

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7546046号
(P7546046)

(45)発行日 令和6年9月5日(2024.9.5)

(24)登録日 令和6年8月28日(2024.8.28)

(51)国際特許分類	F I	
C 0 7 C 15/38 (2006.01)	C 0 7 C 15/38	C S P
C 0 9 K 11/06 (2006.01)	C 0 9 K 11/06	6 9 0
H 1 0 K 50/10 (2023.01)	H 0 5 B 33/14	B
H 0 5 B 33/22 (2006.01)	H 0 5 B 33/22	C
	H 0 5 B 33/22	A
請求項の数 23 (全290頁)		

(21)出願番号	特願2022-515249(P2022-515249)	(73)特許権者	000183646
(86)(22)出願日	令和3年3月11日(2021.3.11)		出光興産株式会社
(86)国際出願番号	PCT/JP2021/009830		東京都千代田区大手町一丁目2番1号
(87)国際公開番号	WO2021/210304	(74)代理人	110000637
(87)国際公開日	令和3年10月21日(2021.10.21)		弁理士法人樹之下知的財産事務所
審査請求日	令和5年10月18日(2023.10.18)	(72)発明者	中野 裕基
(31)優先権主張番号	特願2020-73002(P2020-73002)		東京都千代田区大手町一丁目2番1号
(32)優先日	令和2年4月15日(2020.4.15)		出光興産株式会社内
(33)優先権主張国・地域又は機関	日本国(JP)	(72)発明者	田崎 聡美
早期審査対象出願			東京都千代田区大手町一丁目2番1号
			出光興産株式会社内
		(72)発明者	西村 和樹
			東京都千代田区大手町一丁目2番1号
			出光興産株式会社内
		(72)発明者	糸井 裕亮
最終頁に続く			

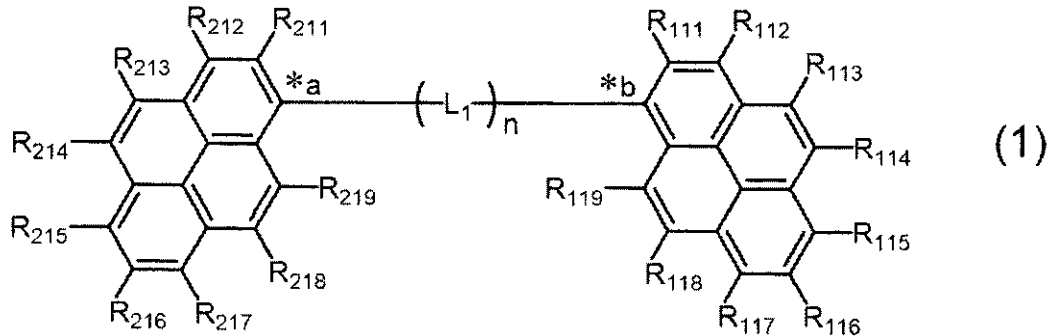
(54)【発明の名称】 化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

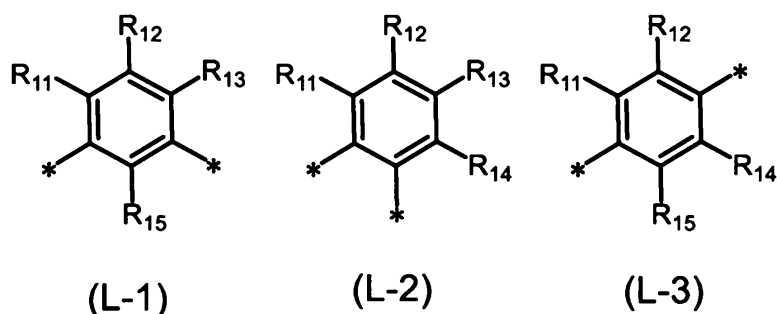
下記一般式（1）で表され、少なくとも1つの重水素原子を有し、かつ下記一般式（1）で表される化合物が有する全水素原子数のうち、30%以上が重水素原子である、化合物。

【化1】



（前記一般式（1）において、nは、1であり、
L₁は、下記一般式（L-1）～（L-3）のいずれかで表される基であり、
R₁₁₁～R₁₁₉及びR₂₁₁～R₂₁₉は、水素原子である。）

【化 4】



10

(前記一般式 (L-1) ~ (L-3) において、
 2つの*は、前記一般式 (1) 中の* a との結合位置、又は前記一般式 (1) 中の* b との結合位置であり、
 R₁₁ ~ R₁₅ は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 無置換のフェニル基、又は
 無置換のナフチル基である。)

【請求項 2】

請求項 1 に記載の化合物において、
 L₁ は、少なくとも 1 つの重水素原子を有する、
 化合物。

20

【請求項 3】

請求項 1 または請求項 2 に記載の化合物において、
 L₁ は、前記一般式 (L-1) で表される基である、
 化合物。

【請求項 4】

請求項 1 から請求項 3 のいずれか一項に記載の化合物において、
 R₁₁ ~ R₁₅ のうち少なくとも 1 つは、重水素原子である、
 化合物。

30

【請求項 5】

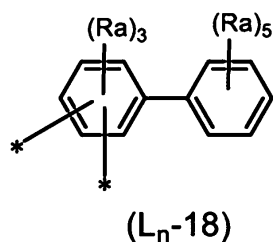
請求項 1 から請求項 4 のいずれか一項に記載の化合物において、
 R₁₁ ~ R₁₅ のうち 1 つ以上が置換基であり、置換基としての R₁₁ ~ R₁₅ のうち少なくとも 1 つは、それぞれ独立に、1 つ以上の重水素原子を有する、
 化合物。

【請求項 6】

請求項 1 または請求項 2 に記載の化合物において、
 - (L₁)_n - は、下記一般式 (L_n-18) で表される基である、
 化合物。

【化 6】

40



(前記一般式 (L_n-18) において、R_a は、水素原子であり、
 前記一般式 (L_n-18) 中、2 つの* のうち一方の* は、前記一般式 (1) における

50

* a との結合位置を表し、他方の * は、前記一般式 (1) における * b との結合位置を表す。)

【請求項 7】

請求項 6 に記載の化合物において、
複数の R_{a1} のうち少なくとも 1 つは、重水素原子である、
化合物。

【請求項 8】

請求項 1 から請求項 7 のいずれか一項に記載の化合物において、
- $(L_1)_n$ が含んでいる炭素原子の総数は、21 以下である、
化合物。

10

【請求項 9】

請求項 1 から請求項 8 のいずれか一項に記載の化合物において、
 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ のうち少なくとも 1 つは、重水素原子である、
化合物。

【請求項 10】

請求項 1 から請求項 9 のいずれか一項に記載の化合物において、
 $R_{111} \sim R_{119}$ は重水素原子であるか、又は
 $R_{211} \sim R_{219}$ は重水素原子である、
化合物。

【請求項 11】

20

請求項 1 から請求項 10 のいずれか一項に記載の化合物において、
前記化合物が有する全水素原子数のうち、40% 以上が重水素原子である、
化合物。

【請求項 12】

請求項 1 から請求項 11 のいずれか一項に記載の化合物において、
前記化合物が有する全水素原子数のうち、50% 以上が重水素原子である、
化合物。

【請求項 13】

請求項 1 から請求項 12 のいずれか一項に記載の化合物において、
前記化合物が有する全水素原子数のうち、60% 以上が重水素原子である、
化合物。

30

【請求項 14】

請求項 1 から請求項 13 のいずれか一項に記載の化合物において、
前記化合物が有する全水素原子数のうち、70% 以上が重水素原子である、
化合物。

【請求項 15】

請求項 1 から請求項 14 のいずれか一項に記載の化合物において、
前記化合物が有する全水素原子数のうち、80% 以上が重水素原子である、
化合物。

【請求項 16】

40

請求項 1 から請求項 15 のいずれか一項に記載の化合物において、
 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ は重水素原子である、
化合物。

【請求項 17】

陽極と、
陰極と、
前記陽極と前記陰極との間に含まれる発光層と、を含み、
前記発光層は、化合物 M2 として、請求項 1 から請求項 16 のいずれか一項に記載の化合物を含む、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

50

【請求項 18】

請求項 17 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記発光層は、さらに蛍光発光性の化合物 M 1 を含む、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 19】

請求項 18 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記化合物 M 2 の一重項エネルギー $S_1(M2)$ と、前記化合物 M 1 の一重項エネルギー $S_1(M1)$ とが、下記数式 (数 1) の関係を満たす、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$S_1(M2) > S_1(M1) \quad \cdots (\text{数 } 1)$$

10

【請求項 20】

請求項 17 から請求項 19 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記発光層は、金属錯体を含まない、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 21】

請求項 17 から請求項 20 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記陽極と、前記発光層との間に、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。

20

【請求項 22】

請求項 17 から請求項 21 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記陰極と、前記発光層との間に、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 23】

請求項 17 から請求項 22 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

30

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

40

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 1～5 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】特開 2013-157552 号公報

【文献】国際公開第 2005/115950 号

【文献】国際公開第 2011/077691 号

【文献】特開 2018-125504 号公報

50

【文献】米国特許出願公開 2019 / 280209 号明細書

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

本発明の目的は、寿命を長くすることができる化合物、当該化合物を用い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。

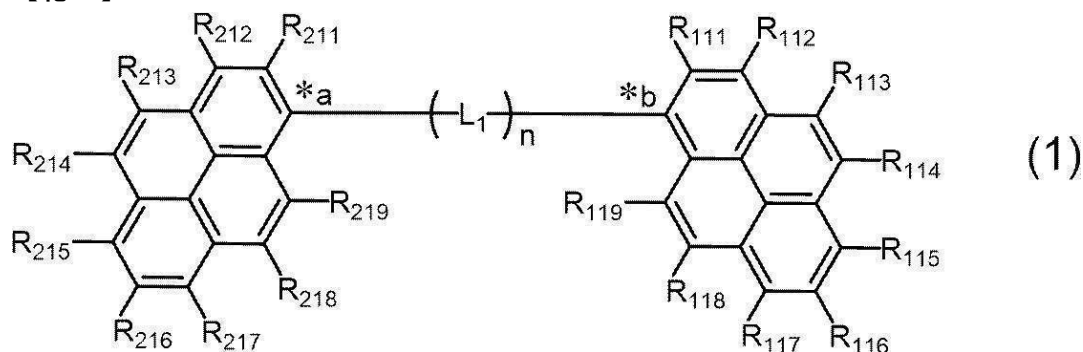
【課題を解決するための手段】

【0005】

本発明の一態様によれば、下記一般式（1）で表され、少なくとも1つの重水素原子を有する化合物が提供される。

【0006】

【化1】



【0007】

（前記一般式（1）において、 n は、1、2、3、又は4であり、 n が、2、3、又は4の場合、複数の L_1 は、互いに同一であるか又は異なり、

L_1 は、

置換もしくは無置換のフェニル基、

置換もしくは無置換のビフェニル基、

置換もしくは無置換のターフェニル基、

置換もしくは無置換のナフチル基、

置換もしくは無置換のフェナントリル基、

置換もしくは無置換のクリセニル基、

置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、

置換もしくは無置換のフルオレニル基、

置換もしくは無置換の9,9'-スピロビフルオレニル基、

置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基、及び

置換もしくは無置換の9,9'-ジフェニルフルオレニル基からなる群から選択されるいずれかの基から1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基、又は

下記一般式（11）で表される基であり、

$R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ は、それぞれ独立に、水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})で表される基、

—O—(R_{904})で表される基、

—S—(R_{905})で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

— C (= O) R₈₀₁ で表される基、

— C O O R₈₀₂ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

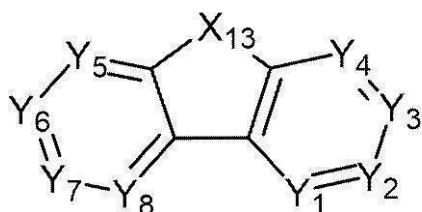
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリアル基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

ただし、前記一般式 (1) で表される化合物は、— N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基を有さず、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 のアリアル基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である。)

【 0 0 0 8 】

【 化 2 】



(11)

【 0 0 0 9 】

(前記一般式 (1 1) において、X₁₃ は、酸素原子又は硫黄原子であり、Y₁ ～ Y₈ は、それぞれ独立に、C R₃₀₀ 又は窒素原子であり、

複数の R₃₀₀ は、互いに同一であるか又は異なり、

複数の R₃₀₀ 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 R₃₀₀ のうち 2 つは、前記一般式 (1) 中の * a もしくは他の L₁ と結合する単結合、又は前記一般式 (1) 中の * b もしくは他の L₁ と結合する単結合であり、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、かつ前記一般式 (1) 中の * a 、 * b もしくは他の L₁ と結合する単結合ではない R₃₀₀ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

— S i (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

— O — (R₉₀₄) で表される基、

— S — (R₉₀₅) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

— C (= O) R₈₀₁ で表される基、

— C O O R₈₀₂ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である。))
(前記一般式 (1) で表される化合物中、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る。))

【0010】

本発明の一態様によれば、

陽極と、

陰極と、

前記陽極と前記陰極との間に含まれる発光層と、を含み、

前記発光層は、化合物 M2 として、前述の本発明の一態様に係る化合物を含む、

有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

【0011】

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

【0012】

本発明の一態様によれば、寿命を長くすることができる化合物、当該化合物を用い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ができる。

【図面の簡単な説明】

【0013】

【図1】本発明の第三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】本発明の第四実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の概略構成を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【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、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、及び複素環化合物) の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」

については、別途記載のない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が6であり、ナフタレン環は環形成炭素数が10であり、ピリジン環は環形成炭素数5であり、フラン環は環形成炭素数4である。また、例えば、9,9-ジフェニルフルオレニル基の環形成炭素数は13であり、9,9'-スピロビフルオレニル基の環形成炭素数は25である。

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

10

【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。

20

【0018】

本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の炭素数を表し、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。

30

【0019】

本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「原子数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の原子数を表し、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。

40

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】

「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】

50

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

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

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

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

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

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

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

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

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

【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。

「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、ここに列举した「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、

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、

10

20

30

40

50

o-ターフェニル-2-イル基、
1-ナフチル基、
2-ナフチル基、
アントリル基、

ベンゾアントリル基、
フェナントリル基、
ベンゾフェナントリル基、
フェナレニル基、
ピレニル基、

クリセニル基、
ベンゾクリセニル基、
トリフェニレニル基、
ベンゾトリフェニレニル基、
テトラセニル基、
ペンタセニル基、
フルオレニル基、

9, 9'-スピロビフルオレニル基、
ベンゾフルオレニル基、
ジベンゾフルオレニル基、
フルオランテニル基、
ベンゾフルオランテニル基、
ペリレニル基、及び

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

【0025】

10

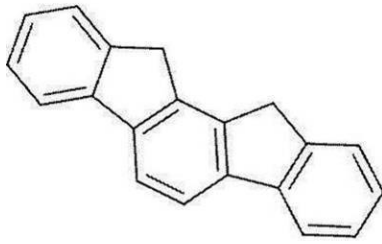
20

30

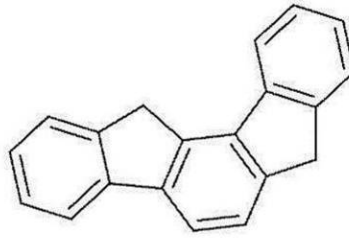
40

50

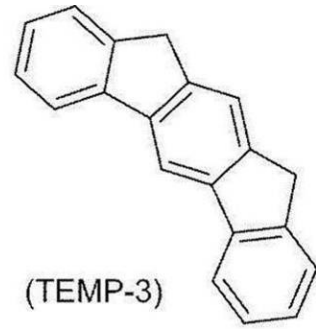
【化 3】



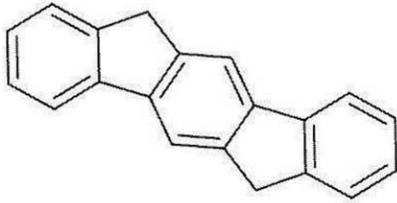
(TEMP-1)



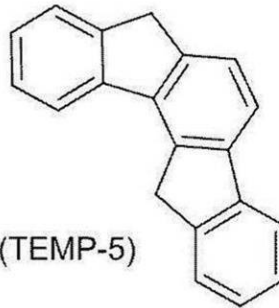
(TEMP-2)



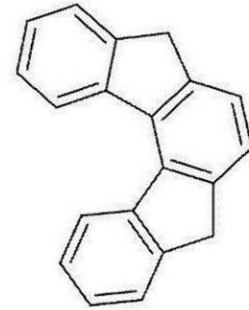
(TEMP-3)



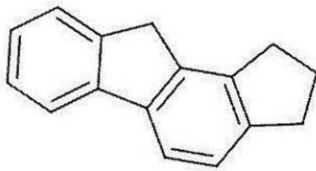
(TEMP-4)



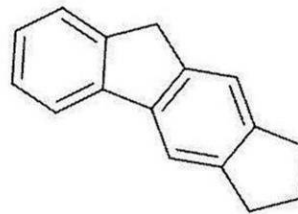
(TEMP-5)



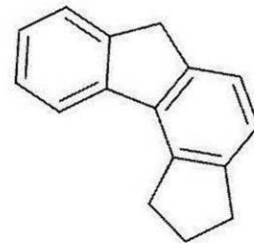
(TEMP-6)



(TEMP-7)



(TEMP-8)



(TEMP-9)

【 0 0 2 6 】

10

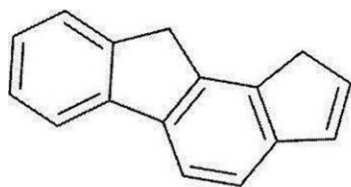
20

30

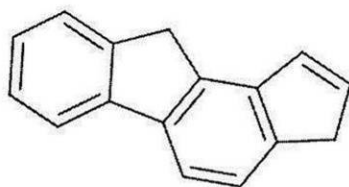
40

50

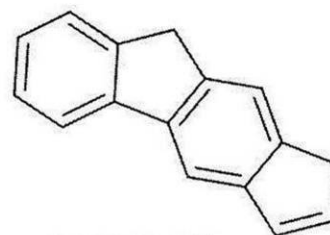
【化 4】



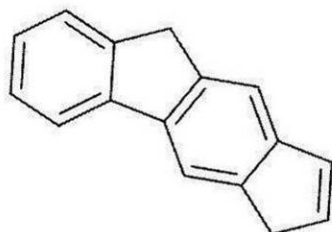
(TEMP-10)



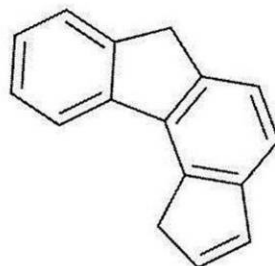
(TEMP-11)



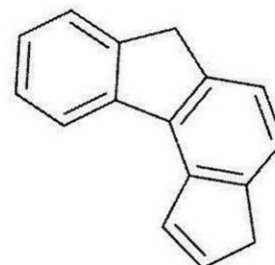
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

【 0 0 2 7 】

・置換のアリール基（具体例群 G 1 B）：

o-トリル基、

m-トリル基、

p-トリル基、

パラ-キシリル基、

メタ-キシリル基、

オルト-キシリル基、

パラ-イソプロピルフェニル基、

メタ-イソプロピルフェニル基、

オルト-イソプロピルフェニル基、

パラ-tert-ブチルフェニル基、

メタ-tert-ブチルフェニル基、

オルト-tert-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-tert-ブチルフェニル)フルオレニル基、

シアノフェニル基、

トリフェニルシリルフェニル基、

トリメチルシリルフェニル基、

フェニルナフチル基、

ナフチルフェニル基、及び

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

【 0 0 2 8 】

・「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

10

20

30

40

50

の基である。ヘテロ原子の具体例としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、及びホウ素原子が挙げられる。

本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基である。

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

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

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

【0029】

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。

【0030】

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。

【0031】

・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、
 アザカルバゾリル基、及びジアザカルバゾリル基。
 【 〇 〇 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。
 【 〇 〇 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）、

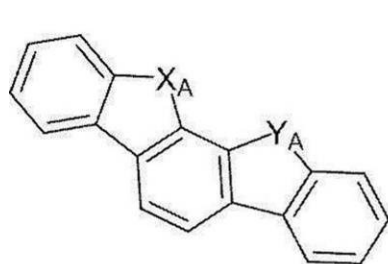
ナフトベンゾチオフェニル基（ナフトベンゾチエニル基）、
 ベンゾチアゾリル基、
 ベンゾイソチアゾリル基、
 フェノチアジニル基、
 ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、
 アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、
 ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、
 アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフトベンゾチエニル基）、及び
 ジアザナフトベンゾチオフェニル基（ジアザナフトベンゾチエニル基）。

【0034】

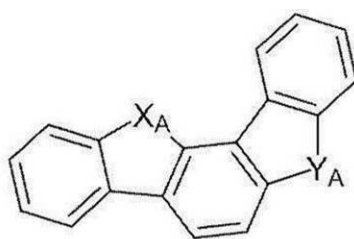
・下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群G2A4）：

【0035】

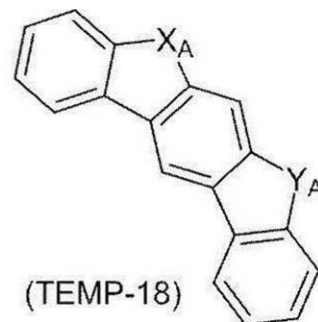
【化5】



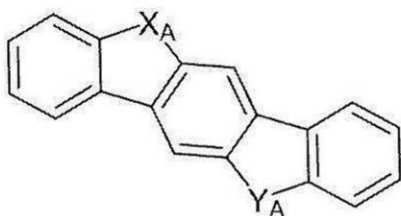
(TEMP-16)



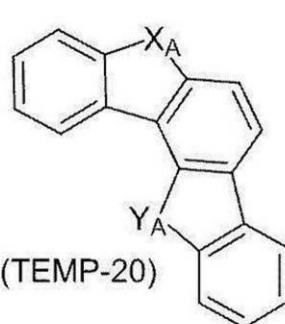
(TEMP-17)



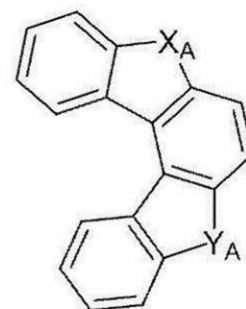
(TEMP-18)



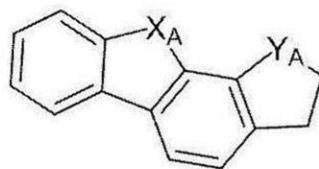
(TEMP-19)



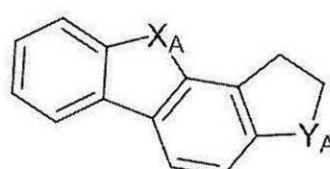
(TEMP-20)



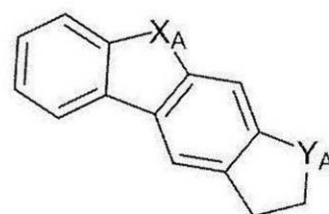
(TEMP-21)



(TEMP-22)



(TEMP-23)



(TEMP-24)

【0036】

10

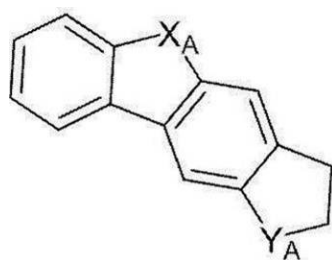
20

30

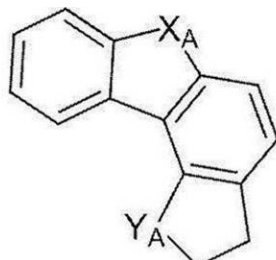
40

50

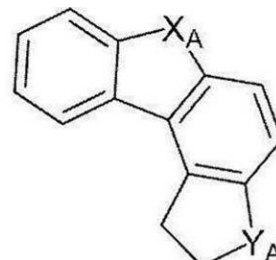
【化 6】



(TEMP-25)

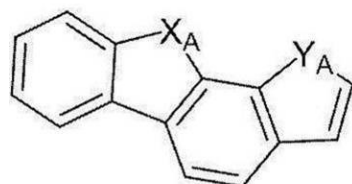


(TEMP-26)

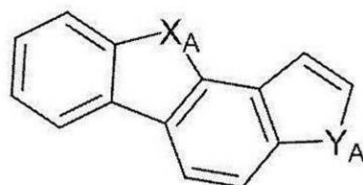


(TEMP-27)

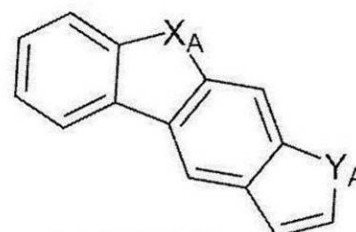
10



(TEMP-28)

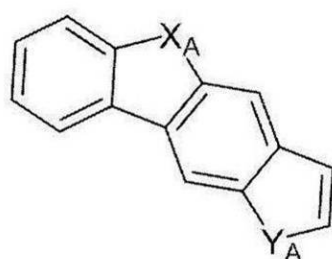


(TEMP-29)

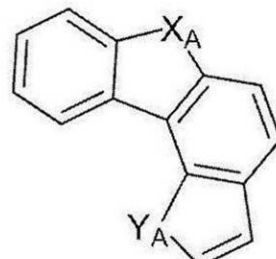


(TEMP-30)

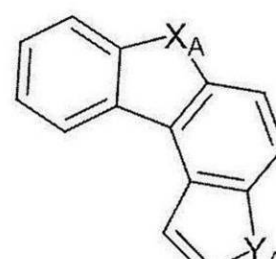
20



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

30

【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 CH_2 である。ただし、 X_A 及び Y_A のうち少なくとも1つは、酸素原子、硫黄原子、又はNHである。

前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) において、 X_A 及び Y_A の少なくともいずれかがNH、又は CH_2 である場合、前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) で表される環構造から誘導される1価の複素環基には、これらNH、又は CH_2 から1つの水素原子を除いて得られる1価の基が含まれる。

【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、

40

50

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

【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、

ｾｰﾌﾞ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、

ｾｰﾌﾞ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、

10

20

30

40

50

s-ブチル基、及び
t-ブチル基。

【0045】

・置換のアルキル基（具体例群G3B）：
ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、
ペンタフルオロエチル基、
2, 2, 2-トリフルオロエチル基、及び
トリフルオロメチル基。

【0046】

・「置換もしくは無置換のアルケニル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルケニル基」の具体例（具体例群G4）としては、以下の無置換のアルケニル基（具体例群G4A）、及び置換のアルケニル基（具体例群G4B）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルケニル基とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「無置換のアルケニル基」である場合を指し、「置換のアルケニル基」とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「置換のアルケニル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「アルケニル基」という場合は、「無置換のアルケニル基」と「置換のアルケニル基」の両方を含む。

「置換のアルケニル基」は、「無置換のアルケニル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルケニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルケニル基」（具体例群G4A）が置換基を有する基、及び置換のアルケニル基（具体例群G4B）の例等が挙げられる。尚、ここに列举した「無置換のアルケニル基」の例や「置換のアルケニル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルケニル基」には、具体例群G4Bの「置換のアルケニル基」におけるアルケニル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G4Bの「置換のアルケニル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

【0047】

・無置換のアルケニル基（具体例群G4A）：
ビニル基、
アリル基、
1-ブテニル基、
2-ブテニル基、及び
3-ブテニル基。

【0048】

・置換のアルケニル基（具体例群G4B）：
1, 3-ブタンジエニル基、
1-メチルビニル基、
1-メチルアリル基、
1, 1-ジメチルアリル基、
2-メチルアリル基、及び
1, 2-ジメチルアリル基。

【0049】

・「置換もしくは無置換のアルキニル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキニル基」の具体例（具体例群G5）としては、以下の無置換のアルキニル基（具体例群G5A）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルキニル基とは、「置換もしくは無置換のアルキニル基」が「無置換のアルキニル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキニル基」という場合は、「無置換のアルキニル基」と「置換のアルキニル基」の両方を含む。

「置換のアルキニル基」は、「無置換のアルキニル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキニル基」（具体例群G5A）における1つ以上の水素原子が置換基と置

10

20

30

40

50

き換わった基等が挙げられる。

【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、ここに列举した「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-アダマンチル基、

2-アダマンチル基、

1-ノルボルニル基、及び

2-ノルボルニル基。

【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。

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

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

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

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

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

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

10

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

【 0 0 5 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)

20

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

【 0 0 5 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)

30

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

【 0 0 5 7 】

40

・「－ N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基」

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

－ N (G 1) (G 1) 、

－ N (G 2) (G 2) 、

－ N (G 1) (G 2) 、

－ N (G 3) (G 3) 、及び

－ N (G 6) (G 6)

が挙げられる。

ここで、

50

- G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。
G 2 は、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。
G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。
G 6 は、具体例群 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。
- N (G 1) (G 1) における複数の G 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。
- N (G 2) (G 2) における複数の G 2 は、互いに同一であるか、又は異なる。
- N (G 3) (G 3) における複数の G 3 は、互いに同一であるか、又は異なる。
- N (G 6) (G 6) における複数の G 6 は、互いに同一であるか、又は異なる。

【 0 0 5 8 】

・「ハロゲン原子」

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

【 0 0 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、1～50 であり、好ましくは 1～30 であり、より好ましくは 1～18 である。「置換のフルオロアルキル基」は、「フルオロアルキル基」の 1 つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のフルオロアルキル基」には、「置換のフルオロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のフルオロアルキル基」における置換基の 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のフルオロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群 G 3）における 1 つ以上の水素原子がフッ素原子と置き換わった基の例等が挙げられる。

【 0 0 6 0 】

・「置換もしくは無置換のハロアルキル基」

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

【 0 0 6 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、1～50 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。

【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。

【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。

【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】

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

【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-

10

20

30

40

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】

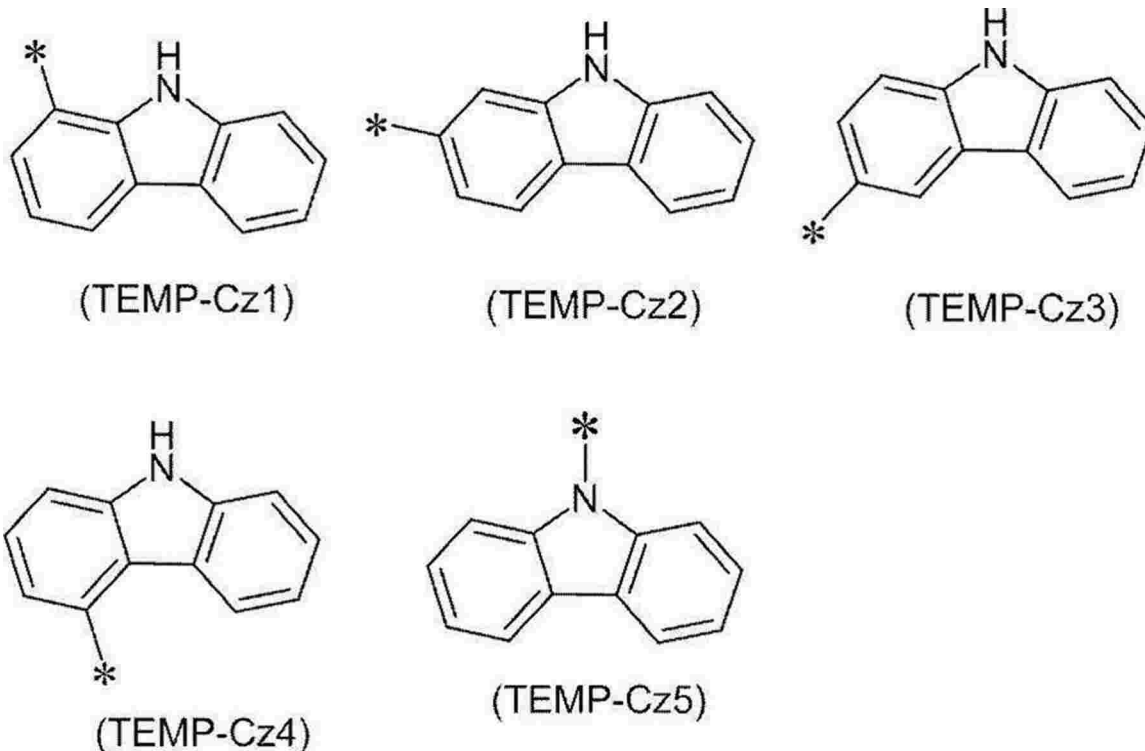
本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基、カルバゾリル基（1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、又は9-カルバゾリル基）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ナフトベンゾチオフエニル基、アザジベンゾチオフエニル基、ジアザジベンゾチオフ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

【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】

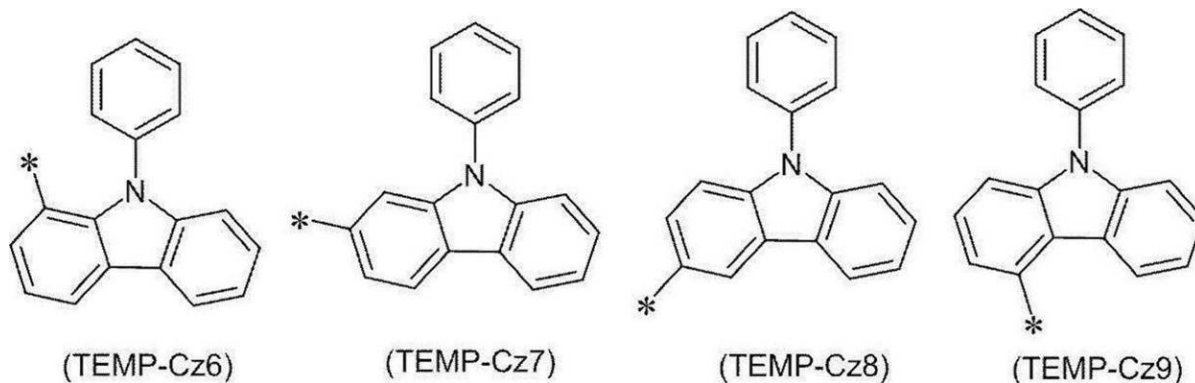


【0071】

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】

【化 8】



10

【0073】

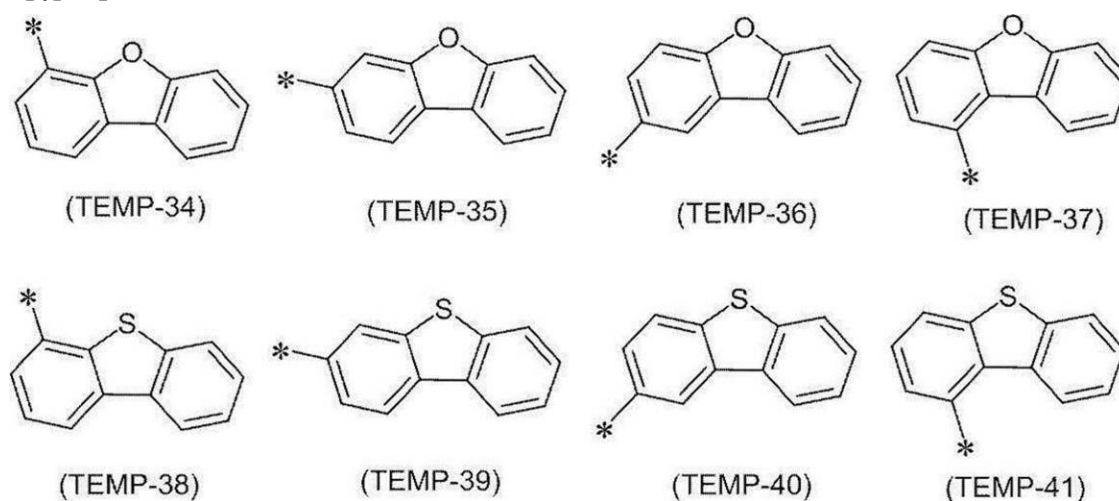
前記一般式 (TEMP-Cz1) ~ (TEMP-Cz9) 中、*は、結合位置を表す。

【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】



20

30

【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、及びセーブチル基等である。

【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

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 G 1 3）としては、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の１つの水素原子を除くことにより誘導される２価の基等が挙げられる。

【 0 0 8 0 】

・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

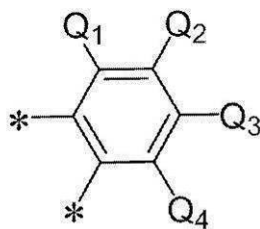
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の１つの水素原子を除くことにより誘導される２価の基である。「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群 G 1 4）としては、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の１つの水素原子を除くことにより誘導される２価の基等が挙げられる。

【 0 0 8 1 】

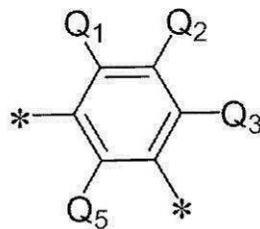
本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式（TEMP-42）～（TEMP-68）のいずれかの基である。

【 0 0 8 2 】

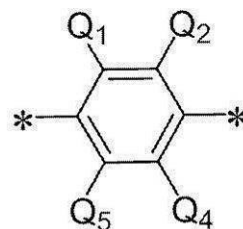
【 化 1 0 】



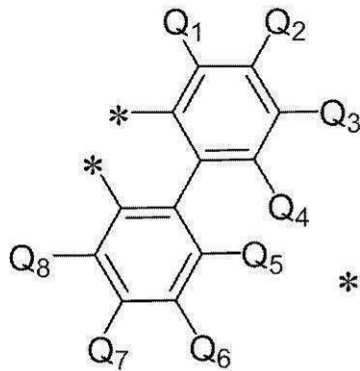
(TEMP-42)



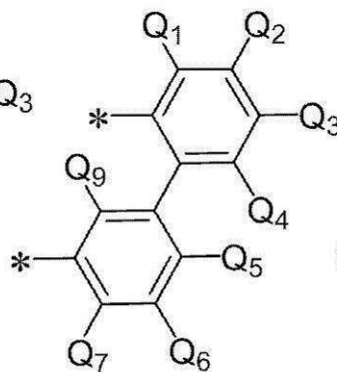
(TEMP-43)



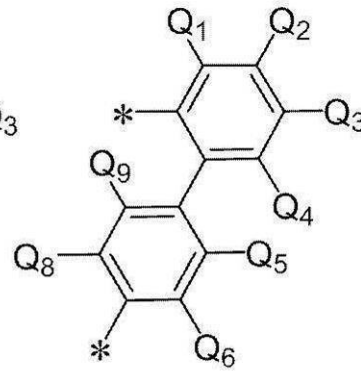
(TEMP-44)



(TEMP-45)



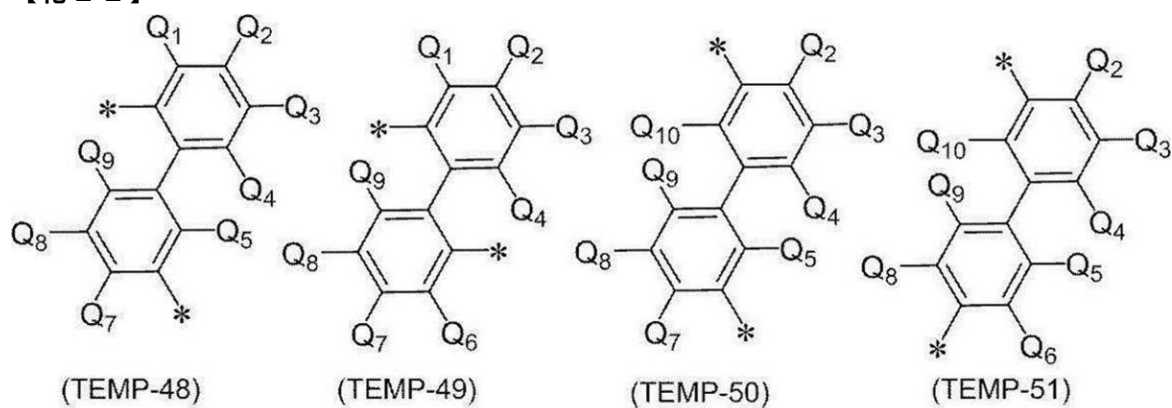
(TEMP-46)



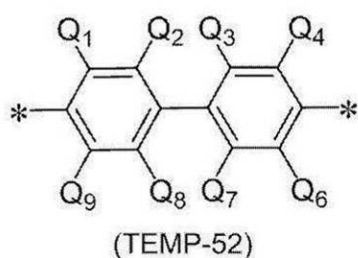
(TEMP-47)

【 0 0 8 3 】

【化 1 1】



10



20

【 0 0 8 4】

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

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

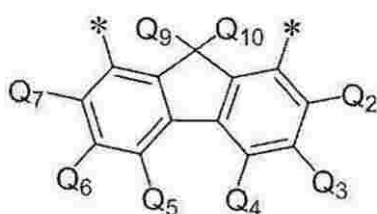
【 0 0 8 5】

30

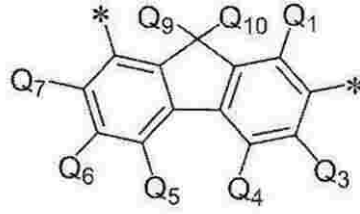
40

50

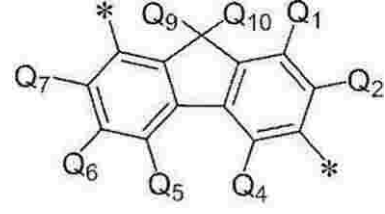
【化 1 2】



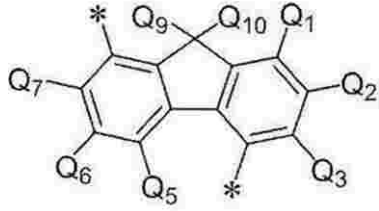
(TEMP-53)



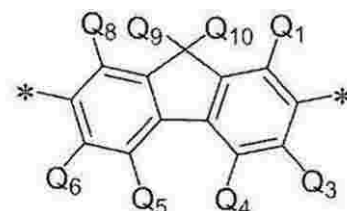
(TEMP-54)



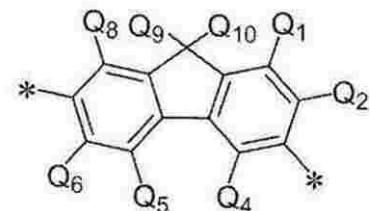
(TEMP-55)



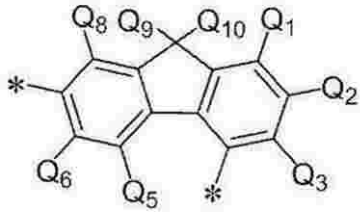
(TEMP-56)



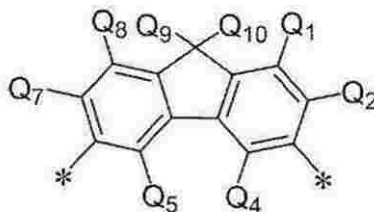
(TEMP-57)



(TEMP-58)



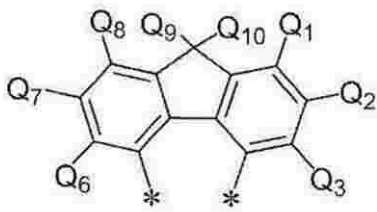
(TEMP-59)



(TEMP-60)



(TEMP-61)



(TEMP-62)

【 0 0 8 6】

前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、 $Q_1 \sim Q_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

式 Q_9 及び Q_{10} は、単結合を介して互いに結合して環を形成してもよい。

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

【 0 0 8 7】

10

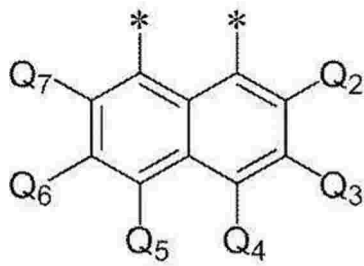
20

30

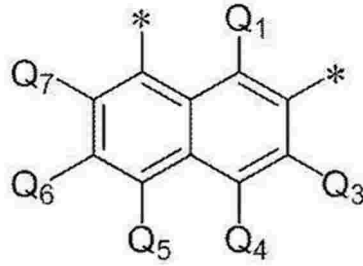
40

50

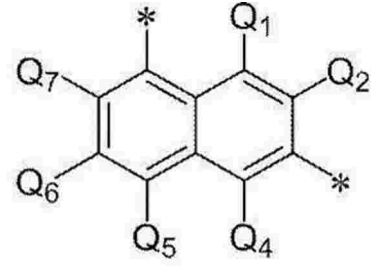
【化 1 3】



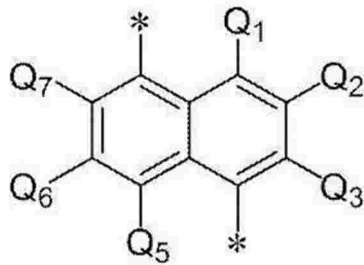
(TEMP-63)



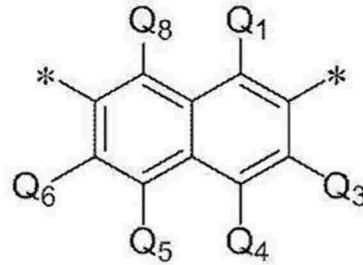
(TEMP-64)



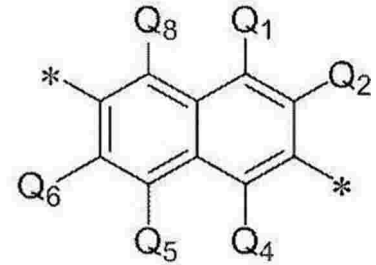
(TEMP-65)



(TEMP-66)



(TEMP-67)



(TEMP-68)

【 0 0 8 8】

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

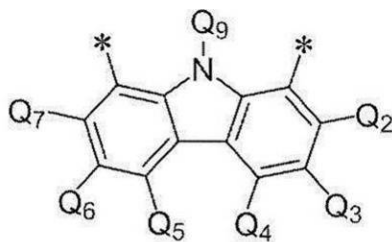
前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、* は、結合位置を表す。

【 0 0 8 9】

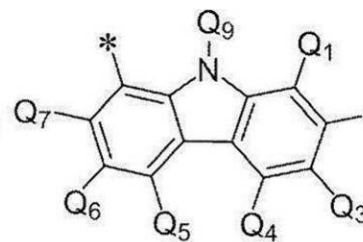
本明細書に記載の置換もしくは無置換の2価の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-102) のいずれかの基である。

【 0 0 9 0】

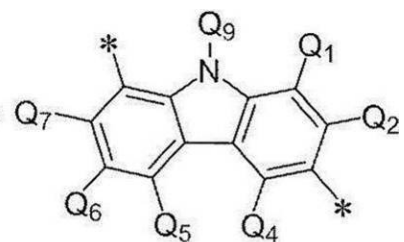
【化 1 4】



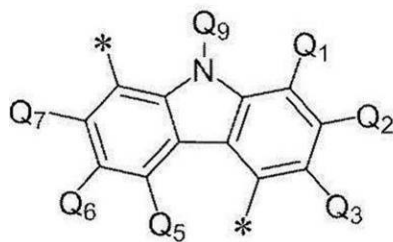
(TEMP-69)



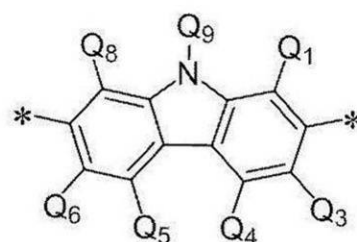
(TEMP-70)



(TEMP-71)



(TEMP-72)



(TEMP-73)



(TEMP-74)

【 0 0 9 1】

10

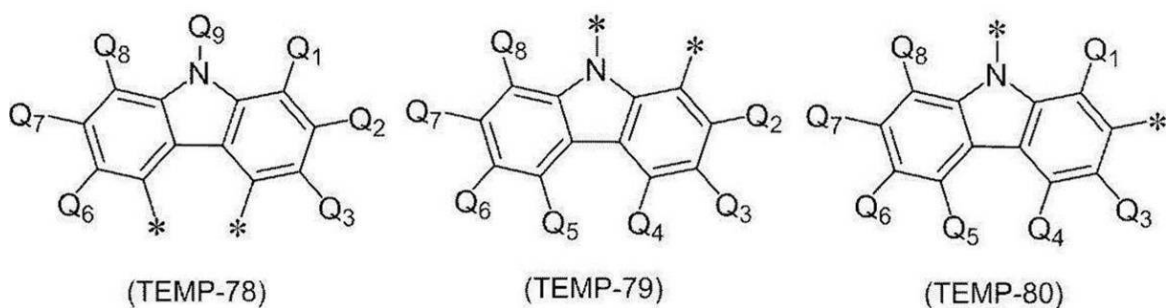
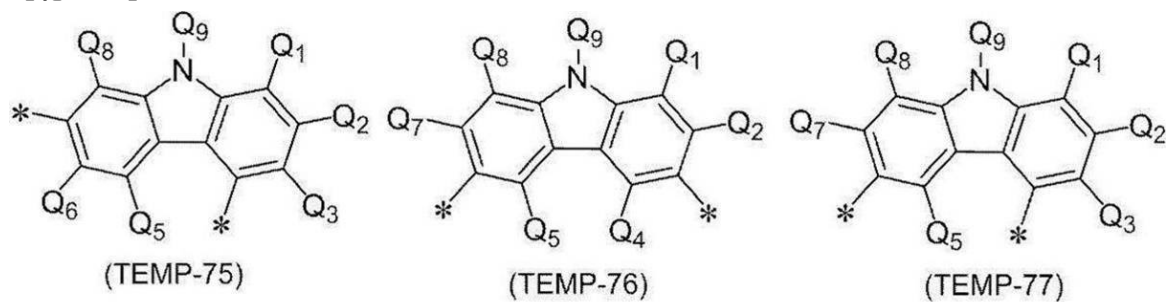
20

30

40

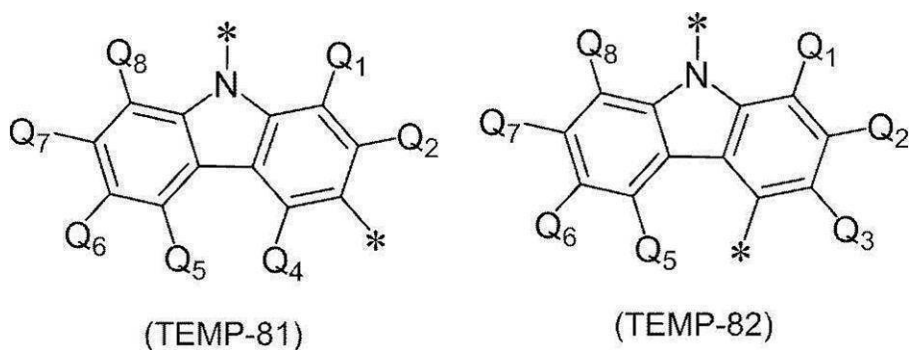
50

【化 1 5】



【 0 0 9 2】

【化 1 6】

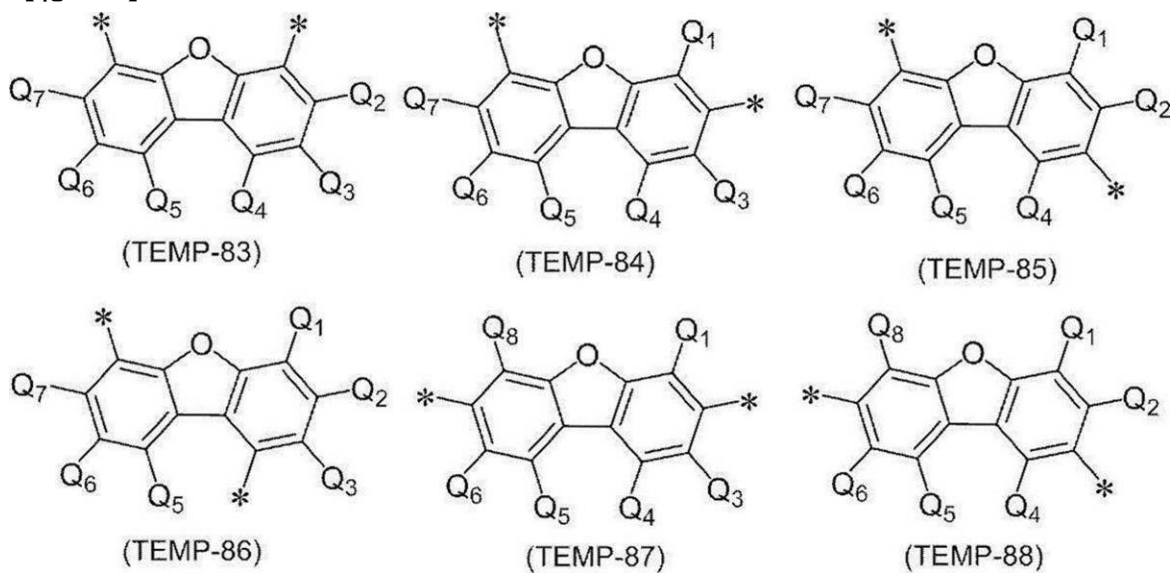


【 0 0 9 3】

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

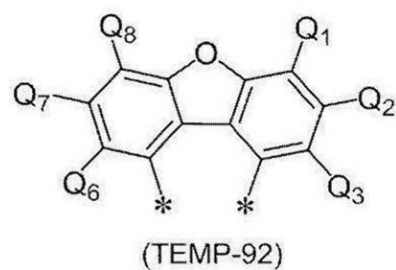
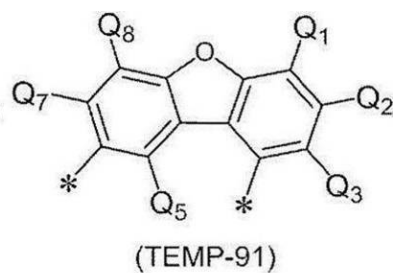
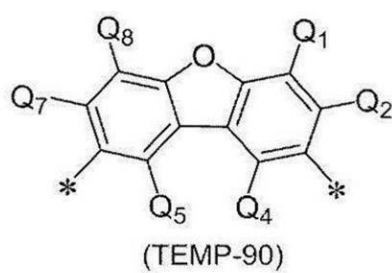
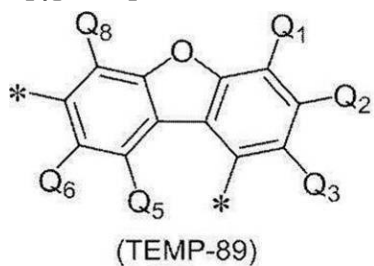
【 0 0 9 4】

【化 1 7】



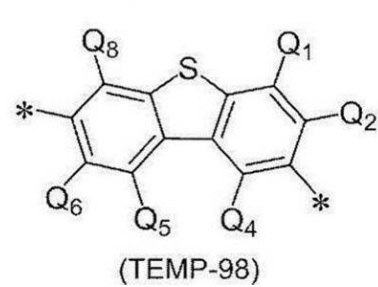
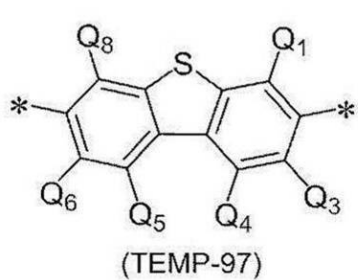
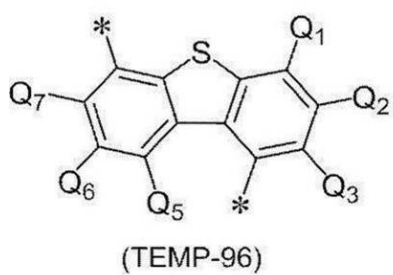
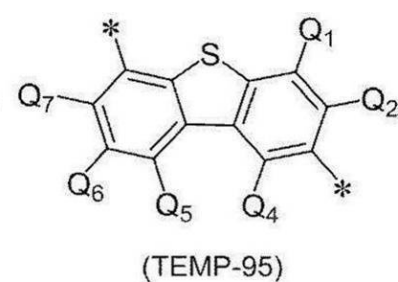
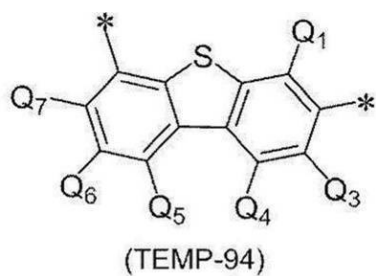
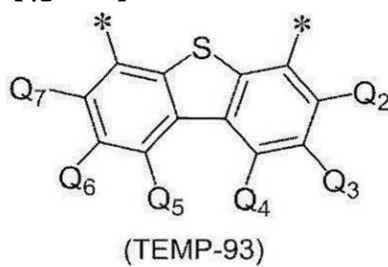
【 0 0 9 5 】

【 化 1 8 】



【 0 0 9 6 】

【 化 1 9 】



【 0 0 9 7 】

10

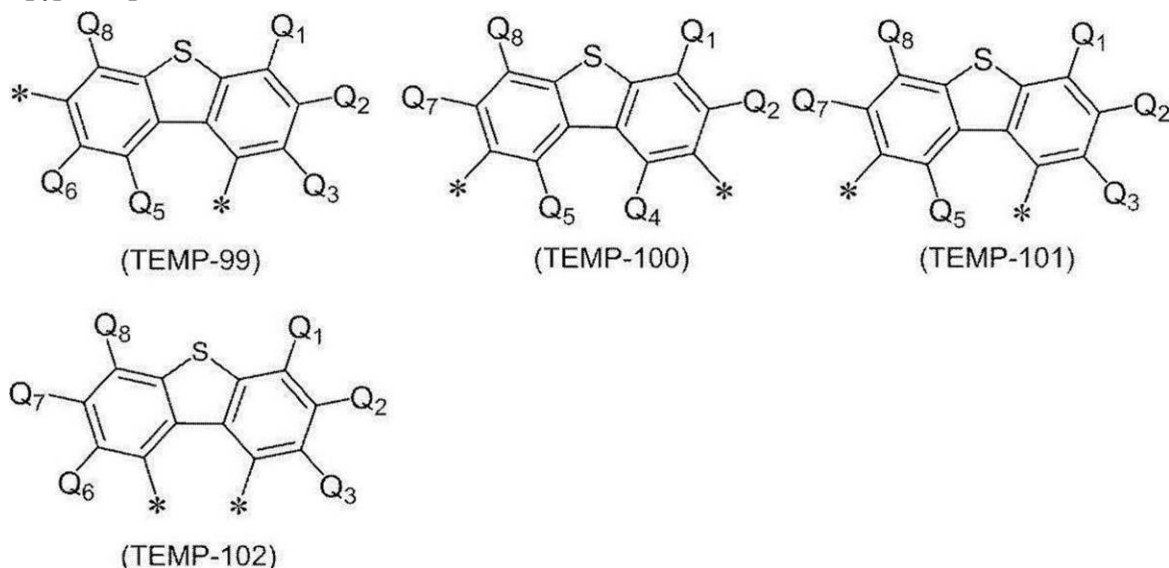
20

30

40

50

【化 20】



10

【0098】

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

20

【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。

30

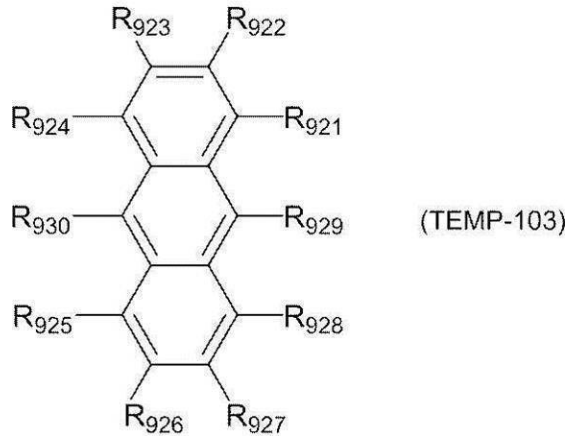
本明細書における、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合（以下、これらの場合をまとめて「結合して環を形成する場合」と称する場合がある。）について、以下、説明する。母骨格がアントラセン環である下記一般式（TEMP-103）で表されるアントラセン化合物の場合を例として説明する。

【0101】

40

50

【化 2 1】



10

【0 1 0 2】

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

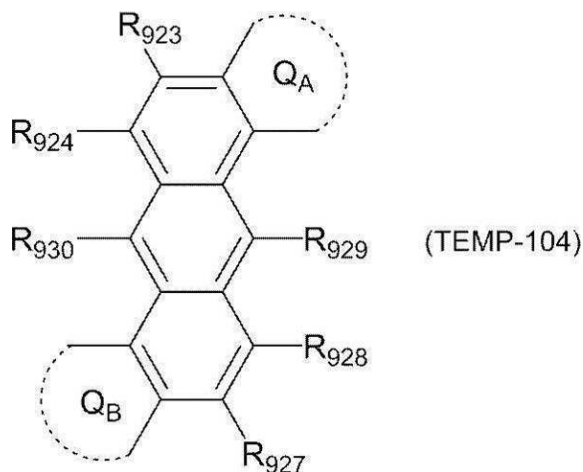
20

【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、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して環 Q_A を形成し、同時に R_{925} と R_{926} とが互いに結合して環 Q_B を形成した場合は、前記一般式（TEMP-103）で表されるアントラセン化合物は、下記一般式（TEMP-104）で表される。

【0 1 0 4】

【化 2 2】



30

40

【0 1 0 5】

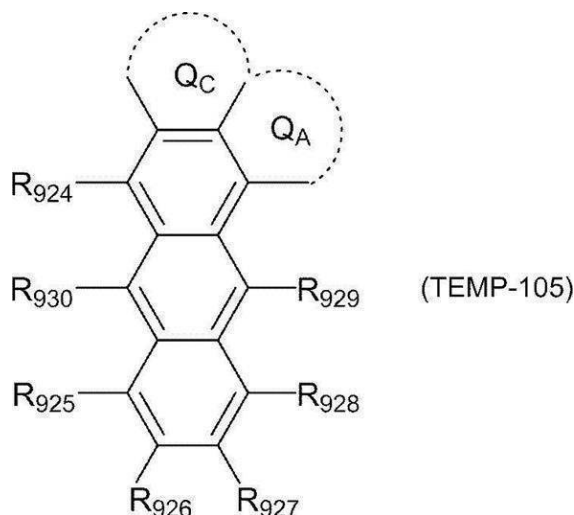
「隣接する2つ以上からなる組」が環を形成する場合とは、前述の例のように隣接する「2つ」からなる組が結合する場合だけでなく、隣接する「3つ以上」からなる組が結合する場合も含む。例えば、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して環 Q_A を形成し、かつ、 R_{922} と R_{923} とが互いに結合して環 Q_C を形成し、互いに隣接する3つ（ R_{921} 、 R_{922} 及び R_{923} ）からなる組が互いに結合して環を形成して、アントラセン母骨格に縮合する場合を意味し、この場合、前記一般式（TEMP-103）で表されるアント

50

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

【0106】

【化23】



【0107】

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

【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、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して形成された環 Q_A は、 R_{921} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、 R_{922} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、1以上の任意の元素とで形成する環を意味する。具体例としては、 R_{921} と R_{922} とで環 Q_A を形成する場合において、 R_{921} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、 R_{922} とが結合するアントラセン骨格の炭素原子と、4つの炭素原子とで単環の不飽和の環を形成する場合、 R_{921} と R_{922} とで形成する環は、ベンゼン環である。

【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

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。

10

20

30

40

50

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

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

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

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

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

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

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

【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を下限值とし、「AA～BB」の後に記載される数値BBを上限值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(1)で表され、少なくとも1つの重水素原子を有する化合物である。

【0118】

10

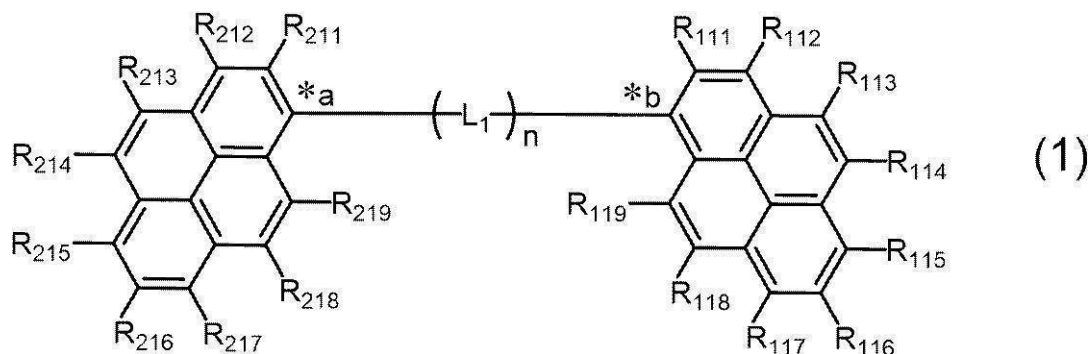
20

30

40

50

【化 2 4】



10

【0 1 1 9】

(前記一般式 (1) において、 n は、1、2、3、又は 4 であり、 n が、2、3、又は 4 の場合、複数の L_1 は、互いに同一であるか又は異なり、

L_1 は、

置換もしくは無置換のフェニル基、

置換もしくは無置換のビフェニル基、

置換もしくは無置換のターフェニル基、

置換もしくは無置換のナフチル基、

置換もしくは無置換のフェナントリル基、

置換もしくは無置換のクリセニル基、

置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、

置換もしくは無置換のフルオレニル基、

置換もしくは無置換の 9, 9'-スピロビフルオレニル基、

置換もしくは無置換の 9, 9-ジメチルフルオレニル基、及び

置換もしくは無置換の 9, 9-ジフェニルフルオレニル基からなる群から選択されるいずれかの基から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 2 価の基、又は

下記一般式 (11) で表される基であり、

$R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})で表される基、

—O—(R_{904})で表される基、

—S—(R_{905})で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、

—C(=O) R_{801} で表される基、

—COOR $_{802}$ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であり、

ただし、前記一般式 (1) で表される化合物は、—N(R_{906})(R_{907})で表される基を有さず、 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

20

30

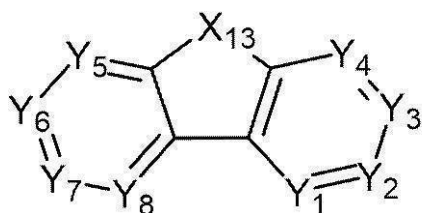
40

50

無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である。)

【0120】

【化25】



(11)

【0121】

(前記一般式(11)において、 X_{13} は、酸素原子又は硫黄原子であり、 $Y_1 \sim Y_8$ は、それぞれ独立に、 CR_{300} 又は窒素原子であり、

複数の R_{300} は、互いに同一であるか又は異なり、

複数の R_{300} 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_{300} のうち2つは、前記一般式(1)中の $*a$ もしくは他の L_1 と結合する単結合、又は前記一般式(1)中の $*b$ もしくは他の L_1 と結合する単結合であり、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、かつ前記一般式(1)中の $*a$ 、 $*b$ もしくは他の L_1 と結合する単結合ではない R_{300} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})で表される基、

—O—(R_{904})で表される基、

—S—(R_{905})で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O) R_{801} で表される基、

—COOR $_{802}$ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。)

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

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

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

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

10

20

30

40

50

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

【0122】

本明細書において、「前記一般式(1)で表され、少なくとも1つの重水素原子を有する化合物」とは、化合物(前記一般式(1)で表される化合物)が有する水素原子の全てが軽水素原子ではない化合物をいう。

本明細書において、化合物(前記一般式(1)で表される化合物)が有する全水素原子数のうち、10%以上が重水素原子であることも好ましく、20%以上が重水素原子であることも好ましく、30%以上が重水素原子であることも好ましく、40%以上が重水素原子であることも好ましく、50%以上が重水素原子であることも好ましく、60%以上が重水素原子であることも好ましく、70%以上が重水素原子であることも好ましく、80%以上が重水素原子であることも好ましい。

【0123】

・化合物中に重水素原子が含まれていることの確認方法、及び化合物中における重水素原子の結合位置の特定方法

化合物中に重水素原子が含まれていることは、質量分析法又は¹H-NMR分析法により確認する。また、化合物中の重水素原子の結合位置は、¹H-NMR分析法により特定する。

具体的には、対象化合物について質量分析を行い、水素原子が全て軽水素原子である対応化合物と比較して分子量が1増えていることにより、重水素原子を1つ含むことを確認する。また、重水素原子は、¹H-NMR分析にてシグナルが出ないことから、対象化合物について¹H-NMR分析を行って得られた積分値によって分子内に含まれている重水素原子の数を確認する。また、対象化合物について¹H-NMR分析を行い、シグナルを帰属することにより重水素原子の結合位置を特定する。

【0124】

本実施形態の化合物において、nは、1、2、又は3であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、nは、1又は2であることがより好ましい。

【0125】

本実施形態の化合物において、L₁は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9-ジメチルフルオレニル基、及び置換もしくは無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基からなる群から選択されるいずれかの基から1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基、又は前記一般式(11)で表される基であることが好ましい。

【0126】

本実施形態の化合物において、前記一般式(11)で表される基は、下記一般式(12)で表される基であることが好ましい。

【0127】

10

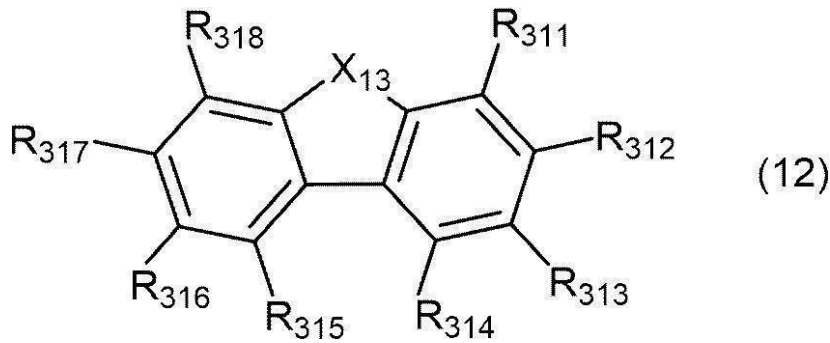
20

30

40

50

【化 2 6】



10

【0 1 2 8】

(前記一般式 (1 2) において、 X_{13} は、前記一般式 (1 1) における X_{13} と同義であり、

$R_{311} \sim R_{318}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{311} \sim R_{318}$ のうち 2 つは、前記一般式 (1) 中の * a もしくは他の L_1 と結合する単結合、又は前記一般式 (1) 中の * b もしくは他の L_1 と結合する単結合であり、

20

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、かつ前記一般式 (1) 中の * a、* b もしくは他の L_1 と結合する単結合ではない $R_{311} \sim R_{318}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1 1) における R_{300} と同義である。))

【0 1 2 9】

一般的に、化合物を重水素化した場合、素子が長寿命化することが知られている。

本実施形態に係る化合物は、重水素化化合物であり、2 つのビレン環の間を連結する基を特定の連結基 L_1 とすることで、素子の長寿命化を図っている。例えば、一般式 (1) 中、連結基 L_1 がカルbazolリレン基等のように電子リッチな置換基となった化合物は、素子作成のための成膜時に反応し易いため、重水素化しても長寿命化の効果が限定的になるおそれがあるため、一般式 (1) の連結基 L_1 から除外されている。

30

一方、有機 EL 素子を量産する際、生産効率を向上させるため、発光層等の有機層を高速 (例えば蒸着速度 $20 \text{ \AA} / \text{s}$) で成膜することがある。例えば、一般式 (1) 中、連結基 L_1 はアリール基等、電子リッチではない置換基である方が成膜時に反応することが回避されるため、発光層を高速成膜した場合、重水素化による長寿命化の効果がより期待できる。

一般式 (1 1) で表される基や、カルbazolリレン基等のヘテロアリーレン基以外の連結基 L_1 とすることで、一般式 (1) で表される化合物は、電子リッチとなることを回避し、高速成膜時に反応し難くなり、その結果、素子寿命が向上し易くなると考えられる。

40

よって、連結基 L_1 は、アリーレン基であることが好ましい。しかし、アリーレン基の中でも、9, 9-ジメチルフルオレン環等の環形成炭素数が少ない (分子量の小さい) 連結基を有する化合物を用いて発光層を高速成膜すると、ベンゾスピロフルオレン環等の環形成炭素数が多い (分子量の大きい) 連結基を有する化合物を用いて発光層を高速成膜した場合に比べ、重水素化による長寿命化の効果がより発現されることがわかってきた。

環形成炭素数が多い (分子量の大きい) アリーレン基が連結基となった場合、一般式 (1) で表される化合物は、高速成膜時に、熱分解がより起こりやすい環境下に置かれるため、熱分解し易くなり、その結果、素子寿命の低下が起こり易くなると考えられる。

一方、環形成炭素数が少ない (分子量の小さい) アリーレン基が連結基となった場合、

50

一般式(1)で表される化合物は、高速成膜時に、熱分解がより起こりやすい環境下に置かれても熱分解し難く、その結果、素子寿命が向上すると考えられる。

よって、本実施形態の化合物によれば、連結基 L_1 の中でも、環形成炭素数が少ない連結基(例えば $-(L_1)_n-$ が含んでいる炭素原子の総数が21以下の連結基)を選択することで、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果がより発現される。

【0130】

本実施形態の化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、

L_1 は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基、及び置換もしくは無置換の9,9'-ジフェニルフルオレニル基からなる群から選択されるいずれかの基から1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基であるが好ましい。

【0131】

本実施形態の化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、

L_1 は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、及び置換もしくは無置換の9,9'-ジアルキルフルオレニル基からなる群から選択されるいずれかの基から1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基であることがより好ましい。

【0132】

本実施形態の化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、 L_1 は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、及び置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基からなる群から選択されるいずれかの基から1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基であるがさらに好ましい。

【0133】

本実施形態の化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、 L_1 は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、及び置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基からなる群から選択されるいずれかの基から1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基であるがさらに好ましい。

【0134】

本実施形態の化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、 $-(L_1)_n-$ が含んでいる炭素原子の総数は、21以下であることがより好ましく、13以下であることがさらに好ましい。

$-(L_1)_n-$ が含んでいる炭素原子の総数が21以下であることにより、ベンゾスピロフルオレン環等のように2つのピレン環の間に環形成炭素数が多い(分子量の大きい)連結基を有する化合物に比べて、例えば、有機EL素子を量産するときに、前記一般式(1)で表される化合物を用いて発光層を成膜する際の蒸着速度を上げて、重水素化による長寿命化の効果が得られる。発光層等の有機層を高速で成膜する際に、成膜に用いられる化合物は、熱分解がより起こりやすい環境下に置かれる。そのため、2つのピレン環の

間に環形成炭素数が多い（分子量の大きい）連結基を有する化合物は、高速成膜時に熱分解し易く、その結果、素子寿命の低下が起こりやすいと推測される。

【 0 1 3 5 】

本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ が含んでいる炭素原子の総数は、21以下であることも好ましい。

【 0 1 3 6 】

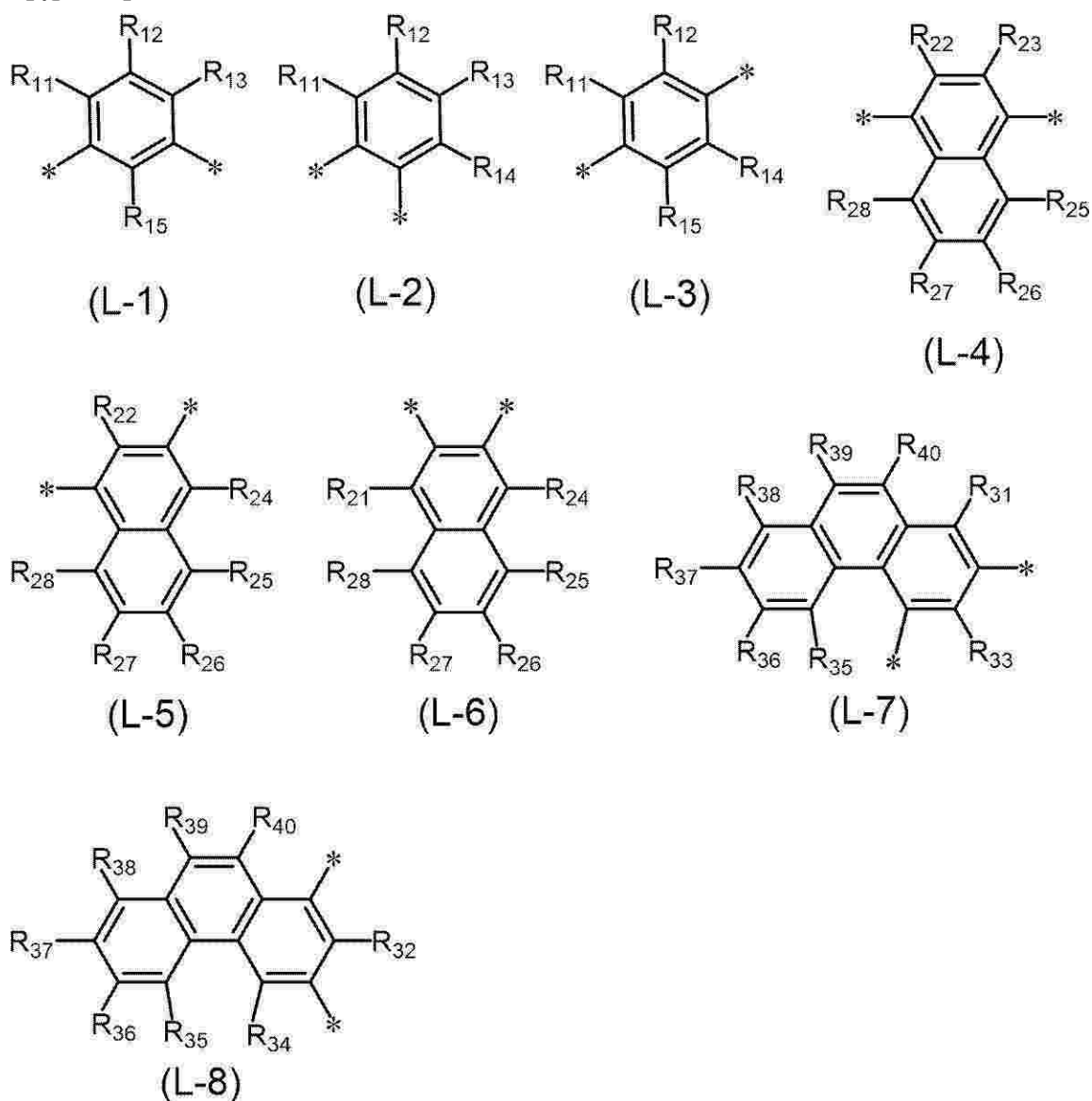
本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ 、並びに $-(L_1)_n$ が含んでいる炭素原子の総数は、21以下であることも好ましく、13以下であることも好ましい。

【 0 1 3 7 】

本実施形態の化合物において、 L_1 は、下記一般式 $(L-1) \sim (L-18)$ のいずれかで表される基であることが好ましい。

【 0 1 3 8 】

【化 2 7】



【 0 1 3 9 】

10

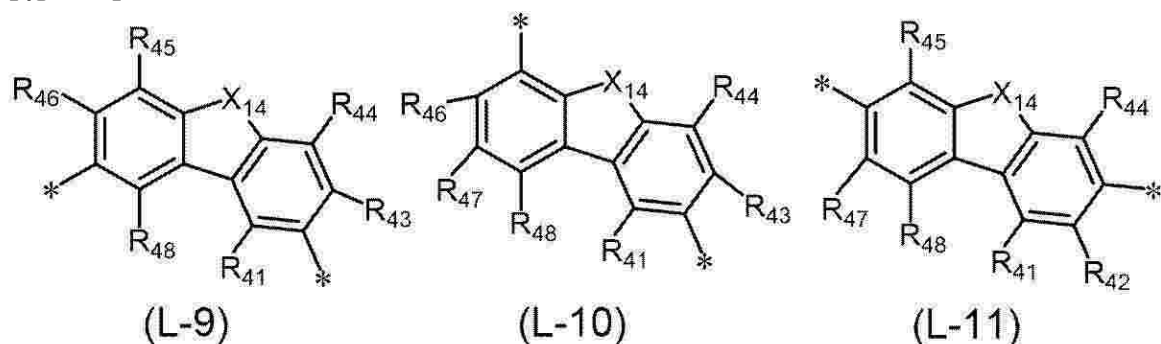
20

30

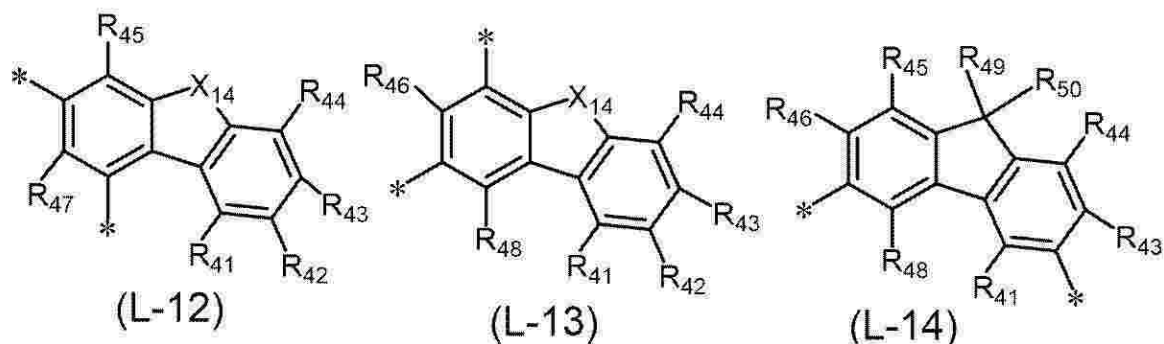
40

50

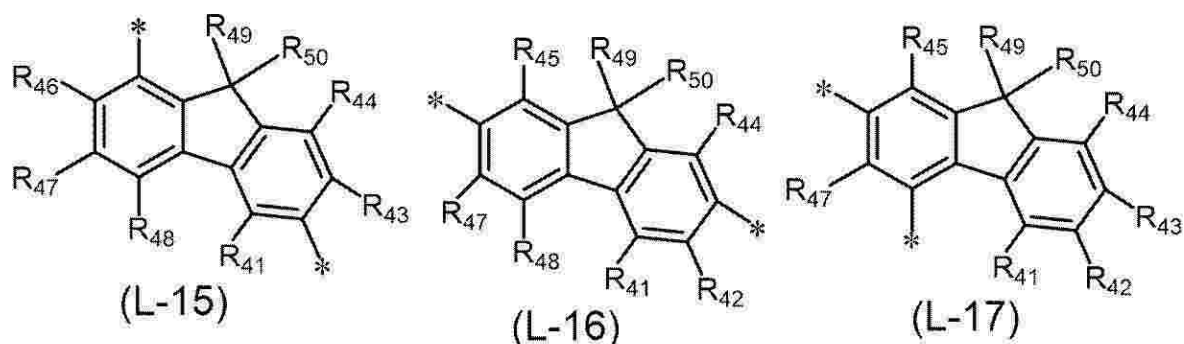
【化 28】



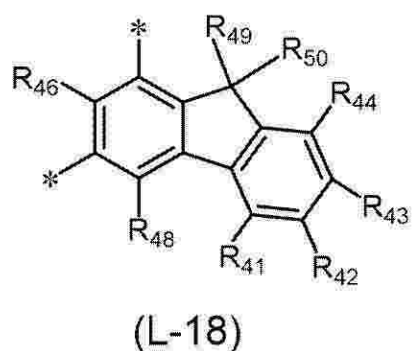
10



20



30



40

【0140】

(前記一般式 (L-1) ~ (L-18) において、 X_{14} は、酸素原子又は硫黄原子であり、

$R_{11} \sim R_{15}$ 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、

$R_{21} \sim R_{28}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

50

互いに結合せず、

$R_{31} \sim R_{40}$ 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、

$R_{41} \sim R_{48}$ 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 $R_{11} \sim R_{15}$ のうち2つは、前記一般式(1)中の* a もしくは他の L_1 と結合する単結合、又は前記一般式(1)中の* b もしくは他の L_1 と結合する単結合であり、

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 $R_{21} \sim R_{28}$ のうち2つは、前記一般式(1)中の* a もしくは他の L_1 と結合する単結合、又は前記一般式(1)中の* b もしくは他の L_1 と結合する単結合であり、

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 $R_{31} \sim R_{40}$ のうち2つは、前記一般式(1)中の* a もしくは他の L_1 と結合する単結合、又は前記一般式(1)中の* b もしくは他の L_1 と結合する単結合であり、

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 $R_{41} \sim R_{50}$ のうち2つは、前記一般式(1)中の* a もしくは他の L_1 と結合する単結合、又は前記一般式(1)中の* b もしくは他の L_1 と結合する単結合であり、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、かつ前記一般式(1)中の* a 、* b もしくは他の L_1 と結合する単結合ではない $R_{11} \sim R_{15}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{40}$ 、及び $R_{41} \sim R_{50}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(11)における R_{300} と同義である。)

【0141】

本実施形態の化合物において、 n が1の場合、 $-(L_1)_n-$ は、前記一般式 $(L-1) \sim (L-18)$ で表される基からなる群から選択される基であり、

n が2の場合、 $-(L_1)_n-$ は、前記一般式 $(L-1) \sim (L-18)$ で表される基からなる群から選択される2つの基が互いに結合した基であり、

n が3の場合、 $-(L_1)_n-$ は、前記一般式 $(L-1) \sim (L-18)$ で表される基からなる群から選択される3つの基が互いに結合した基であることが好ましい。

【0142】

前記一般式 $(L-14) \sim (L-18)$ において、

$R_{41} \sim R_{48}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ置換もしくは無置換の縮合環を形成しないことが好ましい。

【0143】

本実施形態の化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、 n が1の場合、 $-(L_1)_n-$ は、前記一般式 $(L-1) \sim (L-8)$ 及び $(L-14) \sim (L-18)$ で表される基からなる群から選択される基であることが好ましく、

n が2の場合、 $-(L_1)_n-$ は、前記一般式 $(L-1) \sim (L-8)$ 及び $(L-14) \sim (L-18)$ で表される基からなる群から選択される2つの基が互いに結合した基であることが好ましく、

n が3の場合、 $-(L_1)_n-$ は、前記一般式 $(L-1) \sim (L-8)$ 及び $(L-14) \sim (L-18)$ で表される基からなる群から選択される3つの基が互いに結合した基であることが好ましい。

【0144】

本実施形態の化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、

10

20

30

40

50

L_1 は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、前記一般式 (L-14) で表される基、前記一般式 (L-15) で表される基、前記一般式 (L-16) で表される基、前記一般式 (L-17) で表される基、及び前記一般式 (L-18) で表される基からなる群から選択されるいずれかの基から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 2 価の基であり、かつ

— (L_1)_n— が含んでいる炭素原子の総数は、21 以下であることがより好ましい。

また、 L_1 は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、前記一般式 (L-14) で表される基、前記一般式 (L-15) で表される基、前記一般式 (L-16) で表される基、前記一般式 (L-17) で表される基、及び前記一般式 (L-18) で表される基からなる群から選択されるいずれかの基から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 2 価の基であり、かつ

— (L_1)_n— が含んでいる炭素原子の総数は、21 以下であることがさらに好ましい。

この態様において、当該 L_1 が、前記一般式 (L-14) で表される基、前記一般式 (L-15) で表される基、前記一般式 (L-16) で表される基、前記一般式 (L-17) で表される基、及び前記一般式 (L-18) で表される基からなる群から選択されるいずれかの基から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 2 価の基である場合、

前記一般式 (L-14) ~ (L-18) 中、

R_{49} 及び R_{50} 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 ~ 6 のアルキル基であり、

R_{41} ~ R_{48} は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換のアルキル基であり、

R_{41} ~ R_{48} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換のアルキル基、

置換もしくは無置換のハロアルキル基、

置換もしくは無置換のアルケニル基、

置換もしくは無置換のアルキニル基、

置換もしくは無置換のシクロアルキル基、

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

— O — (R_{904}) で表される基、

— S — (R_{905}) で表される基、

置換もしくは無置換のアラルキル基、

— C (=O) R_{801} で表される基、

— COO R_{802} で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換のアリール基、又は

置換もしくは無置換の複素環基であり、

R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換のアルキル基、

置換もしくは無置換のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換のアリール基、又は

10

20

30

40

50

置換もしくは無置換の複素環基であることが好ましい。

【0145】

本実施形態の化合物において、 L_1 は、少なくとも1つの重水素原子を有することが好ましい。

【0146】

本実施形態の化合物において、 $R_{11} \sim R_{15}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{40}$ 、及び $R_{41} \sim R_{50}$ のうち少なくとも1つは、重水素原子であることが好ましい。

【0147】

本実施形態の化合物において、 $R_{11} \sim R_{15}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{40}$ 、及び $R_{41} \sim R_{50}$ のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての $R_{11} \sim R_{15}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{40}$ 、及び $R_{41} \sim R_{50}$ のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子を有することが好ましい。

【0148】

本実施形態の化合物において、 $-(L_1)_n-$ は、下記一般式 $(L_{n-1}) \sim (L_{n-1}8)$ のいずれかで表される基であることが好ましい。

【0149】

10

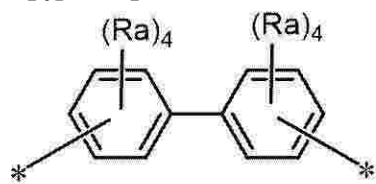
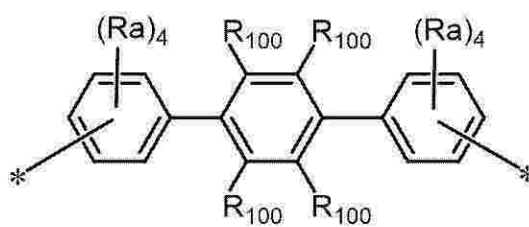
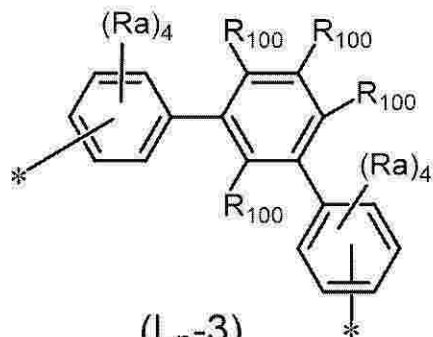
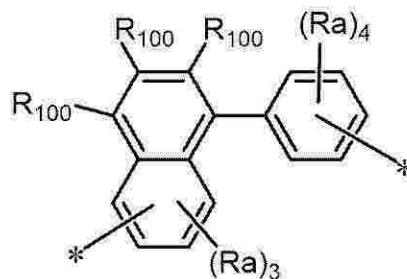
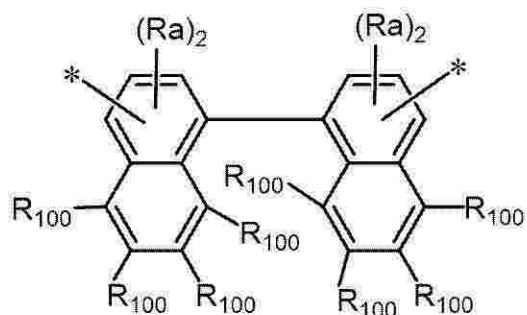
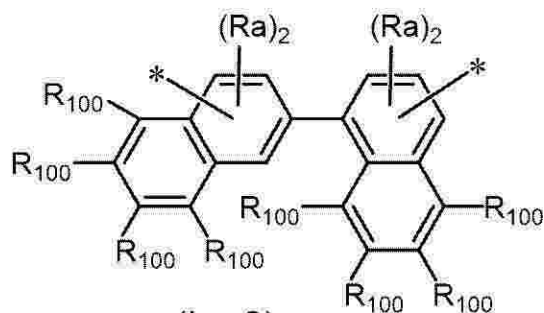
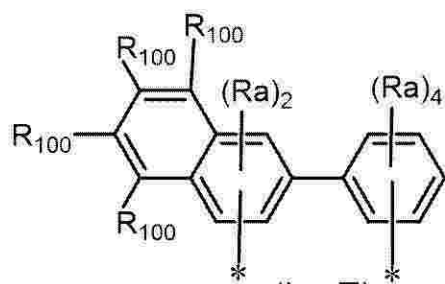
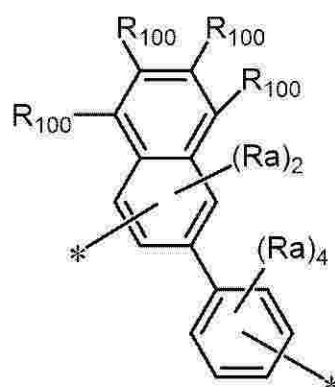
20

30

40

50

【化 2 9】

(L_n-1)(L_n-2)(L_n-3)(L_n-4)(L_n-5)(L_n-6)(L_n-7)(L_n-8)

【 0 1 5 0 】

10

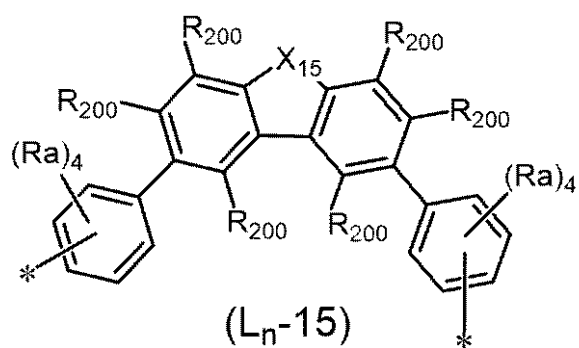
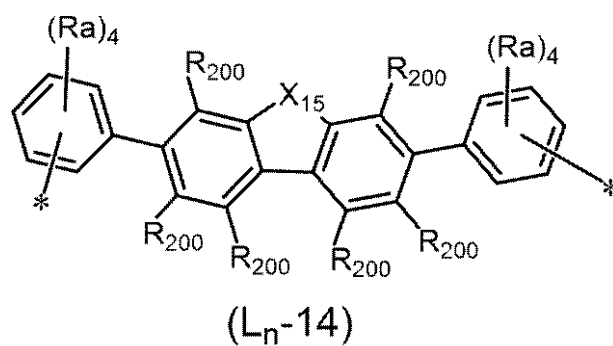
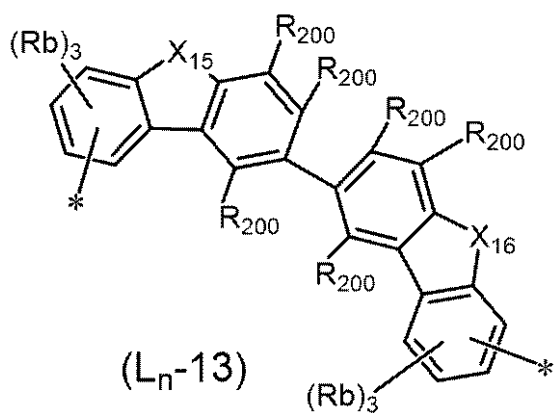
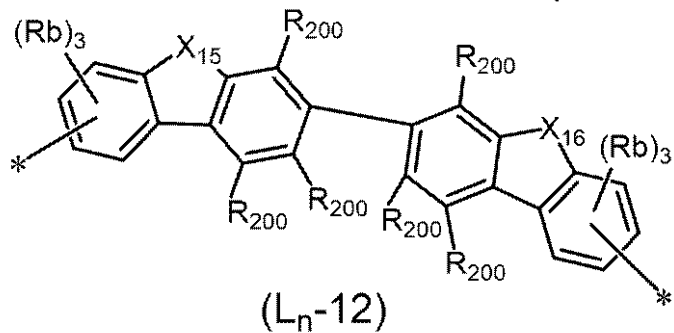
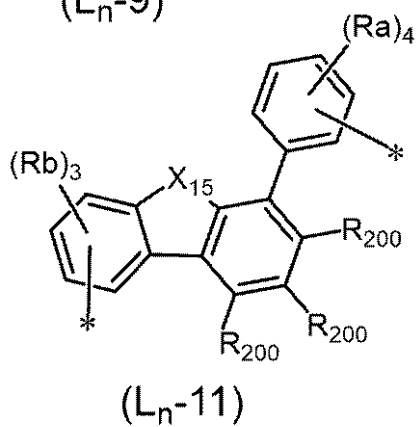
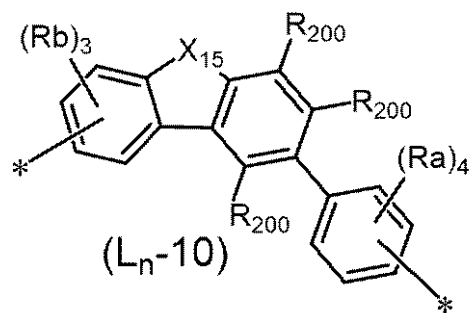
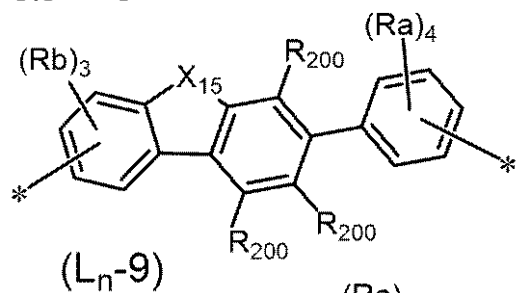
20

30

40

50

【化 3 0】



【 0 1 5 1】

10

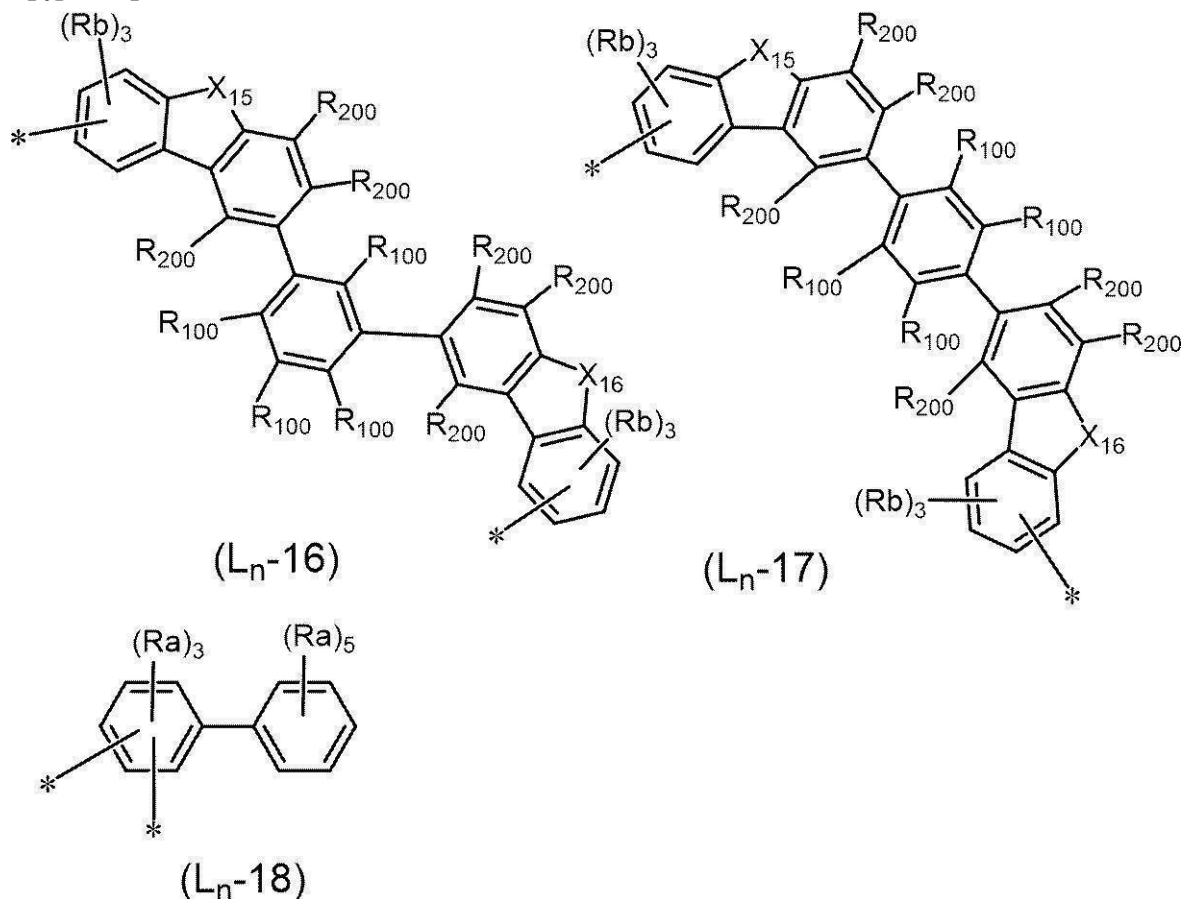
20

30

40

50

【化 3 1】



【 0 1 5 2】

(前記一般式 (L_n-1) ~ (L_n-18) において、X₁₅ 及び X₁₆ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、又は C R₁₅ A R₁₆ A であり、

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、

複数の R_b 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、

複数の R₁₀₀ 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、

複数の R₂₀₀ 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、

複数の R_a は、互いに同一であるか又は異なり、

複数の R_b は、互いに同一であるか又は異なり、

複数の R₁₀₀ は、互いに同一であるか又は異なり、

複数の R₂₀₀ は、互いに同一であるか又は異なり、

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_a、R_b、R₁₀₀、R₂₀₀、R₁₅A 及び R₁₆A は、それぞれ独立に、前記

一般式 (11) における R_{300} と同義であり、

前記一般式 $(L_n - 1) \sim (L_n - 18)$ 中、2つの*のうち一方の*は、前記一般式 (1) における *a との結合位置を表し、他方の*は、前記一般式 (1) における *b との結合位置を表す。)

【0153】

本実施形態の化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、 $-(L_1)_n-$ が、前記一般式 $(L_n - 1) \sim (L_n - 8)$ 及び $(L_n - 18)$ で表される基からなる群から選択される基であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、 $-(L_1)_n-$ が、前記一般式 $(L_n - 9) \sim (L_n - 17)$ で表される基からなる群から選択される基である場合、当該一般式 $(L_n - 9) \sim (L_n - 17)$ で表される基は、置換もしくは無置換の9,9'-スピロビフルオレニル基から1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基を有さず、かつ置換もしくは無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基から1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基を有さないことがより好ましい。

【0154】

本実施形態の化合物において、複数の R_a 、複数の R_b 、複数の R_{100} 、複数の R_{200} 、 R_{15A} 及び R_{16A} のうち少なくとも1つは、重水素原子であることが好ましい。

【0155】

本実施形態の化合物において、複数の R_a 、複数の R_b 、複数の R_{100} 、複数の R_{200} 、 R_{15A} 及び R_{16A} のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての R_a 、 R_b 、 R_{100} 、 R_{200} 、 R_{15A} 及び R_{16A} のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子を有することが好ましい。

【0156】

本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、 R_{300} 、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基であることが好ましい。

【0157】

本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、 R_{300} 、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~18のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、又は置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、 R_{300} 、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1~18のアルキル基、無置換のフェニル基、無置換のビフェニル基、無置換のターフェニル基、無置換のナフチル基、無置換のアントリル基、無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、無置換の9,9-ジメチルフルオレニル基、無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基、無置換のジベンゾフラニル基、無置換のナフトベンゾフラニル基、無置換のジベンゾチオフェニル基、又は無置換のナフトベンゾチオフェニル基であることがより好ましい。

【0158】

本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ 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1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のシクロアルキル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であり、

$-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基における R_{901} 、 R_{902} 及び R_{903} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ 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1～18のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～18のシクロアルキル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基、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の複素環基であり、

$-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基における R_{901} 、 R_{902} 及び R_{903} は、それぞれ独立に、無置換の炭素数1～18のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数6～18のアリール基であることがより好ましい。

【0159】

本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、 R_{300} 、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} のうち少なくとも1つは、重水素原子であることが好ましい。

【0160】

本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ は重水素原子であるか、又は $R_{211} \sim R_{219}$ は重水素原子であることが好ましい。

【0161】

本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ は重水素原子であることが好ましい。

【0162】

本実施形態の化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、 R_{300} 、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、 R_{300} 、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子を有することが好ましい。

【0163】

本実施形態の化合物において、 L_1 、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、 R_{300} 、 $R_{311} \sim R_{318}$ 、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} 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、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フェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-スプロピフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジフェニルフルオレニル基である、置換もしくは無置換のピリジル基、置換もしくは無置換のピリミジニル基、置換もしくは無置換のトリアジニル基、置換もしくは無置換のキノリル基、置換もしくは無置換のイソキノリル基、置換もしくは無置換のキナゾリニル基、置換もしくは無置換のベンゾイミダゾリル基、置換もしくは無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換の1-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の2-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の3-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の4-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換のベンゾカルバゾリル基、置換もしくは無置換のアザカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジアザカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置

10

20

30

40

50

換のナフトベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフエニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフエニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾチオフエニル基、又は置換もしくは無置換のジアザジベンゾチオフエニル基であることが好ましい。

【0164】

本実施形態の化合物において、 L_1 、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、 R_{300} 、 $R_{311} \sim R_{318}$ 、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} 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、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフエニル基、置換もしくは無置換の9，9-ジメチルフルオレニル基、又は置換もしくは無置換の9，9-ジフェニルフルオレニル基であることがより好ましい。

【0165】

本実施形態の化合物において、 L_1 、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、 R_{300} 、 $R_{311} \sim R_{318}$ 、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} 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、いずれも「無置換」の基であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、 L_1 、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、 R_{300} 、 $R_{311} \sim R_{318}$ 、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{801} 及び R_{802} 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、それぞれ独立に、無置換の炭素数1～18のアルキル基、無置換のフェニル基、無置換のナフチル基、無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、無置換のジベンゾフラニル基、無置換のジベンゾチオフエニル基、無置換の9，9-ジメチルフルオレニル基、又は無置換の9，9-ジフェニルフルオレニル基であることがより好ましい。

【0166】

一実施形態において、前記一般式(1)で表され、かつ少なくとも1つの重水素原子を有する化合物は、下記態様A～態様Dに係る化合物であることも好ましい。

【0167】

〔態様Aに係る化合物〕

態様Aに係る化合物は、下記一般式(120-1)で表される化合物である。下記一般式(120-1)で表される化合物は、少なくとも1つの重水素原子を有する。

【0168】

10

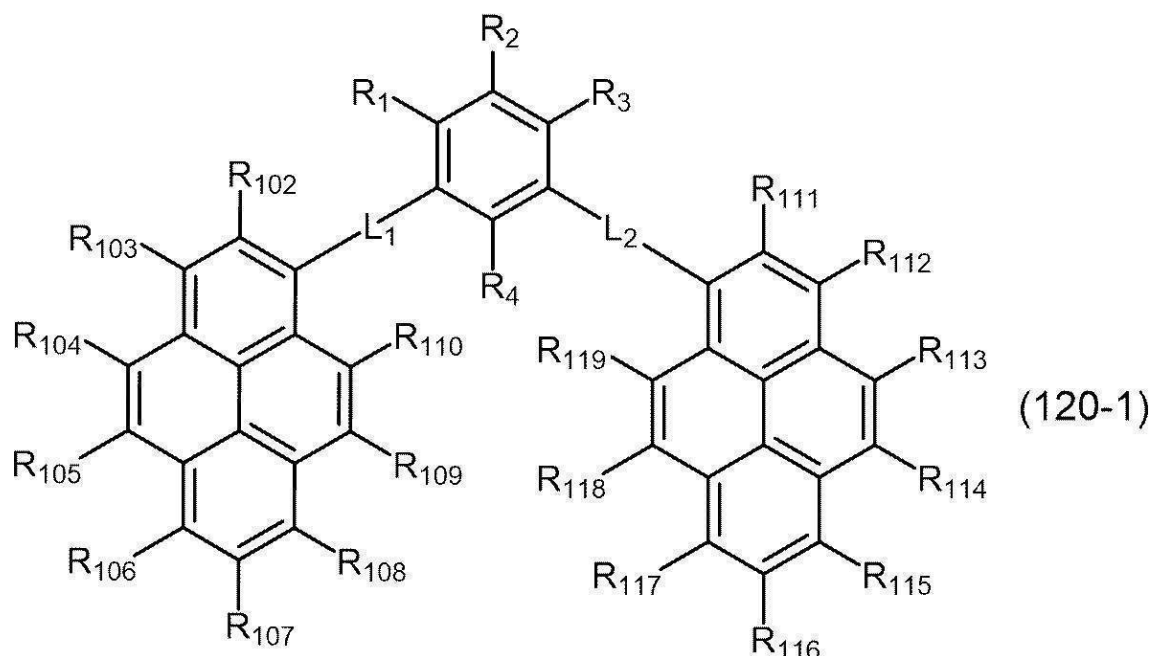
20

30

40

50

【化 3 2】



【 0 1 6 9 】

(前記一般式 (120-1) において、

 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

下記一般式 (120A) で表される基、

下記一般式 (120B) で表される基、

下記一般式 (120C) で表される基、又は

下記一般式 (120D) で表される基であり、

ただし、 $R_1 \sim R_4$ は同時に水素原子ではなく、 L_1 及び L_2 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

