

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2022年9月1日(01.09.2022)



(10) 国際公開番号

WO 2022/181157 A1

(51) 国際特許分類:

C07D 239/26 (2006.01) C07D 405/04 (2006.01)
C07D 401/04 (2006.01) C07D 409/04 (2006.01)
C07D 401/10 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 403/04 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2022/002577

(22) 国際出願日: 2022年1月25日(25.01.2022)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:

特願 2021-029020 2021年2月25日(25.02.2021) JP
特願 2021-180251 2021年11月4日(04.11.2021) JP

(71) 出願人: 出光興産株式会社(IDEMITSU KOSAN CO.,LTD.) [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 吉田 圭(YOSHIDA, Kei); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).
齊藤 雅俊(SAITO, Masatoshi); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).
中村 雅人(NAKAMURA, Masato); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 水

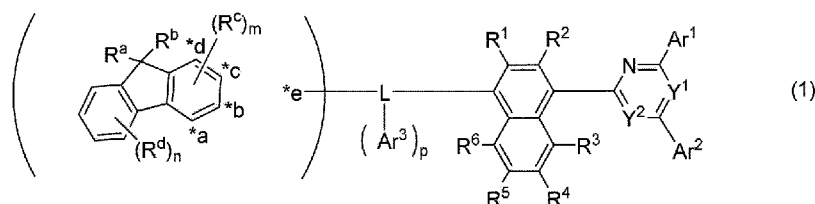
谷 清香(MIZUTANI, Sayaka); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).
三谷 真人(MITANI, Masato); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).
青山 嘉憲(AOYAMA, Yoshinori); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).
高橋 良多(TAKAHASHI, Ryota); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).

(74) 代理人: 弁理士法人大谷特許事務所(OHTANI PATENT OFFICE); 〒1050001 東京都港区虎ノ門三丁目25番2号 虎ノ門ESビル7階 Tokyo (JP).

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

(54) Title: COMPOUND, MATERIAL FOR ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENTS, ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, AND ELECTRONIC DEVICE

(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用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器



(57) Abstract: Provided are a compound that improves the performance of an organic EL element, an organic electroluminescent element having improved element performance, and an electronic device including such an organic electroluminescent element, the compound being represented by formula (1). (In formula (1), each of the symbols is as defined in the specification.) The organic electroluminescent element includes the compound. The electronic device includes such an organic electroluminescent element.

(57) 要約: 有機EL素子の性能をより改善する化合物、素子性能がより改善された有機エレクトロルミネッセンス素子、そのような有機エレクトロルミネッセンス素子を含む電子機器を提供するものであり、下記式(1)で表される化合物。(式(1)中の各記号は明細書において定義したとおり。)、該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子、及びそのような有機エレクトロルミネッセンス素子を含む電子機器。

ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG,
US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

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

添付公開書類:

- 一 国際調査報告 (条約第21条(3))

明 細 書

発明の名称：

化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器

技術分野

[0001] 本発明は、化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子及び該有機エレクトロルミネッセンス素子を含む電子機器に関する。

背景技術

[0002] 一般に有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、“有機ＥＬ素子”と記載することもある）は陽極、陰極、及び陽極と陰極に挟まれた有機層から構成されている。両電極間に電圧が印加されると、陰極側から電子、陽極側から正孔が発光領域に注入され、注入された電子と正孔は発光領域において再結合して励起状態を生成し、励起状態が基底状態に戻る際に光を放出する。従って、電子又は正孔を発光領域に効率よく輸送し、電子と正孔との再結合を容易にする材料の開発は高性能有機ＥＬ素子を得る上で重要である。

[0003] 特許文献１～１２には、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として使用する化合物が開示されている。

先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献１：国際公開第２０１６／１０５１４１号

特許文献２：国際公開第２０１５／１５２６３３号

特許文献３：国際公開第２０１７／１５７９８３号

特許文献４：国際公開第２０１８／２３６０４０号

特許文献５：韓国公開特許第１０－２０１８－００６３７０９公報

特許文献６：中国公開特許第１０９９５６８９７号公報

特許文献７：国際公開第２０２０／０８０７２０号

特許文献8：韓国公開特許第10-2019-135398公報

特許文献9：国際公開第2018/225940号

特許文献10：韓国公開特許第10-2013-135516公報

特許文献11：韓国公開特許第10-2019-97713公報

特許文献12：韓国公開特許第10-2017-136440公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0005] 従来、多くの有機EL素子用の化合物が報告されているが、有機EL素子の性能を更に向上させる化合物が依然として求められている。

[0006] 本発明は、前記の課題を解決するためになされたもので、有機EL素子の性能をより改善する化合物、素子性能がより改善された有機EL素子、そのような有機EL素子を含む電子機器を提供することを目的とする。

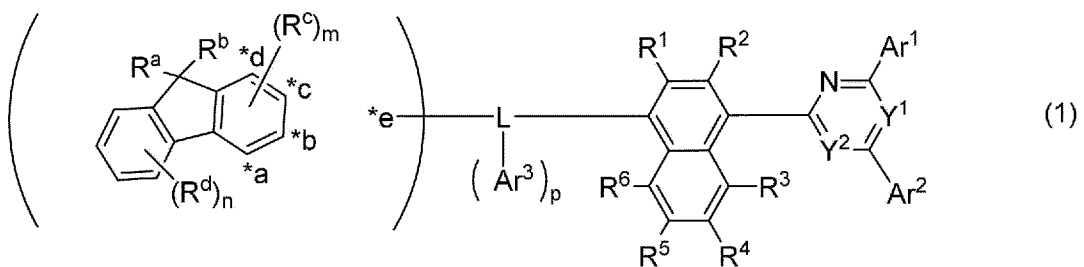
なお、本発明において「有機EL素子の性能をより改善」とは、例えば、長寿命化、高効率化、低電圧化、などを意味するが、これに限定されるものではない。

課題を解決するための手段

[0007] 本発明者らは、特許文献1～12に記載の化合物を含む有機EL素子の性能について鋭意研究を重ねた結果、下記式(1)で表される化合物を含む有機EL素子は、性能がより改善されることを見出した。

[0008] 一態様において、本発明は下記式(1)で表される化合物を提供する。

[化1]



(式(1)中、

Y¹及びY²は、いずれか一方が窒素原子であり、他方がC R¹⁰である。

$A_{r^1} \sim A_{r^3}$ は、それぞれ独立して、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。

L は、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 の (2 + p) 価の芳香族炭化水素環である。

p は、0～3 の整数であり、L が単結合である場合、p は 0 であり、L が置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 の (2 + p) 価の芳香族炭化水素環である場合、p は 0～3 の整数である。

A_{r^3} が 2 個以上存在する場合、2 個以上の A_{r^3} は、互いに同一であるか又は異なり、

$R^1 \sim R^6$ 、 R^{10} 、 R^c 、及び R^d は、それぞれ独立して、
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})で表される基、

—O—(R_{904})で表される基、

—S—(R_{905})で表される基、

—N(R_{906})(R_{907})で表される基、

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、

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立して、

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

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

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

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

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

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

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

R^a 及び R^b は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、又は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基であり、

R^1 と R^2 、 R^a と R^b 、及び隣接する 2 つの R^c は、互いに結合して環を形成せず、

R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、及び隣接する 2 つの R^d から選ばれる 1 以上の組において、隣接する 2 つが互いに結合して置換もしくは無置換の環を形成してもよい。

m は、3 である。

n は、4 である。

R^c は、互いに同一であるか又は異なり、

R dは、互いに同一であるか又は異なり、
* eは、炭素原子* a、* b、* c及び* dから選ばれる一つに結合する。
。)

[0009] 他の態様において、本発明は、前記式(1)で表される化合物を有する有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を提供する。

[0010] さらに他の態様において、本発明は、陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に有機層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該有機層が発光層を含み、該有機層の少なくとも1層が、前記式(1)で表される化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子を提供する。

[0011] さらに他の態様において、本発明は、前記有機エレクトロルミネッセンス素子を含む電子機器を提供する。

発明の効果

[0012] 前記式(1)で表される化合物を含む有機EL素子は改善された素子性能を示す。

図面の簡単な説明

[0013] [図1]本発明の一態様に係る有機EL素子の層構成の一例を示す概略図である。
。

[図2]本発明の一態様に係る有機EL素子の層構成の他の例を示す概略図である。
。

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。

[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。

[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。

[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。

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] 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G 1) としては、以下の無置換のアリール基（具体例群G 1 A）及び置換のアリール基（具体例群G 1 B）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G 1 A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G 1 Bの置換のアリール基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のアリール基」の例、及び「置換のアリール基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアリール基」には、下記具体例群G 1 B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G 1 B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G 1 A）：

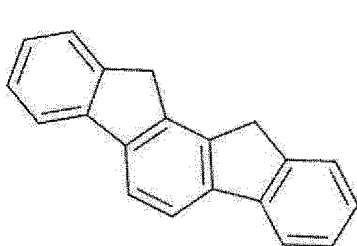
フェニル基、
p-ビフェニル基、
m-ビフェニル基、
o-ビフェニル基、
p-ターフェニル-4-イル基、
p-ターフェニル-3-イル基、
p-ターフェニル-2-イル基、
m-ターフェニル-4-イル基、
m-ターフェニル-3-イル基、
m-ターフェニル-2-イル基、

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

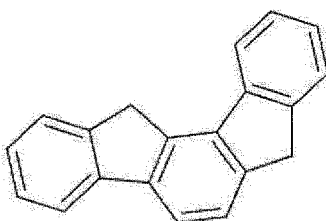
下記一般式 (TEMP-1) ~ (TEMP-15) で表される環構造から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 1 価のアリール基。

[0025]

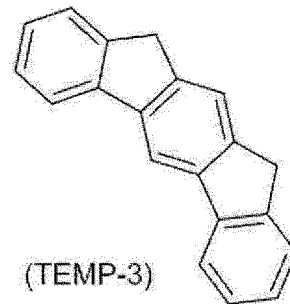
[化2]



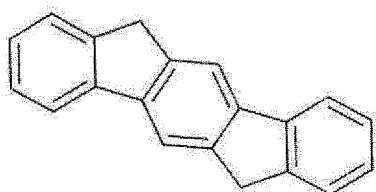
(TEMP-1)



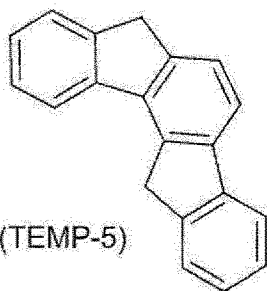
(TEMP-2)



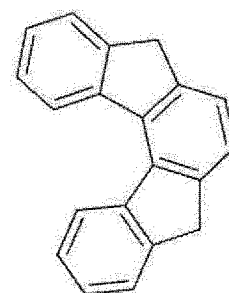
(TEMP-3)



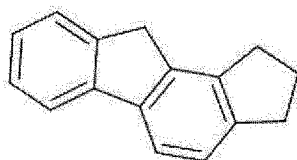
(TEMP-4)



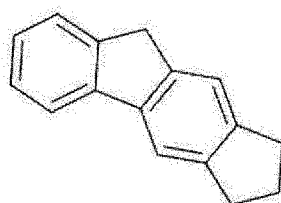
(TEMP-5)



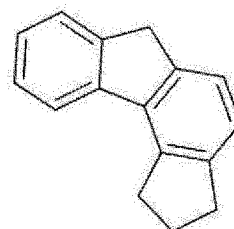
(TEMP-6)



(TEMP-7)

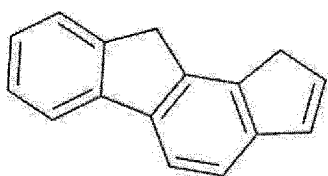


(TEMP-8)

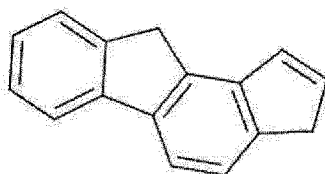


(TEMP-9)

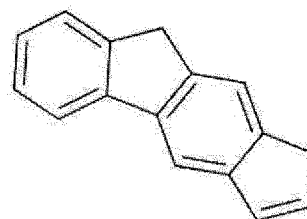
[0026] [化3]



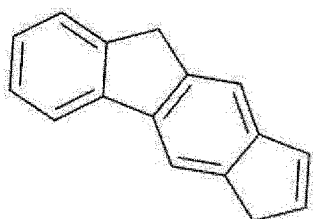
(TEMP-10)



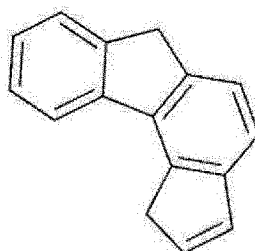
(TEMP-11)



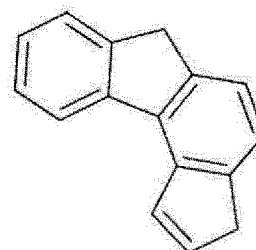
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

[0027] ・置換のアリール基（具体例群G 1 B）：

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

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

[0028] ・「置換もしくは無置換の複素環基」

本明細書に記載の「複素環基」は、環形成原子にヘテロ原子を少なくとも

1つ含む環状の基である。ヘテロ原子の具体例としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、及びホウ素原子が挙げられる。本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基である。

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

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

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

[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。

[0032] ・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。

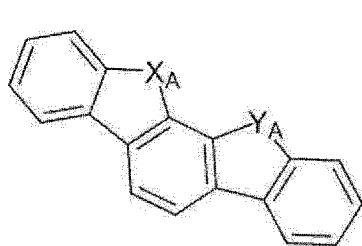
[0033] ・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 3）：

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）。

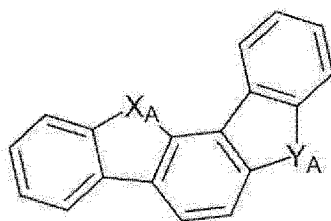
[0034] ・下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群 G 2 A 4）：

[0035]

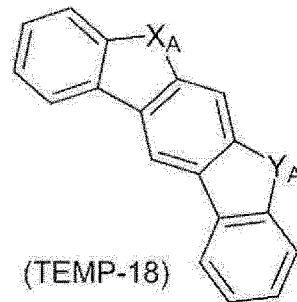
[化4]



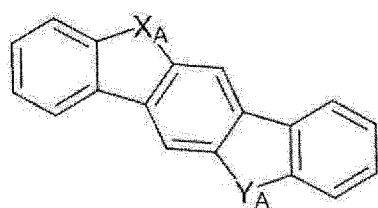
(TEMP-16)



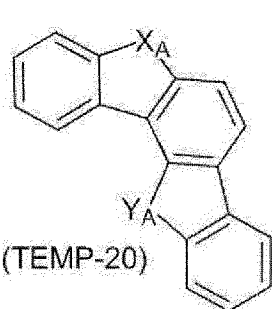
(TEMP-17)



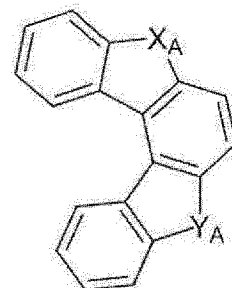
(TEMP-18)



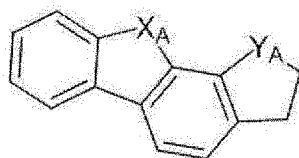
(TEMP-19)



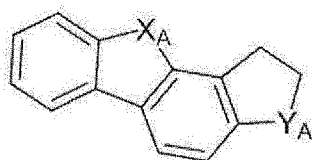
(TEMP-20)



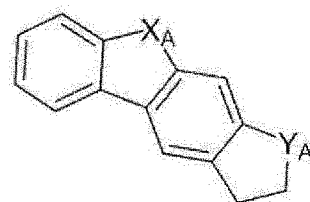
(TEMP-21)



(TEMP-22)



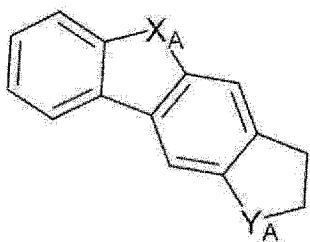
(TEMP-23)



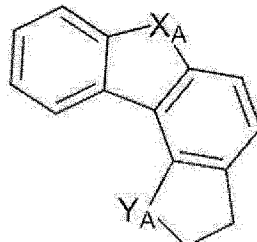
(TEMP-24)

[0036]

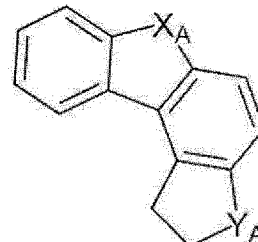
[化5]



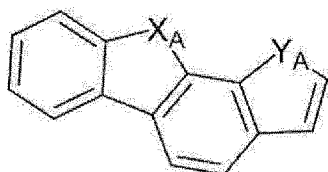
(TEMP-25)



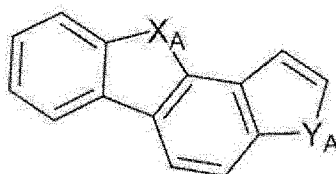
(TEMP-26)



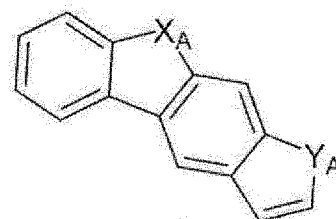
(TEMP-27)



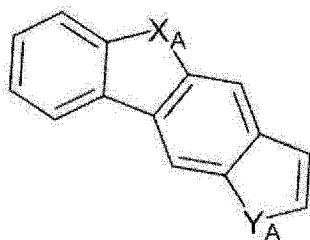
(TEMP-28)



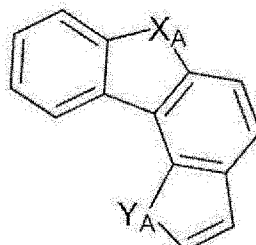
(TEMP-29)



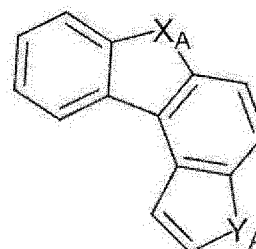
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

[0037] 前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) において、 X_A 及び Y_A は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、NH、又は 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-ビフェニル)カルバゾリル基、
(9-フェニル)フェニルカルバゾリル基、
(9-ナフチル)カルバゾリル基、
ジフェニルカルバゾール-9-イル基、
フェニルカルバゾール-9-イル基、
メチルベンゾイミダゾリル基、
エチルベンゾイミダゾリル基、
フェニルトリアジニル基、
ビフェニルトリアジニル基、
ジフェニルトリアジニル基、
フェニルキナゾリニル基、及び
ビフェニルキナゾリニル基。

[0039] ・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 2）：

フェニルジベンゾフラニル基、
メチルジベンゾフラニル基、
t-ブチルジベンゾフラニル基、及び
スピロ[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G 2 B 3）：

フェニルジベンゾチオフェニル基、
メチルジベンゾチオフェニル基、
t-ブチルジベンゾチオフェニル基、及び
スピロ[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G 2 B 4）：

[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、X A 及び Y A の少なくともいずれかが N H である場合の窒素原子に結合している水素原子、及び X A 及び Y A の一方が C H₂ 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 G 3）としては、以下の無置換のアルキル基（具体例群 G 3 A）及び置換のアルキル基（具体例群 G 3 B）が挙げられる。（ここで、無置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「無置換のアルキル基」である場合を指し、置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「置換のアルキル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキル基」という場合は、「無置換のアルキル基」と「置換のアルキル基」の両方を含む。

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

[0044] ・無置換のアルキル基（具体例群 G 3 A）：

メチル基、

エチル基、
n-プロピル基、
イソプロピル基、
n-ブチル基、
イソブチル基、
s-ブチル基、及び
t-ブチル基。

[0045] ・置換のアルキル基（具体例群G 3 B）：

ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、
ペンタフルオロエチル基、
2，2，2-トリフルオロエチル基、及び
トリフルオロメチル基。

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

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

自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群 G 4 B の「置換のアルケニル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0047] ・無置換のアルケニル基（具体例群 G 4 A）：

ビニル基、
アリル基、
1－ブテニル基、
2－ブテニル基、及び
3－ブテニル基。

[0048] ・置換のアルケニル基（具体例群 G 4 B）：

1，3－ブタンジエニル基、
1－メチルビニル基、
1－メチルアリル基、
1，1－ジメチルアリル基、
2－メチルアリル基、及び
1，2－ジメチルアリル基。

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

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

[0050] ・無置換のアルキニル基（具体例群 G 5 A）：

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

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

[0052] ・無置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 A）：

シクロプロピル基、
シクロブチル基、
シクロペンチル基、
シクロヘキシル基、
1－アダマンチル基、

2-アダマンチル基、
1-ノルボルニル基、及び
2-ノルボルニル基。

[0053] ・置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 B）：

4-メチルシクロヘキシル基。

[0054] ・「 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基」

本明細書に記載の $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基の具体例（具体例群G 7）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、

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。 $-Si(G1)(G1)(G1)$ における複数のG 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

$-Si(G1)(G2)(G2)$ における複数のG 2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

$-Si(G1)(G1)(G2)$ における複数のG 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

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

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

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

[0055] ・「—O—(R₉₀₄)で表される基」

本明細書に記載の—O—(R₉₀₄)で表される基の具体例（具体例群G 8）としては、

—O (G 1)、

—O (G 2)、

—O (G 3)、及び

—O (G 6)

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

[0056] ・「—S—(R₉₀₅)で表される基」

本明細書に記載の—S—(R₉₀₅)で表される基の具体例（具体例群G 9）としては、

—S (G 1)、

—S (G 2)、

—S (G 3)、及び

—S (G 6)

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

[0057] ・「—N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基」

本明細書に記載の—N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基の具体例（具体例群 G 10）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、

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

[0058] ・「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。

[0059] ・「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。

[0060] ・「置換もしくは無置換のハロアルキル基」

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

[0061] ・「置換もしくは無置換のアルコキシ基」

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

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

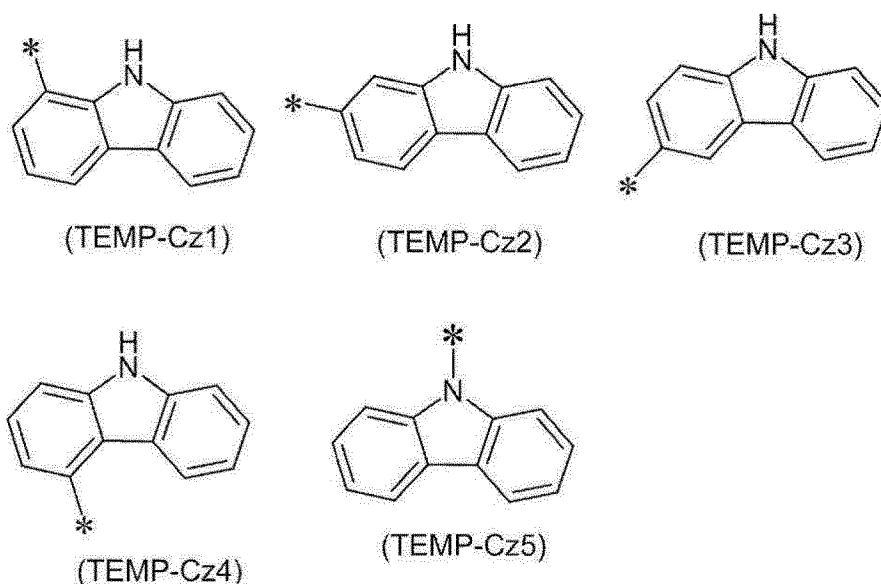
[0067] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリール基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはフェニル基、*p*-ビフェニル基、*m*-ビフェニル基、*o*-ビフェニル基、*p*-ターフェニル-4-イル基、*p*-ターフェニル-3-イル基、*p*-ターフェニル-2-イル基、*m*-ターフェニル-4-イル基、*m*-ターフェニル-3-イル基、*m*-ターフェニル-2-イル基、*o*-ターフェニル-4-イル基、*o*-ターフェニル-3-イル基、*o*-ターフェニル-2-イル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9, 9'-スピロピフルオレニル基、9, 9-ジメチルフルオレニル基、及び9, 9-ジフェニルフルオレニル基等である。

[0068] 本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基、カルバゾリル基（1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、又は9-カルバゾリル基

）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ジアザジベンゾチオフェニル基、（９－フェニル）カルバゾリル基（（９－フェニル）カルバゾール－１－イル基、（９－フェニル）カルバゾール－２－イル基、（９－フェニル）カルバゾール－３－イル基、又は（９－フェニル）カルバゾール－４－イル基）、（９－ビフェニリル）カルバゾリル基、（９－フェニル）フェニルカルバゾリル基、ジフェニルカルバゾール－９－イル基、フェニルカルバゾール－９－イル基、フェニルトリアジニル基、ビフェニリルトリアジニル基、ジフェニルトリアジニル基、フェニルジベンゾフラニル基、及びフェニルジベンゾチオフェニル基等である。

[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。

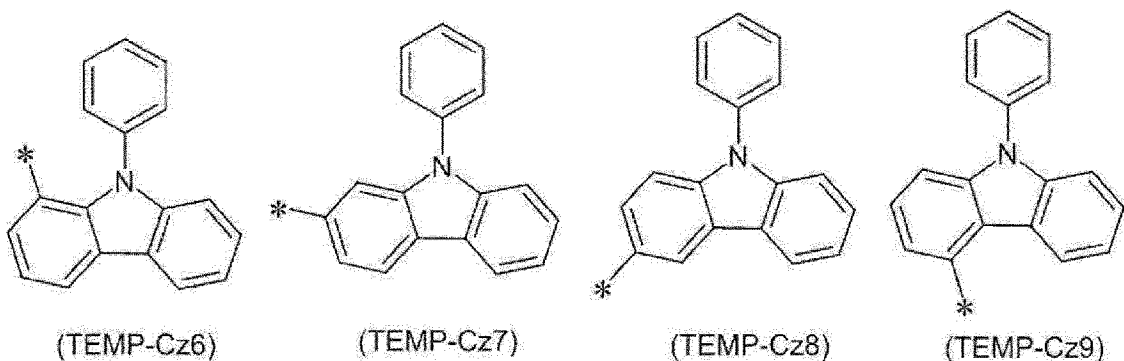
[0070] [化6]



[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]

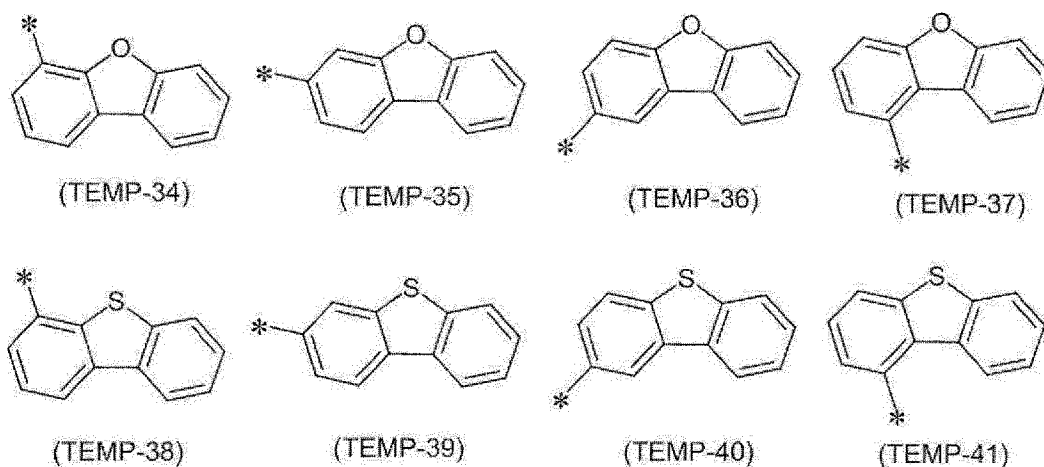
[化7]



[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8]



[0076] 前記一般式 (TEMP-34) ~ (TEMP-41) 中、*は、結合位置を表す。

[0077] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアルキル基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、及びt-ブチル基等である。

[0078] ・「置換もしくは無置換のアリーレン基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリーレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアリール基」からアリール環上の1

つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換のアリーレン基」の具体例（具体例群G 1 2）としては、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」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。

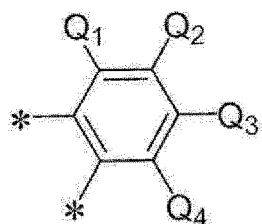
[0080] ・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

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

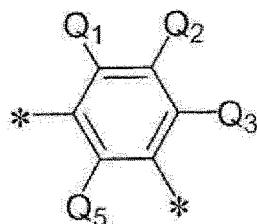
[0081] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式（TEMP-42）～（TEMP-68）のいずれかの基である。

[0082]

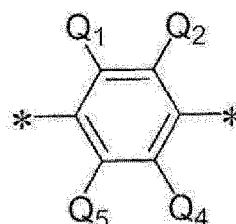
[化9]



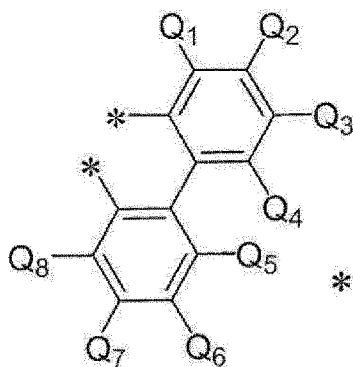
(TEMP-42)



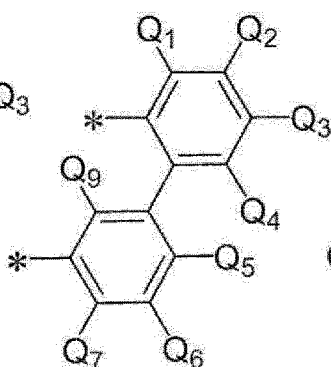
(TEMP-43)



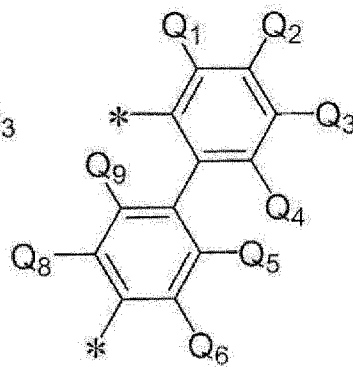
(TEMP-44)



(TEMP-45)

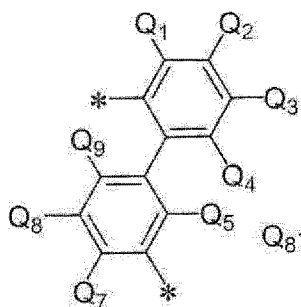


(TEMP-46)

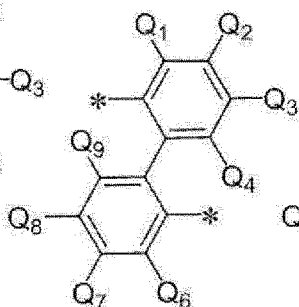


(TEMP-47)

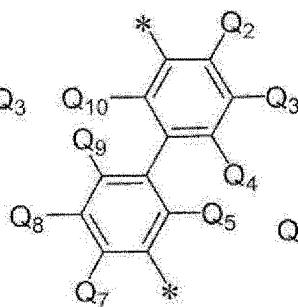
[0083] [化10]



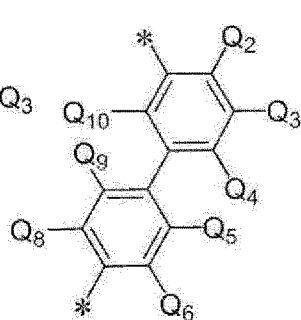
(TEMP-48)



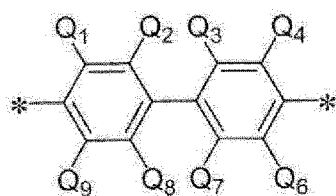
(TEMP-49)



(TEMP-50)



(TEMP-51)



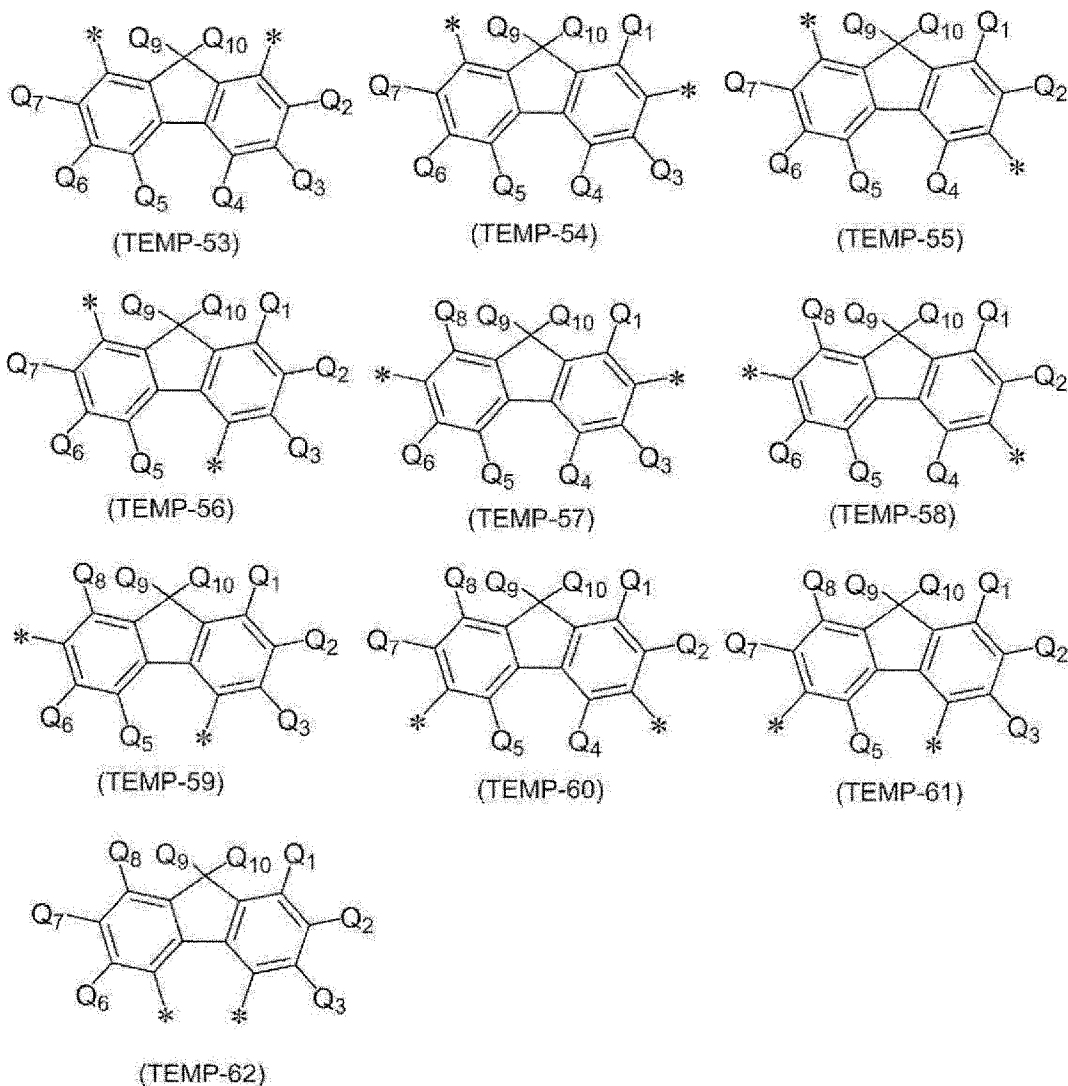
(TEMP-52)

[0084] 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。

[0085] [化11]



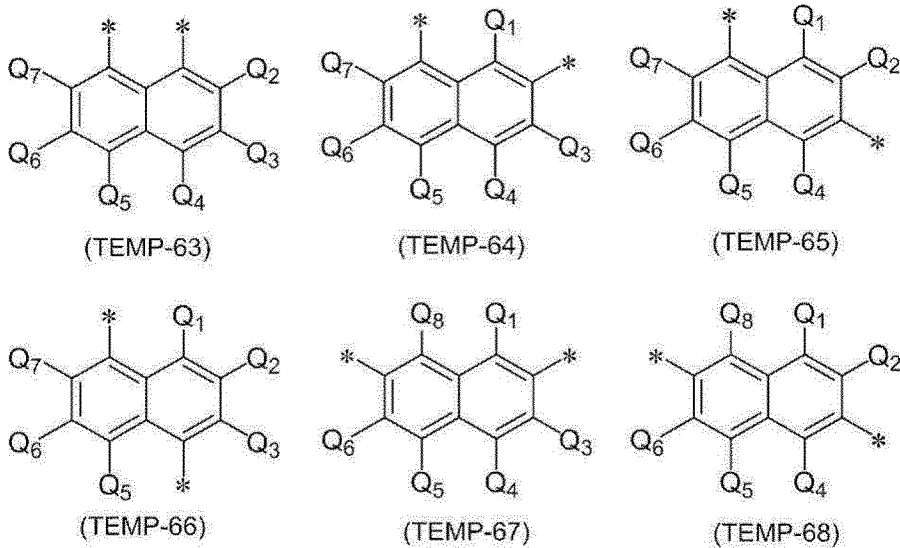
[0086] 前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、 $Q_1 \sim Q_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

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。

[0087]

[化12]

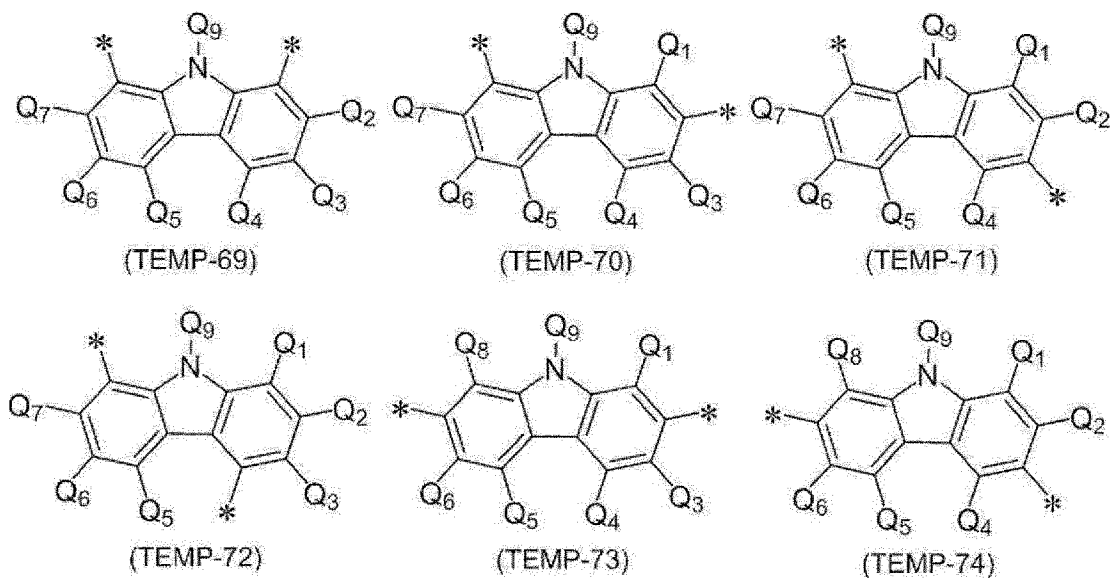


[0088] 前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、 $Q_1 \sim Q_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

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

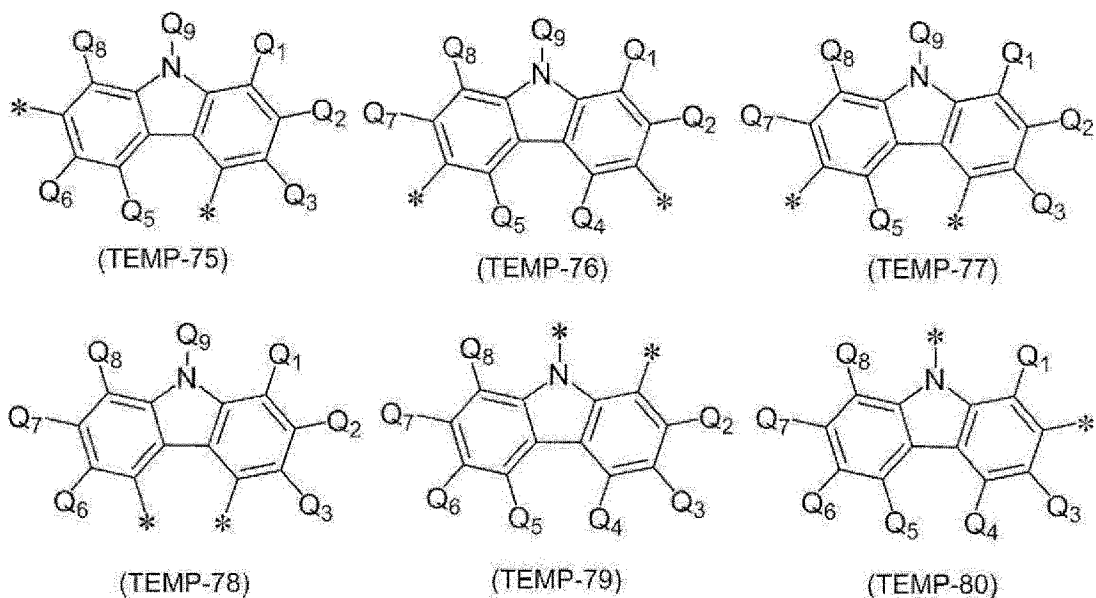
[0089] 本明細書に記載の置換もしくは無置換の2価の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-102) のいずれかの基である。

[0090] [化13]

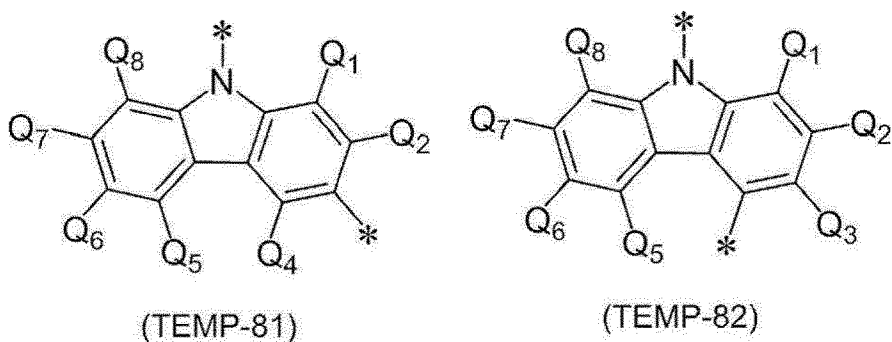


[0091]

[化14]

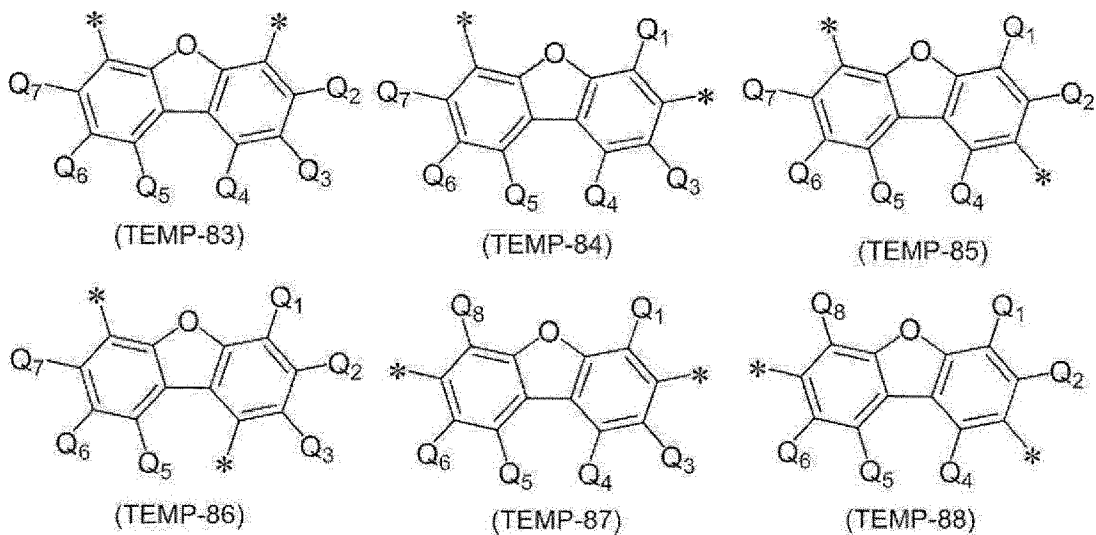


[0092] [化15]

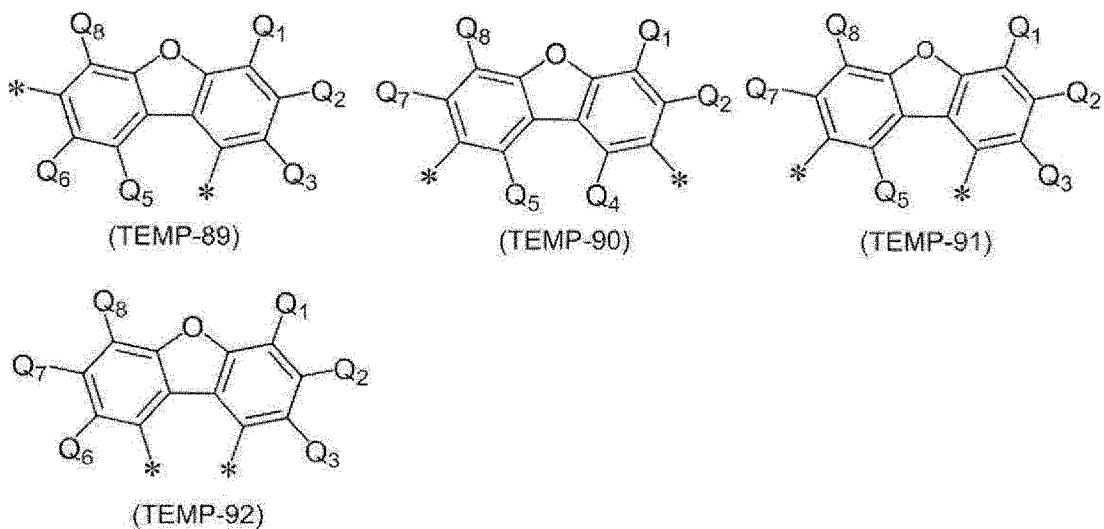


[0093] 前記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-82) 中、 $Q_1 \sim Q_9$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

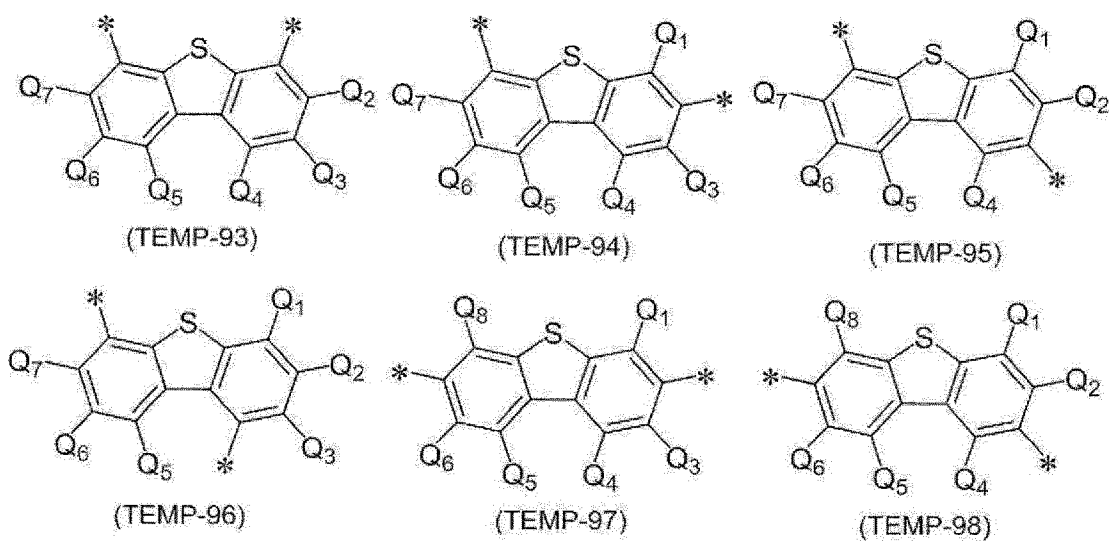
[0094] [化16]



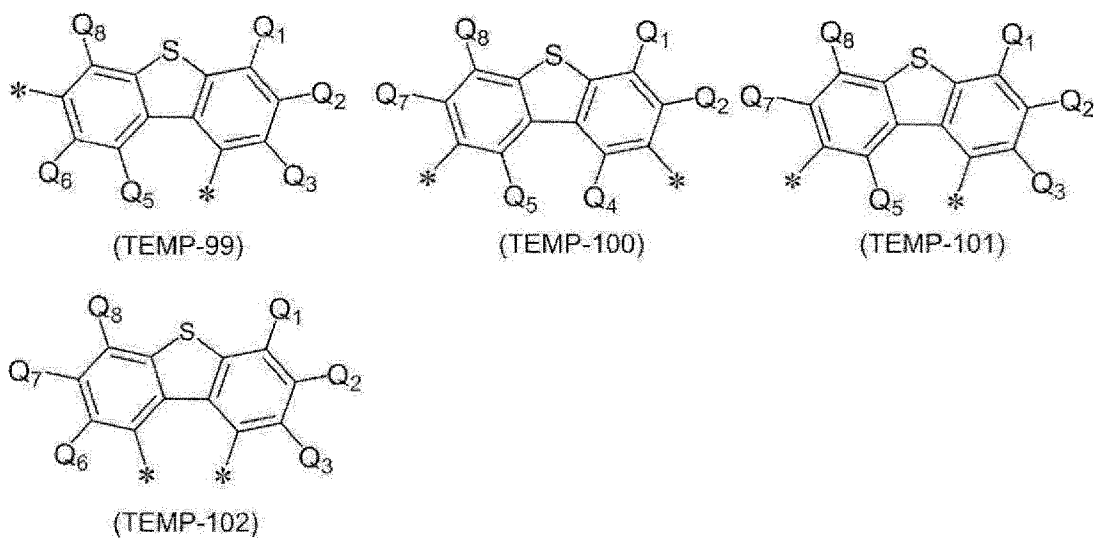
[0095] [化17]



[0096] [化18]



[0097] [化19]



[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。

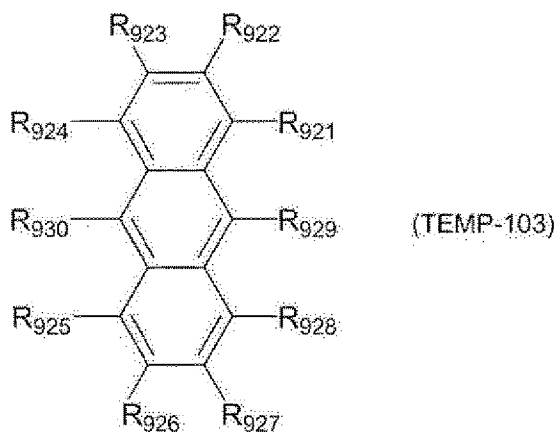
[0099] 以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

[0100] ・「結合して環を形成する場合」

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

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

[0101] [化20]

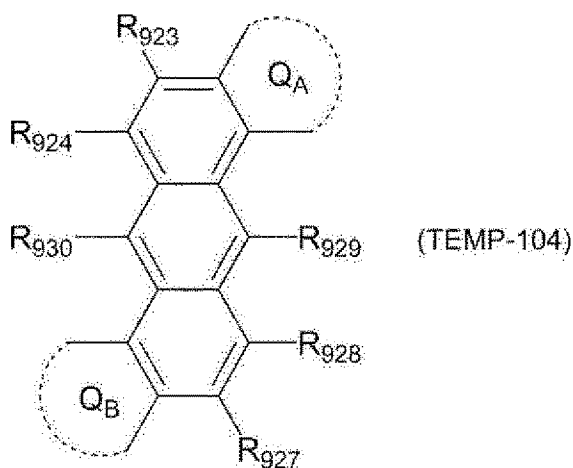


[0102] 例えば、 $R_{921} \sim R_{930}$ のうちの「隣接する2つ以上からなる組の1組以上

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。

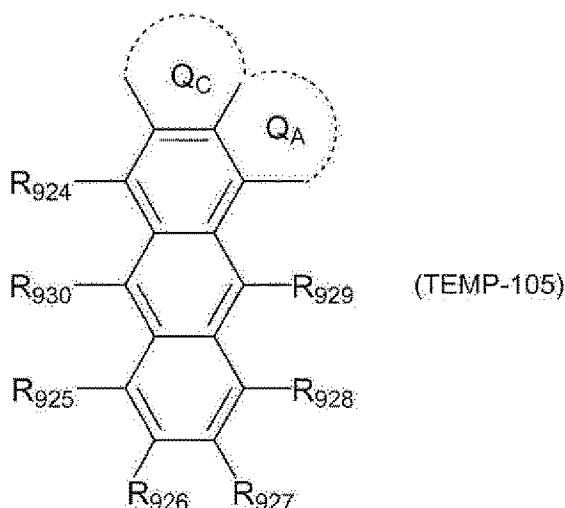
[0103] 上記「1組以上」とは、上記隣接する2つ以上からなる組の2組以上が同時に環を形成してもよいことを意味する。例えば、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して環 Q_A を形成し、同時に R_{925} と R_{926} とが互いに結合して環 Q_B を形成した場合は、前記一般式(TEMP-103)で表されるアントラセン化合物は、下記一般式(TEMP-104)で表される。

[0104] [化21]



[0105] 「隣接する2つ以上からなる組」が環を形成する場合とは、前述の例のように隣接する「2つ」からなる組が結合する場合だけではなく、隣接する「3つ以上」からなる組が結合する場合も含む。例えば、 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22]



[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— (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、及び

無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基

からなる群から選択される基等であり、

ここで、 $R_{901} \sim R_{907}$ 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

は無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基である。

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

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

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

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

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

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

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

[0112] 一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、

炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、及び
環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基
からなる群から選択される基である。

[0113] 一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、

炭素数 1 ～ 18 のアルキル基、
環形成炭素数 6 ～ 18 のアリール基、及び
環形成原子数 5 ～ 18 の複素環基
からなる群から選択される基である。

[0114] 上記任意の置換基の各基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基の具体例である。

[0115] 本明細書において別途記載のない限り、隣接する任意の置換基同士で、「飽和の環」、又は「不飽和の環」を形成してもよく、好ましくは、置換もしくは無置換の飽和の 5 員環、置換もしくは無置換の飽和の 6 員環、置換もしくは無置換の不飽和の 5 員環、又は置換もしくは無置換の不飽和の 6 員環を形成し、より好ましくは、ベンゼン環を形成する。

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

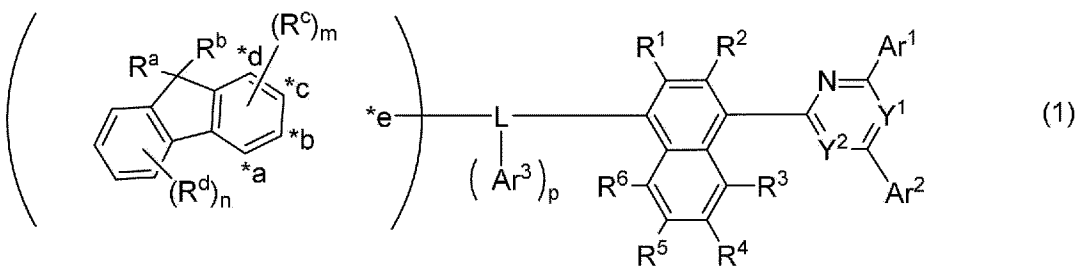
[0116] 本明細書において、「AA ～ BB」を用いて表される数値範囲は、「AA ～ BB」の前に記載される数値 AA を下限値とし、「AA ～ BB」の後に記載される数値 BB を上限値として含む範囲を意味する。

[0117] 以下、本発明の化合物を説明する。

本発明の一態様に係る化合物は下記式（1）で表される。

ただし、以下、式（1）及び後述する式（1）に含まれる式で表される本発明の化合物を単に“発明化合物（1）”又は“発明化合物”と称することがある。

[化23]



[0118] 以下、式（１）及び後述する式（１）に含まれる式中の記号を説明する。

なお、同じ記号は同じ意味を有する。

[0119] 式（１）中、

Y^1 及び Y^2 は、いずれか一方が窒素原子であり、他方が CR^{10} であり、好ましくはメチン基（CH）である。

Y^1 が窒素原子であり、 Y^2 が CR^{10} 、好ましくはメチン基（CH）であるのが好ましい。

[0120] 式（１）中、

$Ar^1 \sim Ar^3$ は、それぞれ独立して、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。

[0121] $Ar^1 \sim Ar^3$ が表す前記置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基の詳細は「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

$Ar^1 \sim Ar^3$ が表す前記無置換のアリール基は、好ましくはフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、又はフルオレニル基である。

[0122] $Ar^1 \sim Ar^3$ が表す前記置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基の詳細は「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

$Ar^1 \sim Ar^3$ が表す前記無置換の複素環基は、好ましくはピリジル基、キノリル基、ジベンゾフラニル基、又はジベンゾチオフェニル基である。

[0123] Ar^1 は、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であり、より好ましくはフェニル基、ビフェニル基、又はナフチル基、

又はフルオレニル基であり、さらに好ましくはフェニル基である。

$A r^1$ は、他の態様において、好ましくは置換もしくは無置換の環形成原子数5～30複素環基であり、より好ましくはピリジル基、キノリル基、ジベンゾフラニル基、又はジベンゾチオフェニル基である。

$A r^2$ は、一態様において、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であり、より好ましくはフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、又はフルオレニル基であり、さらに好ましくはフェニル基である。

$A r^2$ は、他の態様において、好ましくは置換もしくは無置換の環形成原子数5～30複素環基であり、より好ましくはピリジル基、キノリル基、ジベンゾフラニル基、又はジベンゾチオフェニル基である。

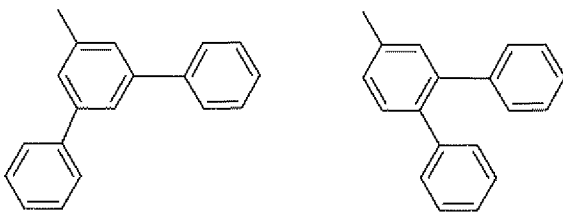
$A r^3$ は、好ましくはフェニル基、ナフチル基、ピリジル基、ジベンゾフラニル基、又はジベンゾチオフェニル基であり、より好ましくはフェニル基、ナフチル基である。

$A r^3$ が2個以上存在する場合、2個以上の $A r^3$ は、互いに同一であるか又は異なる。

$A r^1$ 及び $A r^2$ は、好ましくは、互いに異なり、より好ましくは、アリール基であり、且つ、互いに異なる。

また、 $A r^1$ 及び $A r^2$ は、好ましくは、一方が以下のようなターフェニル構造である。

[化24]



[0124] L は、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の(2+p)価の芳香族炭化水素環である。

本発明の一態様において、 L は、好ましくは単結合である。他の態様にお

いて、Lは、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の2+p価の芳香族炭化水素環である。

[0125] Lが表す前記置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の2+p価の芳香族炭化水素環としては、例えば、フェニレン基、ビフェニリレン基、ターフェニリレン基、ナフチレン基、アントリレン基、ベンゾアントリレン基、フェナントリレン基、ベンゾフェナントリレン基、フェナレニレン基、ピセニレン基、ペンタフェニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ベンゾクリセニレン基、トリフェニレニレン基、フルオランテニレン基、又はフルオレニレン基等が挙げられる。

Lが表す前記無置換の環形成炭素数6～30の2+p価の芳香族炭化水素環は、好ましくはフェニレン基、ビフェニレン基、又はナフチレン基であり、より好ましくはフェニレン基、ナフチレン基である。

[0126] pは、0～3の整数であり、Lが単結合である場合、pは0であり、Lが置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の(2+p)価の芳香族炭化水素環である場合、pは0～3の整数である。

pは、好ましくは0又は1であり、より好ましくは0である。

[0127] $R^1 \sim R^6$ 、 R^{10} 、 R^c 、及び R^d は、それぞれ独立して、

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})で表される基、

—O—(R_{904})で表される基、

—S—(R_{905})で表される基、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立して、

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。

[0128] R^a及びR^bは、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

[0129] R¹とR²、R^aとR^b、及び隣接する2つのR^cは、互いに結合して環を形成せず、

R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、及び隣接する2つの R^d から選ばれる1以上の組において、隣接する2つが互いに結合して置換もしくは無置換の環を形成してもよい。

[0130] m は、3である。

n は、4である。

R^c は、互いに同一であるか又は異なり、

R^d は、互いに同一であるか又は異なる。

[0131] $R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d は、それぞれ独立して、好ましくは水素原子、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、より好ましくは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、さらに好ましくは水素原子である。

[0132] R^a 及び R^b は、それぞれ独立して、好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、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^a 及び R^b は、両方が置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基であってもよい。 R^a 及び R^b は、両方が置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であってもよい。また、 R^a 及び R^b の一方が置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基であり、他方が置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であってもよい。

[0133] $R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d が表す前記ハロゲン原子の詳細は「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりであり、好ましくはフッ素原子である。

[0134] $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、及び R^d が表す前記置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基の詳細は「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

$R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、及び R^d が表す前記無置換のアルキル基は、好

ましくはメチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、又は*t*-ブチル基であり、より好ましくはメチル基、エチル基、イソプロピル基、又は*t*-ブチル基であり、更に好ましくはメチル基又は*t*-ブチル基である。

[0135] $R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d が表す前記置換もしくは無置換の環形成炭素数2～50のアルケニル基の詳細は「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

[0136] $R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d が表す前記置換もしくは無置換の環形成炭素数2～50のアルキニル基の詳細は「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

[0137] $R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d が表す前記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の詳細は「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

$R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d が表す前記無置換のシクロアルキル基は、好ましくはシクロプロピル基、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、又は2-ノルボルニル基であり、より好ましくはシクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、又はシクロヘキシル基であり、更に好ましくはシクロペンチル基又はシクロヘキシル基である。

[0138] $R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d が表す前記-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、前記-O-(R_{904})で表される基、-S-(R_{905})で表される基、及び-N(R_{906})(R_{907})で表される基の詳細は、「本明細書に記載の置換基」において記載したとおりである。

[0139] $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、及び R^d が表す前記置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基の詳細は、「本明細書に記載の置換基」において記載したとおりである。

$R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、及び R^d が表す前記無置換のアリール基は、好ましくはフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、又はフェナントリル基で

あり、より好ましくはフェニル基、ビフェニル基、又はナフチル基であり、さらに好ましくはフェニル基である。

[0140] $R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d が表す前記置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基の詳細は、「本明細書に記載の置換基」において記載したとおりである。

該無置換の複素環基は、好ましくはジベンゾフラニル基、又はジベンゾチオフェニル基である。

[0141] R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、及び隣接する2つの R^d から選ばれる1以上の組において、隣接する2つが互いに結合して形成する任意の置換もしくは無置換の環の詳細は、「本明細書に記載の置換基」において上記したとおりであり、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の脂肪族炭化水素環、置換もしくは無置換の芳香族複素環、及び置換もしくは無置換の非芳香族複素環から選ばれる。

[0142] 前記芳香族炭化水素環は、例えば、ベンゼン環、ビフェニレン環、ナフタレン環、又はフルオレン環であり、好ましくはナフタレン環、又はフルオレン環である。

前記脂肪族炭化水素環は、例えば、シクロペンテン環、シクロペンタジエン環、シクロヘキセン環、シクロヘキサジエン環、又は、前記芳香族炭化水素環を部分的に水素化して得られる炭化水素環である。

[0143] 前記芳香族複素環は、例えば、ピロール環、フラン環、チオフェン環、ピリジン環、イミダゾール環、ピラゾール環、インドール環、イソインドール環、ベンゾフラン環、イソベンゾフラン環、ベンゾチオフェン環、ベンゾイミダゾール環、インダゾール環、ジベンゾフラン環、ナフトベンゾフラン環、ジベンゾチオフェン環、ナフトベンゾチオフェン環、カルバゾール環、又はベンゾカルバゾール環であり、好ましくはジベンゾフラン環、又はジベンゾチオフェン環である。

前記非芳香族複素環は、例えば、上記芳香族複素環を部分的に水素化して得られる複素環である。

[0144] 本発明においては、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、及び隣接する2つの R^d から選ばれる1以上の組において、隣接する2つが互いに結合して置換もしくは無置換の環を形成しなくてもよい。

本発明においては、隣接する2つの R^d から選ばれる1以上の組において、隣接する2つが互いに結合して置換もしくは無置換の環を形成することが好ましく、隣接する2つの R^d から選ばれる1つの組において、隣接する2つが互いに結合して置換もしくは無置換の環を形成することがより好ましく、これらの好ましい場合又はより好ましい場合において、隣接する2つの R^d が互いに結合してベンゼン環を形成することがさらに好ましい。また、 R^d は、好ましくは、アリール基である。

[0145] m は、3である。

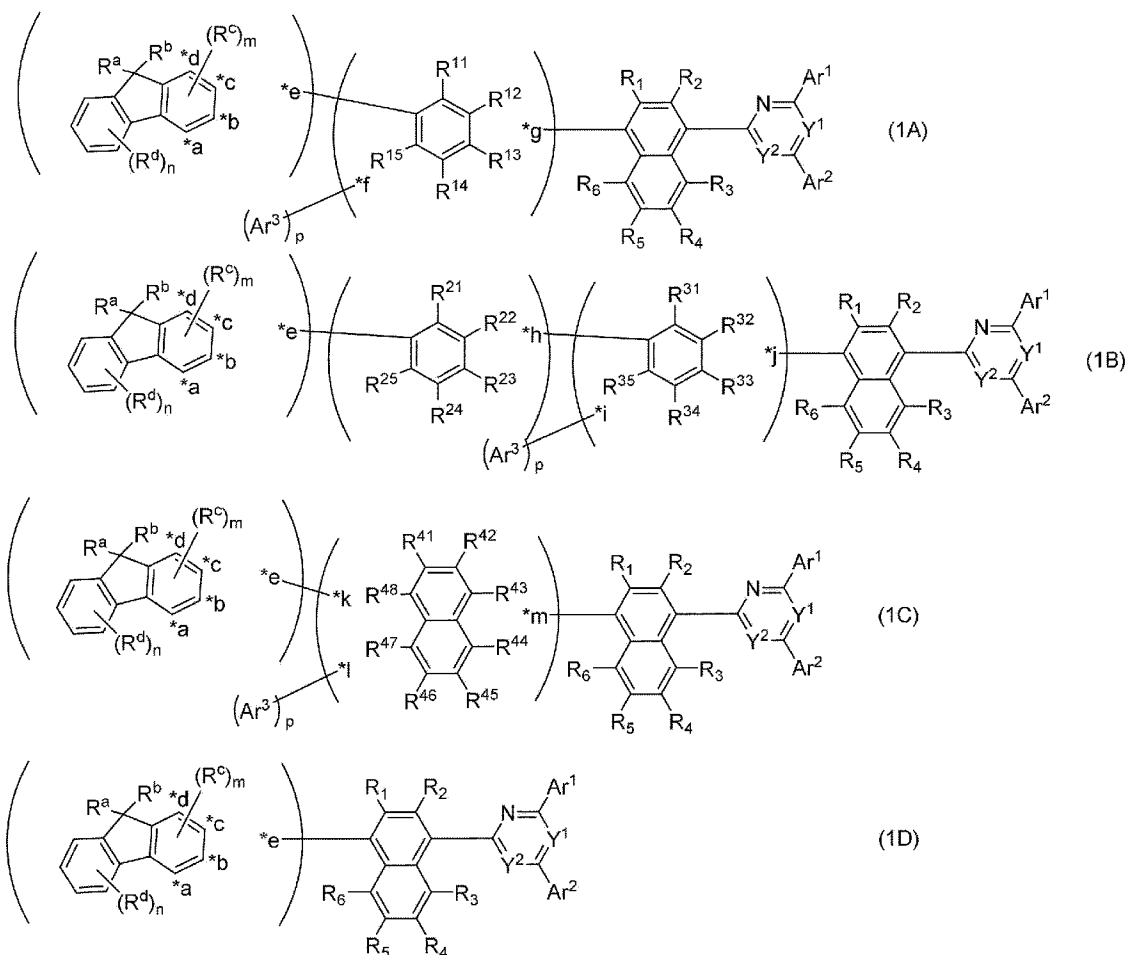
n は、4である。

[0146] $*e$ は、炭素原子 $*a$ 、 $*b$ 、 $*c$ 及び $*d$ から選ばれる一つに結合する。

本発明の一態様において、 $*e$ は、炭素原子 $*a$ に結合することが好ましい。他の態様において、 $*e$ は、炭素原子 $*b$ に結合することが好ましい。さらに他の態様において、 $*e$ は、炭素原子 $*c$ に結合することが好ましい。さらに他の態様において、 $*e$ は、炭素原子 $*d$ に結合することが好ましい。

[0147] 式(1)で表される発明化合物(1)は、好ましくは下記式(1A)～(1D)のいずれかで表される。

[化25]



[0148] 式(1A)～(1D)中、

$R^{11} \sim R^{15}$ 、 $R^{21} \sim R^{25}$ 、 $R^{31} \sim R^{38}$ 及び $R^{41} \sim R^{48}$ は、それぞれ独立して、

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})で表される基、

—O— (R_{904}) で表される基、

—S— (R_{905}) で表される基、

—N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

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。

ただし、

式 (1A) 中、

p が 0 の場合、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる 1 つは *g に結合する単結合であり、

p が 1 の場合、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる 1 つは *f に結合する単結合であり、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる他の 1 つは *g に結合する単結合であり、

p が 2 の場合、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる 2 つは *f に結合する単結合であり、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる他の 1 つは *g に結合する単結合であり、

p が 3 の場合、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる 3 つは *f に結合する単結合であり、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる他の 1 つは *g に結合する単結合であり、

式 (1B) 中、

p が 0 の場合、 $R^{21} \sim R^{28}$ から選ばれる 1 つは *h に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる 1 つは *j に結合する単結合であり、

p が 1 の場合、 $R^{21} \sim R^{25}$ から選ばれる 1 つは *h に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる 1 つは *i に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる他の 1 つは *j に結合する単結合であり、

p が 2 の場合、 $R^{21} \sim R^{25}$ から選ばれる 1 つは *h に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる 2 つは *i に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる他の 1 つは *j に結合する単結合であり、

p が 3 の場合、 $R^{21} \sim R^{25}$ から選ばれる 1 つは *h に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる 3 つは *i に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる他の 1 つは *j に結合する単結合であり、

式 (1C) 中、

pが0の場合、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる1つは $*k$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる他の1つは $*m$ に結合する単結合であり、

pが1の場合、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる1つは $*l$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる他の1つは $*k$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれるさらに他の1つは $*m$ に結合する単結合であり、

pが2の場合、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる2つは $*l$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる他の1つは $*k$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれるさらに他の1つは $*m$ に結合する単結合であり、

pが3の場合、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる3つは $*l$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる他の1つは $*k$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれるさらに他の1つは $*m$ に結合する単結合である。

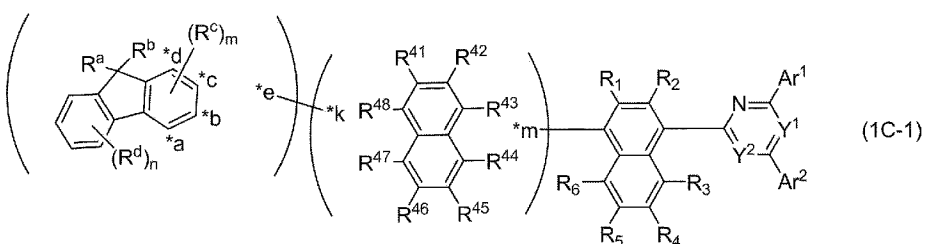
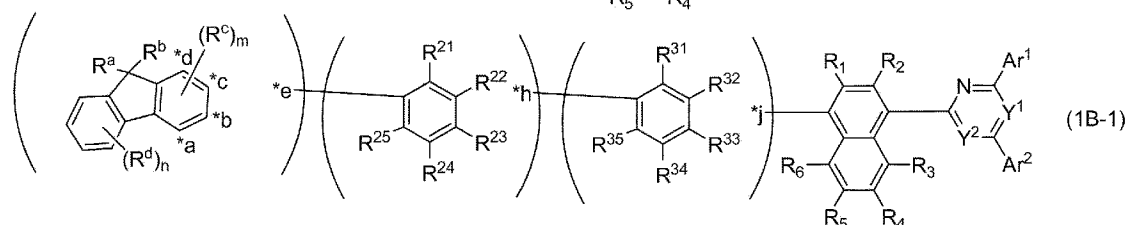
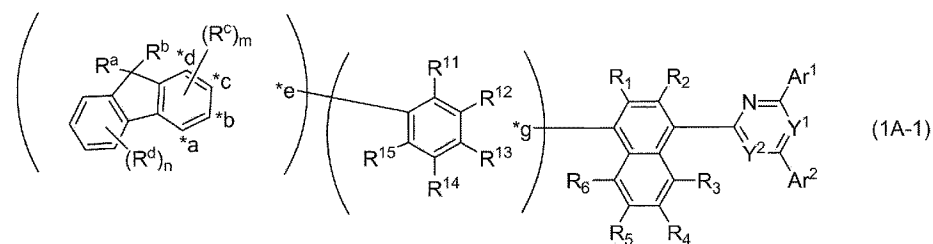
Y^1 、 Y^2 、 $A r^1 \sim A r^3$ 、 p 、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 $*a$ 、 $*b$ 、 $*c$ 、 $*d$ 、 $*e$ 、 n 、 m 、及び $R_{901} \sim R_{907}$ は式(1)において定義したとおりである。

[0149] $R^{11} \sim R^{15}$ 、 $R^{21} \sim R^{25}$ 、 $R^{31} \sim R^{35}$ 、及び $R^{41} \sim R^{48}$ は、それぞれ独立して、好ましくは水素原子、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、より好ましくは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、さらに好ましくは水素原子である。

$R^{11} \sim R^{15}$ 、 $R^{21} \sim R^{25}$ 、 $R^{31} \sim R^{35}$ 、及び $R^{41} \sim R^{48}$ が表す各基の詳細は、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、及び R^d に関して記載した対応する基の詳細と同じであり、好ましい基等もすべて同じである。

[0150] 式(1)で表される発明化合物(1)は、好ましくは下記式(1A-1)、(1B-1)、又は(1C-1)で表される。

[化26]

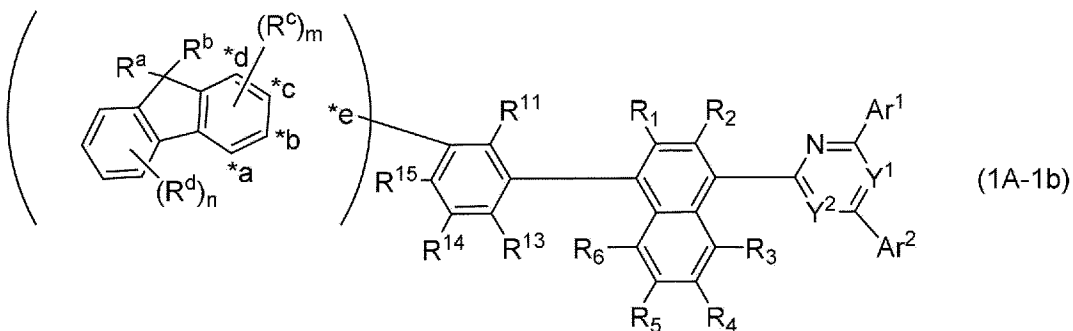
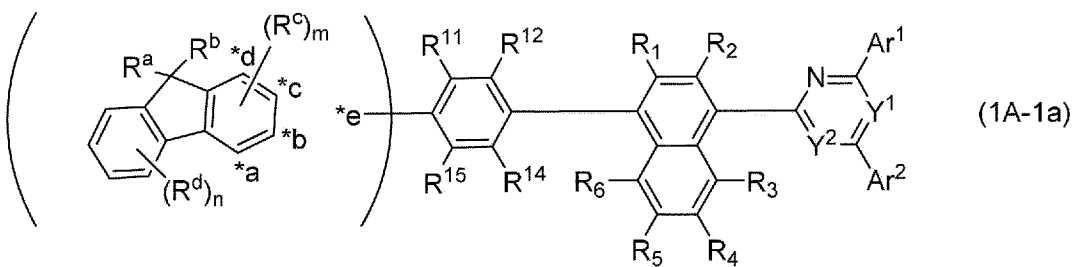


[0151] 式(1A-1)、(1B-1)、及び(1C-1)中、

Y^1 、 Y^2 、 Ar^1 、 Ar^2 、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 $*a$ 、 $*b$ 、 $*c$ 、 $*d$ 、 $*e$ 、 n 、及び m は式(1)において定義したとおりであり、 $R^{11} \sim R^{15}$ 、及び $*g$ は式(1A)で定義したとおりであり、 $R^{21} \sim R^{25}$ 、 $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $*h$ 、及び $*j$ は式(1B)で定義したとおりであり、 $R^{41} \sim R^{48}$ 、 $*k$ 、及び $*m$ は式(1C)で定義したとおりである。

[0152] 式(1)で表される発明化合物(1)は、好ましくは下記式(1A-1a)又は(1A-1b)で表される。

[化27]

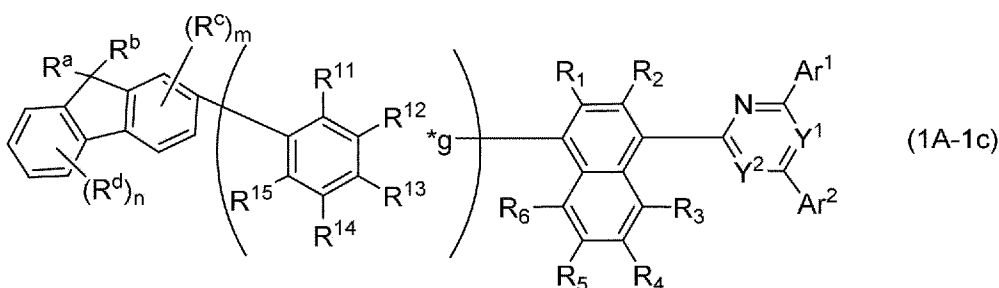


[0153] 式(1A-1a)及び(1A-1b)中、

Y^1 、 Y^2 、 Ar^1 、 Ar^2 、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 $*a$ 、 $*b$ 、 $*c$ 、 $*d$ 、 $*e$ 、 n 、及び m は式(1)において定義したとおりであり、 $R^{11} \sim R^{15}$ は式(1A)で定義したとおりである。

[0154] 式(1)で表される発明化合物(1)は、好ましくは下記式(1A-1c)で表される。

[化28]



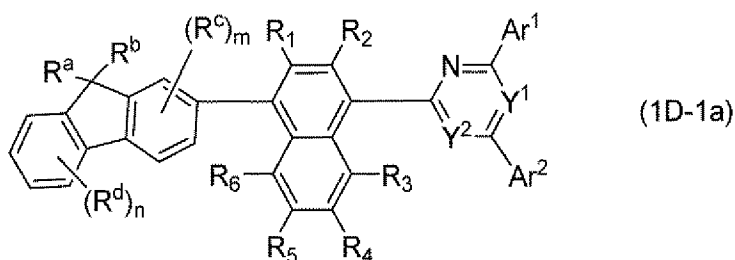
[0155] 式(1A-1c)中、

Y^1 、 Y^2 、 Ar^1 、 Ar^2 、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 n 、及び m は式(1)において定義したとおりであり、 $R^{11} \sim R^{15}$ 、及び $*g$ は式(1A)で定義したとおりである。

[0156] 式(1)で表される発明化合物(1)は、好ましくは下記式(1D-1a

)で表される。

[化29]



[0157] 式(1D-1a)中、

Y^1 、 Y^2 、 Ar^1 、 Ar^2 、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 n 、及び m は式(1)において定義したとおりである。

[0158] 本発明の一態様として、

- (1-1) $R^1 \sim R^6$ 及び R^{10} が、いずれも水素原子であってもよく、
- (1-2) R^c 及び R^d が、いずれも水素原子であってもよく、
- (1-3) 式(1A)において、*f及び*gに結合する単結合でない $R^{11} \sim R^{15}$ が、すべて水素原子であってもよく、
- (1-4) 式(1B)において、*hに結合する単結合でない $R^{21} \sim R^{25}$ が、すべて水素原子であってもよく、
- (1-5) 式(1B)において、*i及び*jに結合する単結合でない $R^{31} \sim R^{35}$ が、すべて水素原子であってもよく、
- (1-6) 式(1C)において、*k、*l及び*mに結合する単結合でない $R^{41} \sim R^{48}$ が、すべて水素原子であってもよく、
- (1-7) 式(1A-1)において、*gに結合する単結合でない $R^{11} \sim R^{15}$ が、すべて水素原子であってもよく、
- (1-8) 式(1B-1)において、*hに結合する単結合でない $R^{21} \sim R^{25}$ が、すべて水素原子であってもよく、
- (1-9) 式(1B-1)において、*jに結合する単結合でない $R^{31} \sim R^{35}$ が、すべて水素原子であってもよく、
- (1-10) 式(1C-1)において、*k及び*mに結合する単結合でない $R^{41} \sim R^{48}$ が、すべて水素原子であってもよく、

(1-11) 式(1A-1a)において、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{14} 及び R^{15} が、すべて水素原子であってもよく、

(1-12) 式(1A-1b)において、 R^{11} 、及び $R^{13} \sim R^{15}$ が、すべて水素原子であってもよく、

(1-13) 式(1A-1c)において、*gに結合する単結合でない $R^{11} \sim R^{15}$ が、すべて水素原子であってもよい。

[0159] 上記したように、本明細書において使用する「水素原子」は軽水素原子、重水素原子、及び三重水素原子を包含する。従って、発明化合物は天然由来の重水素原子を含んでいてもよい。

又、原料化合物の一部又はすべてに重水素化した化合物を使用することにより、発明化合物に重水素原子を意図的に導入してもよい。従って、本発明の一態様において、発明化合物は少なくとも1個の重水素原子を含む。即ち、発明化合物(1)は、式(1)で表される化合物であって、該化合物に含まれる水素原子の少なくとも一つが重水素原子である化合物であってもよい。

[0160] 式(1)で表される化合物において、

$A_{r1} \sim A_{r3}$ が表す置換もしくは無置換のアリール基又は複素環基が有する水素原子；

Lが表す置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の(2+p)価の芳香族炭化水素環が有する水素原子；

$R^1 \sim R^6$ 、 R^{10} 、 R^c 、及び R^d が表す水素原子； $R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d が表す置換もしくは無置換のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、アリール基、又は複素環基が有する水素原子；

$R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d における $R_{901} \sim R_{907}$ が表す水素原子； $R^1 \sim R^6$ 、 R^c 、及び R^d における $R_{901} \sim R_{907}$ が表す置換もしくは無置換のアルキル基、シクロアルキル基、アリール基、又は複素環基が有する水素原子；

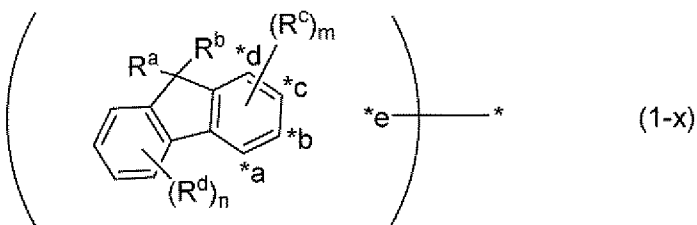
R^a 及び R^b が表す置換もしくは無置換のアルキル基又はアリール基が有する水素原子；

式（１）を構成するピリミジン環が有する水素原子；

式（１）を構成する下記式（１－ｘ）で表される構造に含まれる、 $R^a \sim R^d$ 以外の水素原子；

から選ばれる少なくとも一つの水素原子が重水素原子であってもよい。

[化30]



ただし、式（１－ｘ）中、 $*$ は L への結合位置であり、 $R^a \sim R^d$ 、 $*a$ 、 $*b$ 、 $*c$ 、 $*d$ 、及び $*e$ は式（１）で定義したとおりである。

[0161] 発明化合物の重水素化率は使用する原料化合物の重水素化率に依存する。所定の重水素化率の原料を用いたとしても、天然由来の一定の割合で軽水素同位体が含まれ得る。従って、下記で示される発明化合物の重水素化率の態様は、単に化学式で表される重水素原子の数をカウントして求められる割合に対し、天然由来の微量の同位体を考慮した比率が含まれる。

発明化合物の重水素化率は、好ましくは１％以上、より好ましくは３％以上、更に好ましくは５％以上、より更に好ましくは１０％以上、より更に好ましくは５０％以上である。

[0162] 発明化合物は、重水素化された化合物と重水素化されていない化合物を含む混合物、異なる重水素化率を有する２以上の化合物の混合物であってもよい。このような混合物の重水素化率は、好ましくは１％以上、より好ましくは３％以上、更に好ましくは５％以上、より更に好ましくは１０％以上、より更に好ましくは５０％以上、かつ、１００％未満である。

また、発明化合物中の全水素原子数に対する重水素原子数のそれぞれの割合は、好ましくは１％以上、より好ましくは３％以上、更に好ましくは５％以上、より更に好ましくは１０％以上、かつ、１００％以下である。

[0163] 上記各式の定義に含まれる「置換もしくは無置換の」という場合の置換基

（任意の置換基）の詳細は、「置換もしくは無置換の」という場合の置換基」において記載したとおりである。

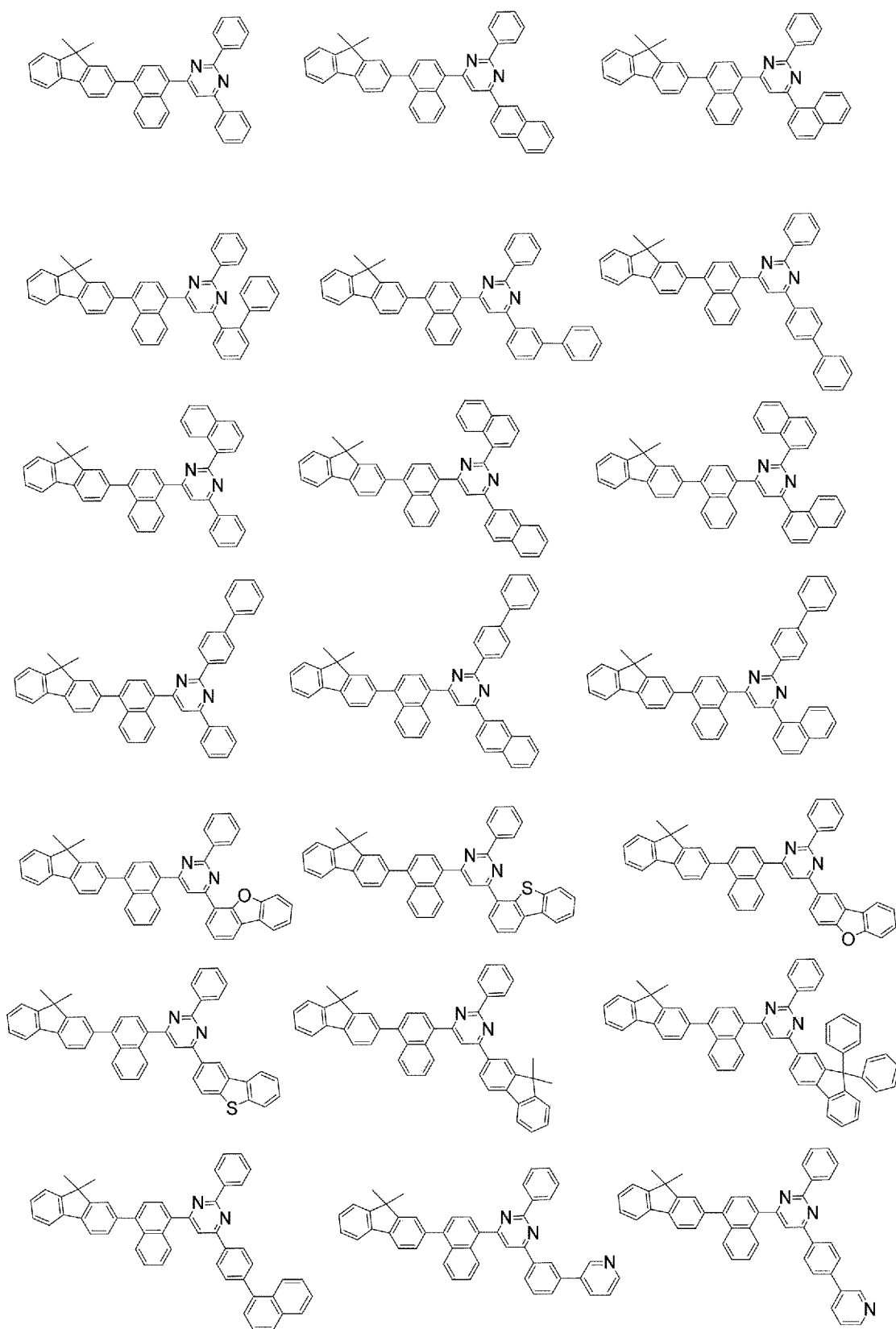
[0164] 発明化合物は、当業者であれば、後述する合成例及び公知の合成方法を参考にして容易に製造することができる。

[0165] 以下に発明化合物の具体例を示すが、以下の例示化合物に限定されるものではない。

下記具体例中、Dは重水素原子を示す。

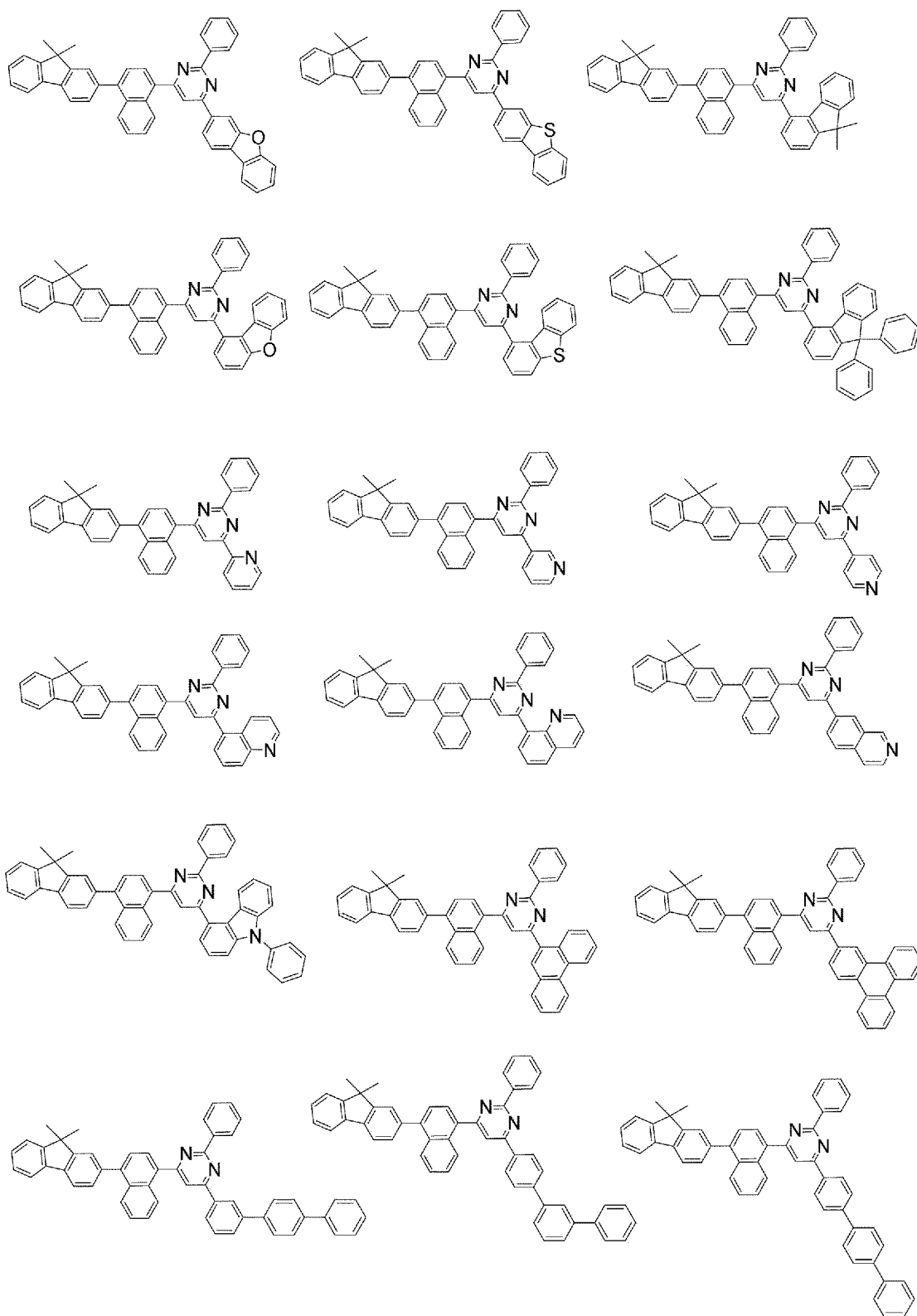
[0166]

[化31]



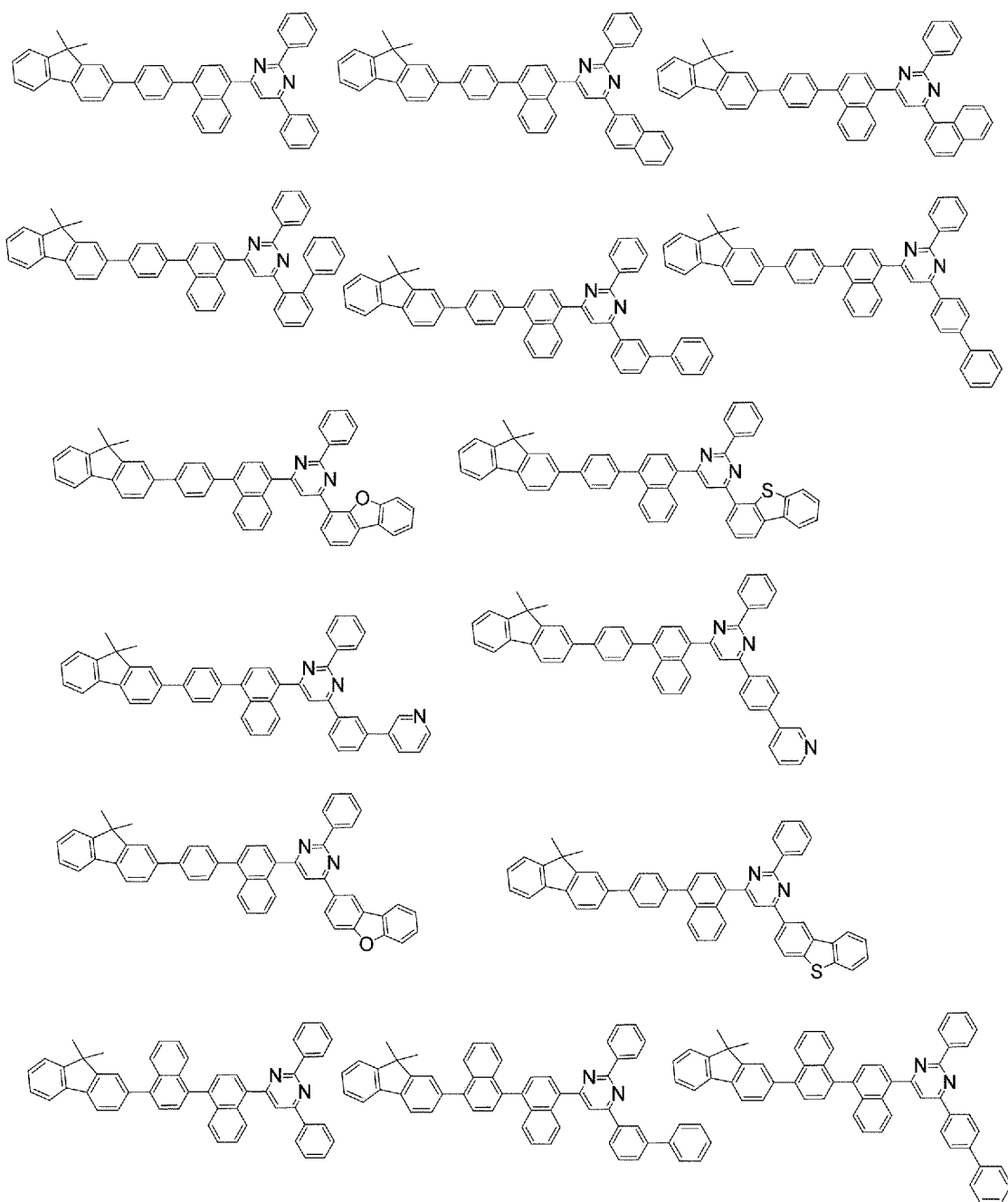
[0167]

[化32]



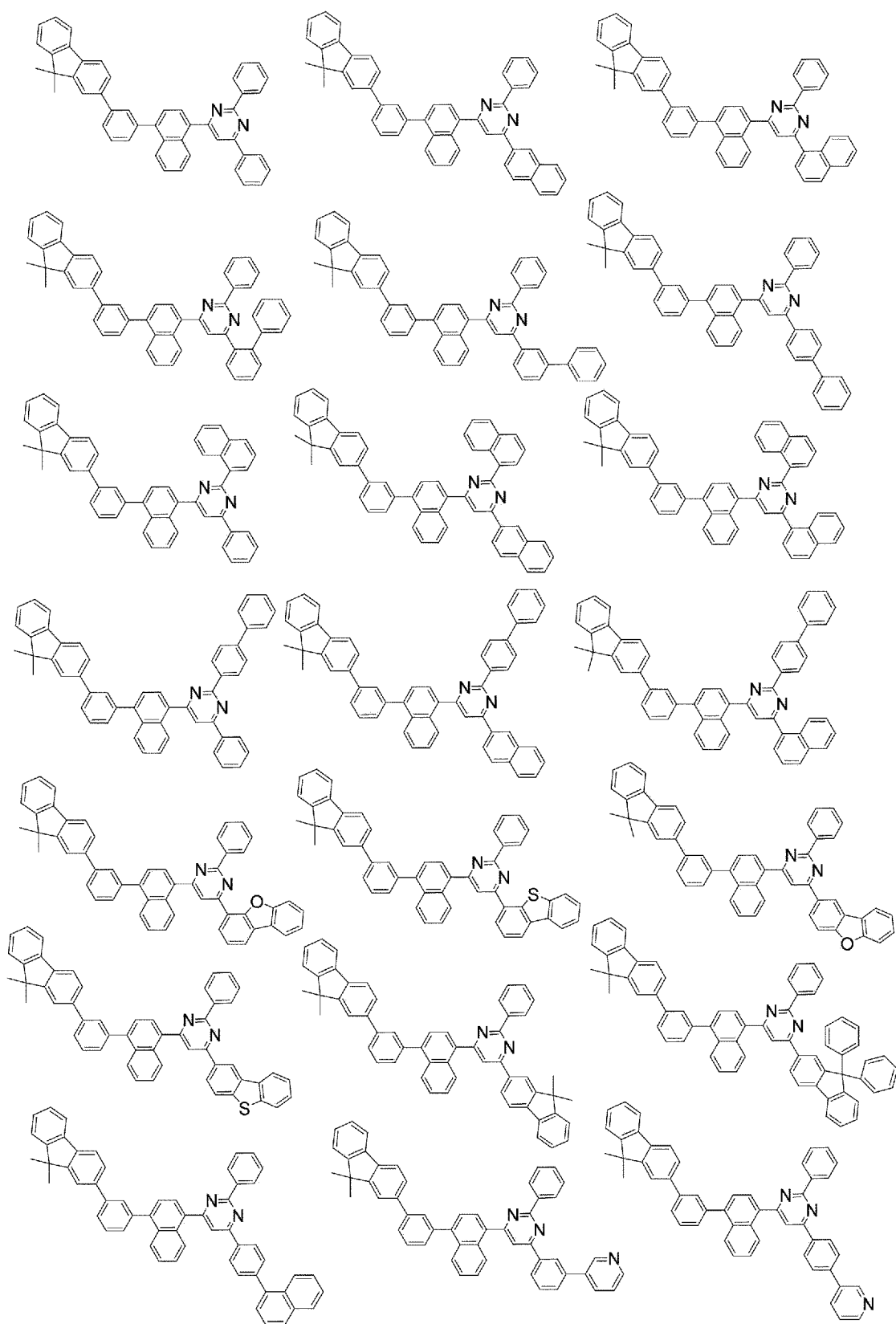
[0168]

[化33]



