

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7693022号
(P7693022)

(45)発行日 令和7年6月16日(2025.6.16)

(24)登録日 令和7年6月6日(2025.6.6)

(51)国際特許分類

C 0 7 D 307/77 (2006.01)	F I	C 0 7 D 307/77	C S P
C 0 9 K 11/06 (2006.01)		C 0 9 K 11/06	6 9 0
H 1 0 K 85/60 (2023.01)		H 1 0 K 85/60	
H 1 0 K 50/12 (2023.01)		H 1 0 K 50/12	
H 1 0 K 50/13 (2023.01)		H 1 0 K 50/13	

請求項の数 18 (全315頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2023-571037(P2023-571037)
 (86)(22)出願日 令和4年12月26日(2022.12.26)
 (86)国際出願番号 PCT/JP2022/048061
 (87)国際公開番号 WO2023/127843
 (87)国際公開日 令和5年7月6日(2023.7.6)
 審査請求日 令和7年2月26日(2025.2.26)
 (31)優先権主張番号 特願2021-212989(P2021-212989)
 (32)優先日 令和3年12月27日(2021.12.27)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)
 (31)優先権主張番号 特願2022-125649(P2022-125649)
 (32)優先日 令和4年8月5日(2022.8.5)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)
 早期審査対象出願

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

最終頁に続く

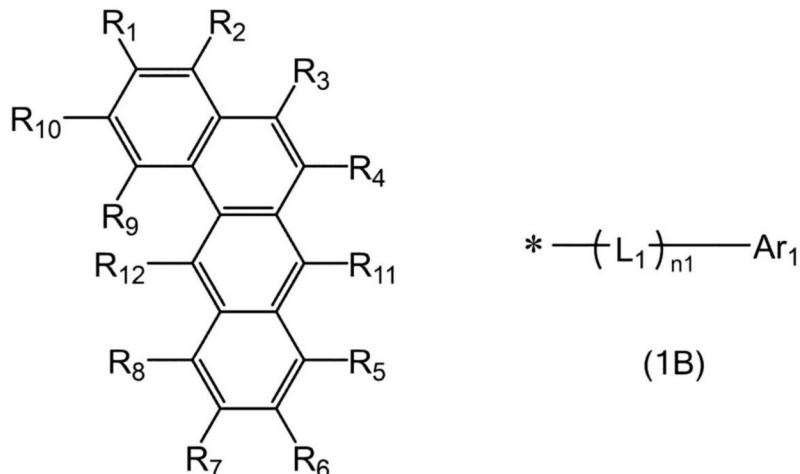
(54)【発明の名称】 化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子、及び電子機器

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式(1A)で表される化合物。

【化1】



- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

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

前記一般式 (1 B - 2) において、

R₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及び R₇₁ ~ R₇₄ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及び R₇₁ ~ R₇₄ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1 B - 1) における R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及び R₆₁ ~ R₆₄ と同義であり、

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

前記一般式 (1 B - 3) において、

R₅₁ ~ R₅₅、及び R₈₁ ~ R₈₄ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R₅₁ ~ R₅₅、及び R₈₁ ~ R₈₄ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1 B - 1) における R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及び R₆₁ ~ R₆₄ と同義であり、

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

前記一般式 (1 B - 1)、(1 B - 2)、及び (1 B - 3) で表される基において、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₉₀₆、及び R₉₀₇ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

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

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

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

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

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

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

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

【請求項 4】

請求項 1 に記載の化合物において、

前記「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であり、

前記「置換もしくは無置換」と記載された環は、いずれも「無置換」の環である、化合物。

【請求項 5】

請求項 1 から請求項 4 のいずれか一項に記載の化合物を含有する、

有機エレクトロミネッセンス素子。

【請求項 6】

10

20

30

40

50

請求項5に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子であって、
 陽極と、
 陰極と、
 前記陽極及び前記陰極の間に配置された有機層と、を有し、
 前記有機層の少なくとも一層は、前記化合物を含有する、
 有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項7】

請求項6に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子であって、
 前記有機層は、発光領域を有し、
 前記発光領域は、少なくとも1つの発光層を含み、
 前記発光層は、前記化合物を含有する、
 有機エレクトロルミネッセンス素子。

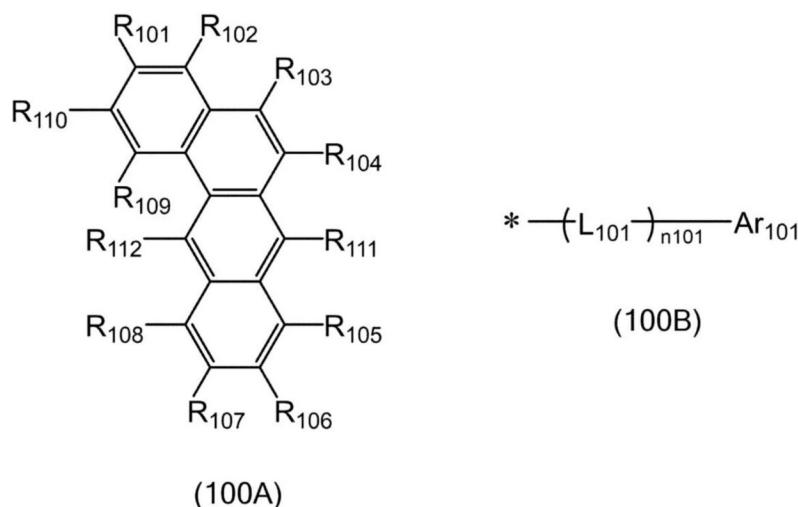
10

【請求項8】

陽極と、
 陰極と、
 前記陽極及び前記陰極の間に配置された発光領域と、を有し、
 前記発光領域は、第一の発光層及び第二の発光層を含み、
 前記第一の発光層は、下記一般式(100A)で表される第一の化合物を含有し、
 前記第二の発光層は、第二の化合物を含有する、
 有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【化3】



30

(前記一般式(100A)において、

R₁₁₁は、前記一般式(100B)で表される基であり、

R₁₀₁～R₁₁₀及びR₁₁₂は、それぞれ独立に、
 水素原子であり、

前記一般式(100B)において、

n₁₀₁は0であり、

A_r₁₀₁は、置換もしくは無置換のベンゾナフトフラニル基であり、

*は、前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、
 ただし、前記一般式(100A)におけるR₁₀₁～R₁₁₂のうち、少なくともいずれかが重水素原子である。)

40

【請求項9】

請求項8に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の化合物の三重項エネルギーT₁(H1)と前記第二の化合物の三重項エネルギーT₁(H2)とが、下記式(数1)の関係を満たす、

50

組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

* は前記一般式 (100A) 中のベンズ [a] アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式 (1B-3) において、

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

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

* は前記一般式 (100A) 中のベンズ [a] アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式 (1B-1)、(1B-2)、及び (1B-3) で表される基において、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{906} 、及び R_{907} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

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

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

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

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

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

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

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

【請求項 12】

請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であり、

前記「置換もしくは無置換」と記載された環は、いずれも「無置換」の環である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 13】

請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の発光層と前記第二の発光層とが、直接、接している、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 14】

請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の発光層は、前記陽極と前記第二の発光層との間に配置されている、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 15】

請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記第一の発光層は、第一の発光性化合物を含有し、前記第二の発光層は、第二の発光性化合物を含有し、

前記第一の発光性化合物及び前記第二の発光性化合物は、それぞれ独立に、最大ピーク

10

20

30

40

50

波長が 500 nm 以下の発光を示す化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 16】

請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記陽極と、前記発光領域との間に、正孔輸送層を有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 17】

請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記陰極と、前記発光領域との間に、電子輸送層を有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 18】

請求項 8 から請求項 17 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を
搭載した、電子機器。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子、及び電子機器に関する。

【背景技術】

【0002】

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

有機 EL 素子の性能向上を図るため、有機 EL 素子に用いる化合物について様々な検討
がなされている（例えば、特許文献 1 ~ 2 参照）。有機 EL 素子の性能としては、例えば
、輝度、発光波長、色度、発光効率、駆動電圧、及び寿命が挙げられる。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

【文献】国際公開第 2021 / 132535 号

【文献】特表第 2013 - 509363 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

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

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

【課題を解決するための手段】

【0005】

本発明の一態様によれば、下記一般式（1A）で表される化合物が提供される。

10

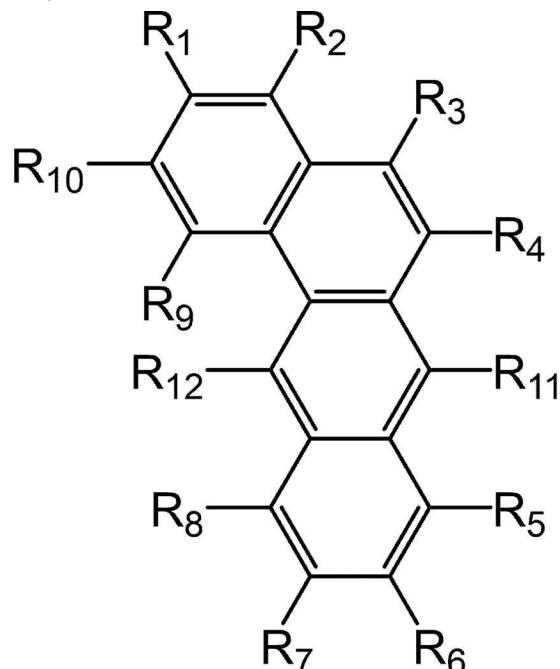
20

30

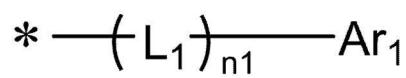
40

50

【化1】



(1A)



10

(1B)

【0006】

(前記一般式(1A)において、

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

、
R₁～R₃、R₉、並びに前記一般式(1B)で表される基以外のR₄～R₈及びR₁₀～R₁₂は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

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

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

-C(=O)R₈₀₁で表される基、-COOR₈₀₂で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₈₀₁、及びR₈₀₂は、それぞれ
独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

30

40

50

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₅ が複数存在する場合、複数の R₉₀₅ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₁ が複数存在する場合、複数の R₈₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₂ が複数存在する場合、複数の R₈₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、
 前記一般式 (1B) において、

10

n₁ は 0 又は 1 以上の整数であり、

n₁ が 1 以上の整数である場合の L₁ は、

無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環が 2 環以上縮合した、環形成炭素数 10 ~ 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 倍の複素環基であり、

ただし、無置換の場合の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基は、縮合環ではなく、

L₁ が 2 以上存在する場合、2 以上の L₁ は、互いに同一であるか、又は異なり、

A_{r1} は、

置換もしくは無置換の環が 4 環以上縮合したアリール基、又は

20

置換もしくは無置換の環が 4 環以上縮合した複素環基であり、

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

ただし、前記一般式 (1A) における R₁ ~ R₁₂、並びに前記一般式 (1B) における L₁ 及び A_{r1} のうち、少なくともいずれかが重水素原子を少なくとも 1 つ有し、L₁ のみが重水素原子を有する場合、L₁ を構成する環のうち前記一般式 (1A) 中のベンズ [a] アントラセン環と直接結合する環に重水素原子が結合する。)

【0007】

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

【0008】

30

本発明の一態様によれば、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された発光領域と、を有し、前記発光領域は、第一の発光層及び第二の発光層を含み、前記第一の発光層は、下記一般式 (100A) で表される第一の化合物を含有し、前記第二の発光層は、第二の化合物を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

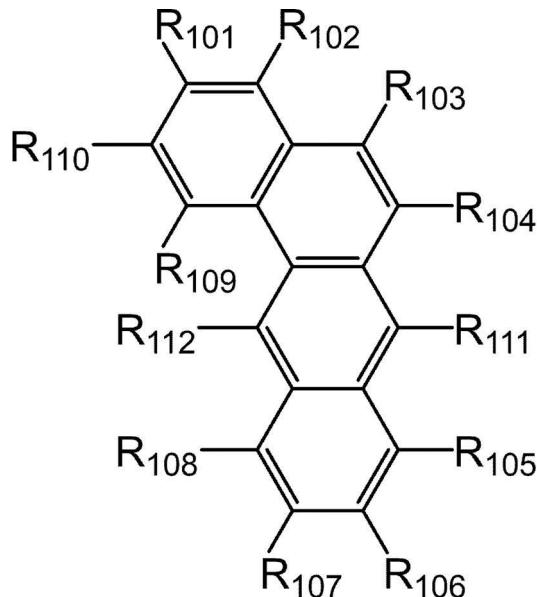
。

【0009】

40

50

【化2】



(100A)

* $-\left(L_{101}\right)_{n101}-Ar_{101}$

(100B)

【0010】

(前記一般式(100A)において、

R₁₀₁～R₁₁₂のうちの1つは、前記一般式(100B)で表される基であり、前記一般式(100B)で表される基以外のR₁₀₁～R₁₁₂は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

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

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

-C(=O)R₈₀₁で表される基、-COOR₈₀₂で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₈₀₁、及びR₈₀₂は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

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

10

20

30

40

50

R₉₀₃が複数存在する場合、複数のR₉₀₃は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₄が複数存在する場合、複数のR₉₀₄は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₅が複数存在する場合、複数のR₉₀₅は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₁が複数存在する場合、複数のR₈₀₁は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₂が複数存在する場合、複数のR₈₀₂は、互いに同一であるか又は異なり、
 前記一般式(100B)において、
 n₁₀₁は0又は1以上の整数であり、
 n₁₀₁が1以上の整数である場合のL₁₀₁は、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、
 置換もしくは無置換の環が2環以上縮合した、環形成炭素数10～50のアリーレン
 基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基であり、
 ただし、無置換の場合の環形成炭素数6～50のアリーレン基は、縮合環ではなく、
 L₁₀₁が2以上存在する場合、2以上のL₁₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり
 、
 Ar₁₀₁は、
 置換もしくは無置換の環が3環以上縮合したアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環が3環以上縮合した複素環基であり、

*は、前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、
 ただし、前記一般式(100A)におけるR₁₀₁～R₁₁₂、並びに前記一般式(100B)におけるL₁₀₁及びAr₁₀₁のうち、少なくともいずれかが重水素原子を少なくとも1つ有し、L₁₀₁のみが重水素原子を有する場合、L₁₀₁を構成する環のうち前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環と直接結合する環に重水素原子が結合する。)

【0011】

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

【0012】

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

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

【図面の簡単な説明】

【0013】

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

【図2】本発明の一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の別の一例の概略構成を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【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)、及び三重水素(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、

10

20

30

40

50

単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、及び複素環化合物)の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。

当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まれない。以下で記される「環形成炭素数」については、別途記載のない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が6であり、ナフタレン環は環形成炭素数が10であり、ピリジン環は環形成炭素数5であり、フラン環は環形成炭素数4である。また、例えば、9,9'-ジフェニルフルオレニル基の環形成炭素数は13であり、9,9'-スピロビフルオレニル基の環形成炭素数は25である。

また、ベンゼン環に置換基として、例えば、アルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、ベンゼン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているベンゼン環の環形成炭素数は、6である。また、ナフタレン環に置換基として、例えば、アルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、ナフタレン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているナフタレン環の環形成炭素数は、10である。

【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、及び環集合)の化合物(例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、及び複素環化合物)の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子(例えば、環を構成する原子の結合を終端する水素原子)や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まれない。以下で記される「環形成原子数」については、別途記載のない限り同様とする。例えば、ピリジン環の環形成原子数は6であり、キナゾリン環の環形成原子数は10であり、フラン環の環形成原子数は5である。例えば、ピリジン環に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子の数は、ピリジン環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているピリジン環の環形成原子数は、6である。また、例えば、キナゾリン環の炭素原子に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子については、キナゾリン環の環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているキナゾリン環の環形成原子数は10である。

【0018】

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

【0019】

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

【0020】

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

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

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

【0021】

10

20

30

40

50

「本明細書に記載の置換基」

以下、本明細書に記載の置換基について説明する。

【0022】

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。 10

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。 20

【0023】

・「置換もしくは無置換のアリール基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」の具体例（具体例群G1）としては、以下の無置換のアリール基（具体例群G1A）及び置換のアリール基（具体例群G1B）等が挙げられる。（ここで、無置換のアリール基とは「置換もしくは無置換のアリール基」が「無置換のアリール基」である場合を指し、置換のアリール基とは「置換もしくは無置換のアリール基」が「置換のアリール基」である場合を指す。）本明細書において、単に「アリール基」という場合は、「無置換のアリール基」と「置換のアリール基」の両方を含む。 30

「置換のアリール基」は、「無置換のアリール基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアリール基」としては、例えば、下記具体例群G1Aの「無置換のアリール基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び下記具体例群G1Bの置換のアリール基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のアリール基」の例、及び「置換のアリール基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアリール基」には、下記具体例群G1Bの「置換のアリール基」におけるアリール基自体の炭素原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び下記具体例群G1Bの「置換のアリール基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

【0024】

・無置換のアリール基（具体例群G1A）：

フェニル基、

p-ビフェニル基、

m-ビフェニル基、

o-ビフェニル基、

p-ターフェニル-4-イル基、

p-ターフェニル-3-イル基、

p-ターフェニル-2-イル基、

m-ターフェニル-4-イル基、

m-ターフェニル-3-イル基、

40

50

m - ターフェニル - 2 - イル基、
 o - ターフェニル - 4 - イル基、
 o - ターフェニル - 3 - イル基、
 o - ターフェニル - 2 - イル基、
 1 - ナフチル基、
 2 - ナフチル基、
 アントリル基、
 ベンゾアントリル基、
 フェナントリル基、
 ベンゾフェナントリル基、
 フェナレニル基、
 ピレニル基、
 クリセニル基、
 ベンゾクリセニル基、
 トリフェニレニル基、
 ベンゾトリフェニレニル基、
 テトラセニル基、
 ペンタセニル基、
 フルオレニル基、
 9, 9' - スピロビフルオレニル基、
 ベンゾフルオレニル基、
 ジベンゾフルオレニル基、
 フルオランテニル基、
 ベンゾフルオランテニル基、
 ペリレニル基、及び
 下記一般式 (TEMP-1) ~ (TEMP-15) で表される環構造から 1 つの水素原子
 を除くことにより誘導される 1 値のアリール基。
 【0025】

10

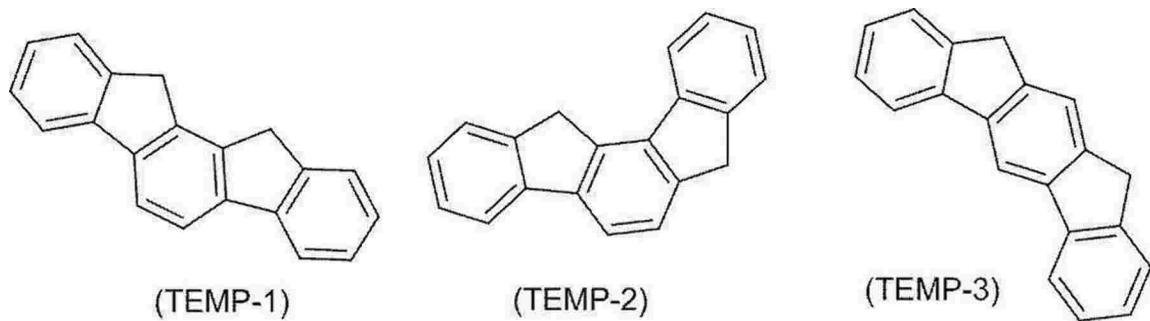
20

30

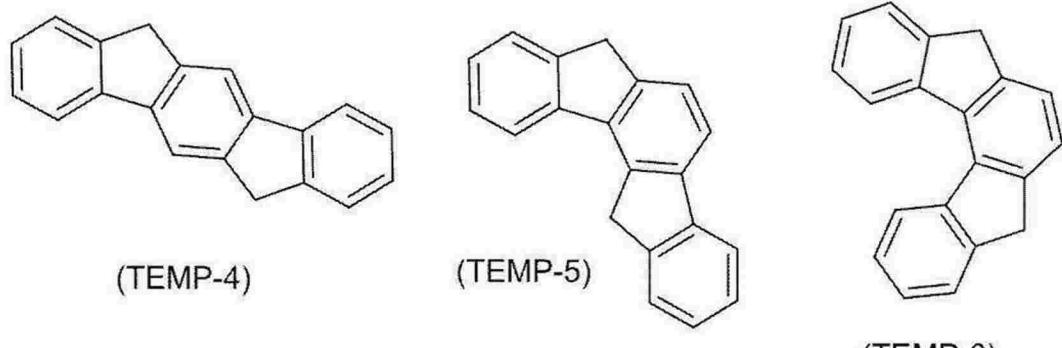
40

50

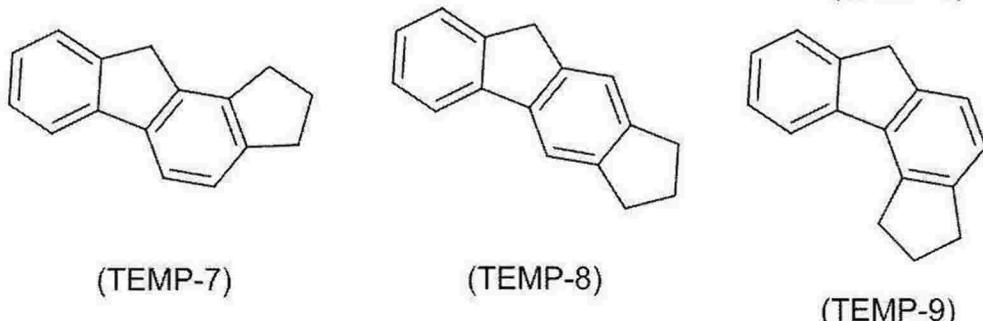
【化3】



10



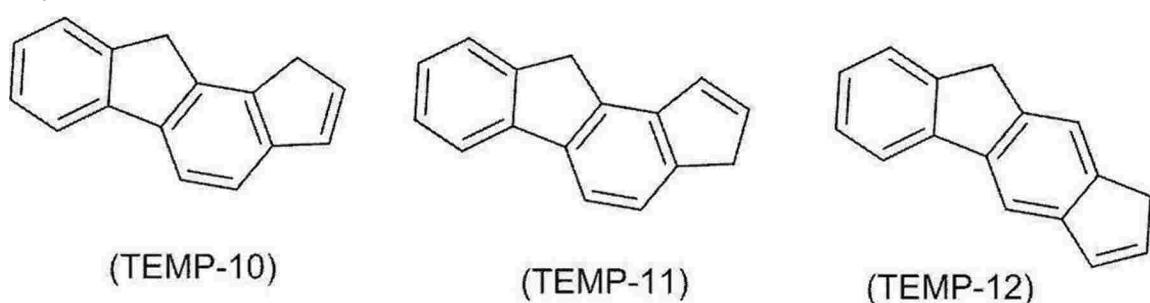
20



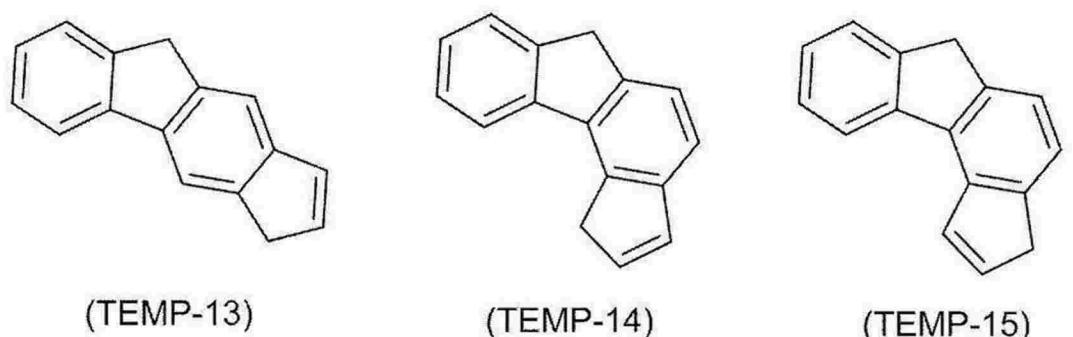
【0026】

30

【化4】



40



50

【0027】

・置換のアリール基（具体例群G1B）：

o - トリル基、
 m - トリル基、
 p - トリル基、
 パラ - キシリル基、
 メタ - キシリル基、
 オルト - キシリル基、
 パラ - イソプロピルフェニル基、
 メタ - イソプロピルフェニル基、
 オルト - イソプロピルフェニル基、
 パラ - t - ブチルフェニル基、
 メタ - t - ブチルフェニル基、
 オルト - t - ブチルフェニル基、
 3, 4, 5 - トリメチルフェニル基、
 9, 9 - ジメチルフルオレニル基、
 9, 9 - ジフェニルフルオレニル基、
 9, 9 - ビス(4 - メチルフェニル)フルオレニル基、
 9, 9 - ビス(4 - イソプロピルフェニル)フルオレニル基、
 9, 9 - ビス(4 - t - ブチルフェニル)フルオレニル基、
 シアノフェニル基、
 トリフェニルシリルフェニル基、
 トリメチルシリルフェニル基、
 フェニルナフチル基、
 ナフチルフェニル基、及び

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

【0028】

・「置換もしくは無置換の複素環基」

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

本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基である。

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

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

「置換の複素環基」は、「無置換の複素環基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換の複素環基」の具体例は、下記具体例群G2Aの「無置換の複素環基」の水素原子が置き換わった基、及び下記具体例群G2Bの置換の複素環基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換の複素環基」の例や「置換の複素環基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換の複素環基」には、具体例群G2Bの「置換の複素環基」における複素環基自体の環形成原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G2Bの「置換の複素環基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

【0029】

10

20

30

40

50

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

【 0 0 3 0 】

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

10

【 0 0 3 1 】

・窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 1）：

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

20

30

40

50

アザカルバゾリル基、及びジアザカルバゾリル基。

【 0 0 3 2 】

・酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 2 ）：

フリル基、

オキサゾリル基、

イソオキサゾリル基、

オキサジアゾリル基、

キサンテニル基、

ベンゾフラニル基、

イソベンゾフラニル基、

ジベンゾフラニル基、

ナフトベンゾフラニル基、

ベンゾオキサゾリル基、

ベンゾイソキサゾリル基、

フェノキサジニル基、

モルホリノ基、

ジナフトフラニル基、

アザジベンゾフラニル基、

ジアザジベンゾフラニル基、

アザナフトベンゾフラニル基、及び

ジアザナフトベンゾフラニル基。

【 0 0 3 3 】

・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 3 ）：

チエニル基、

チアゾリル基、

イソチアゾリル基、

チアジアゾリル基、

ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基）、

イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基）、

ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、

ナフトベンゾチオフェニル基（ナフトベンゾチエニル基）、

ベンゾチアゾリル基、

ベンゾイソチアゾリル基、

フェノチアジニル基、

ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、

アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、

ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、

アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフトベンゾチエニル基）、及び

ジアザナフトベンゾチオフェニル基（ジアザナフトベンゾチエニル基）。

【 0 0 3 4 】

・下記一般式（T E M P - 1 6 ）～（T E M P - 3 3 ）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群 G 2 A 4 ）：

【 0 0 3 5 】

10

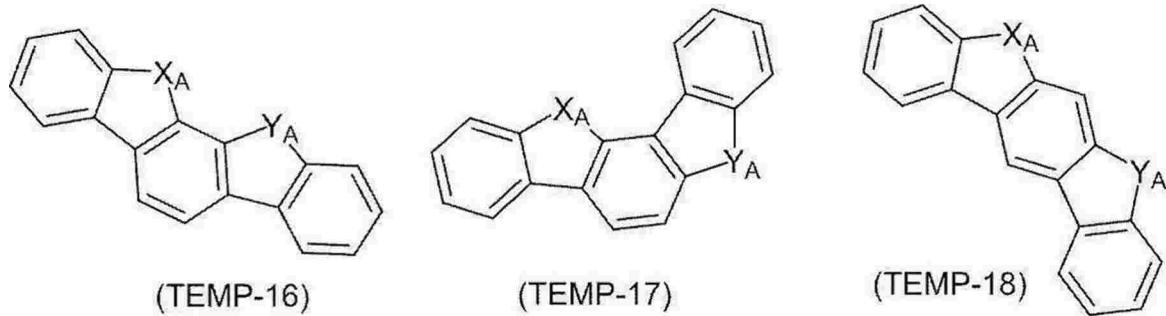
20

30

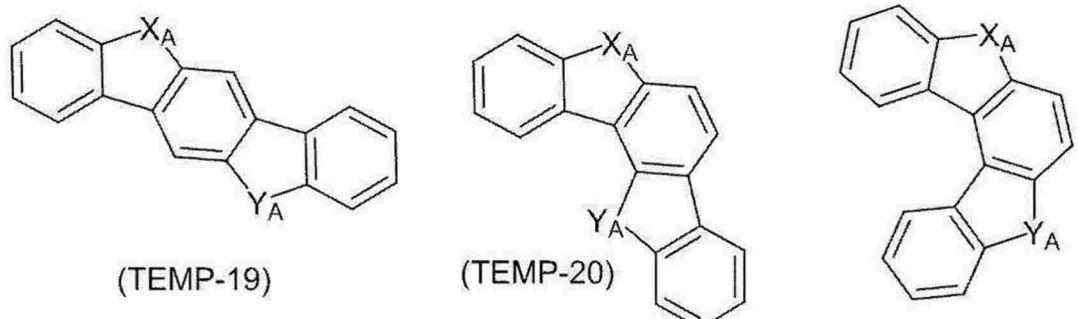
40

50

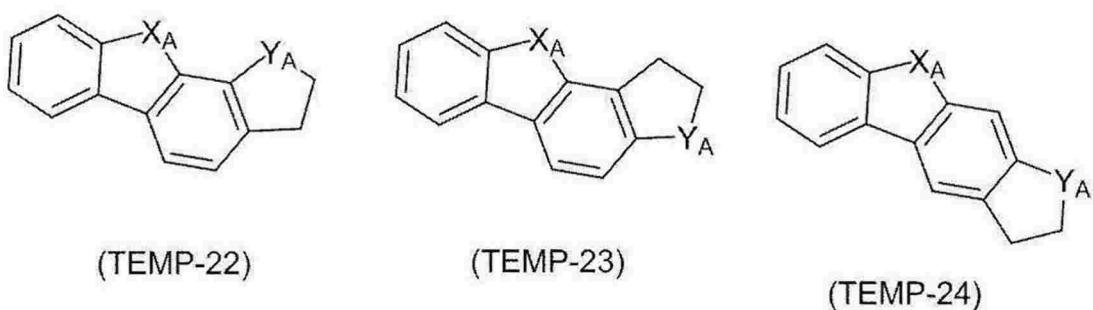
【化 5】



10



20



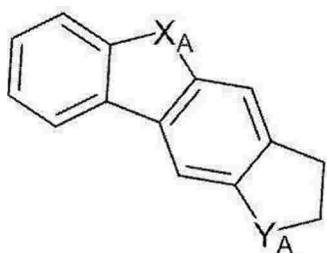
30

【0036】

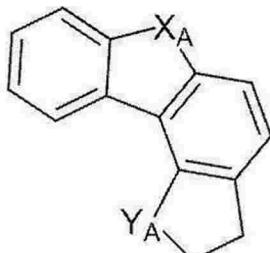
40

50

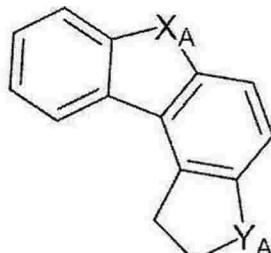
【化6】



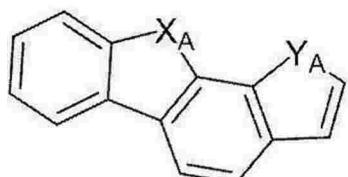
(TEMP-25)



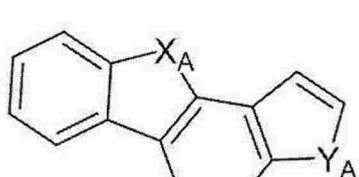
(TEMP-26)



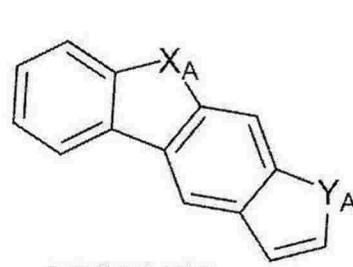
(TEMP-27)



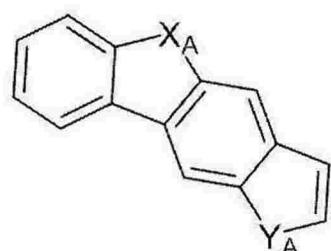
(TEMP-28)



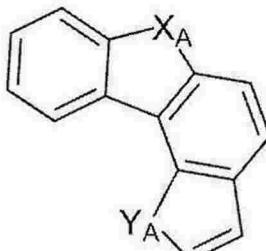
(TEMP-29)



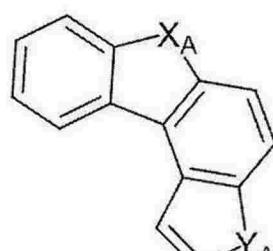
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

【0037】

前記一般式(TEMP-16)～(TEMP-33)において、X_A及びY_Aは、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、NH、又はCH₂である。ただし、X_A及びY_Aのうち少なくとも1つは、酸素原子、硫黄原子、又はNHである。

前記一般式(TEMP-16)～(TEMP-33)において、X_A及びY_Aの少なくともいずれかがNH、又はCH₂である場合、前記一般式(TEMP-16)～(TEMP-33)で表される環構造から誘導される1価の複素環基には、これらNH、又はCH₂から1つの水素原子を除いて得られる1価の基が含まれる。

【0038】

- ・窒素原子を含む置換の複素環基(具体例群G2B1)：
 - (9-フェニル)カルバゾリル基、
 - (9-ビフェニリル)カルバゾリル基、
 - (9-フェニル)フェニルカルバゾリル基、
 - (9-ナフチル)カルバゾリル基、
 - ジフェニルカルバゾール-9-イル基、
 - フェニルカルバゾール-9-イル基、
 - メチルベンゾイミダゾリル基、
 - エチルベンゾイミダゾリル基、
 - フェニルトリアジニル基、
 - ビフェニルトリアジニル基、

ジフェニルトリアジニル基、

フェニルキナゾリニル基、及びビフェニリルキナゾリニル基。

【0039】

・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G2B2）：

フェニルジベンゾフラニル基、

メチルジベンゾフラニル基、

t-ブチルジベンゾフラニル基、及び

スピロ[9H-キサンテン-9,9'-[9H]フルオレン]の1価の残基。

【0040】

・硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群G2B3）：

フェニルジベンゾチオフェニル基、

メチルジベンゾチオフェニル基、

t-ブチルジベンゾチオフェニル基、及び

スピロ[9H-チオキサンテン-9,9'-[9H]フルオレン]の1価の残基。

【0041】

・前記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から誘導される1価の複素環基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群G2B4）：

【0042】

前記「1価の複素環基の1つ以上の水素原子」とは、該1価の複素環基の環形成炭素原子に結合している水素原子、XA及びYAの少なくともいずれかがNHである場合の窒素原子に結合している水素原子、及びXA及びYAの一方がCH₂である場合のメチレン基の水素原子から選ばれる1つ以上の水素原子を意味する。

【0043】

・「置換もしくは無置換のアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」の具体例（具体例群G3）としては、以下の無置換のアルキル基（具体例群G3A）及び置換のアルキル基（具体例群G3B）が挙げられる。（ここで、無置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「無置換のアルキル基」である場合を指し、置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「置換のアルキル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキル基」という場合は、「無置換のアルキル基」と「置換のアルキル基」の両方を含む。

「置換のアルキル基」は、「無置換のアルキル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキル基」（具体例群G3A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のアルキル基（具体例群G3B）の例等が挙げられる。本明細書において、「無置換のアルキル基」におけるアルキル基は、鎖状のアルキル基を意味する。そのため、「無置換のアルキル基」は、直鎖である「無置換のアルキル基」、及び分岐状である「無置換のアルキル基」が含まれる。尚、ここに列挙した「無置換のアルキル基」の例や「置換のアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルキル基」には、具体例群G3Bの「置換のアルキル基」におけるアルキル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G3Bの「置換のアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

【0044】

・無置換のアルキル基（具体例群G3A）：

メチル基、

エチル基、

n-プロピル基、

イソプロピル基、

n-ブチル基、

イソブチル基、

s-ブチル基、及び

10

20

30

40

50

t - プチル基。

【 0 0 4 5 】

・置換のアルキル基（具体例群 G 3 B ）：

ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、

ペンタフルオロエチル基、

2 , 2 , 2 - トリフルオロエチル基、及び

トリフルオロメチル基。

【 0 0 4 6 】

・「置換もしくは無置換のアルケニル基」

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

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

【 0 0 4 7 】

・無置換のアルケニル基（具体例群 G 4 A ）：

ビニル基、

アリル基、

1 - プテニル基、

2 - プテニル基、及び

3 - プテニル基。

【 0 0 4 8 】

・置換のアルケニル基（具体例群 G 4 B ）：

1 , 3 - ブタンジエニル基、

1 - メチルビニル基、

1 - メチルアリル基、

1 , 1 - ジメチルアリル基、

2 - メチルアリル基、及び

1 , 2 - ジメチルアリル基。

【 0 0 4 9 】

・「置換もしくは無置換のアルキニル基」

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

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

10

20

30

40

50

【0050】

- ・無置換のアルキニル基（具体例群G5A）：

エチニル基

【0051】

- ・「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」の具体例（具体例群G6）としては、以下の無置換のシクロアルキル基（具体例群G6A）、及び置換のシクロアルキル基（具体例群G6B）等が挙げられる。（ここで、無置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「無置換のシクロアルキル基」である場合を指し、置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「置換のシクロアルキル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「シクロアルキル基」という場合は、「無置換のシクロアルキル基」と「置換のシクロアルキル基」の両方を含む。

「置換のシクロアルキル基」は、「無置換のシクロアルキル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のシクロアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のシクロアルキル基」（具体例群G6A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のシクロアルキル基（具体例群G6B）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のシクロアルキル基」の例や「置換のシクロアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のシクロアルキル基」には、具体例群G6Bの「置換のシクロアルキル基」におけるシクロアルキル基自体の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び具体例群G6Bの「置換のシクロアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

【0052】

- ・無置換のシクロアルキル基（具体例群G6A）：

シクロプロピル基、

シクロブチル基、

シクロペンチル基、

シクロヘキシル基、

1 - アマンチル基、

2 - アマンチル基、

1 - ノルボルニル基、及び

2 - ノルボルニル基。

【0053】

- ・置換のシクロアルキル基（具体例群G6B）：

4 - メチルシクロヘキシル基。

【0054】

- ・「-Si(R901)(R902)(R903)で表される基」

本明細書に記載の- Si(R901)(R902)(R903)で表される基の具体例（具体例群G7）としては、

- Si(G1)(G1)(G1)、

- Si(G1)(G2)(G2)、

- Si(G1)(G1)(G2)、

- Si(G2)(G2)(G2)、

- Si(G3)(G3)(G3)、及び

- Si(G6)(G6)(G6)

が挙げられる。ここで、

G1は、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G2は、具体例群G2に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

10

20

30

40

50

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

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

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

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

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

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

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

【 0 0 5 5 】

- ・「 - O - (R 9 0 4) で表される基」

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

- O (G 1) 、
- O (G 2) 、
- O (G 3) 、及び
- O (G 6)

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

【 0 0 5 6 】

- ・「 - S - (R 9 0 5) で表される基」

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

- S (G 1) 、
- S (G 2) 、
- S (G 3) 、及び
- S (G 6)

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

【 0 0 5 7 】

- ・「 - N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基」

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

- N (G 1) (G 1) 、
- N (G 2) (G 2) 、
- N (G 1) (G 2) 、
- N (G 3) (G 3) 、及び
- N (G 6) (G 6)

が挙げられる。

ここで、

10

20

30

40

50

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

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

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

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

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

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

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

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

【 0 0 5 8 】

・「ハロゲン原子」

10

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

【 0 0 5 9 】

・「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも 1 つの水素原子がフッ素原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がフッ素原子で置き換わった基（パーフルオロ基）も含む。「無置換のフルオロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1 ~ 5 0 であり、好ましくは 1 ~ 3 0 であり、より好ましくは 1 ~ 1 8 である。「置換のフルオロアルキル基」は、「フルオロアルキル基」の 1 つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のフルオロアルキル基」には、「置換のフルオロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のフルオロアルキル基」における置換基の 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のフルオロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群 G 3 ）における 1 つ以上の水素原子がフッ素原子と置き換わった基の例等が挙げられる。

20

【 0 0 6 0 】

・「置換もしくは無置換のハロアルキル基」

30

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のハロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも 1 つの水素原子がハロゲン原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がハロゲン原子で置き換わった基も含む。「無置換のハロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1 ~ 5 0 であり、好ましくは 1 ~ 3 0 であり、より好ましくは 1 ~ 1 8 である。「置換のハロアルキル基」は、「ハロアルキル基」の 1 つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のハロアルキル基」には、「置換のハロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のハロアルキル基」における置換基の 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のハロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群 G 3 ）における 1 つ以上の水素原子がハロゲン原子と置き換わった基の例等が挙げられる。ハロアルキル基をハロゲン化アルキル基と称する場合がある。

40

【 0 0 6 1 】

・「置換もしくは無置換のアルコキシ基」

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

50

【0062】

- ・「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」

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

【0063】

- ・「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」

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

10

【0064】

- ・「置換もしくは無置換のアリールチオ基」

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

20

【0065】

- ・「置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基」

本明細書に記載の「トリアルキルシリル基」の具体例としては、-Si(G3)(G3)(G3)で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。-Si(G3)(G3)(G3)における複数のG3は、互いに同一であるか、又は異なる。「トリアルキルシリル基」の各アルキル基の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1~50であり、好ましくは1~20であり、より好ましくは1~6である。

【0066】

30

- ・「置換もしくは無置換のアラルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、-(G3)-(G1)で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」であり、G1は、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。従って、「アラルキル基」は、「アルキル基」の水素原子が置換基としての「アリール基」と置き換わった基であり、「置換のアルキル基」の一態様である。「無置換のアラルキル基」は、「無置換のアリール基」が置換した「無置換のアルキル基」であり、「無置換のアラルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、7~50であり、好ましくは7~30であり、より好ましくは7~18である。

「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、ベンジル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-t-ブチル基、-ナフチルメチル基、1--ナフチルエチル基、2--ナフチルエチル基、1--ナフチルイソプロピル基、-ナフチルメチル基、1--ナフチルエチル基、2--ナフチルエチル基、1--ナフチルイソプロピル基、及び2--ナフチルイソプロピル基等が挙げられる。

40

【0067】

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

50

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

【0068】

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

10

20

30

【0069】

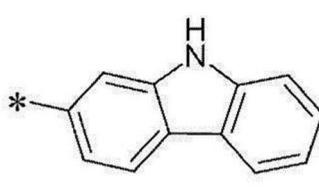
本明細書において、カルバゾリル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

【0070】

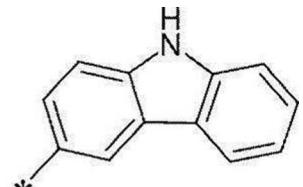
【化7】



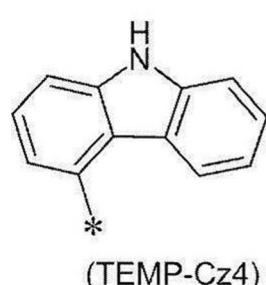
(TEMP-Cz1)



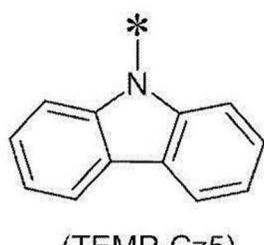
(TEMP-Cz2)



(TEMP-Cz3)



(TEMP-Cz4)



(TEMP-Cz5)

40

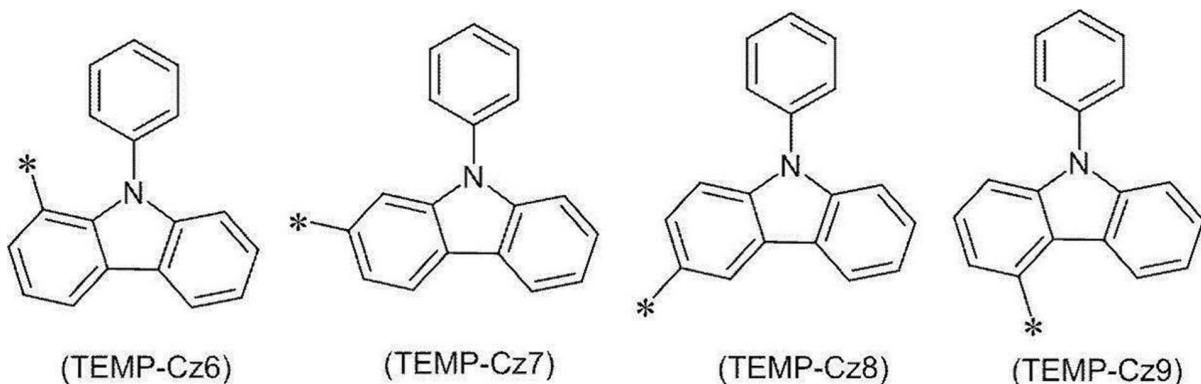
【0071】

本明細書において、(9-フェニル)カルバゾリル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

【0072】

50

【化 8】



【0073】

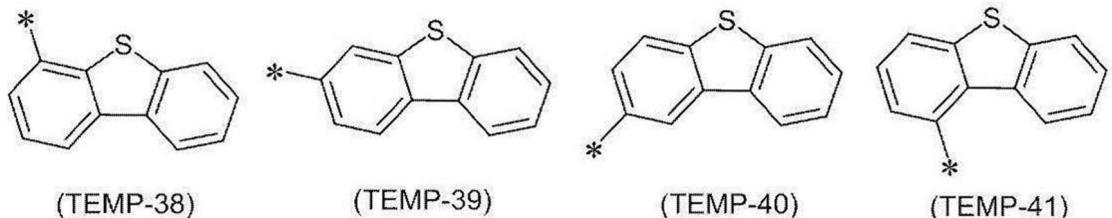
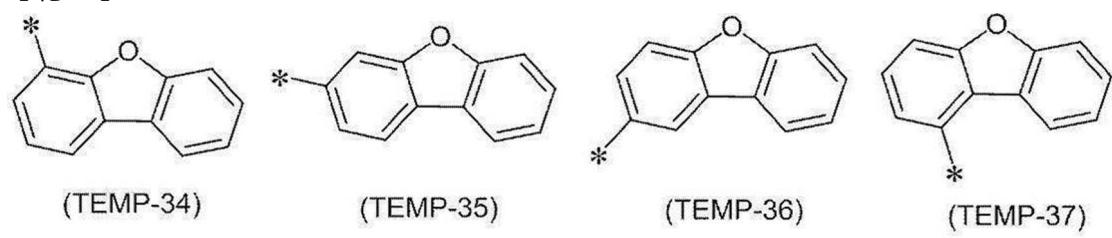
前記一般式 (TEMP-Cz1) ~ (TEMP-Cz9) 中、*は、結合位置を表す。

【0074】

本明細書において、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

【0075】

【化9】



【0076】

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

【0077】

本明細書に記載の置換もしくは無置換のアルキル基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、及びt-ブチル基等である。

【0078】

・「置換もしくは無置換のアリーレン基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリーレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアリール基」からアリール環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換のアリーレン基」の具体例（具体例群G12）としては、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」からアリール環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

【0079】

・「置換もしくは無置換の2価の複素環基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換の2価の複素環基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の1つの水素原子を除くことにより

10

20

30

40

50

誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換の2価の複素環基」の具体例（具体例群G13）としては、具体例群G2に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

【0080】

- ・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

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

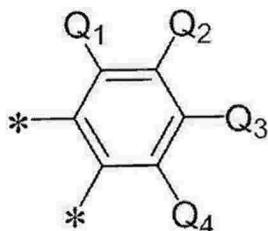
10

【0081】

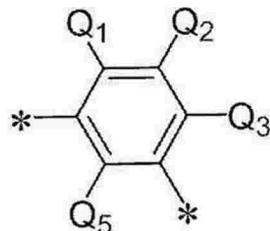
本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式（TEMP-42）～（TEMP-68）のいずれかの基である。

【0082】

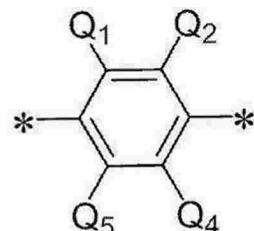
【化10】



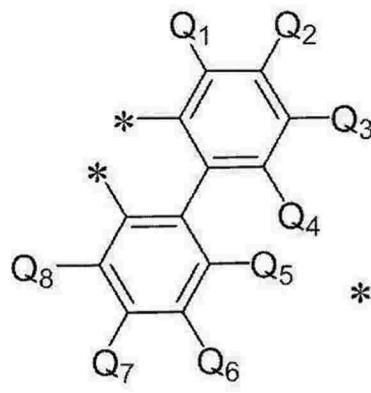
(TEMP-42)



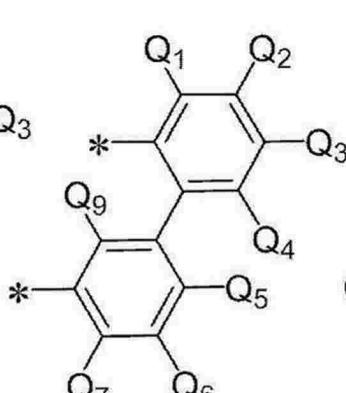
(TEMP-43)



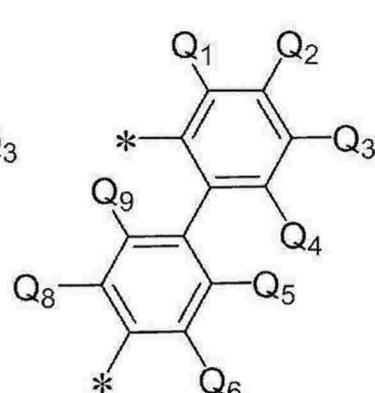
(TEMP-44)



(TEMP-45)



(TEMP-46)



(TEMP-47)

20

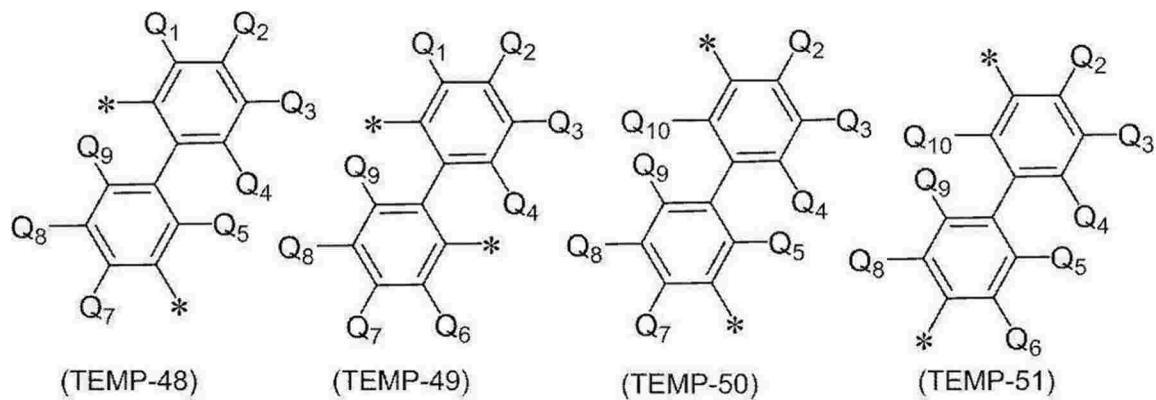
30

【0083】

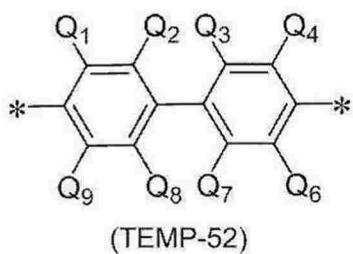
40

50

【化11】



10



20

【0084】

前記一般式(TEMP-42)～(TEMP-52)中、Q₁～Q₁₀は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

前記一般式(TEMP-42)～(TEMP-52)中、*は、結合位置を表す。

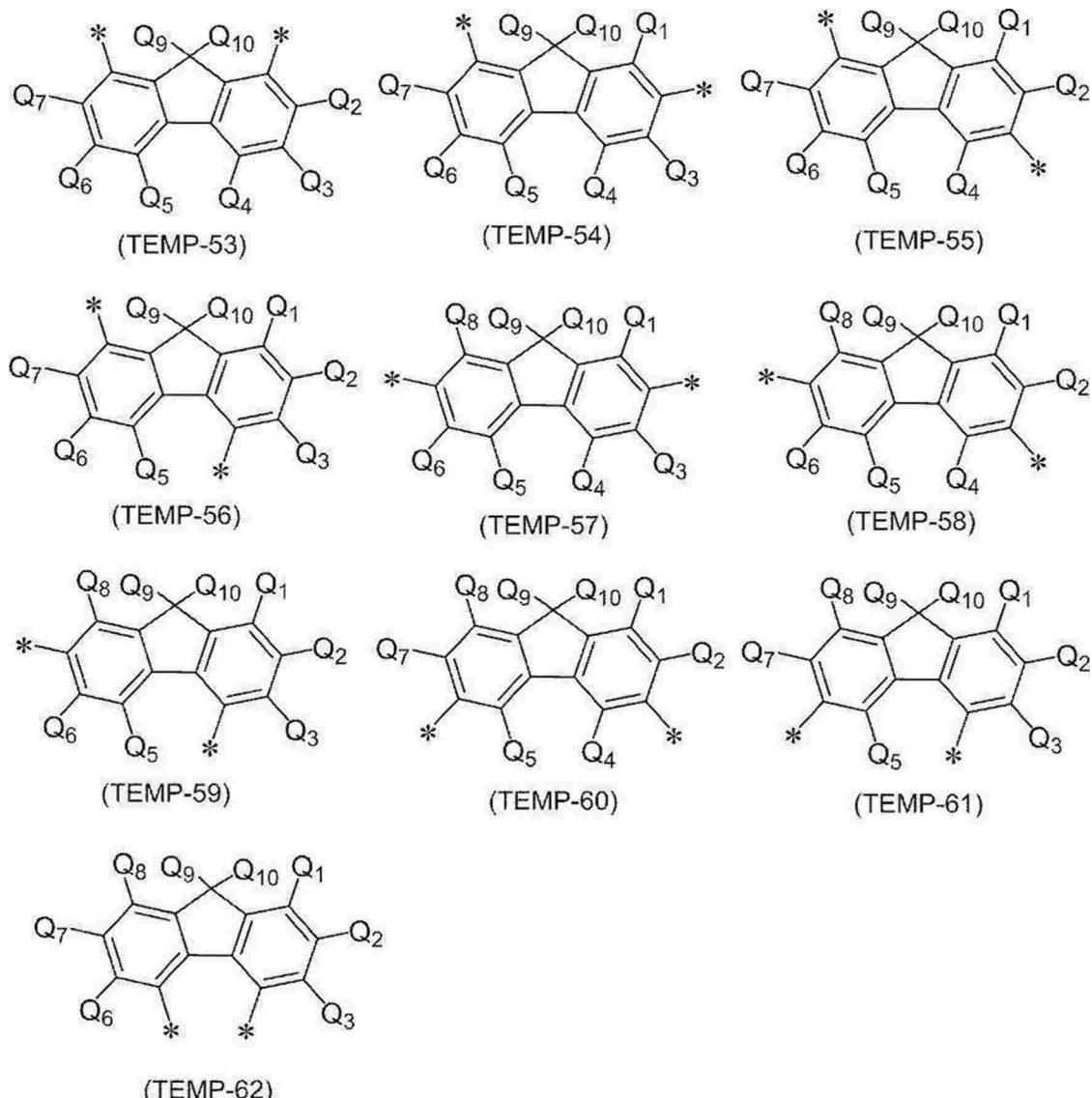
【0085】

30

40

50

【化12】



【0086】

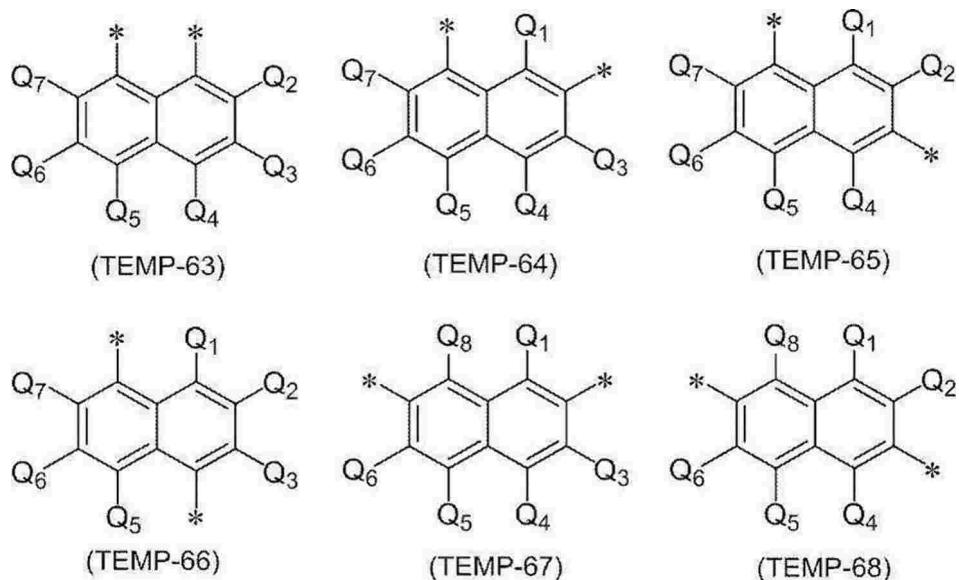
前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、Q₁ ~ Q₁₀ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

式 Q₉ 及び Q₁₀ は、単結合を介して互いに結合して環を形成してもよい。

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

【0087】

【化13】



【0088】

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

20

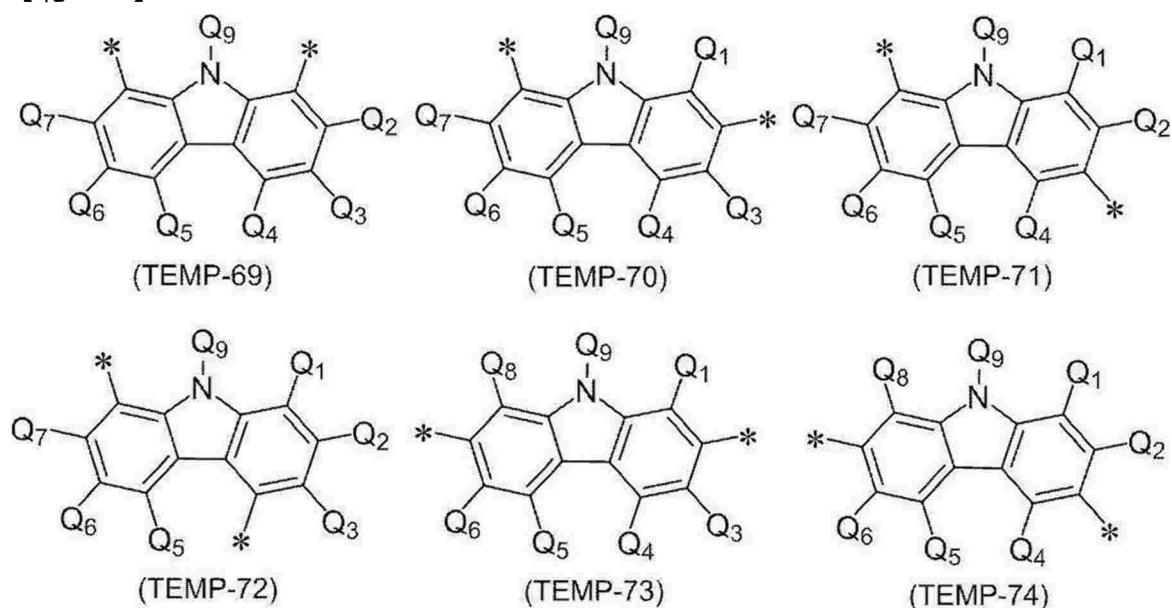
前記一般式(TEMP-63)～(TEMP-68)中、*は、結合位置を表す。

【0089】

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

【0090】

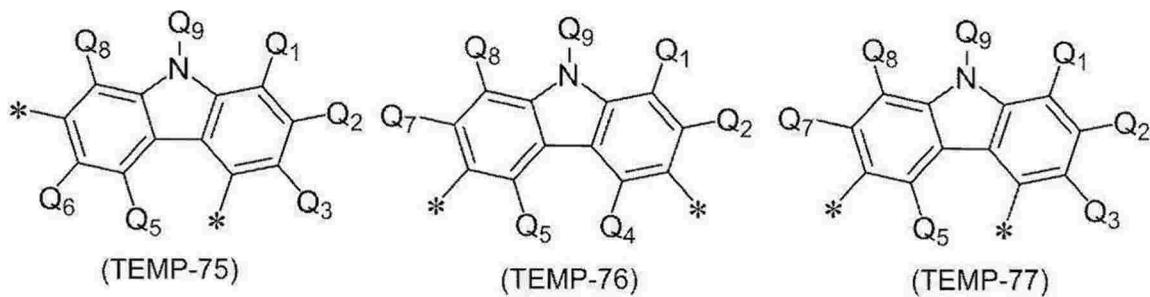
【化14】



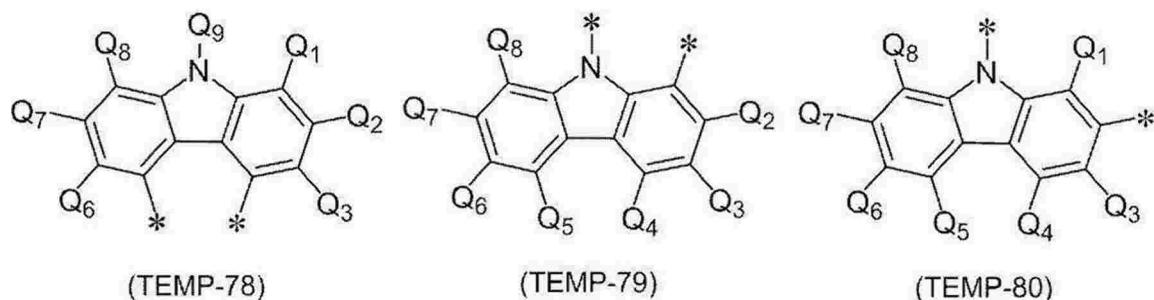
【0091】

50

【化 1 5 】



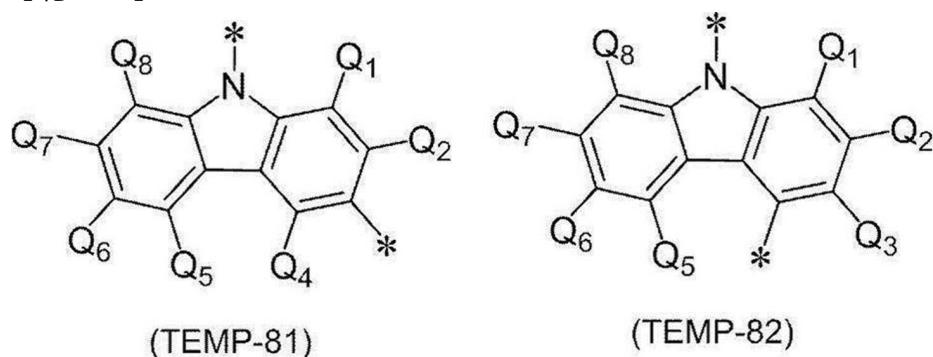
10



20

〔 0 0 9 2 〕

【化 1 6】



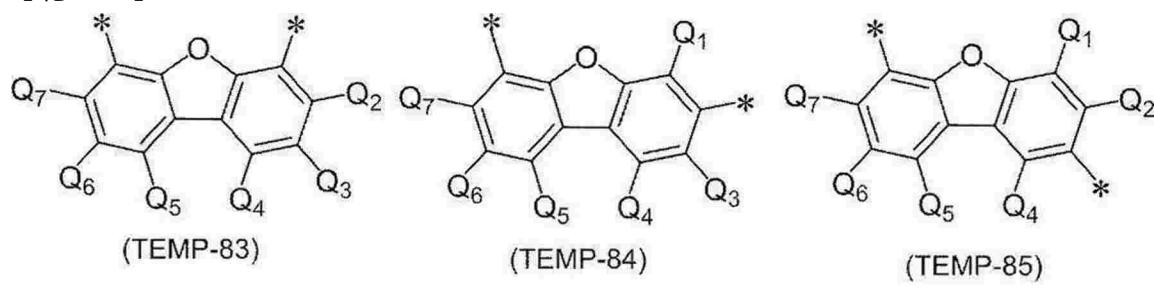
30

(0 0 9 3)

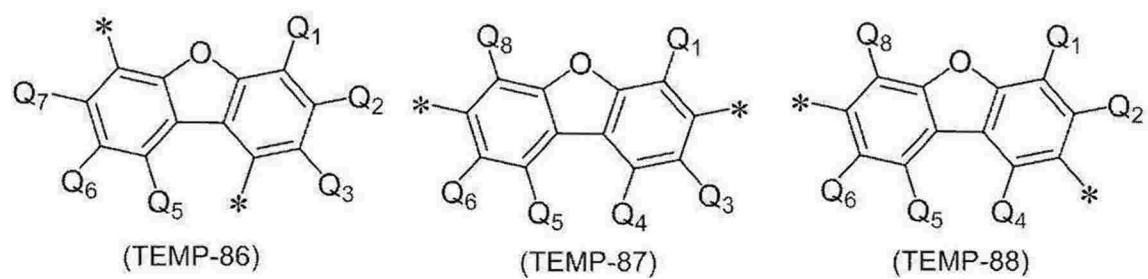
前記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-82) 中、 Q_1 ~ Q_9 は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

〔 0 0 9 4 〕

【化 1 7】



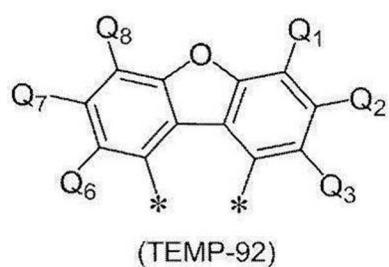
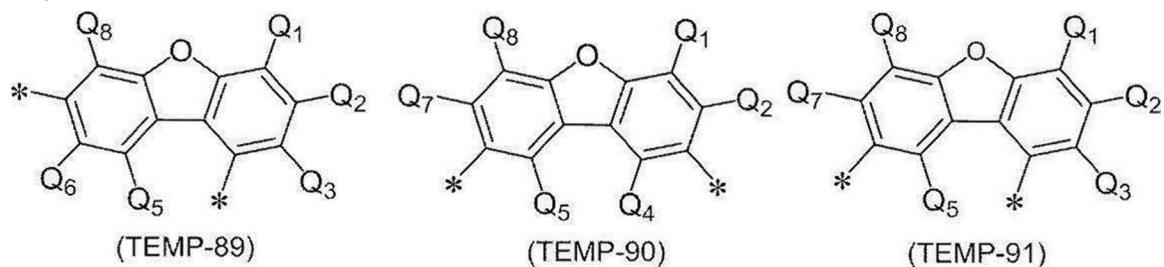
40



50

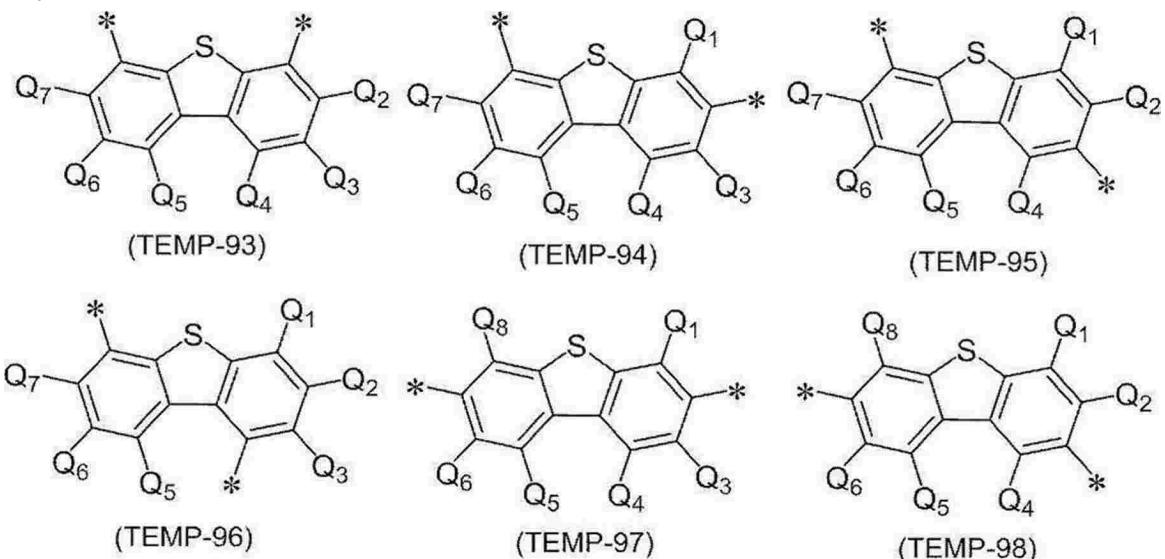
【0 0 9 5】

【化18】



【0 0 9 6】

【化19】



【0 0 9 7】

10

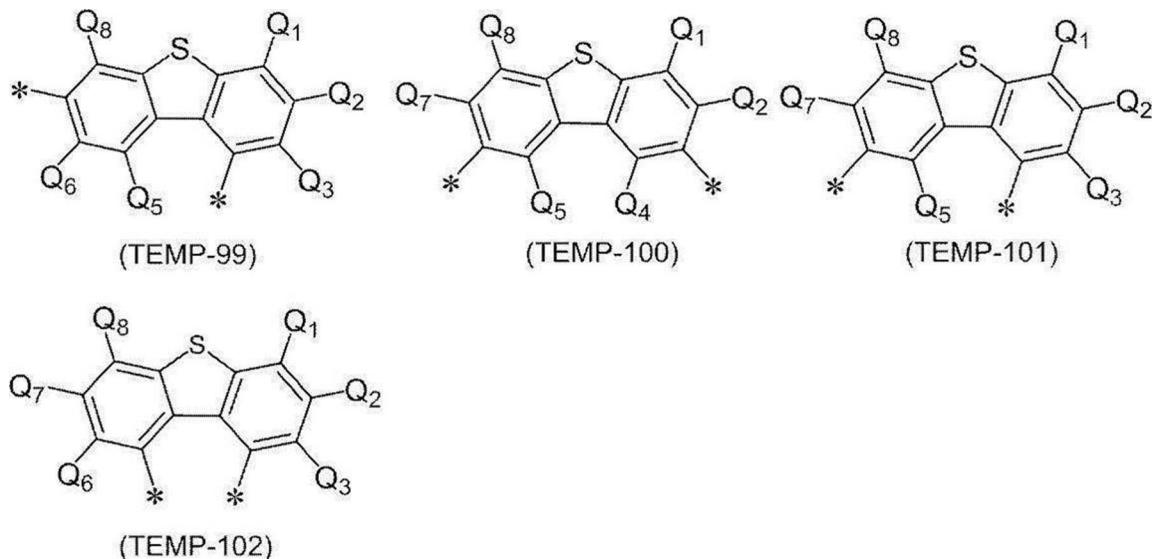
20

30

40

50

【化20】



【0098】

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

【0099】

以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

【0100】

・「結合して環を形成する場合」

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

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

【0101】

10

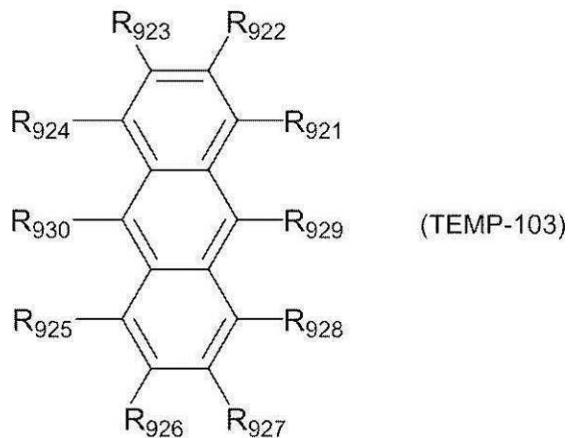
20

30

40

50

【化 2 1】



【0 1 0 2】

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

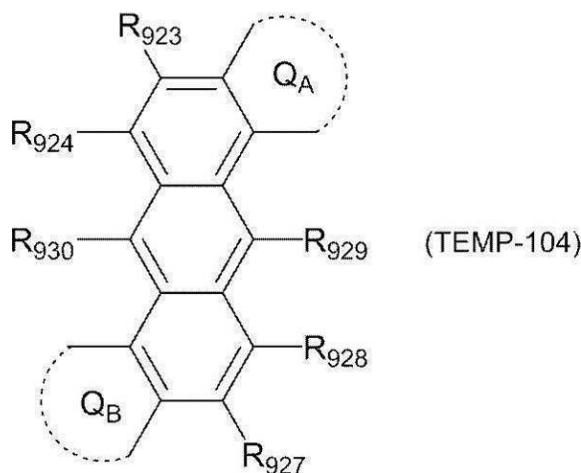
20

【0 1 0 3】

上記「1組以上」とは、上記隣接する2つ以上からなる組の2組以上が同時に環を形成してもよいことを意味する。例えば、R₉₂₁とR₉₂₂とが互いに結合して環Q_Aを形成し、同時にR₉₂₅とR₉₂₆とが互いに結合して環Q_Bを形成した場合は、前記一般式(TEMP-103)で表されるアントラセン化合物は、下記一般式(TEMP-104)で表される。

【0 1 0 4】

【化 2 2】



40

【0 1 0 5】

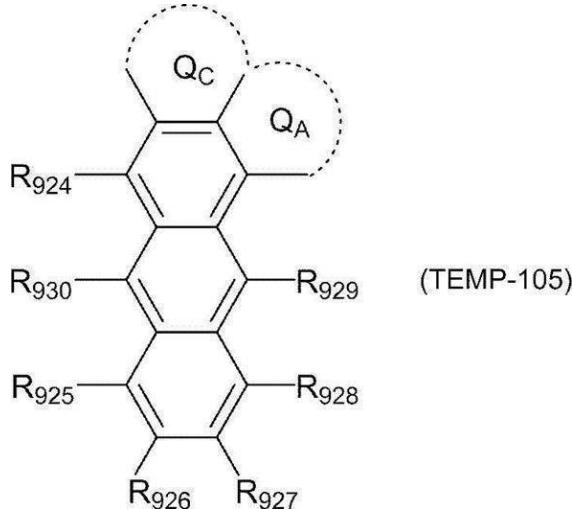
「隣接する2つ以上からなる組」が環を形成する場合とは、前述の例のように隣接する「2つ」からなる組が結合する場合だけではなく、隣接する「3つ以上」からなる組が結合する場合も含む。例えば、R₉₂₁とR₉₂₂とが互いに結合して環Q_Aを形成し、かつ、R₉₂₂とR₉₂₃とが互いに結合して環Q_Cを形成し、互いに隣接する3つ(R₉₂₁、R₉₂₂及びR₉₂₃)からなる組が互いに結合して環を形成して、アントラセン母骨格に縮合する場合を意味し、この場合、前記一般式(TEMP-103)で表されるアント

50

ラセン化合物は、下記一般式（TEMP-105）で表される。下記一般式（TEMP-105）において、環Q_A及び環Q_Cは、R₉₂₂を共有する。

【0106】

【化23】



【0107】

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

【0108】

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

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

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

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

「環を形成する」とは、母骨格の複数の原子のみ、あるいは母骨格の複数の原子とさらに1以上の任意の元素で環を形成することを意味する。例えば、前記一般式（TEMP-104）に示す、R₉₂₁とR₉₂₂とが互いに結合して形成された環Q_Aは、R₉₂₁が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、R₉₂₂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、R₉₂₁とR₉₂₂とで環Q_Aを形成する場合において、R₉₂₁が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、R₉₂₂とが結合するアントラセン骨格の炭素原子と、4つの炭素原子とで单環の不飽和の環を形成する場合、R₉₂₁とR₉₂₂とで形成する環は、ベンゼン環である。

【0109】

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

10

20

30

40

50

合は、水素原子等で終端されてもよいし、後述する「任意の置換基」で置換されてもよい。炭素元素以外の任意の元素を含む場合、形成される環は複素環である。

単環または縮合環を構成する「1以上の任意の元素」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは2個以上15個以下であり、より好ましくは3個以上12個以下であり、さらに好ましくは3個以上5個以下である。

本明細書に別途記載のない限り、「単環」、及び「縮合環」のうち、好ましくは「単環」である。

本明細書に別途記載のない限り、「飽和の環」、及び「不飽和の環」のうち、好ましくは「不飽和の環」である。

本明細書に別途記載のない限り、「単環」は、好ましくはベンゼン環である。

本明細書に別途記載のない限り、「不飽和の環」は、好ましくはベンゼン環である。

「隣接する2つ以上からなる組の1組以上」が、「互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、又は「互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、母骨格の複数の原子と、1個以上15個以下の炭素元素、窒素元素、酸素元素、及び硫黄元素からなる群から選択される少なくとも1種の元素とからなる置換もしくは無置換の「不飽和の環」を形成する。

【0110】

上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基は、例えば後述する「任意の置換基」である。上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基である。

上記の「飽和の環」、又は「不飽和の環」が置換基を有する場合の置換基は、例えば後述する「任意の置換基」である。上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基である。

以上が、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合（「結合して環を形成する場合」）についての説明である。

【0111】

・「置換もしくは無置換の」という場合の置換基

本明細書における一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基（本明細書において、「任意の置換基」と呼ぶことがある。）は、例えば、無置換の炭素数1～50のアルキル基、

無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃)、

- O - (R₉₀₄)、

- S - (R₉₀₅)、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、及び

無置換の環形成原子数5～50の複素環基からなる群から選択される基等であり、

ここで、R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

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

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

10

20

30

40

50

なり、

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

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

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

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

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

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

【0112】

一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、及び

環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基からなる群から選択される基である。

【0113】

一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、炭素数 1 ~ 18 のアルキル基、

環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、及び

環形成原子数 5 ~ 18 の複素環基からなる群から選択される基である。

【0114】

上記任意の置換基の各基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基の具体例である。

【0115】

本明細書において別途記載のない限り、隣接する任意の置換基同士で、「飽和の環」、又は「不飽和の環」を形成してもよく、好ましくは、置換もしくは無置換の飽和の 5 員環、置換もしくは無置換の飽和の 6 員環、置換もしくは無置換の不飽和の 5 員環、又は置換もしくは無置換の不飽和の 6 員環を形成し、より好ましくは、ベンゼン環を形成する。

本明細書において別途記載のない限り、任意の置換基は、さらに置換基を有してもよい。任意の置換基がさらに有する置換基としては、上記任意の置換基と同様である。

【0116】

本明細書において、「AA ~ BB」を用いて表される数値範囲は、「AA ~ BB」の前に記載される数値 AA を下限値とし、「AA ~ BB」の後に記載される数値 BB を上限値として含む範囲を意味する。

【0117】

〔第一実施形態〕

(化合物)

本実施形態に係る化合物は、下記一般式 (100A) で表される化合物である。

【0118】

10

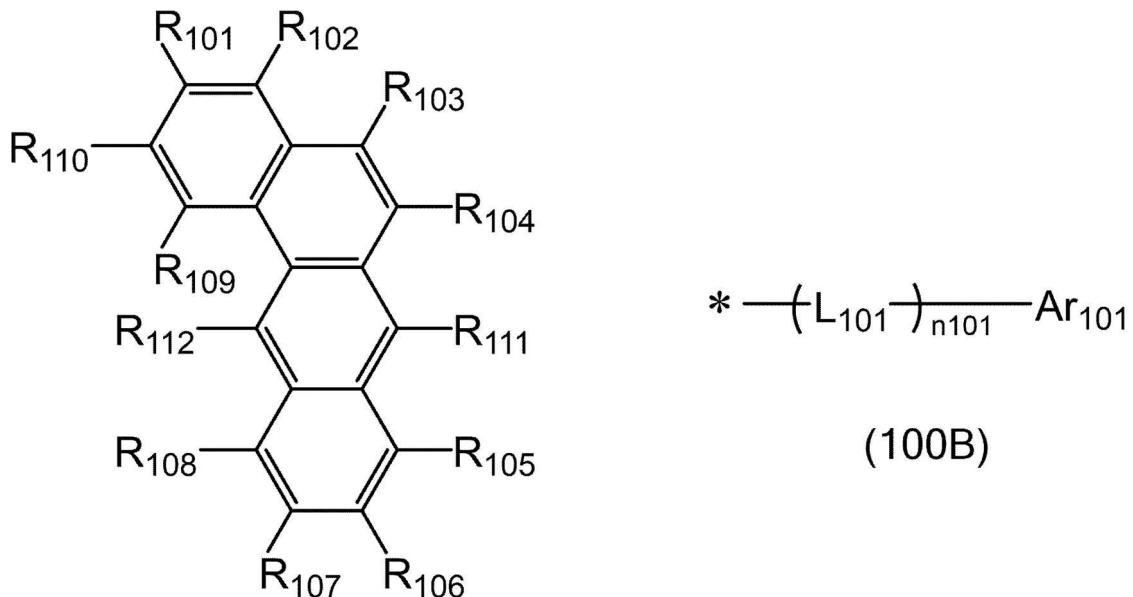
20

30

40

50

【化24】



(100A)

10

20

【0119】

(前記一般式(100A)において、

R₁₀₁～R₁₁₂のうちの1つは、前記一般式(100B)で表される基であり、前記一般式(100B)で表される基以外のR₁₀₁～R₁₁₂は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

30

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

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

-C(=O)R₈₀₁で表される基、-COOR₈₀₂で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

40

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₈₀₁、及びR₈₀₂は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

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

50

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

前記一般式(100B)において、

n₁₀₁は0又は1以上の整数であり、

n₁₀₁が1以上の整数である場合のL₁₀₁は、

無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環が2環以上縮合した、環形成炭素数10～50のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基であり、

ただし、無置換の場合の環形成炭素数6～50のアリーレン基は、縮合環ではなく、

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

A_{r101}は、

置換もしくは無置換の環が3環以上縮合したアリール基、又は

置換もしくは無置換の環が3環以上縮合した複素環基であり、

*は、前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、
ただし、前記一般式(100A)におけるR₁₀₁～R₁₁₂、並びに前記一般式(100B)におけるL₁₀₁及びA_{r101}のうち、少なくともいずれかが重水素原子を少なくとも1つ有し、L₁₀₁のみが重水素原子を有する場合、L₁₀₁を構成する環のうち前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環と直接結合する環に重水素原子が結合する。)

【0120】

なお、本明細書において「縮合環」とは、縮合したアリール基(例えば、ナフチル基等)及び縮合した複素環基(例えば、カルバゾリル基等)等を表す。

【0121】

本実施形態に係る化合物において、L₁₀₁がアリーレン基である場合、当該アリーレン基は、縮合環ではない、無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基であるか、又は置換もしくは無置換の環が2環以上縮合した、環形成炭素数10～50のアリーレン基である。すなわち、L₁₀₁において、例えばビフェニルから誘導される二価の基及びターフェニルから誘導される二価の基等は、「無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基」に相当し、ナフタレンから誘導される二価の基等は「置換もしくは無置換の環が2環以上縮合した、環形成炭素数10～50のアリーレン基」に相当する。

なお、後述の一般式(1A)におけるL₁についても同様である。

【0122】

また、本実施形態に係る化合物において、L₁₀₁のみが重水素原子を有する場合、「L₁₀₁を構成する環のうち前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環と直接結合する環」とは、例えば、L₁₀₁が下記一般式(101X)で表されるビフェニル基であり、*aがベンズ[a]アントラセン環との結合位置である場合、環Aに相当する。

また、本実施形態に係る化合物において、L₁₀₁のみが重水素原子を有する場合、「L₁₀₁を構成する環のうち前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環と直接結合する環に重水素原子が結合する」とは、例えば、L₁₀₁が下記一般式(101X)で表されるビフェニル基であり、*aがベンズ[a]アントラセン環との結合位置である場合、環Aにおける*A1～*A3の少なくともいずれかに重水素原子が結合することを意味する。

なお、後述の一般式(1A)におけるL₁についても同様である。

【0123】

10

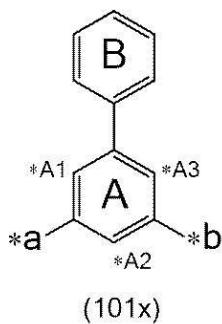
20

30

40

50

【化25】



10

【0124】

(前記一般式(101x)において、*aは、ベンズ[a]アントラセン環との結合位置であり、*bはAr₁₀₁との結合位置である。)

【0125】

本実施形態に係る化合物において、n₁₀₁は、1以上の整数であることが好ましい。

【0126】

本実施形態に係る化合物において、L₁₀₁は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～13のアリーレン基、又は環形成原子数5～12の複素環基であることが好ましく、置換もしくは無置換の炭素数6～13のアリーレン基であることがより好ましい。

20

【0127】

本実施形態に係る化合物において、L₁₀₁が有する置換基は、環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～16の複素環基であることが好ましく、環形成炭素数6～13のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～12の複素環基であることがより好ましく、フェニル基又はナフチル基であることがさらに好ましい。

【0128】

本実施形態に係る化合物において、L₁₀₁は無置換であることも好ましい。

【0129】

本実施形態に係る化合物において、L₁₀₁は、下記一般式(L101)～(L114)で表されるいずれかの基であることも好ましい。なお、下記例示中の*は、結合位置を示す。

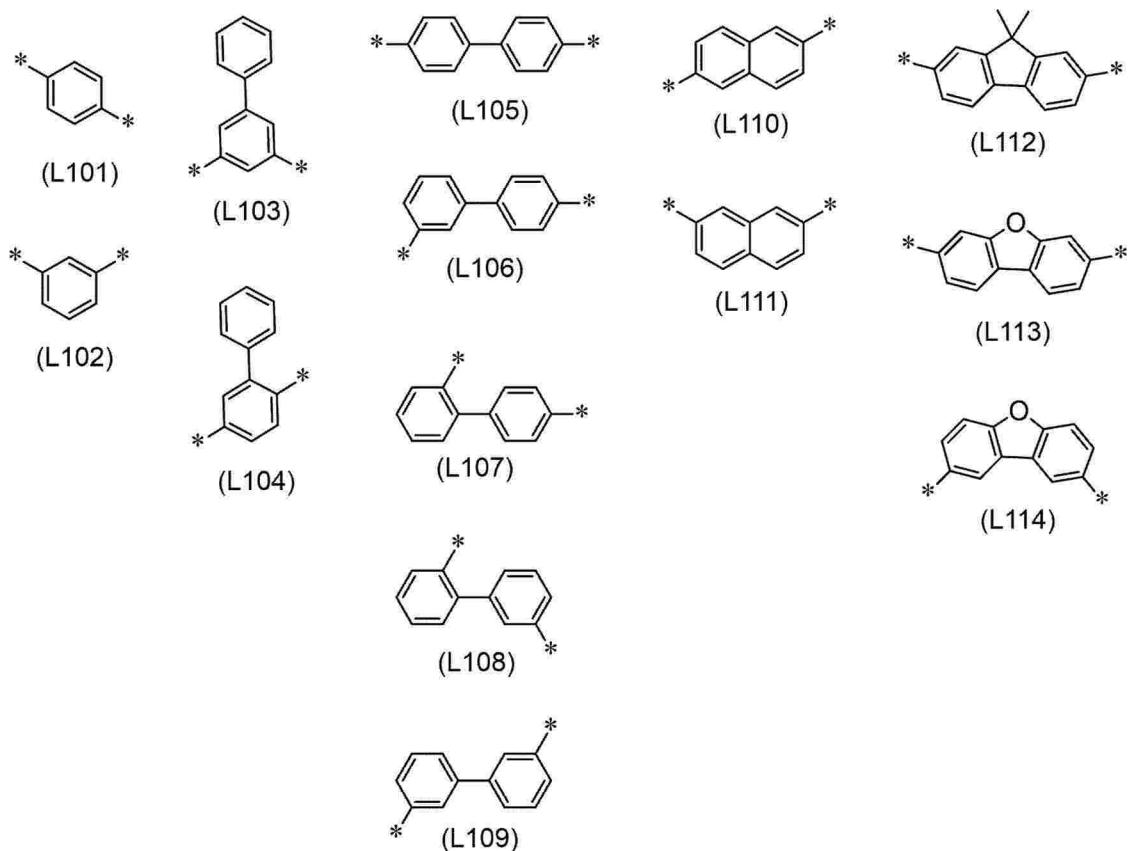
30

【0130】

40

50

【化26】



【0131】

本実施形態に係る化合物において、Ar₁₀₁は0であることも好ましい。すなわち、Ar₁₀₁と前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環とが直接結合することも好ましい。

【0132】

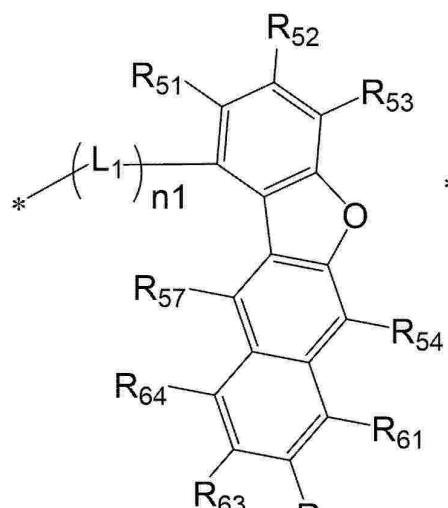
本実施形態に係る化合物において、Ar₁₀₁は、置換もしくは無置換の環が4環以上縮合したアリール基、又は置換もしくは無置換の環が4環以上縮合した複素環基であることも好ましい。

【0133】

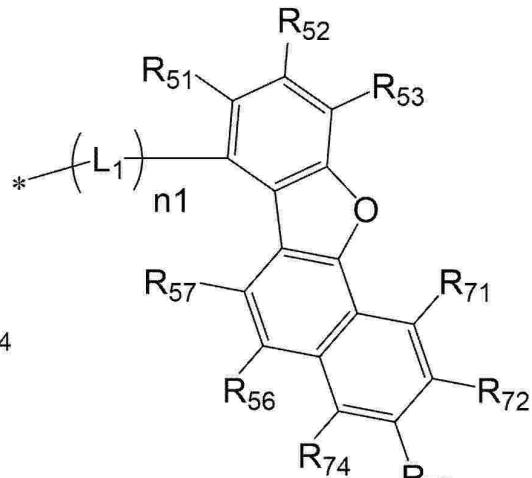
本実施形態に係る化合物において、Ar₁₀₁が、下記一般式(1B-1)、(1B-2)、(1B-3)、又は(1D)で表される基であることも好ましい。

【0134】

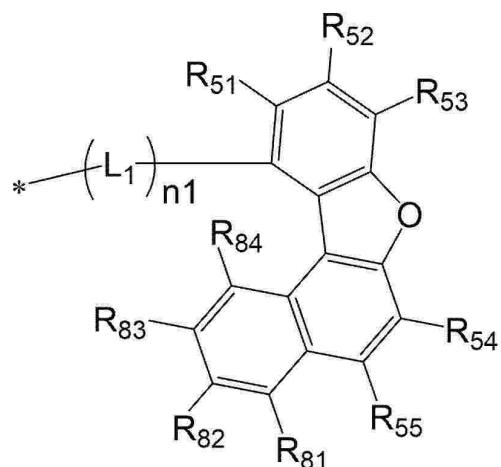
【化 2 7】



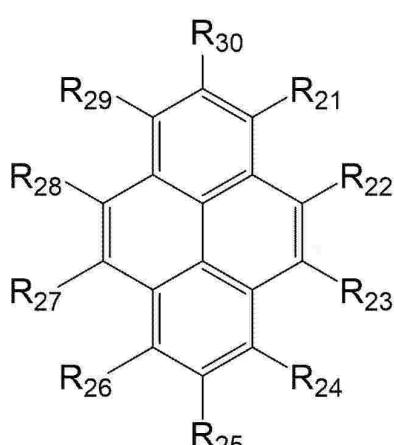
(1B-1)



(1B-2)



(1B-3)



(1D)

【0 1 3 5】

40

(前記一般式 (1B-1)、(1B-2)、及び (1B-3) で表される基において、
 n1 は 0、1、2、又は 3 であり、
 n1 が 1、2、又は 3 である場合の L1 は、
 無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、
 置換もしくは無置換の環が 2 環以上縮合した、環形成炭素数 10 ~ 50 のアリーレン
 基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基であり、
 ただし、無置換の場合の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基は、縮合環ではなく、
 L1 が 2 以上存在する場合、2 以上の L1 は、互いに同一であるか、又は異なり、
 前記一般式 (1B-1) において、

50

R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及びR₆₁ ~ R₆₄のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

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

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及びR₆₁ ~ R₆₄は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 50の複素環基であり、

*は前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式(1B-2)において、

R₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及びR₇₁ ~ R₇₄のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及びR₇₁ ~ R₇₄は、それぞれ独立に、前記一般式(1B-1)におけるR₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及びR₆₁ ~ R₆₄と同義であり、

*は前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式(1B-3)において、

R₅₁ ~ R₅₅、及びR₈₁ ~ R₈₄のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₅₁ ~ R₅₅、及びR₈₁ ~ R₈₄は、それぞれ独立に、前記一般式(1B-1)におけるR₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及びR₆₁ ~ R₆₄と同義であり、

*は前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式(1D)において、R₂₁ ~ R₃₀のうちの1つが前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、当該結合位置ではない前記一般式(1D)中のR₂₁ ~ R₃₀のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式(100A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式(1D)中のR₂₁ ~ R₃₀は、それぞれ独立に、

10

20

30

40

50

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、

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

- O - (R 9 0 4) で表される基、

- S - (R 9 0 5) で表される基、

- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基であり、

前記一般式 (1 B - 1) 、 (1 B - 2) 、 (1 B - 3) 、 及び (1 D) で表される基において、 R 9 0 1 、 R 9 0 2 、 R 9 0 3 、 R 9 0 4 、 R 9 0 5 、 R 9 0 6 、 及び R 9 0 7 は、 それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基であり、

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

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

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

R 9 0 4 が複数存在する場合、複数の R 9 0 4 は、互いに同一であるか又は異なり、

R 9 0 5 が複数存在する場合、複数の R 9 0 5 は、互いに同一であるか又は異なり、

R 9 0 6 が複数存在する場合、複数の R 9 0 6 は、互いに同一であるか又は異なり、

R 9 0 7 が複数存在する場合、複数の R 9 0 7 は、互いに同一であるか又は異なる。)

【 0 1 3 6 】

本実施形態に係る化合物において、 A r 1 0 1 は、 置換もしくは無置換のベンズアントラセニル基、 置換もしくは無置換のピレニル基、 又は置換もしくは無置換のベンゾナフトフラン基であってもよい。

【 0 1 3 7 】

本実施形態に係る化合物において、 A r 1 0 1 にはベンゾフルオレン、 ベンゾキサンテン、 及びジベンゾキサンテンを含まなくてもよい。

【 0 1 3 8 】

本実施形態に係る化合物において、 R 1 0 1 ~ R 1 1 2 及び A r 1 0 1 のうち、 少なくともいずれかが重水素原子を少なくとも 1 つ有することが好ましい。

【 0 1 3 9 】

本実施形態に係る化合物において、 少なくとも R 1 0 1 ~ R 1 1 2 のいずれかが重水素原子であることも好ましい。

【 0 1 4 0 】

本実施形態に係る化合物において、 R 1 0 5 、 R 1 0 6 、 R 1 0 7 、 R 1 0 8 、 R 1 1 1 、 又は R 1 1 2 が、 前記一般式 (1 0 0 B) で表される基であることも好ましい。

本実施形態に係る化合物において、 R 1 0 6 、 R 1 0 7 、 R 1 1 1 、 又は R 1 1 2 が、 前記一般式 (1 0 0 B) で表される基であることも好ましい。

本実施形態に係る化合物において、 R 1 1 1 が、 前記一般式 (1 0 0 B) で表される基であることも好ましい。

H O M O 及び L U M O のより電子密度の大きい位置又は一重項エネルギー S 1 がより小

10

20

30

40

50

さくなる部位である R_{105} 、 R_{106} 、 R_{107} 、 R_{108} 、 R_{111} 、又は R_{112} が、前記一般式 (100B) で表される基であることにより、本実施形態に係る化合物の励起耐性が向上しやすく、有機EL素子の長寿命化効果が得られやすくなる。

【0141】

本実施形態に係る化合物において、 R_{101} ~ R_{110} 及び R_{112} がいずれも重水素原子であることも好ましい。

【0142】

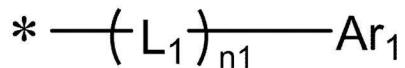
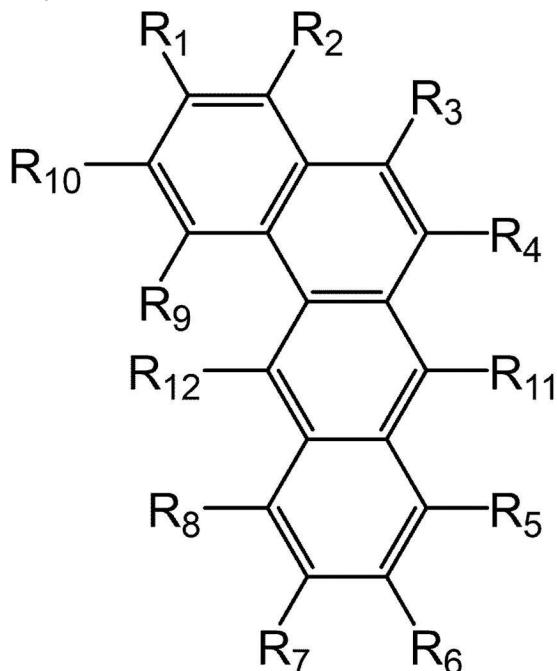
本実施形態に係る化合物において、前記「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であり、前記「置換もしくは無置換」と記載された環は、いずれも「無置換」の環であることも好ましい。

【0143】

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

【0144】

【化28】



(1B)

(1A)

【0145】

(前記一般式 (1A) において、

R_4 ~ R_8 及び R_{10} ~ R_{12} のうちの 1 つは、前記一般式 (1B) で表される基であり

、

R_1 ~ R_3 、 R_9 、並びに前記一般式 (1B) で表される基以外の R_4 ~ R_8 及び R_{10} ~ R_{12} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

10

20

30

40

50

- S - (R₉₀₅) で表される基、
置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、

- C (= O) R₈₀₁ で表される基、
- COOR₈₀₂ で表される基、

ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、

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

R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₈₀₁、及び R₈₀₂ は、それぞれ
独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

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

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

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

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

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

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

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

前記一般式 (1 B) において、

n₁ は 0 又は 1 以上の整数であり、

n₁ が 1 以上の整数である場合の L₁ は、

無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環が 2 環以上縮合した、環形成炭素数 10 ~ 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 倍の複素環基であり、

ただし、無置換の場合の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基は、縮合環ではなく、

L₁ が 2 以上存在する場合、2 以上の L₁ は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar₁ は、

置換もしくは無置換の環が 4 環以上縮合したアリール基、又は

置換もしくは無置換の環が 4 環以上縮合した複素環基であり、

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

ただし、前記一般式 (1 A) における R₁ ~ R₁₂、並びに前記一般式 (1 B) における L₁ 及び Ar₁ のうち、少なくともいずれかが重水素原子を少なくとも 1 つ有し、L₁ のみが重水素原子を有する場合、L₁ を構成する環のうち前記一般式 (1 A) 中のベンズ [a] アントラセン環と直接結合する環に重水素原子が結合する。)

【 0146 】

本実施形態に係る化合物において、n₁ は 1 以上の整数であることも好ましい。

【 0147 】

本実施形態に係る化合物において、n₁ が 1 以上の整数の場合、L₁ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 13 のアリーレン基であることも好ましい。

【 0148 】

本実施形態に係る化合物において、L₁ が有する置換基は、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 16 の複素環基であることが好ましく、環形成炭素数 6 ~ 13 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 12 の複素環基であることがより好ましく、フェニル基又はナフチル基であることがより

10

20

30

40

50

好ましい。

【0149】

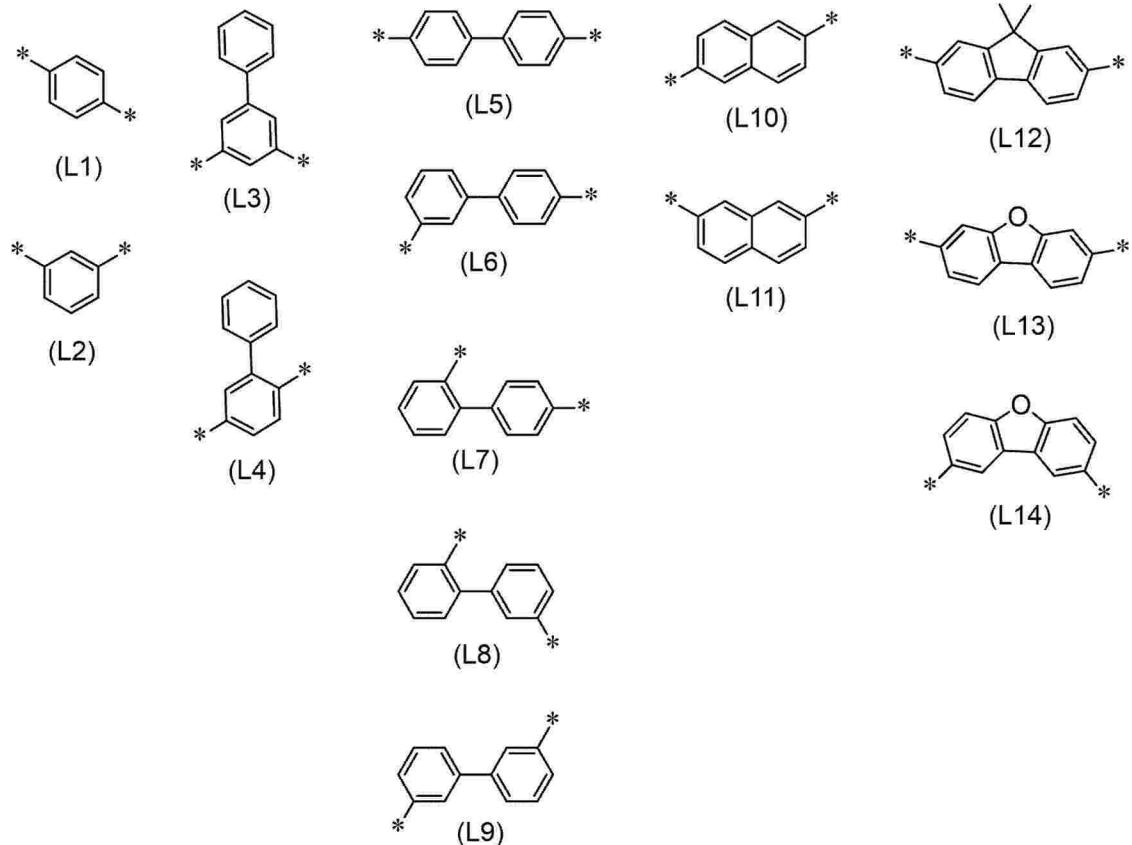
本実施形態に係る化合物において、 L_1 は無置換であることも好ましい。

【0150】

本実施形態に係る化合物において、 L_1 は、下記一般式(L_1)~(L_{14})で表されるいずれかの基であることも好ましい。なお、下記例示中の*は、結合位置を示す。

【0151】

【化29】



【0152】

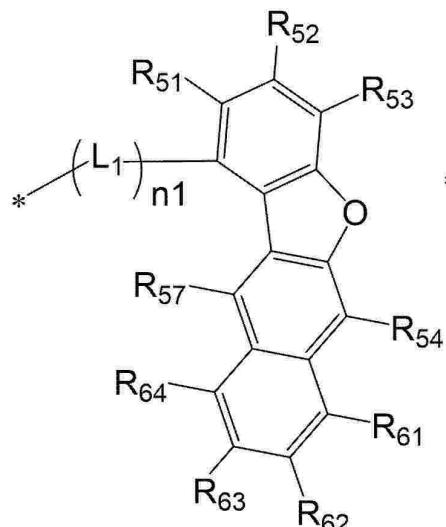
本実施形態に係る化合物において、 n_1 は0であることも好ましい。すなわち、 A_{r1} と前記一般式(1A)中のベンズ[a]アントラセン環とが直接結合することも好ましい。

【0153】

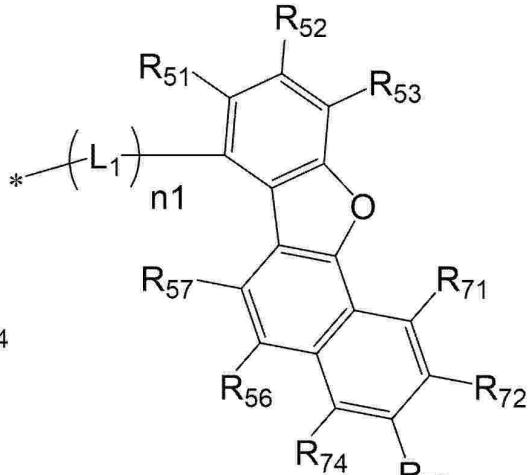
本実施形態に係る化合物において、 A_{r1} が、下記一般式(1B-1)、(1B-2)、(1-B-3)、又は(1D)で表される基であることも好ましい。

【0154】

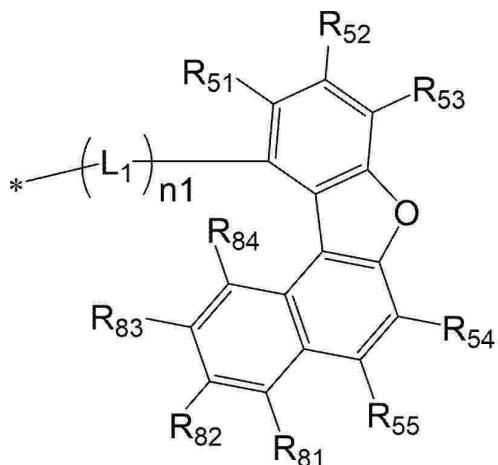
【化 3 0】



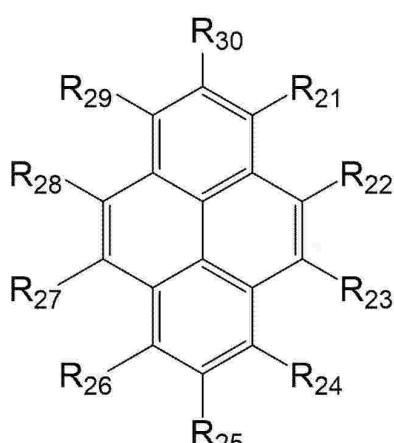
(1B-1)



(1B-2)



(1B-3)



(1D)

【0 1 5 5】

40

(前記一般式 (1B-1)、(1B-2)、及び (1B-3) で表される基において、
 n1 は 0、1、2、又は 3 であり、
 n1 が 1、2、又は 3 である場合の L1 は、
 無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、
 置換もしくは無置換の環が 2 環以上縮合した、環形成炭素数 10 ~ 50 のアリーレン
 基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基であり、
 ただし、無置換の場合の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基は、縮合環ではなく、
 L1 が 2 以上存在する場合、2 以上の L1 は、互いに同一であるか、又は異なり、
 前記一般式 (1B-1) において、

50

R₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及びR₆₁ ~ R₆₄のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

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

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及びR₆₁ ~ R₆₄は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 50の複素環基であり、

*は前記一般式(1A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式(1B-2)において、

R₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及びR₇₁ ~ R₇₄のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₅₁ ~ R₅₃、R₅₆、R₅₇、及びR₇₁ ~ R₇₄は、それぞれ独立に、前記一般式(1B-1)におけるR₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及びR₆₁ ~ R₆₄と同義であり、

*は前記一般式(1A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式(1B-3)において、

R₅₁ ~ R₅₅、及びR₈₁ ~ R₈₄のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₅₁ ~ R₅₅、及びR₈₁ ~ R₈₄は、それぞれ独立に、前記一般式(1B-1)におけるR₅₁ ~ R₅₄、R₅₇、及びR₆₁ ~ R₆₄と同義であり、

*は前記一般式(1A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、

前記一般式(1D)において、R₂₁ ~ R₃₀のうちの1つが前記一般式(1A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置を示し、当該結合位置ではない前記一般式(1D)中のR₂₁ ~ R₃₀のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式(1A)中のベンズ[a]アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式(1D)中のR₂₁ ~ R₃₀は、それぞれ独立に、

10

20

30

40

50

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、

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

- O - (R 9 0 4) で表される基、

- S - (R 9 0 5) で表される基、

- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基であり、

前記一般式 (1 B - 1) 、 (1 B - 2) 、 (1 B - 3) 、 及び (1 D) で表される基において、 R 9 0 1 、 R 9 0 2 、 R 9 0 3 、 R 9 0 4 、 R 9 0 5 、 R 9 0 6 、 及び R 9 0 7 は、 それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基であり、

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

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

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

R 9 0 4 が複数存在する場合、複数の R 9 0 4 は、互いに同一であるか又は異なり、

R 9 0 5 が複数存在する場合、複数の R 9 0 5 は、互いに同一であるか又は異なり、

R 9 0 6 が複数存在する場合、複数の R 9 0 6 は、互いに同一であるか又は異なり、

R 9 0 7 が複数存在する場合、複数の R 9 0 7 は、互いに同一であるか又は異なる。)

【 0 1 5 6 】

本実施形態に係る化合物において、 A r 1 は、 置換もしくは無置換のベンズアントラセニル基、 置換もしくは無置換のピレニル基、 又は置換もしくは無置換のベンゾナフトフラン基であってもよい。

【 0 1 5 7 】

本実施形態に係る化合物において、 A r 1 にはベンゾフルオレン、 ベンゾキサンテン、 及びジベンゾキサンテンを含まなくてもよい。

【 0 1 5 8 】

本実施形態に係る化合物において、 R 1 ~ R 1 2 及び A r 1 のうち、 少なくともいずれかが重水素原子を少なくとも 1 つ有することが好ましい。

【 0 1 5 9 】

本実施形態に係る化合物において、 少なくとも R 1 ~ R 1 2 のいずれかが重水素原子であることも好ましい。

【 0 1 6 0 】

本実施形態に係る化合物において、 R 5 、 R 6 、 R 7 、 R 8 、 R 1 1 、 又は R 1 2 が、 前記一般式 (1 B) で表される基であることも好ましい。

本実施形態に係る化合物において、 R 6 、 R 7 、 R 1 1 、 又は R 1 2 が、 前記一般式 (1 B) で表される基であることも好ましい。

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

HOMO 及び LUMO のより電子密度の大きい位置又は一重項エネルギー S 1 がより小

10

20

30

40

50

さくなる部位である R₅、R₆、R₇、R₈、R₁₁、又は R₁₂が、前記一般式(1B)で表される基であることにより、本実施形態に係る化合物の励起耐性が向上しやすく、有機EL素子の長寿命化効果が得られやすくなる。

【0161】

本実施形態に係る化合物において、R₁～R₁₀及びR₁₂がいずれも重水素原子であることも好ましい。

【0162】

本実施形態に係る化合物において、前記「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であり、前記「置換もしくは無置換」と記載された環は、いずれも「無置換」の環であることも好ましい。

10

【0163】

・本実施形態に係る化合物の製造方法

本実施形態に係る化合物は、後述する実施例に記載の合成方法に従って製造できる。また、本実施形態に係る化合物は、当該合成方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。

【0164】

・本実施形態に係る化合物の具体例

本実施形態に係る化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら具体例に限定されない。本明細書において、重水素原子は、化学式中で D と表記し、軽水素原子は、H と表記するか又は記載を省略する。

