(72)又は一般式(73)で表される環であり、

q環及びs環は、それぞれ独立に、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式(74)で表される環であり、

p環及びt環は、それぞれ独立に、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式(75)又は一般式(76)で表される構造であり、

X₇は、酸素原子、硫黄原子、又はNR₇₀₂である。

R₇₀₁が複数存在する場合、隣接する複数のR₇₀₁は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₇₀₁及びR₇₀₂は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

- Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

- O-(R₉₀₄)で表される基、

- S-(R₉₀₅)で表される基、

- N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

10

20

30

40

50

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 $A r_{701}$ 及び $A r_{702}$ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

L_{701} は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニレン基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニレン基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基であり、

m_1 は、0、1 又は 2 であり、

m_2 は、0、1、2、3 又は 4 であり、

m_3 は、それぞれ独立に、0、1、2 又は 3 であり、

m_4 は、それぞれ独立に、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

R_{701} が複数存在する場合、複数の R_{701} は、互いに同一であるか、又は異なり、

X_7 が複数存在する場合、複数の X_7 は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{702} が複数存在する場合、複数の R_{702} は、互いに同一であるか、又は異なり、

$A r_{701}$ が複数存在する場合、複数の $A r_{701}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

$A r_{702}$ が複数存在する場合、複数の $A r_{702}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

L_{701} が複数存在する場合、複数の L_{701} は、互いに同一であるか、又は異なる。))

【0441】

前記一般式(7)において、p環、q環、r環、s環及びt環の各環は、隣接環と炭素原子2つを共有して縮合する。縮合する位置及び向きは限定されず、任意の位置及び向きで縮合可能である。

【0442】

一実施形態において、r環としての前記一般式(72)又は一般式(73)において、 $m_1 = 0$ 又は $m_2 = 0$ である。

【0443】

一実施形態において、前記一般式(7)で表される化合物は、下記一般式(71-1) ~ (71-6)のいずれかで表される。

【0444】

10

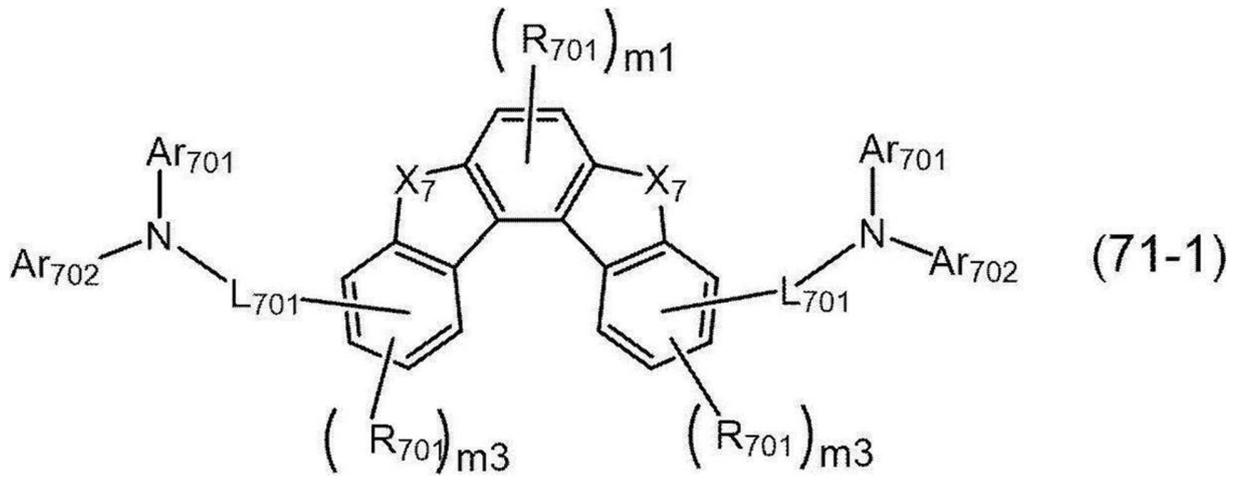
20

30

40

50

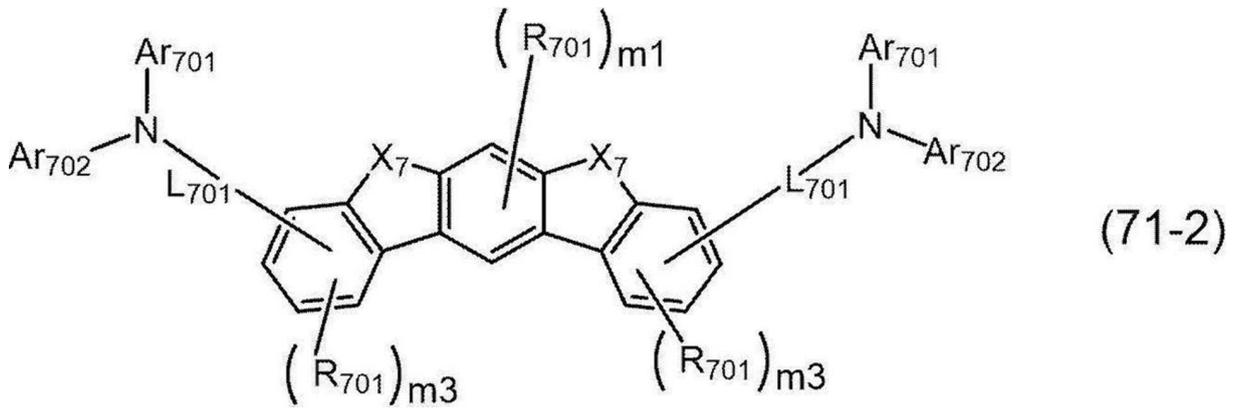
【化 1 6 5】



10

【 0 4 4 5】

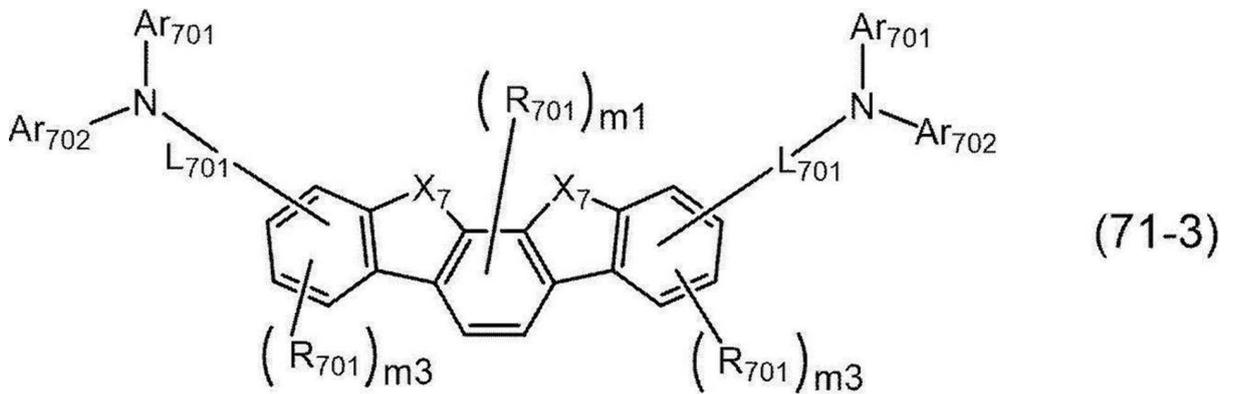
【化 1 6 6】



20

【 0 4 4 6】

【化 1 6 7】



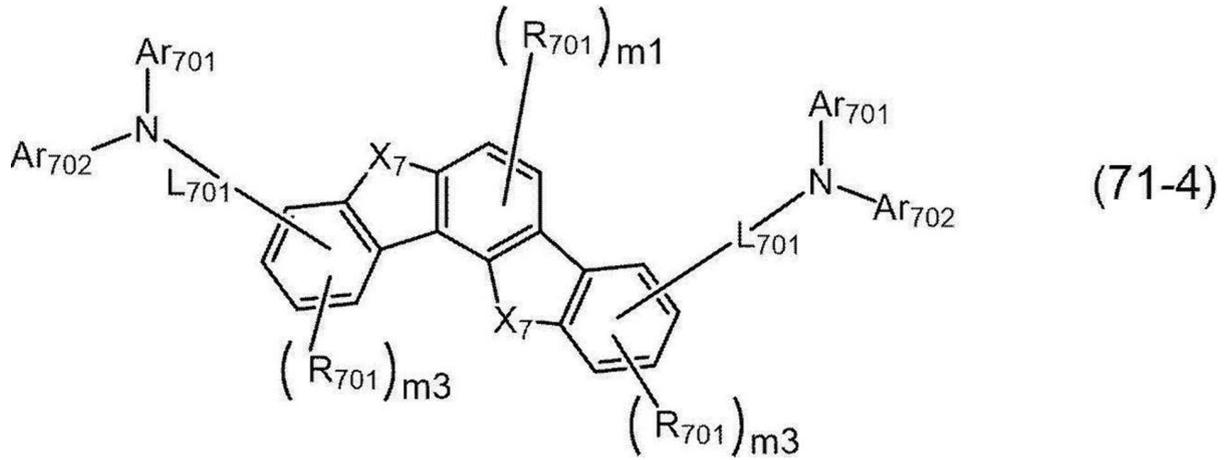
30

【 0 4 4 7】

40

50

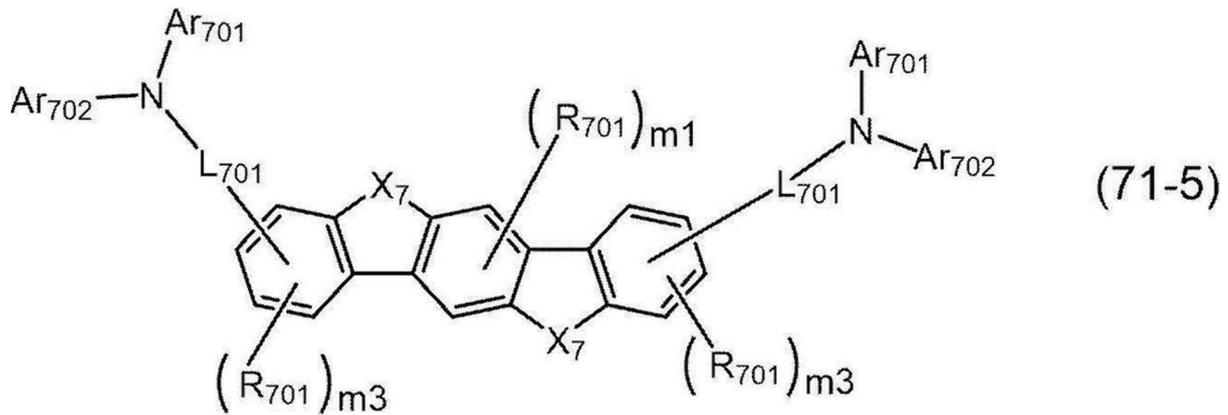
【化168】



10

【0448】

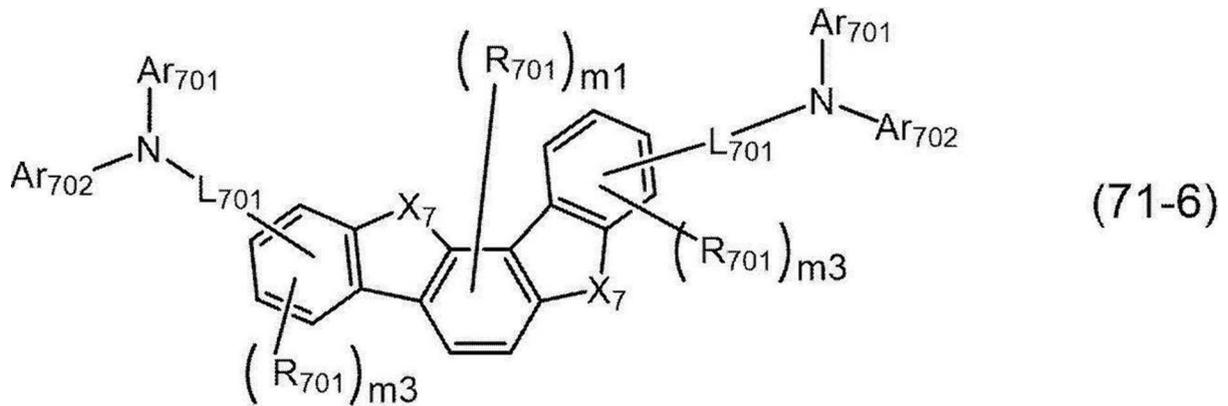
【化169】



20

【0449】

【化170】



40

【0450】

(前記一般式(71-1)~一般式(71-6)において、R701、X7、Ar701、Ar702、L701、m1及びm3は、それぞれ、前記一般式(7)におけるR701、X7、Ar701、Ar702、L701、m1及びm3と同義である。)

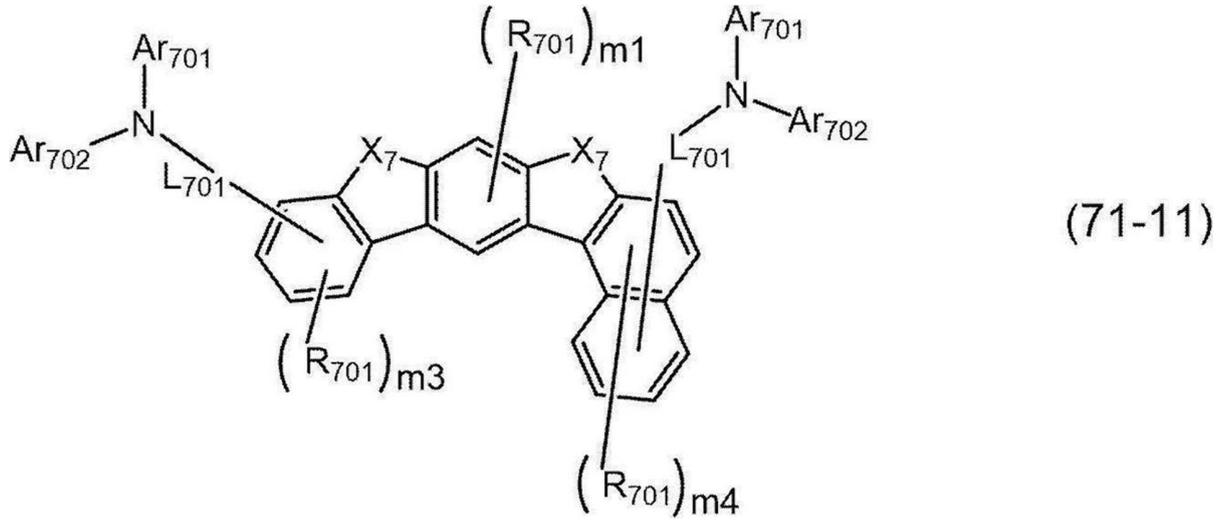
【0451】

一実施形態において、前記一般式(7)で表される化合物は下記一般式(71-11)~一般式(71-13)のいずれかで表される。

【0452】

50

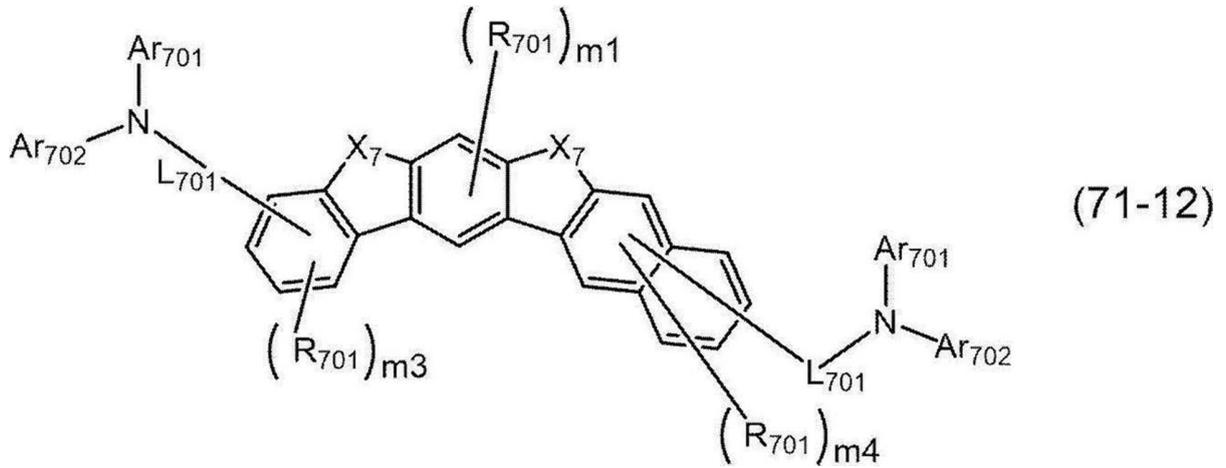
【化171】



10

【0453】

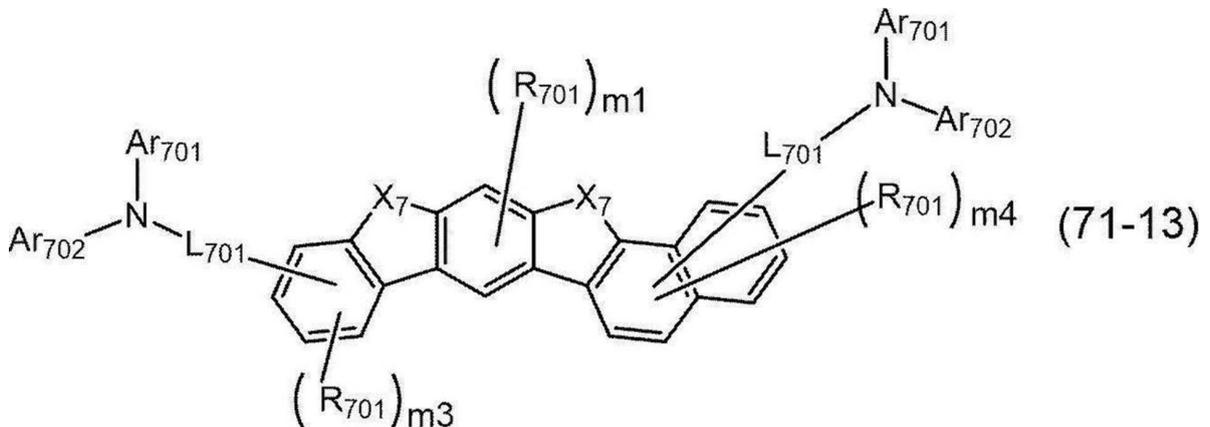
【化172】



20

【0454】

【化173】



30

40

【0455】

(前記一般式(71-11)~一般式(71-13)において、R701、X7、Ar701、Ar702、L701、m1、m3及びm4は、それぞれ、前記一般式(7)におけるR701、X7、Ar701、Ar702、L701、m1、m3及びm4と同義である。)

【0456】

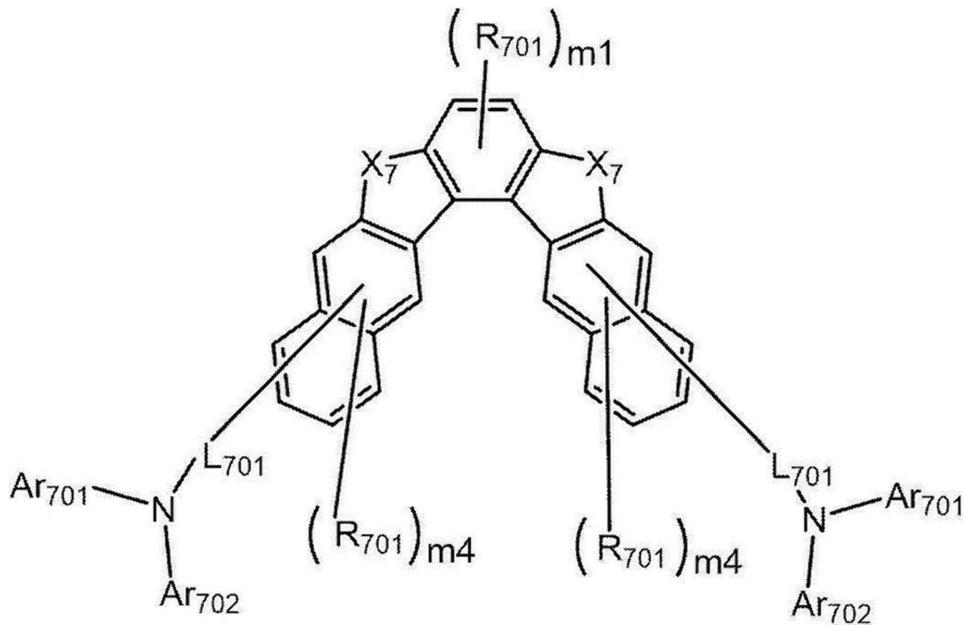
一実施形態において、前記一般式(7)で表される化合物は下記一般式(71-21)

50

~ (7 1 - 2 5) のいずれかで表される。

【 0 4 5 7 】

【 化 1 7 4 】

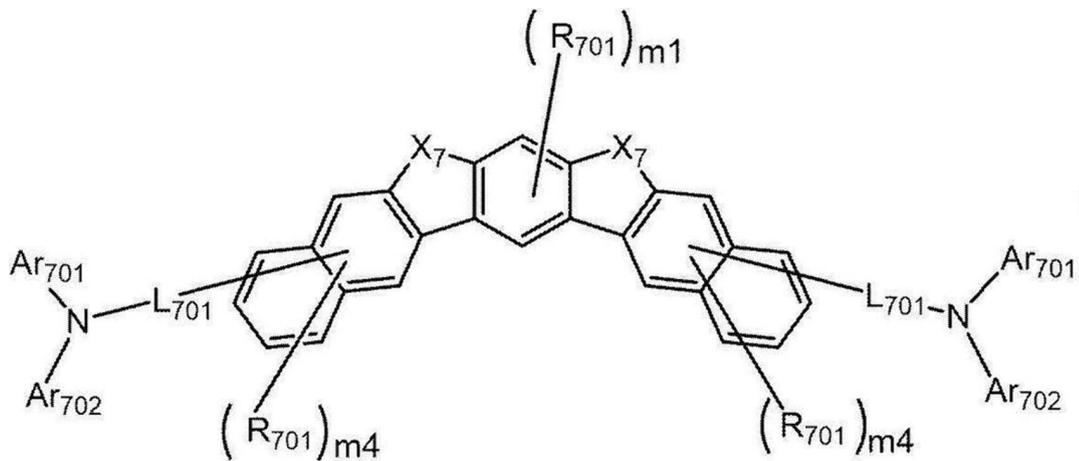


10

20

【 0 4 5 8 】

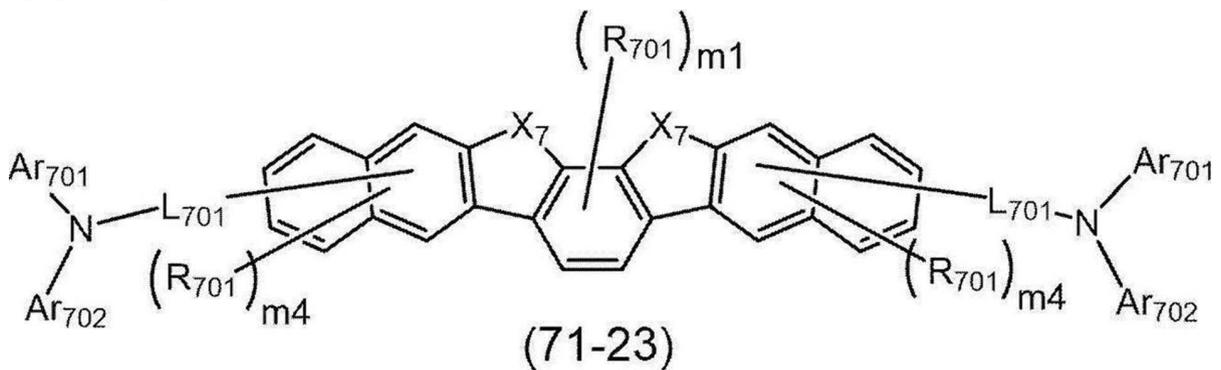
【 化 1 7 5 】



30

【 0 4 5 9 】

【 化 1 7 6 】

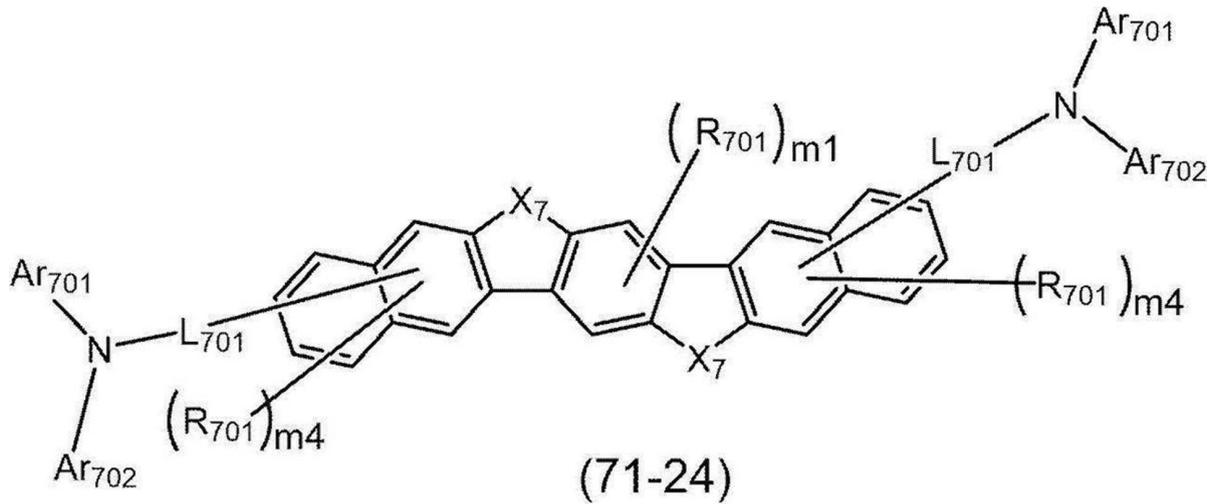


40

【 0 4 6 0 】

50

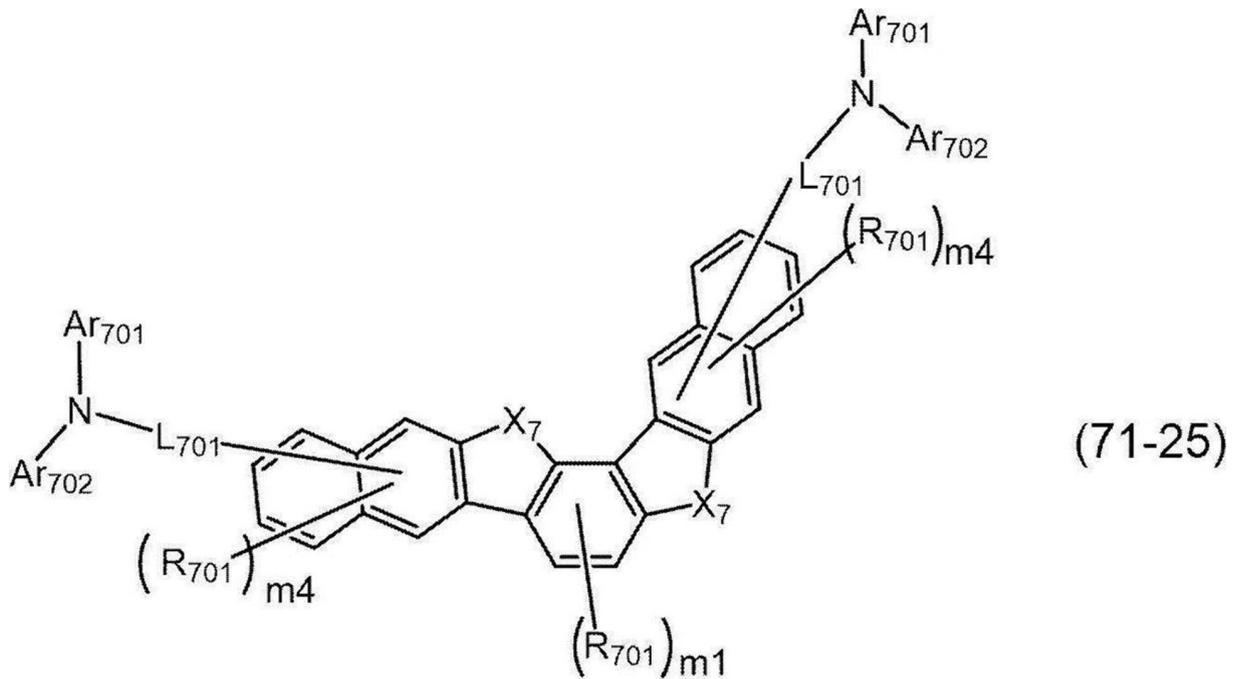
【化 1 7 7】



10

【 0 4 6 1】

【化 1 7 8】



20

30

【 0 4 6 2】

(前記一般式(71-21)~一般式(71-25)において、 R_{701} 、 X_7 、 Ar_{701} 、 Ar_{702} 、 L_{701} 、 m_1 及び m_4 は、それぞれ、前記一般式(7)における R_{701} 、 X_7 、 Ar_{701} 、 Ar_{702} 、 L_{701} 、 m_1 及び m_4 と同義である。)

【 0 4 6 3】

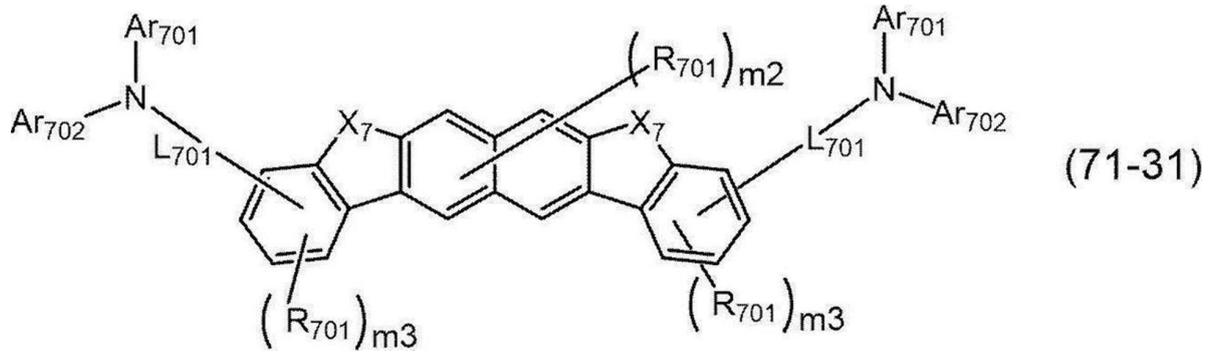
一実施形態において、前記一般式(7)で表される化合物は下記一般式(71-31)~一般式(71-33)のいずれかで表される。

40

【 0 4 6 4】

50

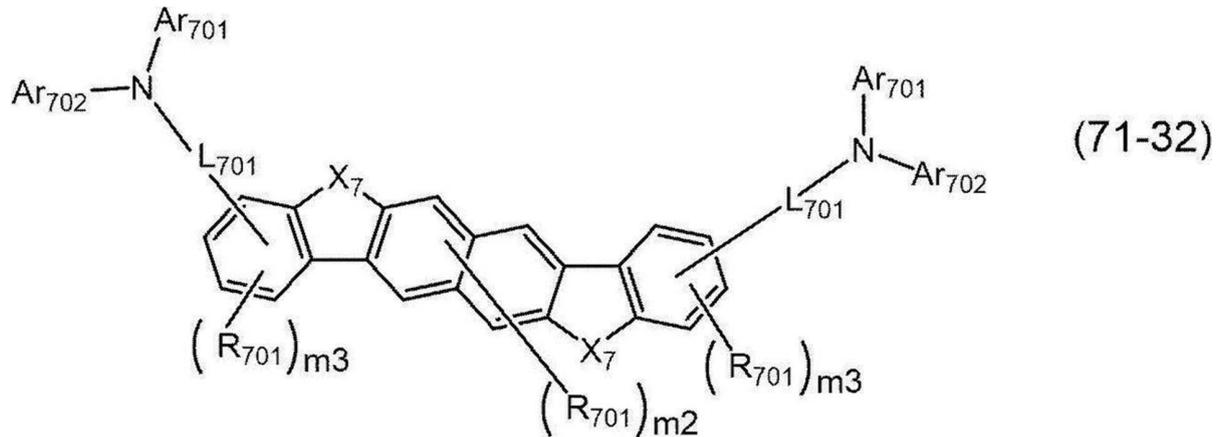
【化179】



10

【0465】

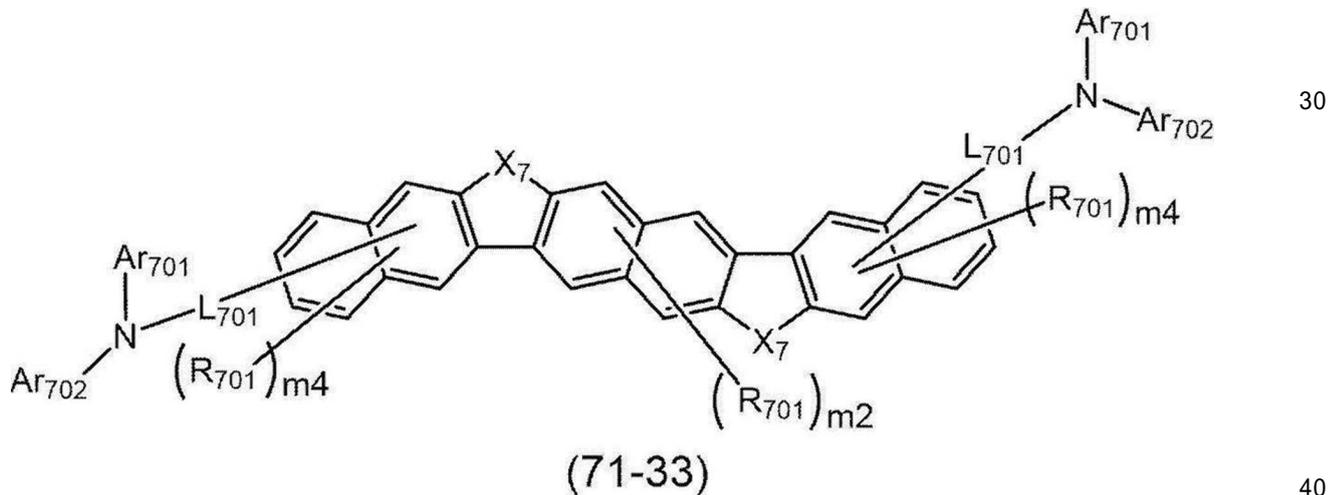
【化180】



20

【0466】

【化181】



30

40

【0467】

(前記一般式(71-31)~一般式(71-33)において、R701、X7、Ar701、Ar702、L701、m2~m4は、それぞれ、前記一般式(7)におけるR701、X7、Ar701、Ar702、L701、m2~m4と同義である。)

【0468】

一実施形態においては、Ar701及びAr702が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基である。

【0469】

一実施形態においては、Ar701及びAr702の一方が置換もしくは無置換の環形成

50

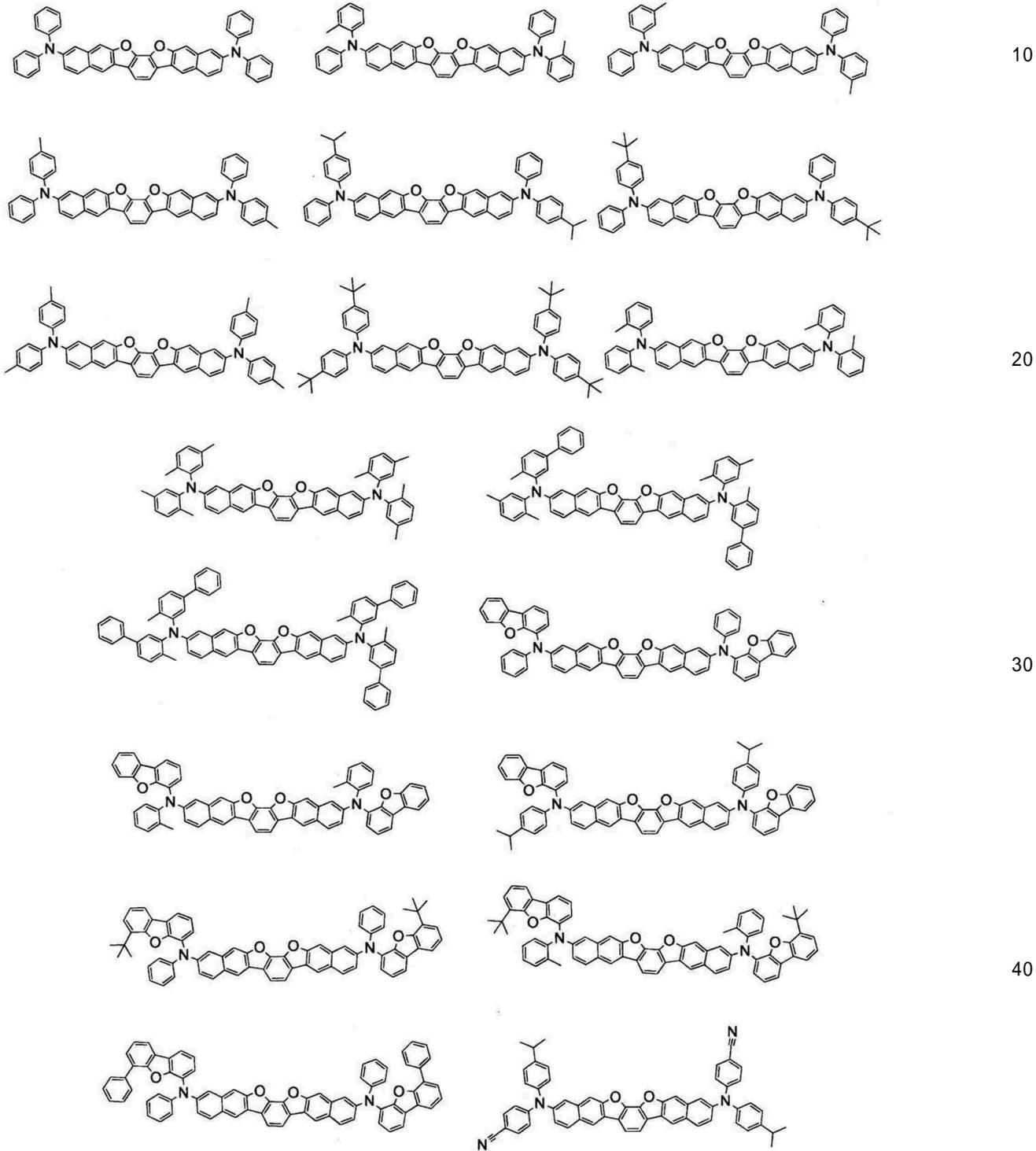
炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、Ar701 及び Ar702 の他方が置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

【0470】

前記一般式(7)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

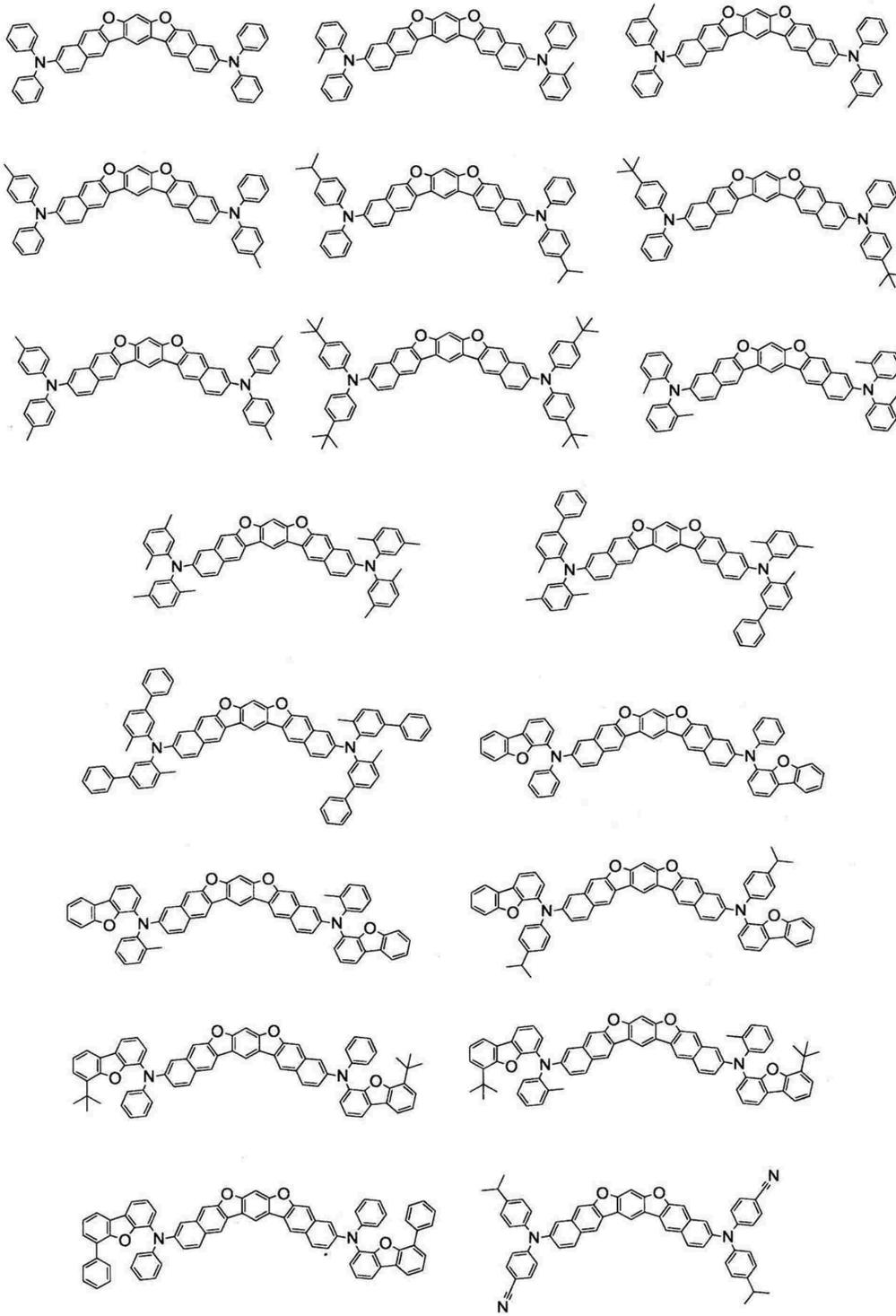
【0471】

【化182】



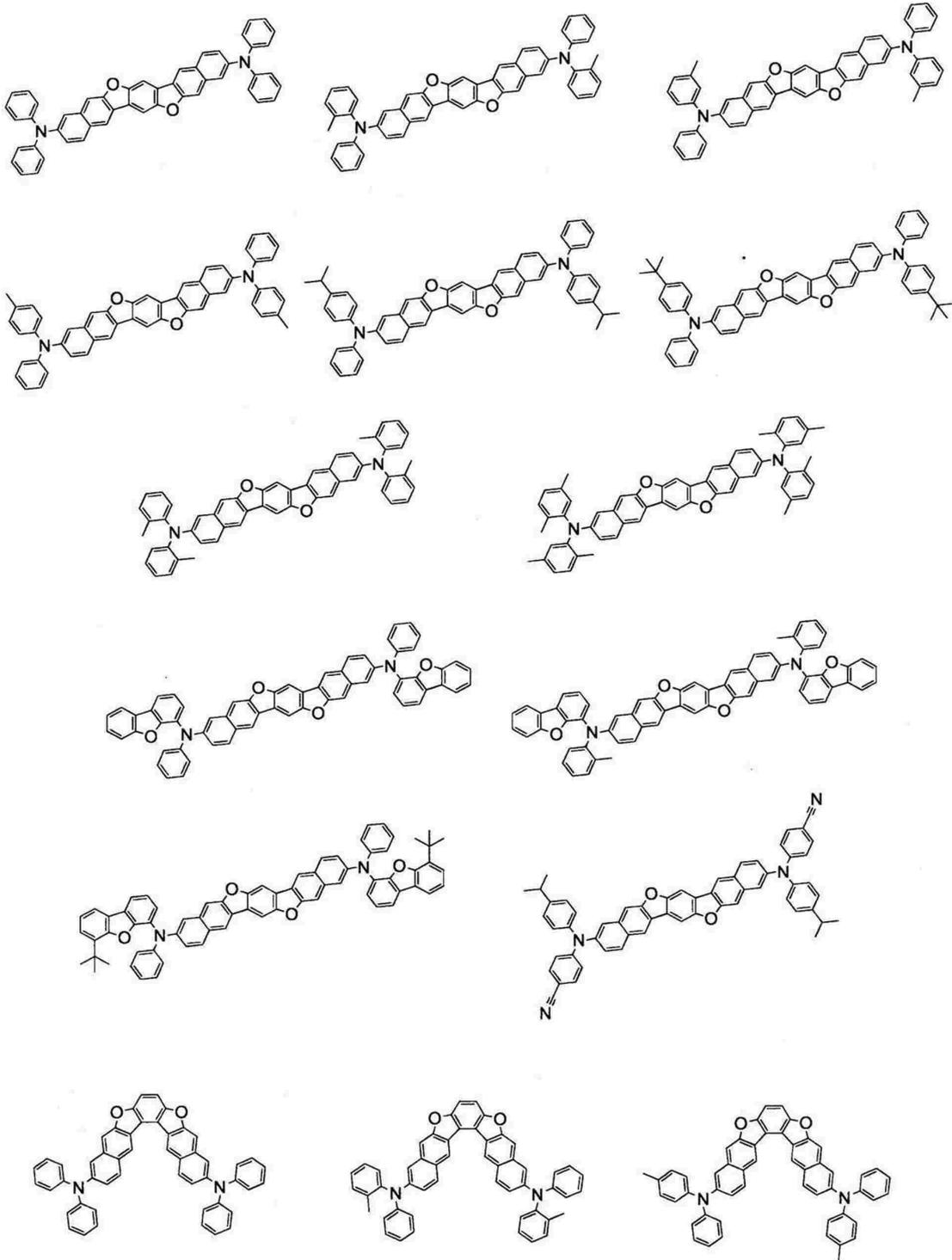
【0472】

【化 1 8 3】



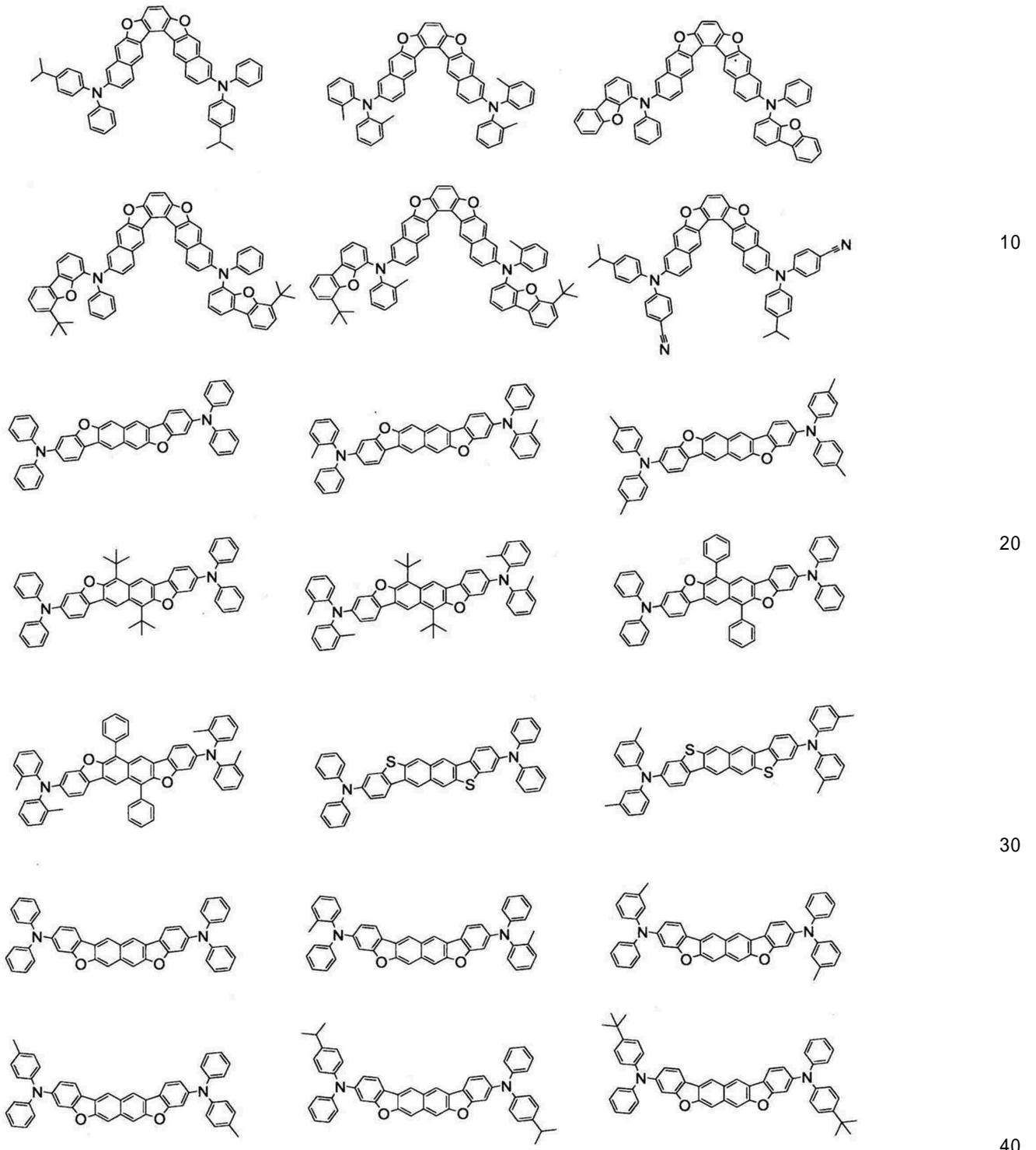
【 0 4 7 3】

【化 1 8 4】



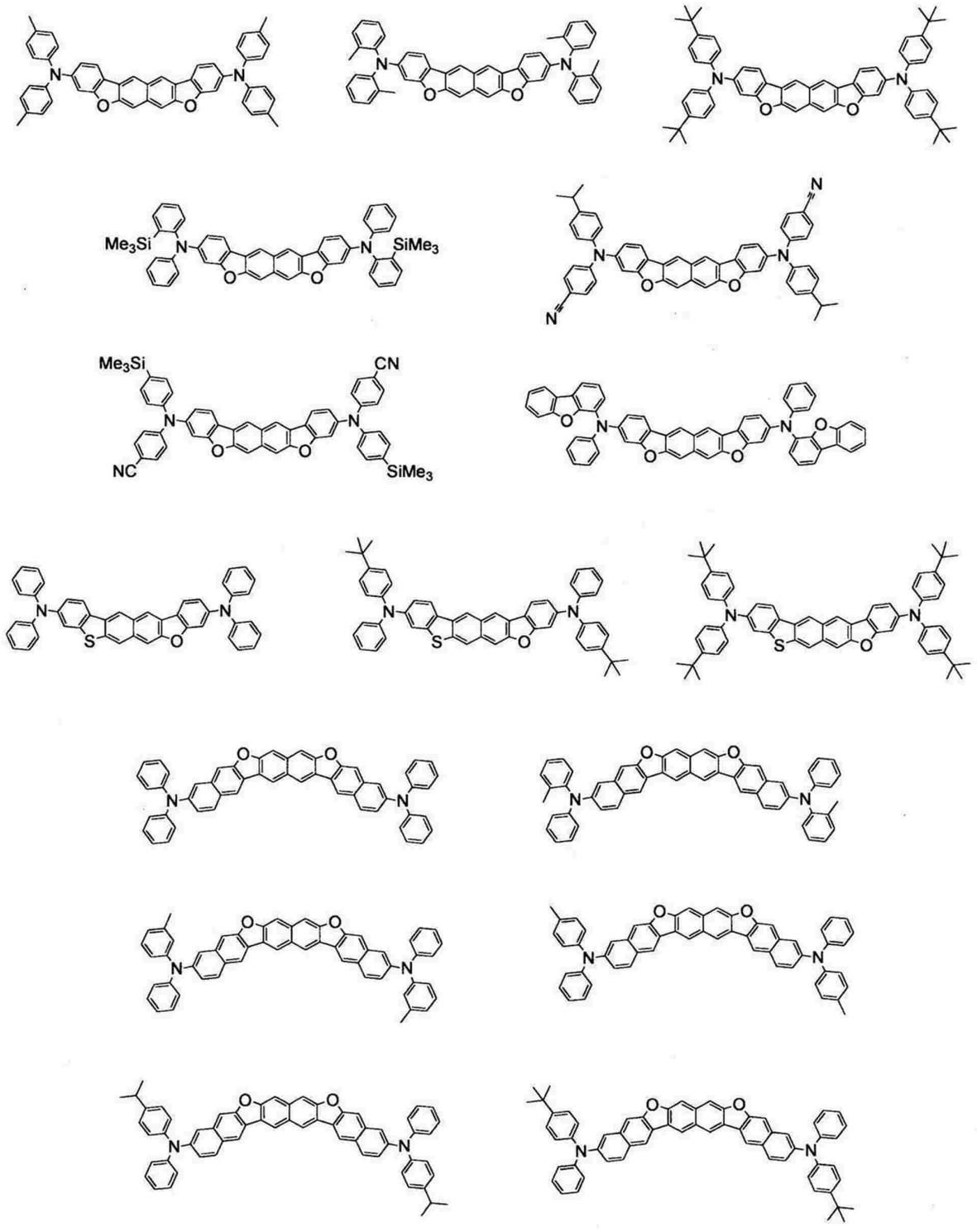
【 0 4 7 4】

【化 1 8 5】



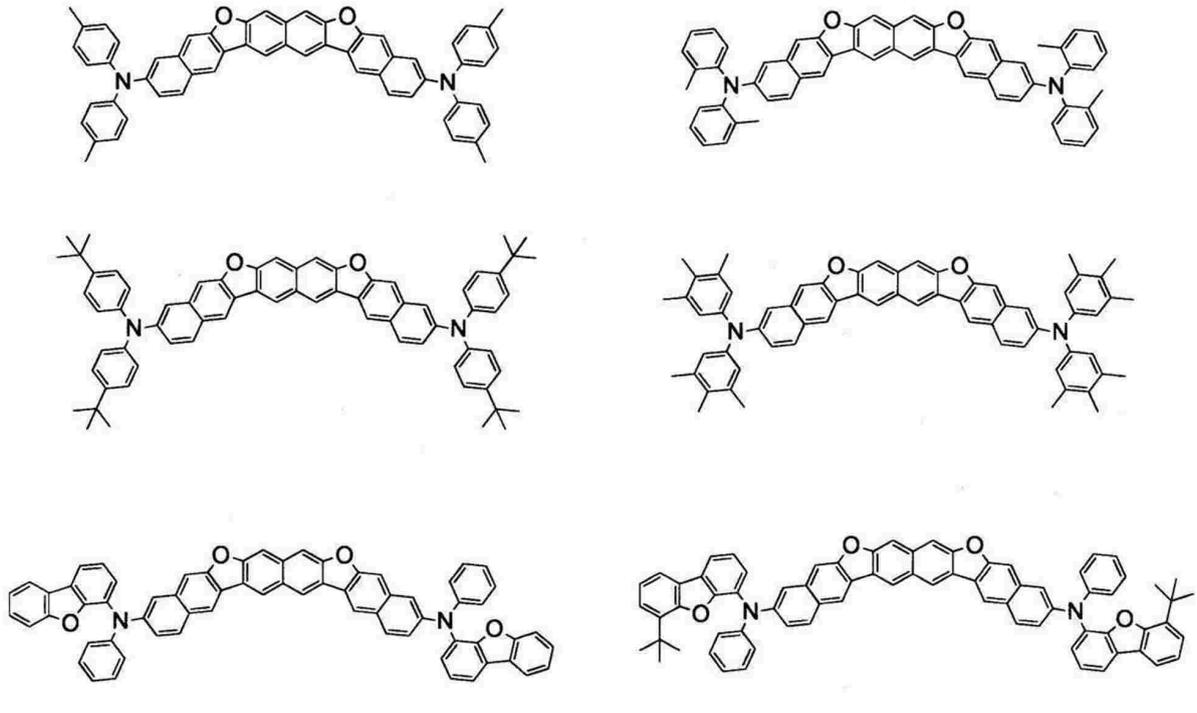
【 0 4 7 5】

【化 1 8 6】



【 0 4 7 6】

【化 1 8 7】



10

20

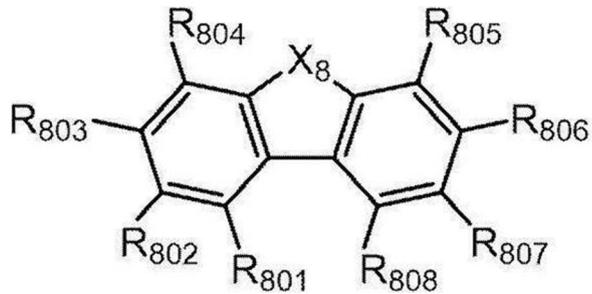
【0 4 7 7】

(一般式(8)で表される化合物)