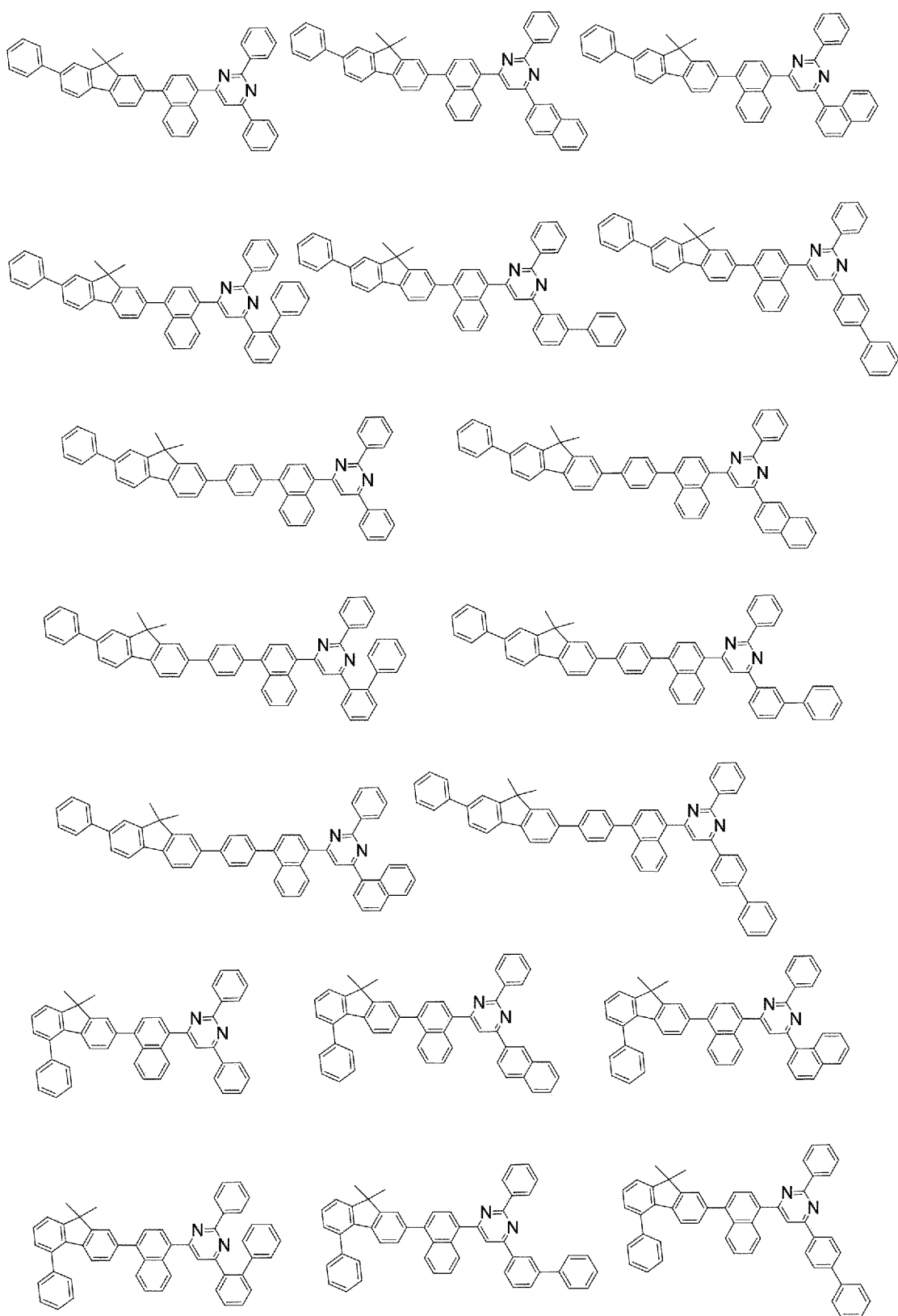
[0169]

[化34]



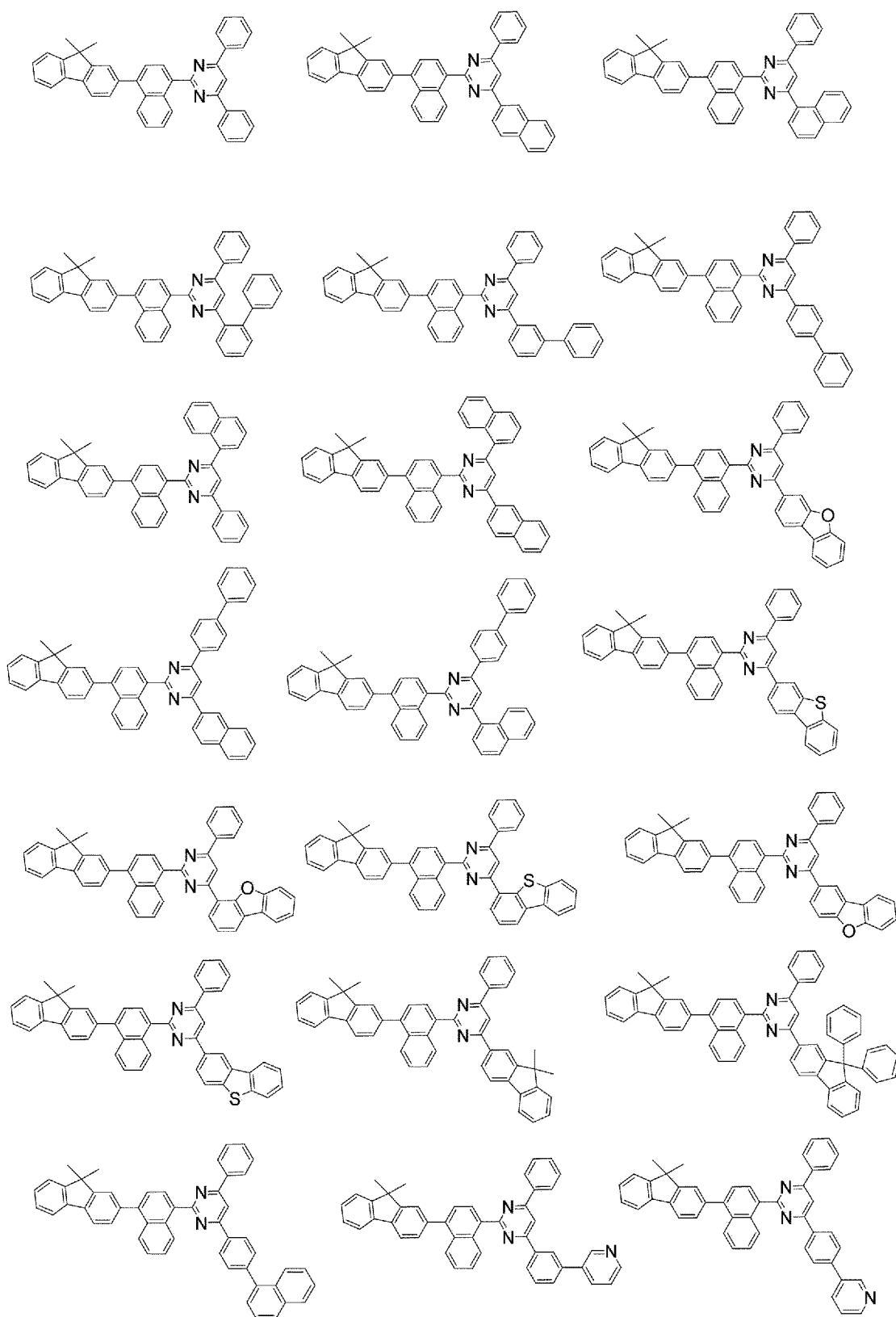
[0170]

[化35]



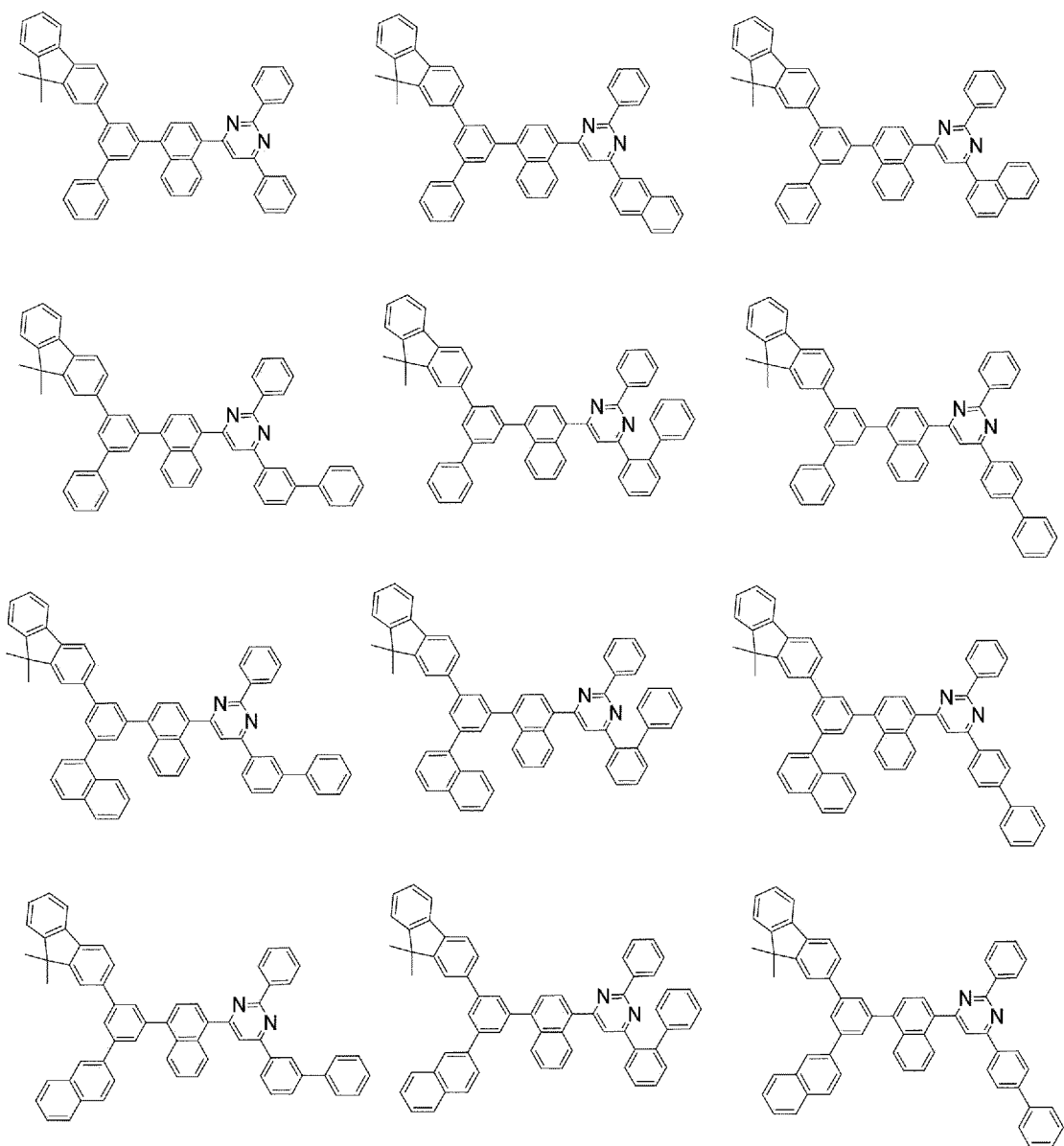
[0171]

[化37]



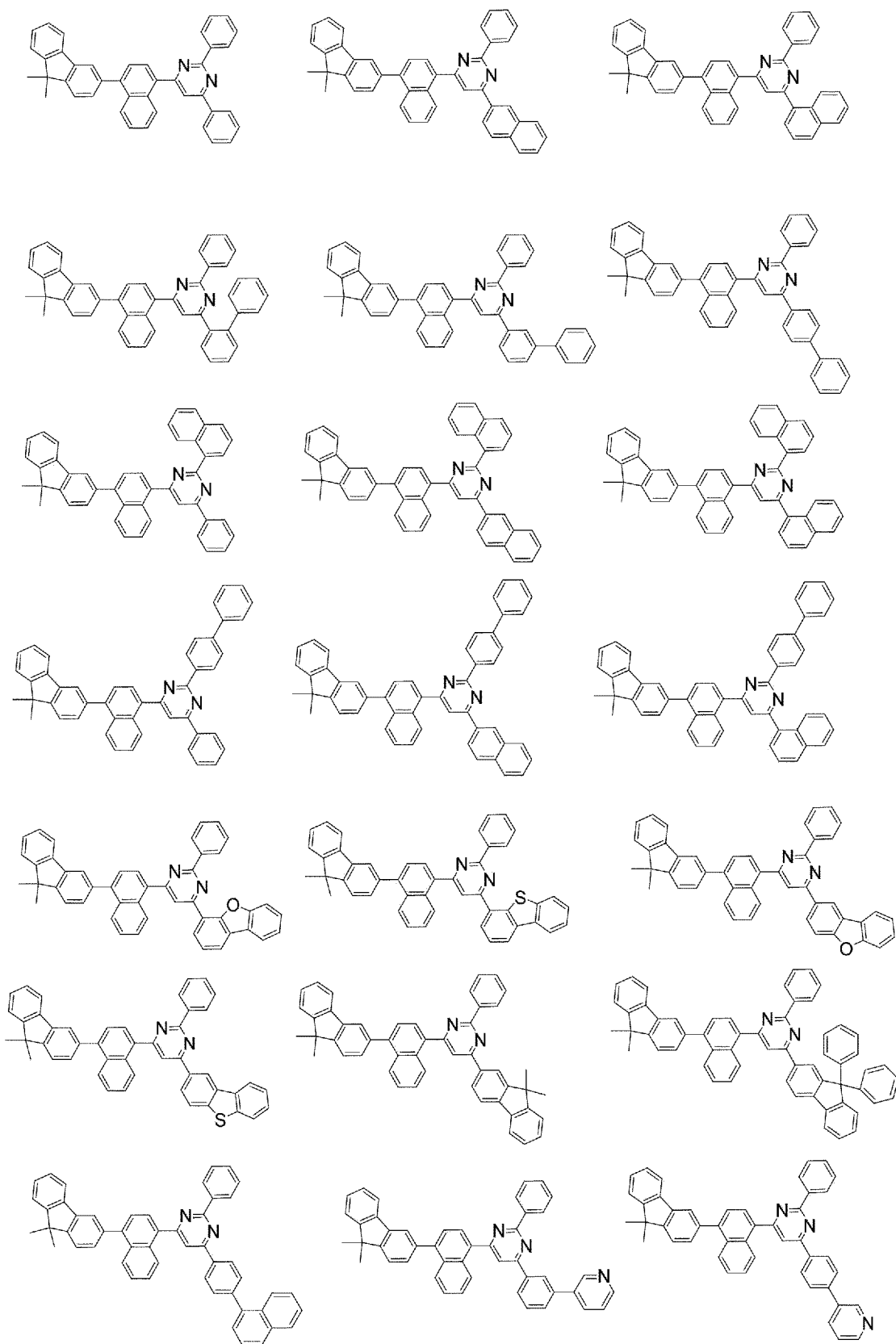
[0173]

[化38]



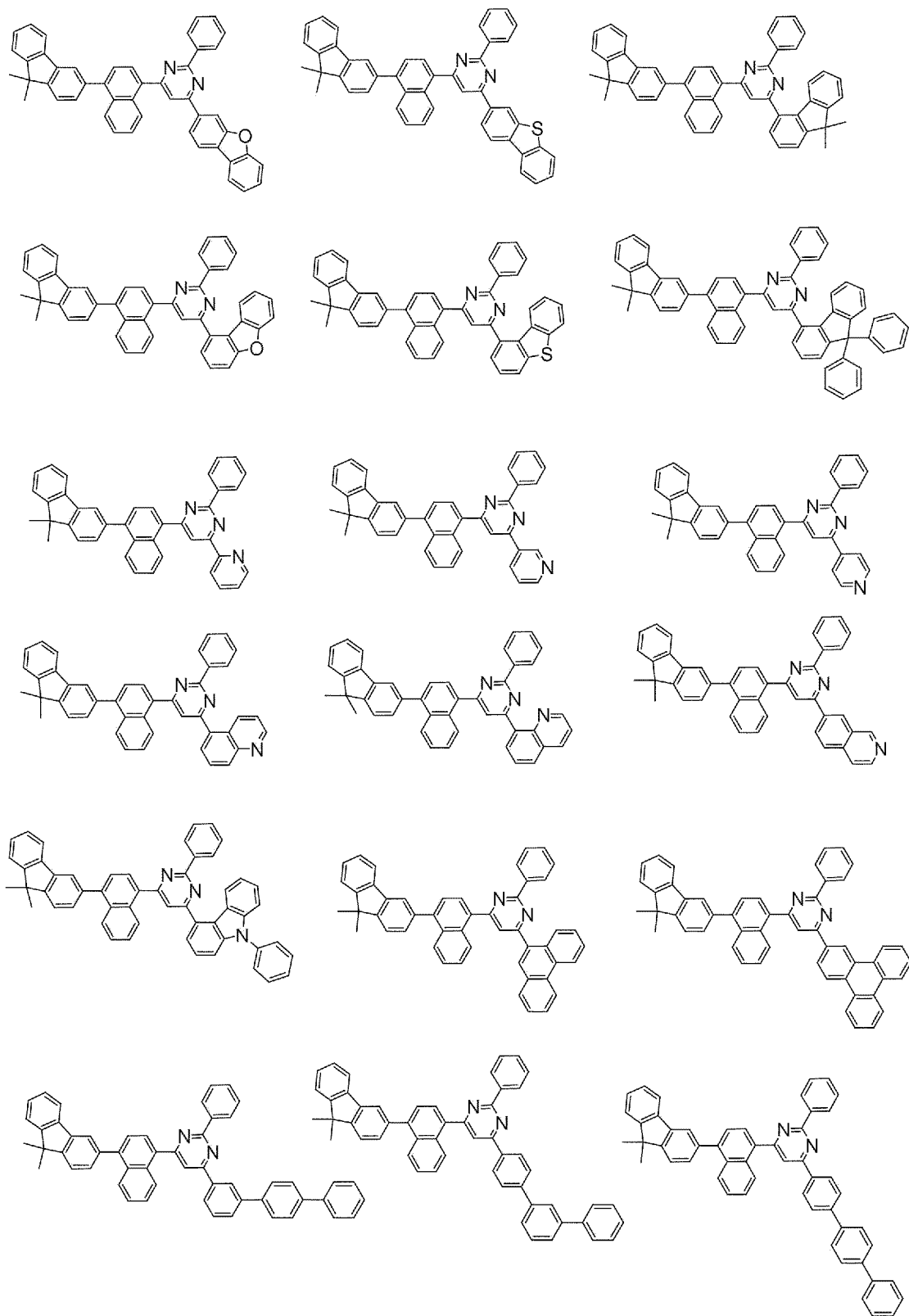
[0174]

[化39]



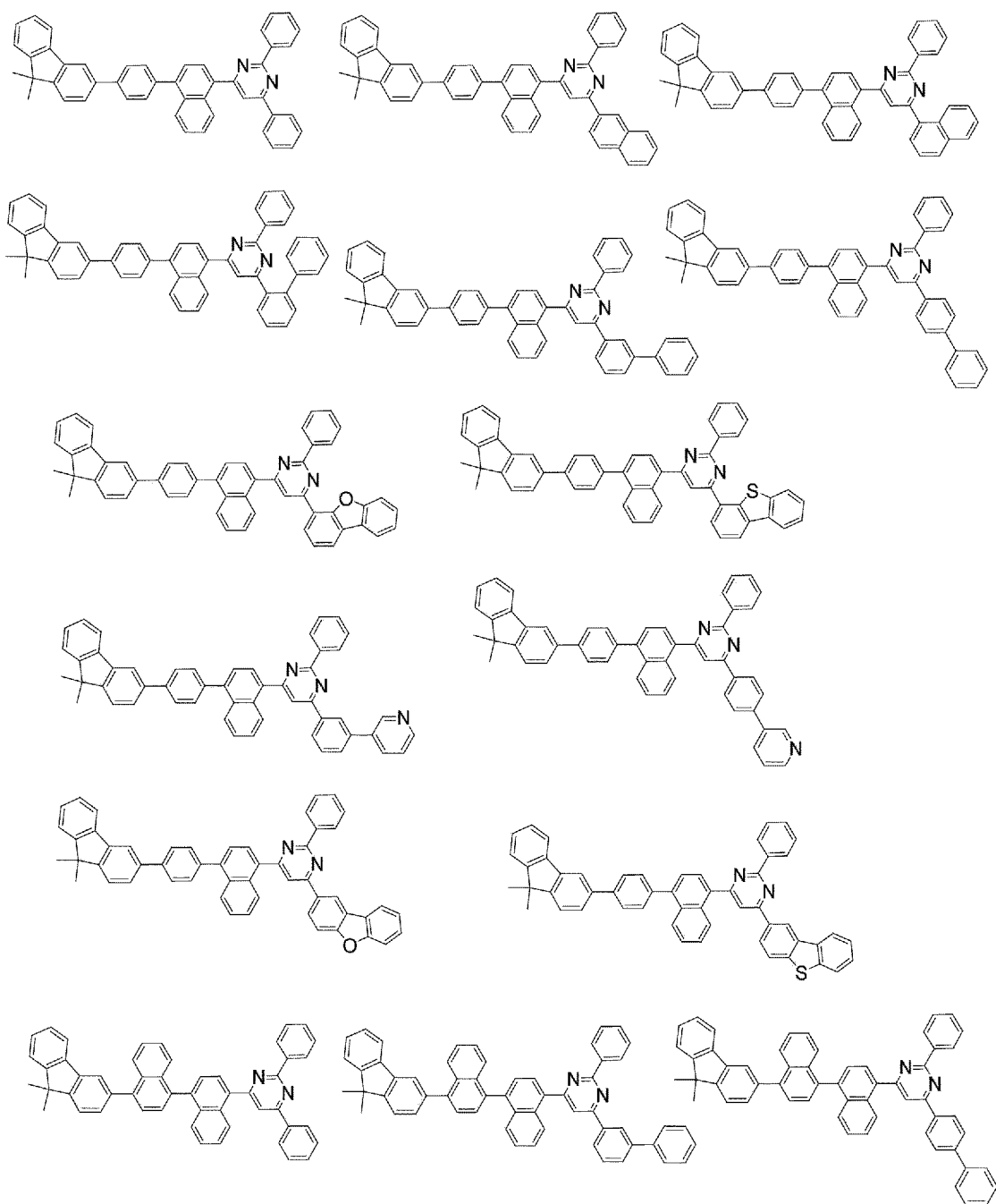
[0175]

[化40]



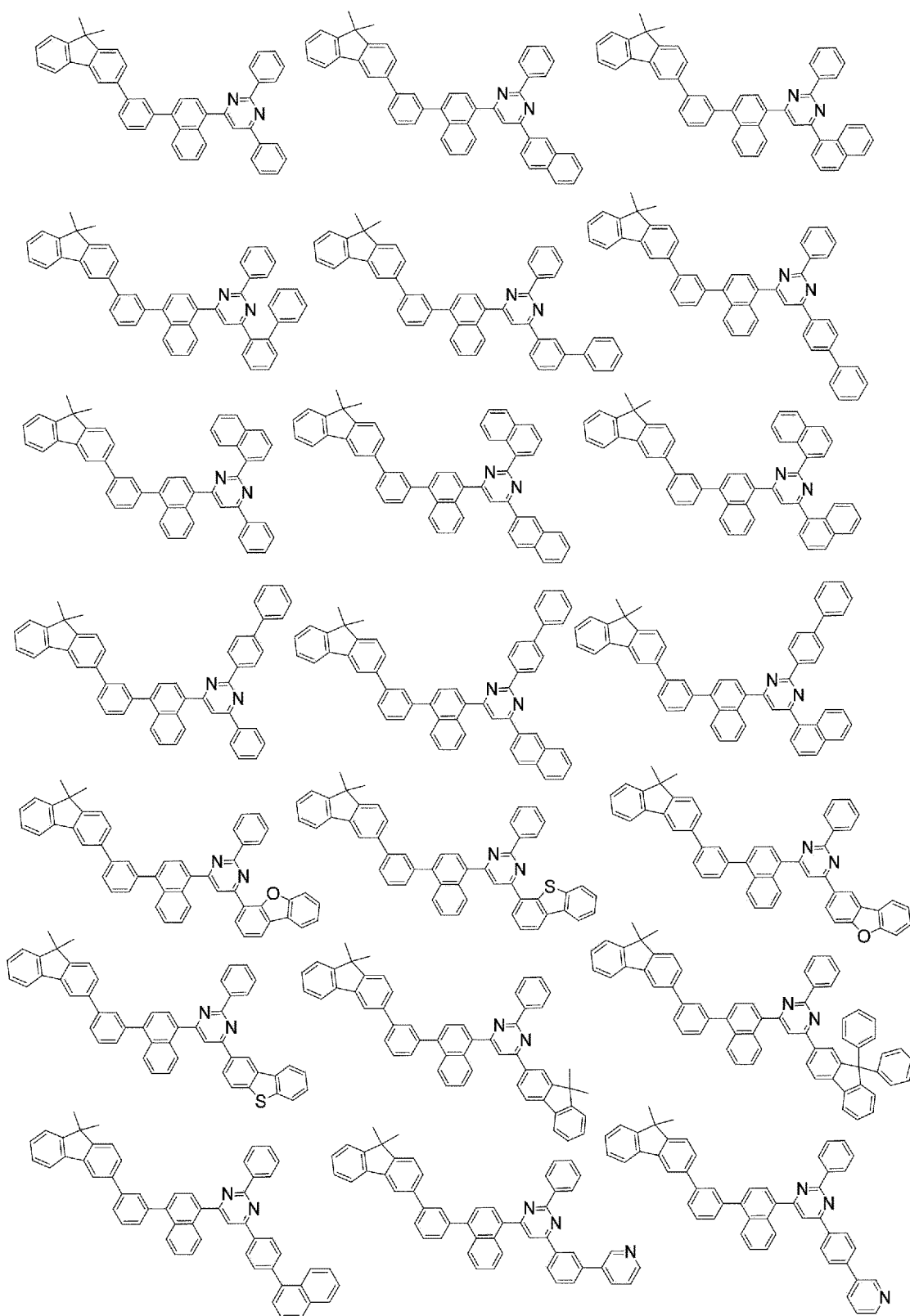
[0176]

[化41]



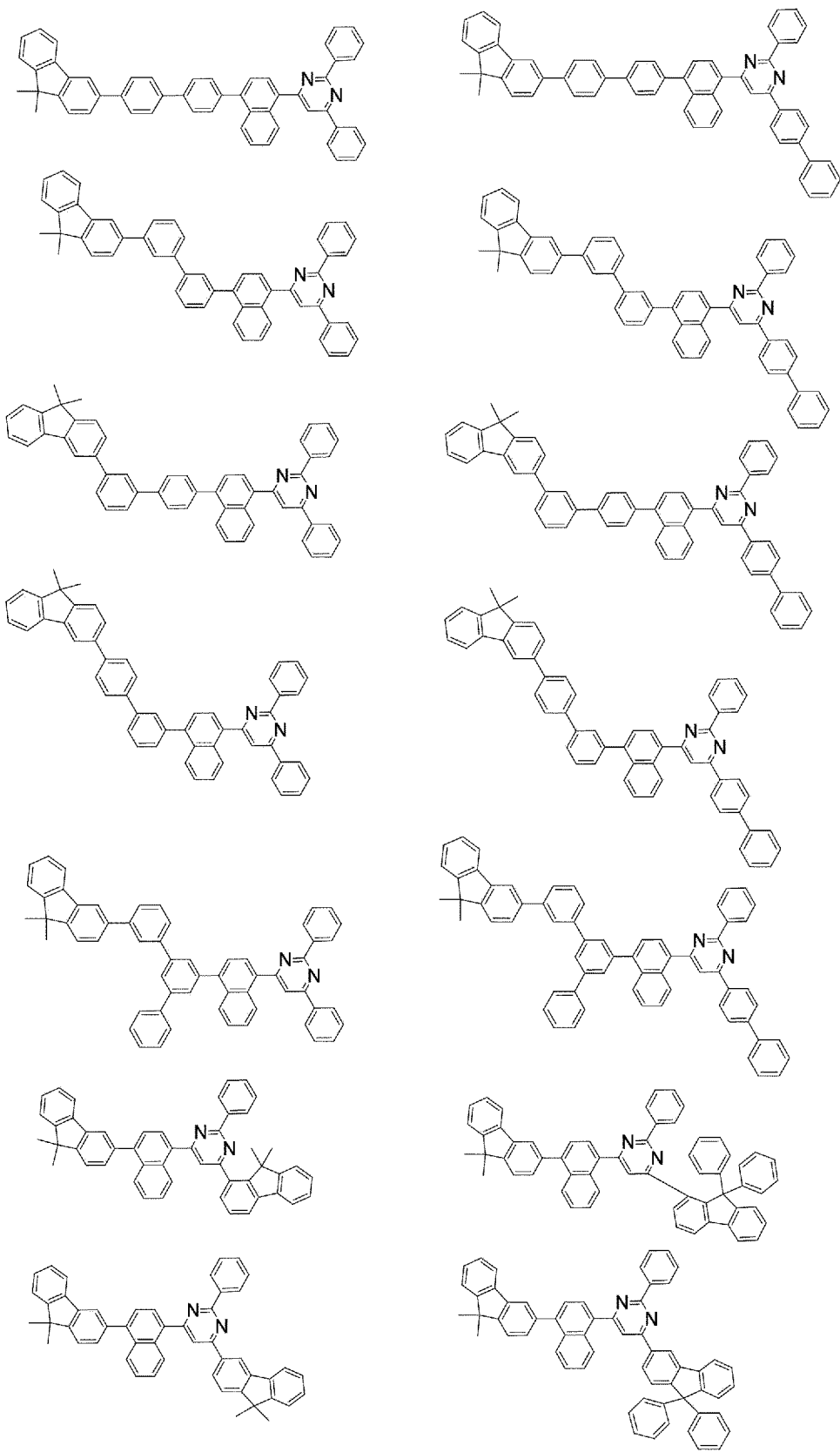
[0177]

[化42]



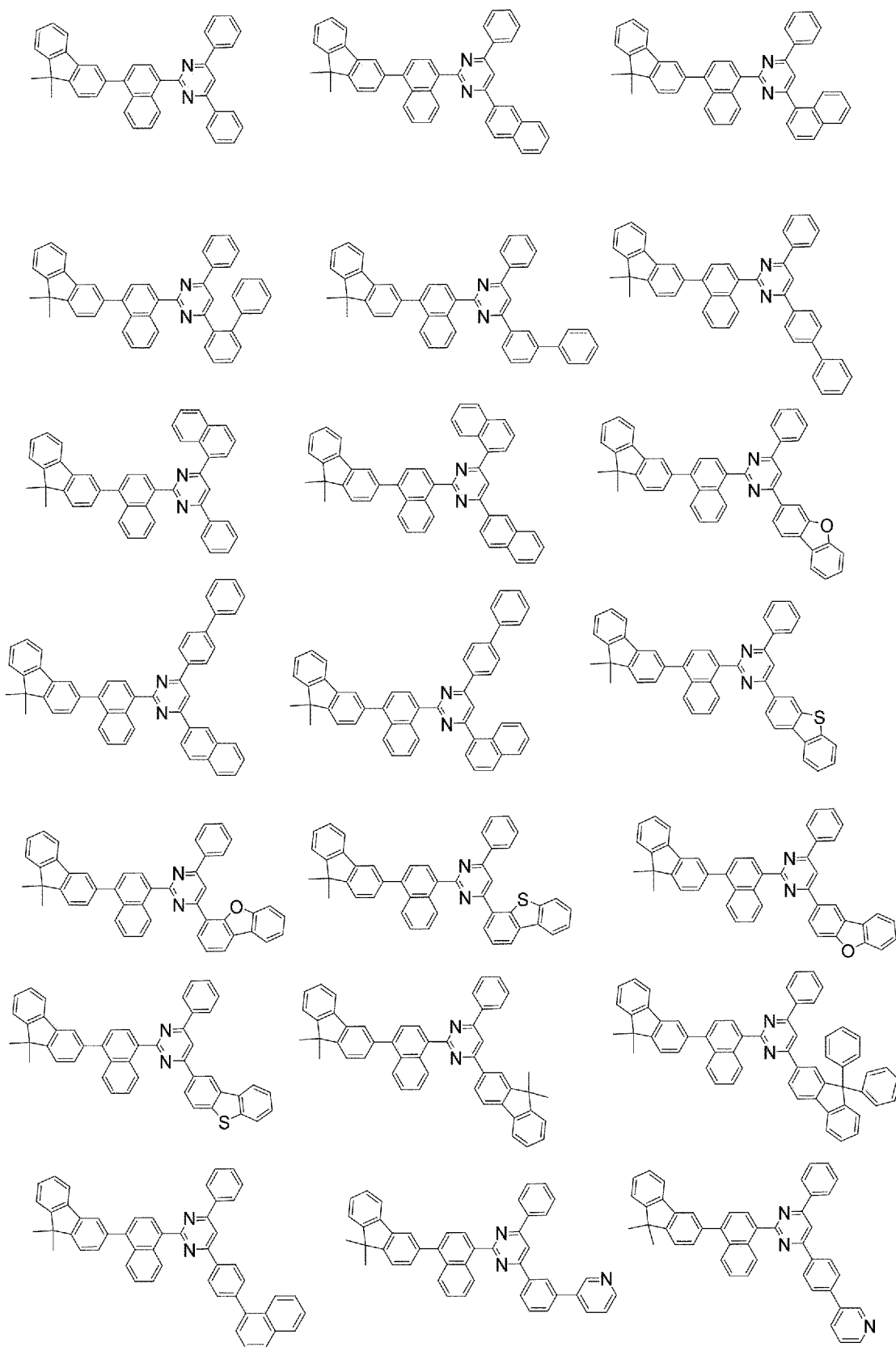
[0178]

[化43]



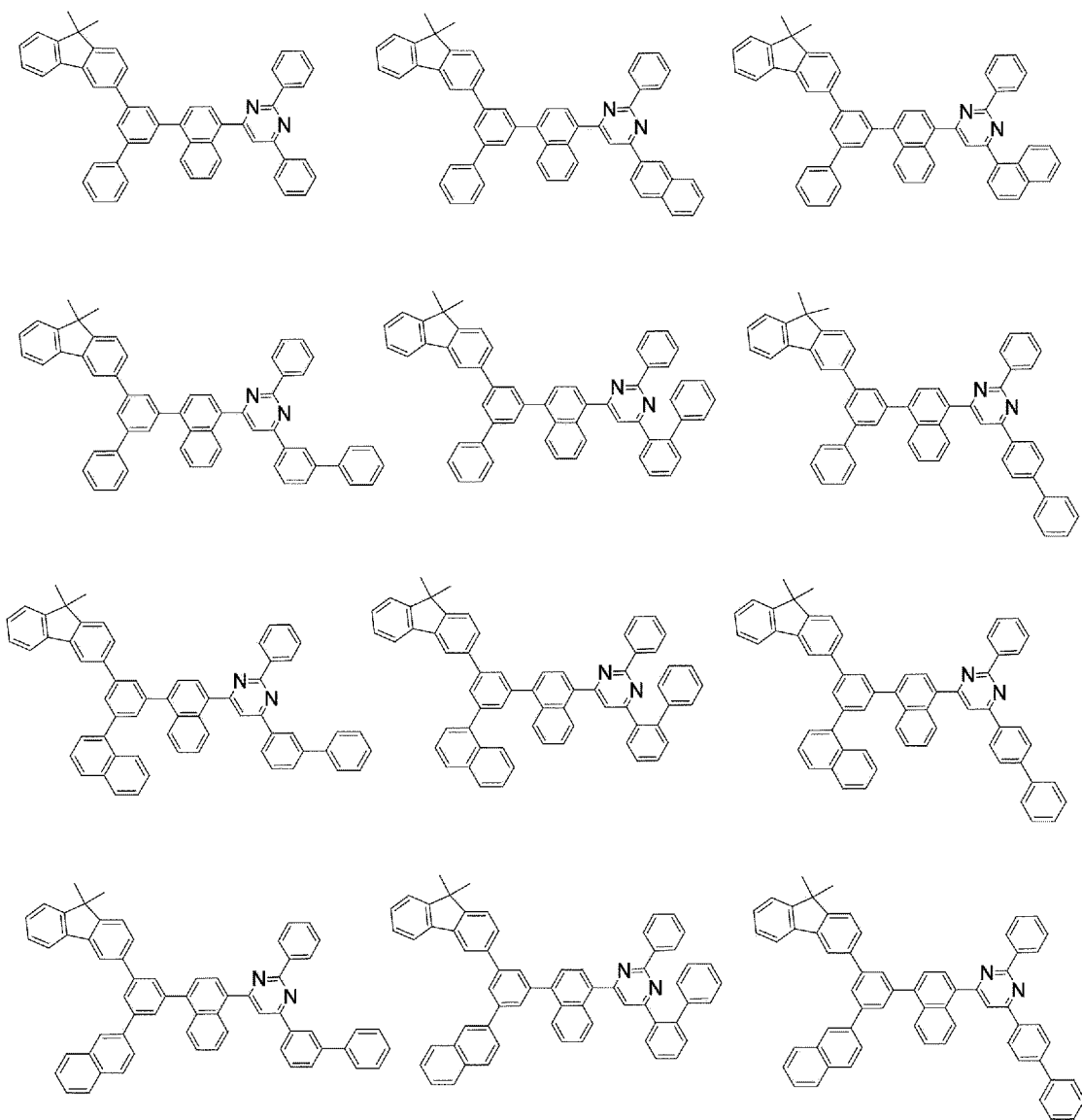
[0179]

[化44]



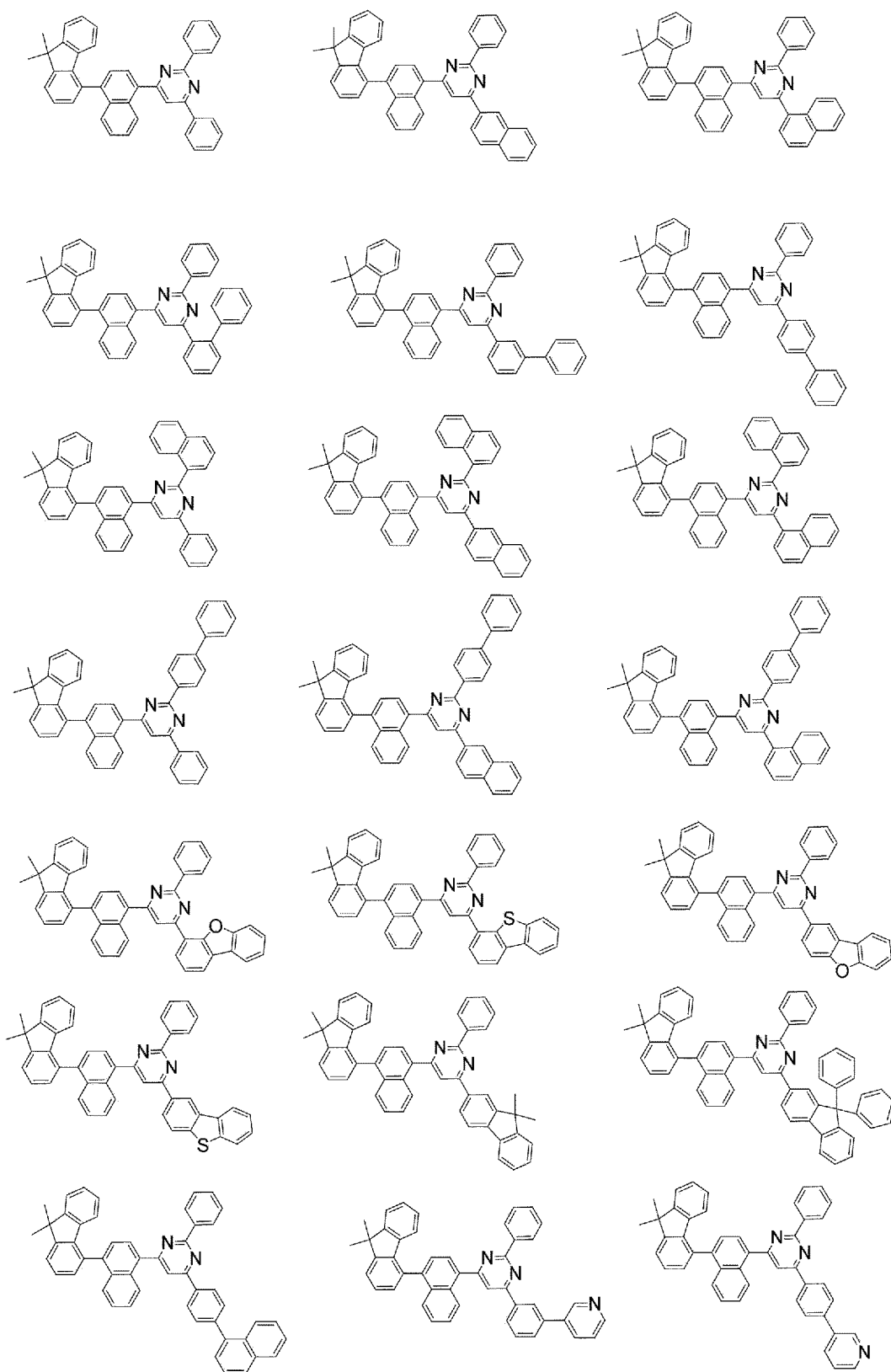
[0180]

[化45]



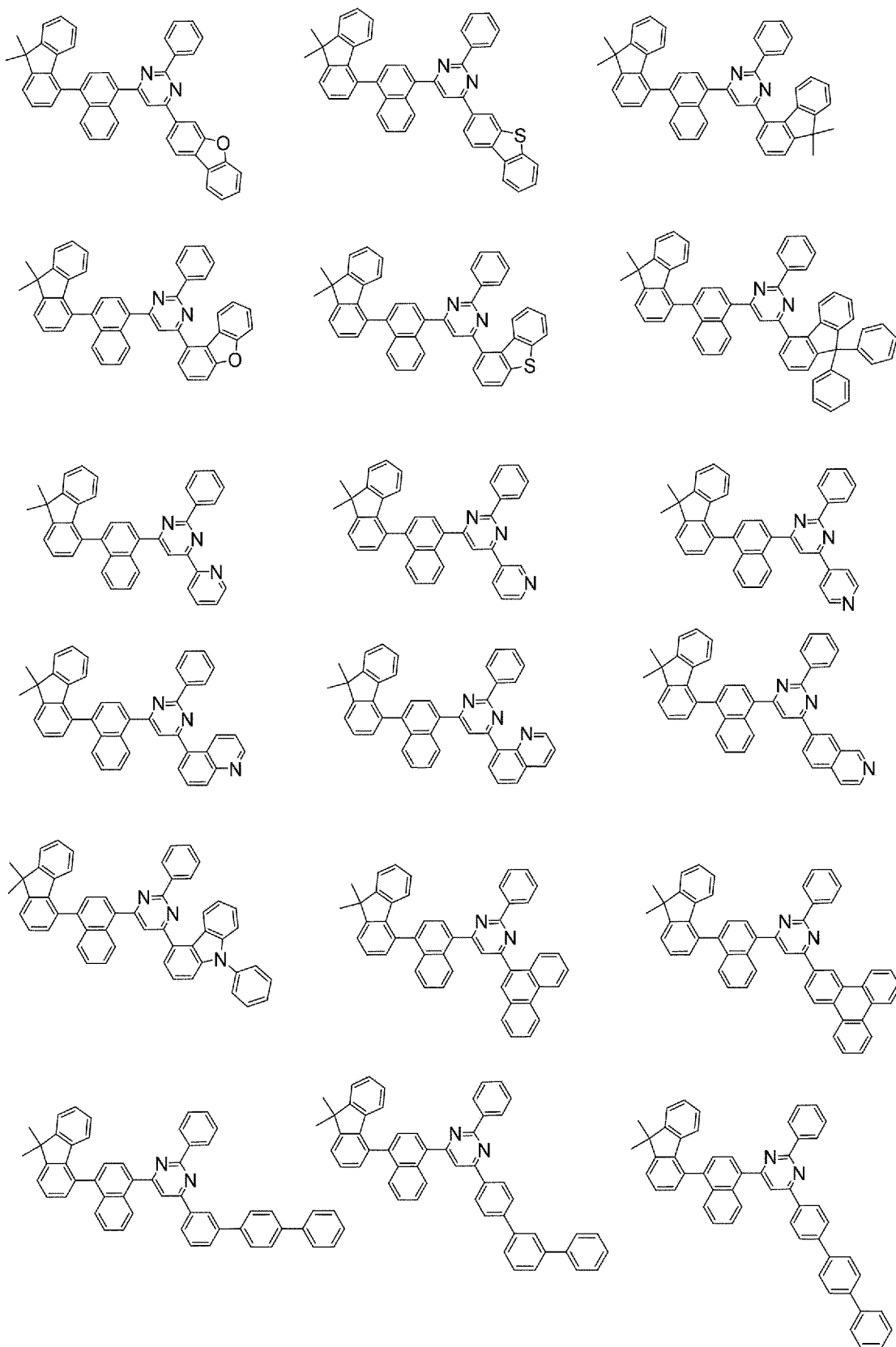
[0181]

[化46]



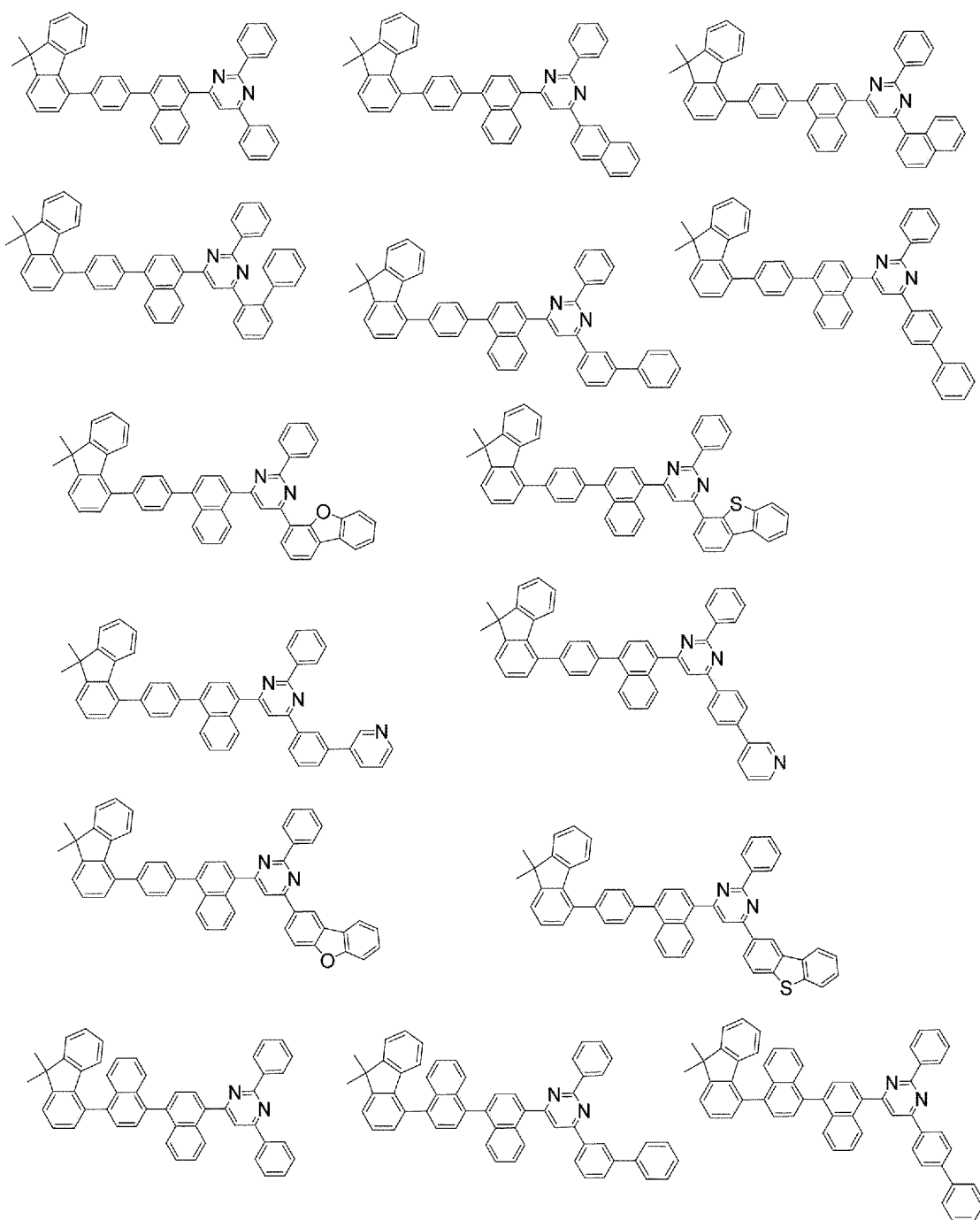
[0182]

[化47]



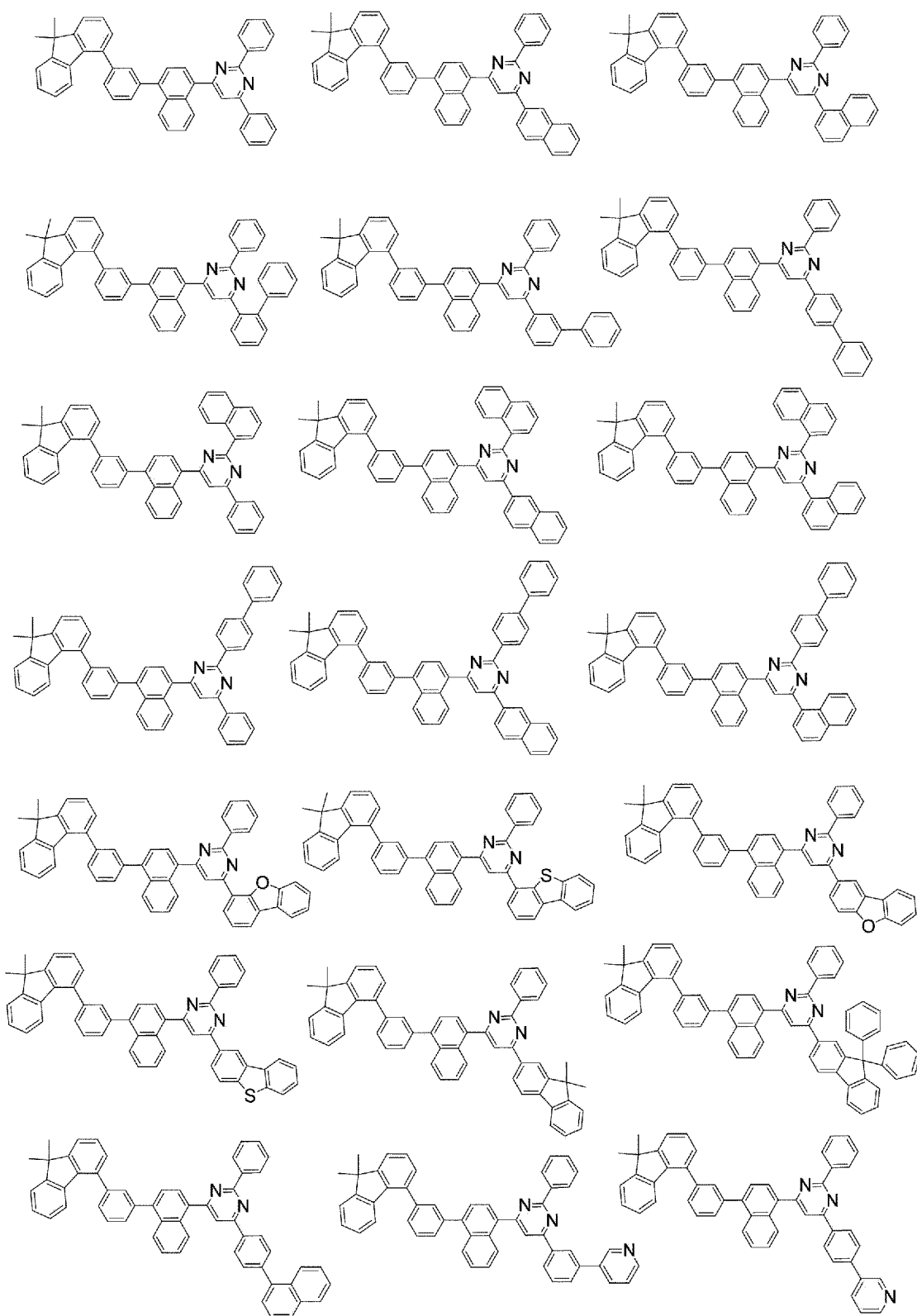
[0183]

[化48]



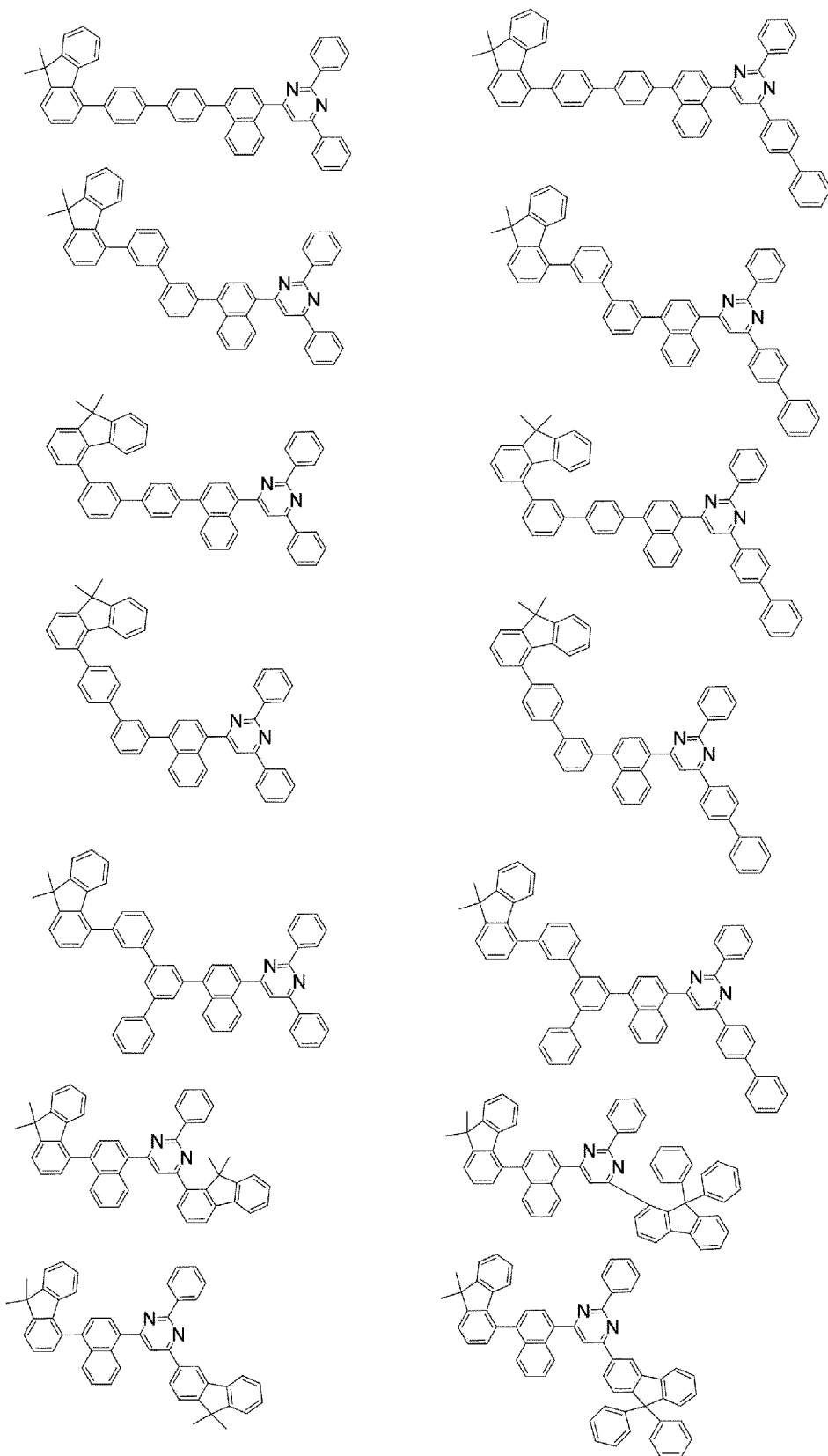
[0184]

[化49]



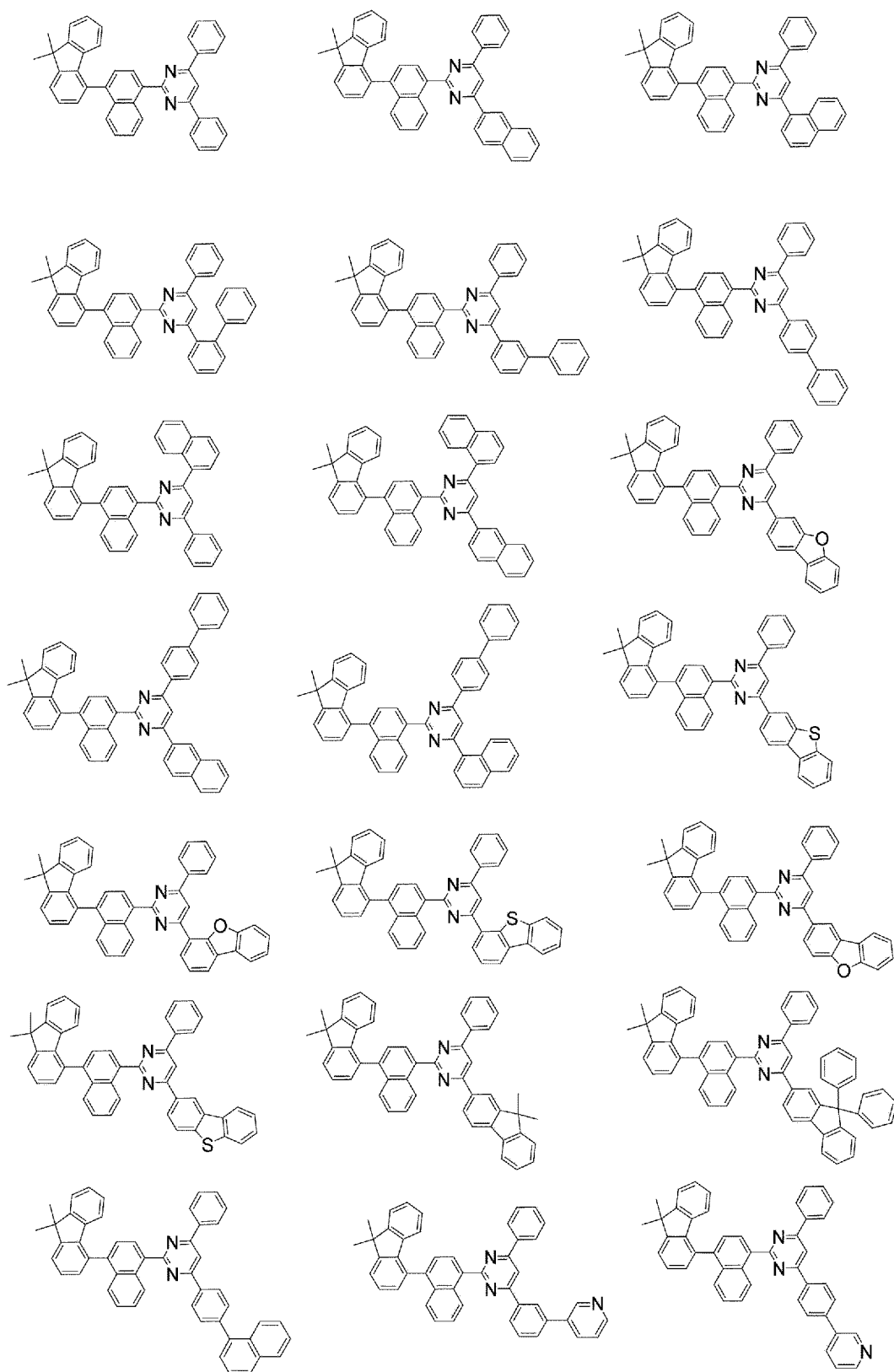
[0185]

[化50]



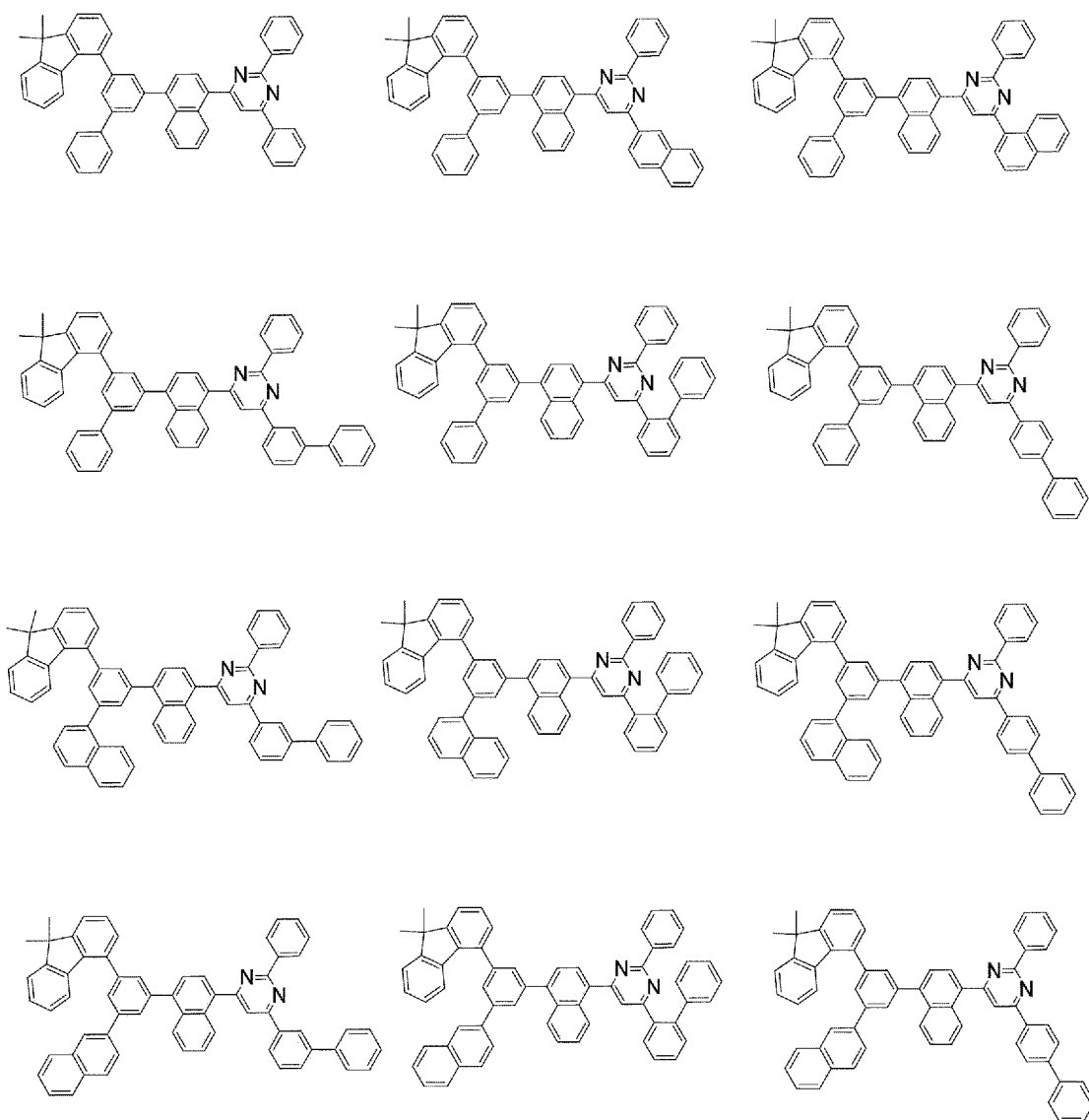
[0186]

[化51]



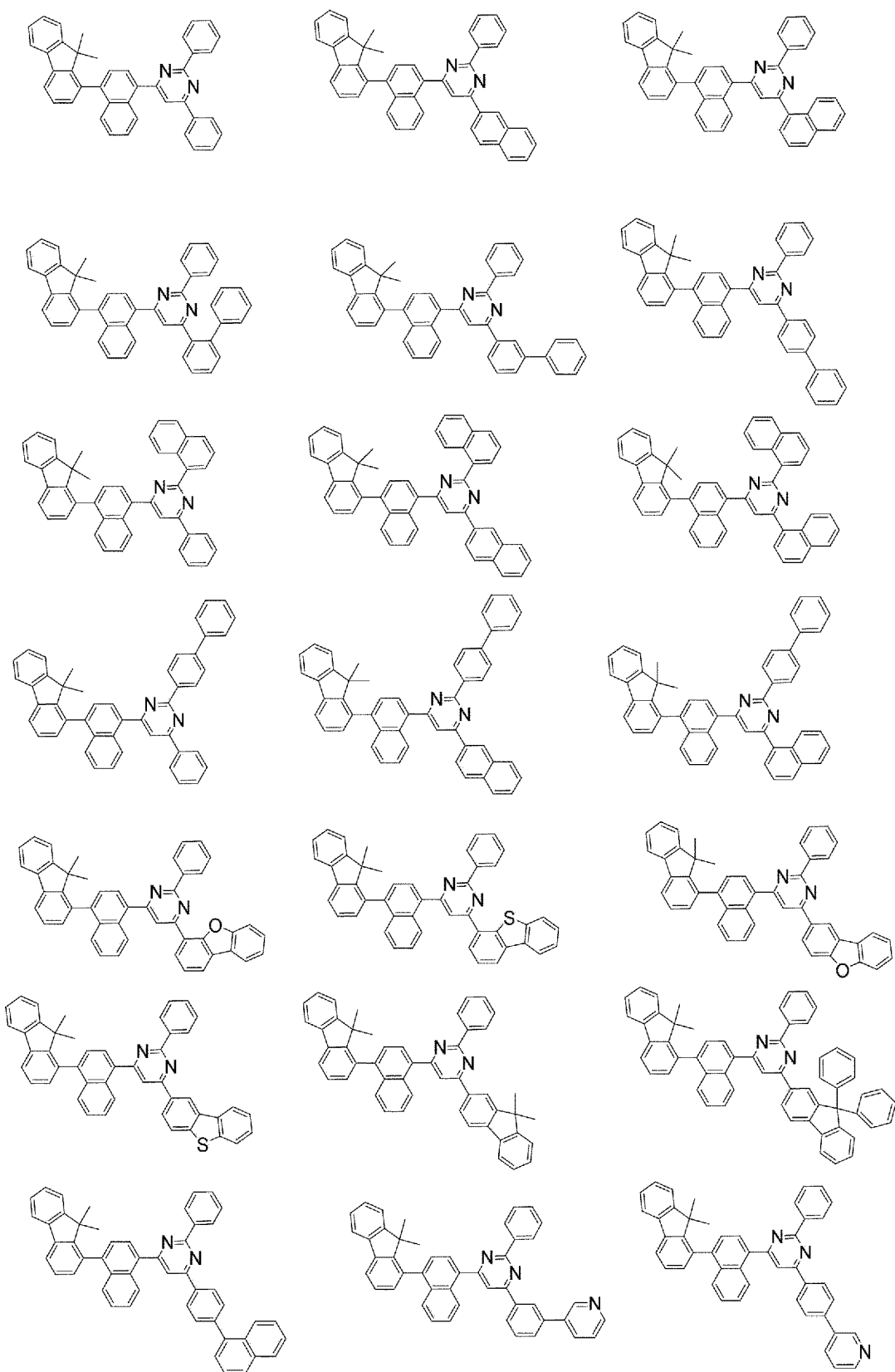
[0187]

[化52]



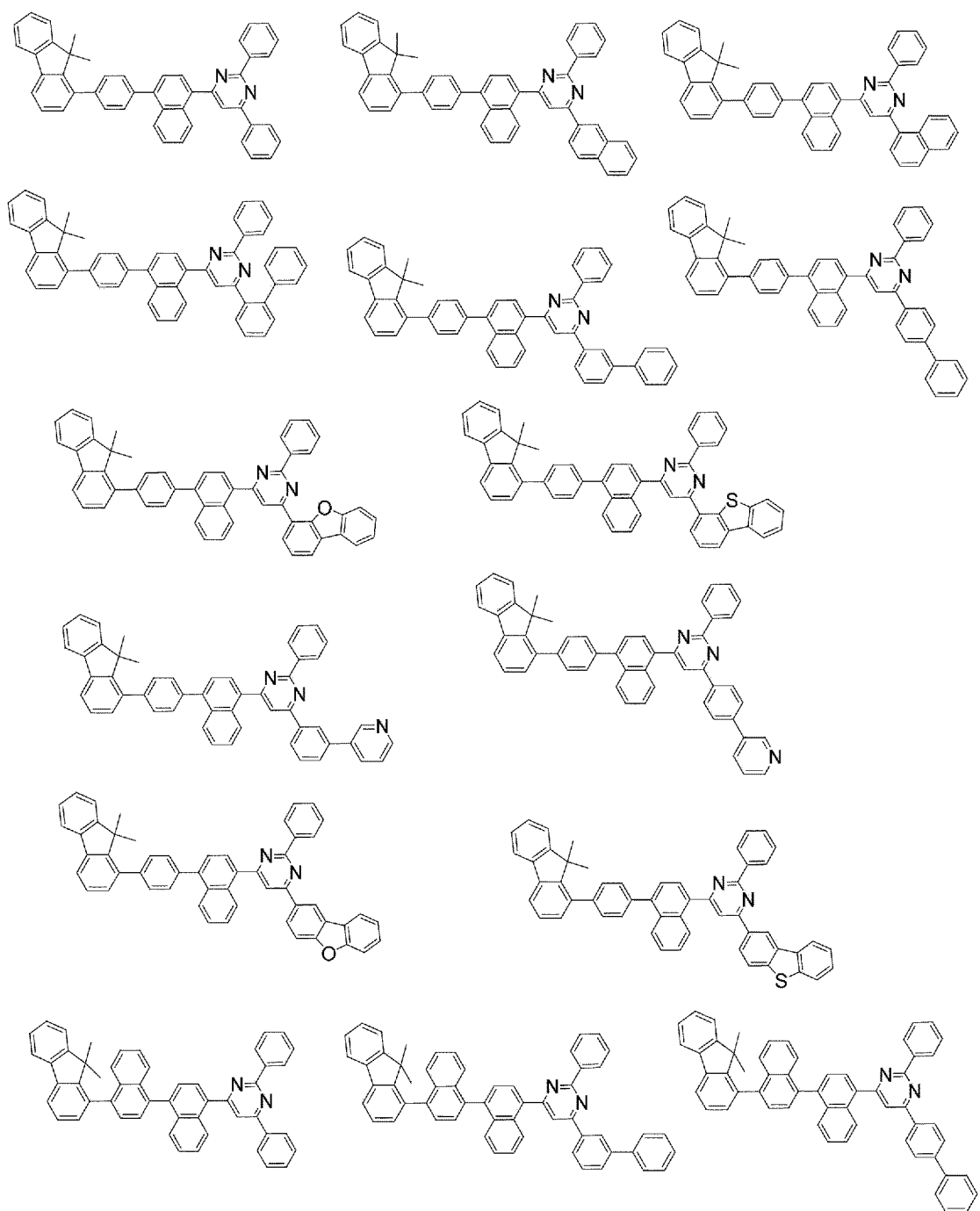
[0188]

[化53]



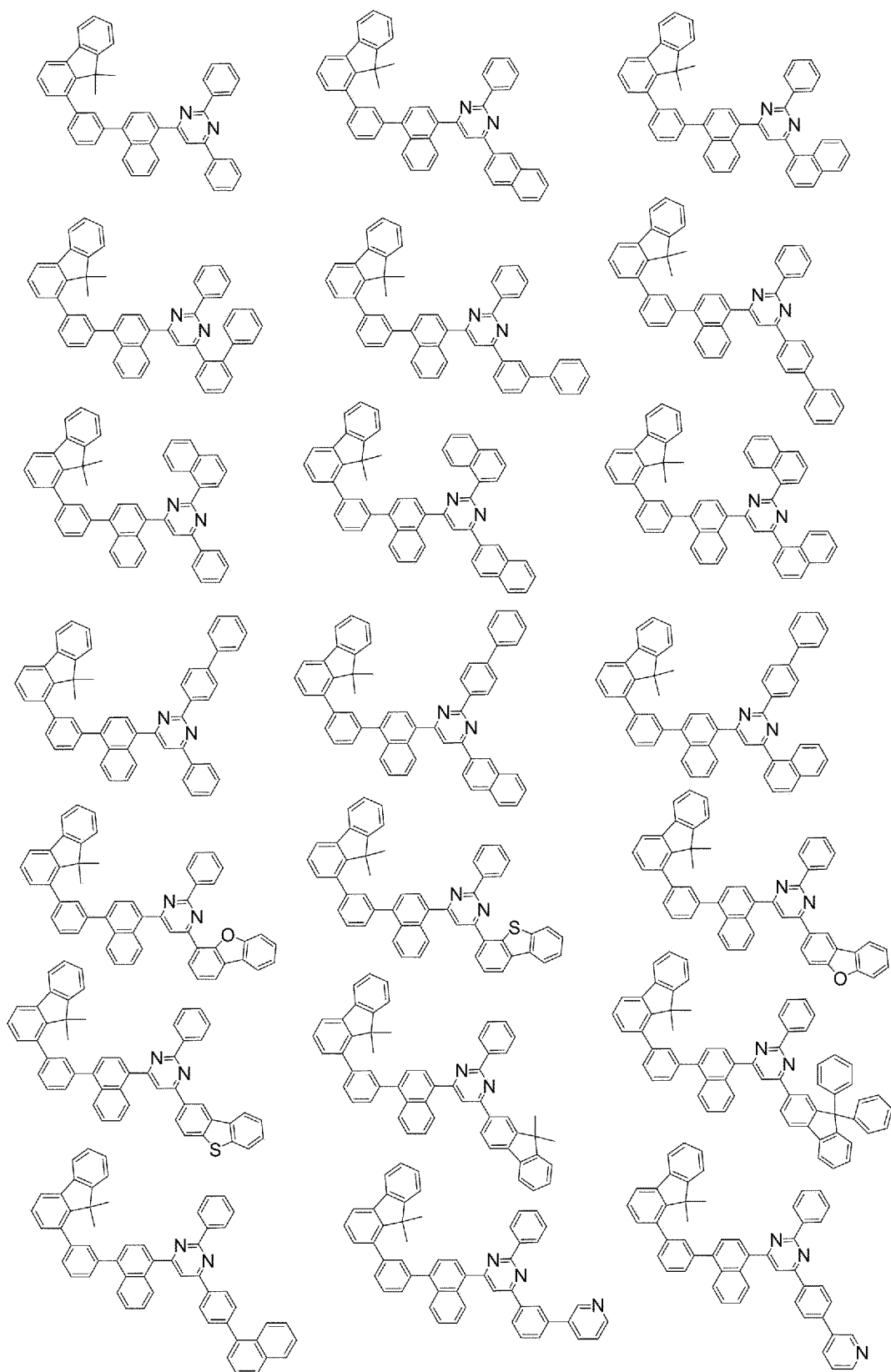
[0189]

[化55]



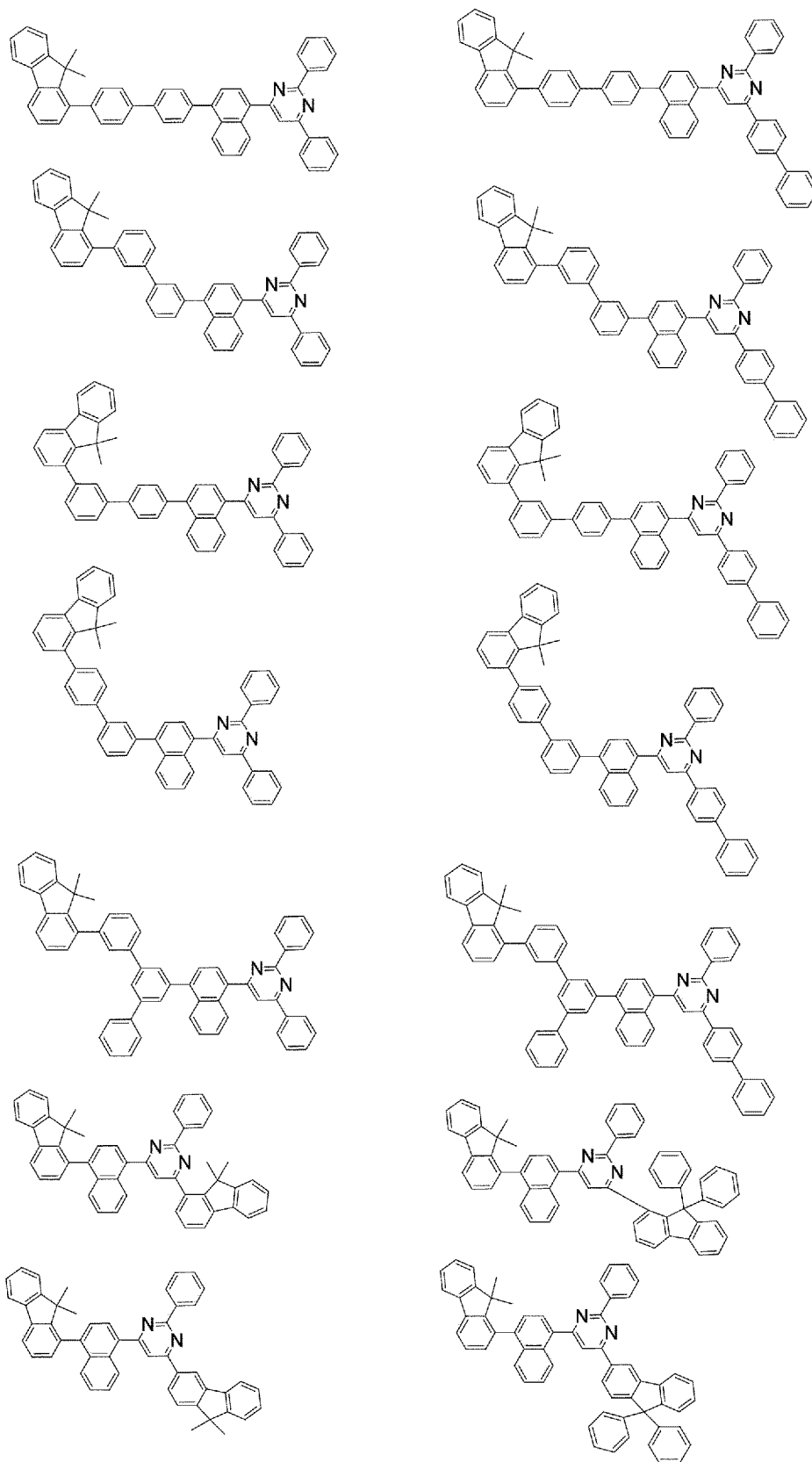
[0191]

[化56]



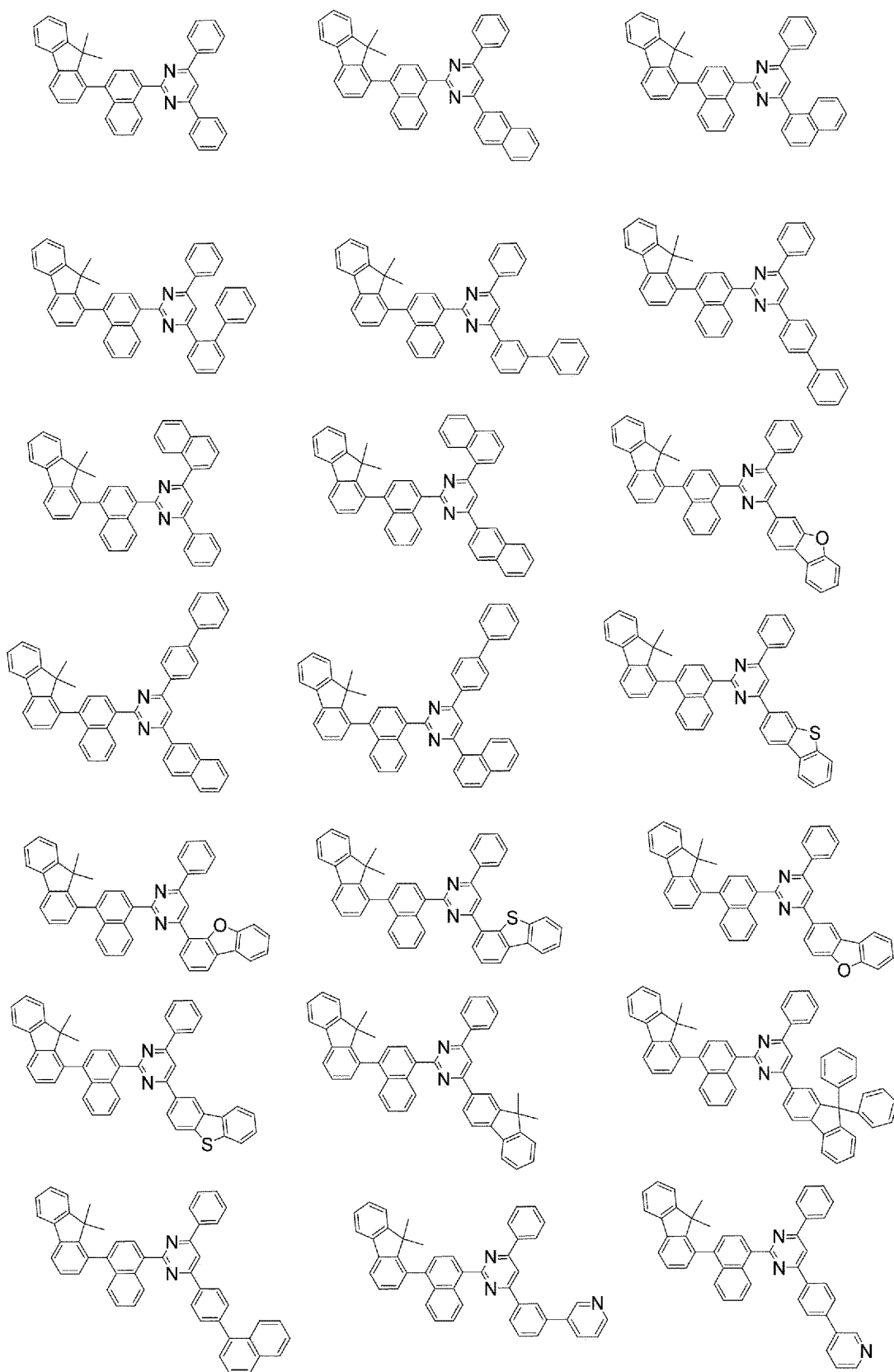
[0192]

[化57]



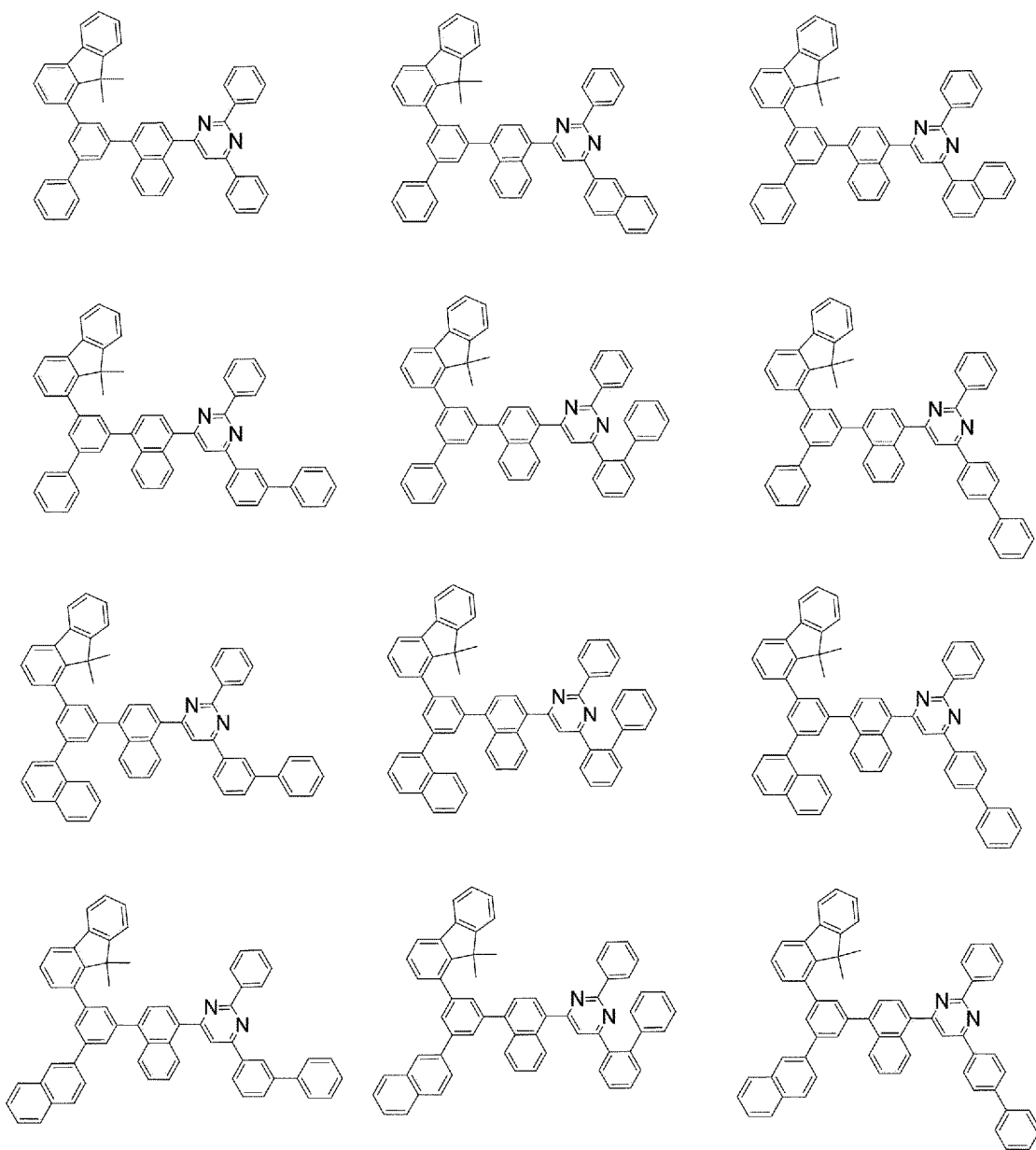
[0193]

[化58]



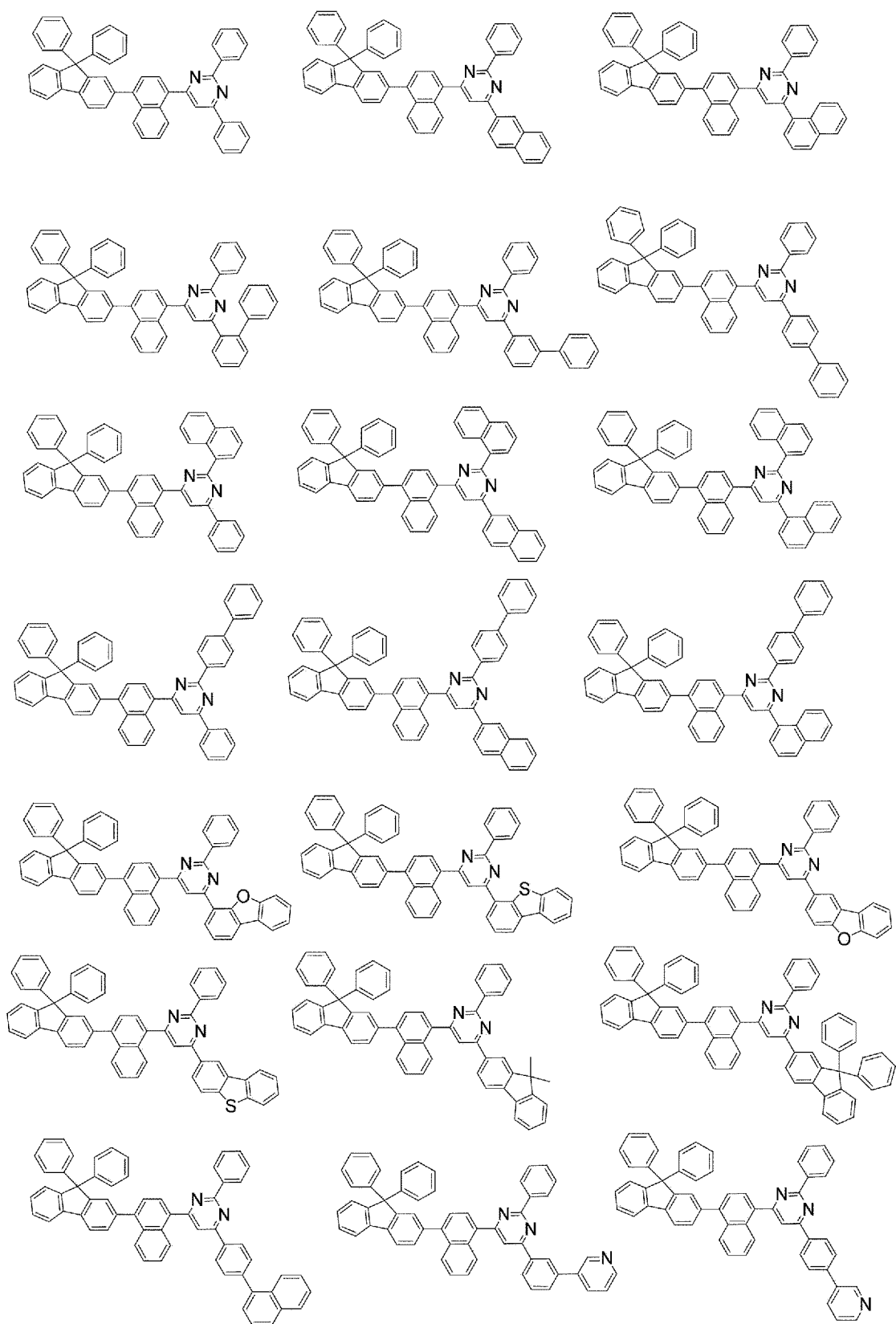
[0194]

[化59]



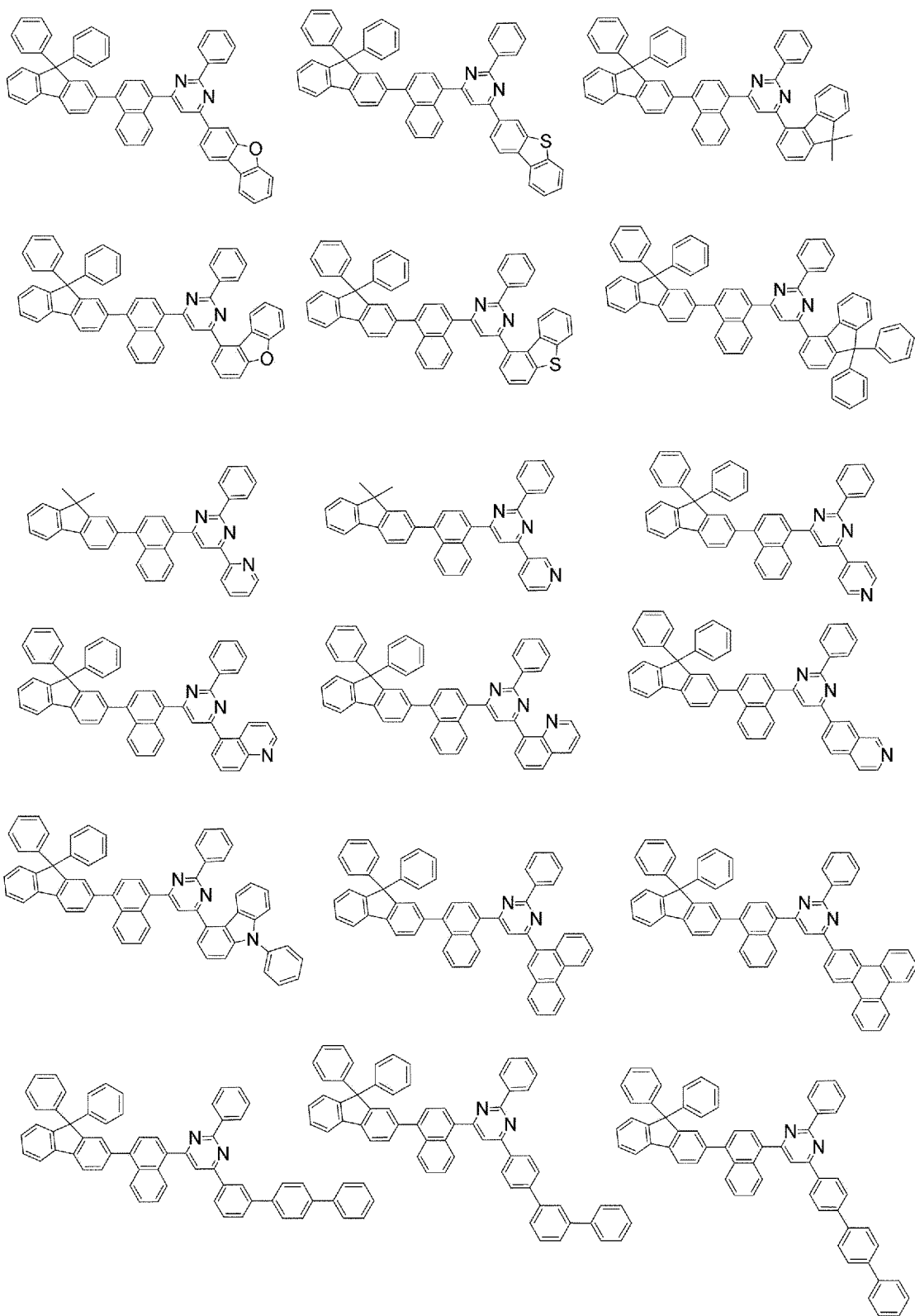
[0195]

[化60]



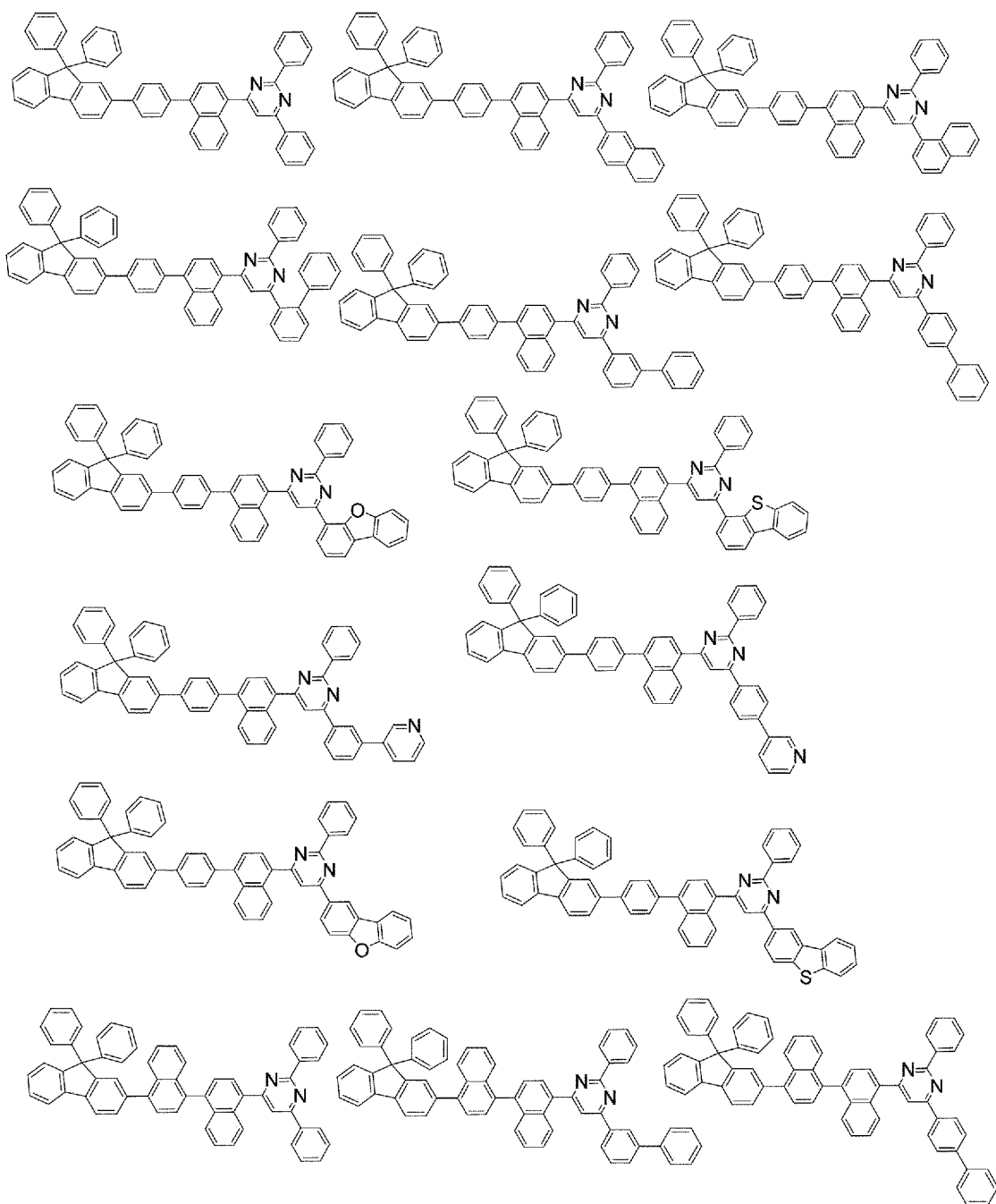
[0196]

[化61]



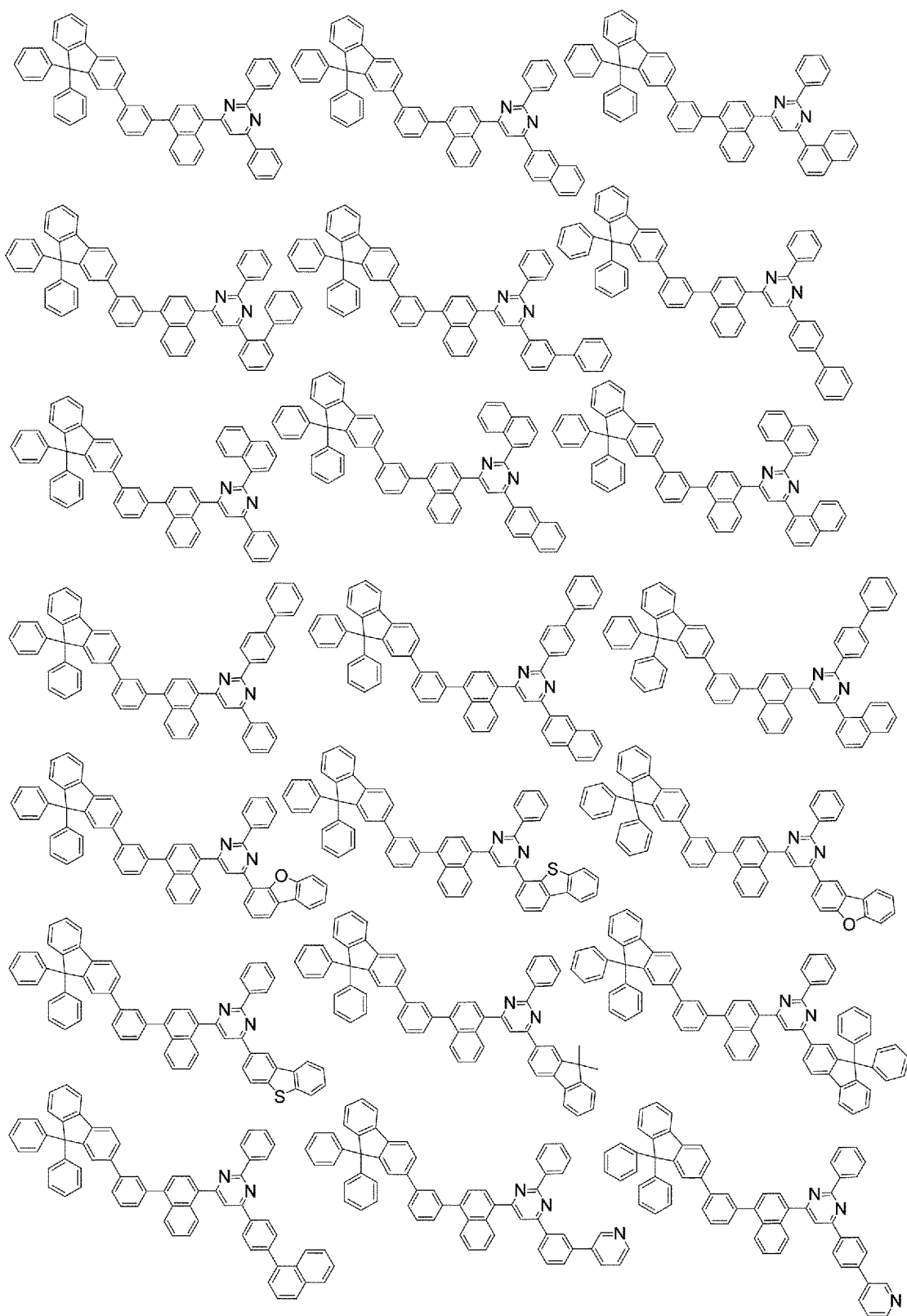
[0197]

[化62]



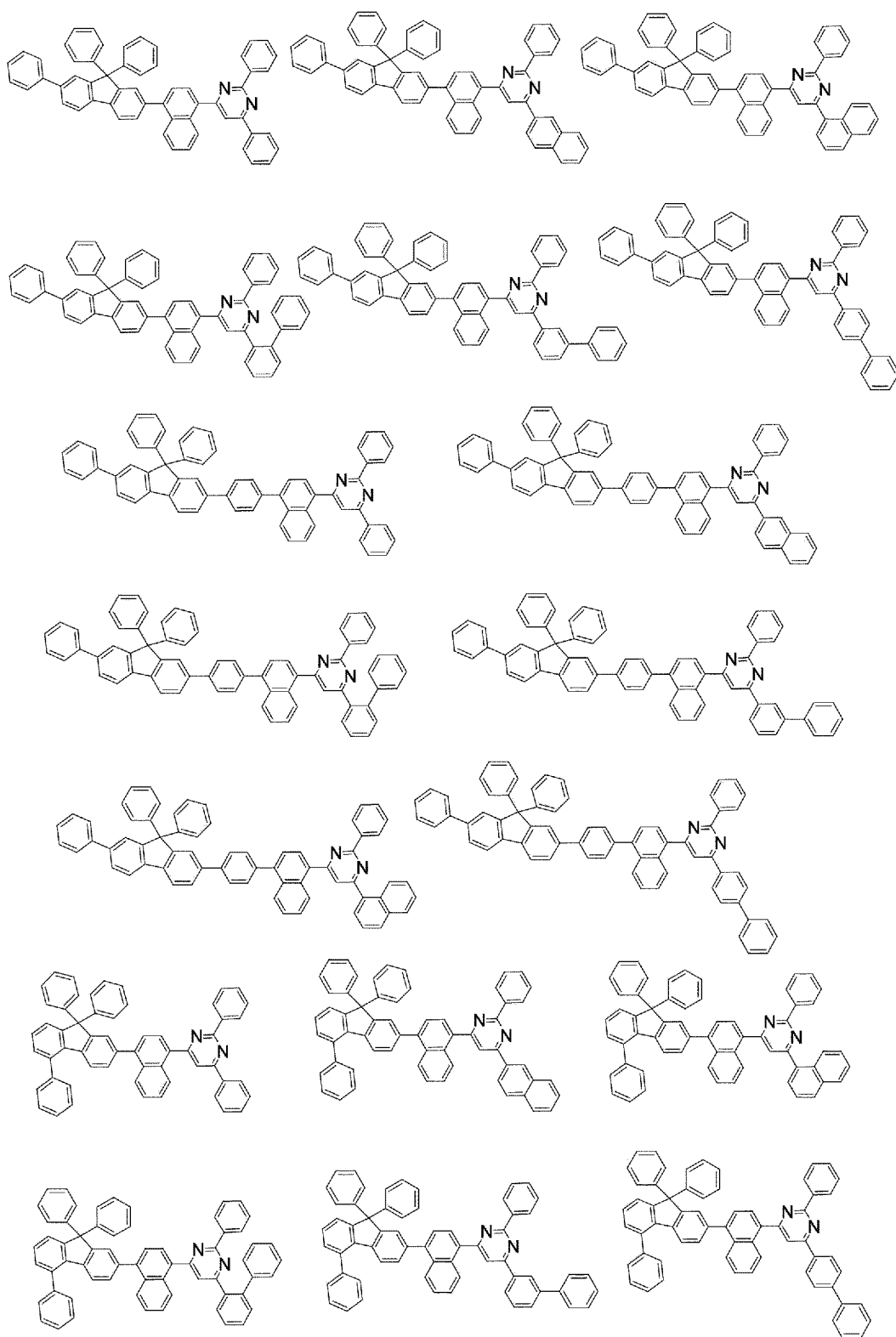
[0198]