20

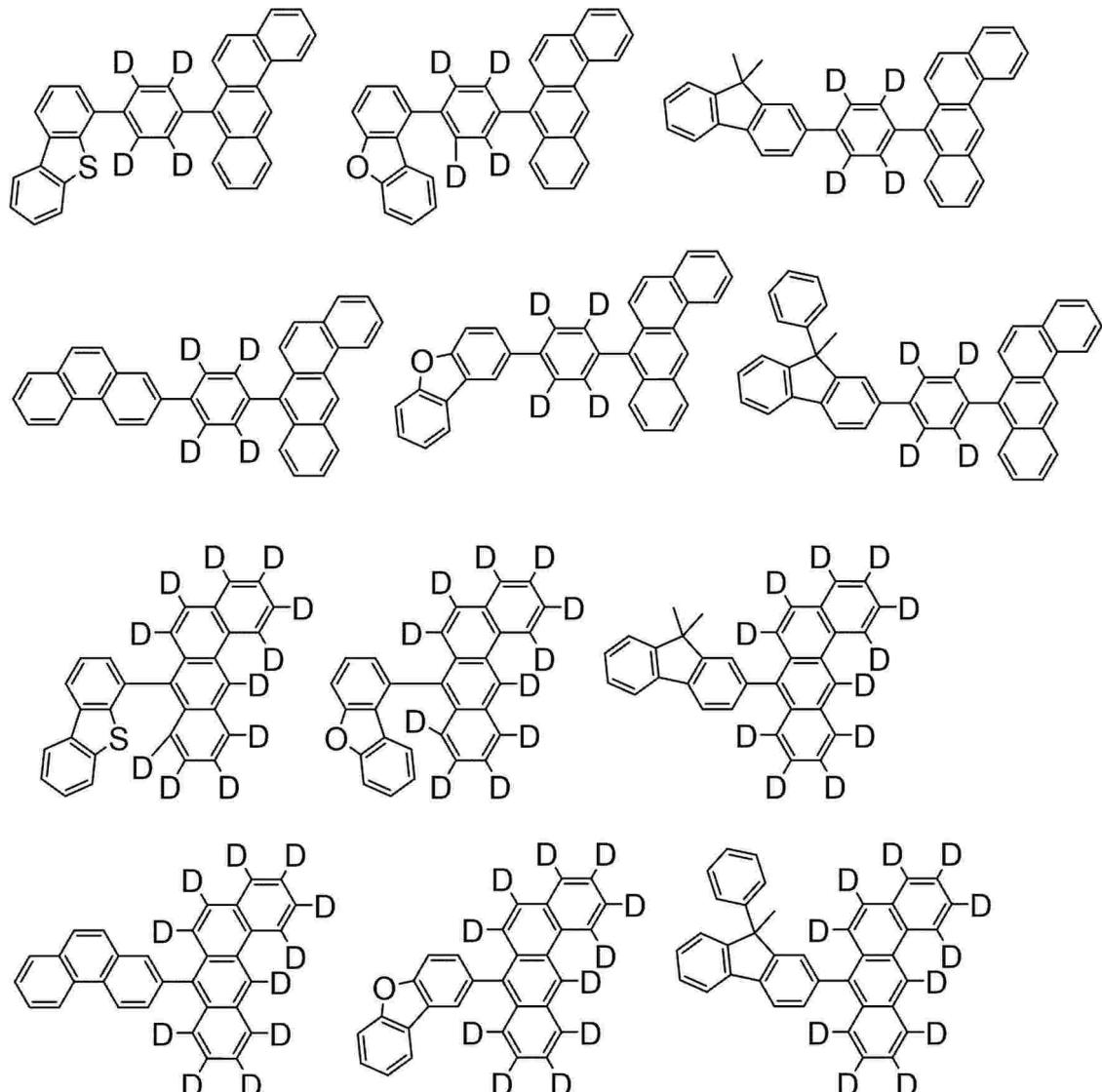
【0165】

30

40

50

【化 3 1】

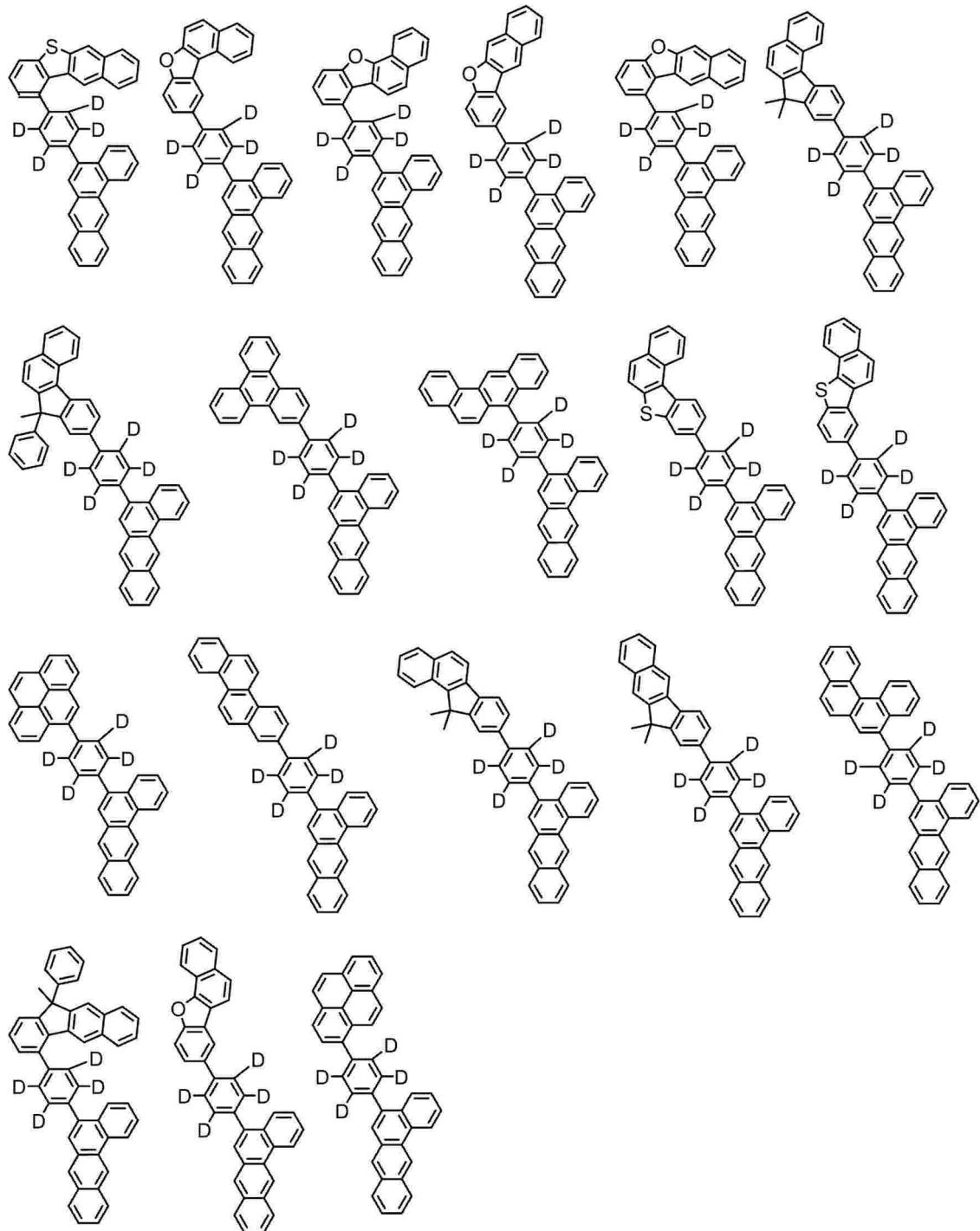


【0 1 6 6】

40

50

【化 3 2】

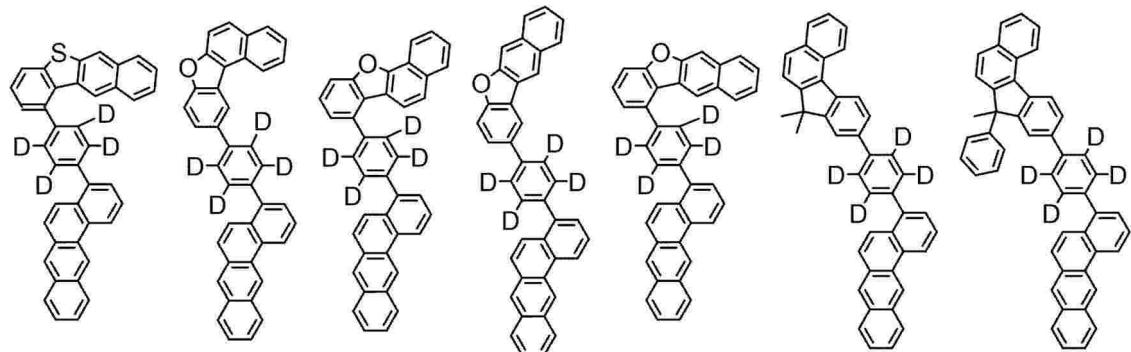


【0 1 6 7】

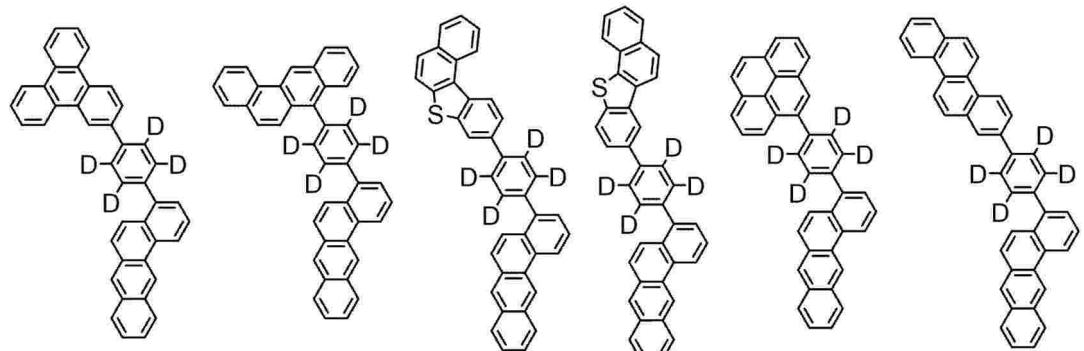
40

50

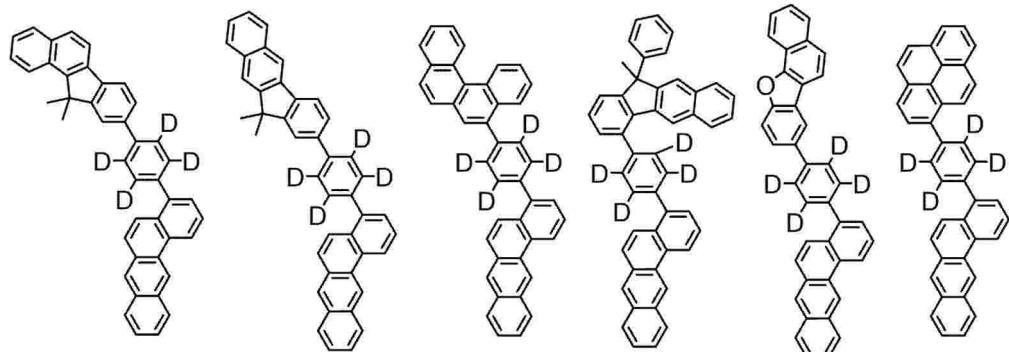
【化 3 3】



10



20



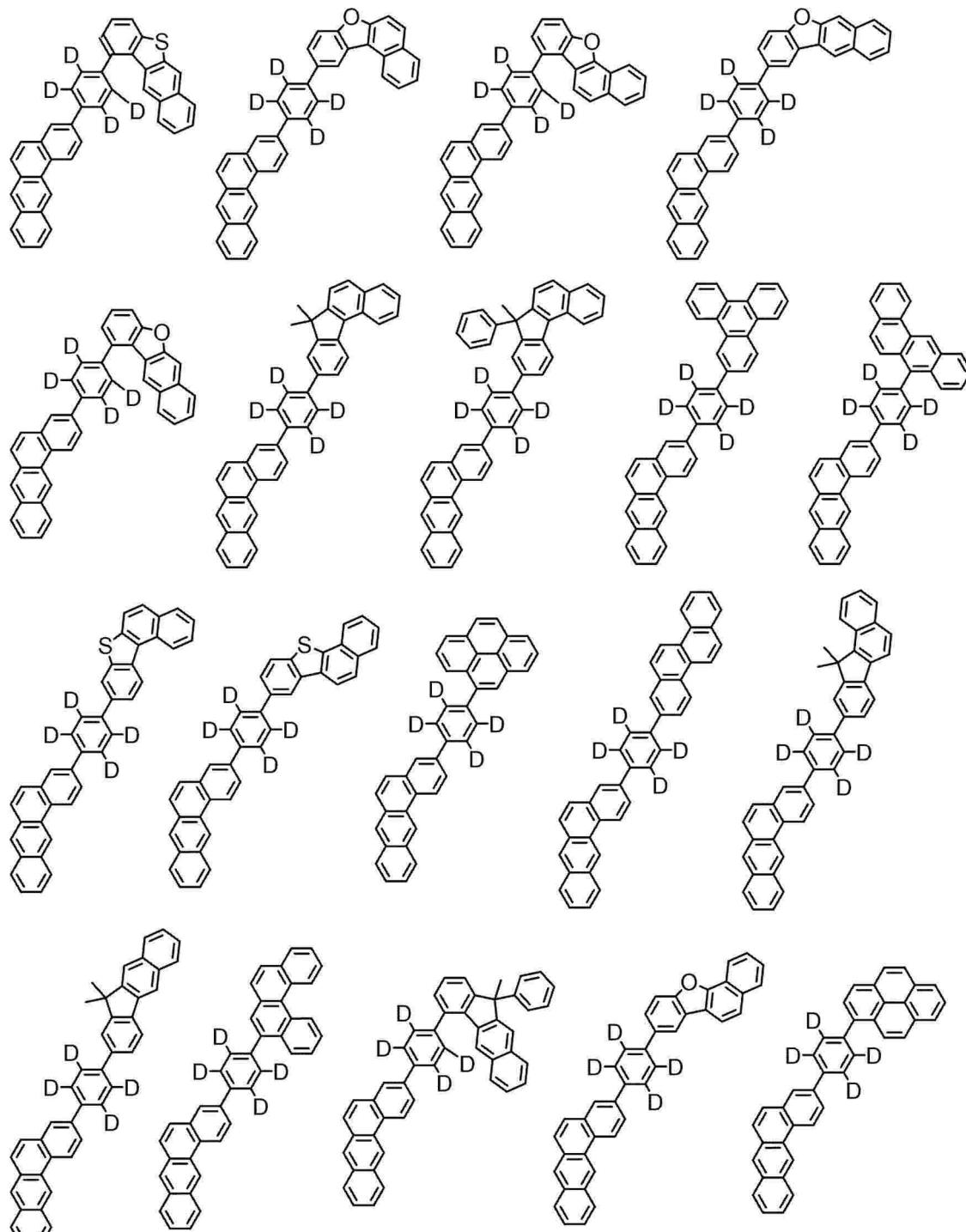
30

【0 1 6 8】

40

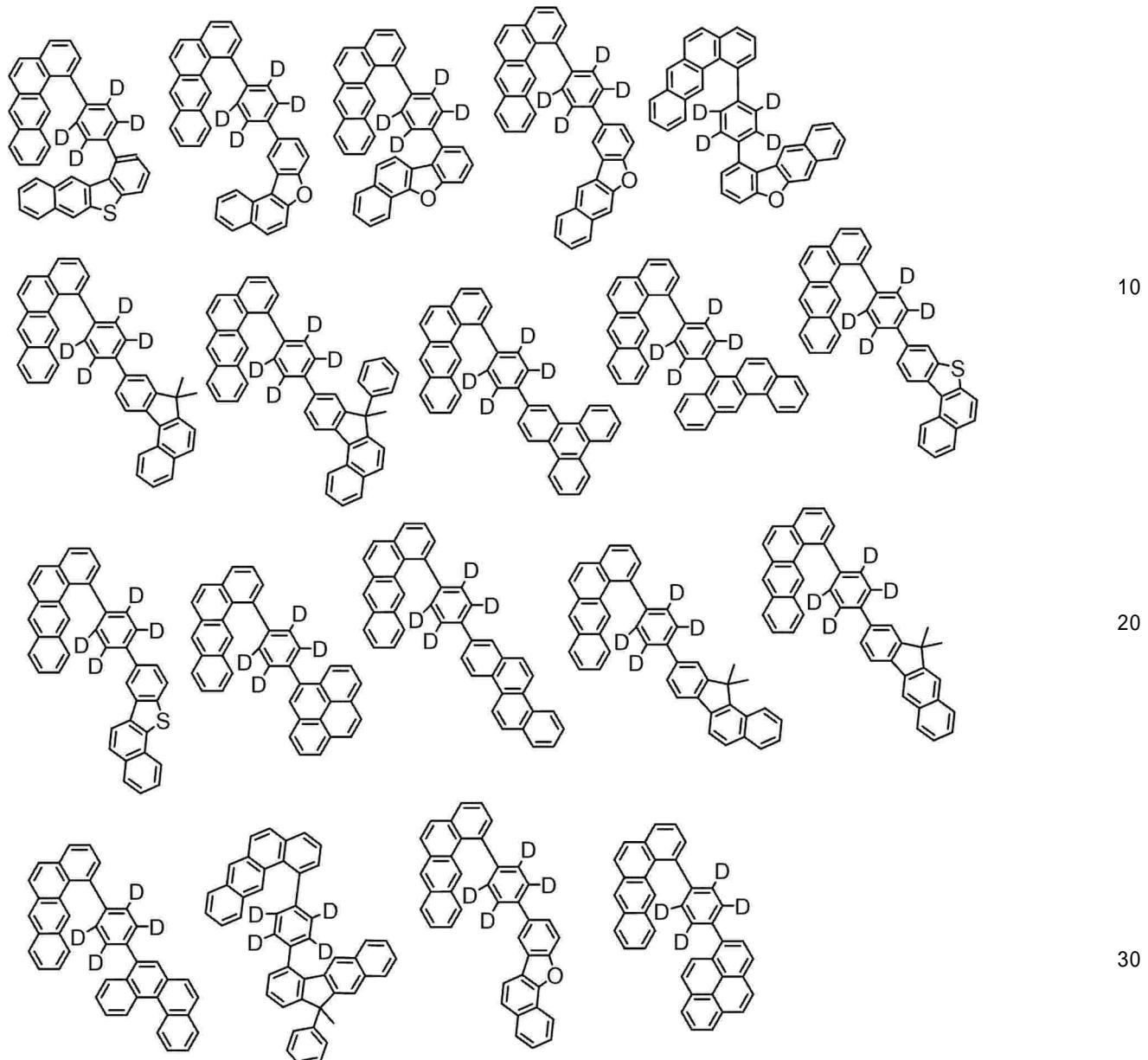
50

【化 3 4】



【0169】

【化 3 5】

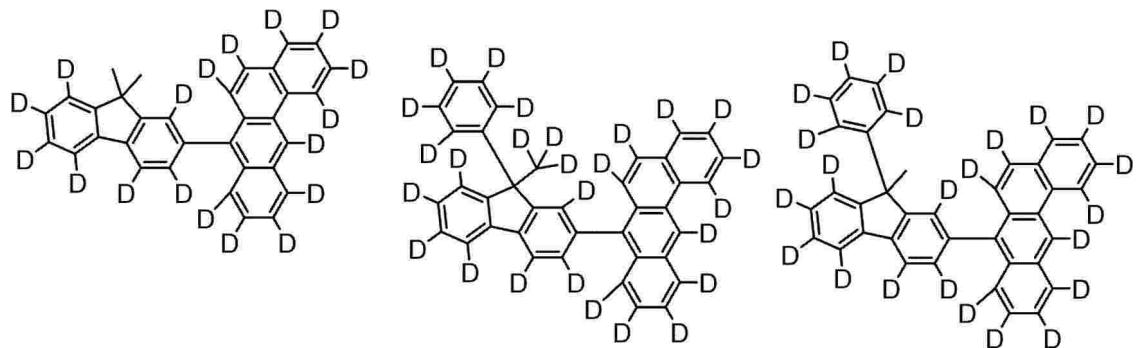


【0170】

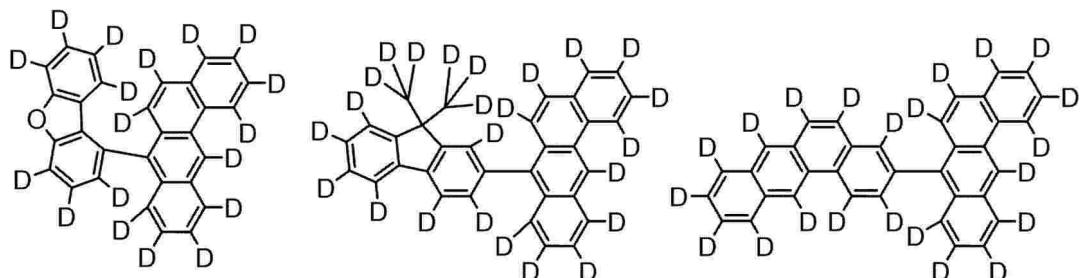
40

50

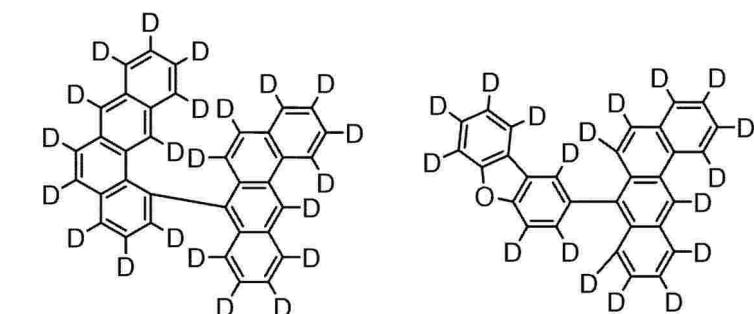
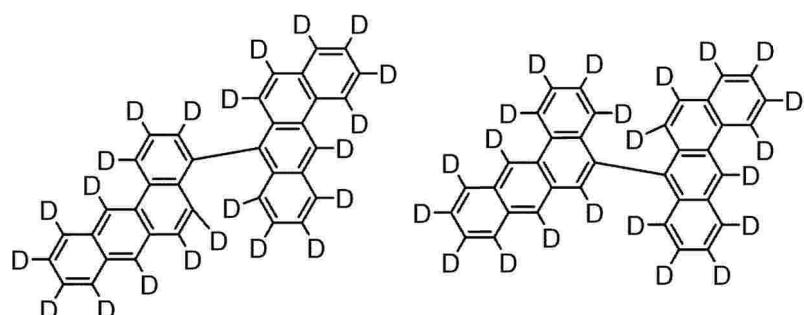
【化 3 6】



10



20



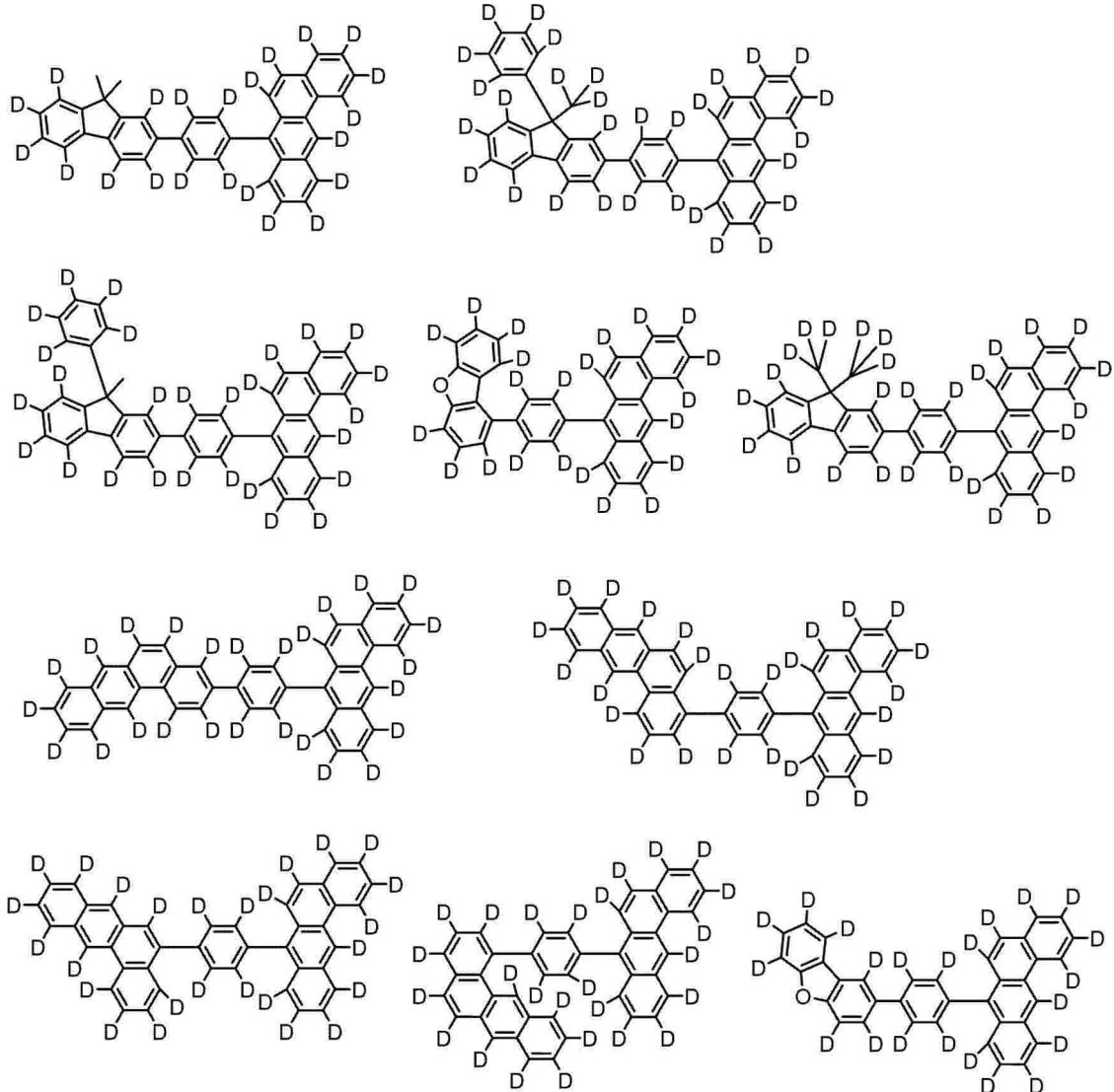
30

【0171】

40

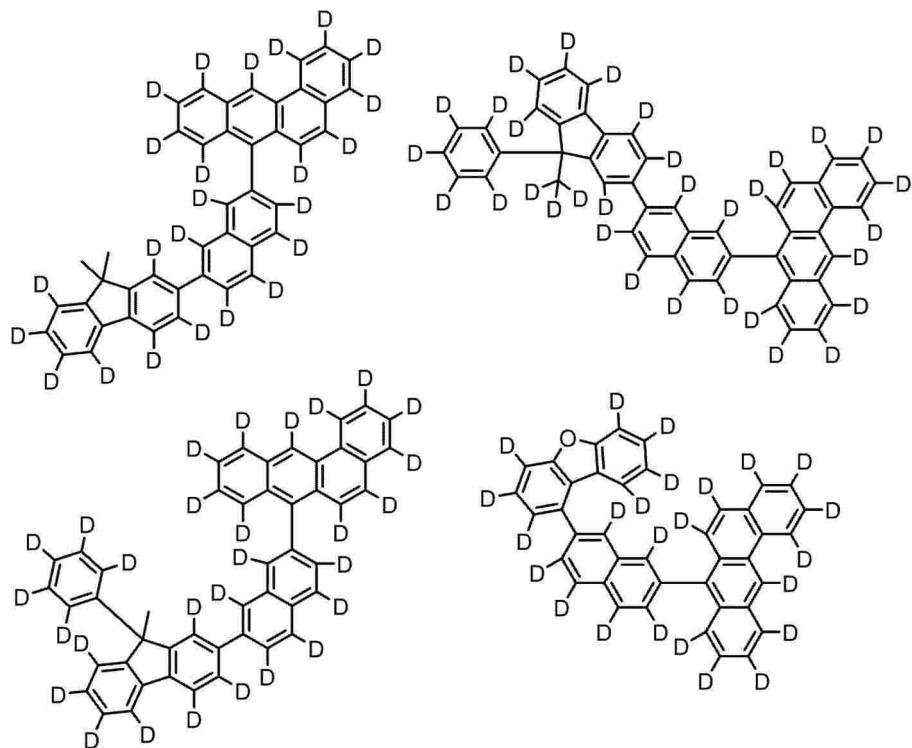
50

【化 3 7】



【0 1 7 2】

【化38】

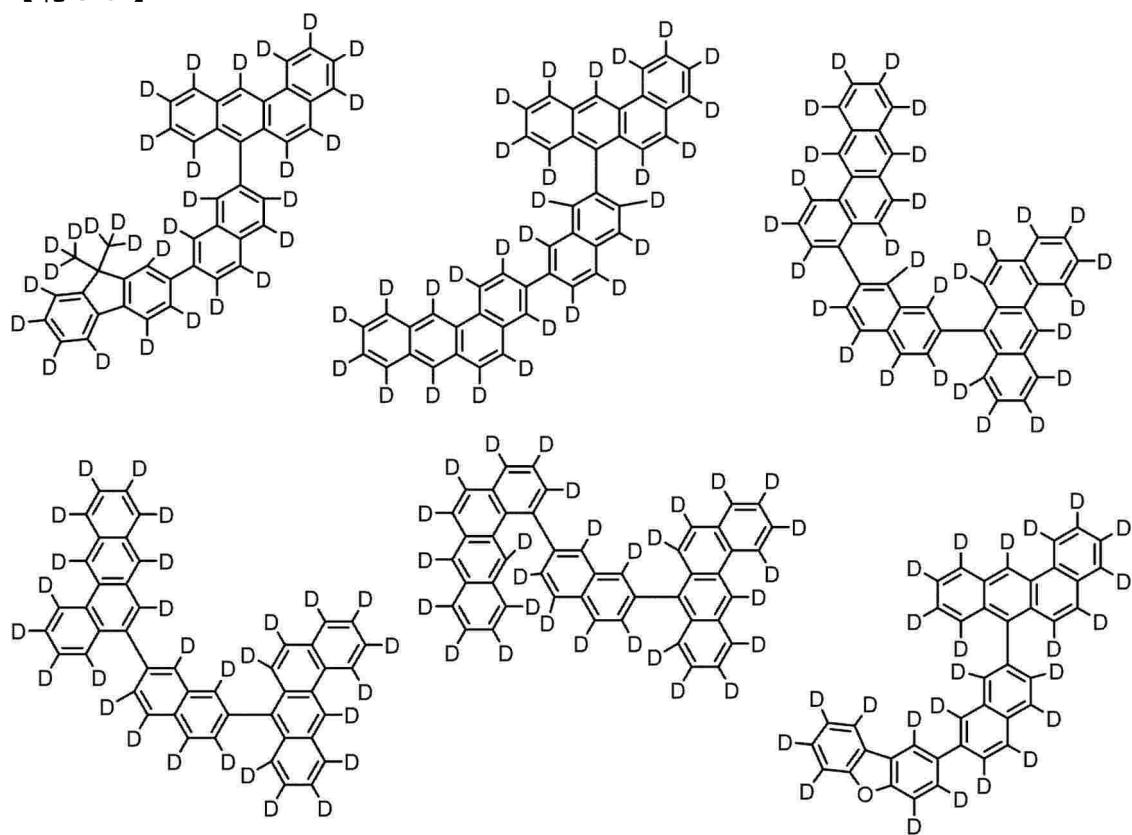


10

20

【0173】

【化39】



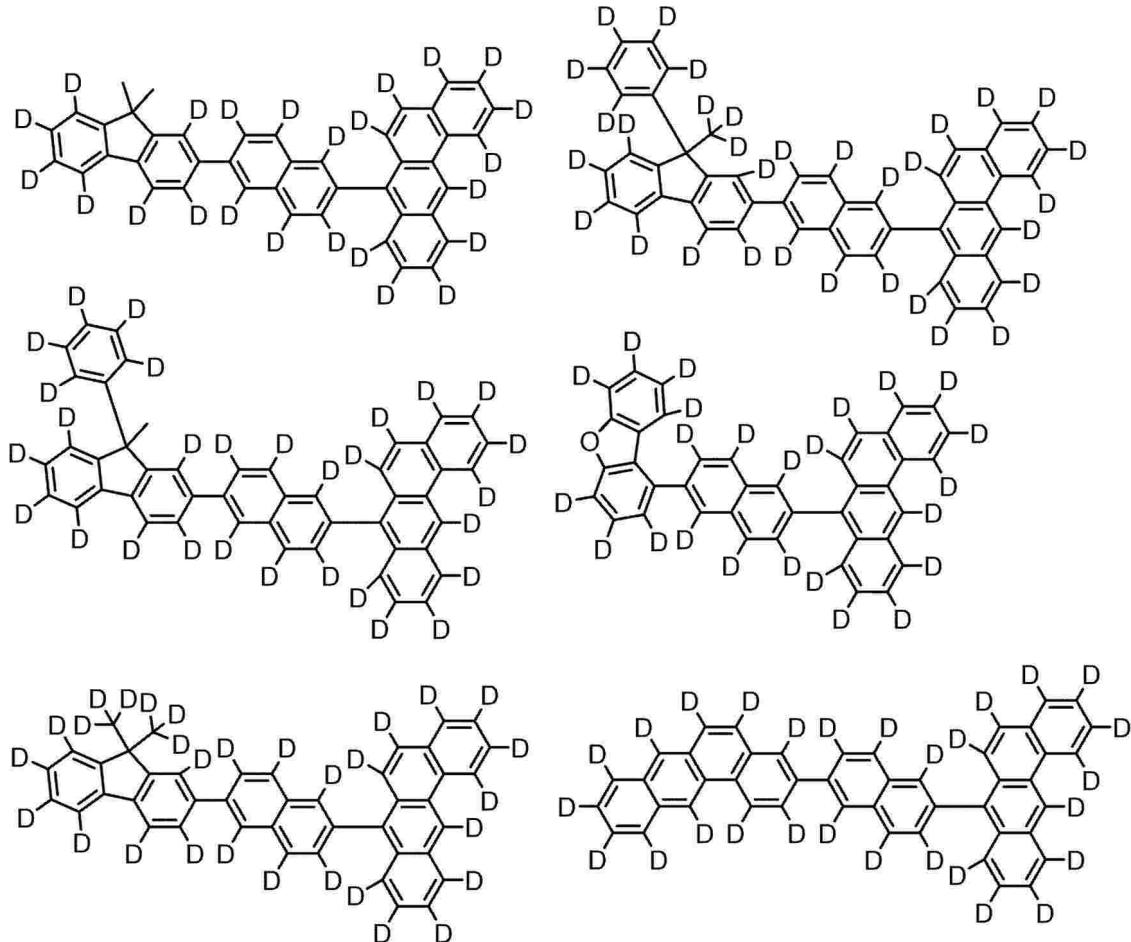
30

40

【0174】

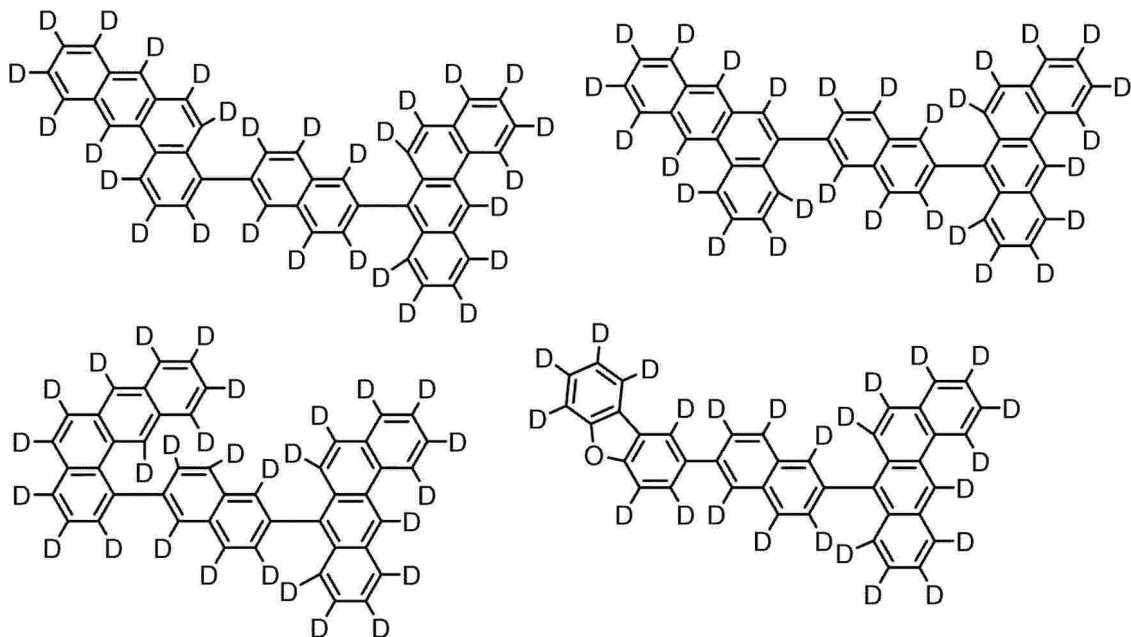
50

【化 4 0】



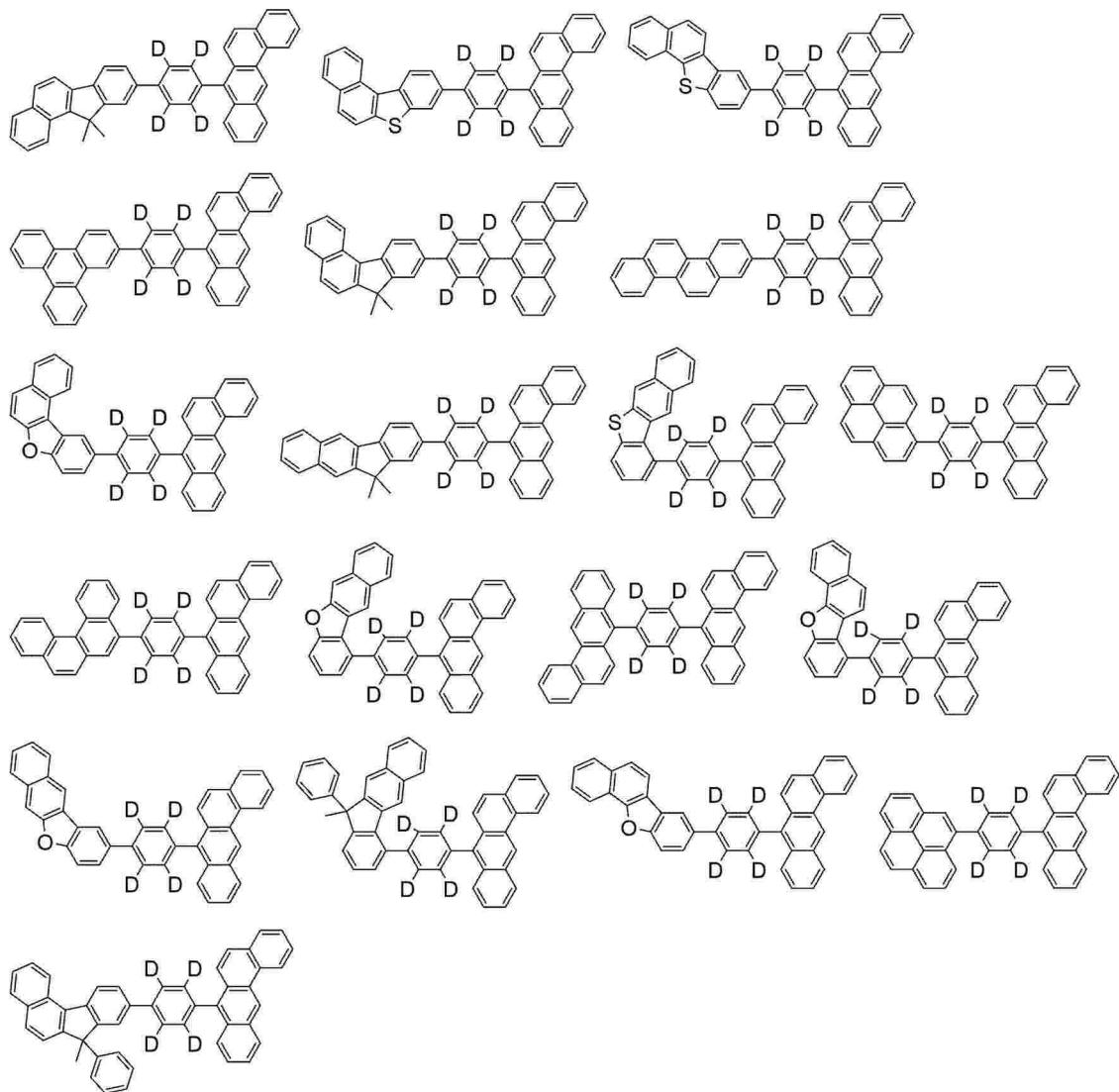
【0 1 7 5】

【化 4 1】



【0 1 7 6】

【化42】



【0177】

10

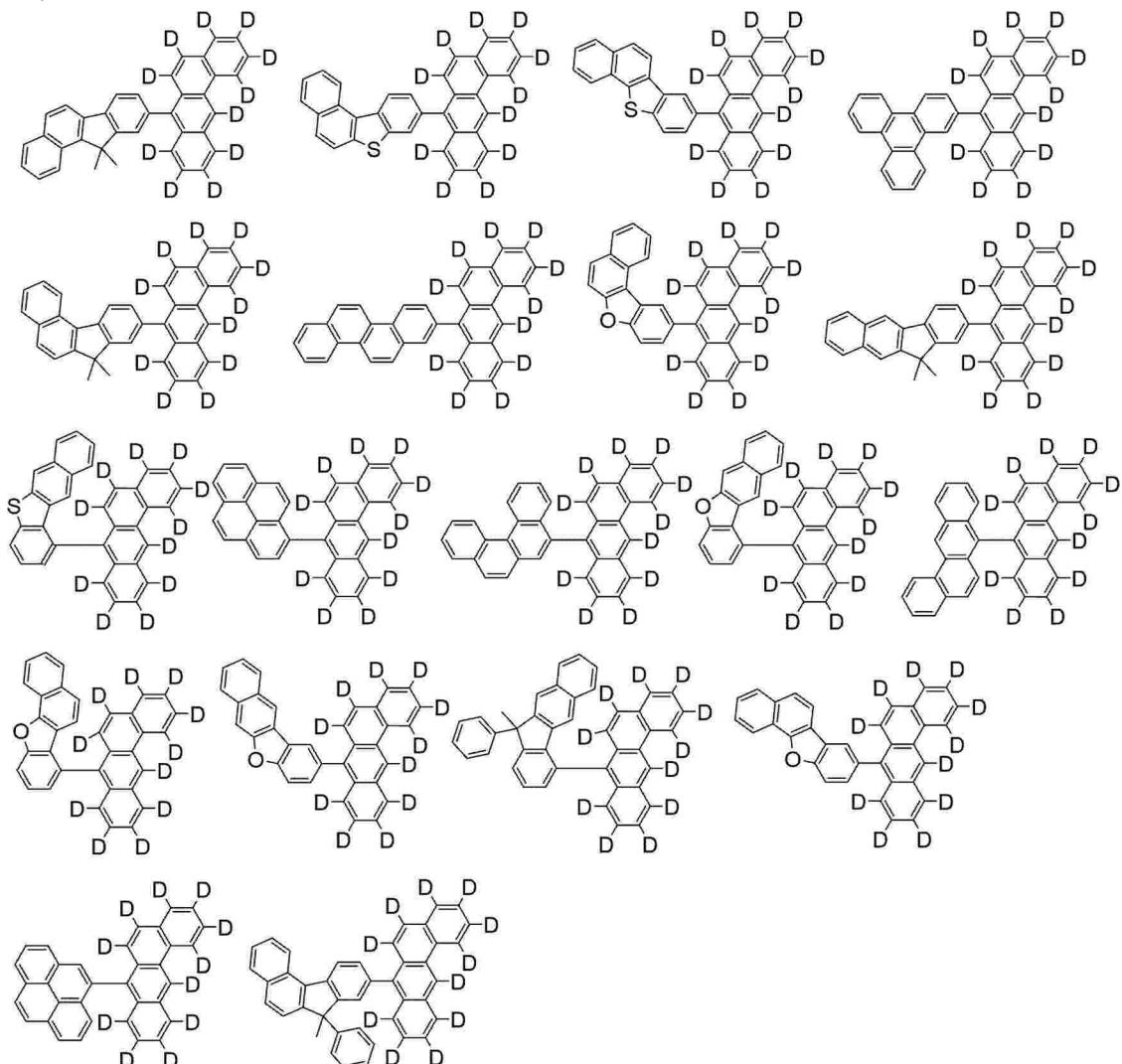
20

30

40

50

【化43】



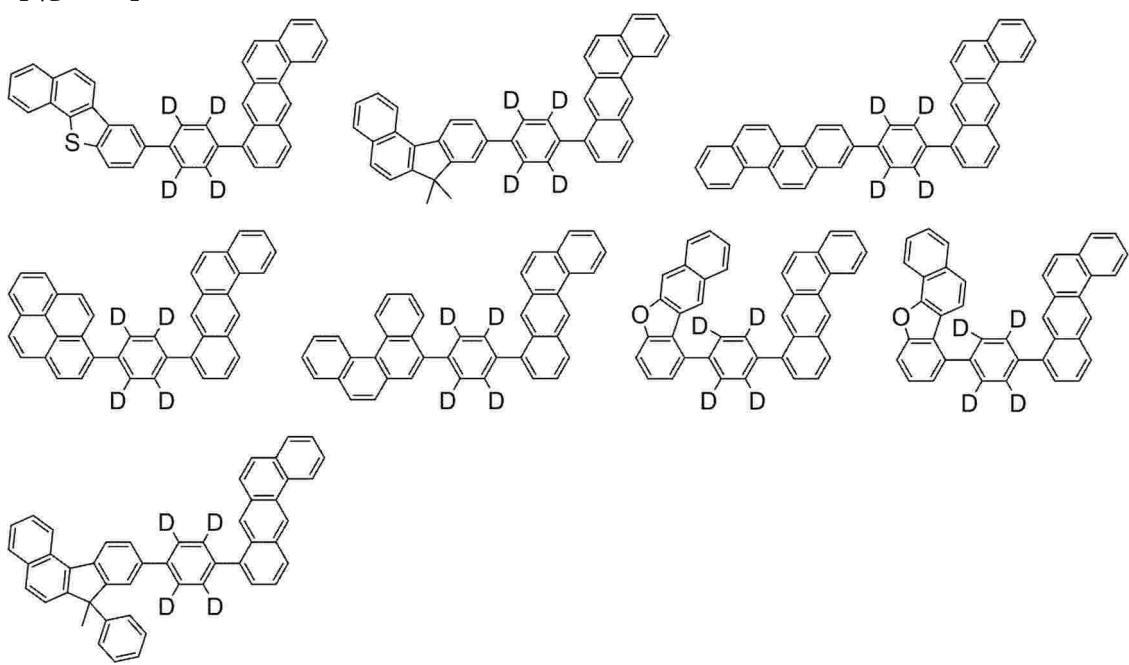
10

20

30

【0178】

【化44】

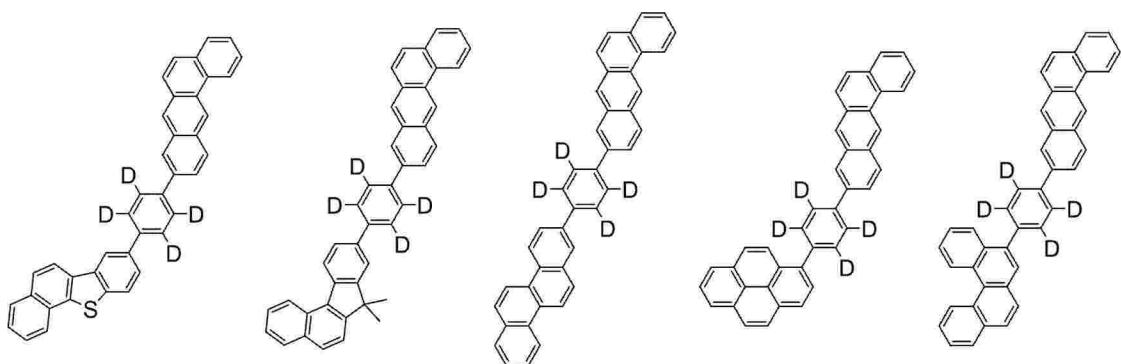


40

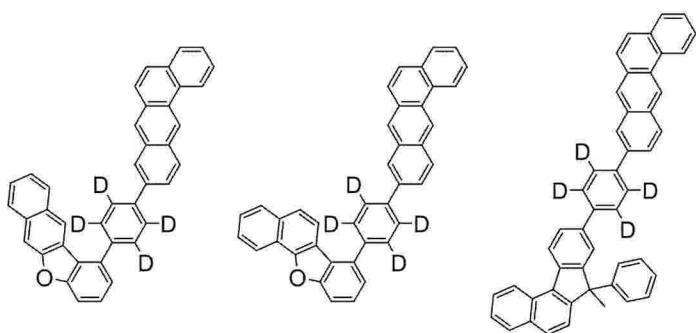
50

【0 1 7 9】

【化 4 5】



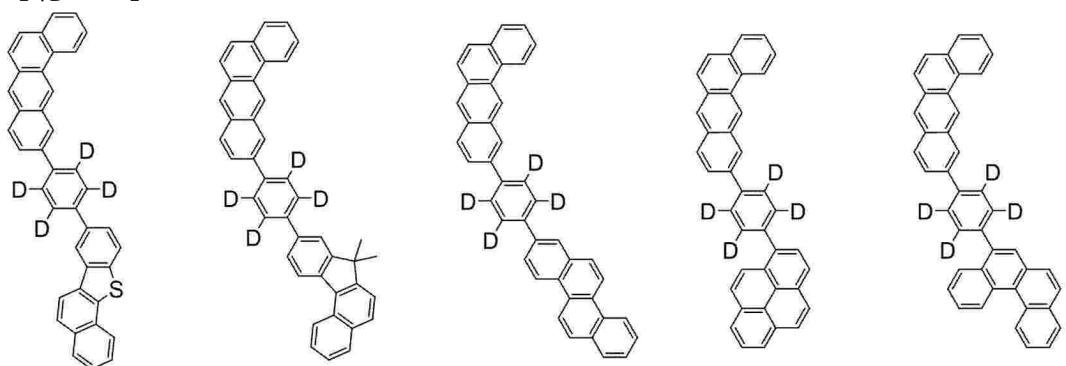
10



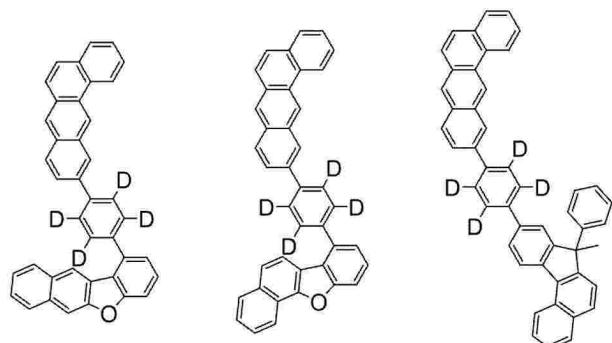
20

【0 1 8 0】

【化 4 6】



30

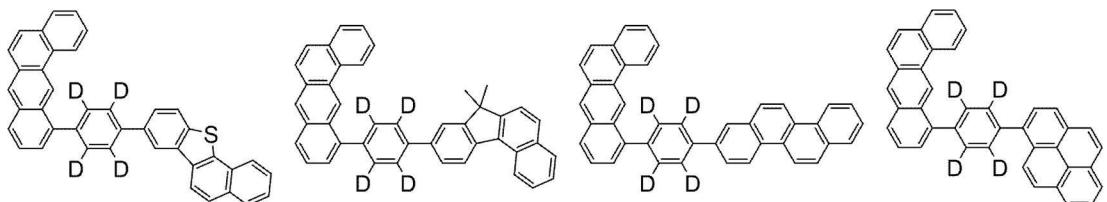


40

【0 1 8 1】

50

【化 4 7】

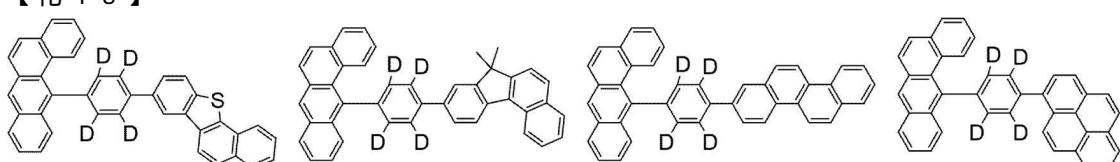


The chemical structure shows a central benzene ring with four phenanthrene groups attached at the 2, 4, 6, and 8 positions. Four deuterium atoms (D) are attached to the central ring at the 2, 4, 6, and 8 positions.

10

【 0 1 8 2 】

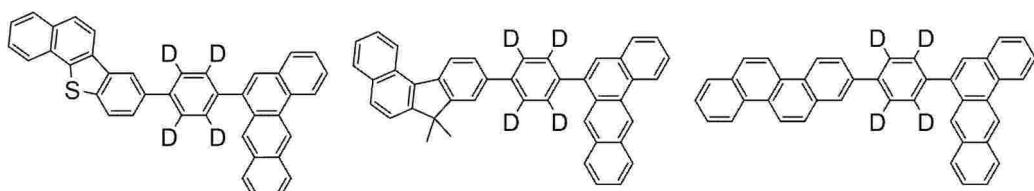
【化 4 8】



20

【 0 1 8 3 】

【化 4 9】

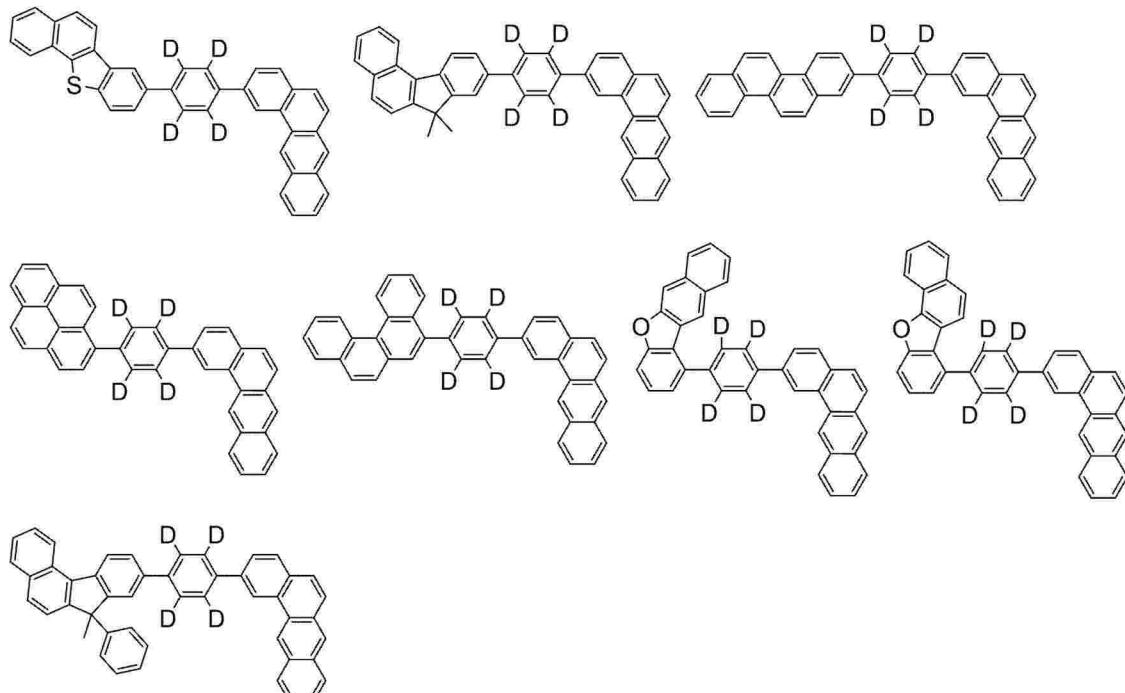


30

〔 0 1 8 4 〕

50

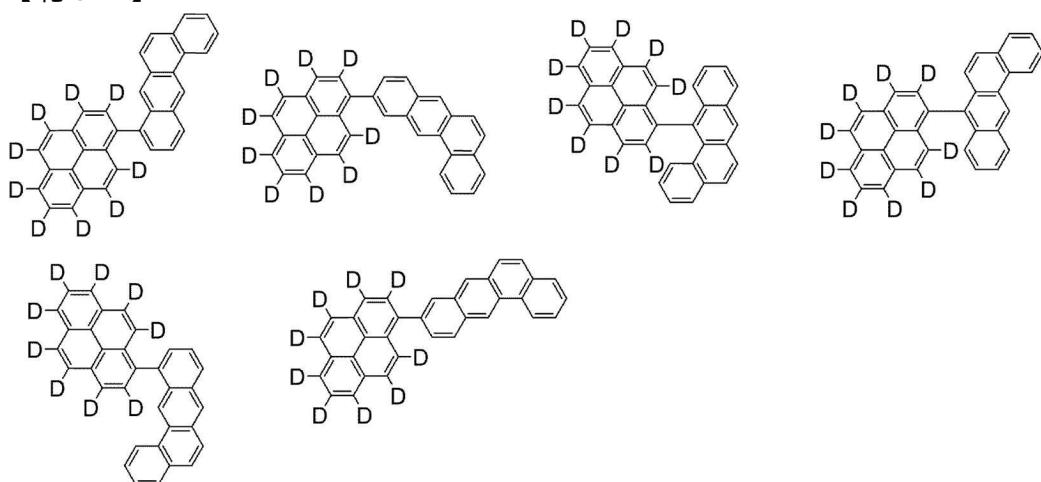
【化 5 0】



10

【0 1 8 5】

【化 5 1】



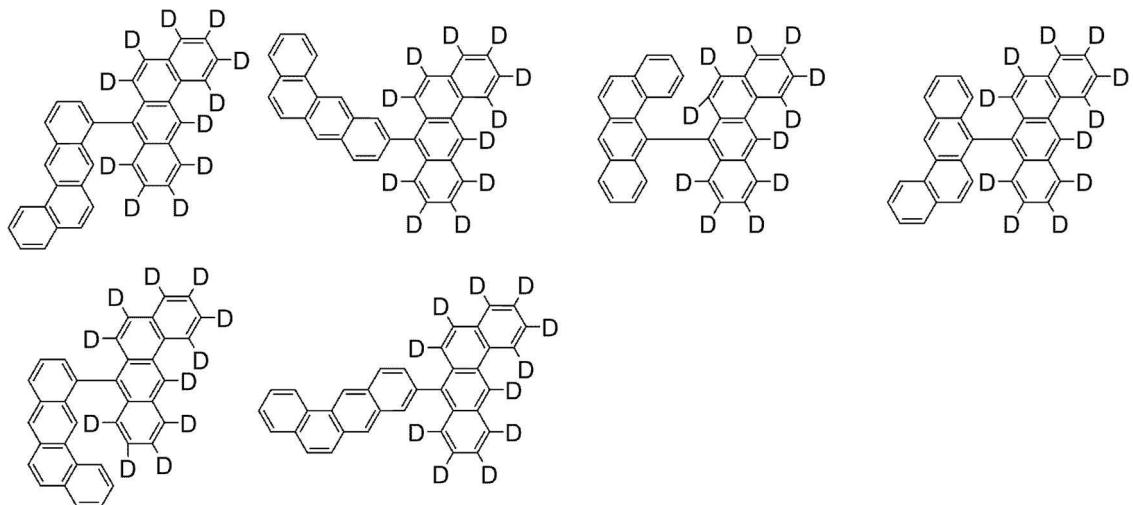
30

【0 1 8 6】

40

50

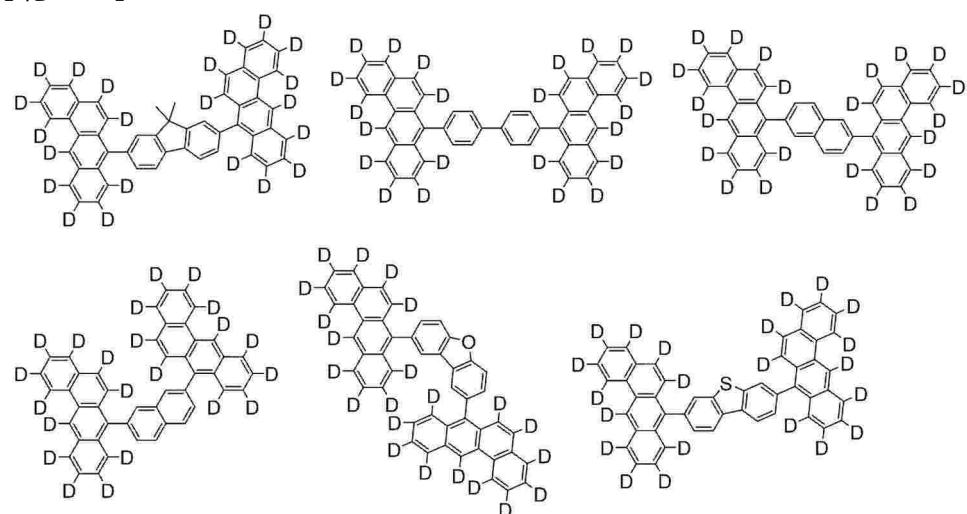
【化 5 2】



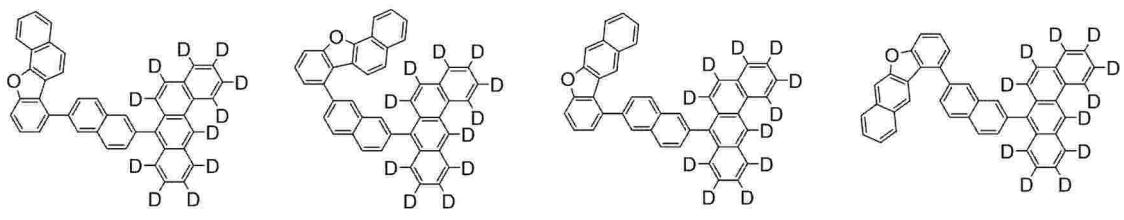
10

【0 1 8 7】

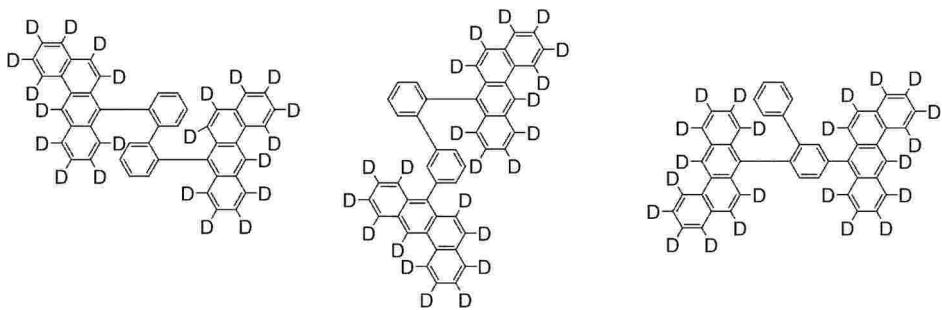
【化 5 3】



20



30

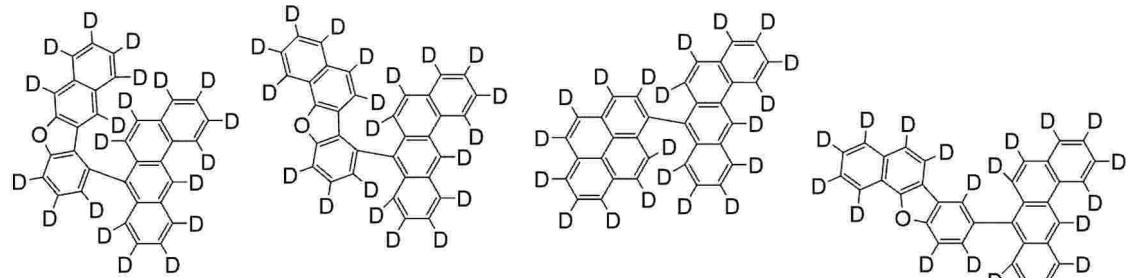


40

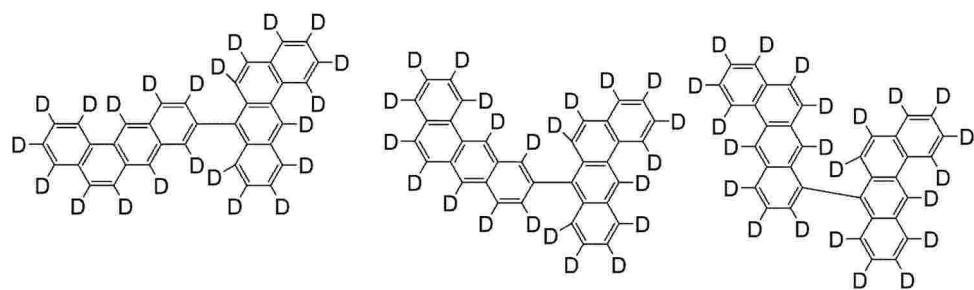
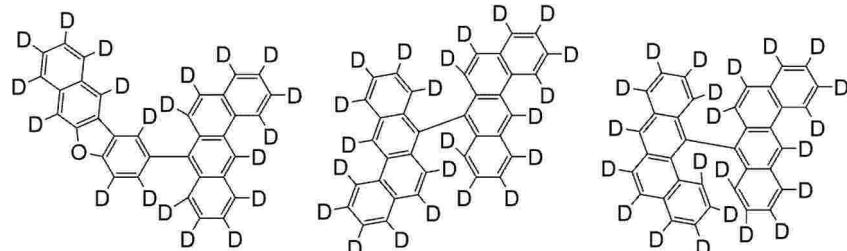
【0 1 8 8】

50

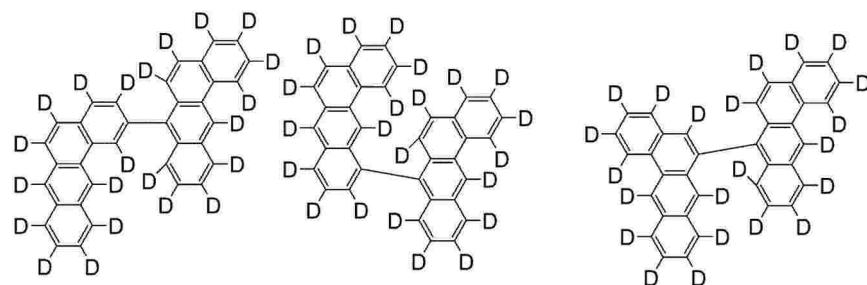
【化 5 4】



10



20



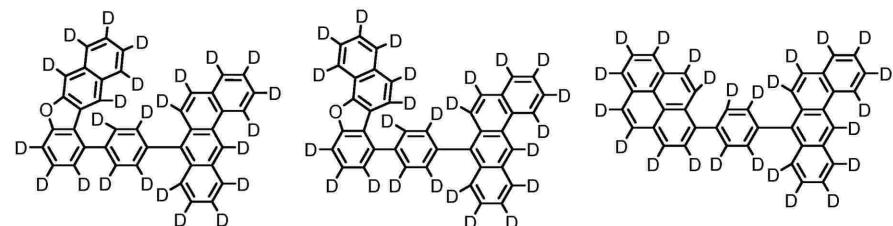
30

【0189】

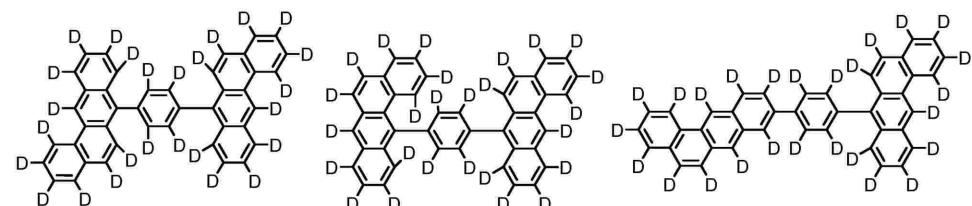
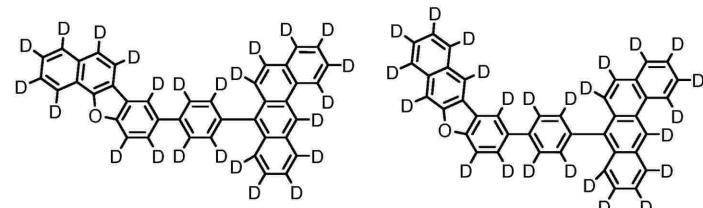
40

50

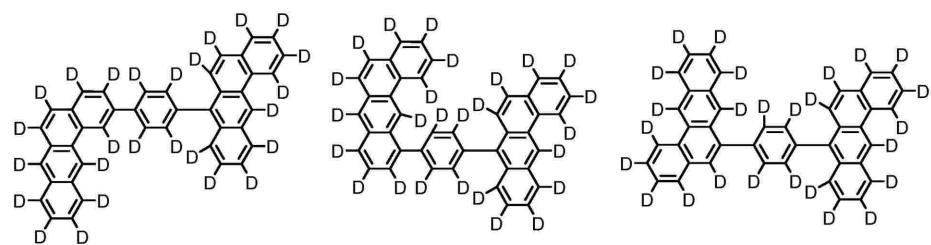
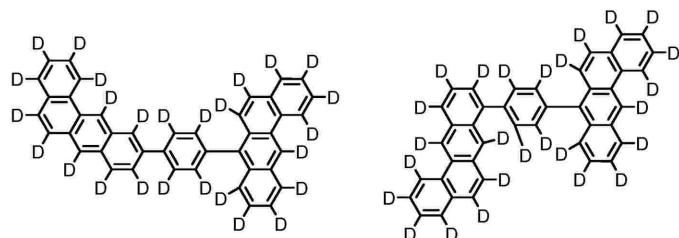
【化 5 5】



10



20



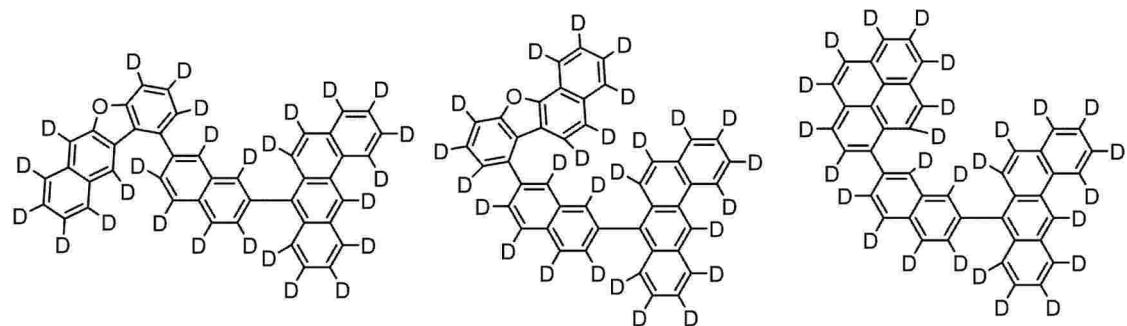
30

【0190】

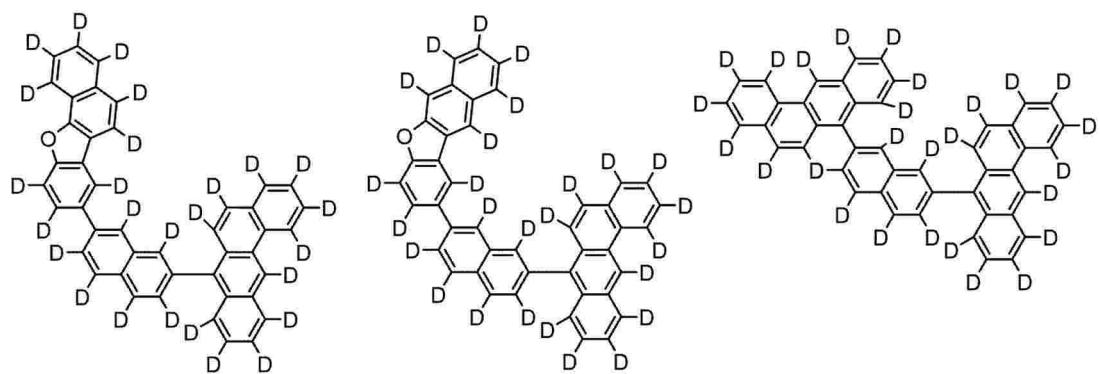
40

50

【化 5 6】



10



20

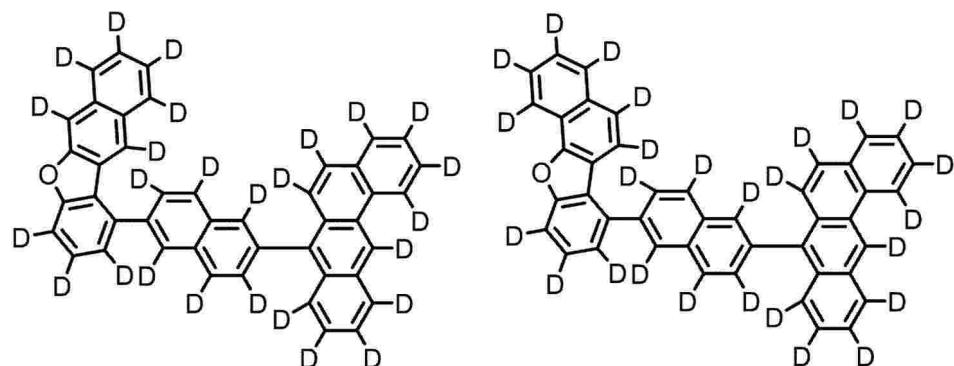
【 0 1 9 1 】

30

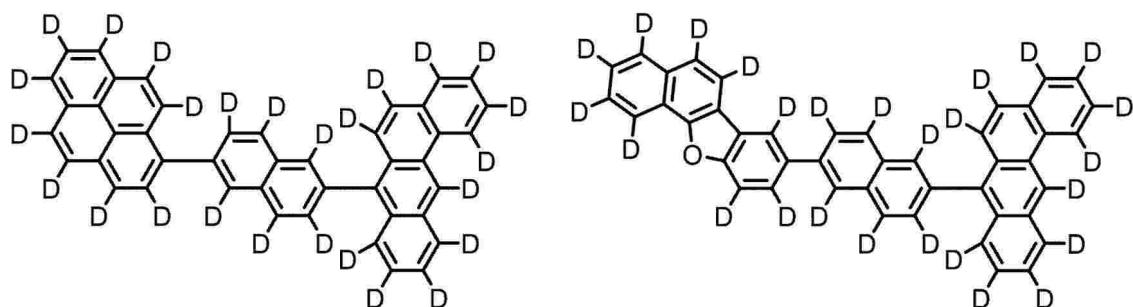
40

50

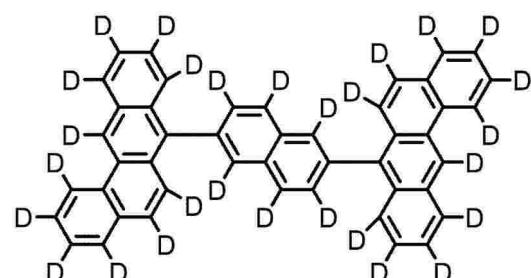
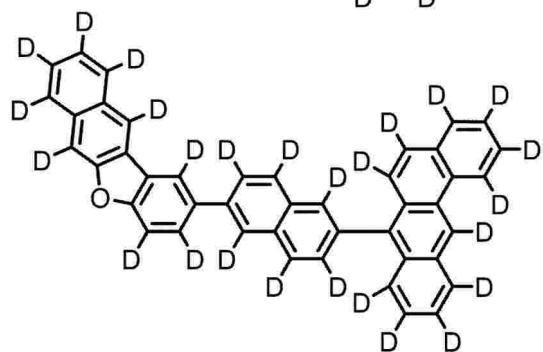
【化 5 7】



10



20



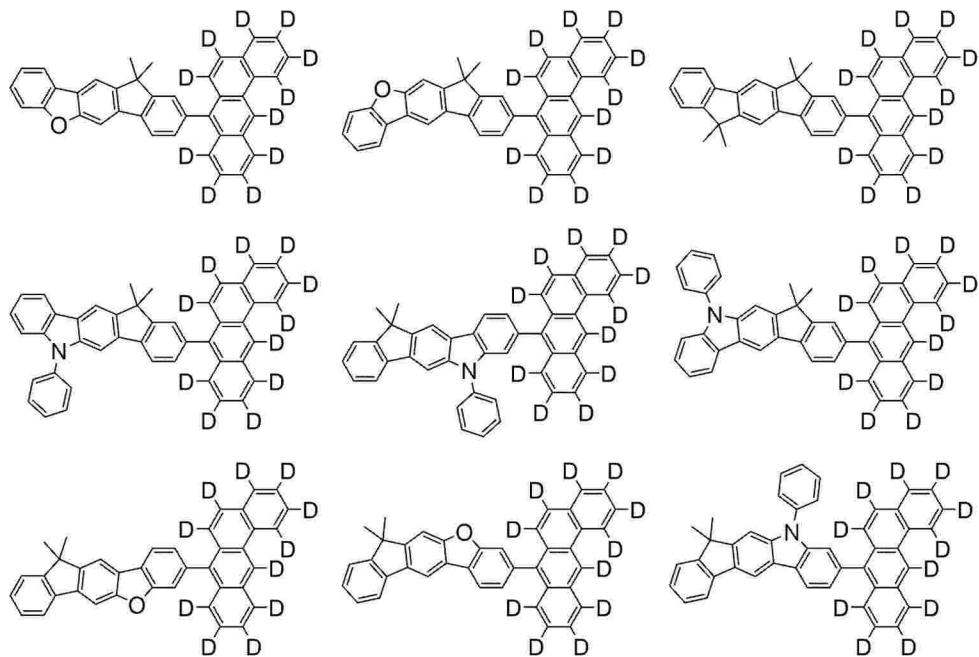
30

【0192】

40

50

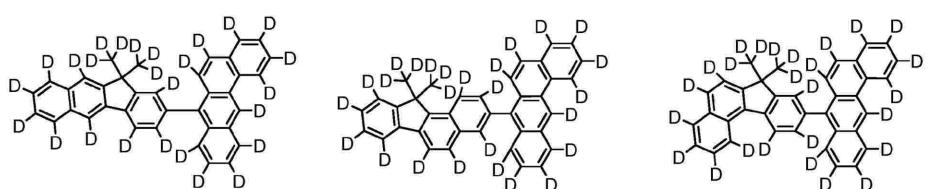
【化 5 8】



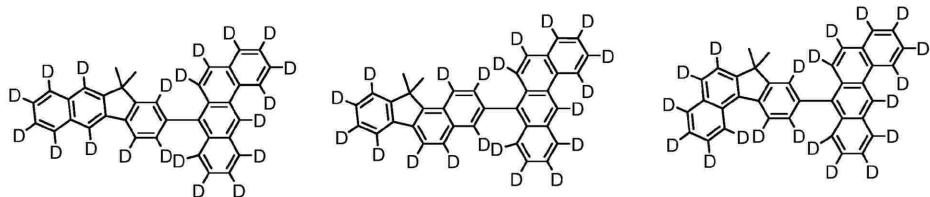
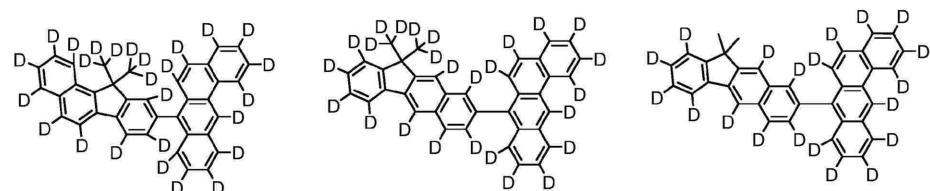
10

【0 1 9 3】

【化 5 9】



20



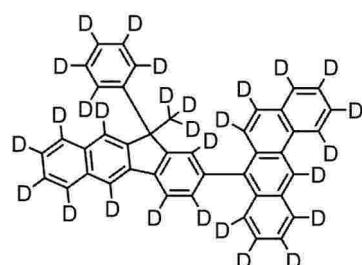
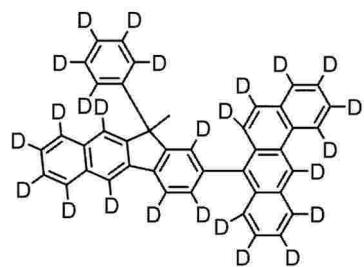
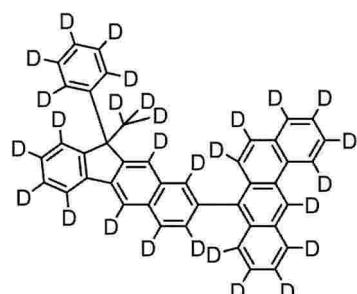
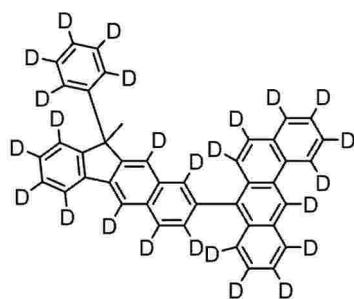
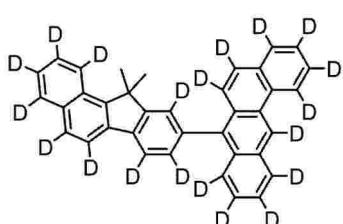
30

40

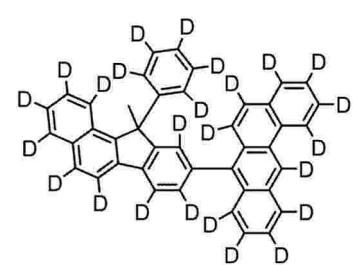
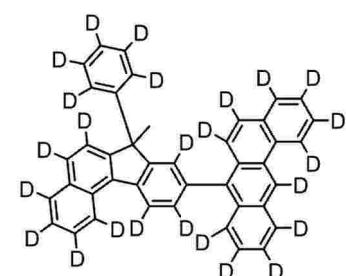
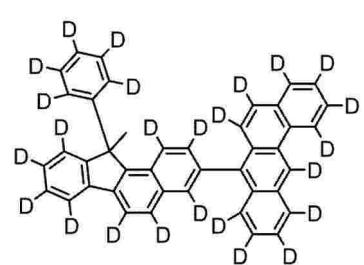
【0 1 9 4】

50

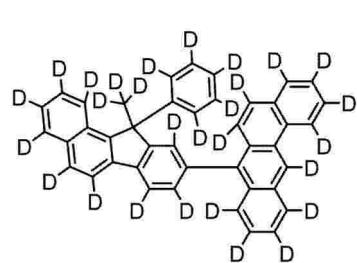
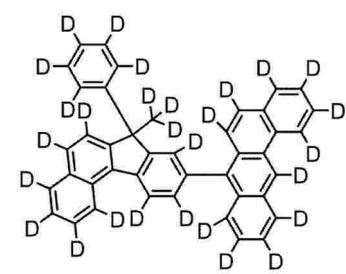
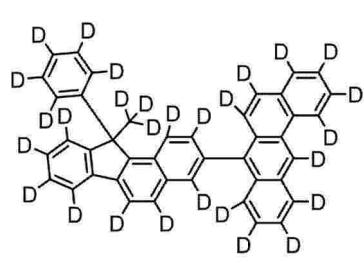
【化 6 0】



10



20



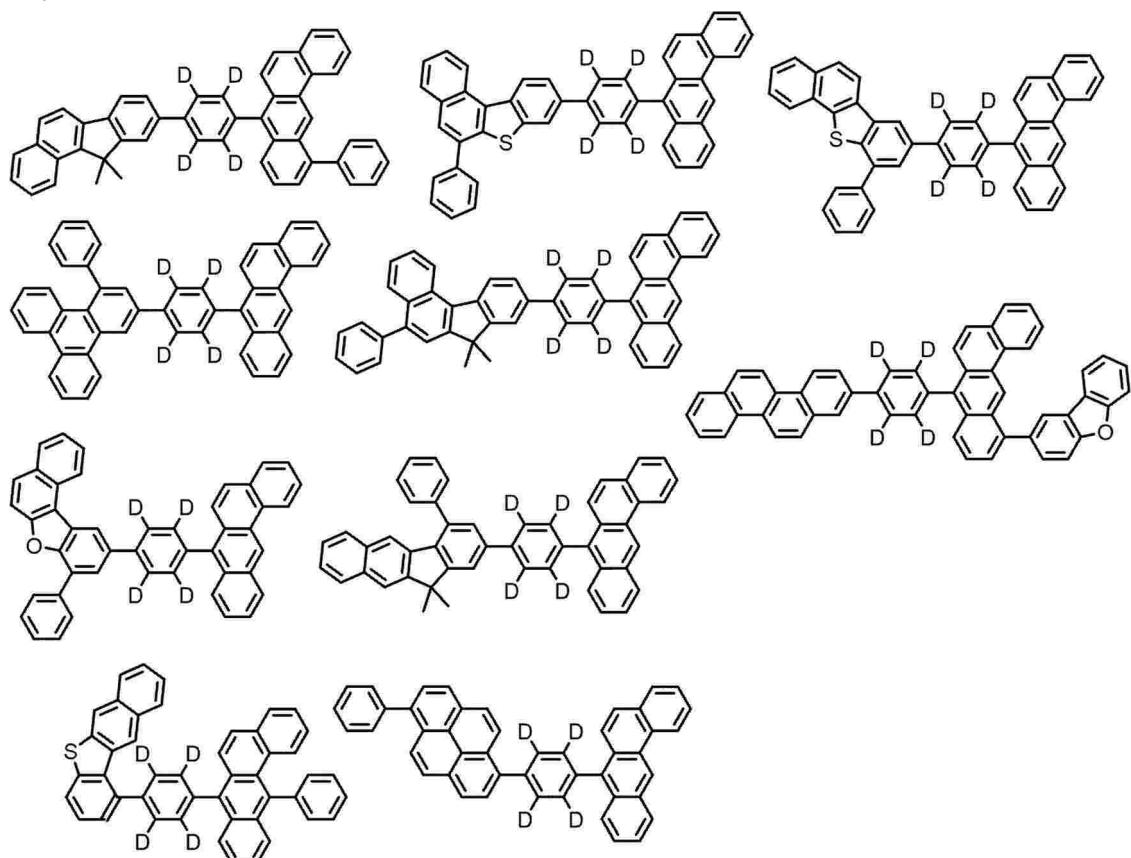
30

【0195】

40

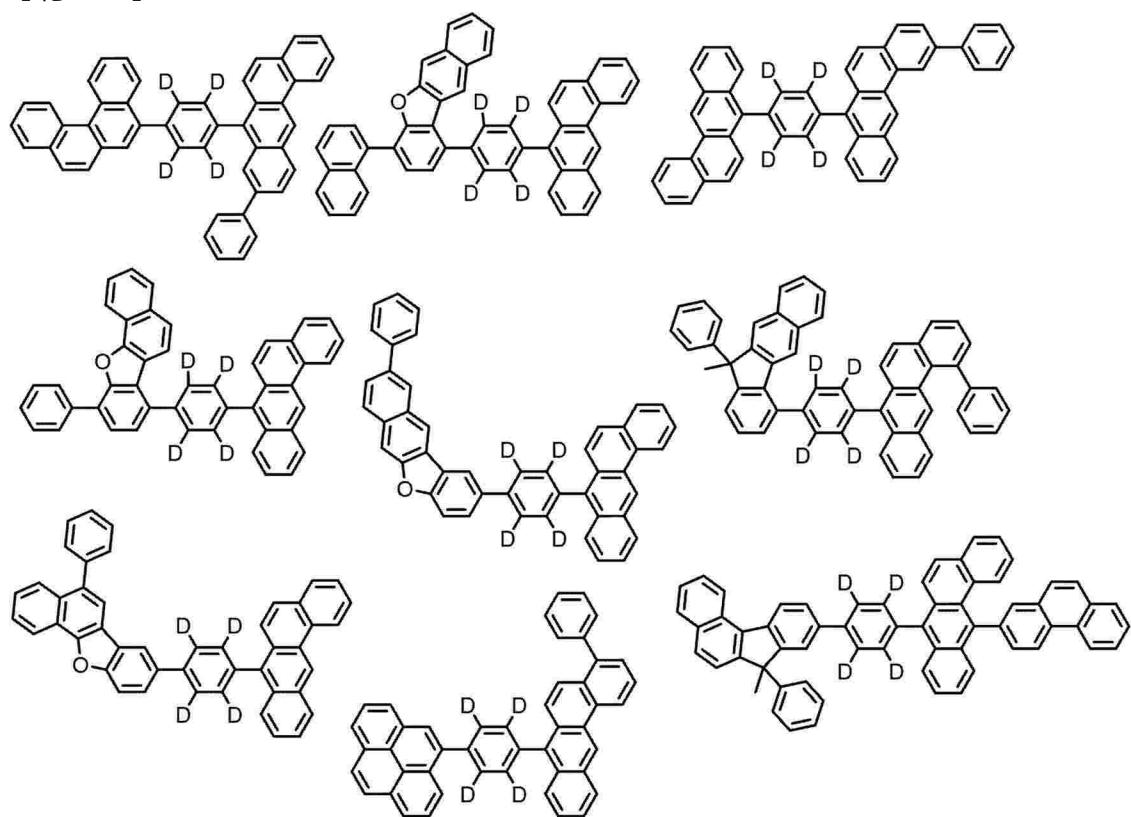
50

【化 6 1】



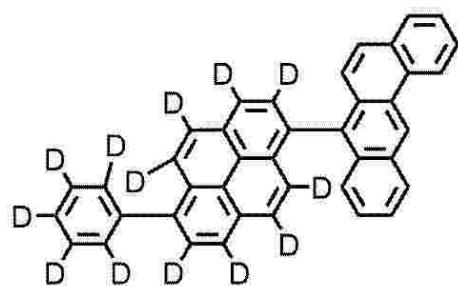
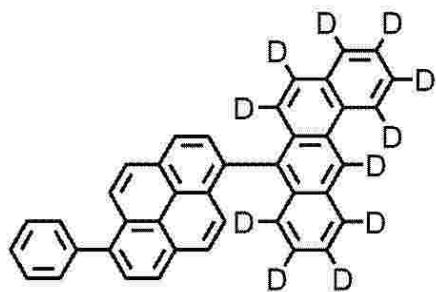
【0 1 9 6】

【化 6 2】

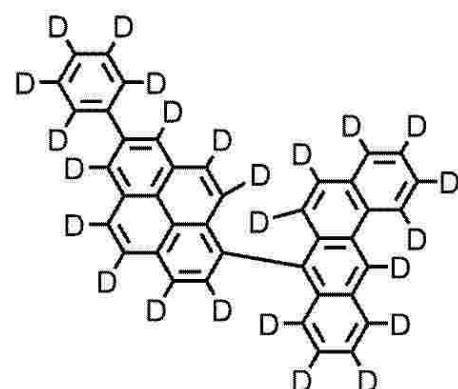
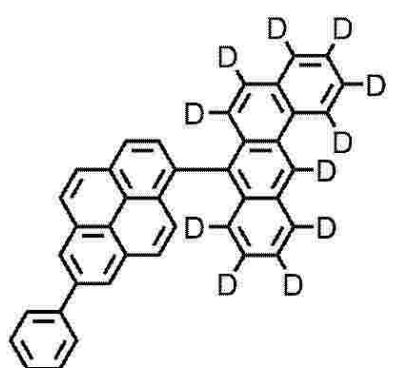


【 0 1 9 7 】

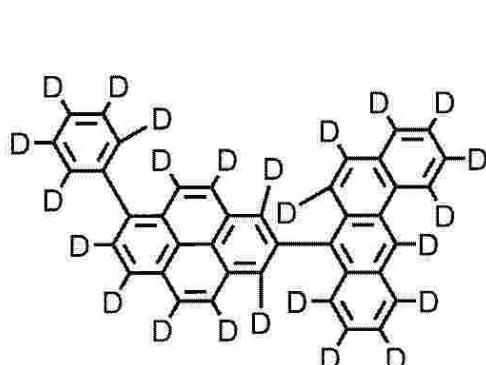
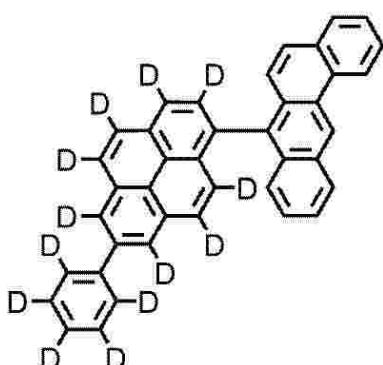
【 化 6 3 】



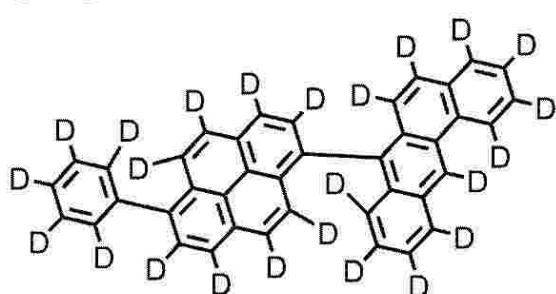
10



20



30

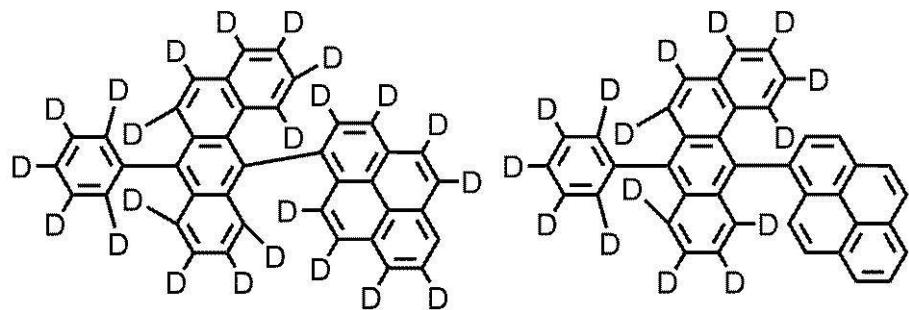


40

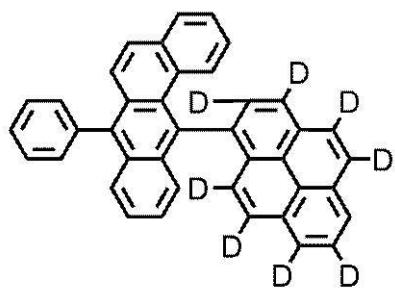
【 0 1 9 8 】

50

【化 6 4】



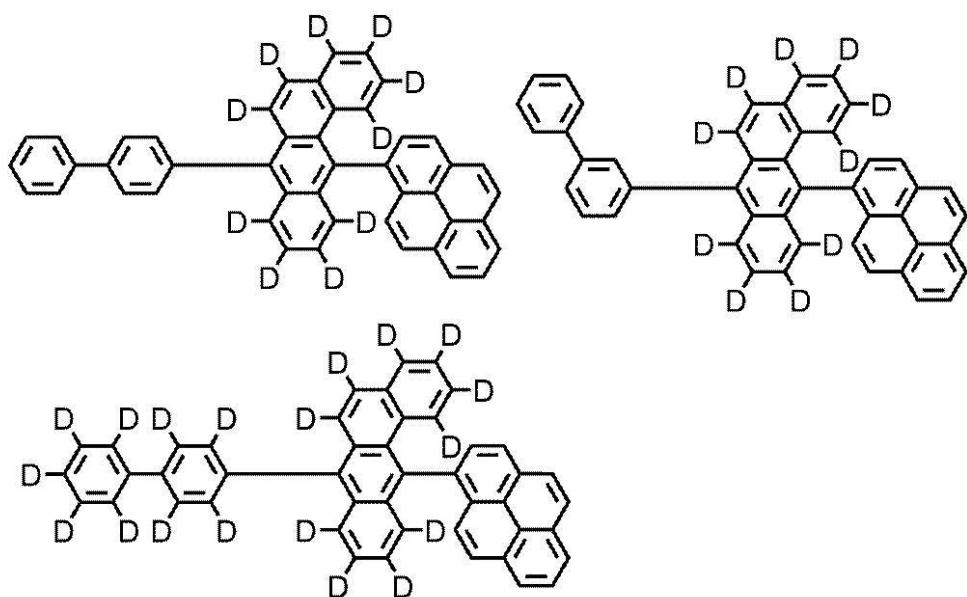
10



20

【0 1 9 9】

【化 6 5】



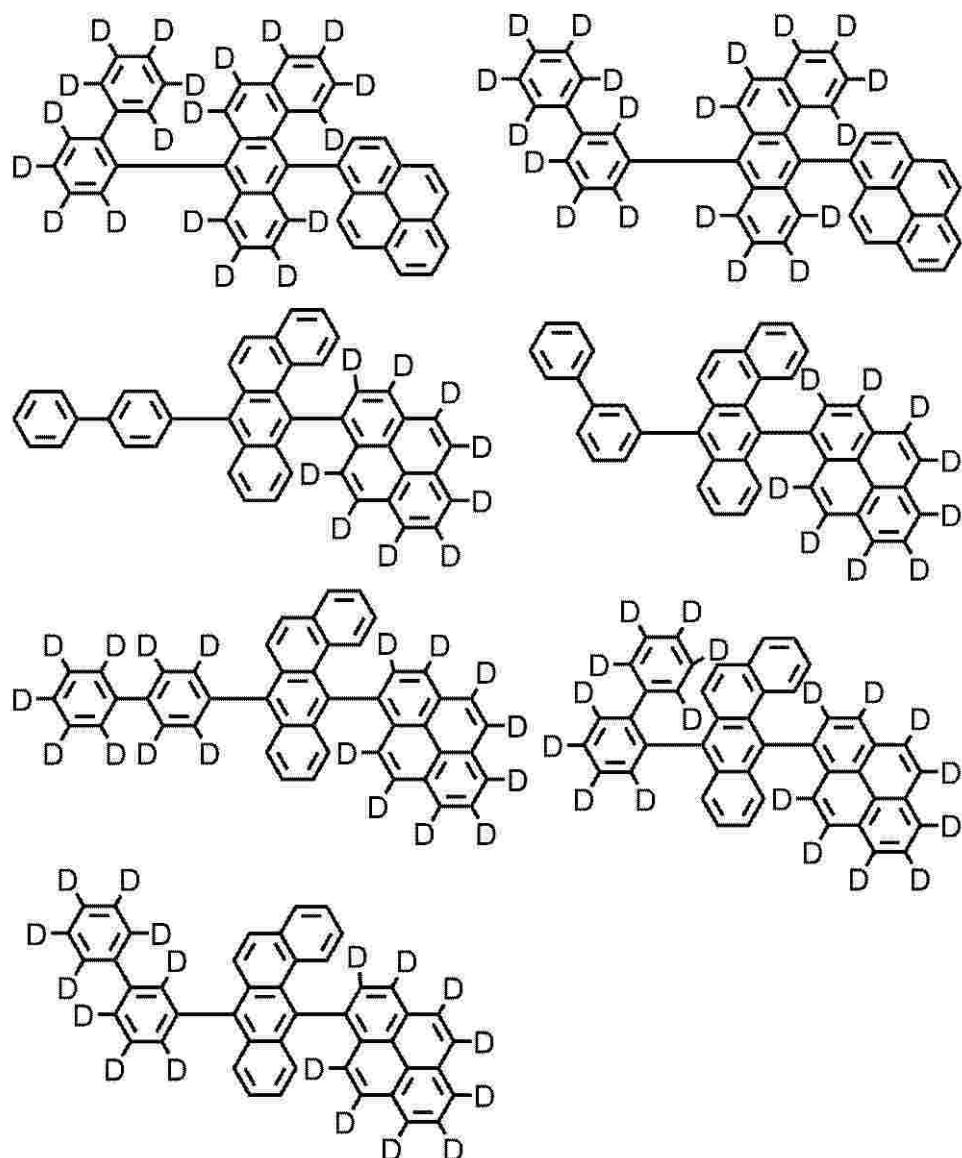
30

40

【0 2 0 0】

50

【化 6 6】

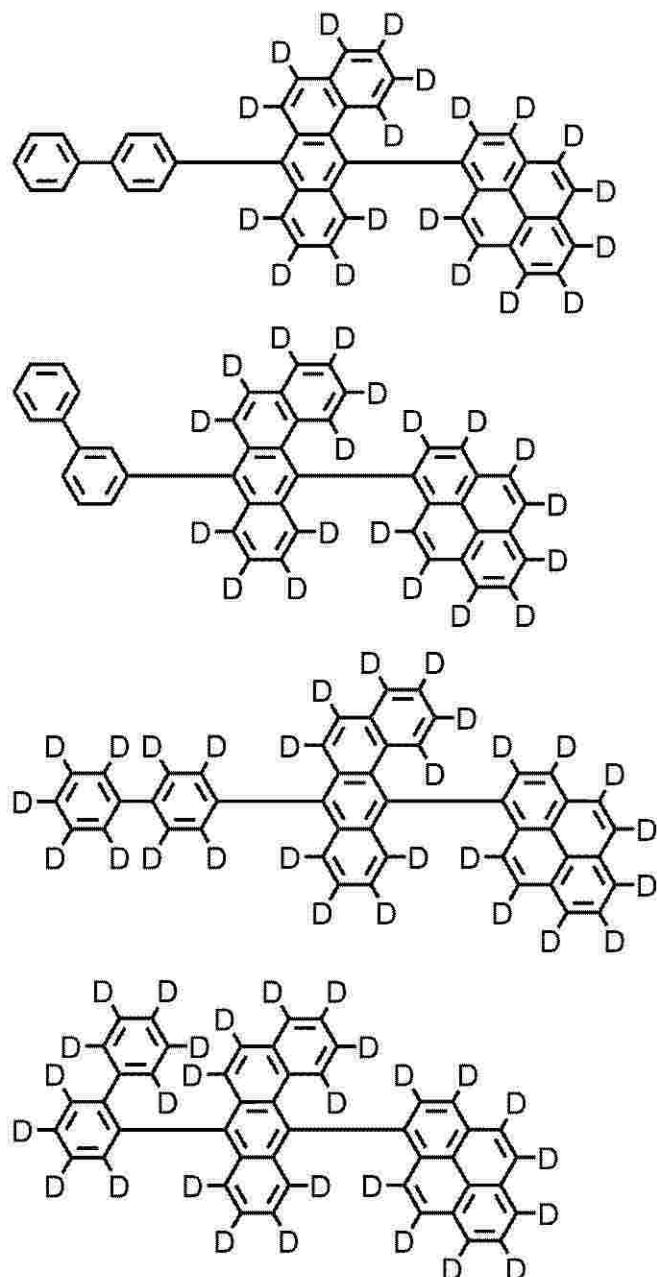


【0201】

40

50

【化 6 7】

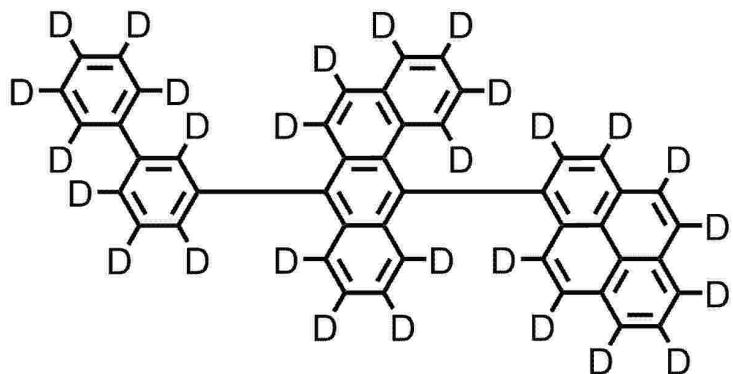


【0202】

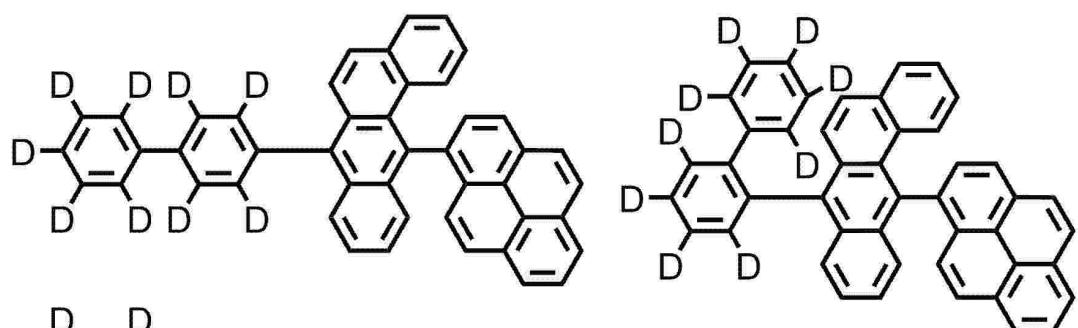
40

50

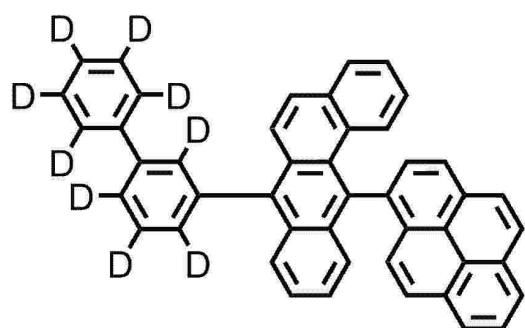
【化 6 8】



10



20



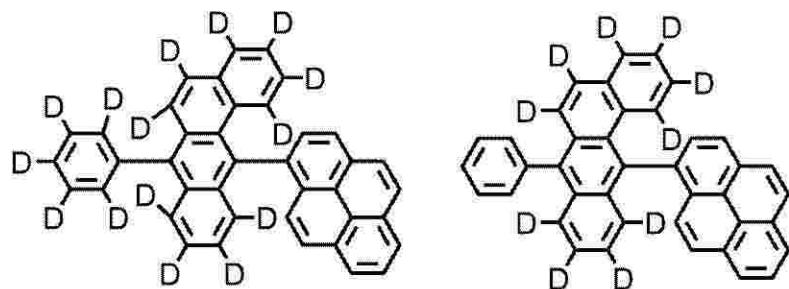
30

【0203】

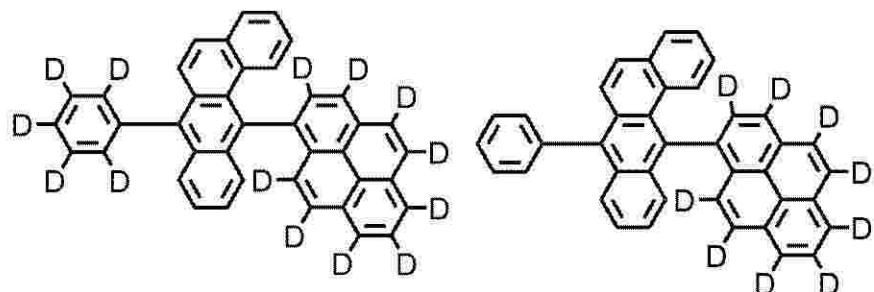
40

50

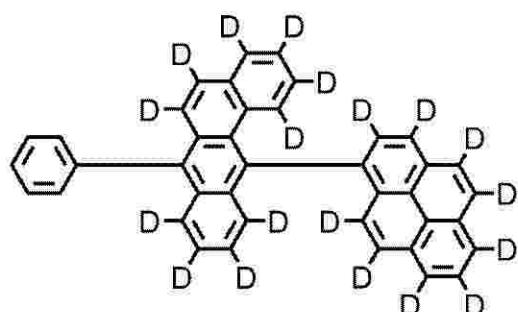
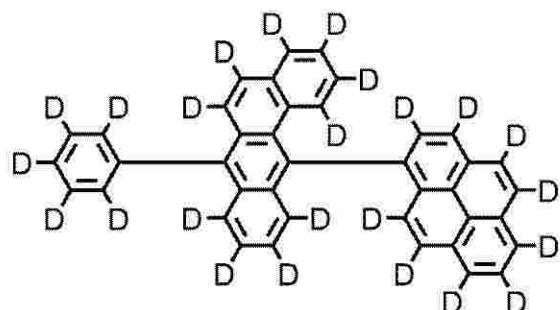
【化 6 9】



10



20

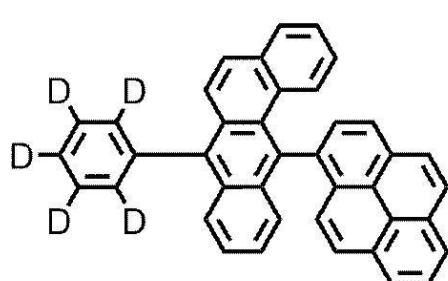


30

【0 2 0 4】

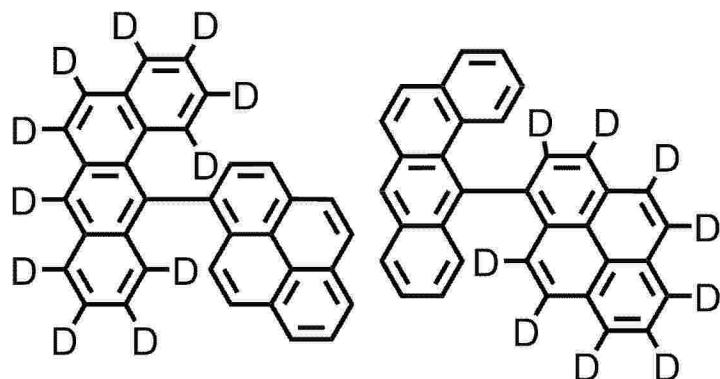
【化 7 0】

40

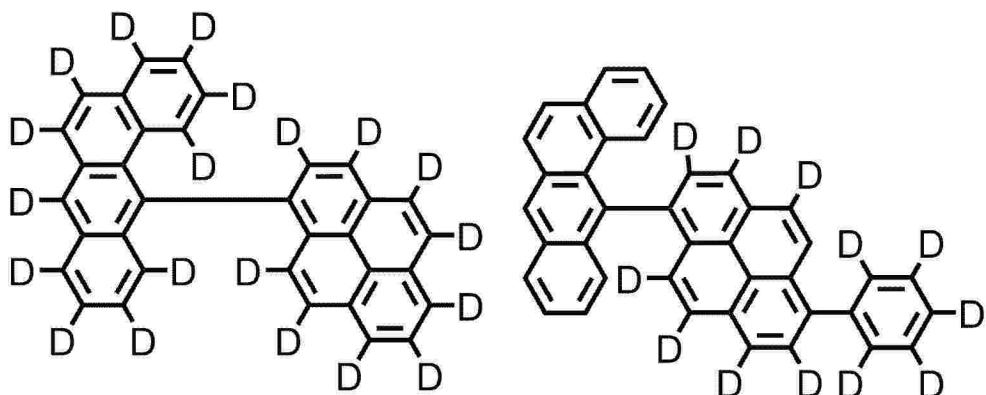


50

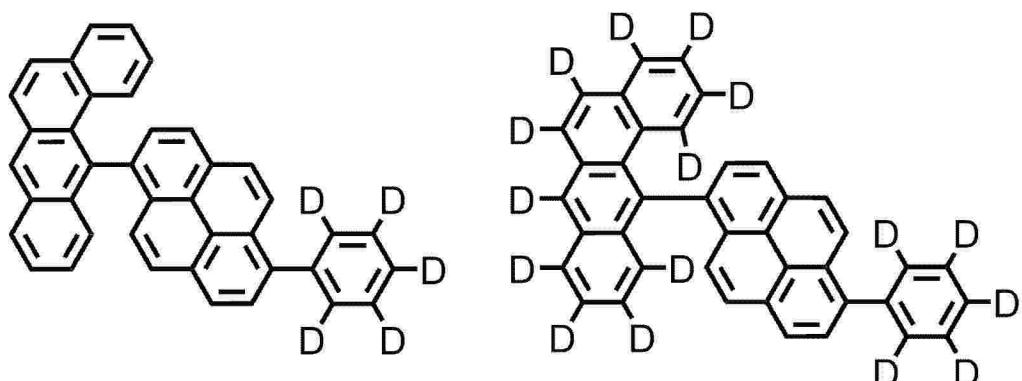
【0205】
【化71】



10



20



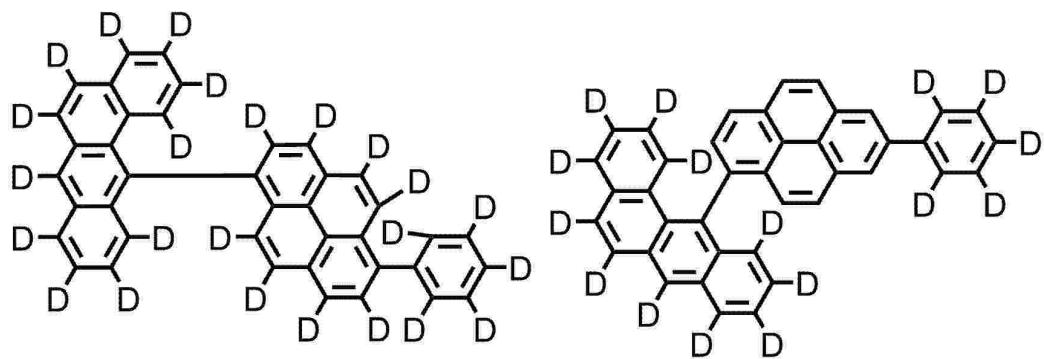
30

【0206】

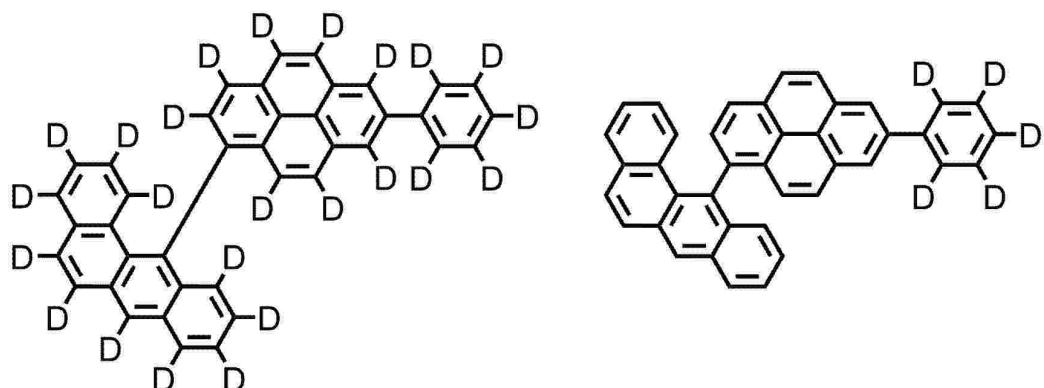
40

50

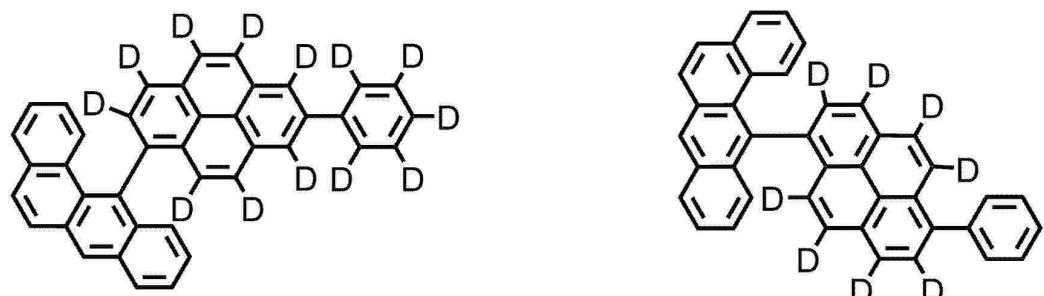
【化 7 2】



10



20



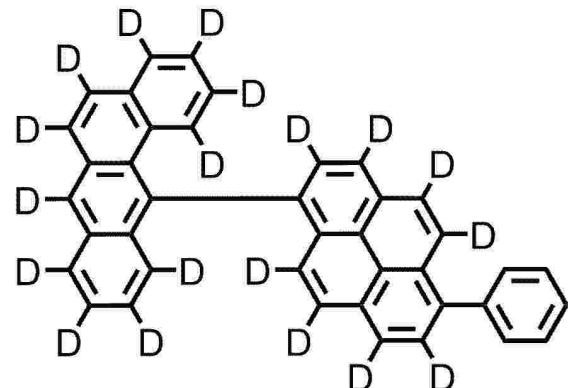
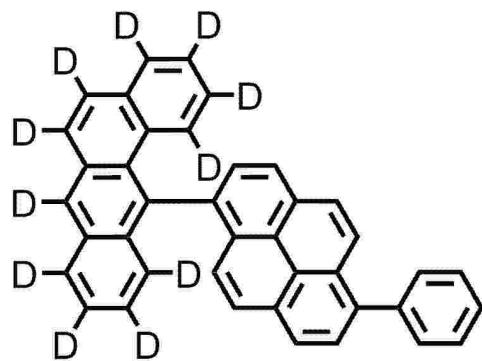
30