一般式(8)で表される化合物について説明する。

【0 4 7 8】

【化 1 8 8】



(8)

30

【0 4 7 9】

(前記一般式(8)において、

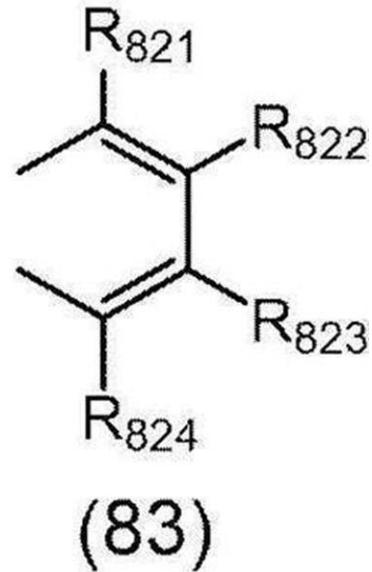
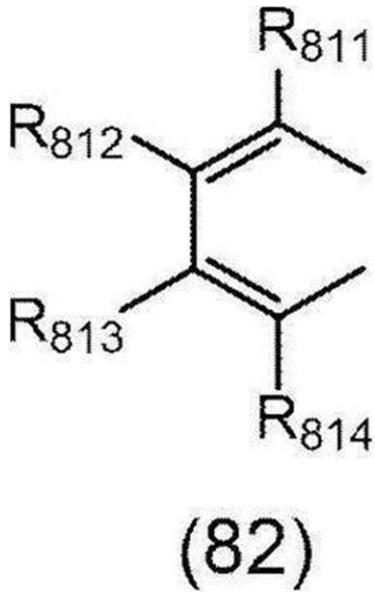
R_{801} と R_{802} 、 R_{802} と R_{803} 、及び R_{803} と R_{804} の少なくとも一組は、互いに結合して下記一般式(82)で示される2価の基を形成し、

R_{805} と R_{806} 、 R_{806} と R_{807} 、及び R_{807} と R_{808} の少なくとも一組は、互いに結合して下記一般式(83)で示される2価の基を形成する。)

40

【0 4 8 0】

【化 1 8 9】



10

【0 4 8 1】

(前記一般式(82)で示される2個の基を形成しない $R_{801} \sim R_{804}$ 、及び $R_{811} \sim R_{814}$ の少なくとも1つは下記一般式(84)で表される1個の基であり、

20

前記一般式(83)で示される2個の基を形成しない $R_{805} \sim R_{808}$ 、及び $R_{821} \sim R_{824}$ の少なくとも1つは下記一般式(84)で表される1個の基であり、

X_8 は、酸素原子、硫黄原子、又は NR_{809} であり、

前記一般式(82)及び一般式(83)で表される2個の基を形成せず、かつ、前記一般式(84)で表される1個の基ではない $R_{801} \sim R_{808}$ 、前記一般式(84)で表される1個の基ではない $R_{811} \sim R_{814}$ 及び $R_{821} \sim R_{824}$ 、並びに R_{809} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

30

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

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

- O-(R_{904})で表される基、

- S-(R_{905})で表される基、

- N(R_{906})(R_{907})で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

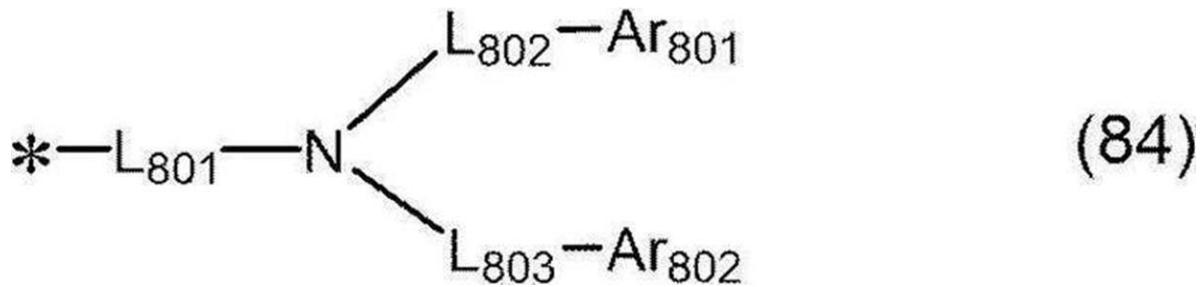
40

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基である。))

【0 4 8 2】

50

【化190】



【0483】

10

(前記一般式(84)において、

Ar₈₀₁及びAr₈₀₂は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

L₈₀₁~L₈₀₃は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の2価の複素環基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリーレン基及び置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の2価の複素環基からなる群から選択される2~4個の基が結合して形成される2価の連結基であり、

20

前記一般式(84)中の*は、前記一般式(8)で表される環構造、一般式(82)又は一般式(83)で表される基との結合位置を示す。)

【0484】

前記一般式(8)において、前記一般式(82)で示される2価の基及び一般式(83)で示される2価の基が形成される位置は特に限定されず、R₈₀₁~R₈₀₈の可能な位置において当該基を形成し得る。

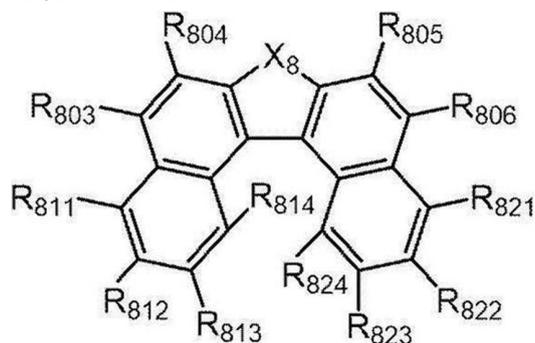
【0485】

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

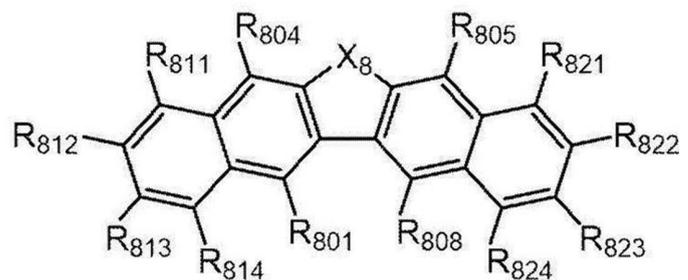
30

【0486】

【化191】



(81-1)



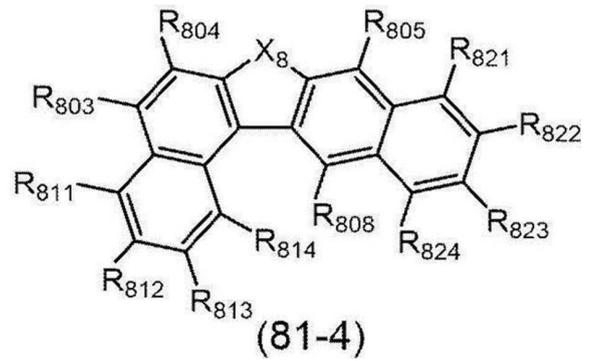
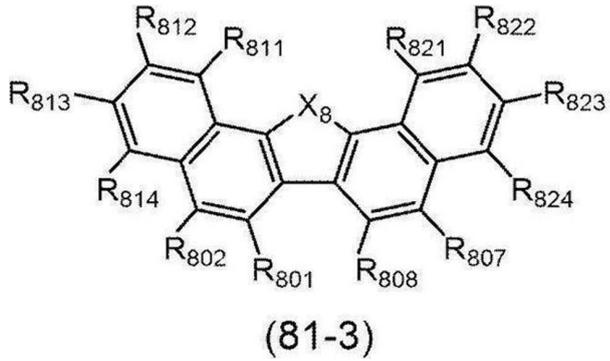
(81-2)

40

【0487】

50

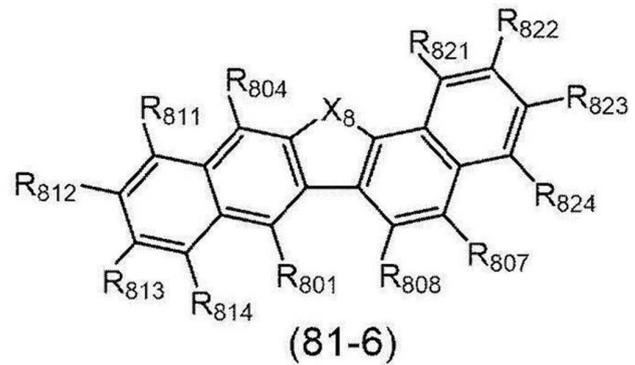
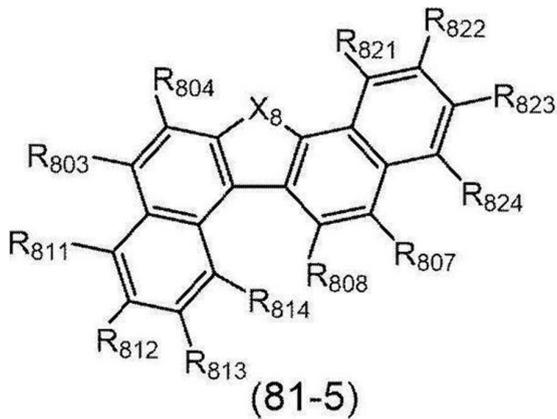
【化 1 9 2】



10

【 0 4 8 8】

【化 1 9 3】



20

【 0 4 8 9】

(前記一般式(81-1)~一般式(81-6)において、

X₈は、前記一般式(8)におけるX₈と同義であり、R₈₀₁~R₈₂₄のうち少なくとも2つは、前記一般式(84)で表される1価の基であり、前記一般式(84)で表される1価の基ではないR₈₀₁~R₈₂₄は、それぞれ独立に

30

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

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

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基である。)

40

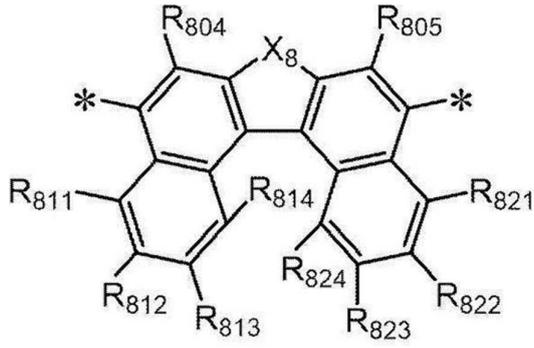
【 0 4 9 0】

一実施形態において、前記一般式(8)で表される化合物は、下記一般式(81-7)~(81-18)のいずれかで表される。

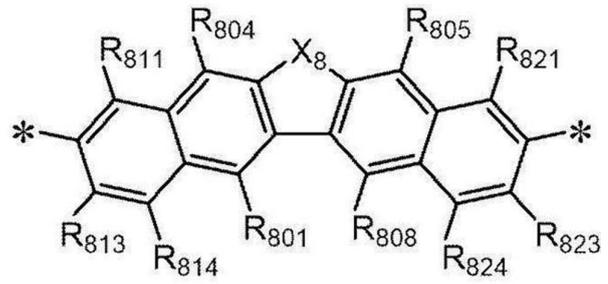
【 0 4 9 1】

50

【化 1 9 4】



(81-7)

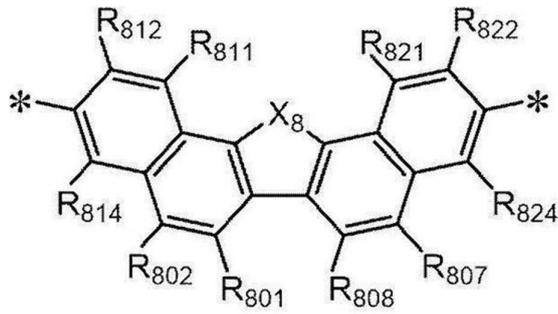


(81-8)

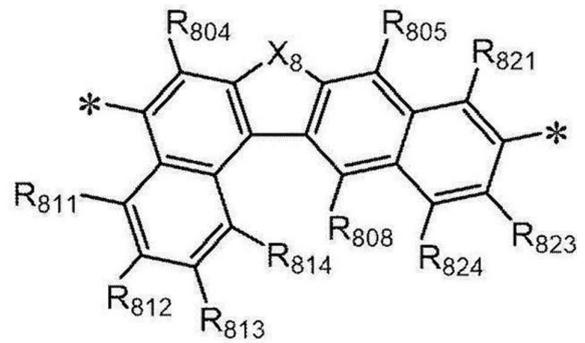
10

【 0 4 9 2】

【化 1 9 5】



(81-9)

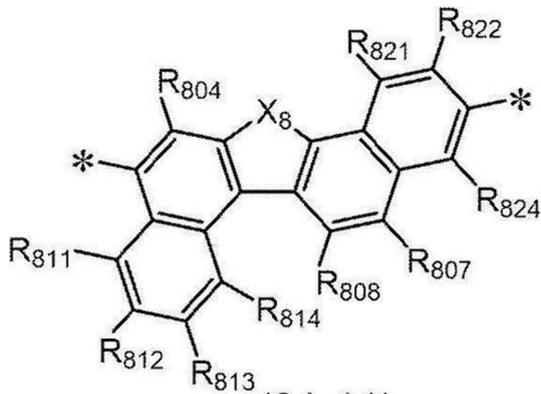


(81-10)

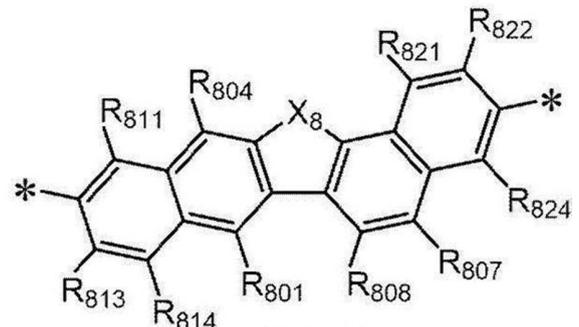
20

【 0 4 9 3】

【化 1 9 6】



(81-11)



(81-12)

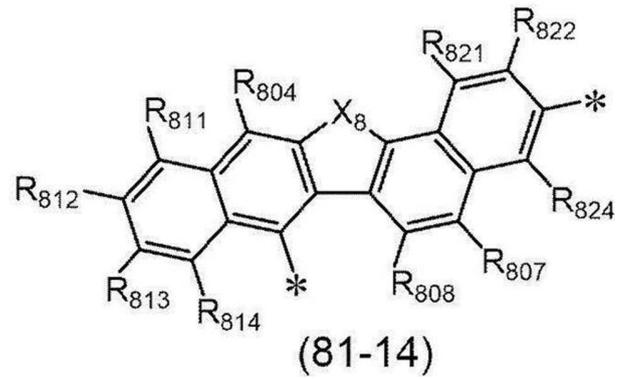
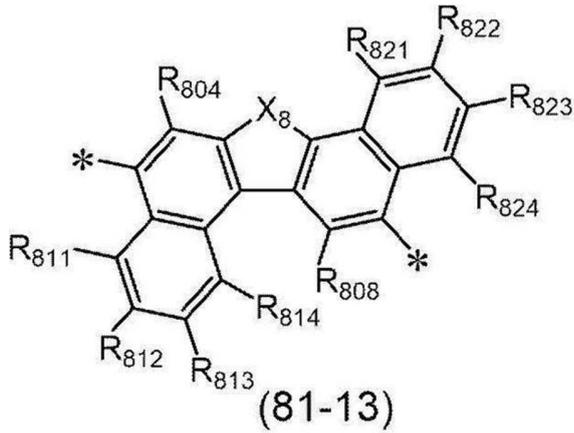
30

【 0 4 9 4】

40

50

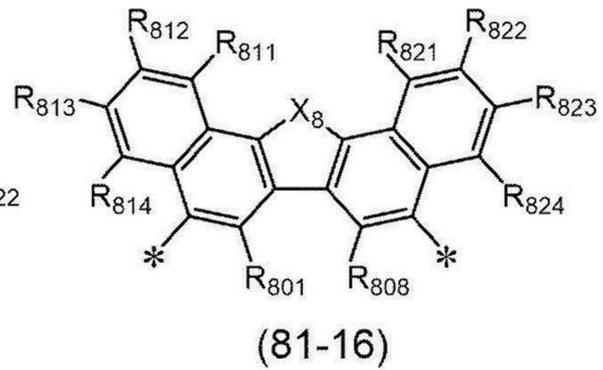
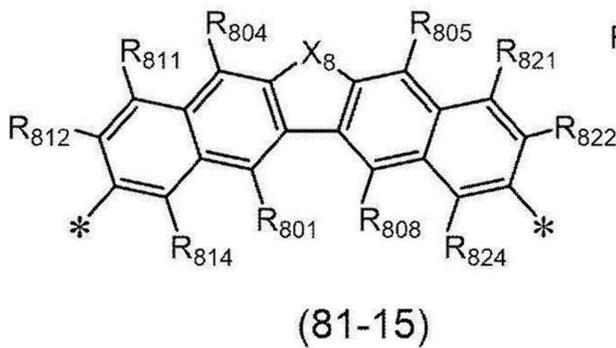
【化 1 9 7】



10

【 0 4 9 5】

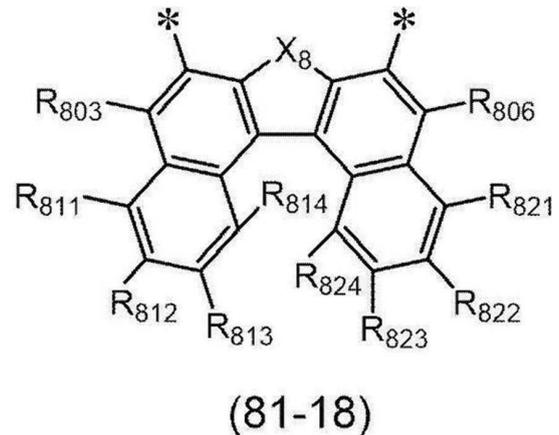
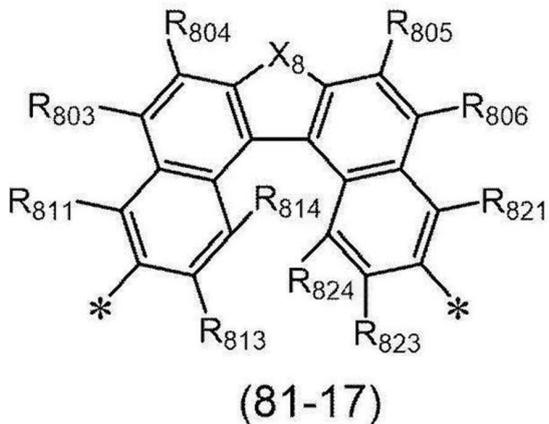
【化 1 9 8】



20

【 0 4 9 6】

【化 1 9 9】



30

【 0 4 9 7】

(前記一般式(81-7)~一般式(81-18)において、

X₈は、前記一般式(8)におけるX₈と同義であり、

*は、前記一般式(84)で表される1価の基と結合する単結合であり、

R₈₀₁~R₈₂₄は、それぞれ独立に、前記一般式(81-1)~一般式(81-6)における前記一般式(84)で表される1価の基ではないR₈₀₁~R₈₂₄と同義である。)

【 0 4 9 8】

前記一般式(82)及び一般式(83)で表される2価の基を形成せず、かつ、前記一般式(84)で表される1価の基ではないR₈₀₁~R₈₀₈、及び、前記一般式(84)

40

50

で表される 1 価の基ではない $R_{811} \sim R_{814}$ 及び $R_{821} \sim R_{824}$ は、好ましくは、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

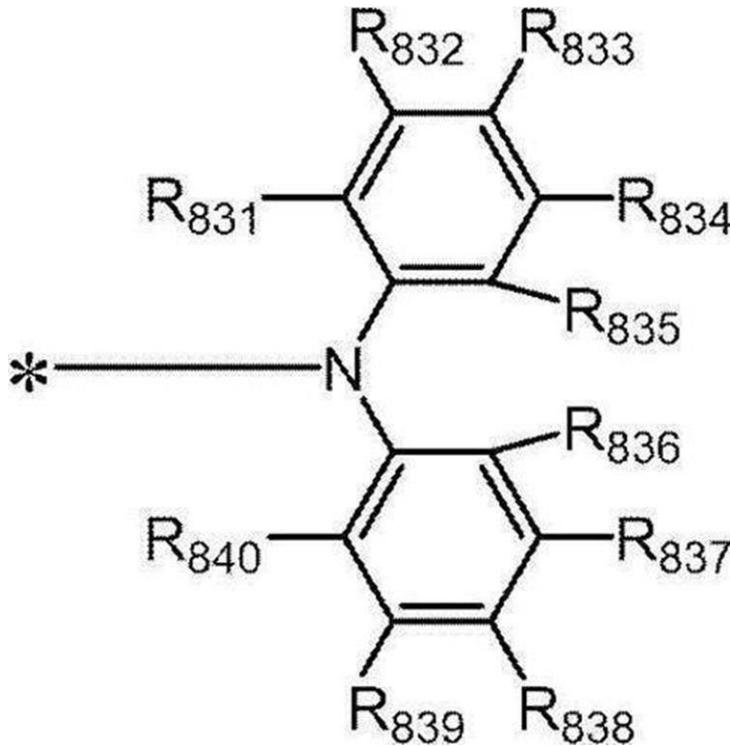
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

【0499】

前記一般式 (84) で表される 1 価の基は、好ましくは下記一般式 (85) 又は一般式 (86) で表される。

【0500】

【化200】



【0501】

(前記一般式 (85) において、

$R_{831} \sim R_{840}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

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

- O - (R_{904}) で表される基、

- S - (R_{905}) で表される基、

- N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

10

20

30

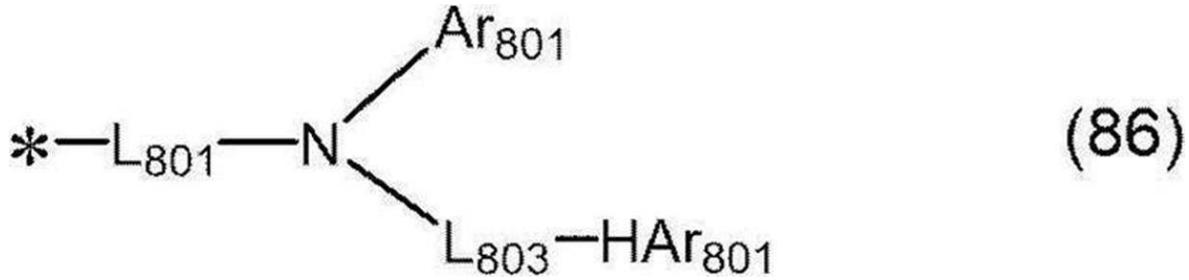
40

50

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
前記一般式 (85) 中の * は、前記一般式 (84) 中の * と同義である。)

【0502】

【化201】



10

【0503】

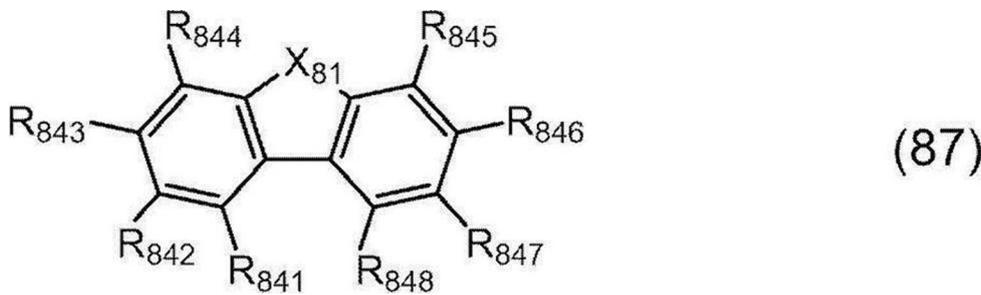
(前記一般式 (86) において、

Ar₈₀₁、L₈₀₁ 及び L₈₀₃ は、前記一般式 (84) における Ar₈₀₁、L₈₀₁ 及び L₈₀₃ と同義であり、

HAr₈₀₁ は、下記一般式 (87) で表される構造である。)

【0504】

【化202】



20

【0505】

(前記一般式 (87) において、

X₈₁ は、酸素原子又は硫黄原子であり、

R₈₄₁ ~ R₈₄₈ のいずれか 1 つは、L₈₀₃ に結合する単結合であり、
単結合ではない R₈₄₁ ~ R₈₄₈ 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。)

【0506】

前記一般式 (8) で表される化合物としては、国際公開第 2014/104144 号に記載の化合物の他、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

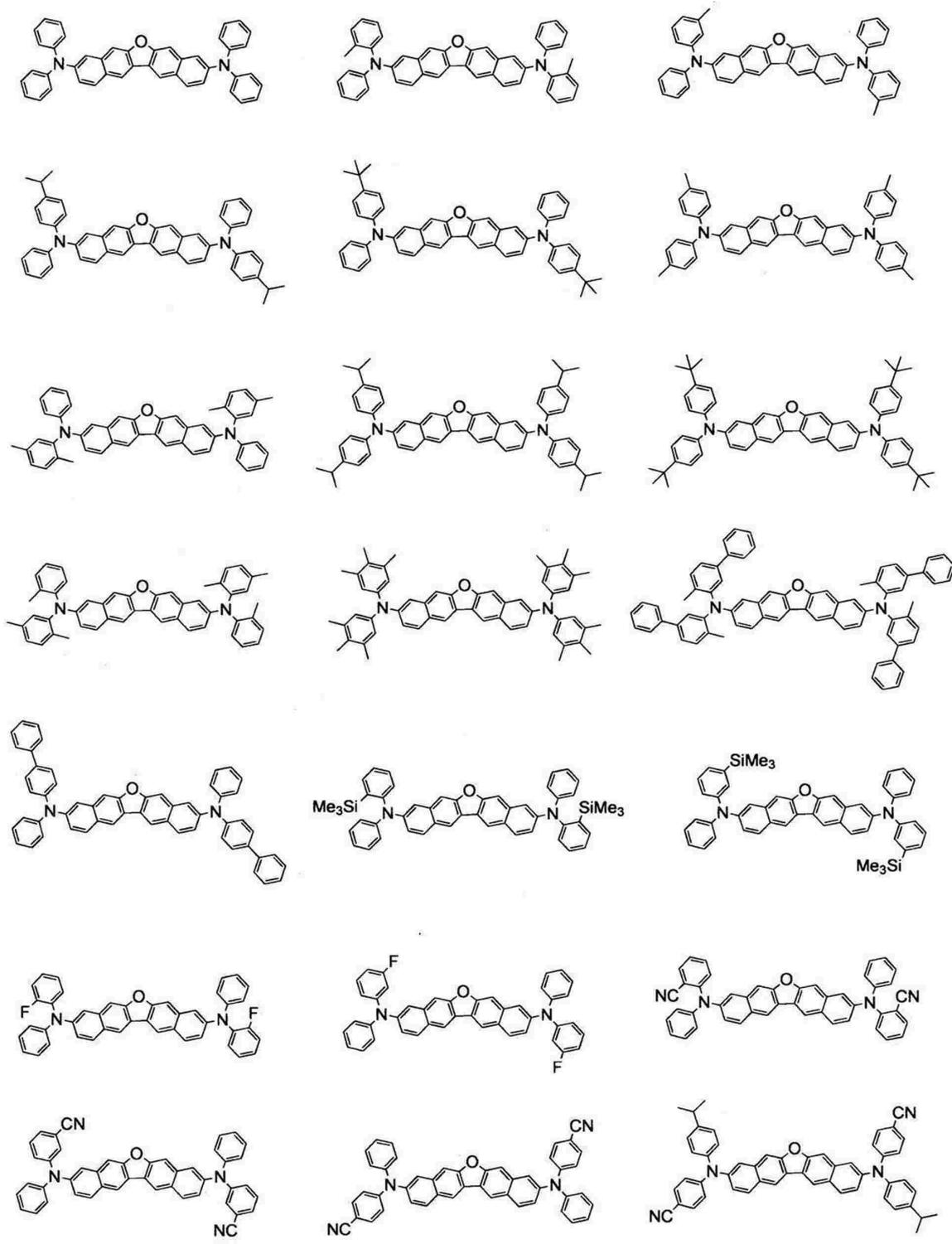
30

40

50

【 0 5 0 7 】

【 化 2 0 3 】



【 0 5 0 8 】

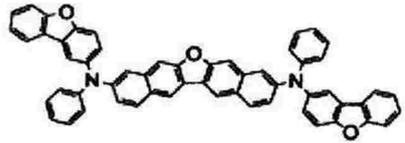
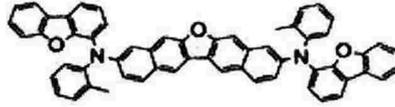
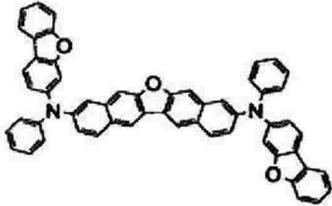
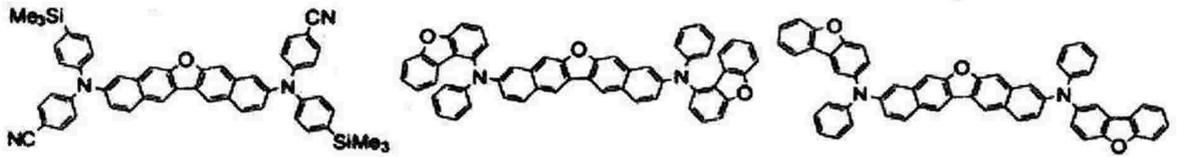
10

20

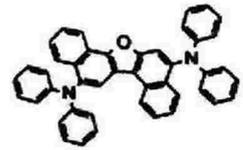
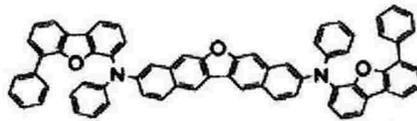
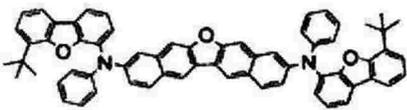
30

40

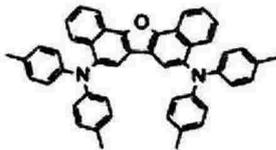
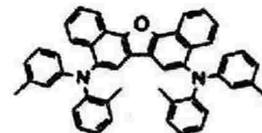
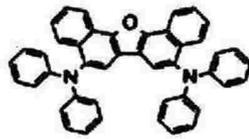
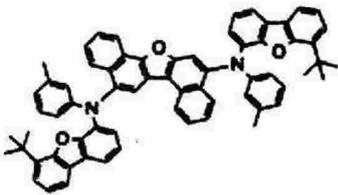
【化 2 0 4】



10



20



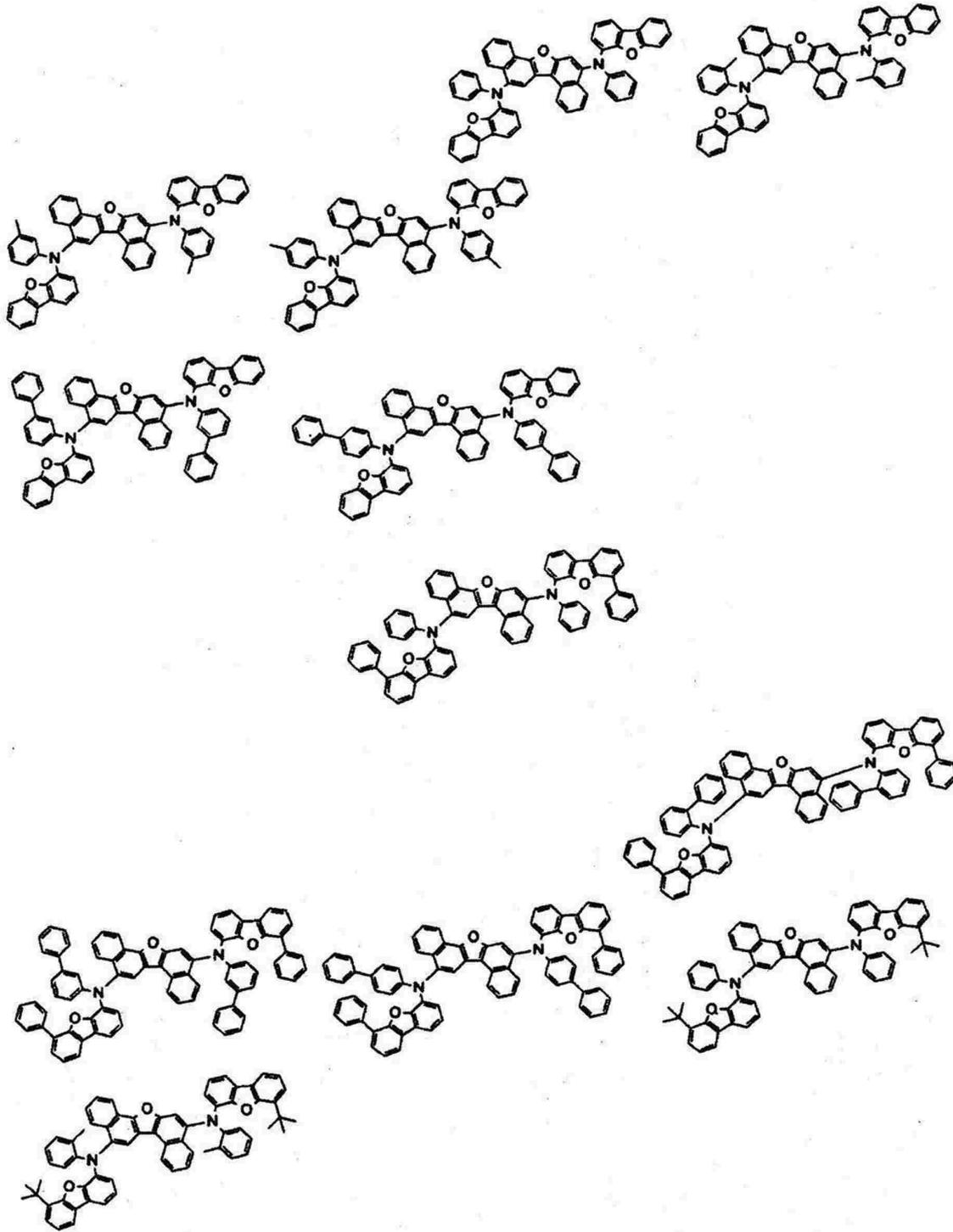
30

【 0 5 0 9】

40

50

【化 2 0 5】



10

20

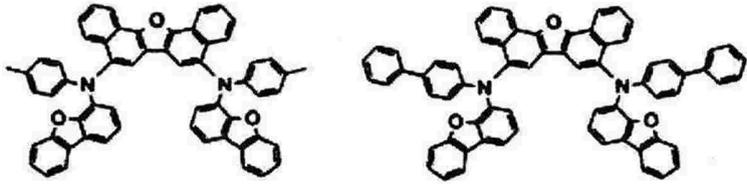
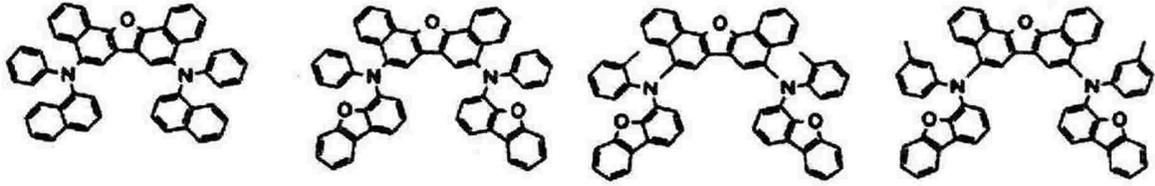
30

40

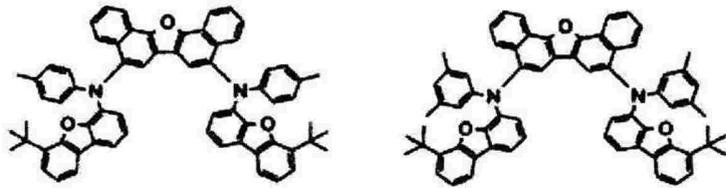
【 0 5 1 0】

50

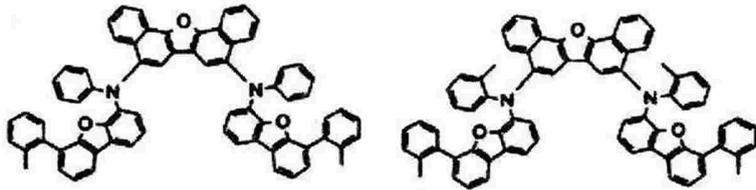
【化 2 0 6】



10



20



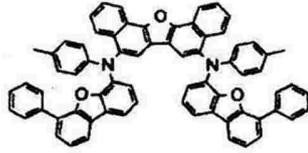
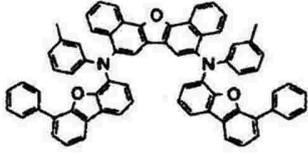
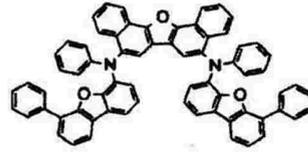
【 0 5 1 1】

30

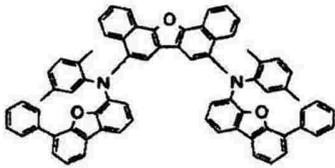
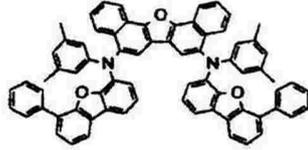
40

50

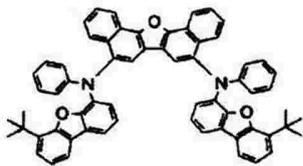
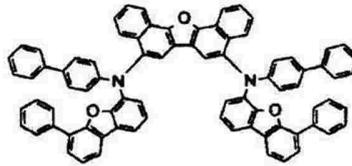
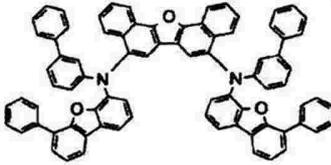
【化 2 0 7】



10



20



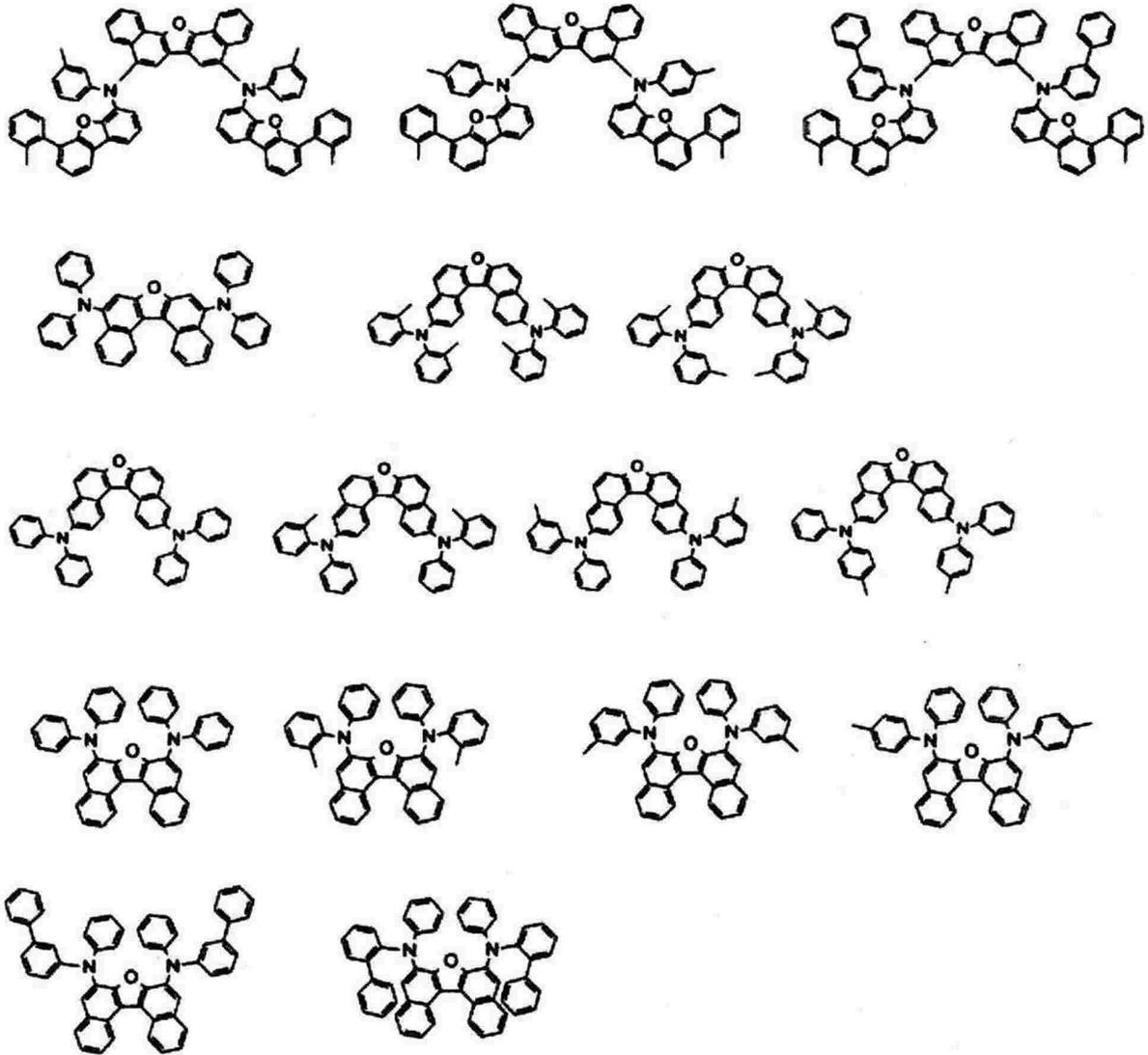
30

【 0 5 1 2】

40

50

【化208】



10

20

30

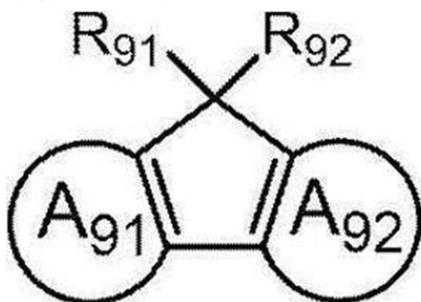
【0513】

(一般式(9)で表される化合物)

一般式(9)で表される化合物について説明する。

【0514】

【化209】



(9)

40

【0515】

(前記一般式(9)において、

A₉₁環及びA₉₂環は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環、又は、

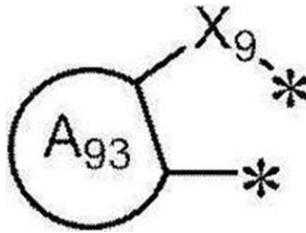
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環であり、

50

A₉₁環及びA₉₂環からなる群から選択される1以上の環は、
下記一般式(92)で表される構造の*と結合する。)

【0516】

【化210】



(92)

10

【0517】

(前記一般式(92)において、

A₉₃環は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50の芳香族炭化水素環、又は、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環であり、

X₉は、N(R₉₃)、C(R₉₄)(R₉₅)、Si(R₉₆)(R₉₇)、Ge(R₉₈)(R₉₉)、酸素原子、硫黄原子又はセレン原子であり、

R₉₁及びR₉₂は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₉₁及びR₉₂、並びにR₉₃~R₉₉は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

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。)

【0518】

A₉₁環及びA₉₂環からなる群から選択される1以上の環は、前記一般式(92)で表される構造の*と結合する。即ち、一実施形態において、A₉₁環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式(92)で表される構造の*と結合する。また、一実施形態において、A₉₂環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式(92)で表される構造の*と結合する。

【0519】

一実施形態において、A₉₁環及びA₉₂環のいずれか又は両方に下記一般式(93)で表される基が結合する。

【0520】

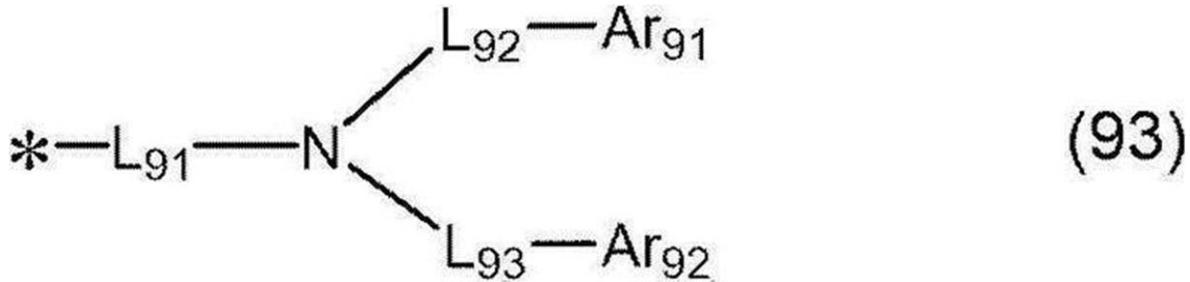
20

30

40

50

【化 2 1 1】



【0 5 2 1】

10

(前記一般式(93)において、

Ar₉₁及びAr₉₂は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

L₉₁~L₉₃は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の2価の複素環基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリーレン基及び置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の2価の複素環基からなる群から選択される2~4個結合して形成される2価の連結基であり、

20

前記一般式(93)中の*は、A₉₁環及びA₉₂環のいずれかとの結合位置を示す。)

【0 5 2 2】

一実施形態において、A₉₁環に加えて、A₉₂環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式(92)で表される構造の*と結合する。この場合、前記一般式(92)で表される構造は、互いに同一でもよいし異なってもよい。

【0 5 2 3】

一実施形態において、R₉₁及びR₉₂は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基である。

30

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

【0 5 2 4】

一実施形態において、環A₉₁及び環A₉₂は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50の芳香族炭化水素環であり、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン環である。

【0 5 2 5】

一実施形態において、環A₉₃は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50の芳香族炭化水素環であり、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン環である。

一実施形態において、X₉は、酸素原子又は硫黄原子である。

【0 5 2 6】

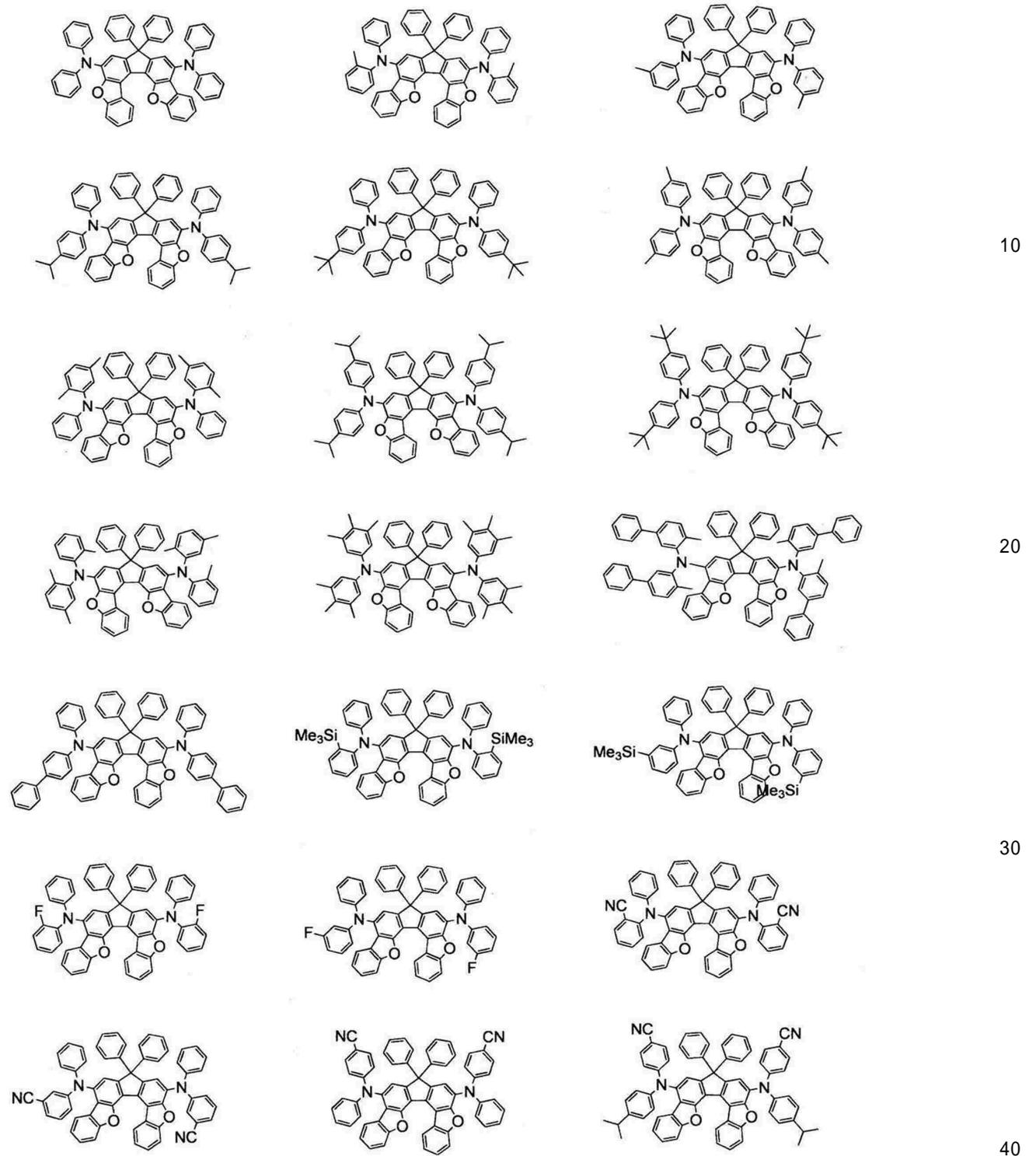
40

前記一般式(9)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

【0 5 2 7】

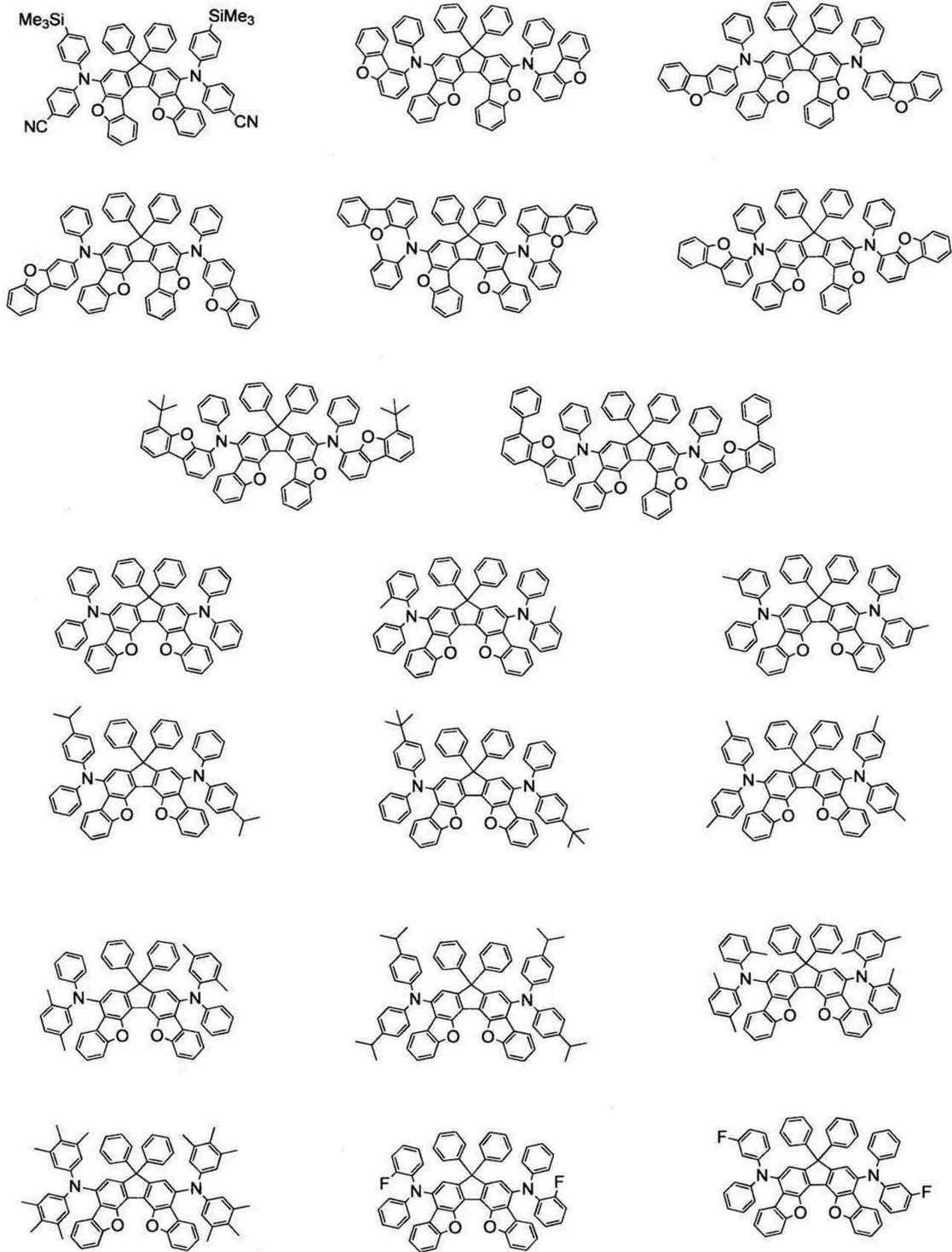
50

【化 2 1 2】



【 0 5 2 8 】

【化 2 1 3】



【 0 5 2 9 】

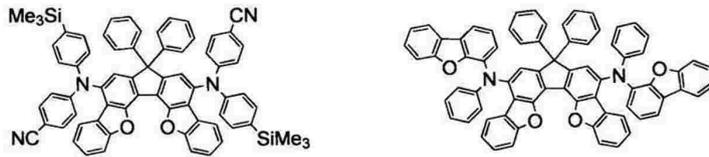
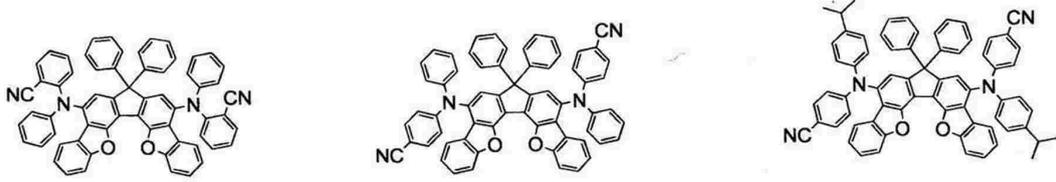
10

