

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関  
国際事務局

(43) 国際公開日  
2020年6月11日(11.06.2020)



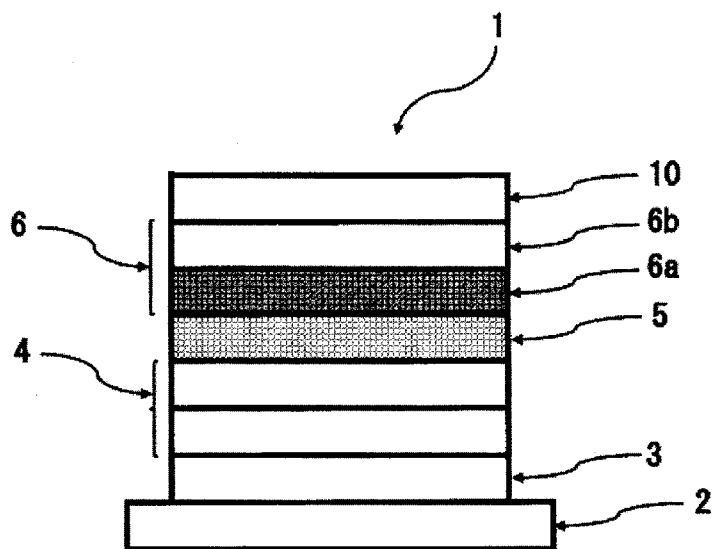
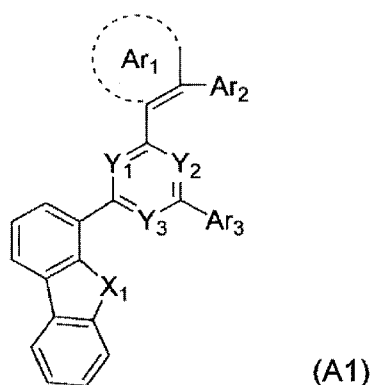
(10) 国際公開番号

WO 2020/116615 A1

- (51) 国際特許分類:  
C07D 409/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
C07D 409/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2019/047833
- (22) 国際出願日: 2019年12月6日(06.12.2019)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:  
特願 2018-229962 2018年12月7日(07.12.2018) JP  
特願 2019-107425 2019年6月7日(07.06.2019) JP
- (71) 出願人: 出光興産株式会社(IDEMITSU KOSAN CO.,LTD.) [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区丸の内三丁目1番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 白崎 良尚 (SHIRASAKI, Yoshinao); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 齊藤 雅俊 (SAITO, Masatoshi); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 吉田 圭 (YOSHIDA, Kei); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 増田 哲也 (MASUDA, Tetsuya); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 中村 雅人 (NAKAMURA, Masato); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 櫛田 知克 (KUSHIDA, Tomokatsu); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).
- (74) 代理人: 特許業務法人平和国際特許事務所 (HEIWA INTERNATIONAL PATENT OFFICE); 〒1010041 東京都千代田区神

(54) Title: NOVEL COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENCE ELEMENT USING SAME

(54) 発明の名称: 新規化合物及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子



(57) Abstract: This compound is represented by formula (A1) ( $X_1$  represents O or S, at least two of  $Y_1$ ,  $Y_2$ , and  $Y_3$  represent N,  $Ar_1$  represents an aryl group including, at least at the ortho position, a benzene ring substituted by  $Ar_2$ ,  $Ar_2$  represents an aryl group, and  $Ar_3$  represents a predetermined group).

(57) 要約: 下記式 (A1) で表される化合物 ( $X_1$  は O 又は S であり、 $Y_1$ 、 $Y_2$  及び  $Y_3$  のうち 2 つ以上は N であり、 $Ar_1$  は、少なくともオルト位に  $Ar_2$  が置換したベンゼン環を含むアリール基であり、 $Ar_2$  はアリール基であり、 $Ar_3$  は所定の基である)。

[続葉有]



WO 2020/116615 A1

田 須 田 町 一 丁 目 2 6 番 地 芝 信 神 田  
ビル3階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

## 明 細 書

発明の名称：

新規化合物及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子

### 技術分野

[0001] 本発明は、新規化合物及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。

### 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」ということがある）に電圧を印加すると、陽極から正孔が、また陰極から電子が、それぞれ発光層に注入される。そして、発光層において、注入された正孔と電子とが再結合し、励起子が形成される。

[0003] 特許文献１及び２には、有機ＥＬ素子用材料として、アジン環とジベンゾチオフェン環とが、連結基を介して又は介さないで結合した化合物、及びそれを用いた有機ＥＬ素子が開示されている。

### 先行技術文献

#### 特許文献

[0004] 特許文献１：ＷＯ２００７／０６９５６９

特許文献２：ＷＯ２０１３／０７７３５２

### 発明の概要

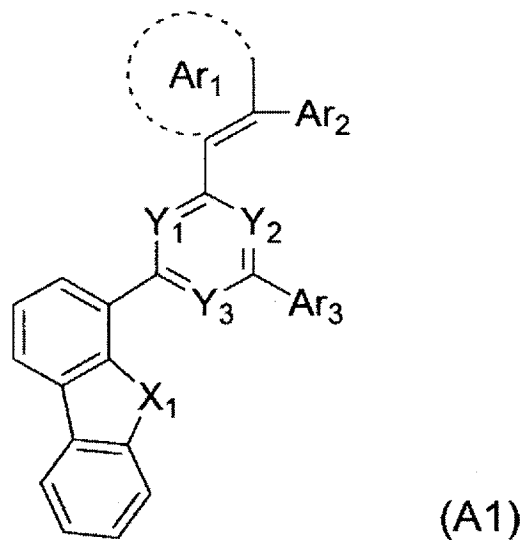
[0005] 本発明の目的は、発光効率の高い有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することができる新規な化合物、及びそれを用いた発光効率が高い有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することである。

[0006] 本発明によれば、以下の新規化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用電子輸送材料、有機エレクトロルミネッセンス及び電子機器が提供される。

１．下記式（Ａ１）で表される化合物。

[0007]

[化1]



[0008] [式 (A1) 中、

$X_1$  は、O 又は S である。

$Y_1$ 、 $Y_2$  及び  $Y_3$  は、それぞれ独立に、CH 又は N である。

但し、 $Y_1$ 、 $Y_2$  及び  $Y_3$  のうち 2 つ以上は N である。

$Ar_1$  は、少なくともオルト位に  $Ar_2$  が置換したベンゼン環を含む、少なくとも 1 つの置換基を有する環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

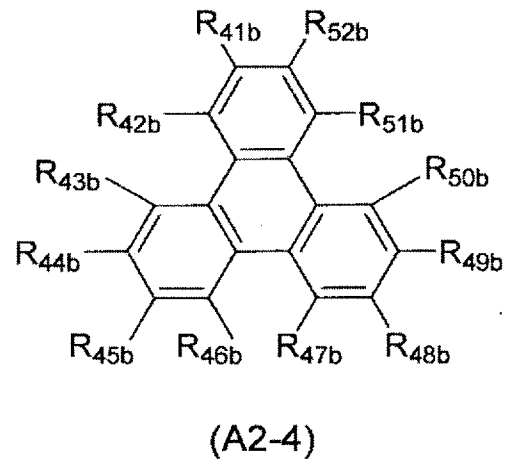
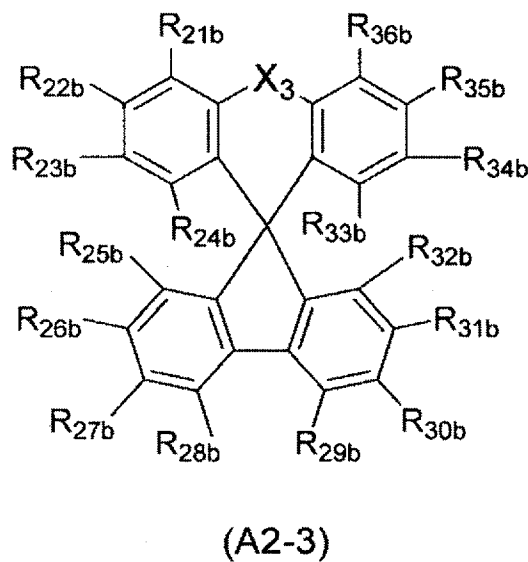
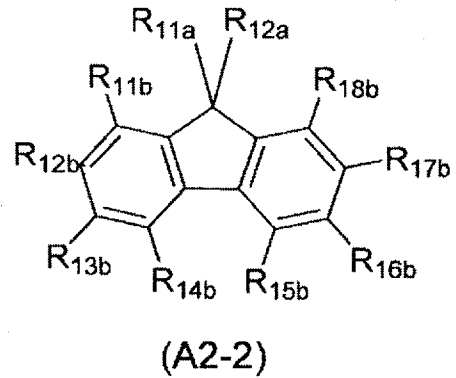
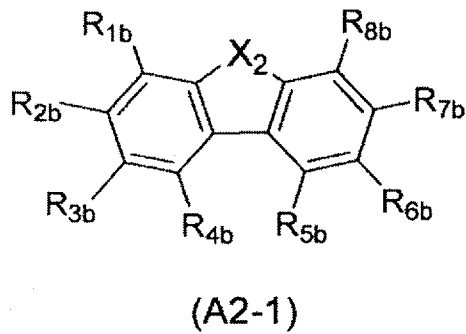
$Ar_2$  は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

$Ar_1$  と  $Ar_2$  は、互いに結合して、置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成し、該 5 員の炭化水素環を介して縮合した多環縮合アリール基となるか、あるいは置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成しない。

$Ar_3$  は、下記式 (A2-1) で表される基、下記式 (A2-2) で表される基、下記式 (A2-3) で表される基、及び下記式 (A2-4) で表される基からなる群から選択される基である。

[0009]

[化2]



[0010] (式(A2-1)中、

 $X_2$ は、O又はSである。

$R_{1b} \sim R_{8b}$ のうちの1つは、 $Y_2$ と $Y_3$ の間の炭素原子に結合する単結合であり、残りは水素原子である。)

(式(A2-2)中、

$R_{11a}$ 及び $R_{12a}$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない。

$R_{11b} \sim R_{18b}$ のうちの1つは、 $Y_2$ と $Y_3$ の間の炭素原子に結合する単結合である。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{11a}$ 及び $R_{11b}$

$R_{2a}$ 、及び前記単結合ではない  $R_{11b} \sim R_{18b}$  は、それぞれ独立に、  
水素原子、  
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、又は  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。) )  
(式 (A2-3) 中、

$R_{21b} \sim R_{36b}$  のうちの 1 つは、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合である。

$X_3$  は、 $NR_{21a}$ 、 $CR_{22a}R_{23a}$ 、O 又は S である。

$R_{21a}$  は、前記単結合ではない  $R_{21b}$  又は前記単結合ではない  $R_{36b}$  のいずれか一方又は両方と互いに結合して置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記単結合ではない  $R_{22b} \sim R_{35b}$ 、前記単結合ではなく、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_{21b}$  及び  $R_{36b}$ 、前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_{21a}$ 、並びに  $R_{22a}$  及び  $R_{23a}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、  
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、又は  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。) )  
(式 (A2-4) 中、

$R_{41b} \sim R_{52b}$  のうちの 1 つは、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合である。

前記単結合ではない  $R_{41b} \sim R_{52b}$  は、それぞれ独立に、  
水素原子、  
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、又は  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。) ]

[0011] 2. 上記式 (A1) で表される化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子用電子輸送材料。

3. 陽極、有機層、及び陰極をこの順に含む有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

該有機層が、上記式（A 1）で表される化合物を含む、  
有機エレクトロルミネッセンス素子。

4. 陽極、発光層、電子輸送帯域、及び陰極をこの順に含む有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

該電子輸送帯域が、上記式（A 1）で表される化合物を含む、  
有機エレクトロルミネッセンス素子。

5. 上記有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器。

[0012] 本発明によれば、発光効率の高い有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することができる新規な化合物、及びそれを用いた発光効率が高い有機エレクトロルミネッセンス素子が提供できる。

### 図面の簡単な説明

[0013] [図1]本発明の一態様に係る有機EL素子の模式図である。

### 発明を実施するための形態

[0014] [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）、三重水素（tritium）を包含する。

[0015] 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。

[0016] 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、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、特筆し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、ベンゼン環や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、環形成炭素数の数に含めない。

[0017] 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、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、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、特筆し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。ピリジン環やキナゾリン環の炭素原子にそれぞれ結合している水素原子や置換基を構成する原子については、環形成原子数の数に含めない。

[0018] 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すものであり、置換されている場合の置換基の炭素数は含めない。ここで、「 $YY$ 」は「 $XX$ 」よりも大きく、「 $XX$ 」と「 $YY$ 」はそれぞれ1以上の整数を意味する。

[0019] 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すものであり、置換されている場合の置換基の原子数は含めない。ここで、「 $YY$ 」は「 $XX$ 」よりも大きく、「 $XX$ 」と「 $YY$ 」はそれぞれ1以上の整数を意味する。

[0020] 「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 $ZZ$ 基が置換基で置換されておらず、水素原子が結合していることを意味する。

あるいは、「置換もしくは無置換のZ Z基」という場合における「置換」とはZ Z基における1つ以上の水素原子が、置換基と置き換わっていることを意味する。「A A基で置換されたB B基」という場合における「置換」も同様に、B B基における1つ以上の水素原子が、A A基と置き換わっていることを意味する。

[0021] 以下、本明細書に記載の置換基について説明する。

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

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

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

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

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

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

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

本明細書に記載の「無置換の2価の複素環基」の環形成原子数は、本明細

書に別途記載のない限り、5～50であり、好ましくは5～30、より好ましくは5～18である。

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

[0022] 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及び置換のアリール基等が挙げられる。（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。）以下、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」が置換基を有する場合であり、下記の「無置換のアリール基」が置換基を有する基や、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」の例や「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、「無置換のアリール基」が置換基を有する基がさらに置換基を有する基や、「置換のアリール基」がさらに置換基を有する基等も含まれる。

[0023] 無置換のアリール基：

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

m-ターフェニル-3-イル基、  
m-ターフェニル-2-イル基、  
o-ターフェニル-4-イル基、  
o-ターフェニル-3-イル基、  
o-ターフェニル-2-イル基、  
1-ナフチル基、  
2-ナフチル基、  
アントリル基、  
ベンゾアントリル基、  
フェナントリル基、  
ベンゾフェナントリル基、  
フェナレニル基、  
ピレニル基、  
クリセニル基、  
ベンゾクリセニル基、  
トリフェニレニル基、  
ベンゾトリフェニレニル基、  
テトラセニル基、  
ペンタセニル基、  
フルオレニル基、  
9, 9'-スピロビフルオレニル基、  
ベンゾフルオレニル基、  
ジベンゾフルオレニル基、  
フルオランテニル基、  
ベンゾフルオランテニル基、  
ペリレニル基

[0024] 置換のアリール基：

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-ジ(4-メチルフェニル)フルオレニル基、  
9, 9-ジ(4-イソプロピルフェニル)フルオレニル基、  
9, 9-ジ(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

[0025] 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、単環の基であっても縮合環の基であってもよい。

本明細書に記載の「複素環基」は、芳香族複素環基であっても脂肪族複素

環基であってもよい。

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及び置換の複素環基等が挙げられる。（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。）以下、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」が置換基を有する場合であり、下記の「無置換の複素環基」が置換基を有する基や、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、「無置換の複素環基」が置換基を有する基がさらに置換基を有する基や、「置換の複素環基」がさらに置換基を有する基等も含まれる。

[0026] 窒素原子を含む無置換の複素環基：

ピロリル基、  
イミダゾリル基、  
ピラゾリル基、  
トリアゾリル基、  
テトラゾリル基、  
オキサゾリル基、  
イソオキサゾリル基、  
オキサジアゾリル基、  
チアゾリル基、  
イソチアゾリル基、  
チアジアゾリル基、  
ピリジル基、  
ピリダジニル基、

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

[0027] 酸素原子を含む無置換の複素環基：

フリル基、

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

[0028] 硫黄原子を含む無置換の複素環基：

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、  
イソベンゾチオフェニル基、  
ジベンゾチオフェニル基、  
ナフトベンゾチオフェニル基、  
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、  
アザジベンゾチオフェニル基、  
ジアザジベンゾチオフェニル基、  
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オフェニル基

[0029] 窒素原子を含む置換の複素環基：

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

[0030] 酸素原子を含む置換の複素環基：

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

[0031] 硫黄原子を含む置換の複素環基：

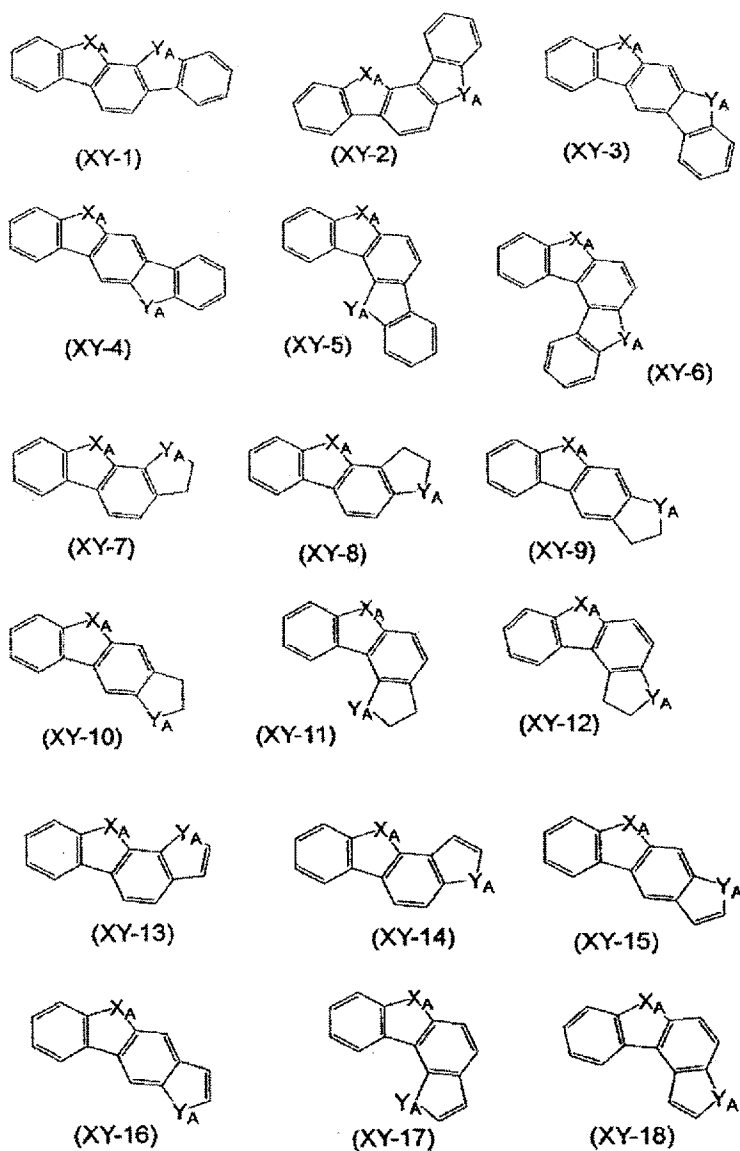
フェニルジベンゾチオフェニル基、  
メチルジベンゾチオフェニル基、

t-ブチルジベンゾチオフェニル基、

スピロ〔9H-チオキサンテン-9, 9'-〔9H〕フルオレン〕の1価の  
残基

[0032] 窒素原子、酸素原子、及び硫黄原子のうち少なくとも1つを含む下記無置換の複素環の環形成原子に結合した1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の基、及び下記無置換の複素環の環形成原子に結合した1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の基が置換基を有する基：

[0033] [化3]



[0034] 式 (XY-1) ~ (XY-18) 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、 $CH_2$  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。

上記式 (XY-1) ~ (XY-18) で表される複素環は、任意の位置で結合を有して 1 価の複素環基となる。

上記式 (XY-1) ~ (XY-18) で表される無置換の複素環から誘導される 1 価の基が置換基を有するとは、これらの式中の骨格を構成する炭素原子に結合した水素原子が置換基に置き換わっている場合、あるいは、 $X_A$  や  $Y_A$  が NH もしくは  $CH_2$  であり、これら NH もしくは  $CH_2$  における水素原子が、置換基と置き換わっている状態を指す。

[0035] 本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」の具体例（具体例群 G3）としては、以下の無置換のアルキル基及び置換のアルキル基が挙げられる。（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」が置換基を有する場合であり、下記の「無置換のアルキル基」が置換基を有する基や、置換のアルキル基の例等が挙げられる。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、「無置換のアルキル基」が置換基を有する基がさらに置換基を有する基や、「置換のアルキル基」がさらに置換基を有する基等も含まれる。

[0036] 無置換のアルキル基：

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、  
t-ブチル基

[0037] 置換のアルキル基：

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、  
トリフルオロメチル基

[0038] 本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルケニル基」の具体例（具体例群G4）としては、以下の無置換のアルケニル基及び置換のアルケニル基等が挙げられる。（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。）以下、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」が置換基を有する場合であり、下記の「無置換のアルケニル基」が置換基を有する基や、置換のアルケニル基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、「無置換のアルケニル基」が置換基を有する基がさらに置換基を有する基や、「置換のアルケニル基」がさらに置換基を有する基等も含まれる。

[0039] 無置換のアルケニル基及び置換のアルケニル基：

ビニル基、  
アリル基、  
1-ブテニル基、

2-ブテニル基、  
3-ブテニル基、  
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、  
1, 2-ジメチルアリル基

[0040] 本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキニル基」の具体例（具体例群G5）としては、以下の無置換のアルキニル基等が挙げられる。（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」が置換基を有する場合であり、下記の「無置換のアルキニル基」が置換基を有する基等が挙げられる。

[0041] 無置換のアルキニル基：

エチニル基

[0042] 本明細書に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」の具体例（具体例群G6）としては、以下の無置換のシクロアルキル基及び置換のシクロアルキル基等が挙げられる。（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。）以下、単に「シクロアルキル基」という場合は、「無置換のシクロアルキル基」と「置換のシクロアルキル基」の両方を含む。

「置換のシクロアルキル基」は「無置換のシクロアルキル基」が置換基を

有する場合であり、下記の「無置換のシクロアルキル基」が置換基を有する基や、置換のシクロアルキル基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、「無置換のシクロアルキル基」が置換基を有する基がさらに置換基を有する基や、「置換のシクロアルキル基」がさらに置換基を有する基等も含まれる。

[0043] 無置換の脂肪族環基：

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、  
2-ノルボルニル基

[0044] 置換のシクロアルキル基：

4-メチルシクロヘキシル基

[0045] 本明細書に記載の $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基の具体例（具体例群G7）としては、

$-Si(G1)(G1)(G1)$ 、  
 $-Si(G1)(G2)(G2)$ 、  
 $-Si(G1)(G1)(G2)$ 、  
 $-Si(G2)(G2)(G2)$ 、  
 $-Si(G3)(G3)(G3)$ 、  
 $-Si(G5)(G5)(G5)$ 、  
 $-Si(G6)(G6)(G6)$

が挙げられる。

ここで、

G 1 は具体例群 G 1 に記載の「アリール基」である。

G 2 は具体例群 G 2 に記載の「複素環基」である。

G 3 は具体例群 G 3 に記載の「アルキル基」である。

G 5 は具体例群 G 5 に記載の「アルキニル基」である。

G 6 は具体例群 G 6 に記載の「シクロアルキル基」である。

[0046] 本明細書に記載の  $-O-$  ( $R_{904}$ ) 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)、

$-O$  (G 6)

が挙げられる。

ここで、

G 1 は具体例群 G 1 に記載の「アリール基」である。

G 2 は具体例群 G 2 に記載の「複素環基」である。

G 3 は具体例群 G 3 に記載の「アルキル基」である。

G 6 は具体例群 G 6 に記載の「シクロアルキル基」である。

[0047] 本明細書に記載の  $-S-$  ( $R_{905}$ ) 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)、

$-S$  (G 6)

が挙げられる。

ここで、

G 1 は具体例群 G 1 に記載の「アリール基」である。

G 2 は具体例群 G 2 に記載の「複素環基」である。

G 3 は具体例群 G 3 に記載の「アルキル基」である。

G 6 は具体例群 G 6 に記載の「シクロアルキル基」である。

[0048] 本明細書に記載の  $-N(R_{906})(R_{907})$  で表される基の具体例（具体例群 G 10）としては、

$-N(G1)(G1)$ 、

$-N(G2)(G2)$ 、

$-N(G1)(G2)$ 、

$-N(G3)(G3)$ 、

$-N(G6)(G6)$

が挙げられる。

ここで、

G 1 は具体例群 G 1 に記載の「アリール基」である。

G 2 は具体例群 G 2 に記載の「複素環基」である。

G 3 は具体例群 G 3 に記載の「アルキル基」である。

G 6 は具体例群 G 6 に記載の「シクロアルキル基」である。

[0049] 本明細書に記載の「ハロゲン原子」の具体例（具体例群 G 11）としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等が挙げられる。

[0050] 本明細書に記載の「アルコキシ基」の具体例としては、 $-O(G3)$  で表される基であり、ここで、G 3 は具体例群 G 3 に記載の「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、より好ましくは1～18である。

本明細書に記載の「アルキルチオ基」の具体例としては、 $-S(G3)$  で表される基であり、ここで、G 3 は具体例群 G 3 に記載の「アルキル基」である。「無置換のアルキルチオ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30、より好ましくは1～18である。

本明細書に記載の「アリールオキシ基」の具体例としては、 $-O(G1)$  で表される基であり、ここで、G 1 は具体例群 G 1 に記載の「アリール基」である。「無置換のアリールオキシ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途

記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30、より好ましくは6～18である。

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

本明細書に記載の「アラルキル基」の具体例としては、 $-(G3)-(G1)$ で表される基であり、ここで、 $G3$ は具体例群 $G3$ に記載の「アルキル基」であり、 $G1$ は具体例群 $G1$ に記載の「アリール基」である。従って、「アラルキル基」は、「アリール基」が置換した、「置換のアルキル基」の一実施形態である。「無置換のアリール基」が置換した「無置換のアルキル基」である「無置換のアラルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、7～50であり、好ましくは7～30、より好ましくは7～18である。

「アラルキル基」の具体例としては、例えば、ベンジル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-*t*-ブチル基、 $\alpha$ -ナフチルメチル基、1- $\alpha$ -ナフチルエチル基、2- $\alpha$ -ナフチルエチル基、1- $\alpha$ -ナフチルイソプロピル基、2- $\alpha$ -ナフチルイソプロピル基、 $\beta$ -ナフチルメチル基、1- $\beta$ -ナフチルエチル基、2- $\beta$ -ナフチルエチル基、1- $\beta$ -ナフチルイソプロピル基、2- $\beta$ -ナフチルイソプロピル基等が挙げられる。

[0051] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリール基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはフェニル基、*p*-ビフェニル基、*m*-ビフェニル基、*o*-ビフェニル基、*p*-ターフェニル-4-イル基、*p*-ターフェニル-3-イル基、*p*-ターフェニル-2-イル基、*m*-ターフェニル-4-イル基、*m*-ターフェニル-3-イル基、*m*-ターフェニル-2-イル基、*o*-ターフェニル-4-イル基、*o*-ターフェニル-3-イル基、*o*-ターフ

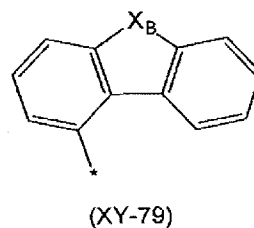
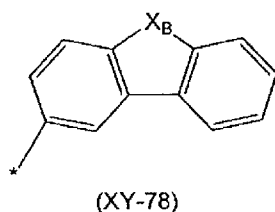
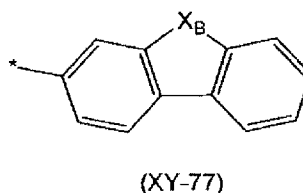
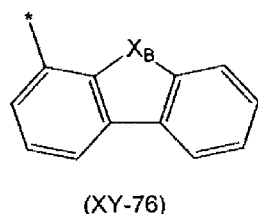
エニル-2-イル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9, 9'-ススピロビフルオレニル基、9, 9-ジフェニルフルオレニル基等である。

[0052] 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、9-カルバゾリル基）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ジアザジベンゾチオフェニル基、（9-フェニル）カルバゾリル基（（9-フェニル）カルバゾール-1-イル基、（9-フェニル）カルバゾール-2-イル基、（9-フェニル）カルバゾール-3-イル基、又は（9-フェニル）カルバゾール-4-イル基）、（9-ビフェニル）カルバゾリル基、（9-フェニル）フェニルカルバゾリル基、ジフェニルカルバゾール-9-イル基、フェニルカルバゾール-9-イル基、フェニルトリアジニル基、ビフェニルトリアジニル基、ジフェニルトリアジニル基、フェニルジベンゾフラニル基、フェニルジベンゾチオフェニル基、インドロカルバゾリル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、ピロリル基、インドリル基、ピロロ[3, 2, 1-jk]カルバゾリル基、フラニル基、ベンゾフラニル基、チオフェニル基、ベンゾチオフェニル基、ピラゾリル基、イミダゾリル基、ベンズイミダゾリル基、トリアゾリル基、オキサゾリル基、ベンズオキサゾリル基、チアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、イソチアゾリル基、ベンズイソチアゾリル基、チアジアゾリル基、イソオキサゾリル基、ベンズイソオキサゾリル基、ピロリジニル基、ピペリジニル基、

ピペラジニル基、イミダゾリジニル基、インドロ [3, 2, 1-j k] カルバゾリル基、ジベンゾチオフェニル基等である。

[0053] 上記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。

[0054] [化4]



[0055] 式 (XY-76) ~ (XY-79) 中、 $X_B$  は、酸素原子又は硫黄原子である。

[0056] 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、*t*-ブチル基等である。

[0057] 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「アリール基」を2価にした基をいう。「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「アリール基」を2価にした基等が挙げられる。即ち、「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「アリール基」の環形成炭素に結合している1つの水素を除いた基である。

[0058] 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」の具体例（具体例群G13）としては、具体例群G2に記載の「複素環基」を2価にした

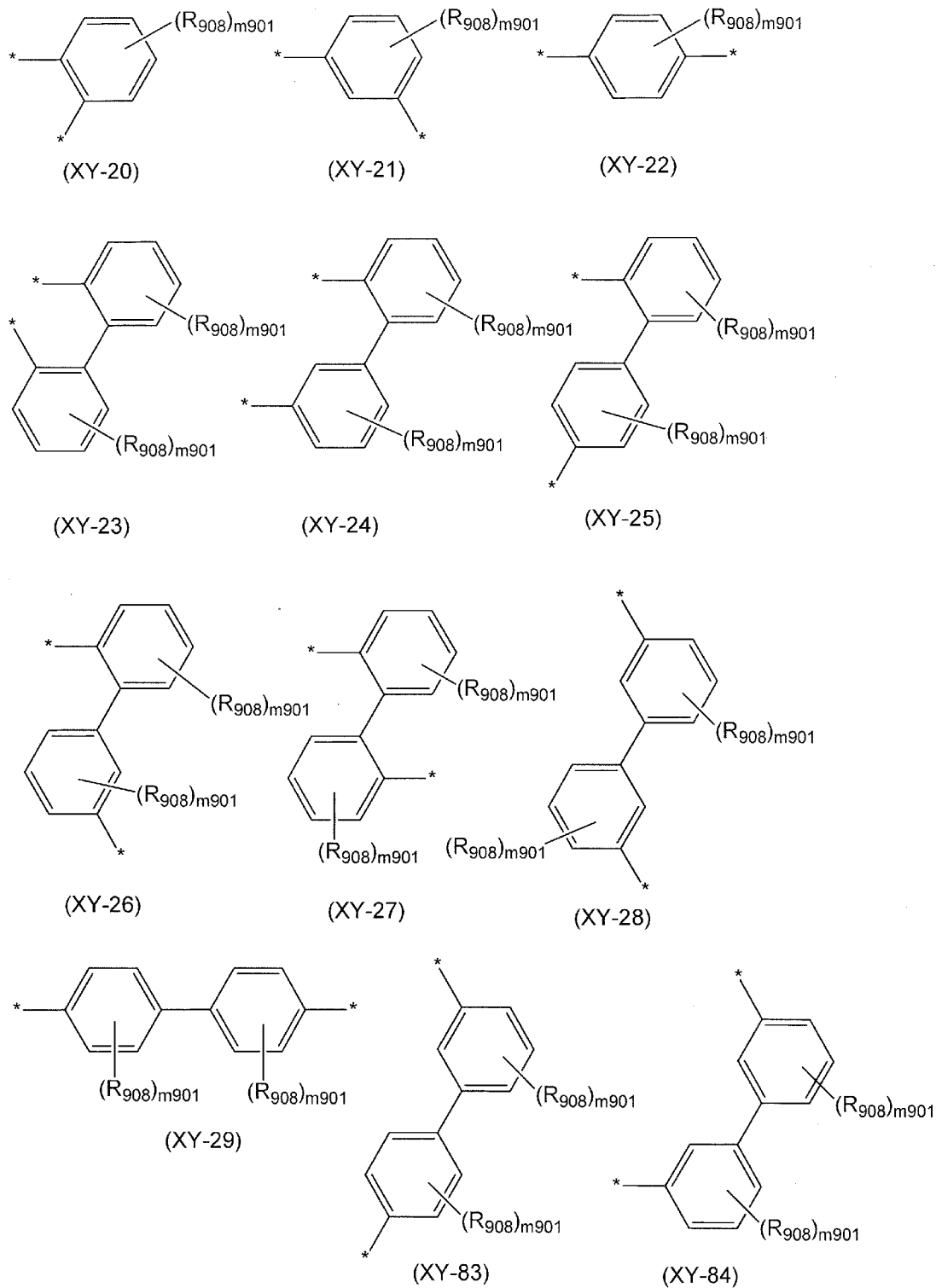
基等が挙げられる。即ち、「置換もしくは無置換の2価の複素環基」の具体例（具体例群G 1 3）としては、具体例群G 2に記載の「複素環基」の環形成原子に結合している1つの水素を除いた基である。

[0059] 本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群G 1 4）としては、具体例群G 3に記載の「アルキル基」を2価にした基等が挙げられる。即ち、「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群G 1 4）としては、具体例群G 3に記載の「アルキル基」のアルカン構造を形成する炭素に結合している1つの水素を除いた基である。

[0060] 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、好ましくは以下いずれかの基である。

[0061]

[化5]



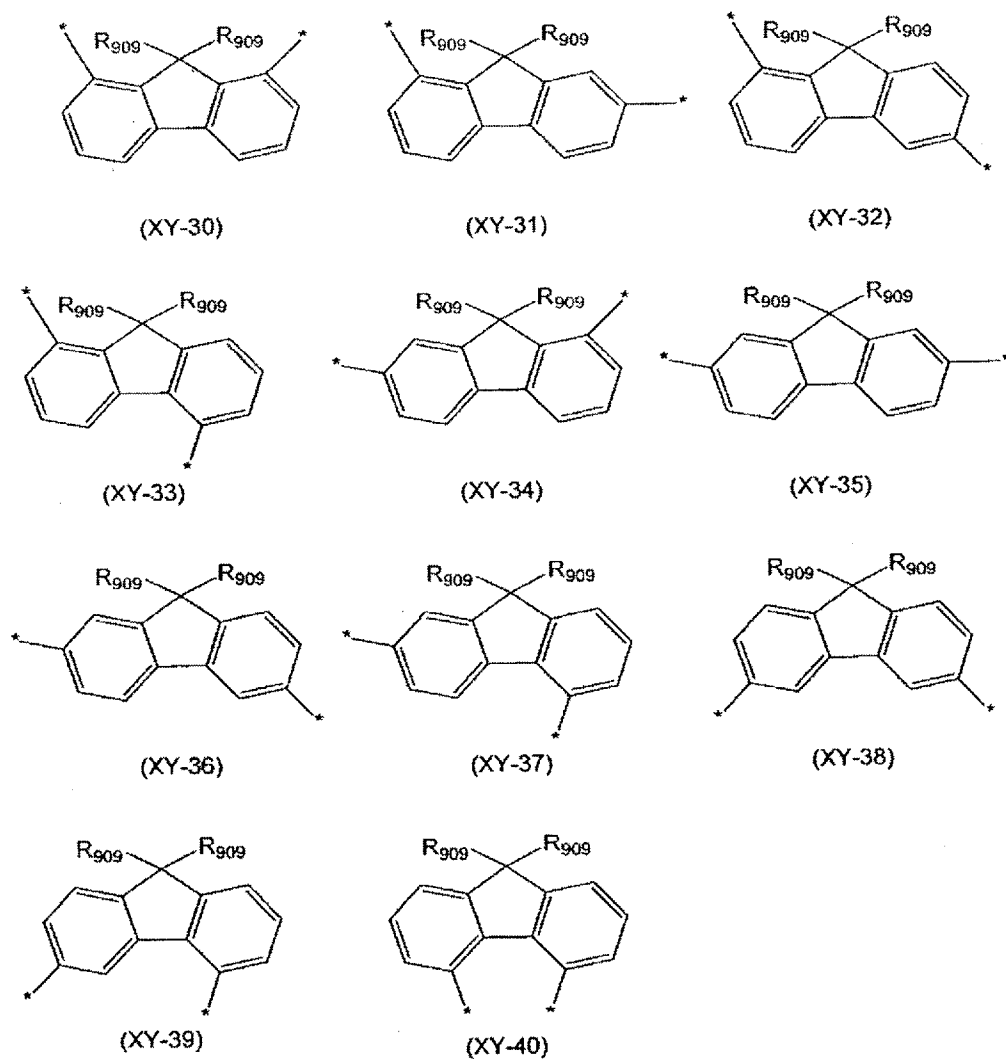
[0062] 式 (XY-20) ~ (XY-29)、(XY-83) 及び (XY-84)

中、 $R_{908}$ は、置換基である。

$m_{901}$ は、0~4の整数であり、 $m_{901}$ が2以上のとき、複数存在す

る  $R_{908}$  は互いに同一であってもよいし、異なってもよい。

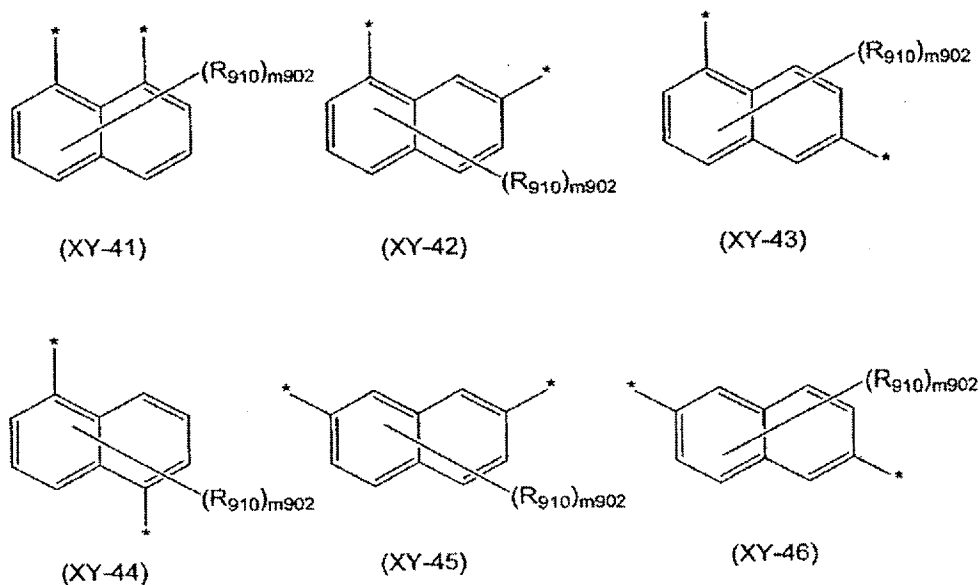
[0063] [化6]



[0064] 式 (XY-30) ~ (XY-40) 中、 $R_{909}$  は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。2 個の  $R_{909}$  は、単結合を介して互いに結合して環を形成してもよい。

[0065]

[化7]



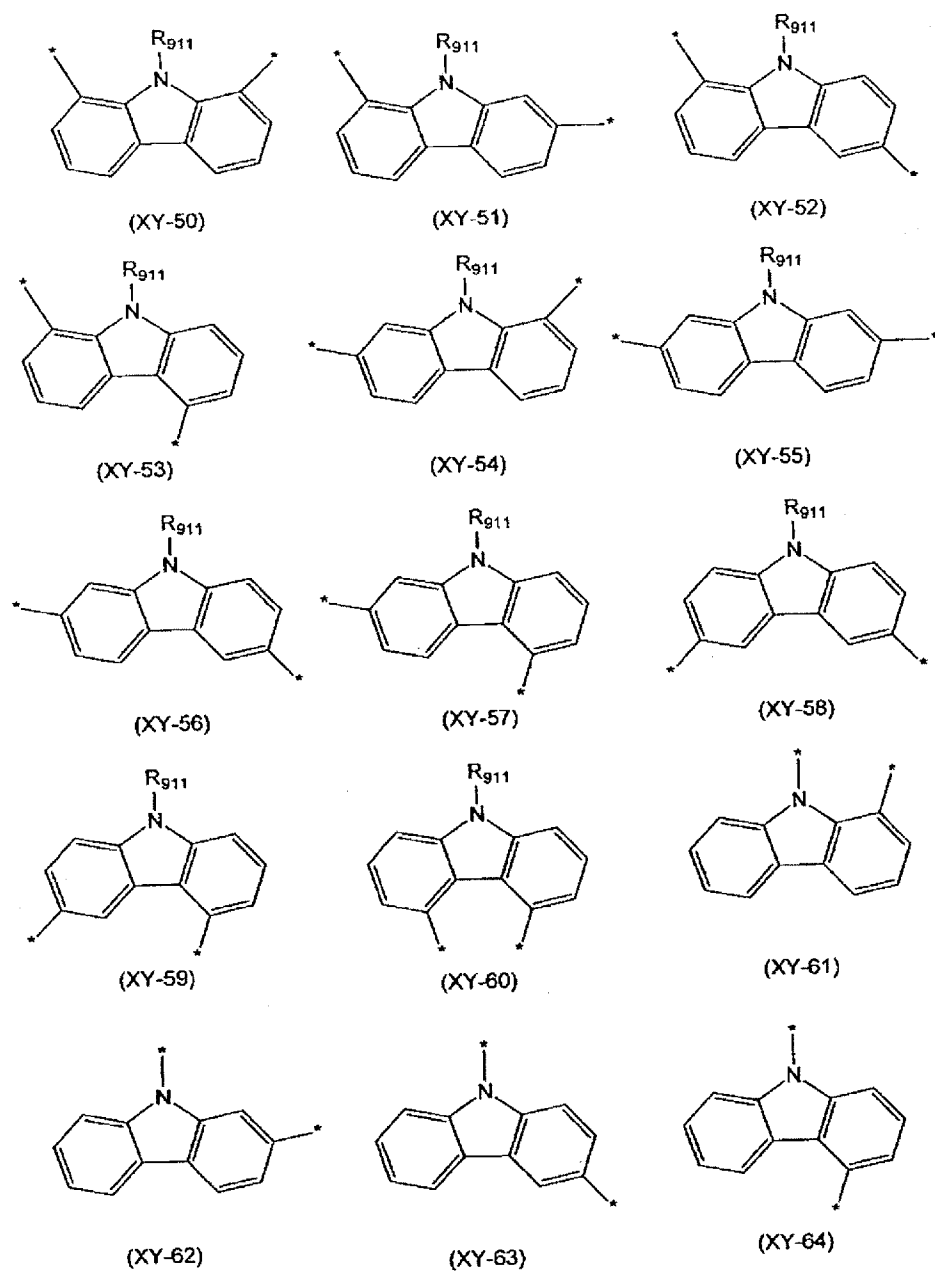
[0066] 式 (XY-41) ~ (XY-46) 中、 $R_{910}$  は、置換基である。

$m_{902}$  は 0 ~ 6 の整数である。 $m_{902}$  が 2 以上のとき、複数存在する  $R_{910}$  は互いに同一であってもよいし、異なってもよい。

[0067] 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、好ましくは以下いずれかの基である。

[0068]

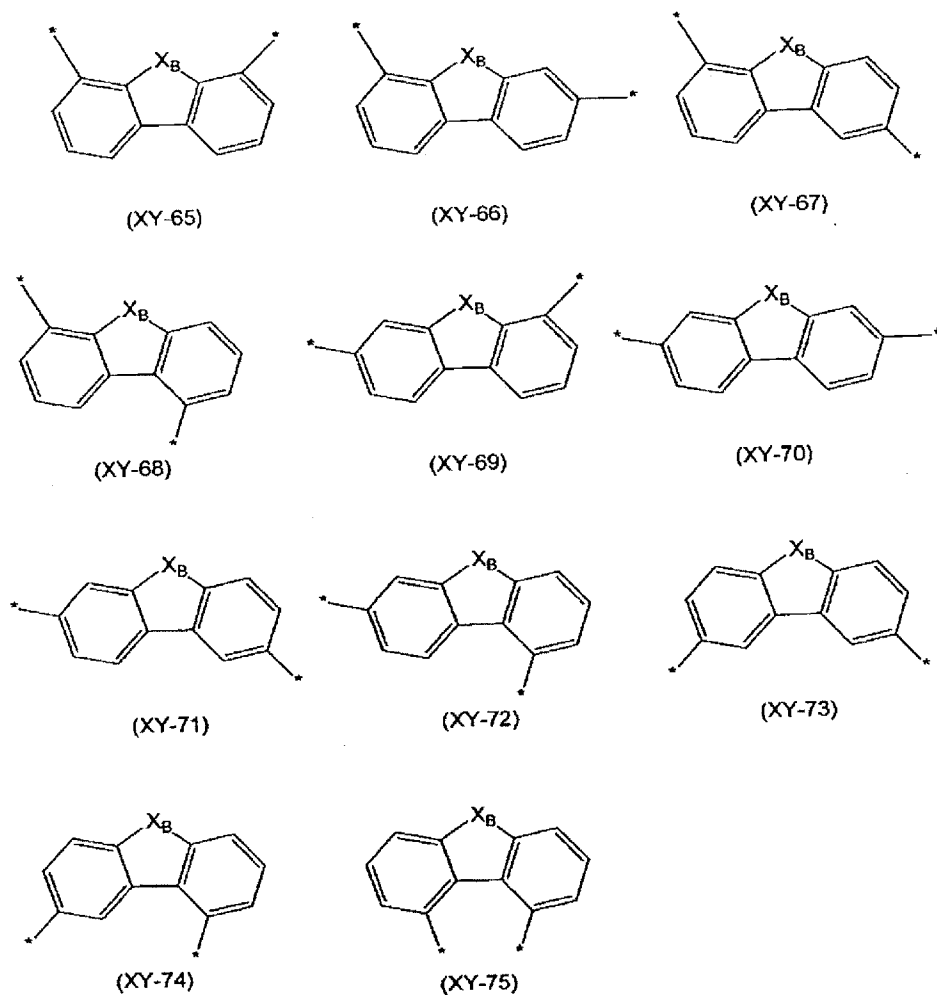
[化8]



[0069] 式 (XY-50) ~ (XY-60) 中、 $R_{911}$  は、水素原子、又は置換基である。

[0070]

[化9]

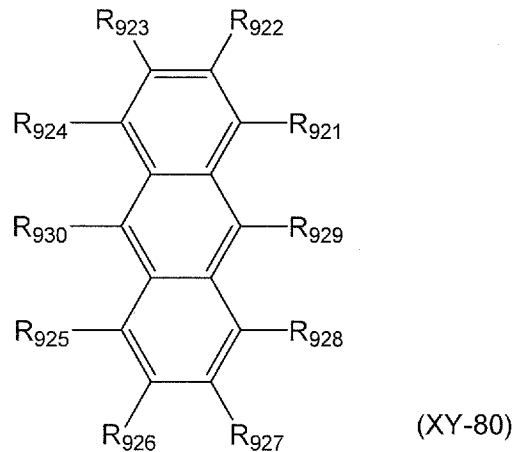


[0071] 上記式 (XY-65) ~ (XY-75) 中、 $X_B$  は、酸素原子又は硫黄原子である。

[0072] 本明細書において、「隣接する2つ以上の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する」場合について、母骨格がアントラセン環である下記式 (XY-80) 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。

[0073]

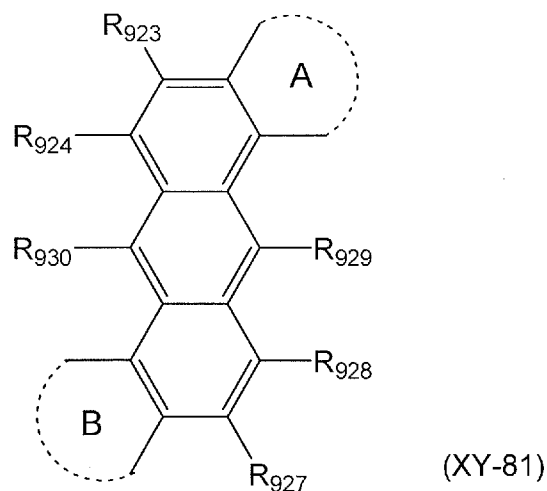
[化10]



[0074] 例えば、 $R_{921} \sim R_{930}$ のうちの「隣接する2つ以上の1組以上が、互いに結合して、環を形成する」場合の1組となる隣接する2つとは、 $R_{921}$ と $R_{922}$ 、 $R_{922}$ と $R_{923}$ 、 $R_{923}$ と $R_{924}$ 、 $R_{924}$ と $R_{930}$ 、 $R_{930}$ と $R_{925}$ 、 $R_{925}$ と $R_{926}$ 、 $R_{926}$ と $R_{927}$ 、 $R_{927}$ と $R_{928}$ 、 $R_{928}$ と $R_{929}$ 、及び $R_{929}$ と $R_{921}$ である。

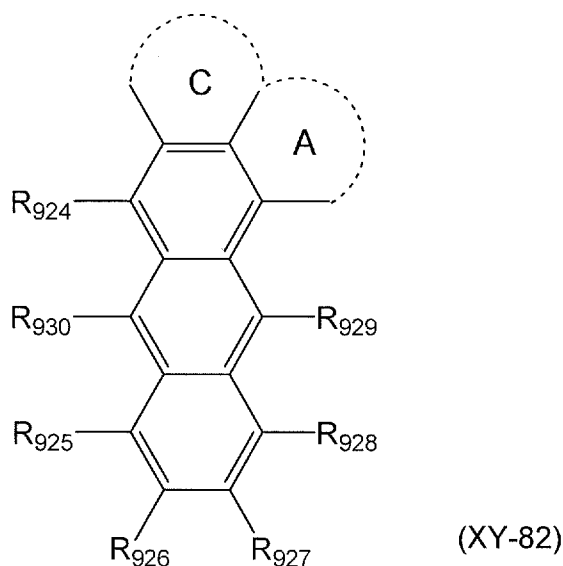
[0075] 上記「1組以上」とは、上記隣接する2つの2組以上が同時に環を形成してもよいことを意味する。例えば、 $R_{921}$ と $R_{922}$ とが互いに結合して環Aを形成し、同時に $R_{925}$ と $R_{926}$ とが互いに結合して環Bを形成した場合は、下記式(XY-81)で表される。

[0076] [化11]



[0077] 「隣接する2つ以上」が環を形成する場合とは、例えば、 $R_{921}$ と $R_{922}$ とが互いに結合して環Aを形成し、 $R_{922}$ と $R_{923}$ とが互いに結合して環Cを形成し、 $R_{921} \sim R_{923}$ の互いに隣接する3つでアントラセン母骨格に縮合する、 $R_{922}$ を共有する環A及び環Cを形成した場合は、下記式(XY-82)で表される。

[0078] [化12]



[0079] 上記式(XY-81)及び(XY-82)において形成された環A～Cは、飽和又は不飽和の環である。

「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脂肪族複素環を意味する。

例えば、上記式(XY-81)に示す、 $R_{921}$ と $R_{922}$ が互いに結合して形成された環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 $R_{922}$ で環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、 $R_{922}$ 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となる。また、飽和の環を形成する場合には、シクロヘキサン環となる。

[0080] ここで、「任意の元素」は、好ましくは、C元素、N元素、O元素、S元素である。任意の元素において（例えばC元素又はN元素の場合）、環形成に関与しない結合は、水素原子等で終端されてもよいし、任意の置換基で置換されてもよい。C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となる。

飽和又は不飽和の環を構成する「1以上の任意の元素」は、好ましくは2個以上15個以下、より好ましくは3個以上12個以下、さらに好ましくは、3個以上5個以下である。

[0081] 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アリール基が、水素原子で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、水素原子で終端された構造が挙げられる。

脂肪族炭化水素環の具体例としては、具体例群G6において具体例として挙げられたシクロアルキル基が、水素原子で終端された構造が挙げられる。

上記の「飽和又は不飽和の環」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「飽和又は不飽和の環」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。

[0082] 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（以下、「任意の置換基」と呼ぶことがある。）は、

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<sub>901</sub>)(R<sub>902</sub>)(R<sub>903</sub>)、  
 —O—(R<sub>904</sub>)、  
 —S—(R<sub>905</sub>)、  
 —N(R<sub>906</sub>)(R<sub>907</sub>)

(ここで、  
R<sub>901</sub>～R<sub>907</sub>は、それぞれ独立に、  
水素原子、  
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は  
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。R<sub>901</sub>  
～R<sub>907</sub>が2個以上存在する場合、2個以上のR<sub>901</sub>～R<sub>907</sub>のそれぞれは同  
一でもよく、異なってもよい。)、  
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1価の複素環基  
からなる群から選択される基である。

[0083] 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1価の複素環基  
からなる群から選択される基である。

[0084] 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1価の複素環基  
からなる群から選択される基である。

[0085] 上記任意の置換基の各基の具体例は、上述した通りである。

[0086] 本明細書において、特にことわらない限り、隣接する任意の置換基同士で、飽和又は不飽和の環（好ましくは、置換もしくは無置換の飽和もしくは不

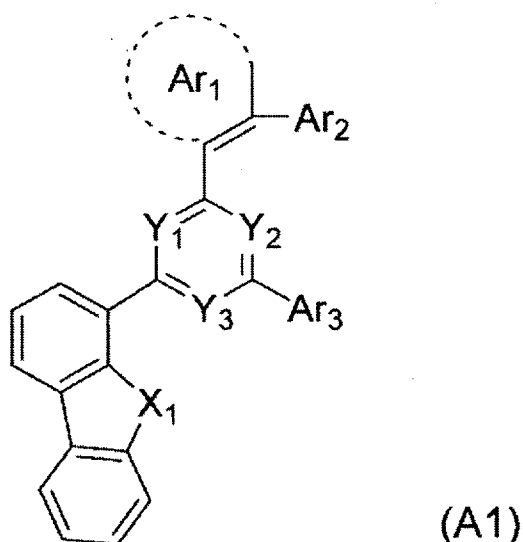
飽和の、5員環又は6員環、より好ましくは、ベンゼン環)を形成してもよい。

本明細書において、特にことわらない限り、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のものが挙げられる。

[0087] [式(A1)で表される化合物]

本発明の一態様の新規化合物は、下記式(A1)で表される。

[0088] [化13]



[0089] [式(A1)中、

$X_1$ は、O又はSである。

$Y_1$ 、 $Y_2$ 及び $Y_3$ は、それぞれ独立に、CH又はNである。

但し、 $Y_1$ 、 $Y_2$ 及び $Y_3$ のうち2つ以上はNである。

$Ar_1$ は、少なくともオルト位に $Ar_2$ が置換したベンゼン環を含む、少なくとも1つの置換基を有する環形成炭素数6～50のアリール基である。

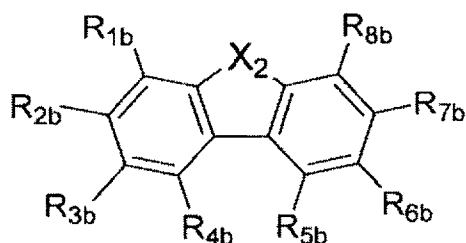
$Ar_2$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

$Ar_1$ と $Ar_2$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成し、該5員の炭化水素環を介して縮合した多環縮合アリール基とな

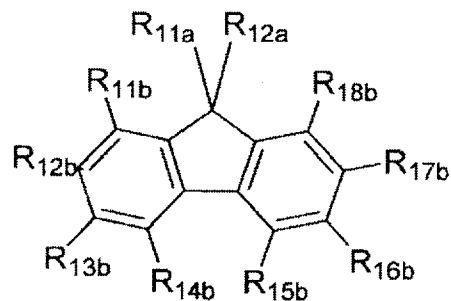
るか、あるいは置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない。

$A r_3$ は、下記式(A2-1)で表される基、下記式(A2-2)で表される基、下記式(A2-3)で表される基、及び下記式(A2-4)で表される基からなる群から選択される基である。

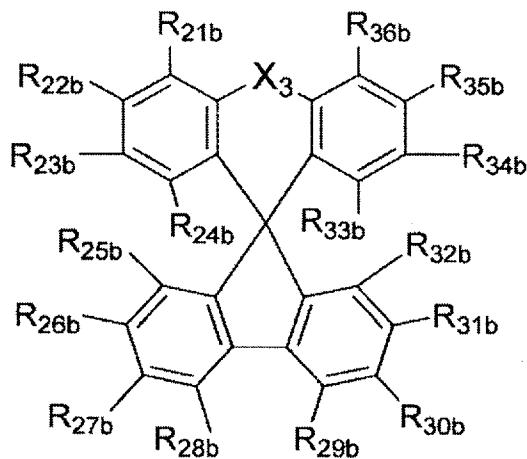
[0090] [化14]



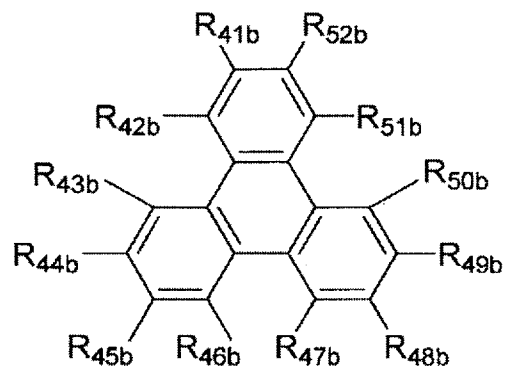
(A2-1)



(A2-2)



(A2-3)



(A2-4)

[0091] (式(A2-1)中、

$X_2$ は、O又はSである。

$R_{1b} \sim R_{8b}$ のうちの1つは、 $Y_2$ と $Y_3$ の間の炭素原子に結合する単結合であり、残りは水素原子である。)

(式(A2-2)中、

$R_{11a}$ 及び $R_{12a}$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環

を形成しない。

$R_{11b} \sim R_{18b}$ のうちの1つは、 $Y_2$ と $Y_3$ の間の炭素原子に結合する単結合である。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{11a}$ 及び $R_{12a}$ 、及び前記単結合ではない $R_{11b} \sim R_{18b}$ は、それぞれ独立に、水素原子、

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

(式(A2-3)中、

$R_{21b} \sim R_{36b}$ のうちの1つは、 $Y_2$ と $Y_3$ の間の炭素原子に結合する単結合である。

$X_3$ は、 $NR_{21a}$ 、 $CR_{22a}R_{23a}$ 、O又はSである。

$R_{21a}$ は、前記単結合ではない $R_{21b}$ 又は前記単結合ではない $R_{36b}$ のいずれか一方又は両方と互いに結合して置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記単結合ではない $R_{22b} \sim R_{35b}$ 、前記単結合ではなく、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{21b}$ 及び $R_{36b}$ 、前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{21a}$ 、並びに $R_{22a}$ 及び $R_{23a}$ は、それぞれ独立に、水素原子、

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

(式(A2-4)中、

$R_{41b} \sim R_{52b}$ のうちの1つは、 $Y_2$ と $Y_3$ の間の炭素原子に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R_{41b} \sim R_{52b}$ は、それぞれ独立に、水素原子、

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

[0092] 上記式 (A 1) で表される化合物は、アフィニティ値が低く、これを電子輸送層の材料として用いると、発光層への電子注入性が向上することで発光効率が低い、及び／又は駆動電圧が低い有機 EL 素子が得られる。

[0093] 上記したように、本明細書において使用する「水素原子」は軽水素原子、重水素原子、及び三重水素原子を包含する。従って、前記式 (A 1) で表される化合物は天然由来の重水素原子を有していてもよい。

また、原料化合物として、当該化合物の有する水素原子の一部又は全てが重水素原子である化合物（以下、「重水素化された化合物」という）を使用することにより、前記式 (A 1) で表される化合物に重水素原子を意図的に導入してもよい。従って、一実施形態においては、前記式 (A 1) で表される化合物は少なくとも 1 個の重水素原子を有する（以下、重水素原子を有する前記式 (A 1) で表される化合物の実施形態を、「実施形態 D」という）。即ち、前記式 (A 1) で表される化合物は、式 (A 1) 又はその好ましい実施形態の式で表される化合物であって、該化合物が有する水素原子のうちの少なくとも 1 個が重水素原子である化合物であってもよい。重水素原子は、前記式 (A 1) 又はその好ましい実施形態の式で表される化合物のいずれの位置の水素原子であってもよい。

[0094] 実施形態 D の前記式 (A 1) で表される化合物の重水素化率（前記式 (A 1) で表される化合物中の全水素原子数に対する重水素原子数の割合）は使用する原料化合物の重水素化率に依存する。

使用する全ての原料化合物の重水素化率を 100% にすることは通常困難であるので、前記式 (A 1) で表される化合物の重水素化率は好ましくは 100% 未満である。

[0095] 実施形態 D の前記式 (A 1) で表される化合物の重水素化率（前記式 (A 1) で表される化合物中の全水素原子数に対する重水素原子数の割合）は、1% 以上、好ましくは 3% 以上、より好ましくは 5% 以上、さらに好ましく

は10%以上である。

[0096] 実施形態Dの前記式(A1)で表される化合物は、化学構造が同一であって、重水素化された化合物と重水素化されていない化合物を含む混合物であってもよい、異なる重水素化率を有する2以上の化合物の混合物であってもよい。このような混合物の重水素化率(前記混合物に含まれる前記式(A1)で表される化合物中の全水素原子数に対する重水素原子数の割合)は、1%以上、好ましくは3%以上、より好ましくは5%以上、さらに好ましくは10%以上、かつ、100%未満である。

[0097] 実施形態Dの前記式(A1)で表される化合物において、 $Y_1$ 、 $Y_2$ 及び $Y_3$ のうちの1つがCHの場合のH(水素原子)が重水素原子であってもよい。

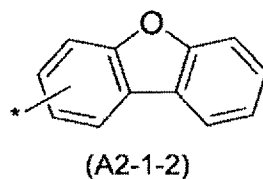
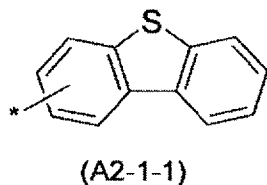
[0098] 実施形態Dの前記式(A1)で表される化合物において、 $A_{r1}$ 及び $A_{r2}$ が表すアリール基が有する水素原子の少なくとも1つが重水素原子であってもよい。重水素化率( $A_{r1}$ 及び $A_{r2}$ が表すアリール基が有する全水素原子数に対する重水素原子数の割合)は、1%以上、好ましくは3%以上、より好ましくは5%以上、さらに好ましくは10%以上、かつ、100%未満である。

[0099] 実施形態Dの前記式(A1)又は(1)で表される化合物において、 $A_{r3}$ が表す前記式(A2-1)で表される基、下記式(A2-2)で表される基、下記式(A2-3)で表される基、及び下記式(A2-4)で表される基からなる群から選択される基が有する水素原子から選ばれる少なくとも1つの水素原子が重水素原子であってもよい。重水素化率( $A_{r3}$ が表す基が有する全水素原子数に対する重水素原子数の割合)は、1%以上、好ましくは3%以上、より好ましくは5%以上、さらに好ましくは10%以上、かつ、100%未満である。

[0100] 一実施形態においては、前記式(A2-1)で表される基が、下記式(A2-1-1)又は(A2-1-2)で表される基である。

[0101]

[化15]



(式 (A2-1-1) 及び (A2-1-2) 中、\*は、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合を表す。)

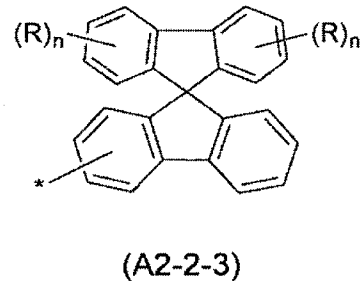
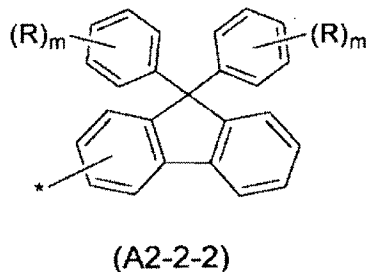
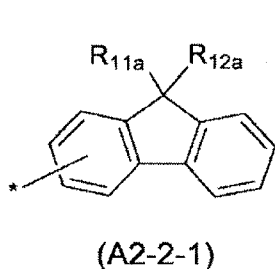
[0102] 一実施形態においては、前記式 (A2-2) 中の  $R_{12b}$ 、 $R_{13b}$ 、 $R_{16b}$ 、 $R_{17b}$  のうちの1つは、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合である。

一実施形態においては、前記式 (A2-2) 中の  $R_{14b}$ 、 $R_{15b}$  のうちの1つは、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合である。

一実施形態においては、前記式 (A2-2) 中の  $R_{12b}$ 、 $R_{17b}$  のうちの1つは、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合である。

[0103] 一実施形態においては、前記式 (A2-2) で表される基が、下記式 (A2-2-1) で表される基、下記式 (A2-2-2) で表される基、及び下記式 (A2-2-3) で表される基から選択される。

[0104] [化16]



[0105] (式 (A2-2-1) ~ (A2-2-3) 中、 $R_{11a}$  及び  $R_{12a}$  は、前記式 (A1) で定義した通りである。

\*は、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合を表す。

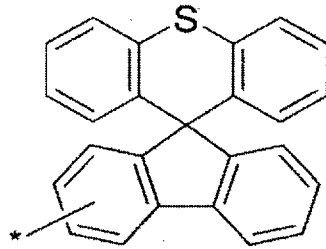
Rは、置換基である。

mは、0~5の整数である。

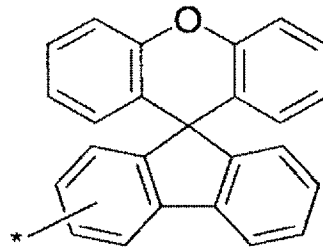
nは、0~4の整数である。)

[0106] 一実施形態においては、前記式 (A 2-3) で表される基が、下記式 (A 2-3-1) で表される基、下記式 (A 2-3-2) で表される基、下記式 (A 2-3-3) で表される基、及び下記式 (A 2-3-4) で表される基から選択される。

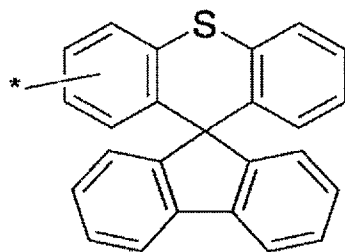
[0107] [化17]



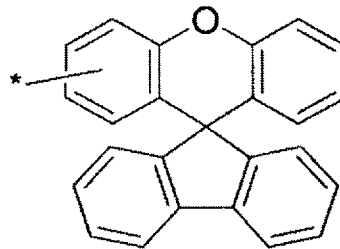
(A2-3-1)



(A2-3-2)



(A2-3-3)



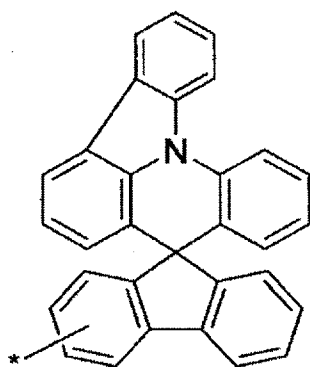
(A2-3-4)

(式 (A 2-3-1) ~ (A 2-3-4) 中、\*は、 $Y_2$ と $Y_3$ の間の炭素原子に結合する単結合を表す。)

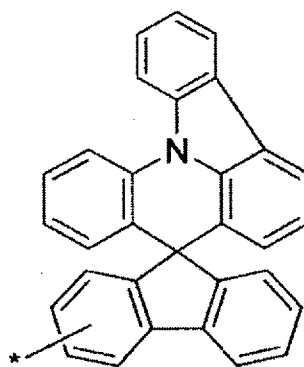
[0108] 一実施形態においては、前記式 (A 2-3) で表される基が、下記式 (A 2-3-5) で表される基、及び下下記式 (A 2-3-6) で表される基から選択される。

[0109]

[化18]



(A2-3-5)

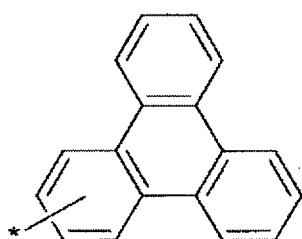


(A2-3-6)

(式 (A 2 - 3 - 5) 及び (A 2 - 3 - 6) 中、\*は、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合を表す。)

[0110] 一実施形態においては、前記式 (A 2 - 4) で表される基が、下記式 (A 2 - 4 - 1) で表される基である。

[0111] [化19]



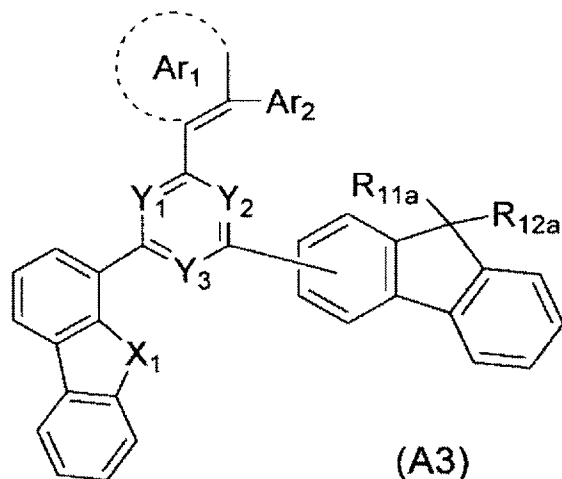
(A2-4-1)

(式 (A 2 - 4 - 1) 中、\*は、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合を表す。)

[0112] 一実施形態においては、前記式 (A 1) で表される化合物が下記式 (A 3) で表される化合物である。

[0113]

[化20]



[0114] (式(A3)中、 $X_1$ 、 $Y_1 \sim Y_3$ 、 $Ar_1$ 及び $Ar_2$ は、前記式(A1)で定義した通りである。

$R_{11a}$ 及び $R_{12a}$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{11a}$ 及び $R_{12a}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

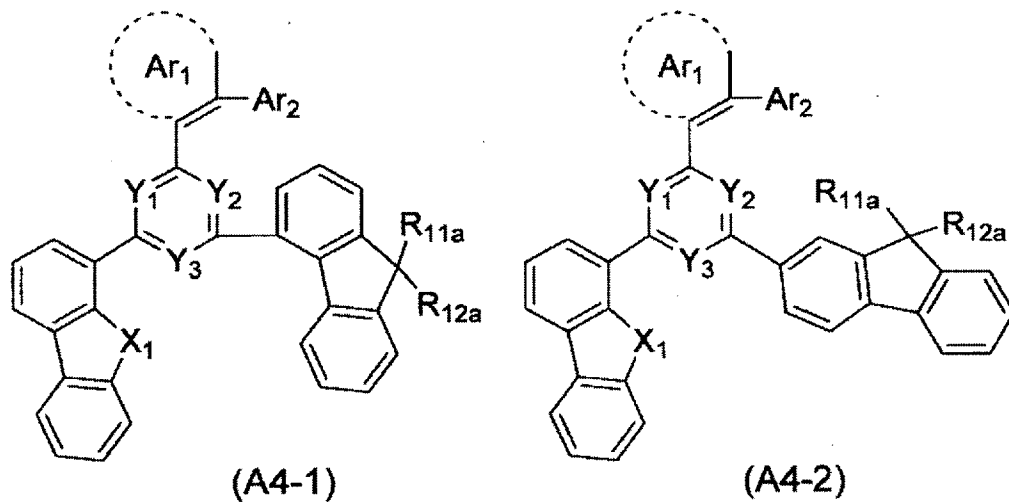
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。)

[0115] 一実施形態においては、前記式(A3)で表される化合物が、下記式(A4-1)又は(A4-2)で表される化合物である。

[0116]

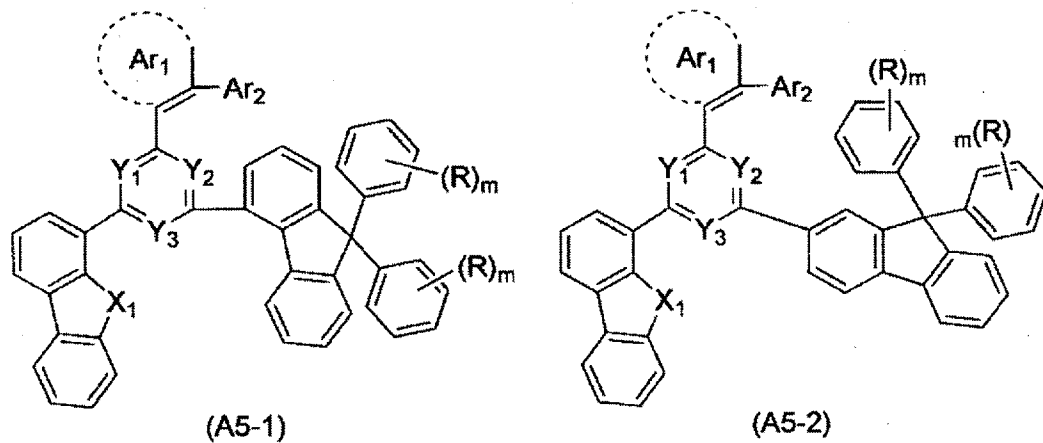
[化21]



[0117] (式 (A4-1) 及び (A4-2) 中、X<sub>1</sub>、Y<sub>1</sub>~Y<sub>3</sub>、Ar<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>、R<sub>11a</sub> 及び R<sub>12a</sub> は、前記式 (A3) で定義した通りである。)

[0118] 一実施形態においては、前記式 (A3) で表される化合物が、下記式 (A5-1) 又は (A5-2) で表される化合物である。

[0119] [化22]



[0120] (式 (A5-1) 及び (A5-2) 中、X<sub>1</sub>、Y<sub>1</sub>~Y<sub>3</sub>、Ar<sub>1</sub> 及び Ar<sub>2</sub> は、前記式 (A3) で定義した通りである。

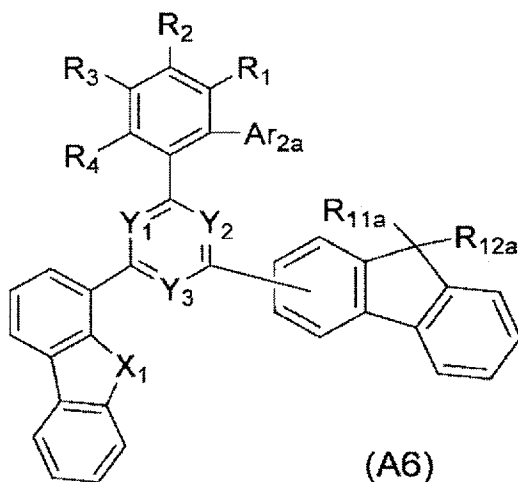
R は、置換基である。

m は、0~5 の整数である。)

[0121] 一実施形態においては、前記式 (A3) で表される化合物が、下記式 (A

6) で表される化合物である。

[0122] [化23]



[0123] (式(A6)中、 $X_1$ 、 $Y_1 \sim Y_3$ 、 $R_{11a}$ 及び $R_{12a}$ は、前記式(A3)で定義した通りである。

$Ar_{2a}$ 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。

前記アリール基である $Ar_{2a}$ と $R_1$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成し、該5員の炭化水素環を介して縮合した、多環縮合アリール基となるか、あるいは置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない。

$Ar_{2a}$ と結合して前記置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない $R_1$ 、及び $R_2 \sim R_4$ 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飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

$Ar_{2a}$ と結合して前記置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1$ 、及び前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_2 \sim R_4$ 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、  
 $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 、  
 $-\text{O}-\text{R}_{904}$ 、  
 $-\text{S}-\text{R}_{905}$ 、  
 $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 、  
 ハロゲン原子、  
 シアノ基、  
 ニトロ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$  は、それぞれ独立に、  
 水素原子、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$  が 2 個以上存在する場合、2 個以上の  $\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$  のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。）

[0124] 一実施形態においては、前記式 (A 6) 中の  $\text{Ar}_{2a}$  が、  
 置換もしくは無置換のフェニル基、  
 置換もしくは無置換のナフチル基、  
 置換もしくは無置換のアントリル基、又は  
 置換もしくは無置換のビフェニル基  
 である。

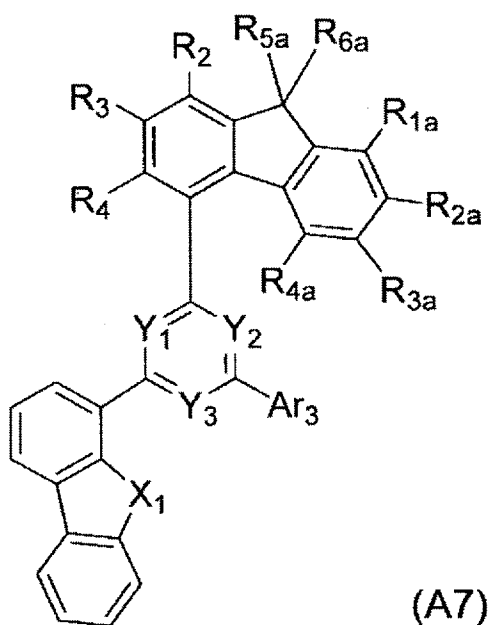
[0125] 一実施形態においては、前記式 (A 6) 中の  $\text{R}_1 \sim \text{R}_4$  の全てが水素原子で

ある。

[0126] 一実施形態においては、 $Ar_3$ が、前記式(A2-1)で表される基である。

[0127] 一実施形態においては、前記式(A1)で表される化合物が、下記式(A7)で表される化合物である。

[0128] [化24]



[0129] (式(A7)中、 $X_1$ 、及び $Y_1 \sim Y_3$ は、前記式(A1)で定義した通りである。

$R_{5a}$ 及び $R_{6a}$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{5a}$ 及び $R_{6a}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

$R_2 \sim R_4$ のうちの隣接する2以上の1組以上、及び $R_{1a} \sim R_{4a}$ のうちの隣

接する2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飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない、 $R_2 \sim R_4$ 、及び $R_{1a} \sim R_{4a}$ 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、

$-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、

$-O-(R_{904})$ 、

$-S-(R_{905})$ 、

$-N(R_{906})(R_{907})$ 、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

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

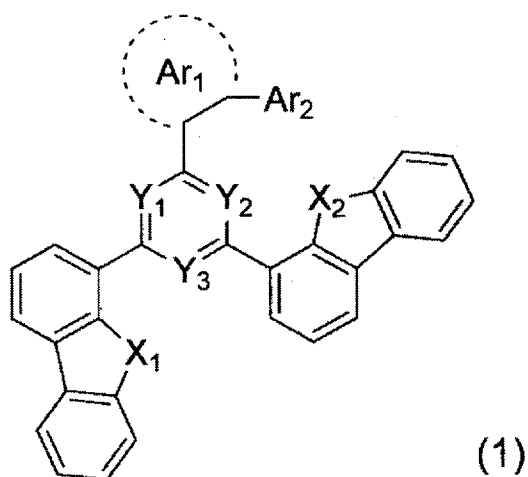
[0130] 一実施形態においては、 $Y_1 \sim Y_3$ が、Nである。

[0131] 一実施形態においては、 $X_1$ がSである。

[0132] [式(1)で表される化合物]

本発明の一態様の新規化合物は、下記式(1)で表される。下記式(1)で表される化合物は、前記式(A1)で表される化合物の一実施形態である。

[0133] [化25]



[0134] (式(1)中、

$X_1$ 及び $X_2$ は、それぞれ独立に、O又はSである。

$Y_1$ 、 $Y_2$ 及び $Y_3$ は、それぞれ独立に、CH又はNである。

但し、 $Y_1$ 、 $Y_2$ 及び $Y_3$ のうち2つ以上はNである。

$Ar_1$ は、少なくともオルト位に $Ar_2$ が置換したベンゼン環を含む、少なくとも1つの置換基を有する環形成炭素数6～50のアリール基である。

$Ar_2$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

$Ar_1$ と $Ar_2$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成し、該5員の炭化水素環を介して縮合した多環縮合アリール基となるか、あるいは置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない。)

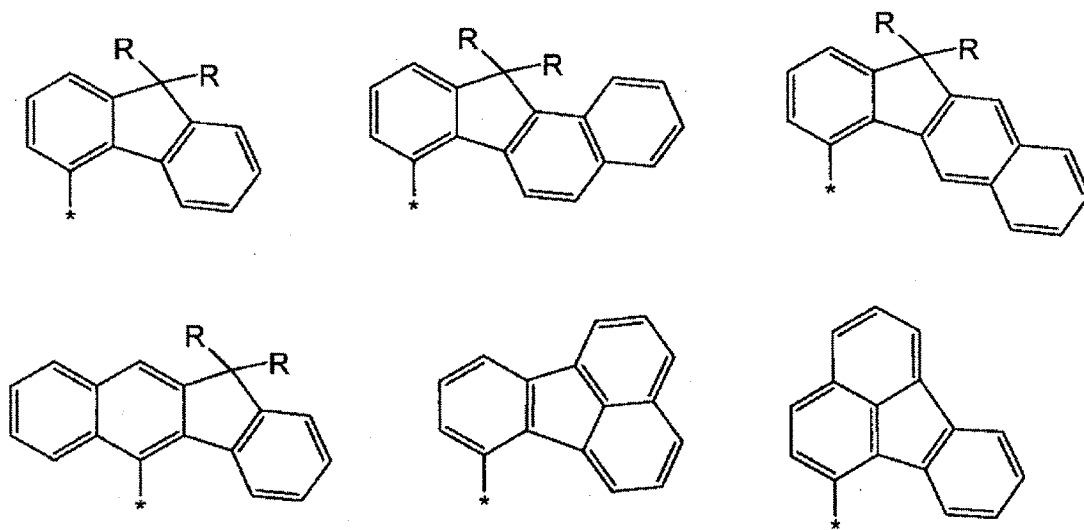
[0135] 式(1)で表される化合物は嵩高い構造を有しており、その構造の嵩高さから、高い電子移動度や、良好な溶解性等を有することも期待される。

[0136] 前記式(1)における、前記 $Ar_1$ である、「少なくともオルト位に $Ar_2$

が置換したベンゼン環を含む、少なくとも1つの置換基を有する環形成炭素数6～50のアリール基」の「アリール基」の具体例としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、フルオレニル基、ナфтаセニル基、ピレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基、フルオランテニル基等が挙げられる。

[0137] また、前記  $A r_1$  である、「少なくともオルト位に  $A r_2$  が置換したベンゼン環を含む、少なくとも1つの置換基を有する環形成炭素数6～50のアリール基」の「アリール基」と、前記アリール基である  $A r_2$  とが5員の炭化水素環を介して縮合して形成される多環縮合アリール基の具体例としては、例えば、下記式で表される基等が挙げられる。

[0138] [化26]

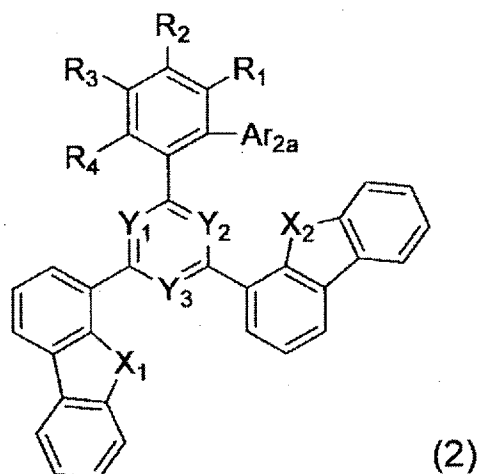


[0139] 上記式中、Rは水素原子又は置換基であり、\*は、 $Y_1 \sim Y_3$ を含む6員環との結合位置である。

[0140] 前記式(1)で表される化合物は、より具体的に示すと、下記式(2)で表される化合物である。

[0141]

[化27]



[0142] (式(2)中、 $X_1$ 、 $X_2$ 、及び $Y_1 \sim Y_3$ は、前記式(1)で定義した通りである。

$Ar_{2a}$ 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。

前記アリール基である $Ar_{2a}$ と $R_1$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成し、該5員の炭化水素環を介して縮合した、多環縮合アリール基となるか、あるいは置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない。

$Ar_{2a}$ と結合して前記置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない $R_1$ 、及び $R_2 \sim R_4$ 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飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

$Ar_{2a}$ と結合して前記置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1$ 、及び前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_2 \sim R_4$ 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、  
 $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 、  
 $-\text{O}-\text{R}_{904}$ 、  
 $-\text{S}-\text{R}_{905}$ 、  
 $-\text{N}(\text{R}_{906})(\text{R}_{907})$ 、  
 ハロゲン原子、  
 シアノ基、  
 ニトロ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

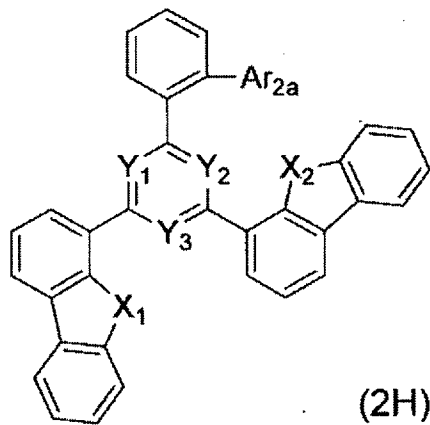
$\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$  は、それぞれ独立に、  
 水素原子、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$  が 2 個以上存在する場合、2 個以上の  $\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$  のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。）