【0207】

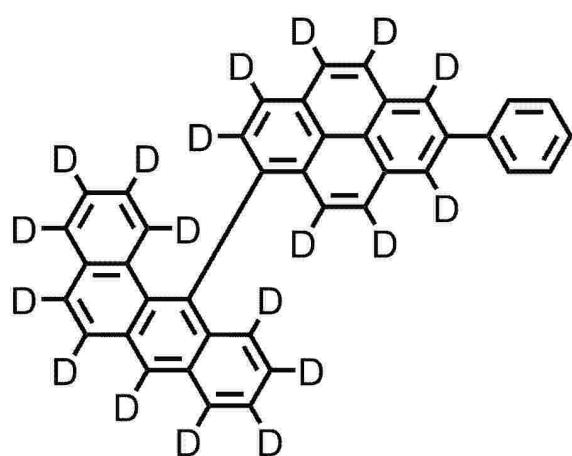
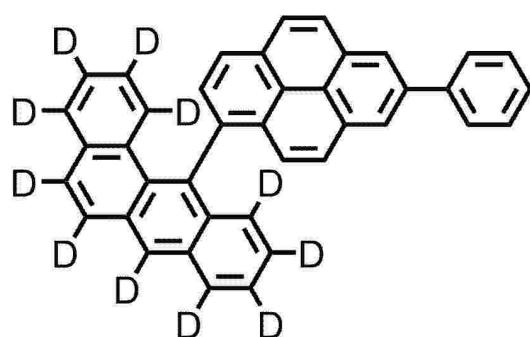
40

50

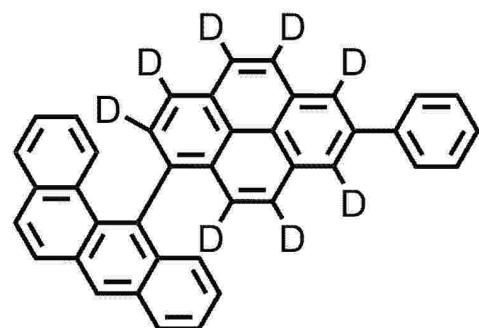
【化 7 3】



10



20



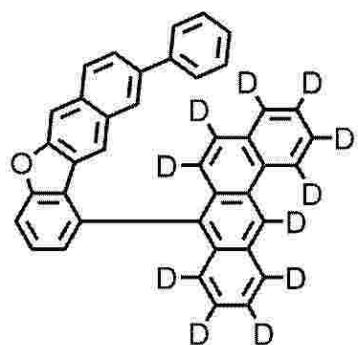
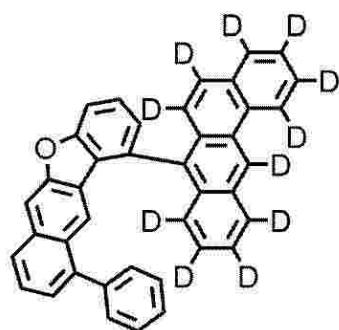
30

【0208】

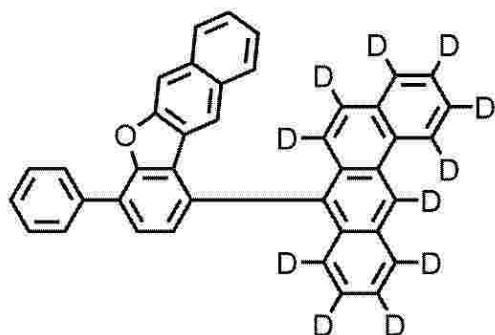
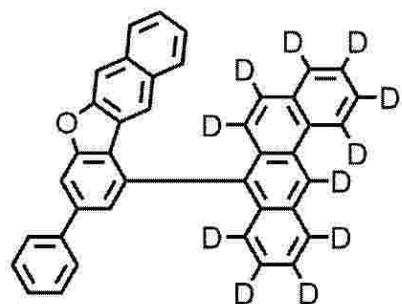
40

50

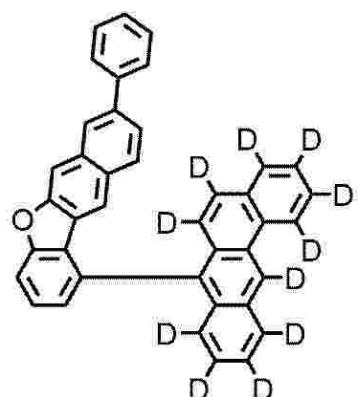
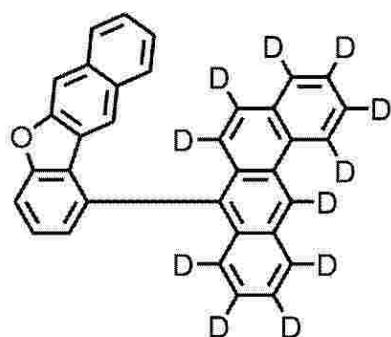
【化 7 4】



10



20



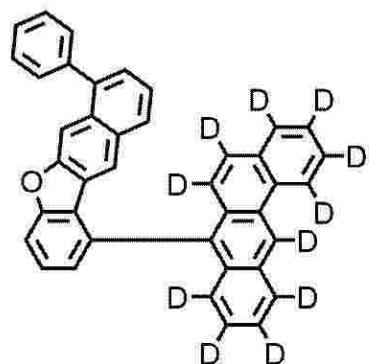
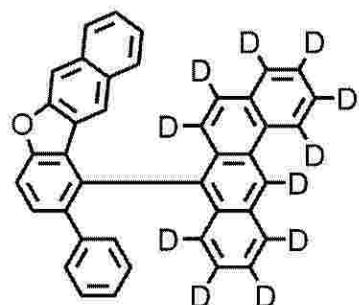
30

【0209】

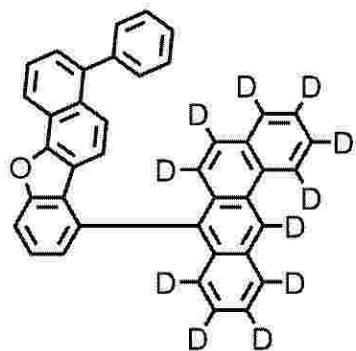
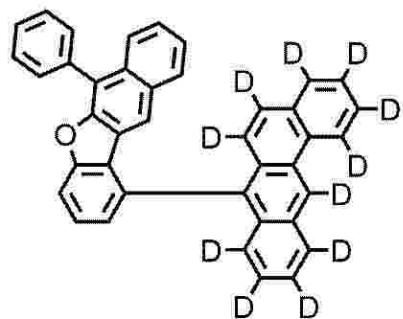
40

50

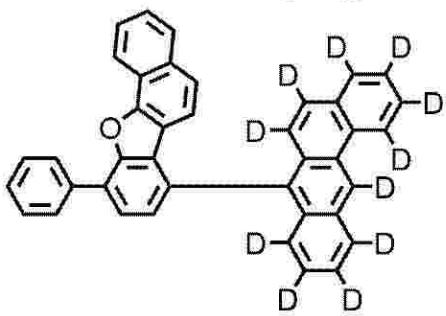
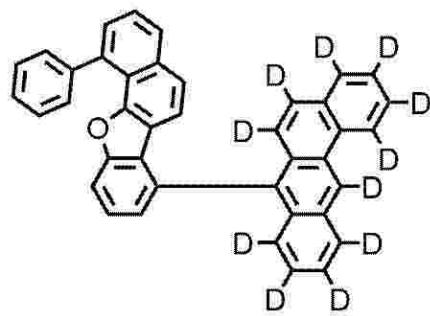
【化 7 5】



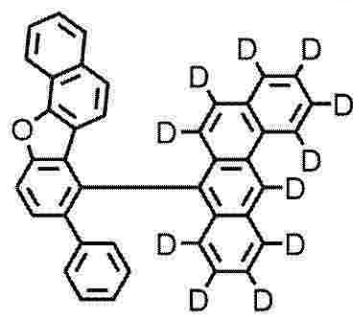
10



20



30

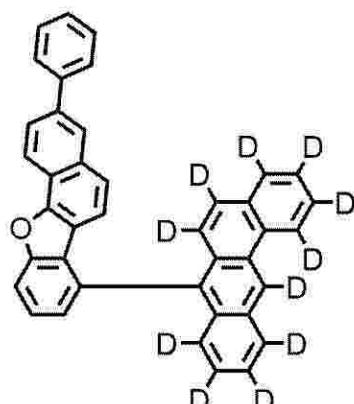
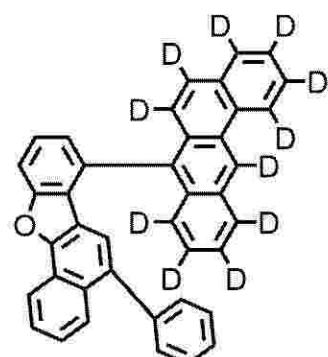


40

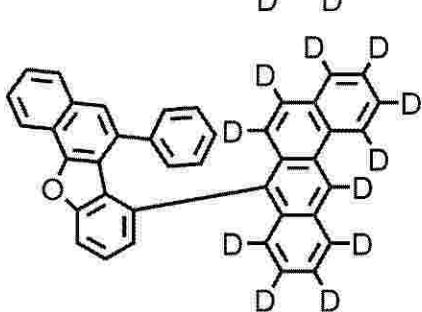
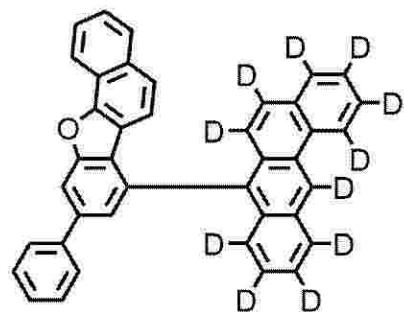
【0210】

50

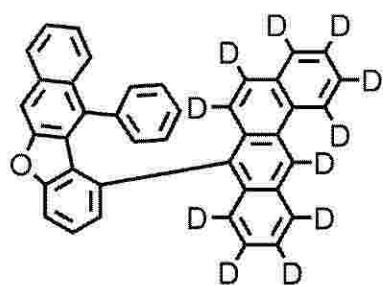
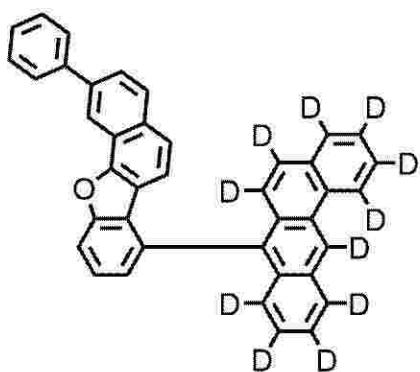
【化 7 6】



10



20



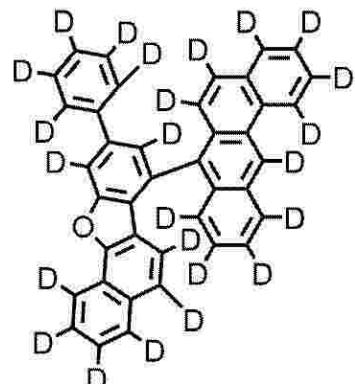
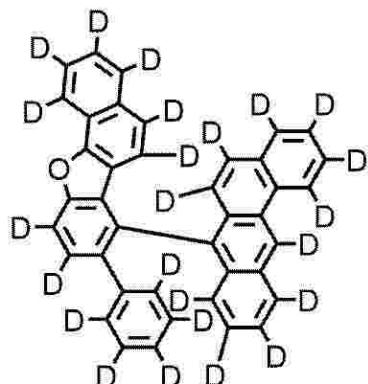
30

【0211】

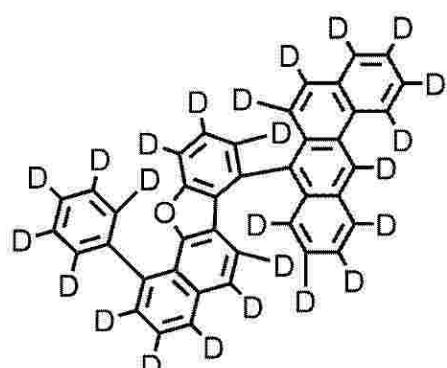
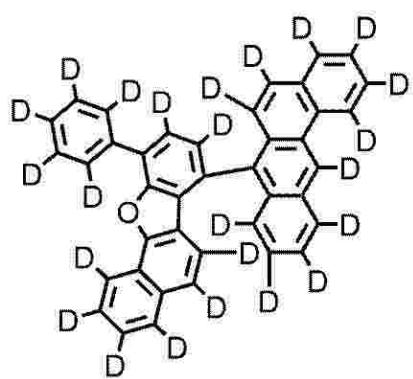
40

50

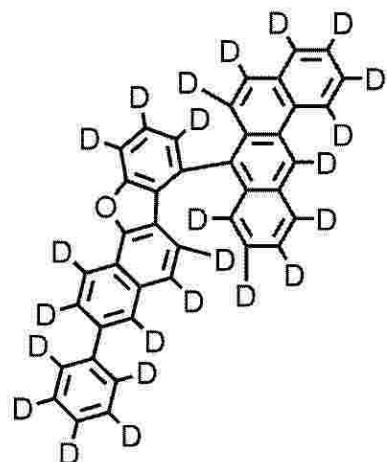
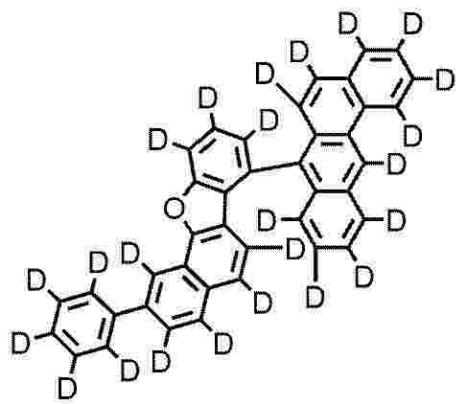
【化 7 7】



10



20



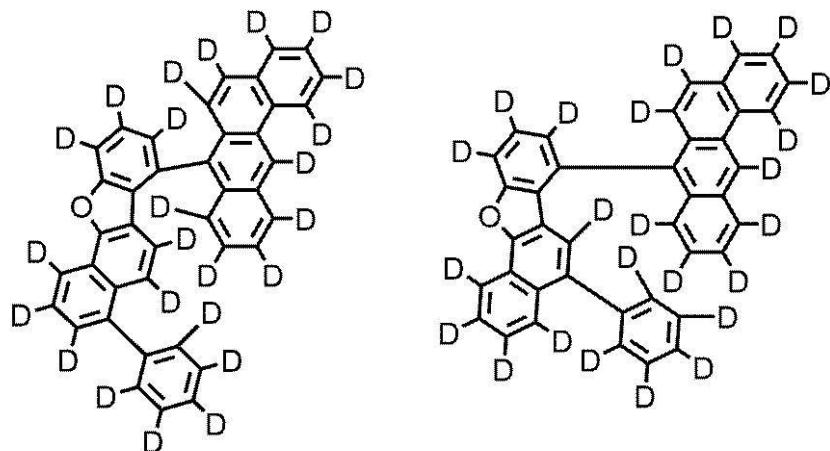
30

【0 2 1 2】

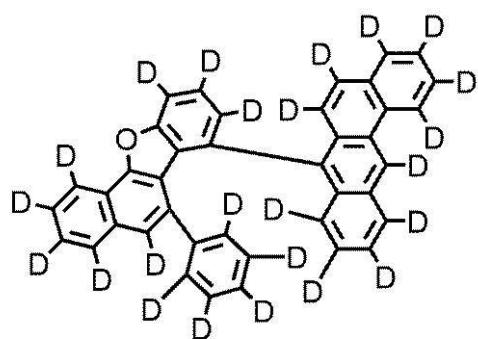
40

50

【化 7 8】



10



20

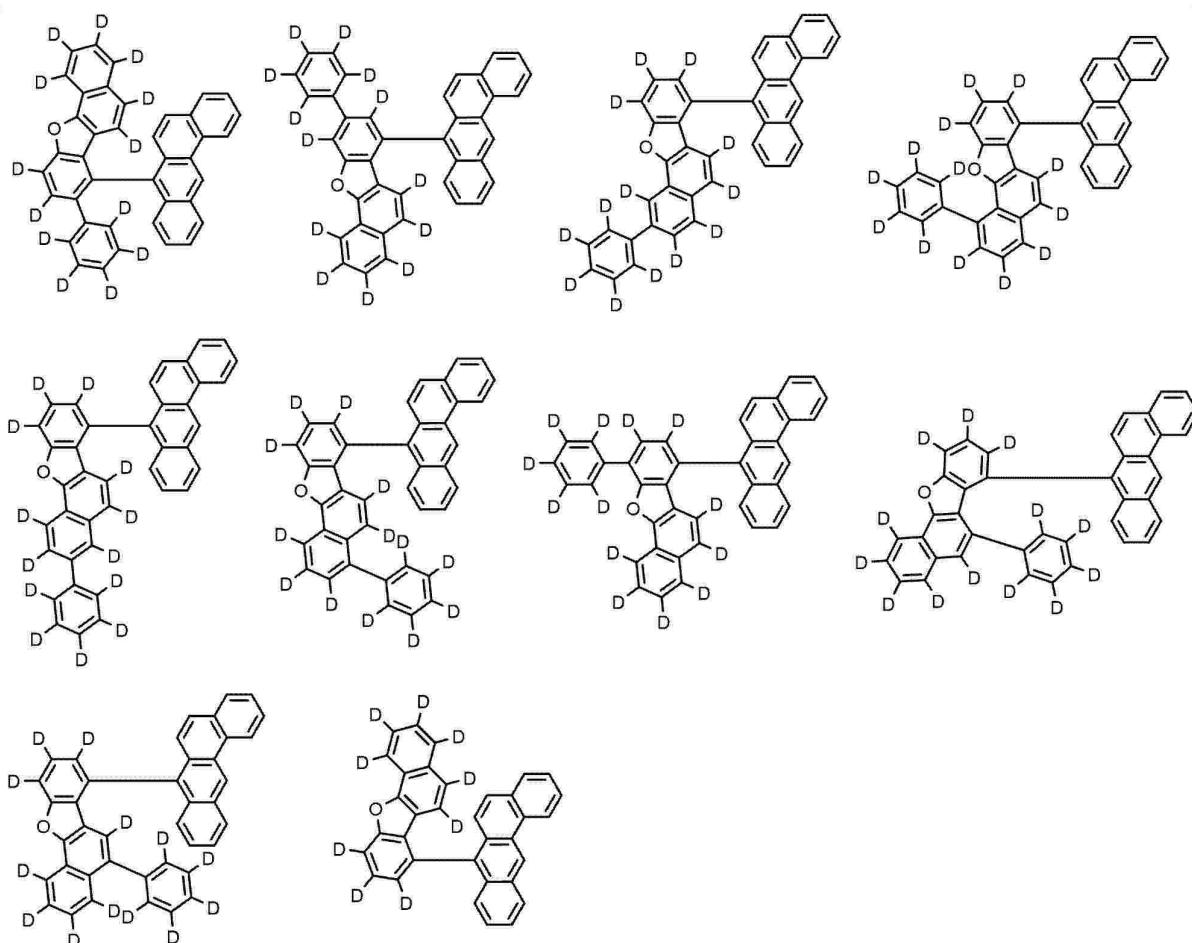
【0 2 1 3】

30

40

50

【化 7 9】



10

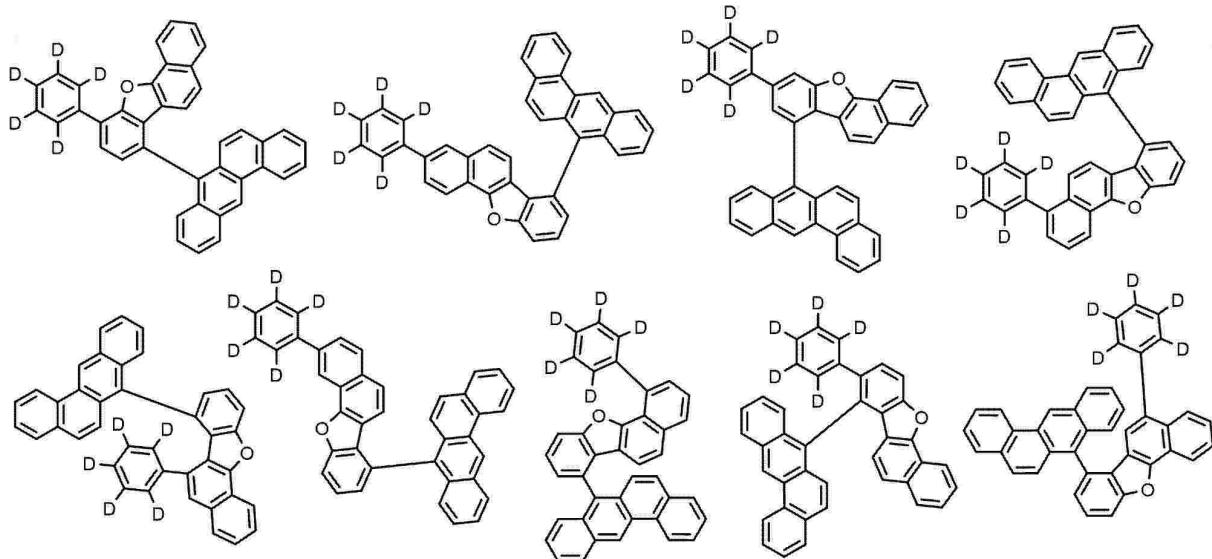
20

30

40

【0 2 1 4】

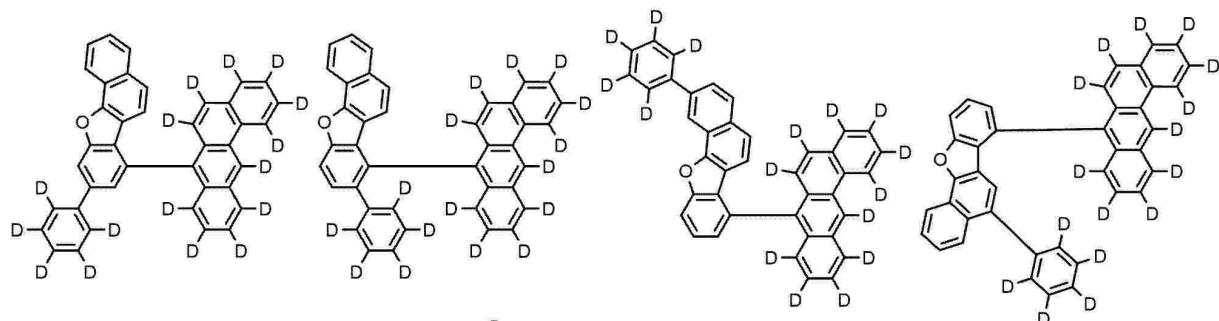
【化 8 0】



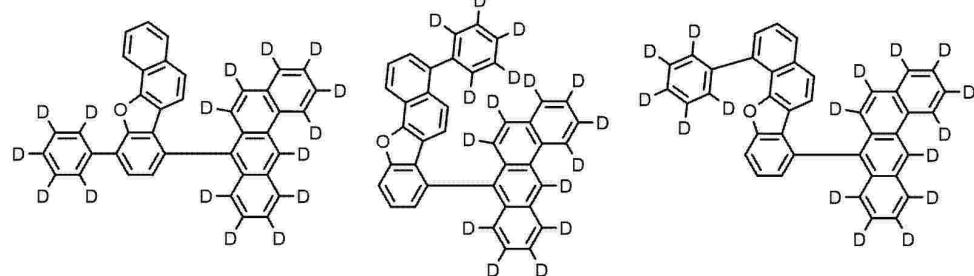
【0 2 1 5】

50

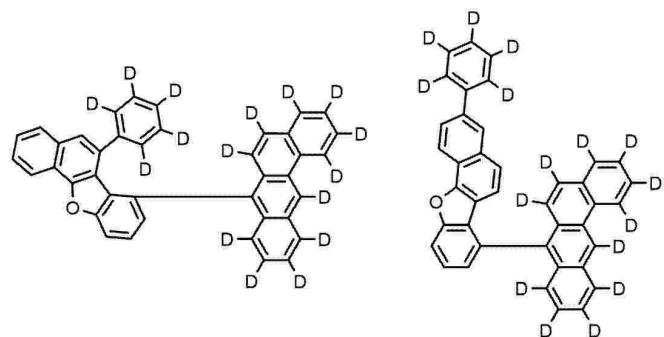
【化 8 1】



10



20



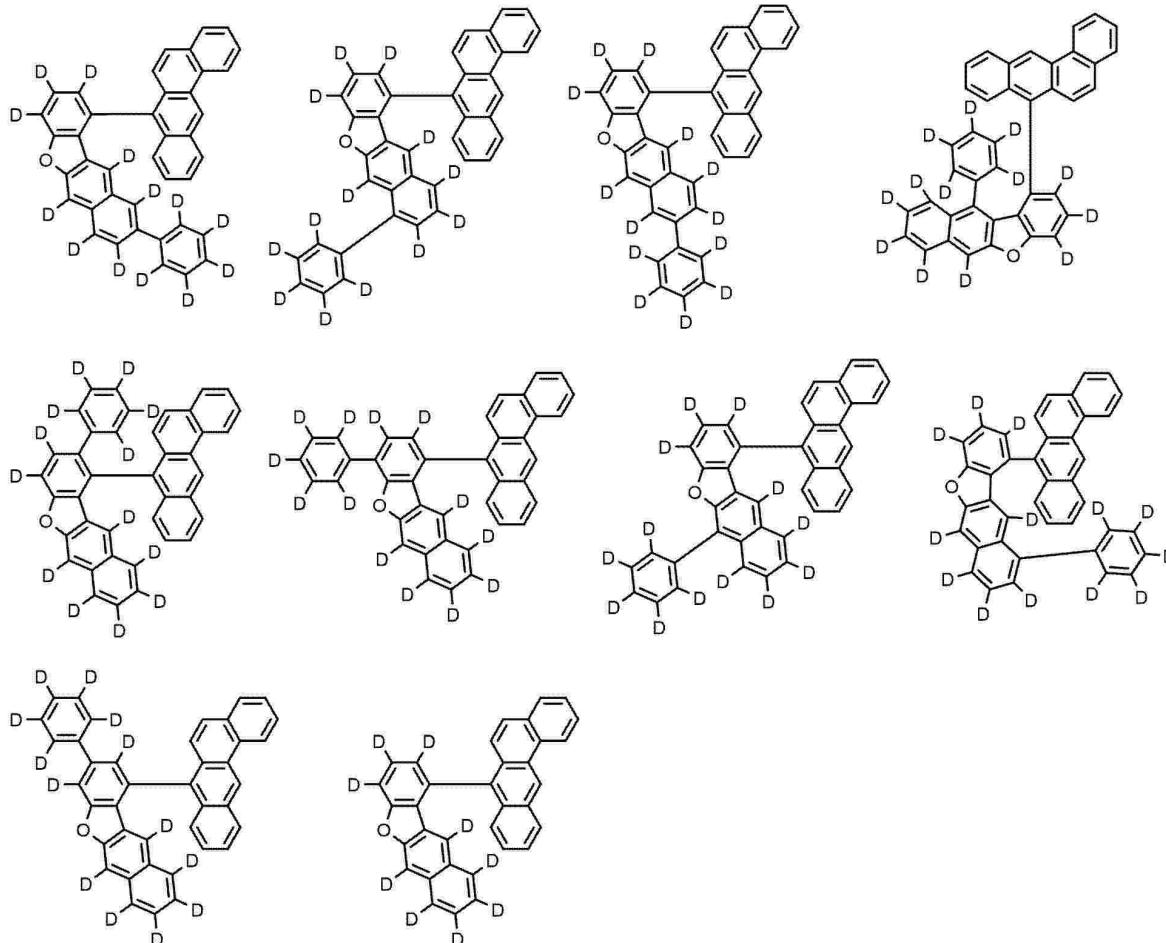
30

【0 2 1 6】

40

50

【化 8 2】



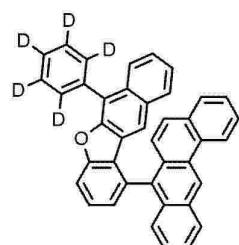
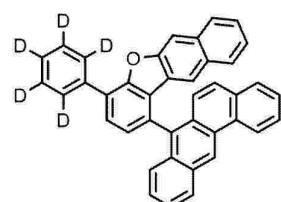
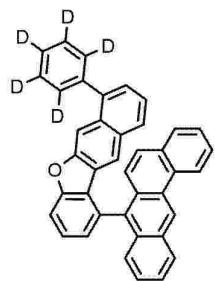
【0 2 1 7】

30

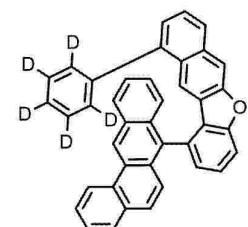
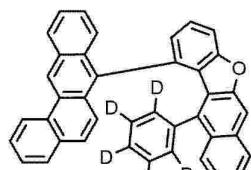
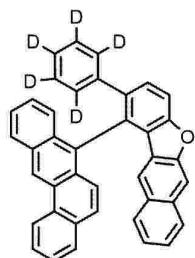
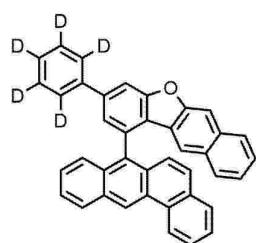
40

50

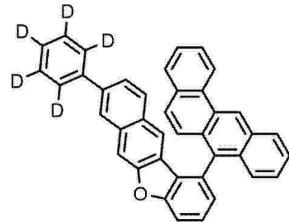
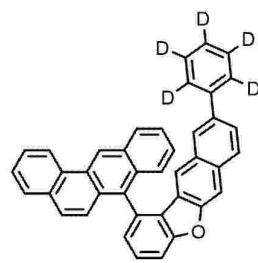
【化 8 3】



10



20



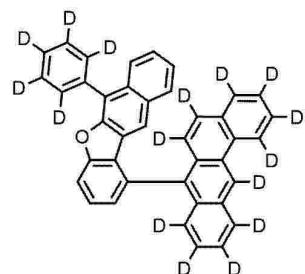
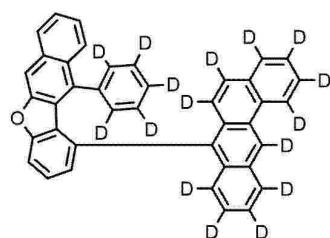
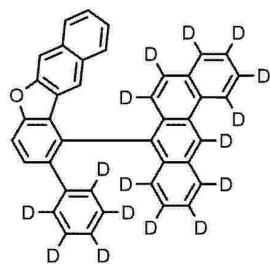
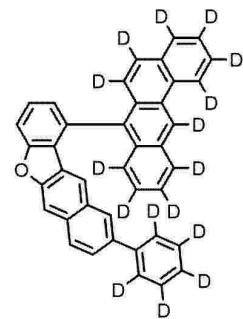
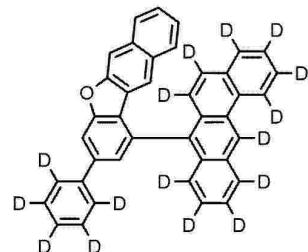
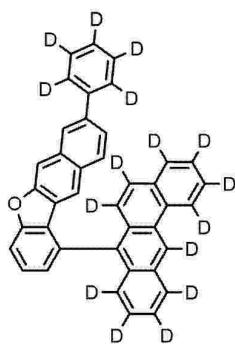
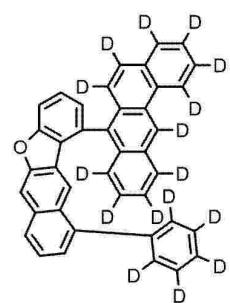
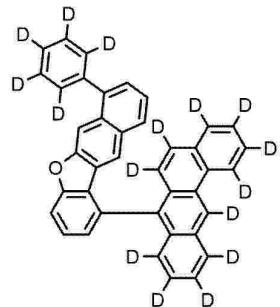
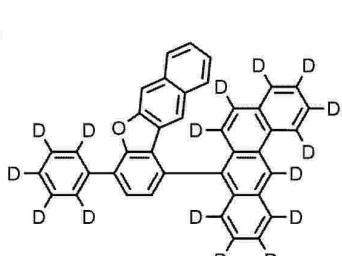
【0218】

30

40

50

【化 8 4】



【 0 2 1 9 】

10

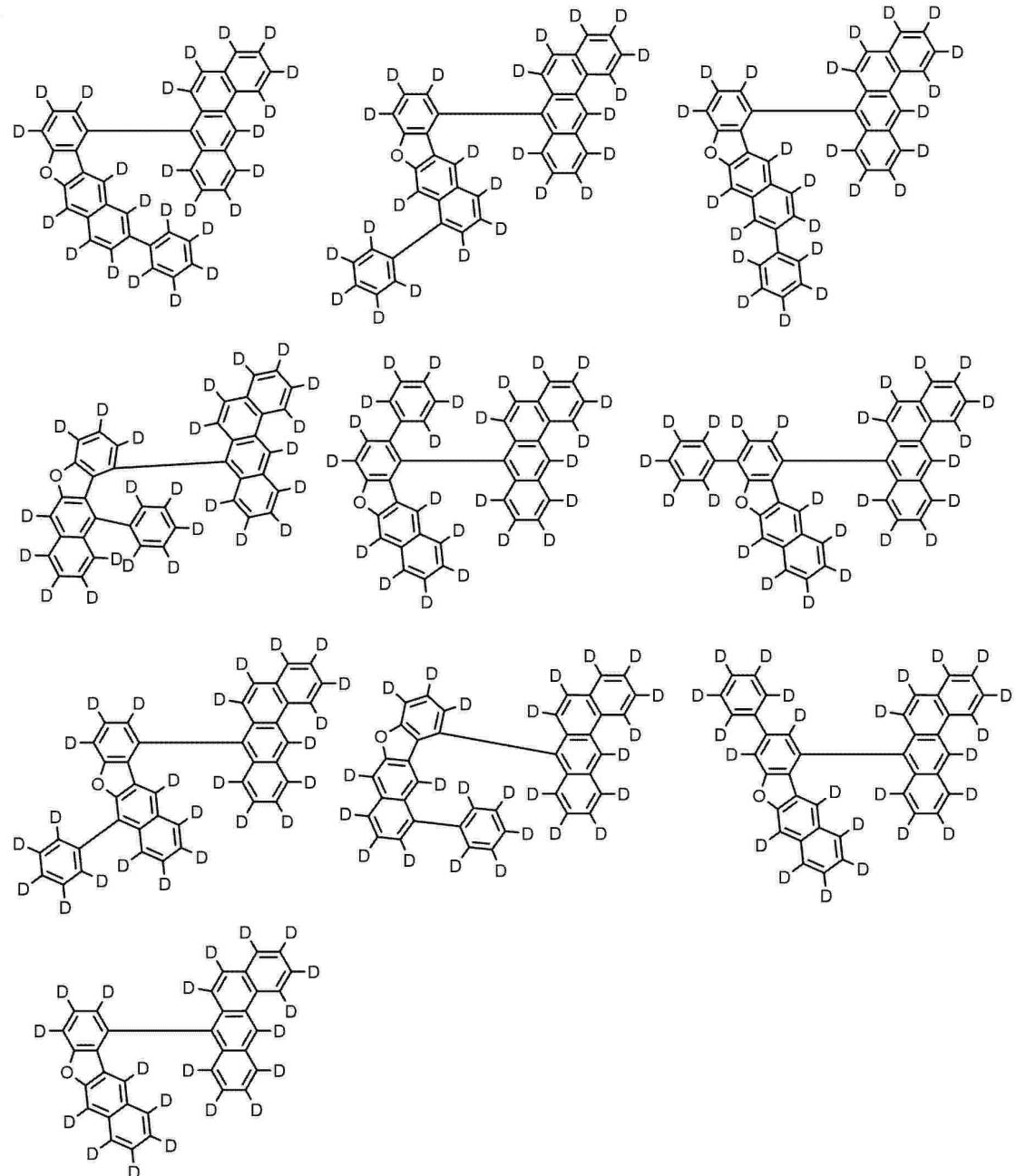
20

30

40

50

【化 8 5】

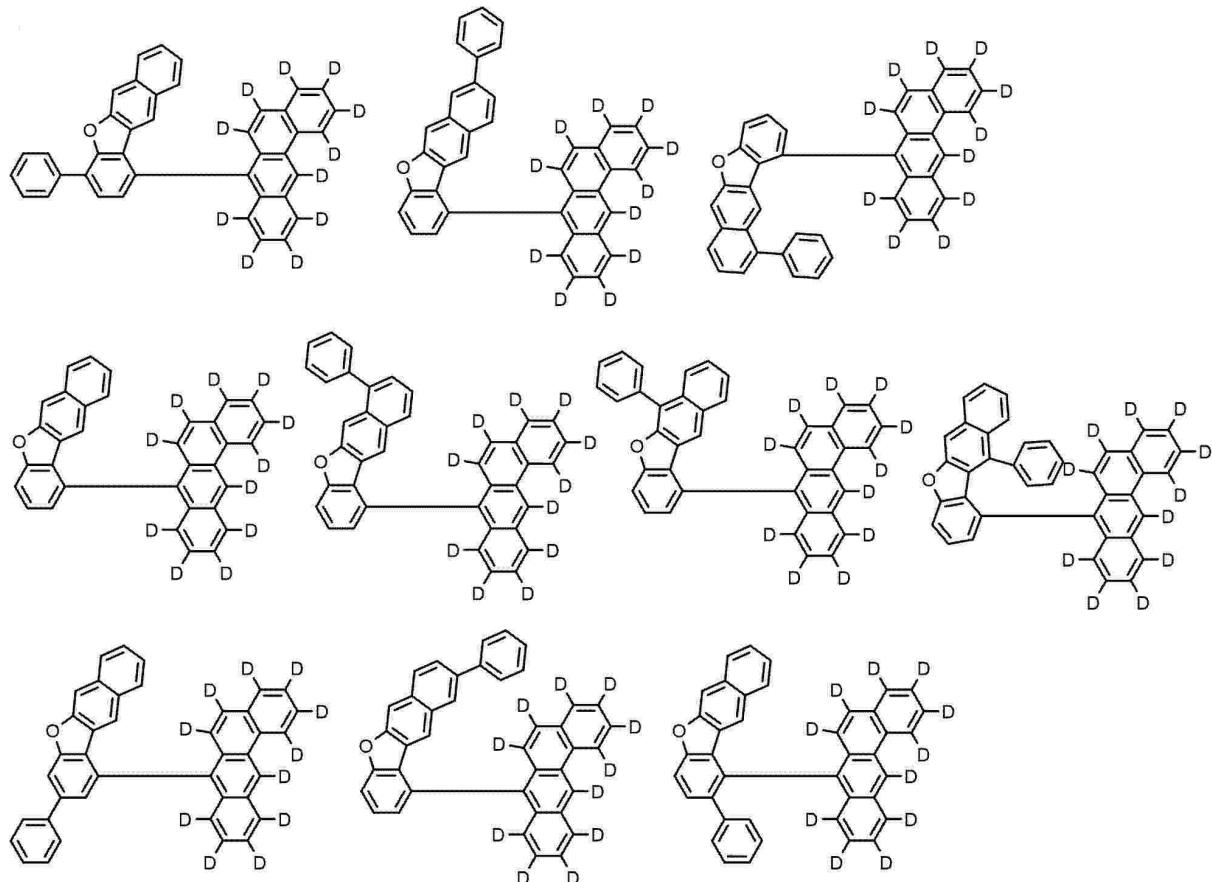


【0220】

40

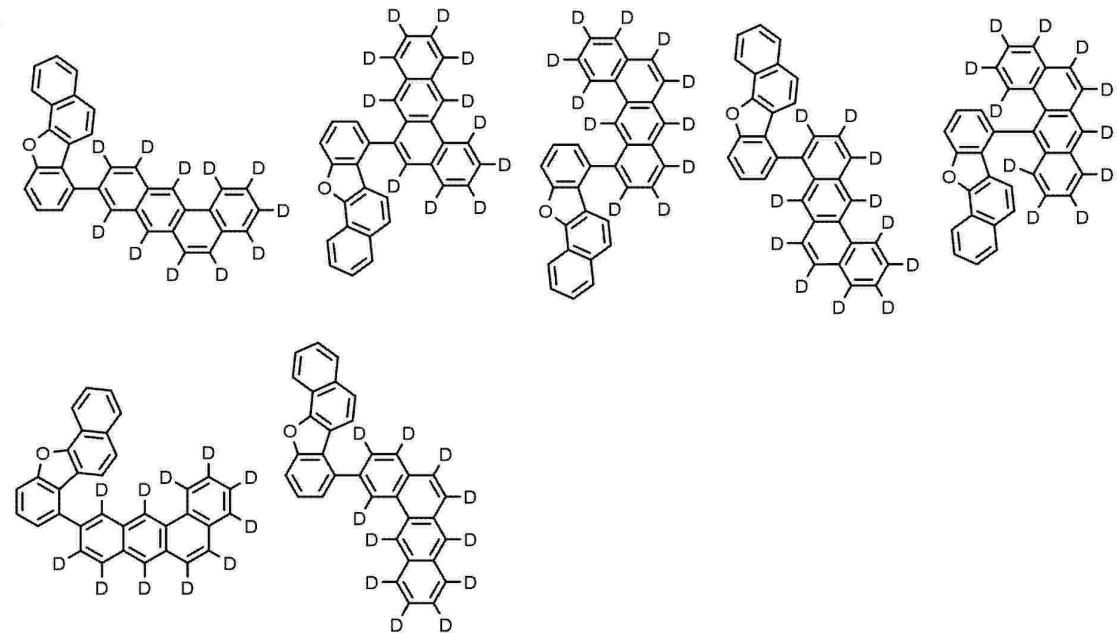
50

【化 8 6】



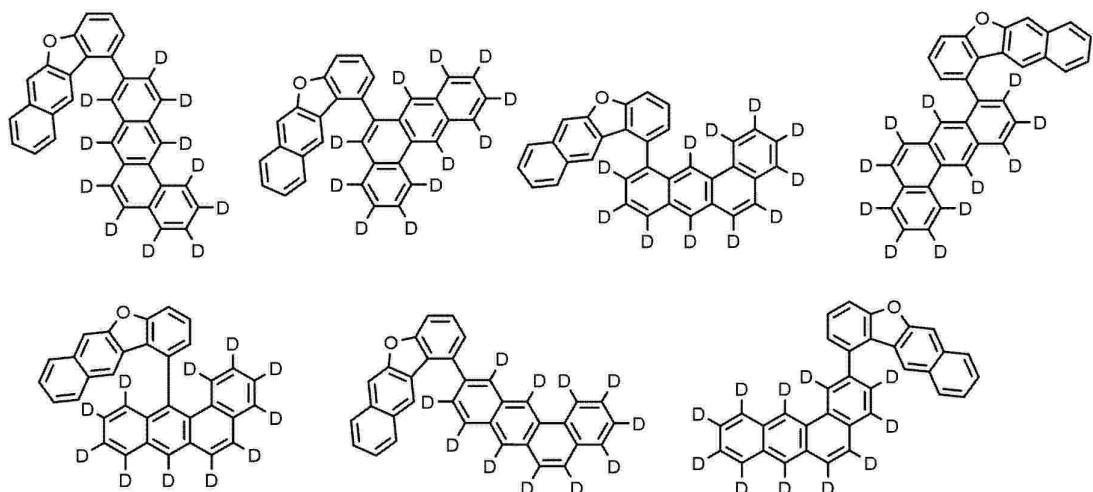
【0 2 2 1】

【化 8 7】



【0 2 2 2】

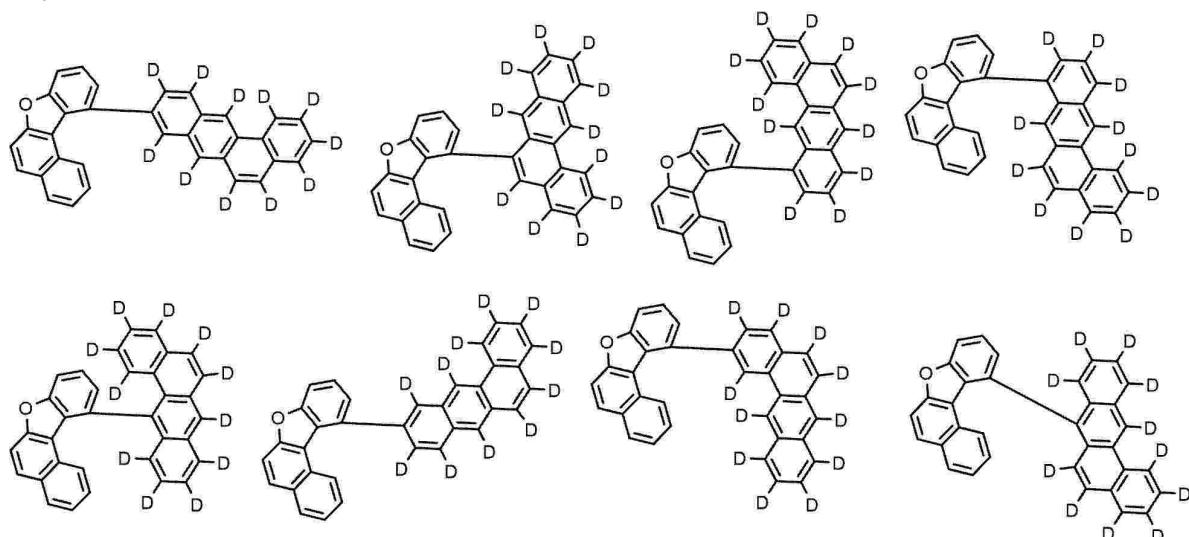
【化 8 8】



10

【0 2 2 3】

【化 8 9】



20

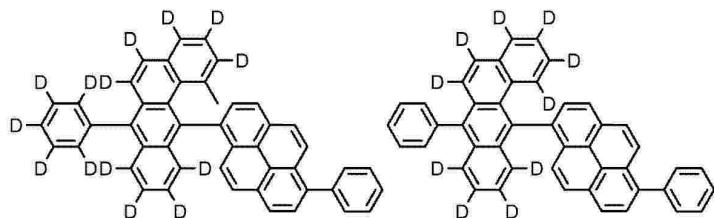
【0 2 2 4】

30

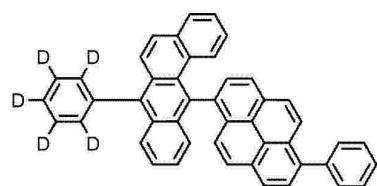
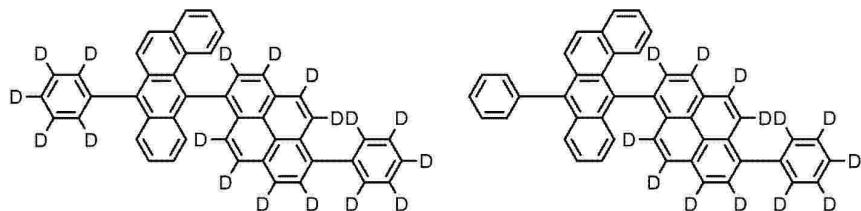
40

50

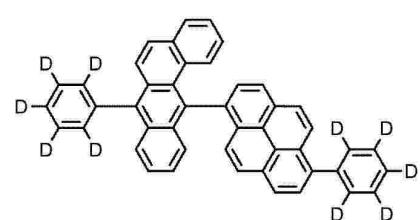
【化90】



10

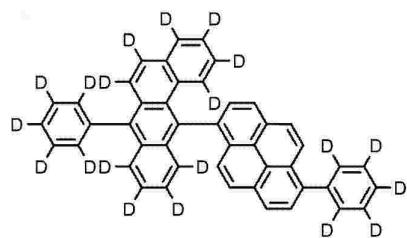


20

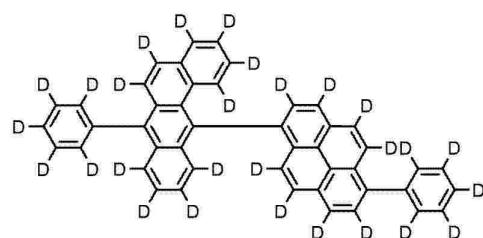
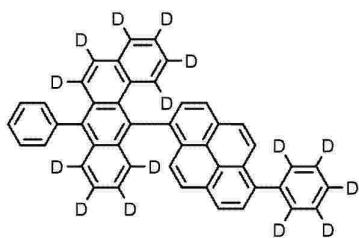


【0225】

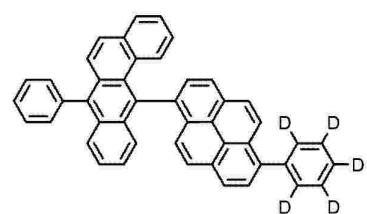
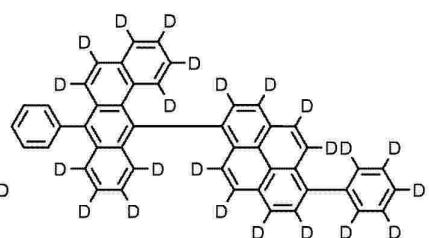
【化91】



30



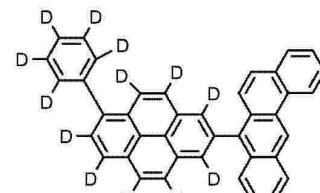
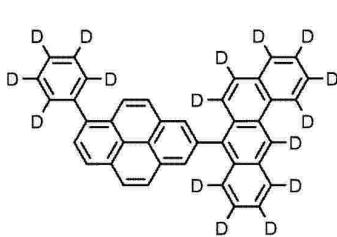
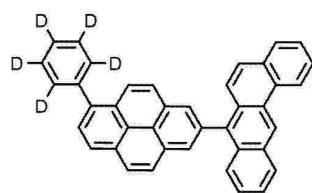
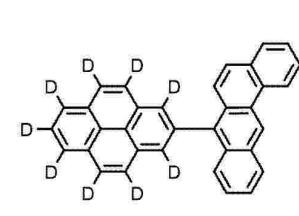
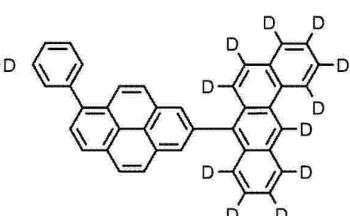
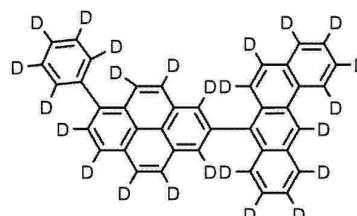
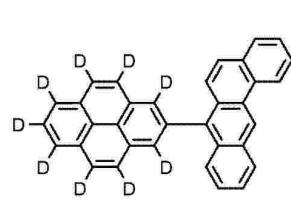
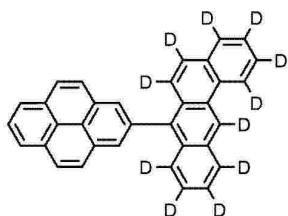
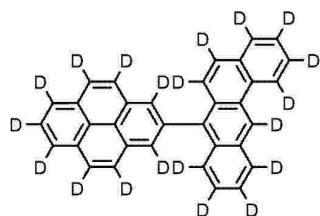
40



50

【0 2 2 6】

【化92】



【0 2 2 7】

10

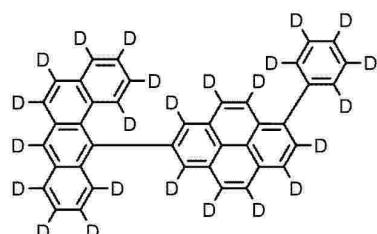
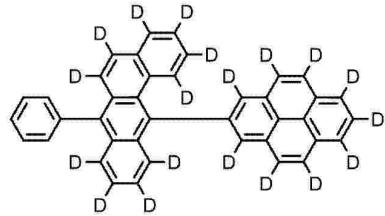
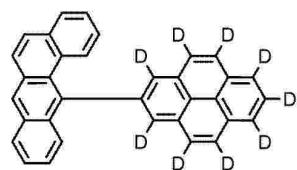
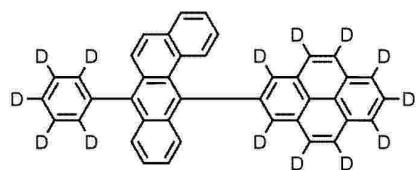
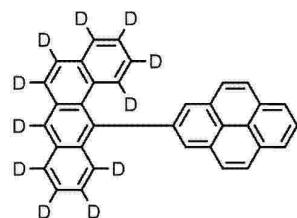
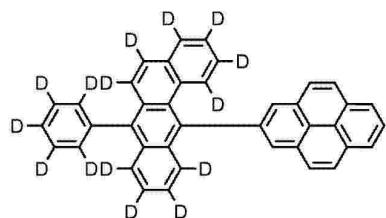
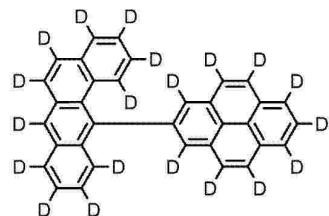
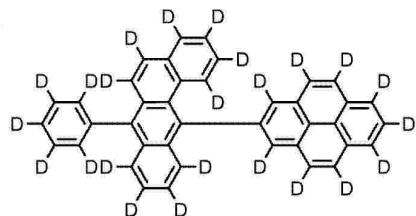
20

30

40

50

【化93】



【0228】

10

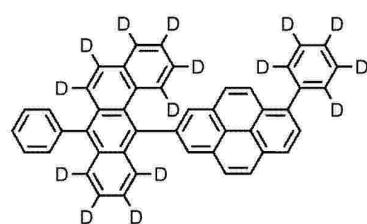
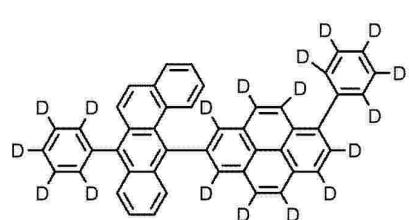
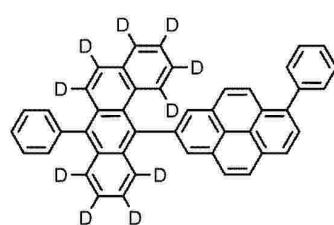
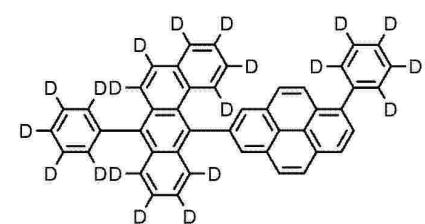
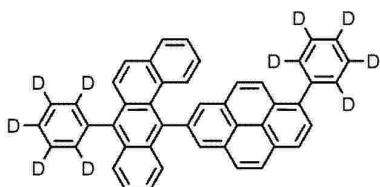
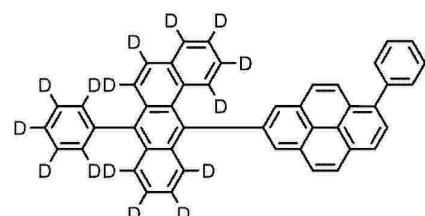
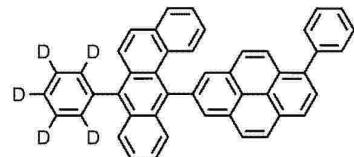
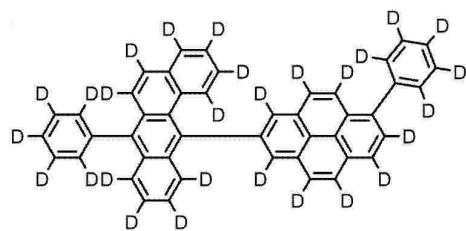
20

30

40

50

【化 9 4】



【0229】

10

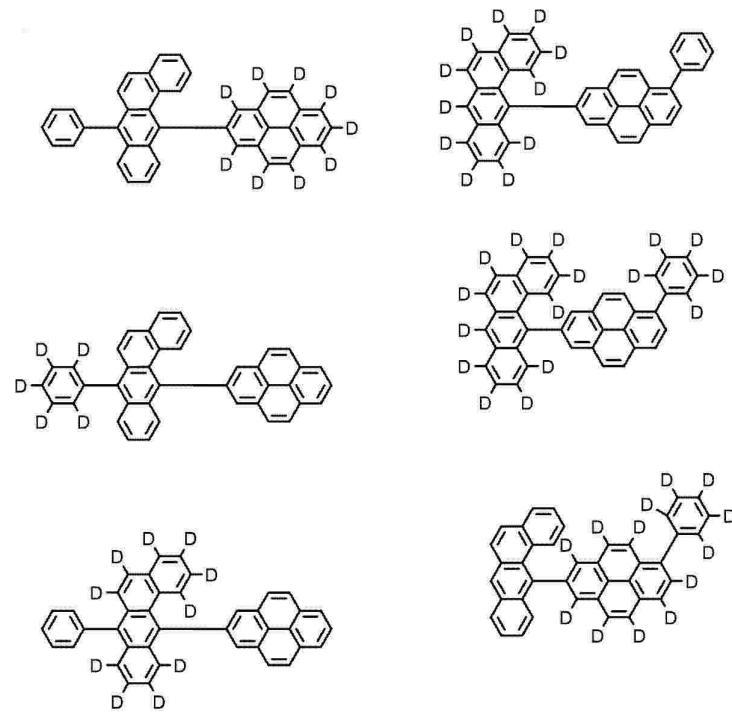
20

30

40

50

【化 9 5】

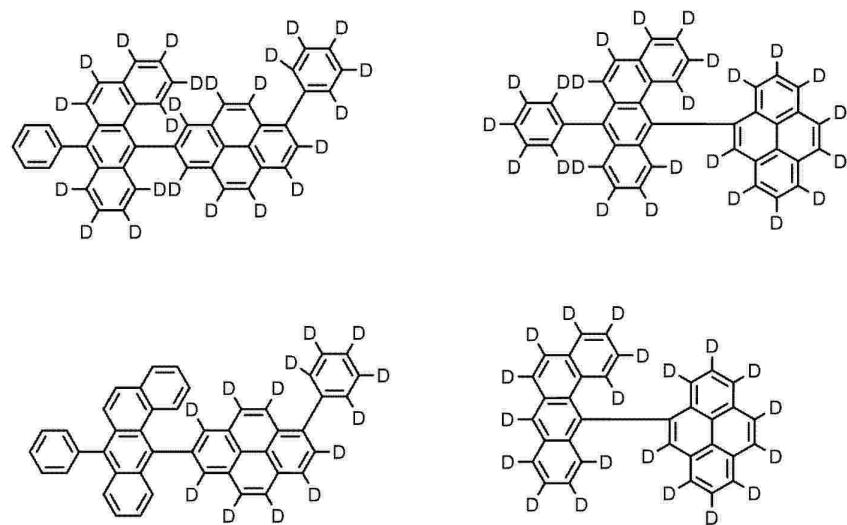


10

20

【0 2 3 0】

【化 9 6】



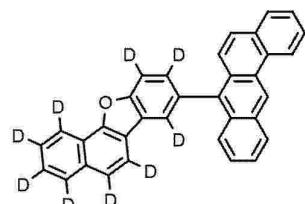
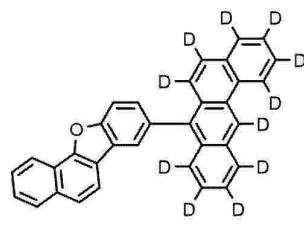
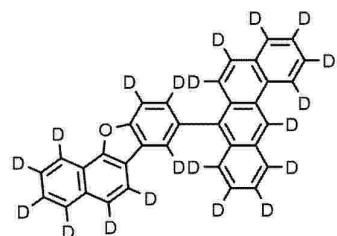
30

40

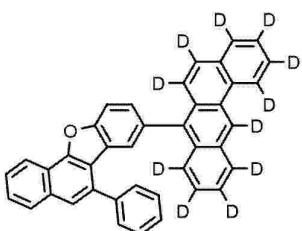
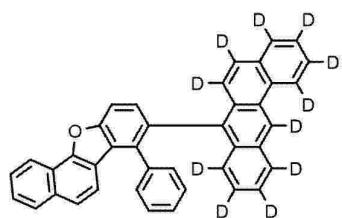
【0 2 3 1】

50

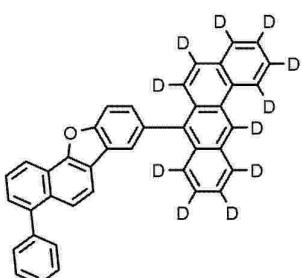
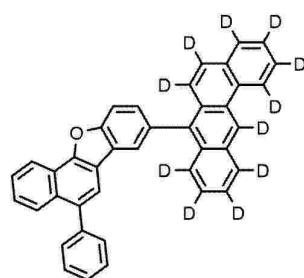
【化 9 7】



10



20



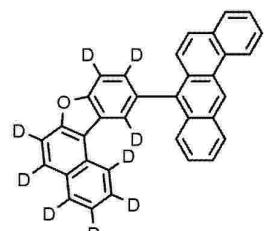
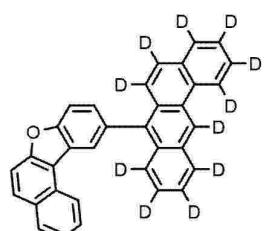
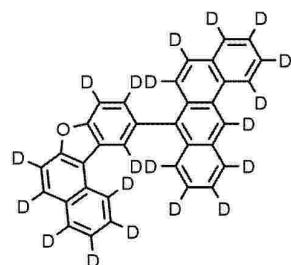
30

【 0 2 3 2 】

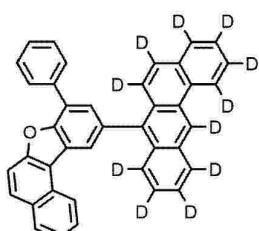
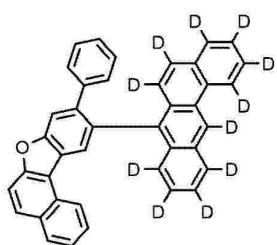
40

50

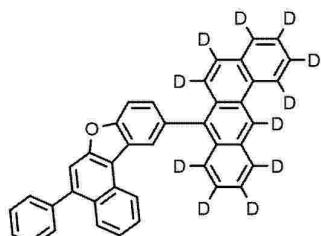
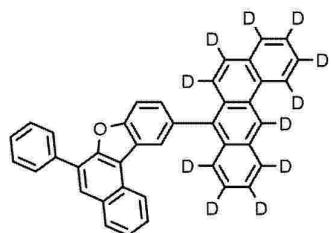
【化 9 8】



10



20



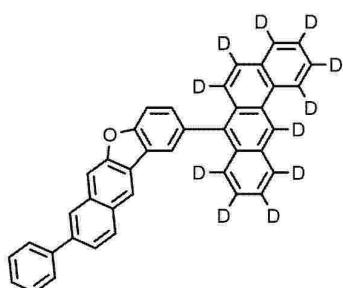
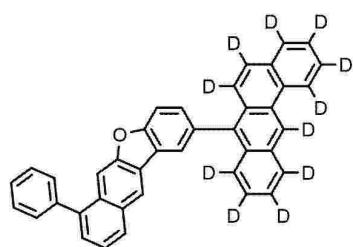
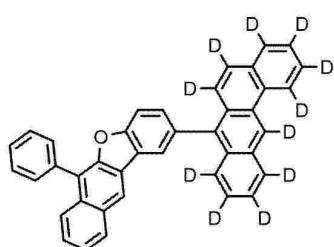
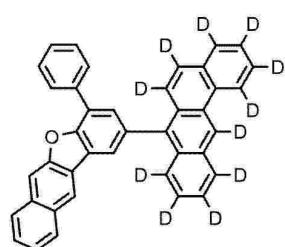
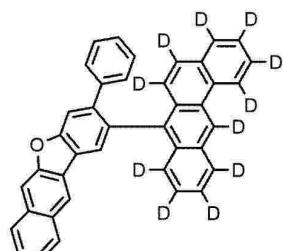
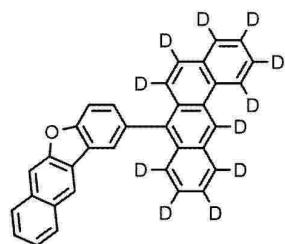
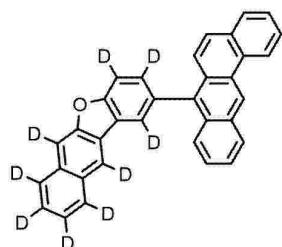
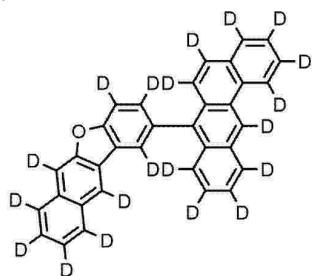
30

【0233】

40

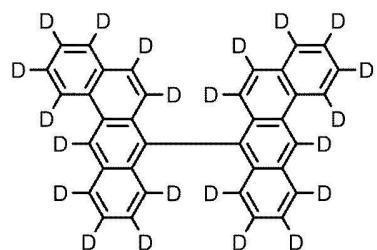
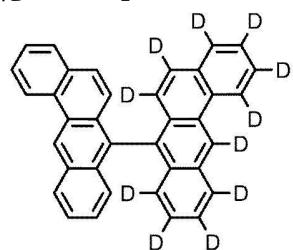
50

【化 9 9】



【0 2 3 4】

【化 1 0 0】



【0 2 3 5】

10

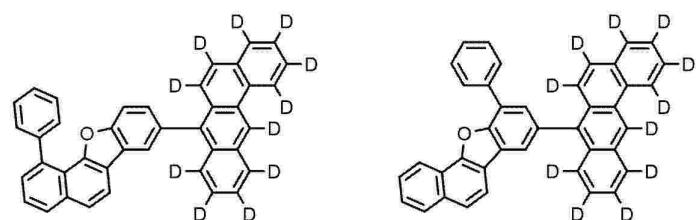
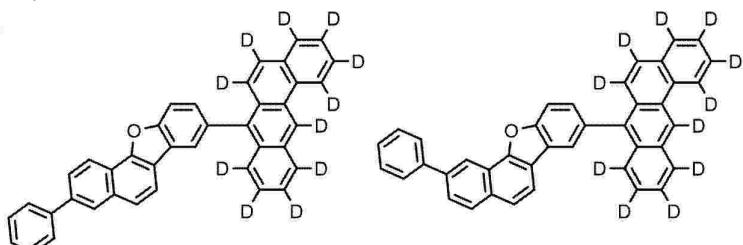
20

30

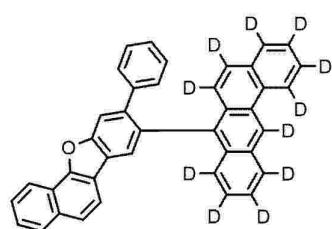
40

50

【化 1 0 1】



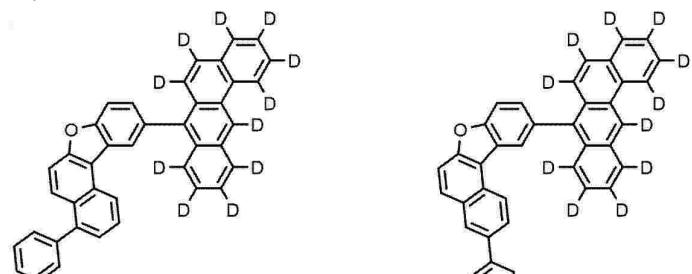
10



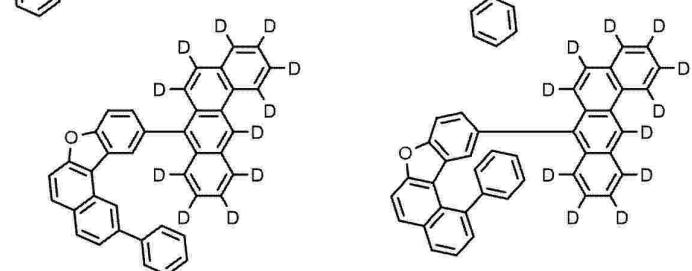
20

【0 2 3 6】

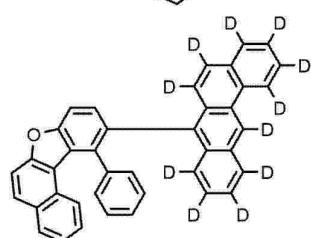
【化 1 0 2】



30



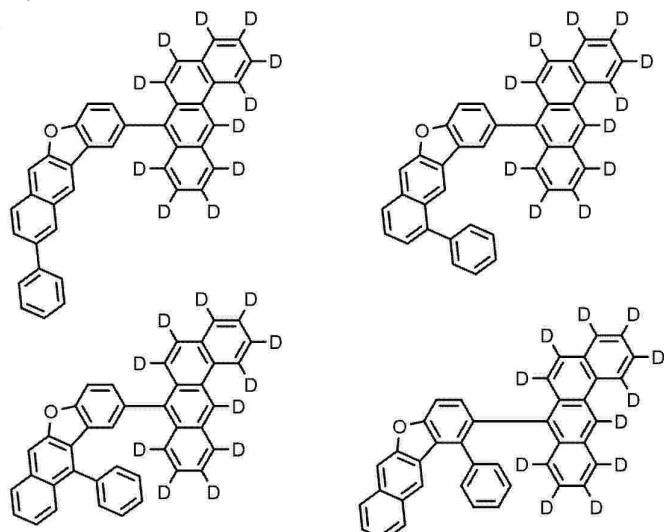
40



【0 2 3 7】

50

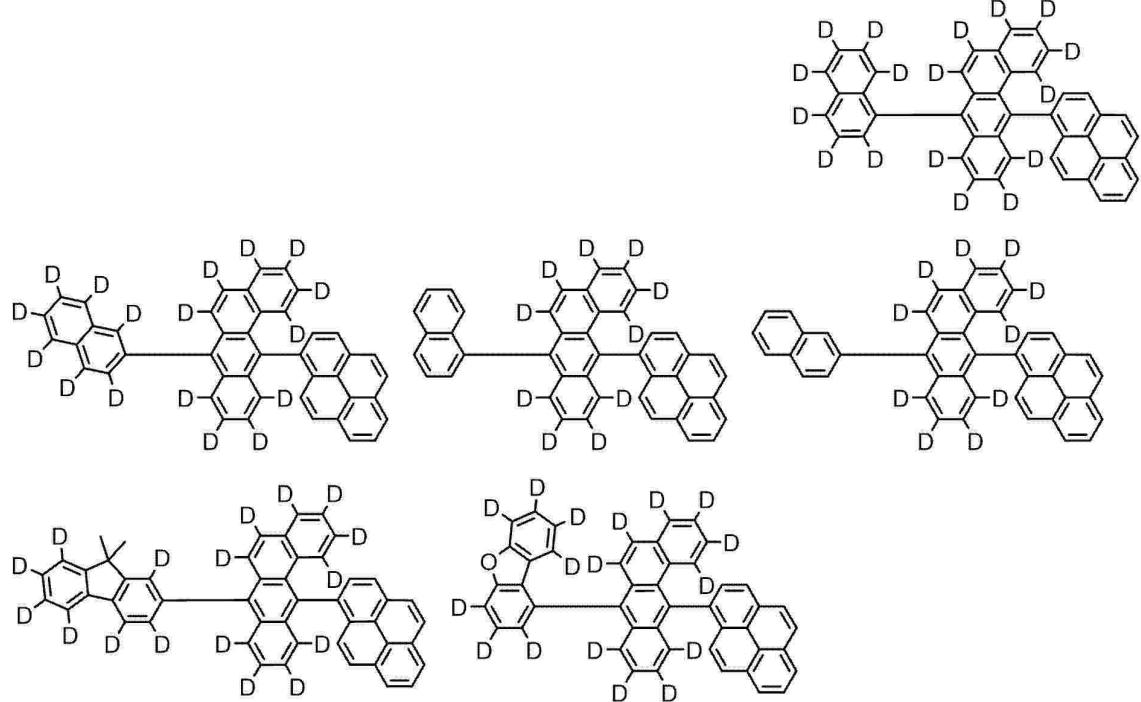
【化 1 0 3】



10

【0 2 3 8】

【化 1 0 4】



20

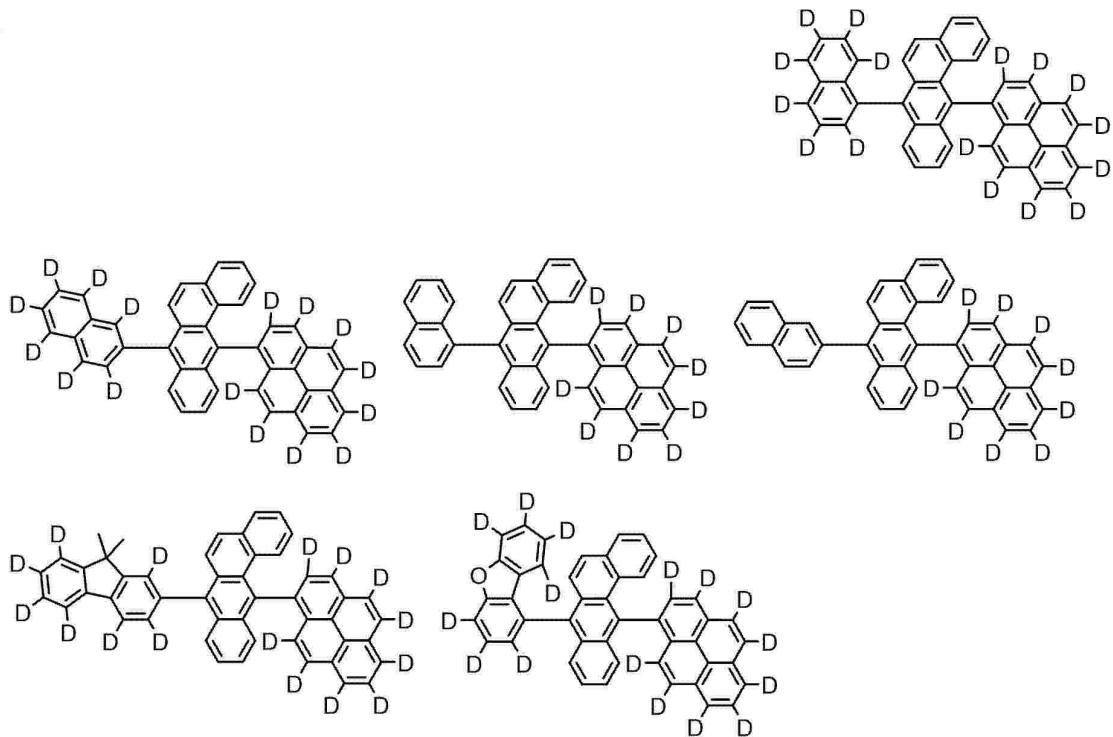
30

【0 2 3 9】

40

50

【化 1 0 5 】



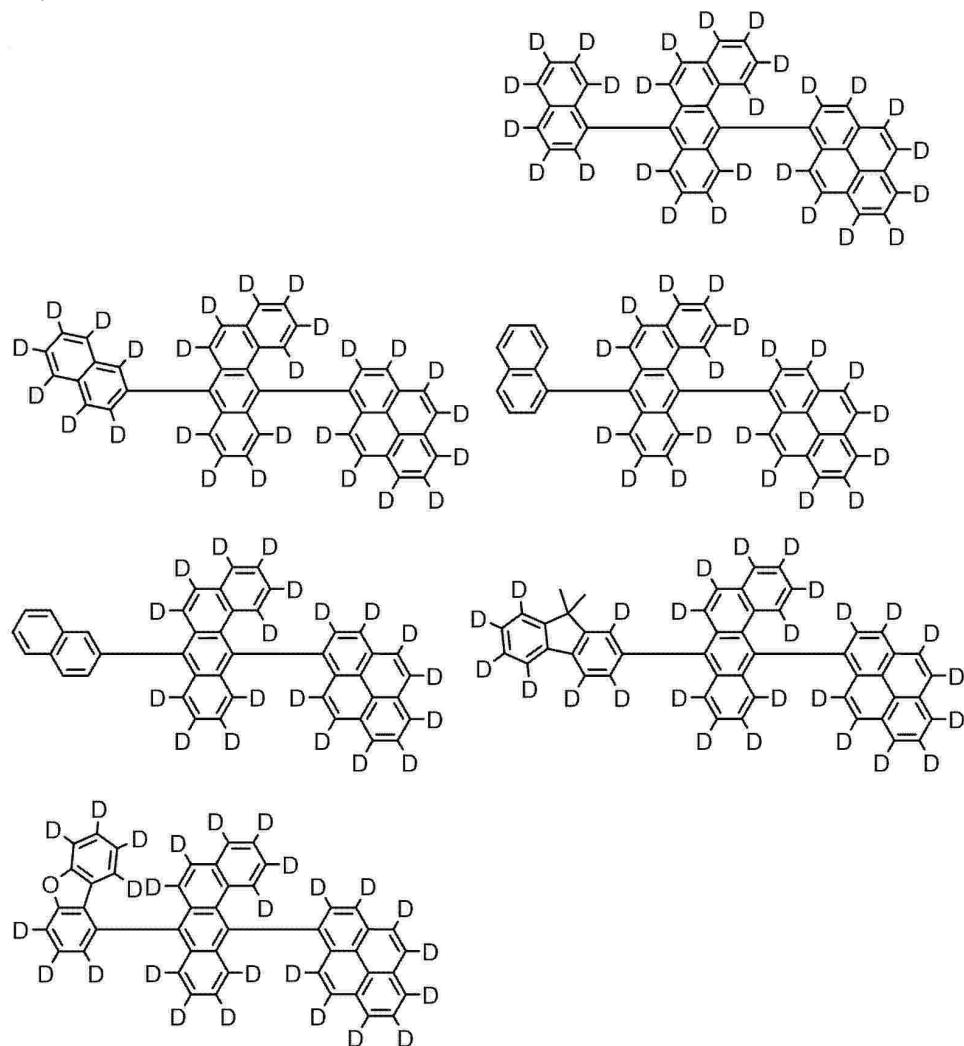
【 0 2 4 0 】

30

40

50

【化 1 0 6 】



10

20

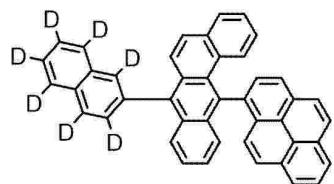
30

【 0 2 4 1 】

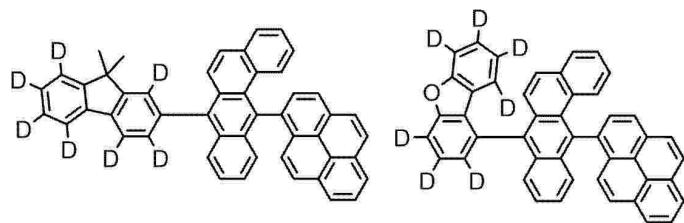
40

50

【化107】



10



20

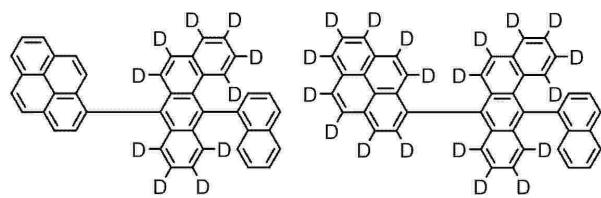
【0242】

30

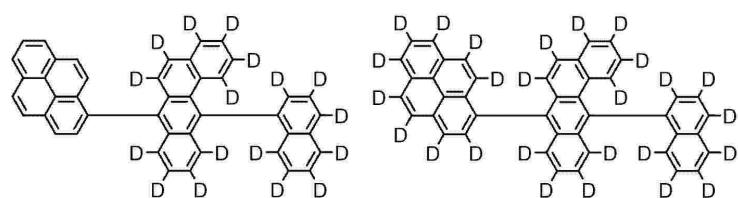
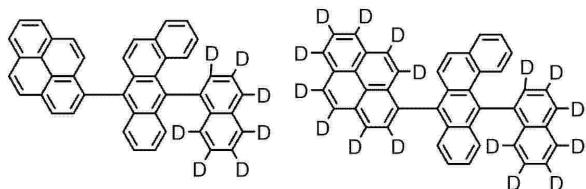
40

50

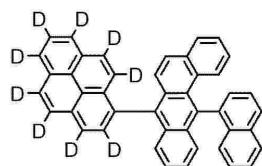
【化108】



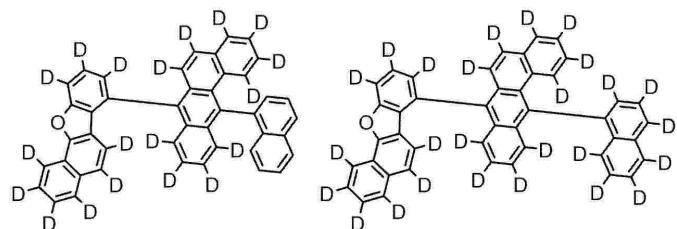
10



20



30



40

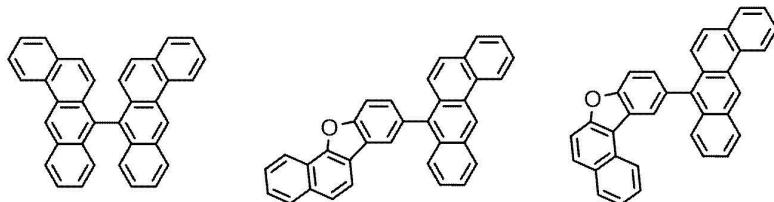
【0243】

なお、前記一般式(100A)で表される化合物及び前記一般式(1A)で表される化合物類似の、新規の軽水素体化合物としては、例えば以下の構造がある。

【0244】

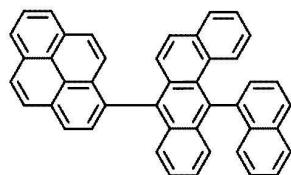
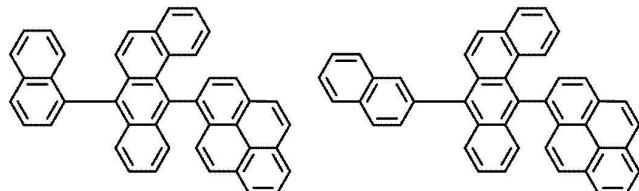
50

【化109】



【0245】

【化110】



【0246】

本実施形態に係る化合物は、ベンズ[*a*]アントラセン環、ベンズ[*a*]アントラセン環と直接結合するリンカー(*L*₁もしくは*L*₁₀₁)、及び*Ar*₁もしくは*Ar*₁₀₁の少なくともいずれかに重水素原子が結合しているため、キャリア耐性又は励起状態の安定化の効果が高い。そのため、本実施形態に係る化合物によれば、有機EL素子の長寿命化が期待できる。

特に、励起状態の中心となる一重項エネルギーS₁及び三重項エネルギーT₁が低いベンズ[*a*]アントラセン環及び*Ar*₁もしくは*Ar*₁₀₁に重水素原子が結合することで、より長寿命化が期待できる。

【0247】

〔第二実施形態〕

(有機エレクトロルミネッセンス素子)

本実施形態に係る有機EL素子について説明する。

本実施形態に係る有機EL素子は、第一実施形態に係る化合物を含有する。

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

【0248】

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

【0249】

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

10

20

30

40

50

で表される化合物を含有する。一実施形態において、発光層は、前記一般式(100Å)で表される化合物を含有する。

【0250】

本実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、陽極及び陰極の間に配置された発光領域と、を有し、発光領域は第一の発光層及び第二の発光層を含み、第一の発光層は、前記一般式(100Å)で表される第一の化合物を含有し、第二の発光層は、第二の化合物を含有することも好ましい。

【0251】

本実施形態に係る有機EL素子は、陽極と、陰極と、陽極及び陰極の間に配置された発光領域と、を有し、発光領域は第一の発光層及び第二の発光層を含み、第一の発光層は、前記一般式(1Å)で表される第一の化合物を含有し、第二の発光層は、第二の化合物を含有することも好ましい。

10

【0252】

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

【0253】

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

20

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

【0254】

(有機EL素子の発光波長)

本実施形態に係る有機EL素子は、素子駆動時に最大ピーク波長が500nm以下の光を放射することが好ましく、430nm以上480nm以下の光を放射することがより好ましい。

素子駆動時に有機EL素子が放射する光の最大ピーク波長の測定は、以下のようにして行う。電流密度が10mA/cm²となるように有機EL素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計CS-2000(コニカミノルタ社製)で計測する。得られた分光放射輝度スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を測定し、これを最大ピーク波長(単位: nm)とする。

30

【0255】

本明細書における化合物の最大ピーク波長の測定方法は、次の通りである。測定対象となる化合物の10⁻⁶mol/L以上10⁻⁵mol/L以下のトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温(300K)でこの試料の発光スペクトル(縦軸: 発光強度、横軸: 波長とする。)を測定する。発光スペクトルは、株式会社日立ハイテクサイエンス製の分光光度計(装置名: F-7000)により測定できる。なお、発光スペクトル測定装置は、ここで用いた装置に限定されない。

40

発光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を発光最大ピーク波長とする。なお、本明細書において、最大ピーク波長を蛍光発光最大ピーク波長(FL-peak)と称する場合がある。

【0256】

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

【0257】

50

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

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

【0258】

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

10

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

【0259】

図1に、本実施形態に係る有機EL素子の一例の概略構成を示す。

図1に示す有機EL素子1Aは、基板2と、陽極3と、陰極4と、陽極3と陰極4との間に配置された有機層10Aと、を含む。有機層10Aは、陽極3側から順に、正孔輸送帯域6、発光領域5A、及び電子輸送帯域7を含む。正孔輸送帯域6は、陽極3側から順に、正孔注入層61及び正孔輸送層62を含む。発光領域5Aは、1つの発光層5を含む。電子輸送帯域7は、発光領域5A側から順に、電子輸送層71及び電子注入層72を含む。

20

【0260】

(発光層)

発光層5は、第一実施形態に係る化合物を含有する。

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

30

【0261】

(発光性化合物)

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

【0262】

発光層5が含有する発光性化合物は、

下記一般式(3)で表される化合物、
下記一般式(4)で表される化合物、
下記一般式(5)で表される化合物、
下記一般式(6)で表される化合物、
下記一般式(7)で表される化合物、
下記一般式(8)で表される化合物、
下記一般式(9)で表される化合物、及び

40

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

【0263】

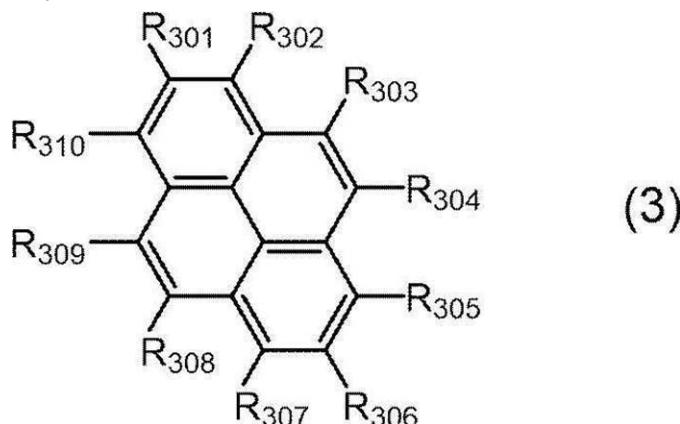
(一般式(3)で表される化合物)

一般式(3)で表される化合物について説明する。

【0264】

50

【化111】



10

【0265】

(前記一般式(3)において、

R₃₀₁～R₃₁₀のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

-O-(R₉₀₄)で表される基、

-S-(R₉₀₅)で表される基、

-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

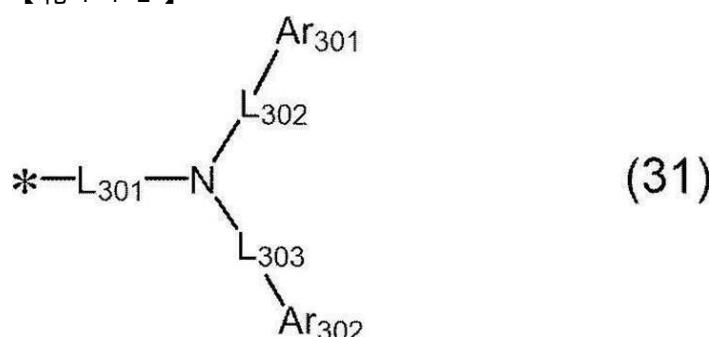
ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

【0266】

【化112】



40

【0267】

(前記一般式(31)において、

Ar₃₀₁及びAr₃₀₂は、それぞれ独立に、

50

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 $L_{301} \sim L_{303}$ は、それぞれ独立に、
 単結合、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の 2 値の複素環基であり、
 * は、前記一般式 (3) 中のピレン環における結合位置を示す。)

【0268】

発光性化合物中、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{906} 及び R_{907} は、それぞれ独立に、

10

水素原子、

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

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

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

20

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

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

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

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

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

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

【0269】

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

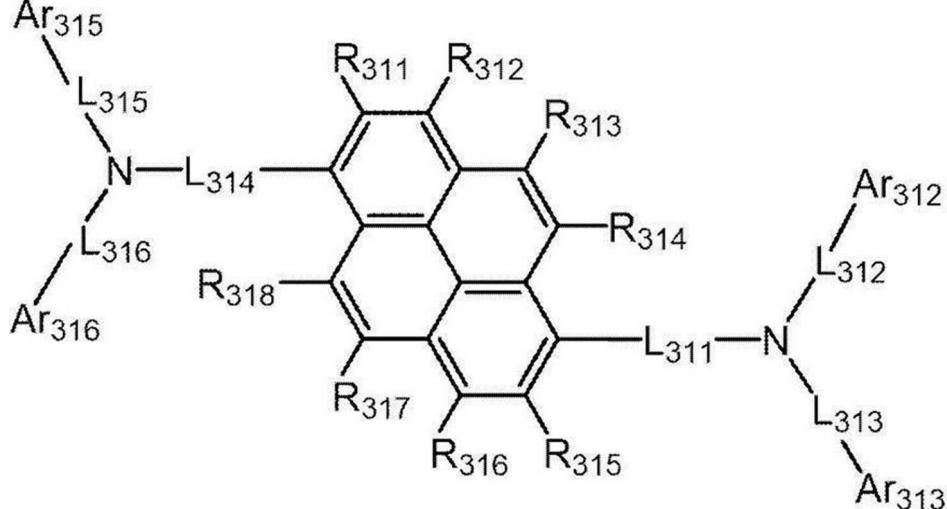
【0270】

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

30

【0271】

【化113】



40

【0272】

(前記一般式 (33) において、

$R_{311} \sim R_{318}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (3) における、前記一般式 (31)

50

) で表される 1 値の基ではない $R_{301} \sim R_{310}$ と同義であり、

$L_{311} \sim L_{316}$ は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の 2 値の複素環基であり、

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

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)

【0273】

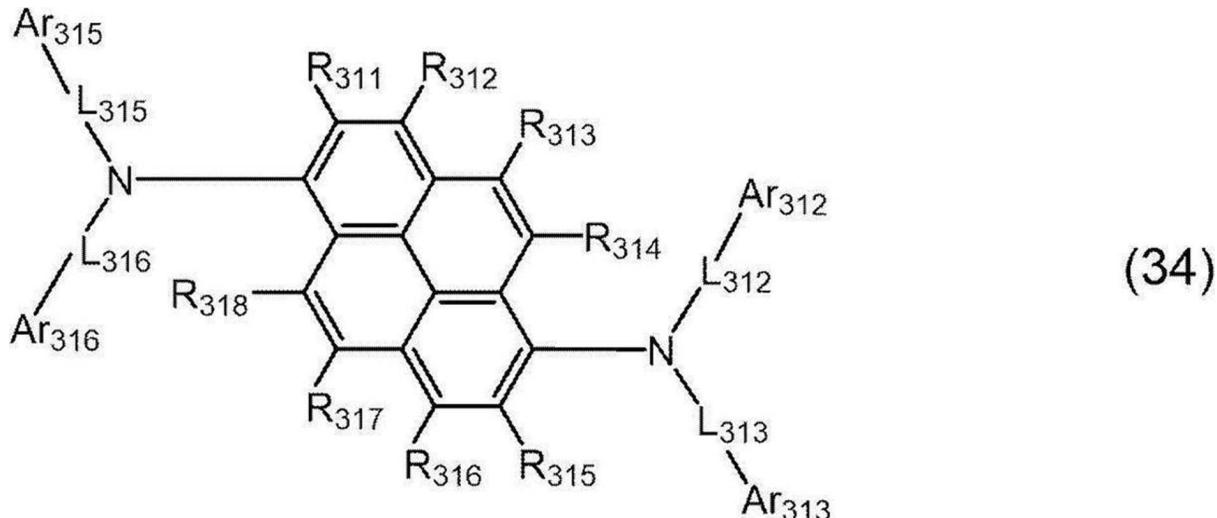
前記一般式 (31) において、 L_{301} は、単結合であることが好ましく、 L_{302} 及び L_{303} は単結合であることが好ましい。 10

【0274】

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

【0275】

【化114】



【0276】

(前記一般式 (34) において、

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

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

Ar_{312} 、 Ar_{313} 、 Ar_{315} 及び Ar_{316} は、それぞれ独立に、前記一般式 (3) における Ar_{312} 、 Ar_{313} 、 Ar_{315} 及び Ar_{316} と同義である。)

【0277】

10

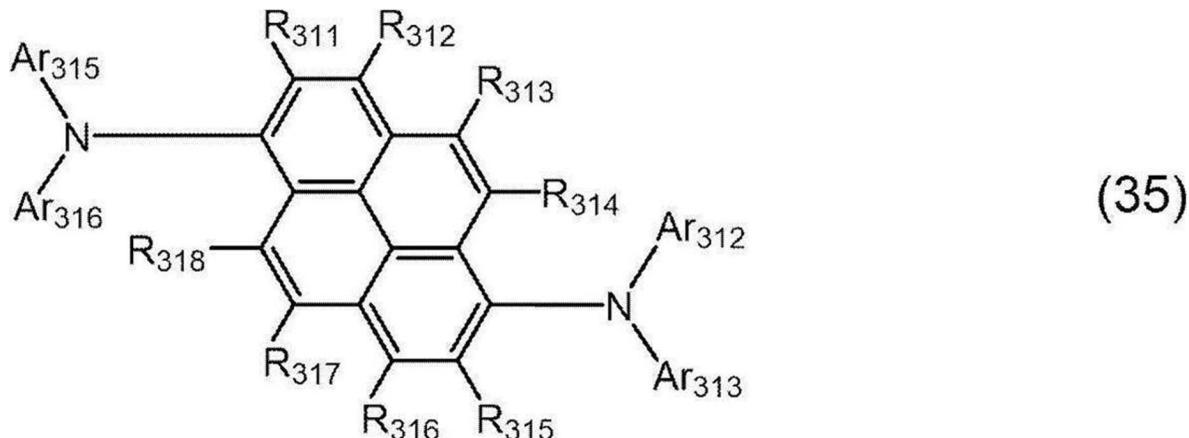
20

30

40

50

【化115】



【0278】

(前記一般式(35)において、

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

Ar₃₁₂、Ar₃₁₃、Ar₃₁₅及びAr₃₁₆は、それぞれ独立に、前記一般式(33)におけるAr₃₁₂、Ar₃₁₃、Ar₃₁₅及びAr₃₁₆と同義である。)

【0279】

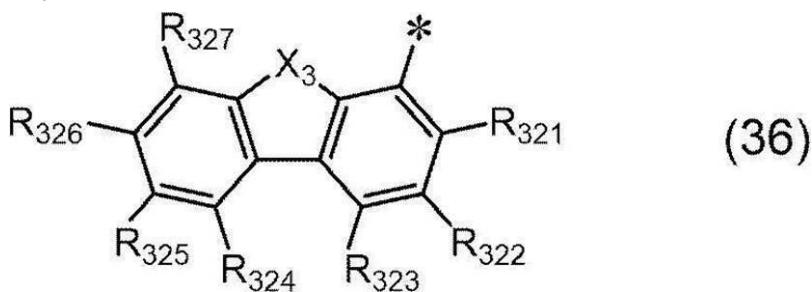
前記一般式(31)において、好ましくは、Ar₃₀₁及びAr₃₀₂のうち少なくとも1つが下記一般式(36)で表される基である。

前記一般式(33) ~ 一般式(35)において、好ましくは、Ar₃₁₂及びAr₃₁₃のうち少なくとも1つが下記一般式(36)で表される基である。

前記一般式(33) ~ 一般式(35)において、好ましくは、Ar₃₁₅及びAr₃₁₆のうち少なくとも1つが下記一般式(36)で表される基である。

【0280】

【化116】



【0281】

(前記一般式(36)において、

X₃は、酸素原子又は硫黄原子を示し、

R₃₂₁ ~ R₃₂₇のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の单環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記单環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₃₂₁ ~ R₃₂₇は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、

10

20

30

40

50

- S i (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

* は、 L₃₀₂ 、 L₃₀₃ 、 L₃₁₂ 、 L₃₁₃ 、 L₃₁₅ 又は L₃₁₆ との結合位置を示す
。)

10

【 0282 】

X₃ は、酸素原子であることが好ましい。

【 0283 】

R₃₂₁ ~ R₃₂₇ のうち少なくとも 1 つは、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

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

20

【 0284 】

前記一般式 (31) において、 Ar₃₀₁ が前記一般式 (36) で表される基であり、 Ar₃₀₂ が置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であることが好ましい。

前記一般式 (33) ~ 一般式 (35) において、 Ar₃₁₂ が前記一般式 (36) で表される基であり、 Ar₃₁₃ が置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であることが好ましい。

前記一般式 (33) ~ 一般式 (35) において、 Ar₃₁₅ が前記一般式 (36) で表される基であり、 Ar₃₁₆ が置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であることが好ましい。

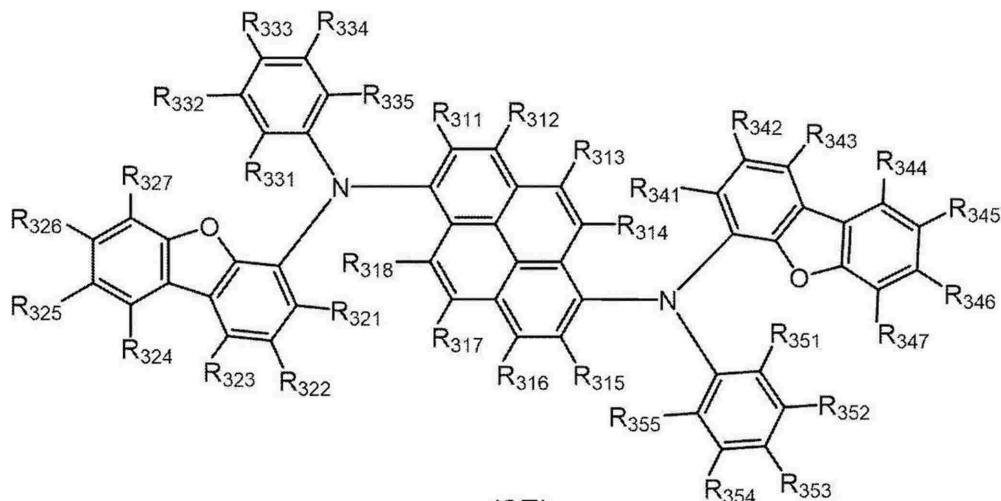
30

【 0285 】

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

【 0286 】

【 化 117 】



(37)

40

50

【0287】

(前記一般式(37)において、

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

R₃₂₁～R₃₂₇のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

R₃₄₁～R₃₄₇のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₃₂₁～R₃₂₇並びにR₃₄₁～R₃₄₇は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₃₃₁～R₃₃₅並びにR₃₅₁～R₃₅₅は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

【0288】

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

【0289】

10

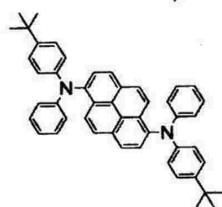
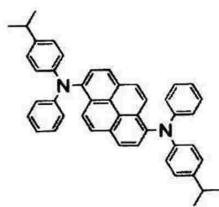
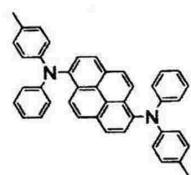
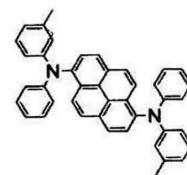
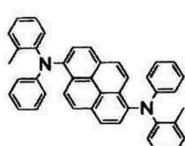
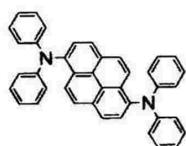
20

30

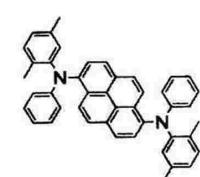
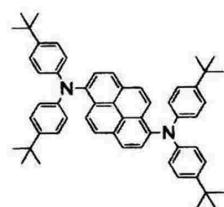
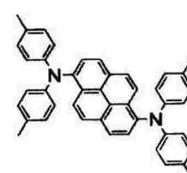
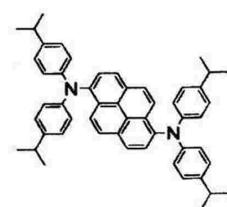
40

50

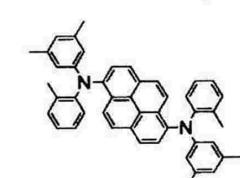
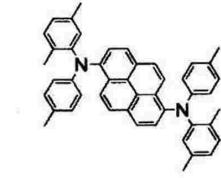
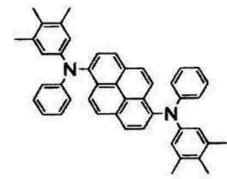
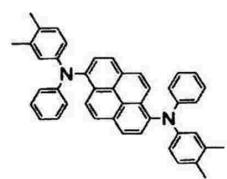
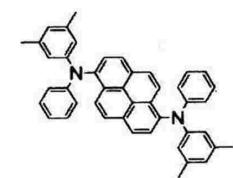
【化118】



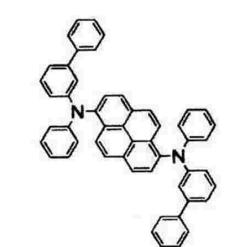
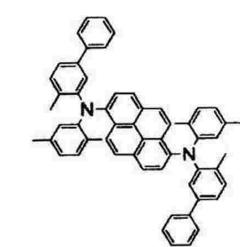
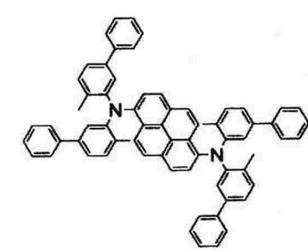
10



20



30

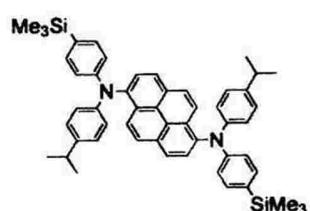
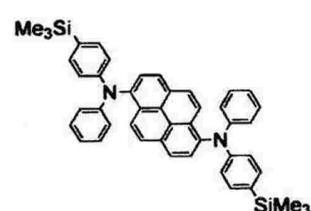
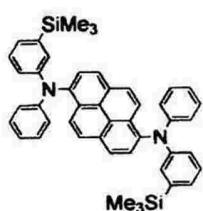
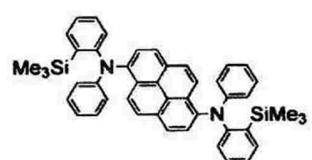
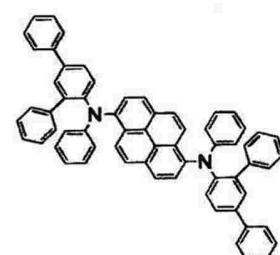
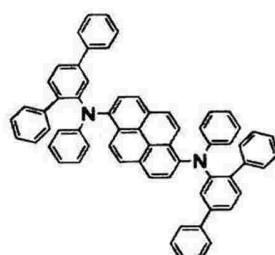
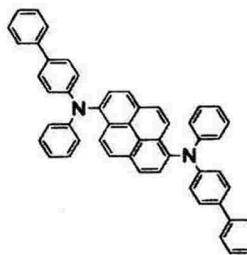


40

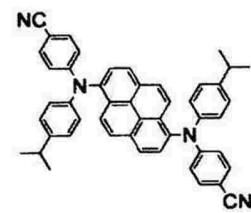
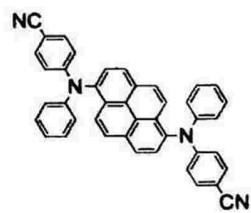
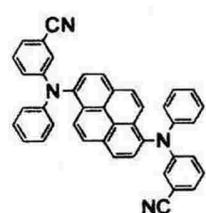
【0290】

50

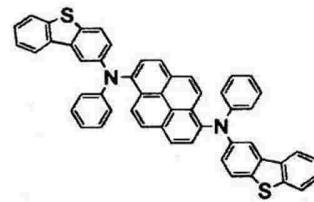
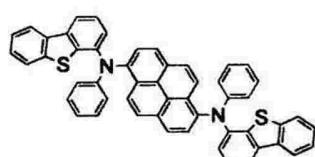
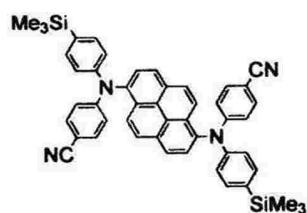
【化119】



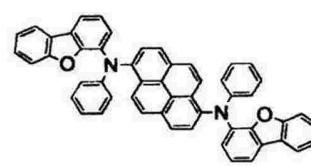
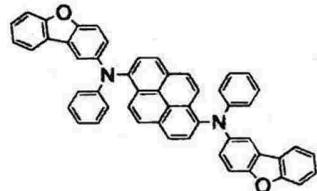
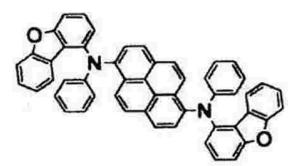
10



20



30

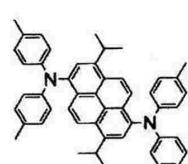
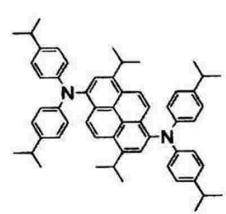
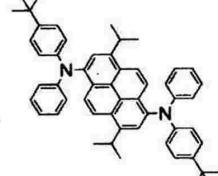
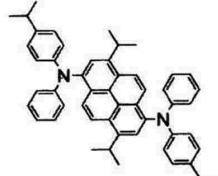
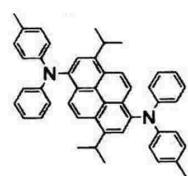
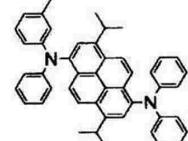
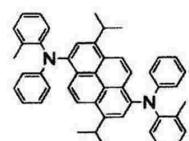
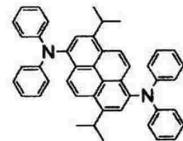
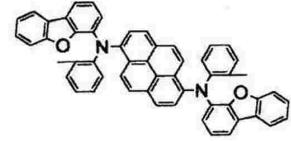
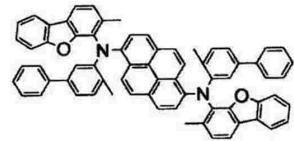
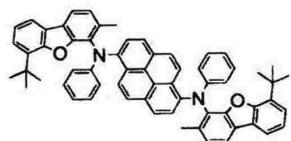
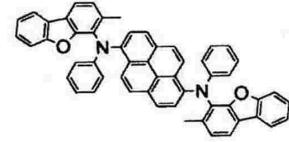
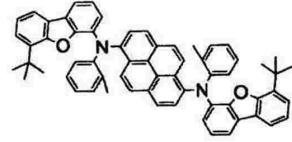
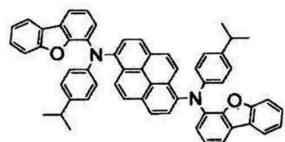
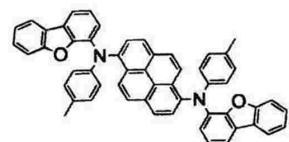
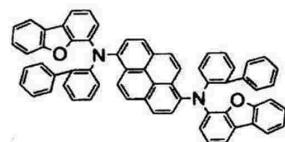
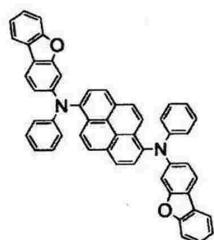


40

【0291】

50

【化120】



10

20

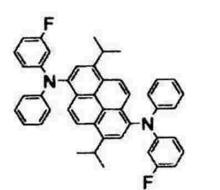
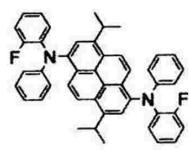
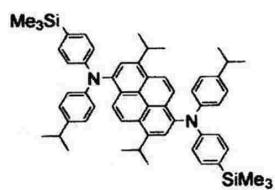
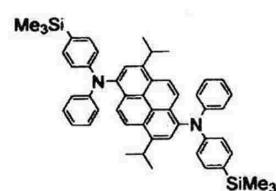
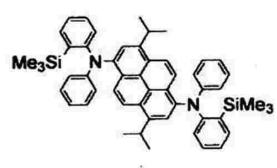
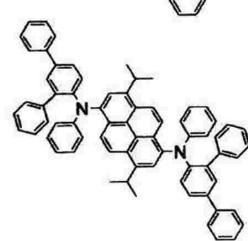
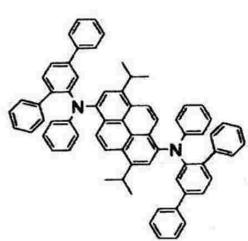
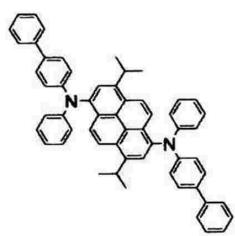
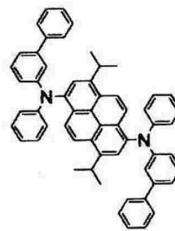
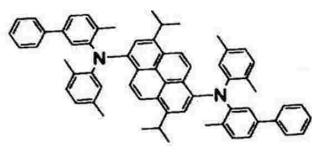
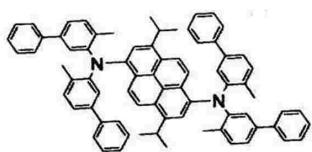
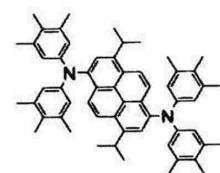
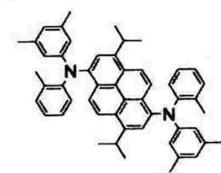
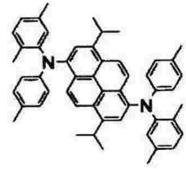
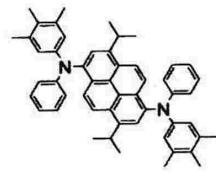
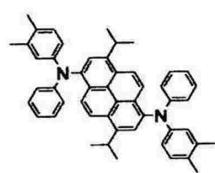
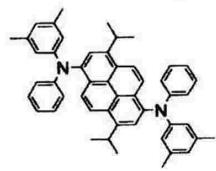
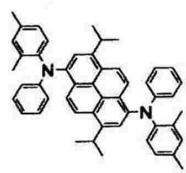
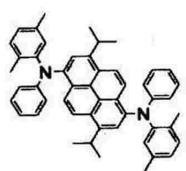
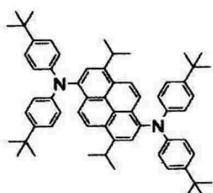
30