20

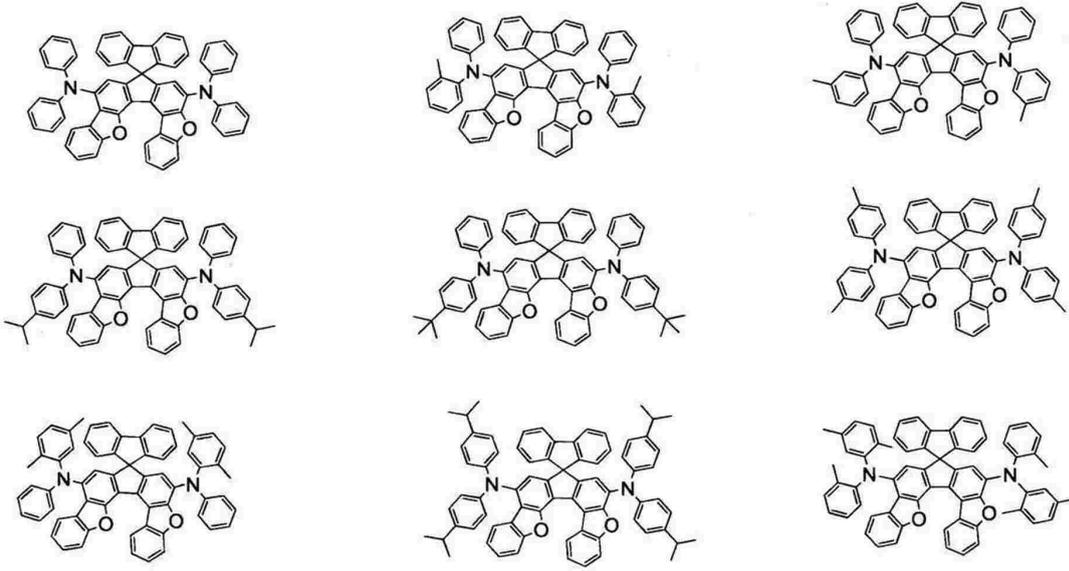
30

40

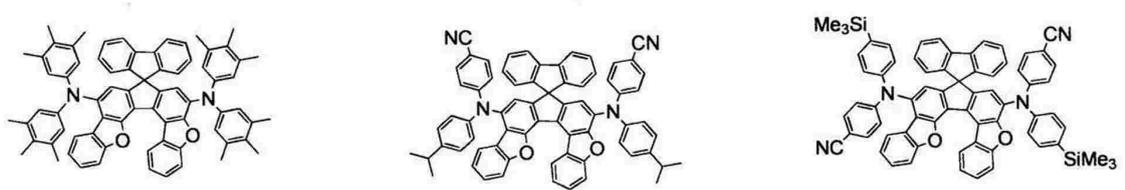
【化 2 1 4】



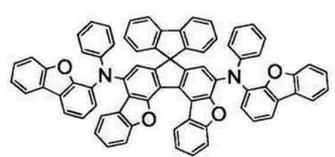
10



20



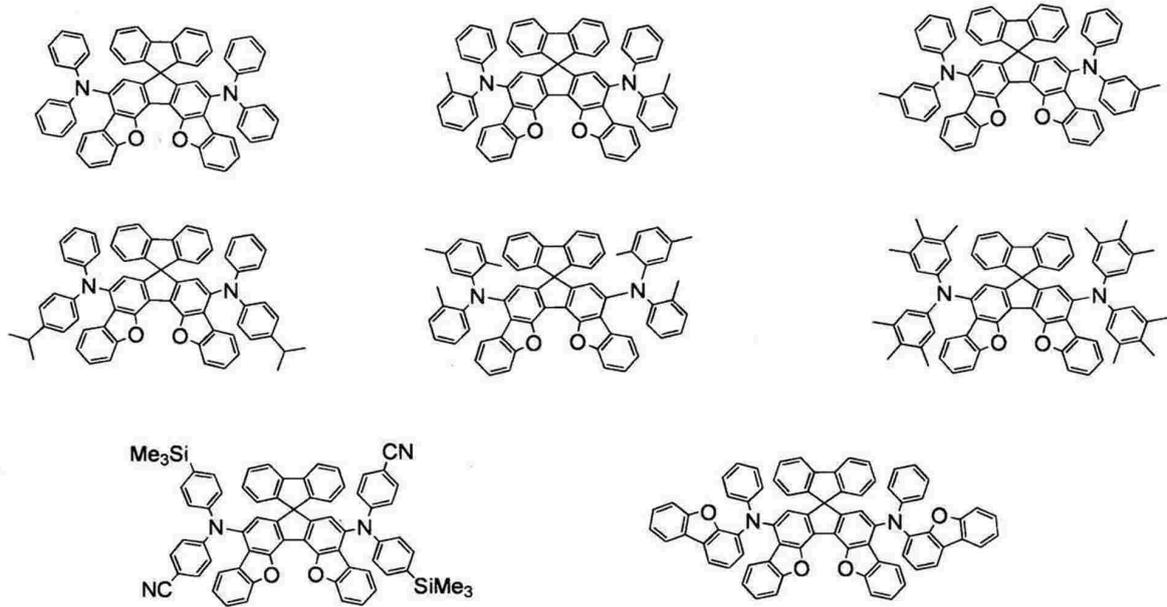
30



40

【 0 5 3 0】

【化 2 1 5】



10

【0 5 3 1】

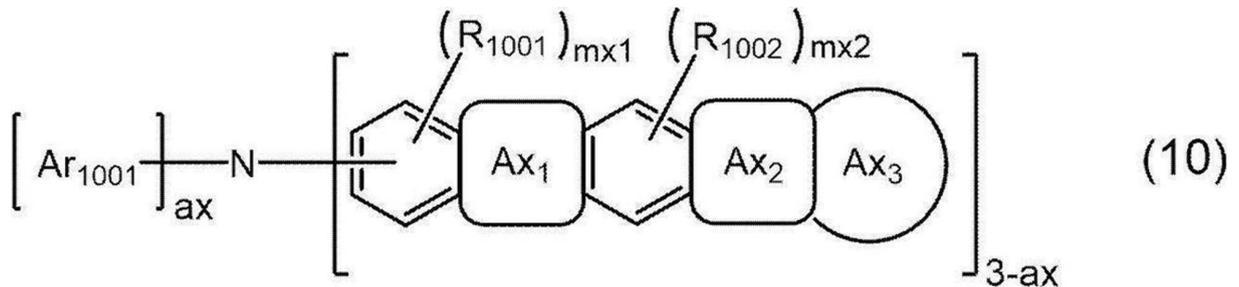
(一般式(10)で表される化合物)

一般式(10)で表される化合物について説明する。

20

【0 5 3 2】

【化 2 1 6】



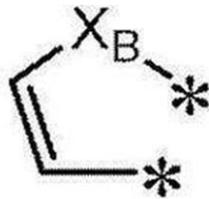
30

【0 5 3 3】

【化 2 1 7】



(10a)



(10b)

40

【0 5 3 4】

(前記一般式(10)において、

Ax₁環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式(10a)で表される環であり、Ax₂環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式(10b)で表される環であり、前記一般式(10b)中の2つの*は、Ax₃環の任意の位置と結合し、X_A及びX_Bは、それぞれ独立に、C(R₁₀₀₃)(R₁₀₀₄)、Si(R₁₀₀₅)(R₁₀₀₆)、酸素原子又は硫黄原子であり、

50

$A \times 3$ 環は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環であり、

$A r 1 0 0 1$ は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

$R 1 0 0 1 \sim R 1 0 0 6$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

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

- O - ($R 9 0 4$) で表される基、

- S - ($R 9 0 5$) で表される基、

- N ($R 9 0 6$) ($R 9 0 7$) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

$m \times 1$ は、3 であり、 $m \times 2$ は、2 であり、

複数の $R 1 0 0 1$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

複数の $R 1 0 0 2$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

$a \times$ は、0、1 又は 2 であり、

$a \times$ が 0 又は 1 の場合、「3 - $a \times$ 」で示されるカッコ内の構造は、互いに同一であるか、又は異なり、

$a \times$ が 2 の場合、複数の $A r 1 0 0 1$ は、互いに同一であるか、又は異なる。) 10

【0535】

一実施形態において、 $A r 1 0 0 1$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。 30

【0536】

一実施形態において、 $A \times 3$ 環は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環であり、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン環、置換もしくは無置換のナフタレン環、又は置換もしくは無置換のアントラセン環である。

【0537】

一実施形態において、 $R 1 0 0 3$ 及び $R 1 0 0 4$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基である。

【0538】

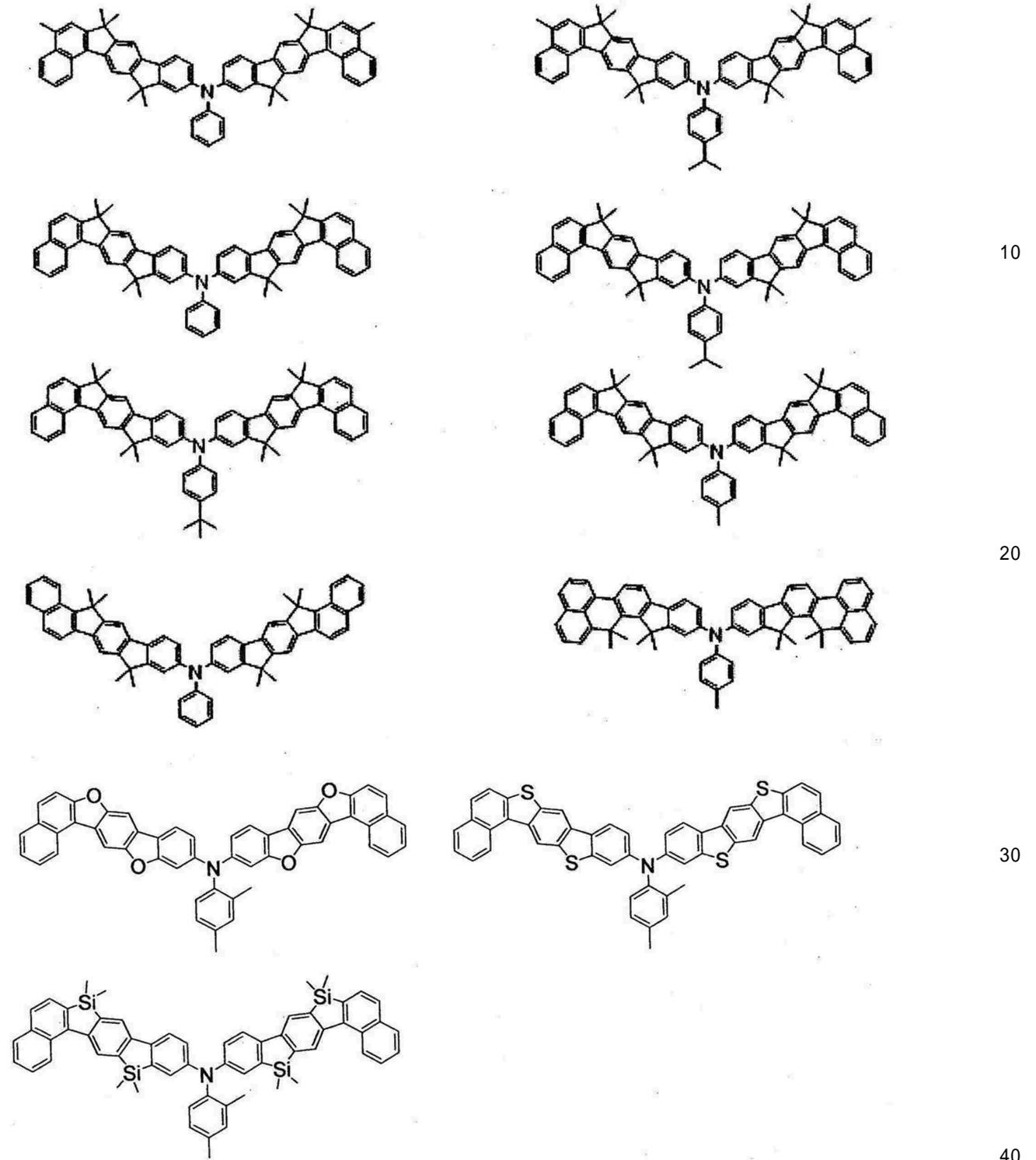
一実施形態において、 $a \times$ は 1 である。 40

【0539】

前記一般式 (1 0) 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。

【0540】

【化 2 1 8】

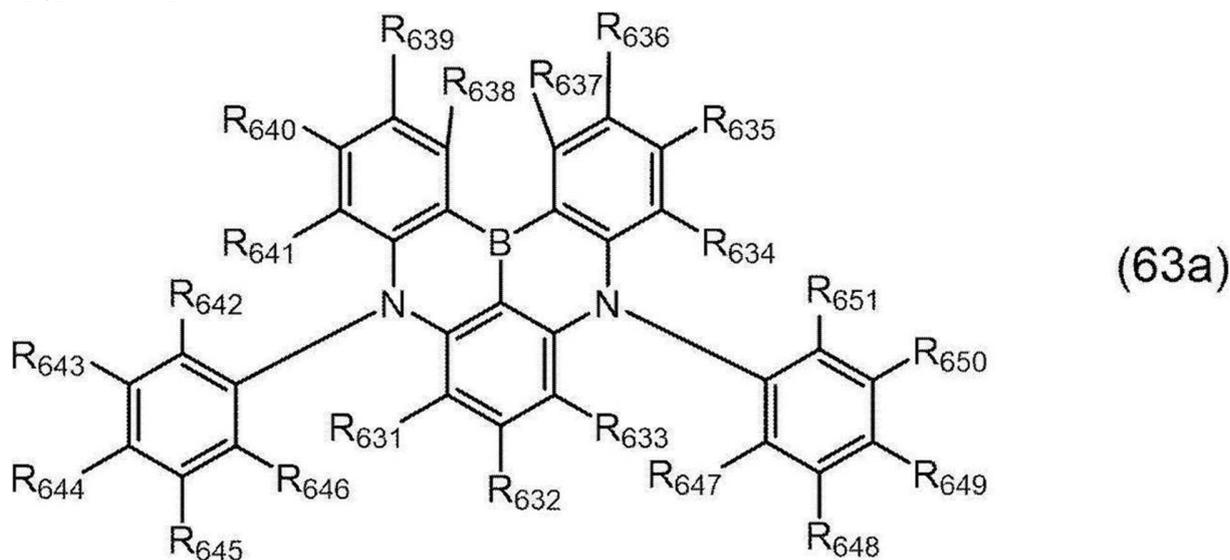


【0 5 4 1】

一実施形態においては、発光層 5 が、発光性化合物として、
 前記一般式 (4) で表される化合物、
 前記一般式 (5) で表される化合物、
 前記一般式 (6) で表される化合物、及び
 下記一般式 (6 3 a) で表される化合物からなる群から選択される 1 以上の化合物を含有する。

【0 5 4 2】

【化 2 1 9】



10

【 0 5 4 3】

(前記一般式(63a)において、

R₆₃₁は、R₆₄₆と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成しない。

20

R₆₃₃は、R₆₄₇と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成しない。

R₆₃₄は、R₆₅₁と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成しない。

R₆₄₁は、R₆₄₂と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成しない。

R₆₃₁ ~ R₆₅₁のうちの隣接する2つ以上の1組以上は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

30

前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₆₃₁ ~ R₆₅₁は、それぞれ独立に、

水素原子、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、

40

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

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

但し、前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₆₃₁ ~ R₆₅₁のうちの少なくとも1つは、

ハロゲン原子、

シアノ基、

50

ニトロ基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
- O - (R₉₀₄) で表される基、
- S - (R₉₀₅) で表される基、
- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

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

【 0 5 4 4 】

一実施形態においては、前記一般式 (4) で表される化合物が、前記一般式 (4 1 - 3)、一般式 (4 1 - 4) 又は一般式 (4 1 - 5) で表される化合物であり、前記一般式 (4 1 - 5) 中の A 1 環が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合複素環である。

【 0 5 4 5 】

一実施形態においては、前記一般式 (4 1 - 3)、一般式 (4 1 - 4)、及び一般式 (4 1 - 5) における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合芳香族炭化水素環が、

置換もしくは無置換のナフタレン環、

置換もしくは無置換のアントラセン環、又は

置換もしくは無置換のフルオレン環であり、

前記置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合複素環が、

置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、

置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は

置換もしくは無置換のジベンゾチオフエン環である。

【 0 5 4 6 】

一実施形態においては、前記一般式 (4 1 - 3)、一般式 (4 1 - 4) 又は一般式 (4 1 - 5) における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合芳香族炭化水素環が、

置換もしくは無置換のナフタレン環、又は

置換もしくは無置換のフルオレン環であり、

前記置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合複素環が、

置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、

置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は

置換もしくは無置換のジベンゾチオフエン環である。

【 0 5 4 7 】

一実施形態においては、前記一般式 (4) で表される化合物が、

下記一般式 (4 6 1) で表される化合物、

下記一般式 (4 6 2) で表される化合物、

下記一般式 (4 6 3) で表される化合物、

下記一般式 (4 6 4) で表される化合物、

下記一般式 (4 6 5) で表される化合物、

下記一般式 (4 6 6) で表される化合物、及び

下記一般式 (4 6 7) で表される化合物からなる群から選択される。

【 0 5 4 8 】

10

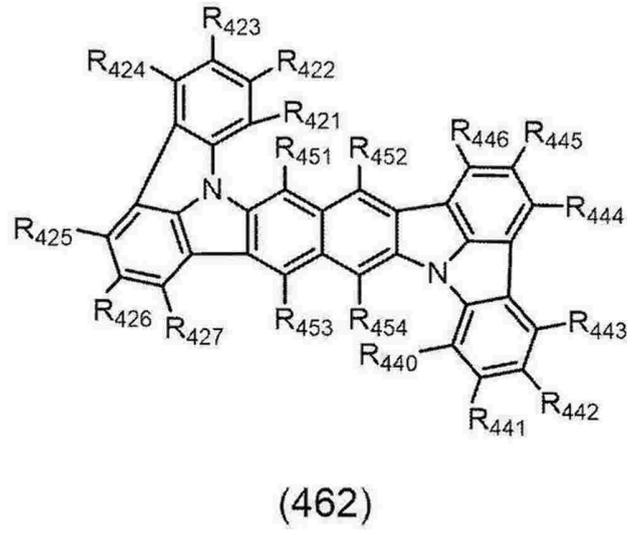
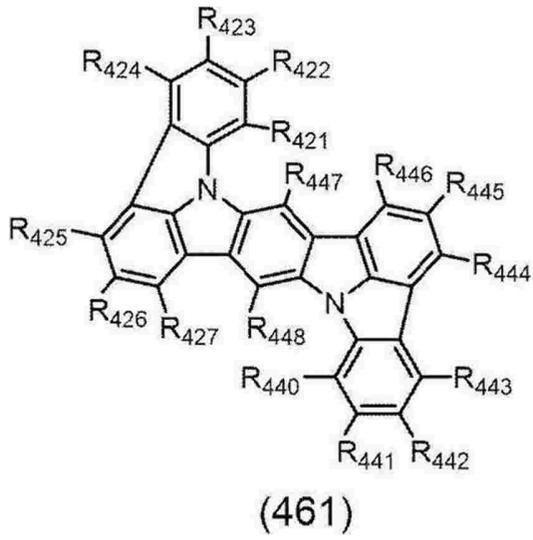
20

30

40

50

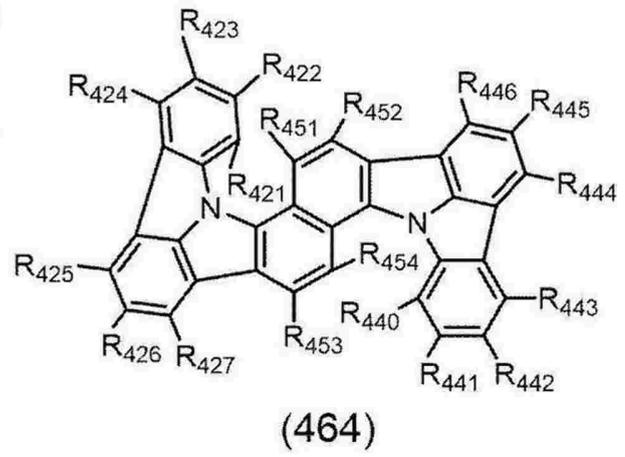
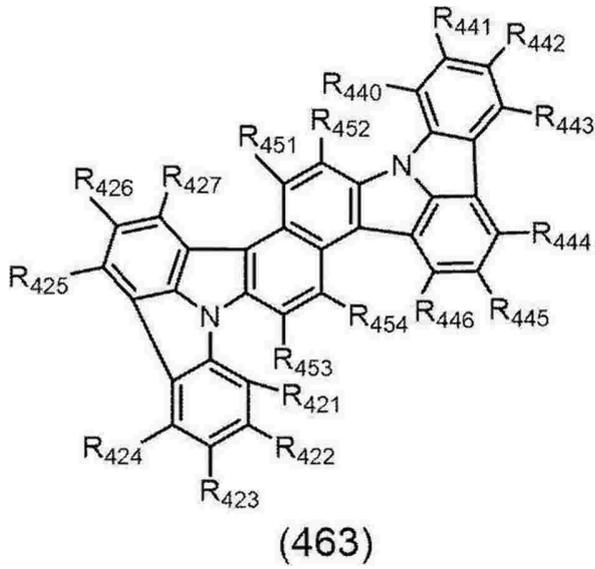
【化 2 2 0】



10

【 0 5 4 9】

【化 2 2 1】



20

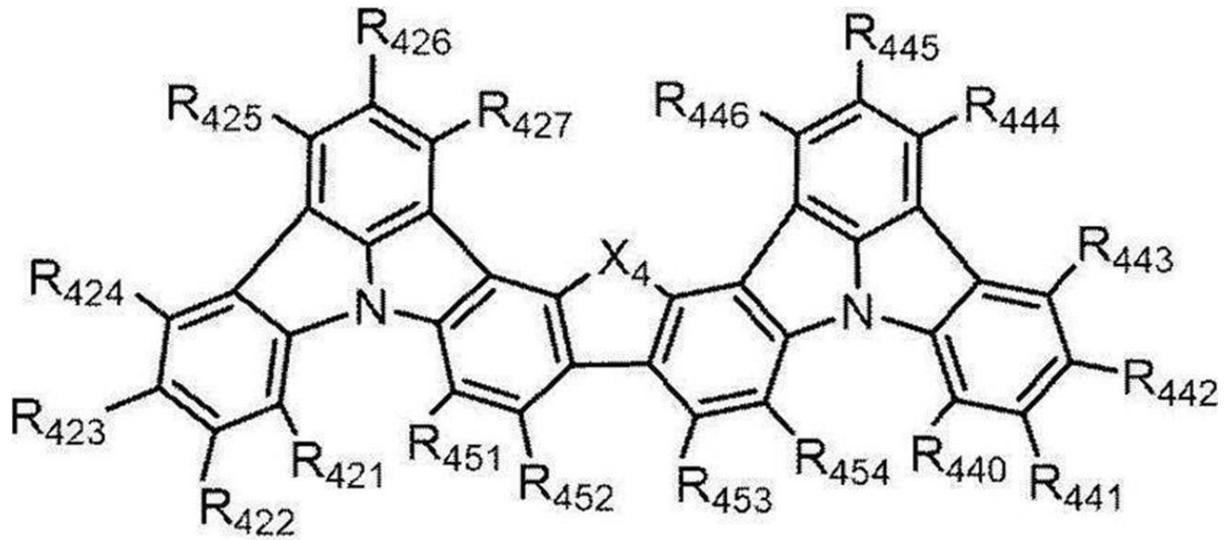
30

【 0 5 5 0】

40

50

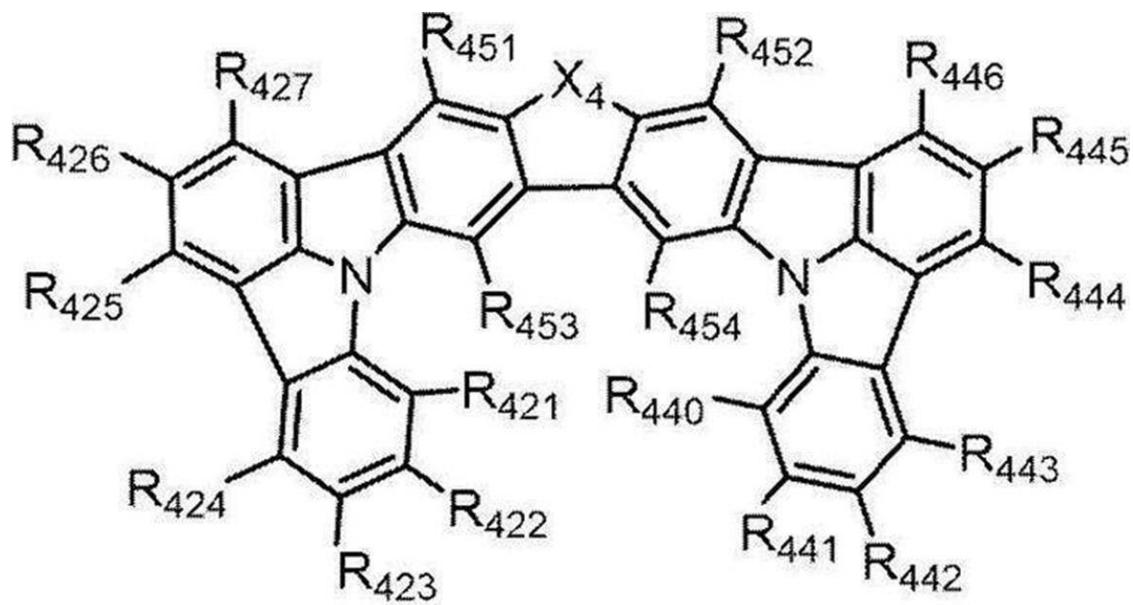
【化 2 2 2】



(465)

【 0 5 5 1】

【化 2 2 3】



(466)

【 0 5 5 2】

10

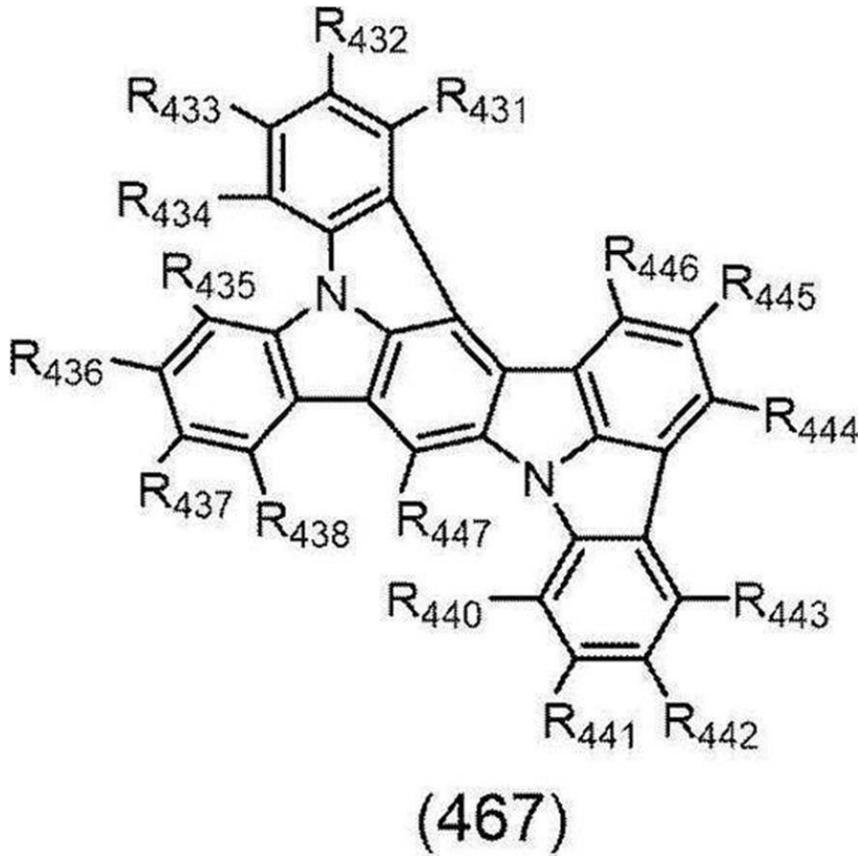
20

30

40

50

【化 2 2 4】



10

20

【0 5 5 3】

(前記一般式(461)~(467)中、

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

R₄₃₇、R₄₃₈、並びに前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₄₂₁
 ~R₄₂₇、R₄₃₁~R₄₃₆、R₄₄₀~R₄₄₈及びR₄₅₁~R₄₅₄は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

X₄は、酸素原子、NR₈₀₁、又はC(R₈₀₂)(R₈₀₃)であり、

R₈₀₁、R₈₀₂及びR₈₀₃は、それぞれ独立に、

30

40

50

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

R₈₀₁ が複数存在する場合、複数の R₈₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₈₀₂ が複数存在する場合、複数の R₈₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、
R₈₀₃ が複数存在する場合、複数の R₈₀₃ は、互いに同一であるか又は異なる。) 10

【0554】

一実施形態においては、R₄₂₁ ~ R₄₂₇ 及び R₄₄₀ ~ R₄₄₈ が、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

【0555】

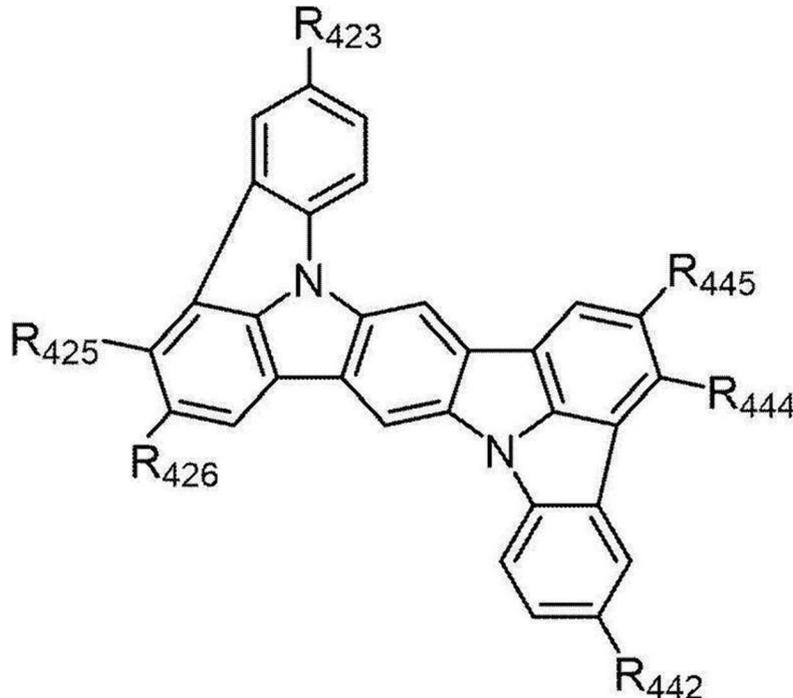
一実施形態においては、R₄₂₁ ~ R₄₂₇ 及び R₄₄₀ ~ R₄₄₇ が、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、及び
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 18 の複素環基からなる群から選択される。 20

【0556】

一実施形態においては、前記一般式(41-3)で表される化合物が、下記一般式(41-3-1)で表される化合物である。

【0557】

【化225】



(41-3-1)

【0558】

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

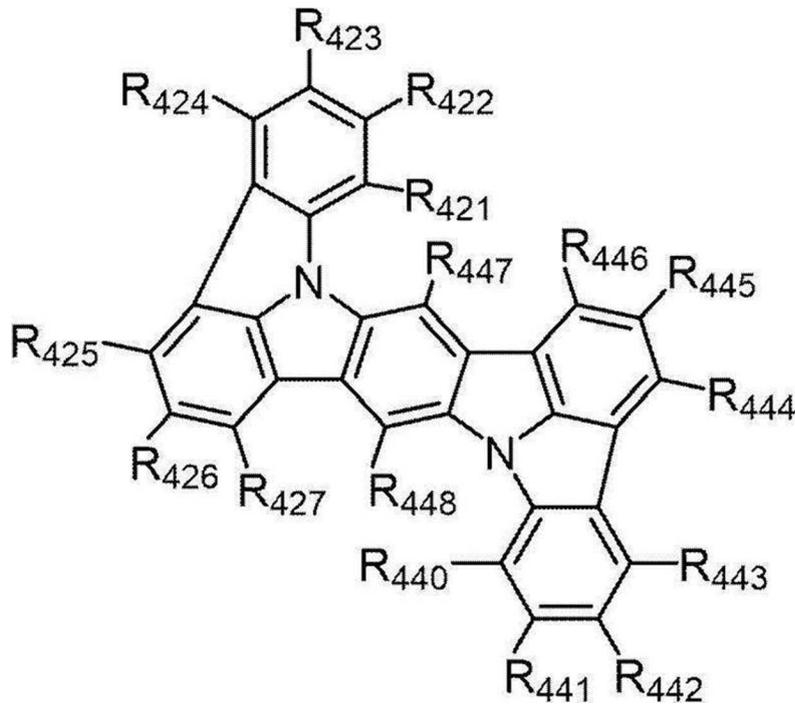
【0559】

一実施形態においては、前記一般式(41-3)で表される化合物が、下記一般式(4 50

1 - 3 - 2) で表される化合物である。

【0560】

【化226】



(41-3-2)

【0561】

(前記一般式(41-3-2)中、R421~R427及びR440~R448は、それぞれ独立に、前記一般式(41-3)におけるR421~R427及びR440~R448と同義であり、

但し、R421~R427及びR440~R446の少なくとも1つは、-N(R906)(R907)で表される基である。)

【0562】

一実施形態においては、前記一般式(41-3-2)における、R421~R427及びR440~R446のいずれか2つが、-N(R906)(R907)で表される基である。

【0563】

一実施形態においては、前記一般式(41-3-2)で表される化合物が、下記式(41-3-3)で表される化合物である。

【0564】

10

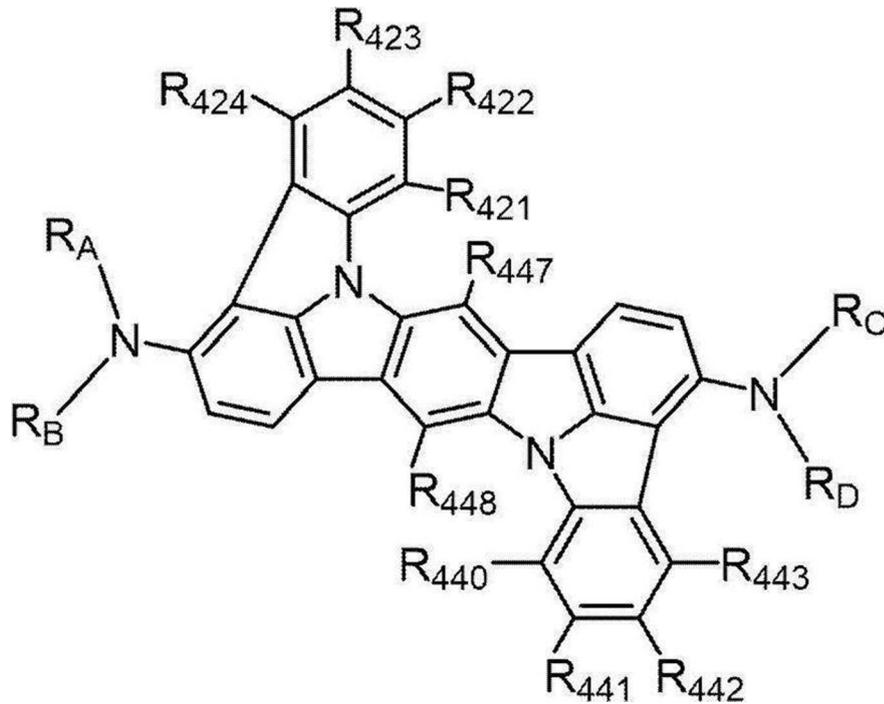
20

30

40

50

【化227】



(41-3-3)

10

20

【0565】

(前記一般式(41-3-3)中、 $R_{421} \sim R_{424}$ 、 $R_{440} \sim R_{443}$ 、 R_{447} 及び R_{448} は、それぞれ独立に、前記一般式(41-3)における $R_{421} \sim R_{424}$ 、 $R_{440} \sim R_{443}$ 、 R_{447} 及び R_{448} と同義であり、

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~18の複素環基である。)

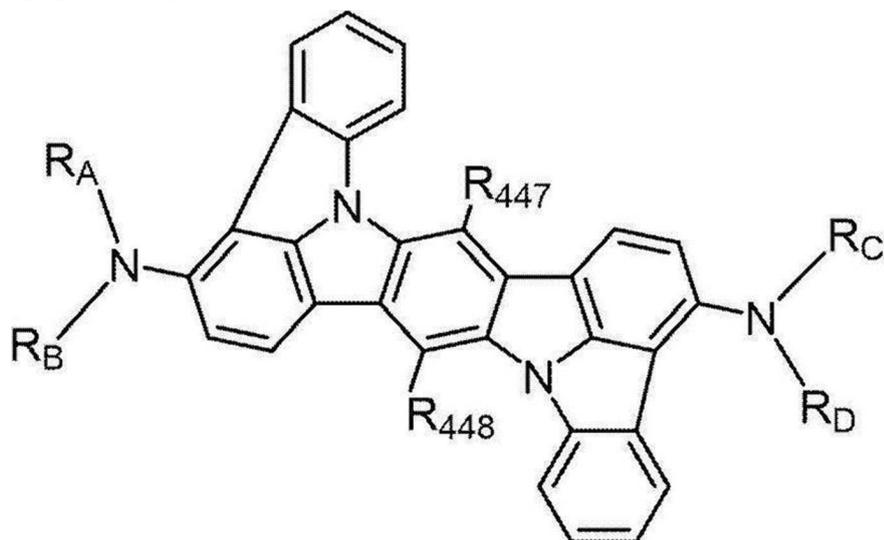
【0566】

一実施形態においては、前記一般式(41-3-3)で表される化合物が、下記式(41-3-4)で表される化合物である。

30

【0567】

【化228】



(41-3-4)

40

【0568】

(前記一般式(41-3-4)中、 R_{447} 、 R_{448} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、前記一般式(41-3-3)における R_{447} 、 R_{448} 、 R_A 、 R_B 、 R_C

50

及び R_D と同義である。)

【0569】

一実施形態においては、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基である。

【0570】

一実施形態においては、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である。

【0571】

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

【0572】

有機 EL 素子 1A において、発光層 5 が含有する発光性化合物は、最大ピーク波長が 500 nm 以下の発光を示す化合物であることが好ましく、430 nm 以上 480 nm 以下の発光を示す化合物であることがより好ましい。

有機 EL 素子 1A において、発光層 5 が含有する発光性化合物は、最大ピーク波長が 500 nm 以下の蛍光発光を示す化合物であることが好ましく、430 nm 以上 480 nm 以下の蛍光発光を示す化合物であることがより好ましい。

【0573】

有機 EL 素子 1A において、発光層 5 が第一実施形態に係る化合物及び発光性化合物を含む場合、第一実施形態に係る化合物は、ホスト材料（マトリックス材料と称する場合もある。）であることが好ましく、発光性化合物は、ドーパント材料（ゲスト材料、エミッター、又は発光材料と称する場合もある。）であることが好ましい。

【0574】

本明細書において、「ホスト材料」とは、例えば、「層の 50 質量% 以上」含まれる材料である。

したがって、例えば、有機 EL 素子 1A の場合、発光層 5 は、前記一般式 (1A) で表される化合物を、発光層の全質量の 50 質量% 以上、含有する。

したがって、例えば、有機 EL 素子 1A の場合、発光層 5 は、前記一般式 (1A - A) で表される化合物を、発光層の全質量の 50 質量% 以上、含有する。

【0575】

(発光層の膜厚)

発光層 5 の膜厚は、5 nm 以上 50 nm 以下であることが好ましく、7 nm 以上 50 nm 以下であることがより好ましく、10 nm 以上 50 nm 以下であることがさらに好ましい。発光層の膜厚が 5 nm 以上であると、発光層を形成し易く、色度を調整し易い。発光層の膜厚が 50 nm 以下であると、駆動電圧の上昇を抑制し易い。

【0576】

(発光層における化合物の含有率)

発光層 5 が第一実施形態に係る化合物及び発光性化合物を含有する場合、発光層 5 における第一実施形態に係る化合物及び発光性化合物の含有率は、例えば、それぞれ、以下の範囲であることが好ましい。

第一実施形態に係る化合物の含有率は、80 質量% 以上 99 質量% 以下であることが好ましく、90 質量% 以上 99 質量% 以下であることがより好ましく、95 質量% 以上 99 質量% 以下であることがさらに好ましい。

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

ただし、発光層 5 における第一実施形態に係る化合物及び発光性化合物の合計含有率の上限は、100 質量% である。

【0577】

なお、本実施形態は、発光層 5 に、第一実施形態に係る化合物及び発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

10

20

30

40

50

発光層 5 は、第一実施形態に係る化合物を 1 種のみ含んでもよいし、2 種以上含んでもよい。発光層 5 は、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。

【0578】

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。

図 2 に示す有機 EL 素子 1 B は、有機層 10 B が、第一の発光領域 5 B を含む点で、有機 EL 素子 1 A と異なり、その他の点は、有機 EL 素子 1 A と同様である。第一の発光領域 5 B は、陽極 3 側から順に、第一の発光層 5 1 及び第二の発光層 5 2 を含む。

第一の発光層 5 1 は、第一の化合物を含有し、第二の発光層 5 2 は、第二の化合物を含有する。第一の化合物と第二の化合物とは、互いに異なる化合物である。

【0579】

(第一の化合物)

有機 EL 素子 1 B の一態様において、第一の化合物は、第一実施形態に係る化合物である。

本実施形態に係る有機 EL 素子の一態様において、第一の化合物は、前記一般式 (1 A) で表される化合物であってもよい。

本実施形態に係る有機 EL 素子の一態様において、第一の化合物は、前記一般式 (1 A - A) で表される化合物であってもよい。

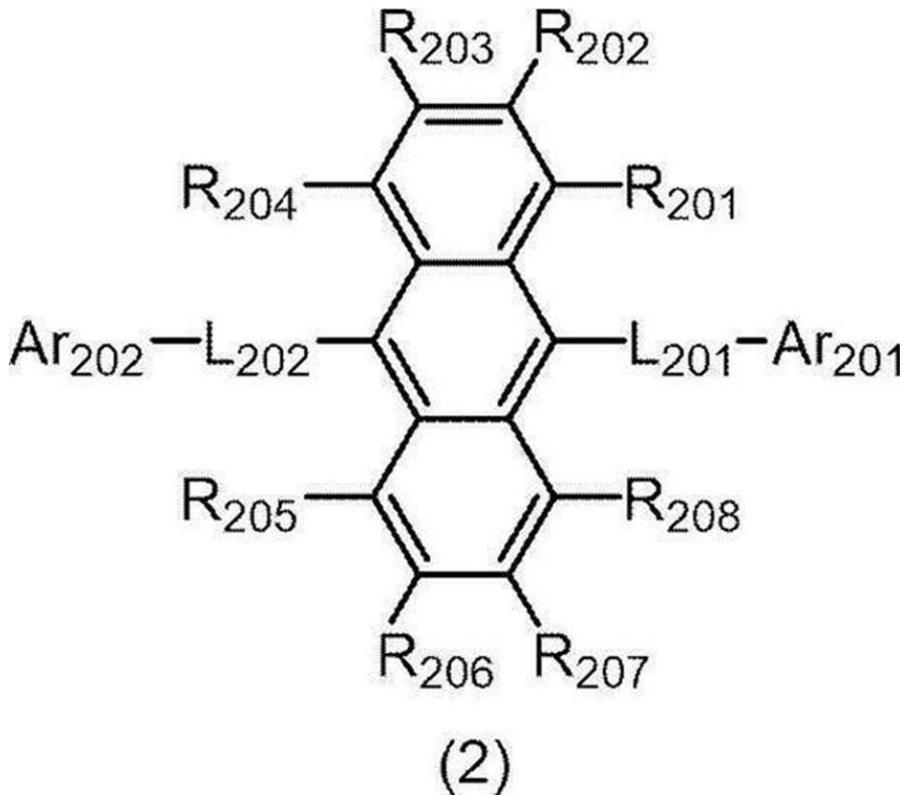
【0580】

(第二の化合物)

有機 EL 素子 1 B 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。

【0581】

【化 2 2 9】



【0582】

(前記一般式 (2) において、

R₂₀₁ ~ R₂₀₈ は、それぞれ独立に、
水素原子、

10

20

30

40

50

- 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、
 - C (= O) R₈₀₁ で表される基、
 - C O O R₈₀₂ で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 L₂₀₁ 及び L₂₀₂ は、それぞれ独立に、
 単結合、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基であり、
 A r₂₀₁ 及び A r₂₀₂ は、それぞれ独立に、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)
- 【 0 5 8 3 】
 (本実施形態に係る第二の化合物中、 R₉₀₁、 R₉₀₂、 R₉₀₃、 R₉₀₄、 R₉₀₅、
 R₉₀₆、 R₉₀₇、 R₈₀₁ 及び R₈₀₂ は、それぞれ独立に、
 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。)
- 【 0 5 8 4 】
 本実施形態に係る有機 E L 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、

10

20

30

40

50

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
 - 置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、
 - C (= O) R₈₀₁ で表される基、
 - C O O R₈₀₂ で表される基、
 - ハロゲン原子、
 - シアノ基、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、
- A r₂₀₁ 及び A r₂₀₂ は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であることが好ましい。
- 【 0 5 8 5 】
- 本実施形態に係る有機 E L 素子において、
L₂₀₁ 及び L₂₀₂ 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、
A r₂₀₁ 及び A r₂₀₂ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であることが好ましい。
- 【 0 5 8 6 】
- 本実施形態に係る有機 E L 素子において、
A r₂₀₁ 及び A r₂₀₂ は、それぞれ独立に、
フェニル基、
ナフチル基、
フェナントリル基、
ピフェニル基、
ターフェニル基、
ジフェニルフルオレニル基、
ジメチルフルオレニル基、
ベンゾジフェニルフルオレニル基、
ベンゾジメチルフルオレニル基、
ジベンゾフラニル基、
ジベンゾチエニル基、
ナフトベンゾフラニル基、又は
ナフトベンゾチエニル基であることが好ましい。
- 【 0 5 8 7 】
- 本実施形態に係る有機 E L 素子において、前記一般式 (2) で表される第二の化合物は、下記一般式 (2 0 1) 、一般式 (2 0 2) 、一般式 (2 0 3) 、一般式 (2 0 4) 、一般式 (2 0 5) 、一般式 (2 0 6) 、一般式 (2 0 7) 、一般式 (2 0 8) 又は一般式 (2 0 9) で表される化合物であることが好ましい。
- 【 0 5 8 8 】