[化63]



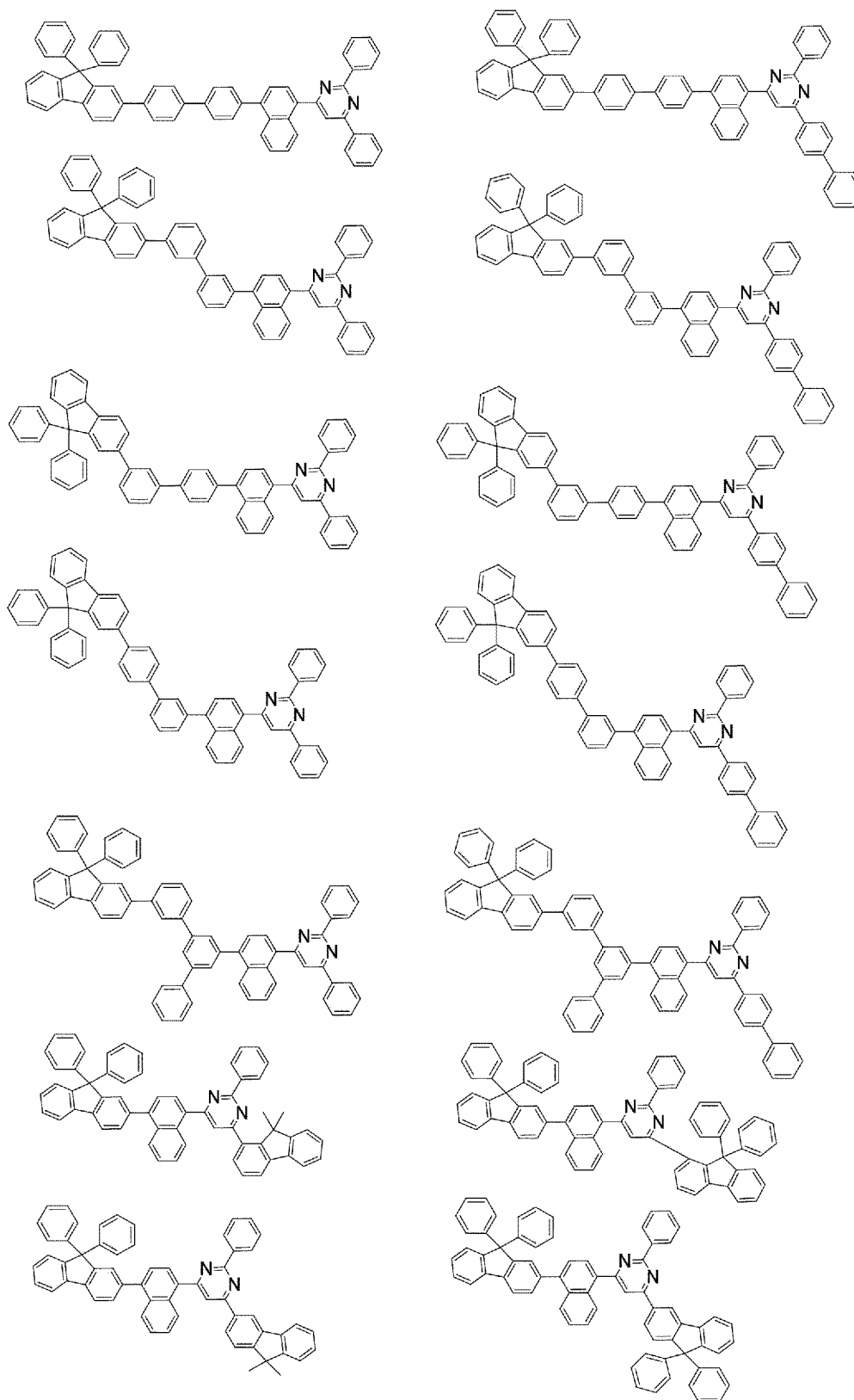
[0199]

[化64]



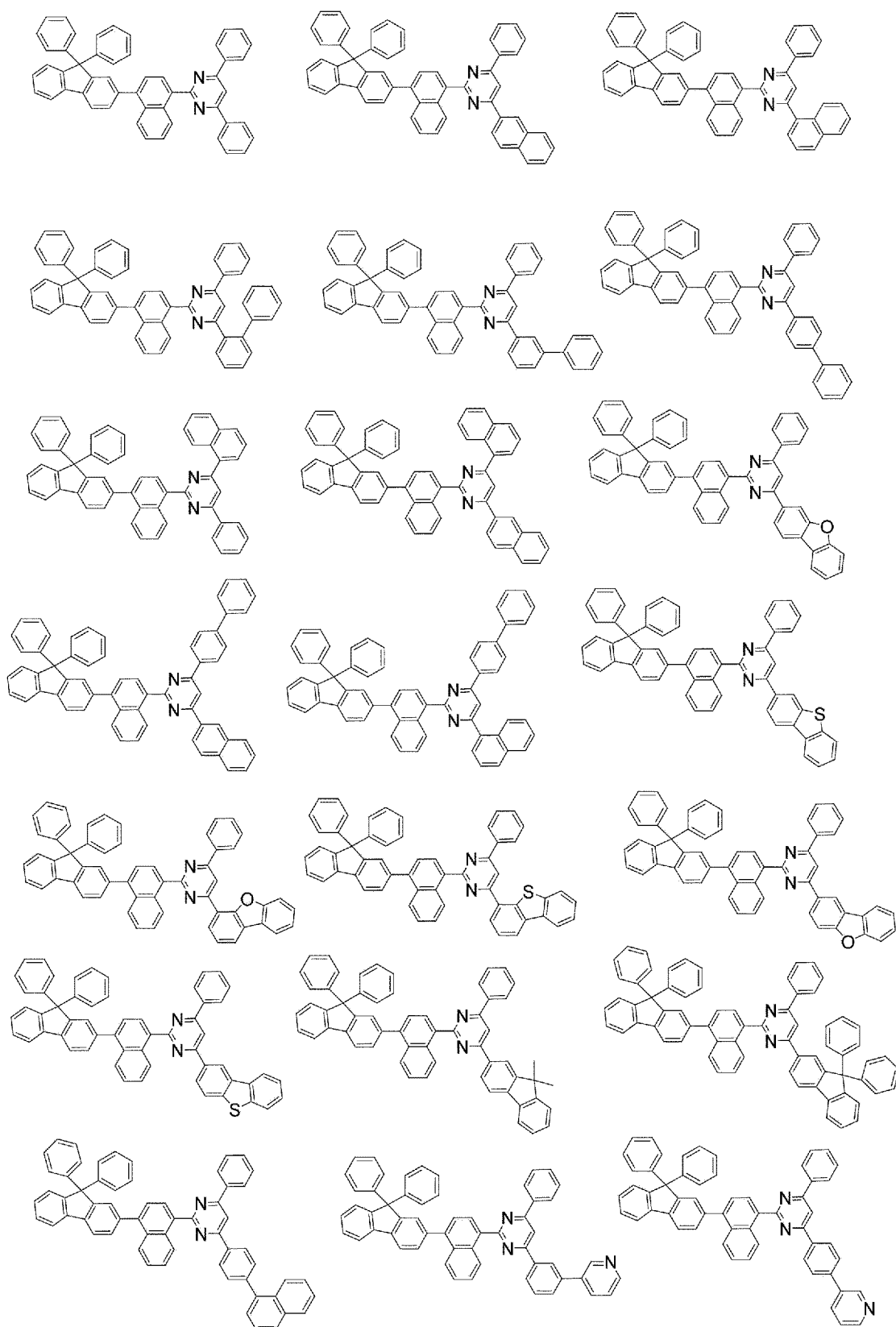
[0200]

[化65]



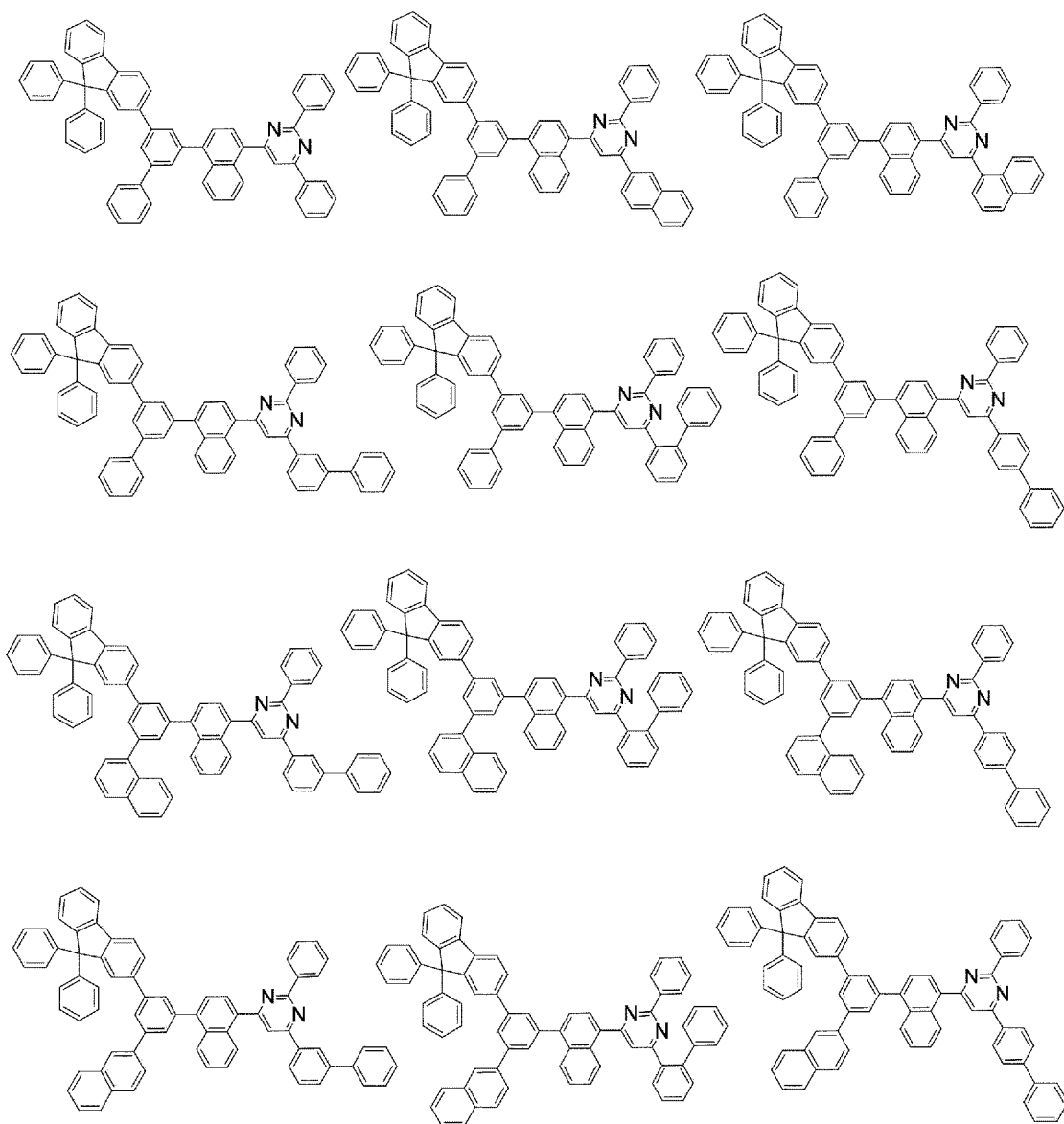
[0201]

[化66]



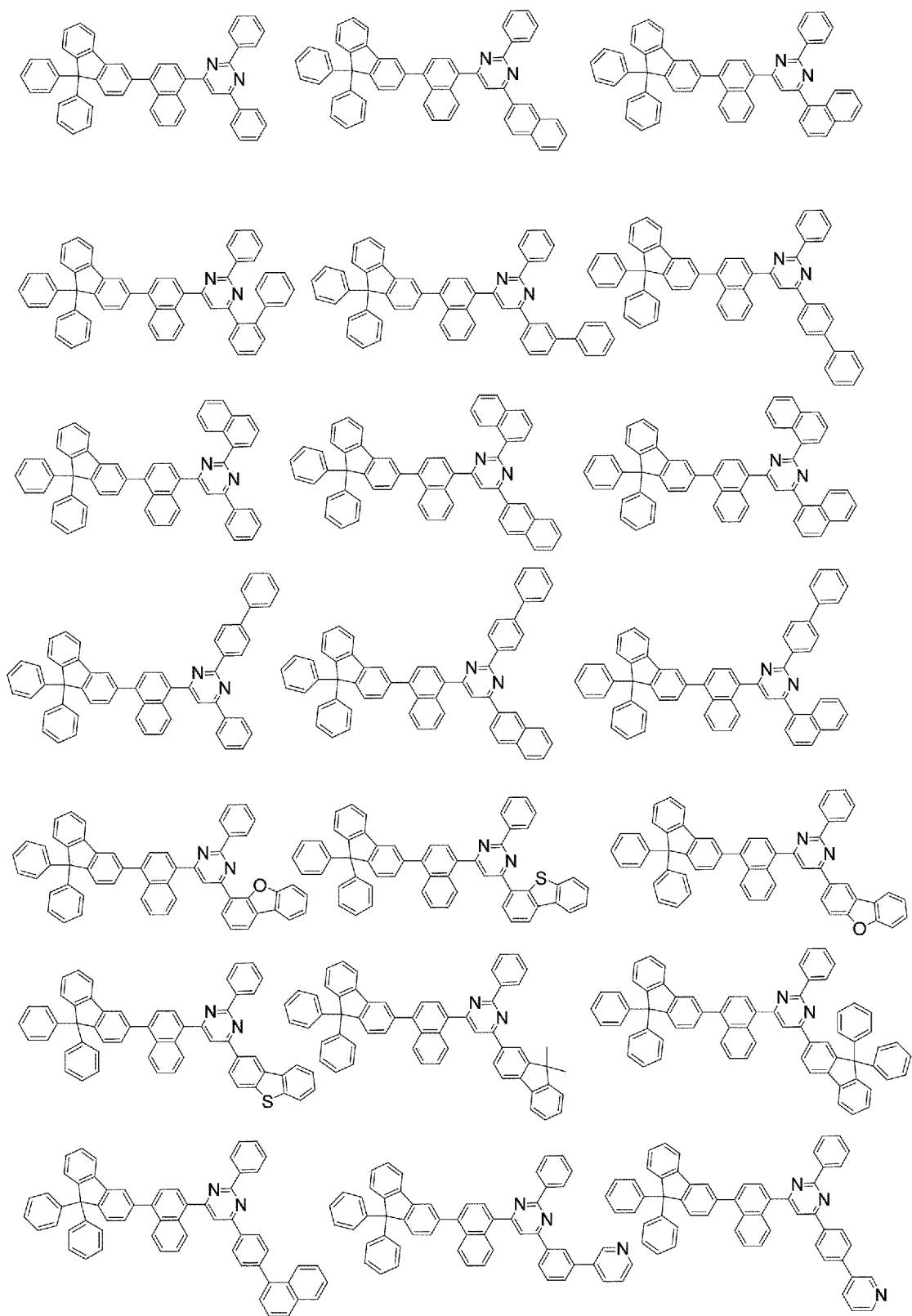
[0202]

[化67]



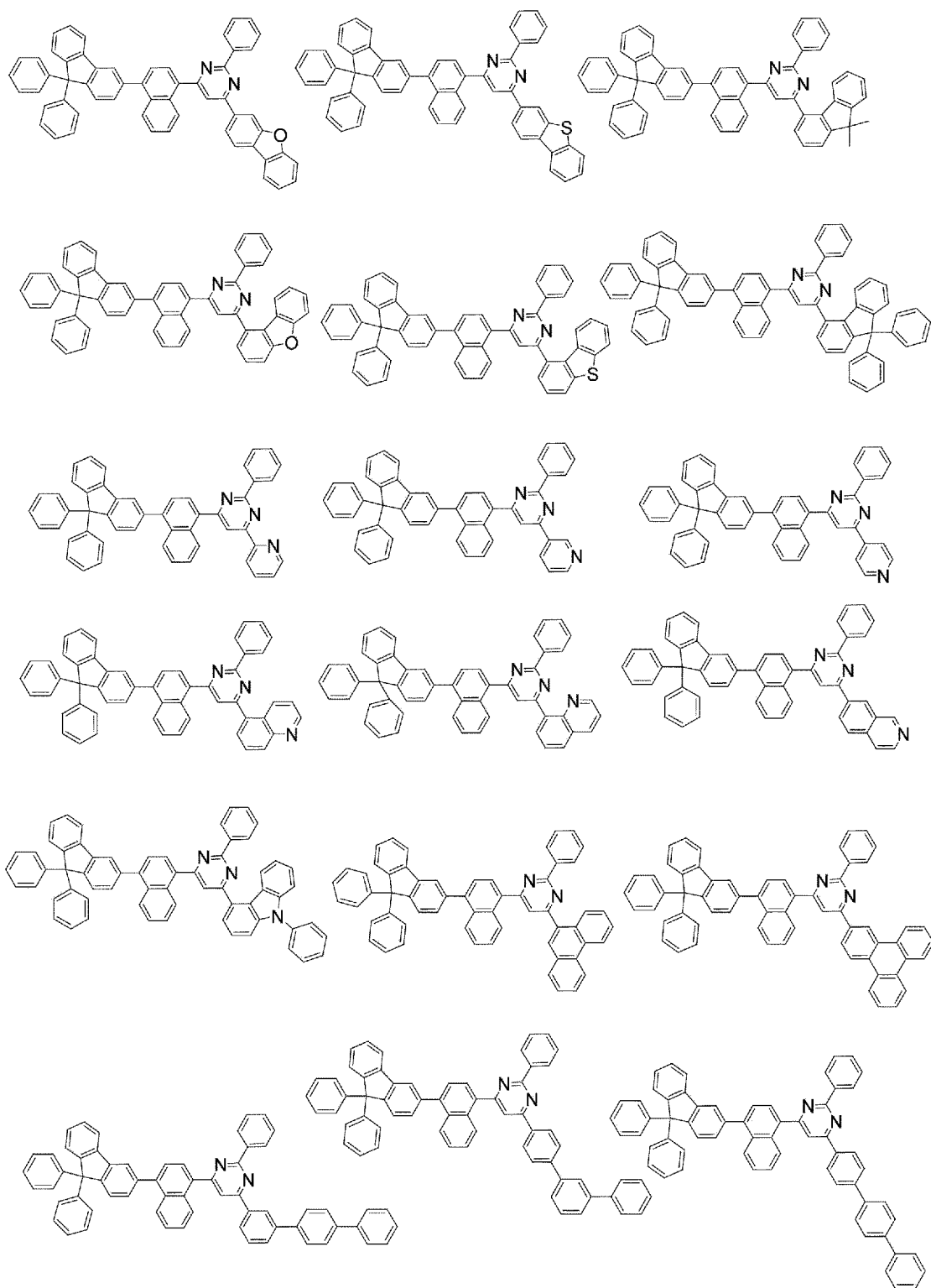
[0203]

[化68]



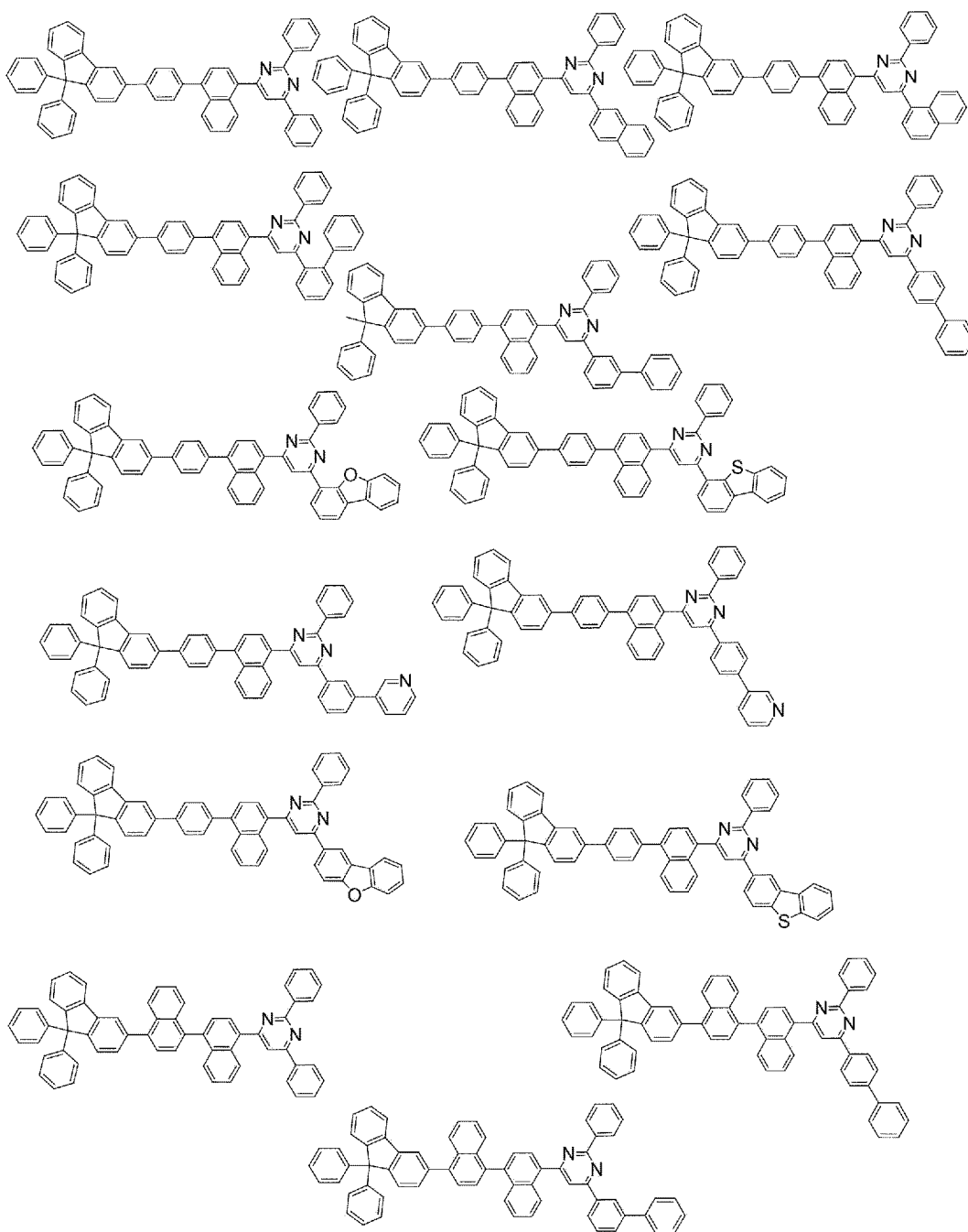
[0204]

[化69]



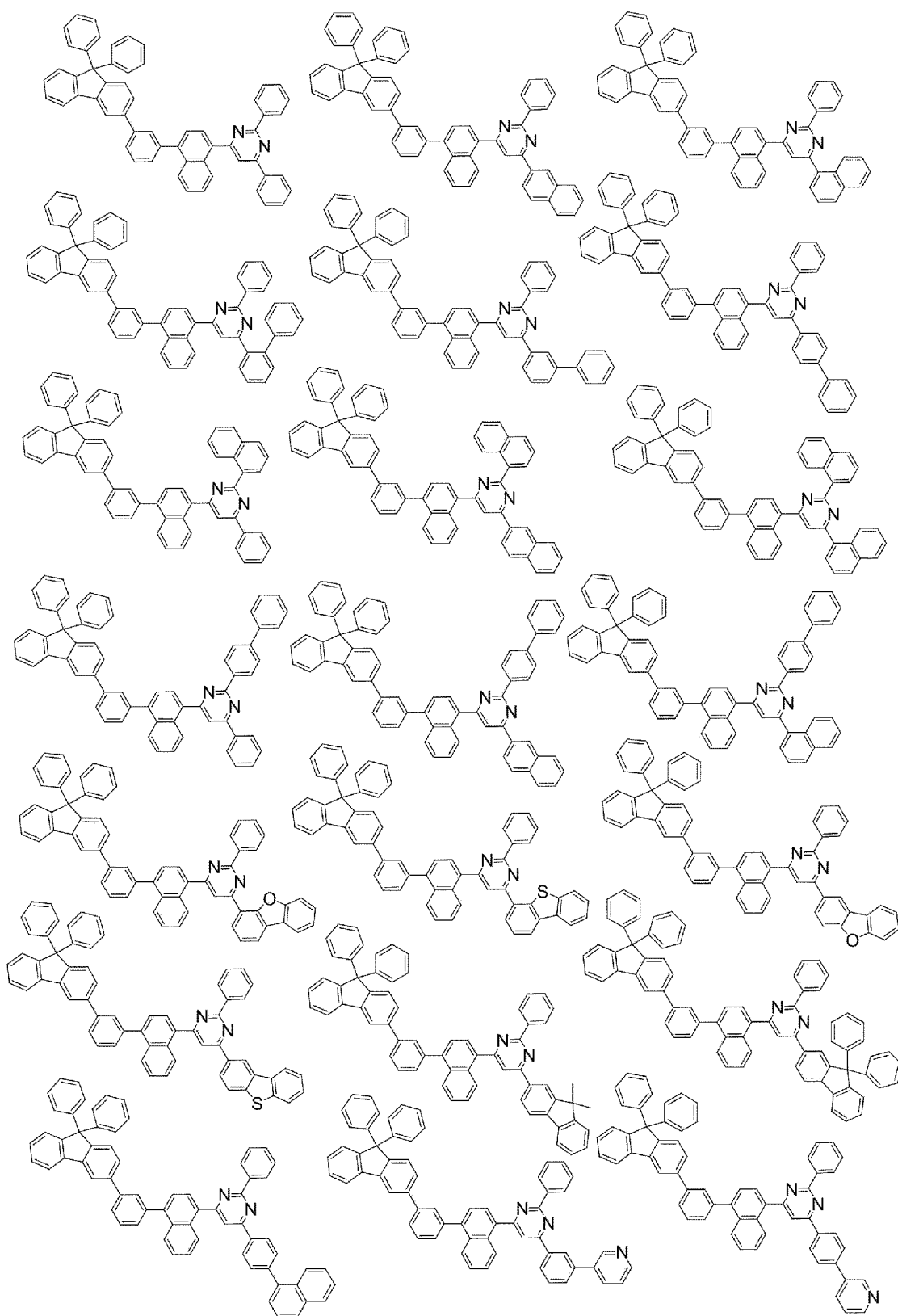
[0205]

[化70]



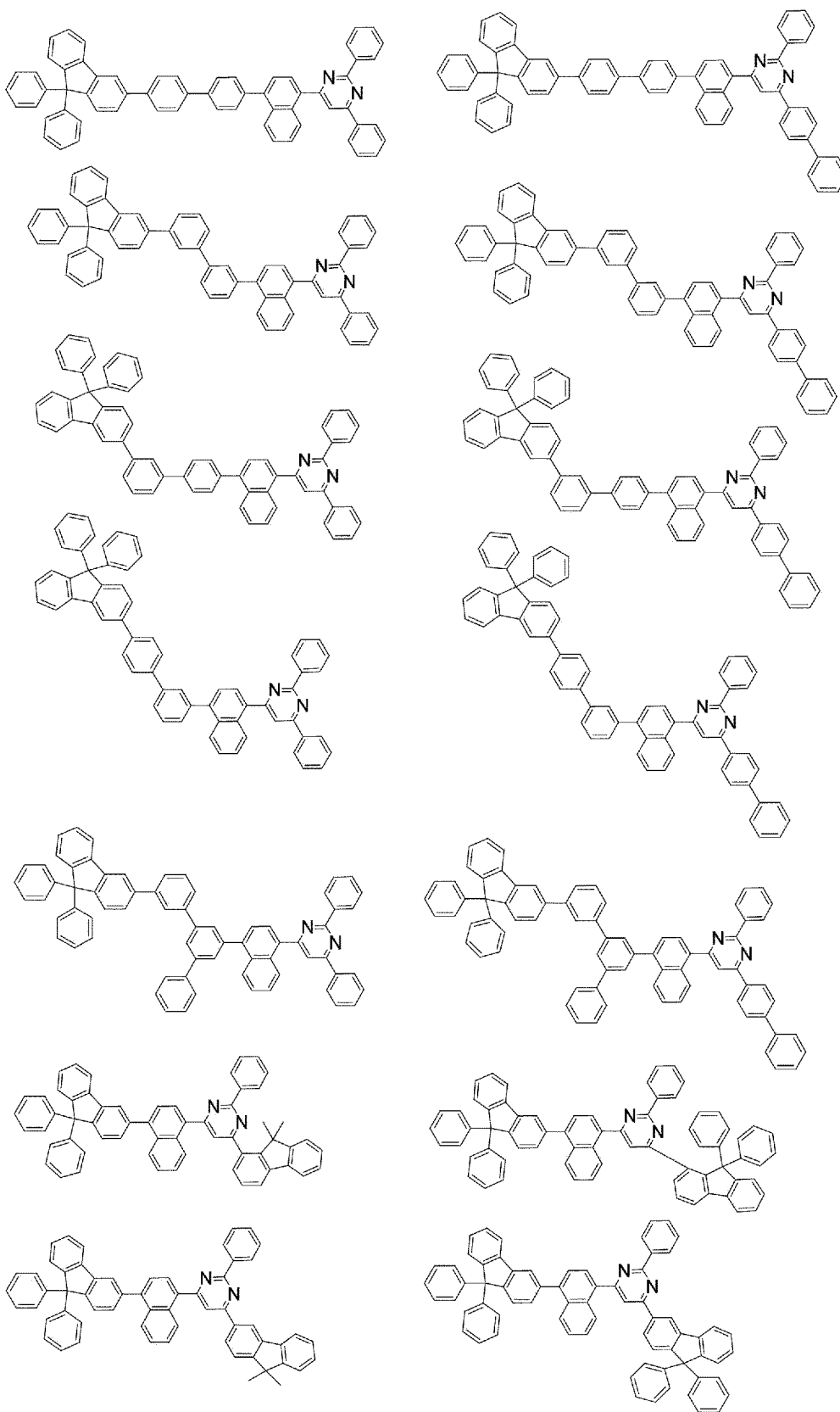
[0206]

[化71]



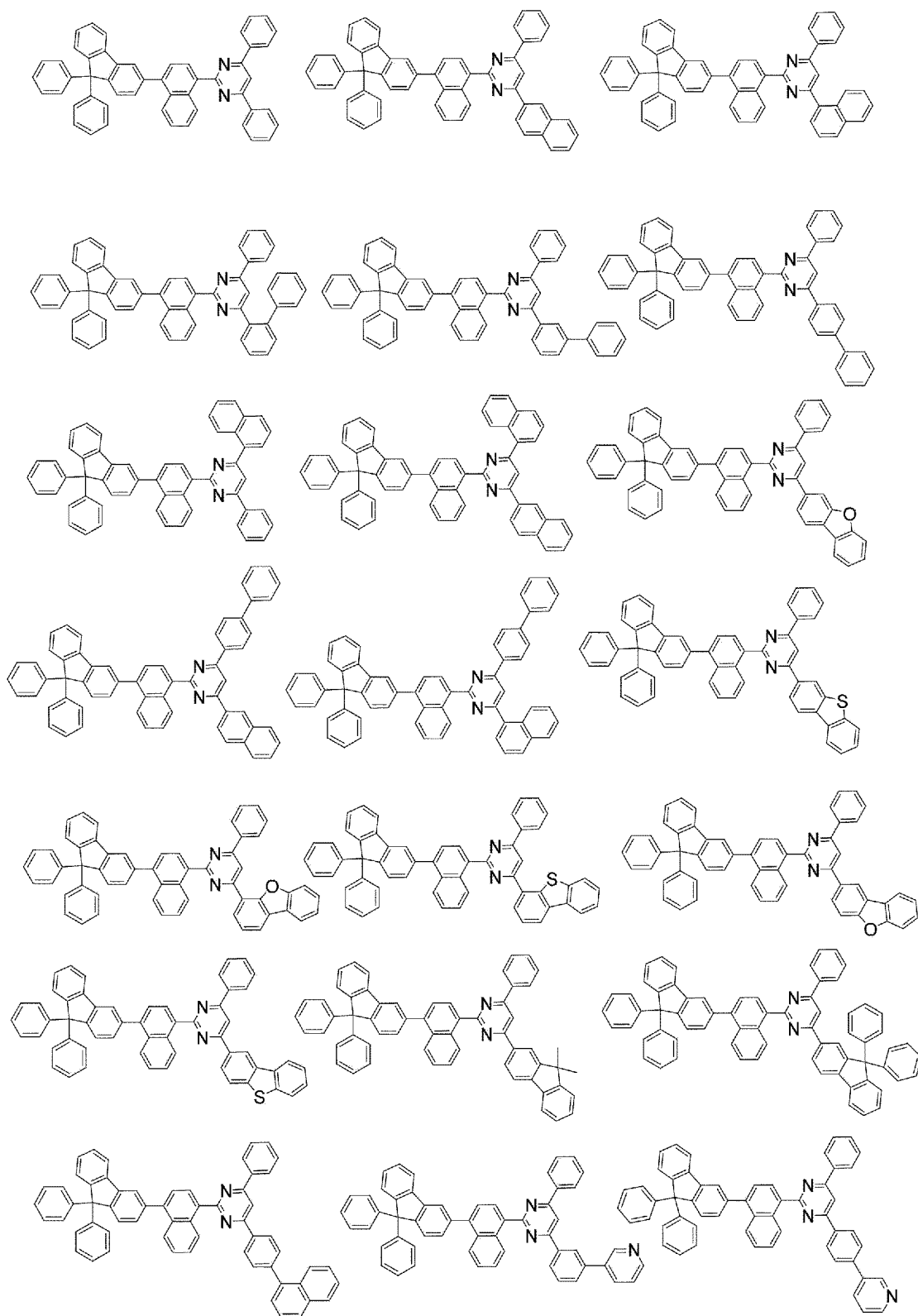
[0207]

[化72]



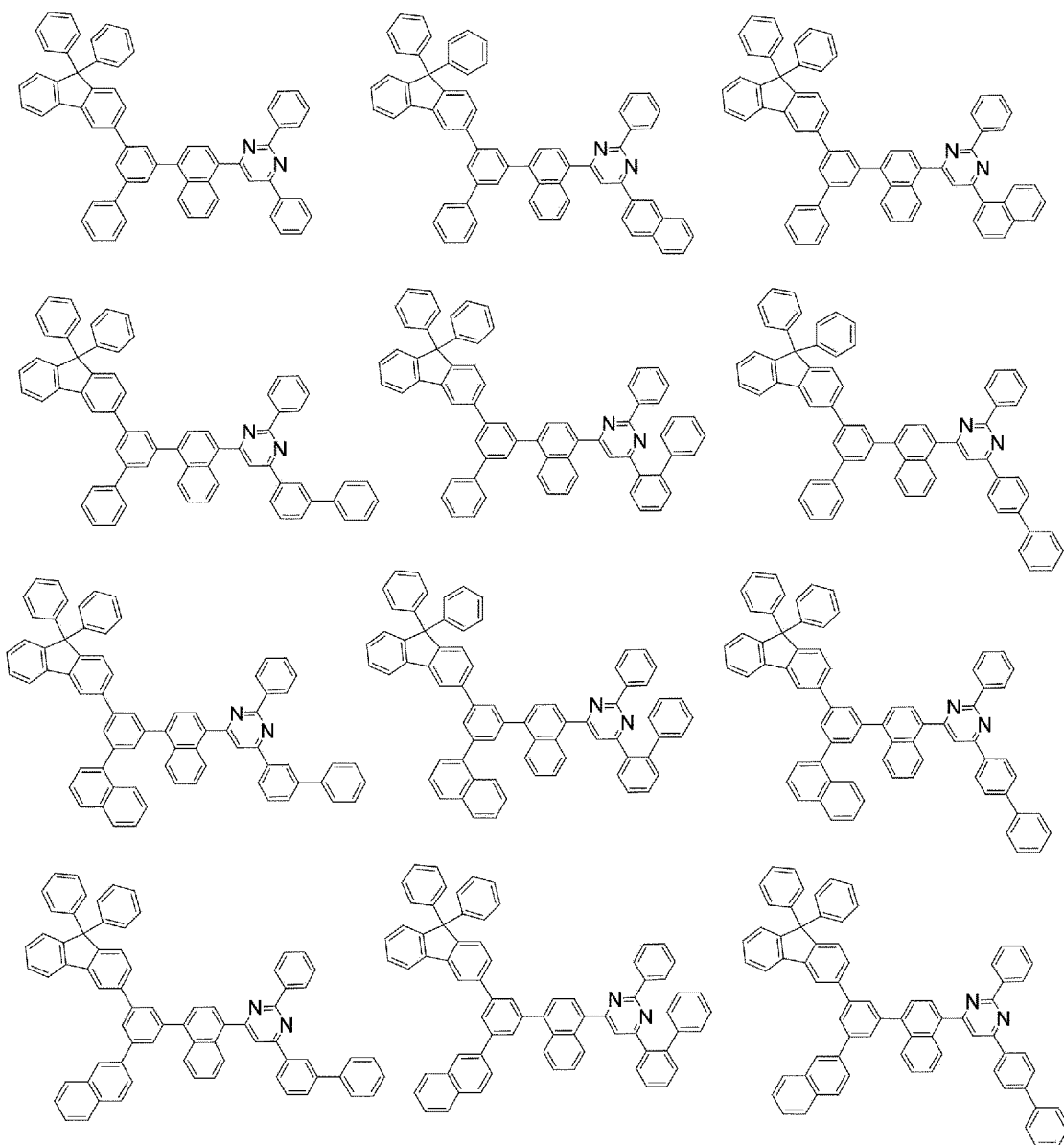
[0208]

[化73]



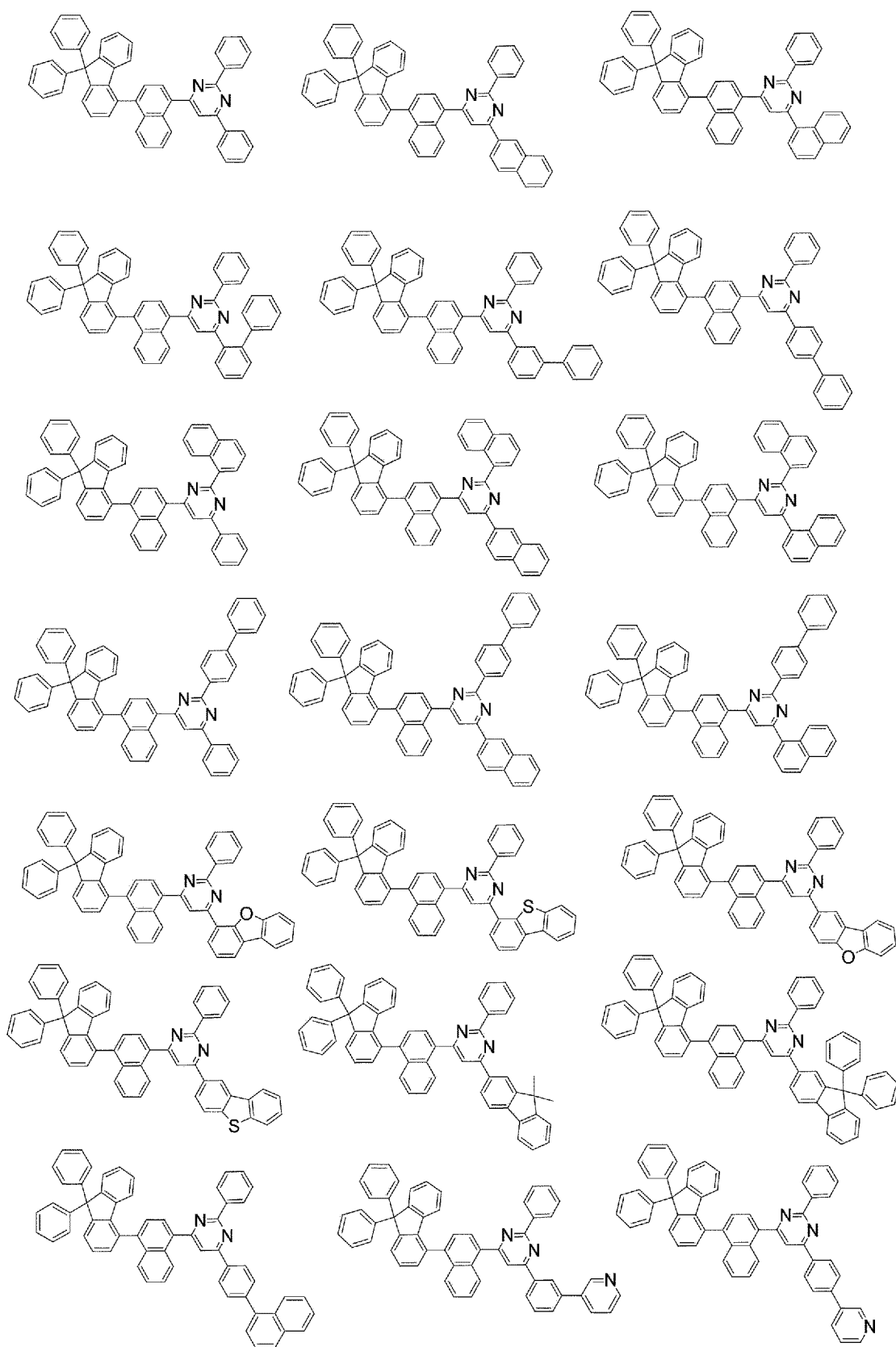
[0209]

[化74]



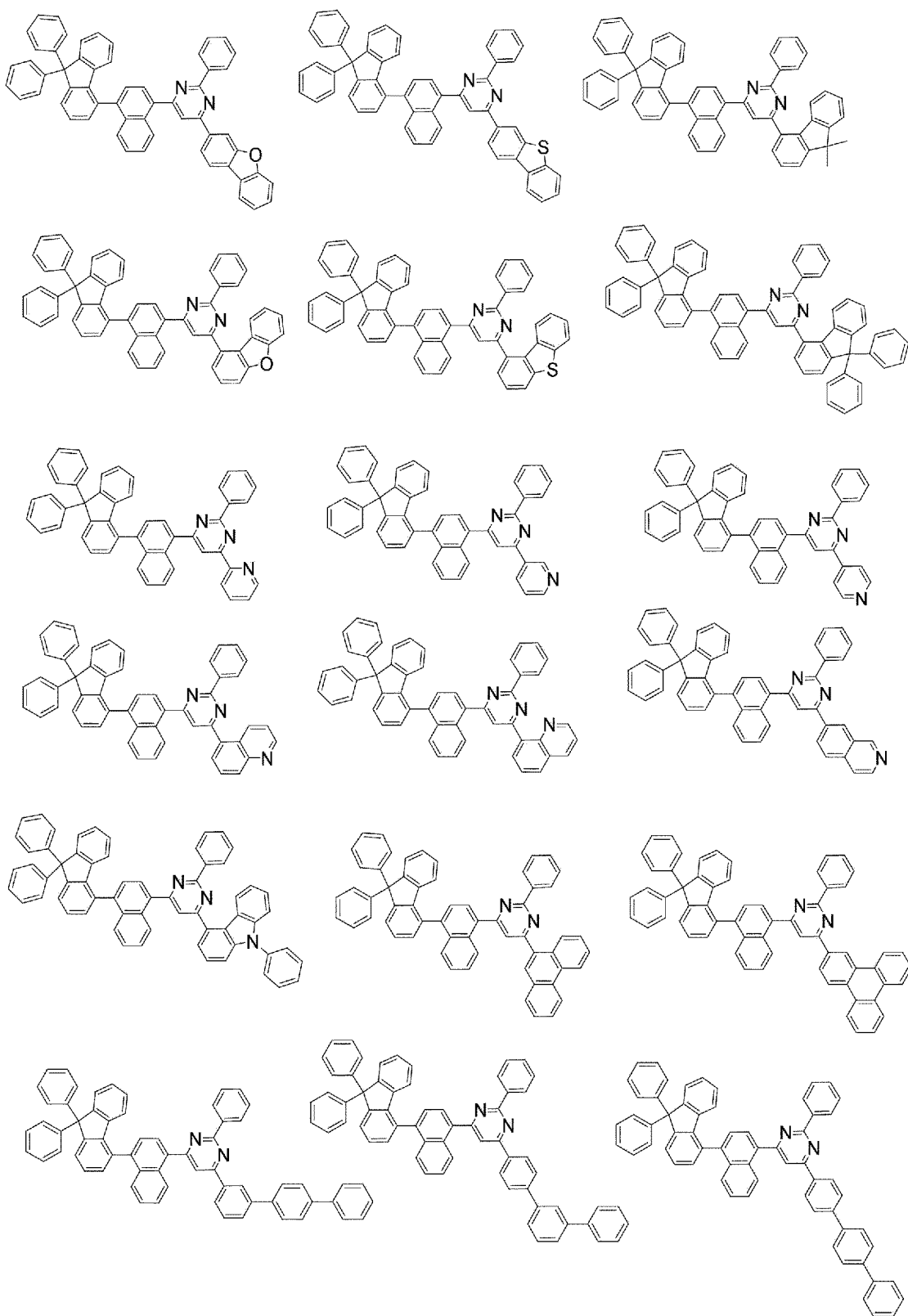
[0210]

[化75]



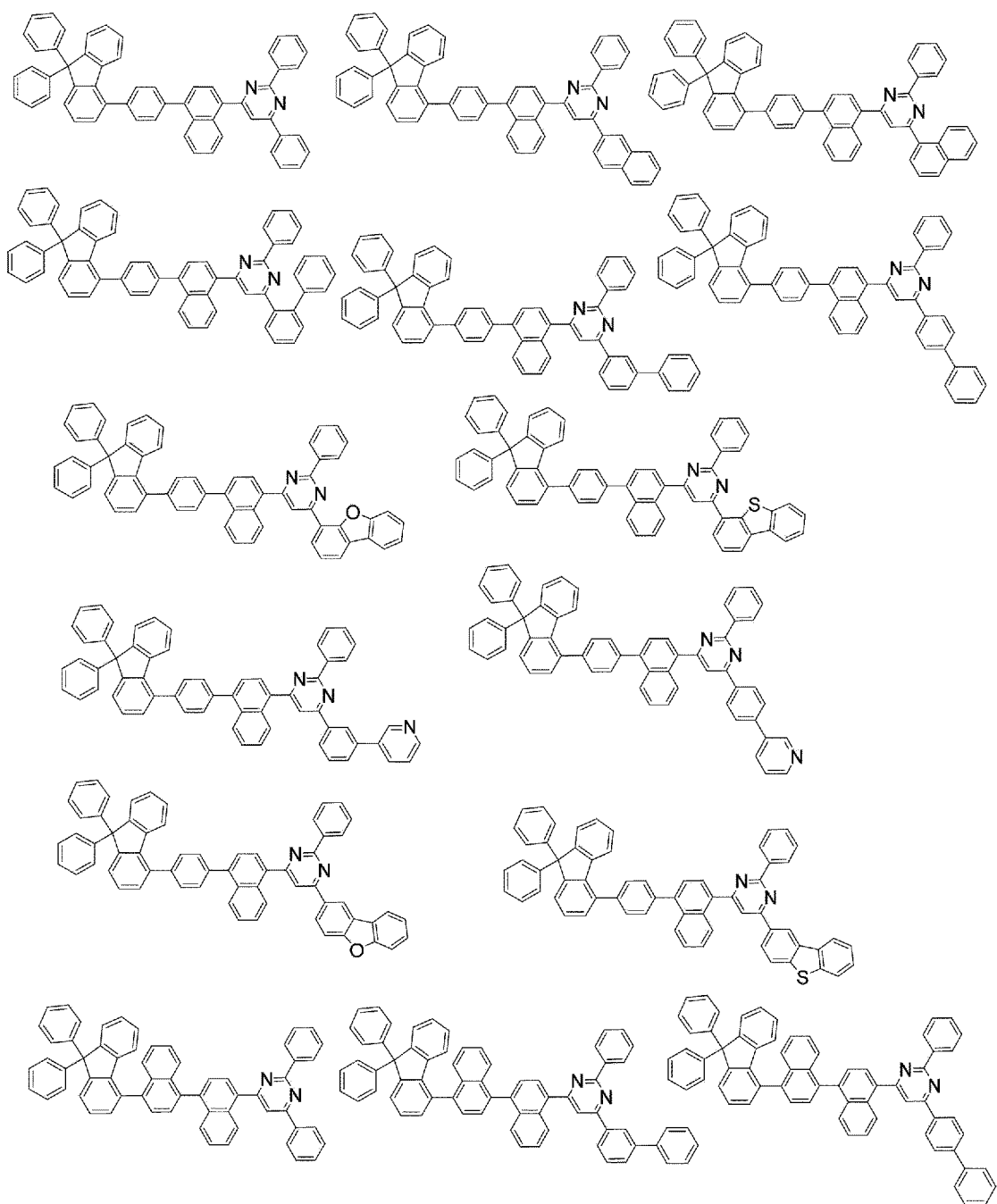
[0211]

[化76]



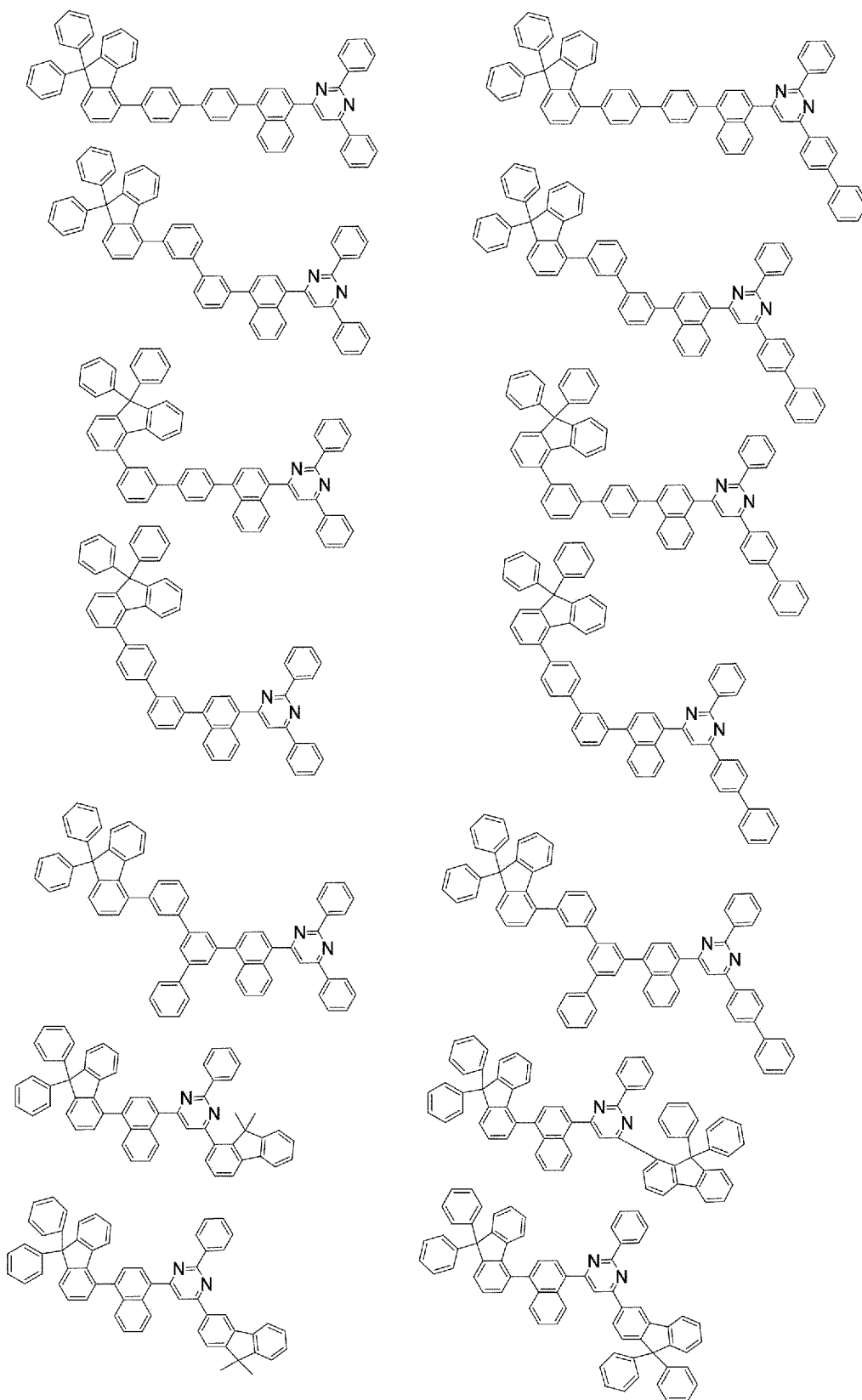
[0212]

[化77]



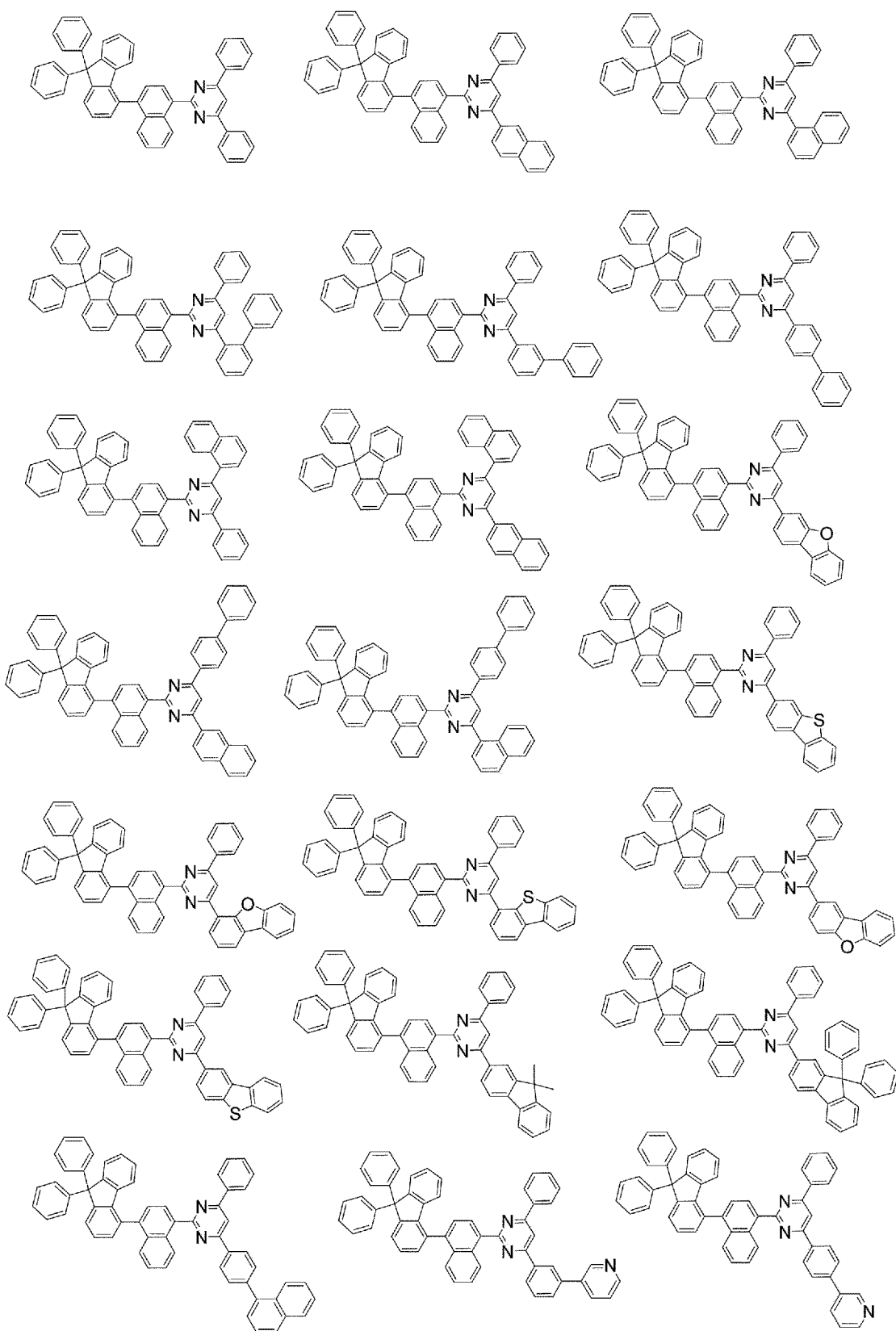
[0213]

[化79]



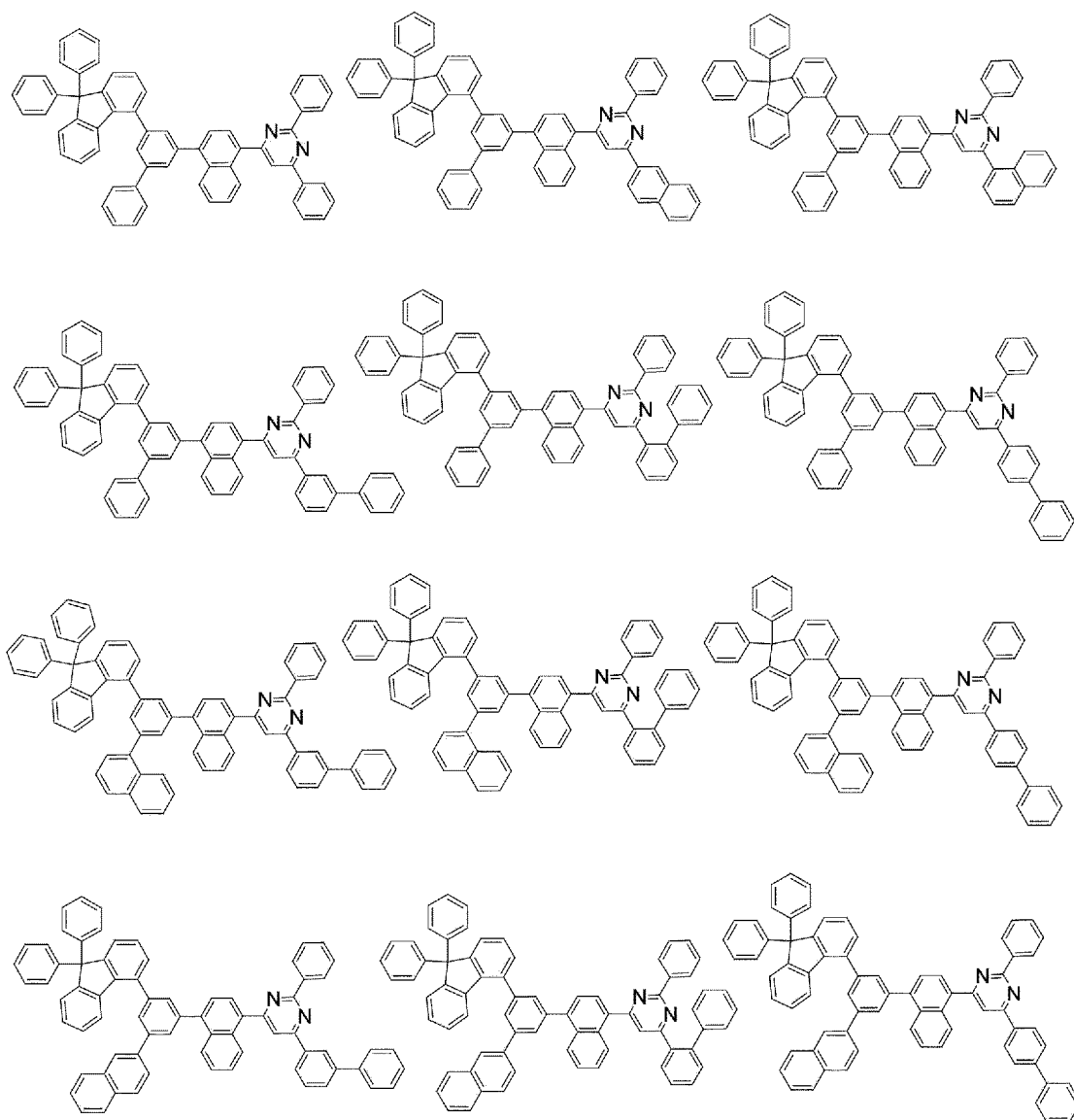
[0215]

[化80]



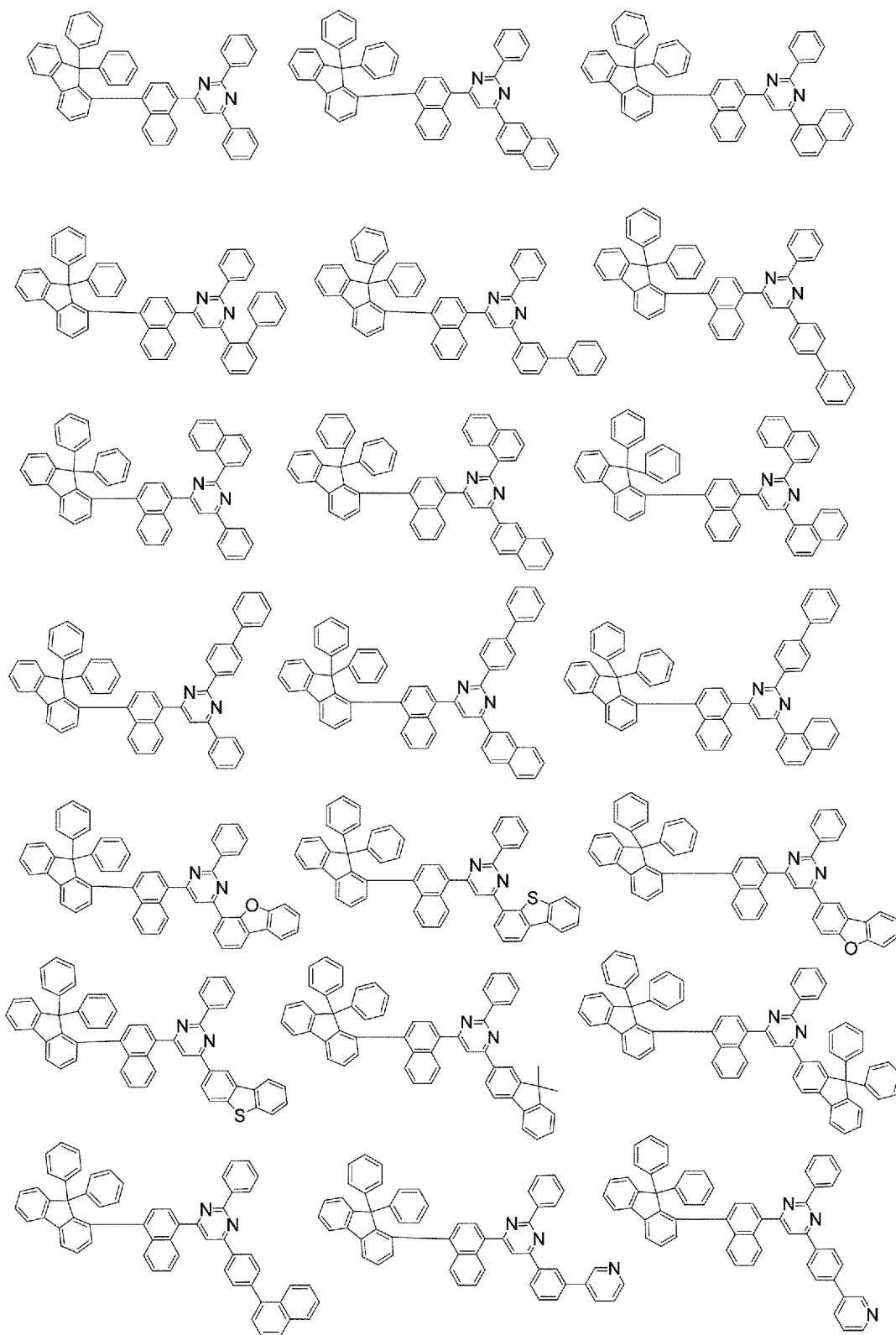
[0216]

[化81]



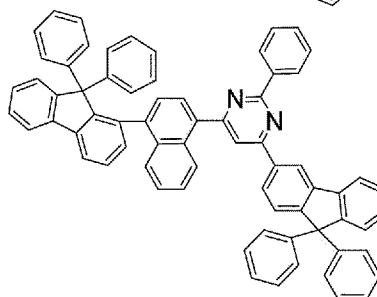
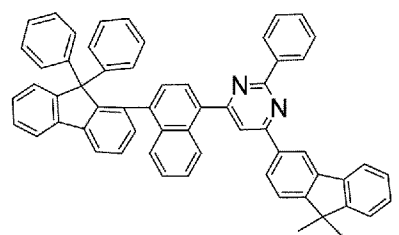
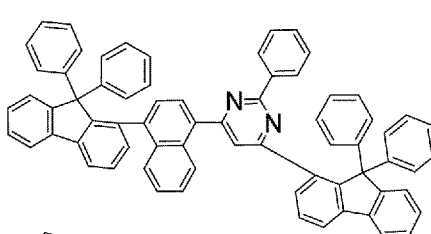
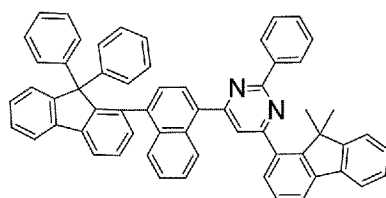
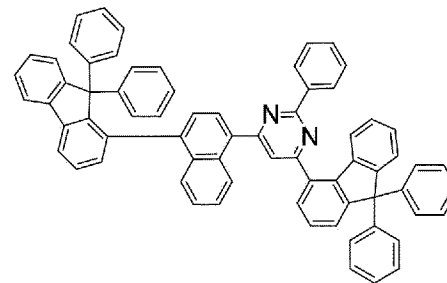
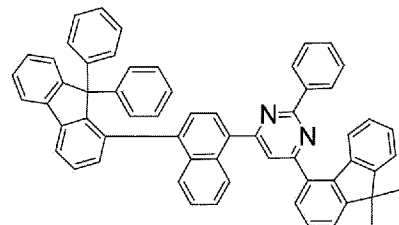
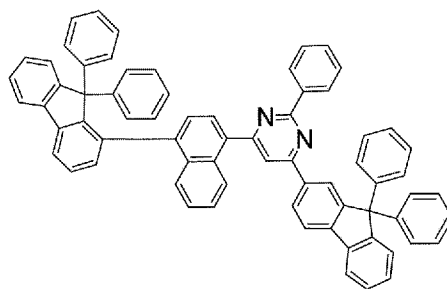
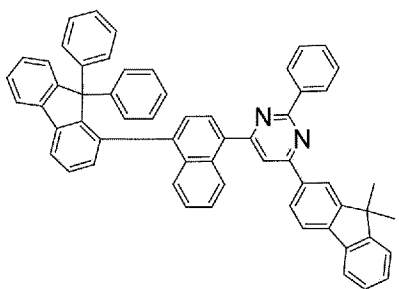
[0217]

[化82]



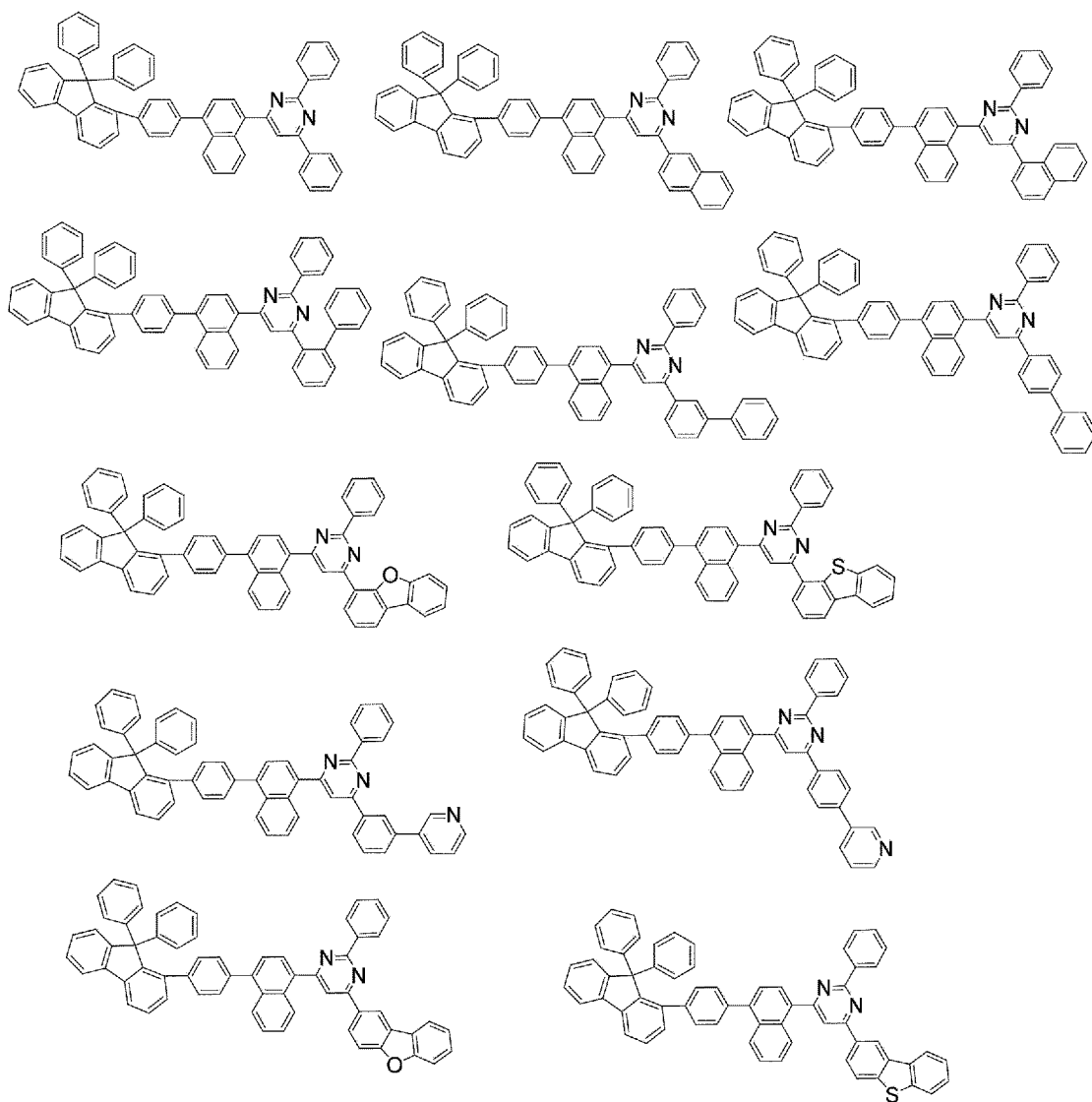
[0218]

[化83]



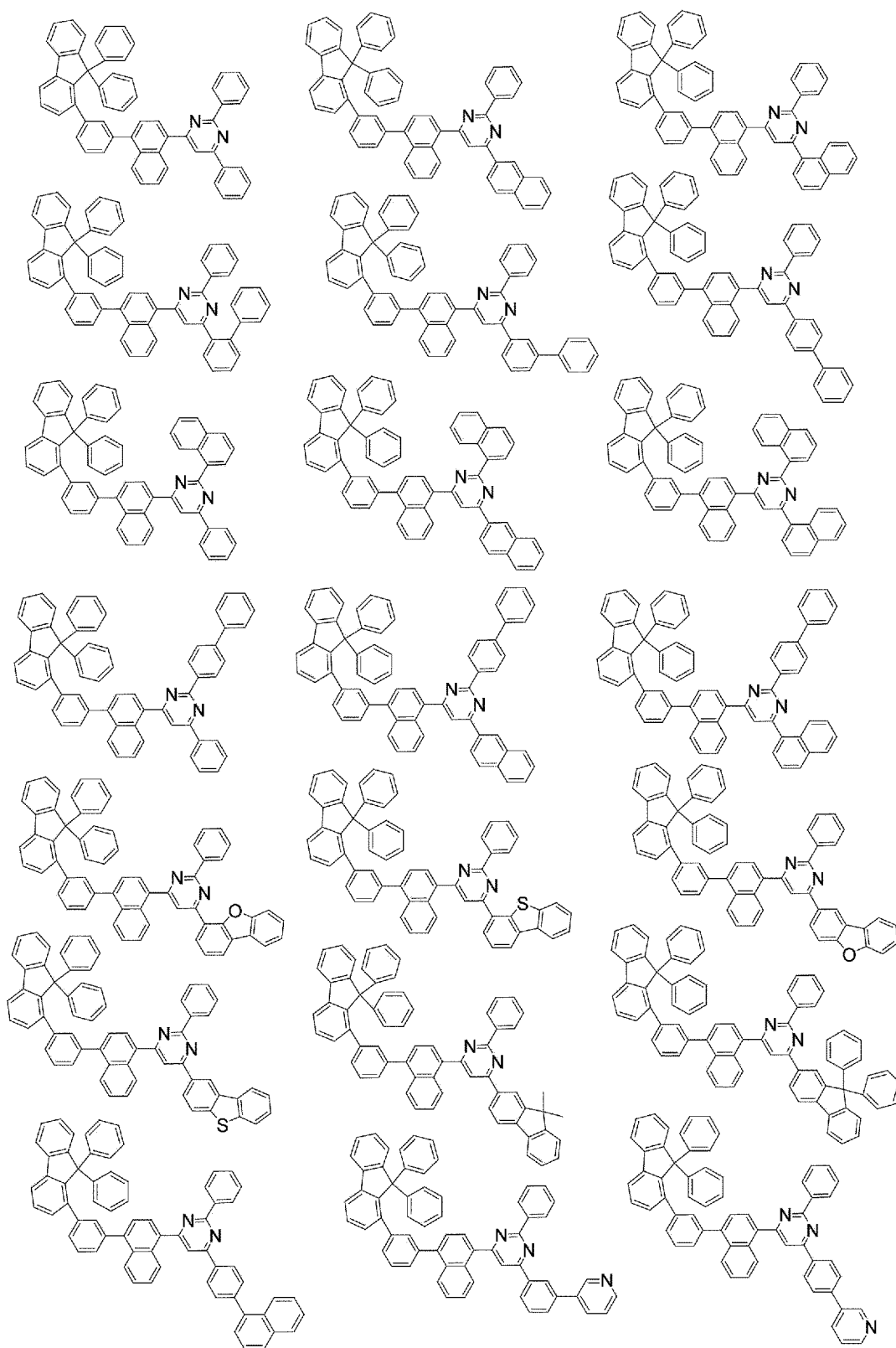
[0219]

[化84]



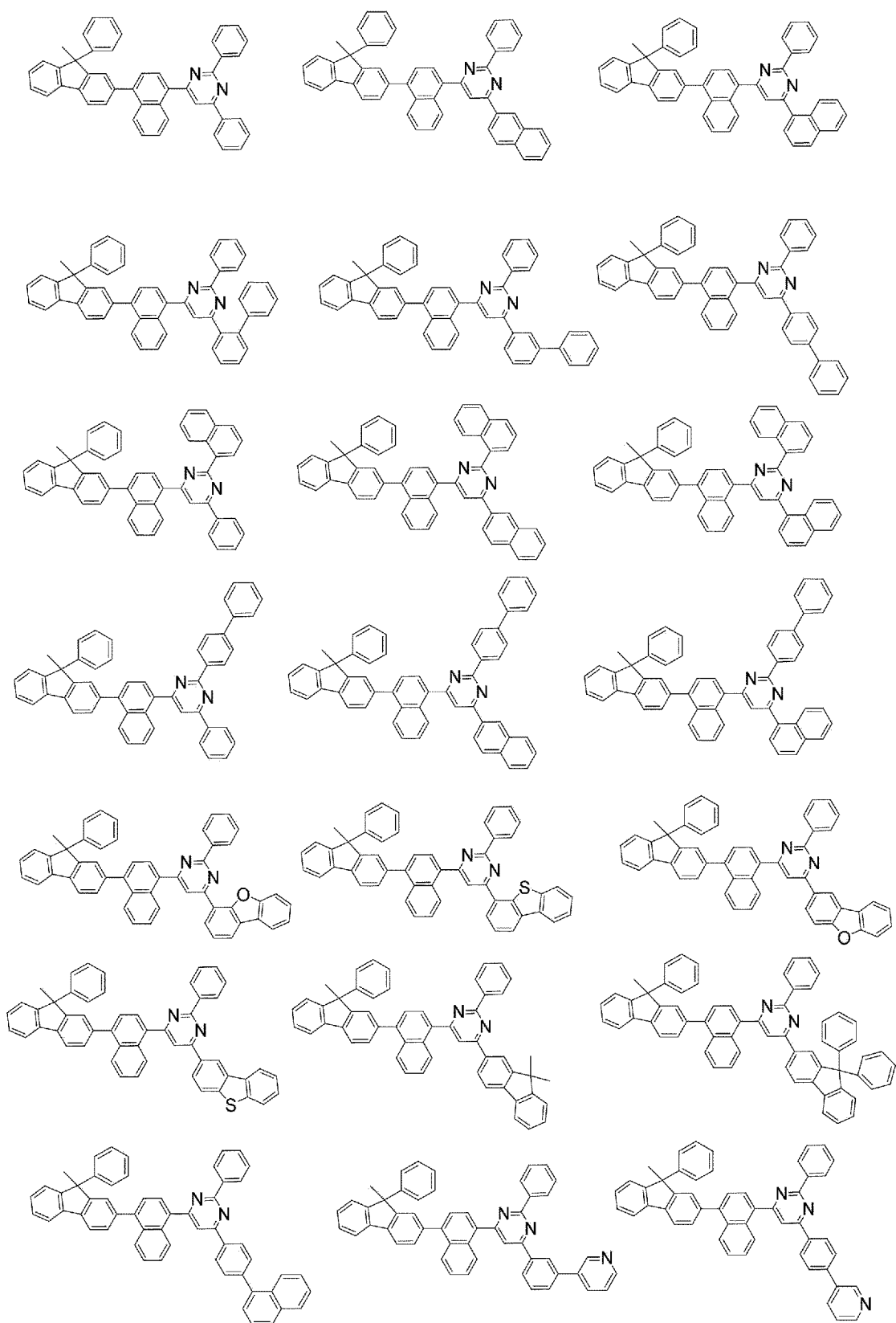
[0220]

[化85]



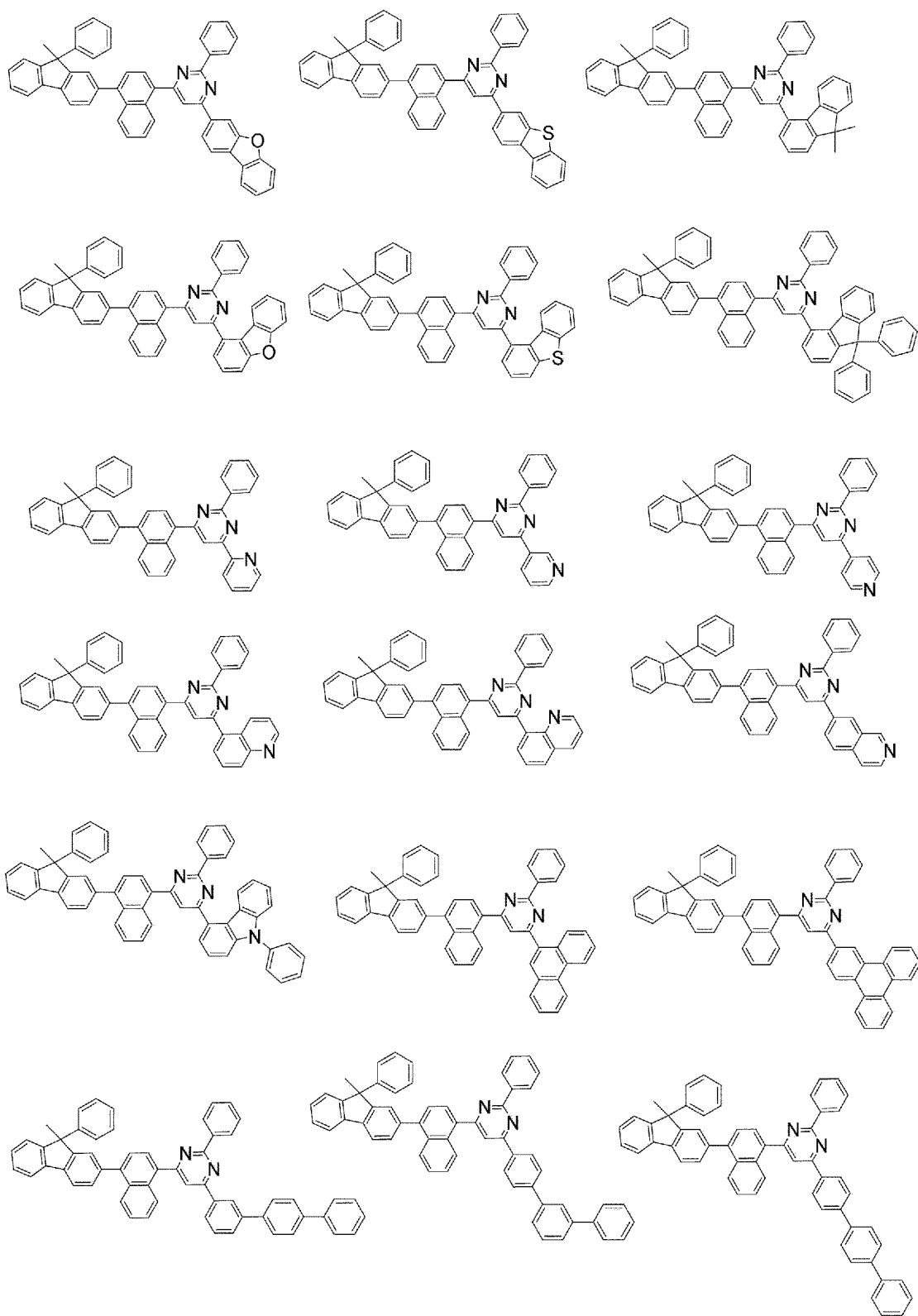
[0221]

[化86]



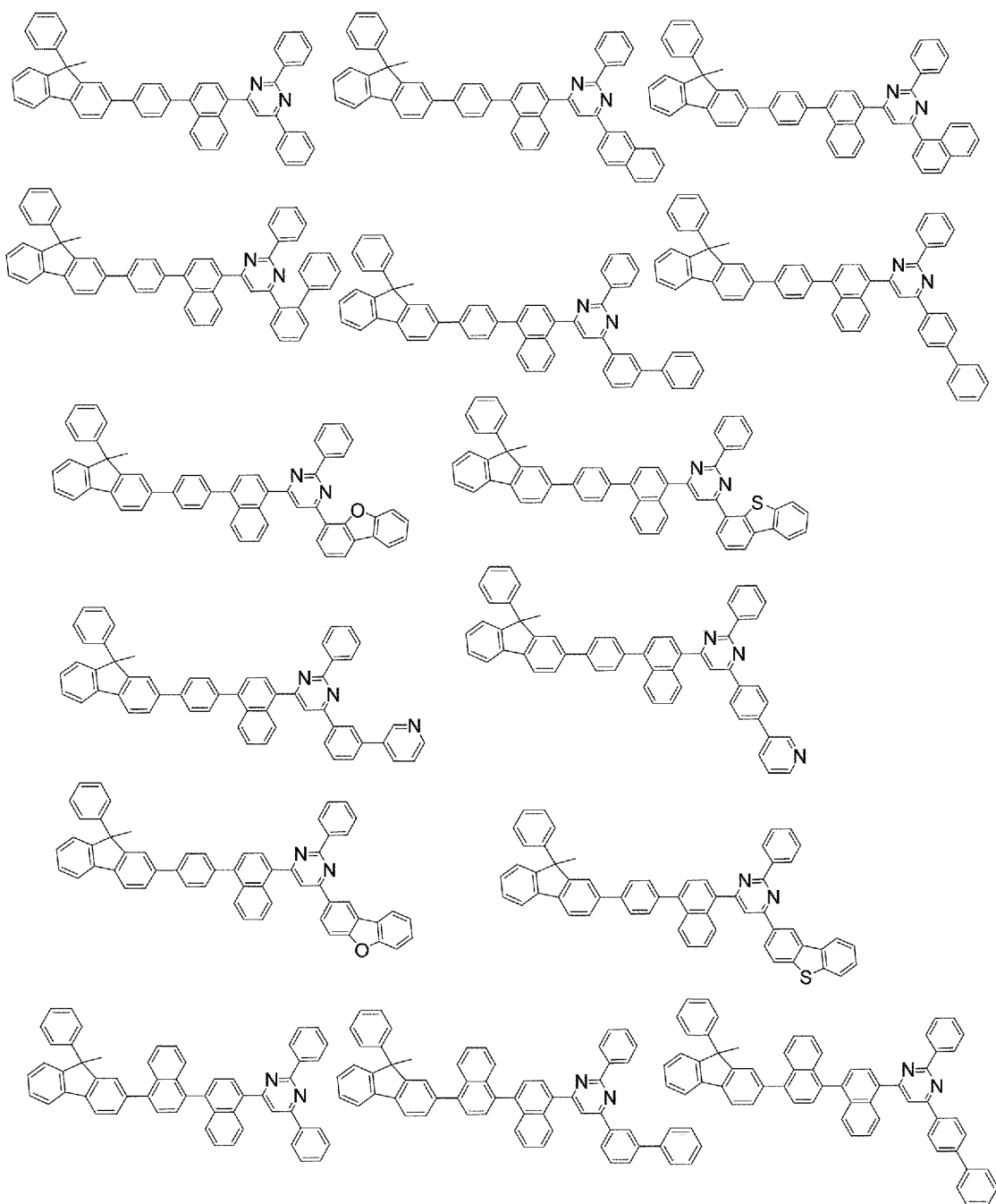
[0222]

[化87]



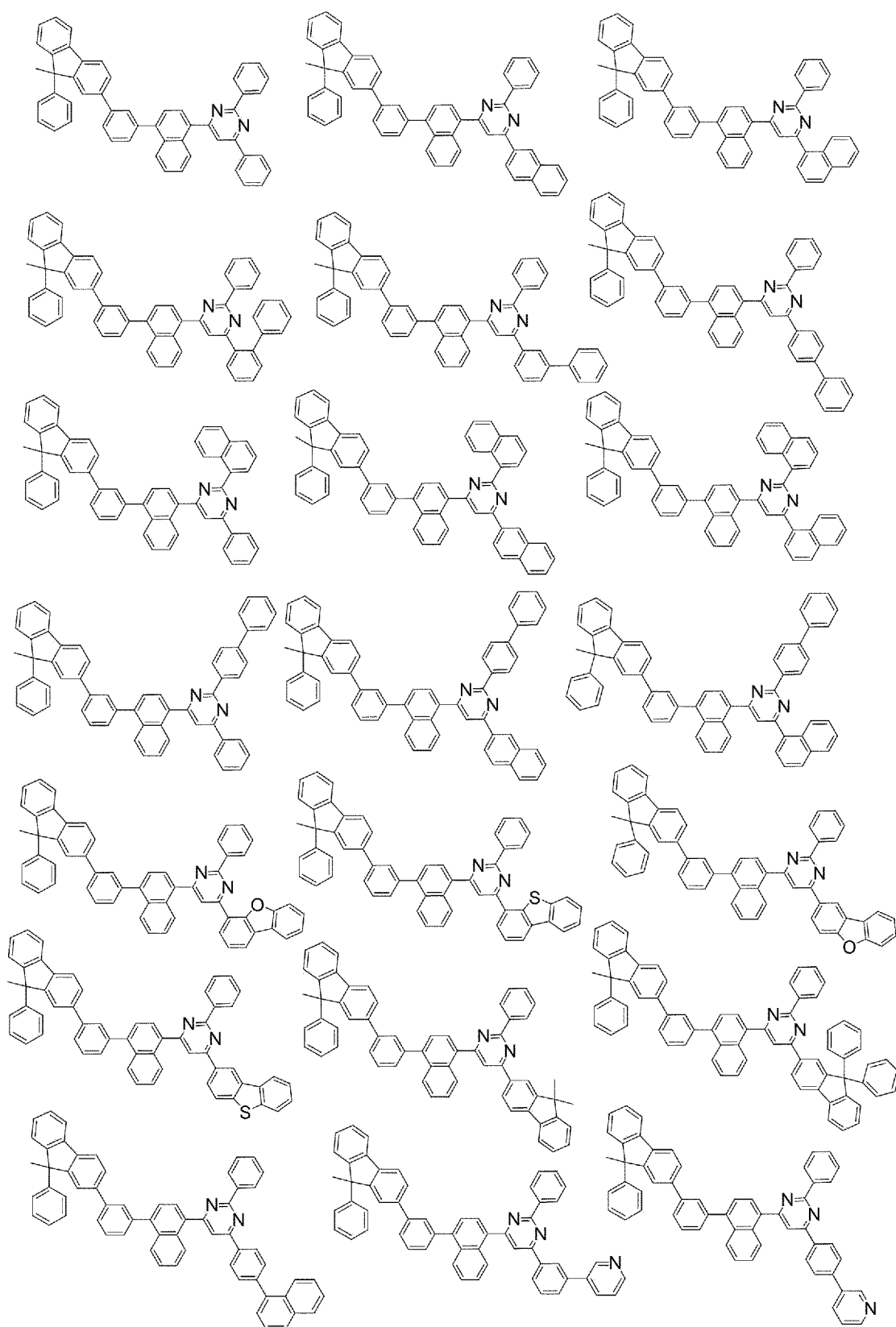
[0223]

[化88]



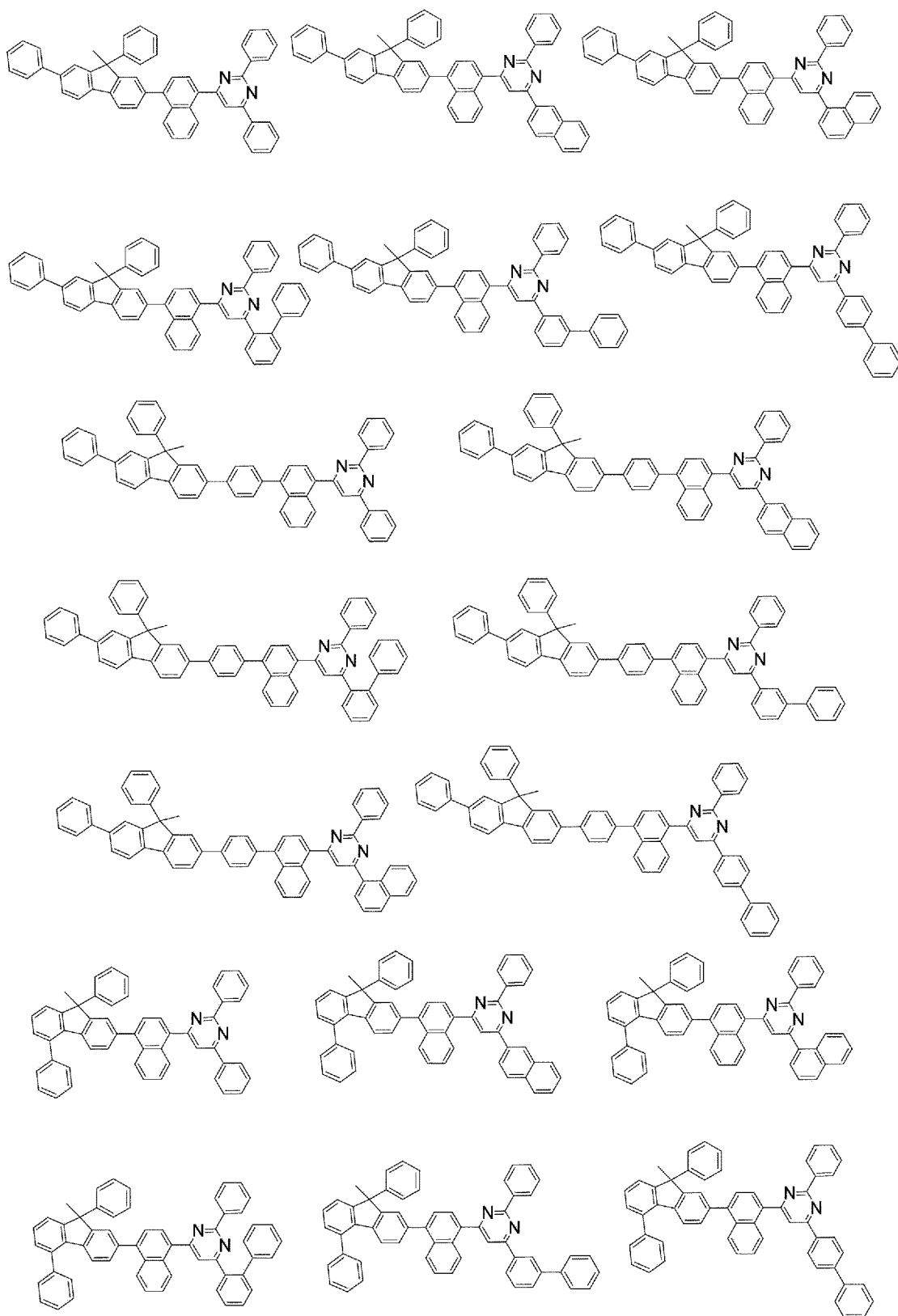
[0224]

[化89]



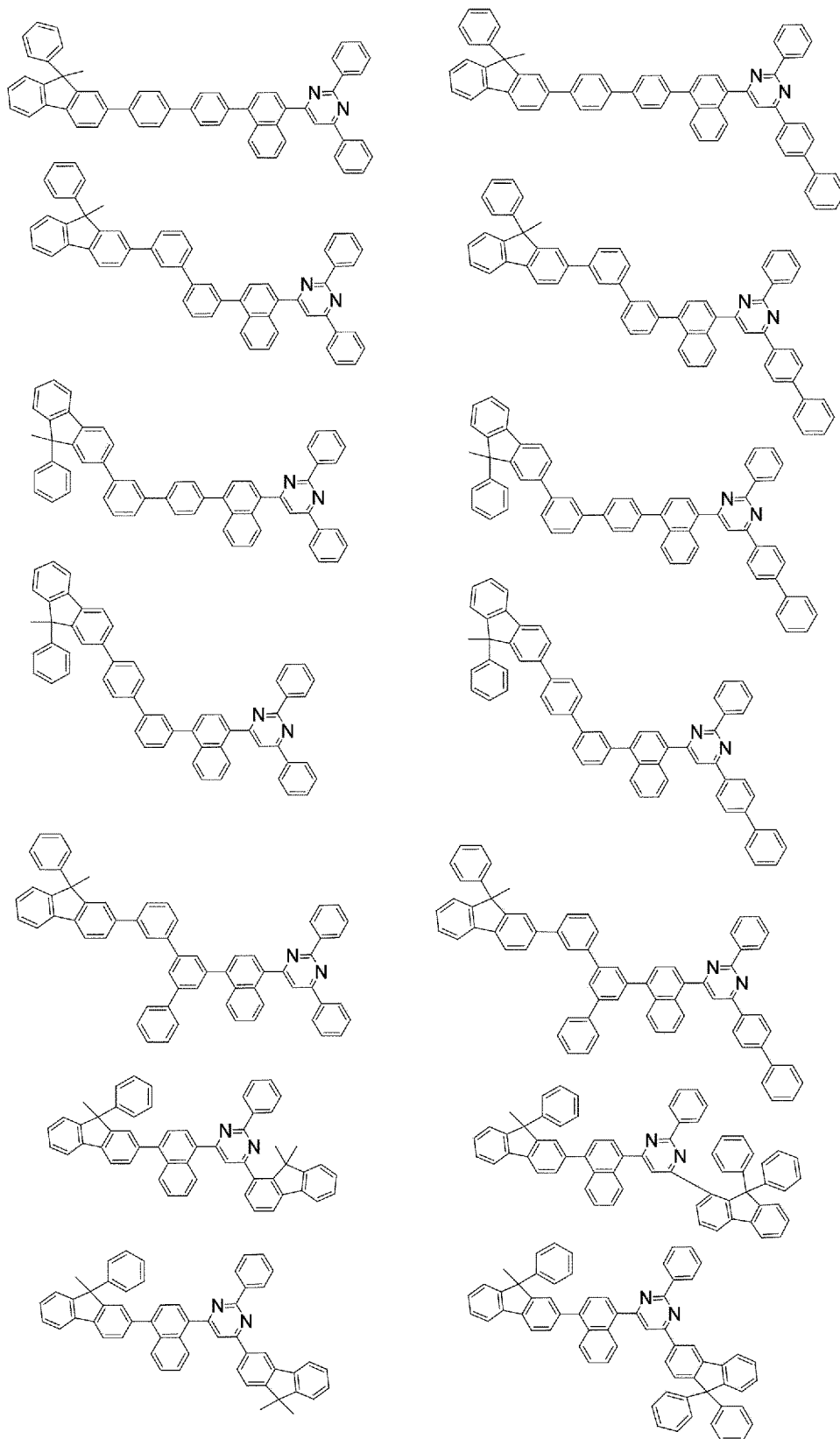
[0225]

[化90]



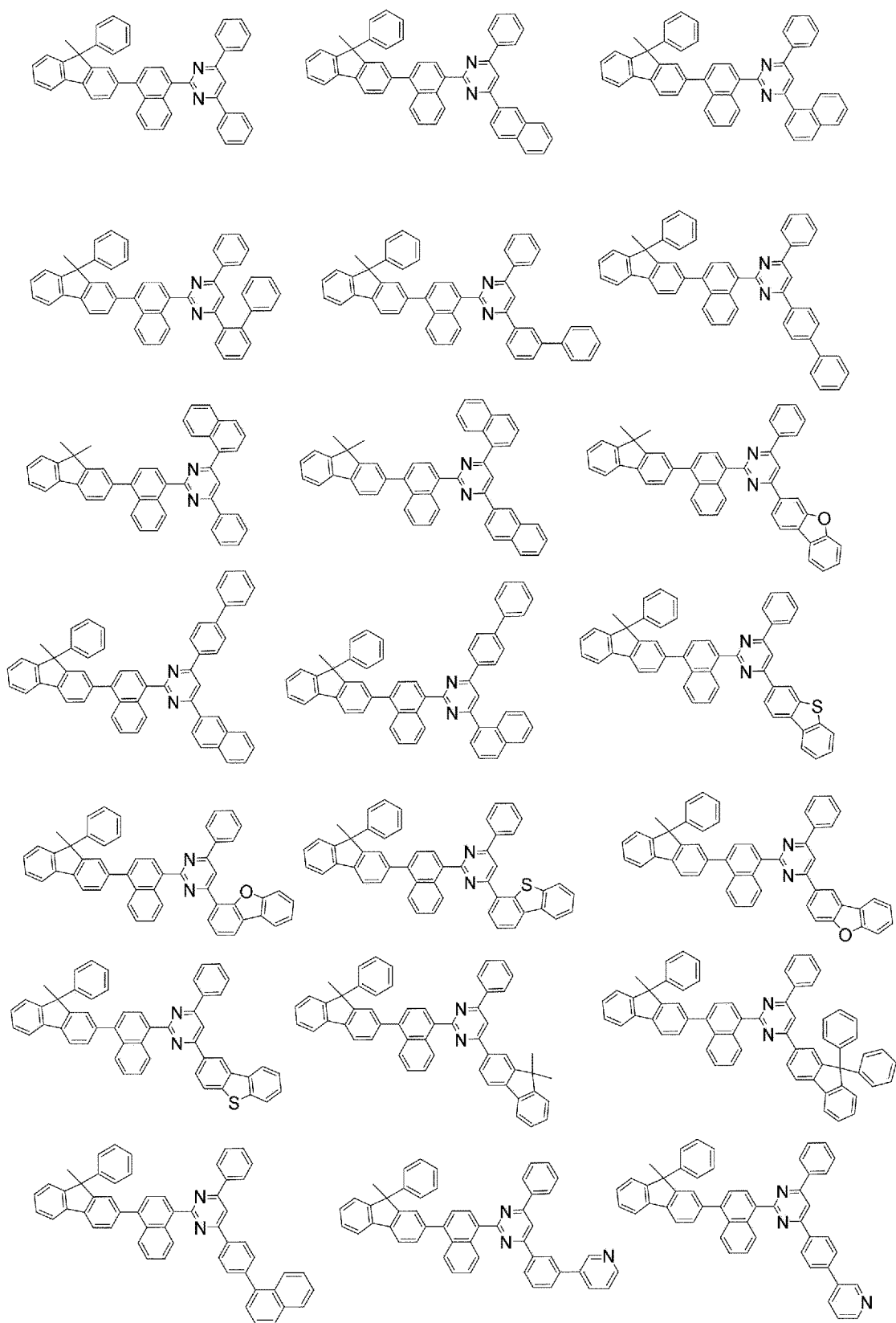
[0226]