[0143] 尚、前記  $\text{Ar}_1$  である、「少なくともオルト位に  $\text{Ar}_2$  が置換したベンゼン環を含む、少なくとも 1 つの置換基を有する環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基」がフェニル基である場合、オルト位は 2 箇所存在し、一方には  $\text{Ar}_{2a}$  が置換し、他方には、環形成しない  $\text{R}_4$  が置換する。当該  $\text{R}_4$  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場合、フェニル基である前記  $\text{Ar}_1$  は、2 箇所のオルト位に上記アリール基を有することになる。

[0144] 一実施形態においては、前記式 (1) で表される化合物が、下記式 (2 H) で表される化合物である。

[0145] [化28]

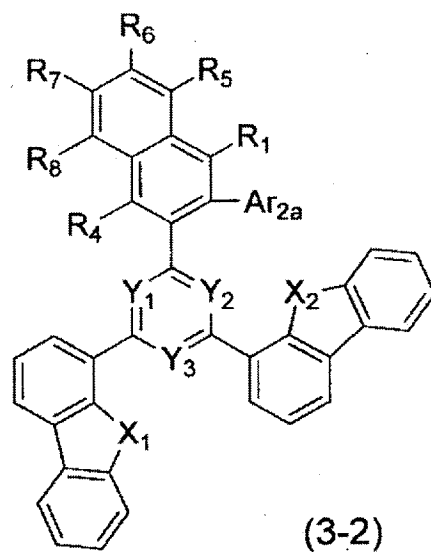
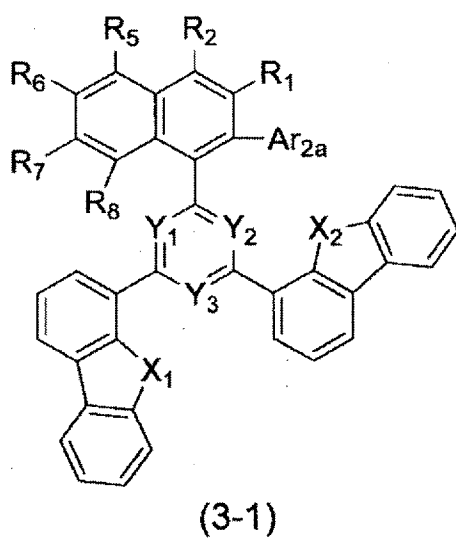


[0146] (式(2H)中、X<sub>1</sub>、X<sub>2</sub>、及びY<sub>1</sub>～Y<sub>3</sub>は、前記式(1)で定義した通りである。

Ar<sub>2a</sub>は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。)

[0147] 一実施形態においては、前記式(1)で表される化合物が、下記式(3-1)で表される化合物又は下記式(3-2)で表される化合物である。

[0148] [化29]



[0149] (式(3-1)及び(3-2)中、X<sub>1</sub>、X<sub>2</sub>、及びY<sub>1</sub>～Y<sub>3</sub>は、前記式(1)で定義した通りである。

$A r_{2a}$ 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。

前記アリール基である $A r_{2a}$ と $R_1$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成し、該5員の炭化水素環を介して縮合した、多環縮合アリール基となるか、あるいは置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない。

$A r_{2a}$ と結合して前記置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない $R_1$ 、並びに $R_2$ 、及び $R_4 \sim R_8$ 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飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

$A r_{2a}$ と結合して前記置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1$ 、並びに前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_2$ 及び $R_4 \sim R_8$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )、

—O—( $R_{904}$ )、

—S—( $R_{905}$ )、

—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

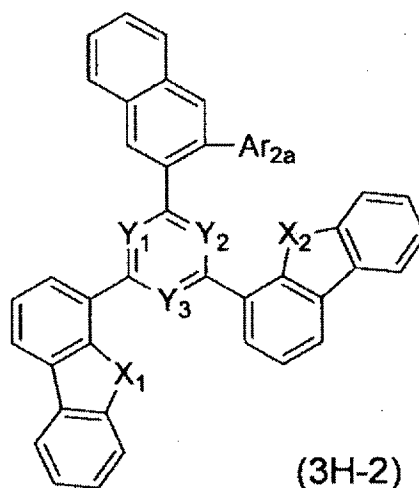
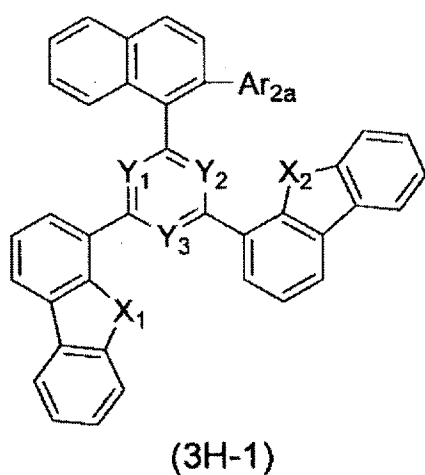
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、  
 水素原子、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

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

[0150] 一実施形態においては、前記式 (1) で表される化合物が、下記式 (3H-1) で表される化合物又は下記式 (3H-2) で表される化合物である。

[0151] [化30]



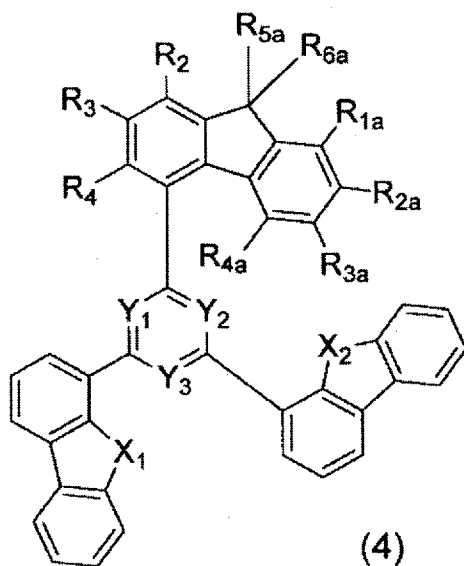
[0152] (式 (3H-1) 及び (3H-2) 中、 $X_1$ 、 $X_2$ 、及び  $Y_1 \sim Y_3$  は、前記式 (1) で定義した通りである。

$Ar_{2a}$  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。）

[0153] 一実施形態においては、前記式 (1) で表される化合物が、下記式 (4) で表される化合物である。

[0154]

[化31]



[0155] (式(4)中、X<sub>1</sub>、X<sub>2</sub>、及びY<sub>1</sub>～Y<sub>3</sub>は、前記式(1)で定義した通りである。

R<sub>5a</sub>及びR<sub>6a</sub>は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しないR<sub>5a</sub>及びR<sub>6a</sub>は、それぞれ独立に、  
水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

R<sub>2</sub>～R<sub>4</sub>のうちの隣接する2以上の1組以上、及びR<sub>1a</sub>～R<sub>4a</sub>のうちの隣接する2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飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない、R<sub>2</sub>～R<sub>4</sub>、及びR<sub>1a</sub>～R<sub>4a</sub>は、それぞれ独立に、  
水素原子、

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

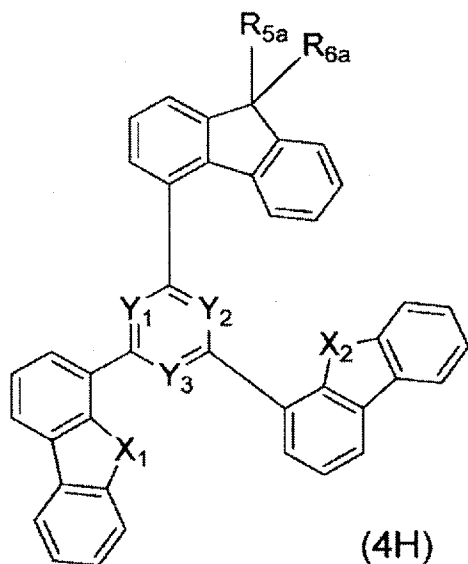
R<sub>901</sub> ～ R<sub>907</sub> は、それぞれ独立に、  
水素原子、  
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は  
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

R<sub>901</sub> ～ R<sub>907</sub> が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>901</sub> ～ R<sub>907</sub> のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。）

[0156] 一実施形態においては、前記式 (1) で表される化合物が、下記式 (4 H) で表される化合物である。

[0157]

[化32]



[0158] (式(4H)中、 $X_1$ 、 $X_2$ 、及び $Y_1 \sim Y_3$ は、前記式(1)で定義した通りである。

$R_{5a}$ 及び $R_{6a}$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{5a}$ 及び $R_{6a}$ は、それぞれ独立に、  
水素原子、

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

[0159] 一実施形態においては、 $Ar_{2a}$ が、  
置換もしくは無置換のフェニル基、  
置換もしくは無置換のナフチル基、  
置換もしくは無置換のアントリル基、又は  
置換もしくは無置換のビフェニル基  
である。

[0160] 一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」置換基が、

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。

[0161] 一実施形態においては、 $X_1$  及び  $X_2$  のうち的一方が S であり、他方が O である。

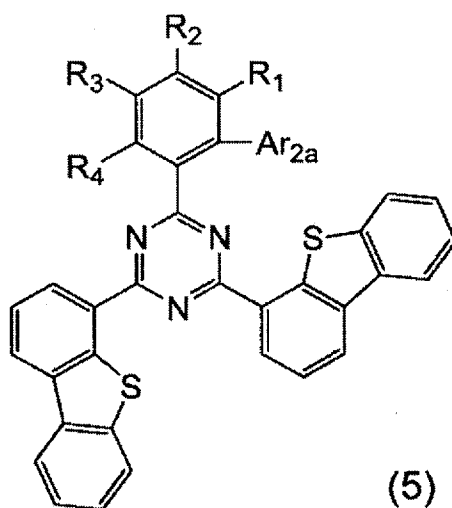
一実施形態においては、 $X_1$  及び  $X_2$  の両方が S である。

$Y_1 \sim Y_3$  のうちの 2 つが N である場合、 $Y_1$  と  $Y_2$  が N、 $Y_1$  と  $Y_3$  が N、又は  $Y_2$  と  $Y_3$  が N のいずれであってもよい。

一実施形態においては、 $Y_1 \sim Y_3$  の全てが N である。

[0162] 一実施形態においては、前記式 (2) で表される化合物が、下記式 (5) で表される化合物である。

[0163] [化33]



[0164] (式 (5) 中、 $R_1 \sim R_4$  及び  $Ar_{2a}$  は、前記式 (2) で定義した通りである。)

[0165] 一実施形態においては、 $X_1$  及び  $X_2$  が S であり、 $Y_1 \sim Y_3$  が N である。

一実施形態においては、 $X_1$  及び  $X_2$  が S であり、 $Y_1$  及び  $Y_2$  が N であり、 $Y_3$  が CH である。

一実施形態においては、 $X_1$  及び  $X_2$  が O であり、 $Y_1 \sim Y_3$  が N である。

一実施形態においては、 $X_1$  及び  $X_2$  が O であり、 $Y_1$  及び  $Y_2$  が N であり、

$Y_3$ がCHである。

一実施形態においては、 $X_1$ 及び $X_2$ の一方がS、他方がOであり、 $Y_1 \sim Y_3$ がNである。

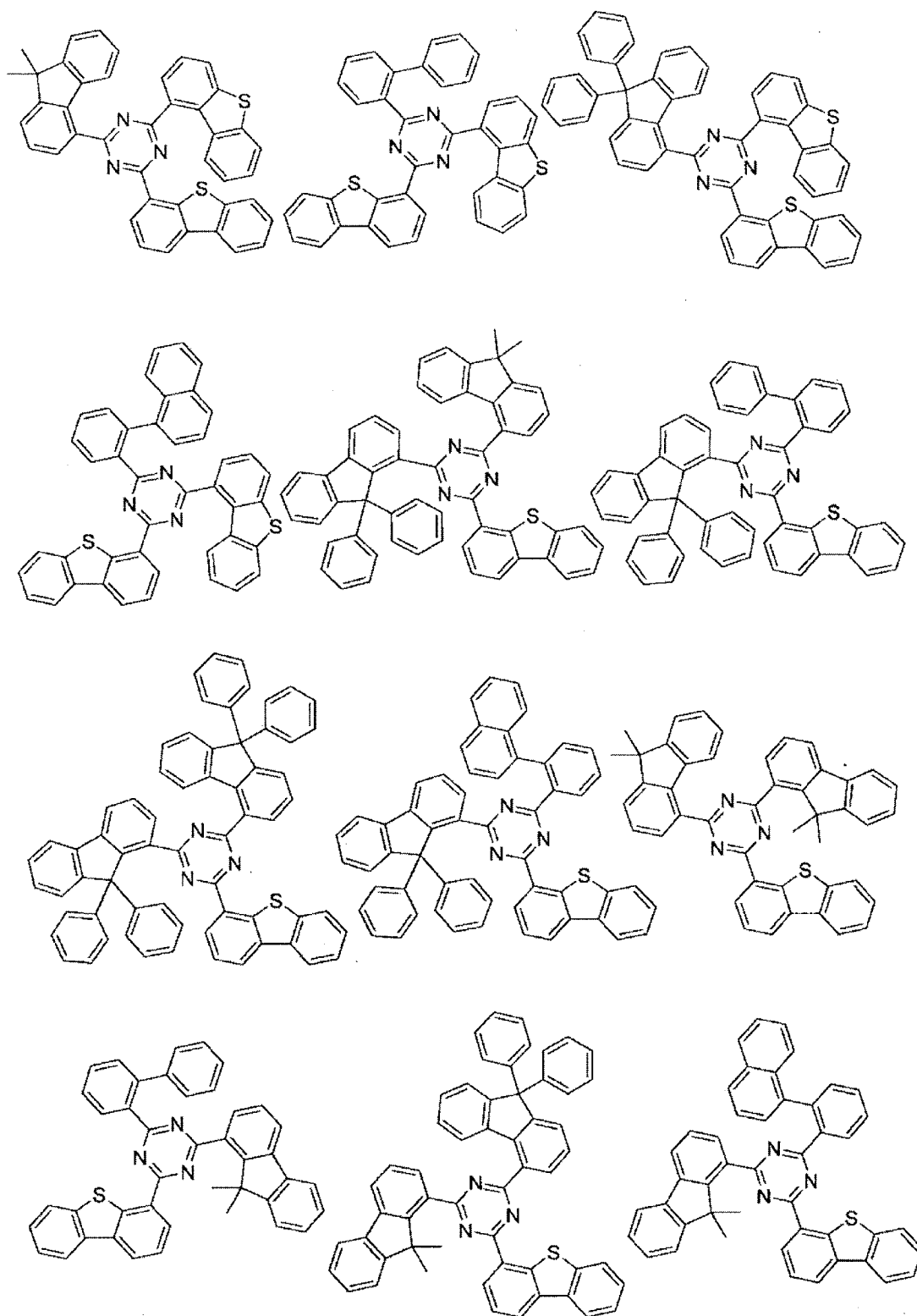
一実施形態においては、 $X_1$ 及び $X_2$ の一方がS、他方がOであり、 $Y_1$ 及び $Y_2$ がNであり、 $Y_3$ がCHである。

[0166] 上記式(A1)、(A2-1)～(A2-4)、(A3)、(A4-1)、(A4-2)、(A5-1)、(A5-2)、(A6)、(A7)、(1)、(2)、(2H)、(3-1)、(3-2)、(3H-1)、(3H-2)、(4)、(4H)、及び(5)における各置換基、及び「置換もしくは無置換の」という場合の置換基の詳細は、本明細書の「定義」の欄に記載の通りである。

[0167] 以下に、式(A1)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、式(A1)で表される化合物は下記具体例に限定されるものではない。下記具体例中、Dは重水素原子を示す。

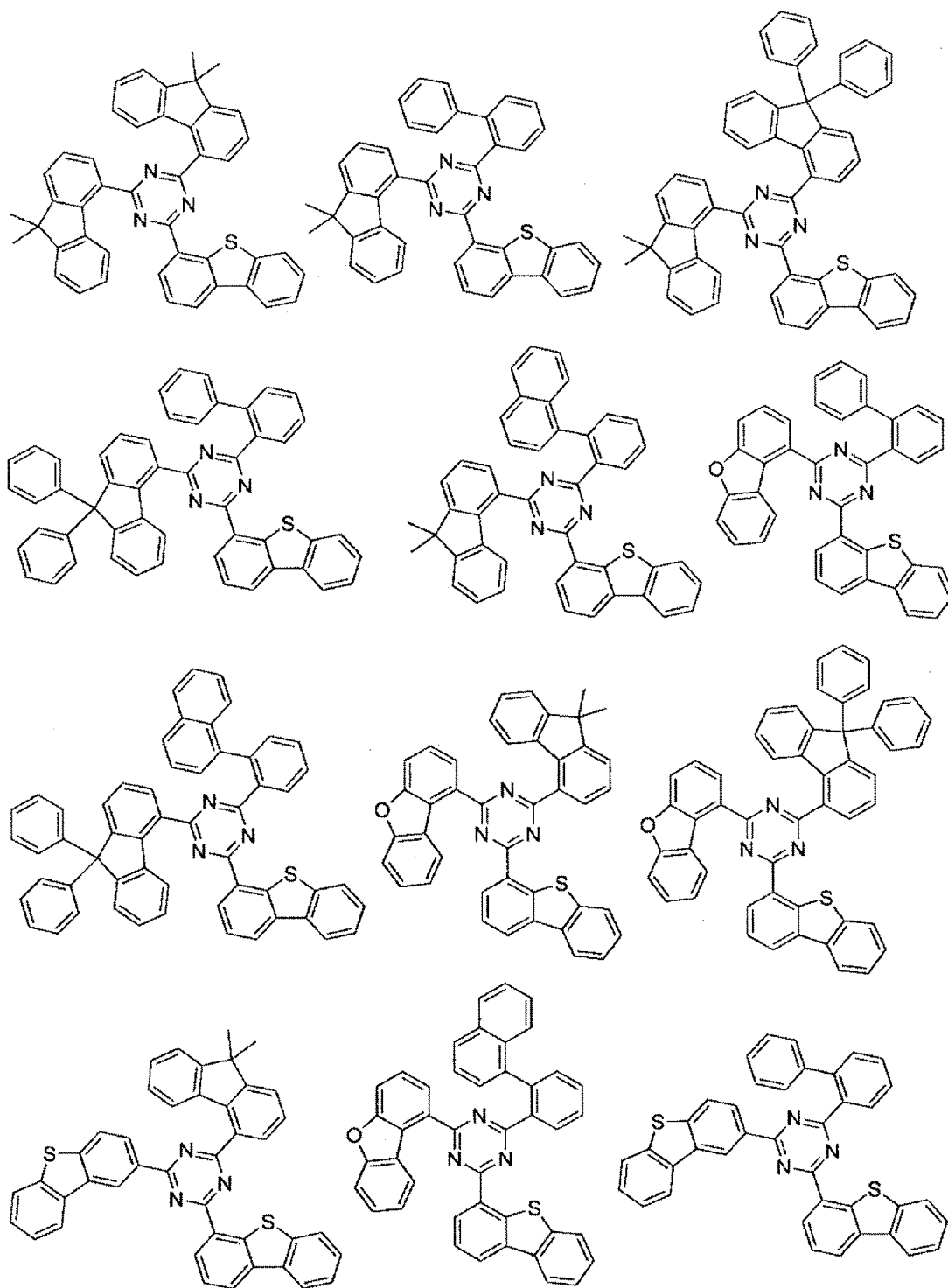
[0168]

[化34]



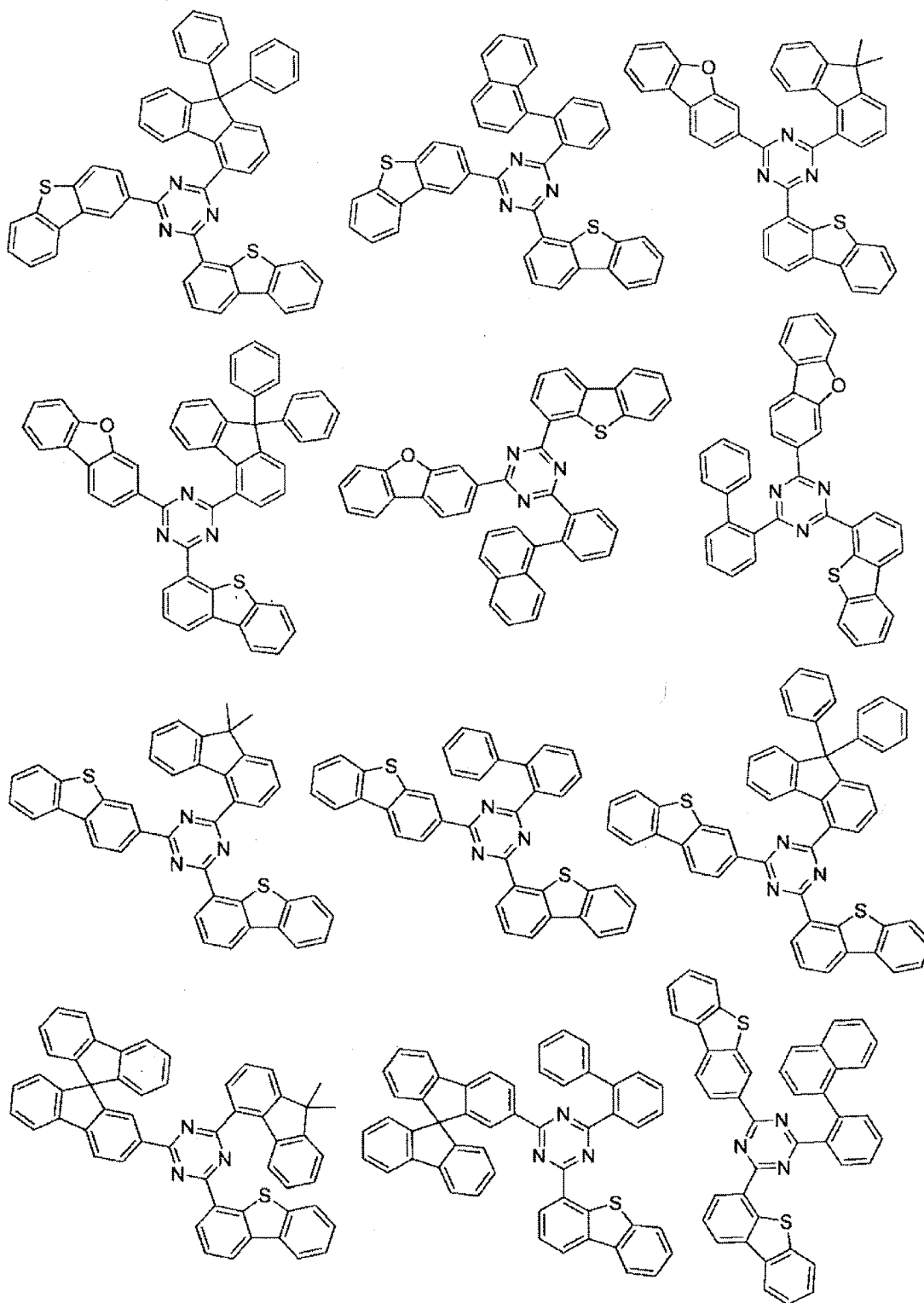
[0169]

[化35]



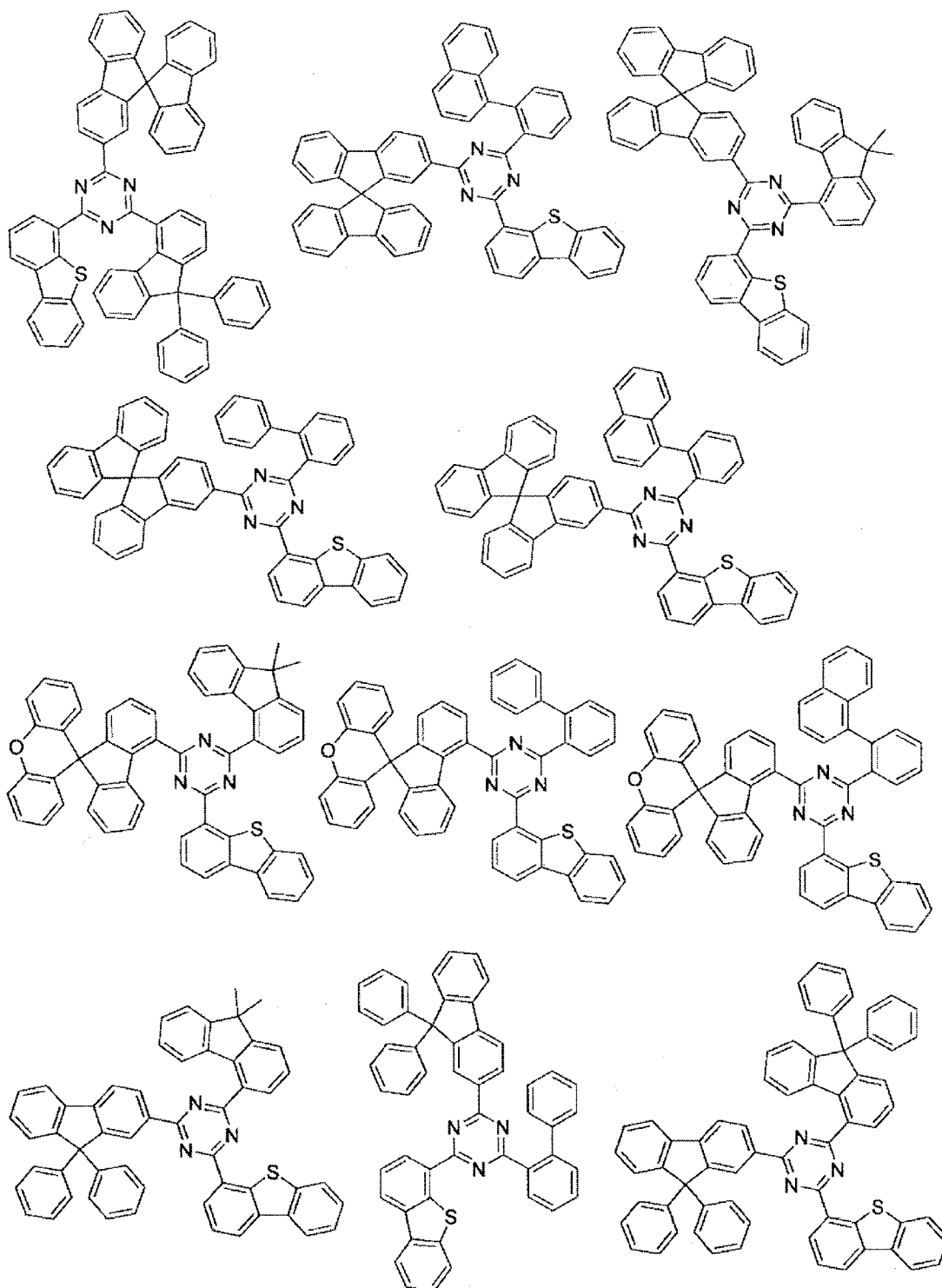
[0170]

[化36]



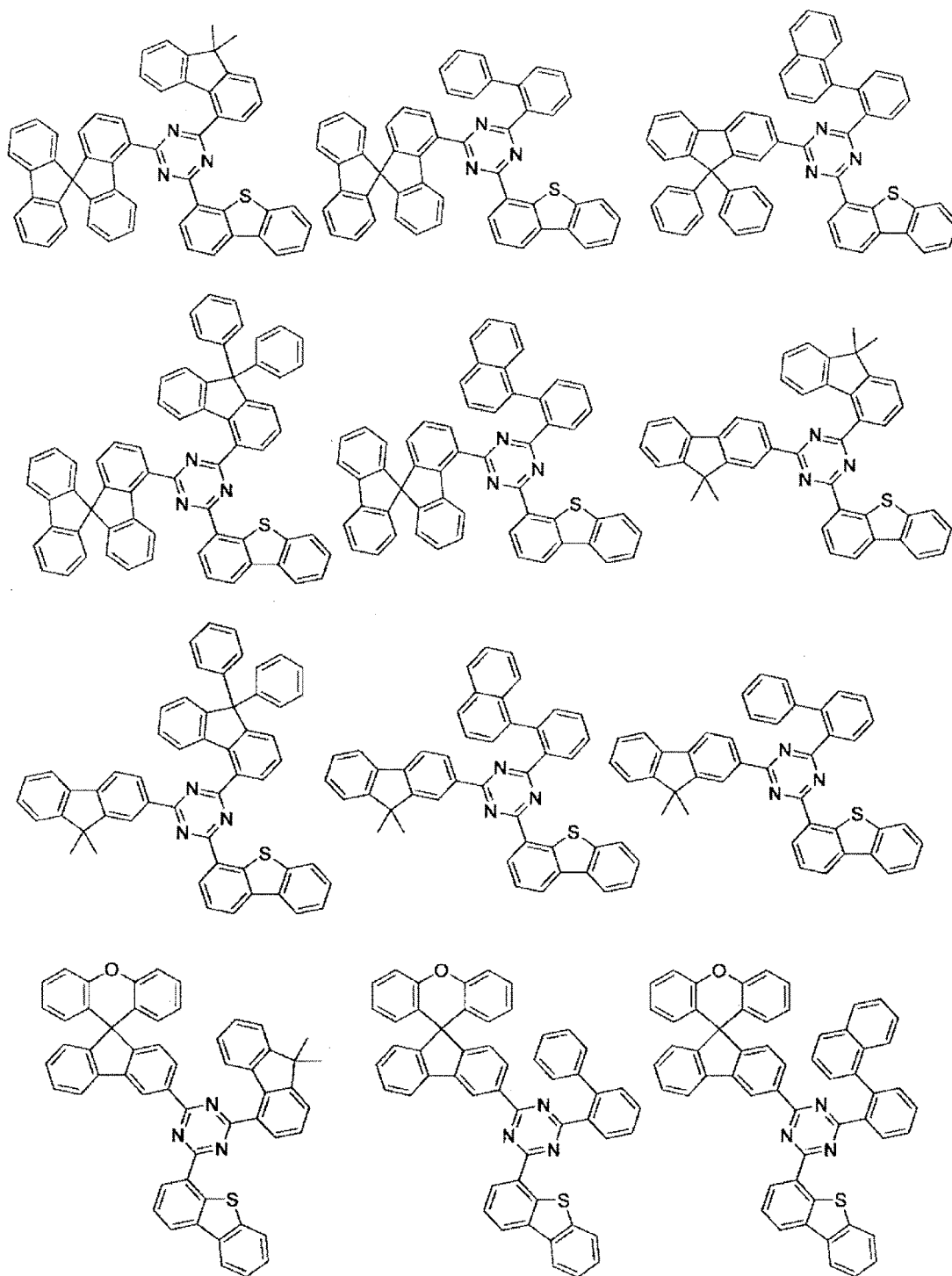
[0171]

[化37]



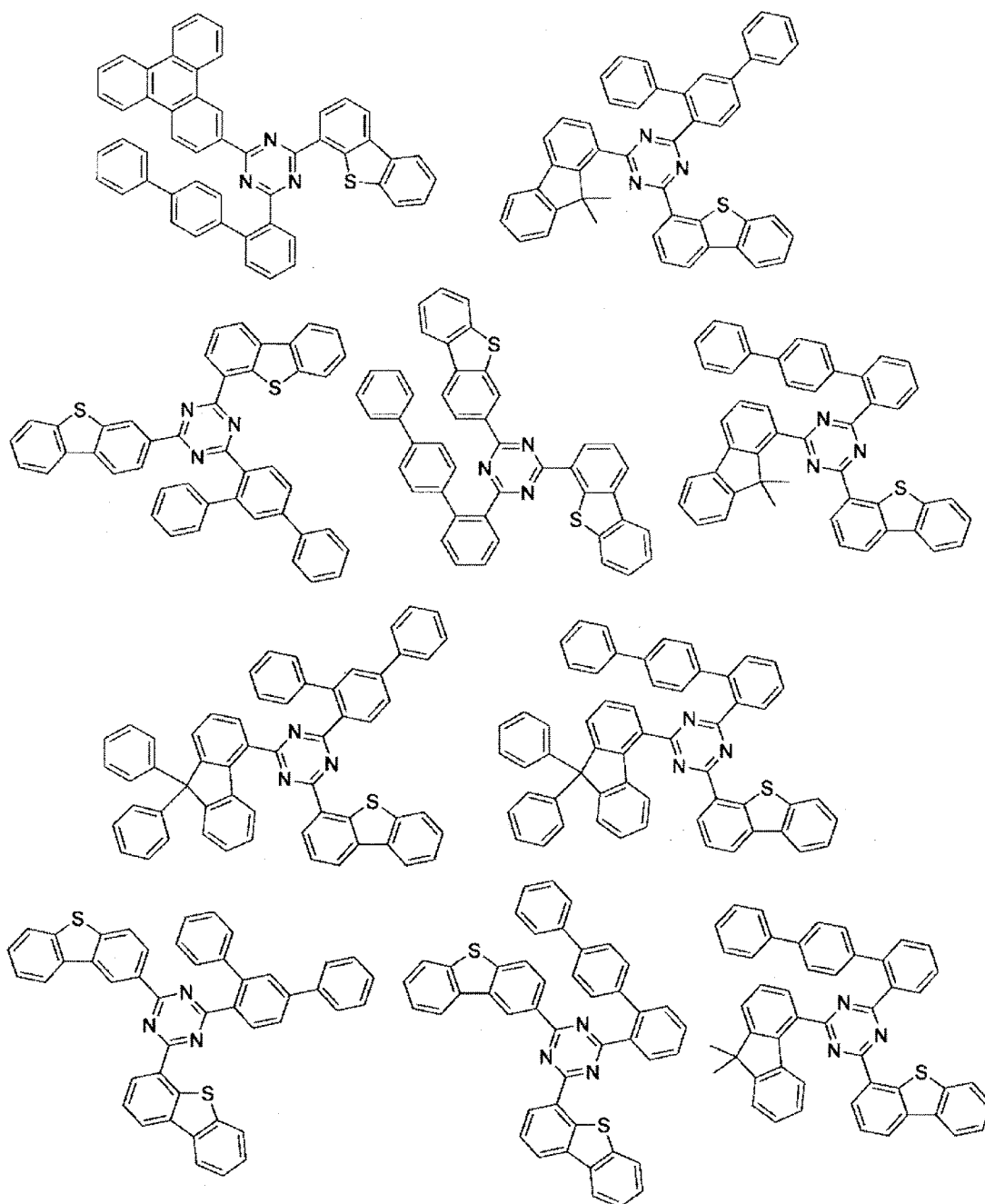
[0172]

[化38]



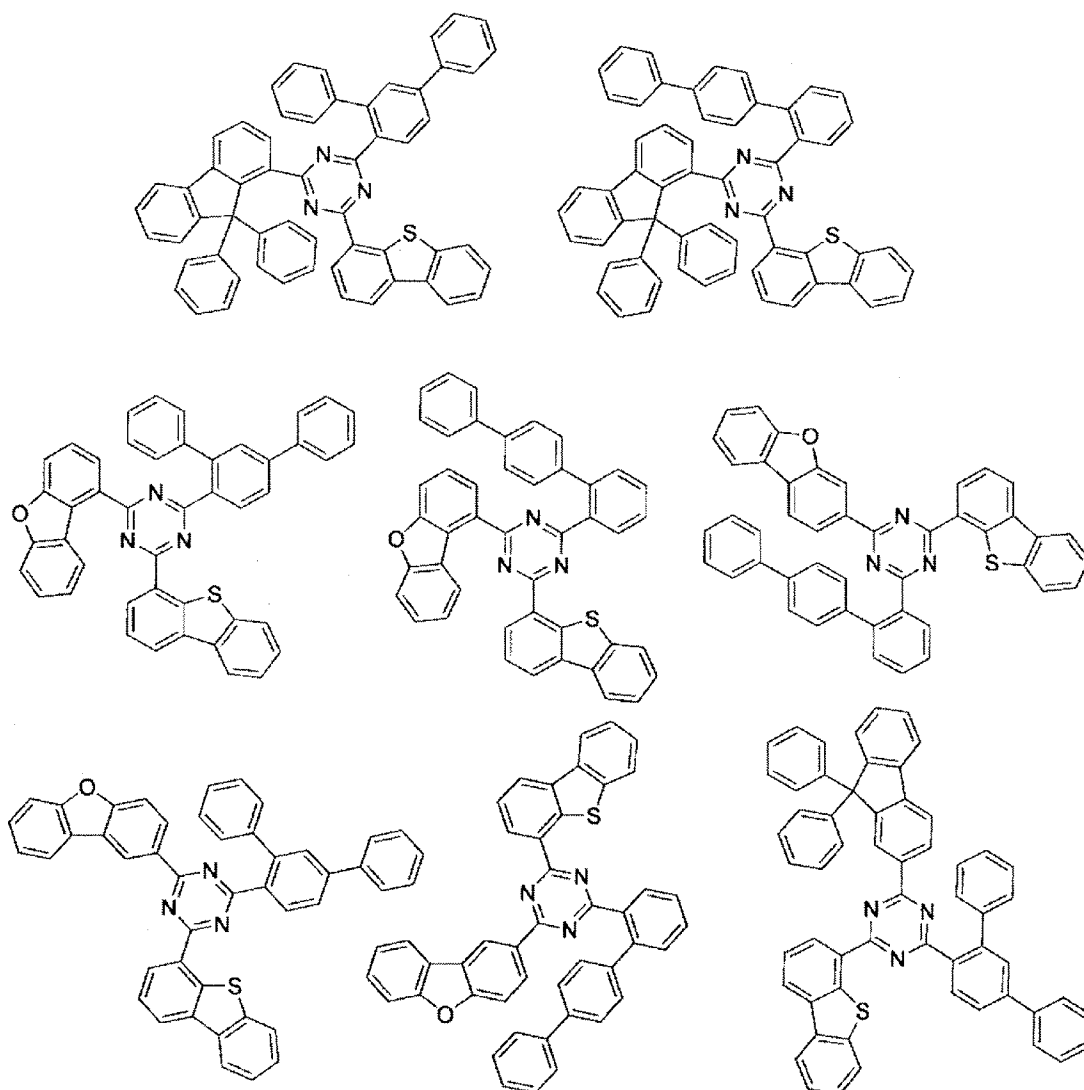
[0173]

[化39]



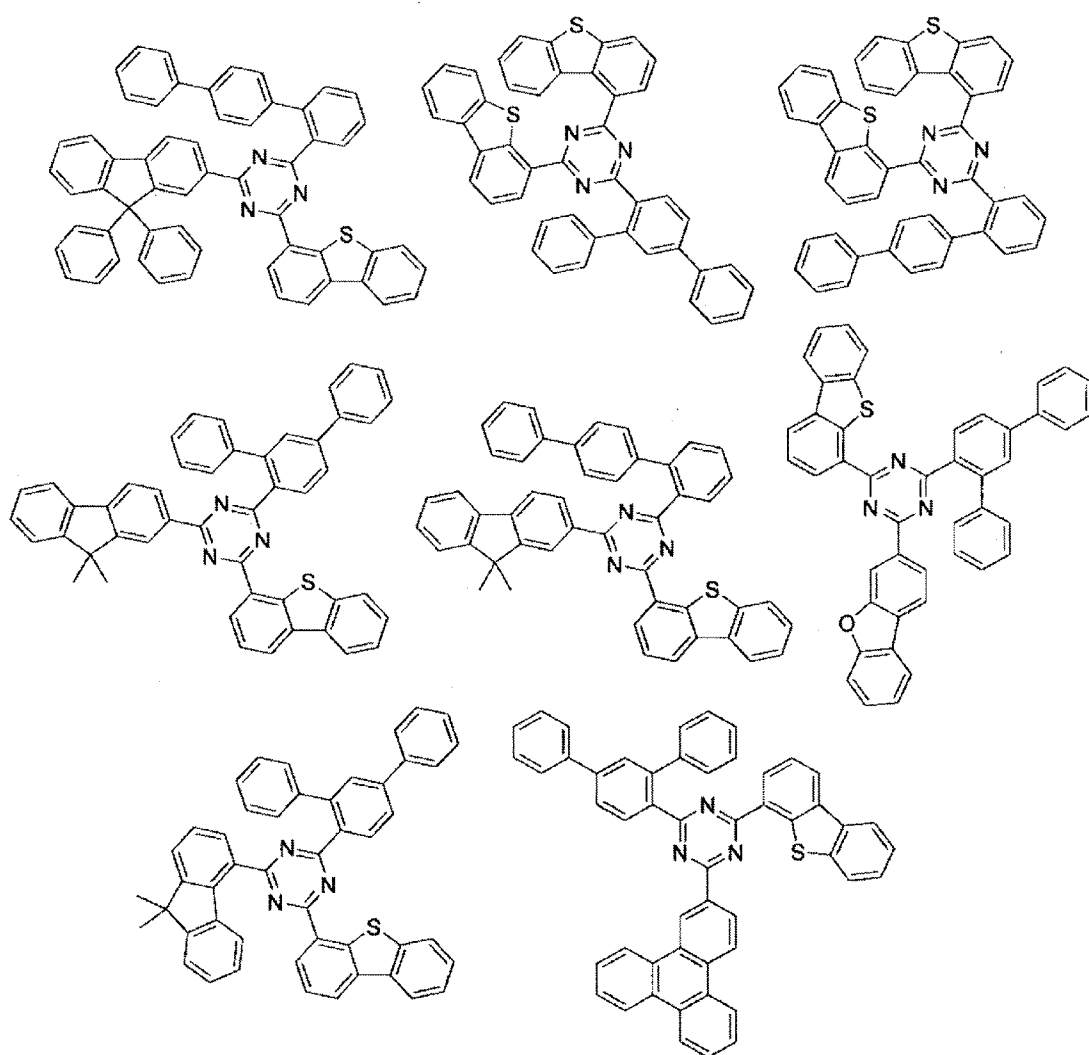
[0174]

[化40]



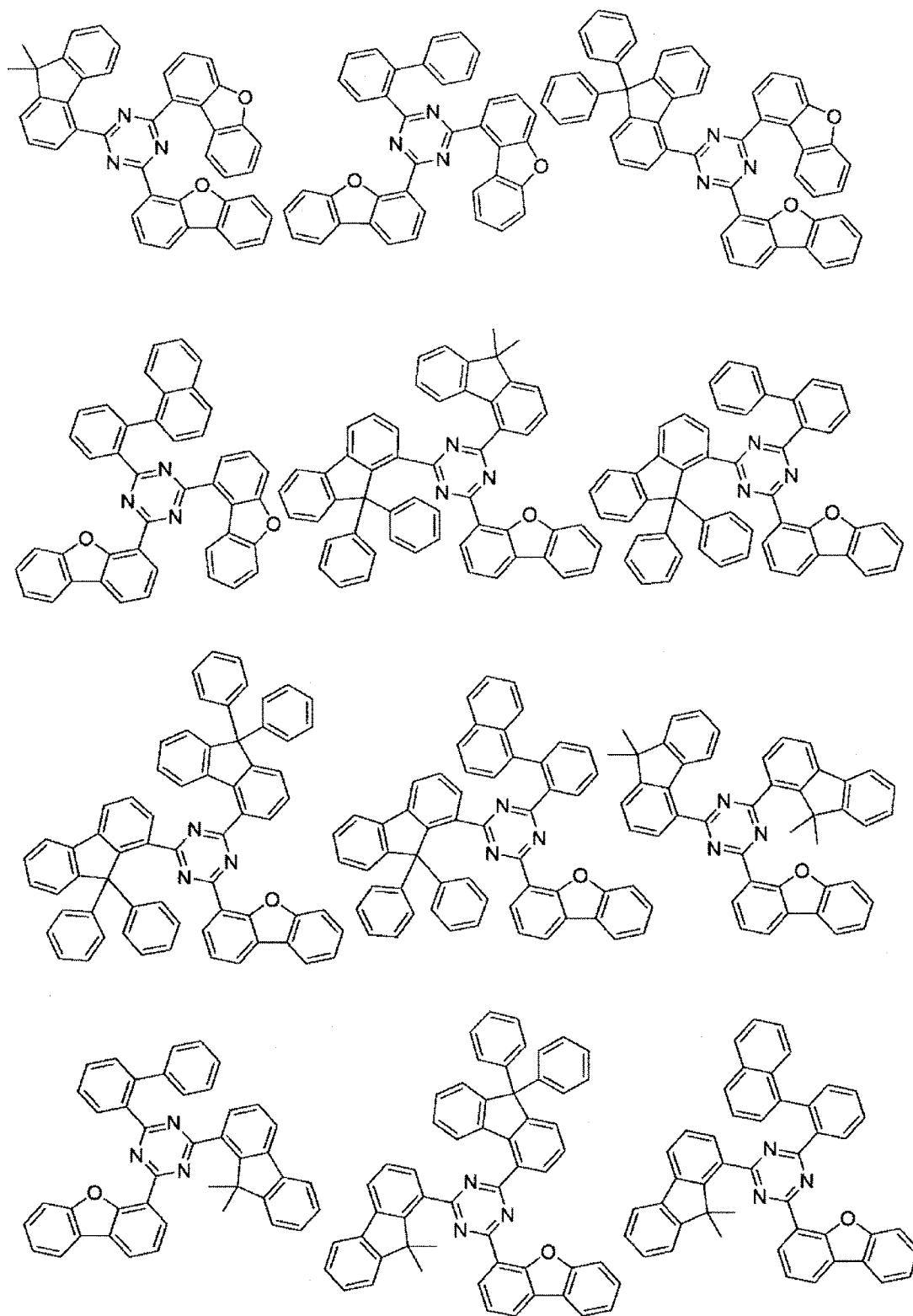
[0175]

[化41]



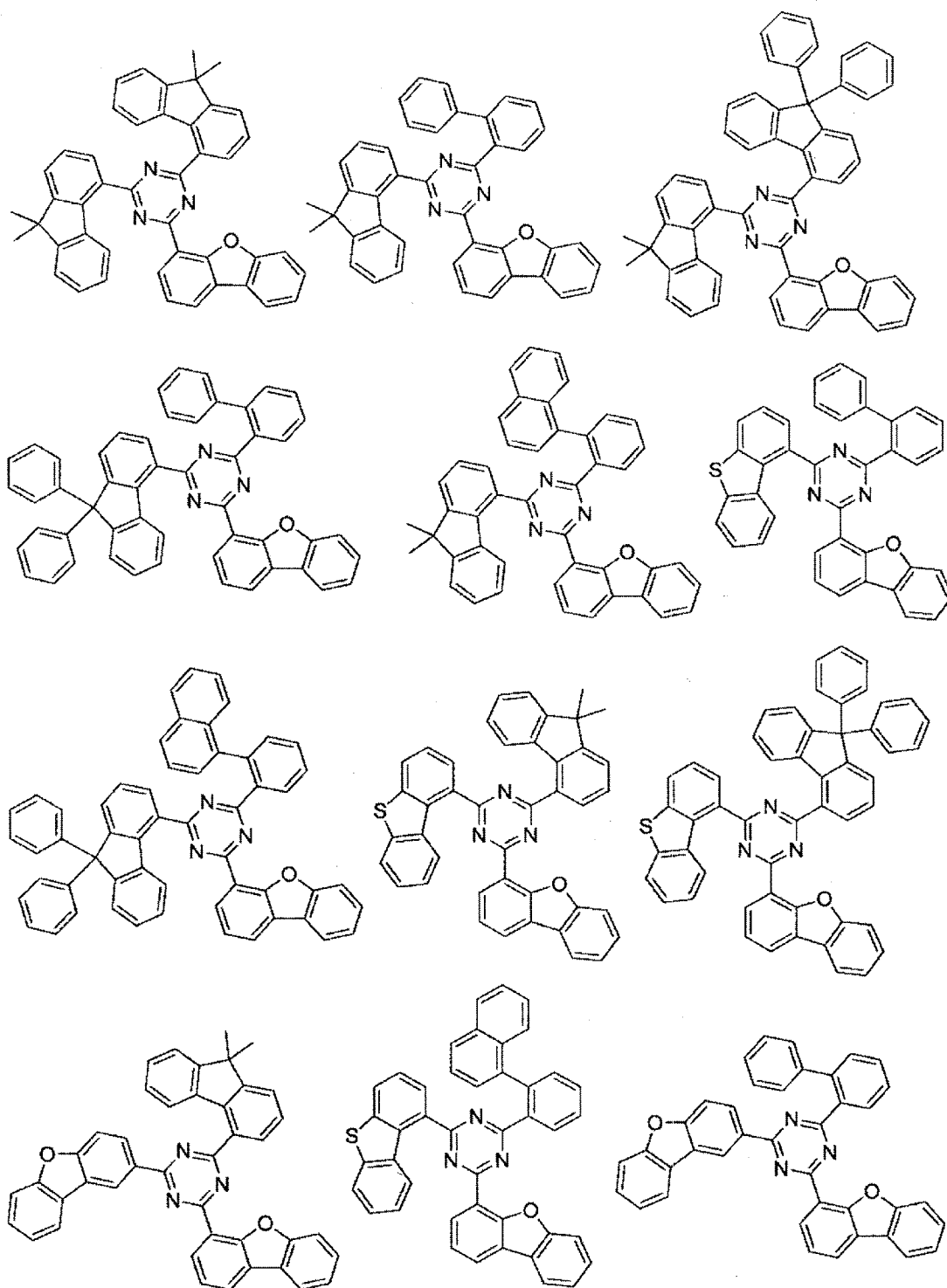
[0176]

[化42]



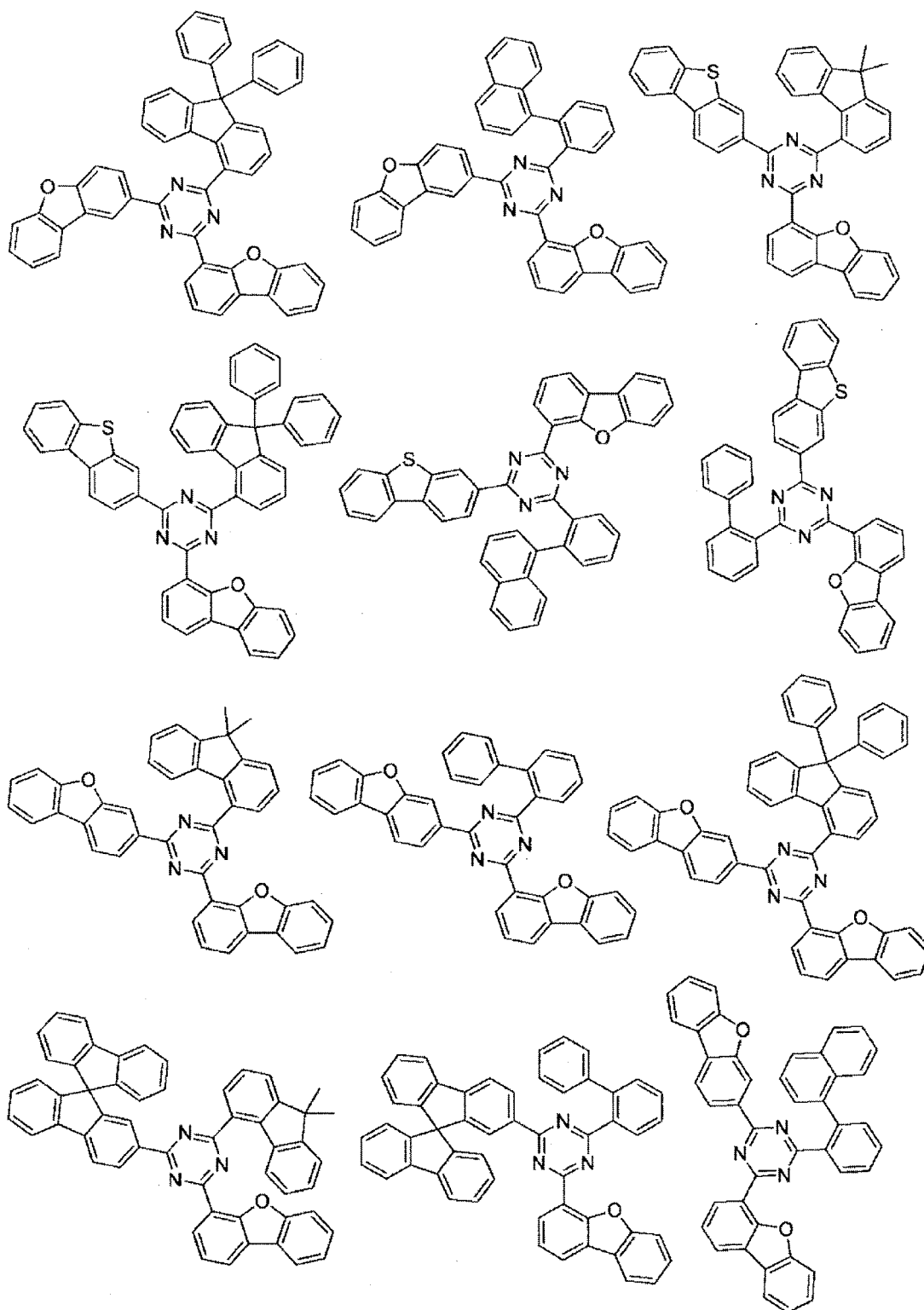
[0177]

[化43]



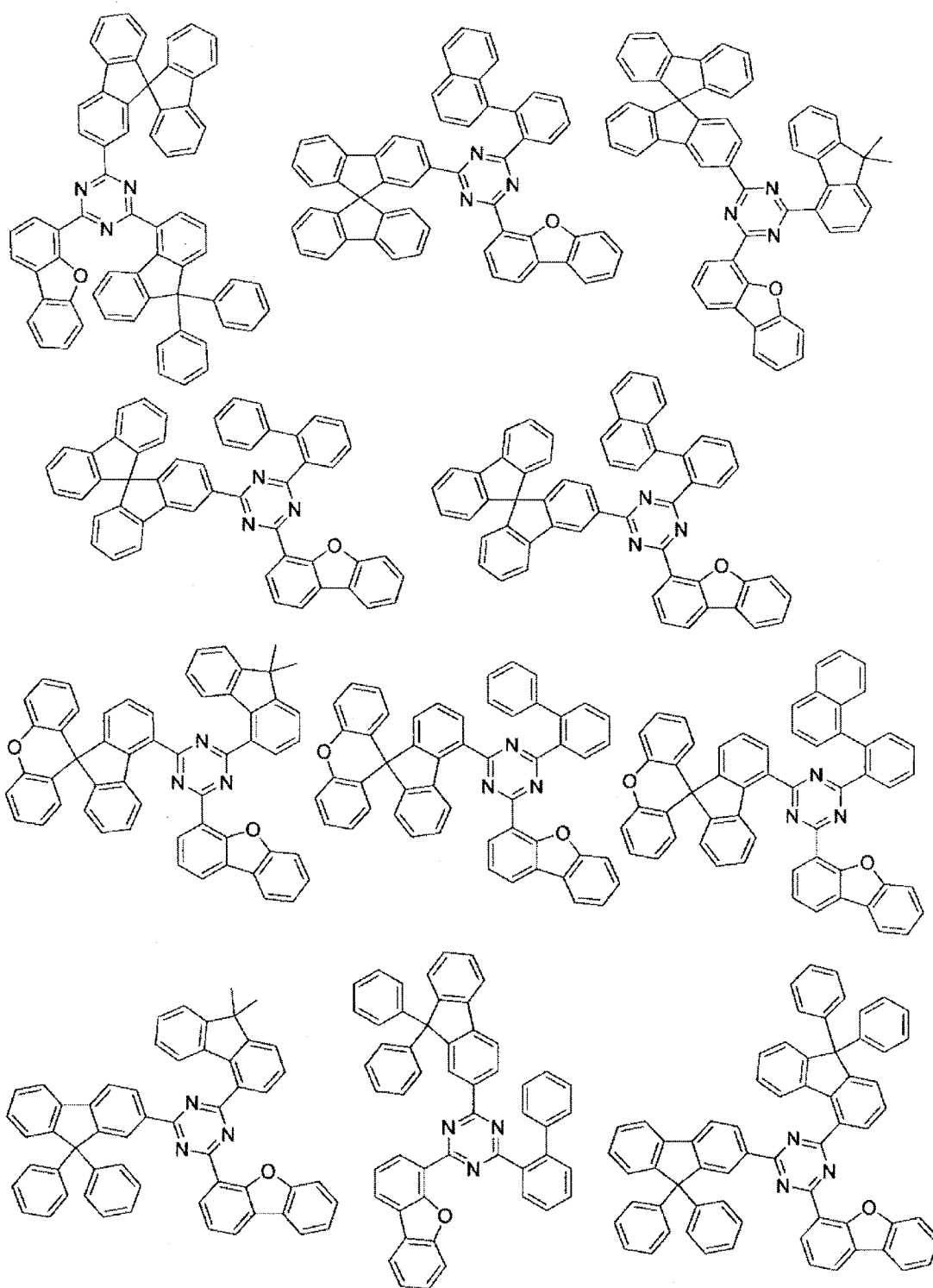
[0178]

[化44]



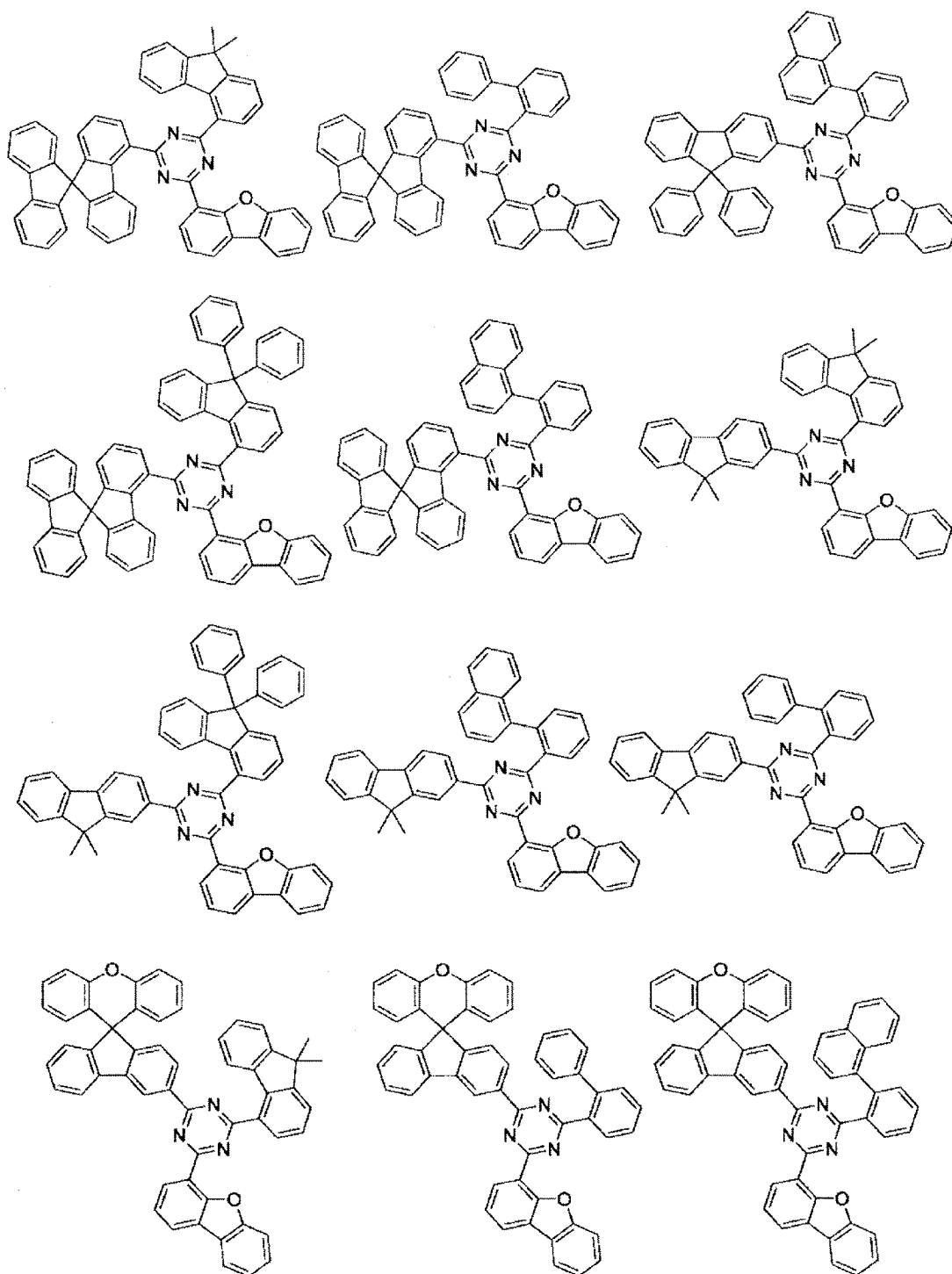
[0179]

[化45]



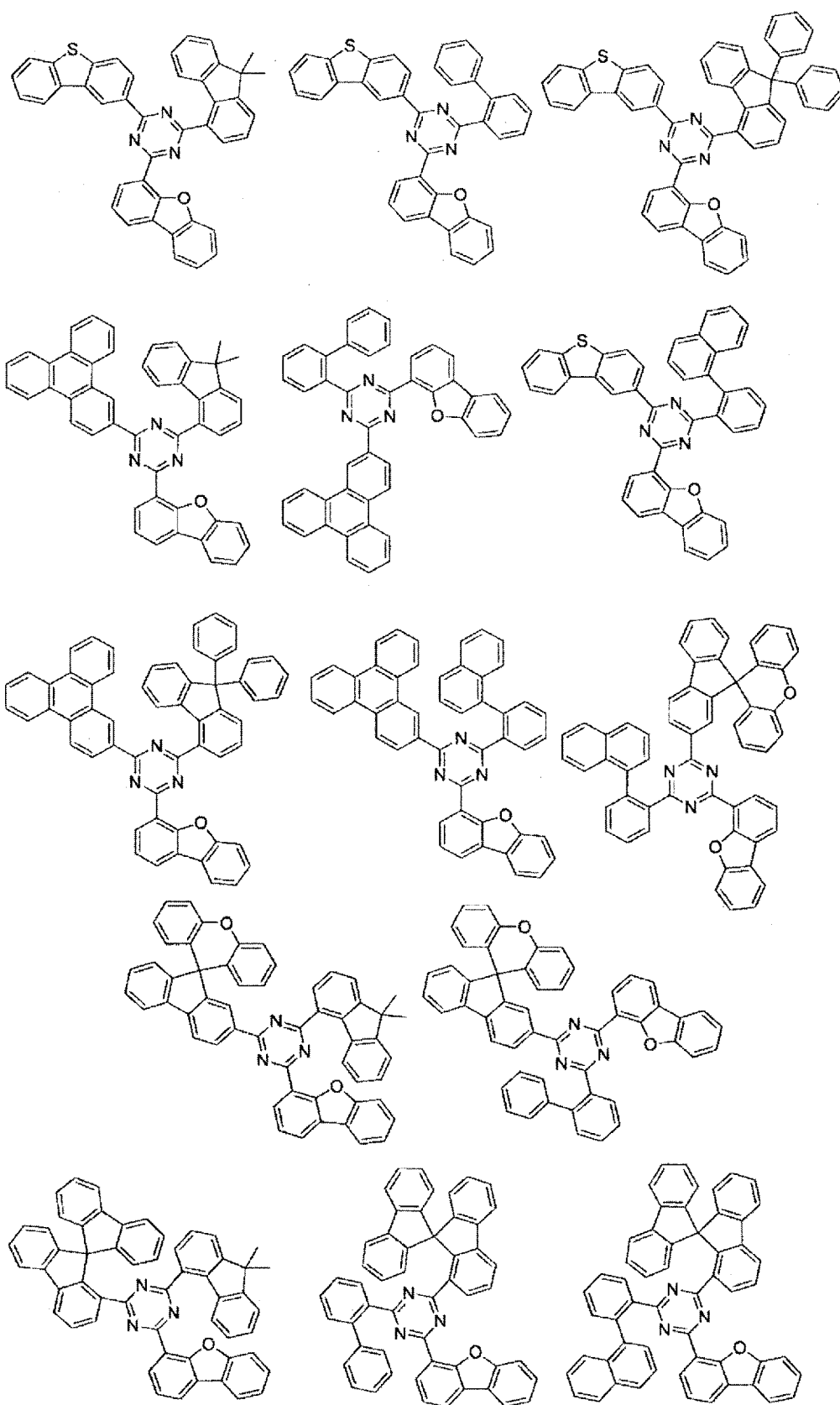
[0180]

[化46]

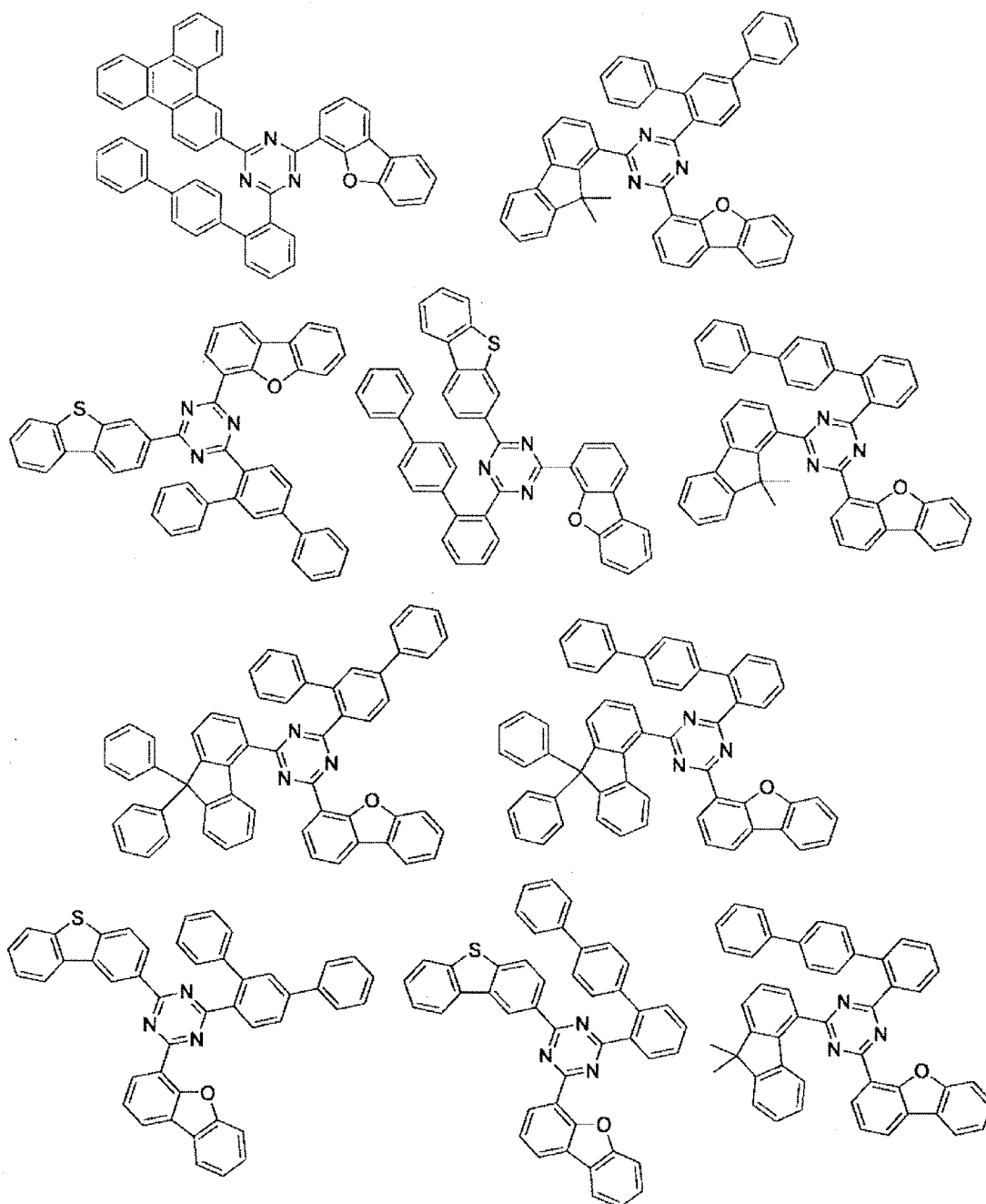


[0181]

[化47]

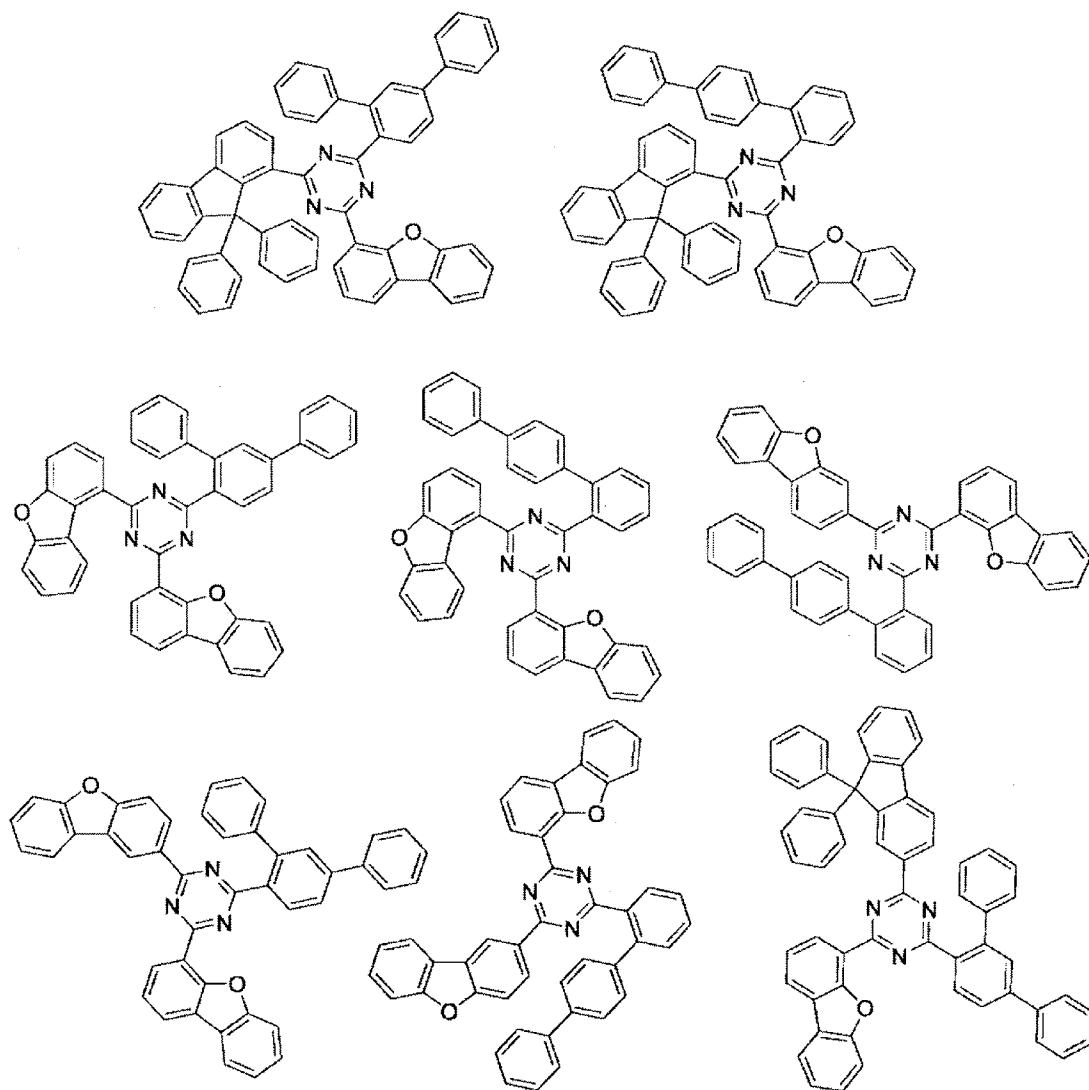


[0182] [化48]



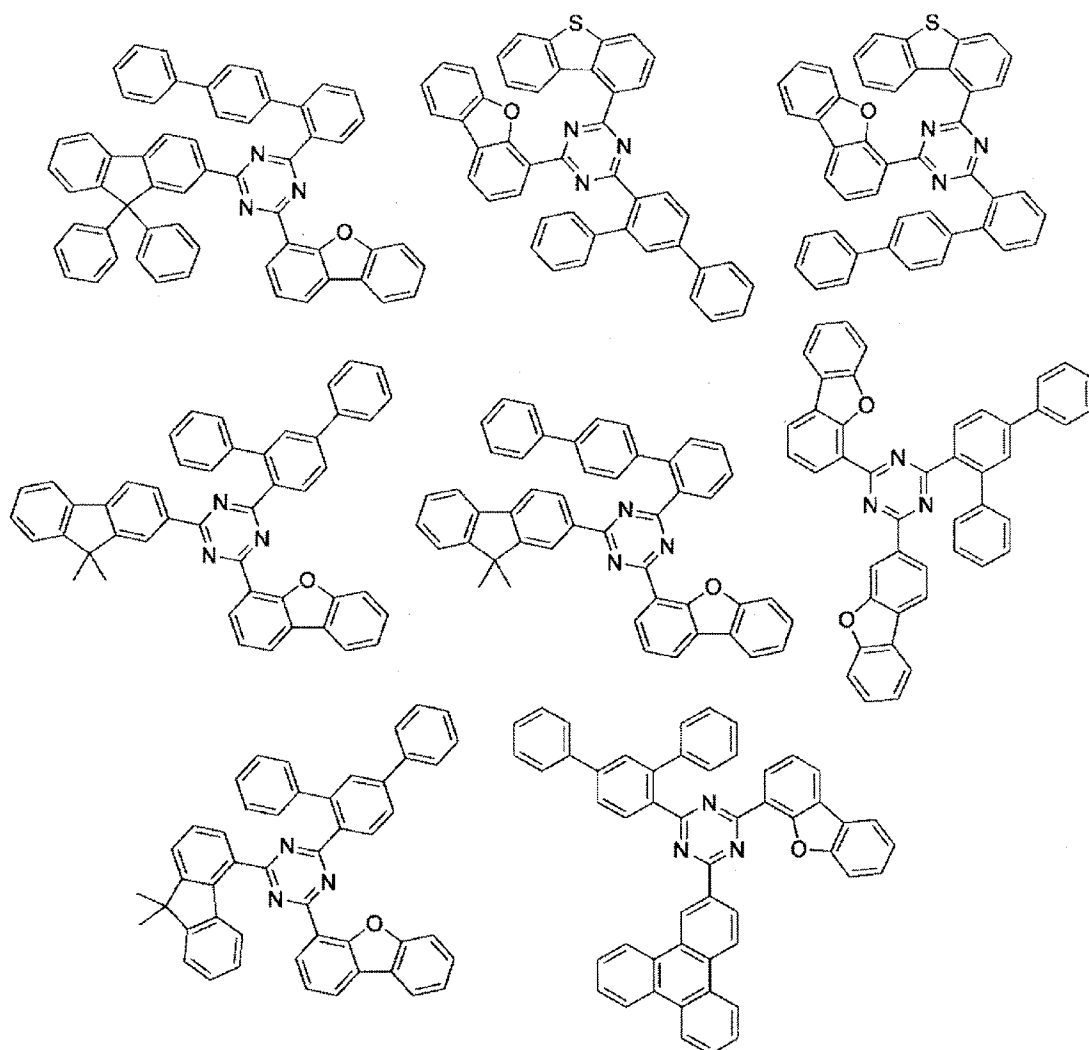
[0183]

[化49]



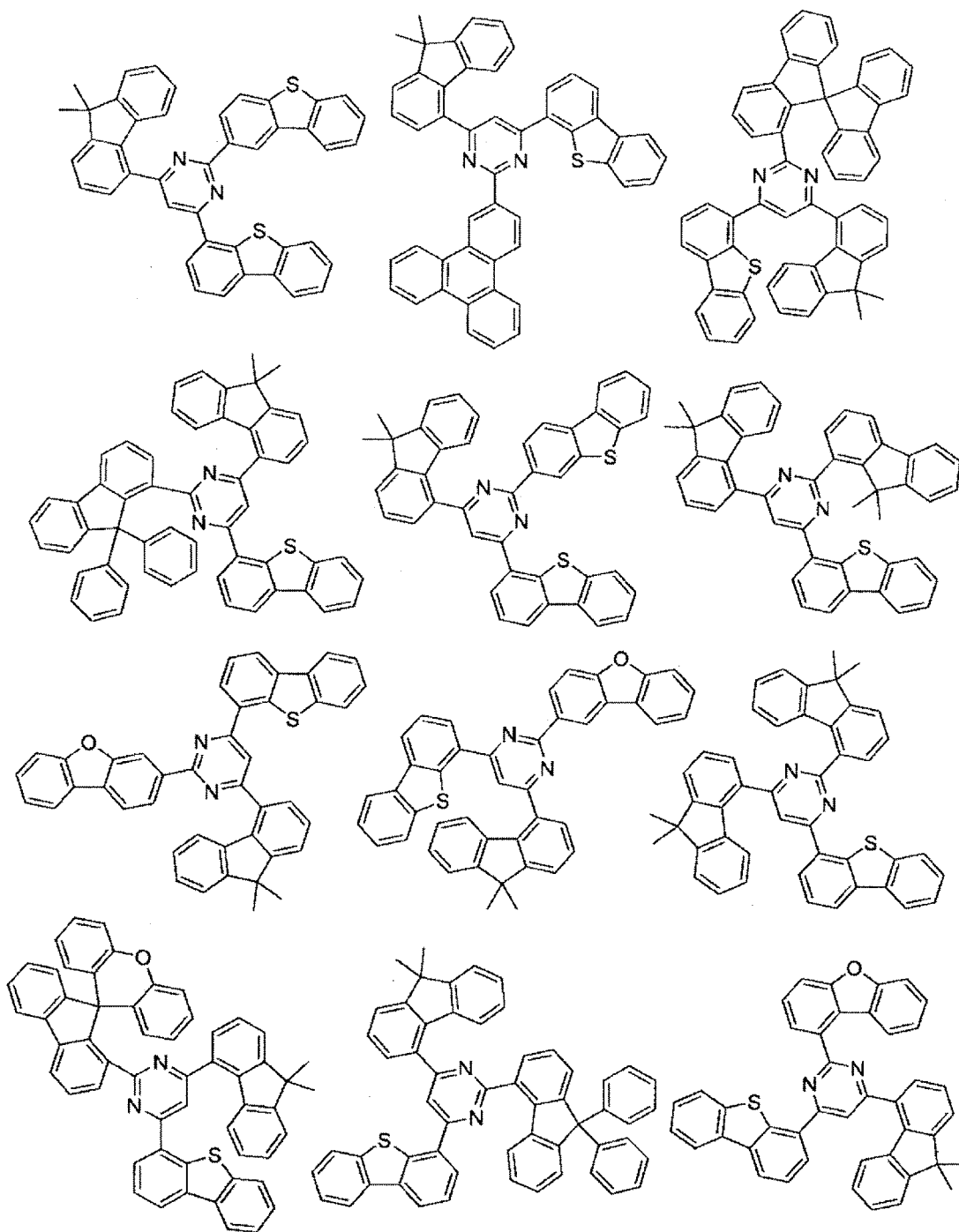
[0184]

[化50]



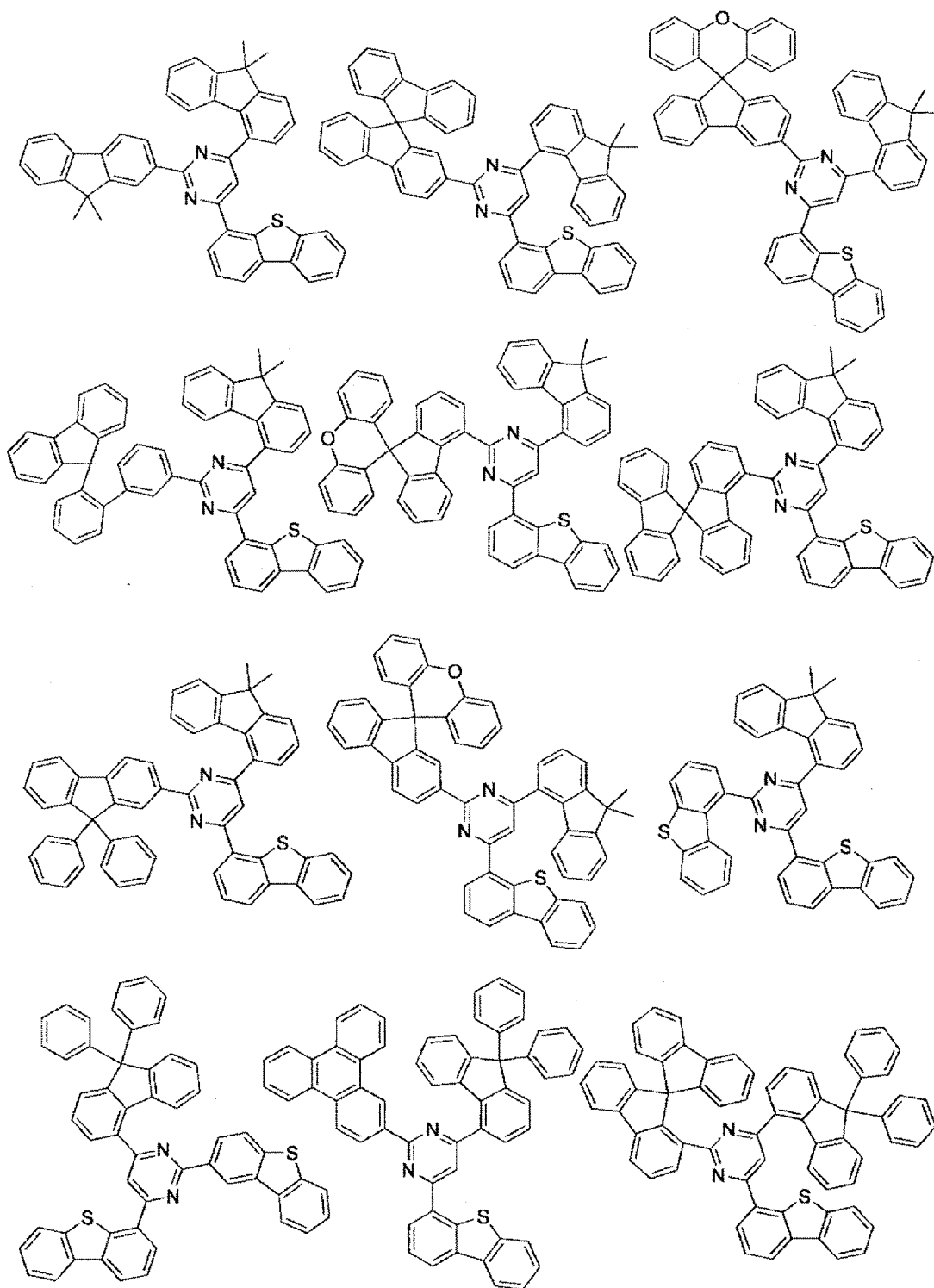
[0185]

[化51]



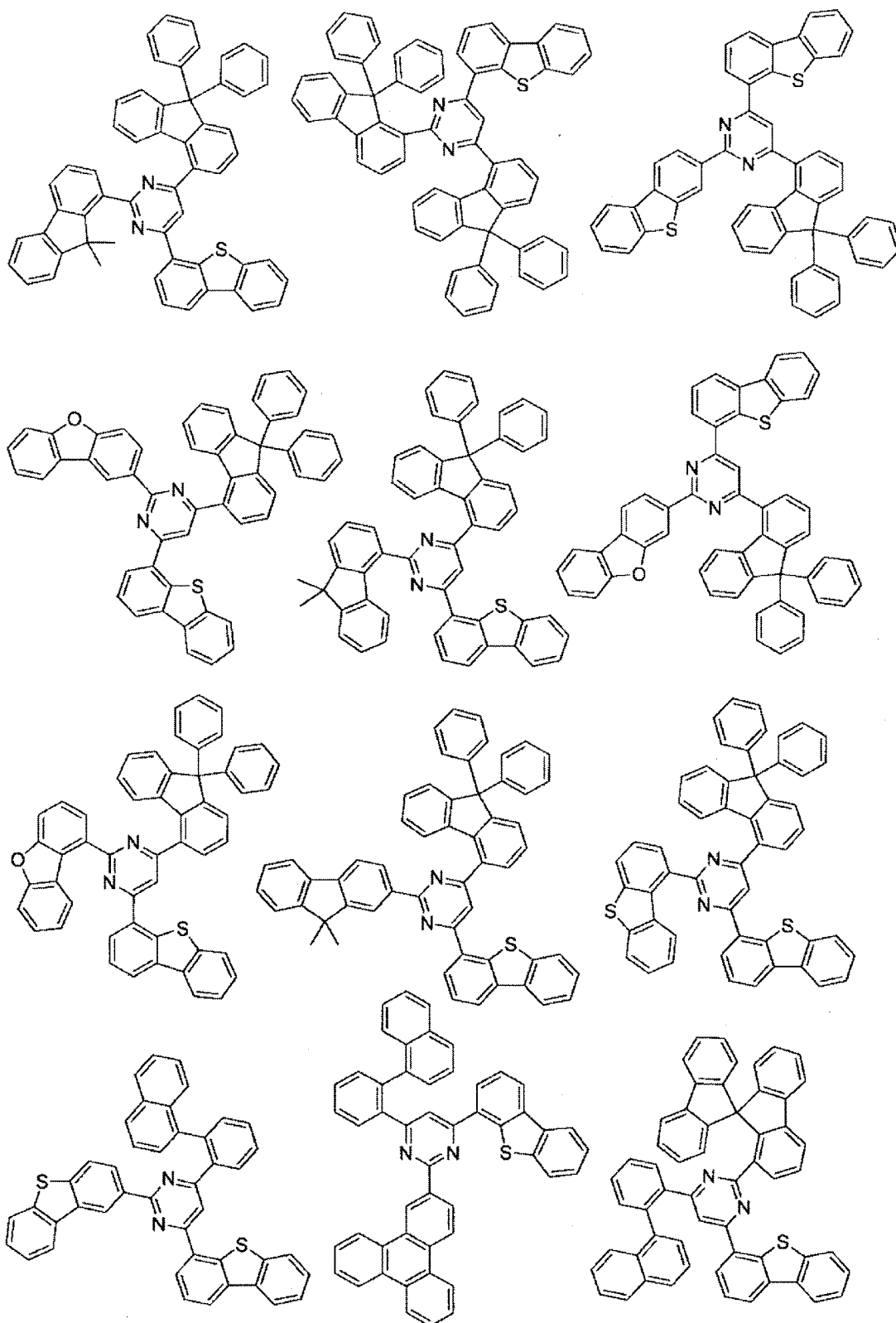
[0186]