10

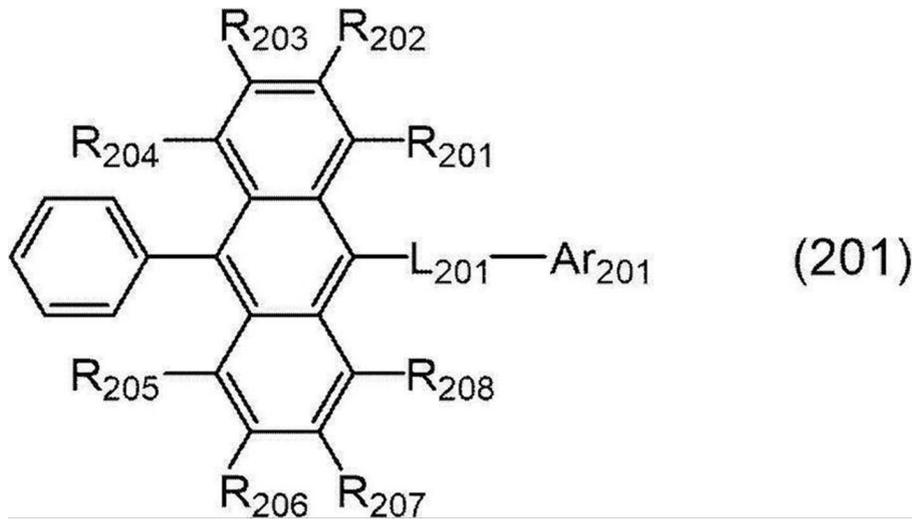
20

30

40

50

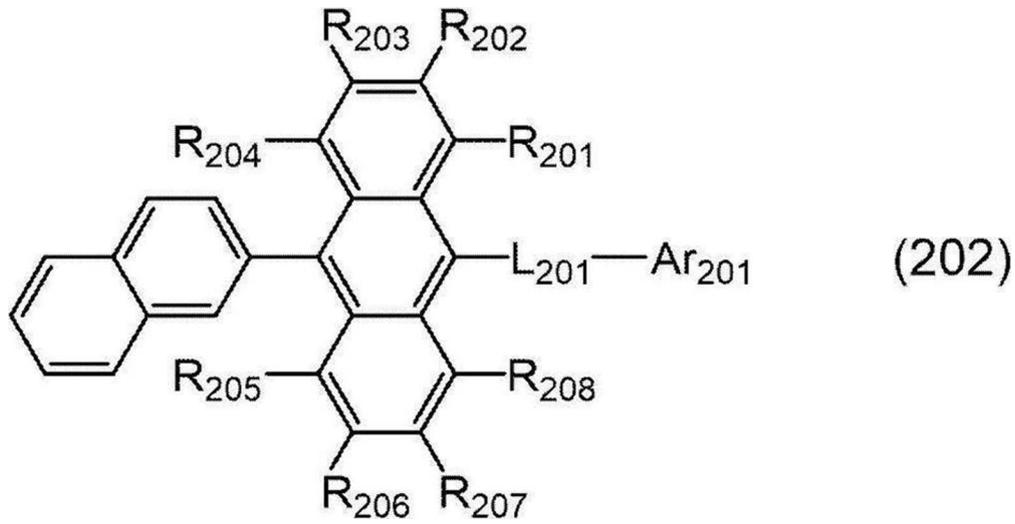
【化230】



10

【0589】

【化231】

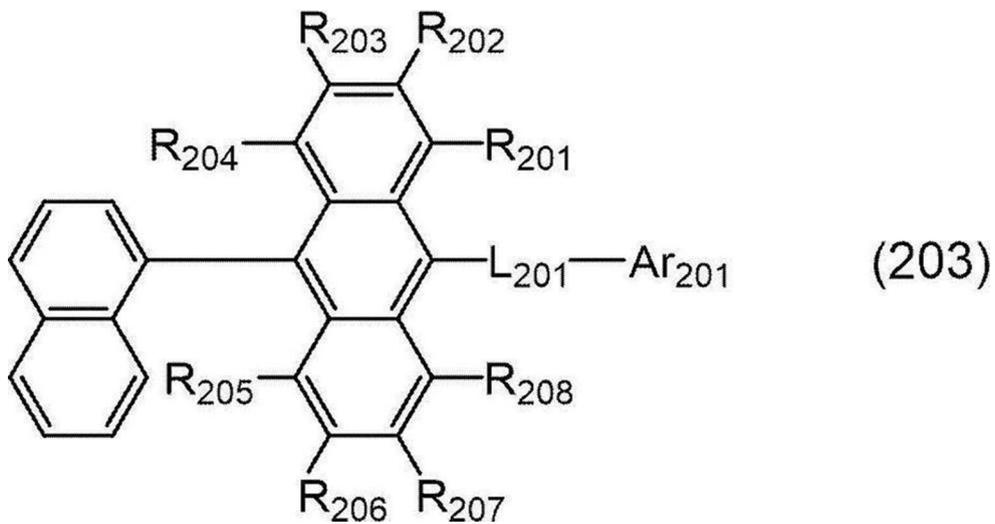


20

30

【0590】

【化232】

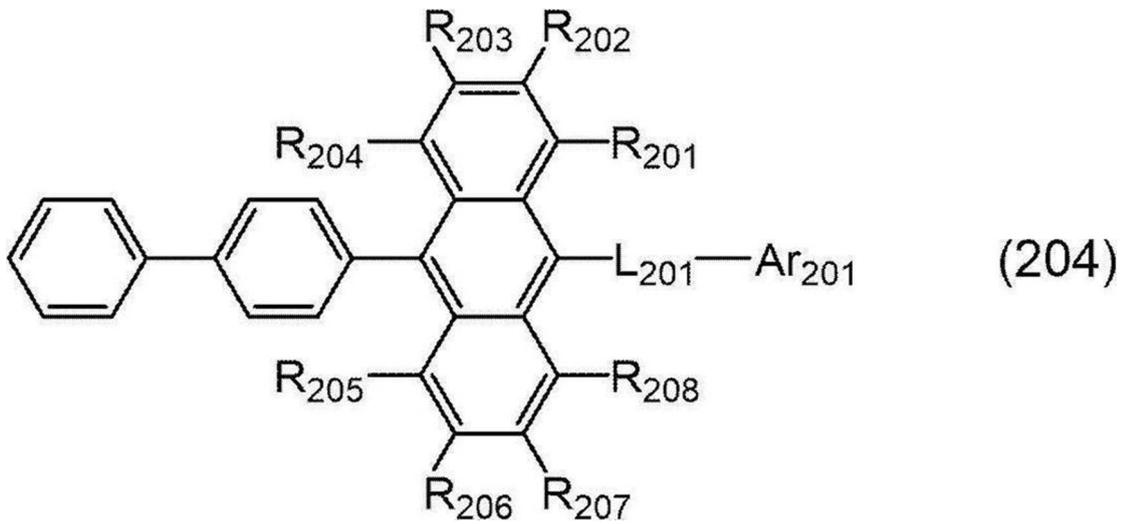


40

【0591】

50

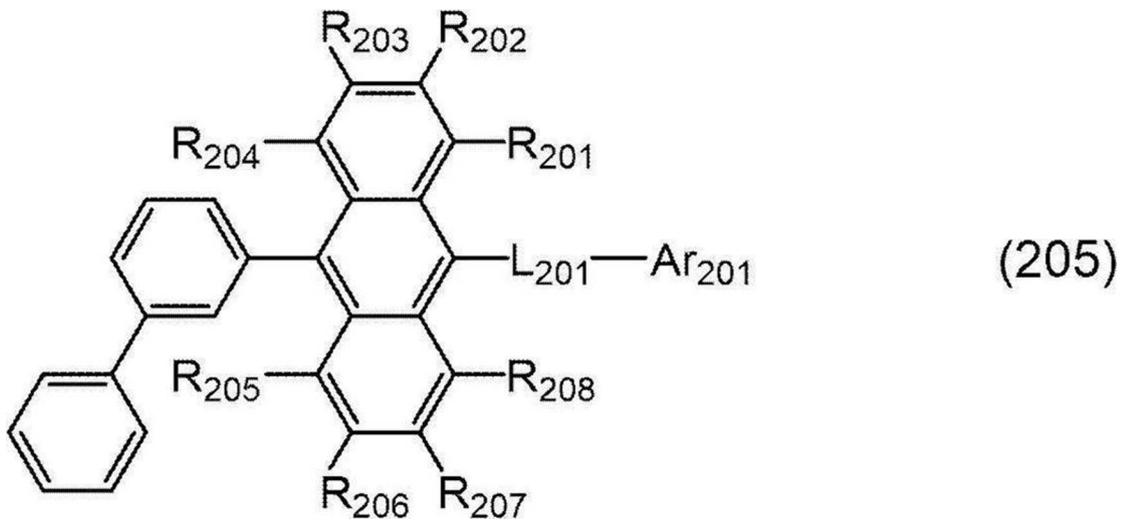
【化 2 3 3】



10

【 0 5 9 2】

【化 2 3 4】

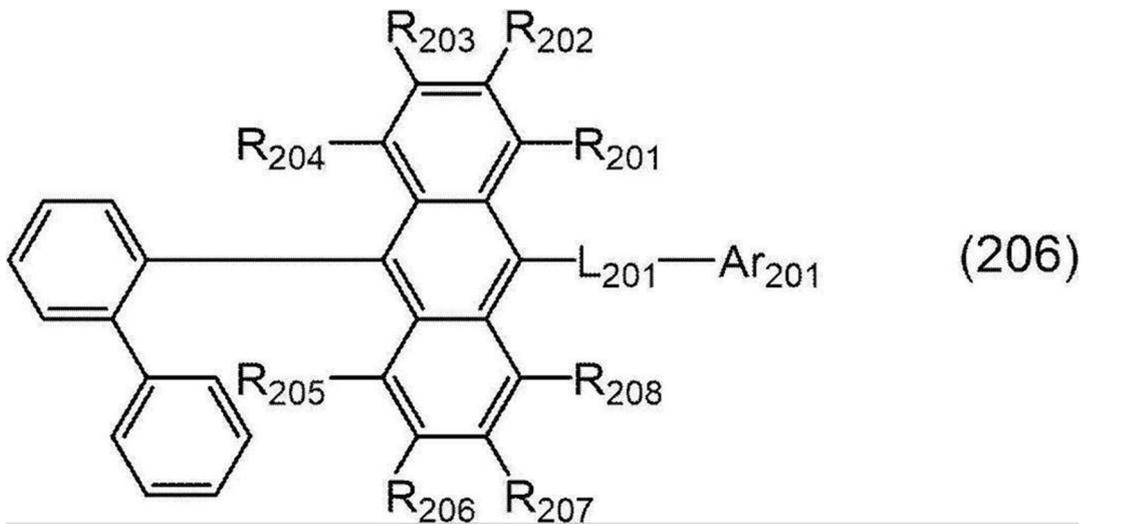


20

30

【 0 5 9 3】

【化 2 3 5】

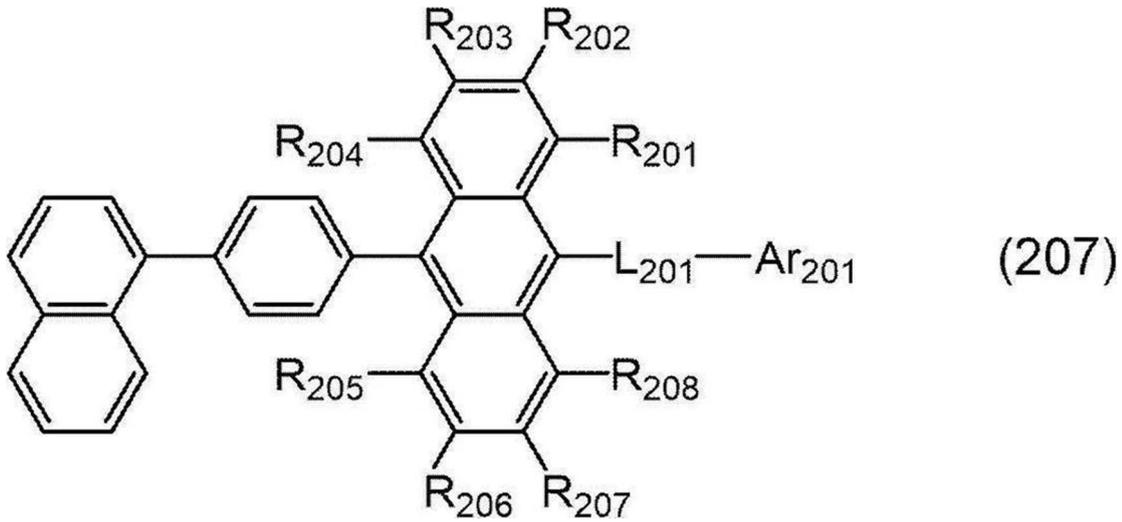


40

【 0 5 9 4】

50

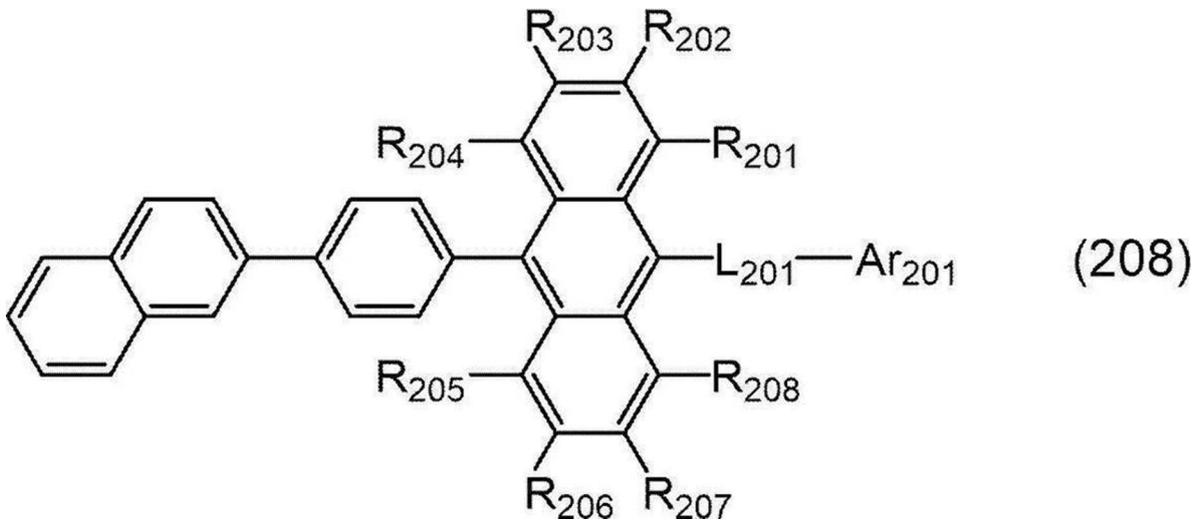
【化236】



10

【0595】

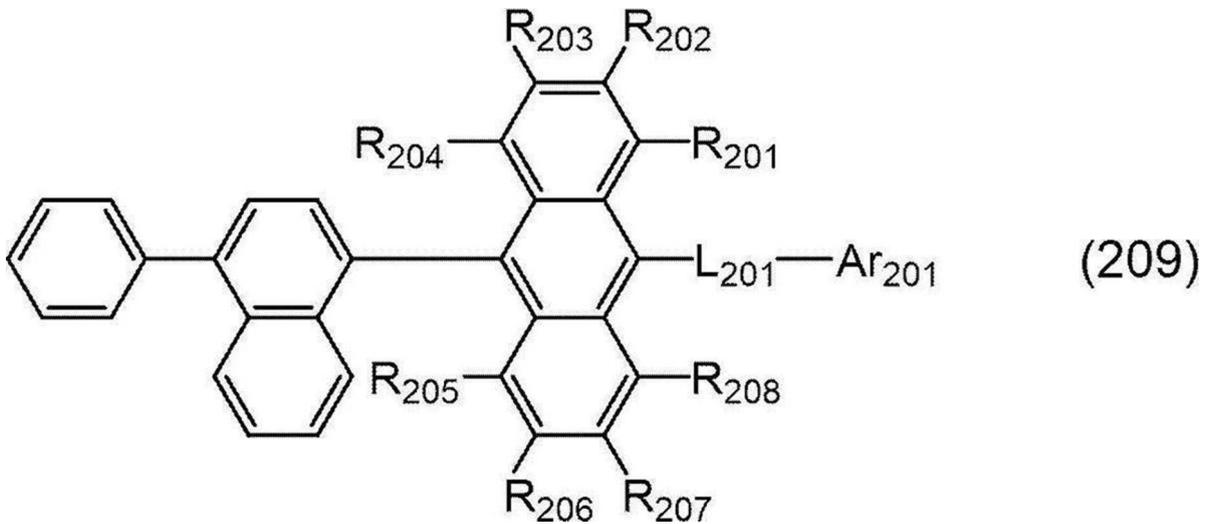
【化237】



20

【0596】

【化238】



30

40

【0597】

(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

50

り、

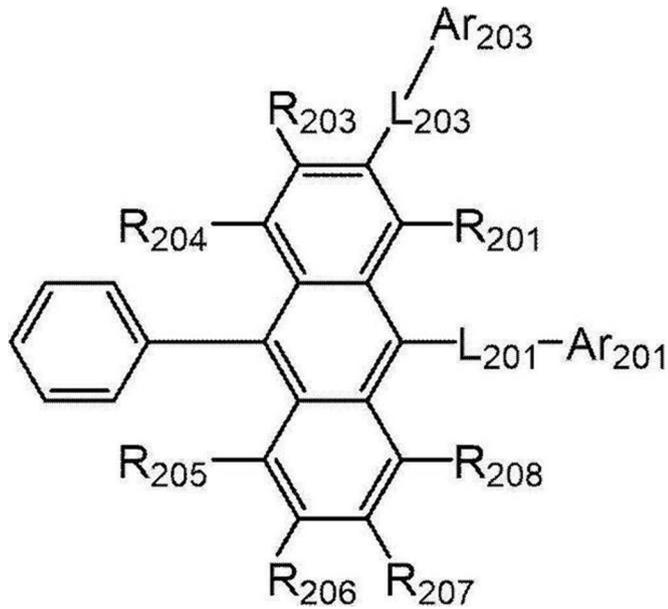
$R_{201} \sim R_{208}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における $R_{201} \sim R_{208}$ と同義である。)

【0598】

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。

【0599】

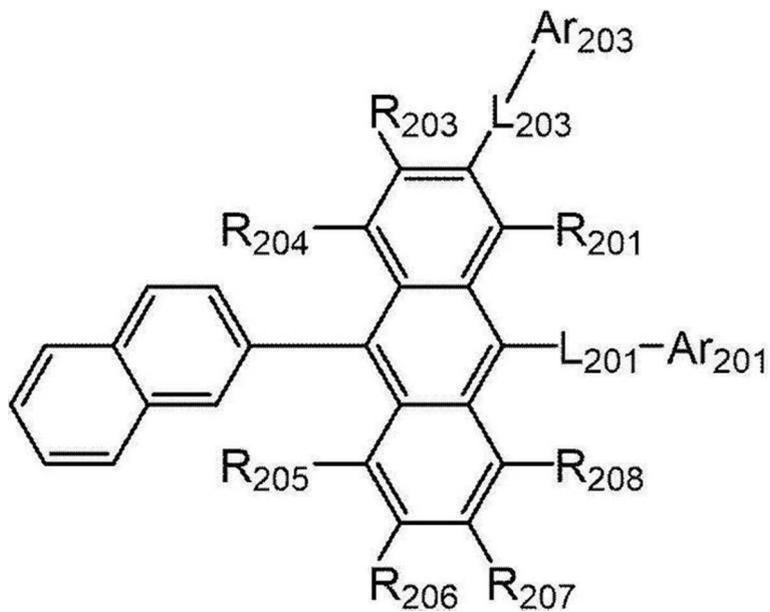
【化239】



(221)

【0600】

【化240】



(222)

【0601】

10

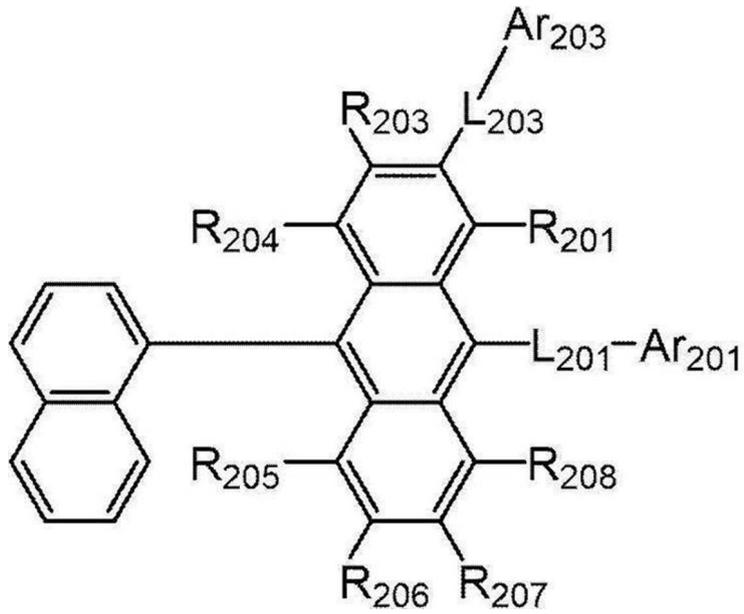
20

30

40

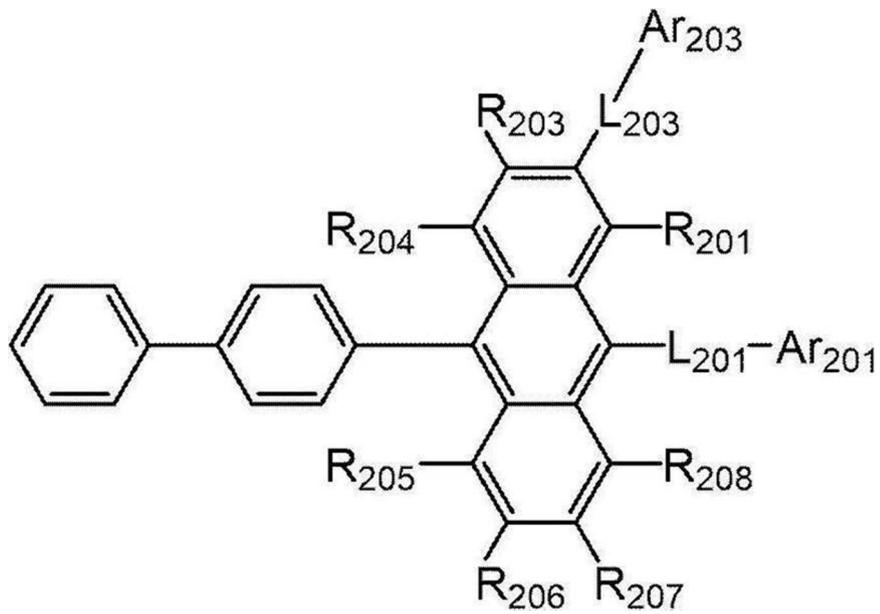
50

【化 2 4 1】



(223)

10

【 0 6 0 2 】
【化 2 4 2】

(224)

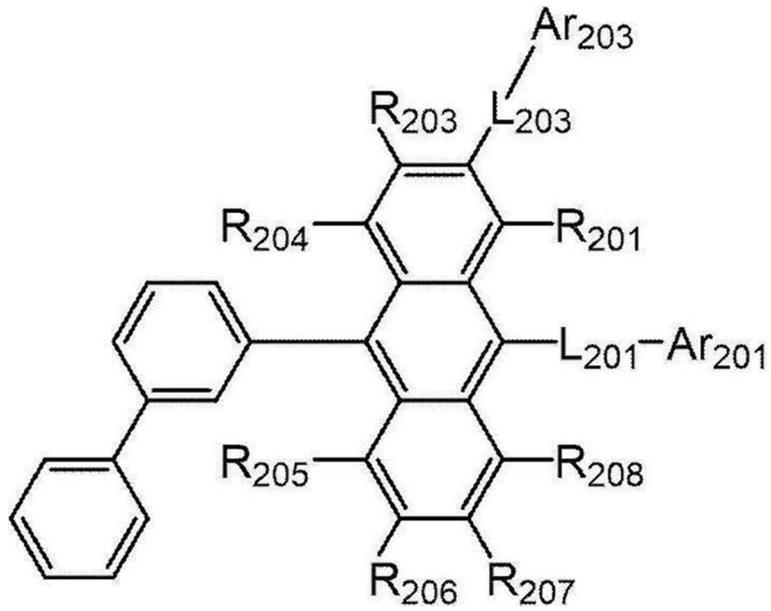
30

【 0 6 0 3 】

40

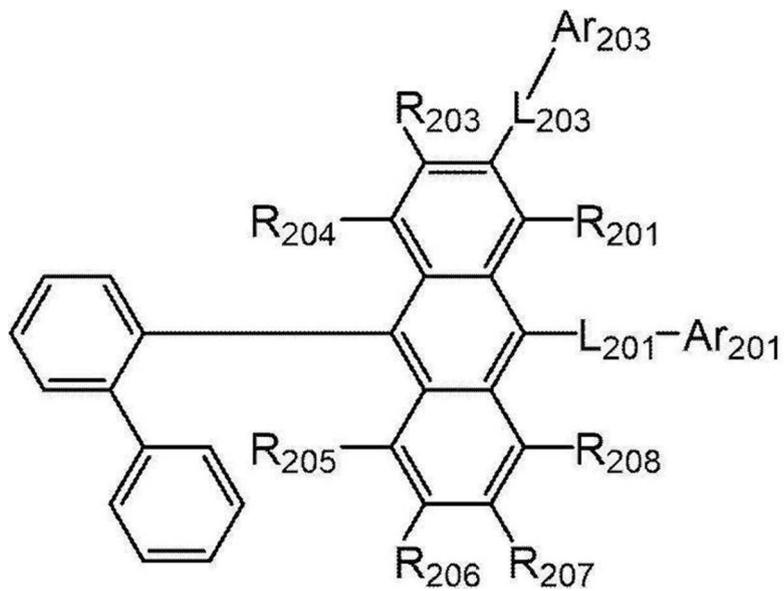
50

【化 2 4 3】



(225)

10

【 0 6 0 4 】
【化 2 4 4】

(226)

20

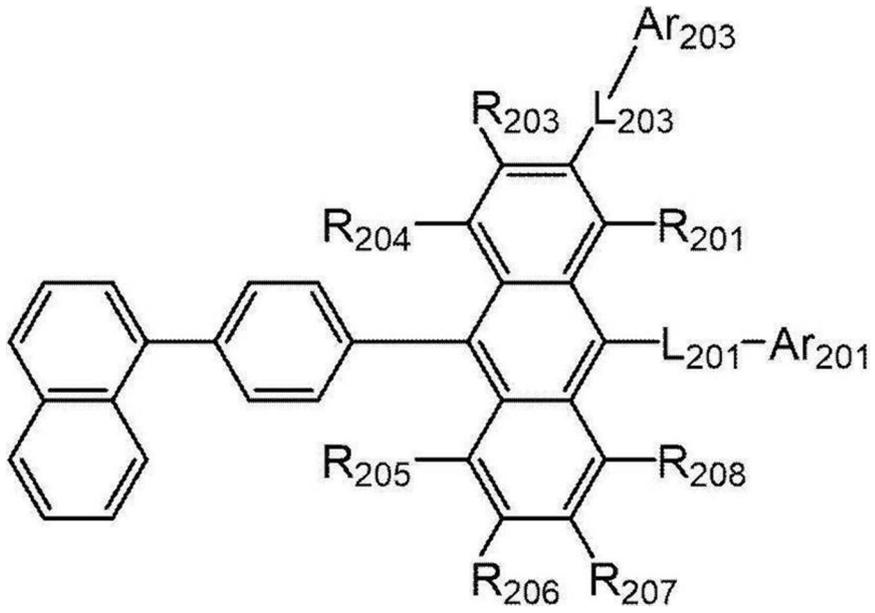
30

【 0 6 0 5 】

40

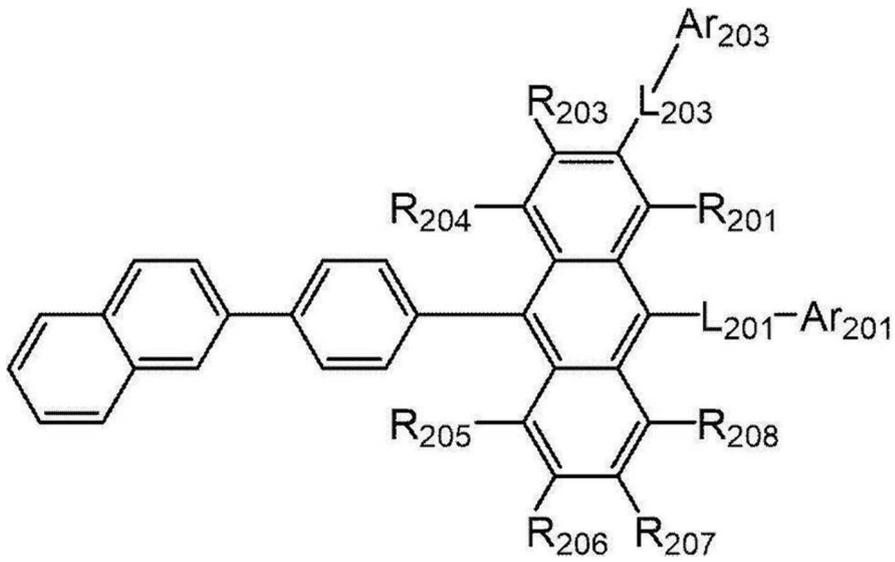
50

【化 2 4 5】



(227)

10

【 0 6 0 6 】
【化 2 4 6】

(228)

20

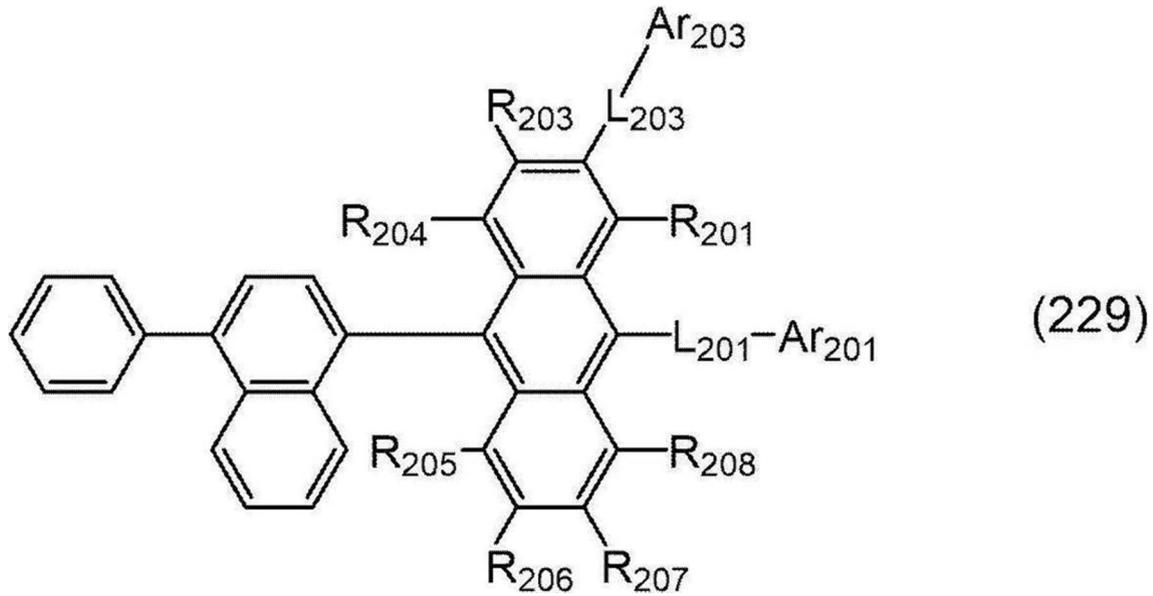
30

【 0 6 0 7 】

40

50

【化 2 4 7】



10

【0608】

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

20

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

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

L₂₀₃は、前記一般式(2)におけるL₂₀₁と同義であり、

L₂₀₃とL₂₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar₂₀₃は、前記一般式(2)におけるAr₂₀₁と同義であり、

Ar₂₀₃とAr₂₀₁は、互いに同一であるか、又は異なる。))

【0609】

30

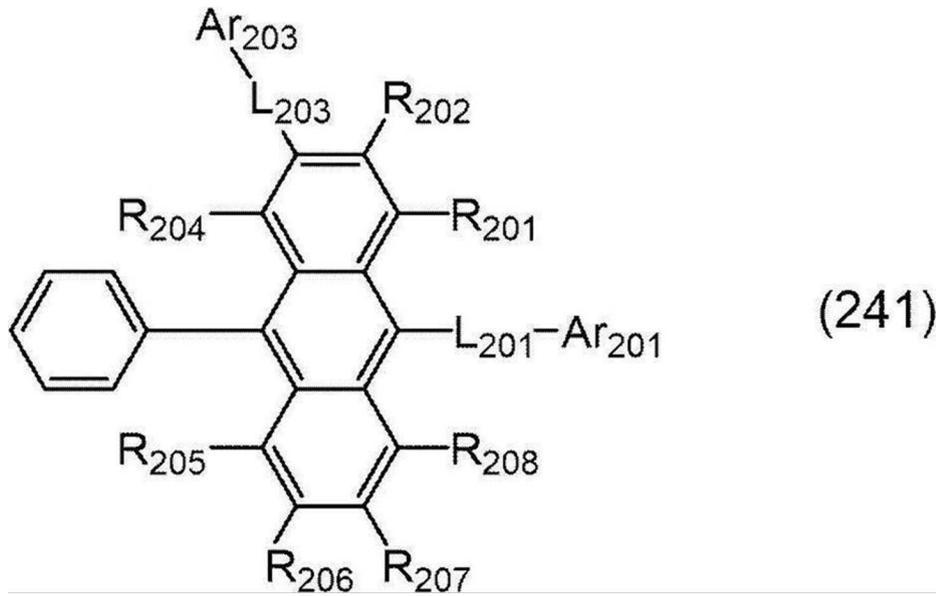
前記一般式(2)で表される第二の化合物は、下記一般式(241)、一般式(242)、一般式(243)、一般式(244)、一般式(245)、一般式(246)、一般式(247)、一般式(248)又は一般式(249)で表される化合物であることも好ましい。

【0610】

40

50

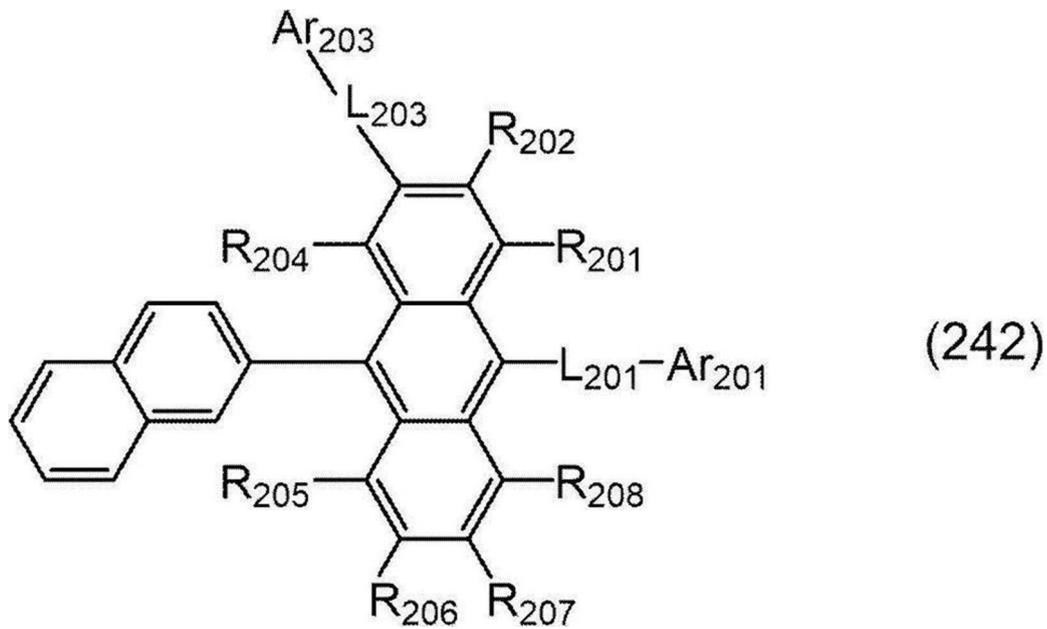
【化 2 4 8】



10

【 0 6 1 1】

【化 2 4 9】



20

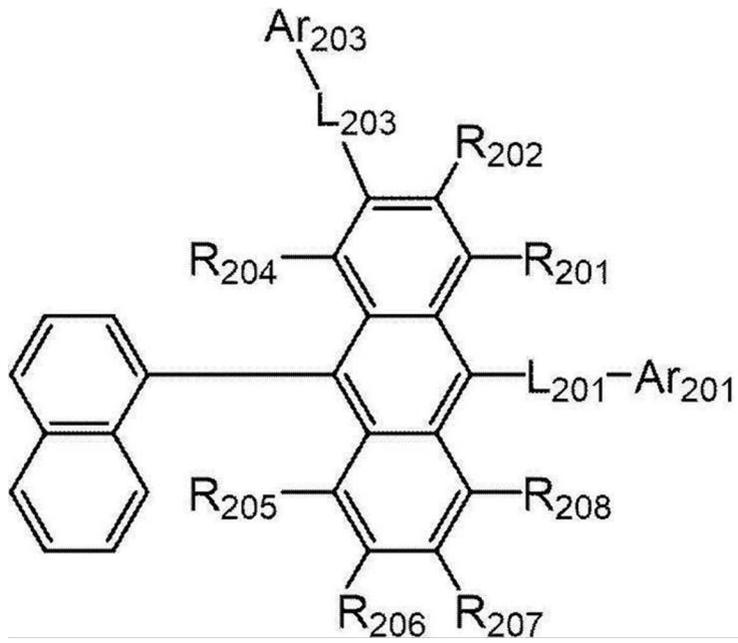
30

【 0 6 1 2】

40

50

【化 2 5 0】

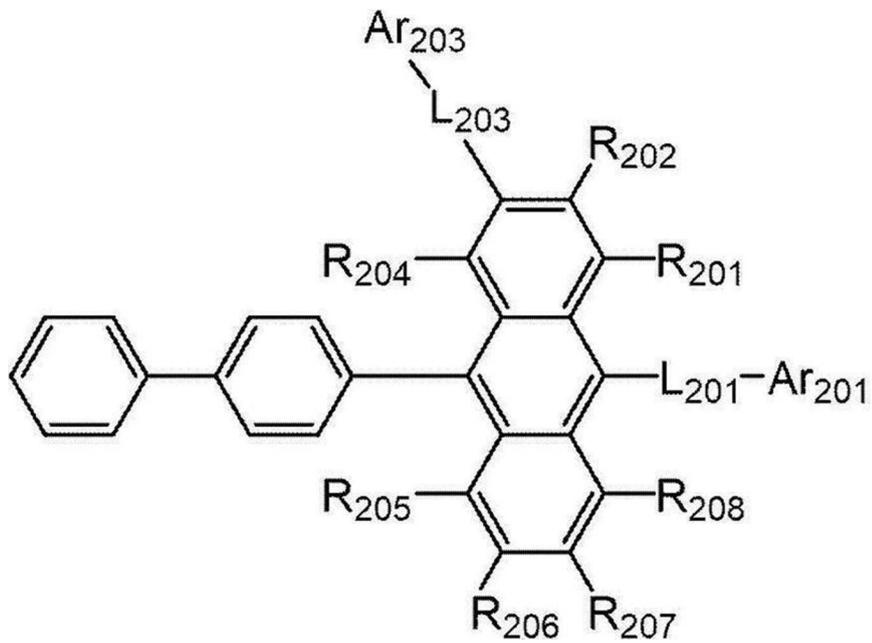


(243)

10

【 0 6 1 3】

【化 2 5 1】



(244)

20

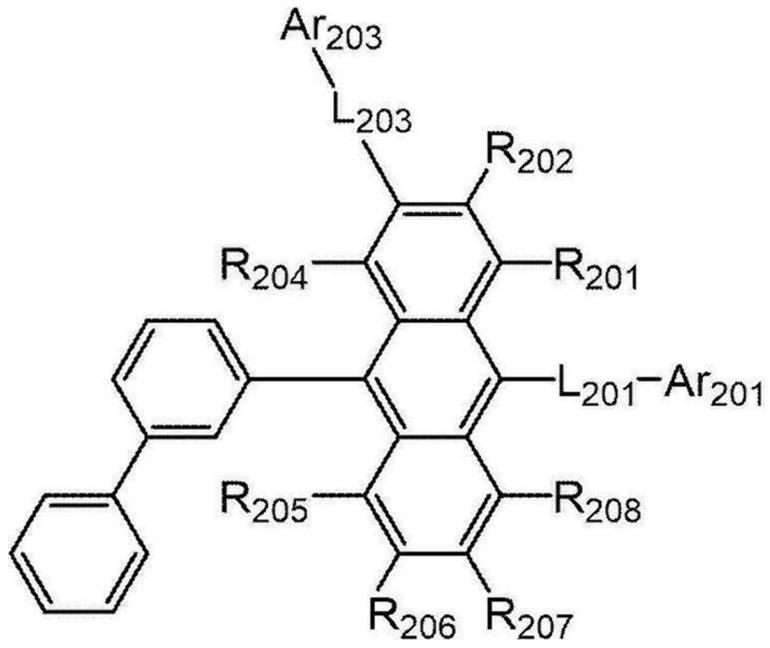
30

【 0 6 1 4】

40

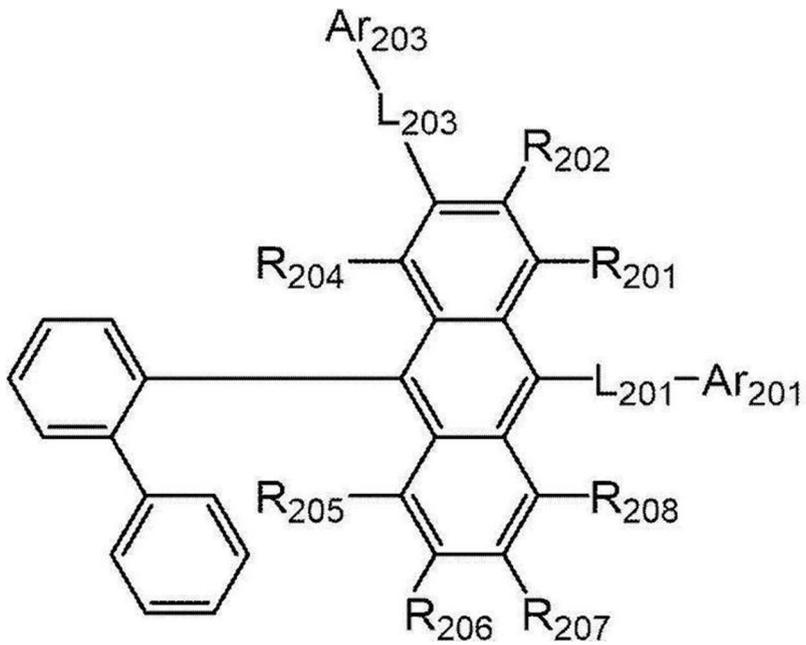
50

【化 2 5 2】



(245)

10

【 0 6 1 5 】
【化 2 5 3】

(246)

20

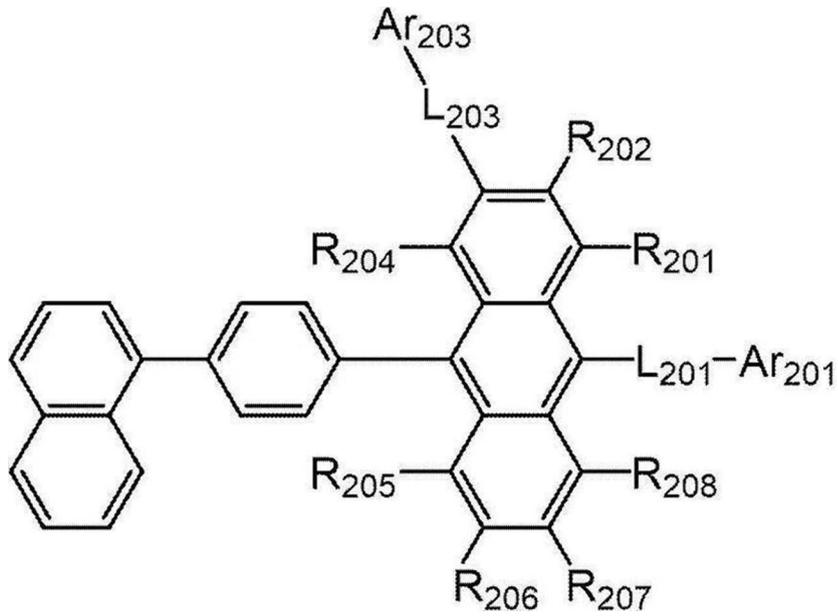
30

【 0 6 1 6 】

40

50

【化 2 5 4】

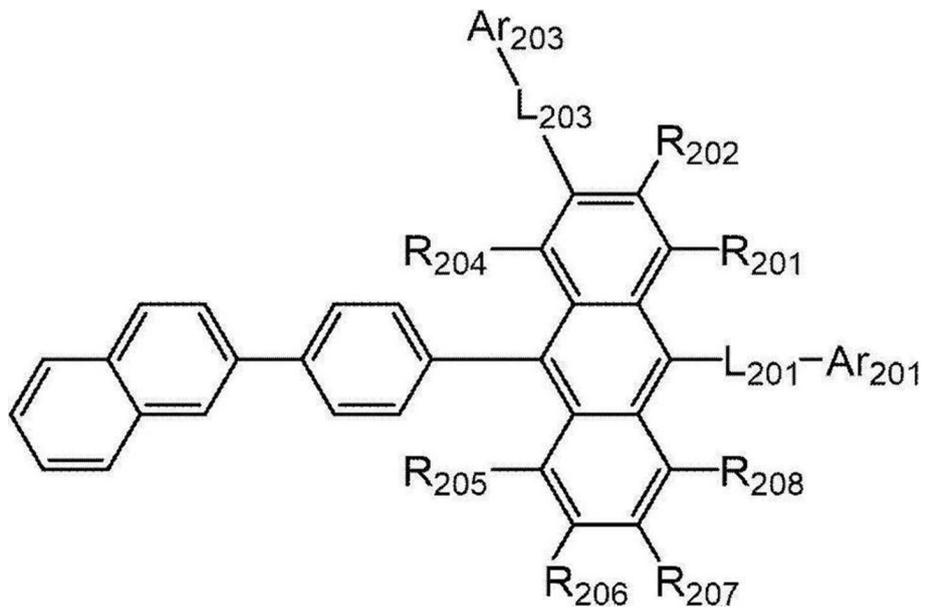


(247)

10

【 0 6 1 7】

【化 2 5 5】



(248)

20

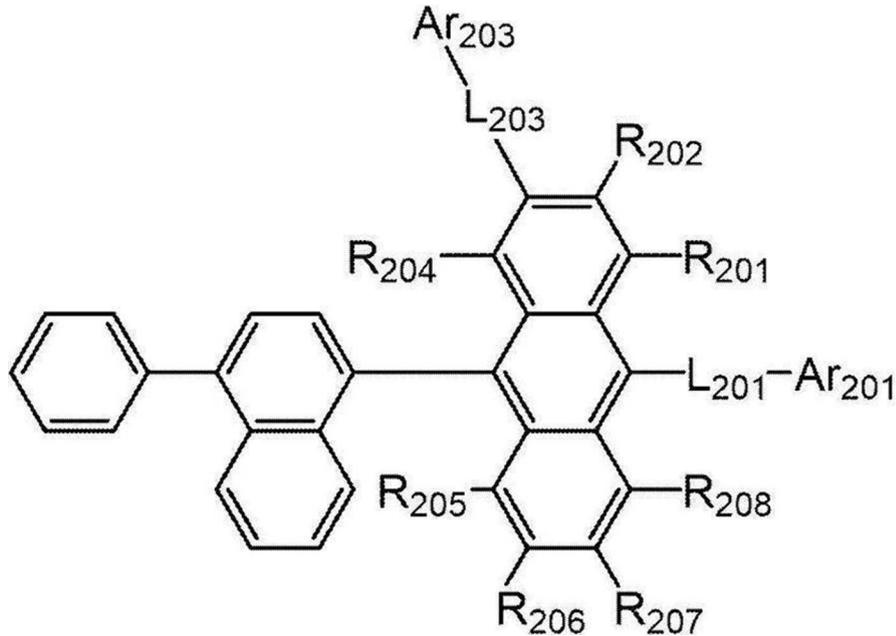
30

【 0 6 1 8】

40

50

【化 2 5 6】



(249)

10

【0619】

(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、

20

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。)

30

【0620】

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。

【0621】

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、

40

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。

【0622】

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が好ましい。

【0623】

50

本実施形態に係る有機 E L 素子において、

前記一般式 (2) で表される第二の化合物中、 $R_{201} \sim R_{208}$ は、水素原子であることが好ましい。

【 0 6 2 4 】

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

【 0 6 2 5 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、例えば、前記一般式 (2) で表される第二の化合物中の $A r_{201}$ は置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基である。

【 0 6 2 6 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、例えば、前記一般式 (2) で表される第二の化合物中の $A r_{201}$ は無置換のジベンゾフラニル基である。

【 0 6 2 7 】

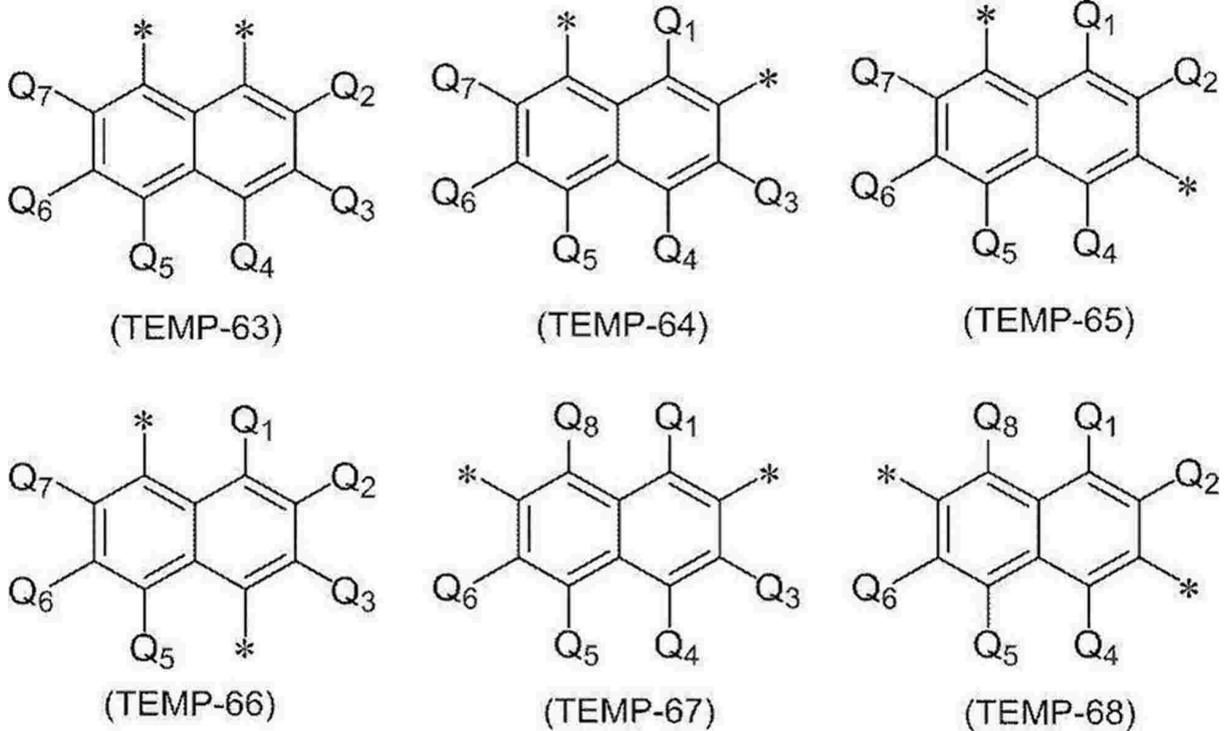
本実施形態に係る有機 E L 素子において、例えば、前記一般式 (2) で表される第二の化合物は少なくとも 1 つの水素を含み、前記水素のうち少なくとも 1 つが重水素である。

【 0 6 2 8 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、例えば、前記一般式 (2) で表される第二の化合物中の L_{201} は TEMP - 6 3 ないし TEMP - 6 8 である。

【 0 6 2 9 】

【 化 2 5 7 】



【 0 6 3 0 】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、例えば、前記一般式 (2) で表される第二の化合物中の $A r_{201}$ は置換もしくは無置換のアントリル基、

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、

10

20

30

40

50

トリフェニレニル基、
ベンゾトリフェニレニル基、
テトラセニル基、
ペンタセニル基、
フルオランテニル基、
ベンゾフルオランテニル基、及び
ペリレニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0631】

本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中のAr₂₀₁は置換もしくは無置換のフルオレニル基である。

10

【0632】

本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中のAr₂₀₁は置換もしくは無置換のキサントニル基である。