[化91]



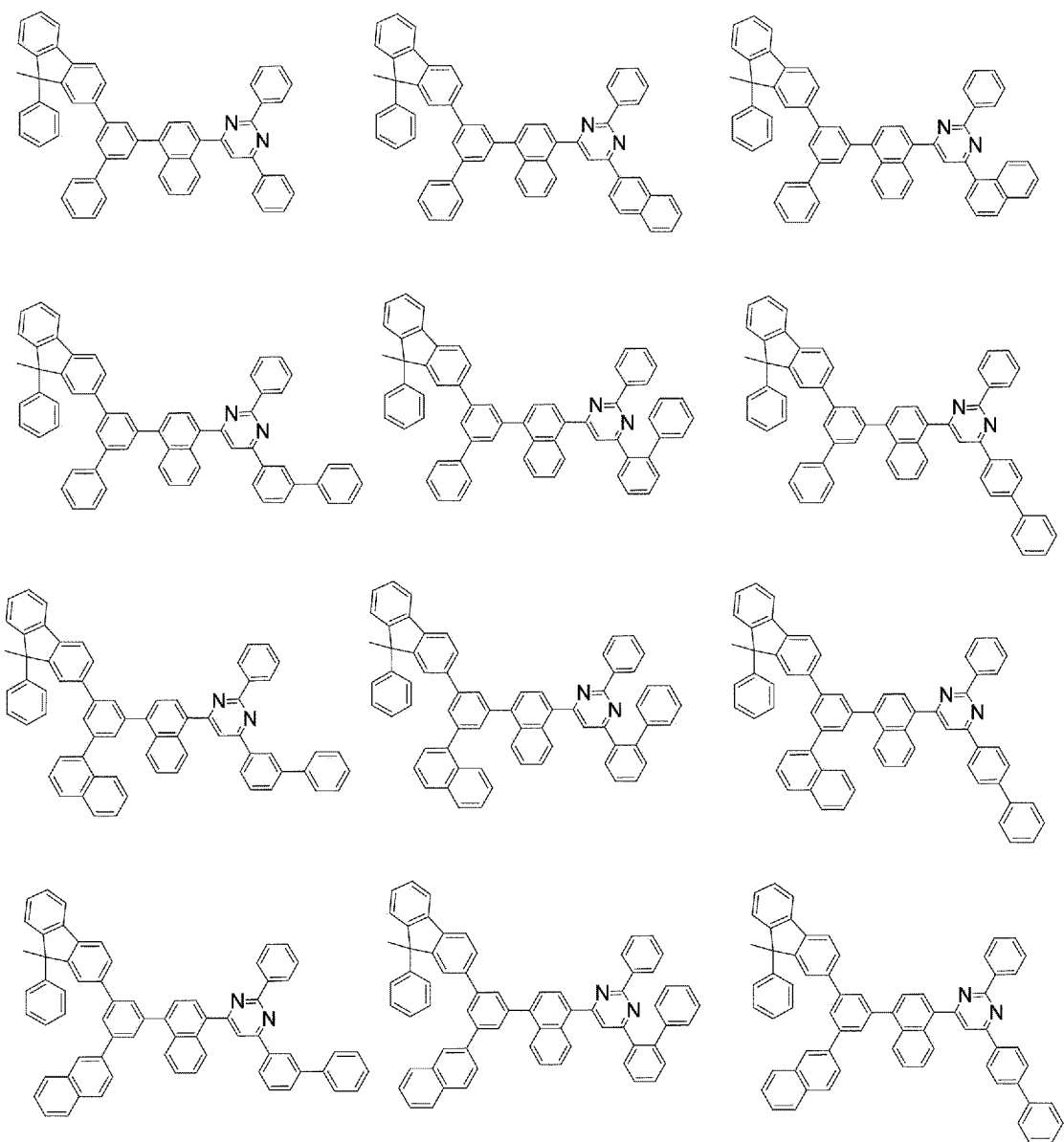
[0227]

[化92]



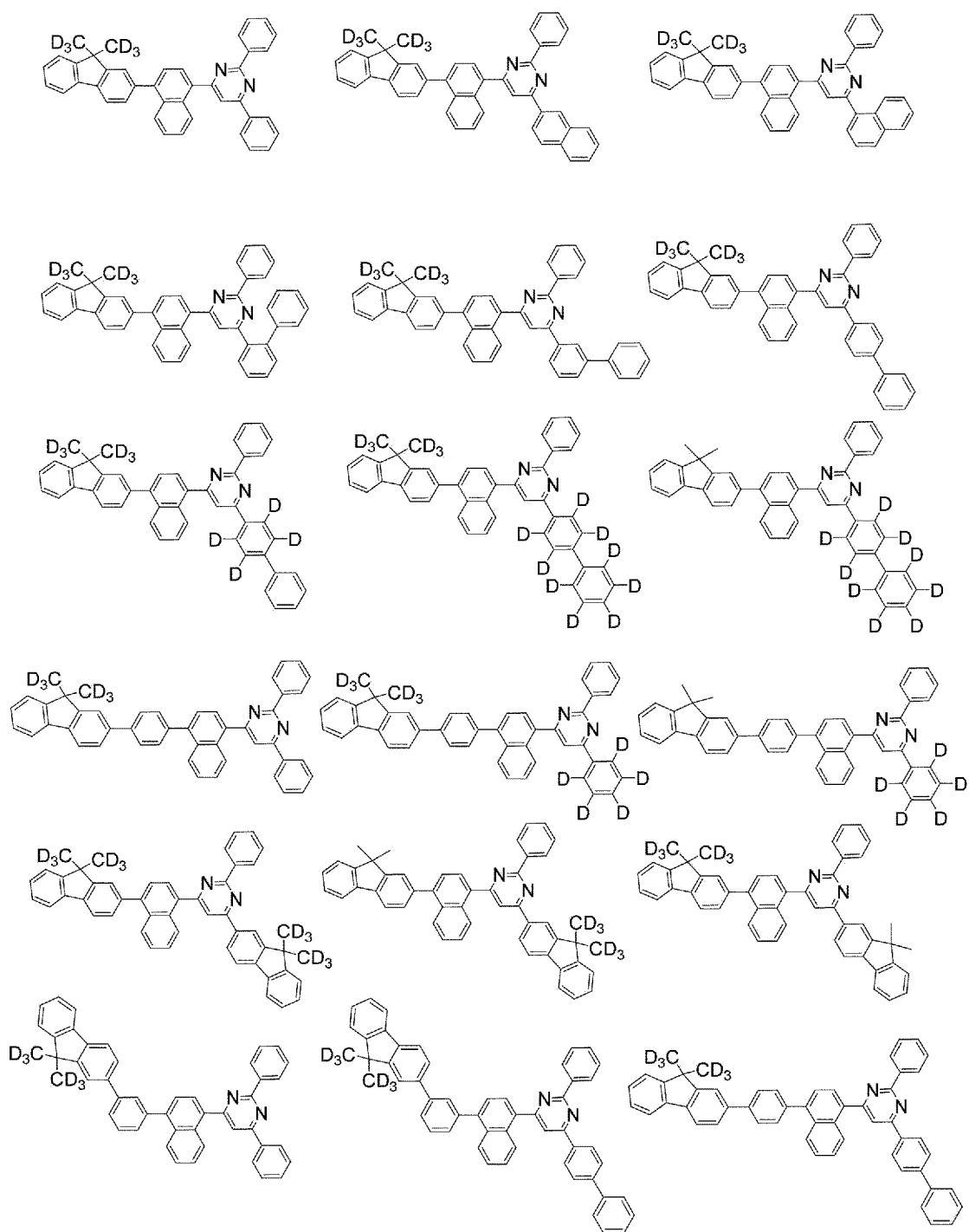
[0228]

[化93]



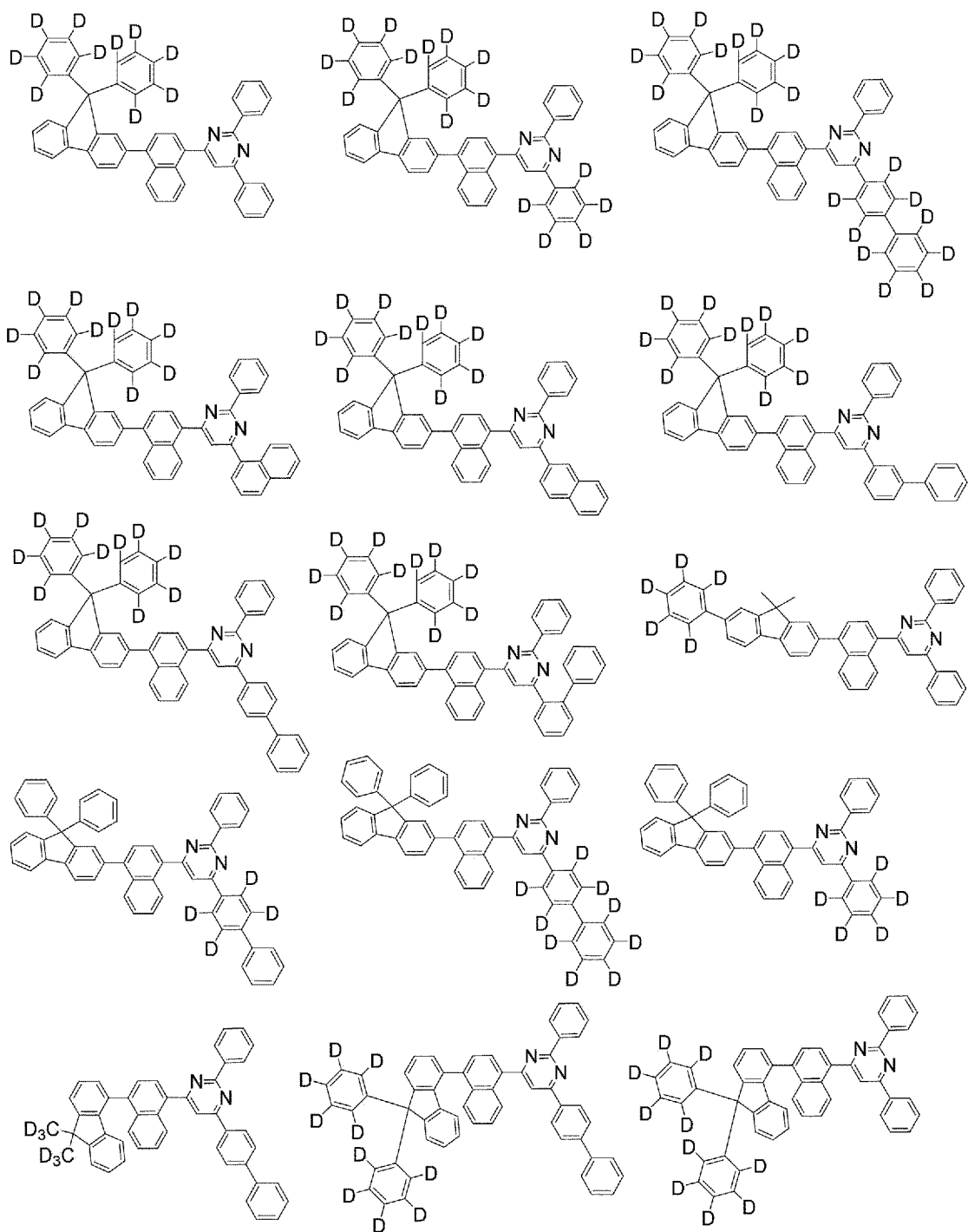
[0229]

[化94]



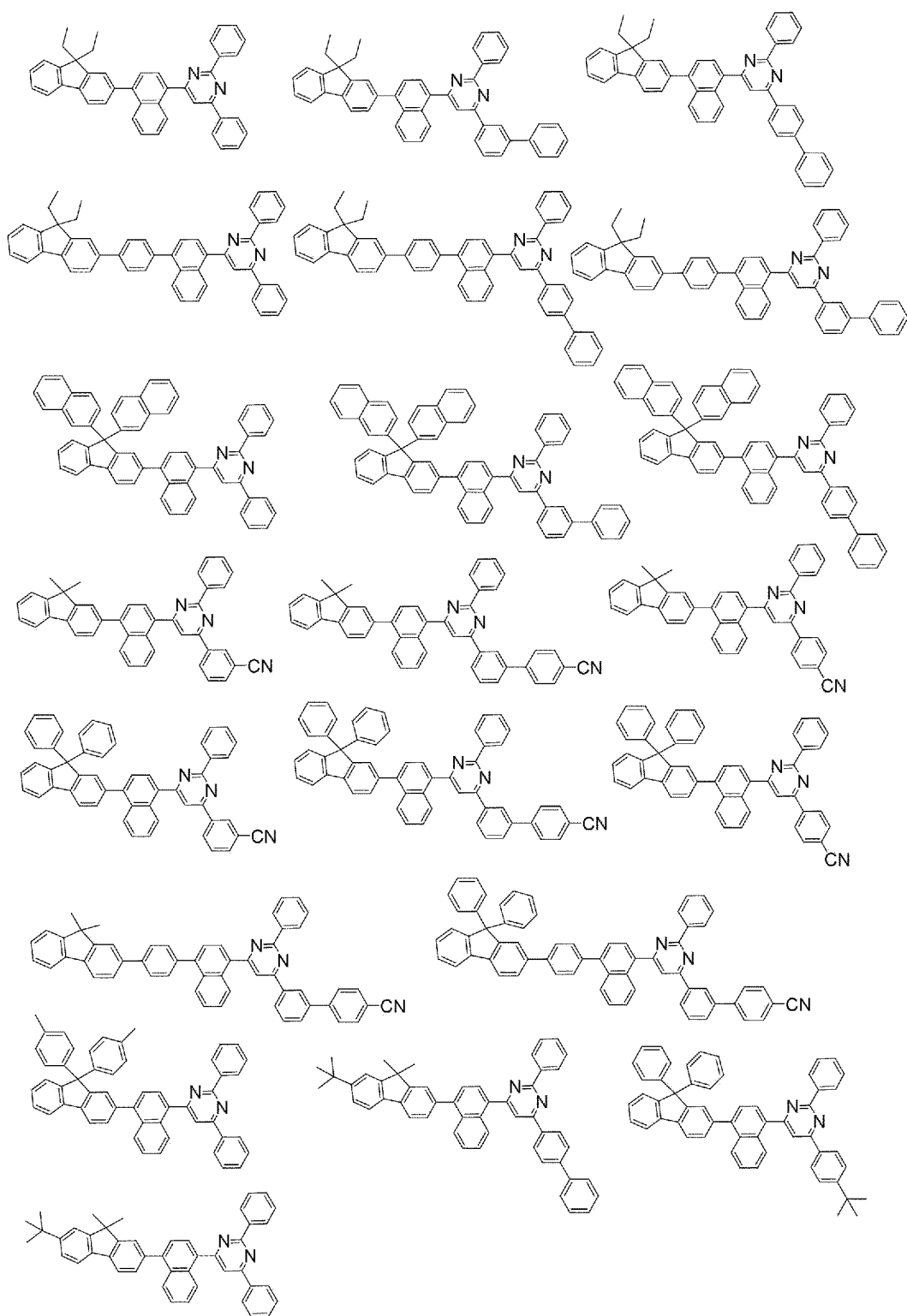
[0230]

[化95]



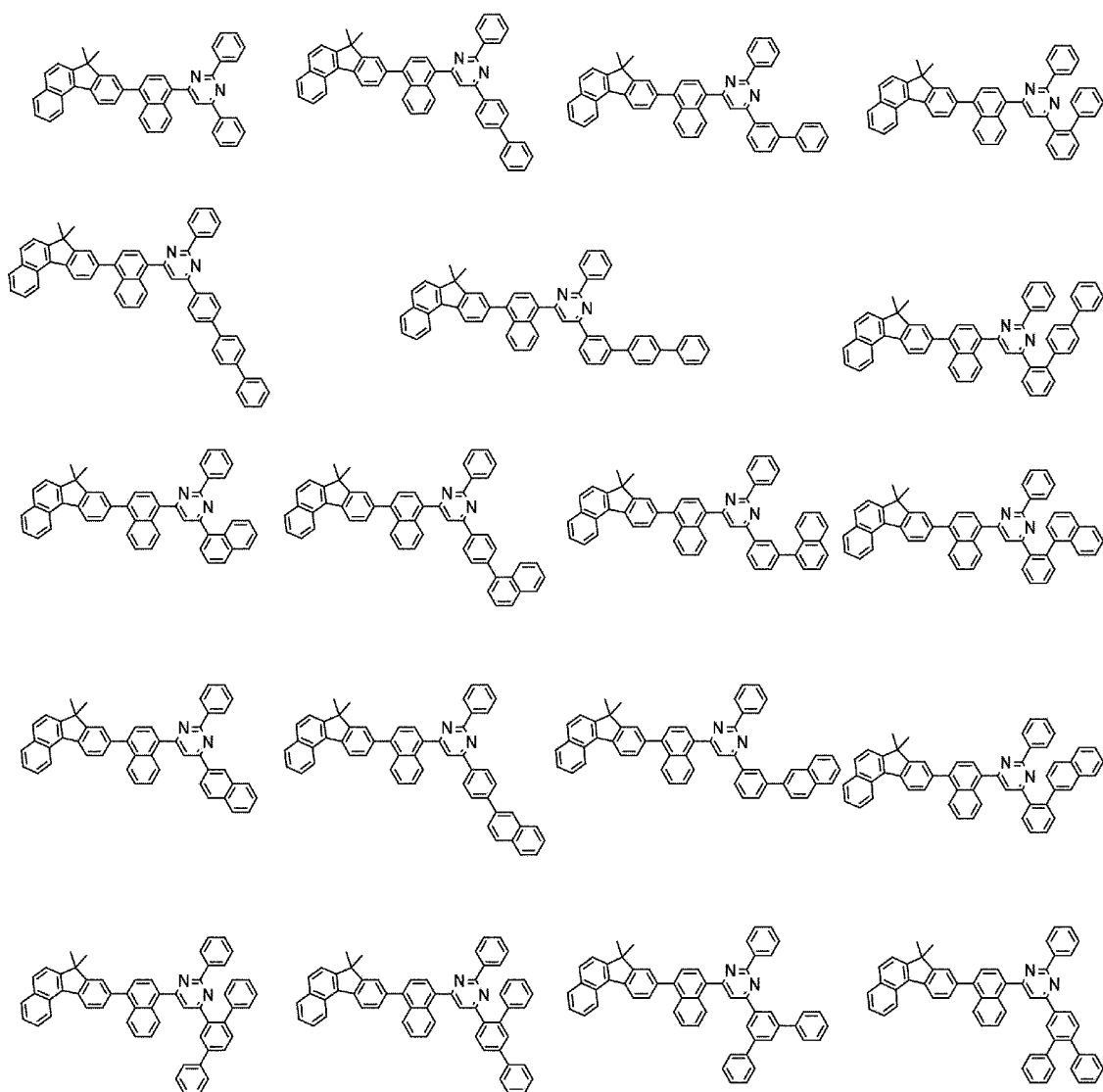
[0231]

[化96]



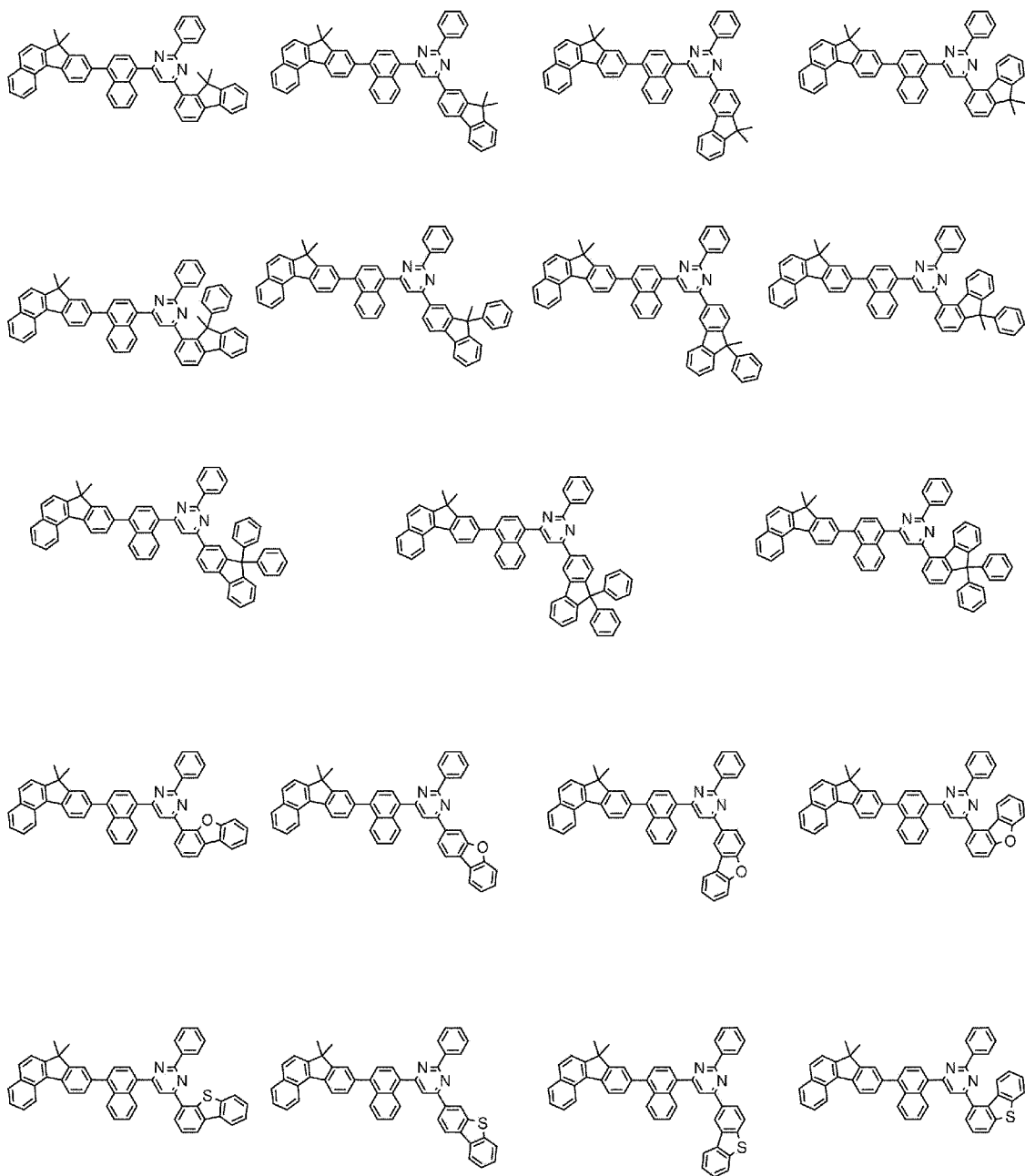
[0232]

[化97]



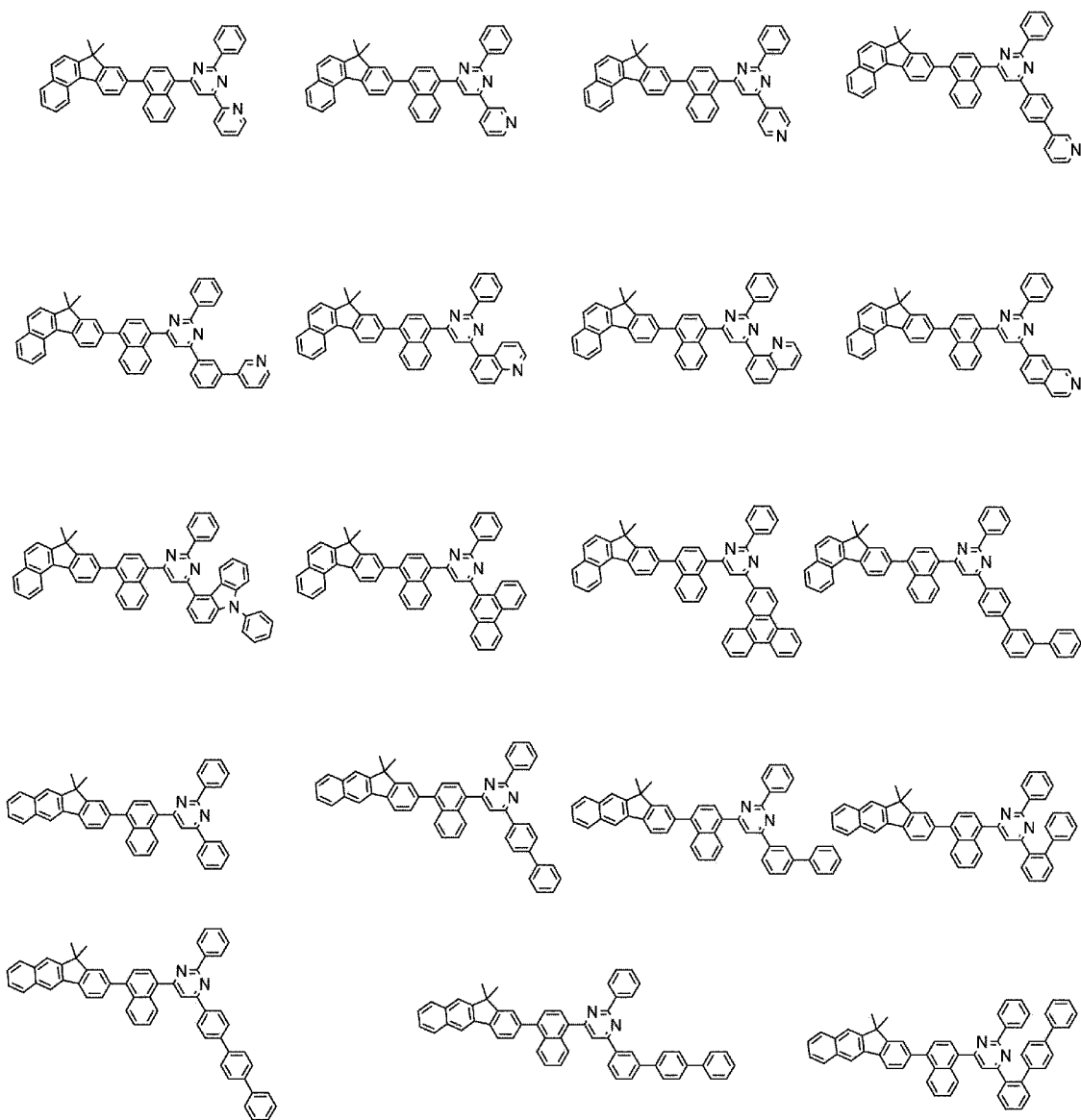
[0233]

[化98]



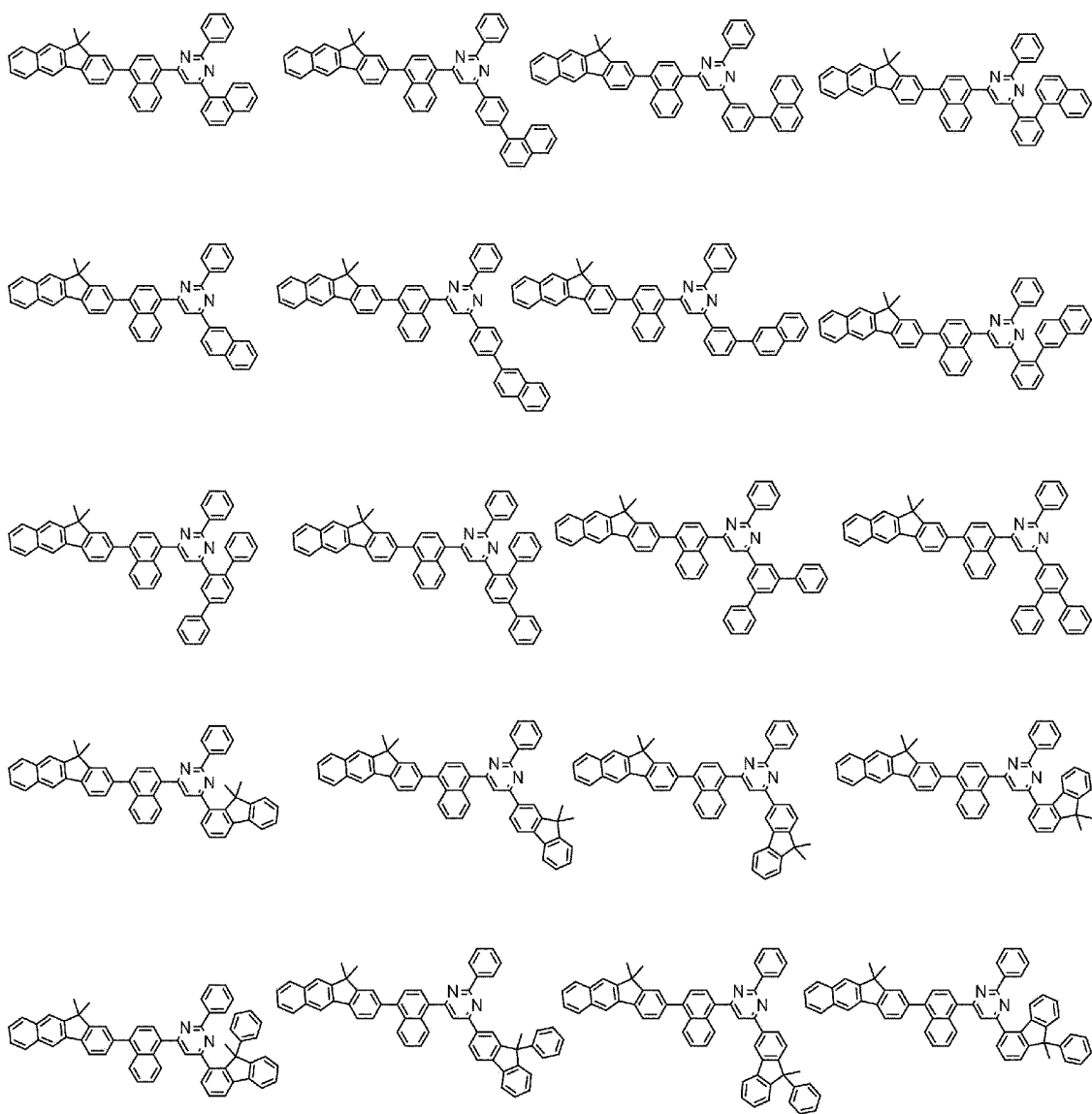
[0234]

[化99]



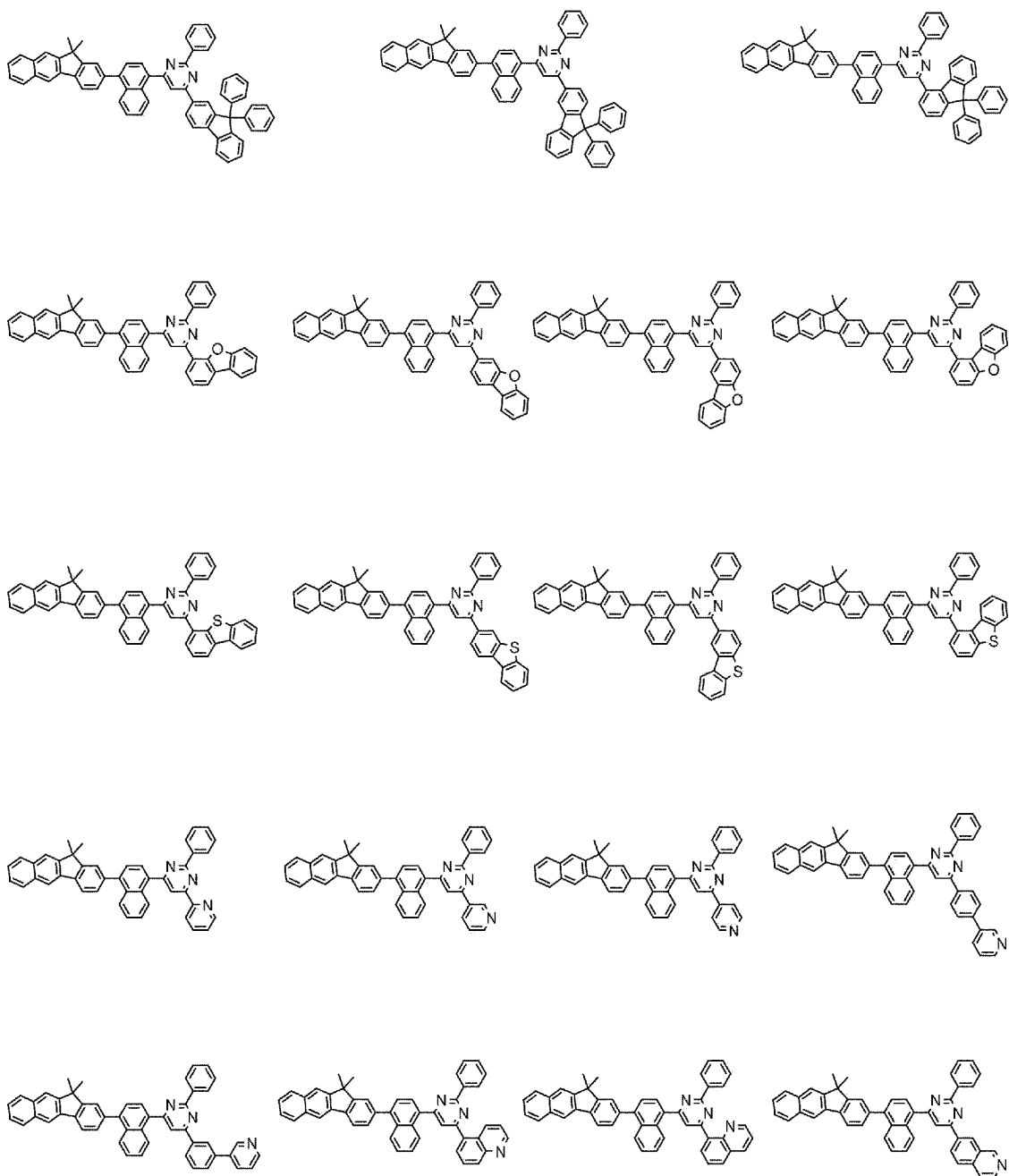
[0235]

[化100]



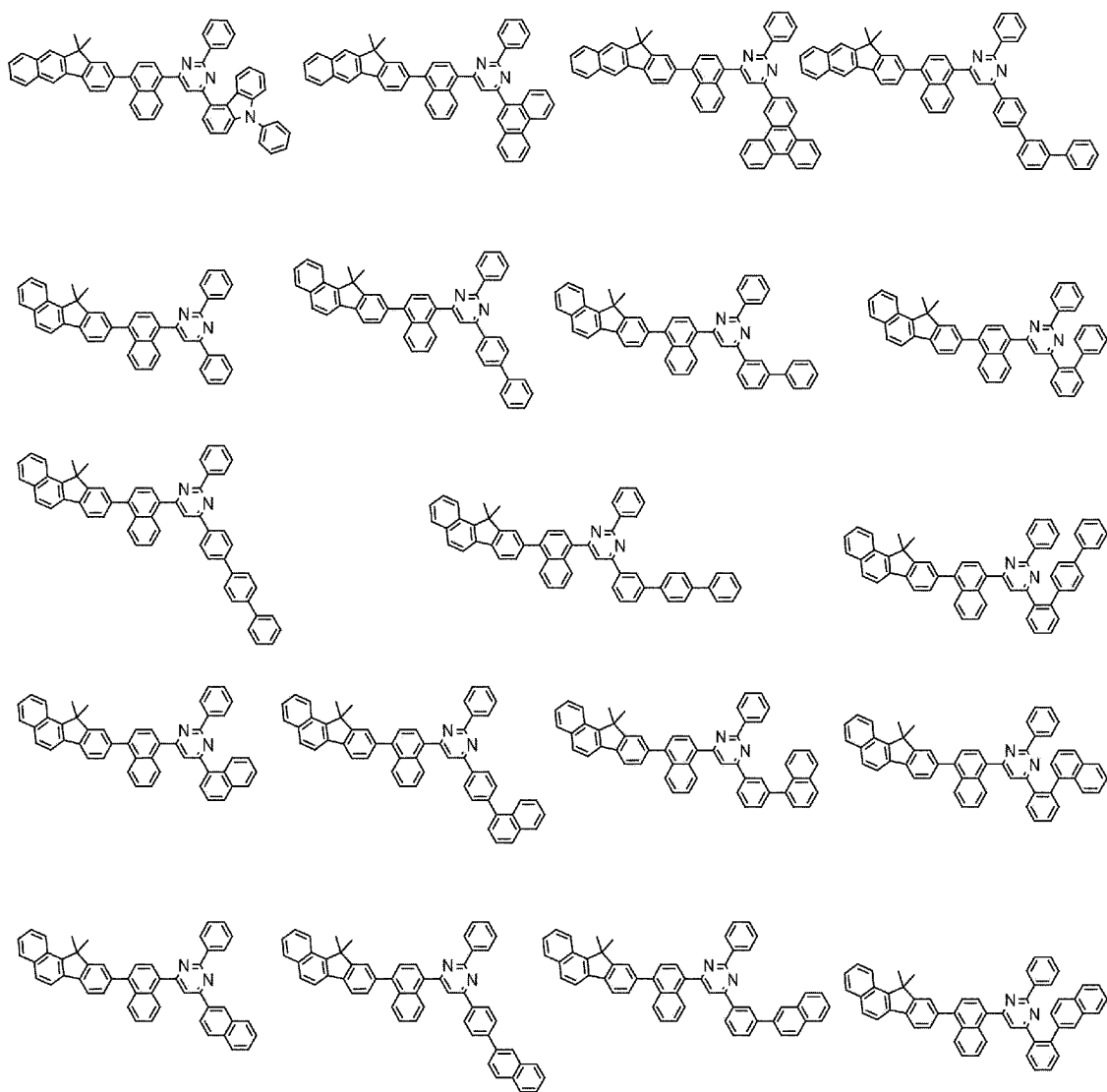
[0236]

[化101]



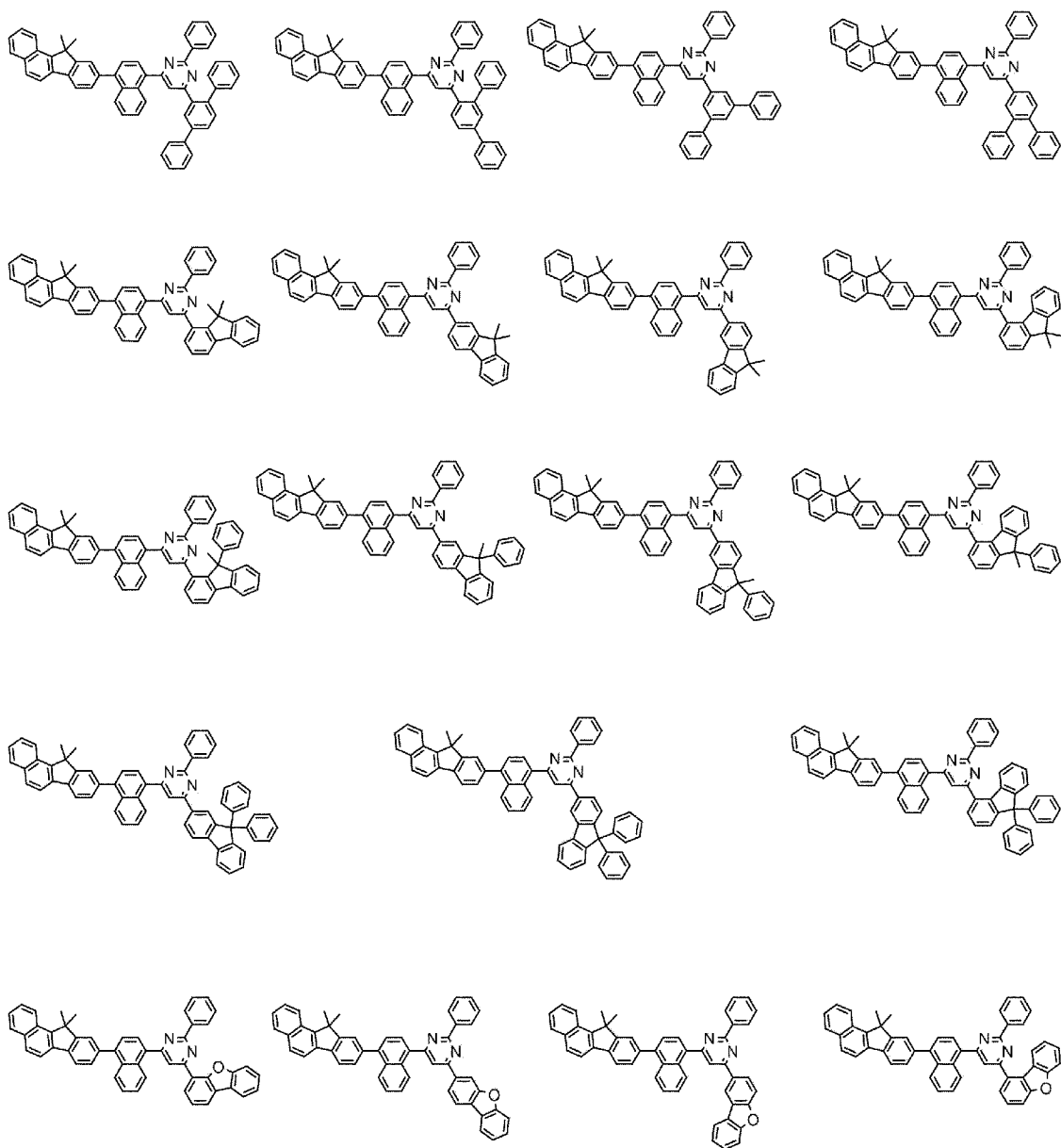
[0237]

[化102]



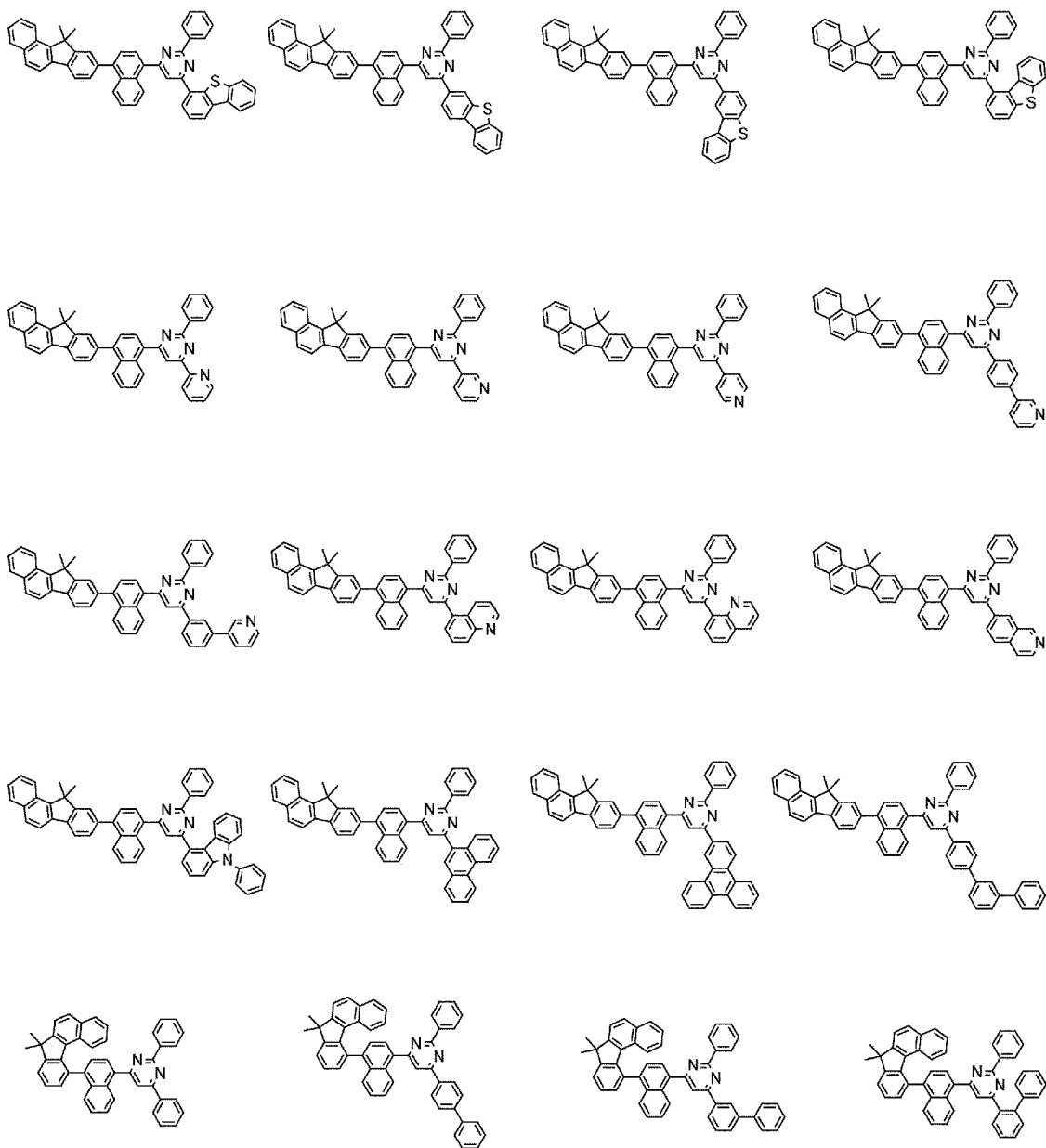
[0238]

[化103]



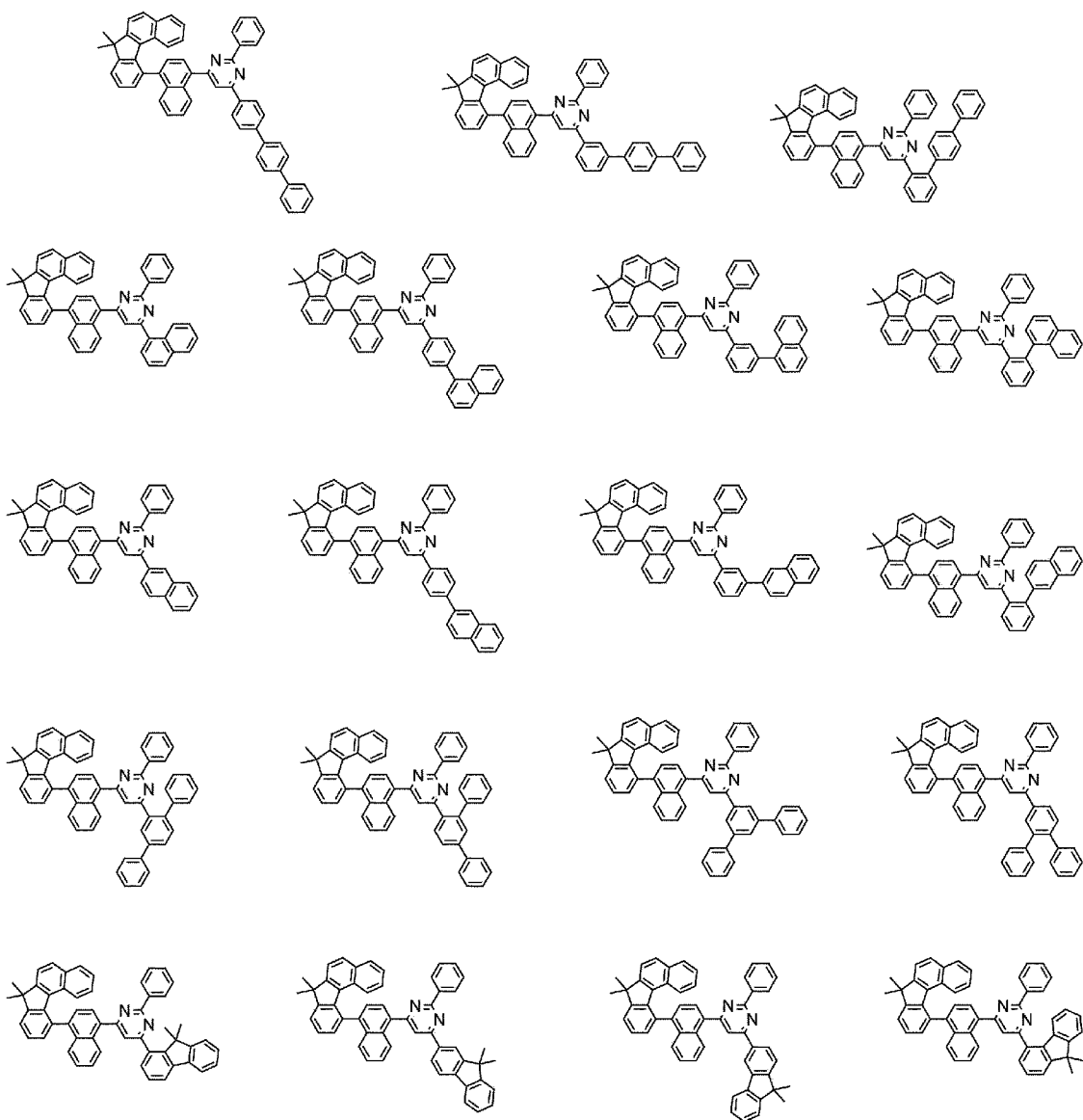
[0239]

[化104]



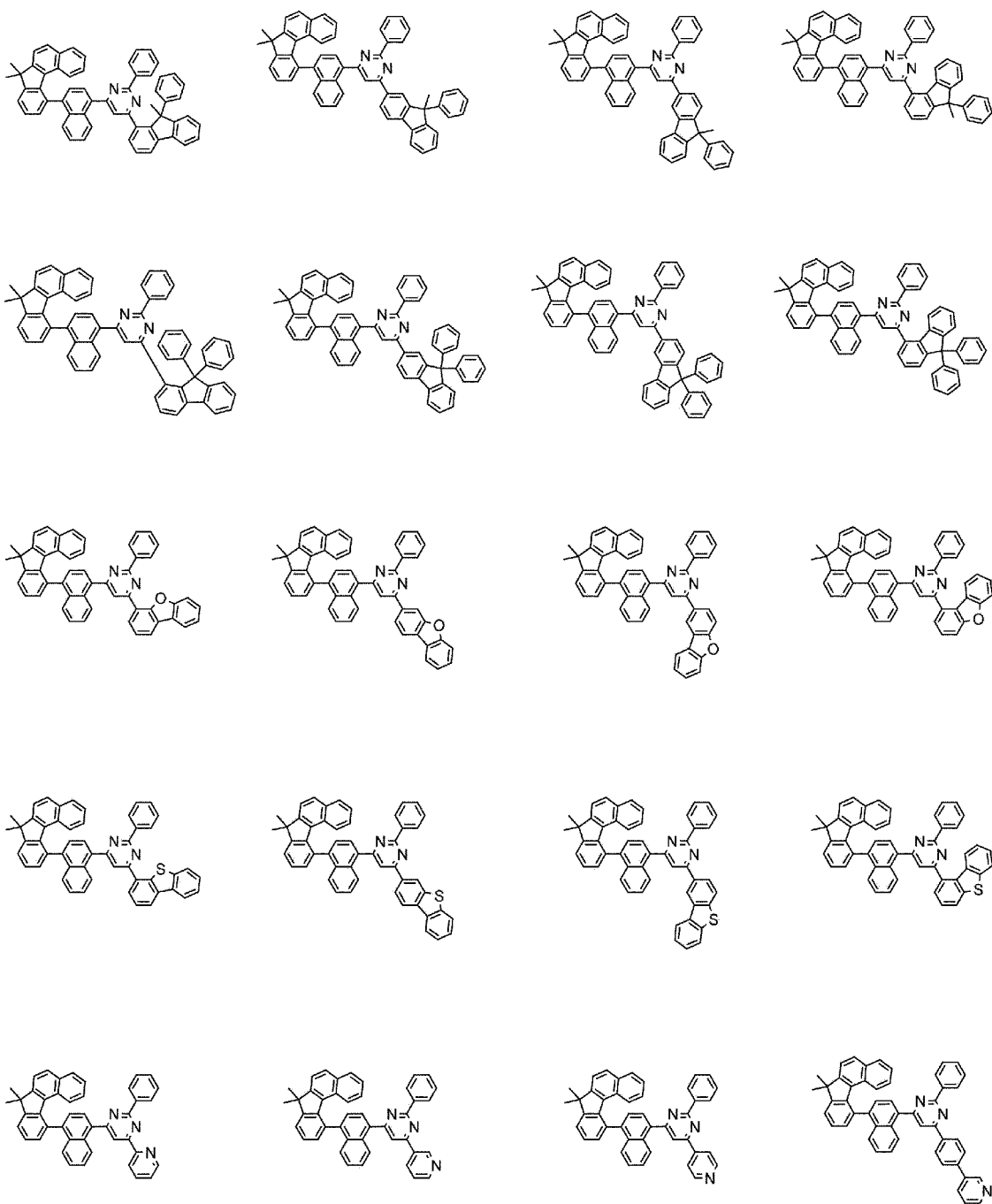
[0240]

[化105]

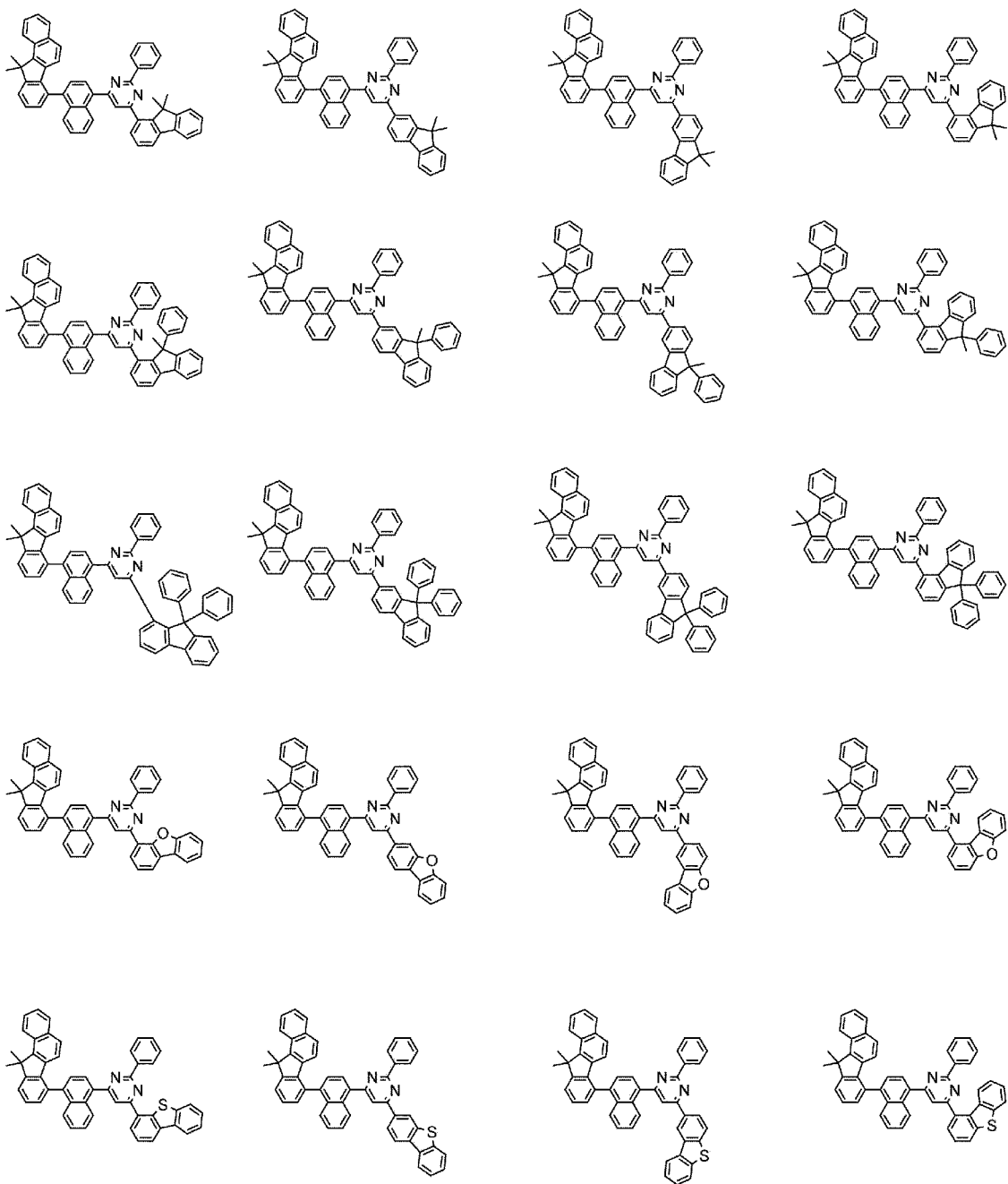


[0241]

[化106]

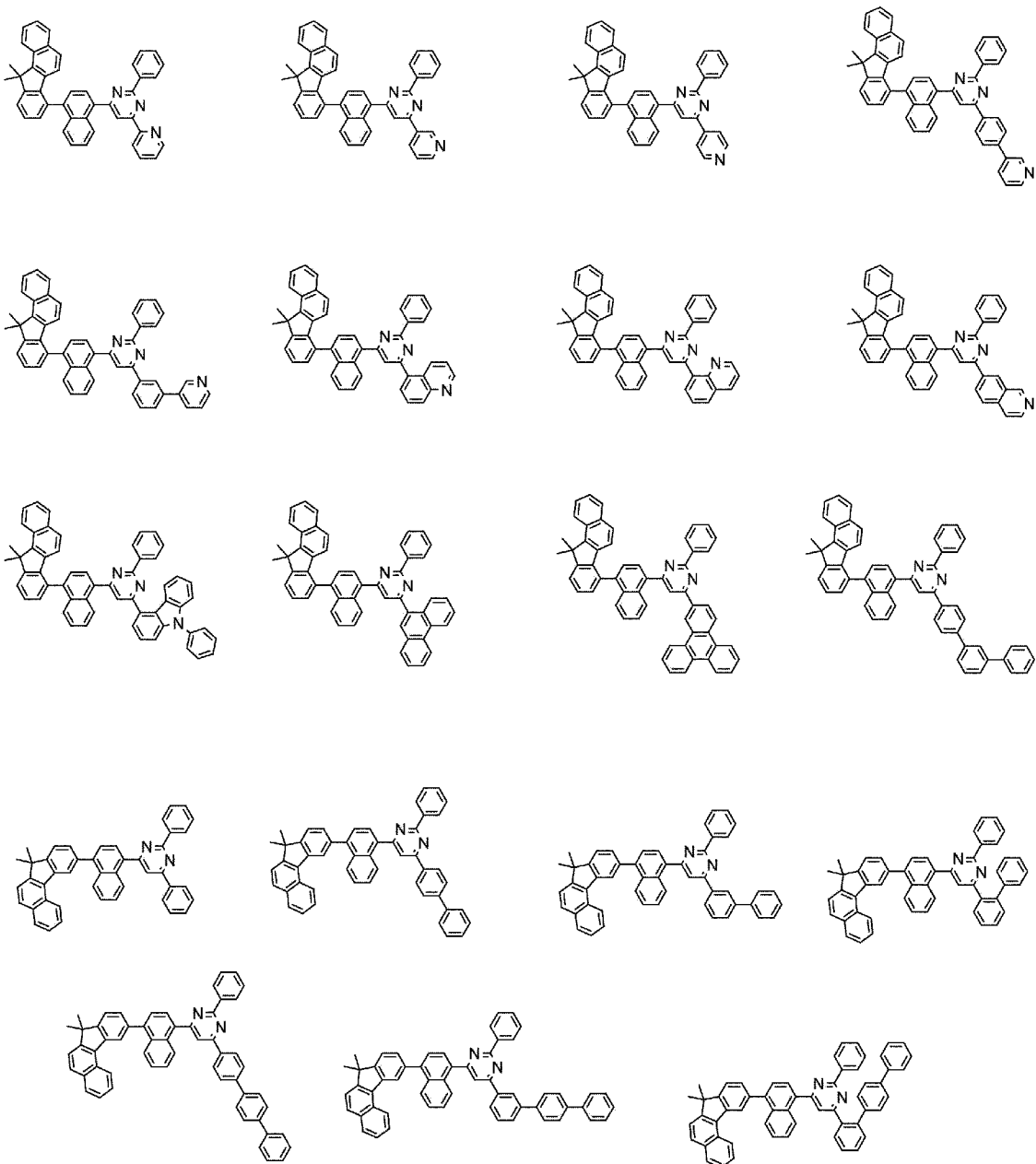


[化109]



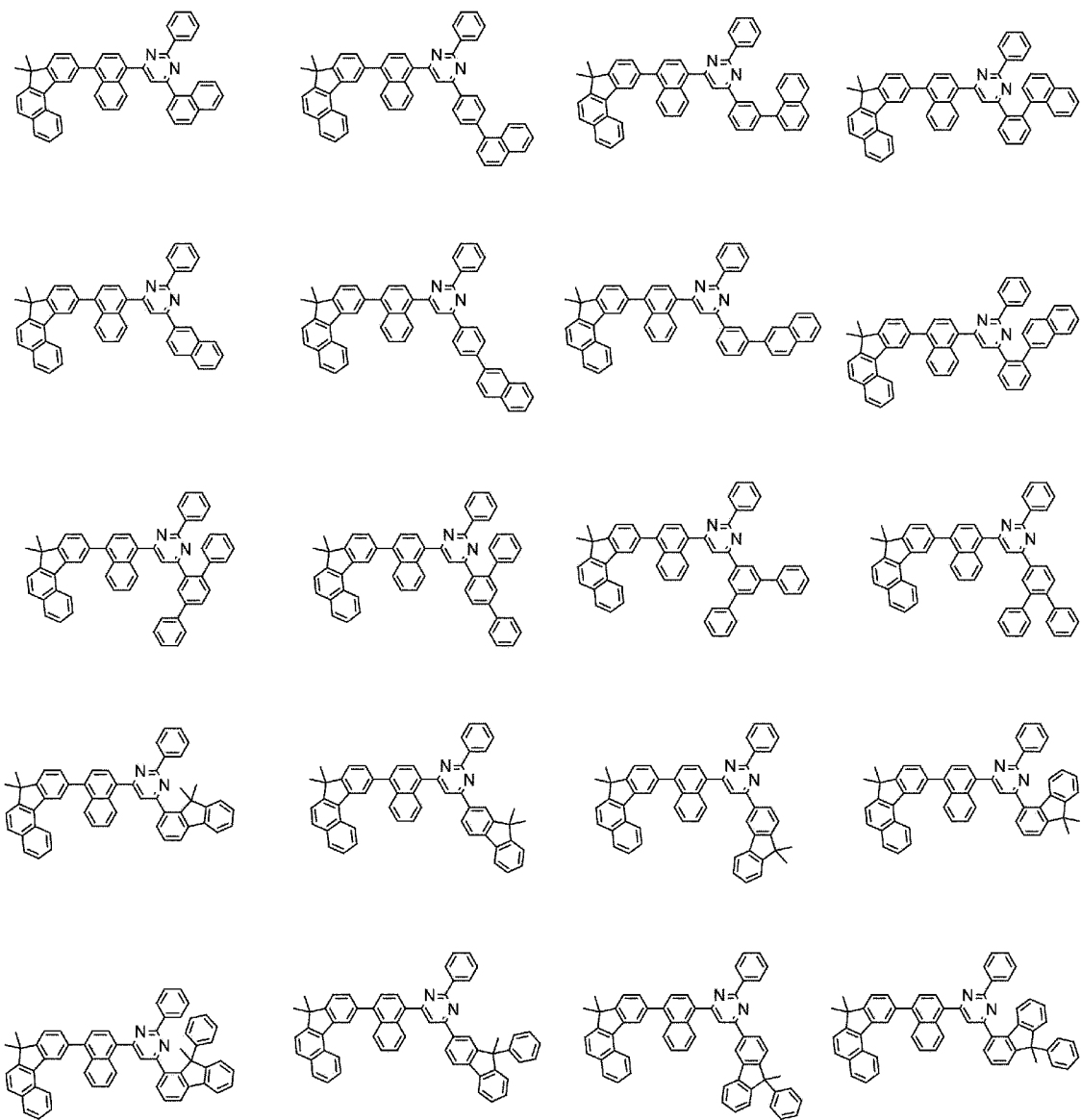
[0245]

[110]



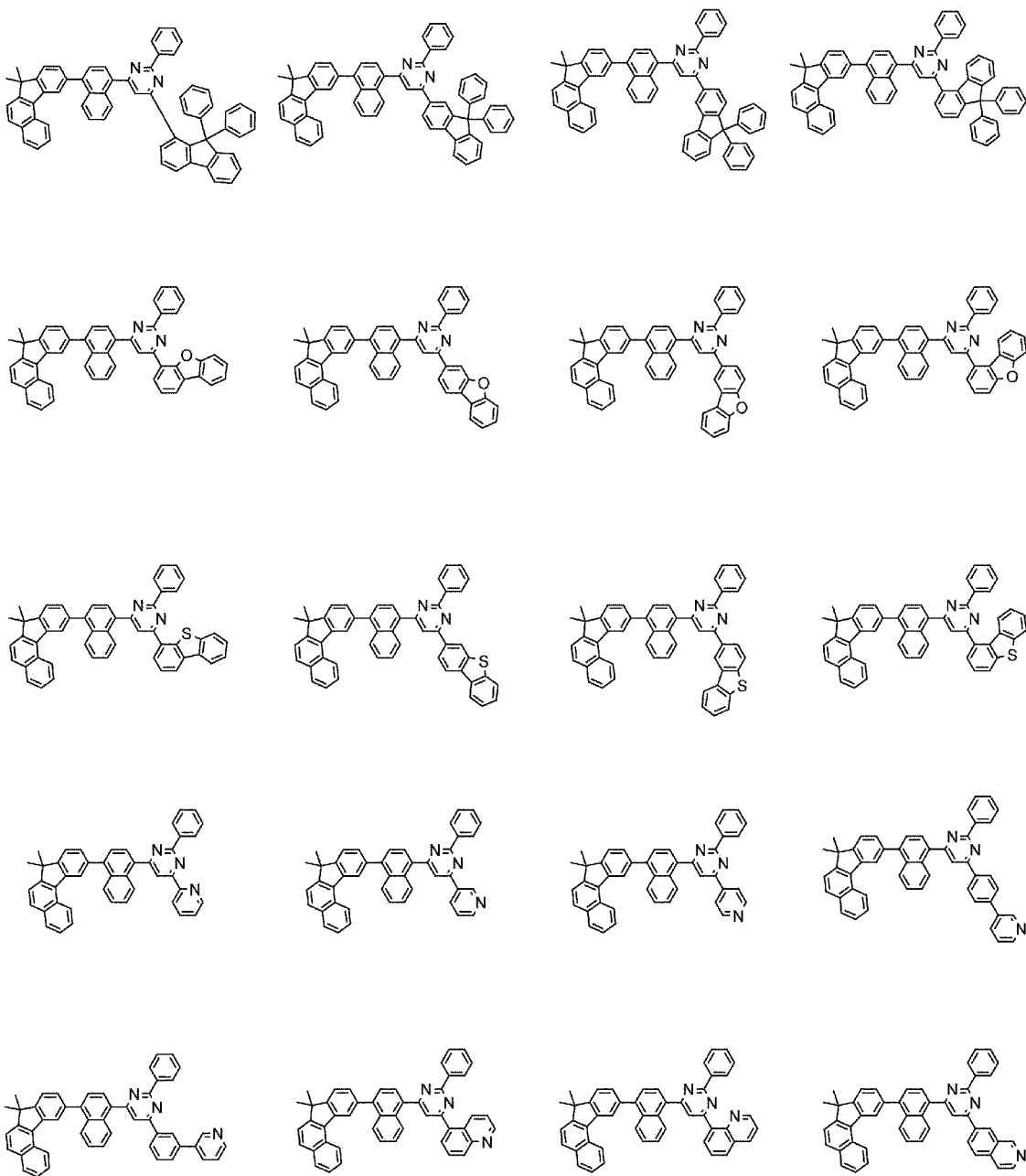
[0246]

[化111]



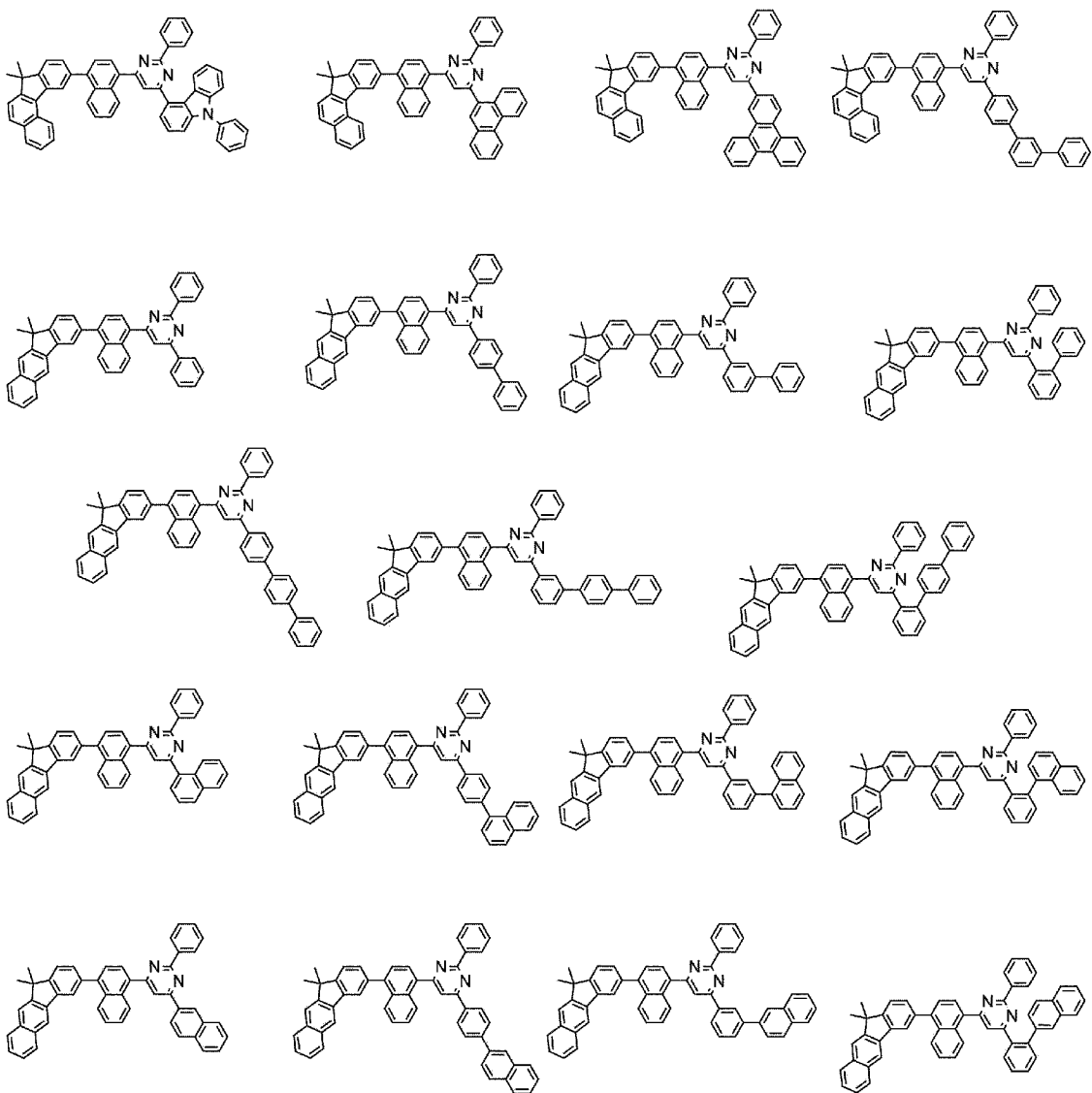
[0247]

[化112]



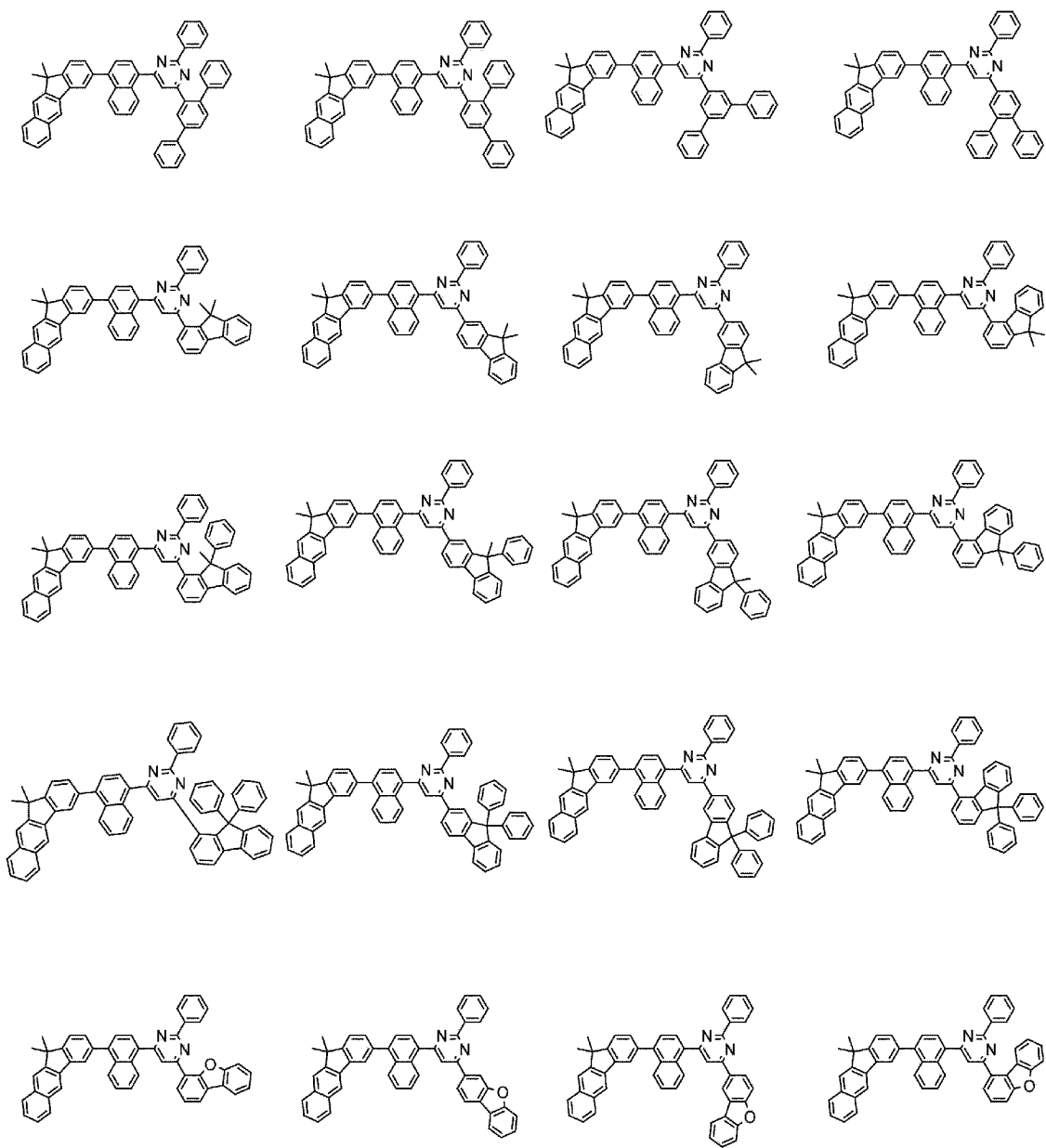
[0248]

[化113]



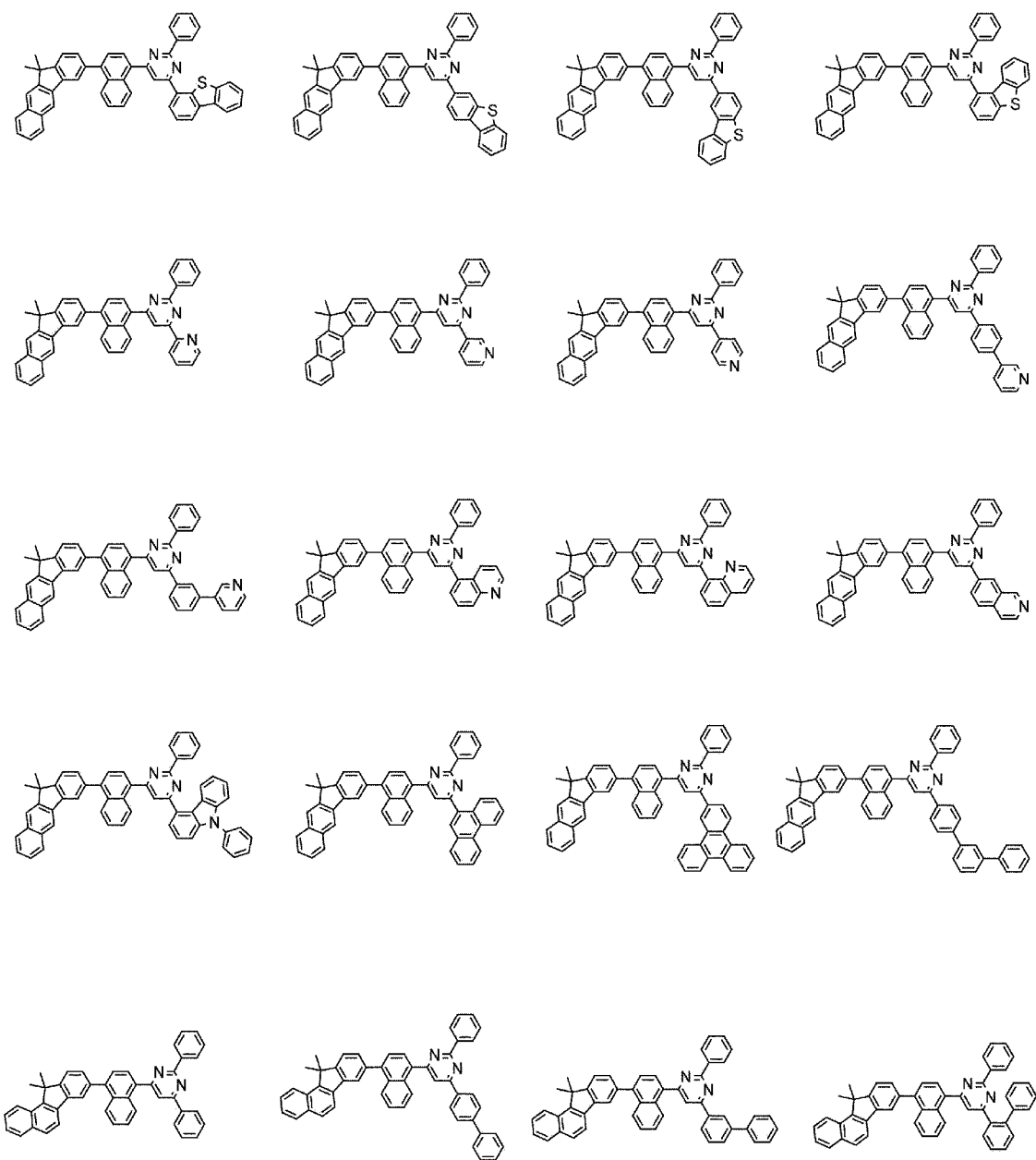
[0249]

[化114]



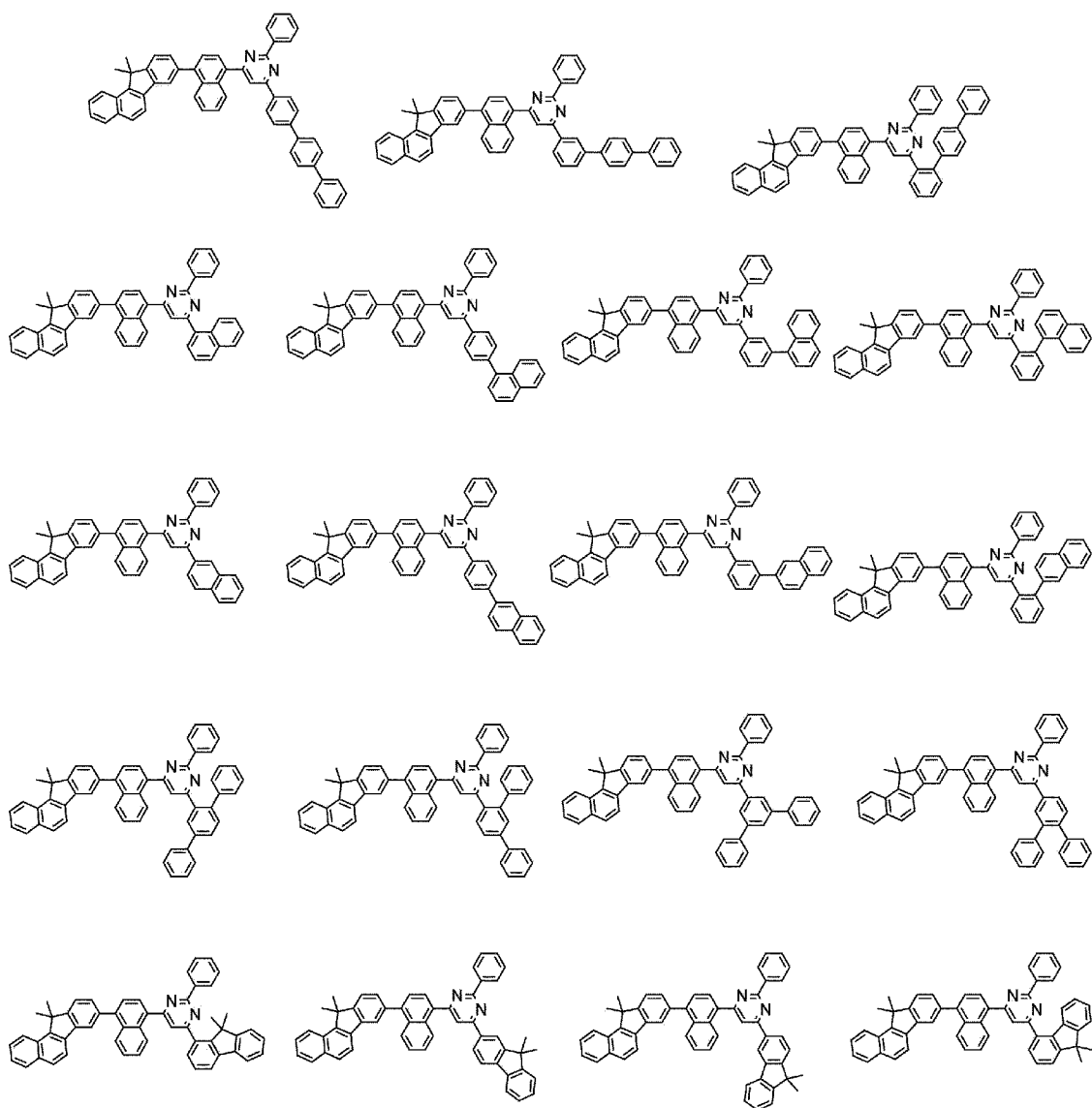
[0250]

[化115]



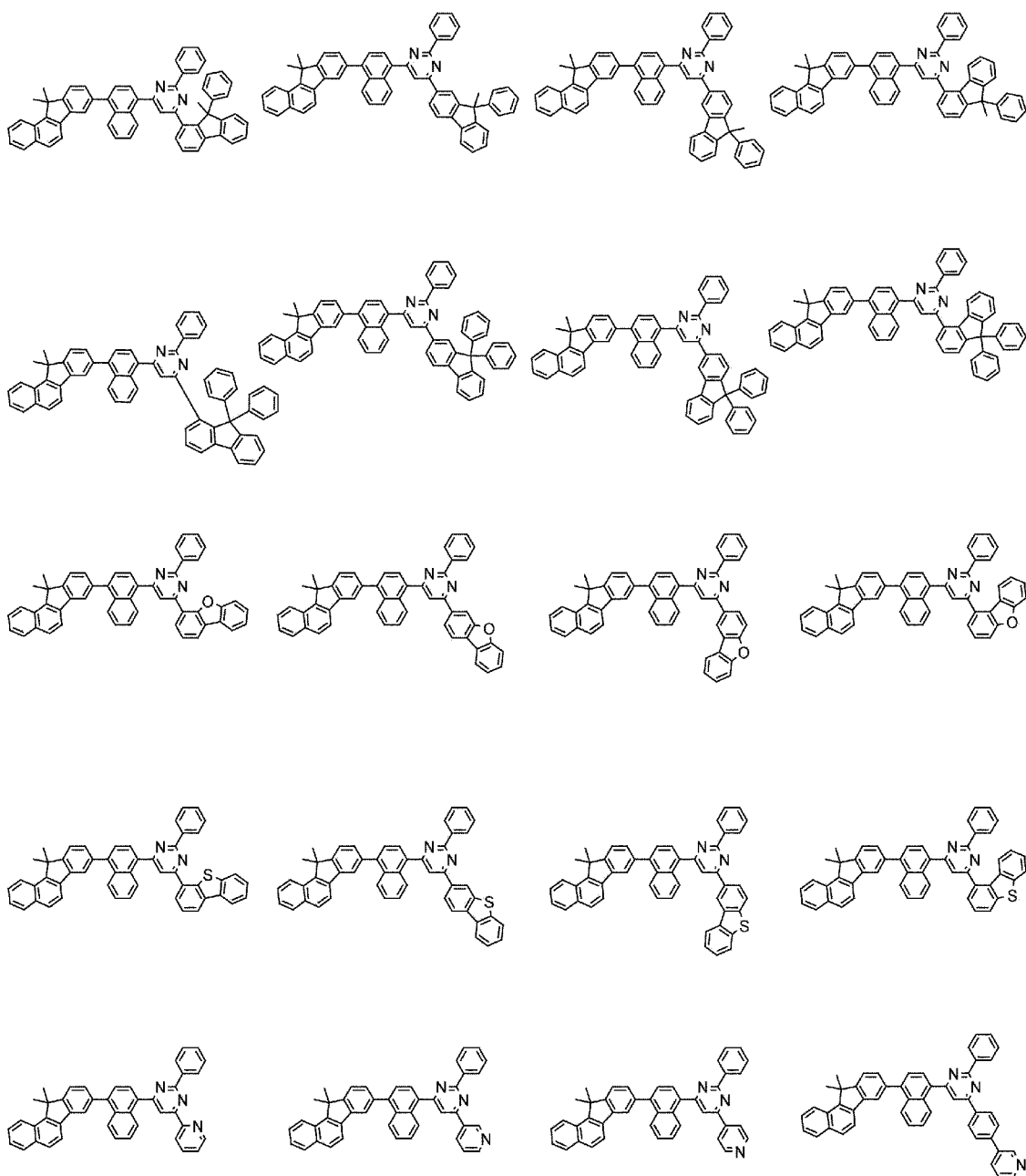
[0251]

[化116]



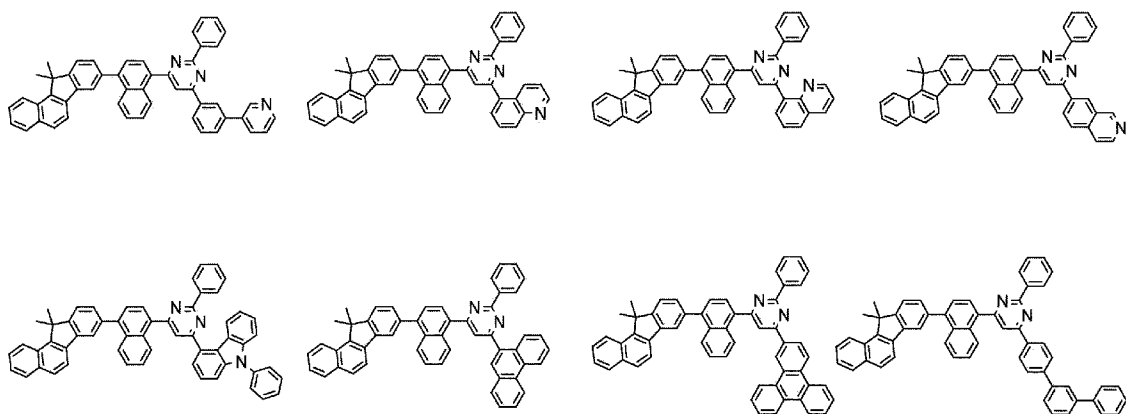
[0252]

[化117]

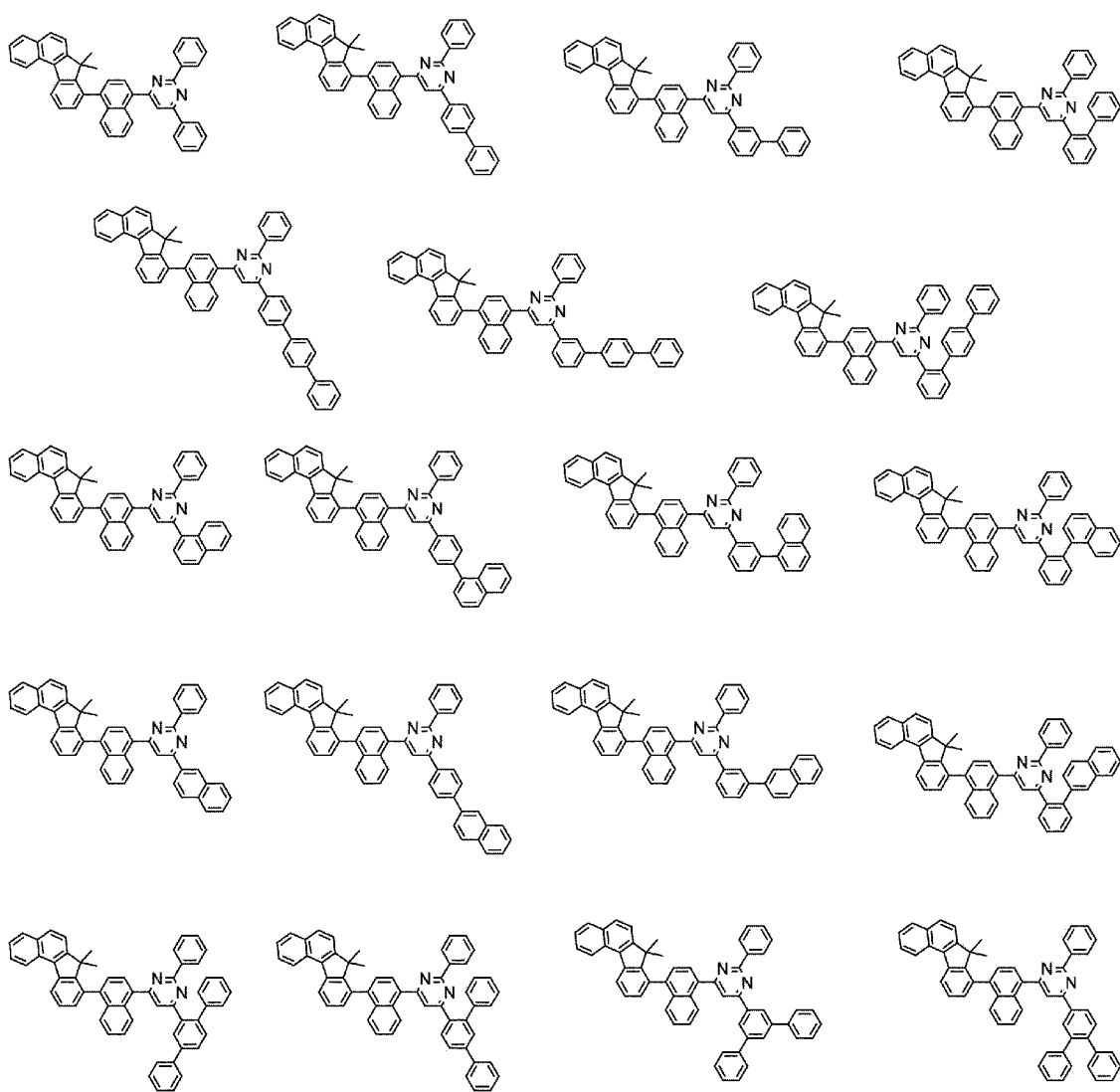


[0253]

[化118]

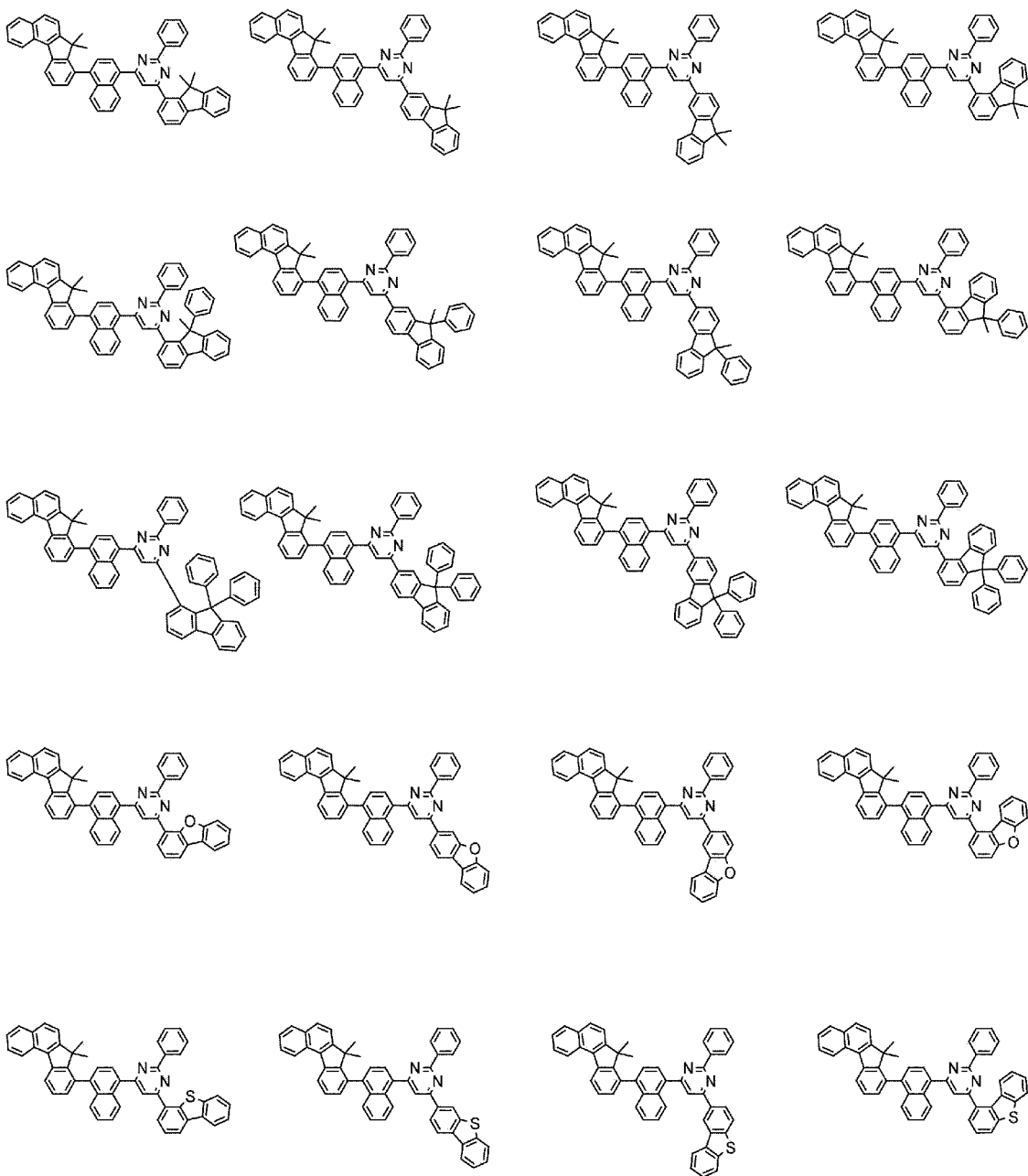


[0254] [化119]



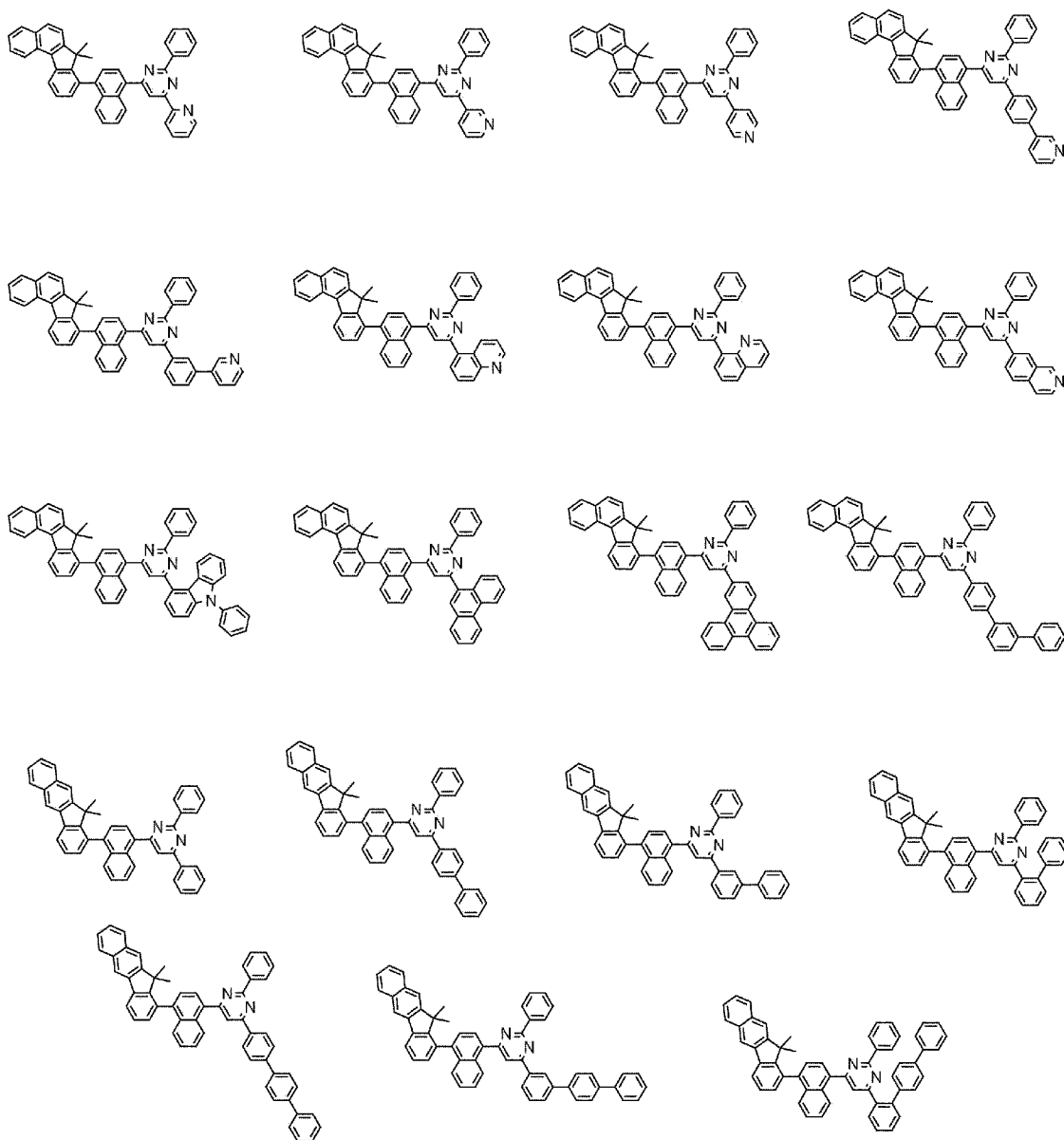
[0255]

[化120]



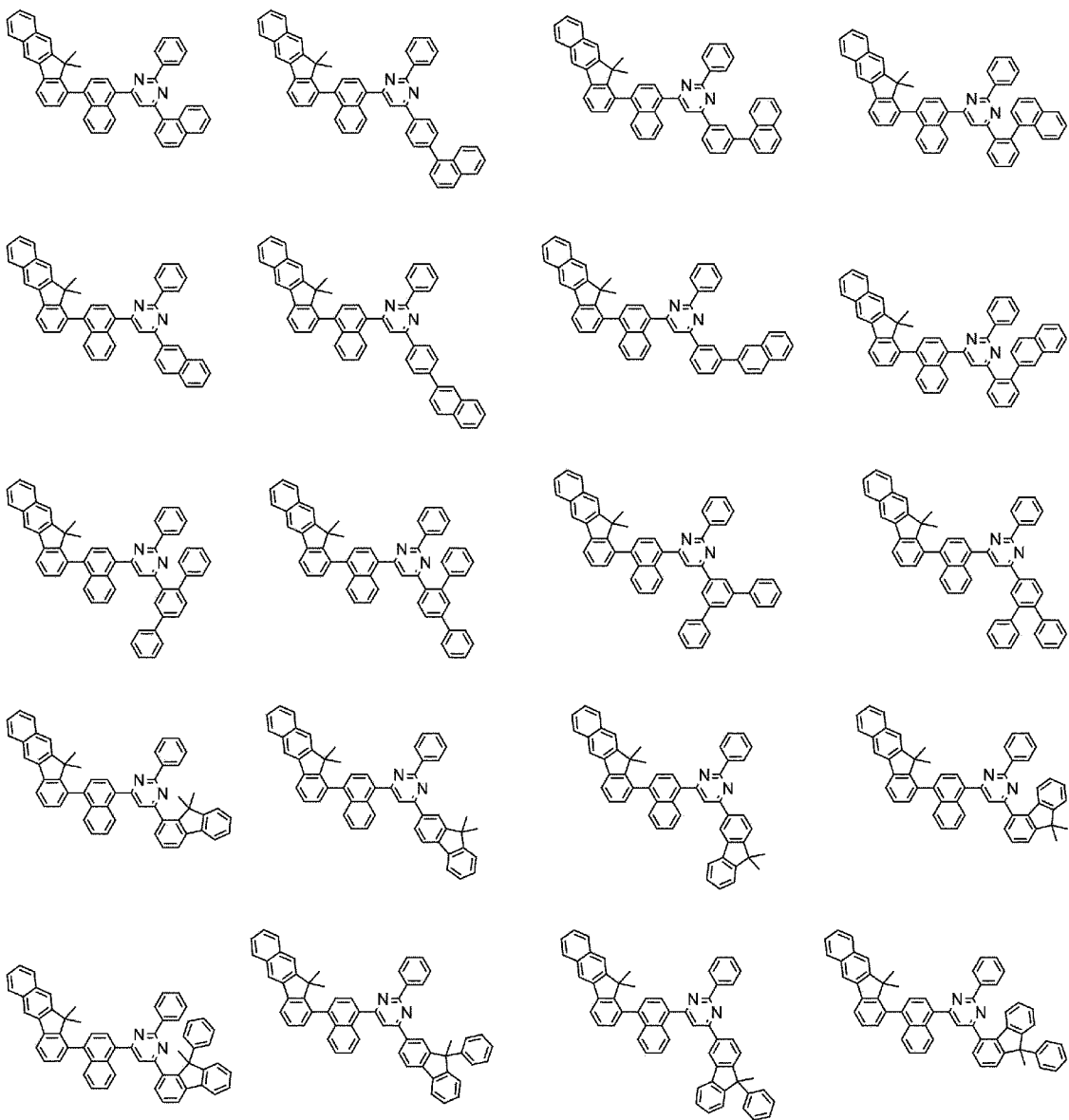
[0256]