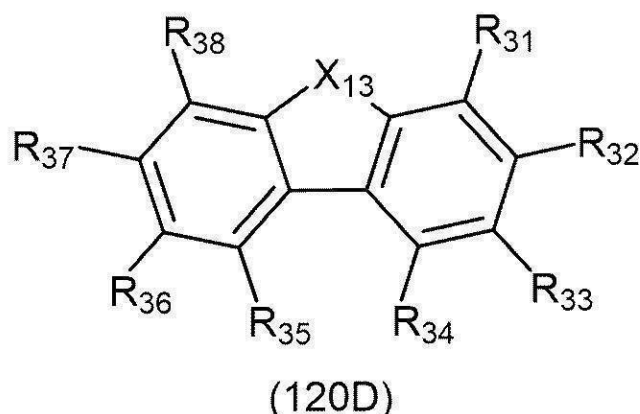
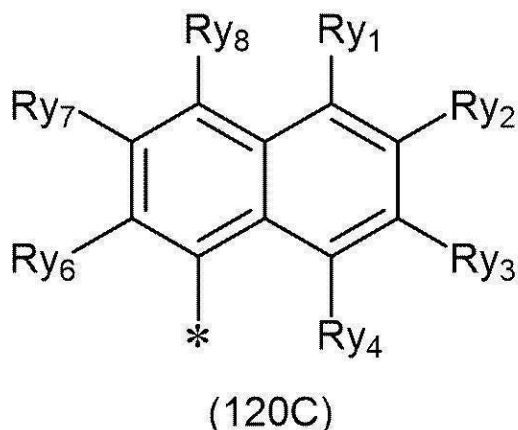
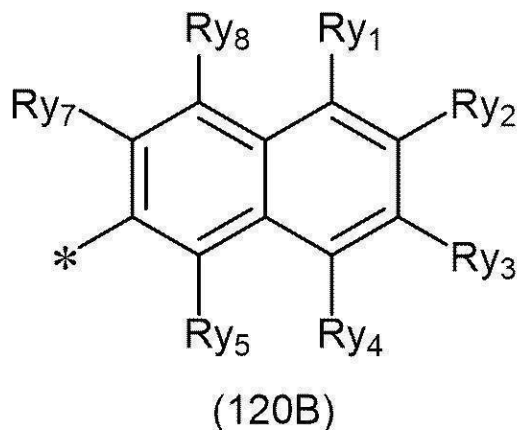
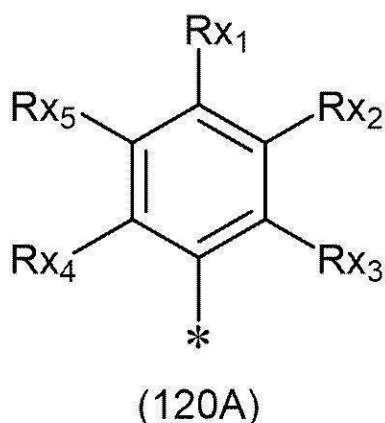
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基であり、

$R_{102} \sim R_{119}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

L_1 及び L_2 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、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環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である。）

【 0 1 7 0 】

【化 3 3】



【0171】

(前記一般式(120A)～(120C)において、

Rx₁～Rx₅及びRy₁～Ry₈は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-スπιロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジフェニルフルオレニル基、置換もしくは無置換のピリジル基、置換もしくは無置換のピリミジニル基、置換もしくは無置換のトリアジニル基、置換もしくは無置換のキノリル基、置換もしくは無置換のイソキノリル基、置換もしくは無置換のキナゾリニル基、置換もしくは無置換のベンゾイミダゾリル基、置換もしくは無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換の1-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の2-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の3-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の4-カルバゾリル基、置換もしくは無置換のベンゾカルバゾリル基、置換もしくは無置換のアザカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジアザカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾチオフェニル基、又は置換もしくは無置換のジアザジベンゾチオフェニル基であり、

ただし、Rx₁～Rx₅のうち、少なくとも1つは水素原子ではなく、前記一般式(120A)、(120B)及び(120C)中の*は、結合位置を表す。)

(前記一般式(120D)において、

X₁₃は、酸素原子、硫黄原子、NR₃₉、又はCR_{39A}R_{39B}であり、

10

20

30

40

50

$R_{31} \sim R_{38}$ 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 $R_{31} \sim R_{38}$ のうちいずれか1つは、 R_1 、 R_2 、 R_3 及び R_4 のうち少なくともいずれかに結合する単結合であり、

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 $R_{31} \sim R_{39}$ は、それぞれ独立に、 $R_{x1} \sim R_{x5}$ 及び $R_{y1} \sim R_{y8}$ と同義であり、

R_{39A} 及び R_{39B} の組が、

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

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_{39A} 及び R_{39B} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。))

【0172】

態様Aに係る化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果
をより発現する観点から、2つのピレン環($R_{111} \sim R_{119}$ を有するピレン環及び $R_{102} \sim R_{110}$ を有するピレン環)を連結する基が含まれている炭素原子の総数は、21以下
であることがより好ましい。

2つのピレン環を連結する基とは、前記一般式(120-1)中、 L_1 、 $R_1 \sim R_4$ を有するフェニレン基及び L_2 からなる基である。

【0173】

態様Aに係る化合物において、 $R_{x1} \sim R_{x5}$ 、 $R_{y1} \sim R_{y8}$ 、及び $R_{31} \sim R_{39}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換の9,9-ジメチルフルオレニル基、又は置換もしくは無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基であることが好ましい。

態様Aに係る化合物において、 $R_{x1} \sim R_{x5}$ 、 $R_{y1} \sim R_{y8}$ 、及び $R_{31} \sim R_{39}$ のうち少なくとも1つは、重水素原子であることが好ましい。

【0174】

態様Aに係る化合物において、 $R_{31} \sim R_{38}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、又は互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成し、

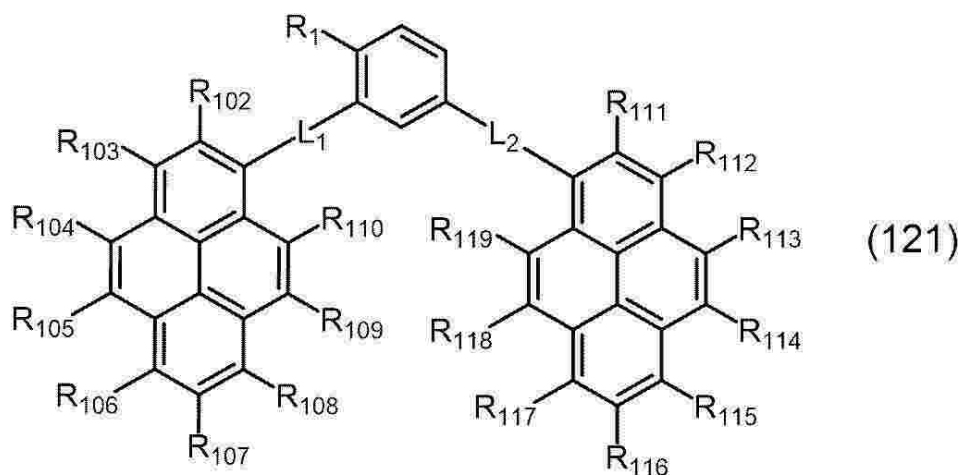
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換の9,9-ジメチルフルオレニル基、又は置換もしくは無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基であることが好ましい。

【0175】

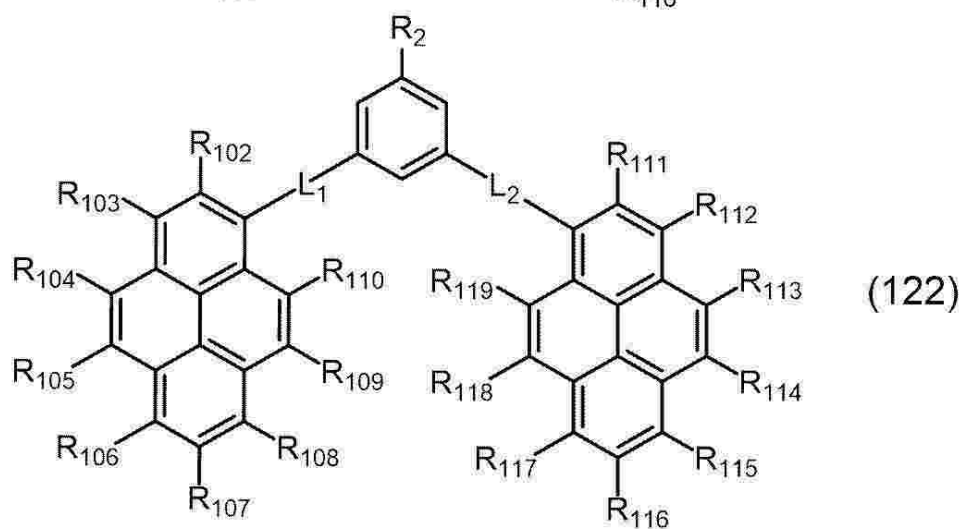
態様Aに係る化合物において、前記一般式(120-1)で表される化合物は、下記一般式(121)、(122)、(123)、(124)又は(125)で表されることが好ましい。

【0176】

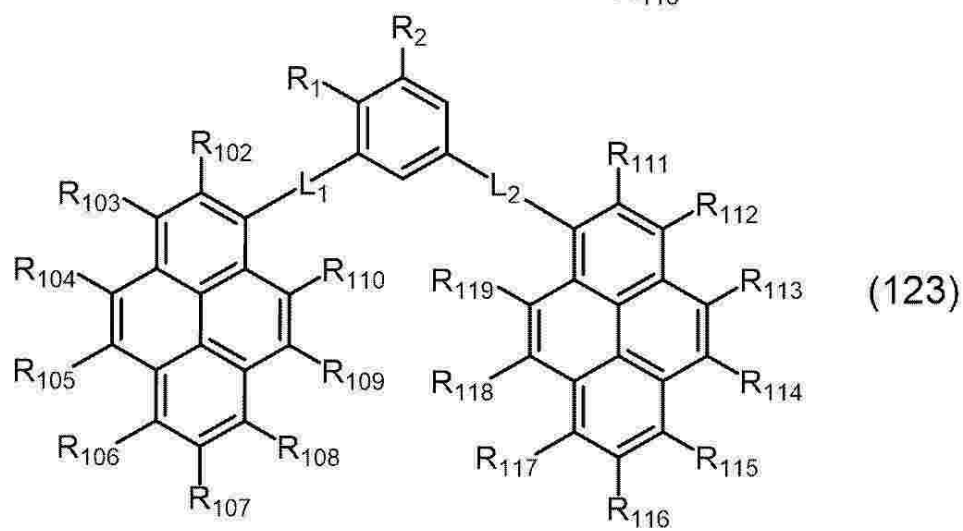
【化 3 4】



10



20



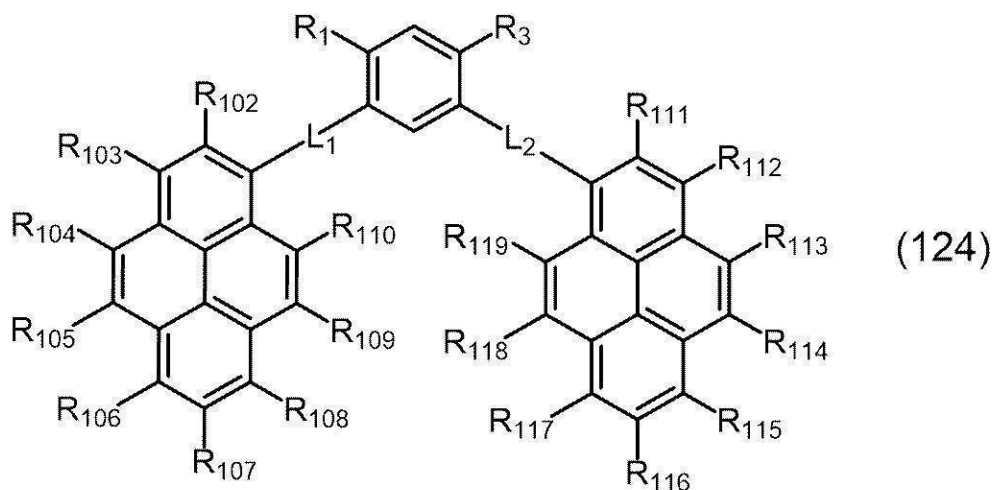
30

40

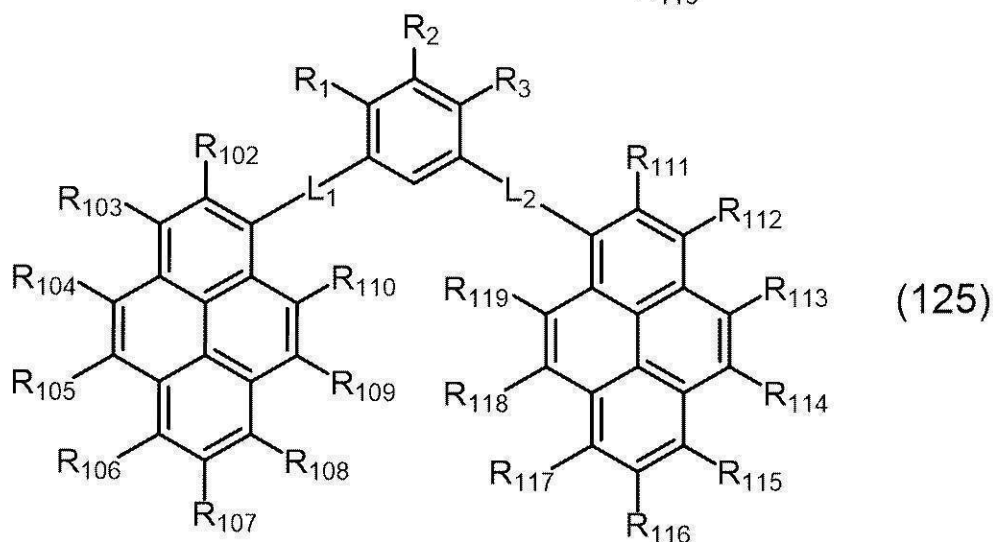
【 0 1 7 7 】

50

【化 3 5】



10



20

【 0 1 7 8 】

(前記一般式(121)～(125)において、 $R_1 \sim R_3$ は、それぞれ独立に、前記一般式(120-1)における $R_1 \sim R_3$ と同義であり、ただし、 $R_1 \sim R_3$ は水素原子ではなく、 L_1 及び L_2 は、それぞれ独立に、前記一般式(120-1)における L_1 及び L_2 と同義であり、 $R_{102} \sim R_{119}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(120-1)における $R_{102} \sim R_{119}$ と同義である。)

30

【 0 1 7 9 】

態様Aに係る化合物において、 L_1 及び L_2 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価の複素環基であることが好ましい。

本実施形態の化合物において、 L_1 及び L_2 は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～18の2価の複素環基であることがより好ましい。

40

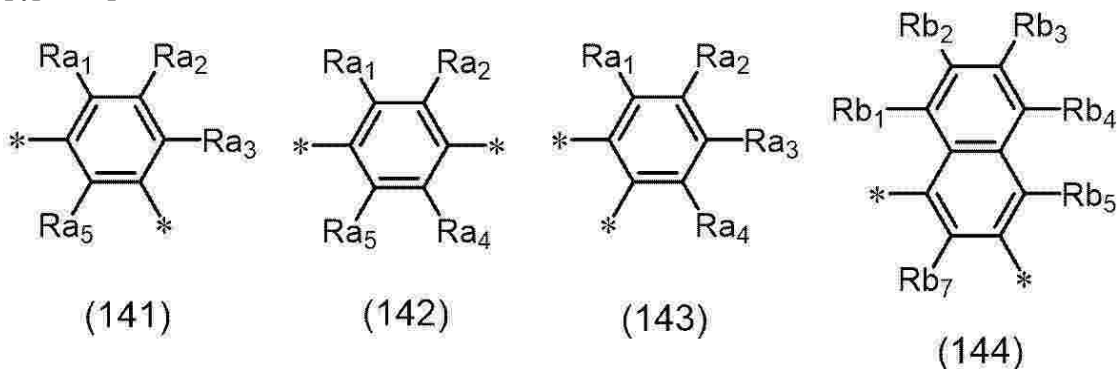
【 0 1 8 0 】

態様Aに係る化合物において、 L_1 及び L_2 は、それぞれ独立に、単結合、又は下記一般式(141)～(150)のいずれかで表される基であることが好ましい。

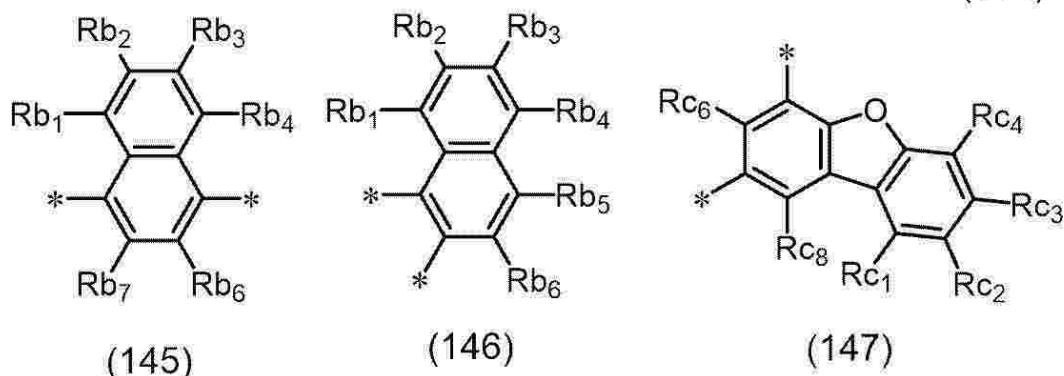
【 0 1 8 1 】

50

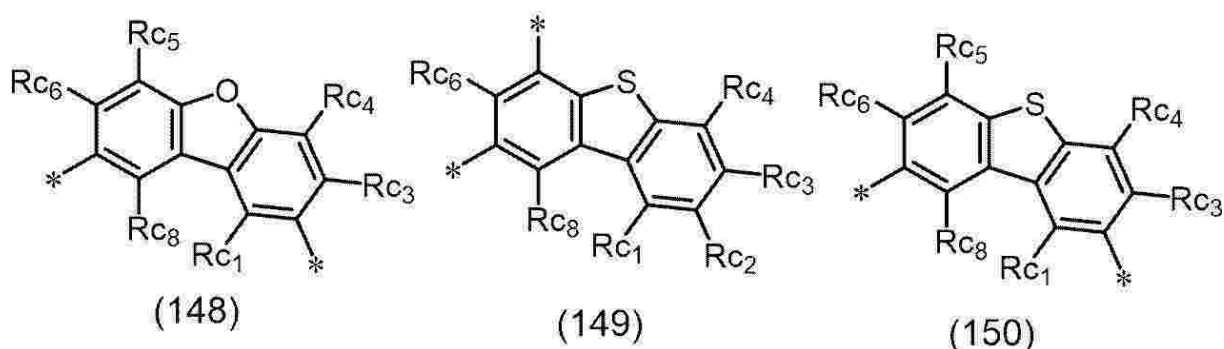
【化 3 6】



10



20



30

【0182】

(前記一般式(141)～(150)において、 $Ra_1 \sim Ra_5$ 、 $Rb_1 \sim Rb_7$ 、及び $Rc_1 \sim Rc_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、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、*は結合位置を表す。)

【0183】

態様Aに係る化合物において、 L_1 は、少なくとも1つの重水素原子を有することが好ましい。 L_2 は、少なくとも1つの重水素原子を有することが好ましい。

態様Aに係る化合物において、 $R_1 \sim R_4$ のうち少なくとも1つは、重水素原子であることが好ましい。 $R_1 \sim R_4$ のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての $R_1 \sim R_4$ のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子であることが好ましい。

40

前記一般式(141)～(150)において、 $Ra_1 \sim Ra_5$ 、 $Rb_1 \sim Rb_7$ 、及び $Rc_1 \sim Rc_8$ のうち少なくとも1つは、重水素原子であることが好ましい。

前記一般式(141)～(150)において、 $Ra_1 \sim Ra_5$ 、 $Rb_1 \sim Rb_7$ 、及び $Rc_1 \sim Rc_8$ のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての Ra 、 Rb 、 R_{100} 、 R_{200} 、 R_{15A} 及び R_{16A} のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子であることが好ましい。

【0184】

態様Aに係る化合物において、 $R_{102} \sim R_{119}$ 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1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～

50

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の複素環基であることが好ましい。

【0185】

態様Aに係る化合物において、 $R_{102} \sim R_{110}$ は、重水素原子であるか、又は $R_{111} \sim R_{119}$ は、重水素原子であることが好ましい。 $R_{102} \sim R_{119}$ は、重水素原子であることが好ましい。 $R_{102} \sim R_{119}$ のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての $R_{102} \sim R_{119}$ のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子であることが好ましい。

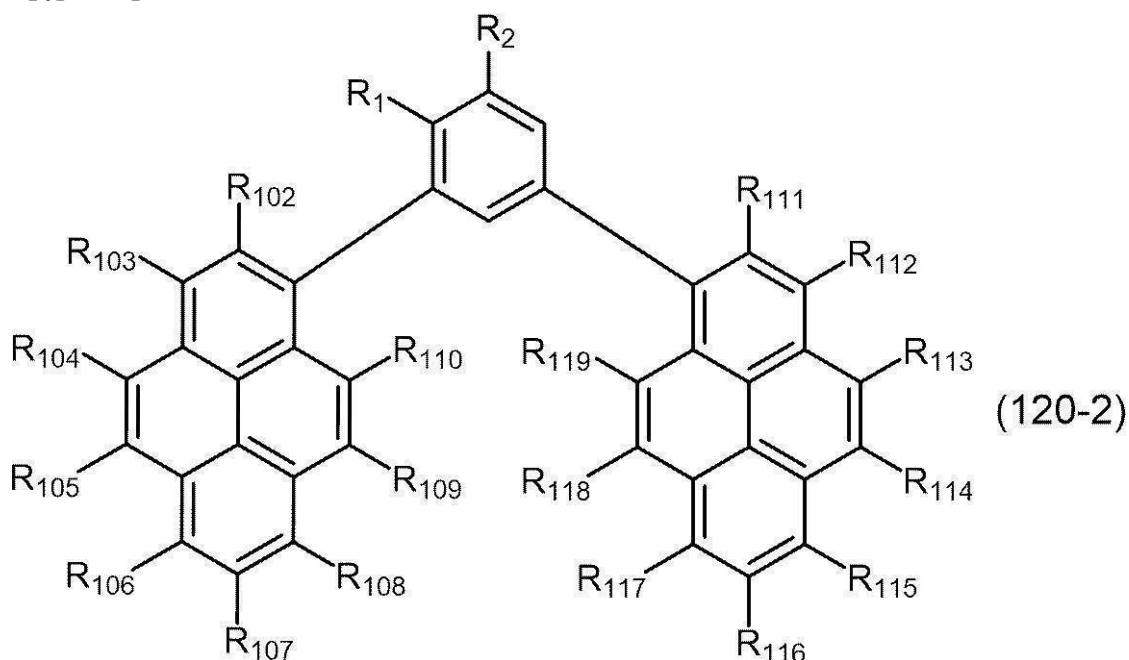
【0186】

〔態様Bに係る化合物〕

態様Bに係る化合物は、下記一般式(120-2)で表される化合物である。下記一般式(120-2)で表される化合物は、少なくとも1つの重水素原子を有する。

【0187】

〔化37〕



【0188】

(前記一般式(120-2)において、

R_1 及び R_2 の組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

ただし、 R_1 及び R_2 の組が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する場合における前記単環は、複素環ではなく、かつ R_1 及び R_2 の組が、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における前記縮合環は、複素環ではなく、

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 R_1 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環形成原子数5～50の複素環基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9-ジメチルフルオレニル基、又は置換もしくは無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基であり、

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_2 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環形成原子数5～50の複素環基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基、又は置換もしくは無置換の9,9'-ジフェニルフルオレニル基であり、

$R_{102} \sim R_{119}$ 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のシクロアルキル基、 $Si(R_x)(R_y)(R_z)$ 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、 $Si(R_x)(R_y)(R_z)$ における R_x 、 R_y 及び R_z 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。)

【0189】

態様Bに係る化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、2つのピレン環($R_{111} \sim R_{119}$ を有するピレン環及び $R_{102} \sim R_{110}$ を有するピレン環)を連結する基が含まれている炭素原子の総数は、21以下であることがより好ましい。

2つのピレン環を連結する基とは、前記一般式(120-2)中、 $R_1 \sim R_2$ を有するフェニレン基である。

【0190】

態様Bに係る化合物において、 R_1 及び R_2 の組が互いに結合しないことが好ましい。

【0191】

態様Bに係る化合物において、 R_1 及び R_2 の組が互いに結合しない場合、前記一般式(120-2)で表される化合物は、下記一般式(121)又は(122)で表されることが好ましい。

【0192】

10

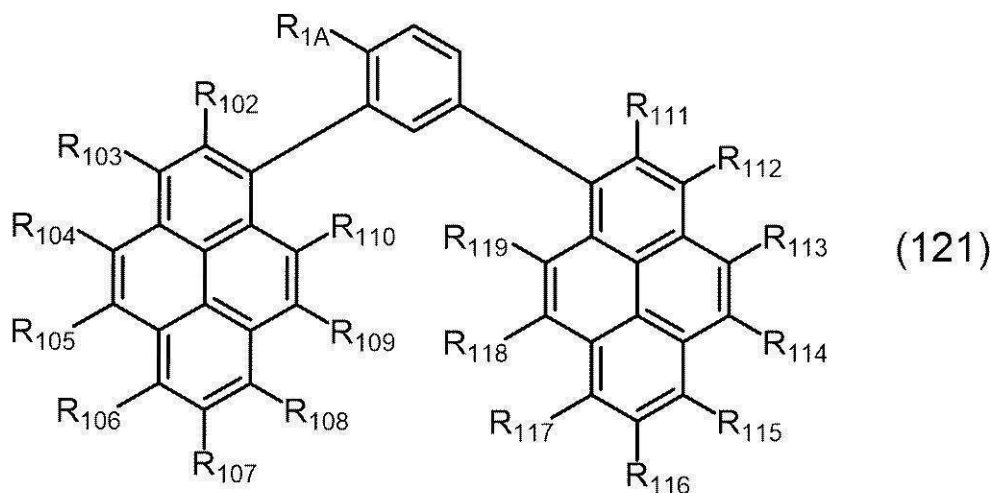
20

30

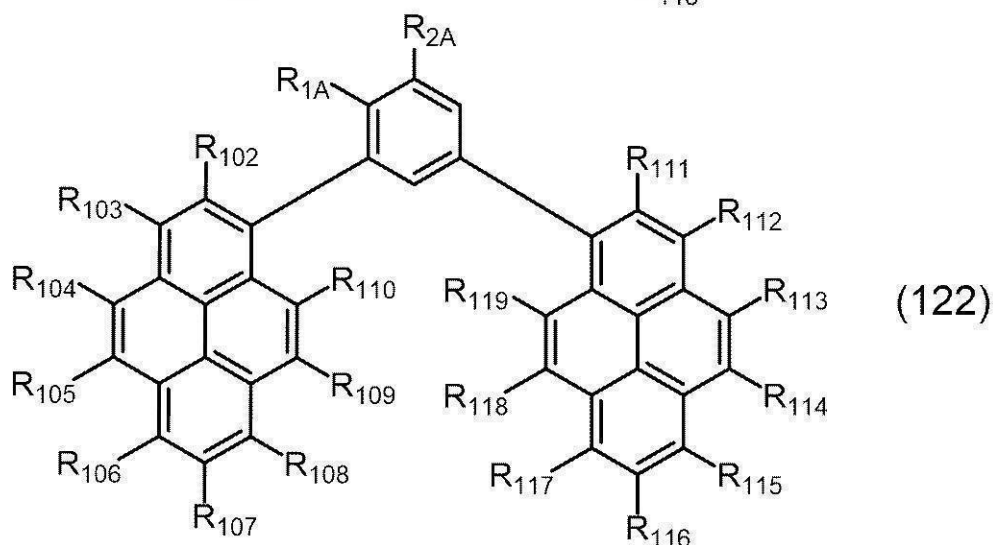
40

50

【化 3 8】



10



20

【 0 1 9 3】

(前記一般式(121)及び(122)において、 R_{1A} 及び R_{2A} は、それぞれ独立に、前記一般式(120-2)における R_1 及び R_2 と同義であり、ただし、 R_{1A} 及び R_{2A} は置換基であり、 $R_{102} \sim R_{119}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(120-2)における $R_{102} \sim R_{119}$ と同義である。)

30

【 0 1 9 4】

態様Bに係る化合物において、 R_1 は、置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジフェニルフルオレニル基、置換もしくは無置換のピリジル基、置換もしくは無置換のピリミジニル基、置換もしくは無置換のトリアジニル基、置換もしくは無置換のキノリル基、置換もしくは無置換のイソキノリル基、置換もしくは無置換のキナゾリニル基、置換もしくは無置換のベンゾイミダゾリル基、置換もしくは無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換の1-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の2-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の3-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の4-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換のベンゾカルバゾリル基、置換もしくは無置換のアザカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジアザカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジベ

40

50

ンゾフラニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾチオフェニル基、又は置換もしくは無置換のジアザジベンゾチオフェニル基であることが好ましい。

【0195】

態様Bに係る化合物において、 R_2 は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジフェニルフルオレニル基、置換もしくは無置換のピリジル基、置換もしくは無置換のピリミジニル基、置換もしくは無置換のトリアジニル基、置換もしくは無置換のキノリル基、置換もしくは無置換のイソキノリル基、置換もしくは無置換のキナゾリニル基、置換もしくは無置換のベンゾイミダゾリル基、置換もしくは無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換の1-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の2-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の3-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の4-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換のベンゾカルバゾリル基、置換もしくは無置換のアザカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジアザカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾチ

【0196】

態様Bに係る化合物において、 R_1 及び R_2 の組が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することも好ましい。

態様Bに係る化合物において、 R_1 及び R_2 のうち少なくとも1つは、重水素原子であることが好ましい。 R_1 及び R_2 のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての R_1 及び R_2 のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子であることが好ましい。

【0197】

態様Bに係る化合物において、 R_1 及び R_2 の組が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する場合における前記単環又は前記縮合環は、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、置換もしくは無置換のアントラセン環、置換もしくは無置換のフェナントレン環、置換もしくは無置換のクリセン環、置換もしくは無置換のフルオレン環、置換もしくは無置換の9,9'-スピロビフルオレン環、置換もしくは無置換の9,9'-ジフェニルフルオレン環、又は置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレン環であることが好ましい。

【0198】

態様Bに係る化合物において、 R_1 及び R_2 の組が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する場合、前記一般式(120-2)で表される化合物は、下記一般式(123)又は(124)で表されることが好ましい。

【0199】

10

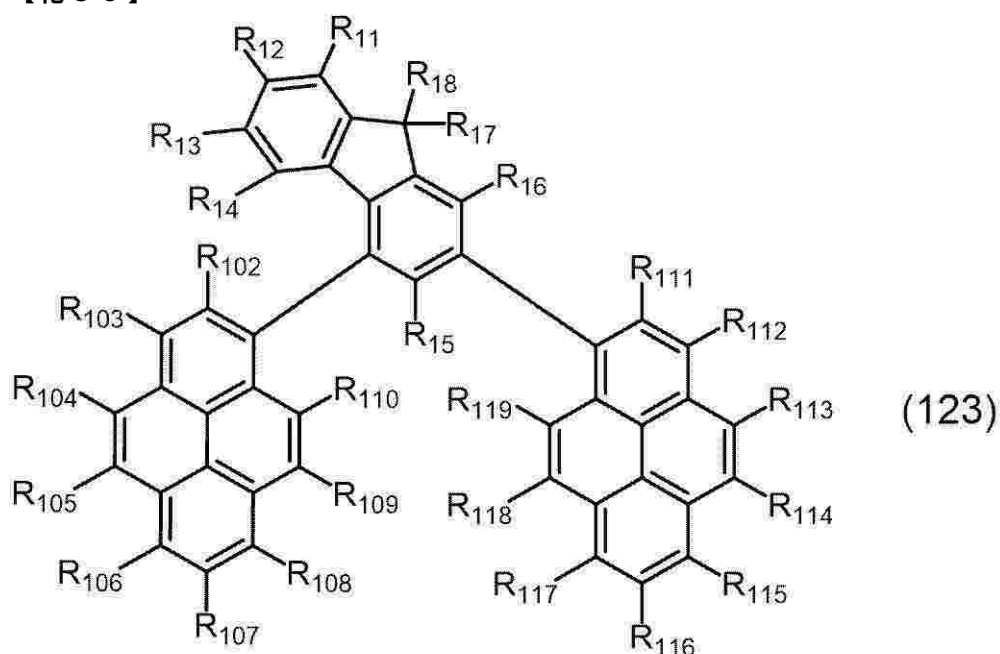
20

30

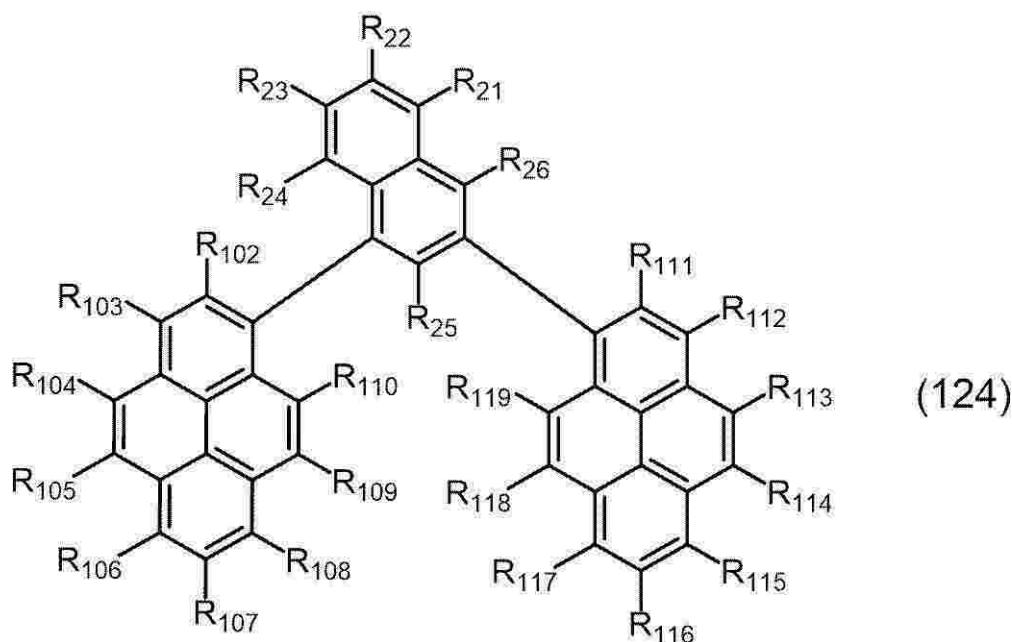
40

50

【化 3 9】



10



20

30

【 0 2 0 0 】

(前記一般式 (123) 及び (124) において、

R₁₀₂～R₁₁₉は、それぞれ独立に、前記一般式 (120-2) における R₁₀₂～R₁₁₉と同義であり、

R₁₁～R₁₄のうちの隣接する2つ以上からなる組、並びに R₁₇及び R₁₈からなる組の1組以上が、

40

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、

R₂₁～R₂₄及び R₂₆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 R₁₁～R₁₈及び R₂₁～R₂₆は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは

50

無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9' - スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9 - ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9 - ジフェニルフルオレニル基である。)

前記一般式 (121) ～ (124) において、 $R_{1A} \sim R_{2A}$ 、 $R_{11} \sim R_{16}$ 、及び $R_{21} \sim R_{26}$ のうち少なくとも 1 つは、重水素原子であることが好ましい。

前記一般式 (121) ～ (124) において、 $R_{1A} \sim R_{2A}$ 、 $R_{11} \sim R_{16}$ 、及び $R_{21} \sim R_{26}$ のうち 1 つ以上が置換基であり、置換基としての $R_{1A} \sim R_{2A}$ 、 $R_{11} \sim R_{16}$ 、及び $R_{21} \sim R_{26}$ のうち少なくとも 1 つは、それぞれ独立に、1 つ以上の重水素原子であることが好ましい。

【0201】

態様 B に係る化合物において、 $R_{102} \sim R_{119}$ 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 ～ 18 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 18 のシクロアルキル基、 $Si(R_x)(R_y)(R_z)$ で表される基、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 の複素環基であることが好ましい。 $Si(R_x)(R_y)(R_z)$ における R_x 、 R_y 及び R_z は、それぞれ独立に、無置換の炭素数 1 ～ 18 のアルキル基、又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。

態様 B に係る化合物において、 $R_{102} \sim R_{119}$ は、水素原子であることが好ましい。

態様 B に係る化合物において、 $R_{102} \sim R_{119}$ は、重水素原子であるか、又は $R_{111} \sim R_{119}$ は、重水素原子であることが好ましい。 $R_{102} \sim R_{119}$ は、重水素原子であることが好ましい。 $R_{102} \sim R_{119}$ のうち 1 つ以上が置換基であり、置換基としての $R_{102} \sim R_{119}$ のうち少なくとも 1 つは、それぞれ独立に、1 つ以上の重水素原子であることが好ましい。

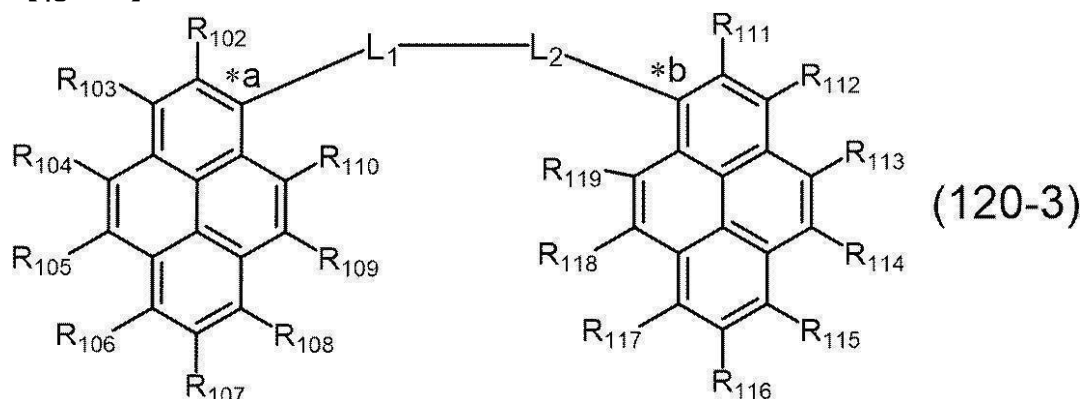
【0202】

〔態様 C に係る化合物〕

態様 C に係る化合物は、下記一般式 (120-3) で表される化合物である。下記一般式 (120-3) で表される化合物は、少なくとも 1 つの重水素原子を有する。

【0203】

【化 40】



(前記一般式 (120-3) において、 L_1 は、下記一般式 (11) ～ (13) のいずれかで表される基であり、 L_2 は、下記一般式 (11A) ～ (13A) のいずれかで表される基であり、

$R_{102} \sim R_{119}$ 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 のシクロアルキル基、 $Si(R_x$

) (R_y) (R_z) 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、

S i (R_x) (R_y) (R_z) における R_x、R_y 及び R_z は、それぞれ独立に、

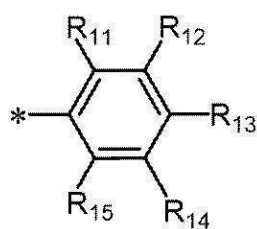
置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基であり、

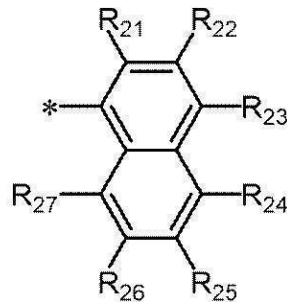
R₁₀₂～R₁₁₉ における「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9'-スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9'-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9'-ジフェニルフルオレニル基である。) 10

【0204】

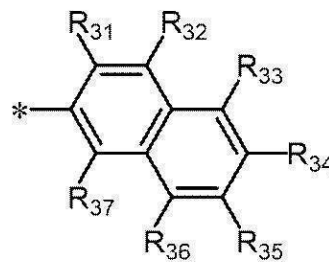
【化41】



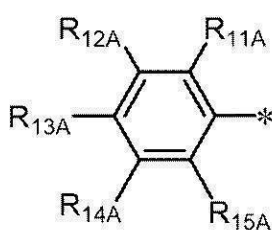
(11)



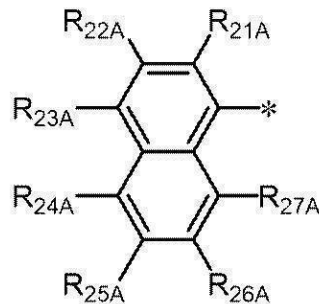
(12)



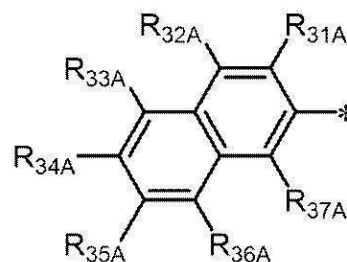
(13)



(11A)



(12A)



(13A)

【0205】

(前記一般式 (11)～(13) 及び (11A)～(13A) において、R₁₁～R₁₅、R₂₁～R₂₇、R₃₁～R₃₇、R_{11A}～R_{15A}、R_{21A}～R_{27A}、及び R_{31A}～R_{37A} 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 のシクロアルキル基、S i (R_x) (R_y) (R_z) 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、S i (R_x) (R_y) (R_z) における R_x、R_y 及び R_z 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 のアリール基であり、 40

R₁₁～R₁₅、R₂₁～R₂₇、及び R₃₁～R₃₇ 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、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環形成原子数 5～50 の複素環基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もし 50

くは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9, 9'-スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の9, 9-ジメチルフルオレニル基、又は置換もしくは無置換の9, 9-ジフェニルフルオレニル基であり、

$R_{11} \sim R_{15}$ 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せず、かつ置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、

$R_{11A} \sim R_{15A}$ 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せず、かつ置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、

$R_{21} \sim R_{27}$ 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せず、かつ置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、

$R_{21A} \sim R_{27A}$ 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せず、かつ置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、

$R_{31} \sim R_{37}$ 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せず、かつ置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、

$R_{31A} \sim R_{37A}$ 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せず、かつ置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、

L_1 としての前記一般式(11)～(13)中、*は、前記一般式(120-3)における*aとの結合位置を表し、 $R_{11} \sim R_{15}$ 、 $R_{21} \sim R_{27}$ 、及び $R_{31} \sim R_{37}$ のいずれか1つは、 L_2 に結合する単結合であり、

L_2 としての前記一般式(11A)～(13A)中、*は、前記一般式(120-3)における*bとの結合位置を表し、 $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれか1つは、 L_1 に結合する単結合であり、

ただし、 L_1 における R_{12} 又は R_{14} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の R_{11A} 、 R_{13A} 、 R_{15A} 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{11} 又は R_{15} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の R_{12A} 、 R_{13A} 、 R_{14A} 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{13} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の R_{11A} 、 R_{12A} 、 R_{14A} 、 R_{15A} 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{21} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{22A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{22} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 R_{21A} 、 $R_{23A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{23} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{22A}$ 、 $R_{24A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{24} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{23A}$ 、 $R_{25A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{25} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{24A}$ 、 $R_{26A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{26} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{25A}$ 、 R_{27A} 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{27} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{26A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{31} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{32A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{32} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、 R_{31A} 及び $R_{33A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{33} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、 $R_{31A} \sim R_{32A}$ 及び $R_{34A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{34} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、 $R_{31A} \sim R_{33A}$ 及び $R_{35A} \sim R_{37A}$ のいずれかいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{35} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、 $R_{31A} \sim R_{34A}$ 及び $R_{36A} \sim R_{37A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{36} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、 $R_{31A} \sim R_{35A}$ 及び R_{37A} のいずれかが L_1 と結合する単結合であり、

L_1 における R_{37} が、 L_2 と結合する単結合のとき、 L_2 の $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{36A}$ のいずれかが L_1 と結合する単結合である。）

【0206】

態様Cに係る化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果をより発現する観点から、2つのピレン環（ $R_{111} \sim R_{119}$ を有するピレン環及び $R_{102} \sim R_{110}$ を有するピレン環）を連結する基が含まれている炭素原子の総数は、21以下であることがより好ましい。

2つのピレン環を連結する基とは、前記一般式（120-3）中、 $-L_1-L_2-$ で表される基である。

【0207】

態様Cに係る化合物において、 $-L_1-L_2-$ は、下記一般式（13-1）～（13-69）のいずれかで表される基であることが好ましい。

【0208】

10

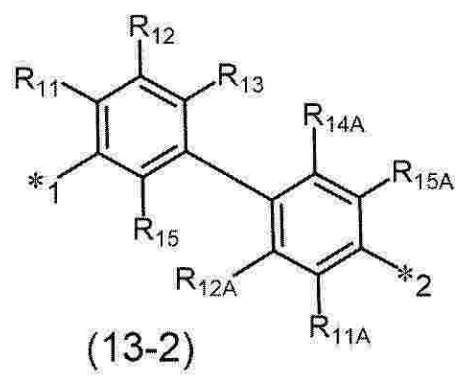
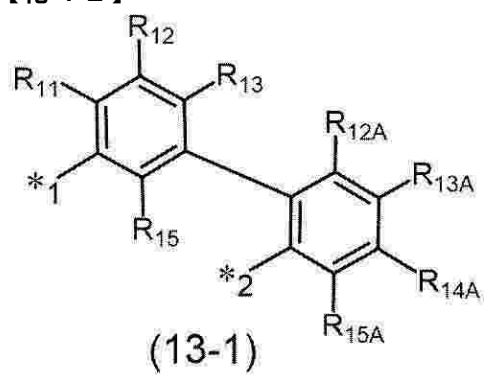
20

30

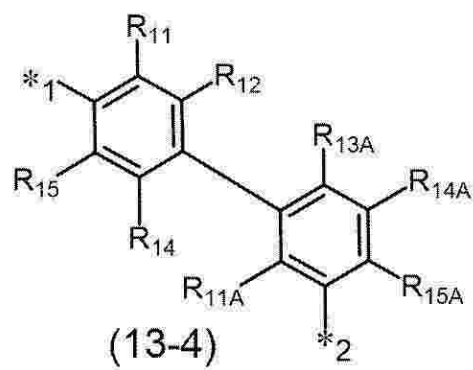
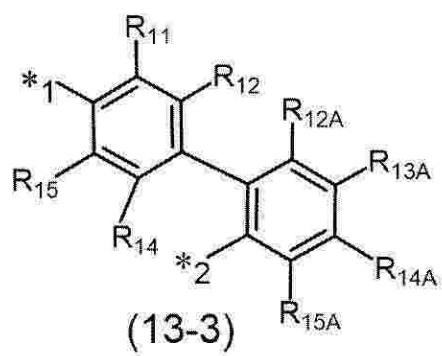
40

50

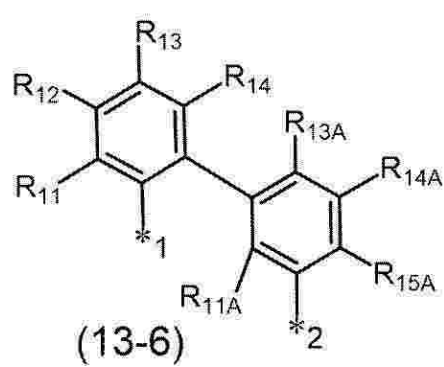
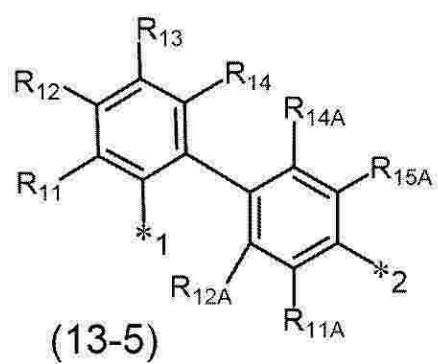
【化 4 2】



10



20



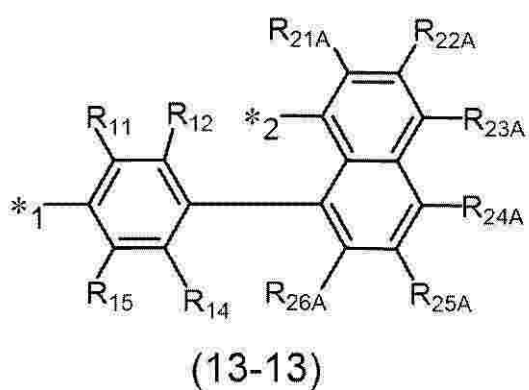
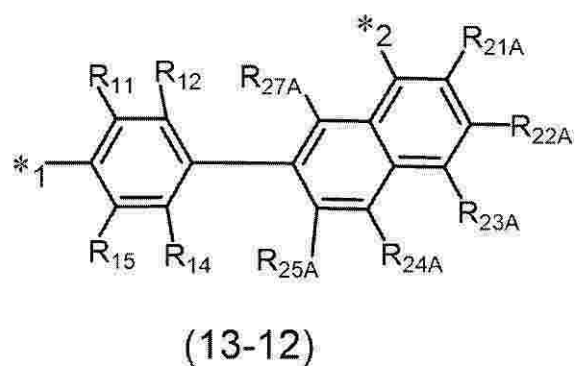
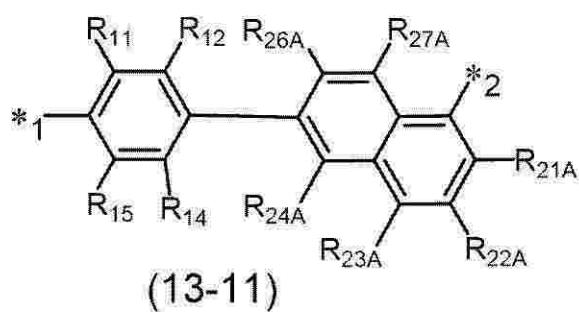
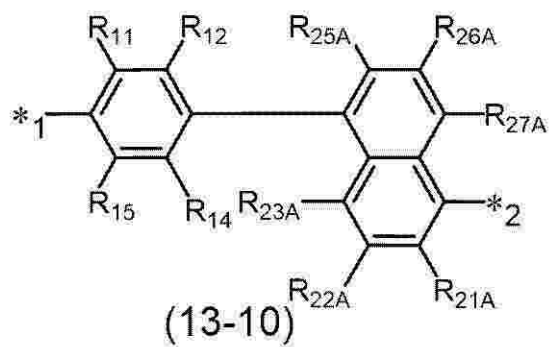
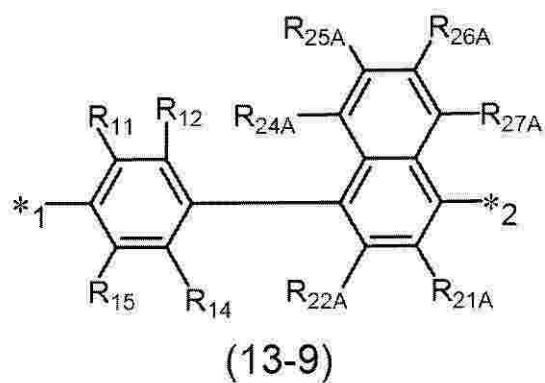
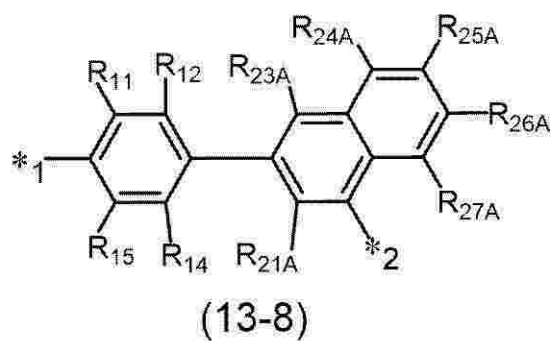
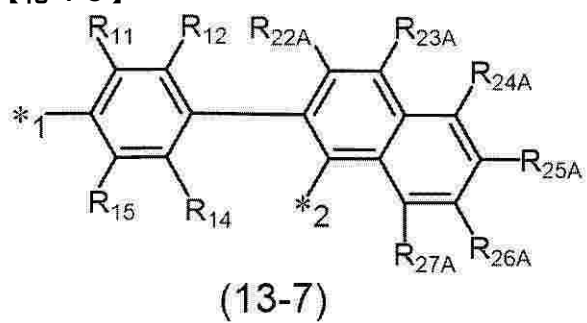
30

【 0 2 0 9 】

40

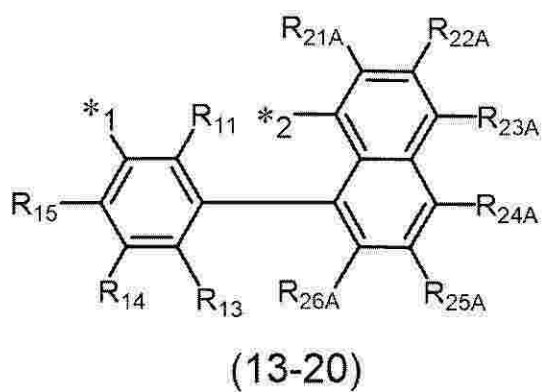
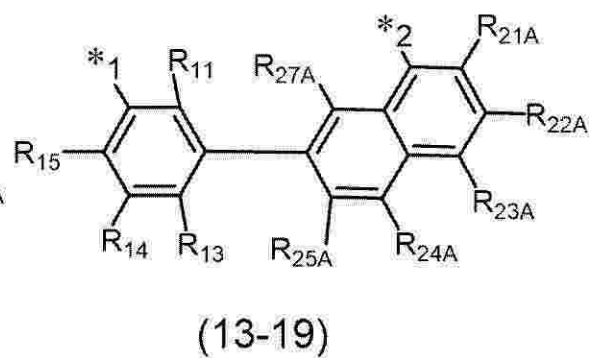
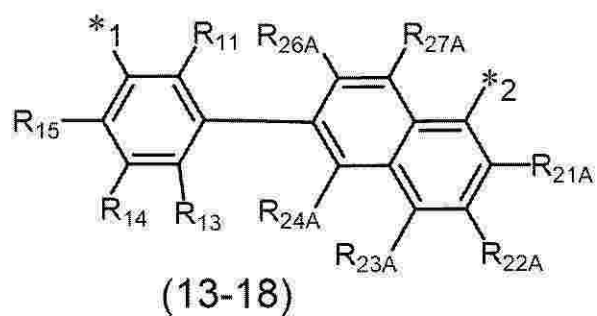
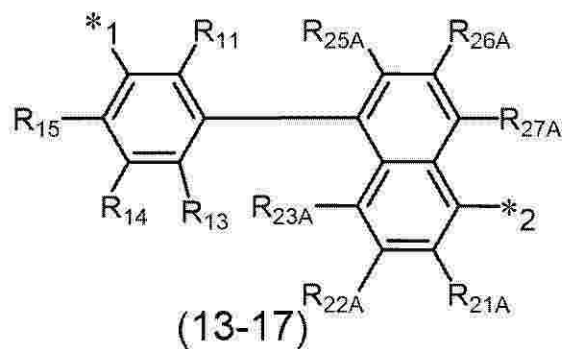
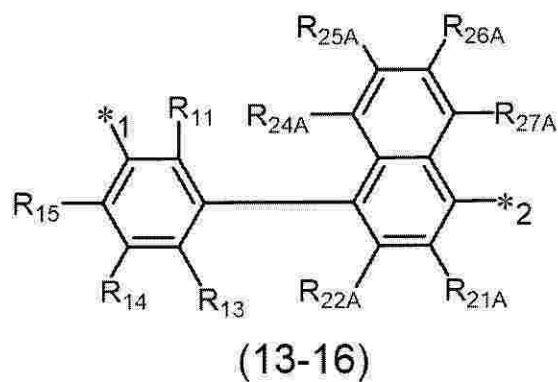
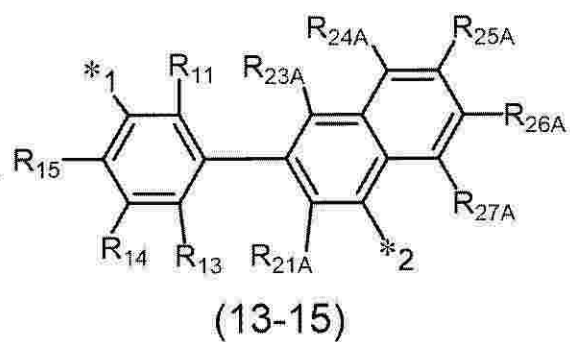
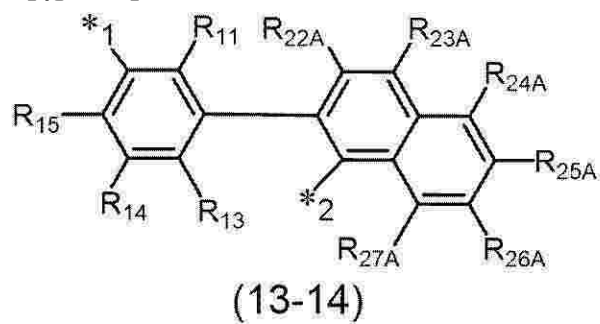
50

【化 4 3】



【 0 2 1 0 】

【化 4 4】



【 0 2 1 1 】

10

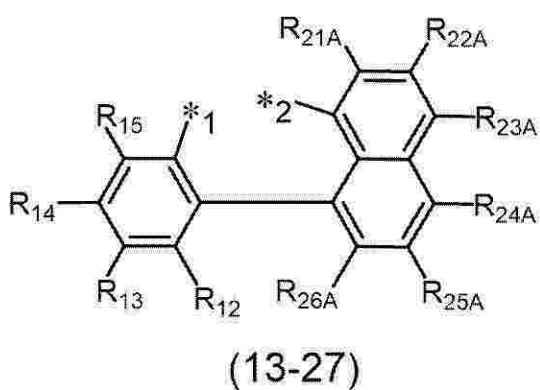
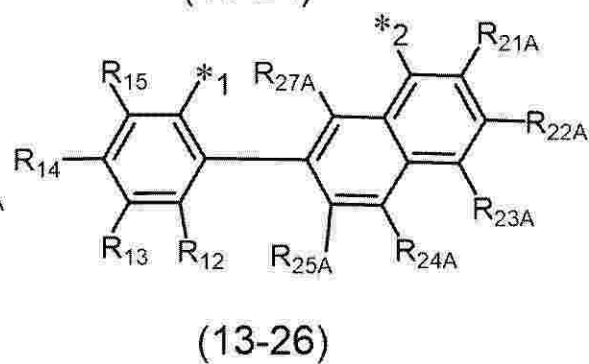
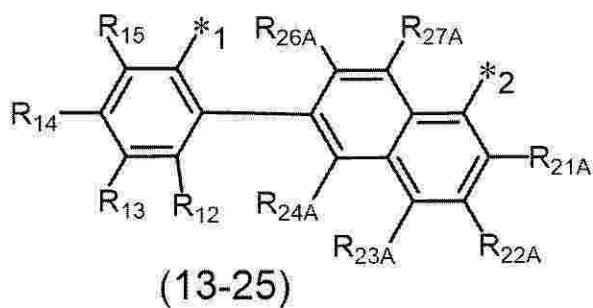
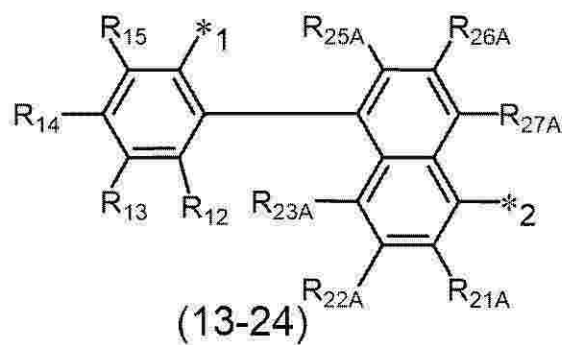
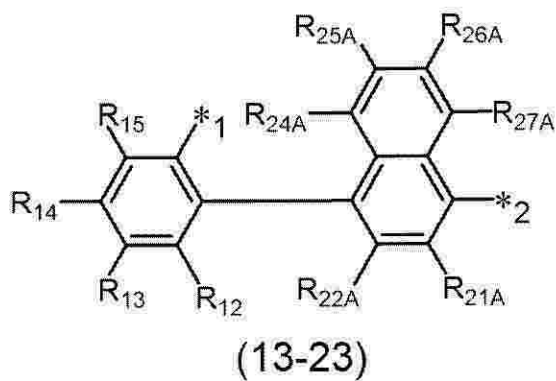
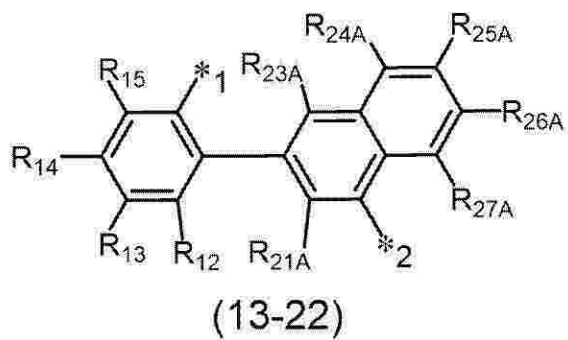
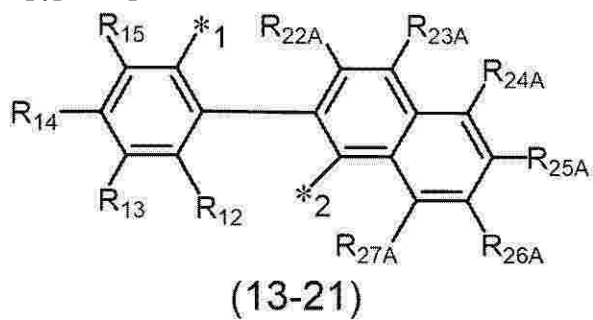
20

30

40

50

【化 4 5】



【 0 2 1 2 】

10

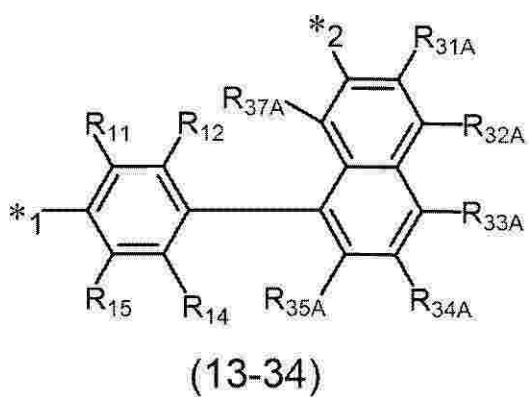
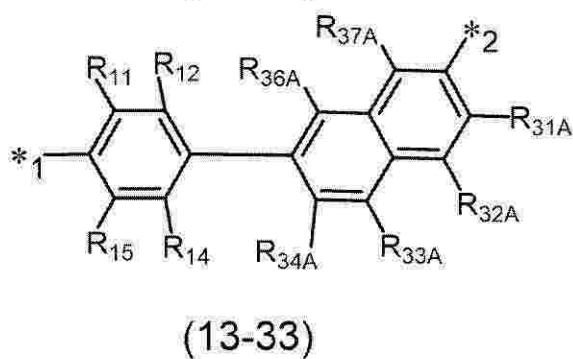
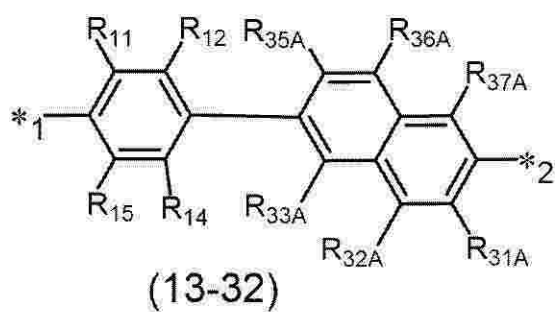
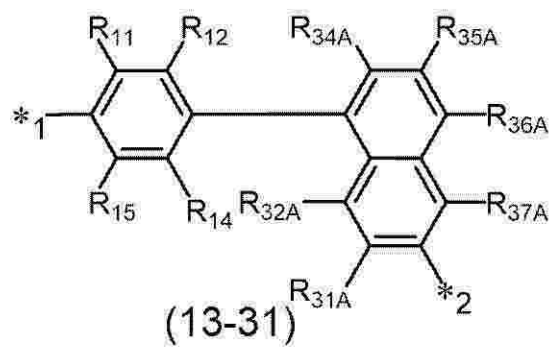
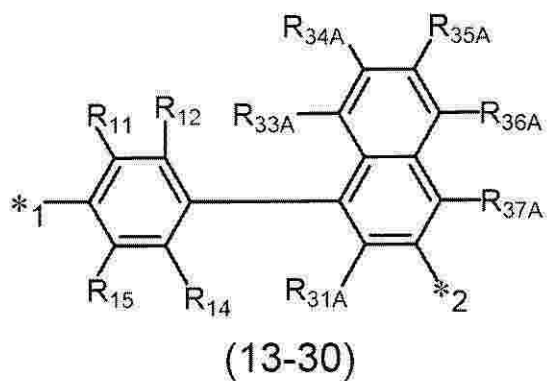
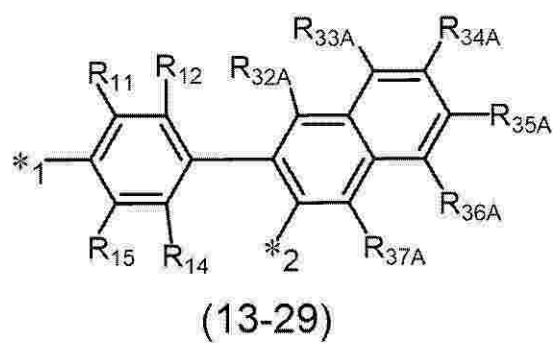
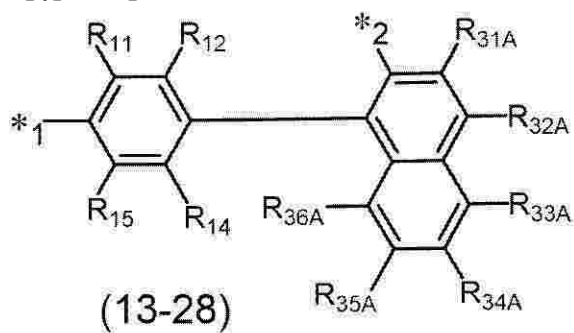
20

30

40

50

【化 4 6】



【 0 2 1 3 】

10

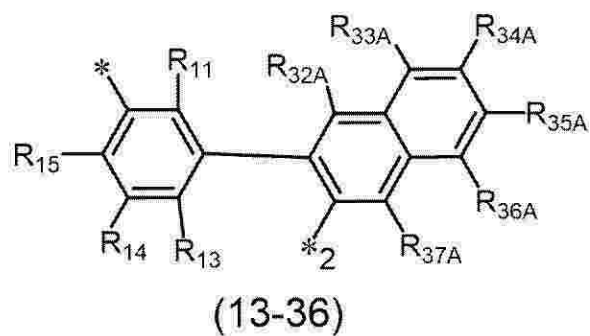
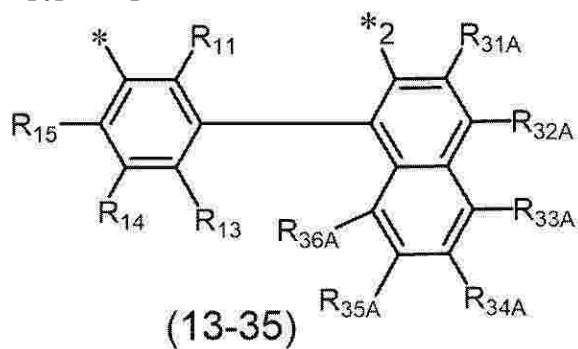
20

30

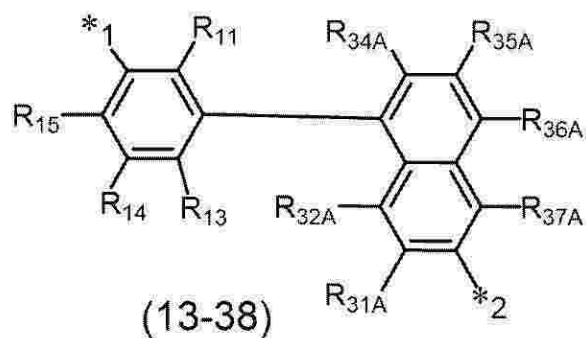
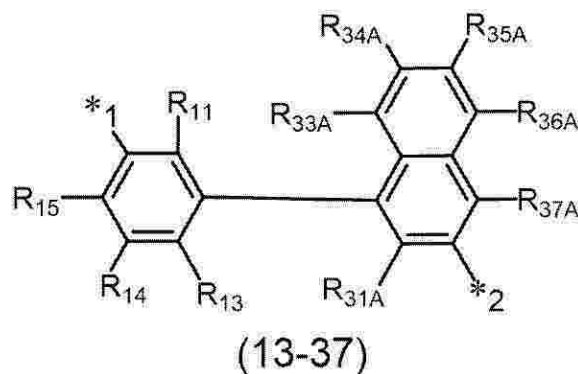
40

50

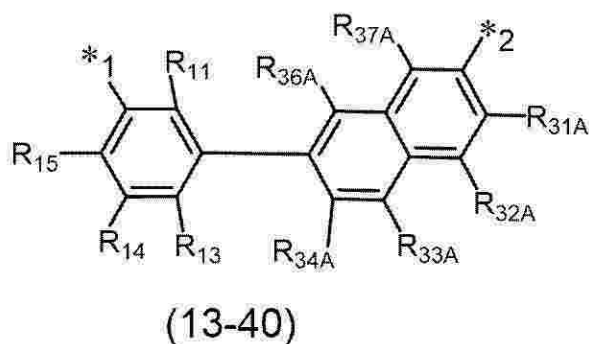
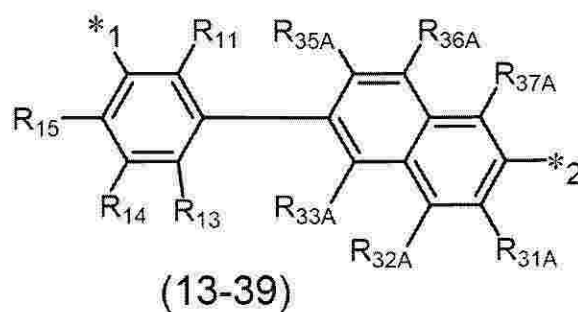
【化 4 7】



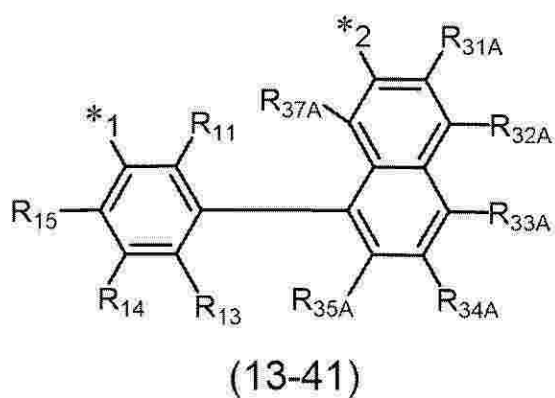
10



20



30

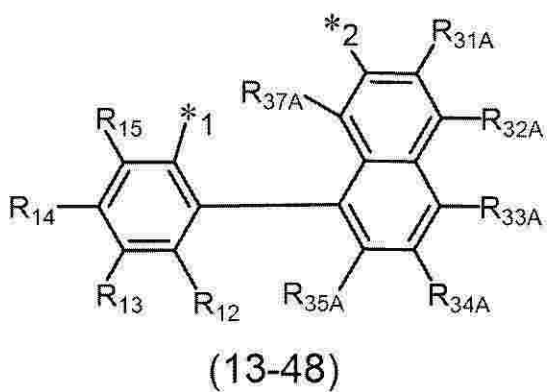
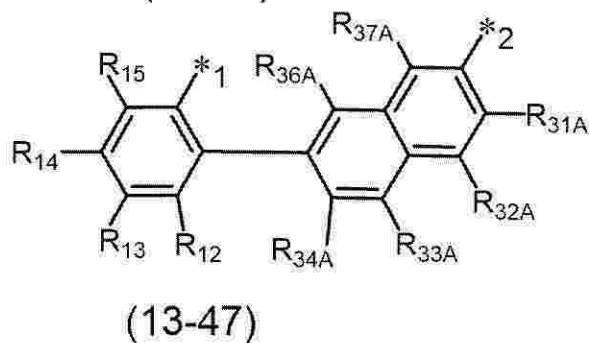
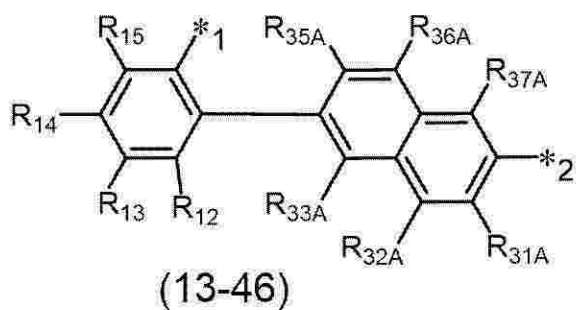
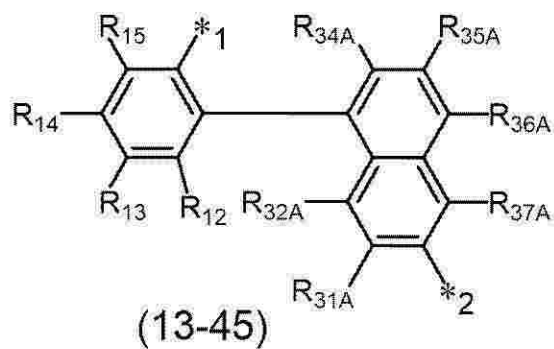
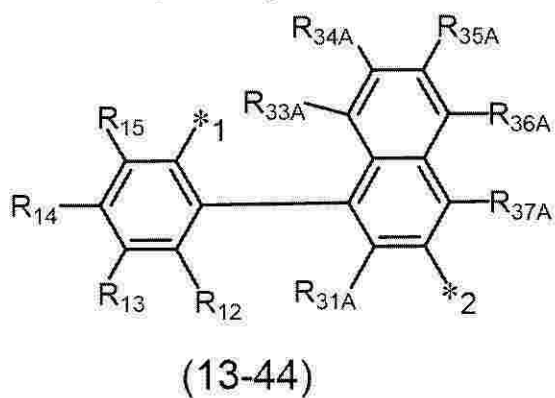
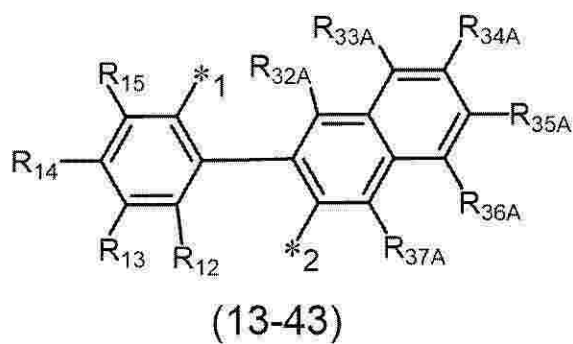
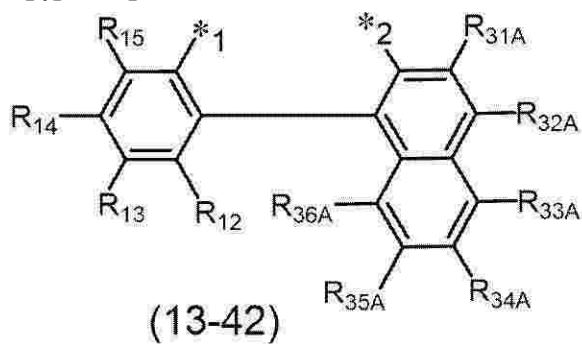


40

【 0 2 1 4 】

50

【化 4 8】



【 0 2 1 5 】

10

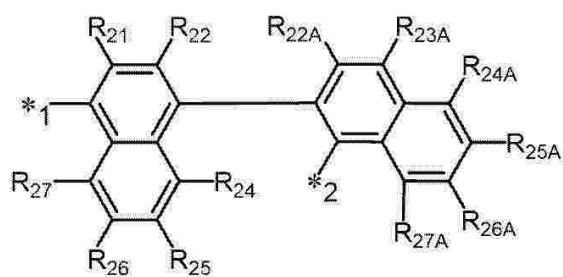
20

30

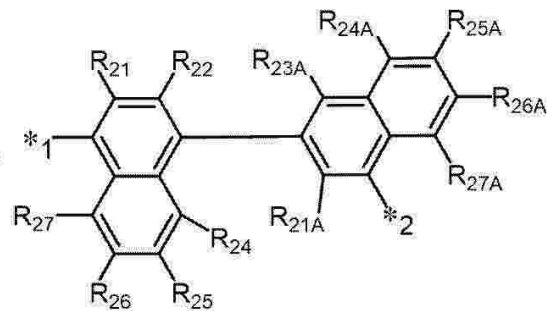
40

50

【化 4 9】

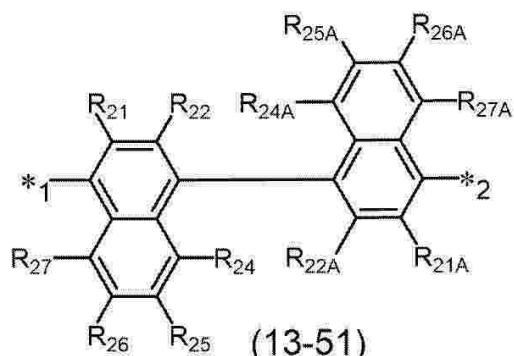


(13-49)

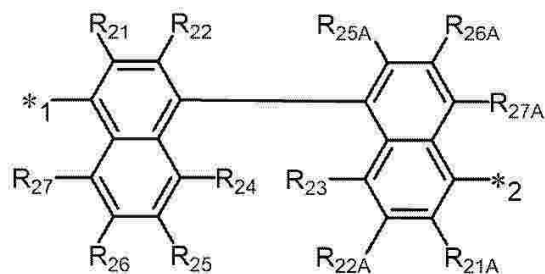


(13-50)

10

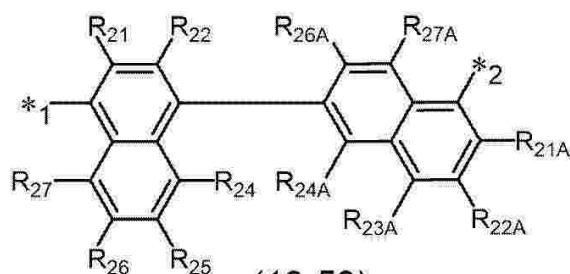


(13-51)

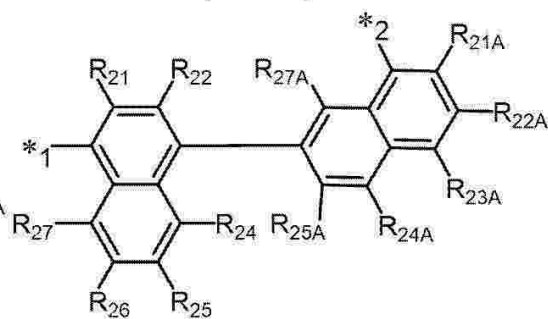


(13-52)

20

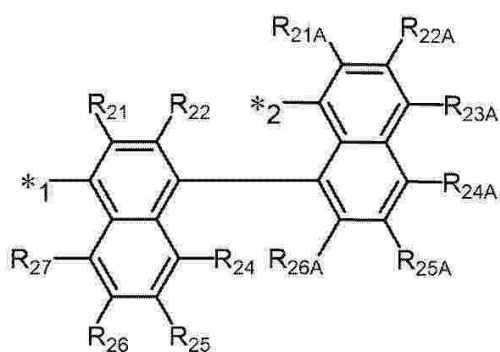


(13-53)



(13-54)

30



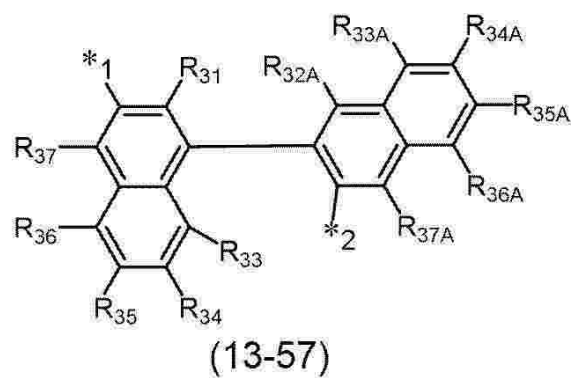
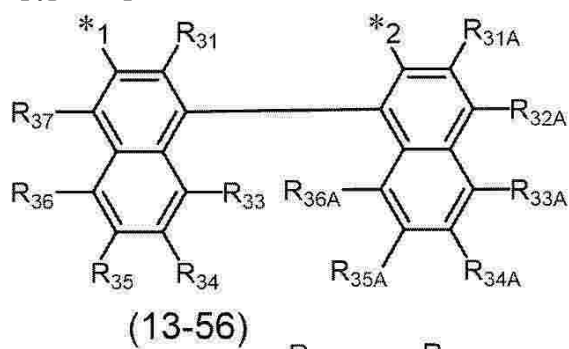
(13-55)

40

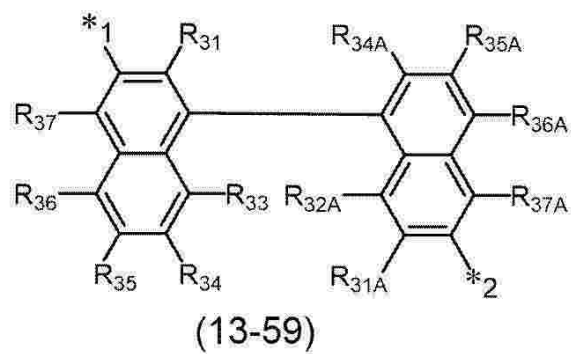
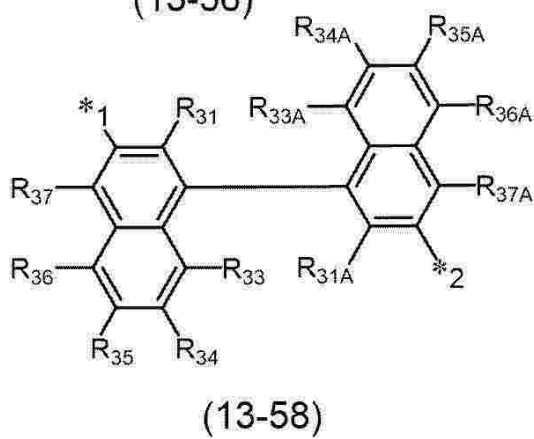
【 0 2 1 6】

50

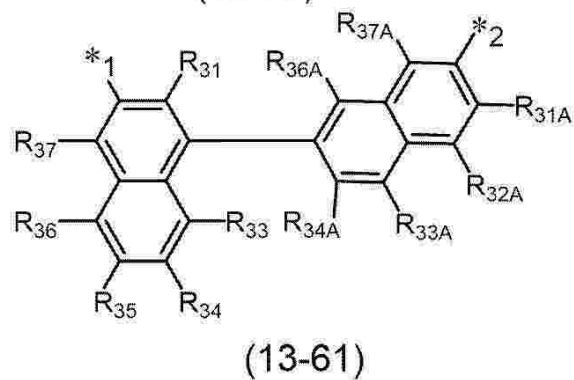
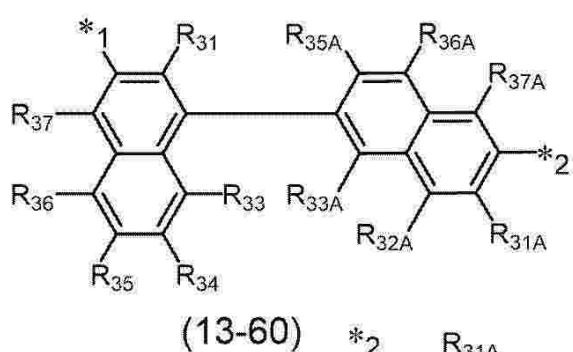
【化 5 0】



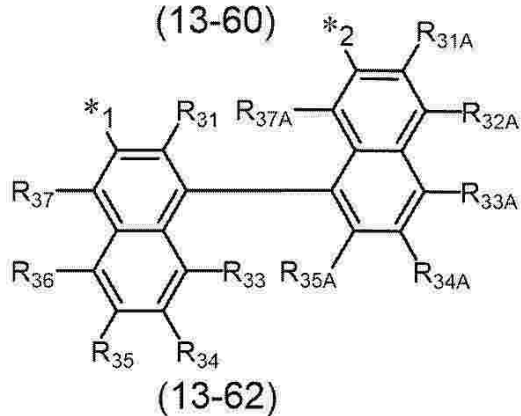
10



20



30

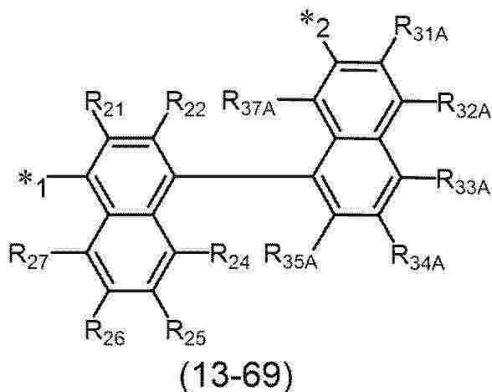
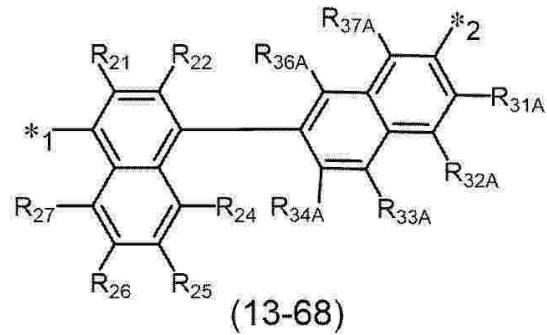
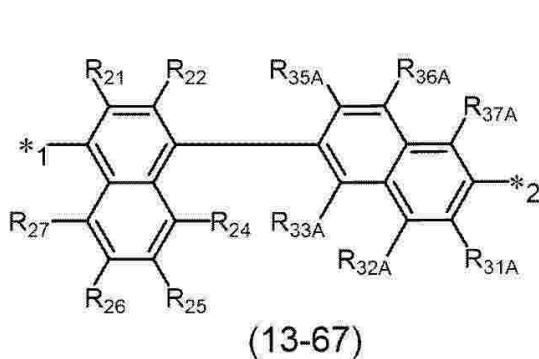
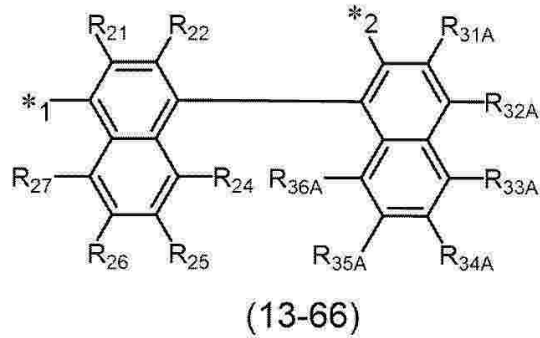
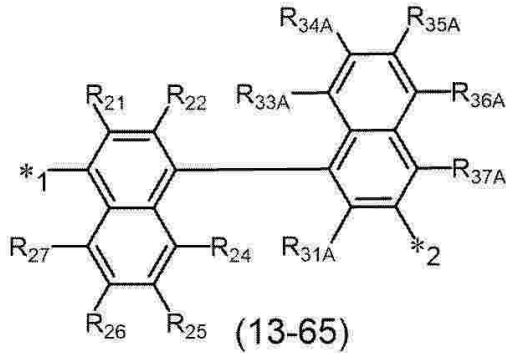
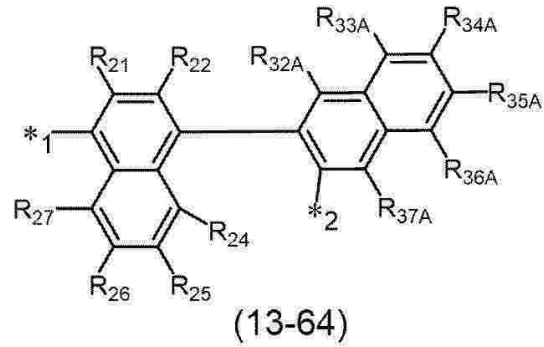
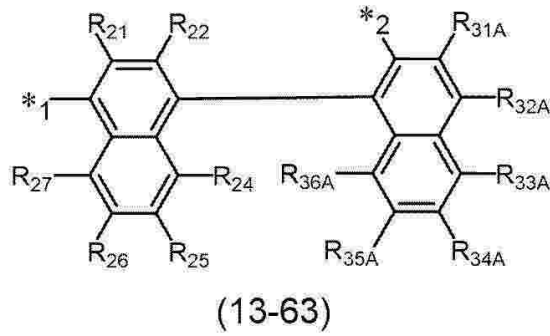


40

【 0 2 1 7】

50

【化 5 1】



【0218】

(前記一般式(13-1)～(13-69)において、 R_{11} ～ R_{15} 、 R_{21} ～ R_{27} 、 R_{31} ～ R_{37} 、 R_{11A} ～ R_{15A} 、 R_{21A} ～ R_{27A} 、及び R_{31A} ～ R_{37A} は、それぞれ独立に、前記一般式(11)～(13)及び(11A)～(13A)における R_{11} ～ R_{15} 、 R_{21} ～ R_{27} 、 R_{31} ～ R_{37} 、 R_{11A} ～ R_{15A} 、 R_{21A} ～ R_{27A} 、及び R_{31A} ～ R_{37A} と同義であり、前記一般式(13-1)～(13-69)における*1は、前記一般式(120-3)における*aとの結合位置を表し、*2は、前記一般式(120-3)における*bとの結合位置を表す。)

【0219】

10

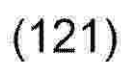
20

30

40

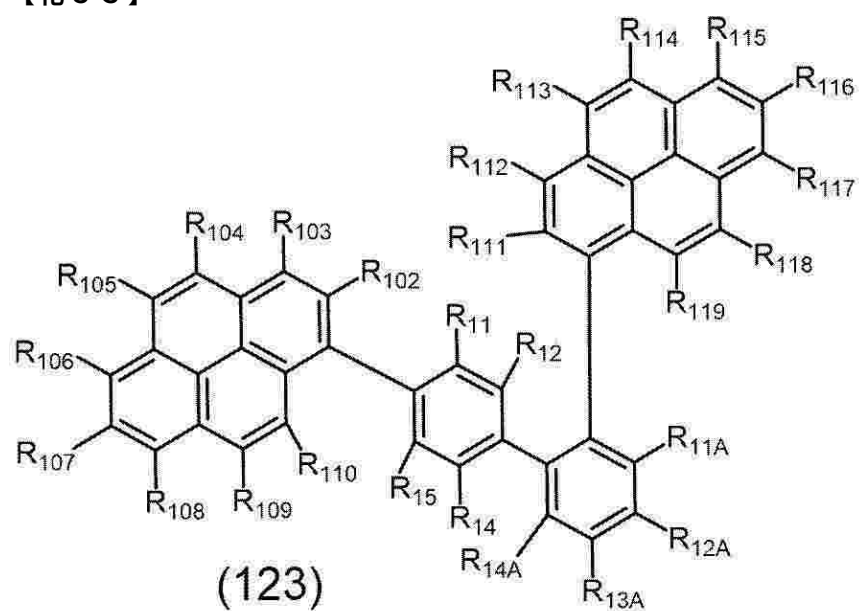
50

【化 5 2】

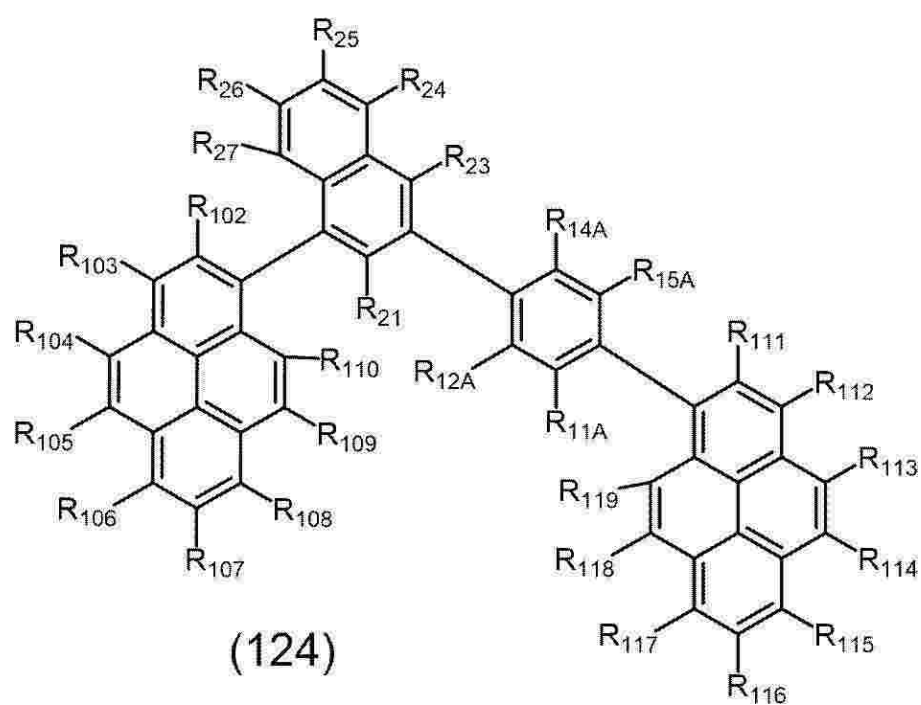


【 0 2 2 1 】

【化 5 3】



(123)



(124)

【 0 2 2 2】

10

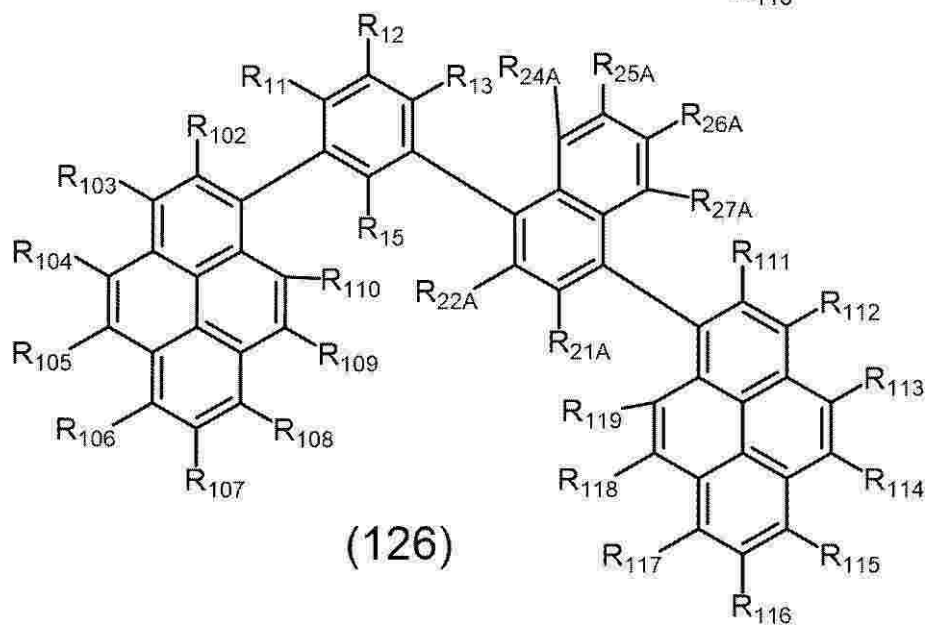
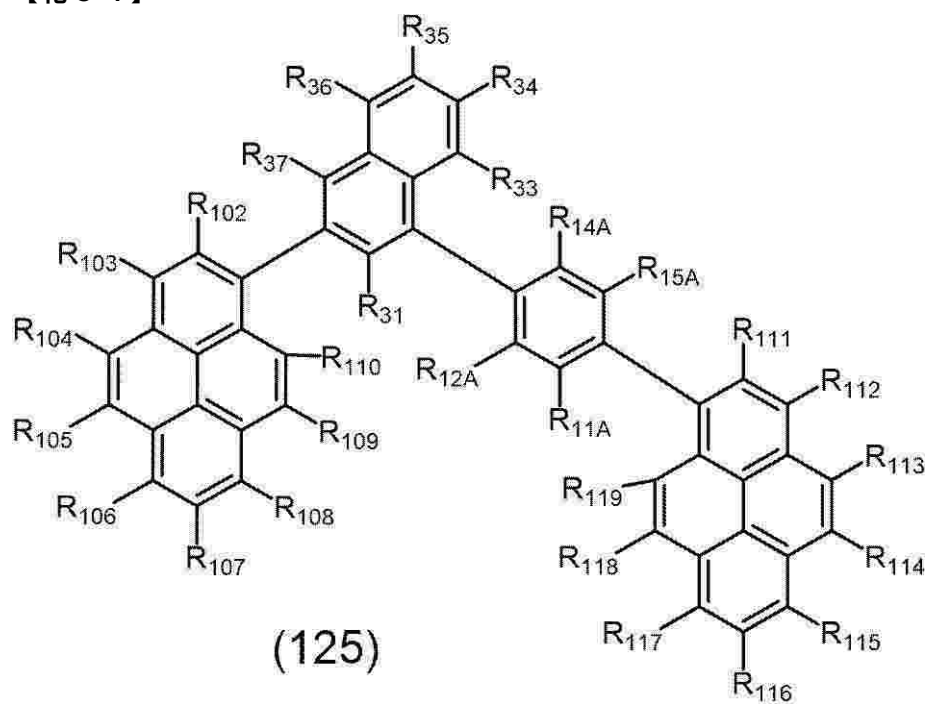
20

30

40

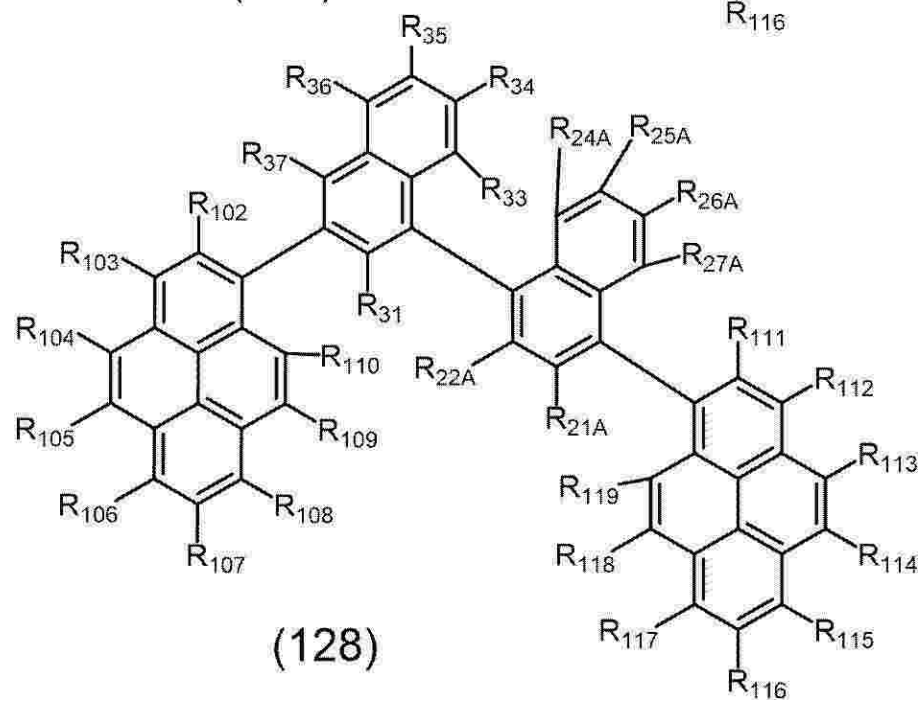
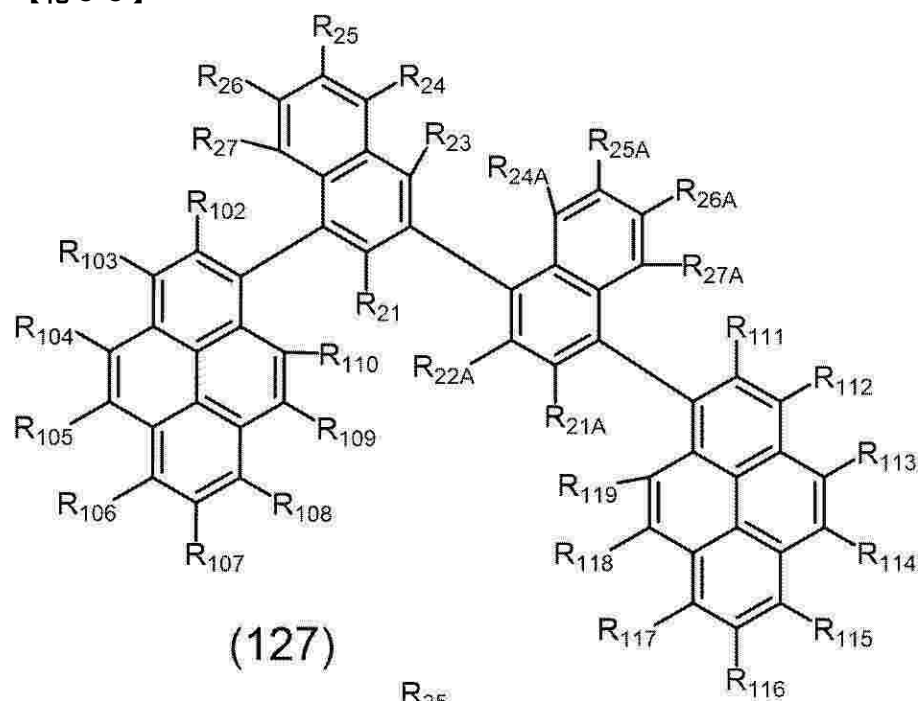
50

【化 5 4】



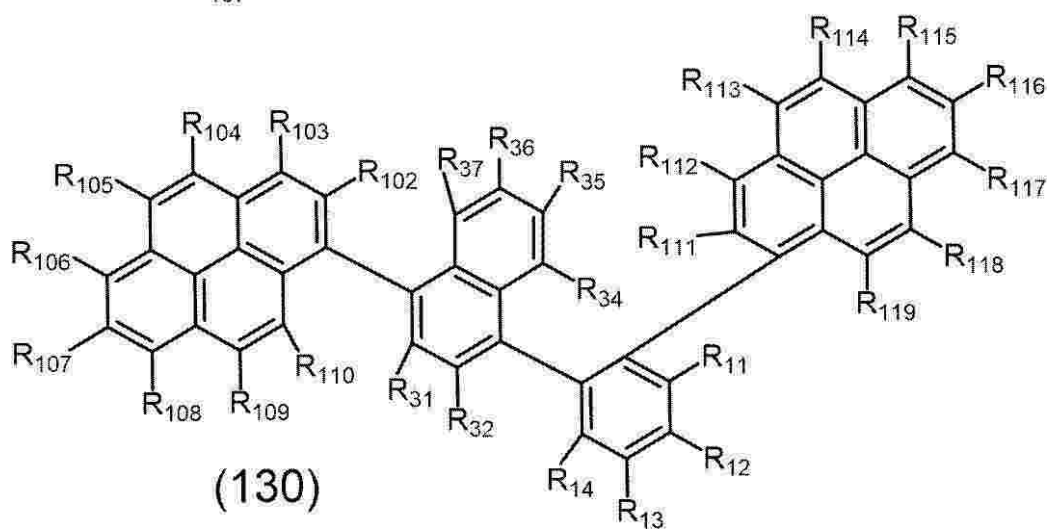
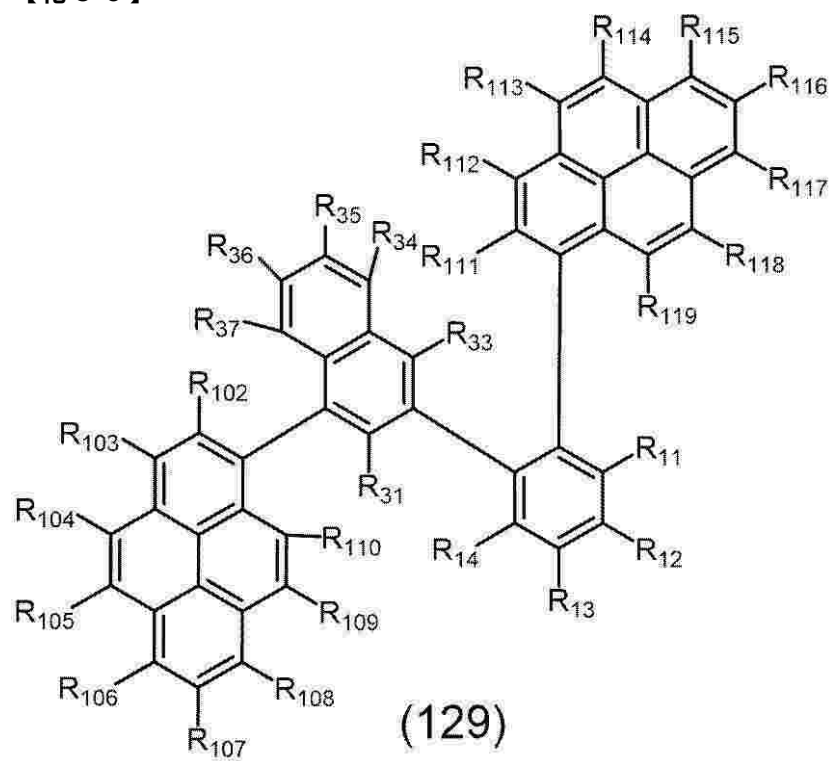
【 0 2 2 3 】

【化 5 5】



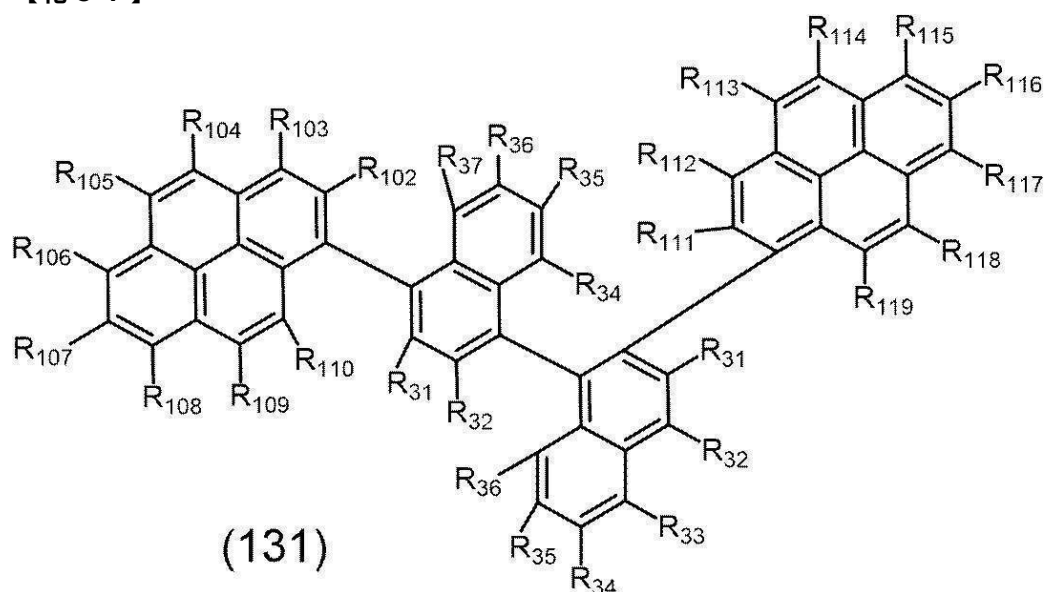
【 0 2 2 4】

【化 5 6】



【 0 2 2 5】

【化 5 7】



【0226】

(前記一般式(121)～(131)において、

R₁₁～R₁₅、R₂₁～R₂₇、R₃₁～R₃₇、R_{11A}～R_{15A}、R_{21A}～R_{27A}、及びR_{31A}～R_{37A}は、それぞれ独立に、前記一般式(11)～(13)及び(11A)～(13A)におけるR₁₁～R₁₅、R₂₁～R₂₇、R₃₁～R₃₇、R_{11A}～R_{15A}、R_{21A}～R_{27A}、及びR_{31A}～R_{37A}と同義であり、R₁₀₂～R₁₁₉は、それぞれ独立に、前記一般式(120-3)におけるR₁₀₂～R₁₁₉と同義である。)