【0633】

本実施形態に係る有機EL素子において、例えば、前記一般式(2)で表される第二の化合物中のAr₂₀₁はベンゾキサントニル基である。

【0634】

(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。

20

【0635】

(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。

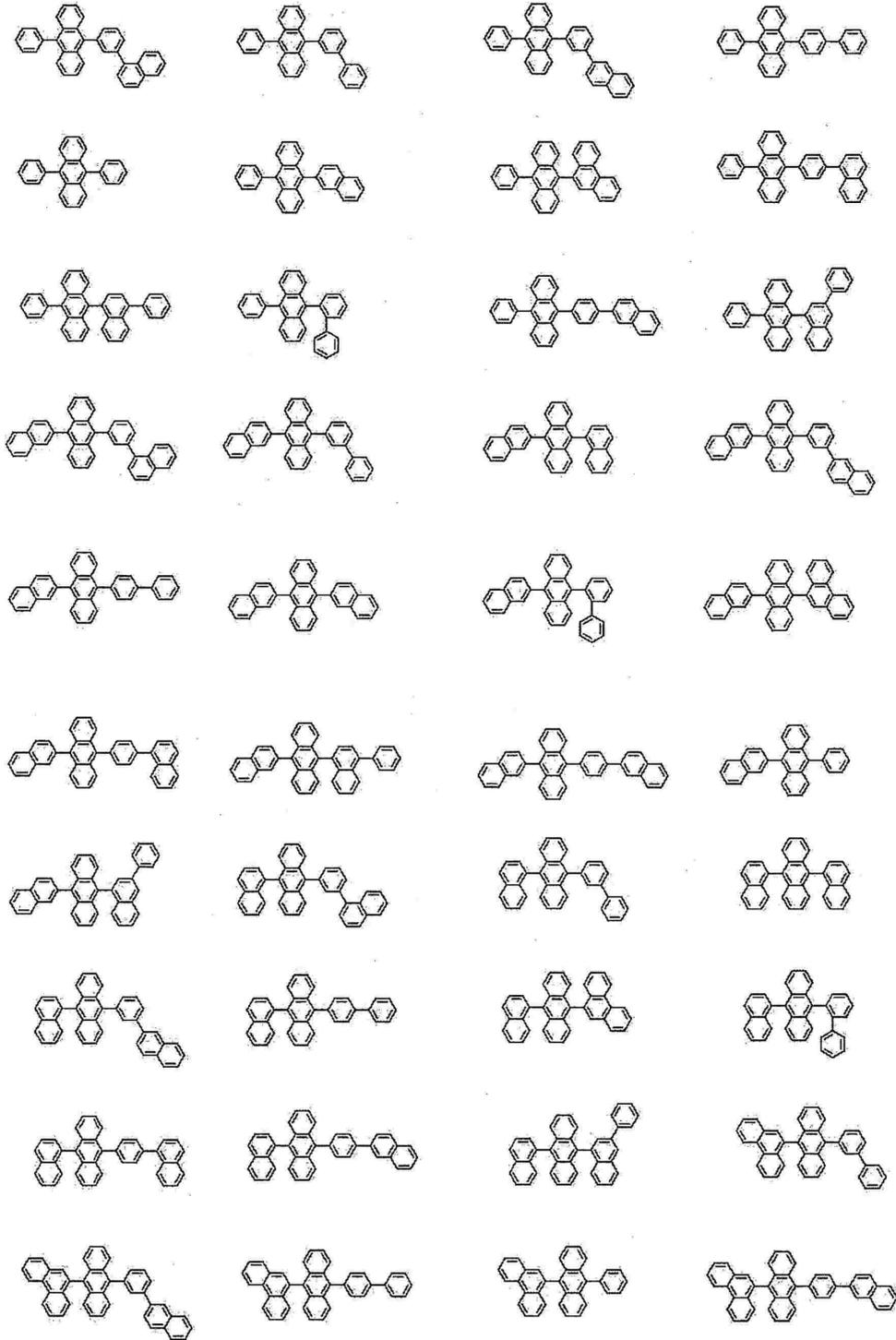
【0636】

30

40

50

【化 2 5 8】



10

20

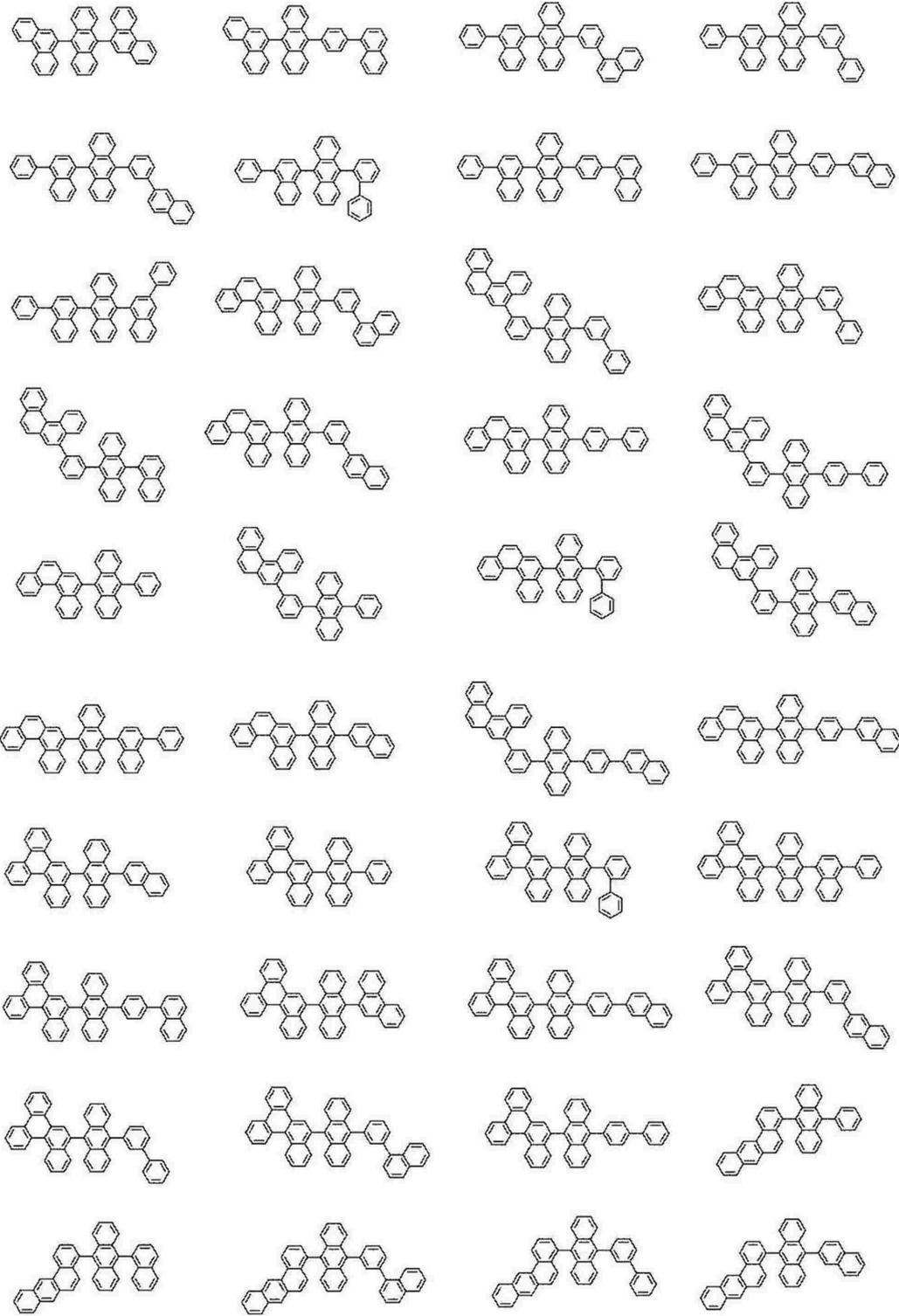
30

40

【 0 6 3 7】

50

【化 2 5 9】



10

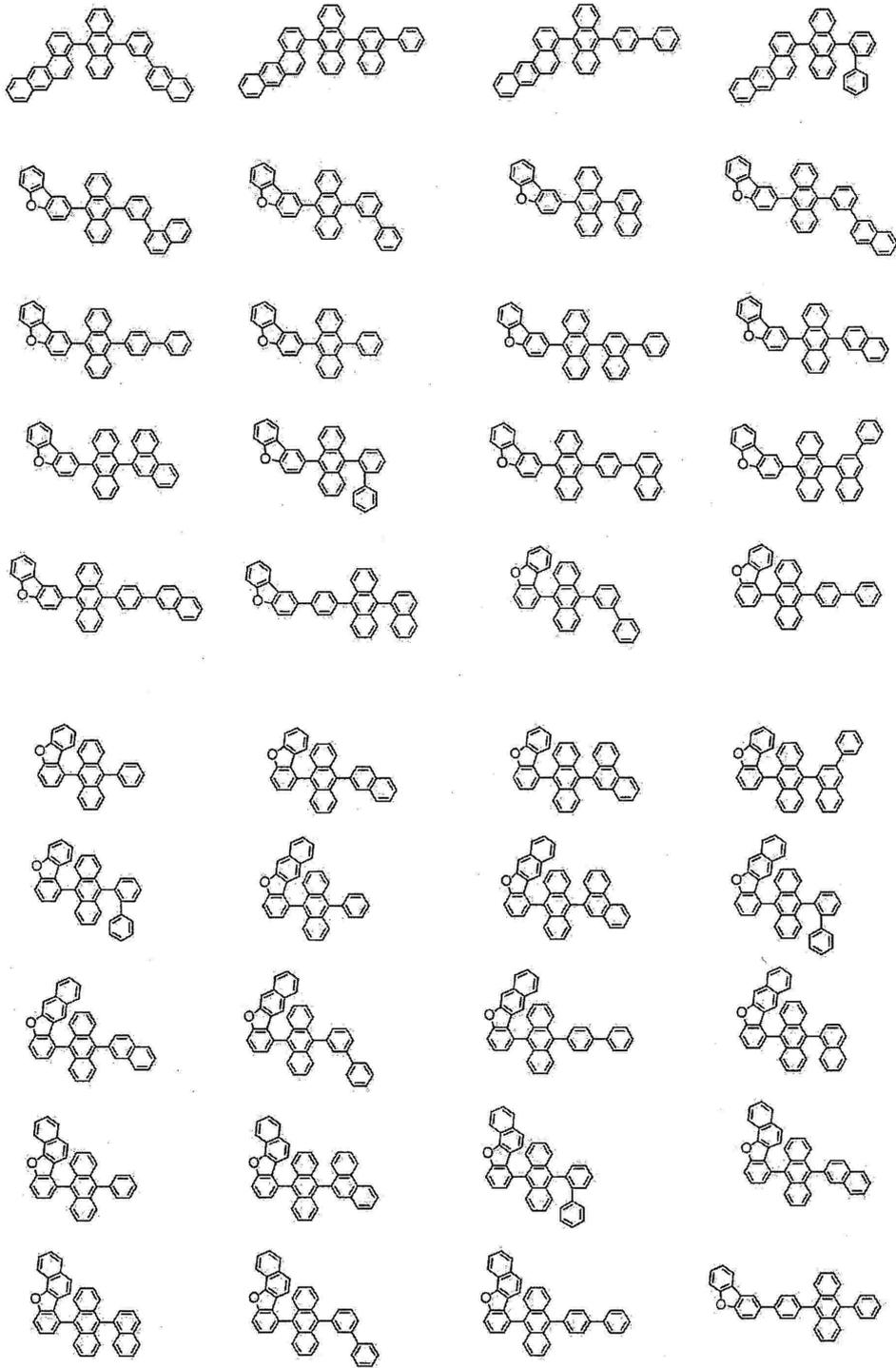
20

30

40

【0 6 3 8】

【化 2 6 0】



10

20

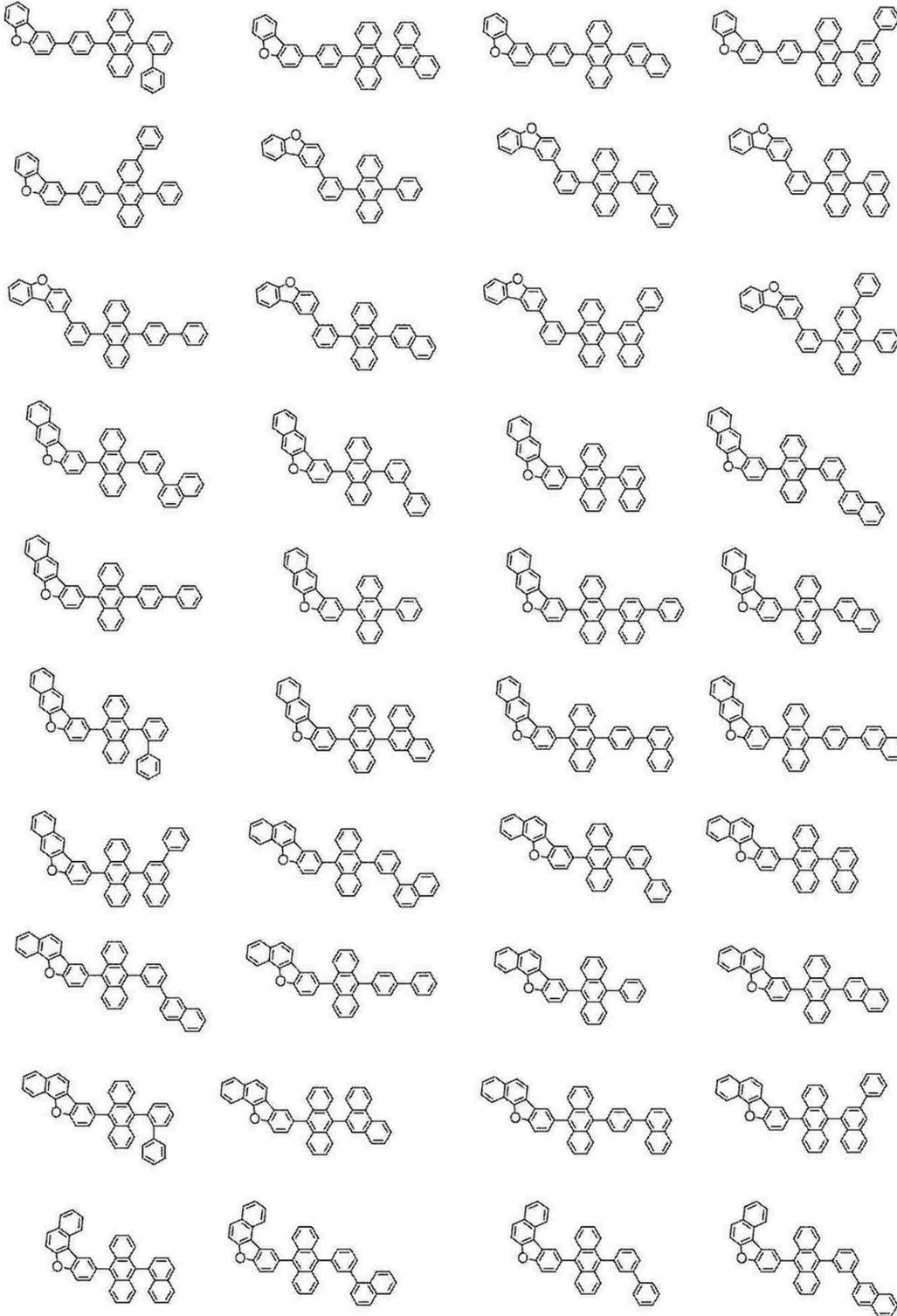
30

40

【 0 6 3 9】

50

【化 2 6 1】



10

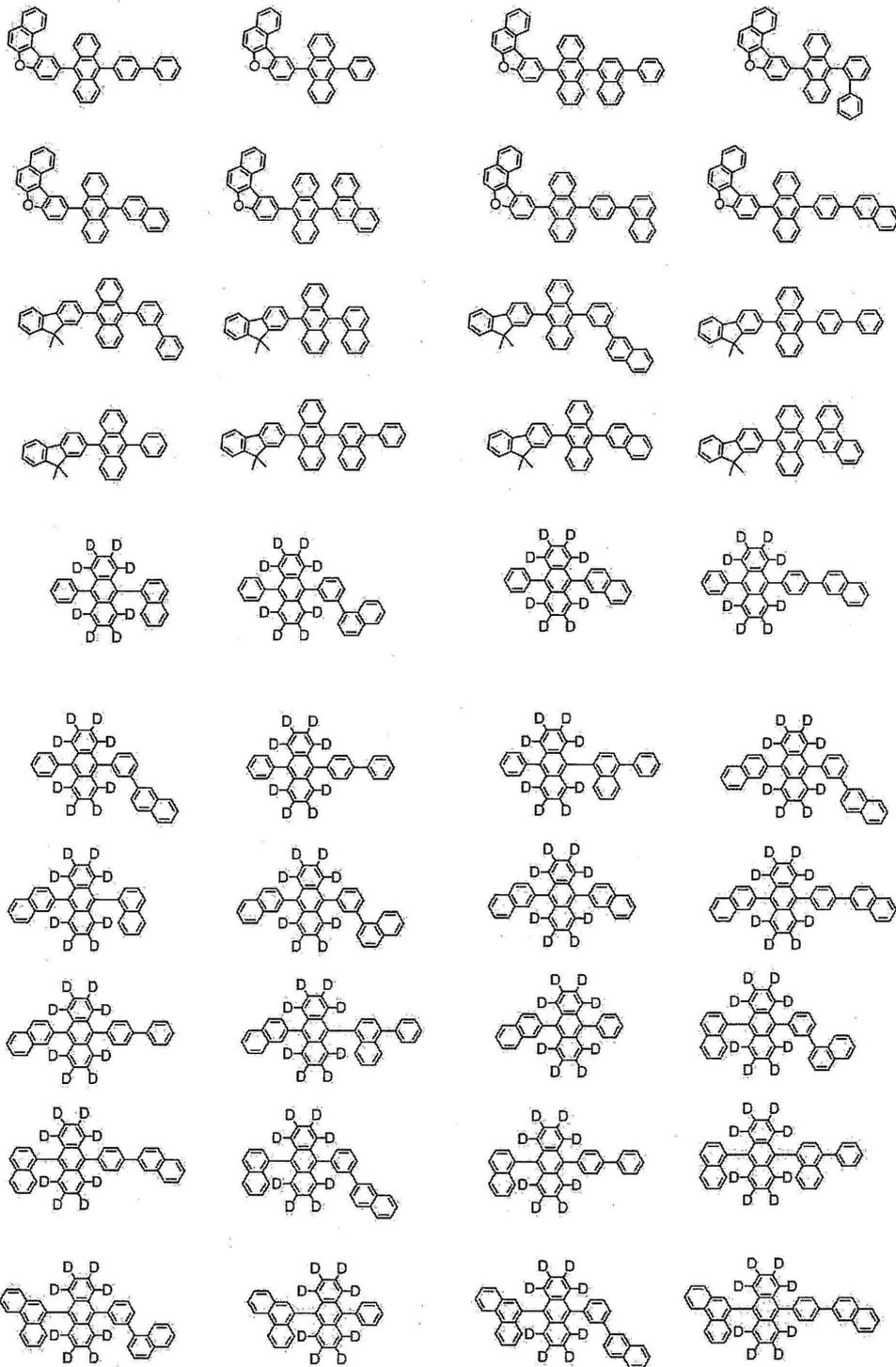
20

30

40

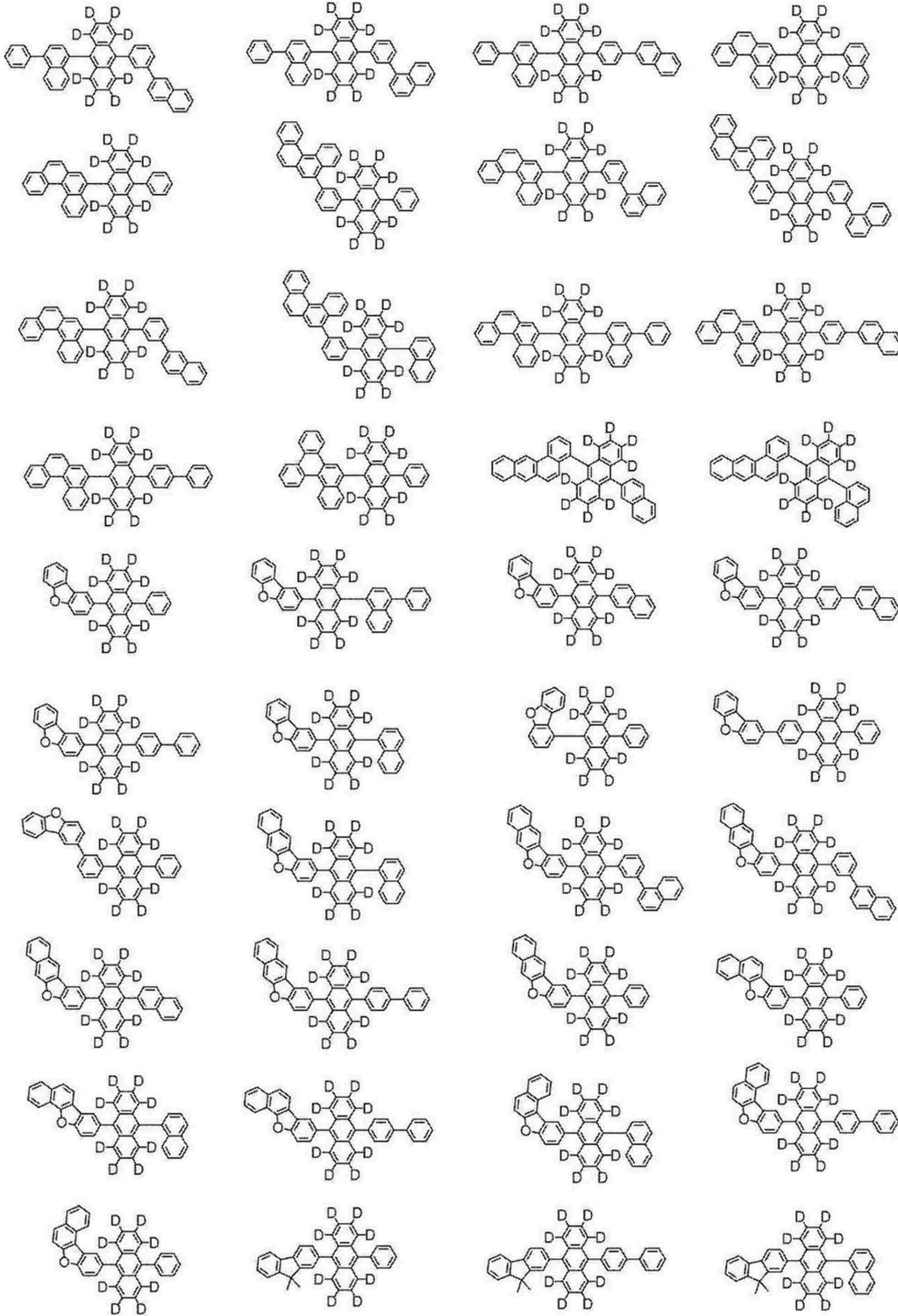
【 0 6 4 0】

【化 2 6 2】



【 0 6 4 1】

【化 2 6 3】



10

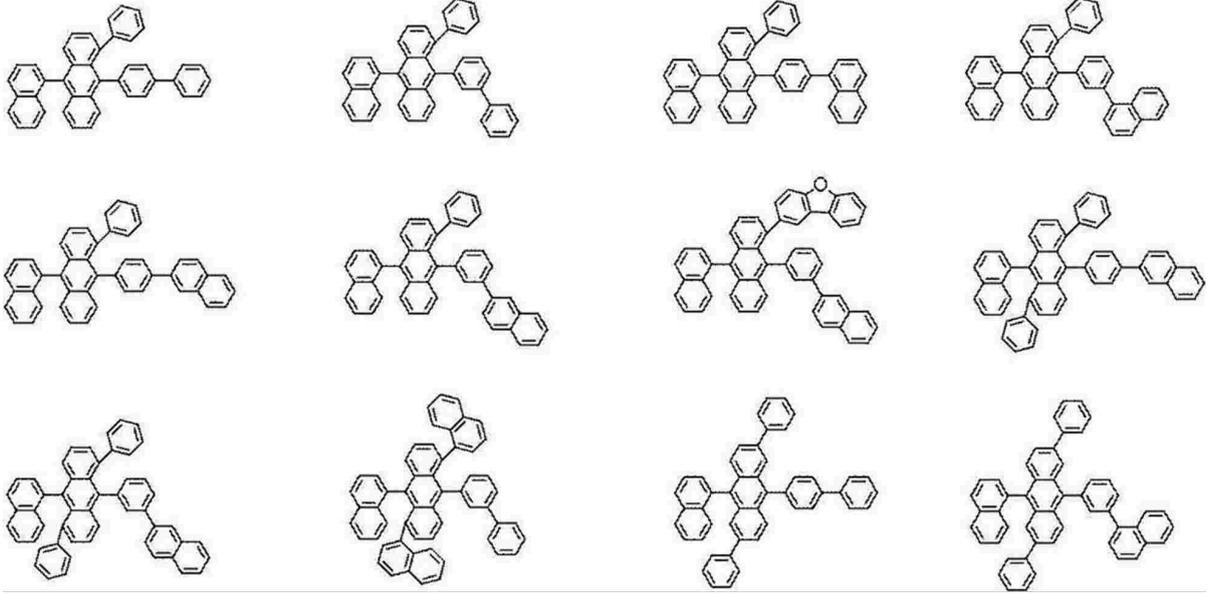
20

30

40

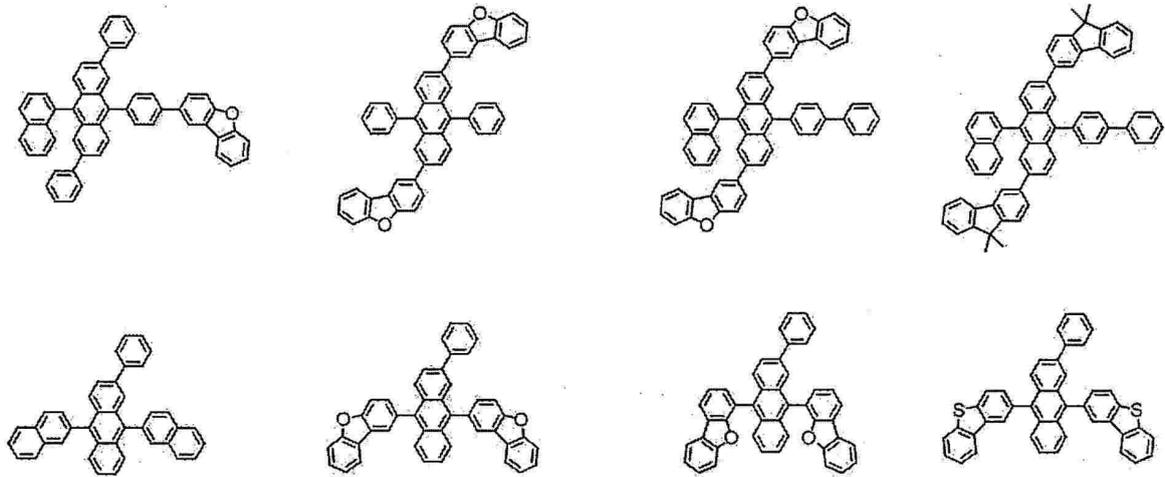
【 0 6 4 2】

【化 2 6 4】



【 0 6 4 3】

【化 2 6 5】

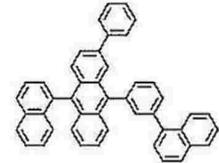
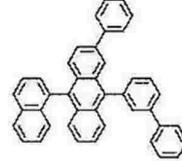
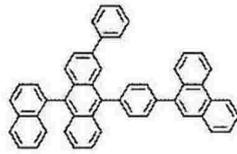
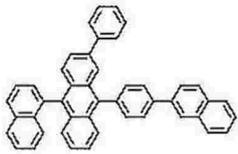
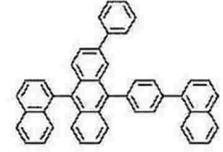
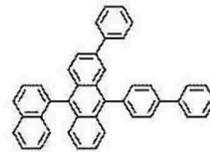
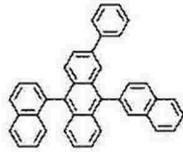
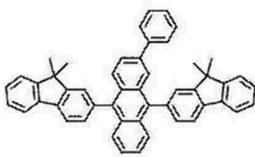


【 0 6 4 4】

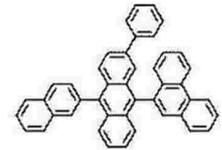
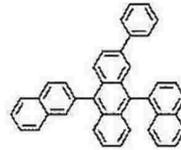
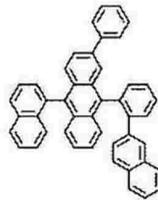
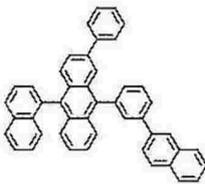
40

50

【化 2 6 6】

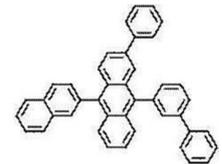
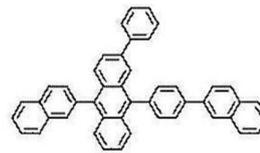
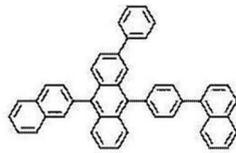
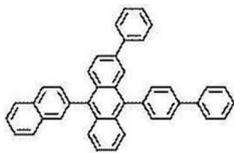


10

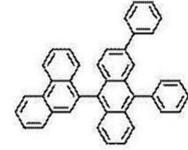
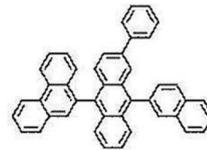
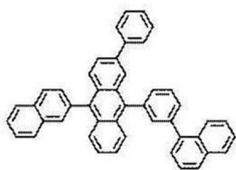
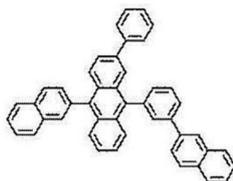


【 0 6 4 5】

【化 2 6 7】



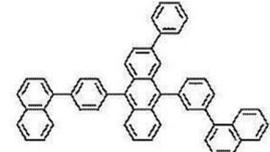
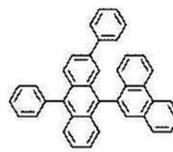
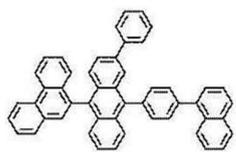
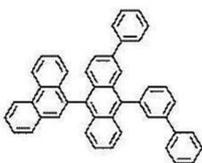
20



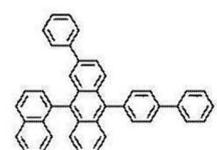
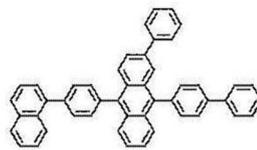
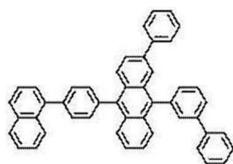
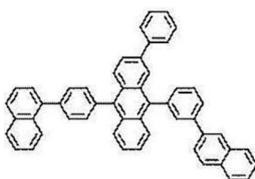
30

【 0 6 4 6】

【化 2 6 8】



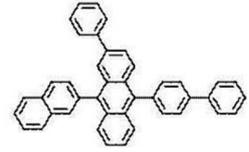
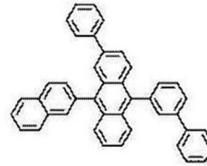
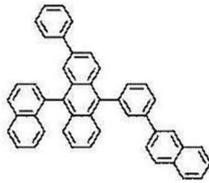
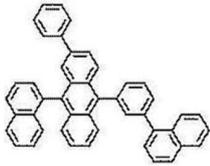
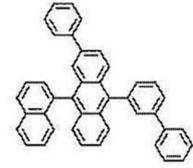
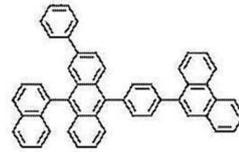
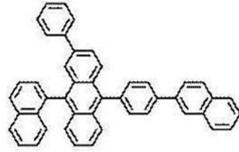
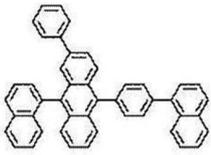
40



【 0 6 4 7】

50

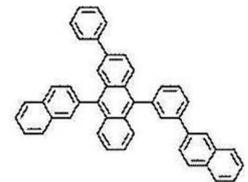
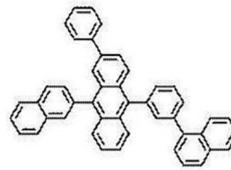
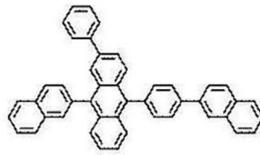
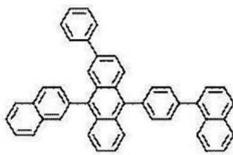
【化 2 6 9】



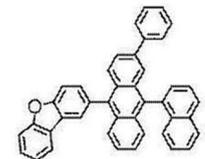
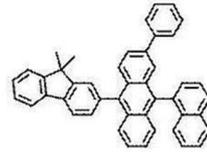
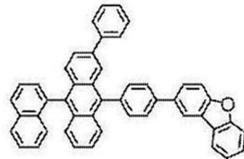
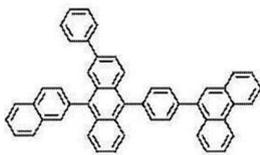
10

【 0 6 4 8】

【化 2 7 0】

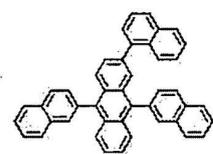
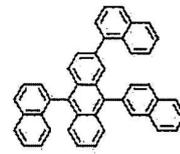
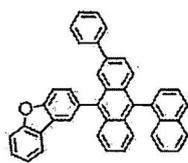
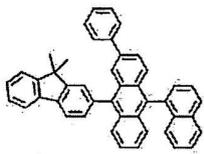


20

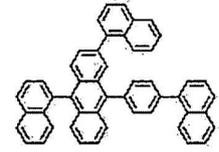
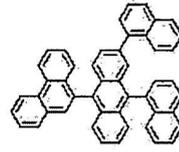
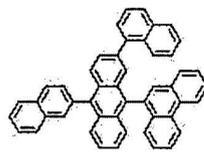
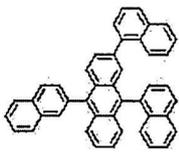


【 0 6 4 9】

【化 2 7 1】



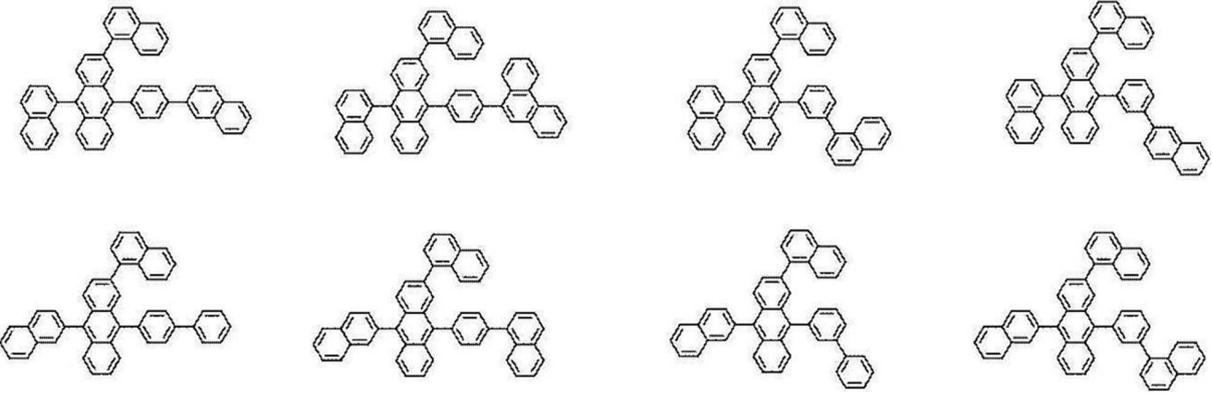
30



【 0 6 5 0】

40

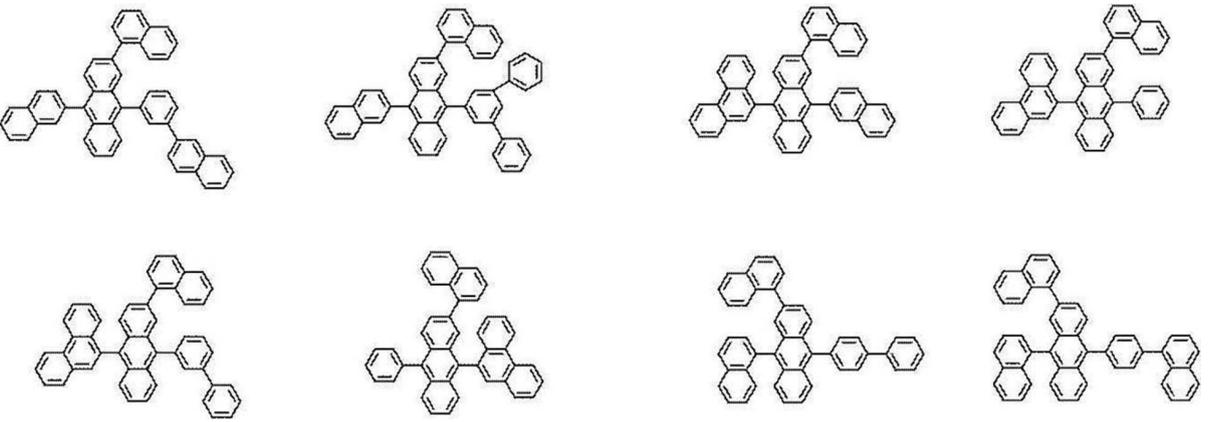
【化 2 7 2】



10

【 0 6 5 1】

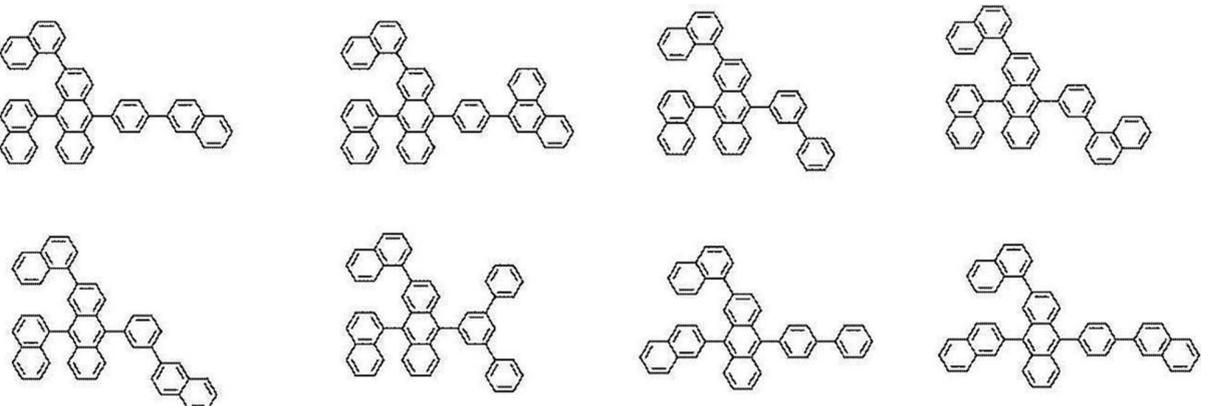
【化 2 7 3】



20

【 0 6 5 2】

【化 2 7 4】

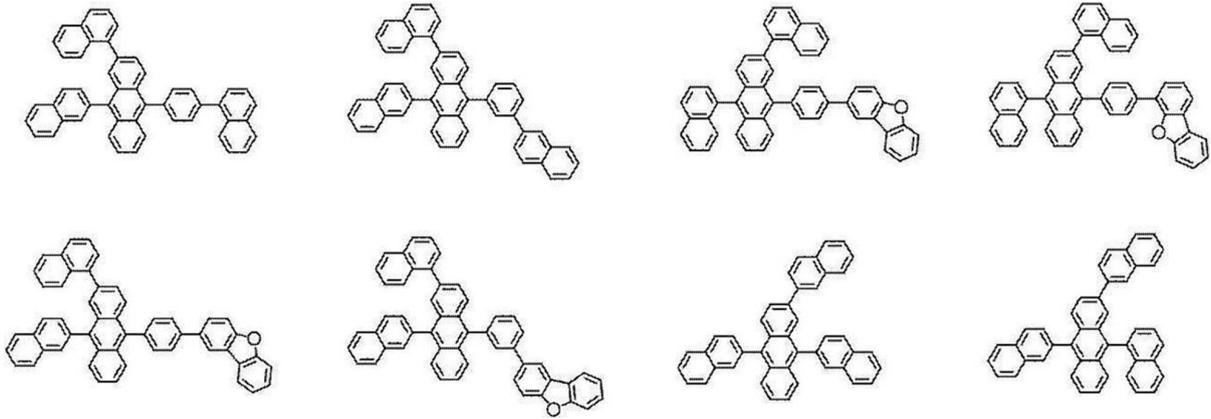


30

【 0 6 5 3】

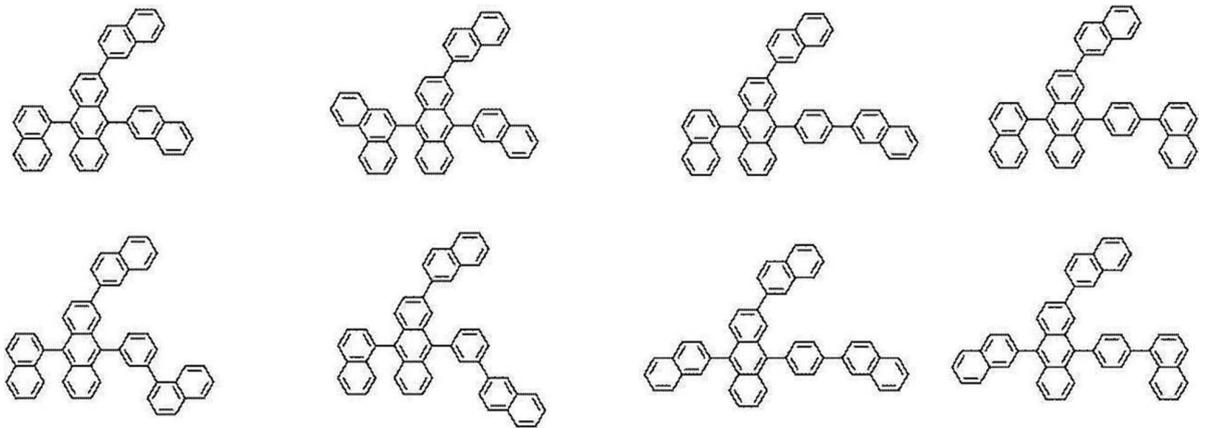
40

【化 2 7 5】



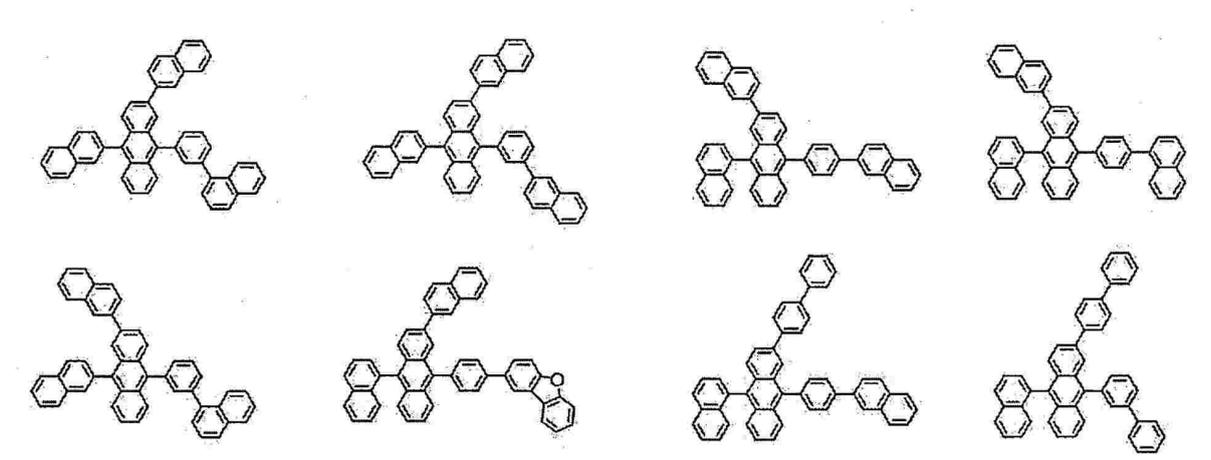
【 0 6 5 4】

【化 2 7 6】



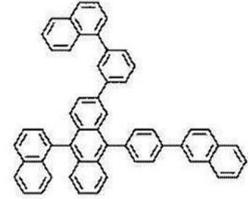
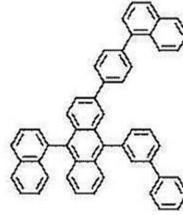
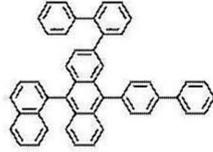
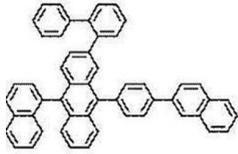
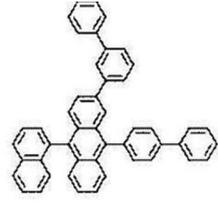
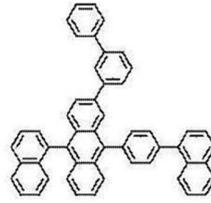
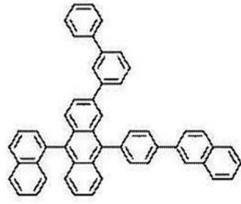
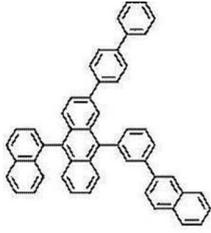
【 0 6 5 5】

【化 2 7 7】



【 0 6 5 6】

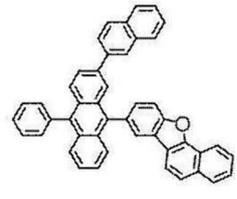
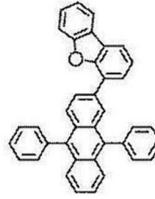
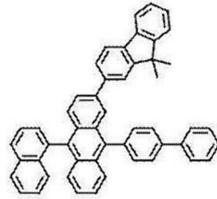
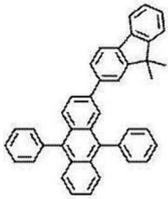
【化 2 7 8】



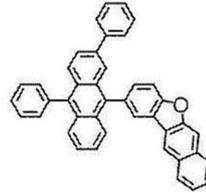
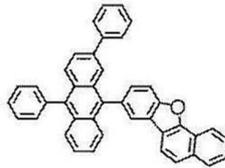
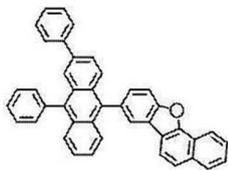
10

【 0 6 5 7】

【化 2 7 9】

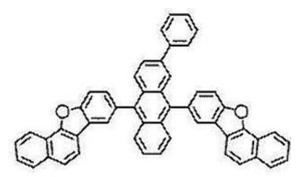
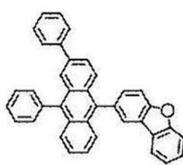
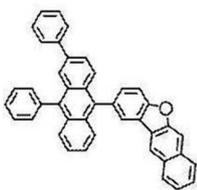


20

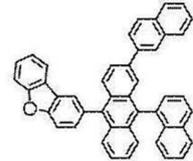
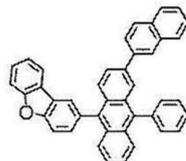
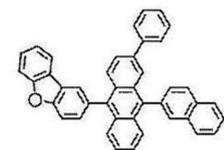


【 0 6 5 8】

【化 2 8 0】



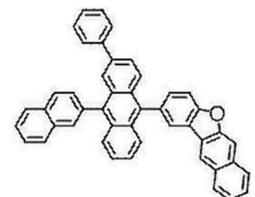
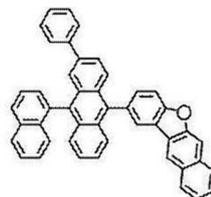
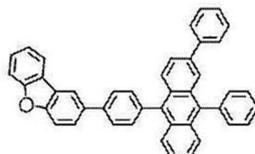
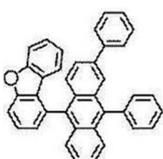
30



40

【 0 6 5 9】

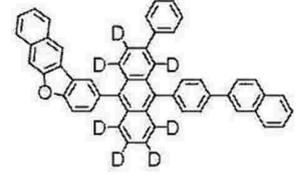
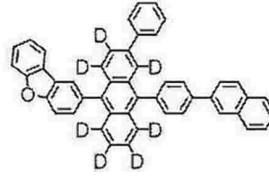
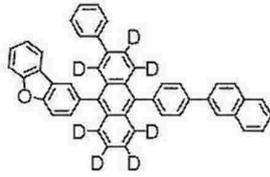
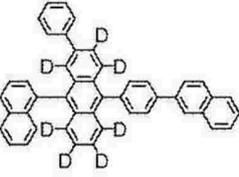
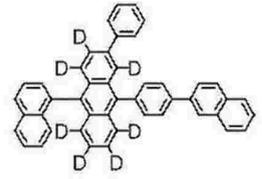
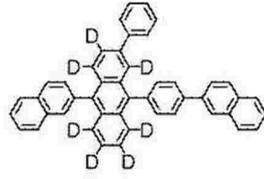
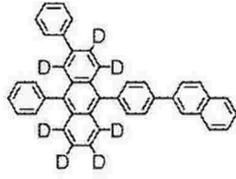
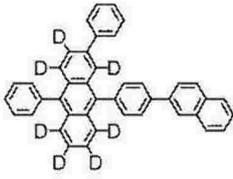
【化 2 8 1】



50

【 0 6 6 0 】

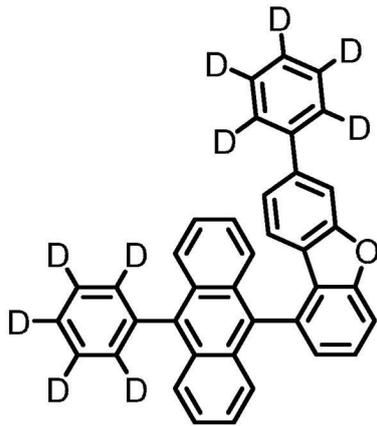
【 化 2 8 2 】



10

【 0 6 6 1 】

【 化 2 8 3 】



20

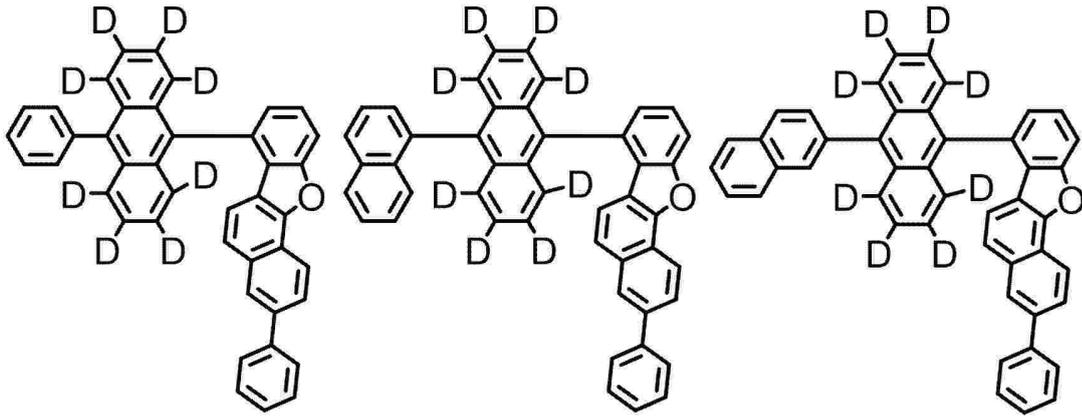
【 0 6 6 2 】

30

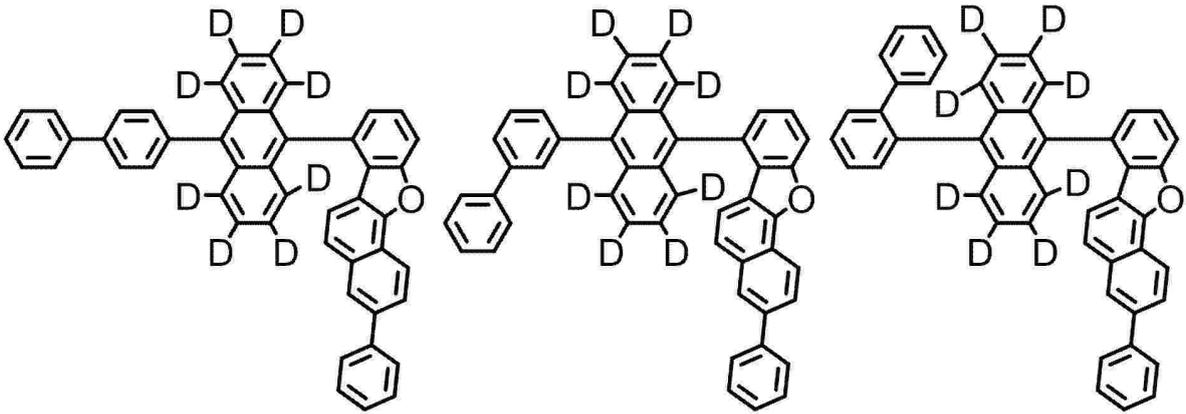
40

50

【化 2 8 4】



10



20

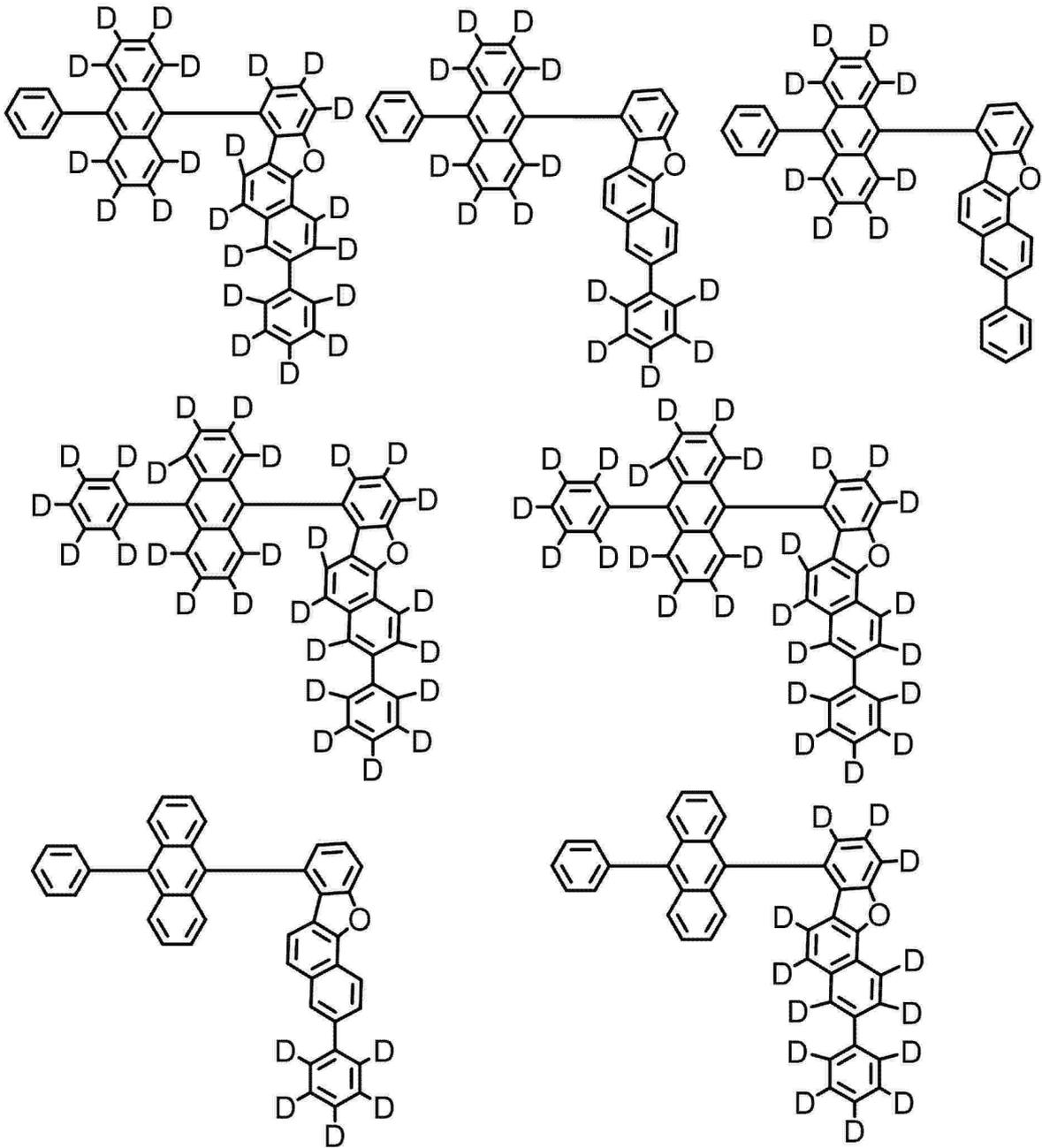
【 0 6 6 3】

30

40

50

【化 2 8 5】



10

20

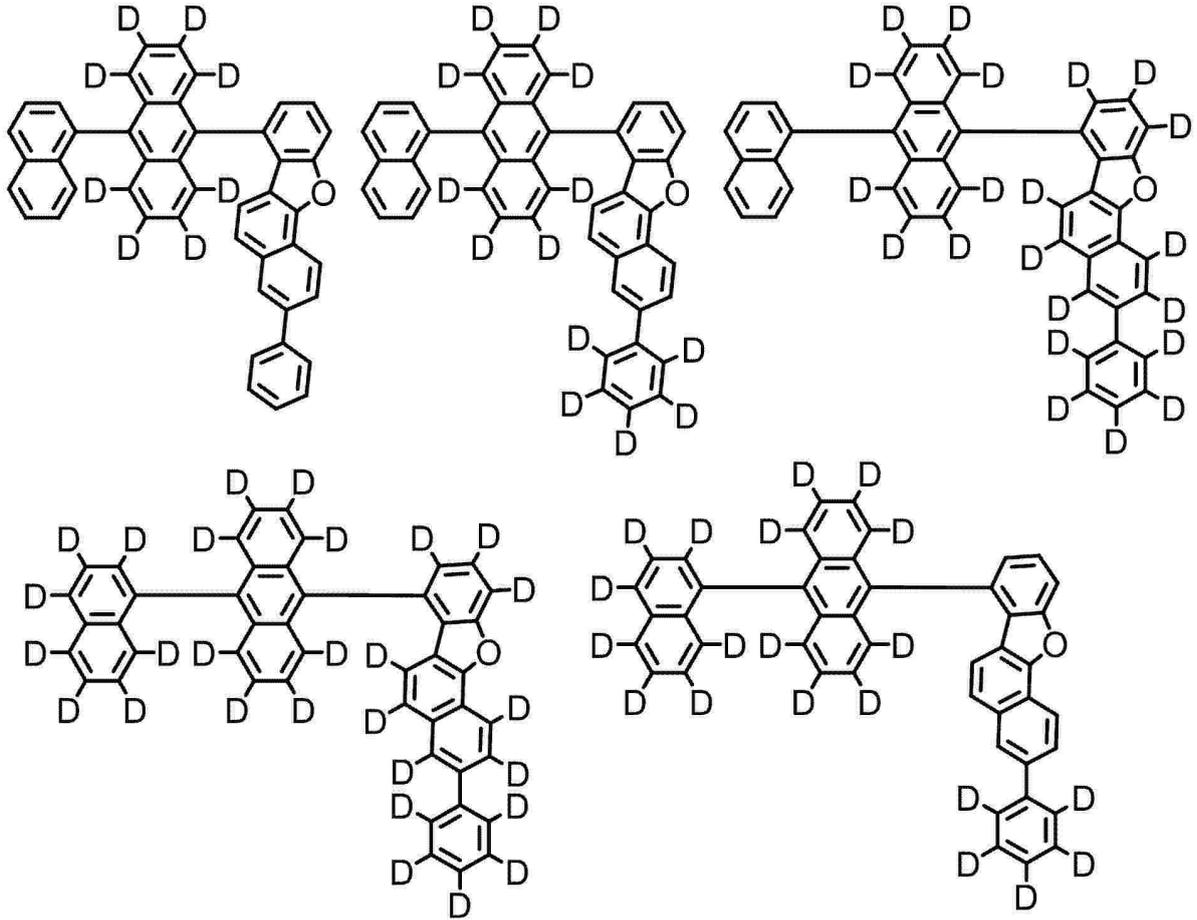
30

【 0 6 6 4】

40

50

【化 2 8 6】



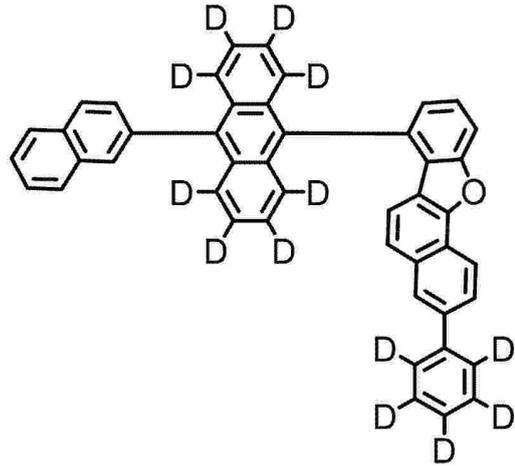
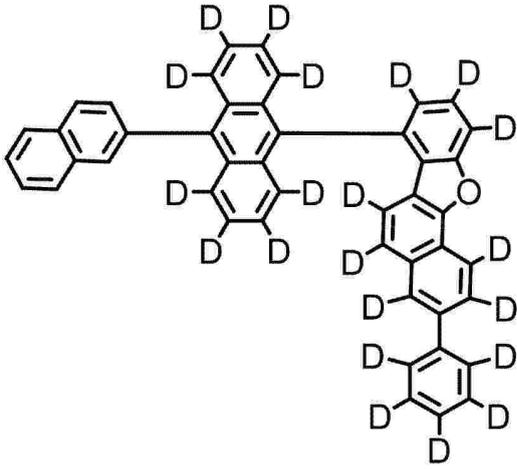
【 0 6 6 5】

30

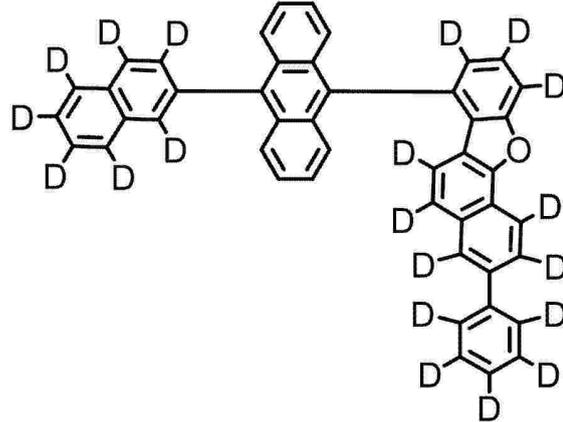
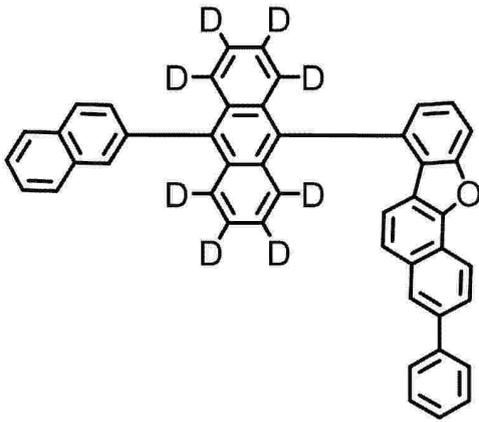
40

50

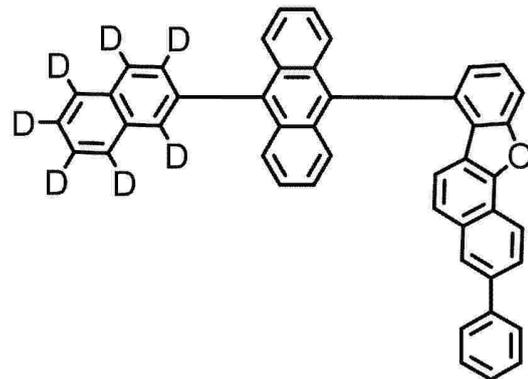
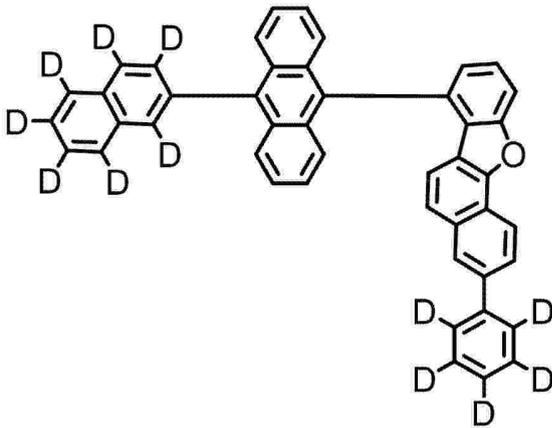
【化 2 8 7】