40

【0292】

50

【化121】



【0293】

10

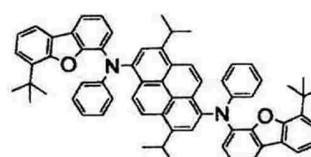
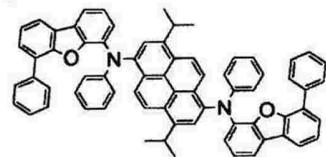
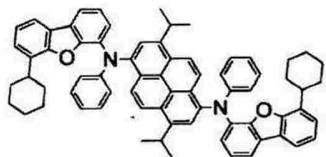
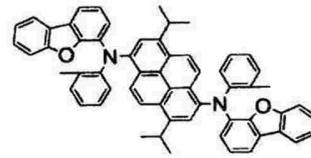
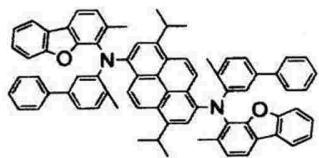
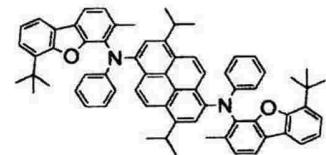
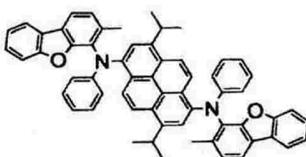
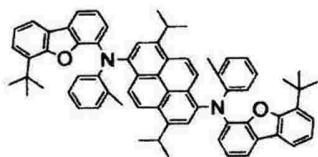
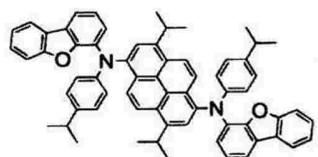
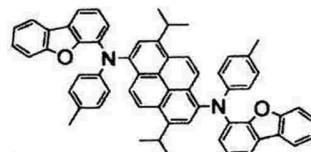
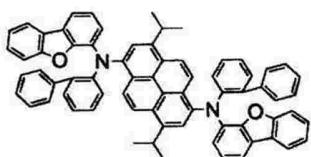
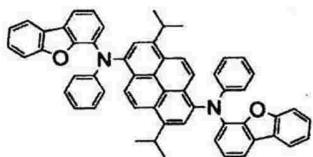
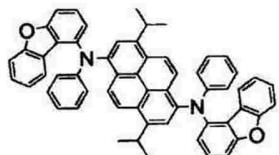
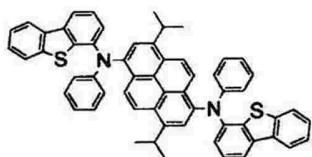
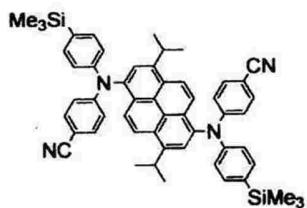
20

30

40

50

【化 1 2 2】



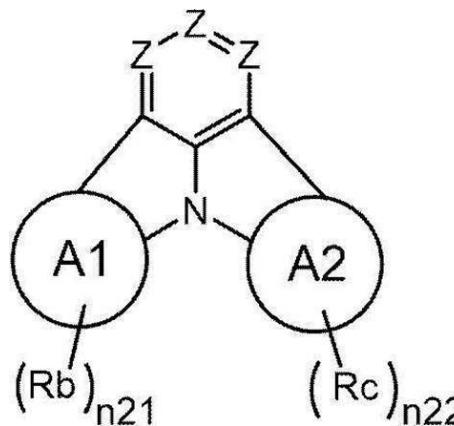
【 0 2 9 4 】

(一般式(4)で表される化合物)

一般式(4)で表される化合物について説明する。

【 0 2 9 5 】

【化 1 2 3】



(4)

【 0 2 9 6 】

40

50

(前記一般式(4)において、

Zは、それぞれ独立に、C R a又は窒素原子であり、

A 1環及びA 2環は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環であり、

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

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

n 2 1及びn 2 2は、それぞれ独立に、0、1、2、3又は4であり、

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

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

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

- O - (R 9 0 4) で表される基、

- S - (R 9 0 5) で表される基、

- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

【0297】

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

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

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

【0298】

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

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

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

10

20

30

40

50

【0299】

R_bは、A₁環としての芳香族炭化水素環を形成する炭素原子のいずれか、又は、A₁環としての複素環を形成する原子のいずれかに結合する。

【0300】

R_cは、A₂環としての芳香族炭化水素環を形成する炭素原子のいずれか、又は、A₂環としての複素環を形成する原子のいずれかに結合する。

【0301】

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

10

【0302】

【化124】

*—L₄₀₁—Ar₄₀₁ (4a)

【0303】

(前記一般式(4a)において、

L₄₀₁は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基であり、

Ar₄₀₁は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、

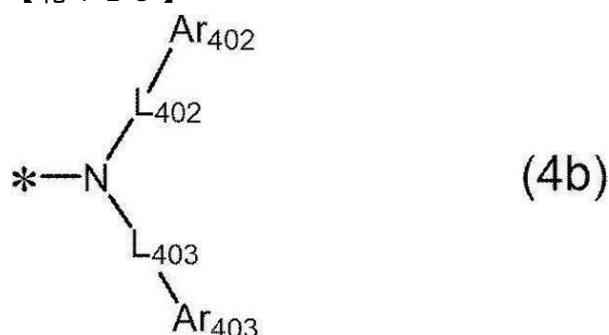
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基、又は

下記一般式(4b)で表される基である。)

20

【0304】

【化125】



【0305】

(前記一般式(4b)において、

L₄₀₂及びL₄₀₃は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基であり、

Ar₄₀₂及びAr₄₀₃からなる組は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないAr₄₀₂及びAr₄₀₃は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

30

40

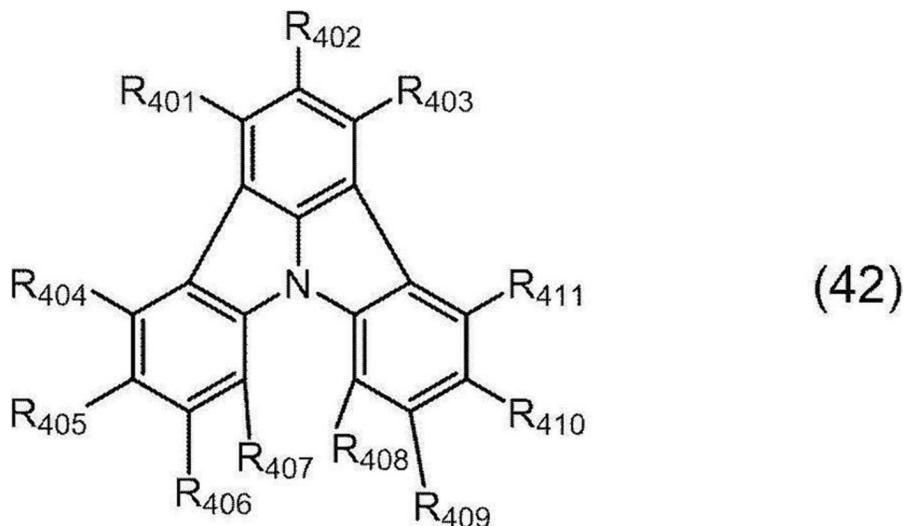
50

【0306】

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

【0307】

【化126】



10

20

【0308】

(前記一般式(42)において、

R401～R411のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

30

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-Si(R901)(R902)(R903)で表される基、

-O-(R904)で表される基、

-S-(R905)で表される基、

-N(R906)(R907)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

40

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

【0309】

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

R404及びR411が前記一般式(4a)で表される基であることが好ましい。

【0310】

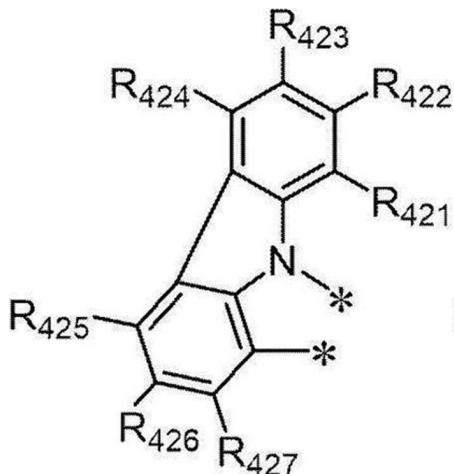
一実施形態において、前記一般式(4)で表される化合物は、A1環に下記一般式(4-1)又は一般式(4-2)で表される構造が結合した化合物である。

50

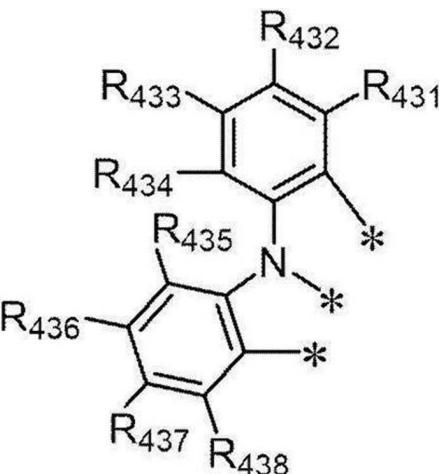
また、一実施形態において、前記一般式(4-2)で表される化合物は、R₄₀₄～R₄₀₇が結合する環に下記一般式(4-1)又は一般式(4-2)で表される構造が結合した化合物である。

【0311】

【化127】



(4-1)



(4-2)

10

20

【0312】

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

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

R₄₂₁～R₄₂₇のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

30

R₄₃₁～R₄₃₈のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

40

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

-O-(R₉₀₄)で表される基、

-S-(R₉₀₅)で表される基、

-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

50

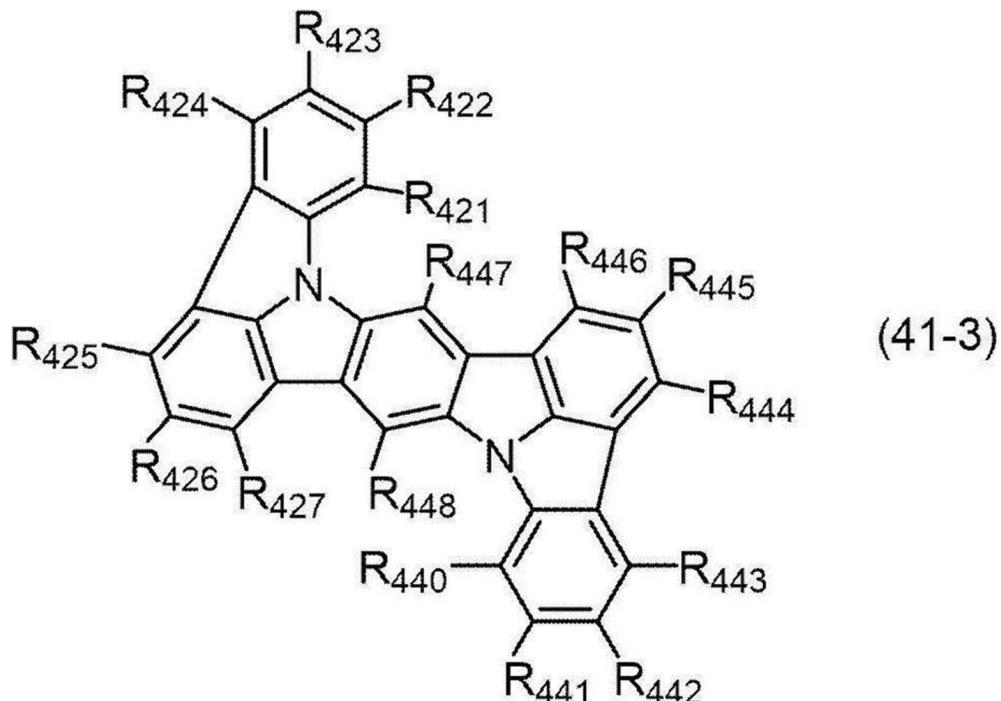
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)

【0313】

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

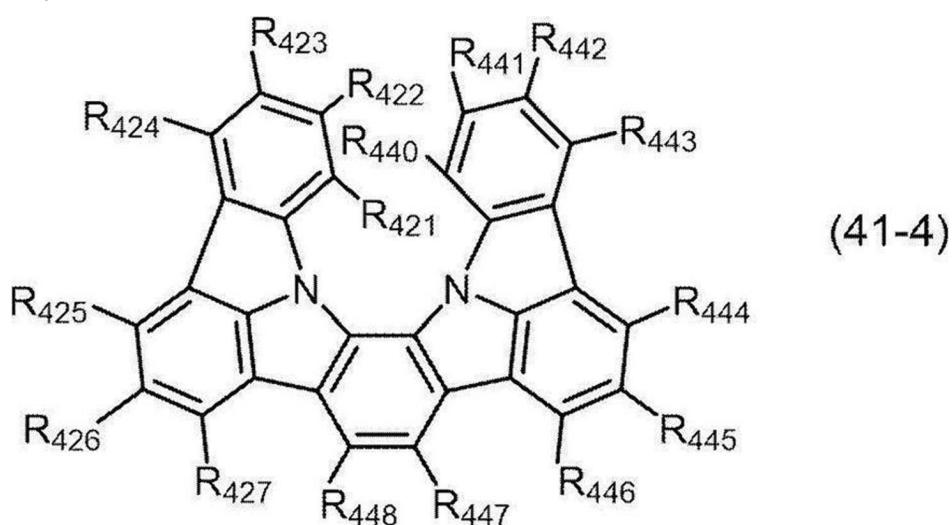
【0314】

【化128】



【0315】

【化129】



【0316】

10

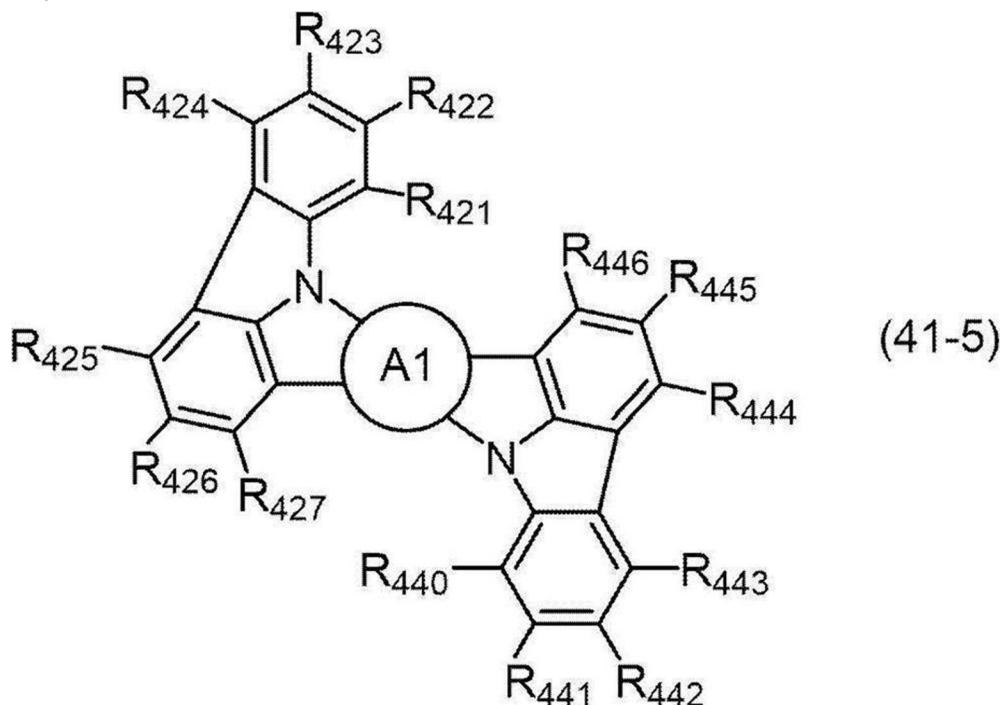
20

30

40

50

【化130】



10

20

【0317】

(前記一般式(41-3)、一般式(41-4)及び一般式(41-5)中、

A1環は、前記一般式(4)で定義した通りであり、

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

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

【0318】

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

30

置換もしくは無置換のナフタレン環、又は

置換もしくは無置換のフルオレン環である。

【0319】

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

置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、

置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は

置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

【0320】

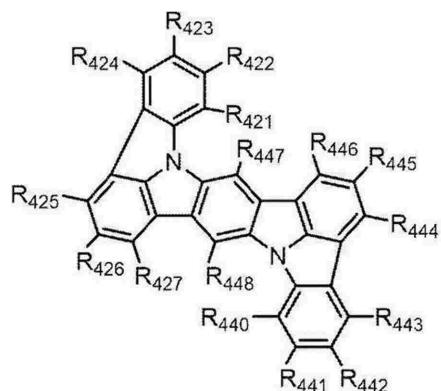
一実施形態においては、前記一般式(4)又は前記一般式(42)で表される化合物は、下記一般式(461)～一般式(467)で表される化合物からなる群から選択される。

40

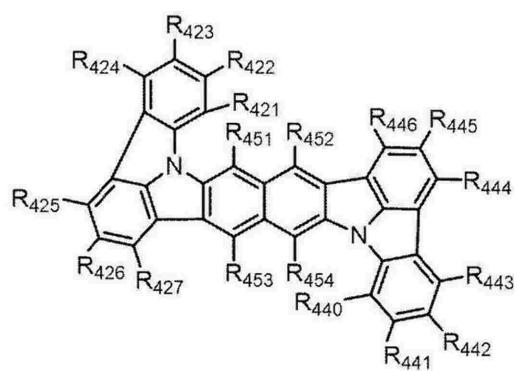
【0321】

50

【化131】



(461)

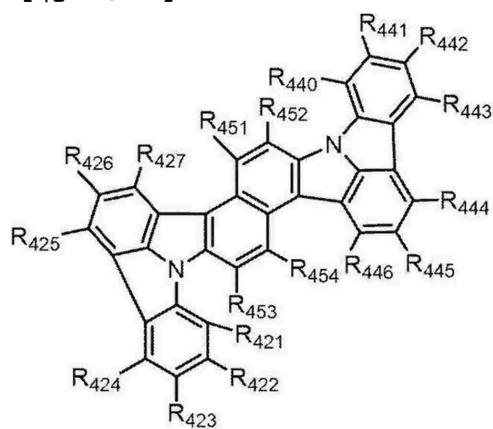


(462)

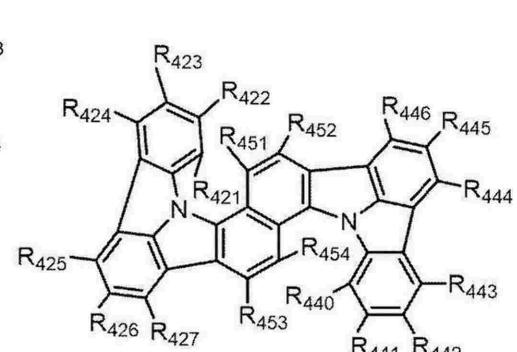
10

【0322】

【化132】



(463)

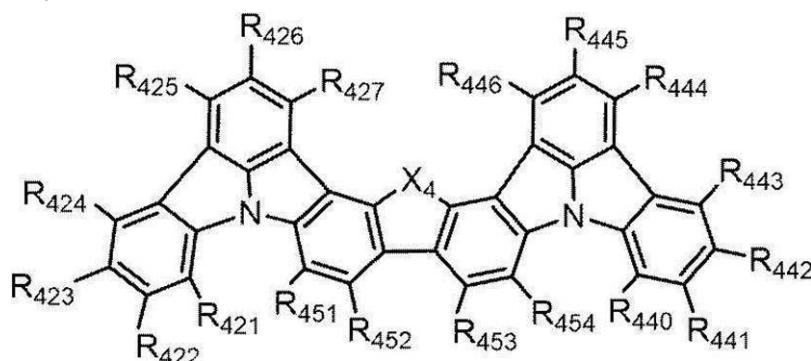


(464)

20

【0323】

【化133】



(465)

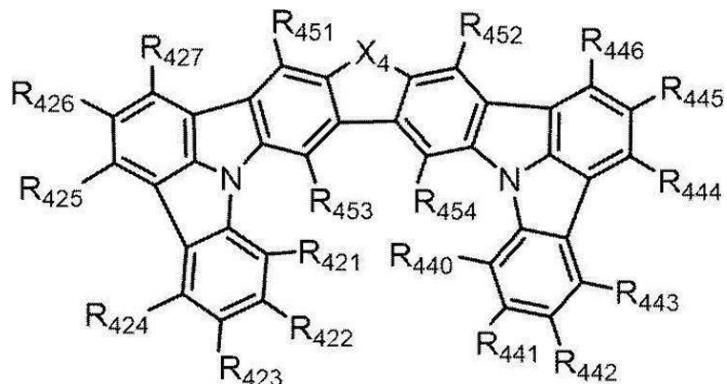
30

【0324】

40

50

【化134】

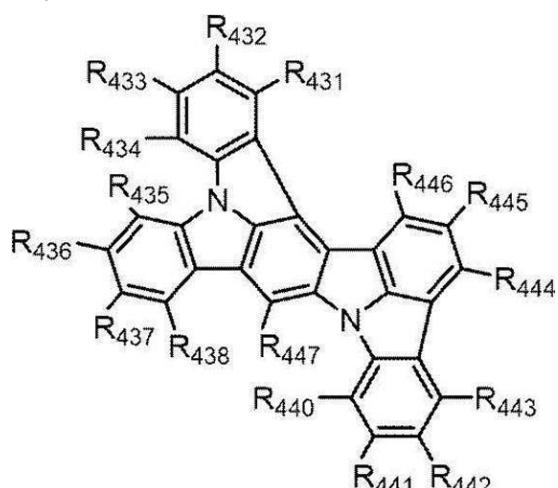


(466)

10

【0325】

【化135】



(467)

20

30

【0326】

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

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

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

R440～R448並びにR451～R454は、それぞれ独立に、前記一般式(4-2)におけるR401～R411と同義であり、

X4は、酸素原子、NR801、又はC(R802)(R803)であり、

R801、R802及びR803は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

好ましくは、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、

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

40

50

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

【0327】

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

【0328】

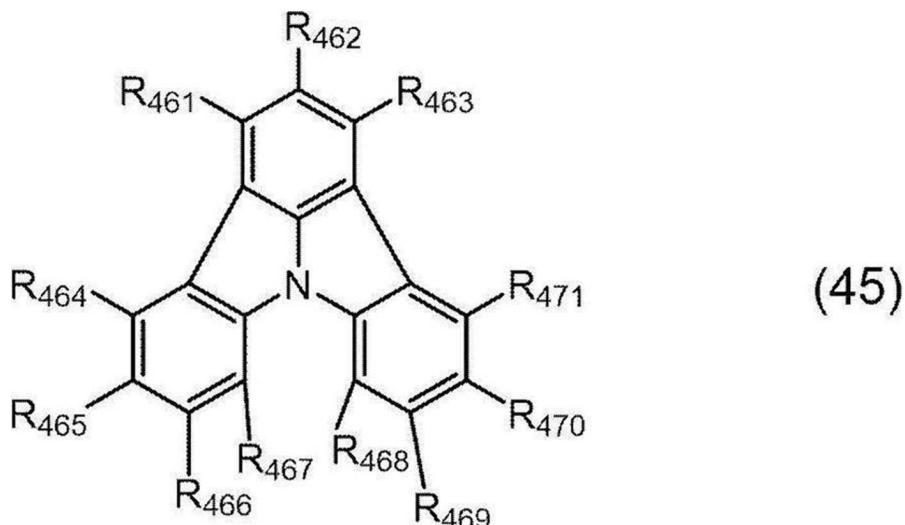
(一般式(45)で表される化合物)

一般式(45)で表される化合物について説明する。

10

【0329】

【化136】



20

【0330】

(前記一般式(45)において、

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

30

ただし、

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

40

R₄₆₁～R₄₇₁が形成する2つ以上の環は、互いに同一であるか、又は異なり、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR₄₆₁～R₄₇₁は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

50

- O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)

【0331】

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

【0332】

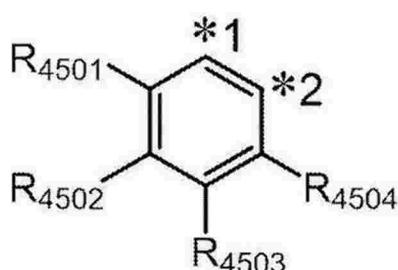
前記一般式(45)で表される化合物における上記の環構造の数は、例えば、2つ、3つ、又は4つである。2つ以上の環構造は、それぞれ前記一般式(45)の母骨格上の同一のベンゼン環上に存在してもよいし、異なるベンゼン環上に存在してもよい。例えば、環構造を3つ有する場合、前記一般式(45)の3つのベンゼン環のそれぞれに1つずつ環構造が存在してもよい。

【0333】

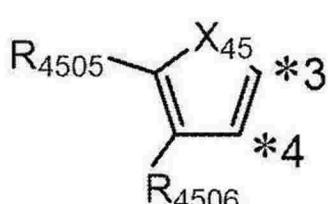
前記一般式(45)で表される化合物における上記の環構造としては、例えば、下記一般式(451)~(460)で表される構造等が挙げられる。

【0334】

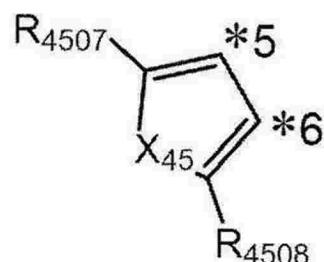
【化137】



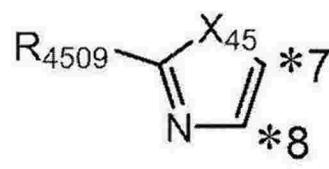
(451)



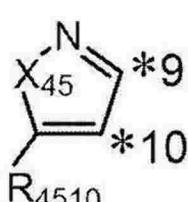
(452)



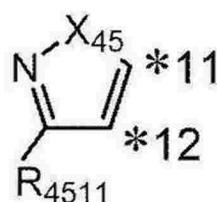
(453)



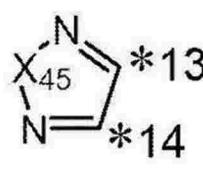
(454)



(455)



(456)



(457)

【0335】

(前記一般式(451)~(457)において、

*1と*2、*3と*4、*5と*6、*7と*8、*9と*10、*11と*12及

10

20

30

40

50

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

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

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

$R_{4501} \sim R_{4506}$ 及び $R_{4512} \sim R_{4513}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

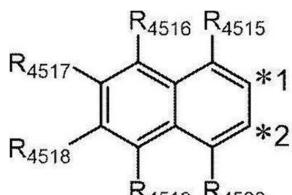
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

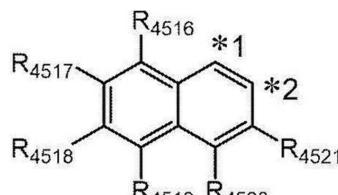
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{4501} \sim R_{4514}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (45) における $R_{461} \sim R_{471}$ と同義である。)

【 0 3 3 6 】

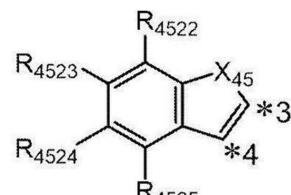
【 化 1 3 8 】



(458)



(459)



(460)

【 0 3 3 7 】

(前記一般式 (458) ~ (460) において、

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

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

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

、

$R_{4512} \sim R_{4513}$ 及び $R_{4515} \sim R_{4525}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

【 0 3 3 8 】

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

【 0 3 3 9 】

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

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

(i i i) 式 (451) ~ (460) における $R_{4501} \sim R_{4514}$ 、 $R_{4515} \sim R_{4525}$ は、好ましくは、それぞれ独立に、

10

20

30

40

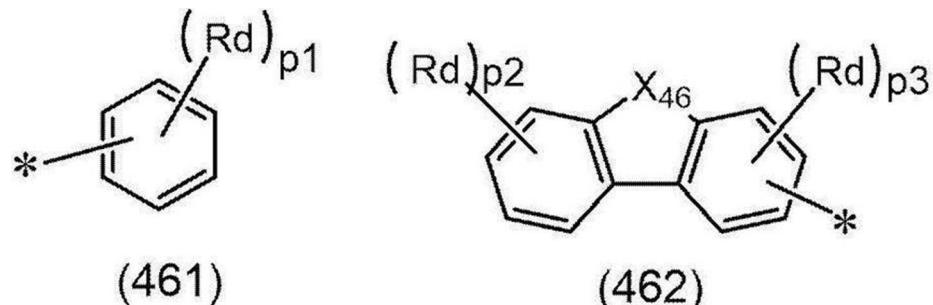
50

水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基、又は
 下記一般式 (461) ~ 一般式 (464) で表される基からなる群から選択される基
 のいずれかである。

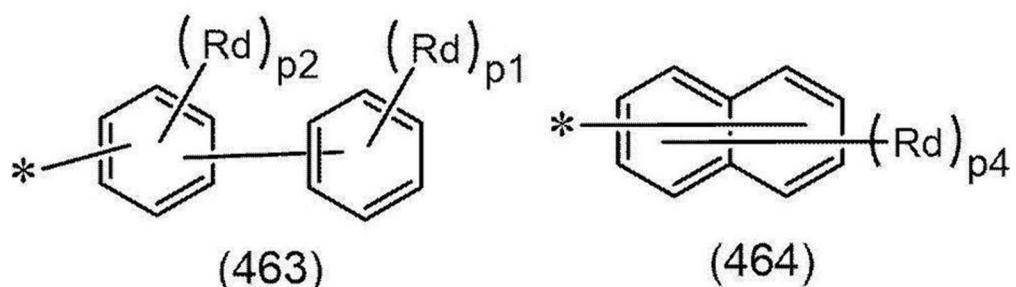
10

【0340】

【化139】



20



30

【0341】

(前記一般式 (461) ~ (464) 中、

R_d は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

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

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

X₄₆ は、C (R₈₀₁) (R₈₀₂)、N R₈₀₃、酸素原子又は硫黄原子であり、R₈₀₁、R₈₀₂ 及び R₈₀₃ は、それぞれ独立に、

水素原子、

40

50

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

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

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

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

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

p₁ は、5 であり、

p₂ は、4 であり、

p₃ は、3 であり、

p₄ は、7 であり、

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

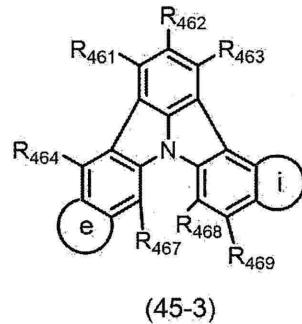
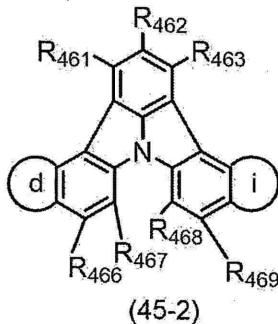
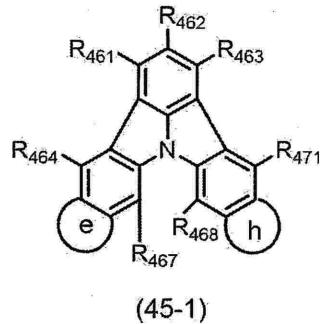
発光性化合物において、R₉₀₁ ~ R₉₀₇ は、前述のように定義した通りである。

【0342】

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

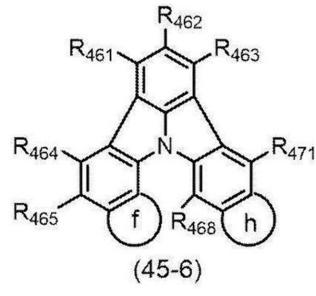
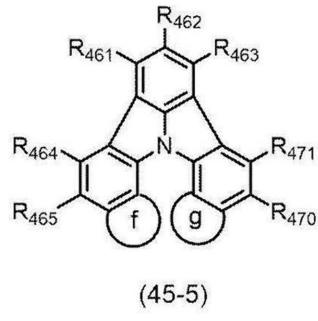
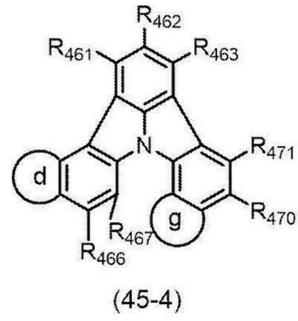
【0343】

【化140】



【0344】

【化141】



【0345】

(前記一般式 (45-1) ~ (45-6) において、

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

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

10

20

30

40

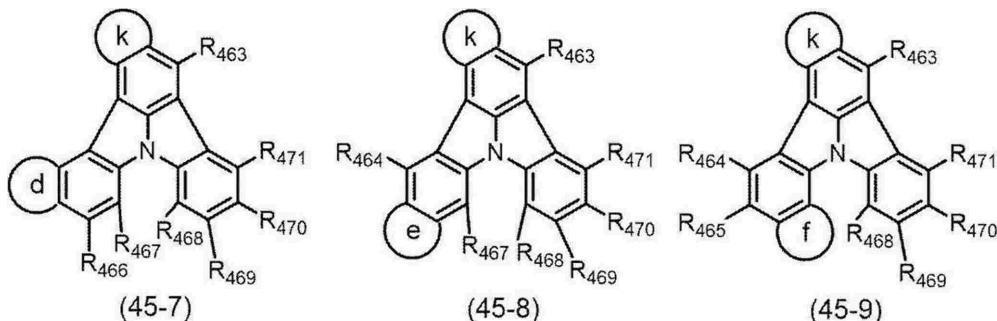
50

【0346】

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

【0347】

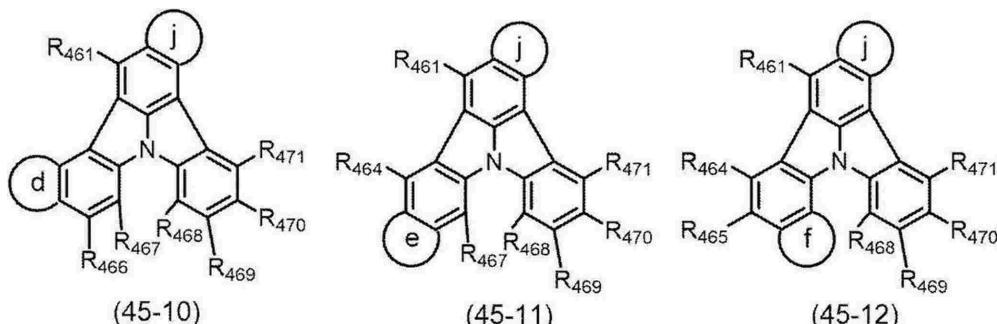
【化142】



10

【0348】

【化143】



20

【0349】

(前記一般式(45-7)～(45-12)において、

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

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

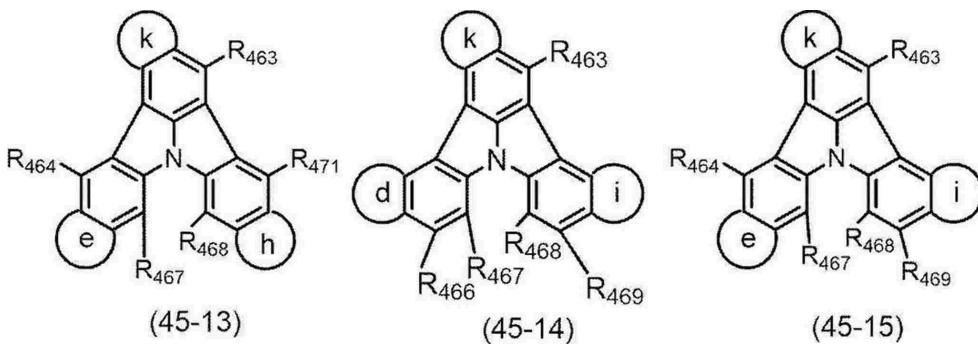
30

【0350】

一実施形態において、前記一般式(45)で表される化合物は、下記一般式(45-1)～(45-21)のいずれかで表される。

【0351】

【化144】

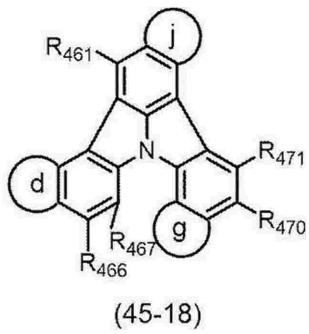
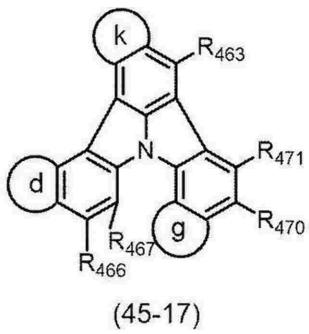
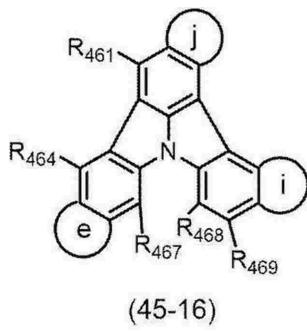


40

【0352】

50

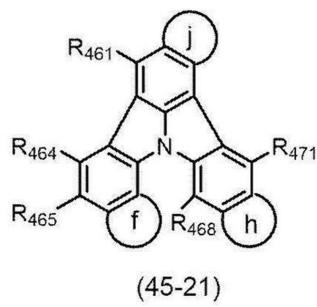
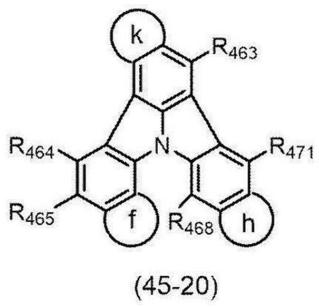
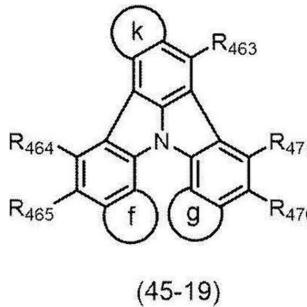
【化145】



10

【0353】

【化146】



20

【0354】

(前記一般式(45-13)～(45-21)において、

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

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

【0355】

前記環g又は前記環hがさらに置換基を有する場合の置換基としては、例えば、

30

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、

前記一般式(461)で表される基、

前記一般式(463)で表される基、又は

前記一般式(464)で表される基が挙げられる。

【0356】

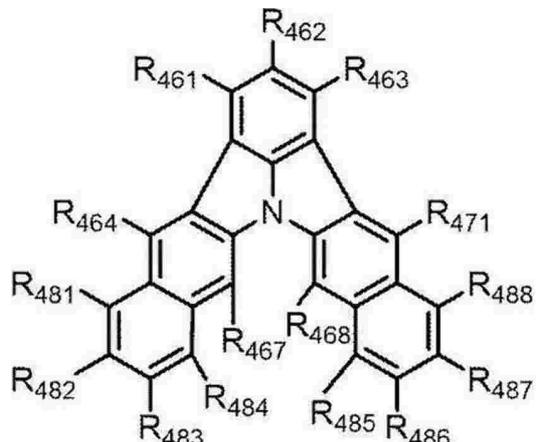
一実施形態において、前記一般式(45)で表される化合物は、下記一般式(45-22)～(45-25)のいずれかで表される。

【0357】

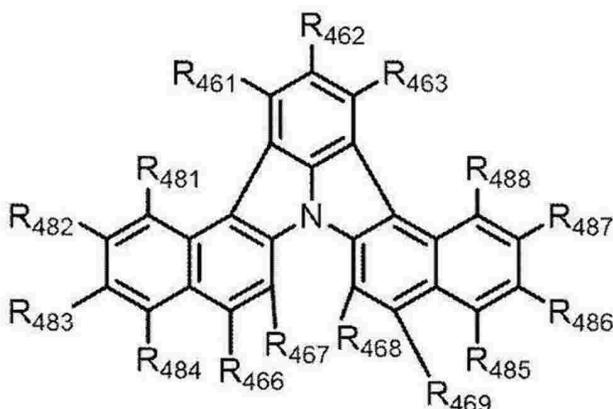
40

50

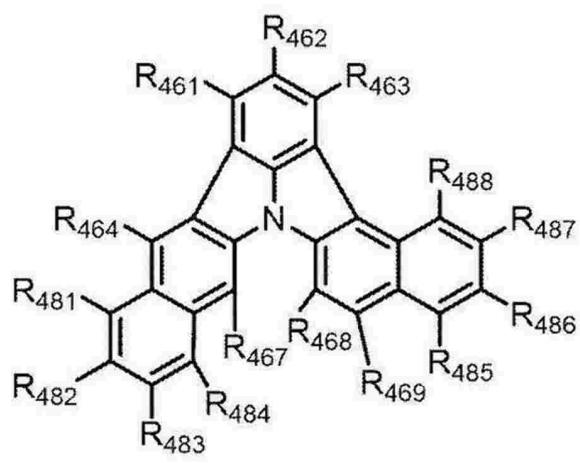
【化147】



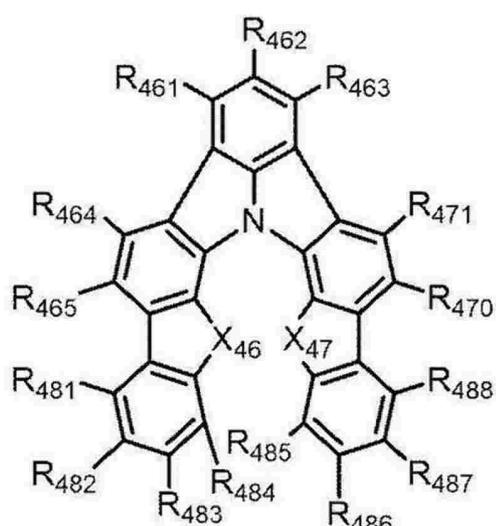
(45-22)



(45-23)



(45-24)



(45-25)

【0358】

(前記一般式(45-22)～(45-25)において、

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

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

R₈₀₁、R₈₀₂及びR₈₀₃は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

好ましくは、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、

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

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

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

10

20

30

40

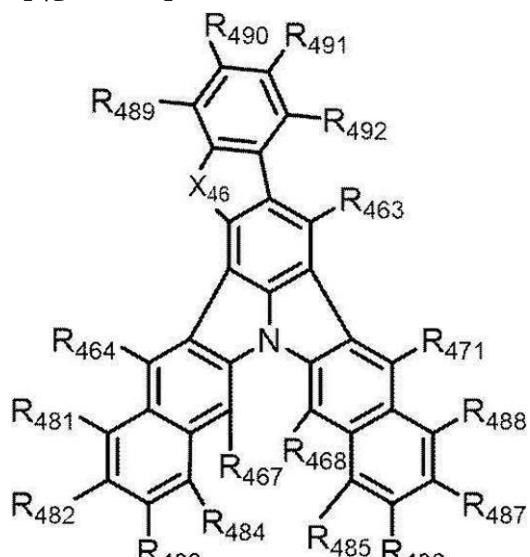
50

【0359】

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

【0360】

【化148】



(45-26)

【0361】

(前記一般式(45-26)において、

X₄₆は、C(R₈₀₁)(R₈₀₂)、N R₈₀₃、酸素原子又は硫黄原子であり、R₄₆₃、R₄₆₄、R₄₆₇、R₄₆₈、R₄₇₁、及びR₄₈₁～R₄₉₂は、それぞれ独立に、前記一般式(45)におけるR₄₆₁～R₄₇₁と同義である。

R₈₀₁、R₈₀₂及びR₈₀₃は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

好ましくは、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、

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

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

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

【0362】

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

【0363】

10

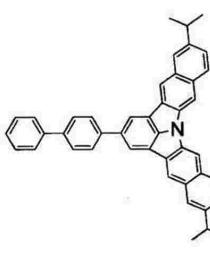
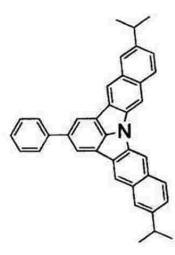
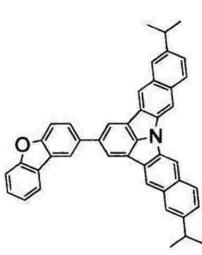
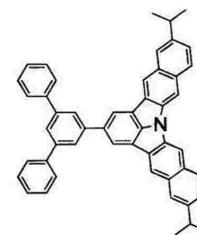
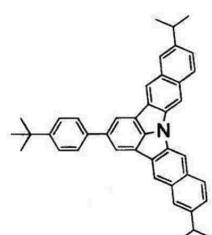
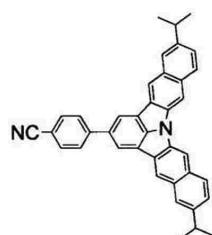
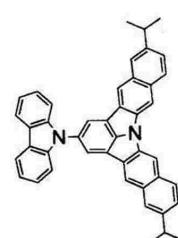
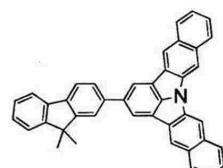
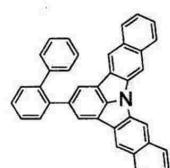
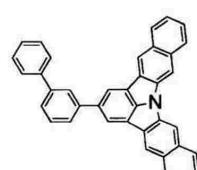
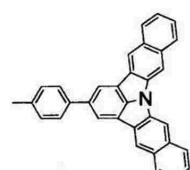
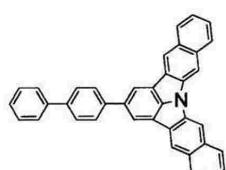
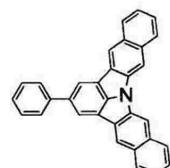
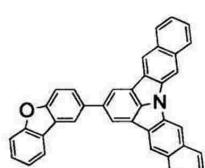
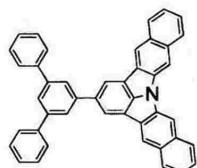
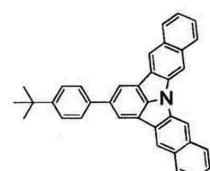
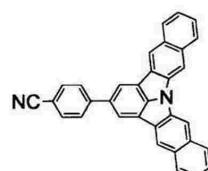
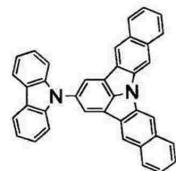
20

30

40

50

【化 1 4 9】



【 0 3 6 4 】

10

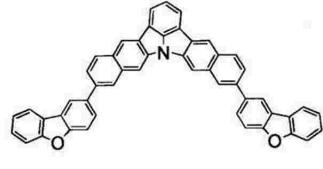
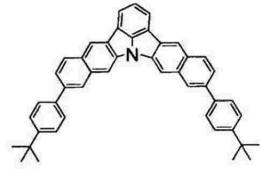
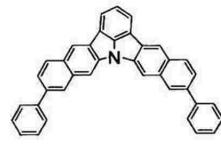
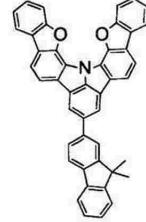
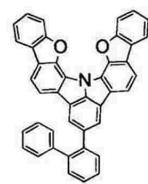
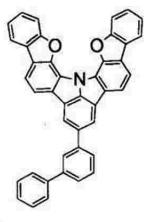
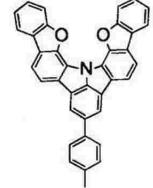
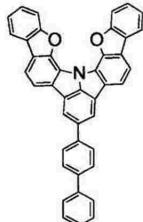
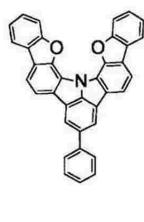
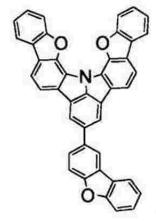
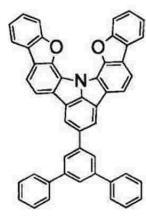
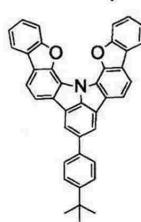
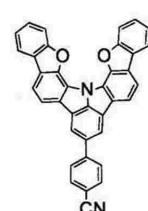
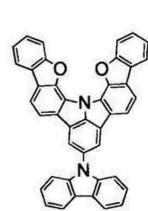
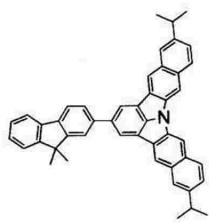
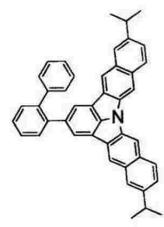
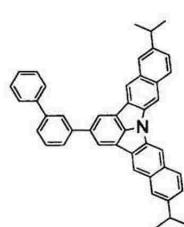
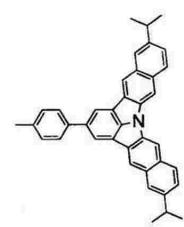
20

30

40

50

【化 150】



【0365】

10

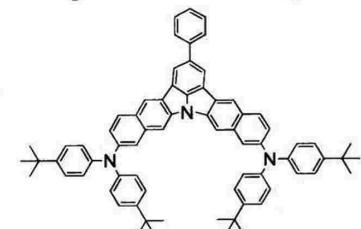
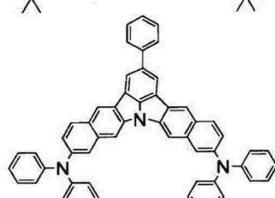
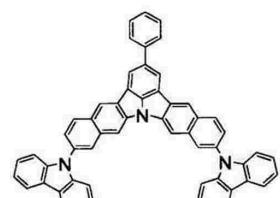
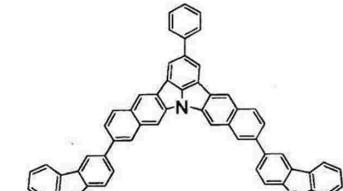
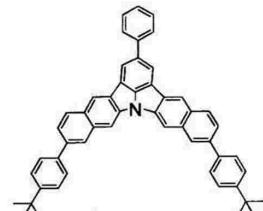
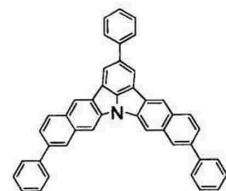
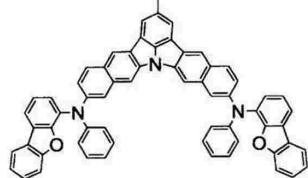
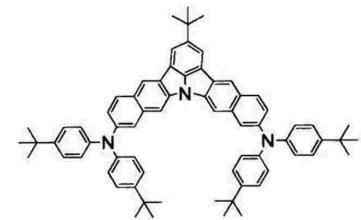
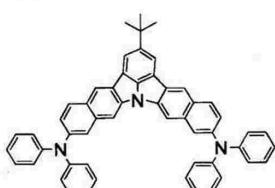
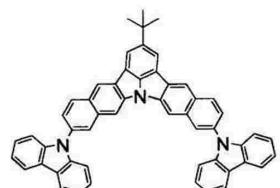
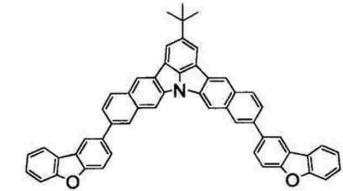
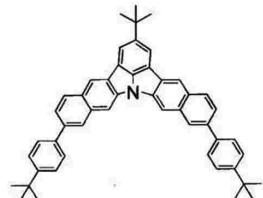
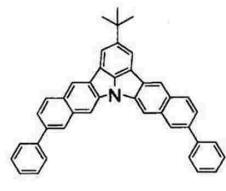
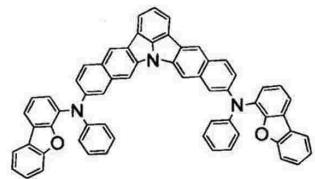
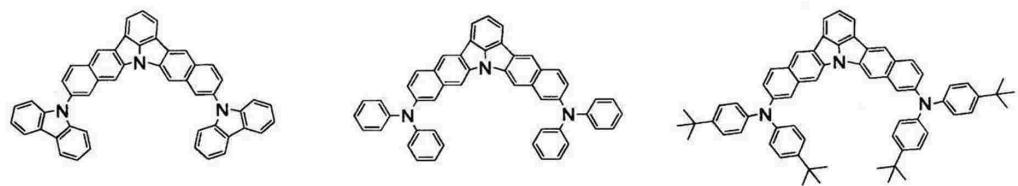
20

30

40

50

【化 151】



【0366】

10

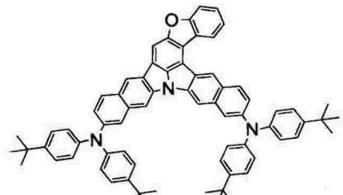
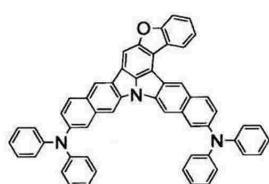
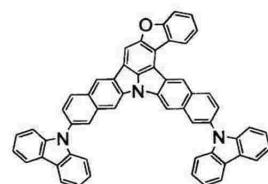
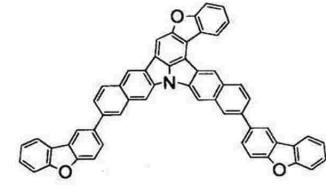
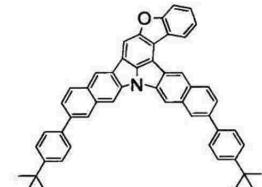
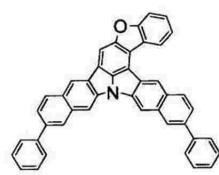
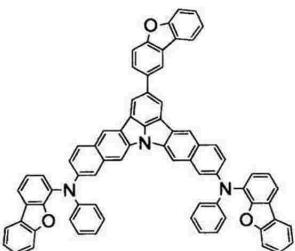
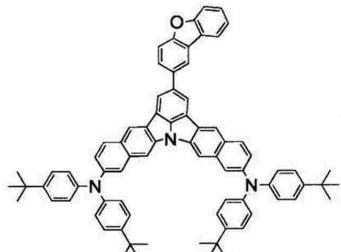
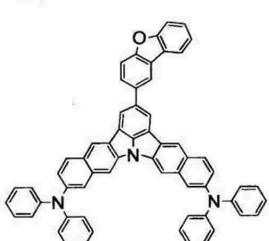
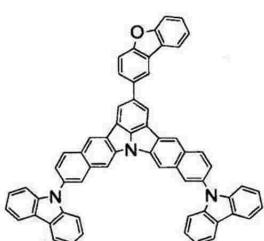
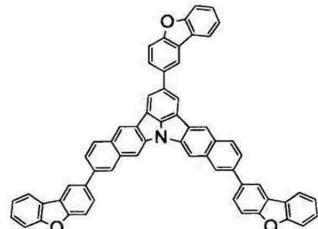
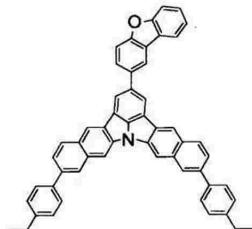
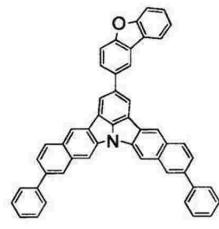
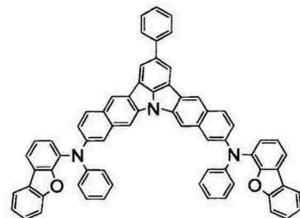
20

30

40

50

【化 1 5 2】



【0 3 6 7】

10

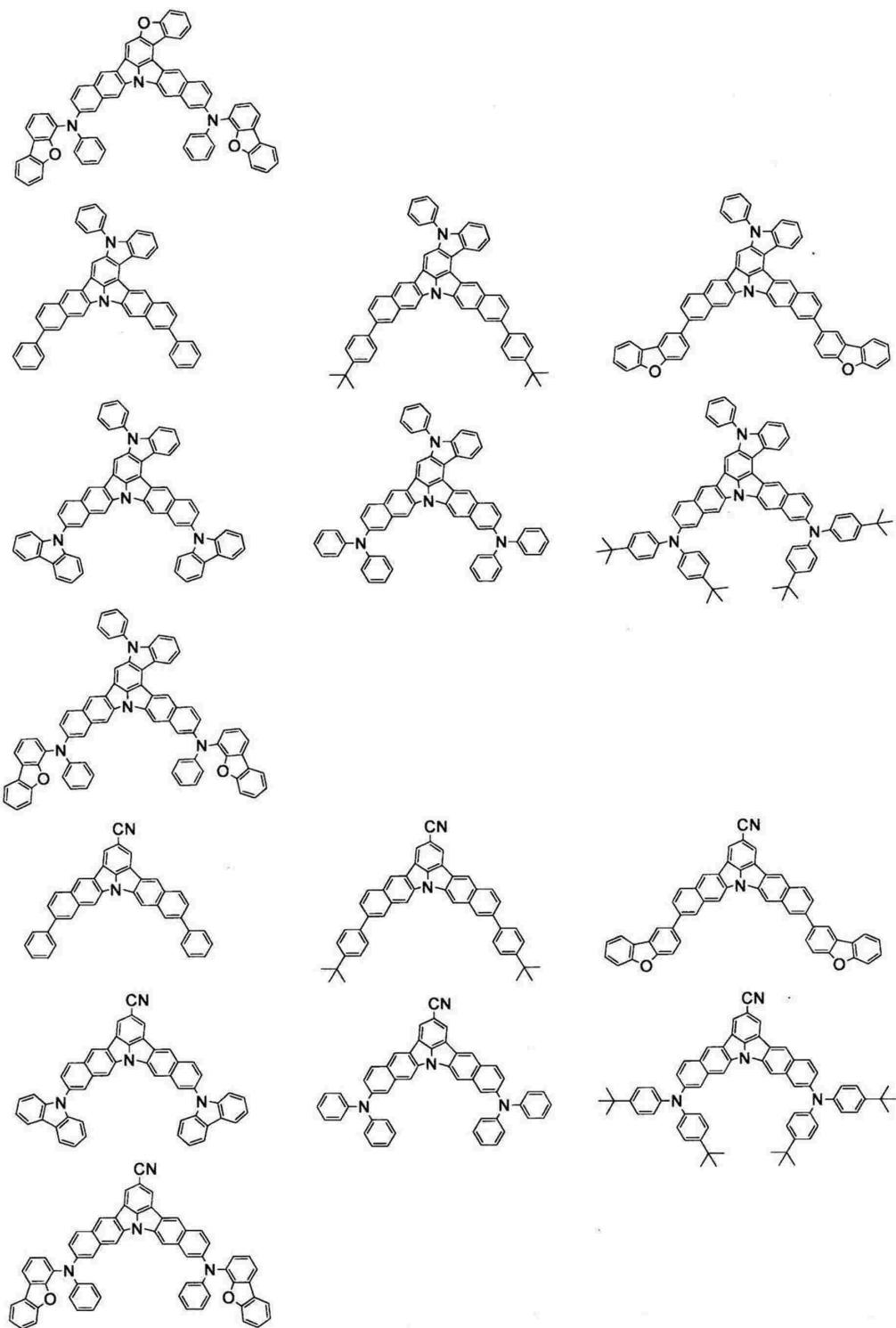
20

30

40

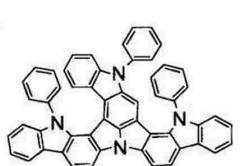
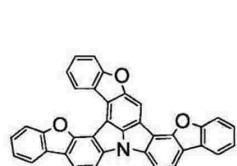
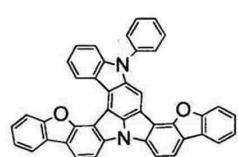
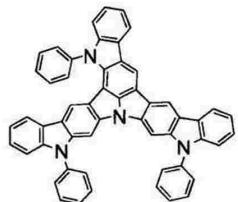
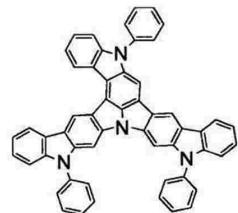
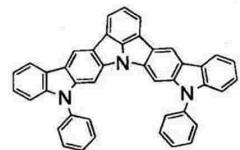
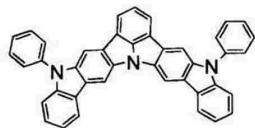
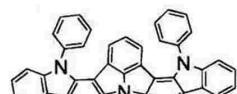
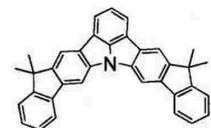
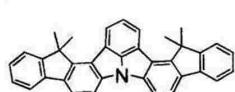
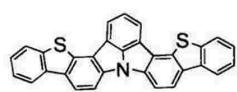
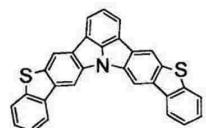
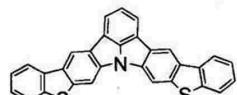
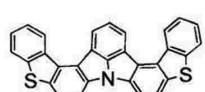
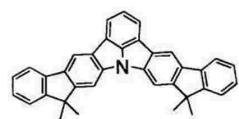
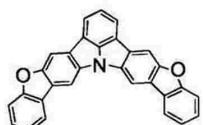
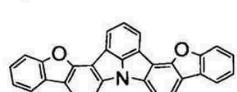
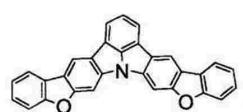
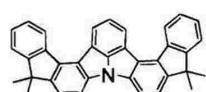
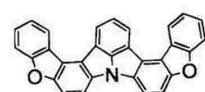
50

【化 153】



【0368】

【化 154】



10

20

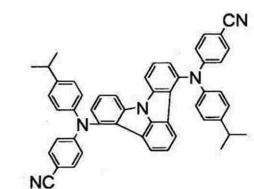
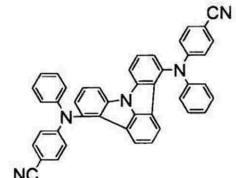
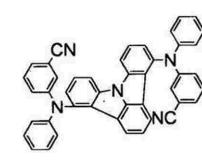
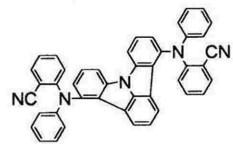
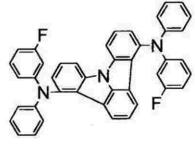
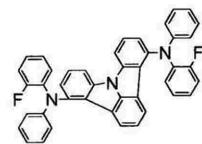
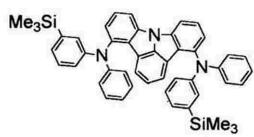
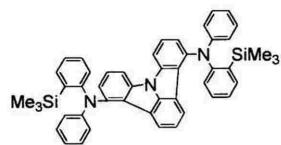
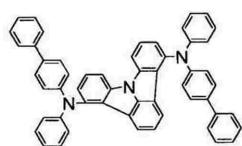
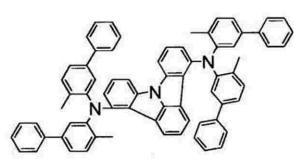
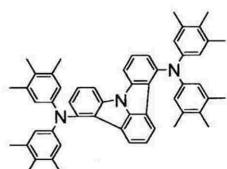
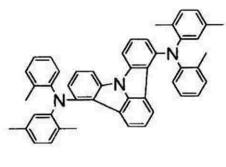
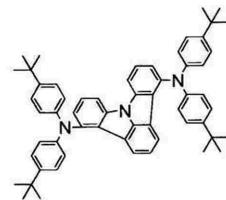
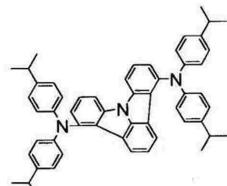
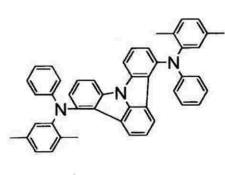
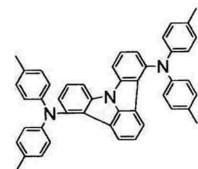
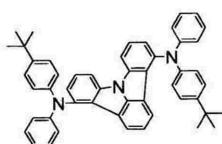
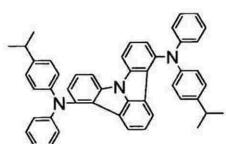
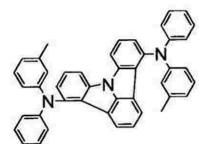
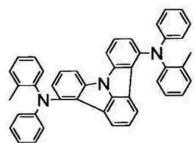
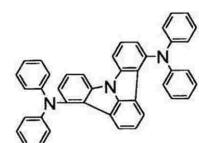
30

40

【0369】

50

【化 155】



【0370】

10

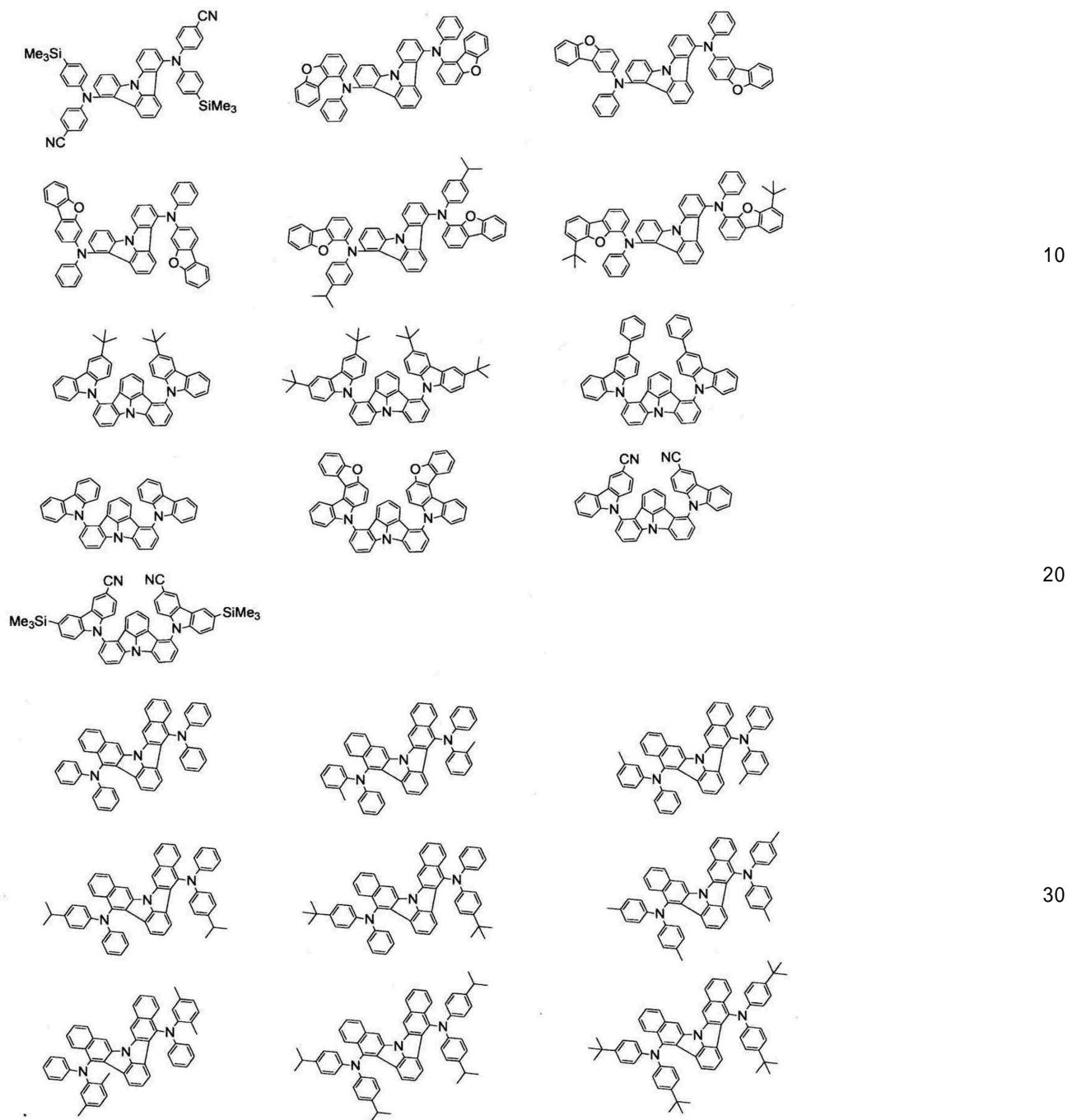
20

30

40

50

【化 1 5 6】

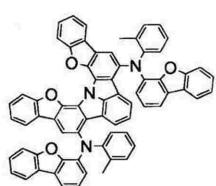
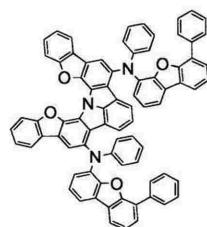
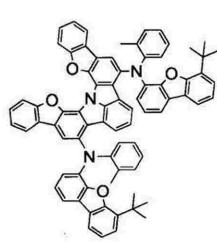
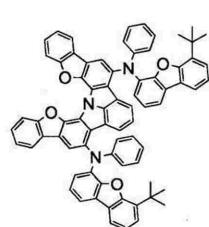
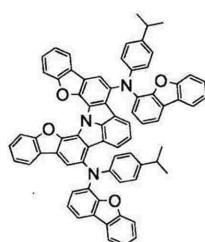
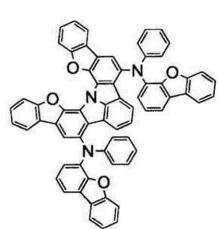
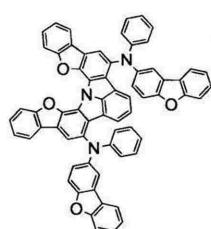
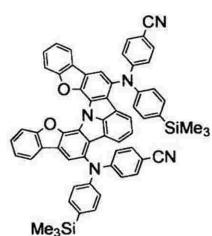
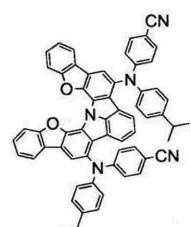
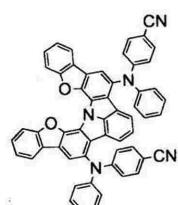
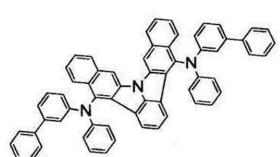
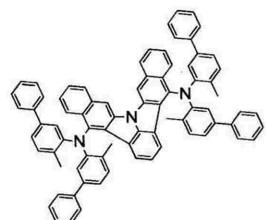
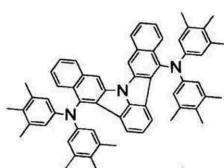
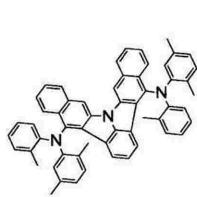


【0 3 7 1】

40

50

【化 1 5 7】



10

20

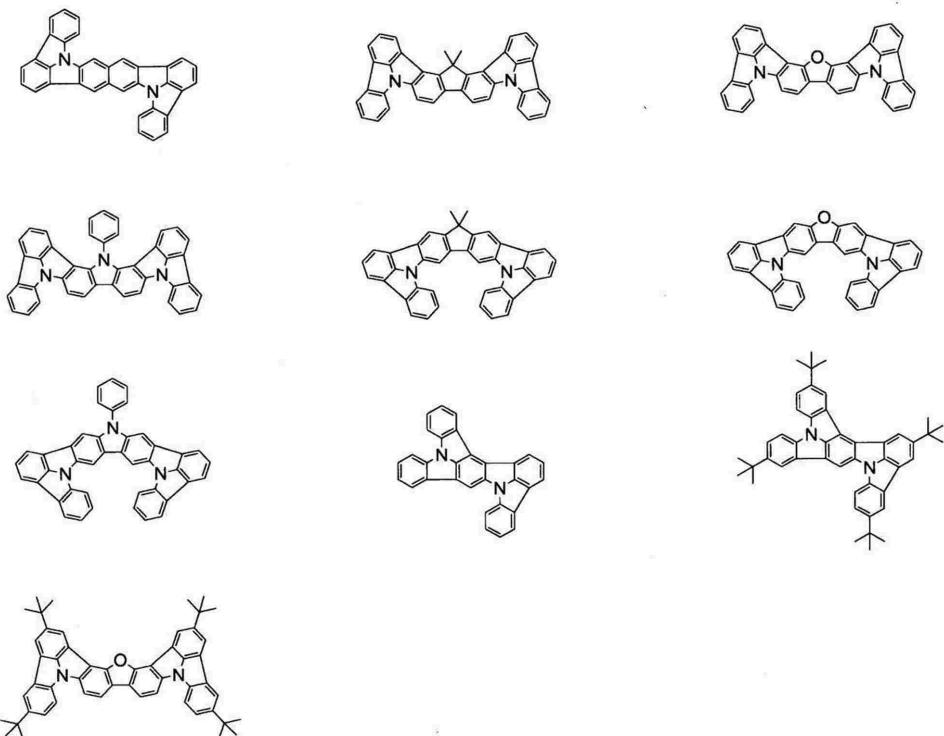
30

【0 3 7 2】

40

50

【化158】



10

20

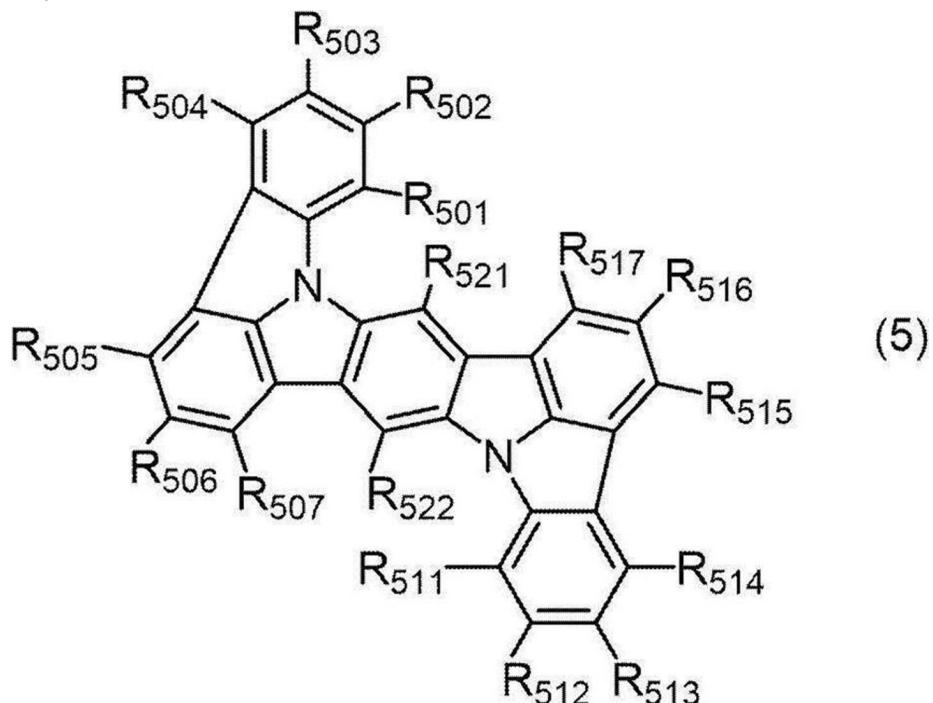
【0373】

(一般式(5)で表される化合物)

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

【0374】

【化159】



【0375】

(前記一般式(5)において、

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

50

が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{501} \sim R_{507}$ 及び $R_{511} \sim R_{517}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

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

- O - (R_{904}) で表される基、

- S - (R_{905}) で表される基、

- N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

R_{521} 及び R_{522} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

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

- O - (R_{904}) で表される基、

- S - (R_{905}) で表される基、

- N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)

【0376】

「 $R_{501} \sim R_{507}$ 及び $R_{511} \sim R_{517}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組」は、例えば、 R_{501} と R_{502} からなる組、 R_{502} と R_{503} からなる組、 R_{503} と R_{504} からなる組、 R_{505} と R_{506} からなる組、 R_{506} と R_{507} からなる組、 R_{501} と R_{502} と R_{503} からなる組等の組合せである。

【0377】

一実施形態において、 $R_{501} \sim R_{507}$ 及び $R_{511} \sim R_{517}$ の少なくとも 1 つ、好ましくは 2 つが - N (R_{906}) (R_{907}) で表される基である。

【0378】

一実施形態においては、 $R_{501} \sim R_{507}$ 及び $R_{511} \sim R_{517}$ は、それぞれ独立に、水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

【0379】

一実施形態においては、前記一般式 (5) で表される化合物は、下記一般式 (52) で

10

20

30

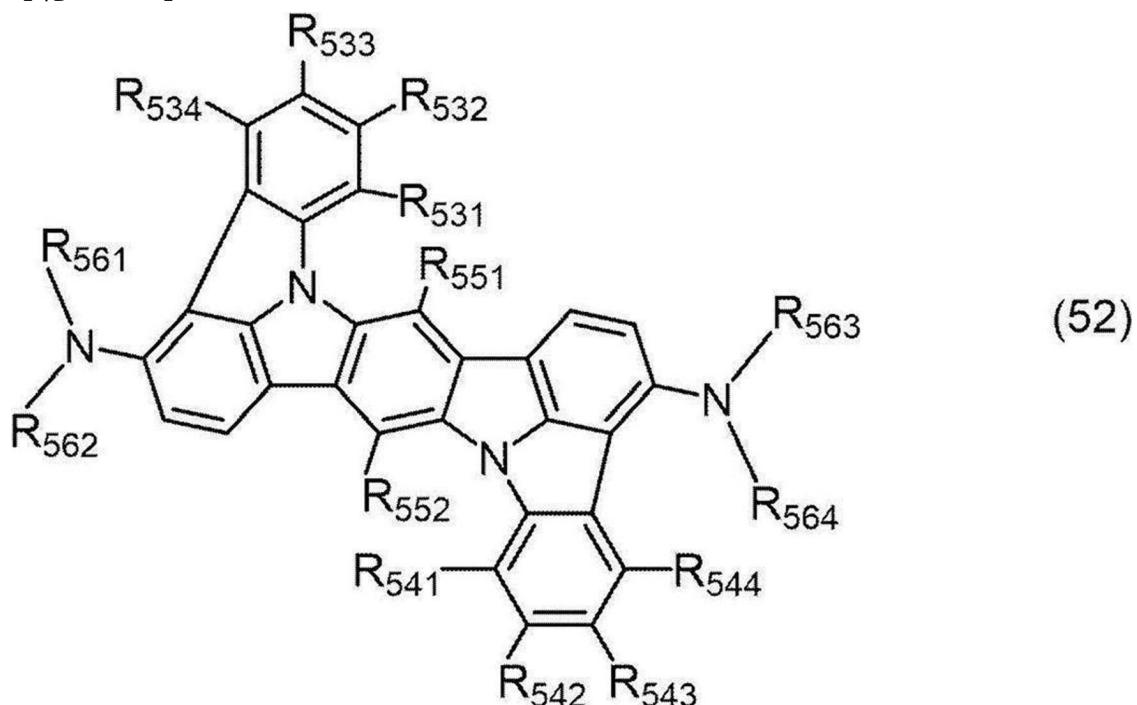
40

50

表される化合物である。

【0380】

【化160】



【0381】

(前記一般式(52)において、

R531～R534及びR541～R544のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR531～R534、R541～R544
4、並びにR551及びR552は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R561～R564は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

【0382】

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

【0383】

10

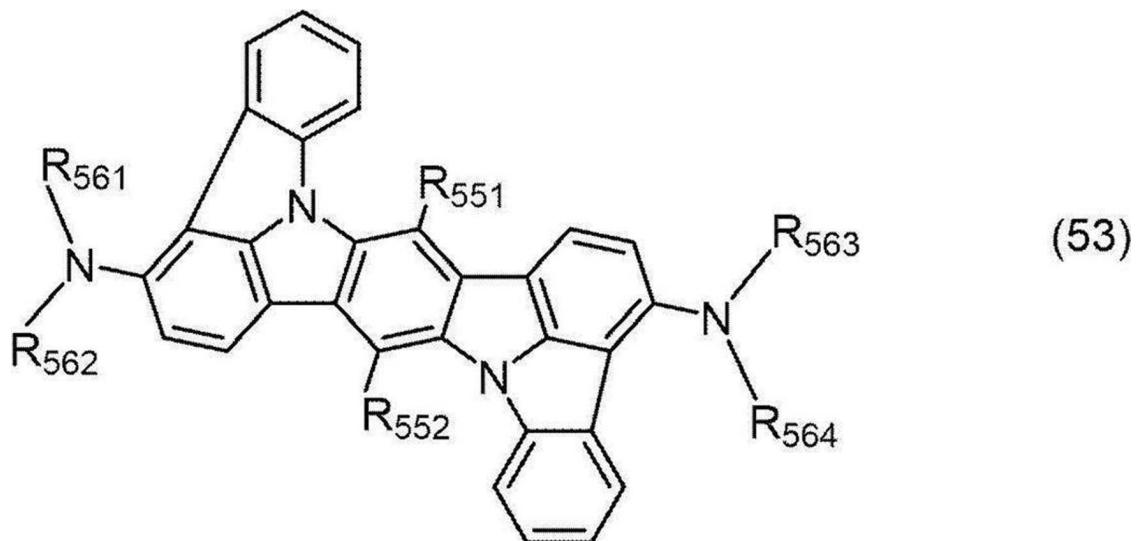
20

30

40

50

【化161】



【0384】

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

20

【0385】

一実施形態においては、前記一般式(52)及び一般式(53)におけるR₅₆₁～R₅₆₄は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基(好ましくはフェニル基)である。

【0386】

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

30

【0387】

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

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

【0388】

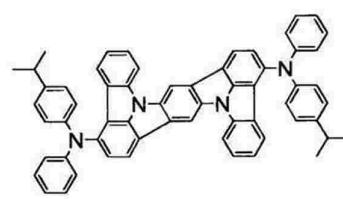
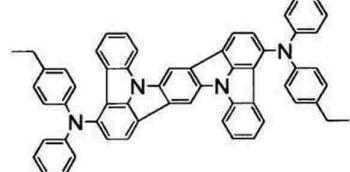
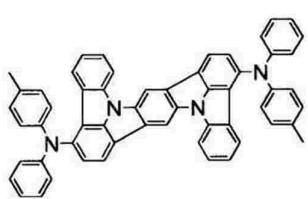
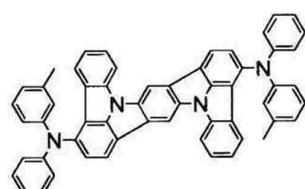
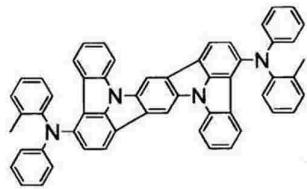
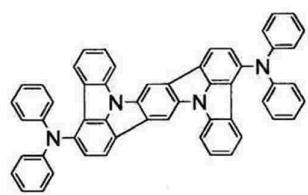
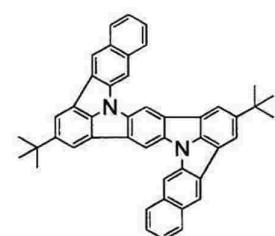
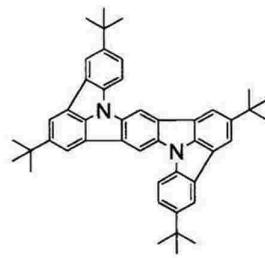
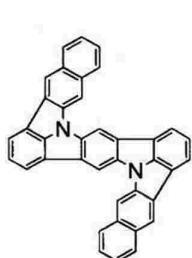
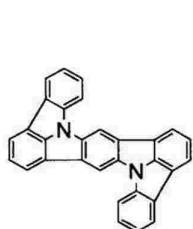
前記一般式(5)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