【0227】

態様Cに係る化合物において、R₁₁～R₁₅、R₂₁～R₂₇、R₃₁～R₃₇、R_{11A}～R_{15A}、R_{21A}～R_{27A}、R_{31A}～R_{37A}、及びR₁₀₂～R₁₁₉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1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のシクロアルキル基、Si(R_x)(R_y)(R_z)で表される基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることが好ましい。Si(R_x)(R_y)(R_z)におけるR_x、R_y及びR_zは、それぞれ独立に、無置換の炭素数1～30のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることが好ましい。

【0228】

態様Cに係る化合物において、R₁₁～R₁₅、R₂₁～R₂₇、R₃₁～R₃₇、R_{11A}～R_{15A}、R_{21A}～R_{27A}、R_{31A}～R_{37A}、及びR₁₀₂～R₁₁₉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1～18のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-スビロピフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基、置換もしくは無置換のピリジル基、置換もしくは無置換のピリミジニル基、置換もしくは無置換のトリアジニル基、置換もしくは無置換のキノリル基、置換もしくは無置換のイソキノリル基、置換もしくは無置換のキナゾリニル基、置換もしくは無置換のベンゾイミダゾリル基、置換もしくは無置換のフェナントロリル基、置換もしくは無置換の1-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の2-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の3-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の4-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換のベンゾカルバゾリル基、置換もしくは無置換のアザカルバゾリル基、置換

もしくは無置換のジアザカルbazリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾチオフェニル基、又は置換もしくは無置換のジアザジベンゾチオフェニル基であることが好ましい。

【0229】

態様Cに係る化合物において、 $R_{11} \sim R_{15}$ 、 $R_{21} \sim R_{27}$ 、 $R_{31} \sim R_{37}$ 、 $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ 、及び $R_{102} \sim R_{119}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換の9,9-ジメチルフルオレニル基、又は置換もしくは無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基であることが好ましい。

10

【0230】

態様Cに係る化合物において、 $R_{11} \sim R_{15}$ 、 $R_{21} \sim R_{27}$ 、 $R_{31} \sim R_{37}$ 、 $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ は、水素原子であることが好ましい。

態様Cに係る化合物において、 $R_{11} \sim R_{15}$ 、 $R_{21} \sim R_{27}$ 、 $R_{31} \sim R_{37}$ 、 $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のうち少なくとも1つは、重水素原子であることが好ましい。 $R_{11} \sim R_{15}$ 、 $R_{21} \sim R_{27}$ 、 $R_{31} \sim R_{37}$ 、 $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての $R_{11} \sim R_{15}$ 、 $R_{21} \sim R_{27}$ 、 $R_{31} \sim R_{37}$ 、 $R_{11A} \sim R_{15A}$ 、 $R_{21A} \sim R_{27A}$ 、及び $R_{31A} \sim R_{37A}$ のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子であることが好ましい。

20

【0231】

態様Cに係る化合物において、 $R_{102} \sim R_{119}$ は、水素原子であることが好ましい。

態様Cに係る化合物において、 $R_{102} \sim R_{119}$ は、重水素原子であるか、又は $R_{111} \sim R_{119}$ は、重水素原子であることが好ましい。 $R_{102} \sim R_{119}$ は、重水素原子であることが好ましい。 $R_{102} \sim R_{119}$ のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての $R_{102} \sim R_{119}$ のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子であることが好ましい。

30

【0232】

〔態様Dに係る化合物〕

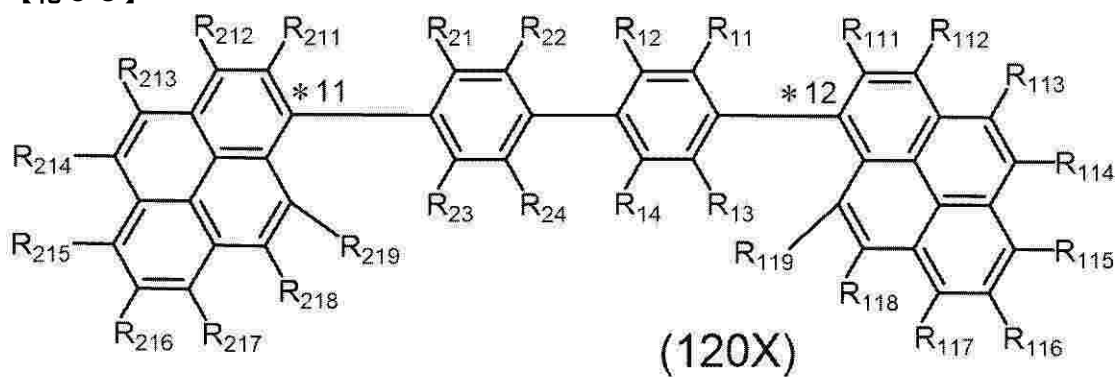
態様Dに係る化合物は、下記一般式(120X)、(120Y)又は(120Z)で表される化合物である。下記一般式(120X)、(120Y)又は(120Z)で表される化合物は、少なくとも1つの重水素原子を有する。

【0233】

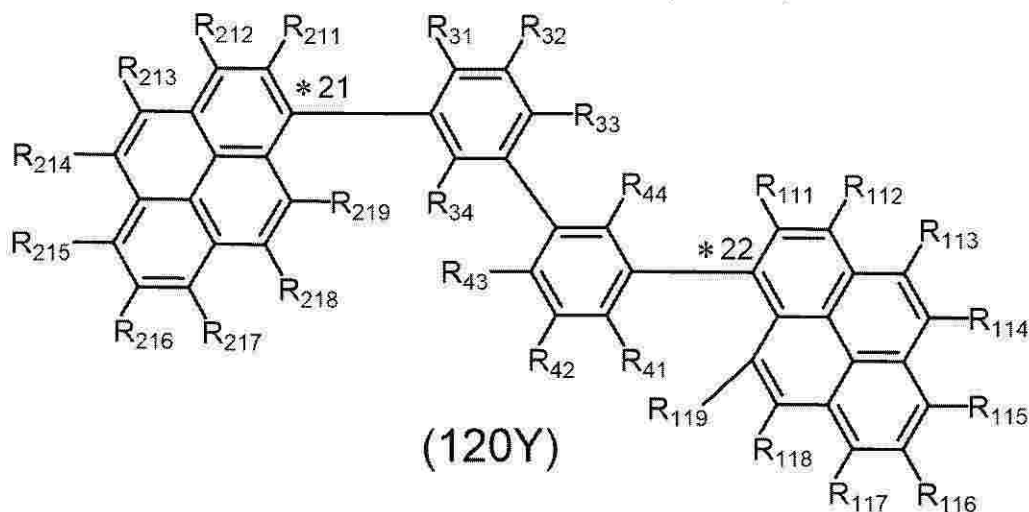
40

50

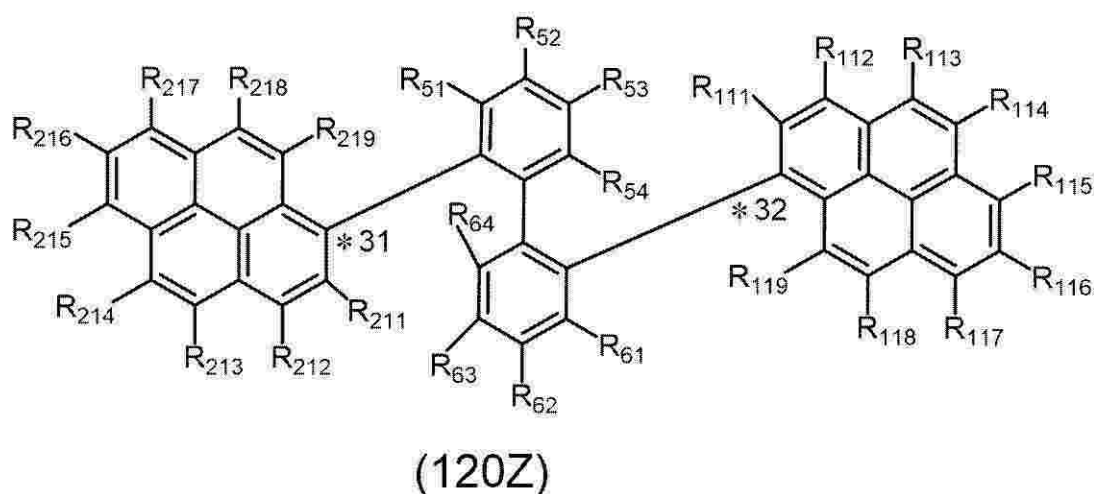
【化 5 8】



10



20



30

【 0 2 3 4】

(前記一般式 (120X)、(120Y) 及び (120Z) において、

40

R₁₁₁～R₁₁₉ 及び R₂₁₁～R₂₁₉ 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 のシクロアルキル基、

S i (R x) (R y) (R z) 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、

S i (R x) (R y) (R z) における R x 、R y 及び R z 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 のアリール基であり、

50

前記一般式 (120X) において、

R₁₁ 及び R₁₂ の組、R₁₃ 及び R₁₄ の組、R₂₁ 及び R₂₂ の組、R₂₃ 及び R₂₄ の組からなる組の 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 R₁₁、R₁₃、R₂₁、及び R₂₃ 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フェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9'-スピロビフルオレニル基、又は下記一般式 (4) で表される基であり、

10

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R₁₂、R₁₄、R₂₂、及び R₂₄ 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ビフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9'-スピロビフルオレニル基、又は下記一般式 (4) で表される基であり、

ただし、R₁₁～R₁₄ 及び R₂₁～R₂₄ のうち、少なくとも 1 つが水素原子ではなく、前記一般式 (120Y) 及び (120Z) において、

20

R₃₁～R₃₃、R₄₁～R₄₃、R₅₁～R₅₄、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 R₃₁～R₃₄、R₄₁～R₄₄、R₅₁～R₅₄、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フェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のスピロビフルオレニル基、又は

30

下記一般式 (4) で表される基であり、

ただし、R₃₁～R₃₄ 及び R₄₁～R₄₄ のうち、少なくとも 1 つが水素原子ではなく、R₅₁～R₅₄ 及び R₆₁～R₆₄ のうち、少なくとも 1 つが水素原子ではなく、

前記一般式 (120X) で表される化合物における、R₁₁ 及び R₁₃ の組と、R₂₁ 及び R₂₃ の組とが、互いに異なる組であるか、又は R₁₂ 及び R₁₄ の組と、R₂₂ 及び R₂₄ の組とが、互いに異なる組であり、

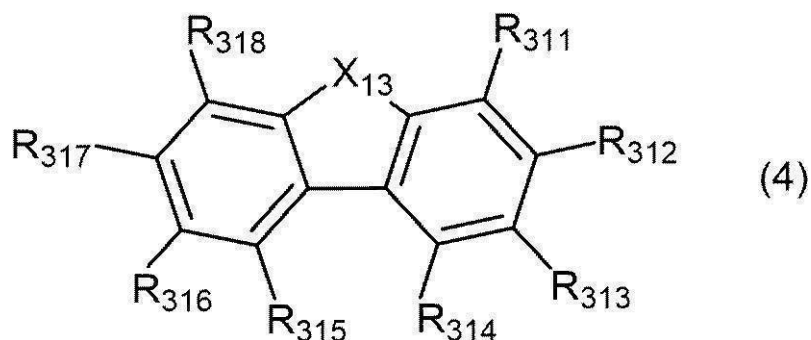
前記一般式 (120Y) で表される化合物における、R₃₁ 及び R₄₁ の組と、R₃₂ 及び R₄₂ の組、R₃₃ 及び R₄₃ の組、並びに R₃₄ 及び R₄₄ の組のうち、少なくとも 1 つの組が互いに異なり、

40

前記一般式 (120Z) で表される化合物における、R₅₁ 及び R₆₁ の組と、R₅₂ 及び R₆₂ の組、R₅₃ 及び R₆₃、並びに R₅₄ 及び R₆₄ の組のうち、少なくとも 1 つの組が互いに異なる。))

【0235】

【化 5 9】



10

【0 2 3 6】

(前記一般式 (4) において、 X_{13} は、酸素原子、硫黄原子、又は NR_{319} であり、 $R_{311} \sim R_{318}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{311} \sim R_{319}$ 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原子数 5 ～ 50 の複素環基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9'-スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9-ジフェニルフルオレニル基であり、

20

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{311} \sim R_{319}$ うちいずれか 1 つは、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ のうち少なくともいずれかに結合する単結合である。)

30

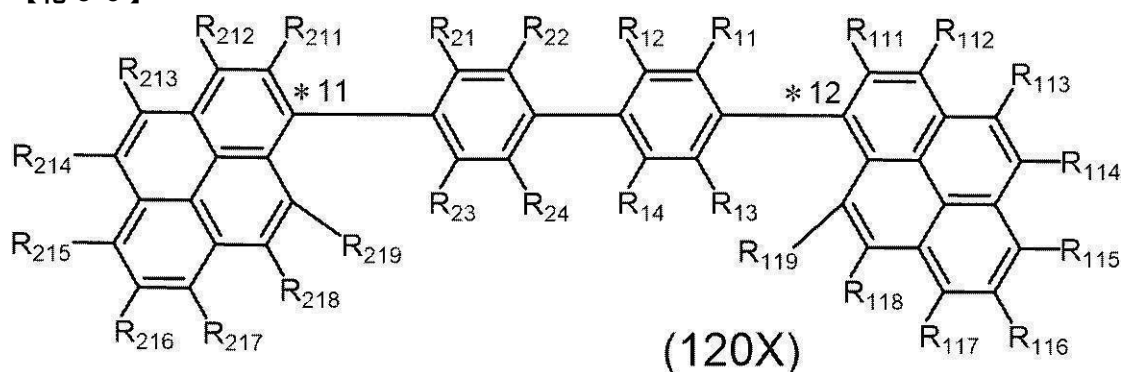
(前記一般式 (1 2 0 X)、(1 2 0 Y) 及び (1 2 0 Z) において、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 $R_{111} \sim R_{119}$ 、 $R_{211} \sim R_{219}$ 、及び $R_{311} \sim R_{319}$ における「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、それぞれ独立に、置換も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環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9'-スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9-ジフェニルフルオレニル基である。)

40

【0 2 3 7】

50

【化 6 0】



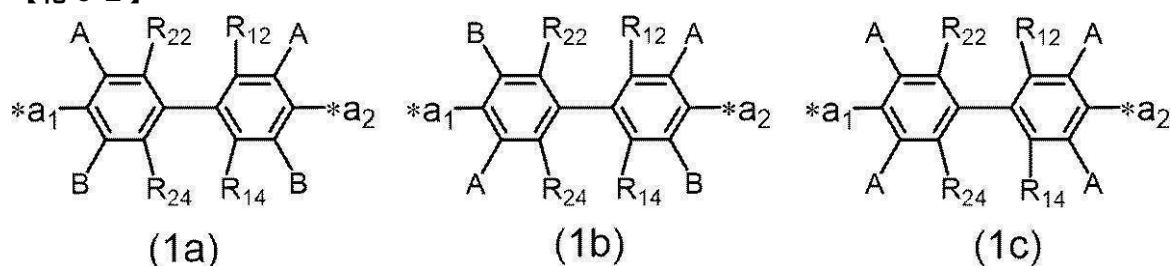
10

【 0 2 3 8】

前記一般式 (120X) において、「R₁₁及びR₁₃の組と、R₂₁及びR₂₃の組とが、互いに異なる」を例に挙げて説明する。下記一般式 (1a)、(1b) 及び (1c) は、前記一般式 (120X) の部分構造を示す。

【 0 2 3 9】

【化 6 1】



20

【 0 2 4 0】

(前記一般式 (1a)、(1b) 及び (1c) 中、

R₁₂、R₁₄、R₂₂ 及び R₂₄ は、それぞれ独立に、前記一般式 (120X) における R₁₂、R₁₄、R₂₂ 及び R₂₄ と同義である。

*a₁ は、前記一般式 (120X) における *11 との結合位置を表し、

*a₂ は、前記一般式 (120X) における *12 との結合位置を表す。)

30

【 0 2 4 1】

例えば、R₁₁ が「A」であり、R₁₃ が「B」である場合、

R₁₁ 及び R₁₃ の組と、R₂₁ 及び R₂₃ の組とが、同一の組であるとは、

R₂₁ が「A」であり、R₂₃ が「B」であるか (前記一般式 (1a))、又は

R₂₁ が「B」であり、R₂₃ が「A」である場合をいう (前記一般式 (1b))。

ただし、「A」及び「B」は、互いに異なる。

また、R₁₁ 及び R₁₃ が同時に「A」である場合、

R₁₁ 及び R₁₃ の組と、R₂₁ 及び R₂₃ の組とが、同一の組であるとは、

R₂₁ 及び R₂₃ が同時に「A」である場合をいう (前記一般式 (1c))。

40

すなわち、R₁₁ 及び R₁₃ の組と、R₂₁ 及び R₂₃ の組とが、互いに異なる組であるとは、例えば、R₁₁ が「A」であり、R₁₃ が「B」であって、

R₂₁ 及び R₂₃ が同時に「A」であるか、

R₂₁ 及び R₂₃ が同時に「B」であるか、又は

R₂₁ 及び R₂₃ の少なくともいずれかが「A」及び「B」とは異なる「C」である場合が挙げられ、

また、R₁₁ 及び R₁₃ が同時に「A」であって、

R₂₁ 及び R₂₃ の少なくともいずれかが「B」である場合、

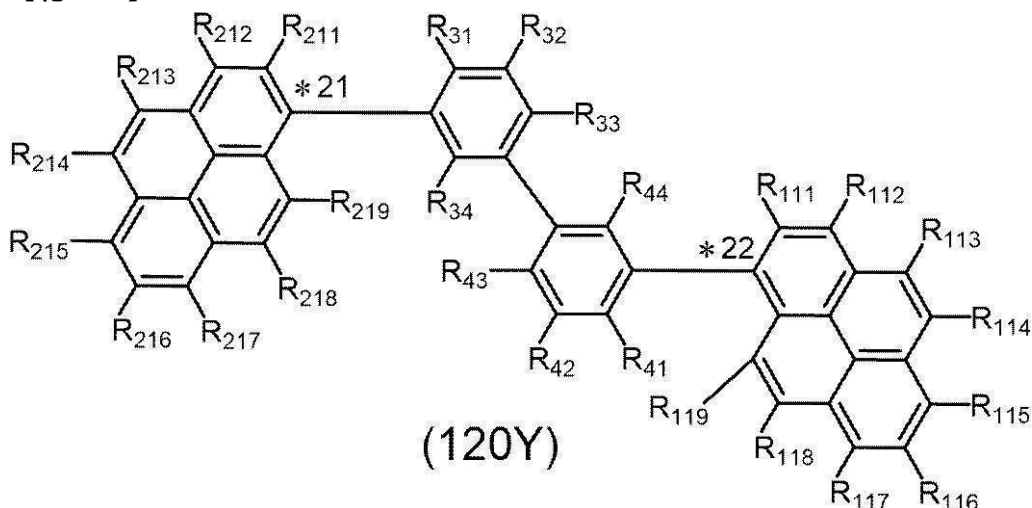
R₂₁ 及び R₂₃ の少なくともいずれかが「A」とは異なる「C」である場合等も挙げられる。

50

前記一般式(120X)において、「R₁₂及びR₁₄の組と、R₂₂及びR₂₄の組とが、互いに異なる」についても同様である。

【0242】

【化62】



10

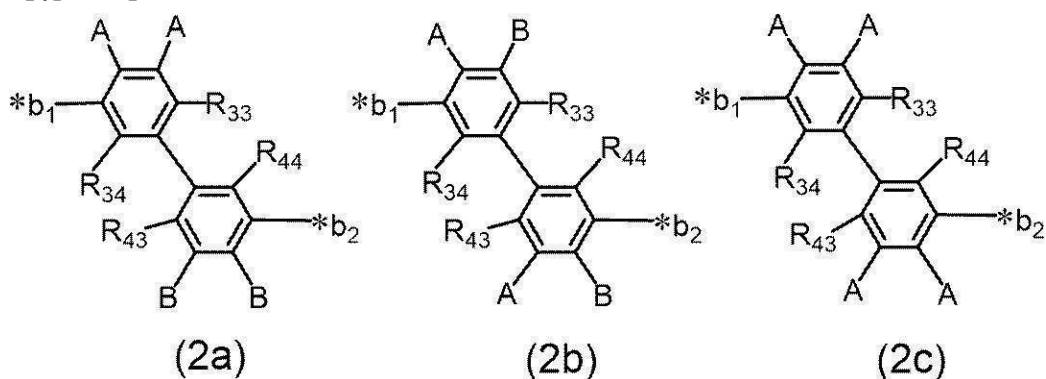
【0243】

前記一般式(120Y)において、「R₃₁及びR₄₁の組と、R₃₂及びR₄₂の組、R₃₃及びR₄₃の組、並びにR₃₄及びR₄₄の組のうち、少なくとも1つの組とが互いに異なる」について、「R₃₁及びR₄₁の組と、R₃₂及びR₄₂の組とが互いに異なる」を例に挙げて説明する。下記一般式(2a)、(2b)及び(2c)は、前記一般式(120Y)の部分構造を示す。

20

【0244】

【化63】



30

【0245】

(前記一般式(2a)、(2b)及び(2c)中、

R₃₃、R₃₄、R₄₃及びR₄₄は、それぞれ独立に、前記一般式(120Y)におけるR₃₃、R₃₄、R₄₃及びR₄₄と同義である。

40

*b₁は、前記一般式(120Y)における*21との結合位置を表し、

*b₂は、前記一般式(120Y)における*22との結合位置を表す。)

【0246】

例えば、R₃₁が「A」であり、R₄₁が「B」の組である場合、

R₃₁及びR₄₁の組と、R₃₂及びR₄₂の組とが、同一の組であるとは、

R₃₂が「A」であり、R₄₂が「B」であるか(前記一般式(2a))、又は

R₃₂が「B」であり、R₄₂が「A」である場合をいう(前記一般式(2b))。

ただし、「A」及び「B」は、互いに異なる。

また、R₃₁及びR₄₁が同時に「A」である場合、

50

R₃₁及びR₄₁の組と、R₃₂及びR₄₂の組とが、同一の組であるとは、
R₃₂及びR₄₂が同時に「A」である場合をいう（前記一般式（2c））。

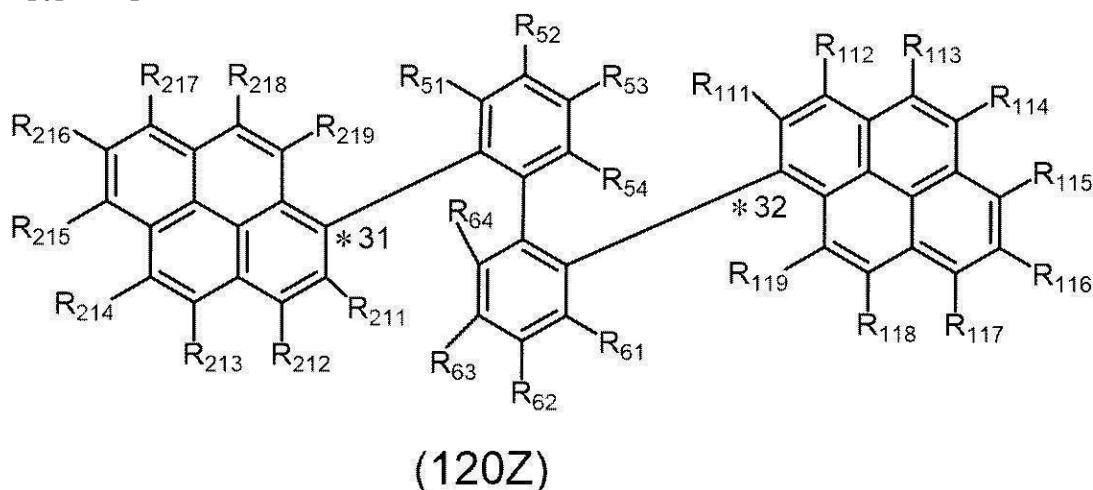
すなわち、R₃₁及びR₄₁の組と、R₃₂及びR₄₂の組とが、互いに異なる組であるとは、例えば、R₃₁が「A」であり、R₄₁が「B」であって、
R₃₂及びR₄₂が同時に「A」であるか、
R₃₂及びR₄₂が同時に「B」であるか、又は
R₃₂及びR₄₂の少なくともいずれかが「A」及び「B」とは異なる「C」である場合が挙げられ、

また、R₃₁及びR₄₁が同時に「A」であって、
R₃₂及びR₄₂の少なくともいずれかが「B」である場合、
R₃₂及びR₄₂の少なくともいずれかが「A」とは異なる「C」である場合等も挙げられる。

前記一般式（120Y）において、「R₃₁及びR₄₁の組と、R₃₃及びR₄₃の組とが互いに異なる」についても同様であり、「R₃₁及びR₄₁の組と、R₃₄及びR₄₄の組とが互いに異なる」についても同様である。

【0247】

【化64】

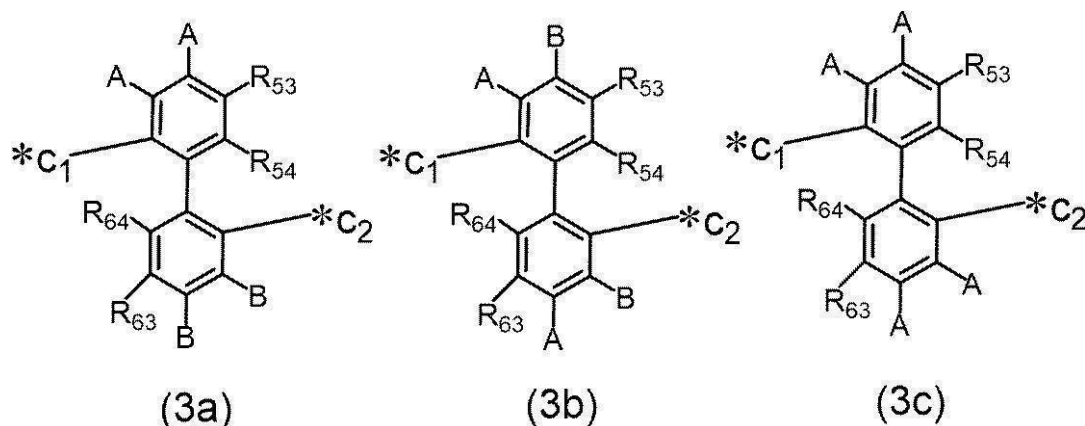


【0248】

前記一般式（120Z）において、「R₅₁及びR₆₁の組と、R₅₂及びR₆₂の組、R₅₃及びR₆₃、並びにR₅₄及びR₆₄の組のうち、少なくとも1つの組とが互いに異なる」について、「R₅₁及びR₆₁の組と、R₅₂及びR₆₂の組とが互いに異なる」を例に挙げて説明する。下記一般式（3a）、（3b）及び（3c）は、前記一般式（120Z）の部分構造を示す。

【0249】

【化 6 5】



10

【0250】

(前記一般式 (3a)、(3b) 及び (3c) 中、

R₅₃、R₅₄、R₆₃ 及び R₆₄ は、それぞれ独立に、前記一般式 (120Z) における R₅₃、R₅₄、R₆₃ 及び R₆₄ と同義である。

*c₁ は、前記一般式 (120Z) における *31 との結合位置を表し、

*c₂ は、前記一般式 (120Z) における *32 との結合位置を表す。)

【0251】

例えば、R₅₁ が「A」であり、R₆₁ が「B」の組である場合、

R₅₁ 及び R₆₁ の組と、R₅₂ 及び R₆₂ の組とが、同一の組であるとは、

R₅₂ が「A」であり、R₆₂ が「B」であるか (前記一般式 (3a))、又は

R₅₂ が「B」であり、R₆₂ が「A」である場合をいう (前記一般式 (3b))。

ただし、「A」及び「B」は、互いに異なる。

また、R₅₁ 及び R₆₁ が同時に「A」である場合、R₅₁ 及び R₆₁ の組と、R₅₂ 及び R₆₂ の組とが、同一の組であるとは、

R₅₂ 及び R₆₂ の組が同時に「A」である場合をいう (前記一般式 (3c))。

すなわち、R₅₁ 及び R₆₁ の組と、R₅₂ 及び R₆₂ の組とが、互いに異なる組であるとは、例えば、R₅₁ が「A」であり、R₆₁ が「B」であって、

R₅₂ 及び R₆₂ が同時に「A」であるか、

R₅₂ 及び R₆₂ が同時に「B」であるか、又は

R₅₂ 及び R₆₂ の少なくともいずれかが「A」及び「B」とは異なる「C」である場合が挙げられ、

また、R₅₁ 及び R₆₁ が同時に「A」であって、

R₅₂ 及び R₆₂ の少なくともいずれかが「B」である場合、

R₅₂ 及び R₆₂ の少なくともいずれかが「A」とは異なる「C」である場合等も挙げられる。

前記一般式 (120Z) において、「R₅₁ 及び R₆₁ の組と、R₅₃ 及び R₆₃ の組とが互いに異なる」についても同様であり、「R₅₁ 及び R₆₁ の組と、R₅₄ 及び R₆₄ の組とが互いに異なる」についても同様である。

【0252】

態様 D に係る化合物において、高速成膜した場合でも、重水素化による長寿命化の効果により発現する観点から、2つのピレン環 (R₁₁₁~R₁₁₉ を有するピレン環及び R₂₁₁~R₂₁₉ を有するピレン環) を連結する基が含まれている炭素原子の総数は、21 以下であることがより好ましい。

2つのピレン環を連結する基とは、前記一般式 (120X) で表される化合物の場合、R₁₁~R₁₄ を有するフェニレン基及び R₂₁~R₂₄ を有するフェニレン基からなる基であり、前記一般式 (120Y) で表される化合物の場合、R₃₁~R₃₄ を有するフェニレン基及び R₄₁~R₄₄ を有するフェニレン基からなる基であり、前記一般式 (120Z

20

30

40

50

)で表される化合物の場合、 $R_{51} \sim R_{54}$ を有するフェニレン基及び $R_{61} \sim R_{64}$ を有するフェニレン基からなる基である。

【0253】

態様Dに係る化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ 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1～18のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～18のシクロアルキル基、 $Si(R_x)(R_y)(R_z)$ で表される基、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の複素環基であることが好ましい。 $Si(R_x)(R_y)(R_z)$ における R_x 、 R_y 及び R_z は、それぞれ独立に、無置換の炭素数1～18のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数6～18のアリール基であることが好ましい。

10

【0254】

態様Dに係る化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ 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1～18のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換の9,9-ジメチルフルオレニル基、又は置換もしくは無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基であることが好ましい。

態様Dに係る化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ は、水素原子であることが好ましい。

20

【0255】

態様Dに係る化合物において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{21} 及び R_{22} の組、 R_{23} 及び R_{24} の組からなる組の1組以上が、互いに結合せず、 $R_{31} \sim R_{33}$ 、 $R_{41} \sim R_{43}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合しないことが好ましい。

【0256】

態様Dに係る化合物は、下記一般式(1-1)、(2-1)又は(3-1)で表されることが好ましい。

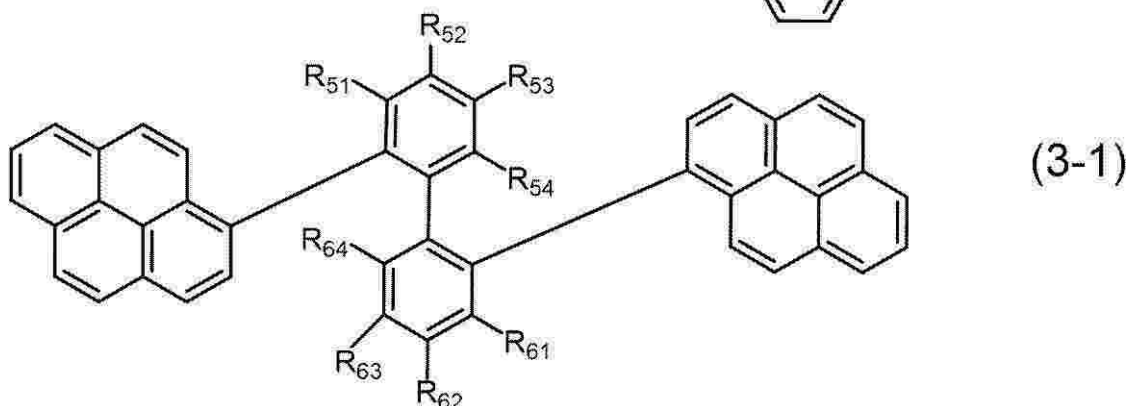
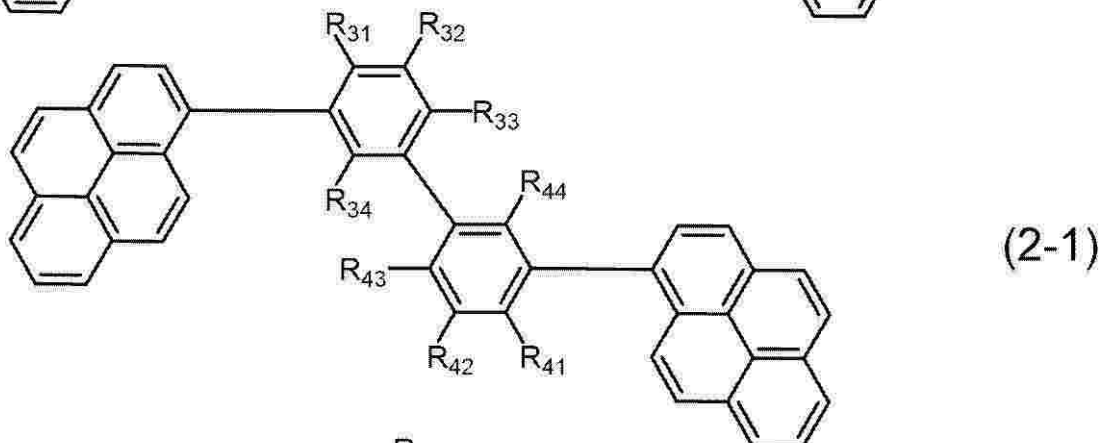
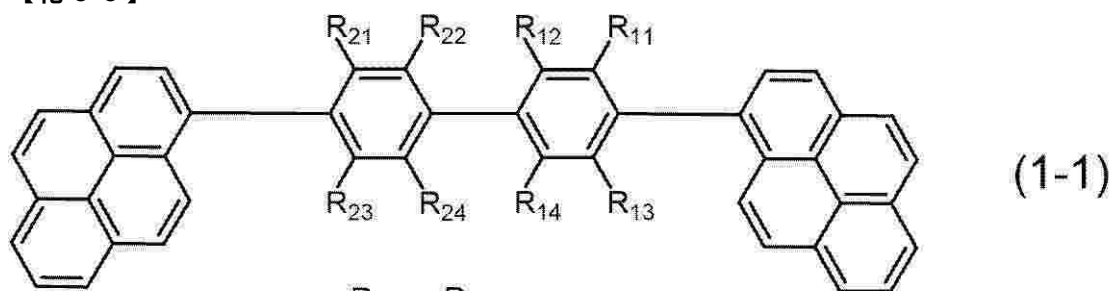
【0257】

30

40

50

【化 6 6】



【 0 2 5 8 】

(前記一般式 (1-1)、(2-1) 及び (3-1) において、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (120X)、(120Y) 及び (120Z) における $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ と同義である。)

【 0 2 5 9 】

態様 D に係る化合物において、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ 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 1～8 のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9'-スピロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9'-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の 9, 9'-ジフェニルフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基であり、

ただし、 R_{12} 、 R_{14} 、 R_{22} 、及び R_{24} は、置換もしくは無置換のフェニル基でないことが好ましい。

【 0 2 6 0 】

態様 D に係る化合物において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{21} 及び R_{22} の組、 R_{23} 及び R_{24} の組からなる組の 1 組以上が互いに結合して置換もしくは

無置換の単環、又は置換もしくは無置換の縮合環を形成し、

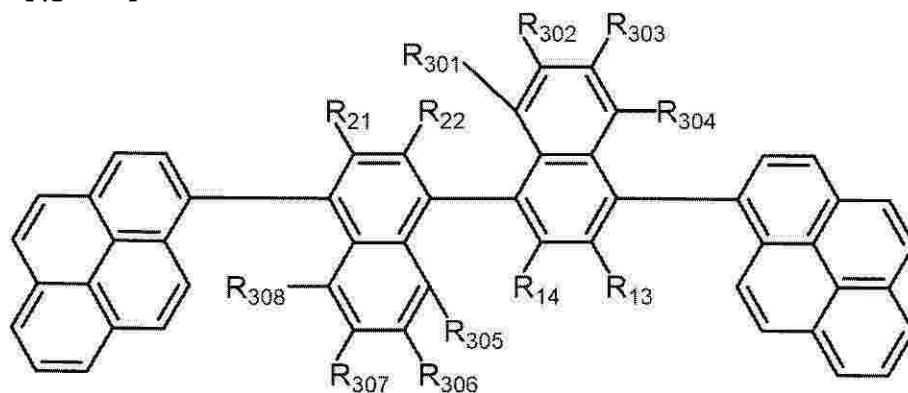
$R_{31} \sim R_{33}$ 、 $R_{41} \sim R_{43}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が互いに結合して置換もしくは無置換の単環、又は置換もしくは無置換の縮合環を形成することが好ましい。

【0261】

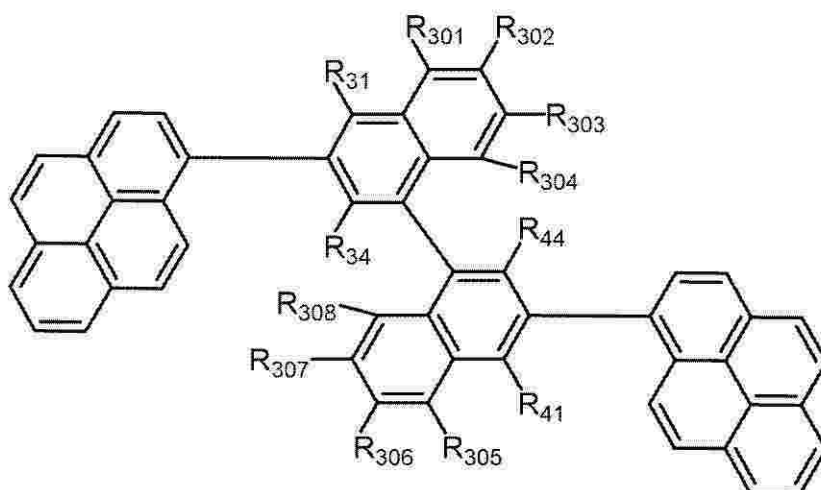
態様Dに係る化合物は、下記一般式(1-2)、(2-2)～(2-3)及び(3-2)～(3-4)のいずれかで表されることが好ましい。

【0262】

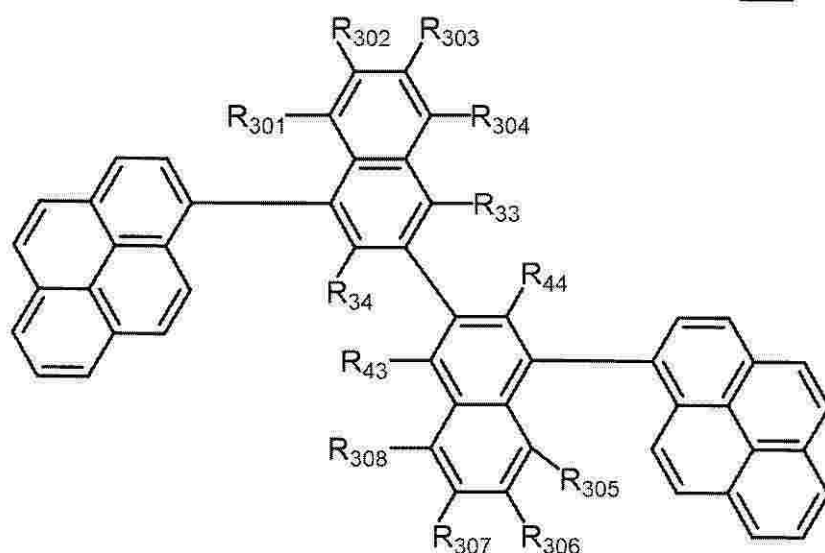
【化67】



(1-2)



(2-2)



(2-3)

【0263】

10

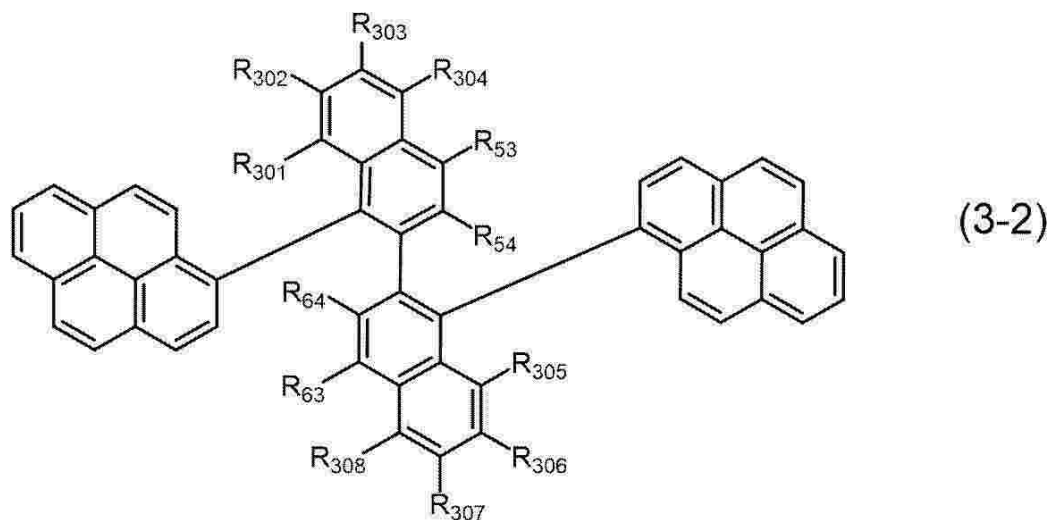
20

30

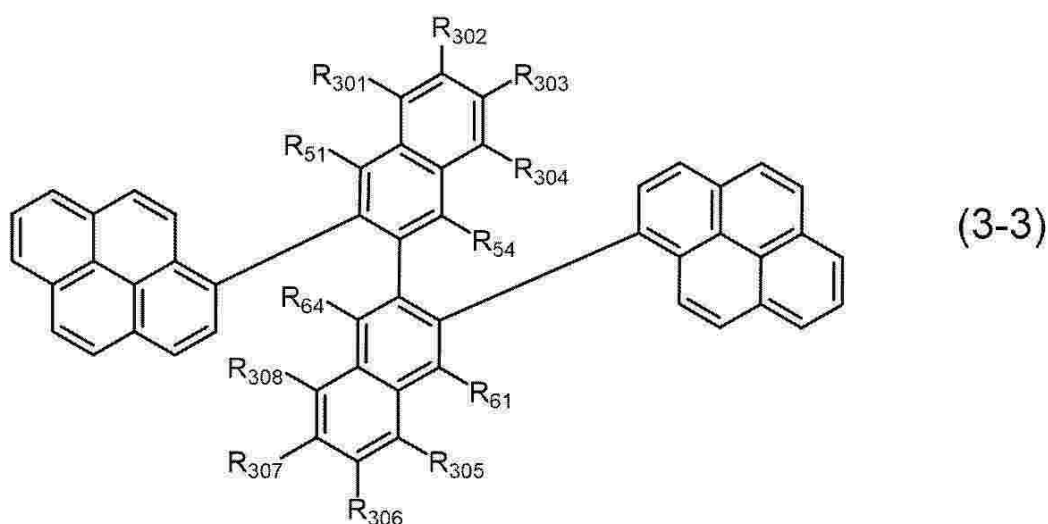
40

50

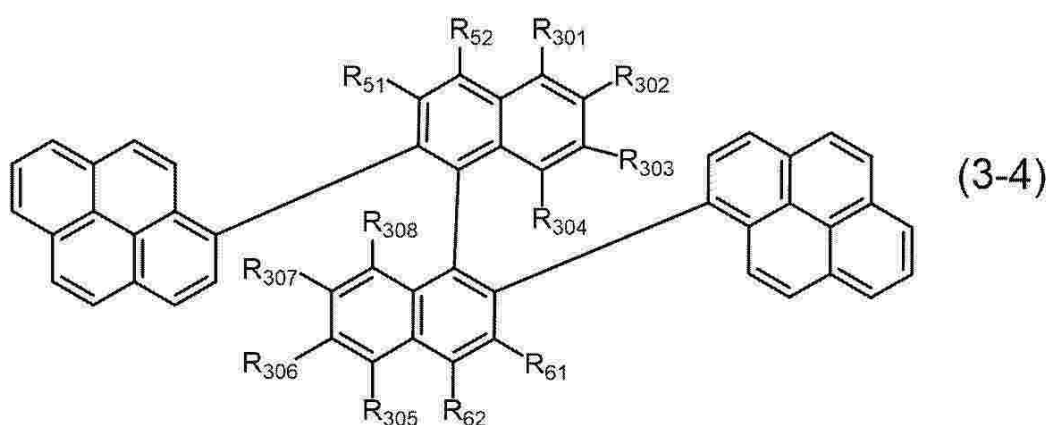
【化 6 8】



10



20



30

40

【0264】

(前記一般式(1-2)、(2-2)～(2-3)及び(3-2)～(3-4)において、 $R_{13} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{22}$ 、 R_{31} 、 R_{33} 、 R_{34} 、 R_{41} 、 R_{43} 、 R_{44} 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(120X)、(120Y)及び(120Z)における $R_{13} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{22}$ 、 R_{31} 、 R_{33} 、 R_{34} 、 R_{41} 、 R_{43} 、 R_{44} 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、及び $R_{61} \sim R_{64}$ と同義であり、 $R_{301} \sim R_{308}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(120X)、(120Y)及び(120Z)における $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 及び $R_{61} \sim R_{64}$ と同義である。)

50

【0265】

前記一般式(1-2)、(2-2)～(2-3)及び(3-2)～(3-4)において、 $R_{13} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{22}$ 、 R_{31} 、 R_{33} 、 R_{34} 、 R_{41} 、 R_{43} 、 R_{44} 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、及び $R_{301} \sim R_{308}$ 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1～8のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-スπιロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジフェニルフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基であり、

10

ただし、 R_{14} 、及び R_{22} は、置換もしくは無置換のフェニル基でないことが好ましい。

【0266】

態様Dに係る化合物において、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、及び $R_{301} \sim R_{308}$ のうち少なくとも1つは、重水素原子であることが好ましい。

態様Dに係る化合物において、 $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、及び $R_{301} \sim R_{308}$ のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての $R_{11} \sim R_{14}$ 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 $R_{31} \sim R_{34}$ 、 $R_{41} \sim R_{44}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、及び $R_{301} \sim R_{308}$ のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子であることが好ましい。

20

態様Dに係る化合物において、 $R_{111} \sim R_{119}$ は重水素原子であるか、又は $R_{211} \sim R_{219}$ は重水素原子であることが好ましい。 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ は重水素原子であることが好ましい。 $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ のうち1つ以上が置換基であり、置換基としての $R_{111} \sim R_{119}$ 及び $R_{211} \sim R_{219}$ のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、1つ以上の重水素原子であることが好ましい。

【0267】

態様A、態様B、態様C及び態様Dに係る化合物において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、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フェニル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のアントリル基、置換もしくは無置換のフェナントリル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-スπιロビフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジメチルフルオレニル基、置換もしくは無置換の9,9'-ジフェニルフルオレニル基である、置換もしくは無置換のピリジル基、置換もしくは無置換のピリミジニル基、置換もしくは無置換のトリアジニル基、置換もしくは無置換のキノリル基、置換もしくは無置換のイソキノリル基、置換もしくは無置換のキナゾリニル基、置換もしくは無置換のベンゾイミダゾリル基、置換もしくは無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換の1-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の2-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の3-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の4-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換のベンゾカルバゾリル基、置換もしくは無置換のアザカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジアザカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジアザジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のアザジベンゾチオフェニル基、又は置換もしくは無置換のジアザジベンゾチオフェニル基であることが好ましい。

30

40

【0268】

態様A、態様B、態様C及び態様Dに係る化合物において、「置換もしくは無置換の」

50

という場合における置換基は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 18 のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換の 9, 9-ジメチルフルオレニル基、又は置換もしくは無置換の 9, 9-ジフェニルフルオレニル基であることがより好ましい。

態様 A、態様 B、態様 C 及び態様 D に係る化合物において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、それぞれ独立に、無置換の炭素数 1 ～ 18 のアルキル基、無置換のフェニル基、無置換のナフチル基、無置換のフェナントロリニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、無置換のジベンゾフラニル基、無置換のジベンゾチオフェニル基、無置換の 9, 9-ジメチルフルオレニル基、又は無置換の 9, 9-ジフェニルフルオレニル基であることがさらに好ましい。

10

【0269】

(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(前記一般式(1)で表される化合物)、態様 A、態様 B、態様 C 及び態様 D に係る化合物の製造方法は、公知の方法により製造できる。また、本実施形態に係る化合物、態様 A、態様 B、態様 C 及び態様 D に係る化合物は、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。

【0270】

本実施形態に係る化合物(前記一般式(1)で表される化合物)、態様 A、態様 B、態様 C 及び態様 D 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、これらの具体例に限定されない。D は重水素原子を表す。

20

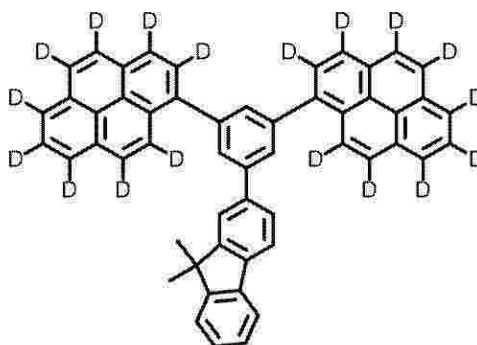
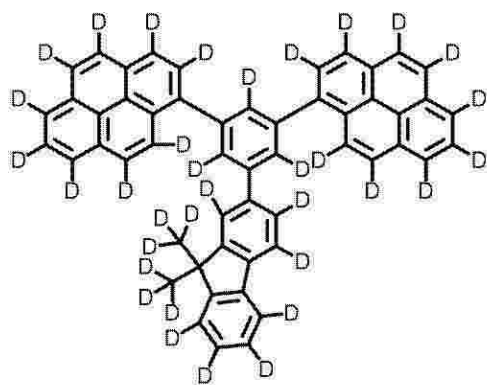
【0271】

30

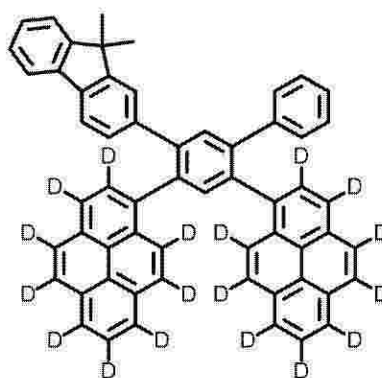
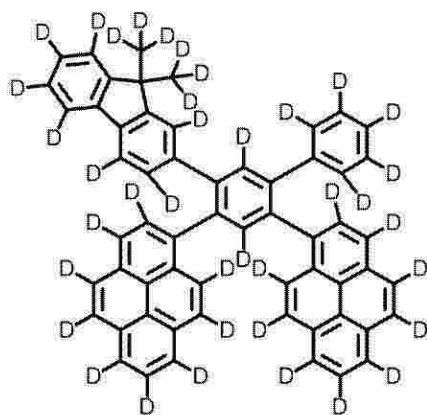
40

50

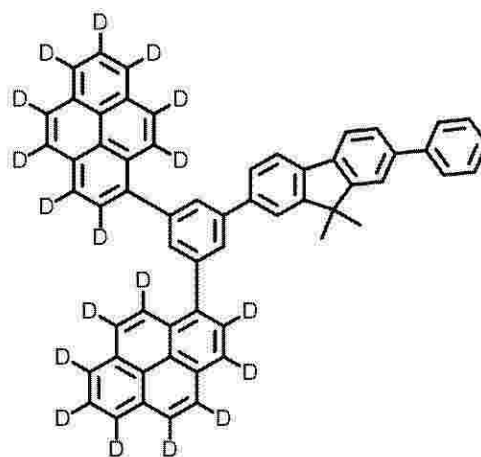
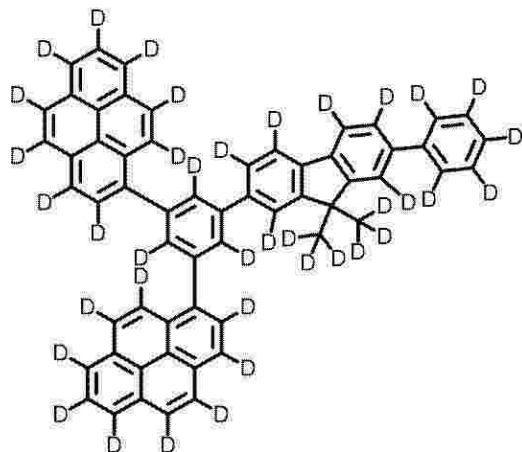
【化 6 9】



10



20



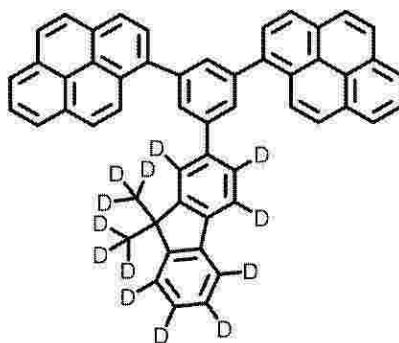
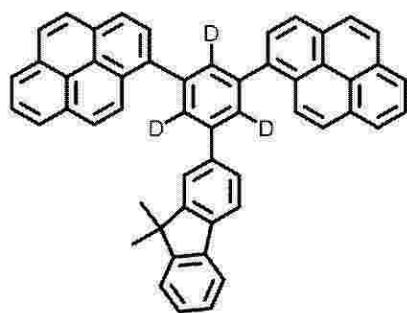
30

【 0 2 7 2】

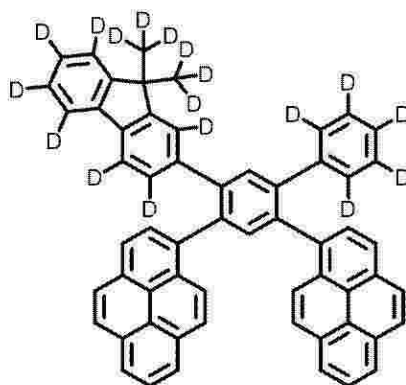
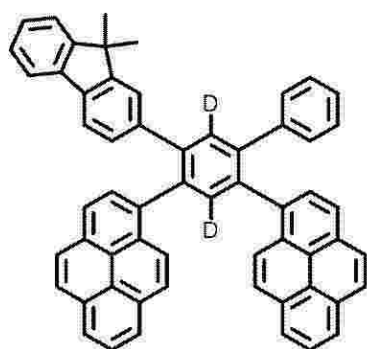
40

50

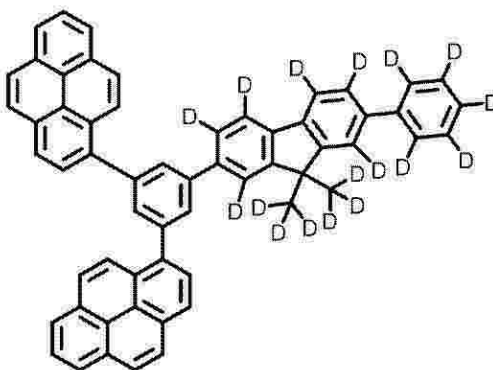
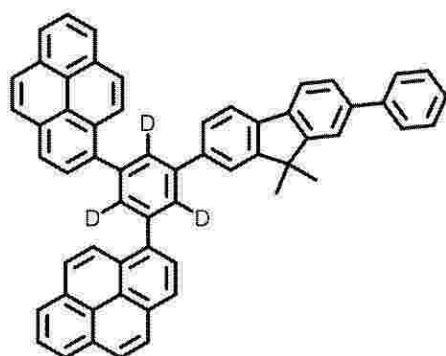
【化 7 0】



10



20



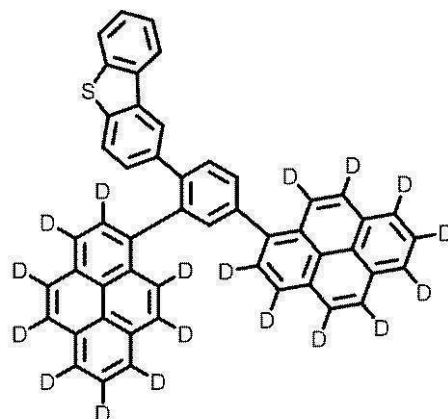
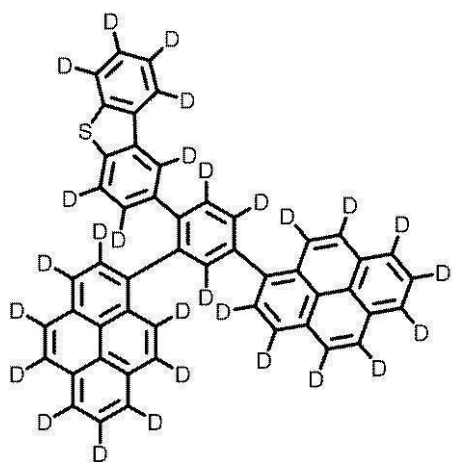
30

【 0 2 7 3】

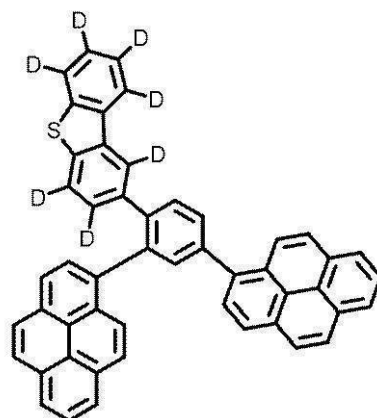
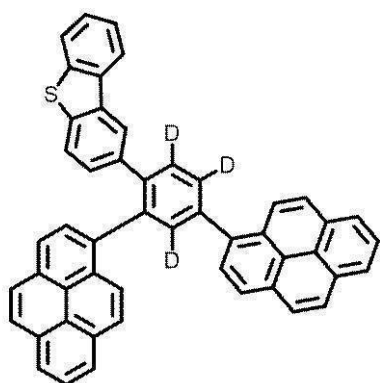
40

50

【化 7 1】



10



20

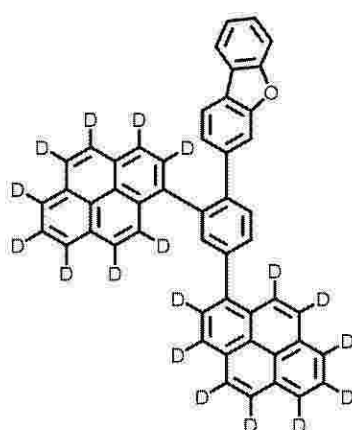
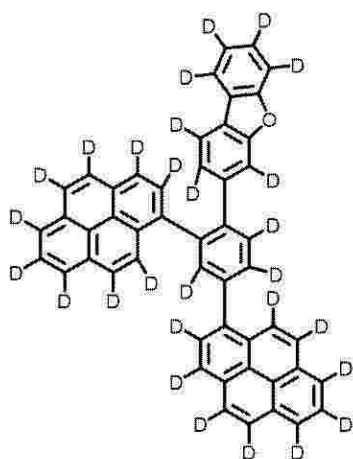
【 0 2 7 4】

30

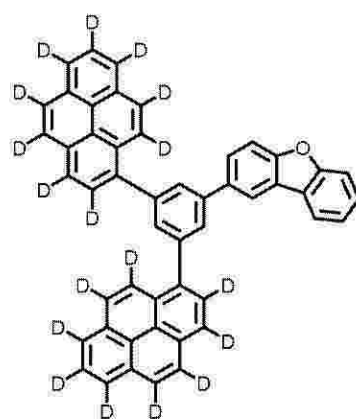
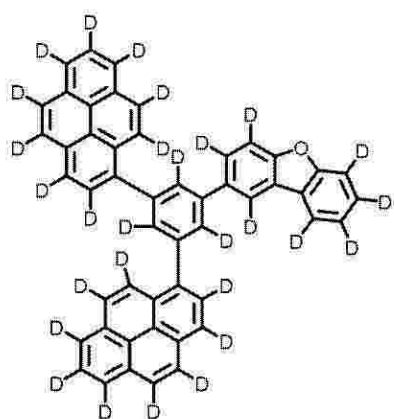
40

50

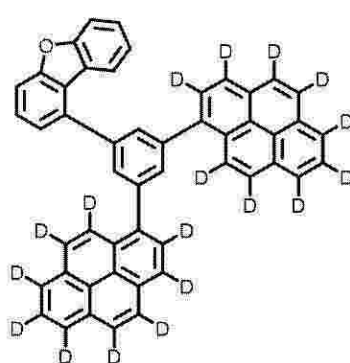
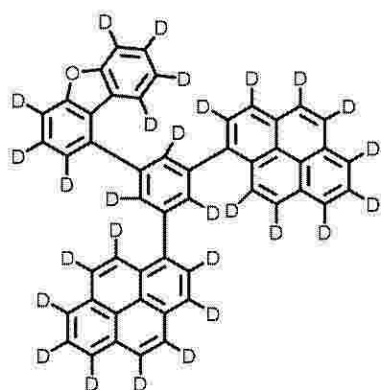
【化 7 2】



10



20



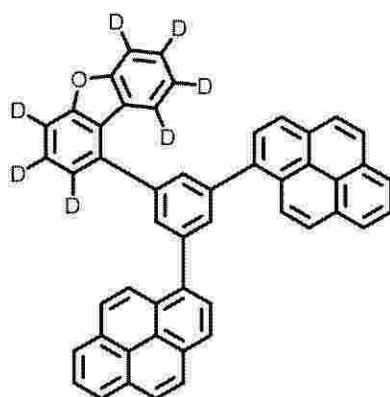
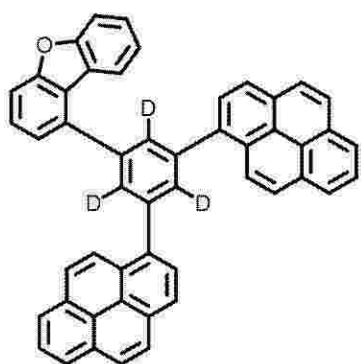
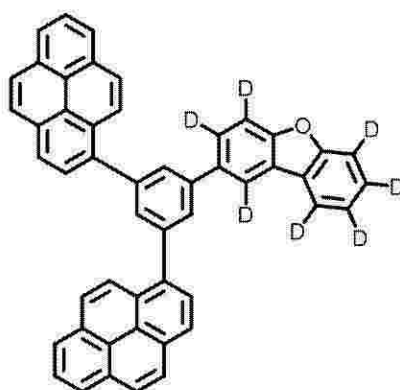
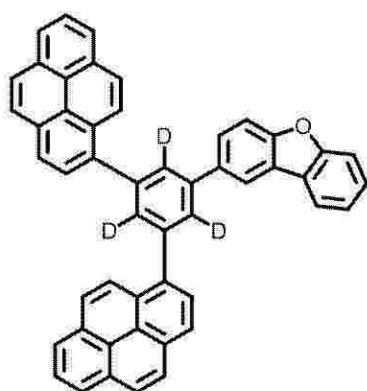
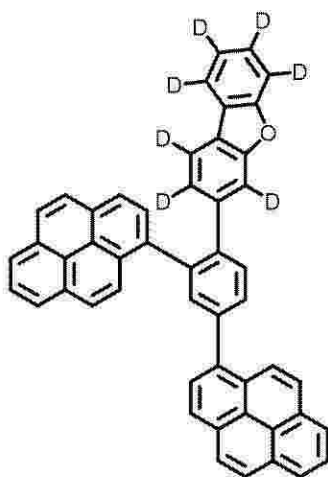
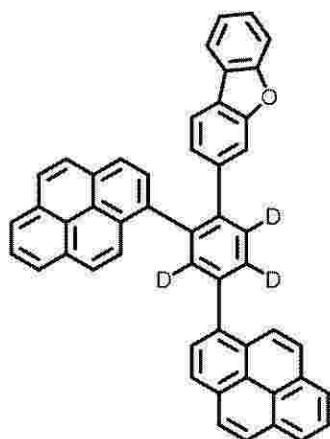
30

【 0 2 7 5 】

40

50

【化 7 3】



【 0 2 7 6 】

10

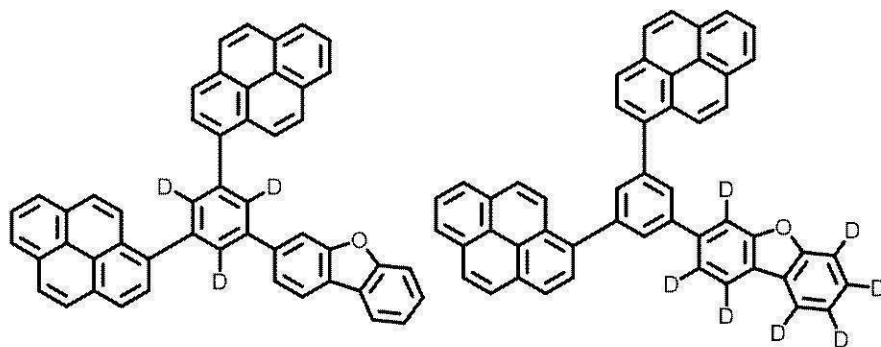
20

30

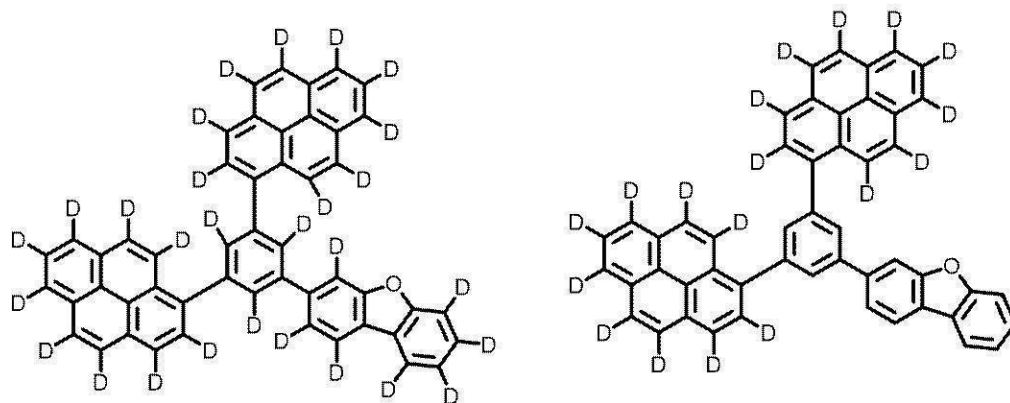
40

50

【化 7 4】



10



20

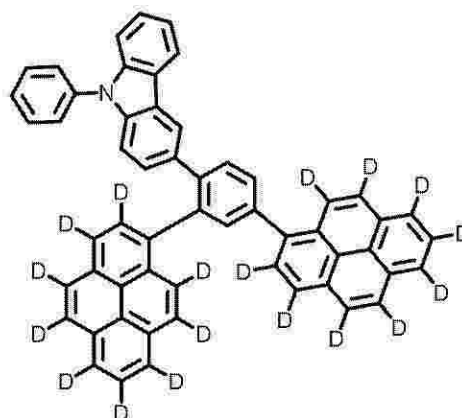
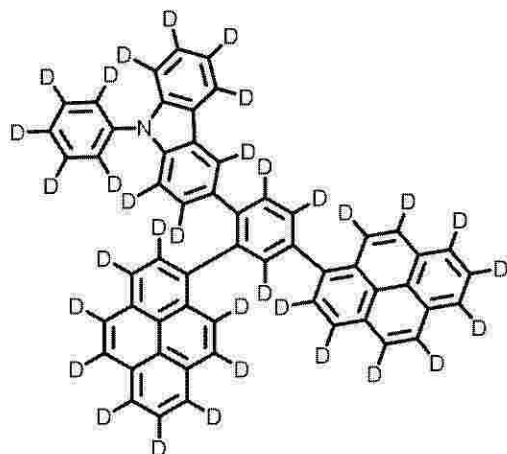
【 0 2 7 7】

30

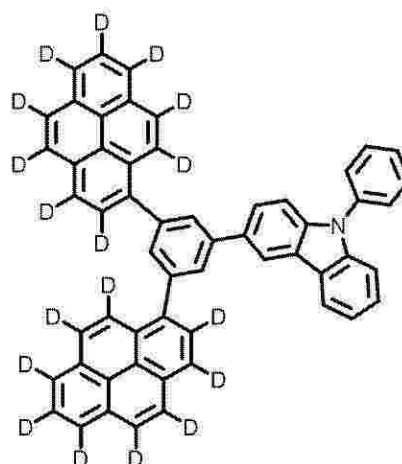
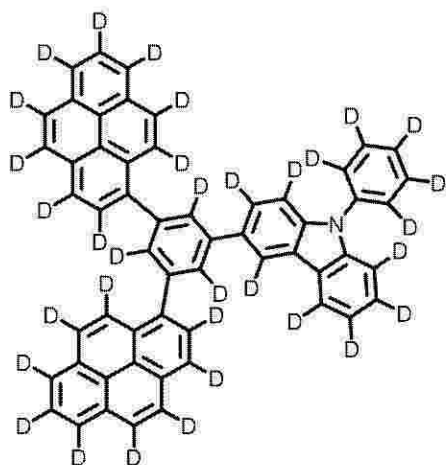
40

50

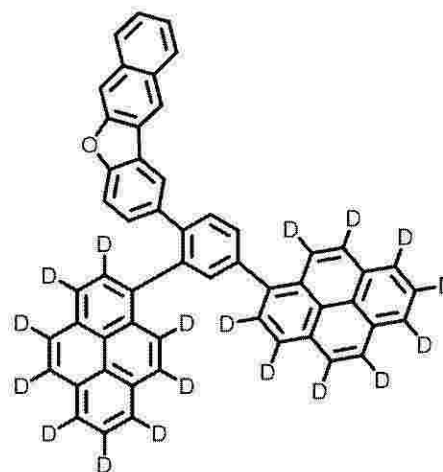
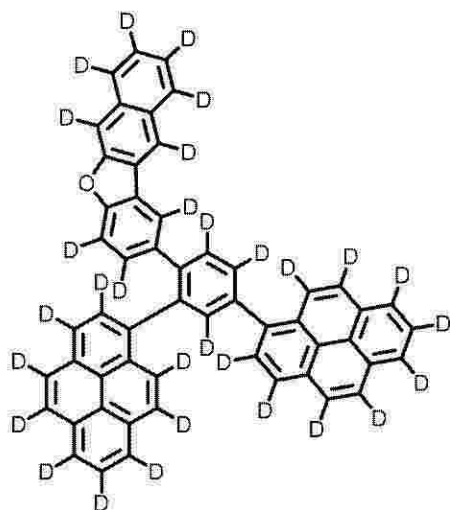
【化 7 5】



10



20



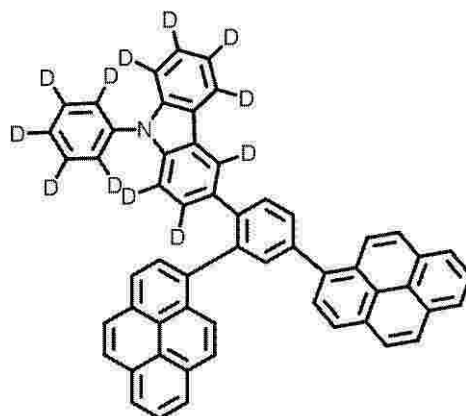
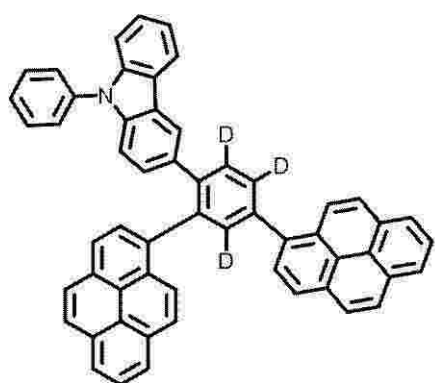
30

【 0 2 7 8 】

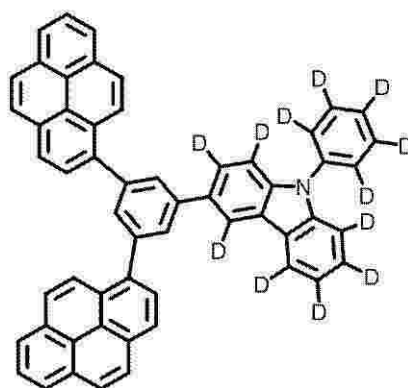
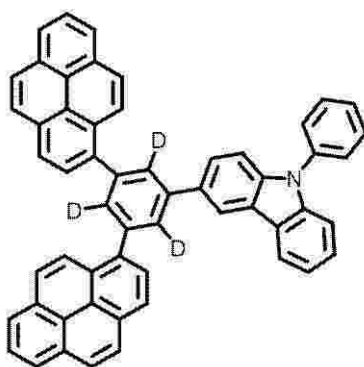
40

50

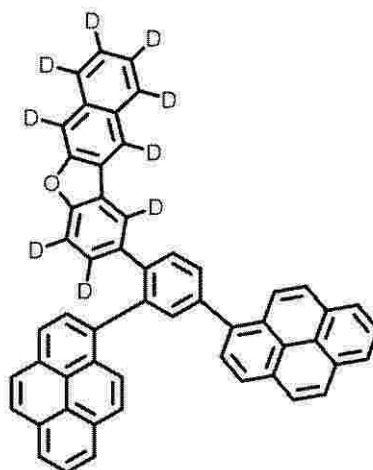
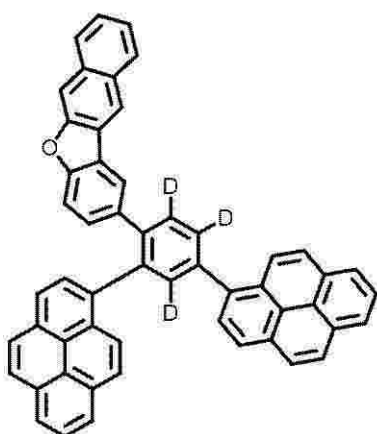
【化 7 6】



10



20



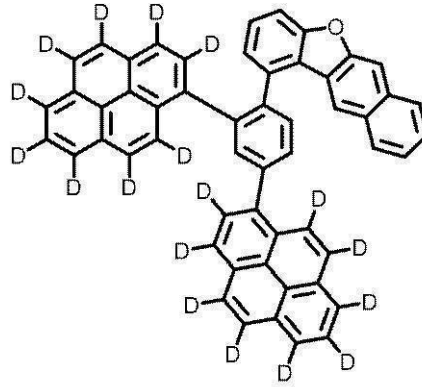
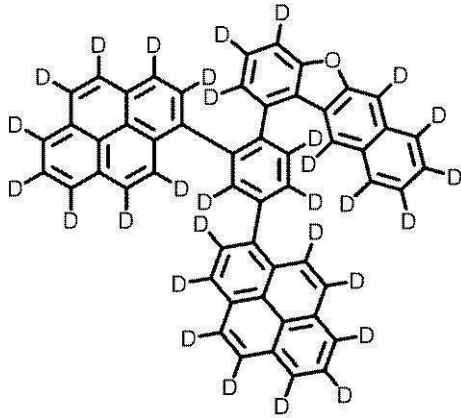
30

【 0 2 7 9】

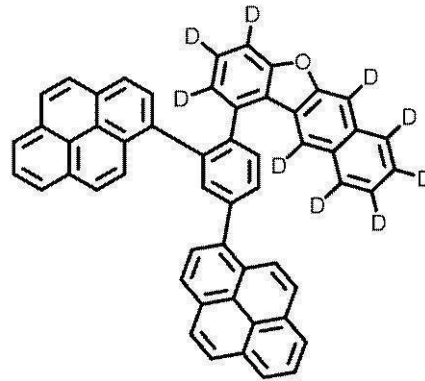
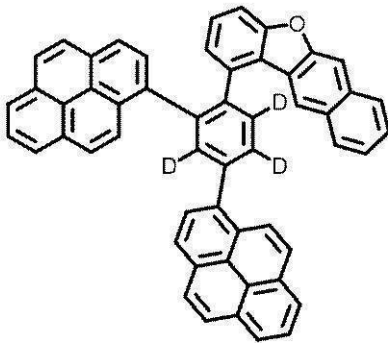
40

50

【化 7 7】



10



20

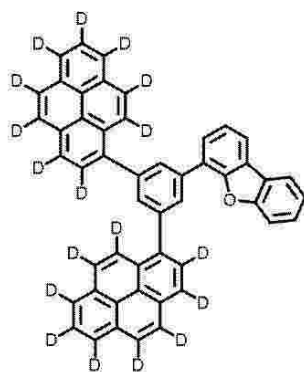
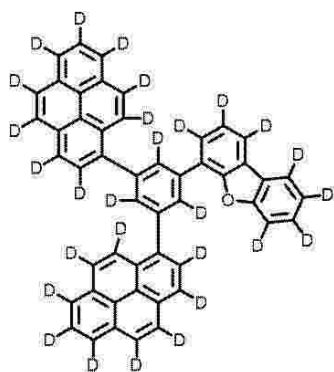
【 0 2 8 0 】

30

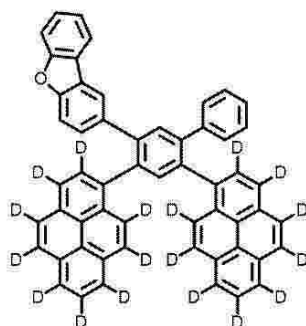
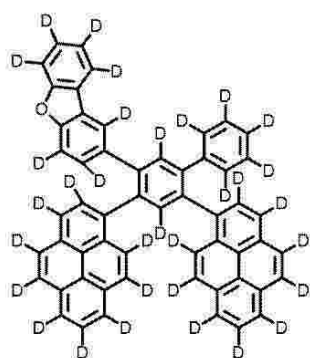
40

50

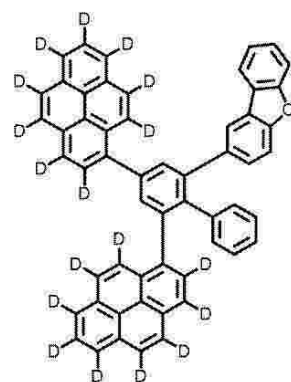
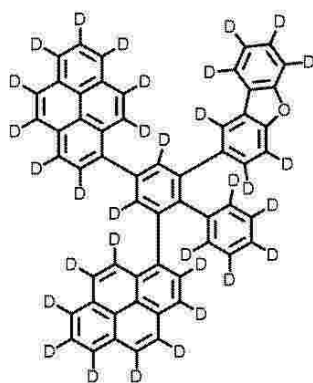
【化 7 8】



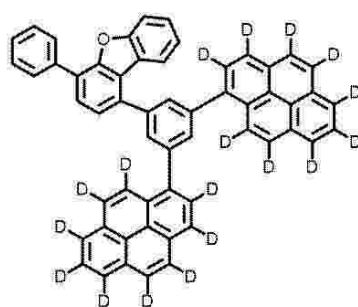
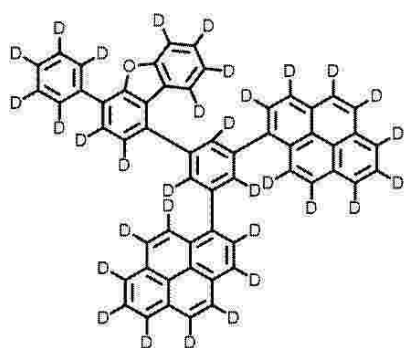
10



20



30

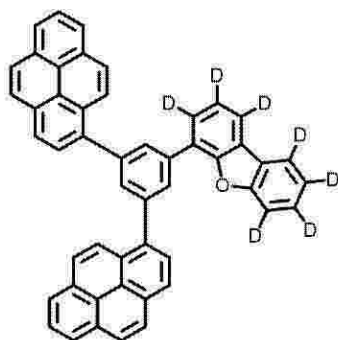
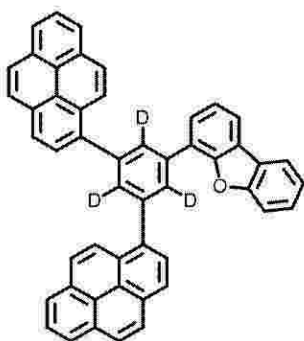


40

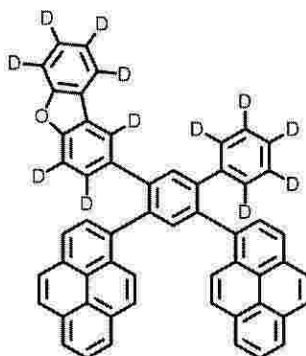
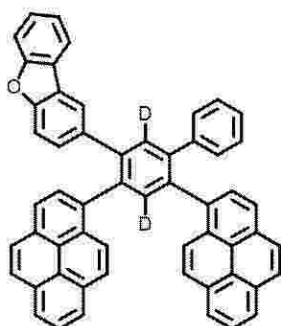
【 0 2 8 1】

50

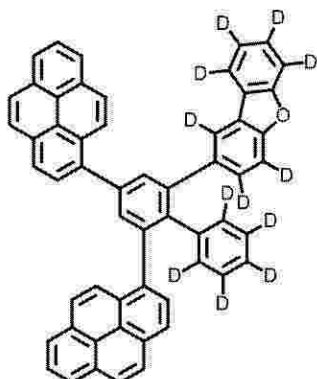
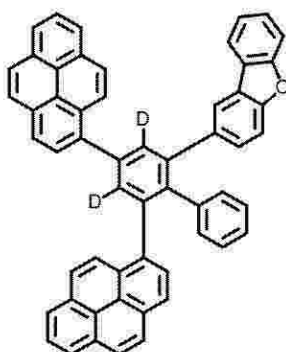
【化 7 9】



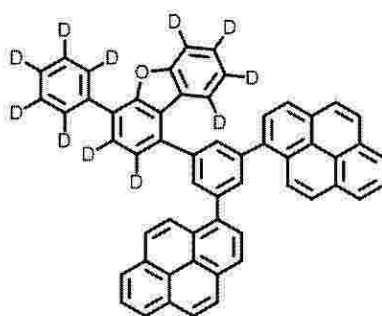
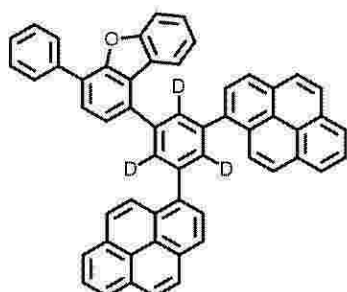
10



20



30

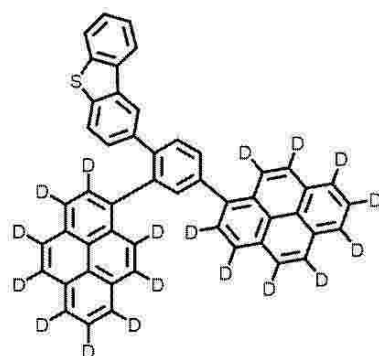
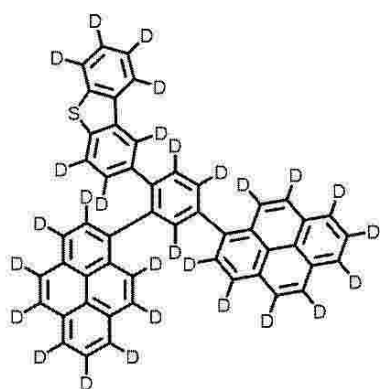
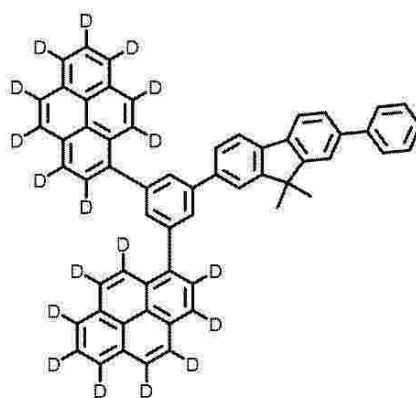
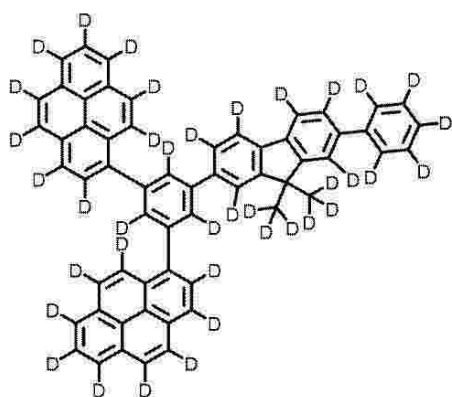
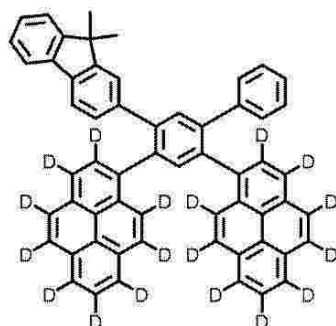
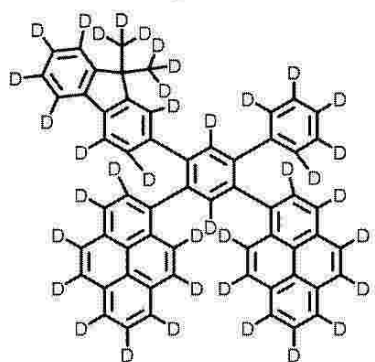
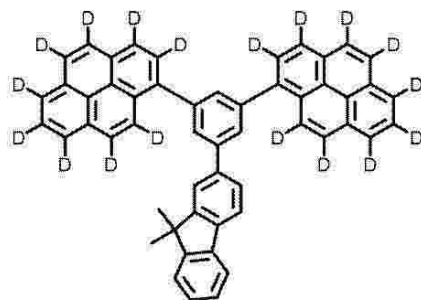
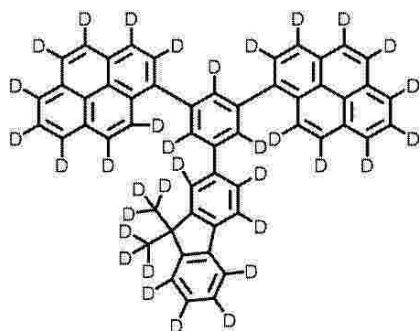


【 0 2 8 2】

40

50

【化 8 0】



【 0 2 8 3】

10

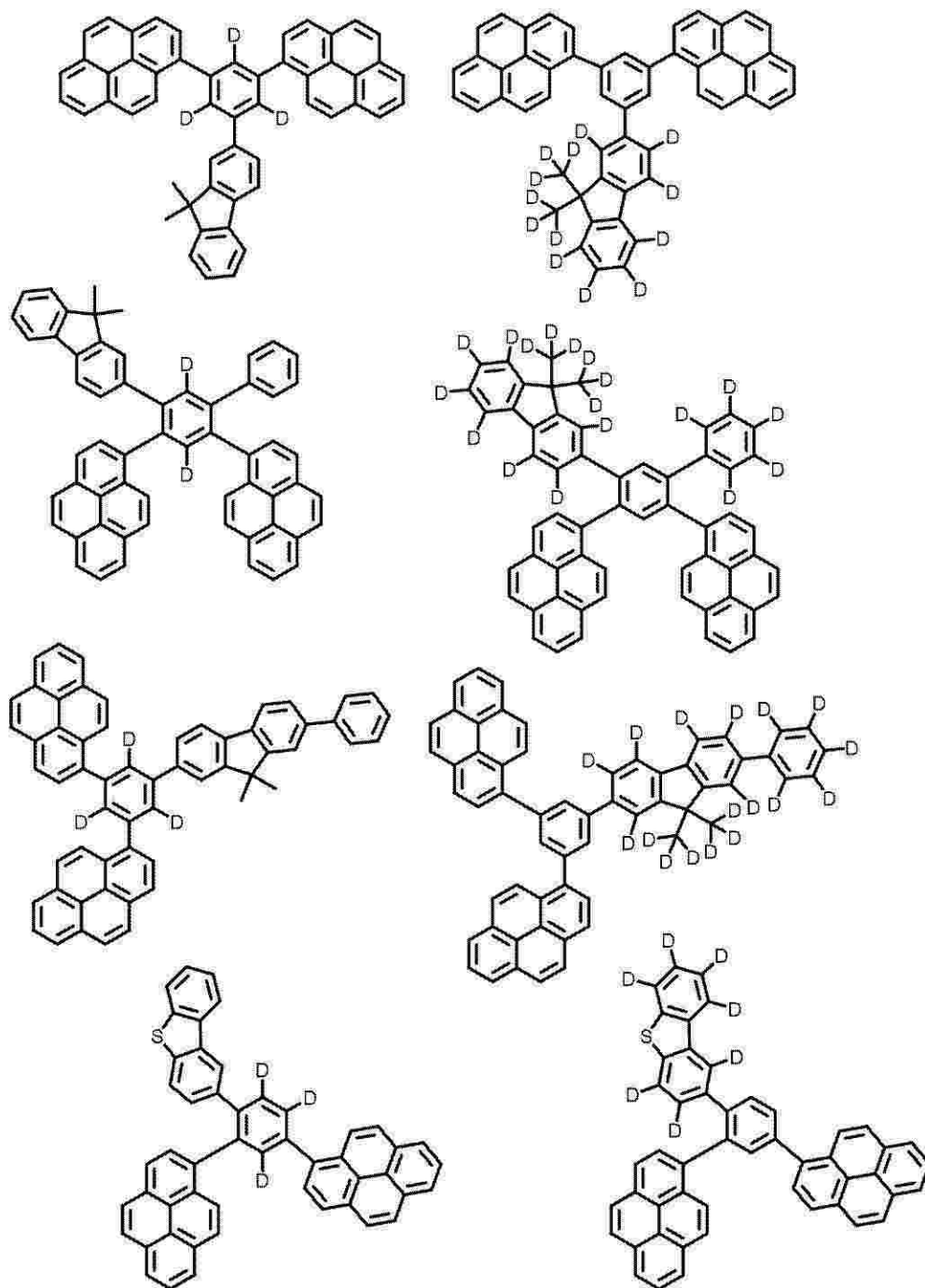
20

30

40

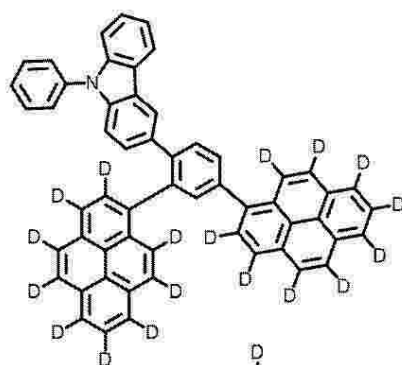
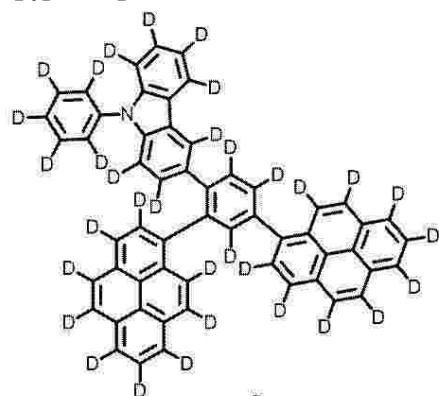
50

【化 8 1】

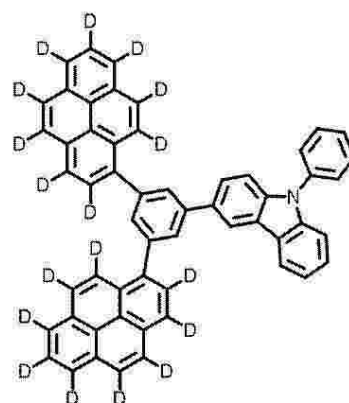
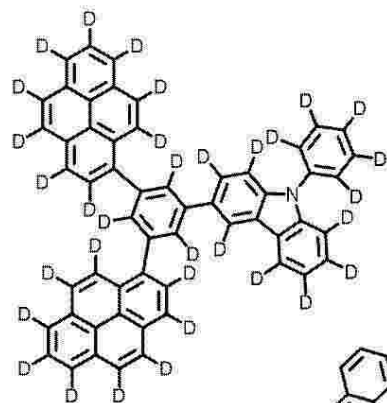


【 0 2 8 4】

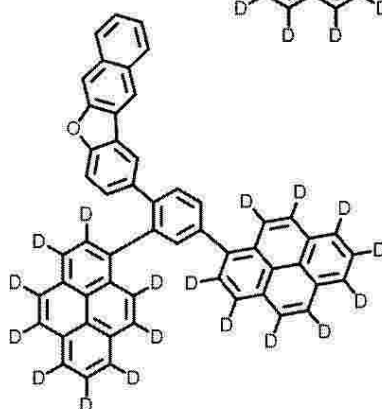
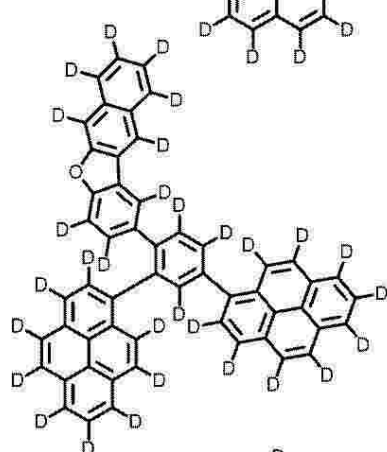
【化 8 2】



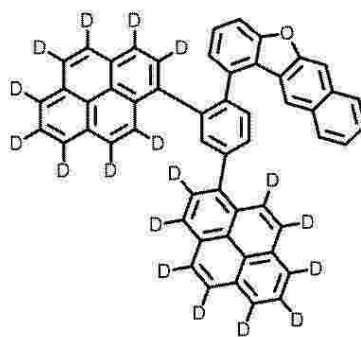
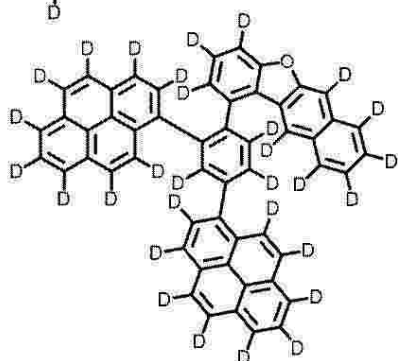
10



20



30

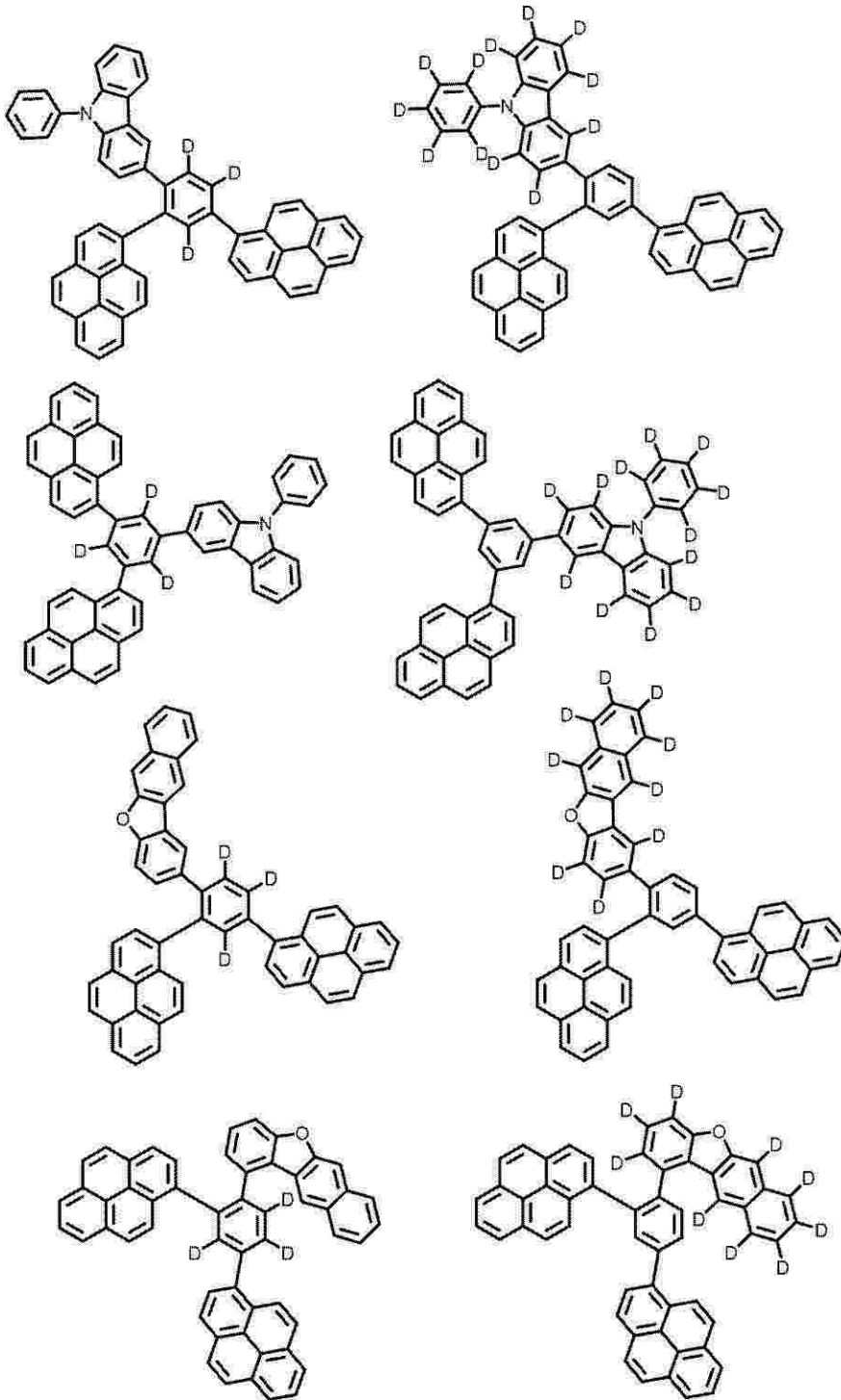


40

【 0 2 8 5】

50

【化 8 3】



【 0 2 8 6】

10

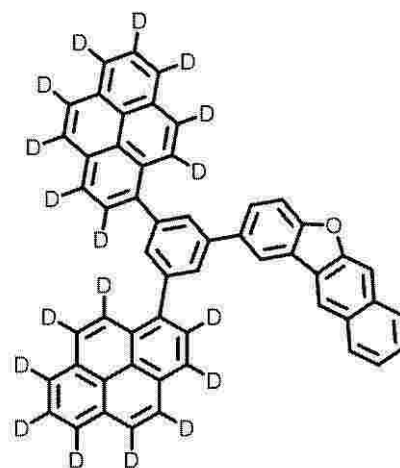
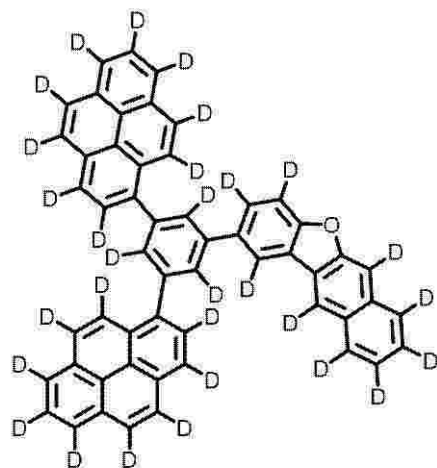
20

30

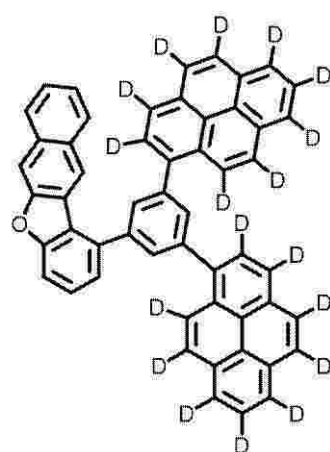
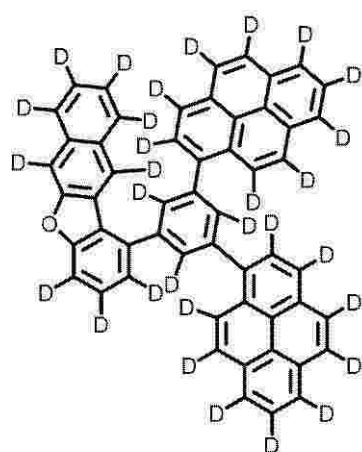
40

50

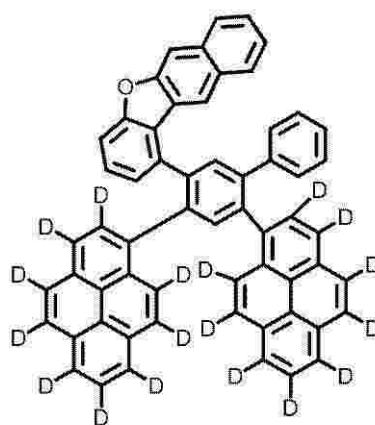
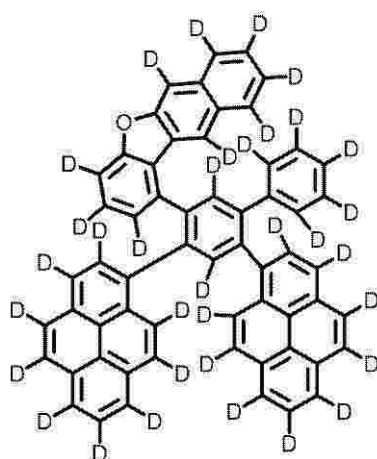
【化 8 4】



10



20



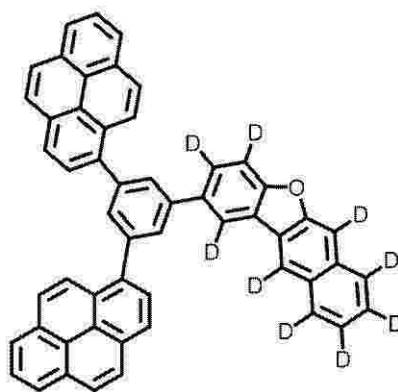
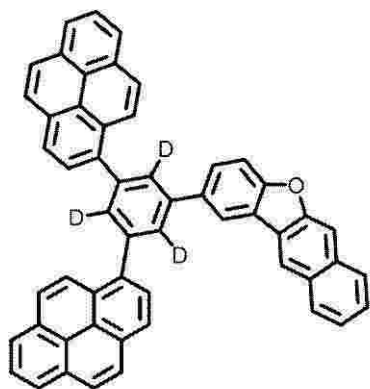
30

【 0 2 8 7 】

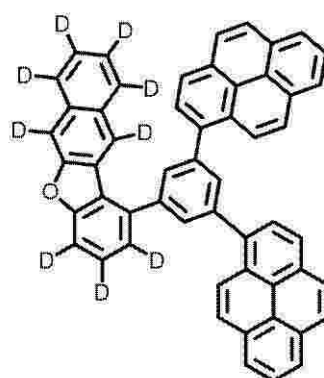
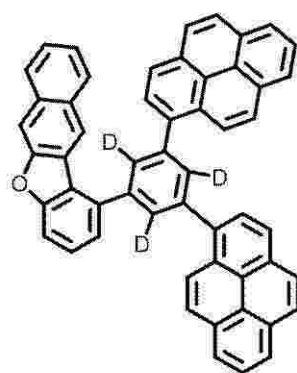
40

50

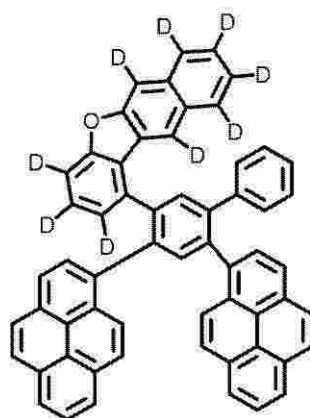
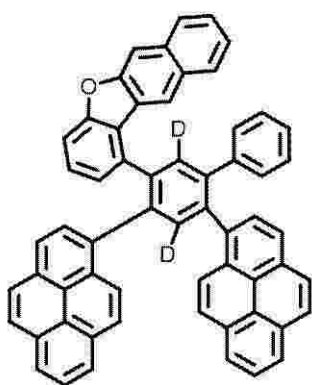
【化 8 5】



10



20



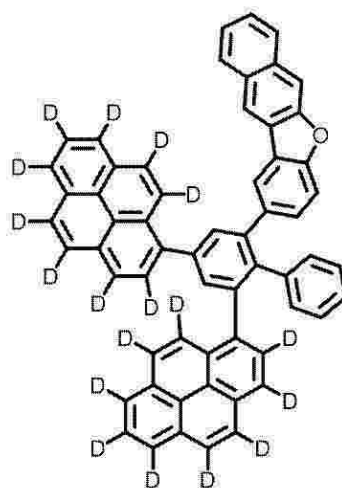
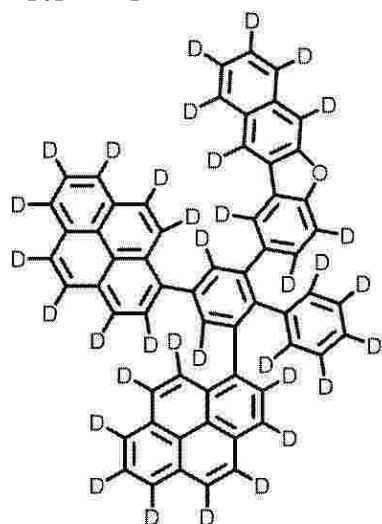
30

【 0 2 8 8 】

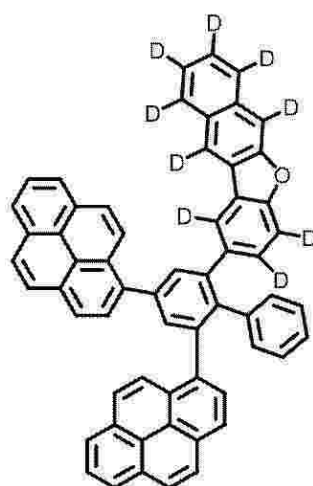
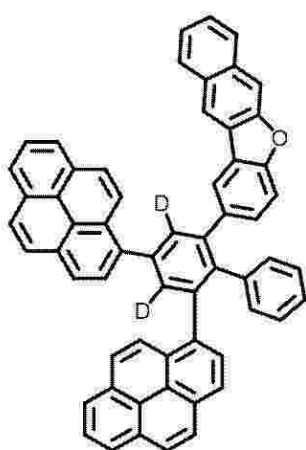
40