10



20



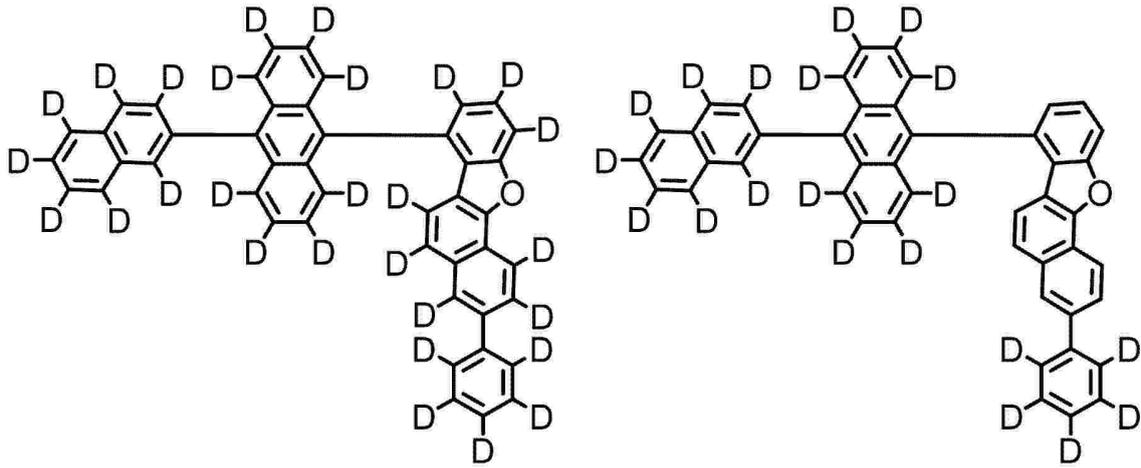
30

【 0 6 6 6】

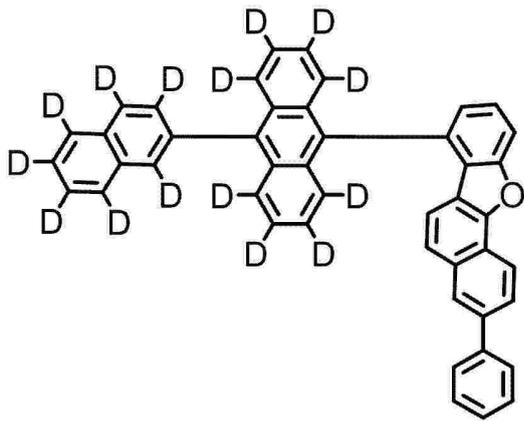
40

50

【化 2 8 8】



10



20

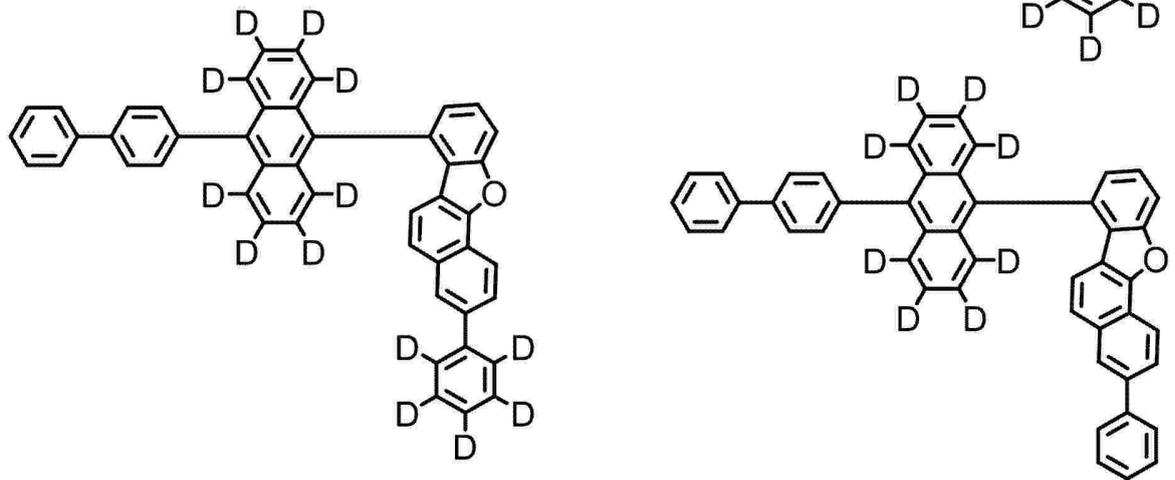
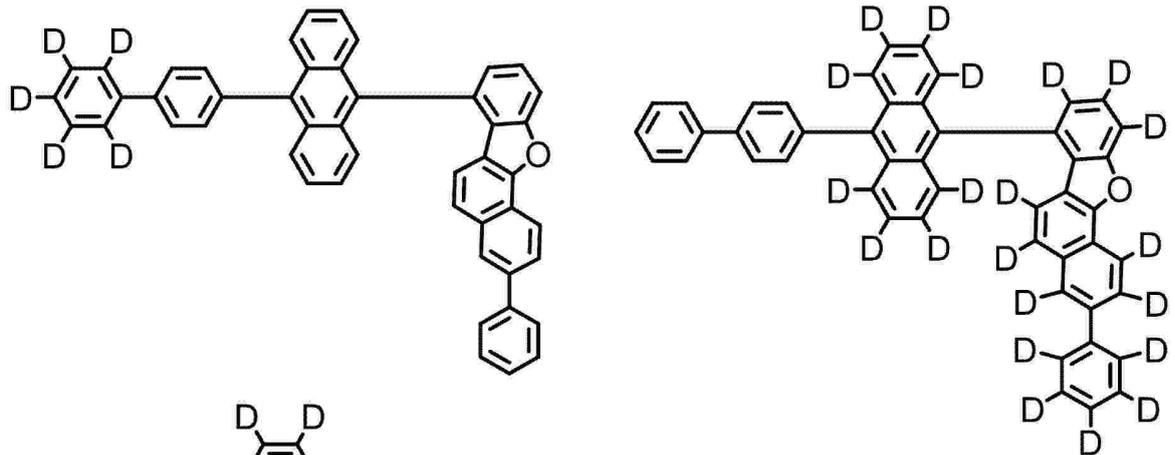
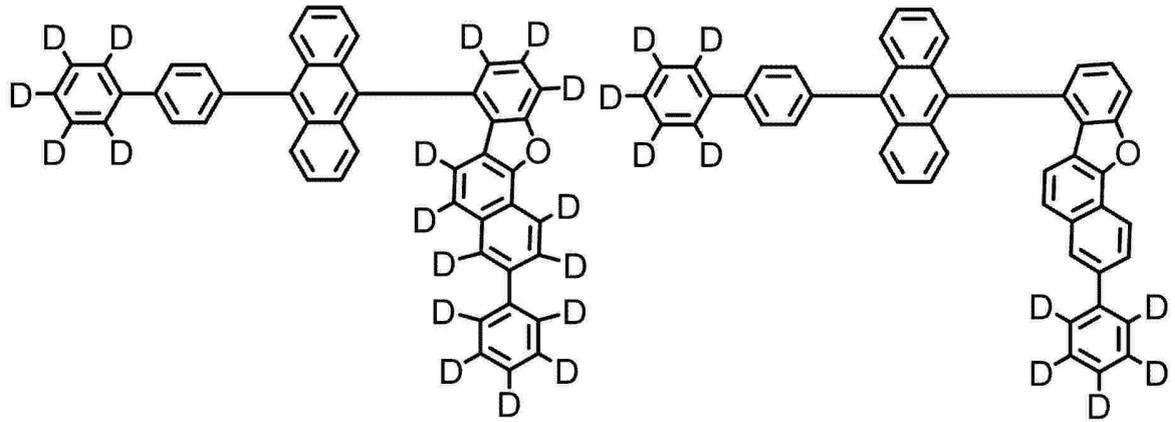
【 0 6 6 7】

30

40

50

【化 2 8 9】



【 0 6 6 8 】

10

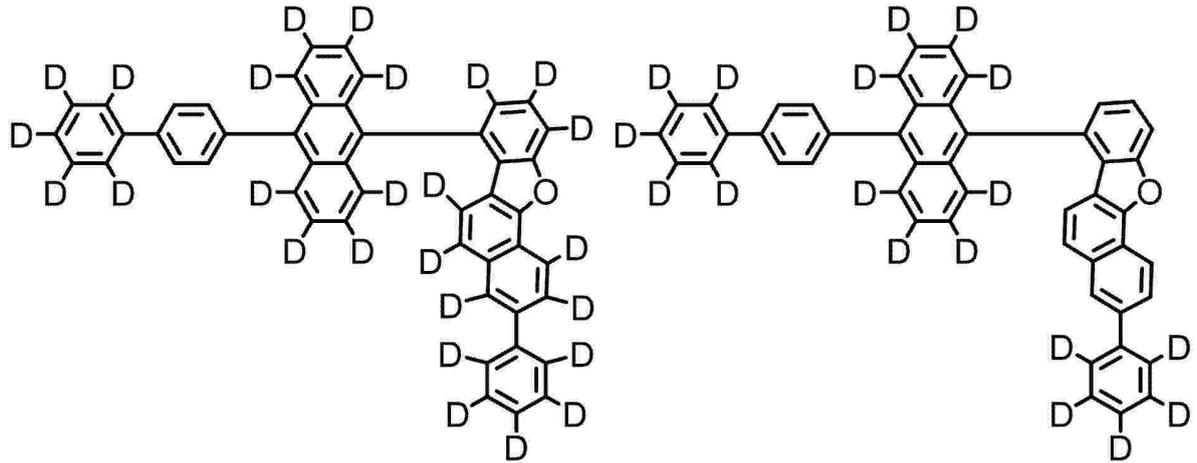
20

30

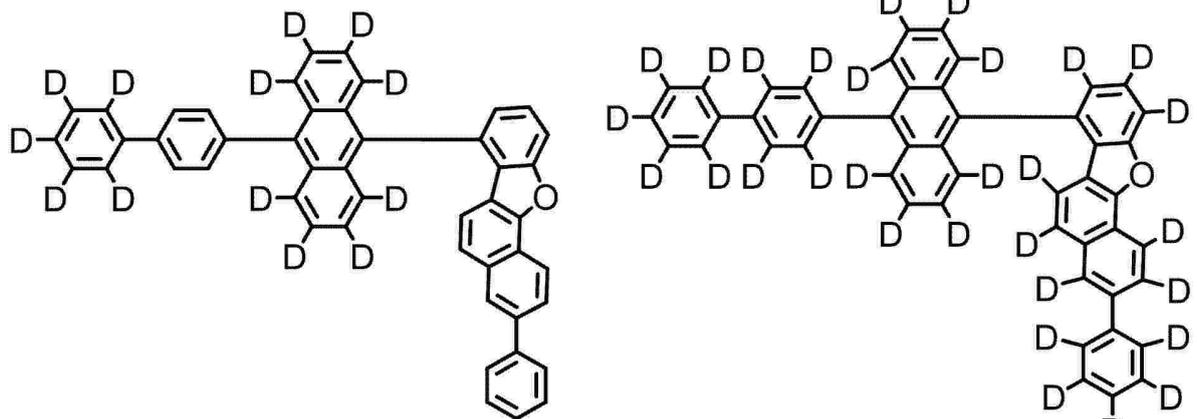
40

50

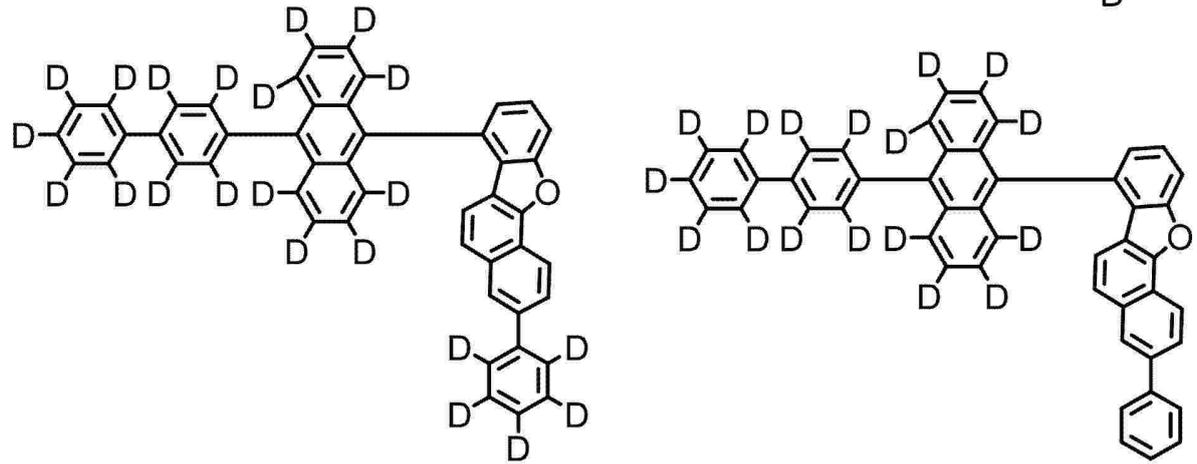
【化 2 9 0】



10



20



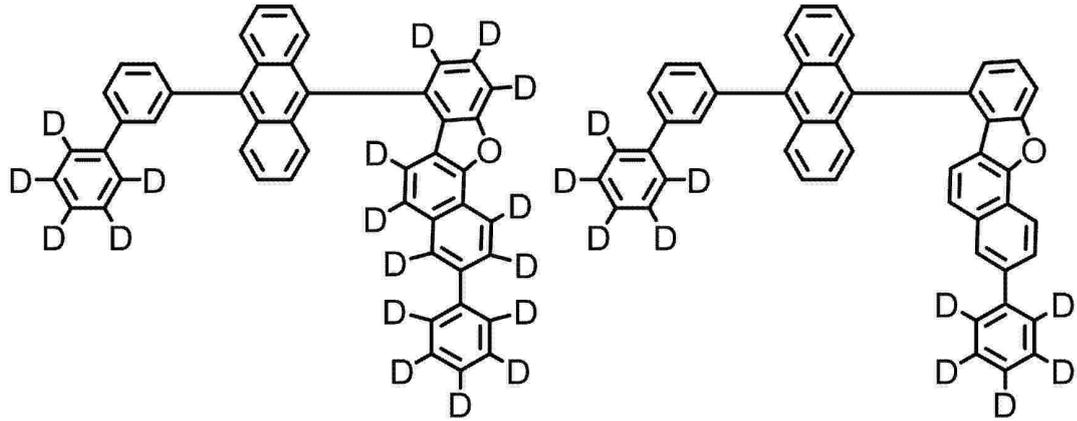
30

【 0 6 6 9】

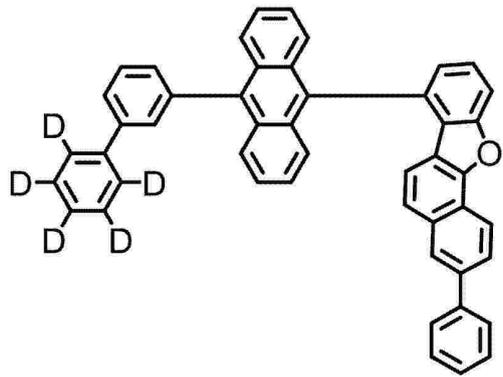
40

50

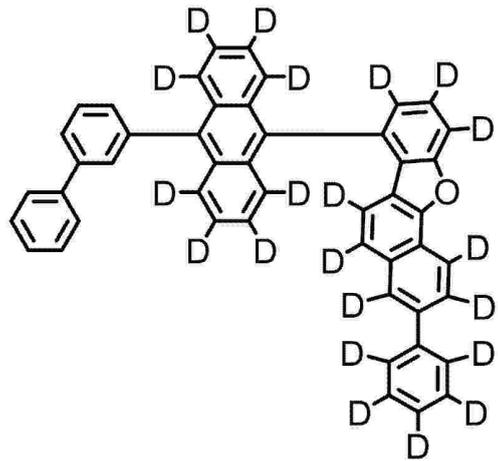
【化 2 9 1】



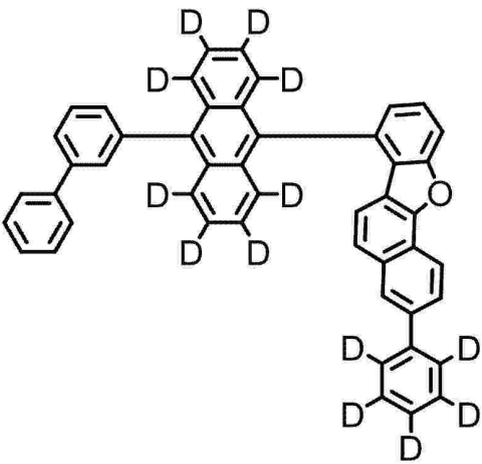
10



20



30

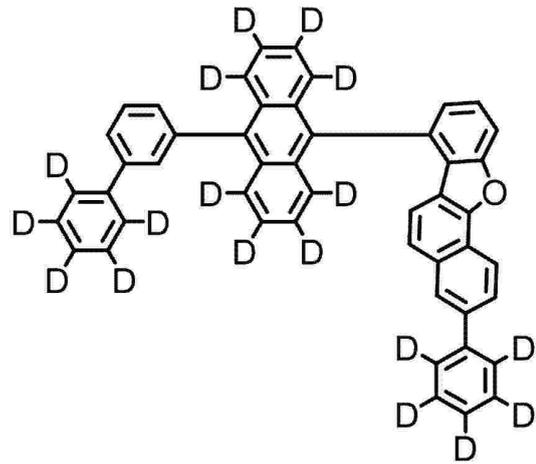
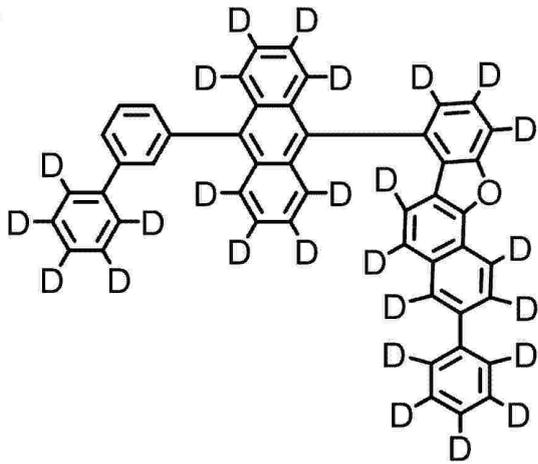


【 0 6 7 0 】

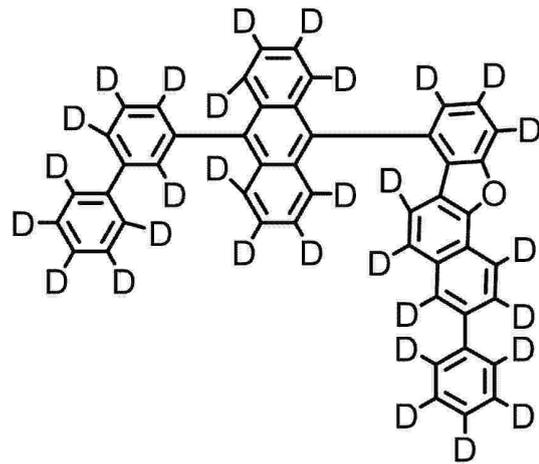
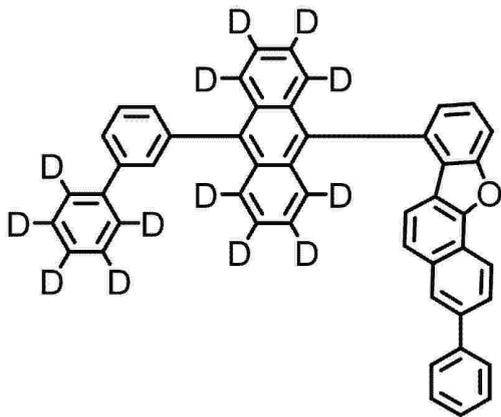
40

50

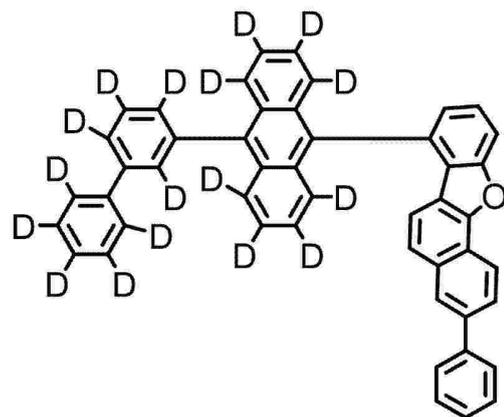
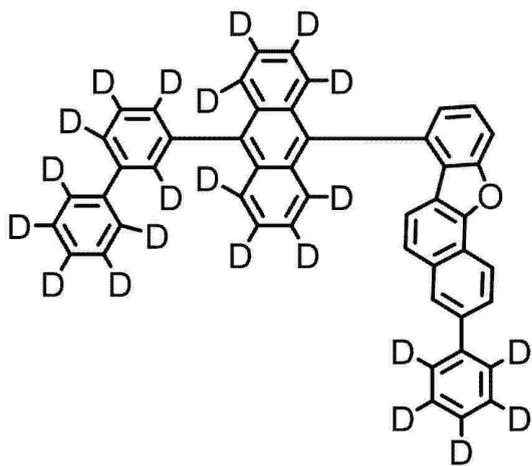
【化 2 9 2】



10



20



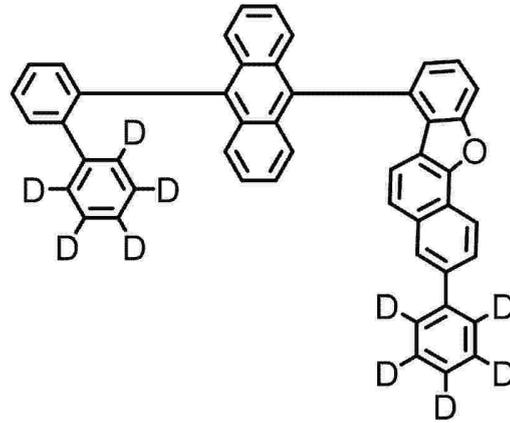
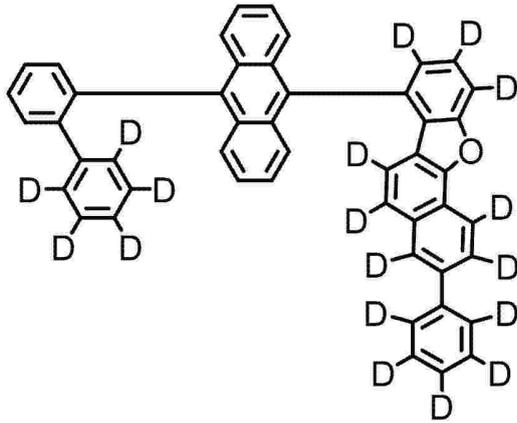
30

【 0 6 7 1】

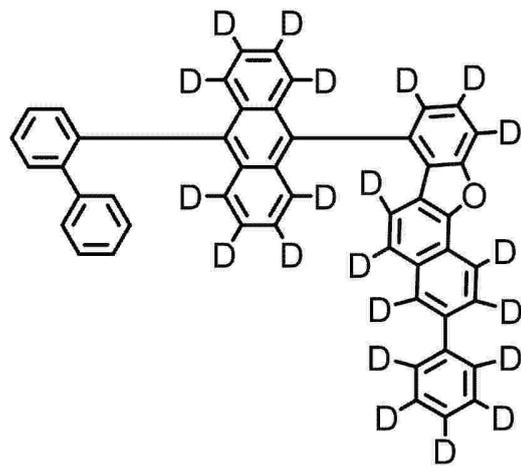
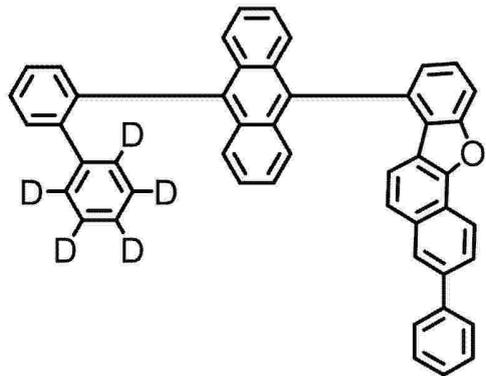
40

50

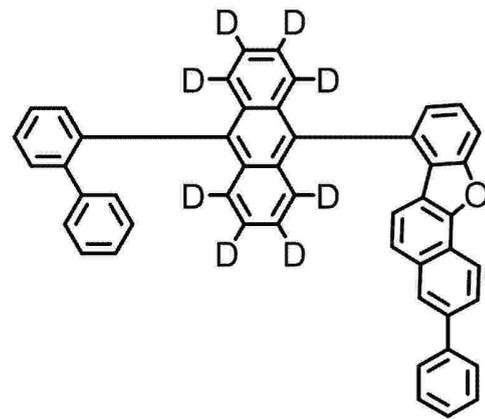
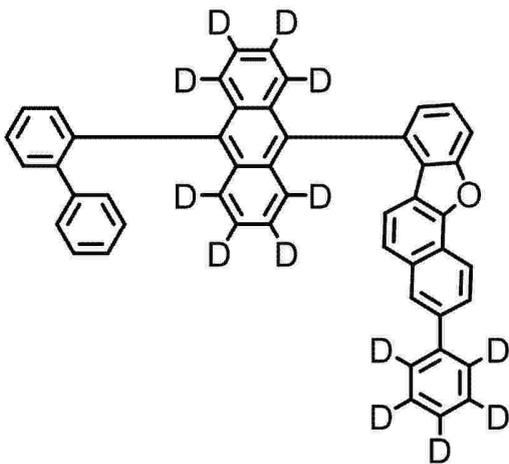
【化 2 9 3】



10



20



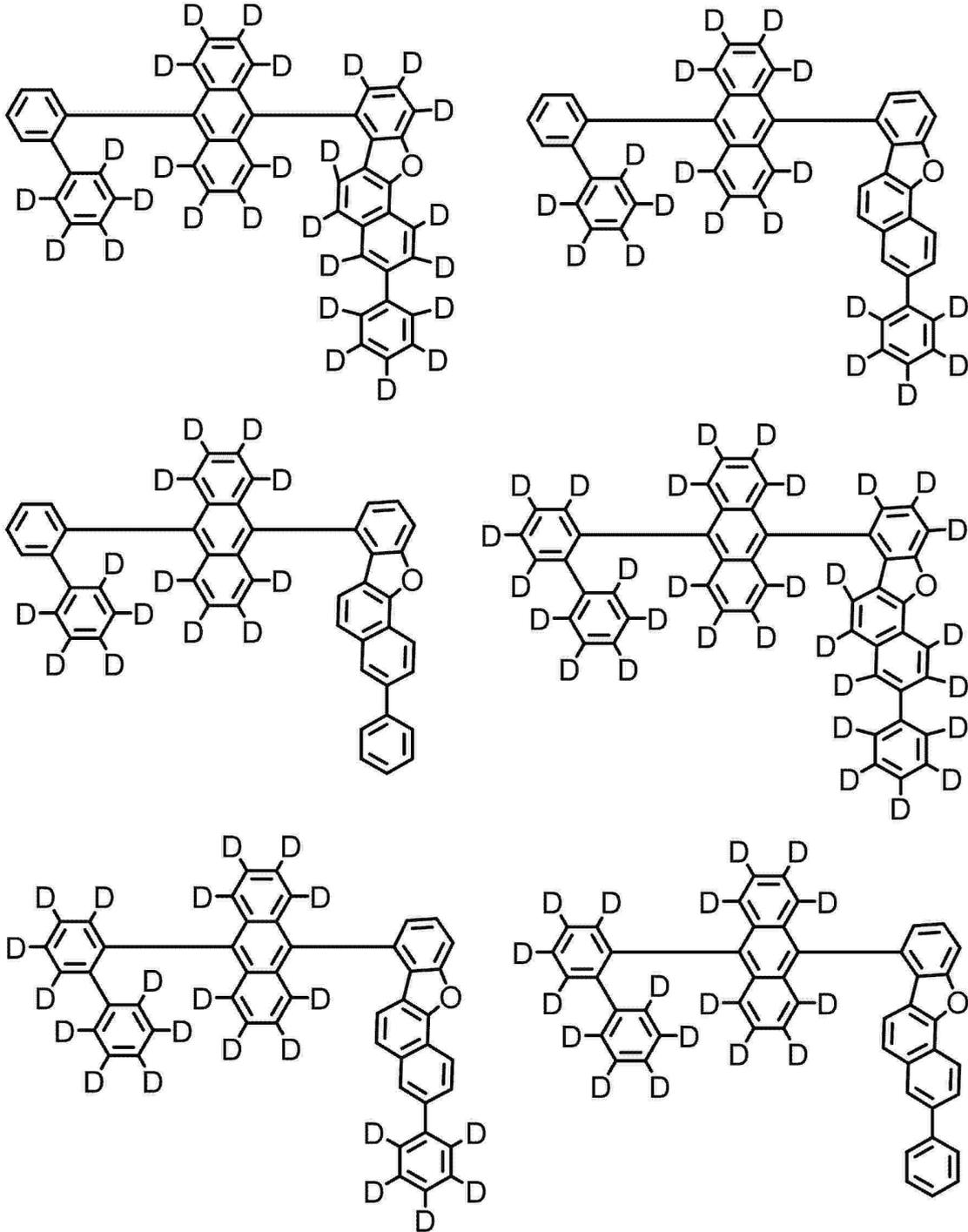
30

【 0 6 7 2】

40

50

【化 2 9 4】



10

20

30

40

【0 6 7 3】

(第一の発光性化合物及び第二の発光性化合物)

有機EL素子1Bにおいて、第一の発光層51は、第一の発光性化合物(好ましくは蛍光発光性の化合物)をさらに含有することも好ましい。

有機EL素子1Bにおいて、第二の発光層52は、第二の発光性化合物(好ましくは蛍光発光性の化合物)をさらに含有することも好ましい。

第一の発光層51が第一の発光性化合物を含有し、かつ第二の発光層52が第二の発光性化合物を含有する場合、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。

第一の発光性化合物及び第二の発光性化合物としては、有機EL素子1Aにて例示した

50

発光性化合物と同様の例が挙げられる。

【0674】

一実施形態においては、有機EL素子1Bは、第一の発光層51における第一の発光性化合物及び第二の発光層52における第二の発光性化合物の少なくともいずれかの化合物として、

前記一般式(4)で表される化合物、

前記一般式(5)で表される化合物、

前記一般式(6)で表される化合物、及び

前記一般式(63a)で表される化合物からなる群から選択される1以上の化合物を含有する。

10

【0675】

一実施形態においては、前記各式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

無置換の炭素数1~50のアルキル基、

無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

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

-O-(R_{904a})で表される基、

-S-(R_{905a})で表される基、

-N(R_{906a})(R_{907a})で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

R_{901a}~R_{907a}は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の炭素数1~50のアルキル基、

無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

R_{901a}が2以上存在する場合、2以上のR_{901a}は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{902a}が2以上存在する場合、2以上のR_{902a}は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{903a}が2以上存在する場合、2以上のR_{903a}は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

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

R_{906a}が2以上存在する場合、2以上のR_{906a}は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

20

30

40

【0676】

一実施形態においては、前記各式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

無置換の炭素数1~50のアルキル基、

無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

50

無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

【0677】

一実施形態においては、前記各式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

無置換の炭素数 1 ~ 18 のアルキル基、

無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5 ~ 18 の複素環基である。

【0678】

有機 EL 素子 1 B において、第一の発光層 5 1 が含有する第一の発光性化合物は、最大ピーク波長が 500 nm 以下の発光を示す化合物であることが好ましく、430 nm 以上 480 nm 以下の発光を示す化合物であることがより好ましい。

10

有機 EL 素子 1 B において、第一の発光層 5 1 が含有する第一の発光性化合物は、最大ピーク波長が 500 nm 以下の蛍光発光を示す化合物であることが好ましく、430 nm 以上 480 nm 以下の蛍光発光を示す化合物であることがより好ましい。

【0679】

有機 EL 素子 1 B において、第二の発光層 5 2 が含有する第二の発光性化合物は、最大ピーク波長が 500 nm 以下の発光を示す化合物であることが好ましく、430 nm 以上 480 nm 以下の発光を示す化合物であることがより好ましい。

有機 EL 素子 1 B において、第二の発光層 5 2 が含有する第二の発光性化合物は、最大ピーク波長が 500 nm 以下の蛍光発光を示す化合物であることが好ましく、430 nm 以上 480 nm 以下の蛍光発光を示す化合物であることがより好ましい。

20

【0680】

有機 EL 素子 1 B において、第一の発光層 5 1 が第一の化合物及び第一の発光性化合物を含む場合、第一の化合物は、ホスト材料であることが好ましく、第一の発光性化合物は、ドーパント材料であることが好ましい。

【0681】

有機 EL 素子 1 B において、第一の化合物の三重項エネルギー $T_1(H1)$ と第二の化合物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。

$$T_1(H1) > T_1(H2) \quad \dots (数 1)$$

30

【0682】

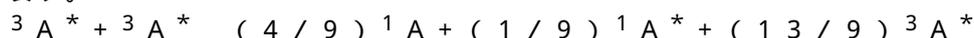
従来、有機 EL 素子の発光効率を向上させるための技術として、Triplet - Triplet - Annihilation (TTA と称する場合がある。) が知られている。TTA は、三重項励起子と三重項励起子とが衝突して、一重項励起子を生成するという機構 (メカニズム) である。なお、TTA メカニズムは、国際公開第 2010/134350 号に記載のように TTF メカニズムと称する場合もある。

【0683】

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。

40

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。



50

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

【0684】

本実施形態に係る有機 EL 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。

有機 EL 素子 1B 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 51 及び第二の発光層 52) を備え、第一の発光層 51 中の第一の化合物の三重項エネルギー $T_1 (H1)$ と、第二の発光層 52 中の第二の化合物の三重項エネルギー $T_1 (H2)$ とが、前記数式 (数 1) の関係を満たすように第一の発光層 51 及び第二の発光層 52 を備えることで、第一の発光層 51 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 52 へと移動し、また、第二の発光層 52 から第一の発光層 51 へ逆移動することを抑制できる。その結果、第二の発光層 52 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 EL 素子 1B が、三重項励起子を主に生成させる第一の発光層 51 と、第一の発光層 51 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 52 と、を異なる領域として備え、第二の発光層 52 中の第二の化合物として、第一の発光層中の第一の化合物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。

【0685】

(三重項エネルギー T_1)

三重項エネルギー T_1 の測定方法としては、下記の方法が挙げられる。

測定対象となる化合物を EPA (ジエチルエーテル: イソペンタン: エタノール = 5 : 5 : 2 (容積比)) 中に、 10^{-5} mol/L 以上 10^{-4} mol/L 以下となるように溶解して溶液を作製し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とする。この測定試料について、低温 (77 [K]) で燐光スペクトル (縦軸: 燐光発光強度、横軸: 波長とする。) を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $\text{edge} [\text{nm}]$ に基づいて、次の換算式 (F1) から算出されるエネルギー量を三重項エネルギー T_1 とする。

$$\text{換算式 (F1)} : T_1 [\text{eV}] = 1239.85 / \text{edge}$$

【0686】

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

10

20

30

40

50

をとる点において引いた接線を当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

燐光の測定には、(株)日立ハイテクノロジー製のF-4500形分光蛍光光度計本体を用いることができる。なお、測定装置はこの限りではなく、冷却装置、及び低温用容器と、励起光源と、受光装置とを組み合わせることにより、測定してもよい。

【0687】

有機EL素子1Bにおいて、第一の発光層51が第一の化合物及び第一の発光性化合物を含む場合、第一の化合物の一重項エネルギー $S_1(H1)$ と、第一の発光性化合物の一重項エネルギー $S_1(D3)$ とが、下記数式(数2)の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(H1) > S_1(D3) \dots (\text{数2})$$

10

【0688】

(一重項エネルギー S_1)

溶液を用いた一重項エネルギー S_1 の測定方法(溶液法と称する場合がある。)としては、下記の方法が挙げられる。

測定対象となる化合物の 10^{-5} mol/L 以上 10^{-4} mol/L 以下のトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温(300K)でこの試料の吸収スペクトル(縦軸:吸収強度、横軸:波長とする。)を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $edge [nm]$ を次に示す換算式(F2)に代入して一重項エネルギー S_1 を算出する。

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

20

吸収スペクトル測定装置としては、例えば、日立社製の分光光度計(装置名:U3310)が挙げられるが、これに限定されない。

【0689】

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。

30

【0690】

有機EL素子1Bにおいて、第二の発光層52が第二の化合物及び第二の発光性化合物を含む場合、第二の化合物は、ホスト材料であることが好ましく、第二の発光性化合物は、ドーパント材料であることが好ましい。

【0691】

有機EL素子1Bにおいて、第二の発光層52が第二の化合物及び第二の発光性化合物を含む場合、第二の化合物の一重項エネルギー $S_1(H2)$ と、第二の発光性化合物の一重項エネルギー $S_1(D4)$ とが、下記数式(数3)の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(H2) > S_1(D4) \dots (\text{数3})$$

【0692】

第一の発光層51及び第二の発光層52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。

40

また、第一の発光層51及び第二の発光層52は、重金属錯体及び燐光発光性の希土類金属錯体を含まないことが好ましい。ここで、重金属錯体としては、例えば、イリジウム錯体、オスmium錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

また、第一の発光層51及び第二の発光層52は、金属錯体を含まないことも好ましい。

【0693】

(発光層の膜厚)

有機EL素子1Bにおける第一の発光層51及び第二の発光層52の膜厚は、それぞれ5nm以上50nm以下であることが好ましく、7nm以上50nm以下であることがよ

50

り好ましく、10 nm以上50 nm以下であることがさらに好ましい。発光層の膜厚が5 nm以上であると、発光層を形成し易く、色度を調整し易い。発光層の膜厚が50 nm以下であると、駆動電圧の上昇を抑制し易い。

【0694】

(発光層における化合物の含有率)

第一の発光層51が第一の化合物及び第一の発光性化合物を含有する場合、第一の発光層51における第一の化合物及び第一の発光性化合物の含有率は、例えば、それぞれ、以下の範囲であることが好ましい。

第一の化合物の含有率は、80質量%以上99質量%以下であることが好ましく、90質量%以上99質量%以下であることがより好ましく、95質量%以上99質量%以下であることがさらに好ましい。

10

第一の発光性化合物の含有率は、1質量%以上10質量%以下であることが好ましく、1質量%以上7質量%以下であることがより好ましく、1質量%以上5質量%以下であることがさらに好ましい。

ただし、第一の発光層51における第一の化合物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。

【0695】

なお、本実施形態は、第一の発光層51に、第一の化合物及び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51は、第一の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。第一の発光層51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。

20

【0696】

第二の発光層52が第二の化合物及び第二の発光性化合物を含有する場合、第二の発光層52における第二の化合物及び第二の発光性化合物の含有率は、例えば、それぞれ、以下の範囲であることが好ましい。

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

第二の発光性化合物の含有率は、1質量%以上10質量%以下であることが好ましく、1質量%以上7質量%以下であることがより好ましく、1質量%以上5質量%以下であることがさらに好ましい。

30

ただし、第二の発光層52における第二の化合物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。

【0697】

なお、本実施形態は、第二の発光層52に、第二の化合物及び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52は、第二の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。第二の発光層52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。

40

【0698】

有機EL素子1Bにおいて、第一の発光層51と第二の発光層52とが、直接、接していることも好ましい。

【0699】

有機EL素子1Bにおいて、「第一の発光層51と第二の発光層52とが、直接、接している」場合、当該「第一の発光層51と第二の発光層52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51に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層52に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で宿主材料としての第一の化合物(以下、「第一の宿主材

50

料」という場合がある。)及びホスト材料としての第二の化合物(以下、「第二のホスト材料」という場合がある。)の両方が混在する領域が生じ、当該領域が第一の発光層51と第二の発光層52との界面に存在する態様。

(LS2)第一の発光層51及び第二の発光層52が発光性の化合物を含む場合に、第一の発光層51に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層52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51と第二の発光層52との界面に存在する態様。

(LS3)第一の発光層51及び第二の発光層52が発光性の化合物を含む場合に、第一の発光層51に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層52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51と第二の発光層52との界面に存在する態様。

10

【0700】

有機EL素子1Bが第三の発光層を含んでいる場合、第一の発光層51と第二の発光層52とが、直接、接しており、第二の発光層52と前記第三の発光層とが、直接、接していることが好ましい。

【0701】

有機EL素子1Bにおいて、「第二の発光層52と第三の発光層とが、直接、接している」場合、当該「第二の発光層52と第三の発光層とが、直接、接している」層構造は、例えば、以下の態様(LS4)、(LS5)及び(LS6)のいずれかの態様も含み得る。

20

(LS4)第二の発光層52に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で第二のホスト材料及び第三のホスト材料(第三の発光層が含有するホスト材料)の両方が混在する領域が生じ、当該領域が第二の発光層52と第三の発光層との界面に存在する態様。

(LS5)第二の発光層52及び第三の発光層が発光性の化合物を含む場合に、第二の発光層52に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で第二のホスト材料、第三のホスト材料及び発光性の化合物が混在する領域が生じ、当該領域が第二の発光層52と第三の発光層との界面に存在する態様。

(LS6)第二の発光層52及び第三の発光層が発光性の化合物を含む場合に、第二の発光層52に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で当該発光性の化合物からなる領域、第二のホスト材料からなる領域、又は第三のホスト材料からなる領域が生じ、当該領域が第二の発光層52と第三の発光層との界面に存在する態様。

30

【0702】

有機EL素子1Bは、介在層をさらに有することも好ましい。

有機EL素子1Bが介在層を有する場合、前記介在層は、第一の発光層51と第二の発光層52との間に配置されていることが好ましい。

【0703】

(介在層)

介在層は、ノンドーブ層であることが好ましい。介在層は、金属原子を含まないことが好ましい。

40

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ことが好ましい。

介在層材料としては、特に限定されないが、発光性化合物以外の材料であることが好ましい。

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。

【0704】

50

介在層材料は、第一の発光層 5 1 が含有する第一の化合物及び第二の発光層 5 2 が含有する第二の化合物の一方、又は両方の化合物であってもよい。

【0705】

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

介在層は、前記介在層材料を、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。

【0706】

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。

【0707】

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

【0708】

有機 EL 素子 1 A 及び有機 EL 素子 1 B に共通する各層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。

【0709】

(基板)

基板 2 は、有機 EL 素子の支持体として用いられる。基板 2 としては、例えば、ガラス、石英、及びプラスチック等を用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる(フレキシブル)基板のことであり、例えば、プラスチック基板等が挙げられる。プラスチック基板を形成する材料としては、例えば、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエーテルスルホン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニル、ポリイミド、及びポリエチレンナフタレート等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。

【0710】

(陽極)

基板上に形成される陽極 3 には、仕事関数の大きい(具体的には 4.0 eV 以上)金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム - 酸化スズ (ITO: Indium Tin Oxide)、珪素もしくは酸化珪素を含有した酸化インジウム - 酸化スズ、酸化インジウム - 酸化亜鉛、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。その他、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。

【0711】

これらの材料は、通常、スパッタリング法により成膜される。例えば、酸化インジウム - 酸化亜鉛は、酸化インジウムに対し 1 質量%以上 10 質量%以下の酸化亜鉛を加えたターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。また、例えば、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウムは、酸化インジウムに対し酸化タングステンを 0.5 質量%以上 5 質量%以下、酸化亜鉛を 0.1 質量%以上 1 質量%以下含有したターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。その他、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、スピコート法などにより作製

10

20

30

40

50

してもよい。

【0712】

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。

【0713】

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。

10

【0714】

（陰極）

陰極4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。

20

【0715】

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。

【0716】

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、スピコート法などを用いて成膜することができる。

30

【0717】

（正孔注入層）

正孔注入層61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。

【0718】

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

40

50

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。

【0719】

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、 dend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。

【0720】

(正孔輸送層)

正孔輸送層62は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層62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: BAFAP)、4, 4' - ビス [N - (9, 9 - ジメチルフルオレン - 2 - イル) - N - フェニルアミノ] ビフェニル (略称: DFLLDPBi)、4, 4', 4'' - トリス (N, N - ジフェニルアミノ) トリフェニルアミン (略称: TDATA)、4, 4', 4'' - トリス [N - (3 - メチルフェニル) - N - フェニルアミノ] トリフェニルアミン (略称: MTDATA)、4, 4' - ビス [N - (スピロ - 9, 9' - ビフルオレン - 2 - イル) - N - フェニルアミノ] ビフェニル (略称: BSPB) などの芳香族アミン化合物等を用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の正孔移動度を有する物質である。

【0721】

正孔輸送層62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。

【0722】

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。

【0723】

(電子輸送層)

電子輸送層71は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層71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: Almq₃)、ビス (10 - ヒドロキシベンゾ [h] キノリナト) ベリリウム (略称: BeBq₂)、BA1q、Znq、ZnPBO、ZnBTZ などの金属錯体等を用い

10

20

30

40

50

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 - (tert - ブチルフェニル) - 1, 3, 4 - オキサジアゾール - 2 - イル] ベンゼン (略称: OXD - 7)、3 - (4 - tert - ブチルフェニル) - 4 - フェニル - 5 - (4 - ビフェニリル) - 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 $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層で構成されていてもよいし、上記物質からなる層が二層以上積層されて構成されていてもよい。

【0724】

また、電子輸送層 71 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。

【0725】

(電子注入層)

電子注入層 72 は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層 72 には、リチウム (Li)、セシウム (Cs)、カルシウム (Ca)、フッ化リチウム (LiF)、フッ化セシウム (CsF)、フッ化カルシウム (CaF₂)、リチウム酸化物 (LiOx) 等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができる。その他、電子輸送性を有する物質にアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を含有させたもの、具体的には Alq 中にマグネシウム (Mg) を含有させたもの等を用いてもよい。なお、この場合には、陰極からの電子注入をより効率良く行うことができる。

【0726】

あるいは、電子注入層 72 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。

【0727】

(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。

【0728】

10

20

30

40

50

(膜厚)

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

【0729】

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

【0730】

〔第三実施形態〕

(電子機器)

本実施形態に係る電子機器は、上述の実施形態のいずれかの有機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。

【0731】

〔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。

【0732】

例えば、発光層は、1層又は2層に限られず、2を超える複数の発光層が積層されていてもよい。有機EL素子が2を超える複数の発光層を有する場合、例えば上述の実施形態で説明した発光層以外のその他の発光層は、蛍光発光型の発光層であってもよく、三重項励起状態から直接基底状態への電子遷移による発光を利用した燐光発光型の発光層であってもよい。

また、有機EL素子が複数の発光層を有する場合、これらの発光層が互いに隣接して設けられていてもよいし、介在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。

【0733】

また、例えば、発光層の陽極側、及び陰極側の少なくとも一方に障壁層を隣接させて設けてもよい。障壁層は、発光層に接して配置され、正孔、電子、及び励起子の少なくともいずれかを阻止することが好ましい。

例えば、発光層の陰極側で接して障壁層が配置された場合、当該障壁層は、電子を輸送し、かつ正孔が当該障壁層よりも陰極側の層(例えば、電子輸送層)に到達することを阻止する。有機EL素子が、電子輸送層を含む場合は、発光層と電子輸送層との間に当該障壁層を含むことが好ましい。

また、発光層の陽極側で接して障壁層が配置された場合、当該障壁層は、正孔を輸送し、かつ電子が当該障壁層よりも陽極側の層(例えば、正孔輸送層)に到達することを阻止する。有機EL素子が、正孔輸送層を含む場合は、発光層と正孔輸送層との間に当該障壁層を含むことが好ましい。

また、励起エネルギーが発光層からその周辺層に漏れ出さないように、障壁層を発光層に隣接させて設けてもよい。発光層で生成した励起子が、当該障壁層よりも電極側の層(例えば、電子輸送層及び正孔輸送層等)に移動することを阻止する。

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

【0734】

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。

【0735】

〔第四実施形態〕

(化合物および有機エレクトロルミネッセンス素子)

10

20

30

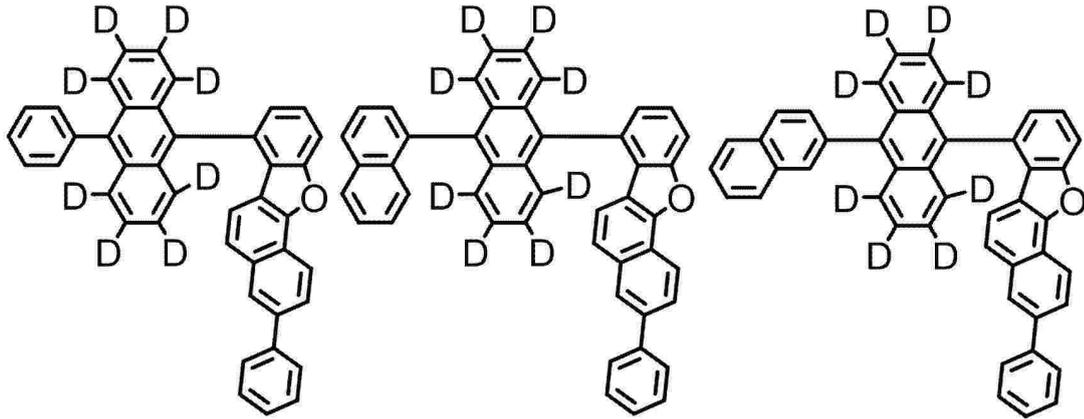
40

50

本実施形態に係る化合物は、下記構造式(2X-1)~(2X-63)である。

【0736】

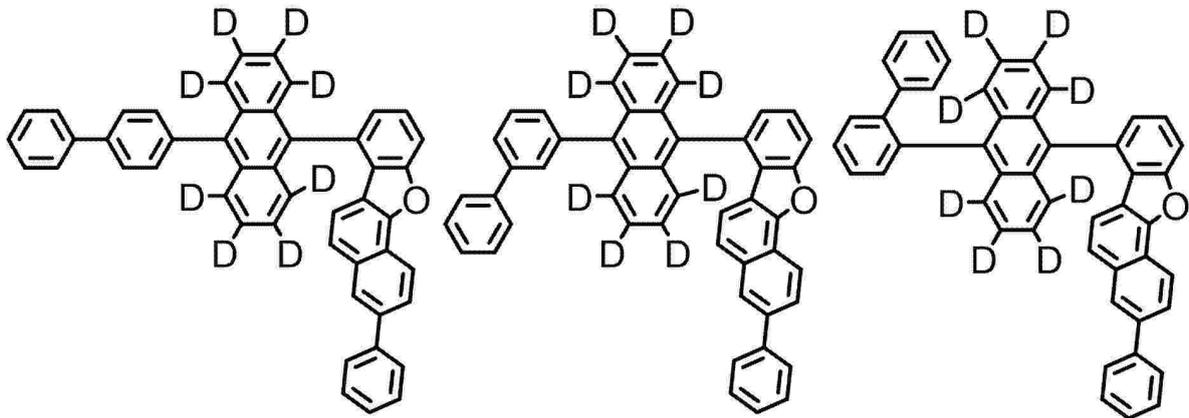
【化295】



(2X-1)

(2X-2)

(2X-3)



(2X-4)

(2X-5)

(2X-6)

【0737】

10

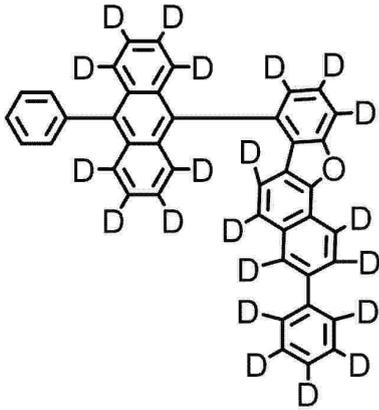
20

30

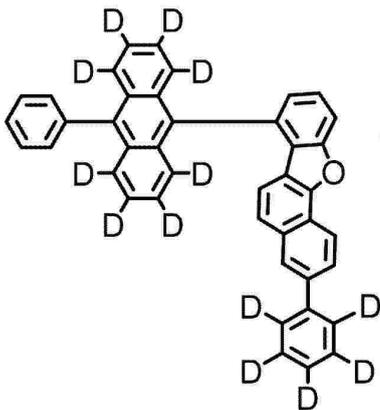
40

50

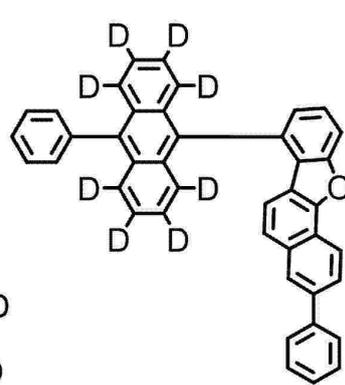
【化 2 9 6】



(2X-7)

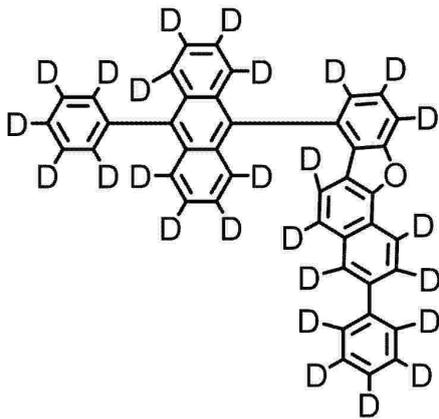


(2X-8)

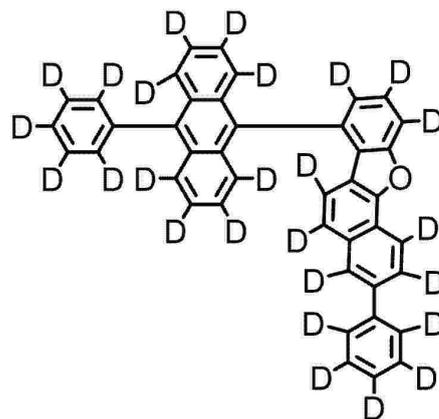


(2X-9)

10

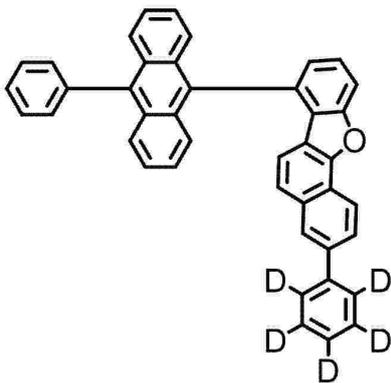


(2X-10)

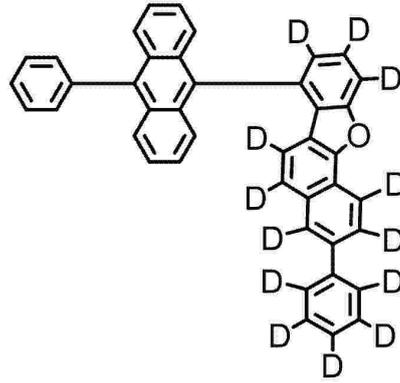


(2X-11)

20



(2X-12)



(2X-13)

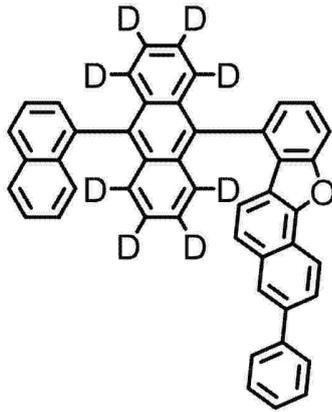
30

【 0 7 3 8】

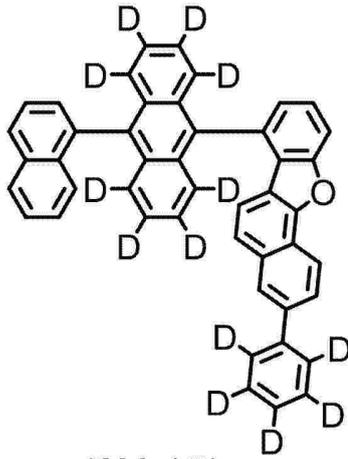
40

50

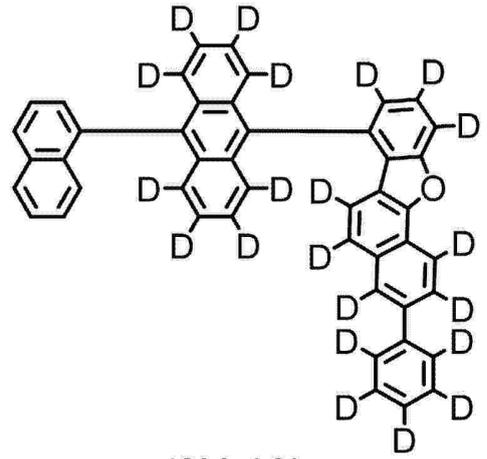
【化 2 9 7】



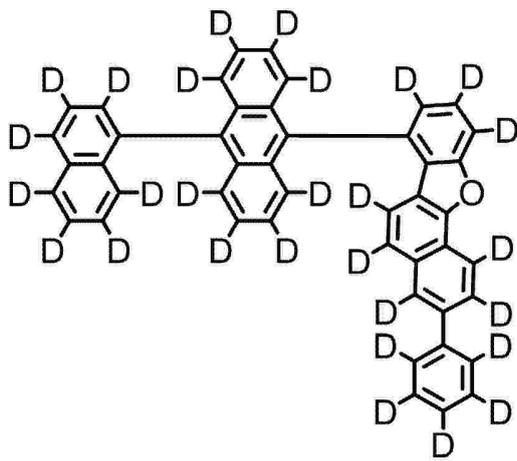
(2X-14)



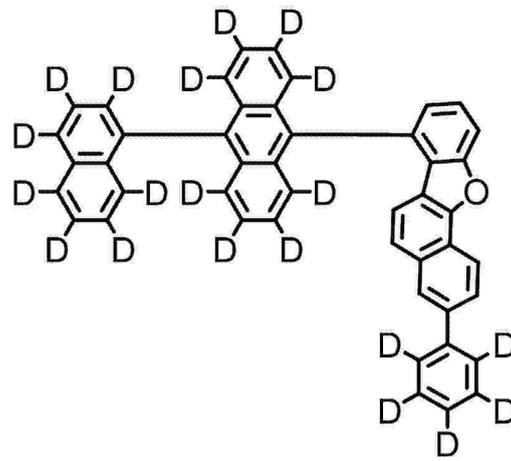
(2X-15)



(2X-16)



(2X-17)



(2X-18)