[化121]



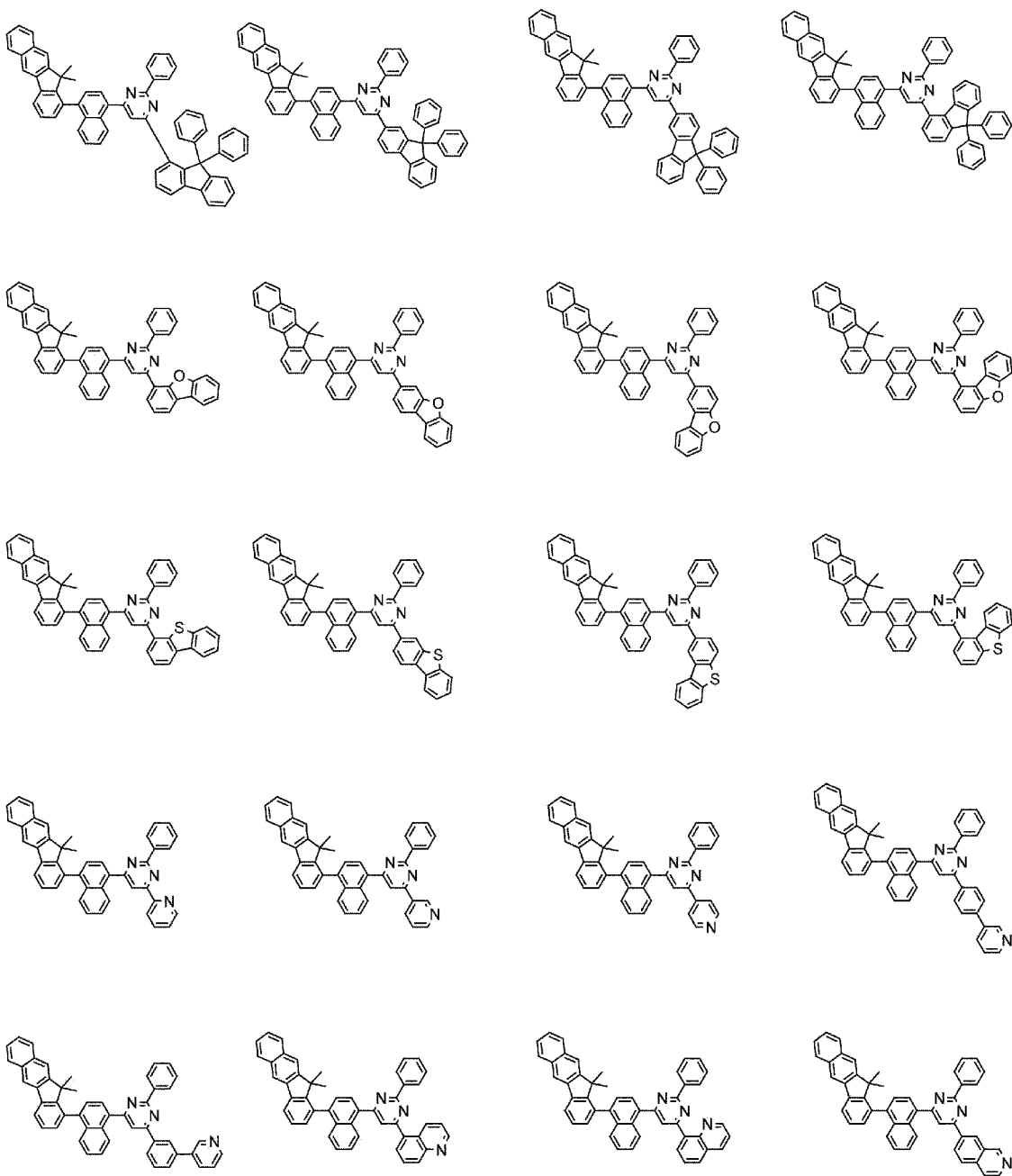
[0257]

[化122]

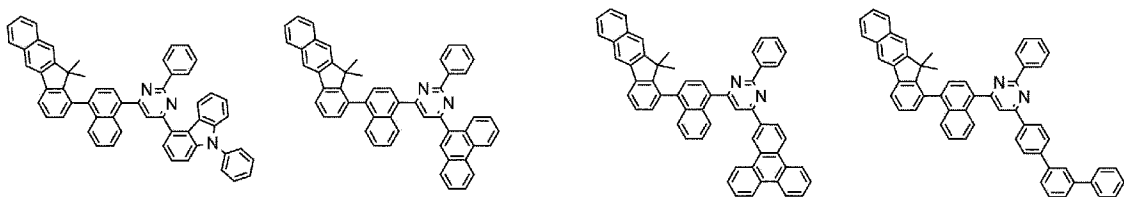


[0258]

[化123]

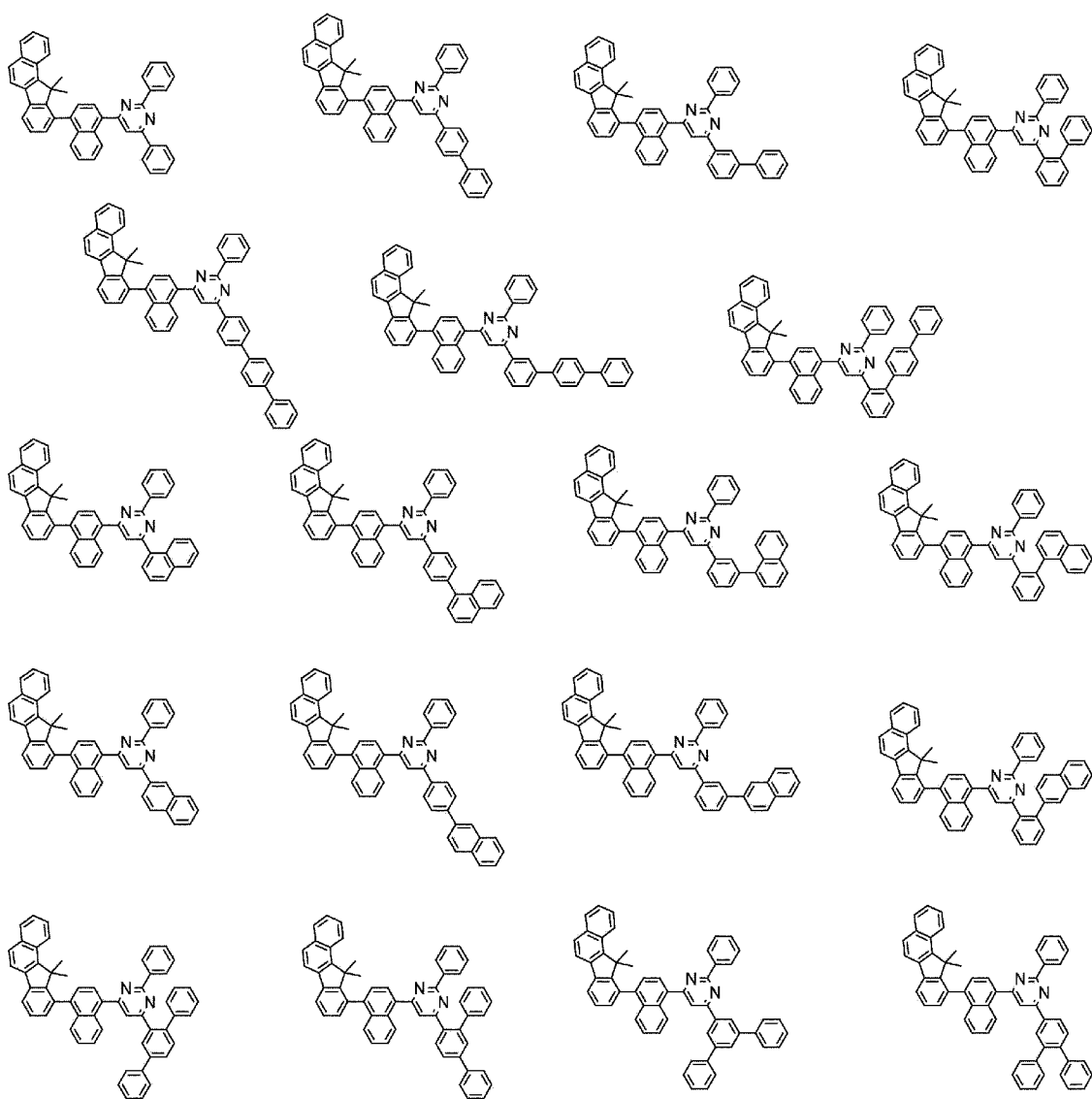


[0259] [化124]



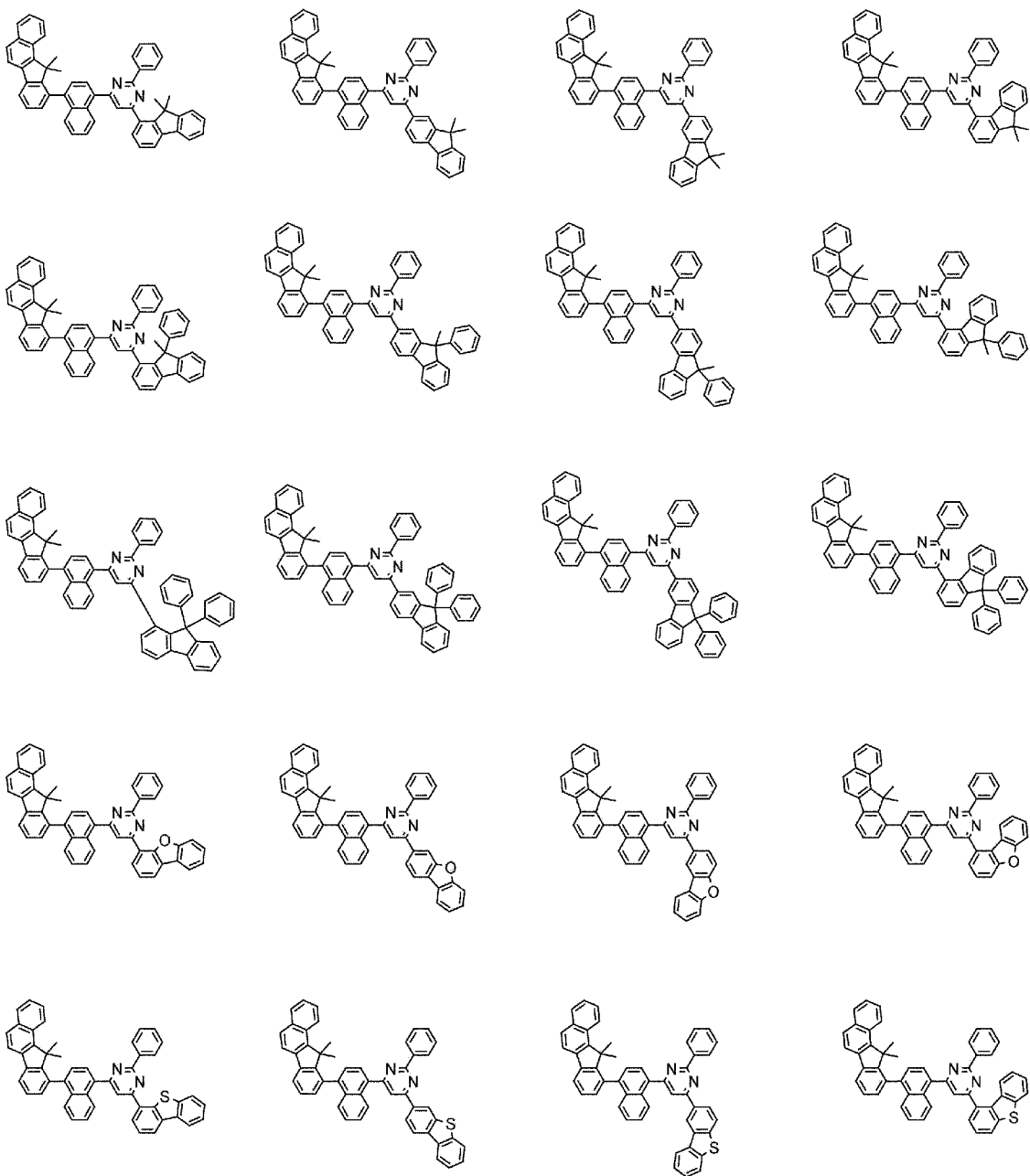
[0260]

[化125]



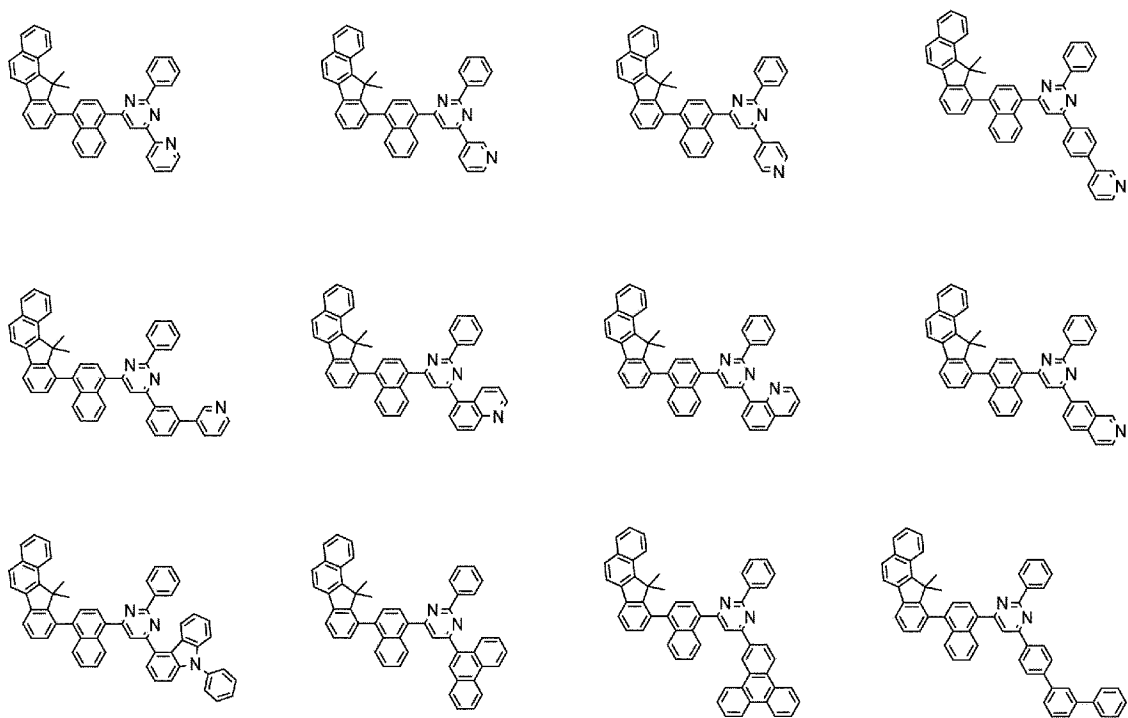
[0261]

[化126]



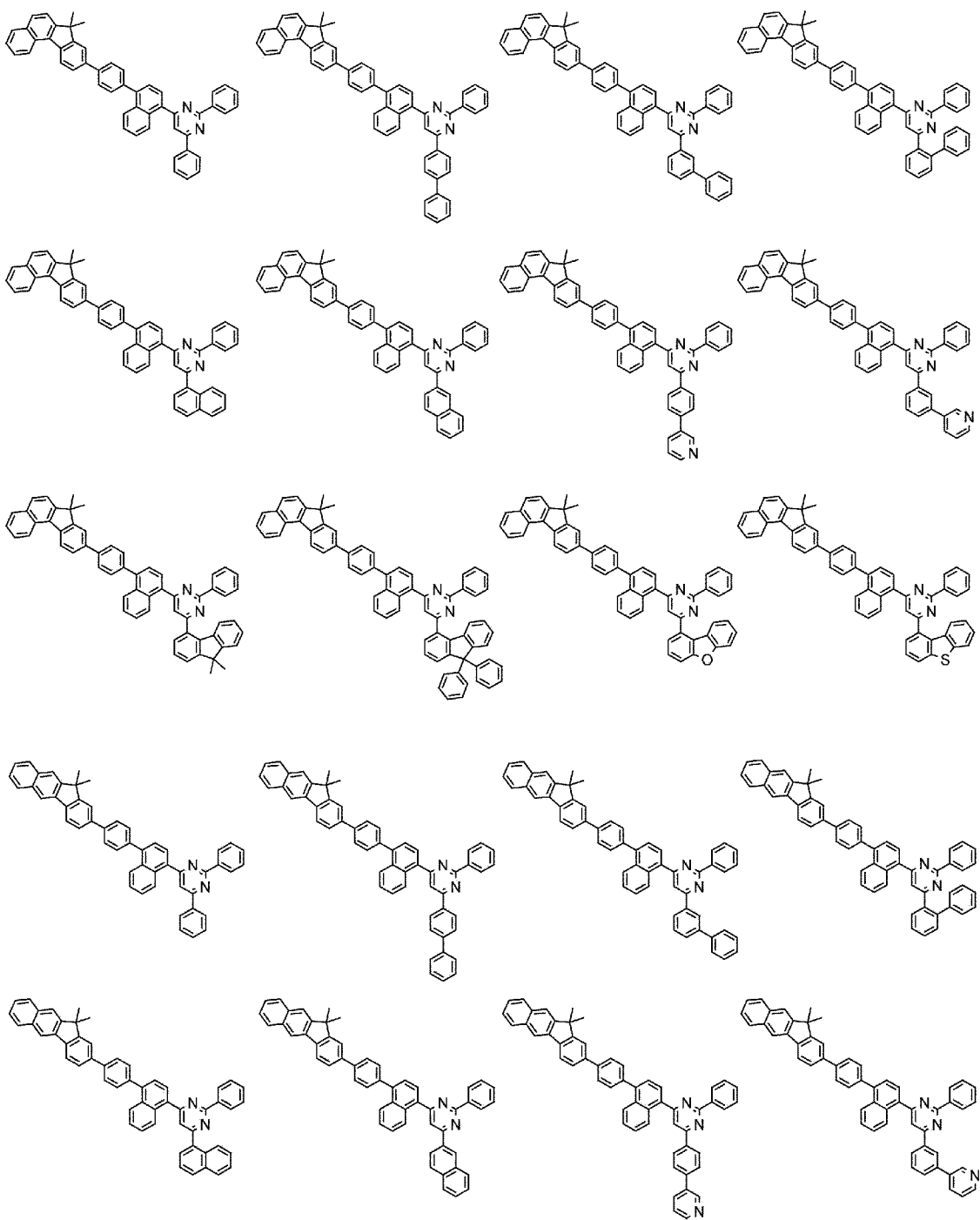
[0262]

[化127]



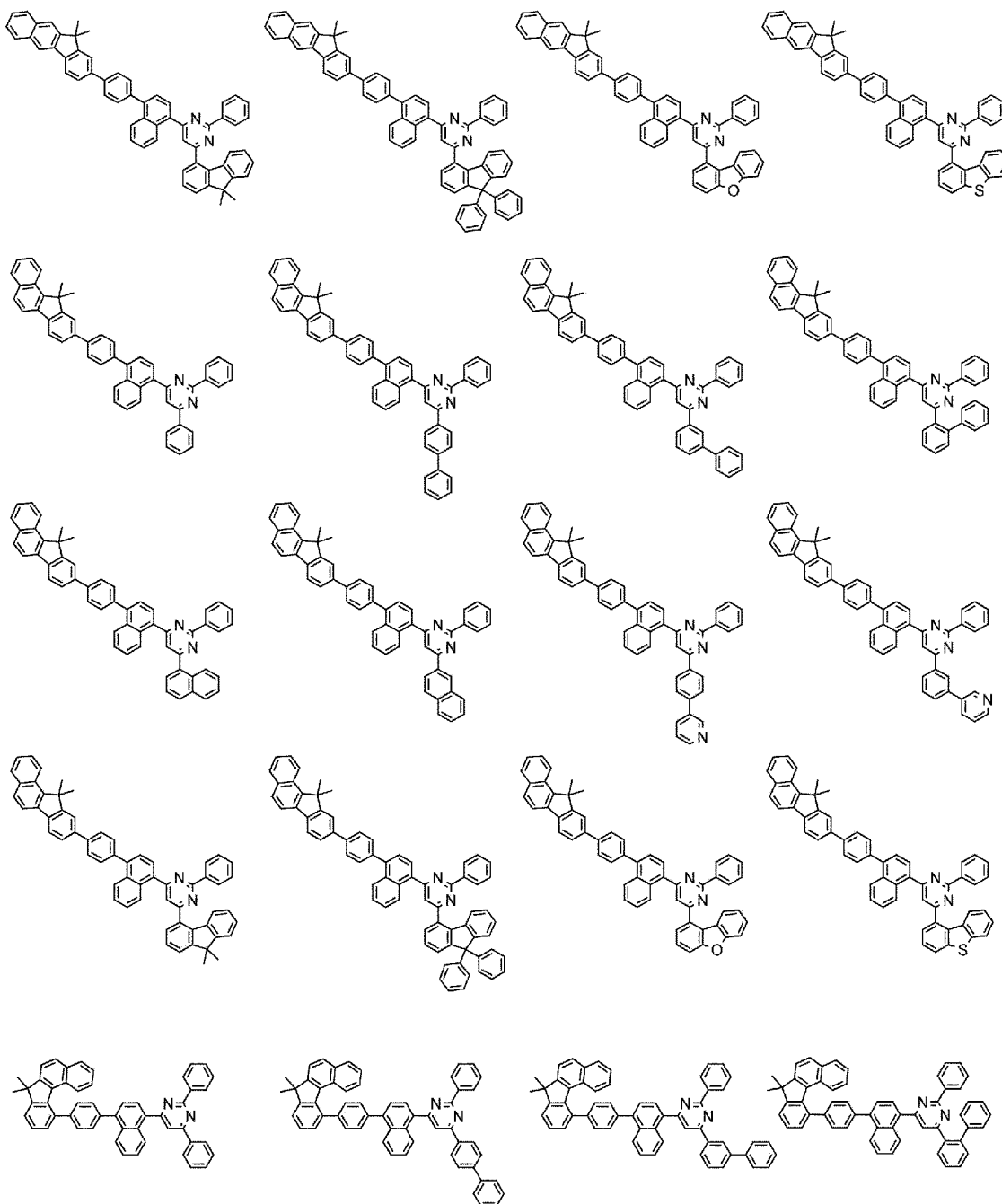
[0263]

[化128]



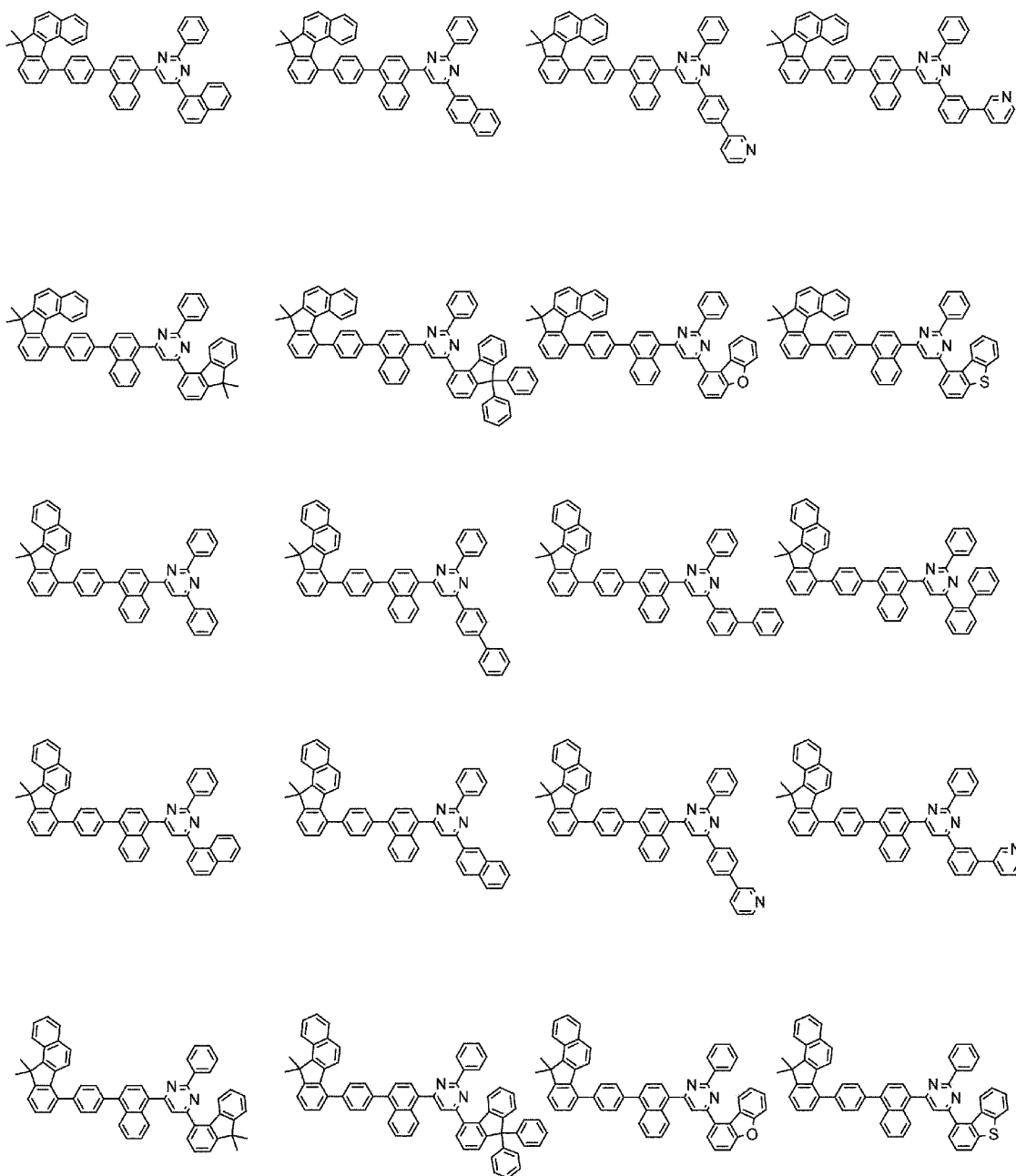
[0264]

[化129]



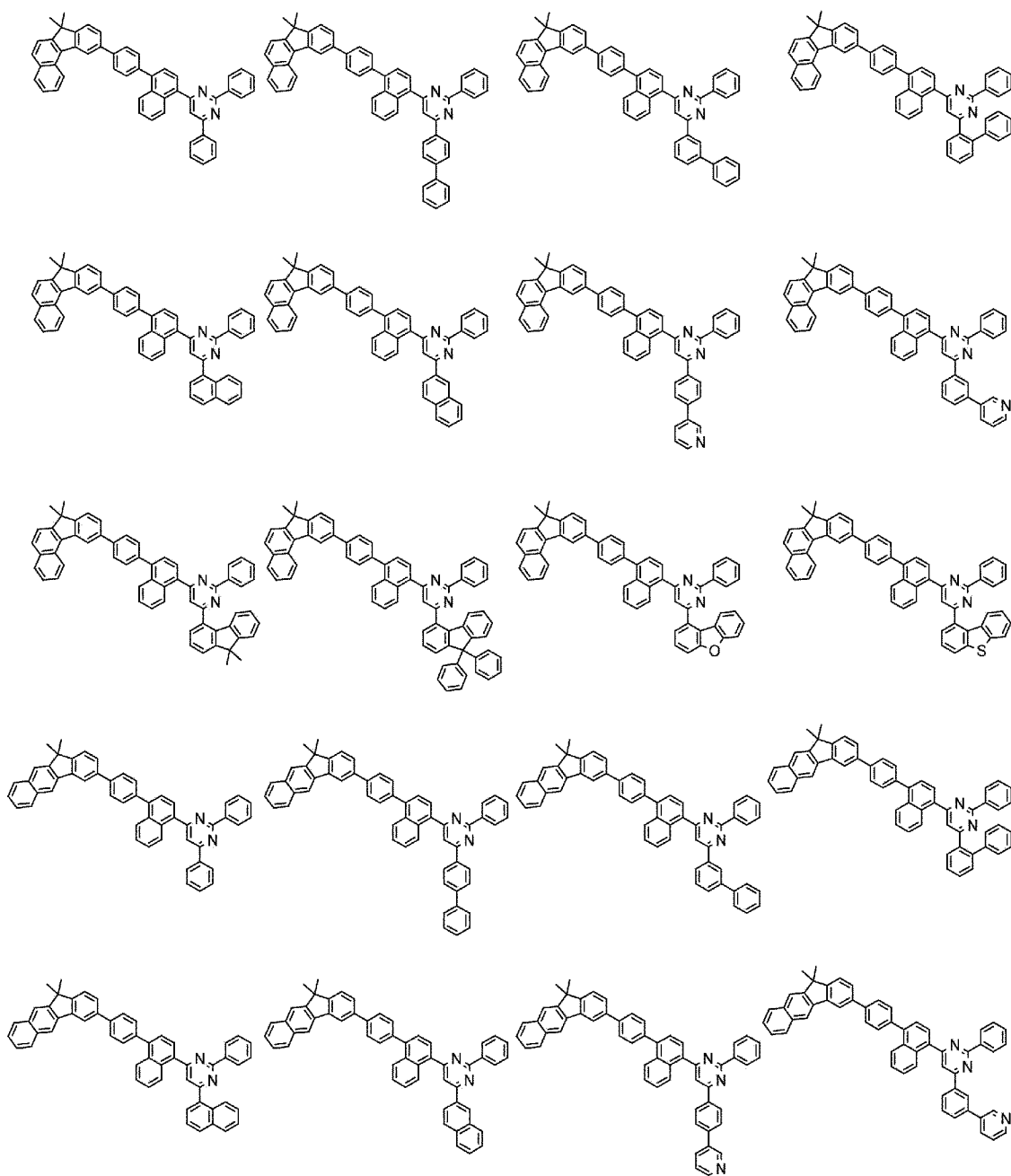
[0265]

[化130]



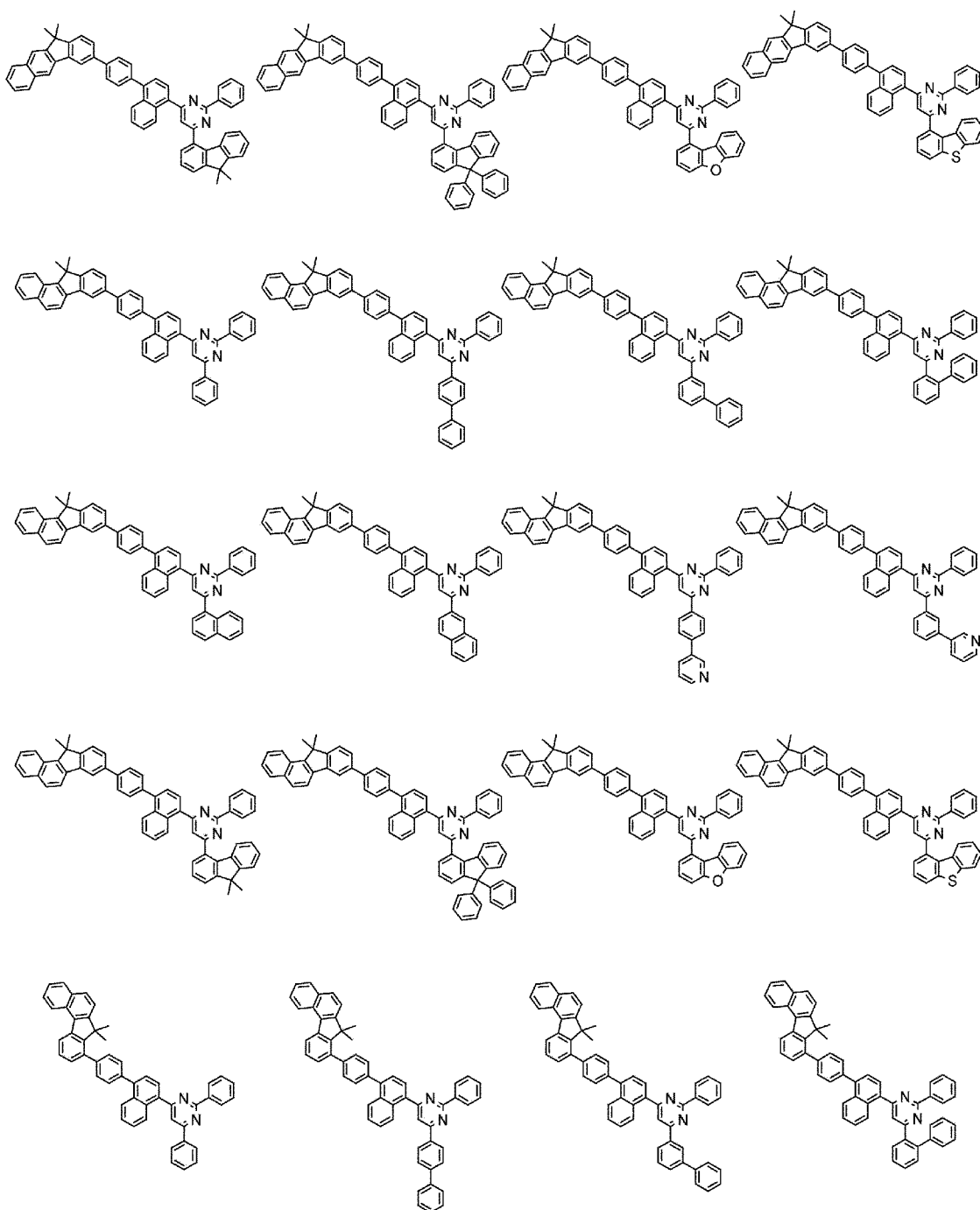
[0266]

[化131]



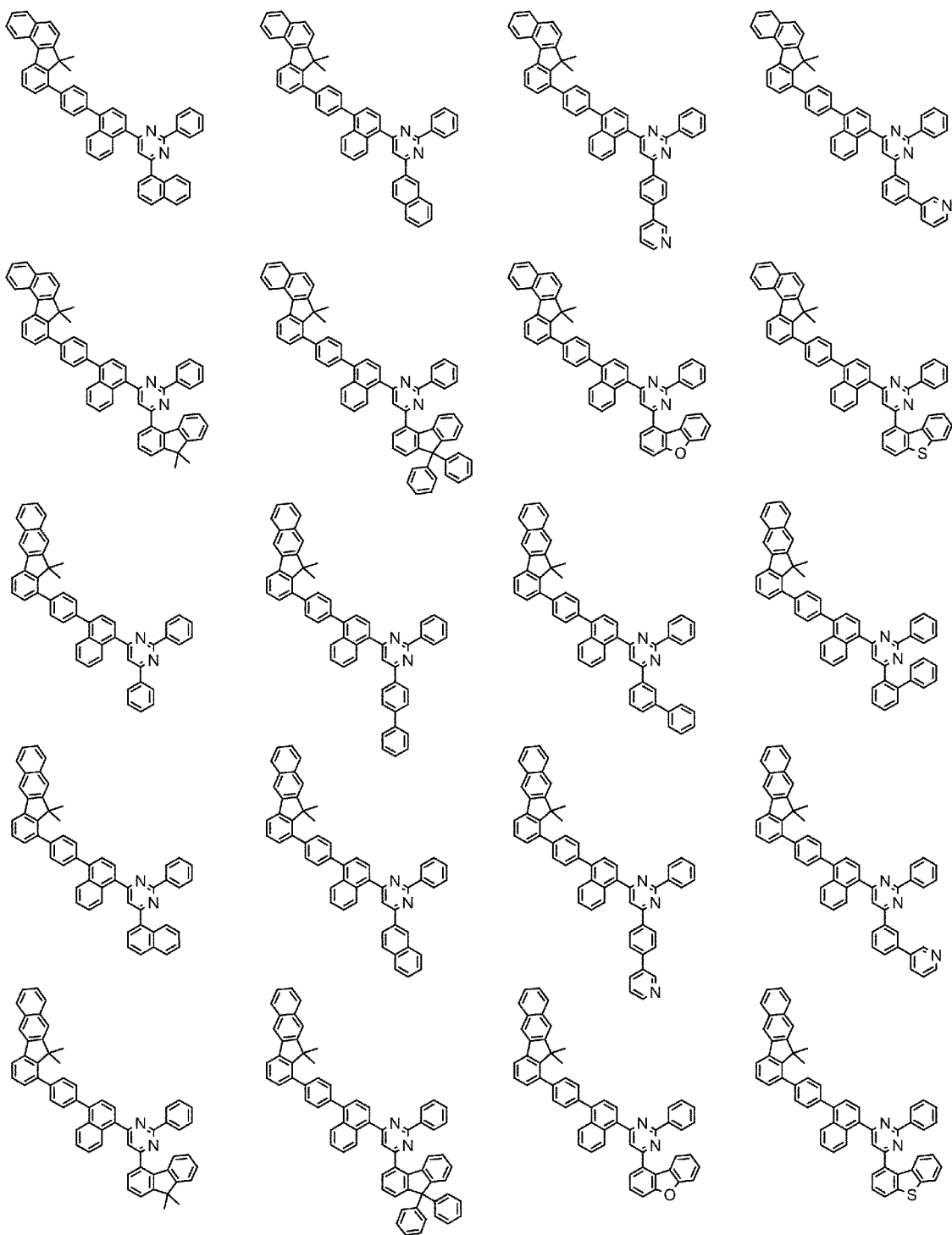
[0267]

[化132]



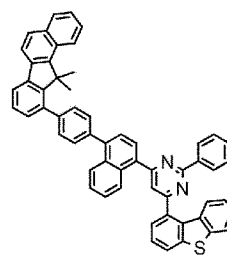
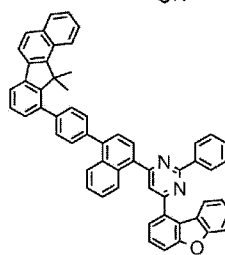
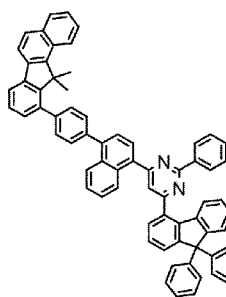
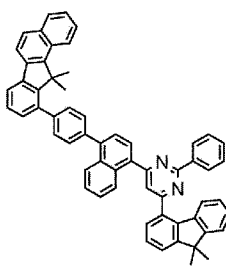
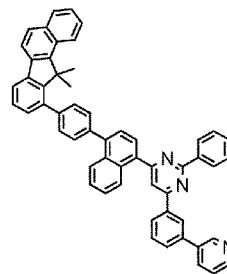
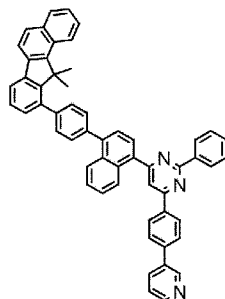
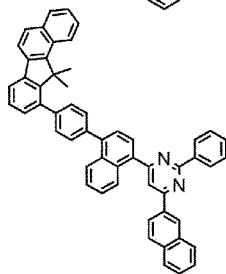
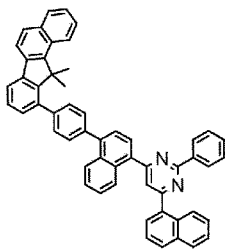
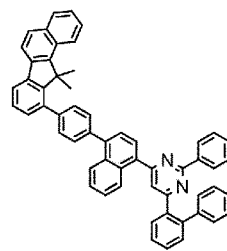
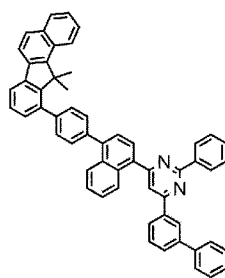
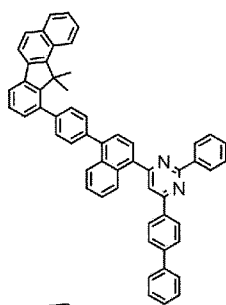
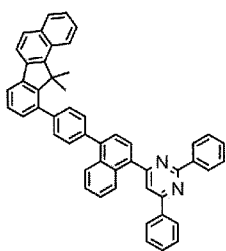
[0268]

[化133]



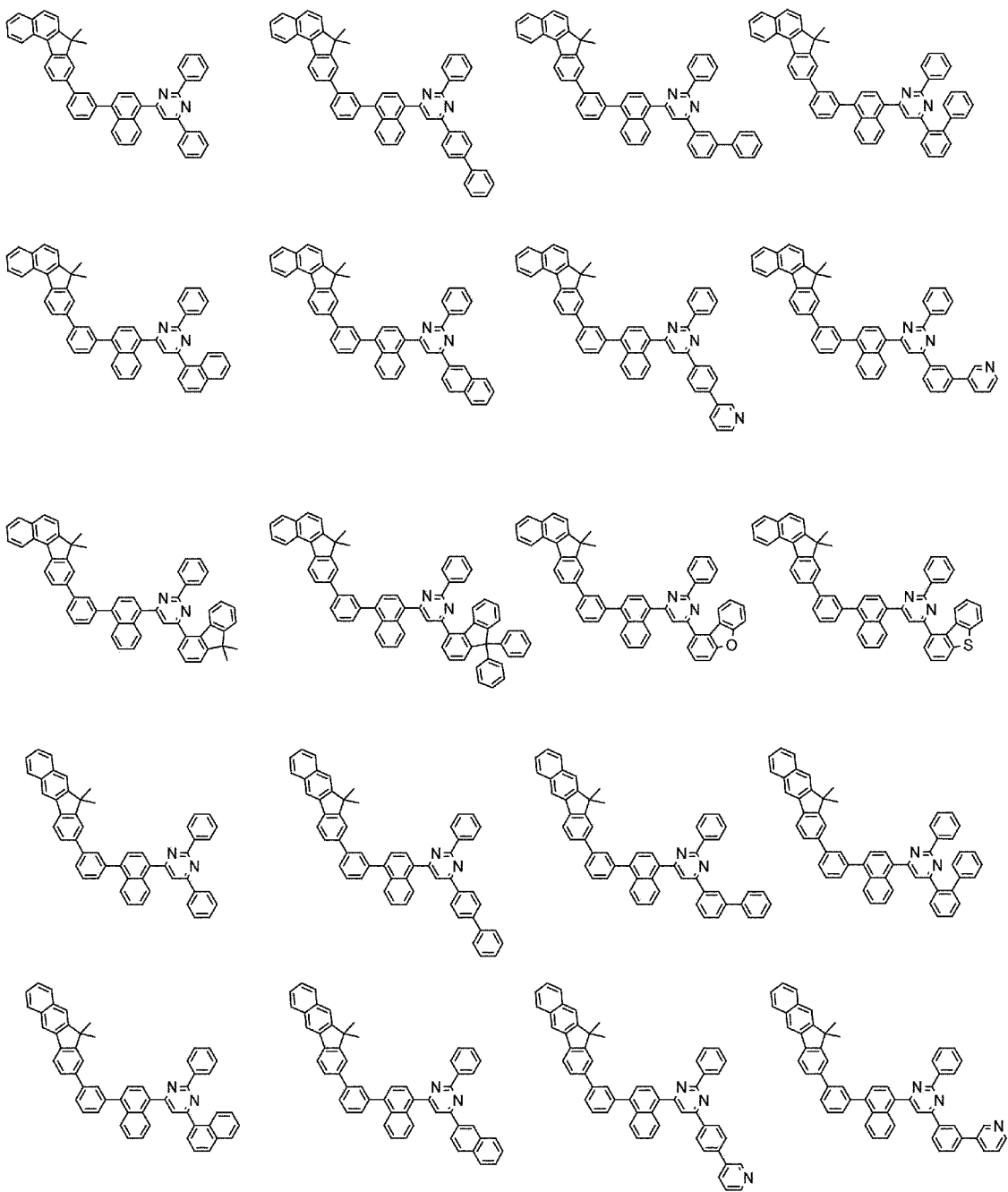
[0269]

[化134]



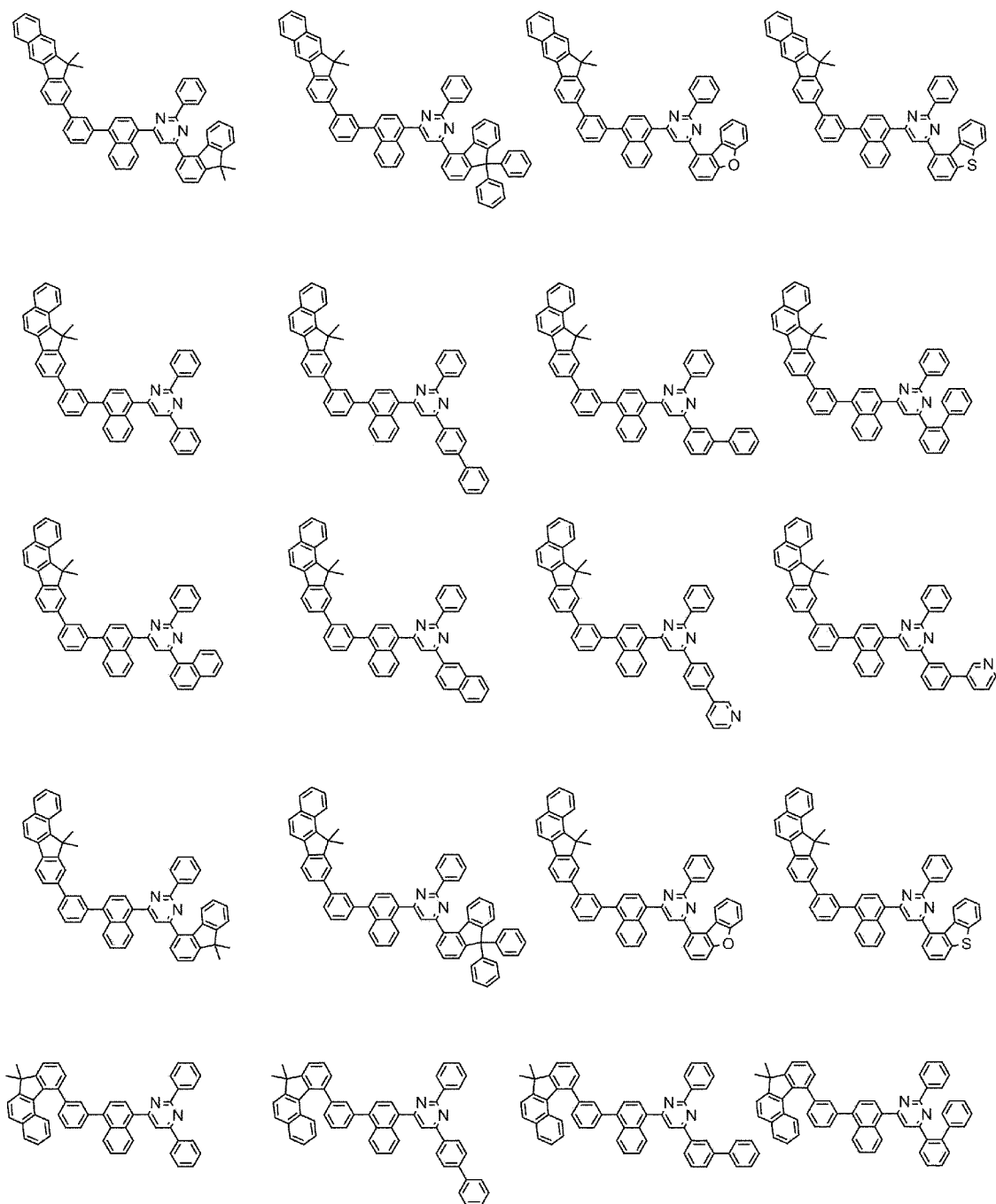
[0270]

[化135]



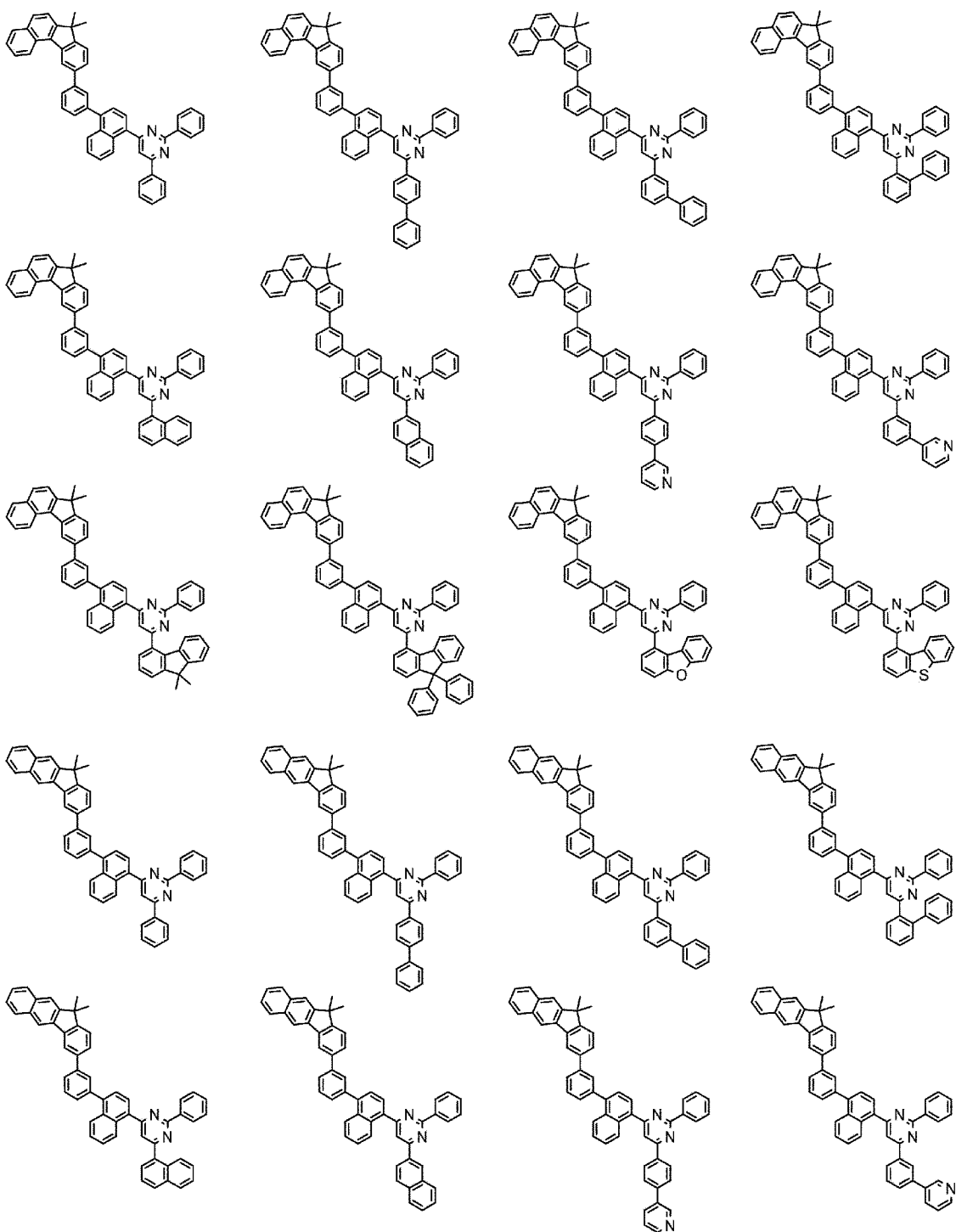
[0271]

[化136]



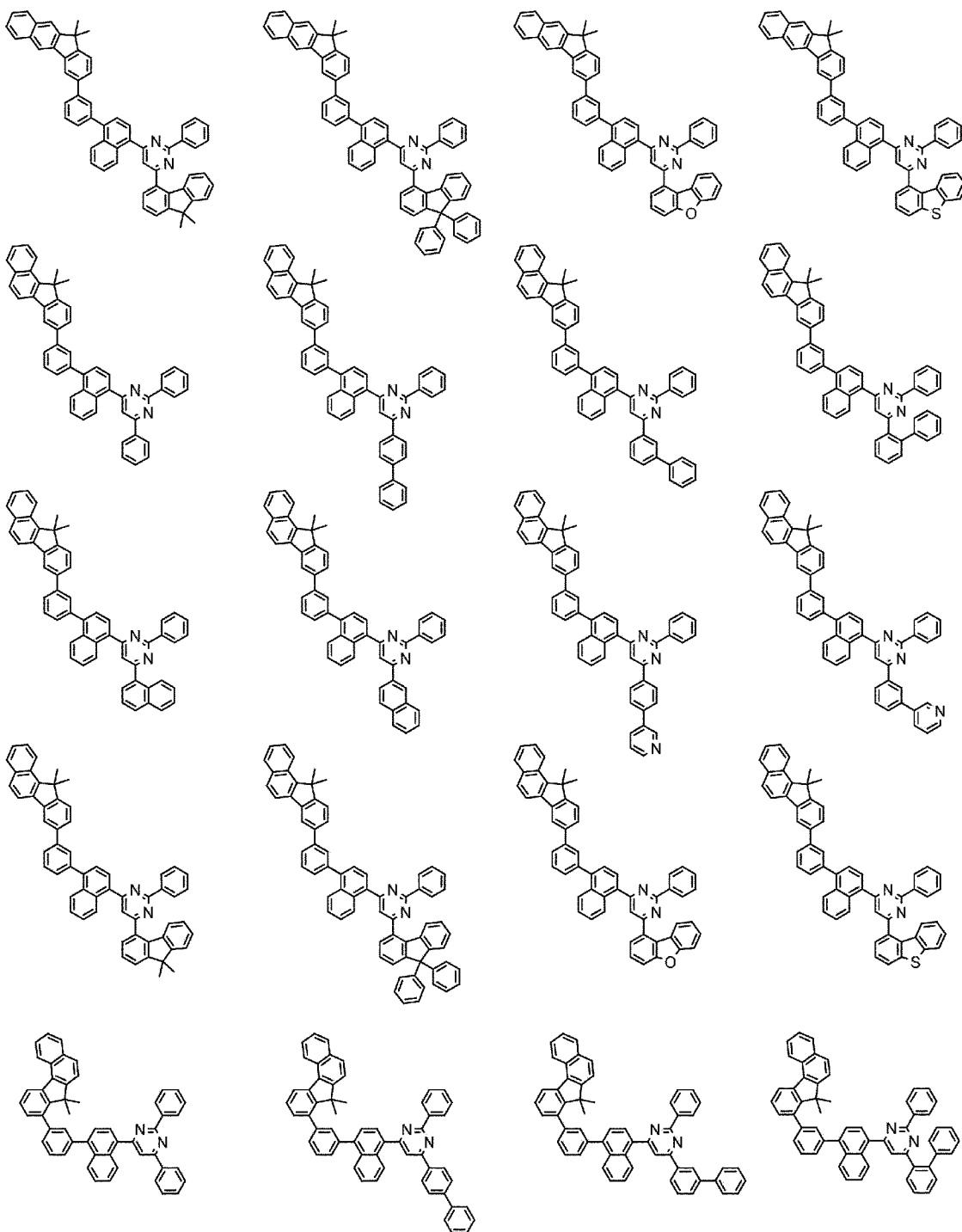
[0272]

[化138]



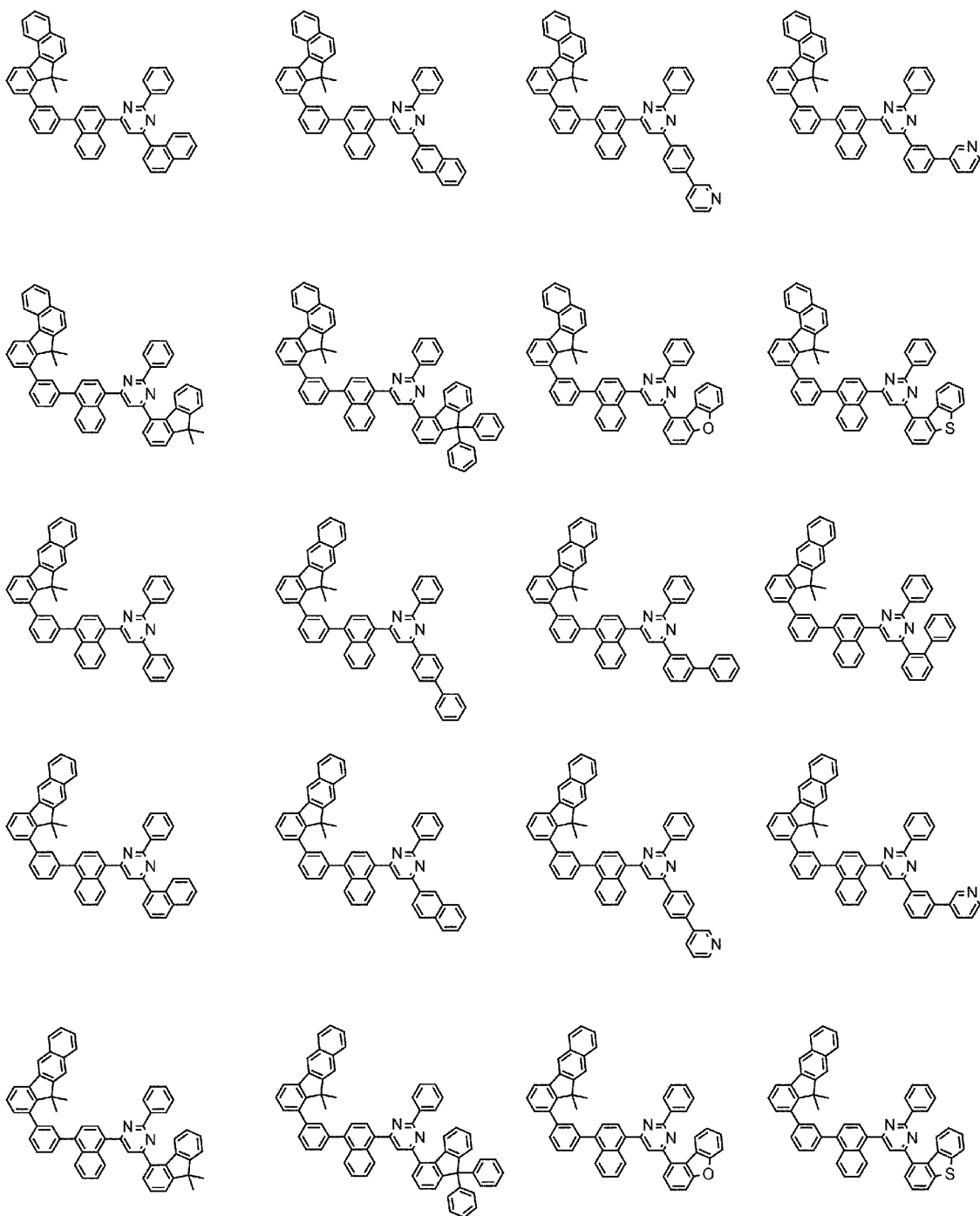
[0274]

[化139]



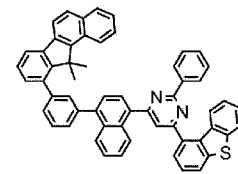
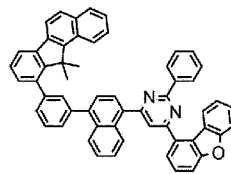
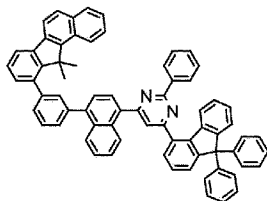
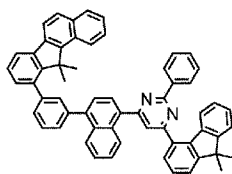
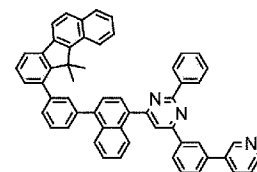
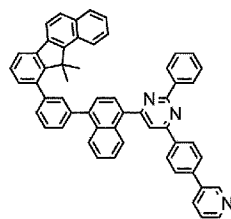
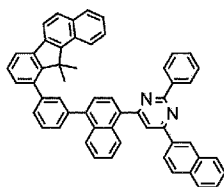
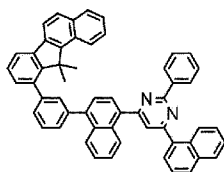
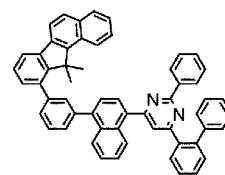
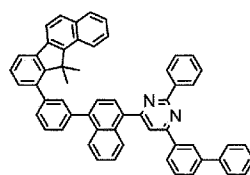
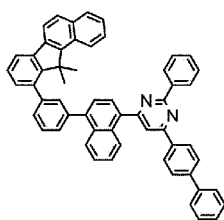
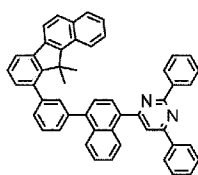
[0275]

[化140]



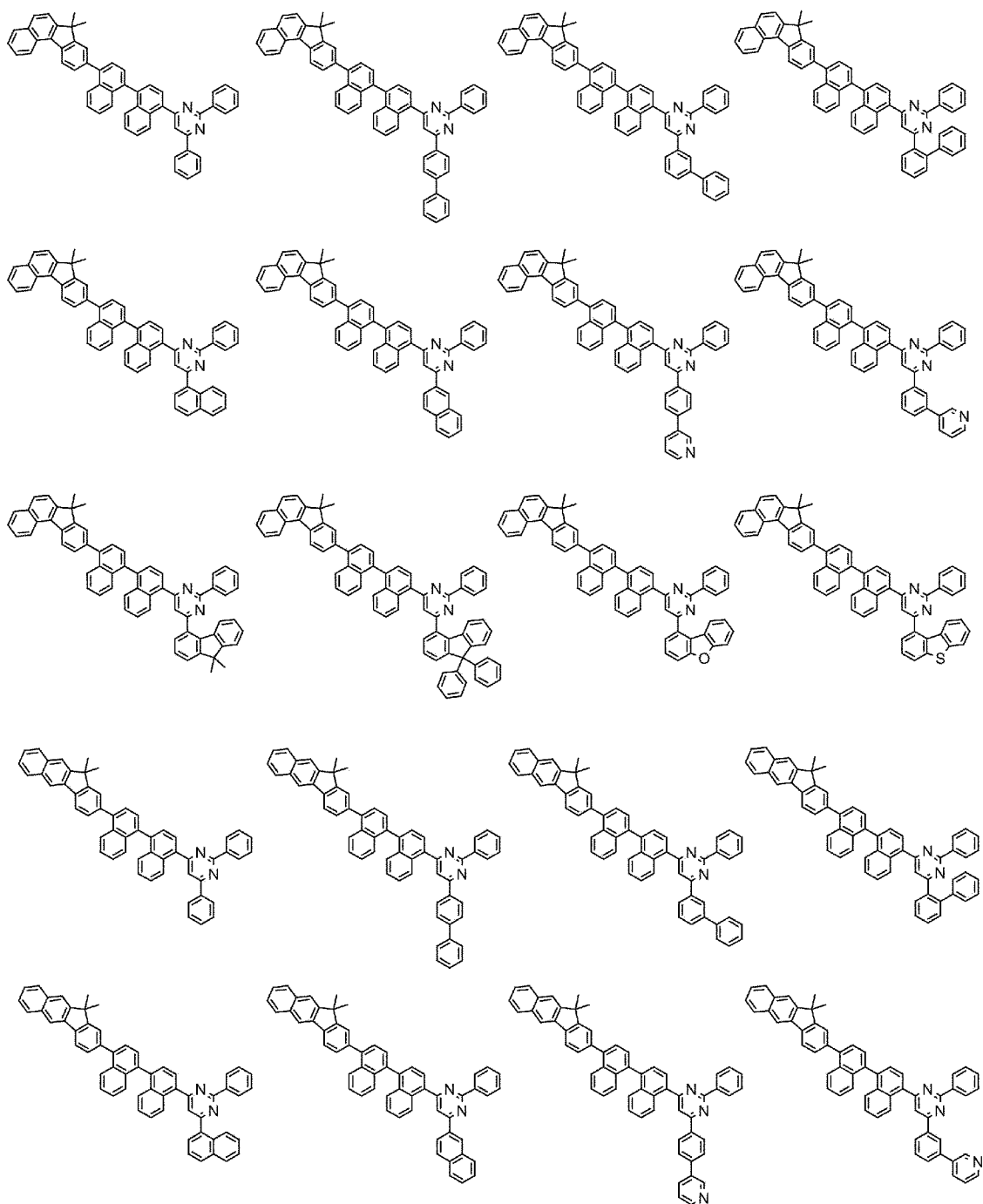
[0276]

[化141]



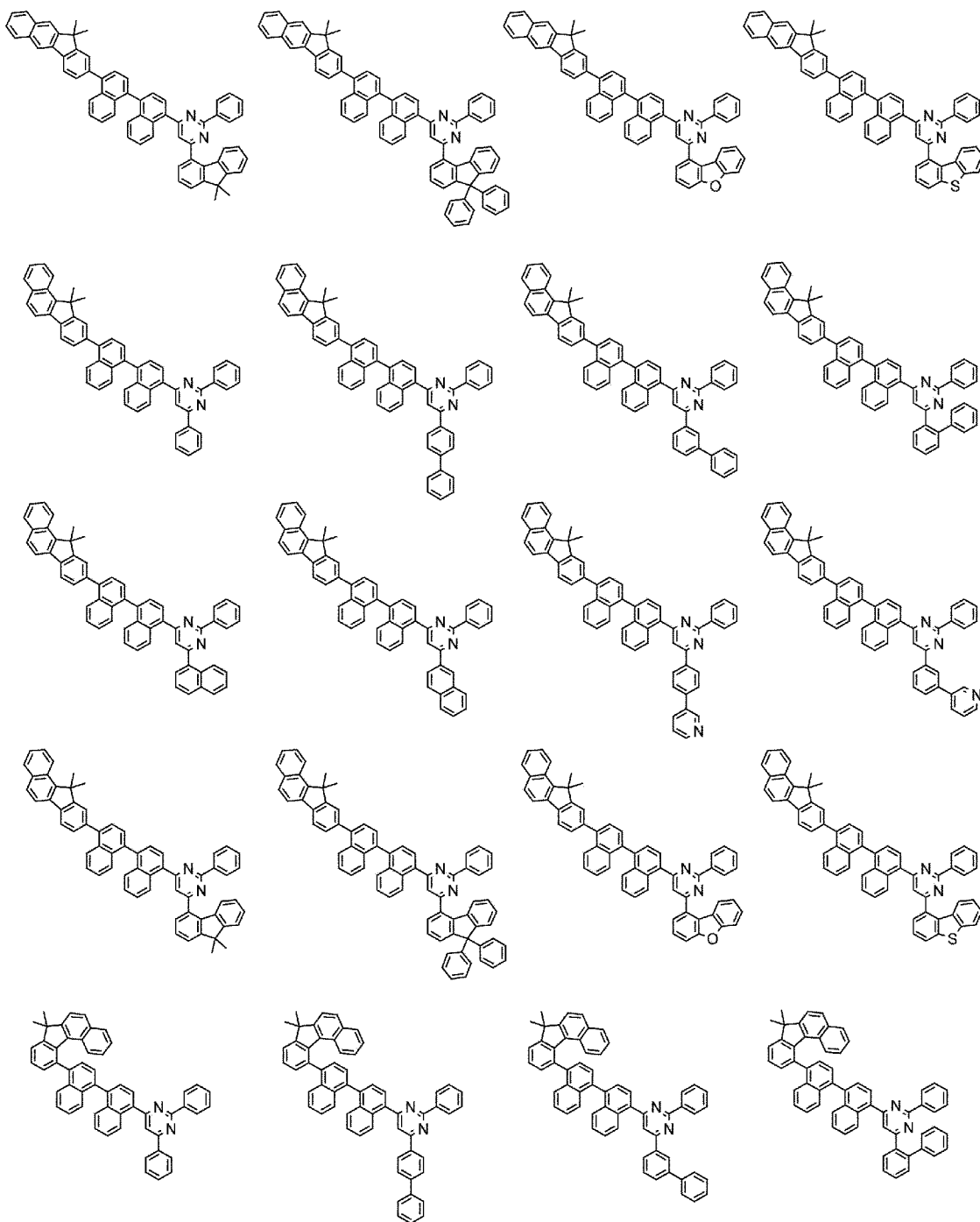
[0277]

[化142]



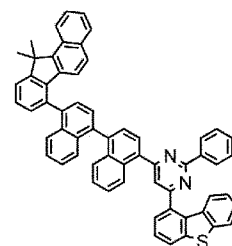
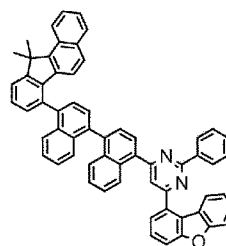
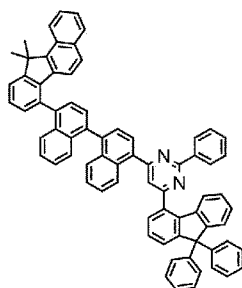
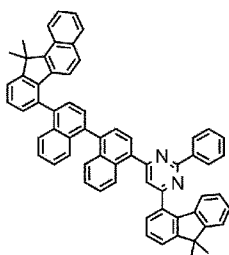
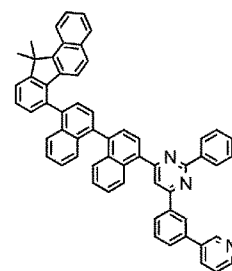
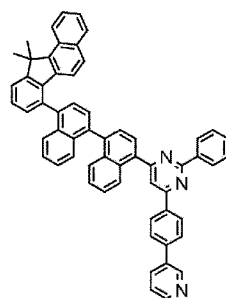
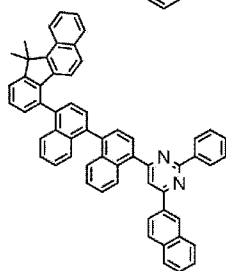
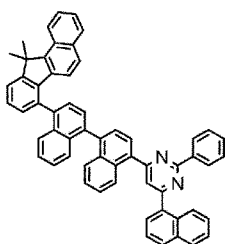
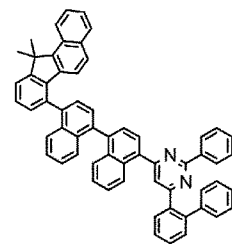
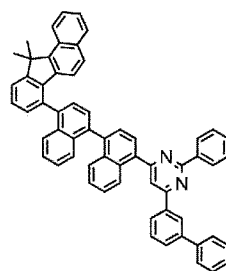
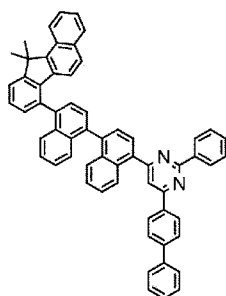
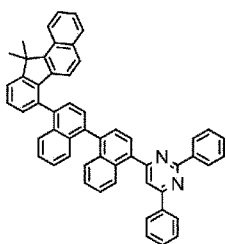
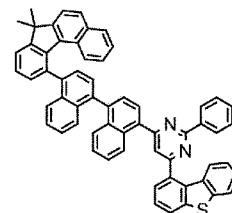
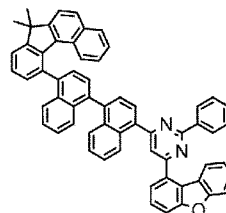
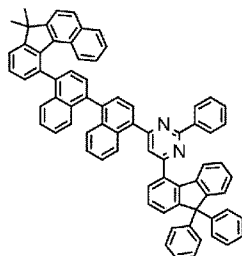
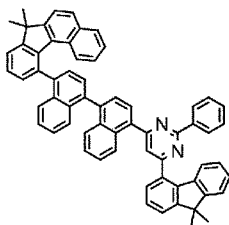
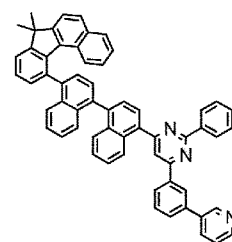
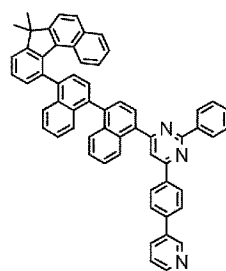
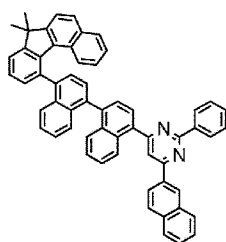
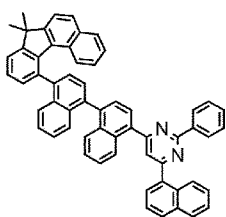
[0278]

[化143]



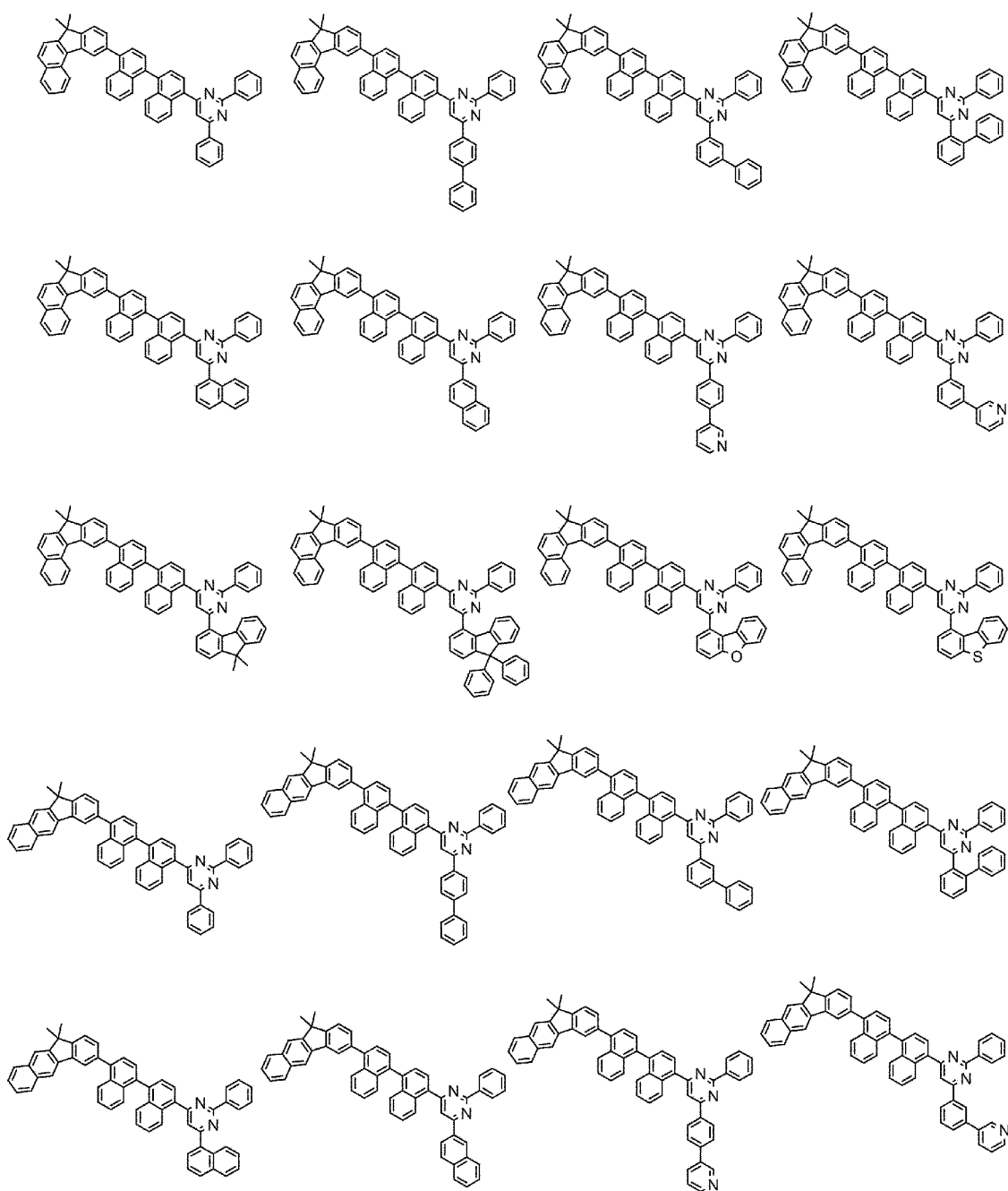
[0279]

[化144]



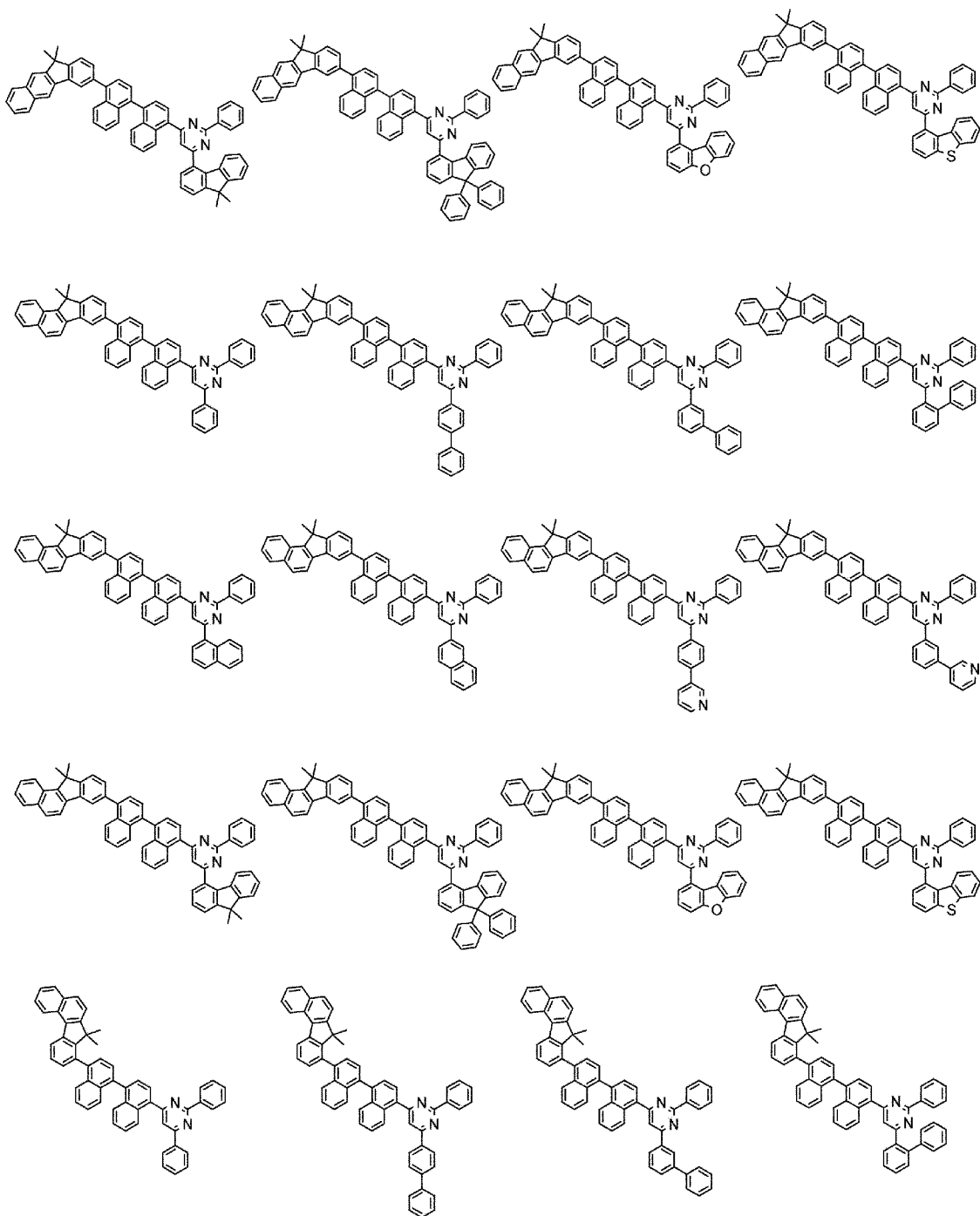
[0280]

[化145]



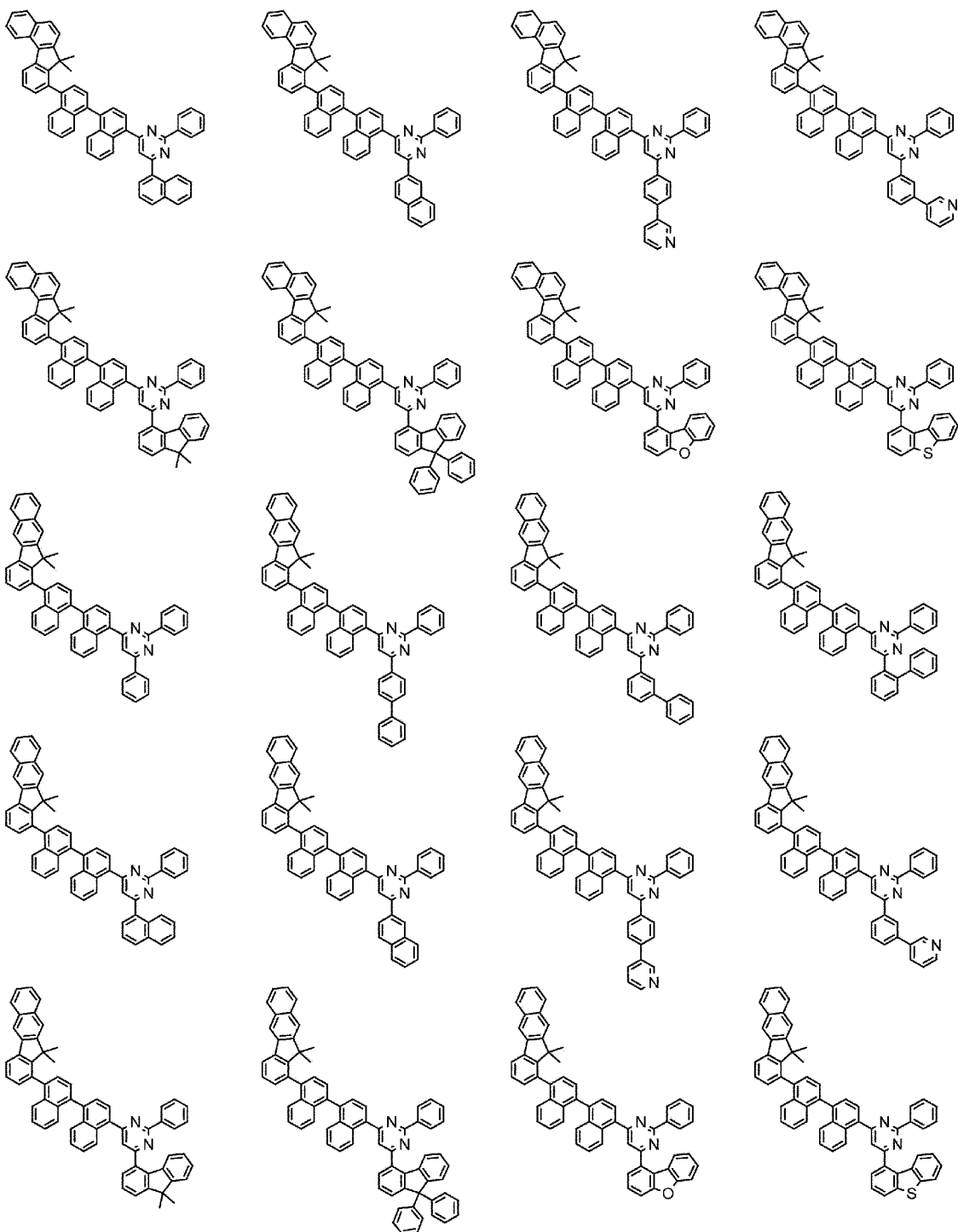
[0281]

[化146]



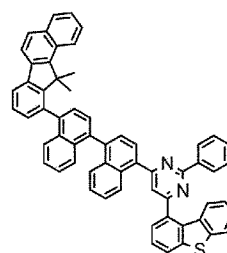
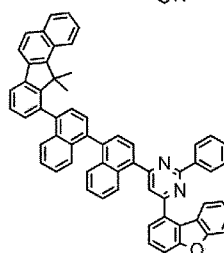
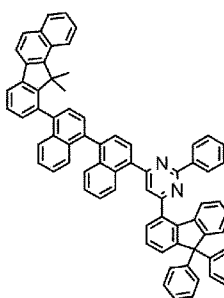
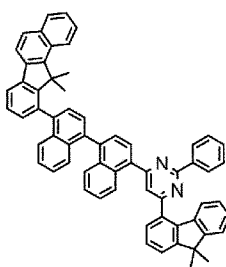
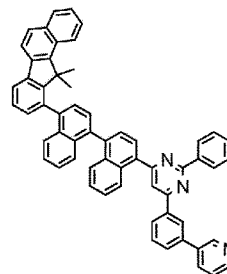
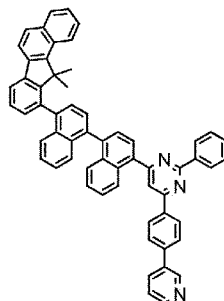
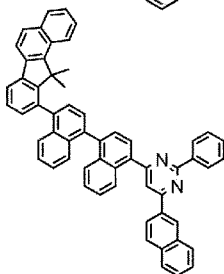
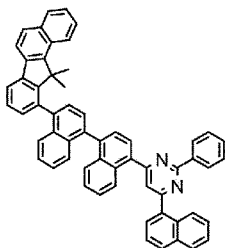
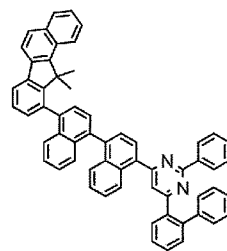
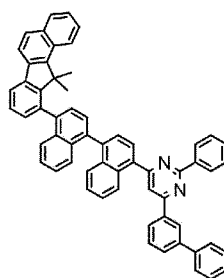
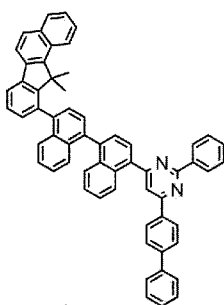
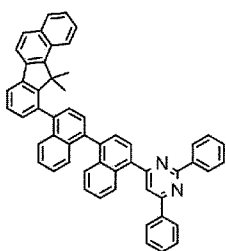
[0282]

[化147]



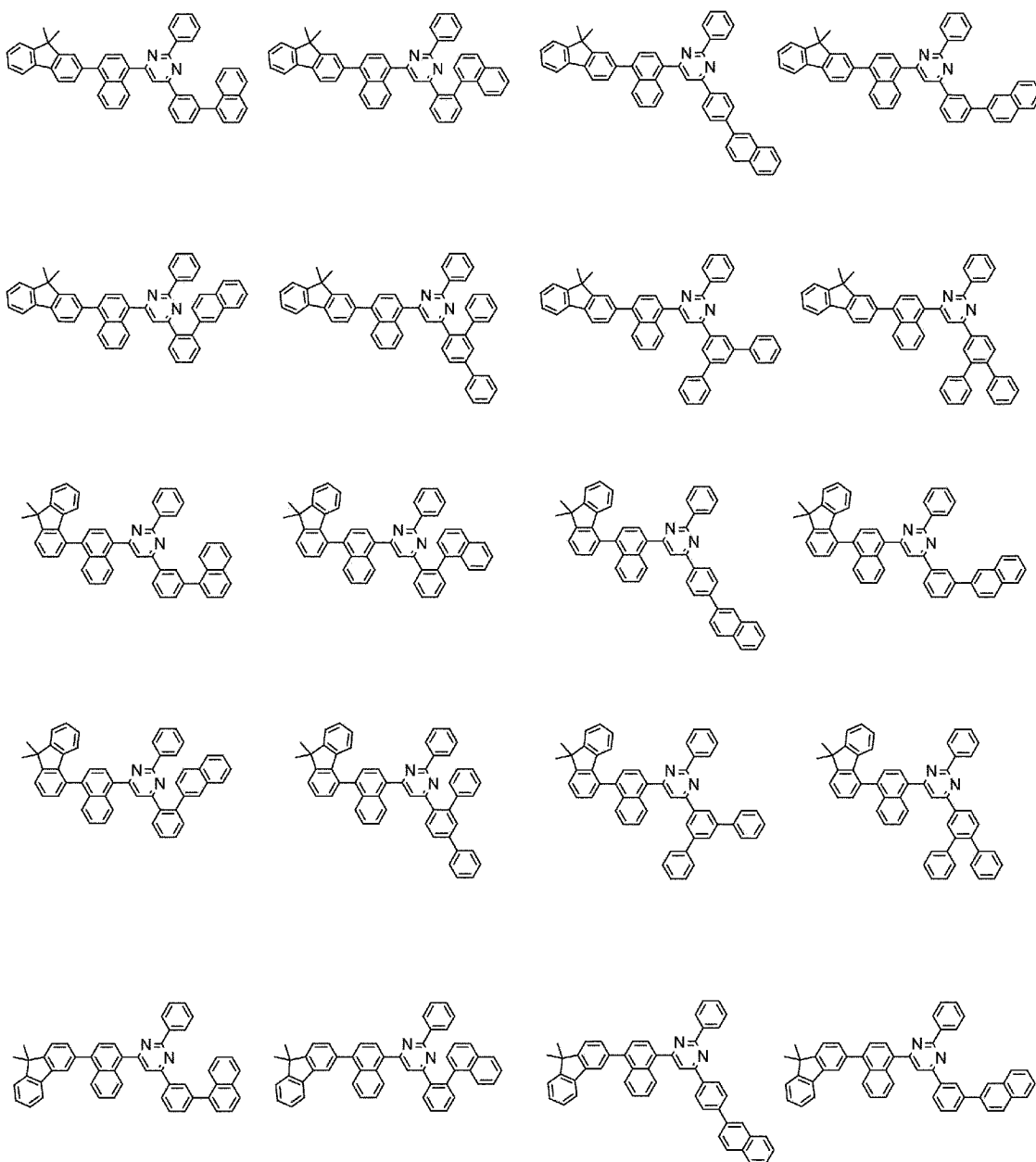
[0283]

[化148]



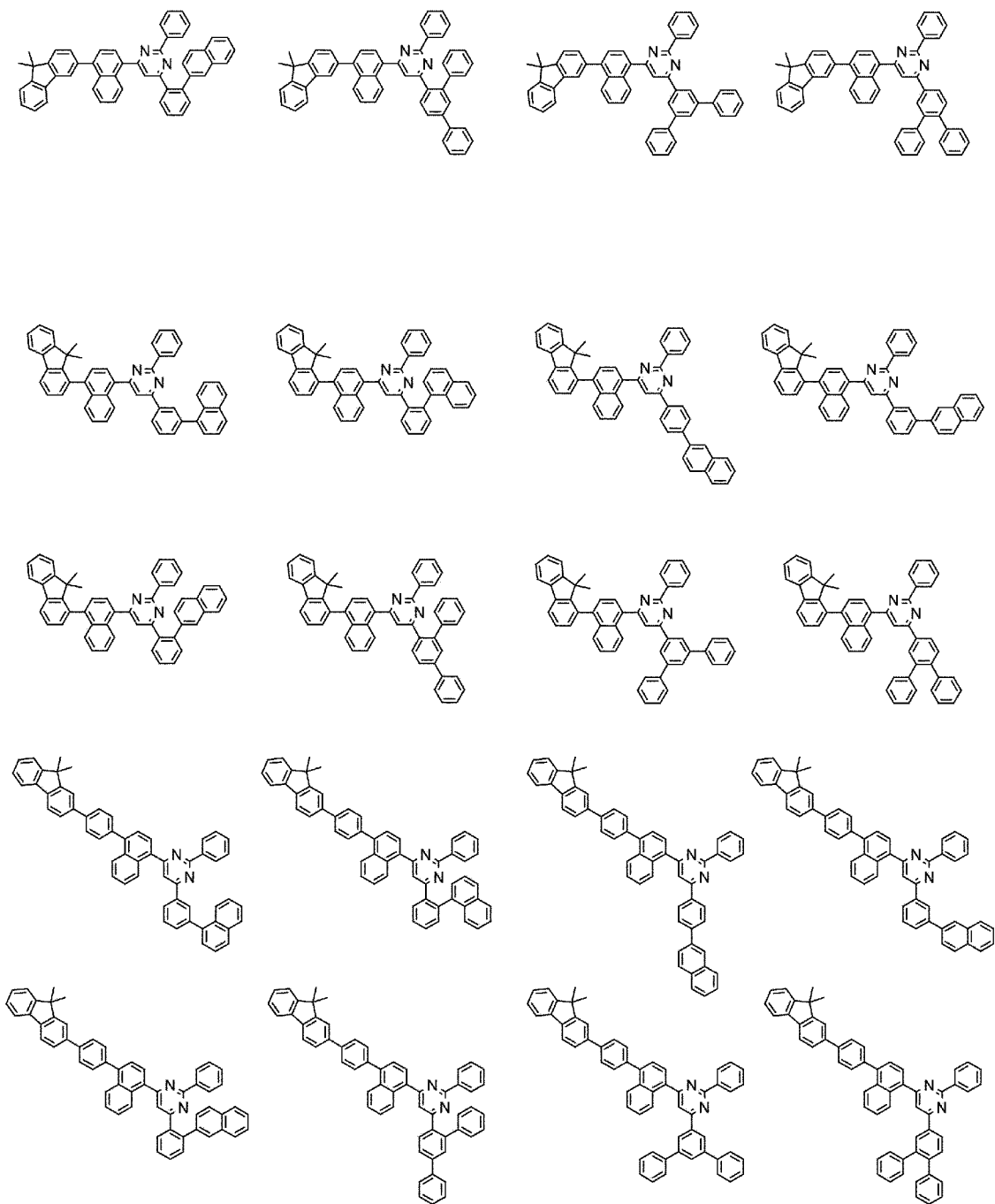
[0284]

[化149]



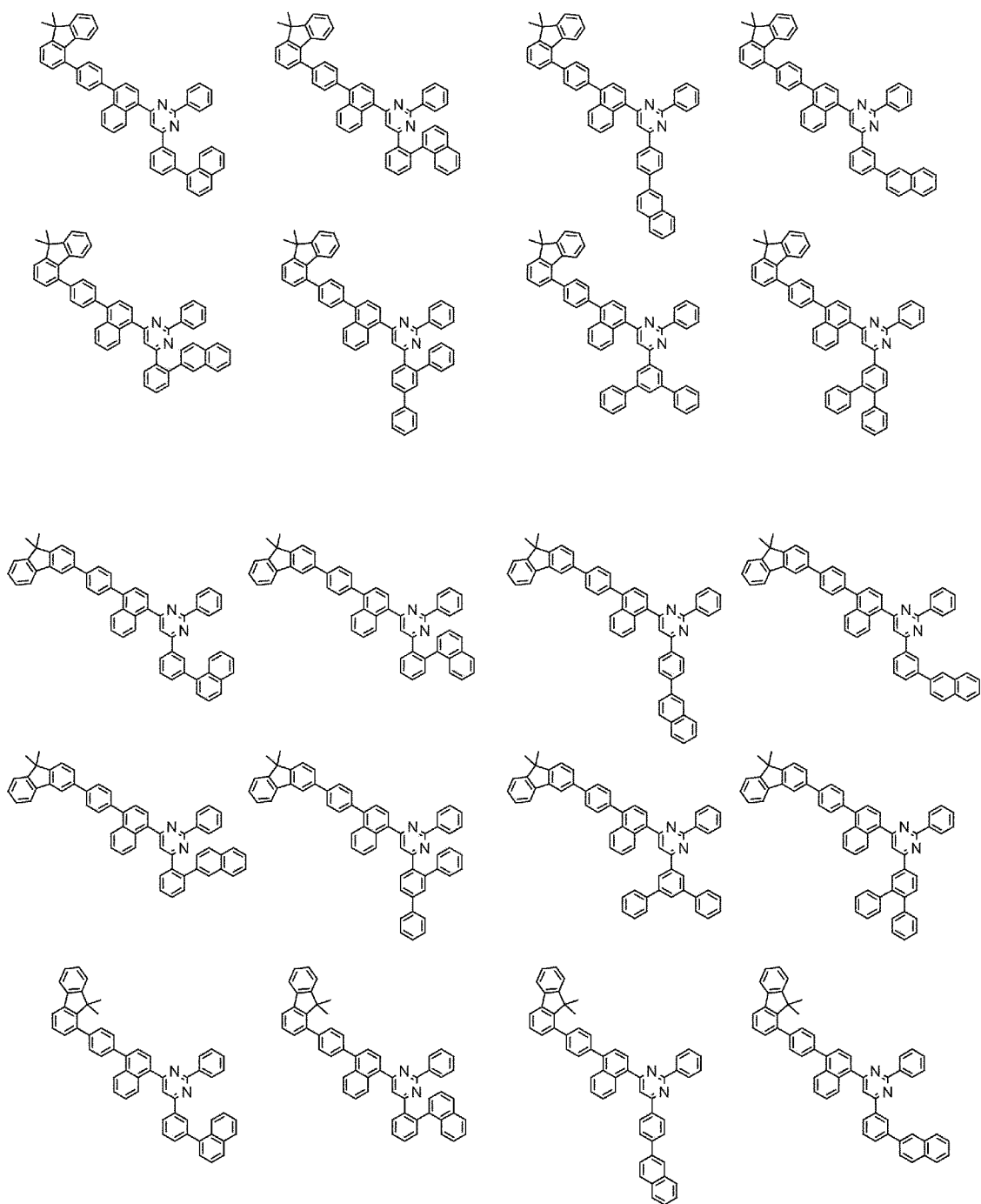
[0285]

[化150]



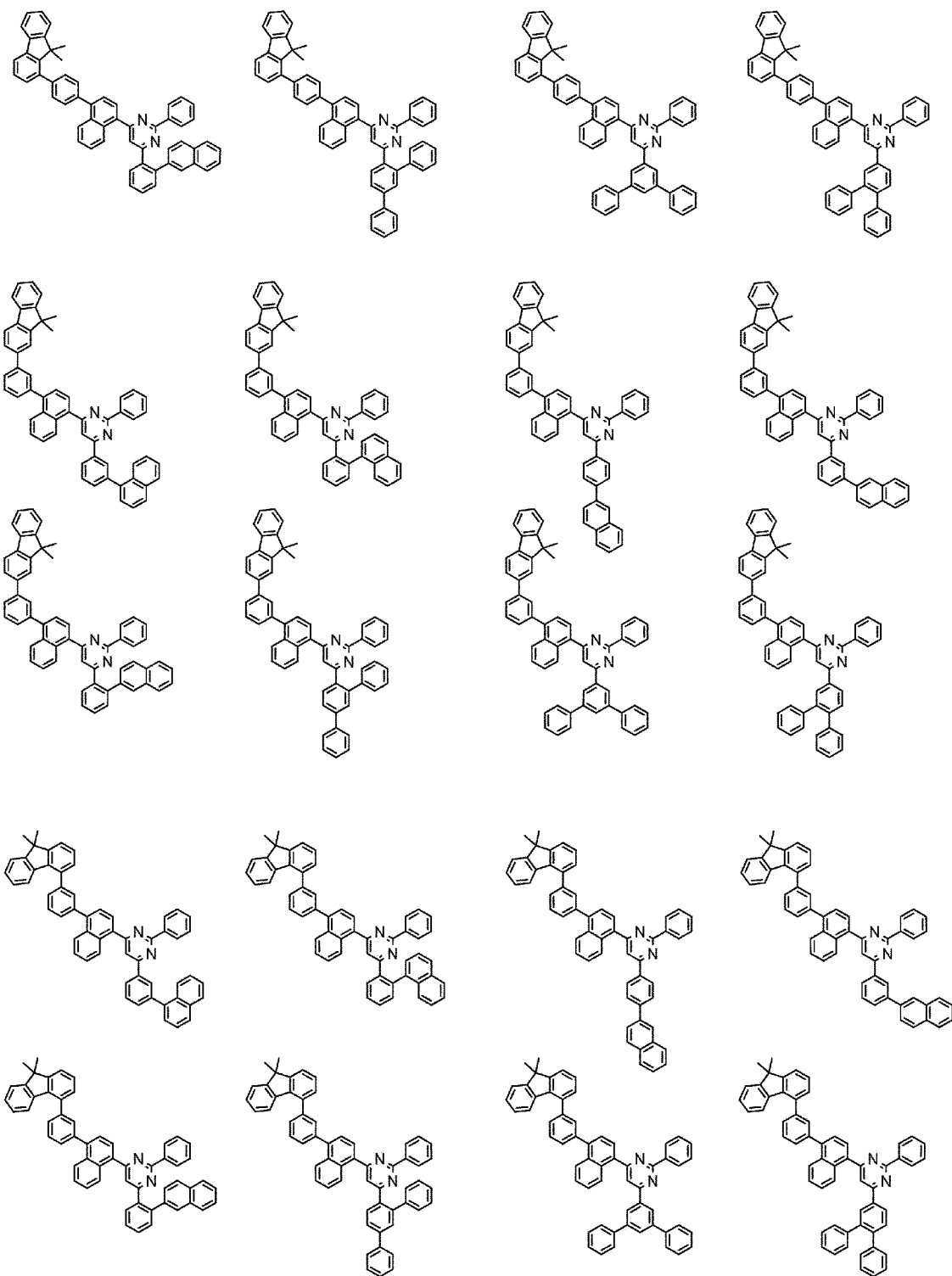
[0286]