50

【化 8 6】



10



20

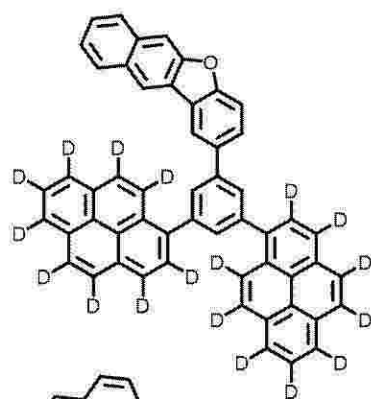
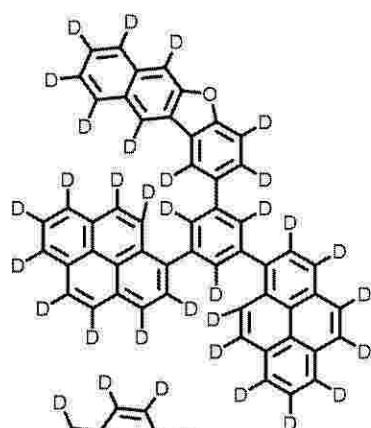
【 0 2 8 9】

30

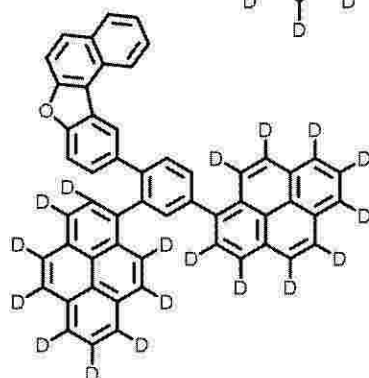
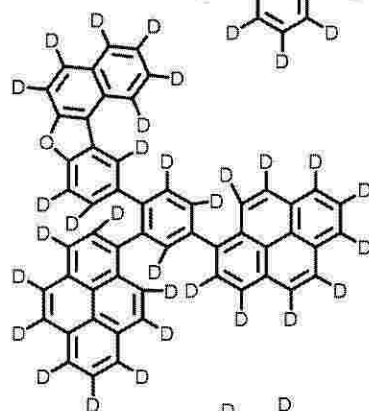
40

50

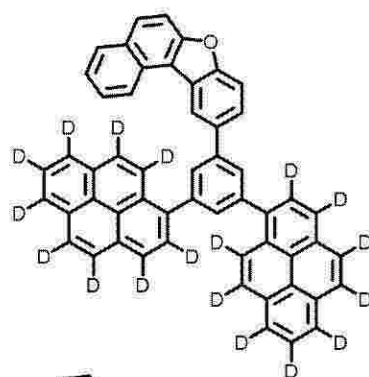
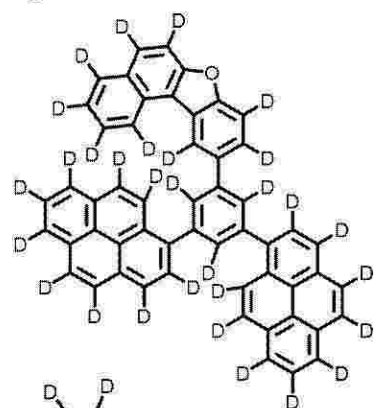
【化 8 7】



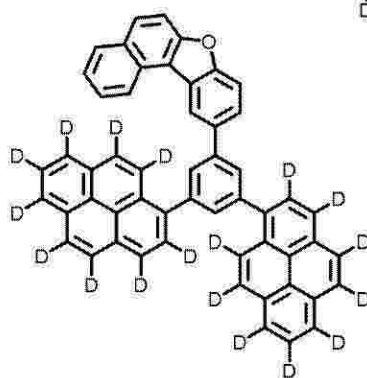
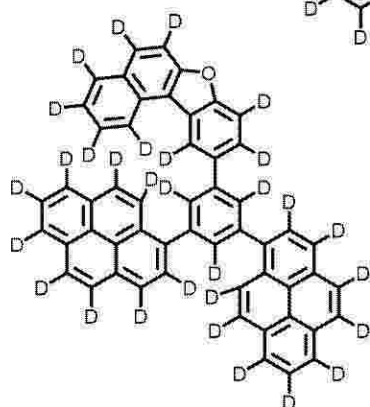
10



20



30

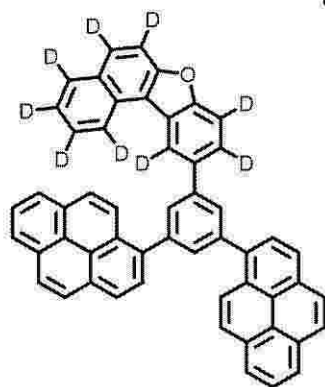
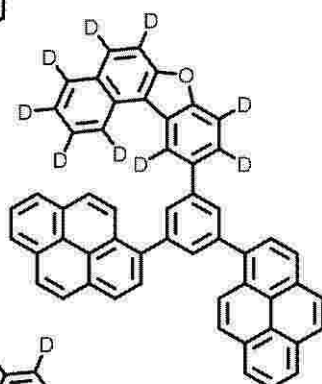
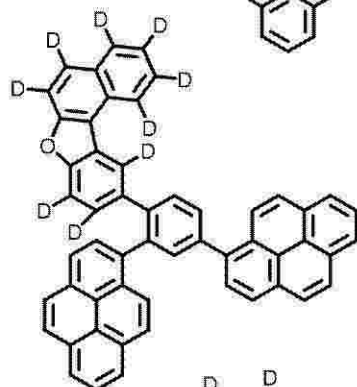
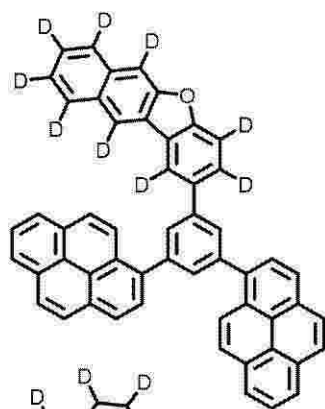
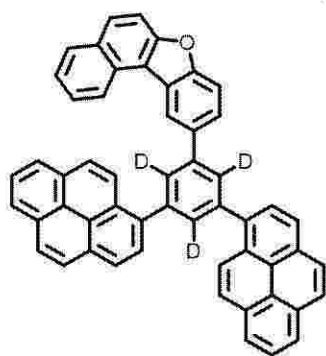
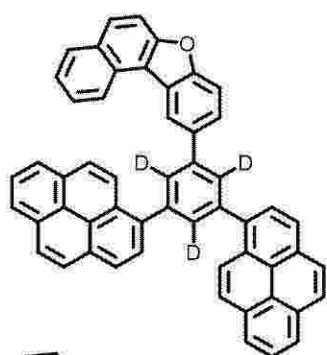
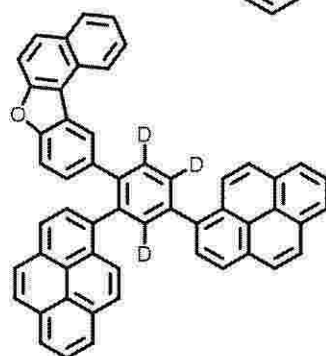
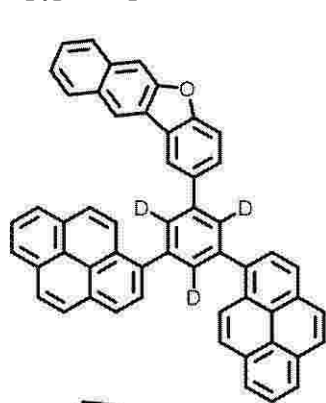


40

【 0 2 9 0 】

50

【化 8 8】



【 0 2 9 1】

10

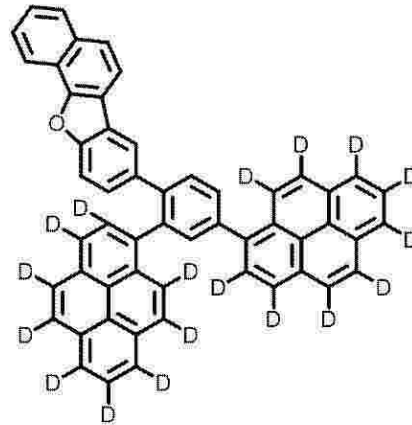
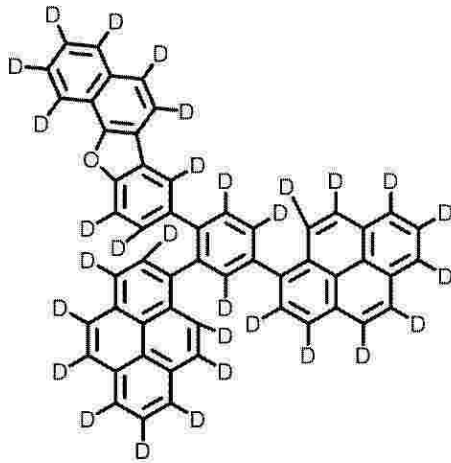
20

30

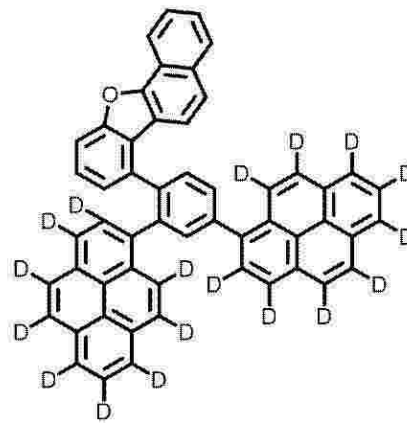
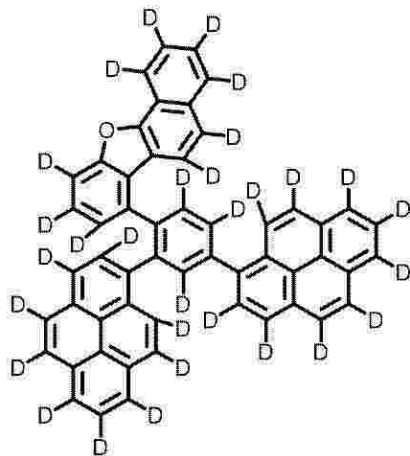
40

50

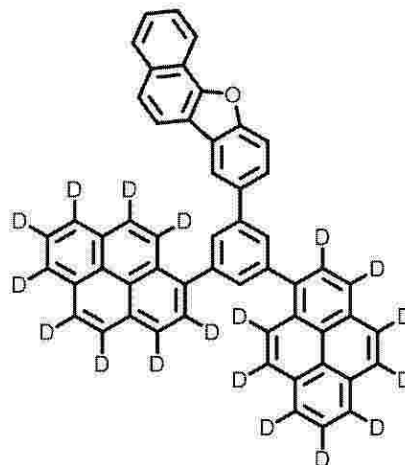
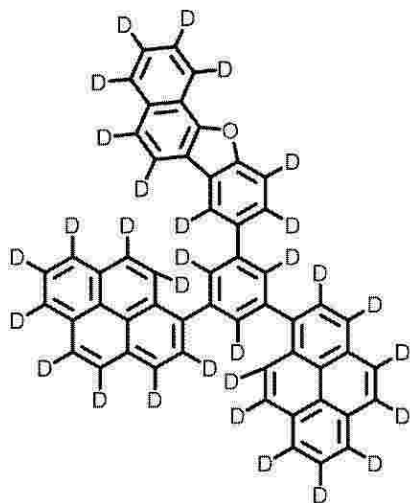
【化 8 9】



10



20



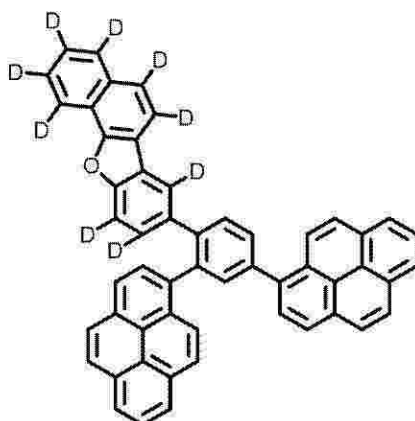
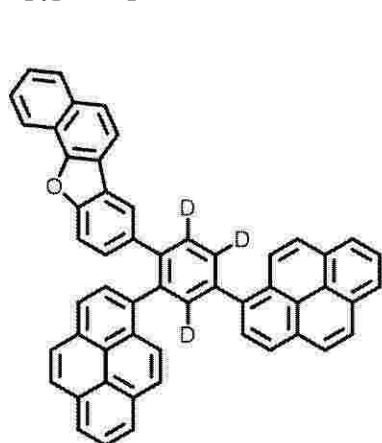
30

40

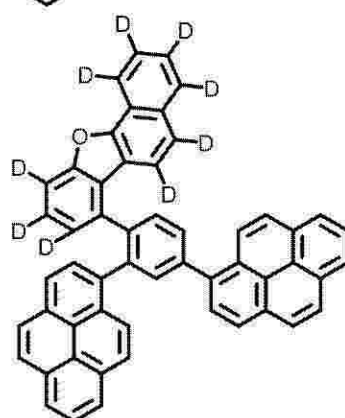
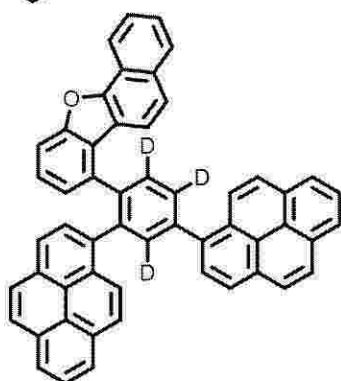
【 0 2 9 2】

50

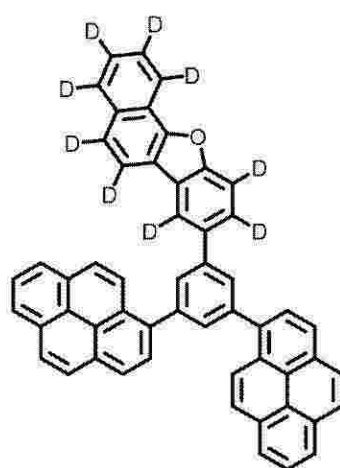
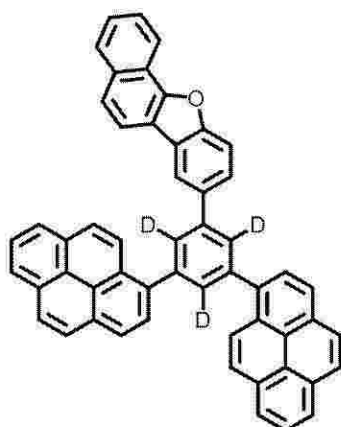
【化 9 0】



10



20



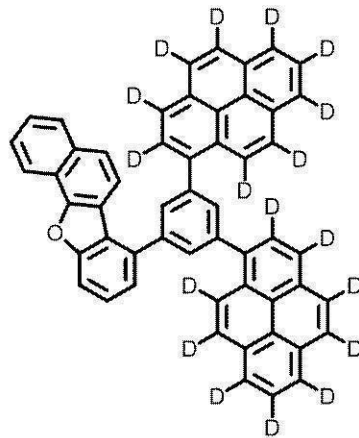
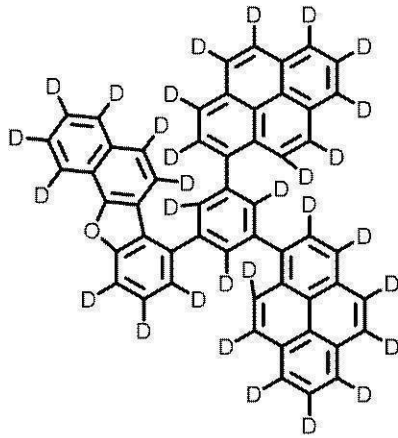
30

【 0 2 9 3】

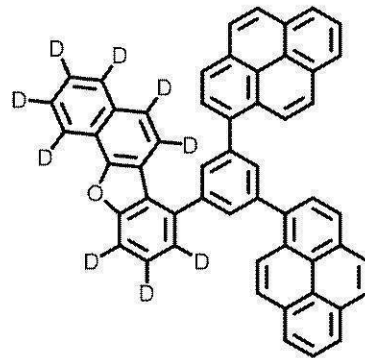
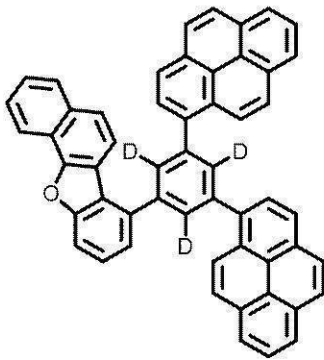
40

50

【化 9 1】



10



20

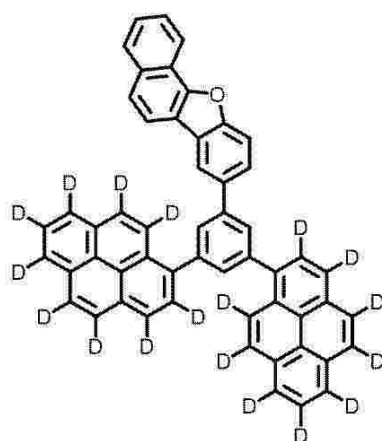
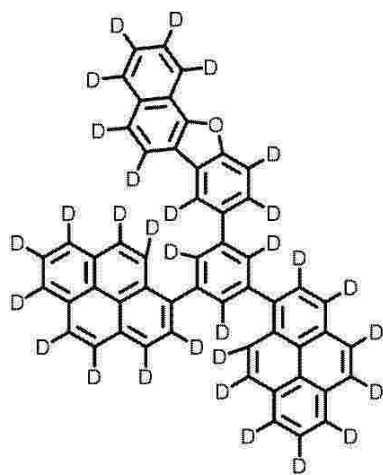
【 0 2 9 4】

30

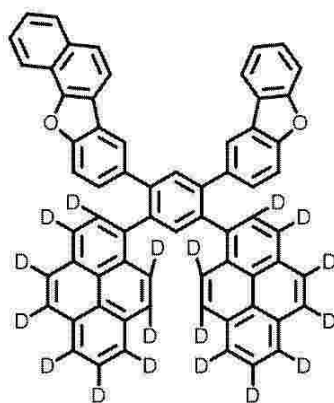
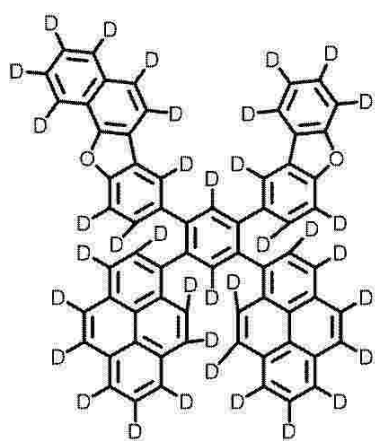
40

50

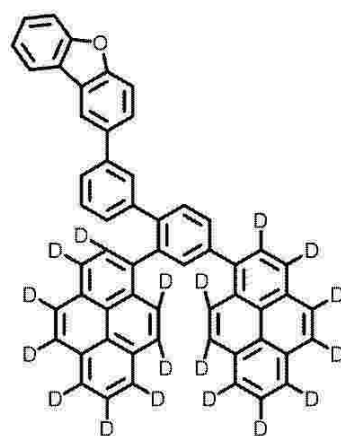
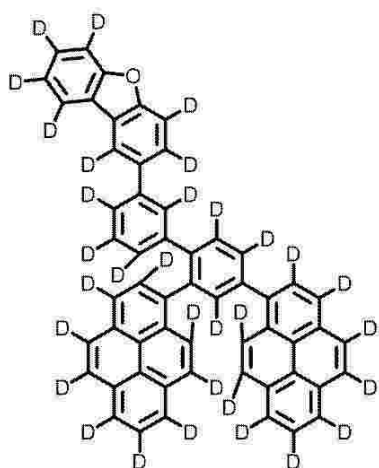
【化 9 2】



10



20



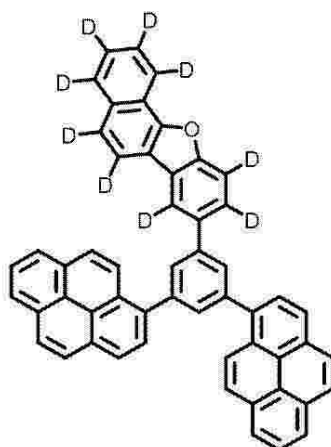
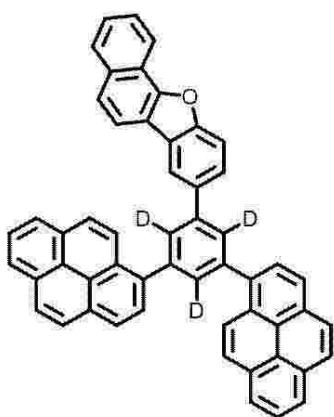
30

40

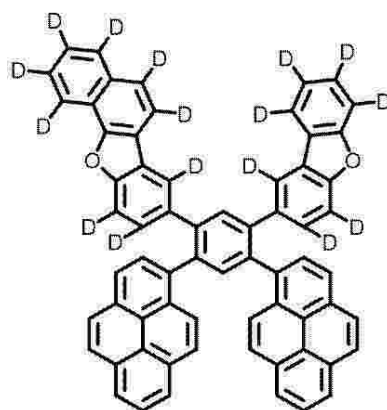
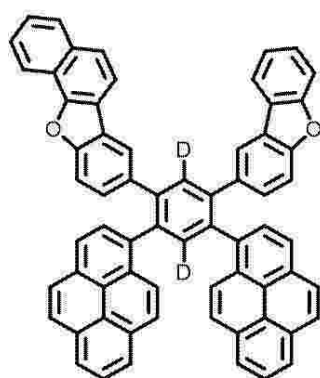
【 0 2 9 5】

50

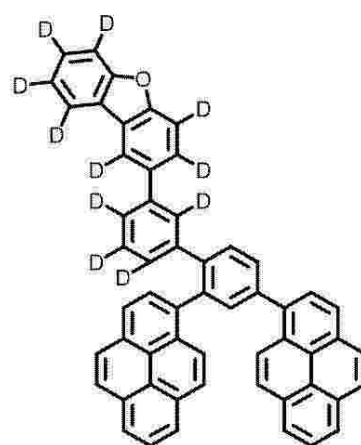
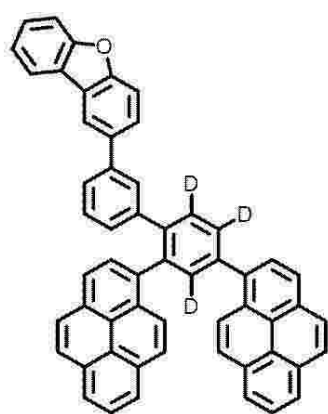
【化 9 3】



10



20



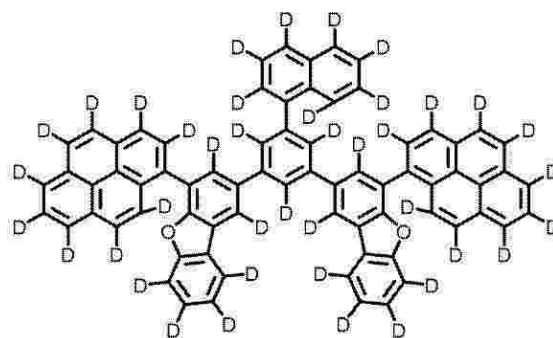
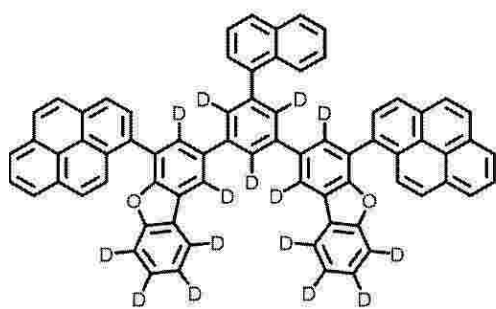
30

40

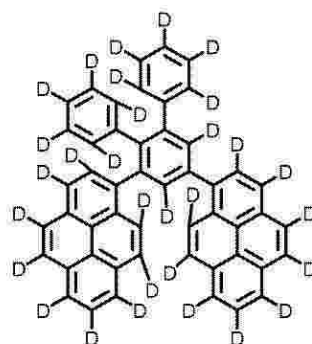
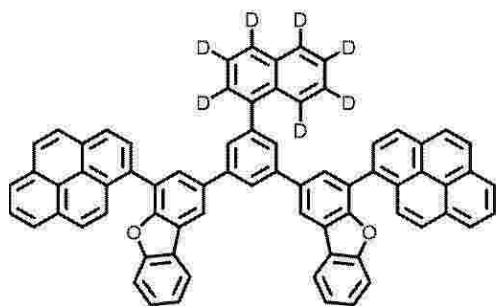
【 0 2 9 6】

50

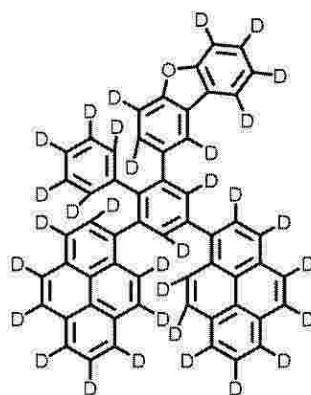
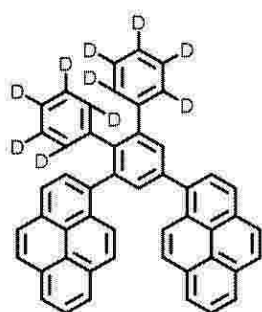
【化 9 4】



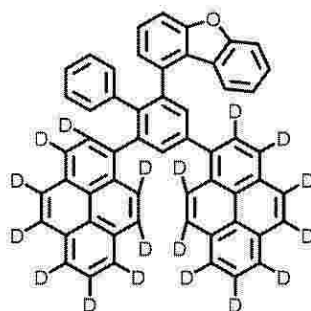
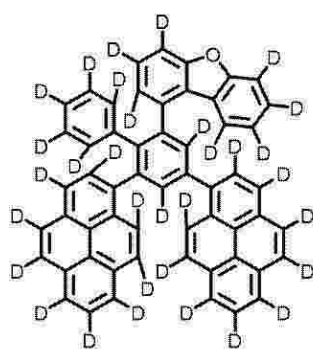
10



20



30

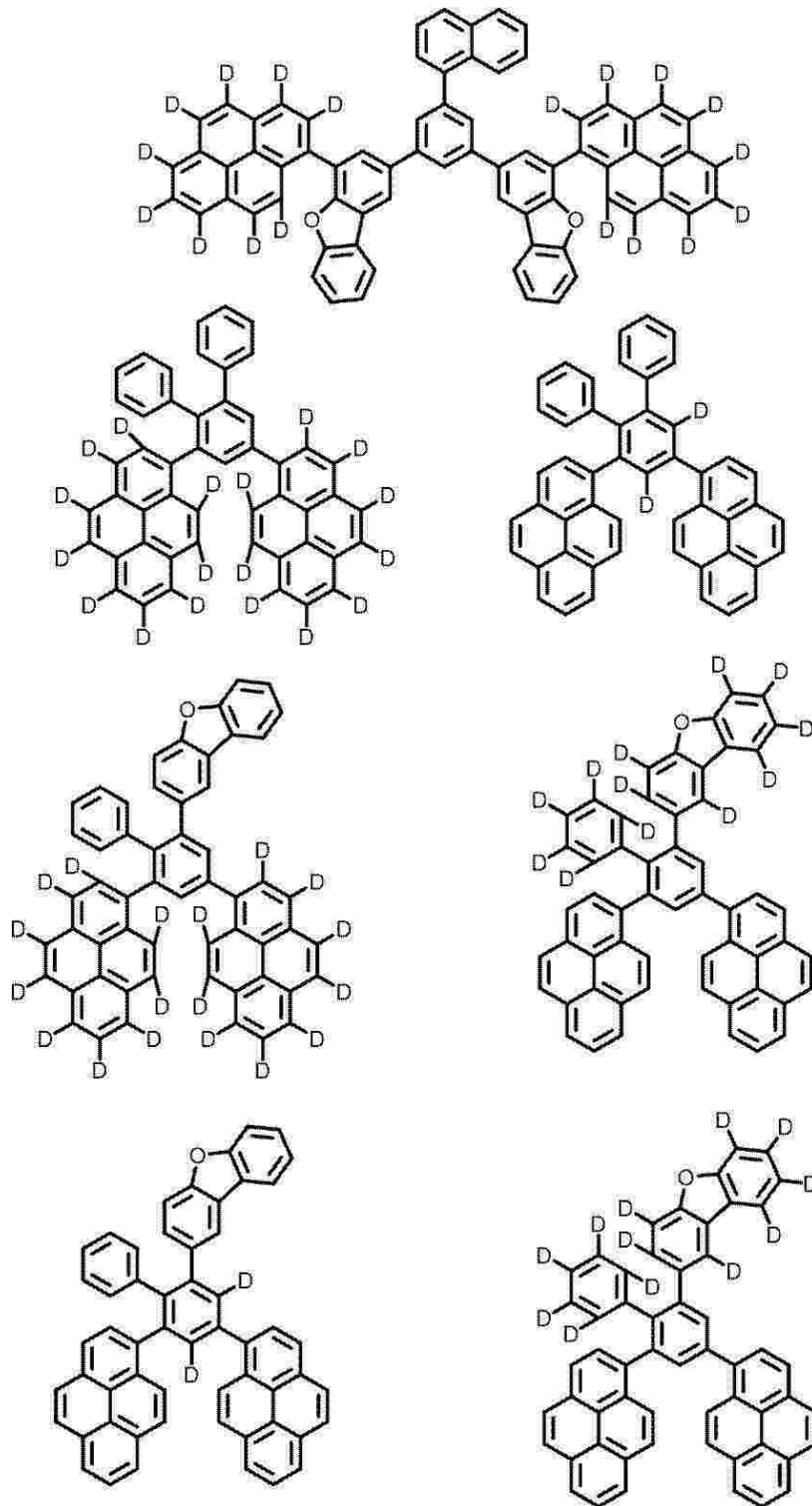


【 0 2 9 7】

40

50

【化 9 5】



【 0 2 9 8】

10

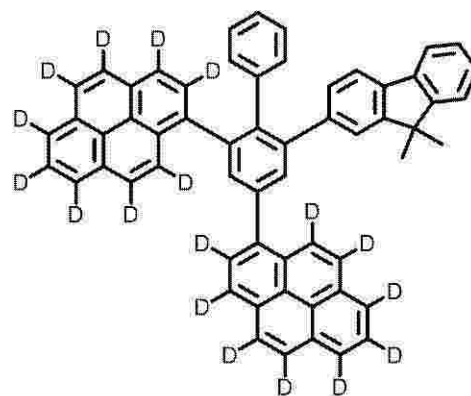
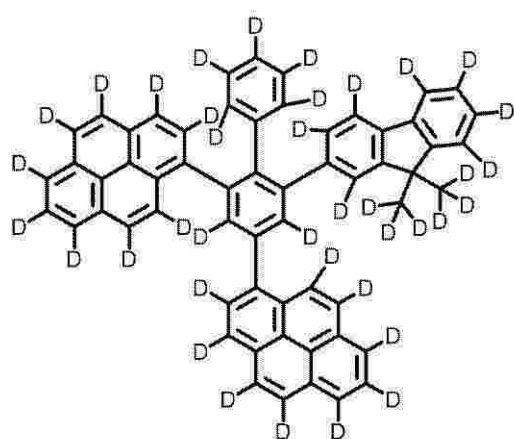
20

30

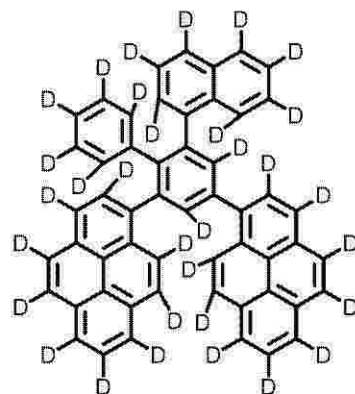
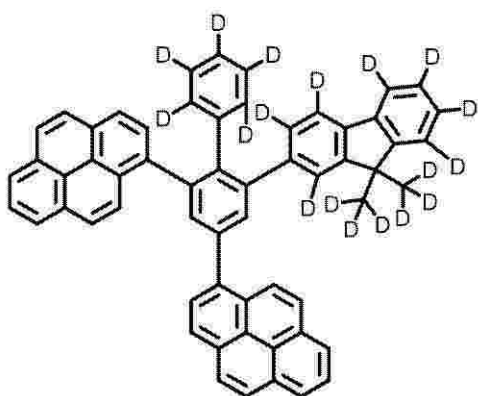
40

50

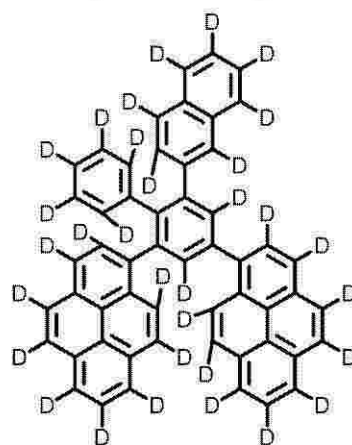
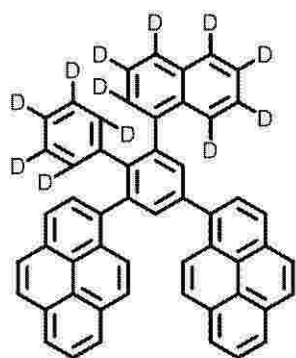
【化 9 6】



10



20



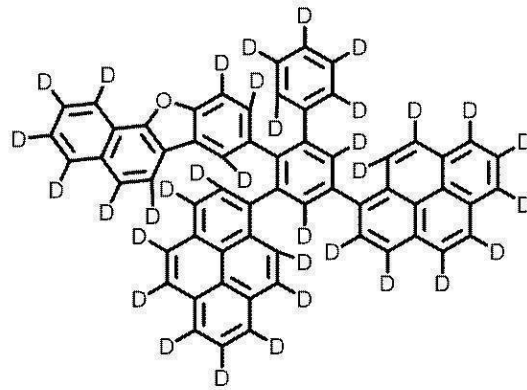
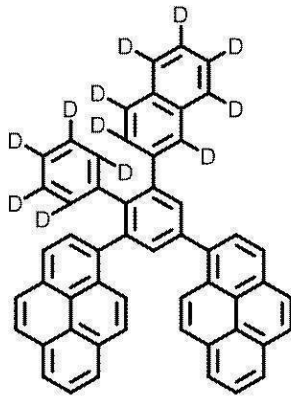
30

【 0 2 9 9 】

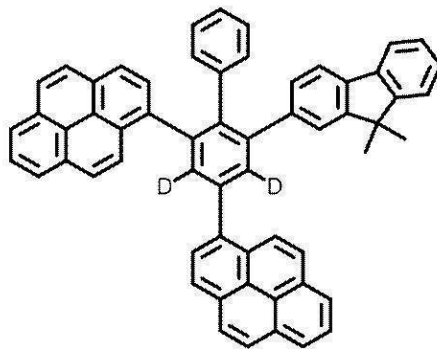
40

50

【化 9 7】



10



20

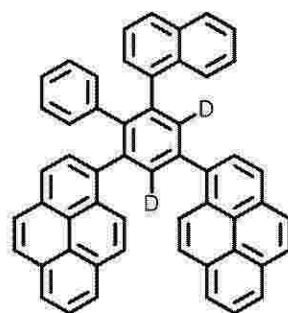
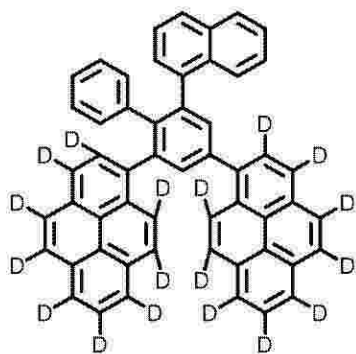
【 0 3 0 0 】

30

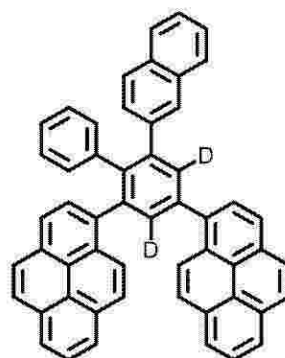
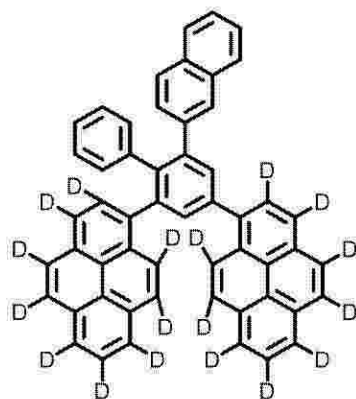
40

50

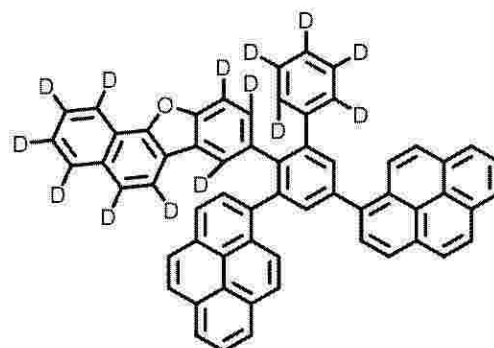
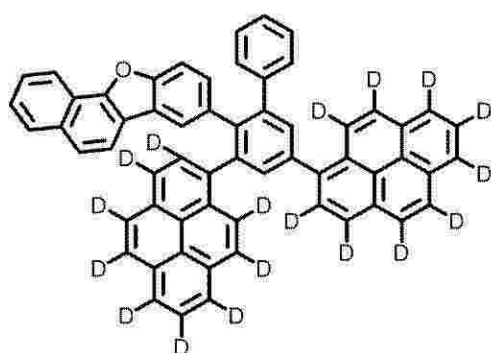
【化 9 8】



10



20



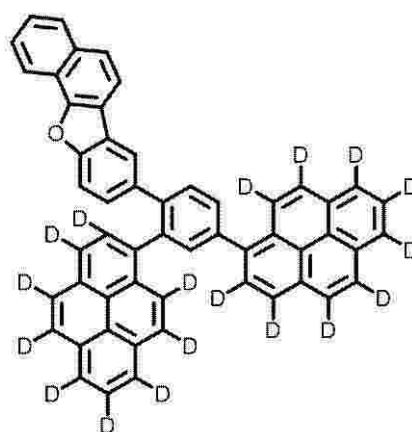
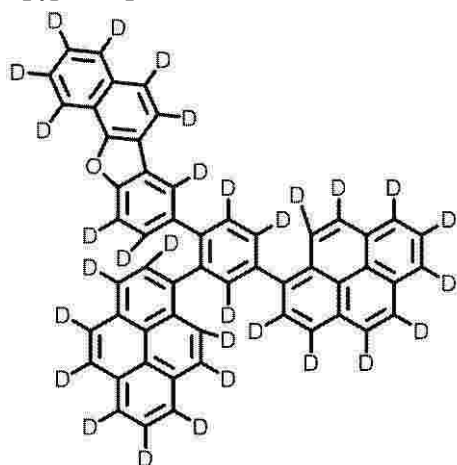
30

【 0 3 0 1】

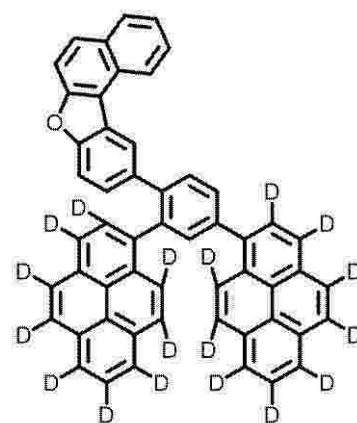
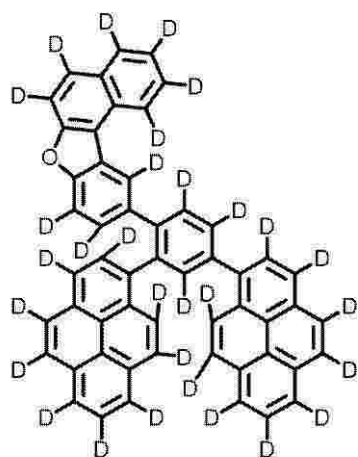
40

50

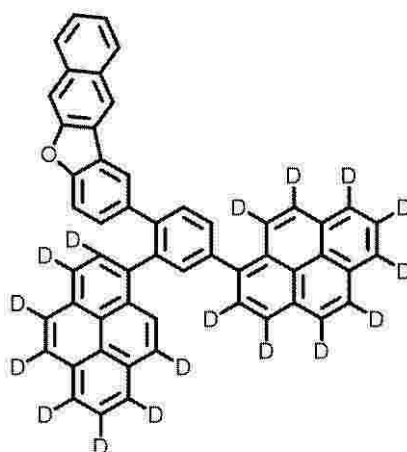
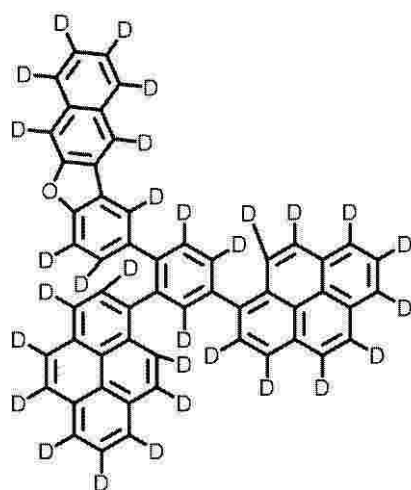
【化 9 9】



10



20



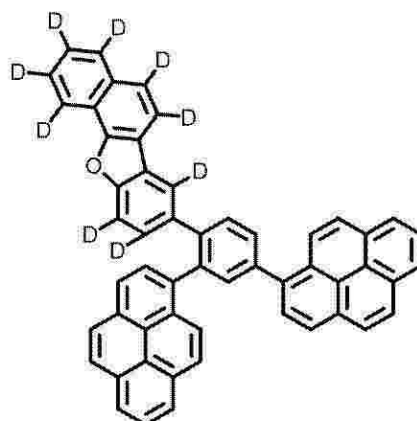
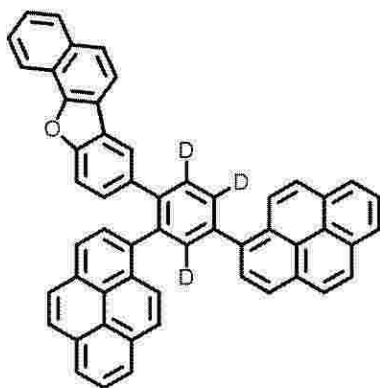
30

40

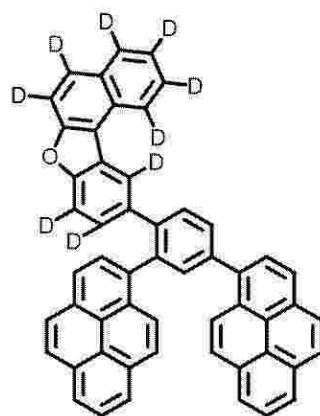
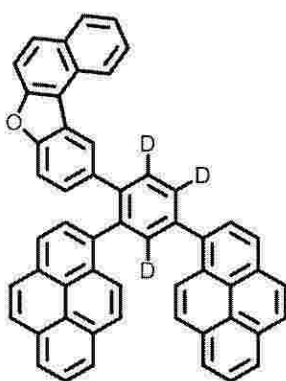
【 0 3 0 2】

50

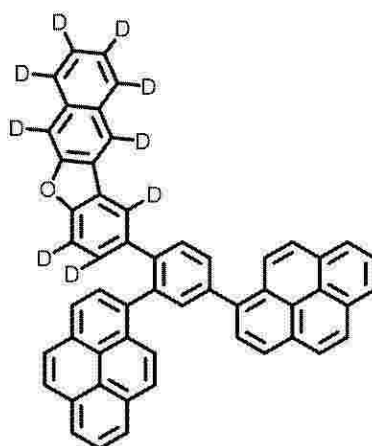
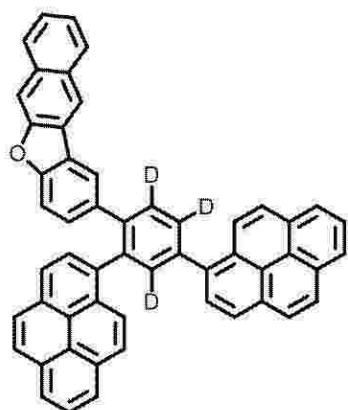
【化 1 0 0】



10



20



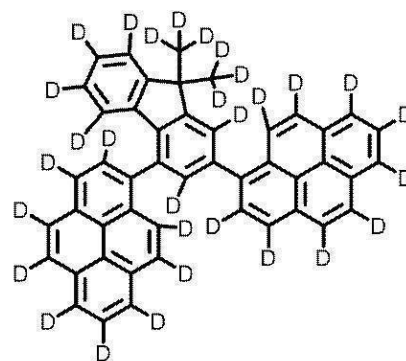
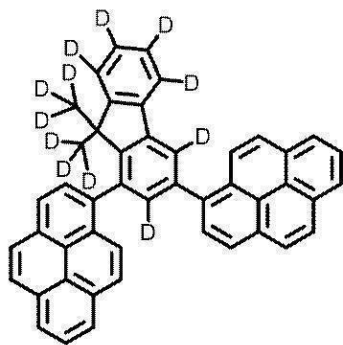
30

【 0 3 0 3】

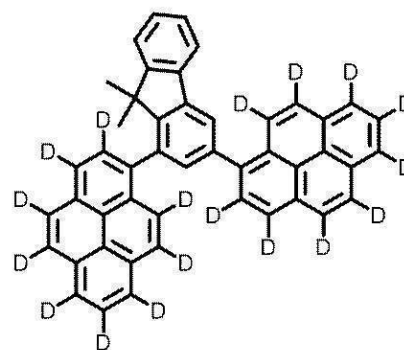
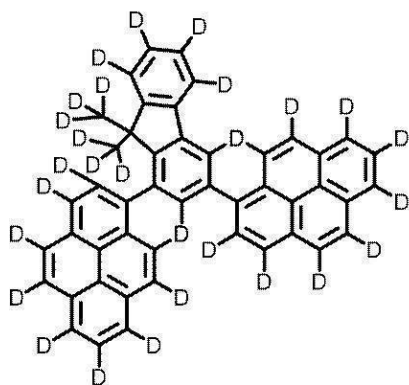
40

50

【化 1 0 1】



10



20

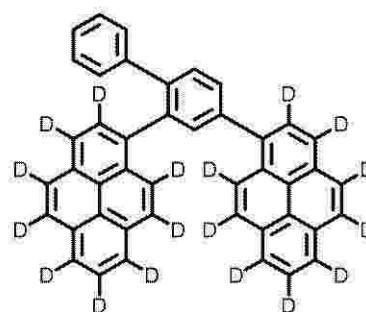
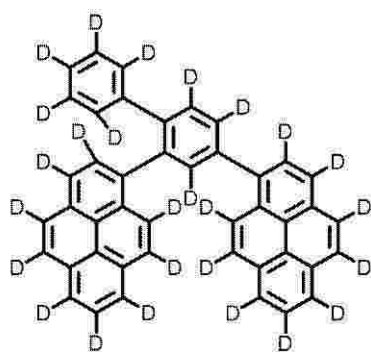
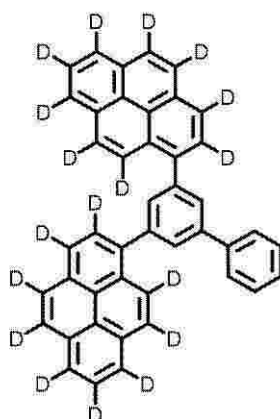
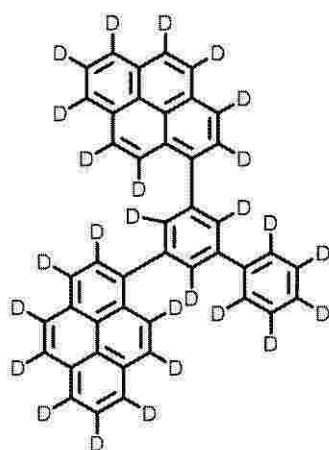
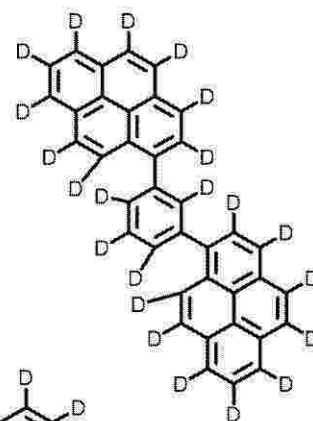
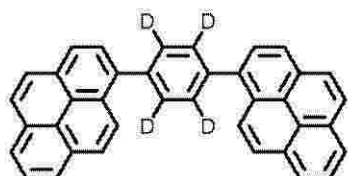
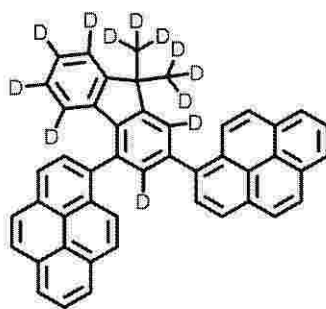
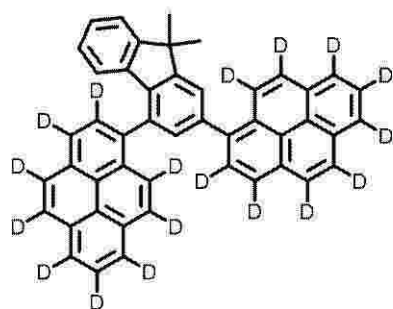
【 0 3 0 4】

30

40

50

【化 1 0 2】



【 0 3 0 5】

10

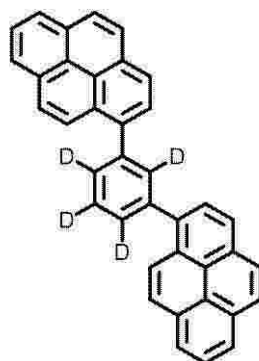
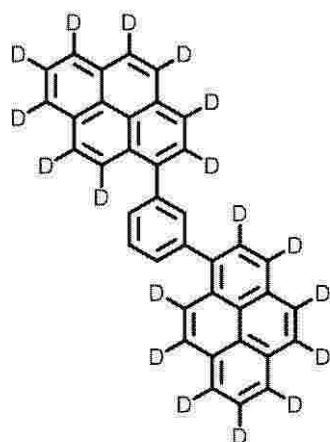
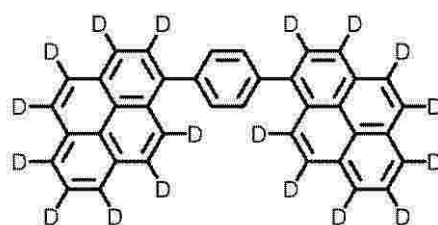
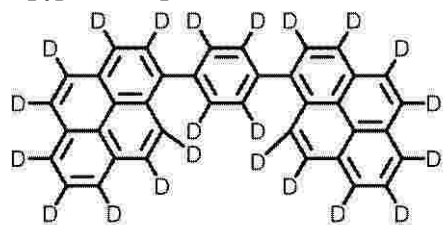
20

30

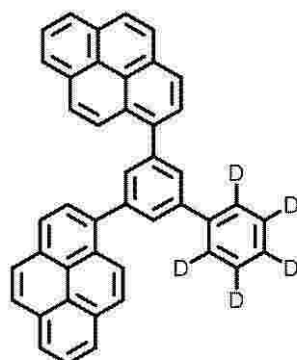
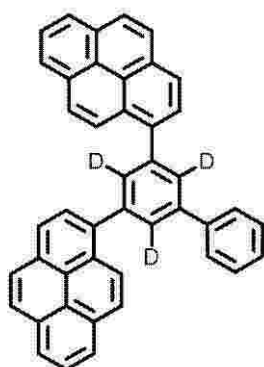
40

50

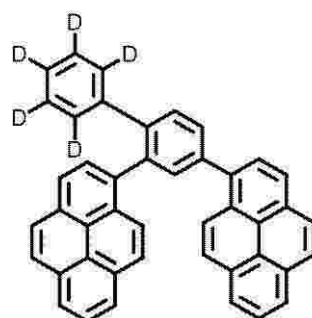
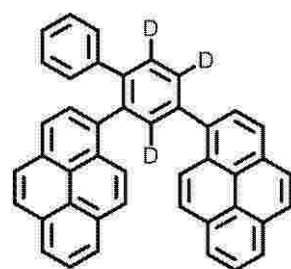
【化 1 0 3】



10



20



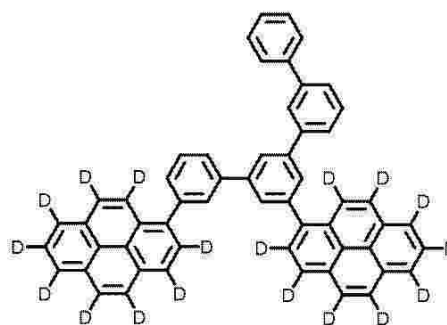
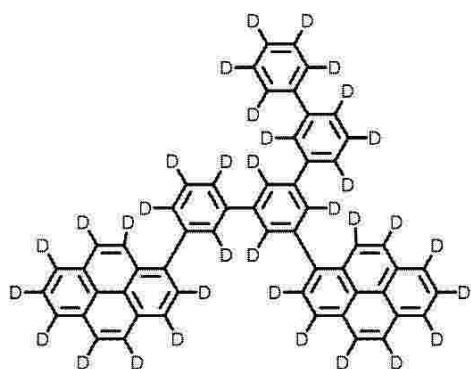
30

【 0 3 0 6】

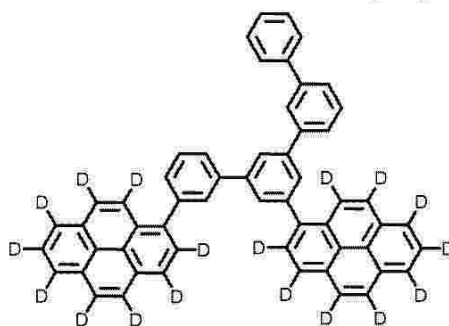
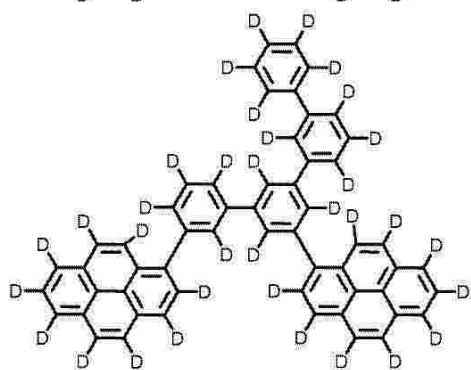
40

50

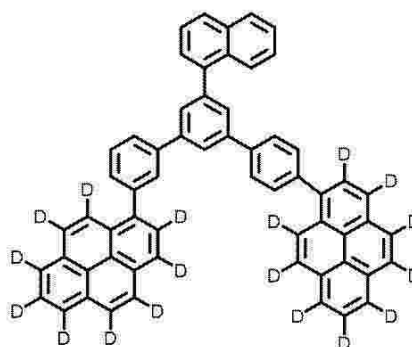
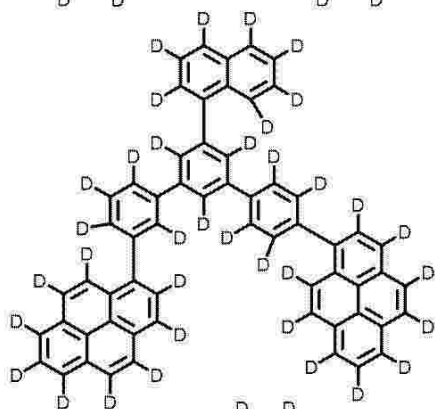
【化 1 0 4】



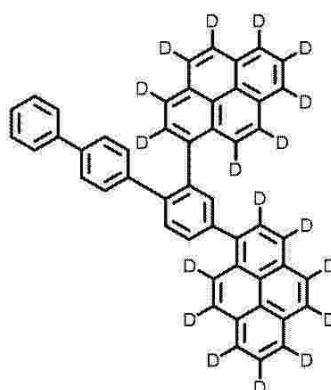
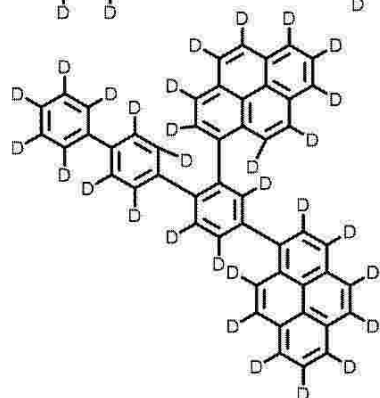
10



20



30

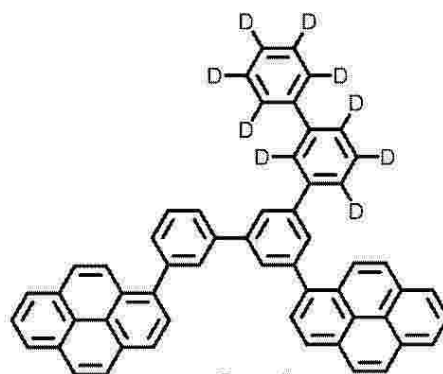
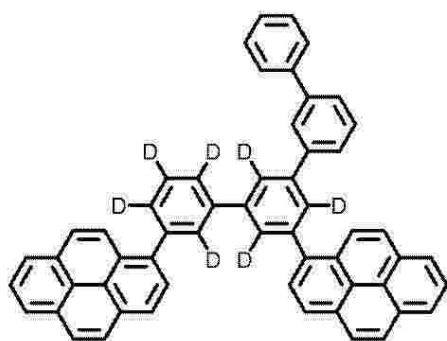


40

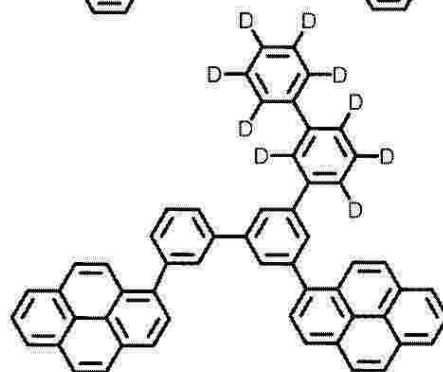
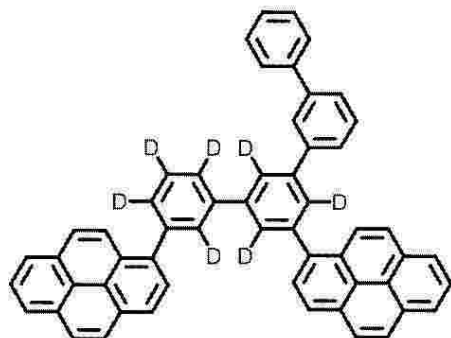
【 0 3 0 7】

50

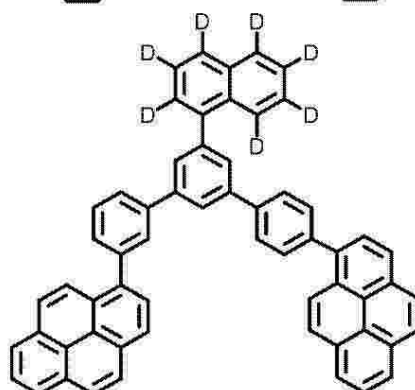
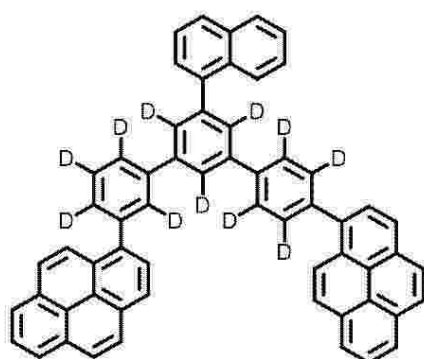
【化 1 0 5】



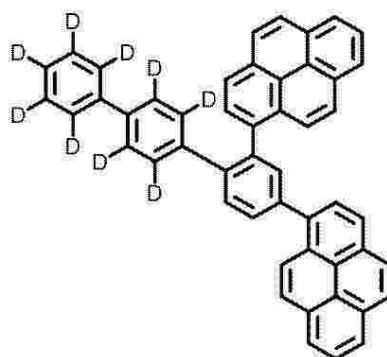
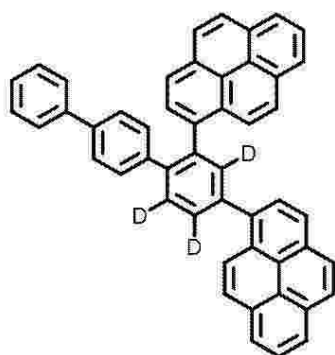
10



20



30

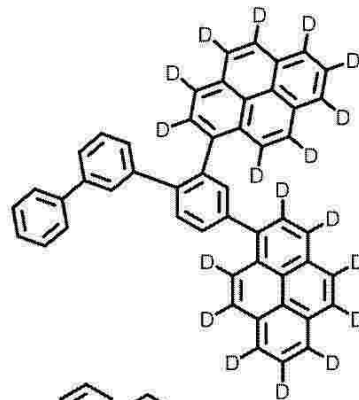
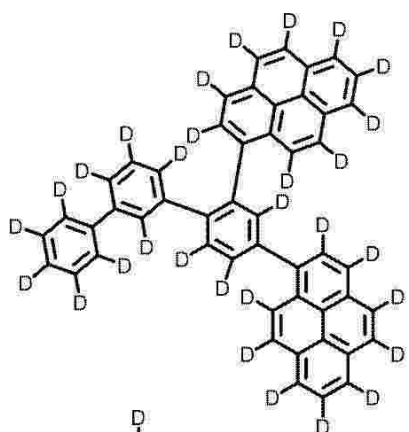


40

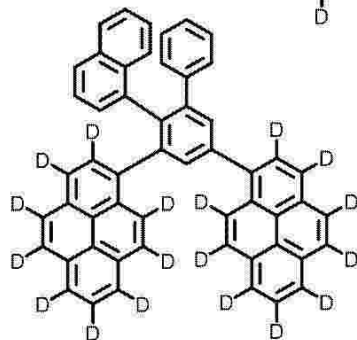
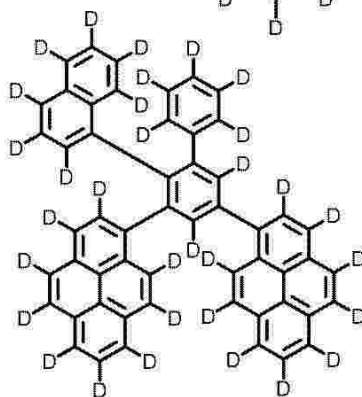
【 0 3 0 8】

50

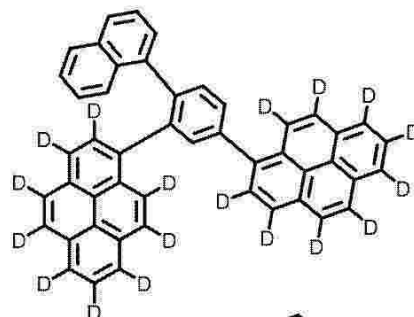
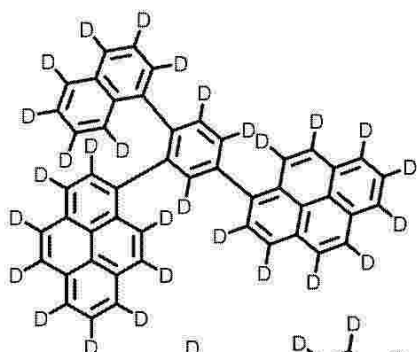
【化 1 0 6】



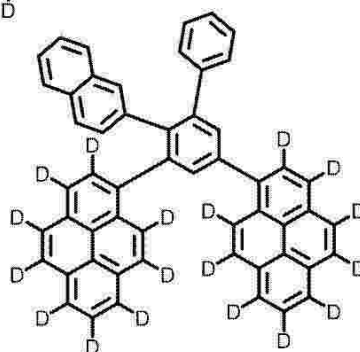
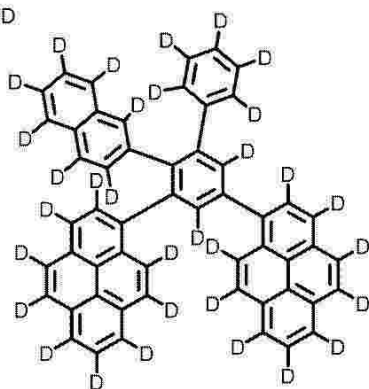
10



20



30

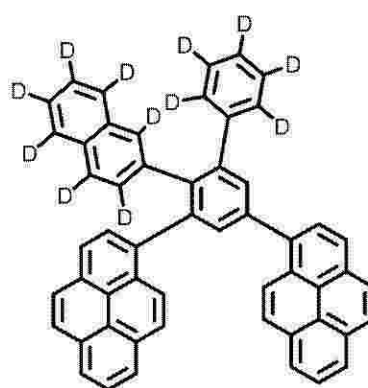
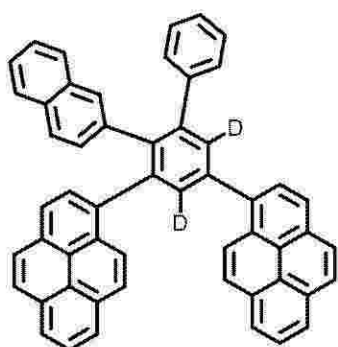
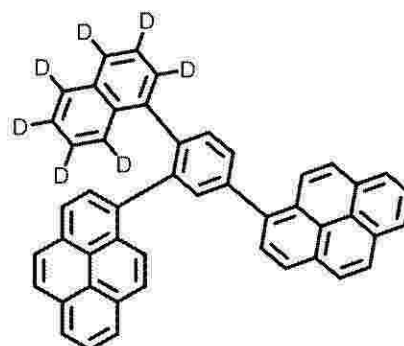
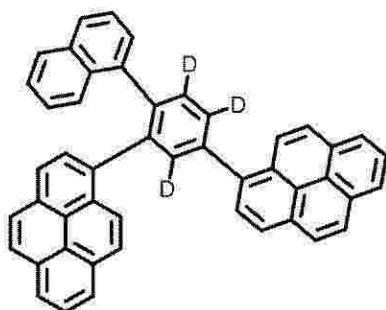
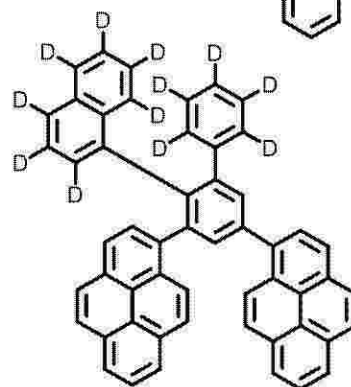
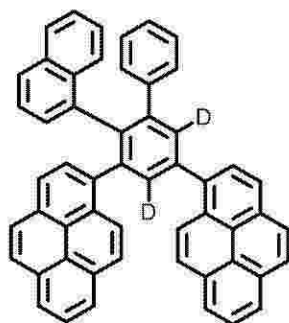
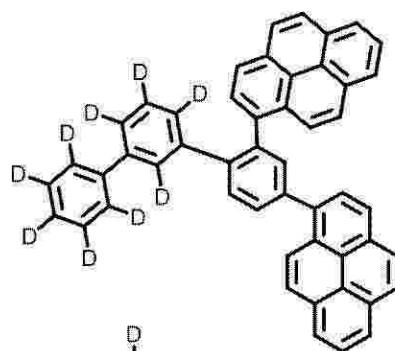
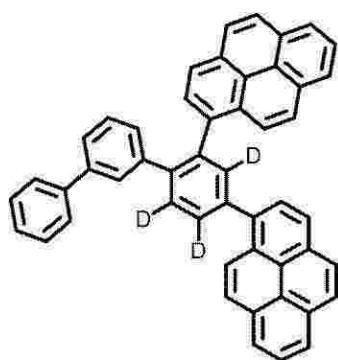


40

【 0 3 0 9】

50

【化 1 0 7】



【 0 3 1 0】

10

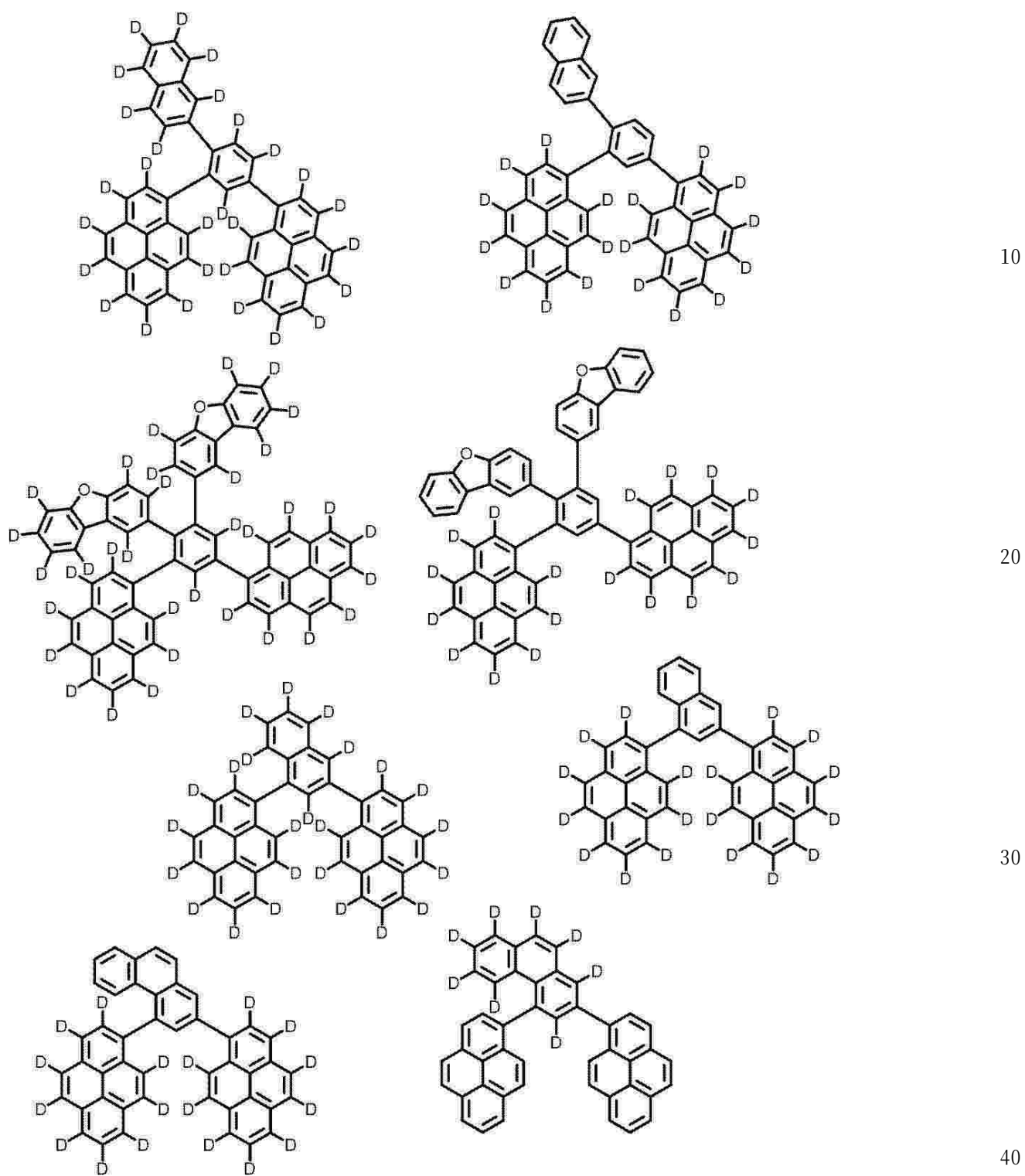
20

30

40

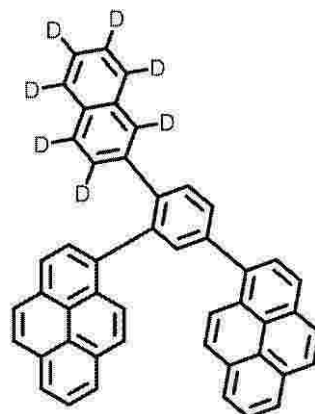
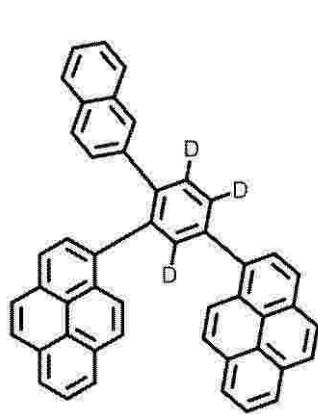
50

【化 1 0 8】

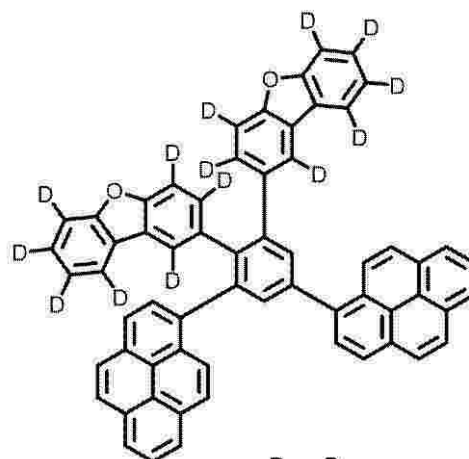
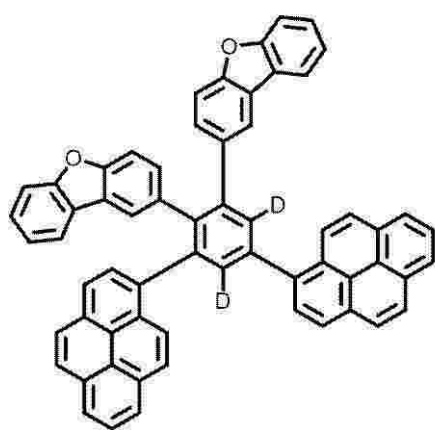


【 0 3 1 1】

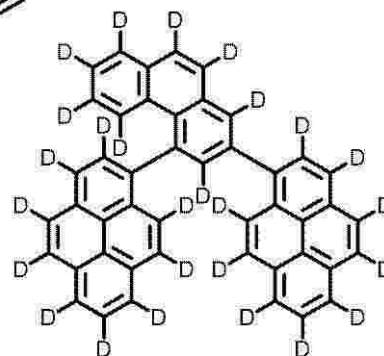
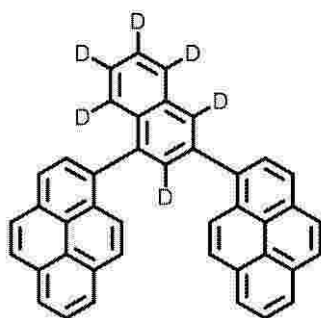
【化 1 0 9】



10



20



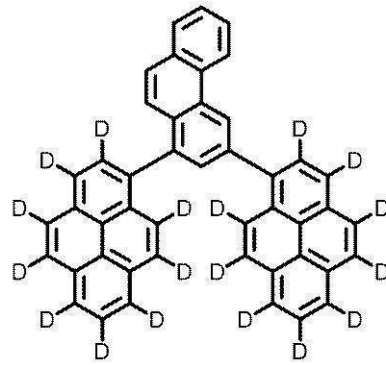
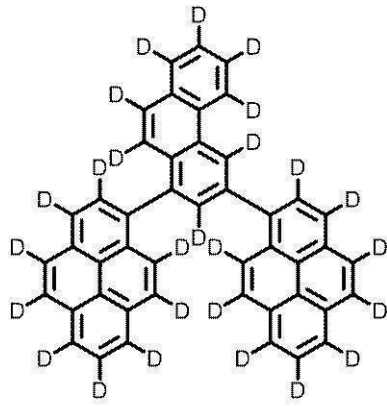
30

【 0 3 1 2】

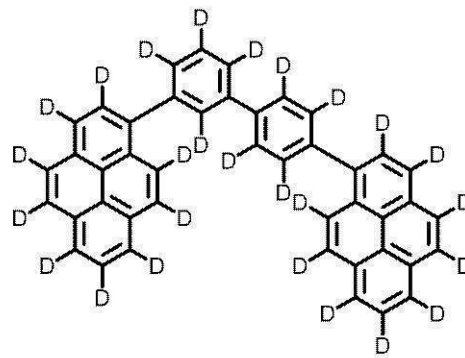
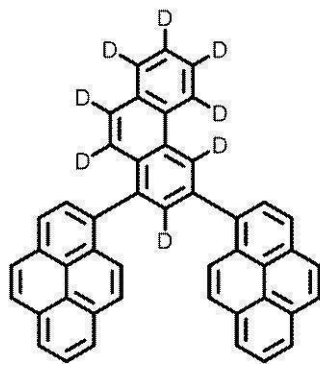
40

50

【化 1 1 0】



10



20

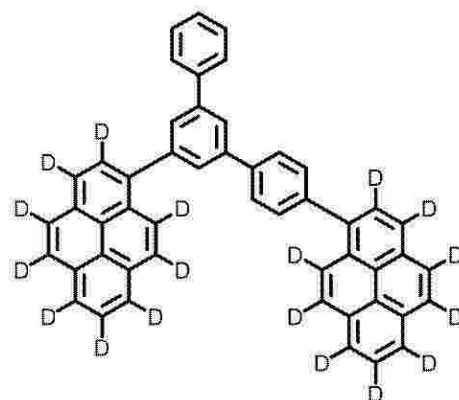
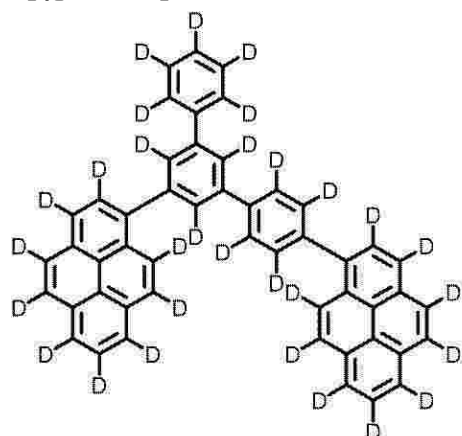
【 0 3 1 3】

30

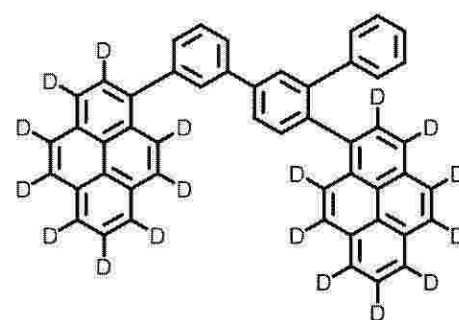
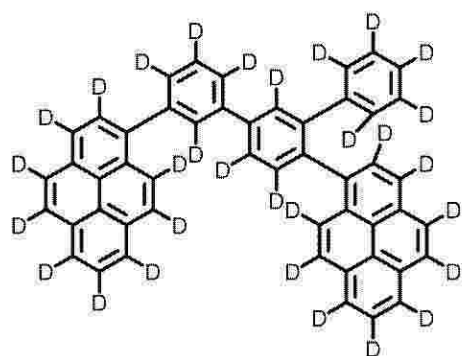
40

50

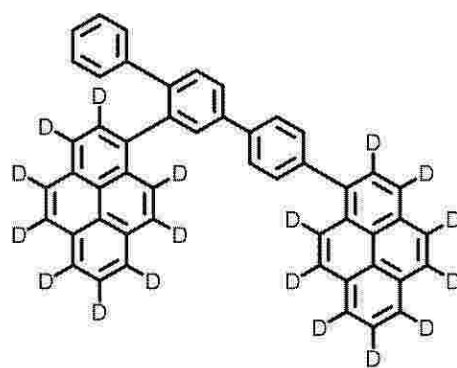
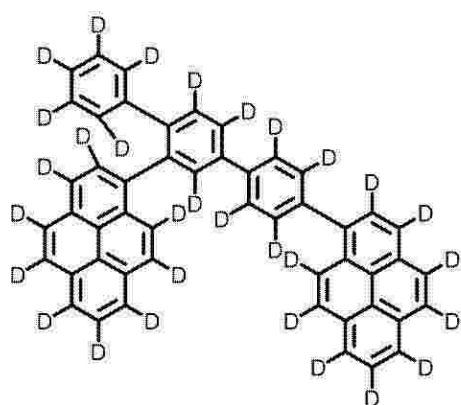
【化 1 1 1】



10



20



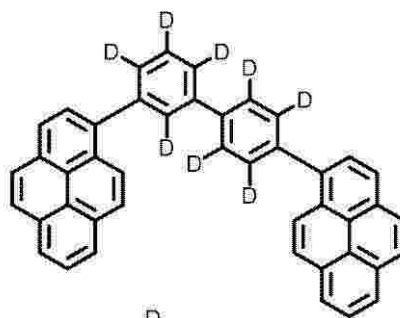
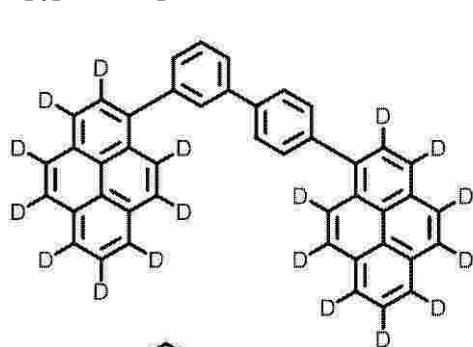
30

【 0 3 1 4】

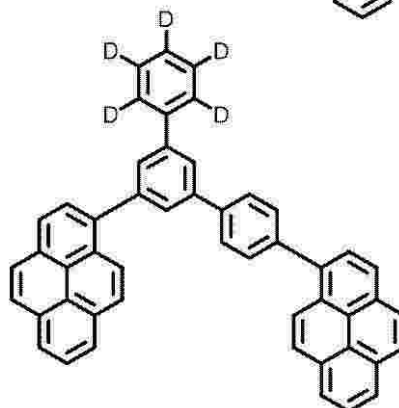
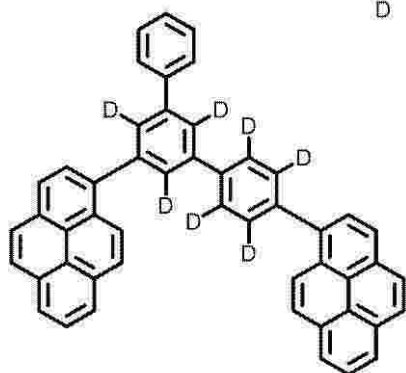
40

50

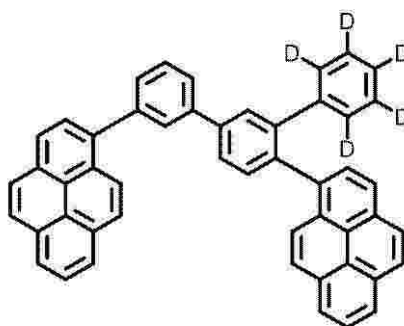
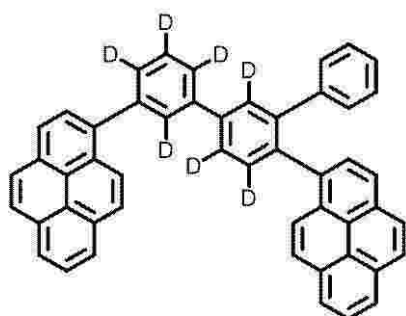
【化 1 1 2】



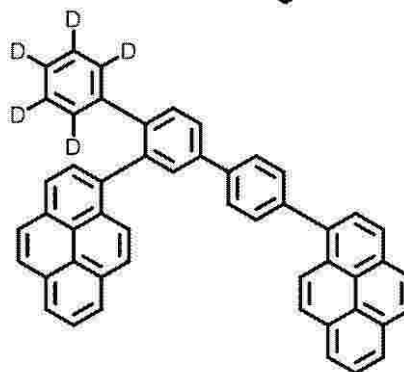
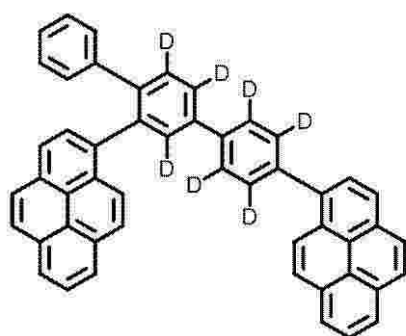
10



20



30

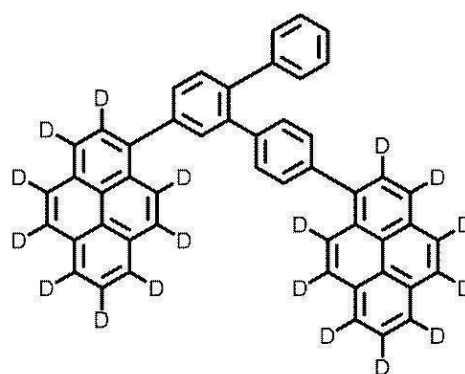
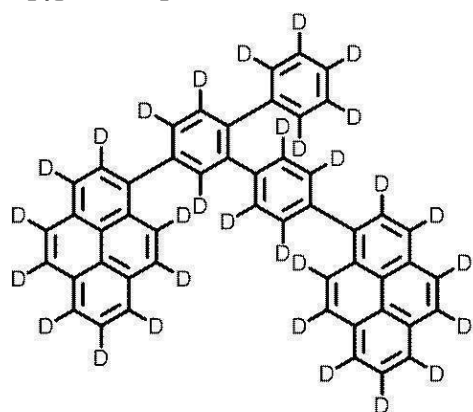


【 0 3 1 5】

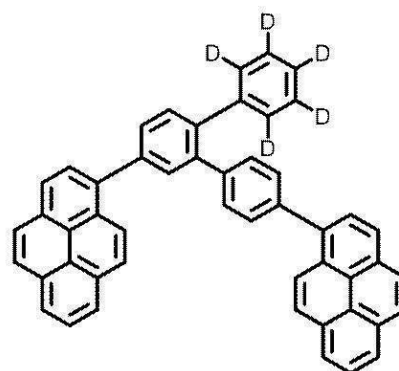
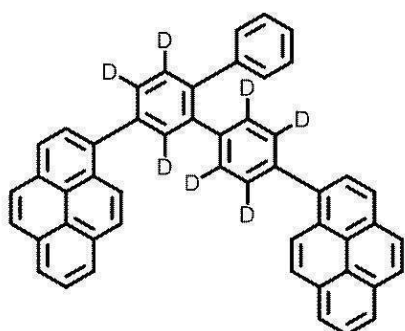
40

50

【化 1 1 3】



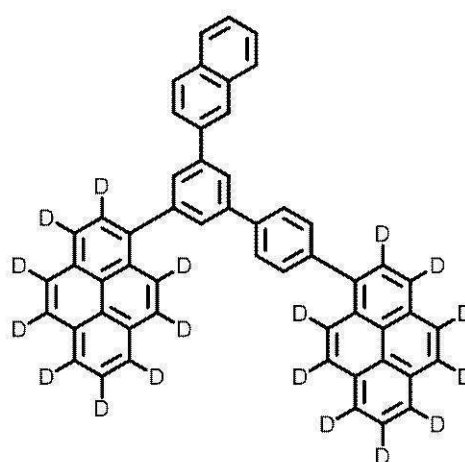
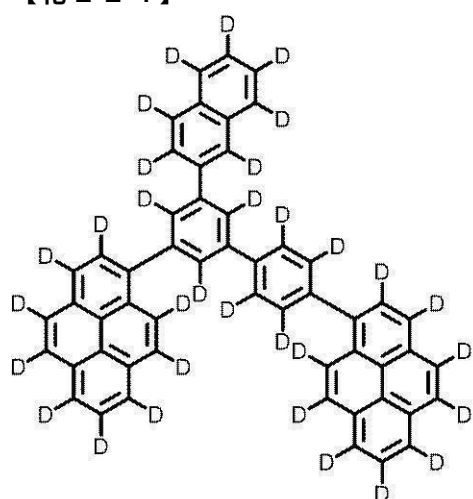
10



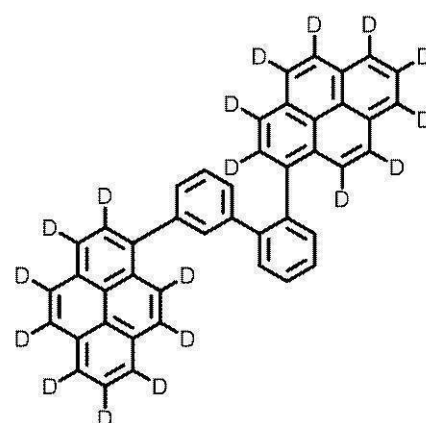
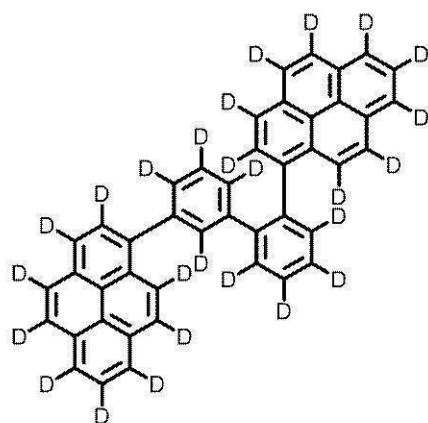
20

【 0 3 1 6】

【化 1 1 4】



30

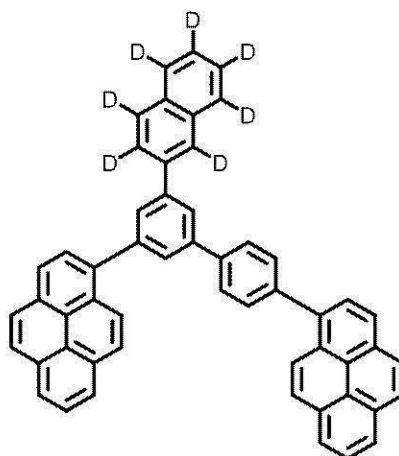
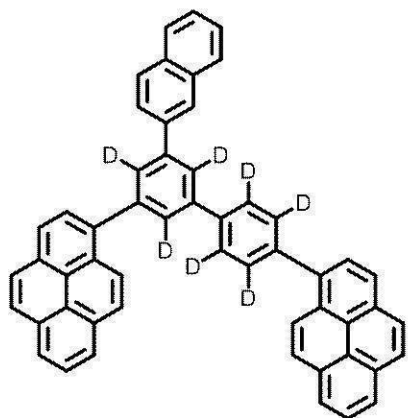


40

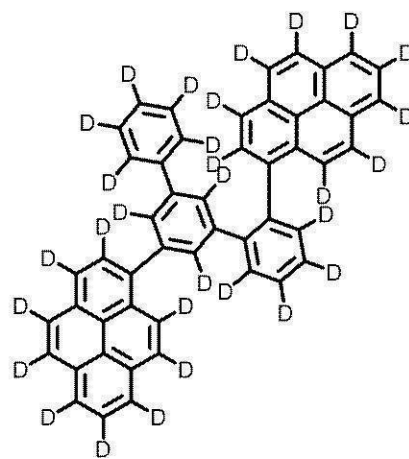
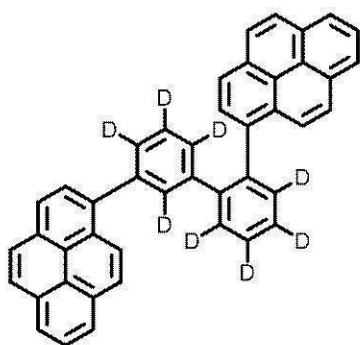
【 0 3 1 7】

50

【化 1 1 5】



10



20

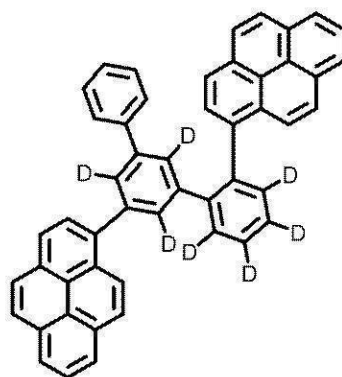
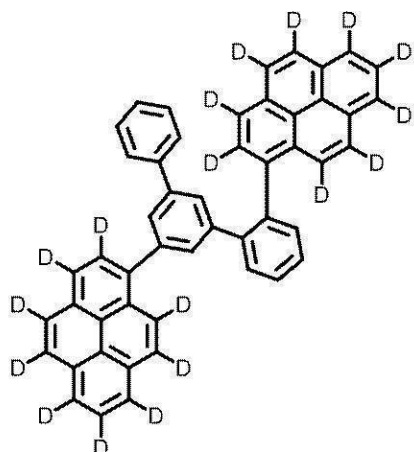
【 0 3 1 8】

30

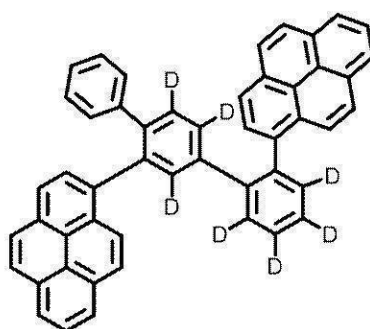
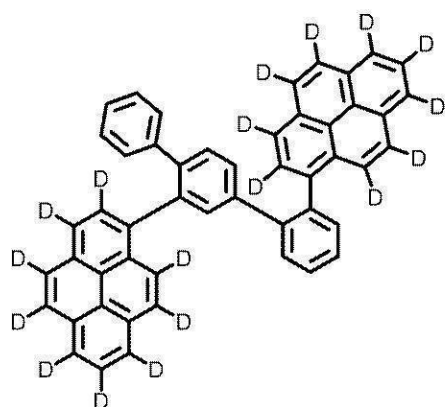
40

50

【化 1 1 6】



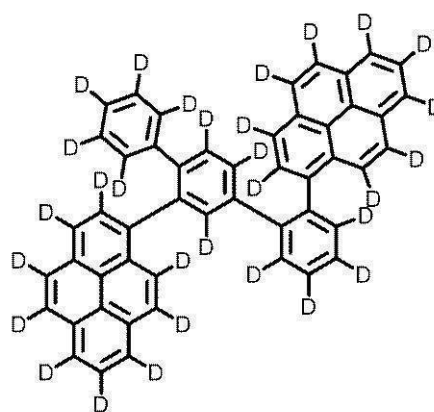
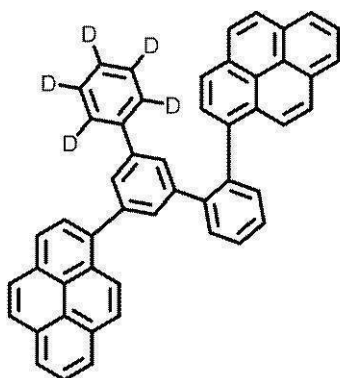
10



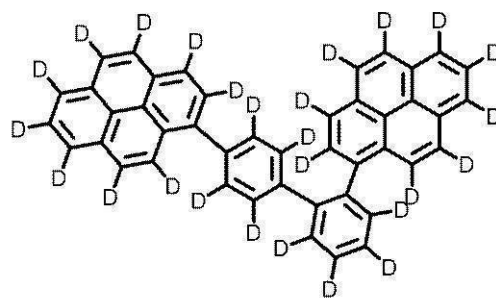
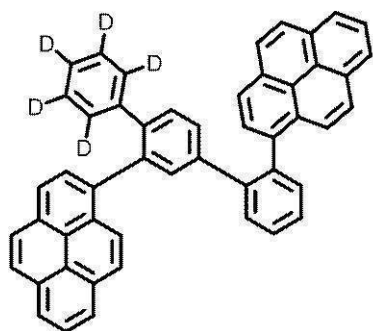
20

【 0 3 1 9】

【化 1 1 7】



30

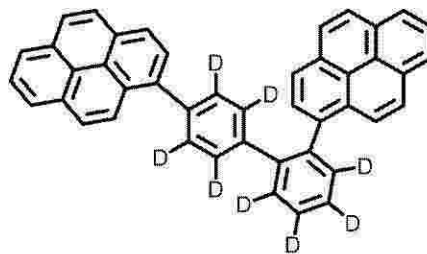
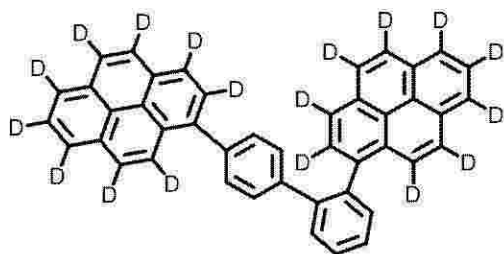


40

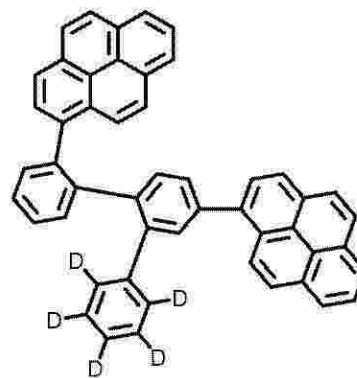
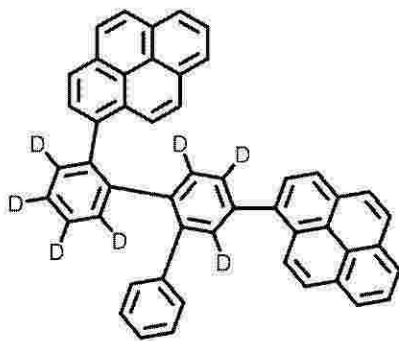
【 0 3 2 0】

50

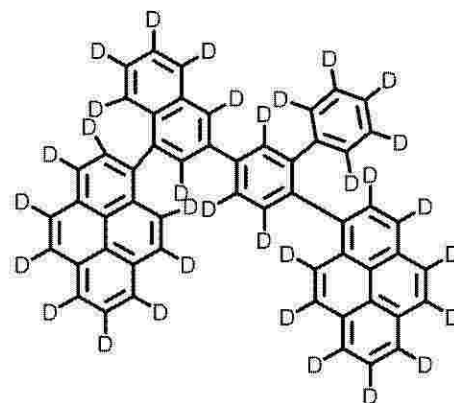
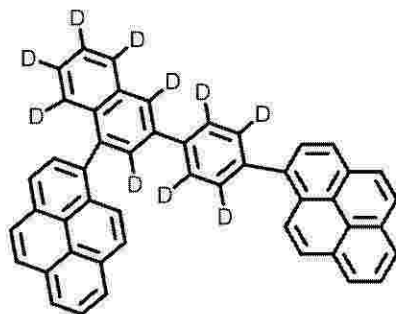
【化 1 1 8】



10



20



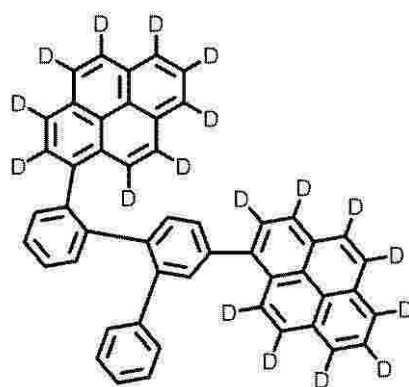
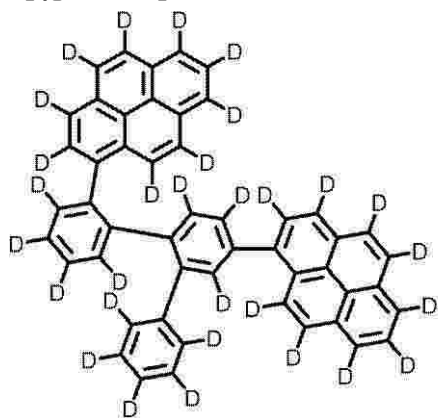
30

【 0 3 2 1】

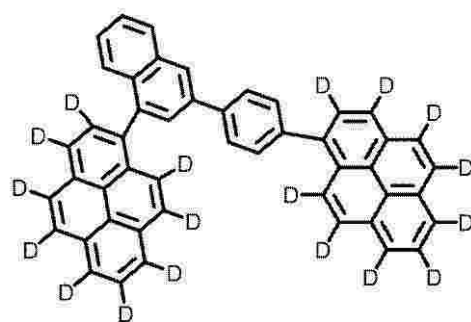
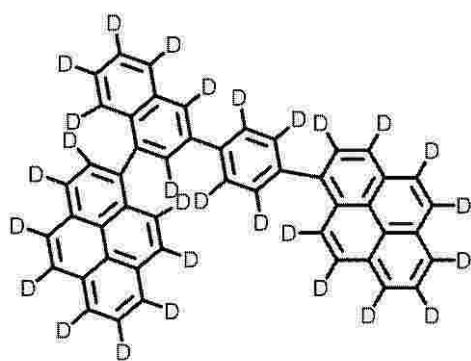
40

50

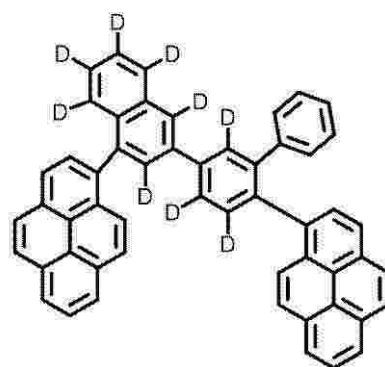
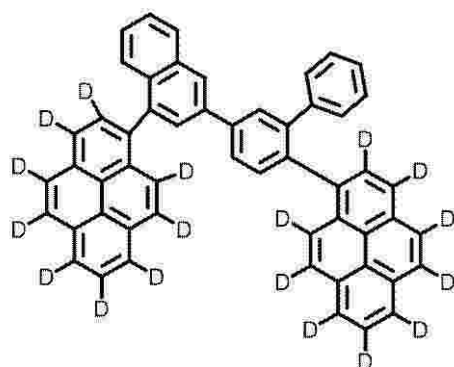
【化 1 1 9】



10



20



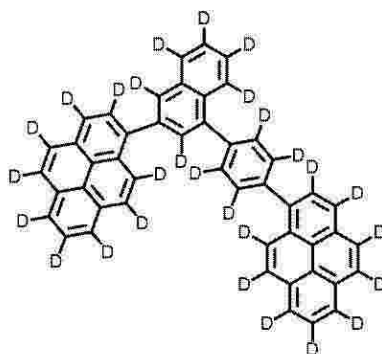
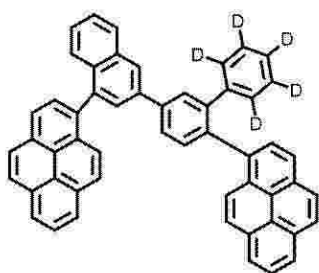
30

【 0 3 2 2】

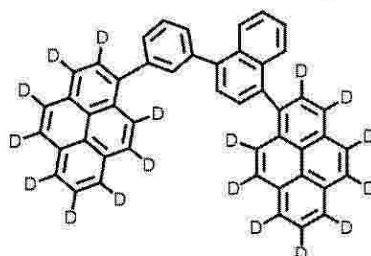
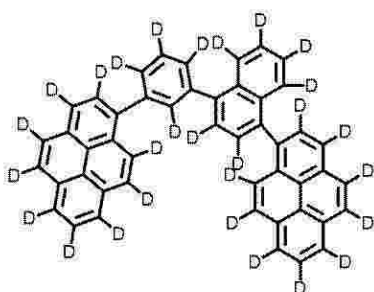
40

50

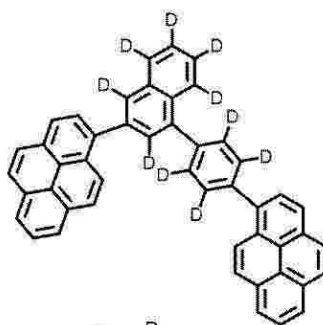
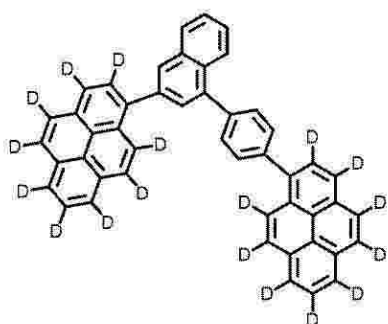
【化 1 2 0】



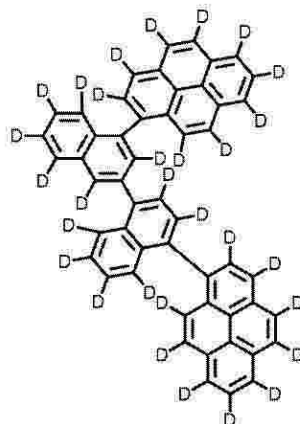
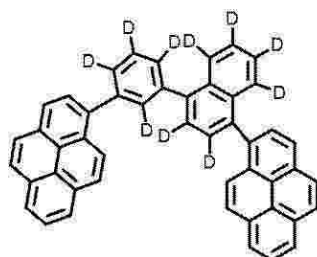
10



20



30

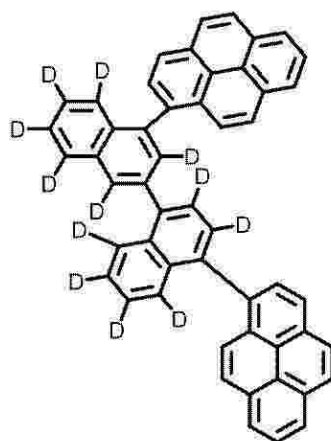
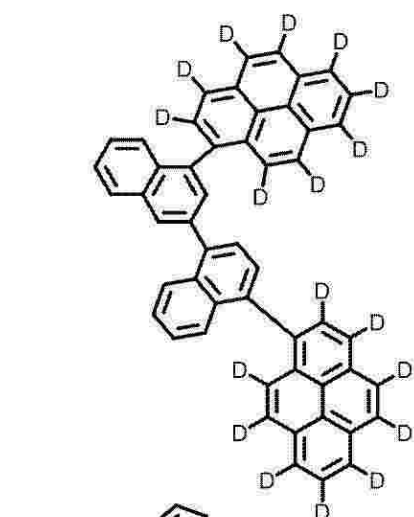


【 0 3 2 3】

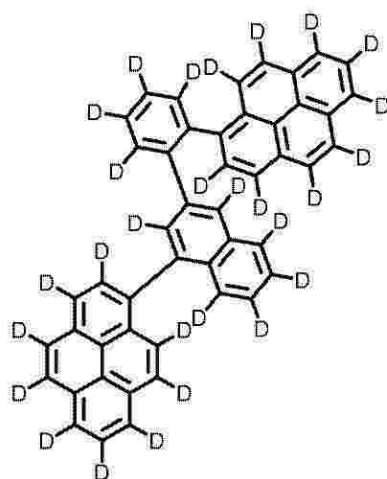
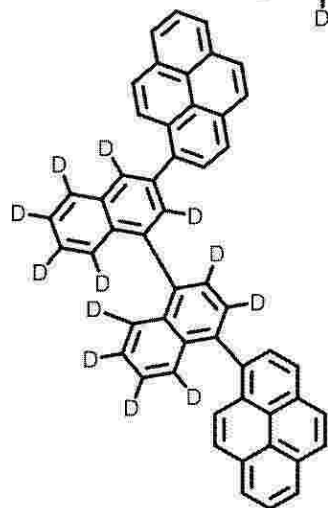
40

50

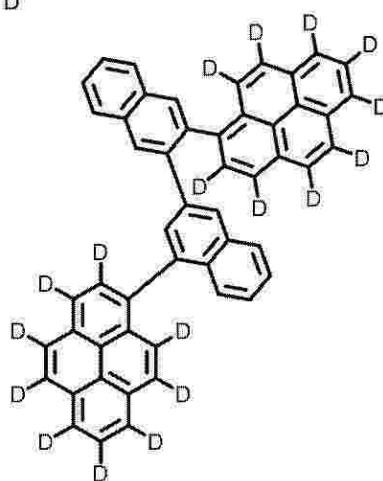
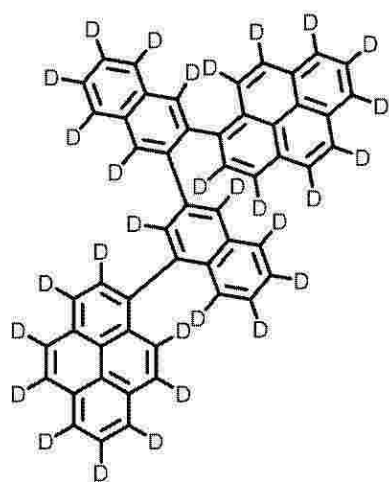
【化 1 2 1】