【 0 7 3 9 】

10

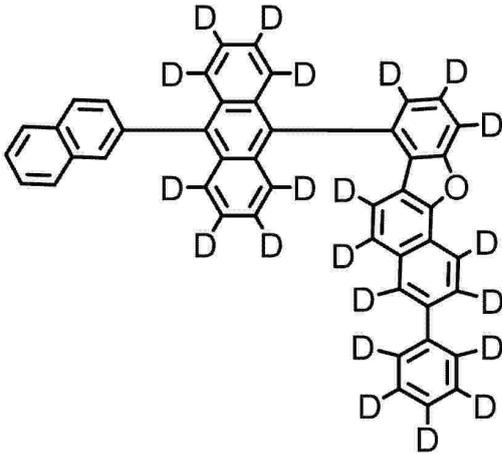
20

30

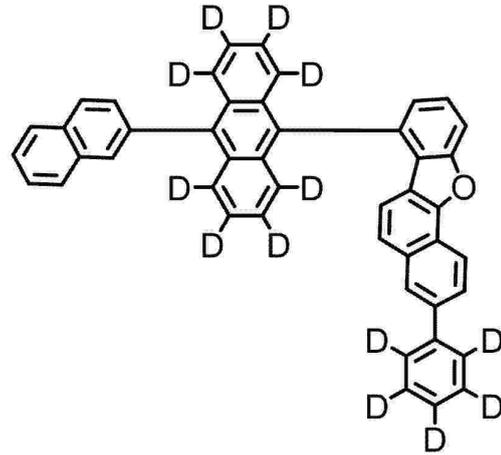
40

50

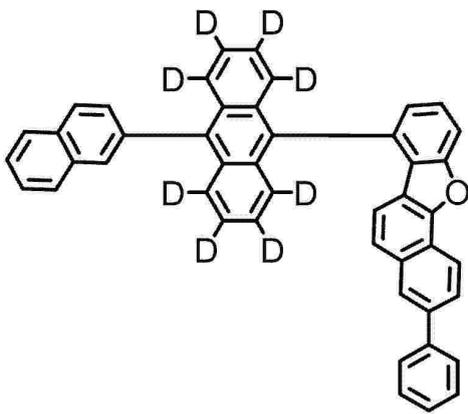
【化 2 9 8】



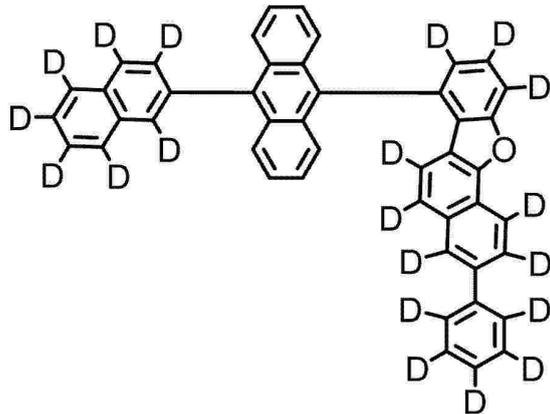
(2X-19)



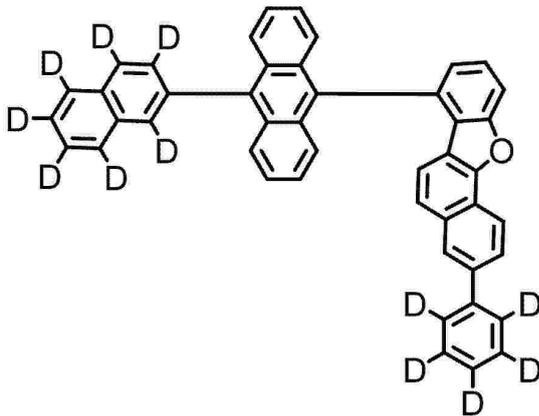
(2X-20)



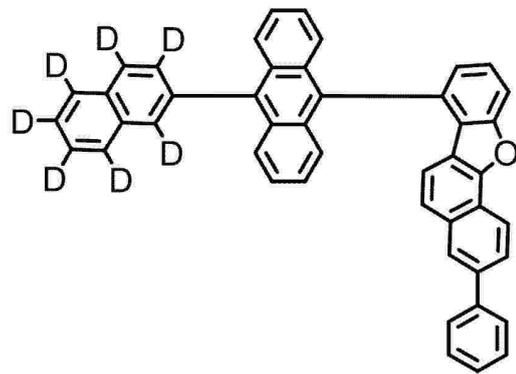
(2X-21)



(2X-22)



(2X-23)



(2X-24)

【 0 7 4 0】

10

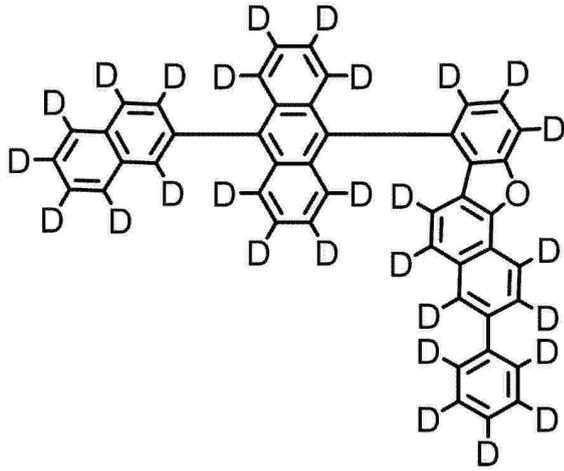
20

30

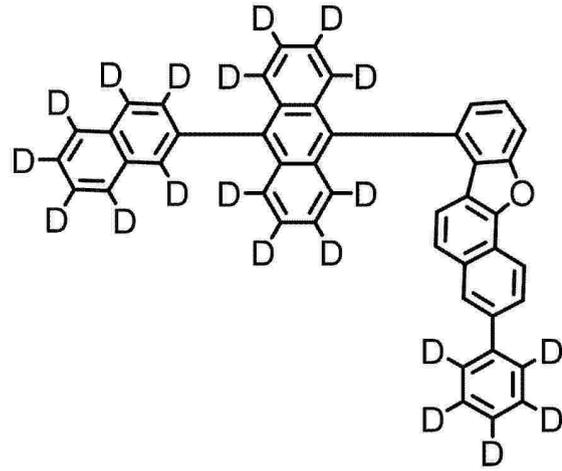
40

50

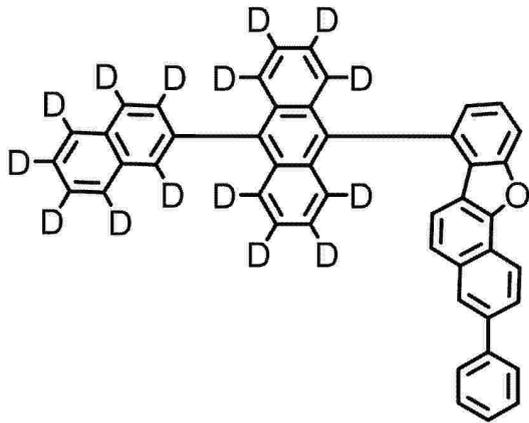
【化 2 9 9】



(2X-25)



(2X-26)



(2X-27)

【 0 7 4 1】

10

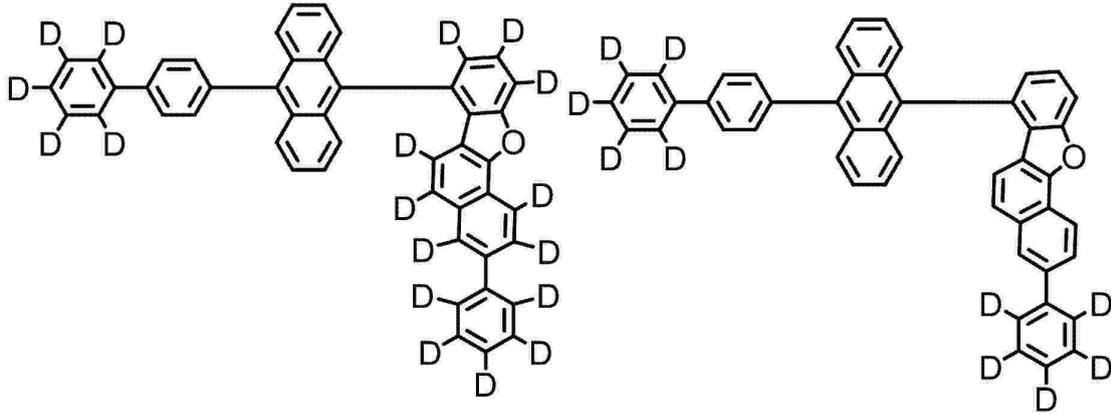
20

30

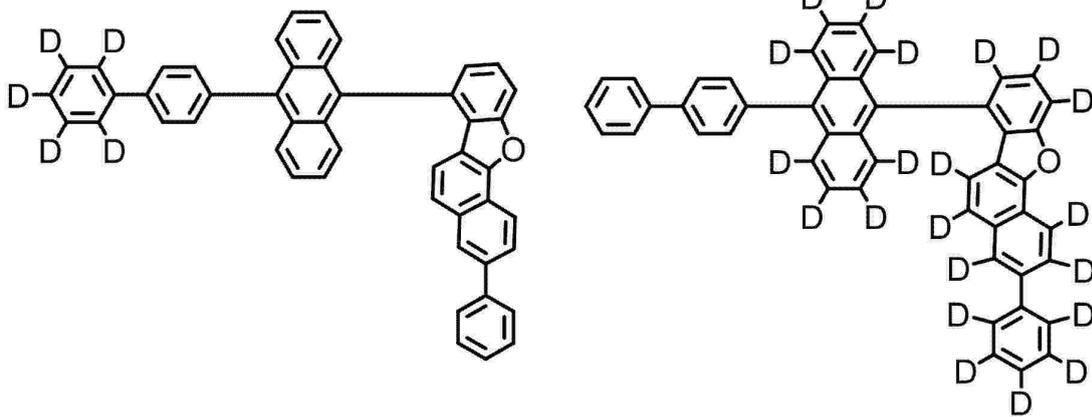
40

50

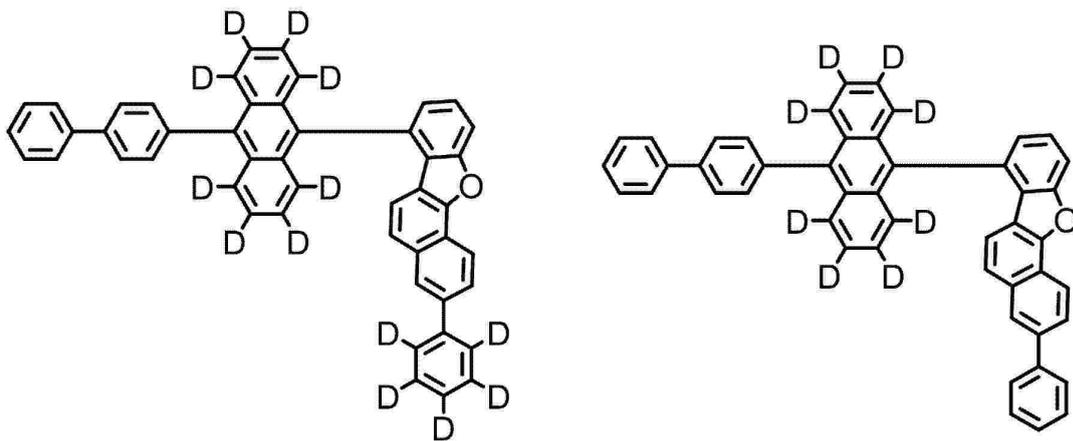
【化 3 0 0】



10



20



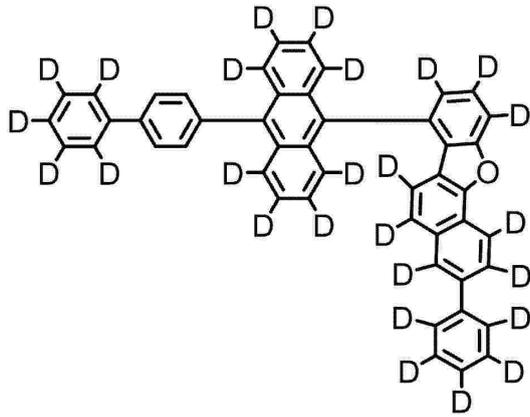
30

40

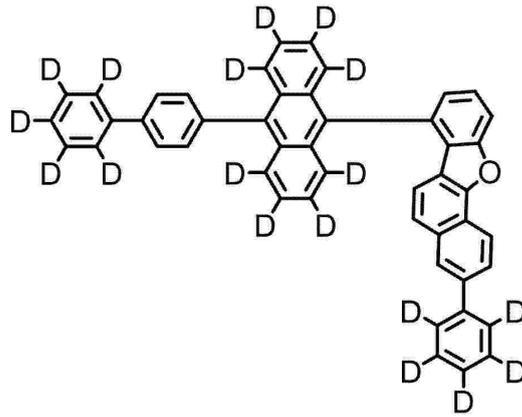
【 0 7 4 2】

50

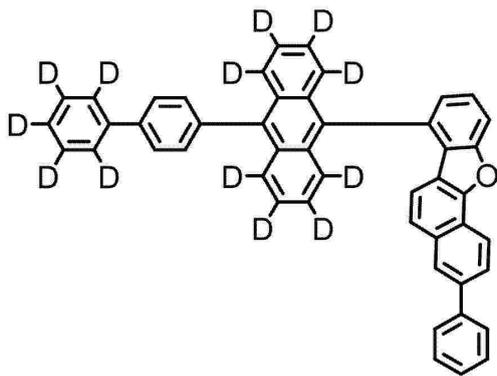
【化 3 0 1】



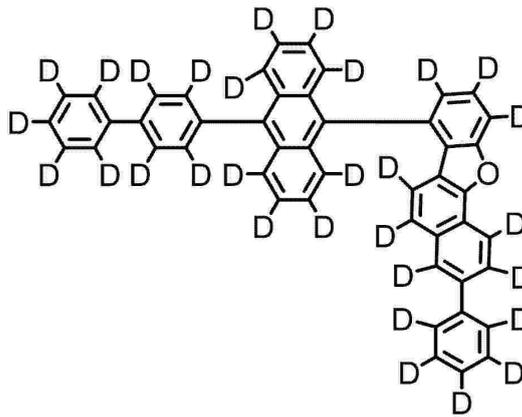
(2X-34)



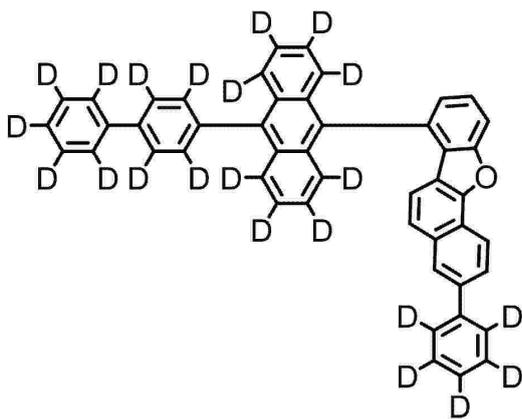
(2X-35)



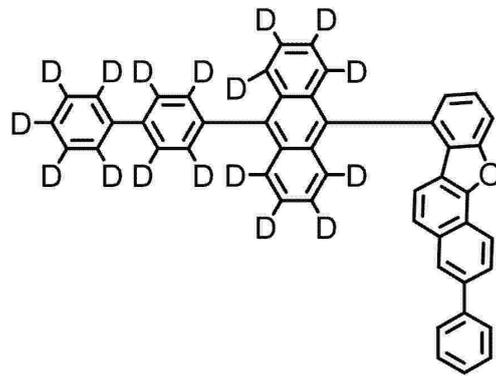
(2X-36)



(2X-37)



(2X-38)



(2X-39)

【 0 7 4 3】

10

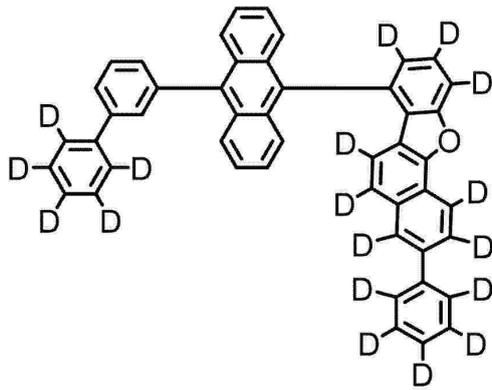
20

30

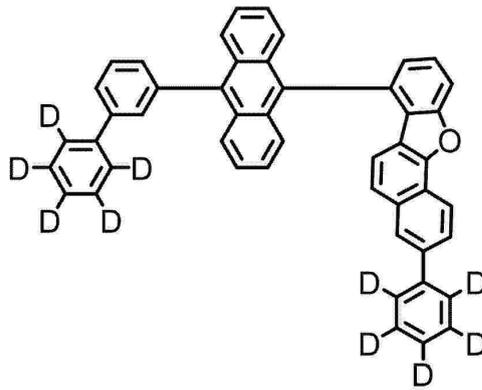
40

50

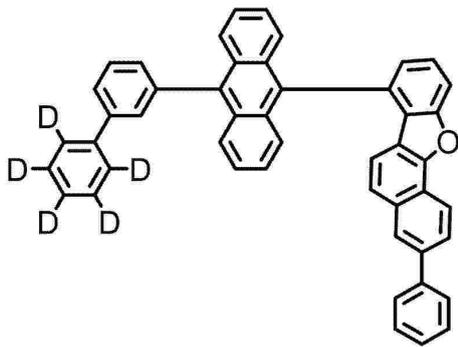
【化 3 0 2】



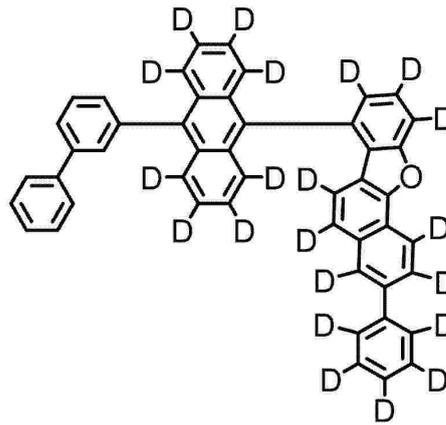
(2X-40)



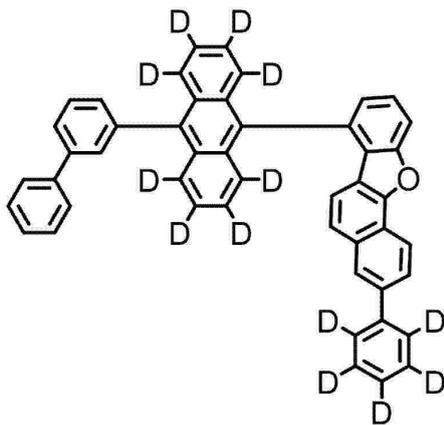
(2X-41)



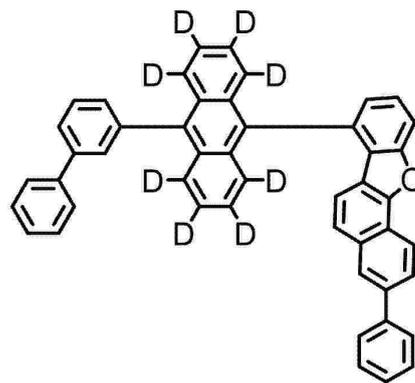
(2X-42)



(2X-43)



(2X-44)



(2X-45)

【 0 7 4 4 】

10

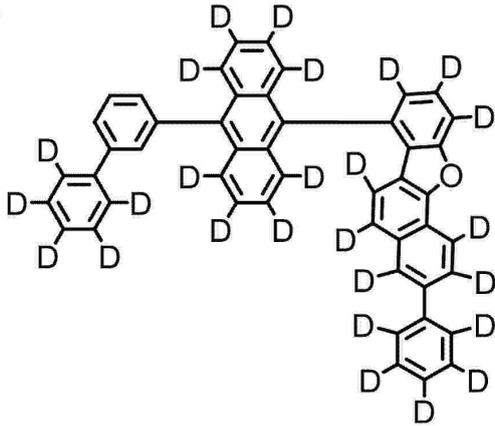
20

30

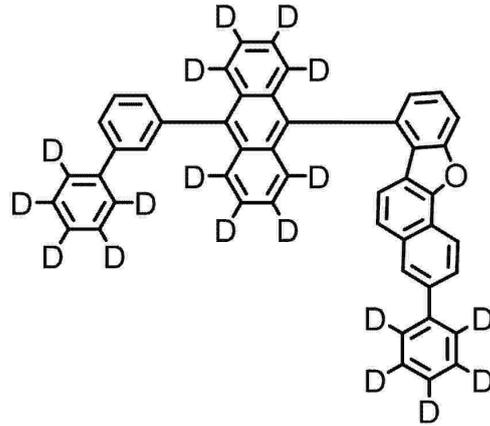
40

50

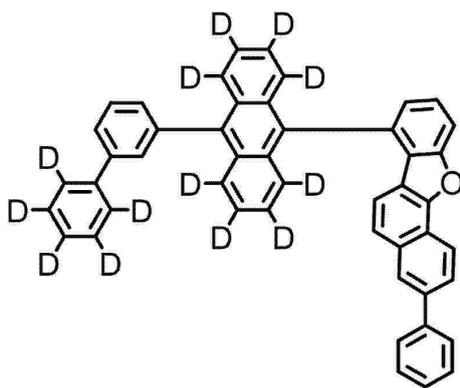
【化 3 0 3】



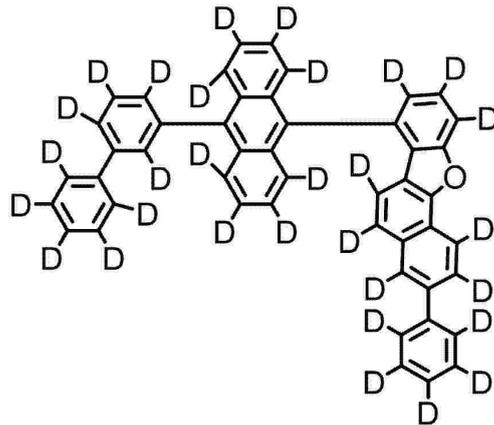
(2X-46)



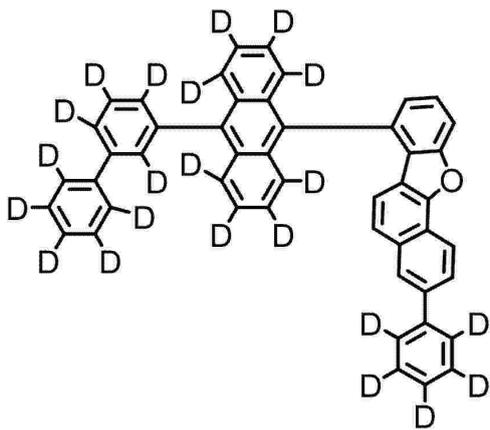
(2X-47)



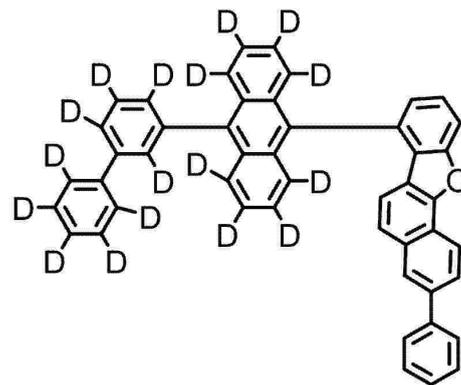
(2X-48)



(2X-49)



(2X-50)



(2X-51)

【 0 7 4 5】

10

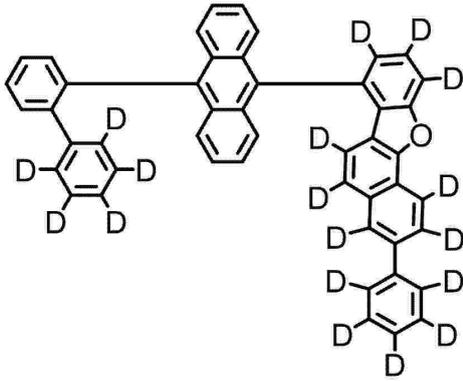
20

30

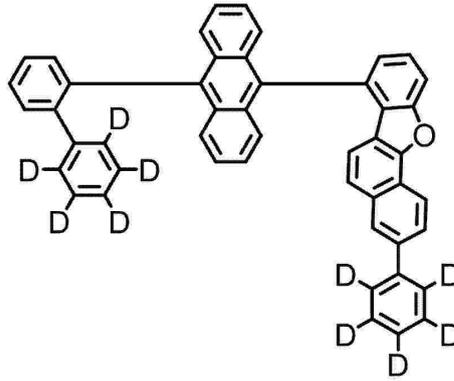
40

50

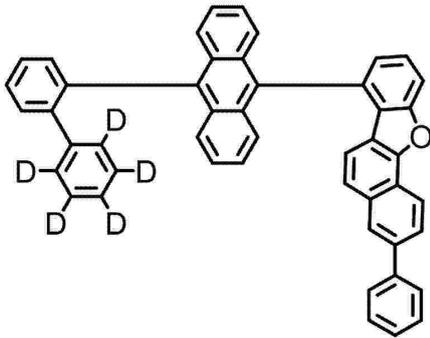
【化 3 0 4】



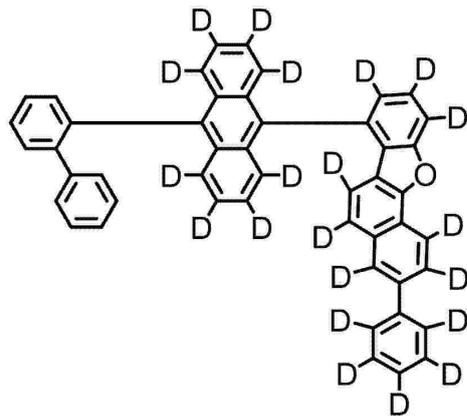
(2X-52)



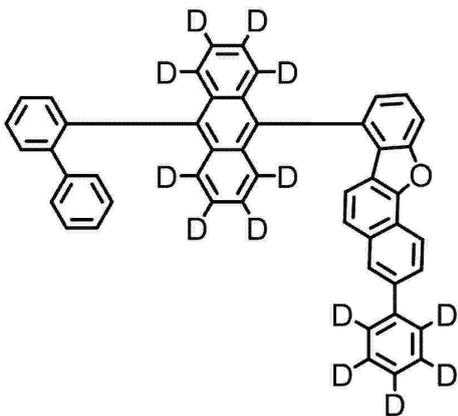
(2X-53)



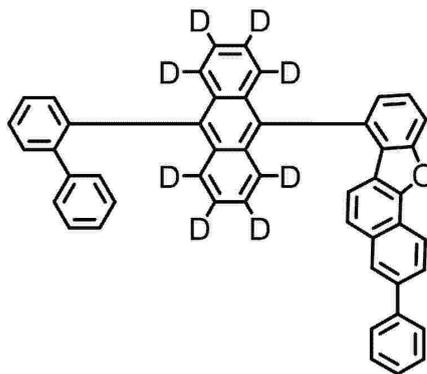
(2X-54)



(2X-55)



(2X-56)



(2X-57)

【 0 7 4 6】

10

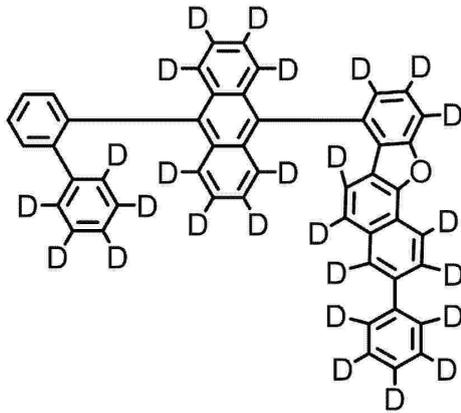
20

30

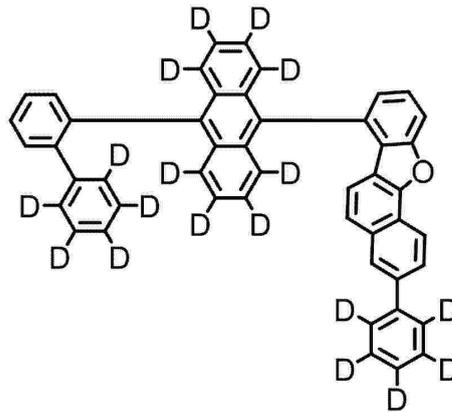
40

50

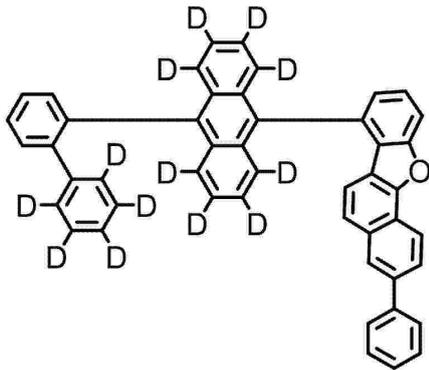
【化 3 0 5】



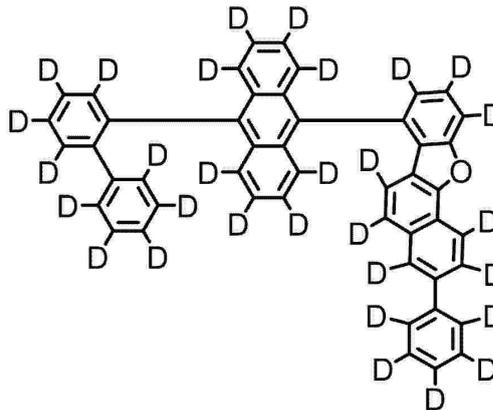
(2X-58)



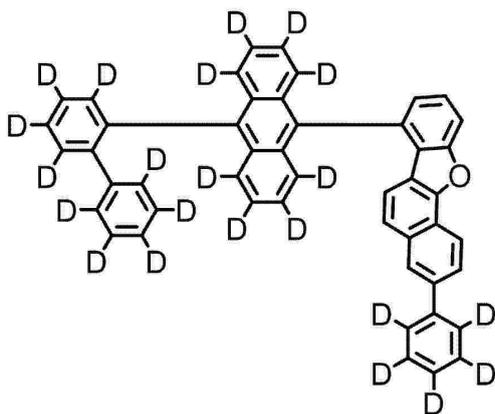
(2X-59)



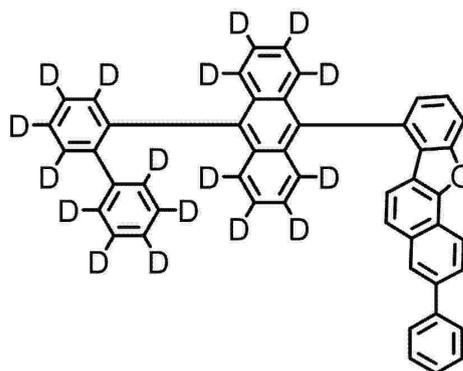
(2X-60)



(2X-61)



(2X-62)



(2X-63)

【 0 7 4 7】

本実施形態に係る有機EL素子について説明する。

本実施形態に係る有機EL素子は、第四実施形態に係る化合物のうち、少なくともいずれかに係る化合物を含有する。

本実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、陽極および陰極の間に配置された有機層と、を有する。この有機層は、有機化合物で構成される層を少なくとも一つ含む。あるいは、この有機層は、有機化合物で構成される複数の層が積層されてなる。有機層は、無機化合物をさらに含んでもよい。

【 0 7 4 8】

10

20

30

40

50

本実施形態に係る有機EL素子の一態様において、有機層の少なくとも一層が、第一実施形態に係る化合物を含有する。

【0749】

本実施形態の有機EL素子において、有機層のうち少なくとも一層は、発光領域を有することが好ましい。本実施形態の有機EL素子において、発光領域は、少なくとも1つの発光層を含有することが好ましい。一実施形態において、発光層は、前記構造式(2X-1)~(2X-63)で表される化合物のうち、少なくともいずれかを含有する。

【0750】

・本実施形態に係る化合物の製造方法

本実施形態に係る化合物は、後述する実施例に記載の合成方法に従って製造できる。また、本実施形態に係る化合物は、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によっても、製造できる。

10

【実施例】

【0751】

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。

【0752】

<化合物>

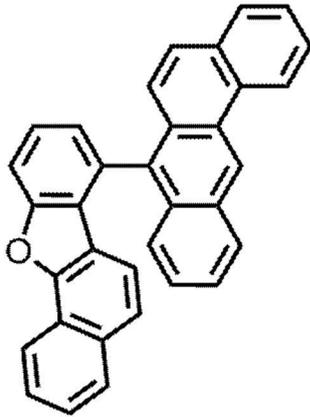
【0753】

実施例に係る有機EL素子の製造に用いた、一般式(1A)で表される化合物、及び一般式(1A-A)で表される化合物の構造を以下に示す。

20

【0754】

【化306】



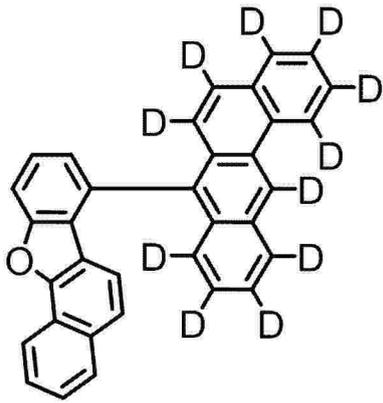
30

BH1-2

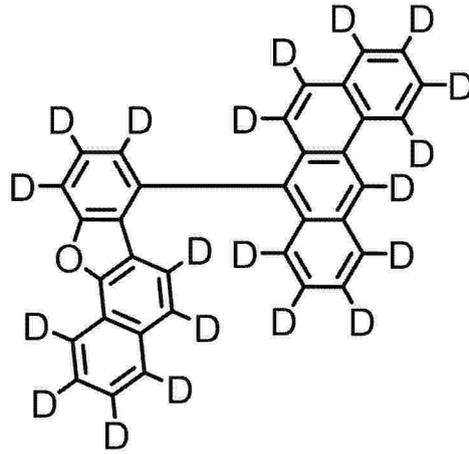
【0755】

40

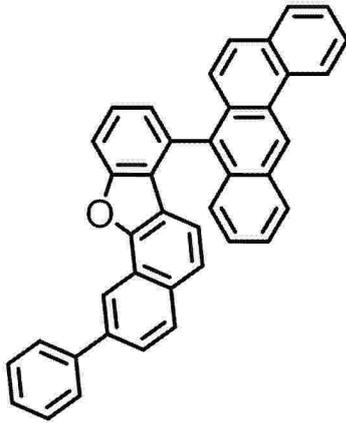
【化 3 0 7】



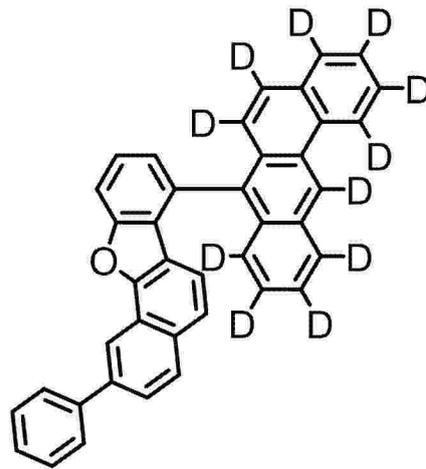
BH1-4



BH1-5



BH1-6



BH1-7

【 0 7 5 6】

10

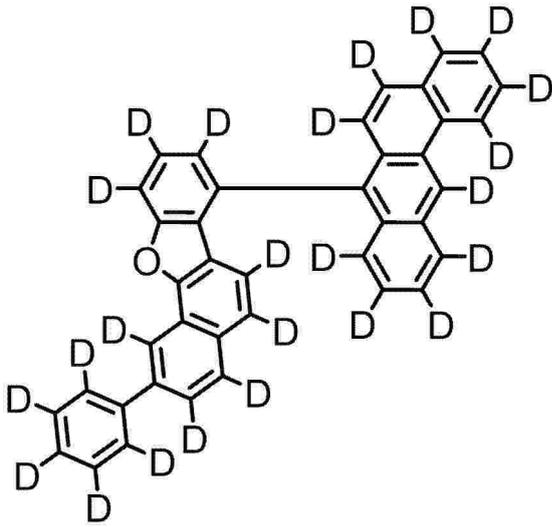
20

30

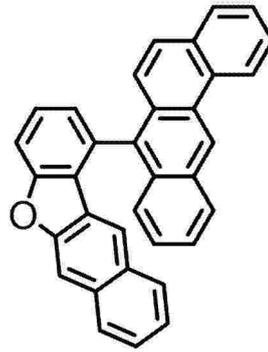
40

50

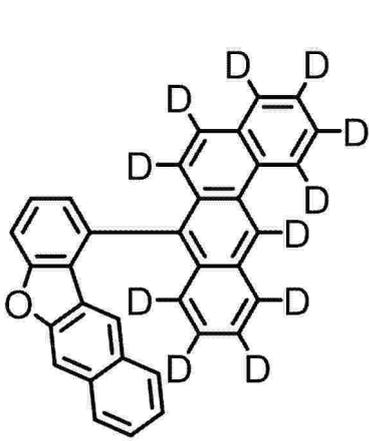
【化 3 0 8】



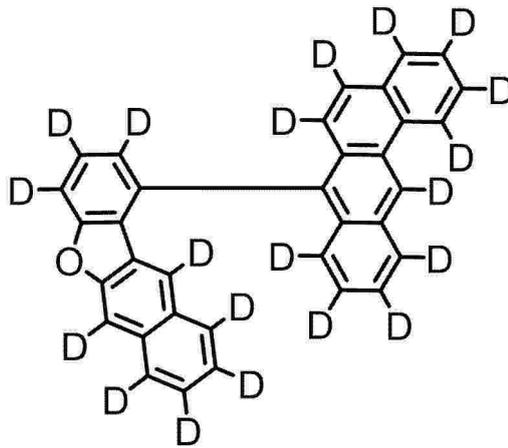
BH1-8



BH1-9



BH1-10



BH1-11

【 0 7 5 7】

10

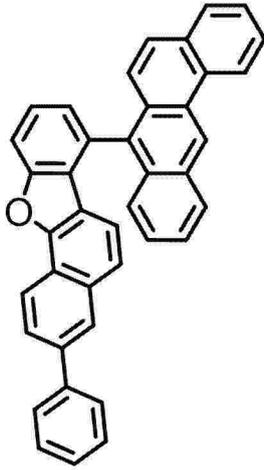
20

30

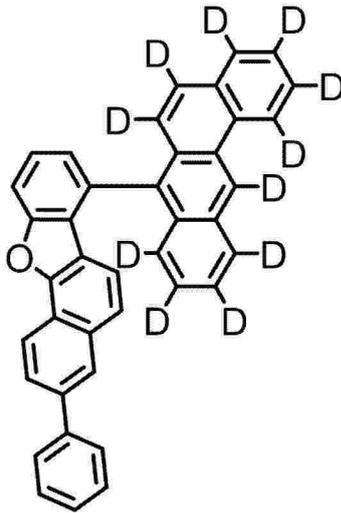
40

50

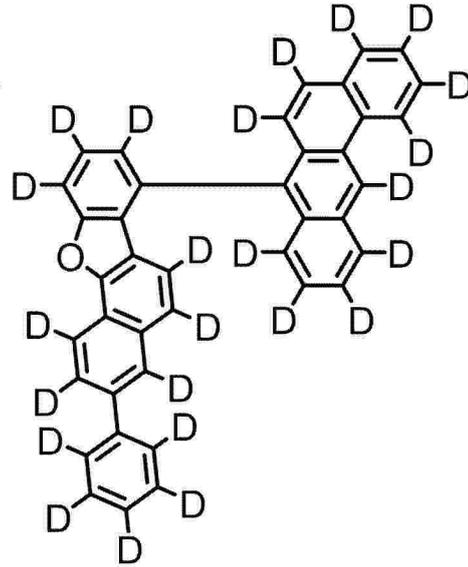
【化 3 0 9】



BH1-12



BH1-13



BH1-14

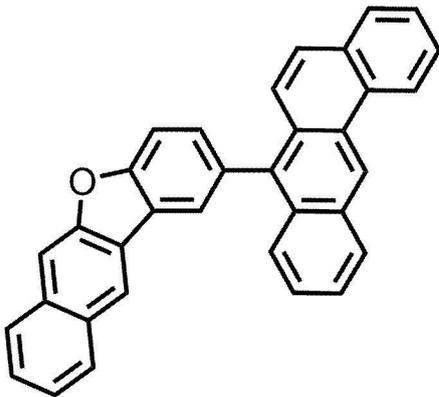
10

【 0 7 5 8 】

比較例に係る有機 E L 素子の製造に用いた比較化合物の構造を以下に示す。

【 0 7 5 9 】

【化 3 1 0】



BH1-Ref2

20

30

【 0 7 6 0 】

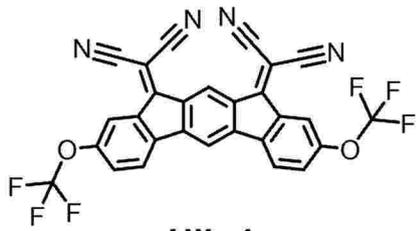
実施例及び比較例に係る有機 E L 素子に用いた、他の化合物の構造を以下に示す。

【 0 7 6 1 】

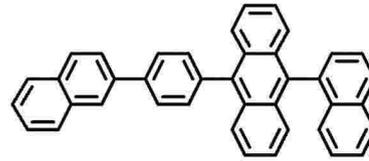
40

50

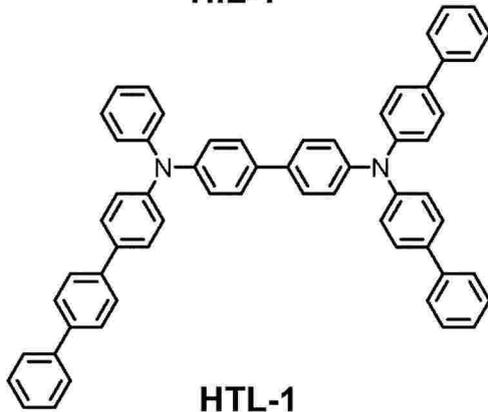
【化 3 1 1】



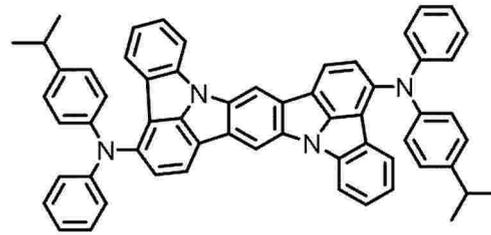
HIL-1



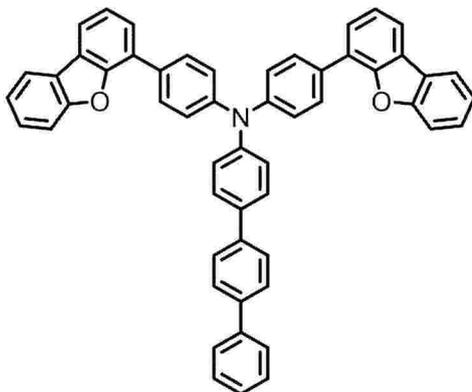
BH-2



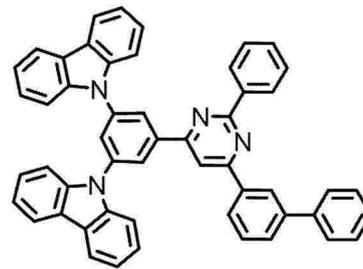
HTL-1



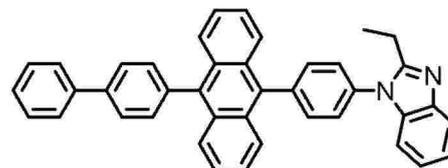
BD-1



EBL-1



aET-1



bET-1

【 0 7 6 2 】

10

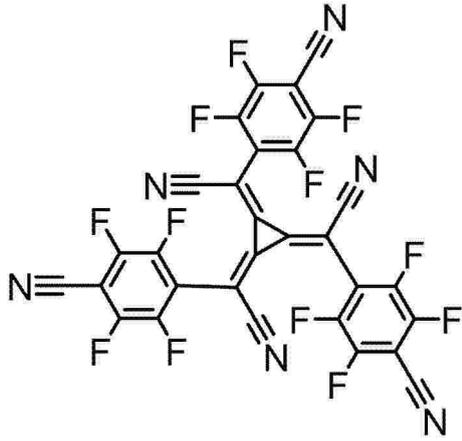
20

30

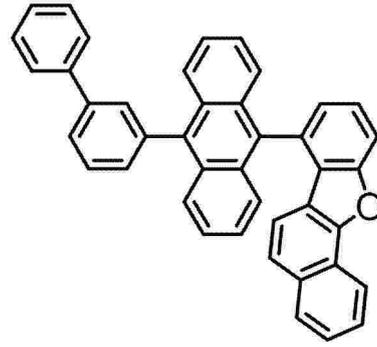
40

50

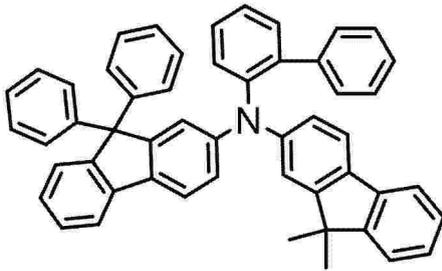
【化 3 1 2】



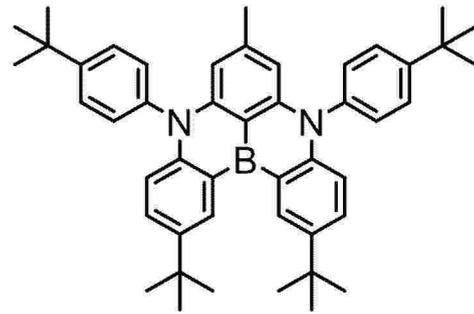
HIL-2



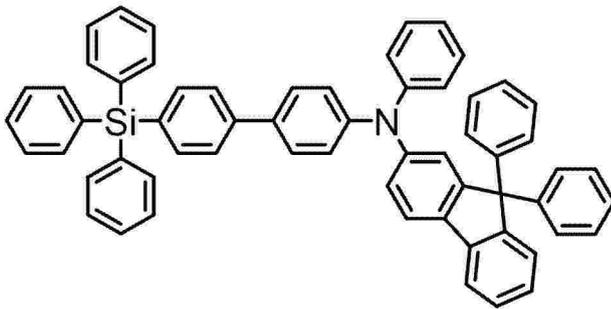
BH-2-4



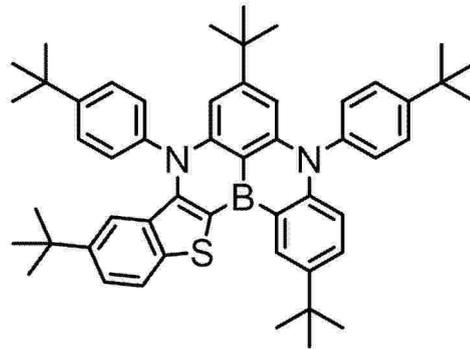
HTL-2



BD-2



EBL-2



BD-3

【 0 7 6 3 】

10

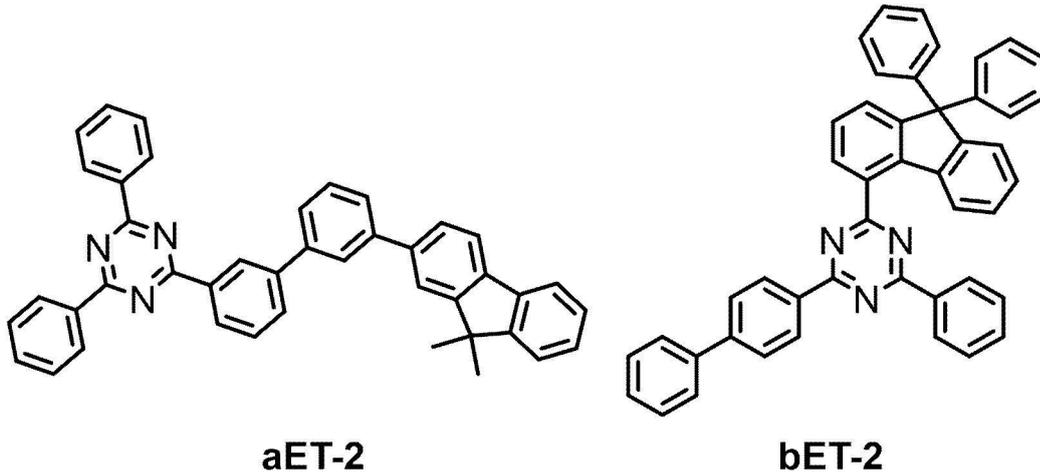
20

30

40

50

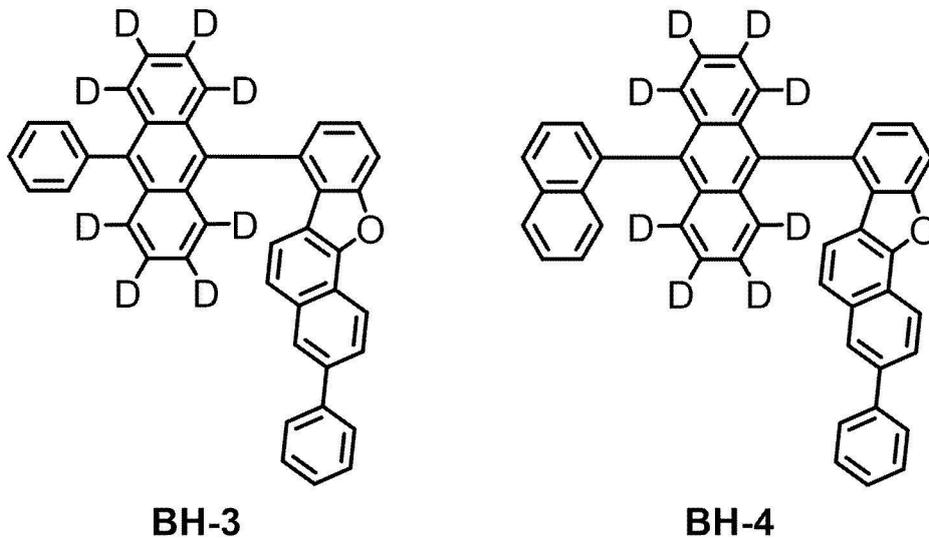
【化 3 1 3】



10

【 0 7 6 4】

【化 3 1 4】



20

30

【 0 7 6 5】

< 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。

【 0 7 6 6】

〔実施例 1 - 1〕

25 mm × 75 mm × 1.1 mm 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、130 nm とした。

40

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 5 nm の正孔注入層 (HI) を形成した。

正孔注入層の成膜に続けて化合物 HTL-1 を蒸着し、膜厚 80 nm の第一の正孔輸送層を成膜した。

第一の正孔輸送層の成膜に続けて化合物 EBL-1 を蒸着し、膜厚 10 nm の第二の正孔輸送層 (電子障壁層ともいう) を成膜した。

第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物 BH1-2 及び第一の発光性化合物

50

としての化合物 B D - 1 を、化合物 B H 1 - 2 の割合が 9 8 質量% 及び化合物 B D - 1 の割合が 2 質量% となるように共蒸着し、膜厚 1 2 . 5 n m の第一の発光層を成膜した。

第一の発光層上に第二の化合物としての化合物 B H - 2 及び第二の発光性化合物としての化合物 B D - 1 を、化合物 B H - 2 の割合が 9 8 質量% 及び化合物 B D - 1 の割合が 2 質量% となるように共蒸着し、膜厚 1 2 . 5 n m の第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物 a E T - 1 を蒸着し、膜厚 1 0 n m の第一の電子輸送層（正孔障壁層ともいう）を形成した。

第一の電子輸送層上に化合物 b E T - 1 を蒸着し、膜厚 1 5 n m の第二の電子輸送層を形成した。

第二の電子輸送層上に L i F を蒸着して膜厚 1 n m の電子注入層を形成した。

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

実施例 1 - 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)/BH1-2: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、括弧内の数字は、膜厚（単位：n m）を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（9 8 % : 2 %）は、第一の発光層又は第二の発光層における化合物 B H 1 - 2 又は化合物 B H - 2 及び化合物 B D - 1 の割合（質量%）を示す。

【 0 7 6 7 】

〔実施例 1 - 2 ~ 実施例 1 - 1 2 〕

実施例 1 - 2 ~ 実施例 1 - 1 2 の有機 E L 素子は、それぞれ、第一の発光層の第一の化合物を表 1 に記載の化合物に変更したこと以外、実施例 1 - 1 と同様にして作製した。

【 0 7 6 8 】

〔比較例 1 - 1 〕

比較例 1 - 1 の有機 E L 素子は、第一の発光層の第一の化合物を表 1 に記載の化合物に変更したこと以外、実施例 1 - 1 と同様にして作製した。

【 0 7 6 9 】

〔実施例 2 - 1 〕

2 5 m m × 7 5 m m × 1 . 1 m m 厚の I T O (I n d i u m T i n O x i d e) 透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を 5 分間行なった後、U V オゾン洗浄を 3 0 分間行なった。I T O 透明電極の膜厚は、1 3 0 n m とした。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして、化合物 H T L - 2 及び化合物 H I L - 2 を、化合物 H T L - 2 の割合が 9 0 質量% 及び化合物 H I L - 2 の割合が 1 0 質量% になるように共蒸着し、膜厚 1 0 n m の正孔注入層（H I）を形成した。

正孔注入層の成膜に続けて化合物 H T L - 2 を蒸着し、膜厚 8 5 n m の第一の正孔輸送層を成膜した。

第一の正孔輸送層の成膜に続けて化合物 E B L - 2 を蒸着し、膜厚 5 n m の第二の正孔輸送層（電子障壁層ともいう）を成膜した。

第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物 B H 1 - 2 及び第一の発光性化合物としての化合物 B D - 2 を、化合物 B H 1 - 2 の割合が 9 8 質量% 及び化合物 B D - 2 の割合が 2 質量% となるように共蒸着し、膜厚 1 0 n m の第一の発光層を成膜した。

第一の発光層上に第二の化合物としての化合物 B H - 2 - 4 及び第二の発光性化合物としての化合物 B D - 2 を、化合物 B H - 2 - 4 の割合が 9 8 質量% 及び化合物 B D - 2 の割合が 2 質量% となるように共蒸着し、膜厚 1 0 n m の第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物 a E T - 2 を蒸着し、膜厚 5 n m の第一の電子輸送層（正孔障壁層ともいう）を形成した。

第一の電子輸送層上に化合物 b E T - 2 及び化合物 L i q を、化合物 b E T - 2 の割合

10

20

30

40

50

が50質量%及び化合物Li_qの割合が50質量%となるように共蒸着し、膜厚25nmの電子輸送層を形成した。Li_qは、(8-キノリノラト)リチウム((8-Quinololato)lithium)の略称である。

第二の電子輸送層上にLi_qを蒸着して膜厚1nmの電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属Alを蒸着して膜厚80nmの陰極を形成した。

実施例2-1の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HTL-2:HIL-2(10,90%:10%)/HTL-2(85)/EBL-2(5)/BH1-2:BD-2(10,98%:2%)/BH-2-4:BD-2(10,98%:2%)/aET-2(5)/bET-2:Liq(25,50%:50%)/Liq(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚(単位:nm)を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字(90%:10%)は、化合物HTL-2及び化合物HIL-2の割合(質量%)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化合物BH1-2又は化合物BH-2-4及び化合物BD-2の割合(質量%)を示す。

【0770】

[実施例2-2~実施例2-4]

実施例2-2~実施例2-4の有機EL素子は、それぞれ、第一の発光層の第一の化合物を表2に記載の化合物に変更したこと以外、実施例2-1と同様にして作製した。

【0771】

[比較例2-1]

比較例2-1の有機EL素子は、第一の発光層の第一の化合物を表2に記載の化合物に変更したこと以外、実施例2-1と同様にして作製した。

【0772】

[実施例3-1]

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HTL-2及び化合物HIL-2を、化合物HTL-2の割合が90質量%及び化合物HIL-2の割合が10質量%になるように共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層(HI)を形成した。

正孔注入層の成膜に続けて化合物HTL-2を蒸着し、膜厚85nmの第一の正孔輸送層を成膜した。

第一の正孔輸送層の成膜に続けて化合物EBL-2を蒸着し、膜厚5nmの第二の正孔輸送層(電子障壁層ともいう)を成膜した。

第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物BH1-2及び第一の発光性化合物としての化合物BD-3を、化合物BH1-2の割合が98質量%及び化合物BD-3の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚10nmの第一の発光層を成膜した。