[化151]



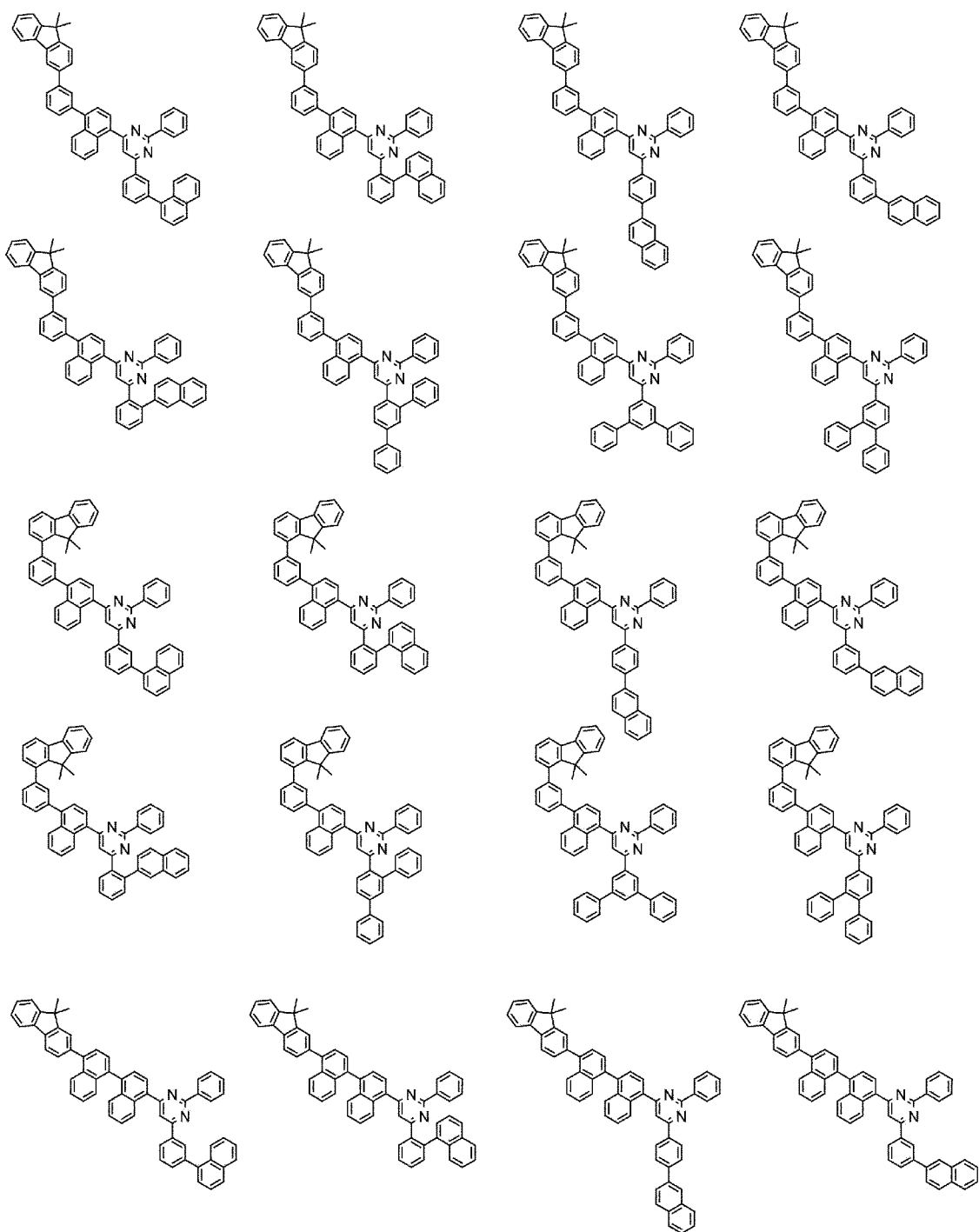
[0287]

[化152]



[0288]

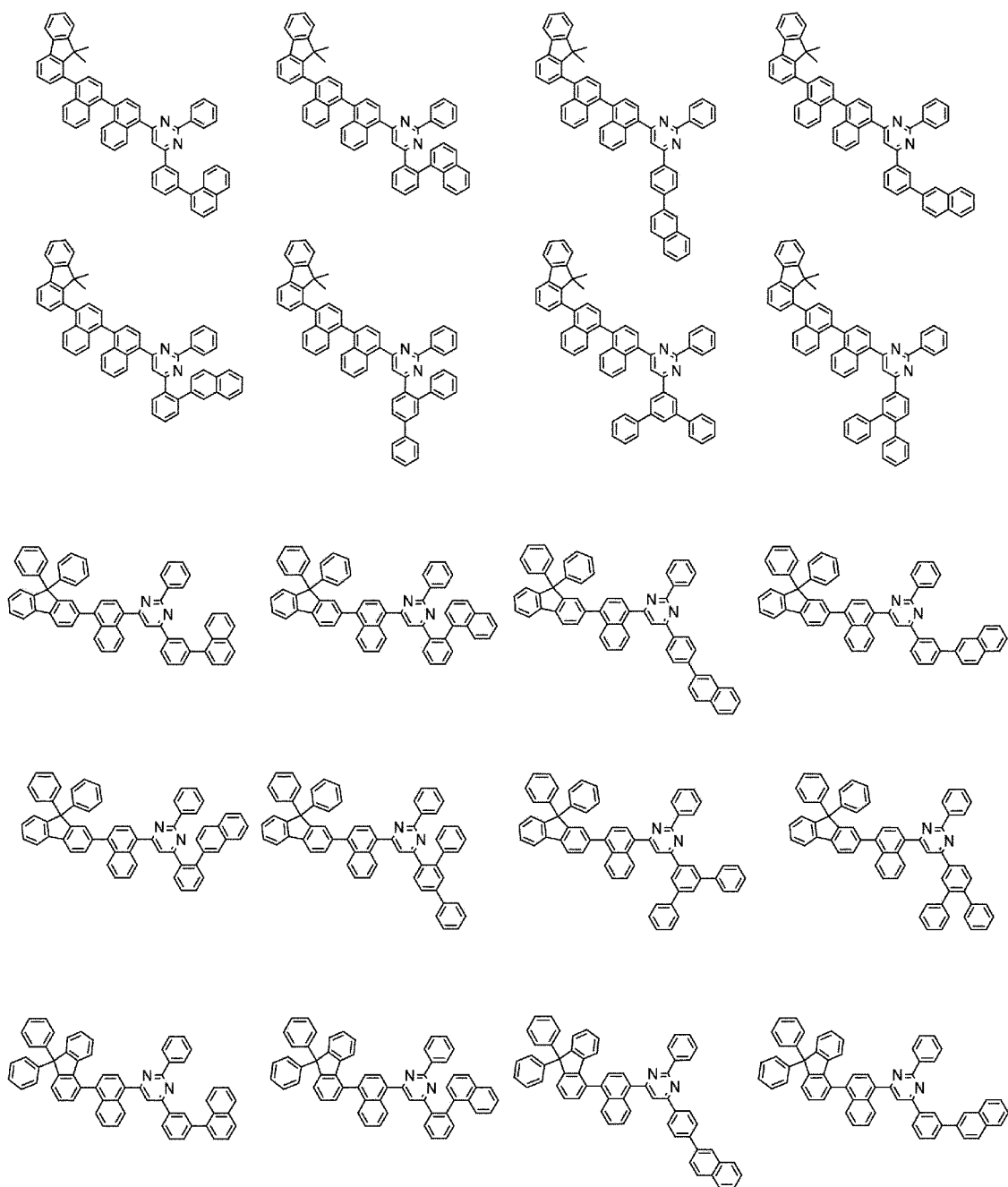
[化153]



[0289]

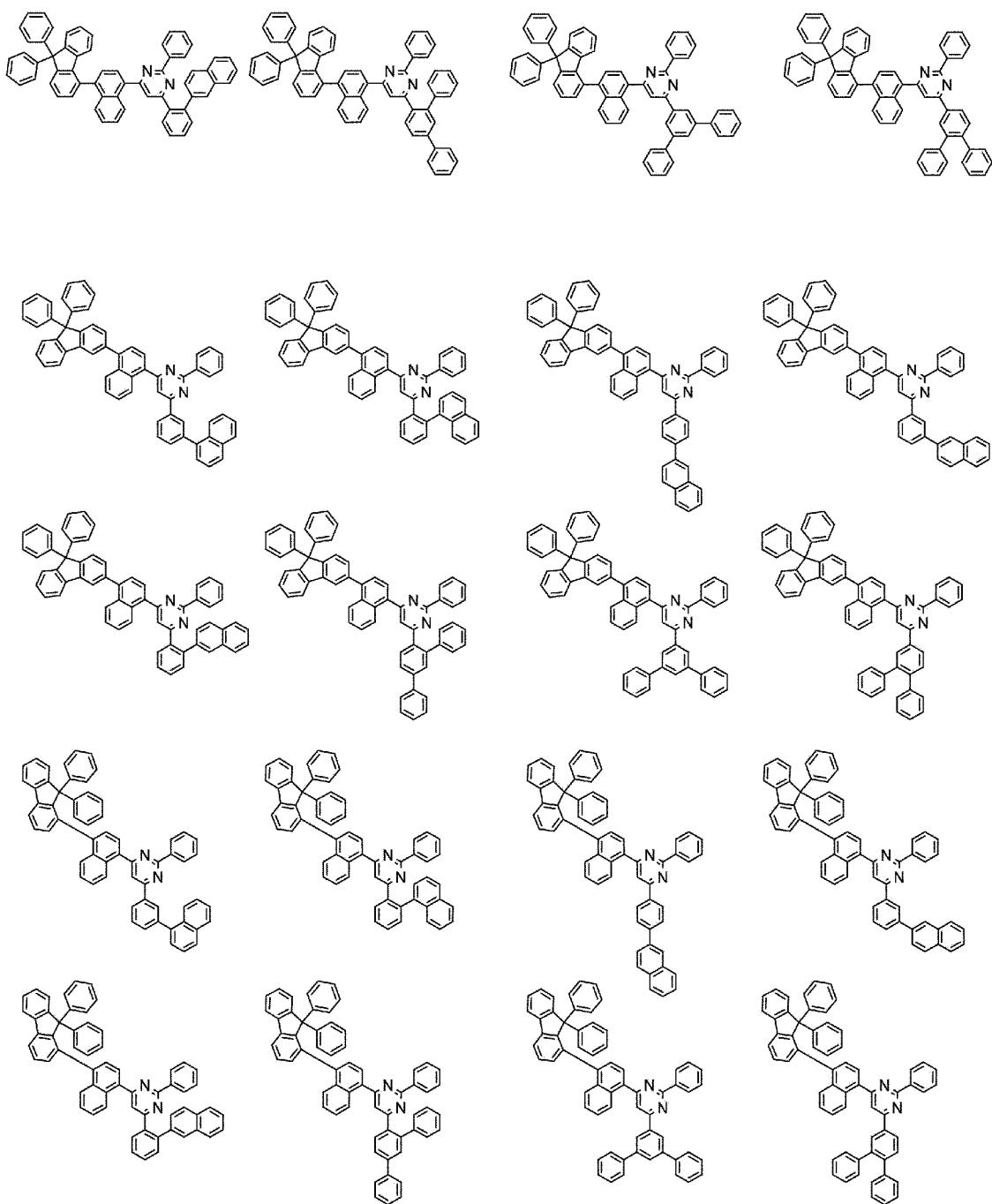
[0290]

[化155]



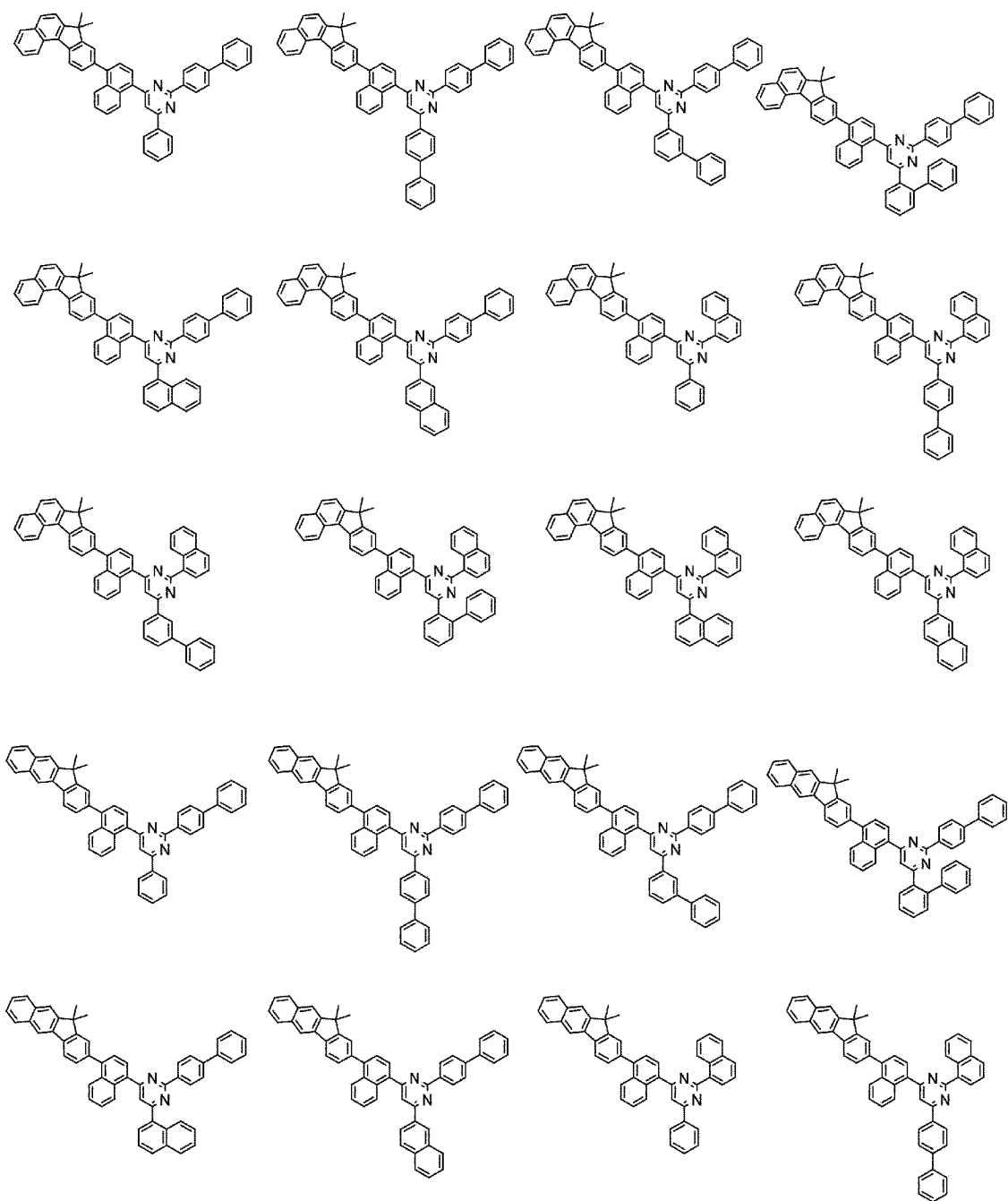
[0291]

[化156]



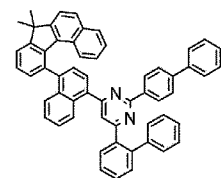
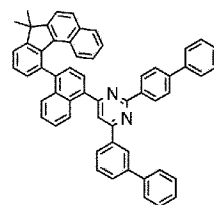
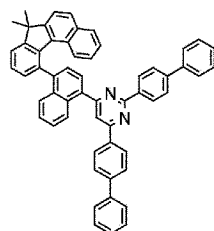
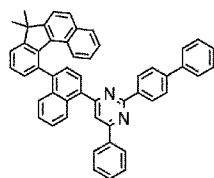
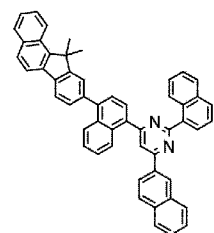
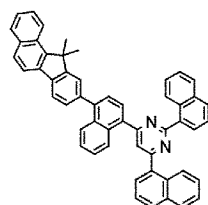
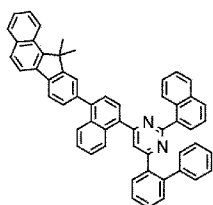
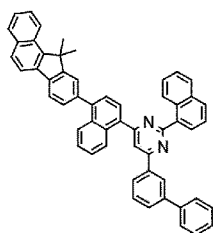
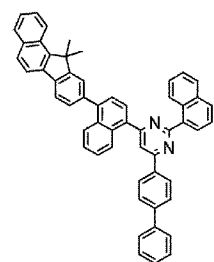
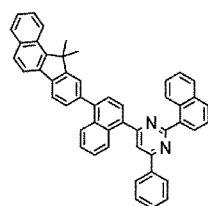
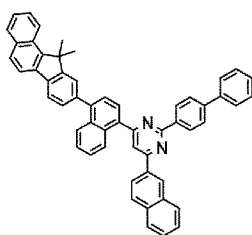
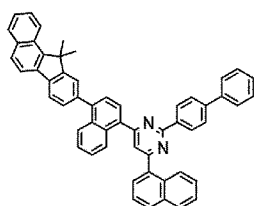
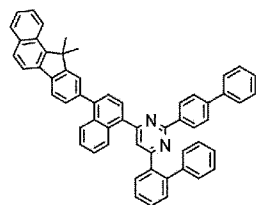
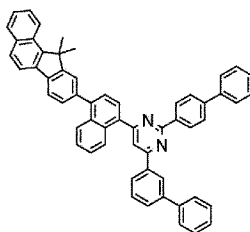
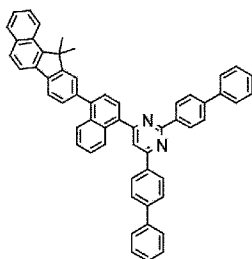
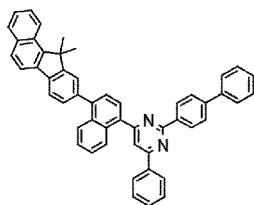
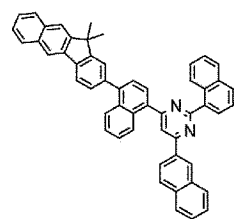
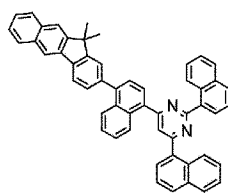
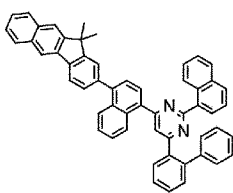
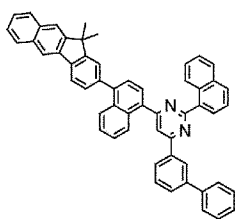
[0292]

[化157]



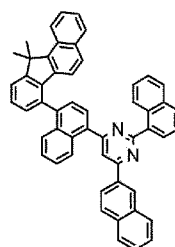
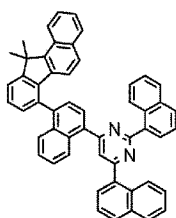
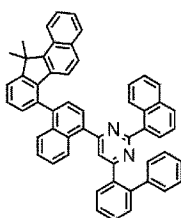
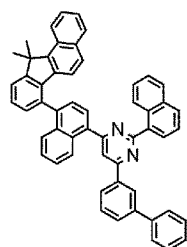
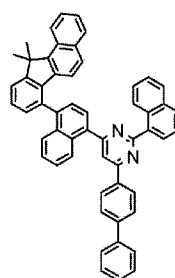
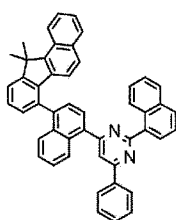
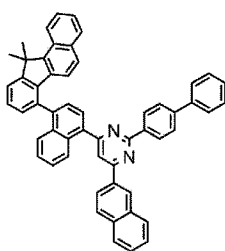
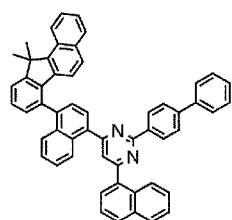
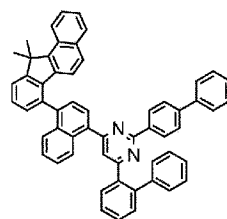
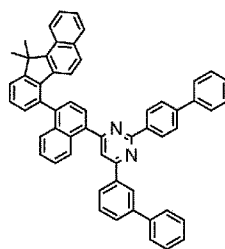
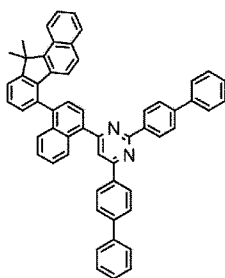
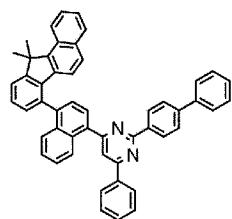
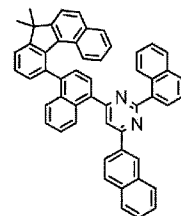
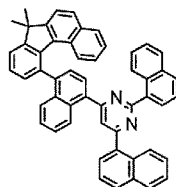
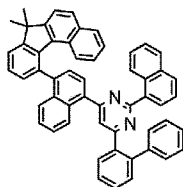
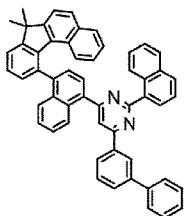
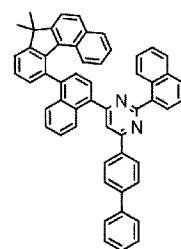
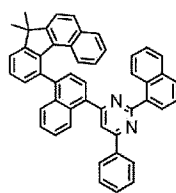
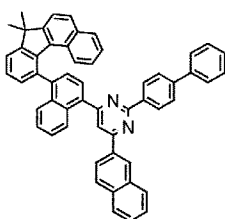
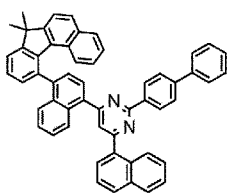
[0293]

[化158]



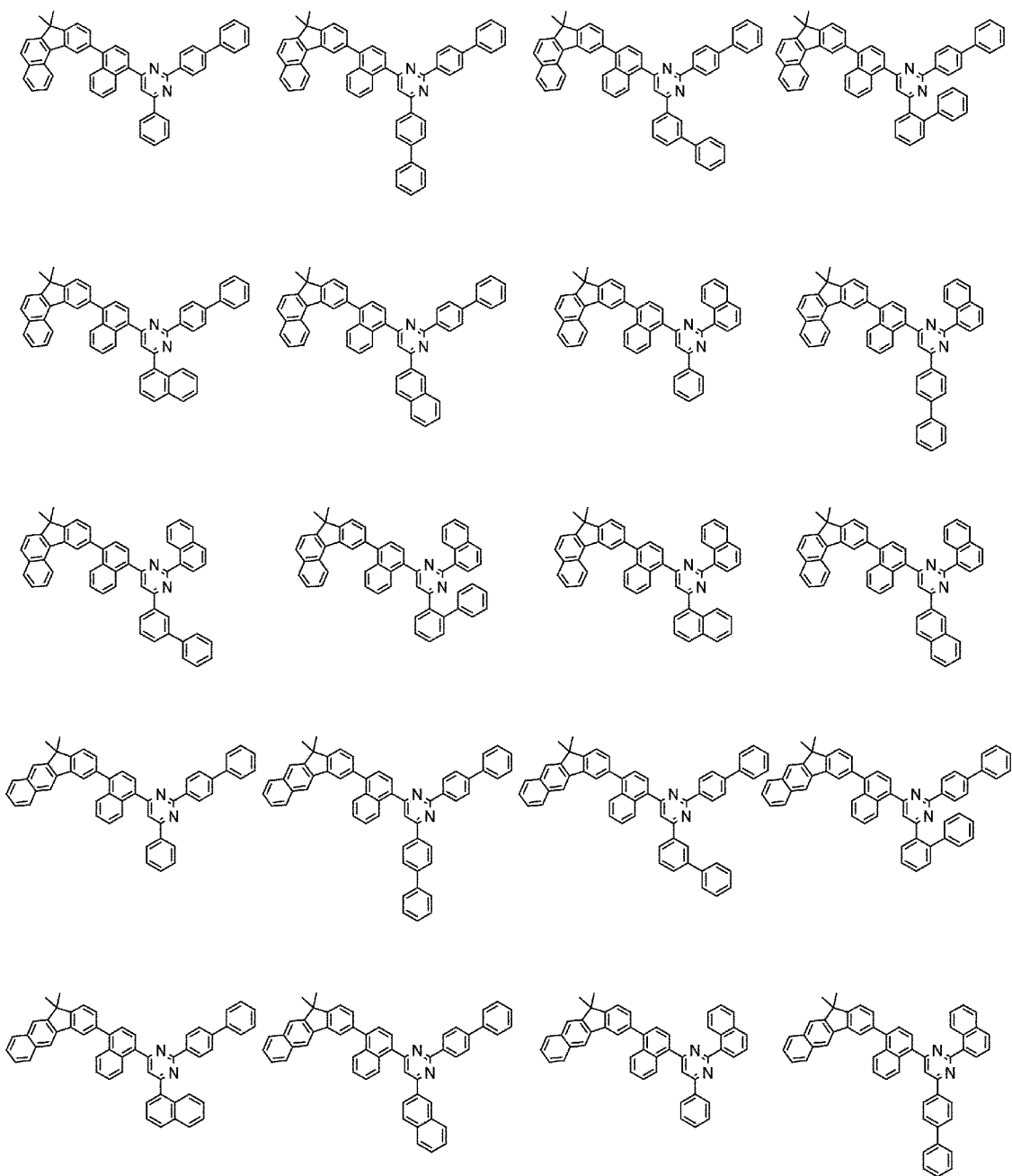
[0294]

[化159]



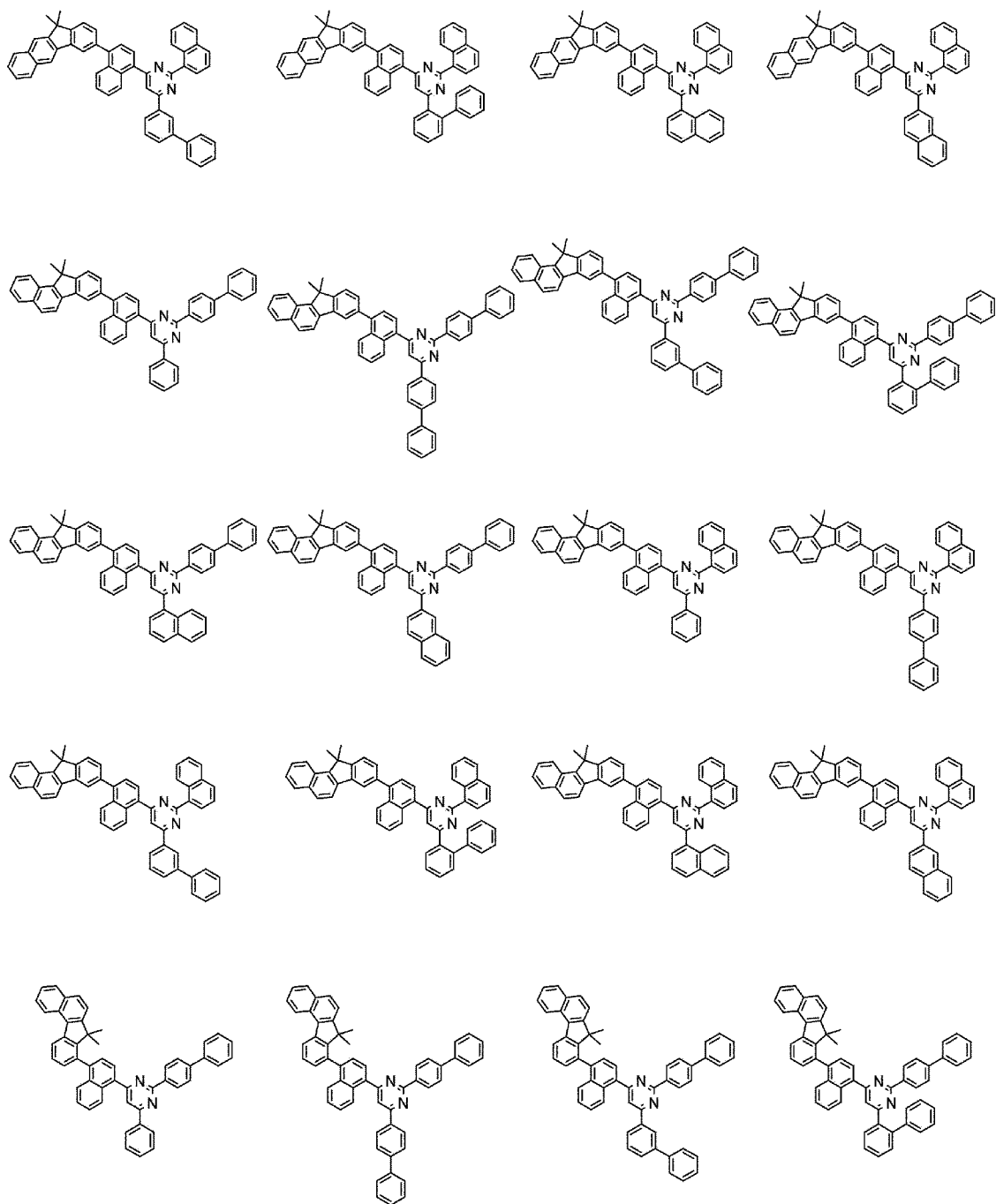
[0295]

[化160]



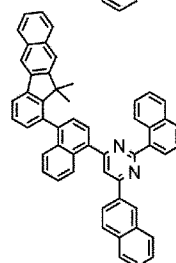
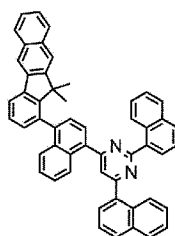
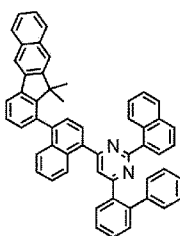
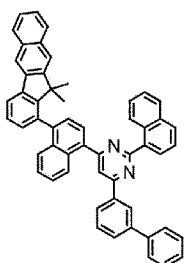
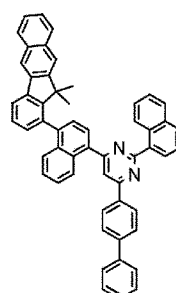
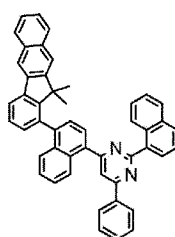
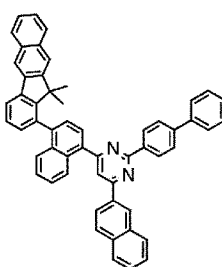
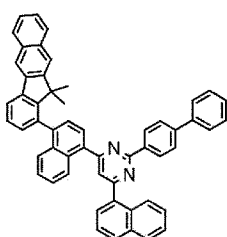
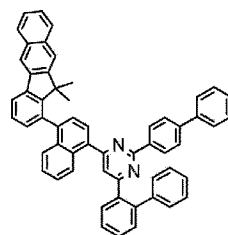
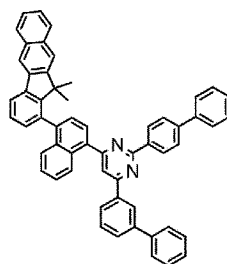
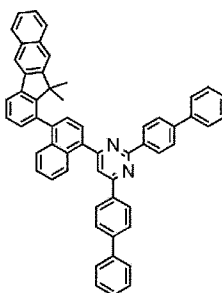
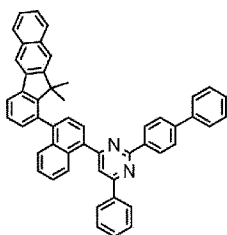
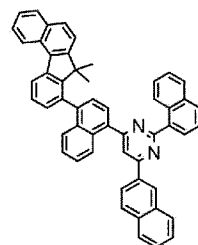
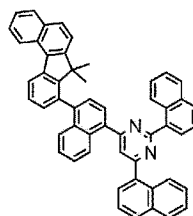
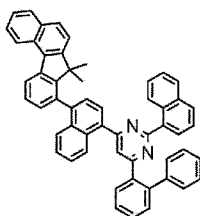
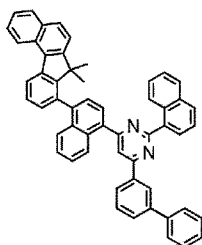
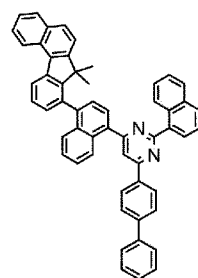
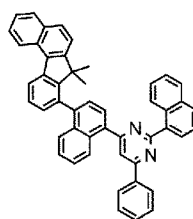
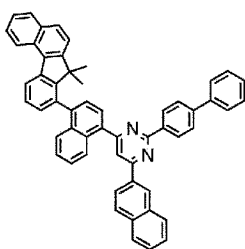
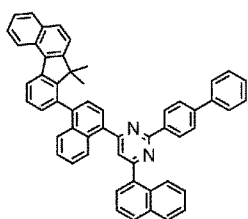
[0296]

[化161]



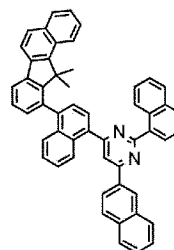
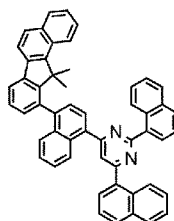
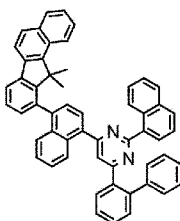
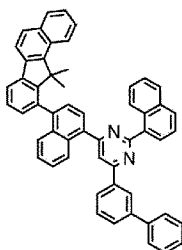
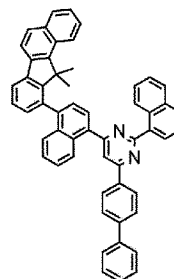
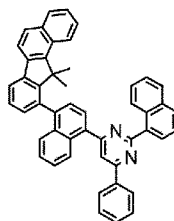
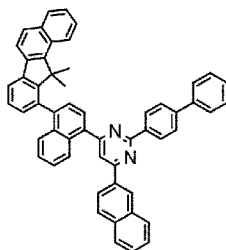
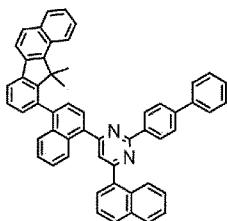
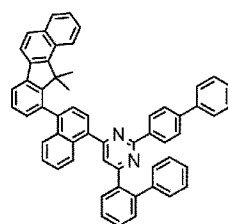
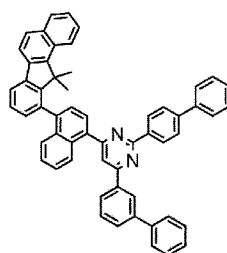
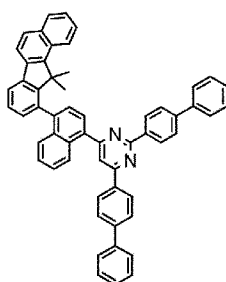
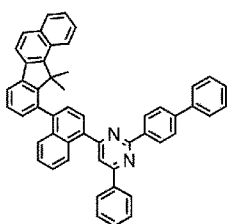
[0297]

[化162]



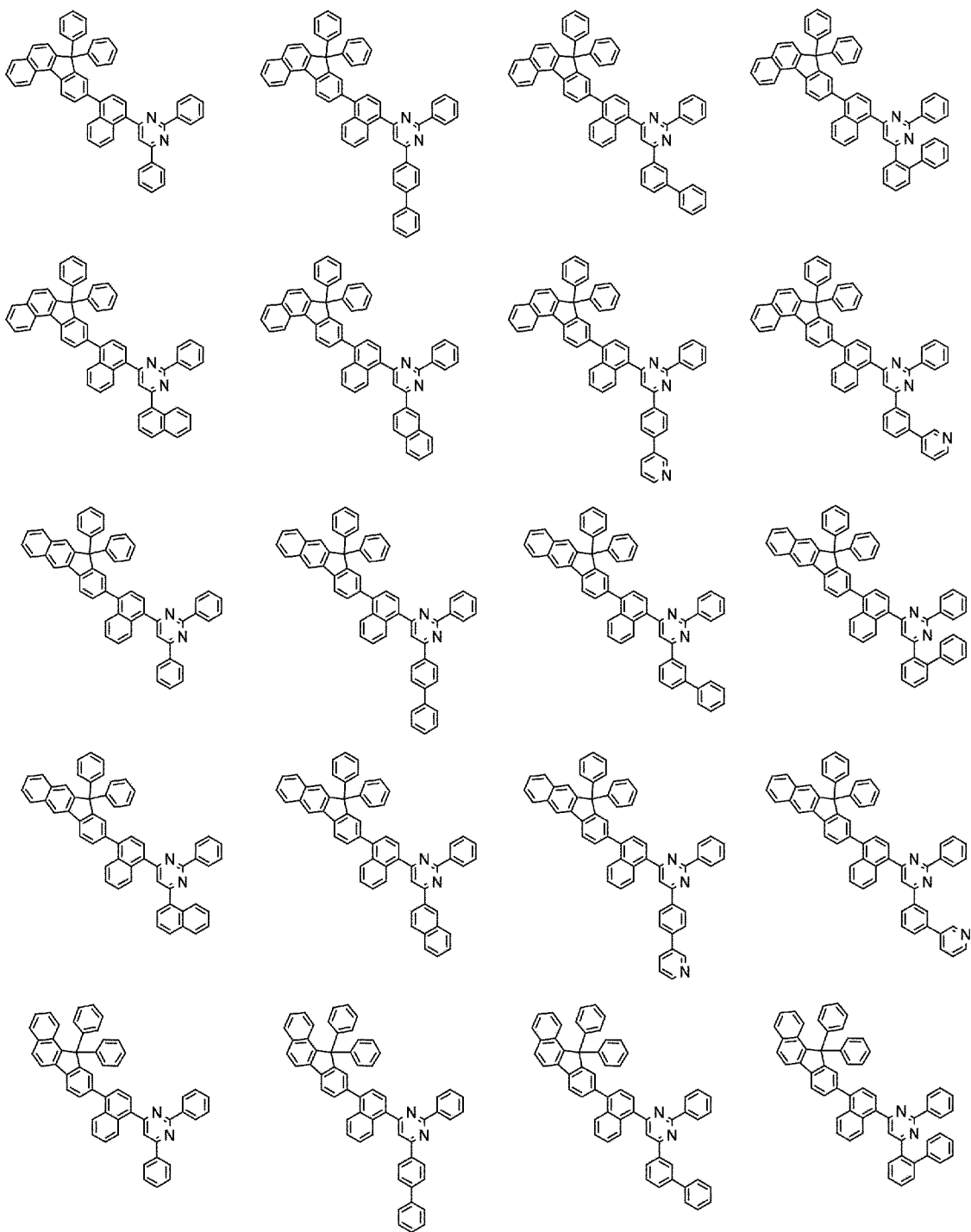
[0298]

[化163]



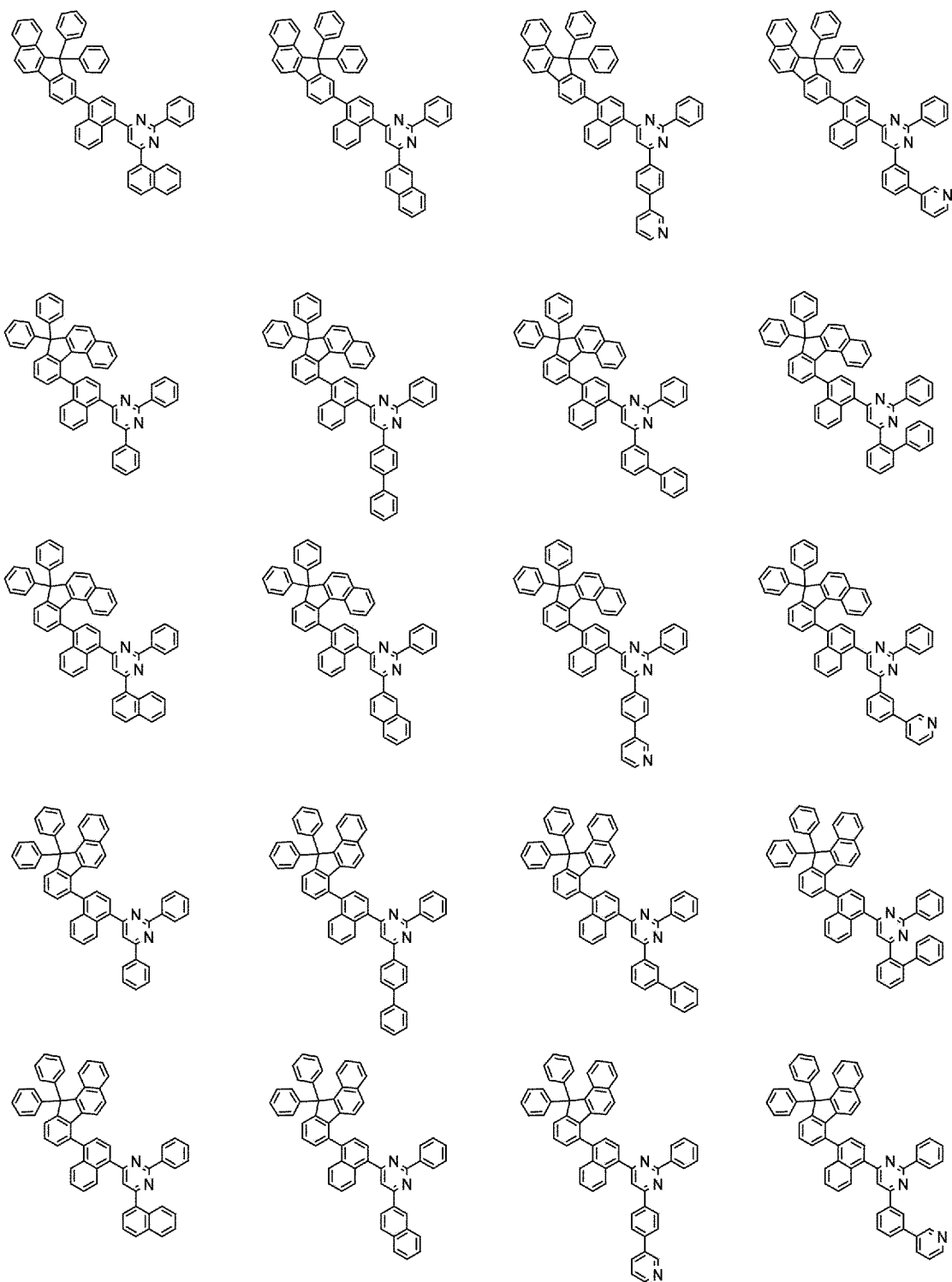
[0299]

[化164]



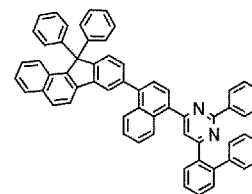
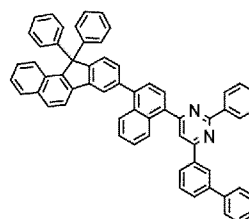
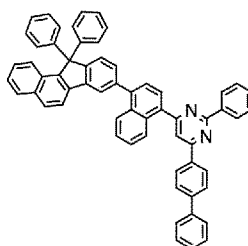
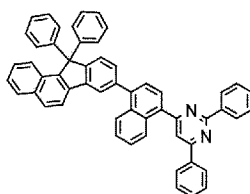
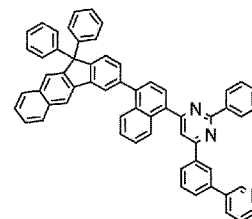
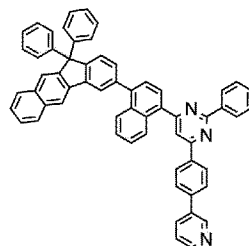
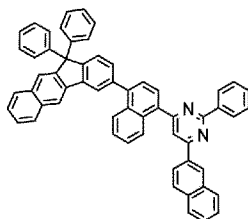
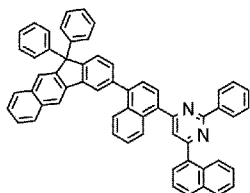
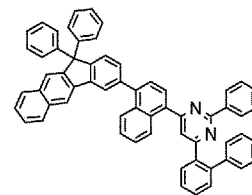
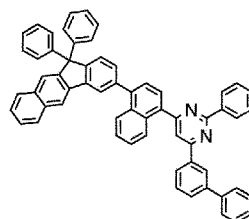
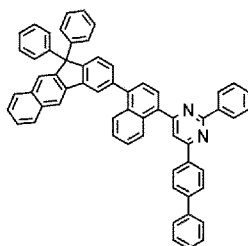
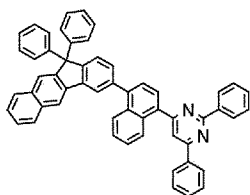
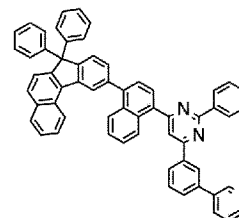
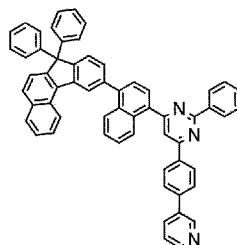
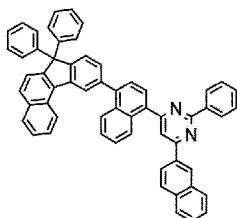
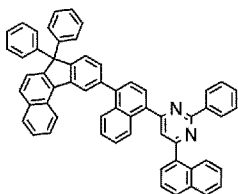
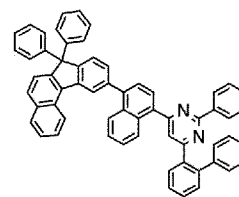
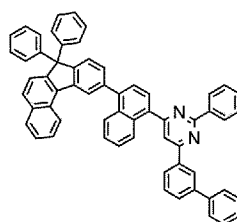
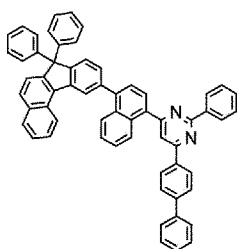
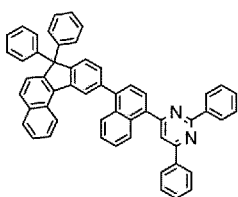
[0300]

[化165]



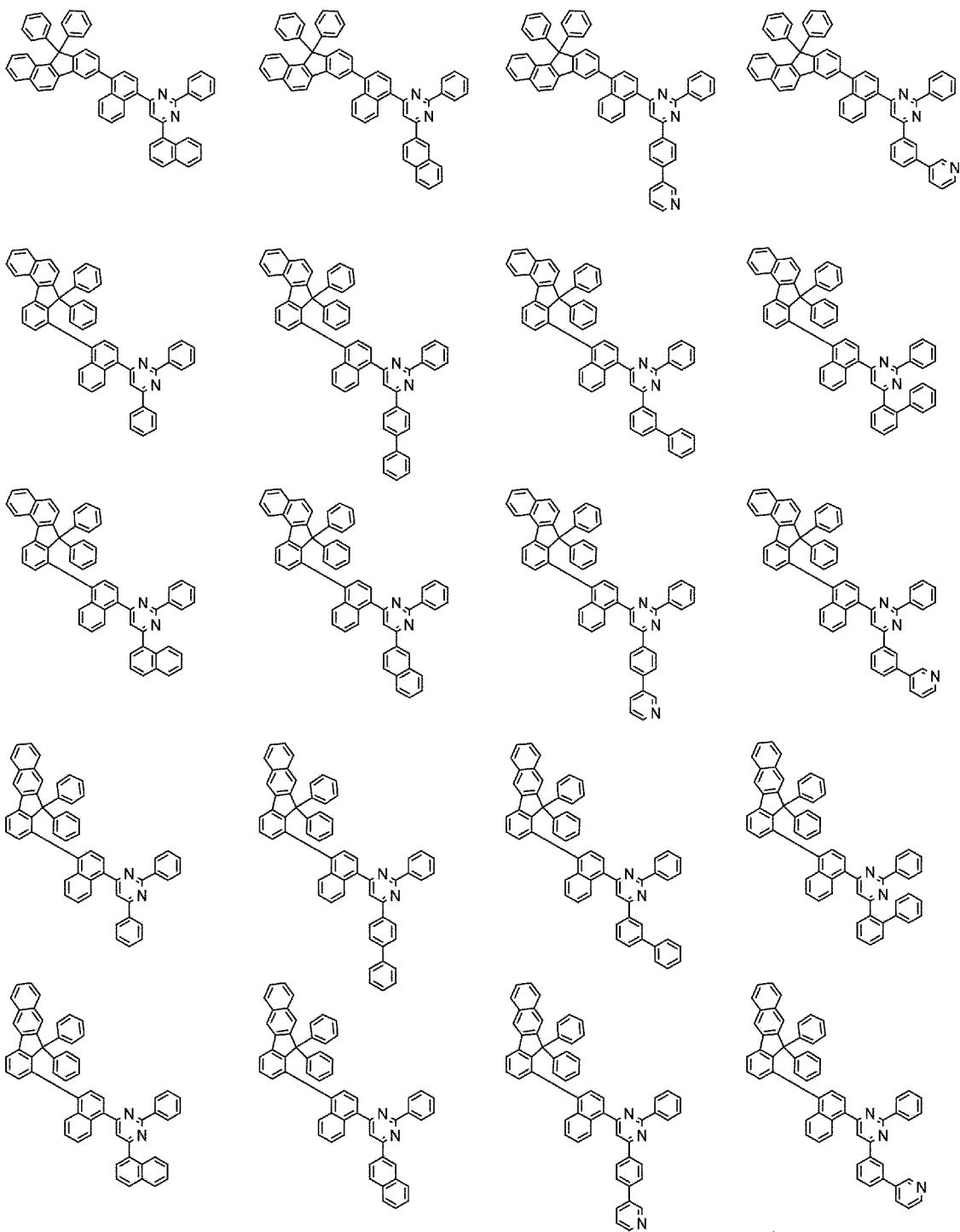
[0301]

[化166]



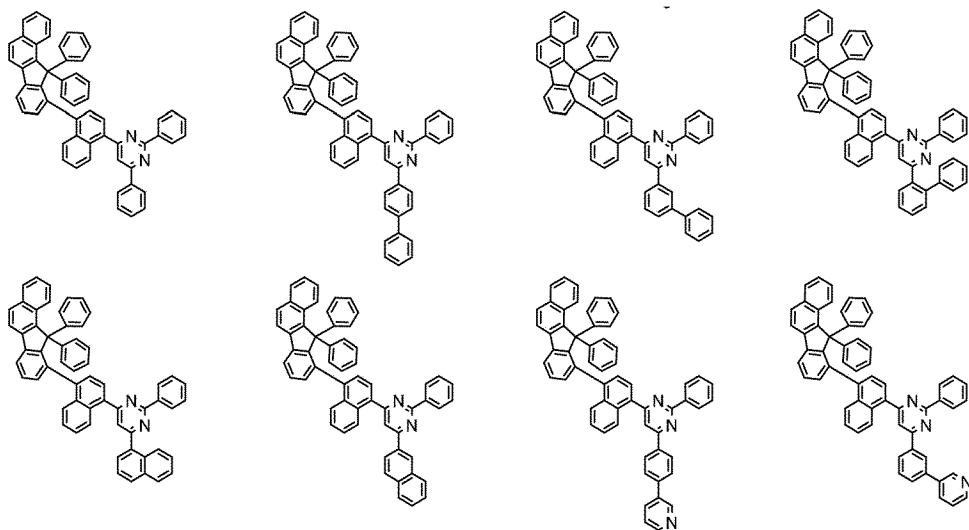
[0302]

[化167]



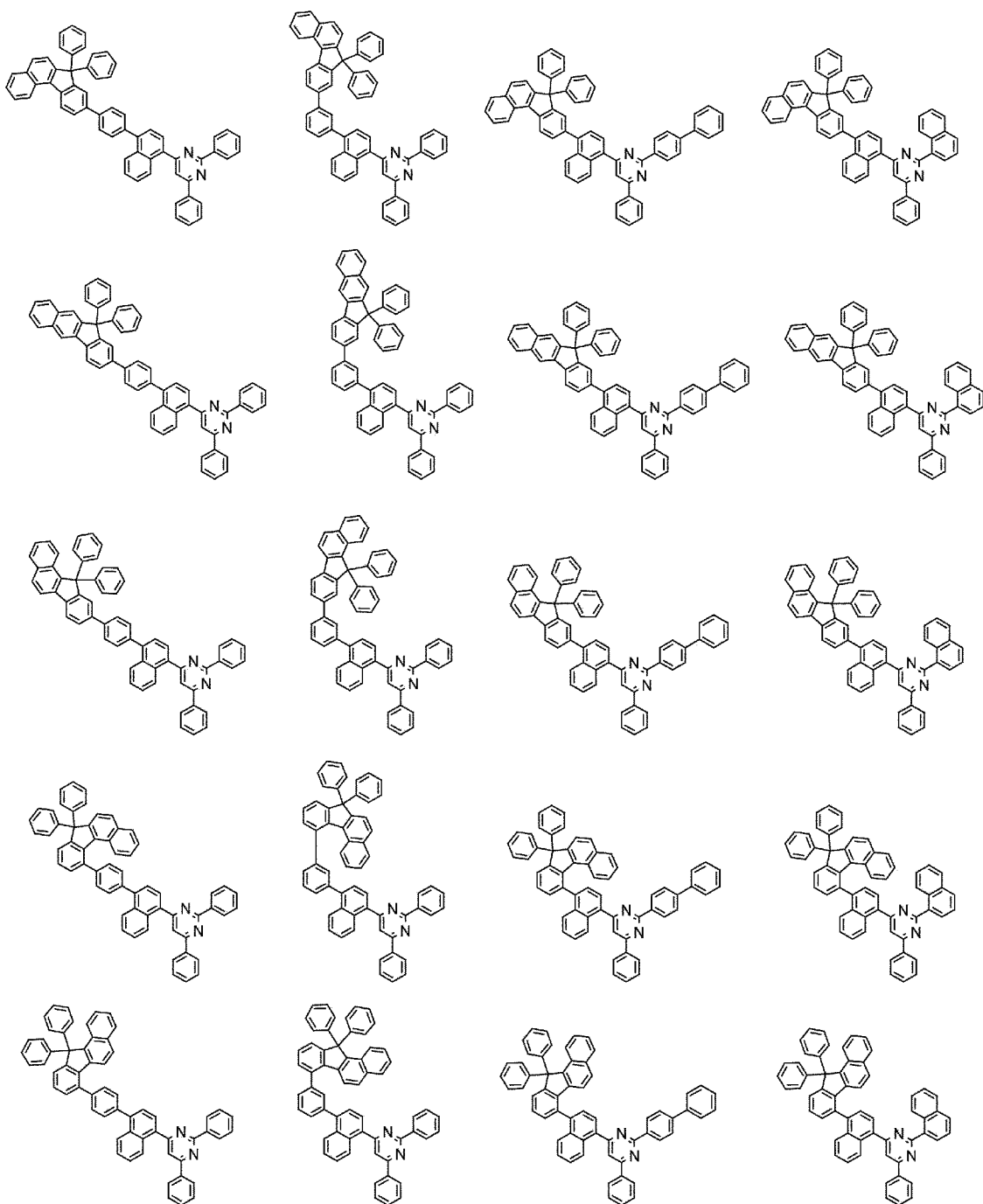
[0303]

[化168]



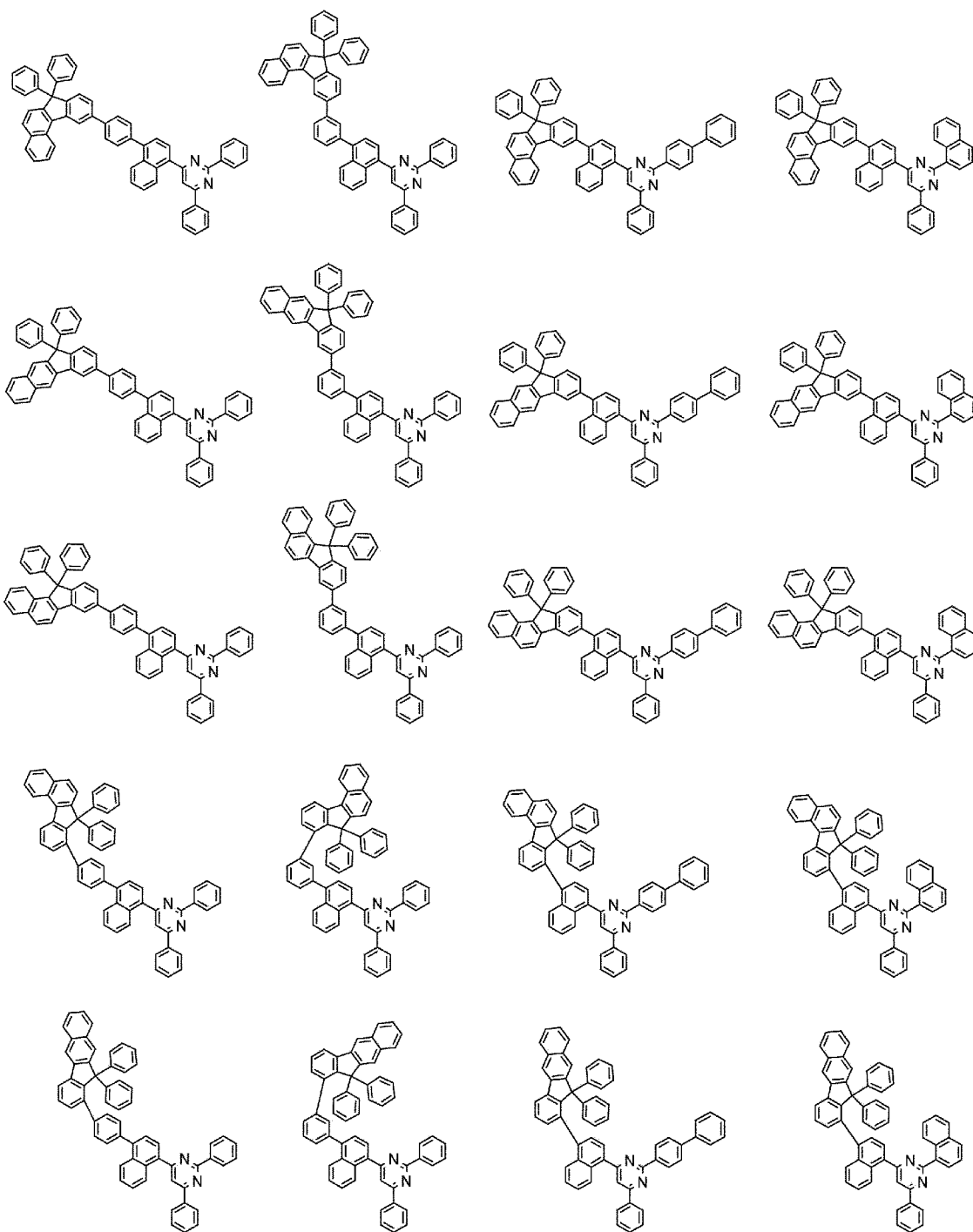
[0304]

[化169]

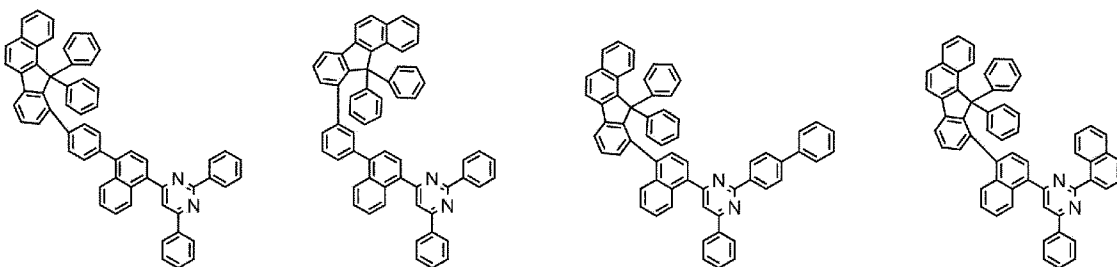


[0305]

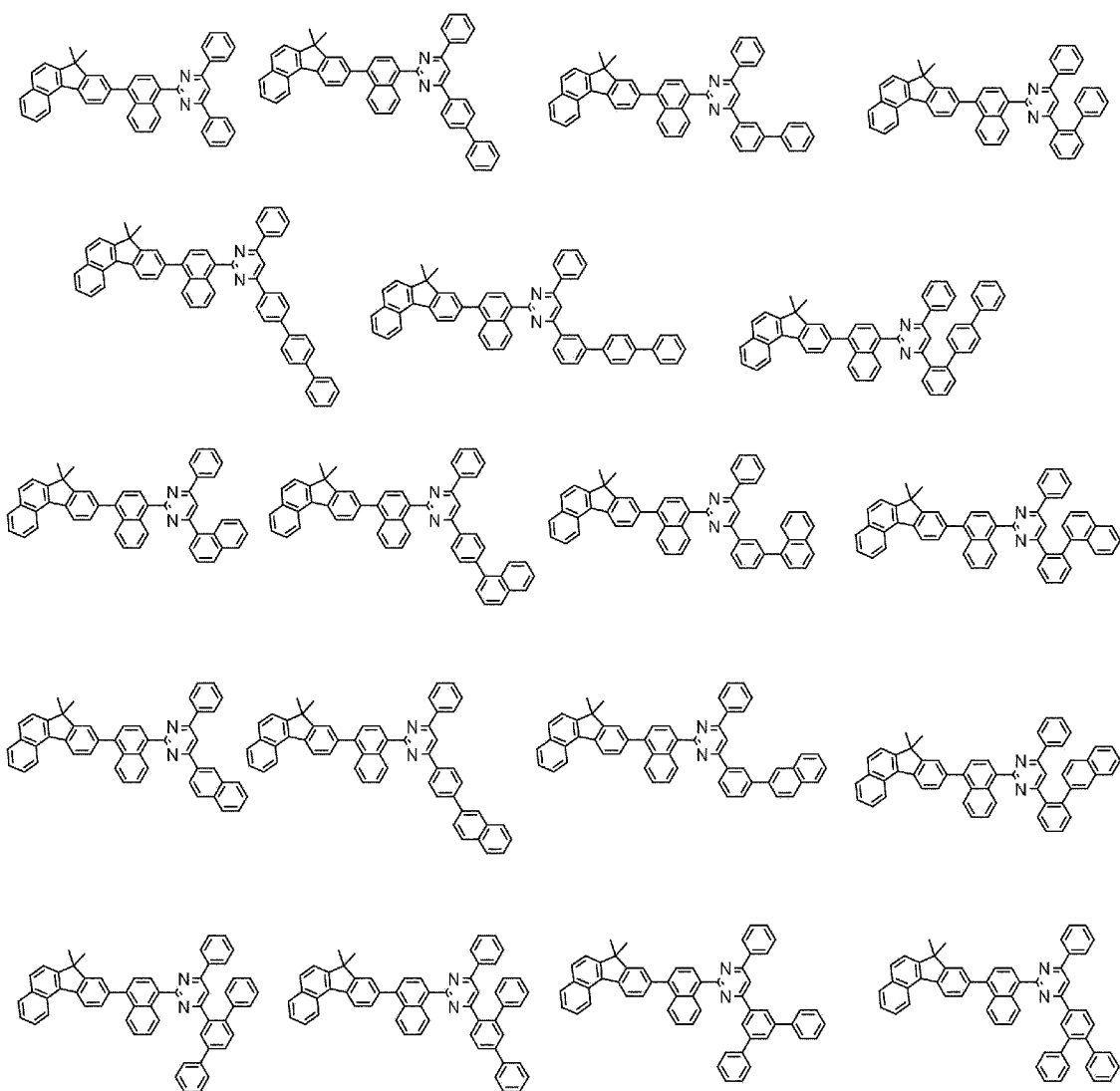
[化170]



[0306] [化171]

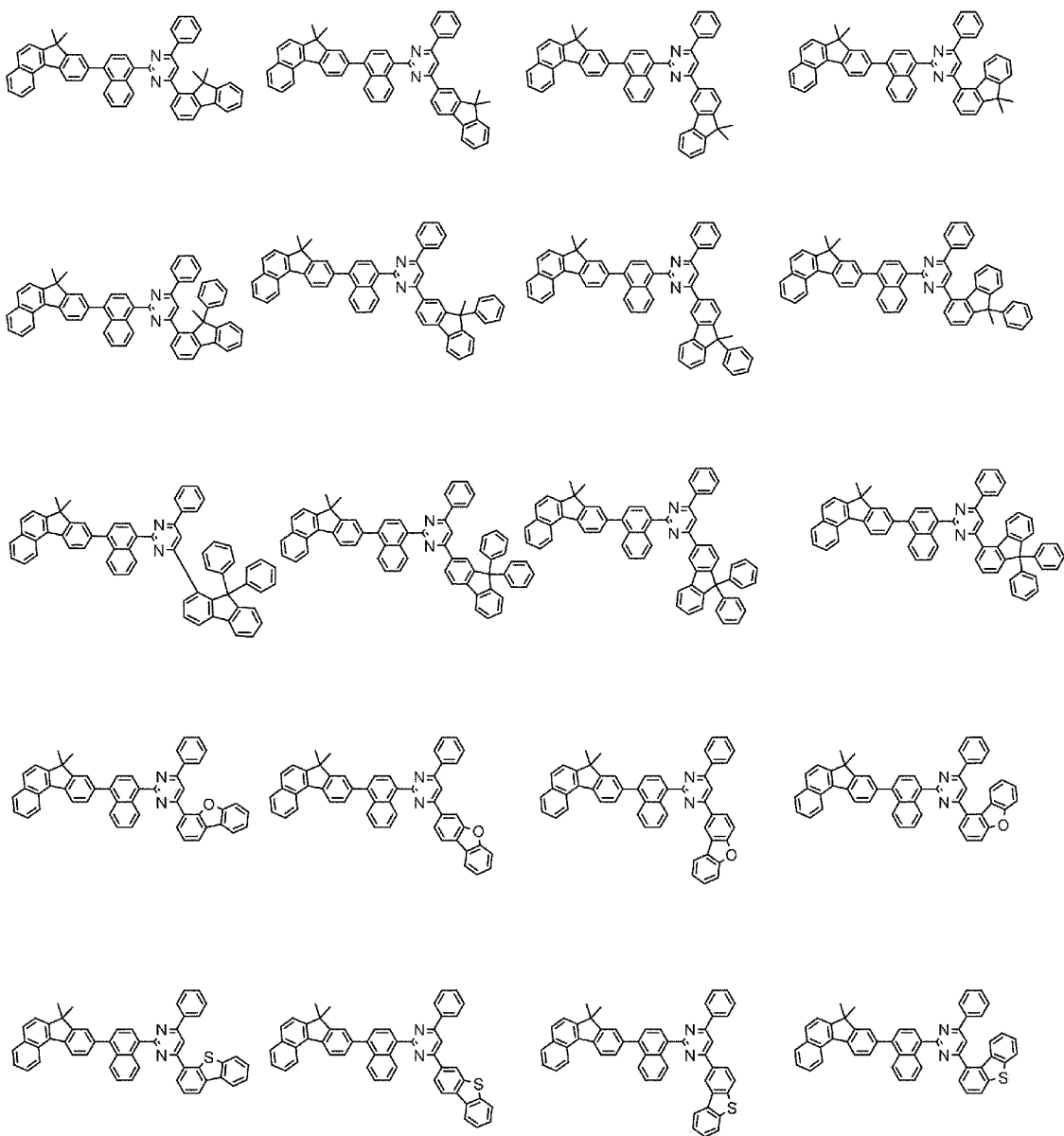


[0307] [化172]



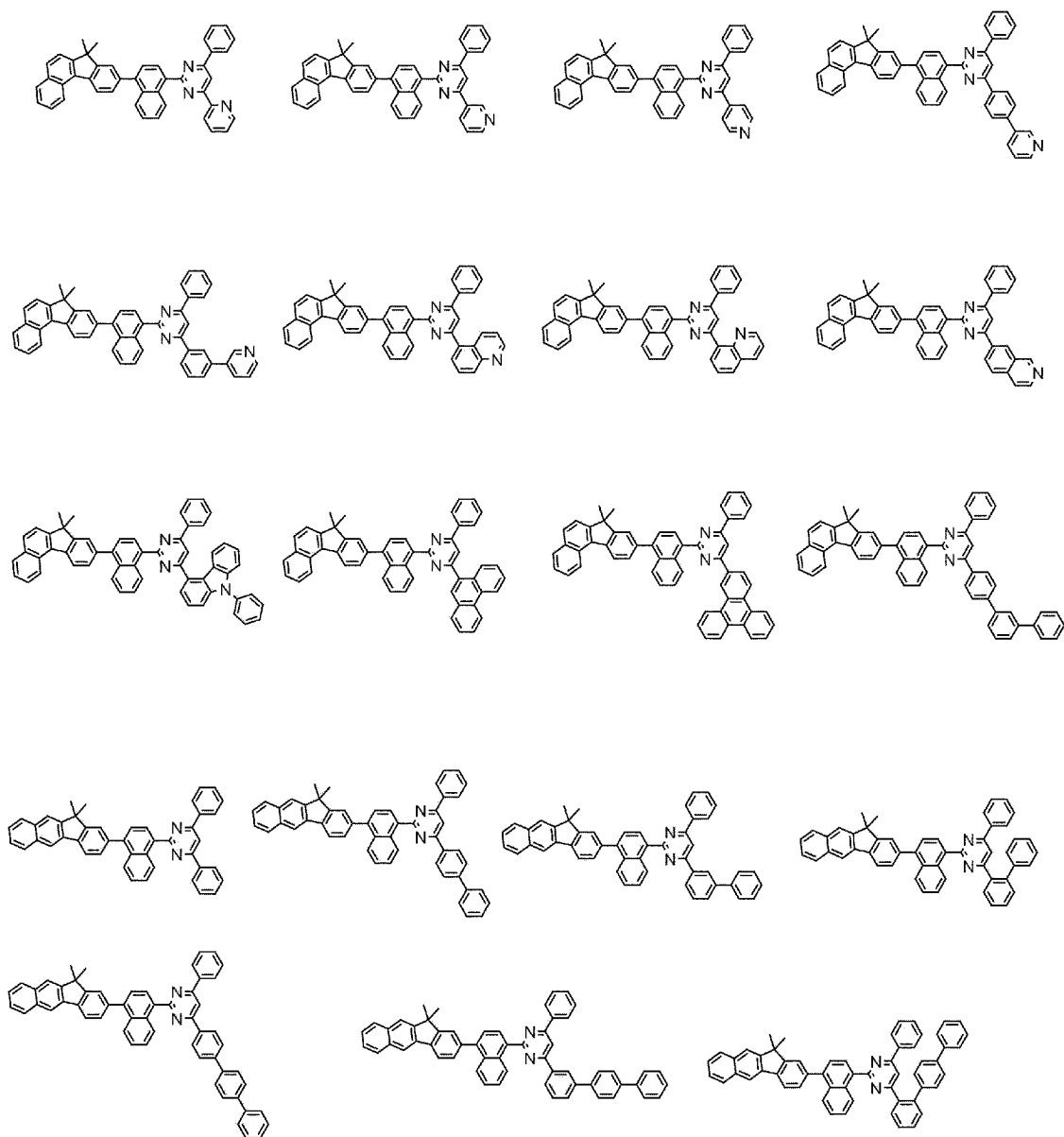
[0308]

[化173]



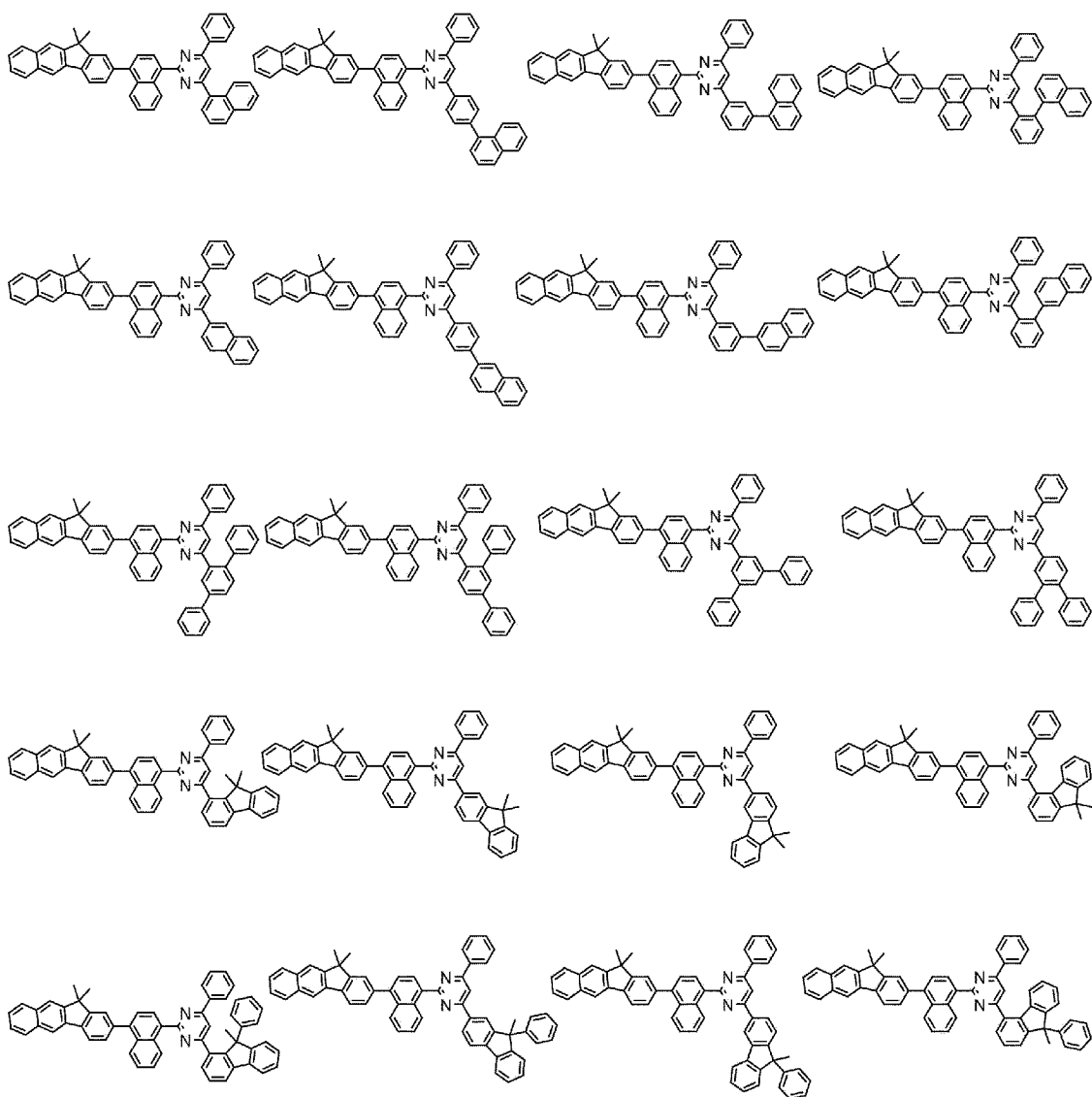
[0309]

[化174]



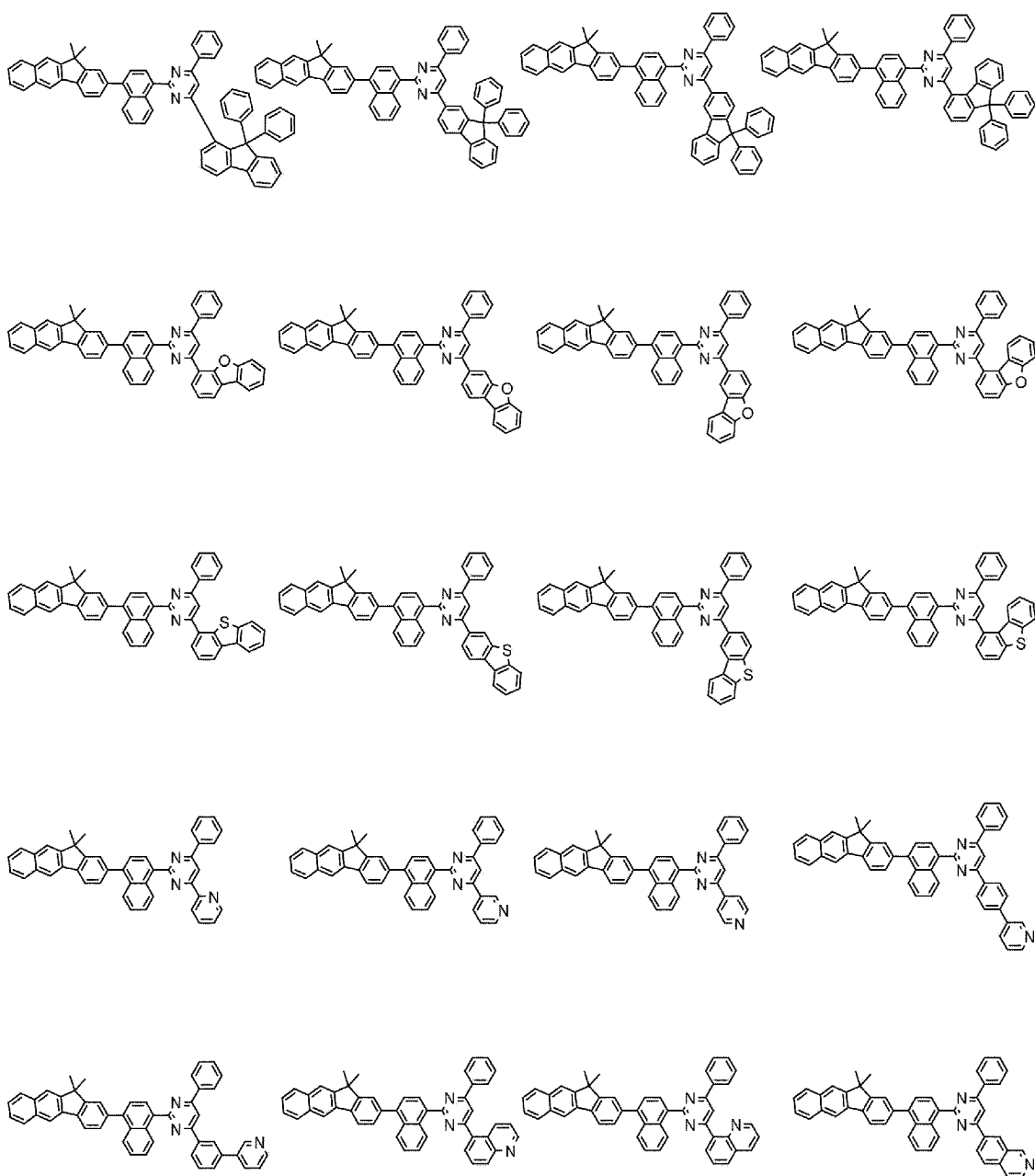
[0310]

[化175]



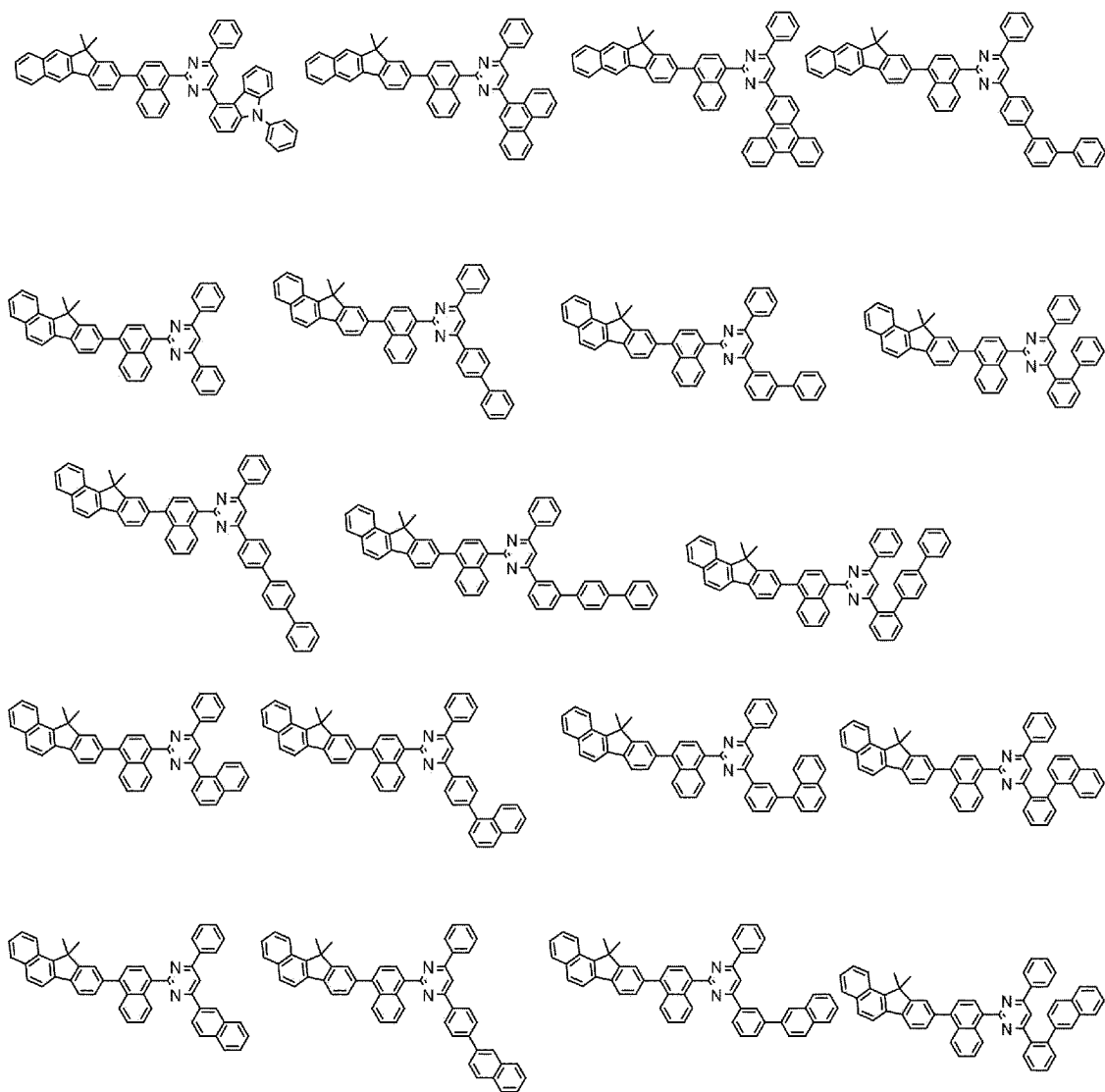
[0311]

[化176]



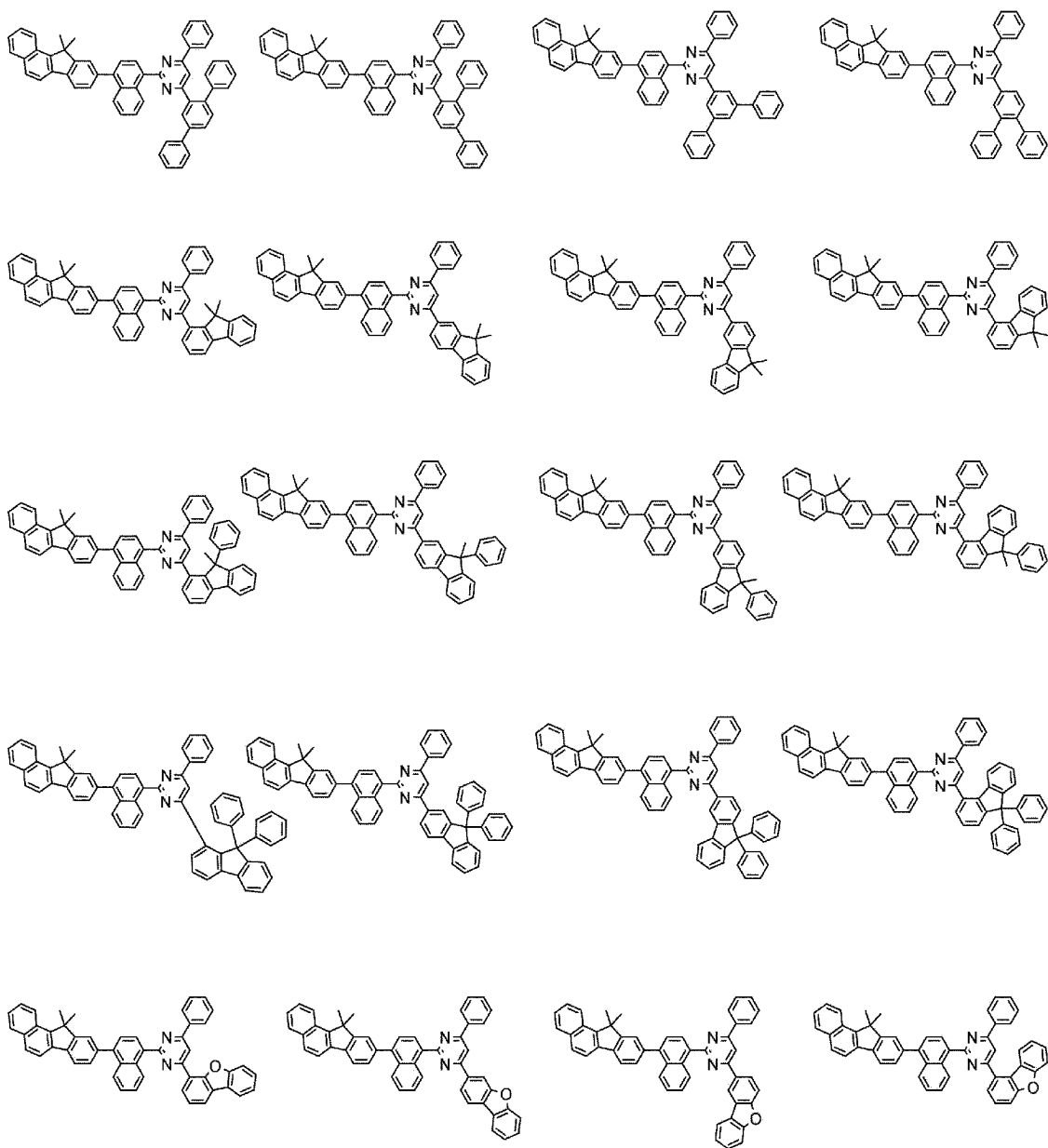
[0312]

[化177]



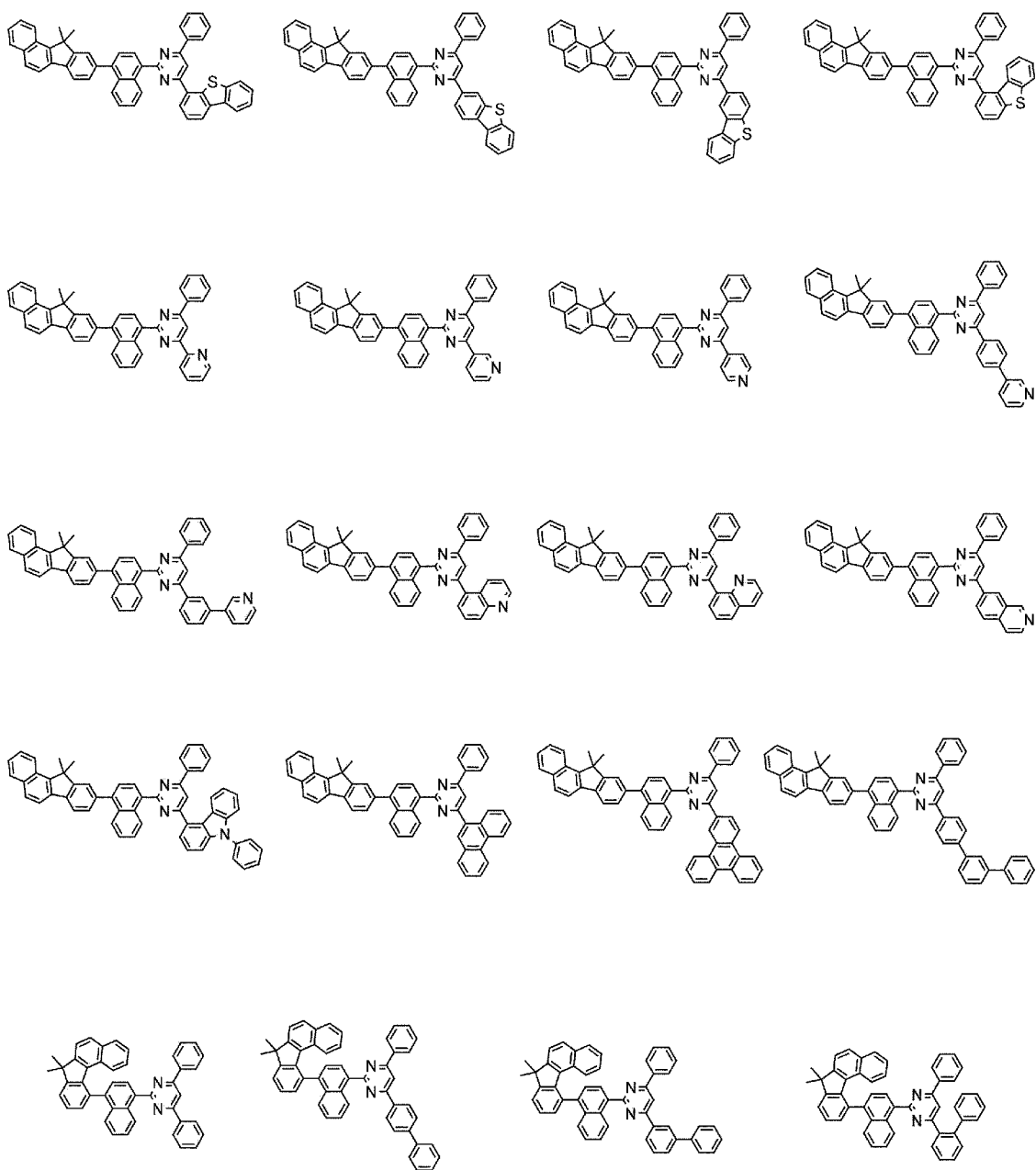
[0313]

[化178]



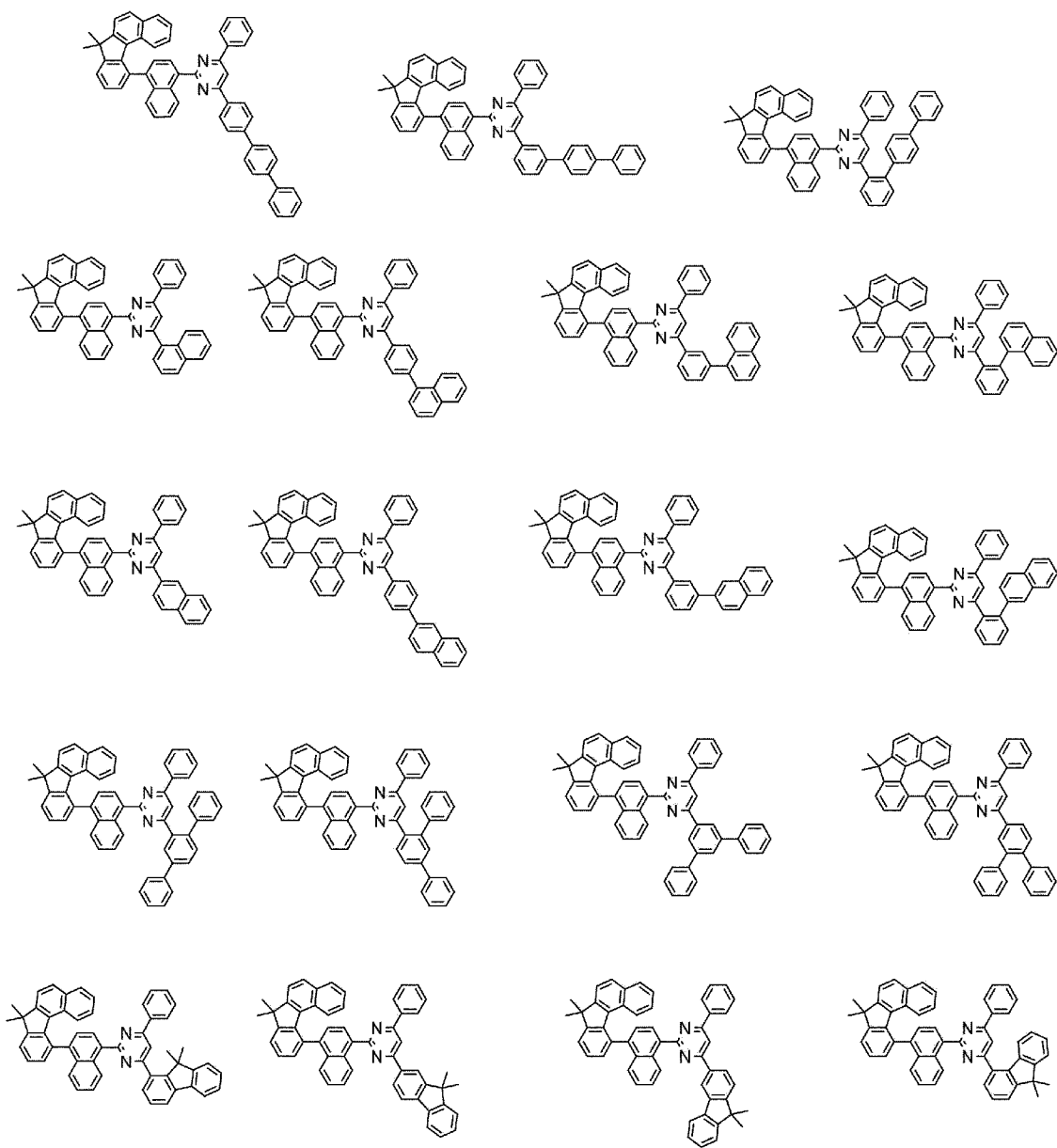
[0314]

[化179]



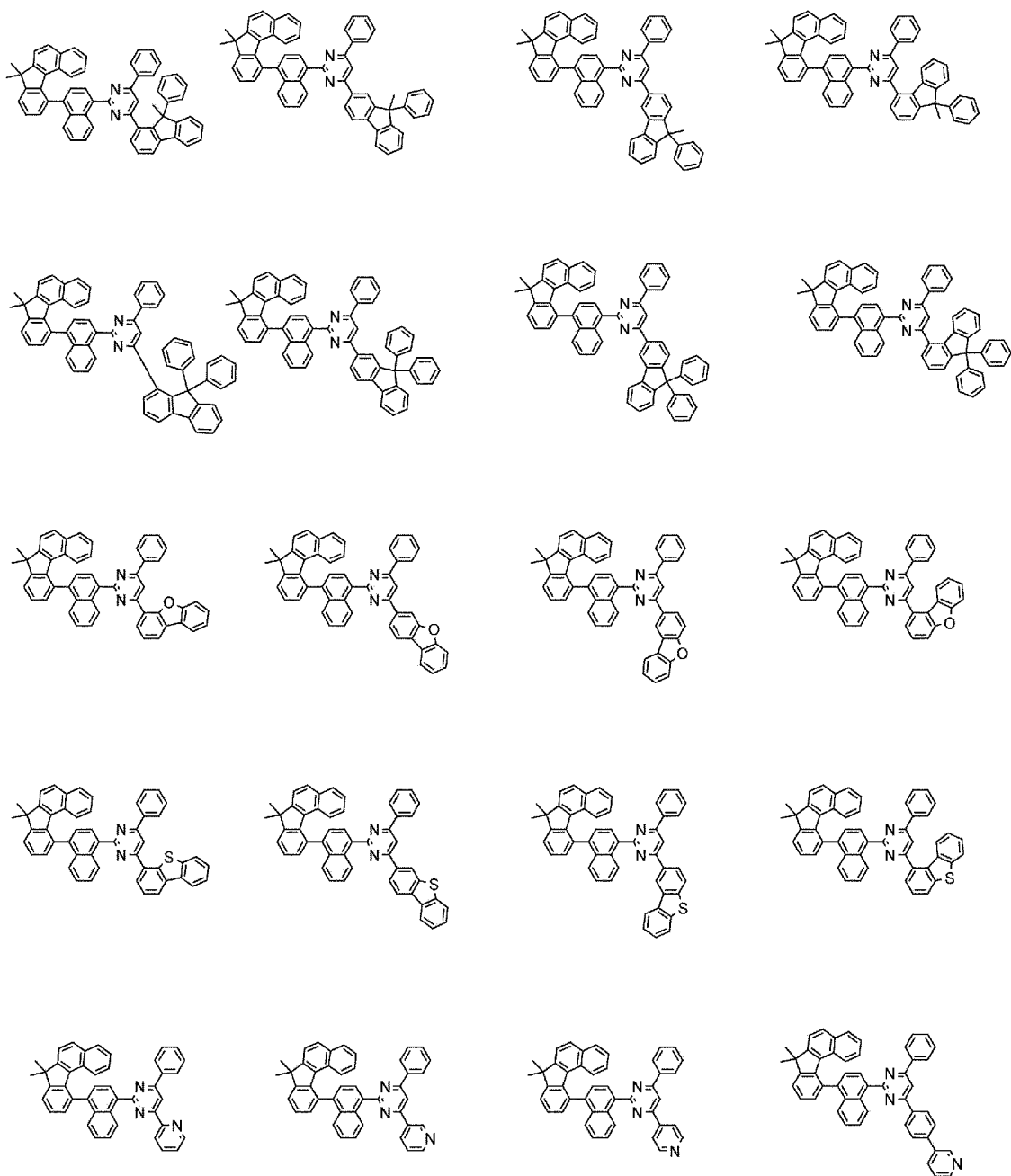
[0315]

[化180]



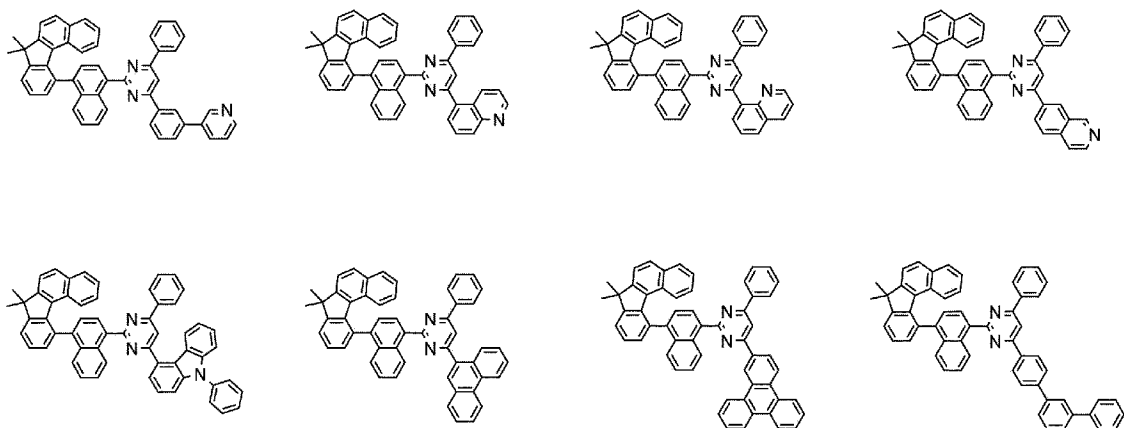
[0316]

[化181]

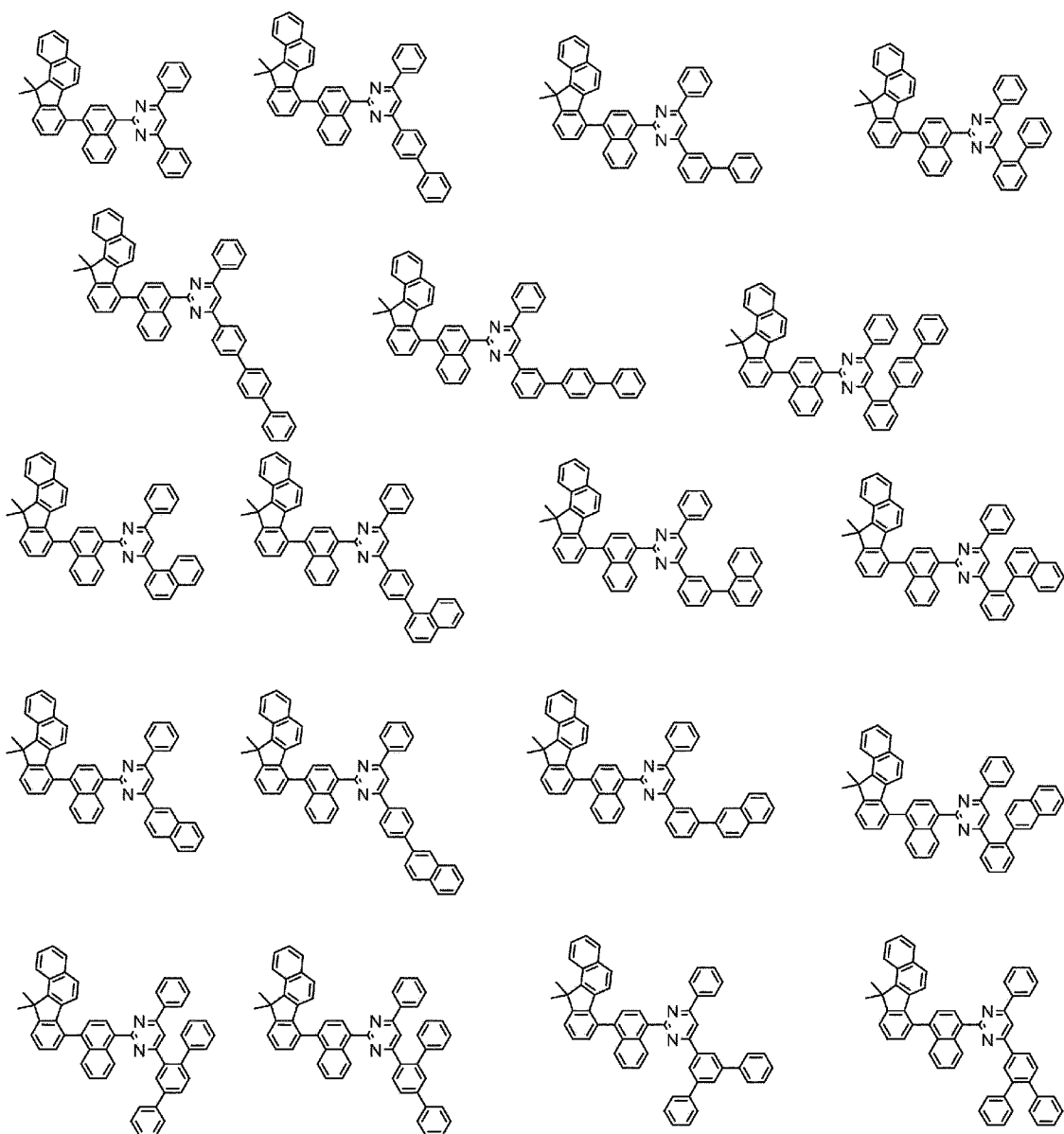


[0317]