10



20



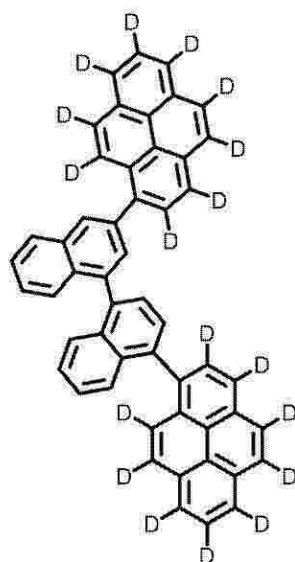
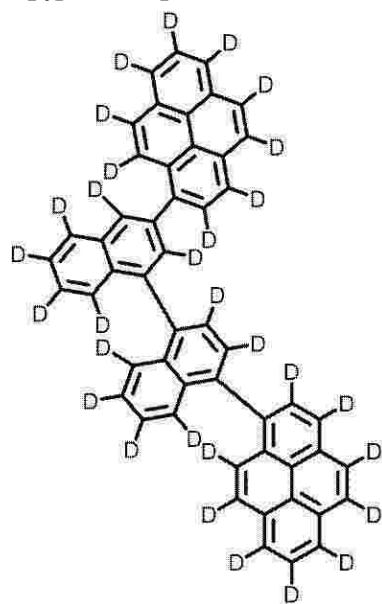
30

【 0 3 2 4】

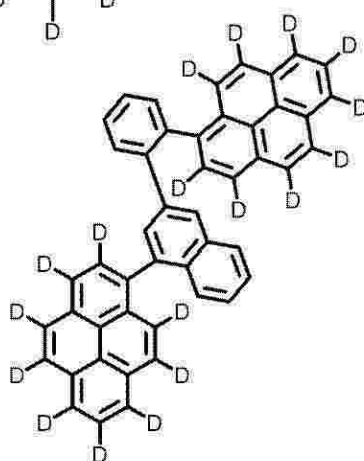
40

50

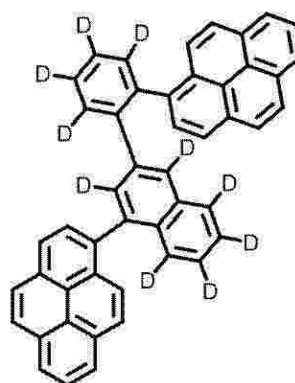
【化 1 2 2】



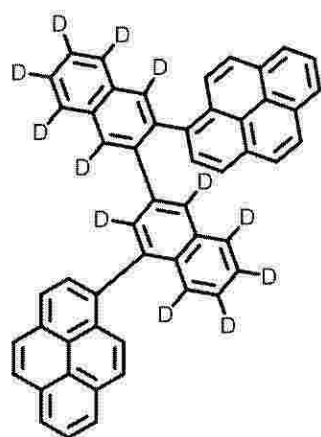
10



20

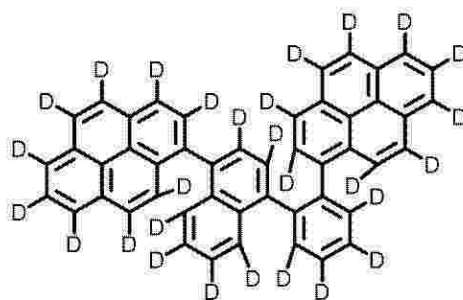


30



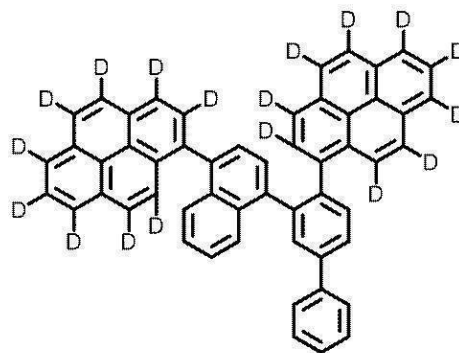
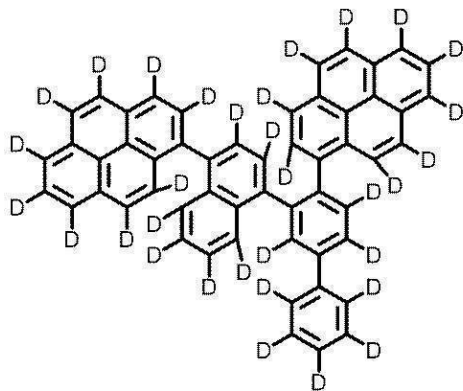
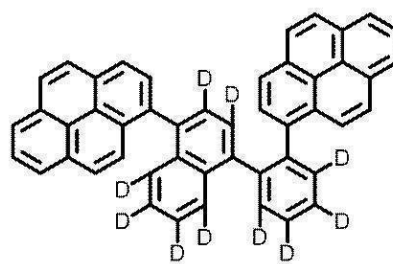
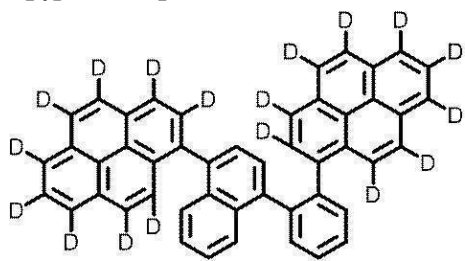
40

【 0 3 2 5】



50

【化 1 2 3】



10

【 0 3 2 6】

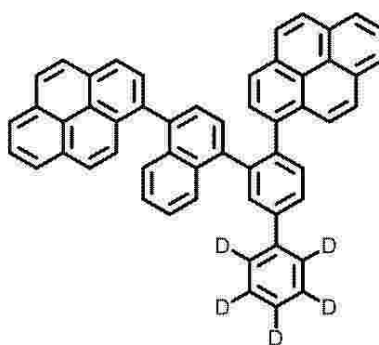
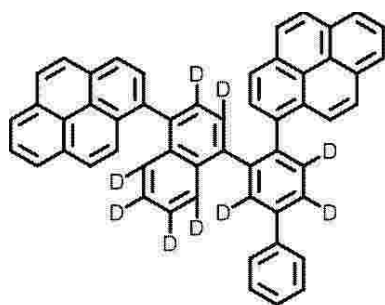
20

30

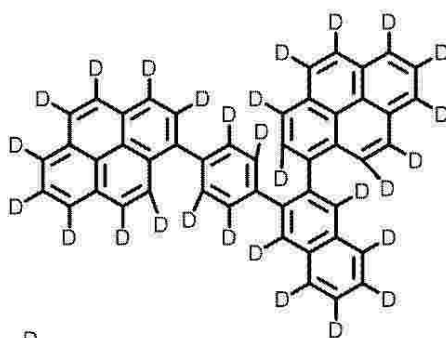
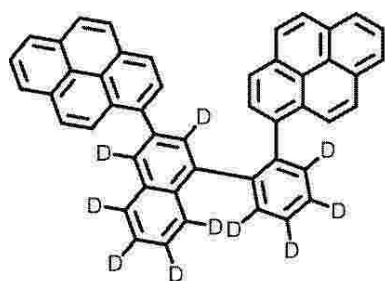
40

50

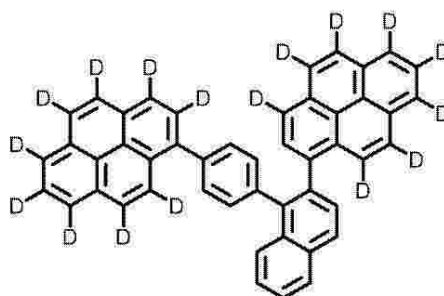
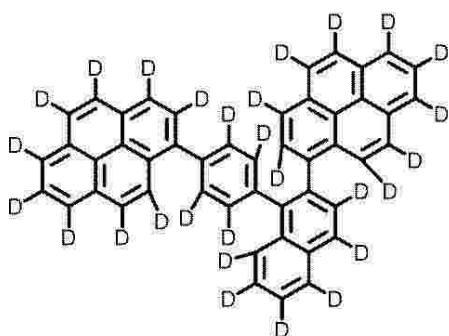
【化 1 2 4】



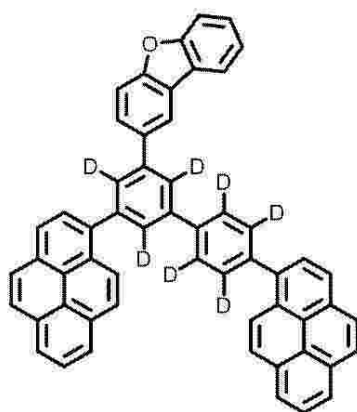
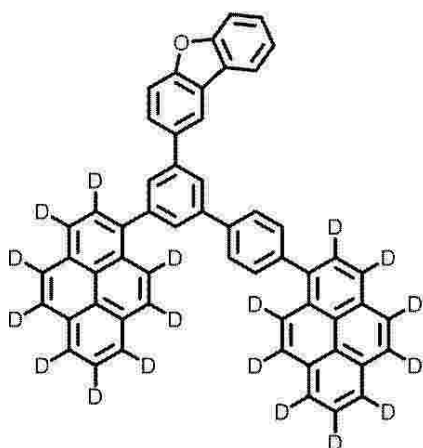
10



20



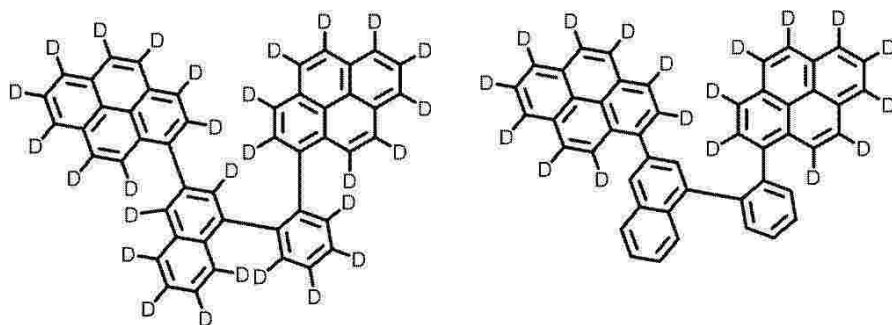
30



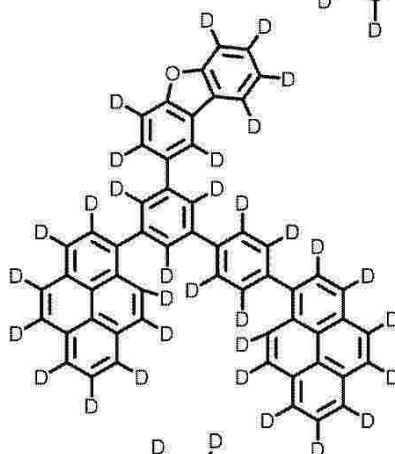
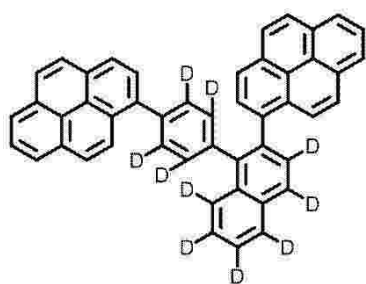
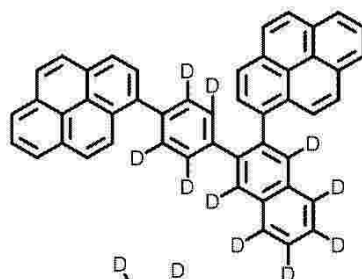
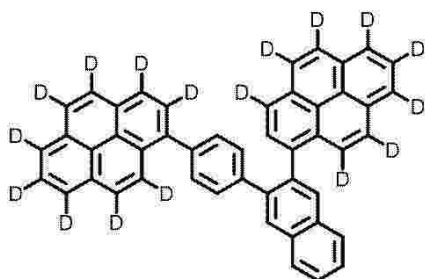
40

【 0 3 2 7 】

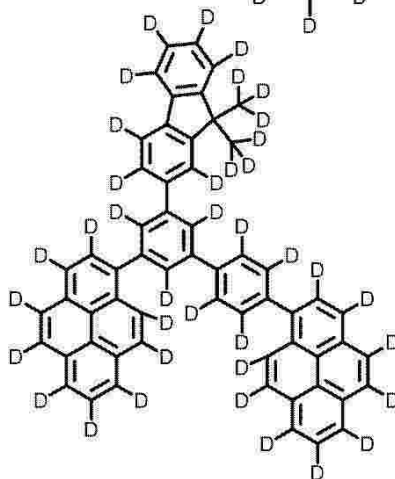
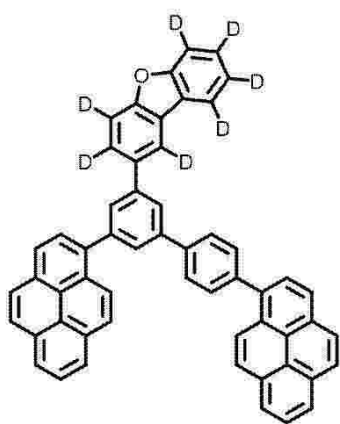
【化 1 2 5】



10



20



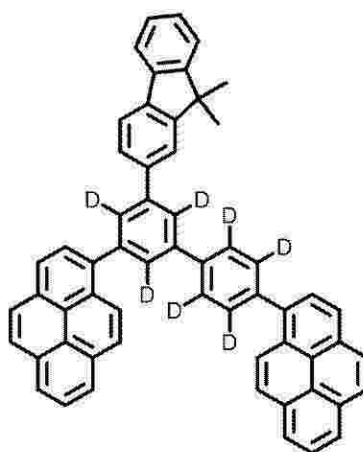
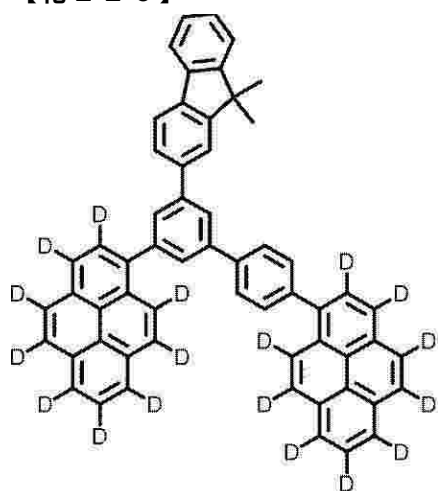
30

【 0 3 2 8】

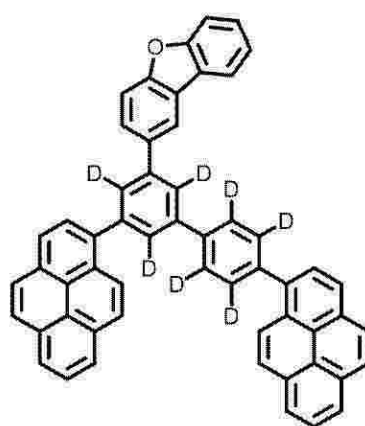
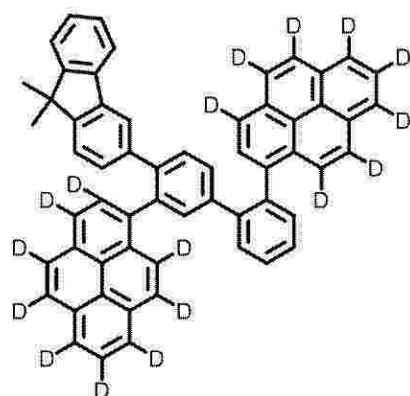
40

50

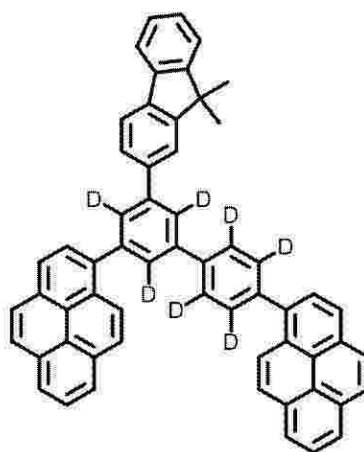
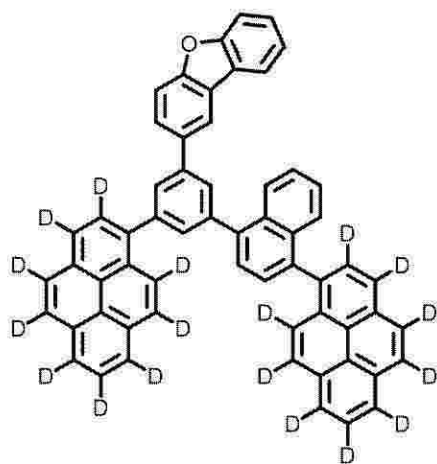
【化 1 2 6】



10



20



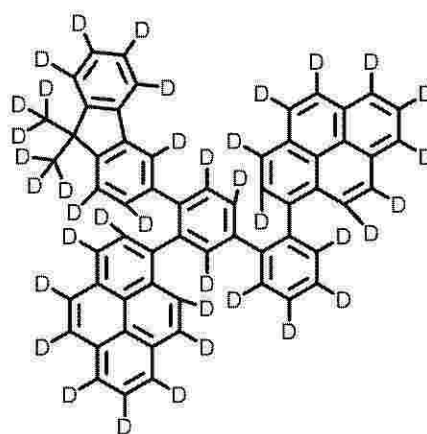
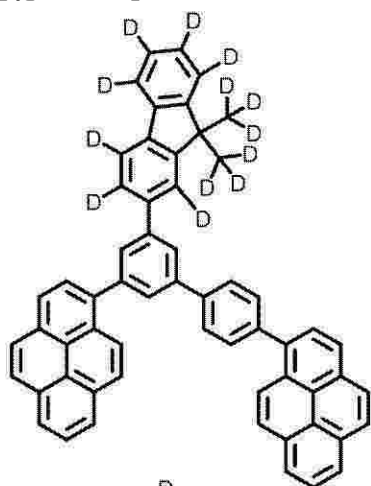
30

【 0 3 2 9】

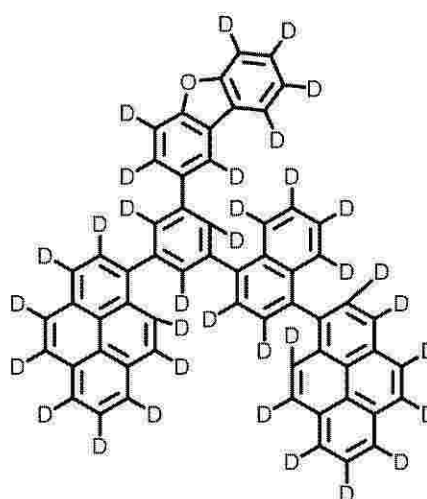
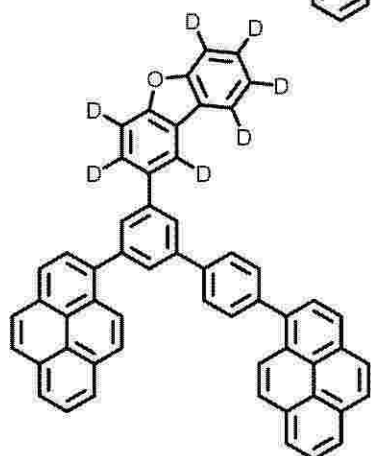
40

50

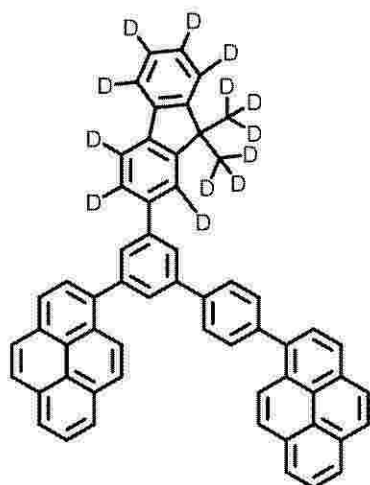
【化 1 2 7】



10



20



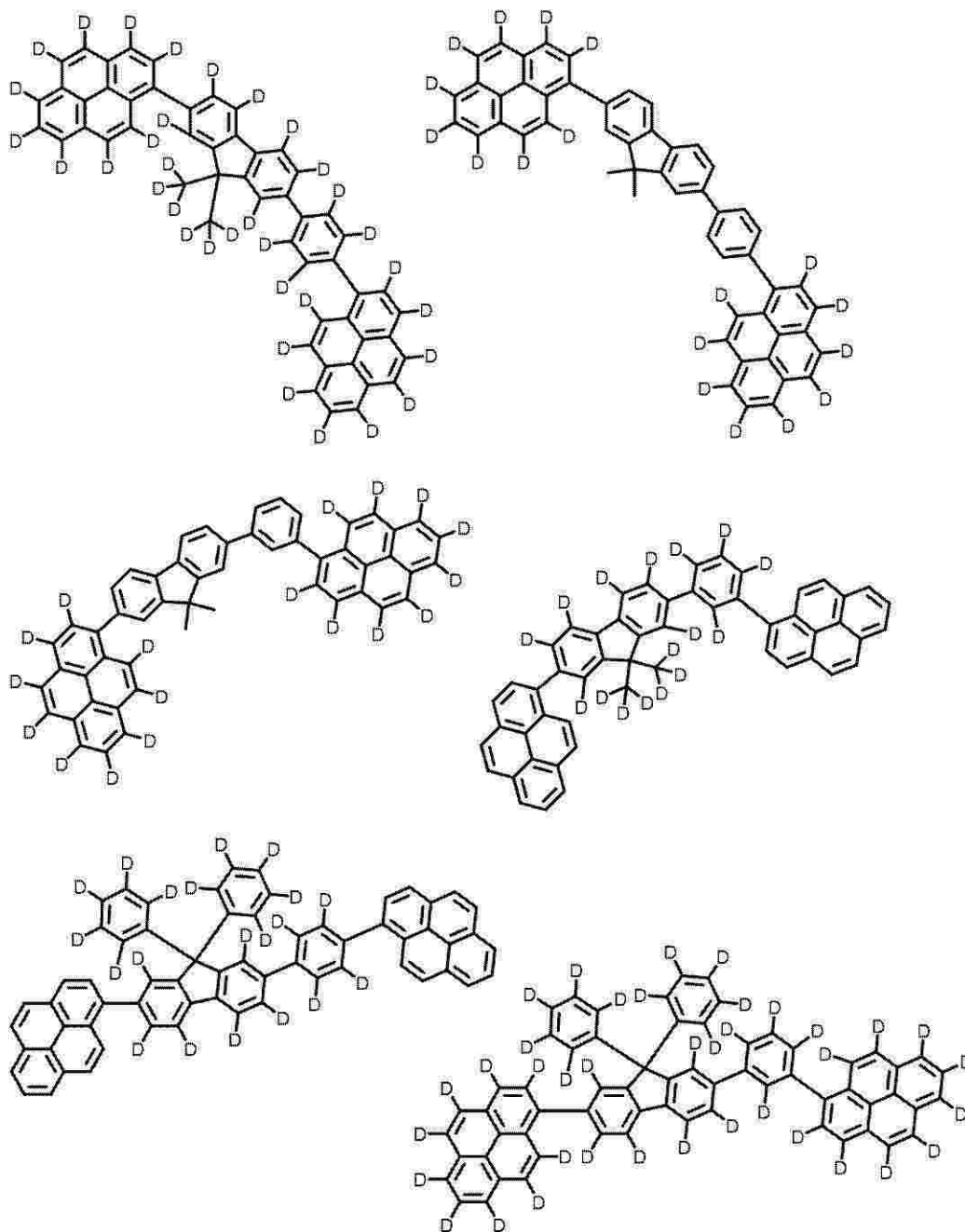
30

【 0 3 3 0】

40

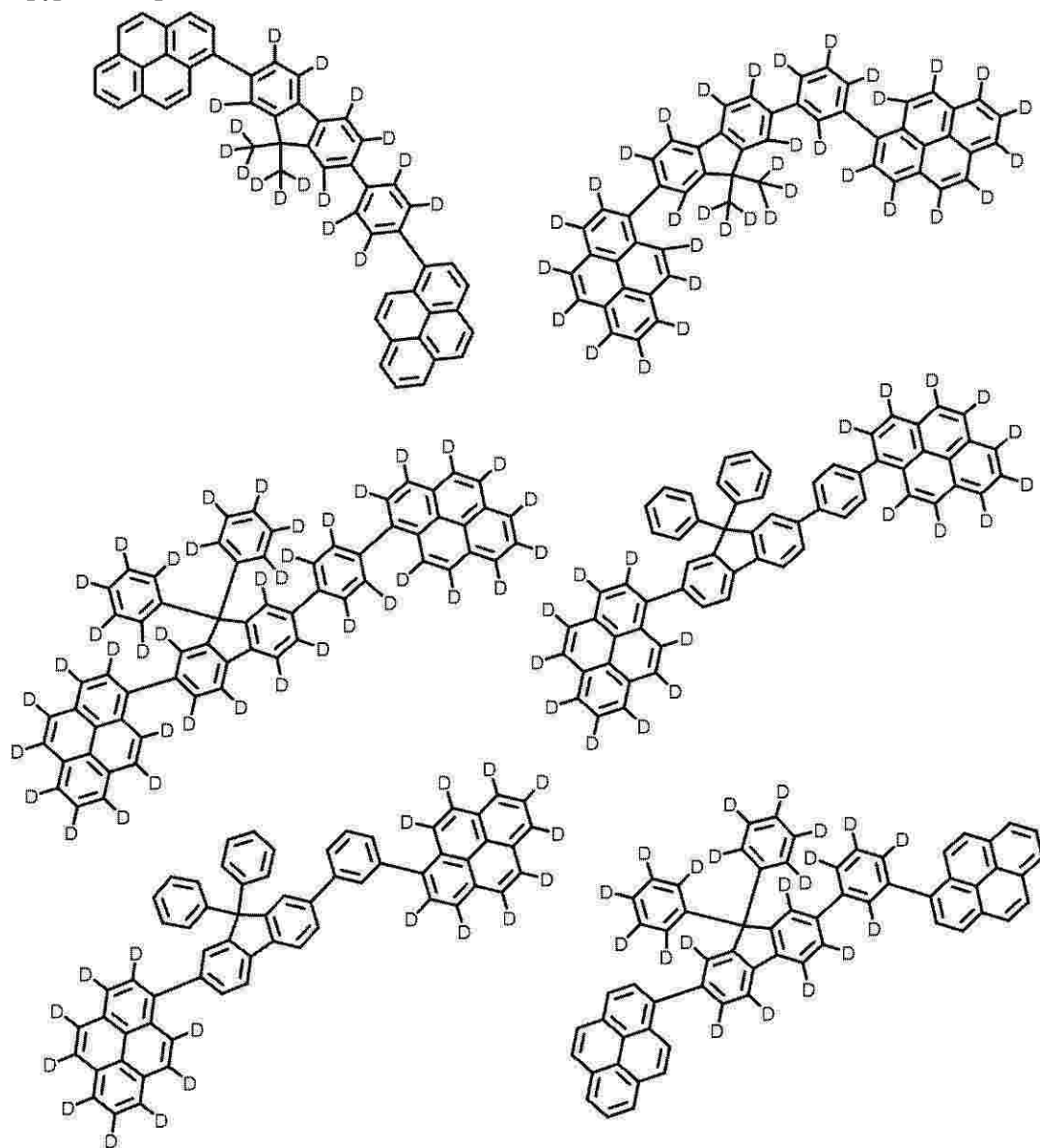
50

【化 1 2 8】



【 0 3 3 1】

【化 1 2 9】



10

20

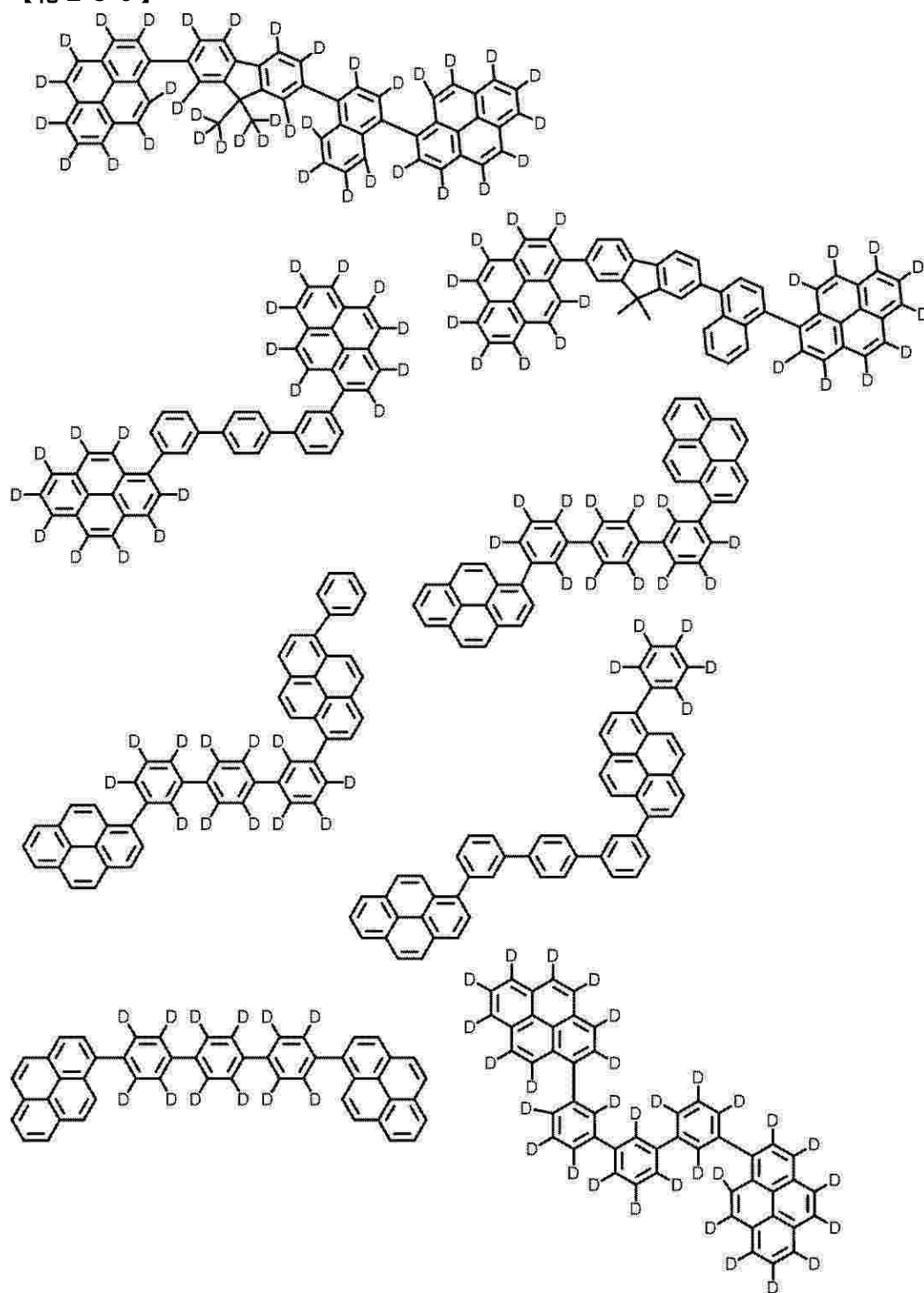
30

【 0 3 3 2】

40

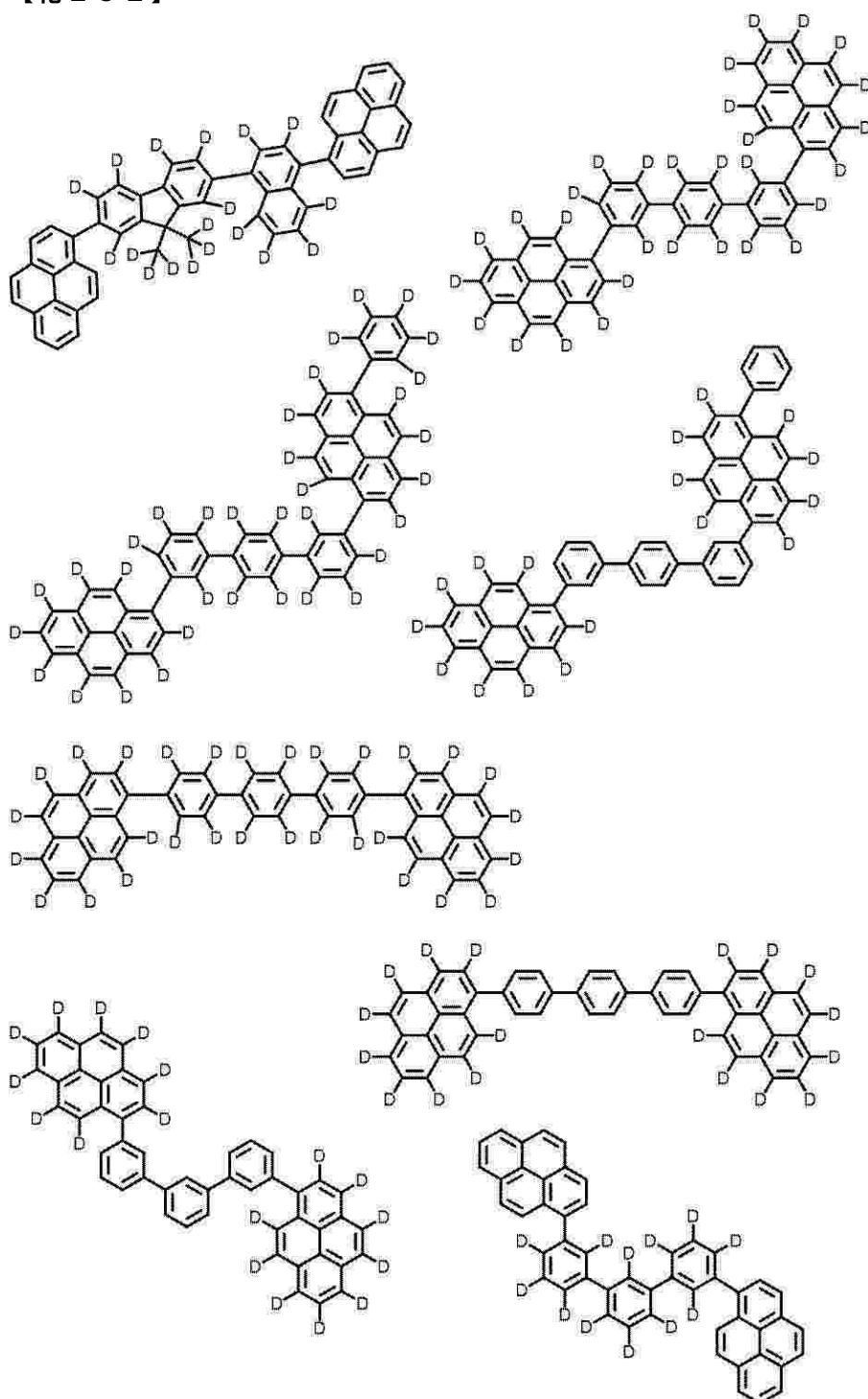
50

【化 1 3 0】



【 0 3 3 3】

【化 1 3 1】



10

20

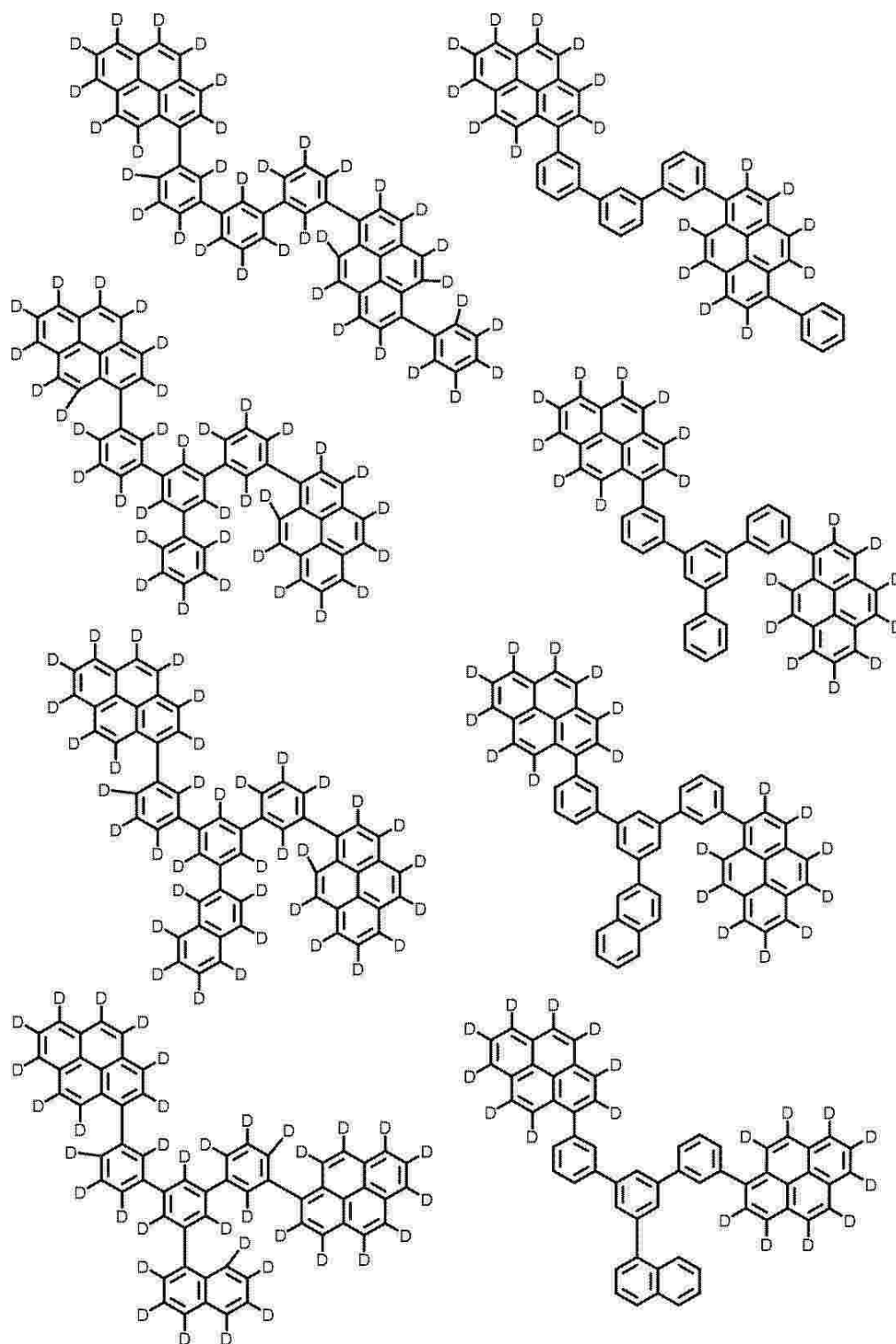
30

【 0 3 3 4】

40

50

【化 1 3 2】



10

20

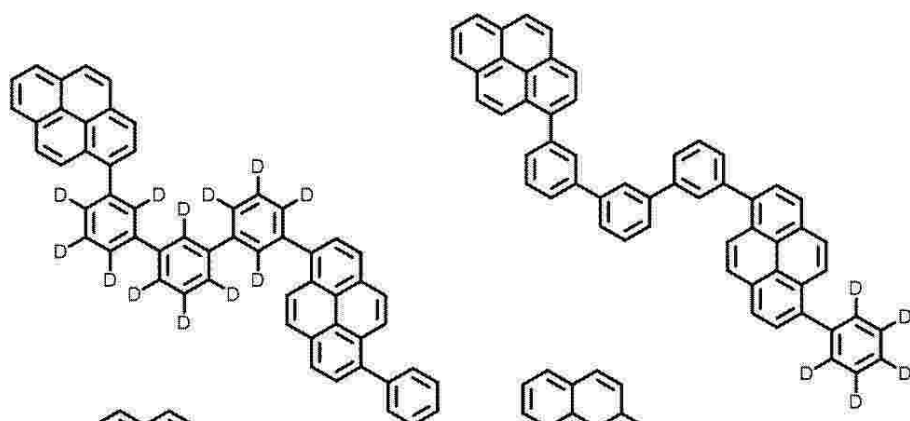
30

40

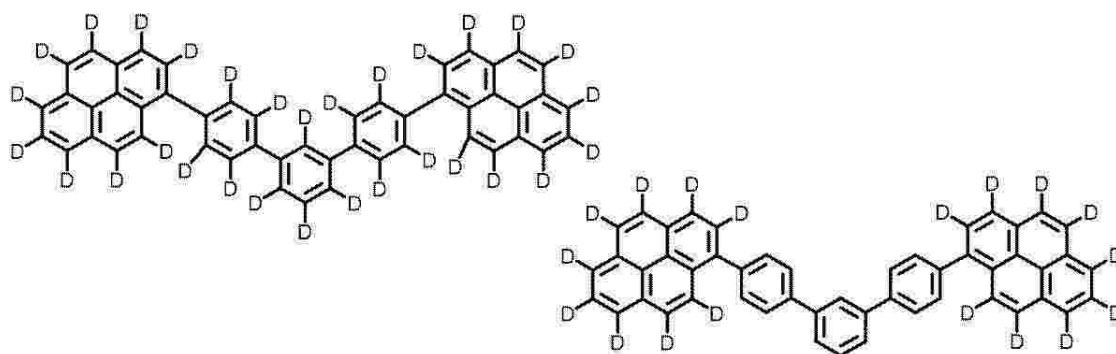
【 0 3 3 5】

50

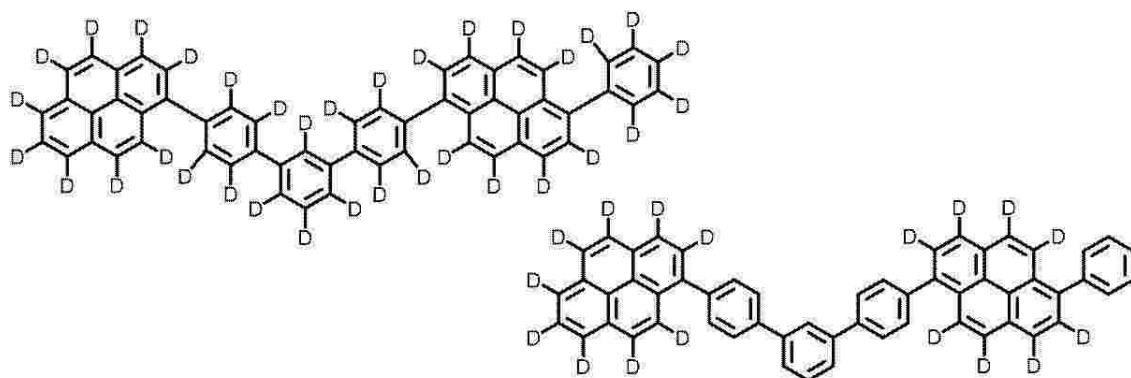
【化 1 3 3】



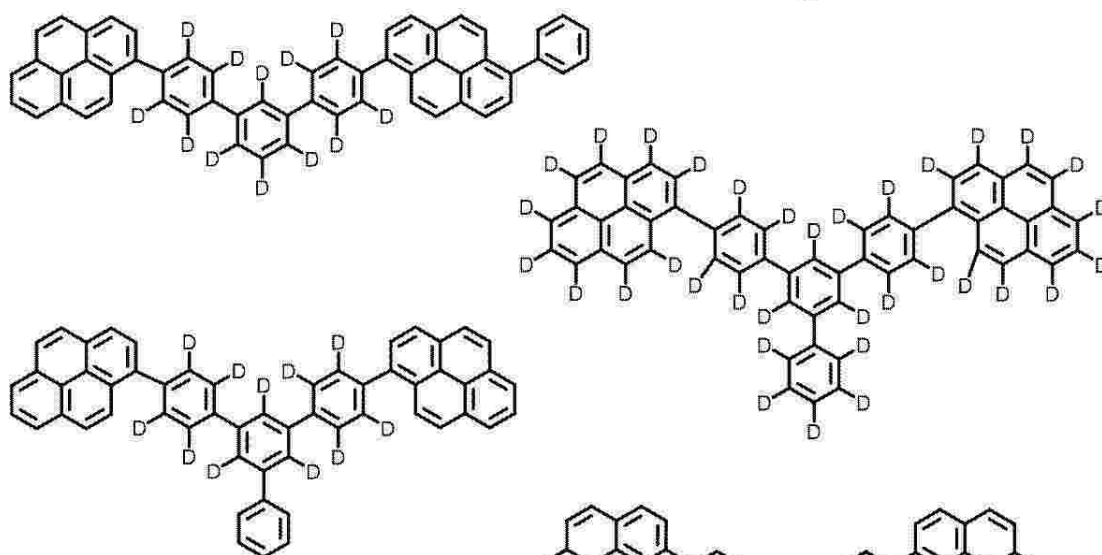
【化 1 3 4】



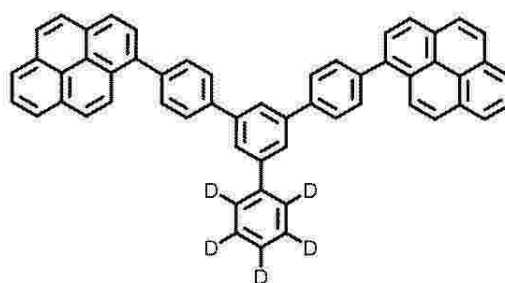
10



20



30

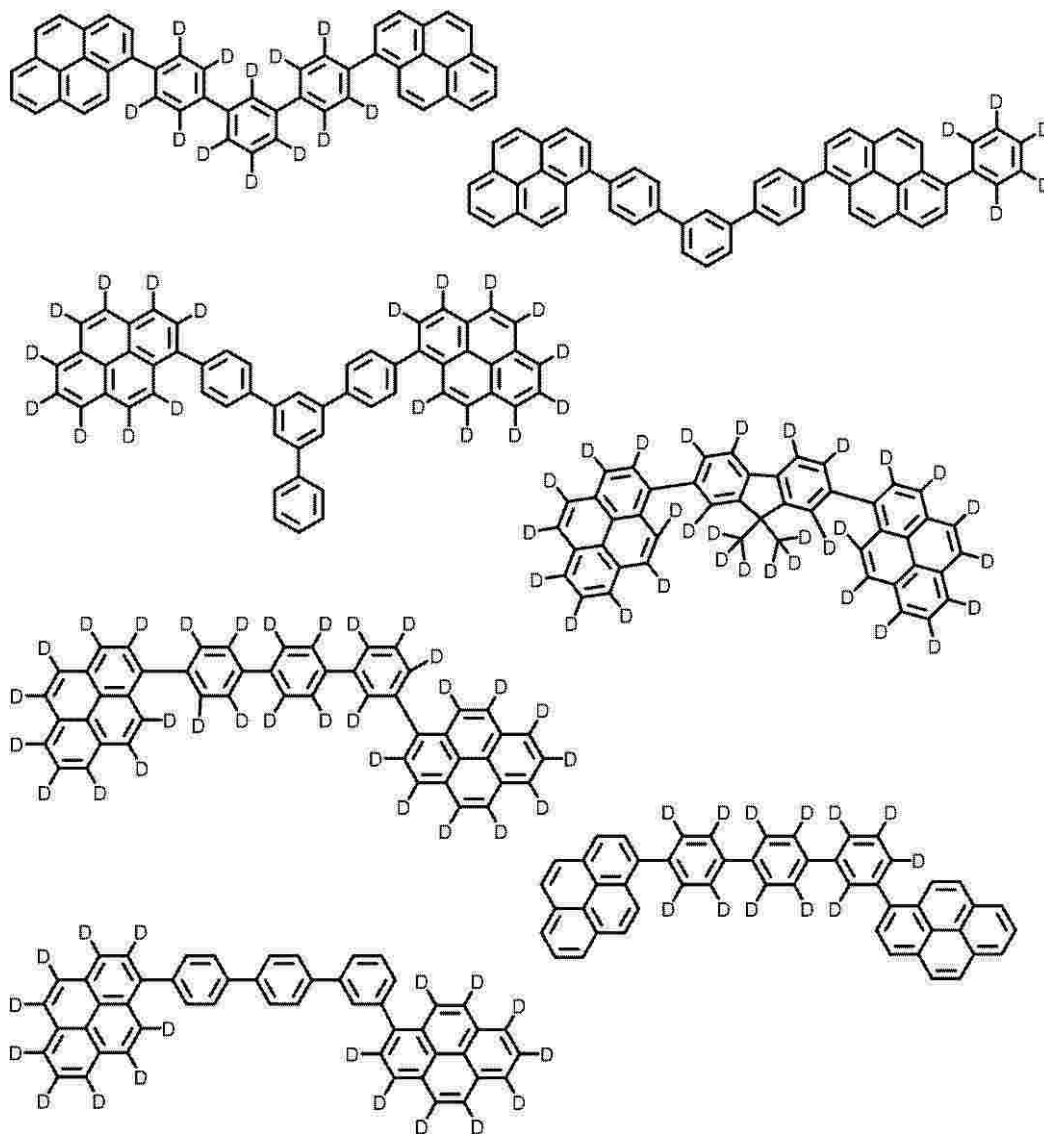


40

【 0 3 3 7】

50

【化 1 3 5】



10

20

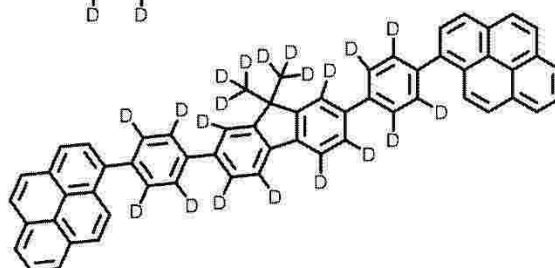
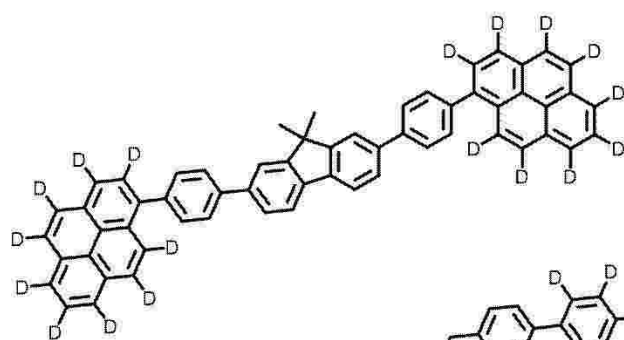
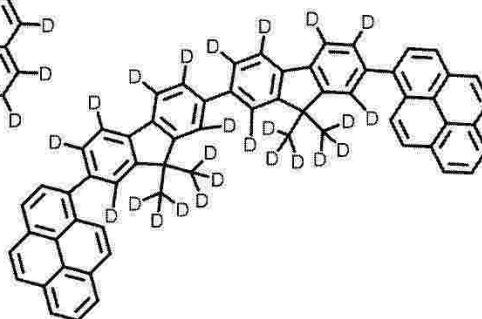
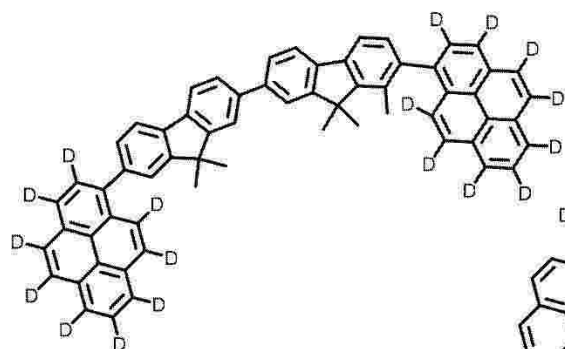
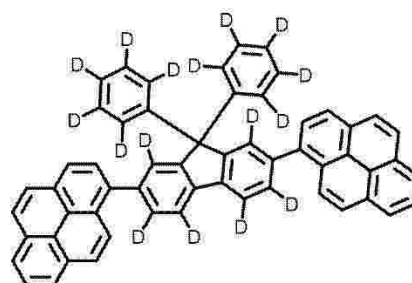
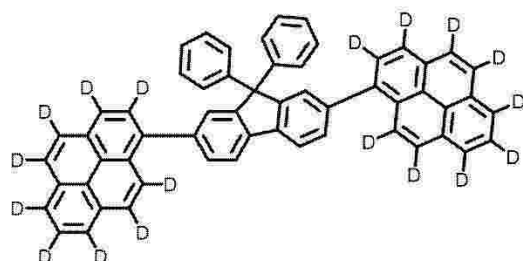
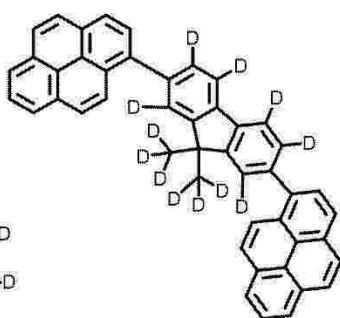
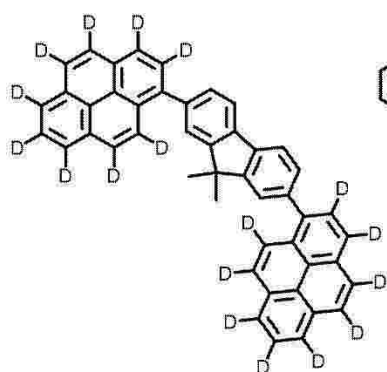
30

【 0 3 3 8】

40

50

【化 1 3 6】



【 0 3 3 9】

10

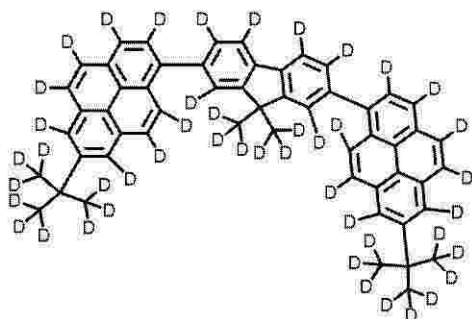
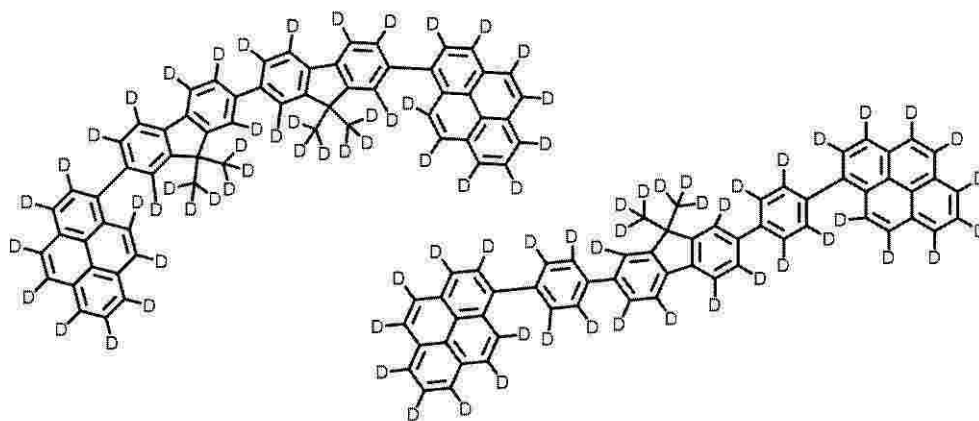
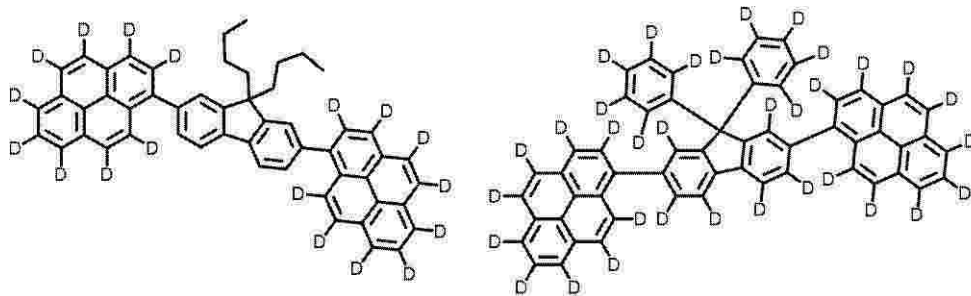
20

30

40

50

【化 1 3 7】



【 0 3 4 0】

10

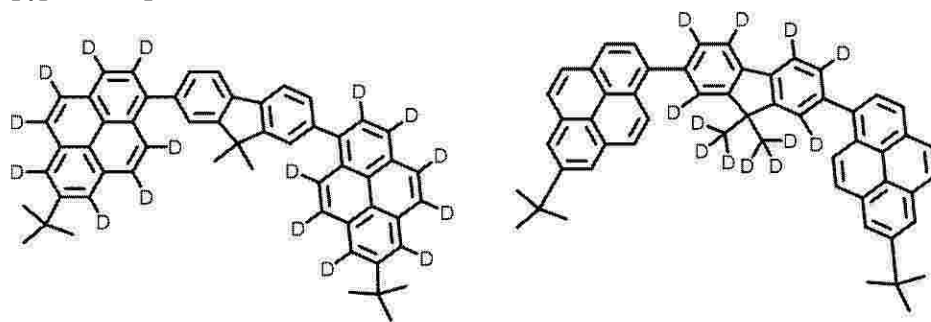
20

30

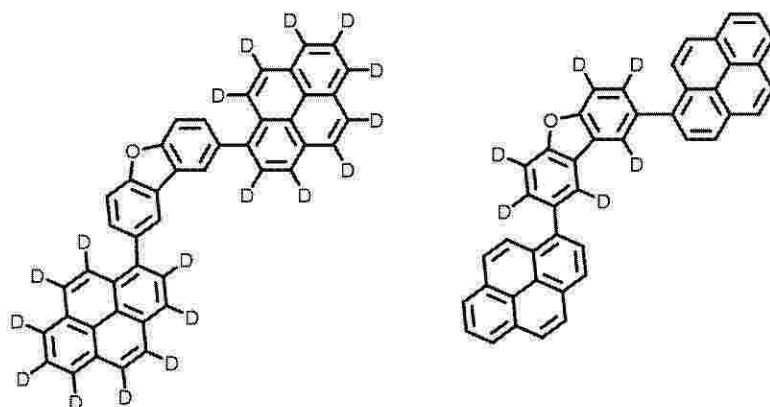
40

50

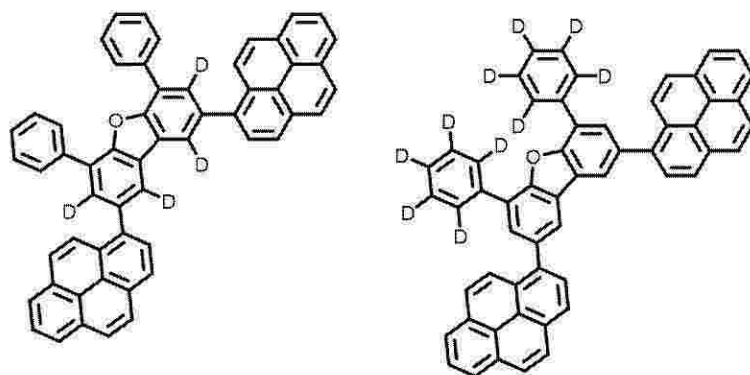
【化 1 3 8】



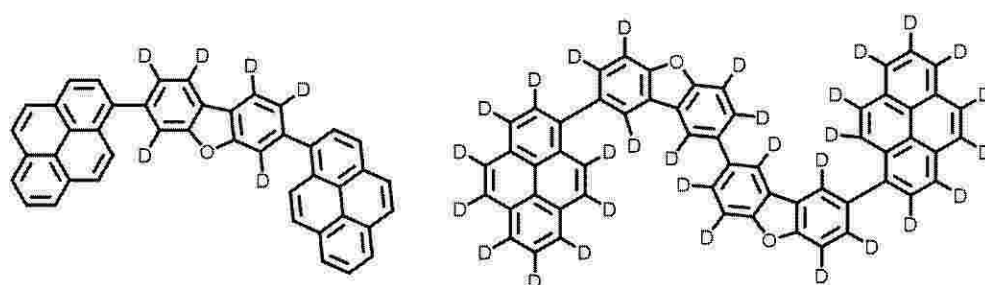
10



20



30

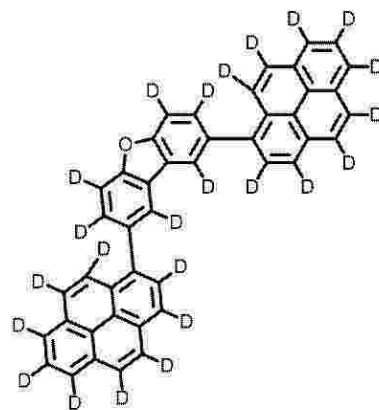
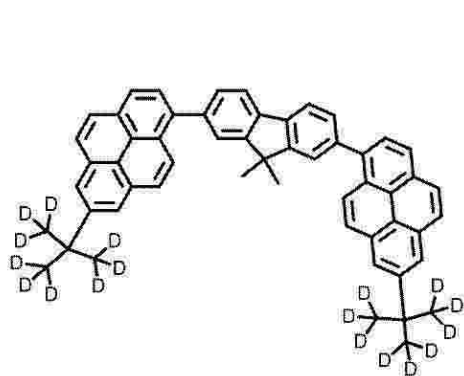


【 0 3 4 1】

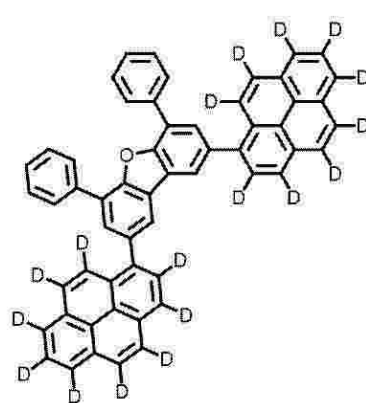
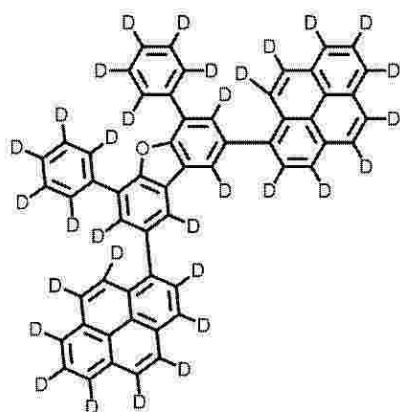
40

50

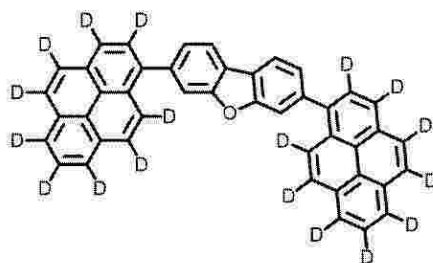
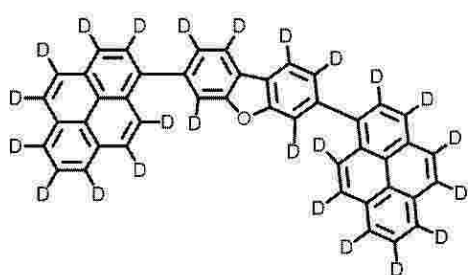
【化 1 3 9】



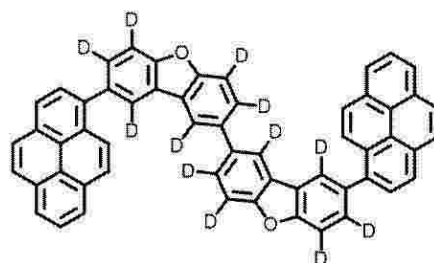
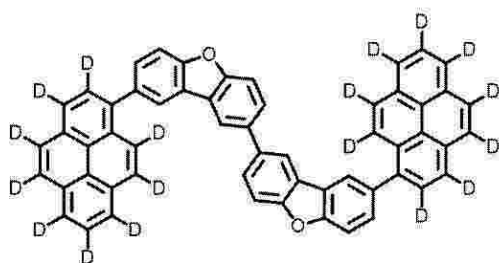
10



20



30

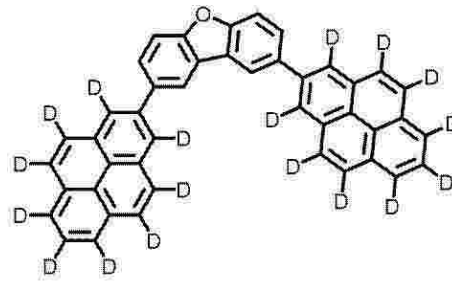
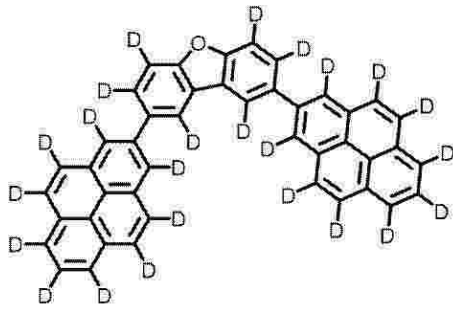


40

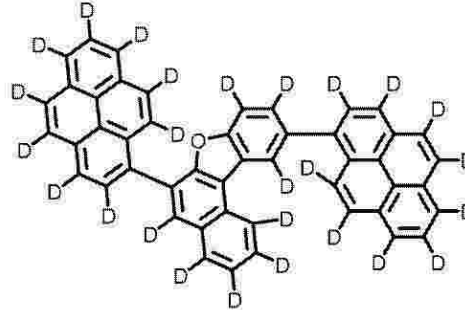
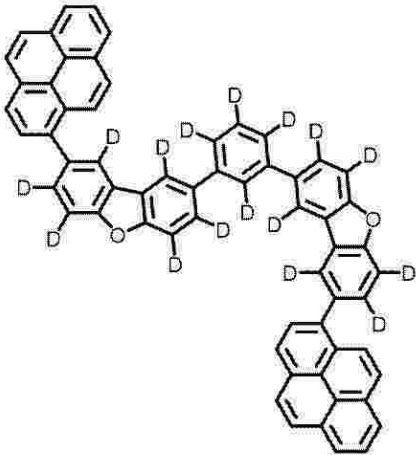
【 0 3 4 2】

50

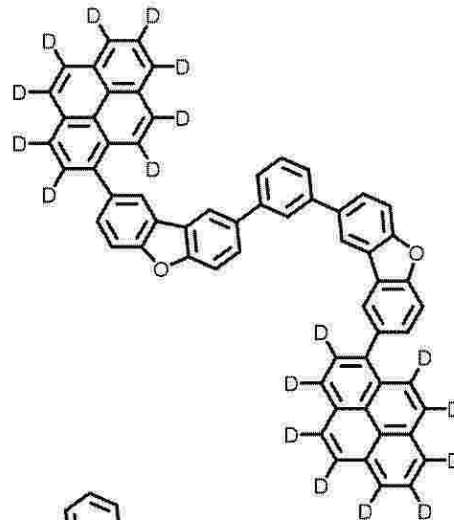
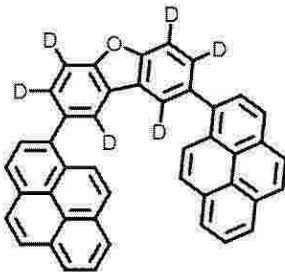
【化 1 4 0】



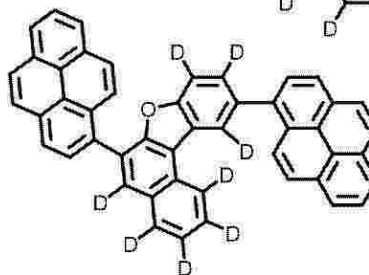
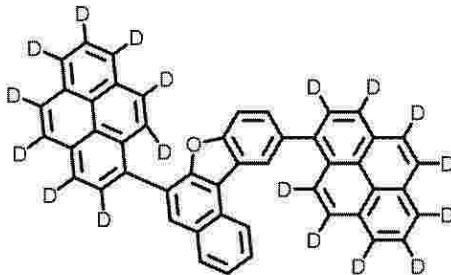
10



20



30



【 0 3 4 3】

40

〔第二実施形態〕

〔有機 E L 素子用材料〕

第二実施形態に係る有機 E L 素子用材料は、第一実施形態の化合物（前記一般式（1）で表される化合物）を含む。

第二実施形態によれば、寿命を長くすることができる有機 E L 素子用材料が得られる。

なお、第二実施形態に係る有機 E L 素子用材料は、さらにその他の化合物を含有していてもよい。第二実施形態に係る有機 E L 素子用材料が、さらにその他の化合物を含んでいる場合、該その他の化合物は、固体であっても液体であってもよい。

【 0 3 4 4】

〔第三実施形態〕

50

〔有機 E L 素子〕

以下、第三実施形態に係る有機 E L 素子の構成について説明する。

【0345】

第三実施形態に係る有機 E L 素子は、陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に含まれる発光層を含む。

発光層は、化合物 M 2 として、第一実施形態に係る化合物（前記一般式（1）で表される化合物）を含む。発光層は、前記一般式（1）で表される化合物をホスト材料として含有することが好ましい。

【0346】

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、発光層は、前記一般式（1）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。

【0347】

第三実施形態において、化合物 M 2（前記一般式（1）で表される化合物）は、少なくとも 1 つの重水素原子を有する。以下の説明では、「少なくとも 1 つの重水素原子を有する化合物 M 2」を、「重水素化化合物 M 2」と称することがある。また、「化合物 M 2 が有する重水素原子の全てを軽水素原子に置き換えた化合物」を「非重水素化化合物 m 2」と称することがある。

【0348】

第三実施形態において、発光層に含まれる重水素化化合物 M 2 及び非重水素化化合物 m 2 の合計に対する、非重水素化化合物 m 2 の含有割合は、99 モル%以下である。非重水素化化合物 m 2 の含有割合は、質量分析法により確認する。

第三実施形態において、発光層に含まれる重水素化化合物 M 2 及び非重水素化化合物 m 2 の合計に対する重水素化化合物 M 2 の含有割合は、30 モル%以上、50 モル%以上、70 モル%以上、90 モル%以上、95 モル%以上、99 モル%以上、又は 100 モル%であることが好ましい。

後述する第四実施形態において、第一の発光層又は第二の発光層に含まれる重水素化化合物 M 2 及び非重水素化化合物 m 2 の合計に対する、非重水素化化合物 m 2 の含有割合、並びに重水素化化合物 M 2 の含有割合も同様の範囲であることが好ましい。

【0349】

〔有機 E L 素子の発光波長〕

本実施形態に係る有機 E L 素子は、素子駆動時に主ピーク波長が 430 nm 以上 480 nm 以下の光を放射することが好ましい。

素子駆動時に有機 E L 素子が放射する光の主ピーク波長の測定は、以下のようにして行う。電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように有機 E L 素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計 CS-2000（コニカミノルタ社製）で計測する。得られた分光放射輝度スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を測定し、これを主ピーク波長（単位：nm）とする。

【0350】

本実施形態に係る有機 E L 素子は、発光層以外に、1 以上の有機層を有していてもよい。有機層としては、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、正孔障壁層及び電子障壁層からなる群から選択される少なくともいずれかの層が挙げられる。なお、発光層は 2 層以上であってもよい。

【0351】

本実施形態に係る有機 E L 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、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、正孔障壁層、及び電子障壁層等からなる群から選択される少なくともいずれかの層をさらに有していてもよい。

【0352】

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

【０３５３】

図１に、本実施形態に係る有機ＥＬ素子の一例の概略構成を示す。

有機ＥＬ素子１は、透光性の基板２と、陽極３と、陰極４と、陽極３と陰極４との間に配置された有機層１０と、を含む。有機層１０は、陽極３側から順に、正孔注入層６、正孔輸送層７、発光層５、電子輸送層８、及び電子注入層９が、この順番で積層されて構成される。発光層５は、化合物Ｍ２として、第一実施形態に係る化合物（前記一般式（１）で表される化合物）を含む。

【０３５４】

（化合物Ｍ２）

本実施形態に係る有機ＥＬ素子１において、化合物Ｍ２は、前記一般式（１）で表される化合物である。

【０３５５】

（化合物Ｍ１）

本実施形態に係る有機ＥＬ素子１において、発光層５は、蛍光発光性の化合物Ｍ１をさらに含むことが好ましい。

【０３５６】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子１において、蛍光発光性の化合物Ｍ１は、下記一般式（１０）で表される化合物、下記一般式（１１）で表される化合物、下記一般式（２１）で表される化合物、下記一般式（３１）で表される化合物、下記一般式（４１）で表される化合物、下記一般式（５１）で表される化合物、下記一般式（６１）で表される化合物、下記一般式（７１）で表される化合物及び下記一般式（８１）で表される化合物からなる群から選択される１以上の化合物であることが好ましい。

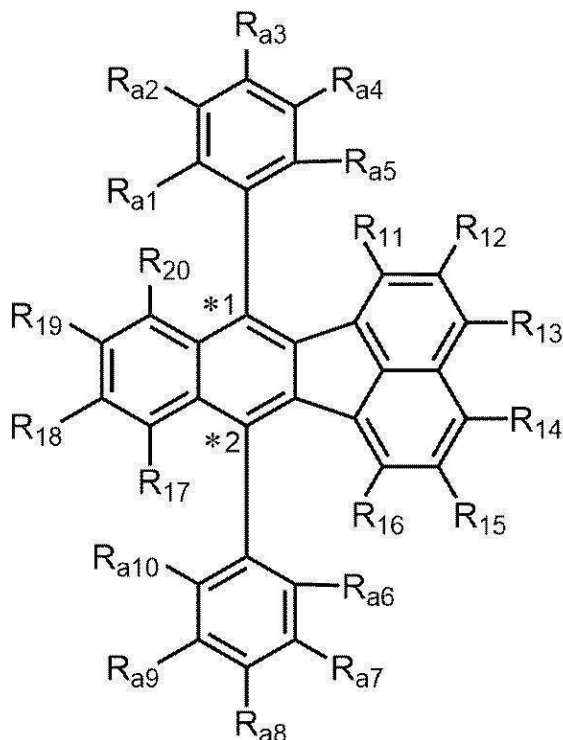
【０３５７】

（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。

【０３５８】

【化１４１】



(10)

【０３５９】

(一般式(10)中、

$R_{11} \sim R_{16}$ のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、 $R_{17} \sim R_{20}$ のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、 $R_{a1} \sim R_{a5}$ のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、及び $R_{a6} \sim R_{a10}$ のうちの互いに隣接する2個以上からなる組のうちのいずれか1組以上は、互いに結合して置換もしくは無置換の環形成原子数3～30の単環を形成するか、置換もしくは無置換の環形成原子数3～30の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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 $R_{11} \sim R_{20}$ 、 $R_{a1} \sim R_{a5}$ 、及び $R_{a6} \sim R_{a10}$ 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1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～30のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換もしくは無置換のアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換もしくは無置換のホスファニル基、

置換もしくは無置換のホスホリル基、

置換もしくは無置換のシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、ニトロ基、カルボキシ基、又は

ハロゲン原子である。)

「 $R_{11} \sim R_{16}$ のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、 $R_{17} \sim R_{20}$ のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、 $R_{a1} \sim R_{a5}$ のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、及び $R_{a6} \sim R_{a10}$ のうちの互いに隣接する2個以上からなる組のうちのいずれか1組以上」が互いに結合して置換もしくは無置換の環形成原子数3～30の単環又は縮合環を形成する具体例について説明する。

互いに隣接する2個以上からなる組が互いに結合して縮合環を形成する具体例としては、上記一般式(10)における $R_{17} \sim R_{20}$ を例にとると、例えば、下記一般式(10A)で表される化合物が挙げられる。下記一般式(10A)で表される化合物では、互いに隣接する R_{18} と R_{19} と R_{20} の3個が互いに結合して縮合環を形成している。

【0360】

10

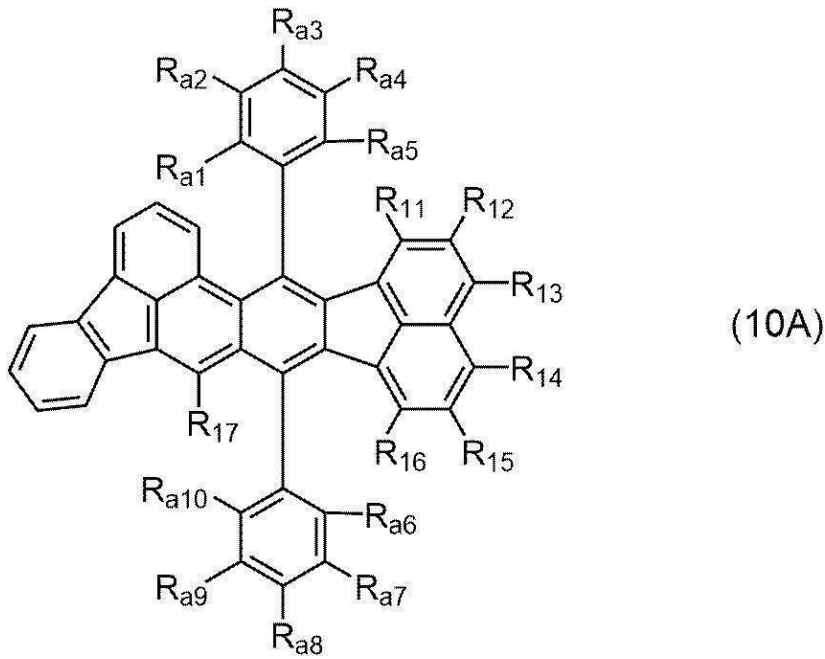
20

30

40

50

【化 1 4 2】



10

【 0 3 6 1】

(一般式 (10A) 中、 $R_{a1} \sim R_{a10}$ 及び $R_{11} \sim R_{17}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (10) における $R_{a1} \sim R_{a10}$ 及び $R_{11} \sim R_{17}$ と同義である。)

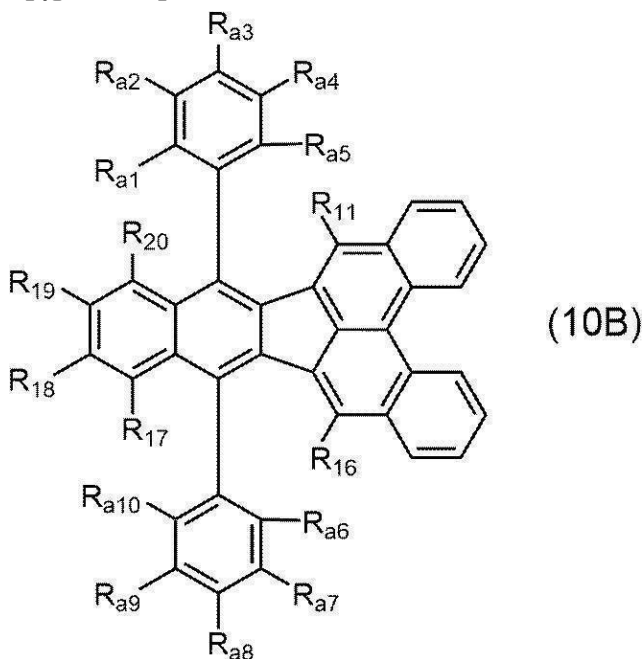
20

【 0 3 6 2】

また、互いに隣接する 2 個以上からなる組が互いに結合して単環を形成する具体例としては、上記式 (10) における $R_{11} \sim R_{16}$ を例にとると、例えば、下記一般式 (10B) で表される化合物が挙げられる。下記一般式 (10B) で表される化合物では、 R_{12} と R_{13} 、及び R_{14} と R_{15} の 2 組が互いに結合して別個の 2 個の単環を形成している。

【 0 3 6 3】

【化 1 4 3】



30

40

【 0 3 6 4】

(一般式 (10B) 中、 $R_{a1} \sim R_{a10}$ 、 R_{11} 及び $R_{16} \sim R_{20}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (10) における $R_{a1} \sim R_{a10}$ 及び R_{11} 、 $R_{16} \sim R_{20}$ と同義である。)

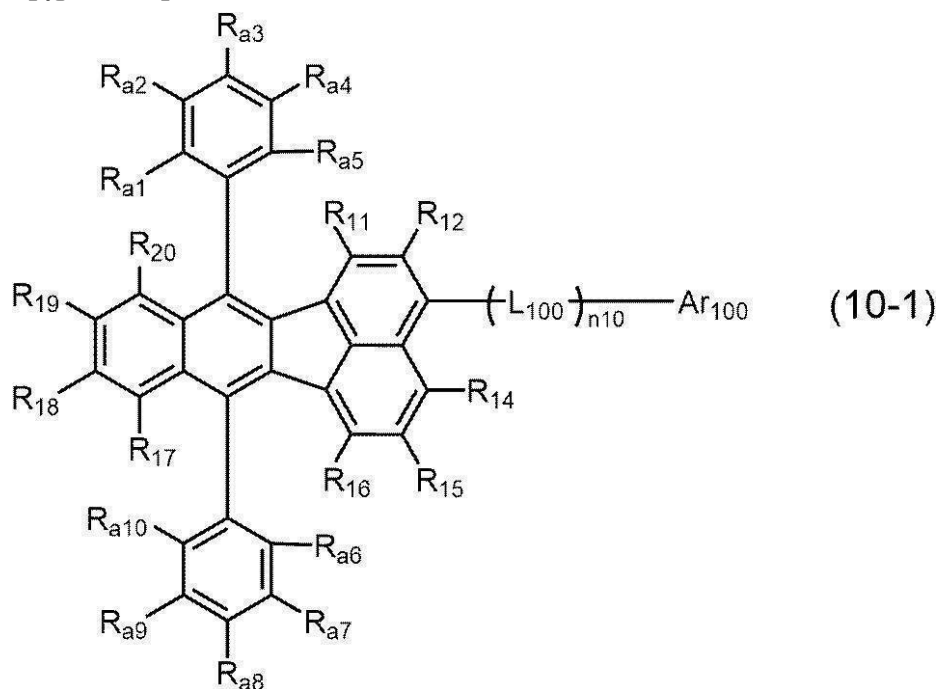
50

【 0 3 6 5 】

一実施形態においては、前記一般式（１０）で表される化合物が、下記一般式（１０－１）で表される化合物である。

【 0 3 6 6 】

【化 1 4 4】



10

20

【 0 3 6 7 】

（前記一般式（１０－１）中、 $R_{11} \sim R_{12}$ 、 $R_{14} \sim R_{20}$ 、及び $R_{a1} \sim R_{a10}$ は、それぞれ独立に、前記一般式（１０）における $R_{11} \sim R_{12}$ 、 $R_{14} \sim R_{20}$ 、及び $R_{a1} \sim R_{a10}$ と同義であり、

n_{10} は、０、１、２又は３であり、

L_{100} は、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の２価の複素環基であり、

n_{10} が、２のとき、複数の L_{100} は互いに同一であるか又は異なり、

n_{10} が、３のとき、複数の L_{100} は互いに同一であるか又は異なり、

Ar_{100} 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、シアノ基、又は置換シリル基である。）

30

【 0 3 6 8 】

前記一般式（１０－１）において、 n_{10} は、０、１又は２であることが好ましい。

前記一般式（１０－１）において、 L_{100} は、

単結合であるか、又は

置換もしくは無置換のフェニル基、

置換もしくは無置換のビフェニル基、

置換もしくは無置換のターフェニル基、

置換もしくは無置換のナフチル基、

置換もしくは無置換のアントリル基、

置換もしくは無置換のフェナントリル基、

置換もしくは無置換のフルオレニル基、

置換もしくは無置換の９，９’－スピロビフルオレニル基、

置換もしくは無置換の９，９－ジメチルフルオレニル基、

置換もしくは無置換の９，９－ジフェニルフルオレニル基、

置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、

40

50

置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、
置換もしくは無置換のジベンゾチオフエニル基、及び
置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフエニル基からなる群から選択されるいずれかの基から1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基であることが好ましい。

【0369】

前記一般式(10-1)において、Ar₁₀₀は、

シアノ基、

置換シリル基、

置換もしくは無置換のフェニル基、

置換もしくは無置換のビフェニル基、

置換もしくは無置換のターフェニル基、

置換もしくは無置換のナフチル基、

置換もしくは無置換のアントリル基、

置換もしくは無置換のフェナントリル基、

置換もしくは無置換のフルオレニル基、

置換もしくは無置換の9,9'-スピロビフルオレニル基、

置換もしくは無置換の9,9-ジメチルフルオレニル基、

置換もしくは無置換の9,9-ジフェニルフルオレニル基、

置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、

置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、

置換もしくは無置換のジベンゾチオフエニル基、又は

置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフエニル基であることが好ましい。

【0370】

前記一般式(10-1)において、

R₁₁~R₁₂、R₁₄~R₁₆及びR₁₇~R₂₀のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、R_{a1}~R_{a5}のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、並びにR_{a6}~R_{a10}のうちの互いに隣接する2個以上からなる組のうちのいずれか1組以上は、互いに結合して置換もしくは無置換の環形成原子数3~30の単環を形成するか、置換もしくは無置換の環形成原子数3~30の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

【0371】

一実施形態においては、前記一般式(10)におけるR₁₂とR₁₃が互いに結合して置換もしくは無置換の環形成原子数3~30の単環を形成する、又は置換もしくは無置換の環形成原子数3~30の縮合環を形成する。

一実施形態においては、前記一般式(10)で表される化合物が、下記式(10-2)で表される化合物である。

【0372】

10

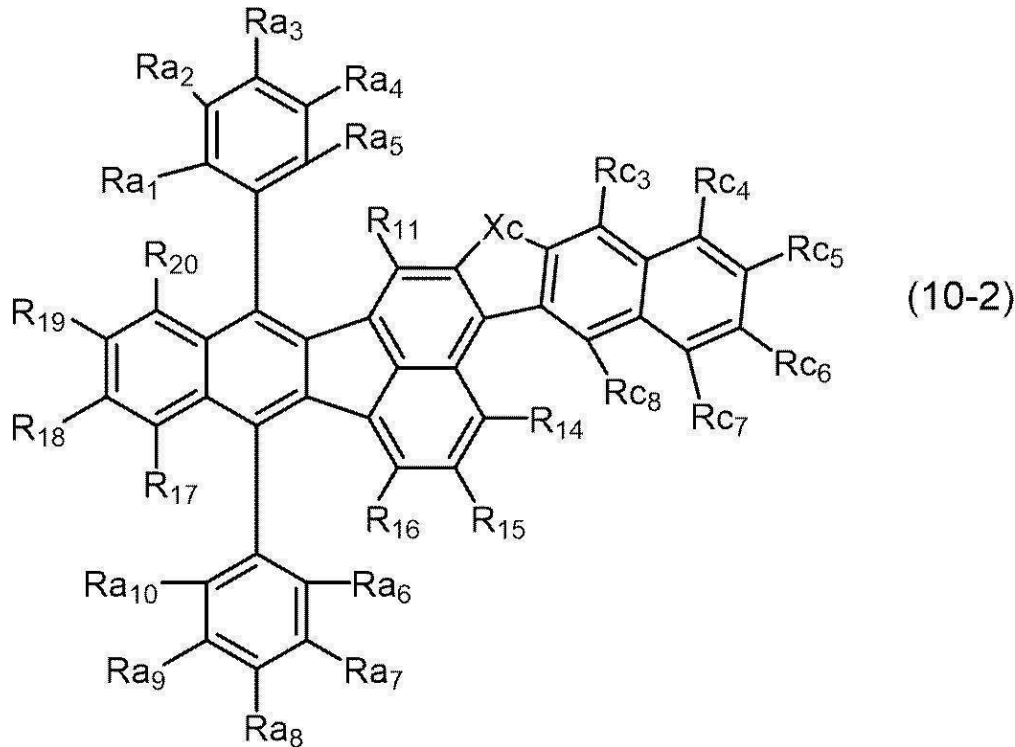
20

30

40

50

【化 1 4 5】



【 0 3 7 3 】

(一般式 (10-2) 中、 X_c は、酸素原子、硫黄原子又は $CR_{c1}R_{c2}$ であり、 R_{11} 、 $R_{14} \sim R_{20}$ 、 $R_{a1} \sim R_{a10}$ 、及び $R_{c3} \sim R_{c8}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (10) における $R_{11} \sim R_{20}$ と同義であり、

R_{c1} 及び R_{c2} 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_{901})(R_{902})(R_{903})、

—O—(R_{904})、

—S—(R_{905})、

—N(R_{906})(R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

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 1 価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

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

R_{901} 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る。 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る。 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る。 R_{904} が複数存在する場合、複数の R_{904} は、互いに同一であるか又は異なる。 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る。 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る。

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。))

【0374】

前記一般式(10-2)において、

R₁₄~R₁₆及びR₁₇~R₂₀のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、R_{a1}~R_{a5}のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、R_{a6}~R_{a10}のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、R_{c3}~R_{c8}のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、並びにR_{c1}とR_{c2}の組のうちのいずれか1組以上は、互いに結合して置換もしくは無置換の環形成原子数3~30の単環を形成するか、置換もしくは無置換の環形成原子数3~30の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

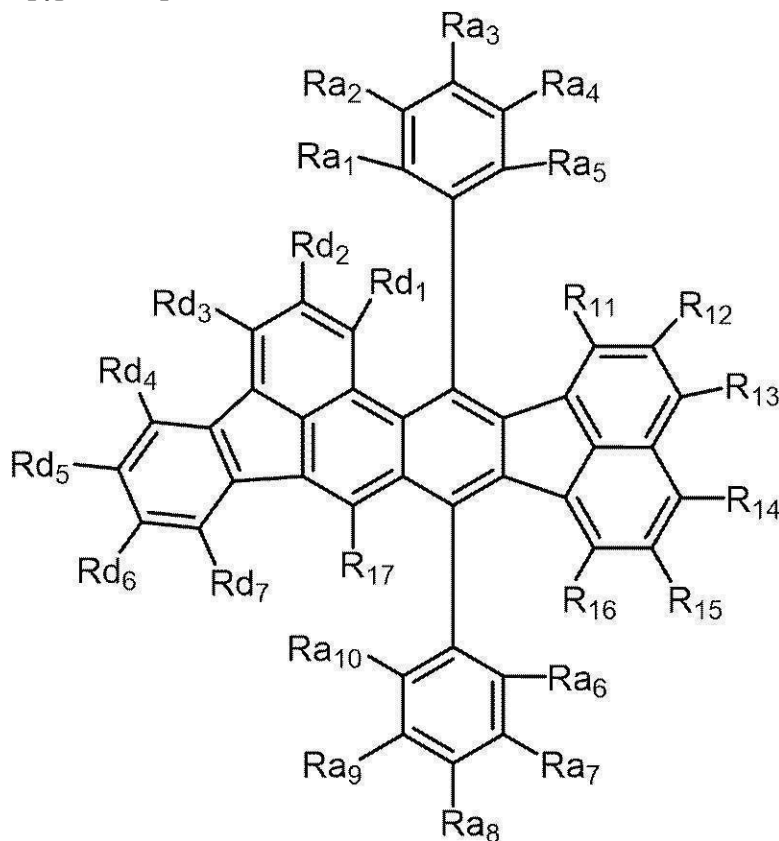
【0375】

一実施形態においては、前記一般式(10)におけるR₁₈~R₂₀のうちの2個以上が、互いに結合して置換もしくは無置換の環形成原子数3~30の単環を形成する、又は置換もしくは無置換の環形成原子数3~30の縮合環を形成する。

一実施形態においては、前記一般式(10)で表される化合物が、下記一般式(10-3)で表される化合物である。

【0376】

【化146】



(10-3)

【0377】

(一般式(10-3)中、R₁₁~R₁₇、R_{a1}~R_{a10}、及びR_{d1}~R_{d7}は、それぞれ独立に、前記一般式(10)におけるR₁₁~R₂₀と同義である。)

【0378】

前記一般式(10-3)において、

R₁₁~R₁₆のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、R₁₇及びR_{d1}~R_{d7}のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、R_{a1}~R_{a5}のうちの互いに隣接する2個以上からなる組、並びにR_{a6}~R_{a10}のうちの互いに隣接する2個以上からなる組のうちのいずれか1組以上は、互いに結合して置換もしくは無置換の環形成原子数3~30の単環を形成するか、置換もしくは無置換の環形成原子数3~30の縮合環を形成するか、

又は互いに結合しない。

【0379】

一実施形態においては、前記一般(10)及び(10-1)～(10-3)における環形成に関与しない $R_{11} \sim R_{20}$ 、 $R_{a1} \sim R_{a5}$ 、 $R_{a6} \sim R_{a10}$ 、 $R_{c1} \sim R_{c8}$ 、及び $R_{d1} \sim R_{d7}$ が、それぞれ独立に、

水素原子、

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1価の複素環基である。

【0380】

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。

【0381】

10

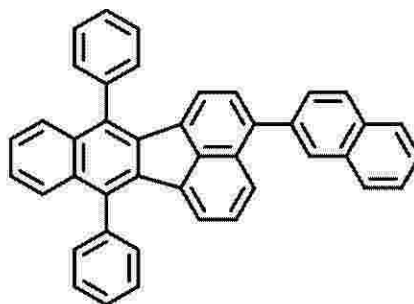
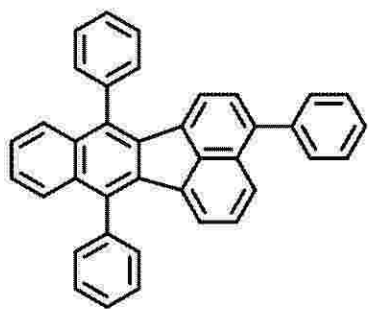
20

30

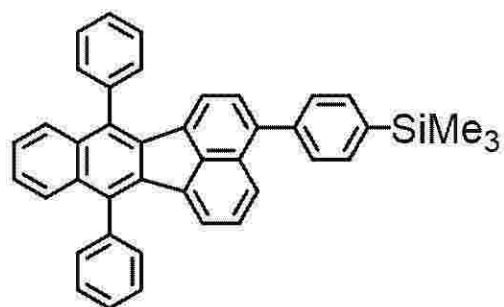
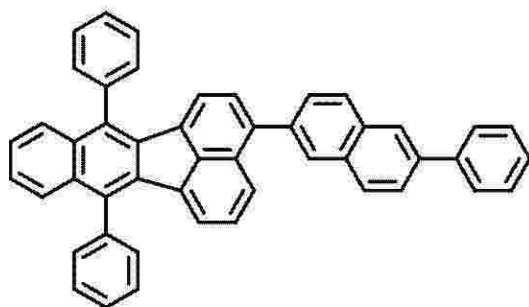
40

50

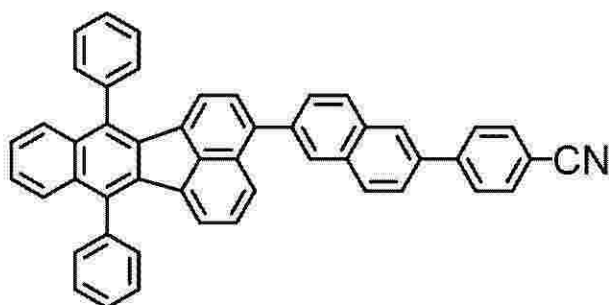
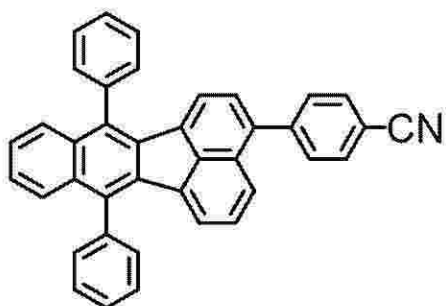
【化 1 4 7】



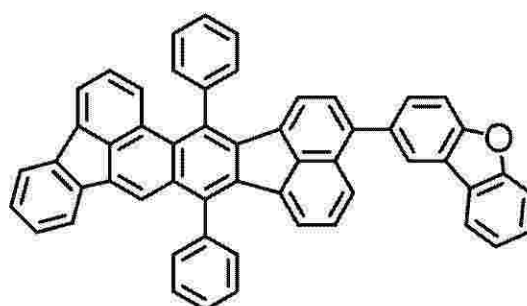
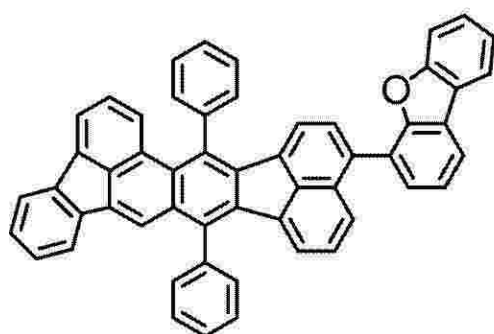
10



20



30

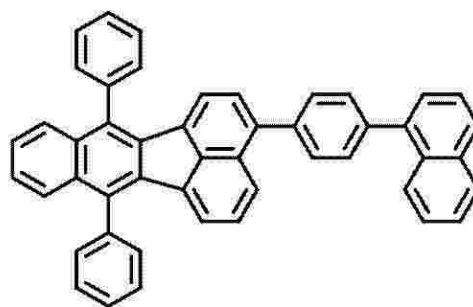
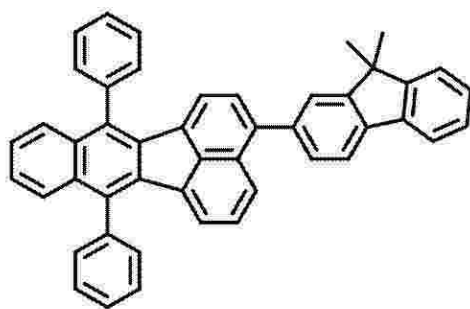


40

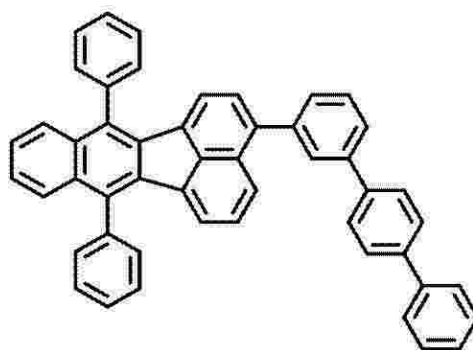
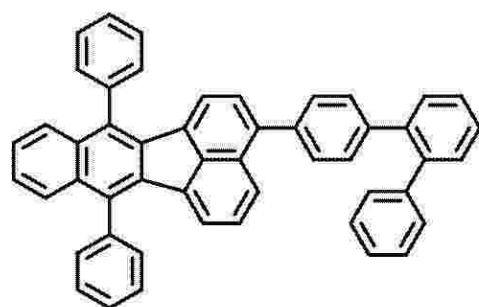
【 0 3 8 2】

50

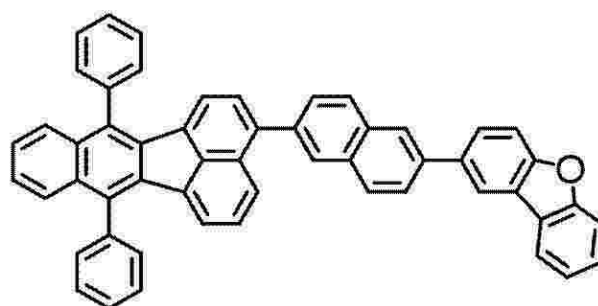
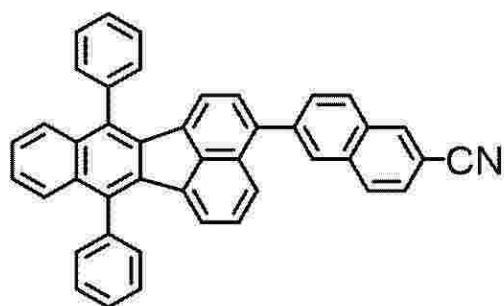
【化 1 4 8】



10



20



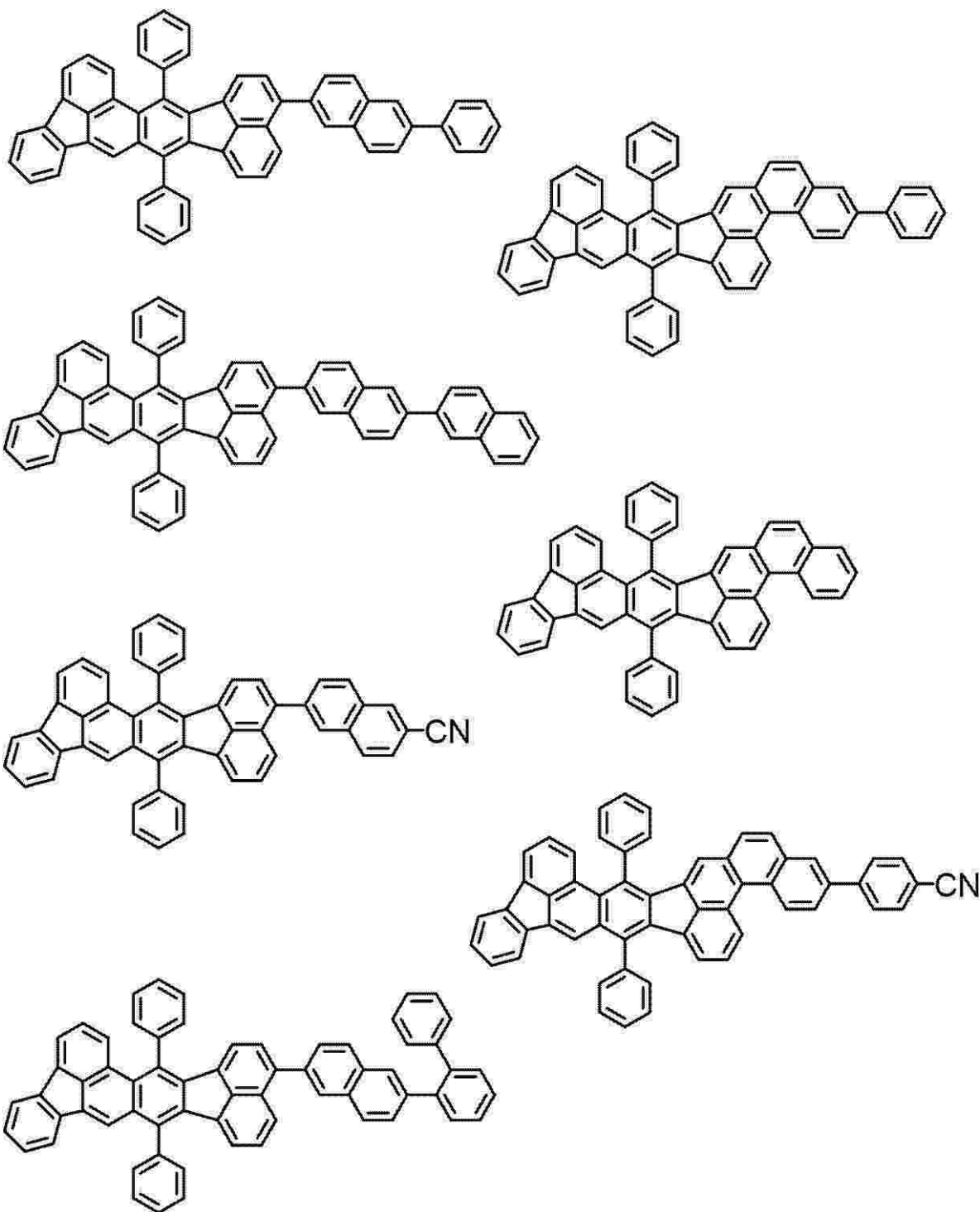
30

【 0 3 8 3】

40

50

【化 1 4 9】



10

20

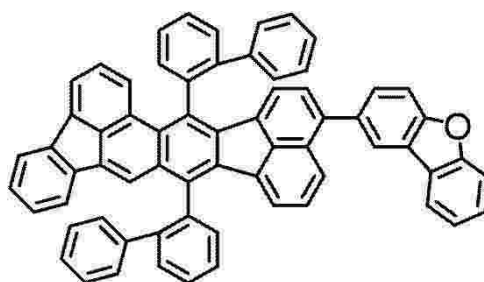
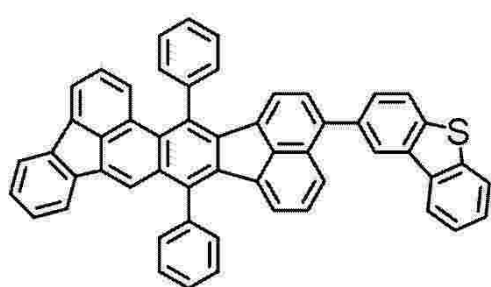
30

40

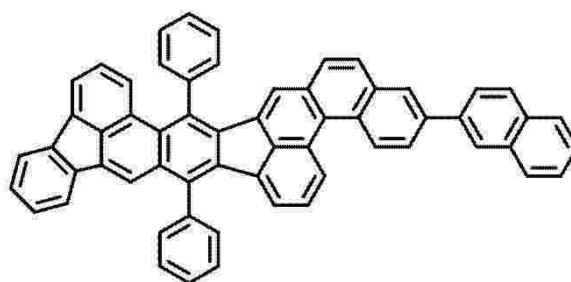
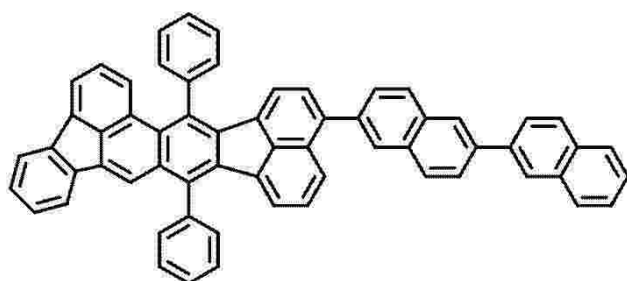
【 0 3 8 4】

50

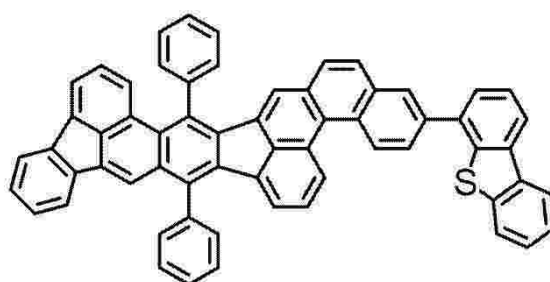
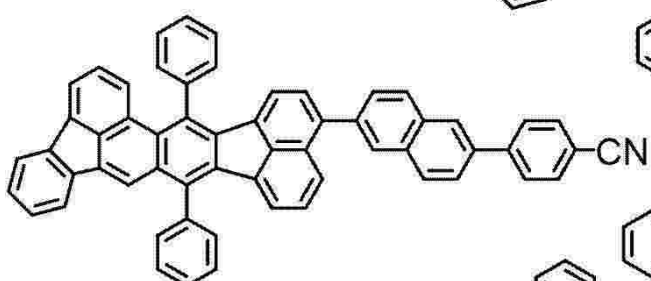
【化 1 5 0】



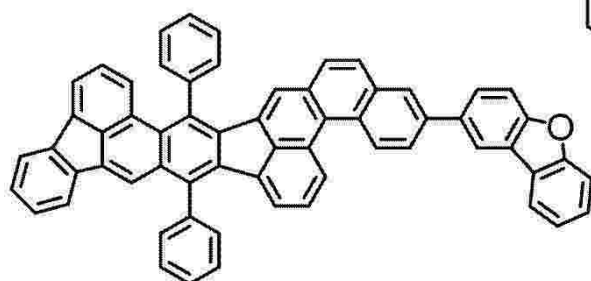
10



20



30

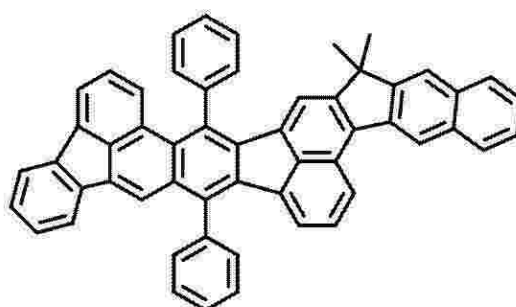
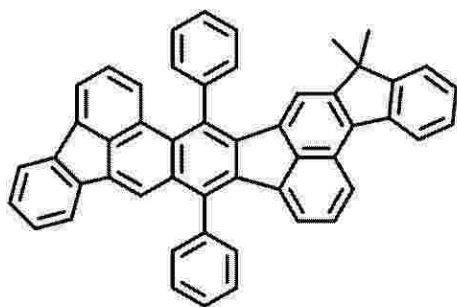