【0389】

40

50

【化 1 6 2】



10

20

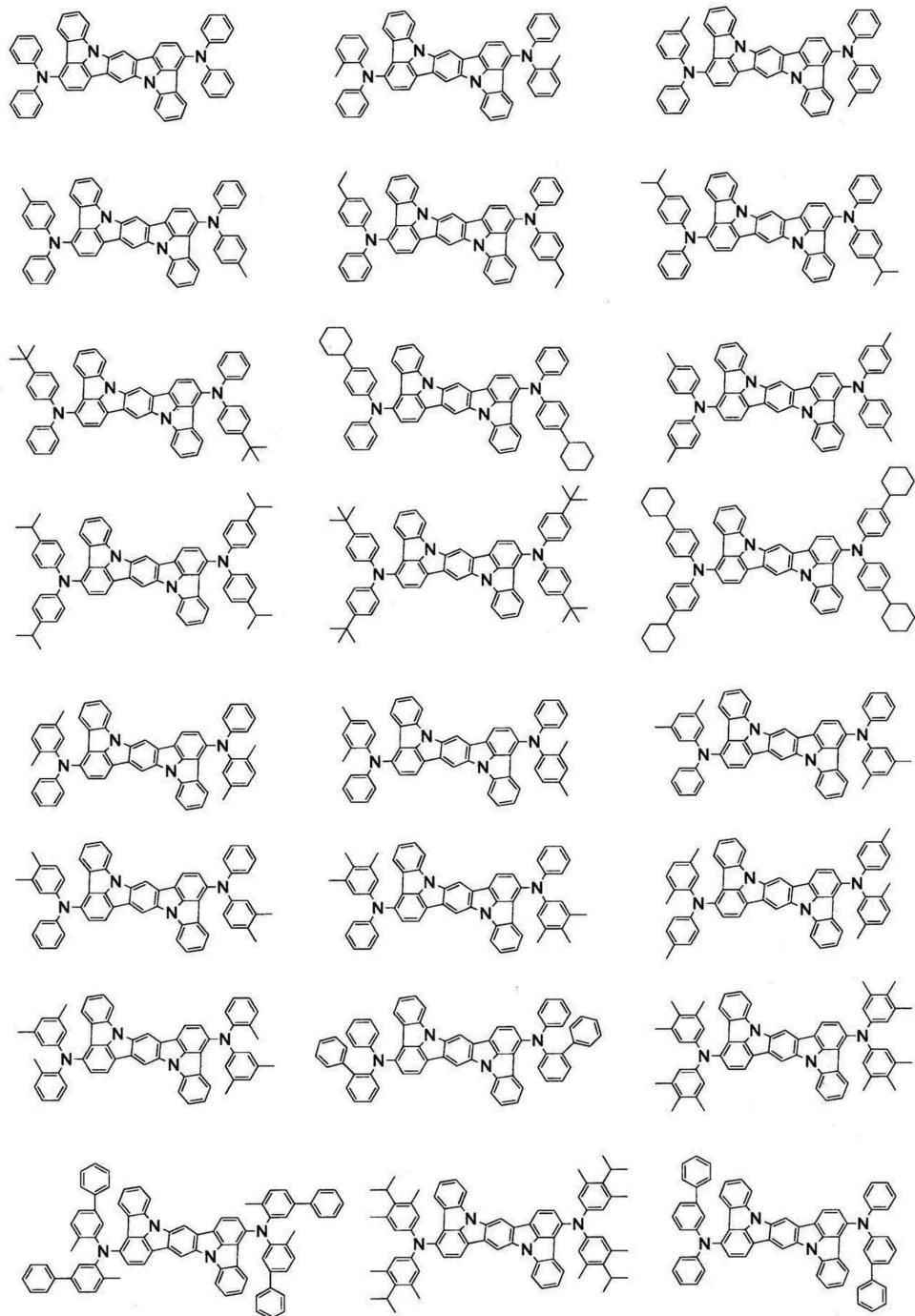
【0 3 9 0】

30

40

50

【化 1 6 3】

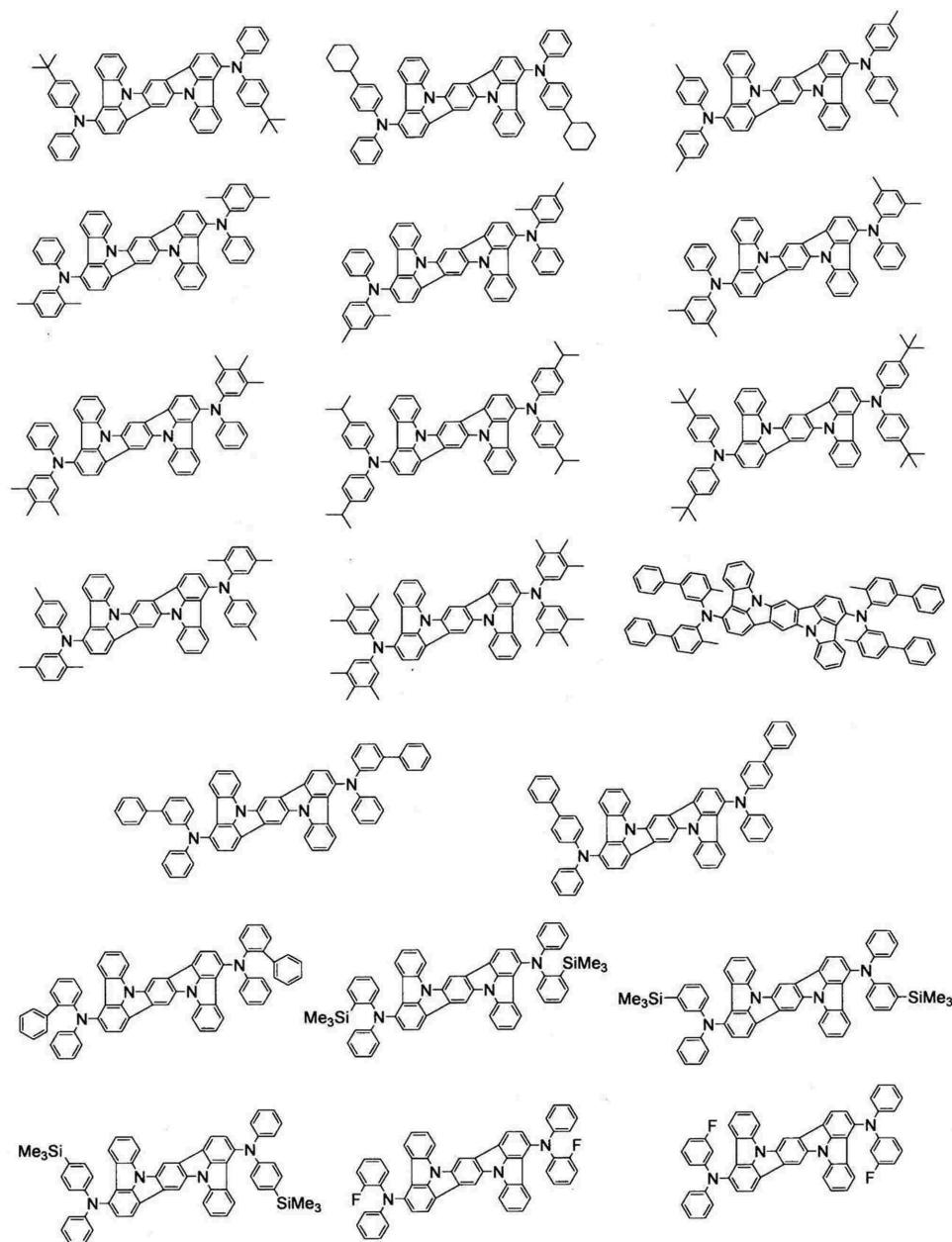


【0 3 9 1】

40

50

【化 1 6 4】

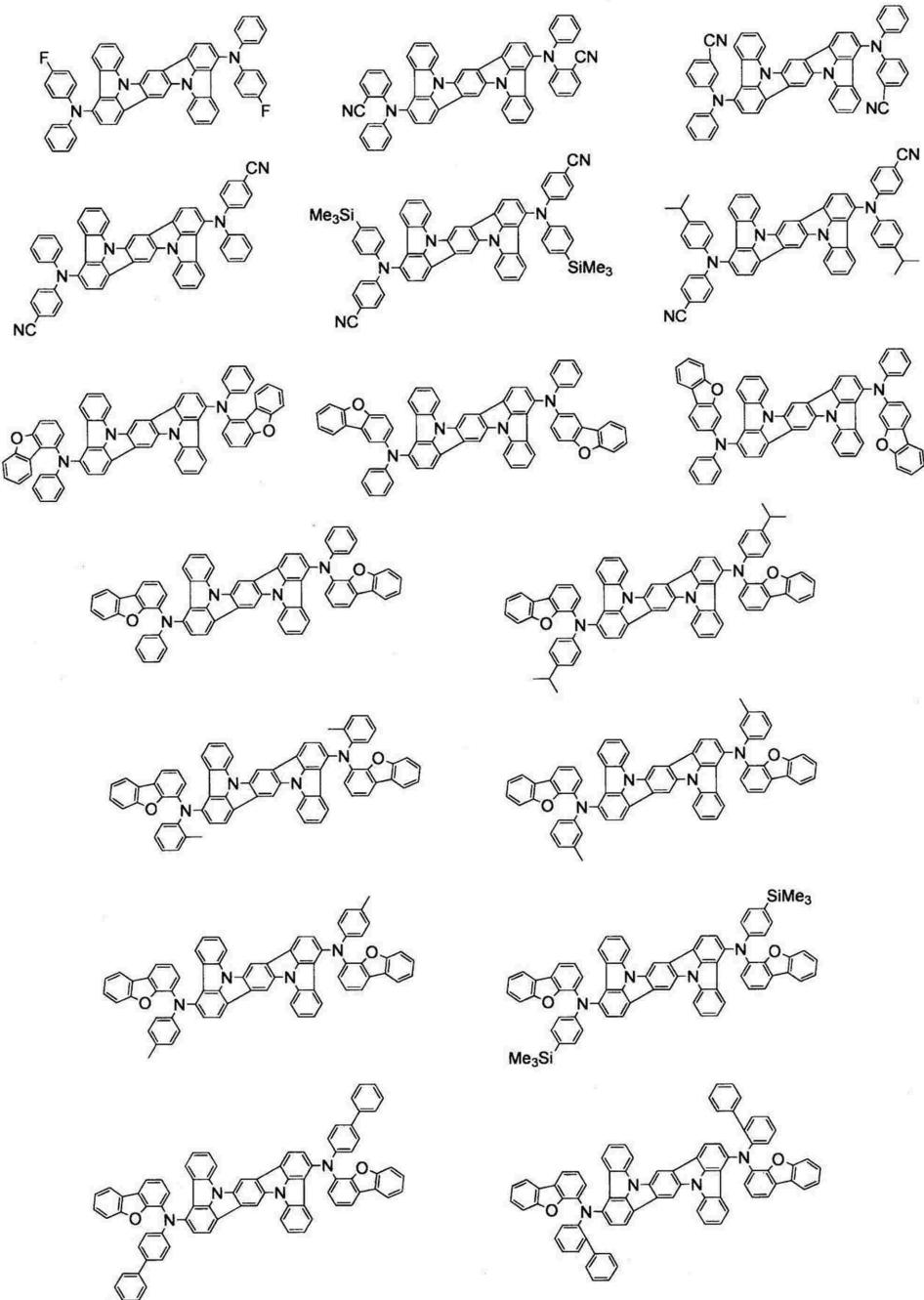


【0 3 9 2】

40

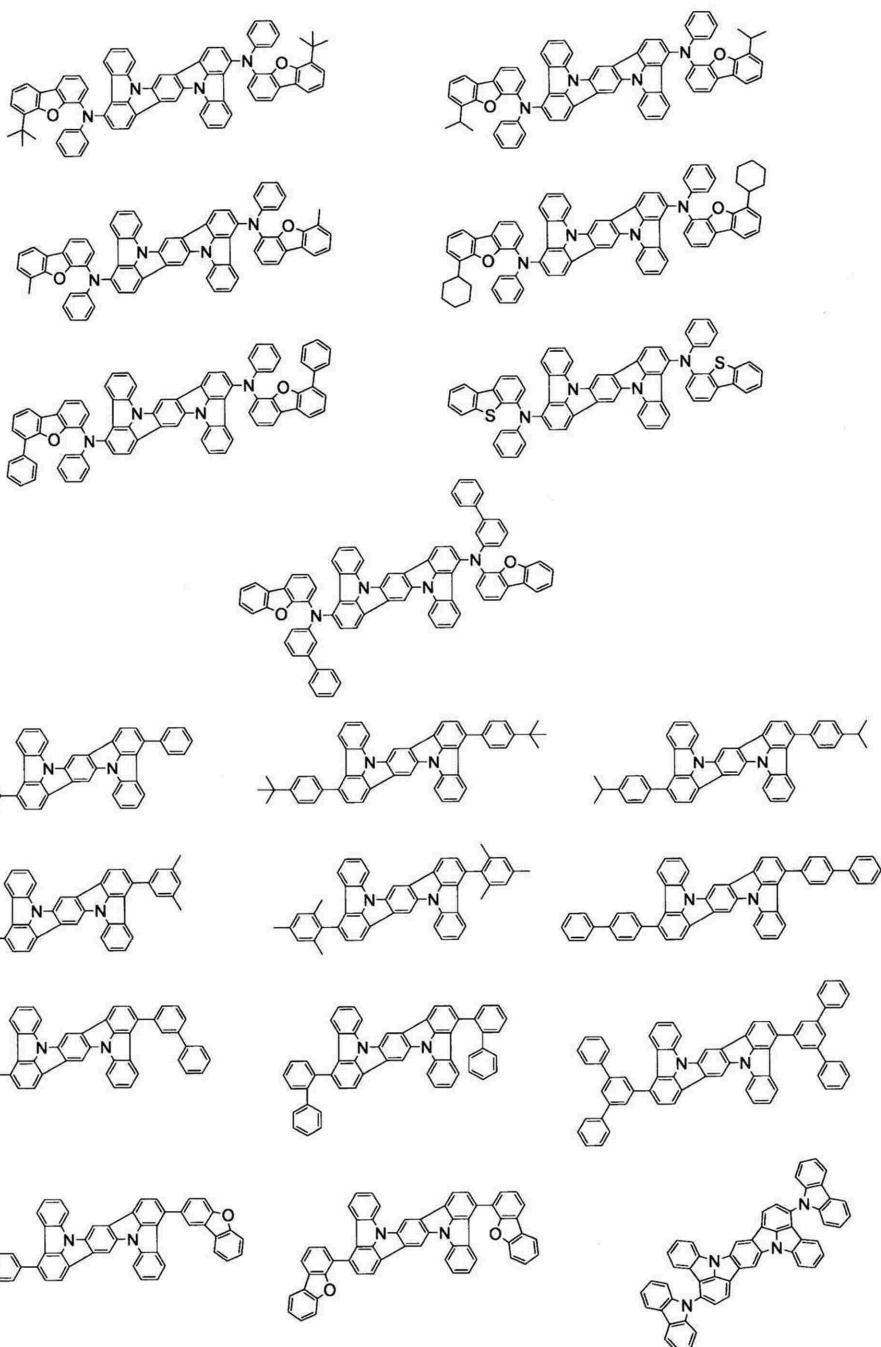
50

【化 1 6 5】



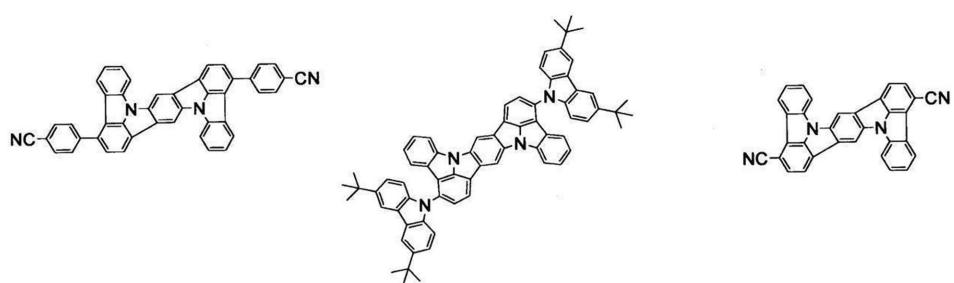
【0 3 9 3】

【化166】



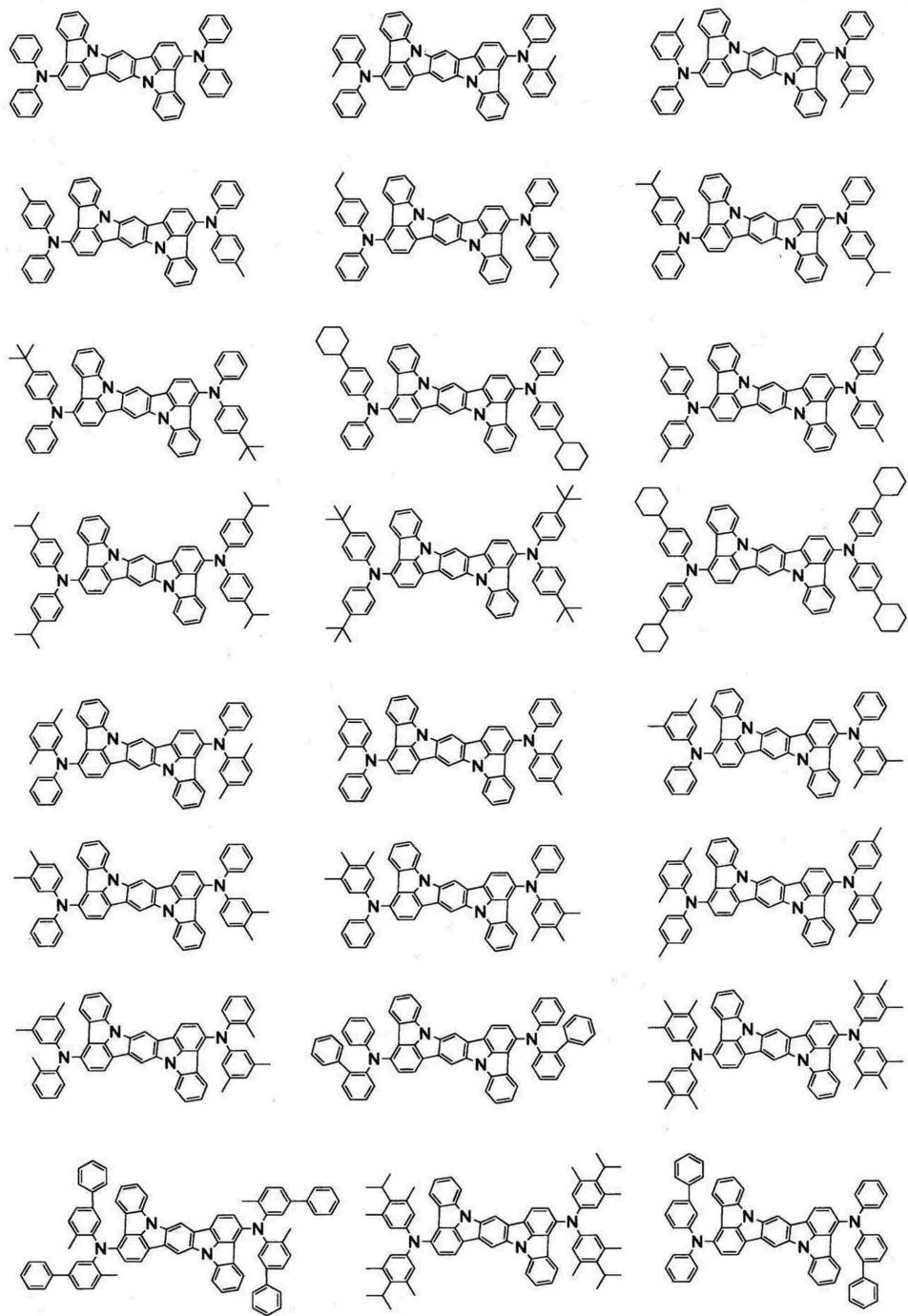
【0394】

【化167】



【0395】

【化 1 6 8 】

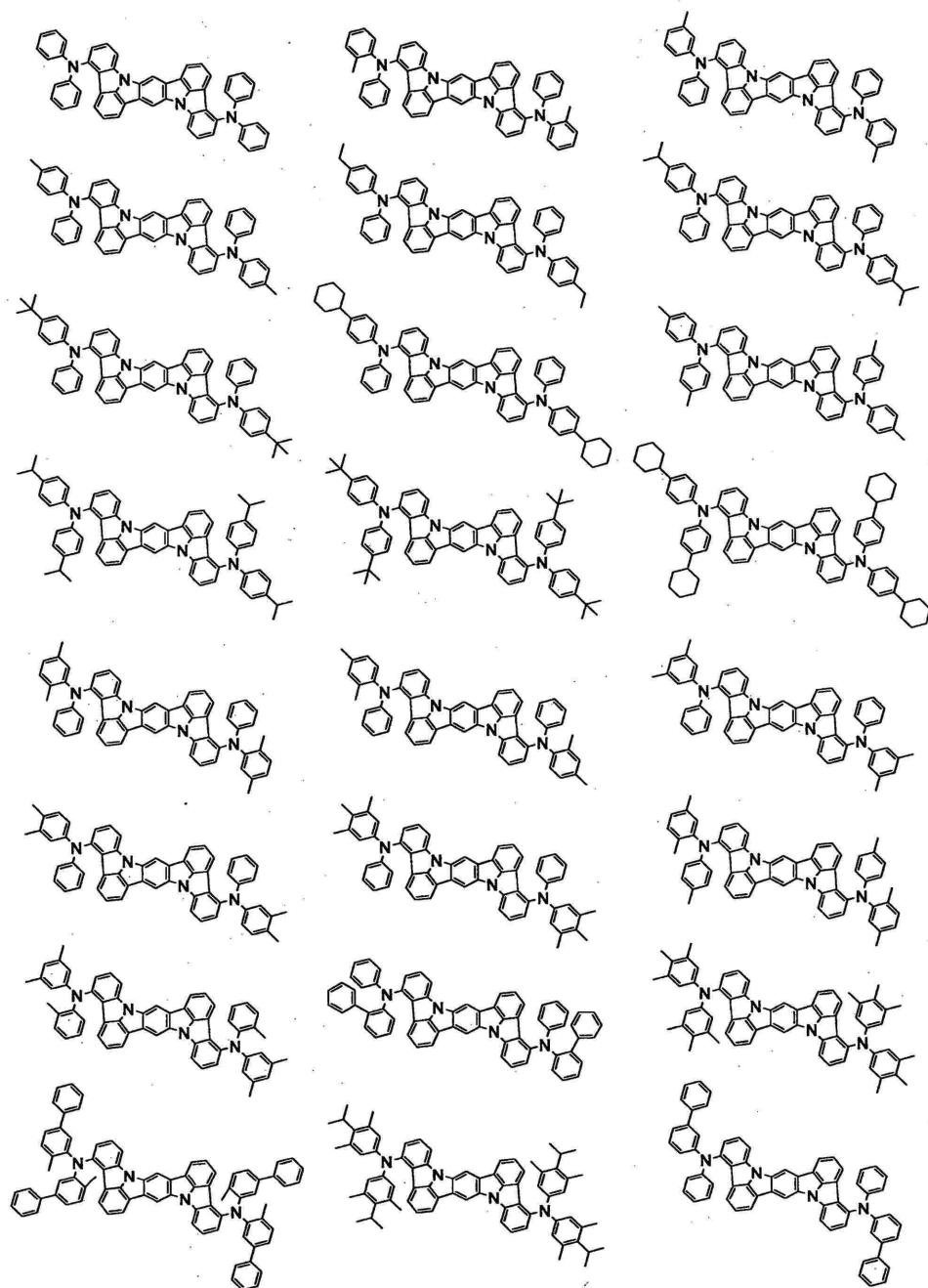


【 0 3 9 6 】

40

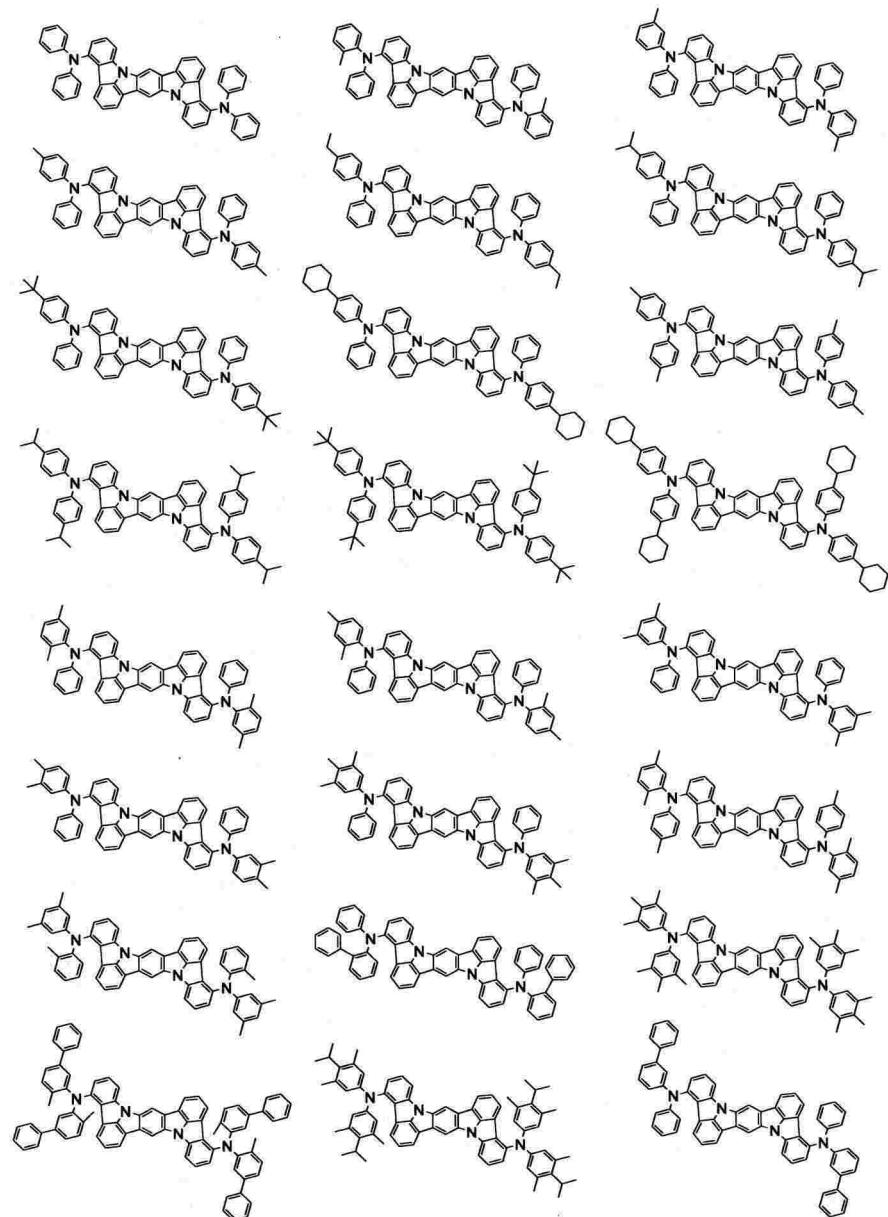
50

【化 169】



【0397】

【化 170】

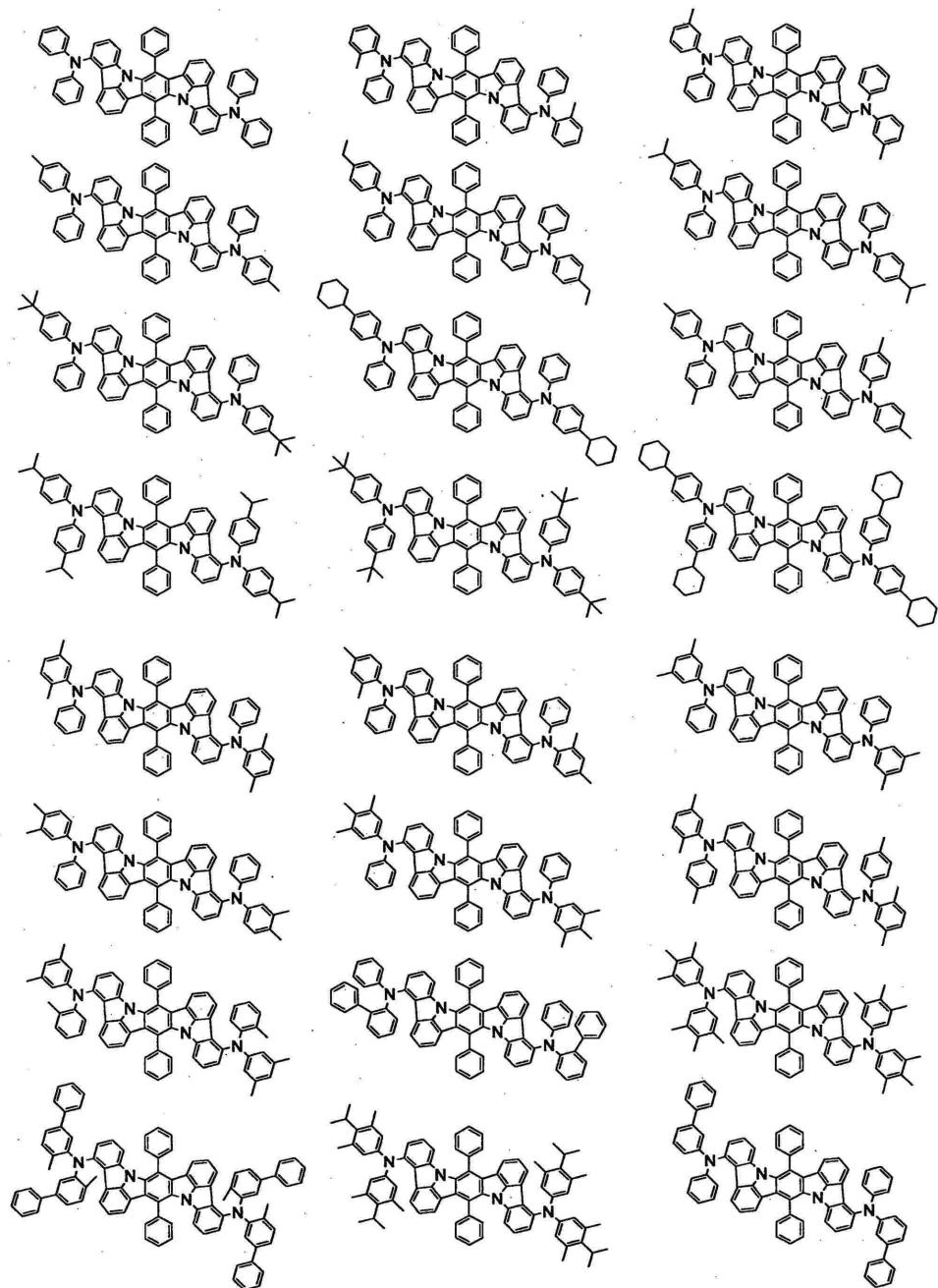


【0398】

40

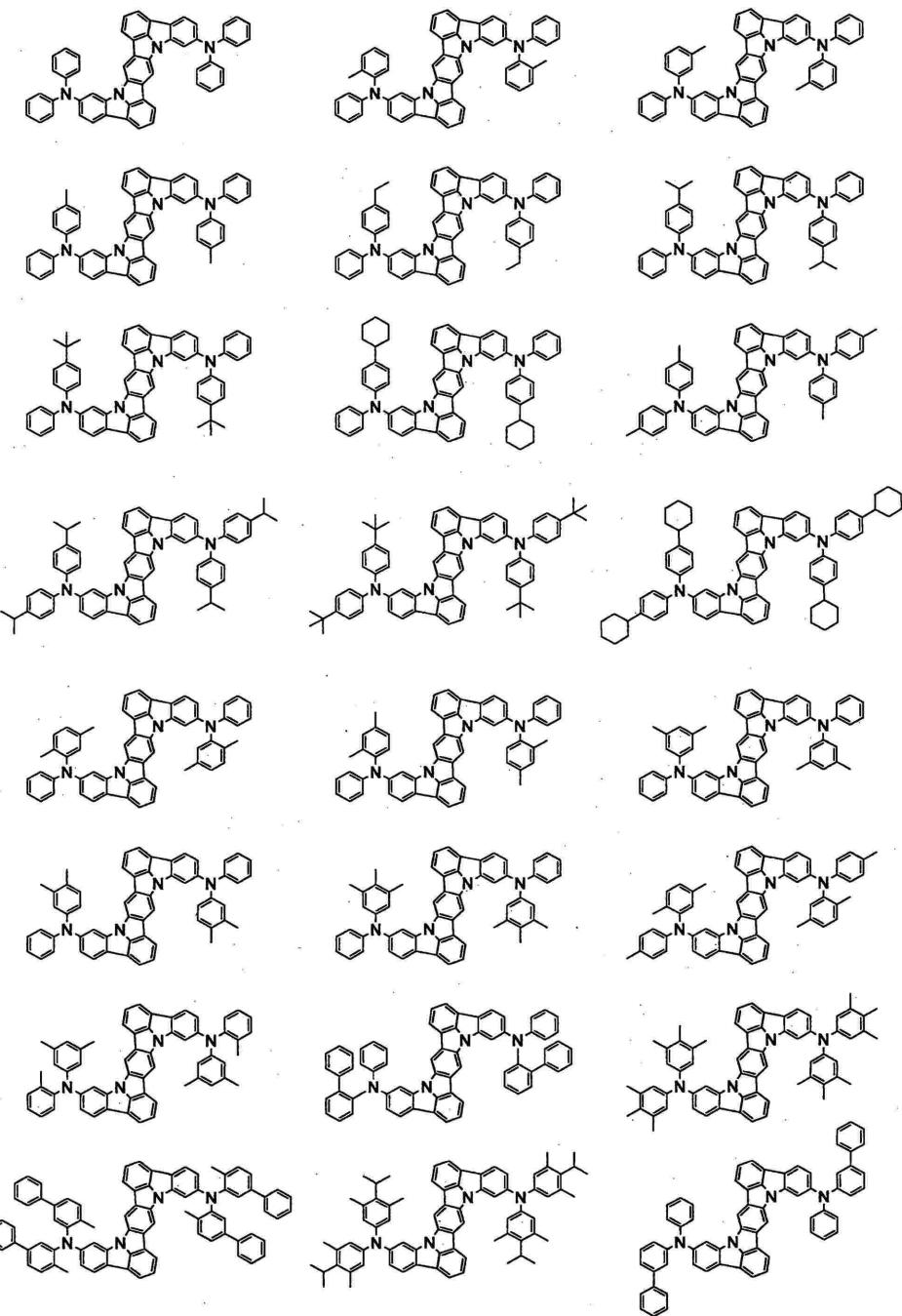
50

【化 171】



【0399】

【化 1 7 2 】

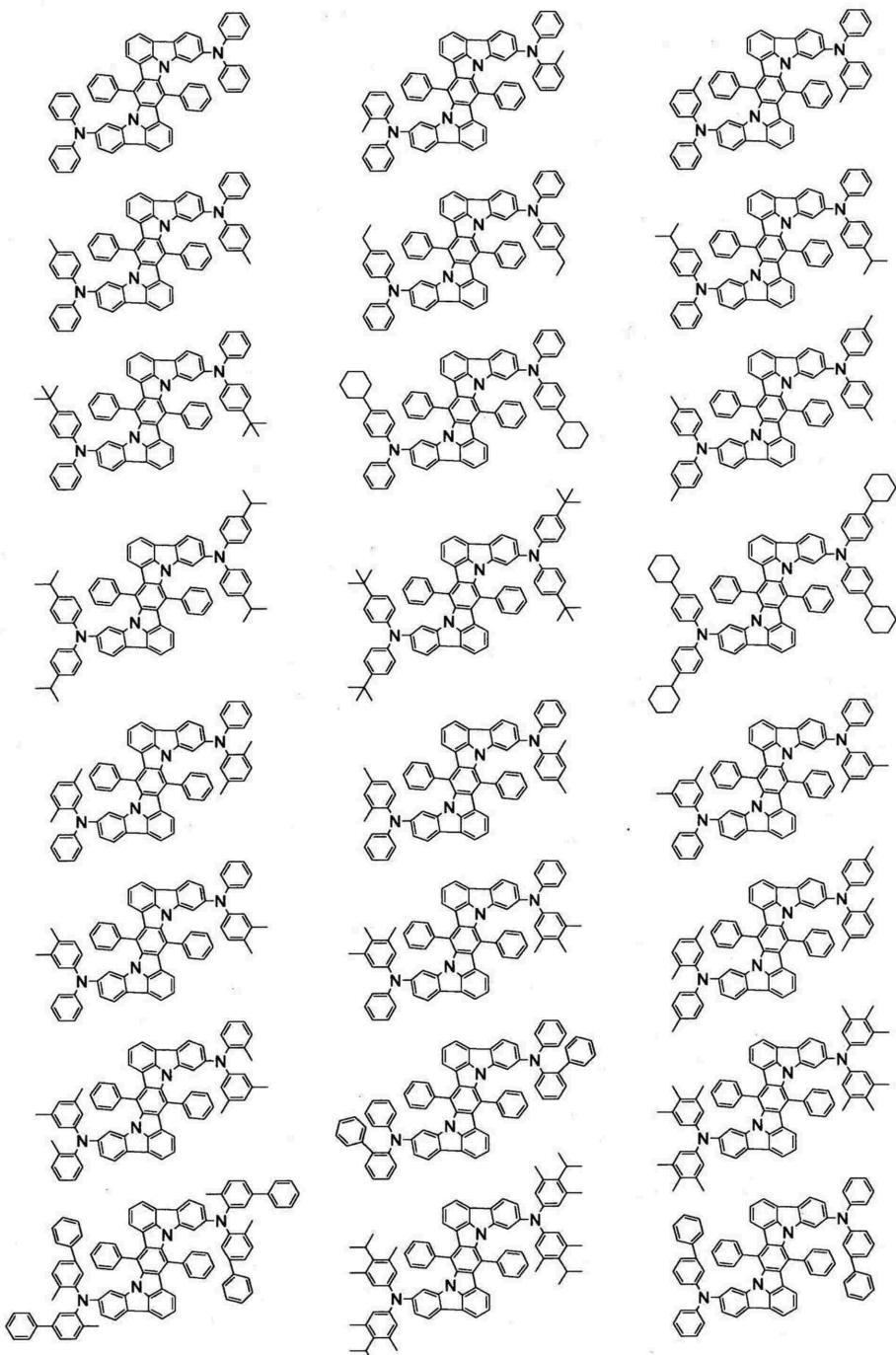


【 0 4 0 0 】

40

50

【化 173】

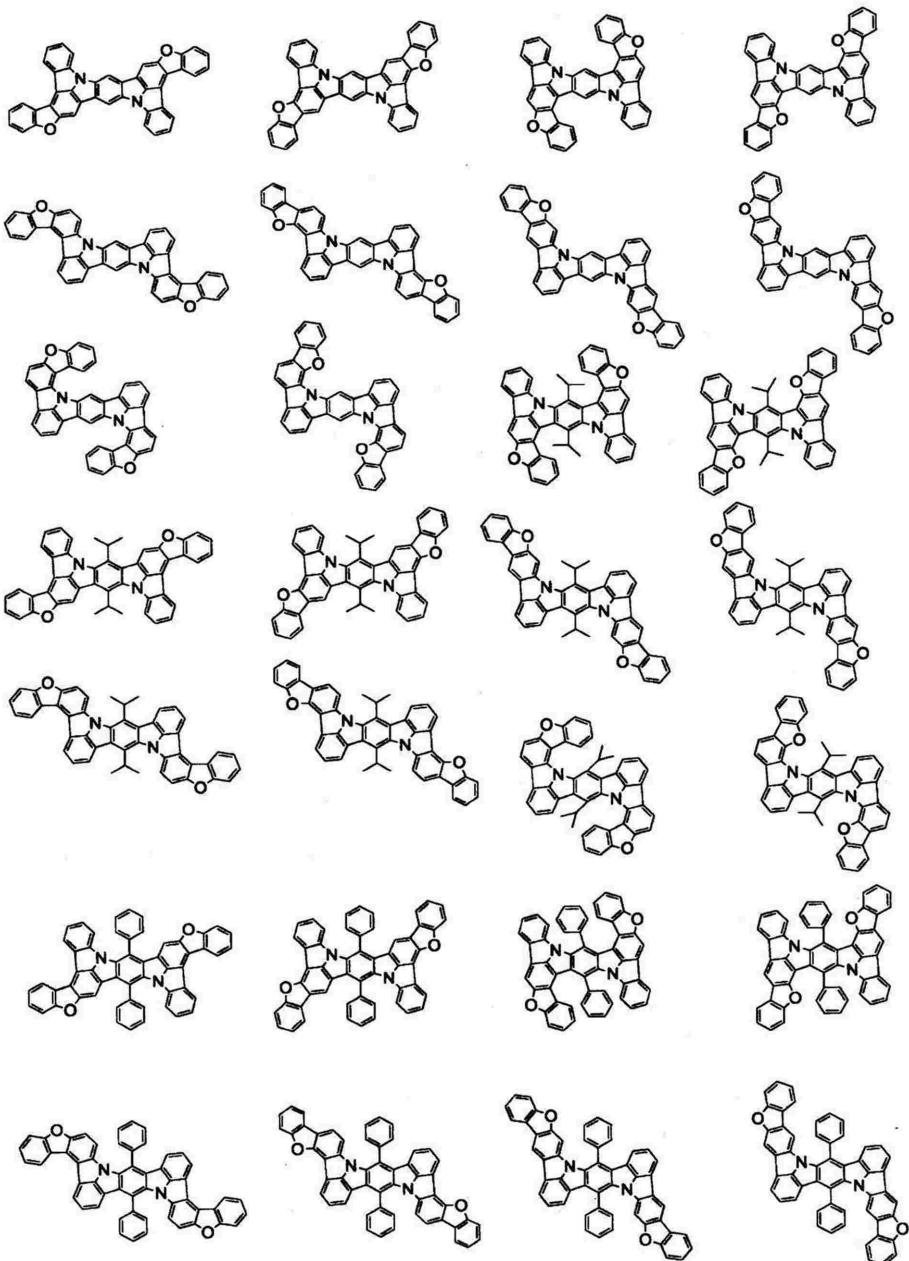


【0401】

40

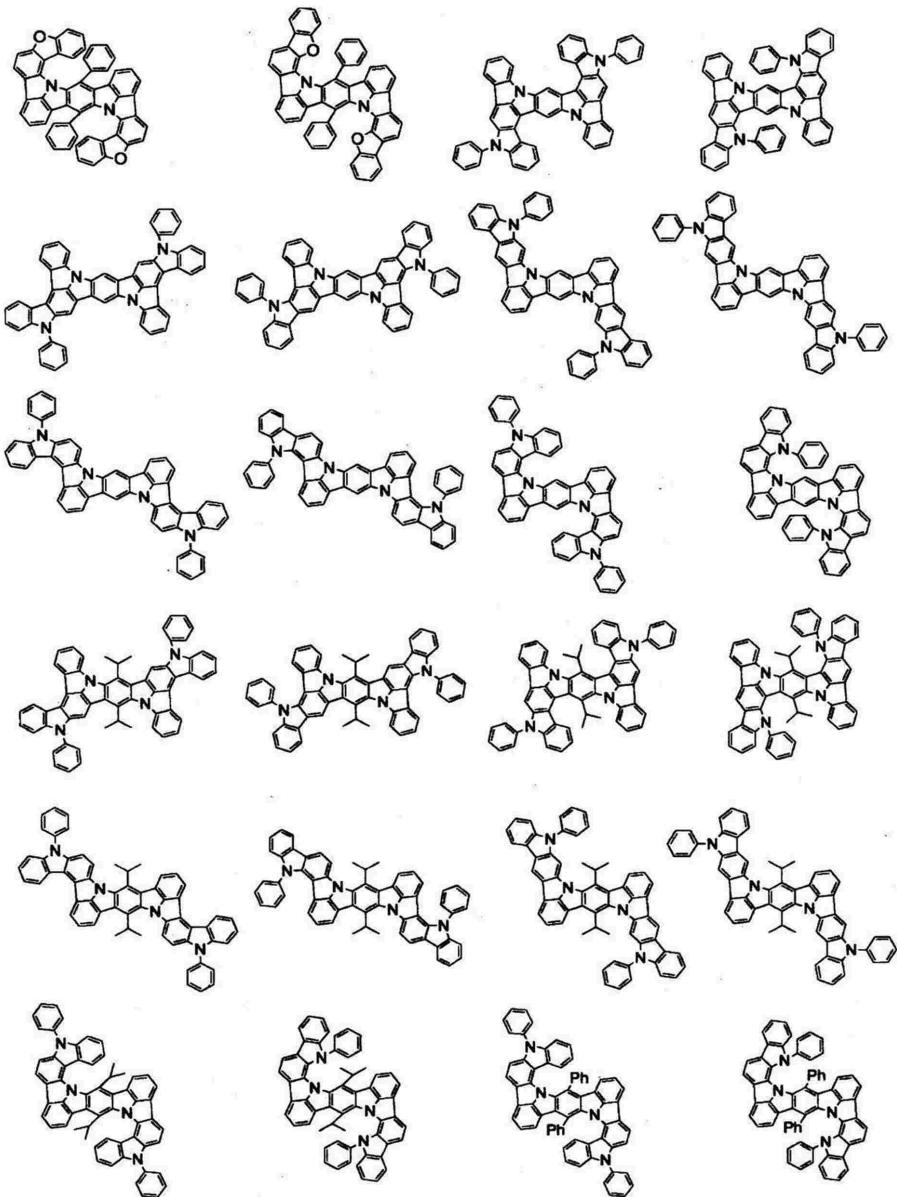
50

【化 174】



【0402】

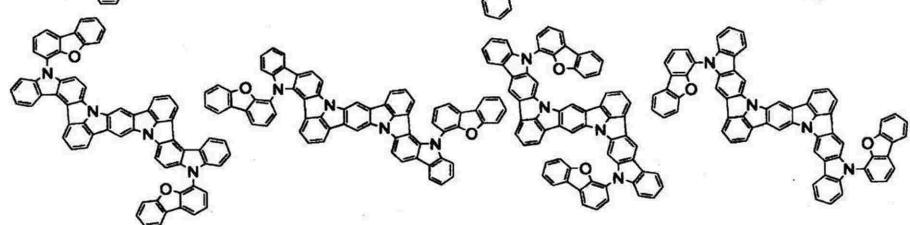
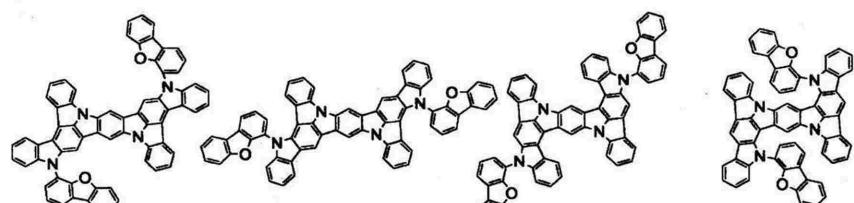
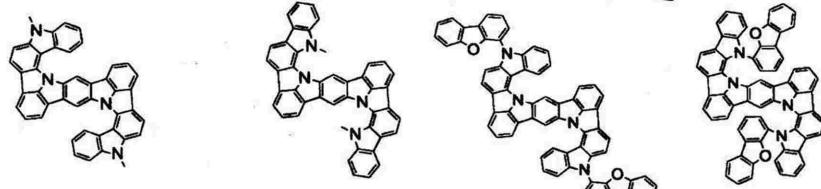
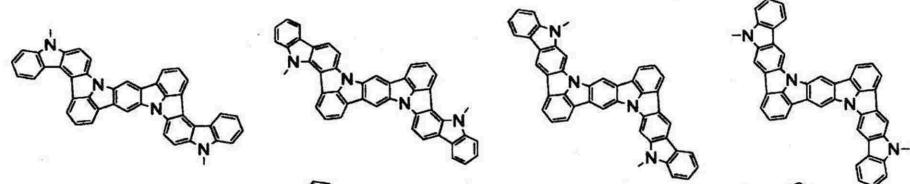
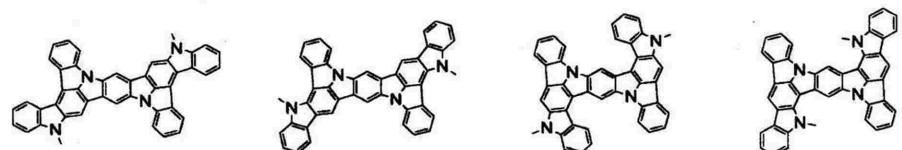
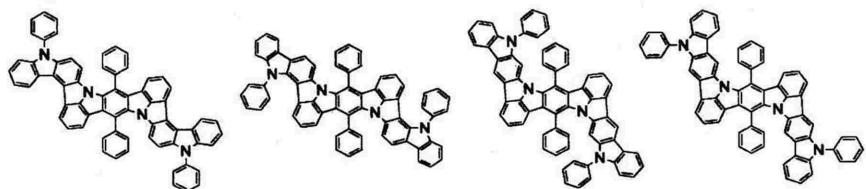
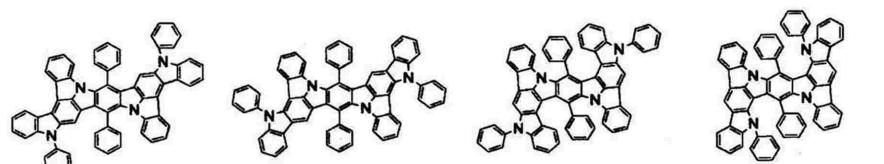
【化175】



(式中、Phはフェニル基である)

【0403】

【化 176】



【0404】

10

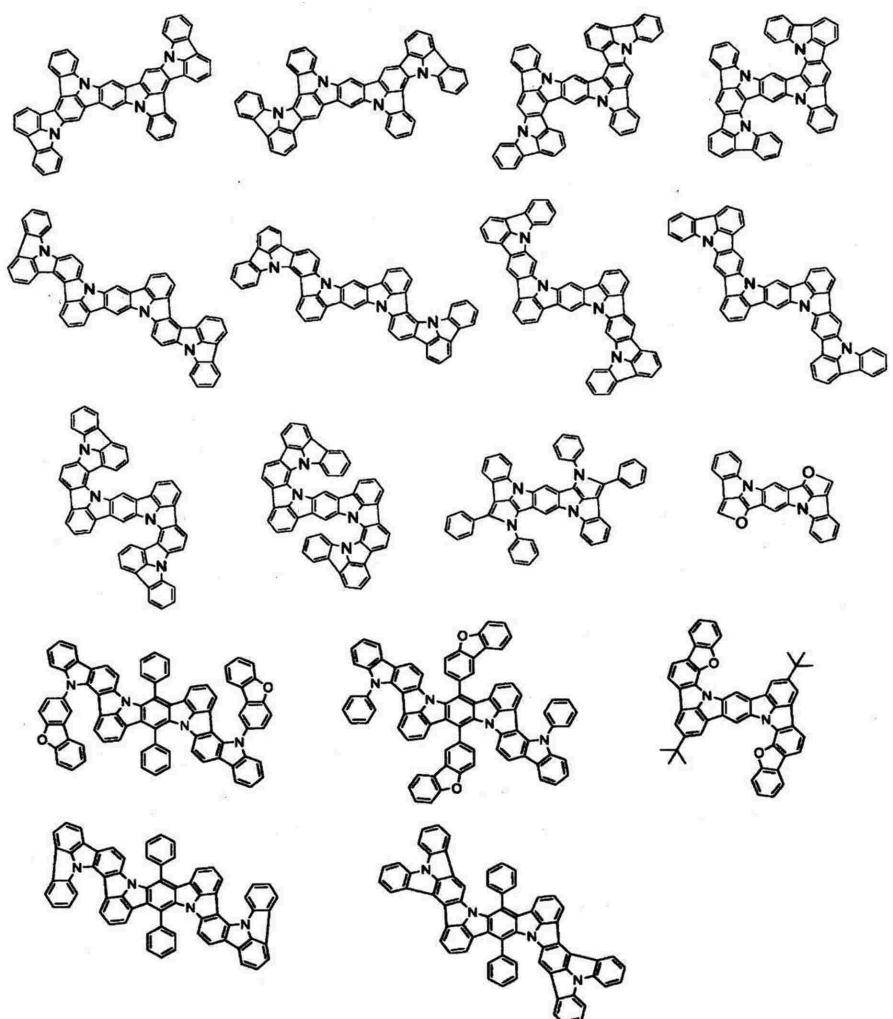
20

30

40

50

【化 177】



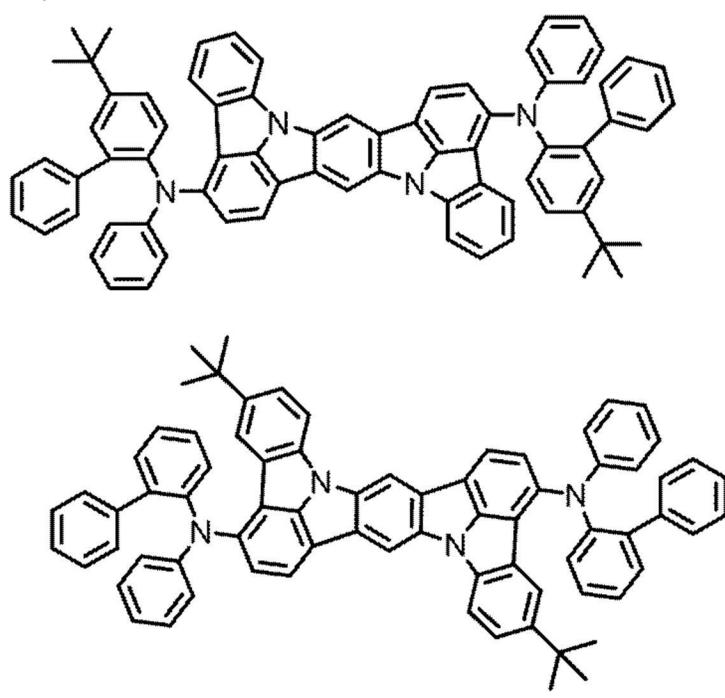
10

20

30

【0405】

【化 178】



40

50

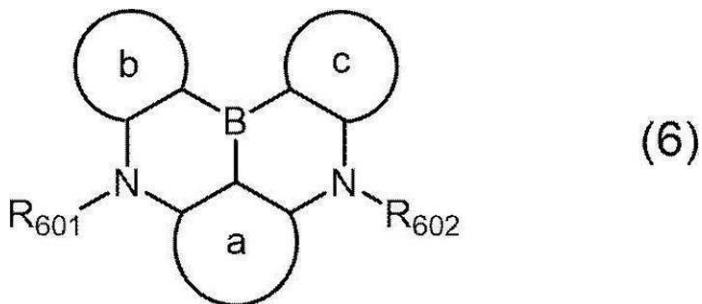
【0406】

(一般式(6)で表される化合物)

一般式(6)で表される化合物について説明する。

【0407】

【化179】



【0408】

(前記一般式(6)において、

a環、b環及びc環は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環であり、

R₆₀₁及びR₆₀₂は、それぞれ独立に、前記a環、b環又はc環と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記置換もしくは無置換の複素環を形成しないR₆₀₁及びR₆₀₂は、それぞれ独立に

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

【0409】

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

【0410】

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

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

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

【0411】

「置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環」の具体例としては、具体例群G1に記載の「アリール基」に水素原子を導入した化合物等が挙げられる。

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

a環の「複素環」は、前記一般式(6)中央の縮合2環構造上の炭素原子3つを環形成原子として含む。b環及びc環の「複素環」は、前記一般式(6)中央の縮合2環構造上の炭素原子2つを環形成原子として含む。「置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環」の具体例としては、具体例群G2に記載の「複素環基」に水素原子を導入した化合物等が挙げられる。

10

20

30

40

50

【0412】

R₆₀₁及びR₆₀₂は、それぞれ独立に、a環、b環又はc環と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成してもよい。この場合における複素環は、前記一般式(6)中央の縮合2環構造上の窒素原子を含む。この場合における複素環は、窒素原子以外のヘテロ原子を含んでいてもよい。R₆₀₁及びR₆₀₂がa環、b環又はc環と結合するとは、具体的には、a環、b環又はc環を構成する原子とR₆₀₁及びR₆₀₂を構成する原子が結合することを意味する。例えば、R₆₀₁がa環と結合して、R₆₀₁を含む環とa環が縮合した2環縮合(又は3環縮合以上)の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群G2のうち、窒素を含む2環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。

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

【0413】

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

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

【0414】

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

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

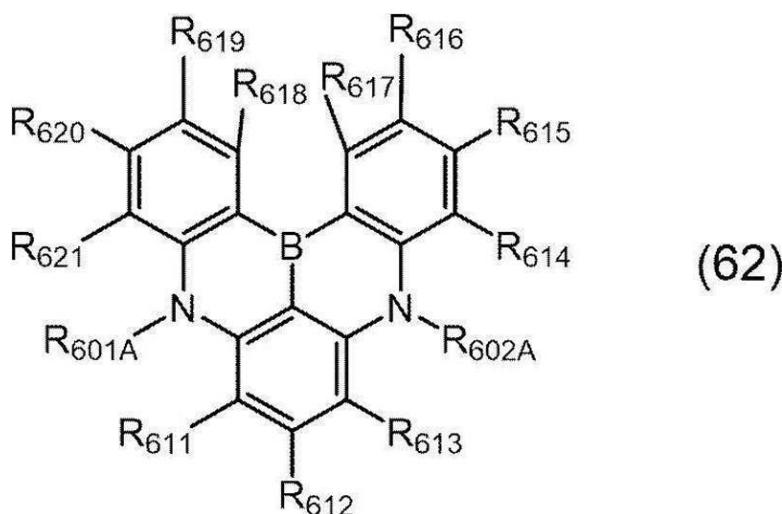
好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基である。

【0415】

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

【0416】

【化180】



【0417】

(前記一般式(62)において、

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

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

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

10

20

30

40

50

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基であり、
 $R_{611} \sim R_{621}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
 互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しない $R_{611} \sim R_{621}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、
 - Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903}) で表される基、
 - O - (R_{904}) で表される基、
 - S - (R_{905}) で表される基、
 - N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

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

【 0 4 1 8 】

前記一般式 (62) の R_{601A} 及び R_{602A} は、それぞれ、前記一般式 (6) の R_{601} 及び R_{602} に対応する基である。

例えば、 R_{601A} と R_{611} が結合して、これらを含む環と a 環に対応するベンゼン環が縮合した 2 環縮合 (又は 3 環縮合以上) の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群 G2 のうち、窒素を含む 2 環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。 R_{601A} と R_{621} が結合する場合、 R_{602A} と R_{613} が結合する場合、及び R_{602A} と R_{614} が結合する場合も上記と同じである。

【 0 4 1 9 】

$R_{611} \sim R_{621}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、又は
 互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成してもよい。

例えば、 R_{611} と R_{612} が結合して、これらが結合する 6 員環に対して、ベンゼン環、インドール環、ピロール環、ベンゾフラン環又はベンゾチオフェン環等が縮合した構造を形成してもよく、形成された縮合環は、ナフタレン環、カルバゾール環、インドール環、ジベンゾフラン環又はジベンゾチオフェン環となる。

【 0 4 2 0 】

一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{611} \sim R_{621}$ は、それぞれ独立に、
 水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。

【 0 4 2 1 】

一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{611} \sim R_{621}$ は、それぞれ独立に、

10

20

30

40

50

水素原子、

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

【0422】

一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{611} \sim R_{621}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、又は
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基である。

【0423】

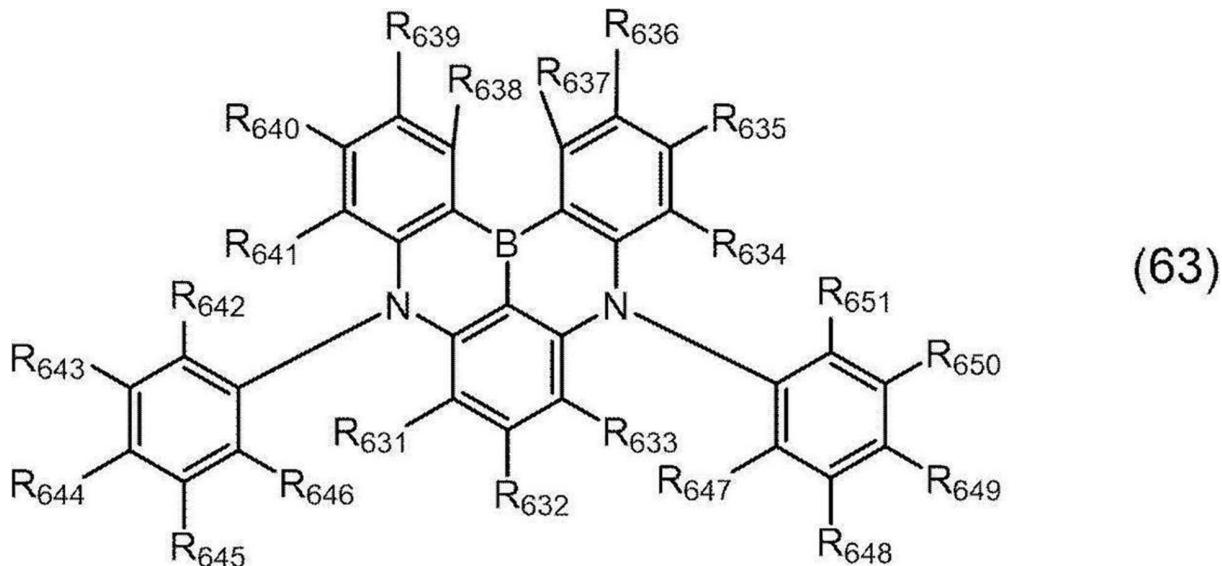
一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{611} \sim R_{621}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、又は
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基であり、
 $R_{611} \sim R_{621}$ のうち少なくとも 1 つは、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のア
ルキル基である。

【0424】

一実施形態において、前記一般式 (62) で表される化合物は、下記一般式 (63) で
表される化合物である。

【0425】

【化 181】



【0426】

(前記一般式 (63) において、

R_{631} は、 R_{646} と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは
置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

R_{633} は、 R_{647} と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは
置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

R_{634} は、 R_{651} と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは
置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

R_{641} は、 R_{642} と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは
置換もしくは無置換の複素環を形成せず、

$R_{631} \sim R_{651}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を
形成しない $R_{631} \sim R_{651}$ は、それぞれ独立に、

40

50

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、

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

- O - (R 9 0 4) で表される基、

- S - (R 9 0 5) で表される基、

- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。)

【 0 4 2 7 】

R 6 3 1 は、 R 6 4 6 と結合して、 置換もしくは無置換の複素環を形成してもよい。 例えば、 R 6 3 1 と R 6 4 6 が結合して、 R 6 4 6 が結合するベンゼン環と、 N を含む環と、 a 環に対応するベンゼン環とが縮合した 3 環縮合以上の含窒素複素環を形成してもよい。 当該含窒素複素環の具体例としては、 具体例群 G 2 のうち、 窒素を含む 3 環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。 R 6 3 3 と R 6 4 7 が結合する場合、 R 6 3 4 と R 6 5 1 が結合する場合、 及び R 6 4 1 と R 6 4 2 が結合する場合も上記と同じである。

【 0 4 2 8 】

一実施形態において、 環形成に寄与しない R 6 3 1 ~ R 6 5 1 は、 それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。

【 0 4 2 9 】

一実施形態において、 環形成に寄与しない R 6 3 1 ~ R 6 5 1 は、 それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。

【 0 4 3 0 】

一実施形態において、 環形成に寄与しない R 6 3 1 ~ R 6 5 1 は、 それぞれ独立に、

水素原子、 又は

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基である。

【 0 4 3 1 】

一実施形態において、 環形成に寄与しない R 6 3 1 ~ R 6 5 1 は、 それぞれ独立に、

水素原子、 又は

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基であり、

R 6 3 1 ~ R 6 5 1 のうち少なくとも 1 つは置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基である。

【 0 4 3 2 】

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

【 0 4 3 3 】

10

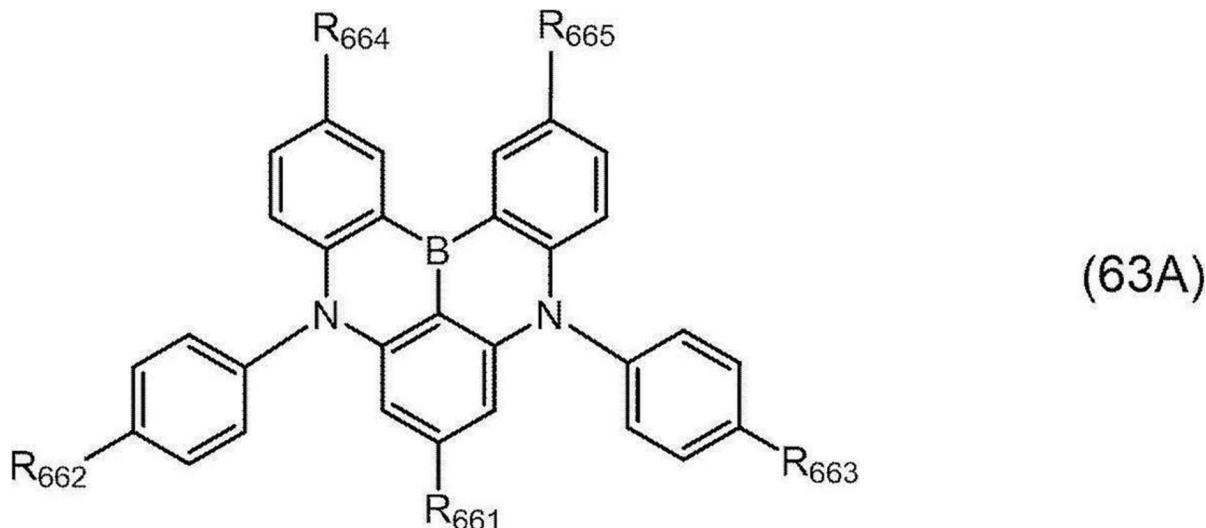
20

30

40

50

【化182】



【0434】

(前記一般式(63A)において、

R661は、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、

R662～R665は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。)

【0435】

—実施形態において、R661～R665は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

【0436】

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

【0437】

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

【0438】

10

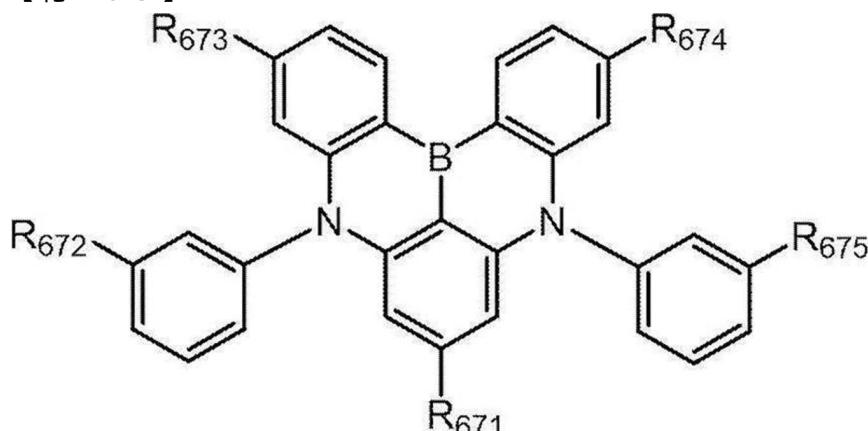
20

30

40

50

【化183】



(63B)

10

【0439】

(前記一般式(63B)において、

R671及びR672は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-N(R906)(R907)で表される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、

R673～R675は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-N(R906)(R907)で表される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。)

20

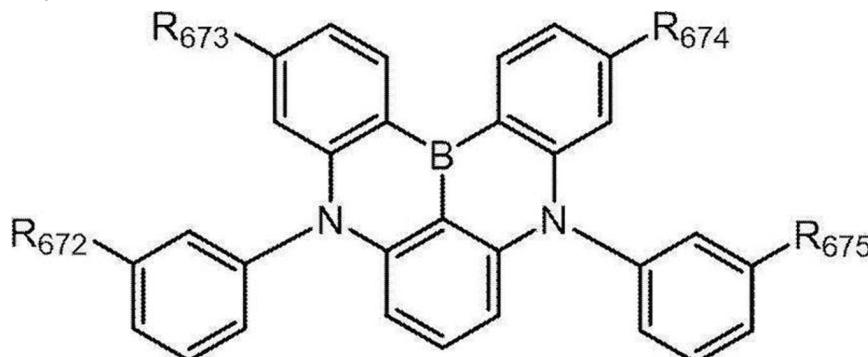
30

【0440】

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

【0441】

【化184】



(63B')

40

【0442】

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

【0443】

一実施形態において、R671～R675のうち少なくとも1つは、

50

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

【0444】

一実施形態において、

R₆₇₂ は、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、

R₆₇₁ 及び R₆₇₃ ~ R₆₇₅ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。

10

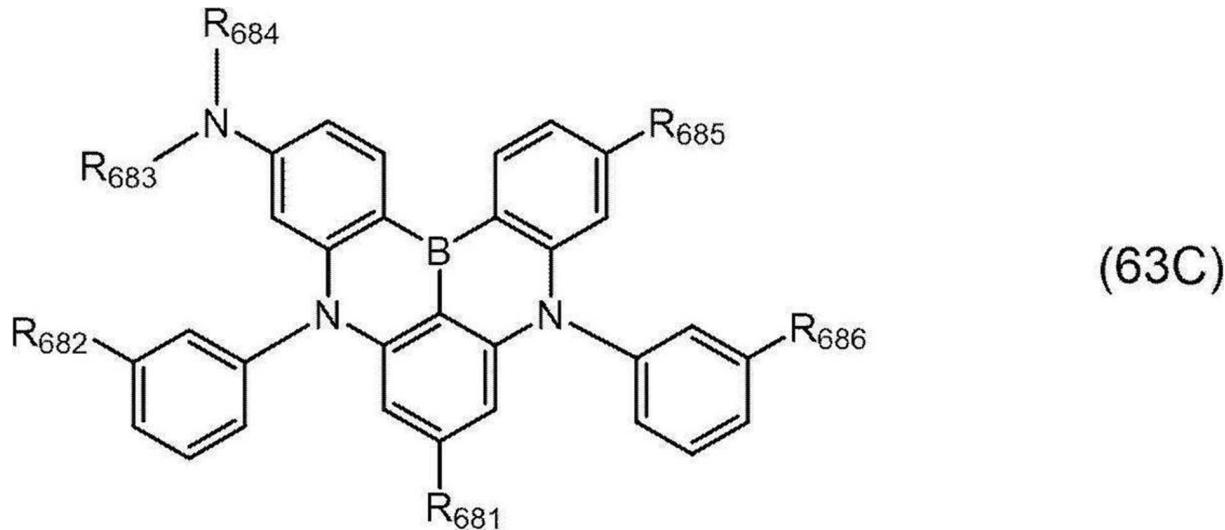
【0445】

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

20

【0446】

【化185】



30

【0447】

(前記一般式 (63C) において、

R₆₈₁ 及び R₆₈₂ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。

40

R₆₈₃ ~ R₆₈₆ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

50

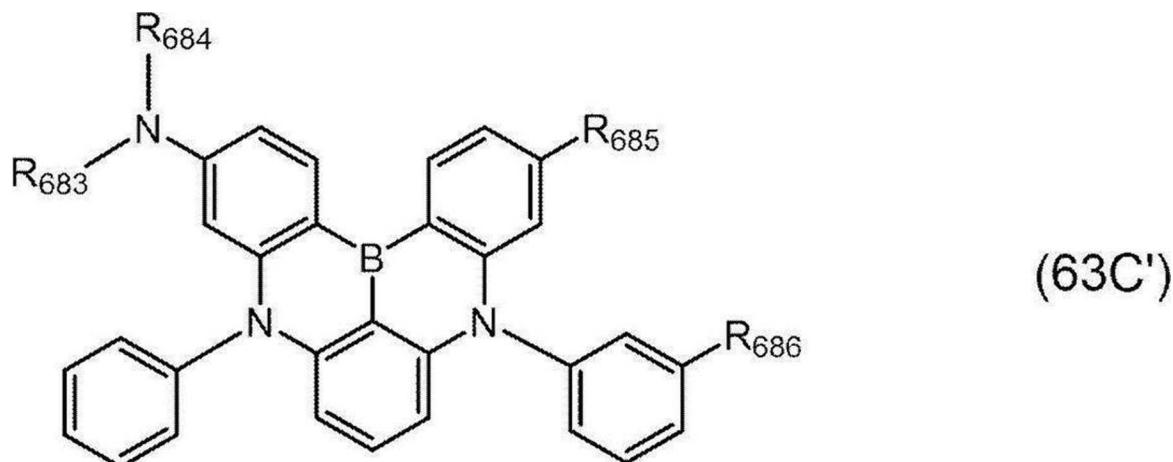
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。)

【0448】

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

【0449】

【化186】



【0450】

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

【0451】

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

【0452】

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

20

30

【0453】

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

【0454】

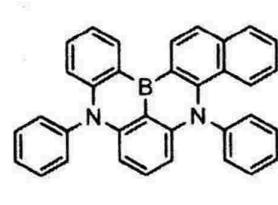
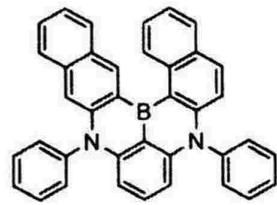
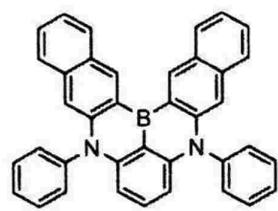
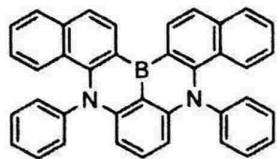
以下に、前記一般式(6)で表される化合物の具体例を記載するが、これらは例示に過ぎず、前記一般式(6)で表される化合物は下記具体例に限定されない。

40

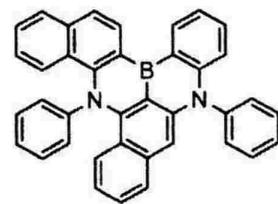
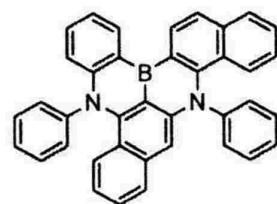
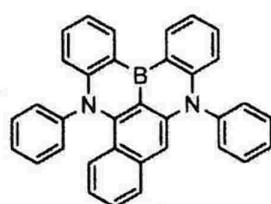
【0455】

50

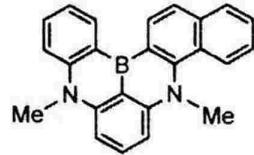
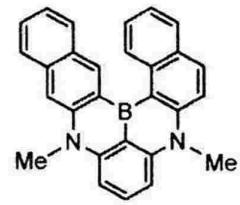
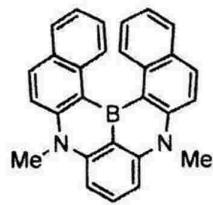
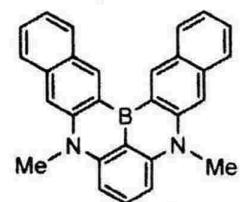
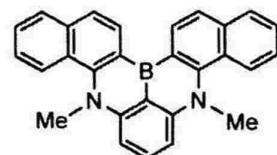
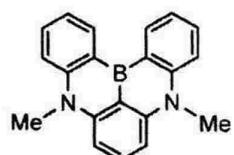
【化 1 8 7】



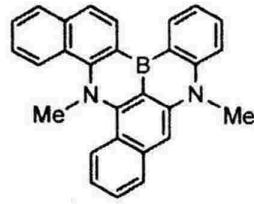
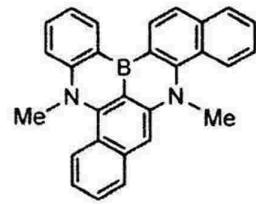
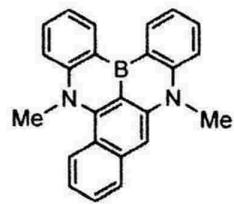
10



20



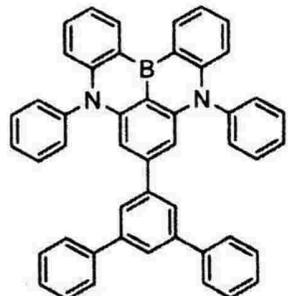
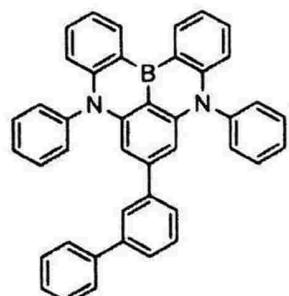
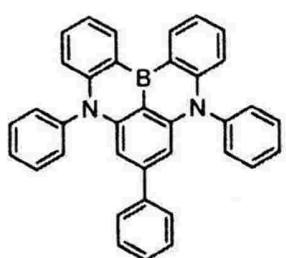
30



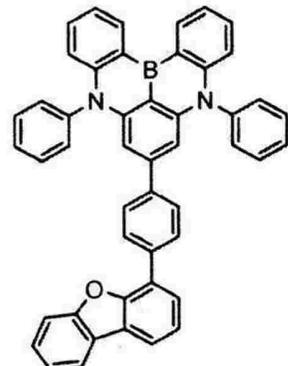
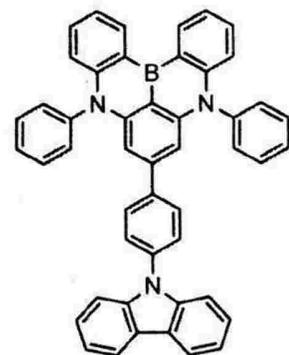
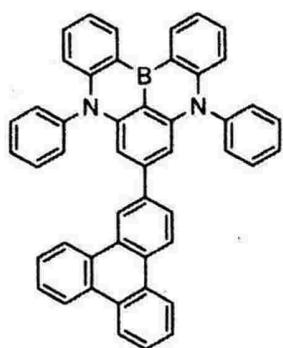
40

【 0 4 5 6 】

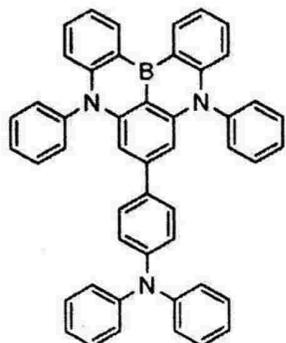
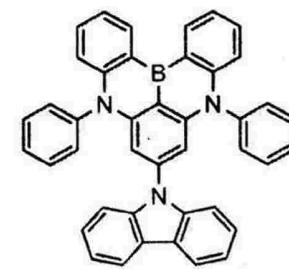
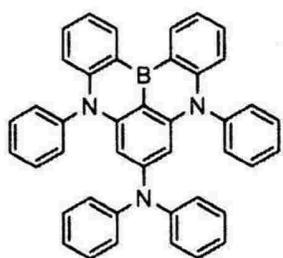
【化 1 8 8 】



10



20



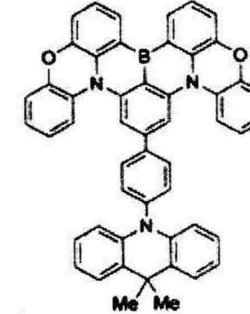
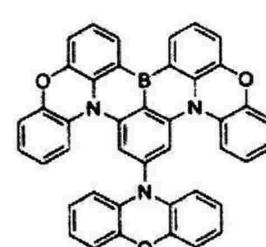
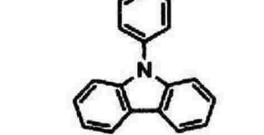
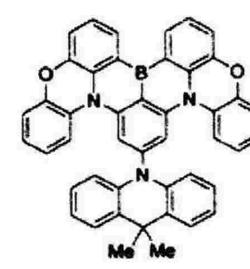
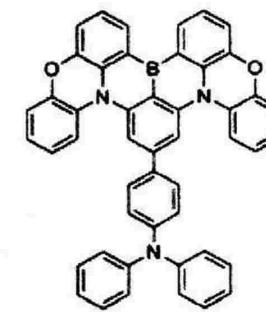
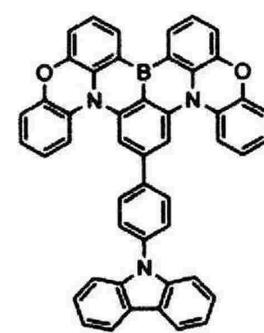
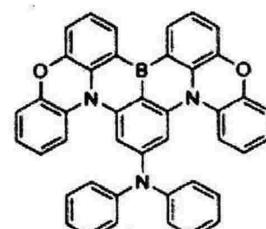
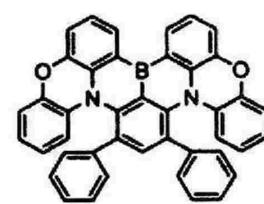
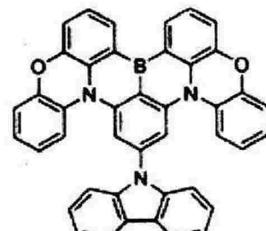
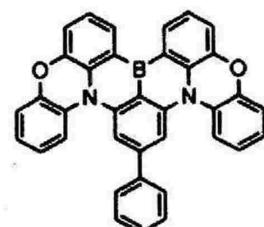
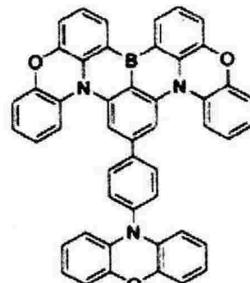
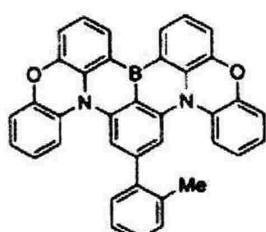
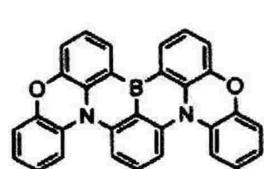
30

【 0 4 5 7 】

40

50

【化 18 9】



10

20

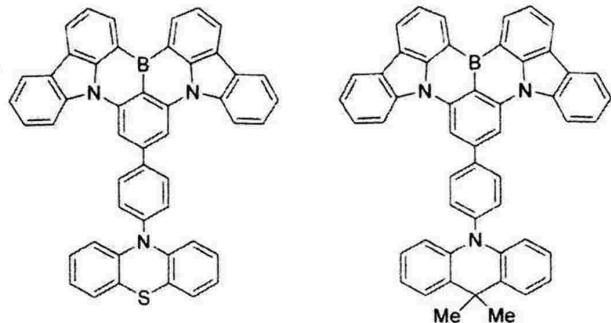
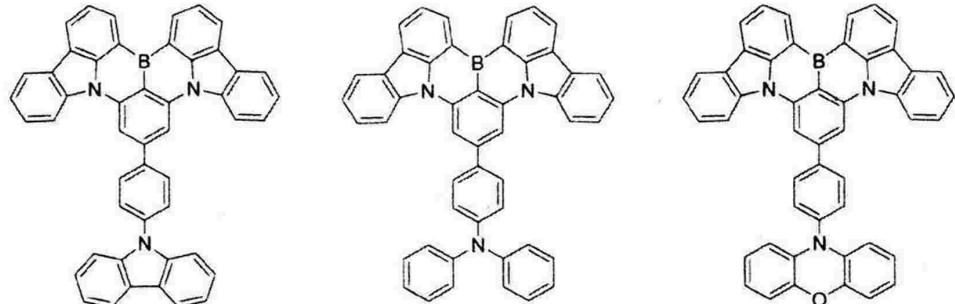
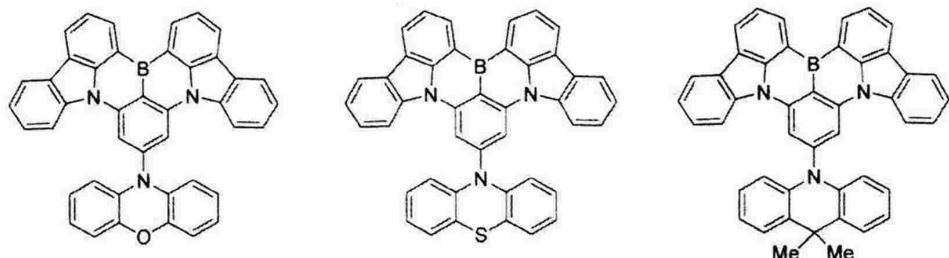
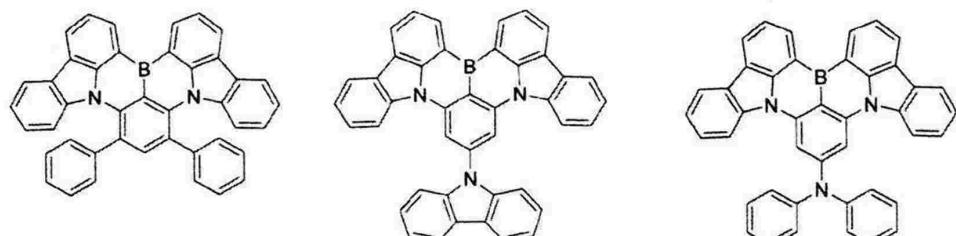
30

40

【0458】

50

【化 1 9 0 】



10

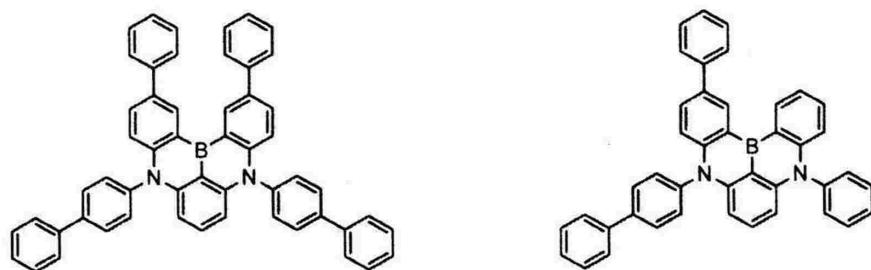
20

30

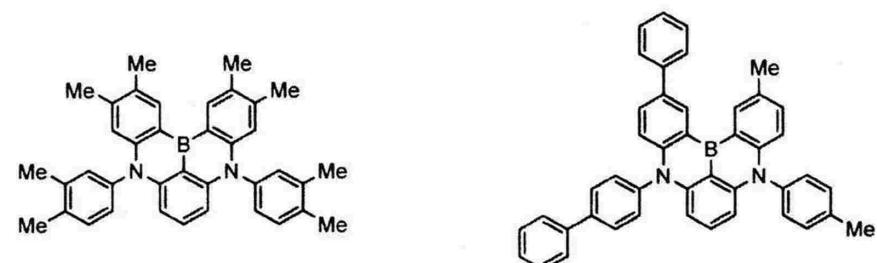
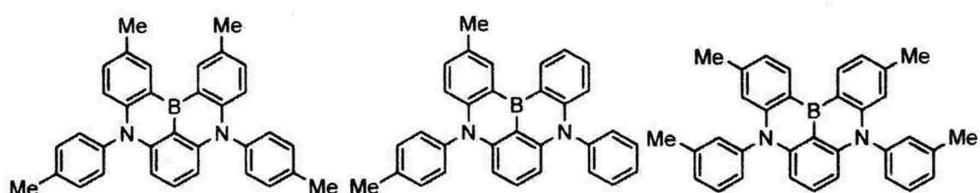
40

【 0 4 5 9 】

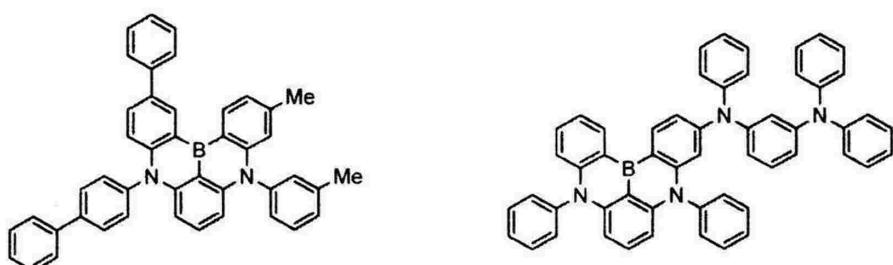
【化191】



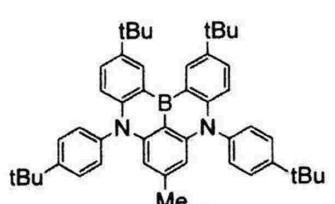
10



20



30

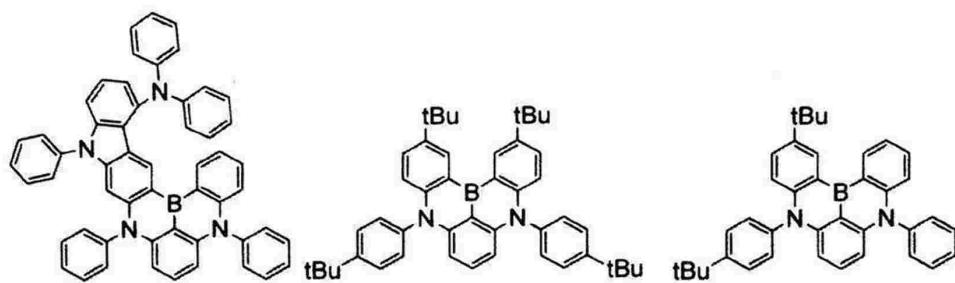


40

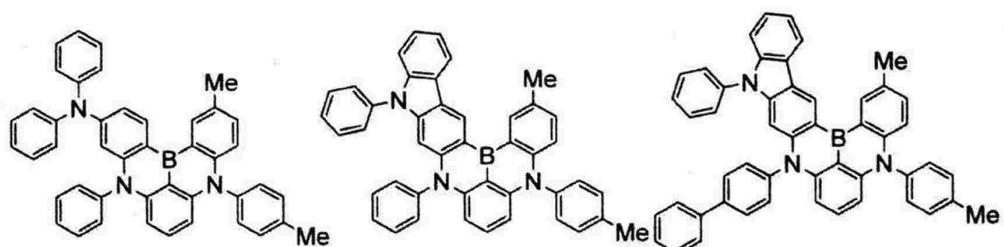
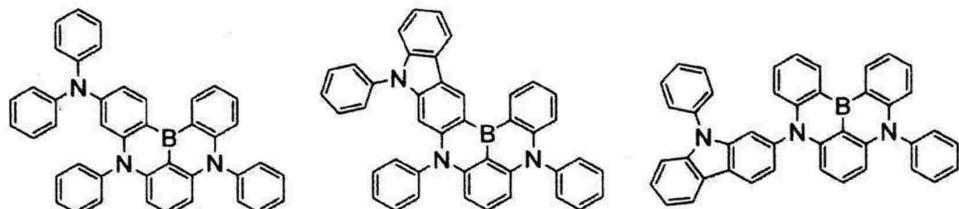
【0460】

50

【化 1 9 2】



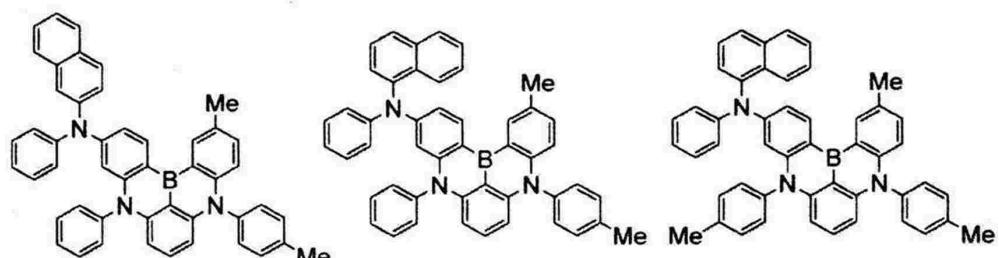
10



20



30

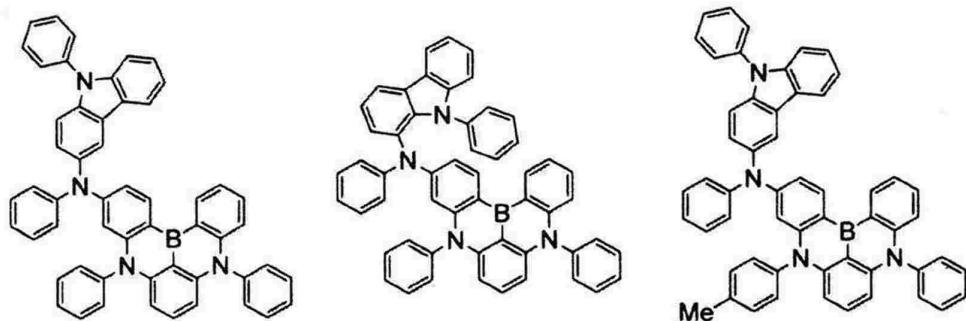


40

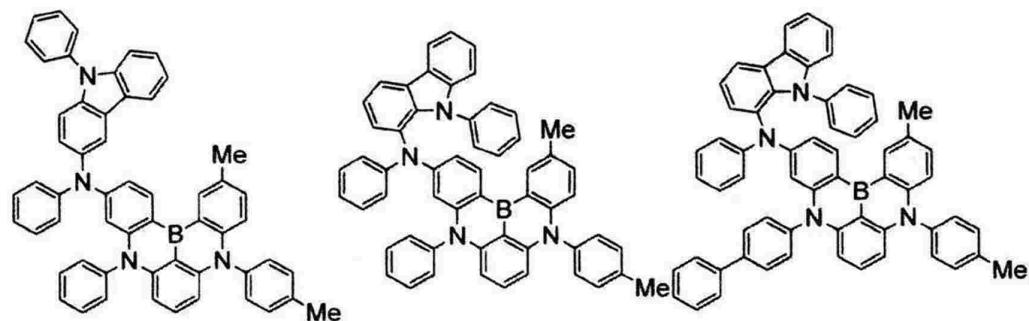
【0 4 6 1】

50

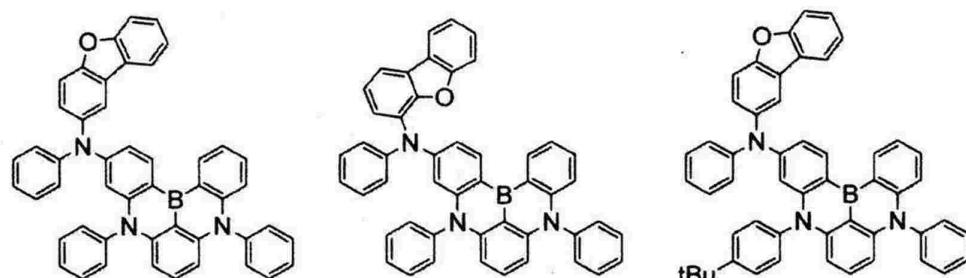
【化 1 9 3 】



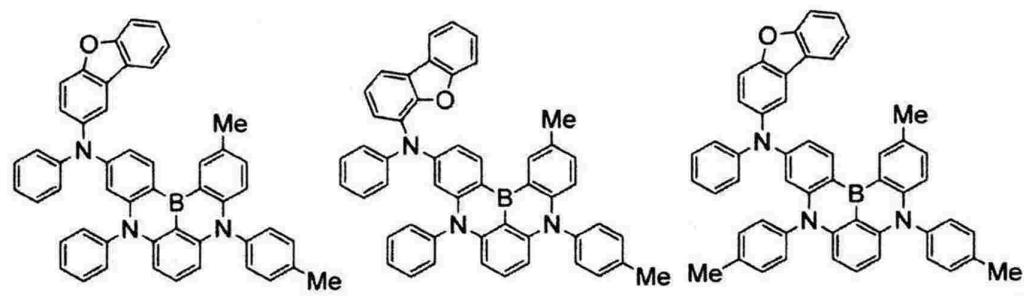
10



20



30

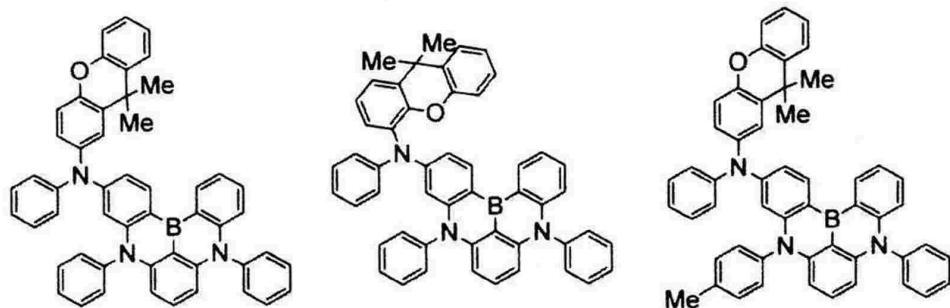


40

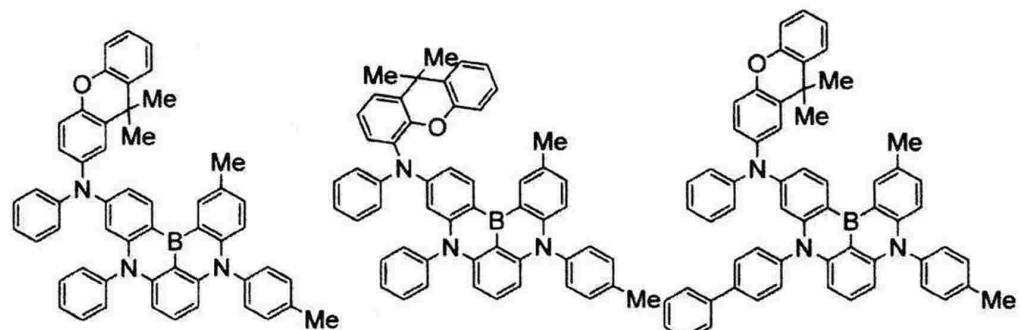
【 0 4 6 2 】

50

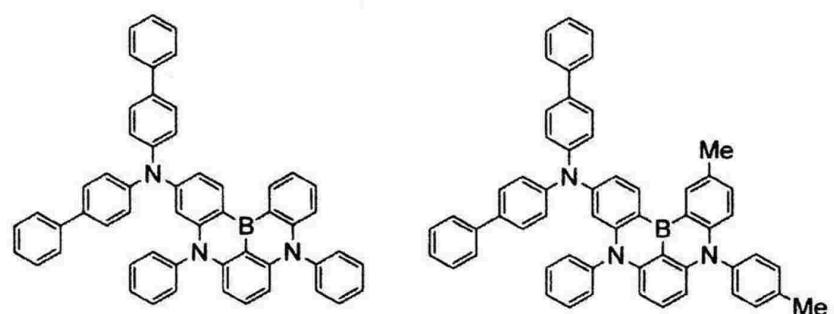
【化194】



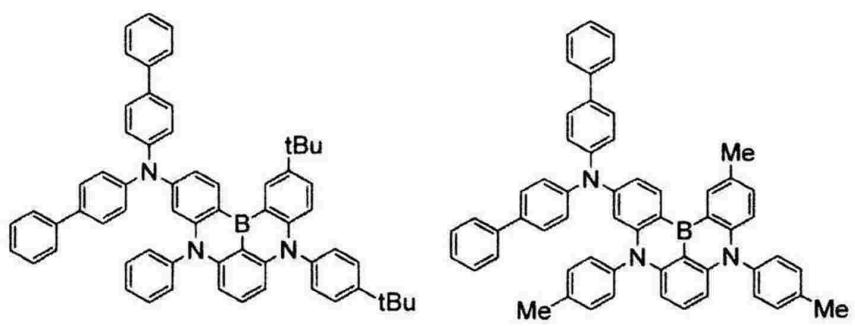
10



20



30

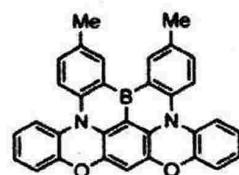
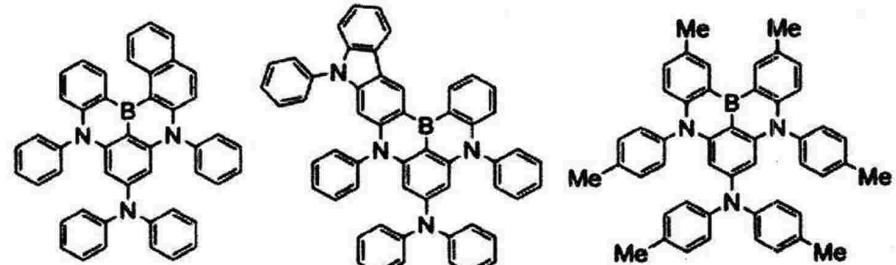
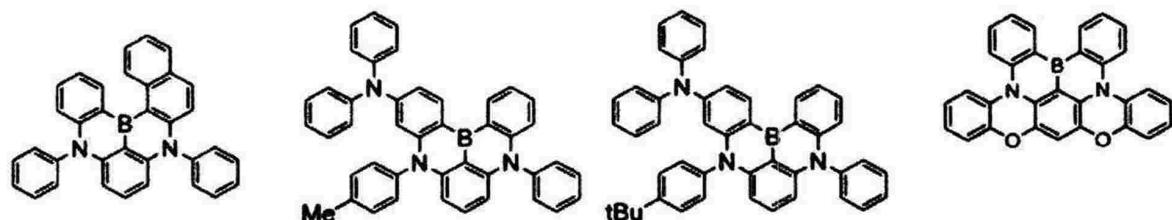


40

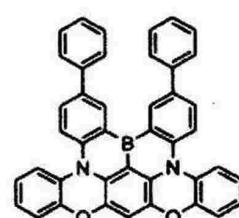
【0463】

50

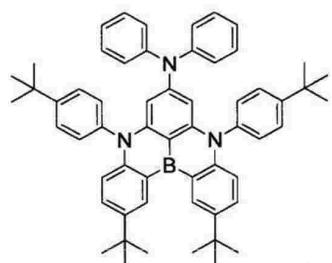
【化 195】



10



20



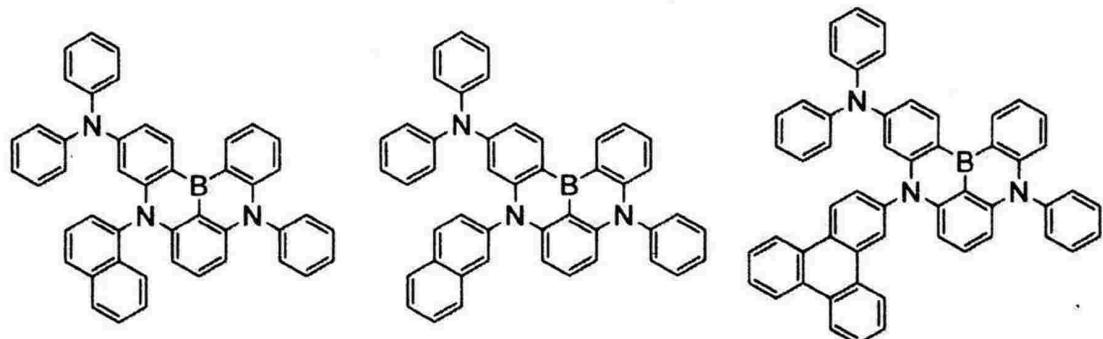
【0464】

30

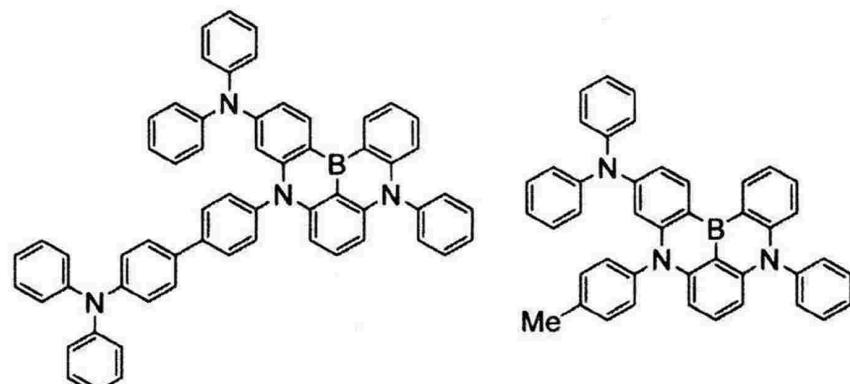
40

50

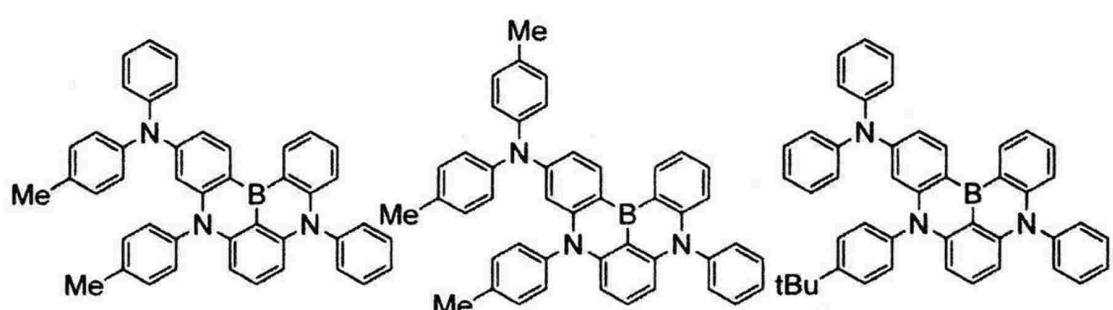
【化 1 9 6 】



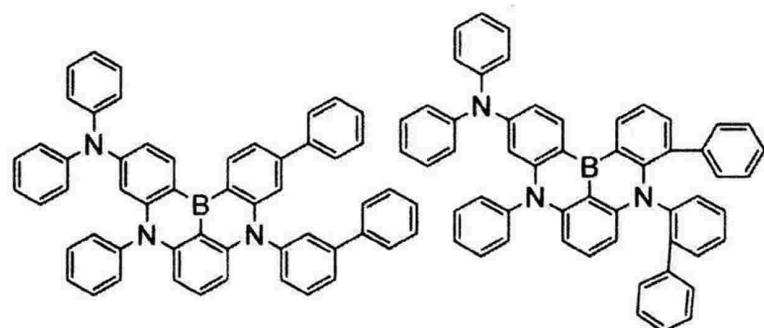
10



20



30

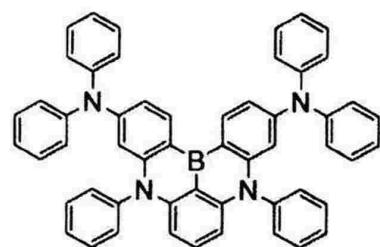
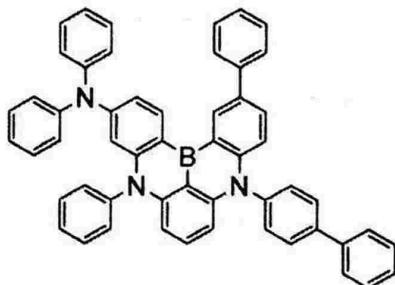


40

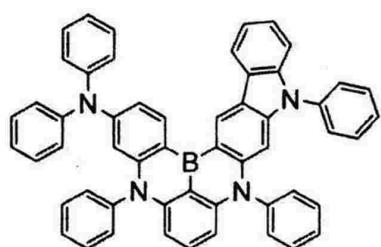
【 0 4 6 5 】

50

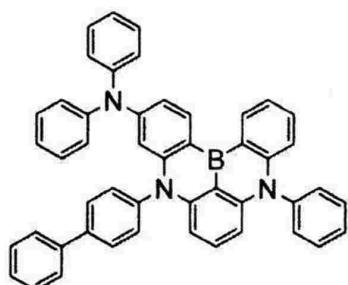
【化 1 9 7】



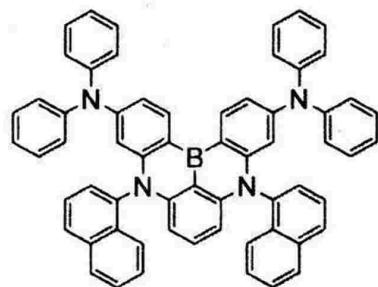
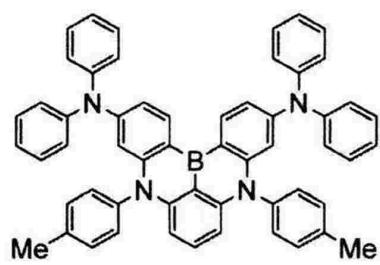
10



20



30

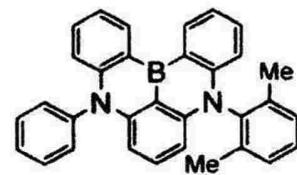
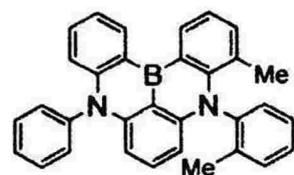
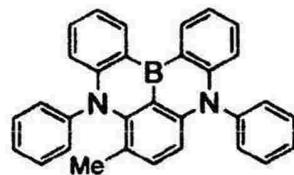
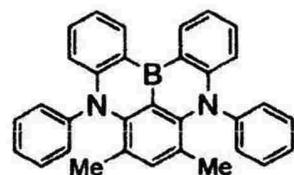
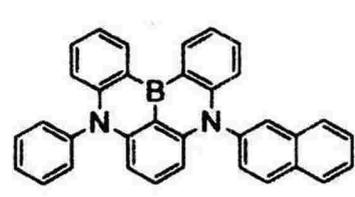
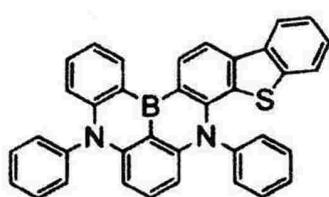
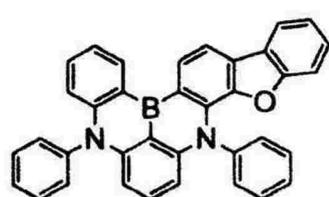
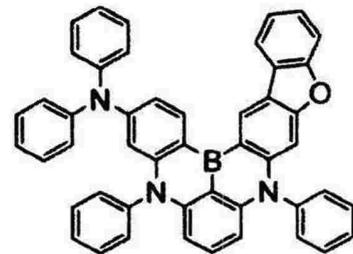
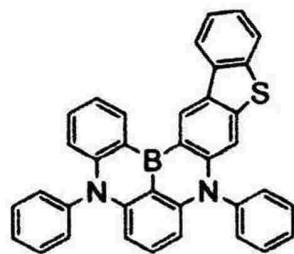
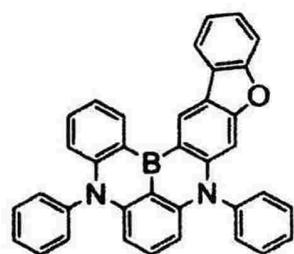
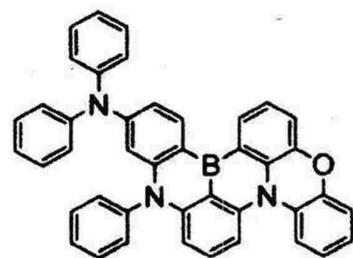
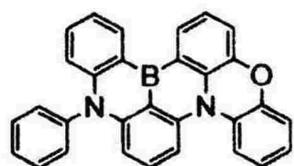


40

【 0 4 6 6 】

50

【化198】



【0467】

10

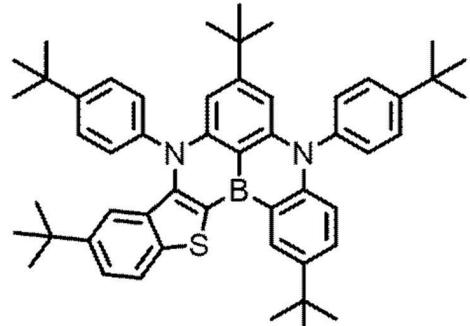
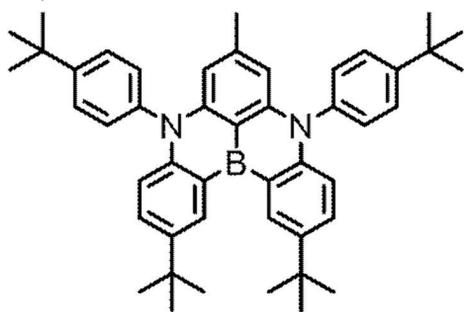
20

30

40

50

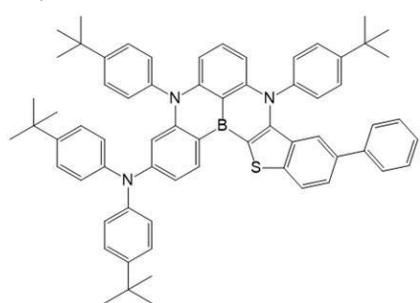
【化199】



10

【0468】

【化200】



20

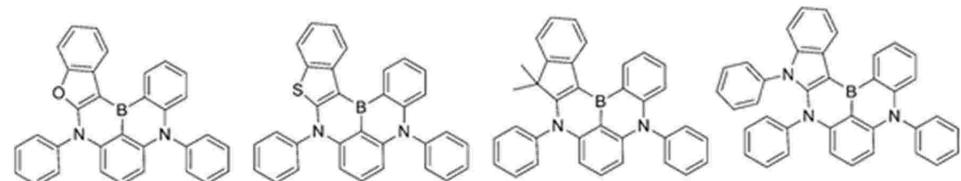
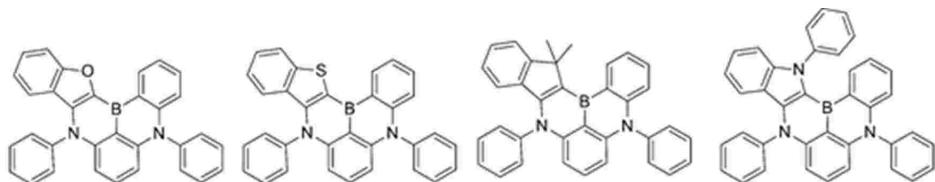
【0469】

30

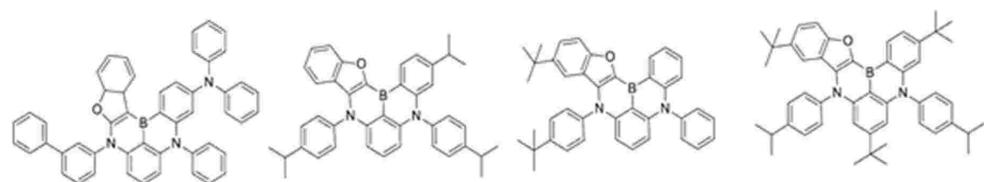
40

50

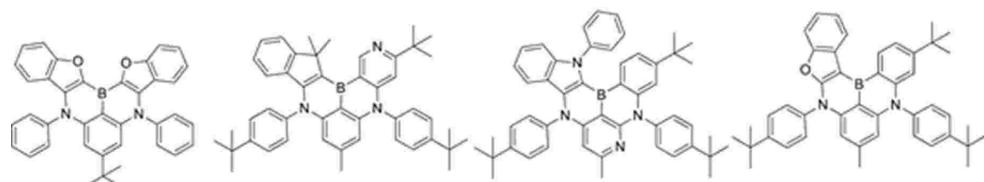
【化 2 0 1】



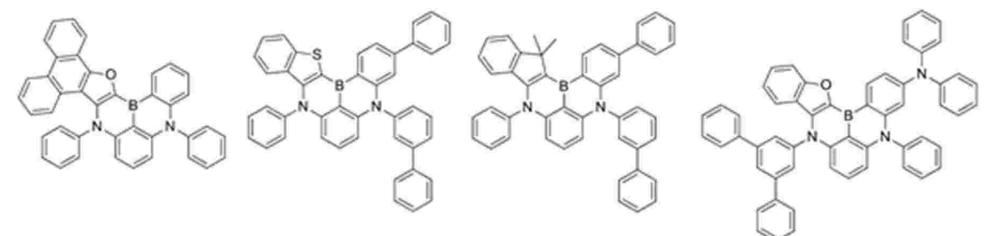
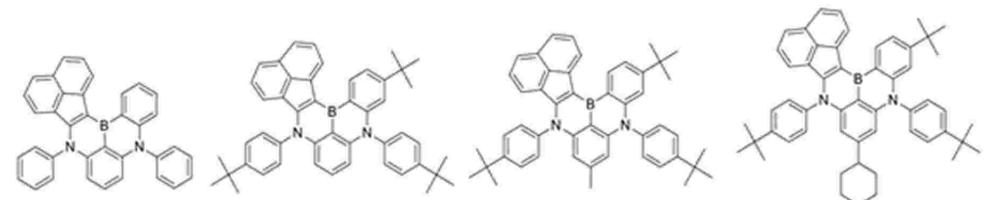
10



20



30

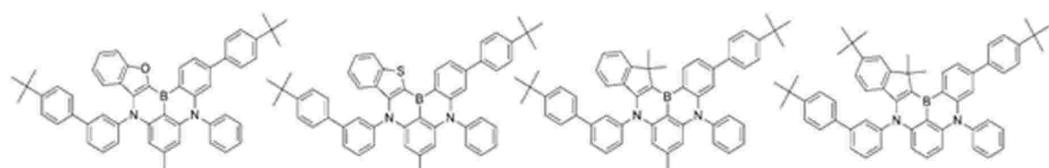
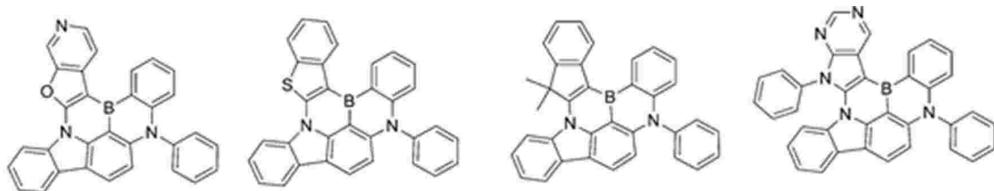


40

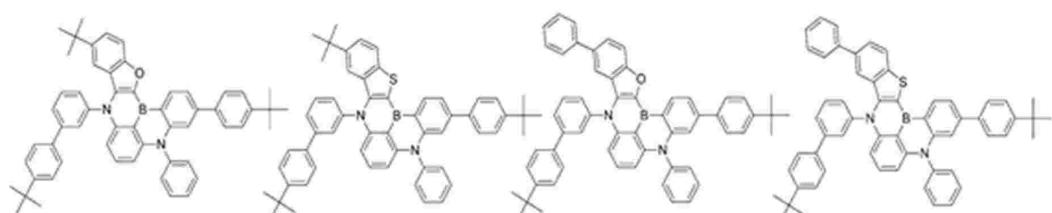
【 0 4 7 0 】

50

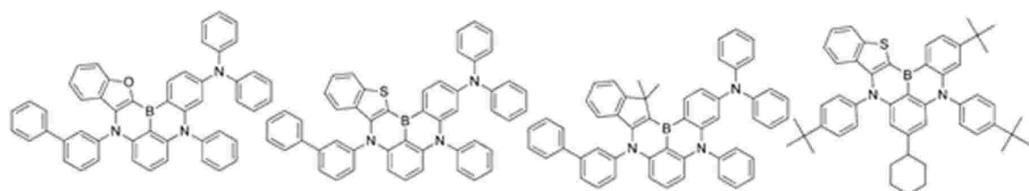
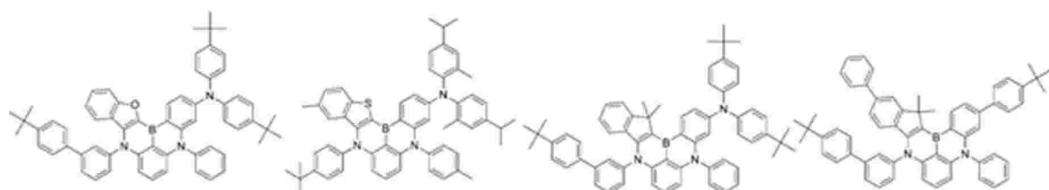
【化 2 0 2】



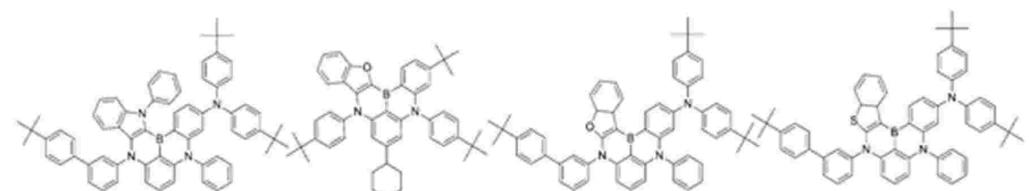
10



20



30

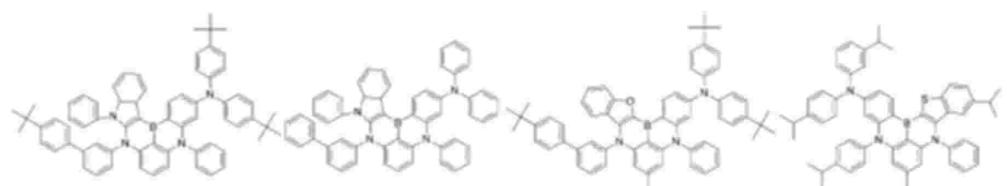
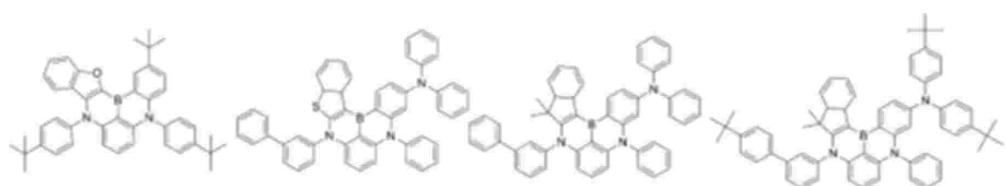


40

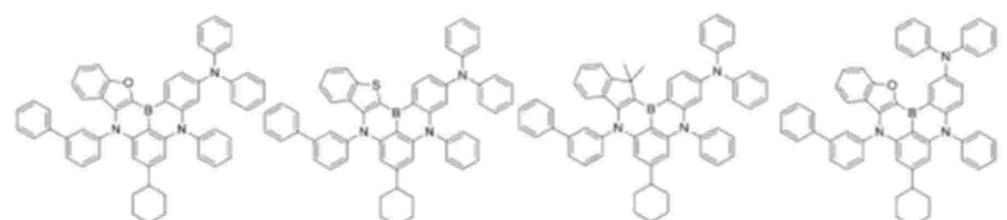
【0 4 7 1】

50

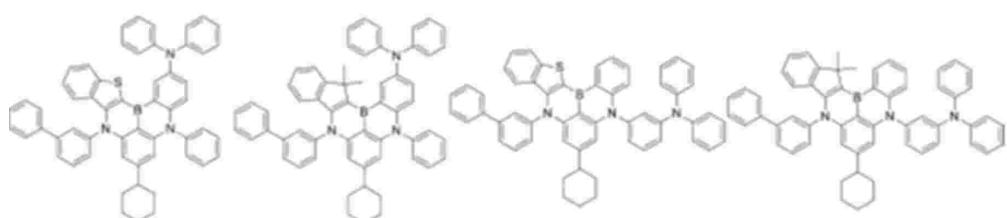
【化 2 0 3 】



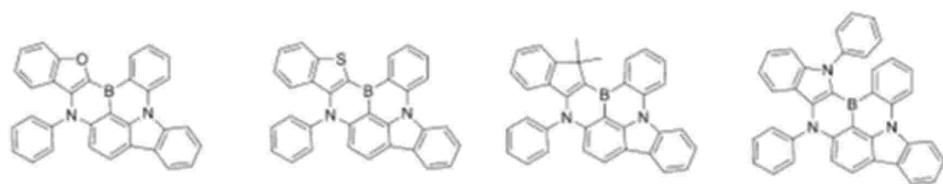
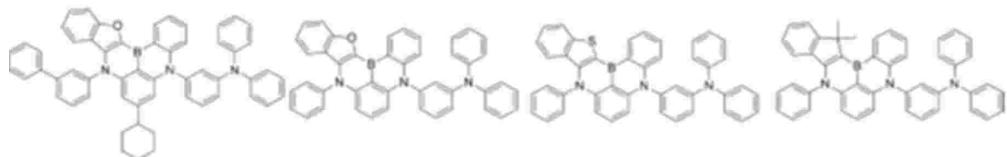
10



20



30

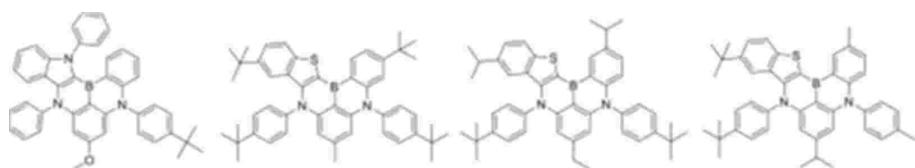


40

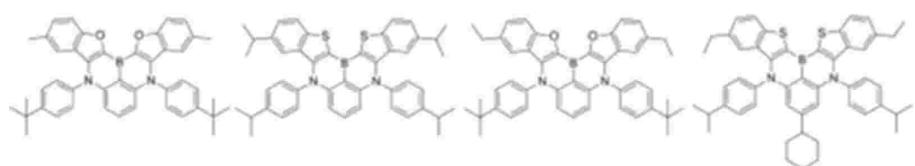
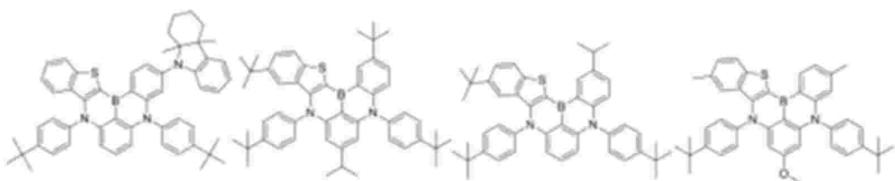
【 0 4 7 2 】

50

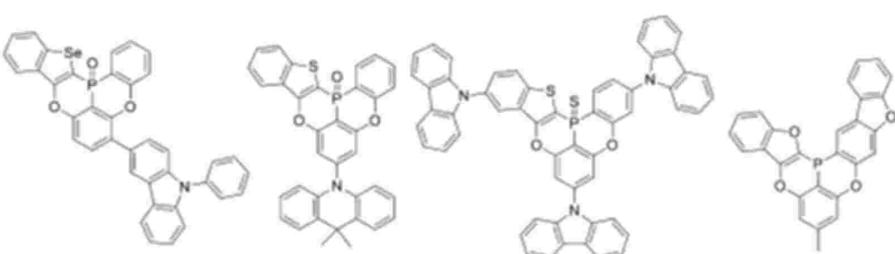
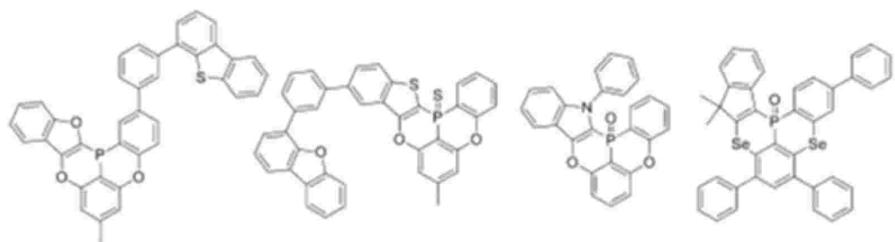
【化 2 0 4】



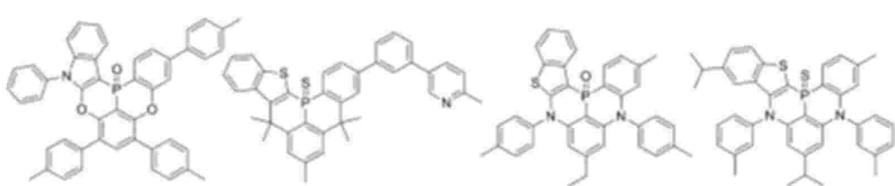
10



20



30



40

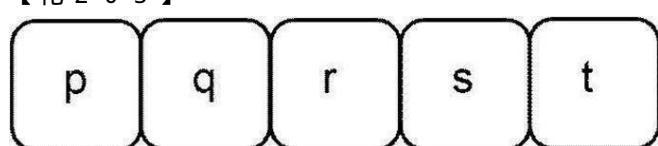
【0 4 7 3】

(一般式 (7) で表される化合物)

一般式 (7) で表される化合物について説明する。

【0 4 7 4】

【化 2 0 5】

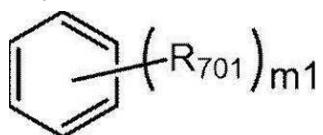


(7)

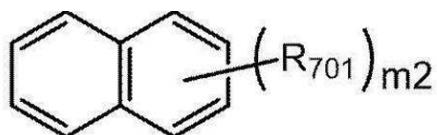
50

【0475】

【化206】



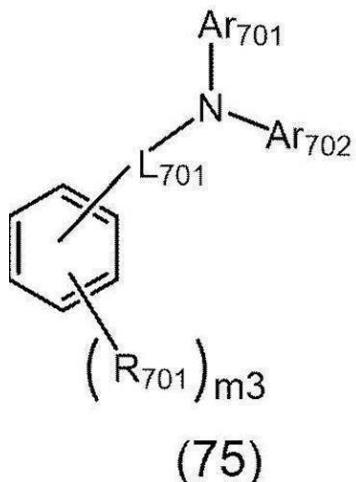
(72)



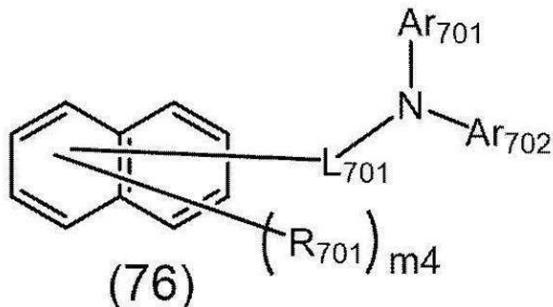
(73)



(74)



(75)



(76)

【0476】

(前記一般式(7)において、

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

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

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

X7は、酸素原子、硫黄原子、又はNR702である。

R701が複数存在する場合、隣接する複数のR701は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

-Si(R901)(R902)(R903)で表される基、

-O-(R904)で表される基、

-S-(R905)で表される基、

-N(R906)(R907)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

10

20

30

40

50

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基であり、
 A_{r701} 及び A_{r702} は、それぞれ独立に、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基であり、

L_{701} は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキレン基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニレン基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニレン基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキレン基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリーレン基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の 2 値の複素環基であり、

m_1 は、0、1 又は 2 であり、

m_2 は、0、1、2、3 又は 4 であり、

m_3 は、それぞれ独立に、0、1、2 又は 3 であり、

m_4 は、それぞれ独立に、0、1、2、3、4 又は 5 であり、

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

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

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

A_{r701} が複数存在する場合、複数の A_{r701} は、互いに同一であるか、又は異なり

、
 A_{r702} が複数存在する場合、複数の A_{r702} は、互いに同一であるか、又は異なり

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

【0477】

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

【0478】

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

【0479】

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

【0480】

10

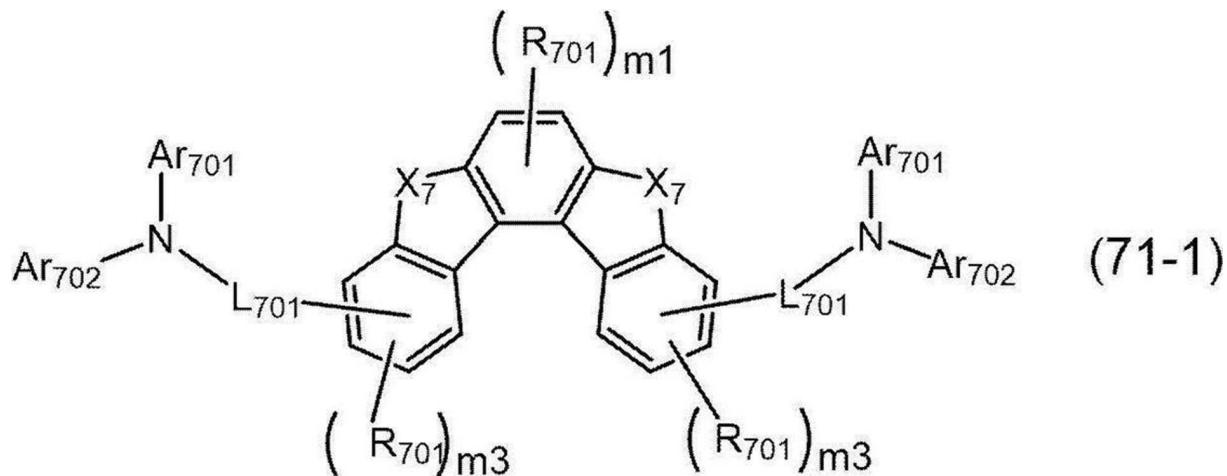
20

30

40

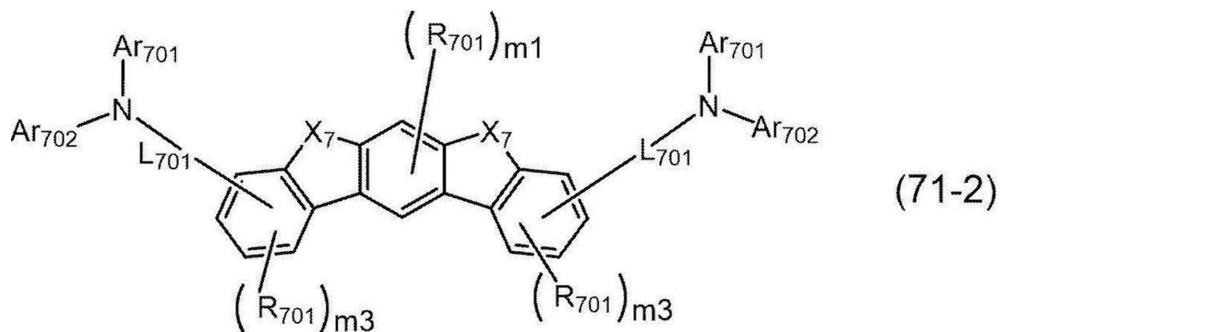
50

【化 2 0 7】



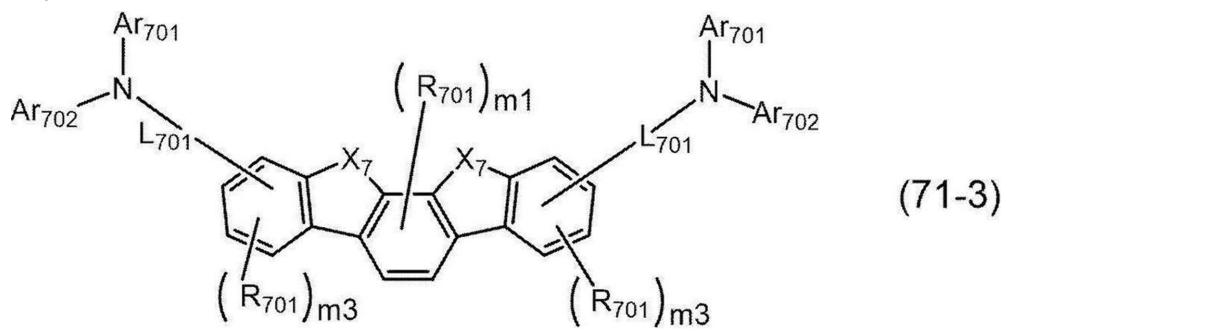
【0 4 8 1】

【化 2 0 8】



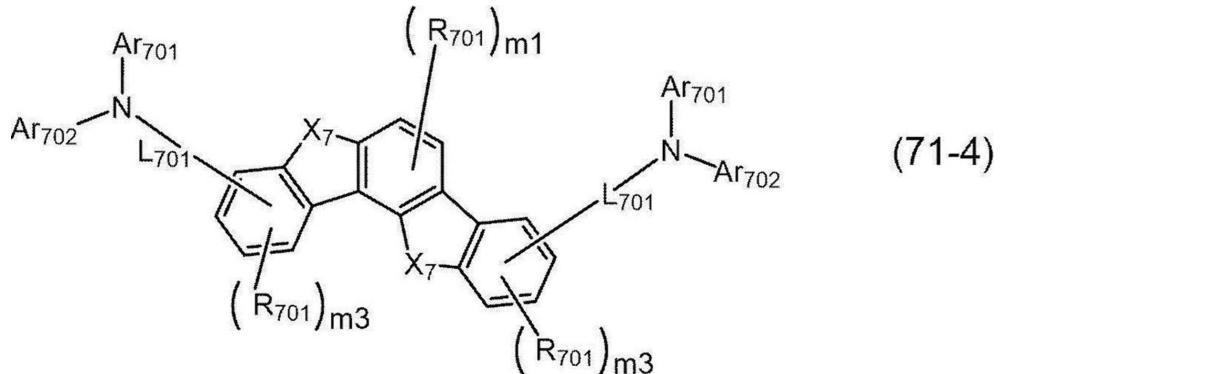
【0 4 8 2】

【化 2 0 9】



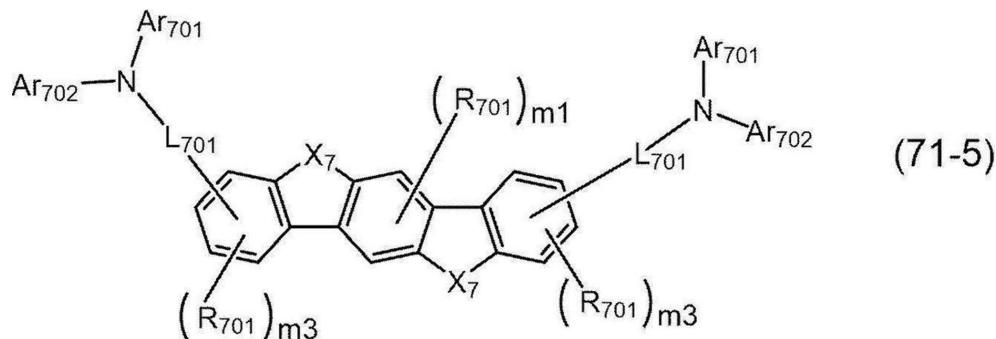
【0 4 8 3】

【化 2 1 0】



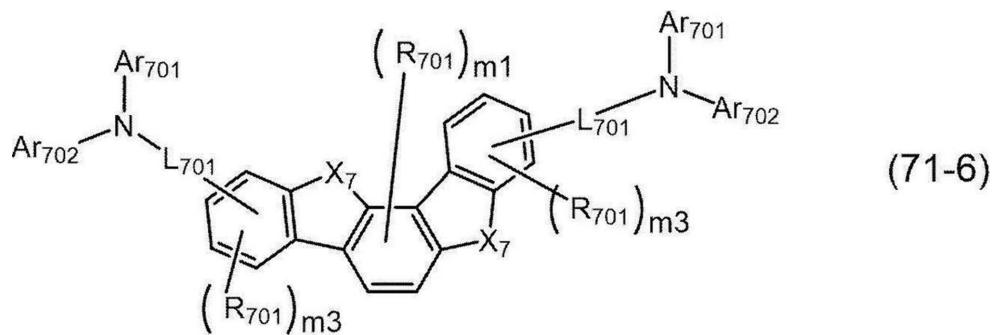
【0 4 8 4】

【化2 1 1】



【0 4 8 5】

【化2 1 2】



【0 4 8 6】

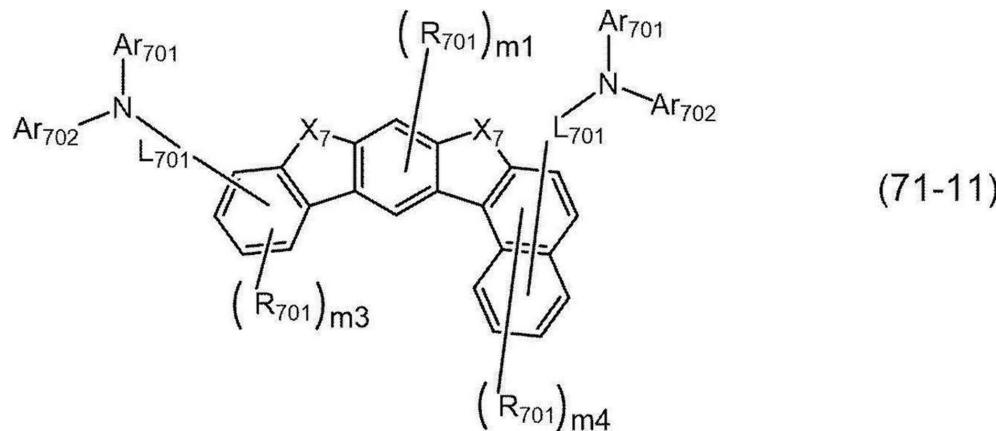
(前記一般式(71-1)～一般式(71-6)において、R701、X7、Ar701、Ar702、L701、m1及びm3は、それぞれ、前記一般式(7)におけるR701、X7、Ar701、Ar702、L701、m1及びm3と同義である。)