第一の発光層上に第二の化合物としての化合物BH-2-4及び第二の発光性化合物としての化合物BD-3を、化合物BH-2-4の割合が98質量%及び化合物BD-3の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚10nmの第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物aET-2を蒸着し、膜厚5nmの第一の電子輸送層(正孔障壁層ともいう)を形成した。

第一の電子輸送層上に化合物bET-2及び化合物Li_qを、化合物bET-2の割合が50質量%及び化合物Li_qの割合が50質量%となるように共蒸着し、膜厚25nmの電子輸送層を形成した。Li_qは、(8-キノリノラト)リチウム((8-Quinololato)lithium)の略称である。

第二の電子輸送層上にLi_qを蒸着して膜厚1nmの電子注入層を形成した。

10

20

30

40

50

電子注入層上に金属Alを蒸着して膜厚80nmの陰極を形成した。

実施例3-1の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HTL-2:HIL-2(10,90%:10%)/HTL-2(85)/EBL-2(5)/BH1-2:BD-3(10,98%:2%)/BH-2-4:BD-3(10,98%:2%)/aET-2(5)/bET-2:Liq(25,50%:50%)/Liq(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚(単位: nm)を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字(90%:10%)は、化合物HTL-2及び化合物HIL-2の割合(質量%)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化合物BH1-2又は化合物BH-2-4及び化合物BD-3の割合(質量%)を示す。

【0773】

[実施例3-2~実施例3-6]

実施例3-2~実施例3-6の有機EL素子は、それぞれ、第一の発光層の第一の化合物を表3に記載の化合物に変更したこと以外、実施例3-1と同様にして作製した。

【0774】

[比較例3-1]

比較例3-1の有機EL素子は、第一の発光層の第一の化合物を表3に記載の化合物に変更したこと以外、実施例3-1と同様にして作製した。

【0775】

[実施例4-1]

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HTL-2及び化合物HIL-2を、化合物HTL-2の割合が90質量%及び化合物HIL-2の割合が10質量%になるように共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層(HI)を形成した。

正孔注入層の成膜に続けて化合物HTL-2を蒸着し、膜厚85nmの第一の正孔輸送層を成膜した。

第一の正孔輸送層の成膜に続けて化合物EBL-2を蒸着し、膜厚5nmの第二の正孔輸送層(電子障壁層ともいう)を成膜した。

第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物BH1-2及び第一の発光性化合物としての化合物BD-2を、化合物BH1-2の割合が98質量%及び化合物BD-2の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚10nmの第一の発光層を成膜した。

第一の発光層上に第二の化合物としての化合物BH-3及び第二の発光性化合物としての化合物BD-2を、化合物BH-3の割合が98質量%及び化合物BD-2の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚10nmの第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物aET-2を蒸着し、膜厚5nmの第一の電子輸送層(正孔障壁層ともいう)を形成した。

第一の電子輸送層上に化合物bET-2及び化合物Liqを、化合物bET-2の割合が50質量%及び化合物Liqの割合が50質量%となるように共蒸着し、膜厚25nmの電子輸送層を形成した。

第二の電子輸送層上にLiqを蒸着して膜厚1nmの電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属Alを蒸着して膜厚80nmの陰極を形成した。

実施例4-1の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HTL-2:HIL-2(10,90%:10%)/HTL-2(85)/EBL-2(5)/BH1-2:BD-2(10,98%:2%)/BH-3:BD-2(10,98%:2%)/aET-2(5)/bET-2:Liq(25,50%:50%)/Liq(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚(単位: nm)を示す。

10

20

30

40

50

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（90%：10%）は、化合物H I L - 2及び化合物H I L - 2の割合（質量%）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化合物B H 1 - 2又は化合物B H - 3及び化合物B D - 2の割合（質量%）を示す。

【0776】

〔実施例4 - 2〕

実施例4 - 2の有機E L素子は、第二の発光層の第二の化合物を表4に記載の化合物に変更したこと以外、実施例4 - 1と同様にして作製した。

【0777】

参考のために、表4に、実施例2 - 1について再掲した。

参考のために、表4に、比較例2 - 1について再掲した。

【0778】

<有機E L素子の評価>

実施例1 - 1～実施例1 - 12、実施例2 - 1～実施例2 - 4、及び実施例3 - 1～実施例3 - 6、及び実施例4 - 1～実施例4 - 2、並びに比較例1 - 1、比較例2 - 1、及び比較例3 - 1で作製した有機E L素子について、以下の評価を行った。評価結果を表1～表4に示す。

【0779】

・寿命（L T 9 5）

得られた有機E L素子に、電流密度が 50 mA/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（L T 9 5（単位：時間））を測定した。輝度は、分光放射輝度計C S - 2000（コニカミノルタ株式会社製）を用いて測定した。

【0780】

表1には、各例（実施例1 - 1～実施例1 - 12、及び比較例1 - 1）のL T 9 5の測定値、並びに下記数式（数1 X）に基づいて算出した「L T 9 5（相対値）」（単位：%）を示す。

$$\text{L T 9 5（相対値）} = (\text{各例のL T 9 5} / \text{比較例1 - 1のL T 9 5}) \times 100 \dots (\text{数1 X})$$

【0781】

表2には、各例（実施例2 - 1～実施例2 - 4、及び比較例2 - 1）のL T 9 5の測定値、並びに下記数式（数2 X）に基づいて算出した「L T 9 5（相対値）」（単位：%）を示す。

$$\text{L T 9 5（相対値）} = (\text{各例のL T 9 5} / \text{比較例2 - 1のL T 9 5}) \times 100 \dots (\text{数2 X})$$

【0782】

表3には、各例（実施例3 - 1～実施例3 - 6、及び比較例3 - 1）のL T 9 5の測定値、並びに下記数式（数3 X）に基づいて算出した「L T 9 5（相対値）」（単位：%）を示す。

$$\text{L T 9 5（相対値）} = (\text{各例のL T 9 5} / \text{比較例3 - 1のL T 9 5}) \times 100 \dots (\text{数3 X})$$

【0783】

表4には、各例（実施例4 - 1～実施例4 - 2、及び比較例2 - 1）のL T 9 5の測定値、並びに下記数式（数4 X）に基づいて算出した「L T 9 5（相対値）」（単位：%）を示す。

$$\text{L T 9 5（相対値）} = (\text{各例のL T 9 5} / \text{比較例2 - 1のL T 9 5}) \times 100 \dots (\text{数4 X})$$

【0784】

・C I E 1 9 3 1 色度

有機E L素子の電流密度が 10.00 mA/cm^2 となるように素子に電圧を印加した

10

20

30

40

50

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。

【0785】

【表1】

	第一の発光層							第二の発光層					素子評価		
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性化合物	膜厚 [nm]	CIE x	CIE y	LT95 (相対値) [%]
	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 1-1	BH1-2	3.08	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	140
実施例 1-2	BH1-4	3.08	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	155
実施例 1-3	BH1-5	3.08	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	165
実施例 1-4	BH1-6	3.11	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	120
実施例 1-5	BH1-7	3.11	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	125
実施例 1-6	BH1-8	3.11	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	135
実施例 1-7	BH1-9	3.10	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	145
実施例 1-8	BH1-10	3.10	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	170
実施例 1-9	BH1-11	3.10	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	180
実施例 1-10	BH1-12	3.10	2.06	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	140
実施例 1-11	BH1-13	3.10	2.06	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	150
実施例 1-12	BH1-14	3.10	2.06	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	170
比較例 1-1	BH1-Ref2	3.08	2.09	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.114	100

10

20

30

【0786】

【表2】

	第一の発光層							第二の発光層					素子評価		
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性化合物	膜厚 [nm]	CIE x	CIE y	LT95 (相対値) [%]
	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 2-1	BH1-2	3.08	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.081	154
実施例 2-2	BH1-6	3.11	2.07	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.132	0.082	123
実施例 2-3	BH1-9	3.10	2.07	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.132	0.082	149
実施例 2-4	BH1-12	3.10	2.06	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.081	163
比較例 2-1	BH1-Ref2	3.08	2.09	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.085	100

40

【0787】

50

【表 3】

	第一の発光層							第二の発光層					素子評価			
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性化合物		膜厚 [nm]	CIE x	CIE y	LT95 (相対値) [%]
	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 3-1	BH1-2	3.08	2.08	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.097	155	
実施例 3-2	BH1-4	3.08	2.08	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.097	172	
実施例 3-3	BH1-5	3.08	2.08	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.097	186	
実施例 3-4	BH1-6	3.11	2.07	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.101	114	
実施例 3-5	BH1-9	3.10	2.07	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.132	0.098	145	
実施例 3-6	BH1-12	3.10	2.06	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.100	166	
比較例 3-1	BH1-Ref2	3.08	2.09	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.102	100	

10

【 0 7 8 8 】

【表 4】

	第一の発光層							第二の発光層					素子評価			
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性化合物		膜厚 [nm]	CIE x	CIE y	LT95 (相対値) [%]
	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 2-1 (再掲)	BH1-2	3.08	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.081	154	
実施例 4-1	BH1-2	3.08	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.02	1.88	BD-2	10	0.133	0.083	133	
実施例 4-2	BH1-2	3.08	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.084	114	
比較例 2-1 (再掲)	BH1-Ref2	3.08	2.09	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	0.133	0.085	100	

20

30

【 0 7 8 9 】

一般式(1A)で表される化合物、及び一般式(1A-A)で表される化合物を用いた実施例1-1~実施例1-12、実施例2-1~実施例2-4、及び実施例3-1~実施例3-6の有機EL素子によれば、比較例1-1、比較例2-1、及び比較例3-1の有機EL素子に比べて、長寿命化した。

また、一般式(1A)で表される化合物、及び一般式(1A-A)で表される化合物を用いた実施例4-1及び実施例4-2の有機EL素子によれば、実施例2-1の有機EL素子と同等に長寿命化した。

40

【 0 7 9 0 】

一般式(1A)で表される化合物、及び一般式(1A-A)で表される化合物を用いた実施例1-1~実施例1-12、実施例2-1~実施例2-4、及び実施例3-1~実施例3-6の有機EL素子によれば、一般式(1A)で表される化合物の場合は、一般式(1B-1)~一般式(1B-3)で表される基のいずれかが結合していることによって、一般式(1A-A)で表される化合物の場合は、一般式(1B-A1)~一般式(1B-A3)で表される基のいずれかが結合していることによって、同じドーパントを用いている場合であってもより深い青色発光を得られることが確認できる。すなわち、第一実施形

50

態に係る化合物をホスト材料として用い、ドーパント（発光性化合物）と組み合わせることで、他のホスト材料と当該ドーパント（発光性化合物）とを含有させた発光層に比べて、同じドーパントを用いているにもかかわらず、より深い青色発光を得られることが確認できる。これは、分子間相互作用がより小さくなるため $CIEy$ が小さくなっていると考えられる。

【0791】

<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 $10 \mu\text{mol/L}$ となるように溶解して溶液を作製し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とした。この測定試料について、低温 (77 [K]) で燐光スペクトル (縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。) を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $edge \text{ [nm]}$ 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。結果は表 1 及び表 2 に示す通りである。

なお、三重項エネルギー T_1 は、測定条件によっては上下 0.02 eV 程度の誤差が生じ得る。

$$\text{換算式 (F1)} : T_1 \text{ [eV]} = 1239.85 / edge$$

【0792】

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 形分光燐光光度計本体を用いた。

【0793】

(一重項エネルギー S_1)

測定対象となる化合物の $10 \mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温 (300 K) でこの試料の吸収スペクトル (縦軸：吸収強度、横軸：波長とする。) を測定した。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $edge \text{ [nm]}$ を次に示す換算式 (F2) に代入して一重項エネルギー S_1 を算出した。結果は表 1 及び表 2 に示す通りである。

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

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

【0794】

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。

【0795】

10

20

30

40

50

(化合物の最大ピーク波長)

化合物の最大ピーク波長 は、以下の方法により測定した。

測定対象となる化合物の $5 \mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温 (300K) でこの試料の発光スペクトル (縦軸: 発光強度、横軸: 波長とする。) を測定した。本実施例では、発光スペクトルを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) で測定した。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 とした。

化合物 B D - 1 の最大ピーク波長 は、 452nm であった。

化合物 B D - 2 の最大ピーク波長 は、 455nm であった。

化合物 B D - 3 の最大ピーク波長 は、 457nm であった。

【0796】

<化合物の合成>

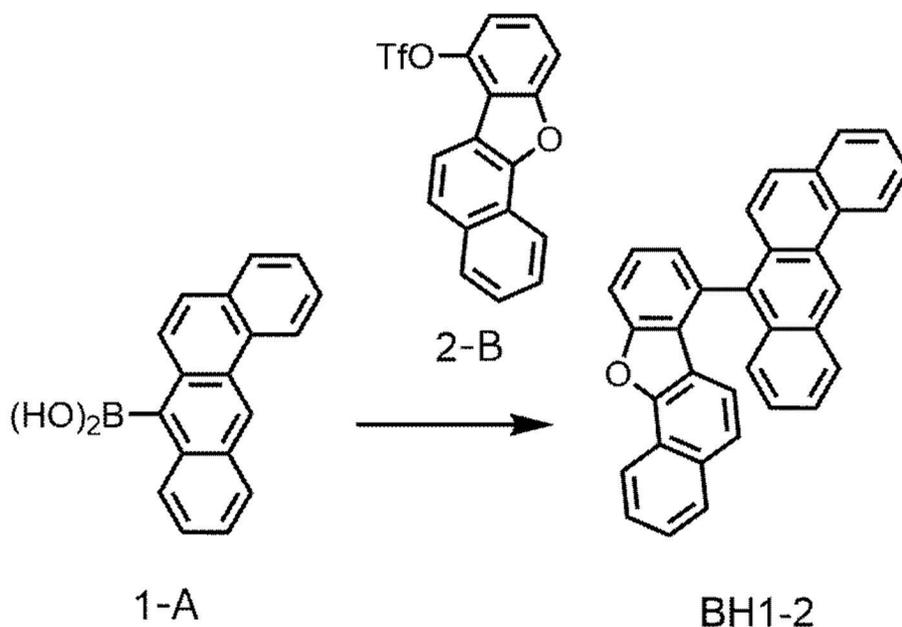
【0797】

[合成例1: 化合物 B H 1 - 2 の合成]

下記合成経路で、化合物 B H 1 - 2 を合成した。

【0798】

【化315】



【0799】

アルゴン雰囲気下、中間体 1 - A : 17.6g (64.5mmol)、中間体 2 - B : 23.6g (64.5mmol)、ジクロロビスアムフォスパラジウム (2) : 0.91g (1.29mmol)、 2M 炭酸ナトリウム水溶液 : 90.0ml (180.0mmol)、及び 1, 2 - ジメトキシエタン : 450ml をフラスコに仕込み、 100°C で 8 時間加熱還流攪拌した。攪拌後に室温 (25°C) まで冷却した後、溶媒を留去し、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、淡黄色固体 24.1g (収率 84%) を得た。

LC-MS 分析 (液体クロマトグラフィ-質量分析) により、当該淡黄色固体を化合物 B H 1 - 2 と同定した。

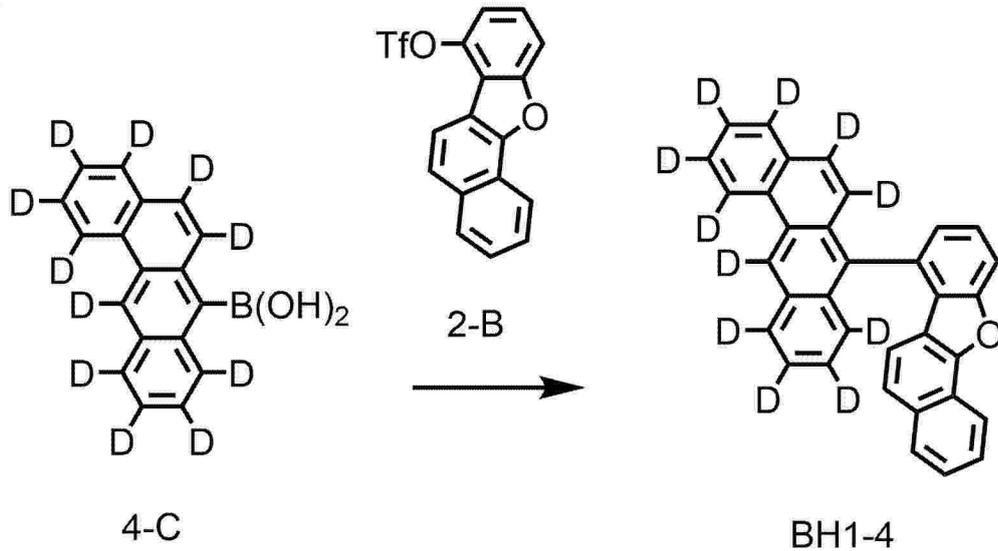
【0800】

[合成例2: 化合物 B H 1 - 4 の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-4を合成した。

【0801】

【化316】



10

20

【0802】

(化合物BH1-4の合成)

アルゴン雰囲気下、中間体4-C: 1.41 g (5.0 mmol)、中間体2-B: 1.83 g (20.0 mmol)、ジクロロビスアムフォスパラジウム(2): 0.07 g (0.1 mmol)、2 M炭酸ナトリウム水溶液: 7.5 ml (15.0 mmol)、及び1,2-ジメトキシエタン: 20 mlをフラスコに仕込み、100℃で8時間加熱攪拌した。攪拌後に室温(25℃)まで冷却した後、溶媒を留去し、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、淡黄色固体1.8 g (収率77%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH1-4と同一した。

30

【0803】

[合成例3: 化合物BH1-5の合成]

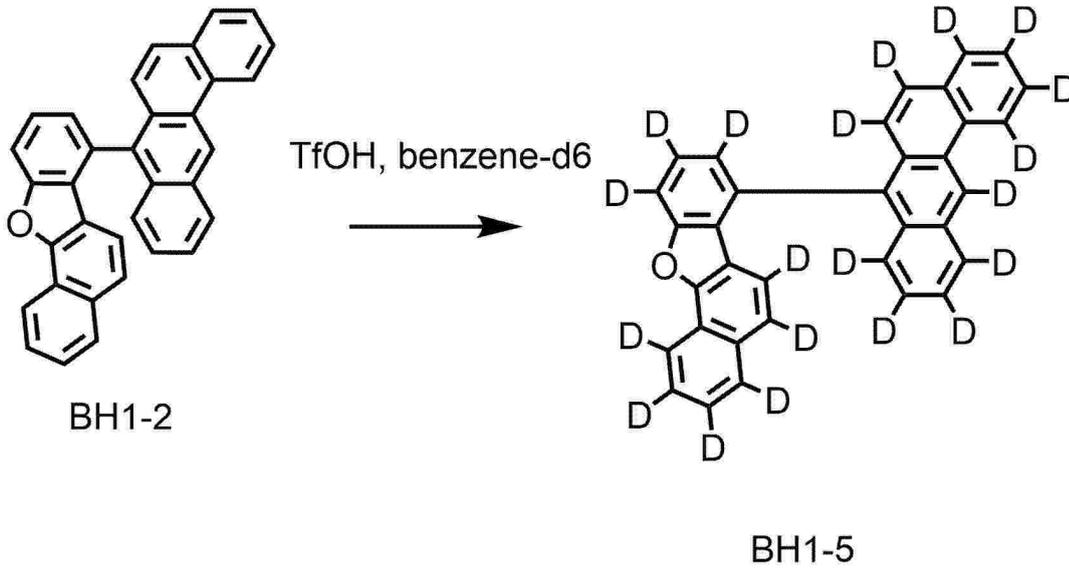
下記合成経路で、化合物BH1-5を合成した。

【0804】

40

50

【化 3 1 7】



10

【0805】

(化合物BH1-5の合成)

アルゴン雰囲気下、化合物BH1-2 : 5.0 g (11.3 mmol) 及びオルト-ジクロロベンゼン : 100 ml をフラスコに仕込み、室温で攪拌しながら完全溶解させた後、ベンゼン-d₆ : 50 ml を加え、10 で5分攪拌した。その後、トリフルオロメタンスルホン酸 : 1.99 ml (22.5 mmol) を加え、10 で2時間攪拌した。その後、重水200 ml を加え、さらに15分攪拌した。攪拌後、水層を除去し残った有機層を濃縮、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、淡黄色固体3.0 g (収率58%) を得た。

20

LC-MS分析(液体クロマトグラフィ-質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH1-5と同一した。

30

【0806】

[合成例4 : 化合物BH1-6の合成]

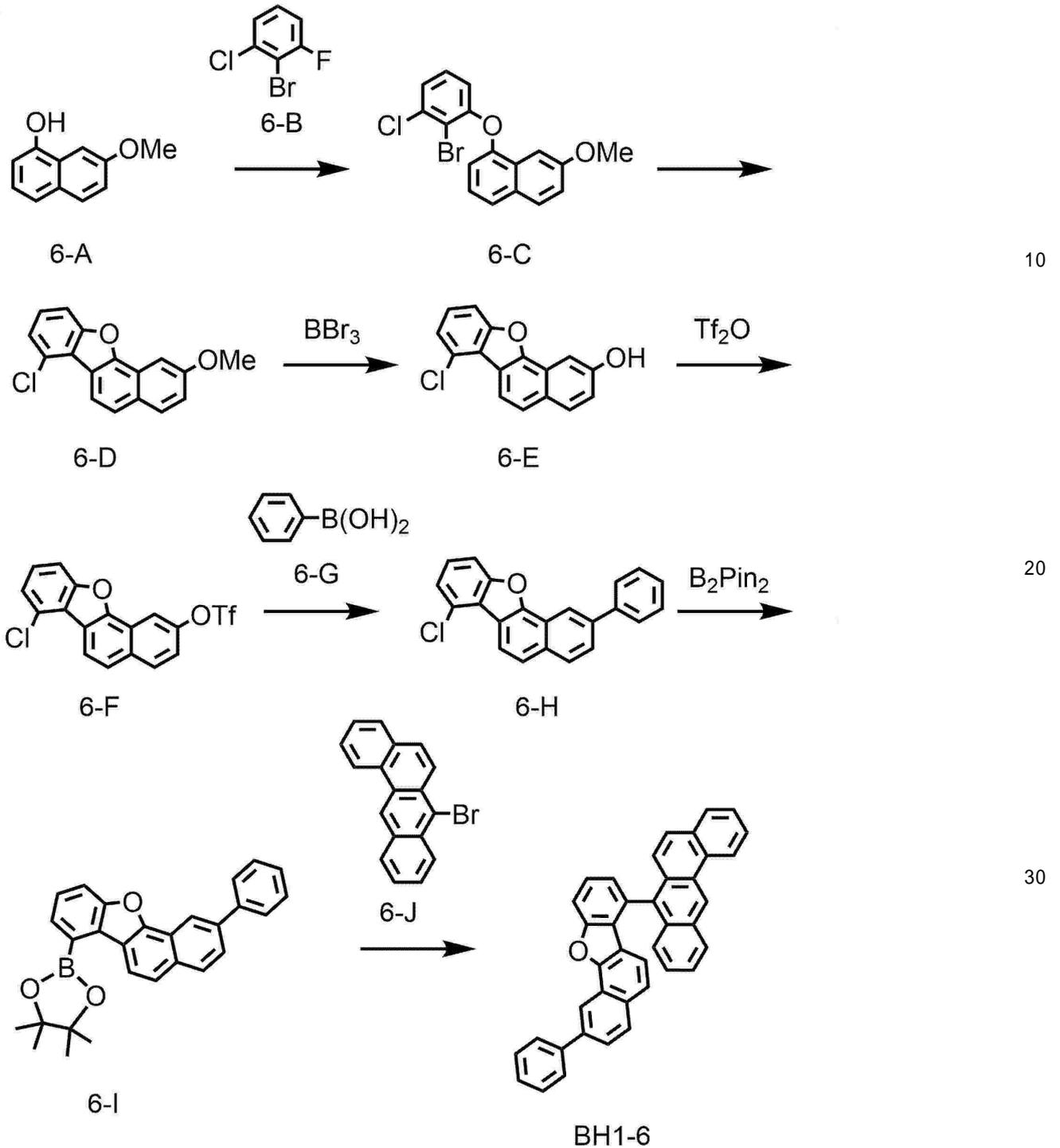
下記合成経路で、化合物BH1-6を合成した。

【0807】

40

50

【化 3 1 8】



【0808】

(中間体 6 - C の合成)

アルゴン雰囲気下、中間体 6 - A : 25.0 g (144.0 mmol)、中間体 6 - B : 31.5 g (158.0 mmol)、炭酸セシウム : 70.1 g (215.0 mmol)、N, N - ジメチルホルムアミド : 300 ml をフラスコに仕込み、130 で10時間加熱攪拌した。室温 (25) まで冷却後、反応溶液を濃縮し得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、白色固体 34.0 g (収率 65%) を得た。

LC - MS 分析 (液体クロマトグラフィー質量分析) により、当該白色固体を中間体 6 - C と同定した。

10

20

30

40

50

【0809】

(中間体6-Dの合成)

アルゴン雰囲気下、中間体6-C: 34.0 g (94.0 mmol)、[1,1-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]ジクロロパラジウム(II): 2.1 g (2.8 mmol)、炭酸カリウム: 25.8 g (187.0 mmol)、N,N-ジメチルホルムアミド: 940 mLをフラスコに仕込み、130 °Cで10時間加熱攪拌した。室温(25 °C)まで冷却後、反応溶液を濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、白色固体15.6 g (収率59%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該白色固体を中間体6-Dと同定した。

10

【0810】

(中間体6-Eの合成)

アルゴン雰囲気下、中間体6-D: 15.6 g (55.2 mmol)、ジクロロメタン: 150 mLをフラスコに仕込み、溶液を0 °Cまで冷却した後に、三臭化ホウ素1Mジクロロメタン溶液: 71.7 mL (71.7 mmol)を系中に滴下し、そのまま1時間攪拌した。室温(25 °C)に戻しながら、さらに6時間攪拌した後、反応溶液に氷水を加えた。よく攪拌した後、水層を除去し、残った有機層を濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、白色固体11.6 g (収率78%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該白色固体を中間体6-Eと同定した。

20

【0811】

(中間体6-Fの合成)

アルゴン雰囲気下、中間体6-E: 11.6 g (43.2 mmol)、ジクロロメタン: 215 mLをフラスコに仕込み、溶液を0 °Cまで冷却した後に、ピリジン: 4.4 mL (56.1 mmol)を系中に滴下し、その後トリフルオロメタンスルホン酸無水物: 9.2 mL (56.1 mmol)を系中に滴下し、そのまま1時間攪拌した。室温(25 °C)に戻しながらさらに6時間攪拌した後、反応溶液に氷水を加えた。よく攪拌した後、水層を除去し、残った有機層を濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、白色固体12.5 g (収率72%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該白色固体を中間体6-Fと同定した。

30

【0812】

(中間体6-Hの合成)

化合物BH1-2の合成において、中間体1-A及び中間体2-Bの代わりに、中間体6-F及び中間体6-Gを用いた以外は、化合物BH1-2の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体6.5 g (収率63%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該白色固体を中間体6-Hと同定した。

【0813】

(化合物6-Iの合成)

アルゴン雰囲気下、中間体6-H: 6.5 g (19.8 mmol)、ビス(ピナコラート)ジボロン10.0 g (39.5 mmol)、酢酸パラジウム(II): 0.09 g (0.4 mmol)、XPhos: 0.75 g (1.6 mmol)、酢酸カリウム5.82 g (59.3 mmol)、及び1,4-ジオキサン100 mLをフラスコに入れ、7時間100 °Cで攪拌した。攪拌後、室温まで冷却した。冷却後、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、硫酸ナトリウムを加えて乾燥した。乾燥後、ろ過し、減圧下濃縮した。粗体をシリカゲルクロマトグラフィーで精製し、白色固体2.8 g (収率49%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該白色固体を中間体6-Iと同定した。

40

【0814】

50

(化合物BH1-6の合成)

化合物BH1-2の合成において、中間体1-A及び中間体2-Bの代わりに、中間体6-I及び中間体6-Jを用いた以外は、化合物BH1-2の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体1.3g(収率53%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH1-6と同定した。

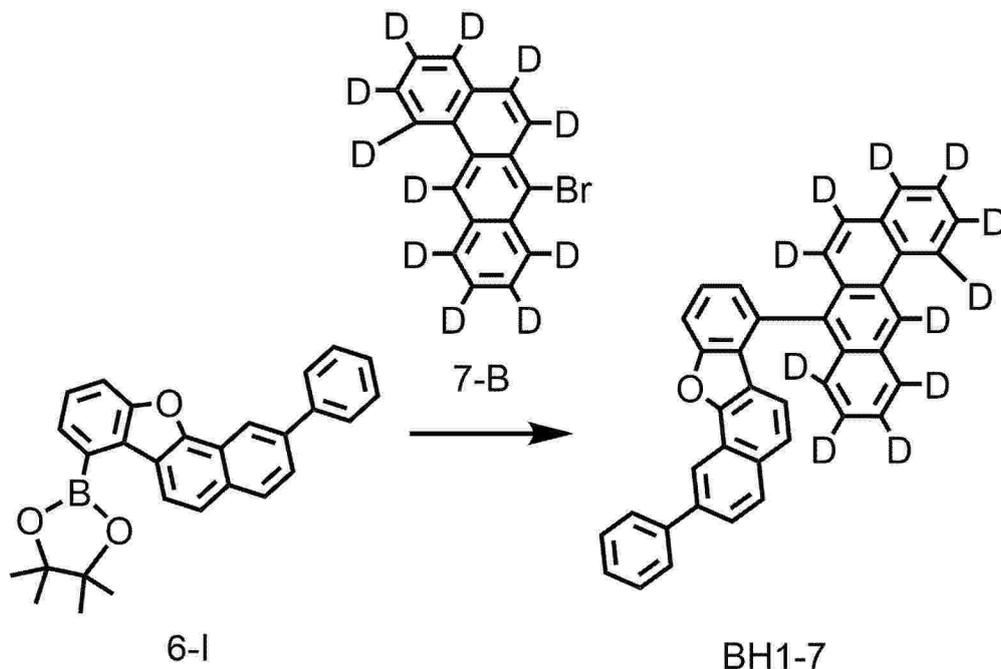
【0815】

[合成例5:化合物BH1-7の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-7を合成した。

【0816】

【化319】



【0817】

(化合物BH1-7の合成)

化合物BH1-2の合成において、中間体1-A及び中間体2-Bの代わりに、中間体6-I及び中間体7-Bを用いた以外は、化合物BH1-2の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体0.8g(収率63%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH1-7と同定した。

【0818】

[合成例6:化合物BH1-8の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-8を合成した。

【0819】

10

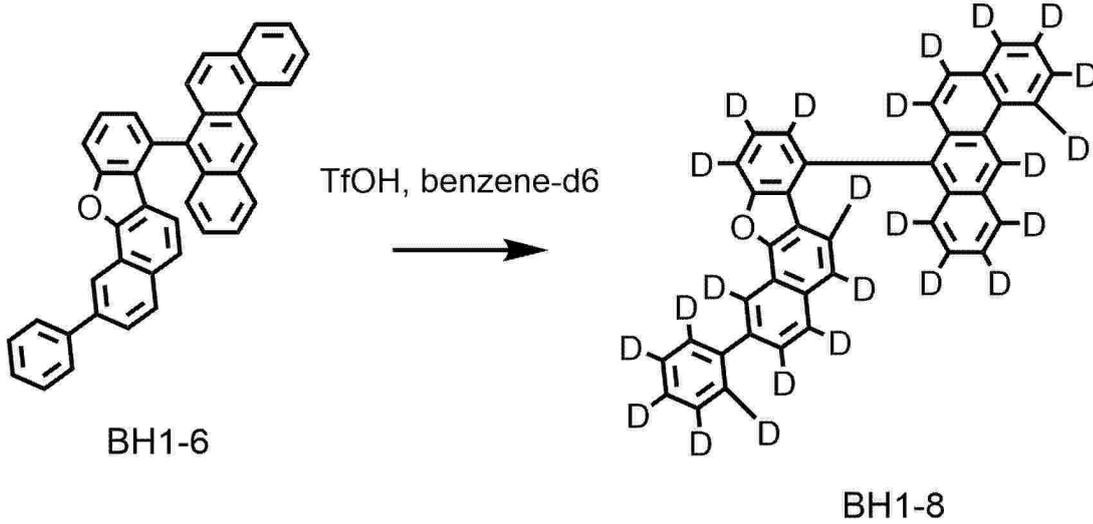
20

30

40

50

【化320】



10

【0820】

(化合物BH1-8の合成)

化合物BH1-5の合成において、化合物BH1-2の代わりに、化合物BH1-6を用いた以外は、化合物BH1-5の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体0.4g(収率36%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH1-8と同定した。

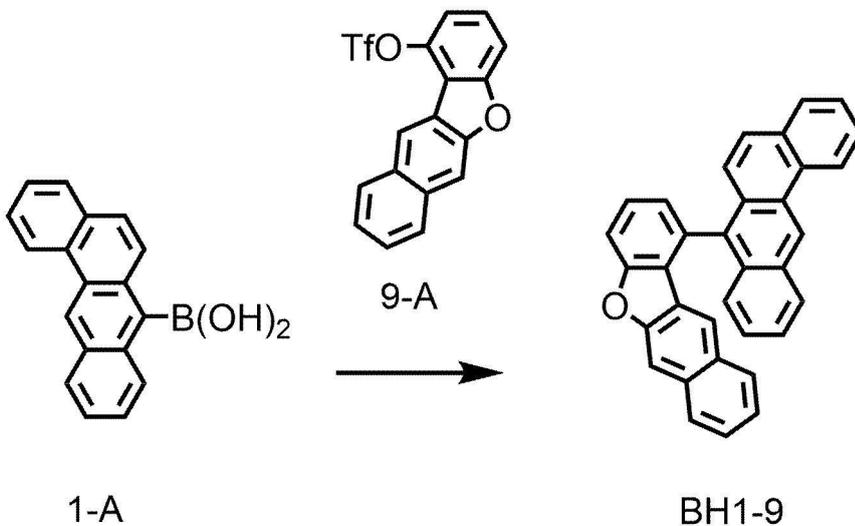
【0821】

[合成例7:化合物BH1-9の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-9を合成した。

【0822】

【化321】



30

40

【0823】

(化合物BH1-9の合成)

化合物BH1-2の合成において、中間体2-Bの代わりに、中間体9-Aを用いた以

50

外は、化合物BH1-2の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体3.6g(収率71%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH1-9と同定した。

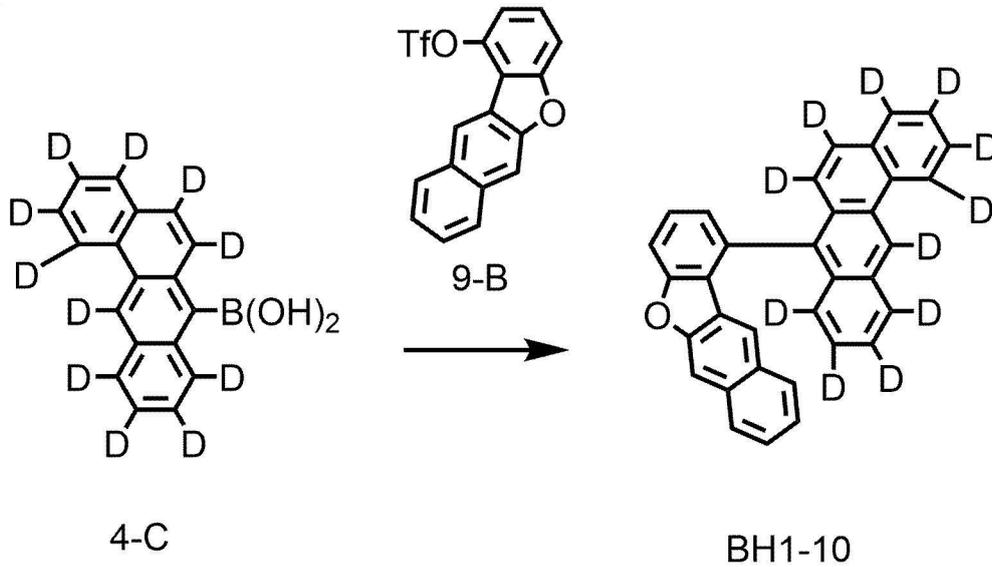
【0824】

[合成例8:化合物BH1-10の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-10を合成した。

【0825】

【化322】



【0826】

(化合物BH1-10の合成)

化合物BH1-2の合成において、中間体1-A及び中間体2-Bの代わりに、中間体4-C及び中間体9-Bを用いた以外は、化合物BH1-2の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体1.1g(収率69%)を得た。

LC-MS分析により、当該淡黄色固体を化合物BH1-10と同定した。

【0827】

[合成例9:化合物BH1-11の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-11を合成した。

【0828】

10

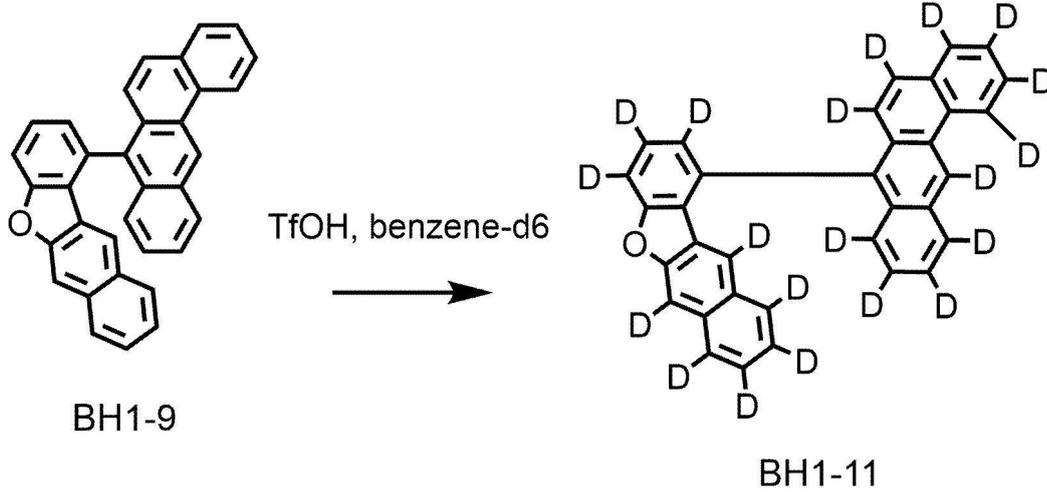
20

30

40

50

【化 3 2 3】



10

【0 8 2 9】

(化合物BH1-11の合成)

化合物BH1-5の合成において、化合物BH1-2の代わりに、化合物BH1-9を用いた以外は、化合物BH1-5の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体0.7g (収率41%)を得た。

20

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH1-11と同定した。

【0 8 3 0】

[合成例10:化合物BH1-12の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-12を合成した。

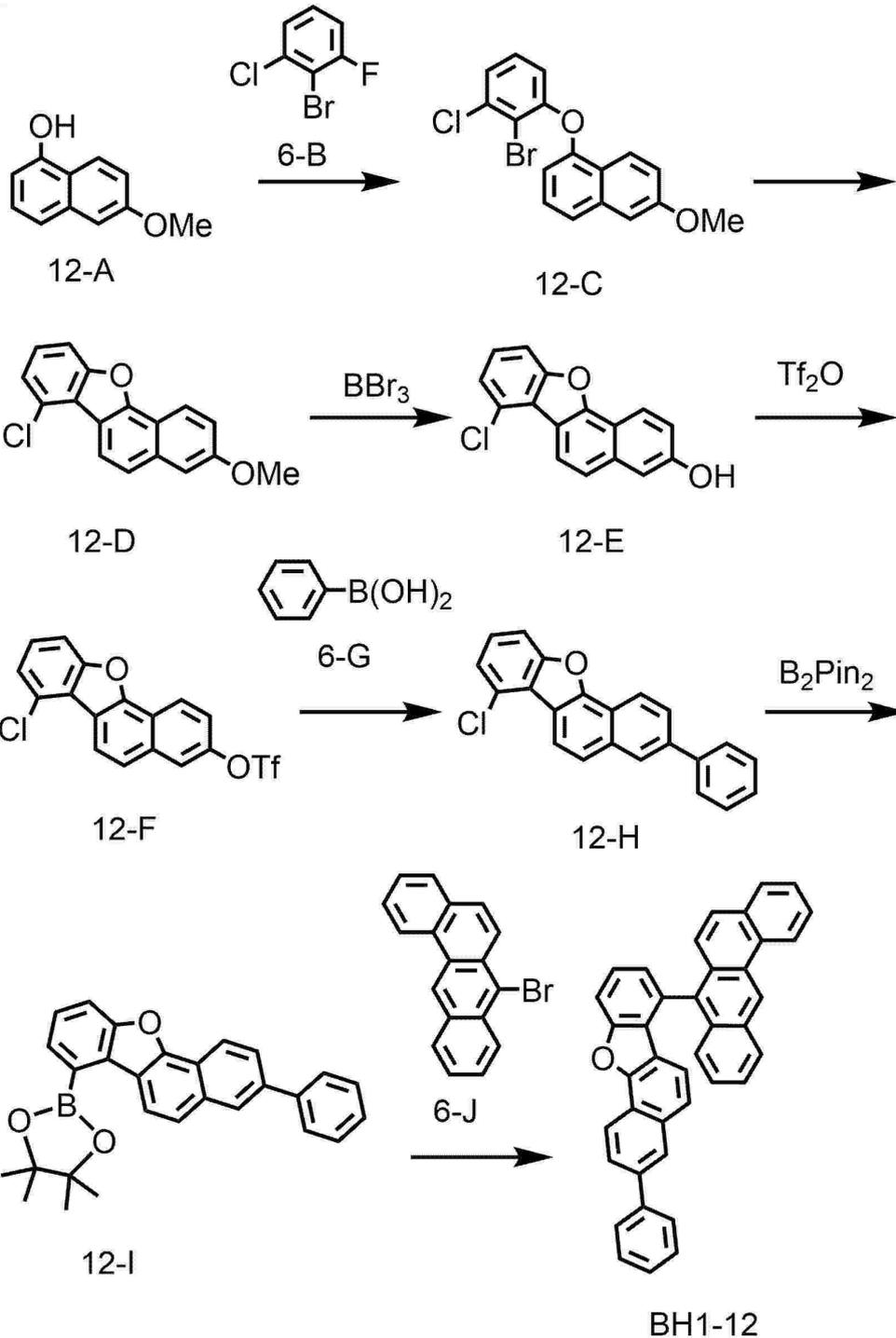
【0 8 3 1】

30

40

50

【化 3 2 4】



10

20

30

40

【0832】

(化合物BH1-12の合成)

中間体6-Aを出発原料とした一連の化合物BH1-6の合成において、中間体6-Aの代わりに中間体12-Aを用いた以外は、化合物BH1-6の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体2.4g(総収率(7step)9%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH1-12と同定した。

【0833】

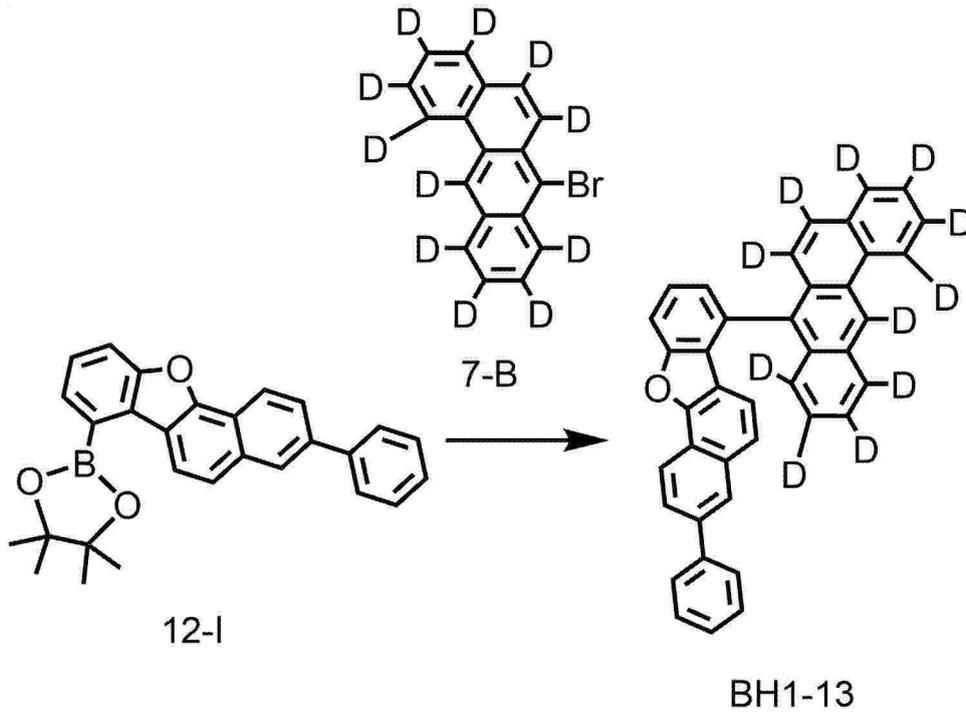
[合成例11:化合物BH1-13の合成]

50

下記合成経路で、化合物BH1-13を合成した。

【0834】

【化325】



10

20

【0835】

(化合物BH1-13の合成)

化合物BH1-2の合成において、中間体1-A及び中間体2-Bの代わりに、中間体12-I及び中間体7-Bを用いた以外は、化合物BH1-2の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体1.7g(収率58%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH1-13と同一した。

30

【0836】

[合成例12:化合物BH1-14の合成]

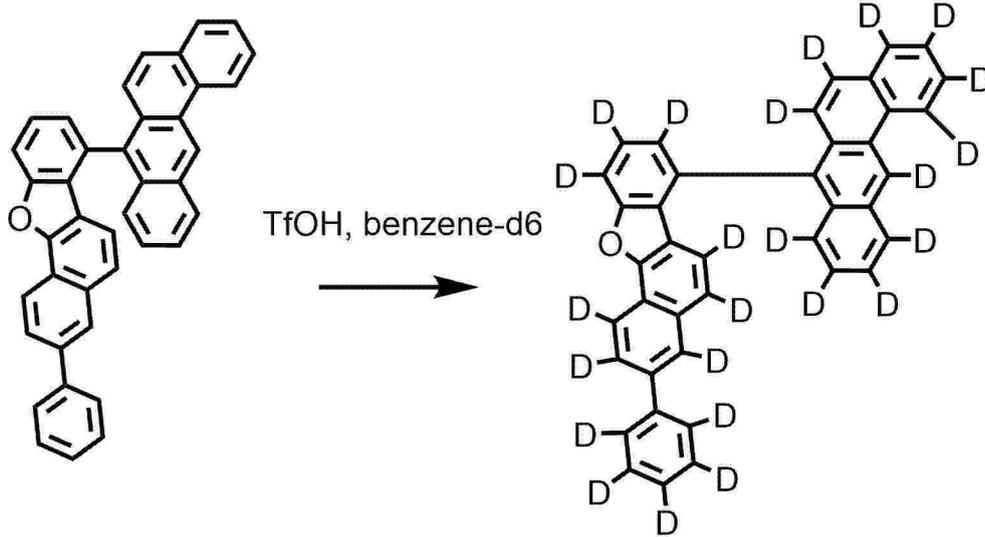
下記合成経路で、化合物BH1-14を合成した。

【0837】

40

50

【化 3 2 6】



BH1-12

BH1-14

10

【0838】

(化合物BH1-14の合成)

化合物BH1-5の合成において、化合物BH1-2の代わりに、化合物BH1-12を用いた以外は、化合物BH1-5の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体0.7g(収率44%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH1-14と同一した。

【0839】

[合成例13:化合物BH-3の合成]

下記合成経路で、化合物BH-3を合成した。

【0840】

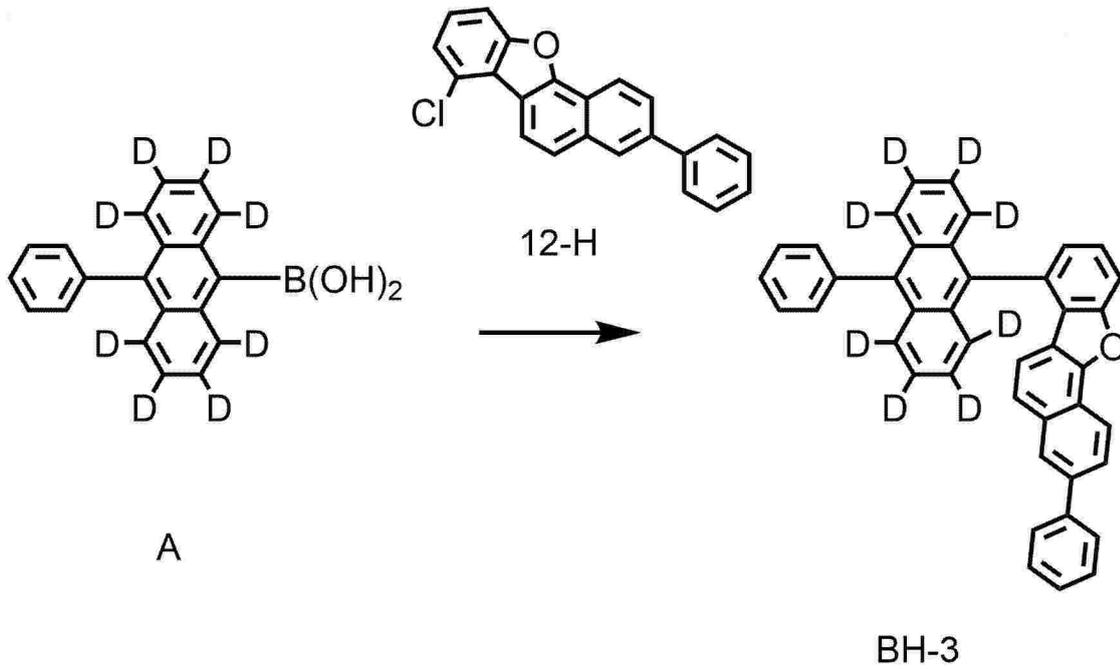
20

30

40

50

【化 3 2 7】



10

20

【0 8 4 1】

(化合物BH-3の合成)

化合物BH-1-2の合成において、中間体1-A及び中間体2-Bの代わりに、中間体A及び中間体12-Hを用いた以外は、化合物BH-1-2の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体2.8g(収率41%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH-3と同定した。

【0 8 4 2】

[合成例14:化合物BH-4の合成]

下記合成経路で、化合物BH-4を合成した。

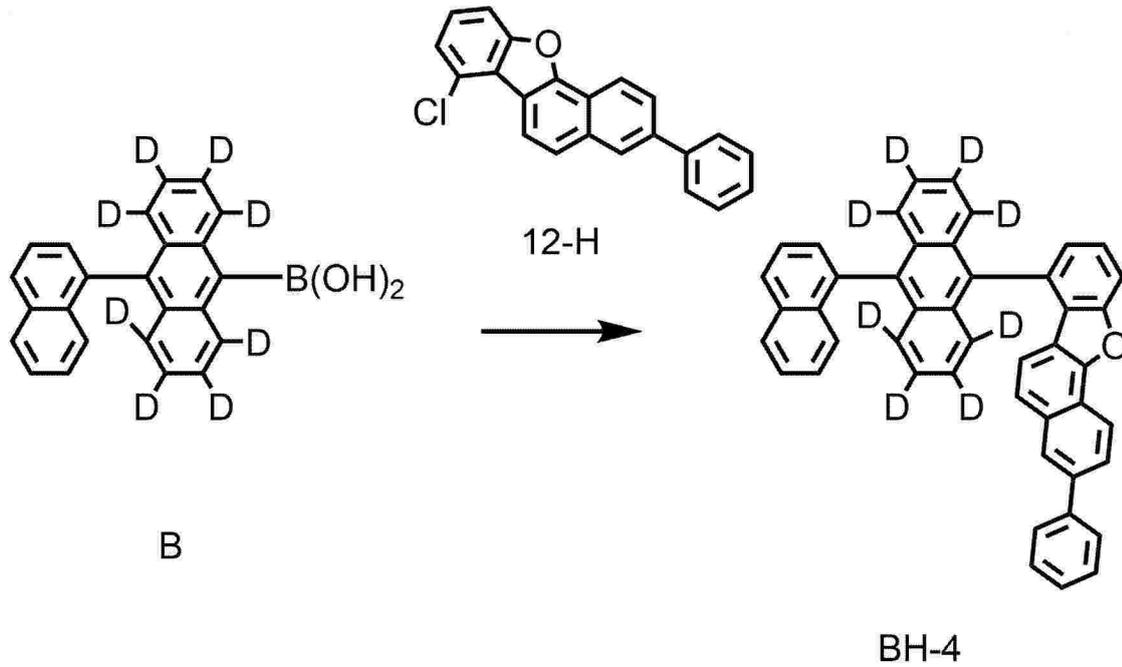
【0 8 4 3】

30

40

50

【化 3 2 8】



10

20

【 0 8 4 4】

(化合物BH-4の合成)

化合物BH-4の合成において、中間体1-A及び中間体2-Bの代わりに、中間体B及び中間体12-Hを用いた以外は、化合物BH-4の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体1.3g(収率43%)を得た。

LC-MS分析(液体クロマトグラフィー質量分析)により、当該淡黄色固体を化合物BH-4と同定した。

【符号の説明】

【 0 8 4 5】

1A, 1B...有機EL素子、2...基板、3...陽極、4...陰極、5A, 5B...発光領域、5...発光層、51...第一の発光層、52...第二の発光層、6...正孔輸送帯域、61...正孔注入層、62...正孔輸送層、7...電子輸送帯域、71...電子輸送層、72...電子注入層。

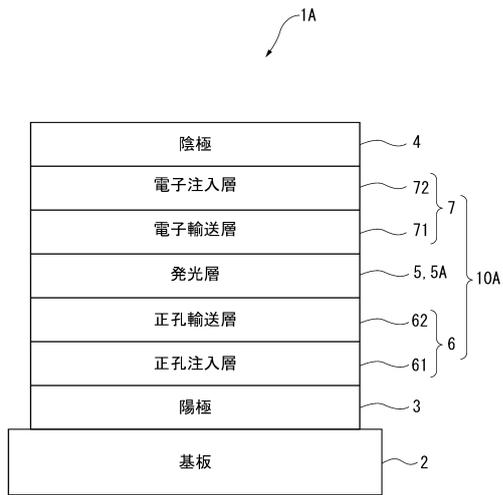
30

40

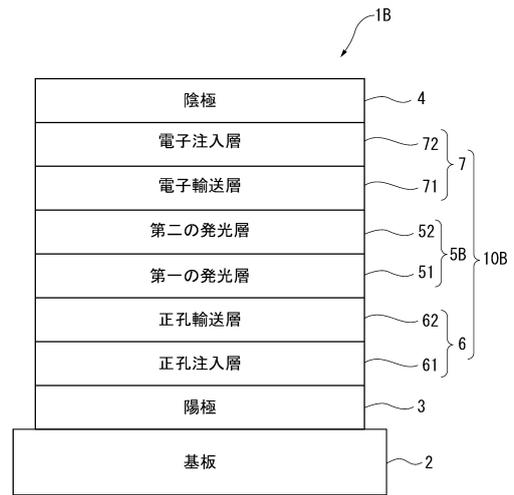
50

【図面】

【図 1】



【図 2】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

H 1 0 K	50/16	(2023.01)	H 1 0 K	50/16	
H 1 0 K	50/17	(2023.01)	H 1 0 K	50/17	
H 1 0 K	50/18	(2023.01)	H 1 0 K	50/17	1 7 1
H 1 0 K	59/10	(2023.01)	H 1 0 K	50/18	
H 1 0 K	85/60	(2023.01)	H 1 0 K	59/10	
H 1 0 K	101/40	(2023.01)	H 1 0 K	85/60	
			H 1 0 K	101:40	

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

(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 系井 裕亮

東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内

審査官 阿久津 江梨子

(56)参考文献

特開2021-90050(JP,A)

特開2020-132571(JP,A)

国際公開第2021/049653(WO,A1)

米国特許出願公開第2020/0111986(US,A1)

(58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

C 0 7 D

C 0 9 K

H 1 0 K

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