40

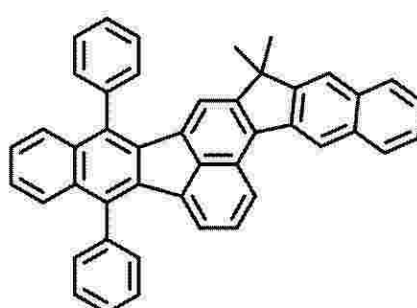
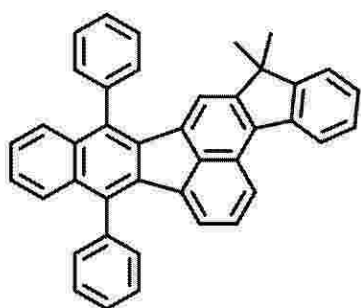
【 0 3 8 5】

50

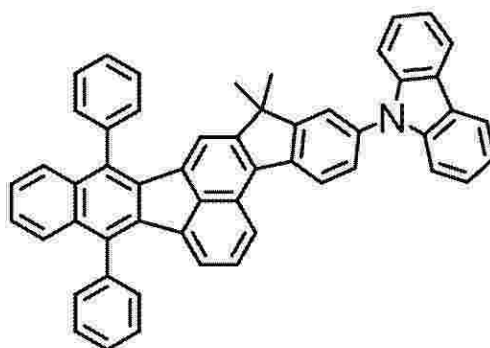
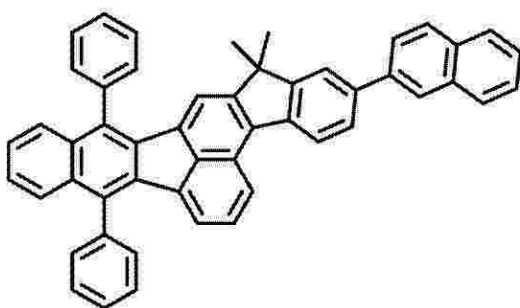
【化 1 5 1】



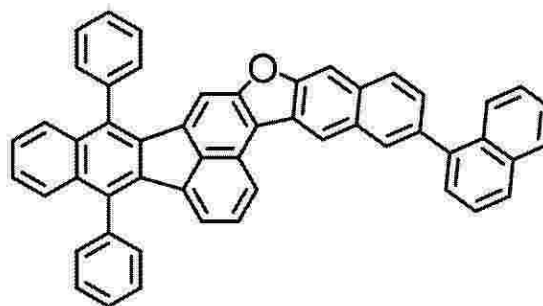
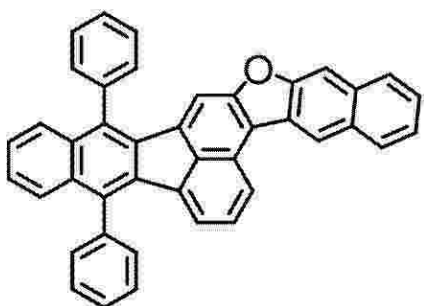
10



20



30

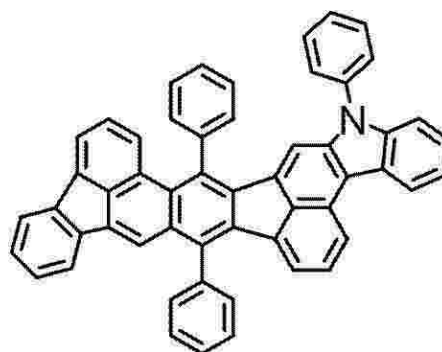
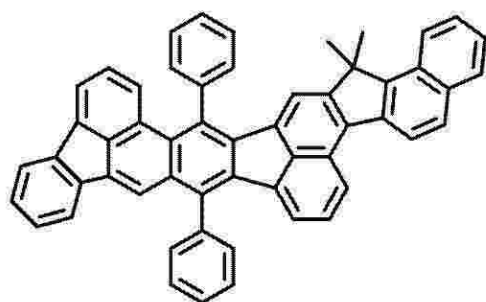


40

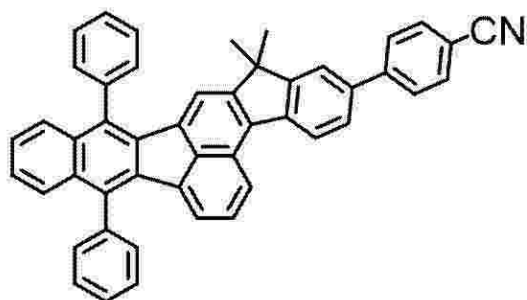
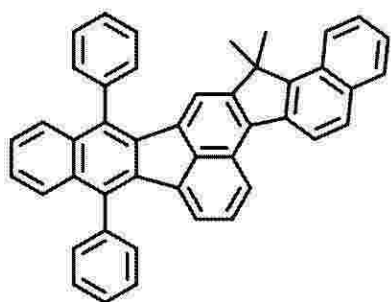
【 0 3 8 6】

50

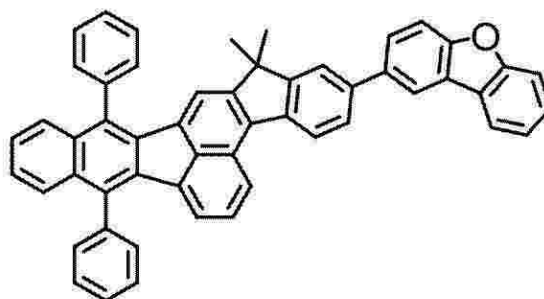
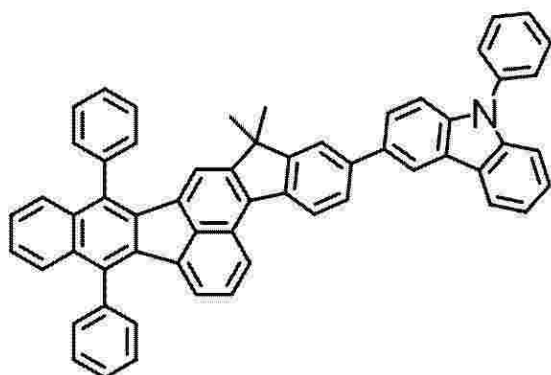
【化 1 5 2】



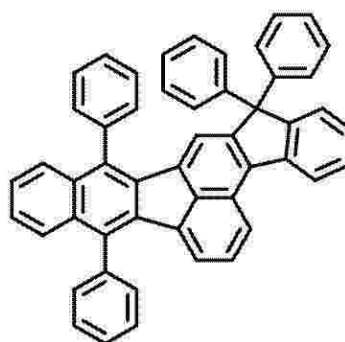
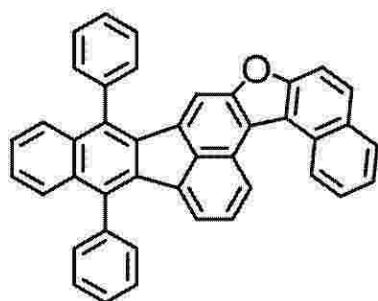
10



20



30

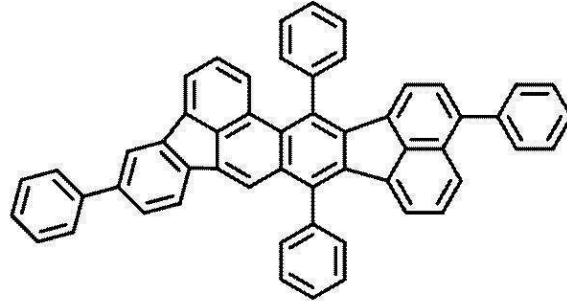
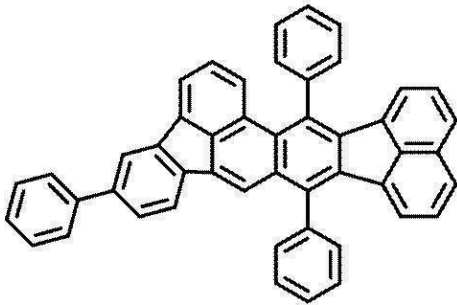
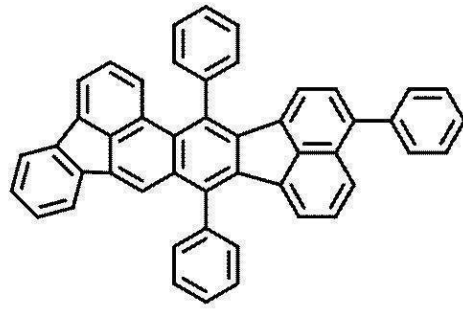
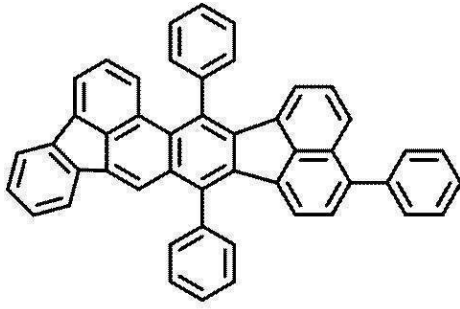


40

【 0 3 8 7】

50

【化 1 5 3】



10

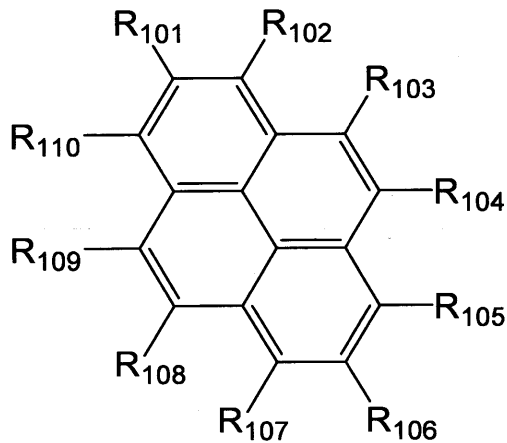
【 0 3 8 8】

(一般式 (1 1) で表される化合物)

一般式 (1 1) で表される化合物について説明する。

【 0 3 8 9】

【化 1 5 4】



(1 1)

20

30

【 0 3 9 0】

(一般式 (1 1) において、

R₁₀₁～R₁₁₀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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

R₁₀₁～R₁₁₀の少なくとも1つは下記一般式 (1 2) で表される1価の基である。

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、かつ下記一般式 (1 2) で表される1価の基ではないR₁₀₁～R₁₁₀は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

40

50

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

$\text{R}_{901} \sim \text{R}_{907}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である。

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る。

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る。

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る。

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

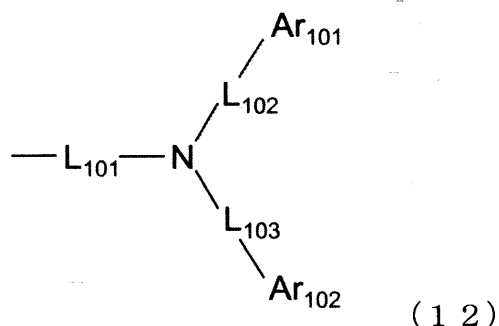
R_{905} が複数存在する場合、複数の R_{905} は、互いに同一であるか又は異なる。

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る。

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。)

【0391】

【化155】



【0392】

(一般式 (12) において、 Ar_{101} 及び Ar_{102} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

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

$\text{L}_{101} \sim \text{L}_{103}$ 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 価の複素環基である。

【0393】

一般式 (11) において、 $\text{R}_{101} \sim \text{R}_{110}$ のうち 2 つが一般式 (12) で表される基であることが好ましい。

【0394】

一実施形態において、一般式 (11) で表される化合物は下記一般式 (13) で表される。

【0395】

10

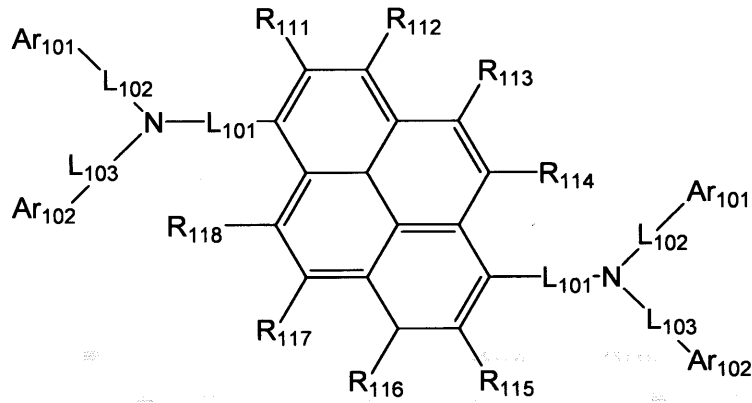
20

30

40

50

【化 1 5 6】



10

【0 3 9 6】

(一般式 (13) において、 $R_{111} \sim R_{118}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における、一般式 (12) で表される 1 価の基ではない $R_{101} \sim R_{110}$ と同義である。 Ar_{101} 、 Ar_{102} 、 L_{101} 、 L_{102} 及び L_{103} は、前記一般式 (12) における Ar_{101} 、 Ar_{102} 、 L_{101} 、 L_{102} 及び L_{103} と同義である。)

【0 3 9 7】

一般式 (11) において、 L_{101} は単結合であることが好ましく、 L_{102} 及び L_{103} は単結合であることが好ましい。

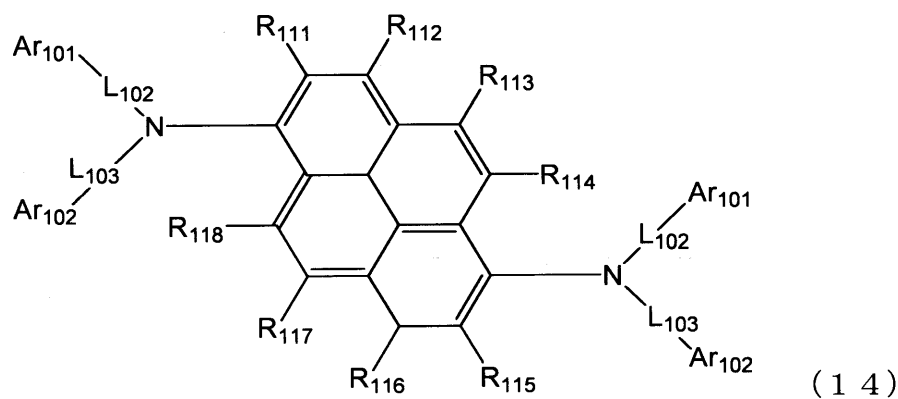
20

【0 3 9 8】

一実施形態において、一般式 (11) で表される化合物は下記一般式 (14) 又は (15) で表される。

【0 3 9 9】

【化 1 5 7】



30

【0 4 0 0】

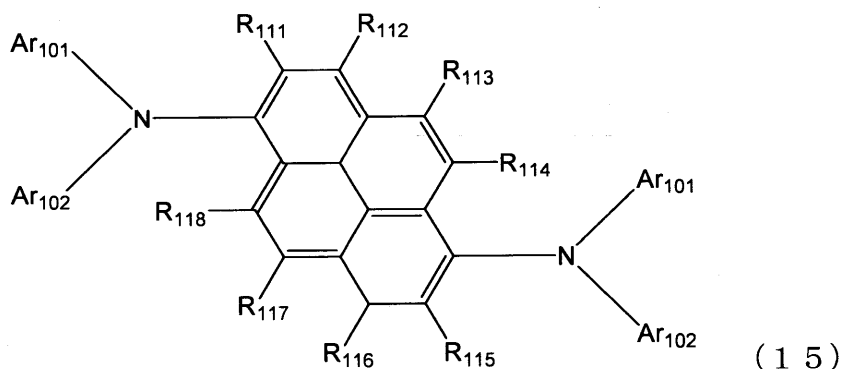
(一般式 (14) において、 $R_{111} \sim R_{118}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (13) における $R_{111} \sim R_{118}$ と同義である。 Ar_{101} 、 Ar_{102} 、 L_{102} 及び L_{103} は、それぞれ独立に、前記一般式 (12) における Ar_{101} 、 Ar_{102} 、 L_{102} 及び L_{103} と同義である。)

40

【0 4 0 1】

50

【化 1 5 8】



10

【 0 4 0 2】

(一般式 (15) において、 $R_{111} \sim R_{118}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (13) における $R_{111} \sim R_{118}$ と同義であり、 Ar_{101} 及び Ar_{102} は、それぞれ独立に、前記一般式 (12) における Ar_{101} 及び Ar_{102} と同義である。)

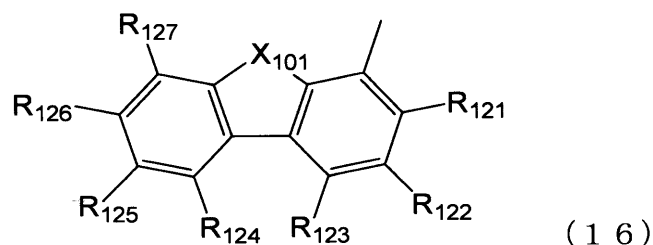
【 0 4 0 3】

一般式 (11) (一般式 (12)) において、好ましくは、 Ar_{101} 及び Ar_{102} のうち少なくとも 1 つが下記一般式 (16) で表される基である。

【 0 4 0 4】

20

【化 1 5 9】



【 0 4 0 5】

30

(一般式 (16) において、

X_{101} は酸素原子又は硫黄原子を示す。

$R_{121} \sim R_{127}$ 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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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 $R_{121} \sim R_{127}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903})、

— O — (R_{904})、

— S — (R_{905})、

— N (R_{906}) (R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

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

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における $R_{901} \sim R_{907}$

40

50

と同義である。)

【0406】

X₁₀₁は、酸素原子であることが好ましい。

R₁₂₁～R₁₂₇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1価の複素環基であることが好ましい。

10

【0407】

一般式(11)(一般式(12))において、Ar₁₀₁が一般式(16)で表される基であり、Ar₁₀₂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。

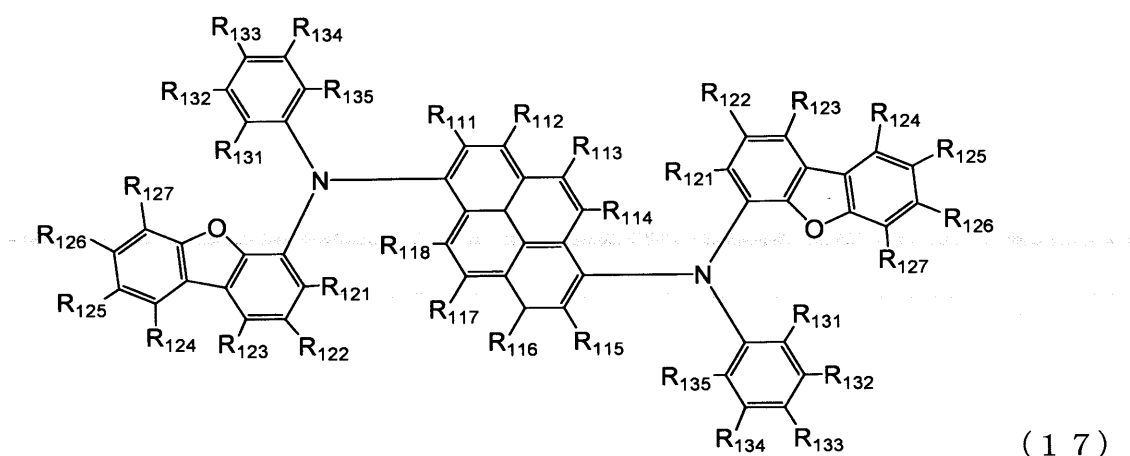
【0408】

一実施形態において、一般式(11)で表される化合物は下記一般式(17)で表される。

【0409】

【化160】

20



30

【0410】

(一般式(17)において、R₁₁₁～R₁₁₈は、それぞれ独立に、前記一般式(13)におけるR₁₁₁～R₁₁₈と同義であり、R₁₂₁～R₁₂₇は、それぞれ独立に、前記一般式(16)におけるR₁₂₁～R₁₂₇と同義である。

R₁₃₁～R₁₃₅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)、

—O—(R₉₀₄)、

—S—(R₉₀₅)、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、前記一般式(11)におけるR₉₀₁～R₉₀₇

40

50

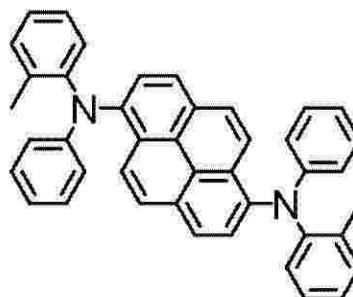
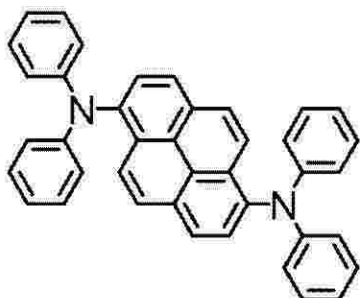
と同義である。)

【0411】

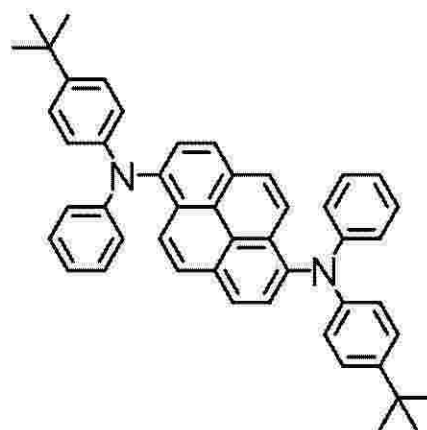
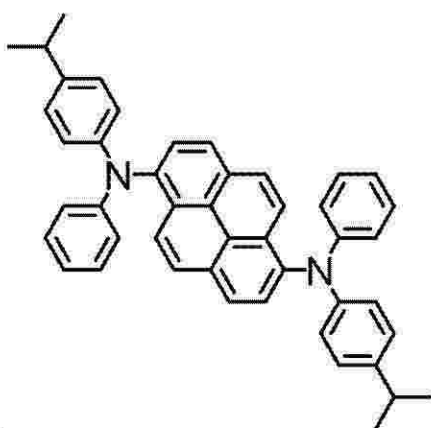
前記一般式(11)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

【0412】

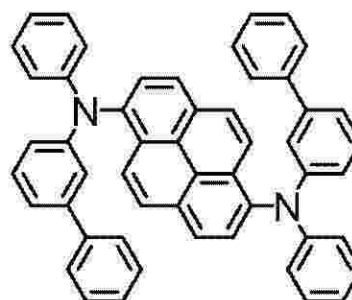
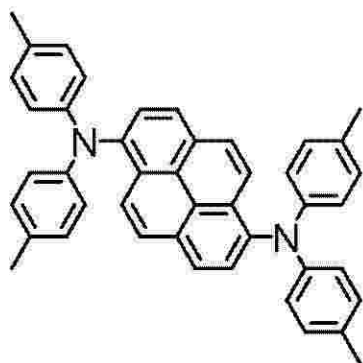
【化161】



10



20



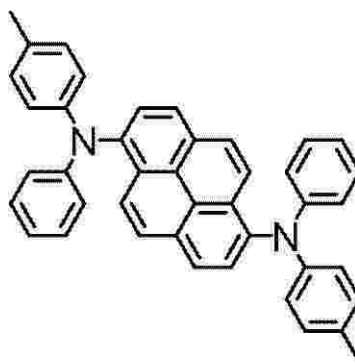
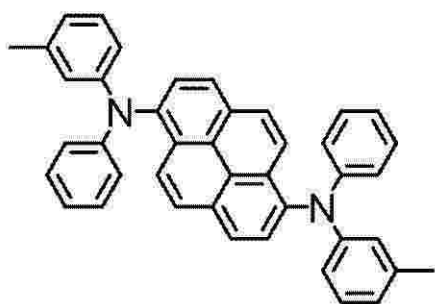
30

【0413】

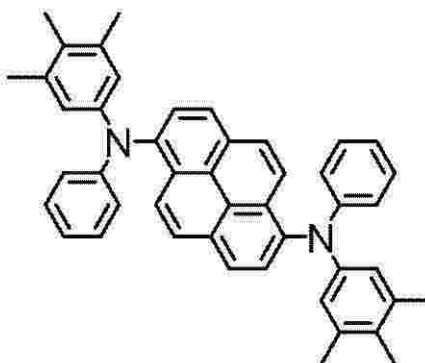
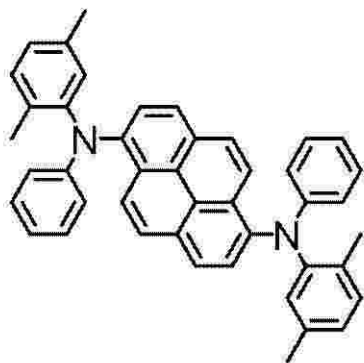
40

50

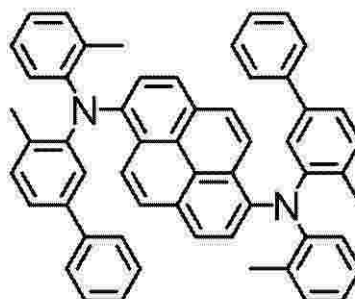
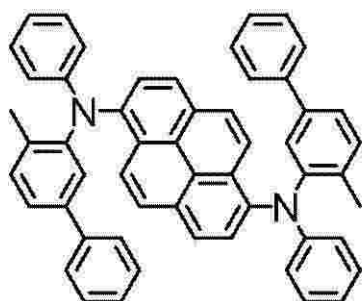
【化 1 6 2】



10



20



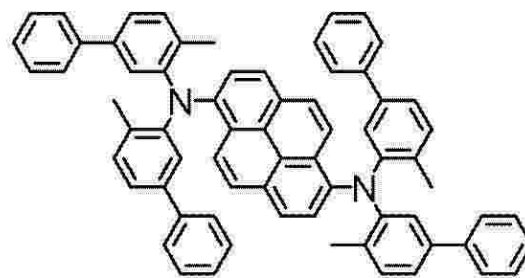
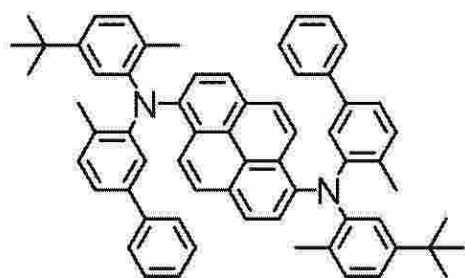
30

【 0 4 1 4】

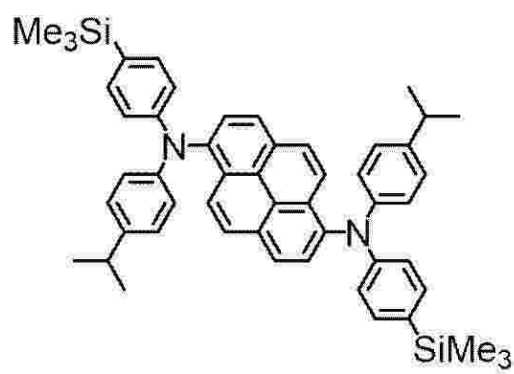
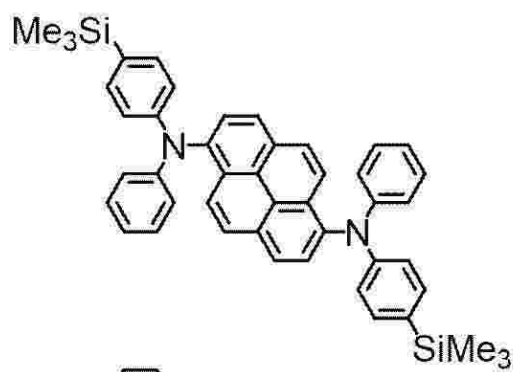
40

50

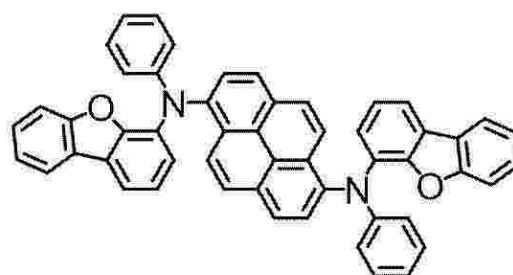
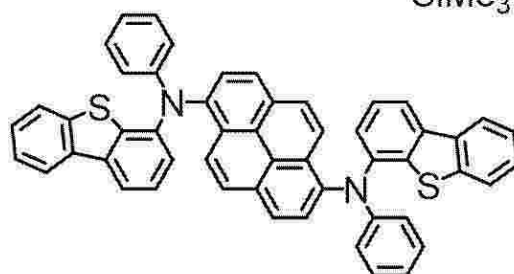
【化 1 6 3】



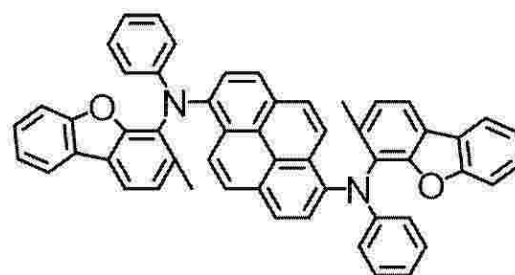
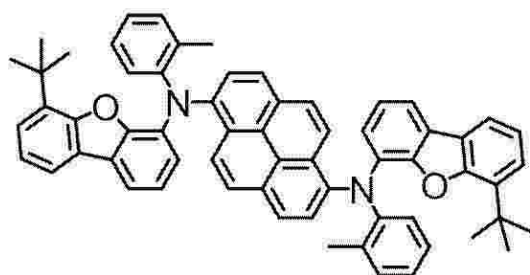
10



20



30

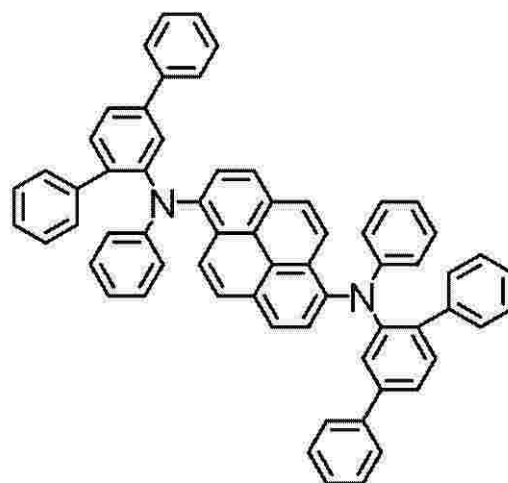
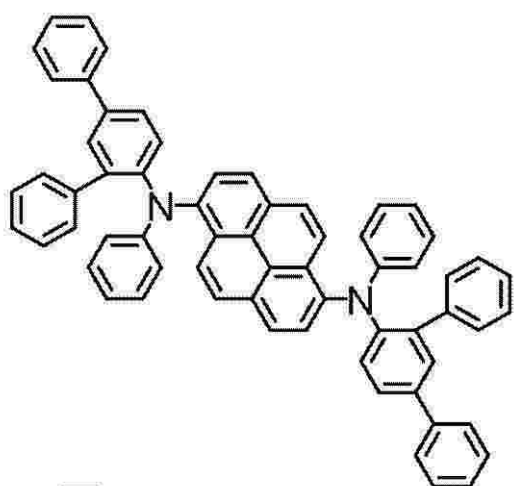


【 0 4 1 5】

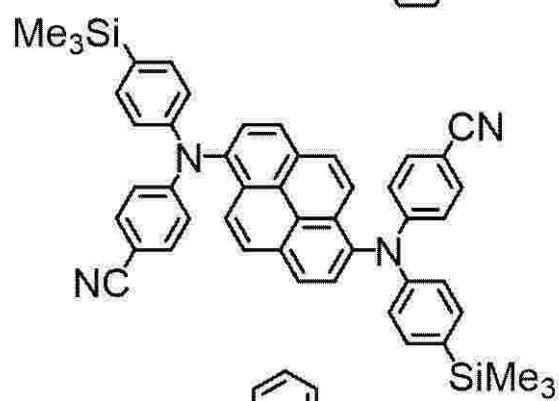
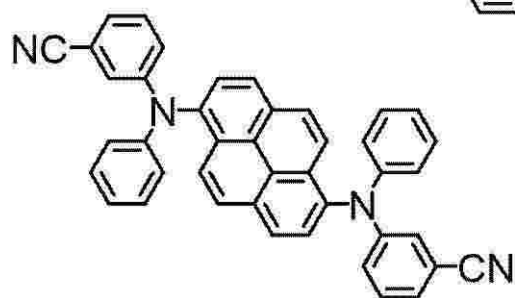
40

50

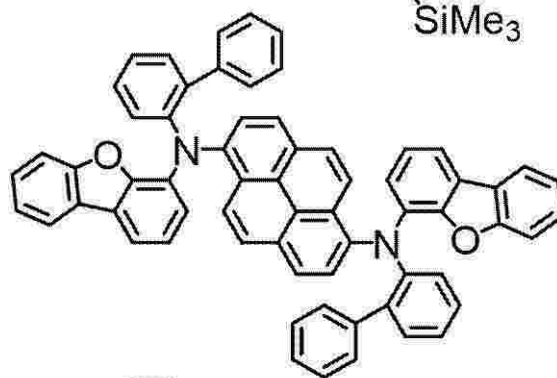
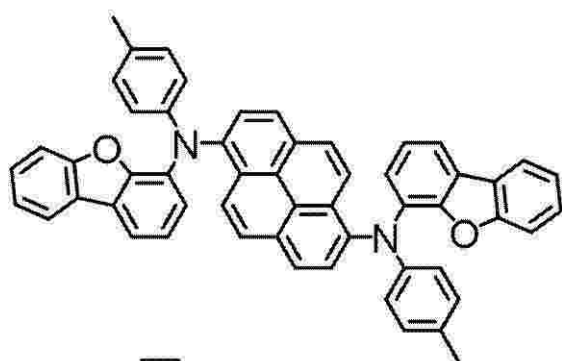
【化 1 6 4】



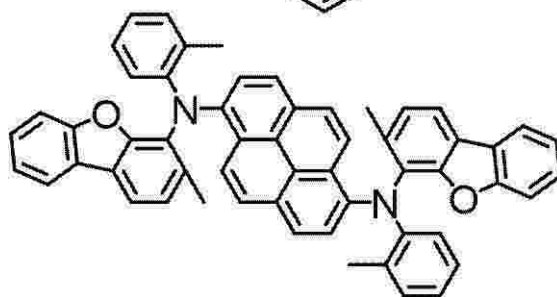
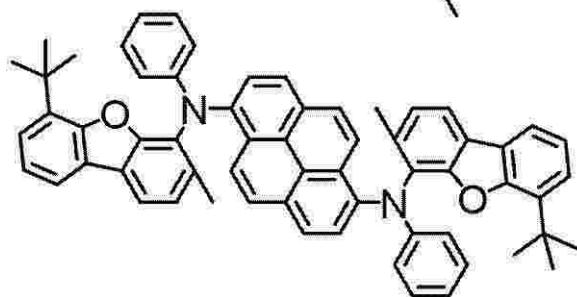
10



20



30

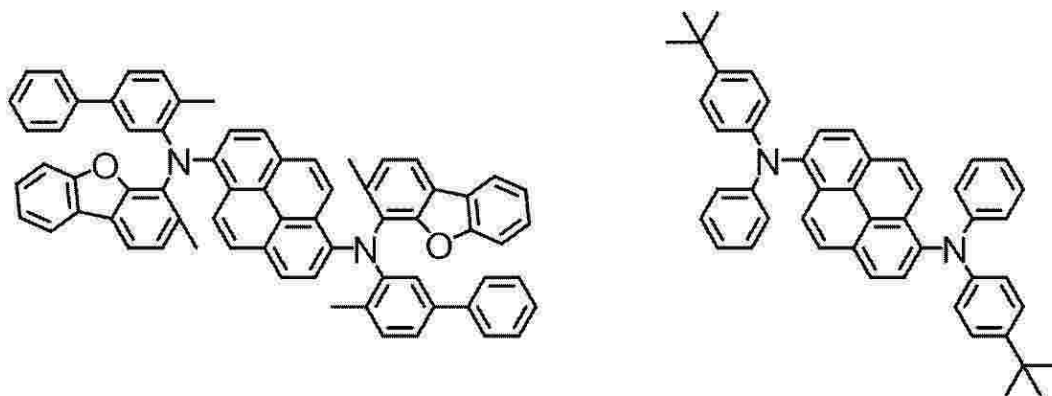


40

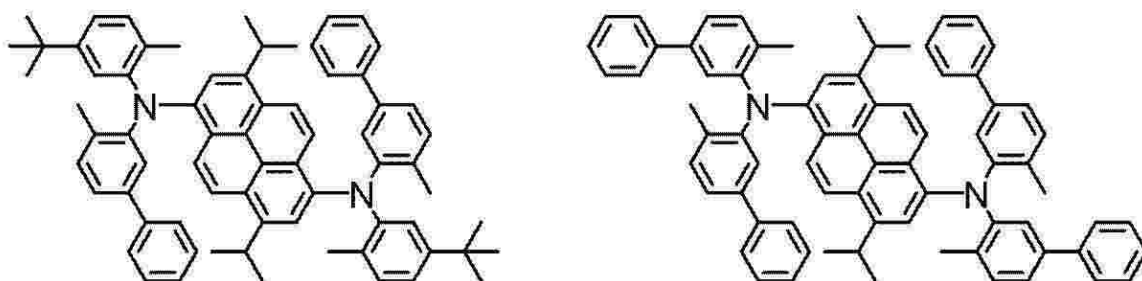
【 0 4 1 6 】

50

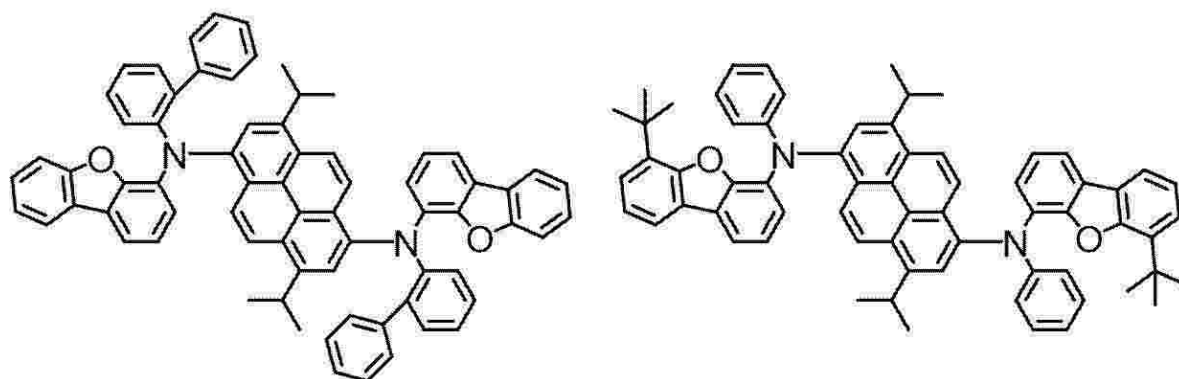
【化 1 6 5】



10



20



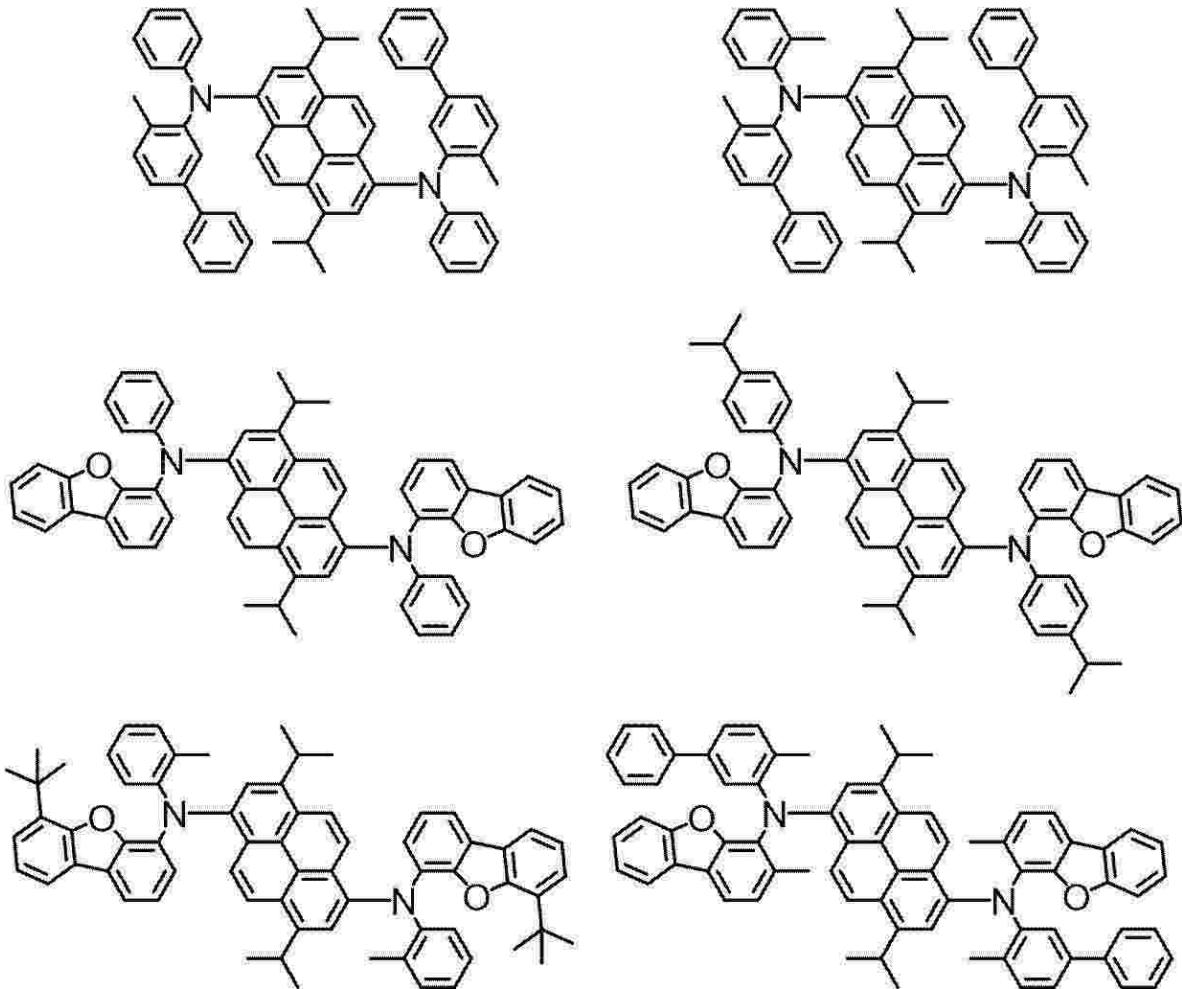
30

【 0 4 1 7】

40

50

【化 1 6 6】



10

20

【 0 4 1 8】

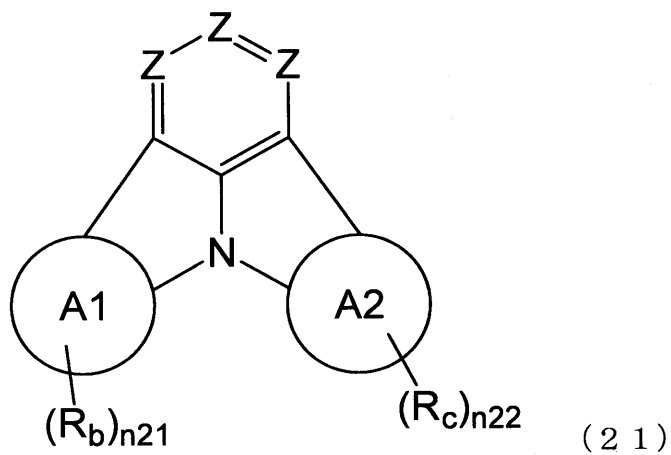
(一般式 (21) で表される化合物)

一般式 (21) で表される化合物について説明する。

30

【 0 4 1 9】

【化 1 6 7】



40

【 0 4 2 0】

(一般式 (21) において、

Z は、それぞれ独立に CR_a 又は N である。

A1 環及び A2 環は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環である。

50

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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

$n21$ 及び $n22$ は、それぞれ独立に、0～4の整数である。

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_a \sim R_c$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

—O—(R_{904})、

—S—(R_{905})、

—N(R_{906})(R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(11)における $R_{901} \sim R_{907}$ と同義である。)

【0421】

A1環及びA2環の「芳香族炭化水素環」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と同じ構造である。A1環及びA2環の「芳香族炭化水素環」は、一般式(21)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ものである。「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。

A1環及びA2環の「複素環」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と同じ構造である。A1環及びA2環の「複素環」は、一般式(21)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ものである。「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。

【0422】

R_b は、A1環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環の複素環を形成する原子のいずれかに結合する。

R_c は、A2環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環の複素環を形成する原子のいずれかに結合する。

【0423】

$R_a \sim R_c$ のうち、少なくとも1つ(好ましくは2つ)は下記一般式(21a)で表される基であることが好ましい。

—L₂₀₁—Ar₂₀₁ (21a)

【0424】

(一般式(21a)において、

L₂₀₁は、

単結合、

10

20

30

40

50

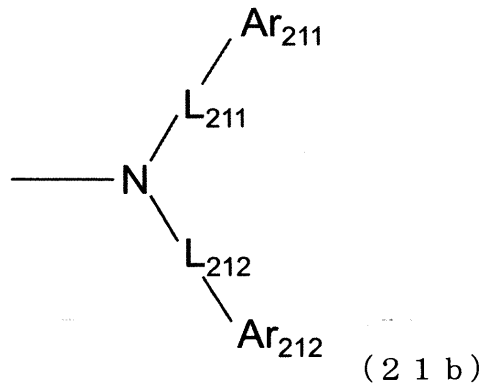
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 の 2 価の複素環基である。

Ar₂₀₁ 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 1 価の複素環基、又は
下記一般式 (21b) で表される基である。

【0425】

【化168】



10

20

【0426】

(一般式 (21b) において、

L₂₁₁ 及び L₂₁₂ 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 価の複素環基である。

Ar₂₁₁ 及び Ar₂₁₂ 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、
置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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 Ar₂₁₁ 及び Ar₂₁₂ は、それぞれ独立に、

30

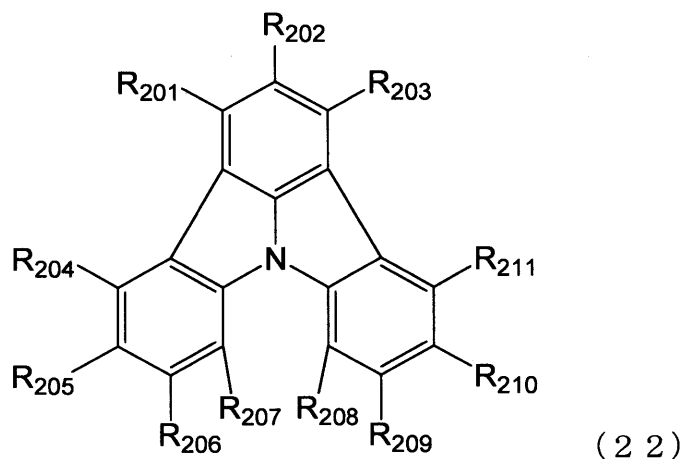
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。)

【0427】

一実施形態において、一般式 (21) で表される化合物は下記一般式 (22) で表され
る。

【0428】

【化169】



40

50

【0429】

(一般式(22)において、

$R_{201} \sim R_{211}$ 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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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 $R_{201} \sim R_{211}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

—O—(R_{904})、

—S—(R_{905})、

—N(R_{906})(R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(11)における $R_{901} \sim R_{907}$ と同義である。) 10

【0430】

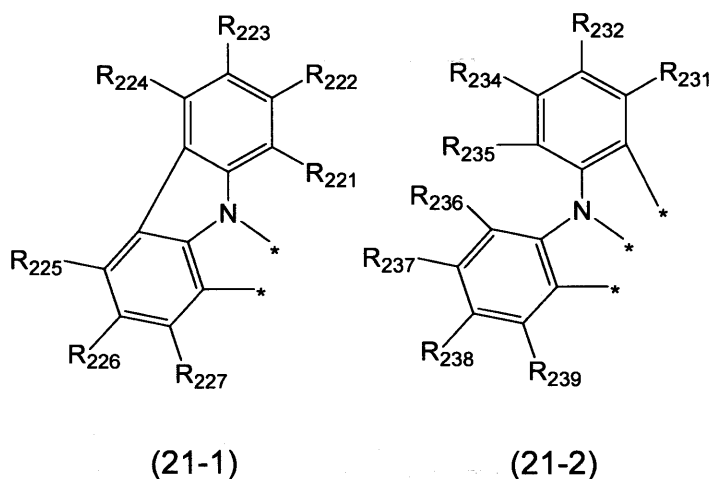
$R_{201} \sim R_{211}$ のうち、少なくとも1つ(好ましくは2つ)は上記一般式(21a)で表される基であることが好ましい。好ましくは R_{204} 及び R_{211} が上記一般式(21a)で表される基である。

【0431】

一実施形態において、一般式(21)で表される化合物は、A1環に下記一般式(21-1)又は(21-2)で表される構造が結合した化合物である。また、一実施形態において、一般式(22)で表される化合物は、 $R_{204} \sim R_{207}$ が結合する環に下記一般式(21-1)又は(21-2)で表される構造が結合した化合物である。 30

【0432】

【化170】



【0433】

(一般式(21-1)において、2つの*は、それぞれ独立に、一般式(21)のA1環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、又は式(22)の $R_{204} \sim R_{207}$ のいずれかと結合する。 50

一般式 (21-2) の 3 つの * は、それぞれ独立に、一般式 (22) の A1 環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、又は一般式 (22) の R₂₀₄ ~ R₂₀₇ のいずれかと結合する。

R₂₂₁ ~ R₂₂₇ 及び R₂₃₁ ~ R₂₃₉ 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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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 R₂₂₁ ~ R₂₂₇ 及び R₂₃₁ ~ R₂₃₉ 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)、

- O - (R₉₀₄)、

- S - (R₉₀₅)、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

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

R₉₀₁ ~ R₉₀₇ は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における R₉₀₁ ~ R₉₀₇ と同義である。)

【0434】

一実施形態においては、一般式 (21) で表される化合物は、下記一般式 (21-3)、一般式 (21-4) 又は一般式 (21-5) で表される化合物である。

【0435】

10

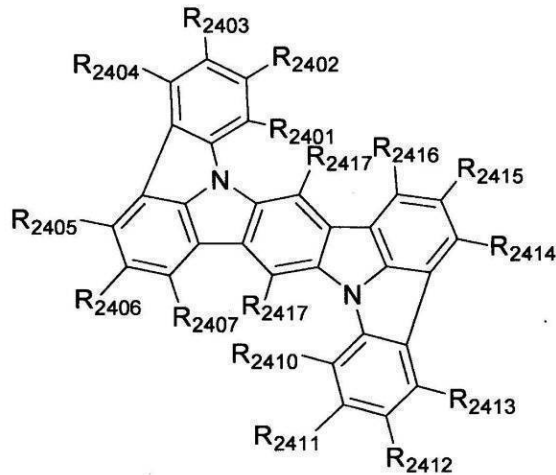
20

30

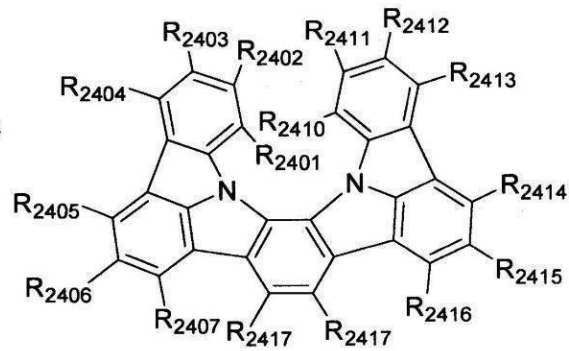
40

50

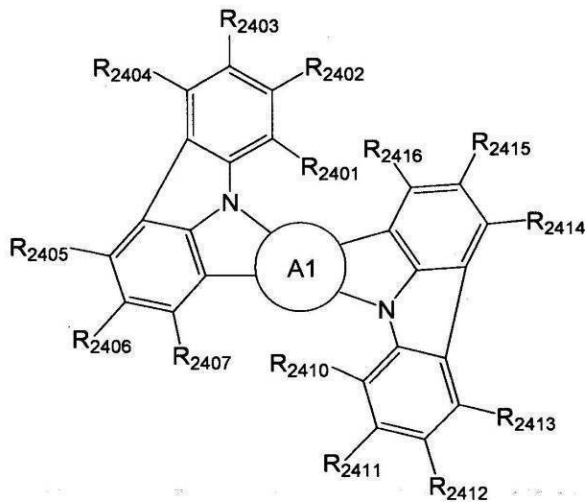
【化 1 7 1】



(21-3)



(21-4)



(21-5)

【0 4 3 6】

(一般式(21-3)、一般式(21-4)及び一般式(21-5)中、A1環は、前記一般式(21)におけるA1環と同義である。

R2401～R2407は、それぞれ独立に、一般式(21-1)及び(21-2)におけるR221～R227と同義であり、R2410～R2417は、それぞれ独立に、一般式(22)におけるR201～R211と同義である。)

【0 4 3 7】

一実施形態においては、一般式(21-5)のA1環の置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環は、置換もしくは無置換のナフタレン環、又は置換もしくは無置換のフルオレン環である。

一実施形態においては、一般式(21-5)のA1環の置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環は、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

【0 4 3 8】

一実施形態においては、一般式(21)又は一般式(22)で表される化合物は、下記一般式(21-6-1)～(21-6-7)で表される化合物からなる群から選択される。

【0 4 3 9】

10

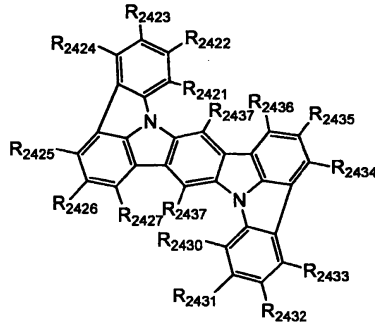
20

30

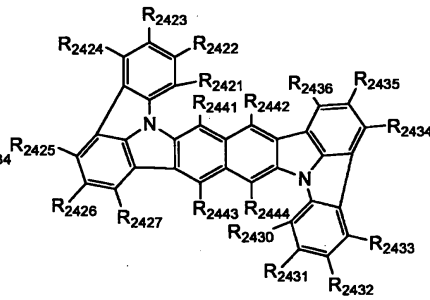
40

50

【化 1 7 2】

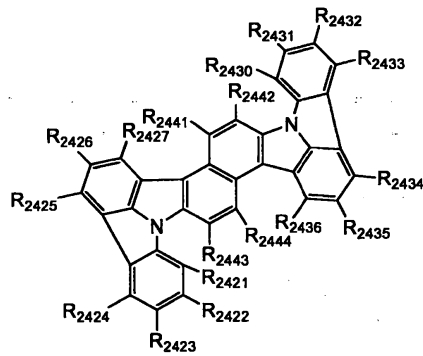


(21-6-1)

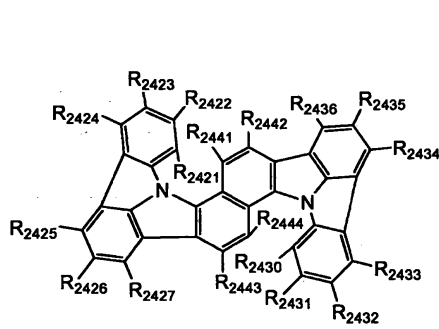


(21-6-2)

10

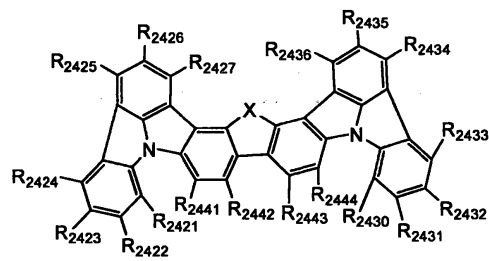


(21-6-3)

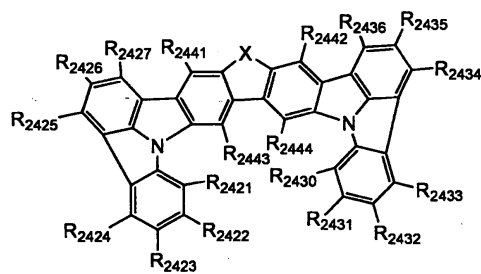


(21-6-4)

20

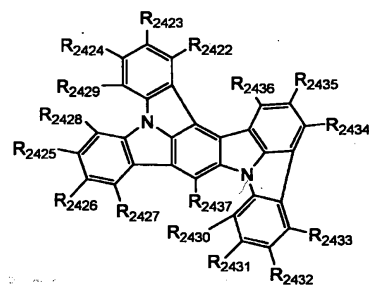


(21-6-5)



(21-6-6)

30



(21-6-7)

40

【0 4 4 0】

(一般式(21-6-1)～(21-6-7)中、 $R_{2421} \sim R_{2427}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(21-1)及び(21-2)における $R_{221} \sim R_{227}$ と同義であり、 $R_{2430} \sim R_{2437}$ 及び $R_{2441} \sim R_{2444}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(22)における $R_{201} \sim R_{211}$ と同義である。)

Xは、O、 NR_{901} 、又は $C(R_{902})(R_{903})$ である。

$R_{901} \sim R_{903}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(11)における $R_{901} \sim R_{903}$ と同義である。)

【0 4 4 1】

50

一実施形態において、一般式(22)で表される化合物は、 $R_{201} \sim R_{211}$ 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、置換もしくは無置換の縮合環を形成する。当該実施形態について、以下一般式(25)として詳述する。

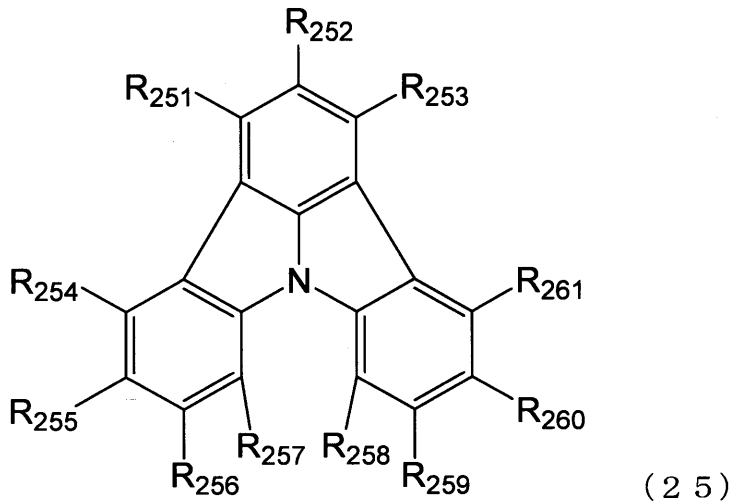
【0442】

(一般式(25)で表される化合物)

一般式(25)で表される化合物について説明する。

【0443】

【化173】



【0444】

(一般式(25)において、

R_{251} と R_{252} の組、 R_{252} と R_{253} の組、 R_{254} と R_{255} の組、 R_{255} と R_{256} の組、 R_{256} と R_{257} の組、 R_{258} と R_{259} の組、 R_{259} と R_{260} の組、及び、 R_{260} と R_{261} の組からなる群から選択される組のうち2以上の組は、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、又は置換もしくは無置換の縮合環を形成する。

ただし、 R_{251} と R_{252} からなる組及び R_{252} と R_{253} からなる組が、同時に単環もしくは縮合環を形成することはない。 R_{254} と R_{255} からなる組及び R_{255} と R_{256} からなる組が、同時に単環もしくは縮合環を形成することはない。 R_{255} と R_{256} からなる組及び R_{256} と R_{257} からなる組が、同時に単環もしくは縮合環を形成することはない。 R_{258} と R_{259} からなる組及び R_{259} と R_{260} からなる組が、同時に単環もしくは縮合環を形成することはない。 R_{259} と R_{260} からなる組及び R_{260} と R_{261} からなる組が、同時に単環もしくは縮合環を形成することはない。

$R_{251} \sim R_{261}$ が形成する2つ以上の単環は、同一であってもよく、異なってもよい。 $R_{251} \sim R_{261}$ が形成する2つ以上の縮合環は、同一であってもよく、異なってもよい。

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 $R_{251} \sim R_{261}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

—O—(R_{904})、

10

20

30

40

50

$-S-$ (R₉₀₅)、
 $-N$ (R₉₀₆) (R₉₀₇)、
 ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇ は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における R₉₀₁～R₉₀₇ と同義である。)

【0445】

一般式 (25) において、R_n と R_{n+1} (n は 251、252、254～256、及び
 258～260 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を形成するか、又は置換もしくは
 無置換の縮合環を形成する。当該単環もしくは縮合環は、好ましくは、C 原子、O 原子、
 S 原子及び N 原子から選ばれる原子から構成され、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。

【0446】

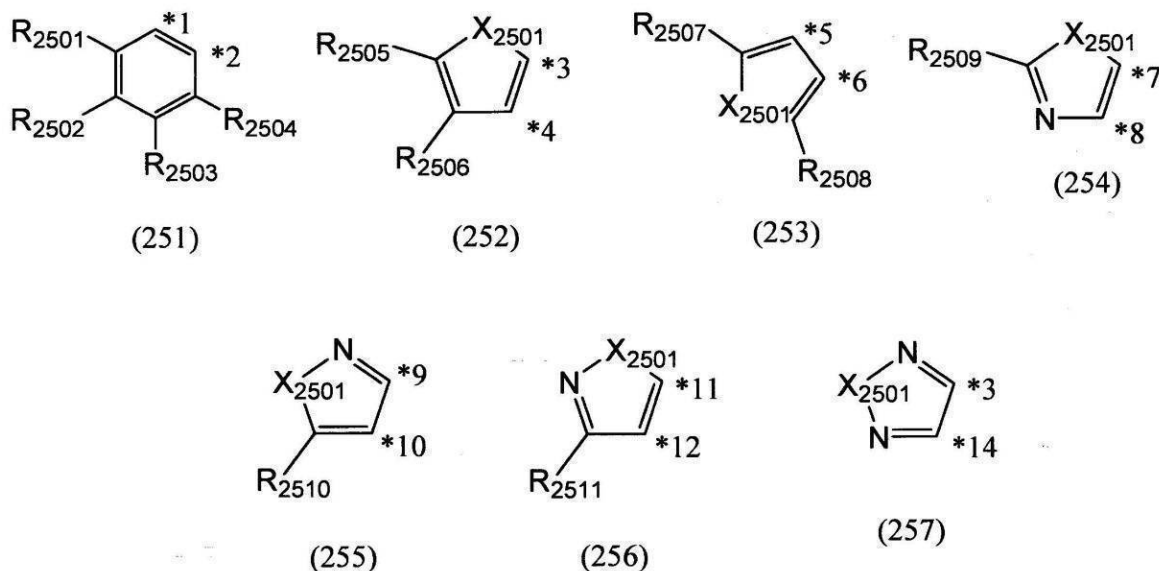
一般式 (25) で表される化合物における上記の環構造の数は、例えば、2 つ、3 つ、
 又は 4 つである。2 つ以上の環構造は、それぞれ一般式 (25) の母骨格上の同一のベン
 ゼン環上に存在してもよいし、異なるベンゼン環上に存在してもよい。例えば、環構造を
 3 つ有する場合、一般式 (25) の 3 つのベンゼン環のそれぞれに 1 つずつ環構造が存在
 してもよい。

【0447】

一般式 (25) 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
 (251)～(260) で表される構造等が挙げられる。

【0448】

【化174】



【0449】

(一般式 (251)～(257) において、*1 と *2、*3 と *4、*5 と *6、*7
 と *8、*9 と *10、*11 と *12 及び *13 と *14 のそれぞれは、R_n と R_{n+1}
 が結合する前記 2 つの環形成炭素原子を表し、R_n が結合する環形成炭素原子は、*1 と
 *2、*3 と *4、*5 と *6、*7 と *8、*9 と *10、*11 と *12 及び *13
 と *14 が表す 2 つの環形成炭素原子のどちらであってもよい。

X₂₅₀₁ は、C (R₂₅₁₂) (R₂₅₁₃)、NR₂₅₁₄、O 又は S である。

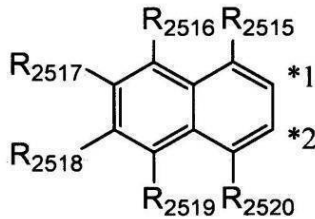
R₂₅₀₁～R₂₅₀₆ 及び R₂₅₁₂～R₂₅₁₃ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組
 の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、置換もしくは

無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

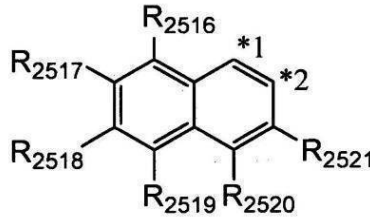
置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{2501} \sim R_{2514}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (25) における $R_{251} \sim R_{261}$ と同義である。)

【0450】

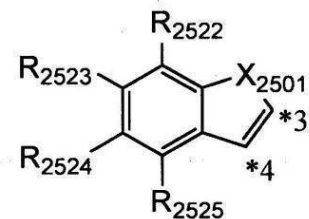
【化175】



(258)



(259)



(260)

10

【0451】

(一般式 (258) ~ (260) 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い。

X_{2501} は、C (R_{2512}) (R_{2513})、N R_{2514} 、O又はSである。

20

$R_{2515} \sim R_{2525}$ 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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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 $R_{2515} \sim R_{2521}$ 及び $R_{2522} \sim R_{2525}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (25) における $R_{251} \sim R_{261}$ と同義である。)

【0452】

一般式 (25) において、 R_{252} 、 R_{254} 、 R_{255} 、 R_{260} 及び R_{261} の少なくとも1つ (好ましくは、 R_{252} 、 R_{255} 及び R_{260} の少なくとも1つ、さらに好ましくは R_{252}) が、環構造を形成しない基であると好ましい。

30

【0453】

(i) 一般式 (25) において、 R_n と R_{n+1} により形成される環構造が置換基を有する場合の置換基、

(ii) 一般式 (25) において、環構造を形成しない $R_{251} \sim R_{261}$ 、及び

(iii) 一般式 (251) ~ (260) における $R_{2501} \sim R_{2514}$ 、 $R_{2515} \sim R_{2525}$ は、好ましくは、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

-N (R_{906}) (R_{907})、

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1価の複素環基、又は

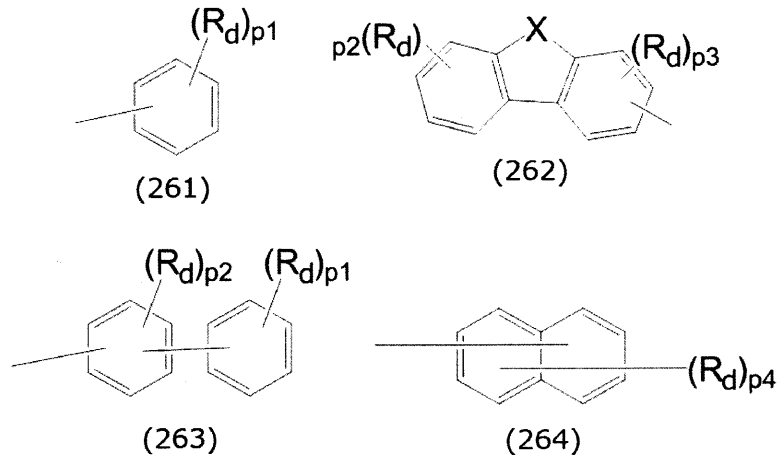
下記の群から選択される基のいずれかである。

40

【0454】

50

【化 1 7 6】



10

【0 4 5 5】

(一般式 (261) ~ (264) 中、 R_d は、それぞれ独立に、
水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

-O-(R_{904})、

-S-(R_{905})、

-N(R_{906})(R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

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

X は、C(R_{901})(R_{902})、NR $_{903}$ 、O 又は S である。

R_{901} ~ R_{907} は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における R_{901} ~ R_{907} と同義である。

p_1 は 0 ~ 5 の整数、 p_2 は 0 ~ 4 の整数、 p_3 は 0 ~ 3 の整数、 p_4 は 0 ~ 7 の整数である。)

【0 4 5 6】

一実施形態において、一般式 (25) で表される化合物は、下記一般式 (25-1) ~ (25-6) のいずれかで表される。

【0 4 5 7】

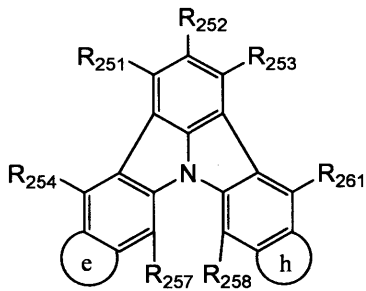
20

30

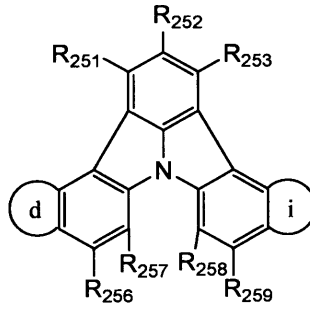
40

50

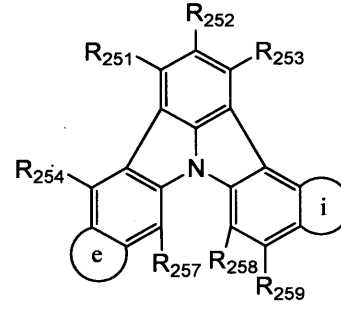
【化 1 7 7】



(25-1)

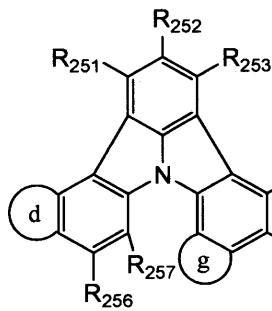


(25-2)

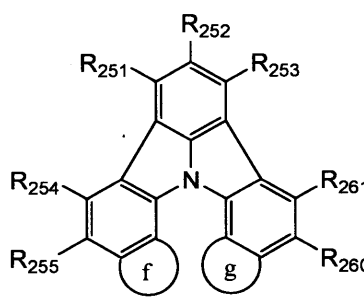


(25-3)

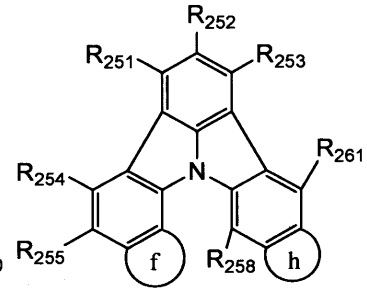
10



(25-4)



(25-5)



(25-6)

20

【0 4 5 8】

(一般式(25-1)～(25-6)において、環d～iは、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の単環、又は置換もしくは無置換の縮合環である。R₂₅₁～R₂₆₁は、それぞれ独立に、前記一般式(25)におけるR₂₅₁～R₂₆₁と同義である。)

【0 4 5 9】

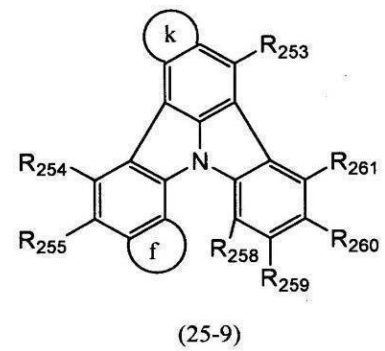
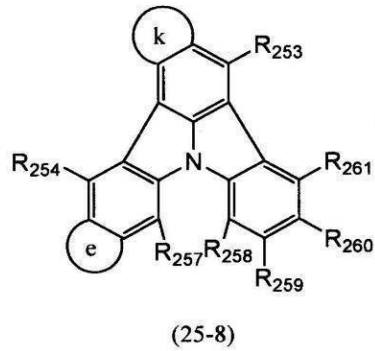
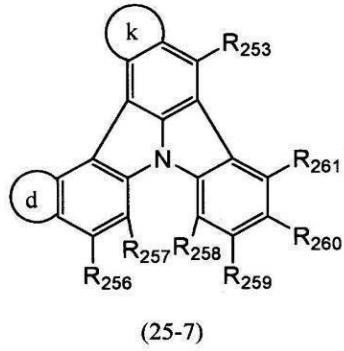
一実施形態において、一般式(25)で表される化合物は、下記一般式(25-7)～(25-12)のいずれかで表される。

30

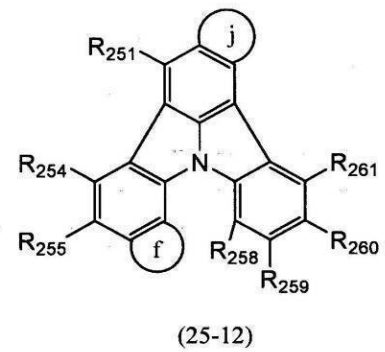
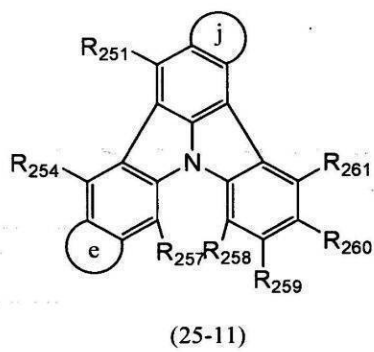
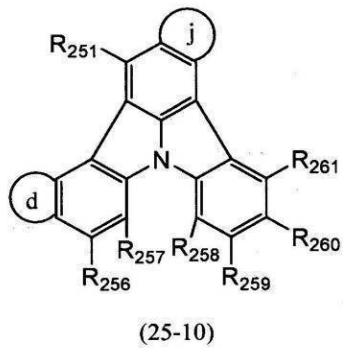
40

50

【化 1 7 8】



10



20

(一般式(25-7)～(25-12)において、環d～f、環k、及び環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る。R₂₅₁～R₂₆₁は、それぞれ独立に、前記一般式(25)におけるR₂₅₁～R₂₆₁と同義である。)

【0460】

一実施形態において、一般式(25)で表される化合物は、下記一般式(25-13)～(25-21)のいずれかで表される。

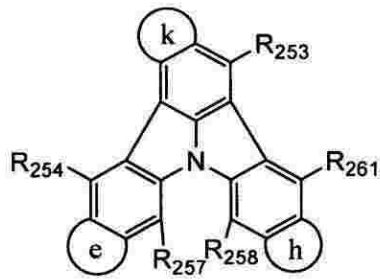
【0461】

30

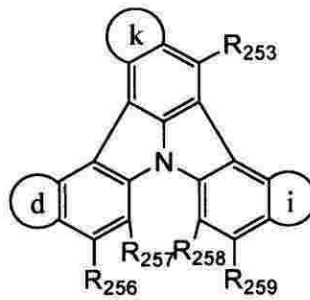
40

50

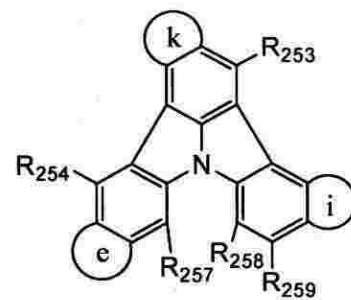
【化 1 7 9】



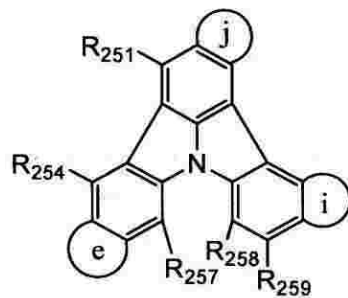
(25-13)



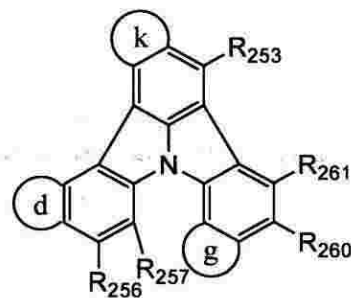
(25-14)



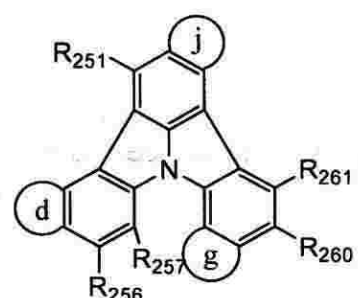
(25-15)



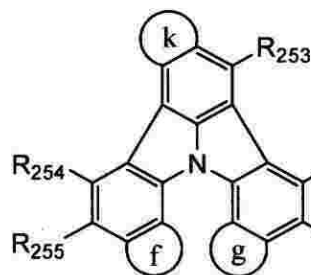
(25-16)



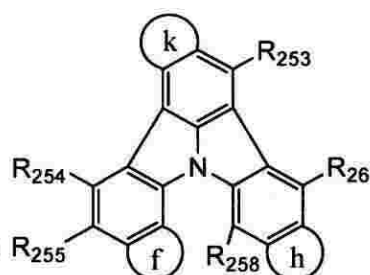
(25-17)



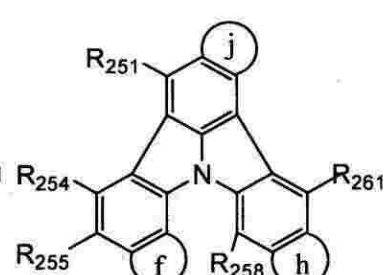
(25-18)



(25-19)



(25-20)



(25-21)

【0 4 6 2】

(一般式(25-13)～(25-21)において、環d～環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環である。R₂₅₁～R₂₆₁は、それぞれ独立に、前記一般式(25)におけるR₂₅₁～R₂₆₁と同義である。)

【0 4 6 3】

前記環g又は環hがさらに置換基を有する場合の置換基としては、例えば、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

上記一般式(261)、(263)又は(264)で表される基が挙げられる。

【0 4 6 4】

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

【0 4 6 5】

10

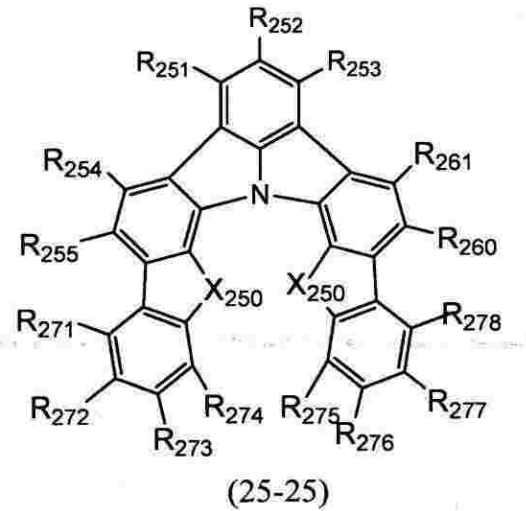
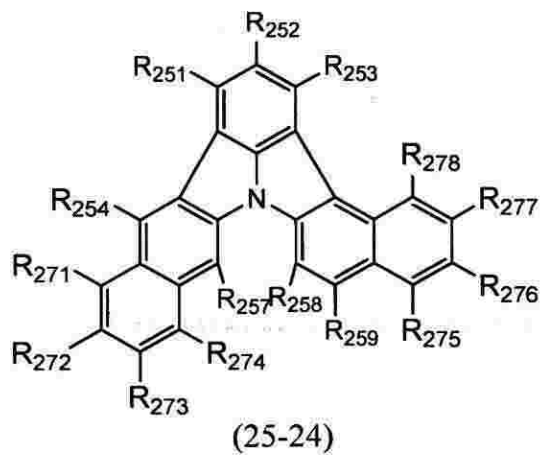
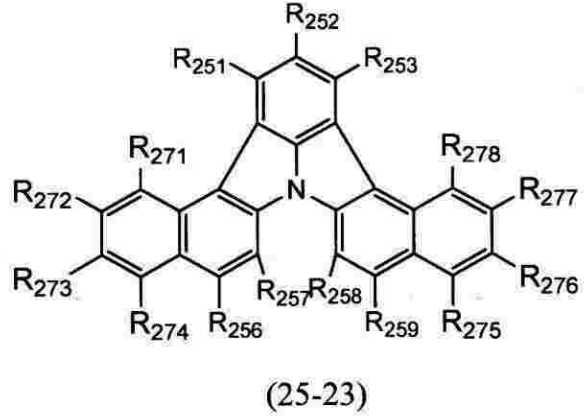
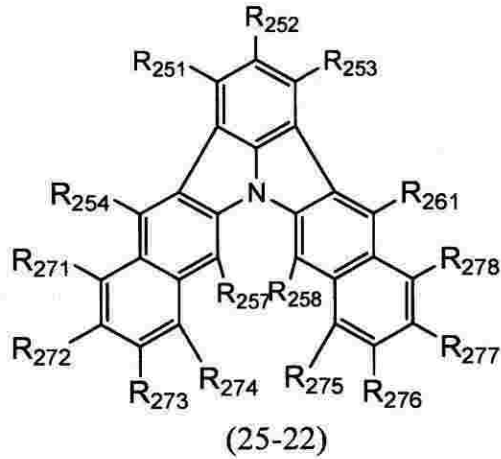
20

30

40

50

【化 1 8 0】



【 0 4 6 6】

(一般式(25-22)～(25-25)において、 X_{250} は、 $C(R_{901})(R_{902})$ 、 NR_{903} 、 O 又は S である。 $R_{251} \sim R_{261}$ 、 $R_{271} \sim R_{278}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(25)における $R_{251} \sim R_{261}$ と同義である。 $R_{901} \sim R_{903}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(11)における $R_{901} \sim R_{903}$ と同義である。)

【 0 4 6 7】

一実施形態において、一般式(25)で表される化合物は、下記一般式(25-26)で表される。

【 0 4 6 8】

10

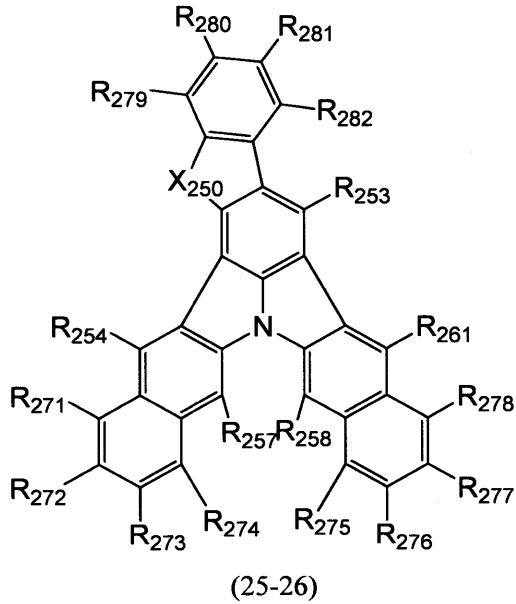
20

30

40

50

【化 1 8 1】



10

【0 4 6 9】

(一般式(25-26)において、 X_{250} は、 $C(R_{901})(R_{902})$ 、 NR_{903} 、 O 又は S である。 R_{253} 、 R_{254} 、 R_{257} 、 R_{258} 、 R_{261} 、及び $R_{271} \sim R_{282}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(25)における $R_{251} \sim R_{261}$ と同義である。 $R_{901} \sim R_{903}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(11)における $R_{901} \sim R_{903}$ と同義である。)

20

【0 4 7 0】

前記一般式(21)で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

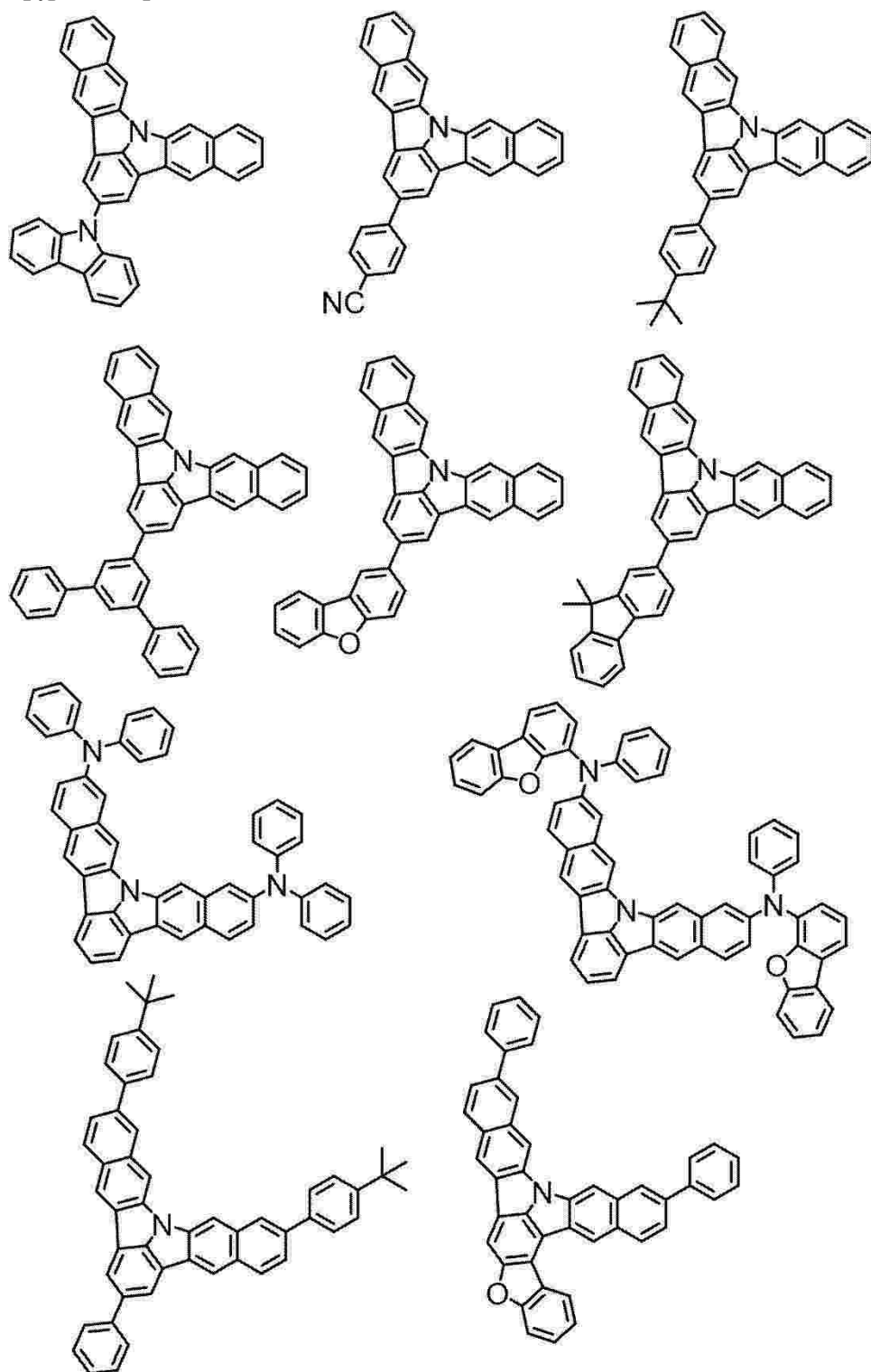
【0 4 7 1】

30

40

50

【化 1 8 2】



10

20

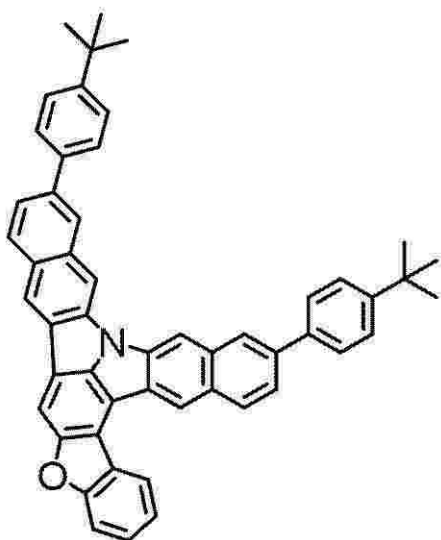
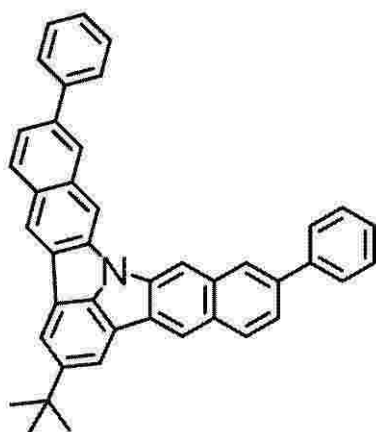
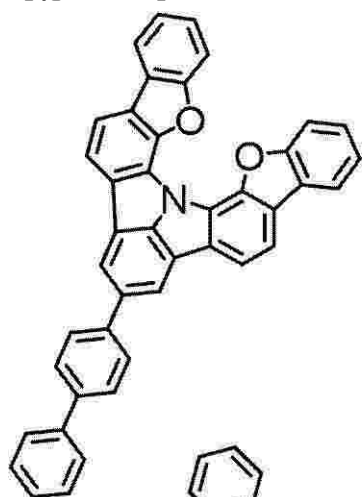
30

40

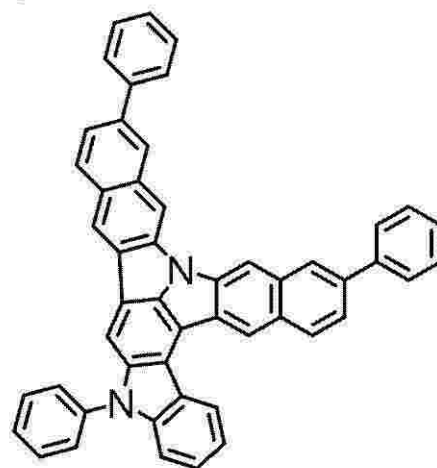
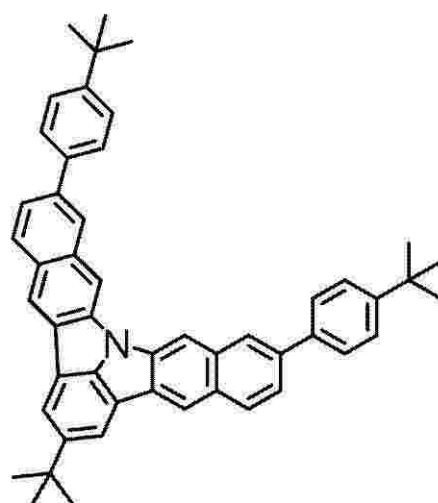
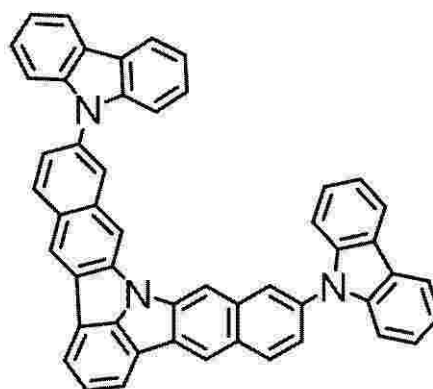
【 0 4 7 2】

50

【化 1 8 3】



【 0 4 7 3】



10

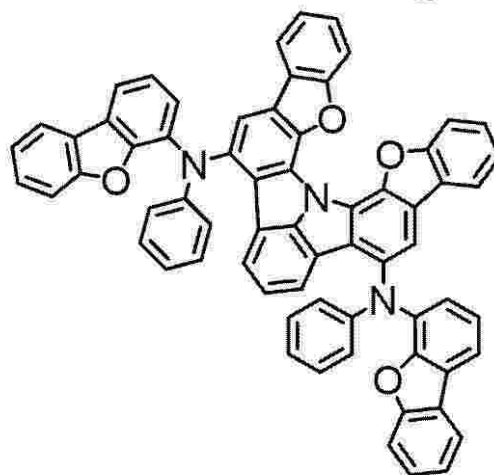
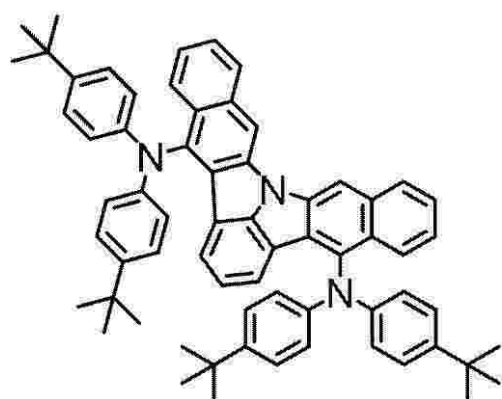
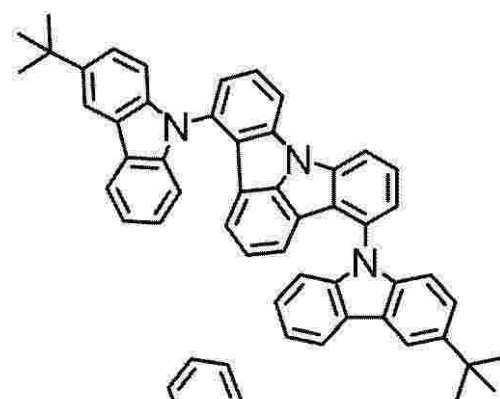
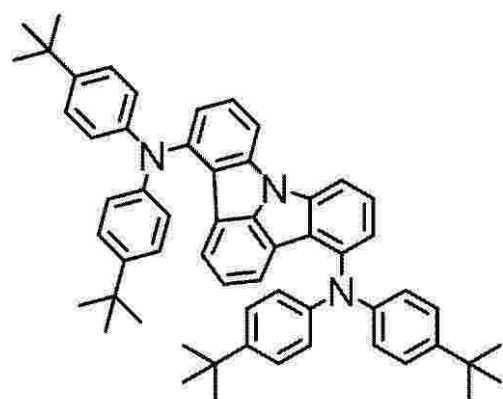
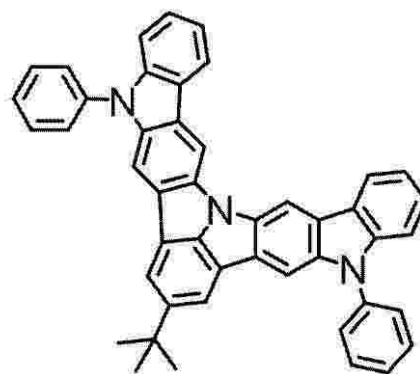
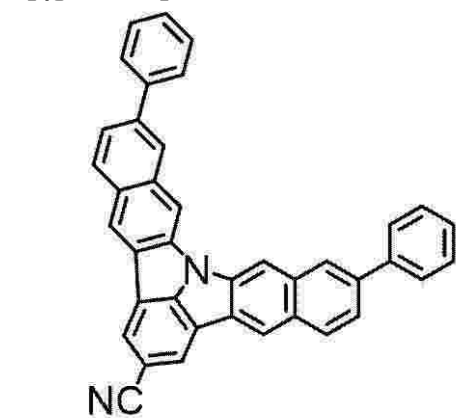
20

30

40

50

【化 1 8 4】



【 0 4 7 4】

10

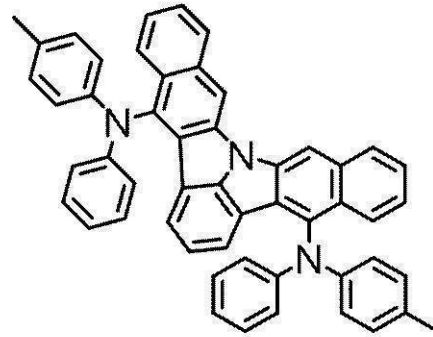
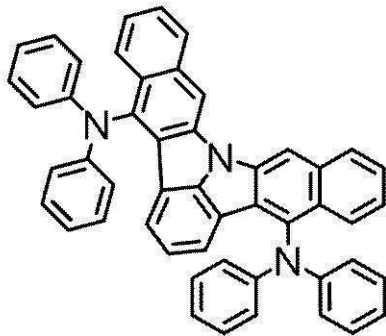
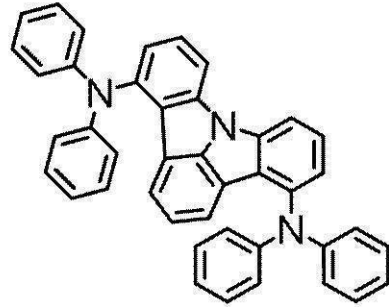
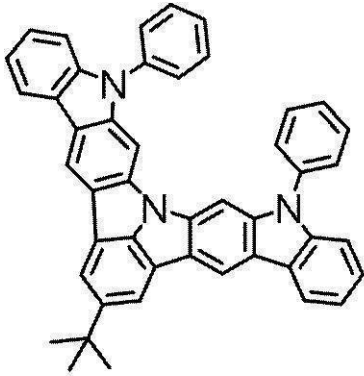
20

30

40

50

【化 185】



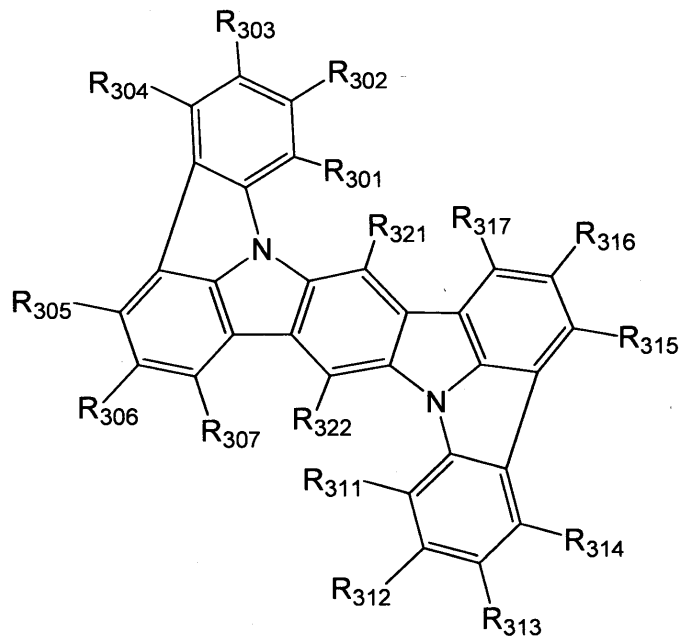
【0475】

(一般式(31)で表される化合物)

一般式(31)で表される化合物について説明する。一般式(31)で表される化合物は、上述した一般式(21-3)で表される化合物に対応する化合物である。

【0476】

【化 186】



(31)

【0477】

(一般式(31)において、

R301~R307及びR311~R317のうち隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、置換もしくは無置換の単環を形成するか、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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 $R_{301} \sim R_{307}$ 及び $R_{311} \sim R_{317}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903})、

— O — (R_{904})、

— S — (R_{905})、

— N (R_{906}) (R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

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

R_{321} 及び R_{322} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903})、

— O — (R_{904})、

— S — (R_{905})、

— N (R_{906}) (R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

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

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における $R_{901} \sim R_{907}$ と同義である。)

【0478】

「 $R_{301} \sim R_{307}$ 及び $R_{311} \sim R_{317}$ のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組」は、例えば、 R_{301} と R_{302} の組、 R_{302} と R_{303} の組、 R_{303} と R_{304} の組、 R_{305} と R_{306} の組、 R_{306} と R_{307} の組、及び R_{301} と R_{302} と R_{303} の組等の組合せである。

【0479】

一実施形態において、 $R_{301} \sim R_{307}$ 及び $R_{311} \sim R_{317}$ 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。

【0480】

一実施形態においては、 $R_{301} \sim R_{307}$ 及び $R_{311} \sim R_{317}$ 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 1 価の複素環基である。

【0481】

一実施形態においては、一般式 (31) で表される化合物は、下記一般式 (32) で表される化合物である。

【0482】

10

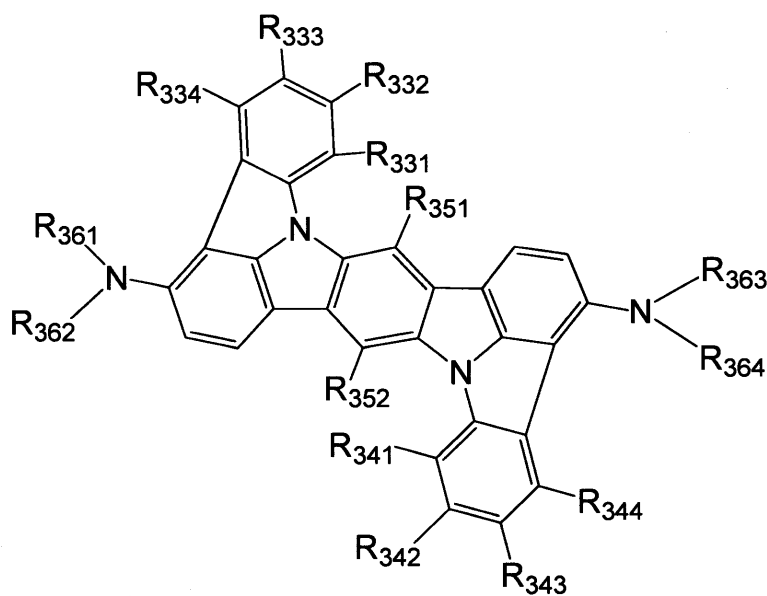
20

30

40

50

【化 1 8 7】



(32)

【0 4 8 3】

(一般式 (32) において、

R₃₃₁～R₃₃₄ 及び R₃₄₁～R₃₄₄ のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、置換もしくは無置換の単環を形成するか、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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 R₃₃₁～R₃₃₄、R₃₄₁～R₃₄₄、並びに R₃₅₁ 及び R₃₅₂ 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 1 価の複素環基である。

R₃₆₁～R₃₆₄ は、それぞれ独立に、

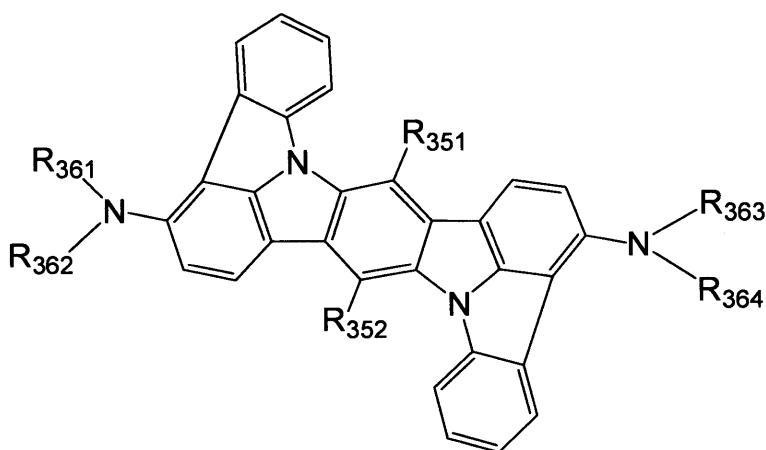
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。))

【0 4 8 4】

一実施形態においては、一般式 (31) 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。

【0 4 8 5】

【化 1 8 8】



(33)

【0486】

(一般式(33)において、 R_{351} 、 R_{352} 及び $R_{361} \sim R_{364}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(32)における R_{351} 、 R_{352} 及び $R_{361} \sim R_{364}$ と同義である。)

【0487】

一実施形態においては、一般式(32)及び(33)における $R_{361} \sim R_{364}$ 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。

【0488】

一実施形態においては、一般式(31)における R_{321} 及び R_{322} 、一般式(32)及び(33)における R_{351} 及び R_{352} は、水素原子である。

10

【0489】

一実施形態においては、一般式(31)～(33)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1価の複素環基である。

【0490】

20

前記一般式(31)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。

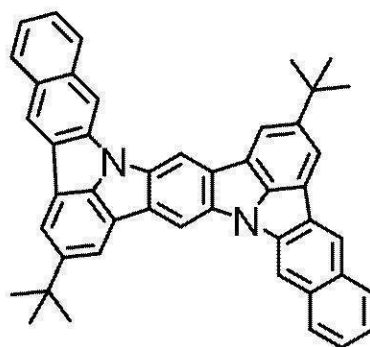
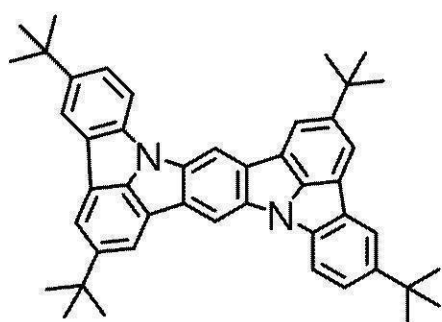
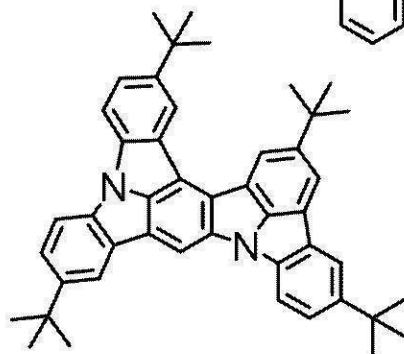
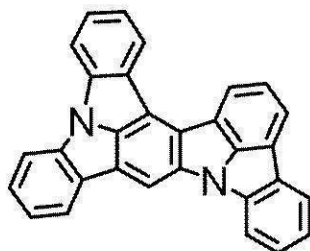
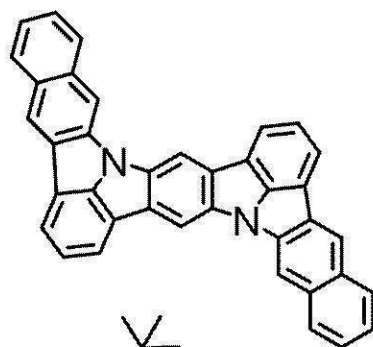
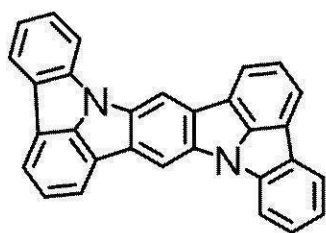
【0491】

30

40

50

【化 1 8 9】



【 0 4 9 2】

10

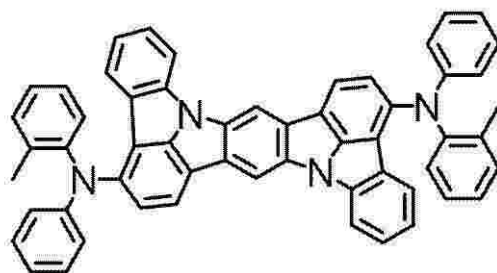
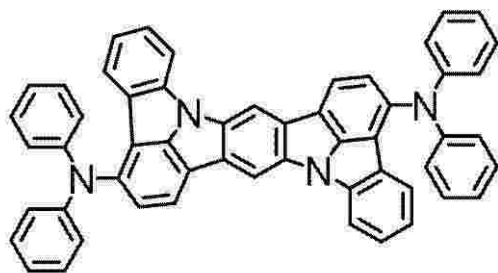
20

30

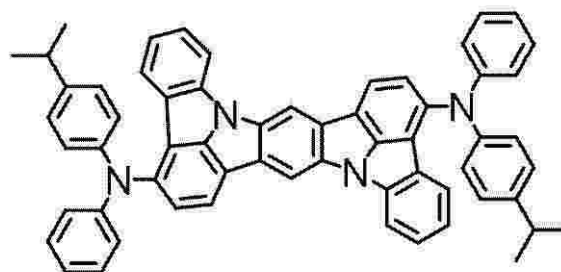
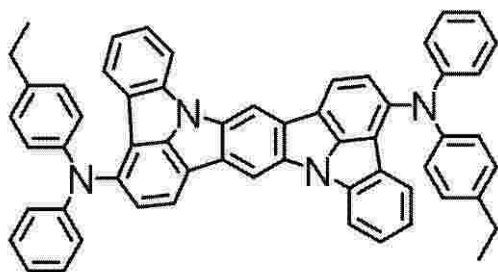
40

50

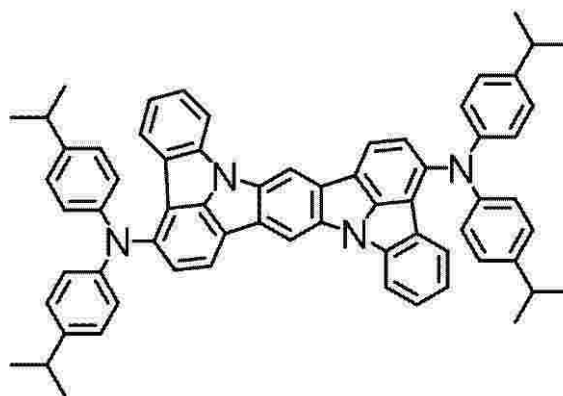
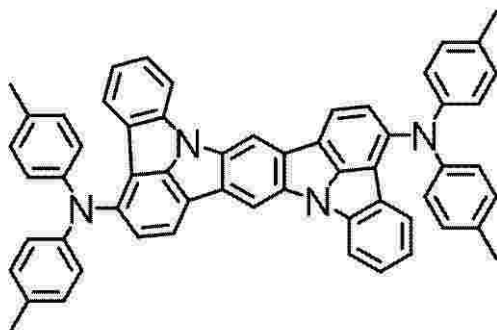
【化 1 9 0】