【0 4 8 7】

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

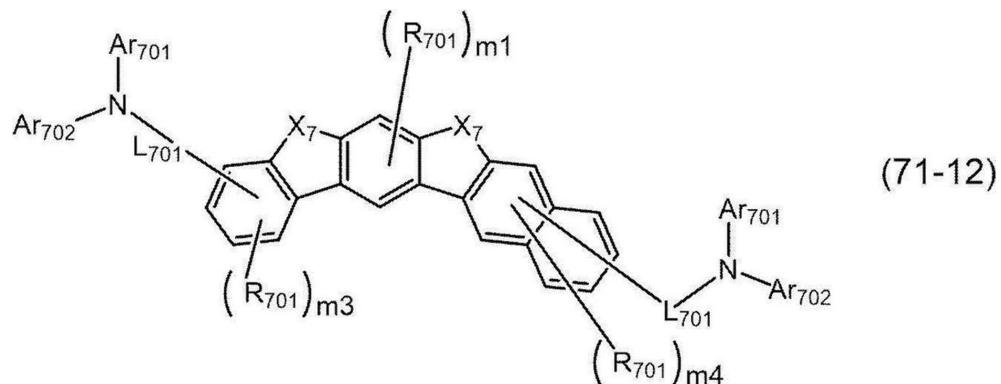
【0 4 8 8】

【化2 1 3】



【0 4 8 9】

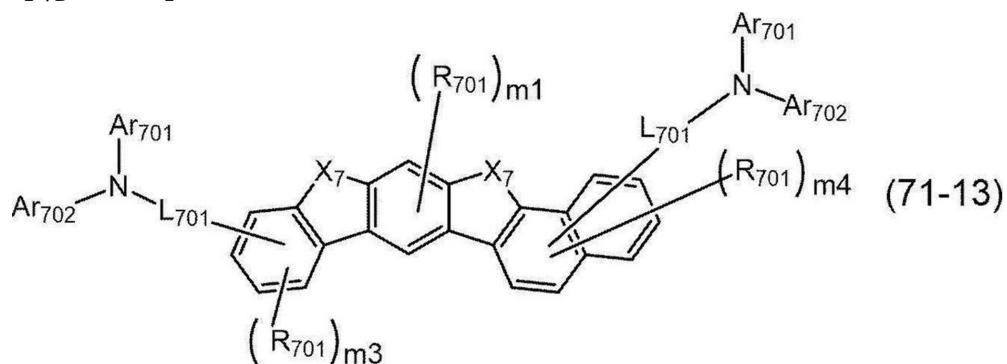
【化214】



10

【0490】

【化215】



20

【0491】

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

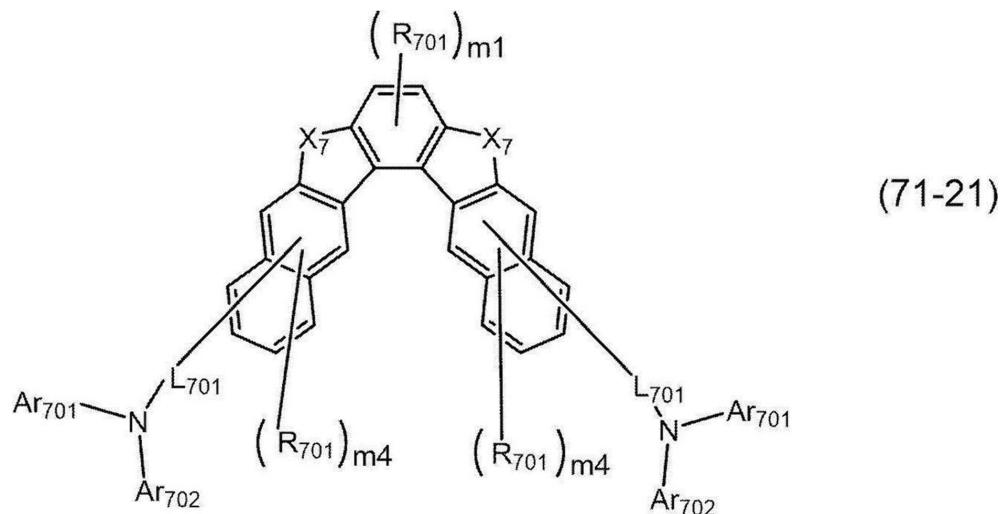
【0492】

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

30

【0493】

【化216】

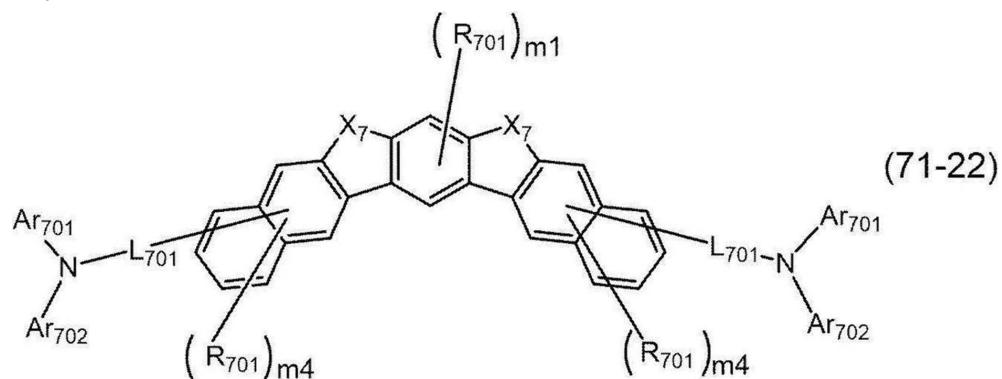


40

【0494】

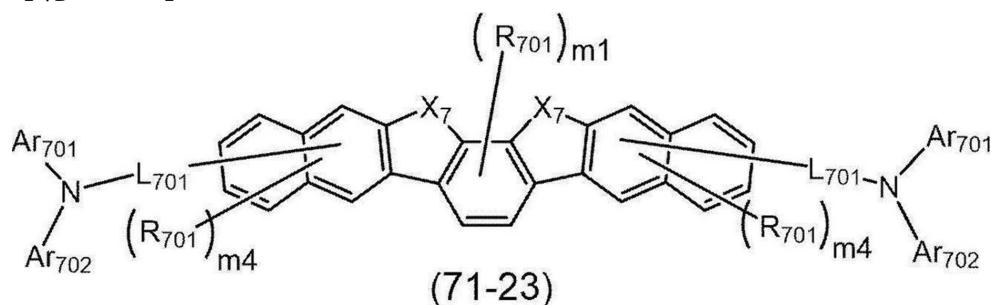
50

【化 2 1 7】



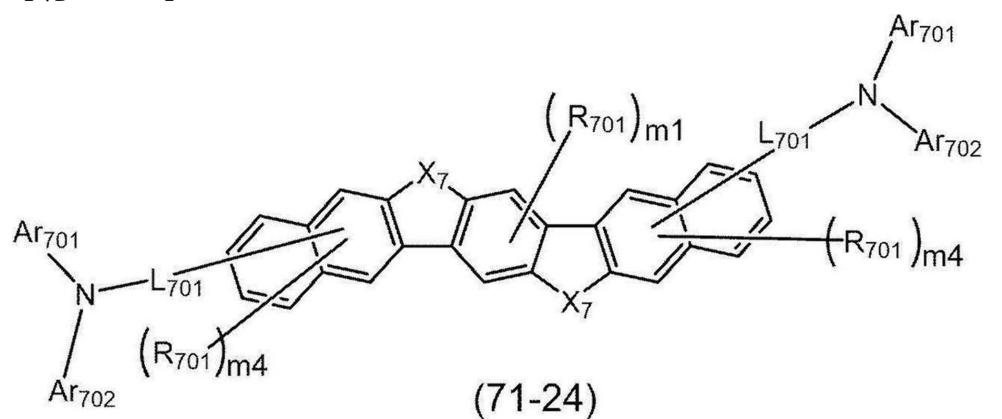
【0 4 9 5】

【化 2 1 8】



【0 4 9 6】

【化 2 1 9】

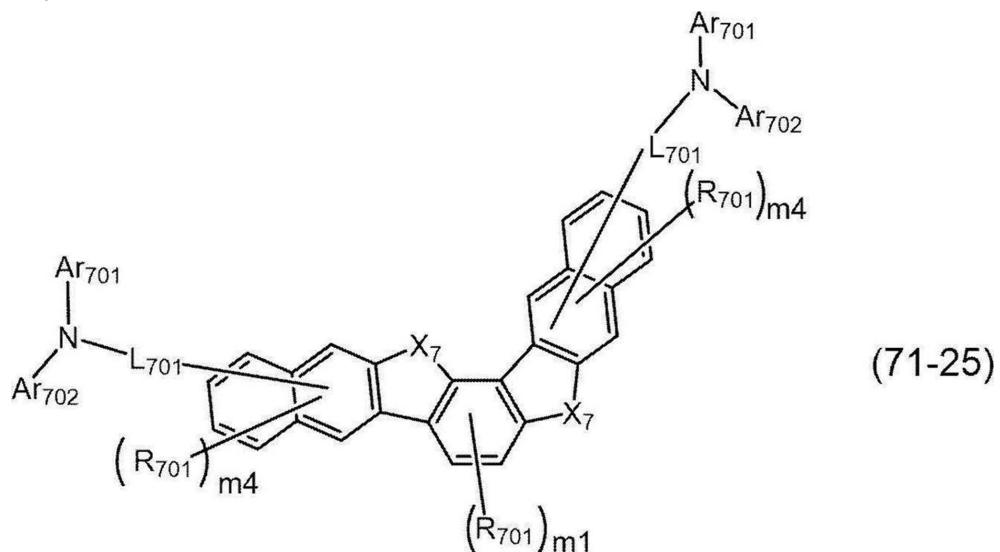


【0 4 9 7】

40

50

【化220】



【0498】

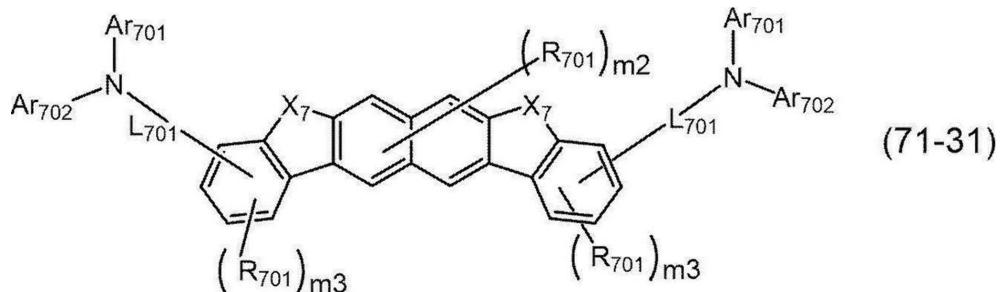
(前記一般式(71-21)～一般式(71-25)において、R₇₀₁、X₇、Ar₇₀₁、Ar₇₀₂、L₇₀₁、m₁及びm₄は、それぞれ、前記一般式(7)におけるR₇₀₁、X₇、Ar₇₀₁、Ar₇₀₂、L₇₀₁、m₁及びm₄と同義である。)

【0499】

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

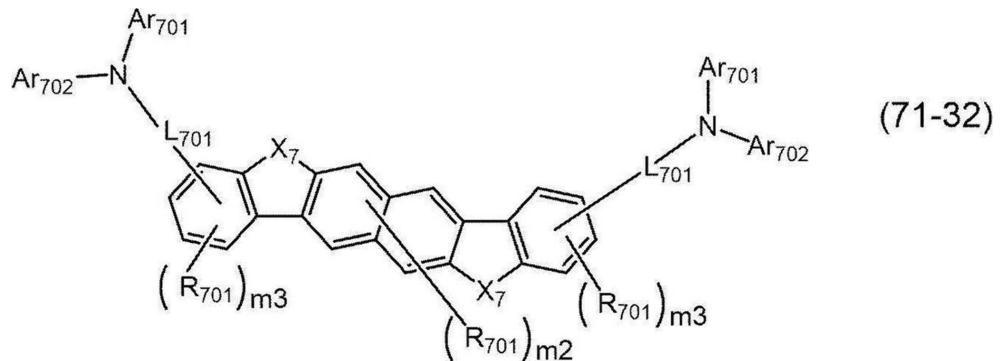
【0500】

【化221】



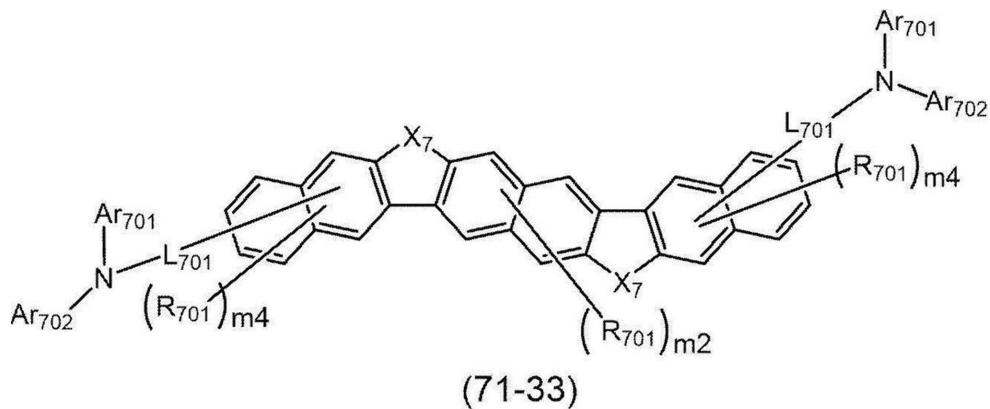
【0501】

【化222】



【0502】

【化223】



【0503】

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

【0504】

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

【0505】

一実施形態においては、Ar₇₀₁及びAr₇₀₂の一方が置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であり、Ar₇₀₁及びAr₇₀₂の他方が置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

【0506】

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

【0507】

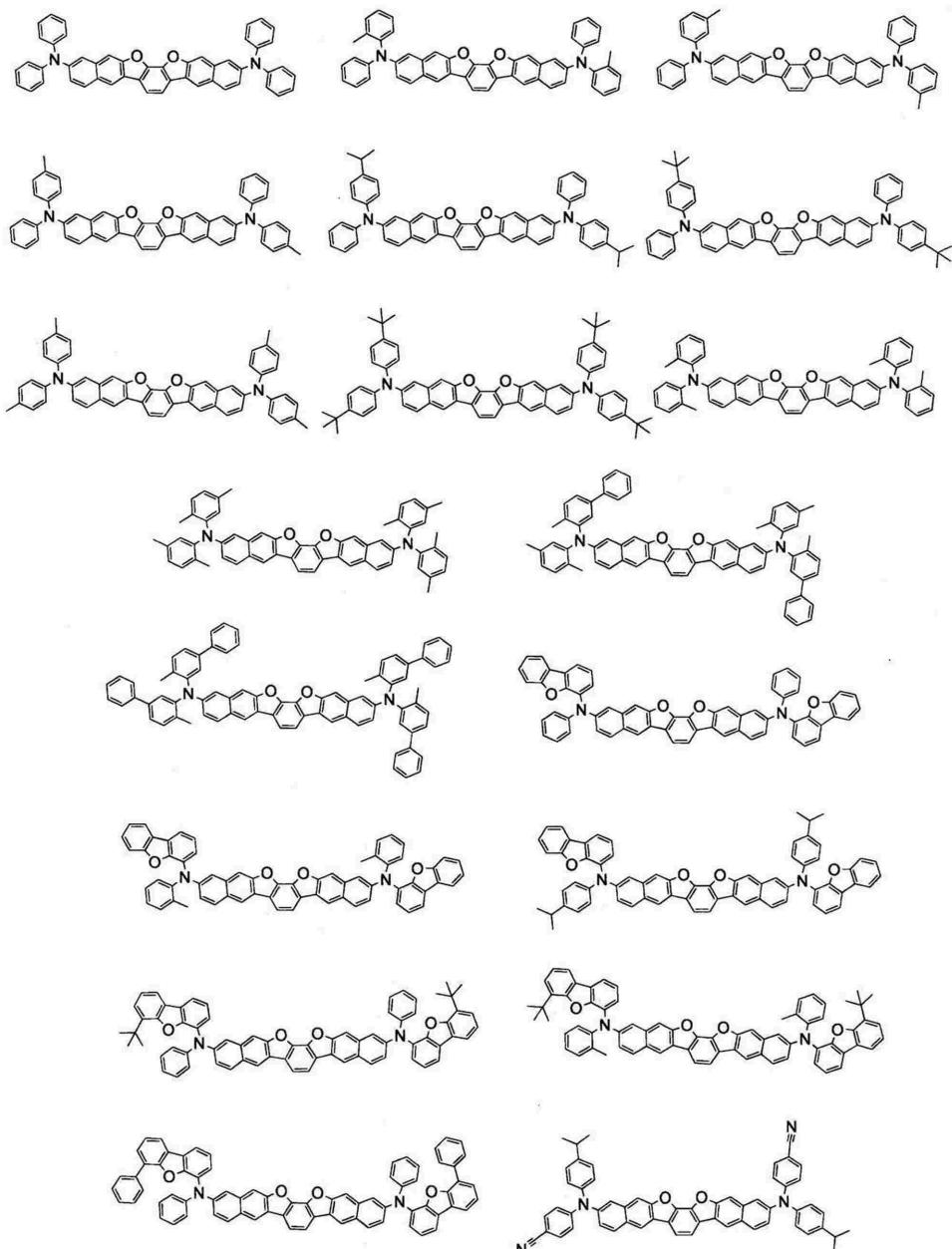
20

30

40

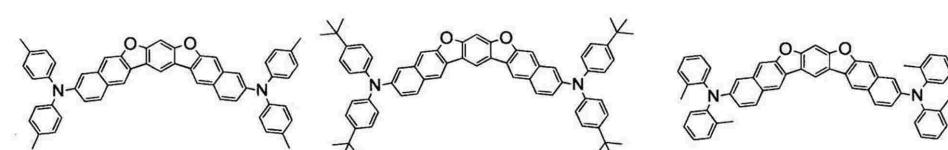
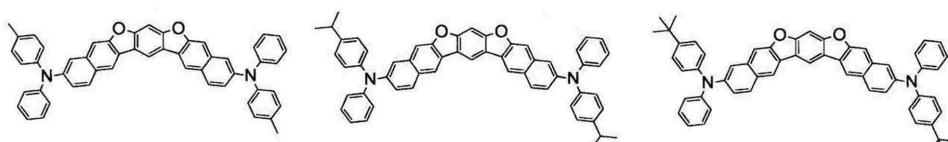
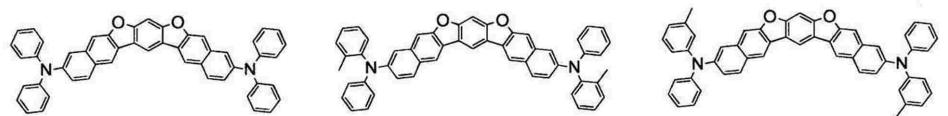
50

【化 2 2 4】

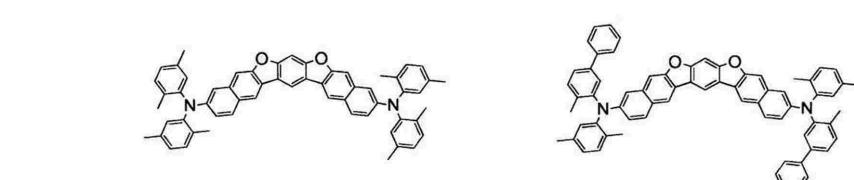


【0508】

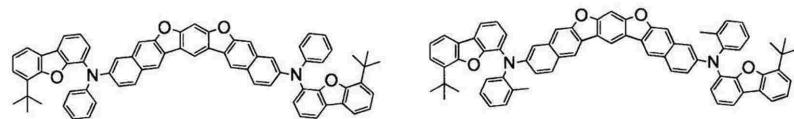
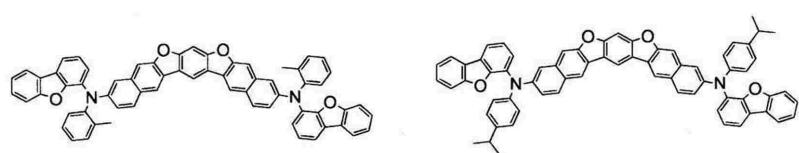
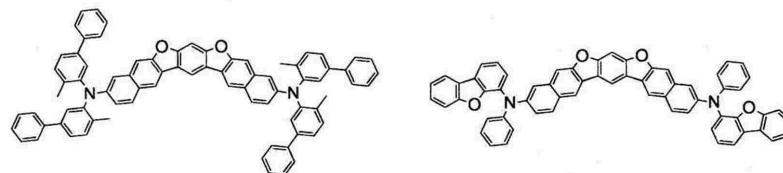
【化 2 2 5】



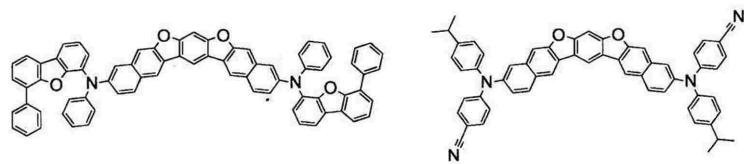
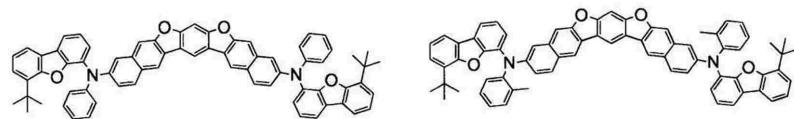
10



20



30

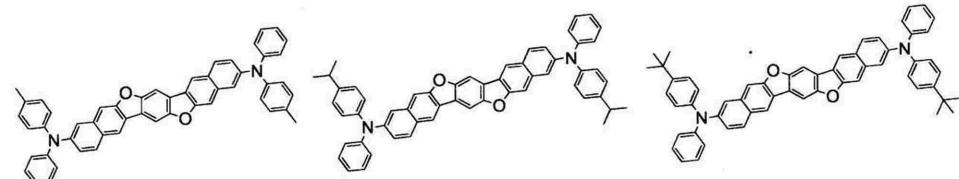
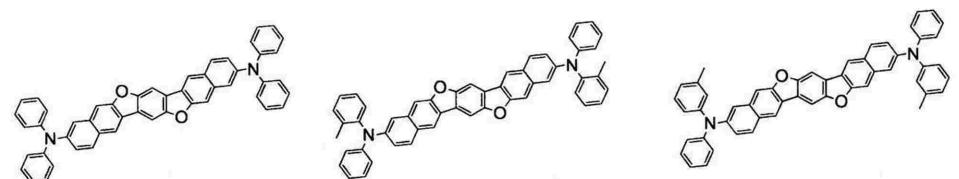


【0 5 0 9】

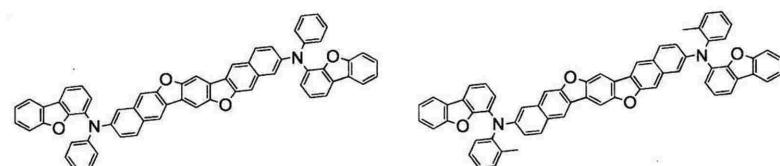
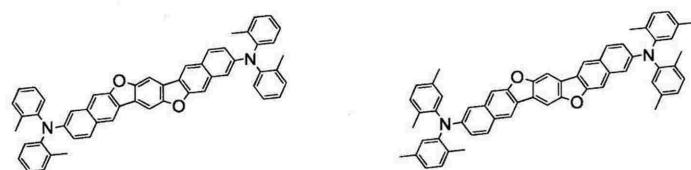
40

50

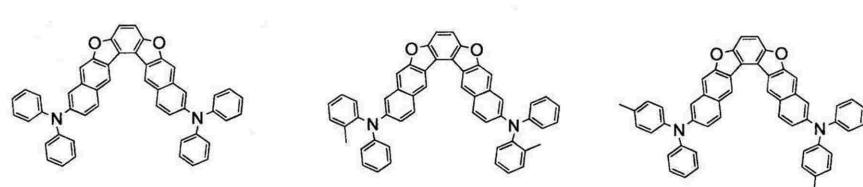
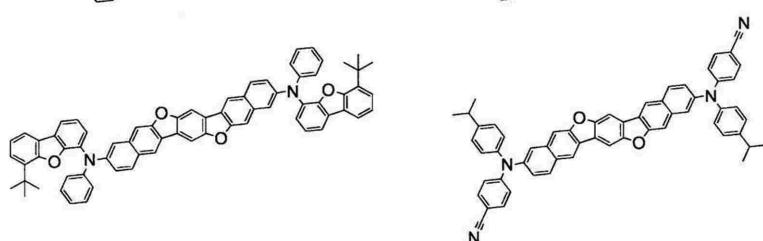
【化 2 2 6】



10



20



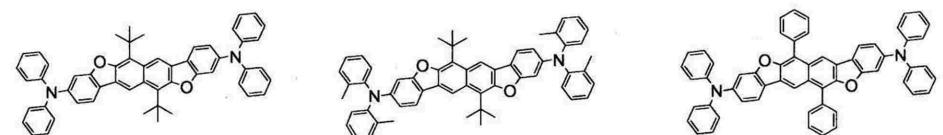
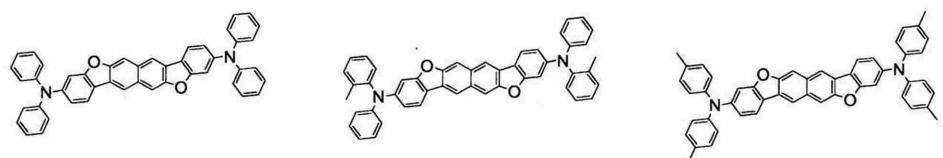
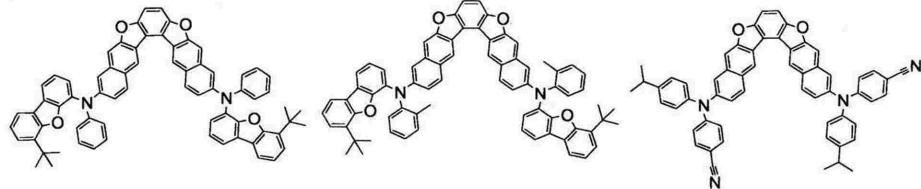
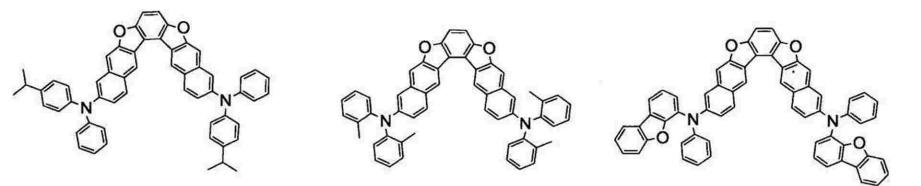
30

【0510】

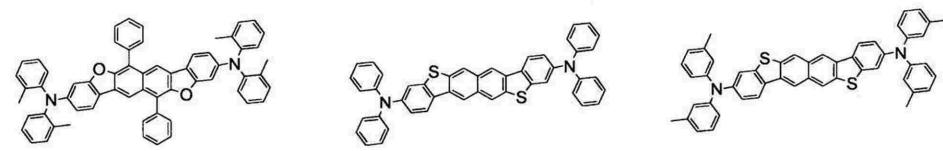
40

50

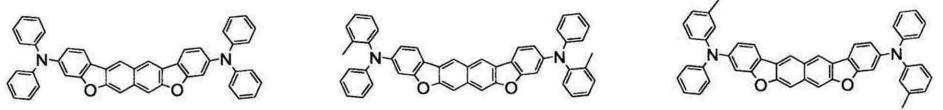
【化 2 2 7】



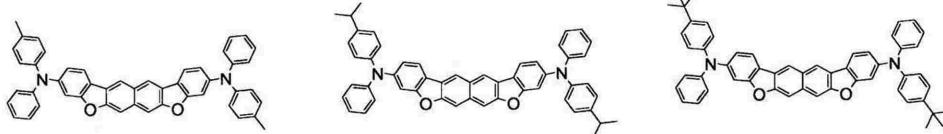
10



20



30

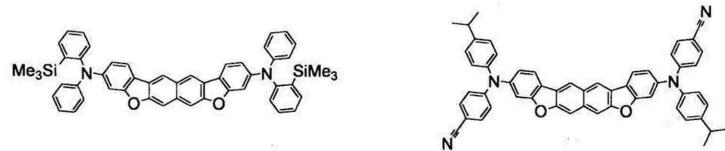
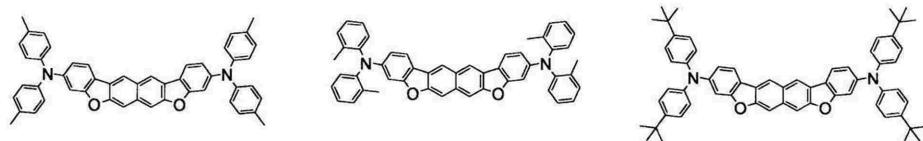


【 0 5 1 1 】

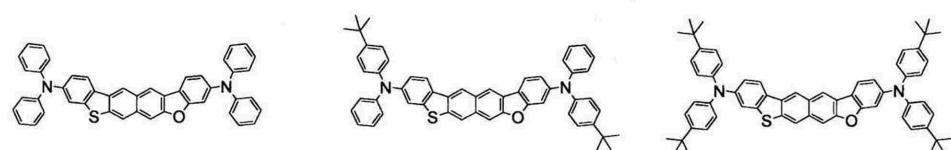
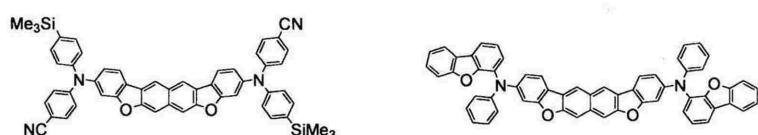
40

50

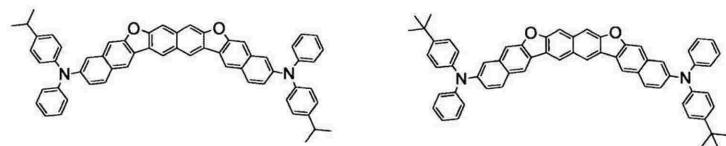
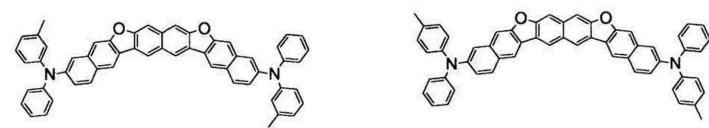
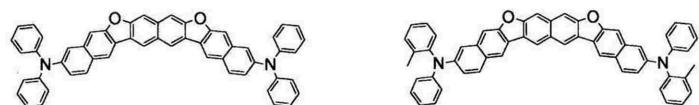
【化 2 2 8】



10



20



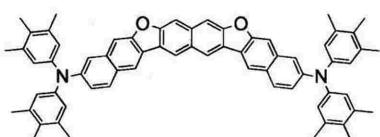
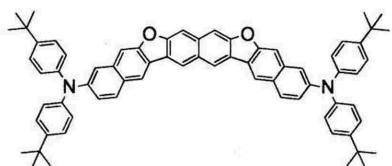
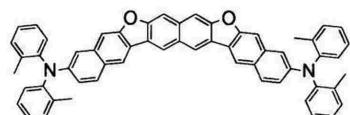
30

【0 5 1 2】

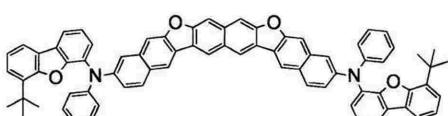
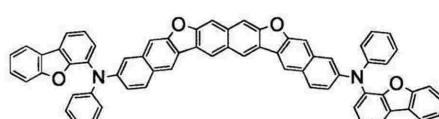
40

50

【化229】



10



【0513】

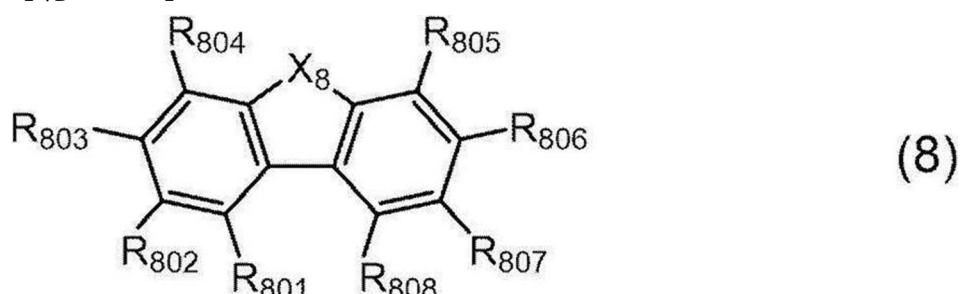
(一般式(8)で表される化合物)

一般式(8)で表される化合物について説明する。

20

【0514】

【化230】



30

【0515】

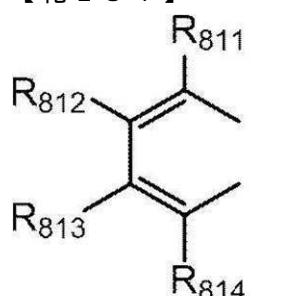
(前記一般式(8)において、

R801とR802、R802とR803、及びR803とR804の少なくとも一組は、互いに結合して下記一般式(82)で示される2価の基を形成し、

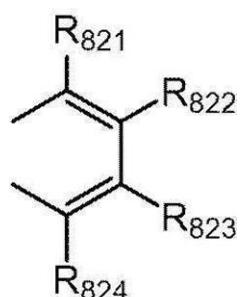
R805とR806、R806とR807、及びR807とR808の少なくとも一組は、互いに結合して下記一般式(83)で示される2価の基を形成する。)

【0516】

【化231】



(82)



(83)

40

50

【0517】

(前記一般式(82)で示される2価の基を形成しないR₈₀₁~R₈₀₄、及びR₈₁₁~R₈₁₄の少なくとも1つは下記一般式(84)で表される1価の基であり、前記一般式(83)で示される2価の基を形成しないR₈₀₅~R₈₀₈、及びR₈₂₁~R₈₂₄の少なくとも1つは下記一般式(84)で表される1価の基であり、X₈は、酸素原子、硫黄原子、又はNR₈₀₉であり、前記一般式(82)及び一般式(83)で表される2価の基を形成せず、かつ、前記一般式(84)で表される1価の基ではないR₈₀₁~R₈₀₈、前記一般式(84)で表される1価の基ではないR₈₁₁~R₈₁₄及びR₈₂₁~R₈₂₄、並びにR₈₀₉は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

-O-(R₉₀₄)で表される基、

-S-(R₉₀₅)で表される基、

-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

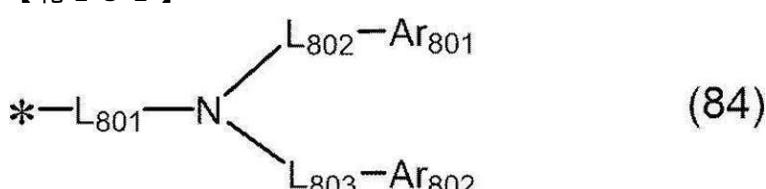
ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基である。)

【0518】

【化232】



【0519】

(前記一般式(84)において、

Ar₈₀₁及びAr₈₀₂は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

L₈₀₁~L₈₀₃は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の2価の複素環基、又は

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

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

【0520】

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

10

20

30

40

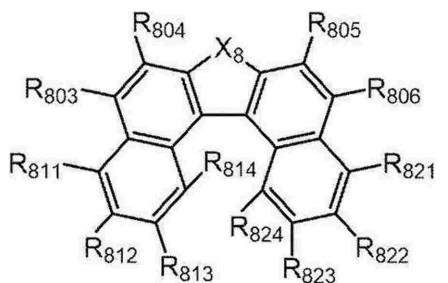
50

【0521】

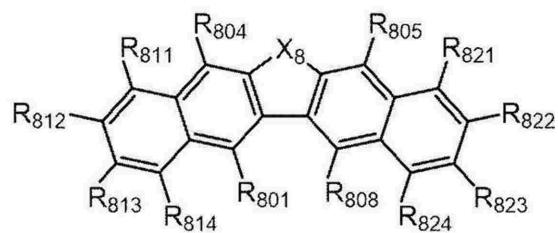
一実施形態において、前記一般式(8)で表される化合物は、下記一般式(81-1)～(81-6)のいずれかで表される。

【0522】

【化233】



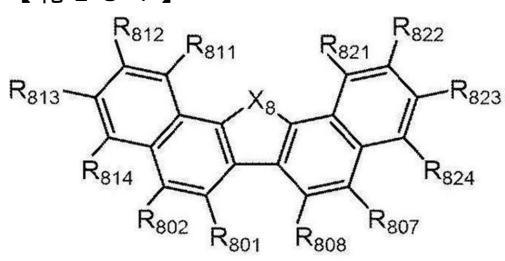
(81-1)



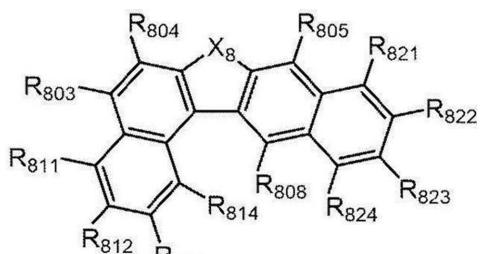
(81-2)

【0523】

【化234】



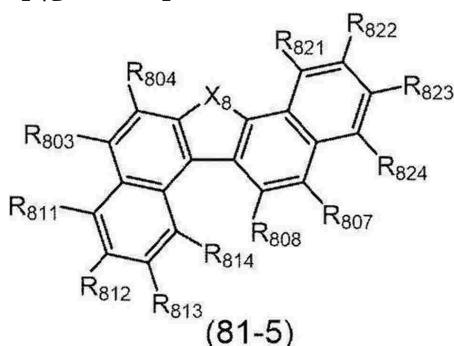
(81-3)



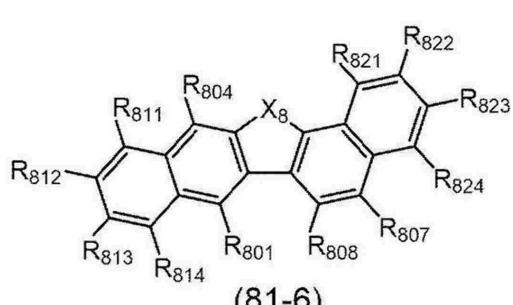
(81-4)

【0524】

【化235】



(81-5)



(81-6)

【0525】

(前記一般式(81-1)～一般式(81-6)において、

X₈は、前記一般式(8)におけるX₈と同義であり、

R₈₀₁～R₈₂₄のうち少なくとも2つは、前記一般式(84)で表される1価の基であり、

前記一般式(84)で表される1価の基ではないR₈₀₁～R₈₂₄は、それぞれ独立に

、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

10

20

30

40

50

- S i (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。)

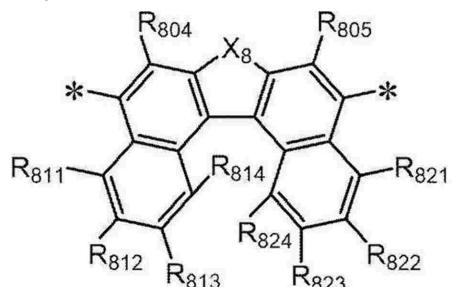
【 0526 】

10

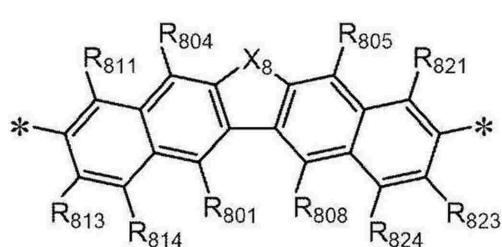
—実施形態において、前記一般式 (8) で表される化合物は、下記一般式 (81 - 7) ~ (81 - 18) のいずれかで表される。

【 0527 】

【 化 236 】



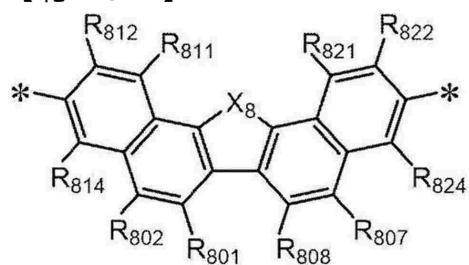
(81-7)



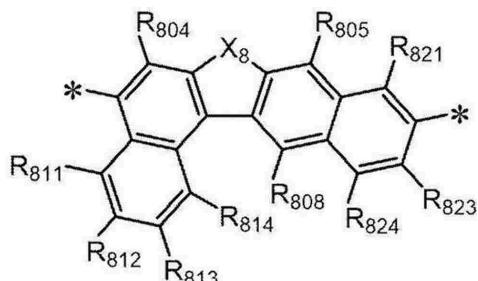
(81-8)

【 0528 】

【 化 237 】



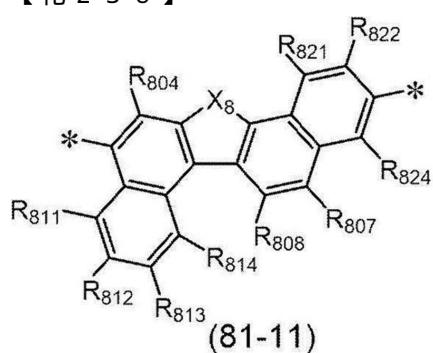
(81-9)



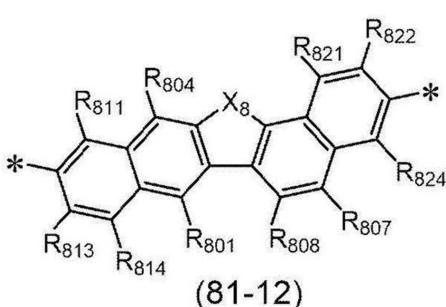
(81-10)

【 0529 】

【 化 238 】



(81-11)



(81-12)

【 0530 】

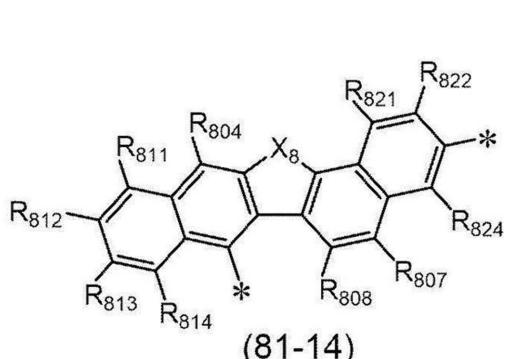
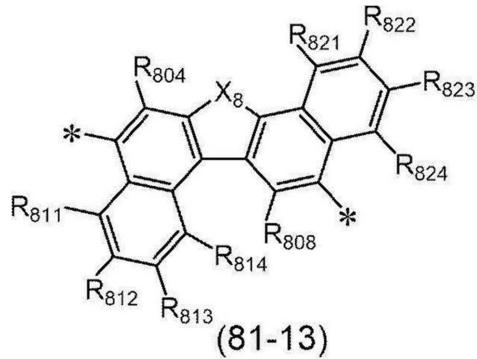
20

30

40

50

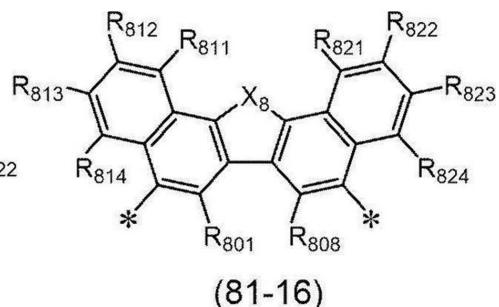
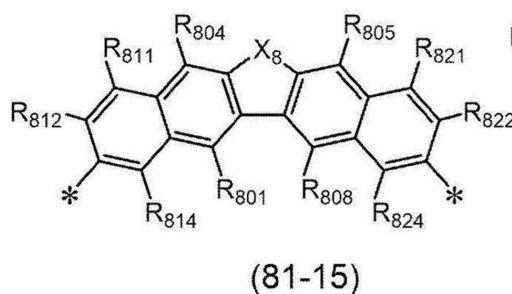
【化239】



10

【0531】

【化240】



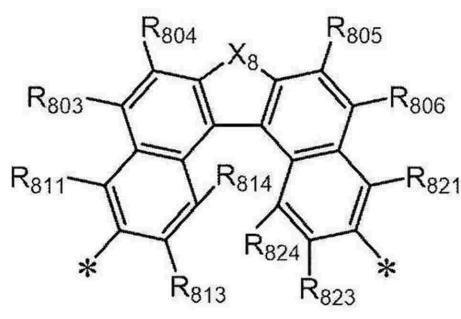
20

(81-15)

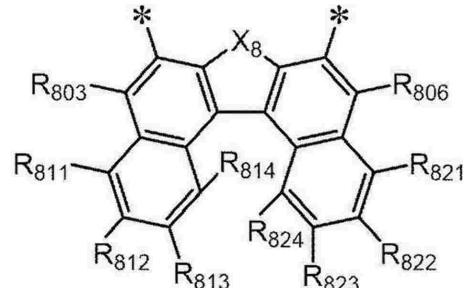
(81-16)

【0532】

【化241】



(81-17)



(81-18)

30

【0533】

(前記一般式(81-7)～一般式(81-18)において、

X_8 は、前記一般式(8)における X_8 と同義であり、

*は、前記一般式(84)で表される1価の基と結合する単結合であり、

R_{801} ～ R_{824} は、それぞれ独立に、前記一般式(81-1)～一般式(81-6)における前記一般式(84)で表される1価の基ではない R_{801} ～ R_{824} と同義である。)

40

【0534】

前記一般式(82)及び一般式(83)で表される2価の基を形成せず、かつ、前記一般式(84)で表される1価の基ではない R_{801} ～ R_{808} 、及び、前記一般式(84)で表される1価の基ではない R_{811} ～ R_{814} 及び R_{821} ～ R_{824} は、好ましくは、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

50

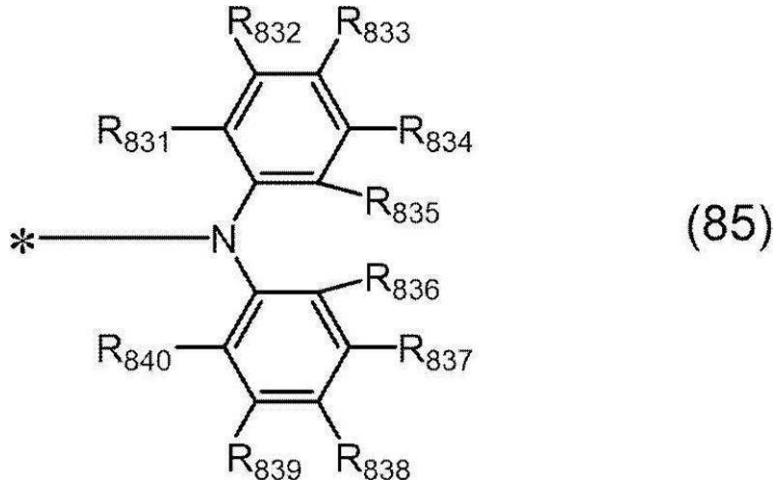
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

【0535】

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

【0536】

【化242】

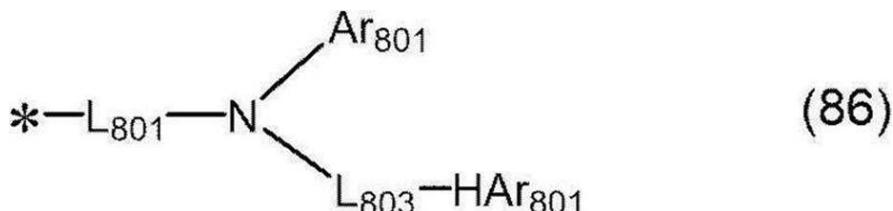


【0537】

(前記一般式 (85) において、
 R₈₃₁ ~ R₈₄₀ は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 前記一般式 (85) 中の * は、前記一般式 (84) 中の * と同義である。)

【0538】

【化243】



【0539】

(前記一般式 (86) において、

10

20

30

40

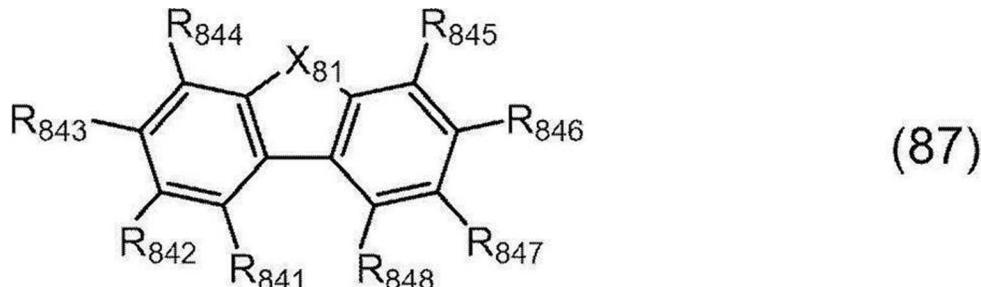
50

A_r₈₀₁、L₈₀₁及びL₈₀₃は、前記一般式(84)におけるA_r₈₀₁、L₈₀₁及びL₈₀₃と同義であり、

H A_r₈₀₁は、下記一般式(87)で表される構造である。)

【0540】

【化244】



【0541】

(前記一般式(87)において、

X₈₁は、酸素原子又は硫黄原子であり、

R₈₄₁～R₈₄₈のいずれか1つは、L₈₀₃に結合する単結合であり、

単結合ではないR₈₄₁～R₈₄₈は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

-O-(R₉₀₄)で表される基、

-S-(R₉₀₅)で表される基、

-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

【0542】

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

【0543】

10

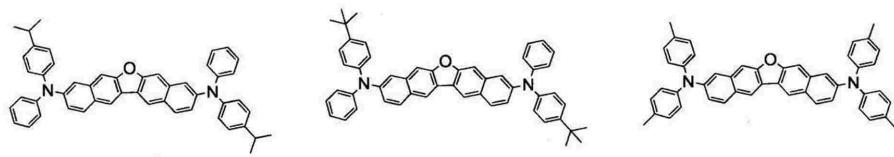
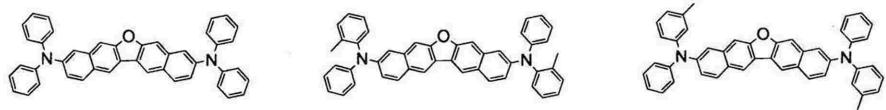
20

30

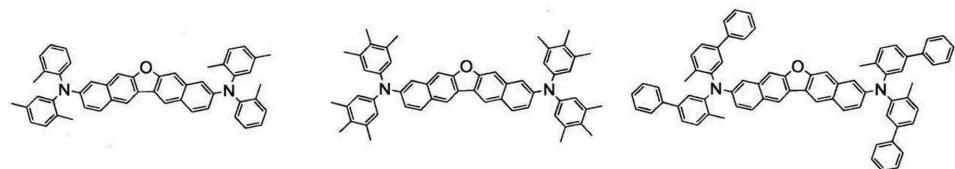
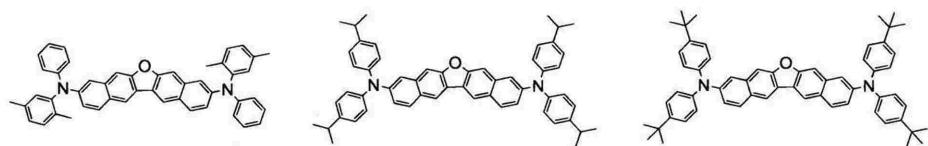
40

50

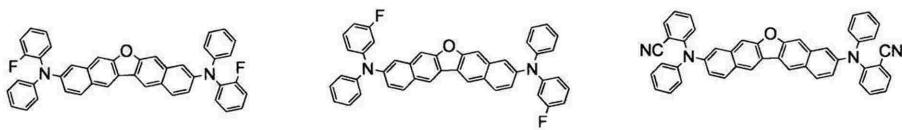
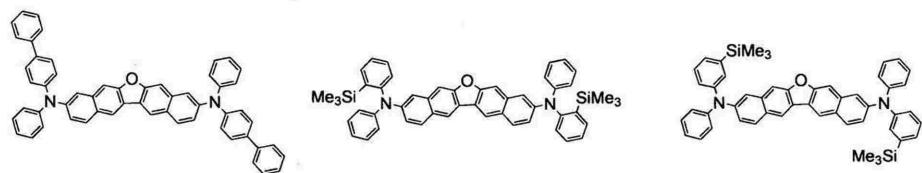
【化 2 4 5】



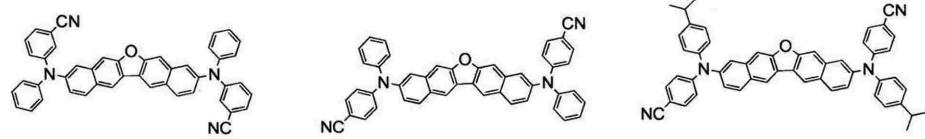
10



20



30

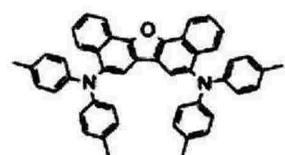
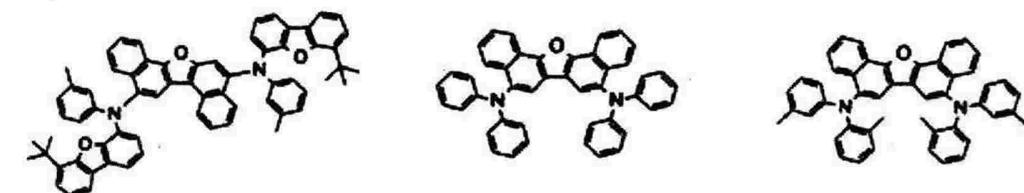
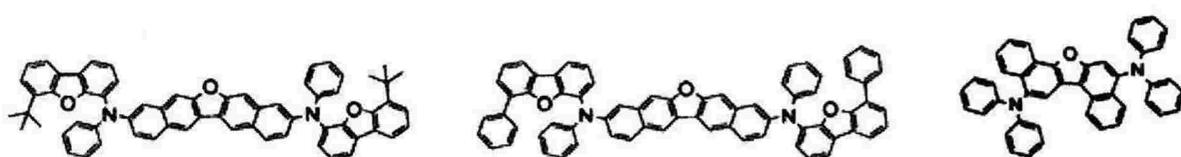
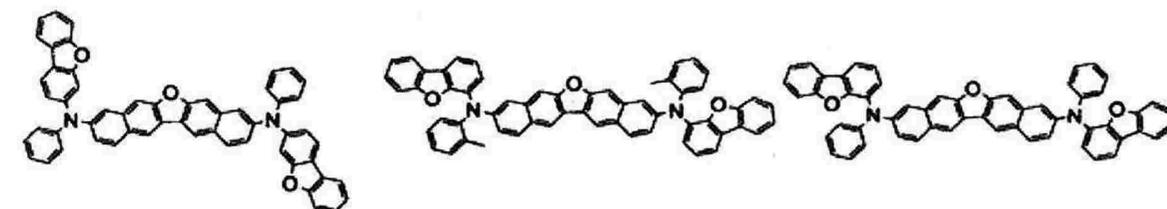
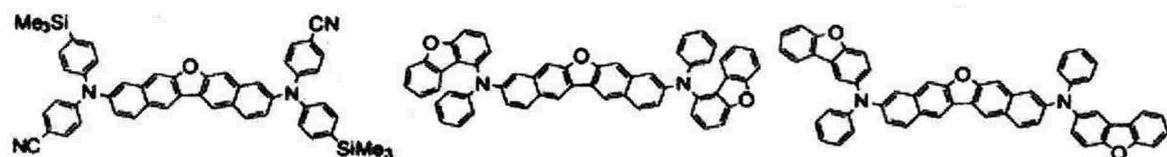


【 0 5 4 4 】

40

50

【化 2 4 6】

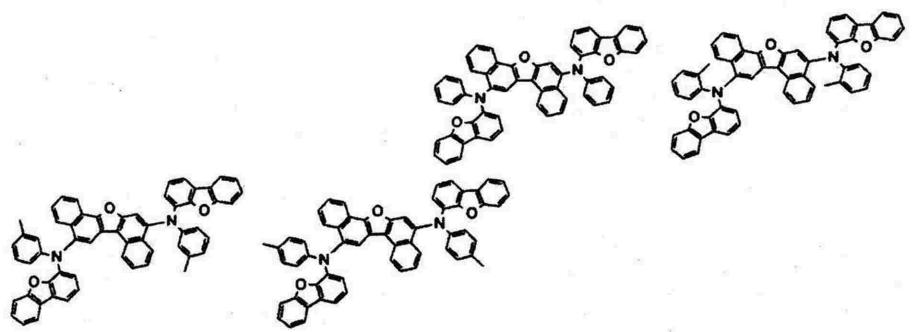


【0 5 4 5】

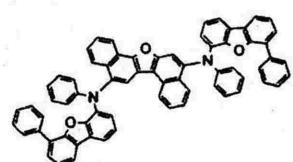
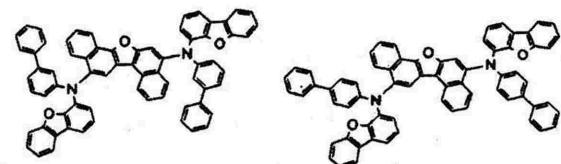
40

50

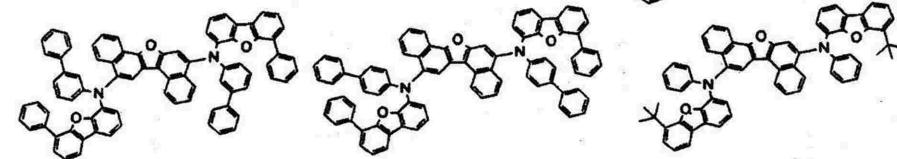
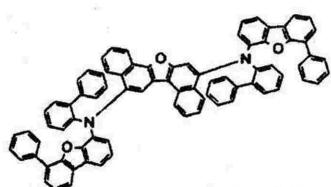
【化 2 4 7】



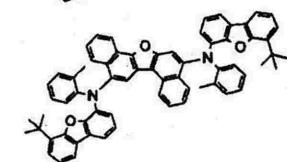
10



20



30

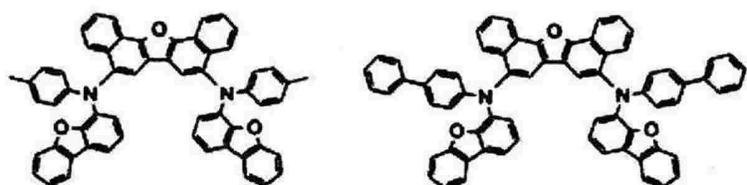
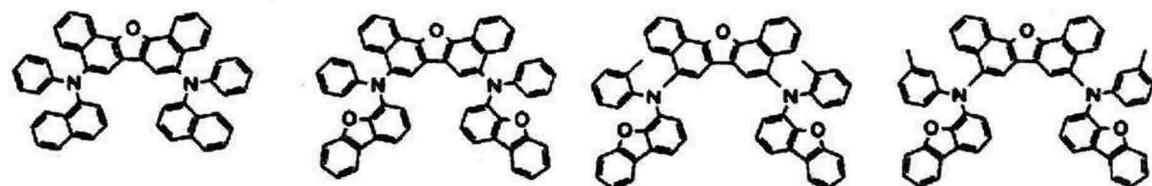


【0 5 4 6】

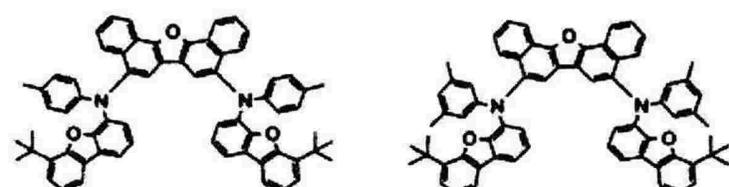
40

50

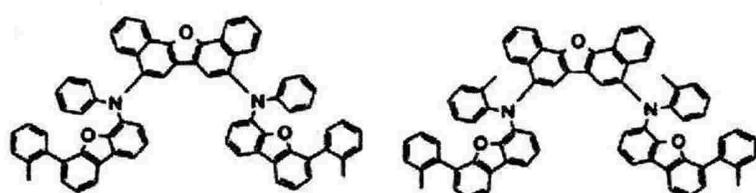
【化 2 4 8】



10



20



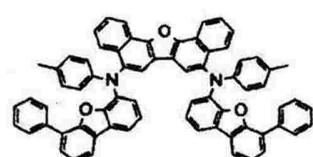
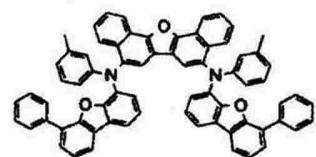
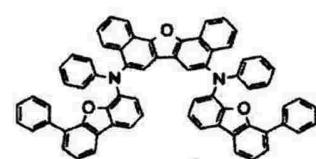
【 0 5 4 7 】

30

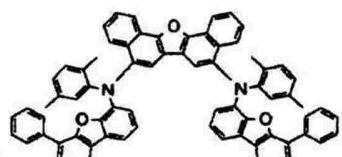
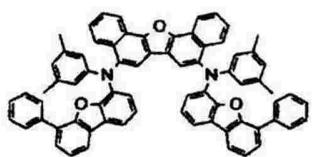
40

50

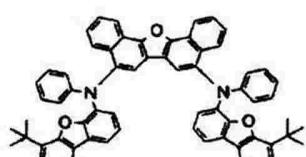
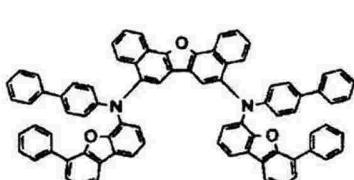
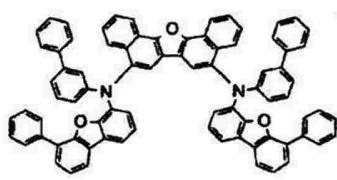
【化 2 4 9】



10



20



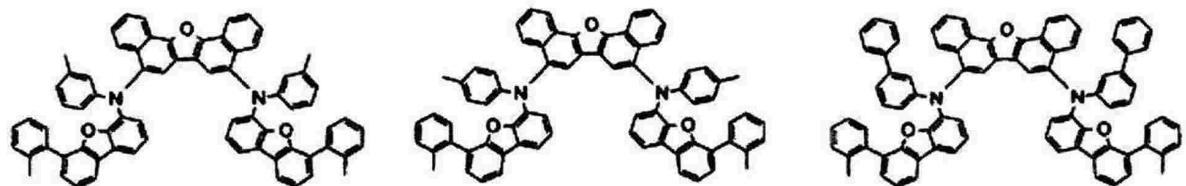
30

【0548】

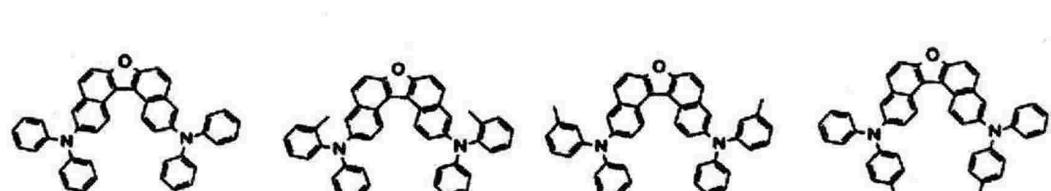
40

50

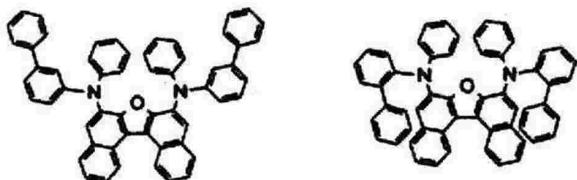
【化250】



10



20



30

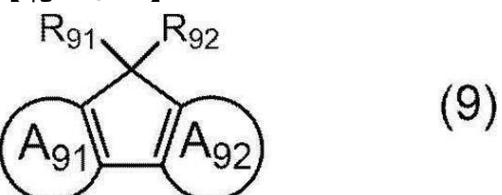
【0549】

(一般式(9)で表される化合物)

一般式(9)で表される化合物について説明する。

【0550】

【化251】



40

【0551】

(前記一般式(9)において、

A91環及びA92環は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50の芳香族炭化水素環、又は、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環であり、

A91環及びA92環からなる群から選択される1以上の環は、

下記一般式(92)で表される構造の*と結合する。)

【0552】

50

【化252】



(92)

【0553】

(前記一般式(92)において、

A93環は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環、又は、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環であり、

X9は、NR93、C(R94)(R95)、Si(R96)(R97)、Ge(R98)(R99)、酸素原子、硫黄原子又はセレン原子であり、

R91及びR92は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-Si(R901)(R902)(R903)で表される基、

-O-(R904)で表される基、

-S-(R905)で表される基、

-N(R906)(R907)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

【0554】

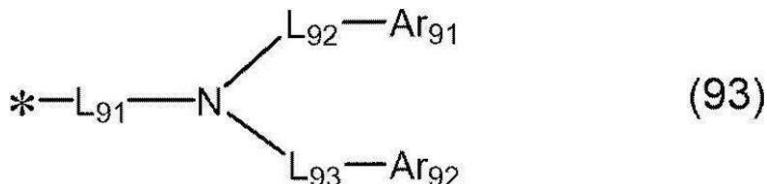
A91環及びA92環からなる群から選択される1以上の環は、前記一般式(92)で表される構造の*と結合する。即ち、一実施形態において、A91環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式(92)で表される構造の*と結合する。また、一実施形態において、A92環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式(92)で表される構造の*と結合する。

【0555】

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

【0556】

【化253】



(93)

10

20

30

40

50

【0557】

(前記一般式(93)において、

A_{91} 及び A_{92} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

L_{91} ～ L_{93} は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基、又は

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

前記一般式(93)中の*は、 A_{91} 環及び A_{92} 環のいずれかとの結合位置を示す。)

【0558】

一実施形態において、 A_{91} 環に加えて、 A_{92} 環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式(92)で表される構造の*と結合する。この場合、前記一般式(92)で表される構造は、互いに同一でもよいし異なってもよい。

【0559】

一実施形態において、 R_{91} 及び R_{92} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

一実施形態において、 R_{91} 及び R_{92} は、互いに結合してフルオレン構造を形成する。

【0560】

一実施形態において、環 A_{91} 及び環 A_{92} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環であり、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン環である。

【0561】

一実施形態において、環 A_{93} は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環であり、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン環である。

一実施形態において、 X_9 は、酸素原子又は硫黄原子である。

【0562】

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

【0563】

10

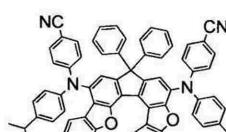
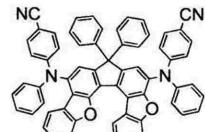
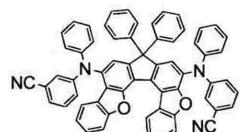
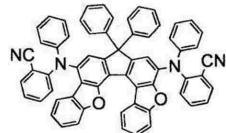
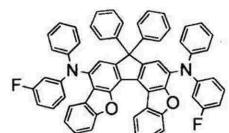
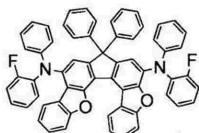
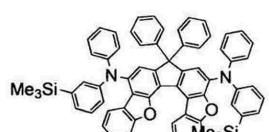
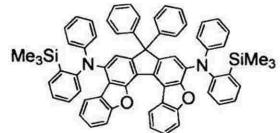
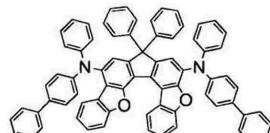
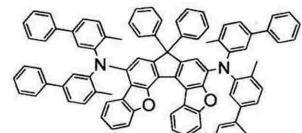
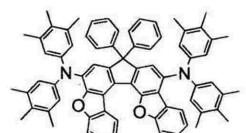
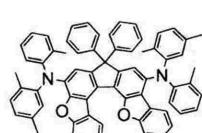
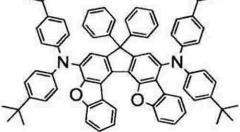
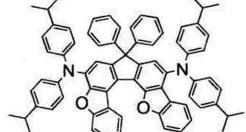
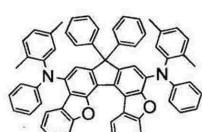
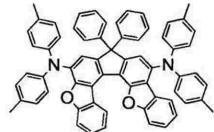
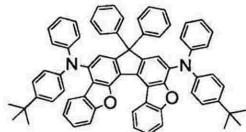
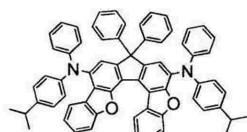
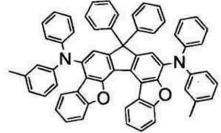
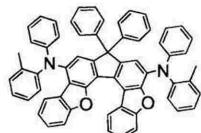
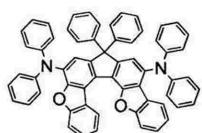
20

30

40

50

【化 254】



【0564】

10

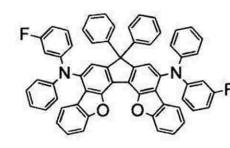
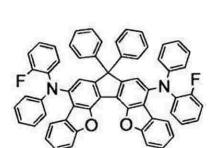
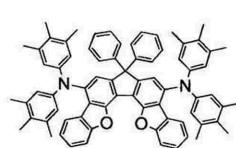
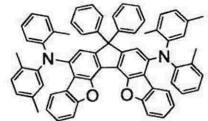
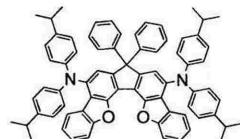
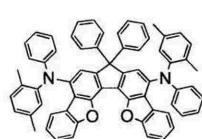
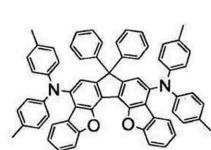
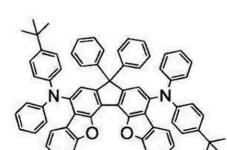
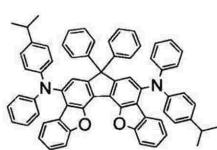
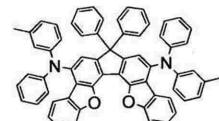
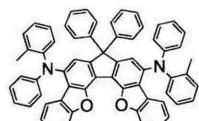
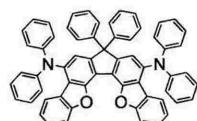
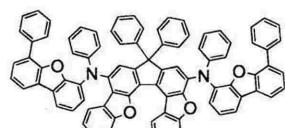
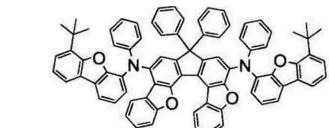
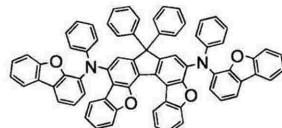
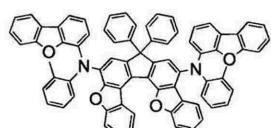
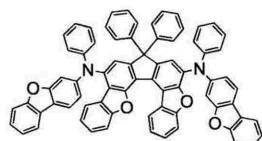
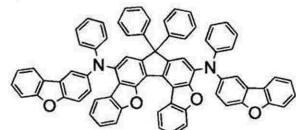
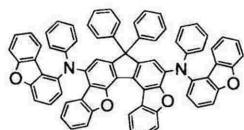
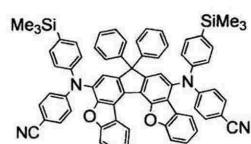
20

30

40

50

【化 255】



【0565】

10

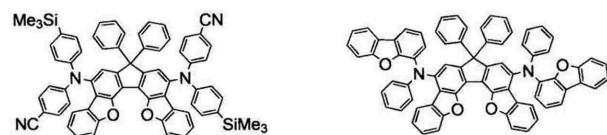
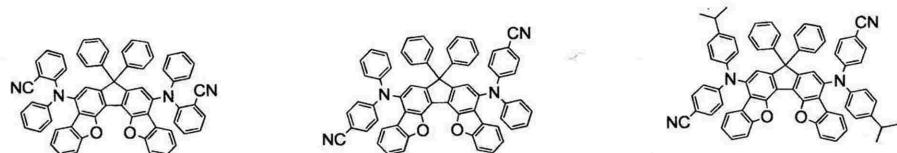
20

30

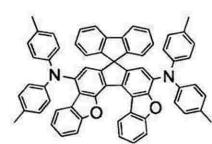
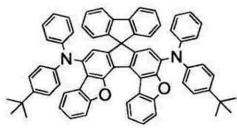
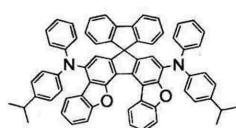
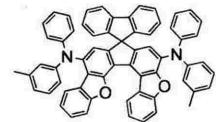
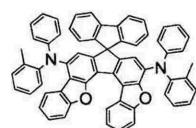
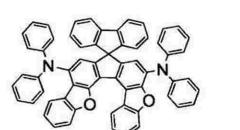
40

50

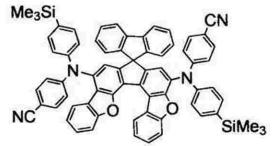
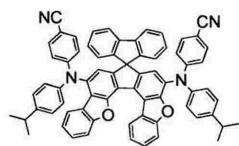
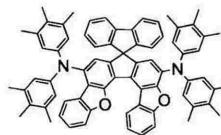
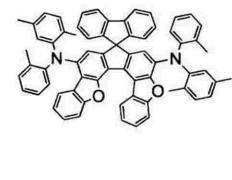
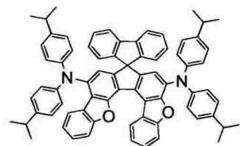
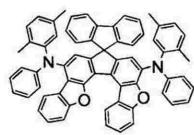
【化 2 5 6】



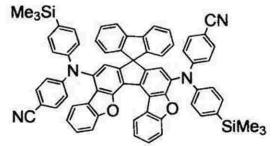
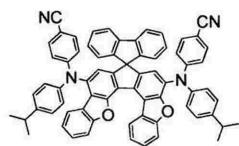
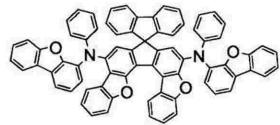
10



20



30



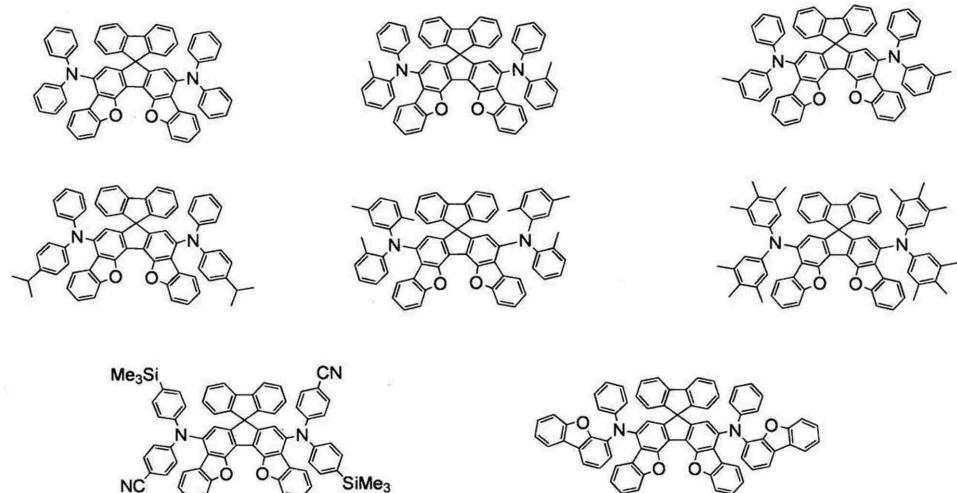
【0 5 6 6】

40



50

【化257】



10

【0567】

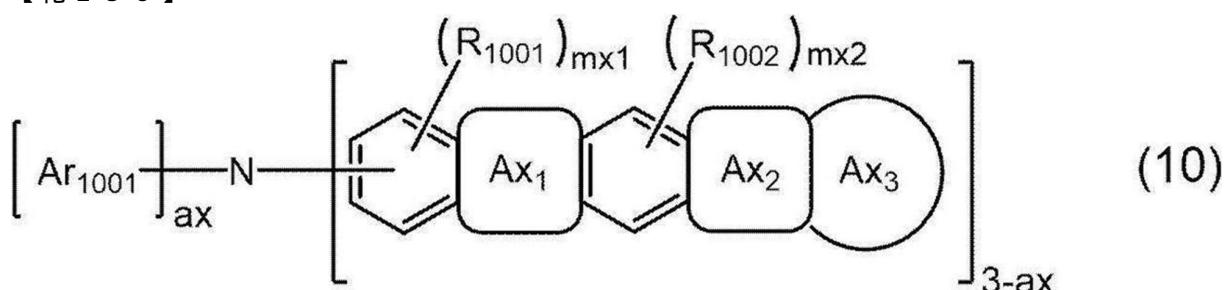
(一般式(10)で表される化合物)

一般式(10)で表される化合物について説明する。

【0568】

【化258】

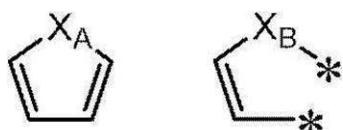
20



【0569】

【化259】

30



(10a) (10b)

【0570】

(前記一般式(10)において、

A x 1 環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式(10a)で表される環であり、

A x 2 環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式(10b)で表される環であり、

前記一般式(10b)中の2つの*は、A x 3 環の任意の位置と結合し、

X_A 及び X_B は、それぞれ独立に、C(R1003)(R1004)、Si(R1005)(R1006)、酸素原子又は硫黄原子であり、

A x 3 環は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50の芳香族炭化水素環、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環であり、

Ar1001は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基であり、

40

50

R₁₀₀₁ ~ R₁₀₀₆ は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 - S i (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 m × 1 は、3 であり、m × 2 は、2 であり、
 複数の R₁₀₀₁ は、互いに同一であるか、又は異なり、
 複数の R₁₀₀₂ は、互いに同一であるか、又は異なり、
 a × は、0、1 又は 2 であり、
 a × が 0 又は 1 の場合、「3 - a ×」で示されるカッコ内の構造は、互いに同一である
 か、又は異なり、
 a × が 2 の場合、複数の A_{r1001} は、互いに同一であるか、又は異なる。)

【0571】

—実施形態において、A_{r1001} は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。

【0572】

—実施形態において、A_{x3} 環は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環であり、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン環、置換もしくは無置換のナフタレン環、又は置換もしくは無置換のアントラセン環である。

【0573】

—実施形態において、R₁₀₀₃ 及び R₁₀₀₄ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基である。

【0574】

—実施形態において、a × は 1 である。

【0575】

前記一般式 (10) で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

【0576】

10

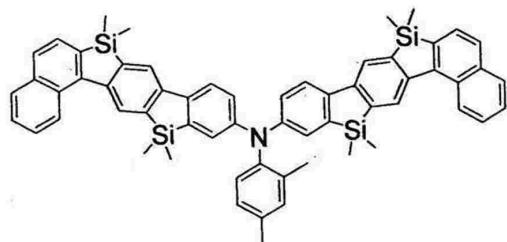
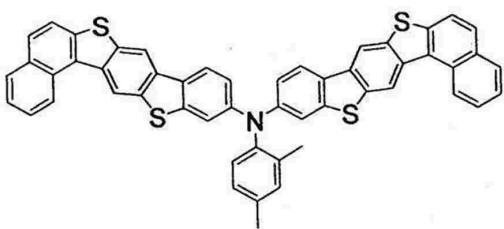
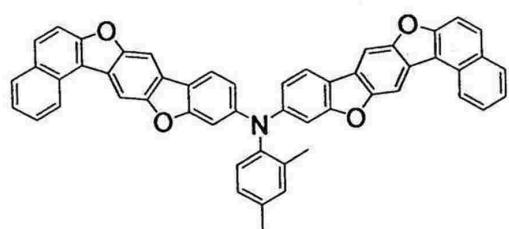
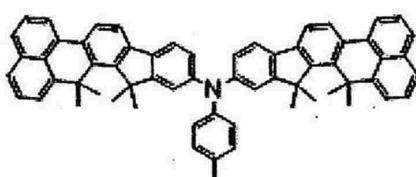
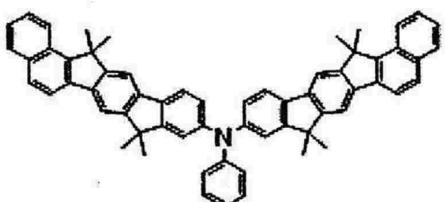
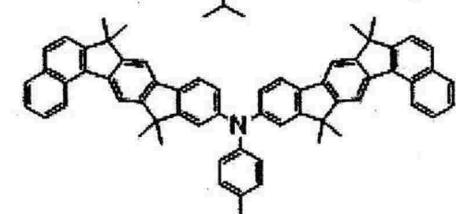
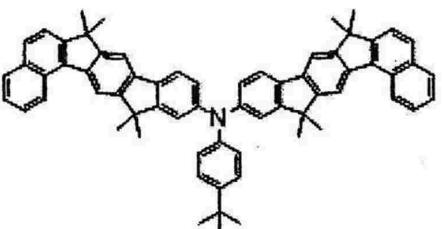
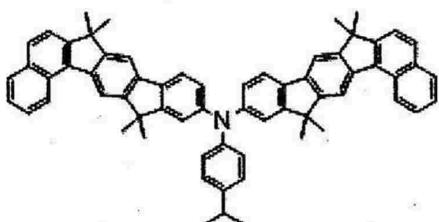
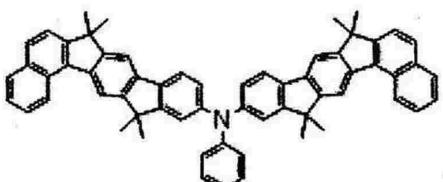
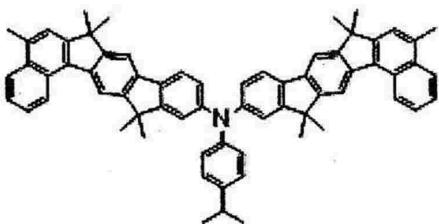
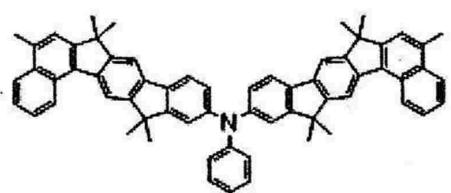
20

30

40

50

【化 2 6 0】



10

20

30

40

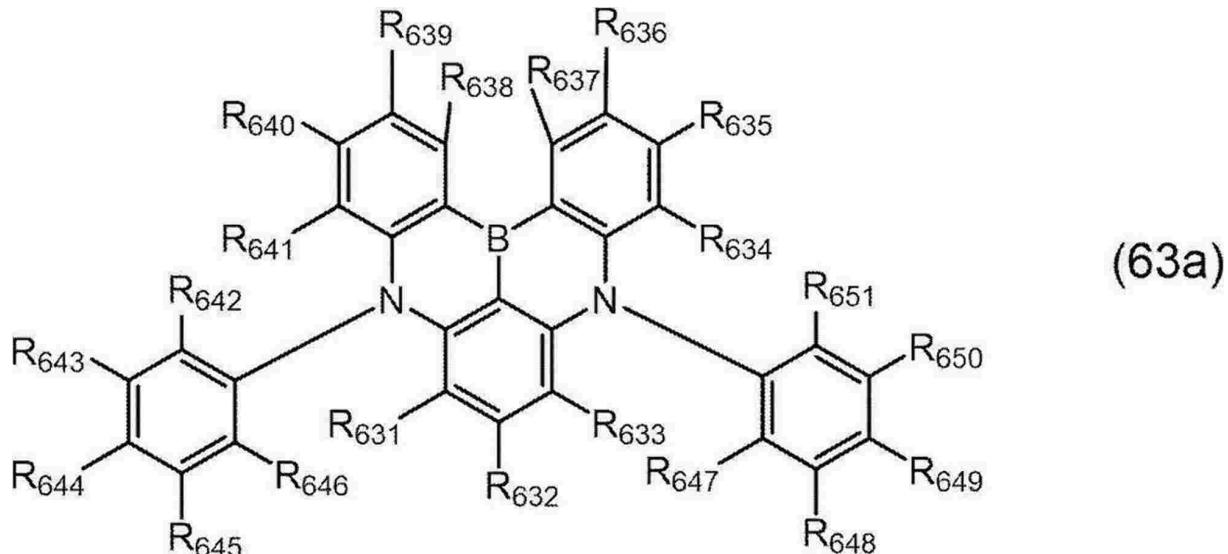
【0 5 7 7】

一実施形態においては、発光層5が、発光性化合物として、
 前記一般式(4)で表される化合物、
 前記一般式(5)で表される化合物、
 前記一般式(6)で表される化合物、及び
 下記一般式(63a)で表される化合物からなる群から選択される1以上の化合物を含
 有する。

【0 5 7 8】

50

【化261】



【0579】

(前記一般式(63a)において、

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

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

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

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

R631～R651のうちの隣接する2つ以上の1組以上は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-Si(R901)(R902)(R903)で表される基、

-O-(R904)で表される基、

-S-(R905)で表される基、

-N(R906)(R907)で表される基、

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

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

ハロゲン原子、

シアノ基、

10

20

30

40

50

ニトロ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 5 0 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、

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

- O - (R 9 0 4) で表される基、

- S - (R 9 0 5) で表される基、

- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の複素環基である。)

【 0 5 8 0 】

一実施形態においては、前記一般式 (4) で表される化合物が、前記一般式 (4 1 - 3)、一般式 (4 1 - 4) 又は一般式 (4 1 - 5) で表される化合物であり、前記一般式 (4 1 - 5) 中の A 1 環が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 0 ~ 5 0 の縮合芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 5 0 の縮合複素環である。

【 0 5 8 1 】

一実施形態においては、前記一般式 (4 1 - 3)、一般式 (4 1 - 4)、及び一般式 (4 1 - 5) における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 0 ~ 5 0 の縮合芳香族炭化水素環が、

置換もしくは無置換のナフタレン環、

置換もしくは無置換のアントラセン環、又は

置換もしくは無置換のフルオレン環であり、

前記置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 5 0 の縮合複素環が、

置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、

置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は

置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

【 0 5 8 2 】

一実施形態においては、前記一般式 (4 1 - 3)、一般式 (4 1 - 4) 又は一般式 (4 1 - 5) における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 0 ~ 5 0 の縮合芳香族炭化水素環が、

置換もしくは無置換のナフタレン環、又は

置換もしくは無置換のフルオレン環であり、

前記置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 5 0 の縮合複素環が、

置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、

置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は

置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

【 0 5 8 3 】

一実施形態においては、前記一般式 (4) で表される化合物が、

下記一般式 (4 6 1) で表される化合物、

下記一般式 (4 6 2) で表される化合物、

下記一般式 (4 6 3) で表される化合物、

下記一般式 (4 6 4) で表される化合物、

下記一般式 (4 6 5) で表される化合物、

下記一般式 (4 6 6) で表される化合物、及び

下記一般式 (4 6 7) で表される化合物からなる群から選択される。

【 0 5 8 4 】

10

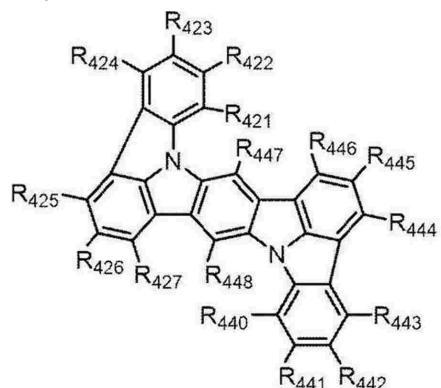
20

30

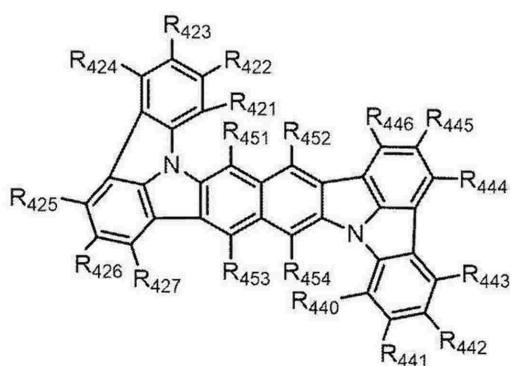
40

50

【化262】



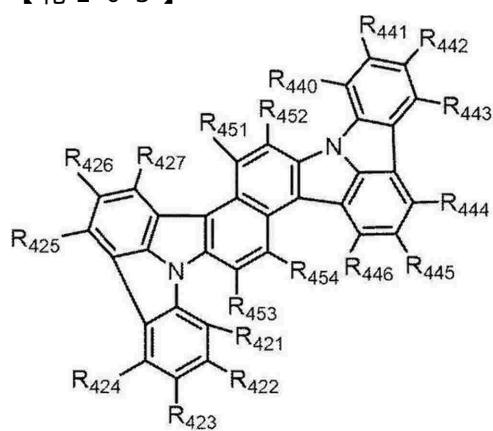
(461)



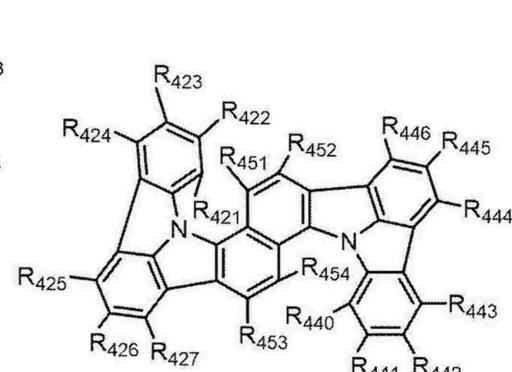
(462)

【0585】

【化263】



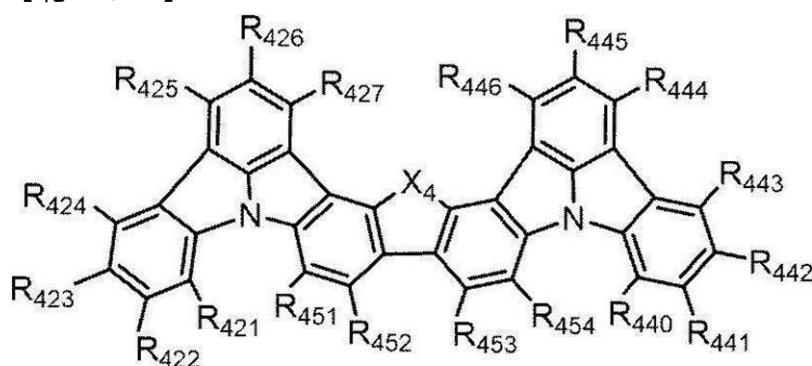
(463)



(464)

【0586】

【化264】



(465)

【0587】

10

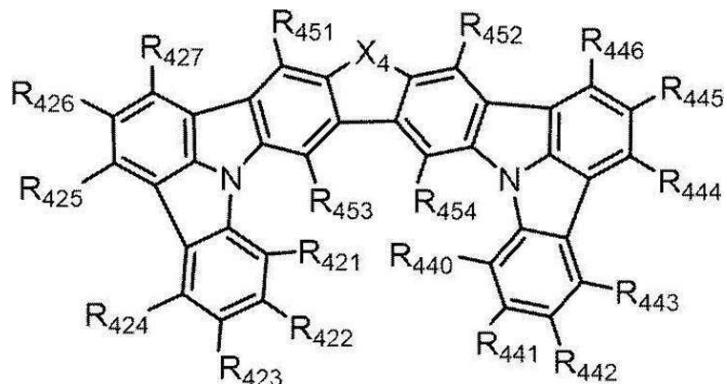
20

30

40

50

【化265】

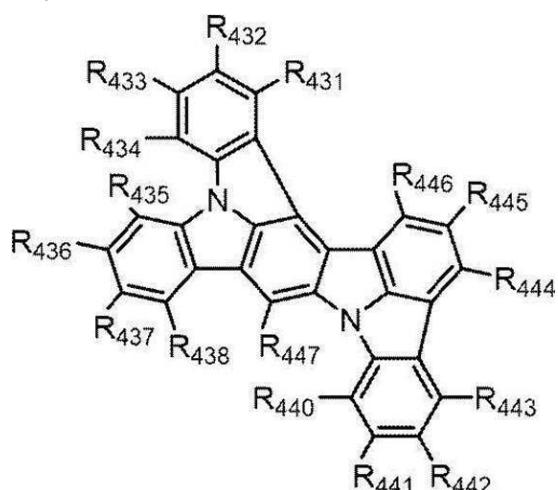


(466)

10

【0588】

【化266】



(467)

20

30

【0589】

(前記一般式(461)～(467)中、

R₄₂₁～R₄₂₇、R₄₃₁～R₄₃₆、R₄₄₀～R₄₄₈及びR₄₅₁～R₄₅₄のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

-Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

-O-(R₉₀₄)で表される基、

-S-(R₉₀₅)で表される基、

-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

ハロゲン原子、

40

50

シアノ基、
 ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 X_4 は、酸素原子、 NR_{801} 、又は $C(R_{802})(R_{803})$ であり、
 R_{801} 、 R_{802} 及び R_{803} は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 好ましくは、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であり、
 R_{801} が複数存在する場合、複数の R_{801} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{802} が複数存在する場合、複数の R_{802} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{803} が複数存在する場合、複数の R_{803} は、互いに同一であるか又は異なる。)

【0590】

—実施形態においては、 $R_{421} \sim R_{427}$ 及び $R_{440} \sim R_{448}$ が、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

【0591】

—実施形態においては、 $R_{421} \sim R_{427}$ 及び $R_{440} \sim R_{447}$ が、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、及び
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 18 の複素環基からなる群から選択される。

【0592】

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

【0593】

10

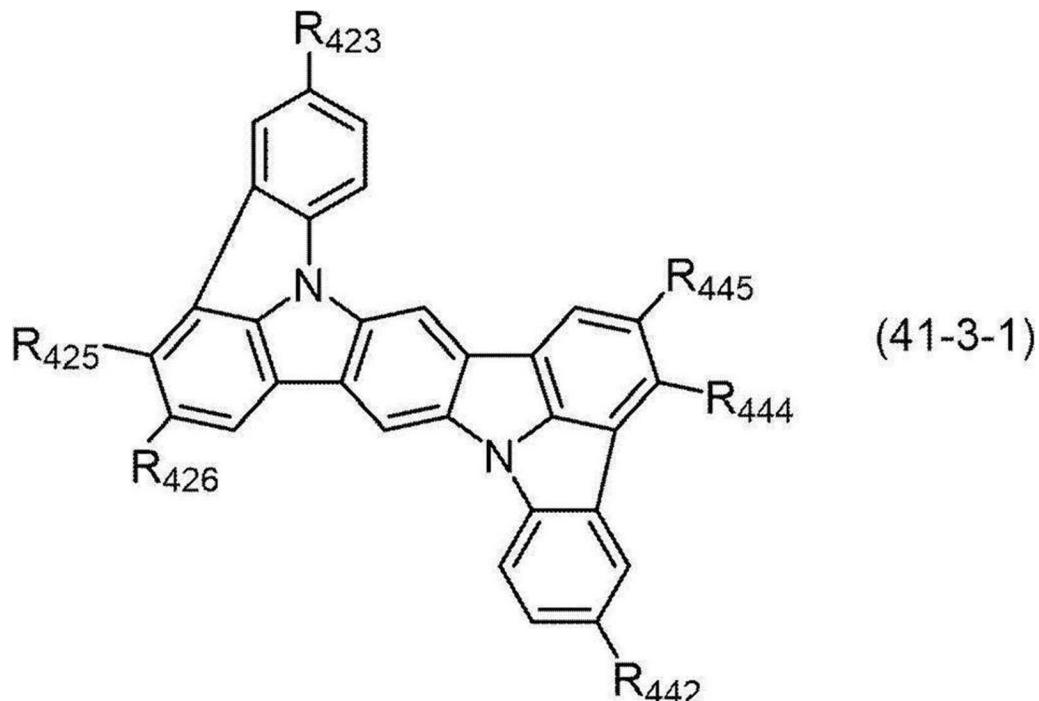
20

30

40

50

【化267】



20

【0594】

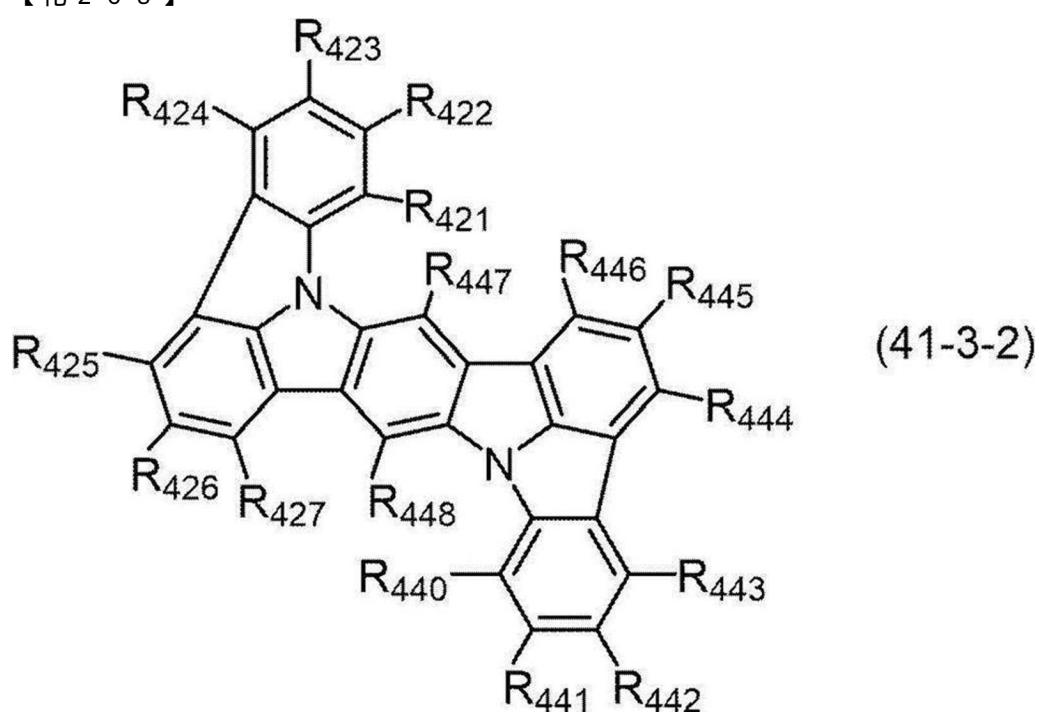
(前記一般式(41-3-1)中、R₄₂₃、R₄₂₅、R₄₂₆、R₄₄₂、R₄₄₄及びR₄₄₅は、それぞれ独立に、前記一般式(41-3)におけるR₄₂₃、R₄₂₅、R₄₂₆、R₄₄₂、R₄₄₄及びR₄₄₅と同義である。)

【0595】

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

【0596】

【化268】



50

【0597】

(前記一般式(41-3-2)中、R₄₂₁～R₄₂₇及びR₄₄₀～R₄₄₈は、それぞれ

50

独立に、前記一般式(41-3)におけるR₄₂₁～R₄₂₇及びR₄₄₀～R₄₄₈と同義であり、

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

【0598】

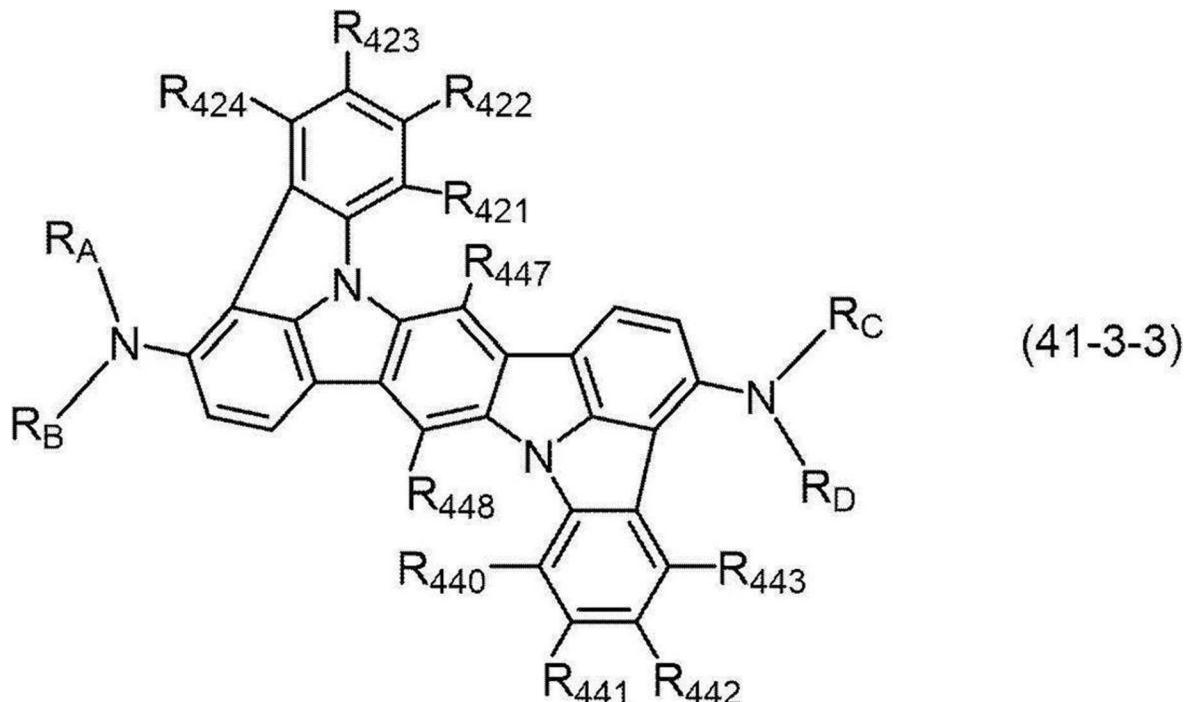
一実施形態においては、前記一般式(41-3-2)における、R₄₂₁～R₄₂₇及びR₄₄₀～R₄₄₆のいずれか2つが、-N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基である。

【0599】

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

【0600】

【化269】



【0601】

(前記一般式(41-3-3)中、R₄₂₁～R₄₂₄、R₄₄₀～R₄₄₃、R₄₄₇及びR₄₄₈は、それぞれ独立に、前記一般式(41-3)におけるR₄₂₁～R₄₂₄、R₄₄₀～R₄₄₃、R₄₄₇及びR₄₄₈と同義であり、

R_A、R_B、R_C及びR_Dは、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～18の複素環基である。)

【0602】

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

【0603】

10

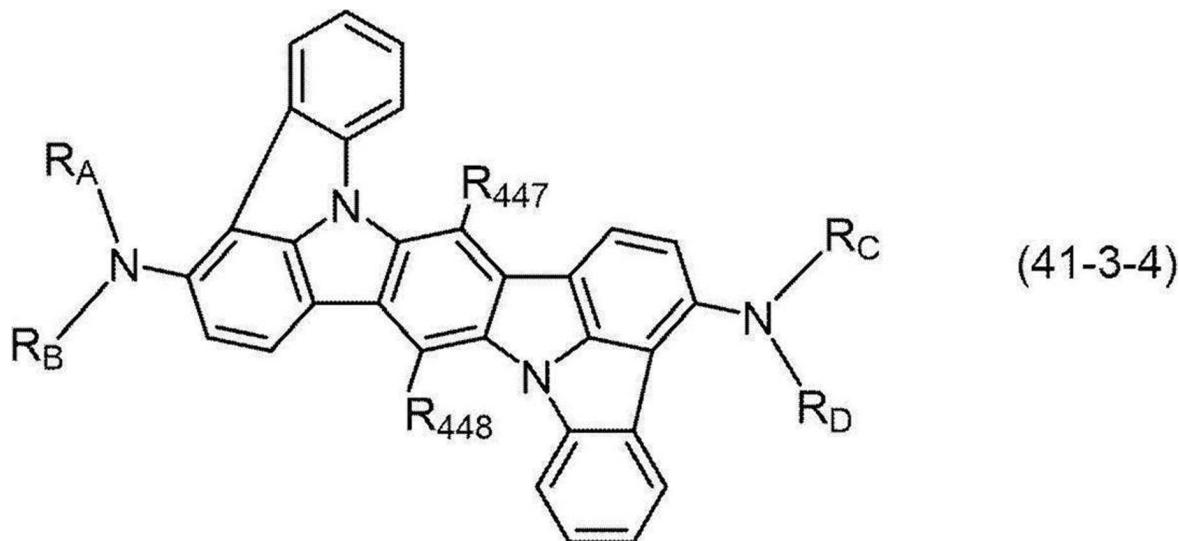
20

30

40

50

【化270】



10

【0604】

(前記一般式(41-3-4)中、R₄₄₇、R₄₄₈、R_A、R_B、R_C及びR_Dは、それぞれ独立に、前記一般式(41-3-3)におけるR₄₄₇、R₄₄₈、R_A、R_B、R_C及びR_Dと同義である。)

20

【0605】

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

【0606】

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

【0607】

一実施形態においては、R₄₄₇及びR₄₄₈が、水素原子である。

【0608】

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

30

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

【0609】

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

40

【0610】

本明細書において、「ホスト材料」とは、例えば、「層の50質量%以上」含まれる材料である。したがって、例えば、有機EL素子1Aの場合、発光層5は、前記一般式(1A)で表される化合物を、発光層の全質量の50質量%以上、含有する。

【0611】

(発光層の膜厚)

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

50

【0612】

(発光層における化合物の含有率)

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

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

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

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

【0613】

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

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

【0614】

図2に、本実施形態に係る有機EL素子の一例の概略構成を示す。

図2に示す有機EL素子1Bは、有機層10Bが、第一の発光領域5Bを含む点で、有機EL素子1Aと異なり、その他の点は、有機EL素子1Aと同様である。第一の発光領域5Bは、陽極3側から順に、第一の発光層51及び第二の発光層52を含む。

第一の発光層51は、第一の化合物を含有し、第二の発光層52は、第二の化合物を含有する。

【0615】

(第一の化合物)

有機EL素子1Bにおいて、第一の化合物は、第一実施形態に係る化合物である。

本実施形態に係る有機EL素子において、第一の化合物は、前記一般式(100A)で表される化合物であることが好ましい。第一の化合物は、前記一般式(1A)で表される化合物であってもよい。

【0616】

(第二の化合物)

有機EL素子1Bにおいて、第二の化合物は、下記一般式(2)で表される化合物である。

【0617】

10

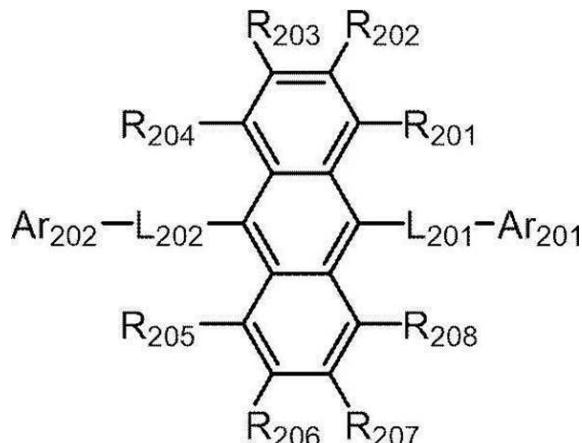
20

30

40

50

【化271】



(2)

【0618】

(前記一般式(2)において、

R₂₀₁～R₂₀₈は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

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

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

- C(=O)R₈₀₁で表される基、- COOR₈₀₂で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

L₂₀₁及びL₂₀₂は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基であり、

Ar₂₀₁及びAr₂₀₂は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

【0619】

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

10

20

30

40

50

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
 R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₅ が複数存在する場合、複数の R₉₀₅ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₆ が複数存在する場合、複数の R₉₀₆ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₉₀₇ が複数存在する場合、複数の R₉₀₇ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₁ が複数存在する場合、複数の R₈₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、
 R₈₀₂ が複数存在する場合、複数の R₈₀₂ は、互いに同一であるか又は異なる。)

10

【0620】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、

R₂₀₁ ~ R₂₀₈ は、それぞれ独立に、
 水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

- O - (R₉₀₄) で表される基、

- S - (R₉₀₅) で表される基、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、

- C (=O) R₈₀₁ で表される基、

- COOR₈₀₂ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、又は

ニトロ基であり、

L₂₀₁ 及び L₂₀₂ は、それぞれ独立に、

20

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 倍の複素環基であり、

A_{r201} 及び A_{r202} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

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

30

【0621】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、

L₂₀₁ 及び L₂₀₂ は、それぞれ独立に、

単結合、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基であり、

A_{r201} 及び A_{r202} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であることが好ましい。

40

【0622】

本実施形態に係る有機 E L 素子において、

A_{r201} 及び A_{r202} は、それぞれ独立に、

フェニル基、

ナフチル基、

フェナントリル基、

ビフェニル基、

50

ターフェニル基、
ジフェニルフルオレニル基、
ジメチルフルオレニル基、
ベンゾジフェニルフルオレニル基、
ベンゾジメチルフルオレニル基、
ジベンゾフラニル基、
ジベンゾチエニル基、
ナフトベンゾフラニル基、又は
ナフトベンゾチエニル基であることが好ましい。