[化52]



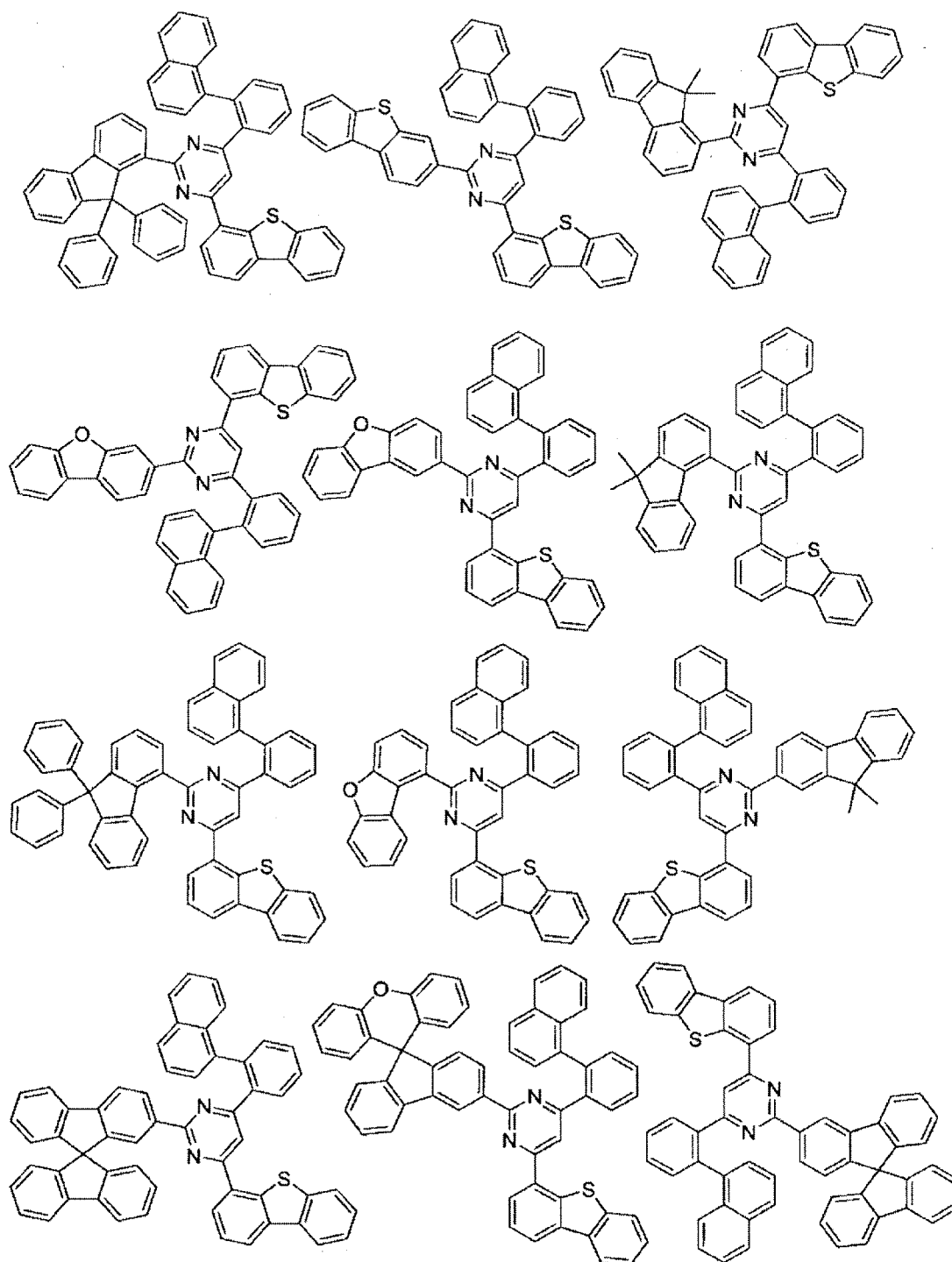
[0187]

[化53]



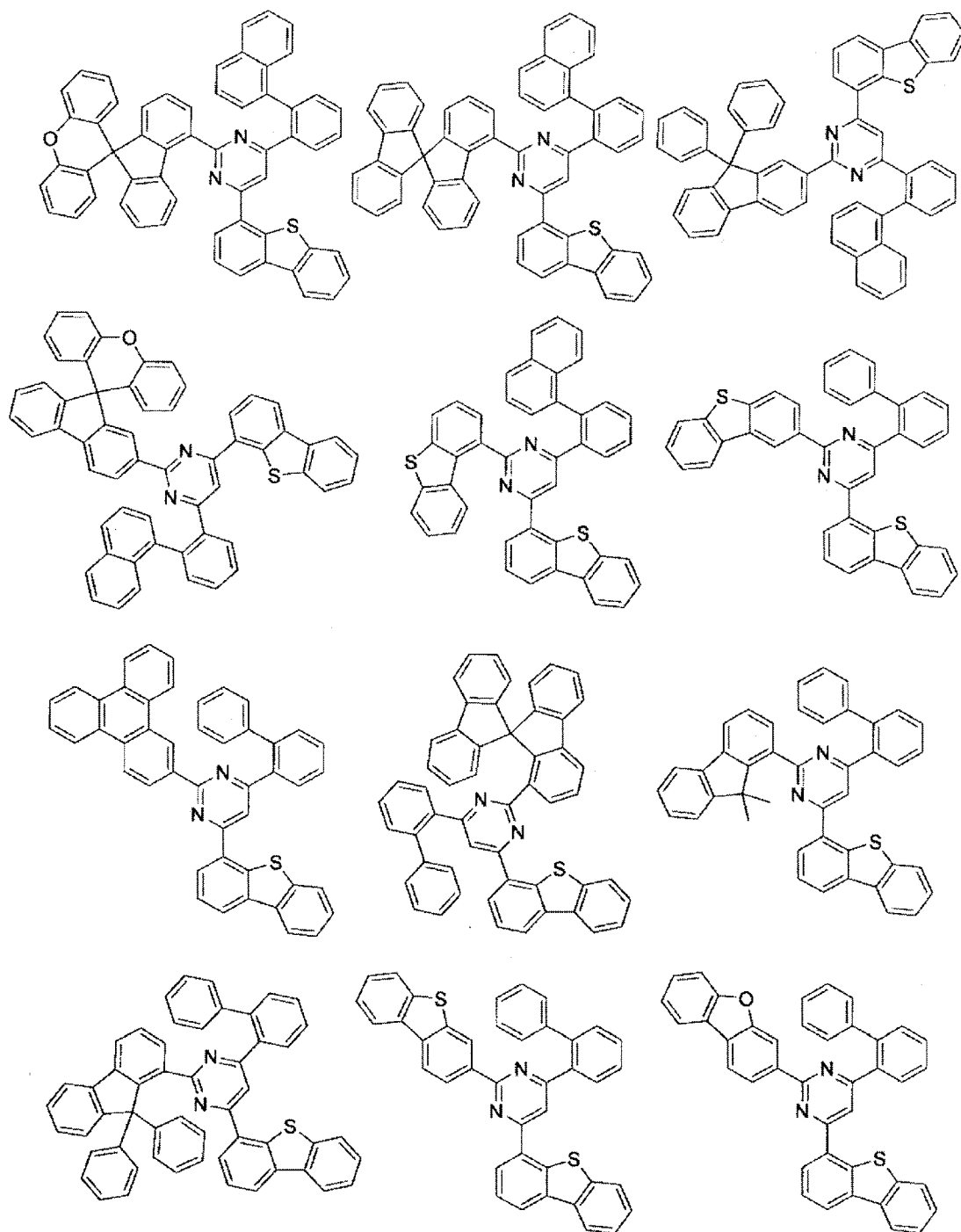
[0188]

[化54]



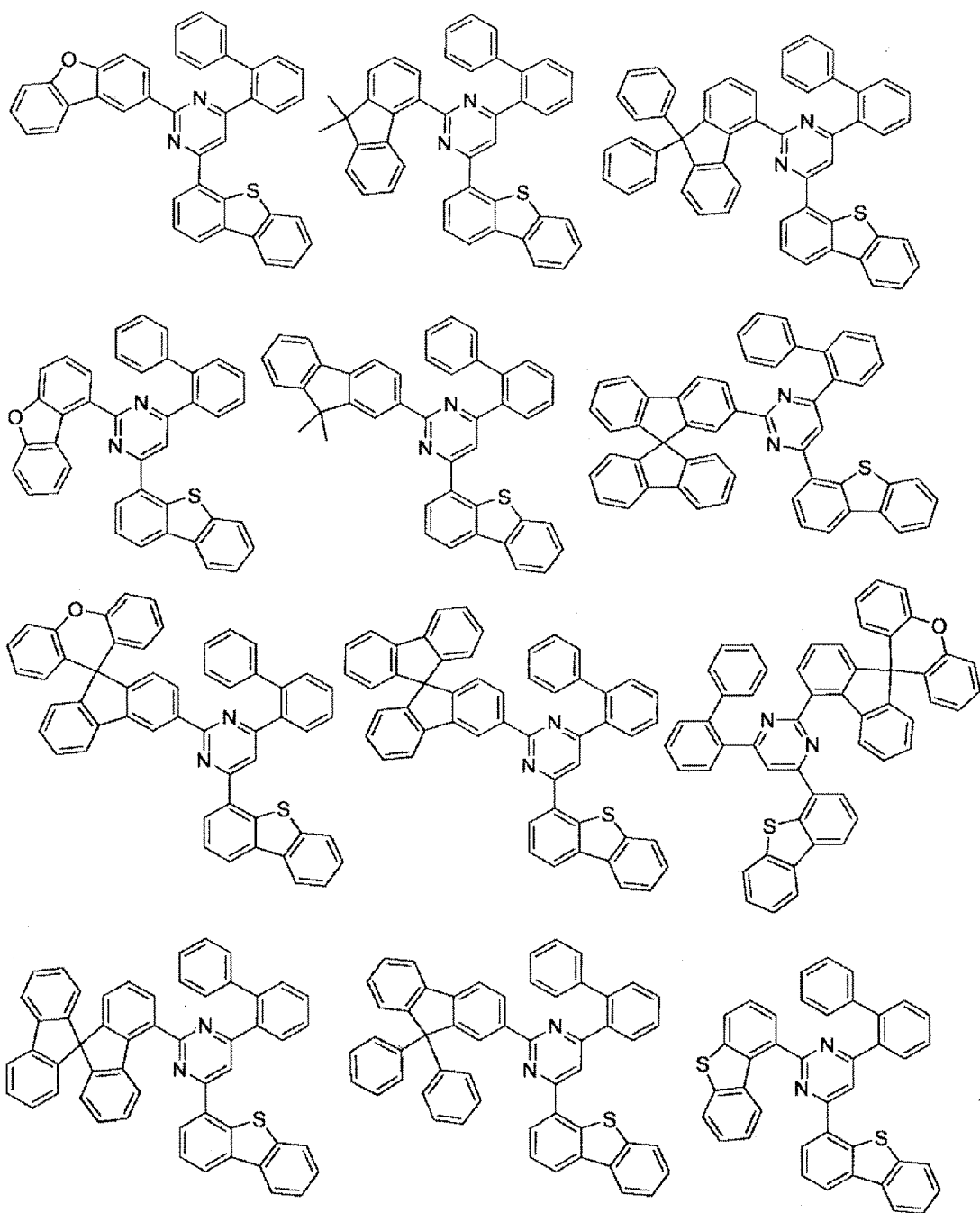
[0189]

[化55]



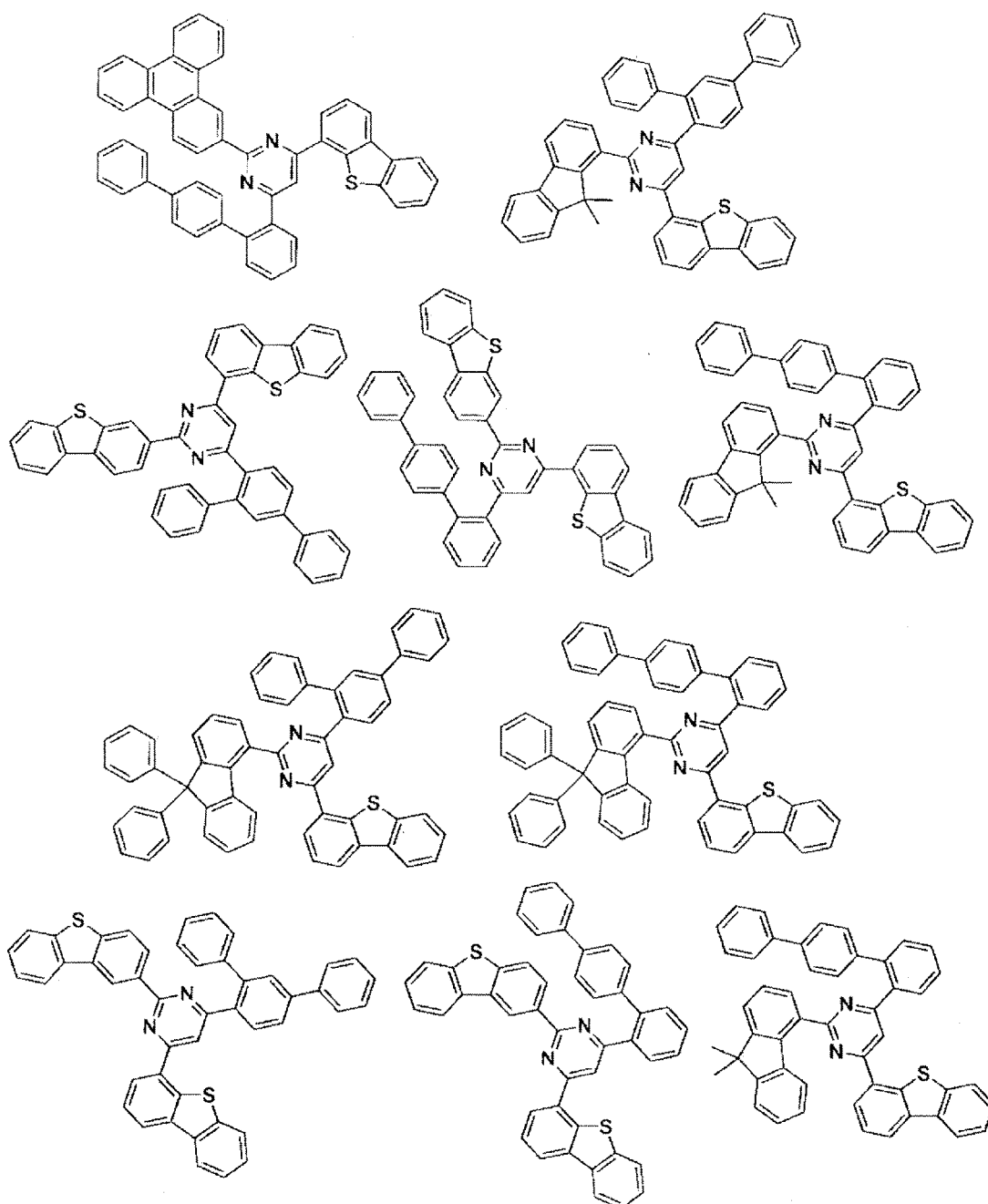
[0190]

[化56]



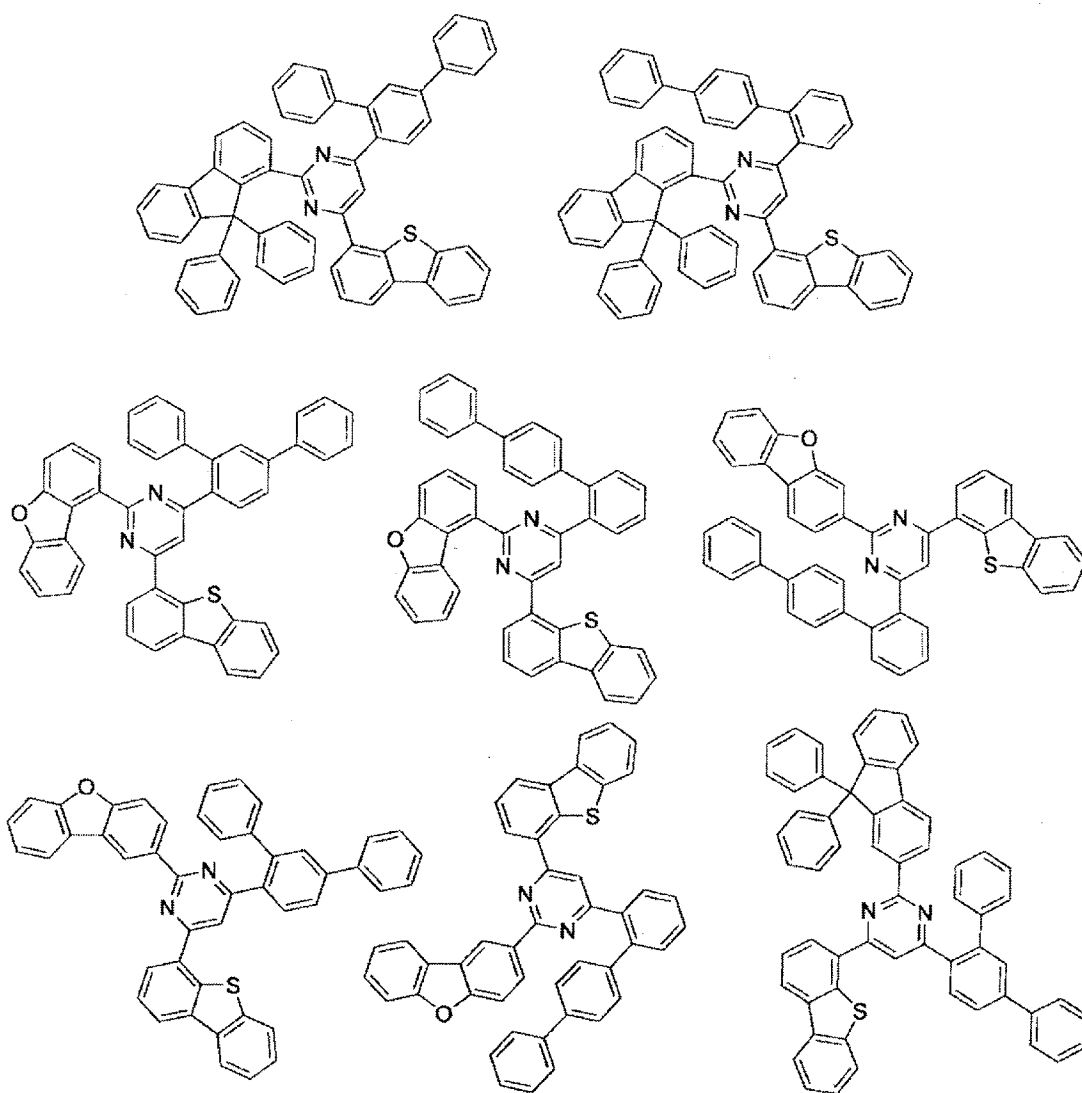
[0191]

[化57]



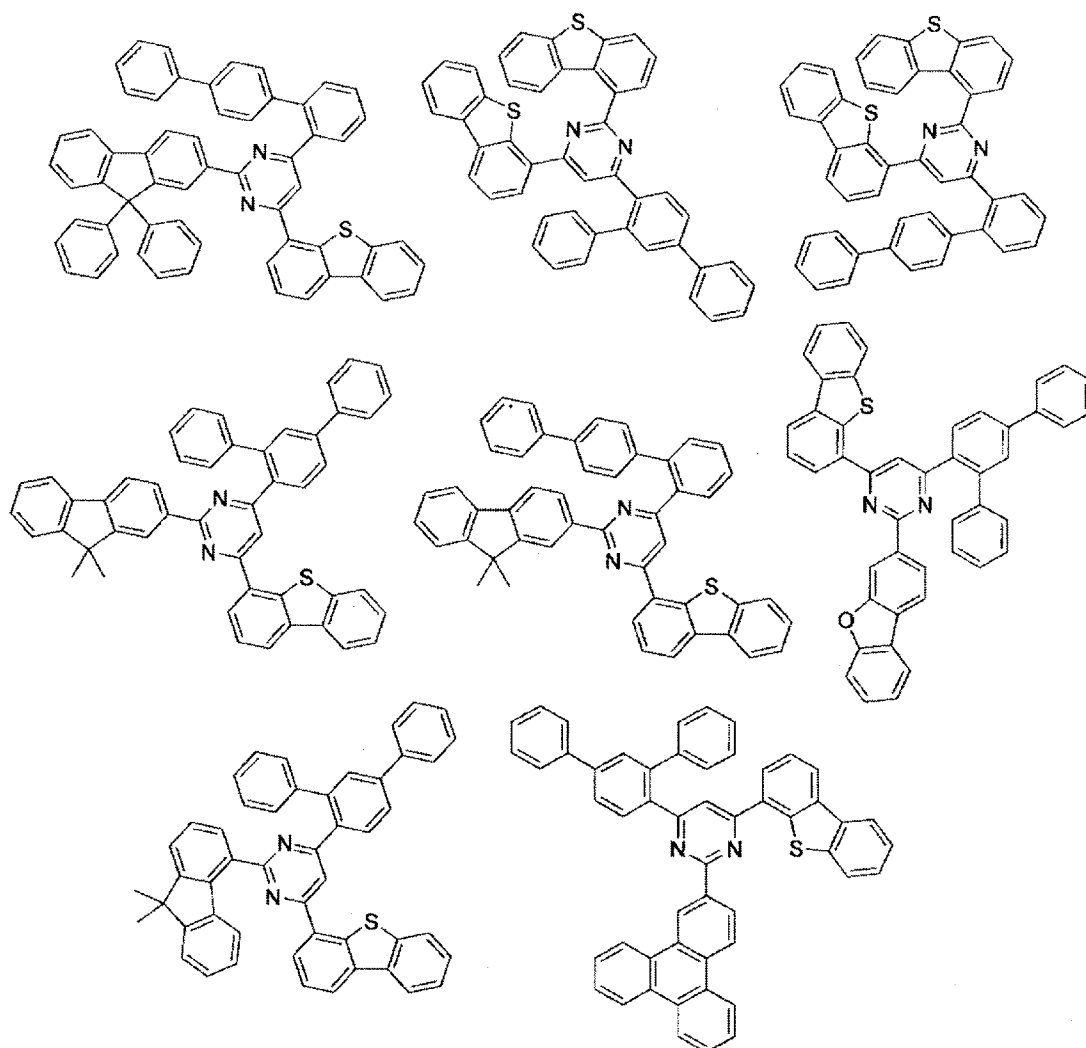
[0192]

[化58]



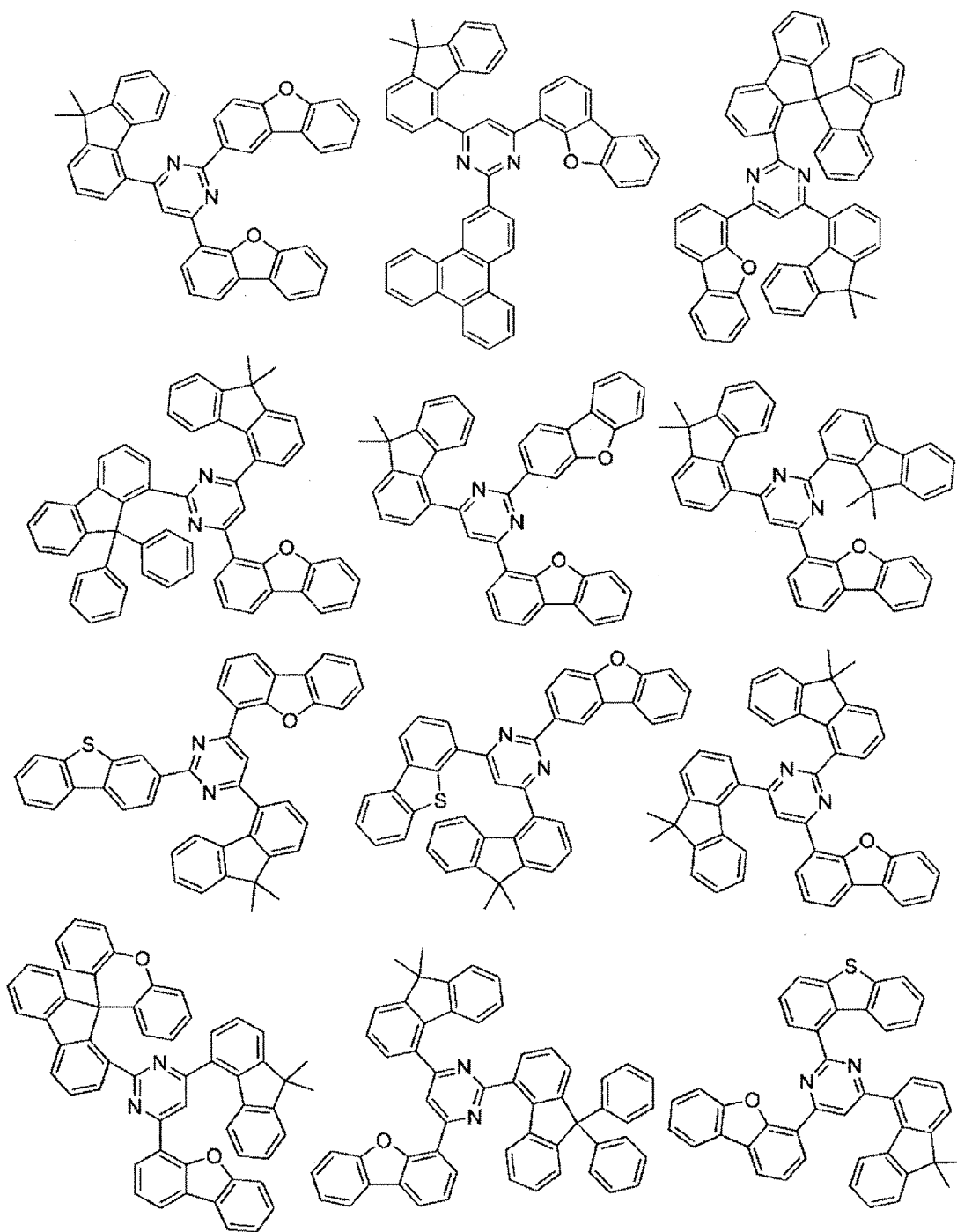
[0193]

[化59]



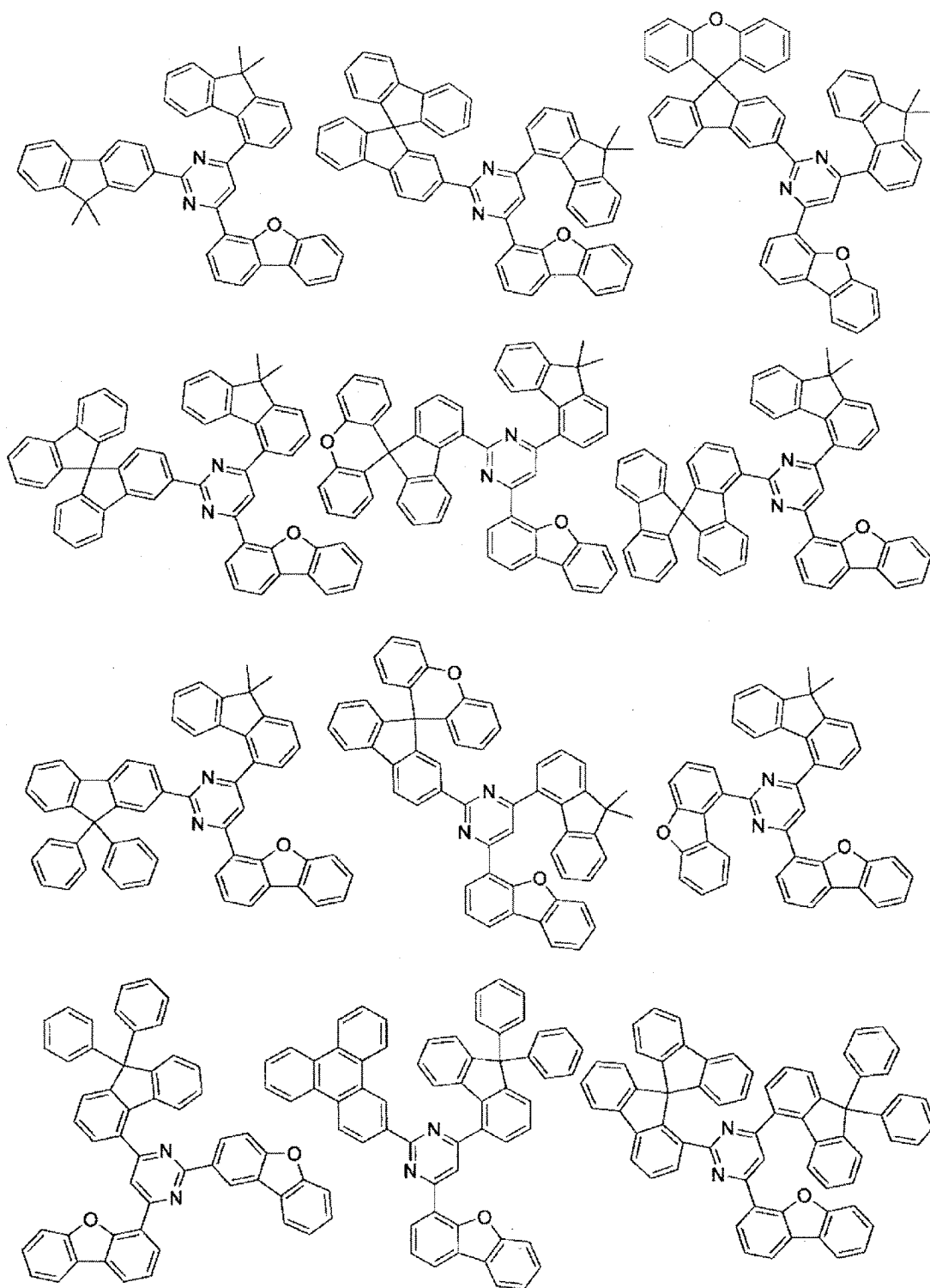
[0194]

[化60]



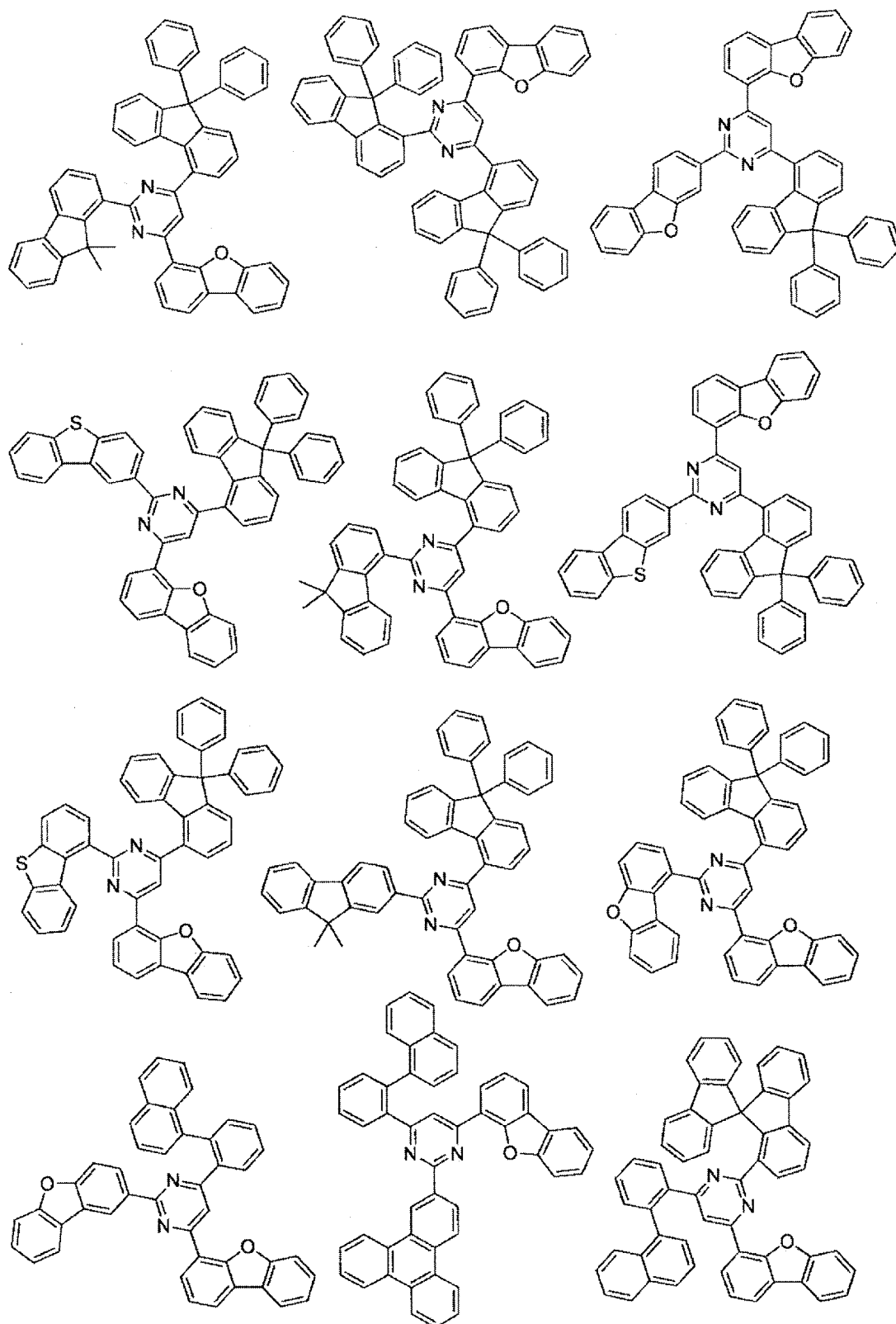
[0195]

[化61]



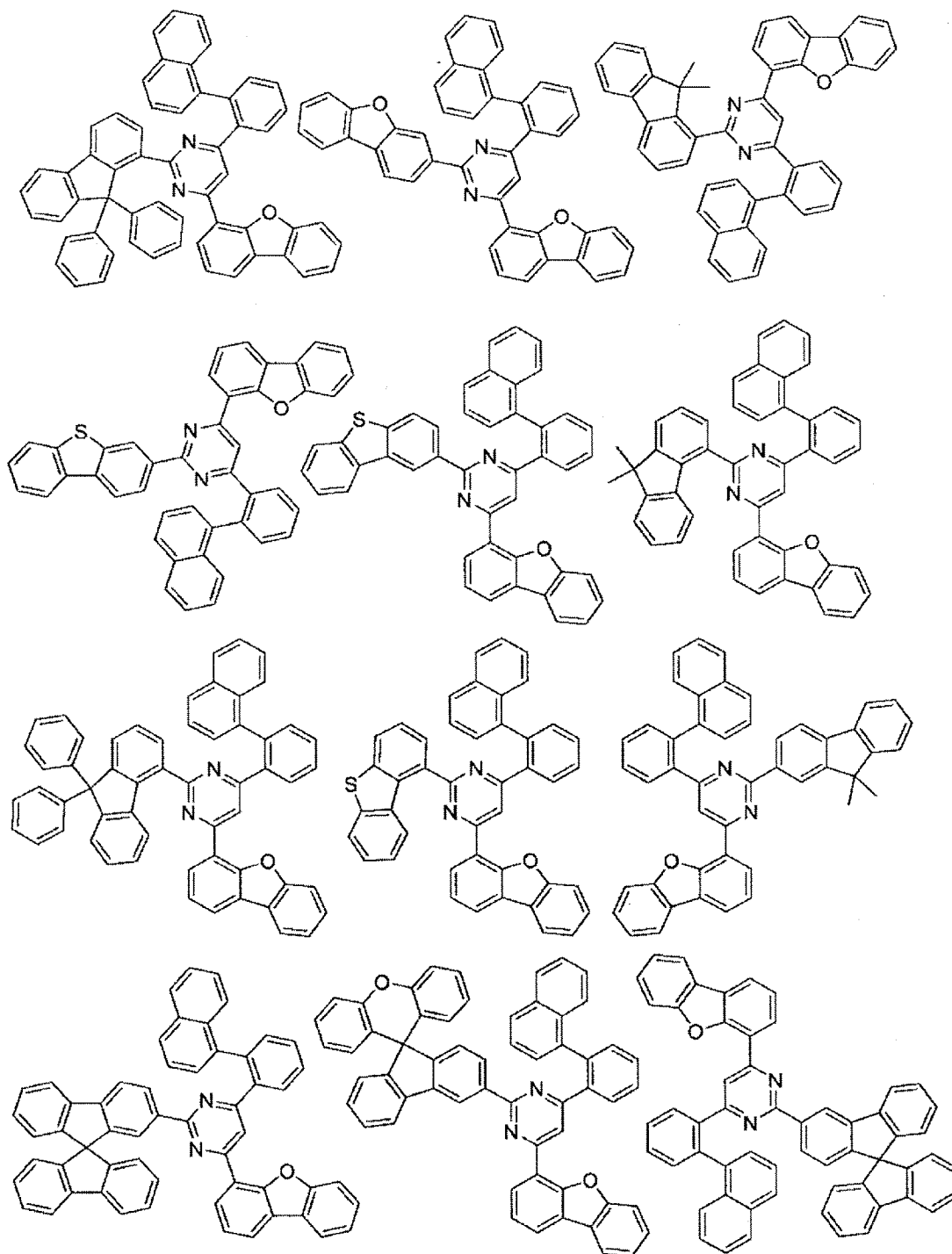
[0196]

[化62]



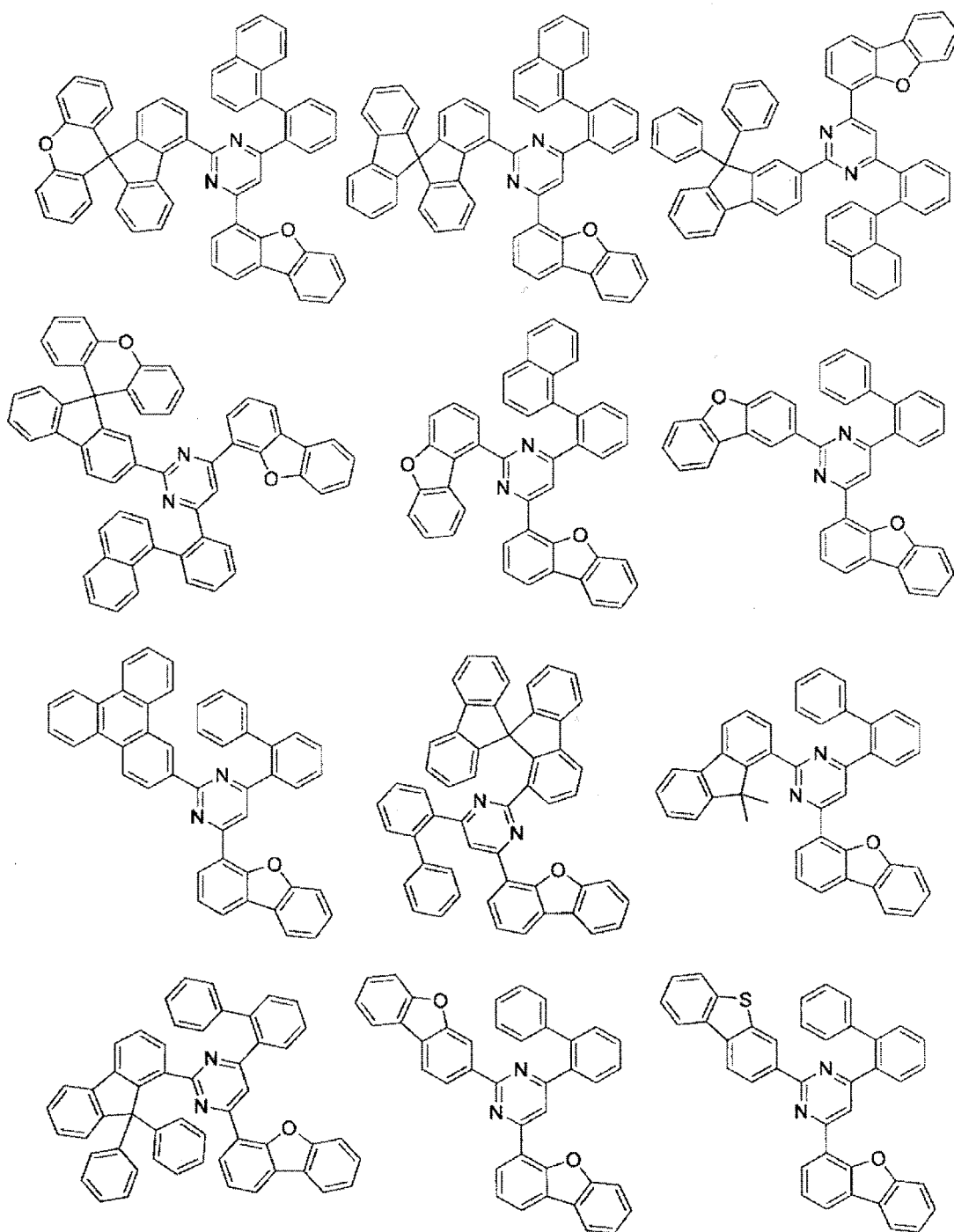
[0197]

[化63]



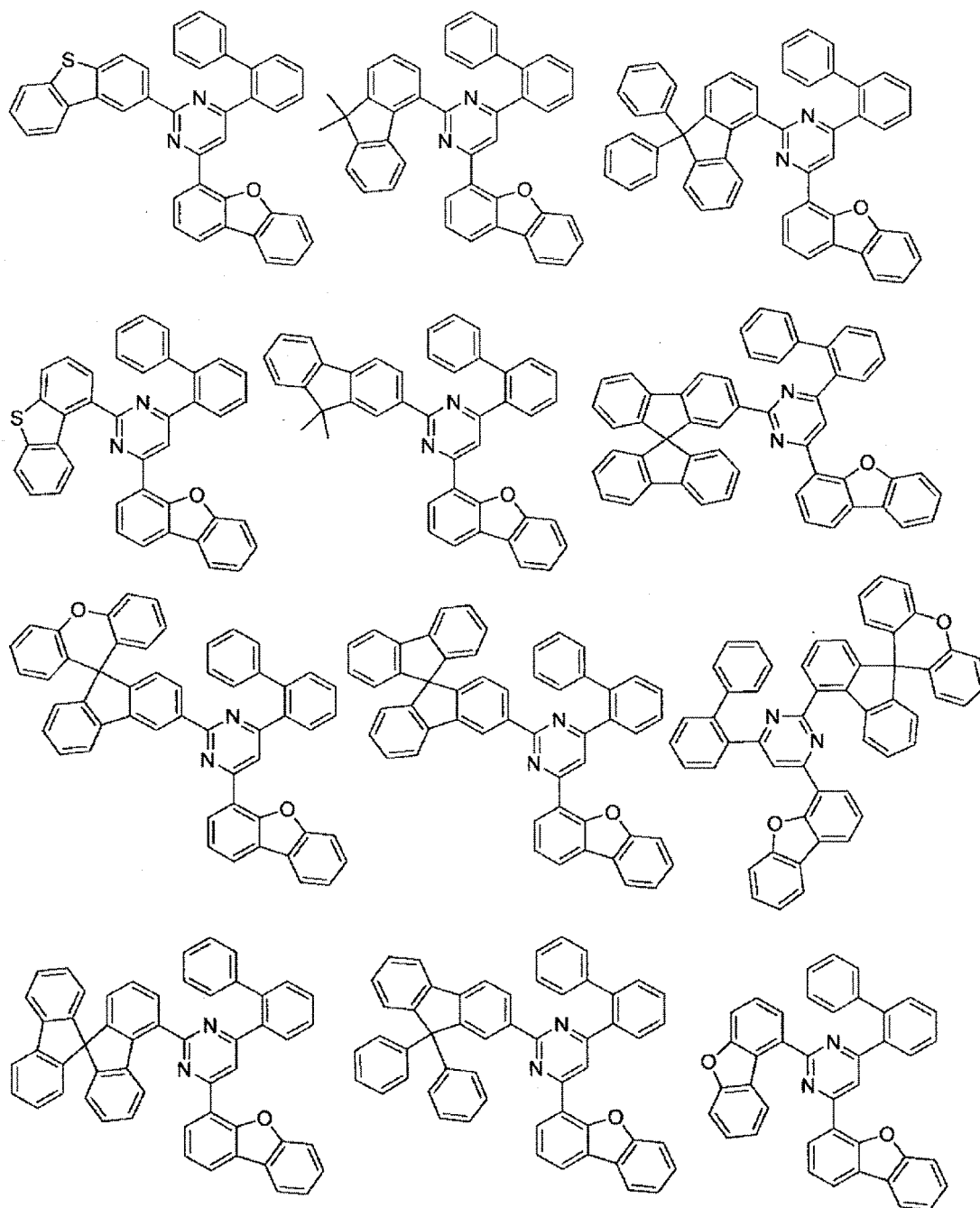
[0198]

[化64]



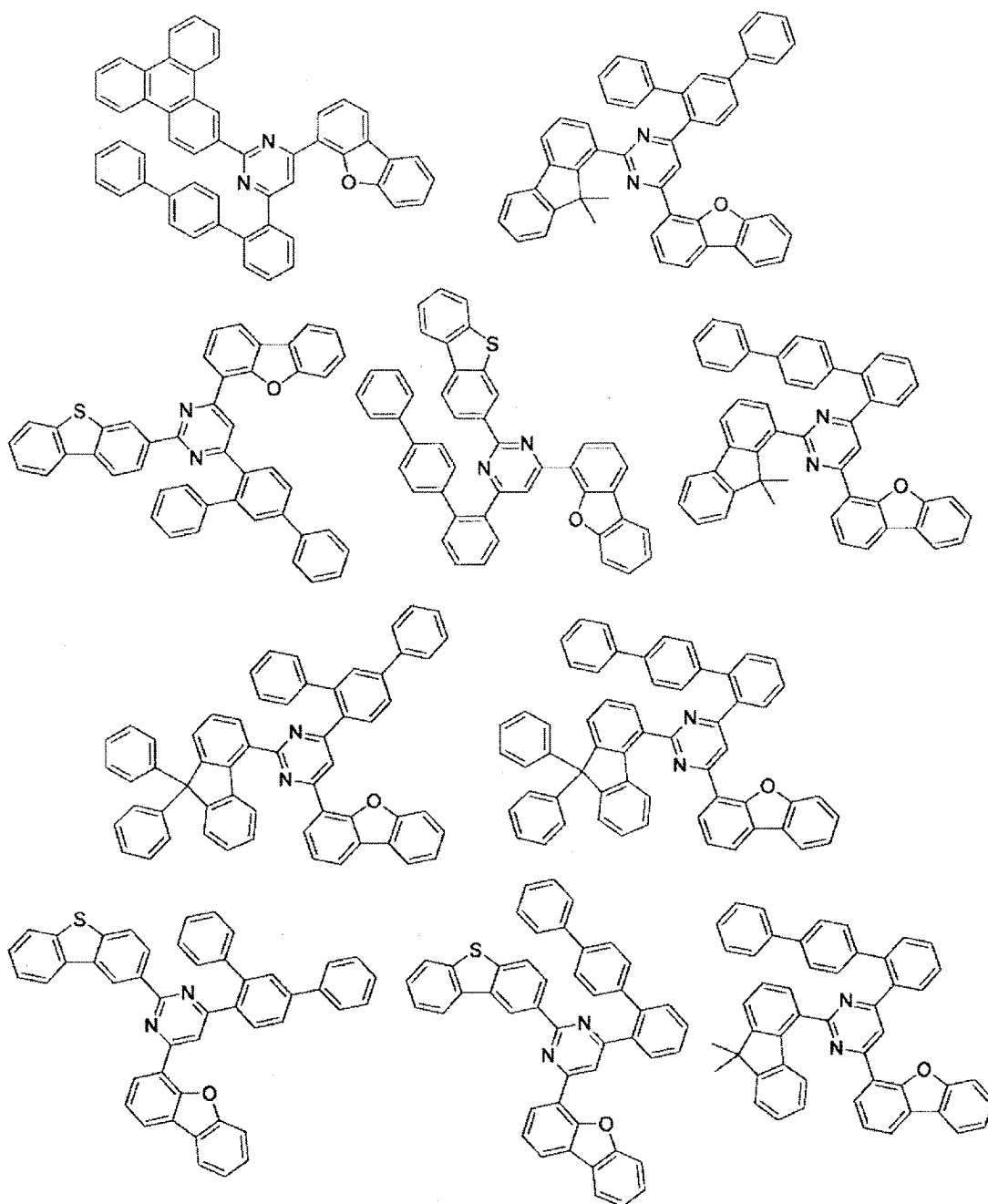
[0199]

[化65]



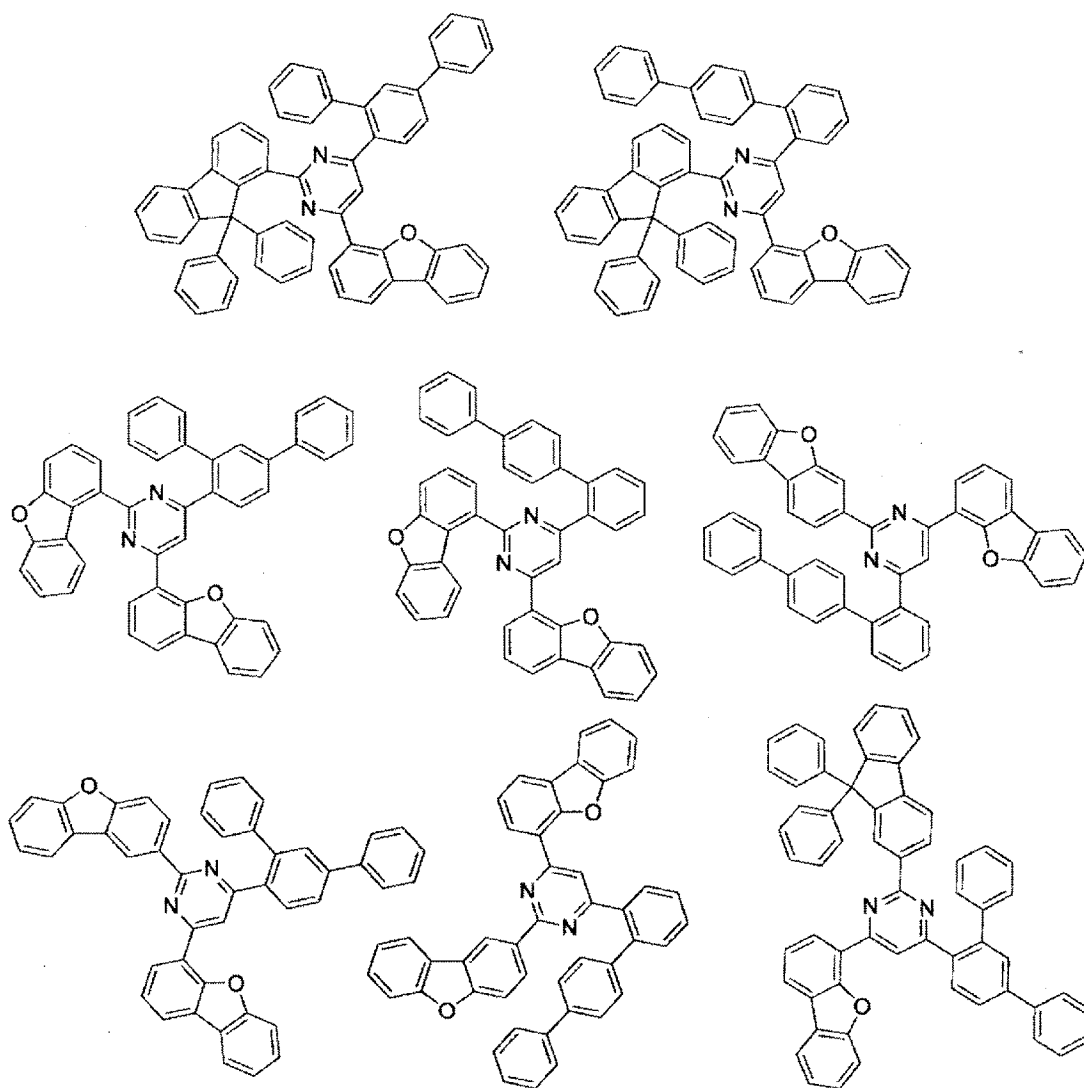
[0200]

[化66]



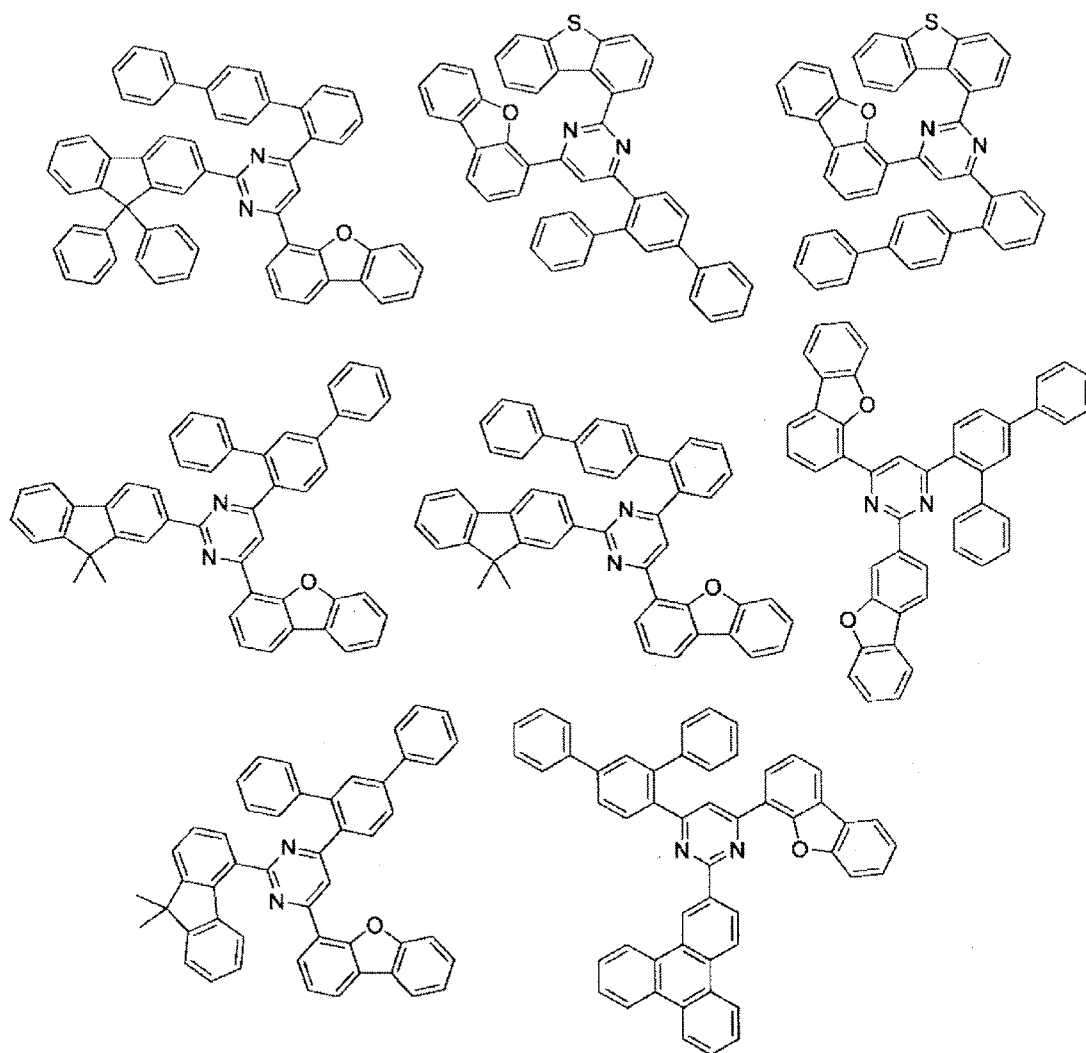
[0201]

[化67]



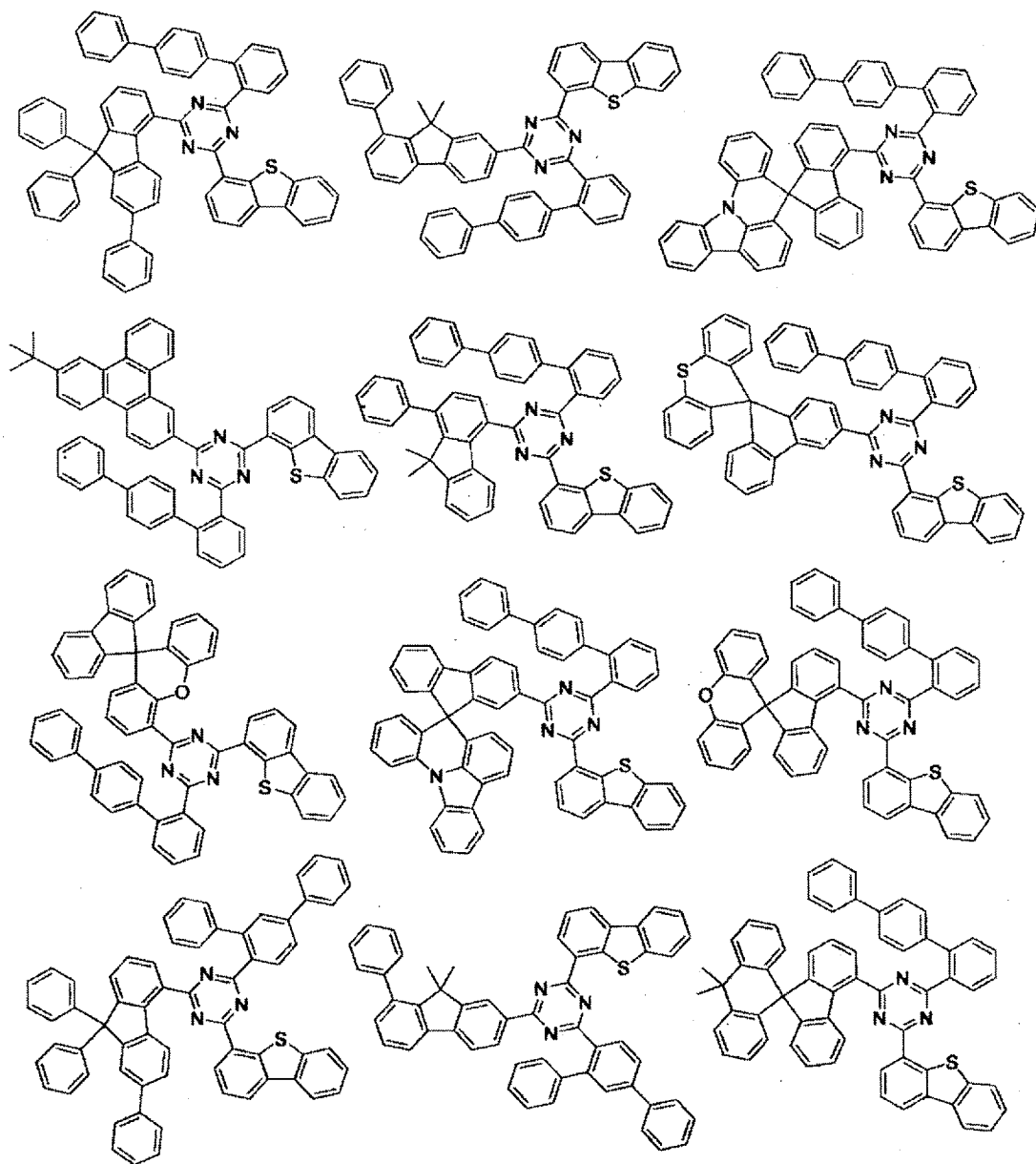
[0202]

[化68]



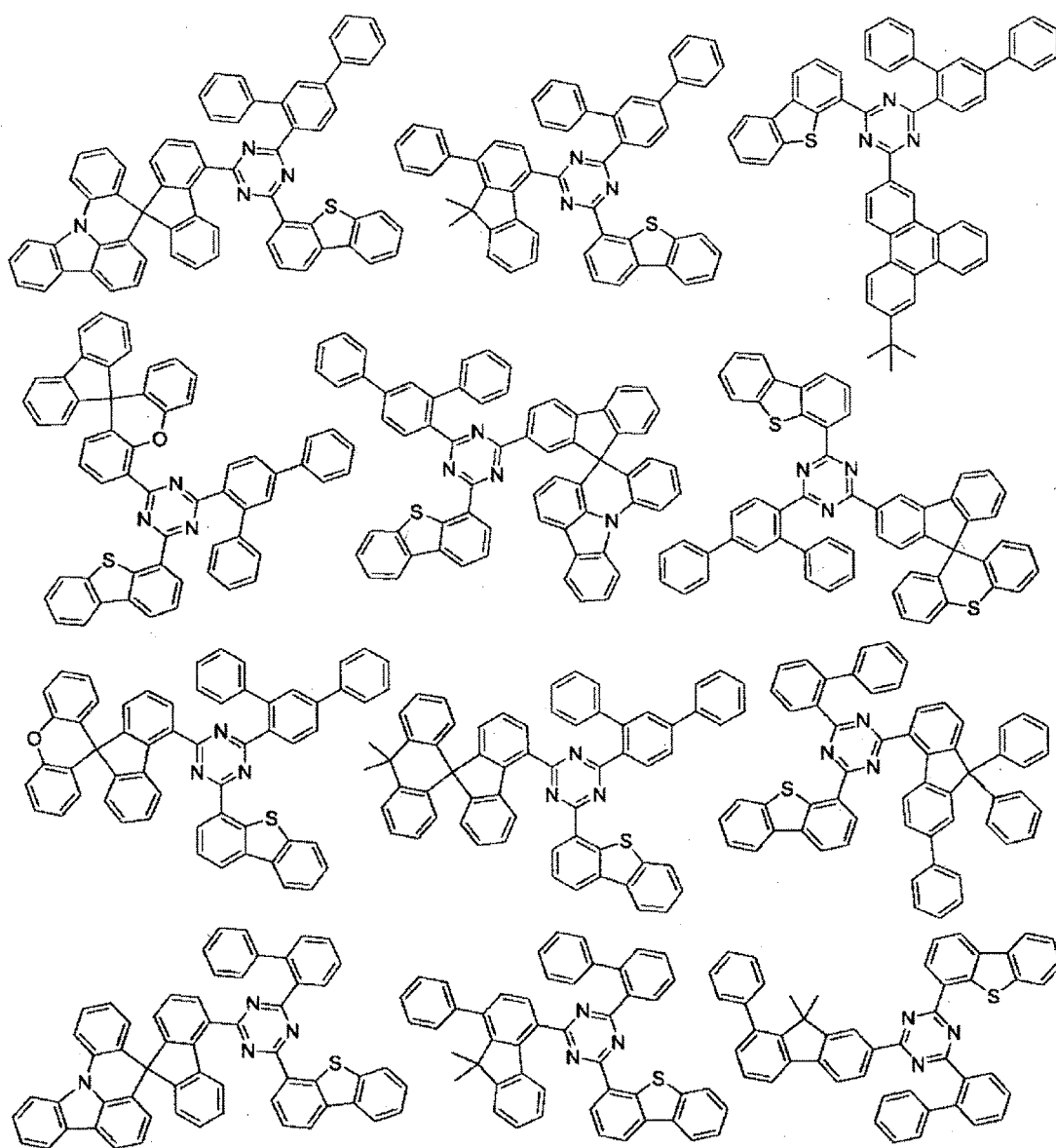
[0203]

[化69]



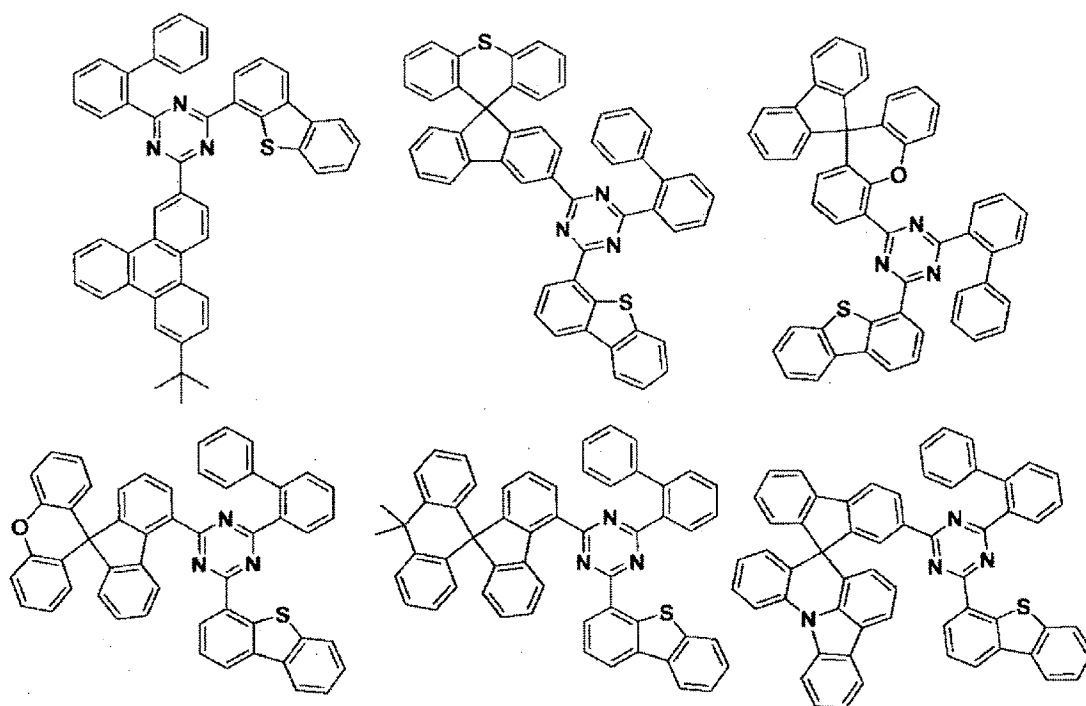
[0204]

[化70]



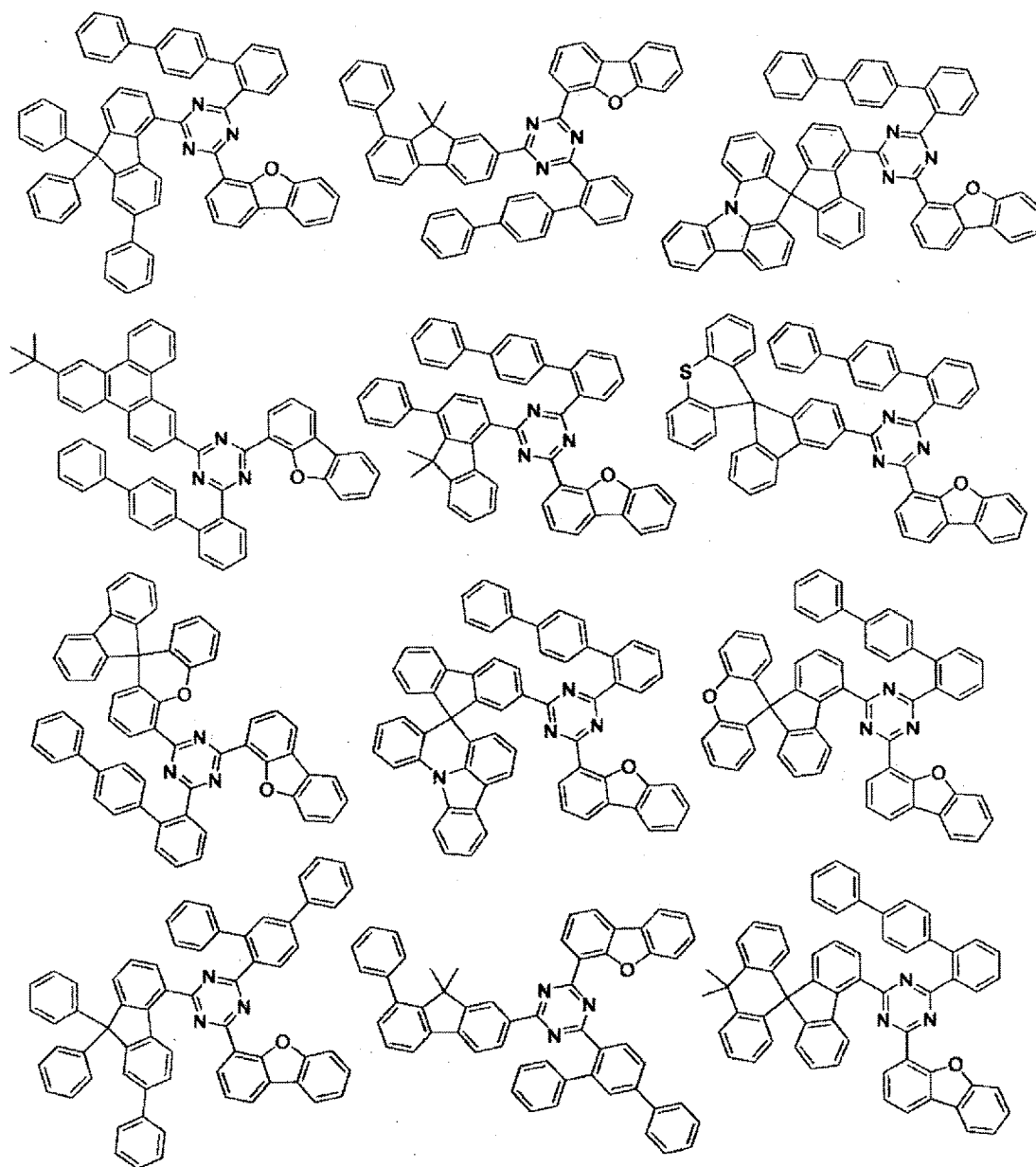
[0205]

[化71]



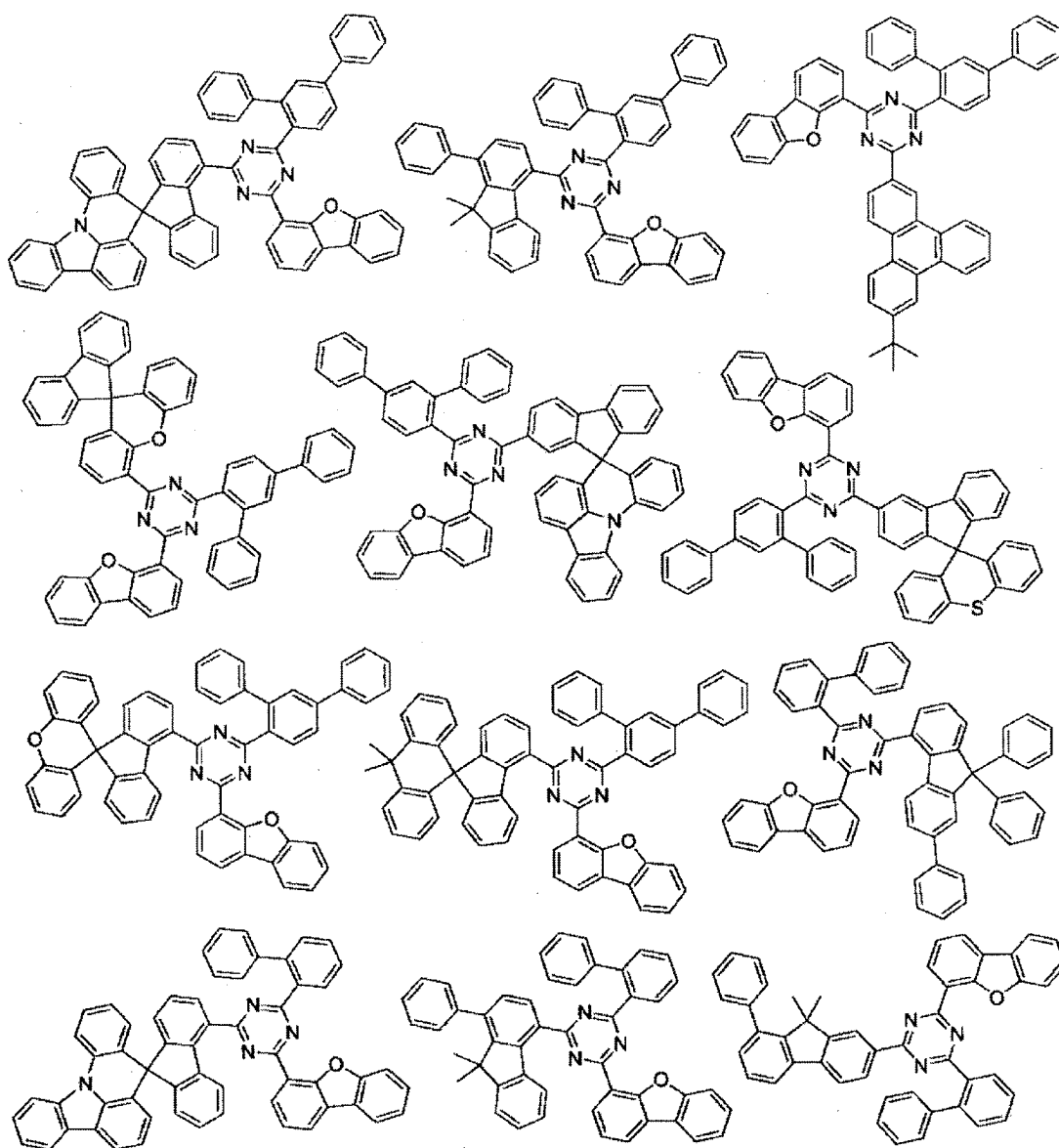
[0206]

[化72]



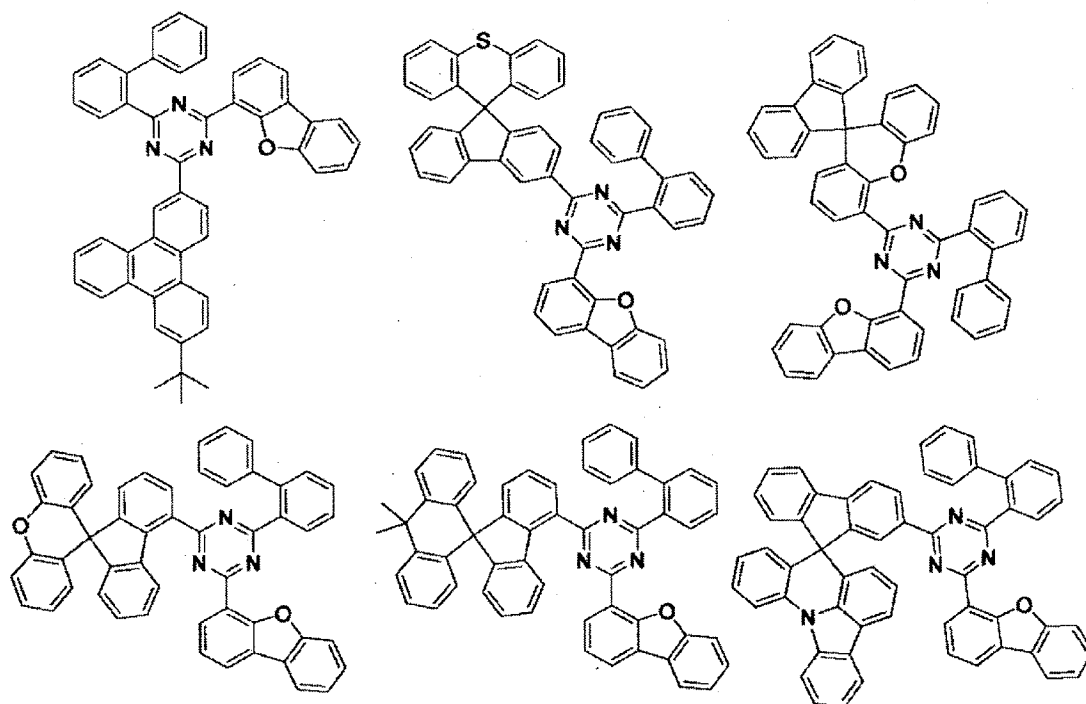
[0207]

[化73]



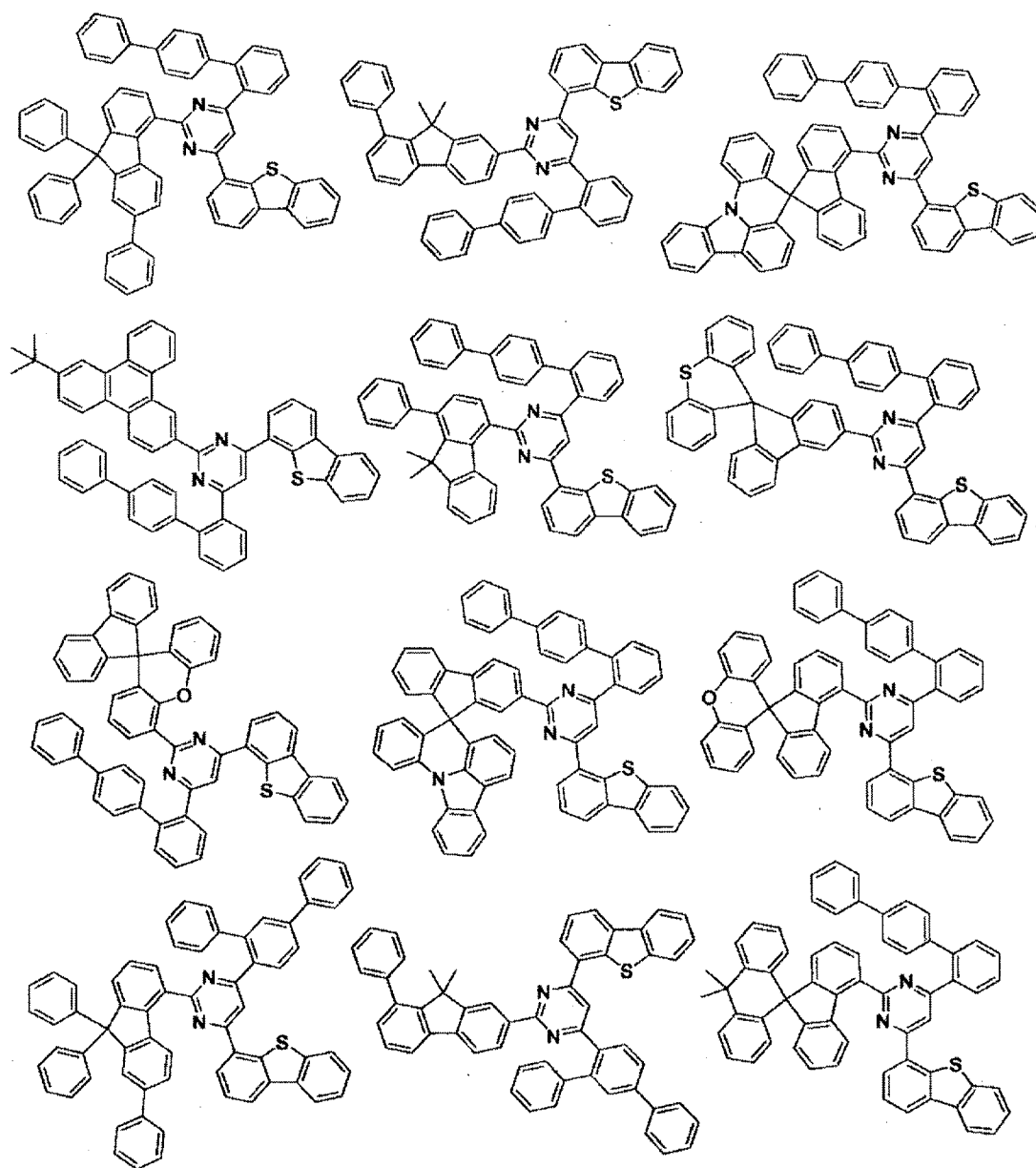
[0208]

[化74]



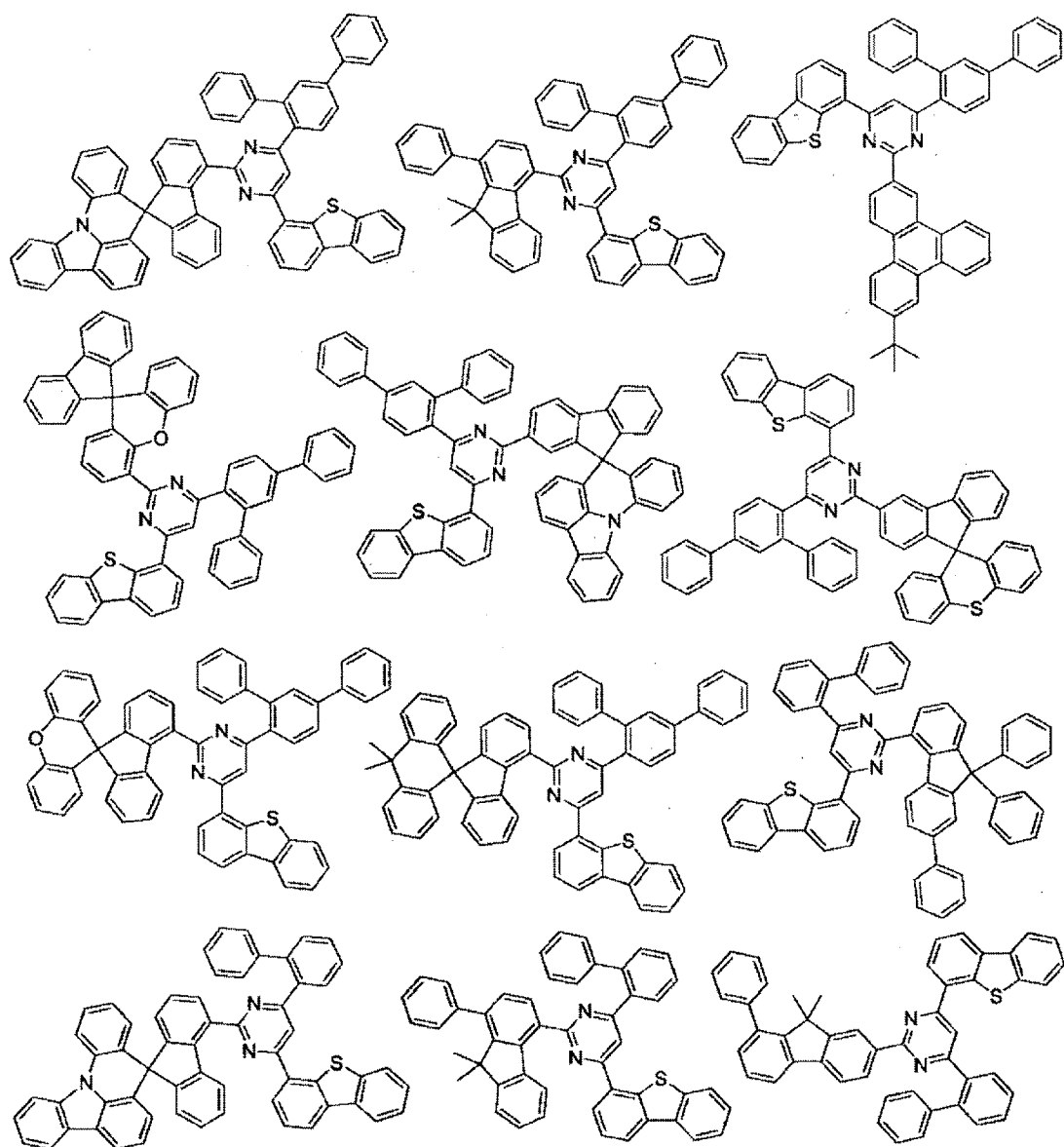
[0209]

[化75]



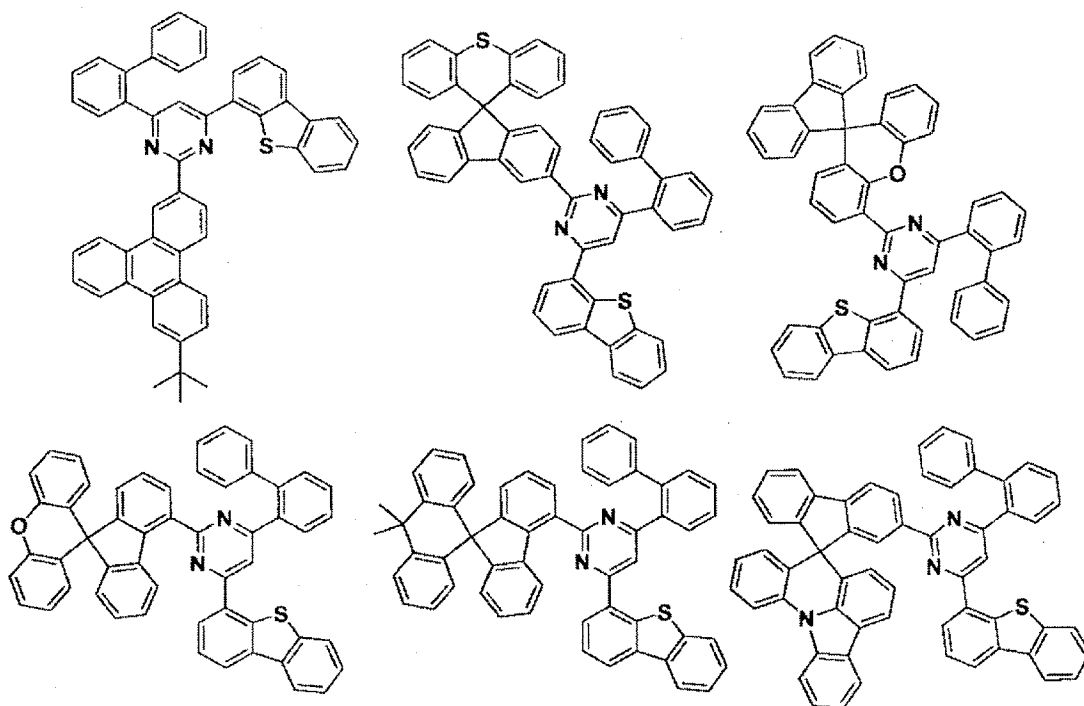
[0210]