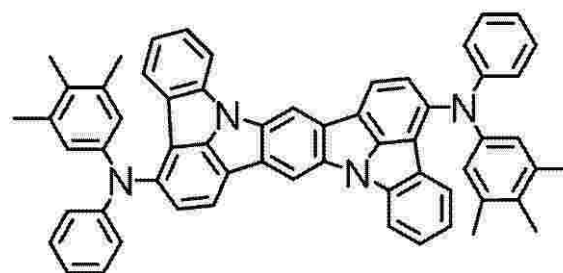
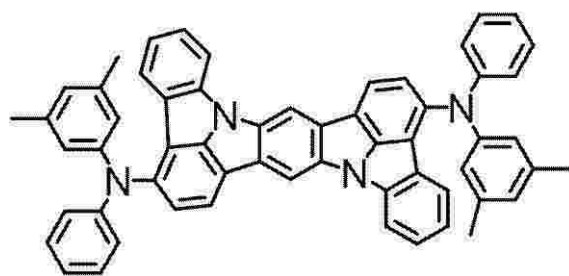
10



20



30

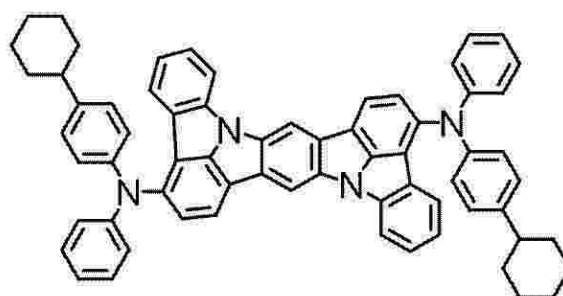
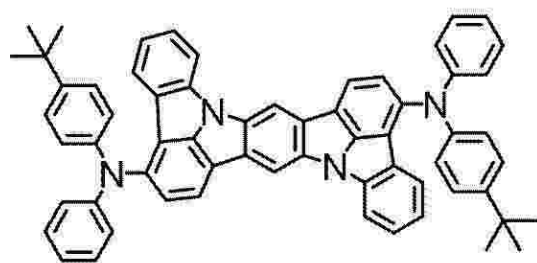
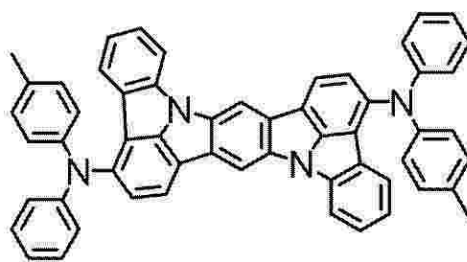
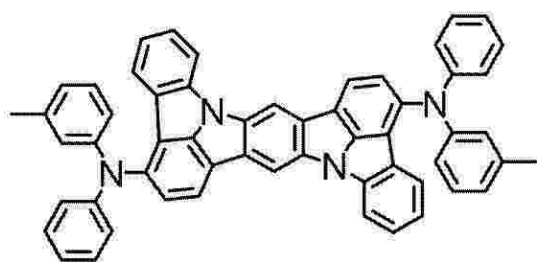


【 0 4 9 3】

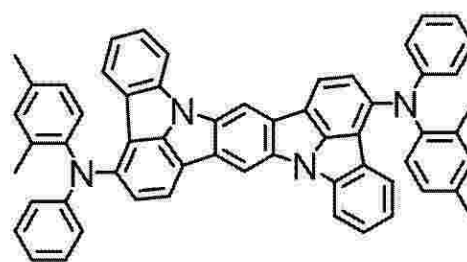
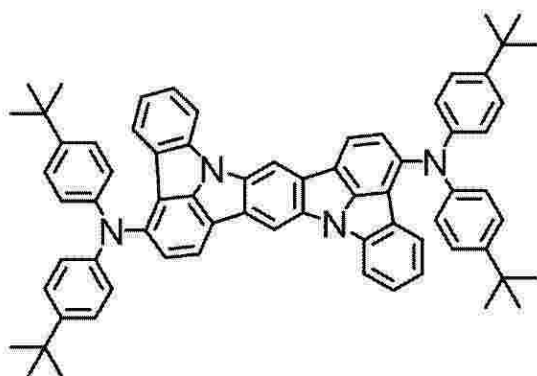
40

50

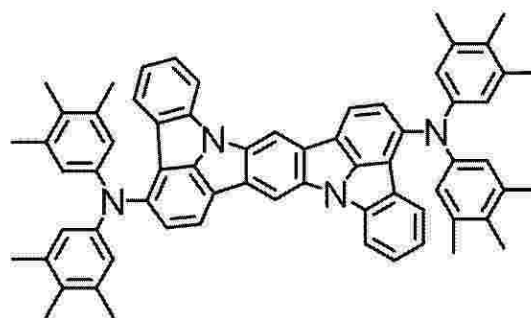
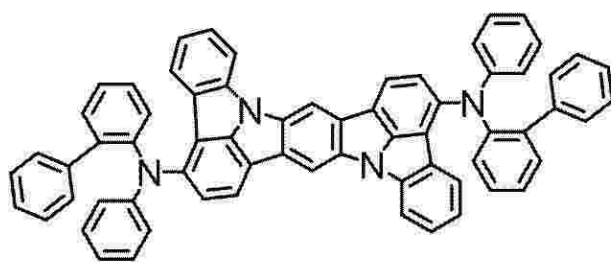
【化 1 9 1】



10



20



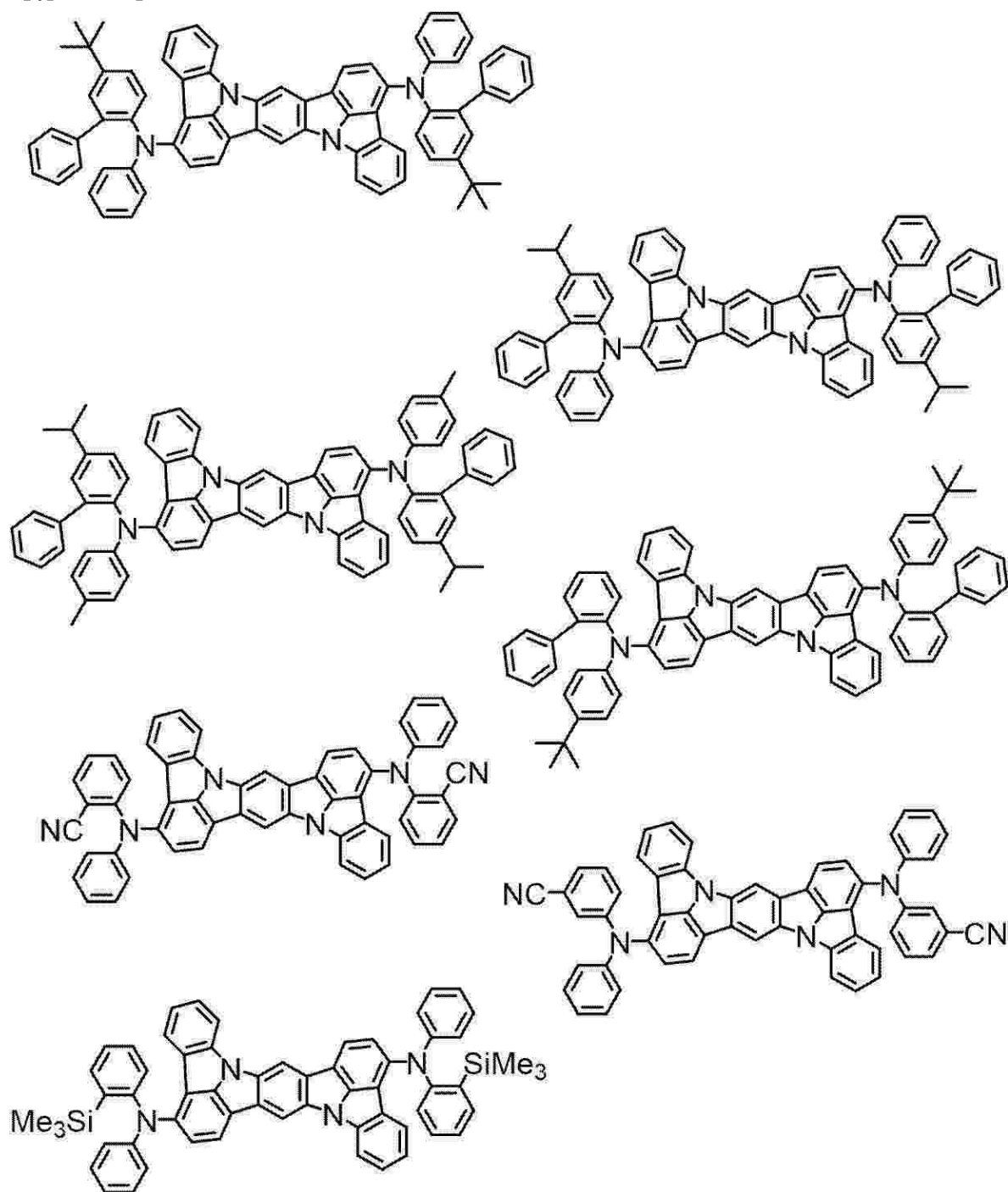
30

【 0 4 9 4】

40

50

【化 1 9 2】



【 0 4 9 5】

10

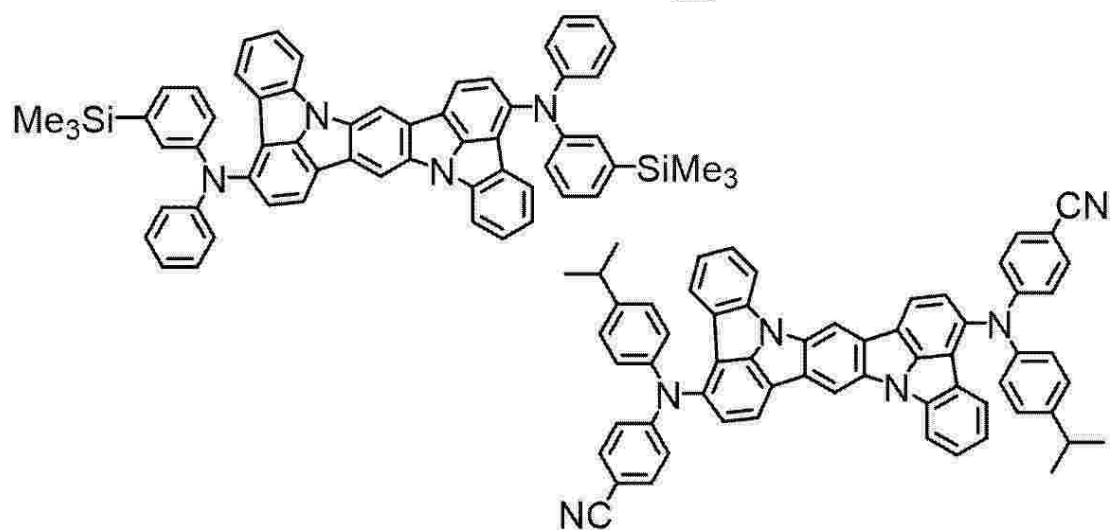
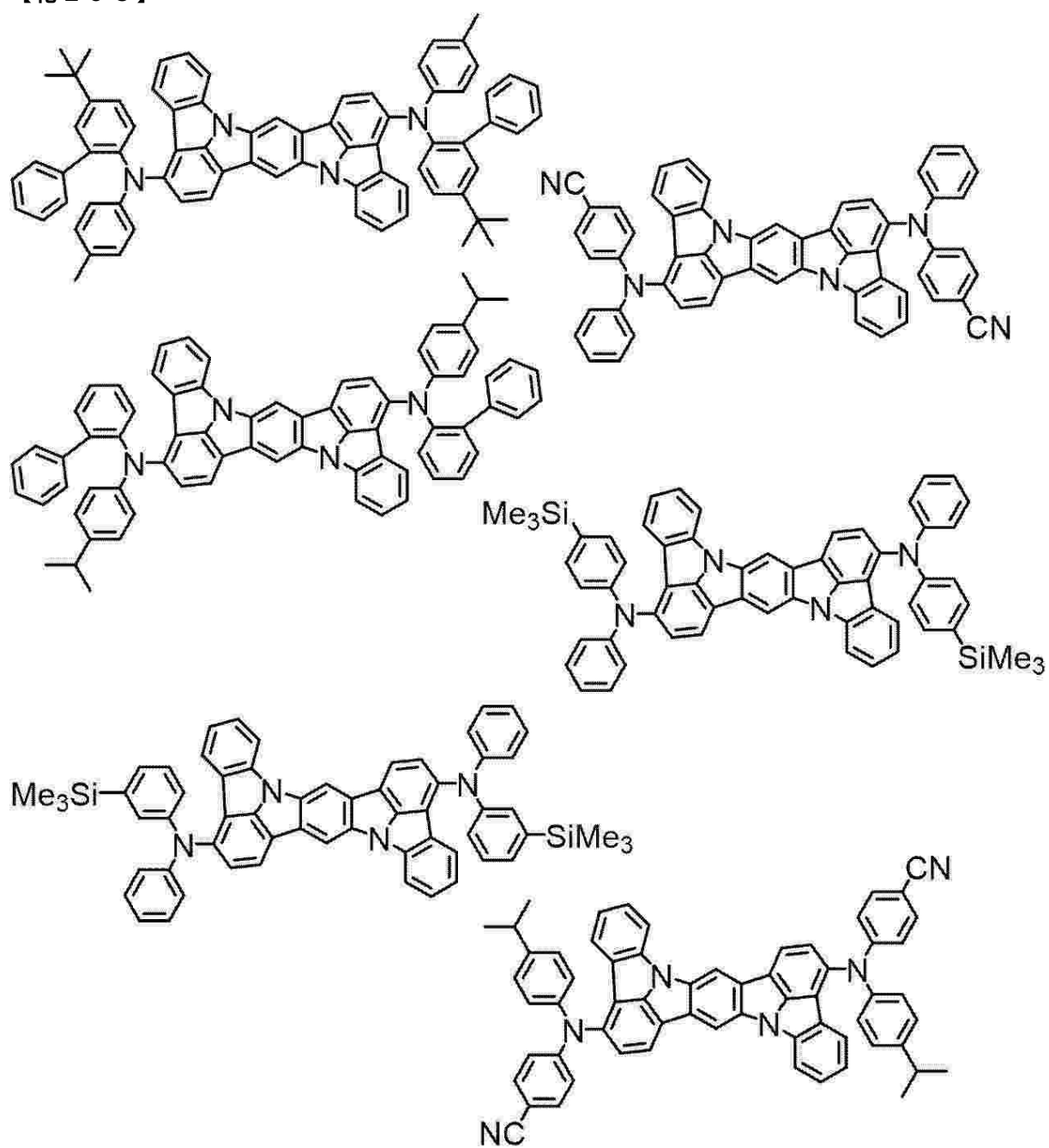
20

30

40

50

【化 1 9 3】



【 0 4 9 6】

10

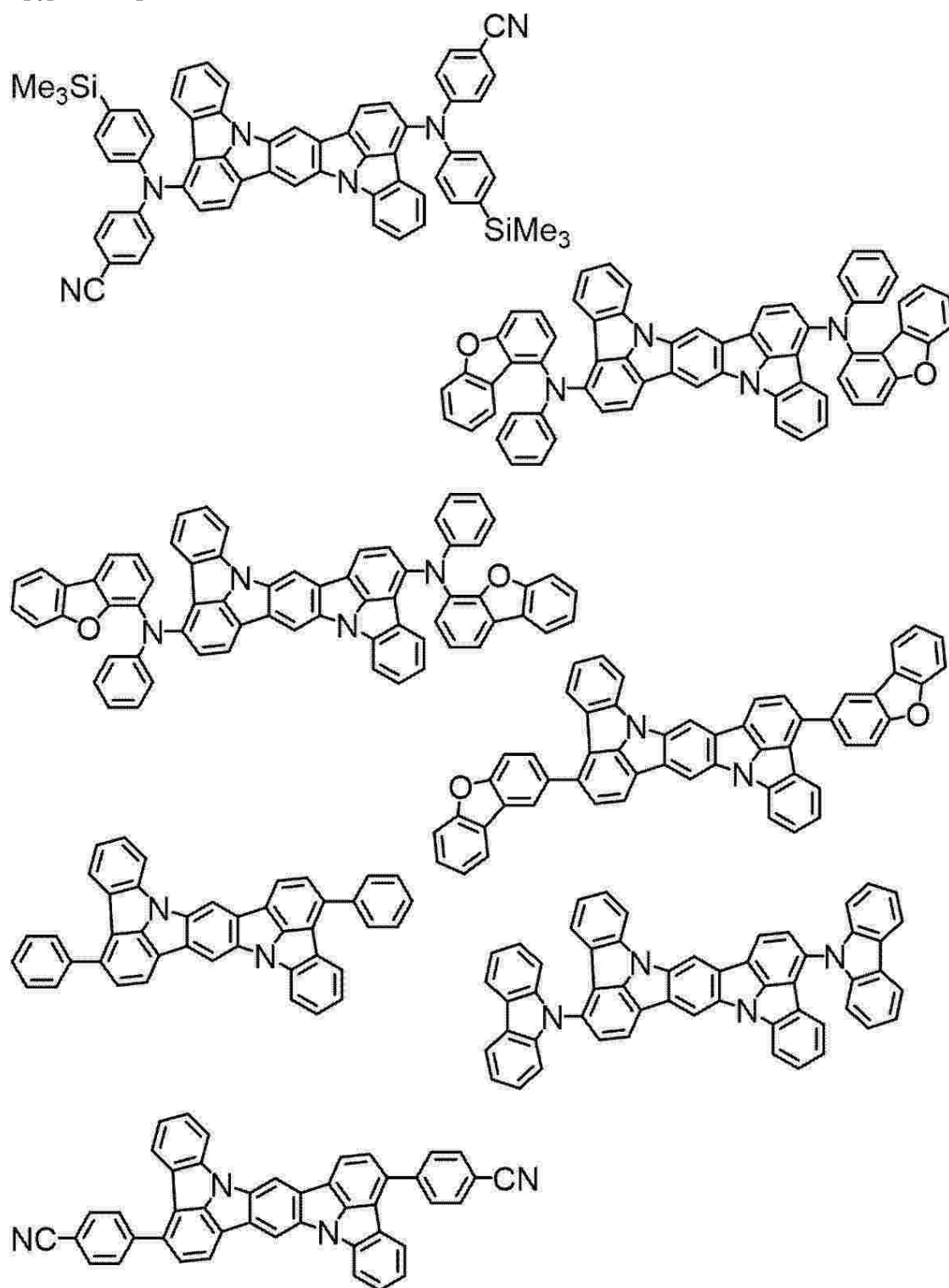
20

30

40

50

【化 1 9 4】



10

20

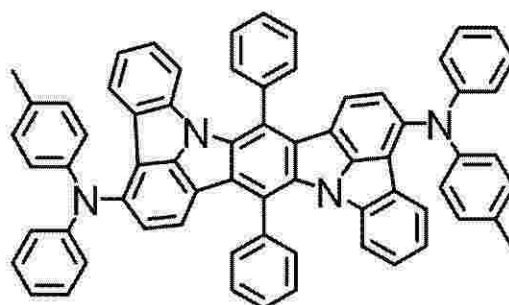
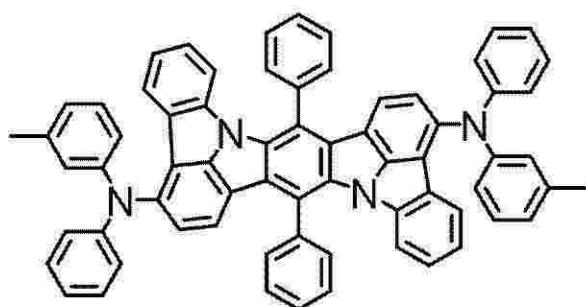
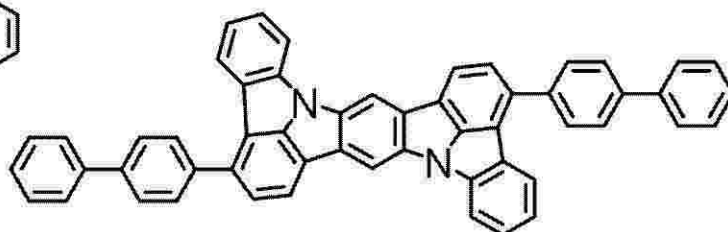
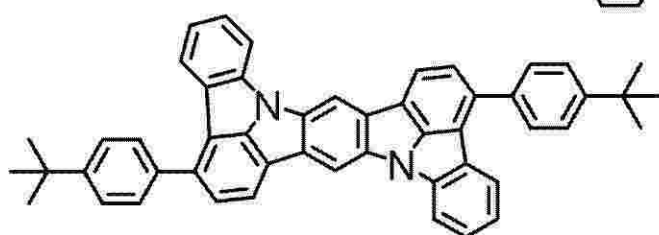
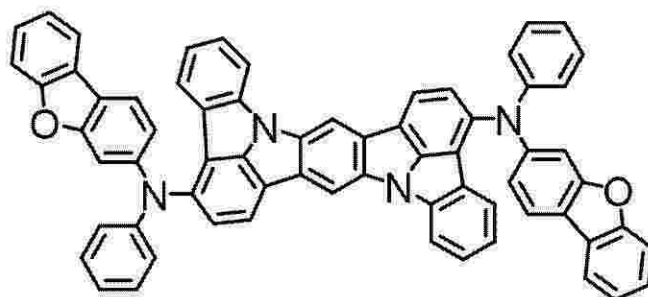
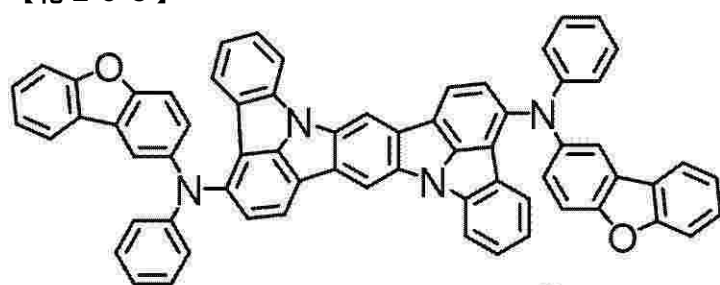
30

40

【 0 4 9 7】

50

【化 1 9 5】



【 0 4 9 8】

10

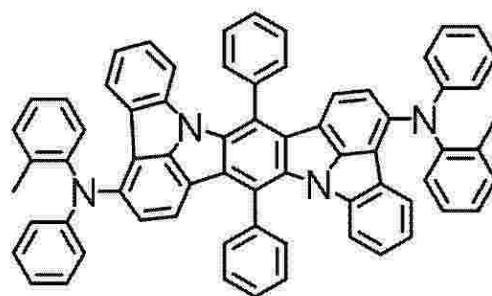
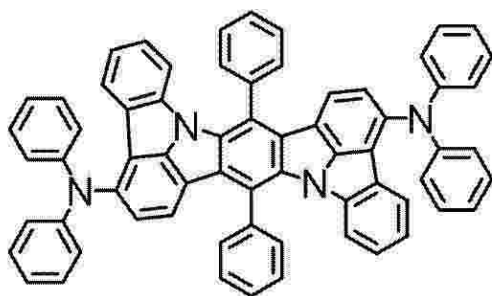
20

30

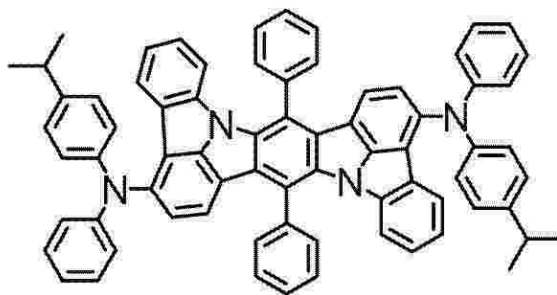
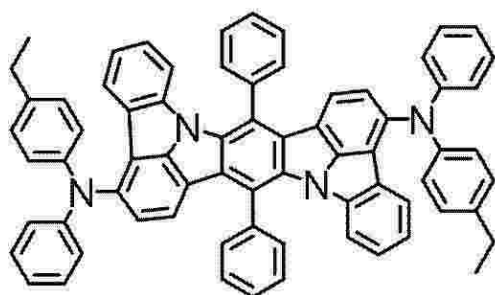
40

50

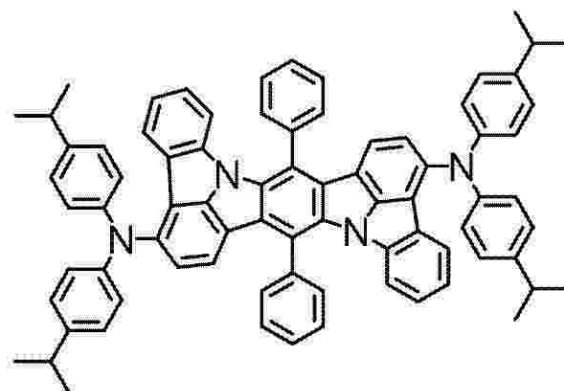
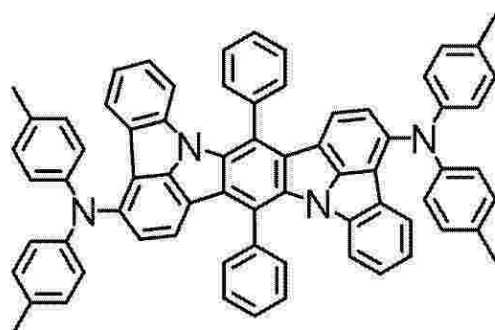
【化 1 9 6】



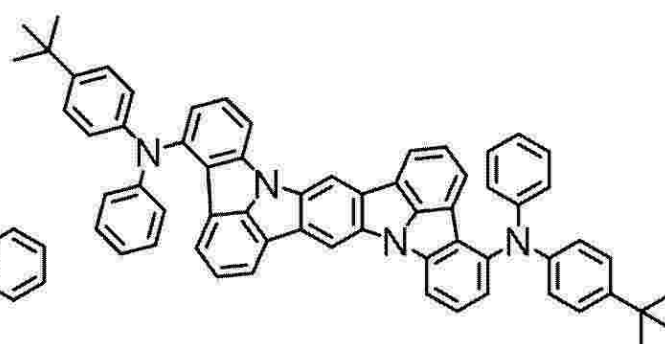
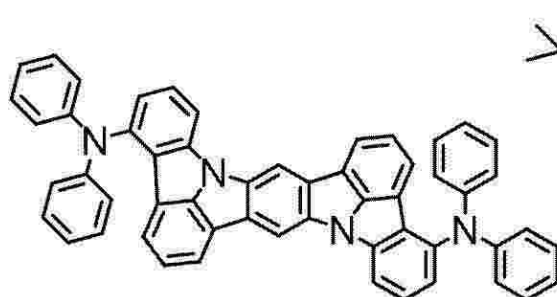
10



20



30

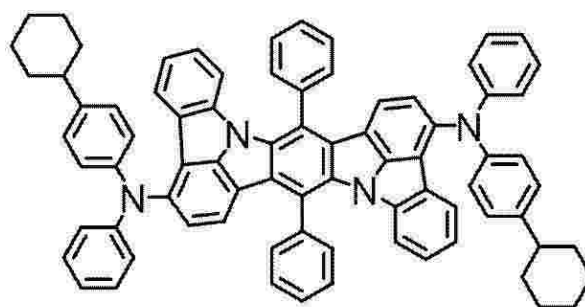
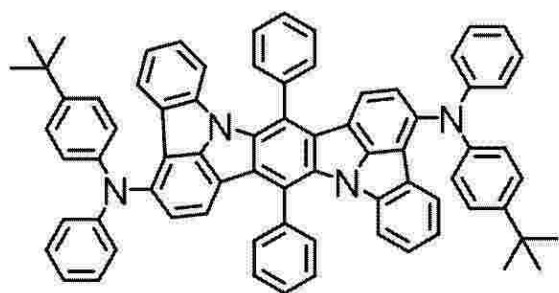


40

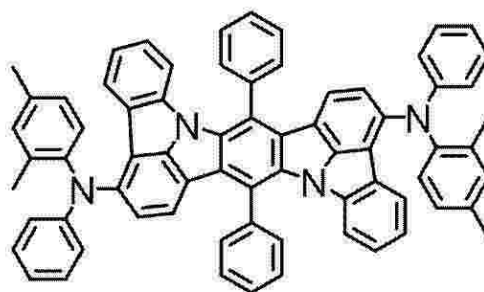
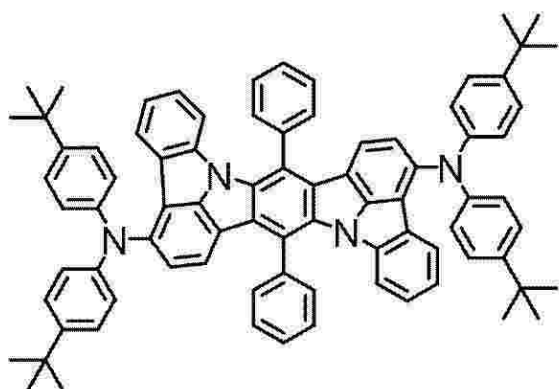
【 0 4 9 9】

50

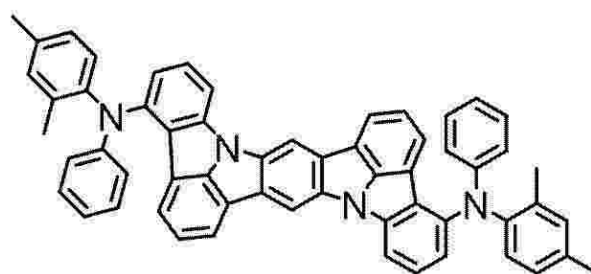
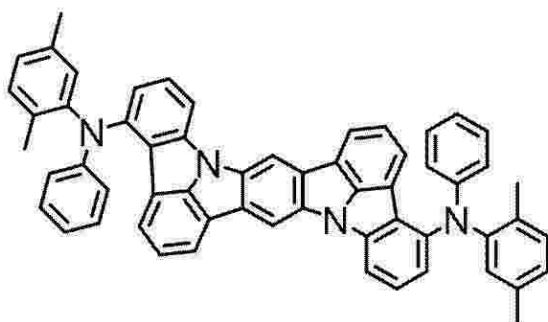
【化 1 9 7】



10



20



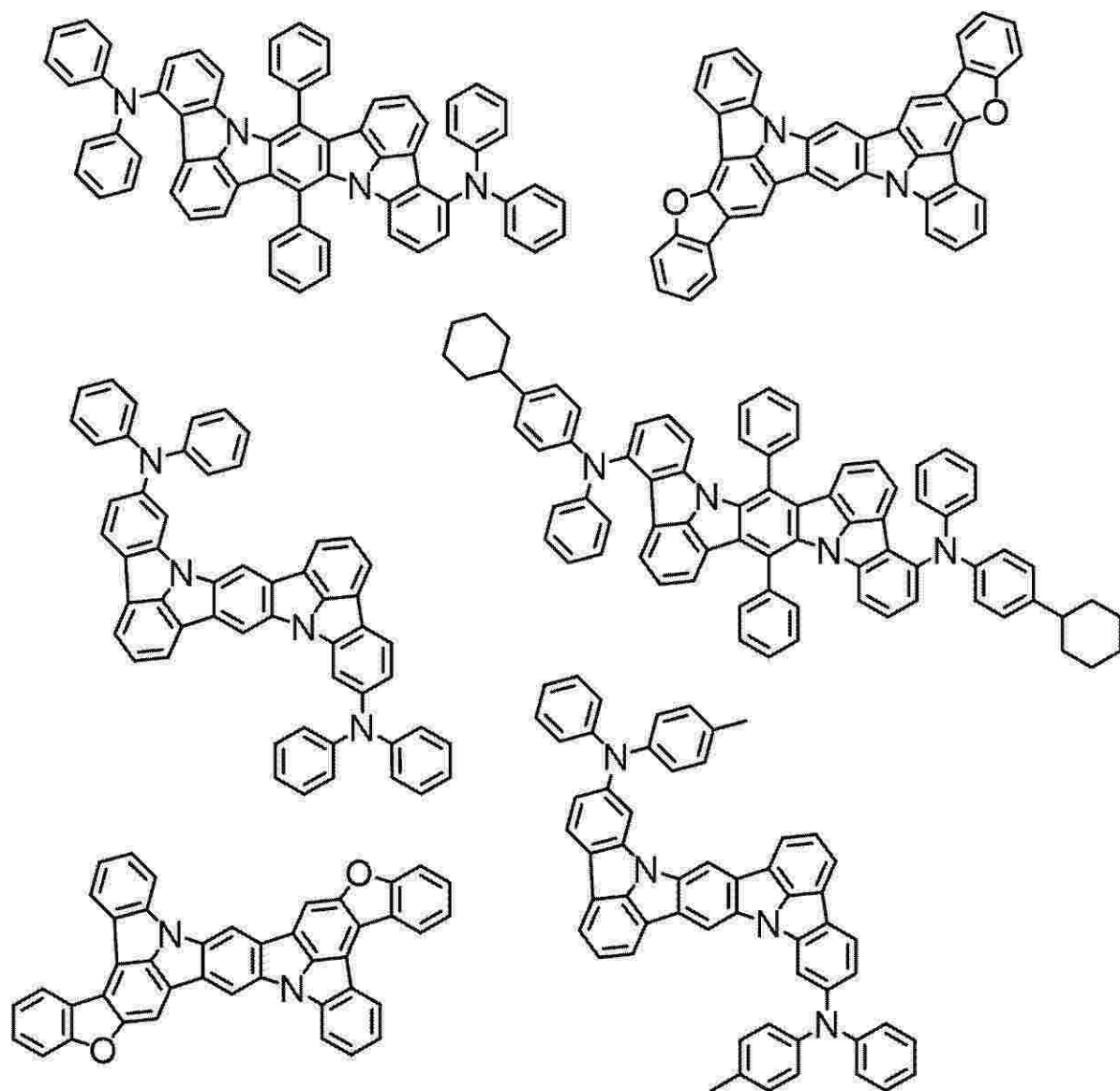
30

【 0 5 0 0 】

40

50

【化 1 9 8】



10

20

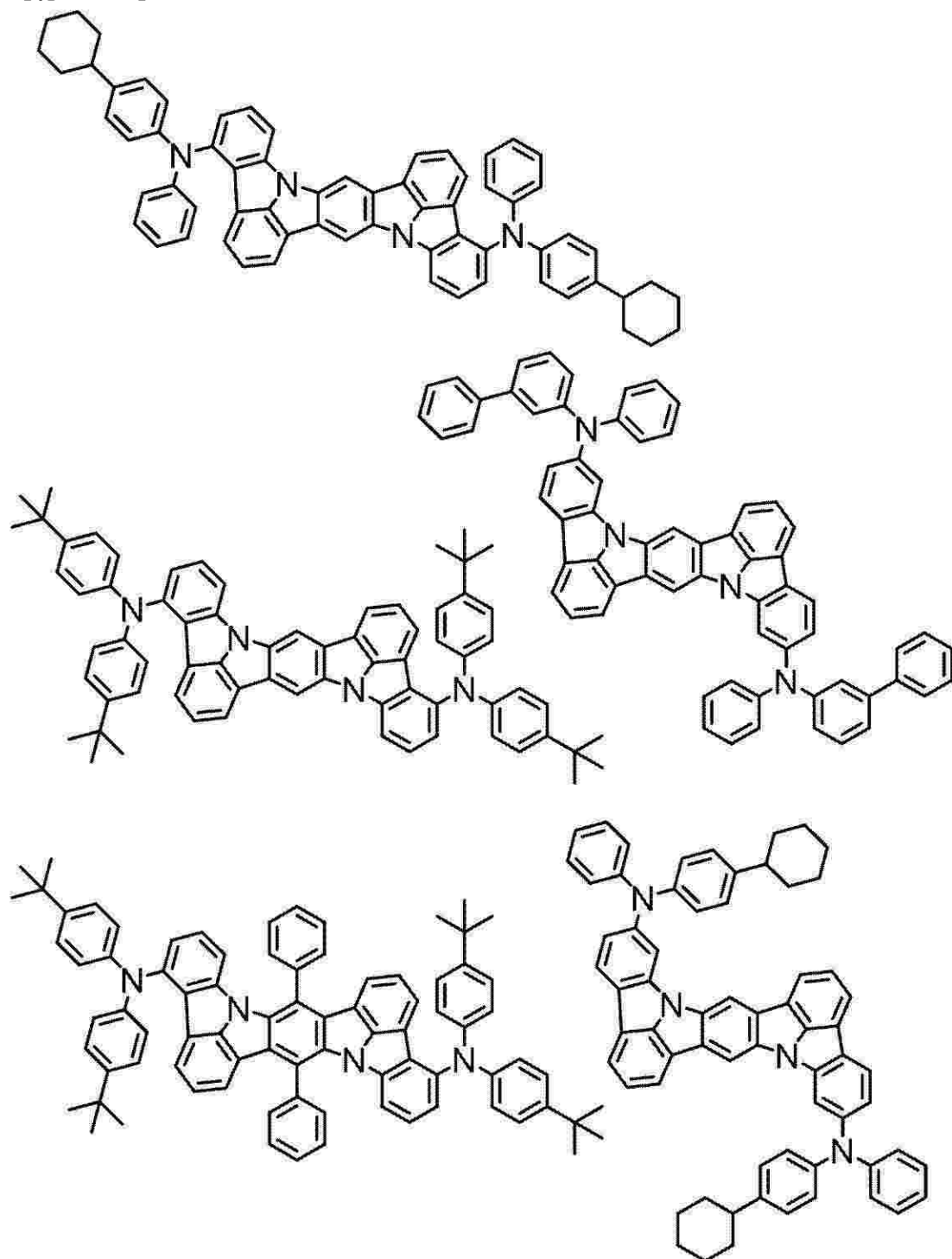
30

【 0 5 0 1】

40

50

【化 1 9 9】



【 0 5 0 2】

10

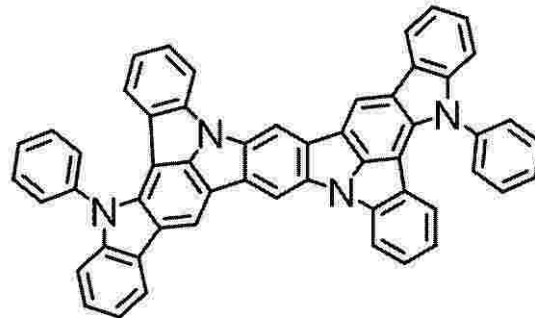
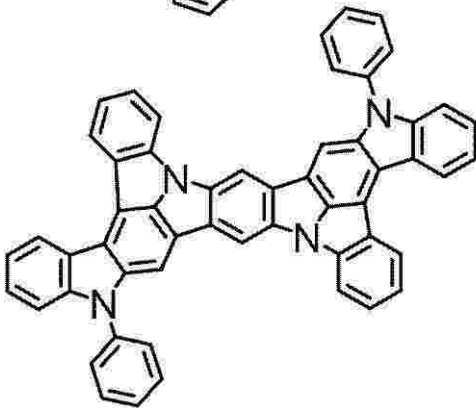
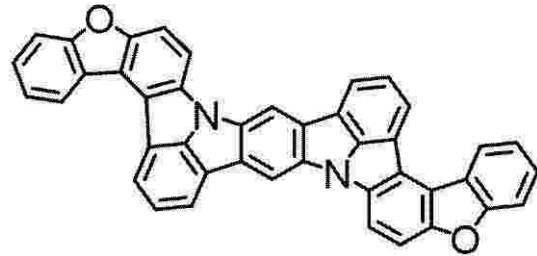
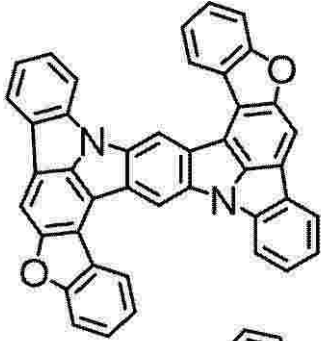
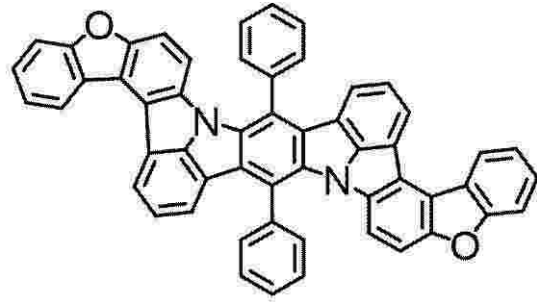
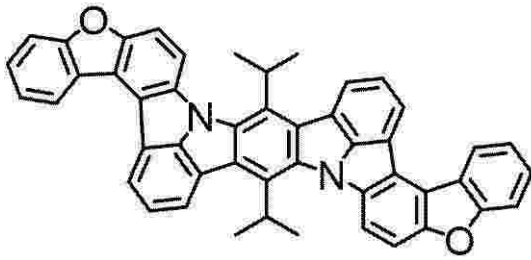
20

30

40

50

【化 2 0 0】



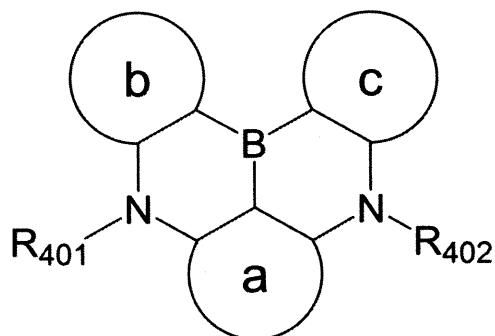
【 0 5 0 3】

(一般式 (41) で表される化合物)

一般式 (41) で表される化合物について説明する。

【 0 5 0 4】

【化 2 0 1】



(41)

【 0 5 0 5】

(一般式 (41) 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 の複素環である。

R₄₀₁及びR₄₀₂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しない。前記置換もしくは無置換の複素環を形成しないR₄₀₁及びR₄₀₂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1価の複素環基である。) 10

【0506】

a環、b環及びc環は、B原子及び2つのN原子から構成される一般式(41)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。

【0507】

a環、b環及びc環の「芳香族炭化水素環」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と同じ構造である。a環の「芳香族炭化水素環」は、一般式(41)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ものである。b環及びc環の「芳香族炭化水素環」は、一般式(41)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ものである。「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。 20

a環、b環及びc環の「複素環」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と同じ構造である。a環の「複素環」は、一般式(41)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ものである。b環及びc環の「複素環」は、一般式(41)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ものである。「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。

【0508】

R₄₀₁及びR₄₀₂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、一般式(41)中央の縮合2環構造上の窒素原子を含むこととなる。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。R₄₀₁及びR₄₀₂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R₄₀₁及びR₄₀₂を構成する原子が結合することを意味する。例えば、R₄₀₁がa環と結合して、R₄₀₁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。 30

R₄₀₁がb環と結合する場合、R₄₀₂がa環と結合する場合、及びR₄₀₂がc環と結合する場合も上記と同じである。 40

【0509】

一実施形態において、一般式(41)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、一般式(41)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。

【0510】

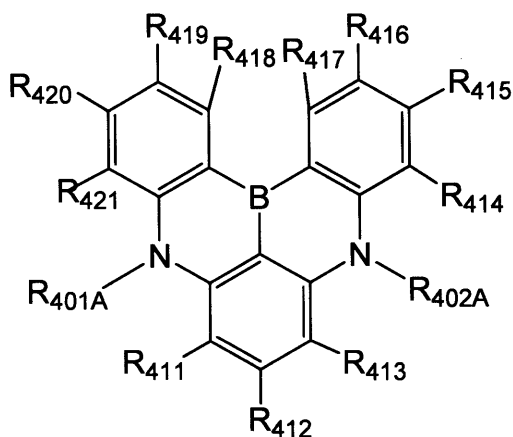
一実施形態において、一般式(41)におけるR₄₀₁及びR₄₀₂は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基であり、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。 50

【0511】

一実施形態において、一般式(41)で表される化合物は下記一般式(42)で表される化合物である。

【0512】

【化202】



(42)

【0513】

(一般式(42)において、

R401Aは、R411及びR421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しない。R402Aは、R413及びR414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しない。

前記置換もしくは無置換の複素環を形成しないR401A及びR402A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1価の複素環基である。

R411～R421のうちの隣接する2つ以上からなる組の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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

前記置換もしくは無置換の複素環又は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R411～R421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)、
- O—(R904)、
- S—(R905)、
- N(R906)(R907)、
- ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は
- 置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、前記一般式(11)におけるR₉₀₁～R₉₀₇と同義である。)

【0514】

一般式(42)のR_{401A}及びR_{402A}は、一般式(41)のR₄₀₁及びR₄₀₂に対応する基である。

例えば、R_{401A}とR₄₁₁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_{401A}とR₄₁₂が結合する場合、R_{402A}とR₄₁₃が結合する場合、及びR_{402A}とR₄₁₄が結合する場合も上記と同じである。

10

【0515】

R₄₁₁～R₄₂₁のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。例えば、R₁₁とR₁₂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。

【0516】

一実施形態において、環形成に寄与しないR₄₁₁～R₄₂₁は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

20

【0517】

一実施形態において、環形成に寄与しないR₄₁₁～R₄₂₁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1価の複素環基である。

【0518】

一実施形態において、環形成に寄与しないR₄₁₁～R₄₂₁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。

【0519】

一実施形態において、環形成に寄与しないR₄₁₁～R₄₂₁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、R₄₁₁～R₄₂₁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。

30

【0520】

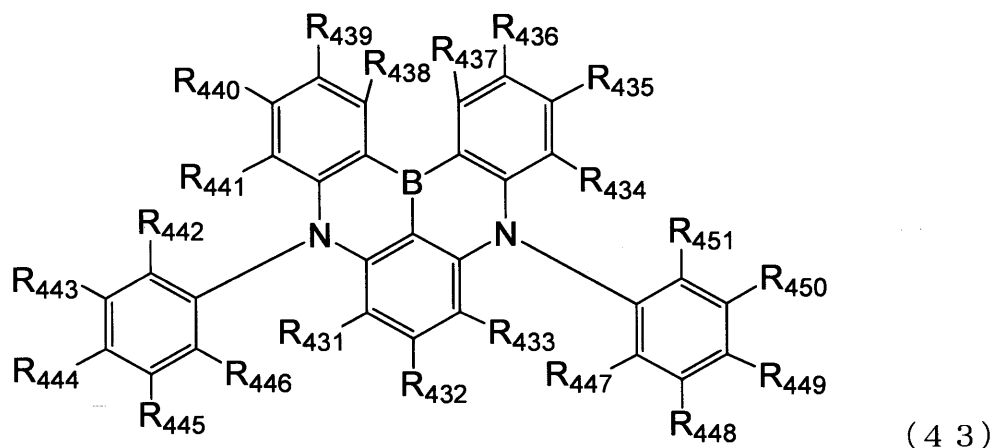
一実施形態において、前記一般式(42)で表される化合物は、下記一般式(43)で表される化合物である。

【0521】

40

50

【化 2 0 3】



【 0 5 2 2】

(一般式 (43) において、

R₄₃₁は、R₄₄₆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。R₄₃₃は、R₄₄₇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。R₄₃₄は、R₄₅₁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。R₄₄₁は、R₄₄₂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。

R₄₃₁～R₄₅₁のうちの隣接する2つ以上からなる組の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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

前記置換もしくは無置換の複素環又は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R₄₃₁～R₄₅₁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)、

—O—(R₉₀₄)、

—S—(R₉₀₅)、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、前記一般式(11)におけるR₉₀₁～R₉₀₇と同義である。)

【 0 5 2 3】

R₄₃₁は、R₄₄₆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、R₄₃₁とR₄₄₆の組が結合して、R₄₆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G2のうち、窒素を含む3環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。R₄₃₃とR₄₄₇の組が結合する場合、R₄₃₄とR₄₅₁の組が結合する場合、及びR₄₄₁とR₄₄₂の組が結合する場合も上記と同じである。

【 0 5 2 4】

一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{431} \sim R_{451}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

【0525】

一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{431} \sim R_{451}$ 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1価の複素環基である。

【0526】

一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{431} \sim R_{451}$ 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。

10

【0527】

一実施形態において、環形成に寄与しない $R_{431} \sim R_{451}$ 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、 $R_{431} \sim R_{451}$ 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。

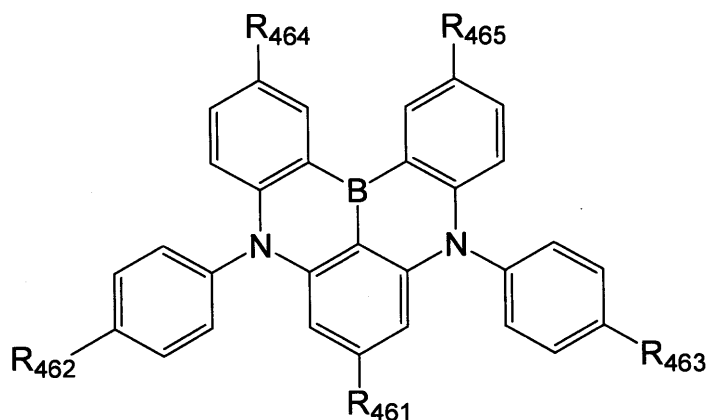
【0528】

一実施形態において、前記一般式(43)で表される化合物は、下記一般式(43A)で表される化合物である。

【0529】

【化204】

20



(43A)

30

【0530】

(一般式(43A)において、 R_{461} 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のアリール基である。

40

$R_{462} \sim R_{465}$ 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。)

【0531】

一実施形態において、 $R_{461} \sim R_{465}$ 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

50

基である。

【0532】

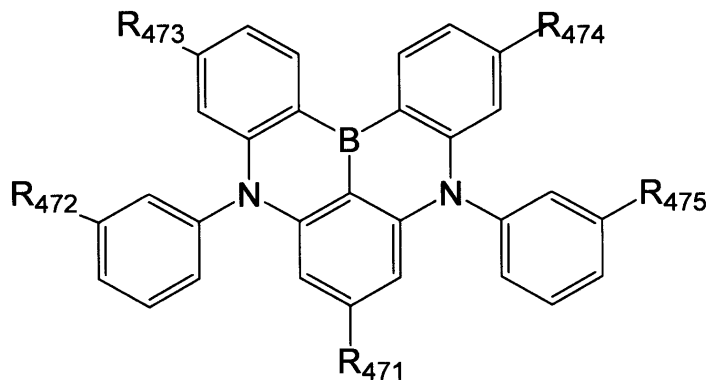
一実施形態において、 $R_{461} \sim R_{465}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基である。

【0533】

一実施形態において、前記一般式(43)で表される化合物は、下記一般式(43B)で表される化合物である。

【0534】

【化205】



(43B)

【0535】

(一般式(43B)において、 R_{471} 及び R_{472} は、それぞれ独立に、水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、
-N(R_{906})(R_{907})、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

$R_{473} \sim R_{475}$ 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(R_{906})(R_{907})、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

R_{906} 及び R_{907} は、それぞれ独立に、前記一般式(11)における R_{906} 及び R_{907} と同義である。)

【0536】

一実施形態において、前記一般式(43)で表される化合物は、下記一般式(43B')で表される化合物である。

【0537】

10

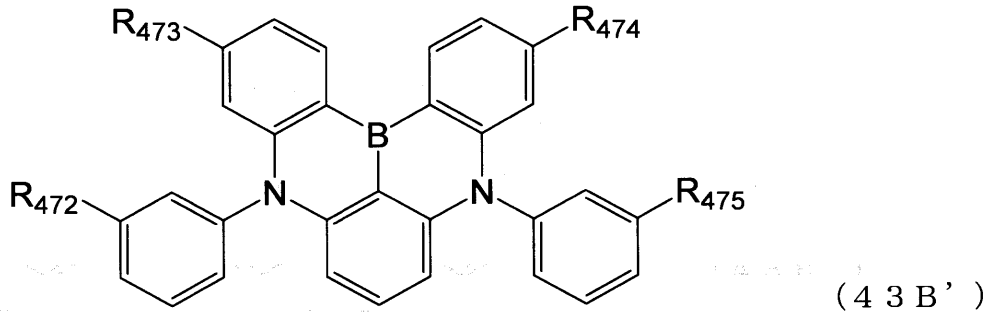
20

30

40

50

【化 2 0 6】



10

【 0 5 3 8】

(一般式 (4 3 B') において、 $R_{472} \sim R_{475}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (4 3 B) における $R_{472} \sim R_{475}$ と同義である。)

【 0 5 3 9】

一実施形態において、 $R_{471} \sim R_{475}$ 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、
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、
- N (R_{906}) (R_{907})、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 5 0 のアリール基である。

20

【 0 5 4 0】

一実施形態において、 R_{472} は、
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、
- N (R_{906}) (R_{907})、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 5 0 のアリール基であり、
 R_{471} 及び $R_{473} \sim R_{475}$ 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、
- N (R_{906}) (R_{907})、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 5 0 のアリール基である。

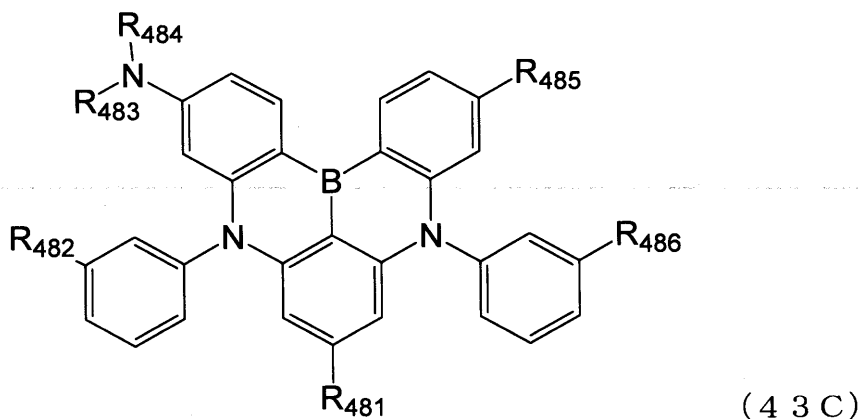
30

【 0 5 4 1】

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

【 0 5 4 2】

【化 2 0 7】



40

50

【0543】

(一般式(43C)において、

R_{481} 及び R_{482} 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。

$R_{483} \sim R_{486}$ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。)

10

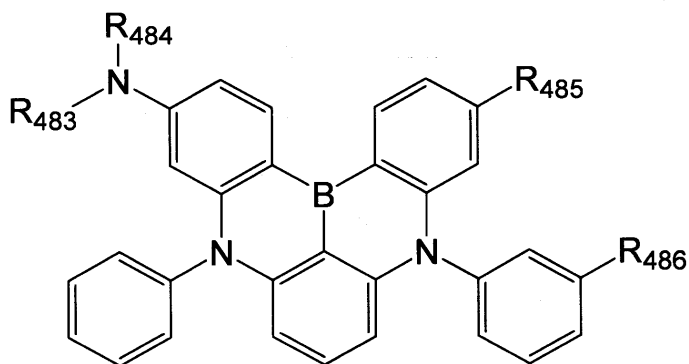
【0544】

一実施形態において、前記一般式(43)で表される化合物は、下記一般式(43C')
で表される化合物である。

【0545】

【化208】

20



(43C')

30

【0546】

(一般式(43C')において、 $R_{483} \sim R_{486}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(43C)における $R_{483} \sim R_{486}$ と同義である。)

【0547】

一実施形態において、 $R_{481} \sim R_{486}$ 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。

【0548】

一実施形態において、 $R_{481} \sim R_{486}$ 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。

40

【0549】

一般式(41)で表される化合物は、まずa環、b環及びc環を連結基(N-R₁を含む基及びN-R₂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(Bを含む基)で結合させることで最終生成物を製造することができる(第2反応)。第1反応ではバツハブルトー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。

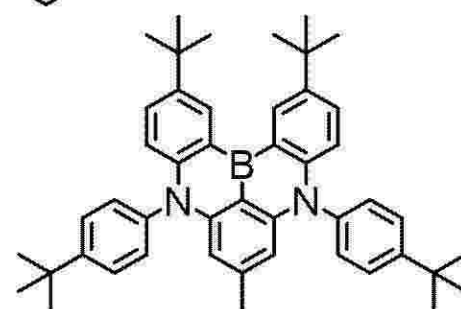
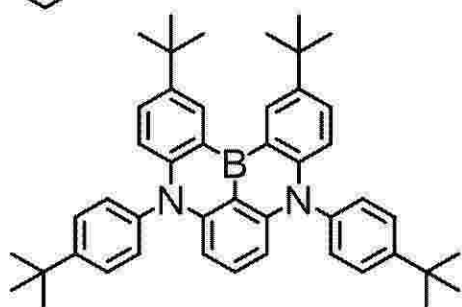
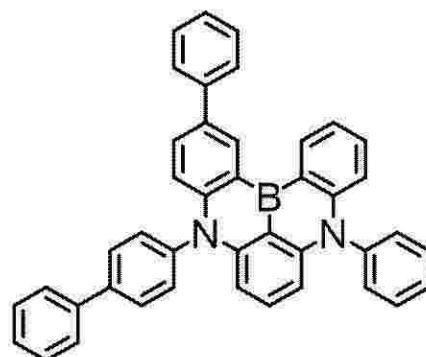
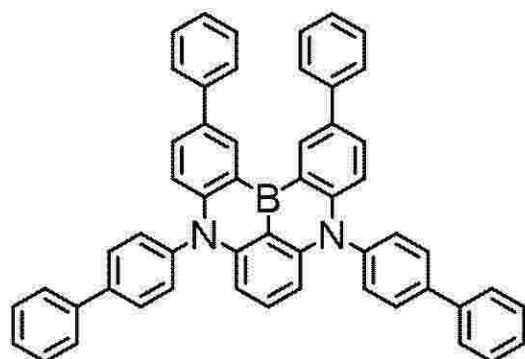
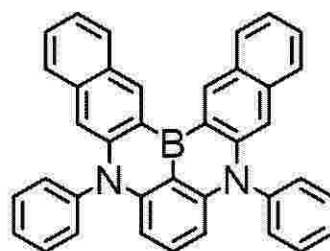
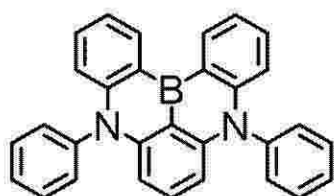
【0550】

前記一般式(41)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。

50

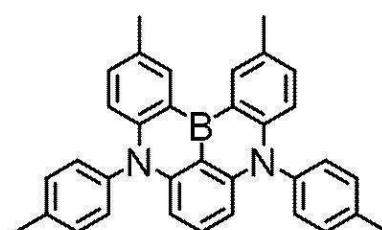
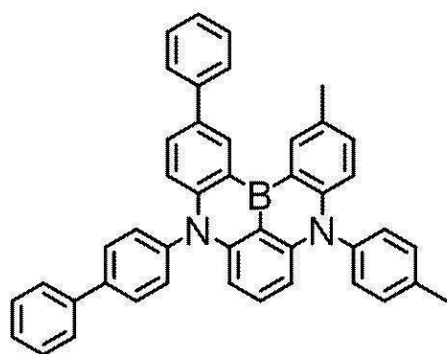
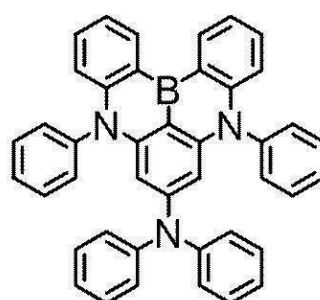
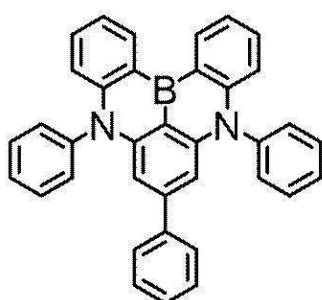
【 0 5 5 1 】

【 化 2 0 9 】



【 0 5 5 2 】

【 化 2 1 0 】



【 0 5 5 3 】

10

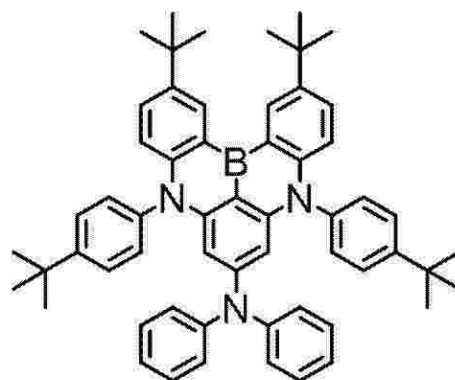
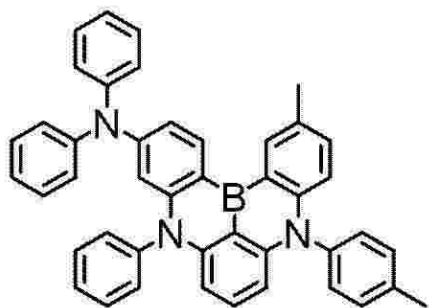
20

30

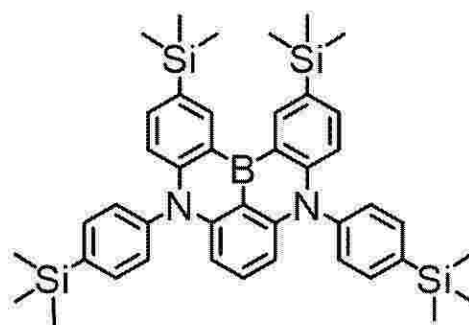
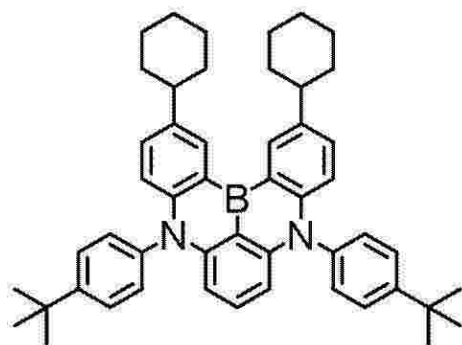
40

50

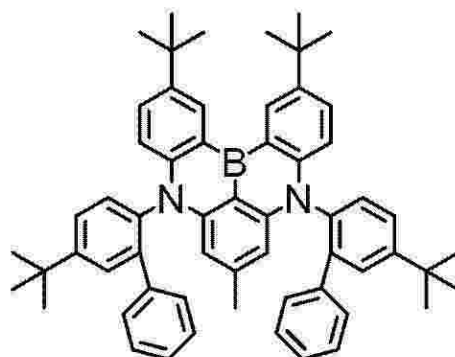
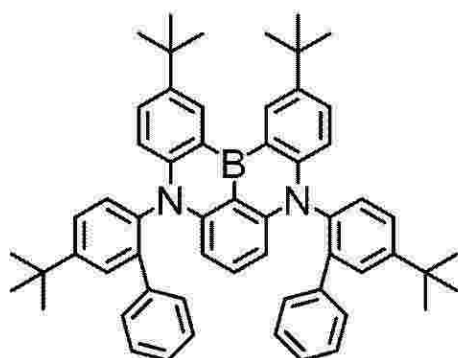
【化 2 1 1】



10



20



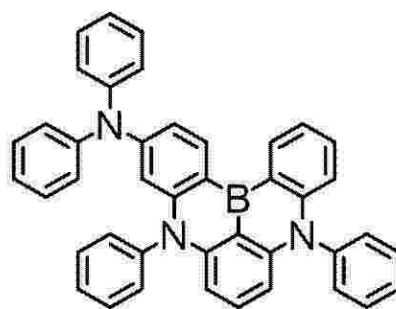
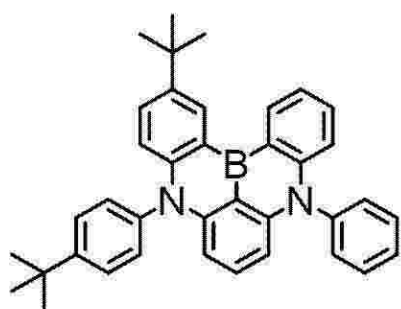
30

【 0 5 5 4】

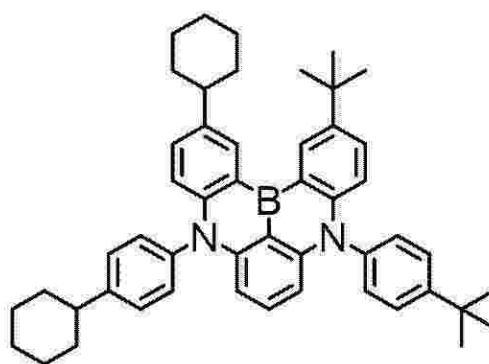
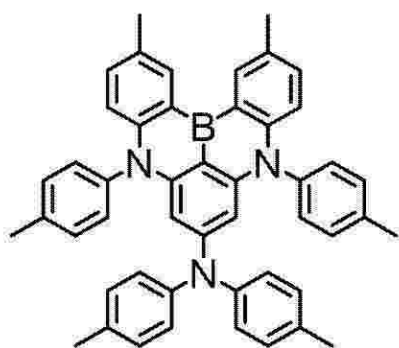
40

50

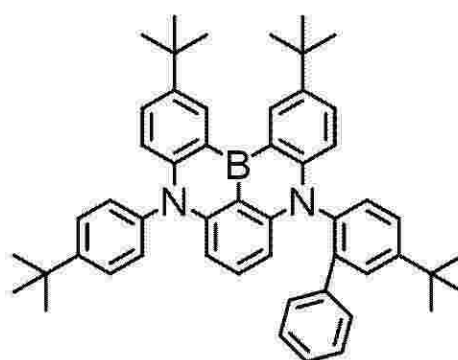
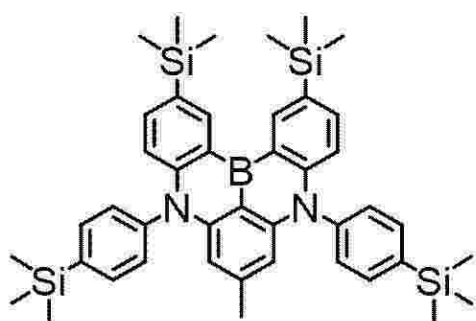
【化 2 1 2】



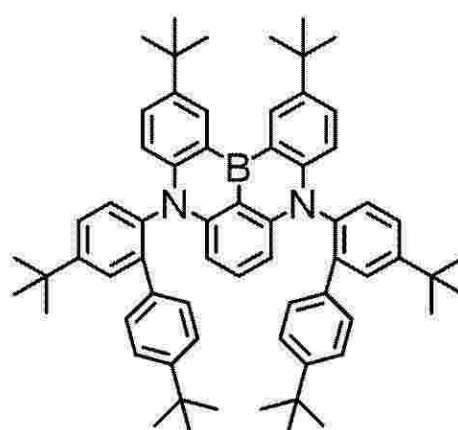
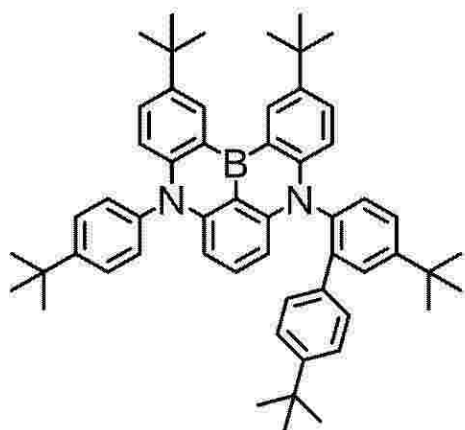
10



20



30



40

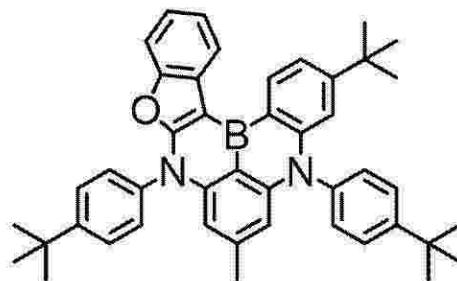
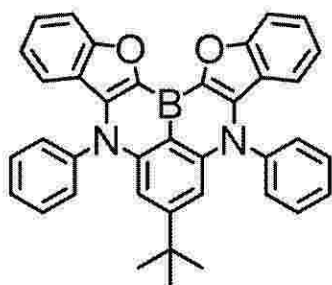
【 0 5 5 5】

50

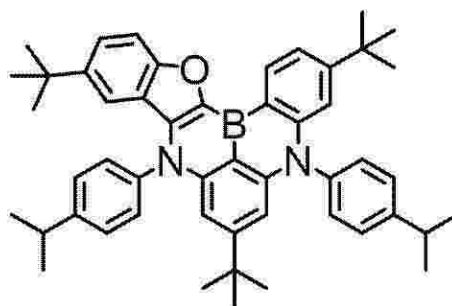
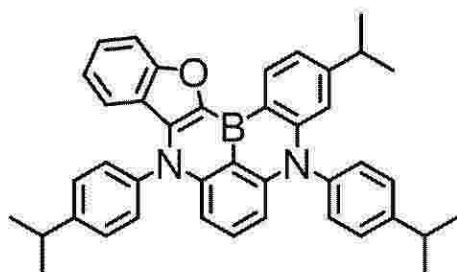
【化 2 1 3】



10



20



【 0 5 5 6】

(一般式 (5 1) で表される化合物)

一般式 (5 1) で表される化合物について説明する。

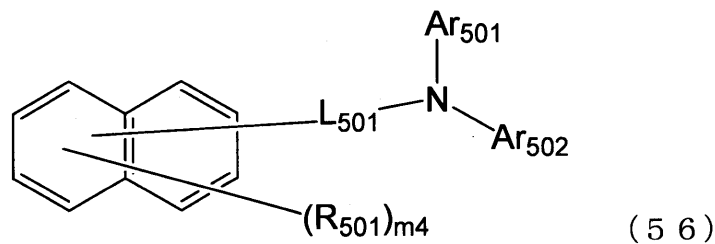
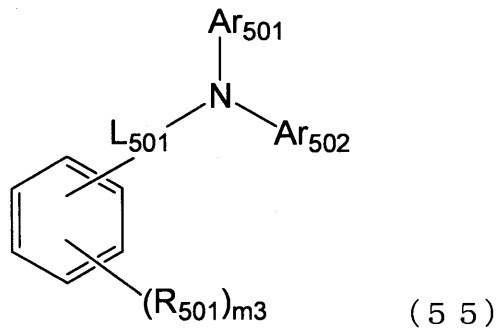
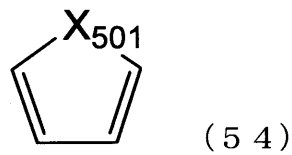
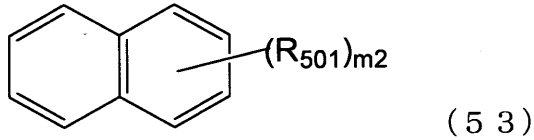
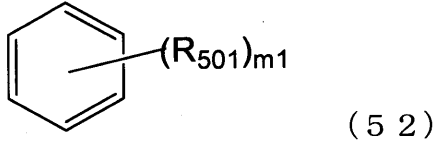
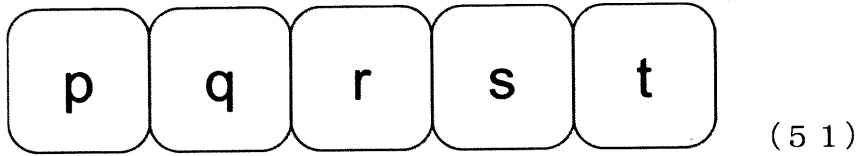
【 0 5 5 7】

30

40

50

【化 2 1 4】



【0 5 5 8】

(一般式 (5 1) において、

r 環は、隣接環の任意の位置で縮合する一般式 (5 2) 又は一般式 (5 3) で表される環である。

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一般式 (5 4) で表される環である。

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一般式 (5 5) 又は一般式 (5 6) で表される構造である。

R₅₀₁ が複数存在する場合、隣接する複数の R₅₀₁ 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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

X₅₀₁ は、酸素原子、硫黄原子、又は N R₅₀₂ である。

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{501} 及び R_{502} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

—O—(R_{904})、

—S—(R_{905})、

—N(R_{906})(R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

R_{901} ～ R_{907} は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における R_{901} ～ R_{907} と同義である。

Ar_{501} 及び Ar_{502} 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 1 価の複素環基である。

L_{501} は、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキレン基、

置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニレン基、

置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 2 価の複素環基である。

m_1 は 0～2 の整数であり、 m_2 は 0～4 の整数であり、 m_3 は、それぞれ独立に 0～3 の整数であり、 m_4 は、それぞれ独立に 0～5 の整数である。 R_{501} が複数存在する場合、複数の R_{501} は互いに同一であってもよいし、異なってもよい。)

【0559】

一般式 (51) において、p 環～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。縮合する位置や向きは限定されず、任意の位置・向きで縮合可能である。

【0560】

一実施形態において、r 環の一般式 (52) 又は一般式 (53) において、 R_{501} は水素原子である。

【0561】

一実施形態において、一般式 (51) で表される化合物は、下記一般式 (51-1)～(51-6) のいずれかで表される。

【0562】

10

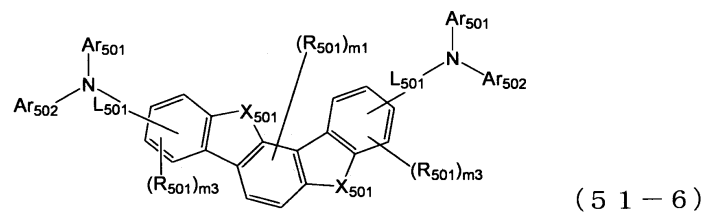
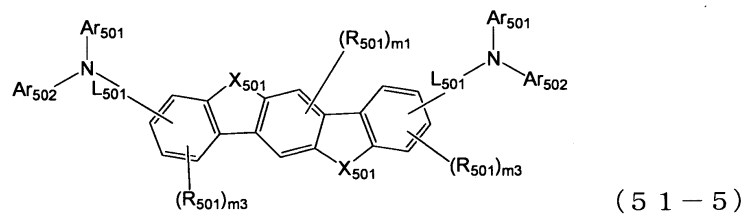
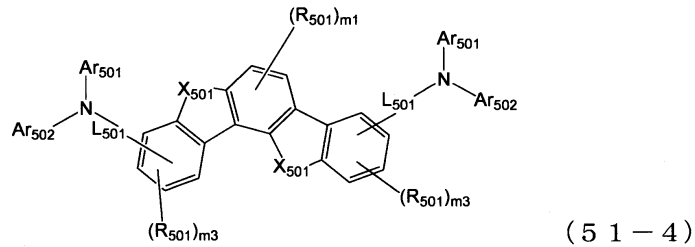
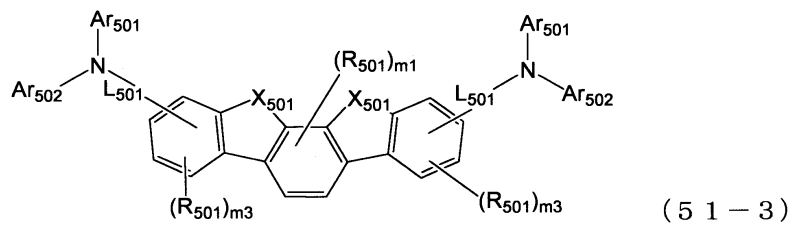
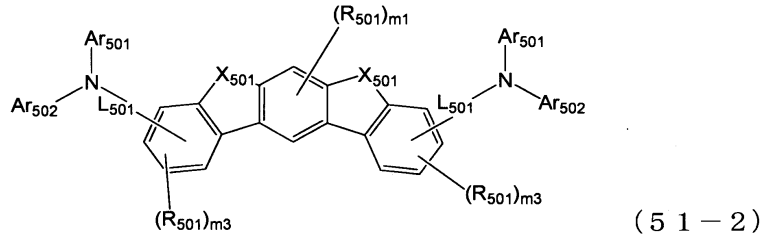
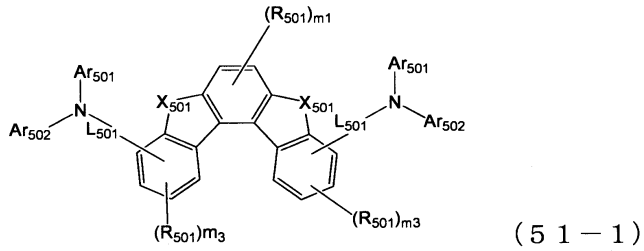
20

30

40

50

【化 2 1 5】



【0563】

(一般式(51-1)～(51-6)において、 R_{501} 、 X_{501} 、 Ar_{501} 、 Ar_{502} 、 L_{501} 、 $m1$ 及び $m3$ は、それぞれ独立に、前記一般式(51)における R_{501} 、 X_{501} 、 Ar_{501} 、 Ar_{502} 、 L_{501} 、 $m1$ 及び $m3$ と同義である。)

【0564】

一実施形態において、一般式(51)で表される化合物は下記一般式(51-11)～(51-13)のいずれかで表される。

【0565】

10

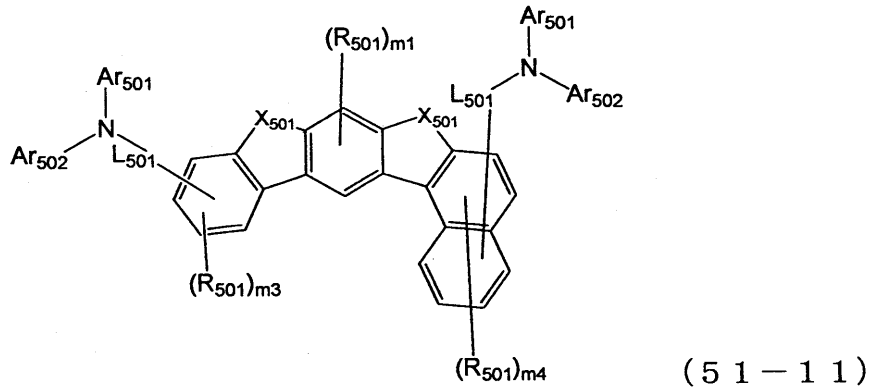
20

30

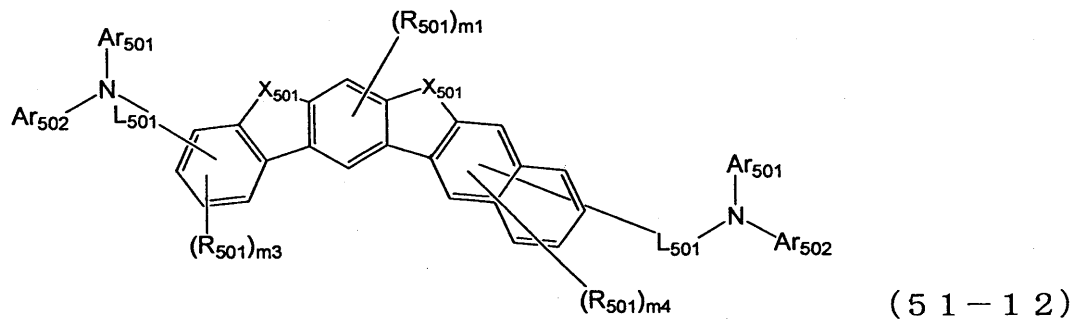
40

50

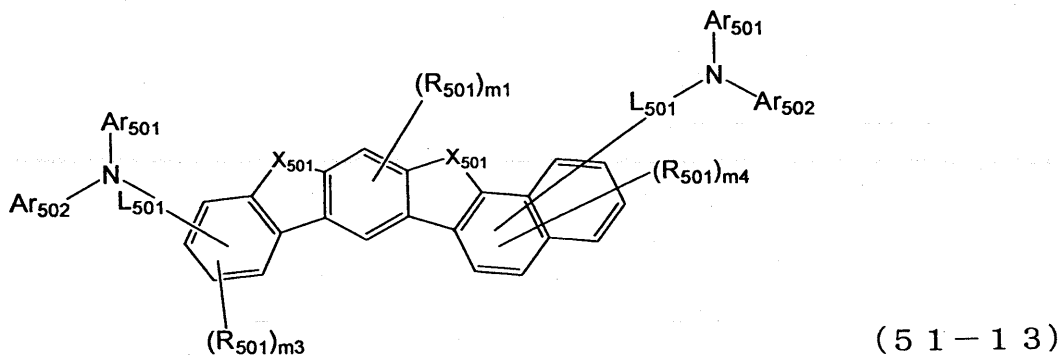
【化 2 1 6】



10



20



30

【0566】

(一般式 (51-11) ~ (51-13) において、 R_{501} 、 X_{501} 、 Ar_{501} 、 Ar_{502} 、 L_{501} 、 $m1$ 、 $m3$ 及び $m4$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (51) における R_{501} 、 X_{501} 、 Ar_{501} 、 Ar_{502} 、 L_{501} 、 $m1$ 、 $m3$ 及び $m4$ と同義である。)

【0567】

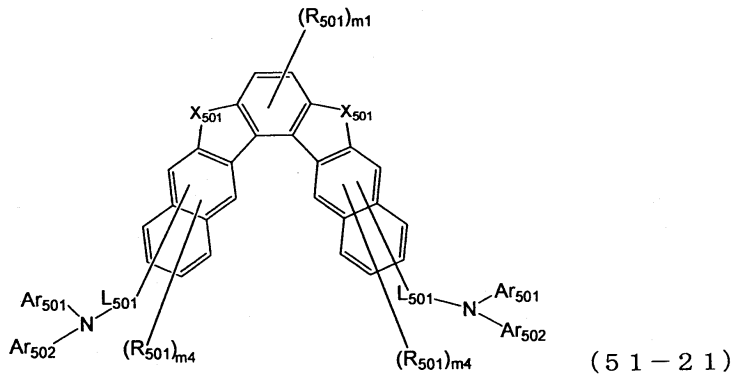
一実施形態において、一般式 (51) で表される化合物は下記一般式 (51-21) ~ (51-25) のいずれかで表される。

40

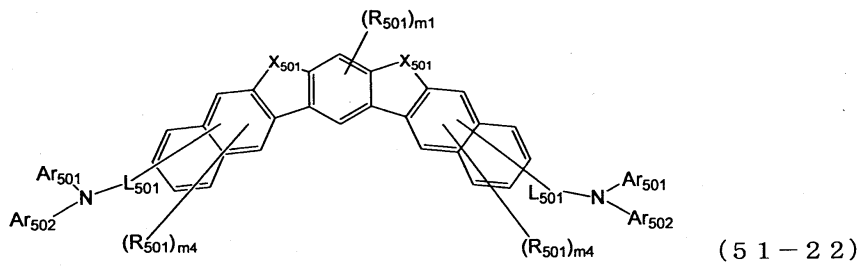
【0568】

50

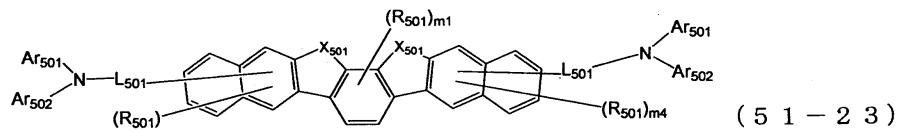
【化 2 1 7】



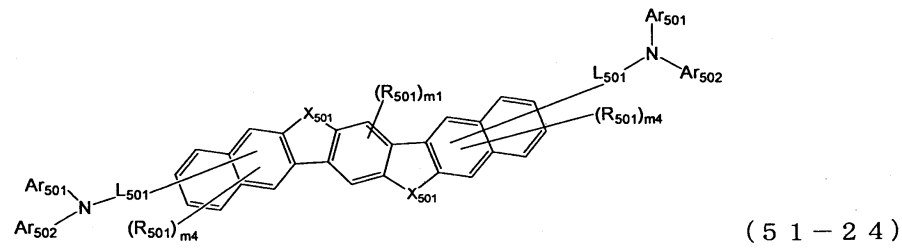
10



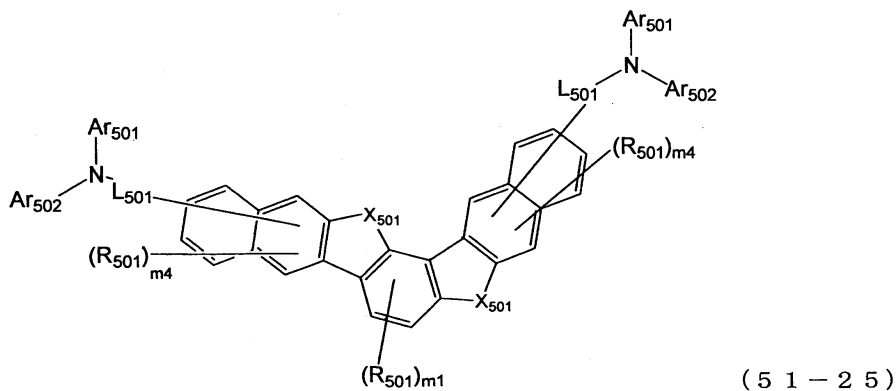
20



30



40



【0569】

(一般式 (51-21) ~ (51-25) において、 R_{501} 、 X_{501} 、 Ar_{501} 、 Ar_{502} 、 L_{501} 、 $m1$ 及び $m4$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (51) における R_{501} 、 X_{501} 、 Ar_{501} 、 Ar_{502} 、 L_{501} 、 $m1$ 及び $m4$ と同義である。)

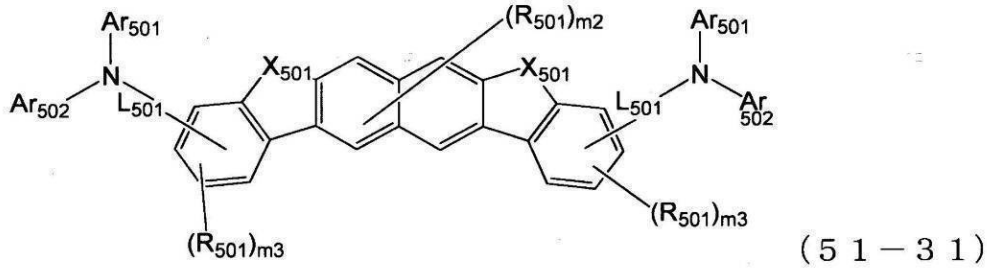
【0570】

一実施形態において、一般式 (51) で表される化合物は下記一般式 (51-31) ~ (51-33) のいずれかで表される。

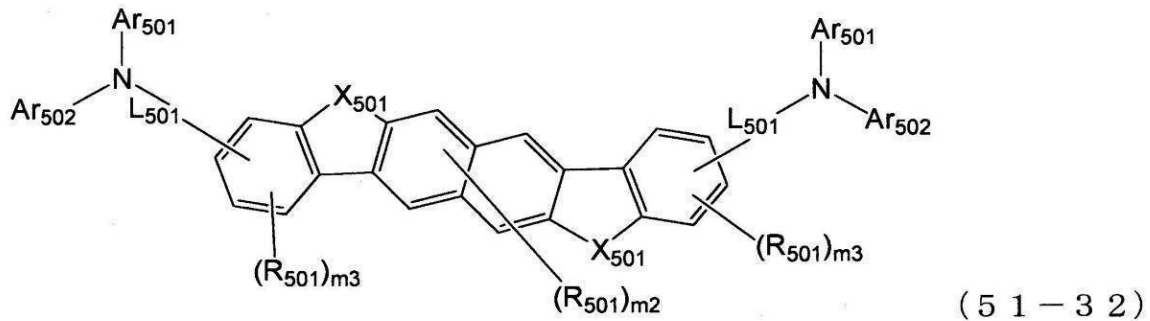
【0571】

50

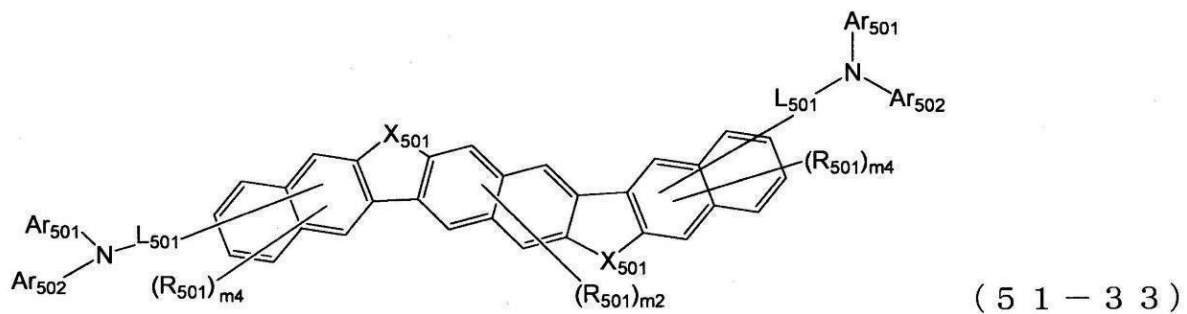
【化 2 1 8】



10



20



【 0 5 7 2 】

30

(一般式 (51-31) ~ (51-33) において、 R_{501} 、 X_{501} 、 Ar_{501} 、 Ar_{502} 、 L_{501} 、 $m1 \sim m4$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (51) における R_{501} 、 X_{501} 、 Ar_{501} 、 Ar_{502} 、 L_{501} 、 $m1 \sim m4$ と同義である。)

【 0 5 7 3 】

一実施形態においては、 Ar_{501} 及び Ar_{502} が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。

【 0 5 7 4 】

一実施形態においては、 Ar_{501} 及び Ar_{502} 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、他方が置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

40

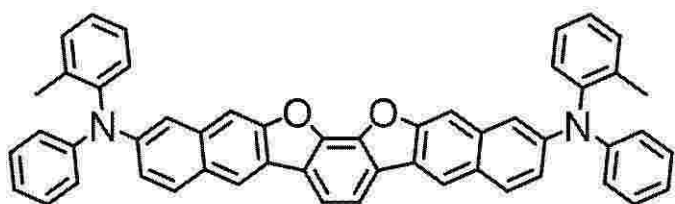
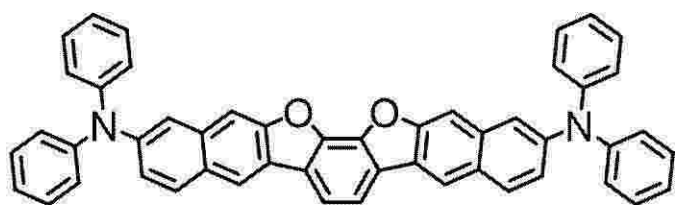
【 0 5 7 5 】

前記一般式 (51) で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

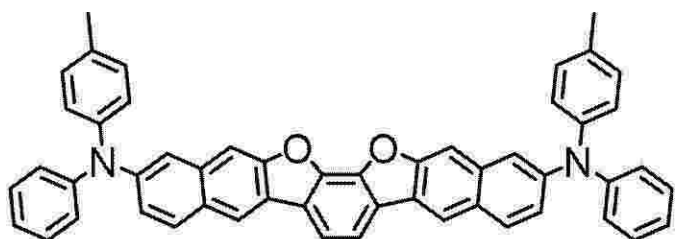
【 0 5 7 6 】

50

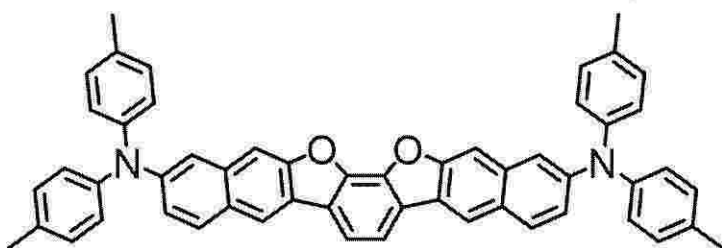
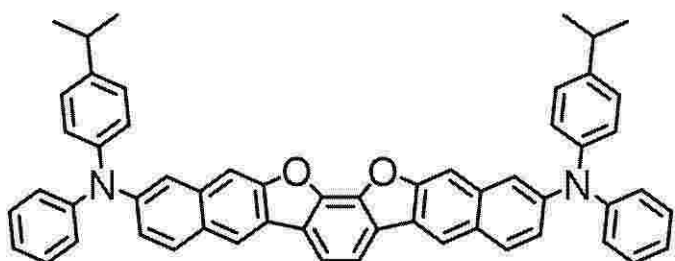
【化 2 1 9】



10



20



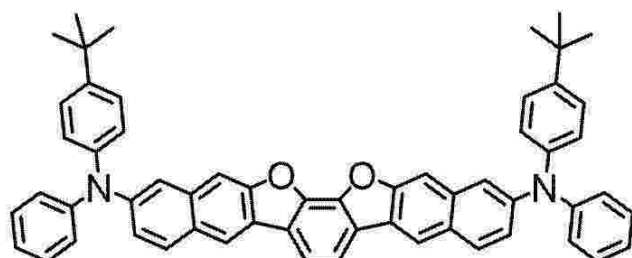
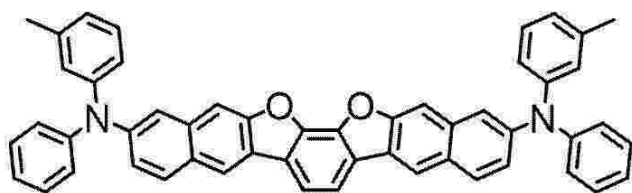
30

【 0 5 7 7】

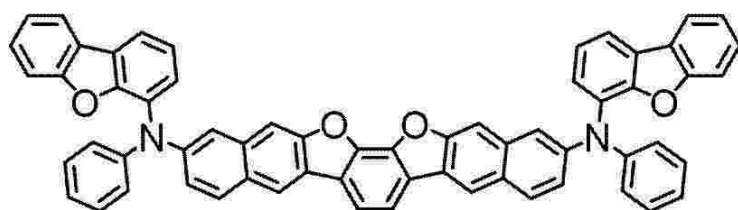
40

50

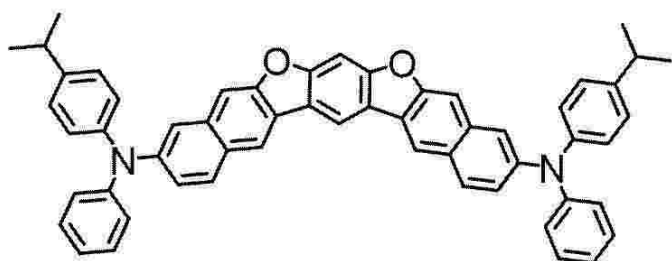
【化 2 2 0】



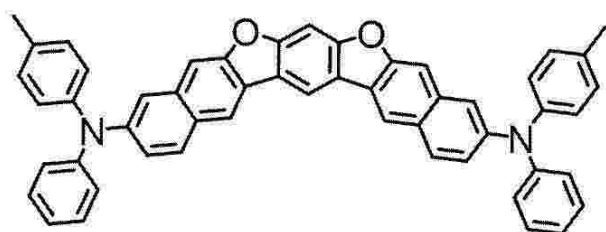
10



20



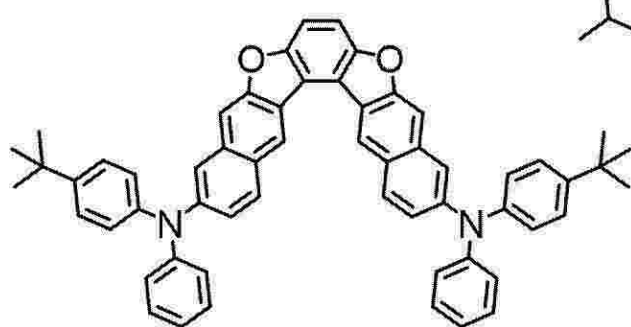
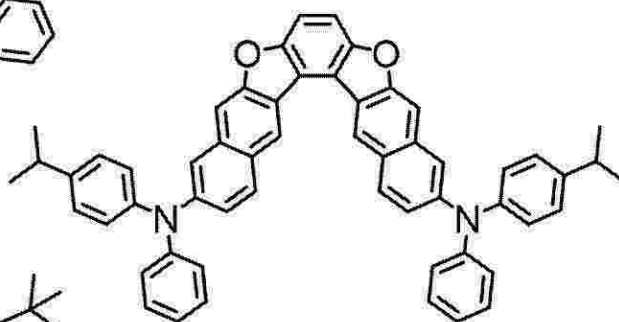
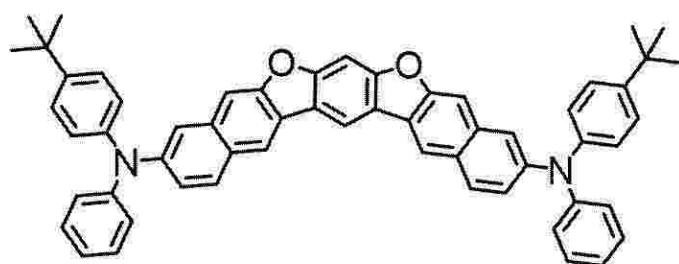
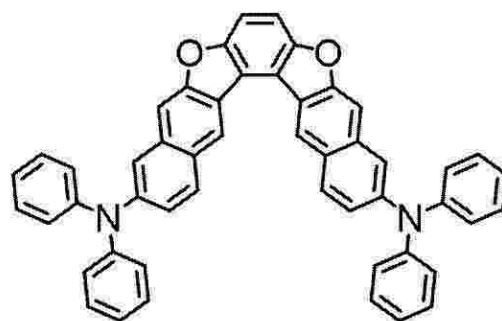
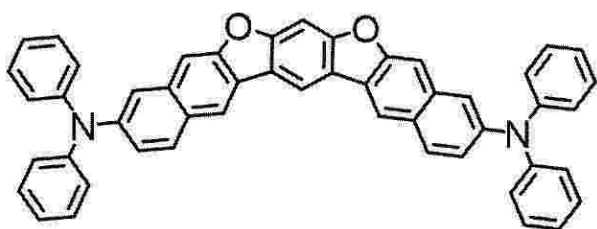
30



40

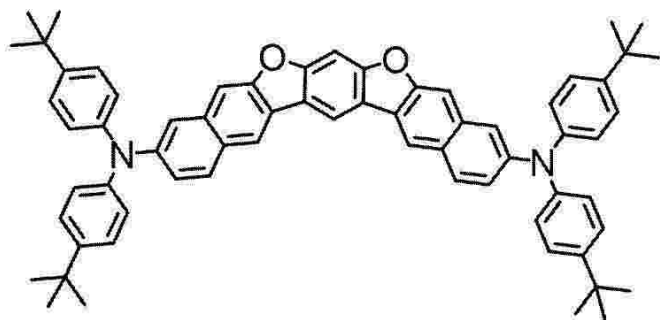
【 0 5 7 8】

50

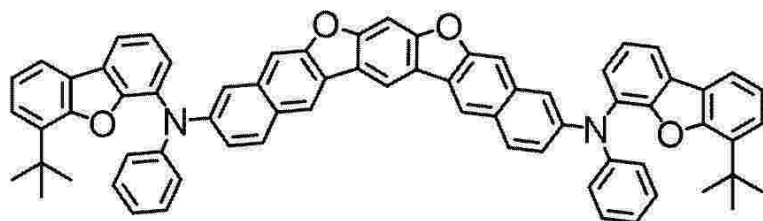
Cc1ccc(Nc2ccc(cc2)Nc3ccc(cc3)Nc4ccc(cc4)Nc5ccc(cc5)Nc6ccc(cc6)Nc7ccc(cc7)Nc8ccc(cc8)Nc9ccc(cc9)Nc10ccc(cc10)Nc11ccc(cc11)Nc12ccc(cc12)Nc13ccc(cc13)Nc14ccc(cc14)Nc15ccc(cc15)Nc16ccc(cc16)Nc17ccc(cc17)Nc18ccc(cc18)Nc19ccc(cc19)Nc20ccc(cc20)Nc21ccc(cc21)Nc22ccc(cc22)Nc23ccc(cc23)Nc24ccc(cc24)Nc25ccc(cc25)Nc26ccc(cc26)Nc27ccc(cc27)Nc28ccc(cc28)Nc29ccc(cc29)Nc30ccc(cc30)Nc31ccc(cc31)Nc32ccc(cc32)Nc33ccc(cc33)Nc34ccc(cc34)Nc35ccc(cc35)Nc36ccc(cc36)Nc37ccc(cc37)Nc38ccc(cc38)Nc39ccc(cc39)Nc40ccc(cc40)Nc41ccc(cc41)Nc42ccc(cc42)Nc43ccc(cc43)Nc44ccc(cc44)Nc45ccc(cc45)Nc46ccc(cc46)Nc47ccc(cc47)Nc48ccc(cc48)Nc49ccc(cc49)Nc50ccc(cc50)Nc51ccc(cc51)Nc52ccc(cc52)Nc53ccc(cc53)Nc54ccc(cc54)Nc55ccc(cc55)Nc56ccc(cc56)Nc57ccc(cc57)Nc58ccc(cc58)Nc59ccc(cc59)Nc60ccc(cc60)Nc61ccc(cc61)Nc62ccc(cc62)Nc63ccc(cc63)Nc64ccc(cc64)Nc65ccc(cc65)Nc66ccc(cc66)Nc67ccc(cc67)Nc68ccc(cc68)Nc69ccc(cc69)Nc70ccc(cc70)Nc71ccc(cc71)Nc72ccc(cc72)Nc73ccc(cc73)Nc74ccc(cc74)Nc75ccc(cc75)Nc76ccc(cc76)Nc77ccc(cc77)Nc78ccc(cc78)Nc79ccc(cc79)Nc80ccc(cc80)Nc81ccc(cc81)Nc82ccc(cc82)Nc83ccc(cc83)Nc84ccc(cc84)Nc85ccc(cc85)Nc86ccc(cc86)Nc87ccc(cc87)Nc88ccc(cc88)Nc89ccc(cc89)Nc90ccc(cc90)Nc91ccc(cc91)Nc92ccc(cc92)Nc93ccc(cc93)Nc94ccc(cc94)Nc95ccc(cc95)Nc96ccc(cc96)Nc97ccc(cc97)Nc98ccc(cc98)Nc99ccc(cc99)Nc100ccc(cc100)Nc101ccc(cc101)Nc102ccc(cc102)Nc103ccc(cc103)Nc104ccc(cc104)Nc105ccc(cc105)Nc106ccc(cc106)Nc107ccc(cc107)Nc108ccc(cc108)Nc109ccc(cc109)Nc110ccc(cc110)Nc111ccc(cc111)Nc112ccc(cc112)Nc113ccc(cc113)Nc114ccc(cc114)Nc115ccc(cc115)Nc116ccc(cc116)Nc117ccc(cc117)Nc118ccc(cc118)Nc119ccc(cc119)Nc120ccc(cc120)Nc121ccc(cc121)Nc122ccc(cc122)Nc123ccc(cc123)Nc124ccc(cc124)Nc125ccc(cc125)Nc126ccc(cc126)Nc127ccc(cc127)Nc128ccc(cc128)Nc129ccc(cc129)Nc130ccc(cc130)Nc131ccc(cc131)Nc132ccc(cc132)Nc133ccc(cc133)Nc134ccc(cc134)Nc135ccc(cc135)Nc136ccc(cc136)Nc137ccc(cc137)Nc138ccc(cc138)Nc139ccc(cc139)Nc140ccc(cc140)Nc141ccc(cc141)Nc142ccc(cc142)Nc143ccc(cc143)Nc144ccc(cc144)Nc145ccc(cc145)Nc146ccc(cc146)Nc147ccc(cc147)Nc148ccc(cc148)Nc149ccc(cc149)Nc150ccc(cc150)Nc151ccc(cc151)Nc152ccc(cc152)Nc153ccc(cc153)Nc154ccc(cc154)Nc155ccc(cc155)Nc156ccc(cc156)Nc157ccc(cc157)Nc158ccc(cc158)Nc159ccc(cc159)Nc160ccc(cc160)Nc161ccc(cc161)Nc162ccc(cc162)Nc163ccc(cc163)Nc164ccc(cc164)Nc165ccc(cc165)Nc166ccc(cc166)Nc167ccc(cc167)Nc168ccc(cc168)Nc169ccc(cc169)Nc170ccc(cc170)Nc171ccc(cc171)Nc172ccc(cc172)Nc173ccc(cc173)Nc174ccc(cc174)Nc175ccc(cc175)Nc176ccc(cc176)Nc177ccc(cc177)Nc178ccc(cc178)Nc179ccc(cc179)Nc180ccc(cc180)Nc181ccc(cc181)Nc182ccc(cc182)Nc183ccc(cc183)Nc184ccc(cc184)Nc185ccc(cc185)Nc186ccc(cc186)Nc187ccc(cc187)Nc188ccc(cc188)Nc189ccc(cc189)Nc190ccc(cc190)Nc191ccc(cc191)Nc192ccc(cc192)Nc193ccc(cc193)Nc194ccc(cc194)Nc195ccc(cc195)Nc196ccc(cc196)Nc197ccc(cc197)Nc198ccc(cc198)Nc199ccc(cc199)Nc200ccc(cc200)Nc201ccc(cc201)Nc202ccc(cc202)Nc203ccc(cc203)Nc204ccc(cc204)Nc205ccc(cc205)Nc206ccc(cc206)Nc207ccc(cc207)Nc208ccc(cc208)Nc209ccc(cc209)Nc210ccc(cc210)Nc211ccc(cc211)Nc212ccc(cc212)Nc213ccc(cc213)Nc214ccc(cc214)Nc215ccc(cc215)Nc216ccc(cc216)Nc217ccc(cc217)Nc218ccc(cc218)Nc219ccc(cc219)Nc220ccc(cc220)Nc221ccc(cc221)Nc222ccc(cc222)Nc223ccc(cc223)Nc224ccc(cc224)Nc225ccc(cc225)Nc226ccc(cc226)Nc227ccc(cc227)Nc228ccc(cc228)Nc229ccc(cc229)Nc230ccc(cc230)Nc231ccc(cc231)Nc232ccc(cc232)Nc233ccc(cc233)Nc234ccc(cc234)Nc235ccc(cc235)Nc236ccc(cc236)Nc237ccc(cc237)Nc238ccc(cc238)Nc239ccc(cc239)Nc240ccc(cc240)Nc241ccc(cc241)Nc242ccc(cc242)Nc243ccc(cc243)Nc244ccc(cc244)Nc245ccc(cc245)Nc246ccc(cc246)Nc247ccc(cc247)Nc248ccc(cc248)Nc249ccc(cc249)Nc250ccc(cc250)Nc251ccc(cc251)Nc252ccc(cc252)Nc253ccc(cc253)Nc254ccc(cc254)Nc255ccc(cc255)Nc256ccc(cc256)Nc257ccc(cc257)Nc258ccc(cc258)Nc259ccc(cc259)Nc260ccc(cc260)Nc261ccc(cc261)Nc262ccc(cc262)Nc263ccc(cc263)Nc264ccc(cc264)Nc265ccc(cc265)Nc266ccc(cc266)Nc267ccc(cc267)Nc268ccc(cc268)Nc269ccc(cc269)Nc270ccc(cc270)Nc271ccc(cc271)Nc272ccc(cc272)Nc273ccc(cc273)Nc274ccc(cc274)Nc275ccc(cc275)Nc276ccc(cc276)Nc277ccc(cc277)Nc278ccc(cc278)Nc279ccc(cc279)Nc280ccc(cc280)Nc281ccc(cc281)Nc282ccc(cc282)Nc283ccc(cc283)Nc284ccc(cc284)Nc285ccc(cc285)Nc286ccc(cc286)Nc287ccc(cc287)Nc288ccc(cc288)Nc289ccc(cc289)Nc290ccc(cc290)Nc291ccc(cc291)Nc292ccc(cc292)Nc293ccc(cc293)Nc294ccc(cc294)Nc295ccc(cc295)Nc296ccc(cc296)Nc297ccc(cc297)Nc298ccc(cc298)Nc299ccc(cc299)Nc300ccc(cc300)Nc301ccc(cc301)Nc302ccc(cc302)Nc303ccc(cc303)Nc304ccc(cc304)Nc305ccc(cc305)Nc306ccc(cc306)Nc307ccc(cc307)Nc308ccc(cc308)Nc309ccc(cc309)Nc310ccc(cc310)Nc311ccc(cc311)Nc312ccc(cc312)Nc313ccc(cc313)Nc314ccc(cc314)Nc315ccc(cc315)Nc316ccc(cc316)Nc317ccc(cc317)Nc318ccc(cc318)Nc319ccc(cc319)Nc320ccc(cc320)Nc321ccc(cc321)Nc322ccc(cc322)Nc323ccc(cc323)Nc324ccc(cc324)Nc325ccc(cc325)Nc326ccc(cc326)Nc327ccc(cc327)Nc328ccc(cc328)Nc329ccc(cc329)Nc330ccc(cc330)Nc331ccc(cc331)Nc332ccc(cc332)Nc333ccc(cc333)Nc334ccc(cc334)Nc335ccc(cc335)Nc336ccc(cc336)Nc337ccc(cc337)Nc338ccc(cc338)Nc339ccc(cc339)Nc340ccc(cc340)Nc341ccc(cc341)Nc342ccc(cc342)Nc343ccc(cc343)Nc344ccc(cc344)Nc345ccc(cc345)Nc346ccc(cc346)Nc347ccc(cc347)Nc348ccc(cc348)Nc349ccc(cc349)Nc350ccc(cc350)Nc351ccc(cc351)Nc352ccc(cc352)Nc353ccc(cc353)Nc354ccc(cc354)Nc355ccc(cc355)Nc356ccc(cc356)Nc357ccc(cc357)Nc358ccc(cc358)Nc359ccc(cc359)Nc360ccc(cc360)Nc361ccc(cc361)Nc362ccc(cc362)Nc363ccc(cc363)Nc364ccc(cc364)Nc365ccc(cc365)Nc366ccc(cc366)Nc367ccc(cc367)Nc368ccc(cc368)Nc369ccc(cc369)Nc370ccc(cc370)Nc371ccc(cc371)Nc372ccc(cc372)Nc373ccc(cc373)Nc374ccc(cc374)Nc375ccc(cc375)Nc376ccc(cc376)Nc377ccc(cc377)Nc378ccc(cc378)Nc379ccc(cc379)Nc380ccc(cc380)Nc381ccc(cc381)Nc382ccc(cc382)Nc383ccc(cc383)Nc384ccc(cc384)Nc385ccc(cc385)Nc386ccc(cc386)Nc387ccc(cc387)Nc388ccc(cc388)Nc389ccc(cc389)Nc390ccc(cc390)Nc391ccc(cc391)Nc392ccc(cc392)N