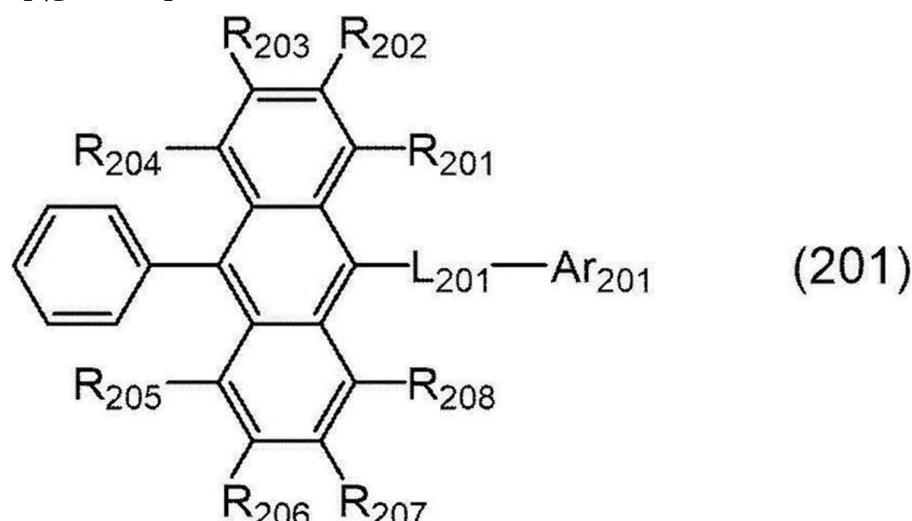
【0623】

10

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

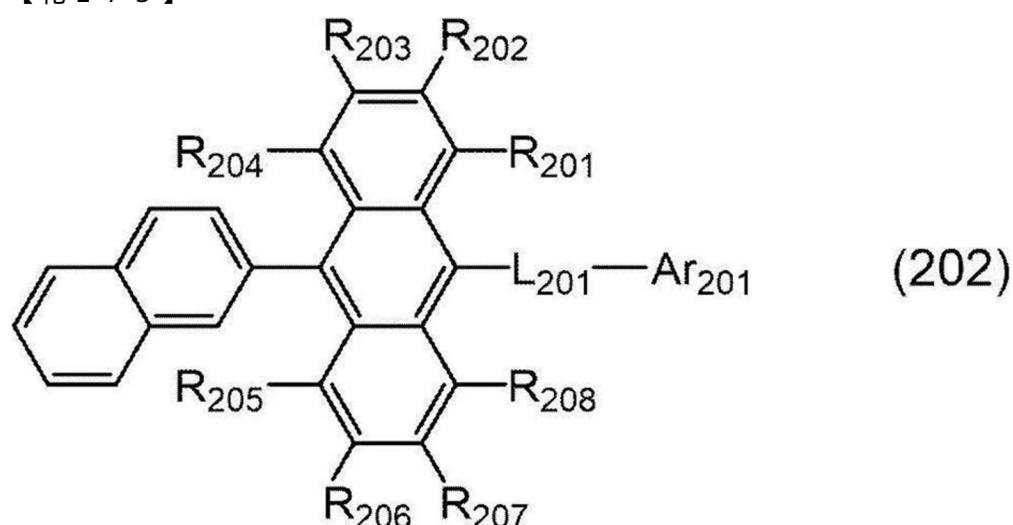
【0624】

【化272】



【0625】

【化273】



【0626】

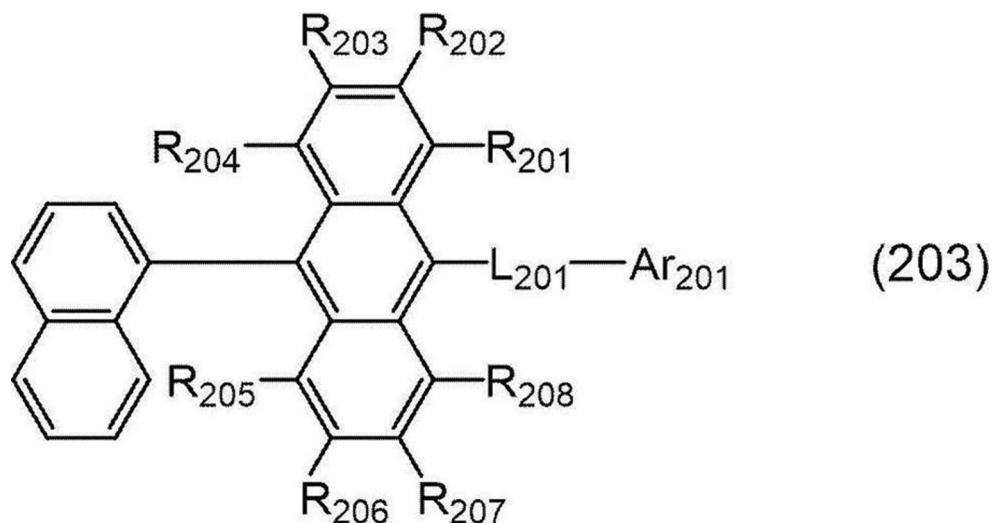
20

30

40

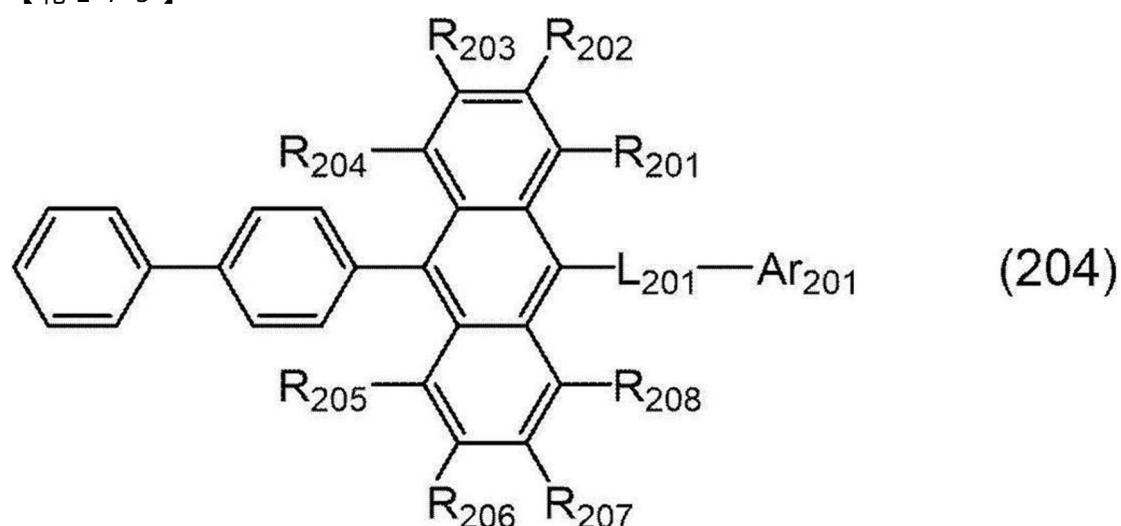
50

【化 2 7 4】



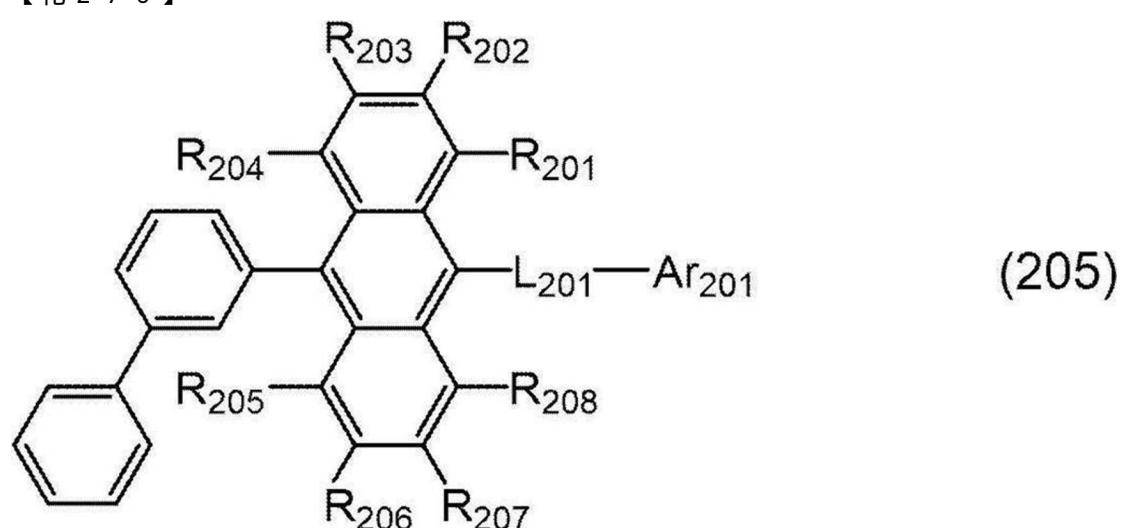
【0 6 2 7】

【化 2 7 5】



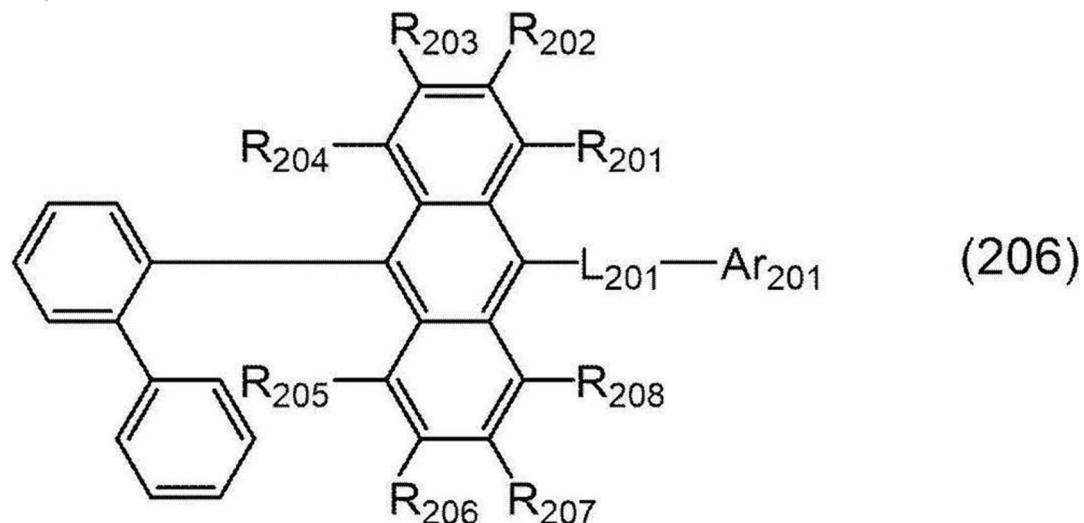
【0 6 2 8】

【化 2 7 6】



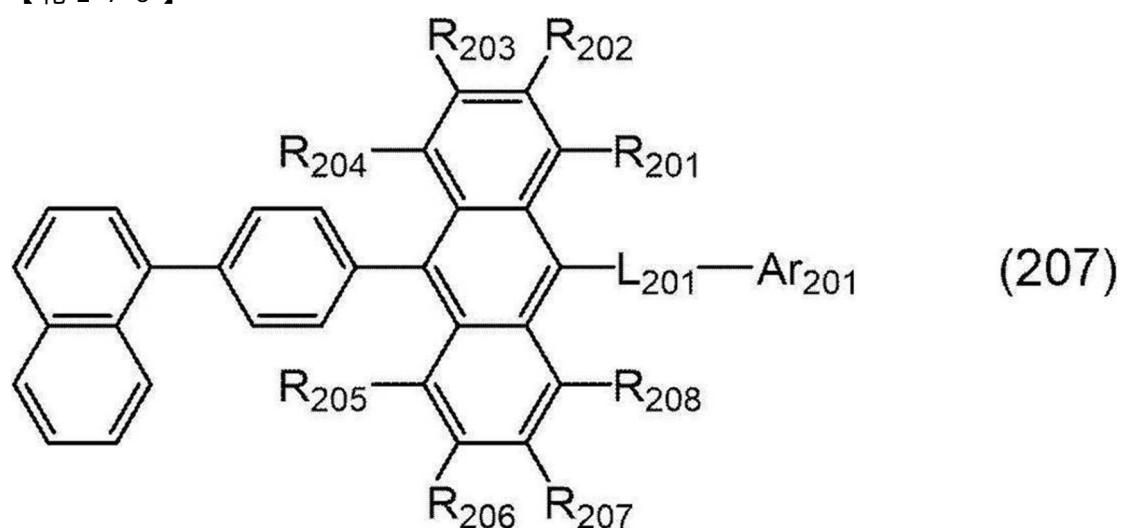
【0 6 2 9】

【化277】



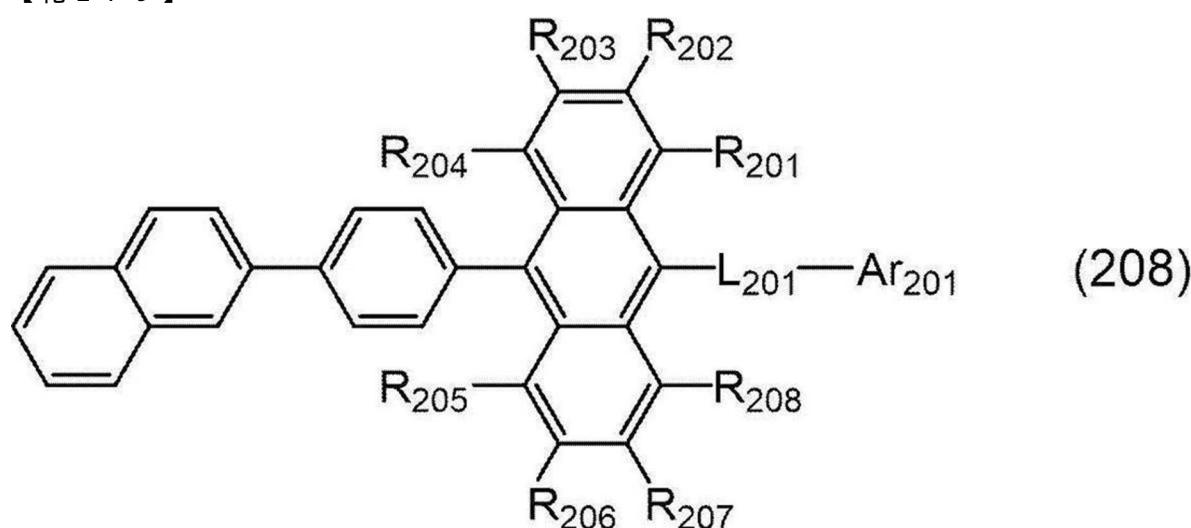
【0630】

【化278】



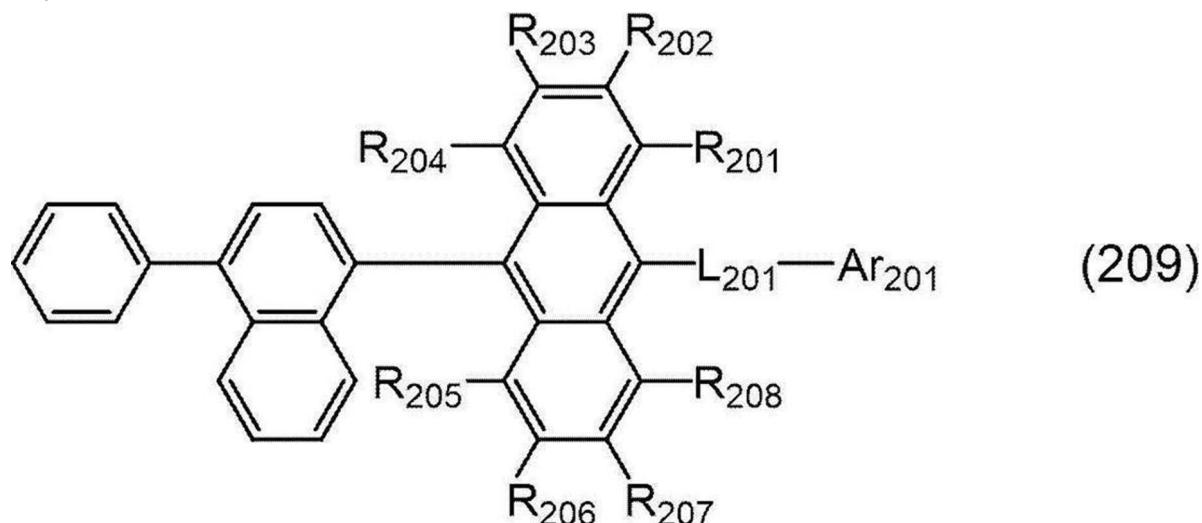
【0631】

【化279】



【0632】

【化280】



10

【0633】

(前記一般式(201)～(209)中、

L₂₀₁及びAr₂₀₁は、前記一般式(2)におけるL₂₀₁及びAr₂₀₁と同義であり、R₂₀₁～R₂₀₈は、それぞれ独立に、前記一般式(2)におけるR₂₀₁～R₂₀₈と同義である。)

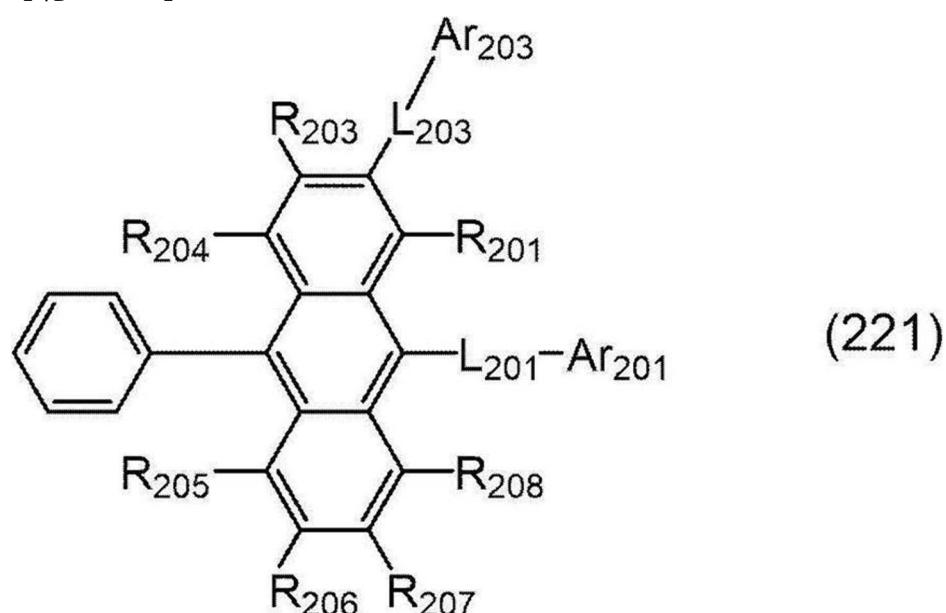
20

【0634】

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

【0635】

【化281】



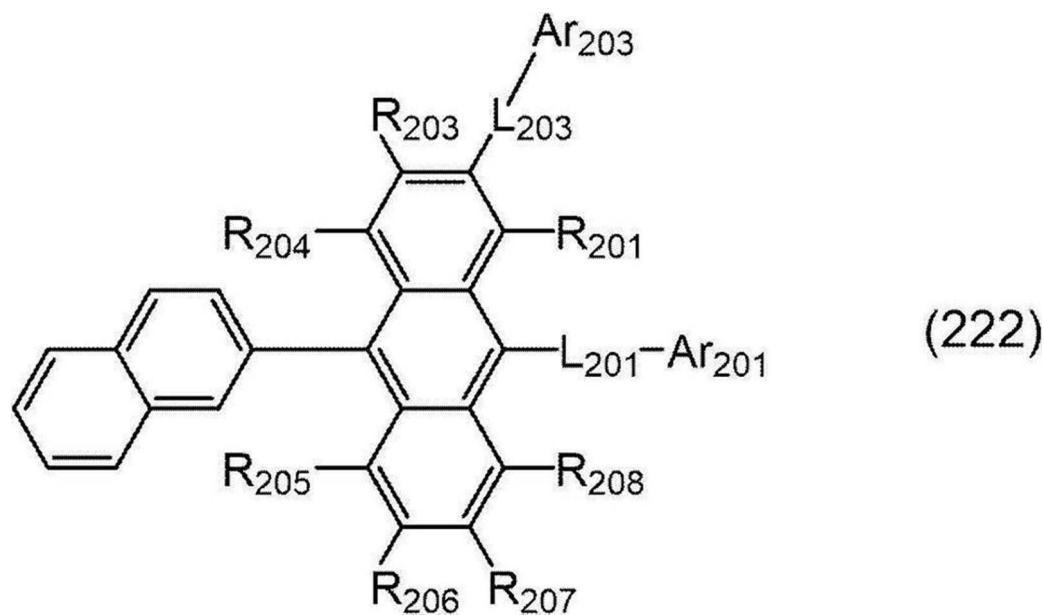
30

【0636】

40

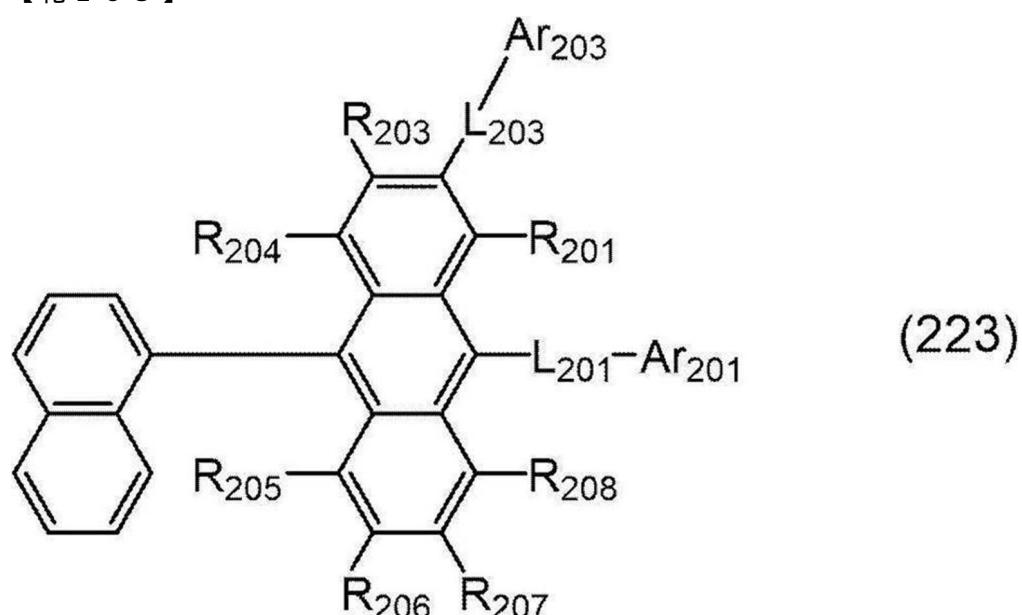
50

【化 2 8 2】



【0 6 3 7】

【化 2 8 3】

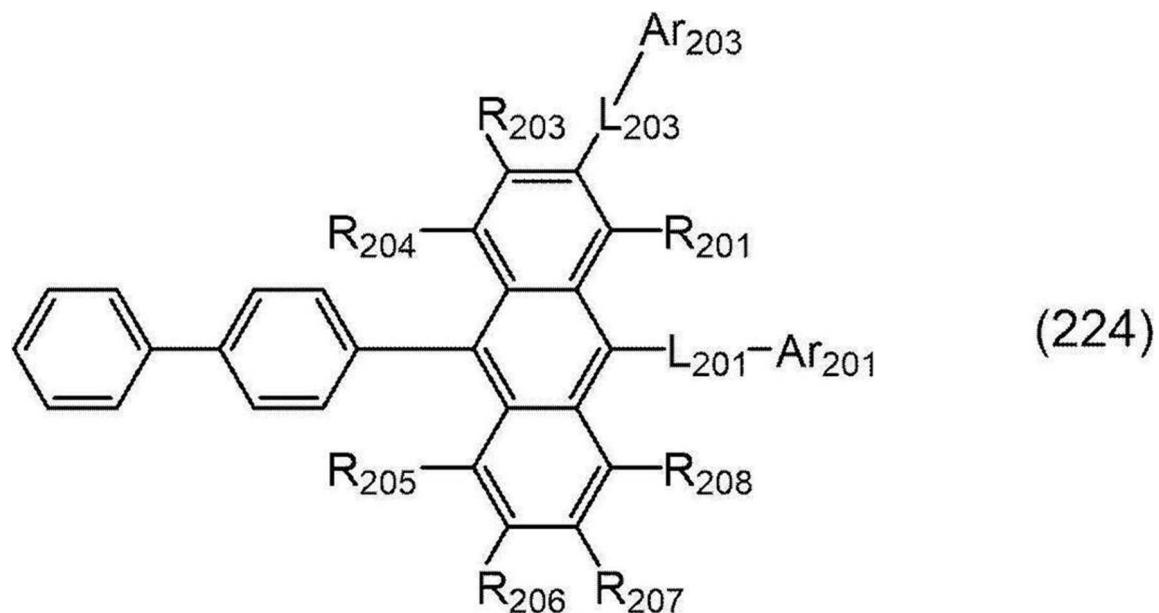


【0 6 3 8】

40

50

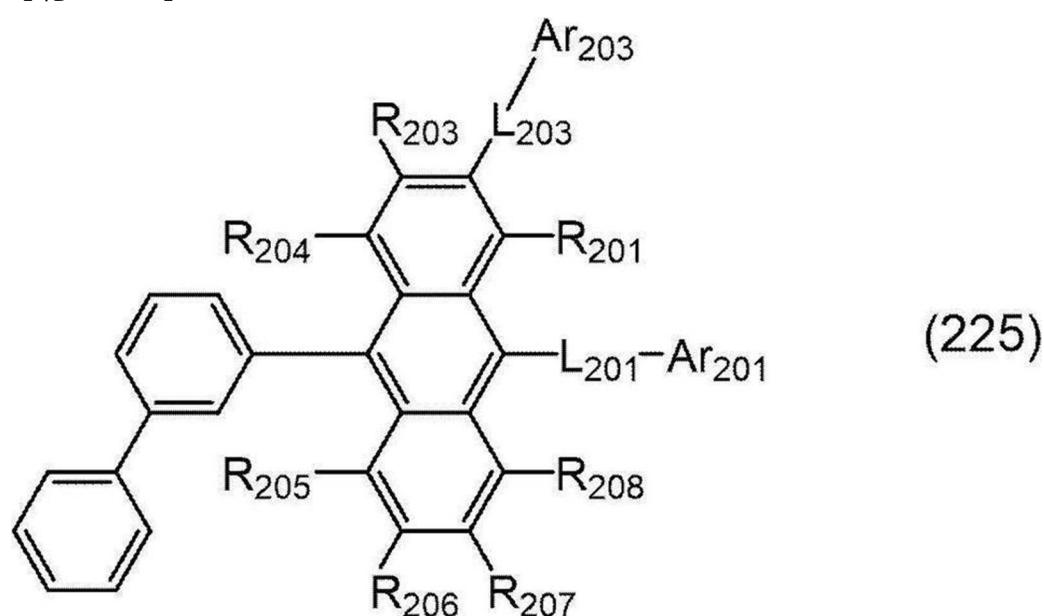
【化 2 8 4】



【0 6 3 9】

【化 2 8 5】

20

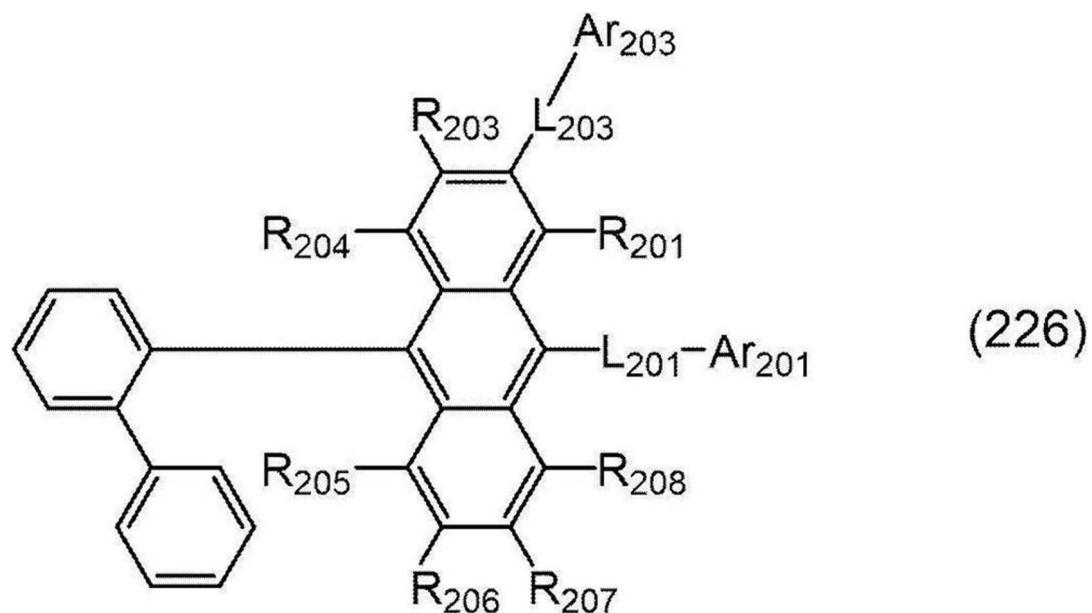


【0 6 4 0】

40

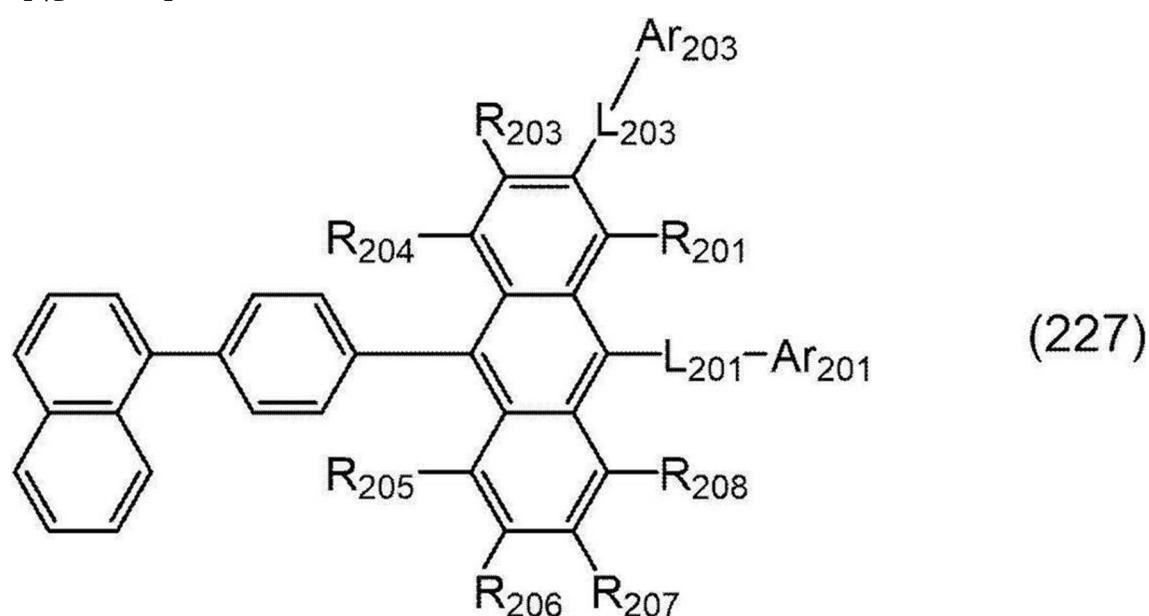
50

【化 2 8 6】



【0 6 4 1】

【化 2 8 7】

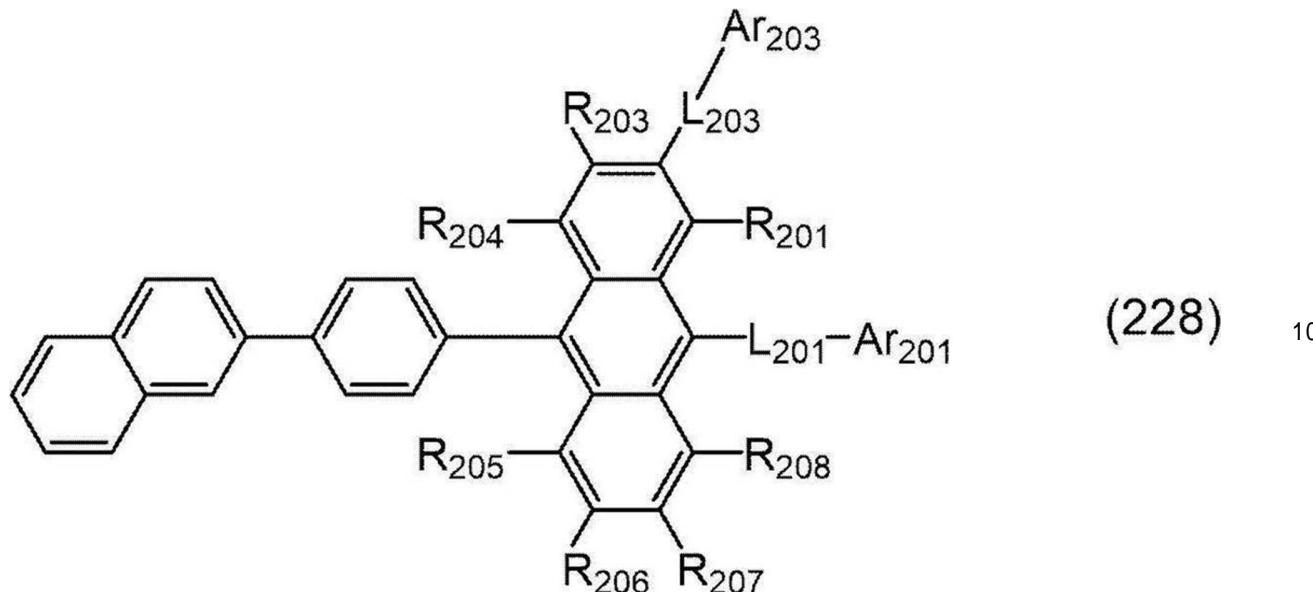


【0 6 4 2】

40

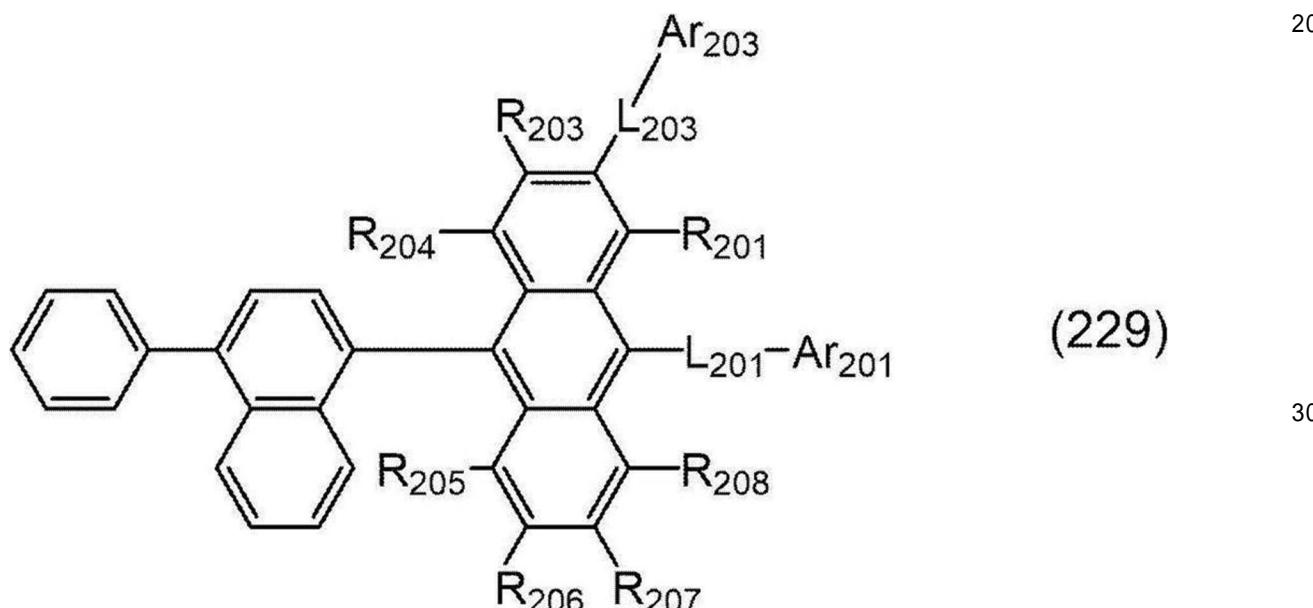
50

【化288】



【0643】

【化289】



【0644】

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

R₂₀₁並びにR₂₀₃～R₂₀₈は、それぞれ独立に、前記一般式(2)におけるR₂₀並びにR₂₀₃～R₂₀₈と同義であり、

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

L₂₀₃は、前記一般式(2)におけるL₂₀₁と同義であり、

L₂₀₃とL₂₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar₂₀₃は、前記一般式(2)におけるAr₂₀₁と同義であり、

Ar₂₀₃とAr₂₀₁は、互いに同一であるか、又は異なる。)

【0645】

前記一般式(2)で表される第二の化合物は、下記一般式(241)、一般式(242)

40

40

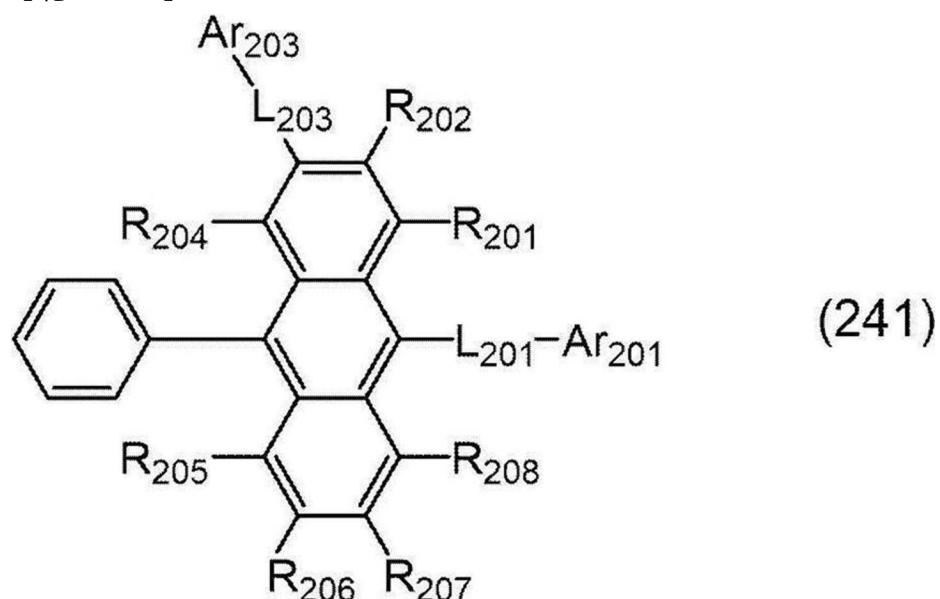
40

50

)、一般式(243)、一般式(244)、一般式(245)、一般式(246)、一般式(247)、一般式(248)又は一般式(249)で表される化合物であることも好みしい。

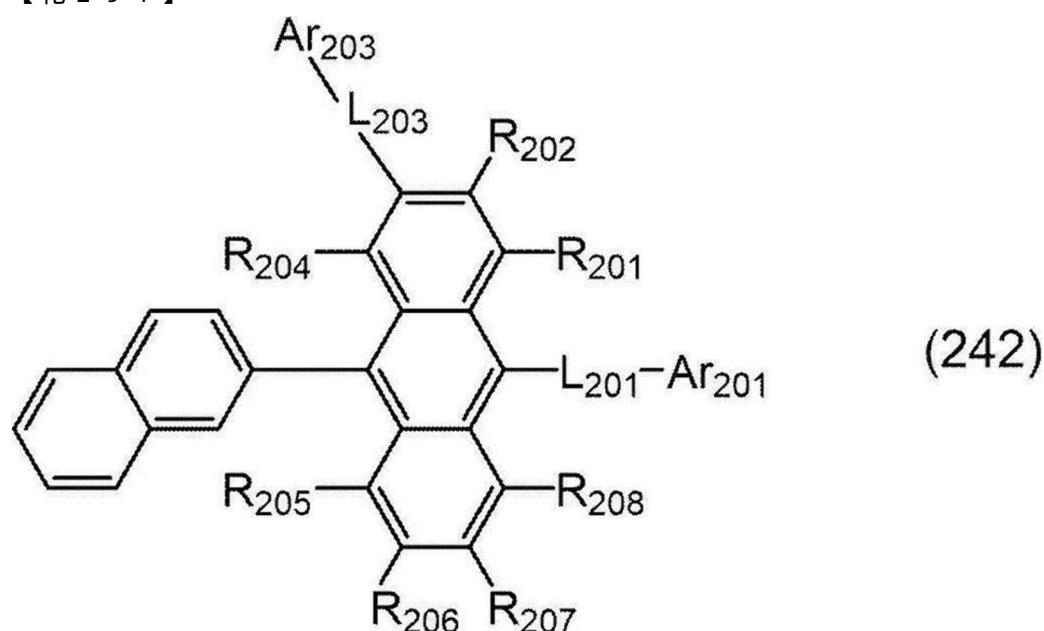
【0646】

【化290】



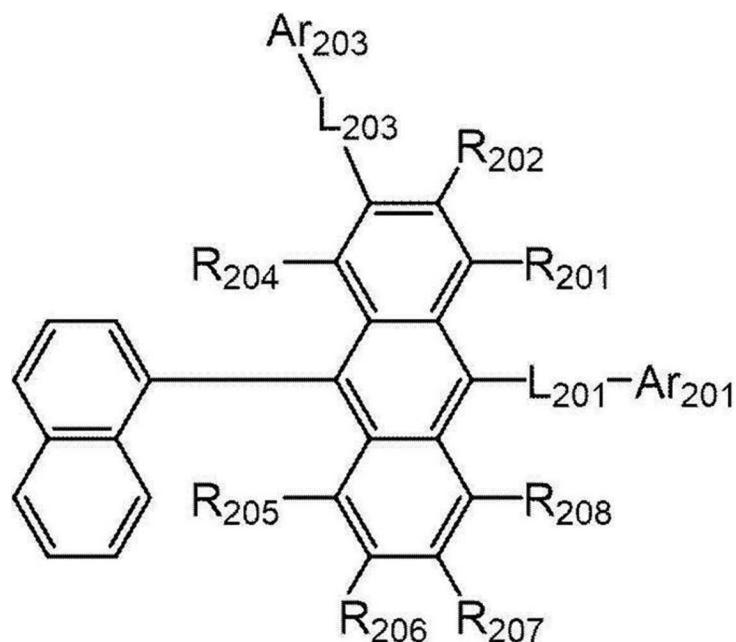
【0647】

【化291】



【0648】

【化292】



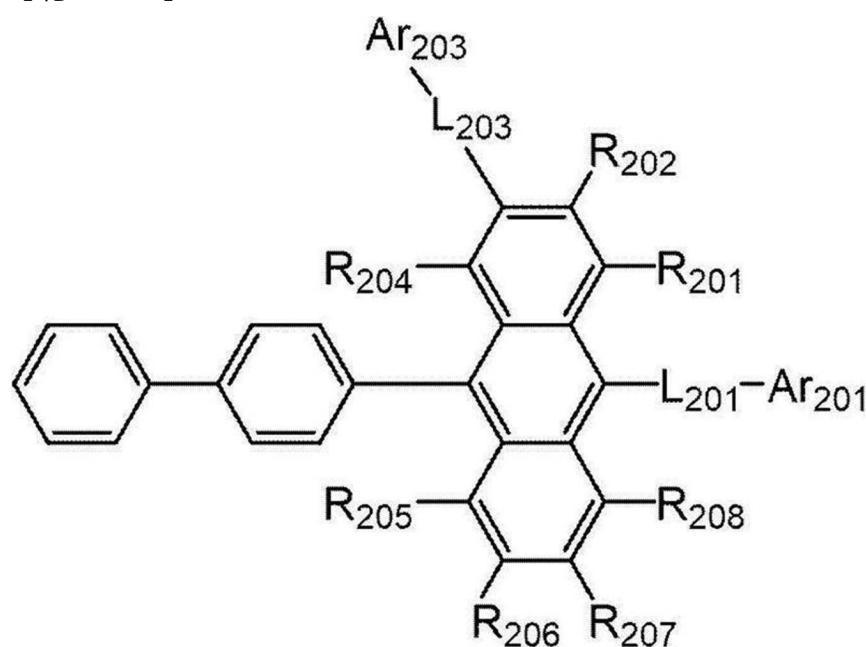
(243)

10

【0649】

【化293】

20



(244)

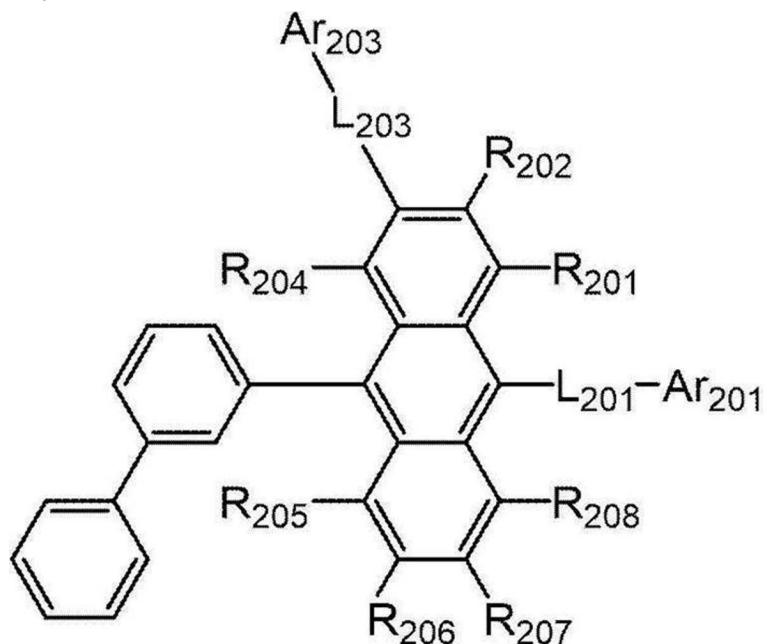
30

【0650】

40

50

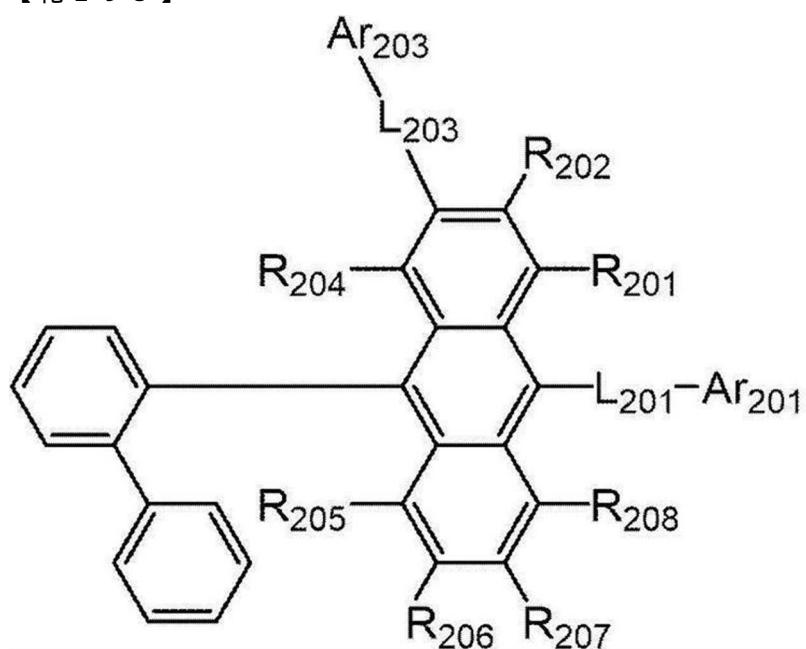
【化 2 9 4 】



(245)

【 0 6 5 1 】

【化 2 9 5 】



(246)

【 0 6 5 2 】

10

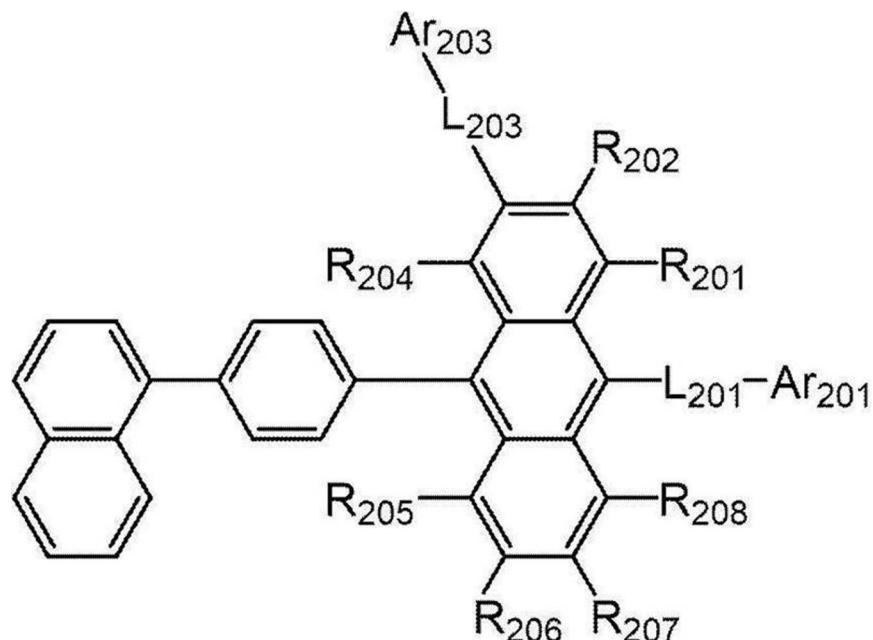
20

30

40

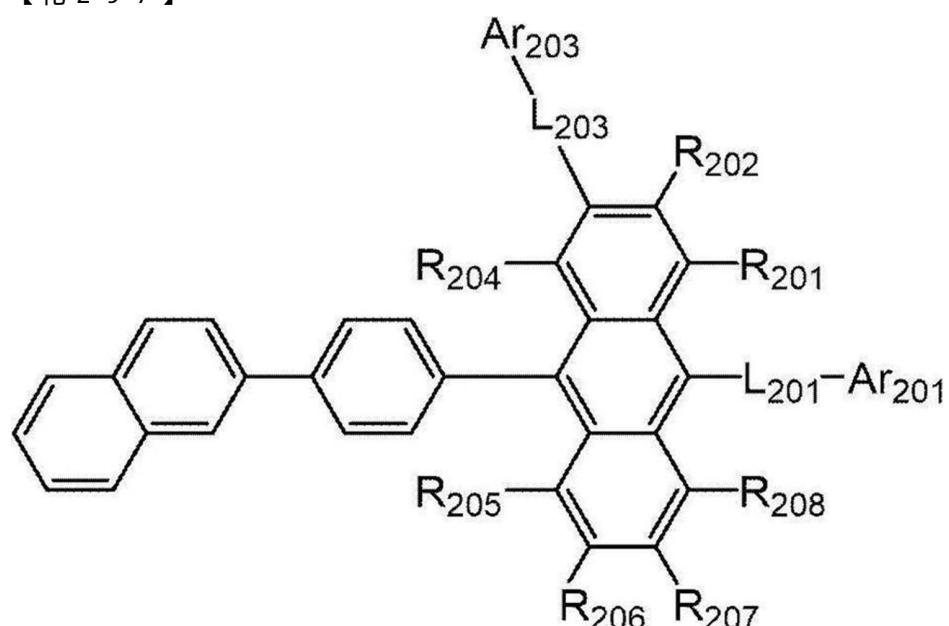
50

【化 2 9 6】



【0 6 5 3】

【化 2 9 7】

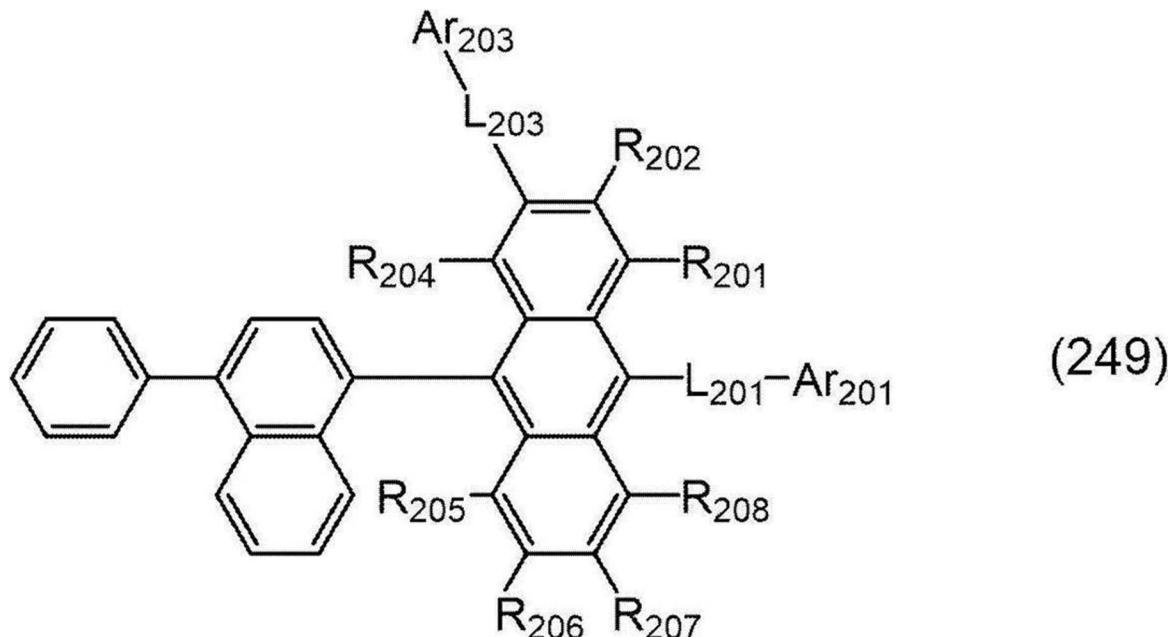


【0 6 5 4】

40

50

【化298】



【0655】

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

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

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

L₂₀₃は、前記一般式(2)におけるL₂₀₁と同義であり、

L₂₀₃とL₂₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ar₂₀₃は、前記一般式(2)におけるAr₂₀₁と同義であり、

Ar₂₀₃とAr₂₀₁は、互いに同一であるか、又は異なる。)

【0656】

前記一般式(2)で表される第二の化合物中、R₂₀₁～R₂₀₈は、それぞれ独立に、水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、又は

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

【0657】

L₂₀₁は、

単結合、又は

無置換の環形成炭素数6～22のアリーレン基であり、

Ar₂₀₁は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～22のアリール基であることが好ましい。

【0658】

本実施形態に係る有機EL素子において、

前記一般式(2)で表される第二の化合物中、R₂₀₁～R₂₀₈は、それぞれ独立に、水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、又は

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

【0659】

20

20

30

40

50

フルオランテニル基、
ベンゾフルオランテニル基、及び
ペリレニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0667】

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

【0668】

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

【0669】

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

10

【0670】

(第二の化合物の製造方法)

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

【0671】

(第二の化合物の具体例)

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

20

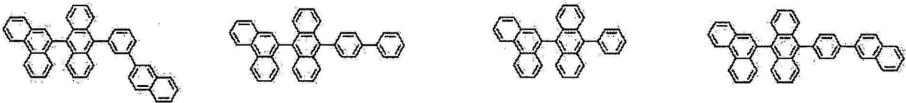
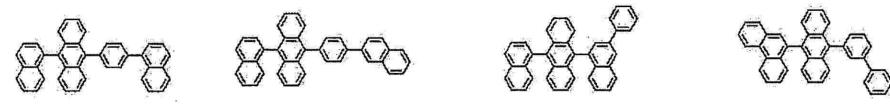
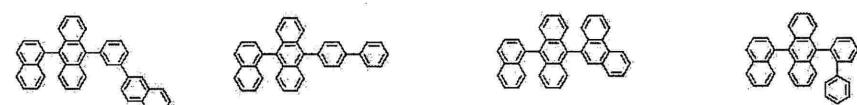
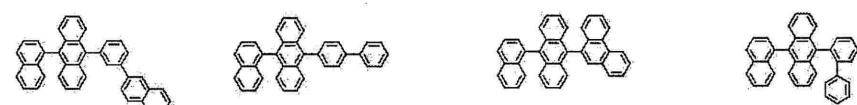
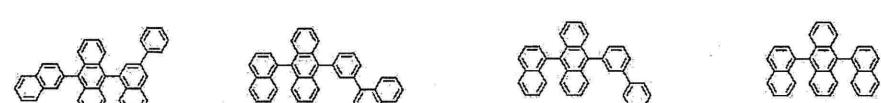
【0672】

30

40

50

【化 3 0 0】



【 0 6 7 3 】

10

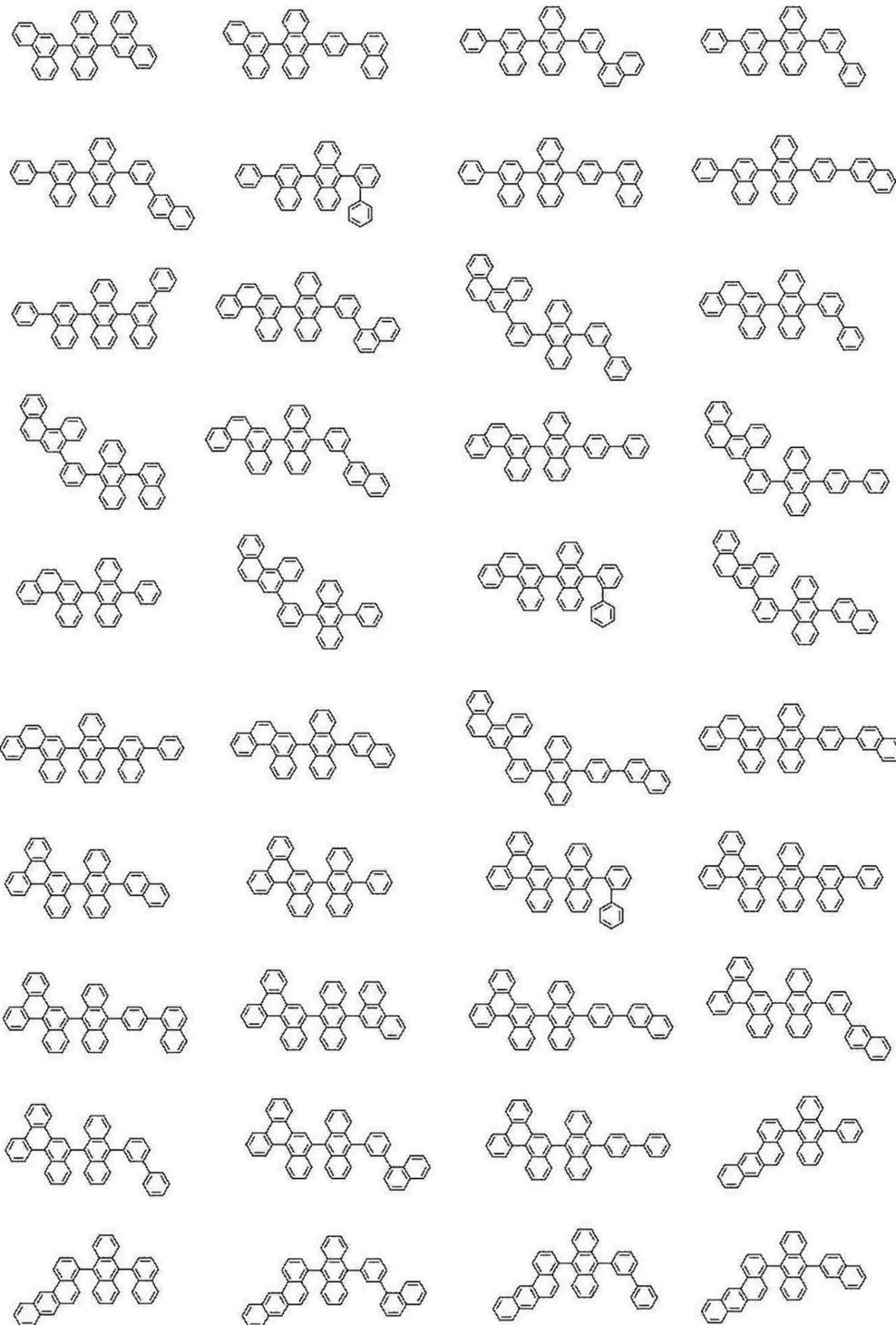
20

30

40

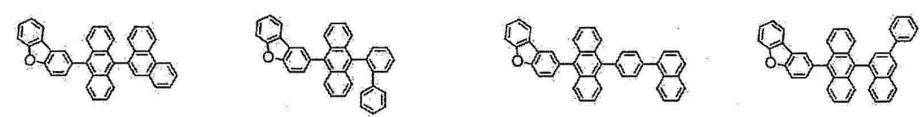
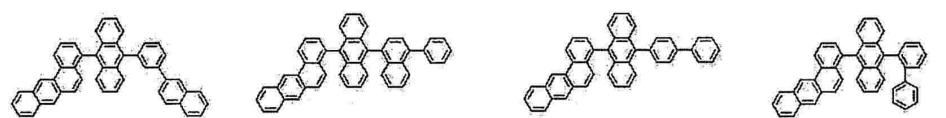
50

【化 3 0 1】



【 0 6 7 4 】

【化 3 0 2】

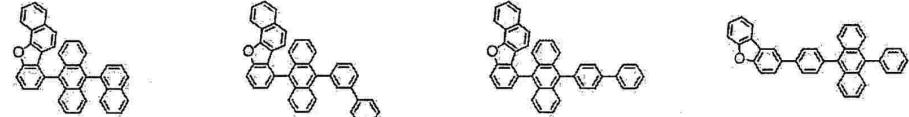
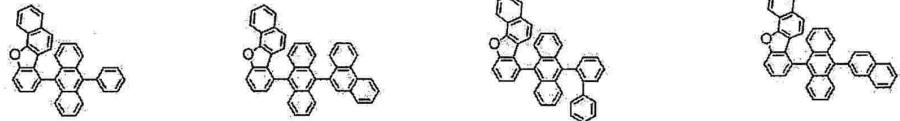
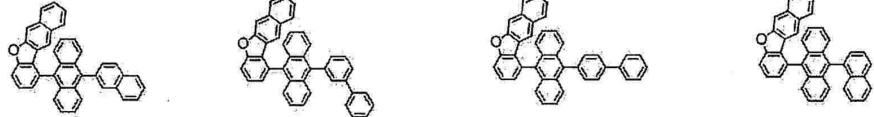


10

20



30

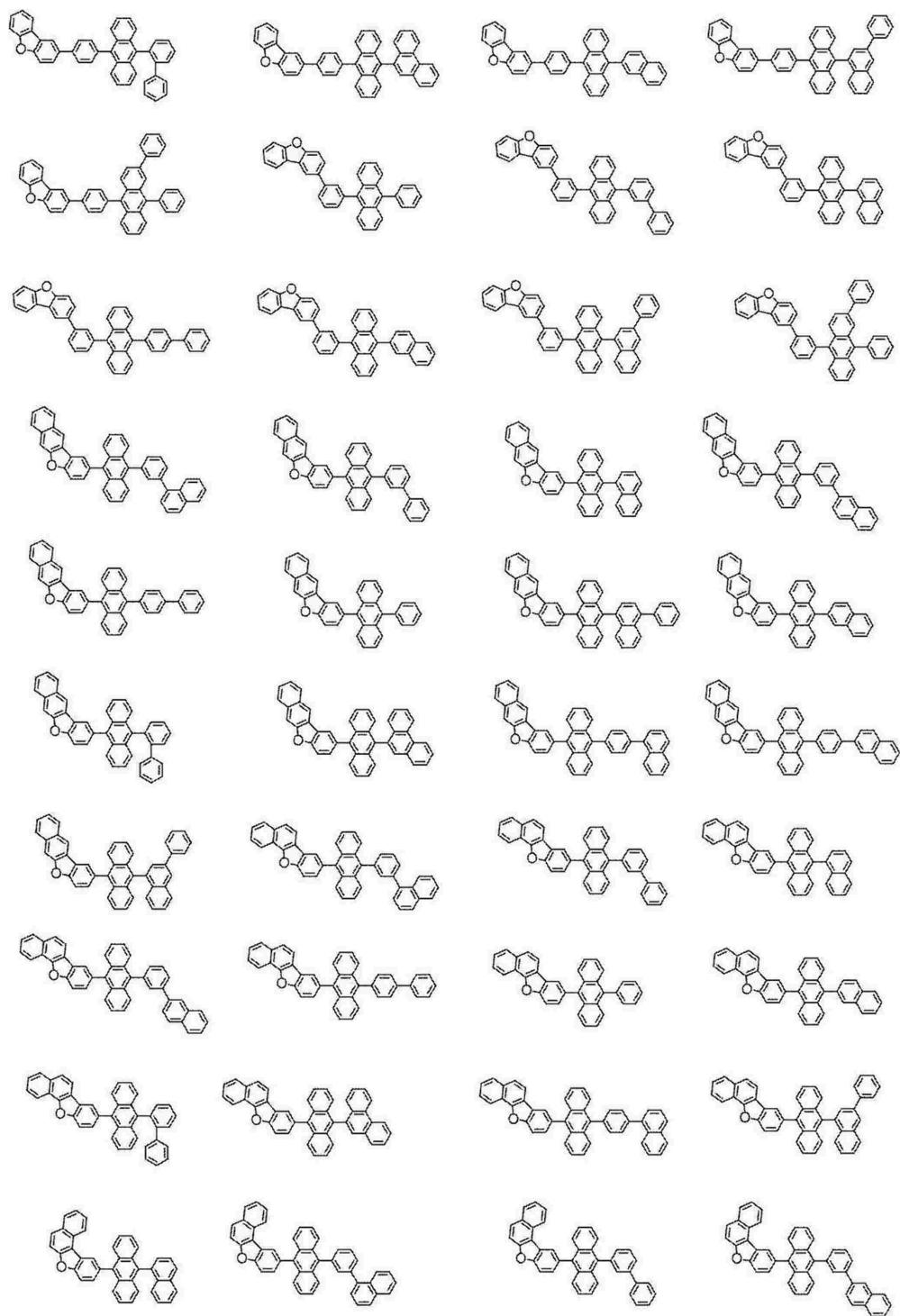


40

【 0 6 7 5 】

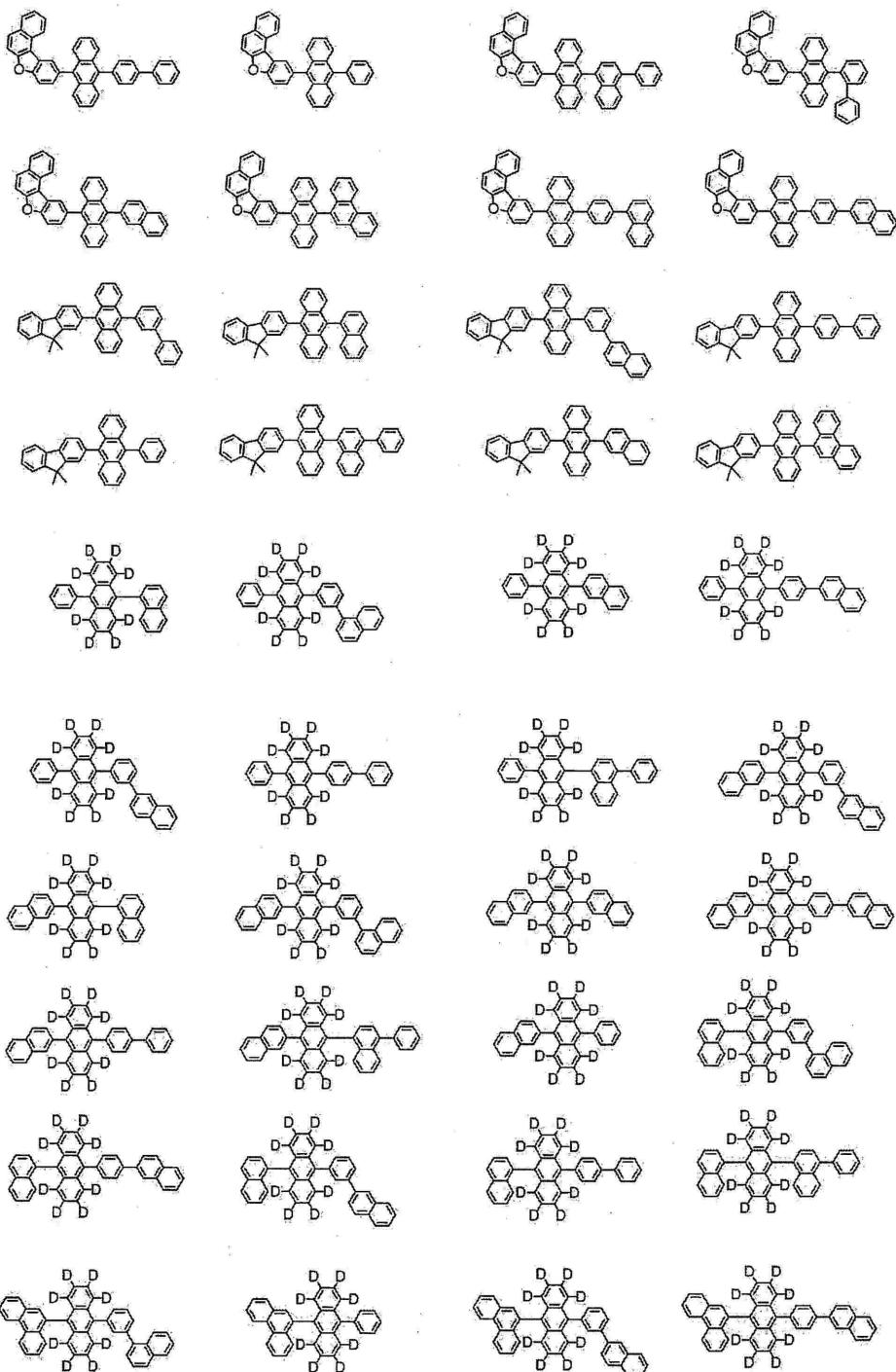
50

【化 3 0 3】



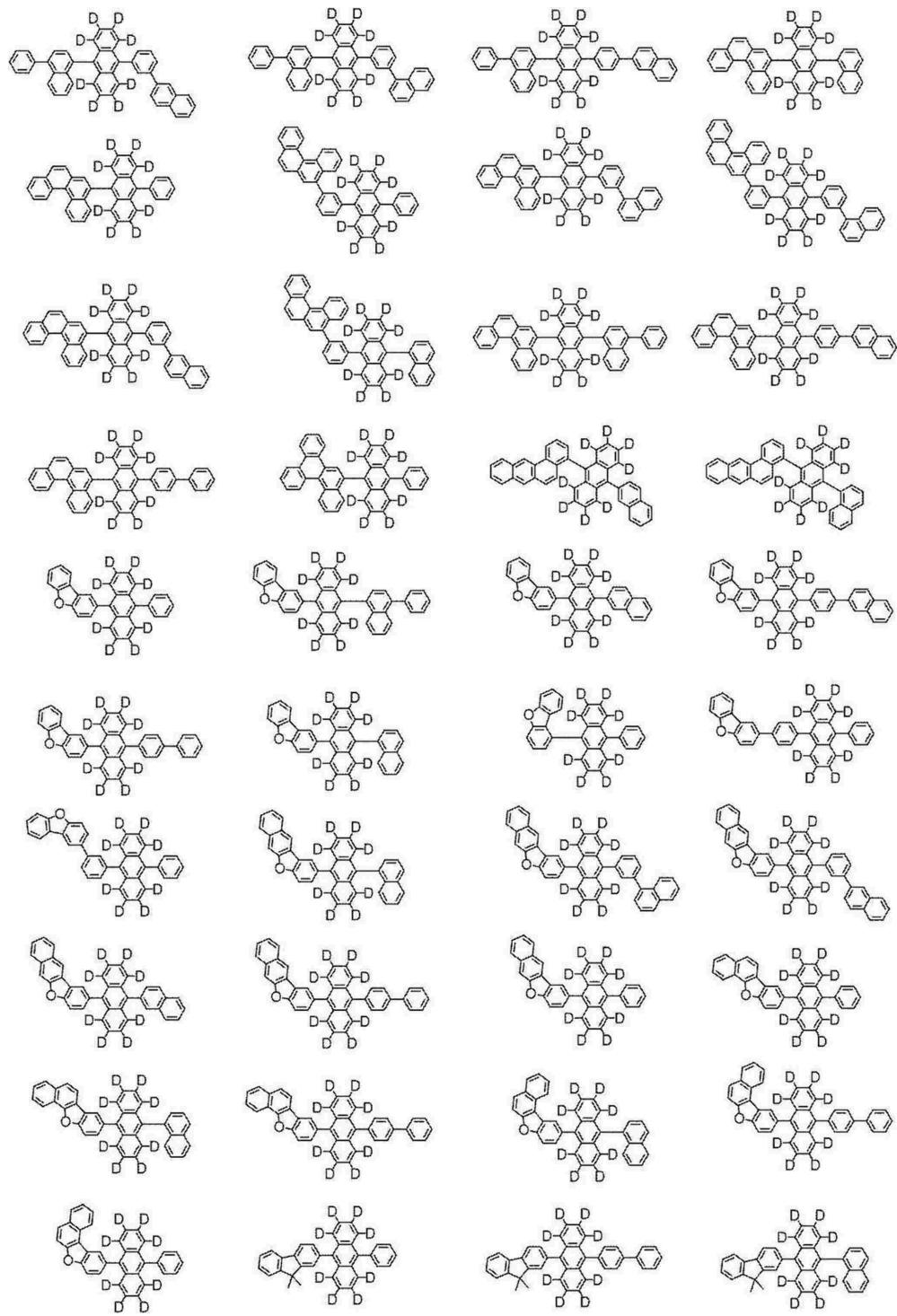
(0 6 7 6)

【化 3 0 4】



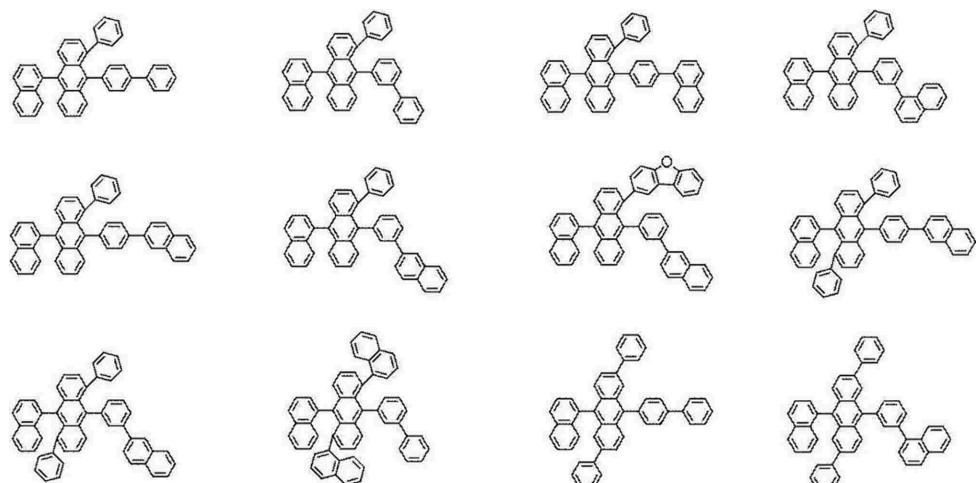
【 0 6 7 7 】

【化 3 0 5】



【0 6 7 8】

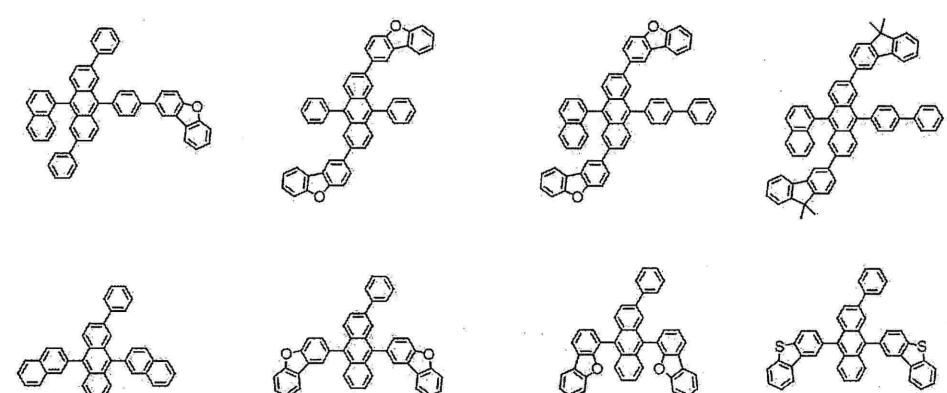
【化 3 0 6】



10

【0 6 7 9】

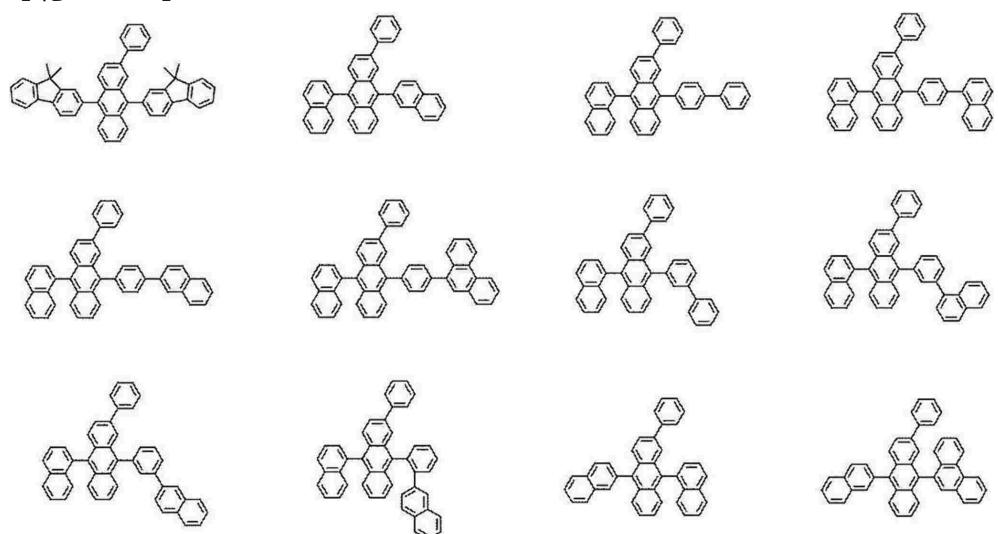
【化 3 0 7】



20

【0 6 8 0】

【化 3 0 8】



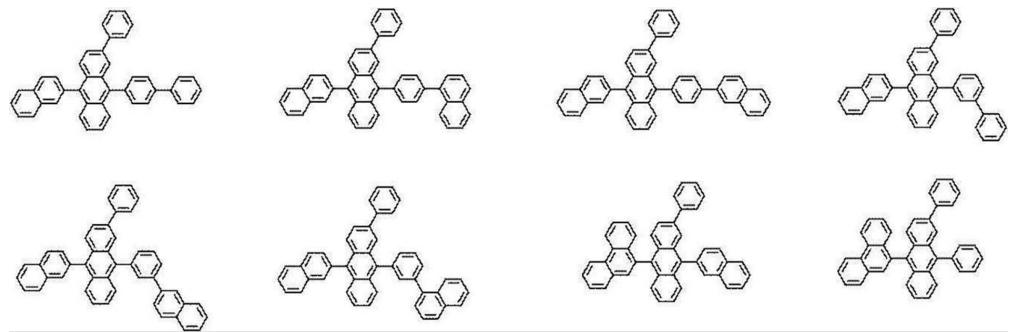
30

40

【0 6 8 1】

50

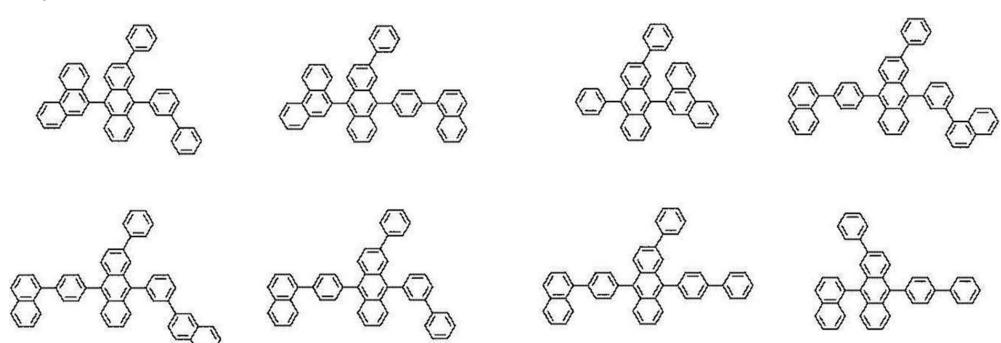
【化 3 0 9】



10

【0 6 8 2】

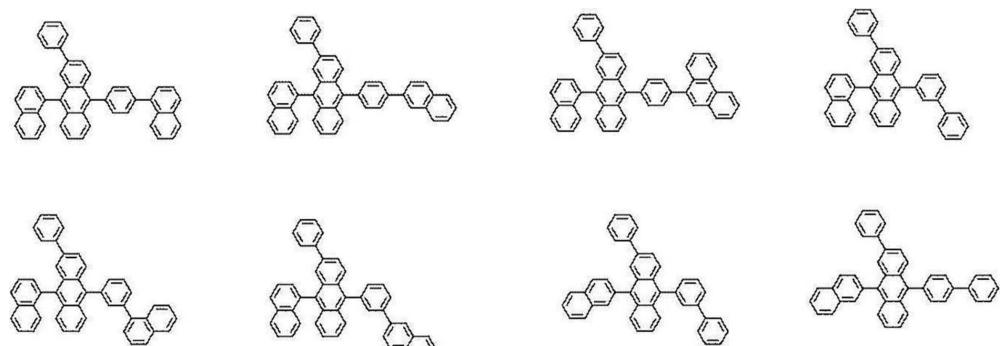
【化 3 1 0】



20

【0 6 8 3】

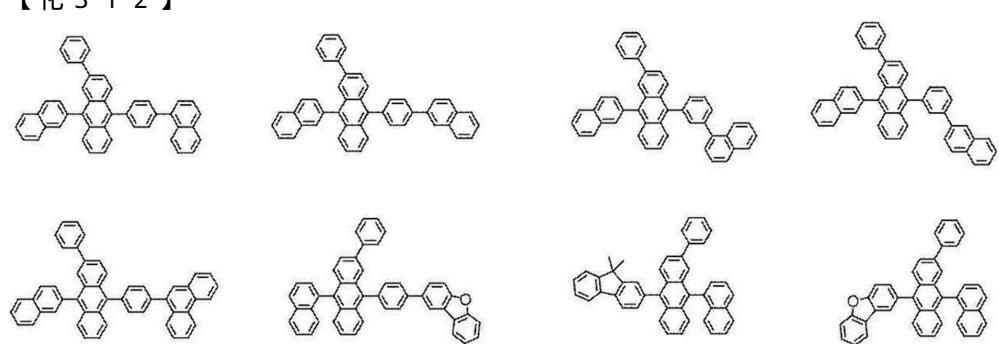
【化 3 1 1】



30

【0 6 8 4】

【化 3 1 2】

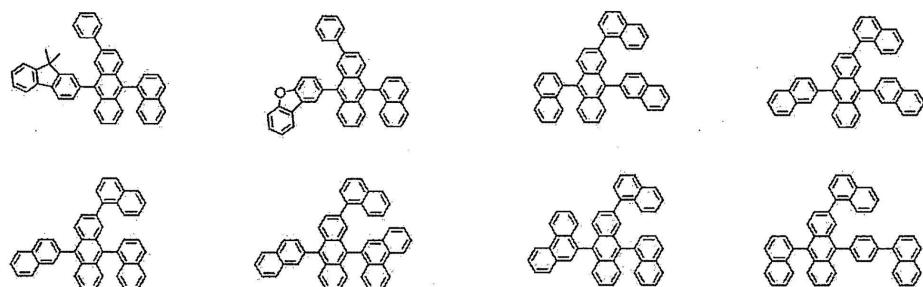


40

【0 6 8 5】

50

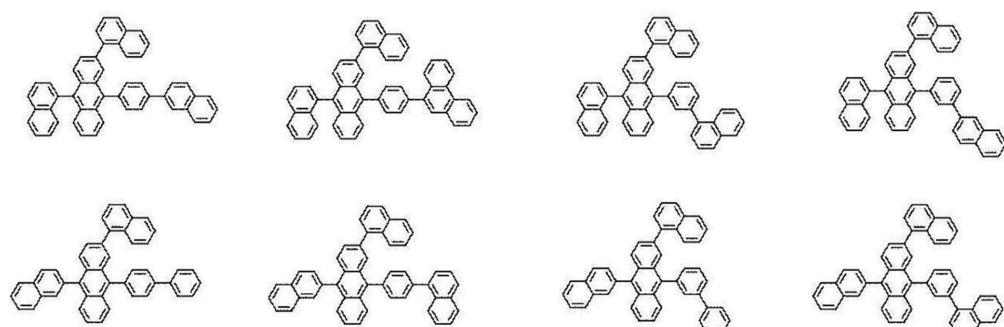
【化313】



10

【0686】

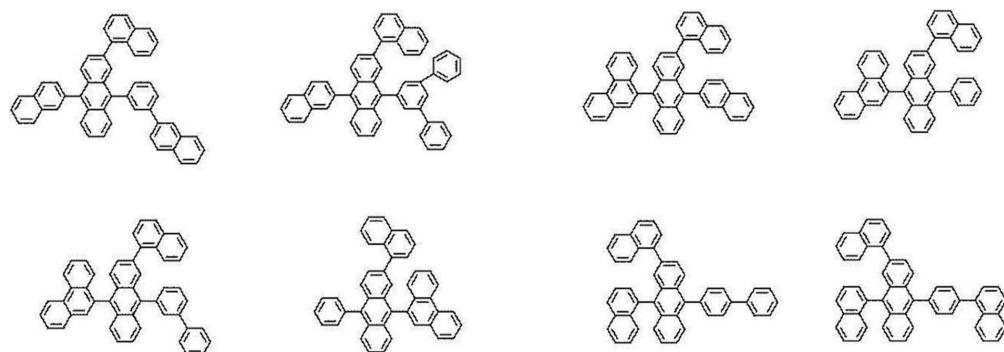
【化314】



20

【0687】

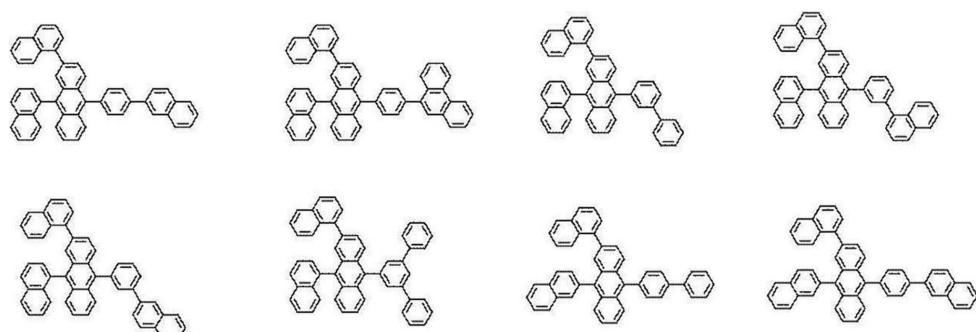
【化315】



30

【0688】

【化316】

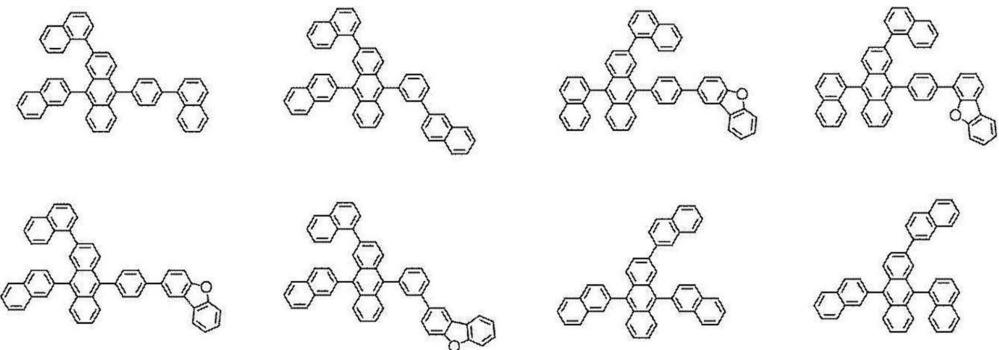


40

【0689】

50

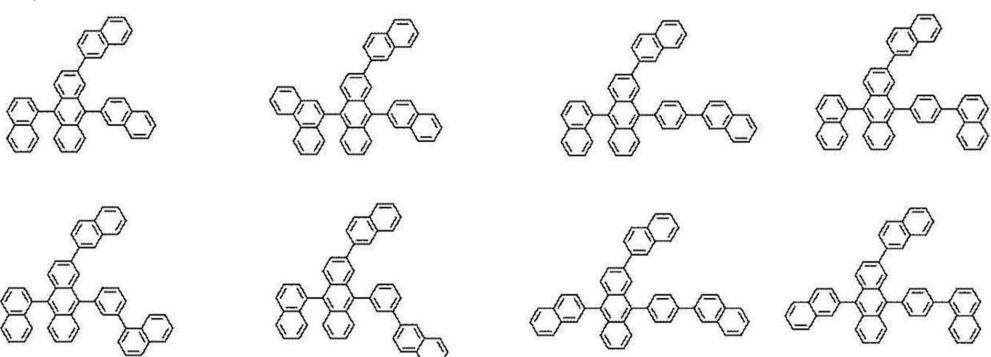
【化 3 1 7】



10

【0 6 9 0】

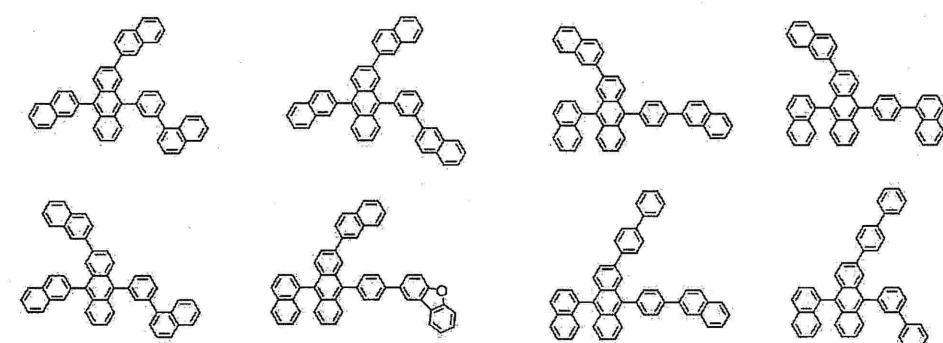
【化 3 1 8】



20

【0 6 9 1】

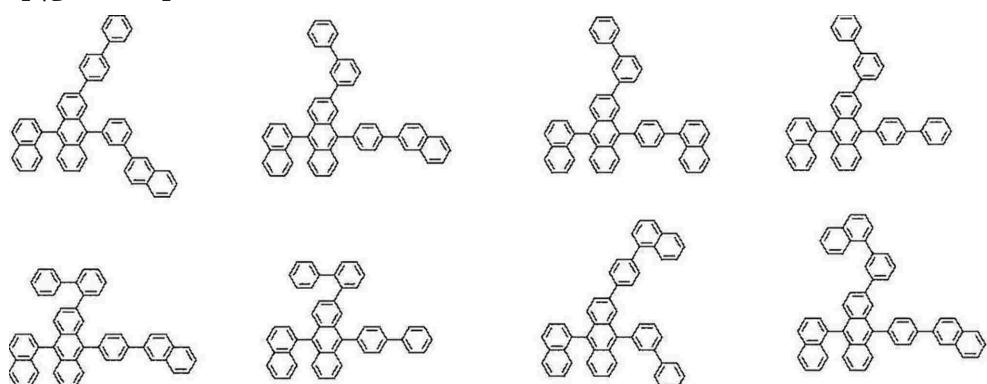
【化 3 1 9】



30

【0 6 9 2】

【化 3 2 0】

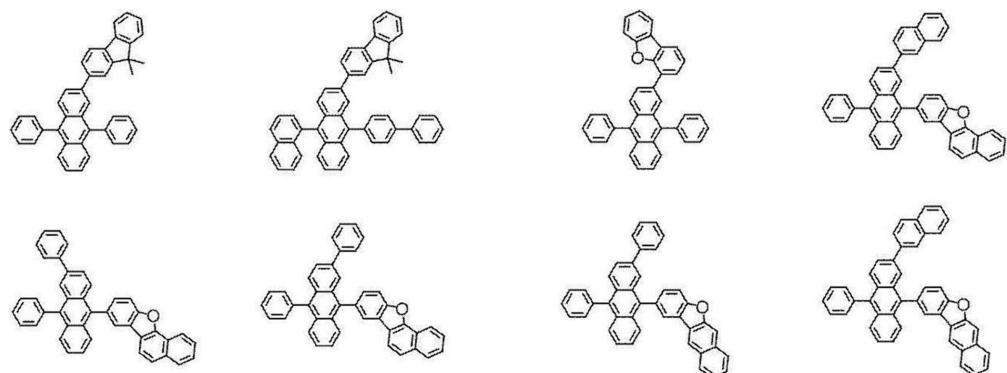


40

【0 6 9 3】

50

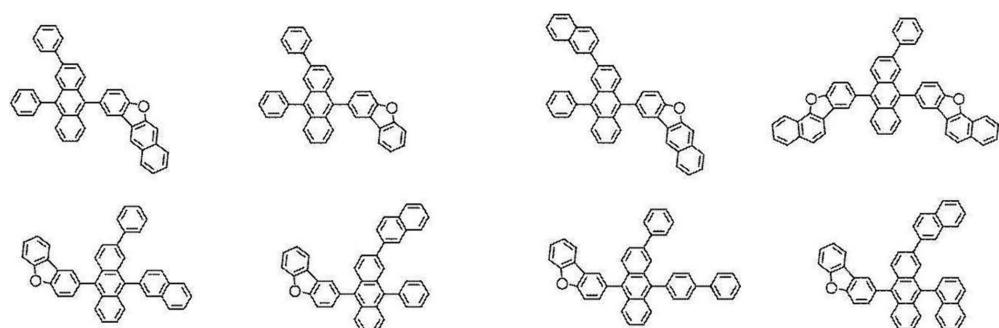
【化 3 2 1】



10

【0 6 9 4】

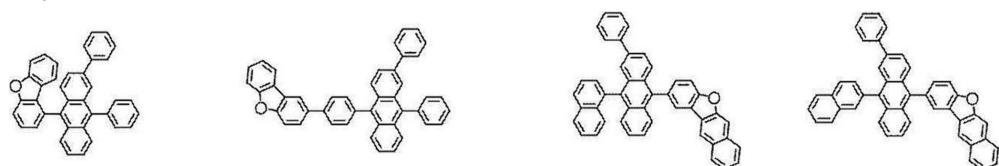
【化 3 2 2】



20

【0 6 9 5】

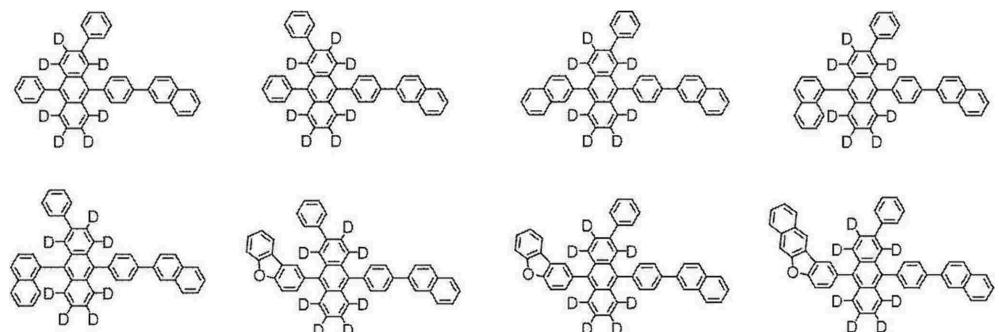
【化 3 2 3】



30

【0 6 9 6】

【化 3 2 4】

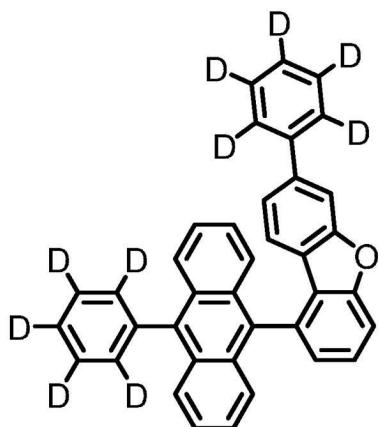


40

【0 6 9 7】

50

【化325】



10

【0698】

(第一の発光性化合物及び第二の発光性化合物)

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

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

第一の発光層51が第一の発光性化合物を含有し、かつ第二の発光層52が第二の発光性化合物を含有する場合、第一の発光性化合物と第二の発光性化合物とは、互いに同一であるか又は異なる。

第一の発光性化合物及び第二の発光性化合物としては、有機EL素子1Aにて例示した発光性化合物と同様の例が挙げられる。

【0699】

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

前記一般式(4)で表される化合物、

前記一般式(5)で表される化合物、

前記一般式(6)で表される化合物、及び

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

【0700】

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

無置換の炭素数1～50のアルキル基、

無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

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

-O-(R_{904a})で表される基、

-S-(R_{905a})で表される基、

-N(R_{906a})(R_{907a})で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

20

30

40

50

R_{901a} ~ R_{907a} は、それぞれ独立に、
水素原子、
無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、
R_{901a} が 2 以上存在する場合、2 以上の R_{901a} は、互いに同一であるか、又は異なり、
R_{902a} が 2 以上存在する場合、2 以上の R_{902a} は、互いに同一であるか、又は異なり、
R_{903a} が 2 以上存在する場合、2 以上の R_{903a} は、互いに同一であるか、又は異なり、
R_{904a} が 2 以上存在する場合、2 以上の R_{904a} は、互いに同一であるか、又は異なり、
R_{905a} が 2 以上存在する場合、2 以上の R_{905a} は、互いに同一であるか、又は異なり、
R_{906a} が 2 以上存在する場合、2 以上の R_{906a} は、互いに同一であるか、又は異なる。
R_{907a} が 2 以上存在する場合、2 以上の R_{907a} は、互いに同一であるか、又は異なる。

【0701】

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

無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

【0702】

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

無置換の炭素数 1 ~ 18 のアルキル基、
無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は
無置換の環形成原子数 5 ~ 18 の複素環基である。

【0703】

有機 E L 素子 1 B において、第一の発光層 51 が含有する第一の発光性化合物は、最大ピーク波長が 500 nm 以下の発光を示す化合物であることが好ましく、430 nm 以上 480 nm 以下の発光を示す化合物であることがより好ましい。

有機 E L 素子 1 B において、第一の発光層 51 が含有する第一の発光性化合物は、最大ピーク波長が 500 nm 以下の蛍光発光を示す化合物であることが好ましく、430 nm 以上 480 nm 以下の蛍光発光を示す化合物であることがより好ましい。

【0704】

有機 E L 素子 1 B において、第二の発光層 52 が含有する第二の発光性化合物は、最大ピーク波長が 500 nm 以下の発光を示す化合物であることが好ましく、430 nm 以上 480 nm 以下の発光を示す化合物であることがより好ましい。

有機 E L 素子 1 B において、第二の発光層 52 が含有する第二の発光性化合物は、最大ピーク波長が 500 nm 以下の蛍光発光を示す化合物であることが好ましく、430 nm 以上 480 nm 以下の蛍光発光を示す化合物であることがより好ましい。

【0705】

有機 E L 素子 1 B において、第一の発光層 51 が第一の化合物及び第一の発光性化合物を含む場合、第一の化合物は、ホスト材料であることが好ましく、第一の発光性化合物は、ドーパント材料であることが好ましい。

【0706】

10

20

30

40

50

有機 E L 素子 1 B において、第一の化合物の三重項エネルギー T_1 (H 1) と第二の化合物の三重項エネルギー T_1 (H 2) とが、下記数式 (数 1) の関係を満たすことが好ましい。

$$T_1 \text{ (H 1)} > T_1 \text{ (H 2)} \dots \text{ (数 1)}$$

【 0 7 0 7 】

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

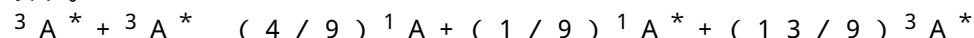
10

【 0 7 0 8 】

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

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

20



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

30

【 0 7 0 9 】

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

40

有機 E L 素子 1 B は、所定の関係を満たす、少なくとも 2 つの発光層 (すなわち、第一の発光層 51 及び第二の発光層 52) を備え、第一の発光層 51 中の第一の化合物の三重項エネルギー T_1 (H 1) と、第二の発光層 52 中の第二の化合物の三重項エネルギー T_1 (H 2) とが、前記数式 (数 1) の関係を満たすように第一の発光層 51 及び第二の発光層 52 を備えることで、第一の発光層 51 で生成した三重項励起子は、過剰キャリアによってクエンチされずに第二の発光層 52 へと移動し、また、第二の発光層 52 から第一の発光層 51 へ逆移動することを抑制できる。その結果、第二の発光層 52 において、TTF メカニズムが発現して、一重項励起子が効率良く生成され、発光効率が向上する。

このように、有機 E L 素子 1 B が、三重項励起子を主に生成させる第一の発光層 51 と

50

、第一の発光層 5 1 から移動してきた三重項励起子を活用して T T F メカニズムを主に発現させる第二の発光層 5 2 と、を異なる領域として備え、第二の発光層 5 2 中の第二の化合物として、第一の発光層中の第一の化合物よりも小さな三重項エネルギーを有する化合物を用いて、三重項エネルギーの差を設けることで、発光効率が向上する。

【 0 7 1 0 】

(三重項エネルギー T_1)

三重項エネルギー T_1 の測定方法としては、下記の方法が挙げられる。

測定対象となる化合物を E P A (ジエチルエーテル：イソペンタン：エタノール = 5 : 5 : 2 (容積比)) 中に、 10^{-5} mol / L 以上 10^{-4} mol / L 以下となるように溶解して溶液を作製し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とする。この測定試料について、低温 (77 [K]) で燐光スペクトル (縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。) を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $edge [nm]$ に基づいて、次の換算式 (F 1) から算出されるエネルギー量を三重項エネルギー T_1 とする。

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

【 0 7 1 1 】

燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ (つまり縦軸が増加するにつれ)、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線 (すなわち変曲点における接線) が、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

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

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

【 0 7 1 2 】

有機 E L 素子 1 B において、第一の発光層 5 1 が第一の化合物及び第一の発光性化合物を含む場合、第一の化合物の一重項エネルギー S_1 (H 1) と、第一の発光性化合物の一重項エネルギー S_1 (D 3) とが、下記式 (数 2) の関係を満たすことが好ましい。

$S_1 (H 1) > S_1 (D 3) \dots$ (数 2)

【 0 7 1 3 】

(一重項エネルギー S_1)

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

測定対象となる化合物の 10^{-5} mol / L 以上 10^{-4} mol / L 以下のトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温 (300 K) でこの試料の吸収スペクトル (縦軸：吸収強度、横軸：波長とする。) を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $edge [nm]$ を次に示す換算式 (F 2) に代入して一重項エネルギー S_1 を算出する。

換算式 (F 2) : $S_1 [eV] = 1239.85 / edge$

吸収スペクトル測定装置としては、例えば、日立社製の分光光度計 (装置名: U 331 0) が挙げられるが、これに限定されない。

【 0 7 1 4 】

吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ (つ

10

20

30

40

50

まり縦軸の値が減少するにつれ)、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側(ただし、吸光度が0.1以下となる場合は除く)で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

なお、吸光度の値が0.2以下の極大点は、上記最も長波長側の極大値には含めない。

【0715】

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

【0716】

有機EL素子1Bにおいて、第二の発光層52が第二の化合物及び第二の発光性化合物を含む場合、第二の化合物の一重項エネルギーS₁(H2)と、第二の発光性化合物の一重項エネルギーS₁(D4)とが、下記式(数3)の関係を満たすことが好ましい。

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

【0717】

第一の発光層51及び第二の発光層52は、燐光発光性材料(ドーパント材料)を含まないことが好ましい。

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

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

【0718】

(発光層の膜厚)

有機EL素子1Bにおける第一の発光層51及び第二の発光層52の膜厚は、それぞれ5nm以上50nm以下であることが好ましく、7nm以上50nm以下であることがより好ましく、10nm以上50nm以下であることがさらに好ましい。発光層の膜厚が5nm以上であると、発光層を形成し易く、色度を調整し易い。発光層の膜厚が50nm以下であると、駆動電圧の上昇を抑制し易い。

【0719】

(発光層における化合物の含有率)

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

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

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

ただし、第一の発光層51における第一の化合物及び第一の発光性化合物の合計含有率の上限は、100質量%である。

【0720】

なお、本実施形態は、第一の発光層51に、第一の化合物及び第一の発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

第一の発光層51は、第一の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。第一の発光層51は、第一の発光性化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

【0721】

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

10

20

30

40

50

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

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

ただし、第二の発光層52における第二の化合物及び第二の発光性化合物の合計含有率の上限は、100質量%である。

【0722】

なお、本実施形態は、第二の発光層52に、第二の化合物及び第二の発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

第二の発光層52は、第二の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。第二の発光層52は、第二の発光性化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

【0723】

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

【0724】

有機EL素子1Bにおいて、「第一の発光層51と第二の発光層52とが、直接、接している」場合、当該「第一の発光層51と第二の発光層52とが、直接、接している」層構造は、例えば、以下の態様(LS1)、(LS2)及び(LS3)のいずれかの態様も含み得る。

(LS1) 第一の発光層51に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層52に係る化合物の蒸着の工程を経る過程でホスト材料としての第一の化合物(以下、「第一のホスト材料」という場合がある。)及びホスト材料としての第二の化合物(以下、「第二のホスト材料」という場合がある。)の両方が混在する領域が生じ、当該領域が第一の発光層51と第二の発光層52との界面に存在する態様。

(LS2) 第一の発光層51及び第二の発光層52が発光性の化合物を含む場合に、第一の発光層51に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層52に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で第一のホスト材料、第二のホスト材料及び発光性の化合物が混在する領域が生じ、当該領域が第一の発光層51と第二の発光層52との界面に存在する態様。

(LS3) 第一の発光層51及び第二の発光層52が発光性の化合物を含む場合に、第一の発光層51に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層52に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で当該発光性の化合物からなる領域、第一のホスト材料からなる領域、又は第二のホスト材料からなる領域が生じ、当該領域が第一の発光層51と第二の発光層52との界面に存在する態様。

【0725】

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

【0726】

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

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

(LS5) 第二の発光層52及び第三の発光層が発光性の化合物を含む場合に、第二の発光層52に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過

10

20

30

40

50

程で第二のホスト材料、第三のホスト材料及び発光性の化合物が混在する領域が生じ、当該領域が第二の発光層 5 2 と第三の発光層との界面に存在する態様。

(L S 6) 第二の発光層 5 2 及び第三の発光層が発光性の化合物を含む場合に、第二の発光層 5 2 に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で当該発光性の化合物からなる領域、第二のホスト材料からなる領域、又は第三のホスト材料からなる領域が生じ、当該領域が第二の発光層 5 2 と第三の発光層との界面に存在する態様。

【 0 7 2 7 】

有機 E L 素子 1 B は、介在層をさらに有することも好ましい。

有機 E L 素子 1 B が介在層を有する場合、前記介在層は、第一の発光層 5 1 と第二の発光層 5 2 との間に配置されていることが好ましい。 10

【 0 7 2 8 】

(介在層)

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

介在層は、介在層材料を含む。介在層材料は、発光性化合物ではないことが好ましい。

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

介在層材料としては、例えば、1) オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、若しくはフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、2) カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、若しくはクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、3) トリアリールアミン誘導体、若しくは縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族アミン化合物が挙げられる。 20

【 0 7 2 9 】

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

【 0 7 3 0 】

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

介在層は、前記介在層材料を、介在層の全質量の 60 質量 % 以上、含有することが好ましく、介在層の全質量の 70 質量 % 以上、含有することがより好ましく、介在層の全質量の 80 質量 % 以上、含有することがさらに好ましく、介在層の全質量の 90 質量 % 以上、含有することがよりさらに好ましく、介在層の全質量の 95 質量 % 以上、含有することがさらになお好ましい。 30

介在層は、介在層材料を 1 種のみ含んでもよいし、2 種以上含んでもよい。

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

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

【 0 7 3 1 】

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

【 0 7 3 2 】

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

【 0 7 3 3 】

有機 E L 素子 1 A 及び有機 E L 素子 1 B に共通する各層の構成についてさらに説明する。以下、符号の記載は省略することがある。

【 0 7 3 4 】

(基板)

基板 2 は、有機 E L 素子の支持体として用いられる。基板 2 としては、例えば、ガラス、石英、及びプラスチック等を用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。 50

可撓性基板とは、折り曲げができる（フレキシブル）基板のことであり、例えば、プラスチック基板等が挙げられる。プラスチック基板を形成する材料としては、例えば、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエーテルスルファン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニル、ポリイミド、及びポリエチレンナフタレート等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。

【0735】

（陽極）

基板上に形成される陽極3には、仕事関数の大きい（具体的には4.0 eV以上）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム-酸化スズ（ITO: Indium Tin Oxide）、珪素もしくは酸化珪素を含有した酸化インジウム-酸化スズ、酸化インジウム-酸化亜鉛、酸化タンクス滕、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。この他、金（Au）、白金（Pt）、ニッケル（Ni）、タンクス滕（W）、クロム（Cr）、モリブデン（Mo）、鉄（Fe）、コバルト（Co）、銅（Cu）、パラジウム（Pd）、チタン（Ti）、または金属材料の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

【0736】

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

【0737】

陽極上に形成されるEL層のうち、陽極に接して形成される正孔注入層は、陽極の仕事関数に関係なく正孔（ホール）注入が容易である複合材料を用いて形成されるため、電極材料として可能な材料（例えば、金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物、その他、元素周期表の第1族または第2族に属する元素も含む）を用いることができる。

【0738】

仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム（Li）やセシウム（Cs）等のアルカリ金属、およびマグネシウム（Mg）、カルシウム（Ca）、ストロンチウム（Sr）等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金（例えば、MgAg、AlLi）、ユーロピウム（Eu）、イッテルビウム（Yb）等の希土類金属およびこれらを含む合金等を用いることができる。なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、およびこれらを含む合金を用いて陽極を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。さらに、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

【0739】

（陰極）

陰極4には、仕事関数の小さい（具体的には3.8 eV以下）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム（Li）やセシウム（Cs）等のアルカリ金属、およびマグネシウム（Mg）、カルシウム（Ca）、ストロンチウム（Sr）等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金（例えば、MgAg、AlLi）、ユーロピウム（Eu）、イッテルビウム（Yb）等の希土類金属およびこれらを含む合金等が挙げられる。

【0740】

なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、これらを含む合金を用いて陰極を形成する場

10

20

30

40

50

合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。また、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

【0741】

なお、電子注入層を設けることにより、仕事関数の大小に関わらず、Al、Ag、ITO、グラフェン、珪素もしくは酸化珪素を含有した酸化インジウム・酸化スズ等様々な導電性材料を用いて陰極を形成することができる。これらの導電性材料は、スパッタリング法やインクジェット法、スピンドルコート法等を用いて成膜することができる。

【0742】

(正孔注入層)

正孔注入層61は、正孔注入性の高い物質を含む層である。正孔注入性の高い物質としては、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タンゲステン酸化物、マンガン酸化物等を用いることができる。

【0743】

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

【0744】

また、正孔注入性の高い物質としては、高分子化合物(オリゴマー、デンドリマー、ポリマー等)を用いることもできる。例えば、ポリ(N-ビニルカルバゾール)(略称:PVK)、ポリ(4-ビニルトリフェニルアミン)(略称:PVTPA)、ポリ[N-(4-{N'-(4-(4-ジフェニルアミノ)フェニル)フェニル}-N'-フェニルアミノ]フェニル)メタクリルアミド](略称:PTPDMA)、ポリ[N,N'-ビス(4-ブチルフェニル)-N,N'-ビス(フェニル)ベンジジン](略称:Poly-TPD)などの高分子化合物が挙げられる。また、ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフェン)/ポリ(スチレンスルホン酸)(PEDOT/PPS)、ポリアニリン/ポリ(スチレンスルホン酸)(PAni/PPS)等の酸を添加した高分子化合物を用いることもできる。

【0745】

(正孔輸送層)

正孔輸送層62は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層62には、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用する事ができる。具体的には、4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:NPB)やN,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ジフェニル-[1,1'-ビフェニル]-4,4'-ジアミン(略称:TPD)、4-フェニル-4'--(9-フェニルフルオレン-9-イル)トリフェニルアミン(略称: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)-

10

20

30

40

50

N - フェニルアミノ] トリフェニルアミン(略称: M T D A T A)、4 , 4 ' - ビス [N - (スピロ - 9 , 9 ' - ビフルオレン - 2 - イル) - N フェニルアミノ] ビフェニル(略称: B S P B)などの芳香族アミン化合物等を用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の正孔移動度を有する物質である。

【 0 7 4 6 】

正孔輸送層 6 2 には、C B P 、9 - [4 - (N - カルバゾリル)] フェニル - 1 0 - フエニルアントラセン (C z P A) 、9 - フェニル - 3 - [4 - (1 0 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 9 H - カルバゾール (P C z P A) のようなカルバゾール誘導体や、t - B u D N A 、D N A 、D P A n t h のようなアントラセン誘導体を用いても良い。ポリ (N - ビニルカルバゾール) (略称: P V K) やポリ (4 - ビニルトリフェニルアミン) (略称: P V T P A) 等の高分子化合物を用いることもできる。

10

【 0 7 4 7 】

但し、電子よりも正孔の輸送性の高い物質であれば、これら以外のものを用いてもよい。なお、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。

【 0 7 4 8 】

(電子輸送層)

電子輸送層 7 1 は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層 7 1 には、1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、2) イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、3) 高分子化合物を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、A l q 、トリス (4 - メチル - 8 - キノリノラト) アルミニウム(略称: A l m q 3)、ビス (1 0 - ヒドロキシベンゾ [h] キノリナト) ベリリウム(略称: B e B q 2)、B A l q 、Z n q 、Z n P B O 、Z n B T Z などの金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、2 - (4 - ビフェニリル) - 5 - (4 - t e r t - 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 t e r t - 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 - t e r t - ブチルフェニル) - 4 - フェニル - 5 - (4 - ビフェニリル) - 1 , 2 , 4 - トリアゾール(略称: T A Z)、3 - (4 - t e r t - ブチルフェニル) - 4 - (4 - エチルフェニル) - 5 - (4 - ビフェニリル) - 1 , 2 , 4 - トリアゾール(略称: p - E t T A Z)、パソフェナントロリン(略称: B P h e n)、パソキュプロイン(略称: B C P)、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: B z O s)などの複素芳香族化合物も用いることができる。本実施態様においては、ベンゾイミダゾール化合物を好適に用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層で構成されていてもよいし、上記物質からなる層が二層以上積層されて構成されていてもよい。

20

30

【 0 7 4 9 】

また、電子輸送層 7 1 には、高分子化合物を用いることもできる。例えば、ポリ [(9 , 9 - ジヘキシルフルオレン - 2 , 7 - ジイル) - c o - (ピリジン - 3 , 5 - ジイル)] (略称: P F - P y) 、ポリ [(9 , 9 - ジオクチルフルオレン - 2 , 7 - ジイル) - c o - (2 , 2 ' - ビピリジン - 6 , 6 ' - ジイル)] (略称: P F - B P y) などを用いることができる。

40

【 0 7 5 0 】

(電子注入層)

電子注入層 7 2 は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層 7 2 には、リチウム (L i) 、セシウム (C s) 、カルシウム (C a) 、フッ化リチウム (L i F) 、フッ化セシウム (C s F) 、フッ化カルシウム (C a F 2) 、リチウム酸化物 (L i O x) 等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができ

50

る。その他、電子輸送性を有する物質にアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を含有させたもの、具体的には A 1 q 中にマグネシウム (Mg) を含有させたもの等を用いてもよい。なお、この場合には、陰極からの電子注入をより効率良く行うことができる。

【0751】

あるいは、電子注入層 7 2 に、有機化合物と電子供与体 (ドナー) とを混合してなる複合材料を用いてもよい。このような複合材料は、電子供与体によって有機化合物に電子が発生するため、電子注入性および電子輸送性に優れている。この場合、有機化合物としては、発生した電子の輸送に優れた材料であることが好ましく、具体的には、例えば上述した電子輸送層を構成する物質 (金属錯体や複素芳香族化合物等) を用いることができる。電子供与体としては、有機化合物に対し電子供与性を示す物質であればよい。具体的には、アルカリ金属やアルカリ土類金属や希土類金属が好ましく、リチウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、エルビウム、イッテルビウム等が挙げられる。また、アルカリ金属酸化物やアルカリ土類金属酸化物が好ましく、リチウム酸化物、カルシウム酸化物、バリウム酸化物等が挙げられる。また、酸化マグネシウムのようなルイス塩基を用いることもできる。また、テトラチアフルバレン (略称: TTF) 等の有機化合物を用いることもできる。

10

【0752】

(層形成方法)

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

20

【0753】

(膜厚)

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

【0754】

30

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

【0755】

(第三実施形態)

(電子機器)

本実施形態に係る電子機器は、上述の実施形態のいずれかの有機 E L 素子を搭載している。電子機器としては、例えば、表示装置及び発光装置等が挙げられる。表示装置としては、例えば、表示部品 (例えば、有機 E L パネルモジュール等)、テレビ、携帯電話、タブレット、及びパーソナルコンピュータ等が挙げられる。発光装置としては、例えば、照明及び車両用灯具等が挙げられる。

40

【0756】

(実施形態の変形)