[化76]



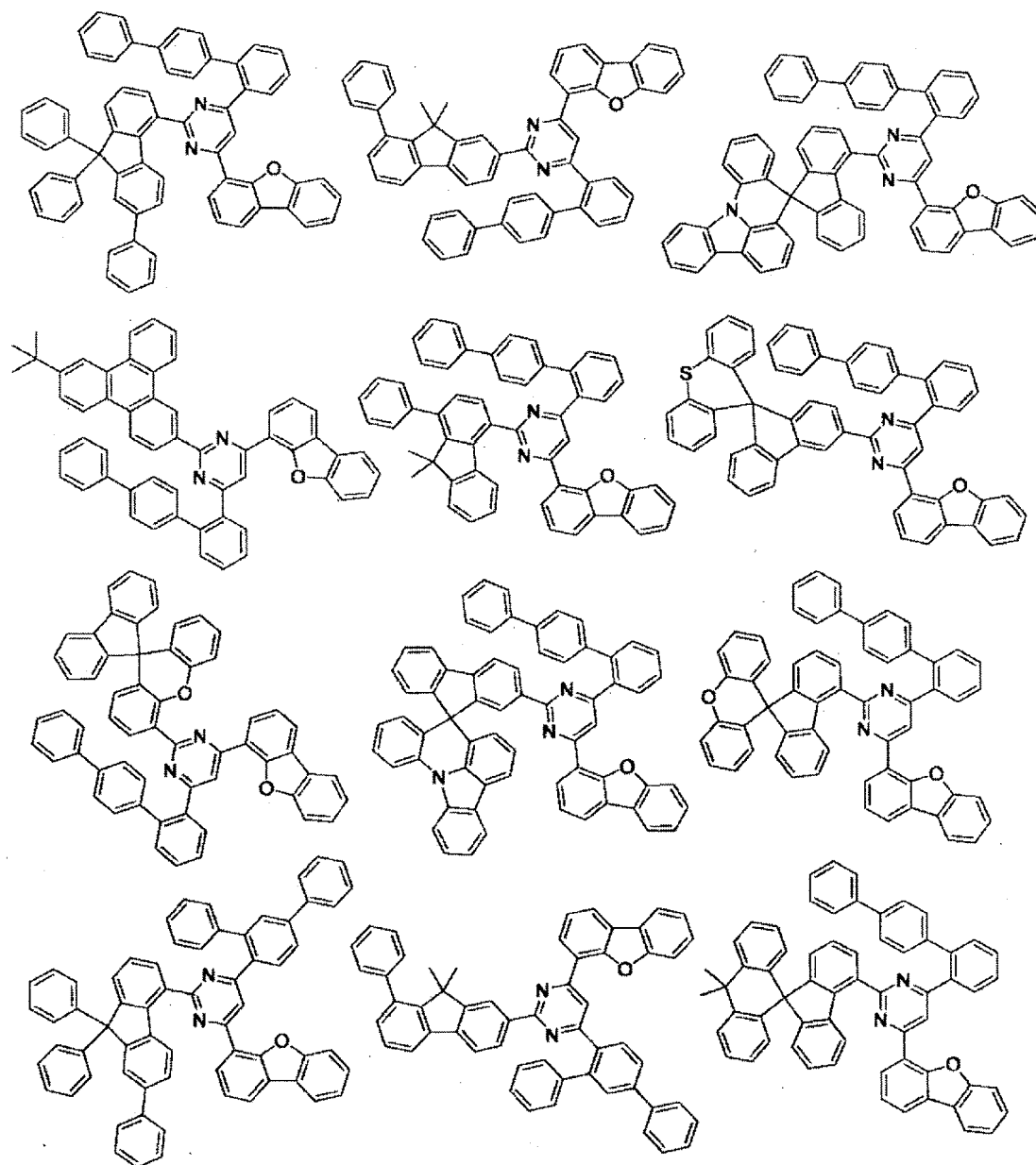
[0211]

[化77]



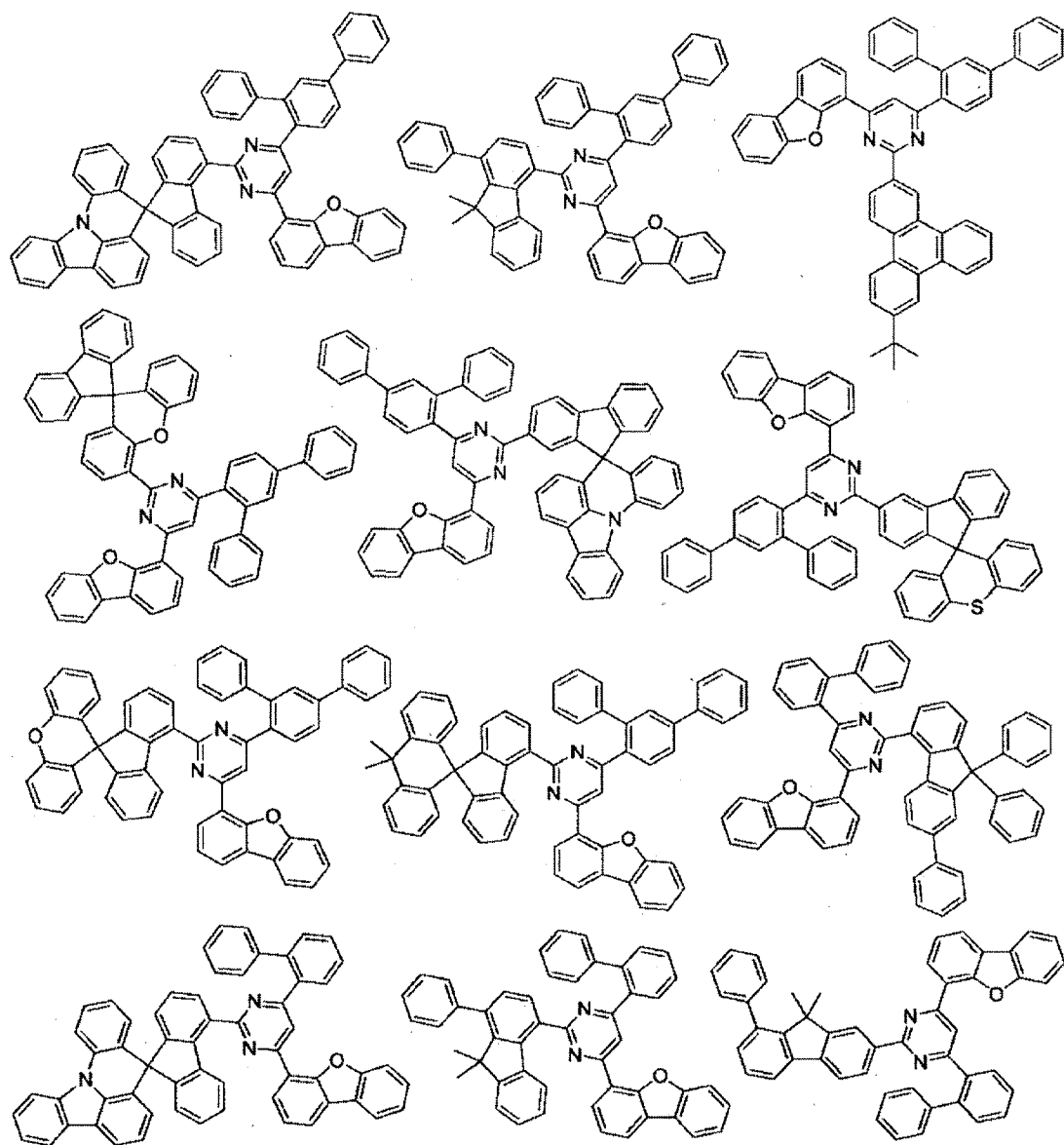
[0212]

[化78]



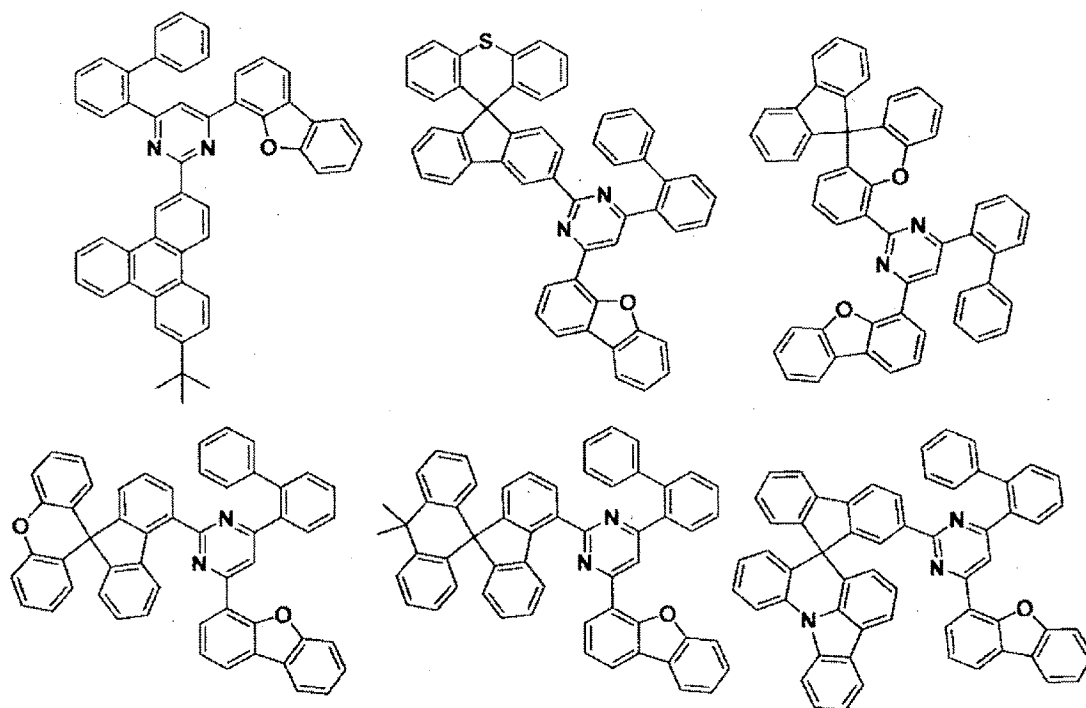
[0213]

[化79]



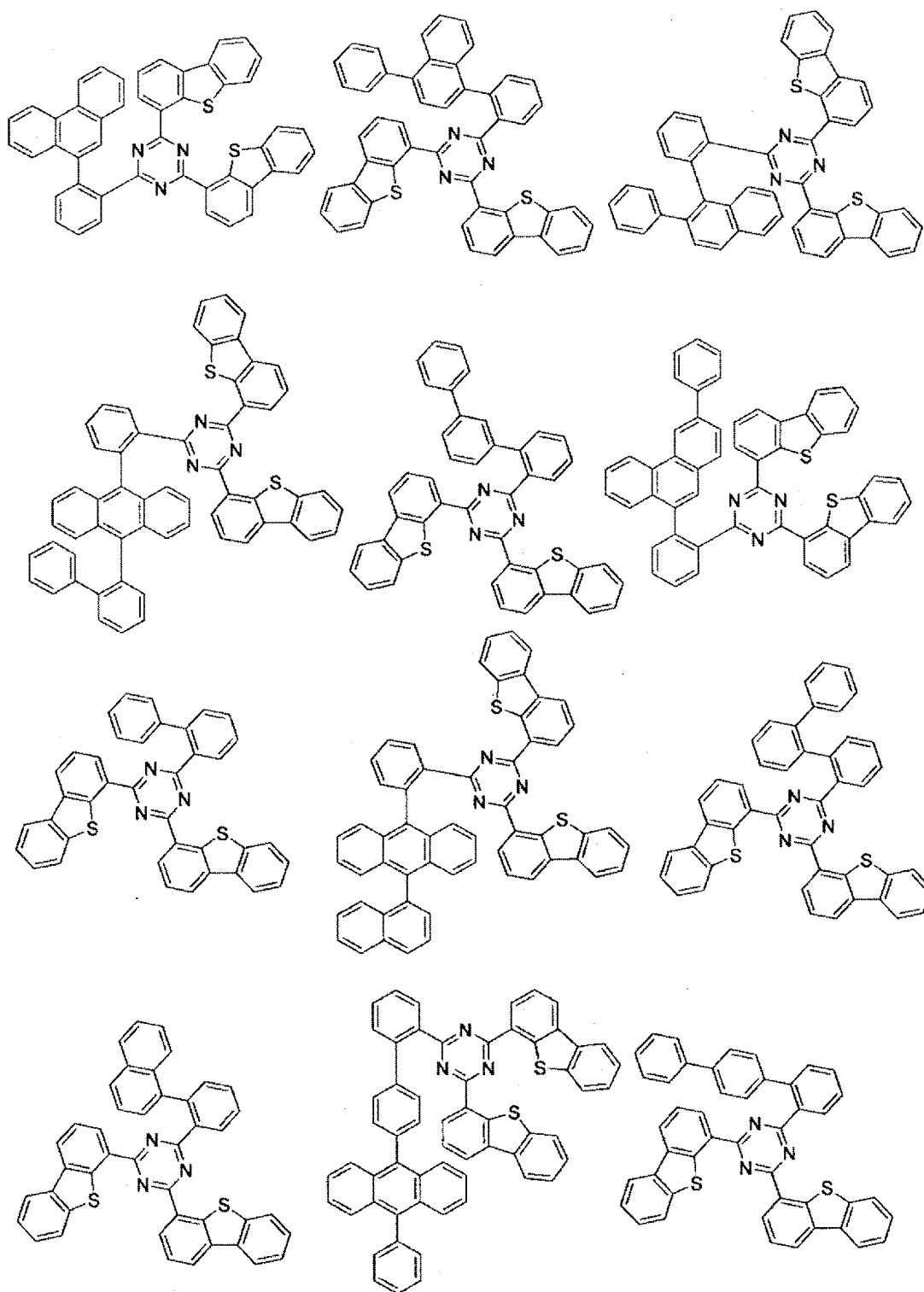
[0214]

[化80]



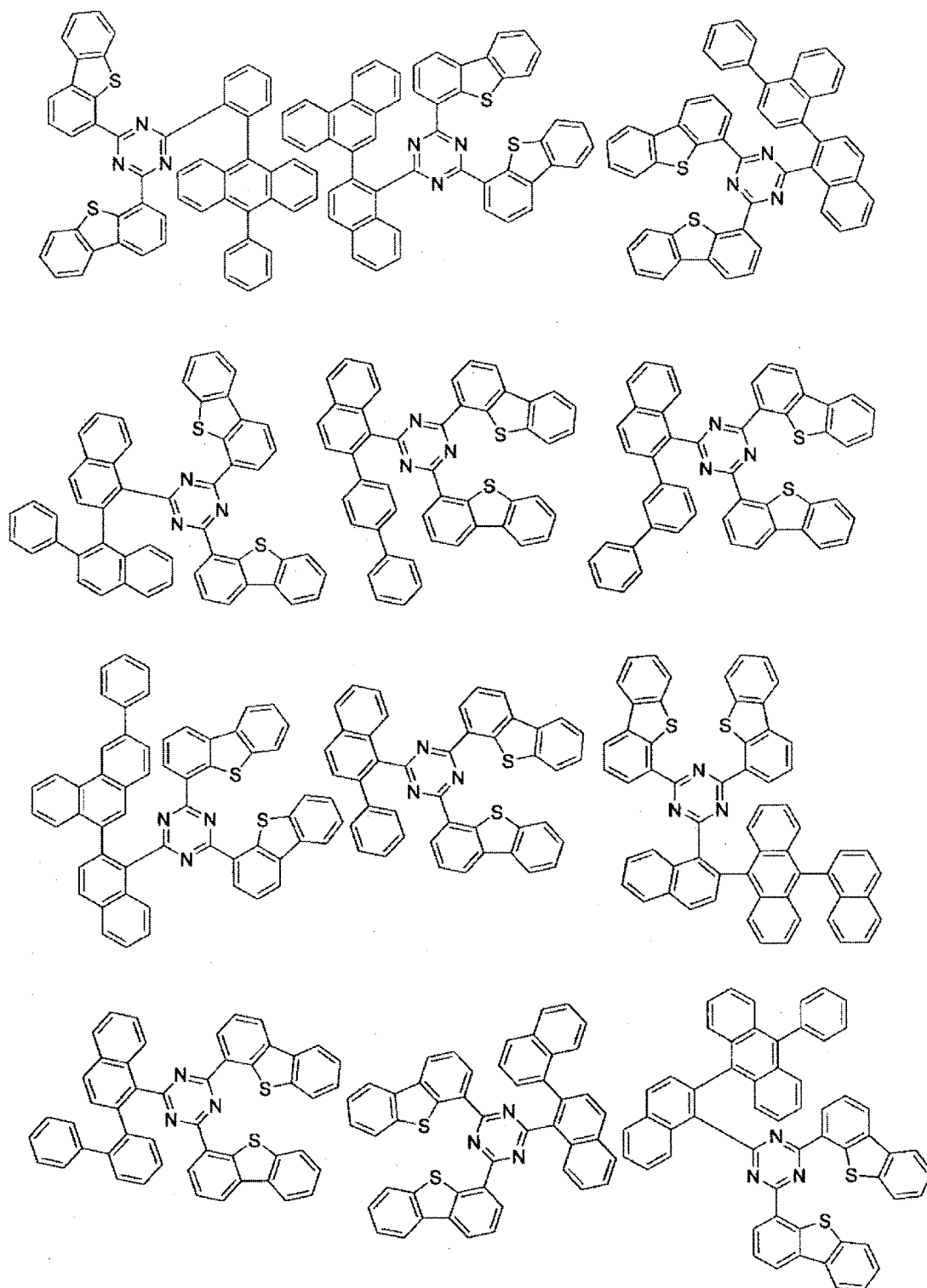
[0215]

[化81]



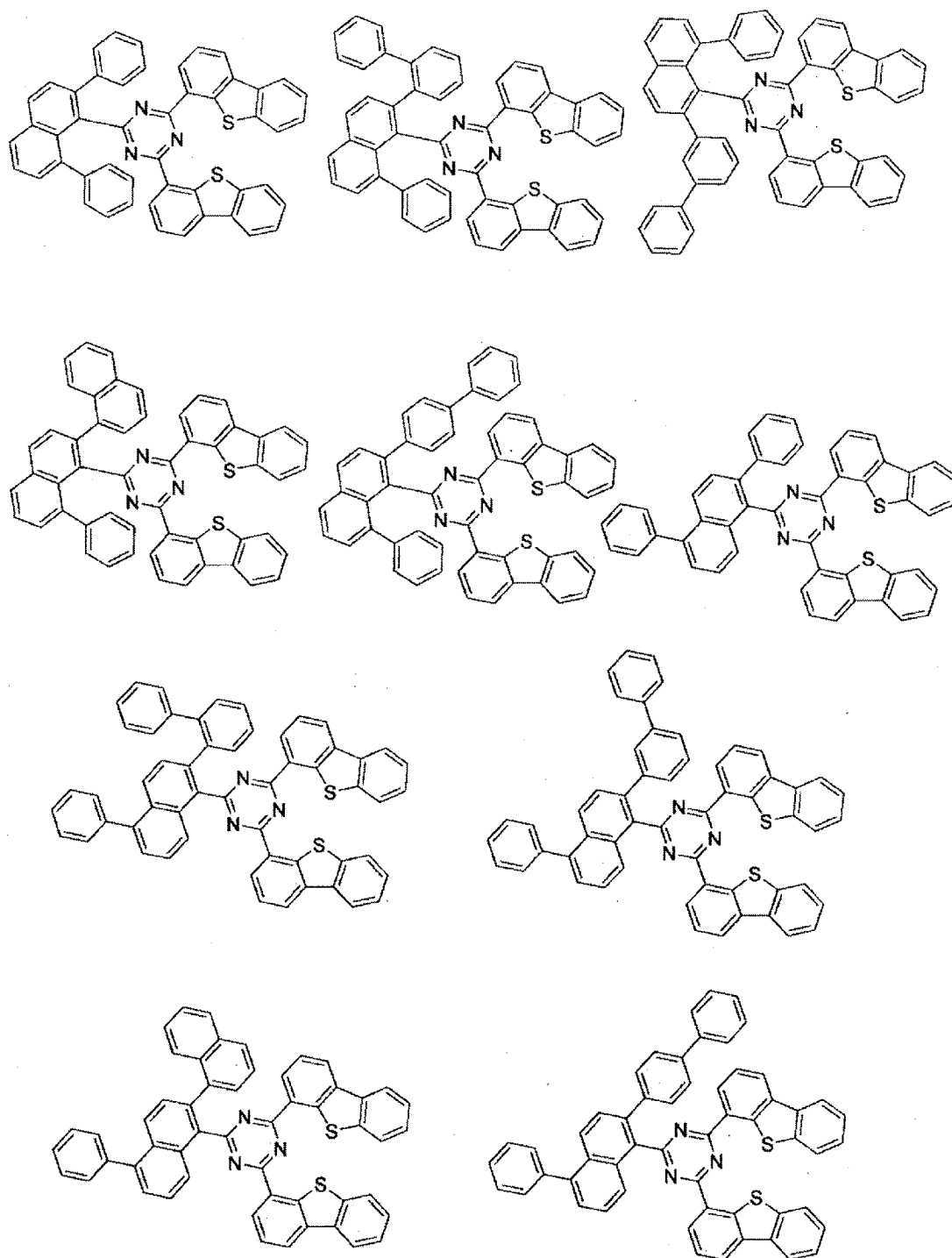
[0216]

[化82]



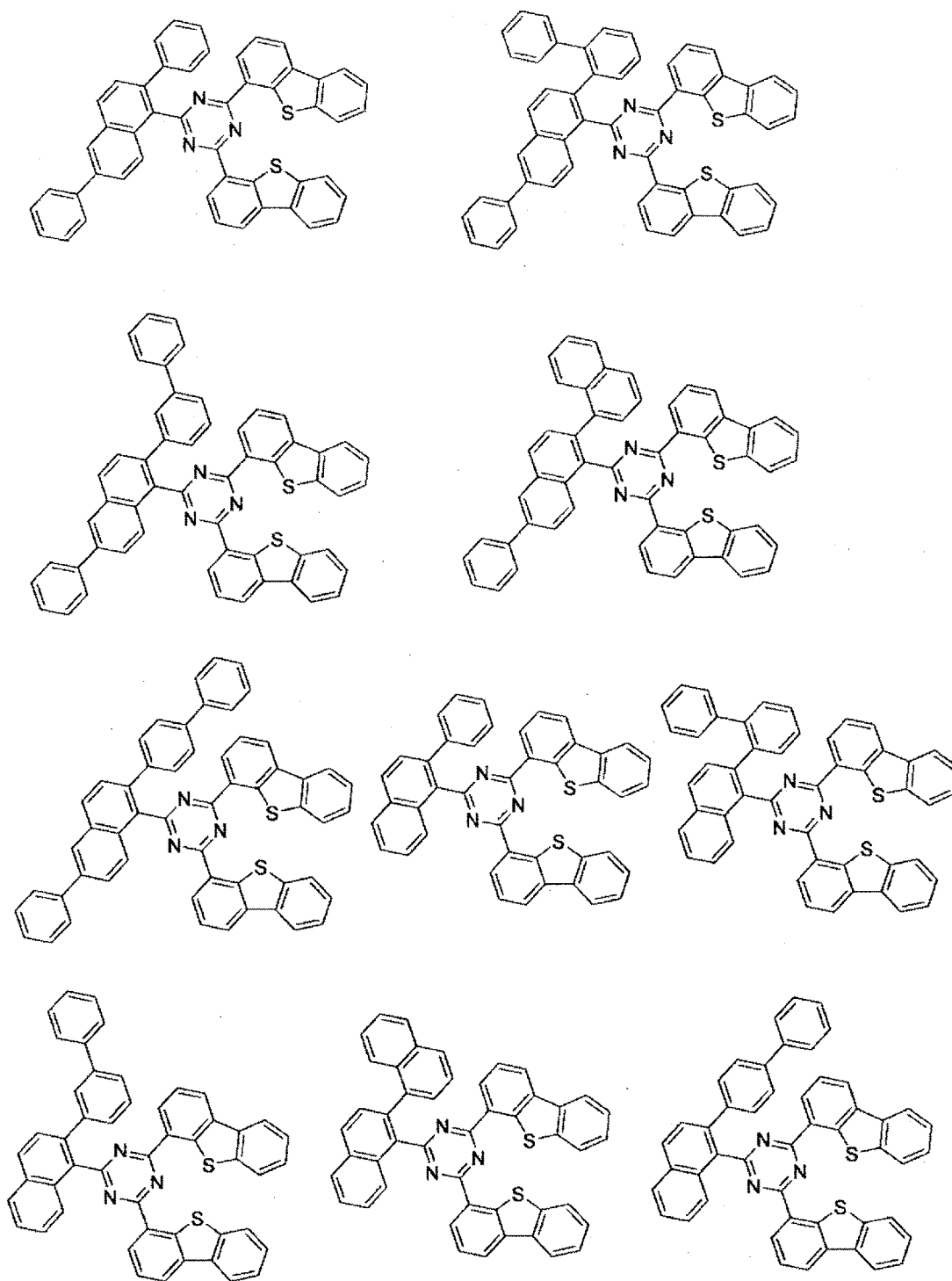
[0217]

[化83]



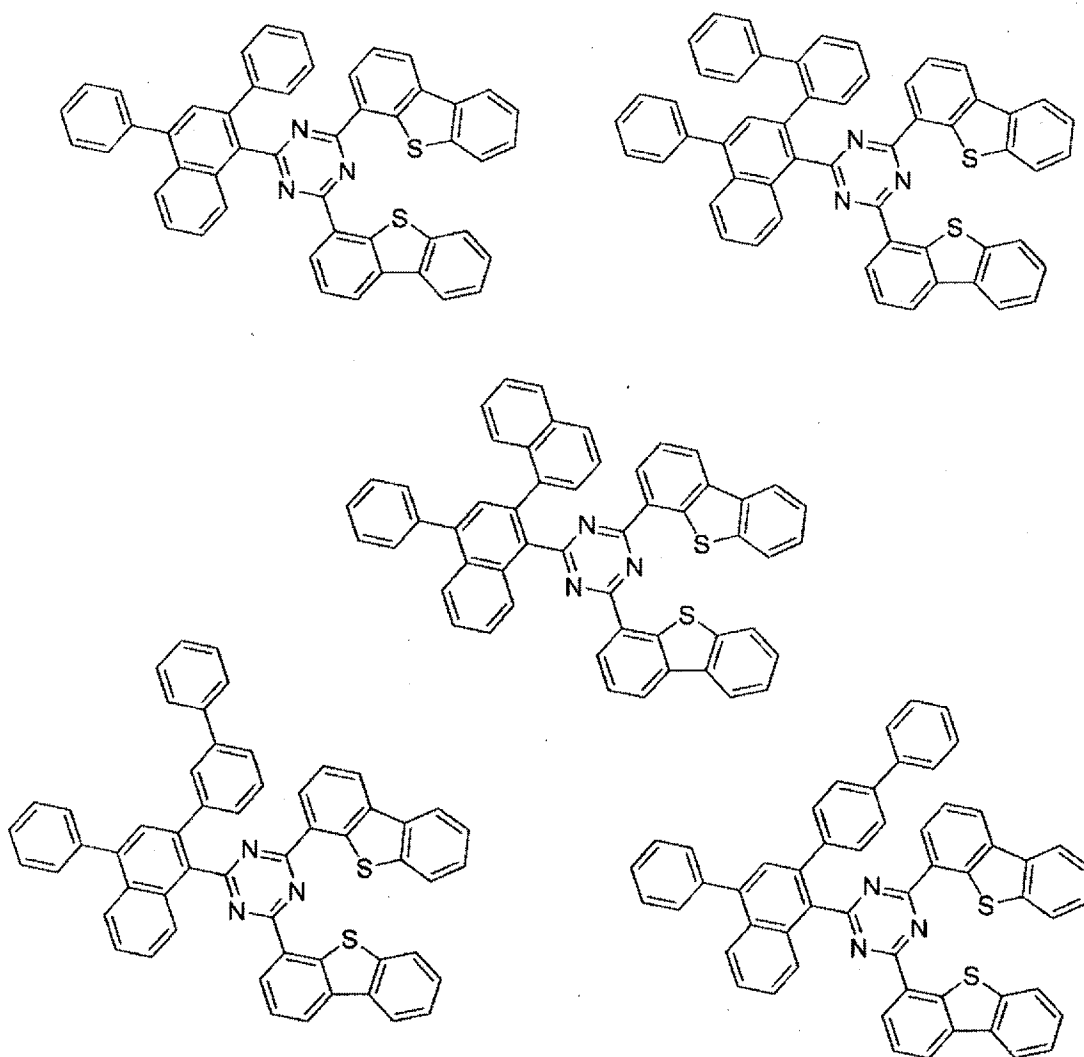
[0218]

[化84]



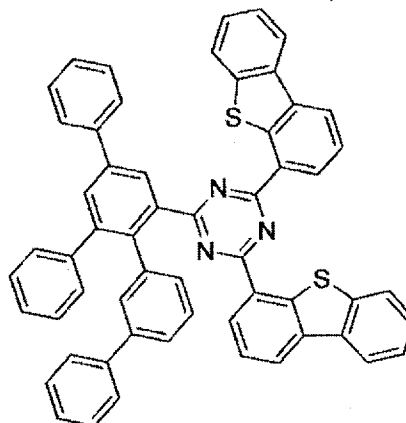
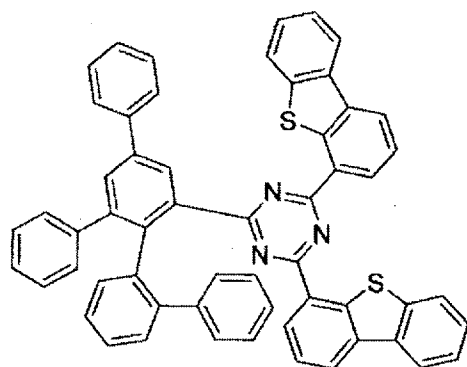
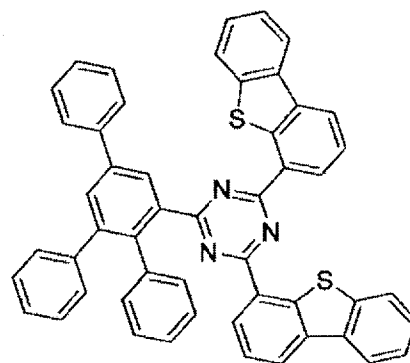
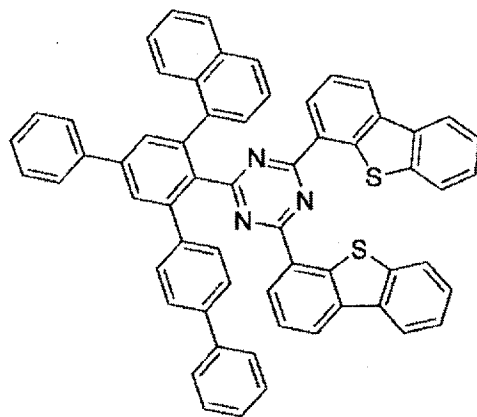
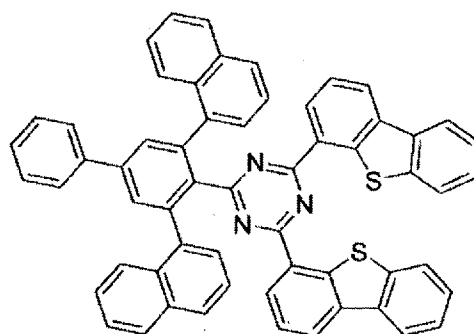
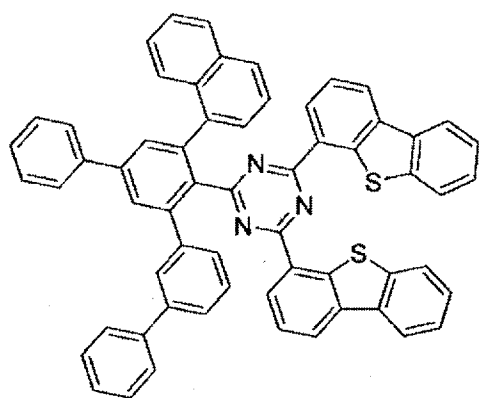
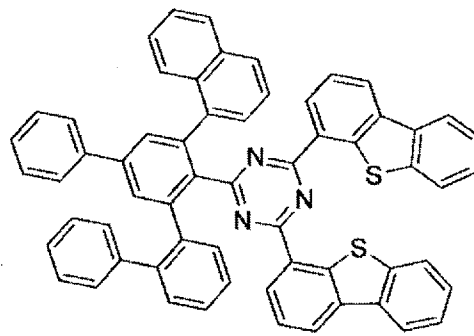
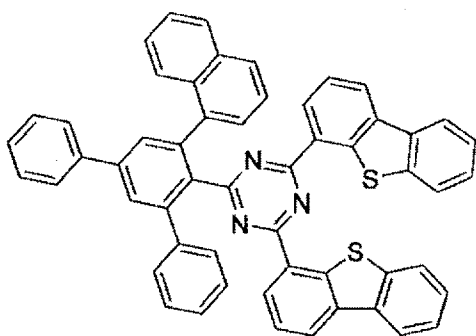
[0219]

[化85]

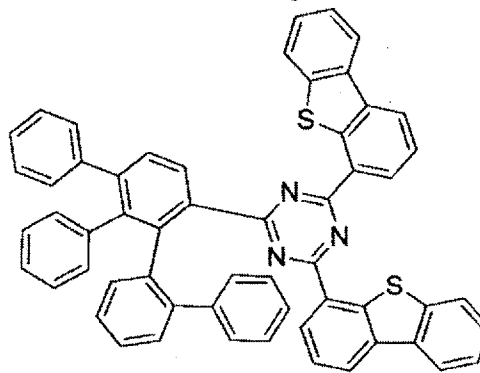
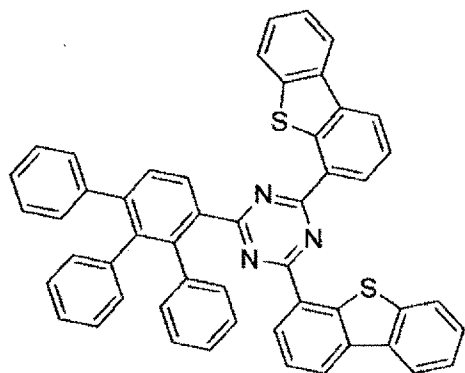
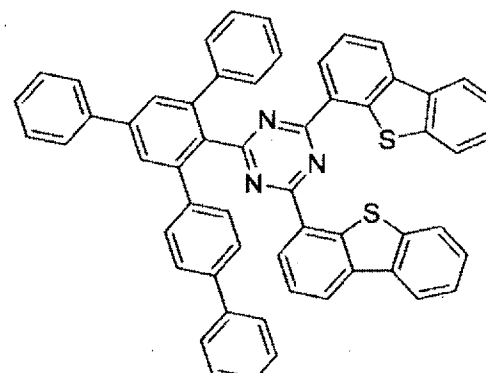
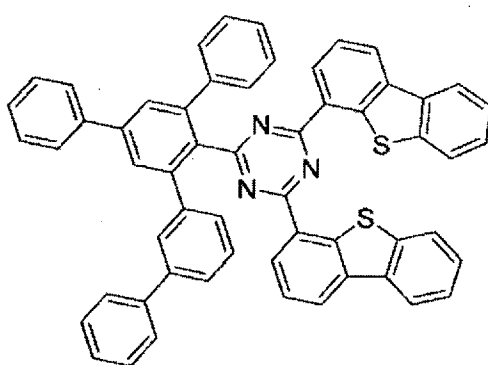
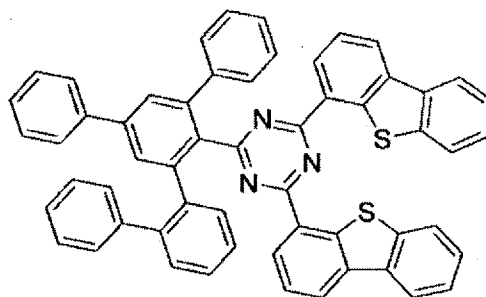
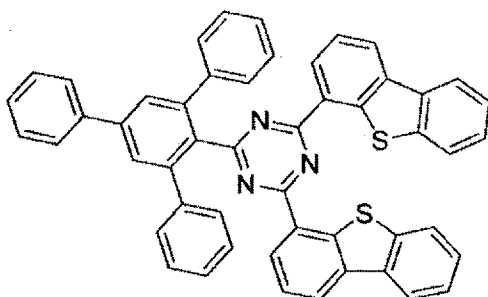
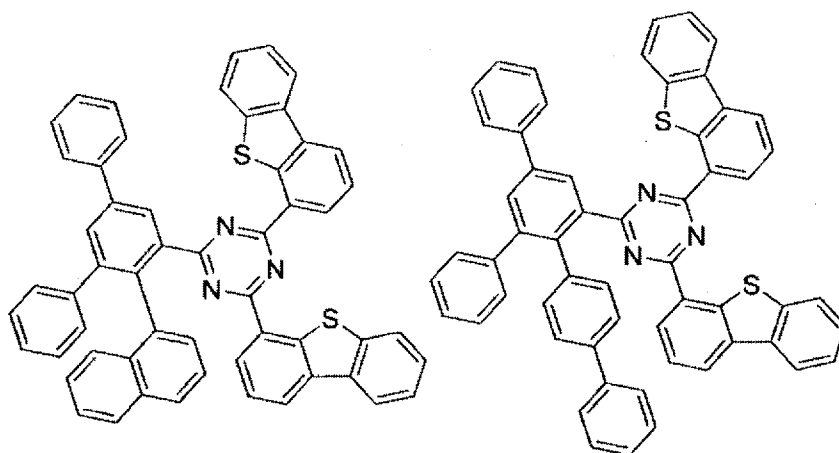


[0220]

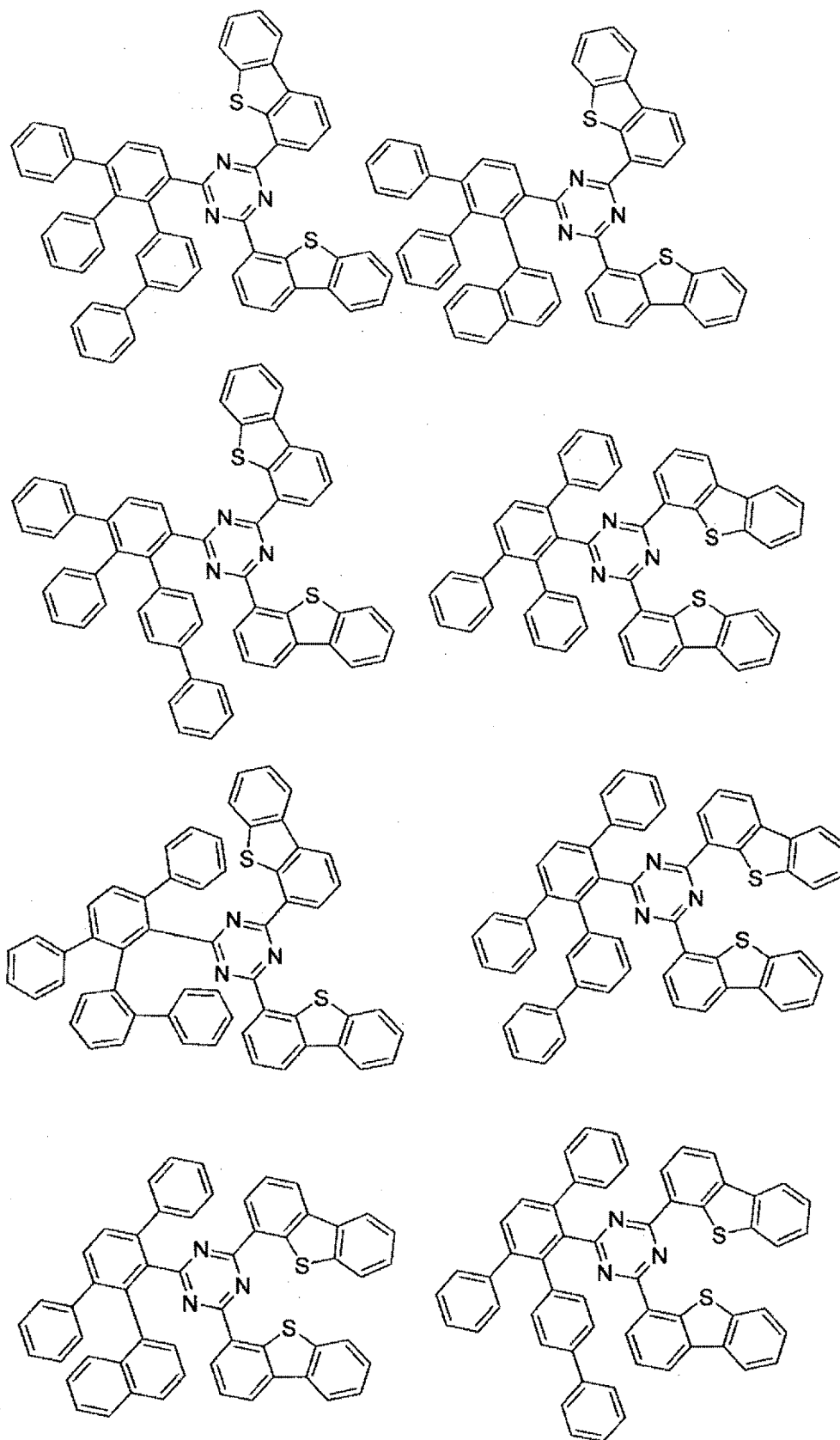
[化86]



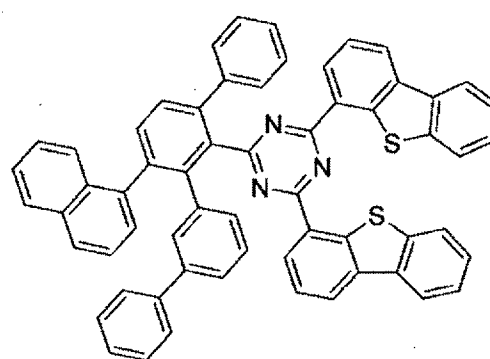
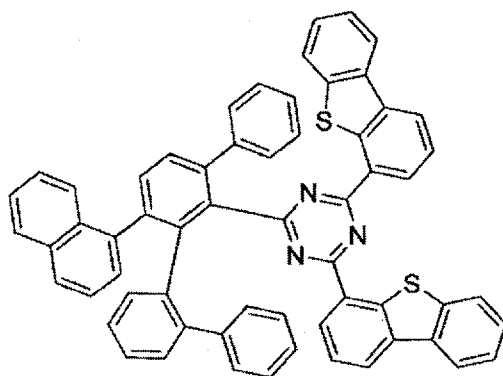
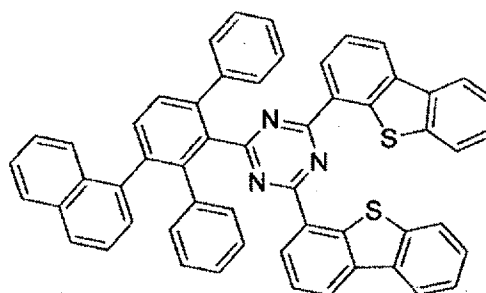
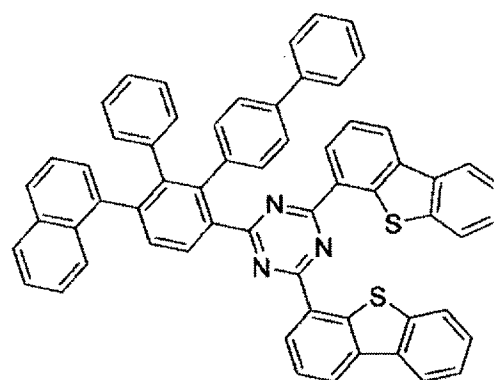
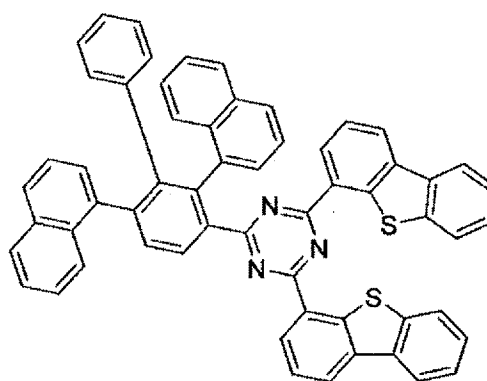
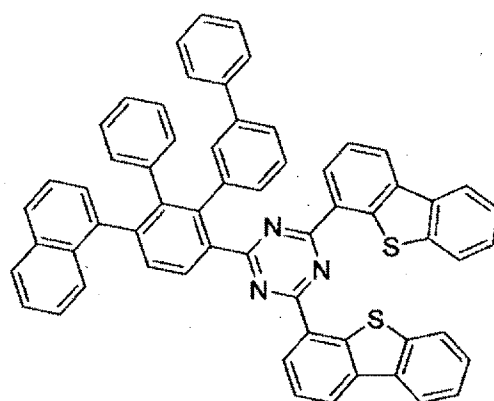
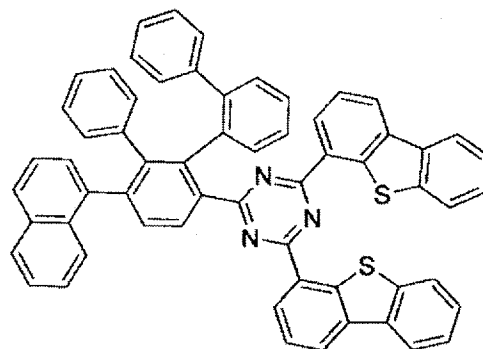
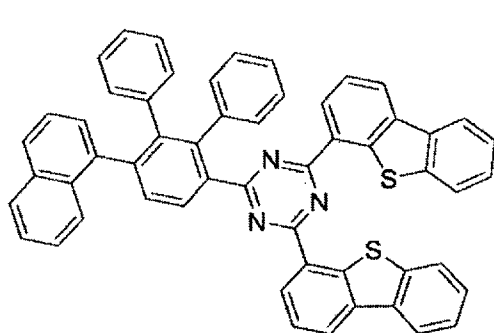
[0221] [化87]



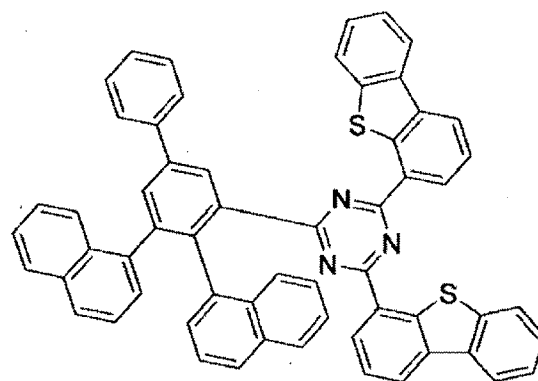
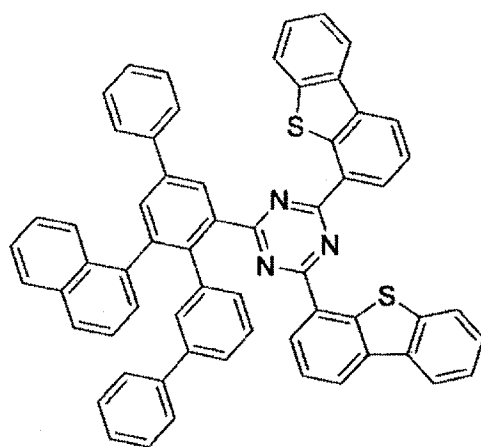
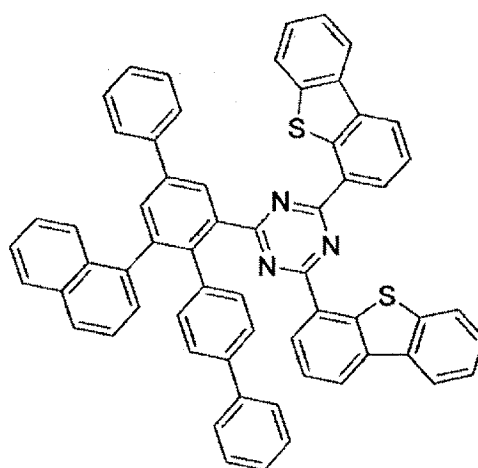
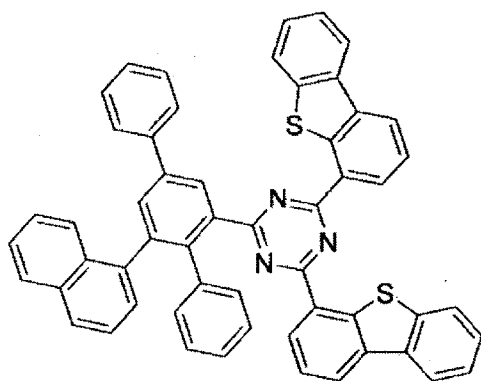
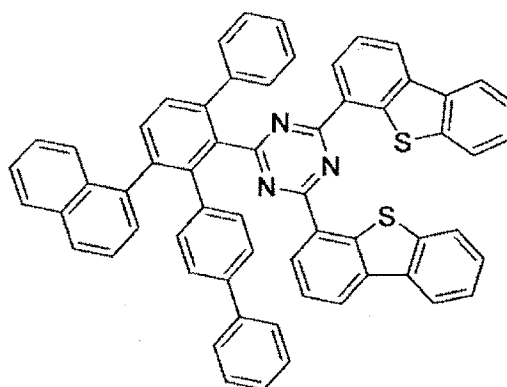
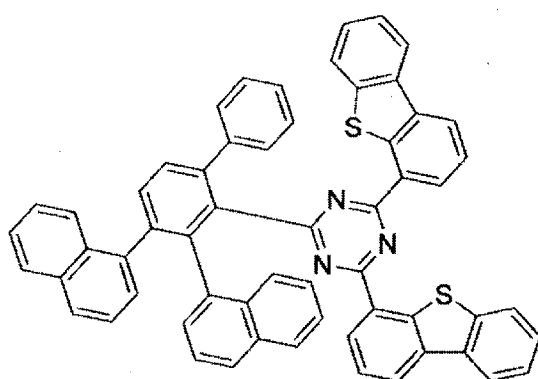
[0222] [化88]



[0223] [化89]

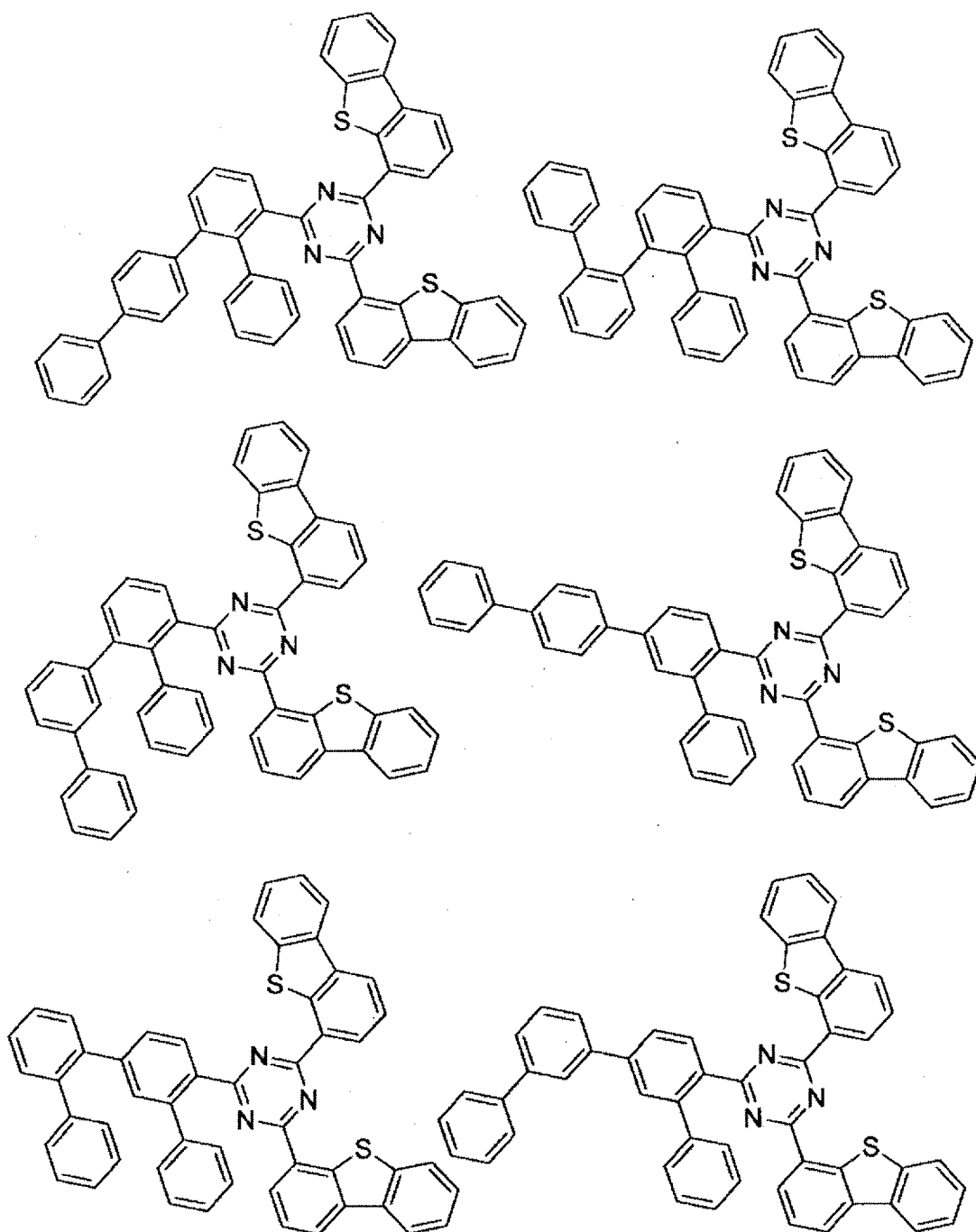


[0224] [化90]



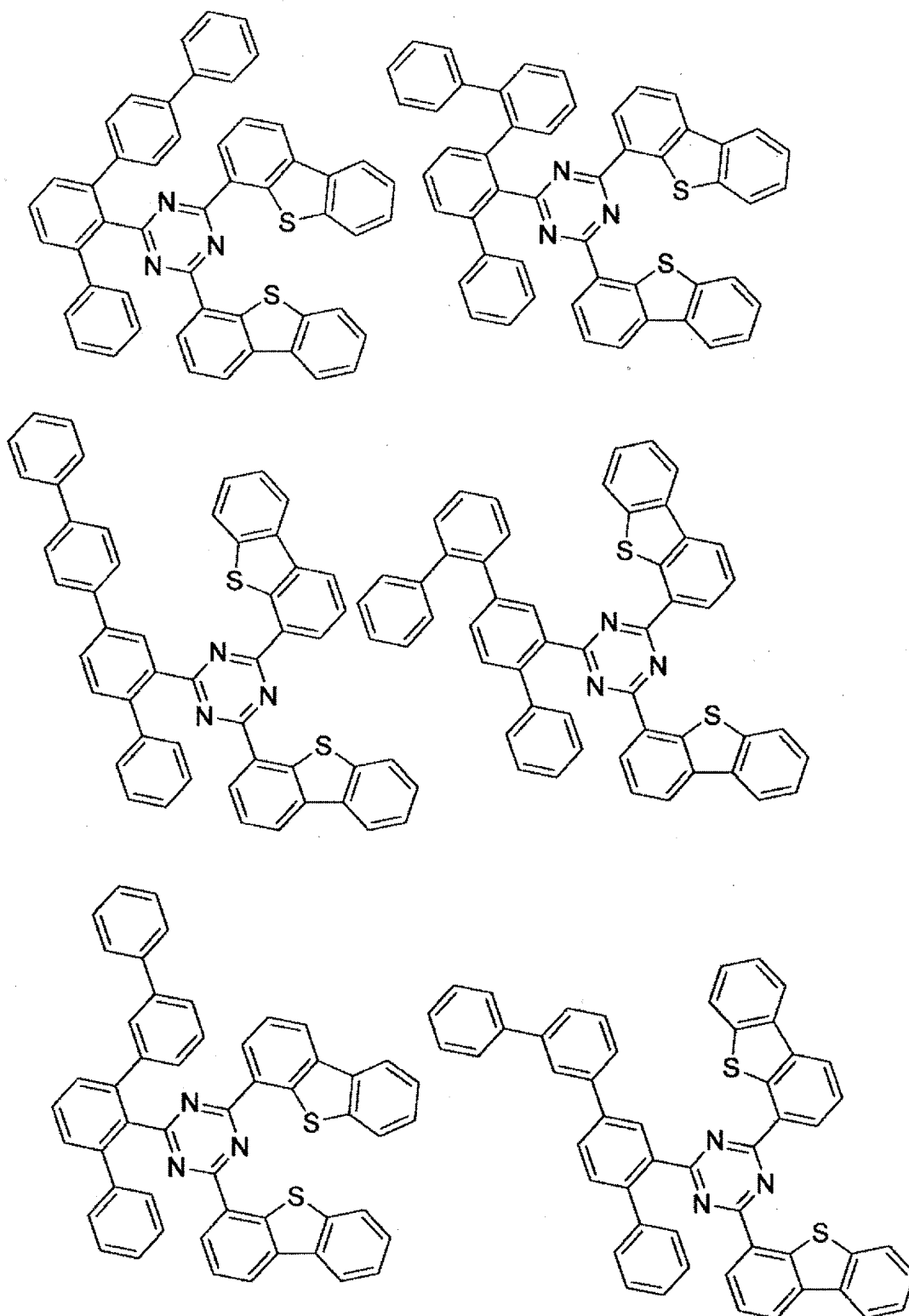
[0225]

[化91]



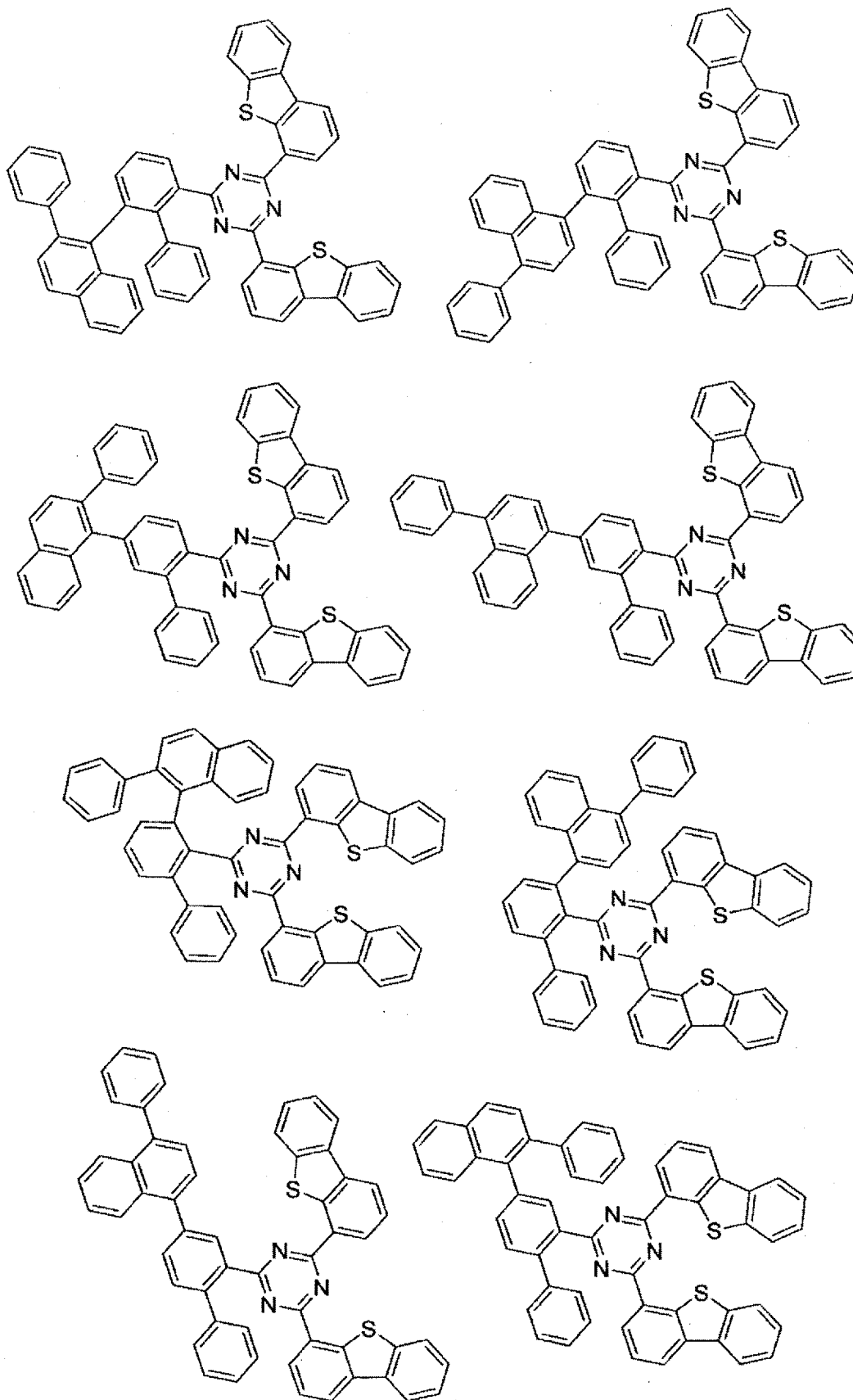
[0226]

[化92]

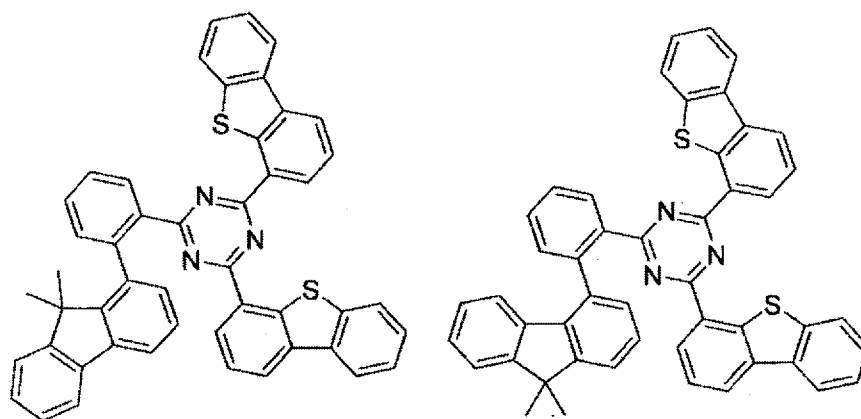
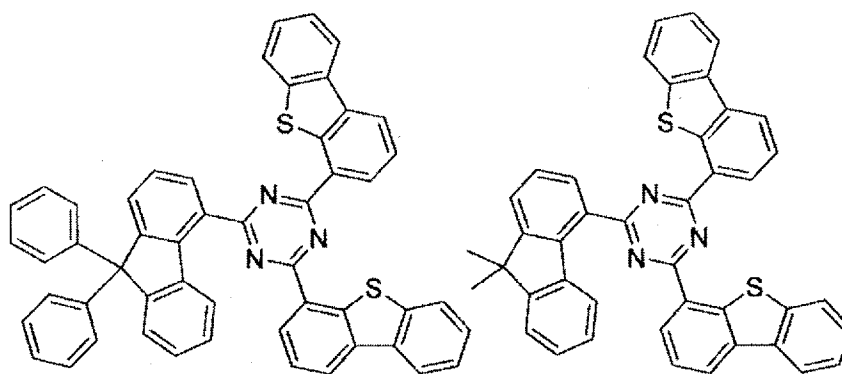


[0227]

[化93]

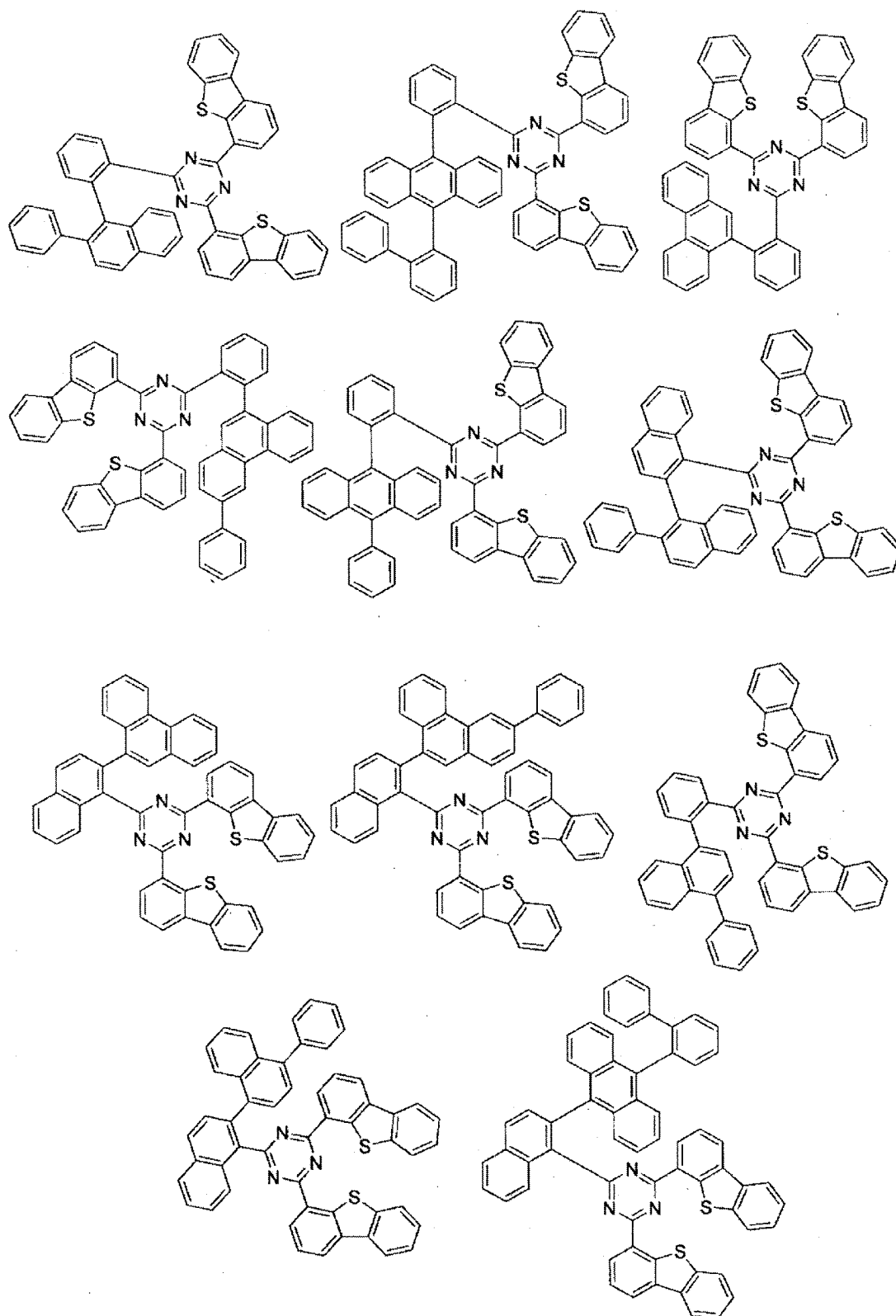


[0228] [化94]



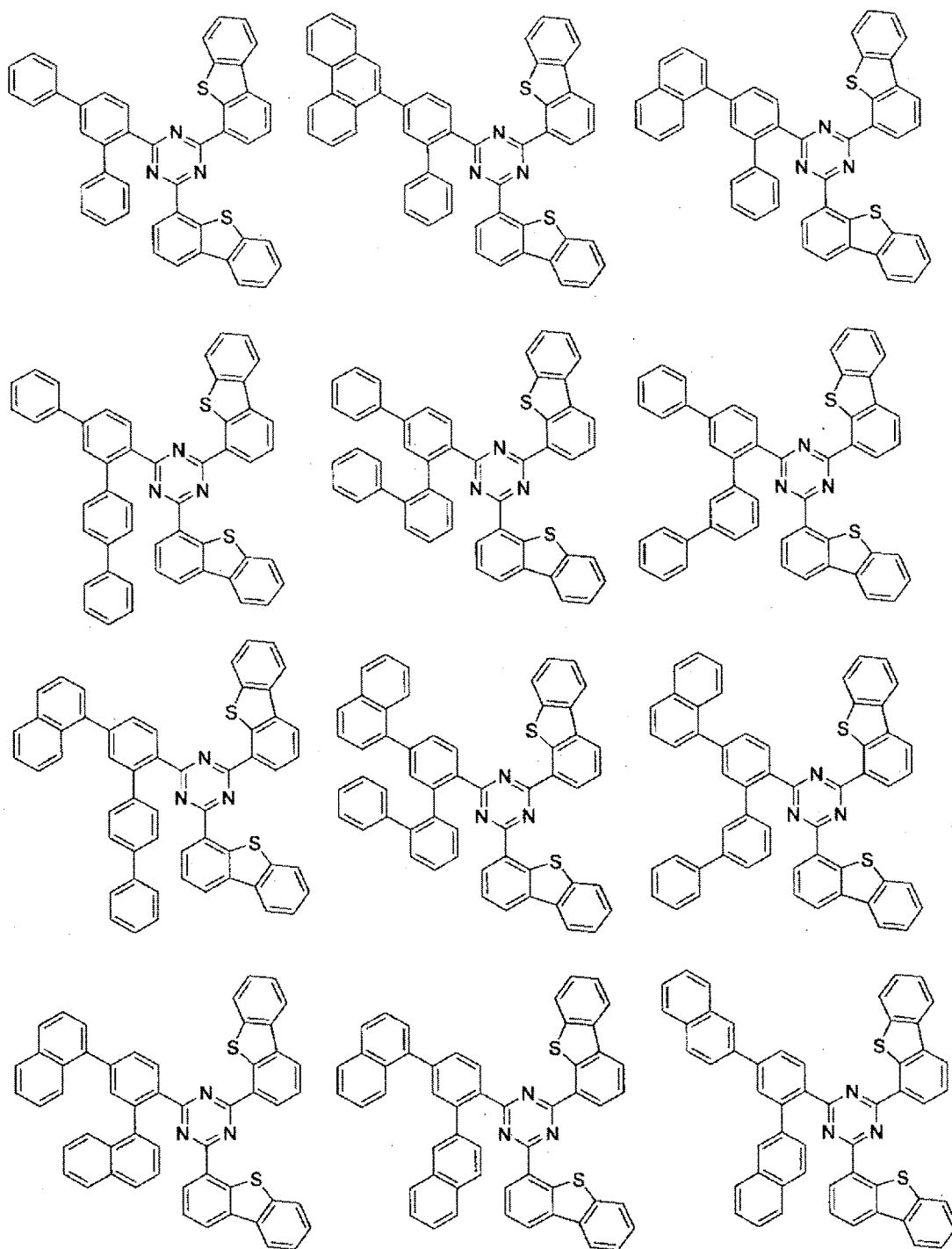
[0229]

[化95]



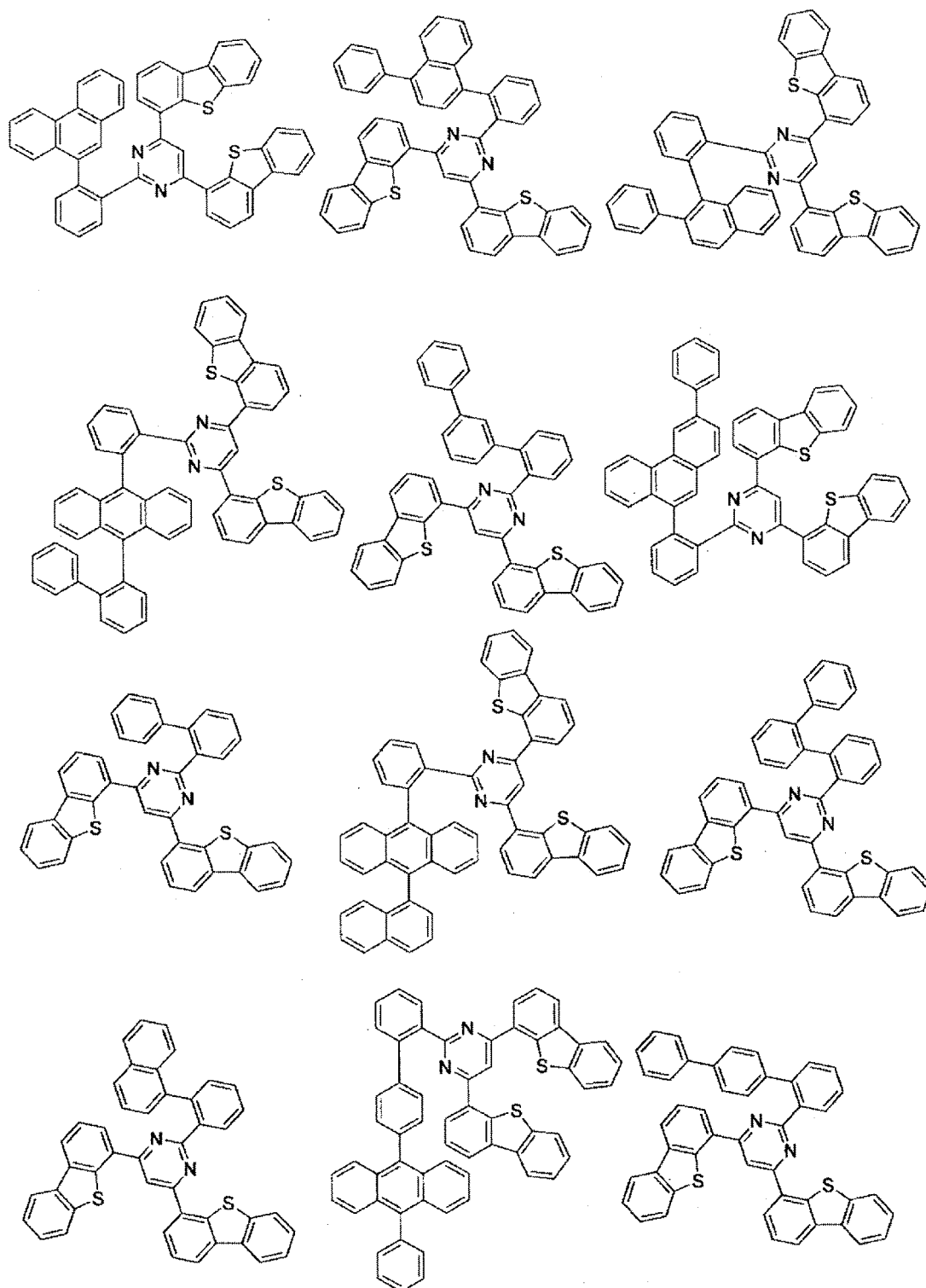
[0230]

[化96]



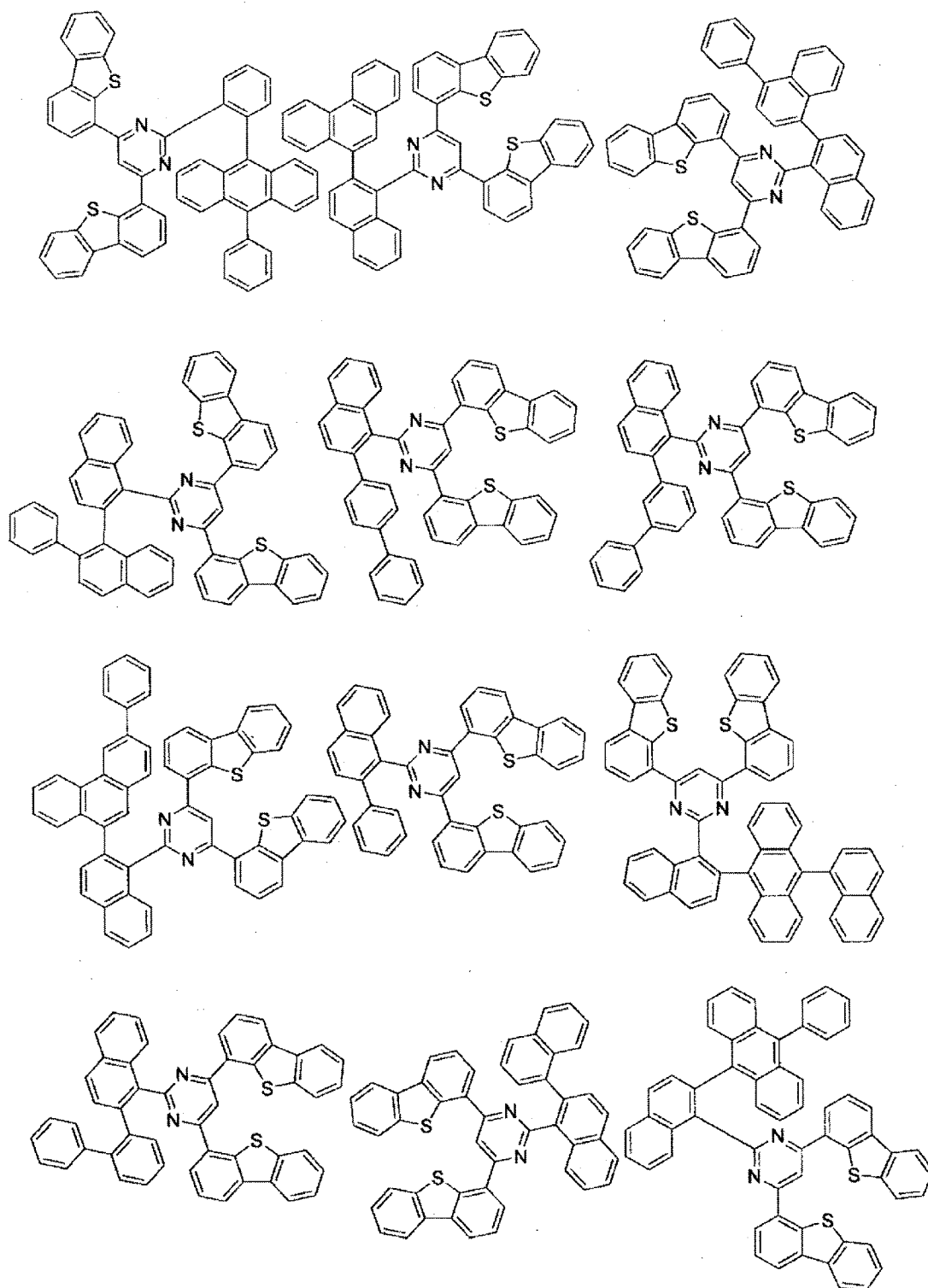
[0231]

[化97]



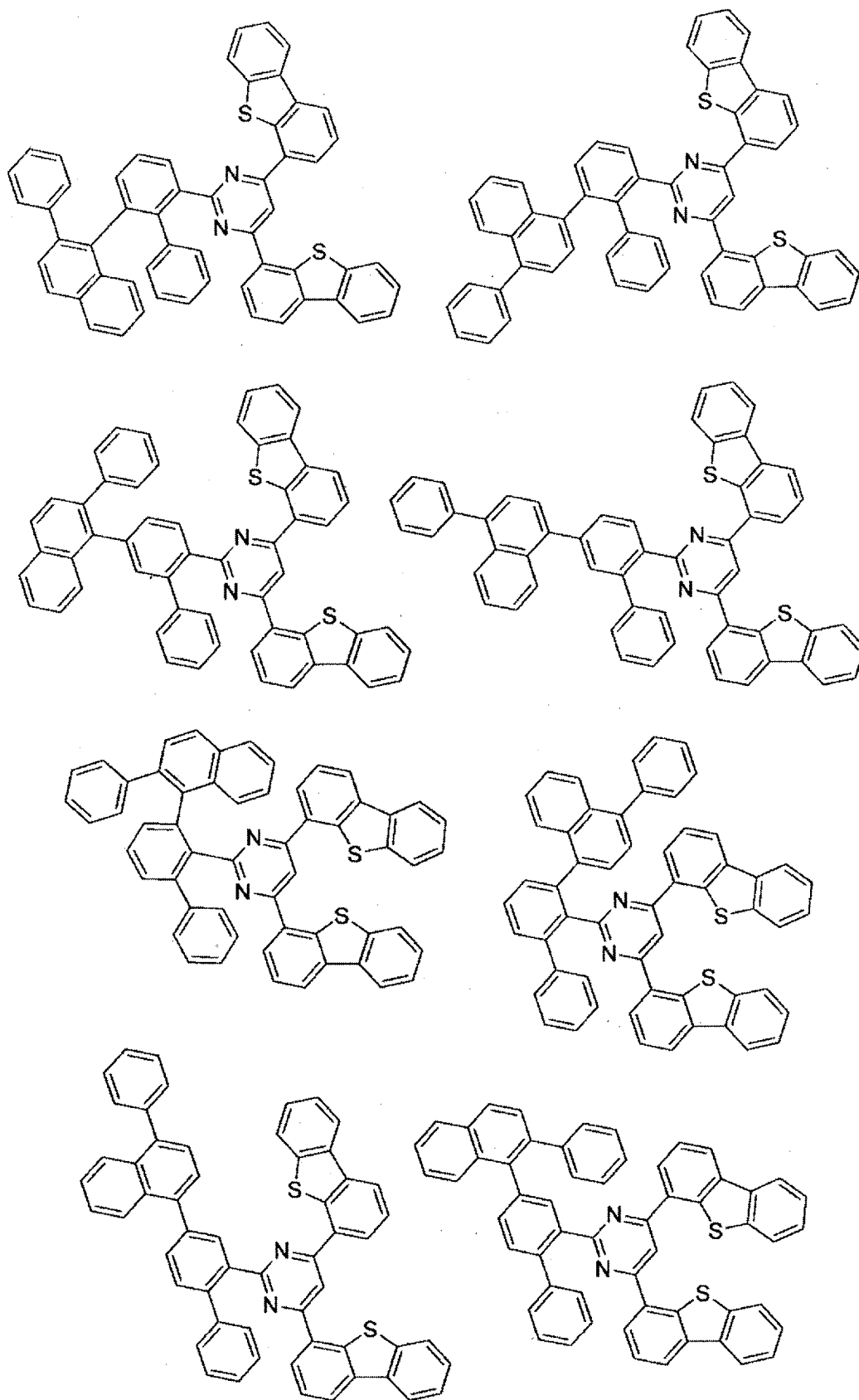
[0232]

[化98]

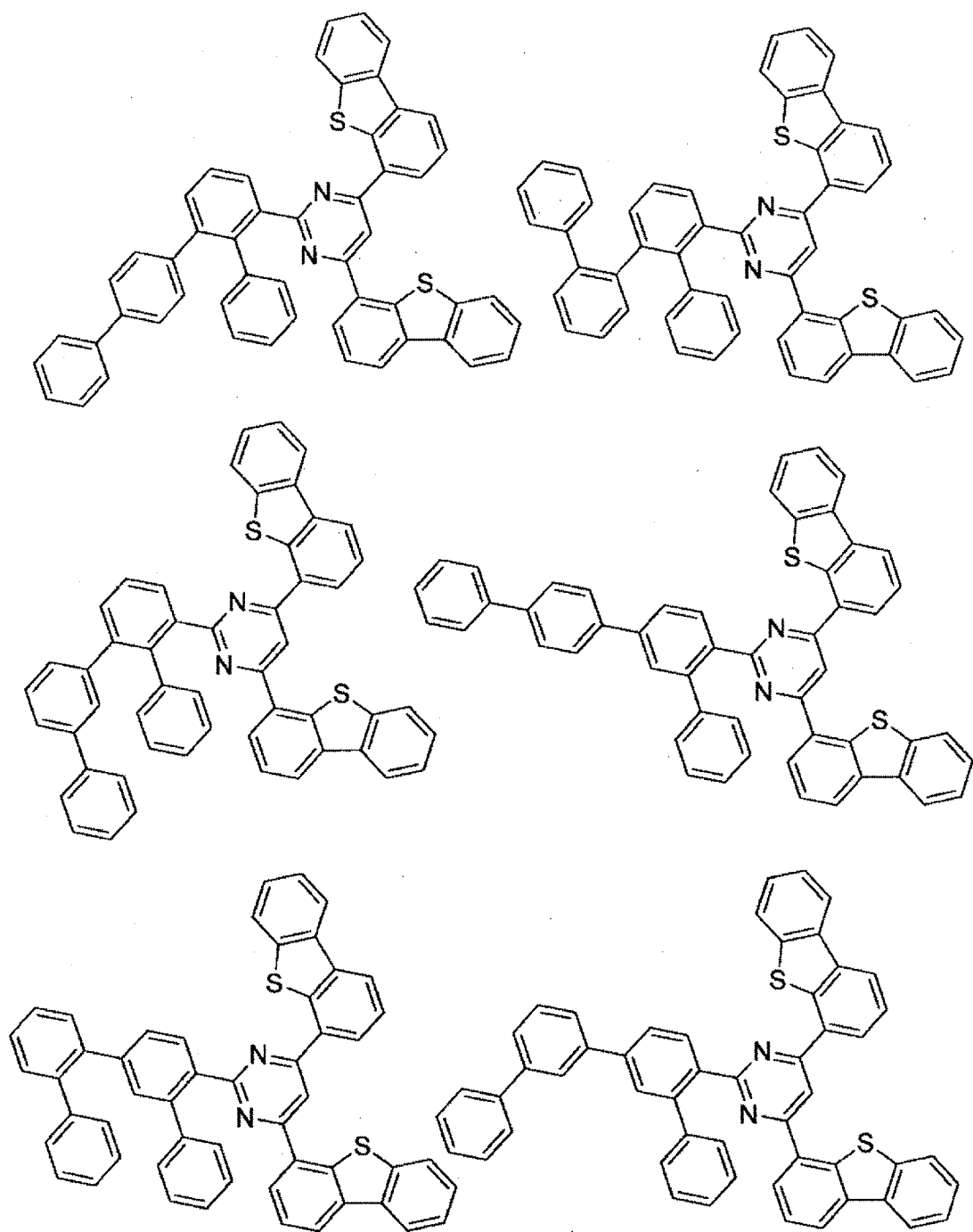


[0233]