【 0 5 7 9 】

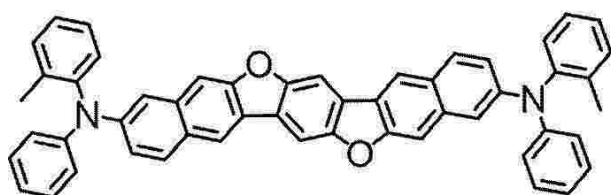
【化 2 2 2】



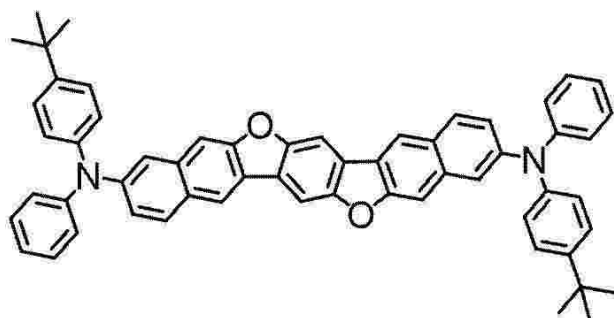
10



20

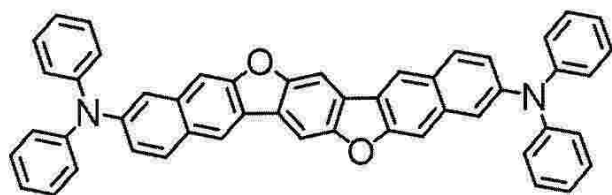


30



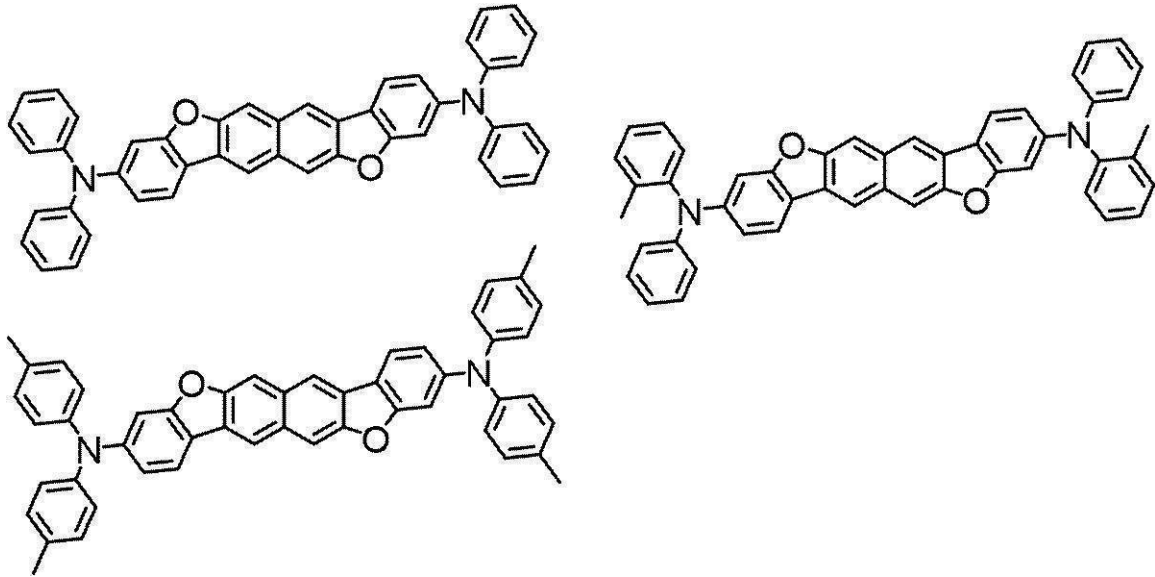
40

【 0 5 8 0】



50

【化 2 2 3】



10

【 0 5 8 1】

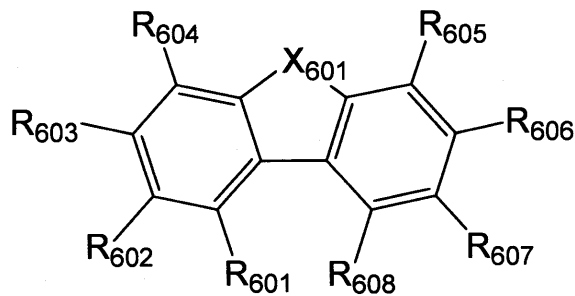
(一般式 (6 1) で表される化合物)

一般式 (6 1) で表される化合物について説明する。

20

【 0 5 8 2】

【化 2 2 4】



(6 1)

30

【 0 5 8 3】

(一般式 (6 1) において、

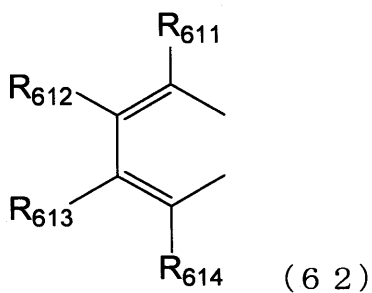
R₆₀₁とR₆₀₂の組、R₆₀₂とR₆₀₃の組、及びR₆₀₃とR₆₀₄の組の少なくとも一組は互いに結合して下記一般式 (6 2) で示される2価の基を形成する。

R₆₀₅とR₆₀₆の組、R₆₀₆とR₆₀₇の組、及びR₆₀₇とR₆₀₈の組の少なくとも一組は互いに結合して下記一般式 (6 3) で示される2価の基を形成する。

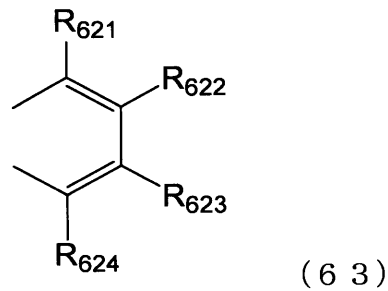
【 0 5 8 4】

【化 2 2 5】

40



(6 2)



(6 3)

【 0 5 8 5】

50

R₆₀₁～R₆₀₄のうち前記一般式(62)で示される2価の基を形成しないもの、及びR₆₁₁～R₆₁₄の少なくとも1つは、下記一般式(64)で表される1価の基である。

R₆₀₅～R₆₀₈のうち前記一般式(63)で示される2価の基を形成しないもの、及びR₆₂₁～R₆₂₄の少なくとも1つは、下記一般式(64)で表される1価の基である。

X₆₀₁は酸素原子、硫黄原子、又はN R₆₀₉である。

前記一般式(62)及び(63)で表される2価の基を形成せず、かつ、前記一般式(64)で表される1価の基ではないR₆₀₁～R₆₀₈、前記一般式(64)で表される1価の基ではないR₆₁₁～R₆₁₄及びR₆₂₁～R₆₂₄、並びにR₆₀₉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)、

—O—(R₉₀₄)、

—S—(R₉₀₅)、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

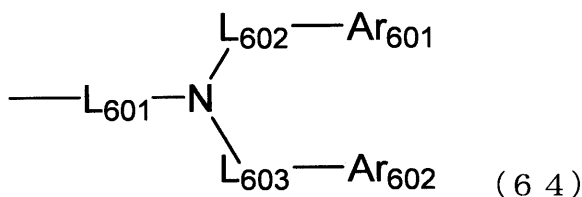
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、前記一般式(11)におけるR₉₀₁～R₉₀₇と同義である。

【0586】

【化226】



一般式(64)において、Ar₆₀₁及びAr₆₀₂は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

L₆₀₁～L₆₀₃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

これらが2～4個結合して形成される2価の連結基である。))

【0587】

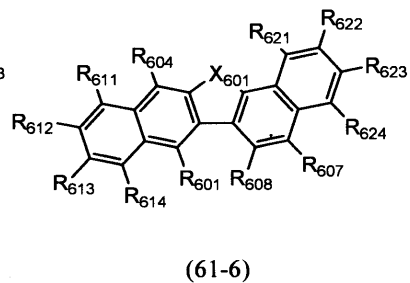
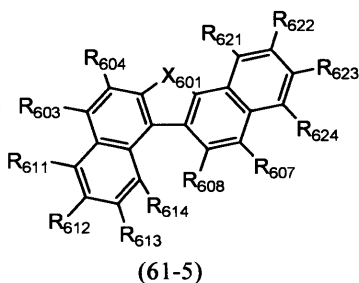
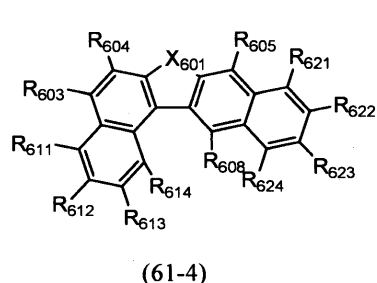
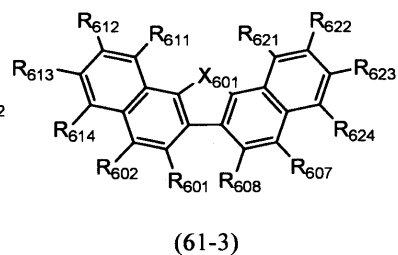
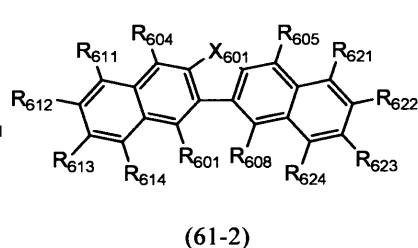
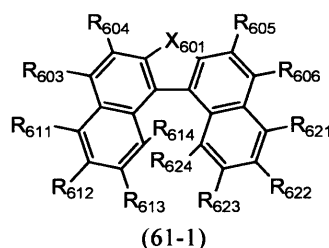
一般式(61)において、一般式(62)で示される2価の基及び一般式(63)で示される2価の基が形成される位置は特に限定されず、R₆₀₁～R₆₀₈の可能な位置において当該基を形成し得る。

【0588】

一実施形態において、一般式(61)で表される化合物は、下記一般式(61-1)～(61-6)のいずれかで表される。

【0589】

【化 2 2 7】



【0 5 9 0】

(一般式 (61-1) ~ (61-6) において、X₆₀₁ は、前記一般式 (61) における X₆₀₁ と同義である。

R₆₀₁ ~ R₆₂₄ の少なくとも 2 つは前記一般式 (64) で表される 1 価の基である。

前記一般式 (64) で表される 1 価の基ではない R₆₀₁ ~ R₆₂₄ 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)、

—O—(R₉₀₄)、

—S—(R₉₀₅)、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

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

R₉₀₁ ~ R₉₀₇ は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における R₉₀₁ ~ R₉₀₇ と同義である。))

【0 5 9 1】

一実施形態において、一般式 (61) で表される化合物は、下記一般式 (61-7) ~ (61-18) のいずれかで表される。

【0 5 9 2】

10

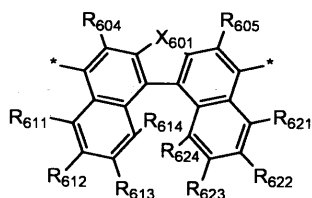
20

30

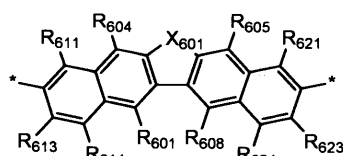
40

50

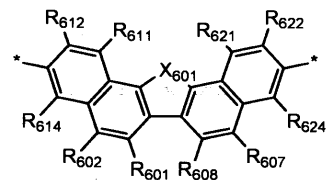
【化 2 2 8】



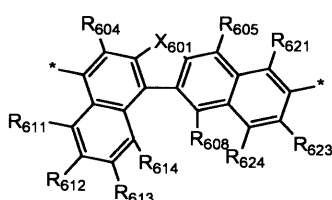
(61-7)



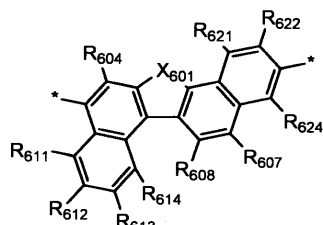
(61-8)



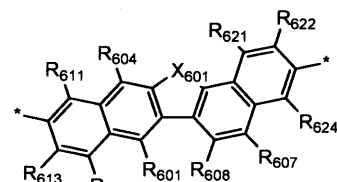
(61-9)



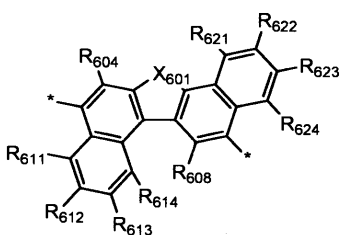
(61-10)



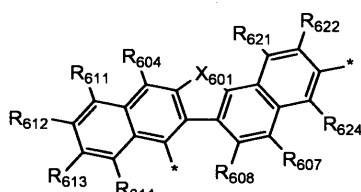
(61-11)



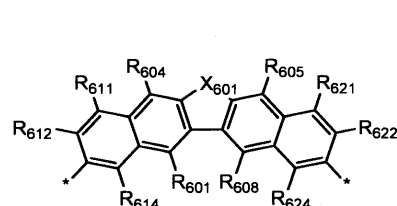
(61-12)



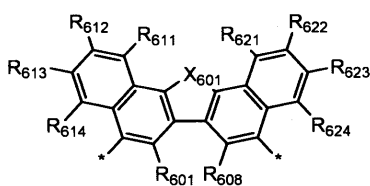
(61-13)



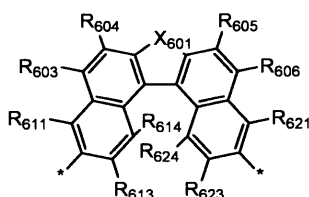
(61-14)



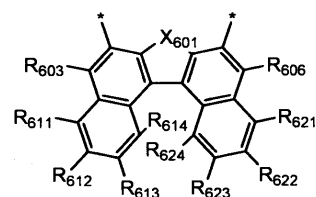
(61-15)



(61-16)



(61-17)



(61-18)

【0593】

(一般式(61-7)～(61-18)において、X₆₀₁は、前記一般式(61)におけるX₆₀₁と同義である。＊は前記一般式(64)で表される1価の基と結合する単結合である。R₆₀₁～R₆₂₄は、それぞれ独立に、前記一般式(64)で表される1価の基ではないR₆₀₁～R₆₂₄と同義である。)

【0594】

前記一般式(62)及び(63)で表される2価の基を形成せず、かつ、前記一般式(64)で表される1価の基ではないR₆₀₁～R₆₀₈、及び、前記一般式(64)で表される1価の基ではないR₆₁₁～R₆₁₄及びR₆₂₁～R₆₂₄は、好ましくは、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

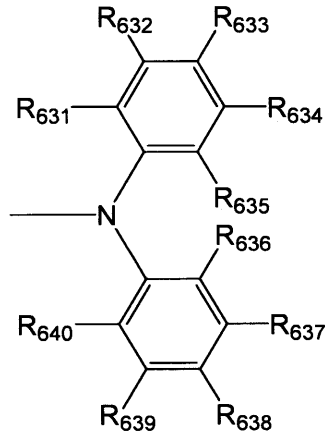
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

【0595】

一般式 (64) で表される 1 価の基は、好ましくは下記一般式 (65) 又は (66) で表される。

【0596】

【化229】



(65)

【0597】

(一般式 (65) において、R631～R640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)、

—O—(R904)、

—S—(R905)、

—N(R906)(R907)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

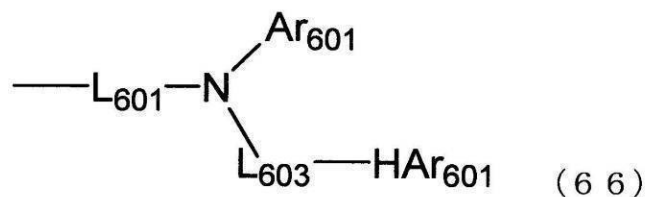
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

R901～R907は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における R901～R907 と同義である。)

【0598】

【化230】



(66)

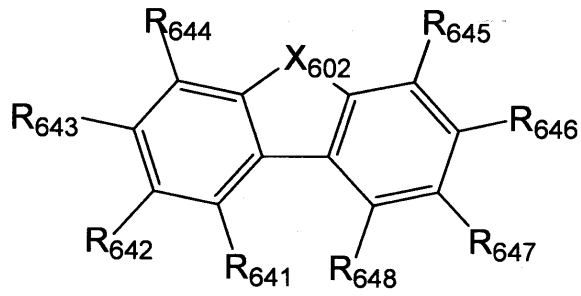
【0599】

(一般式 (66) において、Ar601、L601及びL603は、それぞれ独立に、前記一般式 (64) における Ar601、L601及びL603と同義である。HAr601は下

記一般式（６７）で表される構造である。

【０６００】

【化２３１】



10

【０６０１】

（一般式（６７）において、 X_{602} は酸素原子又は硫黄原子である。

$R_{641} \sim R_{648}$ のいずれか１つは L_{603} に結合する単結合である。

単結合ではない $R_{641} \sim R_{648}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

—O—(R_{904})、

—S—(R_{905})、

—N(R_{906})(R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の１価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、前記一般式（１１）における $R_{901} \sim R_{907}$ と同義である。）

【０６０２】

前記一般式（６１）で表される化合物としては、国際公開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。

【０６０３】

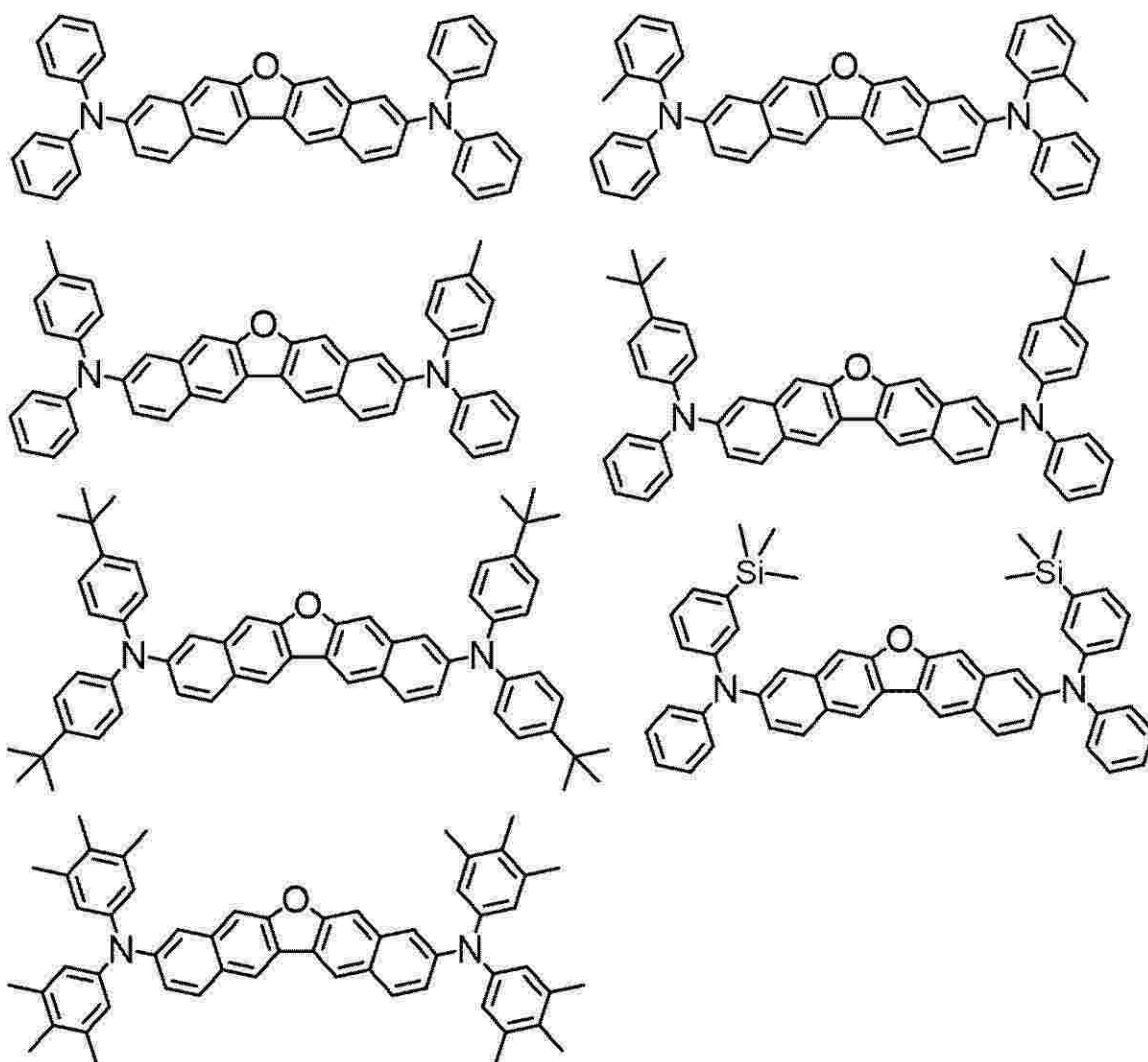
20

30

40

50

【化 2 3 2】



【 0 6 0 4】

10

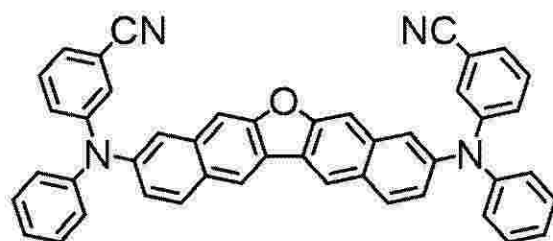
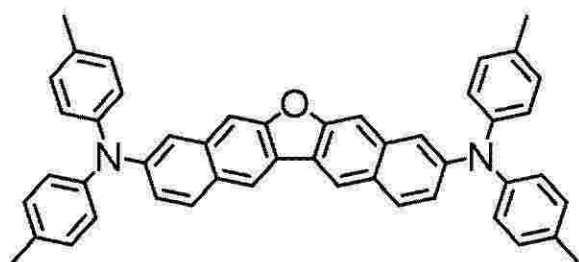
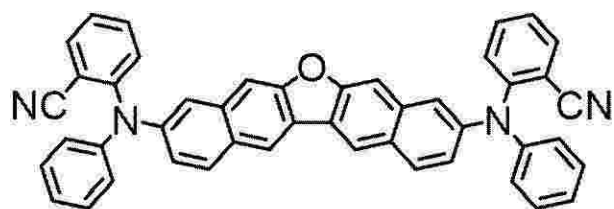
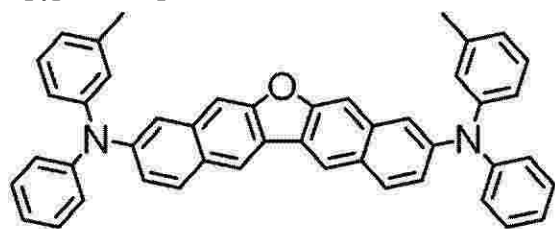
20

30

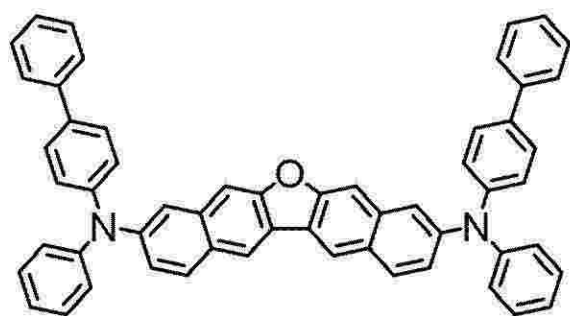
40

50

【化 2 3 3】



10



20

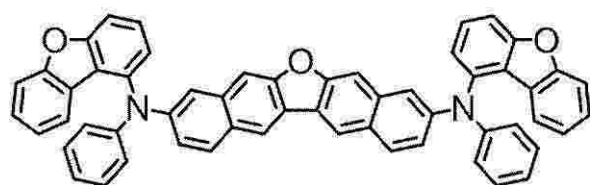
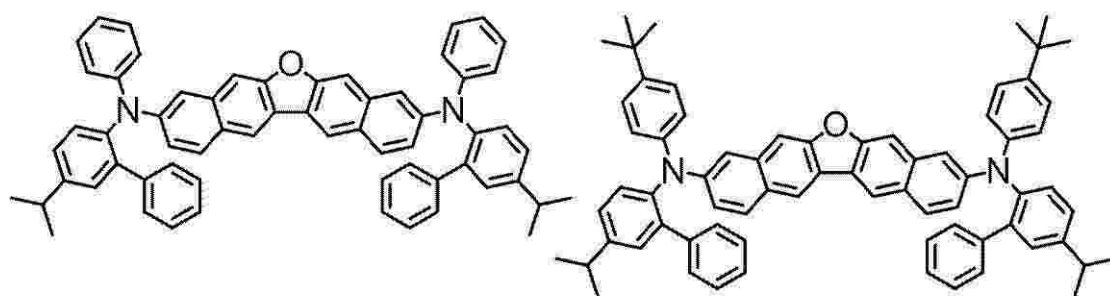
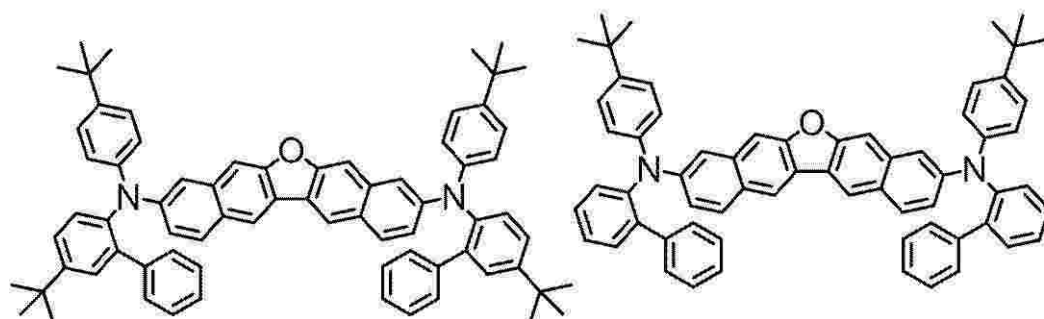
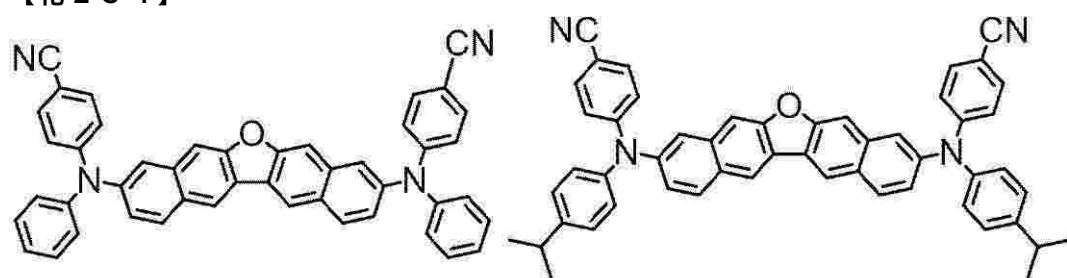
【 0 6 0 5】

30

40

50

【化 2 3 4】



【 0 6 0 6】

10

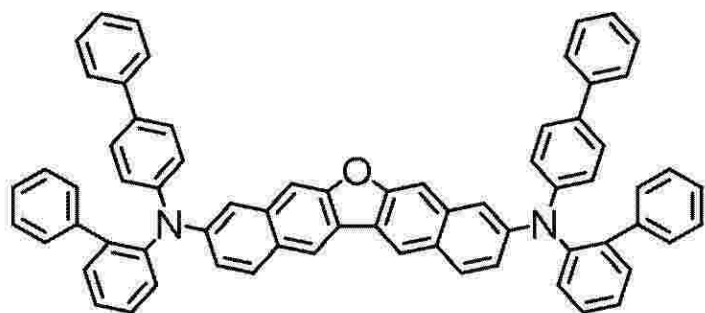
20

30

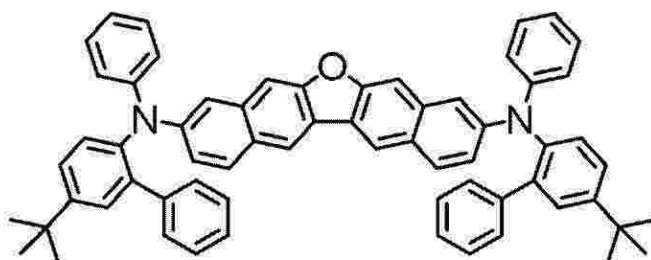
40

50

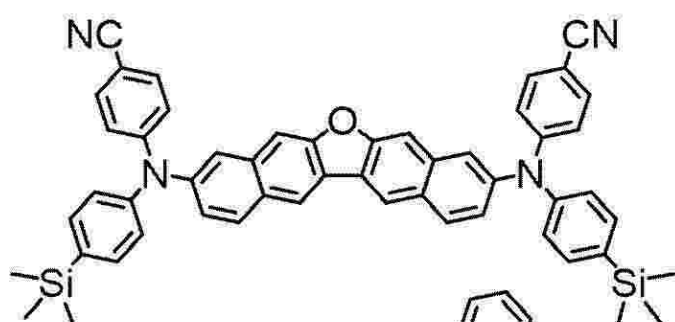
【化 2 3 5】



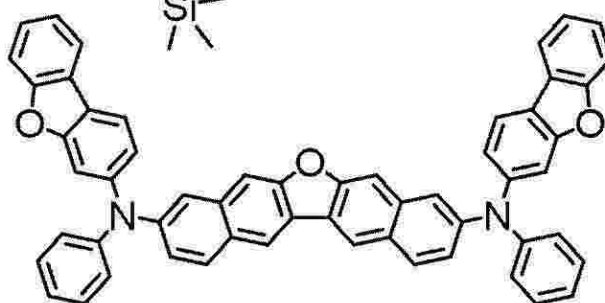
10



20



30



40

【 0 6 0 7】

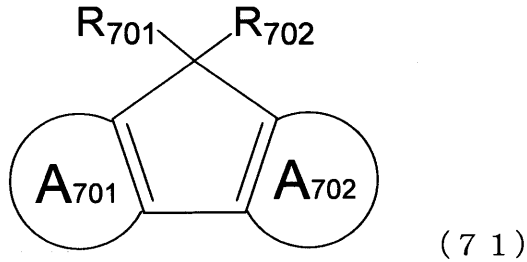
(一般式 (71) で表される化合物)

一般式 (71) で表される化合物について説明する。

【 0 6 0 8】

50

【化 2 3 6】



10

【 0 6 0 9】

(一般式 (71) において、

A₇₀₁ 環及び A₇₀₂ 環は、それぞれ独立に、

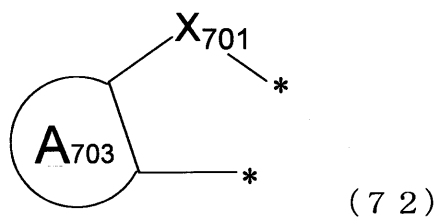
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 の芳香族炭化水素環、又は、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環である。

A₇₀₁ 環及び A₇₀₂ 環からなる群から選択される 1 以上は、下記一般式 (72) で表される構造の * と結合する。

【 0 6 1 0】

【化 2 3 7】



20

【 0 6 1 1】

(一般式 (72) において、

A₇₀₃ 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 の複素環である。

X₇₀₁ は、N R₇₀₃、C (R₇₀₄) (R₇₀₅)、Si (R₇₀₆) (R₇₀₇)、Ge (R₇₀₈) (R₇₀₉)、O、S 又は Se である。

R₇₀₁ 及び R₇₀₂ 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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

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 R₇₀₁ 及び R₇₀₂、並びに R₇₀₃～R₇₀₉ 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)、- O - (R₉₀₄)、- S - (R₉₀₅)、- N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇ は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における R₉₀₁～R₉₀₇

30

40

50

と同義である。)

【0612】

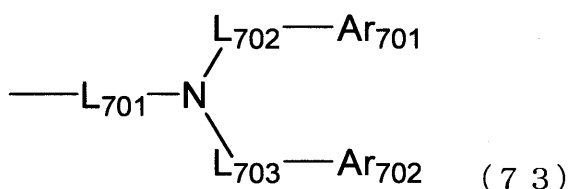
A₇₀₁環及びA₇₀₂環からなる群から選択される1以上は、一般式(72)で表される構造の*と結合する。即ち、一実施形態において、A₇₀₁環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、一般式(72)で表される構造の*と結合する。また、一実施形態において、A₇₀₂環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、一般式(72)で表される構造の*と結合する。

【0613】

一実施形態において、A₇₀₁環及びA₇₀₂環のいずれか又は両方に下記一般式(73)で表される基が結合する。

【0614】

【化238】



【0615】

(一般式(73)において、Ar₇₀₁及びAr₇₀₂は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

L₇₀₁～L₇₀₃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

これらが2～4個結合して形成される2価の連結基である。)

【0616】

一実施形態において、A₇₀₁環に加えて、A₇₀₂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、一般式(72)で表される構造の*と結合する。この場合、一般式(72)で表される構造は同一でもよいし異なってもよい。

【0617】

一実施形態において、R₇₀₁及びR₇₀₂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、R₇₀₁及びR₇₀₂は、互いに結合してフルオレン構造を形成する。

【0618】

一実施形態において、環A₇₀₁及び環A₇₀₂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。

【0619】

一実施形態において、環A₇₀₃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、X₇₀₁は、O又はSである。

【0620】

前記一般式(71)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。

【0621】

10

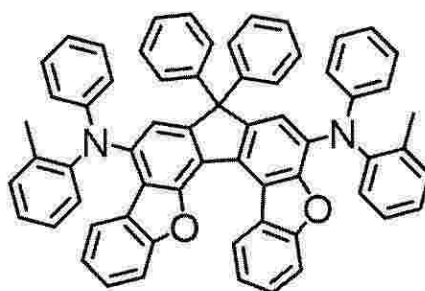
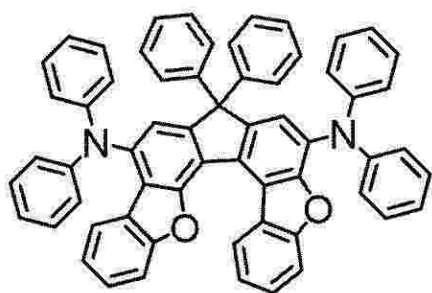
20

30

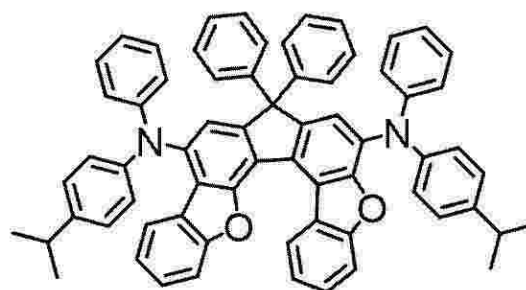
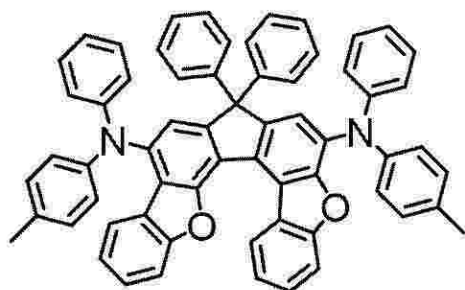
40

50

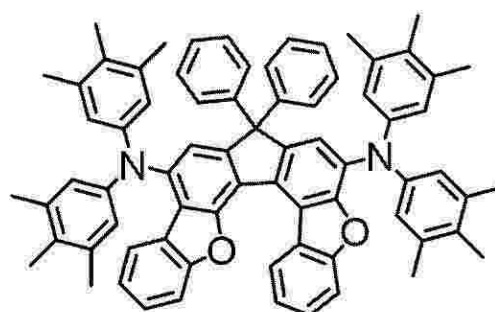
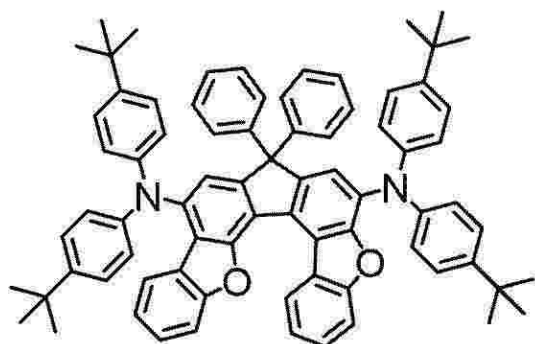
【化 2 3 9】



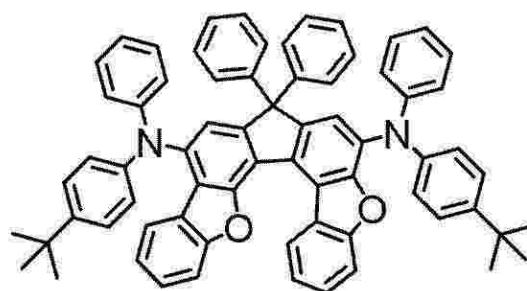
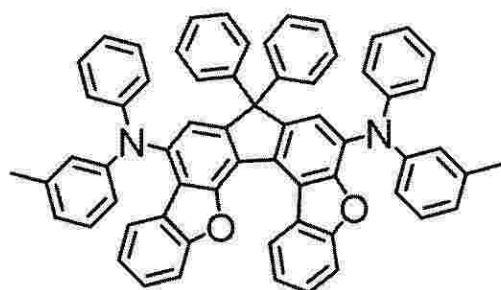
10



20



30

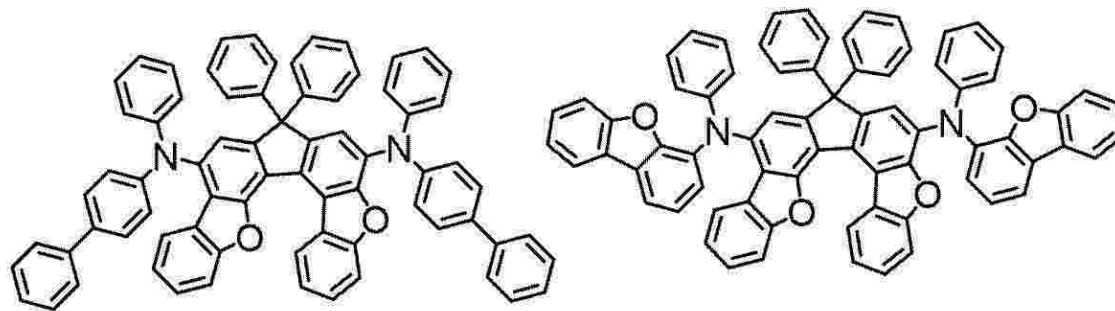


【 0 6 2 2】

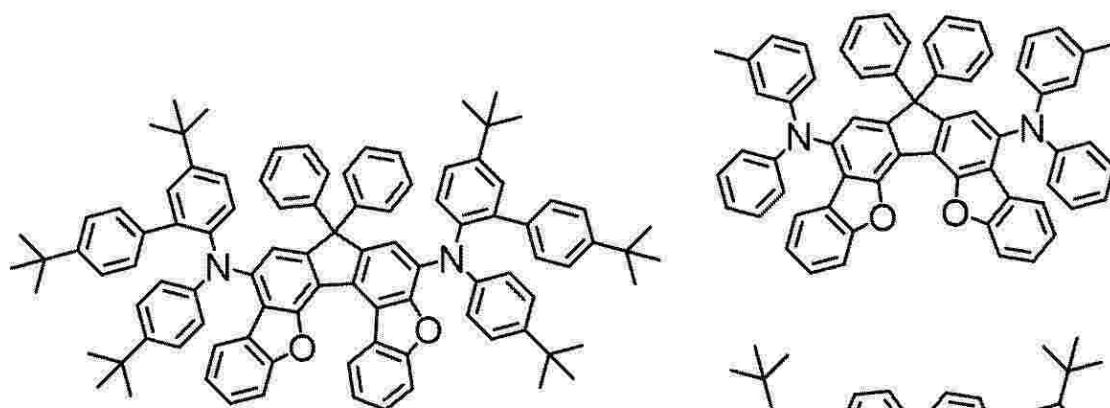
40

50

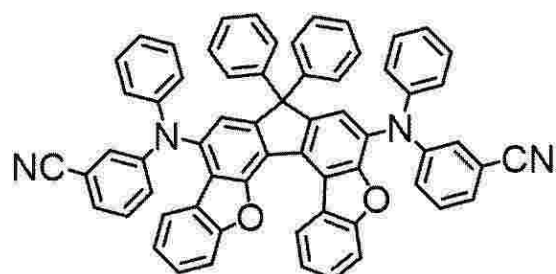
【化 2 4 0】



10

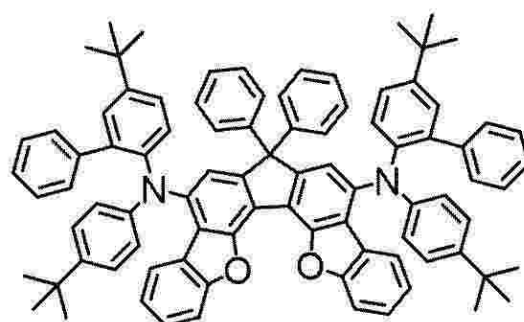


20



30

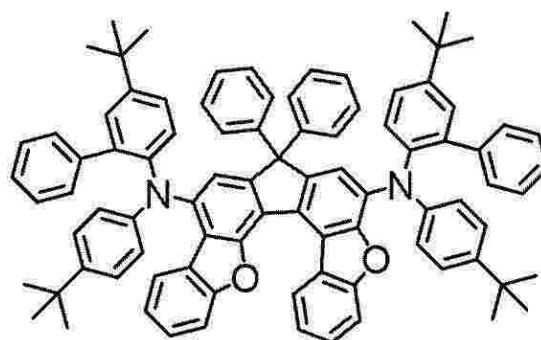
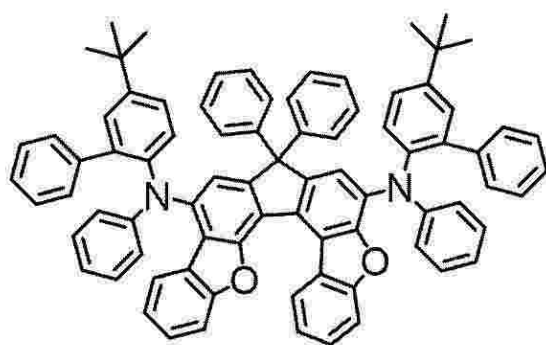
【 0 6 2 3】



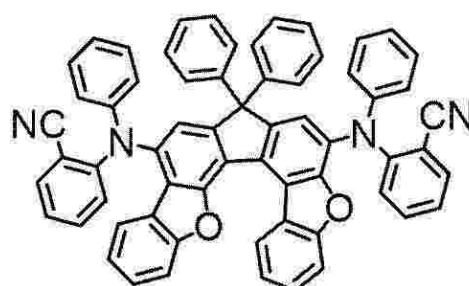
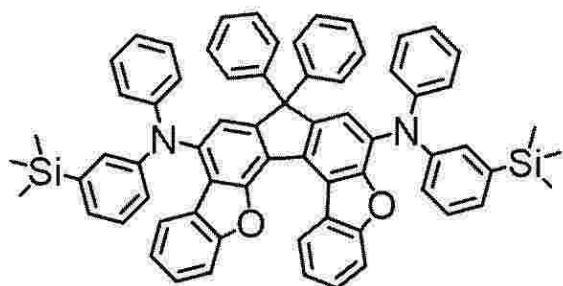
40

50

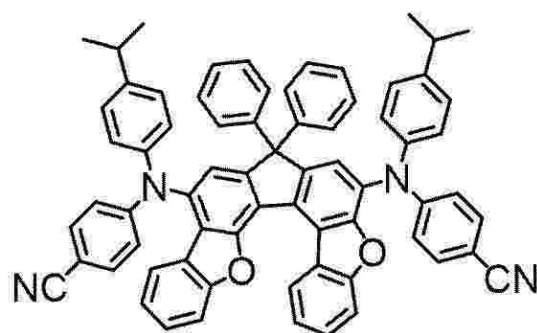
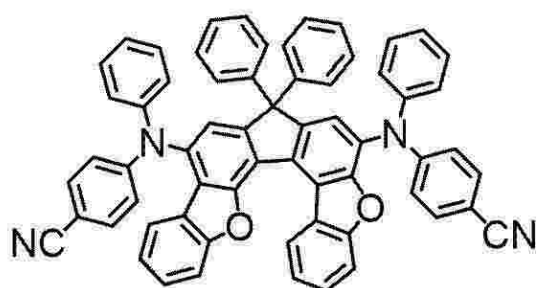
【化 2 4 1】



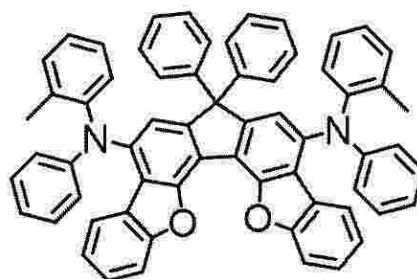
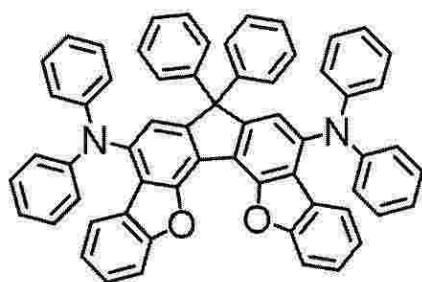
10



20



30

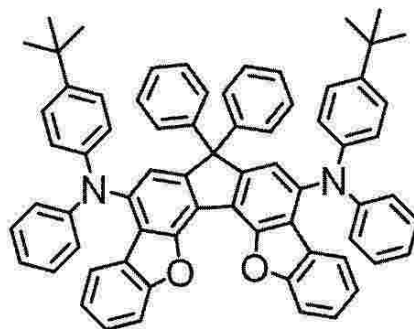
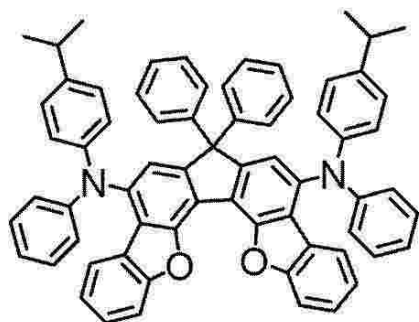


【 0 6 2 4】

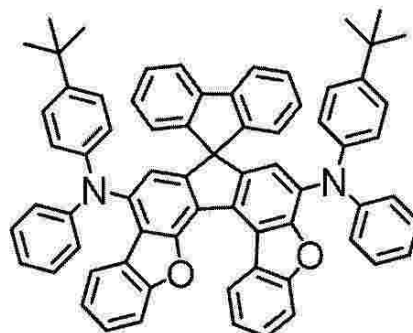
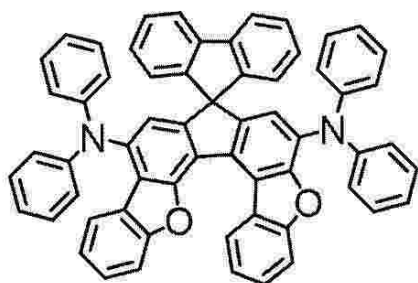
40

50

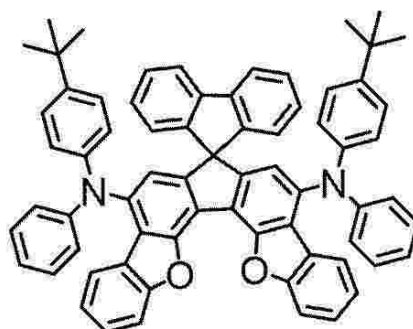
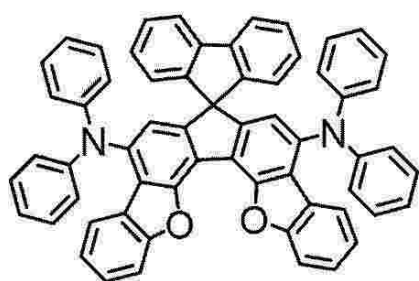
【化 2 4 2】



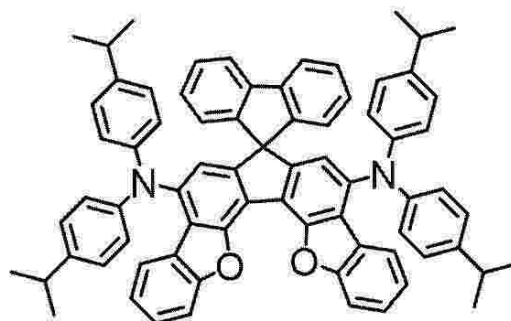
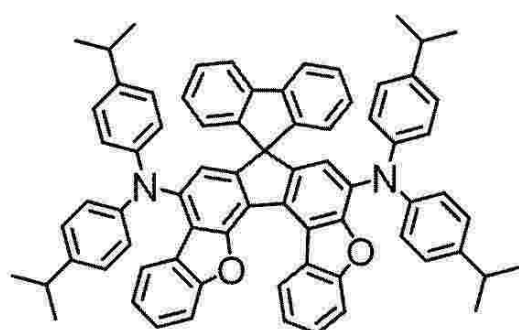
10



20



30



40

【 0 6 2 5】

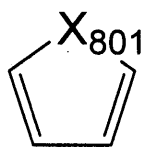
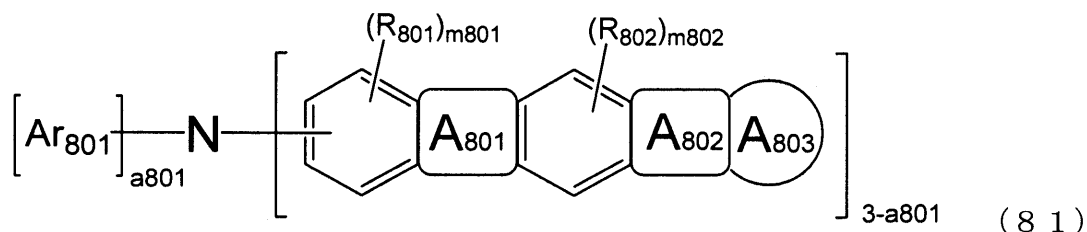
(一般式 (8 1) で表される化合物)

一般式 (8 1) で表される化合物について説明する。

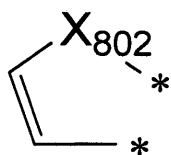
【 0 6 2 6】

50

【化 2 4 3】



(82)



(83)

【0627】

(一般式(81)において、

A₈₀₁環は、隣接環の任意の位置で縮合する一般式(82)で表される環である。

A₈₀₂環は、隣接環の任意の位置で縮合する一般式(83)で表される環である。2つの*はA₈₀₃環の任意の位置と結合する。

X₈₀₁及びX₈₀₂は、それぞれ独立に、C(R₈₀₃)(R₈₀₄)、Si(R₈₀₅)(R₈₀₆)、酸素原子又は硫黄原子である。

A₈₀₃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の複素環である。

Ar₈₀₁は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

R₈₀₁～R₈₀₆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)、

—O—(R₉₀₄)、

—S—(R₉₀₅)、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、前記一般式(11)におけるR₉₀₁～R₉₀₇と同義である。

m₈₀₁及びm₈₀₂は、それぞれ独立に、0～2の整数である。これらが2の場合、複数のR₈₀₁又はR₈₀₂は互いに同一であってもよいし、異なってもよい。

a₈₀₁は0～2の整数である。a₈₀₁が0又は1の場合、「3—a₈₀₁」で示されるカッコ内の構造は互いに同一であってもよいし、異なってもよい。a₈₀₁が2の場合、Ar₈₀₁は互いに同一であってもよいし、異なってもよい。)

【0628】

10

20

30

40

50

一実施形態において、 Ar_{801} 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。

【0629】

一実施形態において、環 A_{803} 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。

【0630】

一実施形態において、 R_{803} 及び R_{804} 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。

【0631】

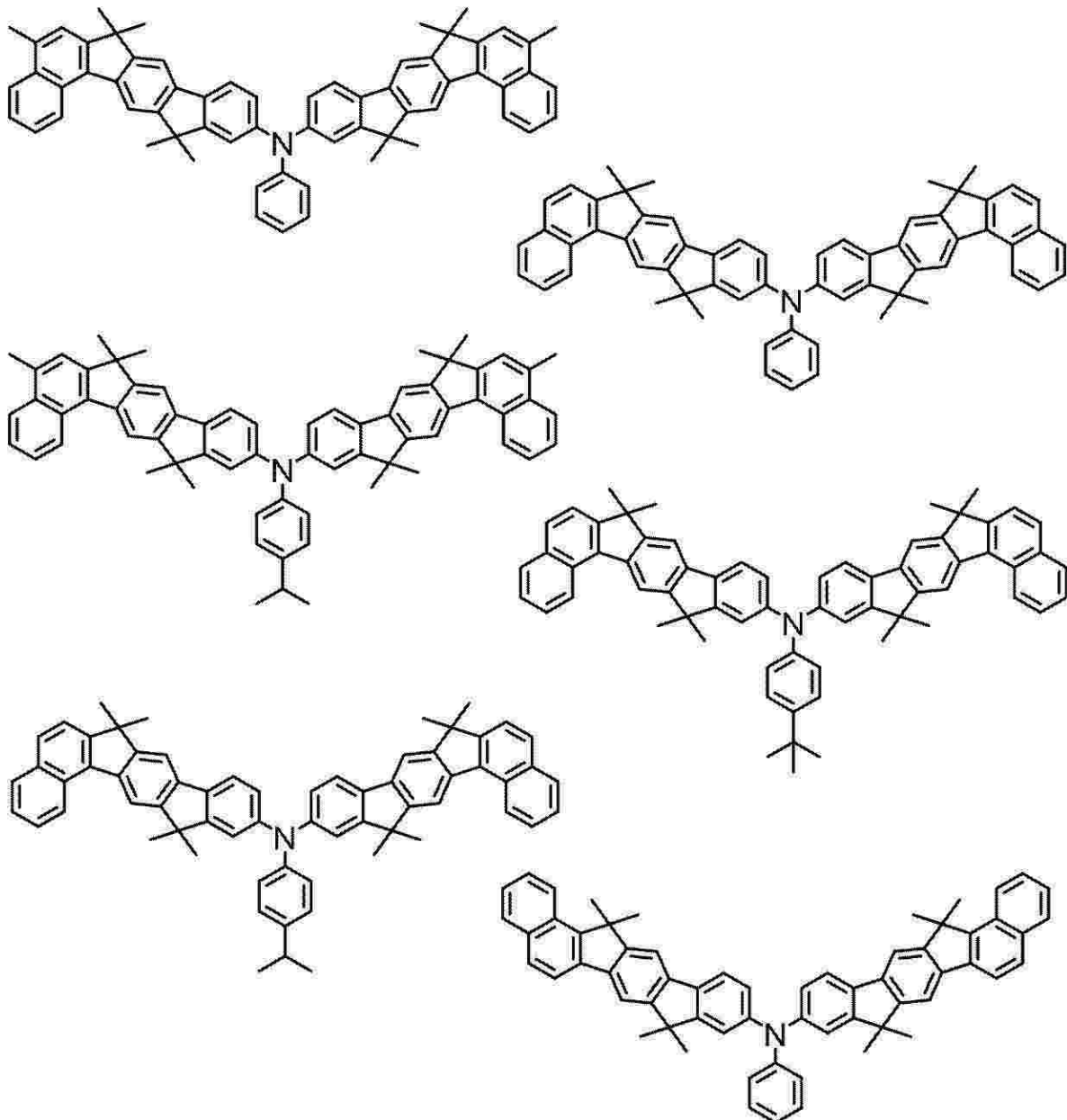
一実施形態において、 a_{801} は1である。

【0632】

前記一般式(81)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。

【0633】

【化244】



【0634】

一実施形態においては、前記発光層が、

前記一般式（１）で表される化合物と、

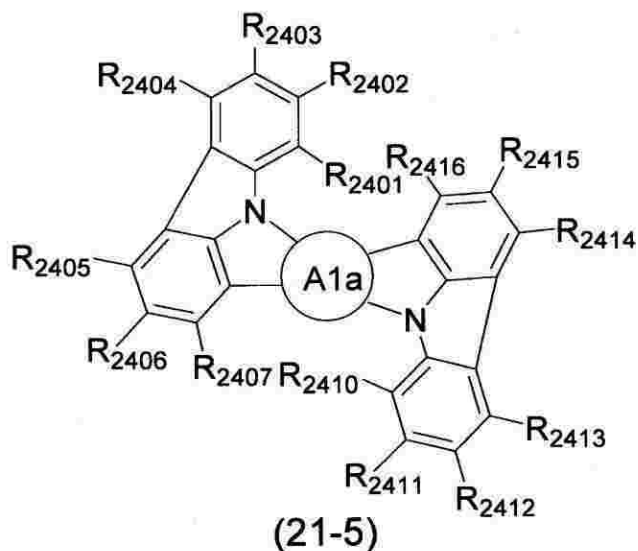
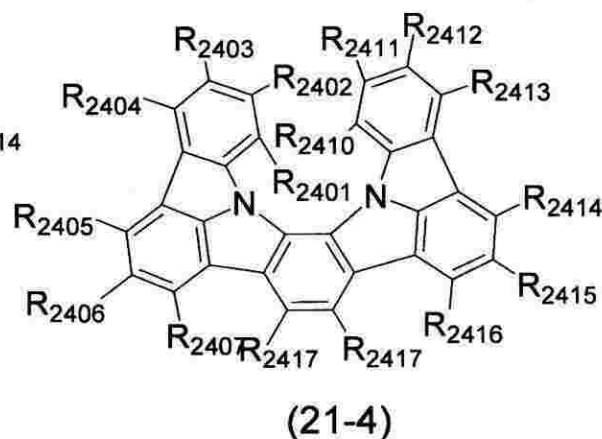
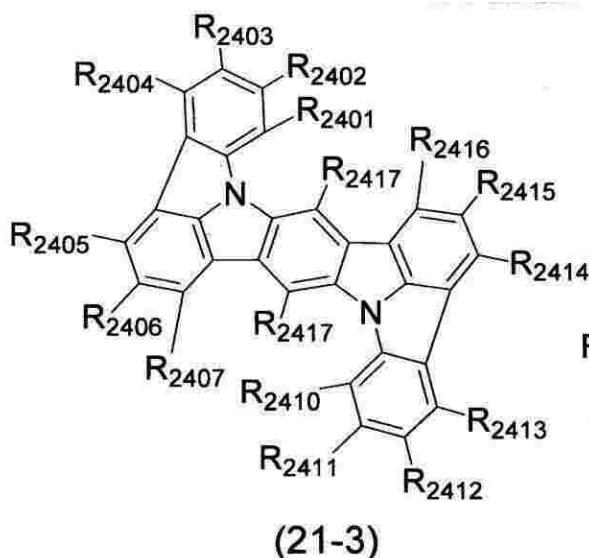
前記一般式（１０）で表される化合物、前記一般式（１１）で表される化合物、前記一般式（２１）で表される化合物、前記一般式（３１）で表される化合物、前記一般式（４１）で表される化合物、前記一般式（５１）で表される化合物、前記一般式（６１）で表される化合物及び前記一般式（８１）で表される化合物からなる群から選択される１以上の化合物と、を含有する。

【０６３５】

一実施形態においては、前記一般式（２１）で表される化合物が、下記一般式（２１－３）、一般式（２１－４）又は一般式（２１－５）で表される化合物である。

【０６３６】

【化２４５】



【０６３７】

（一般式（２１－３）、一般式（２１－４）及び一般式（２１－５）中、

A1a環は、置換もしくは無置換の環形成炭素数１０～５０の縮合芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数８～５０の縮合複素環である。

R2401～R2407及びR2410～R2416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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

R₂₄₁₇、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R₂₄₀₁～R₂₄₀₇及びR₂₄₁₀～R₂₄₁₆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)、

—O—(R₉₀₄)、

—S—(R₉₀₅)、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、前記一般式(11)におけるR₉₀₁～R₉₀₇と同義である。)

【0638】

一実施形態においては、前記一般式(21-1)～(21-3)における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合芳香族炭化水素環が、置換もしくは無置換のナフタレン環、置換もしくは無置換のアントラセン環、又は置換もしくは無置換のフルオレン環であり、前記置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環が、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

【0639】

一実施形態においては、前記一般式(21-1)～(21-3)における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合芳香族炭化水素環が、置換もしくは無置換のナフタレン環、又は置換もしくは無置換のフルオレン環であり、前記置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環が、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

【0640】

一実施形態においては、前記一般式(21)で表される化合物が、下記一般式(21-6-1)で表される化合物、下記一般式(21-6-2)で表される化合物、下記一般式(21-6-3)で表される化合物、下記一般式(21-6-4)で表される化合物、下記一般式(21-6-5)で表される化合物、下記一般式(21-6-6)で表される化合物、及び下記一般式(21-6-7)で表される化合物からなる群から選択される。

【0641】

10

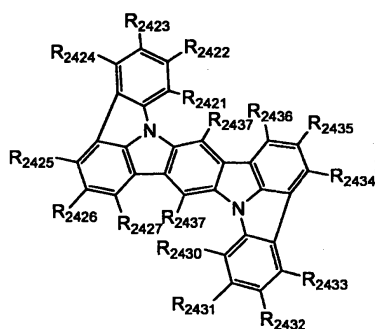
20

30

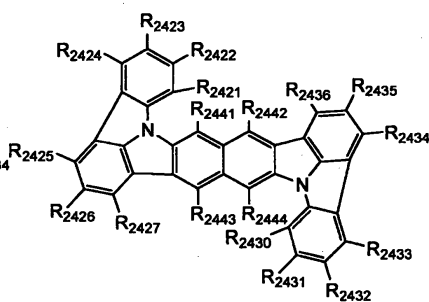
40

50

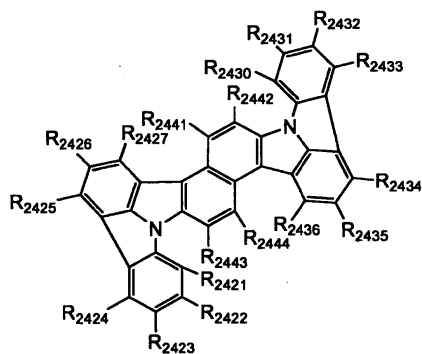
【化 2 4 6】



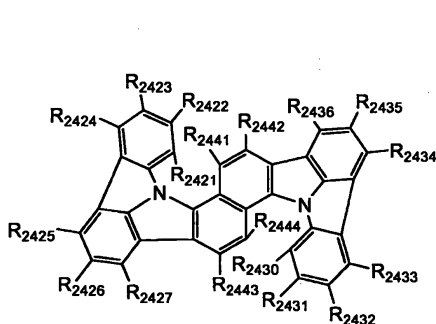
(21-6-1)



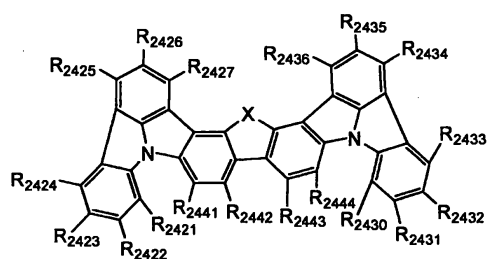
(21-6-2)



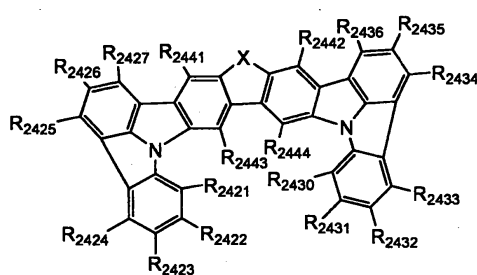
(21-6-3)



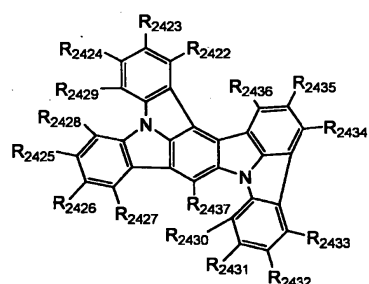
(21-6-4)



(21-6-5)



(21-6-6)



(21-6-7)

【0 6 4 2】

(一般式 (21-6-1) ~ (21-6-7) 中、

R2421~R2427、R2430~R2436及びR2441~R2444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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

R2437、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R2421~R2427、R2430~R2436及びR2441~R2444は、それぞれ独立に、

水素原子、

10

20

30

40

50

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 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)、
 - O - (R₉₀₄)、
 - S - (R₉₀₅)、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

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

10

X は、O、NR₉₀₁、又は C (R₉₀₂) (R₉₀₃) である。

R₉₀₁ ～ R₉₀₃ は、それぞれ独立に、前記一般式 (11) における R₉₀₁ ～ R₉₀₃ と同義である。)

【0643】

一実施形態においては、R₂₄₀₁ ～ R₂₄₀₇ 及び R₂₄₁₀ ～ R₂₄₁₇ 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。

20

【0644】

一実施形態においては、R₂₄₀₁ ～ R₂₄₀₇ 及び R₂₄₁₀ ～ R₂₄₁₇ 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。

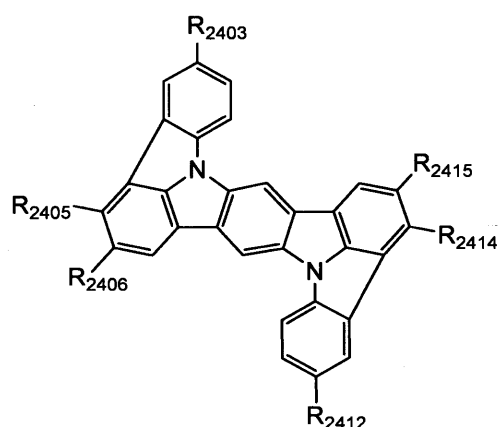
【0645】

一実施形態においては、前記一般式 (21-3) で表される化合物が、下記一般式 (21-3-1) で表される化合物である。

【0646】

30

【化247】



40

(21-3-1)

【0647】

(一般式 (21-3-1) 中、R₂₄₀₃、R₂₄₀₅、R₂₄₀₆、R₂₄₁₂、R₂₄₁₄ 及び R₂₄₁₅ は、それぞれ独立に、前記一般式 (21-3) における R₂₄₀₃、R₂₄₀₅、R₂₄₀₆、R₂₄₁₂、R₂₄₁₄ 及び R₂₄₁₅ と同義である。)

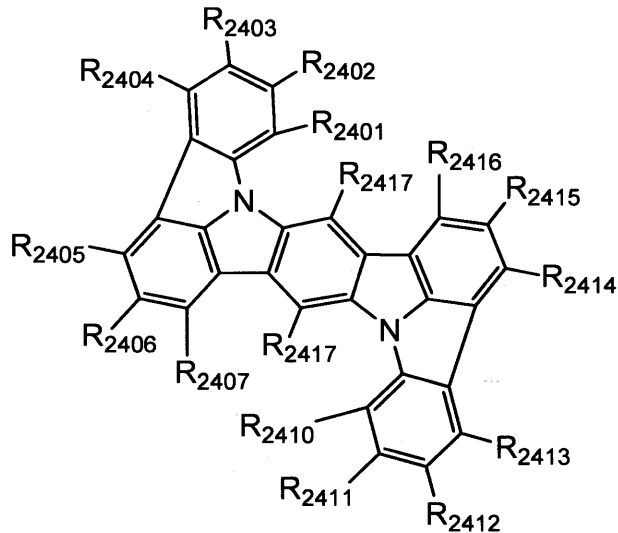
【0648】

50

一実施形態においては、前記一般式（21-3）で表される化合物が、下記一般式（21-3-2）で表される化合物である。

【0649】

【化248】



(21-3-2)

【0650】

（一般式（21-3-2）中、R₂₄₀₁～R₂₄₀₇及びR₂₄₁₀～R₂₄₁₇は、それぞれ独立に、前記一般式（21-3）におけるR₂₄₀₁～R₂₄₀₇及びR₂₄₁₀～R₂₄₁₇と同義である。）

但し、R₂₄₀₁～R₂₄₀₇及びR₂₄₁₀～R₂₄₁₆の少なくとも1つは-N（R₉₀₆）（R₉₀₇）である。

R₉₀₆及びR₉₀₇は、それぞれ独立に、前記一般式（11）におけるR₉₀₆及びR₉₀₇と同義である。）

【0651】

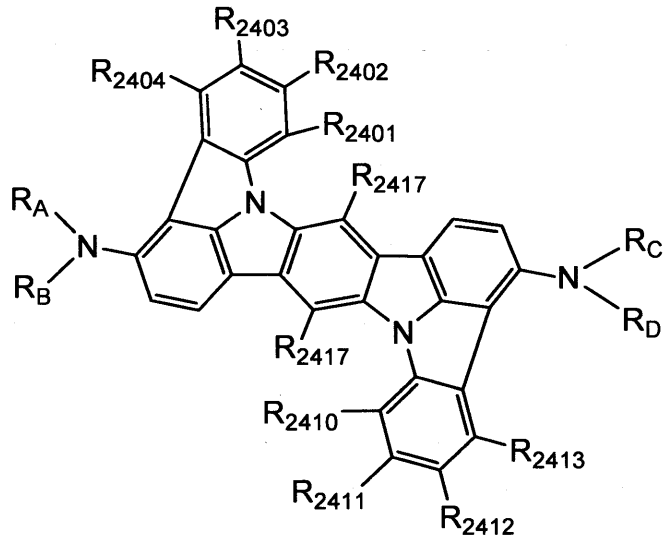
一実施形態においては、前記一般式（21-3-2）における、R₂₄₀₁～R₂₄₀₇及びR₂₄₁₀～R₂₄₁₆のいずれか2つが-N（R₉₀₆）（R₉₀₇）である（R₉₀₆及びR₉₀₇は、それぞれ独立に、前記一般式（11）におけるR₉₀₆及びR₉₀₇と同義である。）。

【0652】

一実施形態においては、前記一般式（21-3-2）で表される化合物が、下記一般式（21-3-3）で表される化合物である。

【0653】

【化 2 4 9】



(21-3-3)

【0 6 5 4】

(一般式 (21-3-3) 中、 $R_{2401} \sim R_{2404}$ 、 $R_{2410} \sim R_{2413}$ 及び R_{2417} は、それぞれ独立に、前記一般式 (21-3) における $R_{2401} \sim R_{2404}$ 、 $R_{2410} \sim R_{2413}$ 及び R_{2417} と同義である。

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

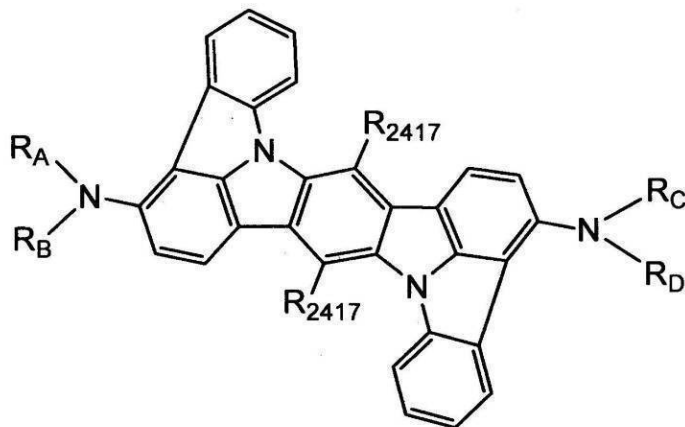
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 18 の 1 価の複素環基である。)

【0 6 5 5】

一実施形態においては、前記一般式 (21-3-3) で表される化合物が、下記一般式 (21-3-4) で表される化合物である。

【0 6 5 6】

【化 2 5 0】



(21-3-4)

【0 6 5 7】

(前記一般式 (21-3-4) 中、 R_{2417} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、前記一般式 (21-3-3) における R_{2417} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D と同義である。)

【0 6 5 8】

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。

【0659】

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。

【0660】

一実施形態においては、前記2つの R_{2417} が、それぞれ水素原子である。

【0661】

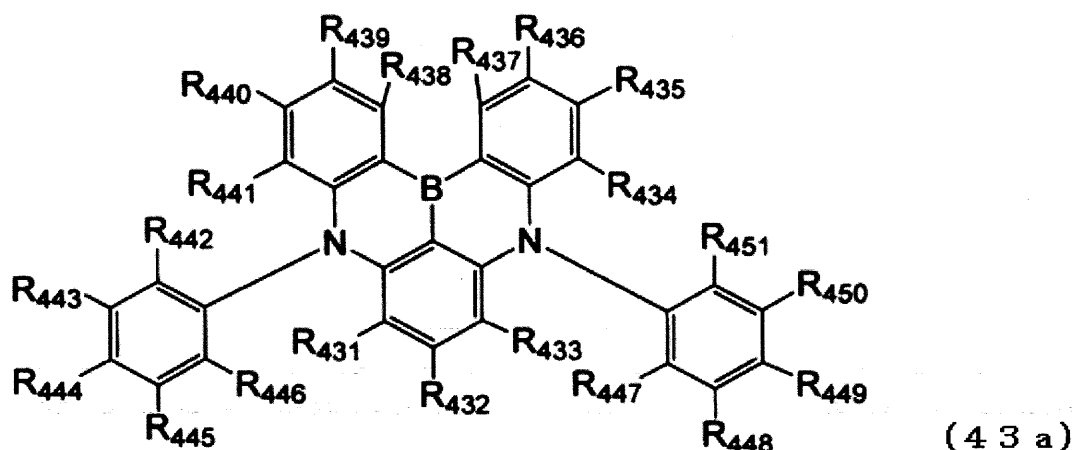
一実施形態においては、前記発光層が、

前記一般式(1)で表される化合物と、

前記一般式(10)で表される化合物、前記一般式(21)で表される化合物、前記一般式(31)で表される化合物、前記一般式(51)で表される化合物、前記一般式(61)で表される化合物、前記一般式(71)で表される化合物及び下記一般式(43a)で表される化合物からなる群から選択される1以上の化合物と、含有する。

【0662】

【化251】



【0663】

(前記一般式(43a)において、

R_{431} は、 R_{446} 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。 R_{433} は、 R_{447} 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。 R_{434} は、 R_{451} 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。 R_{441} は、 R_{442} 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。

$R_{431} \sim R_{451}$ 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、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合しない。

前記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 $R_{431} \sim R_{451}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

—O—(R_{904})、

10

20

30

40

50

－S－(R₉₀₅)、

－N(R₉₀₆)(R₉₀₇)、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、前記一般式(11)におけるR₉₀₁～R₉₀₇と同義である。但し、前記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R₄₃₁～R₄₅₁のうちの少なくとも1つは、

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)、

－O－(R₉₀₄)、

－S－(R₉₀₅)、

－N(R₉₀₆)(R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。)

【0664】

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。

【0665】

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。

【0666】

本実施形態に係る有機EL素子において、前記発光層は、蛍光発光性の化合物M1をさらに含有し、前記化合物M1は、主ピーク波長が430nm以上480nm以下の発光を示す化合物であることが好ましい。

【0667】

化合物の主ピーク波長の測定方法は、次の通りである。測定対象となる化合物の 10^{-6} mol/L以上 10^{-5} mol/L以下のトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温(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。

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主ピーク波長とする。なお、本明細書において、主ピーク波長を蛍光発光主ピーク波長(F L - p e a k)と称する場合がある。

【0668】

本実施形態に係る有機EL素子において、発光層が化合物M2(前記一般式(1)で表される化合物)及び蛍光発光性の化合物M1を含む場合、化合物M2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、化合物M1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。

【0669】

本実施形態に係る有機EL素子において、発光層が化合物M2（前記一般式（1）で表される化合物）及び蛍光発光性の化合物M1を含む場合、前記化合物M2の一重項エネルギー S_1 （M2）と、前記化合物M1の一重項エネルギー S_1 （M1）とが、下記数式（数1）の関係を満たすことが好ましい。

一重項エネルギー S_1 とは、最低励起一重項状態と基底状態とのエネルギー差を意味する。

$$S_1(M2) > S_1(M1) \quad \dots (数1)$$

10

【0670】

（一重項エネルギー S_1 ）

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

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

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

20

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

【0671】

吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ（つまり縦軸の値が減少するにつれ）、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側（ただし、吸光度が0.1以下となる場合は除く）で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

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

30

【0672】

発光層は、燐光発光性材料（ドーパント材料）を含まないことが好ましい。

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

また、発光層は、金属錯体を含まないことも好ましい。

【0673】

（発光層の膜厚）

本実施形態に係る有機EL素子の発光層の膜厚は、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。

40

【0674】

（発光層における化合物の含有率）

発光層が、化合物M2（前記一般式（1）で表される化合物）、及び蛍光発光性の化合物M1を含有する場合、発光層における化合物M2及び化合物M1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。

化合物M2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

50

ることがさらに好ましい。

化合物M1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、発光層における化合物M2及び化合物M1の合計含有率の上限は、100質量%である。

【0675】

なお、本実施形態は、発光層に、化合物M2及び化合物M1以外の材料が含まれることを除外しない。

発光層は、化合物M2を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。発光層は、化合物M1を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

【0676】

有機EL素子1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。

【0677】

(基板)

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

【0678】

(陽極)

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

【0679】

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

【0680】

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。

【0681】

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

10

20

30

40

50

ちリチウム (Li) やセシウム (Cs) 等のアルカリ金属、およびマグネシウム (Mg)、カルシウム (Ca)、ストロンチウム (Sr) 等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金 (例えば、MgAg、AlLi)、ユーロピウム (Eu)、イッテルビウム (Yb) 等の希土類金属およびこれらを含む合金等を用いることもできる。なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、およびこれらを含む合金を用いて陽極を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。さらに、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

【0682】

(陰極)

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

【0683】

なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、これらを含む合金を用いて陰極を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。また、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

【0684】

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

【0685】

(正孔注入層)

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

【0686】

また、正孔注入性の高い物質としては、低分子の有機化合物である4,4',4''-トリス (N,N-ジフェニルアミノ) トリフェニルアミン (略称: TDATA)、4,4',4''-トリス [N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ] トリフェニルアミン (略称: MTDATA)、4,4'-ビス [N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: DPAB)、4,4'-ビス (N-{4-[N'-(3-メチルフェニル)-N'-フェニルアミノ] フェニル}-N-フェニルアミノ) ビフェニル (略称: DNTPD)、1,3,5-トリス [N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ] ベンゼン (略称: DPA3B)、3-[N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール (略称: PCzPCA1)、3,6-ビス [N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール (略称: PCzPCA2)、3-[N-(1-ナフチル)-N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル) アミノ]-9-フェニルカルバゾール (略称: PCzPCN1) 等の芳香族アミン化合物等やジピラジノ [2,3-f:2',3'-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。

【0687】

また、正孔注入性の高い物質としては、高分子化合物 (オリゴマー、デンドリマー、ポリマー等) を用いることもできる。例えば、ポリ (N-ビニルカルバゾール) (略称: P

10

20

30

40

50

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

【0688】

(正孔輸送層)

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層には、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用する事ができる。具体的には、4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:NPB)やN,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ジフェニル-[1,1'-ビフェニル]-4,4'-ジアミン(略称:TPD)、4-フェニル-4'-(9-フェニルフルオレン-9-イル)トリフェニルアミン(略称:BAFLP)、4,4'-ビス[N-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:DFLDPBi)、4,4',4''-トリス(N,N'-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン(略称:TDATA)、4,4',4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称:MTDATA)、4,4'-ビス[N-(スピロ-9,9'-ビフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:BSPB)などの芳香族アミン化合物等を用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の正孔移動度を有する物質である。

【0689】

正孔輸送層には、CBP、9-[4-(N-カルバゾリル)]フェニル-10-フェニルアントラセン(CzPA)、9-フェニル-3-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(PCzPA)のようなカルバゾール誘導体や、t-BuDNA、DNA、DPAnthのようなアントラセン誘導体を用いても良い。ポリ(N-ビニルカルバゾール)(略称:PVK)やポリ(4-ビニルトリフェニルアミン)(略称:PVTPA)等の高分子化合物を用いることもできる。

【0690】

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。

【0691】

(電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層には、1)アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、2)イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、3)高分子化合物を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、Alq、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(略称:Almq₃)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(略称:BeBq₂)、BALq、Znq、ZnPBO、ZnBTZなどの金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、2-(4-ビフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称:PBD)、1,3-ビス[5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称:OXD-7)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称:TAZ)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-(4-エチルフェニル)-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称:p-EtTAZ)、バソフェナントロリン(略称:BPhen)、バソキュプロイン(略称:BCP)、4,4'-ビス(5-メチルベンゾオキサゾー

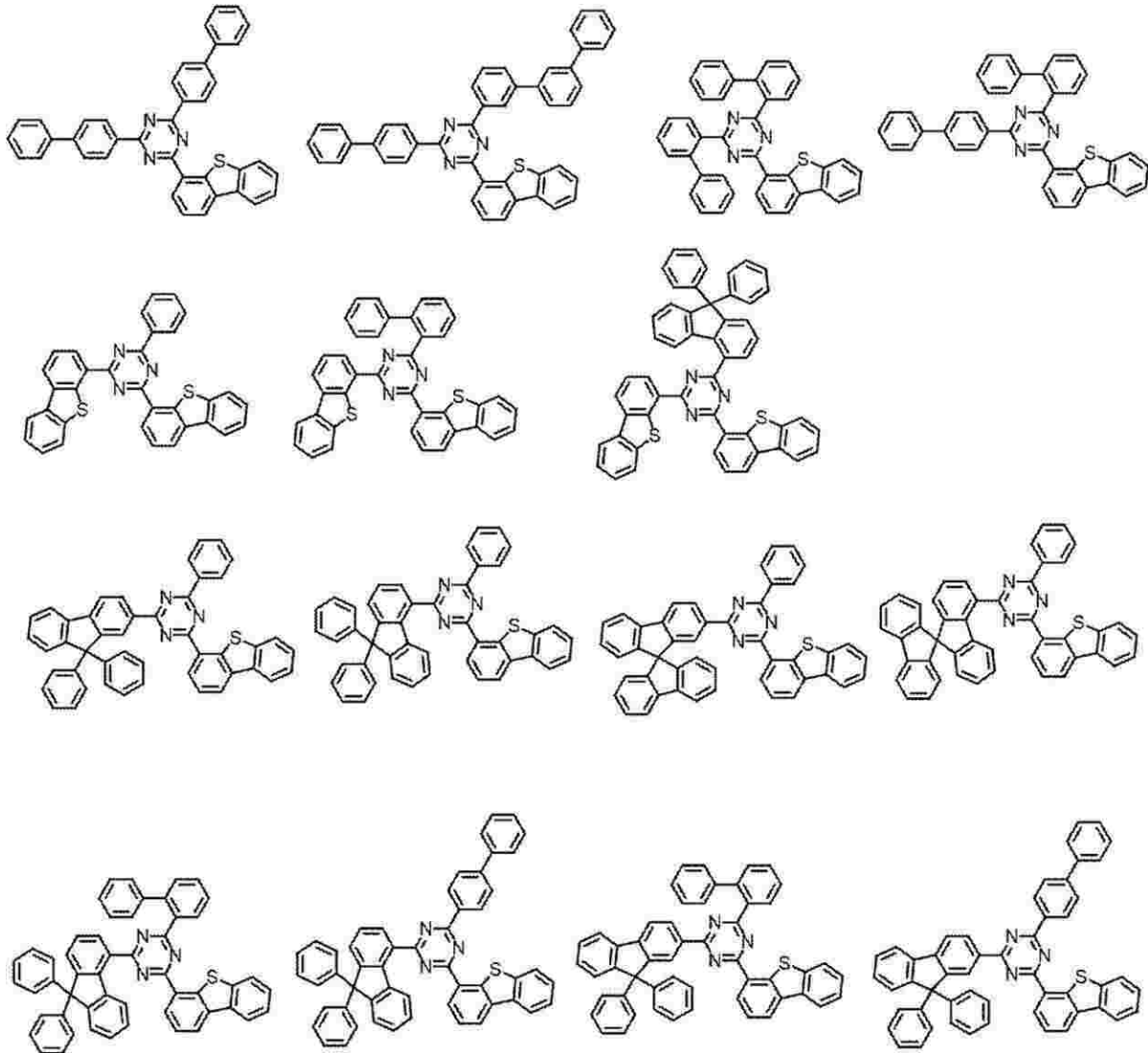
ルー２－イル) スチルベン (略称: BzOs) などの複素芳香族化合物も用いることができる。本実施態様においては、ベンゾイミダゾール化合物を好適に用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層で構成されていてもよいし、上記物質からなる層が二層以上積層されて構成されていてもよい。

【0692】

電子輸送層に用い得る化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物挙げられる。ただし、本発明は、これら化合物の具体例に限定されない。

【0693】

【化252】



【0694】

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

【0695】

(電子注入層)

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層には、リチウム(L

10

20

30

40

50

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

【0696】

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

【0697】

(層形成方法)

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

【0698】

(膜厚)

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

【0699】

第三実施形態によれば、寿命を長くすることができる有機エレクトロルミネッセンス素子を提供できる。

【0700】

(第四実施形態)

第四実施形態の有機EL素子の構成について説明する。第四実施形態の説明において第三実施形態と同一の構成要素は、同一符号や名称を付す等して説明を省略もしくは簡略化する。また、第四実施形態では、特に言及されない材料や化合物については、第一実施形態から第三実施形態で説明した材料や化合物と同様の材料や化合物を用いることができる。

【0701】

第四実施形態の有機EL素子は、発光層を2層有する点で、第三実施形態の有機EL素子と異なる。その他の点については第三実施形態と同様である。

【0702】

2層の発光層を有する有機EL素子の一態様として、例えば、次の有機EL素子が挙げられる。

陽極と、

陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された第一の発光層と、

前記第一の発光層と前記陰極との間に配置された第二の発光層と、を有し、

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。

【0703】

第一の発光層及び第二の発光層のうち少なくとも一方の発光層は、ホスト材料として、化合物M2（前記一般式（1）で表される化合物）を含む。

【0704】

第一の発光層及び第二の発光層のうち少なくとも一方の発光層は、化合物M2と、さらに蛍光発光性の化合物M1とを含むことが好ましい。

化合物M2を含まない発光層は、蛍光発光型の発光層であっても、三重項励起状態から直接基底状態への電子遷移による発光を利用した燐光発光型の発光層であってもよい。

例えば、第一の発光層及び第二の発光層のうち一方の発光層が、ホスト材料としての化合物M2と、蛍光発光性の化合物M1とを含む場合、他方の発光層に含まれるホスト材料及び発光材料は、特に限定されない。

ホスト材料としては、化合物M2（前記一般式（1）で表される化合物）の他、例えば、1）アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、若しくは亜鉛錯体等の金属錯体、2）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、3）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。

発光材料としては、蛍光発光性の化合物M1の他、例えば、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、トリアリールアミン誘導体、芳香族アミン誘導体、及びテトラセン誘導体等が挙げられる。

【0705】

図2に、第四実施形態に係る有機EL素子の一例の概略構成を示す。

有機EL素子1Aは、透光性の基板2と、陽極3と、陰極4と、陽極3と陰極4との間に配置された有機層10Aと、を含む。有機層10Aは、陽極3側から順に、正孔注入層6、正孔輸送層7、第一の発光層51、第二の発光層52、電子輸送層8、及び電子注入層9が、この順番で積層されて構成される。第一の発光層51と第二の発光層52とが、直接、接している。

第四実施形態によれば、寿命を長くすることができる有機エレクトロルミネッセンス素子を提供できる。

第四実施形態に係る有機EL素子においては、第一の発光層と、第二の発光層とが、直接、接している。第一の発光層と第二の発光層とをこのように積層させることで、生成した一重項励起子及び三重項励起子を有効に活用でき、その結果、有機EL素子の発光効率を向上させることができる。

【0706】

〔第五実施形態〕

〔電子機器〕

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

【0707】

〔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。

【0708】

例えば、発光層は、1層又は2層に限られず、2を超える複数の発光層が積層されていてもよい。有機EL素子が2を超える複数の発光層を有する場合、少なくとも1つの発光

10

20

30

40

50

層が化合物 M 2（前記一般式（1）で表される化合物）を含有していればよい。例えば、その他の発光層が、蛍光発光型の発光層であっても、三重項励起状態から直接基底状態への電子遷移による発光を利用した燐光発光型の発光層であってもよい。

また、有機 E L 素子が複数の発光層を有する場合、これらの発光層が互いに隣接して設けられていてもよいし、中間層を介して複数の発光ユニットが積層された、いわゆるタンデム型の有機 E L 素子であってもよい。

【0709】

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

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

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

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

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

【0710】

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】

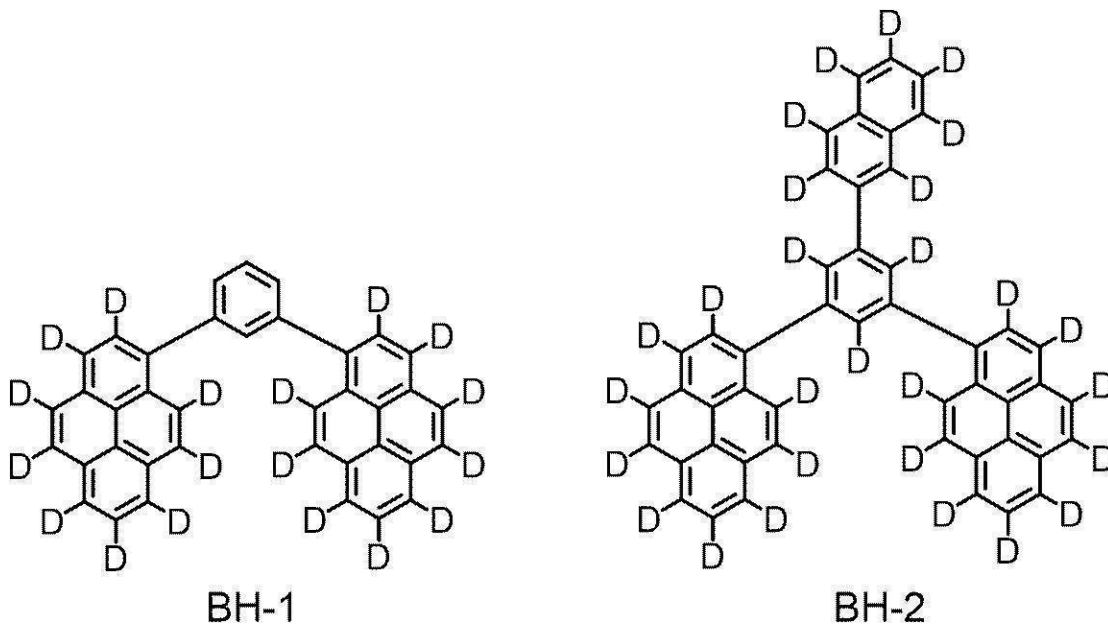
【0711】

<化合物>

実施例 1～2 に係る一般式（1）で表される化合物の構造を以下に示す。

【0712】

【化 253】



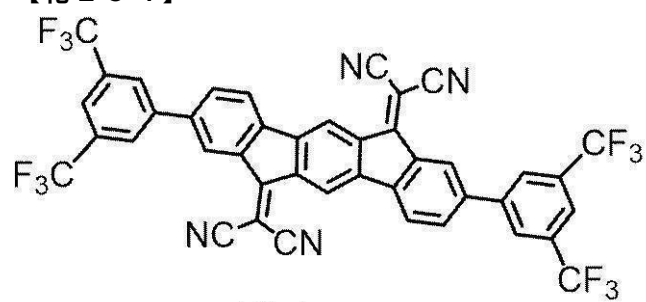
【0713】

実施例 1～2 及び比較例 1～4 に係る有機 E L 素子の製造に用いた、他の化合物の構造

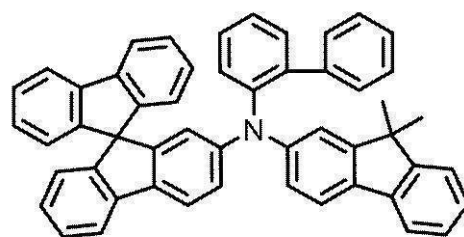
を以下に示す。

【0714】

【化254】



HI-1

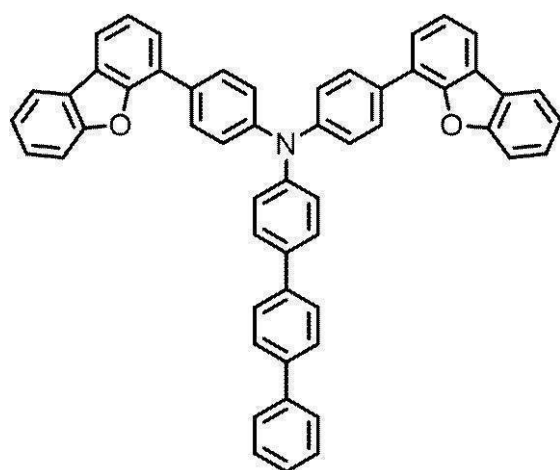


HT-1

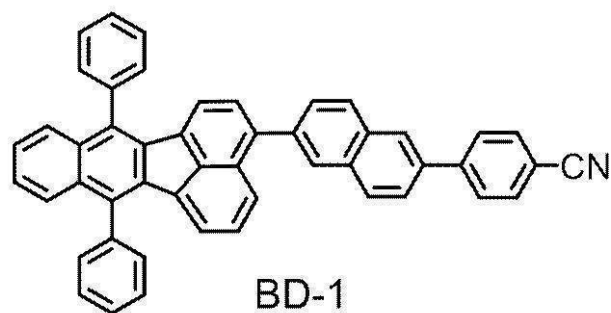
10

【0715】

【化255】



EBL-1



BD-1

20

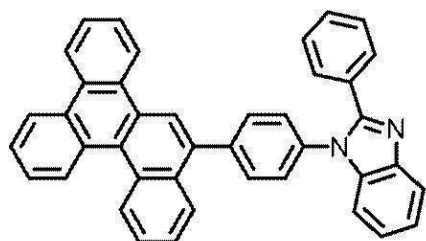
【0716】

30

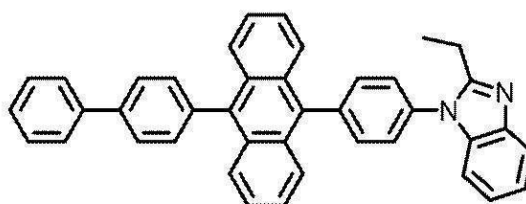
40

50

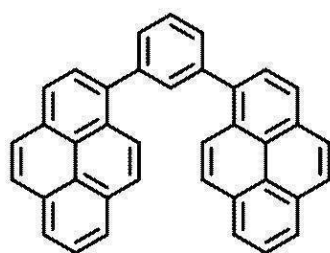
【化 2 5 6】



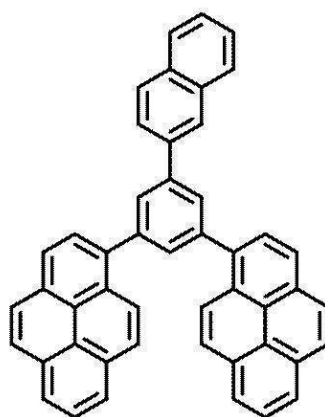
HBL-1



BH-3



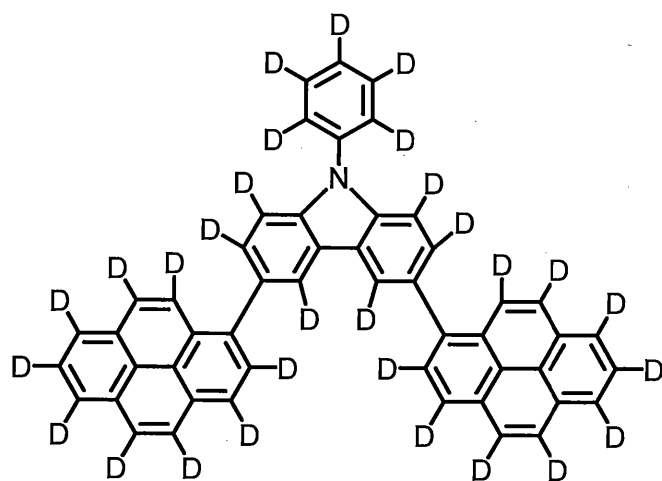
Com.BH-A



Com.BH-B

【 0 7 1 7】

【化 2 5 7】



Com.BH-C

【 0 7 1 8】

10

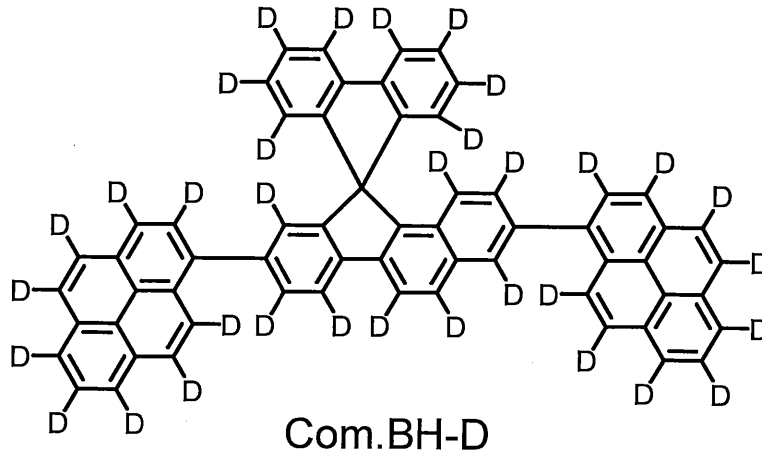
20

30

40

50

【化 2 5 8】



10

【 0 7 1 9】

<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。

【 0 7 2 0】

〔実施例1〕

20

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HI-1を蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層（HI）を形成した。

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

30

第二の正孔輸送層上に化合物BH-1（ホスト材料（BH））及び化合物BD-1（ドープアント材料（BD））を、化合物BD-1の割合が4質量%となるように共蒸着し、膜厚25nmの発光層を成膜した。

発光層上に化合物HBL-1を蒸着し、膜厚10nmの第1の電子輸送層（正孔障壁層ともいう）（HBL）を形成した。

第1の電子輸送層上に化合物ET-1を蒸着し、膜厚15nmの第2の電子輸送層（ET）を形成した。

第2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50nmの陰極を形成した。

40

実施例1の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HI-1(5)/HT-1(80)/EBL-1(10)/BH-1:BD-1(25,96%:4%)/HBL-1(10)/ET-1(15)/LiF(1)/Al(50)

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（96%：4%）は、発光層におけるホスト材料（化合物BH-1）及び化合物BD-1の割合（質量%）を示す。

【 0 7 2 1】

〔実施例2及び比較例1～2〕

実施例2及び比較例1～2の有機EL素子は、実施例1の発光層における化合物BH-1を表1に記載の化合物にそれぞれ置き換えたこと以外、実施例1と同様にして作製した。

50

【0722】

＜有機EL素子の評価1＞

実施例1～2及び比較例1～2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及び表2に示す。

【0723】

・寿命LT95

分光放射輝度計CS-200（コニカミノルタ株式会社製）を用いて、得られた有機EL素子に、電流密度が 50 mA/cm^2 となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が95%となるまでの時間（単位：h）を測定した。

以下では、初期輝度に対して輝度が95%となるまでの時間を「寿命LT95（h）」と称する。

下記数式（数1）を用いて、比較例1の「寿命LT95（h）」を100としたときの実施例1の「寿命LT95（h）」を「寿命LT95（相対値：%）」として求めた。

実施例1の寿命LT95（相対値：%）＝（実施例1の寿命LT95（h）／比較例1の寿命LT95（h））×100 （数1）

また、下記数式（数2）を用いて、比較例2の「寿命LT95（h）」を100としたときの実施例2の「寿命LT95（h）」を「寿命LT95（相対値：%）」として求めた。

実施例2の寿命LT95（相対値：%）＝（実施例2の寿命LT95（h）／比較例2の寿命LT95（h））×100 （数2）

【0724】

・素子駆動時の主ピーク波長 λ_p

有機EL素子の電流密度が 10 mA/cm^2 となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計CS-2000（コニカミノルタ株式会社製）で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、主ピーク波長 λ_p （単位：nm）を算出した。

【0725】

【表1】

	発光層			LT95 [相対値：%]	λ_p [nm]
	ホスト材料 (BH)	ドーパント 材料(BD)	膜厚 [nm]		
実施例1	BH-1	BD-1	25	129	455
比較例1	Com.BH-A	BD-1	25	100	455

【0726】

表1に示すとおり、「重水素原子を有する化合物BH-1」を発光層に含む実施例1の有機EL素子は、化合物BH-1を「重水素原子を有さない化合物Com.BH-A」に置き換えた比較例1の有機EL素子に比べて、寿命が長くなった。

【0727】

【表2】

	発光層			LT95 [相対値：%]	λ_p [nm]
	ホスト材料 (BH)	ドーパント 材料(BD)	膜厚 [nm]		
実施例2	BH-2	BD-1	25	132	455
比較例2	Com.BH-B	BD-1	25	100	455

【0728】

表2に示すとおり、「重水素原子を有する化合物BH-2」を発光層に含む実施例2の有機EL素子は、化合物BH-2を「重水素原子を有さない化合物Com.BH-B」に置き換えた比較例2の有機EL素子に比べて、寿命が長くなった。

【0729】

<有機EL素子の作製2>

〔実施例1A〕

実施例1Aの有機EL素子は、表3に記載のとおり、実施例1の化合物BH-1の蒸着速度を $20 \text{ \AA} / \text{s}$ （オングストローム／秒）に変更して発光層を成膜したこと以外、実施例1と同様にして作製した。なお、実施例1の化合物BH-1の蒸着速度は $1 \text{ \AA} / \text{s}$ であった。

【0730】

〔比較例3～4〕

比較例3～4の有機EL素子は、実施例1Aの発光層における化合物BH-1を表3に記載の化合物にそれぞれ置き換えたこと以外、実施例1Aと同様にして作製した。

【0731】

<有機EL素子の評価2>

実施例1A及び比較例3～4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。

【0732】

・寿命LT95

実施例1と同様の方法で寿命LT95（h）を測定した。

下記数式（数3）を用いて、比較例4の「寿命LT95（h）」を100としたときの実施例1Aの「寿命LT95（h）」を「寿命LT95（相対値：%）」として求めた。また、下記数式（数3）中、実施例1Aを比較例3に置き換えて、比較例3の「寿命LT95（相対値：%）」も求めた。

実施例1Aの寿命LT95（相対値：%）＝（実施例1Aの寿命LT95（h）／比較例4の寿命LT95（h））×100（数3）

【0733】

・素子駆動時の主ピーク波長 λ_p

実施例1と同様の方法で最大ピーク波長 λ_p （単位：nm）を測定した。

【0734】

【表3】

	発光層				LT95 [相対値：%]	λ_p [nm]
	ホスト材料 (BH)	ドーパント 材料(BD)	蒸着速度 [$\text{\AA} / \text{s}$]	膜厚 [nm]		
実施例1A	BH-1	BD-1	20	25	145	455
比較例3	Com.BH-C	BD-1	20	25	115	457
比較例4	Com.BH-D	BD-1	20	25	100	457

【0735】

比較例3のように2つのピレン環の間に、連結基としてカルバゾリレン基を有するホスト材料を用いて発光層の蒸着速度を上げた場合、又は比較例4のように2つのピレン環の間に、環形成炭素数が多い連結基（ベンゾスピロフルオレン）を有するホスト材料を用いて発光層の蒸着速度を上げた場合、重水素化による長寿命化の効果が得られなかった。

一方、実施例1Aのように2つのピレン環の間に、環形成炭素数が少ない連結基を有するホスト材料を用いて発光層の蒸着速度を上げた場合、寿命が顕著に向上した。

【0736】

（トルエン溶液の調製）

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

【0737】

(蛍光発光主ピーク波長 (FL-peak) の測定)

蛍光スペクトル測定装置 (分光蛍光光度計F-7000 (株式会社日立ハイテクサイエンス製)) を用いて、化合物BD-1のトルエン溶液を390nmで励起した場合の蛍光発光主ピーク波長を測定した。

化合物BD-1の蛍光発光主ピーク波長は、442nmであった。

【符号の説明】

【0738】

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

10

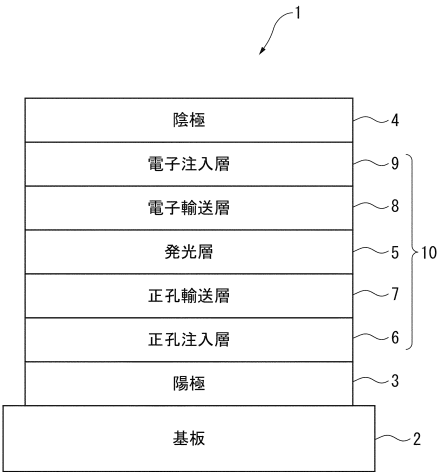
20

30

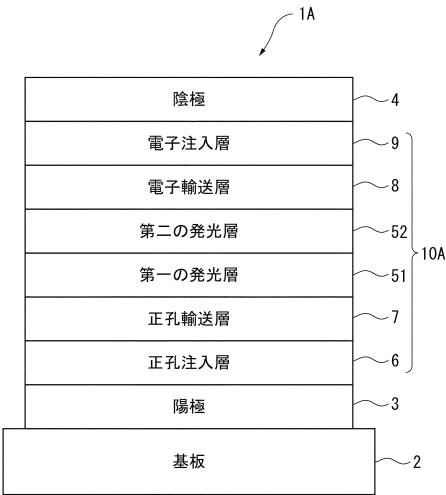
40

50

【図面】
【図 1】



【図 2】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

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 小森 潔

- (56)参考文献 中国特許出願公開第106565705 (CN, A)
国際公開第2005/005440 (WO, A1)
特開2019-161218 (JP, A)
特開2018-125504 (JP, A)
特開2017-123352 (JP, A)
国際公開第2014/003405 (WO, A1)
特開2006-140235 (JP, A)
国際公開第2007/029798 (WO, A1)
国際公開第2007/100010 (WO, A1)
国際公開第2004/018588 (WO, A1)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)
C07C
CAplus/REGISTRY (STN)