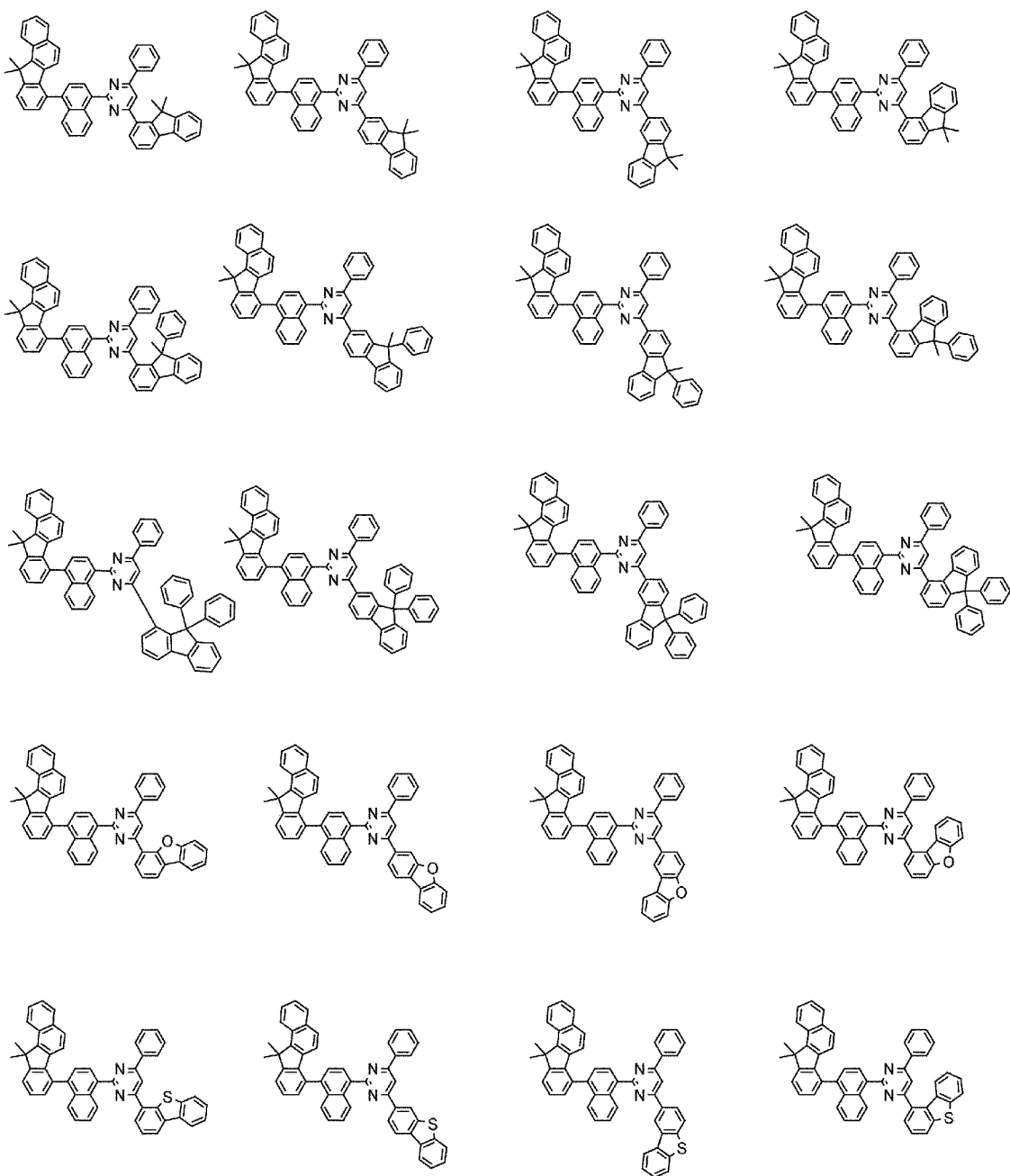
[化182]



[0318] [化183]

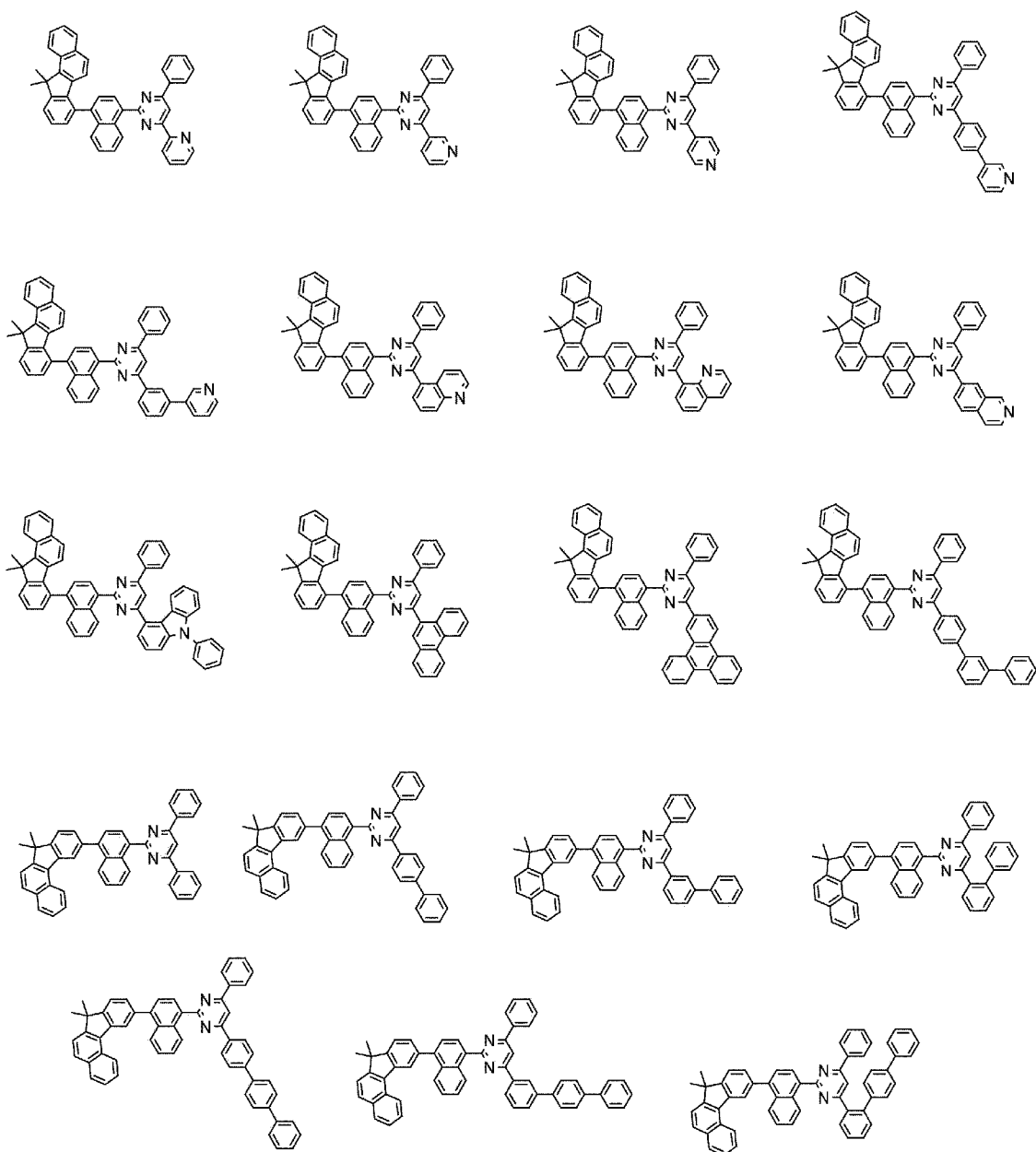


[0319] [化184]



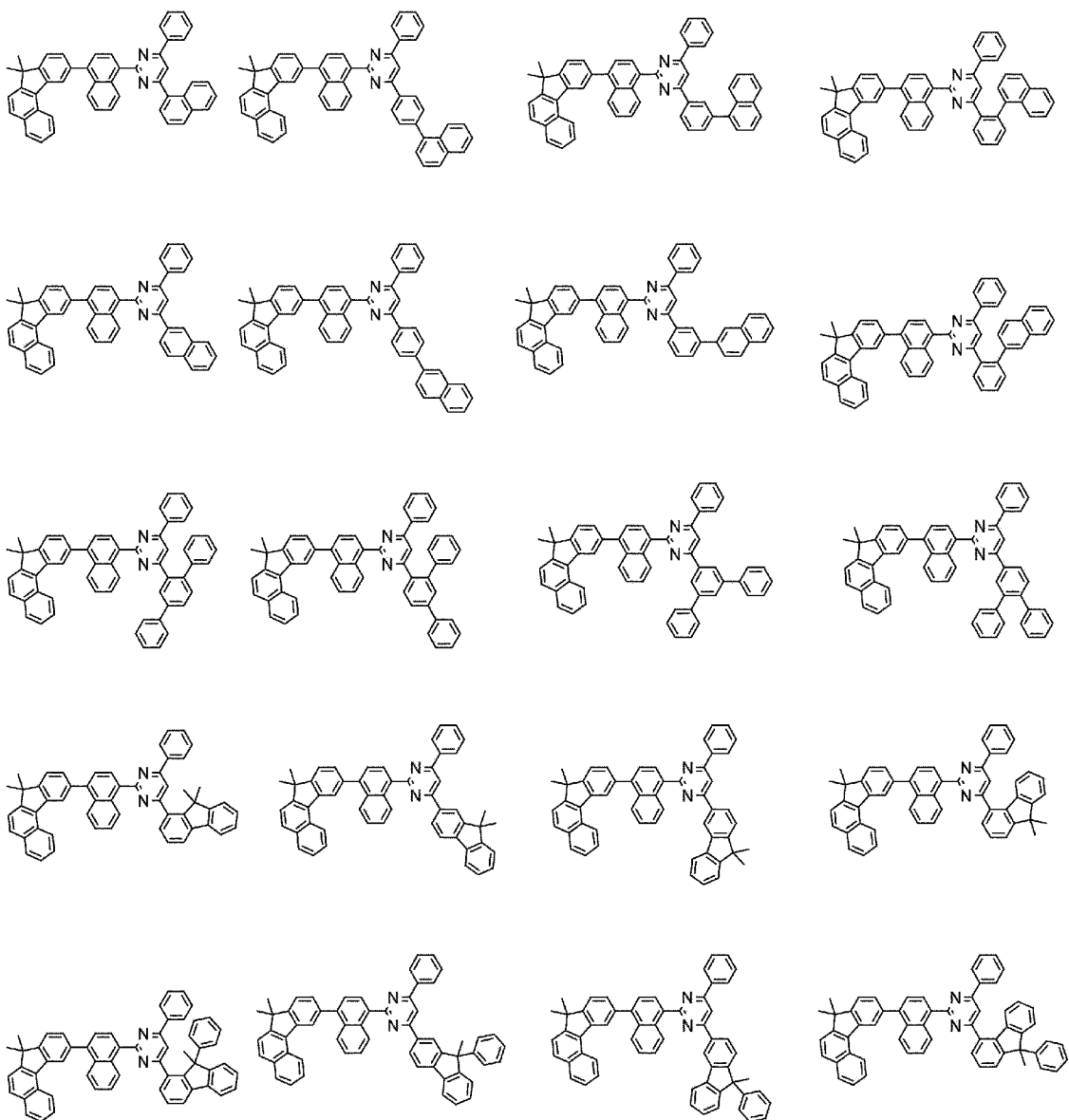
[0320]

[化185]



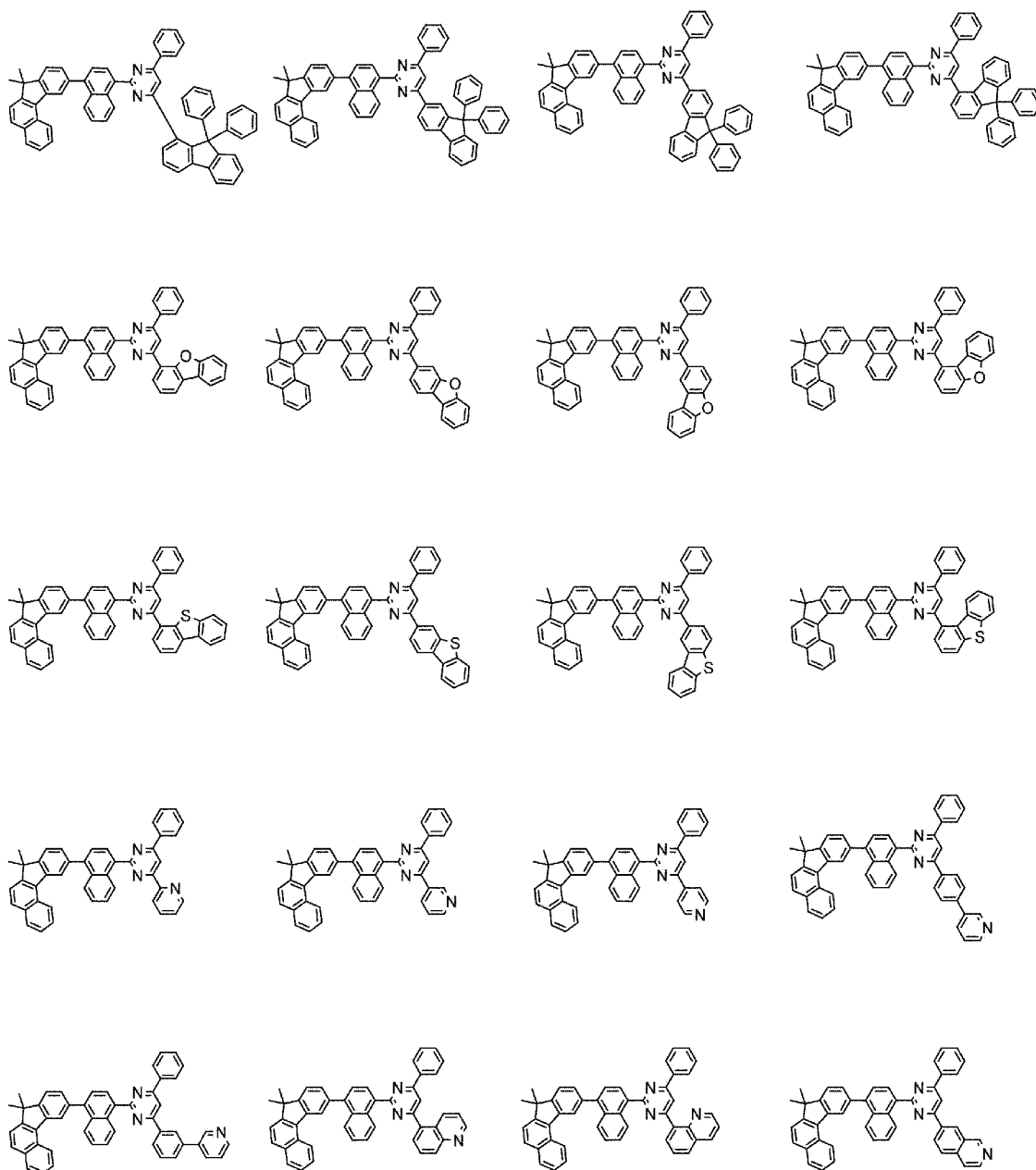
[0321]

[化186]



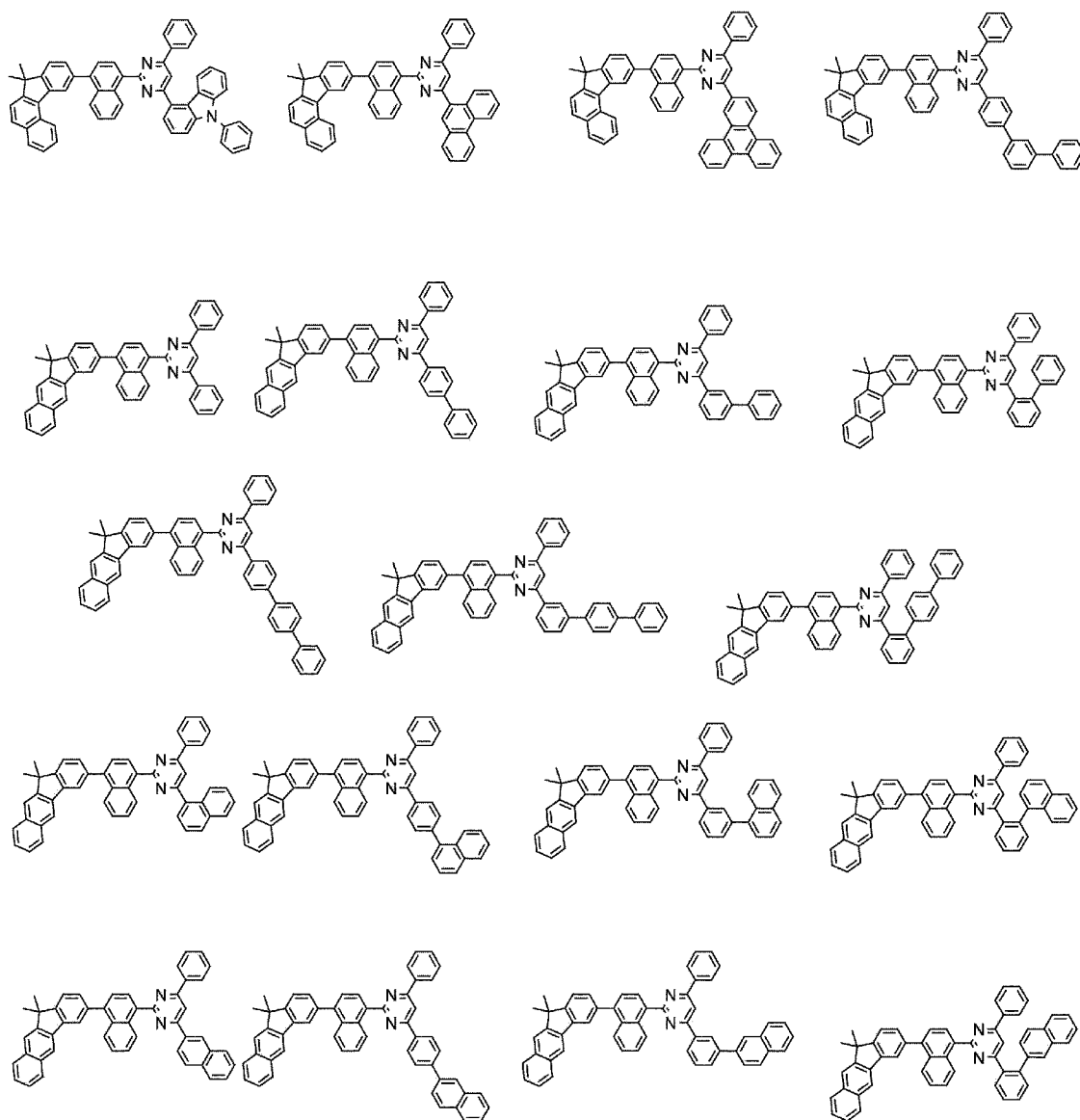
[0322]

[化187]



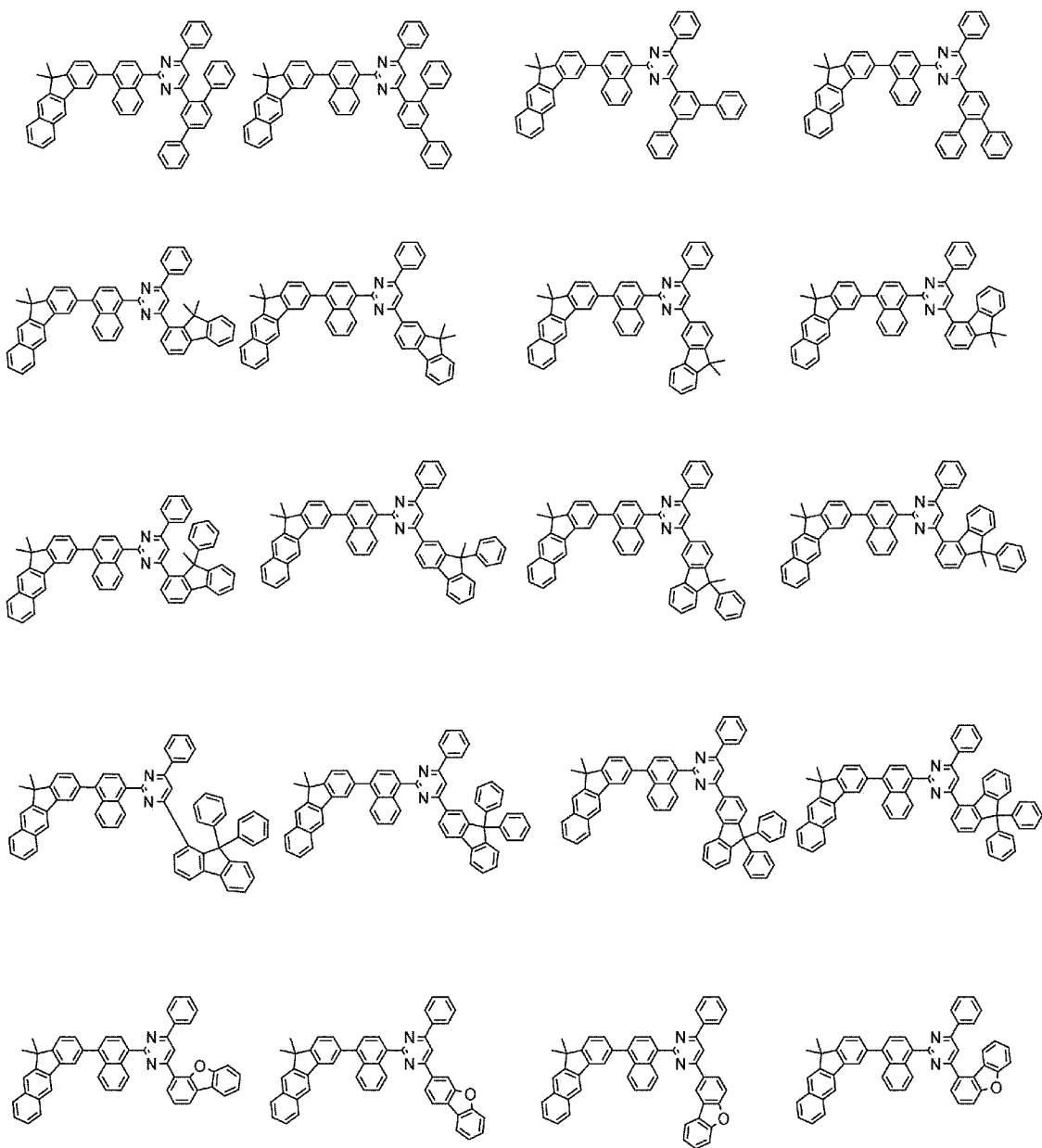
[0323]

[化188]



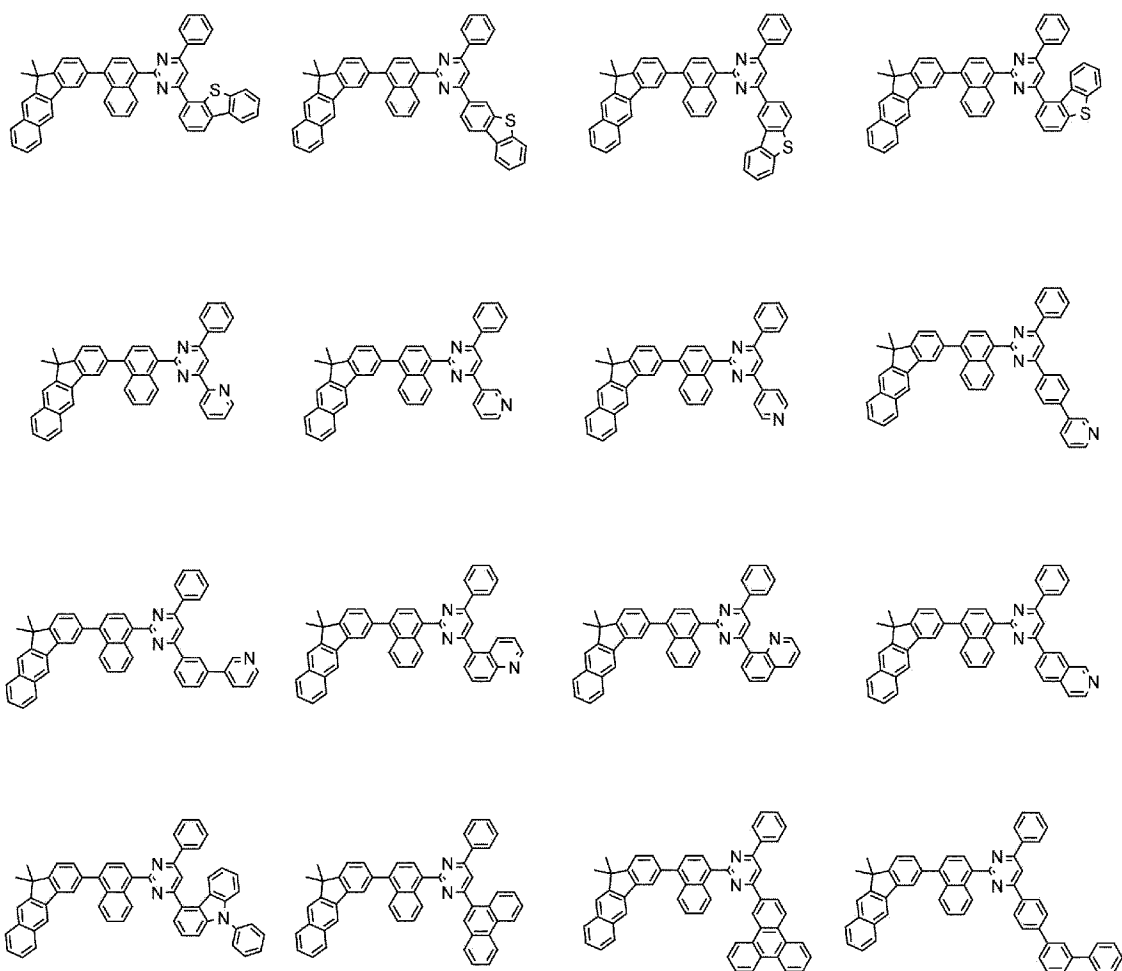
[0324]

[化189]



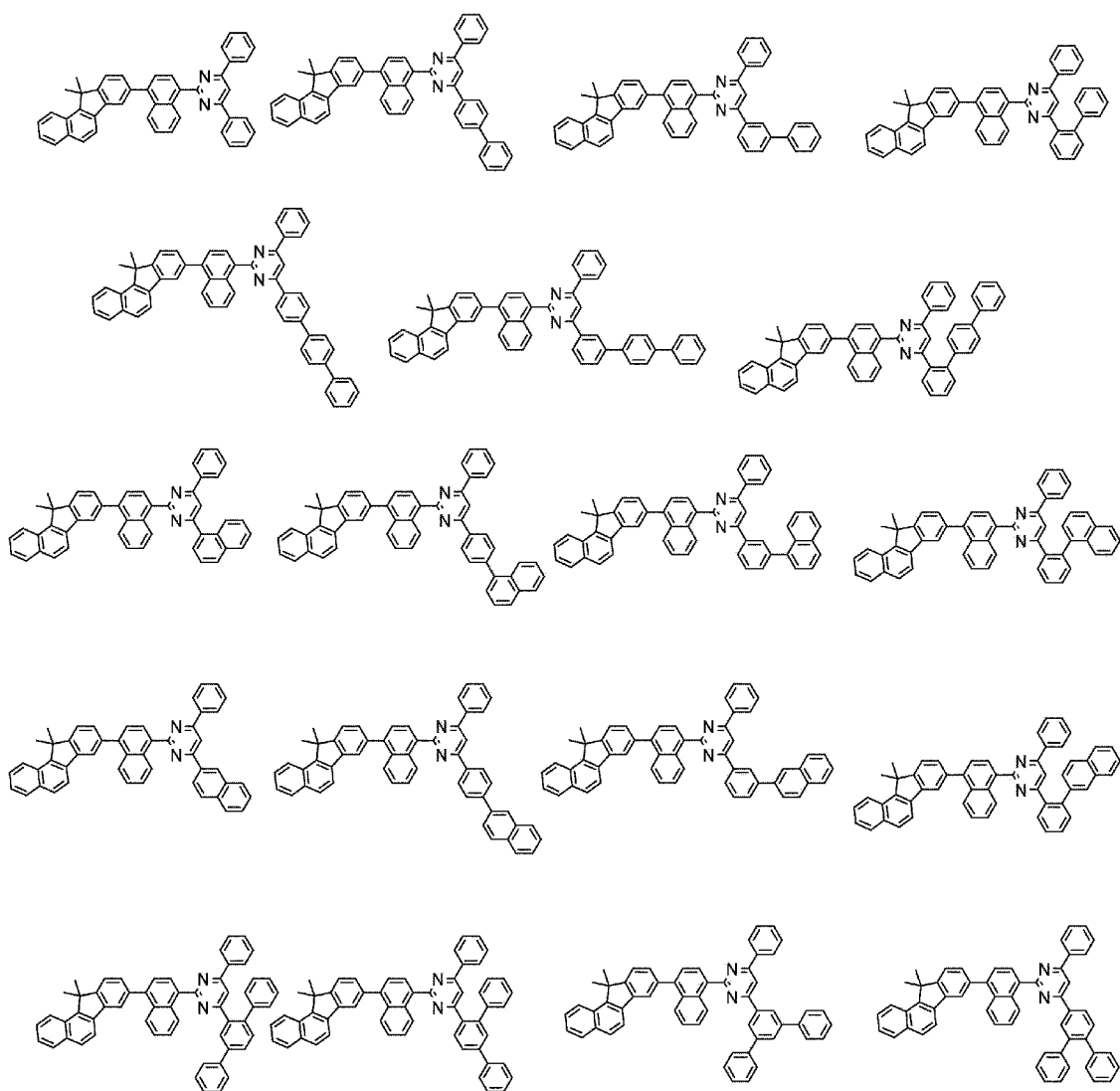
[0325]

[化190]



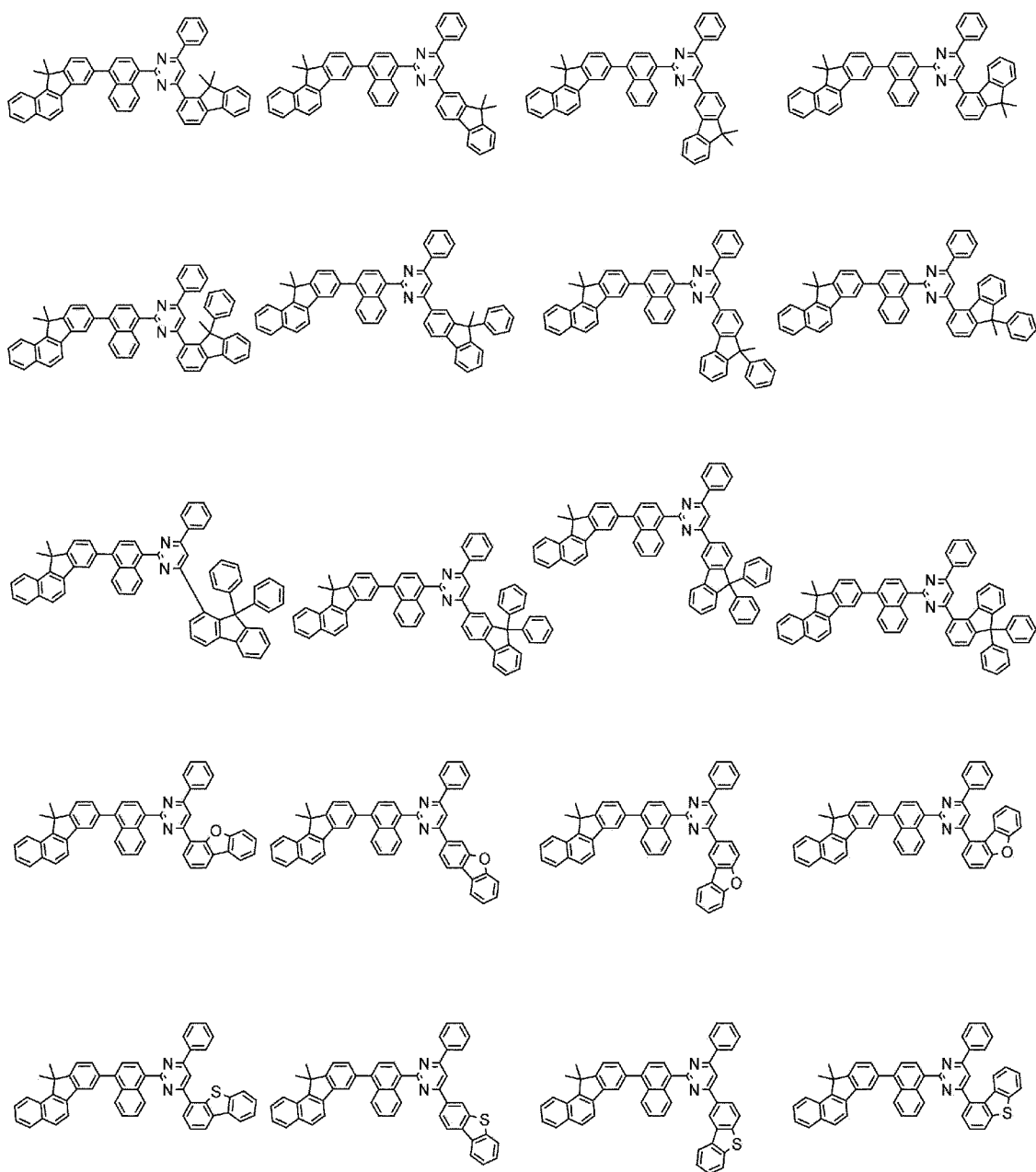
[0326]

[化191]



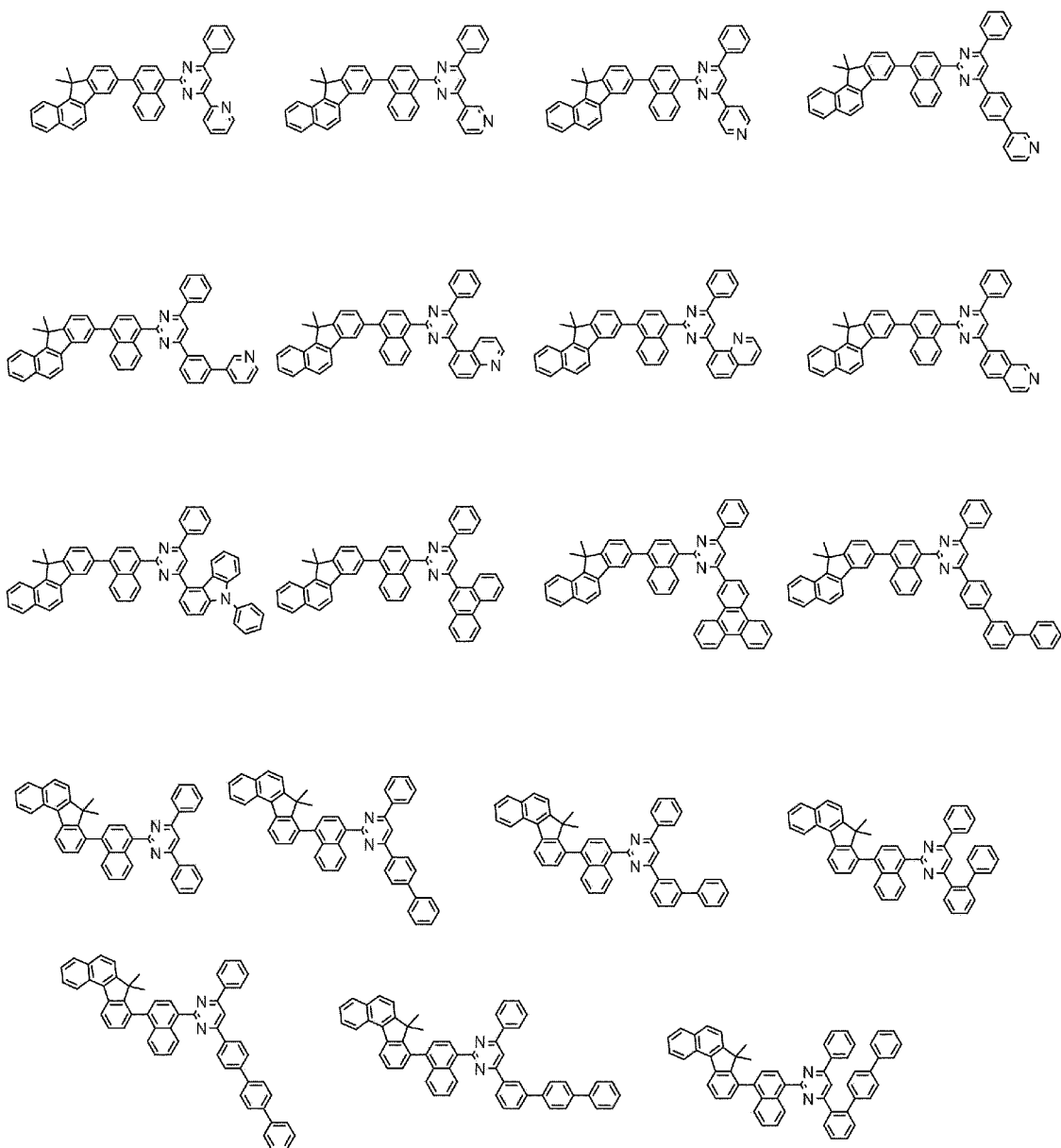
[0327]

[化192]



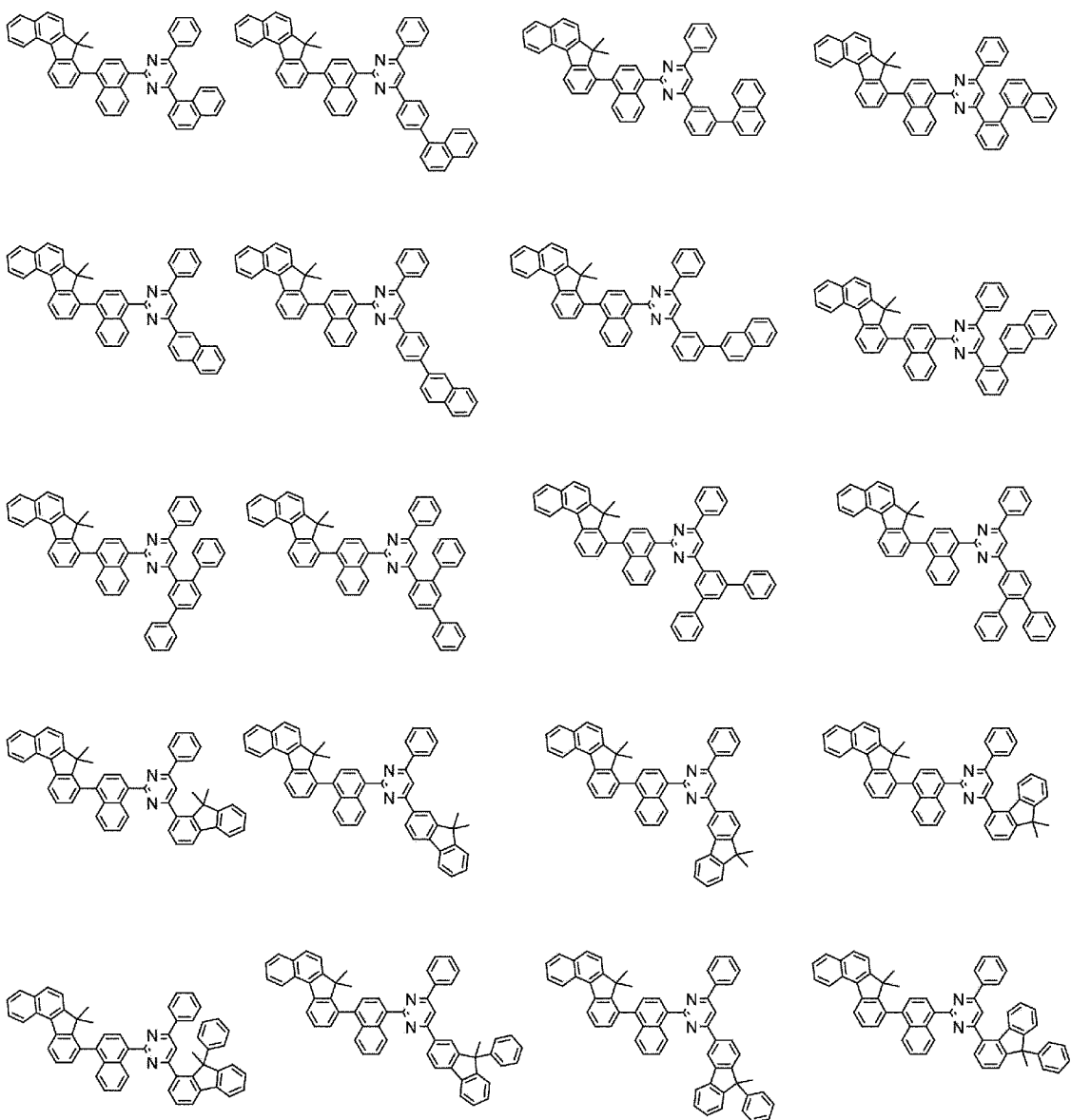
[0328]

[化193]



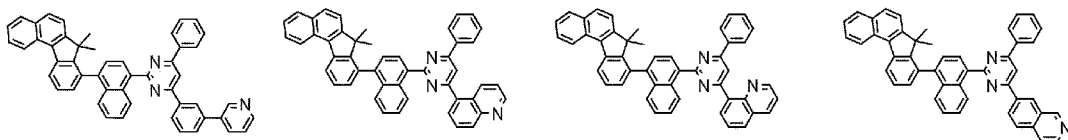
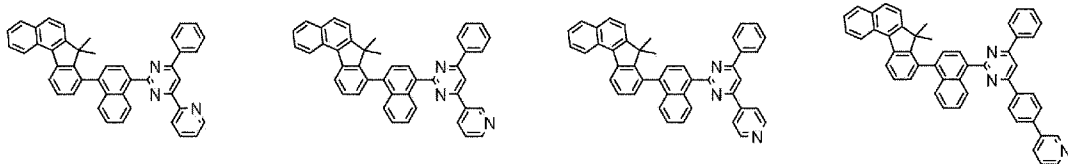
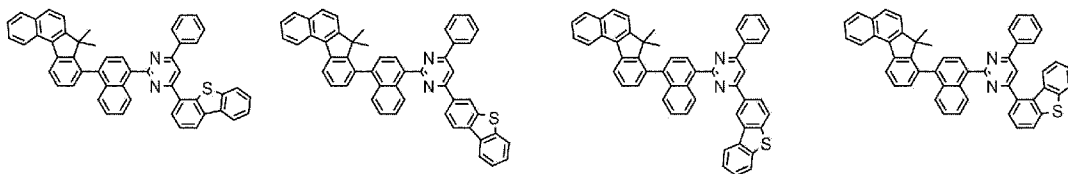
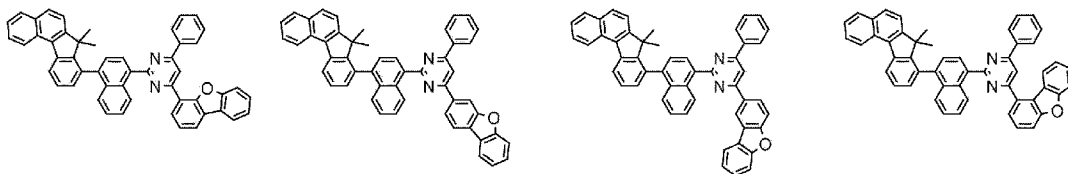
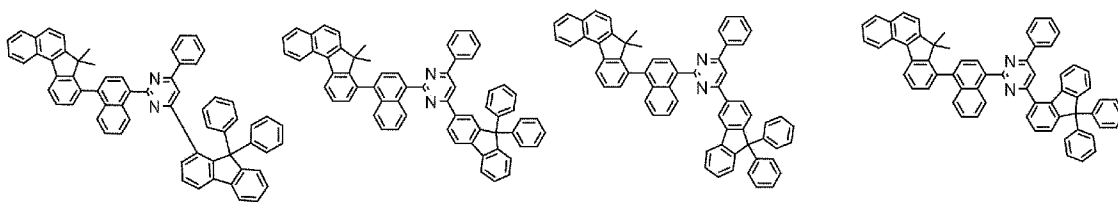
[0329]

[化194]



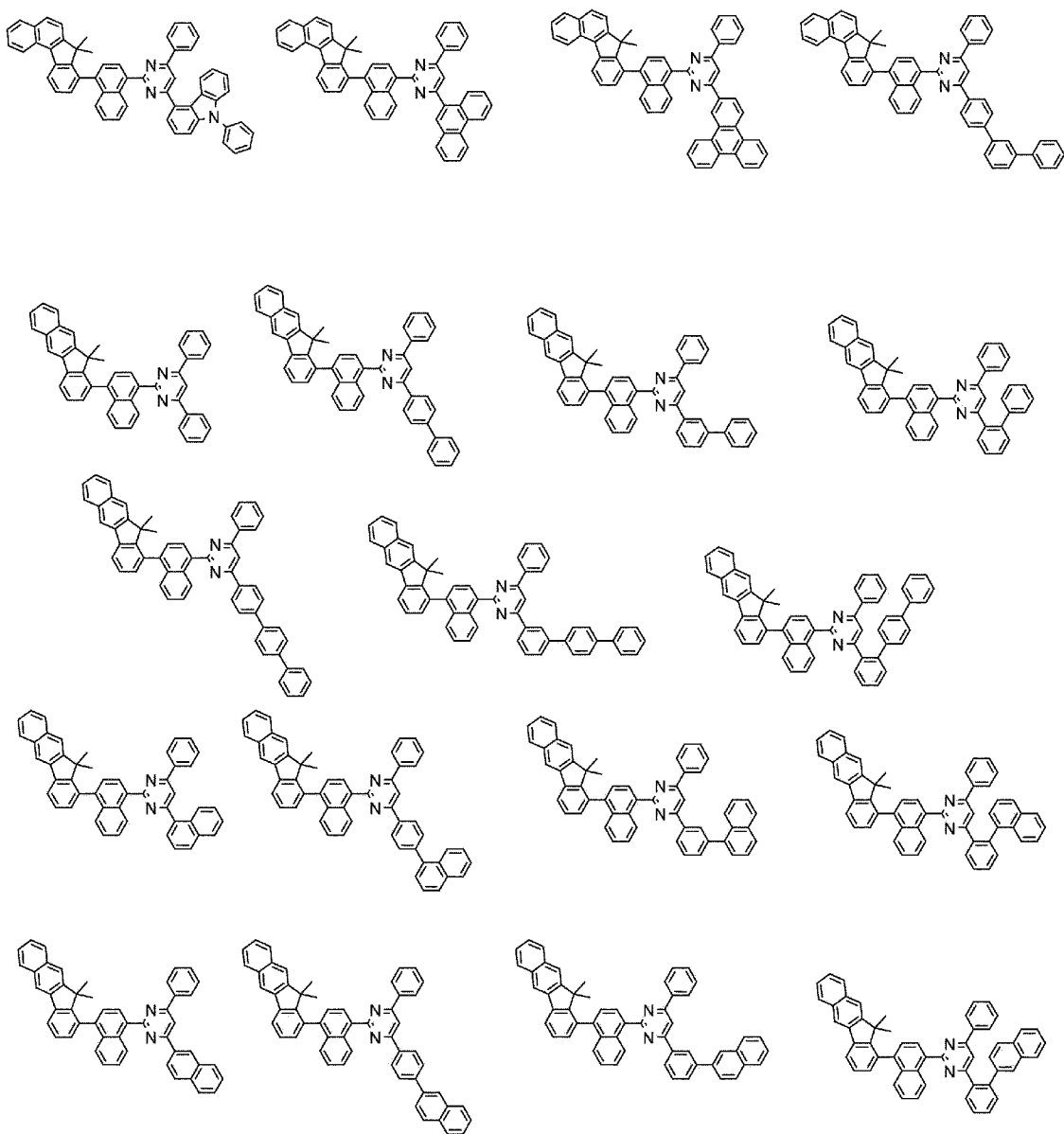
[0330]

[化195]



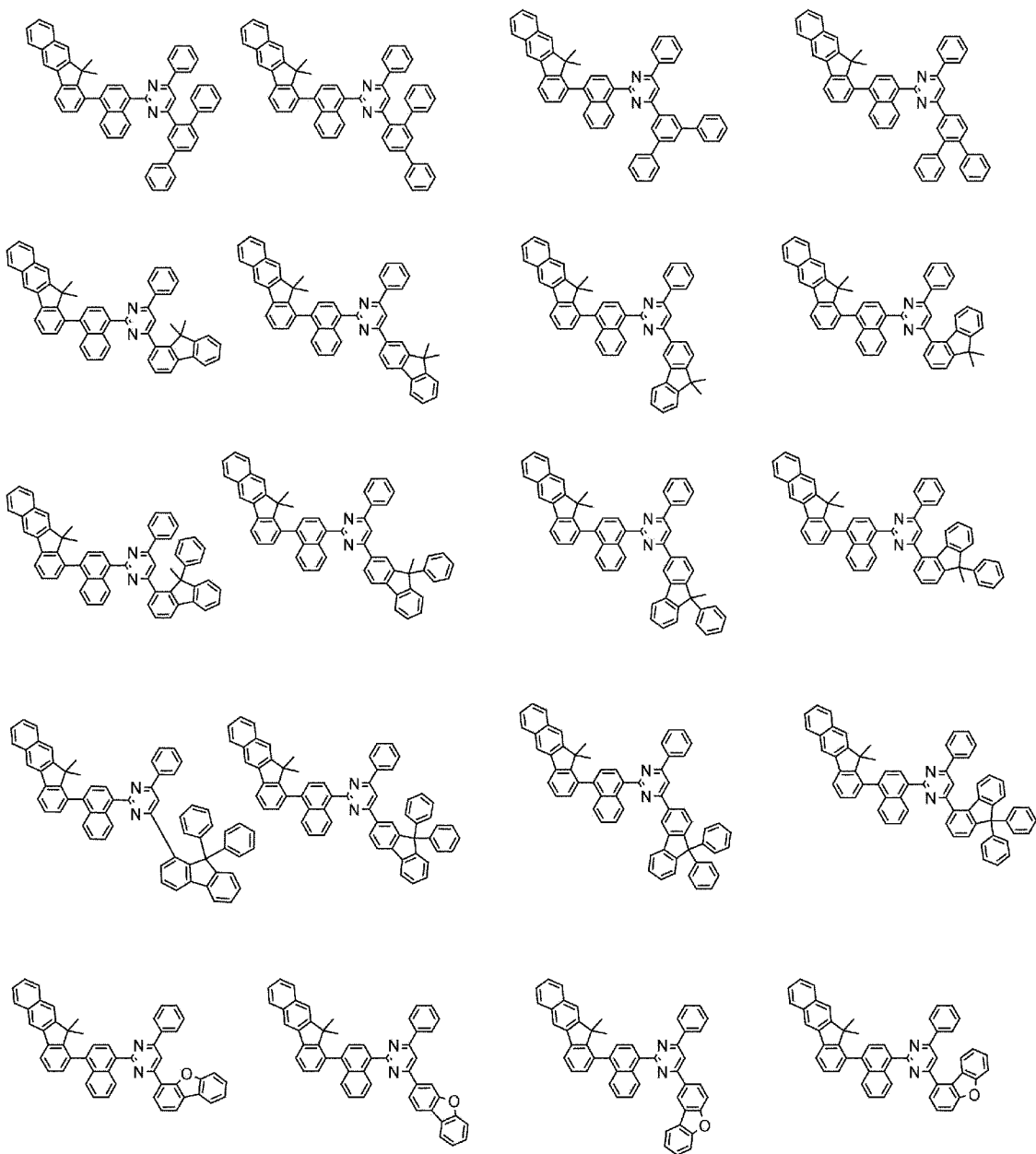
[0331]

[化196]



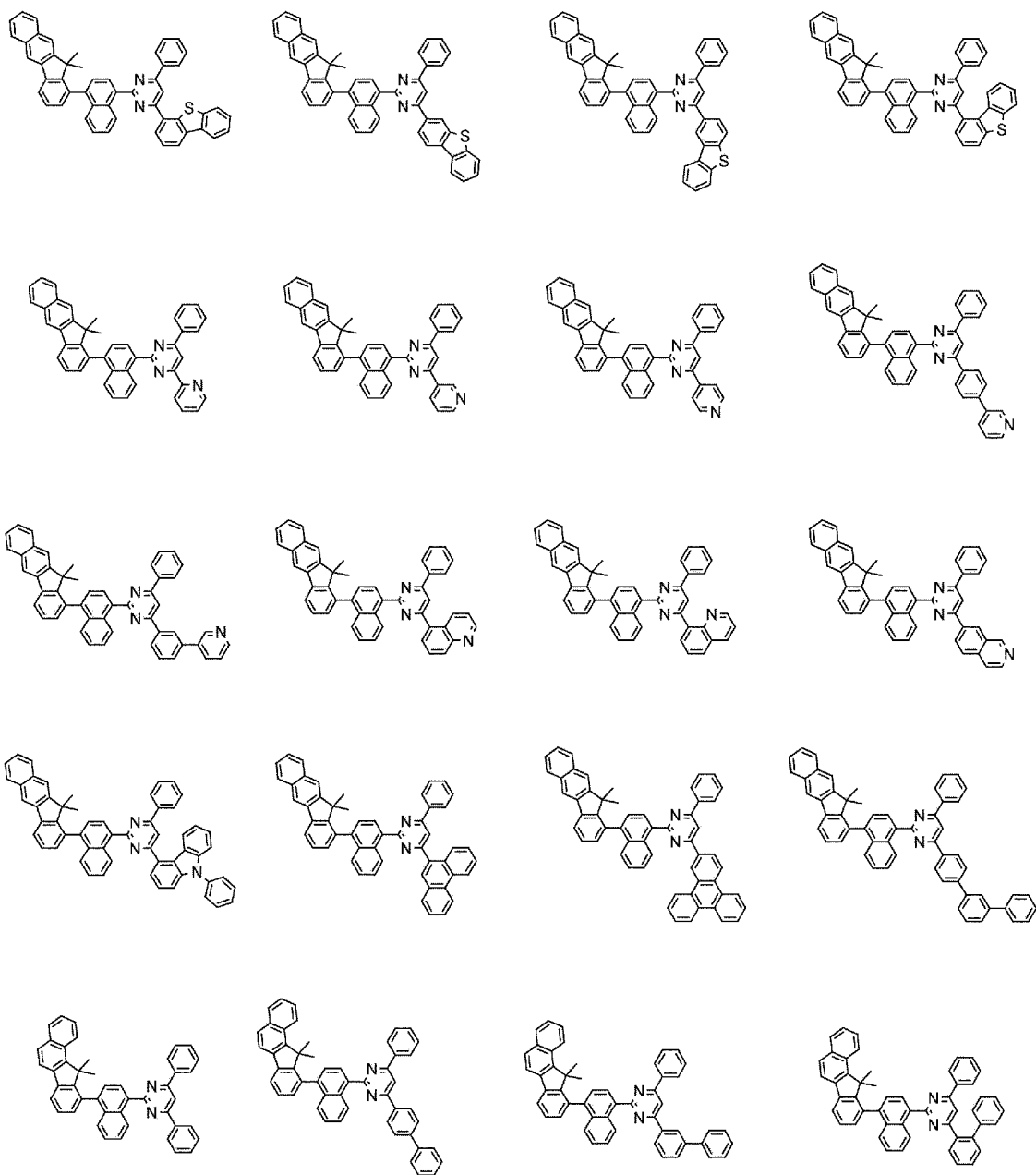
[0332]

[化197]



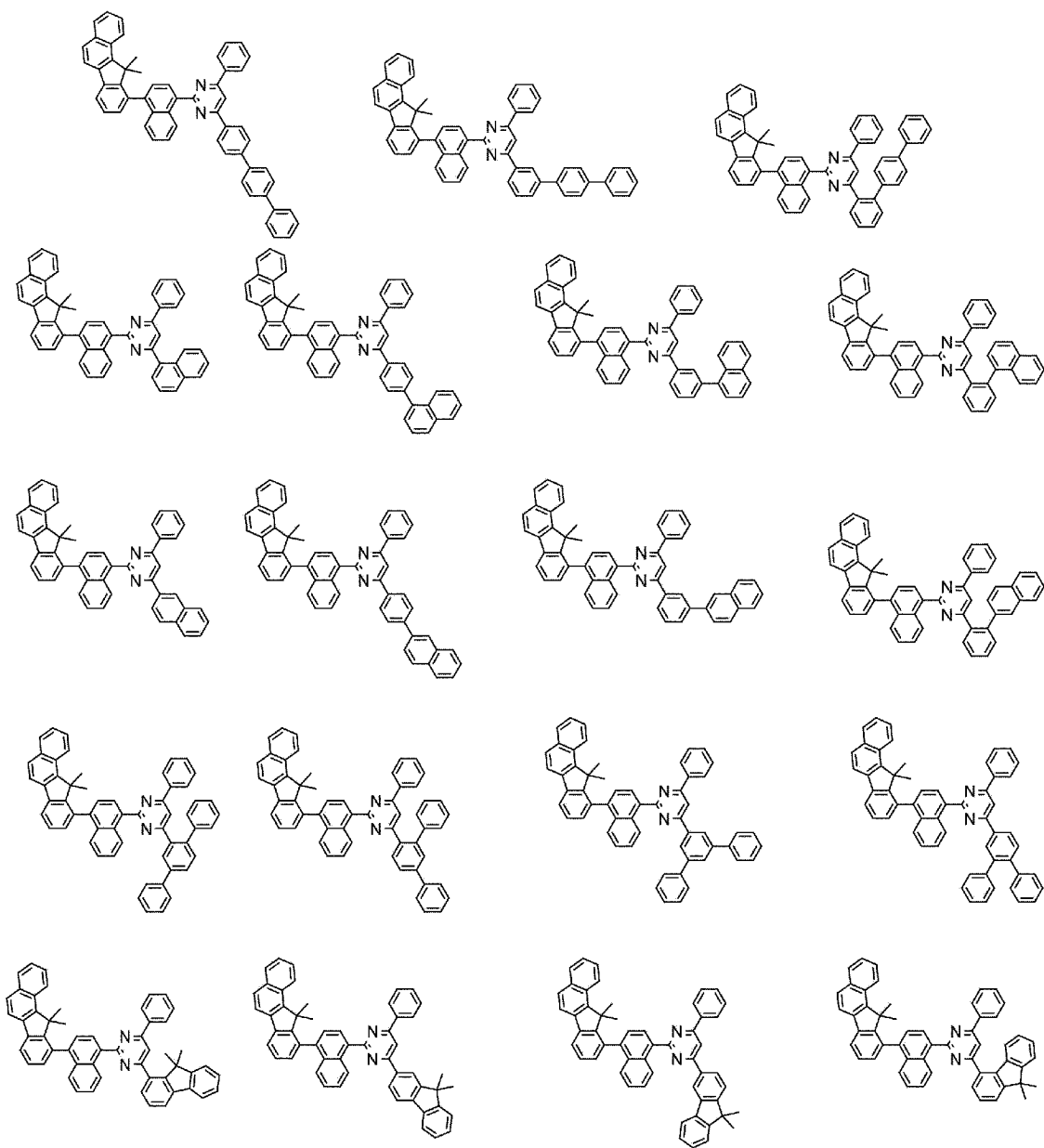
[0333]

[化198]



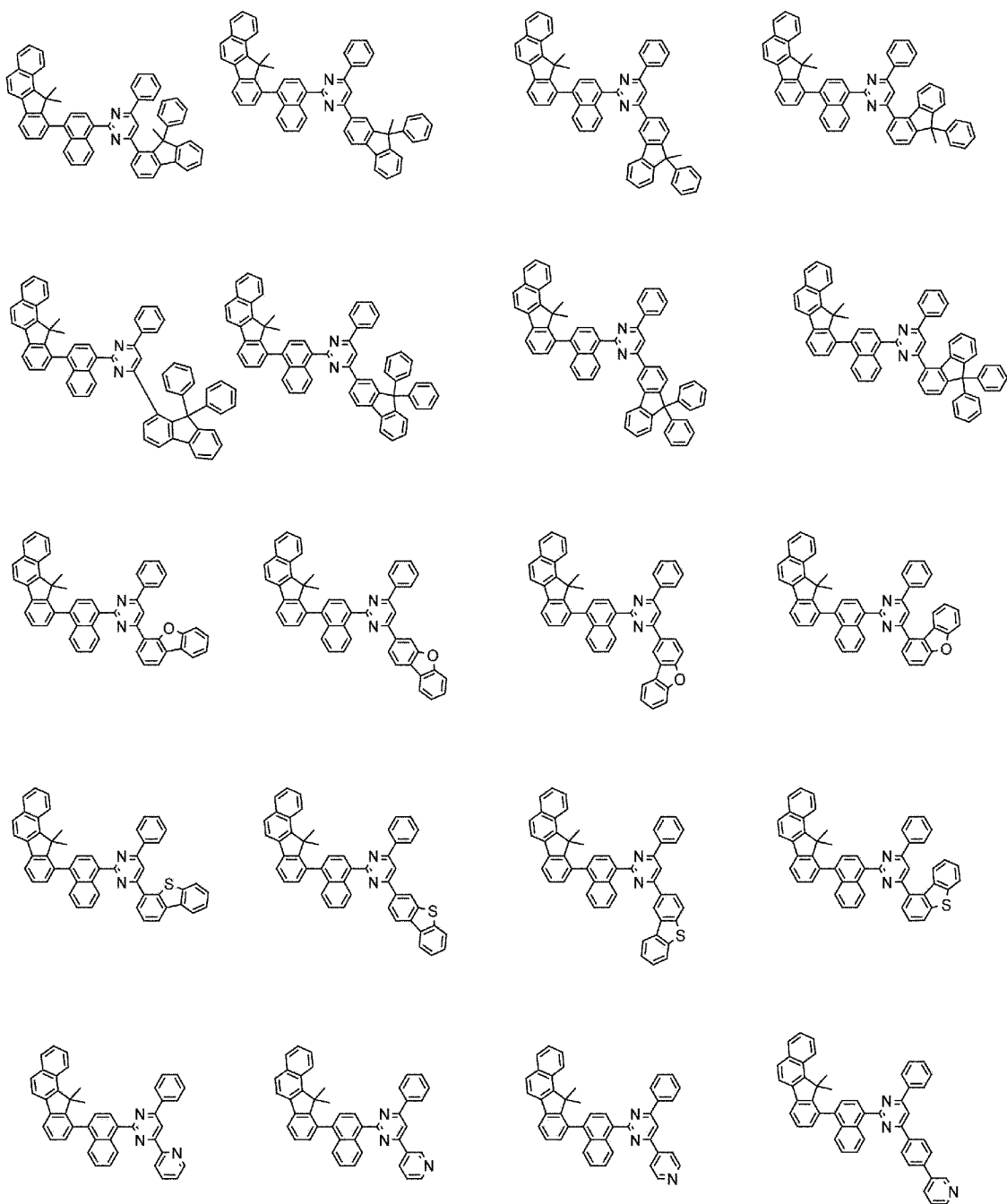
[0334]

[化199]



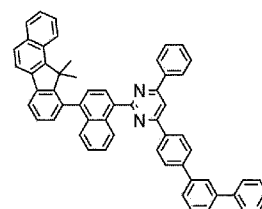
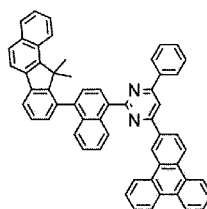
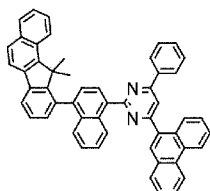
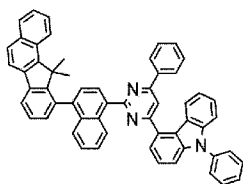
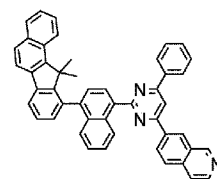
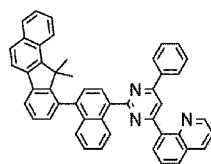
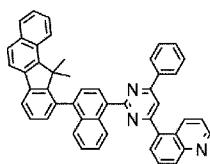
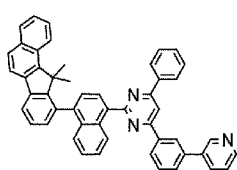
[0335]

[化200]



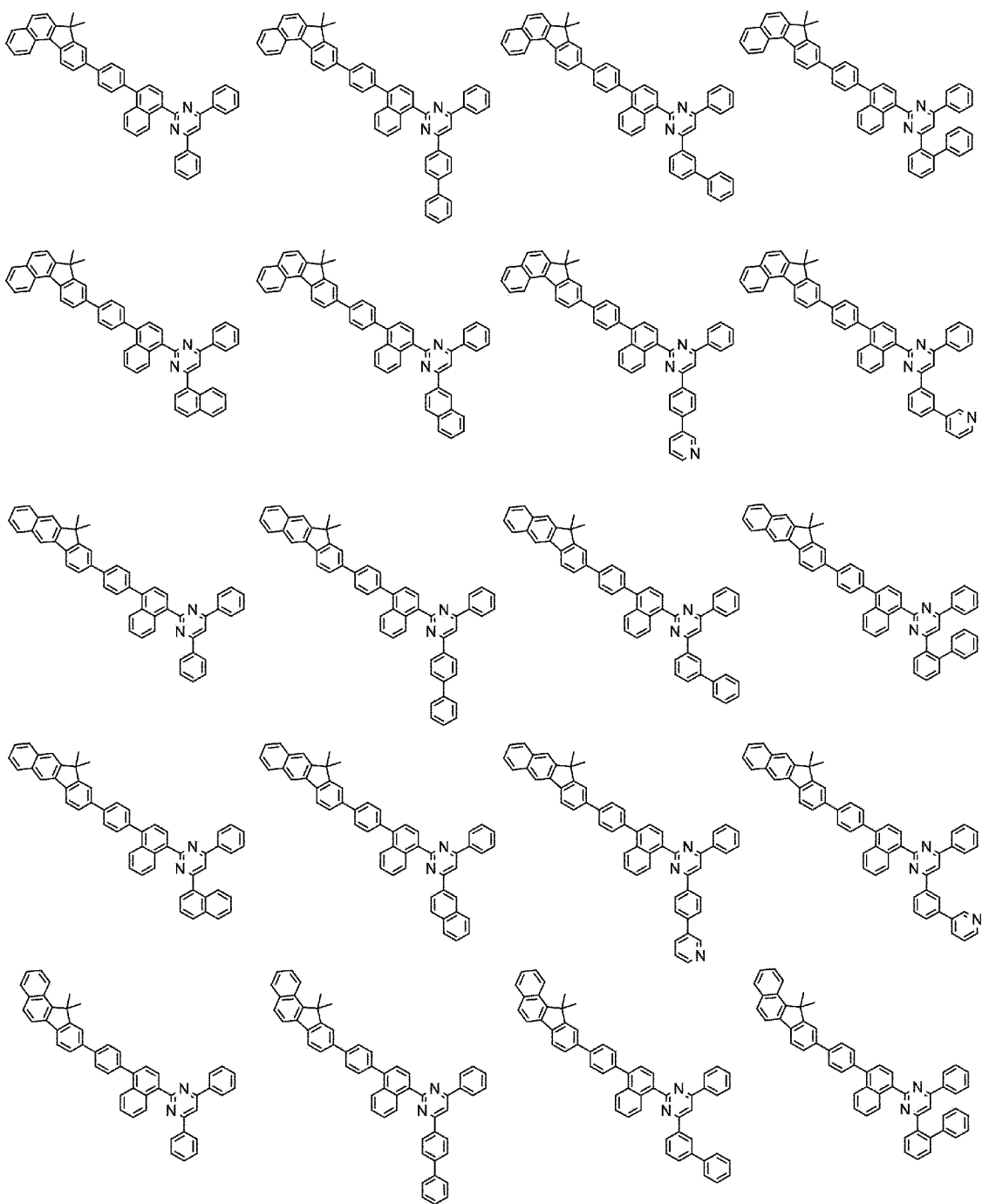
[0336]

[化201]



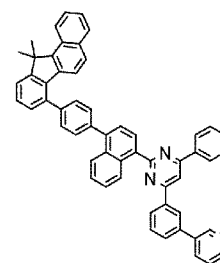
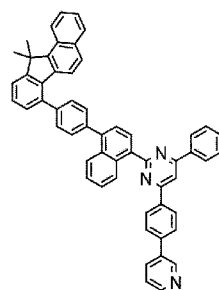
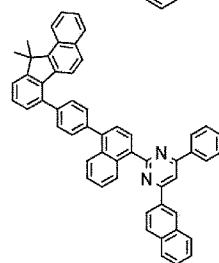
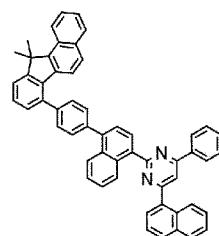
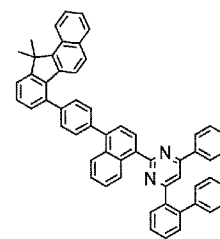
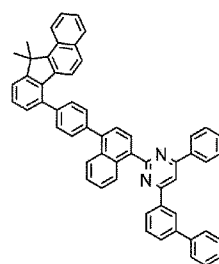
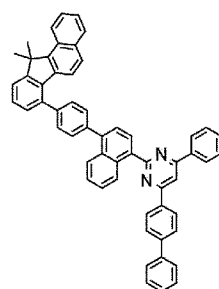
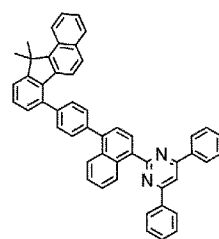
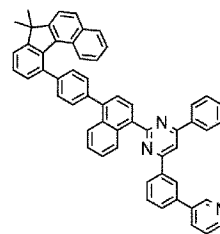
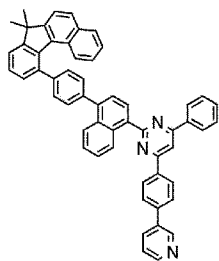
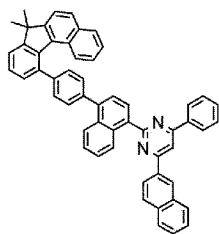
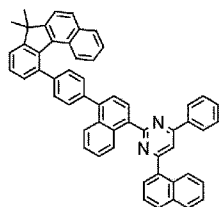
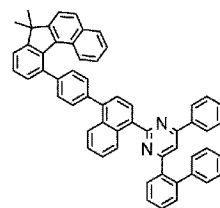
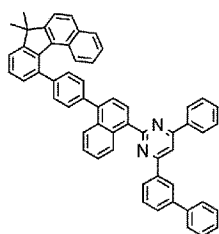
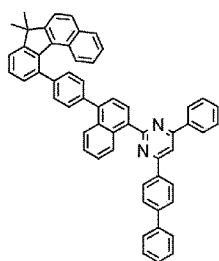
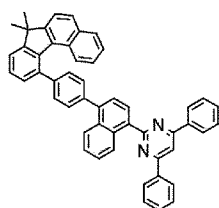
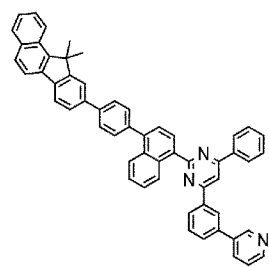
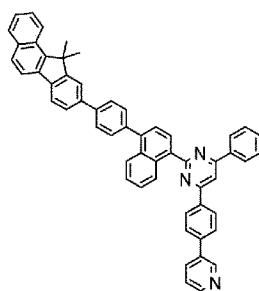
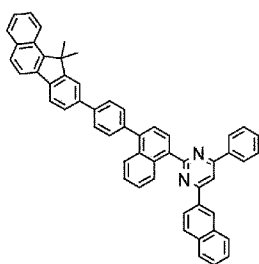
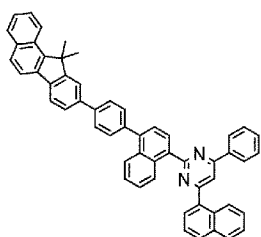
[0337]

[化202]



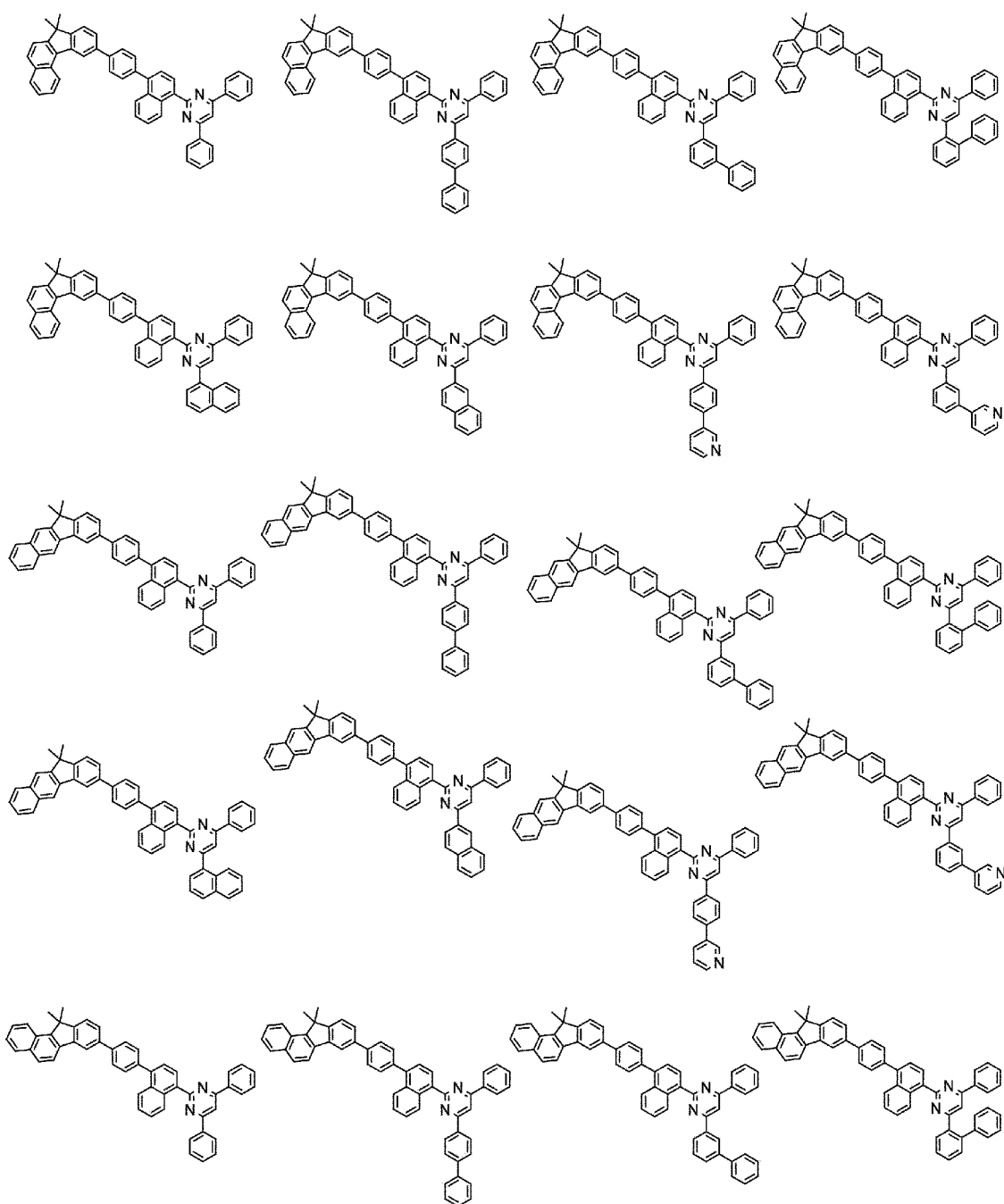
[0338]

[化203]



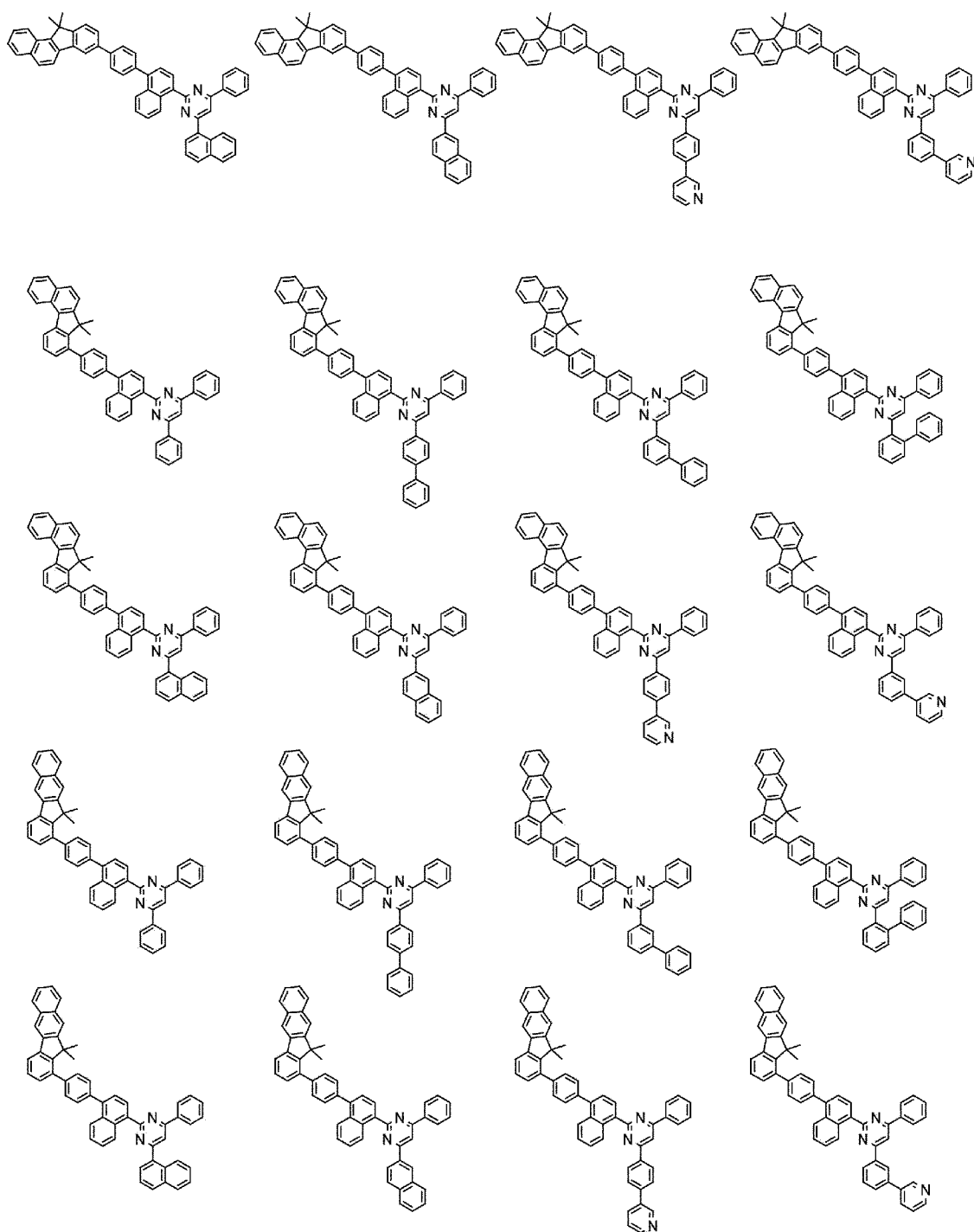
[0339]

[化204]



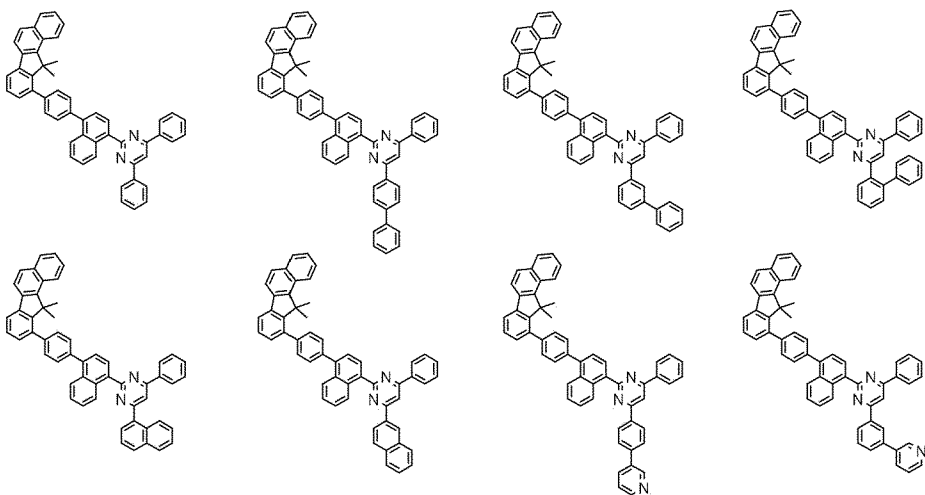
[0340]

[化205]

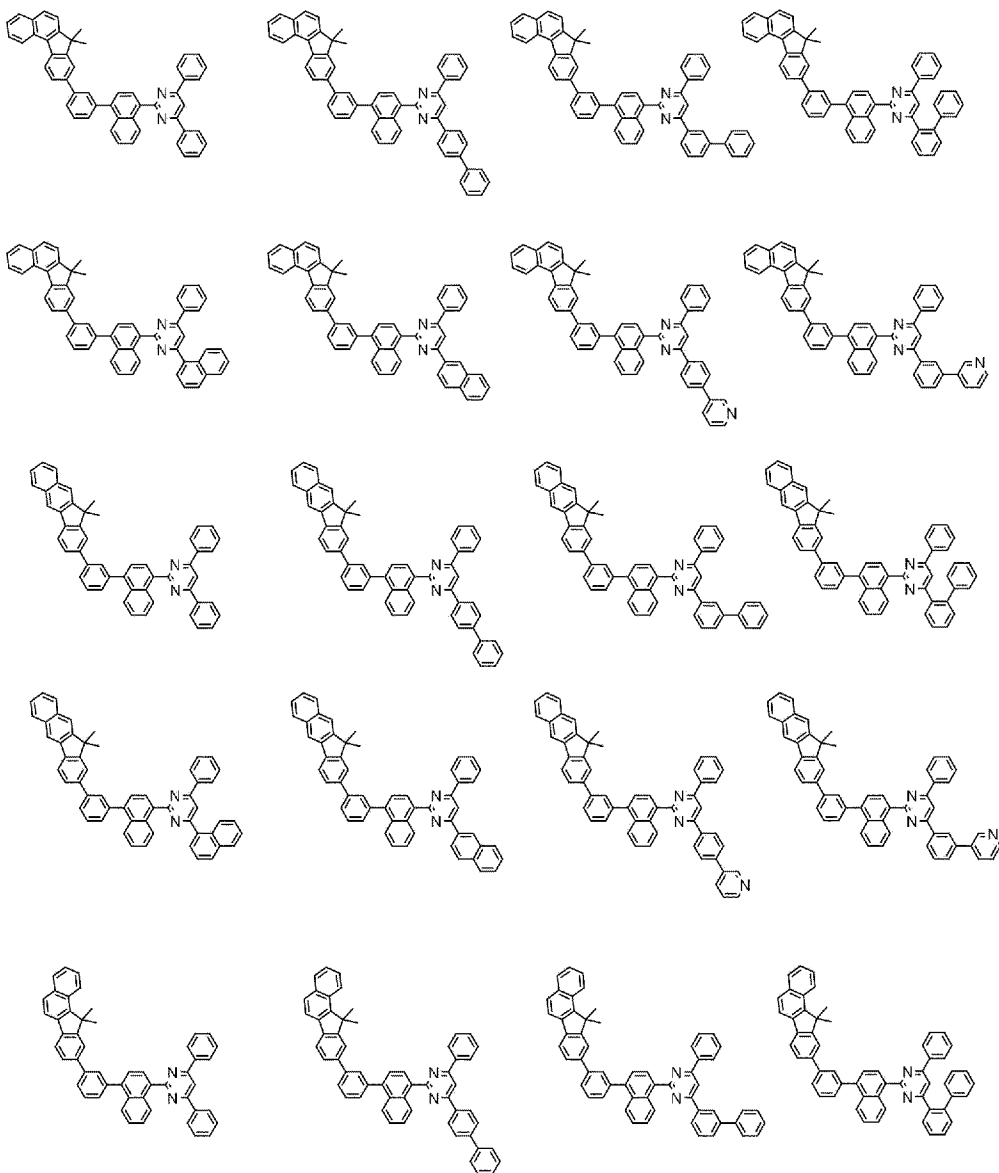


[0341]

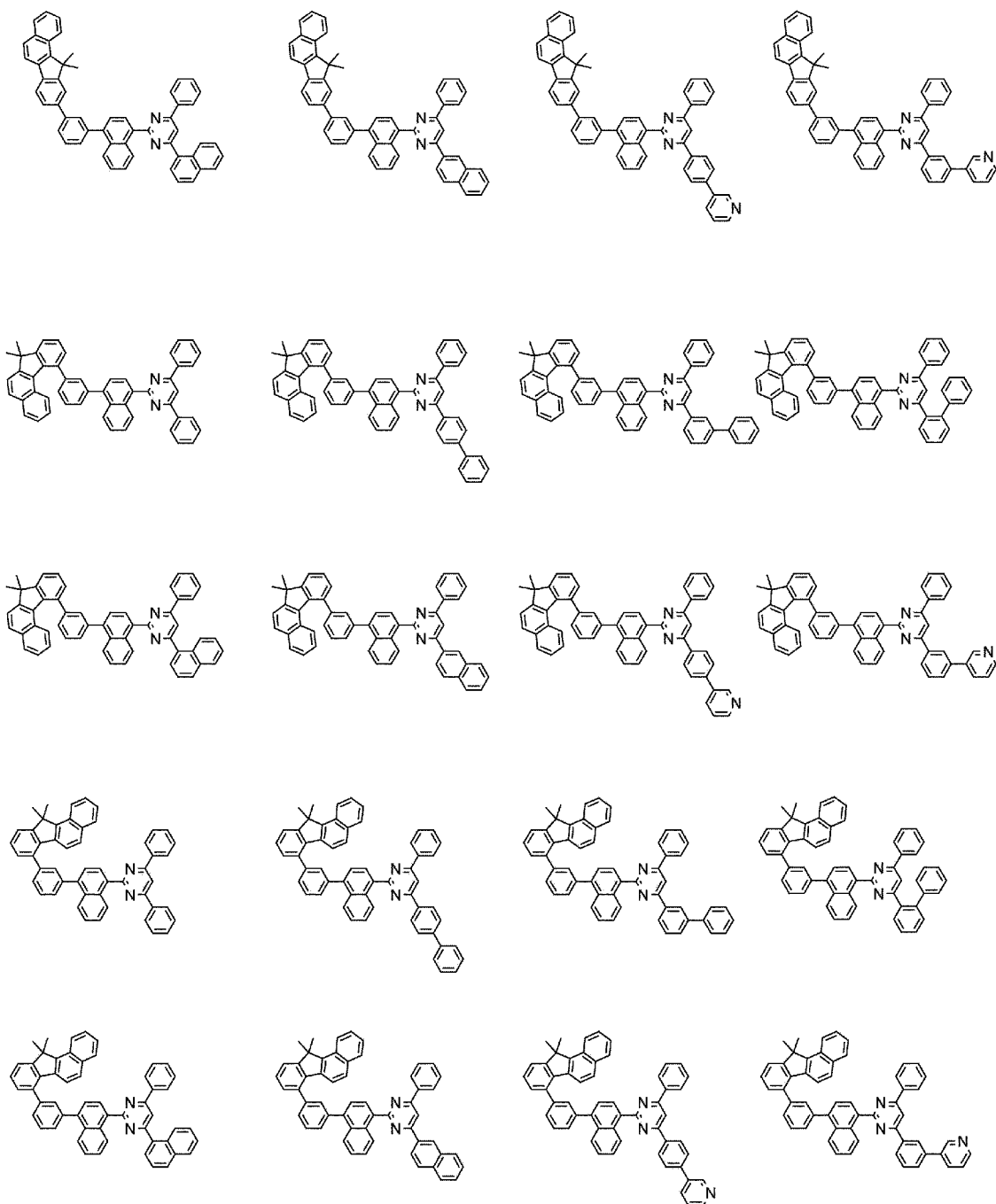
[化206]



[0342] [化207]

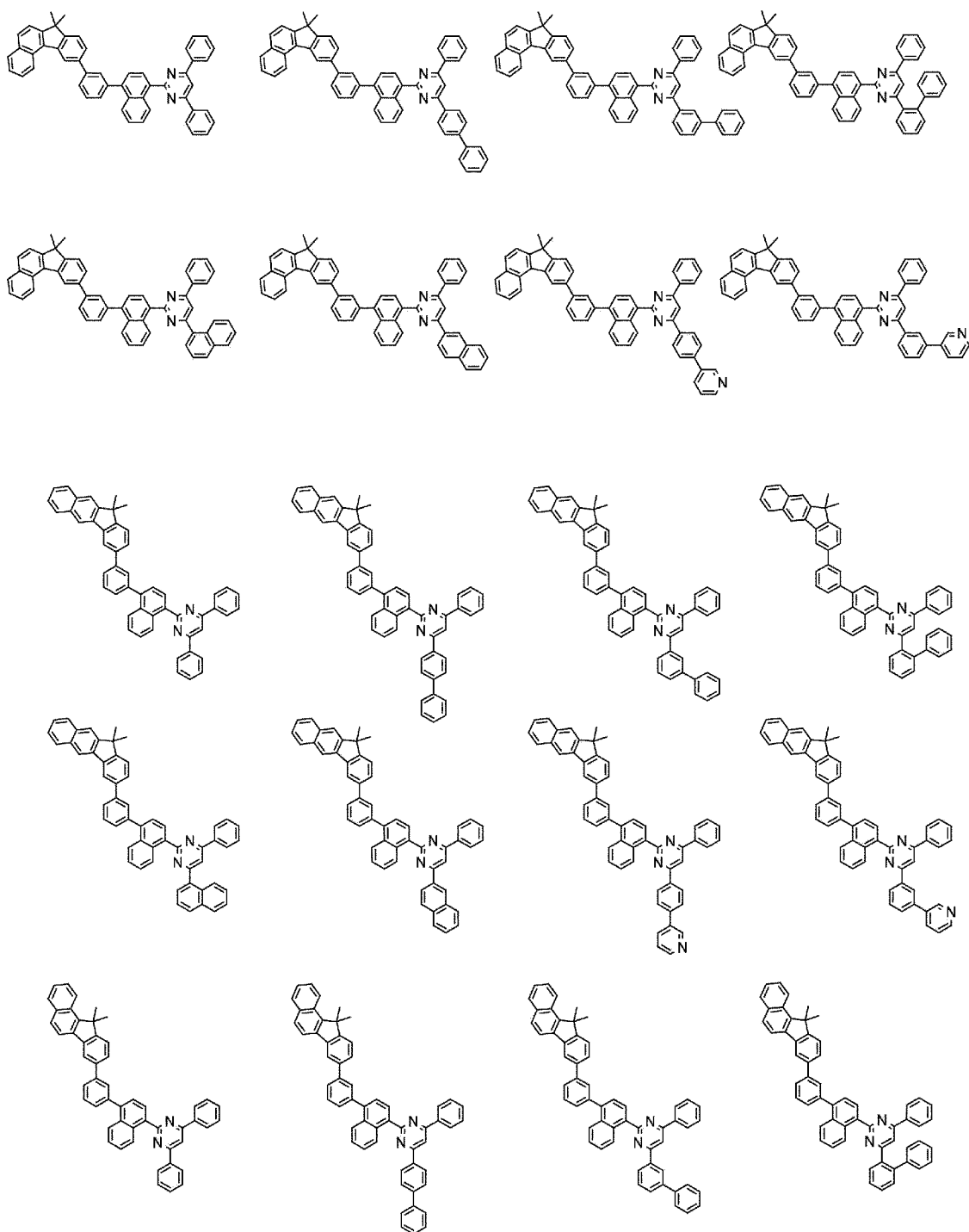


[0343] [化208]



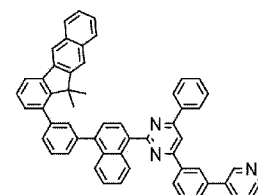
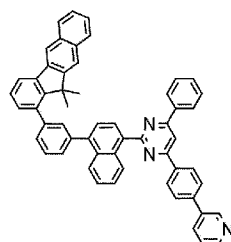
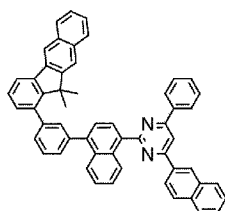
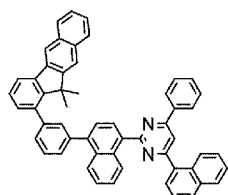
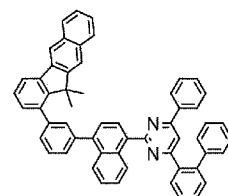
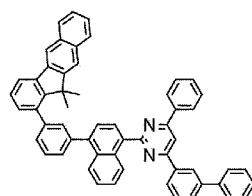
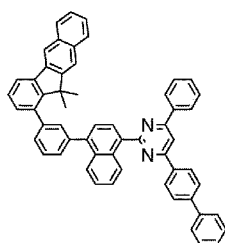
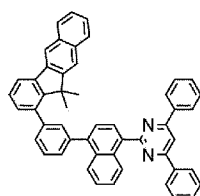
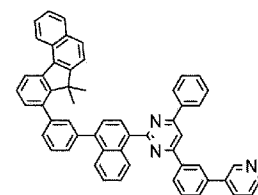
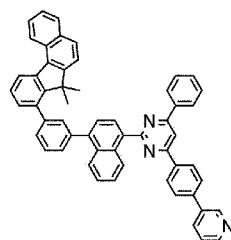
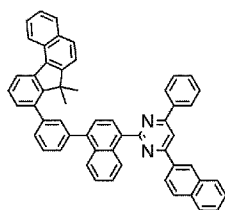
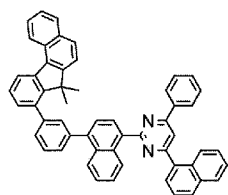
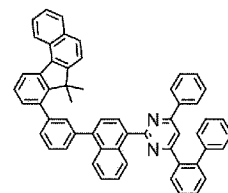
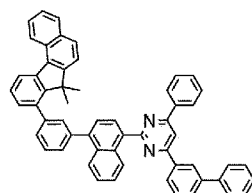
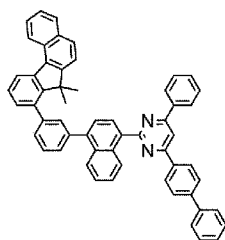
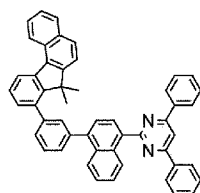
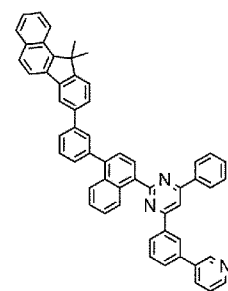
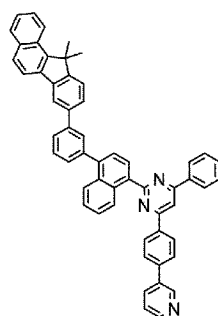
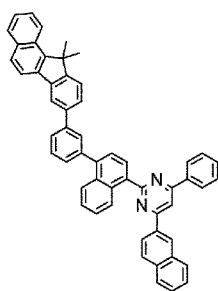
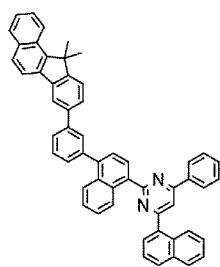
[0344]

[化209]



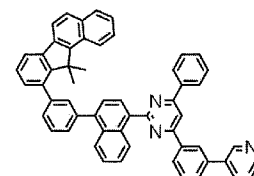
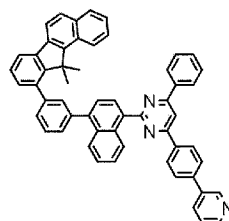
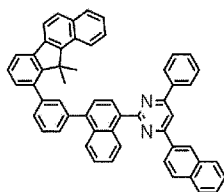
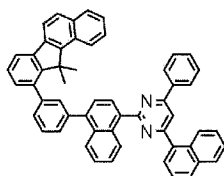
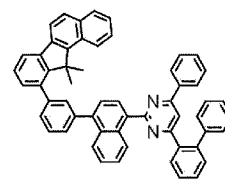
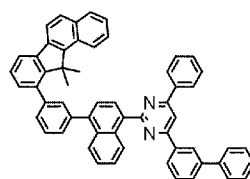
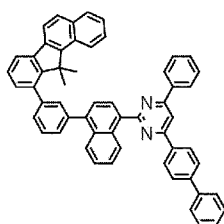
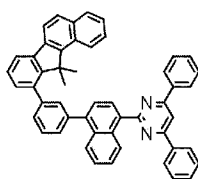
[0345]

[化210]



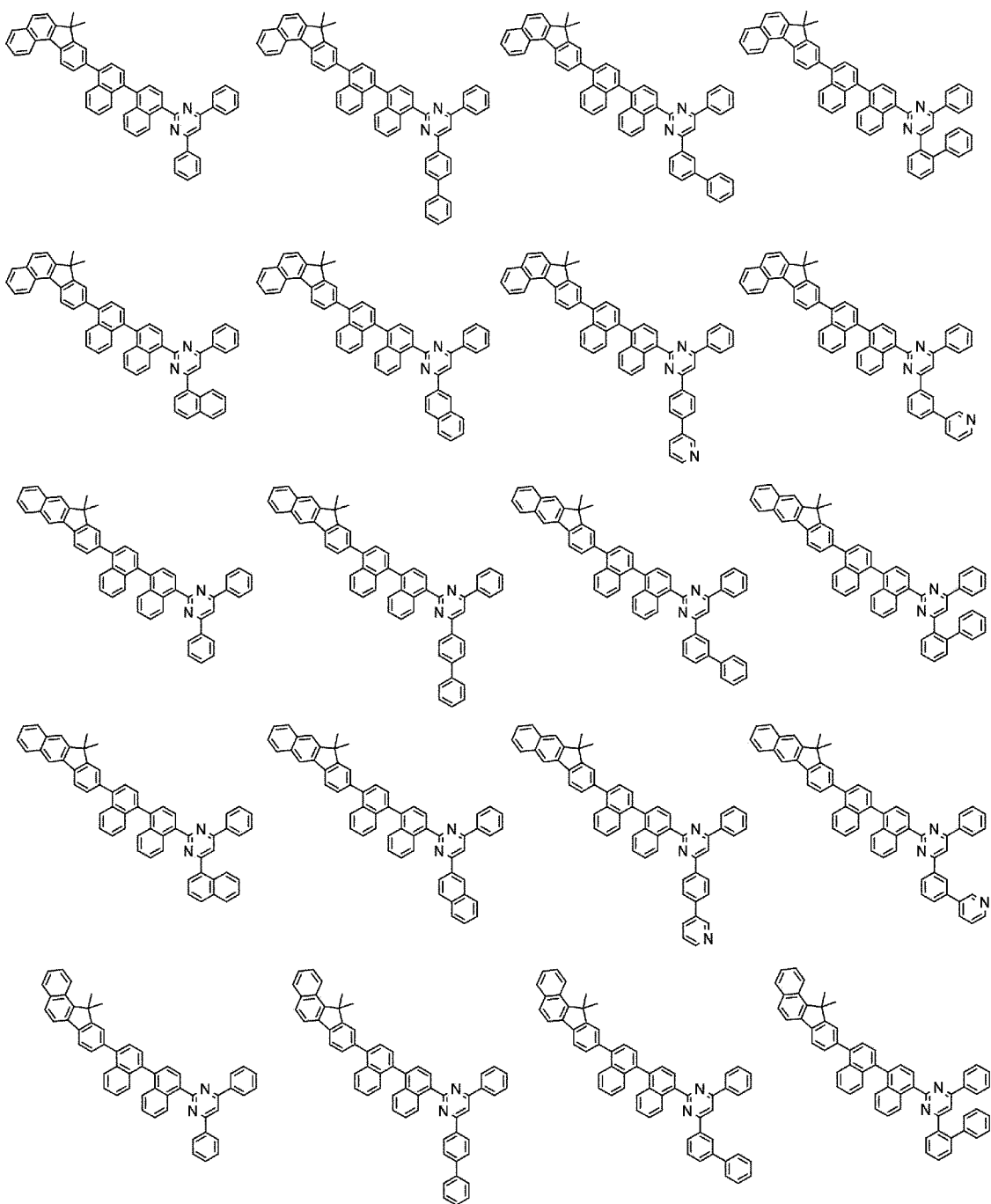
[0346]