[化99]

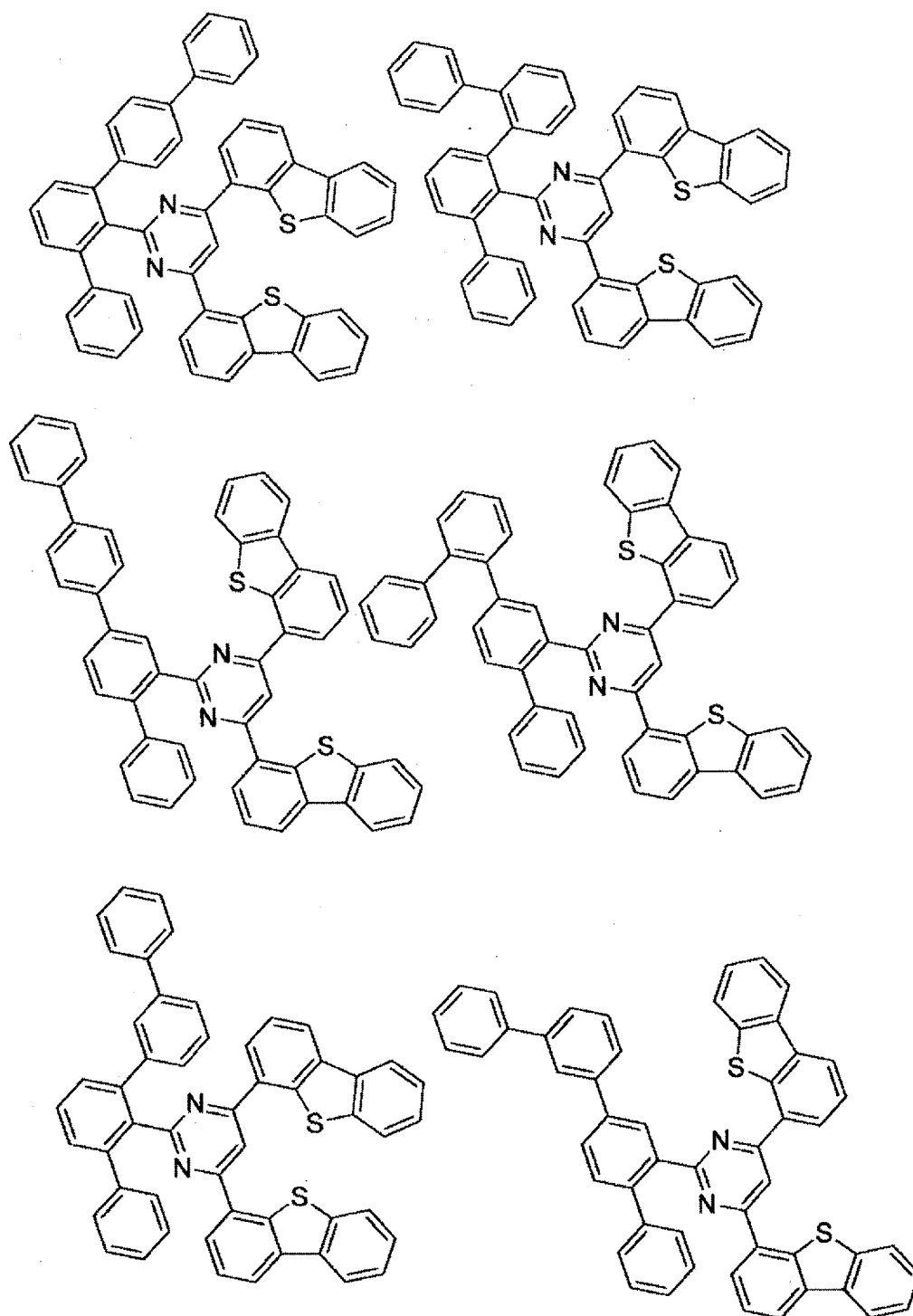


[0234] [化100]



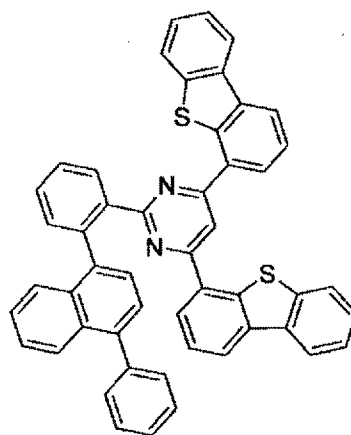
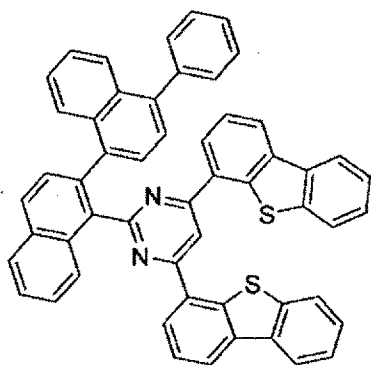
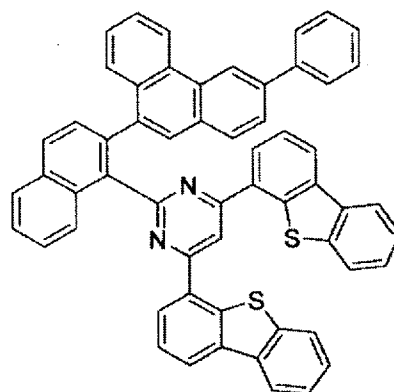
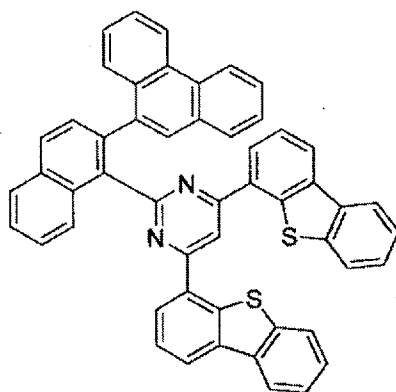
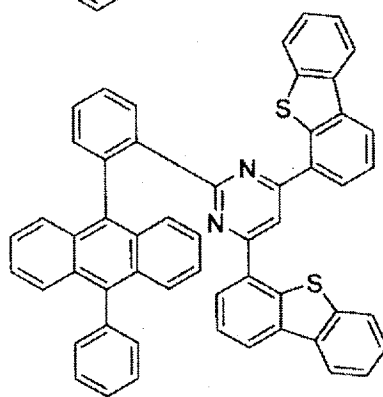
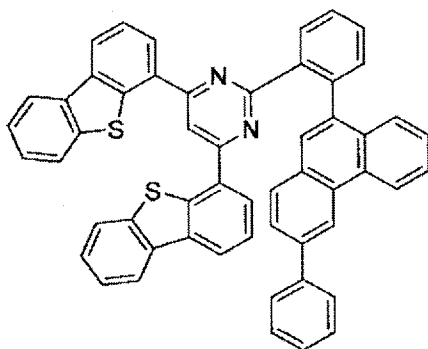
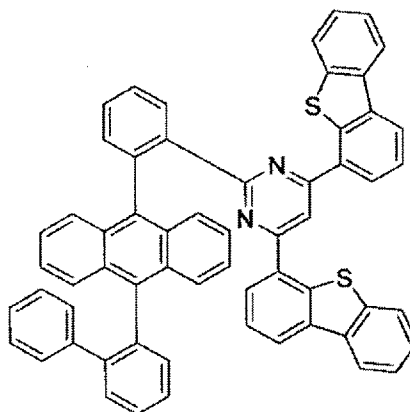
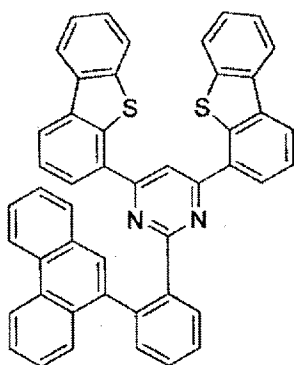
[0235]

[化101]

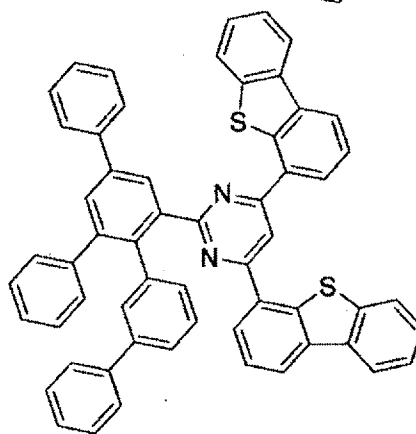
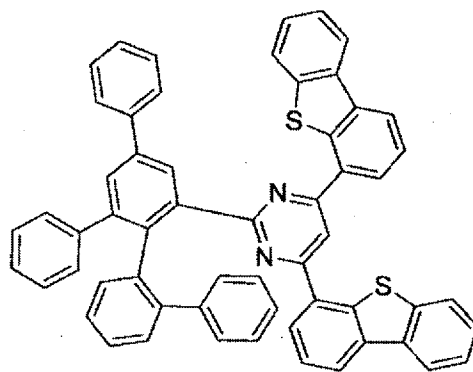
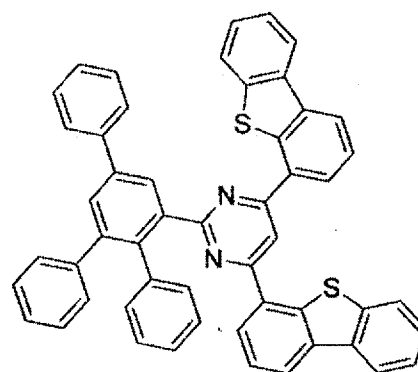
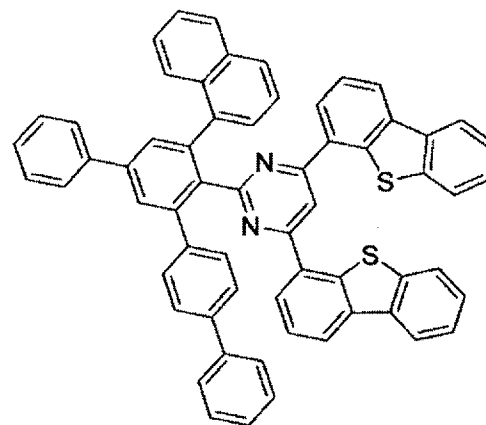
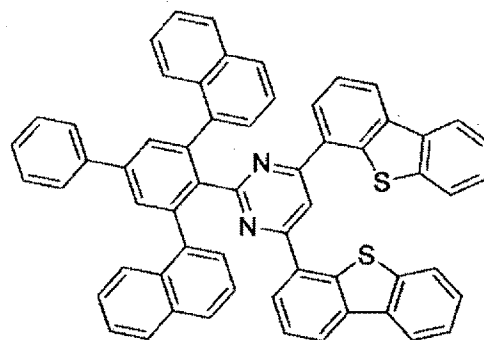
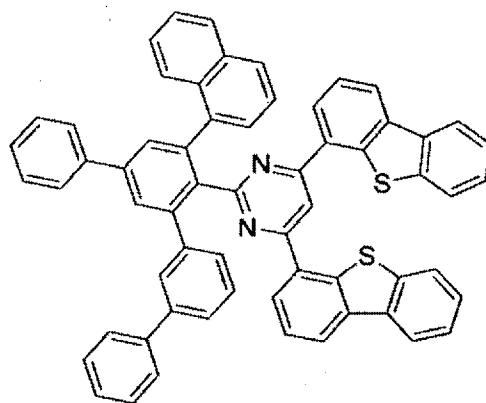
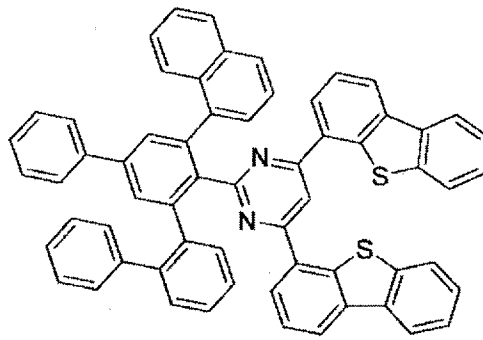
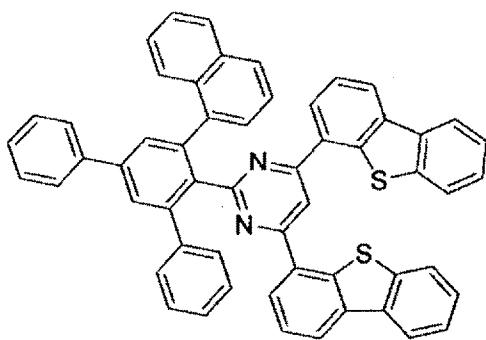


[0236]

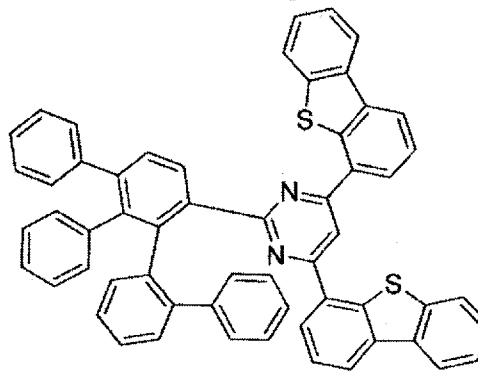
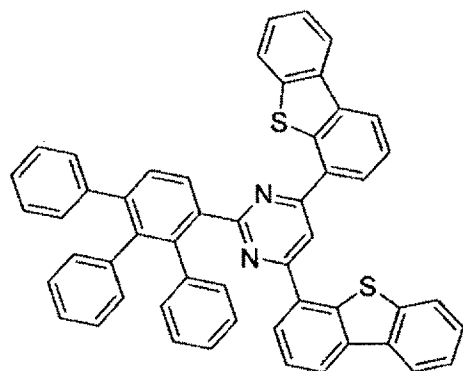
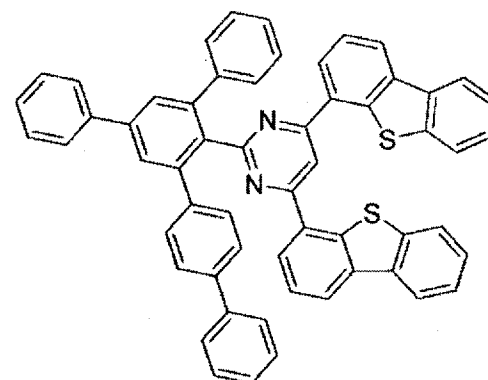
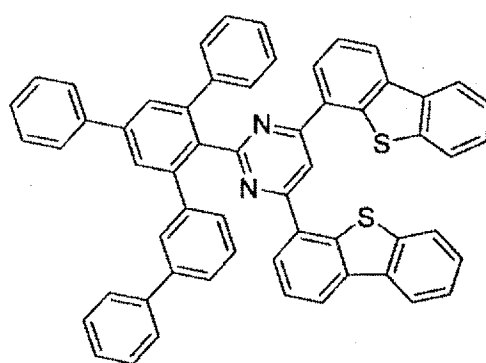
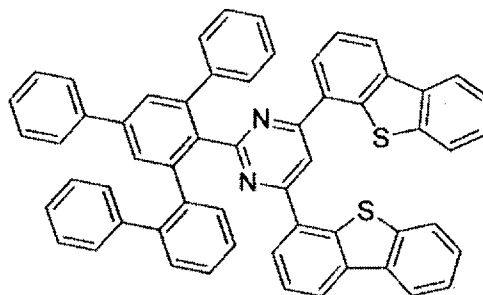
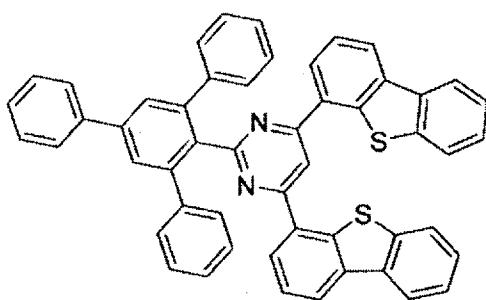
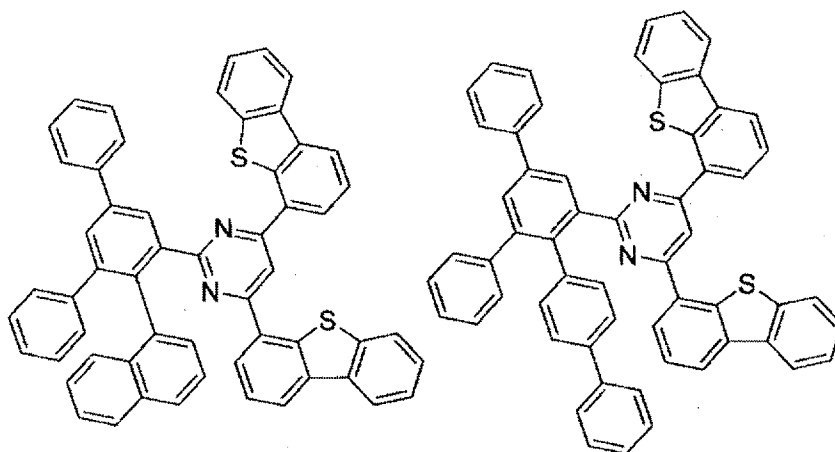
[化102]



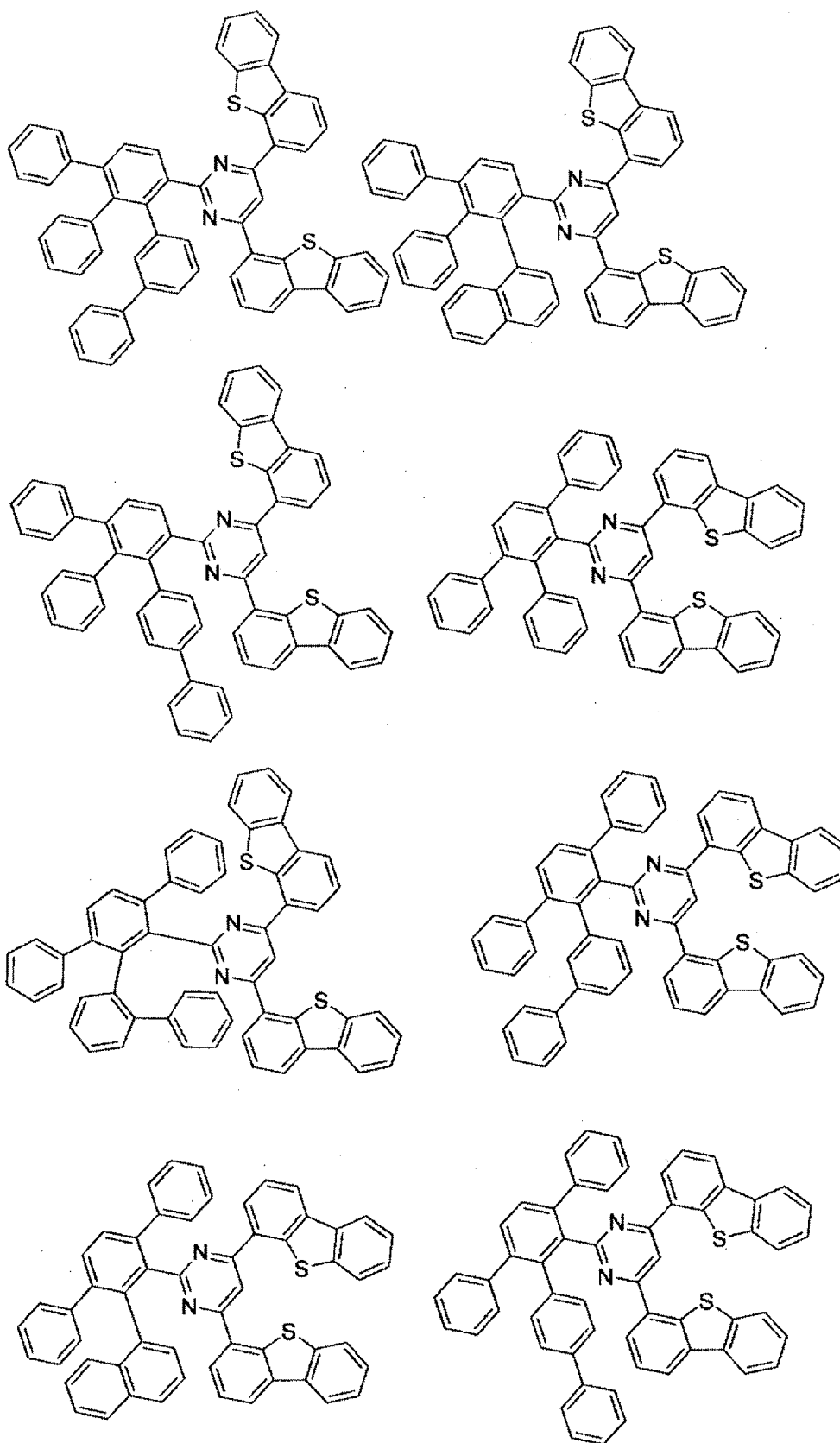
[0237] [化103]



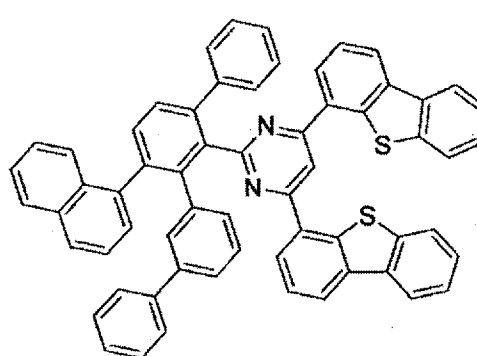
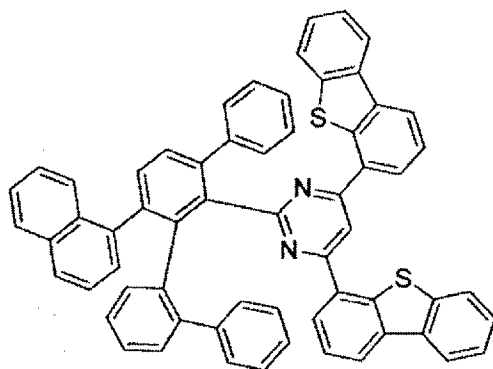
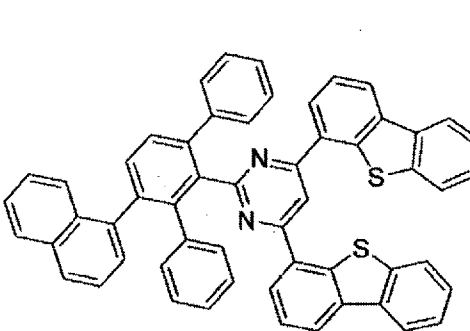
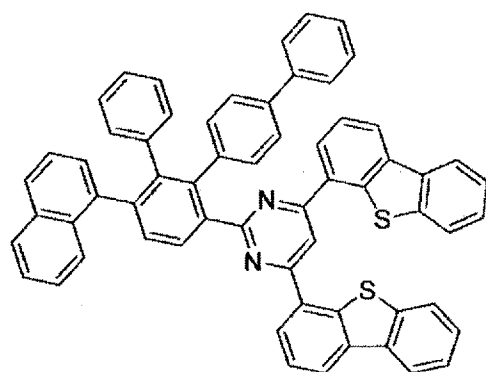
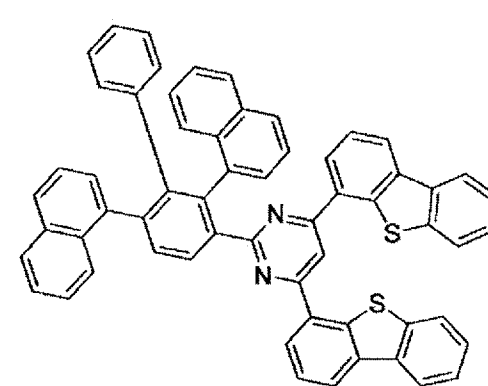
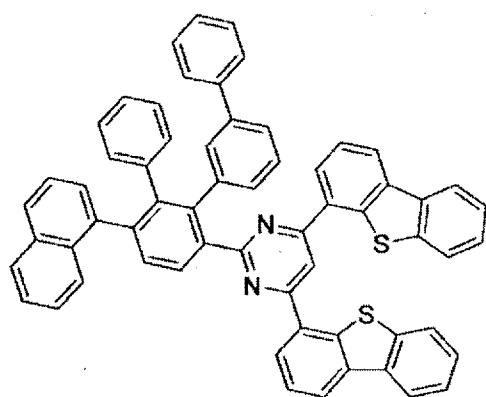
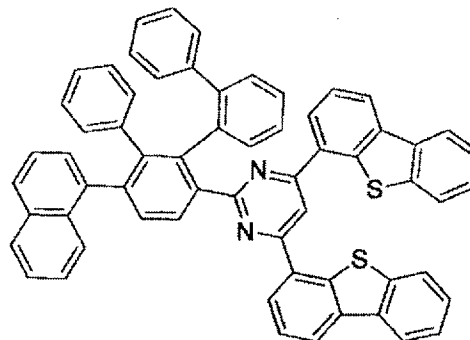
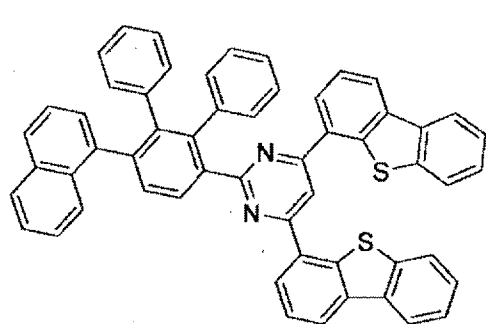
[0238] [化104]



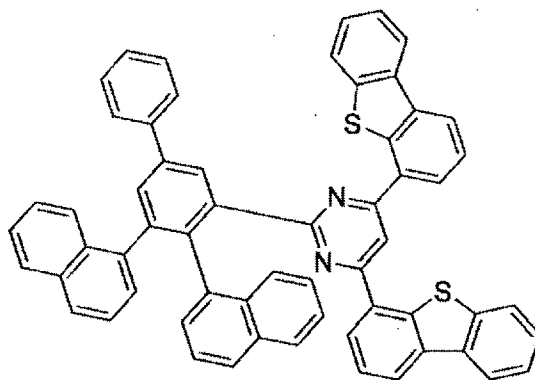
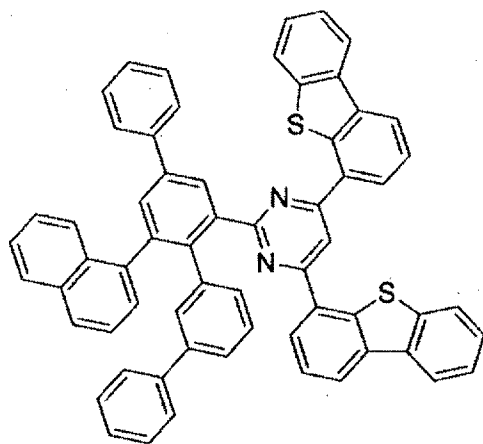
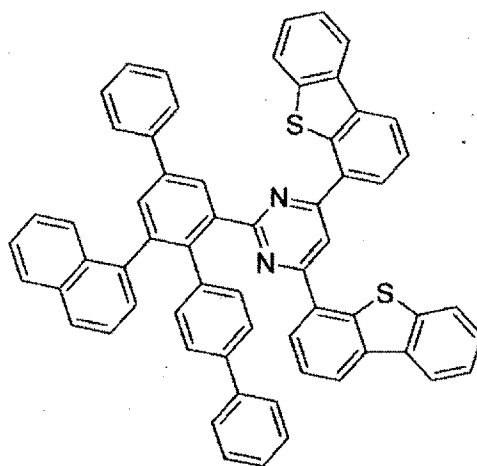
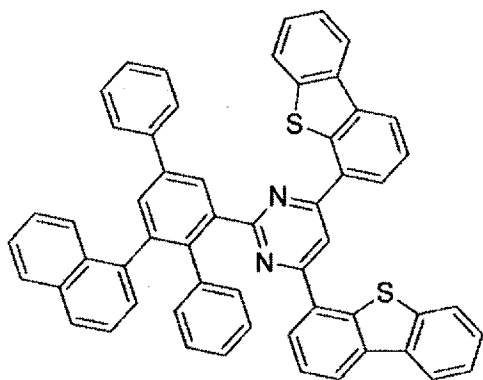
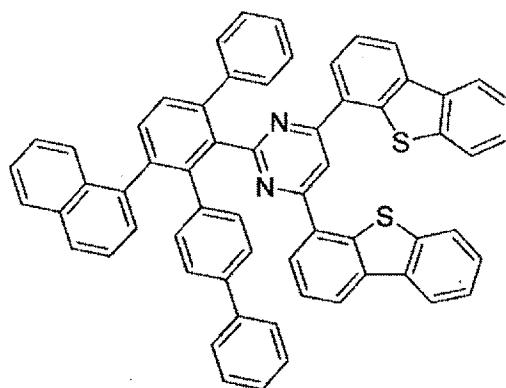
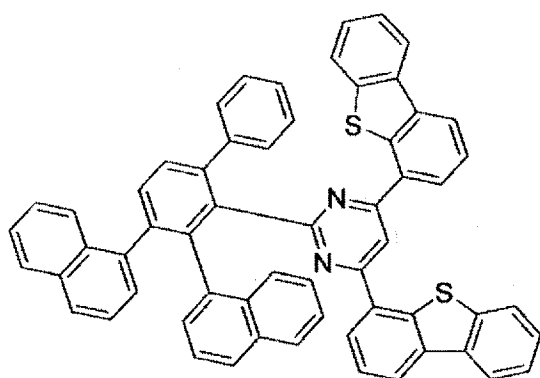
[0239] [化105]



[0240] [化106]

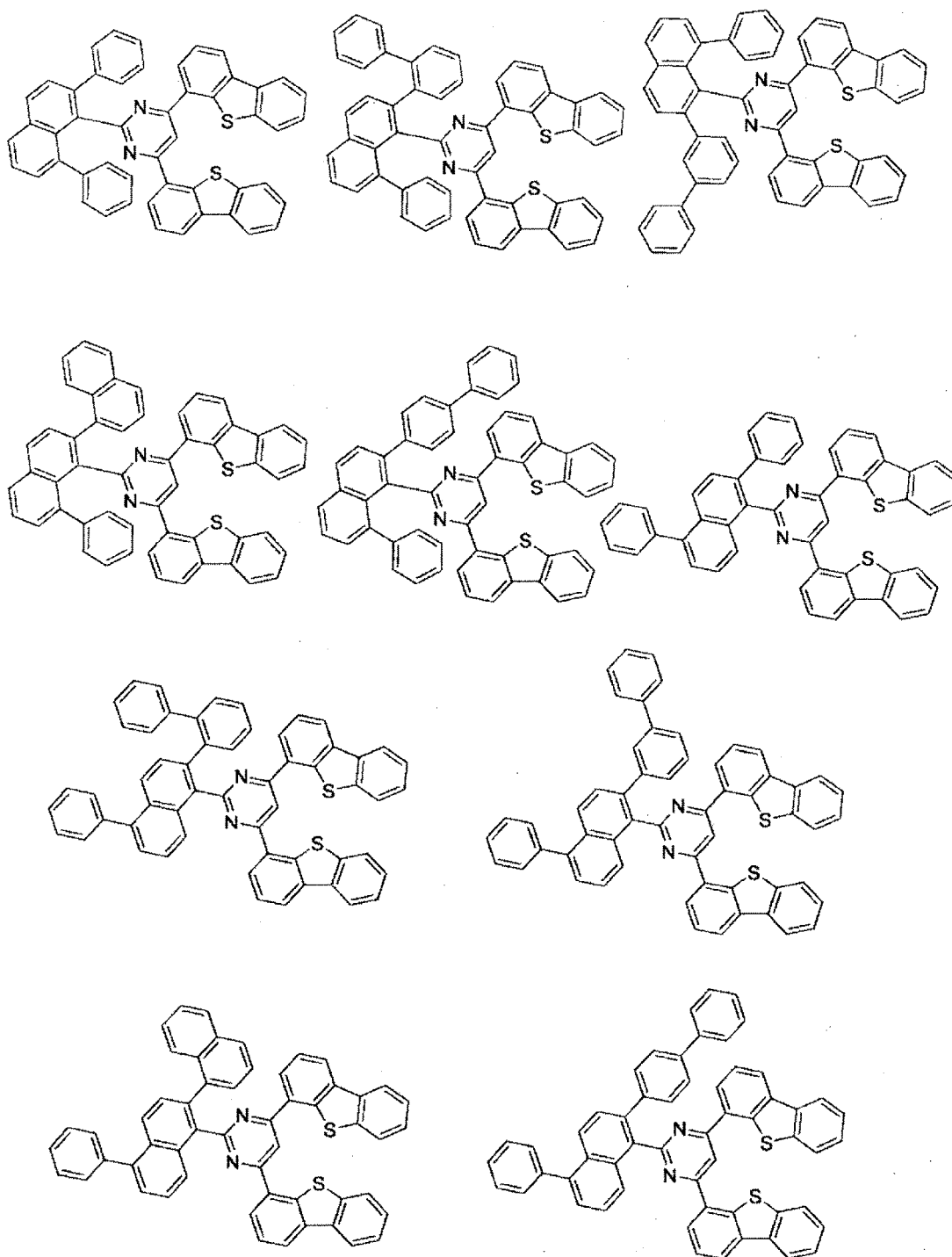


[0241] [化107]



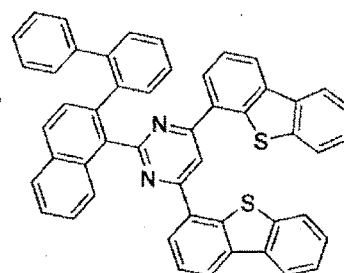
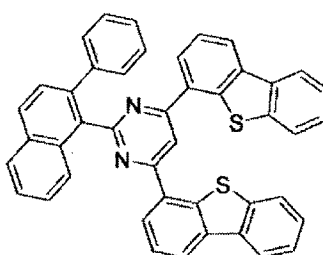
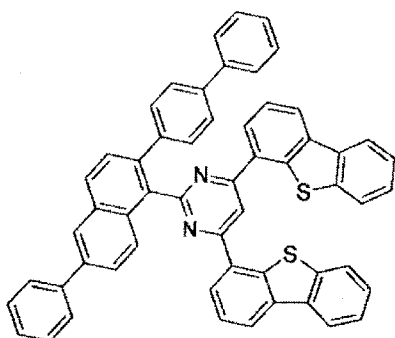
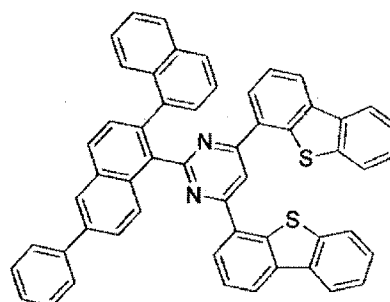
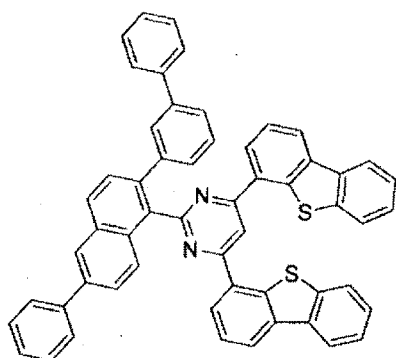
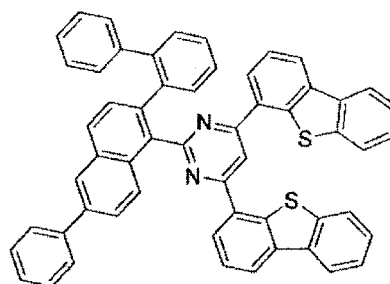
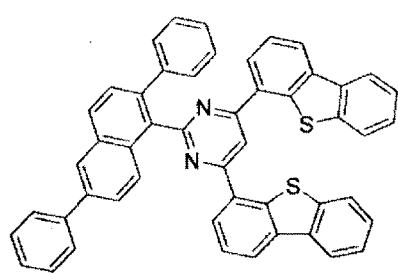
[0242]

[化108]



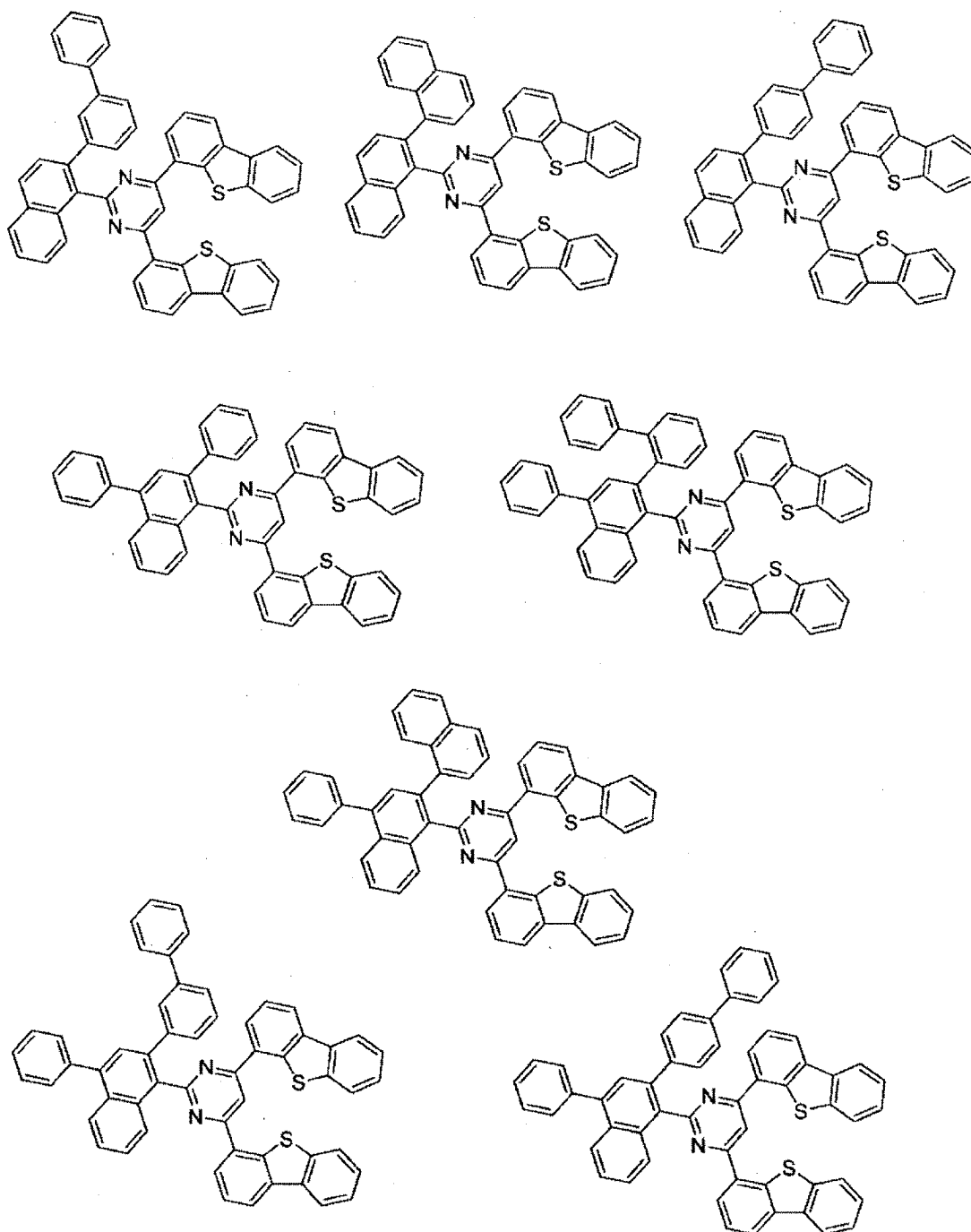
[0243]

[化109]



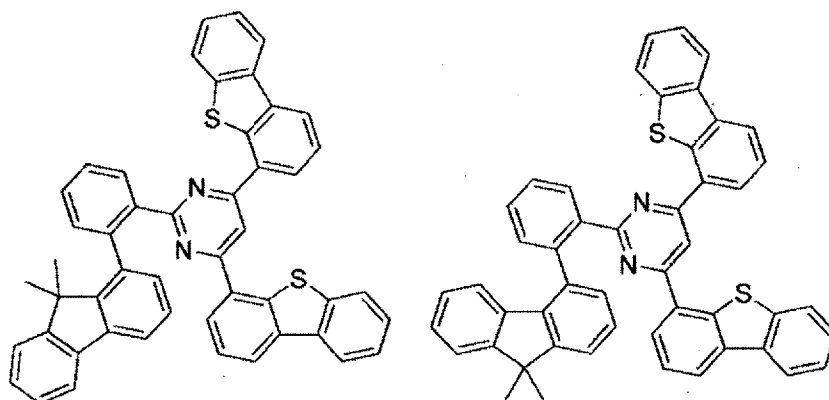
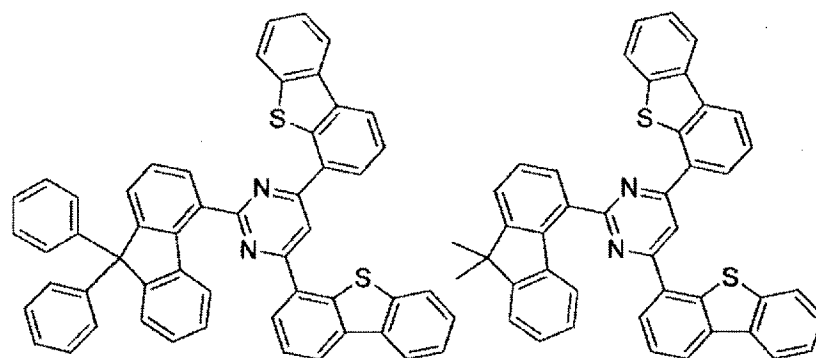
[0244]

[化110]



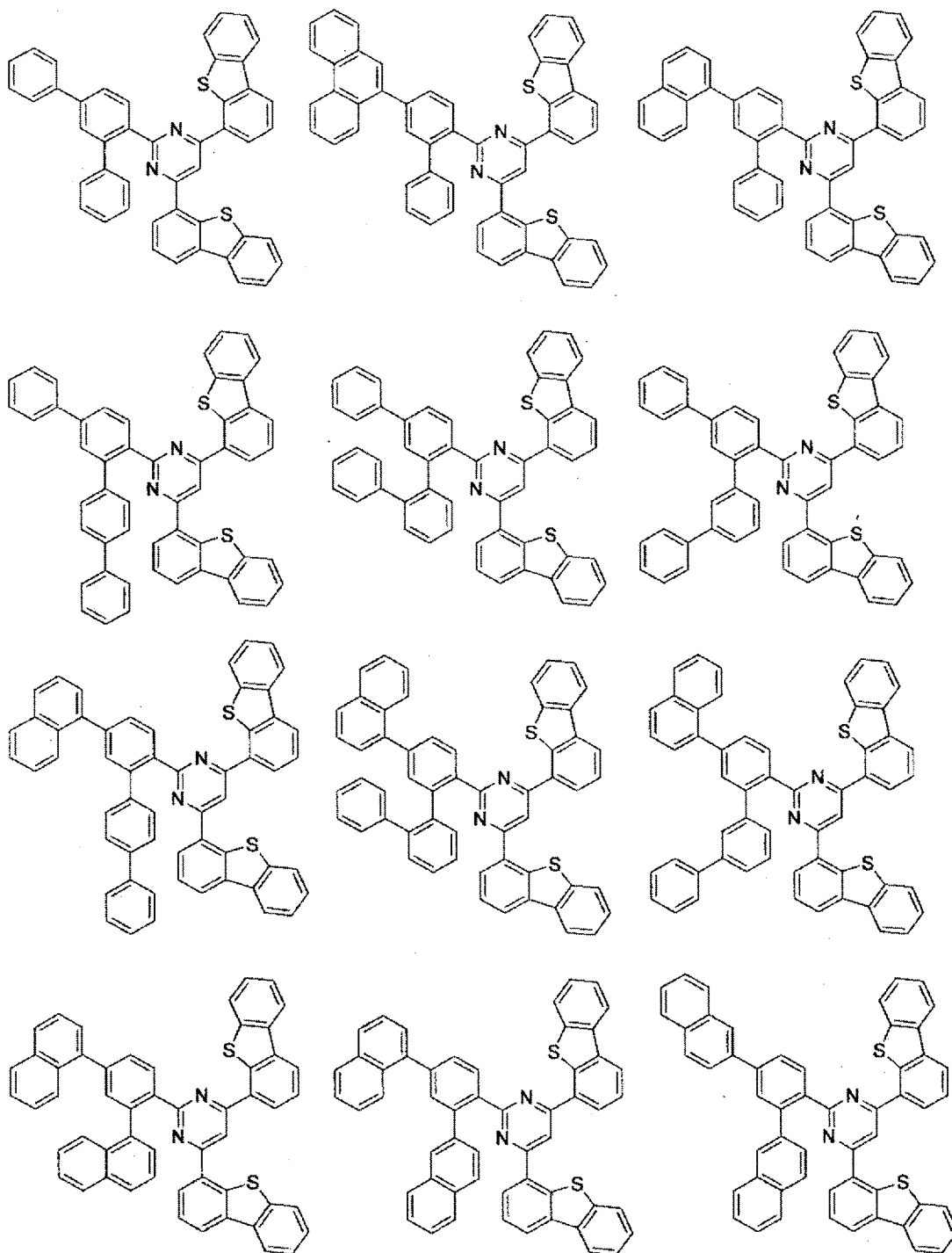
[0245]

[化111]



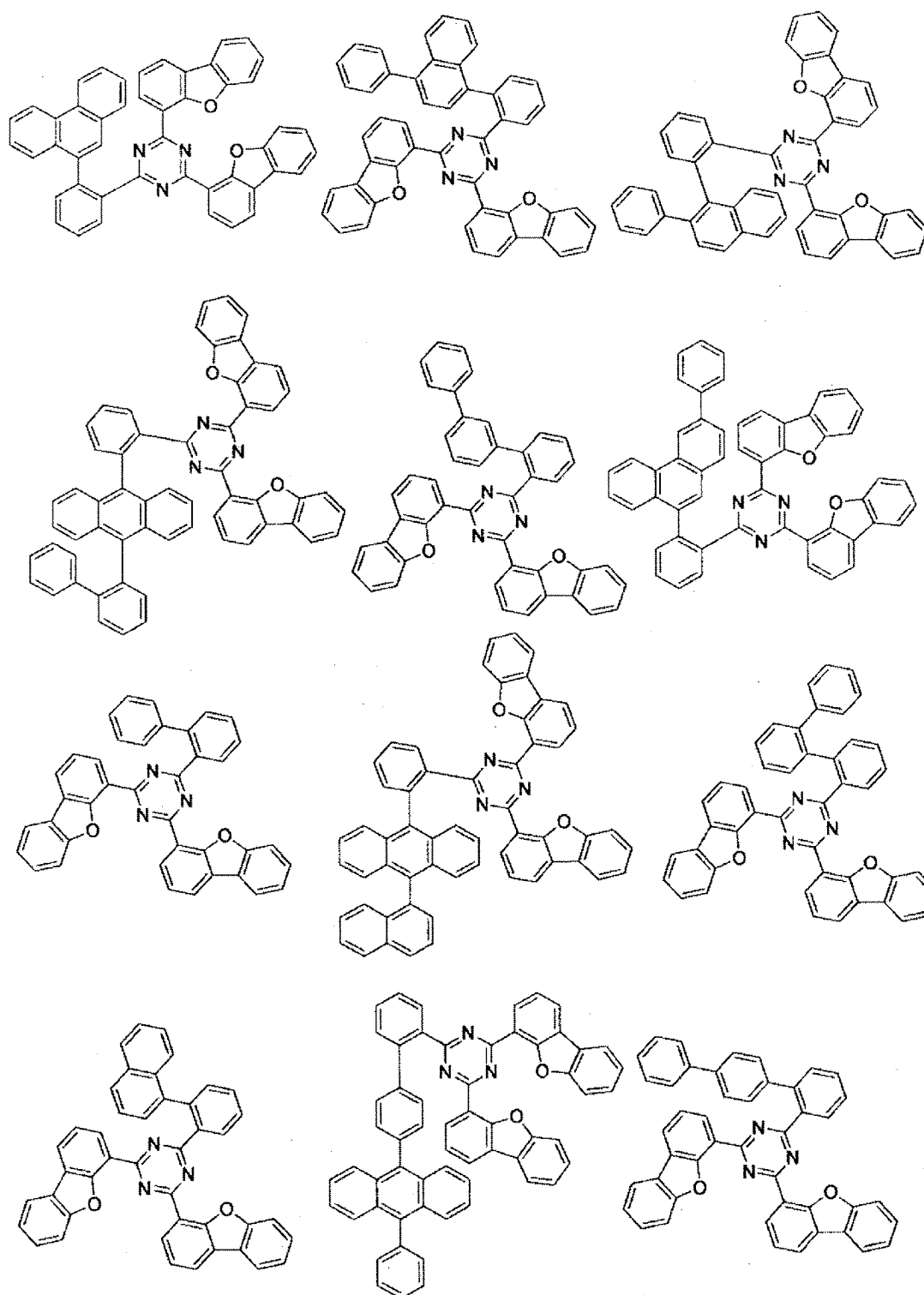
[0246]

[化112]



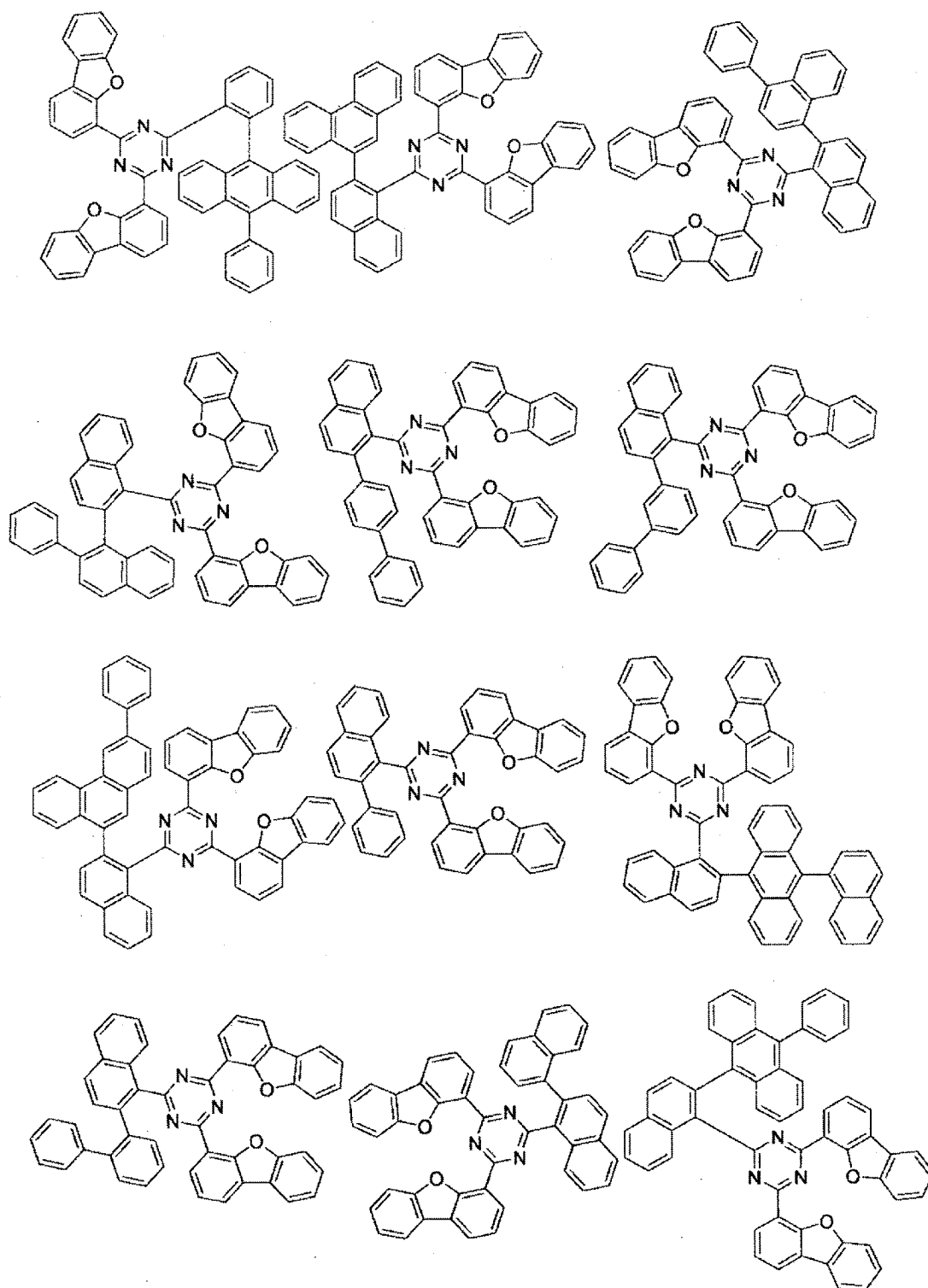
[0247]

[化113]



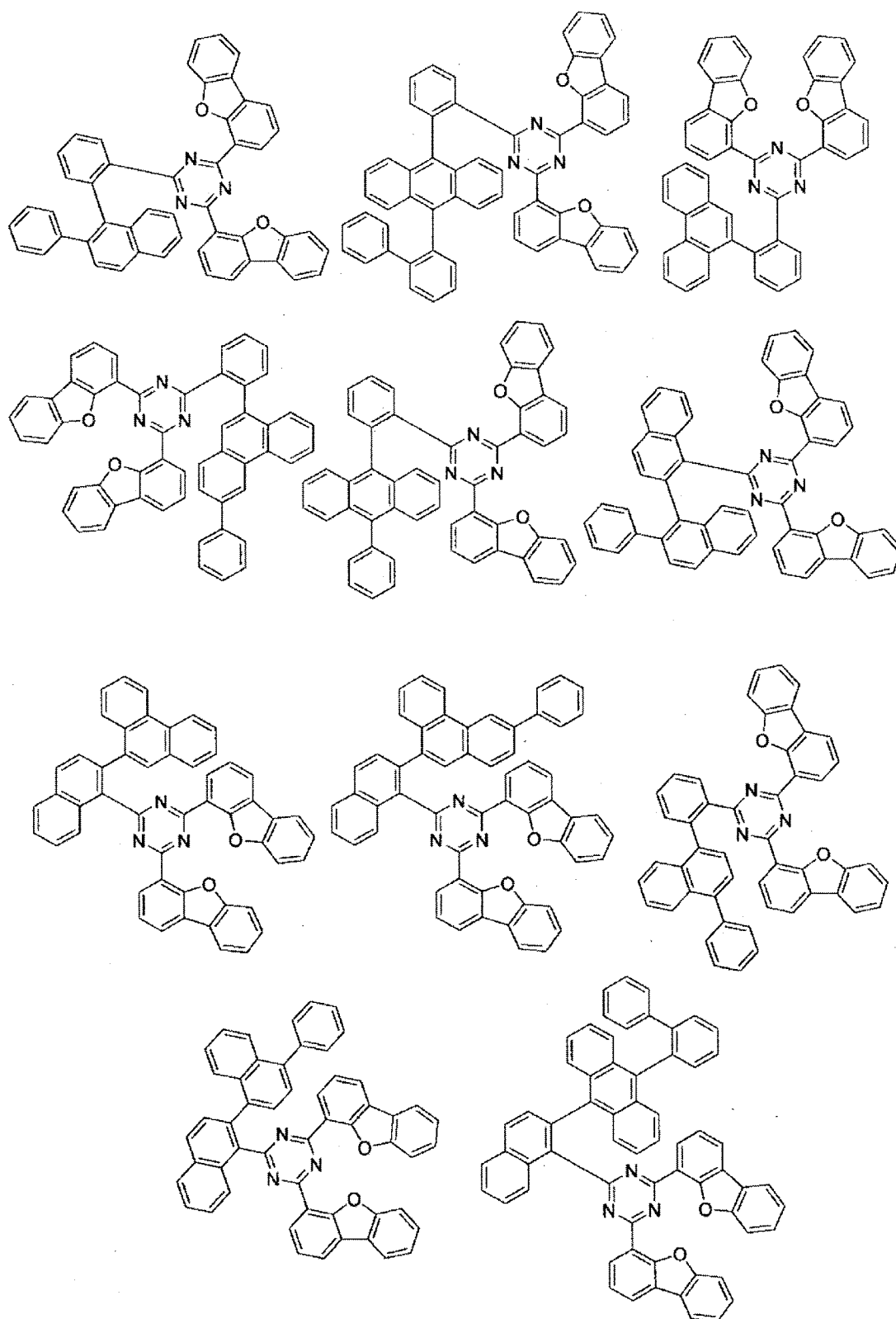
[0248]

[化114]



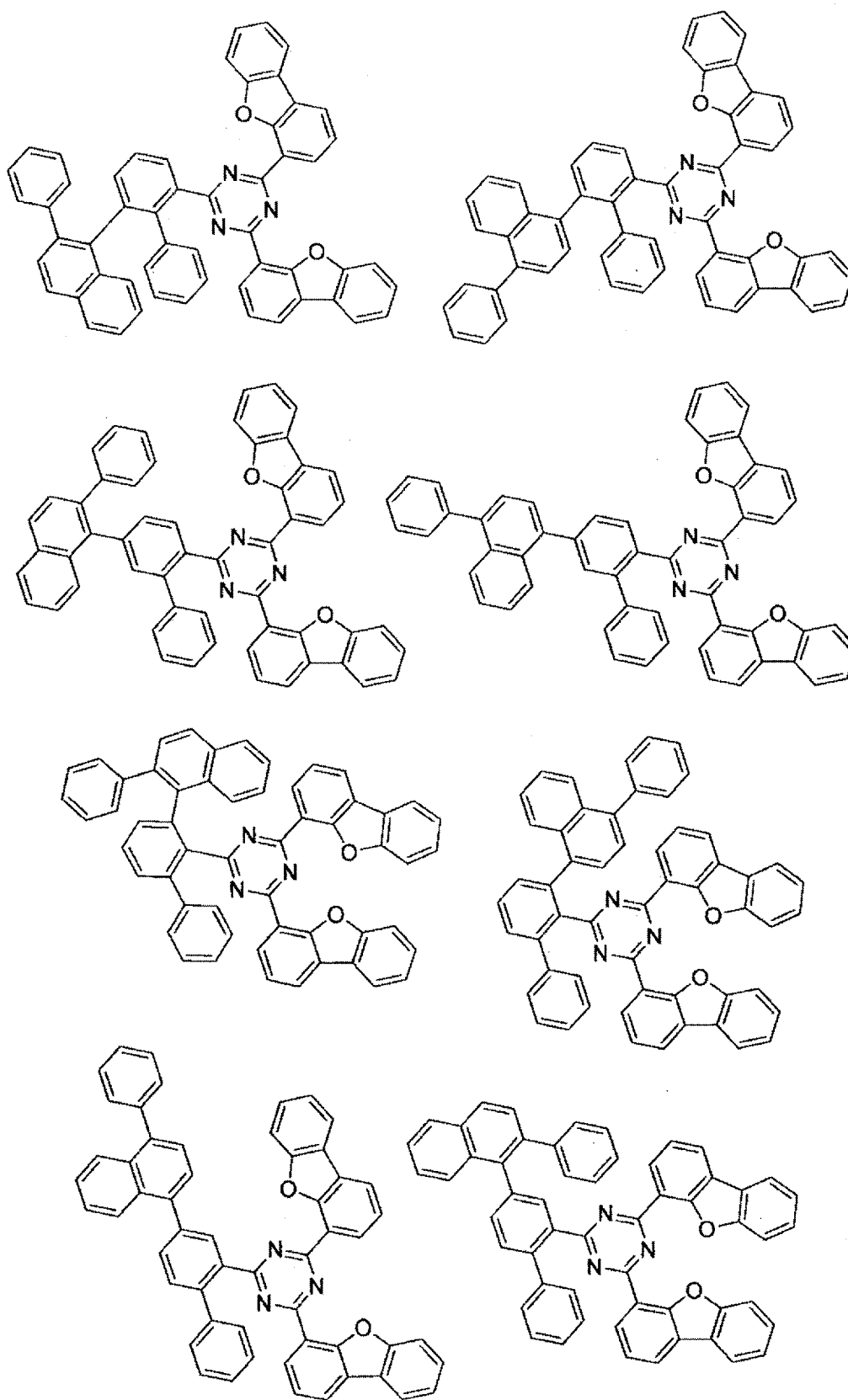
[0249]

[化115]

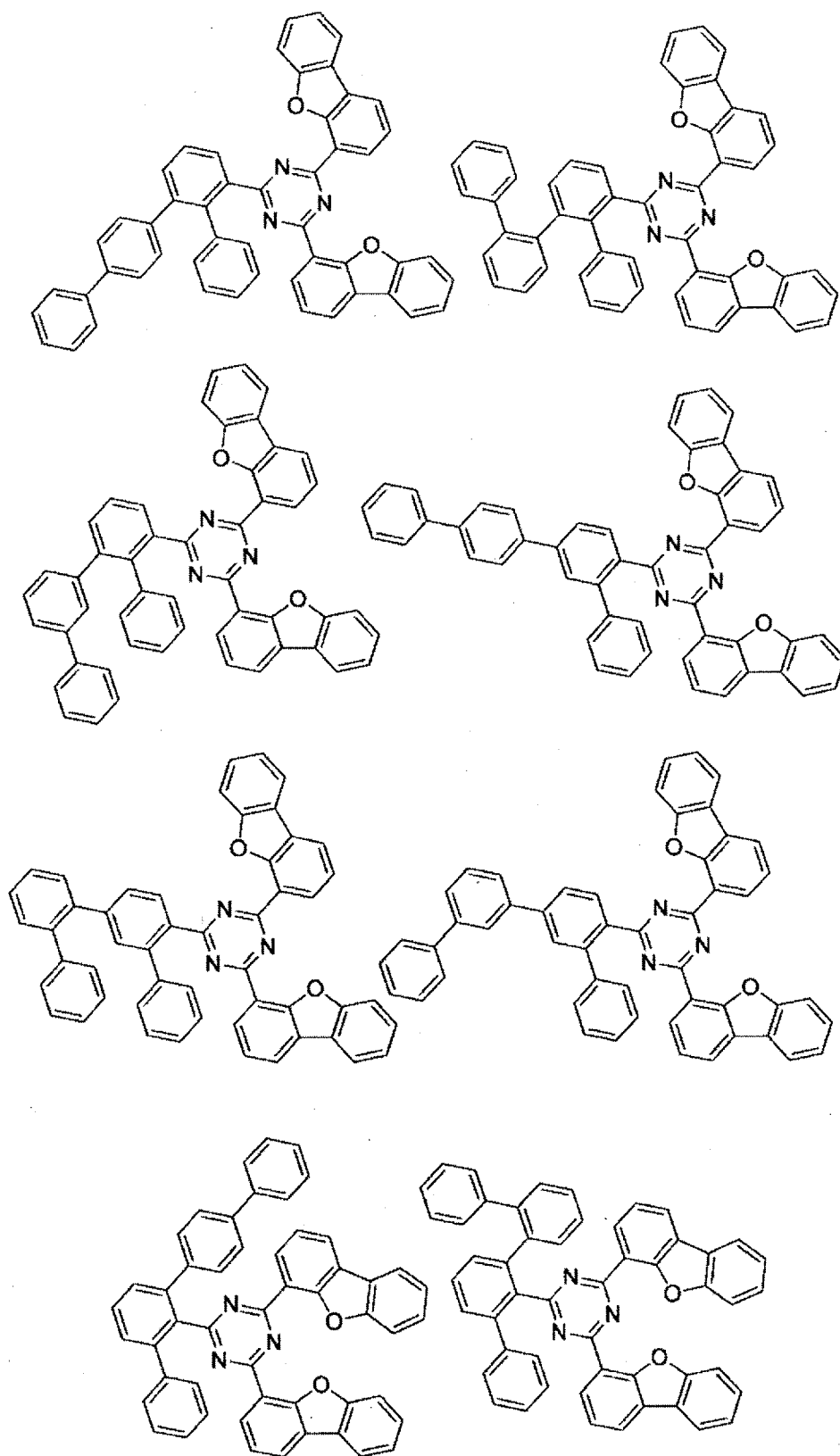


[0250]

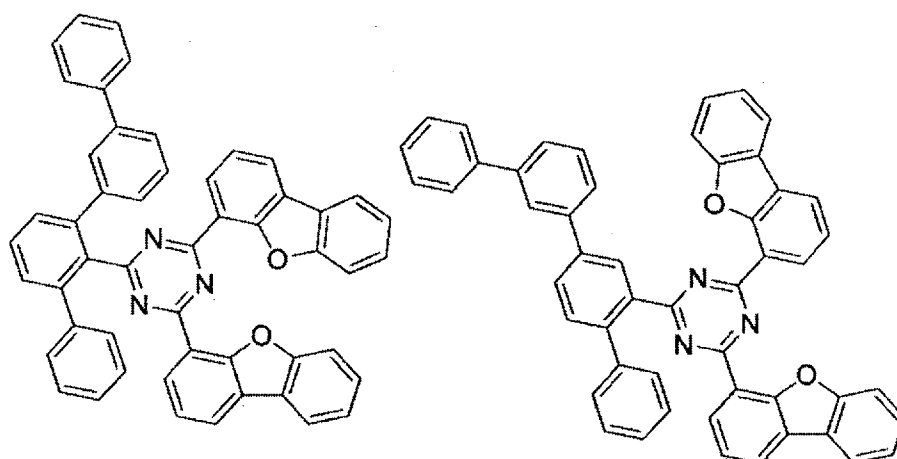
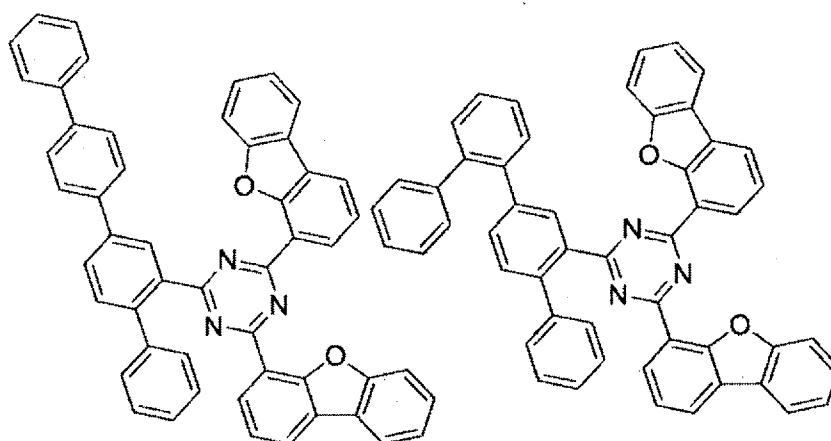
[化116]



[0251] [化117]

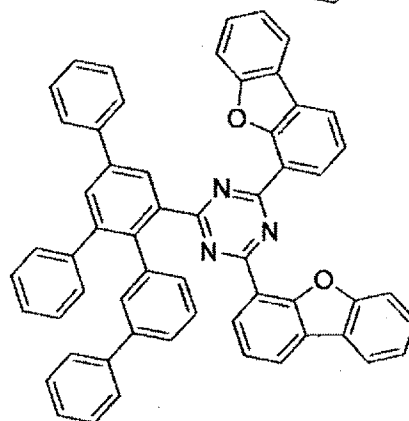
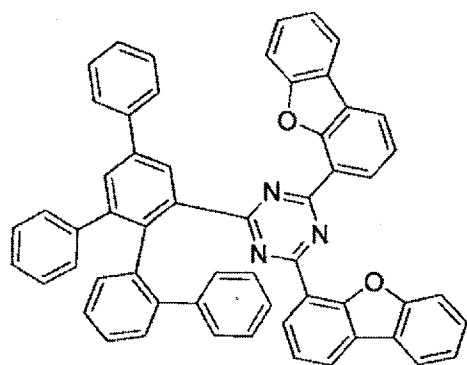
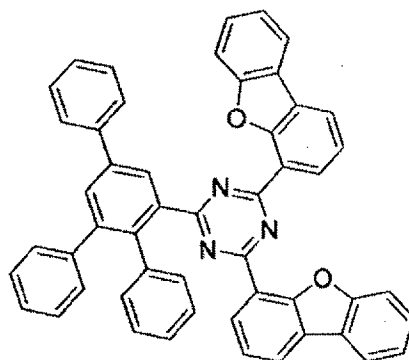
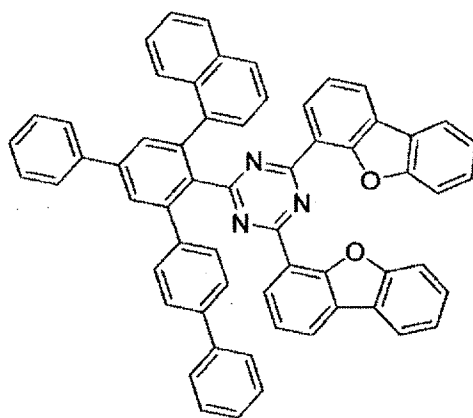
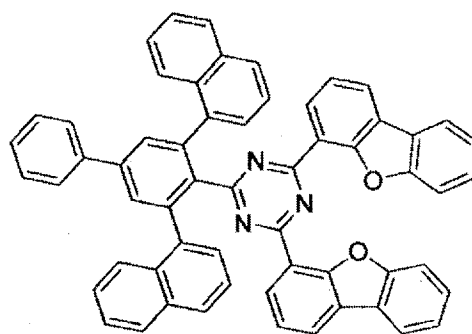
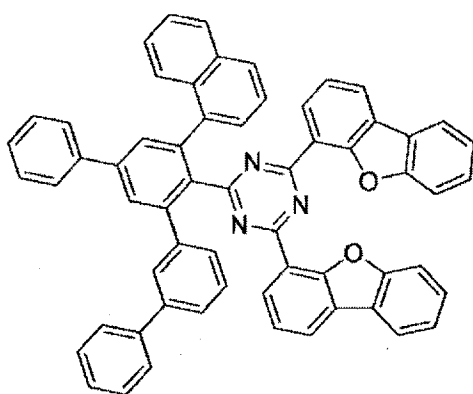
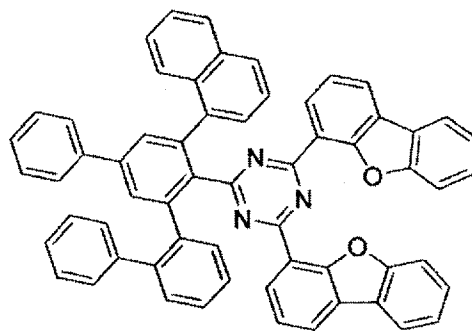
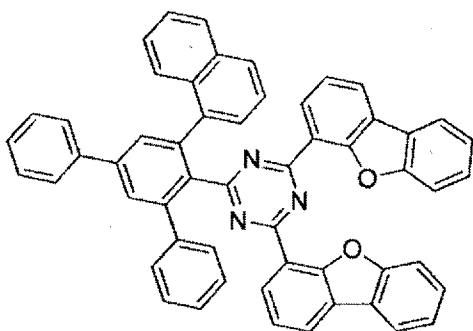


[0252] [化118]

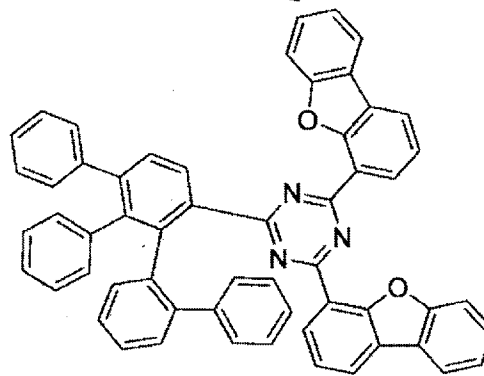
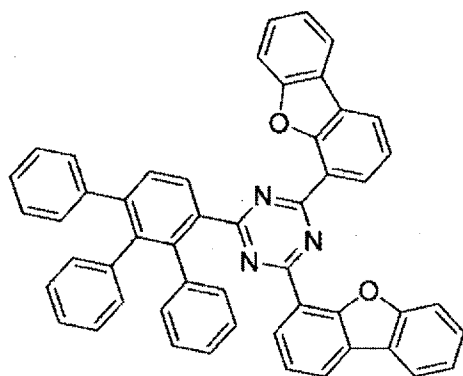
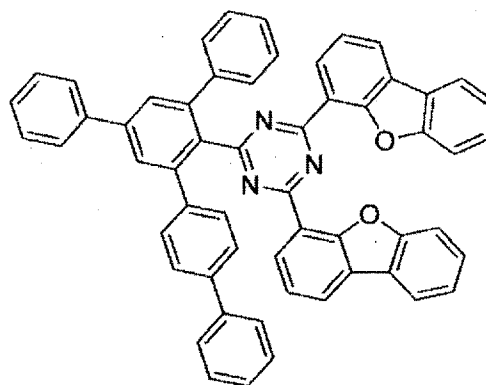
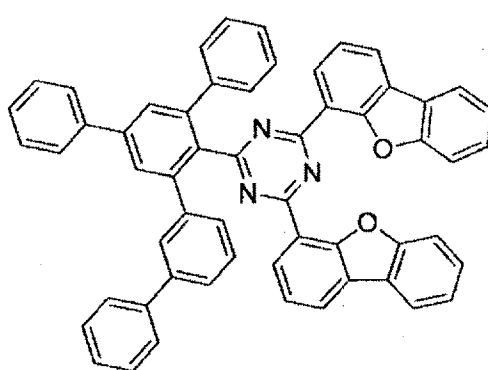
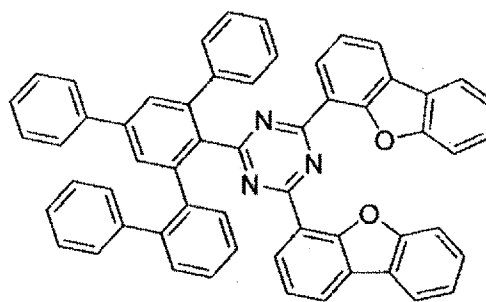
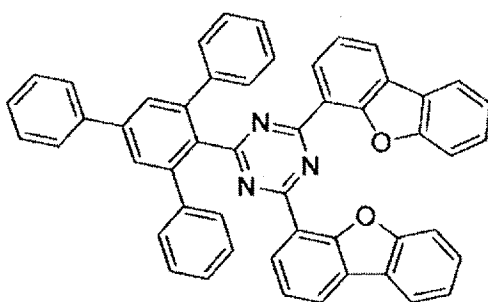
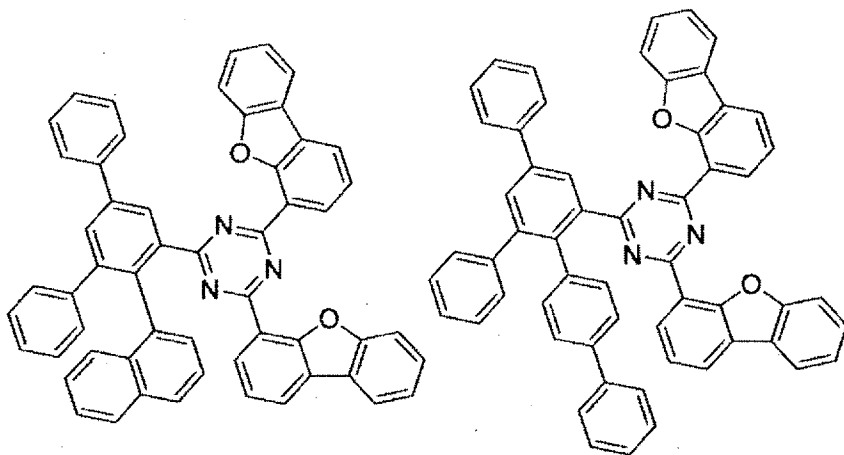


[0253]

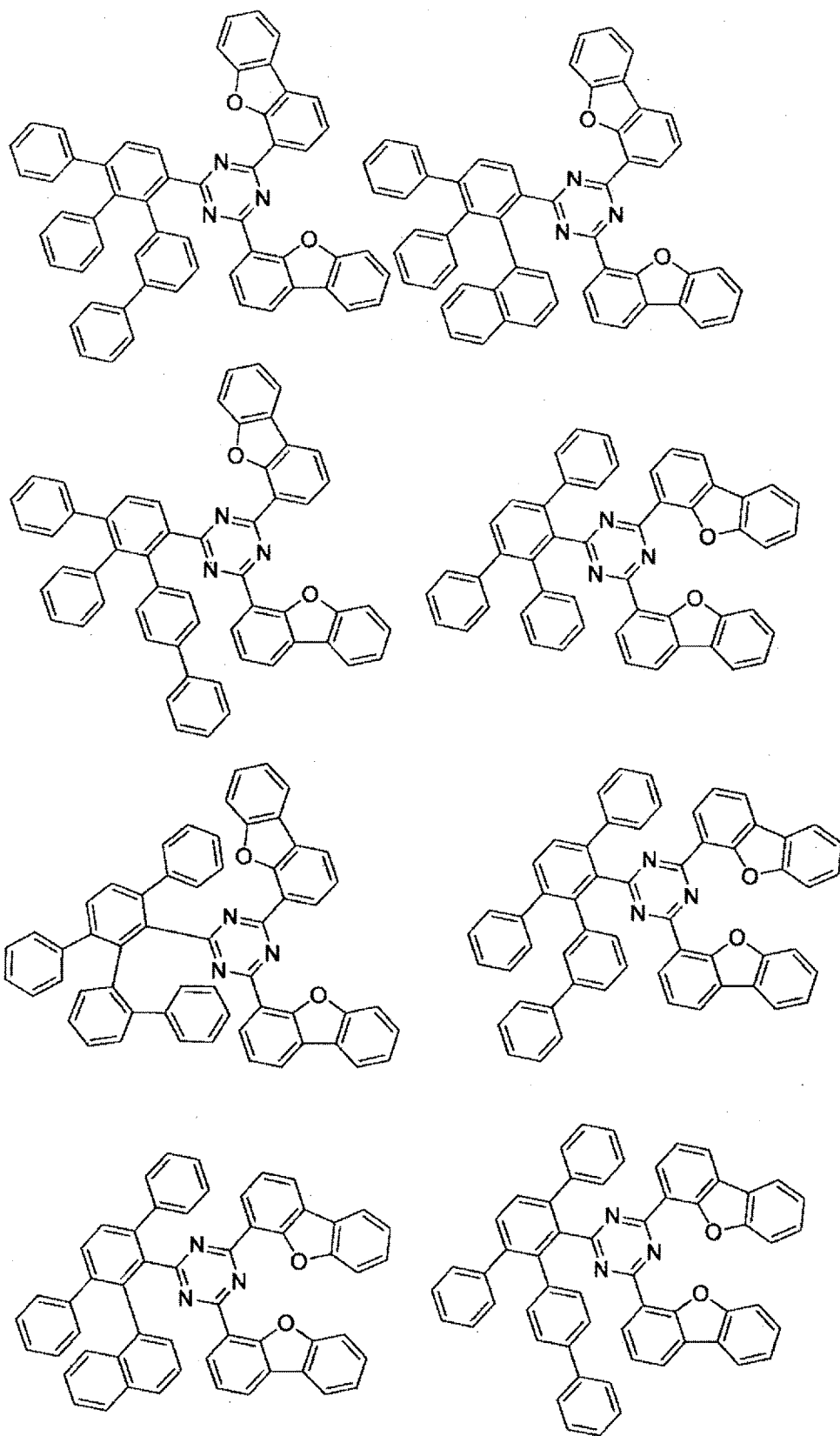
[化119]



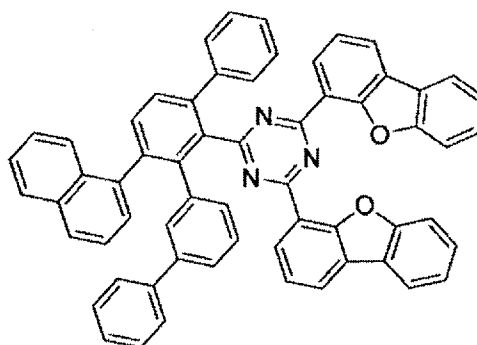
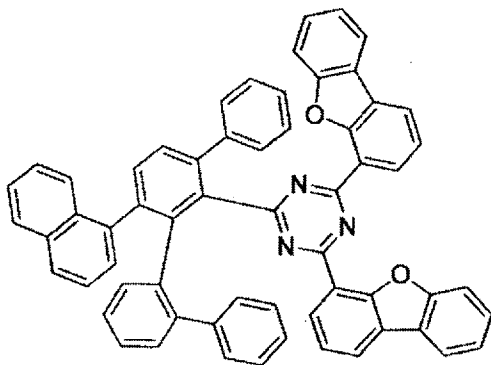
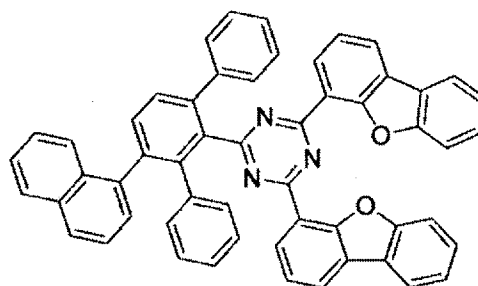
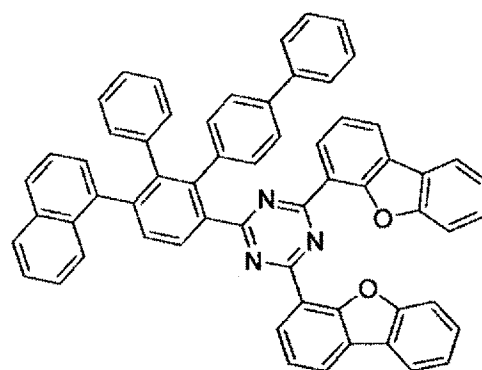
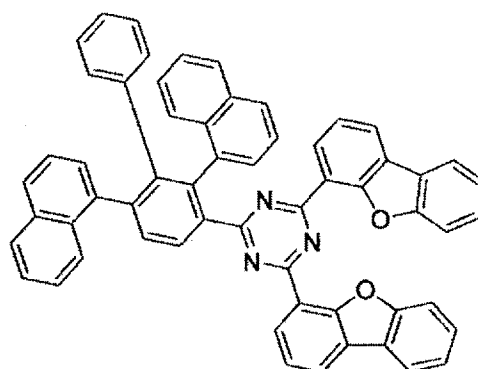
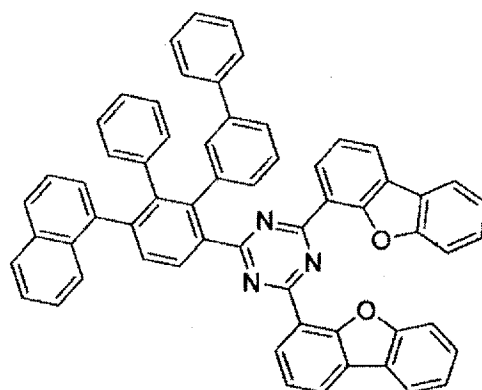
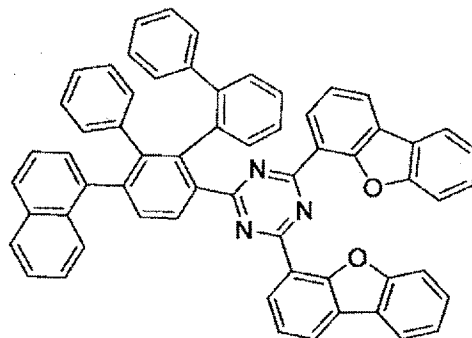
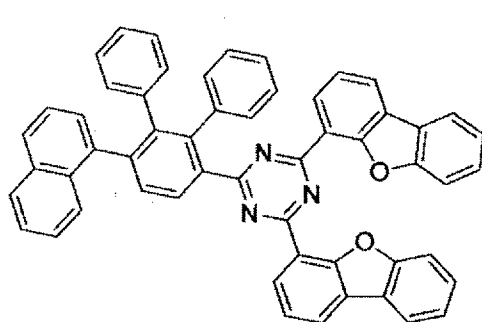
[0254] [化120]