なお、本発明は、上述の実施形態に限定されず、本発明の目的を達成できる範囲での変更、改良等は、本発明に含まれる。

【0757】

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

また、有機 E L 素子が複数の発光層を有する場合、これらの発光層が互いに隣接して設

50

けられていてもよいし、介在層を介して複数の発光ユニットが積層された、いわゆるタンデム型の有機EL素子であってもよい。

【0758】

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

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

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

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

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

【0759】

その他、本発明の実施における具体的な構造、及び形状等は、本発明の目的を達成できる範囲で他の構造等としてもよい。

【実施例】

【0760】

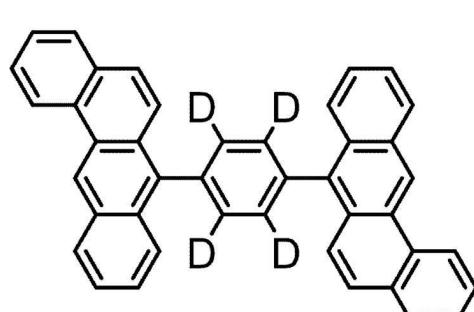
以下、実施例を挙げて本発明をさらに詳細に説明する。本発明はこれら実施例に何ら限定されない。

<化合物>

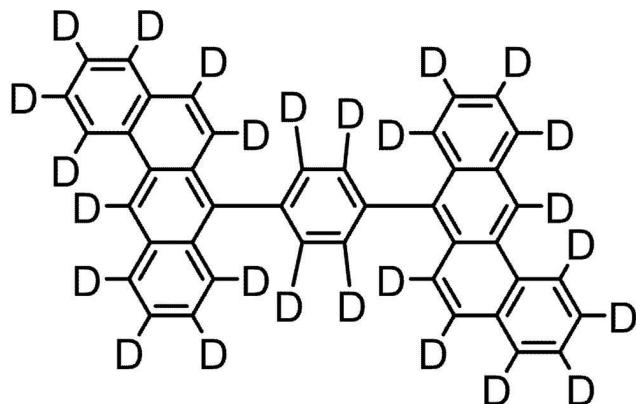
実施例に係る有機EL素子の製造に用いた、一般式（100A）で表される化合物の構造を以下に示す。

【0761】

【化326】



BH1-1



BH1-2

【0762】

10

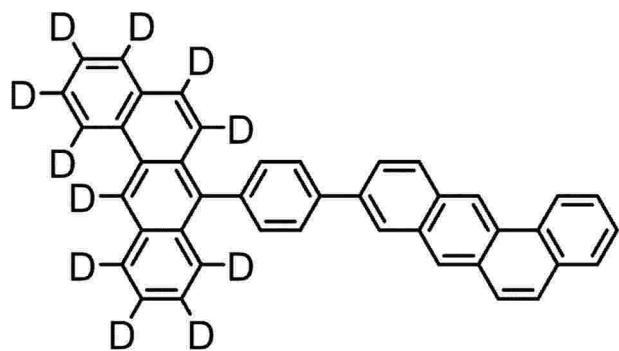
20

30

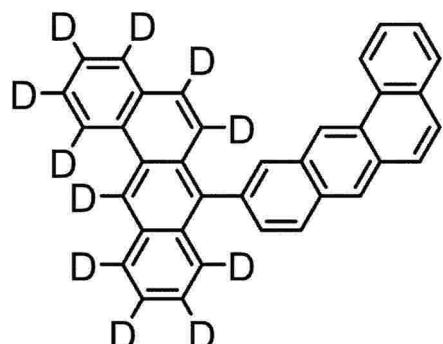
40

50

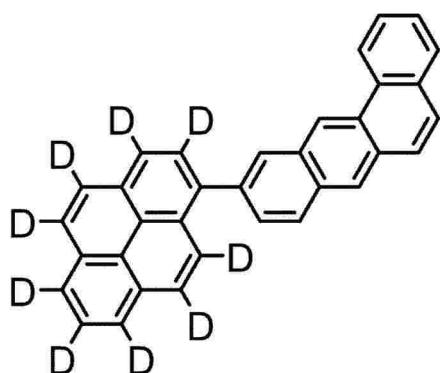
【化327】



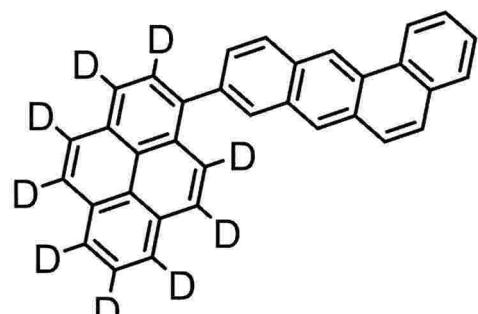
BH1-3



BH1-4



BH1-5



BH1-6

【0763】

10

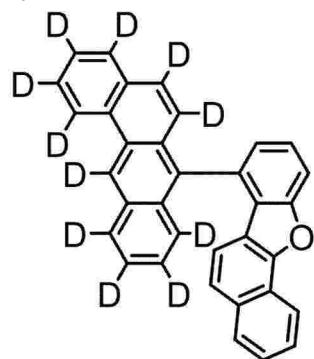
20

30

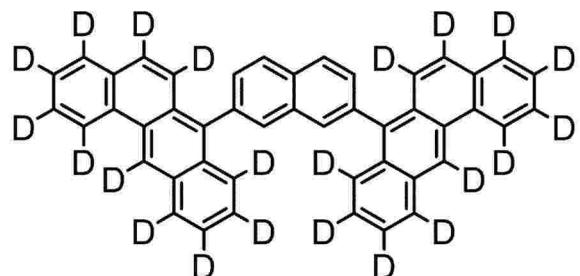
40

50

【化328】

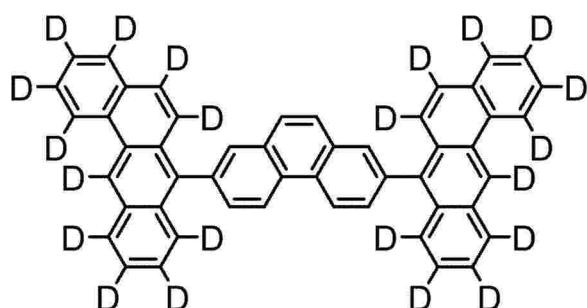


BH1-7

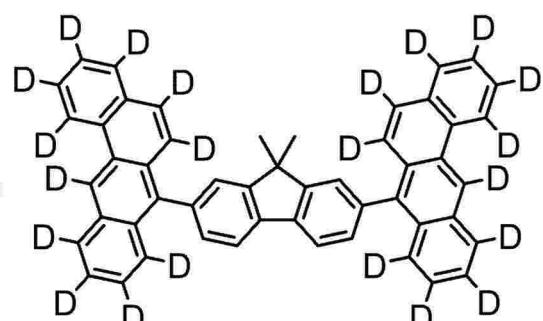


BH1-8

10



BH1-9

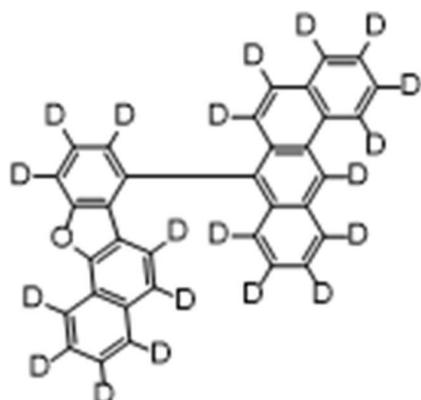


BH1-10

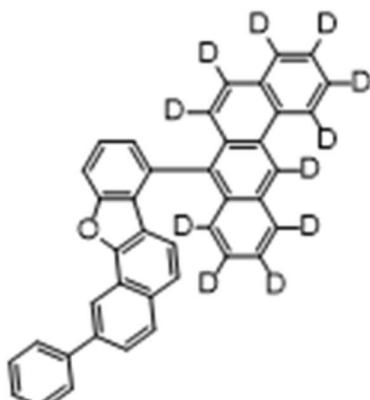
20

【0764】

【化329】



BH1-11



BH1-12

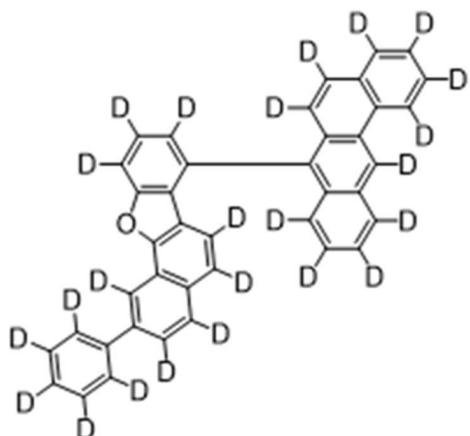
30

【0765】

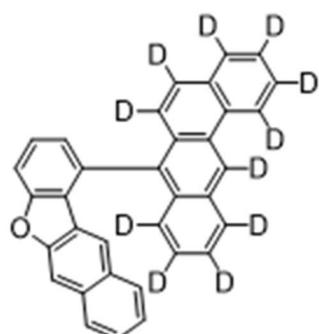
40

50

【化330】



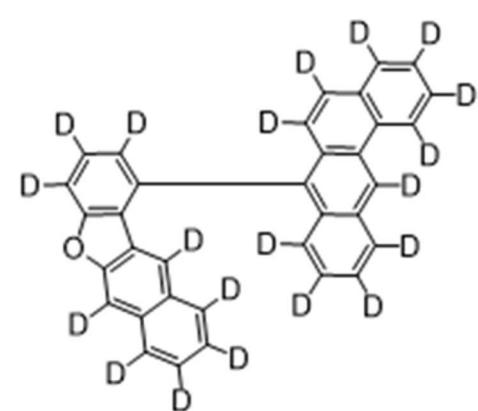
BH1-13



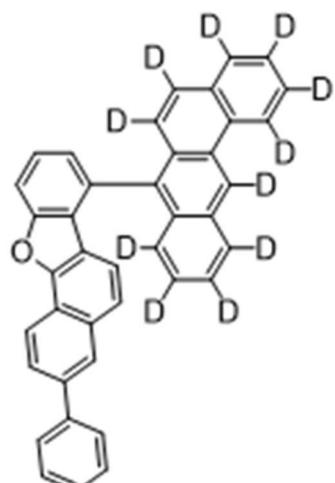
BH1-14

【0766】

【化331】



BH1-15



BH1-16

【0767】

10

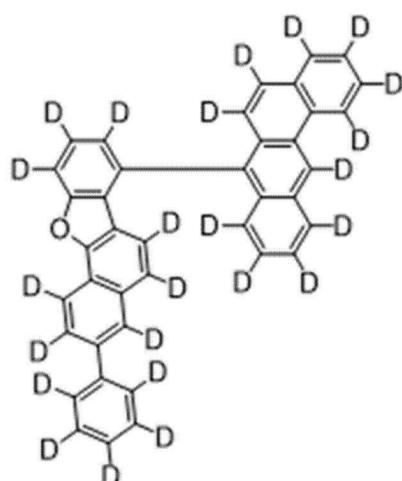
20

30

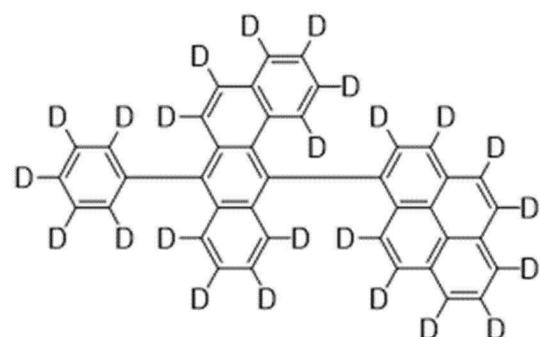
40

50

【化332】



BH1-17



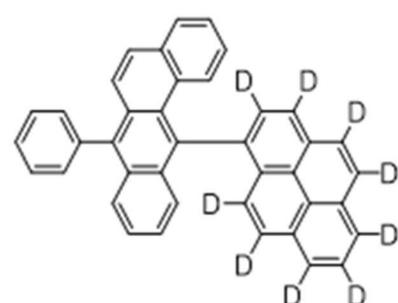
BH1-18

10

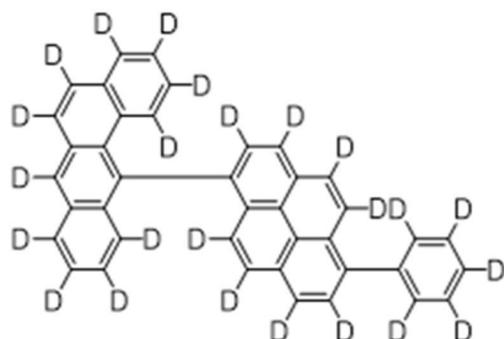
【0768】

【化333】

20



BH1-19



BH1-20

30

【0769】

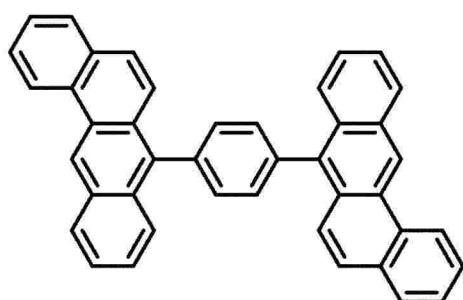
比較例に係る有機EL素子の製造に用いた比較化合物の構造を以下に示す。

【0770】

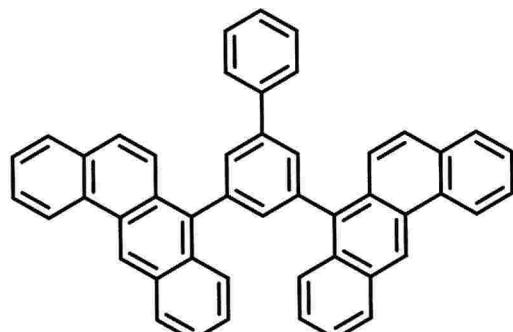
40

50

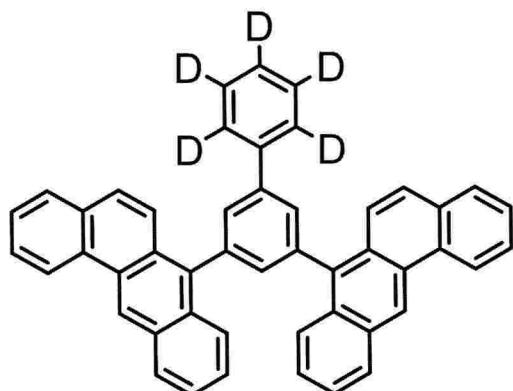
【化 3 3 4】



BH-Ref1



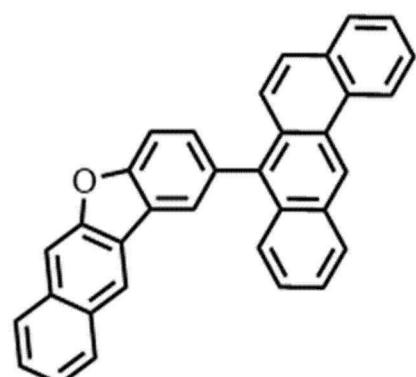
BH-Ref2



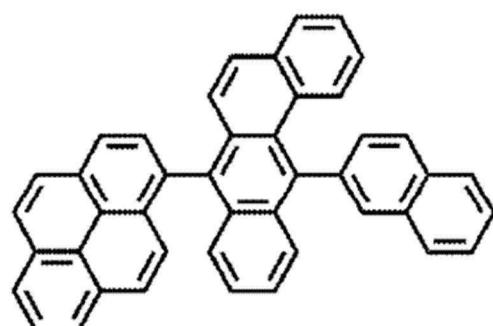
BH-Ref3

10

20

【0 7 7 1】
【化 3 3 5】

BH-Ref4



BH-Ref5

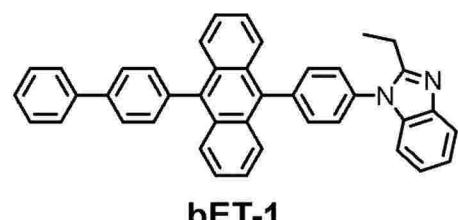
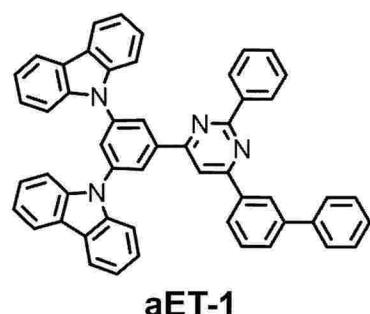
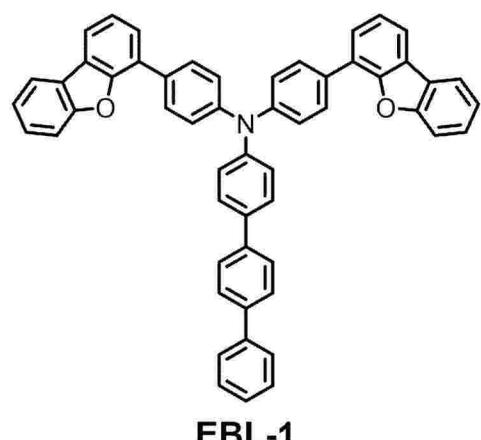
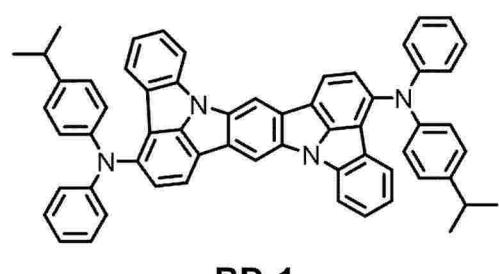
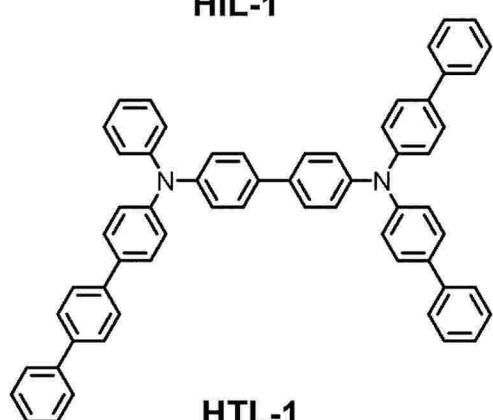
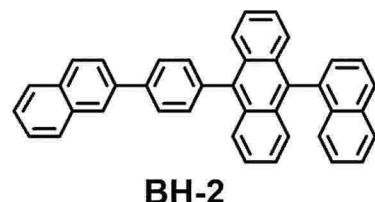
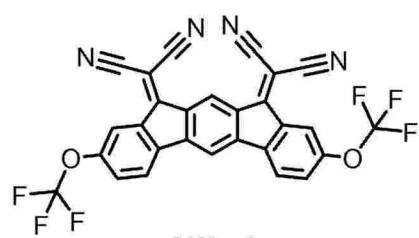
30

40

【0 7 7 2】
実施例並びに比較例に係る有機EL素子に用いた、他の化合物の構造を以下に示す。
【0 7 7 3】

50

【化 3 3 6】



【0 7 7 4】

10

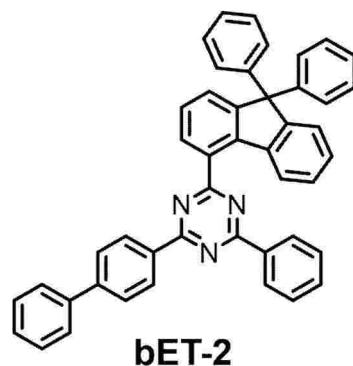
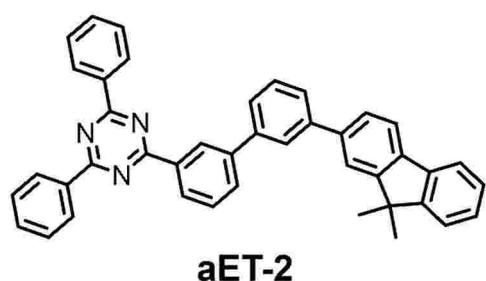
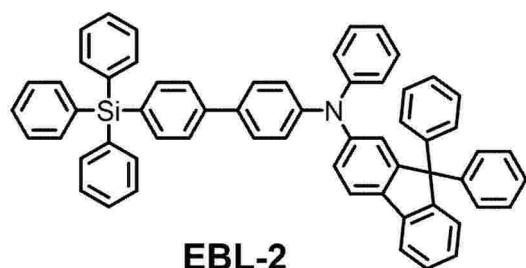
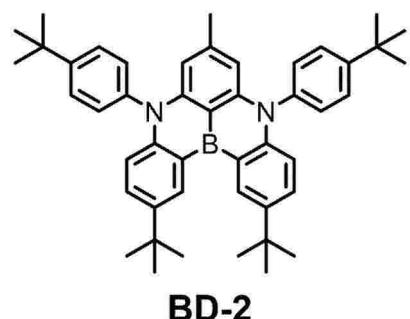
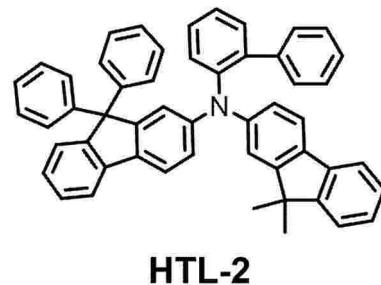
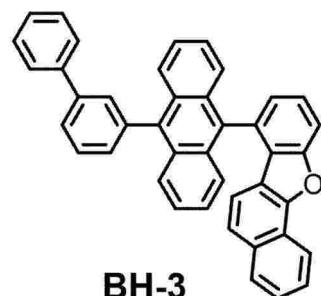
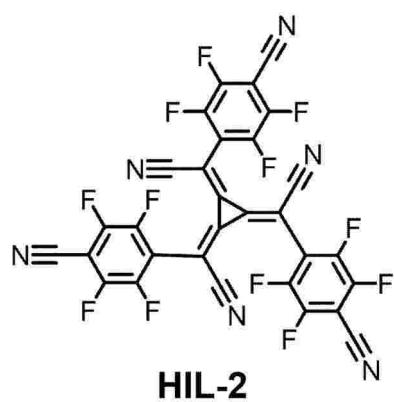
20

30

40

50

【化 3 3 7】



【0 7 7 5】

10

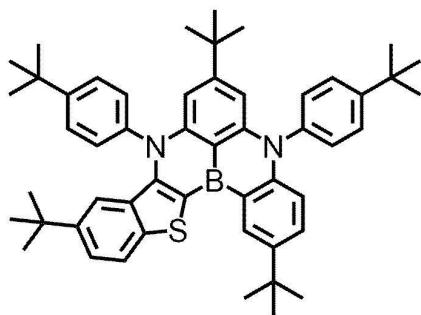
20

30

40

50

【化338】



BD-3

10

【0776】

<有機EL素子の作製(1)>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

【0777】

20

〔実施例1〕

25 mm × 75 mm × 1.1 mm厚のITO (Indium Tin Oxide) 透明電極(陽極)付きガラス基板(ジオマテック株式会社製)をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。ITO透明電極の膜厚は、130 nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HIL-1を蒸着し、膜厚5 nmの正孔注入層(HIL)を形成した。

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

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

第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物BH1-1及び第一の発光性化合物としての化合物BD-1を、化合物BD-1の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚12.5 nmの第一の発光層を成膜した。

第一の発光層上に第二の化合物としての化合物BH-2及び第二の発光性化合物としての化合物BD-1を、化合物BD-1の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚12.5 nmの第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物aET-1を蒸着し、膜厚10 nmの第一の電子輸送層(正孔障壁層ともいう)を形成した。

第一の電子輸送層上に化合物bET-1を蒸着し、膜厚15 nmの第二の電子輸送層を形成した。

第二の電子輸送層上にLiFを蒸着して膜厚1 nmの電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属Alを蒸着して膜厚80 nmの陰極を形成した。

実施例1の素子構成を略的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HIL-1(5)/HTL-1(80)/EBL-1(10)/BH1-1:BD-1(12.5,98%:2%)/BH-2:BD-1(12.5,98%:2%)/aET-1(10)/bET-1(15)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚(単位: nm)を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字(98%:2%)は、第一の発光層又は第二の発光層における化合物BH1-1又は化合物BH-2及び化合物BD-1の割

30

40

50

合(質量%)を示す。

【0778】

〔実施例2〕

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

【0779】

〔比較例1、2、及び3〕

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

【0780】

<有機EL素子の評価(1)>

実施例1及び2、並びに比較例1、2、及び3で作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。評価結果を表1に示す。

【0781】

・寿命(LT95)

得られた有機EL素子に、電流密度が50mA/cm²となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が95%となるまでの時間(LT95(単位:時間))を測定した。輝度は、分光放射輝度計CS-2000(コニカミノルタ株式会社製)を用いて測定した。

【0782】

【表1】

	第一の発光層						第二の発光層				素子評価		
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性 化合物	膜厚 [nm]	
	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]		名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]			
実施例1	BH1-1	3.11	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	98
実施例2	BH1-2	3.11	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	111
比較例1	BH-Ref1	3.11	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	88
比較例2	BH-Ref2	3.19	2.03	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	68
比較例3	BH-Ref3	3.19	2.03	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	70

10

20

【0783】

<有機EL素子の作製(2)>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

【0784】

〔実施例3〕

25mm×75mm×1.1mm厚のITO(Indium Tin Oxide)透明電極(陽極)付きガラス基板(ジオマテック株式会社製)をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。ITO透明電極の膜厚は、130nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして、化合物HTL-2及び化合物HIL-2を共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層を形成した。この正孔注入層中の化合物HTL-2の割合を90質量%とし、化合物HIL-2の割合を10質量%とした。

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

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

第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物BH1-1及び第一の発光性化合物としての化合物BD-2を、化合物BD-2の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜

30

40

50

厚 10 nm の第一の発光層を成膜した。

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

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

第一の電子輸送層上に化合物 bET-2 及び化合物 Liq を共蒸着し、膜厚 25 nm の第二の電子輸送層を形成した。この第二の電子輸送層の化合物 bET-2 の割合を 50 質量% とし、化合物 Liq の割合を 50 質量% とした。なお、Liq は、(8-キノリノラト)リチウム ((8-Quinolinolato) lithium) の略称である。

第二の電子輸送層上に化合物 Liq を蒸着して膜厚 1 nm の電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属 Al を蒸着して膜厚 80 nm の陰極を形成した。

実施例 3 の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

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

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（90% : 10%）は、正孔注入層における化合物 HTL-2 及び化合物 HIL-2 の割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（98% : 2%）は、第一の発光層又は第二の発光層における BH1-1 又は BH-3 及び化合物 BD-2 の割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（50% : 50%）は、第二の電子輸送層における化合物 bET-2 及び化合物 Liq の割合（質量%）を示す。

【0785】

〔実施例 4、5、6、7、8、9、10、11、及び 12〕

実施例 4、5、6、7、8、9、10、11、及び 12 の有機 EL 素子は、それぞれ、第一の発光層の第一の化合物を表 2 に記載の化合物に変更したこと以外、実施例 3 と同様にして作製した。

【0786】

<有機 EL 素子の評価（2）>

実施例 3、4、5、6、7、8、9、10、11、及び 12 で作製した有機 EL 素子について、以下の評価を行った。評価結果を表 2 に示す。

【0787】

・寿命（LT95）

得られた有機 EL 素子に、電流密度が 50 mA / cm² となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が 95% となるまでの時間（LT95（単位：時間））を測定した。輝度は、分光放射輝度計 CS-2000（コニカミノルタ株式会社製）を用いて測定した。

【0788】

10

20

30

40

50

【表2】

	第一の発光層						第二の発光層						素子評価
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性 化合物	膜厚 [nm]	LT95 [h]
	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]		名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]			
実施例3	BH1-1	3.11	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	46
実施例4	BH1-2	3.11	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	51
実施例5	BH1-3	3.06	2.04	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	58
実施例6	BH1-4	3.04	2.03	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	18
実施例7	BH1-5	3.03	2.03	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	33
実施例8	BH1-6	3.04	2.03	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	21
実施例9	BH1-7	3.08	2.08	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	19
実施例10	BH1-8	3.06	2.07	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	48
実施例11	BH1-9	3.04	2.06	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	39
実施例12	BH1-10	3.06	2.07	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	44

【0789】

<有機EL素子の作製(3)>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

【0790】

〔実施例13〕

25mm×75mm×1.1mm厚のITO(Indium Tin Oxide)透明電極(陽極)付きガラス基板(ジオマテック株式会社製)をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。ITO透明電極の膜厚は、130nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HIL-1を蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層(HIL)を形成した。

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

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

第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物BH1-7及び第一の発光性化合物としての化合物BD-1を、化合物BD-1の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚12.5nmの第一の発光層を成膜した。

第一の発光層上に第二の化合物としての化合物BH-2及び第二の発光性化合物としての化合物BD-1を、化合物BD-1の割合が2質量%となるように共蒸着し、膜厚12.5nmの第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物aET-1を蒸着し、膜厚10nmの第一の電子輸送層(正孔障壁層ともいう)を形成した。

第一の電子輸送層上に化合物bET-1を蒸着し、膜厚15nmの第二の電子輸送層を形成した。

第二の電子輸送層上にLiFを蒸着して膜厚1nmの電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属Alを蒸着して膜厚80nmの陰極を形成した。

実施例13の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HIL-1(5)/HTL-1(80)/EBL-1(10)/BH1-7:BD-1(12.5,98%:2%)/BH-2:BD-1(12.5,98%:2%)/aET-1(10)/bET-1(15)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚(単位: nm)を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字(98%:2%)は、第一の発光層又は第二の発光層における化合物BH1-7又は化合物BH-2及び化合物BD-1の割合(質量%)を示す。

10

20

30

40

50

【0791】

〔実施例14、15、16、17、18、19、及び20〕

実施例14、15、16、17、18、19、及び20の有機EL素子は、それぞれ、第一の発光層の第一の化合物を表3に記載の化合物に変更したこと以外、実施例13と同様にして作製した。

【0792】

〔比較例4〕

比較例4の有機EL素子は、第一の発光層の第一の化合物を表3に記載の化合物に変更したこと以外、実施例13と同様にして作製した。

【0793】

<有機EL素子の評価(3)>

実施例13、14、15、16、17、18、19、及び20、並びに比較例4で作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。評価結果を表3に示す。

【0794】

・CIE1931色度

電流密度が10.00mA/cm²となるように素子に電圧を印加した時のCIE1931色度座標(x、y)を分光放射輝度計CS-2000(コニカミノルタ株式会社製)で計測した。

【0795】

・寿命(LT95)

得られた有機EL素子に、電流密度が50mA/cm²となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が95%となるまでの時間(LT95(単位:時間))を測定した。輝度は、分光放射輝度計CS-2000(コニカミノルタ株式会社製)を用いて測定した。

表3には、各例(実施例13~20、及び比較例4)のLT95の測定値、並びに下記数式(数1X)に基づいて算出した「LT95(相対値)」(単位:%)を示す。

$$LT95(\text{相対値}) = (\text{各例のLT95} / \text{比較例4のLT95}) \times 100 \dots (\text{数1X})$$

【0796】

【表3】

名称	第一の発光層						第二の発光層						素子評価		
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の 発光性 化合物	膜厚 [nm]	CIE x	CIE y	LT95 (相対値) [%]
	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称		S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称					
実施例13	BH1-7	3.08	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	155
実施例14	BH1-11	3.08	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	165
実施例15	BH1-12	3.11	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	125
実施例16	BH1-13	3.11	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	135
実施例17	BH1-14	3.10	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	170
実施例18	BH1-15	3.10	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.134	0.110	180
実施例19	BH1-16	3.10	2.06	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	150
実施例20	BH1-17	3.10	2.06	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.110	170
比較例4	BH-Ref4	3.08	2.09	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	0.133	0.114	100

【0797】

<有機EL素子の作製(4)>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

【0798】

〔実施例21〕

25mm×75mm×1.1mm厚のITO(Indium Tin Oxide)透明電極(陽極)付きガラス基板(ジオマテック株式会社製)をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。ITO透明電極の膜厚は、130nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして、化合物HTL-

10

20

30

40

50

2 及び化合物 H I L - 2 を共蒸着し、膜厚 10 nm の正孔注入層を形成した。この正孔注入層中の化合物 H T L - 2 の割合を 90 質量% とし、化合物 H I L - 2 の割合を 10 質量% とした。

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

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

第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物 B H 1 - 7 及び第一の発光性化合物としての化合物 B D - 3 を、化合物 B D - 3 の割合が 2 質量% となるように共蒸着し、膜厚 10 nm の第一の発光層を成膜した。 10

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

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

第一の電子輸送層上に化合物 b E T - 2 及び化合物 L i q を共蒸着し、膜厚 25 nm の第二の電子輸送層を形成した。この第二の電子輸送層の化合物 b E T - 2 の割合を 50 質量% とし、化合物 L i q の割合を 50 質量% とした。

第二の電子輸送層上に化合物 L i q を蒸着して膜厚 1 nm の電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属 A 1 を蒸着して膜厚 80 nm の陰極を形成した。 20

実施例 2 1 の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HTL-2:HIL-2(10,90%:10%)/HTL-2(85)/EBL-2(5)/BH1-7:BD-3(10,98%:2%)/BH-3:BD-3(10,98%:2%)/aET-2(5)/bET-2:Liq(25,50%:50%)/Liq(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（90% : 10%）は、正孔注入層における化合物 H T L - 2 及び化合物 H I L - 2 の割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（98% : 2%）は、第一の発光層又は第二の発光層における B H 1 - 7 又は B H - 3 及び化合物 B D - 3 の割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（50% : 50%）は、第二の電子輸送層における化合物 b E T - 2 及び化合物 L i q の割合（質量%）を示す。 30

【0799】

〔実施例 2 2〕

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

【0800】

〔比較例 5〕

比較例 5 の有機 E L 素子は、第一の発光層の第一の化合物を表 4 に記載の化合物に変更したこと以外、実施例 2 1 と同様にして作製した。

【0801】

<有機 E L 素子の評価（4）>

実施例 2 1 及び 2 2、並びに比較例 5 で作製した有機 E L 素子について、以下の評価を行った。評価結果を表 4 に示す。 40

【0802】

・CIE 1931 色度

電流密度が 10 . 00 mA / cm² となるように素子に電圧を印加した時の CIE 1931 色度座標（x, y）を分光放射輝度計 CS - 2000（コニカミノルタ株式会社製）で計測した。

【0803】

・寿命（LT95）

得られた有機 E L 素子に、電流密度が 50 mA / cm² となるように電圧を印加し、初

期輝度に対して輝度が95%となるまでの時間(LT95(単位:時間))を測定した。輝度は、分光放射輝度計CS-2000(コニカミノルタ株式会社製)を用いて測定した。

表4には、各例(実施例21~22、及び比較例5)のLT95の測定値、並びに下記数式(数2X)に基づいて算出した「LT95(相対値)」(単位:%)を示す。

$$LT95(\text{相対値}) = (\text{各例のLT95} / \text{比較例5のLT95}) \times 100 \dots (\text{数2X})$$

【0804】

【表4】

第一の化合物	第一の発光層						第二の発光層						素子評価		
	第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性化合物	膜厚 [nm]	CIE x	CIE y	LT95 (相対値) [%]			
	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]		名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]					名称			
実施例21	BH1-7	3.08	2.08	BD-3	2.80	2.45	10	BH-3	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.097	172
実施例22	BH1-11	3.08	2.08	BD-3	2.80	2.45	10	BH-3	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.097	186
比較例5	BH-Ref4	3.08	2.09	BD-3	2.80	2.45	10	BH-3	3.01	1.87	BD-3	10	0.131	0.102	100

【0805】

<有機EL素子の作製(5)>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

【0806】

[実施例23、24、及び25]

実施例23、24、及び25の有機EL素子は、それぞれ、第一の発光層の第一の化合物を表5に記載の化合物に変更したこと以外、実施例1と同様にして作製した。

【0807】

[比較例6]

比較例6の有機EL素子は、第一の発光層の第一の化合物を表5に記載の化合物に変更したこと以外、実施例1と同様にして作製した。

【0808】

<有機EL素子の評価(5)>

実施例23、24、及び25、並びに比較例6で作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。評価結果を表5に示す。

【0809】

・寿命(LT95)

得られた有機EL素子に、電流密度が50mA/cm²となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が95%となるまでの時間(LT95(単位:時間))を測定した。輝度は、分光放射輝度計CS-2000(コニカミノルタ株式会社製)を用いて測定した。

表5には、各例(実施例23~25、及び比較例6)のLT95の測定値、並びに下記数式(数3X)に基づいて算出した「LT95(相対値)」(単位:%)を示す。

$$LT95(\text{相対値}) = (\text{各例のLT95} / \text{比較例6のLT95}) \times 100 \dots (\text{数3X})$$

【0810】

【表5】

第一の化合物	第一の発光層						第二の発光層						素子評価		
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性化合物	膜厚 [nm]	LT95 (相対値) [%]		
	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]		名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称				
実施例23	BH1-18	3.02	2.05	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	750		
実施例24	BH1-19	3.02	2.05	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	730		
実施例25	BH1-20	3.02	2.05	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	740		
比較例6	BH-Ref5	3.04	2.05	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	100		

【0811】

<有機EL素子の作製(6)>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

【0812】

〔実施例26〕

実施例26の有機EL素子は、第一の発光層の第一の化合物を表6に記載の化合物に変更したこと以外、実施例3と同様にして作製した。

【0813】

〔比較例7〕

比較例7の有機EL素子は、第一の発光層の第一の化合物を表6に記載の化合物に変更したこと以外、実施例3と同様にして作製した。

10

【0814】

<有機EL素子の評価(6)>

実施例26及び比較例7で作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。評価結果を表6に示す。

【0815】

・寿命(LT95)

得られた有機EL素子に、電流密度が50mA/cm²となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が95%となるまでの時間(LT95(単位:時間))を測定した。輝度は、分光放射輝度計CS-2000(コニカミノルタ株式会社製)を用いて測定した。

表6には、各例(実施例26及び比較例7)のLT95の測定値、並びに下記式(数4X)に基づいて算出した「LT95(相対値)」(単位:%)を示す。

20

$$LT95(\text{相対値}) = (\text{各例のLT95} / \text{比較例7のLT95}) \times 100 \dots (\text{数4X})$$

【0816】

【表6】

	第一の発光層						第二の発光層						素子評価	
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の 発光性 化合物	膜厚 [nm]		
	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]		名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称			
実施例26	BH1-20	3.02	2.05	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	660	
比較例7	BH-Ref5	3.04	2.05	BD-2	2.71	2.64	10	BH-3	3.01	1.87	BD-2	10	100	

30

【0817】

<有機EL素子の作製(7)>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

【0818】

〔実施例27〕

実施例27の有機EL素子は、第一の発光層の第一の化合物を表7に記載の化合物に変更したこと以外、実施例21と同様にして作製した。

【0819】

〔比較例8〕

比較例8の有機EL素子は、第一の発光層の第一の化合物を表7に記載の化合物に変更したこと以外、実施例21と同様にして作製した。

40

【0820】

<有機EL素子の評価(7)>

実施例27及び比較例8で作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。評価結果を表7に示す。

【0821】

・寿命(LT95)

得られた有機EL素子に、電流密度が50mA/cm²となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が95%となるまでの時間(LT95(単位:時間))を測定した。

50

輝度は、分光放射輝度計 C S - 2 0 0 0 (コニカミノルタ株式会社製)を用いて測定した。表 7 には、各例(実施例 27 及び比較例 8)の L T 9 5 の測定値、並びに下記数式(数 5 X)に基づいて算出した「L T 9 5 (相対値)」(単位: %)を示す。

$$L T 9 5 (相対値) = (各例の L T 9 5 / 比較例 8 の L T 9 5) \times 1 0 0 \dots (数 5 X)$$

【0822】

【表 7】

	第一の発光層						第二の発光層						素子評価
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の 発光性 化合物	膜厚 [nm]	LT95 (相対値) [%]
	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]		名称	S ₁ [eV]	T ₁ [eV]	名称		
実施例27	BH1-20	3.02	2.05	BD-3	2.80	2.45	10	BH-3	3.01	1.87	BD-3	10	620
比較例8	BH-Ref5	3.04	2.05	BD-3	2.80	2.45	10	BH-3	3.01	1.87	BD-3	10	100

【0823】

<化合物の評価>

(三重項エネルギー T₁)

測定対象となる化合物を E P A (ジエチルエーテル:イソペンタン:エタノール = 5 : 5 : 2 (容積比))中に、濃度が 1 0 μ m o l / L となるように溶解して溶液を作製し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とした。この測定試料について、低温 (77 [K]) で熒光スペクトル (縦軸: 熒光発光強度、横軸: 波長とする。) を測定し、この熒光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 _{edge} [nm] に基づいて、次の換算式 (F1) から算出されるエネルギー量を三重項エネルギー T₁とした。結果は表 1 及び表 2 に示す通りである。

なお、三重項エネルギー T₁ は、測定条件によっては上下 0.02 eV 程度の誤差が生じ得る。

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

【0824】

熒光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。熒光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ(つまり縦軸が増加するにつれ)、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線(すなわち変曲点における接線)が、当該熒光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

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

熒光の測定には、(株)日立ハイテクノロジー製の F - 4 5 0 0 形分光蛍光光度計本体を用いた。

【0825】

(一重項エネルギー S₁)

測定対象となる化合物の 1 0 μ m o l / L トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温 (300 K) でこの試料の吸収スペクトル (縦軸: 吸収強度、横軸: 波長とする。) を測定した。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 _{edge} [nm] を次に示す換算式 (F2) に代入して一重項エネルギー S₁ を算出した。結果は表 1 及び表 2 に示す通りである。

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

吸収スペクトル測定装置としては、日立社製の分光光度計(装置名: U 3 3 1 0)を用いた。

【0826】

吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ（つまり縦軸の値が減少するにつれ）、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側（ただし、吸光度が0.1以下となる場合は除く）で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

なお、吸光度の値が0.2以下の極大点は、上記最も長波長側の極大値には含めない。

【0827】

(化合物の最大ピーク波長)

10

化合物の最大ピーク波長は、以下の方法により測定した。

測定対象となる化合物の5 μm o l / Lトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（300 K）でこの試料の発光スペクトル（縦軸：発光強度、横軸：波長とする。）を測定した。本実施例では、発光スペクトルを株式会社日立ハイテクサイエンス製の分光蛍光度計（装置名：F-7000）で測定した。なお、発光スペクトル測定装置は、ここで用いた装置に限定されない。発光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を最大ピーク波長とした。

化合物B D - 1 の最大ピーク波長は、452 nm であった。

化合物B D - 2 の最大ピーク波長は、455 nm であった。

化合物B D - 3 の最大ピーク波長は、457 nm であった。

20

【0828】

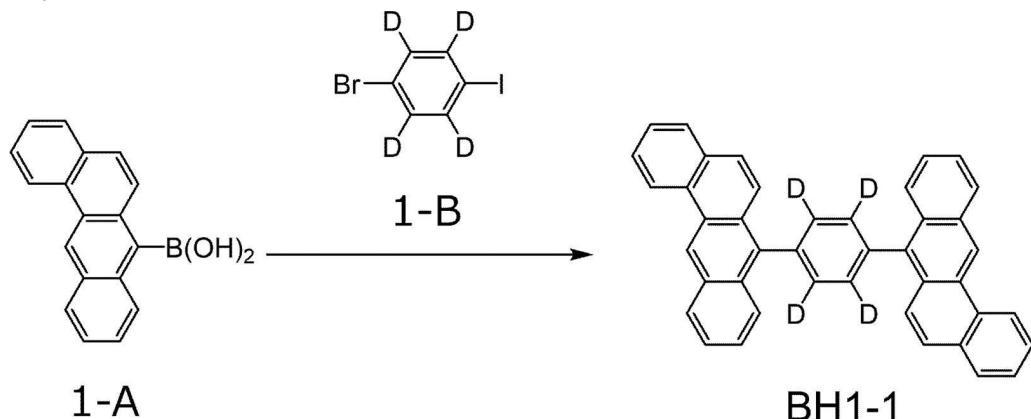
<化合物の合成>

[合成例1：化合物B H 1 - 1 の合成]

下記合成経路で、化合物B H 1 - 1 を合成した。

【0829】

【化339】



30

【0830】

(化合物B H 1 - 1 の合成)

40

アルゴン雰囲気下、中間体1-A：11.4 g（41.8 mm o l）、中間体1-B：5.0 g（17.4 mm o l）、ジクロロビスアムフォスパラジウム（2）：0.99 g（1.4 mm o l）、2 M炭酸ナトリウム水溶液：21.8 ml（43.6 mm o l）、及び1,2-ジメトキシエタン：350 mlをフラスコに仕込み、73で8時間加熱攪拌した。攪拌後に室温（25）まで冷却した後、溶媒を留去し、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体2.0 g（収率22%）を得た。

L C - M S分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該白色固体を化合物B H 1 - 1 と同定した。

【0831】

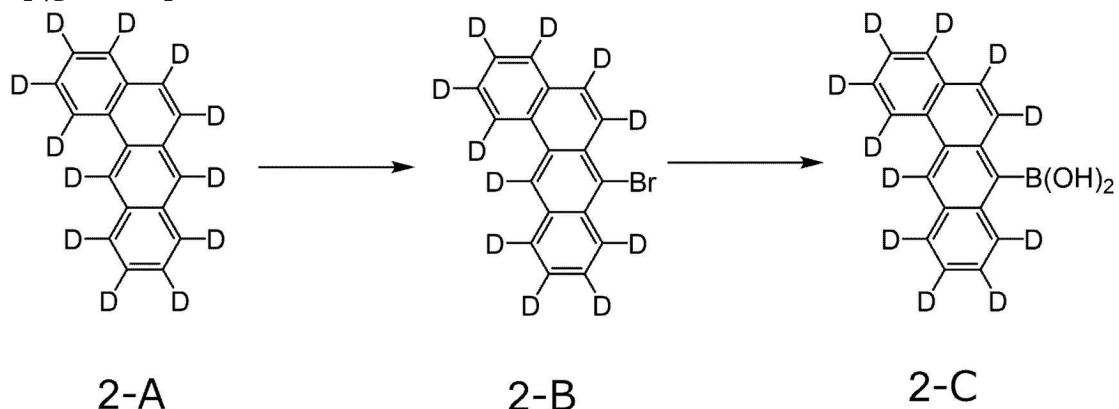
[合成例2：化合物B H 1 - 2 の合成]

50

下記合成経路で、化合物 B H 1 - 2 を合成した。

【0832】

【化340】



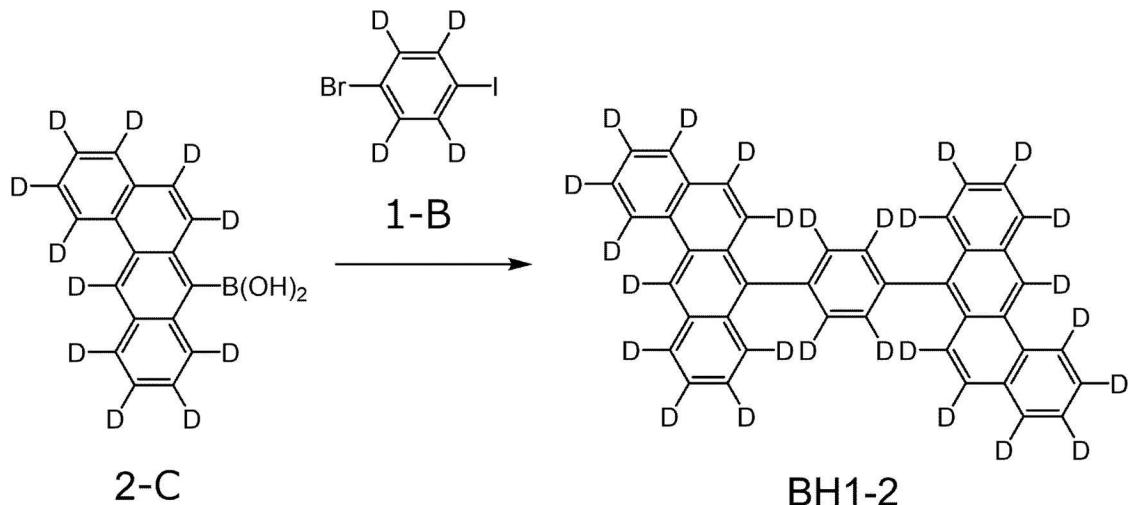
【0833】

(中間体 2 - C の合成)

国際公開第 2007/114358 号に記載の合成方法と同様の合成方法で中間体 2 - A から 2 step で中間体 2 - C を合成し、白色固体 9.2 g (総収率 64%) を得た。LC - MS 分析により、当該白色固体を中間体 2 - C と同定した。

【0834】

【化341】



【0835】

(化合物 B H 1 - 2 の合成)

化合物 B H 1 - 1 の合成において、中間体 1 - A の代わりに中間体 2 - C を用いた以外は、化合物 B H 1 - 1 の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体 0.32 g (収率 39%) を得た。

LC - MS 分析により、当該白色固体を化合物 B H 1 - 2 と同定した。

【0836】

[合成例 3 : 化合物 B H 1 - 3 の合成]

下記合成経路で、化合物 B H 1 - 3 を合成した。

【0837】

10

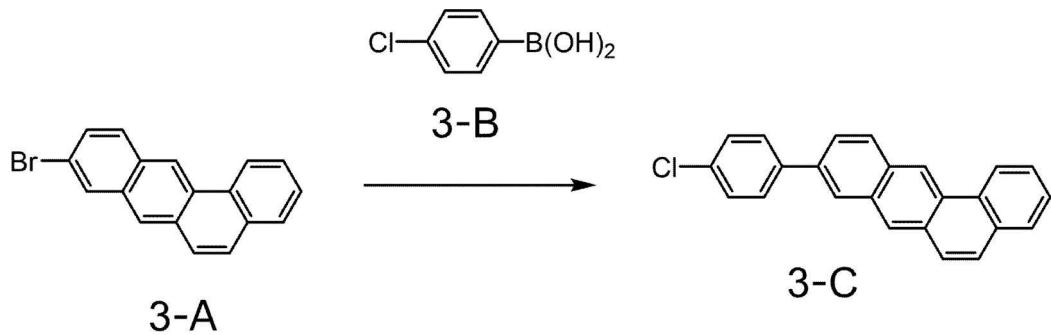
20

30

40

50

【化342】



10

【0838】

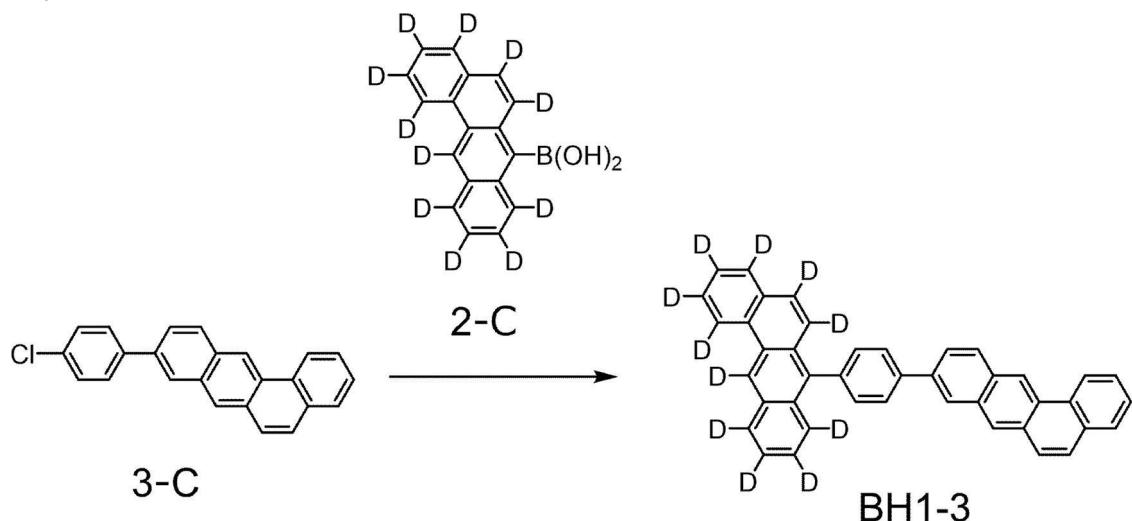
(中間体3-Cの合成)

化合物BH1-1の合成において、中間体1-A及び中間体1-Bの代わりに中間体3-A及び中間体3-Bを用いた以外は、化合物BH1-1の合成方法と同様の方法で中間体3-Cを合成し、白色固体3.4g(収率38%)を得た。

LC-MS分析により、当該白色固体を中間体3-Cと同定した。

【0839】

【化343】



20

30

【0840】

(化合物BH1-3の合成)

化合物BH1-1の合成において、中間体1-A及び中間体1-Bの代わりに中間体2-C及び中間体3-Cを用いた以外は、化合物BH1-1の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体1.1g(収率39%)を得た。

LC-MS分析により、当該白色固体を化合物BH1-3と同定した。

40

【0841】

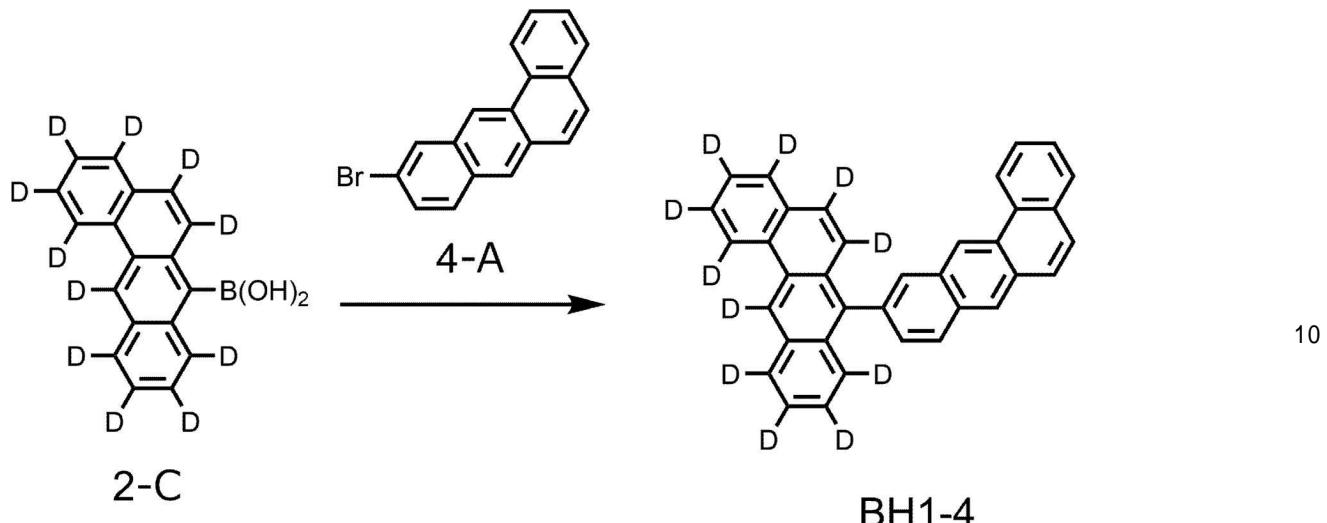
[合成例4：化合物BH1-4の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-4を合成した。

【0842】

50

【化344】



【0843】

(化合物BH1-4の合成)

化合物BH1-1の合成において、中間体1-A及び中間体1-Bの代わりに中間体2-C及び中間体4-Aを用いた以外は、化合物BH1-1の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体0.7g(収率62%)を得た。

LC-MS分析により、当該淡黄色固体を化合物BH1-4と同定した。

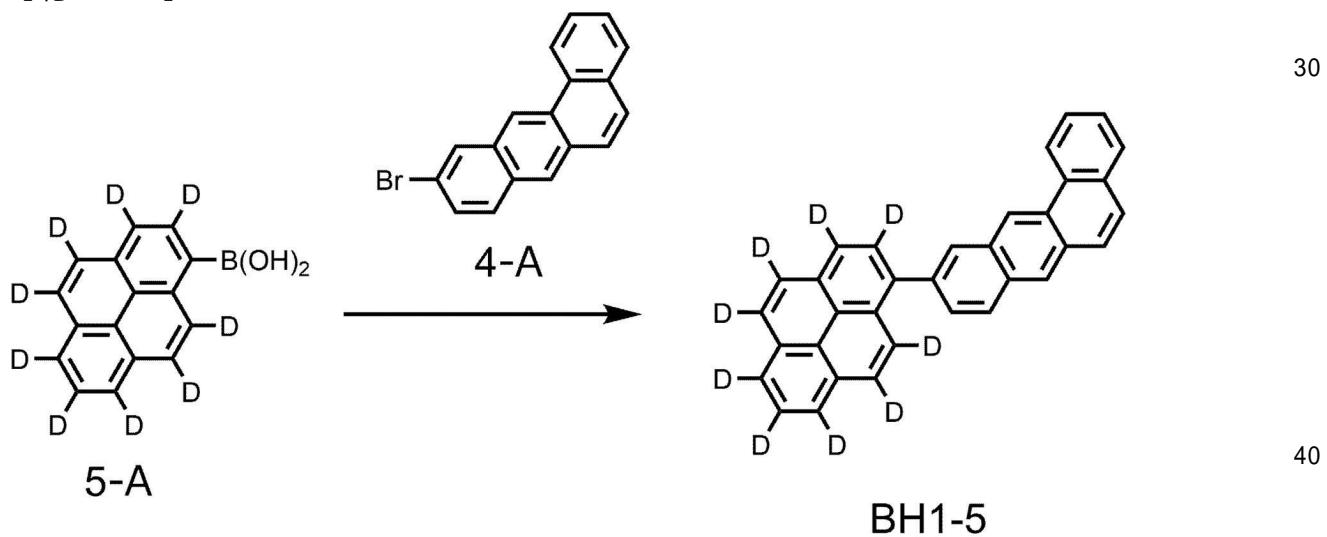
【0844】

[合成例5：化合物BH1-5の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-5を合成した。

【0845】

【化345】



【0846】

(化合物BH1-5の合成)

化合物BH1-1の合成において、中間体1-A及び中間体1-Bの代わりに中間体4-A及び中間体5-Aを用いた以外は、化合物BH1-1の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体1.3g(収率48%)を得た。

LC-MS分析により、当該淡黄色固体を化合物BH1-5と同定した。

10

20

30

40

50

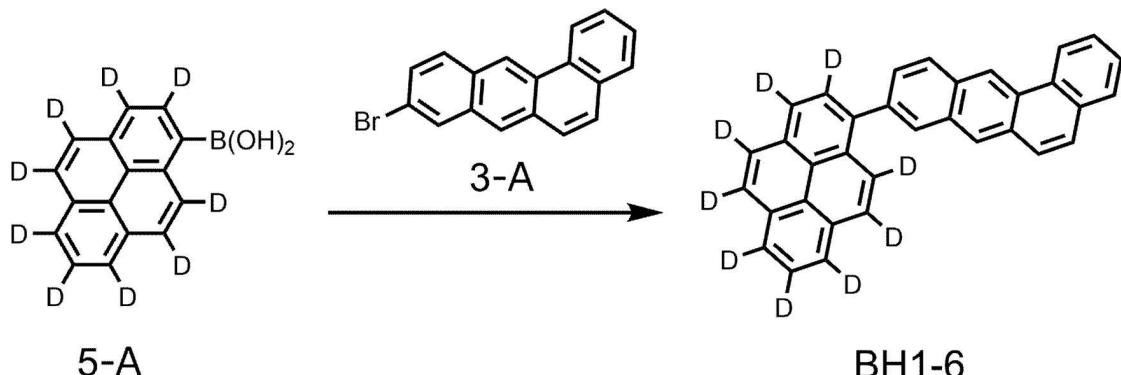
【0847】

〔合成例6：化合物BH1-6の合成〕

下記合成経路で、化合物BH1-6を合成した。

【0848】

【化346】



【0849】

〔化合物BH1-6の合成〕

化合物BH1-1の合成において、中間体1-A及び中間体1-Bの代わりに中間体3-A及び中間体5-Aを用いた以外は、化合物BH1-1の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体0.2g（収率19%）を得た。

LC-MS分析により、当該淡黄色固体を化合物BH1-6と同定した。

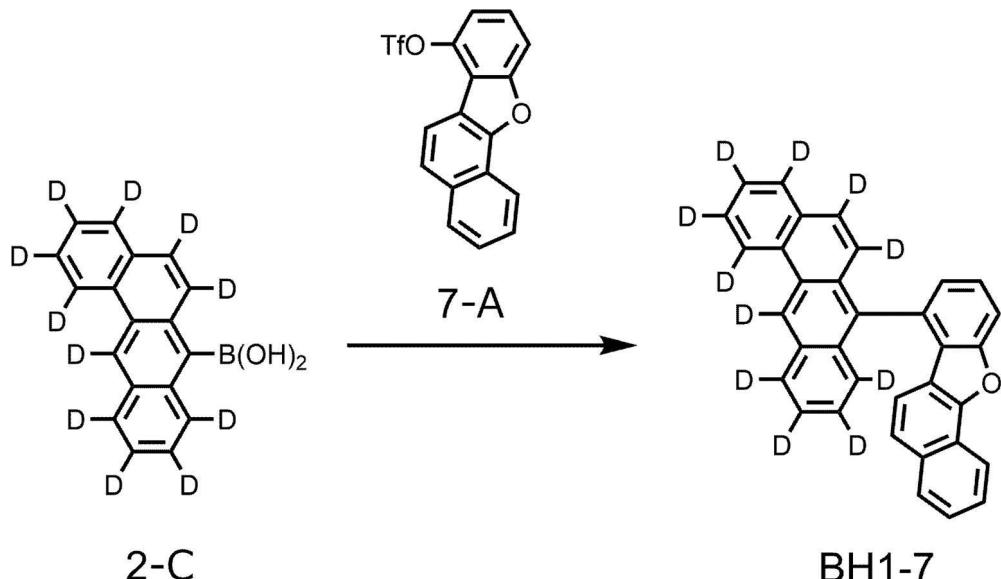
【0850】

〔合成例7：化合物BH1-7の合成〕

下記合成経路で、化合物BH1-7を合成した。

【0851】

【化347】



【0852】

〔化合物BH1-7の合成〕

化合物BH1-1の合成において、中間体1-A及び中間体1-Bの代わりに中間体2-C及び中間体7-Aを用いた以外は、化合物BH1-1の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体2.1g（収率77%）を得た。

10

20

30

40

50

L C - M S 分析により、当該白色固体を化合物 B H 1 - 7 と同定した。

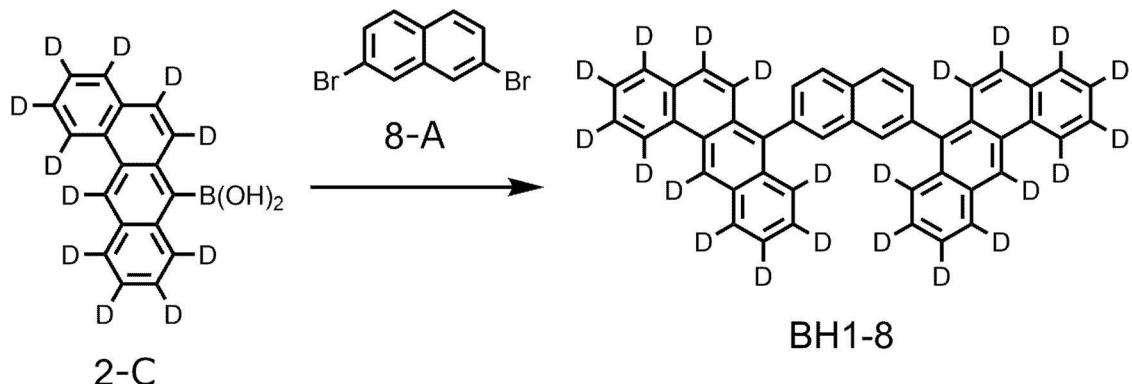
【 0 8 5 3 】

[合成例 8 : 化合物 B H 1 - 8 の合成]

下記合成経路で、化合物 B H 1 - 8 を合成した。

【 0 8 5 4 】

【 化 3 4 8 】



【 0 8 5 5 】

(化合物 B H 1 - 8 の合成)

化合物 B H 1 - 1 の合成において、中間体 1 - A 及び中間体 1 - B の代わりに中間体 2 - C 及び中間体 8 - A を用いた以外は、化合物 B H 1 - 1 の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体 0.9 g (収率 51 %) を得た。

L C - M S 分析により、当該白色固体を化合物 B H 1 - 8 と同定した。

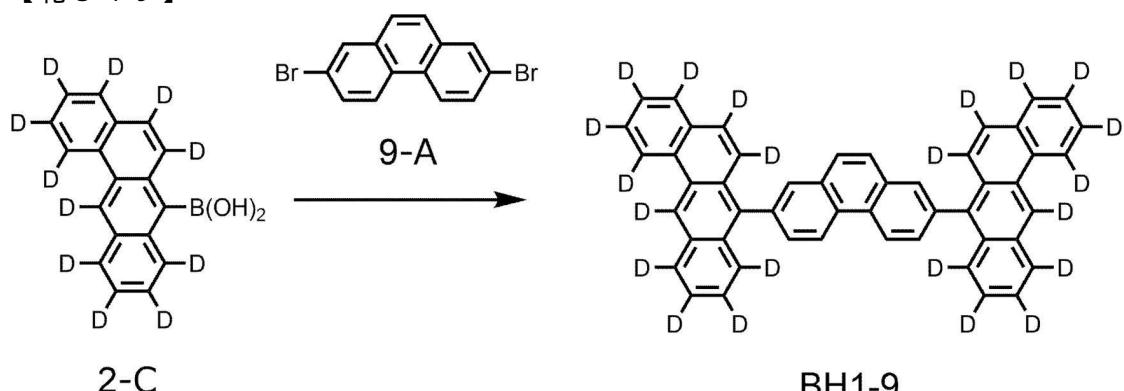
【 0 8 5 6 】

[合成例 9 : 化合物 B H 1 - 9 の合成]

下記合成経路で、化合物 B H 1 - 9 を合成した。

【 0 8 5 7 】

【 化 3 4 9 】



【 0 8 5 8 】

(化合物 B H 1 - 9 の合成)

化合物 B H 1 - 1 の合成において、中間体 1 - A 及び中間体 1 - B の代わりに中間体 2 - C 及び中間体 9 - A を用いた以外は、化合物 B H 1 - 1 の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体 1.7 g (収率 46 %) を得た。

L C - M S 分析により、当該白色固体を化合物 B H 1 - 9 と同定した。

【 0 8 5 9 】

[合成例 10 : 化合物 B H 1 - 10 の合成]

下記合成経路で、化合物 B H 1 - 10 を合成した。

10

20

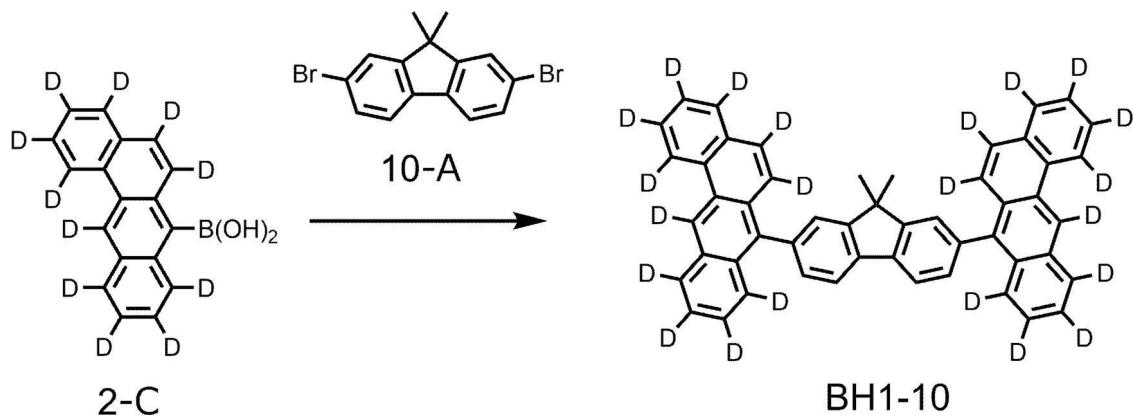
30

40

50

【0860】

【化350】



【0861】

(化合物B H 1 - 1 0の合成)

化合物B H 1 - 1 の合成において、中間体1 - A 及び中間体1 - B の代わりに中間体2 - C 及び中間体1 0 - A を用いた以外は、化合物B H 1 - 1 の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体1 . 3 g (收率63%)を得た。

L C - M S 分析により、当該白色固体を化合物B H 1 - 1 0 と同定した。

20

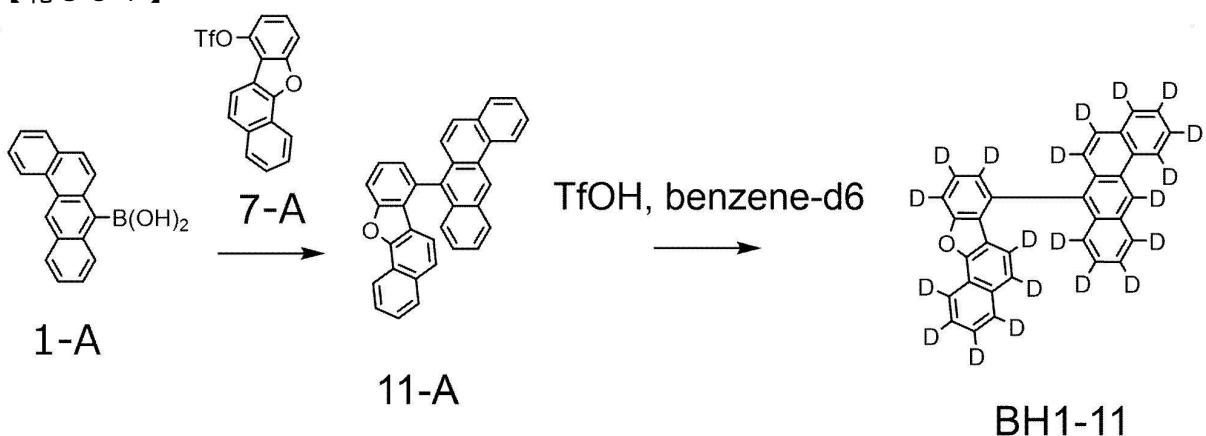
【0862】

[合成例11：化合物B H 1 - 1 1の合成]

下記合成経路で、化合物B H 1 - 1 1 を合成した。

【0863】

【化351】



【0864】

(中間体1 1 - Aの合成)

化合物B H 1 - 1 の合成において、中間体1 - B の代わりに中間体7 - A を用いた以外は、化合物B H 1 - 1 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体2 . 3 g (收率56%)を得た。

L C - M S 分析により、当該淡黄色固体を中間体1 1 - A と同定した。

40

【0865】

(化合物B H 1 - 1 1の合成)

アルゴン雰囲気下、中間体1 1 - A : 5 . 0 g (11 . 3 mmol) 及びオルト - ジクロロベンゼン : 1 0 0 m l をフラスコに仕込み、室温で攪拌しながら完全溶解させた後、ベンゼン - d 6 : 5 0 m l を加え、1 0 で5分攪拌した。その後、トリフルオロメタン

50

スルホン酸：1.99ml (22.5mmol) を加え、10で2時間攪拌した。その後重水200mlを加えさらに15分攪拌した。攪拌後、水層を除去し残った有機層を濃縮、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、淡黄色固体3.0g (収率58%)を得た。

LC-MS分析により、当該淡黄色固体を化合物BH1-11と同定した。

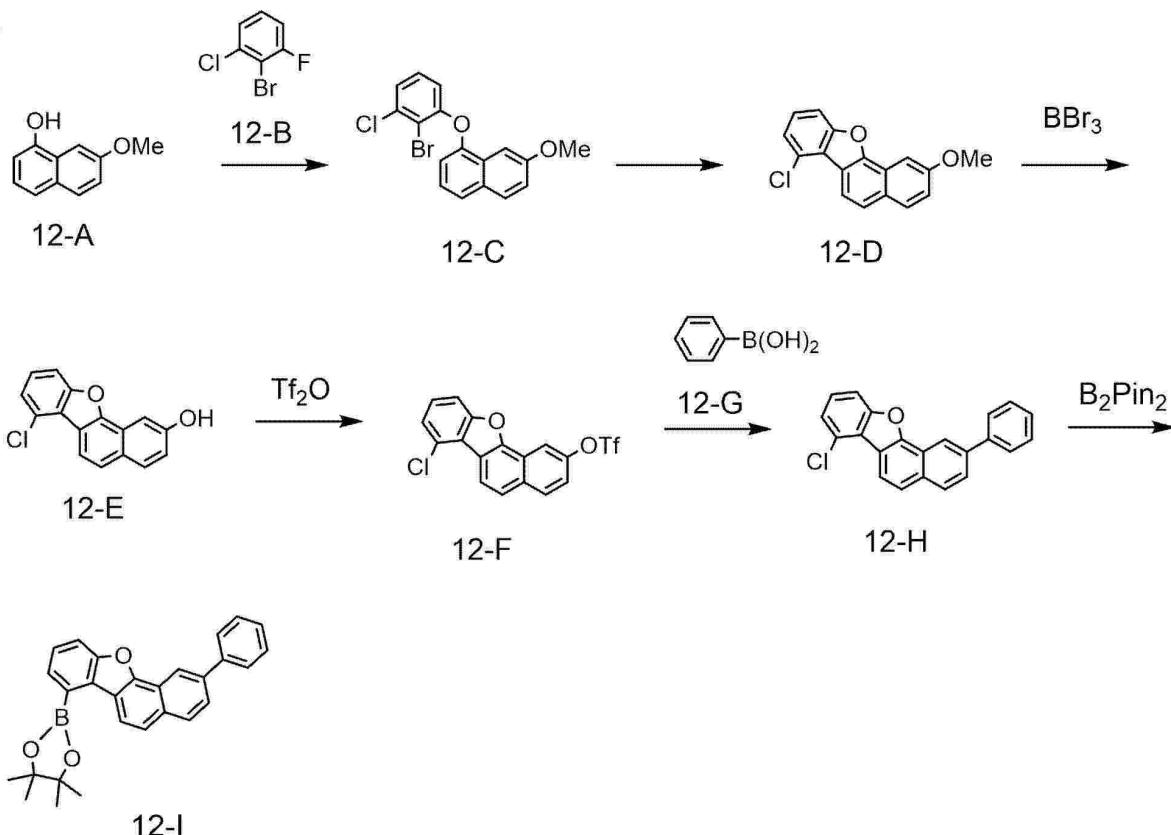
【0866】

[合成例12：化合物BH1-12の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-12を合成した。

【0867】

【化352】



【0868】

(中間体12-Cの合成)

アルゴン雰囲気下、中間体12-A：25.0g (144.0mmol)、中間体12-B：31.5g (158.0mmol)、炭酸セシウム：70.1g (215.0mmol)、N,N-ジメチルホルムアミド：300mlをフラスコに仕込み、130で10時間加熱攪拌した。

室温(25)まで冷却後、反応溶液を濃縮し得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体34.0g (収率65%)を得た。

LC-MS分析により、当該白色固体を中間体12-Cと同定した。

【0869】

(中間体12-Dの合成)

アルゴン雰囲気下、中間体12-C：34.0g (94.0mmol)、[1,1-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]ジクロロパラジウム(II)：2.1g (2.8mmol)、炭酸カリウム：25.8g (187.0mmol)、N,N-ジメチルホルムアミド：940mlをフラスコに仕込み、130で10時間加熱攪拌した。

室温(25)まで冷却後、反応溶液を濃縮し得られた残渣をシリカゲルカラム

10

20

30

40

50

トグラフィで精製し、白色固体 . 15 . 6 g (収率 59 %)を得た。

L C - M S 分析により、当該白色固体を中間体 12 - D と同定した。

【 0870 】

(中間体 12 - E の合成)

アルゴン雰囲気下、中間体 12 - D : 15 . 6 g (55 . 2 mmol)、ジクロロメタン : 150 ml をフラスコに仕込み、溶液を 0 ℃ まで冷却した後に、三臭化ホウ素 1 M ジクロロメタン溶液 : 71 . 7 ml (71 . 7 mmol) を系中に滴下し、そのまま 1 時間攪拌した。

室温 (25 ℃) に戻しながらさらに 6 時間攪拌した後、反応溶液に氷水を加えた。

よく攪拌した後水層を除去し、残った有機層を濃縮、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 11 . 6 g (収率 78 %)を得た

L C - M S 分析により、当該白色固体を中間体 12 - E と同定した。

【 0871 】

(中間体 12 - F の合成)

アルゴン雰囲気下、中間体 12 - E : 11 . 6 g (43 . 2 mmol)、ジクロロメタン : 215 ml をフラスコに仕込み、溶液を 0 ℃ まで冷却した後に、ピリジン : 4 . 4 ml (56 . 1 mmol) を系中に滴下し、その後トリフルオロメタンスルホン酸無水物 : 9 . 2 ml (56 . 1 mmol) を系中に滴下し、そのまま 1 時間攪拌した。

室温 (25 ℃) に戻しながらさらに 6 時間攪拌した後、反応溶液に氷水を加えた。

よく攪拌した後水層を除去し、残った有機層を濃縮、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 12 . 5 g (収率 72 %)を得た。

L C - M S 分析により、当該白色固体を中間体 12 - F と同定した。

【 0872 】

(中間体 12 - H の合成)

化合物 B H 1 - 1 の合成において、中間体 1 - A 及び中間体 1 - B の代わりに中間体 12 - F 及び中間体 12 - G を用いた以外は、化合物 B H 1 - 1 の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体 6 . 5 g (収率 63 %)を得た。

L C - M S 分析により、当該白色固体を中間体 12 - H と同定した。

【 0873 】

(中間体 12 - I の合成)

アルゴン雰囲気下、中間体 12 - H : 6 . 5 g (19 . 8 mmol)、ビス (ピナコラート) ジボロン 10 . 0 g (39 . 5 mmol)、酢酸パラジウム (II) : 0 . 09 g (0 . 4 mmol)、X Phos : 0 . 75 g (1 . 6 mmol)、酢酸カリウム 5 . 82 g (59 . 3 mmol)、及び 1 , 4 - デオキサン 100 mL をフラスコに入れ、7 時間 100 ℃ で攪拌した。攪拌後、室温まで冷却した。冷却後、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、硫酸ナトリウムを加えて乾燥した。乾燥後、ろ過し、減圧下濃縮した。粗体をシリカゲルクロマトグラフィーで精製し、白色固体 2 . 8 g (収率 49 %)を得た。

L C - M S 分析により、当該白色固体を中間体 12 - I と同定した。

【 0874 】

10

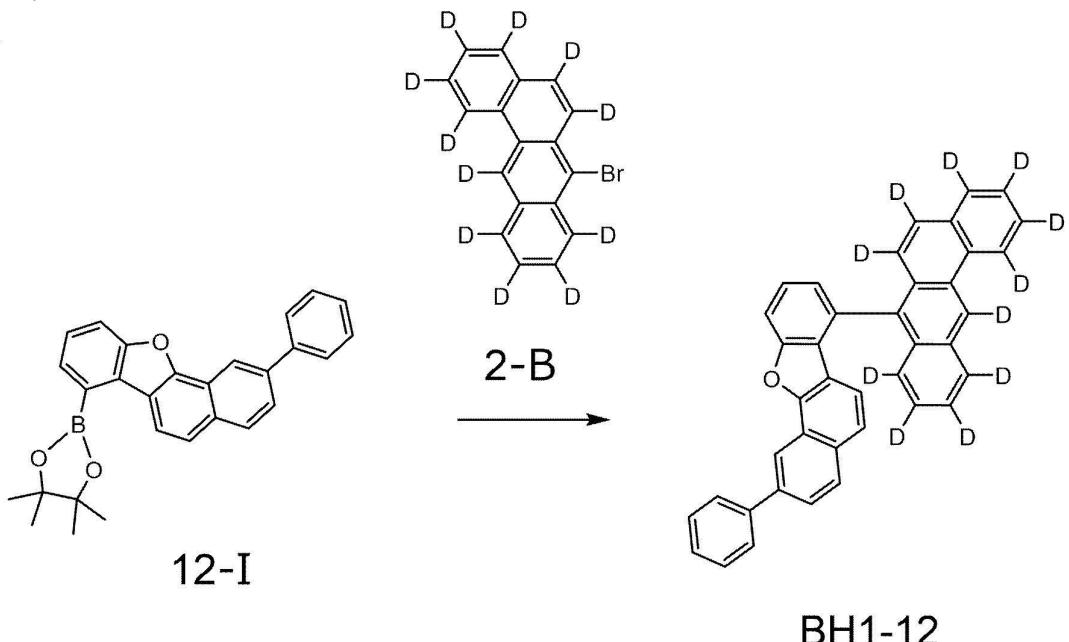
20

30

40

50

【化353】



【0875】

(化合物B H 1 - 1 2の合成)

化合物B H 1 - 1 の合成において、中間体1 - A 及び中間体1 - B の代わりに中間体1 2 - I 及び中間体2 - B を用いた以外は、化合物B H 1 - 1 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体0 . 8 g (収率6 3 %)を得た。

L C - M S 分析により、当該淡黄色固体を化合物B H 1 - 1 2 と同定した。

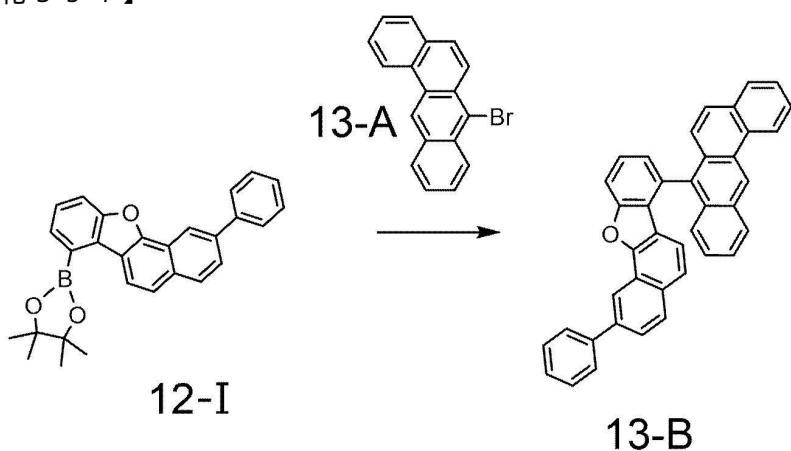
【0876】

[合成例13：化合物B H 1 - 1 3の合成]

下記合成経路で、化合物B H 1 - 1 3 を合成した。

【0877】

【化354】



【0878】

(中間体13 - Bの合成)

化合物B H 1 - 1 の合成において、中間体1 - A 及び中間体1 - B の代わりに中間体1 2 - I 及び中間体13 - A を用いた以外は、化合物B H 1 - 1 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体1 . 3 g (収率5 3 %)を得た。

L C - M S 分析により、当該淡黄色固体を中間体13 - B と同定した。

10

20

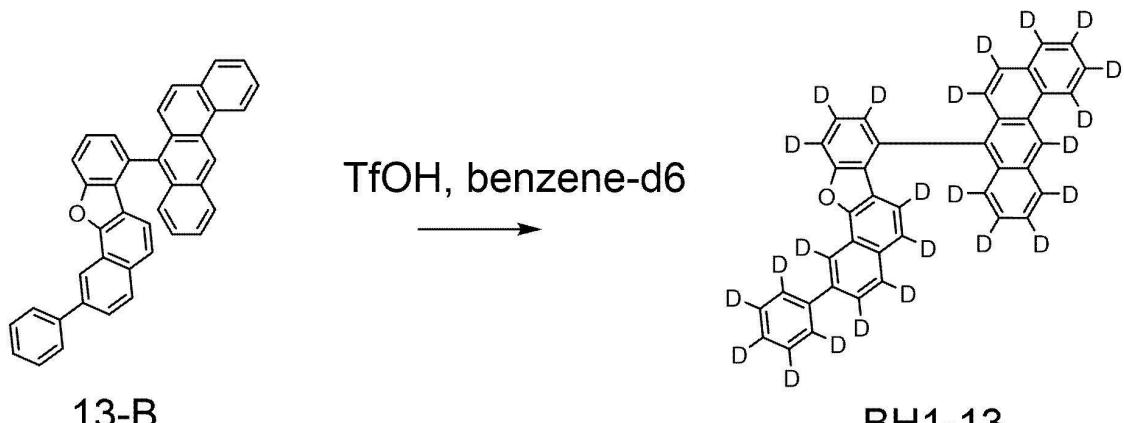
30

40

50

【0879】

【化355】



【0880】

(化合物 BH1-11 の合成)

化合物 BH1-11 の合成において、中間体 11-A の代わりに中間体 13-B を用いた以外は、化合物 BH1-11 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体 0.4 g (収率 36%) を得た。

LC-MS 分析により、当該淡黄色固体を化合物 BH1-13 と同定した。

20

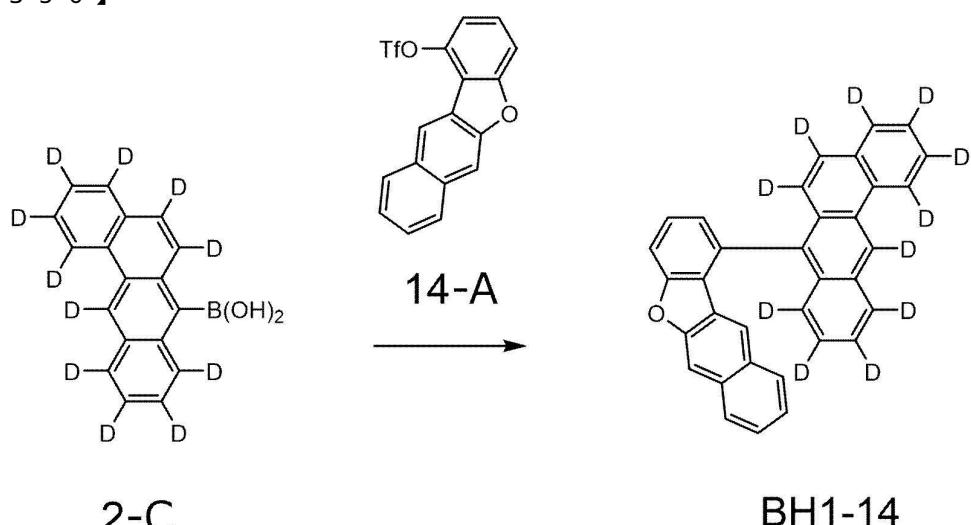
【0881】

[合成例 14：化合物 BH1-14 の合成]

下記合成経路で、化合物 BH1-14 を合成した。

【0882】

【化356】



40

【0883】

(化合物 BH1-14 の合成)

化合物 BH1-14 の合成において、中間体 1-A 及び中間体 1-B の代わりに中間体 2-C 及び中間体 15-A を用いた以外は、化合物 BH1-14 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体 3.6 g (収率 71%) を得た。

LC-MS 分析により、当該淡黄色固体を化合物 BH1-14 と同定した。

【0884】

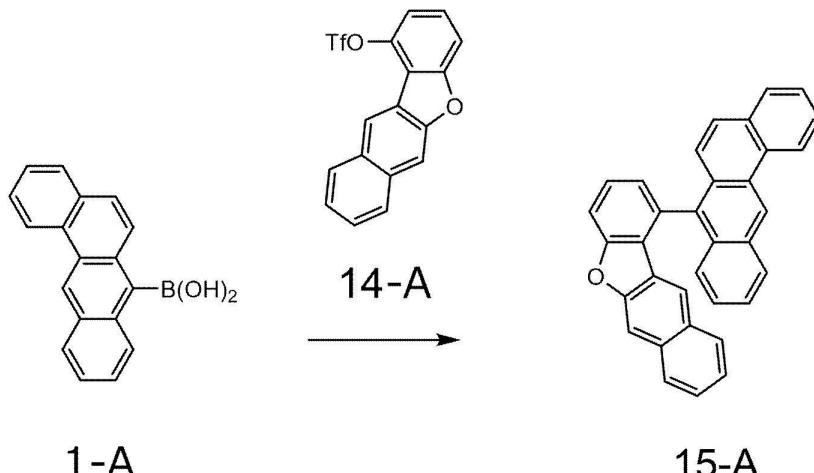
[合成例 15：化合物 BH1-15 の合成]

50

下記合成経路で、化合物 B H 1 - 1 5 を合成した。

【0885】

【化357】



【0886】

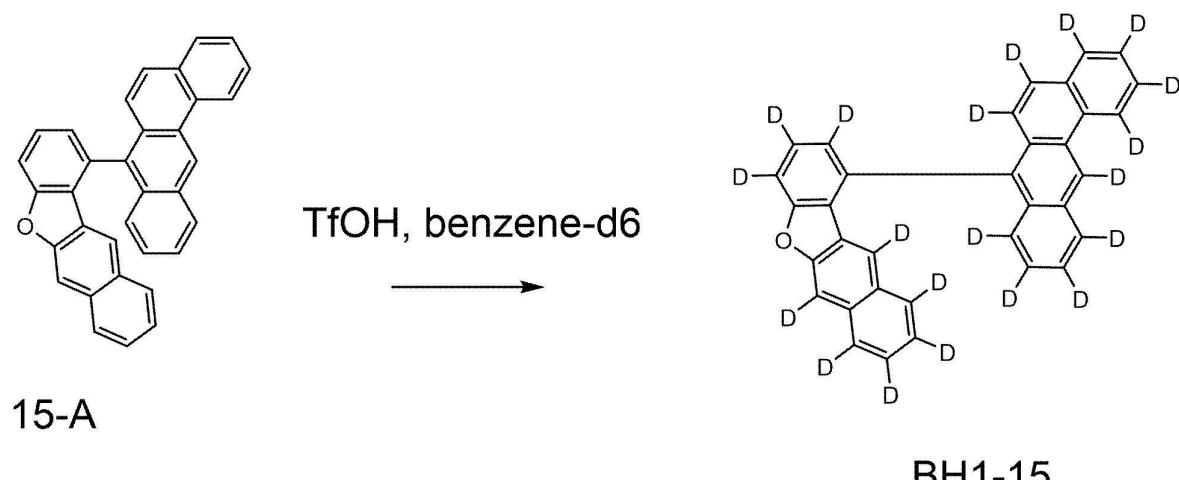
(中間体 15 - A の合成)

化合物 B H 1 - 1 の合成において、中間体 1 - B の代わりに中間体 14 - A を用いた以外は、化合物 B H 1 - 1 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体 3.6 g (収率 71%)を得た。

L C - M S 分析により、当該淡黄色固体を中間体 15 - A と同定した。

【0887】

【化358】



【0888】

(化合物 B H 1 - 1 5 の合成)

化合物 B H 1 - 1 1 の合成において、中間体 1 1 - A の代わりに中間体 15 - A を用いた以外は、化合物 B H 1 - 1 1 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体 0.7 g (収率 41%)を得た。

L C - M S 分析により、当該淡黄色固体を化合物 B H 1 - 1 5 と同定した。

【0889】

[合成例 16：化合物 B H 1 - 1 6 の合成]

下記合成経路で、化合物 B H 1 - 1 6 を合成した。

【0890】

10

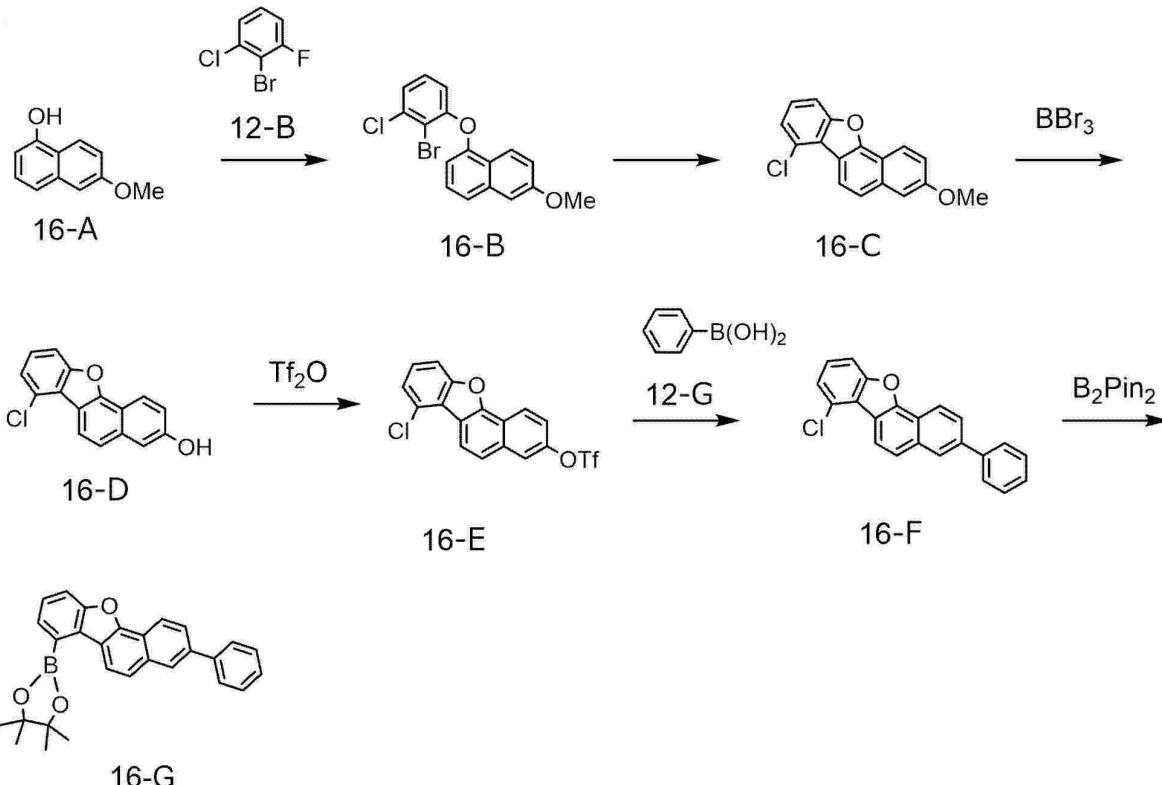
20

30

40

50

【化359】



【0891】

(中間体16-Gの合成)

中間体12-Aを出発原料とした一連の中間体12-Iの合成において、中間体12-Aの代わりに中間体16-Aを用いた以外は、中間体12-Iの合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体2.4g（総収率（7step）9%、）を得た。

LC-MS分析により、当該淡黄色固体を中間体16-Gと同定した。

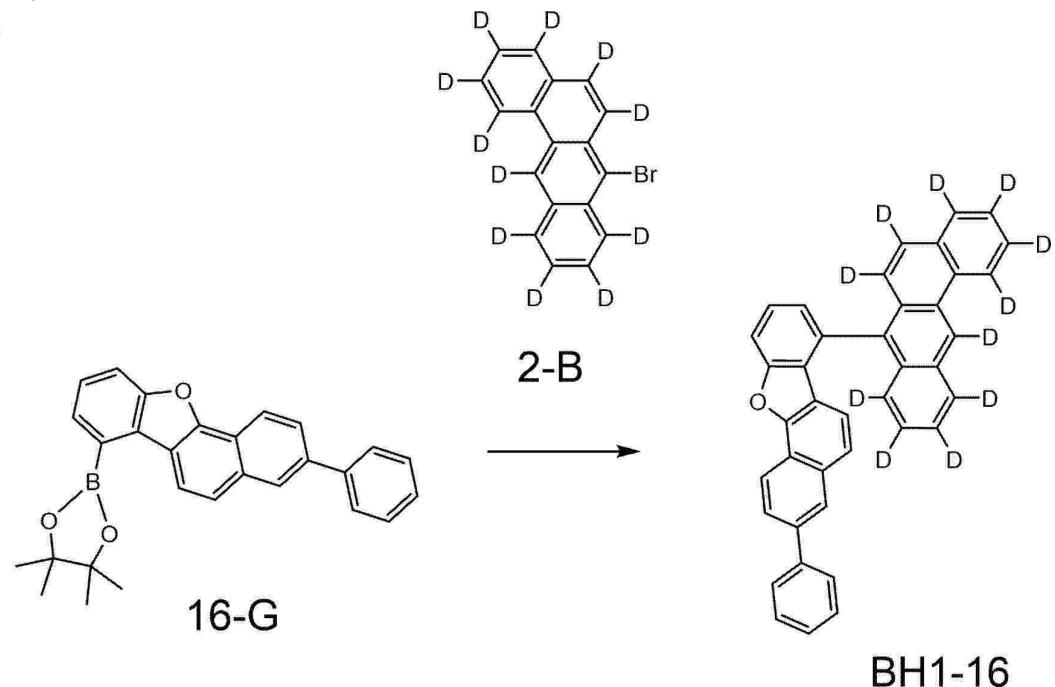
【0892】

30

40

50

【化360】



10

20

【0893】

(化合物BH1-16の合成)

化合物BH1-1の合成において、中間体1-A及び中間体1-Bの代わりに中間体16-G及び中間体2-Bを用いた以外は、化合物BH1-1の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体1.7g(収率58%)を得た。

LC-MS分析により、当該淡黄色固体を化合物BH1-16と同定した。

【0894】

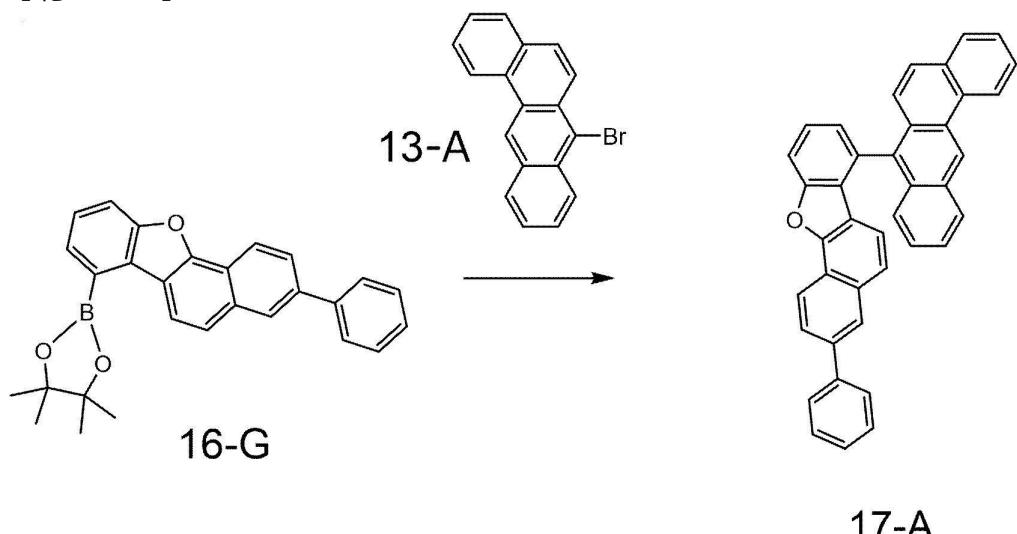
[合成例17：化合物BH1-17の合成]

下記合成経路で、化合物BH1-17を合成した。

30

【0895】

【化361】



40

【0896】

(中間体17-Aの合成)

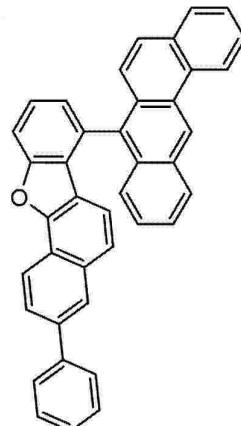
50

中間体 13 - B の合成において、中間体 12 - I の代わりに中間体 16 - G を用いた以外は、中間体 13 - B の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体 2.4 g (総収率 (7 step) 9%) を得た。

L C - M S 分析により、当該淡黄色固体を中間体 17 - A と同定した。

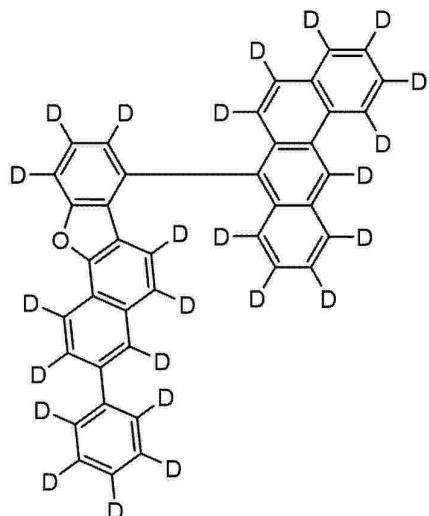
【0897】

【化362】



17-A

TfOH, benzene-d6



10

BH1-17

20

【0898】

(化合物 BH1 - 17 の合成)

化合物 BH1 - 11 の合成において、中間体 11 - A の代わりに中間体 17 - A を用いた以外は、化合物 BH1 - 11 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体 0.7 g (収率 44%) を得た。

L C - M S 分析により、当該淡黄色固体を化合物 BH1 - 17 と同定した。

30

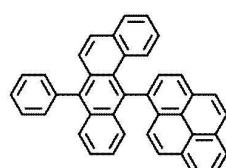
【0899】

[合成例 18 : 化合物 BH1 - 18 の合成]

下記合成経路で、化合物 BH1 - 18 を合成した。

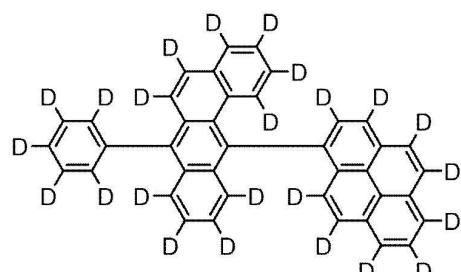
【0900】

【化363】



18-A

TfOH, benzene-d6



40

BH1-18

【0901】

(化合物 BH1 - 18 の合成)

化合物 BH1 - 11 の合成において、中間体 11 - A の代わりに中間体 18 - A を用いた以外は、化合物 BH1 - 11 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体 0.5 g (

50

収率 24%)を得た。

L C - M S 分析により、当該淡黄色固体を化合物 B H 1 - 1 8 と同定した。

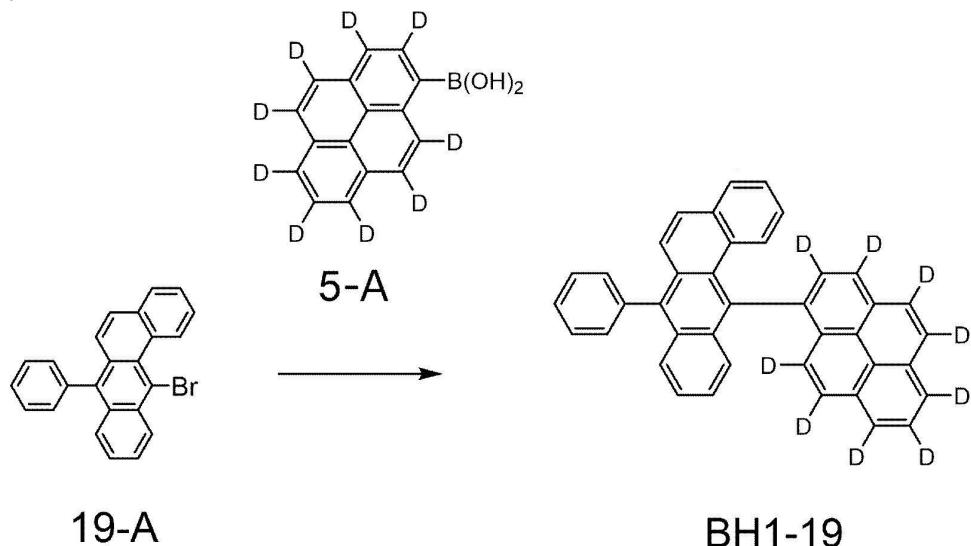
【 0 9 0 2 】

【 合成例 1 9 : 化合物 B H 1 - 1 9 の合成 】

下記合成経路で、化合物 B H 1 - 1 9 を合成した。

【 0 9 0 3 】

【 化 3 6 4 】



【 0 9 0 4 】

(化合物 B H 1 - 1 9 の合成)

化合物 B H 1 - 1 の合成において、中間体 1 - A 及び中間体 1 - B の代わりに中間体 1 9 - A 及び中間体 5 - A を用いた以外は、化合物 B H 1 - 1 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体 0.9 g (収率 47%)を得た。

L C - M S 分析により、当該淡黄色固体を化合物 B H 1 - 1 9 と同定した。

【 0 9 0 5 】

【 合成例 2 0 : 化合物 B H 1 - 2 0 の合成 】

下記合成経路で、化合物 B H 1 - 2 0 を合成した。

【 0 9 0 6 】

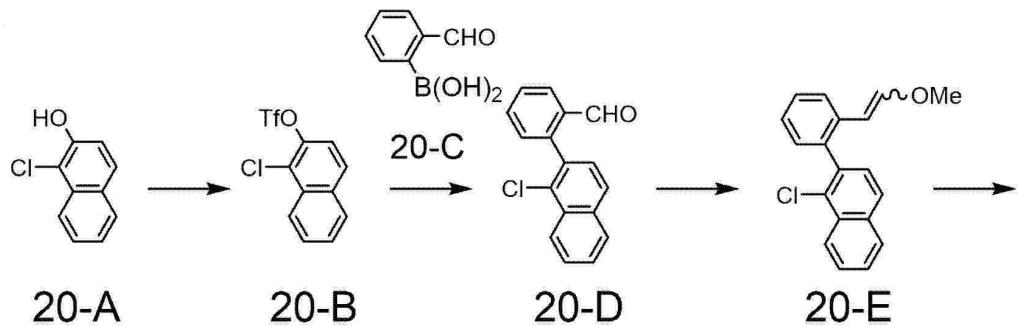
20

30

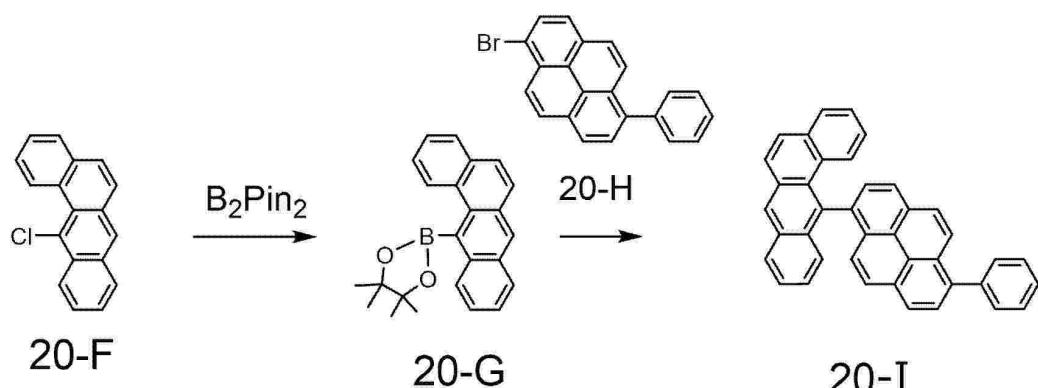
40

50

【化365】



10



20

【0907】

(中間体20-Bの合成)

中間体12-Fの合成において、中間体12-Eの代わりに中間体20-Aを用いた以外は、中間体12-Fの合成方法と同様の方法で合成し、白色固体21.3g(収率73%)を得た。

30

LC-MS分析により、当該白色固体を中間体20-Bと同定した。

【0908】

(中間体20-Dの合成)

化合物BH1-1の合成において、中間体1-A及び中間体1-Bの代わりに中間体20-B及び中間体20-Cを用いた以外は、化合物BH1-1の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体19.3g(収率87%)を得た。

LC-MS分析により、当該白色固体を中間体20-Dと同定した。

【0909】

(中間体20-Eの合成)

アルゴン雰囲気下、(メトキシメチル)トリフェニルホスホニウムクロリド:28.1g、テトラヒドフラン:130m1をフラスコに仕込み5分攪拌した後、カリウムtert-ブトキシド1mol/Lテトラヒドロフラン溶液:82m1を加え、1.5時間室温で攪拌した。その後別途、テトラヒドフラン:342m1に溶解させた中間体20-D:21.1gの溶液を系中に加え室温で3時間攪拌した。その後析出した固体をろかし、ろ液を濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体22.5g(収率98%)を得た。

40

LC-MS分析により、当該白色固体を中間体20-Eと同定した。

【0910】

(中間体20-Fの合成)

アルゴン雰囲気下、中間体20-E:22.5g、ジクロロメタン:684m1をフラ

50

スコに仕込み 0 ℃ で 5 分攪拌した後、メタンスルホン酸 : 7 mL を加えそのまま 0 ℃ で 3 時間攪拌した。その後、飽和炭酸水素ナトリウム水溶液で洗浄し水層を除去した後、有機層を濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 9.4 g (収率 45%)を得た。

LC-MS 分析により、当該白色固体を中間体 20-F と同定した。

【0911】

(中間体 20-G の合成)

中間体 12-I の合成において、中間体 12-H の代わりに中間体 20-F を用いた以外は、中間体 12-I の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体 5.7 g (収率 41%)を得た。

LC-MS 分析により、当該白色固体を中間体 20-G と同定した。

【0912】

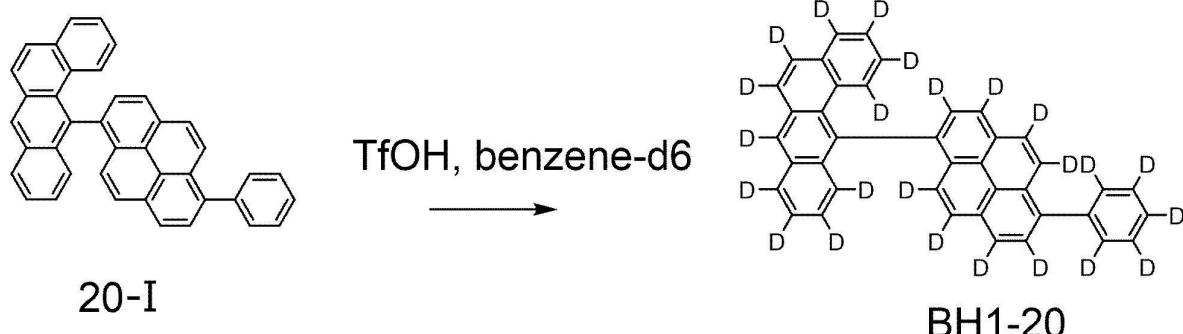
(中間体 20-I の合成)

化合物 BH1-1 の合成において、中間体 1-A 及び中間体 1-B の代わりに中間体 20-G 及び中間体 20-H を用いた以外は、化合物 BH1-1 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体 1.9 g (収率 25%)を得た。

LC-MS 分析により、当該淡黄色固体を中間体 20-I と同定した。

【0913】

【化366】



【0914】

(化合物 BH1-20 の合成)

化合物 BH1-11 の合成において、中間体 11-A の代わりに中間体 20-I を用いた以外は、化合物 BH1-11 の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体 0.2 g (収率 43%)を得た。

LC-MS 分析により、当該淡黄色固体を化合物 BH1-20 と同定した。

【符号の説明】

【0915】

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

10

20

30

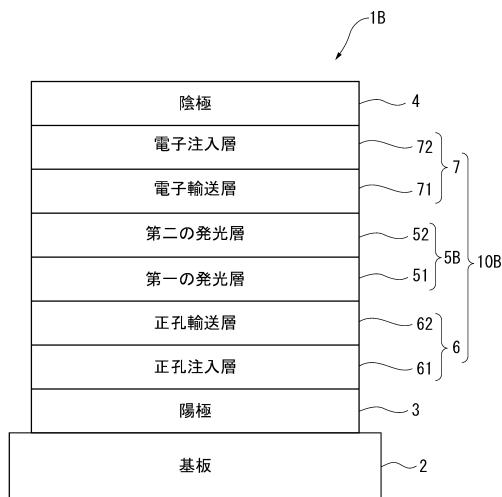
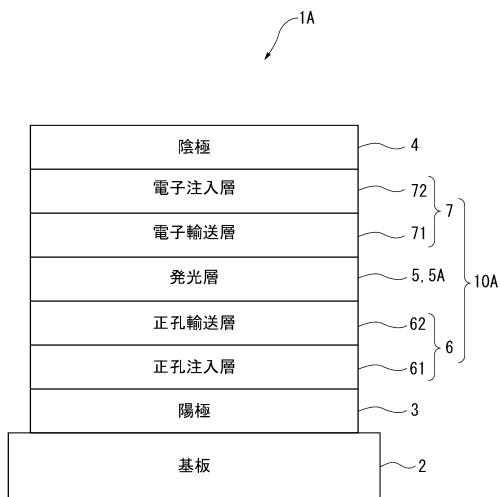
40

50

【図面】

【図1】

【図2】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

H 1 0 K	50/15 (2023.01)	F I	H 1 0 K	50/15
H 1 0 K	50/16 (2023.01)		H 1 0 K	50/16
H 1 0 K	59/10 (2023.01)		H 1 0 K	59/10

東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内

(72)発明者 白崎 良尚

東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内

(72)発明者 三谷 真人

東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内

(72)発明者 糸井 裕亮

東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内

審査官 高橋 直子

(56)参考文献 特許第7572572 (JP, B2)

中国特許出願公開第113501810 (CN, A)

国際公開第2021/210305 (WO, A1)

国際公開第2020/096053 (WO, A1)

国際公開第2021/132535 (WO, A1)

特表2013-509363 (JP, A)

国際公開第2021/180950 (WO, A1)

国際公開第2022/091691 (WO, A1)

国際公開第2022/264827 (WO, A1)

国際公開第2022/264826 (WO, A1)

(58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

C 0 7 D

C 0 9 K

H 1 0 K

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