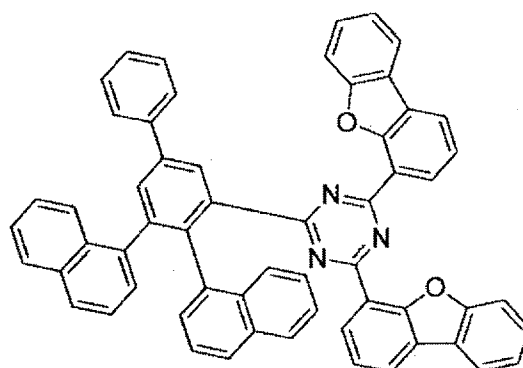
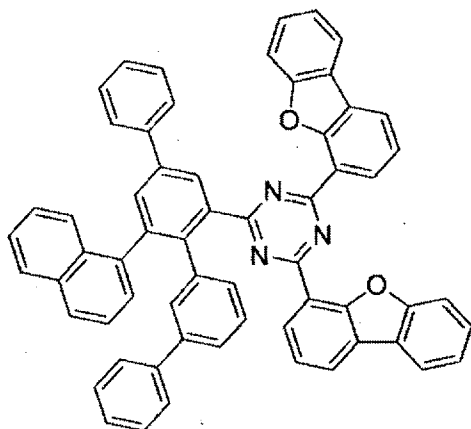
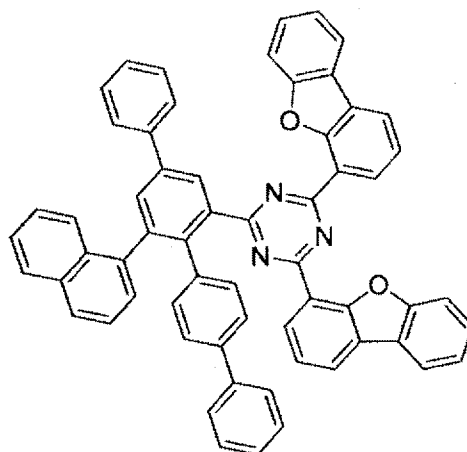
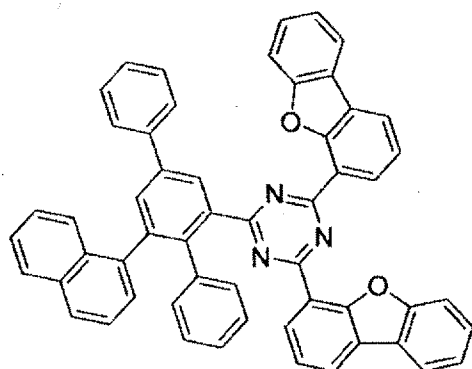
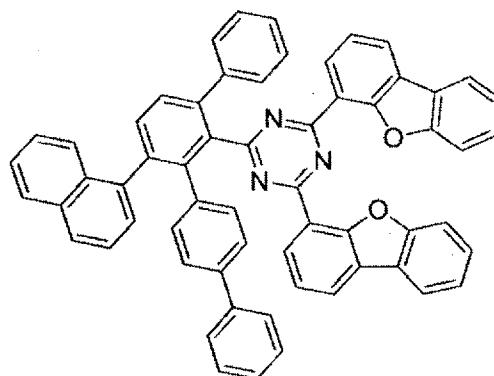
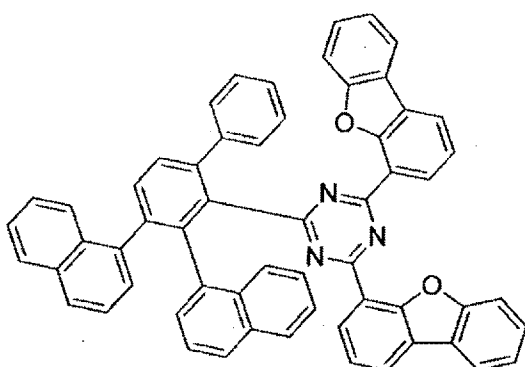
[0255] [化121]



[0256] [化122]

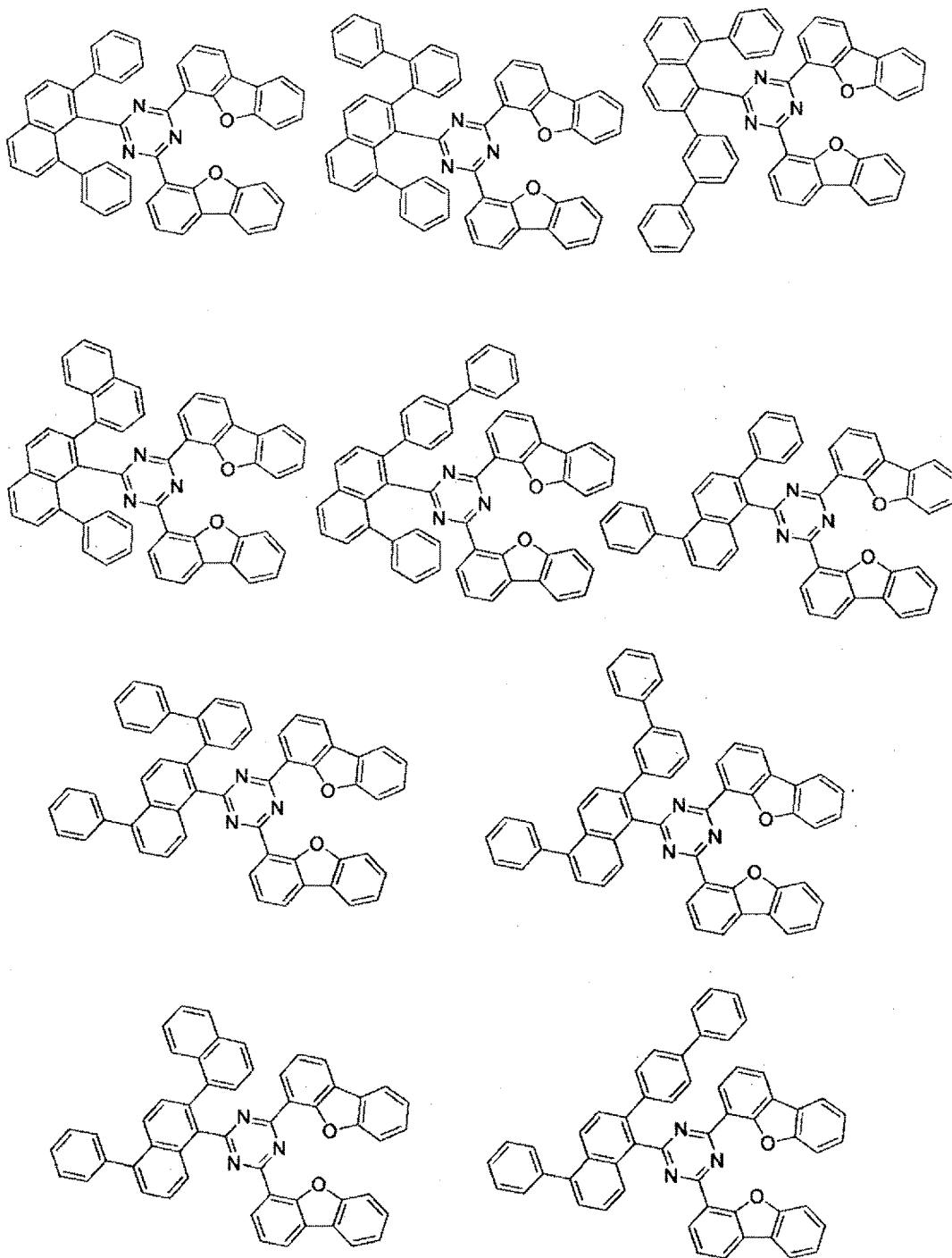


[0257] [化123]



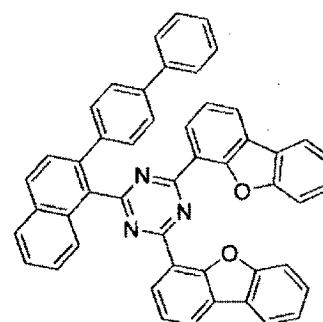
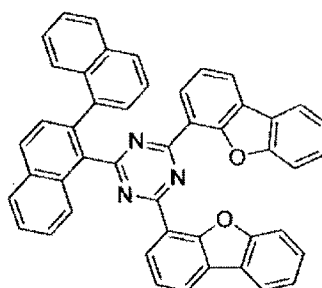
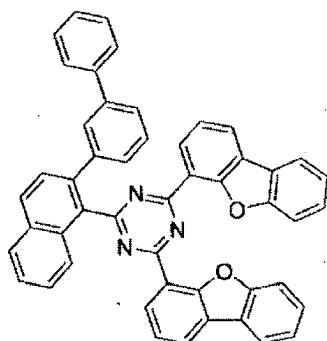
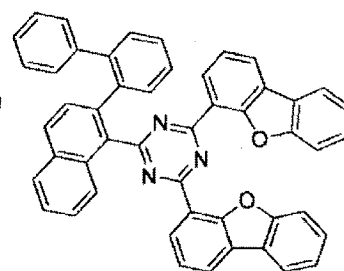
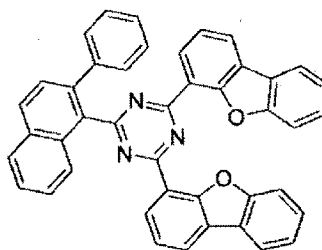
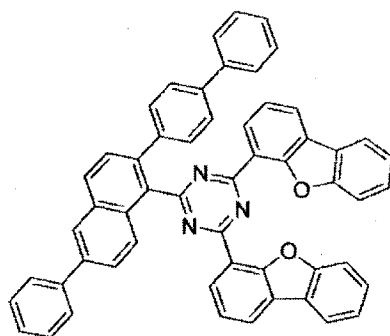
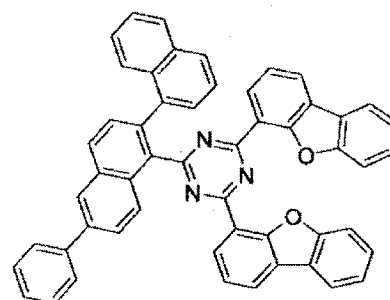
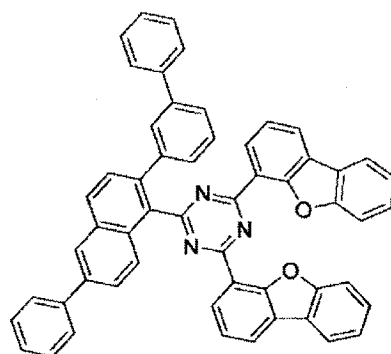
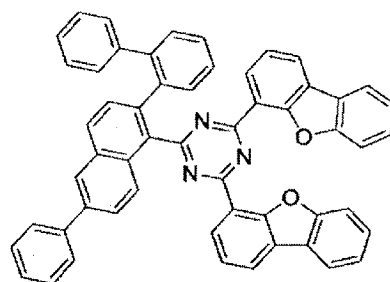
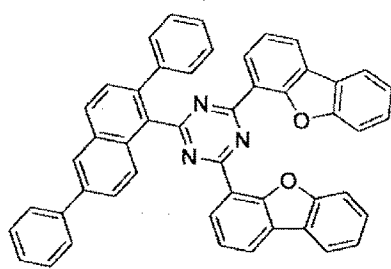
[0258]

[化124]



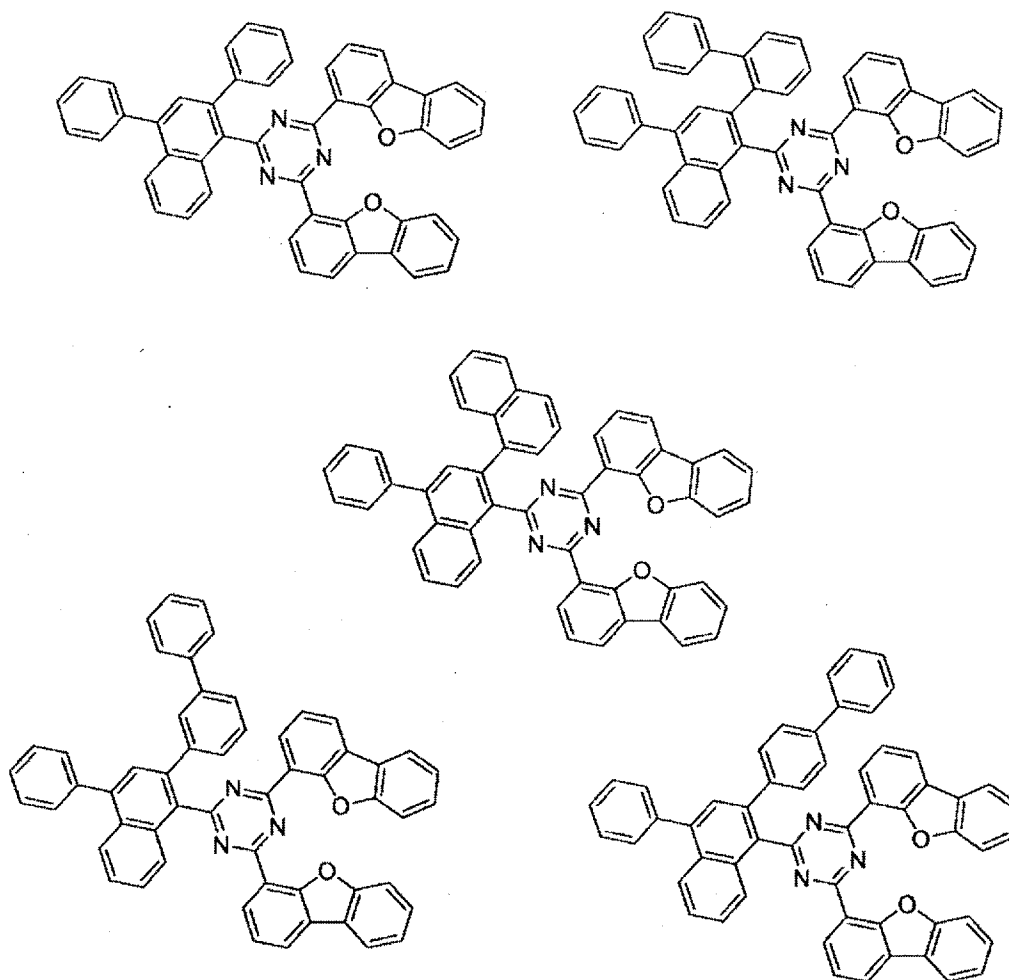
[0259]

[化125]



[0260]

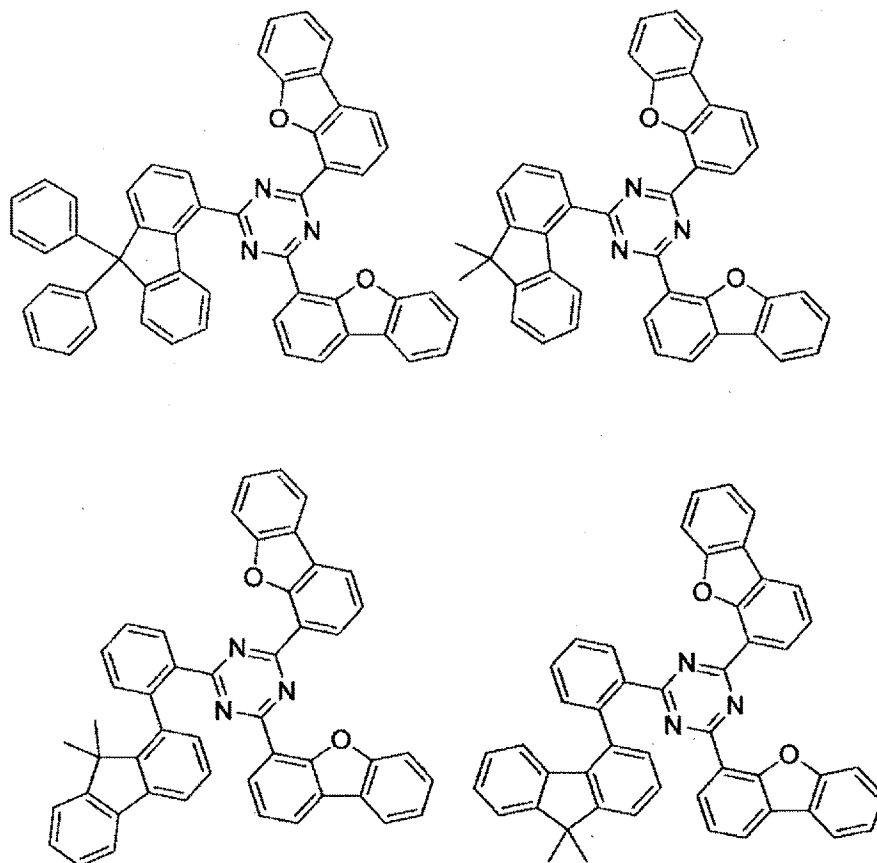
[化126]



[0261]

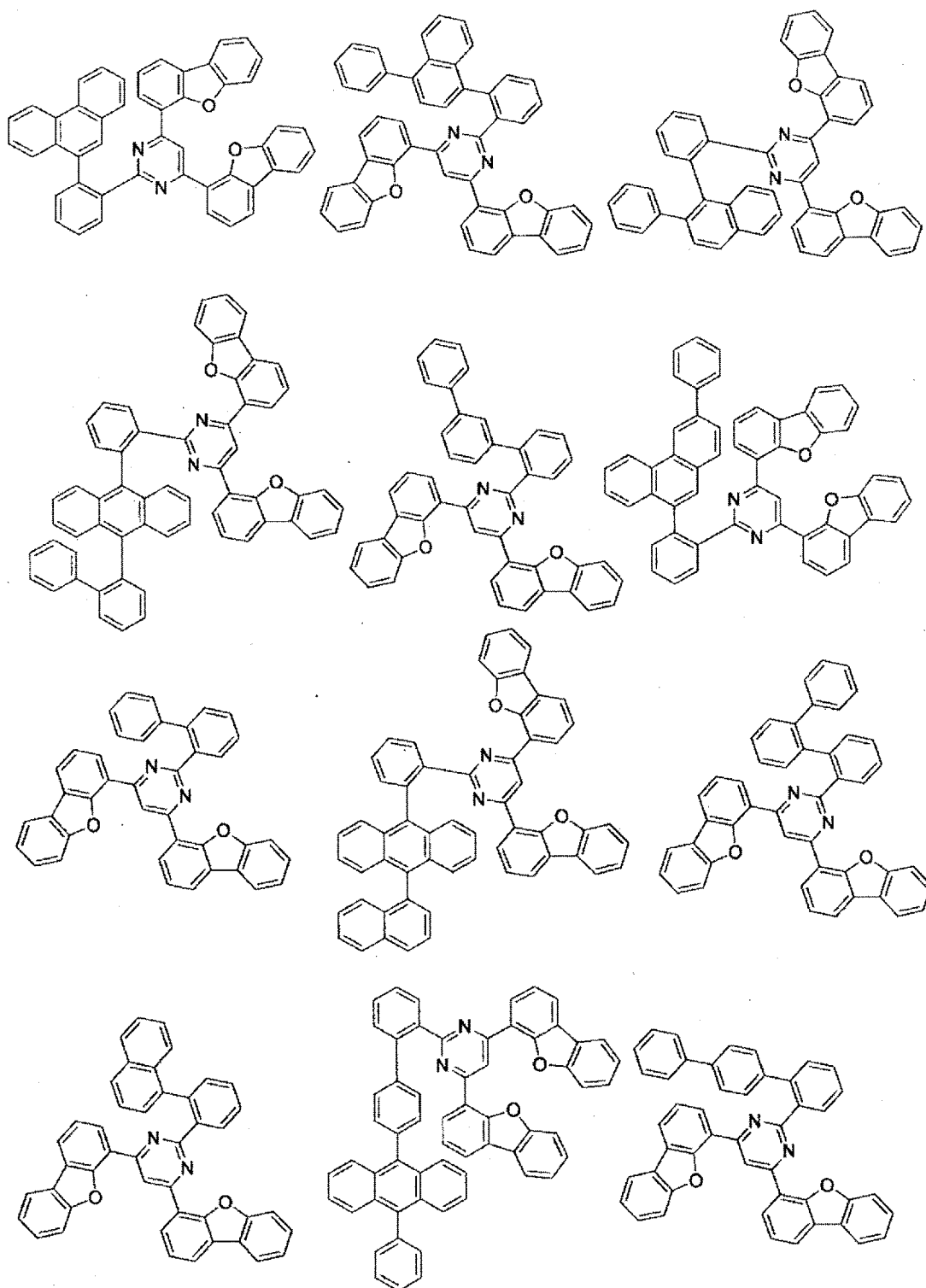


[化128]



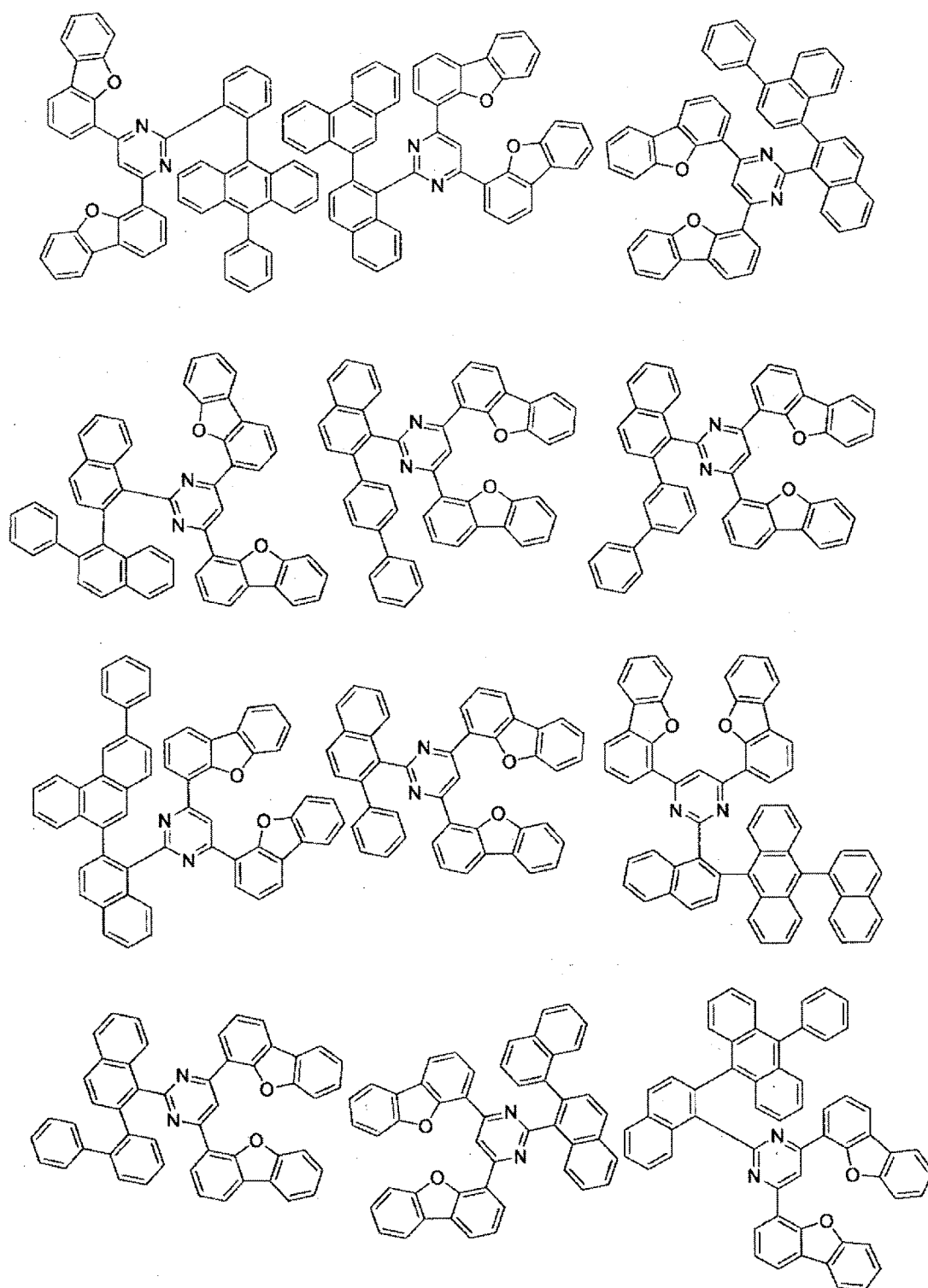
[0263]

[化129]



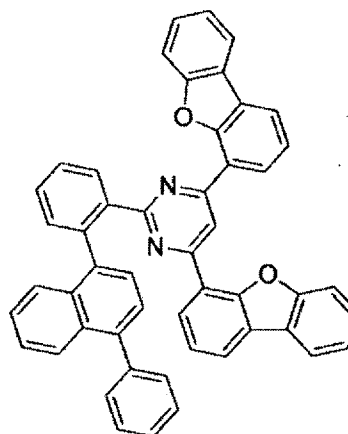
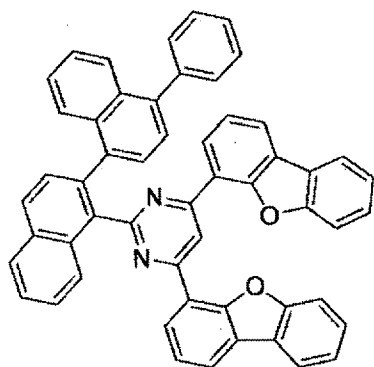
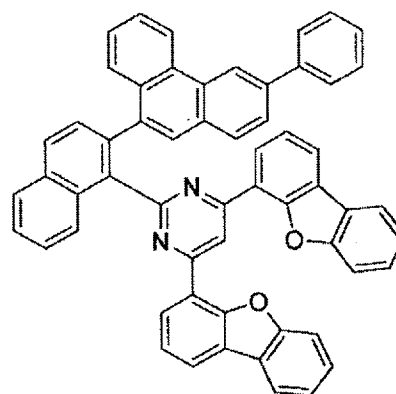
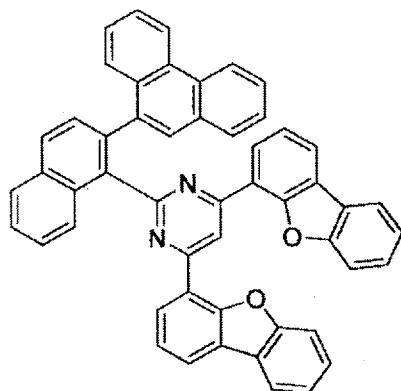
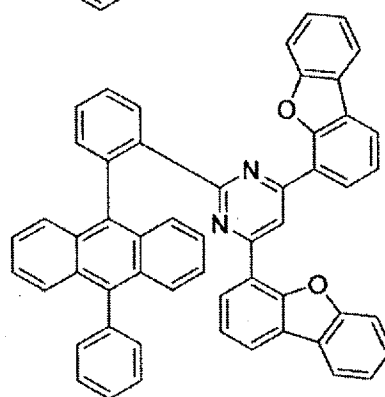
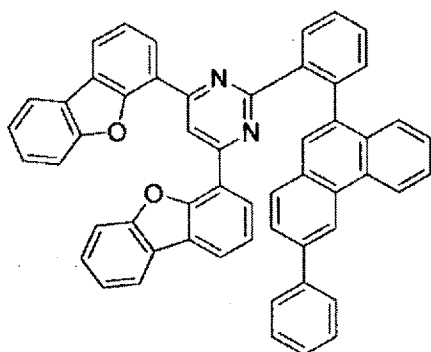
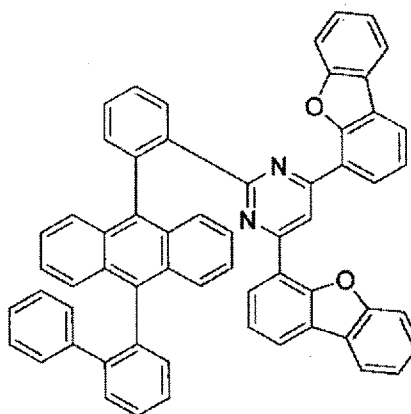
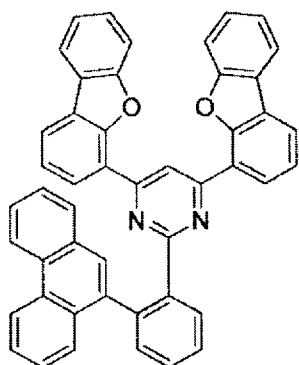
[0264]

[化130]

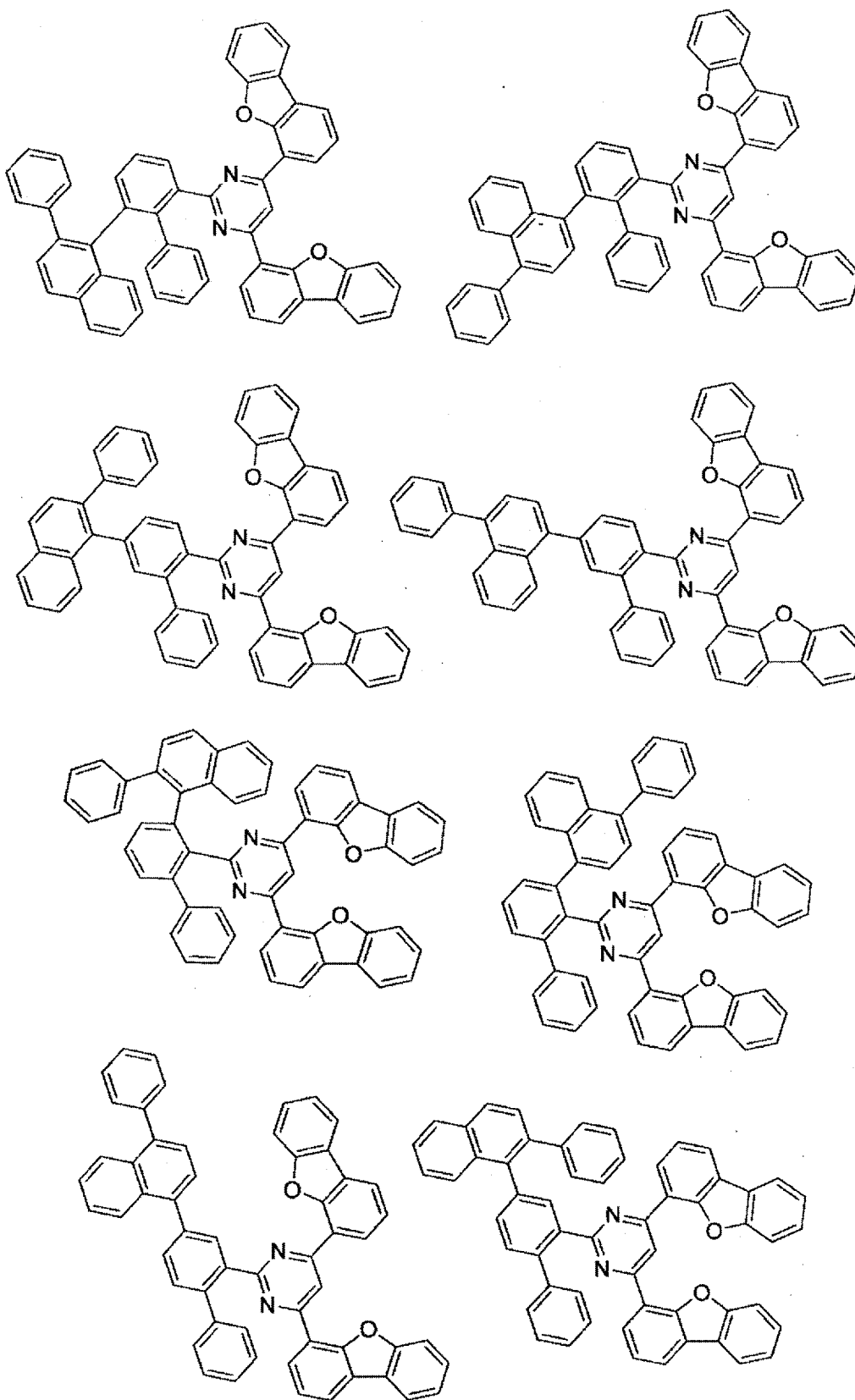


[0265]

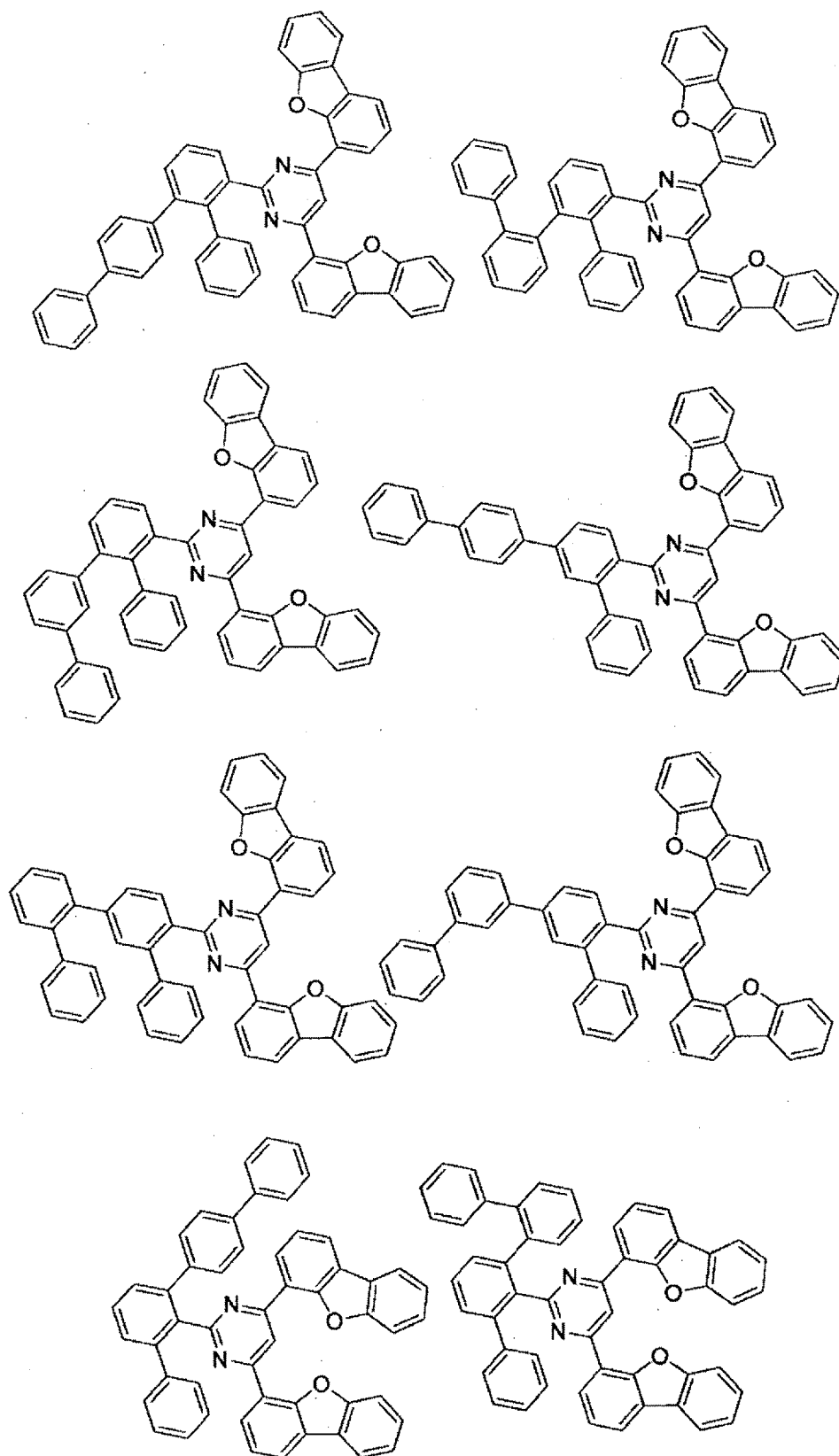
[化131]



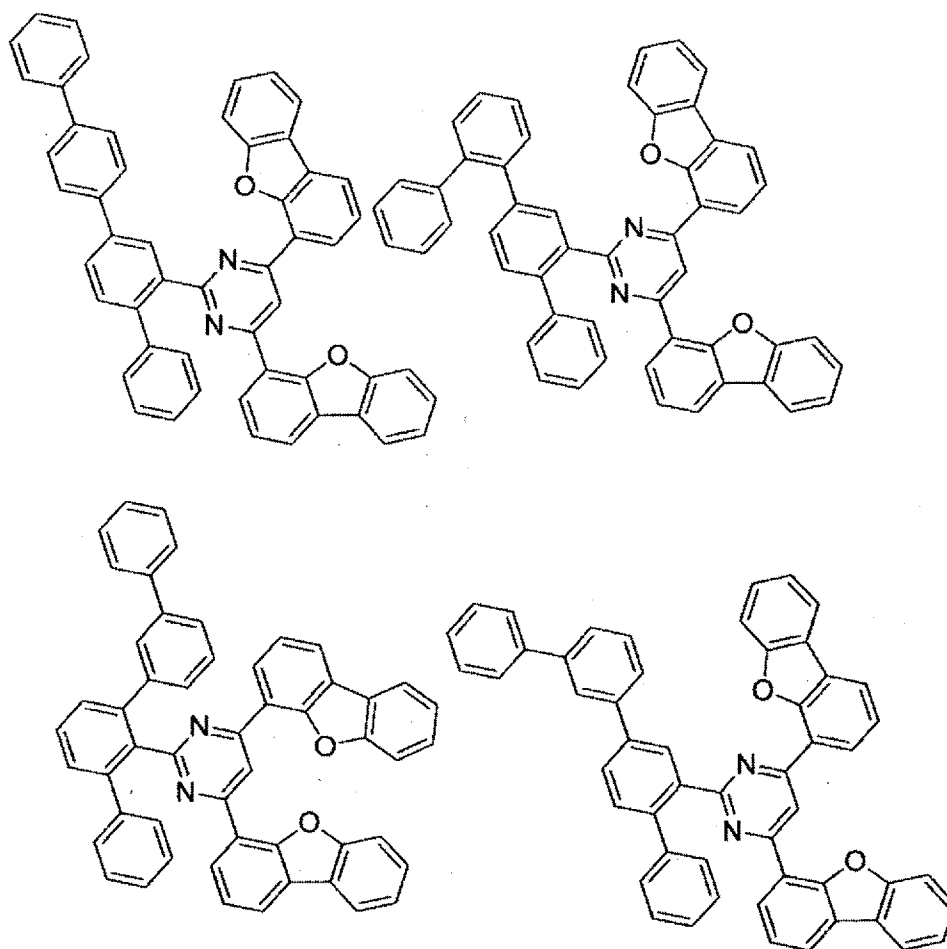
[0266] [化132]



[0267] [化133]



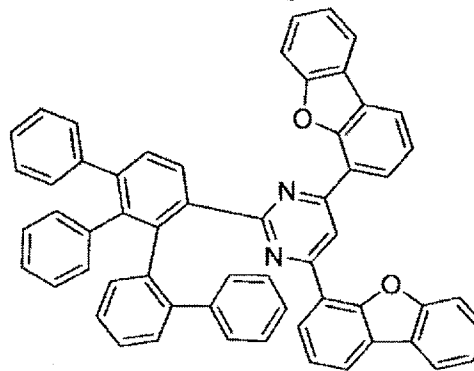
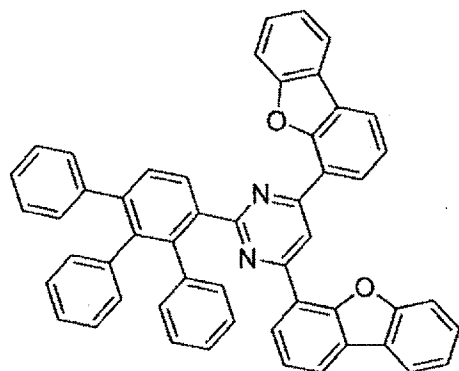
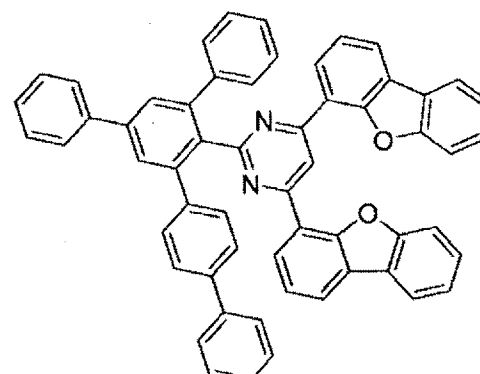
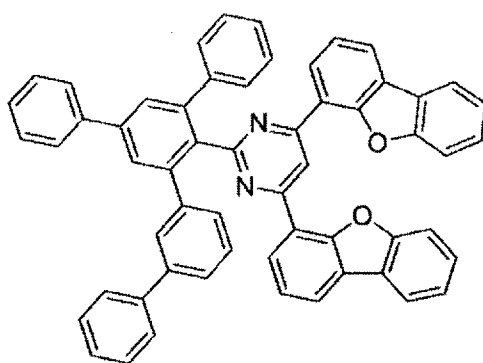
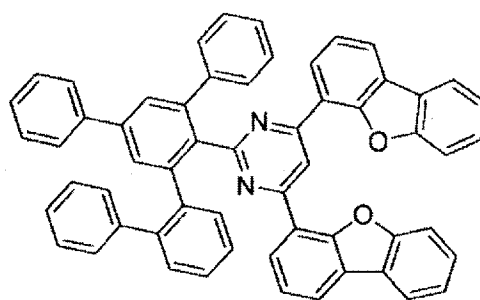
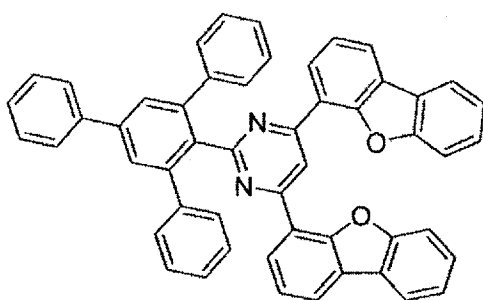
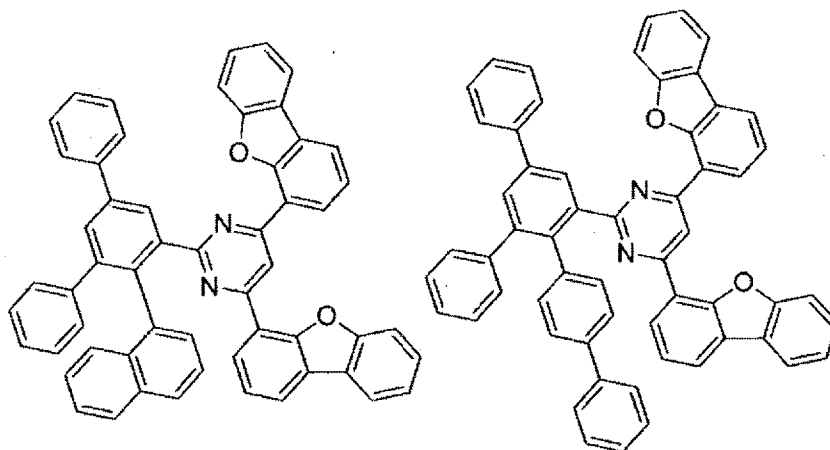
[0268] [化134]



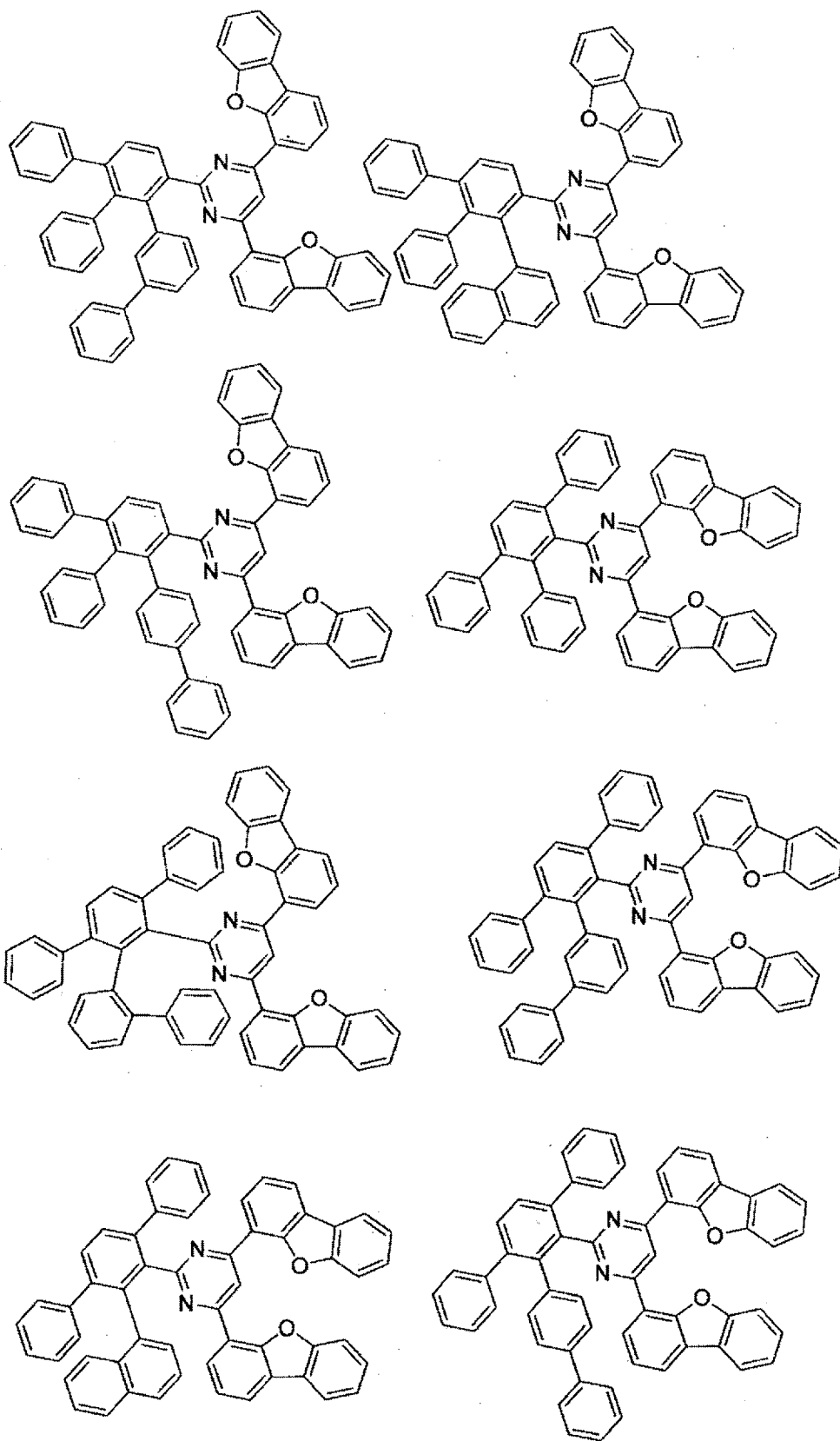
[0269]



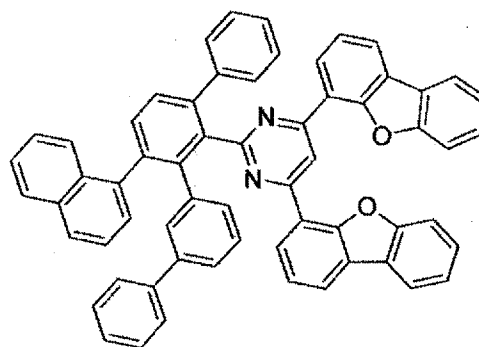
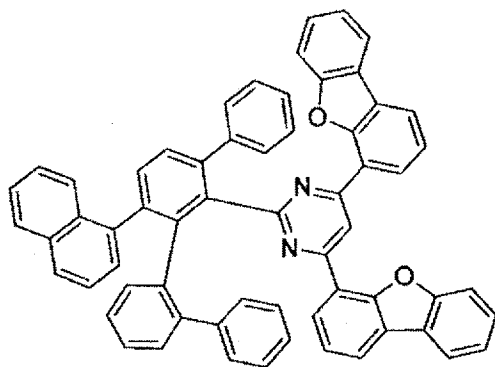
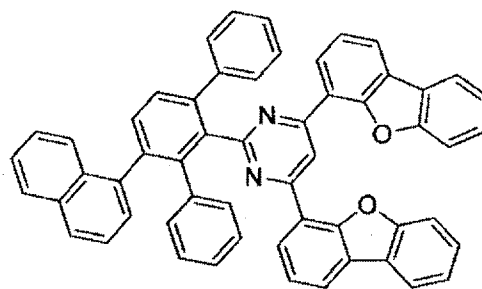
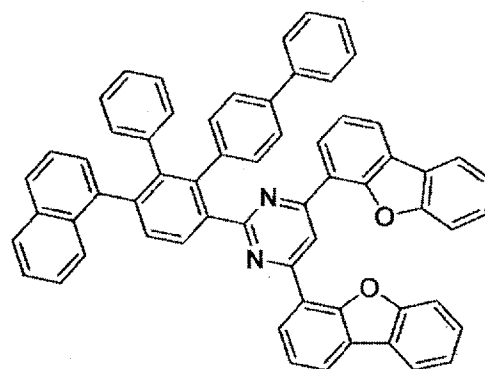
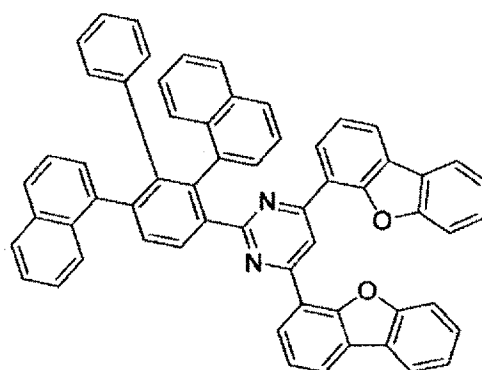
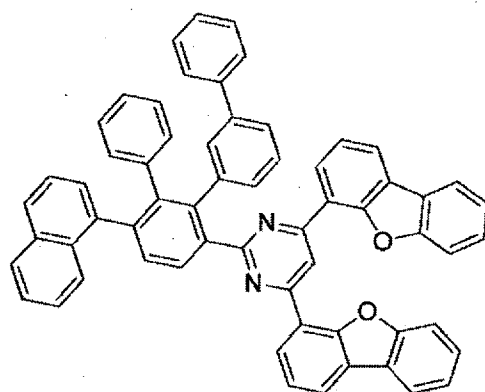
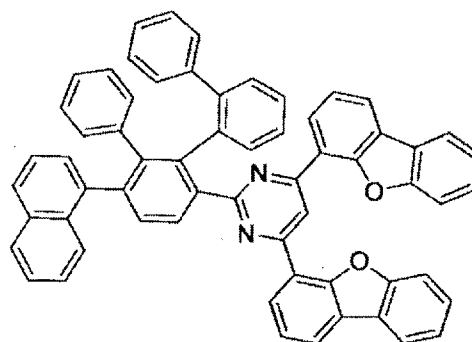
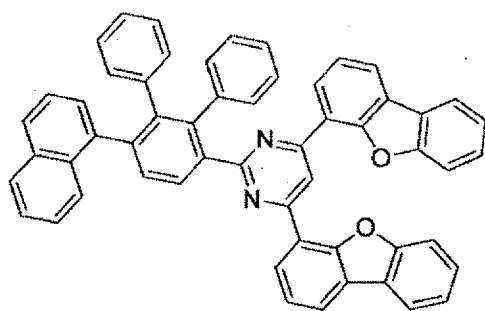
[化136]



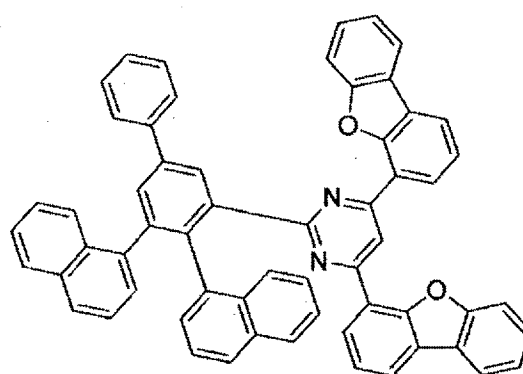
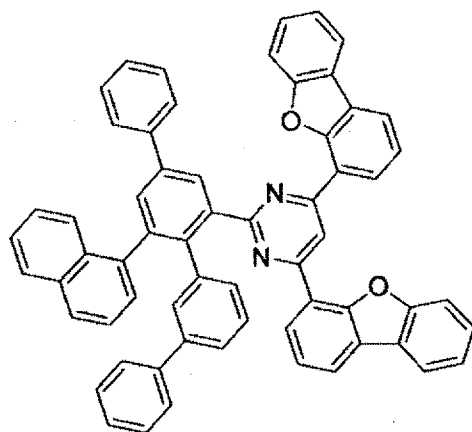
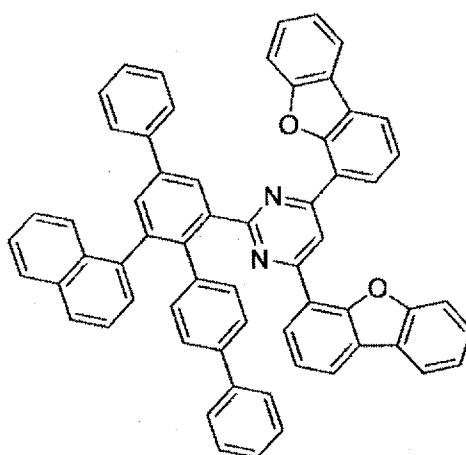
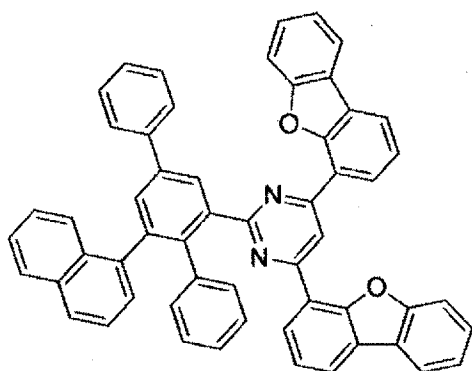
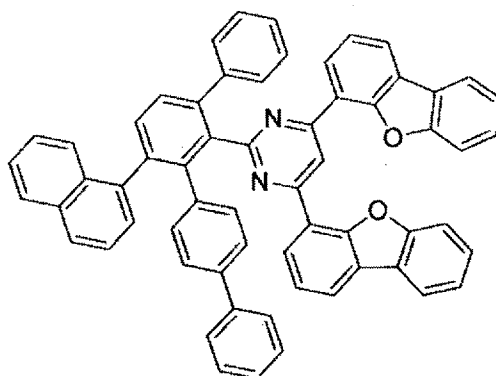
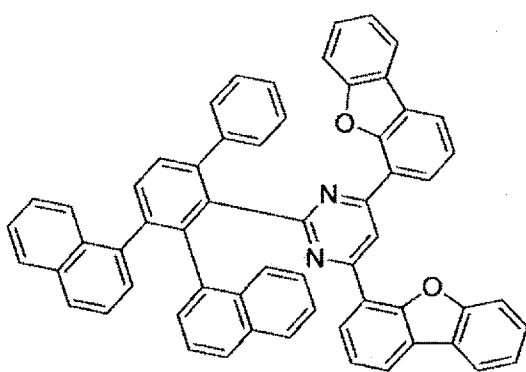
[0271] [化137]



[0272] [化138]

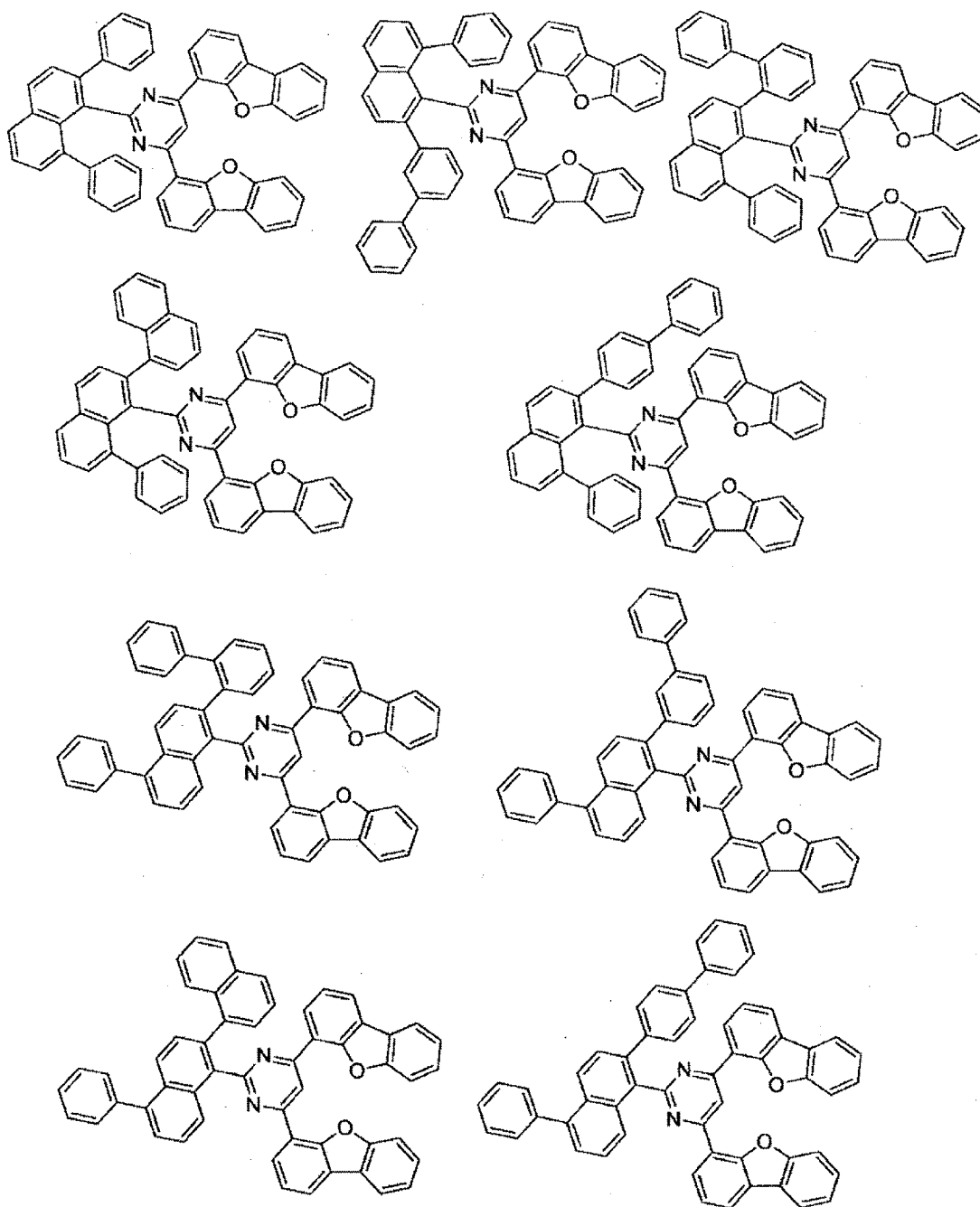


[0273] [化139]



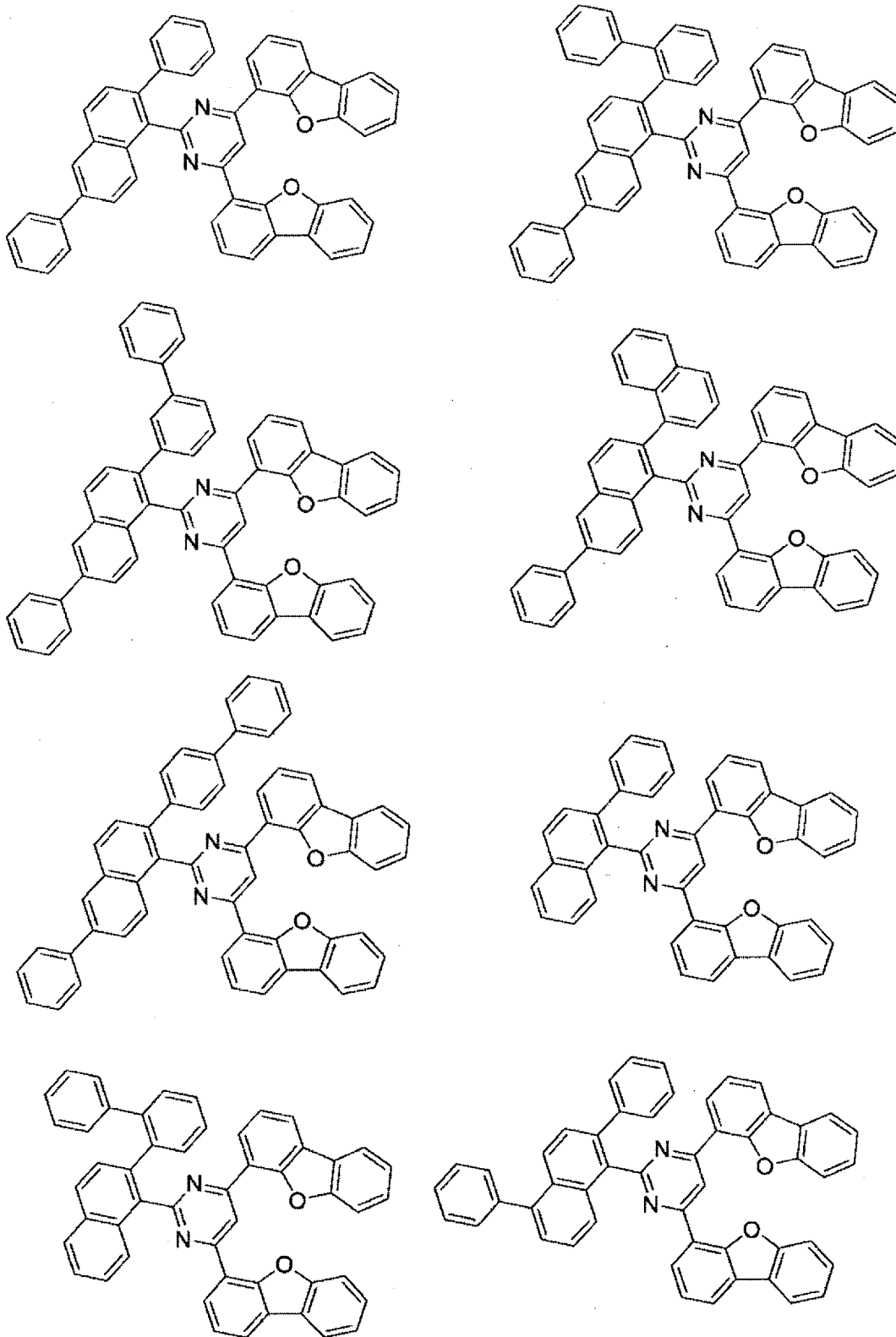
[0274]

[化140]



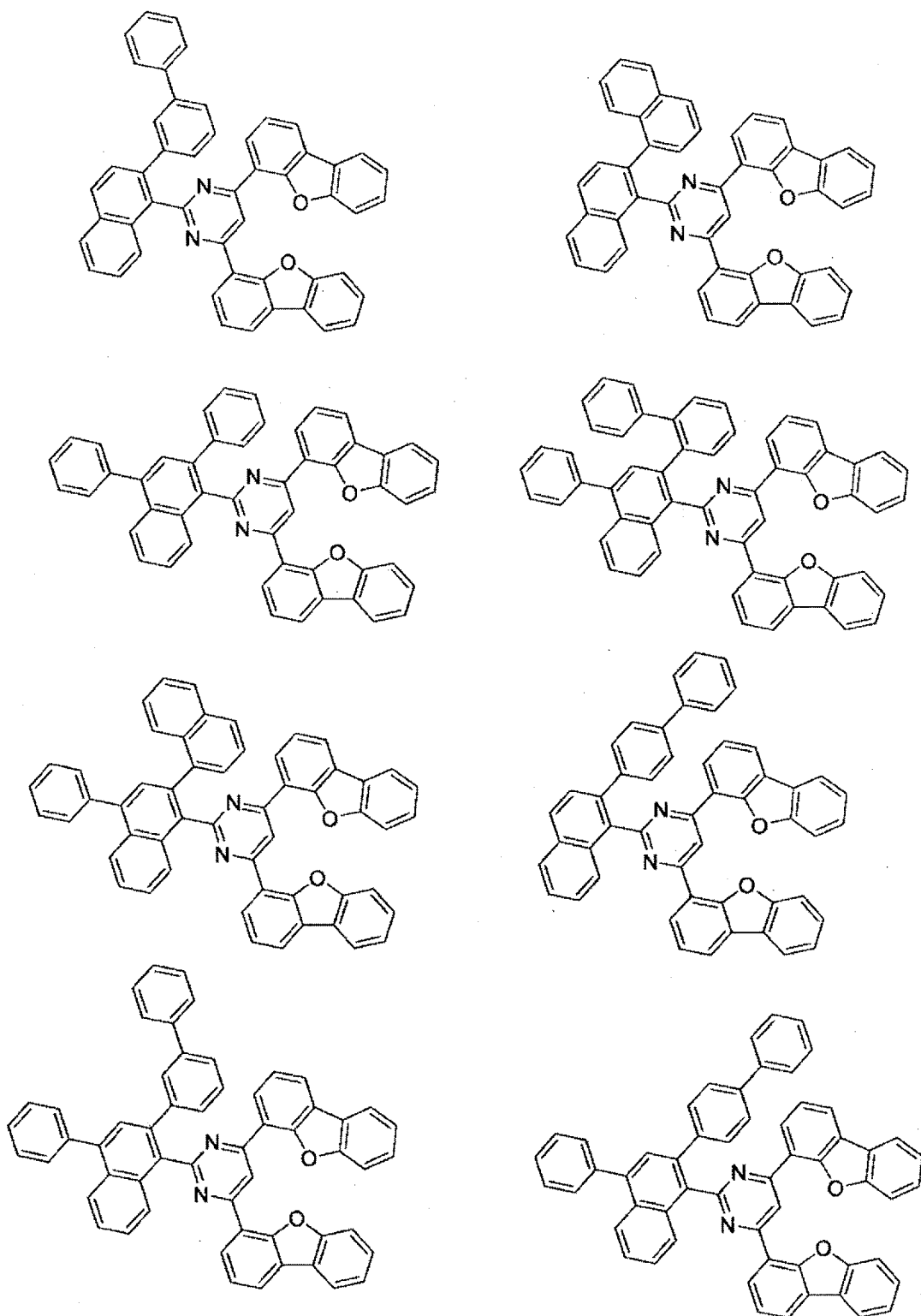
[0275]

[化141]



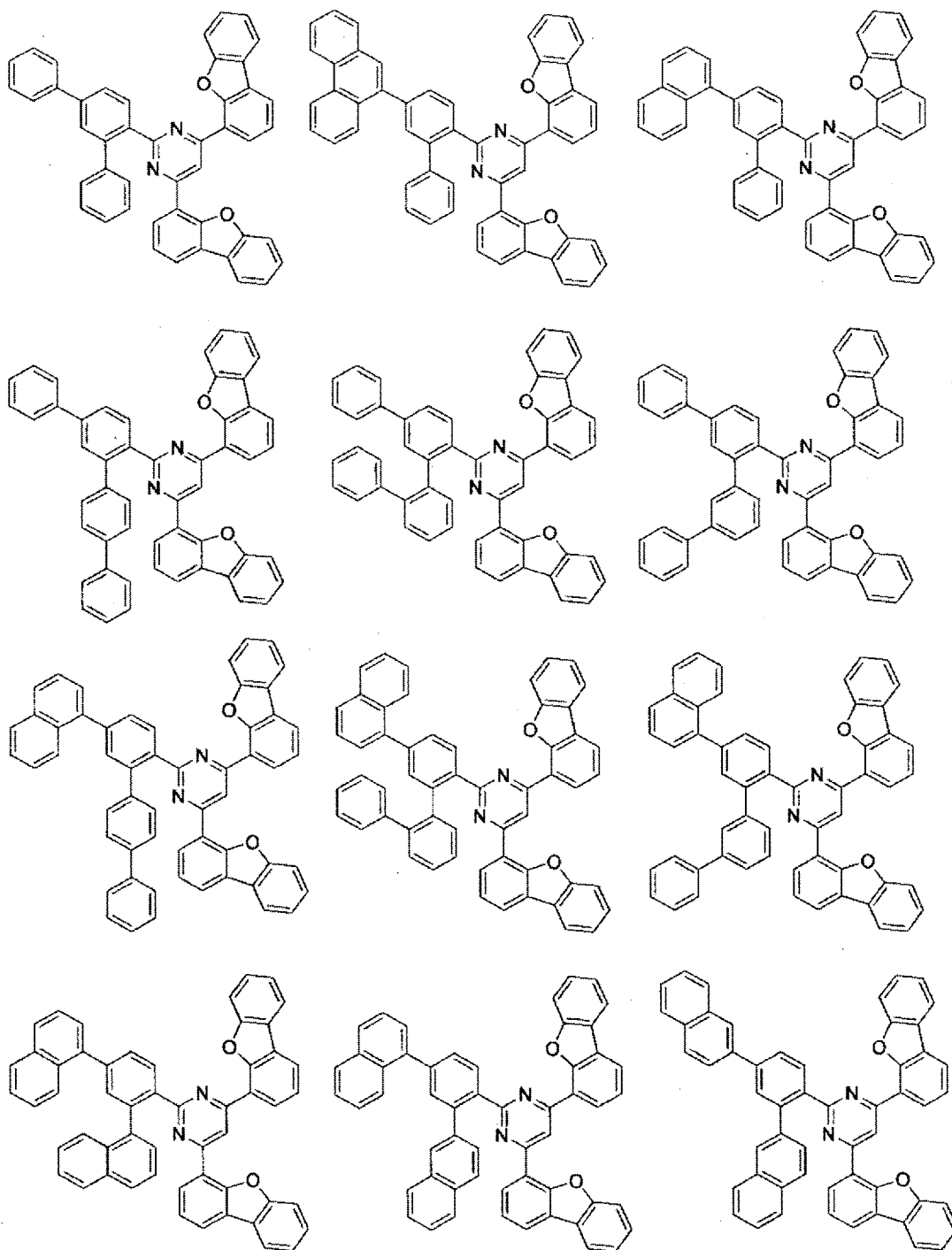
[0276]

[化142]



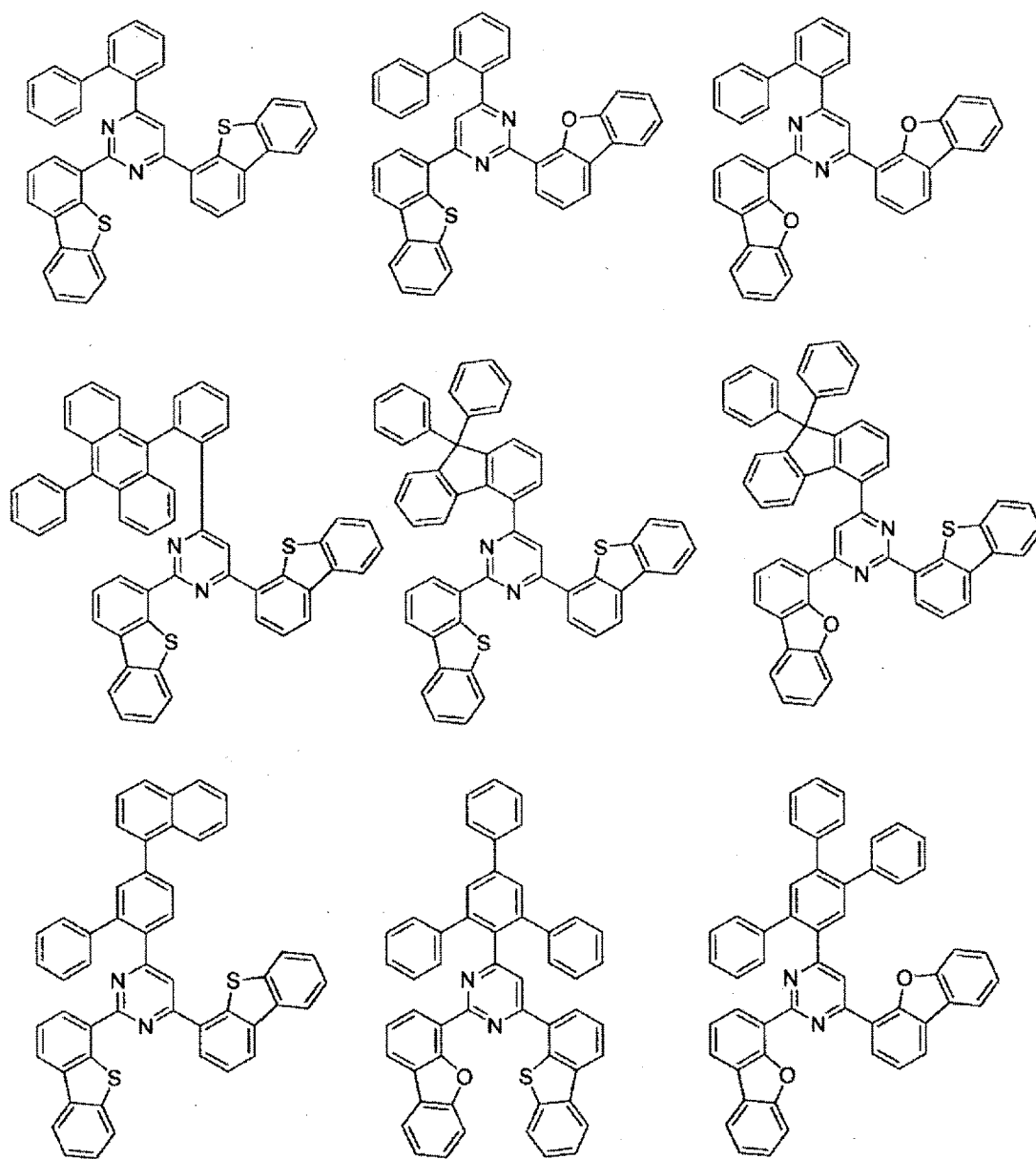
[0277]

[化143]



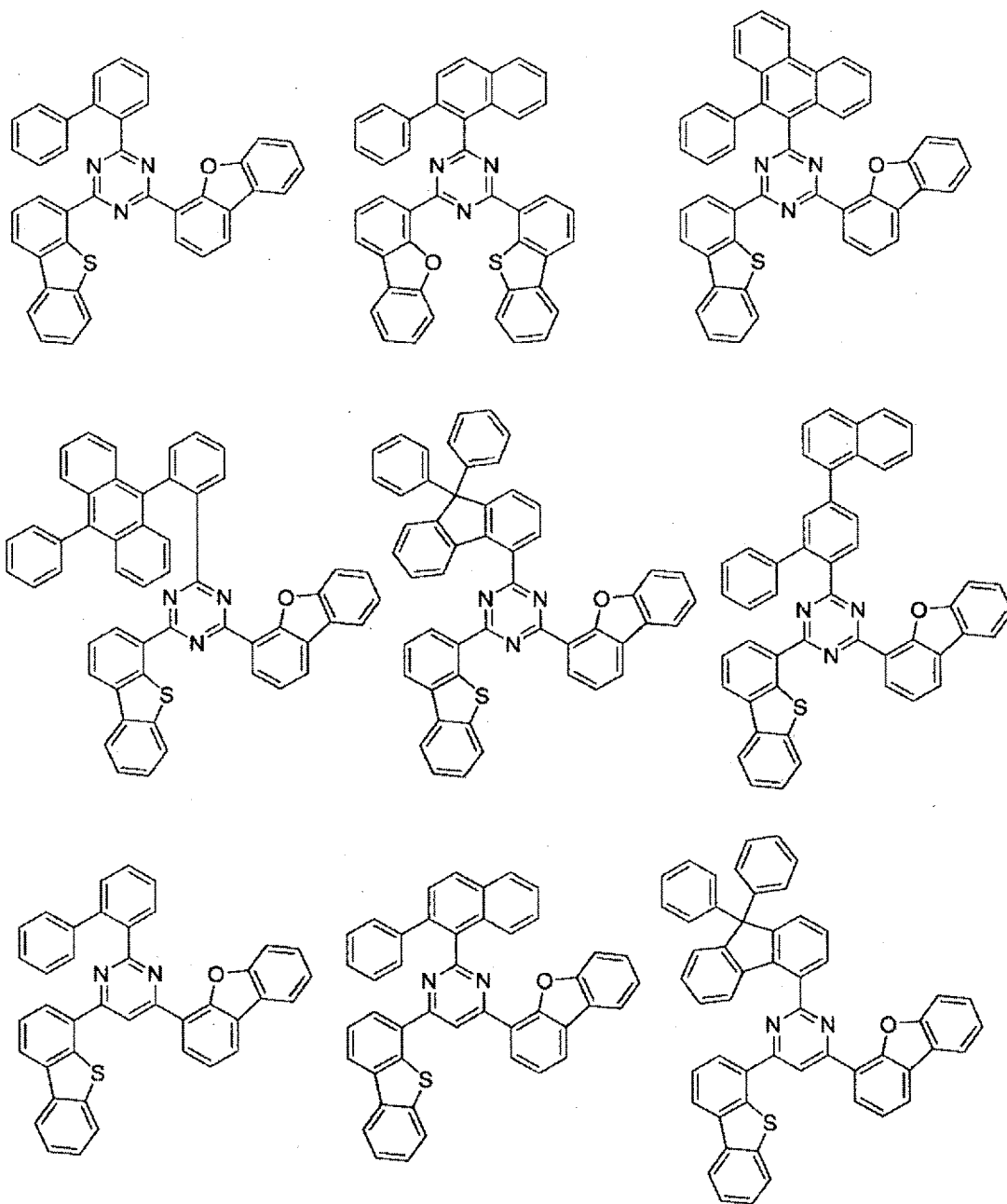
[0278]

[化144]



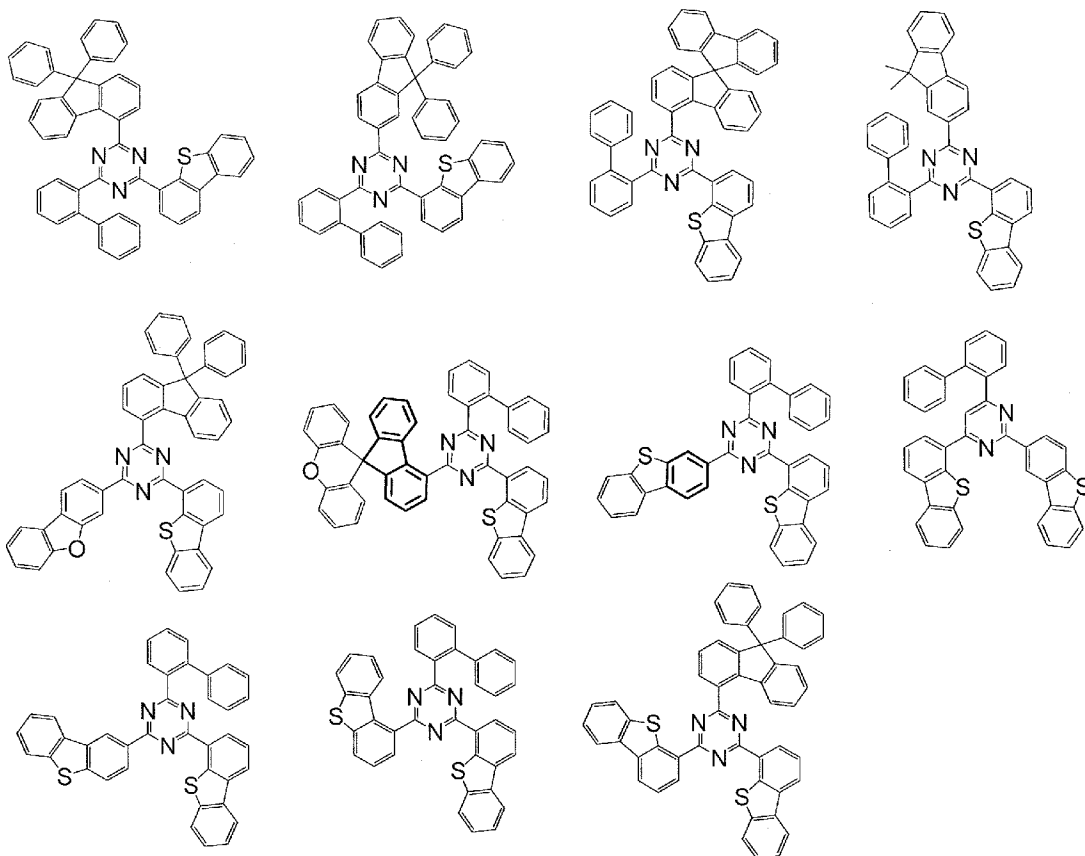
[0279]

[化145]

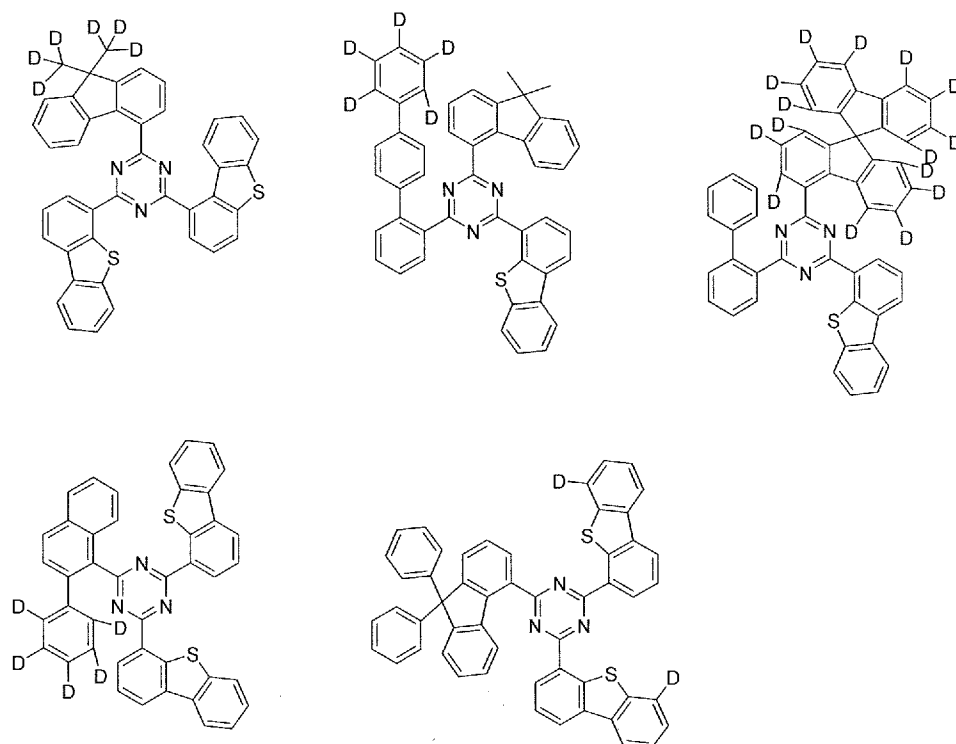


[0280]

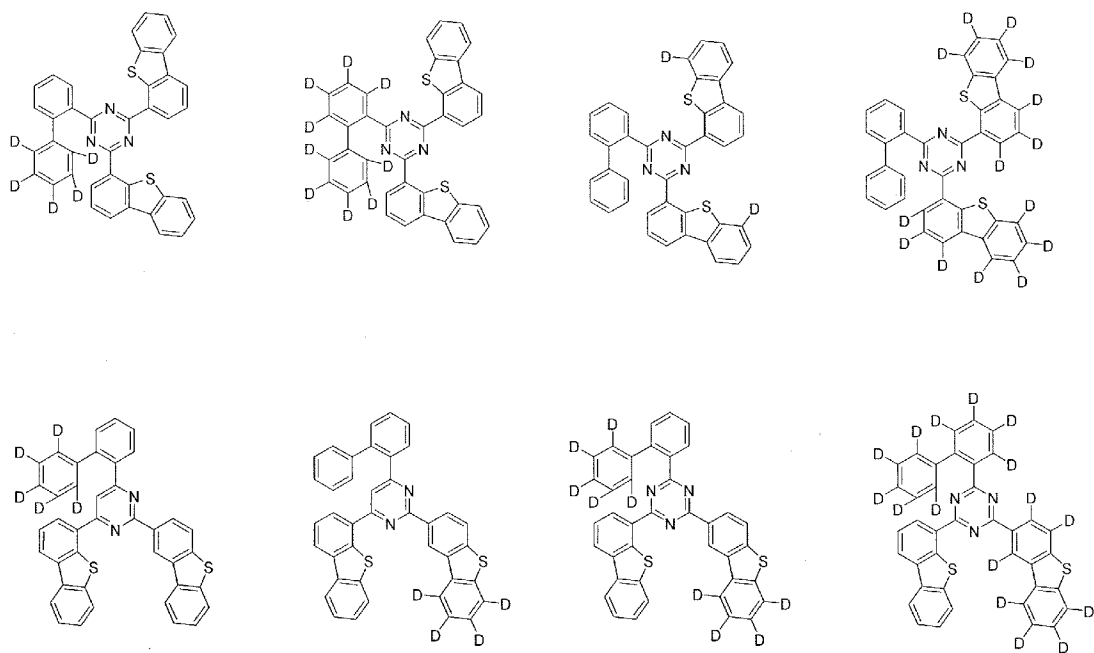
[化146]



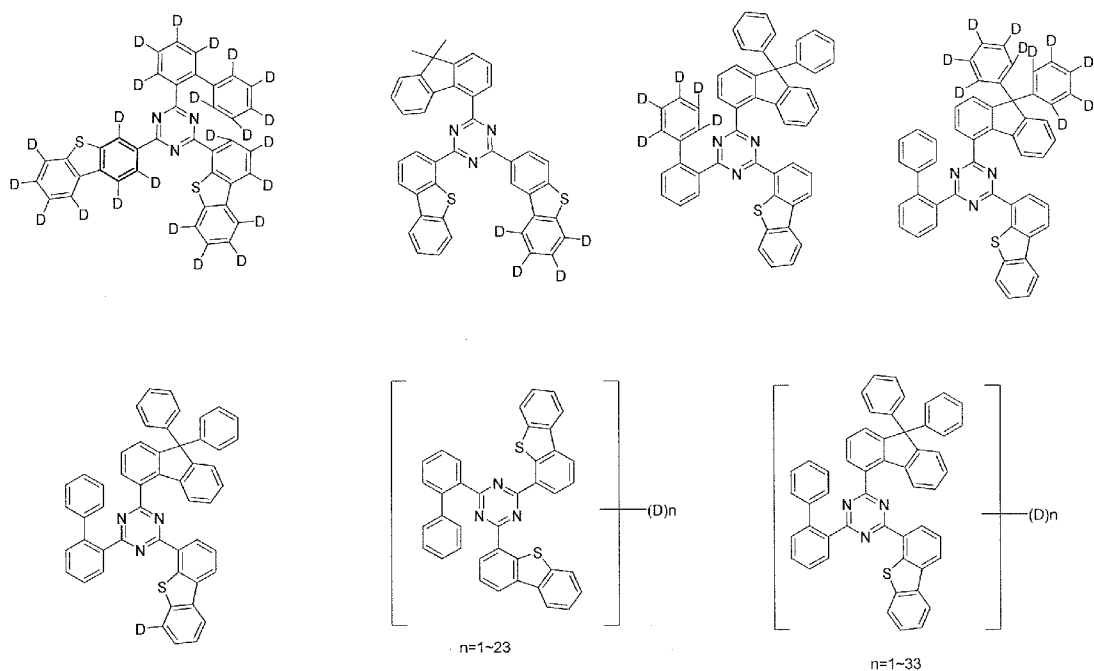
[0281] [化147]



## [0282] [化148]



## [0283] [化149]



[0284] 上記式（A1）で表される化合物は、後述する実施例に記載の方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応や原料を用いることで、製造することができる。

## [0285] [有機EL素子用電子輸送材料]

本発明の一態様の前記式（A 1）で表される化合物は、有機EL素子用材料として有用であり、特に、電子輸送材料として有用である。

本発明の一態様の有機エレクトロルミネッセンス素子用電子輸送材料は、前記式（A 1）で表される化合物を含む。

[0286] [有機エレクトロルミネッセンス素子]

本発明の一態様の有機エレクトロルミネッセンス素子は、陽極、有機層、及び陰極をこの順に含む有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

該有機層が、上記式（A 1）で表される化合物を含む。

上記式（A 1）で表される化合物は、複数の有機層を有する場合、いずれの層に含まれていてもよい。有機層の種類については後述する。

[0287] また、本発明の一態様の有機エレクトロルミネッセンス素子は、陽極、発光層、電子輸送帯域、及び陰極をこの順に含む有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

該電子輸送帯域が、上記式（A 1）で表される化合物を含む。

[0288] 一実施形態においては、前記電子輸送帯域が、前記発光層、第1電子輸送層、第2電子輸送層及び前記陰極の順に該第1電子輸送層及び第2電子輸送層を含み、

該第1電子輸送層及び第2電子輸送層のうちの少なくとも1層が、上記式（A 1）で表される化合物を含む。

一実施形態においては、前記電子輸送帯域が、前記発光層、第1電子輸送層、第2電子輸送層及び前記陰極の順に該第1電子輸送層及び第2電子輸送層を含み、

該第2電子輸送層が、上記式（A 1）で表される化合物を含む。

第1電子輸送層又は第2電子輸送層のいずれか一方又は両方に上記式（A 1）で表される化合物が含まれていることにより、発光効率が高い有機EL素子が得られる。

[0289] 一実施形態の有機EL素子においては、前記式（A 1）で表される化合物

が、少なくとも1個の重水素原子を有する。

また、前記式(A1)で表される化合物は、化合物中の全ての水素原子が軽水素原子である式(A1)で表される化合物(以下、「軽水素体(A1)」という)と、化合物中の全ての水素原子のうちの少なくとも1個が重水素原子である式(A1)で表される化合物(以下、「重水素体(A1)」という)との混合物であってもよい。

但し、軽水素体(A1)は、不可避免的に重水素原子を天然存在比以下の割合で含んでいてもよい。

[0290] 一実施形態においては、前記第1電子輸送層又は第2電子輸送層のいずれか一方又は両方に含まれる前記式(A1)で表される化合物は、製造コストの観点から、式(A1)で表される化合物中の全ての水素原子が軽水素原子である上記式(A1)で表される化合物(軽水素体(A1))であることが好ましい。

従って、一実施形態においては、前記第1電子輸送層又は第2電子輸送層のいずれか一方又は両方が実質的に軽水素体(A1)のみからなる上記式(A1)で表される化合物を含む有機EL素子を含む。

「実質的に軽水素体(A1)のみからなる上記式(A1)で表される化合物」とは、式(A1)で表される化合物の総量に対する軽水素体(A1)の含有割合が、90モル%以上、好ましくは95モル%以上、より好ましくは99モル%以上(それぞれ100%を含む)であることを意味する。

[0291] 本発明の一態様に係る有機EL素子の概略構成を、図1を参照して説明する。

本発明の一態様に係る有機EL素子1は、基板2と、陽極3、有機薄膜層4、発光層5、有機薄膜層6及び陰極10をこの順に有する。陽極3と発光層5との間に位置する有機薄膜層4は、正孔輸送帯域として機能し、発光層5と陰極10との間に位置する有機薄膜層6は、電子輸送帯域として機能する。

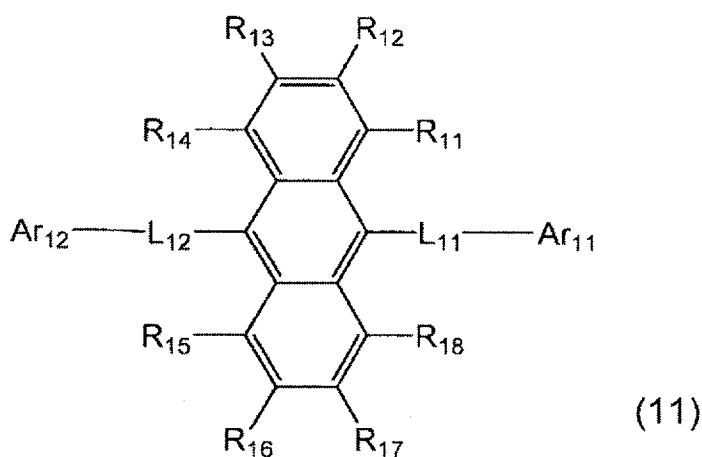
有機薄膜層6は、発光層5側に位置する第1電子輸送層6aと陰極10側

に位置する第2電子輸送層6bとを含む。

第1電子輸送層6a又は第2電子輸送層6bのいずれか一方又は両方は、前記式(A1)で表される化合物を含む。第1電子輸送層6a又は第2電子輸送層6bが上記式(A1)で表される化合物を含むことにより、発光効率が向上した有機EL素子が得られる。

[0292] 一実施形態においては、前記発光層が、下記式(11)で表される化合物を含む。

[0293] [化150]



[0294] (式(11)において、

$R_{11} \sim R_{18}$ 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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )、

—O—( $R_{904}$ )、

—S—( $R_{905}$ )、

—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

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

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

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

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

$R_{11} \sim R_{14}$  のうちの隣接する 2 つ以上、及び  $R_{15} \sim R_{18}$  のうちの隣接する 2 つ以上は、互いに結合して環を形成しない。

$L_{11}$  及び  $L_{12}$  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 価の複素環基である。

$A_{r11}$  及び  $A_{r12}$  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

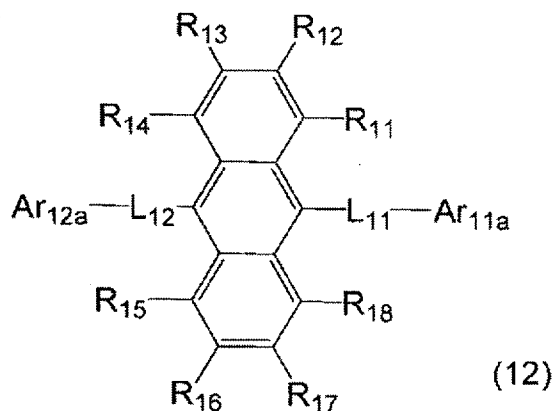
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。)

[0295] 発光層が前記式 (11) で表される化合物を含むことにより、さらに発光効率が向上した有機 EL 素子が得られる。

[0296] 一実施形態においては、前記式 (11) で表される化合物が、下記式 (12) で表される化合物である。

[0297]

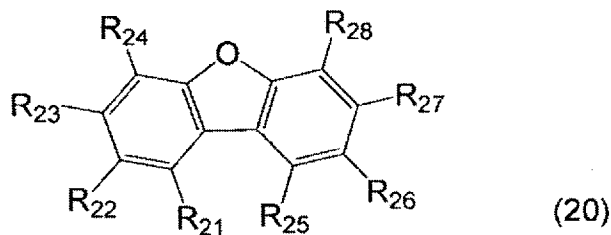
[化151]



[0298] [式(12)中、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $L_{11}$ 及び $L_{12}$ は、前記式(11)で定義した通りである。

$Ar_{11a}$ 及び $Ar_{12a}$ のうち少なくとも1つは下記式(20)で表される1価の基である。

[0299] [化152]



[0300] (式(20)中、

$R_{21} \sim R_{28}$ のうちの1つは $L_{11}$ 又は $L_{12}$ と結合する単結合であり、

$L_{11}$ 又は $L_{12}$ と結合する単結合ではない $R_{21} \sim R_{28}$ 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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )、

—O— ( $R_{904}$ )、

—S— ( $R_{905}$ )、

—N ( $R_{906}$ ) ( $R_{907}$ )、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$  は前記式 (11) で定義した通りである。

$L_{11}$  又は  $L_{12}$  と結合する単結合ではない  $R_{21} \sim R_{28}$  のうちの隣接する 2 以上は、互いに結合して環を形成しない。)

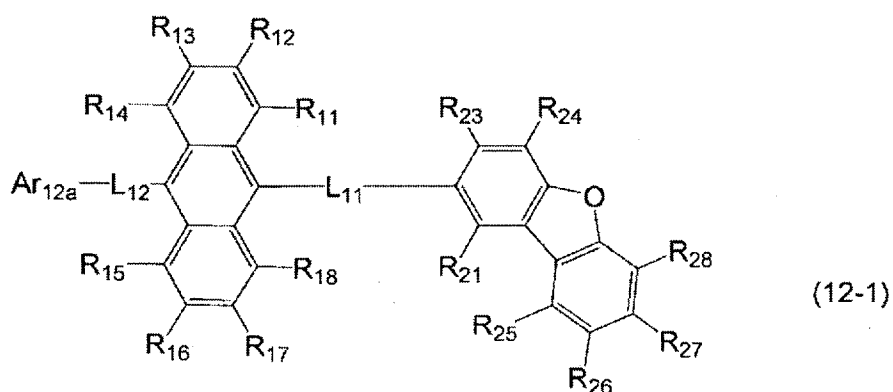
前記式 (20) で表される 1 価の基ではない  $Ar_{11a}$  又は  $Ar_{12a}$  は、

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

前記式 (20) で表される 1 価の基以外の、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。]

[0301] 一実施形態においては、前記式 (12) で表される化合物が、下記式 (12-1) で表される化合物である。

[0302] [化153]



[0303] (式 (12-1) 中、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $L_{11}$  及び  $L_{12}$  は、前記式 (11) で定義した通りである。

$Ar_{12a}$  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

前記式 (20) で表される 1 価の基以外の、置換もしくは無置換の環形成原

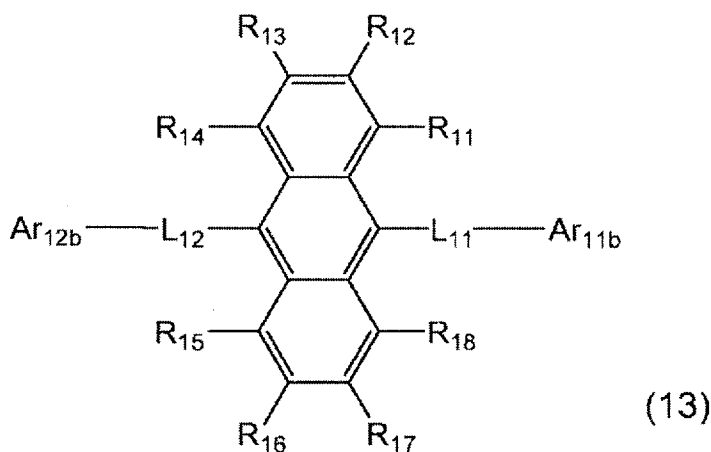
子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

$R_{21}$  及び  $R_{23} \sim R_{28}$  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、  
 $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、  
 $-\text{O}- (R_{904})$ 、  
 $-\text{S}- (R_{905})$ 、  
 $-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 、  
 ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$  は前記式 (11) で定義した通りである。)

[0304] 一実施形態においては、前記式 (11) で表される化合物が、下記式 (13) で表される化合物である。

[0305] [化154]



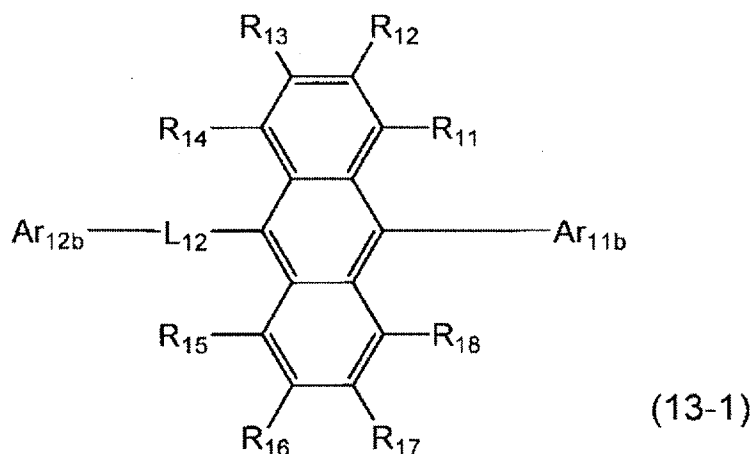
[0306] (式 (13) において、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $L_{11}$  及び  $L_{12}$  は、前記式 (11) で定義した通りである。

$\text{Ar}_{11b}$  及び  $\text{Ar}_{12b}$  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のベンゼン環のみで構成されるアリール基である。)

[0307] 一実施形態においては、前記式(13)で表される化合物が、下記式(13-1)で表される化合物である。

[0308] [化155]



[0309] (式(13-1)中、 $R_{11} \sim R_{18}$ 及び $L_{12}$ は、前記式(11)で定義した通りである。

$Ar_{11b}$ 及び $Ar_{12b}$ 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のベンゼン環のみで構成されるアリール基である。)

[0310] ここで、「ベンゼン環のみで構成される」アリール基とは、ベンゼン環以外の環を含むアリール基は除かれることを意味する。具体的には、ベンゼン環の他に5員環を含むフルオレン環から誘導される基等は除かれる。

「ベンゼン環のみで構成される」アリール基は、ベンゼン環単環からなる基(即ち、フェニル基)、2以上のベンゼン環が単結合を介して連続して結合した基(例えば、ビフェニル基等)、及びベンゼン環の縮合環からなる基(例えば、ナフチル基等)を含む。

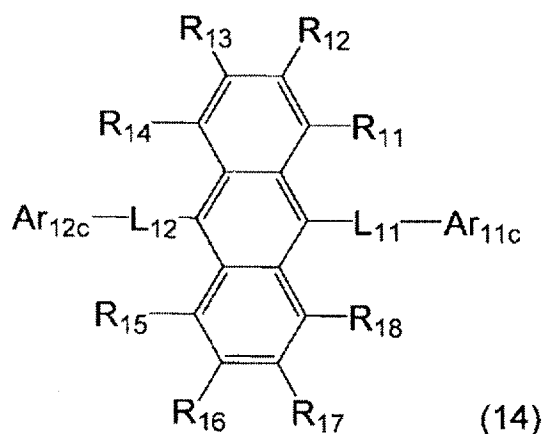
尚、ベンゼン環のみで構成されるアリール基には、任意の置換基が置換していてもよい。

[0311] 一実施形態においては、 $Ar_{11b}$ 及び $Ar_{12b}$ が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基、

置換もしくは無置換のナフチル基、  
 置換もしくは無置換のビフェニルイル基、  
 置換もしくは無置換のターフェニルイル基  
 置換もしくは無置換のアントリル基、又は  
 置換もしくは無置換のフェナントリル基である。

[0312] 一実施形態においては、前記式(11)で表される化合物が、下記式(14)で表される化合物である。

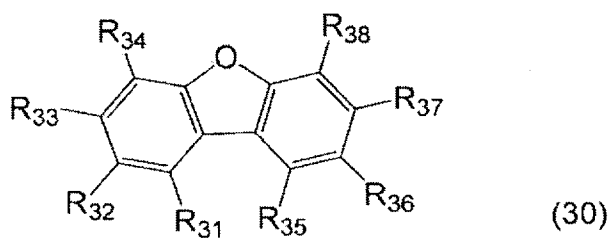
[0313] [化156]



[0314] [式(14)中、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $L_{11}$ 及び $L_{12}$ は、前記式(11)で定義した通りである。

$Ar_{11c}$ 及び $Ar_{12c}$ のうち少なくとも1つは下記式(30)で表される1価の基である。

[化157]

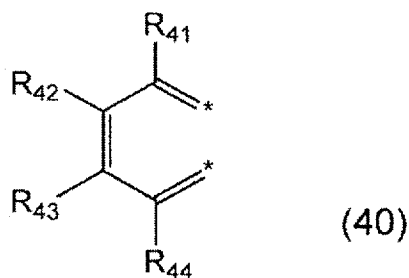


式(30)中、

$R_{31} \sim R_{34}$ のうちの隣接する2つ又は $R_{35} \sim R_{38}$ のうちの隣接する2つは

、互いに結合して下記式（４０）で表される不飽和の環を形成する。

[化158]



式（４０）中、

\*は、 $R_{31} \sim R_{34}$ のうちの隣接する２つ又は $R_{35} \sim R_{38}$ のうちの隣接する２つとの結合位置である。

前記式（４０）で表される不飽和の環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ 、及び $R_{41} \sim R_{44}$ のうちの隣接する２つ以上は、互いに結合して環を形成しない。

前記式（４０）で表される不飽和の環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ 及び $R_{41} \sim R_{44}$ のうちの１つは $L_{11}$ 又は $L_{12}$ と結合する単結合であり、

前記式（４０）で表される不飽和の環を形成せず、かつ $L_{11}$ 又は $L_{12}$ と結合する単結合ではない $R_{31} \sim R_{38}$ 、及び $L_{11}$ 又は $L_{12}$ と結合する単結合ではない $R_{41} \sim R_{44}$ 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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )、

—O—( $R_{904}$ )、

—S—( $R_{905}$ )、

—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )、

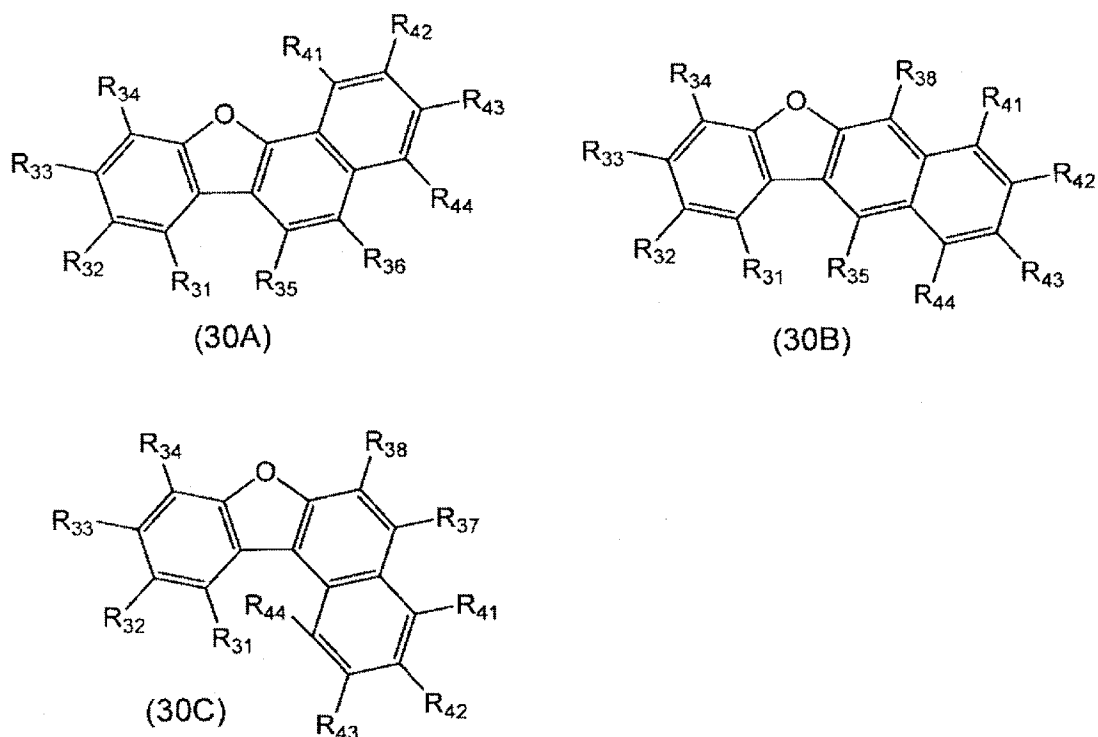
ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

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

$R_{901} \sim R_{907}$  は、前記式 (11) で定義した通りである。]

[0315] 一実施形態においては、前記式 (30) で表される 1 価の基が、下記式 (30A) ～ (30C) で表される 1 価の基から選択される。

[化159]

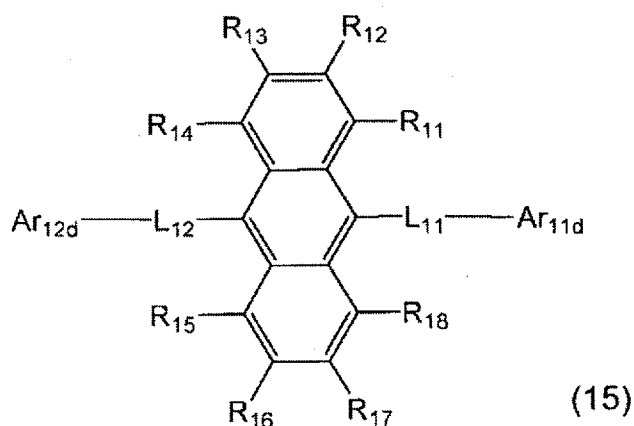


[0316] (式 (30A) ～ (30C) 中、 $R_{31} \sim R_{38}$  及び  $R_{41} \sim R_{44}$  は、前記式 (14) で定義した通りである。)

[0317] 一実施形態においては、前記式 (11) で表される化合物が、下記式 (15) で表される化合物である。

[0318]

[化160]



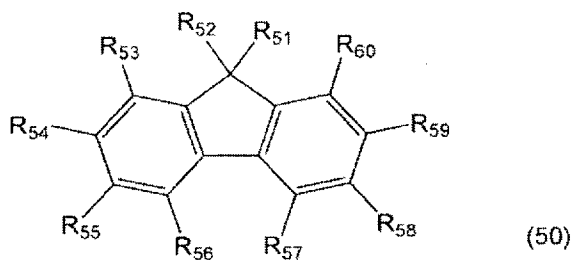
[0319] [式(15)において、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $L_{11}$ 及び $L_{12}$ は、前記式(11)で定義した通りである。

$Ar_{11d}$ 及び $Ar_{12d}$ のうちの少なくとも1つは、下記式(50)で表される1価の基である。

下記式(50)で表される1価の基ではない $Ar_{11d}$ 及び $Ar_{12d}$ 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1価の複素環基である。

$Ar_{11d}$ 及び $Ar_{12d}$ の両方が下記式(50)で表される1価の基である場合、下記式(50)で表される1価の基である $Ar_{11d}$ 及び $Ar_{12d}$ は、互いに同一であってもよいし、異なってもよい。

[0320] [化161]



[0321] (式(50)中、

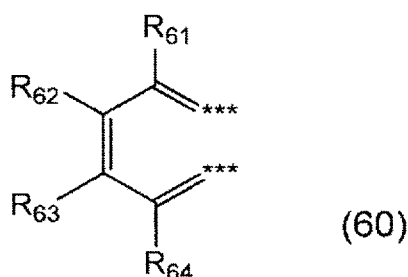
$R_{51}$ 及び $R_{52}$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

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、又は  
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基である。

$R_{51}$  及び  $R_{52}$  は、互いに結合して環を形成しない。

$R_{53} \sim R_{60}$  のうちの隣接する 2 つの 1 組以上が、互いに結合して下記式 (60) で表される不飽和の環を形成するか、あるいは下記式 (60) で表される不飽和の環を形成しない。

[0322] [化162]



[0323] 式 (60) 中、\*\*は、 $R_{53} \sim R_{60}$  のうちの隣接する 2 つとの結合位置である。

$R_{53} \sim R_{60}$  のうちの隣接する 2 つの 1 組以上が、互いに結合して前記式 (60) で表される不飽和の環を形成する場合、前記式 (60) で表される不飽和の環を形成しない  $R_{53} \sim R_{60}$ 、及び  $R_{61} \sim R_{64}$  のうちの 1 つは  $L_{11}$  又は  $L_{12}$  と結合する単結合である。

前記式 (60) で表される不飽和の環が 2 つ以上形成される場合、複数存在する  $R_{61} \sim R_{64}$  は、互いに同一でも、異なってもよい。

$R_{53} \sim R_{60}$  のうちの隣接する 2 つの 1 組以上が、互いに結合して前記式 (60) で表される不飽和の環を形成しない場合、 $R_{53} \sim R_{60}$  のうちの 1 つは  $L_{11}$  又は  $L_{12}$  と結合する単結合である。

前記式 (60) で表される不飽和の環を形成する場合、及び前記式 (60) で表される不飽和の環を形成しない場合において、前記式 (60) で表される不飽和の環を形成せず、かつ  $L_{11}$  又は  $L_{12}$  と結合する単結合ではない  $R_5$

$_3 \sim R_{60}$ のうちの隣接する2つの1組以上は、互いに結合して、前記式(60)で表される不飽和の環以外の、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成するか、又は置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

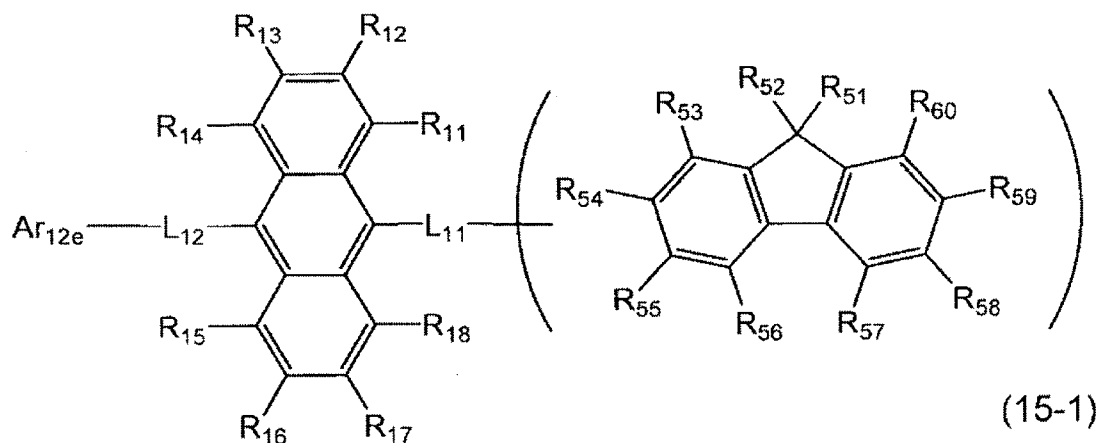
前記式(60)で表される不飽和の環を形成せず、前記式(60)で表される不飽和の環以外の置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成せず、かつ $L_{11}$ 又は $L_{12}$ と結合する単結合ではない $R_{53} \sim R_{60}$ 、及び $L_{11}$ 又は $L_{12}$ と結合する単結合ではない $R_{61} \sim R_{64}$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、  
 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、  
 $-O-(R_{904})$ 、  
 $-S-(R_{905})$ 、  
 $-N(R_{906})(R_{907})$ 、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、前記式(11)で定義した通りである。]

[0324] 一実施形態においては、前記式(15)で表される化合物が、下記式(15-1)で表される化合物である。

[0325]

[化163]



[0326] (式(15-1)中、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $L_{11}$ 、 $L_{12}$ 及び $R_{51} \sim R_{60}$ は、前記式(15)で定義した通りである。

$Ar_{12e}$ は、前記式(50)で表される1価の基以外の、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。)

[0327] 一実施形態においては、前記式(11)～(15)における $R_{11} \sim R_{18}$ が水素原子である。

一実施形態においては、前記式(11)～(15)における $L_{11}$ 及び $L_{12}$ が、それぞれ独立に、

単結合、

無置換のフェニレン基、

無置換のナフチレン基

無置換のビフェニルジイル基、又は

無置換のターフェニルジイル基である。

[0328] 一実施形態においては、前記第1電子輸送層及び第2電子輸送層のいずれか一方又は両方が、さらにアルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属を含有する有機錯体、アルカリ土類金属を

含有する有機錯体、及び、希土類金属を含有する有機錯体からなる群から選択される１種又は２種以上を含有する。

一実施形態においては、前記第２電子輸送層が、さらにアルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属を含有する有機錯体、アルカリ土類金属を含有する有機錯体、及び、希土類金属を含有する有機錯体からなる群から選択される１種又は２種以上を含有する。

[0329] 一実施形態においては、前記陽極と前記発光層との間に正孔輸送層を有する。

[0330] 以下、本発明の一態様に係る有機ＥＬ素子の層構成について説明する。

本発明の一態様に係る有機ＥＬ素子は、陰極及び陽極からなる１対の電極間に有機層を備えている。有機層は、有機化合物を包含する層を少なくとも１層含む。あるいはまた、有機層は、有機化合物を包含する複数の層が積層されてなる。有機層は、１または複数の有機化合物のみからなる層を有してもよい。有機層は、有機化合物と、無機化合物とを同時に包含する層を有してもよい。有機層は、１または複数の無機化合物のみからなる層を有してもよい。

有機層が包含する層のうちの少なくとも１層が、発光層である。有機層は、例えば、１層の発光層として構成されていてもよく、また、有機ＥＬ素子の層構成で採用され得る他の層を含んでいてもよい。有機ＥＬ素子の層構成で採用され得る層としては、特に限定されるものではないが、例えば、陽極と発光層との間に設けられる正孔輸送帯域（正孔輸送層、正孔注入層、電子阻止層、励起子阻止層等）、発光層、スペース層、陰極と発光層との間に設けられる電子輸送帯域（電子輸送層、電子注入層、正孔阻止層等）等が挙げられる。

[0331] 本発明の一態様に係る有機ＥＬ素子は、例えば、蛍光又は燐光発光型の単色発光素子であってもよく、蛍光／燐光ハイブリッド型の白色発光素子であ

ってもよい。また、単独の発光ユニットを有するシンプル型であってもよく、複数の発光ユニットを有するタンデム型であってもよい。

尚、「発光ユニット」とは、有機層を含み、該有機層のうちの少なくとも1層が発光層であり、注入された正孔と電子が再結合することにより発光する最小単位を言う。

また、本明細書に記載の「発光層」とは、発光機能を有する有機層である。発光層は、例えば、燐光発光層、蛍光発光層等であり、また、1層でも複数層でもよい。

発光ユニットは、燐光発光層や蛍光発光層を複数有する積層型であってもよく、この場合、例えば、燐光発光層で生成された励起子が蛍光発光層に拡散することを防ぐためのスペース層を各発光層の間に有していてもよい。

[0332] シンプル型有機EL素子としては、例えば、陽極／発光ユニット／陰極のような素子構成が挙げられる。

発光ユニットの代表的な層構成を以下に示す。カッコ内の層は任意である。

(a) (正孔注入層／) 正孔輸送層／蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)

(b) (正孔注入層／) 正孔輸送層／燐光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)

(c) (正孔注入層／) 正孔輸送層／第1 蛍光発光層／第2 蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)

(d) (正孔注入層／) 正孔輸送層／第1 燐光発光層／第2 燐光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)

(e) (正孔注入層／) 正孔輸送層／燐光発光層／スペース層／蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)

(f) (正孔注入層／) 正孔輸送層／第1 燐光発光層／第2 燐光発光層／スペース層／蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)

(g) (正孔注入層／) 正孔輸送層／第1 燐光発光層／スペース層／第2 燐

光発光層／スペース層／蛍光発光層（／電子輸送層／電子注入層）

（h）（正孔注入層／）正孔輸送層／燐光発光層／スペース層／第1蛍光発光層／第2蛍光発光層（／電子輸送層／電子注入層）

（i）（正孔注入層／）正孔輸送層／電子阻止層／蛍光発光層（／電子輸送層／電子注入層）

（j）（正孔注入層／）正孔輸送層／電子阻止層／燐光発光層（／電子輸送層／電子注入層）

（k）（正孔注入層／）正孔輸送層／励起子阻止層／蛍光発光層（／電子輸送層／電子注入層）

（l）（正孔注入層／）正孔輸送層／励起子阻止層／燐光発光層（／電子輸送層／電子注入層）

（m）（正孔注入層／）第1正孔輸送層／第2正孔輸送層／蛍光発光層（／電子輸送層／電子注入層）

（n）（正孔注入層／）第1正孔輸送層／第2正孔輸送層／蛍光発光層（／第1電子輸送層／第2電子輸送層／電子注入層）

（o）（正孔注入層／）第1正孔輸送層／第2正孔輸送層／燐光発光層（／電子輸送層／電子注入層）

（p）（正孔注入層／）第1正孔輸送層／第2正孔輸送層／燐光発光層（／第1電子輸送層／第2電子輸送層／電子注入層）

（q）（正孔注入層／）正孔輸送層／蛍光発光層／正孔阻止層（／電子輸送層／電子注入層）

（r）（正孔注入層／）正孔輸送層／燐光発光層／正孔阻止層（／電子輸送層／電子注入層）

（s）（正孔注入層／）正孔輸送層／蛍光発光層／励起子阻止層（／電子輸送層／電子注入層）

（t）（正孔注入層／）正孔輸送層／燐光発光層／励起子阻止層（／電子輸送層／電子注入層）

[0333] ただし、本発明の一態様に係る有機EL素子の層構成は、これらに限定さ

れるものではない。例えば、有機EL素子が、正孔注入層及び正孔輸送層を有する場合には、正孔輸送層と陽極との間に正孔注入層が設けられていることが好ましい。また、有機EL素子が、電子注入層及び電子輸送層を有する場合には、電子輸送層と陰極との間に電子注入層が設けられていることが好ましい。また、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層、及び電子注入層のそれぞれは、1層で構成されていてもよく、複数の層で構成されていてもよい。

[0334] 複数の燐光発光層、及び、燐光発光層と蛍光発光層は、それぞれ互いに異なる色の発光層であってもよい。例えば、前記発光ユニット（f）は、正孔輸送層／第1燐光発光層（赤色発光）／第2燐光発光層（緑色発光）／スペース層／蛍光発光層（青色発光）／電子輸送層とすることもできる。

尚、各発光層と、正孔輸送層又はスペース層との間に、電子阻止層を設けてもよい。また、各発光層と電子輸送層との間に、正孔阻止層を設けてもよい。電子阻止層や正孔阻止層を設けることにより、電子又は正孔を発光層内に閉じ込めて、発光層における電荷の再結合確率を高め、発光効率を向上させることができる。

[0335] タンデム型有機EL素子の代表的な素子構成としては、例えば、陽極／第1発光ユニット／中間層／第2発光ユニット／陰極のような素子構成が挙げられる。

第1発光ユニット及び第2発光ユニットは、例えば、それぞれ独立に、上述した発光ユニットから選択することができる。

中間層は、一般的に、中間電極、中間導電層、電荷発生層、電子引抜層、接続層、コネクタ層、又は中間絶縁層とも呼ばれる。中間層は、第1発光ユニットに電子を、第2発光ユニットに正孔を供給する層であり、公知の材料により形成することができる。

[0336] 以下、本明細書に記載の有機EL素子の各層の機能や材料等について説明する。

[0337] （基板）

基板は、有機EL素子の支持体として用いられる。基板は、波長400～700nmの可視光領域の光の透過率が50%以上であることが好ましく、また、平滑な基板が好ましい。基板の材料としては、例えば、ソーダライムガラス、アルミノシリケートガラス、石英ガラス、プラスチック等が挙げられる。また、基板として、可撓性基板を用いることができる。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブルな）基板を指し、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の具体例としては、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、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。

[0338] （陽極）

陽極としては、例えば、金属、合金、導電性化合物、及びこれらの混合物等であって、仕事関数の大きい（具体的には、4.0eV以上）ものを用いることが好ましい。陽極の材料の具体例としては、酸化インジウム－酸化スズ（ITO: Indium Tin Oxide）、ケイ素もしくは酸化ケイ素を含有する酸化インジウム－酸化スズ、酸化インジウム－酸化亜鉛、酸化タングステン、又は酸化亜鉛を含有する酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。また、金、銀、白金、ニッケル、タングステン、クロム、モリブデン、鉄、コバルト、銅、パラジウム、チタン、及びこれらの金属の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

[0339] 陽極は、通常、これらの材料をスパッタリング法により基板上に成膜することにより形成される。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て1～10質量%の酸化亜鉛を添加したターゲットを用いて、スパッタリング法により形成することができる。また、例えば、酸化タングステン、又は酸化亜鉛を含有する酸化インジウムは、酸化インジウムに対して酸化タングステンを0.5～5質量%、又は酸化亜鉛を0.1～1質量%添加したターゲットを用いて、スパッタリング法により形成することができる。

。

陽極の他の形成方法としては、例えば、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、スピコート法等が挙げられる。例えば、銀ペースト等を用いる場合は、塗布法やインクジェット法等を用いることができる。

[0340] 尚、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注入が容易である材料を用いて形成される。このため、陽極には、一般的な電極材料、例えば、金属、合金、導電性化合物、これらの混合物を用いることができる。具体的には、リチウム、セシウム等のアルカリ金属；マグネシウム；カルシウム、ストロンチウム等のアルカリ土類金属；これらの金属を含む合金（例えば、マグネシウム－銀、アルミニウム－リチウム）；ユーロピウム、イッテルビウム等の希土類金属；希土類金属を含む合金等の仕事関数の小さい材料を陽極に用いることもできる。

[0341] （正孔注入層）

正孔注入層は、正孔注入性の高い物質を含む層であり、陽極から有機層に正孔を注入する機能を有する。正孔注入性の高い物質としては、例えば、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、マンガン酸化物、芳香族アミン化合物、電子吸引性（アクセプター性）の化合物、高分子化合物（オリゴマー、 dendrimer、ポリマー等）等が挙げられる。これらの中でも、芳香族アミン化合物、アクセプター性の化合物が好ましく、より好ましくはアクセプター性の化合物である。

[0342] 芳香族アミン化合物の具体例としては、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'〕

ーフェニルアミノ] フェニル}ーNーフェニルアミノ) ビフェニル (略称: DNTPD)、1, 3, 5ートリス [Nー (4ージフェニルアミノフェニル)ーNーフェニルアミノ] ベンゼン (略称: DPAB)、3ー [Nー (9ーフェニルカルバゾールー3ーイル)ーNーフェニルアミノ]ー9ーフェニルカルバゾール (略称: PCzPCA1)、3, 6ービス [Nー (9ーフェニルカルバゾールー3ーイル)ーNーフェニルアミノ]ー9ーフェニルカルバゾール (略称: PCzPCA2)、3ー [Nー (1ーナフチル)ーNー (9ーフェニルカルバゾールー3ーイル) アミノ]ー9ーフェニルカルバゾール (略称: PCzPCN1) 等が挙げられる。

[0343] アクセプター性の化合物としては、例えば、電子吸引基を有する複素環誘導体、電子吸引基を有するキノン誘導体、アリールボラン誘導体、ヘテロアリールボラン誘導体等が好ましく、具体例としては、ヘキサシアノヘキサザトリフェニレン、2, 3, 5, 6ーテトラフルオロー7, 7, 8, 8ーテトラシアノキノジメタン (略称: F4TCNQ)、1, 2, 3ートリス [(シアノ) (4ーシアノー2, 3, 5, 6ーテトラフルオロフェニル) メチレン] シクロプロパン等が挙げられる。

アクセプター性の化合物を用いる場合、正孔注入層は、さらにマトリックス材料を含むことが好ましい。マトリックス材料としては、有機EL素子用の材料として公知の材料を用いることができ、例えば、電子供与性 (ドナー性) の化合物を用いることが好ましい。

[0344] (正孔輸送層)

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い物質を含む層であり、陽極から有機層に正孔を輸送する機能を有する。

[0345] 正孔輸送性の高い物質としては、 $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$  以上の正孔移動度を有する物質であることが好ましく、例えば、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、高分子化合物等が挙げられる。

[0346] 芳香族アミン化合物の具体例としては、4, 4'ービス [Nー (1ーナフチル)ーNーフェニルアミノ] ビフェニル (略称: NPB)、N, N'ービ

ス（３－メチルフェニル）－N，N’－ジフェニル－[1，1’－ビフェニル]－4，4’－ジアミン（略称：TPD）、4－フェニル－4’－（9－フェニルフルオレン－9－イル）トリフェニルアミン（略称：BAFLP）、4，4’－ビス[N－（9，9－ジメチルフルオレン－2－イル）－N－フェニルアミノ]ビフェニル（略称：DFLDPBi）、4，4’，4’’－トリス（N，N－ジフェニルアミノ）トリフェニルアミン（略称：TDATA）、4，4’，4’’－トリス[N－（３－メチルフェニル）－N－フェニルアミノ]トリフェニルアミン（略称：MTDATA）、4，4’－ビス[N－（スピロ－9，9’－ビフルオレン－2－イル）－N－フェニルアミノ]ビフェニル（略称：BSPB）等が挙げられる。

[0347] カルバゾール誘導体の具体例としては、4，4’－ジ（9－カルバゾリル）ビフェニル（略称：CBP）、9－[4－（9－カルバゾリル）フェニル]－10－フェニルアントラセン（略称：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（略称：PCzPA）等が挙げられる。

[0348] アントラセン誘導体の具体例としては、2－t－ブチル－9，10－ジ（2－ナフチル）アントラセン（略称：t－BuDNA）、9，10－ジ（2－ナフチル）アントラセン（略称：DNA）、9，10－ジフェニルアントラセン（略称：DPAnth）等が挙げられる。

[0349] 高分子化合物の具体例としては、ポリ（N－ビニルカルバゾール）（略称：PVK）、及びポリ（4－ビニルトリフェニルアミン）（略称：PVTPA）等が挙げられる。

[0350] 電子輸送性よりも正孔輸送性の方が高い化合物であれば、正孔輸送層に、これら以外の物質を用いてもよい。

[0351] 正孔輸送層は、単層でもよく、2層以上が積層されていてもよい。この場合、発光層に近い側に、正孔輸送性の高い物質のうち、エネルギーギャップのより大きい物質を含む層を配置することが好ましい。

[0352] （発光層）

発光層は、発光性の高い物質（ドーパント材料）を含む層である。ドーパント材料としては、種々の材料を用いることができ、例えば、蛍光発光性化合物（蛍光ドーパント）、燐光発光性化合物（燐光ドーパント）等を用いることができる。蛍光発光性化合物とは、一重項励起状態から発光可能な化合物であり、これを含む発光層は蛍光発光層と呼ばれる。また、燐光発光性化合物とは、三重項励起状態から発光可能な化合物であり、これを含む発光層は、燐光発光層と呼ばれる。

[0353] 発光層は、通常、ドーパント材料、及びこれを効率よく発光させるためのホスト材料を含有する。尚、ドーパント材料は、文献によっては、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。また、ホスト材料は、文献によっては、マトリックス材料と称する場合もある。

1つの発光層に、複数のドーパント材料、及び複数のホスト材料を含んでもよい。また、発光層が複数であってもよい。

[0354] 本明細書では、蛍光ドーパントと組み合わせられたホスト材料を、「蛍光ホスト」と称し、燐光ドーパントと組み合わせられたホスト材料を「燐光ホスト」と称する。尚、蛍光ホストと燐光ホストとは、分子構造のみで区分されるものではない。燐光ホストとは、燐光ドーパントを含有する燐光発光層を形成する材料であるが、蛍光発光層を形成する材料として利用できないことを意味するものではない。蛍光ホストについても同様である。

[0355] 発光層におけるドーパント材料の含有量は、特に限定されるものではないが、十分な発光及び濃度消光の観点から、例えば、0.1～70質量%であることが好ましく、より好ましくは0.1～30質量%、さらに好ましくは1～30質量%、よりさらに好ましくは1～20質量%、特に好ましくは1～10質量%である。

[0356] <蛍光ドーパント>

蛍光ドーパントとしては、例えば、縮合多環芳香族誘導体、スチリルアミン誘導体、縮合環アミン誘導体、ハウ素含有化合物、ピロール誘導体、インドール誘導体、カルバゾール誘導体等が挙げられる。これらの中でも、縮合

環アミン誘導体、ホウ素含有化合物、カルバゾール誘導体が好ましい。

縮合環アミン誘導体としては、例えば、ジアミノピレン誘導体、ジアミノクリセン誘導体、ジアミノアントラセン誘導体、ジアミノフルオレン誘導体、ベンゾフロ骨格が1つ以上縮環したジアミノフルオレン誘導体等が挙げられる。

ホウ素含有化合物としては、例えば、ピロメテン誘導体、トリフェニルボラン誘導体等が挙げられる。

[0357] 青色系の蛍光ドーパントとしては、例えば、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、トリアリールアミン誘導体等が挙げられる。具体的には、N, N'-ビス[4-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル]-N, N'-ジフェニルスチルベン-4, 4'-ジアミン(略称: YGA2S)、4-(9H-カルバゾール-9-イル)-4'-(10-フェニル-9-アントリル)トリフェニルアミン(略称: YGAPA)、4-(10-フェニル-9-アントリル)-4'-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)トリフェニルアミン(略称: PCBAPA)等が挙げられる。

[0358] 緑色系の蛍光ドーパントとしては、例えば、芳香族アミン誘導体等が挙げられる。具体的には、N-(9, 10-ジフェニル-2-アントリル)-N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン(略称: 2PCAPA)、N-[9, 10-ビス(1, 1'-ビフェニル-2-イル)-2-アントリル]-N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン(略称: 2PCABPhA)、N-(9, 10-ジフェニル-2-アントリル)-N, N', N'-トリフェニル-1, 4-フェニレンジアミン(略称: 2DPAPA)、N-[9, 10-ビス(1, 1'-ビフェニル-2-イル)-2-アントリル]-N, N', N'-トリフェニル-1, 4-フェニレンジアミン(略称: 2DPABPhA)、N-[9, 10-ビス(1, 1'-ビフェニル-2-イル)]-N-[4-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル]-N-フェニルアントラセン-2-アミン(略称: 2YGABPhA)

）、N，N，9-トリフェニルアントラセン-9-アミン（略称：DP h A P h A）等が挙げられる。

[0359] 赤色系の蛍光ドーパントとしては、テトラセン誘導体、ジアミン誘導体等が挙げられる。具体的には、N，N，N'，N'-テトラキス（4-メチルフェニル）テトラセン-5，11-ジアミン（略称：p-m P h T D）、7，14-ジフェニル-N，N，N'，N'-テトラキス（4-メチルフェニル）アセナフト[1，2-a]フルオランテン-3，10-ジアミン（略称：p-m P h A F D）等が挙げられる。

[0360] <燐光ドーパント>

燐光ドーパントとしては、例えば、燐光発光性の重金属錯体、燐光発光性の希土類金属錯体が挙げられる。

重金属錯体としては、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等が挙げられる。重金属錯体は、イリジウム、オスミウム、及び白金から選択される金属のオルトメタル化錯体が好ましい。

希土類金属錯体としては、例えば、テルビウム錯体、ユーロピウム錯体等が挙げられる。具体的には、トリス（アセチルアセトナート）（モノフェナントロリン）テルビウム（III）（略称：T b（a c a c）<sub>3</sub>（P h e n））、トリス（1，3-ジフェニル-1，3-プロパンジオナート）（モノフェナントロリン）ユーロピウム（III）（略称：E u（D B M）<sub>3</sub>（P h e n））、トリス[1-（2-テノイル）-3，3，3-トリフルオロアセトナート]（モノフェナントロリン）ユーロピウム（III）（略称：E u（T T A）<sub>3</sub>（P h e n））等が挙げられる。これらの希土類金属錯体は、異なる多重度間の電子遷移により、希土類金属イオンが発光するため、燐光ドーパントとして好ましい。

[0361] 青色系の燐光ドーパントとしては、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等が挙げられる。具体的には、ビス[2-（4'，6'-ジフルオロフェニル）ピリジナート-N，C 2' ]イリジウム（III）テトラキス（1-ピラゾリル）ボラート（略称：F l r 6）、ビス[2-（4'，6'

ージフルオロフェニル) ピリジナト-N, C 2' ] イリジウム (III) ピコリナート (略称: F l r p i c)、ビス [2- (3', 5'-ビストリフルオロメチルフェニル) ピリジナト-N, C 2' ] イリジウム (III) ピコリナート (略称: l r (C F 3 p p y) <sub>2</sub> (p i c))、ビス [2- (4', 6'-ジフルオロフェニル) ピリジナト-N, C 2' ] イリジウム (III) アセチルアセトナート (略称: F l r a c a c) 等が挙げられる。

[0362] 緑色系の燐光ドーパントとしては、例えば、イリジウム錯体等が挙げられる。具体的には、トリス (2-フェニルピリジナト-N, C 2' ) イリジウム (III) (略称: l r (p p y) <sub>3</sub>)、ビス (2-フェニルピリジナト-N, C 2' ) イリジウム (III) アセチルアセトナート (略称: l r (p p y) <sub>2</sub> (a c a c))、ビス (1, 2-ジフェニル-1H-ベンゾイミダゾラト) イリジウム (III) アセチルアセトナート (略称: l r (p b i) <sub>2</sub> (a c a c))、ビス (ベンゾ [h] キノリナト) イリジウム (III) アセチルアセトナート (略称: l r (b z q) <sub>2</sub> (a c a c)) 等が挙げられる。

[0363] 赤色系の燐光ドーパントとしては、例えば、イリジウム錯体、白金錯体、テルビウム錯体、ユーロピウム錯体等が挙げられる。具体的には、ビス [2- (2'-ベンゾ [4, 5-α] チエニル) ピリジナト-N, C 3' ] イリジウム (III) アセチルアセトナート (略称: l r (b t p) <sub>2</sub> (a c a c))、ビス (1-フェニルイソキノリナト-N, C 2' ) イリジウム (III) アセチルアセトナート (略称: l r (p i q) <sub>2</sub> (a c a c))、(アセチルアセトナート) ビス [2, 3-ビス (4-フルオロフェニル) キノキサリナト] イリジウム (III) (略称: l r (F d p q) <sub>2</sub> (a c a c))、2, 3, 7, 8, 12, 13, 17, 18-オクタエチル-21H, 23H-ポルフィリン白金 (II) (略称: P t O E P) 等が挙げられる。

[0364] <ホスト材料>

ホスト材料としては、例えば、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；インドール誘導体、ピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、トリアジン誘導体、キノリン誘導体、イソキノリン誘導体、キナゾリン誘

導体、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフェン誘導体、オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素環化合物；ナフタレン誘導体、トリフェニレン誘導体、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、クリセン誘導体、ナフタセン誘導体、フルオランテン誘導体等の縮合芳香族化合物；トリアリールアミン誘導体、縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族アミン化合物等が挙げられる。ホスト材料は、複数種を併用してもよい。

[0365] 金属錯体の具体例としては、トリス（８－キノリノラト）アルミニウム（II）（略称：A l q）、トリス（４－メチル－８－キノリノラト）アルミニウム（III）（略称：A l m q 3）、ビス（１０－ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト）ベリリウム（II）（略称：B e B q 2）、ビス（２－メチル－８－キノリノラト）（４－フェニルフェノラト）アルミニウム（III）（略称：B A l q）、ビス（８－キノリノラト）亜鉛（II）（略称：Z n q）、ビス〔２－（２－ベンゾオキサゾリル）フェノラト〕亜鉛（II）（略称：Z n P B O）、ビス〔２－（２－ベンゾチアゾリル）フェノラト〕亜鉛（II）（略称：Z n B T Z）等が挙げられる。

[0366] 複素環化合物の具体例としては、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：P B D）、１，３－ビス〔５－（p－tert－ブチルフェニル）－１，３，４－オキサジアゾール－２－イル〕ベンゼン（略称：O X D－７）、３－（４－ビフェニリル）－４－フェニル－５－（４－tert－ブチルフェニル）－１，２，４－トリアゾール（略称：T A Z）、２，２′，２′′－（１，３，５－ベンゼントリイル）トリス（１－フェニル－１H－ベンゾイミダゾール）（略称：T P B I）、バソフェナントロリン（略称：B P h e n）、バソキュプロイン（略称：B C P）等が挙げられる。

[0367] 縮合芳香族化合物の具体例としては、９－〔４－（１０－フェニル－９－アントリル）フェニル〕－９H－カルバゾール（略称：C z P A）、３，６－ジフェニル－９－〔４－（１０－フェニル－９－アントリル）フェニル〕

ー9H-カルバゾール（略称：DPCzPA）、9, 10-ビス（3, 5-ジフェニルフェニル）アントラセン（略称：DPPA）、9, 10-ジ（2-ナフチル）アントラセン（略称：DNA）、2-tert-ブチル-9, 10-ジ（2-ナフチル）アントラセン（略称：t-BuDNA）、9, 9'-ビアントリル（略称：BANT）、9, 9'-（スチルベン-3, 3'-ジイル）ジフェナントレン（略称：DPNS）、9, 9'-（スチルベン-4, 4'-ジイル）ジフェナントレン（略称：DPNS2）、3, 3', 3''-（ベンゼン-1, 3, 5-トリイル）トリピレン（略称：TPB3）、9, 10-ジフェニルアントラセン（略称：DPAnth）、6, 12-ジメトキシ-5, 11-ジフェニルクリセン等が挙げられる。

[0368] 芳香族アミン化合物の具体例としては、N, N-ジフェニル-9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：CzA1PA）、4-(10-フェニル-9-アントリル)トリフェニルアミン（略称：DPPhPA）、N, 9-ジフェニル-N-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：PCAPPA）、N, 9-ジフェニル-N-{4-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]フェニル}-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：PCAPBA）、N-(9, 10-ジフェニル-2-アントリル)-N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：2PCAPPA）、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または $\alpha$ -NPD）、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, 4'-ビス[N-(9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル（略称：DFLDPBi）、4, 4'-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）等が挙げられる。

[0369] 蛍光ホストとしては、蛍光ドーパントよりも高い一重項準位を有する化合

物が好ましく、例えば、複素環化合物、縮合芳香族化合物等が挙げられる。縮合芳香族化合物としては、例えば、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、クリセン誘導体、ナфтаセン誘導体等が好ましい。

[0370] 燐光ホストとしては、燐光ドーパントよりも高い三重項準位を有する化合物が好ましく、例えば、金属錯体、複素環化合物、縮合芳香族化合物等が挙げられる。これらの中でも、例えば、インドール誘導体、カルバゾール誘導体、ピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、トリアジン誘導体、キノリン誘導体、イソキノリン誘導体、キナゾリン誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフエン誘導体、ナфтаレン誘導体、トリフェニレン誘導体、フェナントレン誘導体、フルオランテン誘導体等が好ましい。

[0371] (電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送性の高い物質としては、 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上の電子移動度を有する物質であることが好ましく、例えば、上記式(A1)で表される化合物や、金属錯体、芳香族複素環化合物、芳香族炭化水素化合物、高分子化合物等が挙げられる。

[0372] 金属錯体としては、例えば、アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等が挙げられる。具体的には、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム(III)(略称: 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)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(4-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)(略称: BAAlq)、ビス(8-キノリノラト)亜鉛(II)(略称: Znq)、ビス[2-(2-ベンゾオキサゾリル)フェノラト]亜鉛(II)(略称: ZnPBO)、ビス[2-(2-ベンゾチアゾリル)フェノラト]亜鉛(II)(略称: ZnBTZ)等が挙げられる。

[0373] 芳香族複素環化合物としては、例えば、ベンズイミダゾール誘導体、イミダゾピリジン誘導体、ベンズイミダゾフェナントリジン誘導体等のイミダゾール誘導体；ピリミジン誘導体、トリアジン誘導体等のアジン誘導体；キノ

リン誘導体、イソキノリン誘導体、フェナントロリン誘導体等の含窒素六員環構造を含む化合物（複素環にホスフィンオキサイド系の置換基を有するものも含む。）等が挙げられる。具体的には、2-(4-ビフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール（略称：PBD）、1,3-ビス[5-(tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン（略称：OXD-7）、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール（略称：TAZ）、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-(4-エチルフェニル)-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール（略称：p-EtTAZ）、バソフェナントロリン（略称：BPhen）、バソキュプロイン（略称：BCP）、4,4'-ビス(5-メチルベンゾオキサゾール-2-イル)スチルベン（略称：BzOs）等が挙げられる。

[0374] 芳香族炭化水素化合物としては、例えば、アントラセン誘導体、フルオランテン誘導体等が挙げられる。

[0375] 高分子化合物の具体例としては、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）等が挙げられる。

[0376] 正孔輸送性よりも電子輸送性の方が高い化合物であれば、電子輸送層に、これら以外の物質を用いてもよい。

[0377] 電子輸送層は、単層でもよく、2層以上が積層されていてもよい。この場合、発光層に近い側に、電子輸送性の高い物質のうち、エネルギーギャップのより大きい物質を含む層を配置することが好ましい。

[0378] 電子輸送層には、例えば、アルカリ金属、マグネシウム、アルカリ土類金属、これらのうちの2以上の金属を含む合金等の金属；8-キノリノラトリウム（略称：Li q）等のアルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物

等の金属化合物が含まれていてもよい。アルカリ金属、マグネシウム、アルカリ土類金属、又はこれらのうちの2以上の金属を含む合金等の金属が、電子輸送層に含まれる場合、その含有量は、特に限定されるものではないが、0.1～50質量%であることが好ましく、より好ましくは0.1～20質量%、さらに好ましくは1～10質量%である。

アルカリ金属化合物、又はアルカリ土類金属化合物等の金属化合物の金属化合物が電子輸送層に含まれる場合、その含有量は、1～99質量%であることが好ましく、より好ましくは10～90質量%である。尚、電子輸送層が複数層である場合の発光層側にある層は、これらの金属化合物のみで形成することもできる。

[0379] (電子注入層)

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層であり、陰極から発光層へ効率よく電子注入する機能を有する。電子注入性の高い物質としては、例えば、アルカリ金属、マグネシウム、アルカリ土類金属、これらの化合物等が挙げられる。具体的には、リチウム、セシウム、カルシウム、フッ化リチウム、フッ化セシウム、フッ化カルシウム、リチウム酸化物等が挙げられる。その他、電子輸送性を有する物質に、アルカリ金属、マグネシウム、アルカリ土類金属、又はこれらの化合物を含有させたもの、例えば、Alqにマグネシウムを含有させたもの等を用いることもできる。

[0380] また、電子注入層には、有機化合物及びドナー性の化合物を含む複合材料を用いることもできる。有機化合物がドナー性の化合物から電子を受け取るため、このような複合材料は電子注入性及び電子輸送性に優れている。

有機化合物としては、受け取った電子の輸送性に優れた物質が好ましく、例えば、上述した電子輸送性の高い物質である金属錯体や芳香族複素環化合物等を用いることができる。

ドナー性の化合物としては、有機化合物に電子を供与することができる物質であればよく、例えば、アルカリ金属、マグネシウム、アルカリ土類金属、希土類金属等が挙げられる。具体的には、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、具体的には、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、テトラシアフルバレン（略称：TTF）等の有機化合物を用いることもできる。

[0381] （陰極）

陰極は、金属、合金、導電性化合物、及びこれらの混合物等であって、仕事関数の小さい（具体的には、 $3.8\text{ eV}$ 以下）ものを用いることが好ましい。陰極の材料としては、例えば、リチウム、セシウム等のアルカリ金属；マグネシウム；カルシウム、ストロンチウム等のアルカリ土類金属；これらの金属を含む合金（例えば、マグネシウム－銀、アルミニウム－リチウム）；ユーロピウム、イッテルビウム等の希土類金属；希土類金属を含む合金等が挙げられる。

陰極は、通常、真空蒸着法やスパッタリング法で形成される。また、銀ペースト等を用いる場合は、塗布法やインクジェット法等を用いることができる。

[0382] また、電子注入層が設けられる場合、仕事関数の大小に関わらず、アルミニウム、銀、ITO、グラフェン、ケイ素もしくは酸化ケイ素を含有する酸化インジウム－酸化スズ等、種々の導電性材料を用いて陰極を形成することができる。これらの導電性材料は、スパッタリング法やインクジェット法、スピコート法等を用いて成膜することができる。

[0383] （絶縁層）

有機EL素子は、薄膜に電界を印加するため、リークやショートによる画素欠陥が生じやすい。これを防止するために、一対の電極間に薄膜絶縁層を挿入してもよい。

絶縁層に用いられる物質の具体例としては、酸化アルミニウム、フッ化リチウム、酸化リチウム、フッ化セシウム、酸化セシウム、酸化マグネシウム、フッ化マグネシウム、酸化カルシウム、フッ化カルシウム、窒化アルミニ

ウム、酸化チタン、酸化ケイ素、酸化ゲルマニウム、窒化ケイ素、窒化ホウ素、酸化モリブデン、酸化ルテニウム、酸化バナジウム等が挙げられる。絶縁層には、これらの混合物を用いることもでき、また、これらの物質を含む複数の層の積層体とすることもできる。

[0384] (スペース層)

スペース層は、例えば、蛍光発光層と燐光発光層とを積層する場合に、燐光発光層で生成する励起子の蛍光発光層への拡散の防止や、キャリアバランスの調整のために、両層間に設けられる。スペース層は、複数の燐光発光層の間等に設けることもできる。

スペース層は、複数の発光層間に設けられるため、電子輸送性及び正孔輸送性を兼ね備えた物質で形成することが好ましい。また、隣接する燐光発光層内の三重項エネルギーの拡散を防止する観点から、三重項エネルギーが2.6 eV以上であることが好ましい。

スペース層に用いられる物質としては、上述した正孔輸送層に用いられる物質と同様のものが挙げられる。

[0385] (電子阻止層、正孔阻止層、励起子阻止層)

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

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

[0386] (キャッピング層)

有機EL素子は、取り出される光の強度を光干渉効果により調節するため、陰極の上部にキャッピング層を備えることができる。

キャッピング層としては、例えば、高分子化合物、金属酸化物、金属フッ化物、金属ホウ化物、窒化ケイ素、及びシリコン化合物（酸化ケイ素等）等

を用いることができる。

また、芳香族アミン誘導体、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、フルオレン誘導体、又はジベンゾフラン誘導体をキャッピング層に用いることもできる。

また、これらの物質を含む層を積層させた積層体も、キャッピング層として用いることができる。

[0387] (中間層)

タンデム型有機EL素子では、中間層が設けられる。

[0388] (層形成方法)

有機EL素子の各層の形成方法は、別途の記載がない限り、特に限定されるものではない。形成方法としては、乾式成膜法、湿式成膜法等の公知の方法を用いることができる。乾式成膜法の具体例としては、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等が挙げられる。湿式成膜法の具体例としては、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、インクジェット法等の各種塗布法が挙げられる。

[0389] (膜厚)

有機EL素子の各層の膜厚は、別途の記載がない限り、特に限定されるものではない。膜厚が小さすぎると、ピンホール等の欠陥が生じやすく、十分な発光輝度が得られない。一方、膜厚が大きすぎると、高い駆動電圧が必要となり、効率が低下する。このような観点から、膜厚は、通常、 $1\text{ nm} \sim 10\text{ }\mu\text{ m}$ が好ましく、より好ましくは $1\text{ nm} \sim 0.2\text{ }\mu\text{ m}$ である。

[0390] [電子機器]

本発明の一態様に係る電子機器は、上述した本発明の一態様に係る有機EL素子を備えている。電子機器の具体例としては、有機ELパネルモジュール等の表示部品；テレビ、携帯電話、スマートフォン、パーソナルコンピュータ等の表示装置；照明、車両用灯具の発光装置等が挙げられる。

## 実施例

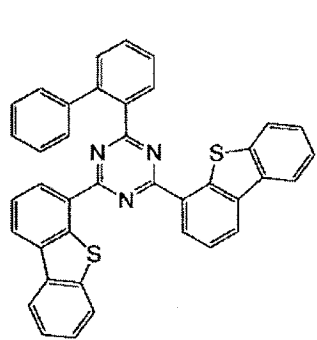
[0391] 次に、実施例及び比較例を挙げて本発明をさらに詳しく説明するが、本発

明はこれらの実施例の記載内容に何ら制限されるものではない。

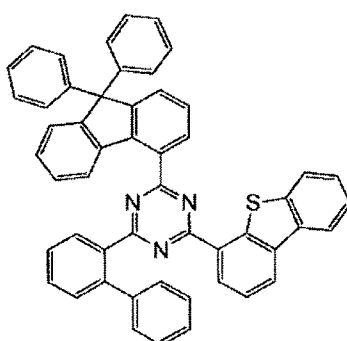
[0392] <化合物>

実施例1～13の有機EL素子の製造に用いた、式(1)又は式(A1)で表される化合物を以下に示す。

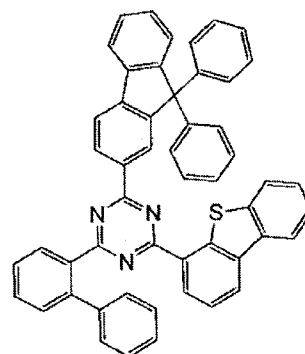
[0393] [化164]



ET-1

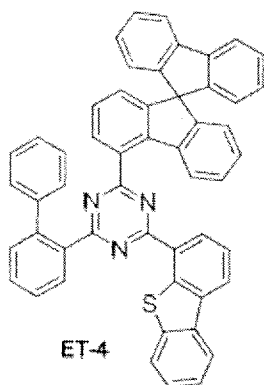


ET-2

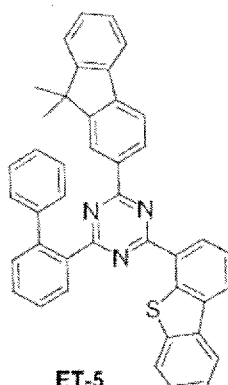


ET-3

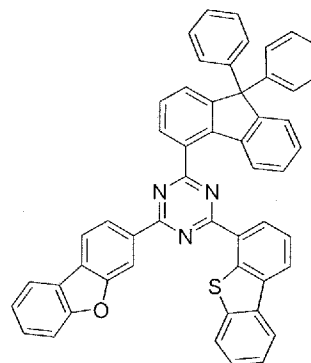
[0394] [化165]



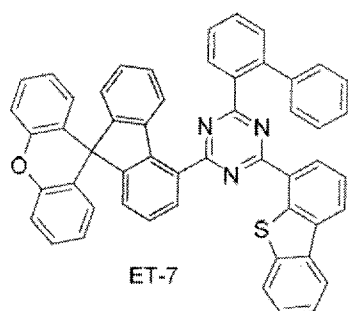
ET-4



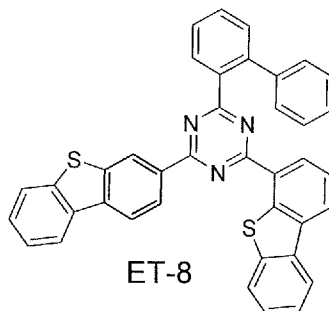
ET-5



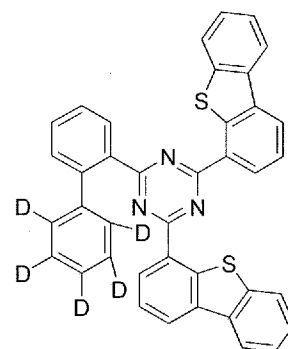
ET-6



ET-7

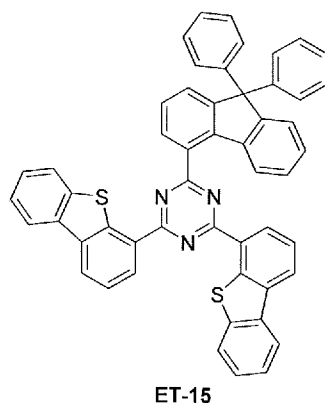
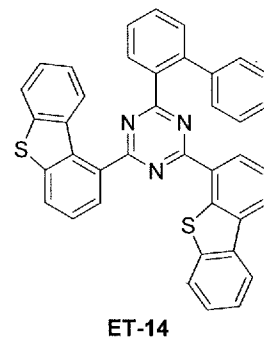
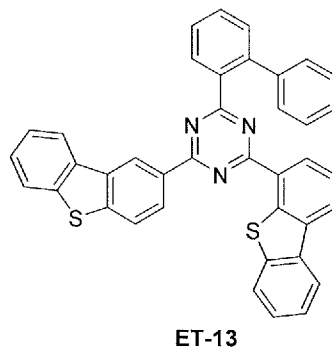
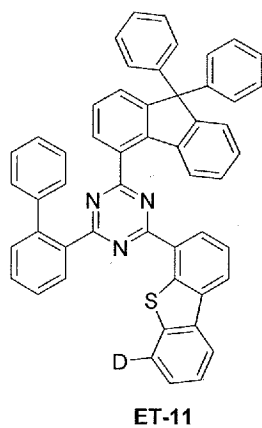


ET-8



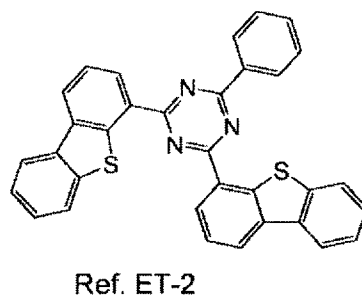
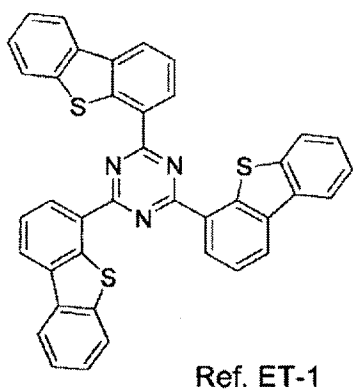
ET-10

[0395] [化166]



[0396] 比較例 1 の有機 EL 素子の製造に用いた化合物を以下に示す。

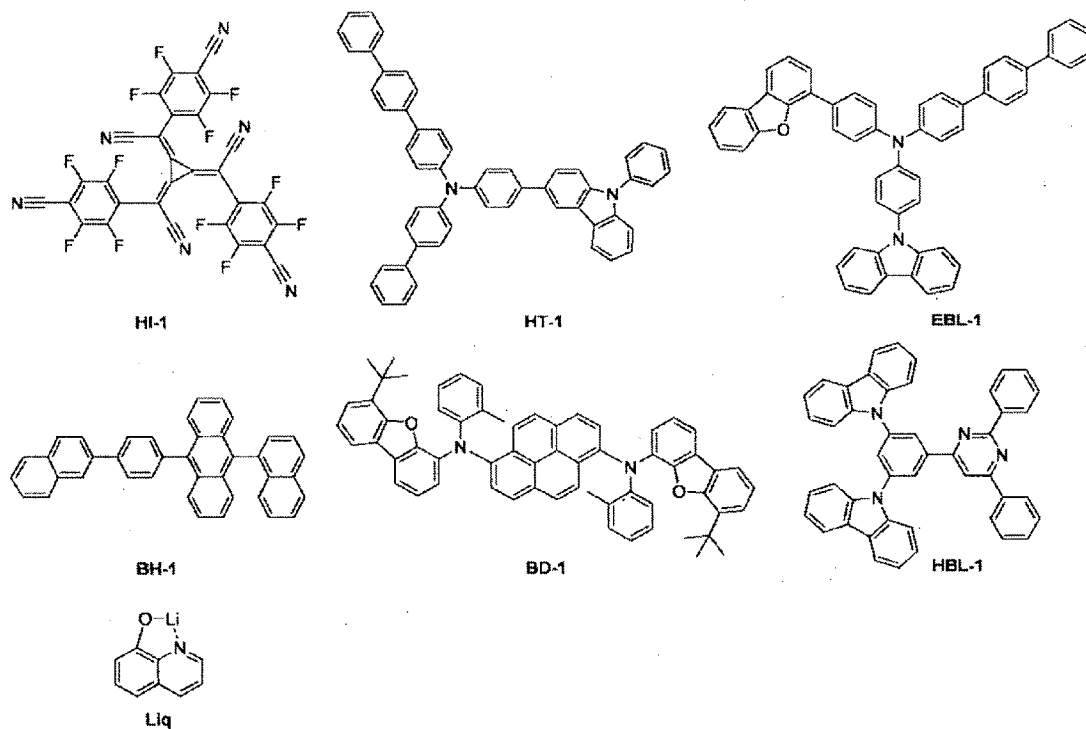
[0397] [化167]



[0398] 実施例 1 ～ 3 及び比較例 1 の有機 EL 素子の製造に用いた、他の化合物を以下に示す。

[0399]

[化168]



## [0400] &lt;化合物のアフィニティ値の算出&gt;

下記実施例及び比較例で用いた、下記表 1 に示す化合物の化学構造式について、量子化学計算プログラム (Gaussian 09, Revision E (Gaussian Inc.)) ; 計算手法 : B3LYP/6-31G\* (理論にはB3LYP、基底関数に6-31G\*を使用したことを意味する)) を用いて、電子親和力 (アフィニティ値 :  $A_f$ ) を算出した。結果を表 1 及び下記表 2 に示す。

[0401]

[表1]

| 化合物       | Af (eV) |
|-----------|---------|
| ET-1      | 1.93    |
| ET-2      | 1.86    |
| ET-3      | 1.91    |
| ET-4      | 1.87    |
| ET-5      | 1.90    |
| ET-7      | 1.93    |
| ET-10     | 1.93    |
| ET-11     | 1.86    |
| ET-13     | 1.90    |
| ET-14     | 1.93    |
| Ref. ET-1 | 2.00    |
| Ref. ET-2 | 1.98    |

## [0402] &lt;有機EL素子の作製&gt;

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

## [0403] (実施例1)

25mm×75mm×1.1mm厚のITO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の膜厚は、130nmとした。

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

[0404] 次に、正孔注入層上に、化合物HT-1を蒸着し、HI-1：HT-1膜上に膜厚80nmの第1正孔輸送層を形成した。

次に、この第1正孔輸送層上に、化合物EBL-1を蒸着し、膜厚5 nmの第2正孔輸送層（電子阻止層）を形成した。

次に、この第2正孔輸送層上に、化合物BH-1（ホスト材料）及び化合物BD-1（ドーパント材料）を化合物BD-1の割合が4質量%となるように共蒸着し、膜厚25 nmの発光層を形成した。

[0405] 次に、この発光層上に、化合物HBL-1を蒸着し、膜厚5 nmの第1電子輸送層（正孔阻止層）を形成した。

次に、この第1電子輸送層上に、化合物ET-1及びLi qを、Li qの割合が50質量%となるように共蒸着して、膜厚20 nmの第2電子輸送層を形成した。

次に、この第2電子輸送層上に、フッ化リチウム（Li F）を蒸着して、膜厚1 nmの電子注入性電極（陰極）を形成した。

そして、この電子注入性電極上に、金属Alを蒸着し、膜厚80 nmの金属Al陰極を形成した。

[0406] 実施例1の有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HI-1 : HT-1 (10 ; 3%) / HT-1 (80)  
/ EBL-1 (5) / BH-1 : BD-1 (25 ; 4%) / HBL-1 (5)  
/ ET-1 : Li q (20 ; 50質量%) / Li F (1) / Al (80)

尚、括弧内の数字は膜厚（単位：nm）を表す。また、同じく括弧内において、パーセント表示された数字は、それぞれ、第1正孔注入層における第2の化合物、発光層におけるドーパント材料、及び第2電子輸送層における第2の化合物の割合（質量%）を示す。

[0407] （有機EL素子の評価）

得られた有機EL素子の初期特性を、室温下、DC（直流）定電流10 mA / cm<sup>2</sup>駆動で測定した。駆動電圧の測定結果を表1に示す。

また、電流密度が10 mA / cm<sup>2</sup>となるように有機EL素子に電圧を印加し、EL発光スペクトルを分光放射輝度計CS-1000（コニカミノルタ

株式会社製)にて計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、外部量子効率EQE(%)を算出した。結果を表2に示す。

[0408] (実施例2～3、及び比較例1)

実施例1における第2電子輸送層に用いた化合物ET-1を下記表2に記載の化合物に置き換えたこと以外、実施例1と同様にして有機EL素子を作製し、評価した。結果を表2に示す。

[0409] [表2]

|      | 外部量子効率<br>(%) | 駆動電圧<br>(V) | 第2電子輸送層<br>の材料 | 第2電子輸送層の材料<br>のアフィニティ<br>(eV) |
|------|---------------|-------------|----------------|-------------------------------|
| 実施例1 | 7.7           | 4.2         | ET-1           | 1.93                          |
| 実施例2 | 9.8           | 3.8         | ET-2           | 1.86                          |
| 実施例3 | 9.7           | 3.8         | ET-3           | 1.91                          |
| 比較例1 | 6.9           | 4.7         | Ref. ET-1      | 2.00                          |

[0410] 表2の結果から、4-ジベンゾチオフェニル基3つがトリアジン環に置換した化合物Ref. ET-1を第2電子輸送層に用いた比較例1の有機EL素子に比べ、式(1)で表される化合物ET-1を用いた実施例1の有機EL素子は、駆動電圧が低く、かつ外部量子効率が向上していることがわかる。

また、式(A1)で表される化合物ET-2又はET-3を用いた実施例2及び3の有機EL素子は、化合物ET-1よりもさらに低い駆動電圧、かつより高い外部量子効率を示すことがわかる。第2電子輸送層の材料である、化合物ET-2及びET-3は、化合物ET-1よりもさらに低いアフィニティ値を有することにより、発光層への電子注入性を高めることができ、その結果、発光効率が向上し、駆動電圧が低減されと考えられる。

[0411] 表1の結果から、式(1)で表される化合物ET-1は、Ref. ET-1及びRef. ET-2に比べて、Afの値が1.93Vと特異的に低いことがわかる。これはトリアジン環に結合するフェニル基のオルト位にフェニル基が置換していることで得られる効果である。

また、式（A 1）で表される化合物E T－2及びE T－3は、化合物E T－1よりもさらにA f値が低いことがわかる。これは、トリアジン環に結合するフェニル基のオルト位にフェニル基が置換し、さらに当該トリアジン環に縮合環が置換していることで得られる効果である。

[0412] 上記表1及び2における対比から、式（1）を包含する、式（A 1）で表される化合物は、電子親和力（アフィニティ）が低いため、ホスト材料や第1電子輸送層（正孔阻止層）との電子親和力の差が小さくなるため、電子を効率的に発光層へと輸送すると考えられる。それ故、式（A 1）で表される化合物を電子輸送材料として用いることで、発光層への電子注入性が向上し、有機E L素子の発光効率（外部量子効率E Q E）が向上すると考えられる。

[0413] （実施例4～13及び比較例2）

実施例1における第2電子輸送層に用いた化合物E T－1を下記表3に記載の化合物に置き換えたこと以外、実施例1と同様にして有機E L素子を作製し、評価した。結果を、前記比較例1と共に下記表3に示す。

[0414]

[表3]

|       | 外部量子効率<br>(%) | 駆動電圧<br>(V) | 第2電子輸送層<br>の材料 |
|-------|---------------|-------------|----------------|
| 実施例4  | 9.8           | 3.8         | ET-4           |
| 実施例5  | 9.7           | 3.9         | ET-5           |
| 実施例6  | 8.1           | 4.2         | ET-6           |
| 実施例7  | 9.3           | 3.9         | ET-7           |
| 実施例8  | 8.5           | 4.1         | ET-8           |
| 実施例9  | 7.7           | 4.2         | ET-10          |
| 実施例10 | 9.7           | 3.8         | ET-11          |
| 実施例11 | 9.6           | 3.9         | ET-13          |
| 実施例12 | 9.4           | 3.9         | ET-14          |
| 実施例13 | 8.4           | 4.1         | ET-15          |
| 比較例1  | 6.9           | 4.7         | Ref. ET-1      |
| 比較例2  | 7.1           | 4.6         | Ref. ET-2      |

[0415] 表1の結果から、式(A1)で表される化合物ET-4、ET-5、ET-7、ET-10、ET-11、ET-13及びET-14は、Ref. ET-1及びRef. ET-2に比べて、Afの値が1.86~1.93Vと特異的に低いことがわかる。これはトリアジン環に結合するフェニル基のオルト位にフェニル基が置換していることで得られる効果である。

[0416] 表3の結果から、式(A1)で表される化合物を電子輸送材料として用いることで、発光層への電子注入性が向上し、有機EL素子の発光効率(外部量子効率EQE)が向上すると考えられる。

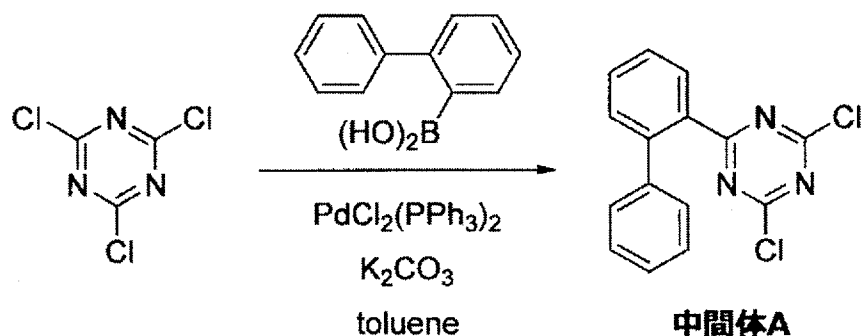
[0417] <化合物の合成>

(合成実施例1)：化合物ET-1の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-1を合成した。

## [0418] (1) 中間体Aの合成

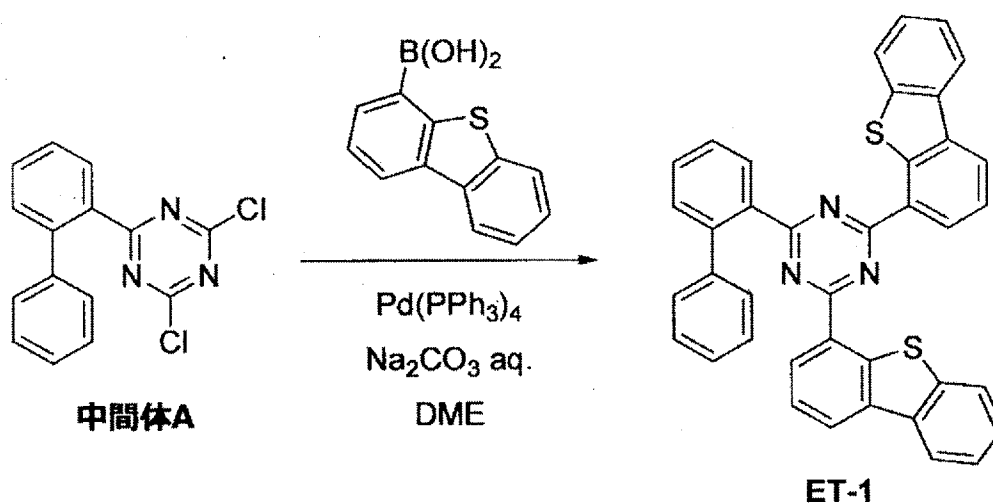
[化169]



[0419] シアヌル酸クロリド（10 g）とビフェニル-2-ボロン酸（7.2 g）をトルエン（180 mL）中に加え、得られた溶液にアルゴンガスを5分間通じた。これにジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0.13 g）と炭酸カリウム（20 g）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら、20時間60℃に加熱した。反応溶液をろ過して無機塩を除去した。ろ液をカラムクロマトグラフィーに付し、中間体Aを得た（2.3 g、収率21%）。

## [0420] (2) 化合物ET-1の合成

[化170]



[0421] 中間体A（0.5 g）とベンゾチオフェン-4-ボロン酸（1.1 g）をジメトキシエタン（30 mL）中に加え、得られた溶液にアルゴンガスを5

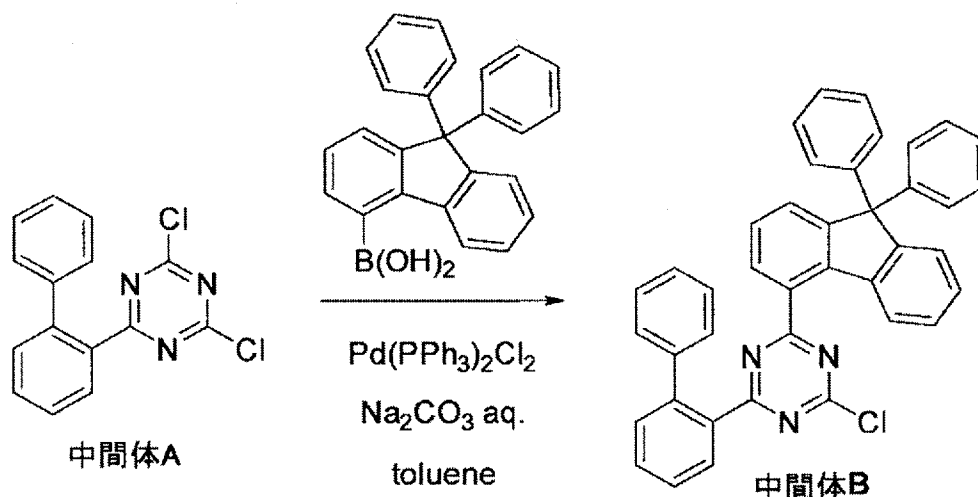
分間通じた。これにテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0.1 g）と炭酸ナトリウム水溶液（2 M、4 mL）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら6時間加熱還流した。反応液をろ過して固体を得た。固体をカラムクロマトグラフィーに付し、生成物を得た（0.41 g、収率41%）。E T-1の分子量は597.75であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）=597であったことから、得られた生成物を化合物E T-1と同定した。

[0422]（合成実施例2）：化合物E T-2の合成

下記合成スキームに沿って化合物E T-2を合成した。

[0423]（1）中間体Bの合成

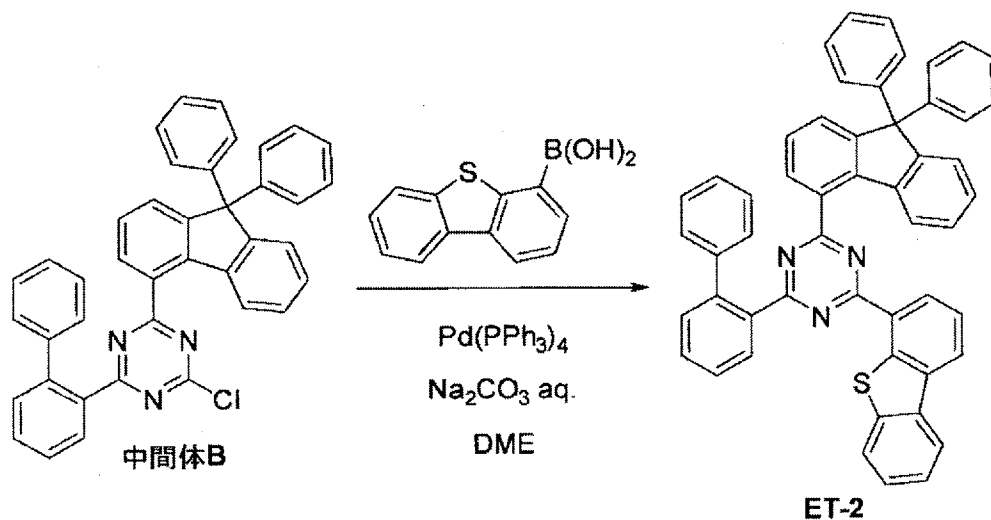
[化171]



[0424] 中間体A（7.2 g）と、9,9-ジフェニルフルオレン-4-ボロン酸（9.4 g）をトルエン（120 mL）に溶解した溶液にアルゴンガスを5分通じた。これにジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（83 mg）と炭酸ナトリウム水溶液（2 M、24 mL）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら60℃で終夜加熱した。反応溶液を溶媒留去後、カラムクロマトグラフィーに付し、中間体Bを得た（8.3 g、収率57%）。

[0425]（2）化合物E T-2の合成

[化172]



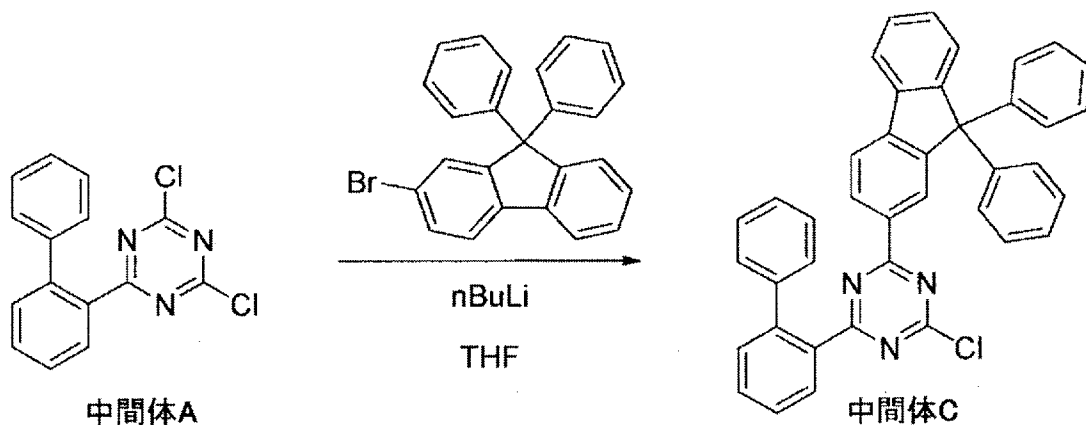
[0426] 中間体B（4.0 g）と、ジベンゾチオフェン-4-ボロン酸（2.5 g）をジメトキシエタン（DME）70 mLに溶解し、溶液にアルゴンガスを5分通じた。これにテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（317 mg）と炭酸ナトリウム水溶液（2 M、10 mL）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら72℃で3時間加熱した。反応溶液をカラムクロマトグラフィーに付して得られた固体をトルエンで再結晶し、ET-2を得た（2.8 g、収率56%）。ET-2の分子量は731.92であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）= 732であったことから、化合物ET-2と同定した。

[0427] （合成実施例3）：化合物ET-3の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-3を合成した。

[0428] （1）中間体Cの合成

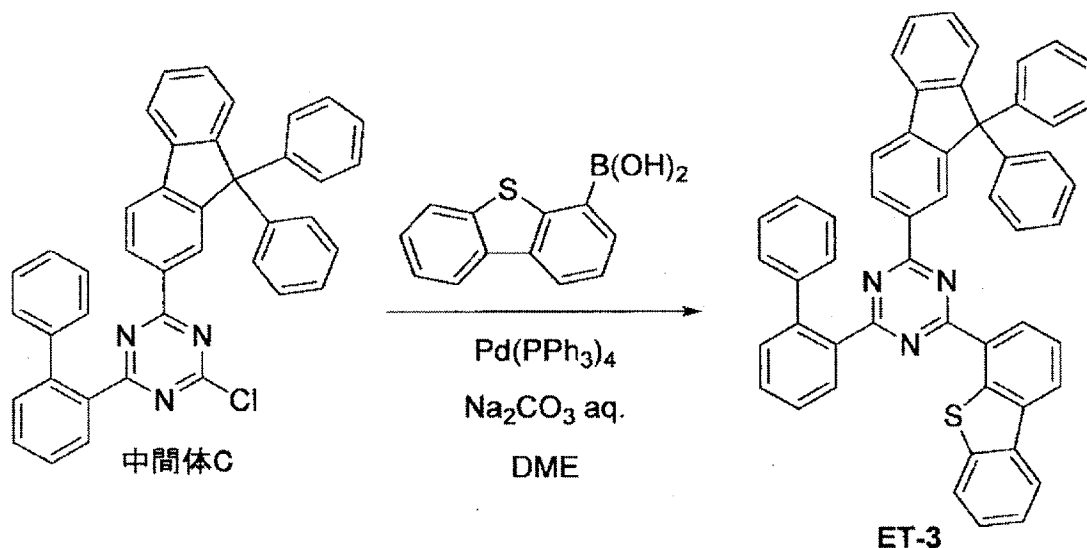
[化173]



[0429] アルゴン雰囲気下、9, 9-ジフェニル-2-ブロモフルオレン（9.7 g）のテトラヒドロフラン溶液（50 mL）を $-78^{\circ}\text{C}$ に冷却し、ノルマルブチルリチウムの $n$ -ヘキサン溶液（1.6 M、16 mL）を30分間かけて滴加した後、 $-78^{\circ}\text{C}$ でさらに1時間攪拌した。この溶液を、 $-78^{\circ}\text{C}$ に冷却した中間体A（5.7 g）のテトラヒドロフラン溶液（100 mL）に1時間かけて滴加し、その後室温で終夜攪拌した。反応液から溶媒を減圧留去して固体を得た。この固体をカラムクロマトグラフィーに付し、得られた固体をジクロロメタンとヘキサンとを混合した溶媒で洗浄し、中間体Cを得た（7.6 g、収率56%）。

[0430] （2）化合物ET-3の合成

[化174]



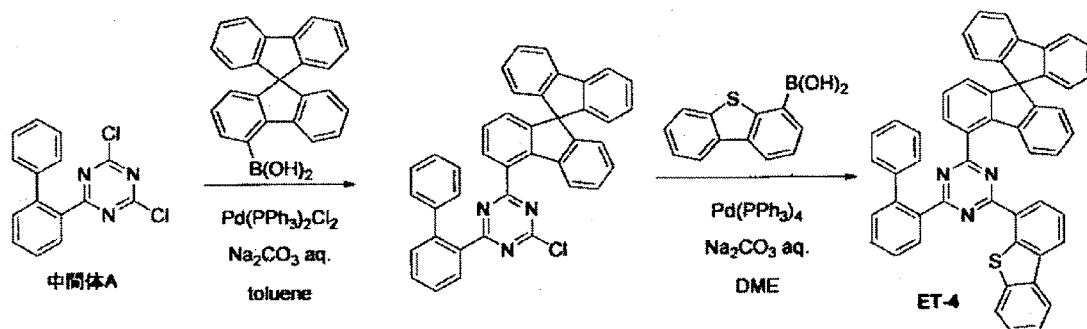
[0431] 中間体C（6.3 g）と、ジベンゾチオフェン-4-ボロン酸（3.0 g）をジメトキシエタン（DME）（100 mL）に溶解し、溶液にアルゴンガスを5分通じた。これにテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（62 mg）と炭酸ナトリウム水溶液（2 M、17 mL）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら55℃で8時間加熱した。反応溶液から溶媒を留去し、得られた固体を酢酸エチルで洗浄後、ヘキサンとトルエンとを混合した溶媒で再結晶を行い、ET-3を得た（1.8 g、収率23%）。ET-3の分子量は731.97であり、得られた化合物のマスペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）= 732であったことから、化合物ET-3と同定した。

[0432]（合成実施例4）：化合物ET-4の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-4を合成した。

[0433]

[化175]

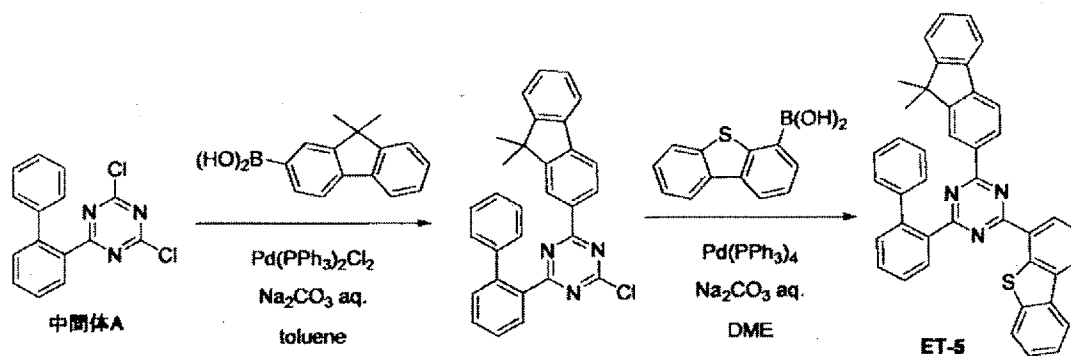


[0434] 9, 9-ジフェニルフルオレン-4-ボロン酸を9, 9'-スピロビフルオレン-4-ボロン酸に変更した他は化合物ET-2と同様の方法で化合物ET-4を得た。化合物ET-4の分子量は729.90であり、得られた化合物のマスペクトルの分析結果は、 $m/z$  (質量と電荷の比) = 730であったことから、化合物ET-4と同定した。

[0435] (合成実施例5) : 化合物ET-5の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-5を合成した。

[0436] [化176]

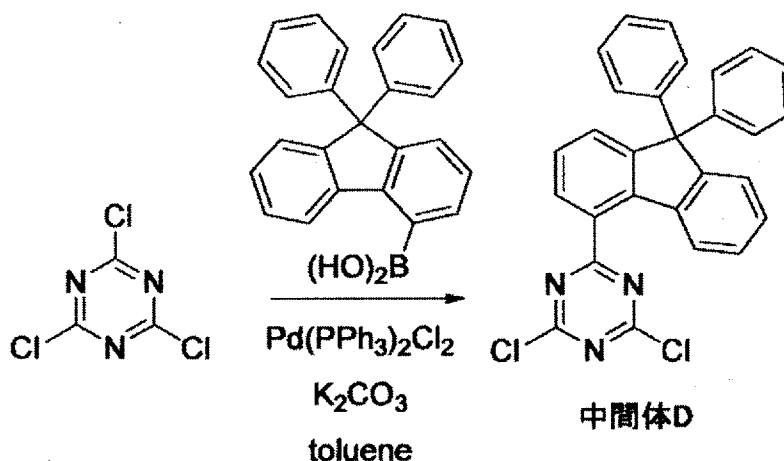


[0437] 9, 9-ジフェニルフルオレン-4-ボロン酸を9, 9-ジメチルフルオレン-2-ボロン酸に変更した他はE化合物T-2と同様の方法で化合物ET-5を得た。化合物ET-5の分子量は607.78であり、得られた化合物のマスペクトルの分析結果は、 $m/z$  (質量と電荷の比) = 608であったことから、化合物ET-5と同定した。

[0438] (合成実施例6) : 化合物ET-6の合成

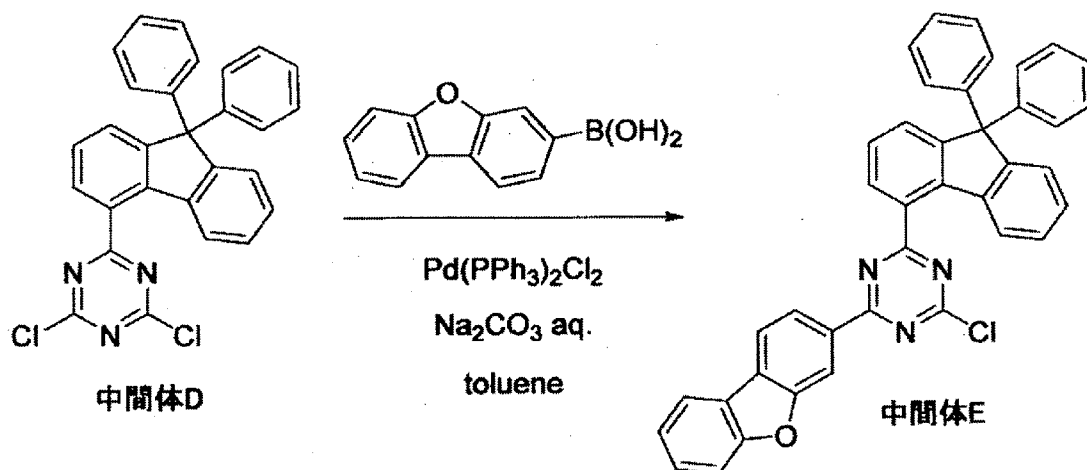
下記合成スキームに沿って化合物E T-6を合成した。

[0439] [化177]



[0440] シアヌル酸クロリド（10 g）と9，9-ジフェニルフルオレン-4-ボロン酸（14.1 g）をトルエン（150 mL）中に加え、得られた溶液にアルゴンガスを5分間通じた。これにジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0.14 g）と炭酸カリウム（16 g）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら、60℃で15時間加熱した。反応溶液をろ過して無機塩を除去した。ろ液をカラムクロマトグラフィーに付し、中間体Dを得た（5.5 g、収率30%）。

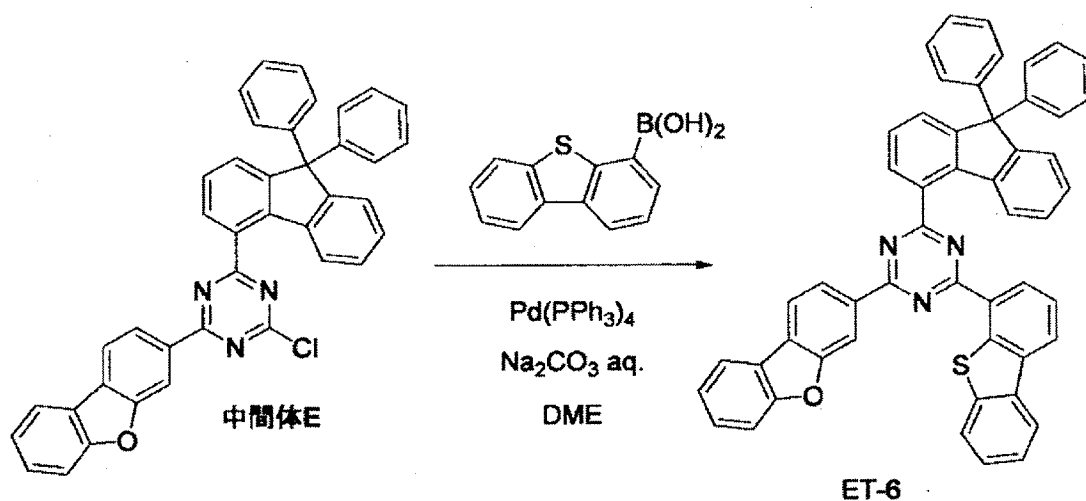
[0441] [化178]



[0442] 中間体D（5.5 g）と、ジベンゾフラン-3-ボロン酸（2.5 g）を

トルエン（120 mL）に溶解し、溶液にアルゴンガスを5分通じた。これにジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（83 mg）と炭酸ナトリウム水溶液（2 M、18 mL）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら55℃で10時間加熱した。反応溶液から溶媒を留去し、得られた固体を酢酸エチルで洗浄後、ヘキサンとトルエンとを混合した溶媒で再結晶を行い、中間体Eを得た（2.1 g、収率30%）。

[0443] [化179]



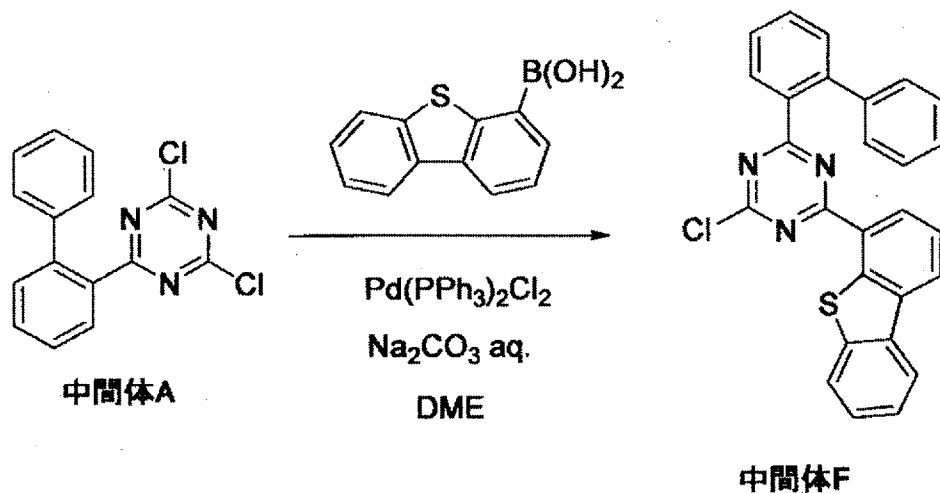
[0444] 中間体E（3.0 g）と、ジベンゾチオフェン-4-ボロン酸（1.1 g）をジメトキシエタン（DME）（100 mL）に溶解し、溶液にアルゴンガスを5分通じた。これにテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（58 mg）と炭酸ナトリウム水溶液（2 M、7.5 mL）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら55℃で9時間加熱した。反応溶液から溶媒を留去し、得られた固体を酢酸エチルで洗浄後、トルエンで再結晶を行い、ET-6を得た（1.2 g、収率31%）。ET-6の分子量は745.90であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）= 746であったことから、化合物ET-6と同定した。

[0445] （合成実施例7）：化合物ET-7の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-7を合成した。

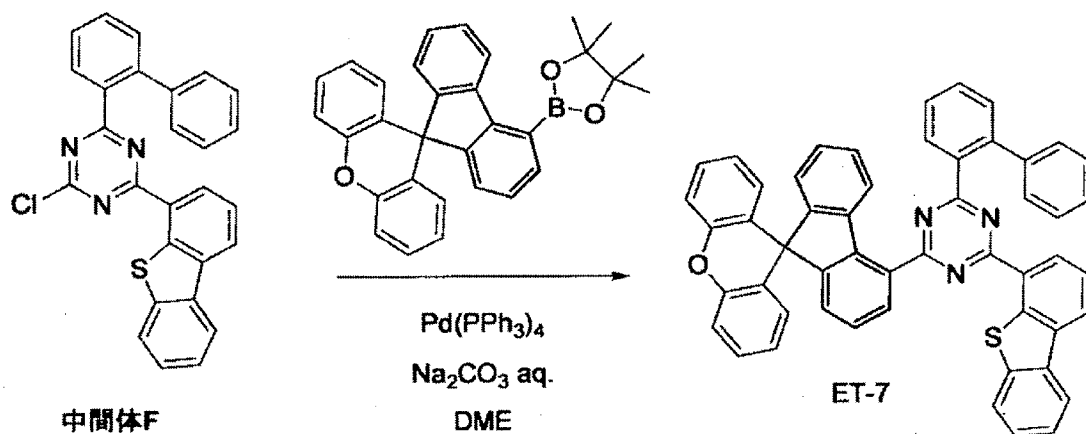
[0446]

[化180]



[0447] 中間体A (2.5 g) と、ジベンゾチオフェン-4-ボロン酸 (1.9 g) をトルエン (100 mL) に溶解し、溶液にアルゴンガスを5分通じた。これにジクロロビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (116 mg) と炭酸ナトリウム水溶液 (2 M、12 mL) を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら55℃で10時間加熱した。反応溶液から溶媒を留去し、得られた固体をカラムクロマトグラフィーに付し、中間体Fを得た (0.7 g、収率19%)。

[0448] [化181]



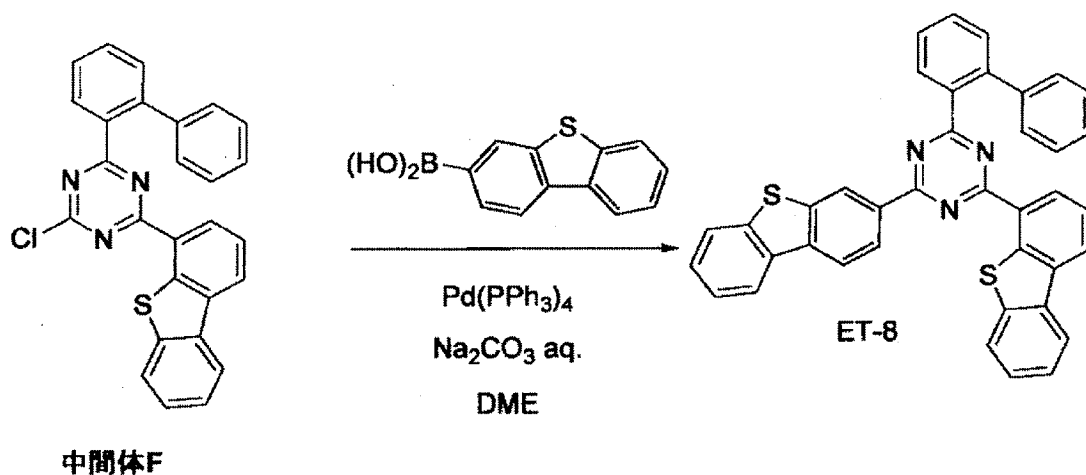
[0449] 中間体F (2.3 g) と、スピロ[9H-フルオレン-9,9'-[9H]キサンテン]-4-(4,4,5,5-テトラメチル)-1,3,2-ジオキサボロラ

ン（国際出願番号WO2014/072017A1に従って合成）（2.3 g）をジメトキシエタン（DME）（100 mL）に溶解し、溶液にアルゴンガスを5分通じた。これにテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（59 mg）と炭酸ナトリウム水溶液（2 M、15 mL）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら55℃で9時間加熱した。反応溶液から溶媒を留去し、得られた固体をカラムクロマトグラフィーに付し、ET-7を得た（2.0 g、収率53%）。ET-7の分子量は745.90であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）= 746であったことから、化合物ET-7と同定した。

[0450]（合成実施例8）：化合物ET-8の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-8を合成した。

[0451] [化182]



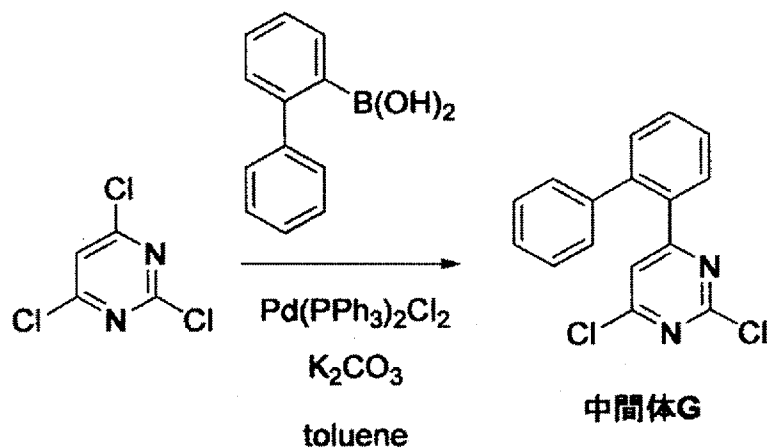
[0452] 中間体F（3.0 g）と、ジベンゾチオフェン-3-ボロン酸（1.5 g）をジメトキシエタン（DME）（150 mL）に溶解し、溶液にアルゴンガスを5分通じた。これにテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（154 mg）と炭酸ナトリウム水溶液（2 M、10 mL）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら55℃で6時間加熱した。反応溶液から溶媒を留去し、得られた固体をカラムクロマトグラフィーに付し、ET-8を得た（2.4 g、収率60%）。ET-8の分子量は597.75であり、得ら

れた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）＝598であったことから、化合物E T－8と同定した。

[0453]（合成実施例9）：化合物E T－9の合成

下記合成スキームに沿って化合物E T－9を合成した。

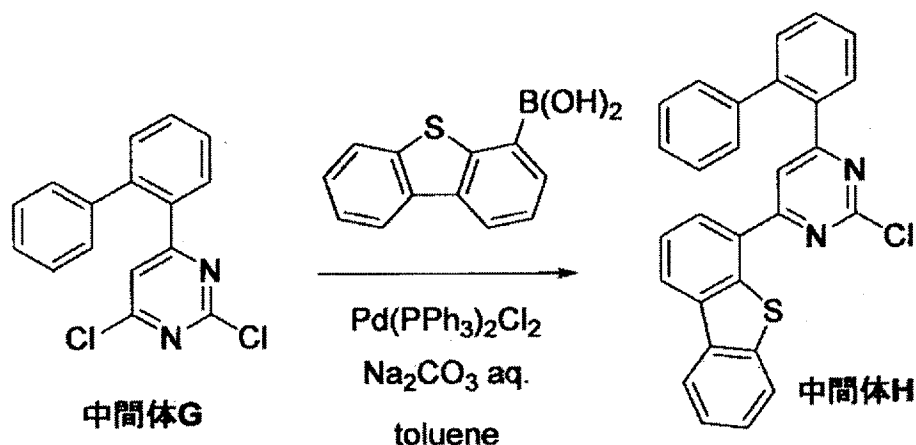
[0454] [化183]



[0455] 2, 4, 6－トリクロロピリミジン（5.0 g）と2－ビフェニルボロン酸（5.4 g）をトルエン（250 mL）中に加え、得られた溶液にアルゴンガスを5分間通じた。これにジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0.1 g）と炭酸カリウム（11 g）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら、60℃で10時間加熱した。反応溶液をろ過して無機塩を除去した。ろ液を減圧下溶媒留去後、残渣をカラムクロマトグラフィーに付し、中間体Gを得た（3.3 g、収率40％）。

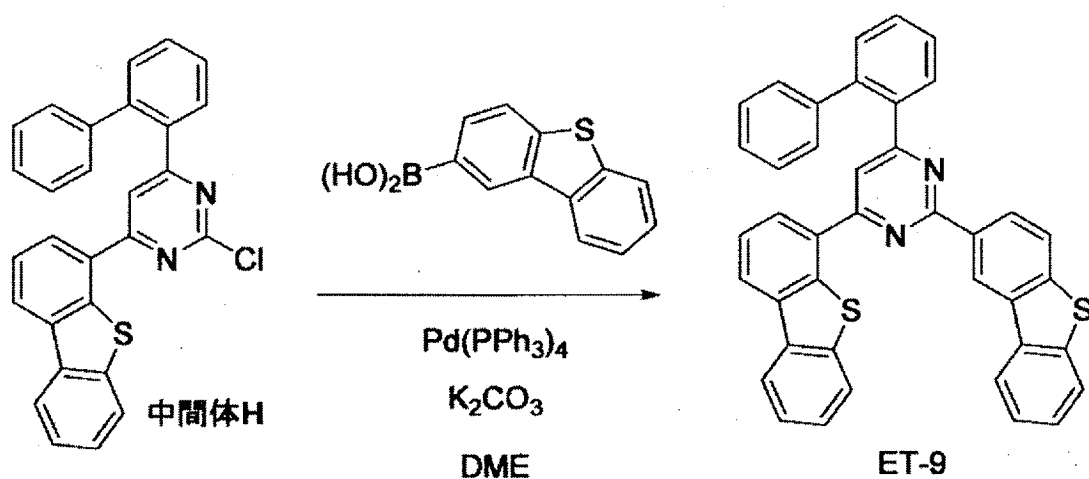
[0456]

[化184]



[0457] 中間体G (3.3 g) と、ジベンゾチオフェン-4-ボロン酸 (2.5 g) をトルエン (100 mL) に溶解し、溶液にアルゴンガスを5分通じた。これにジクロロビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (38 mg) と炭酸ナトリウム水溶液 (2 M、11 mL) を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら50℃で8時間加熱した。反応溶液から溶媒を留去し、得られた固体をカラムクロマトグラフィーに付し、中間体Hを得た (1.7 g、収率35%)。

[0458] [化185]



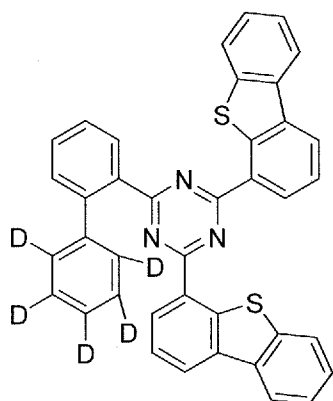
[0459] 中間体H (4.0 g) と、ジベンゾチオフェン-2-ボロン酸 (2.0 g) をジメトキシエタン (DME) (100 mL) に溶解し、溶液にアルゴン

ガスを5分通じた。これにテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（103mg）と炭酸カリウム（3.7g）を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら55℃で8時間加熱した。反応溶液から溶媒を留去し、得られた固体をトルエンで再結晶し、ET-9を得た（3.6g、収率67%）。ET-9の分子量は596.77であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）=597であったことから、化合物ET-9と同定した。

[0460]（合成実施例10）：化合物ET-10の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-10を合成した。

[0461] [化186]



ET-10

[0462] 合成実施例1において、ビフェニル-2-ボロン酸の代わりに1,1'-ビフェニル-2'-ボロン酸（2,3,4,5,6-d）を用いた以外は同様の合成スキームにより化合物ET-10を合成した。

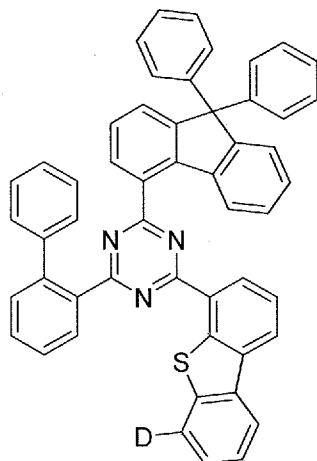
化合物ET-10の分子量は602.78であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）=602であったことから、得られた生成物を化合物ET-10と同定した。

[0463]（合成実施例11）：化合物ET-11の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-11を合成した。

[0464]

[化187]



ET-11

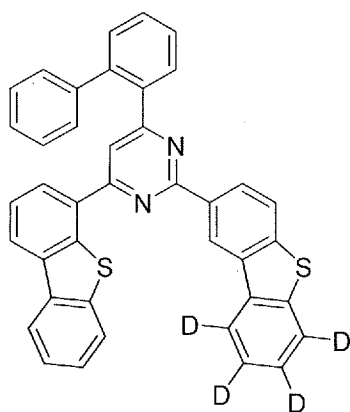
[0465] 合成実施例2において、ジベンゾチオフェン-4-ボロン酸の代わりにジベンゾチオフェン-4-ボロン酸(6-d)を用いた以外は同様の合成スキームにより化合物ET-11を合成した。

化合物ET-11の分子量は732.92であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$  (質量と電荷の比) = 732であったことから、得られた生成物を化合物ET-11と同定した。

[0466] (合成実施例12) : 化合物ET-12の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-12を合成した。

[0467] [化188]



ET-12

[0468] 合成実施例9において、ジベンゾチオフェン-2-ボロン酸の代わりに重

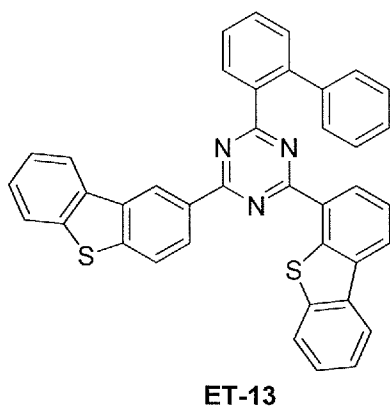
水素化ジベンゾチオフェン-2-ボロン酸（6, 7, 8, 9-d）を用いた以外は同様の合成スキームにより化合物ET-12を合成した。

化合物ET-12の分子量は600.79であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）=600であったことから、得られた生成物を化合物ET-12と同定した。

[0469]（合成実施例13）：化合物ET-13の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-13を合成した。

[0470] [化189]



[0471] 合成実施例8において、ジベンゾチオフェン-3-ボロン酸の代わりに重水素化ジベンゾチオフェン-2-ボロン酸を用いた以外は同様の合成スキームにより化合物ET-13を合成した。

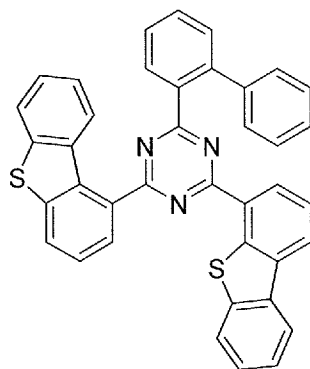
化合物ET-13の分子量は597.75であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）=597であったことから、得られた生成物を化合物ET-13と同定した。

[0472]（合成実施例14）：化合物ET-14の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-14を合成した。

[0473]

[化190]



ET-14

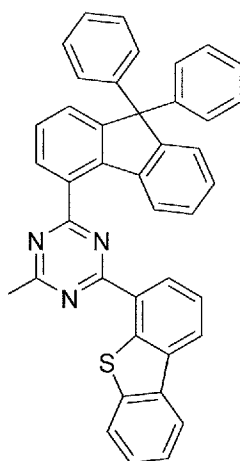
[0474] 合成実施例8において、ジベンゾチオフェン-3-ボロン酸の代わりに重水素化ジベンゾチオフェン-1-ボロン酸を用いた以外は同様の合成スキームにより化合物ET-14を合成した。

化合物ET-14の分子量は597.75であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）=597であったことから、得られた生成物を化合物ET-14と同定した。

[0475]（合成実施例15）：化合物ET-15の合成

下記合成スキームに沿って化合物ET-15を合成した。

[0476] [化191]



ET-15

[0477] 合成実施例1において、ピフェニル-2-ボロン酸の代わりに9,9-ジフェニルフルオレン-4-ボロン酸を用いた以外は同様の合成スキームによ

り化合物E T - 1 5を合成した。

化合物E T - 1 5の分子量は7 6 1 . 9 6であり、得られた化合物のマススペクトルの分析結果は、 $m/z$ （質量と電荷の比）= 7 6 1であったことから、得られた生成物を化合物E T - 1 5と同定した。

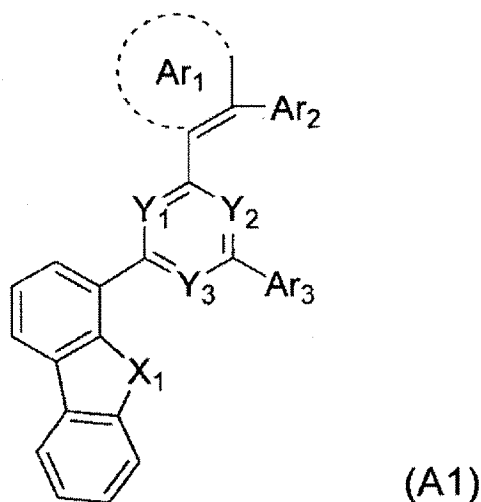
[0478] 上記に本発明の実施形態及び／又は実施例を幾つか詳細に説明したが、当業者は、本発明の新規な教示及び効果から実質的に離れることなく、これら例示である実施形態及び／又は実施例に多くの変更を加えることが容易である。従って、これらの多くの変更は本発明の範囲に含まれる。

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

## 請求の範囲

[請求項1] 下記式 (A 1) で表される化合物。

[化192]



[式 (A 1) 中、

$X_1$  は、O 又は S である。

$Y_1$ 、 $Y_2$  及び  $Y_3$  は、それぞれ独立に、CH 又は N である。

但し、 $Y_1$ 、 $Y_2$  及び  $Y_3$  のうち 2 つ以上は N である。

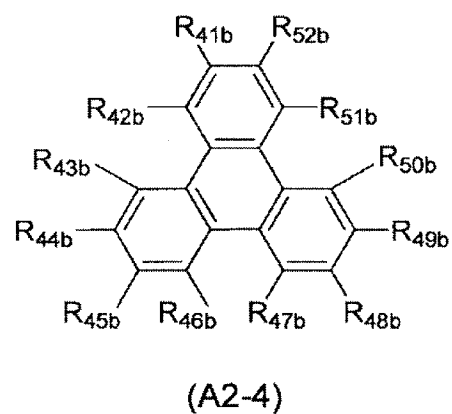
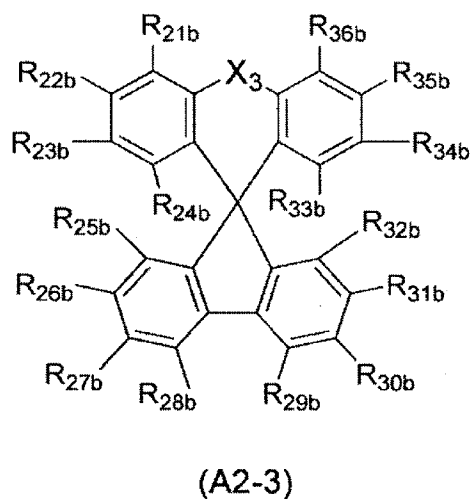
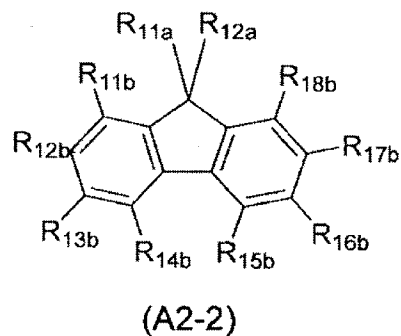
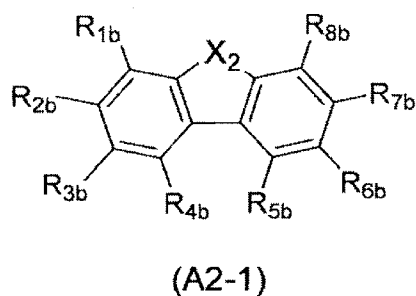
$Ar_1$  は、少なくともオルト位に  $Ar_2$  が置換したベンゼン環を含む、環形成炭素数 6～50 のアリール基である。 $Ar_1$  は、 $Ar_2$  の他に置換基を有していてもよい。

$Ar_2$  は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基である。

$Ar_1$  と  $Ar_2$  は、互いに結合して、置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成し、該 5 員の炭化水素環を介して縮合した多環縮合アリール基となるか、あるいは置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成しない。

$Ar_3$  は、下記式 (A 2-1) で表される基、下記式 (A 2-2) で表される基、下記式 (A 2-3) で表される基、及び下記式 (A 2-4) で表される基からなる群から選択される基である。

[化193]



(式 (A 2 - 1) 中、

 $X_2$  は、O 又は S である。

$R_{1b} \sim R_{8b}$  のうちの 1 つは、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合であり、残りは水素原子である。)

(式 (A 2 - 2) 中、

$R_{11a}$  及び  $R_{12a}$  は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない。

$R_{11b} \sim R_{18b}$  のうちの 1 つは、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合である。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_{11a}$  及び  $R_{12a}$ 、及び前記単結合ではない  $R_{11b} \sim R_{18b}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、

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

(式 (A 2 - 3) 中、

$R_{21b} \sim R_{36b}$  のうちの 1 つは、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合である。

$X_3$  は、 $NR_{21a}$ 、 $CR_{22a}R_{23a}$ 、 $O$  又は  $S$  である。

$R_{21a}$  は、前記単結合ではない  $R_{21b}$  又は前記単結合ではない  $R_{36b}$  のいずれか一方又は両方と互いに結合して置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記単結合ではない  $R_{22b} \sim R_{35b}$ 、前記単結合ではなく、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_{21b}$  及び  $R_{36b}$ 、前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_{21a}$ 、並びに  $R_{22a}$  及び  $R_{23a}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、

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

(式 (A 2 - 4) 中、

$R_{41b} \sim R_{52b}$  のうちの 1 つは、 $Y_2$  と  $Y_3$  の間の炭素原子に結合する単結合である。

前記単結合ではない  $R_{41b} \sim R_{52b}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、

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

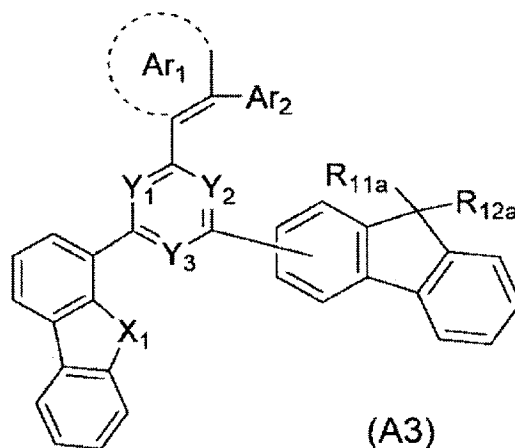
]

[請求項2]

前記式 (A 1) で表される化合物が、少なくとも 1 個の重水素原子を有する、請求項 1 に記載の化合物。

[請求項3] 前記式 (A 1) で表される化合物が下記式 (A 3) で表される化合物である、請求項 1 又は 2 に記載の化合物。

[化194]



(式 (A 3) 中、 $X_1$ 、 $Y_1 \sim Y_3$ 、 $Ar_1$  及び  $Ar_2$  は、前記式 (A 1) で定義した通りである。

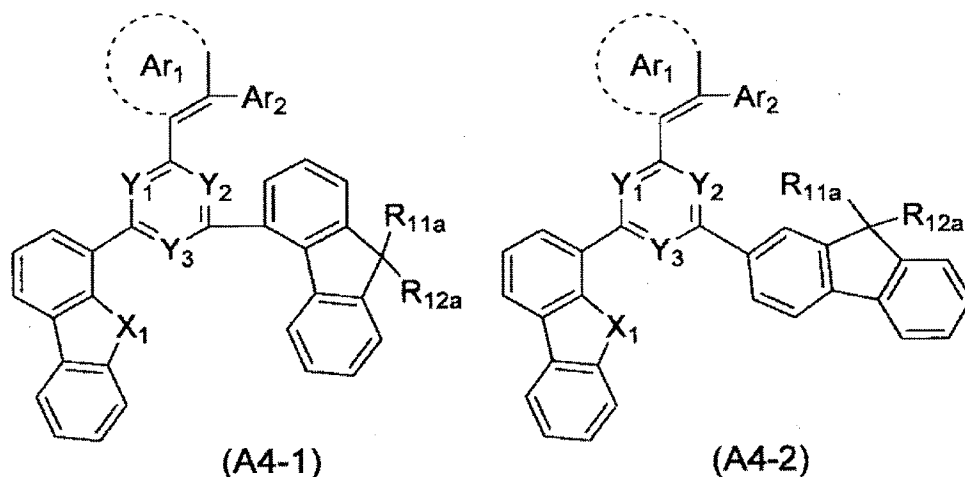
$R_{11a}$  及び  $R_{12a}$  は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_{11a}$  及び  $R_{12a}$  は、それぞれ独立に、  
水素原子、

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

[請求項4] 前記式 (A 3) で表される化合物が、下記式 (A 4 - 1) 又は (A 4 - 2) で表される化合物である、請求項 3 に記載の化合物。

[化195]

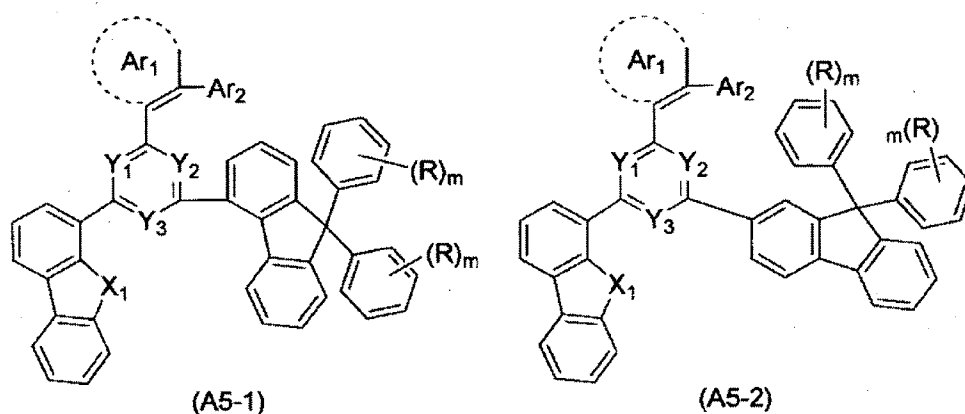


(式 (A4-1) 及び (A4-2) 中、 $X_1$ 、 $Y_1 \sim Y_3$ 、 $Ar_1$ 、 $Ar_2$ 、 $R_{11a}$  及び  $R_{12a}$  は、前記式 (A3) で定義した通りである。)

[請求項5]

前記式 (A3) で表される化合物が、下記式 (A5-1) 又は (A5-2) で表される化合物である、請求項3又は4に記載の化合物。

[化196]



(式 (A5-1) 及び (A5-2) 中、 $X_1$ 、 $Y_1 \sim Y_3$ 、 $Ar_1$  及び  $Ar_2$  は、前記式 (A3) で定義した通りである。

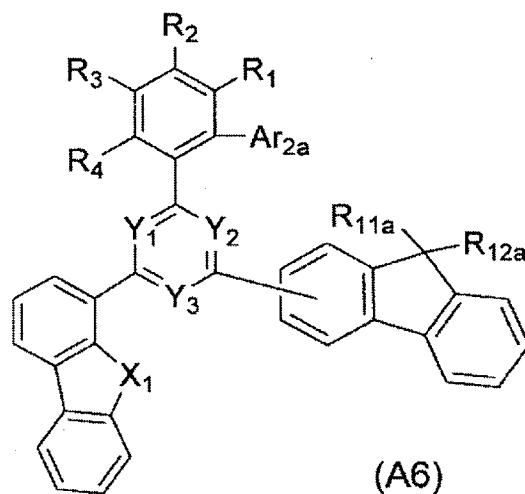
$R$  は、置換基である。

$m$  は、0～5の整数である。

$R$  が2以上のとき、2以上の $R$ は互いに同一であってもよいし、異なってもよい。)

[請求項6] 前記式 (A 3) で表される化合物が、下記式 (A 6) で表される化合物である、請求項 3 に記載の化合物。

[化197]



(式 (A 6) 中、 $X_1$ 、 $Y_1 \sim Y_3$ 、 $R_{11a}$  及び  $R_{12a}$  は、前記式 (A 3) で定義した通りである。

$Ar_{2a}$  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。

前記アリール基である  $Ar_{2a}$  と  $R_1$  は、互いに結合して、置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成し、該 5 員の炭化水素環を介して縮合した、多環縮合アリール基となるか、あるいは置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成しない。

$Ar_{2a}$  と結合して前記置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成しない  $R_1$ 、及び  $R_2 \sim R_4$  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飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

$Ar_{2a}$  と結合して前記置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_1$ 、及び前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形

成しない  $R_2 \sim R_4$  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、  
 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、  
 $-O-(R_{904})$ 、  
 $-S-(R_{905})$ 、  
 $-N(R_{906})(R_{907})$ 、  
 ハロゲン原子、  
 シアノ基、  
 ニトロ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。  
 。

$R_{901} \sim R_{907}$  は、それぞれ独立に、  
 水素原子、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。  
 。

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

[請求項7]

$Ar_{2a}$  が、  
 置換もしくは無置換のフェニル基、  
 置換もしくは無置換のナフチル基、

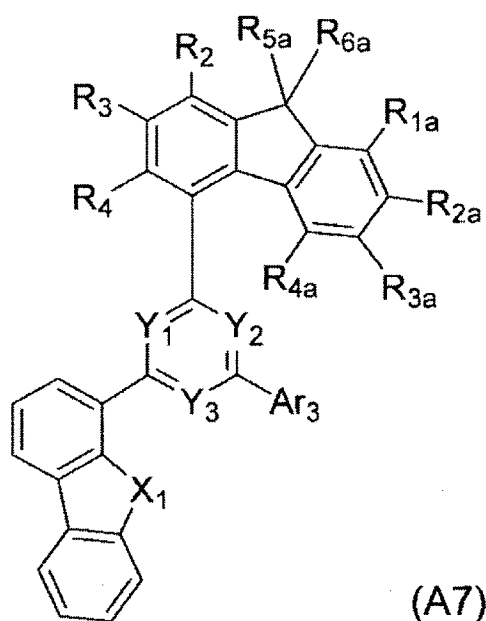
置換もしくは無置換のアントリル基、又は  
置換もしくは無置換のビフェニル基  
である、請求項 6 に記載の化合物。

[請求項 8]  $R_1 \sim R_4$  の全てが水素原子である、請求項 6 又は 7 に記載の化合物。

[請求項 9]  $Ar_3$  が、前記式 (A 2 - 1) で表される基である、請求項 1 に記載の化合物。

[請求項 10] 前記式 (A 1) で表される化合物が、下記式 (A 7) で表される化合物である、請求項 1 に記載の化合物。

[化 198]



(式 (A 7) 中、 $X_1$ 、 $Y_1 \sim Y_3$ 、及び  $Ar_3$  は、前記式 (A 1) で定義した通りである。

$R_{5a}$  及び  $R_{6a}$  は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_{5a}$  及び  $R_{6a}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

$R_2 \sim R_4$  のうちの隣接する 2 以上の 1 組以上、及び  $R_{1a} \sim R_{4a}$  のうちの隣接する 2 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飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない、 $R_2 \sim R_4$ 、及び  $R_{1a} \sim R_{4a}$  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 ( $R_{901}$ ) ( $R_{902}$ ) ( $R_{903}$ )、

— O — ( $R_{904}$ )、

— S — ( $R_{905}$ )、

— N ( $R_{906}$ ) ( $R_{907}$ )、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である

。

$R_{901} \sim R_{907}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

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

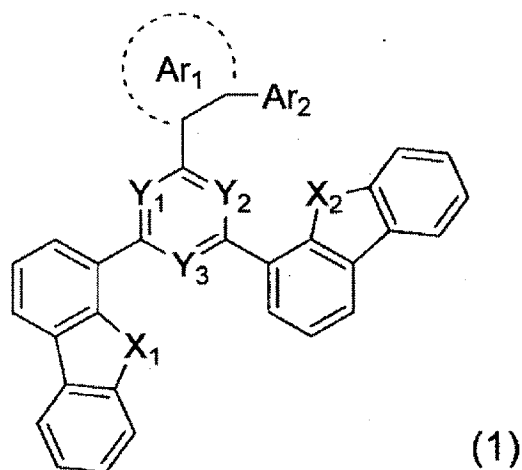
$R_{901} \sim R_{907}$ が2個以上存在する場合、2個以上の $R_{901} \sim R_{907}$ のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。）

[請求項11]  $Y_1 \sim Y_3$ が、Nである、請求項1～10のいずれかに記載の化合物。

[請求項12]  $X_1$ がSである、請求項1～11のいずれかに記載の化合物。

[請求項13] 前記式(A1)で表される化合物が、下記式(1)で表される化合物である、請求項1に記載の化合物。

[化199]



(式(1)中、

$X_1$ 及び $X_2$ は、それぞれ独立に、O又はSである。

$Y_1$ 、 $Y_2$ 及び $Y_3$ は、それぞれ独立に、CH又はNである。

但し、 $Y_1$ 、 $Y_2$ 及び $Y_3$ のうち2つ以上はNである。

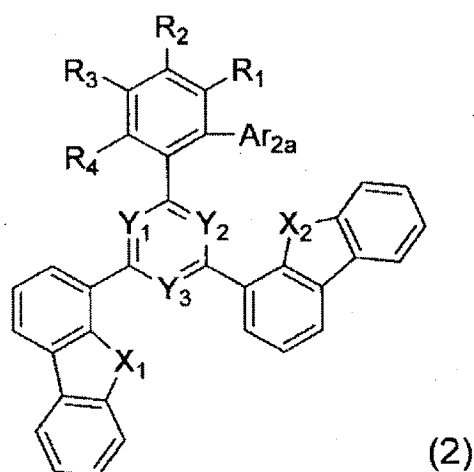
$Ar_1$ は、少なくともオルト位に $Ar_2$ が置換したベンゼン環を含む、環形成炭素数6～50のアリール基である。 $Ar_1$ は、 $Ar_2$ の他に置換基を有していてもよい。

$Ar_2$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

$Ar_1$ と $Ar_2$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成し、該5員の炭化水素環を介して縮合した多環縮合アリール基となるか、あるいは置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない。)

[請求項14] 前記式(1)で表される化合物が、下記式(2)で表される化合物である、請求項13に記載の化合物。

[化200]



(式(2)中、 $X_1$ 、 $X_2$ 、及び $Y_1 \sim Y_3$ は、前記式(1)で定義した通りである。

$Ar_{2a}$ 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。

前記アリール基である $Ar_{2a}$ と $R_1$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成し、該5員の炭化水素環を介して縮合した、多環縮合アリール基となるか、あるいは置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない。

$Ar_{2a}$ と結合して前記置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成しない $R_1$ 、及び $R_2 \sim R_4$ 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飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

$Ar_{2a}$ と結合して前記置換もしくは無置換の5員の炭化水素環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1$ 、及び前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_2 \sim R_4$ 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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )、

—O—( $R_{904}$ )、

—S—( $R_{905}$ )、

—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である

。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

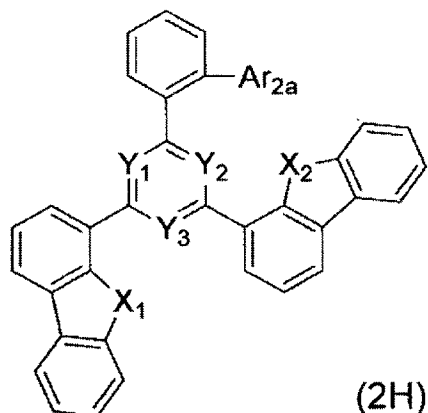
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である

。

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

[請求項15] 前記式(1)で表される化合物が、下記式(2H)で表される化合物である、請求項13又は14に記載の化合物。

[化201]

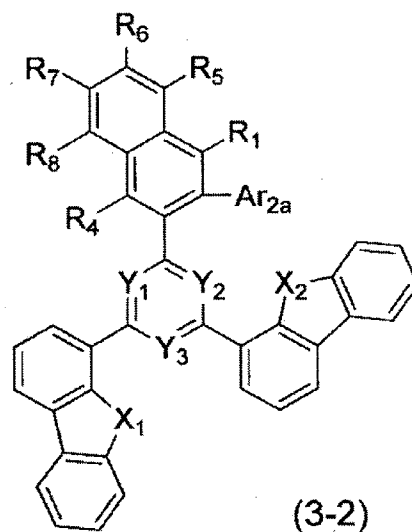
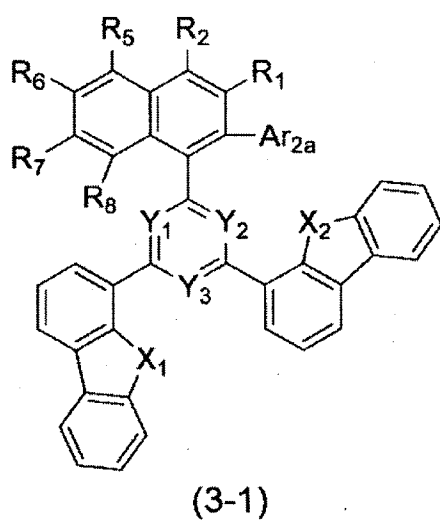


(式(2H)中、 $X_1$ 、 $X_2$ 、及び $Y_1 \sim Y_3$ は、前記式(1)で定義した通りである。

$Ar_{2a}$ 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。)

[請求項16] 前記式(1)で表される化合物が、下記式(3-1)で表される化合物又は下記式(3-2)で表される化合物である、請求項13又は14に記載の化合物。

[化202]



(式 (3-1) 及び (3-2) 中、 $X_1$ 、 $X_2$ 、及び  $Y_1 \sim Y_3$  は、前記式 (1) で定義した通りである。

$A_{r_{2a}}$  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。

前記アリール基である  $A_{r_{2a}}$  と  $R_1$  は、互いに結合して、置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成し、該 5 員の炭化水素環を介して縮合した、多環縮合アリール基となるか、あるいは置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成しない。

$A_{r_{2a}}$  と結合して前記置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成しない  $R_1$ 、並びに  $R_2$ 、及び  $R_4 \sim R_8$  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飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

$A_{r_{2a}}$  と結合して前記置換もしくは無置換の 5 員の炭化水素環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_1$ 、並びに前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_2$  及び  $R_4 \sim R_8$  は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

— Si ( $R_{901}$ ) ( $R_{902}$ ) ( $R_{903}$ )、

— O — ( $R_{904}$ )、

— S — ( $R_{905}$ )、

— N ( $R_{906}$ ) ( $R_{907}$ )、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である

。

$R_{901} \sim R_{907}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である

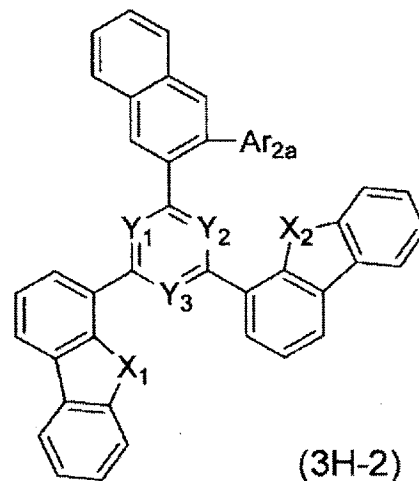
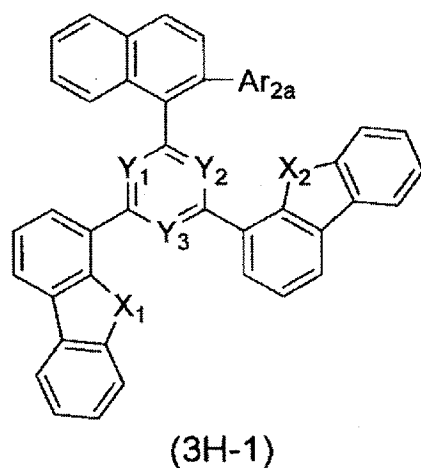
。

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

[請求項17]

前記式 (1) で表される化合物が、下記式 (3H-1) で表される化合物又は下記式 (3H-2) で表される化合物である、請求項 13、14 及び 16 のいずれかに記載の化合物。

[化203]

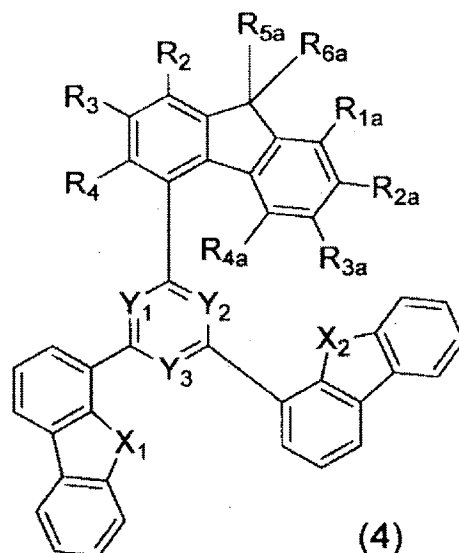


(式 (3H-1) 及び (3H-2) 中、 $X_1$ 、 $X_2$ 、及び  $Y_1 \sim Y_3$  は、前記式 (1) で定義した通りである。

$Ar_{2a}$ 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。）

[請求項18] 前記式(1)で表される化合物が、下記式(4)で表される化合物である、請求項13又は14に記載の化合物。

[化204]



(式(4)中、 $X_1$ 、 $X_2$ 、及び $Y_1 \sim Y_3$ は、前記式(1)で定義した通りである。

$R_{5a}$ 及び $R_{6a}$ は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{5a}$ 及び $R_{6a}$ は、それぞれ独立に、水素原子、

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

$R_2 \sim R_4$ のうちの隣接する2以上の1組以上、及び $R_{1a} \sim R_{4a}$ のうちの隣接する2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飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無

置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない、 $R_2$   
 $\sim R_4$ 、及び $R_{1a} \sim R_{4a}$ 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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )、

—O—( $R_{904}$ )、

—S—( $R_{905}$ )、

—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である

。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である

。

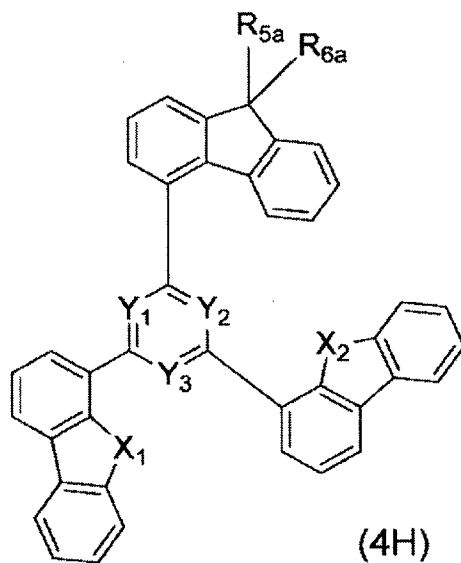
$R_{901} \sim R_{907}$ が2個以上存在する場合、2個以上の $R_{901} \sim R_{907}$   
 のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。）

[請求項19]

前記式(1)で表される化合物が、下記式(4H)で表される化合

物である、請求項 13、14 及び 18 のいずれかに記載の化合物。

[化205]



(式 (4H) 中、 $X_1$ 、 $X_2$ 、及び  $Y_1 \sim Y_3$  は、前記式 (1) で定義した通りである。

$R_{5a}$  及び  $R_{6a}$  は、互いに結合して、置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の環を形成しない  $R_{5a}$  及び  $R_{6a}$  は、それぞれ独立に、  
水素原子、

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

[請求項20]

$Ar_{2a}$  が、

置換もしくは無置換のフェニル基、

置換もしくは無置換のナフチル基、

置換もしくは無置換のアントリル基、又は

置換もしくは無置換のビフェニル基

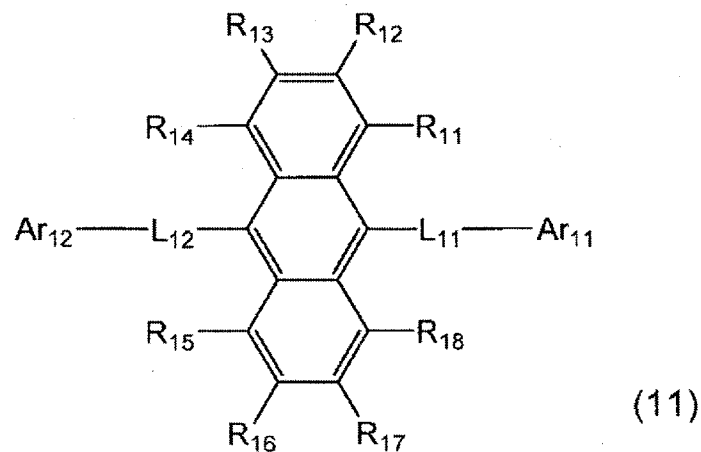
である、請求項 14～17 のいずれかに記載の化合物。

- [請求項21] 前記「置換もしくは無置換の」の置換基が、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、請求項1～20のいずれかに記載の化合物。
- [請求項22]  $X_1$  及び  $X_2$  のうちの一方がSであり、他方がOである、請求項1～10のいずれかに記載の化合物。
- [請求項23]  $X_1$  及び  $X_2$  の両方がSである、請求項13～21のいずれかに記載の化合物。
- [請求項24]  $Y_1 \sim Y_3$  の全てがNである、請求項1～23のいずれかに記載の化合物。
- [請求項25] 請求項1～24のいずれかに記載の化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子用電子輸送材料。
- [請求項26] 陽極、有機層、及び陰極をこの順に含む有機エレクトロルミネッセンス素子であって、  
該有機層が、請求項1～24のいずれかに記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項27] 請求項1～24のいずれかに記載の化合物が、少なくとも1個の重水素原子を有する、請求項26に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項28] 陽極、発光層、電子輸送帯域、及び陰極をこの順に含む有機エレクトロルミネッセンス素子であって、  
該電子輸送帯域が、請求項1～24のいずれかに記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項29] 前記電子輸送帯域が、前記発光層、第1電子輸送層、第2電子輸送層及び前記陰極の順に該第1電子輸送層及び第2電子輸送層を含み、  
該第1電子輸送層及び第2電子輸送層のうちの少なくとも1層が、請求項1～24のいずれかに記載の化合物を含む、

請求項 28 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項30] 前記発光層が、下記式 (11) で表される化合物を含む、請求項 28 又は 29 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化206]



(式 (11) において、

$R_{11} \sim R_{18}$  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、

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

$-\text{O}- (R_{904})$ 、

$-\text{S}- (R_{905})$ 、

$-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ 、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である

。

$R_{901} \sim R_{907}$  は、それぞれ独立に、

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

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

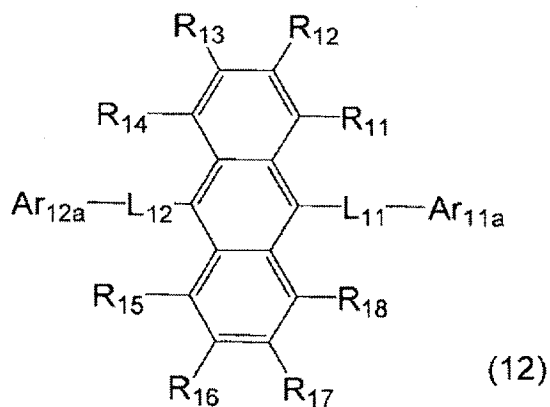
$R_{11} \sim R_{14}$  のうちの隣接する 2 つ以上、及び  $R_{15} \sim R_{18}$  のうちの隣接する 2 つ以上は、互いに結合して環を形成しない。

$L_{11}$  及び  $L_{12}$  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 価の複素環基である。  
。

$A_{r11}$  及び  $A_{r12}$  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 1 価の複素環基である。  
。)

[請求項31] 前記式 (11) で表される化合物が、下記式 (12) で表される化合物である、請求項30に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。  
。

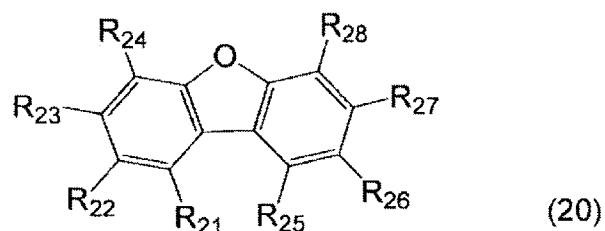
[化207]



〔式（１２）中、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $L_{11}$ 及び $L_{12}$ は、前記式（１１）で定義した通りである。

$Ar_{11a}$ 及び $Ar_{12a}$ のうち少なくとも１つは下記式（２０）で表される１価の基である。

[化208]



（式（２０）中、

$R_{21} \sim R_{28}$ のうちの１つは $L_{11}$ 又は $L_{12}$ と結合する単結合であり

、

$L_{11}$ 又は $L_{12}$ と結合する単結合ではない $R_{21} \sim R_{28}$ 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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )、

—O— ( $R_{904}$ )、

—S— ( $R_{905}$ )、

—N ( $R_{906}$ ) ( $R_{907}$ )、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である

。

$R_{901} \sim R_{907}$ は前記式(11)で定義した通りである。

$L_{11}$ 又は $L_{12}$ と結合する単結合ではない $R_{21} \sim R_{28}$ のうちの隣接する2以上は、互いに結合して環を形成しない。)

前記式(20)で表される1価の基ではない $Ar_{11a}$ 又は $Ar_{12a}$ は、

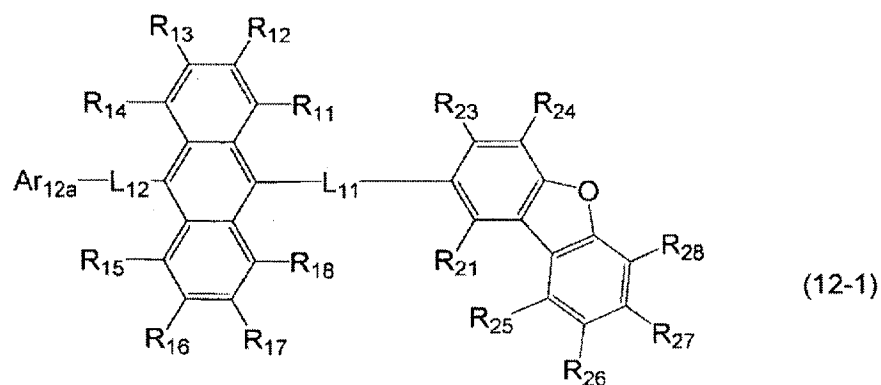
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

前記式(20)で表される1価の基以外の、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。]

[請求項32]

前記式(12)で表される化合物が、下記式(12-1)で表される化合物である、請求項31に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化209]



(式(12-1)中、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $L_{11}$ 及び $L_{12}$ は、前記式(11)で定義した通りである。

$A r_{12a}$ 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

前記式(20)で表される1価の基以外の、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{21}$ 及び $R_{23} \sim R_{28}$ 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( $R_{901}$ )( $R_{902}$ )( $R_{903}$ )、

—O—( $R_{904}$ )、

—S—( $R_{905}$ )、

—N( $R_{906}$ )( $R_{907}$ )、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

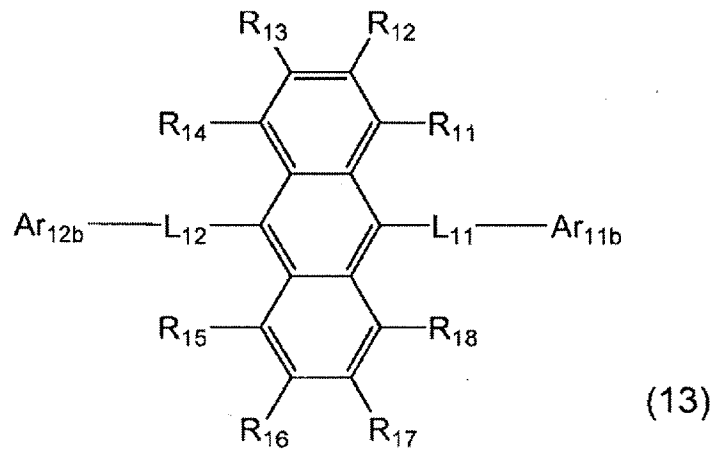
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は前記式(11)で定義した通りである。)

[請求項33]

前記式(11)で表される化合物が、下記式(13)で表される化合物である、請求項30に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化210]

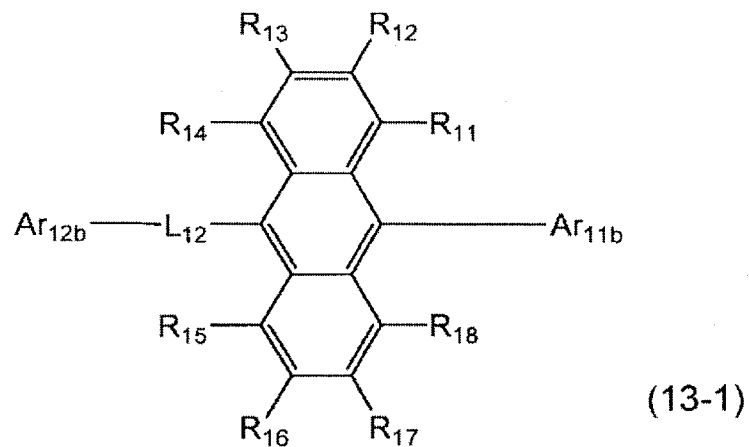


(式(13)中、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $L_{11}$ 及び $L_{12}$ は、前記式(11)で定義した通りである。

$Ar_{11b}$ 及び $Ar_{12b}$ 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のベンゼン環のみで構成されるアリール基である。)

[請求項34] 前記式(13)で表される化合物が、下記式(13-1)で表される化合物である、請求項33に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化211]



(式(13-1)中、 $R_{11} \sim R_{18}$ 及び $L_{12}$ は、前記式(11)で定義した通りである。

$A r_{11b}$ 及び $A r_{12b}$ 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のベンゼン環のみで構成されるアリール基である。)

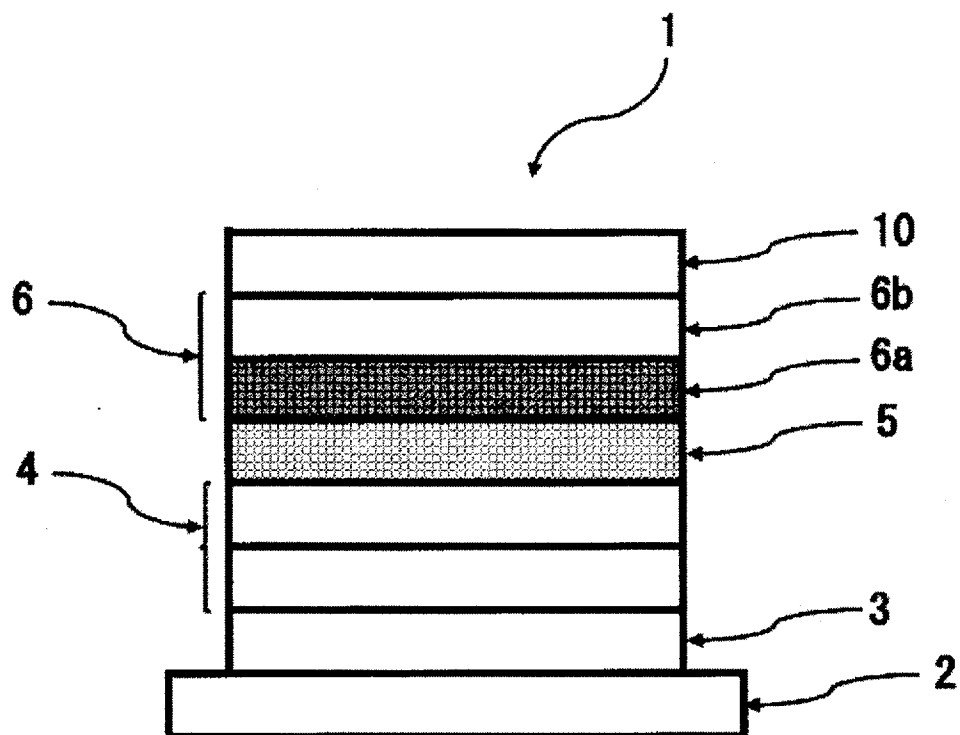
[請求項35]  $A r_{11b}$ 及び $A r_{12b}$ が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のビフェニルイル基、置換もしくは無置換のターフェニルイル基置換もしくは無置換のアントリル基、又は置換もしくは無置換のフェナントリル基である、請求項33又は34に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項36] 前記第1電子輸送層及び第2電子輸送層のいずれか一方又は両方が、さらにアルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属を含有する有機錯体、アルカリ土類金属を含有する有機錯体、及び、希土類金属を含有する有機錯体からなる群から選択される1種又は2種以上を含有する、請求項29～35のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項37] 前記陽極と前記発光層との間に正孔輸送層を有する、請求項28～36のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項38] 請求項27～37のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器。

[図1]



# INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2019/047833

## A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int.Cl. C07D409/04 (2006.01) i, C07D409/14 (2006.01) i, C09K11/06 (2006.01) i, H01L51/50 (2006.01) i

FI: C07D409/04CSP, C07D409/14CSP, H05B33/22B, H05B33/14B, C09K11/06690

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

## B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int.Cl. C07D409/04, C07D409/14, C09K11/06, H01L51/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996

Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2020

Registered utility model specifications of Japan 1996-2020

Published registered utility model applications of Japan 1994-2020

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CAplus/REGISTRY (STN)

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages | Relevant to claim No. |
|-----------|------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| X         | WO 2018/182259 A1 (LG CHEM, LTD.) 04.10.2018                                       | 1-14, 18-38           |
| Y         | (2018-10-04), claims 2, 7                                                          | 1-38                  |
| X         | KR 10-2019-0005805 A (LG CHEM LTD.) 16.01.2019                                     | 1-4, 6-12, 21-38      |
| Y         | (2019-01-16), claim 5                                                              | 1-38                  |
| X         | WO 2019/004612 A1 (LG CHEM, LTD.) 03.01.2019                                       | 1-4, 6-12, 21-38      |
| Y         | (2019-01-03), claims 1, 2, 9                                                       | 1-38                  |
| X         | KR 10-2018-0063710 A (P & H TECH CO., LTD.)                                        | 1-12, 21-38           |
| Y         | 12.06.2018 (2018-06-12), claim 2                                                   | 1-38                  |
| X         | KR 1959821 B1 (LT MATERIALS CO., LTD.) 20.03.2019                                  | 1-4, 6-12, 21-38      |
| Y         | (2019-03-20), claims 1-17, particularly, claims 1, 6, 8                            | 1-38                  |



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

\* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search  
28.01.2020

Date of mailing of the international search report  
10.02.2020

Name and mailing address of the ISA/  
Japan Patent Office  
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,  
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**

International application No.

PCT/JP2019/047833

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                         | Relevant to claim No. |
|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| Y         | CN 106883220 A (PEKING UNIVERSITY SHENZHEN GRADUATE SCHOOL) 23.06.2017 (2017-06-23), claims 1-10, paragraphs [0033]-[0035] | 1-38                  |
| Y         | WO 2013/077352 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 30.05.2013 (2013-05-30), claims 1-28                                          | 1-38                  |
| Y         | WO 2014/097711 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 26.06.2014 (2014-06-26), claims 1-39                                          | 1-38                  |
| Y         | WO 2013/077362 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 30.05.2013 (2013-05-30), claims 1-23                                          | 1-38                  |
| A         | WO 2007/069569 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 21.06.2007 (2007-06-21), entire text                                          | 1-38                  |

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**

Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2019/047833

|                      |            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|----------------------|------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| WO 2018/182259 A1    | 04.10.2018 | US 2019/0214571 A1<br>claims 2, 7<br>CN 109564982 A<br>KR 10-2018-0111558 A                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| KR 10-2019-0005805 A | 16.01.2019 | (Family: none)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| WO 2019/004612 A1    | 03.01.2019 | KR 10-2019-0002299 A<br>claims 1, 2, 9                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| KR 10-2018-0063710 A | 12.06.2018 | (Family: none)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| KR 1959821 B1        | 20.03.2019 | (Family: none)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| CN 106883220 A       | 23.06.2017 | (Family: none)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| WO 2013/077352 A1    | 30.05.2013 | US 2014/0001456 A1<br>claims 1-23<br>US 2014/0073784 A1<br>claims 1-28<br>US 2016/0111655 A1<br>US 2018/0102485 A1<br>US 2018/0331299 A1<br>EP 2752902 A1<br>EP 3211682 A1<br>CN 103380508 A<br>KR 10-2014-0101661 A<br>KR 10-2018-0008922 A<br>KR 10-2018-0049266 A<br>TW 201332995 A<br>CN 107342368 A<br>CN 107501244 A<br>CN 107556298 A<br>CN 107586290 A |
| WO 2014/097711 A1    | 26.06.2014 | US 2016/0197289 A1<br>claims 1-39<br>CN 104871332 A<br>KR 10-2015-0099750 A                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| WO 2013/077362 A1    | 30.05.2013 | US 2014/0312338 A1<br>claims 1-23<br>KR 10-2014-0095491 A<br>TW 201329202 A                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| WO 2007/069569 A1    | 21.06.2007 | EP 1962354 A1<br>entire text<br>CN 101331626 A<br>KR 10-2008-0080306 A<br>TW 200730027 A                                                                                                                                                                                                                                                                       |

| A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））<br>C07D 409/04(2006.01)i; C07D 409/14(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i<br>FI: C07D409/04 CSP; C07D409/14 CSP; H05B33/22 B; H05B33/14 B; C09K11/06 690                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                     |                                                                      |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|
| B. 調査を行った分野                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                                                                     |                                                                      |
| 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））<br>C07D409/04; C07D409/14; C09K11/06; H01L51/50                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                                     |                                                                      |
| 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの<br>日本国実用新案公報 1922-1996年<br>日本国公開実用新案公報 1971-2020年<br>日本国実用新案登録公報 1996-2020年<br>日本国登録実用新案公報 1994-2020年                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                     |                                                                      |
| 国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）<br>CAplus/REGISTRY (STN)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                     |                                                                      |
| C. 関連すると認められる文献                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                     |                                                                      |
| 引用文献の<br>カテゴリー*                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示                                   | 関連する<br>請求項の番号                                                       |
| X                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | WO 2018/182259 A1 (LG CHEM, LTD.) 04.10.2018 (2018-10-04)           | 1-14, 18-38                                                          |
| Y                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 請求項2, 7                                                             | 1-38                                                                 |
| X                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | KR 10-2019-0005805 A (LG CHEM LTD.) 16.01.2019 (2019-01-16)         | 1-4, 6-12, 21-38                                                     |
| Y                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 請求項5                                                                | 1-38                                                                 |
| X                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | WO 2019/004612 A1 (LG CHEM, LTD.) 03.01.2019 (2019-01-03)           | 1-4, 6-12, 21-38                                                     |
| Y                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 請求項1, 2, 9                                                          | 1-38                                                                 |
| X                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | KR 10-2018-0063710 A (P & H TECH CO., LTD.) 12.06.2018 (2018-06-12) | 1-12, 21-38                                                          |
| Y                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 請求項2                                                                | 1-38                                                                 |
| X                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | KR 1959821 B1 (LT MATERIALS CO., LTD.) 20.03.2019 (2019-03-20)      | 1-4, 6-12, 21-38                                                     |
| Y                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 請求項1-17（特に、請求項1, 6, 8）                                              | 1-38                                                                 |
| <input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                     |                                                                      |
| * 引用文献のカテゴリー<br>“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの<br>“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの<br>“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）<br>“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献<br>“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献<br>“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの<br>“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの<br>“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの<br>“&” 同一パテントファミリー文献 |                                                                     |                                                                      |
| 国際調査を完了した日<br>28.01.2020                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                                     | 国際調査報告の発送日<br>10.02.2020                                             |
| 名称及びあて先<br>日本国特許庁(ISA/JP)<br>〒100-8915<br>日本国<br>東京都千代田区霞が関三丁目4番3号                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                     | 権限のある職員（特許庁審査官）<br><br>三木 寛 4P 4151<br><br>電話番号 03-3581-1101 内線 3492 |

## C. 関連すると認められる文献

| 引用文献の<br>カテゴリー* | 引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示                                                                                  | 関連する<br>請求項の番号 |
|-----------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------|
| Y               | CN 106883220 A (PEKING UNIVERSITY SHENZHEN GRADUATE SCHOOL) 23.06.2017<br>(2017 - 06 - 23)<br>請求項1-10, 段落0033-0035 | 1-38           |
| Y               | WO 2013/077352 A1 (出光興産株式会社) 30.05.2013 (2013 - 05 - 30)<br>請求項1-28                                                | 1-38           |
| Y               | WO 2014/097711 A1 (出光興産株式会社) 26.06.2014 (2014 - 06 - 26)<br>請求項1-39                                                | 1-38           |
| Y               | WO 2013/077362 A1 (出光興産株式会社) 30.05.2013 (2013 - 05 - 30)<br>請求項1-23                                                | 1-38           |
| A               | WO 2007/069569 A1 (出光興産株式会社) 21.06.2007 (2007 - 06 - 21)<br>全文                                                     | 1-38           |

国際調査報告  
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2019/047833

| 引用文献 |                 |    | 公表日        | パテントファミリー文献        |    | 公表日 |
|------|-----------------|----|------------|--------------------|----|-----|
| WO   | 2018/182259     | A1 | 04.10.2018 | US 2019/0214571    | A1 |     |
|      |                 |    |            | 請求項2, 7            |    |     |
|      |                 |    |            | CN 109564982       | A  |     |
|      |                 |    |            | KR 10-2018-0111558 | A  |     |
| KR   | 10-2019-0005805 | A  | 16.01.2019 | (ファミリーなし)          |    |     |
| WO   | 2019/004612     | A1 | 03.01.2019 | KR 10-2019-0002299 | A  |     |
|      |                 |    |            | 請求項1, 2, 9         |    |     |
| KR   | 10-2018-0063710 | A  | 12.06.2018 | (ファミリーなし)          |    |     |
| KR   | 1959821         | B1 | 20.03.2019 | (ファミリーなし)          |    |     |
| CN   | 106883220       | A  | 23.06.2017 | (ファミリーなし)          |    |     |
| WO   | 2013/077352     | A1 | 30.05.2013 | US 2014/0001456    | A1 |     |
|      |                 |    |            | 請求項1-23            |    |     |
|      |                 |    |            | US 2014/0073784    | A1 |     |
|      |                 |    |            | 請求項1-28            |    |     |
|      |                 |    |            | US 2016/0111655    | A1 |     |
|      |                 |    |            | US 2018/0102485    | A1 |     |
|      |                 |    |            | US 2018/0331299    | A1 |     |
|      |                 |    |            | EP 2752902         | A1 |     |
|      |                 |    |            | EP 3211682         | A1 |     |
|      |                 |    |            | CN 103380508       | A  |     |
|      |                 |    |            | KR 10-2014-0101661 | A  |     |
|      |                 |    |            | KR 10-2018-0008922 | A  |     |
|      |                 |    |            | KR 10-2018-0049266 | A  |     |
|      |                 |    |            | TW 201332995       | A  |     |
|      |                 |    |            | CN 107342368       | A  |     |
|      |                 |    |            | CN 107501244       | A  |     |
|      |                 |    |            | CN 107556298       | A  |     |
|      |                 |    |            | CN 107586290       | A  |     |
| WO   | 2014/097711     | A1 | 26.06.2014 | US 2016/0197289    | A1 |     |
|      |                 |    |            | 請求項1-39            |    |     |
|      |                 |    |            | CN 104871332       | A  |     |
|      |                 |    |            | KR 10-2015-0099750 | A  |     |
| WO   | 2013/077362     | A1 | 30.05.2013 | US 2014/0312338    | A1 |     |
|      |                 |    |            | 請求項1-23            |    |     |
|      |                 |    |            | KR 10-2014-0095491 | A  |     |
|      |                 |    |            | TW 201329202       | A  |     |
| WO   | 2007/069569     | A1 | 21.06.2007 | EP 1962354         | A1 |     |
|      |                 |    |            | 全文                 |    |     |
|      |                 |    |            | CN 101331626       | A  |     |
|      |                 |    |            | KR 10-2008-0080306 | A  |     |
|      |                 |    |            | TW 200730027       | A  |     |