[化211]



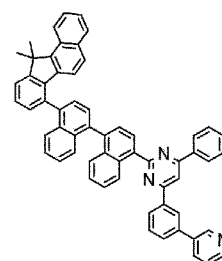
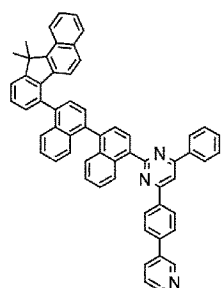
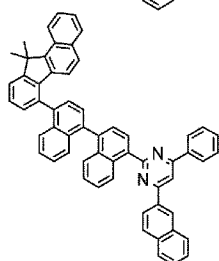
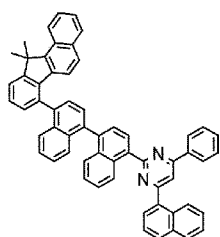
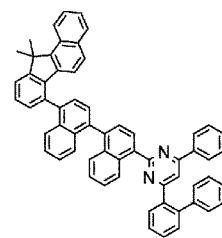
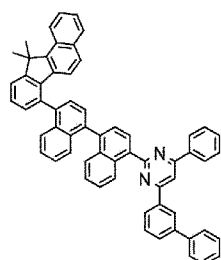
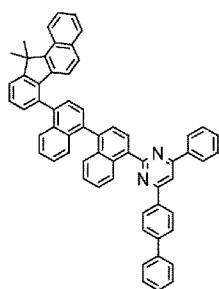
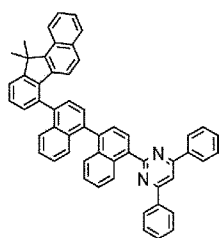
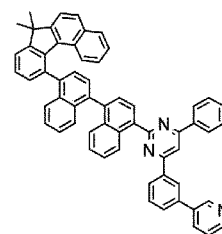
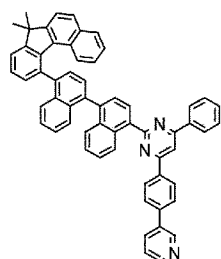
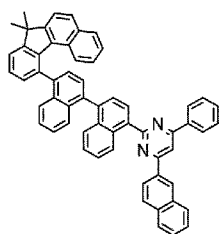
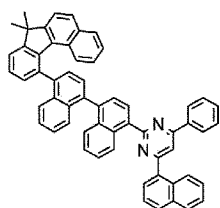
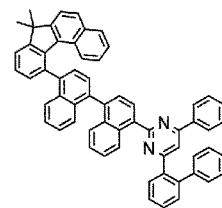
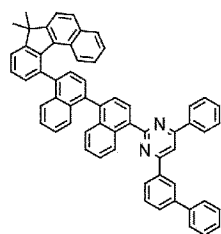
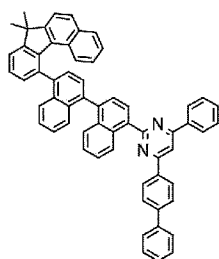
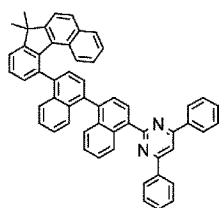
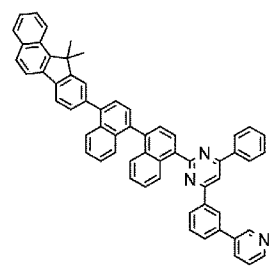
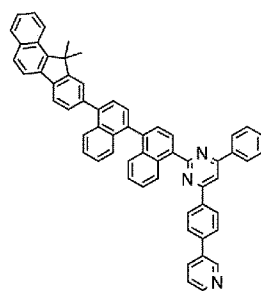
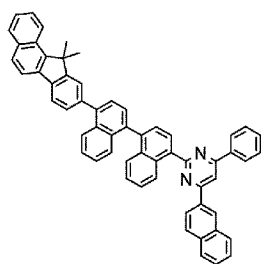
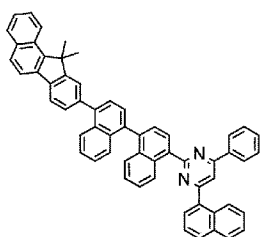
[0347]

[化212]



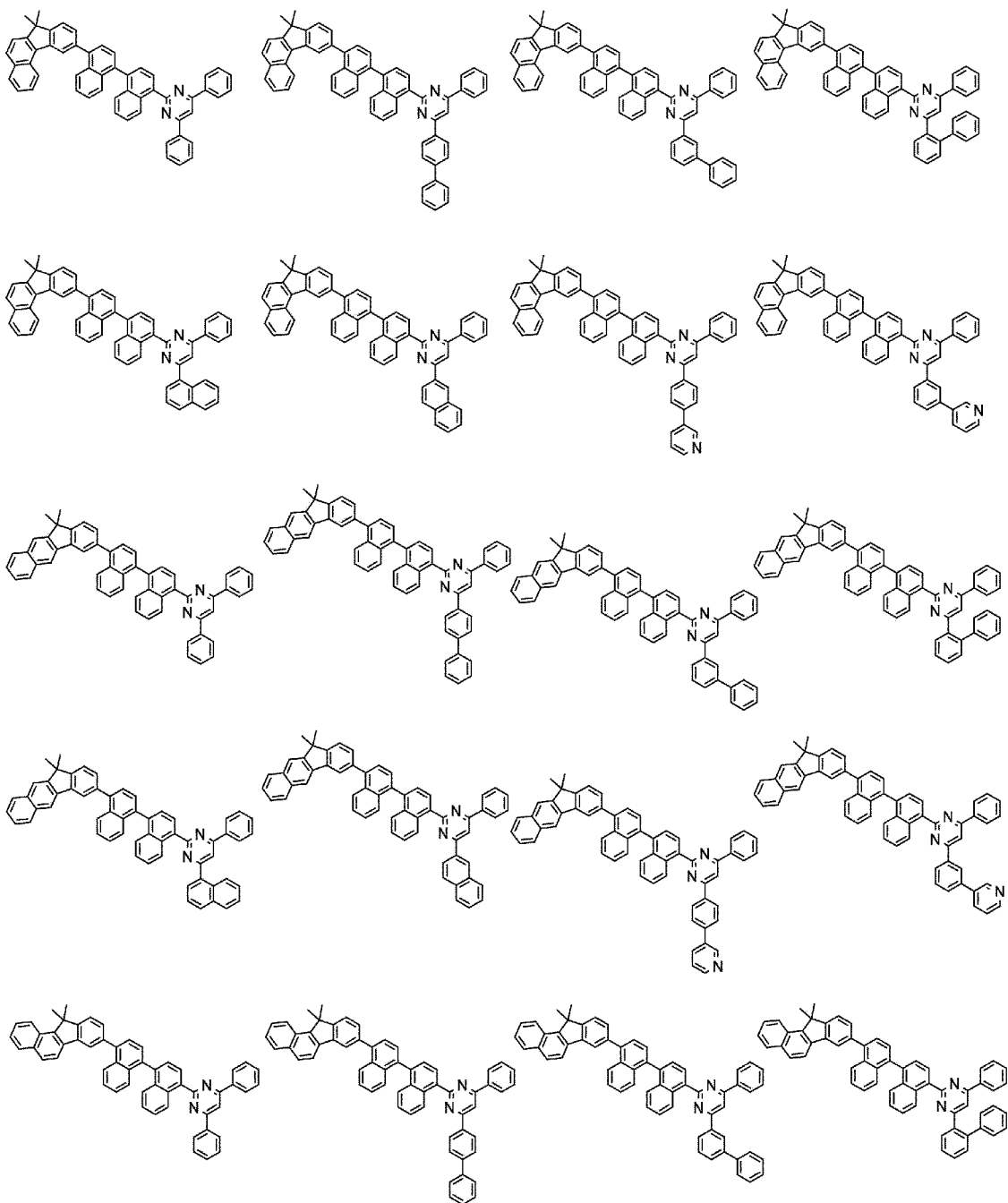
[0348]

[化213]



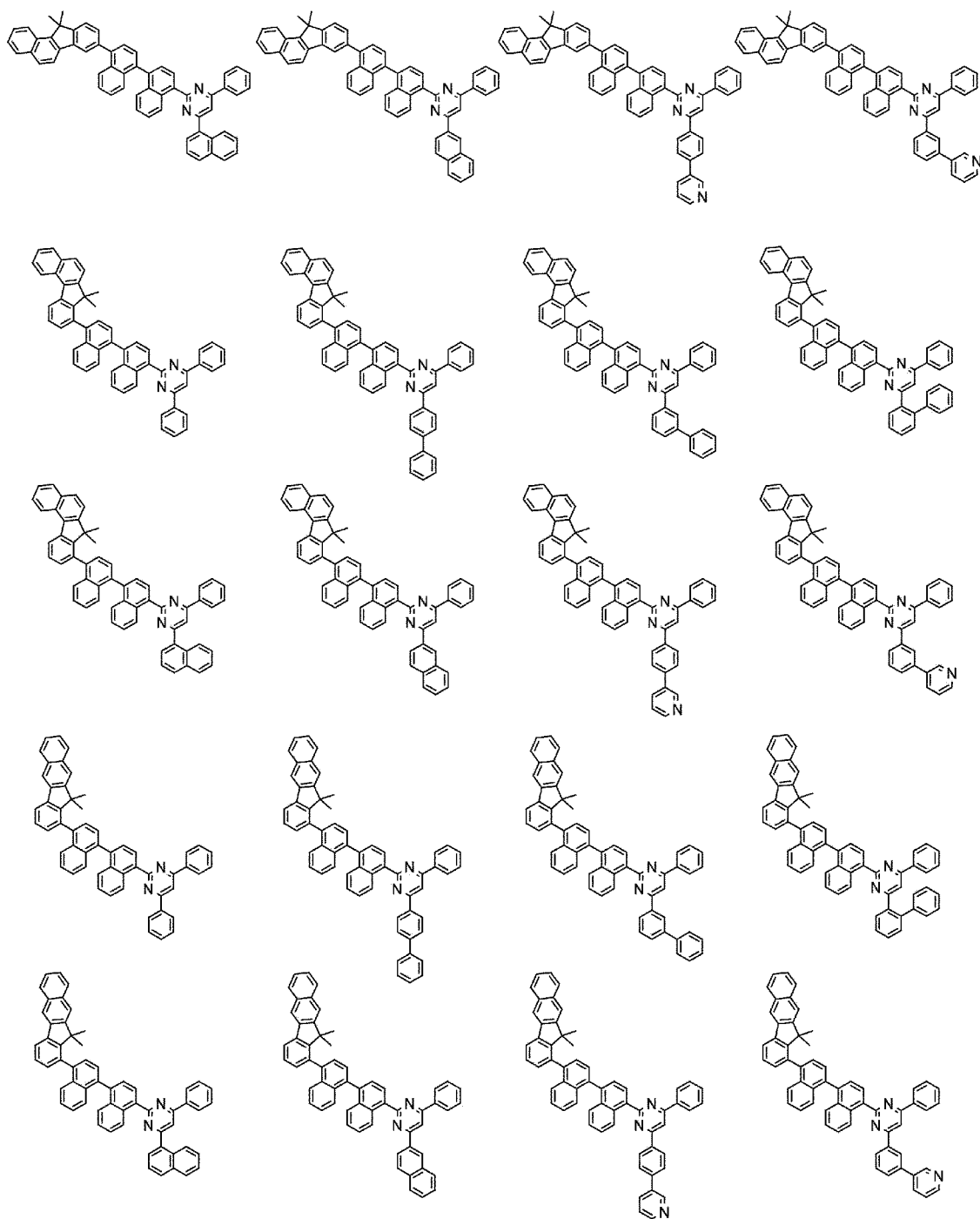
[0349]

[化214]



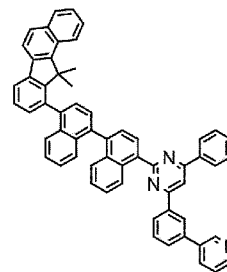
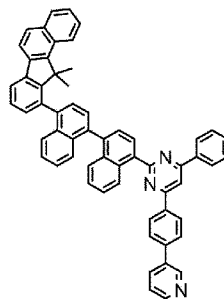
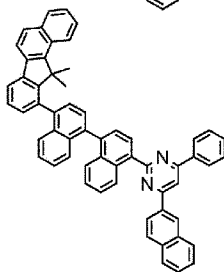
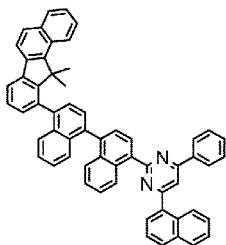
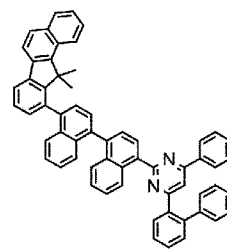
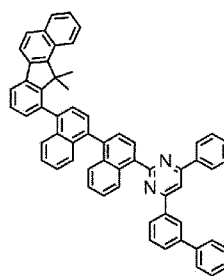
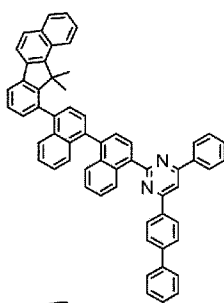
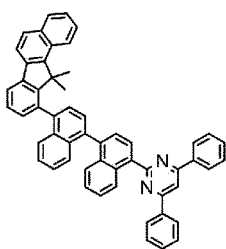
[0350]

[化215]



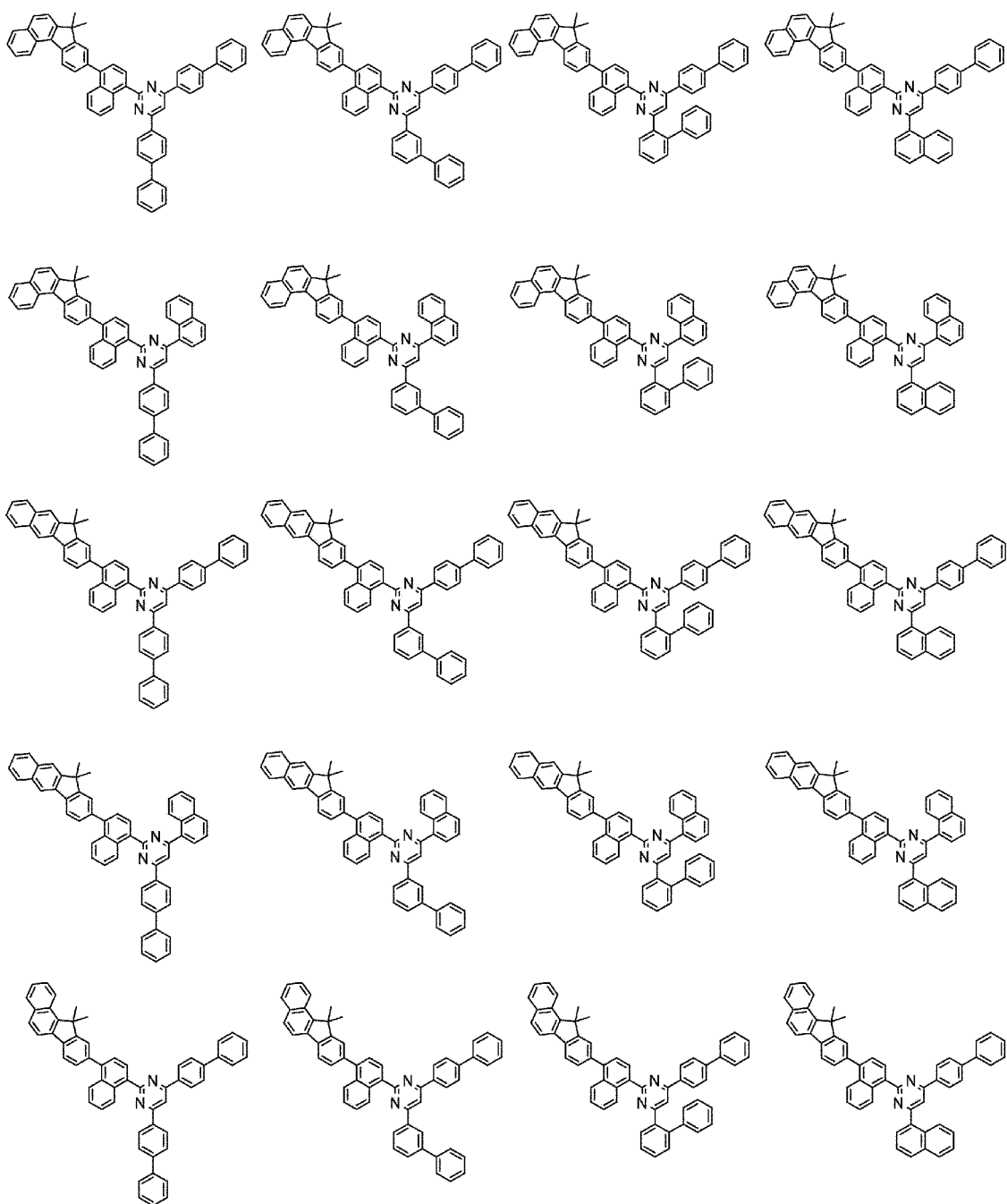
[0351]

[化216]



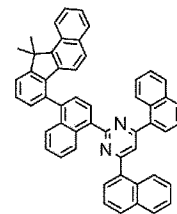
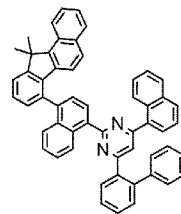
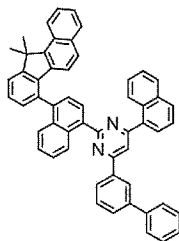
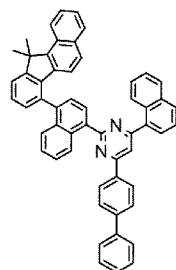
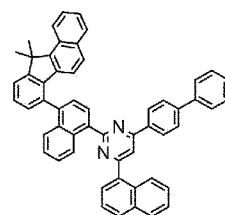
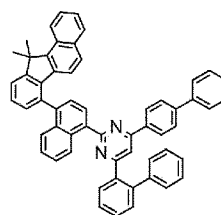
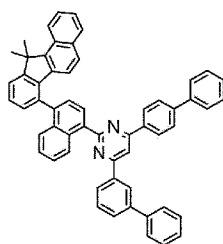
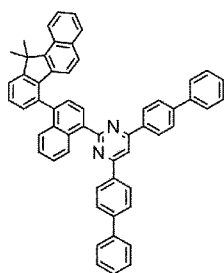
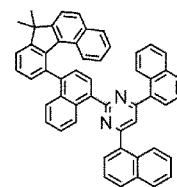
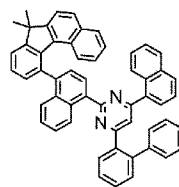
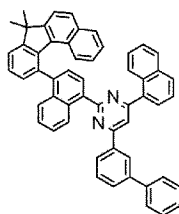
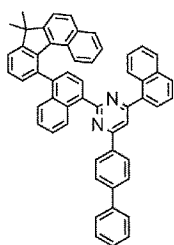
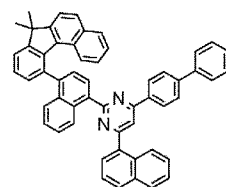
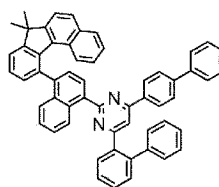
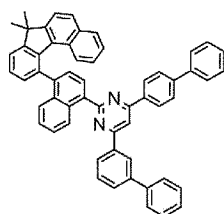
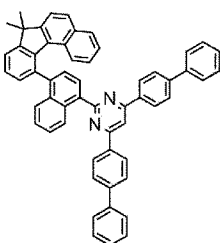
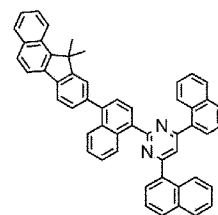
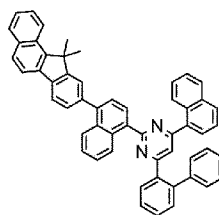
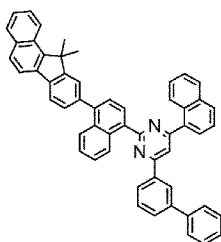
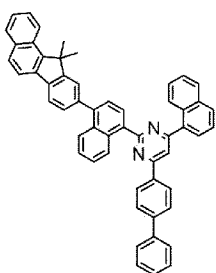
[0352]

[化217]



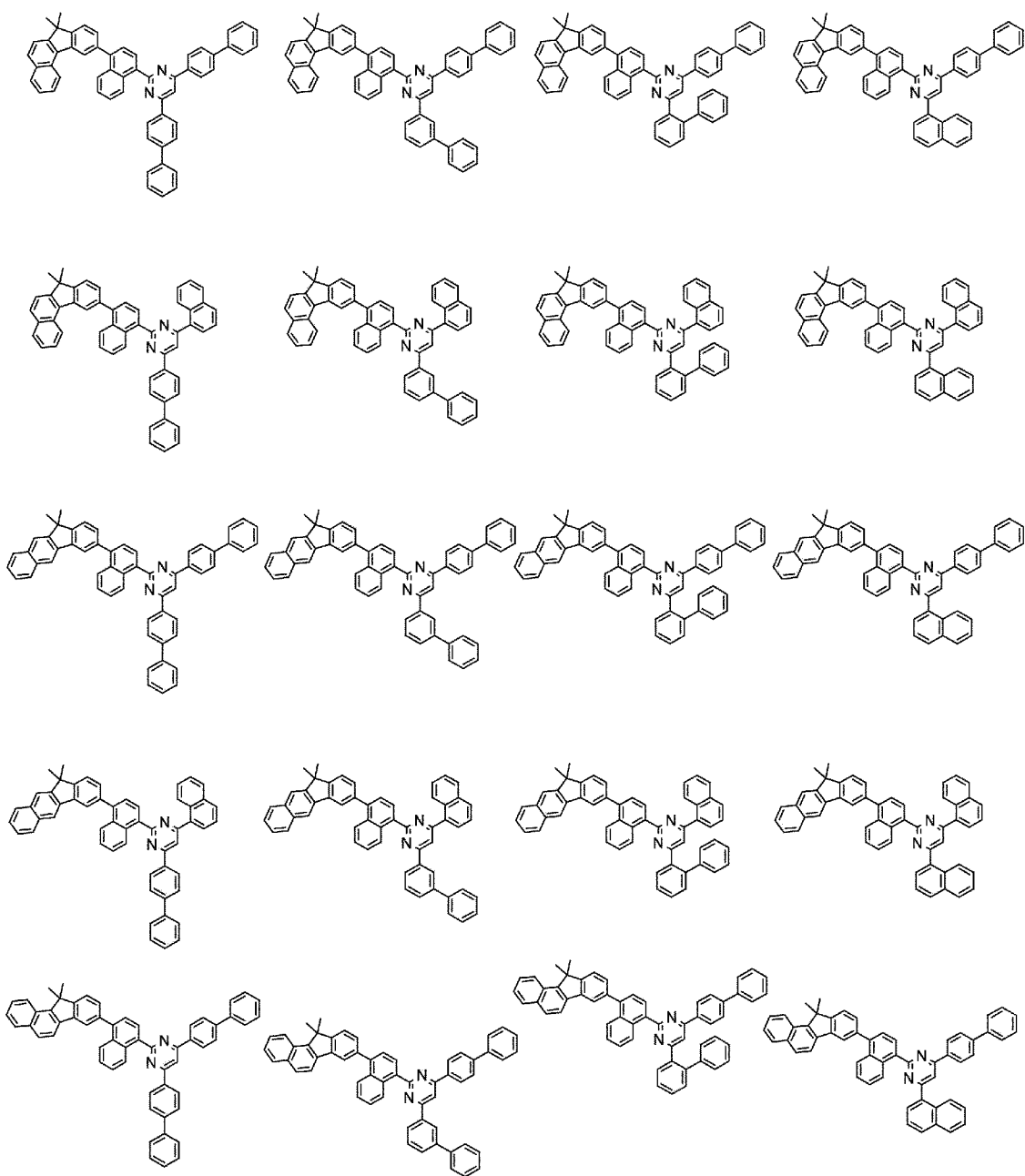
[0353]

[化218]



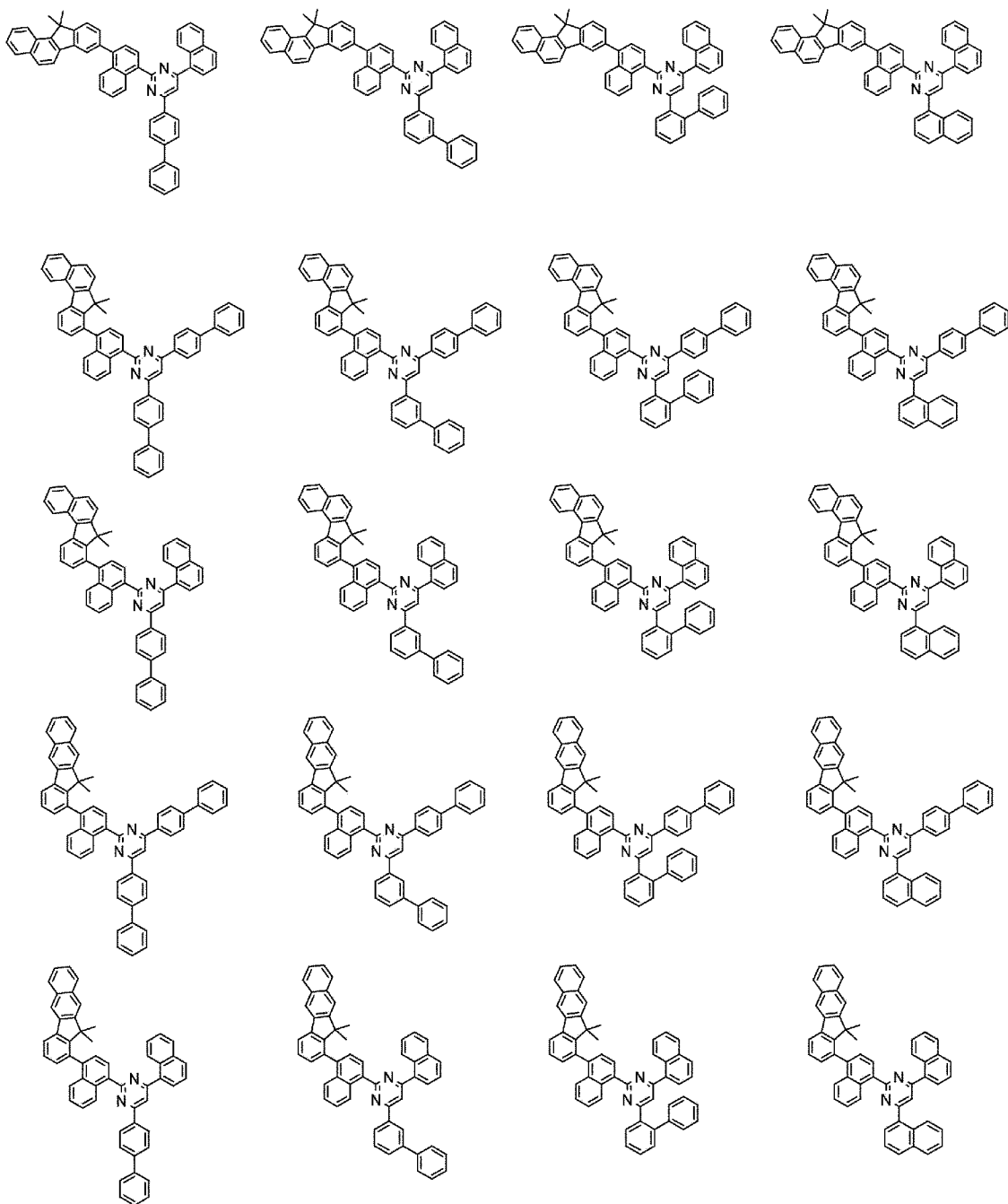
[0354]

[化219]



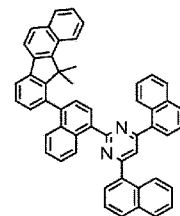
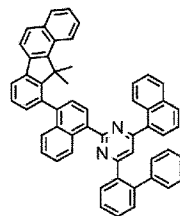
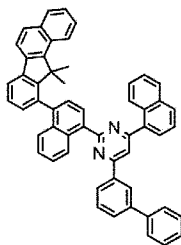
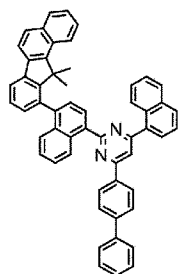
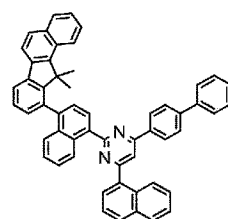
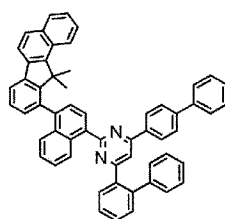
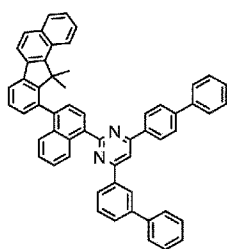
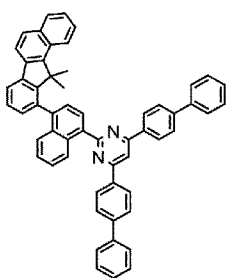
[0355]

[化220]



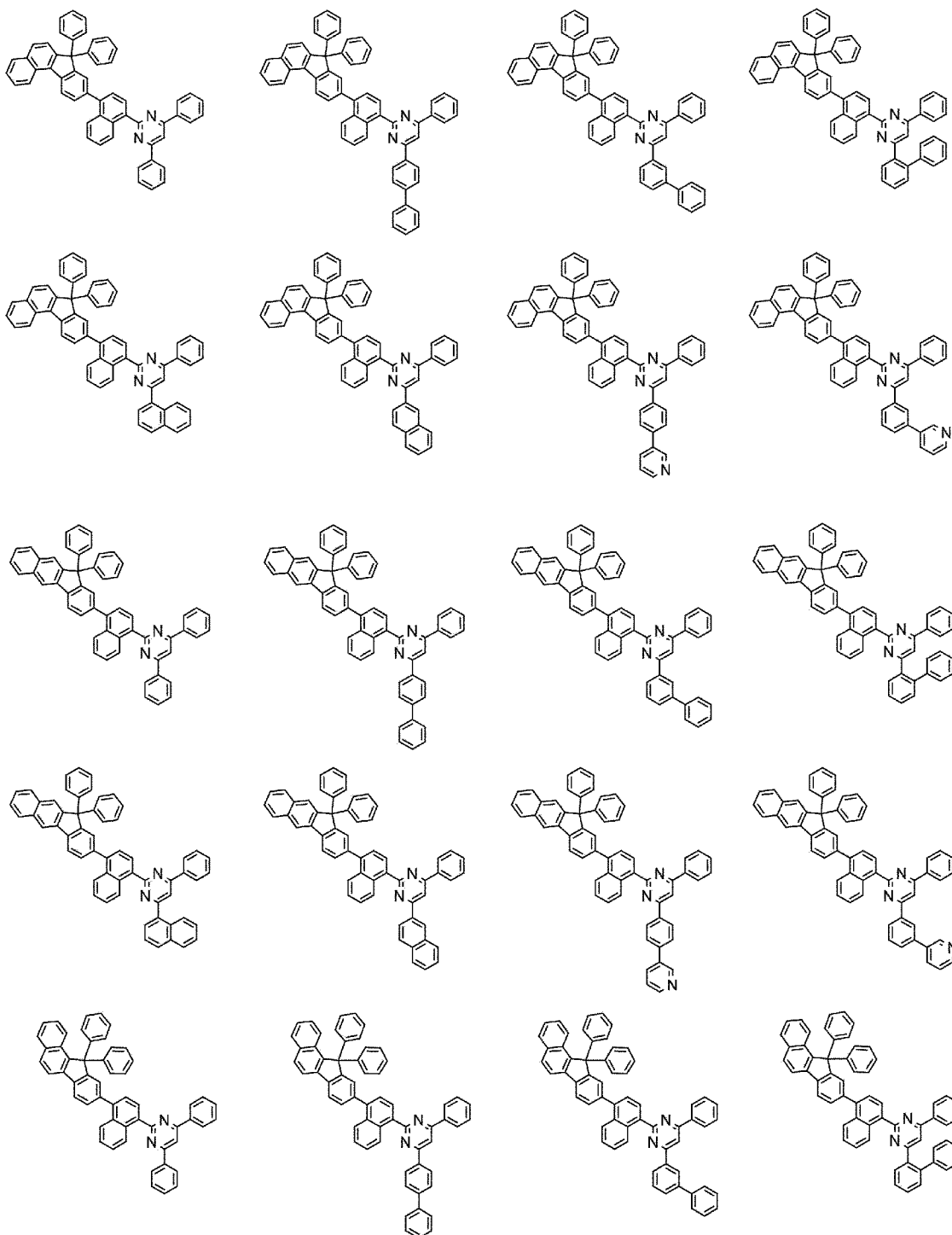
[0356]

[化221]



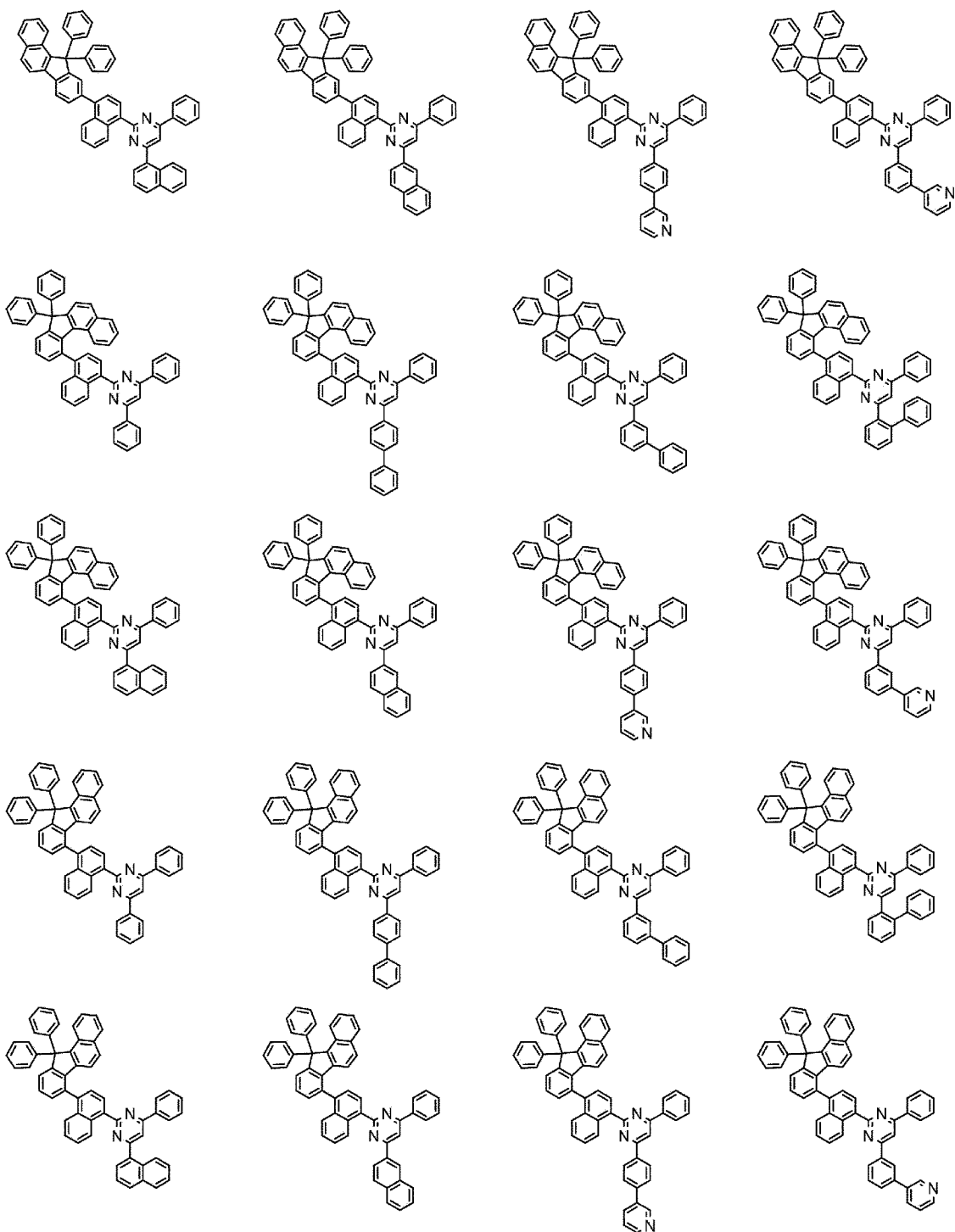
[0357]

[化222]



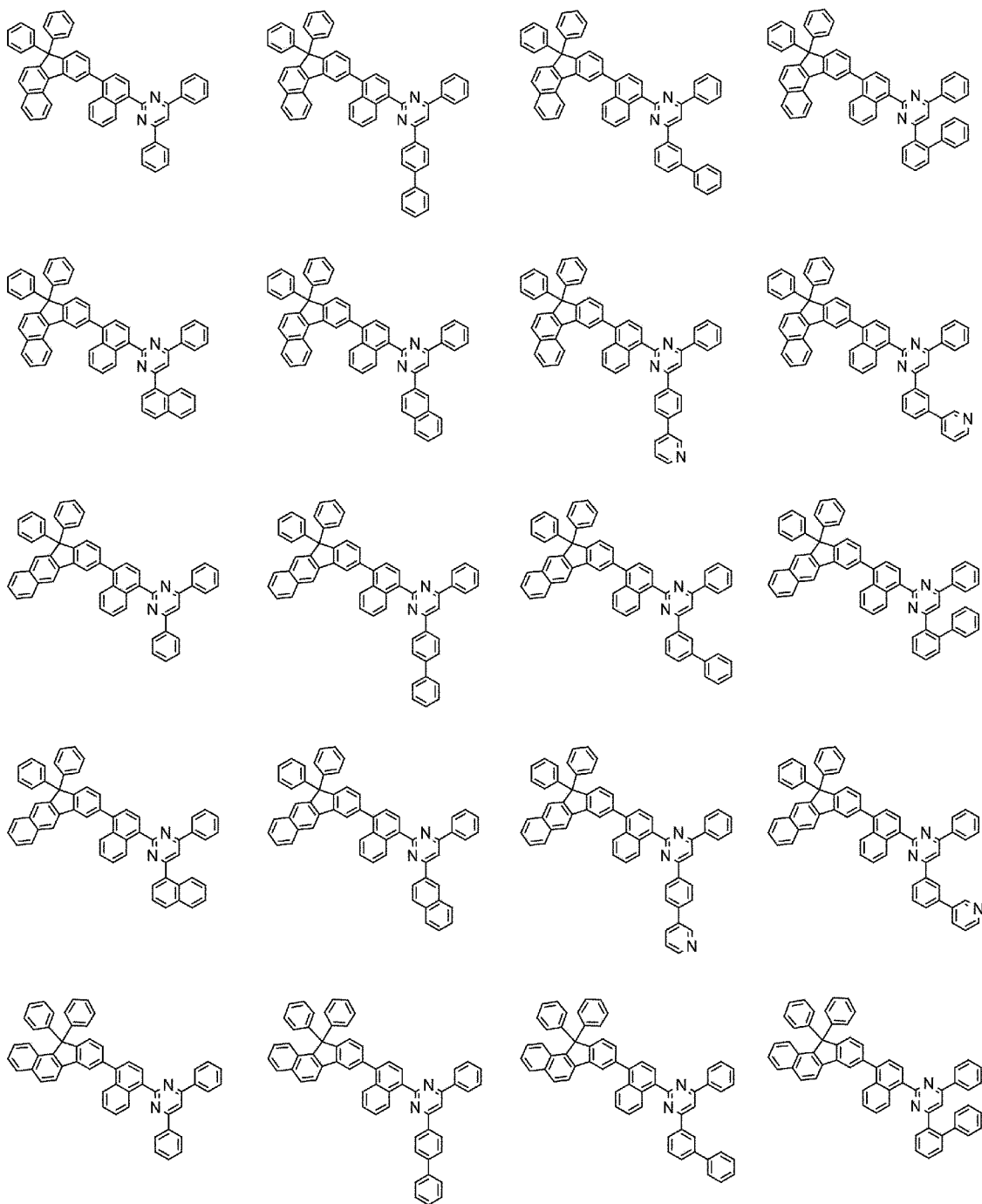
[0358]

[化223]



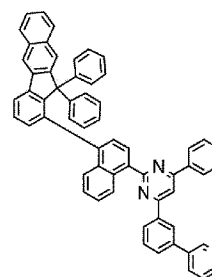
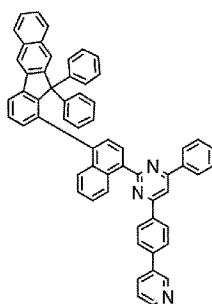
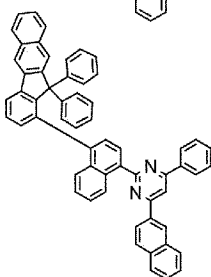
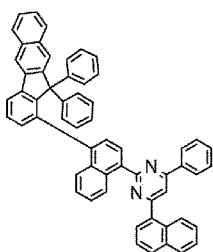
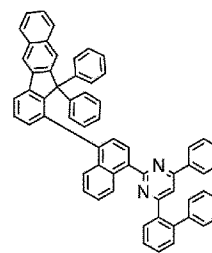
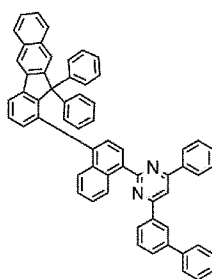
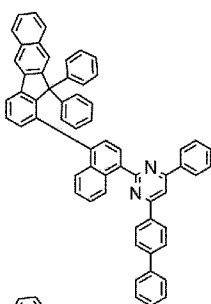
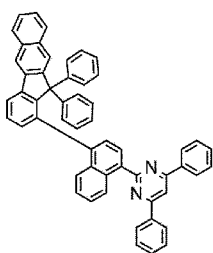
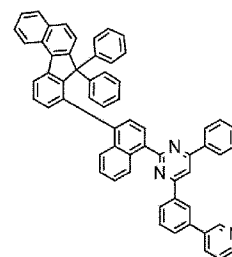
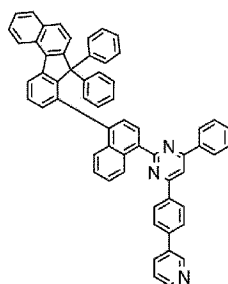
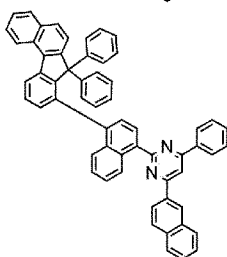
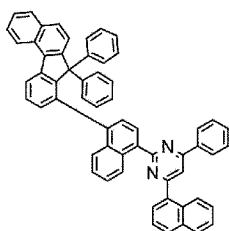
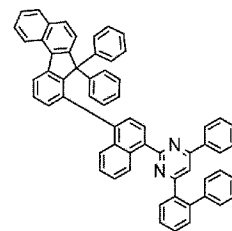
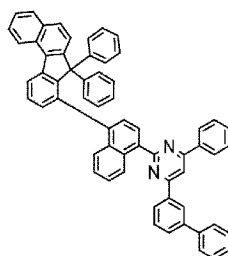
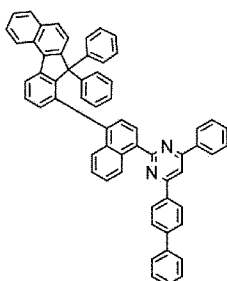
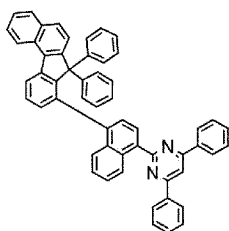
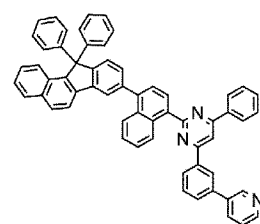
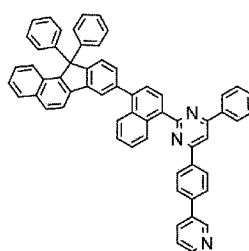
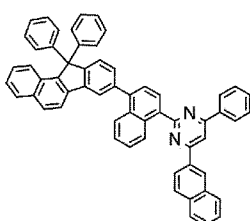
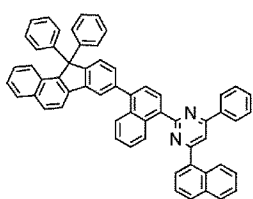
[0359]

[化224]



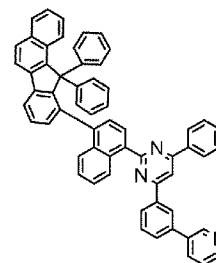
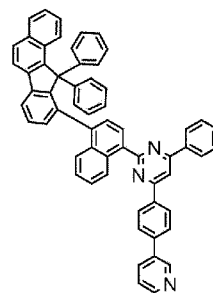
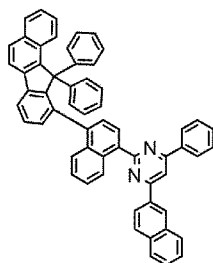
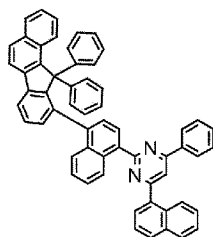
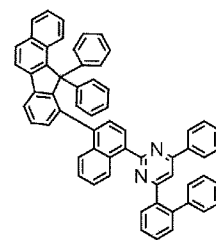
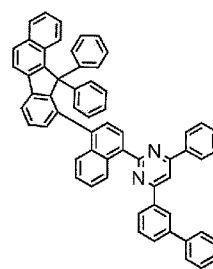
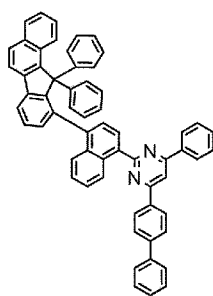
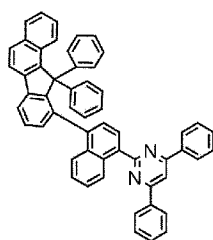
[0360]

[化225]



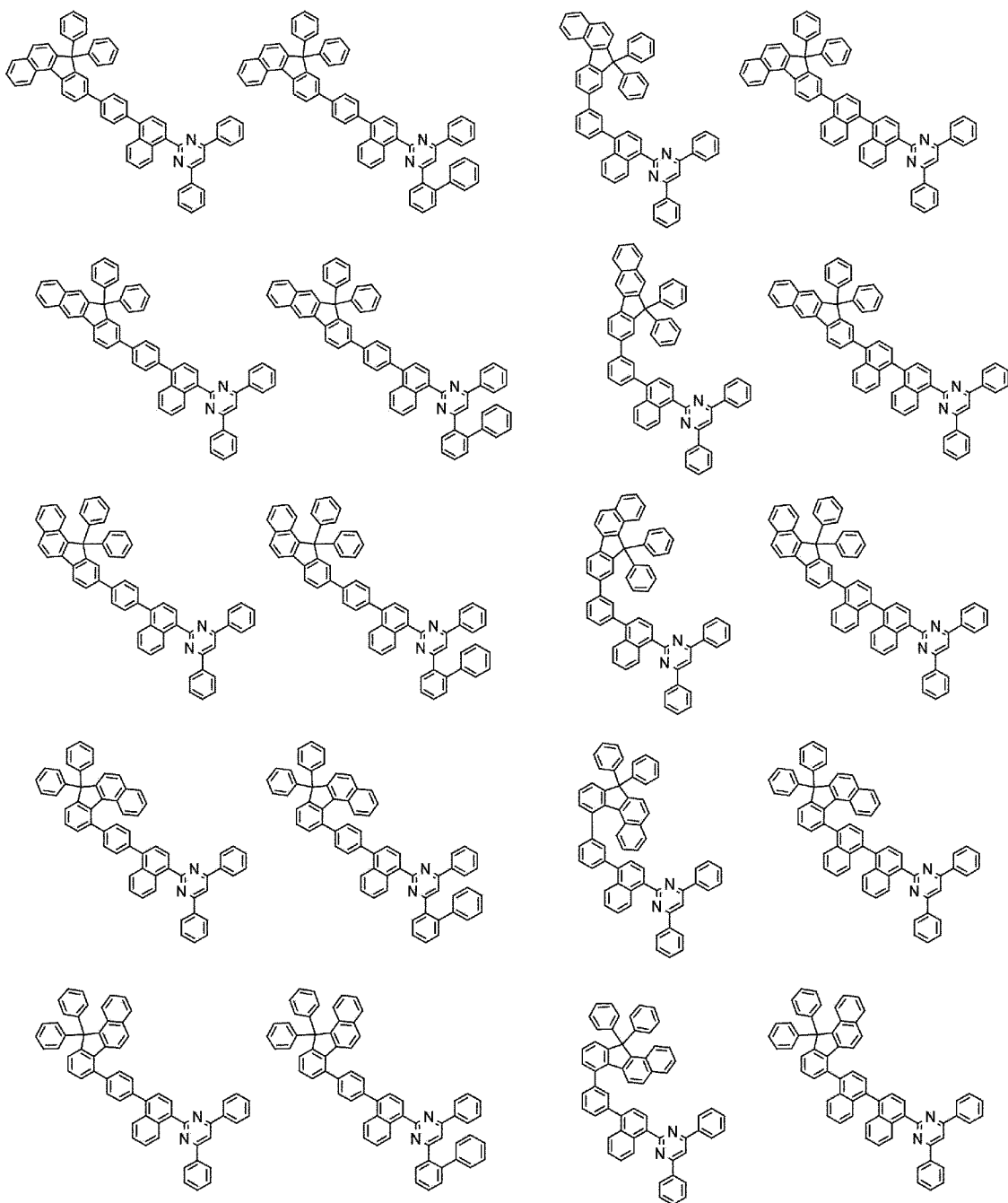
[0361]

[化226]



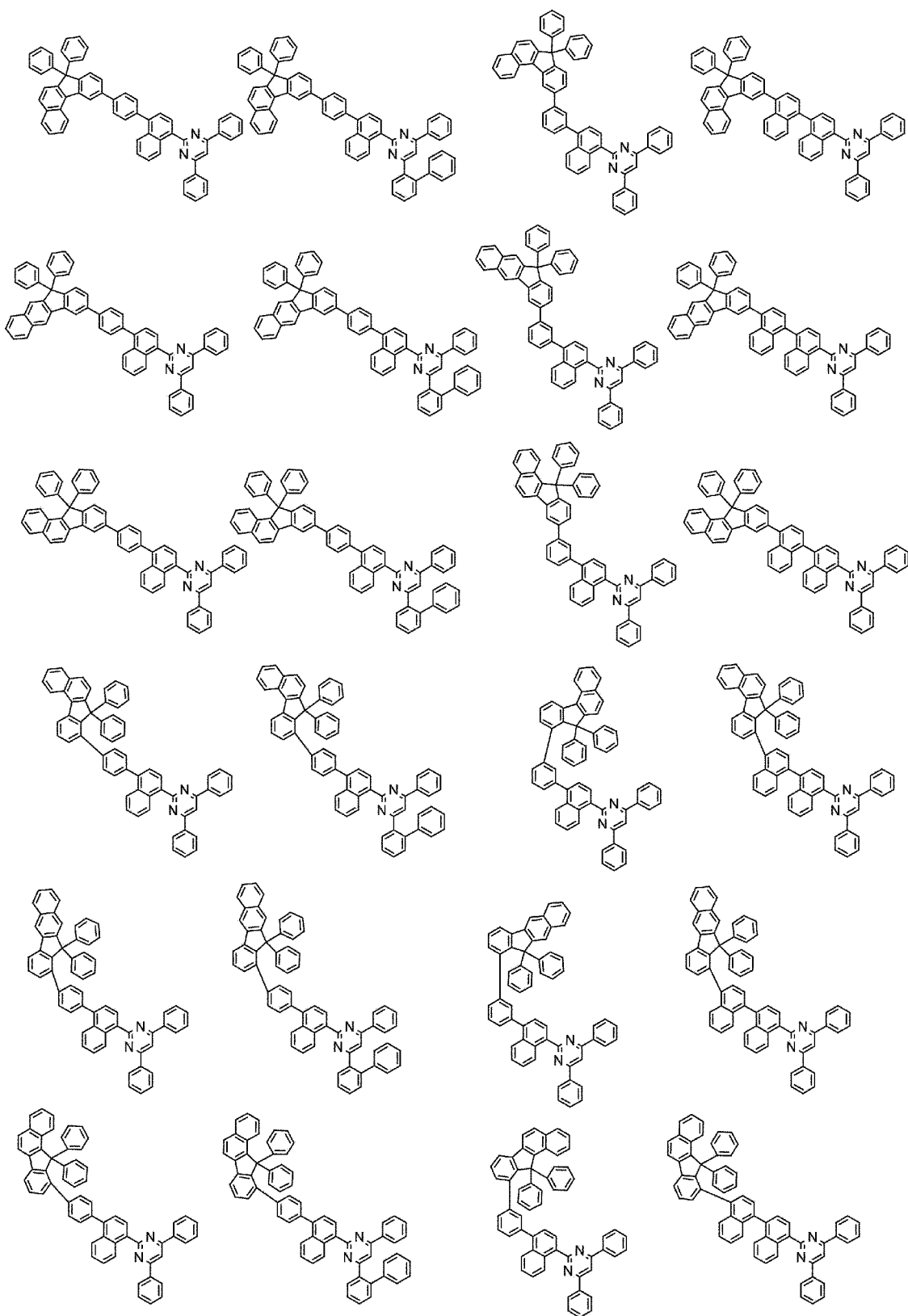
[0362]

[化227]



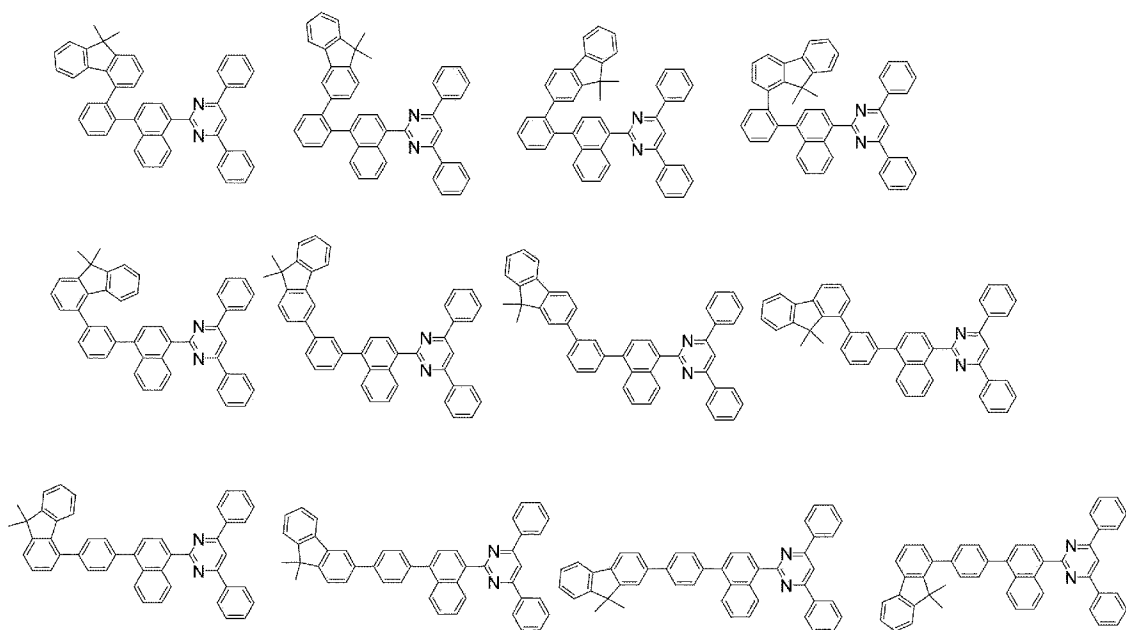
[0363]

[化228]



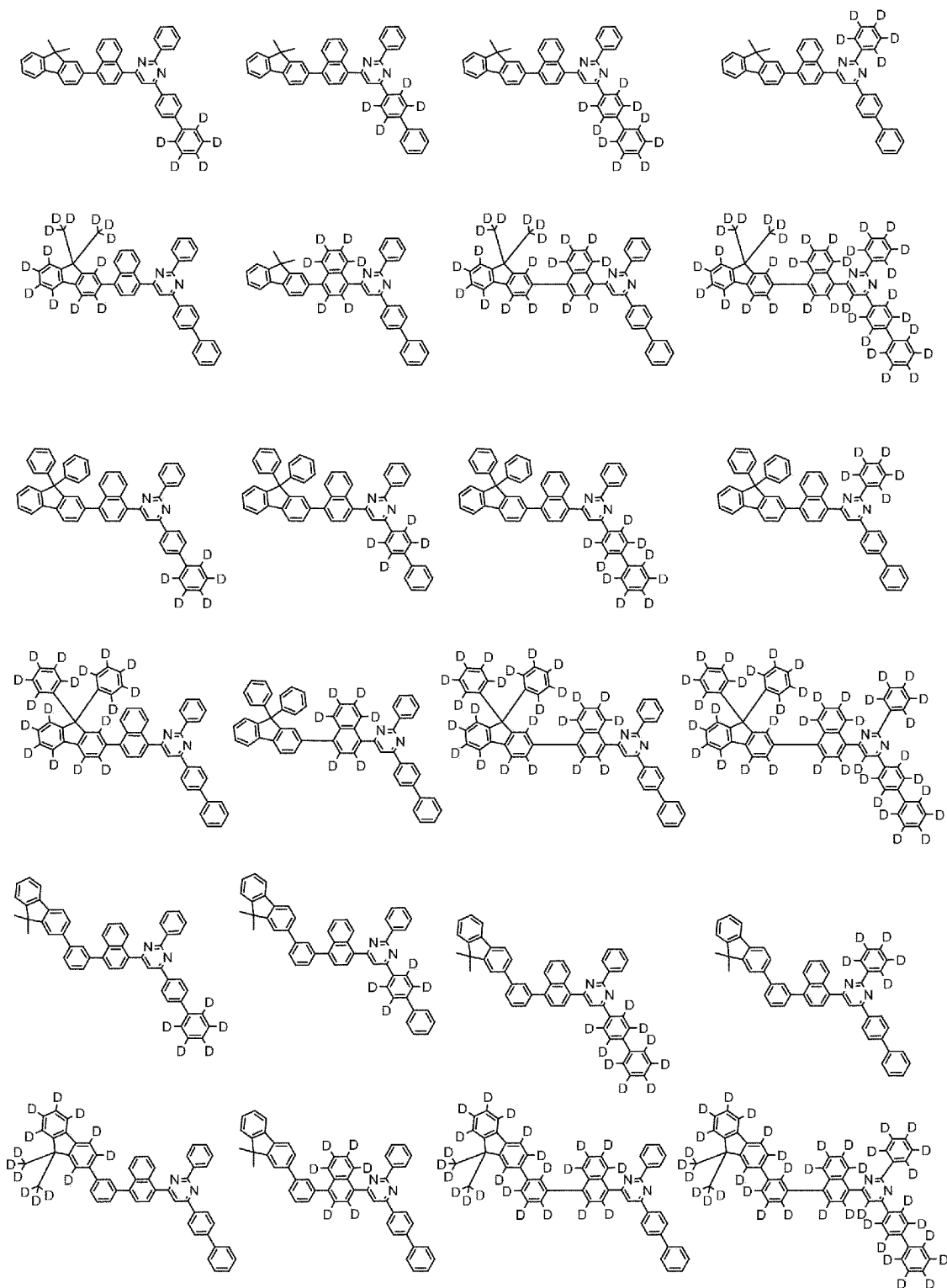
[0364]

[化229]



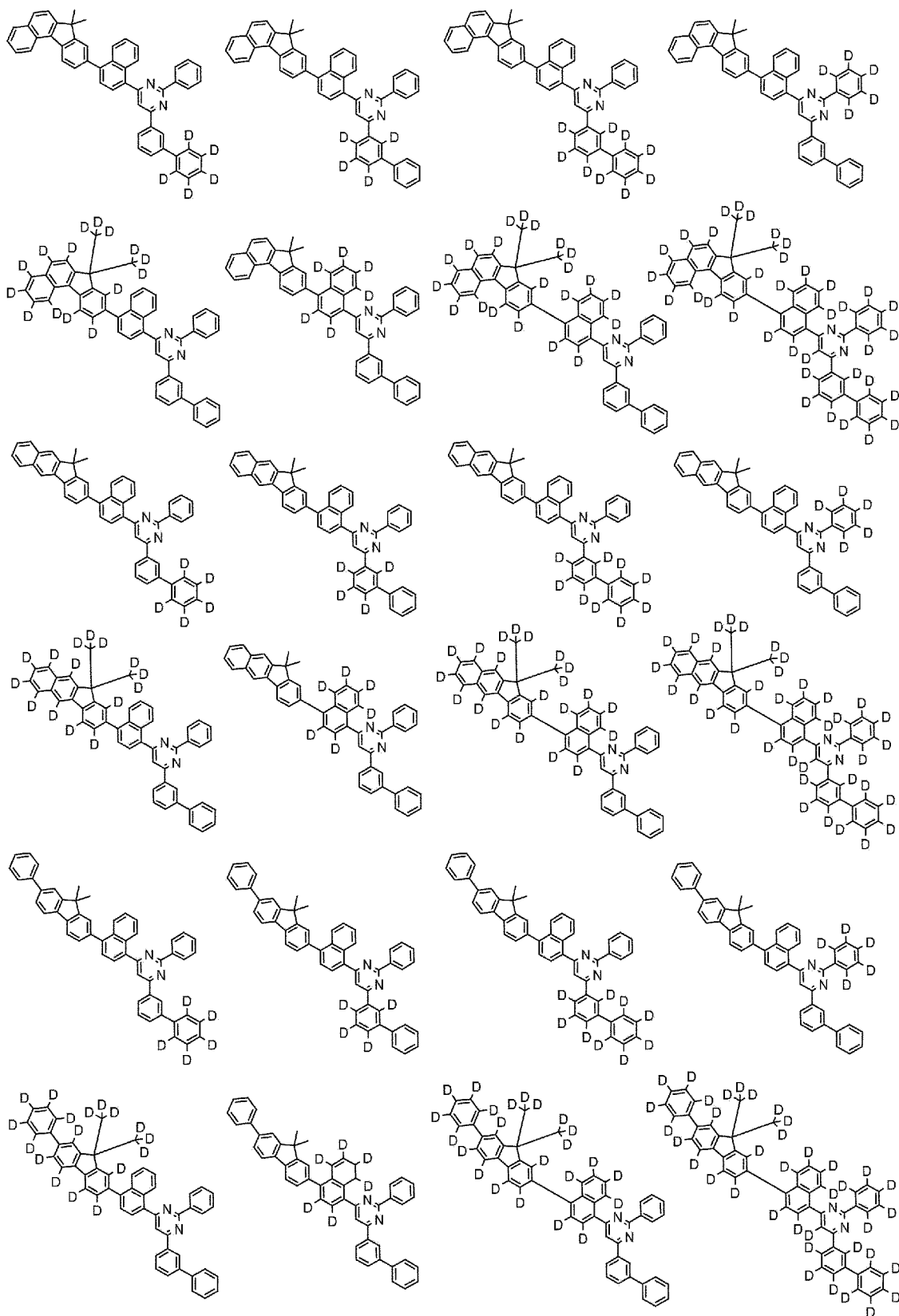
[0365]

[化230]



[0366]

[化231]



[0367] 有機EL素子用材料

本発明の有機EL素子用材料は発明化合物を含む。有機EL素子用材料における発明化合物の含有量は、1質量%以上（100%を含む）であり、10質量%以上（100%を含む）であることが好ましく、50質量%以上（100%を含む）であることがより好ましく、80質量%以上（100%を含む）であることがさらに好ましく、90質量%以上（100%を含む）であることが特に好ましい。本発明の有機EL素子用材料は、有機EL素子の製造に有用である。

[0368] 有機EL素子

本発明の有機EL素子は陽極、陰極、及び該陽極と陰極の間に配置された有機層を含む。該有機層は発光層を含み、該有機層の少なくとも一層が発明化合物を含む。

発明化合物が含まれる有機層の例としては、陽極と発光層との間に設けられる正孔輸送帯域（正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、励起子阻止層等）、発光層、スペース層、陰極と発光層との間に設けられる電子輸送帯域（電子注入層、電子輸送層、正孔阻止層等）等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。発明化合物は好ましくは蛍光又は燐光EL素子の電子輸送帯域の材料、より好ましく電子輸送層、又は正孔阻止層の材料、特に好ましくは第1電子輸送層、第2電子輸送層、又は正孔素子層の材料として用いられる。

[0369] 本発明の有機EL素子は、蛍光又は燐光発光型の単色発光素子であっても、蛍光／燐光ハイブリッド型の白色発光素子であってもよいし、単独の発光ユニットを有するシンプル型であっても、複数の発光ユニットを有するタンデム型であってもよく、中でも、蛍光発光型の素子であることが好ましい。ここで、「発光ユニット」とは、有機層を含み、そのうちの少なくとも一層が発光層であり、注入された正孔と電子が再結合することにより発光する最小単位をいう。

[0370] 例えば、シンプル型有機EL素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を挙げることができる。

(1) 陽極／発光ユニット／陰極

また、上記発光ユニットは、燐光発光層や蛍光発光層を複数有する多層型であってもよく、その場合、各発光層の間に、燐光発光層で生成された励起子が蛍光発光層に拡散することを防ぐ目的で、スペース層を有していてもよい。シンプル型発光ユニットの代表的な層構成を以下に示す。括弧内の層は任意である。

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

[0371] 上記各燐光又は蛍光発光層は、それぞれ互いに異なる発光色を示すものとすることができる。具体的には、上記発光ユニット(f)において、(正孔注入層／) 正孔輸送層／第1燐光発光層(赤色発光)／第2燐光発光層(緑色発光)／スペース層／蛍光発光層(青色発光)／電子輸送層といった層構成等が挙げられる。

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

[0372] タンデム型有機EL素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を挙げることができる。

(2) 陽極／第1発光ユニット／中間層／第2発光ユニット／陰極

ここで、上記第1発光ユニット及び第2発光ユニットとしては、例えば、それぞれ独立に上述の発光ユニットから選択することができる。

上記中間層は、一般的に、中間電極、中間導電層、電荷発生層、電子引抜層、接続層、中間絶縁層とも呼ばれ、第1発光ユニットに電子を、第2発光ユニットに正孔を供給する、公知の材料構成を用いることができる。

[0373] 図1は本発明の有機EL素子の構成の一例を示す概略図である。有機EL素子1は、基板2、陽極3、陰極4、及び該陽極3と陰極4との間に配置された発光ユニット10とを有する。発光ユニット10は、発光層5を有する。発光層5と陽極3との間に正孔輸送帯域6（正孔注入層、正孔輸送層等）、発光層5と陰極4との間に電子輸送帯域7（電子注入層、電子輸送層等）を有する。また、発光層5の陽極3側に電子阻止層（図示せず）を、発光層5の陰極4側に正孔阻止層（図示せず）を、それぞれ設けてもよい。これにより、電子や正孔を発光層5に閉じ込めて、発光層5における励起子の生成効率をさらに高めることができる。

[0374] 図2は、本発明の有機EL素子の他の構成を示す概略図である。有機EL素子11は、基板2、陽極3、陰極4、及び該陽極3と陰極4との間に配置された発光ユニット20とを有する。発光ユニット20は、発光層5を有する。陽極3と発光層5の間に配置された正孔輸送帯域は、正孔注入層6a、第1正孔輸送層6b及び第2正孔輸送層6cから形成されている。また、発光層5と陰極4の間に配置された電子輸送帯域は、第1電子輸送層7a及び第2電子輸送層7bから形成されている。

[0375] なお、本発明において、蛍光ドーパント材料（蛍光発光材料）と組み合わせられたホストを蛍光ホストと称し、燐光ドーパント材料と組み合わせられたホストを燐光ホストと称する。蛍光ホストと燐光ホストは分子構造のみにより区分されるものではない。即ち、燐光ホストとは、燐光ドーパントを含有す

る燐光発光層を形成する材料を意味し、蛍光発光層を形成する材料として利用できないことを意味しているわけではない。蛍光ホストについても同様である。

[0376] 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、プラスチックなどの板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、ポリ塩化ビニルからなるプラスチック基板等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。

[0377] 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4.0 eV以上）金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物などを用いることが好ましい。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、酸化タングステン及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）、又は前記金属の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

[0378] 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1～10 wt %の酸化亜鉛を加えたターゲットを、酸化タングステン及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0.5～5 wt %、酸化亜鉛を0.1～1 wt %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。

[0379] 陽極に接して形成される正孔注入層は、陽極の仕事関数に関係なく正孔注入が容易である材料を用いて形成されるため、電極材料として一般的に使用される材料（例えば、金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物、元素周期表の第1族又は第2族に属する元素）を用いることができる。

仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第1族又は第2族に属する元素、即ちリチウム（Li）やセシウム（Cs）等のアルカリ金属、及びマグネシウム（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、及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）等の希土類金属及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、及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。

[0380] 正孔注入層

正孔注入層は、正孔注入性の高い材料（正孔注入性材料）を含む層であり、陽極と発光層の間、又は、存在する場合には、正孔輸送層と陽極の間に形成される。

[0381] 発明化合物以外の正孔注入性材料としては、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。

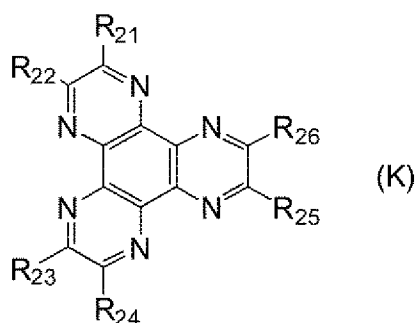
[0382] 低分子の有機化合物である4, 4', 4''-トリス（N, N-ジフェニルアミノ）トリフェニルアミン（略称：TDATA）、4, 4', 4''-トリス〔N-（3-メチルフェニル）-N-フェニルアミノ〕トリフェニルアミン（略称：MTDATA）、4, 4'-ビス〔N-（4-ジフェニルアミノフェニル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル（略称：DPAB）、4, 4'-ビス（N-〔4-〔N'-（3-メチルフェニル）-N'-フェニルアミノ〕フェニル〕-N-フェニルアミノ）ビフェニル（略称：DNTP

D)、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も正孔注入層材料として挙げられる。

[0383] 高分子化合物 (オリゴマー、デンドリマー、ポリマー等) を用いることもできる。例えば、ポリ (N-ビニルカルバゾール) (略称: PVK)、ポリ (4-ビニルトリフェニルアミン) (略称: PVTPA)、ポリ [N-(4-{N'-[4-(4-ジフェニルアミノ)フェニル]フェニル-N'-フェニルアミノ}フェニル)メタクリルアミド] (略称: PTPDMA)、ポリ [N, N'-ビス (4-ブチルフェニル)-N, N'-ビス (フェニル)ベンジジン] (略称: Poly-TPD) などの高分子化合物が挙げられる。また、ポリ (3, 4-エチレンジオキシチオフェン) / ポリ (スチレンスルホン酸) (PEDOT/PSS)、ポリアニリン / ポリ (スチレンスルホン酸) (PAni/PSS) 等の酸を添加した高分子化合物を用いることもできる。

[0384] さらに、下記式 (K) で表されるヘキサアザトリフェニレン (HAT) 化合物などのアクセプター材料を用いることも好ましい。

[化232]



[0385] (上記式中、 $R_{21} \sim R_{26}$ は、それぞれ独立にシアノ基、 $-\text{CONH}_2$ 、カルボキシル基、又は $-\text{COOR}_{27}$ (R_{27} は炭素数1～20のアルキル基又は炭素数3～20のシクロアルキル基を表す)を表す。また、 R_{21} 及び R_{22} 、 R_{23} 及び R_{24} 、及び R_{25} 及び R_{26} から選ばれる隣接する2つが互いに結合して $-\text{CO}-\text{O}-\text{CO}-$ で示される基を形成してもよい。)

R_{27} としては、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、 t -ブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等が挙げられる。

[0386] 正孔輸送層

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い材料（正孔輸送性材料）を含む層であり、陽極と発光層の間、又は、存在する場合には、正孔注入層と発光層の間に形成される。

[0387] 正孔輸送層は、単層構造でもよく、2以上の層を含む多層構造でもよい。例えば、正孔輸送層は第1正孔輸送層（陽極側）と第2正孔輸送層（陰極側）を含む2層構造であってもよい。本発明の一態様において、前記単層構造の正孔輸送層は発光層に隣接していることが好ましく、又、前記多層構造中の最も陰極に近い正孔輸送層、例えば、上記2層構造の第2正孔輸送層、は発光層に隣接していることが好ましい。本発明の他の態様において、前記単層構造の正孔輸送層と発光層の間に、又は、前記多層構造中の最も発光層に近い正孔輸送層と発光層の間に、後述する電子阻止層などを介在させてもよい。

[0388] 正孔輸送層材料としては、例えば、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用することができる。

芳香族アミン化合物としては、例えば、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)、及び、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)が挙げられる。上記化合物は、 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上の正孔移動度を有する。

[0389] カルバゾール誘導体としては、例えば、4, 4'-ジ(9-カルバゾリル)ビフェニル(略称: CBP)、9-[4-(9-カルバゾリル)フェニル]-10-フェニルアントラセン(略称: CzPA)、及び、9-フェニル-3-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称: PCzPA)が挙げられる。

アントラセン誘導体としては、例えば、2-t-ブチル-9, 10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(略称: t-BuDNA)、9, 10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(略称: DNA)、及び、9, 10-ジフェニルアントラセン(略称: DPAnth)が挙げられる。

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。

ただし、電子輸送性よりも正孔輸送性の方が高い化合物であれば、上記以外の化合物を用いてもよい。

[0390] 発光層のドーパント材料

発光層は、発光性の高い材料(ドーパント材料)を含む層であり、種々の材料を用いることができる。例えば、蛍光発光材料や燐光発光材料をドーパント材料として用いることができる。蛍光発光材料は一重項励起状態から発光する化合物であり、燐光発光材料は三重項励起状態から発光する化合物である。

[0391] 発光層に用いることができる青色系の蛍光発光材料として、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、トリアリールアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N, N' -ビス [4 - (9H-カルバゾール-9-イル) フェニル] -N, N' -ジフェニルスチルベン-4, 4' -ジアミン (略称: YGA2S)、4 - (9H-カルバゾール-9-イル) -4' - (10-フェニル-9-アントリル) トリフェニルアミン (略称: YGAPA)、4 - (10-フェニル-9-アントリル) -4' - (9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル) トリフェニルアミン (略称: PCBAPA) などが挙げられる。

[0392] 発光層に用いることができる緑色系の蛍光発光材料として、芳香族アミン誘導体等を使用できる。具体的には、N - (9, 10-ジフェニル-2-アントリル) -N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: 2PCAPA)、N - [9, 10-ビス (1, 1' -ビフェニル-2-イル) -2-アントリル] -N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: 2PCABPhA)、N - (9, 10-ジフェニル-2-アントリル) -N, N', N' -トリフェニル-1, 4-フェニレンジアミン (略称: 2DPAPA)、N - [9, 10-ビス (1, 1' -ビフェニル-2-イル) -2-アントリル] -N, N', N' -トリフェニル-1, 4-フェニレンジアミン (略称: 2DPABPhA)、N - [9, 10-ビス (1, 1' -ビフェニル-2-イル)] -N - [4 - (9H-カルバゾール-9-イル) フェニル] -N-フェニルアントラセン-2-アミン (略称: 2YGABPhA)、N, N, 9-トリフェニルアントラセン-9-アミン (略称: DPhAPhA) などが挙げられる。

[0393] 発光層に用いることができる赤色系の蛍光発光材料として、テトラセン誘導体、ジアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N, N, N', N' -テトラキス (4-メチルフェニル) テトラセン-5, 11-ジアミン (略称: p-mPhTD)、7, 14-ジフェニル-N, N, N', N' -テトラ

キス（４－メチルフェニル）アセナフト〔１，２－*a*〕フルオランテン－３，１０－ジアミン（略称：p-mPhAFD）などが挙げられる。

[0394] 本発明の一態様において、発光層が蛍光発光材料（蛍光ドーパント材料）を含むことが好ましい。

[0395] 発光層に用いることができる青色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体が使用される。具体的には、ビス〔２－（４′，６′－ジフルオロフェニル）ピリジナト－N，C 2′〕イリジウム（ⅠⅠⅠ）テトラキス（１－ピラゾリル）ボラート（略称：F l r 6）、ビス〔２－（４′，６′－ジフルオロフェニル）ピリジナト－N，C 2′〕イリジウム（ⅠⅠⅠ）ピコリナート（略称：F l r p i c）、ビス〔２－（３′，５′ビストリフルオロメチルフェニル）ピリジナト－N，C 2′〕イリジウム（ⅠⅠⅠ）ピコリナート（略称：I r (C F 3 p p y) 2 (p i c)）、ビス〔２－（４′，６′－ジフルオロフェニル）ピリジナト－N，C 2′〕イリジウム（ⅠⅠⅠ）アセチルアセトナート（略称：F l r a c a c）などが挙げられる。

[0396] 発光層に用いることができる緑色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体等が使用される。トリス（２－フェニルピリジナト－N，C 2′）イリジウム（ⅠⅠⅠ）（略称：I r (p p y) 3）、ビス（２－フェニルピリジナト－N，C 2′）イリジウム（ⅠⅠⅠ）アセチルアセトナート（略称：I r (p p y) 2 (a c a c)）、ビス（１，２－ジフェニル－１H－ベンゾイミダゾラト）イリジウム（ⅠⅠⅠ）アセチルアセトナート（略称：I r (p b i) 2 (a c a c)）、ビス（ベンゾ〔h〕キノリナト）イリジウム（ⅠⅠⅠ）アセチルアセトナート（略称：I r (b z q) 2 (a c a c)）などが挙げられる。

[0397] 発光層に用いることができる赤色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、白金錯体、テルビウム錯体、ユーロピウム錯体等の金属錯体が使用される。具体的には、ビス〔２－（２′－ベンゾ〔4，5－ α 〕チエニル）ピリジナト－N，C 3′〕イリジウム（ⅠⅠⅠ）アセチルアセトナート（略称：

Ir (btp) ₂ (acac))、ビス(1-フェニルイソキノリナート-N, C2') イリジウム(III) アセチルアセトナート(略称: Ir (piq) ₂ (acac))、(アセチルアセトナート)ビス[2, 3-ビス(4-フルオロフェニル)キノキサリナート] イリジウム(III) (略称: Ir (Fdpq) ₂ (acac))、2, 3, 7, 8, 12, 13, 17, 18-オクタエチル-21H, 23H-ポルフィリン白金(II) (略称: Pt OEP) 等の有機金属錯体が挙げられる。

[0398] また、トリス(アセチルアセトナート)(モノフェナントロリン)テルビウム(III) (略称: Tb (acac) ₃ (Phen))、トリス(1, 3-ジフェニル-1, 3-プロパンジオナート)(モノフェナントロリン)ユーロピウム(III) (略称: Eu (DBM) ₃ (Phen))、トリス[1-(2-テノイル)-3, 3, 3-トリフルオロアセトナート](モノフェナントロリン)ユーロピウム(III) (略称: Eu (TTA) ₃ (Phen)) 等の希土類金属錯体は、希土類金属イオンからの発光(異なる多重度の電子遷移)であるため、燐光発光材料として用いることができる。

[0399] 本発明の一態様において、発光層が燐光発光材料(燐光ドーパント材料)を含むことが好ましい。

[0400] 発光層のホスト材料

発光層は、上述したドーパント材料を他の材料(ホスト材料)に分散させた構成としてもよい。ドーパント材料よりも最低空軌道準位(LUMO準位)が高く、最高占有軌道準位(HOMO準位)が低い材料を用いることが好ましい。

[0401] ホスト材料としては、例えば

- (1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、又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、又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、又はクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、

(4) トリアリールアミン誘導体又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使用される。

[0402] 例えば、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム(111)(略称: A1q)、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(111)(略称: A1mq3)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(11)(略称: BeBq2)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(4-フェニルフェノラト)アルミニウム(111)(略称: BA1q)、ビス(8-キノリノラト)亜鉛(11)(略称: Znq)、ビス[2-(2-ベンゾオキサゾリル)フェノラト]亜鉛(11)(略称: ZnPB0)、ビス[2-(2-ベンゾチアゾリル)フェノラト]亜鉛(11)(略称: ZnBTZ)などの金属錯体;

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-ビフェニル)-4-フェニル-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称: TAZ)、2,2',2''-(1,3,5-ベンゼントリイル)トリス(1-フェニル-1H-ベンゾイミダゾール)(略称: TPBI)、バソフェナントロリン(略称: BPhen)、バソキュプロイン(略称: BCP)などの複素環化合物;

9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称: CzPA)、3,6-ジフェニル-9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称: DP CzPA)、9,10-ビス(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(略称: DPPA)、9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(略称: DNA)、2-tert-ブチル-9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(略称: t-BuDNA)、9,9'-ビアントリル(略称: BANT)、9,9'-(スチルベン-3,3'-ジイル)ジフェナントレン(略称:

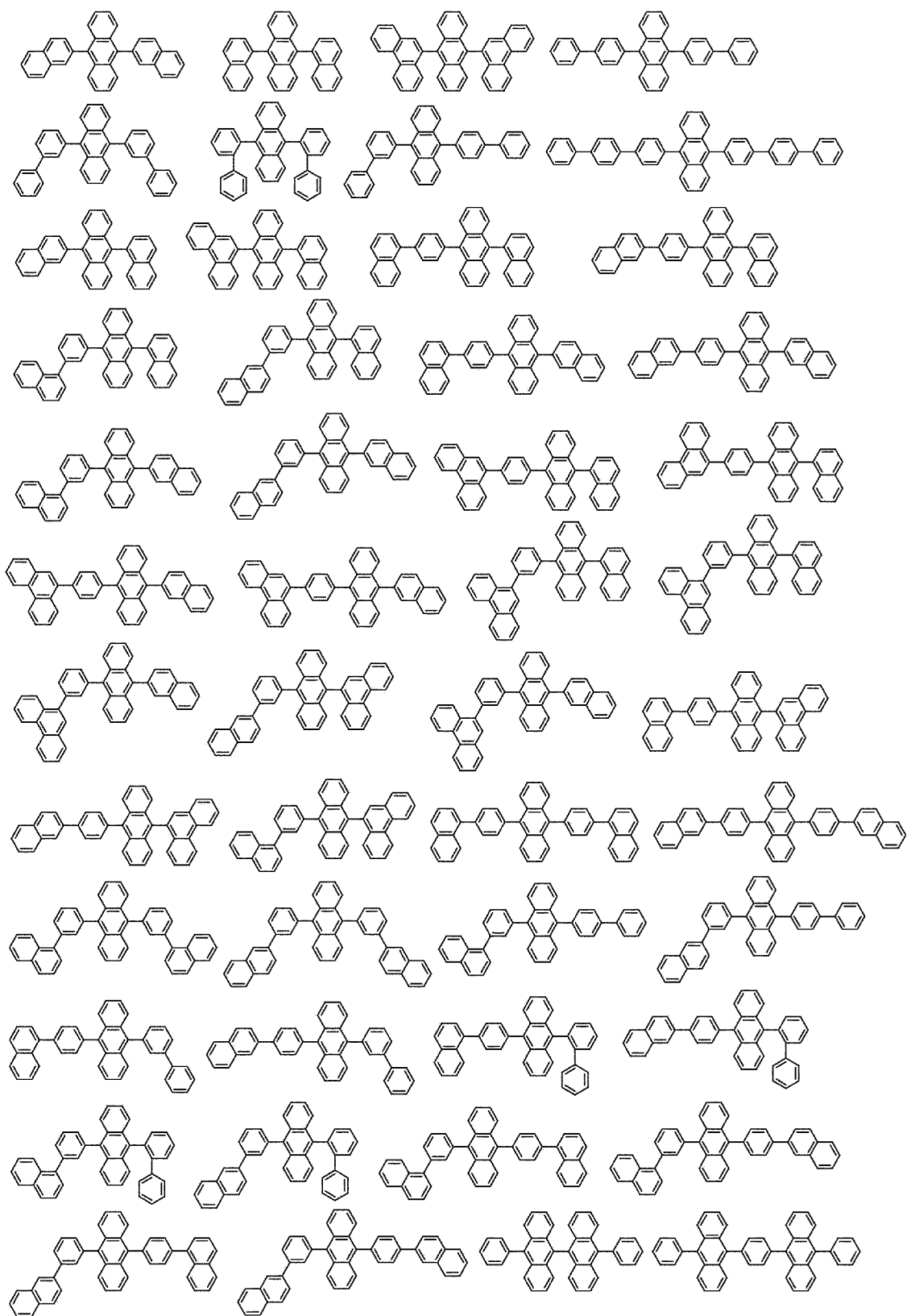
DPNS)、9, 9' - (スチルベン-4, 4' -ジイル) ジフェナントレン (略称: DPNS2)、3, 3', 3'' - (ベンゼン-1, 3, 5-トリイル) トリピレン (略称: TPB3)、9, 10-ジフェニルアントラセン (略称: DPAnth)、6, 12-ジメトキシ-5, 11-ジフェニルクリセンなどの縮合芳香族化合物; 及び

N, N-ジフェニル-9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: CzA1PA)、4-(10-フェニル-9-アントリル) トリフェニルアミン (略称: DP h PA)、N, 9-ジフェニル-N-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: PCAPA)、N, 9-ジフェニル-N-{4-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]フェニル}-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: PCAPBA)、N-(9, 10-ジフェニル-2-アントリル)-N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: 2PCAPA)、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又は α -NPD)、N, N'-ビス(3-メチルフェニル)-N, N'-ジフェニル-[1, 1'-ビフェニル]-4, 4'-ジアミン (略称: TPD)、4, 4'-ビス[N-(9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: DF LDPBi)、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を用いることができる。ホスト材料は複数種用いてもよい。

[0403] 特に、青色蛍光素子の場合には、下記のアントラセン化合物をホスト材料として用いることが好ましい。

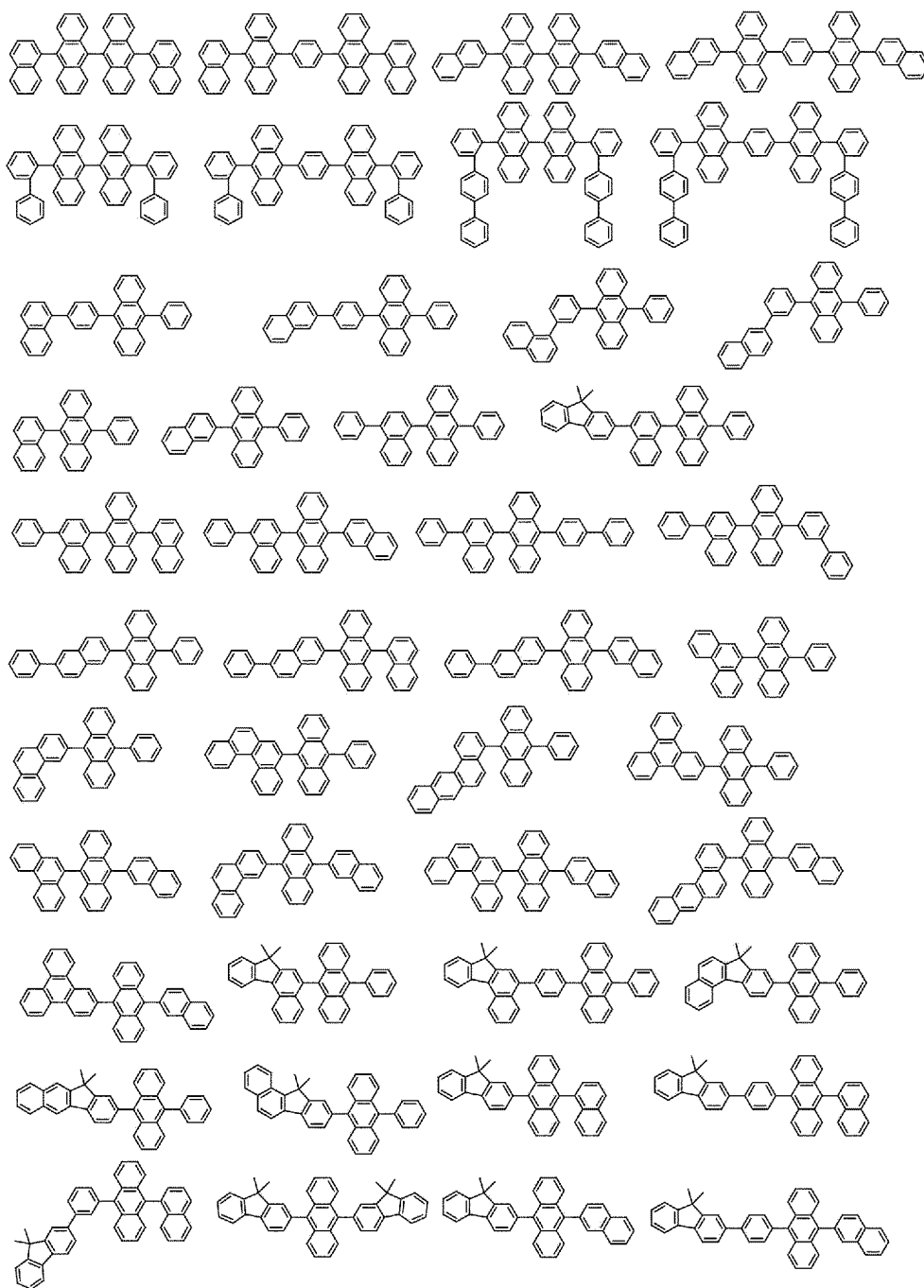
[0404]

[化233]



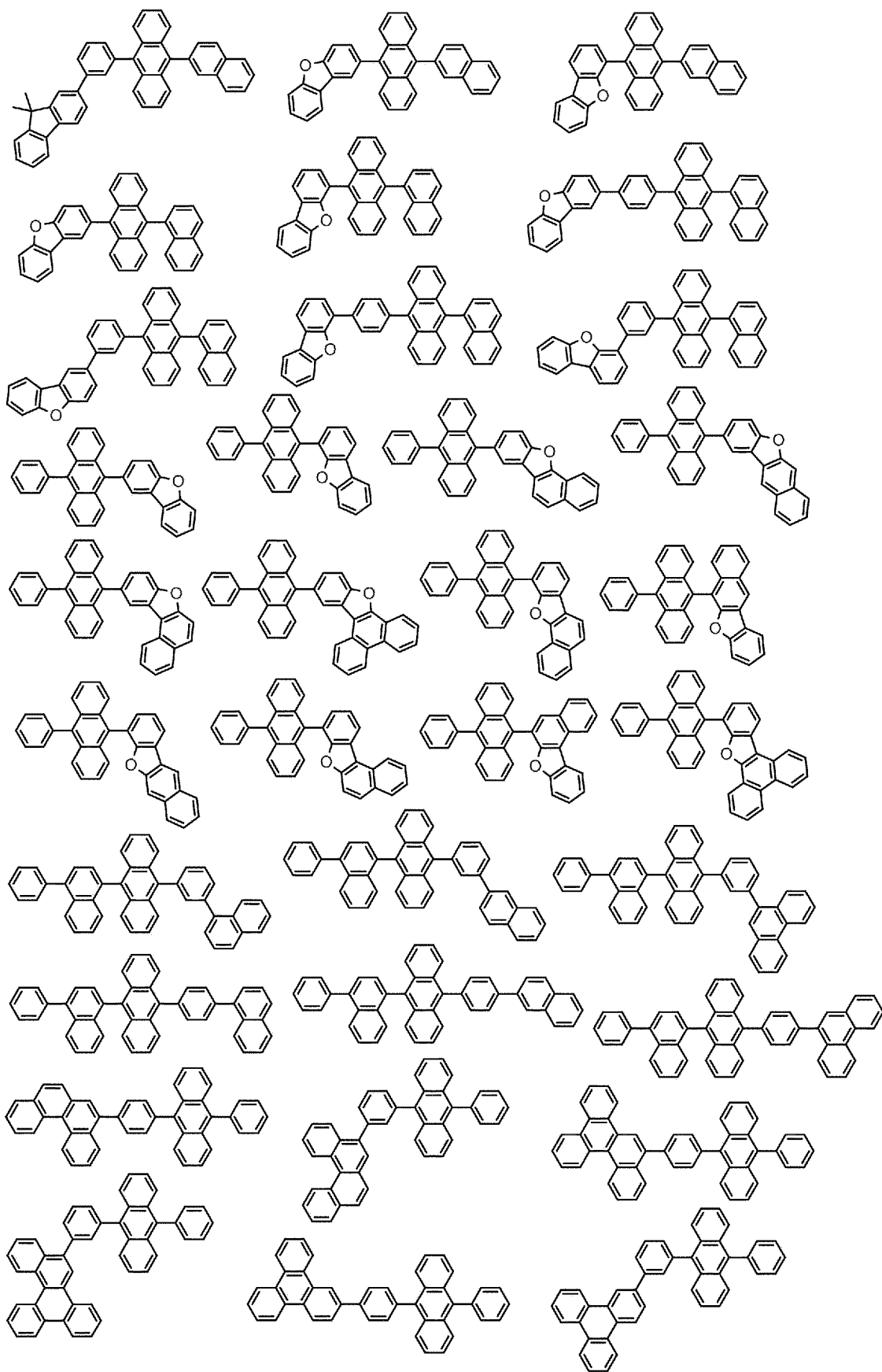
[0405]

[化234]



[0406]

[化235]



[0407] 電子輸送層

電子輸送層は電子輸送性の高い材料（電子輸送性材料）を含む層であり、発光層と陰極の間、又は、存在する場合は、電子注入層と発光層の間に形成される。発明化合物を単独で又は後述の化合物と組み合わせて電子輸送層に用いてもよい。

電子輸送層は、単層構造でもよく、2以上の層を含む多層構造でもよい。例えば、電子輸送層は第1電子輸送層（陽極側）と第2電子輸送層（陰極側）を含む2層構造であってもよい。本発明の一態様において、前記単層構造の電子輸送層は発光層に隣接していることが好ましく、又、前記多層構造中の最も陽極に近い電子輸送層、例えば、上記2層構造の第1電子輸送層、は発光層に隣接していることが好ましい。本発明の他の態様において、前記単層構造の電子輸送層と発光層の間に、又は、前記多層構造中の最も発光層に近い電子輸送層と発光層の間に、後述する正孔阻止層などを介在させてもよい。

前記2層構造の電子輸送層において、発明化合物は、第1電子輸送層と第2電子輸送層の一方に含まれていてもよいし、双方に含まれていてもよい。

本発明の一態様において、発明化合物が第1電子輸送層のみに含まれるのが好ましく、他の態様においては、発明化合物が第2電子輸送層のみに含まれるのが好ましく、さらに他の態様においては、発明化合物が第1電子輸送層と第2電子輸送層に含まれるのが好ましい。

[0408] 本発明の一態様において、前記第1電子輸送層と前記第2電子輸送層の一方又は双方に含まれる発明化合物は、製造コストの観点から、軽水素体であることが好ましい。

前記軽水素体とは、発明化合物中のすべての水素原子が軽水素原子である発明化合物のことである。

従って、本発明は、前記第1電子輸送層と前記第2電子輸送層の一方又は双方が実質的に軽水素体のみからなる発明化合物を含む有機EL素子を含む。「実質的に軽水素体のみからなる発明化合物」とは、発明化合物の総量に

対する軽水素体の含有割合が、90モル%以上、好ましくは95モル%以上、より好ましくは99モル%以上（それぞれ100%を含む）であることを意味する。

[0409] 電子輸送層には、例えば、

- (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。

[0410] 金属錯体としては、例えば、トリス（8-キノリノラト）アルミニウム（ Alq_3 ）（略称： Alq_3 ）、トリス（4-メチル-8-キノリノラト）アルミニウム（略称： $Almq_3$ ）、ビス（10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト）ベリリウム（略称： $BeBq_2$ ）、ビス（2-メチル-8-キノリノラト）（4-フェニルフェノラト）アルミニウム（ Alq_3 ）（略称： $BAAlq_3$ ）、ビス（8-キノリノラト）亜鉛（ Alq_3 ）（略称： Znq_2 ）、ビス[2-（2-ベンゾオキサゾリル）フェノラト]亜鉛（ Alq_3 ）（略称： $ZnPBO$ ）、ビス[2-（2-ベンゾチアゾリル）フェノラト]亜鉛（ Alq_3 ）（略称： $ZnBTZ$ ）が挙げられる。

[0411] 複素芳香族化合物としては、例えば、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-2-イル）スチルベン（略称： $BzOs$ ）が挙げられる。

[0412] 高分子化合物としては、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）が挙げられる。

[0413] 上記材料は、 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上の電子移動度を有する材料である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い材料であれば、上記以外の材料を電子輸送層に用いてもよい。

[0414] 電子注入層

電子注入層は、電子注入性の高い材料を含む層である。電子注入層には、リチウム（Li）、セシウム（Cs）等のアルカリ金属、マグネシウム（Mg）、カルシウム（Ca）、ストロンチウム（Sr）等のアルカリ土類金属、ユーロピウム（Eu）、イッテルビウム（Yb）等の希土類金属、及びこれらの金属を含む化合物を用いることができる。そのような化合物としては、例えば、アルカリ金属酸化物、アルカリ金属ハロゲン化物、アルカリ金属含有有機錯体、アルカリ土類金属酸化物、アルカリ土類金属ハロゲン化物、アルカリ土類金属含有有機錯体、希土類金属酸化物、希土類金属ハロゲン化物、及び希土類金属含有有機錯体が挙げられる。また、これらの化合物を複数混合して用いることもできる。

その他、電子輸送性を有する材料にアルカリ金属、アルカリ土類金属、又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。

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、有機化合物が電子供与体から電子を受け取るため、電子注入性及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、受け取っ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材料（

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材料であればよい。具体的には、アルカリ金属、アルカリ土類金属及び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。

[0415] 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、及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族又は第2族に属する元素、即ちリチウム（Li）やセシウム（Cs）等のアルカリ金属、及びマグネシウム（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、及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）等の希土類金属及びこれらを含む合金等が挙げられる。

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。

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、スピコート法等を用いて成膜することができる。

[0416] 絶縁層

有機EL素子は、超薄膜に電界を印加するために、リークやショートによ

る画素欠陥が生じやすい。これを防止するために、一对の電極間に絶縁性の薄膜層からなる絶縁層を挿入してもよい。

絶縁層に用いられる材料としては、例えば、酸化アルミニウム、弗化リチウム、酸化リチウム、弗化セシウム、酸化セシウム、酸化マグネシウム、弗化マグネシウム、酸化カルシウム、弗化カルシウム、窒化アルミニウム、酸化チタン、酸化珪素、酸化ゲルマニウム、窒化珪素、窒化ホウ素、酸化モリブデン、酸化ルテニウム、酸化バナジウム等が挙げられる。なお、これらの混合物や積層物を用いてもよい。

[0417] スペース層

上記スペース層とは、例えば、蛍光発光層と燐光発光層とを積層する場合に、燐光発光層で生成する励起子を蛍光発光層に拡散させない、あるいは、キャリアバランスを調整する目的で、蛍光発光層と燐光発光層との間に設けられる層である。また、スペース層は、複数の燐光発光層の間に設けることもできる。

スペース層は発光層間に設けられるため、電子輸送性と正孔輸送性を兼ね備える材料であることが好ましい。また、隣接する燐光発光層内の三重項エネルギーの拡散を防ぐため、三重項エネルギーが2.6 eV以上であることが好ましい。スペース層に用いられる材料としては、上述の正孔輸送層に用いられるものと同様のものが挙げられる。

[0418] 阻止層

電子阻止層、正孔阻止層、励起子阻止層などの阻止層を発光層に隣接して設けてもいい。電子阻止層とは発光層から正孔輸送層へ電子が漏れることを防ぐ層であり、正孔阻止層とは発光層から電子輸送層へ正孔が漏れることを防ぐ層である。励起子阻止層は発光層で生成した励起子が周辺の層へ拡散することを防止し、励起子を発光層内に閉じ込める機能を有する。

本発明の一態様において、電子輸送帯域が陰極側の正孔阻止層を含み、該正孔阻止層が発明化合物を含むことが好ましい。また、前記正孔阻止層が前記発光層に隣接することが好ましい。

[0419] 前記有機ＥＬ素子の各層は従来公知の蒸着法、塗布法等により形成することができる。例えば、真空蒸着法、分子線蒸着法（ＭＢＥ法）などの蒸着法、あるいは、層を形成する化合物の溶液を用いた、ディッピング法、スピンコーティング法、キャストリング法、バーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

[0420] 各層の膜厚は特に制限されないが、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、逆に厚すぎると高い駆動電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常５ｎｍ～１０μｍであり、１０ｎｍ～０．２μｍがより好ましい。

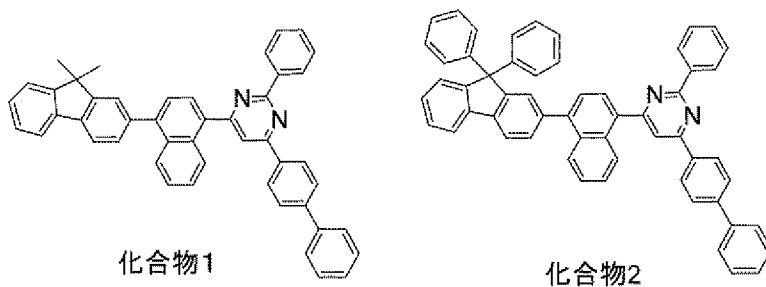
[0421] 前記有機ＥＬ素子は、有機ＥＬパネルモジュール等の表示部品、テレビ、携帯電話、パーソナルコンピュータ等の表示装置、及び、照明、車両用灯具の発光装置等の電子機器に使用できる。

実施例

[0422] 以下、実施例を用いて本発明をさらに詳細に説明するが、本発明は以下の実施例に限定されるものではない。

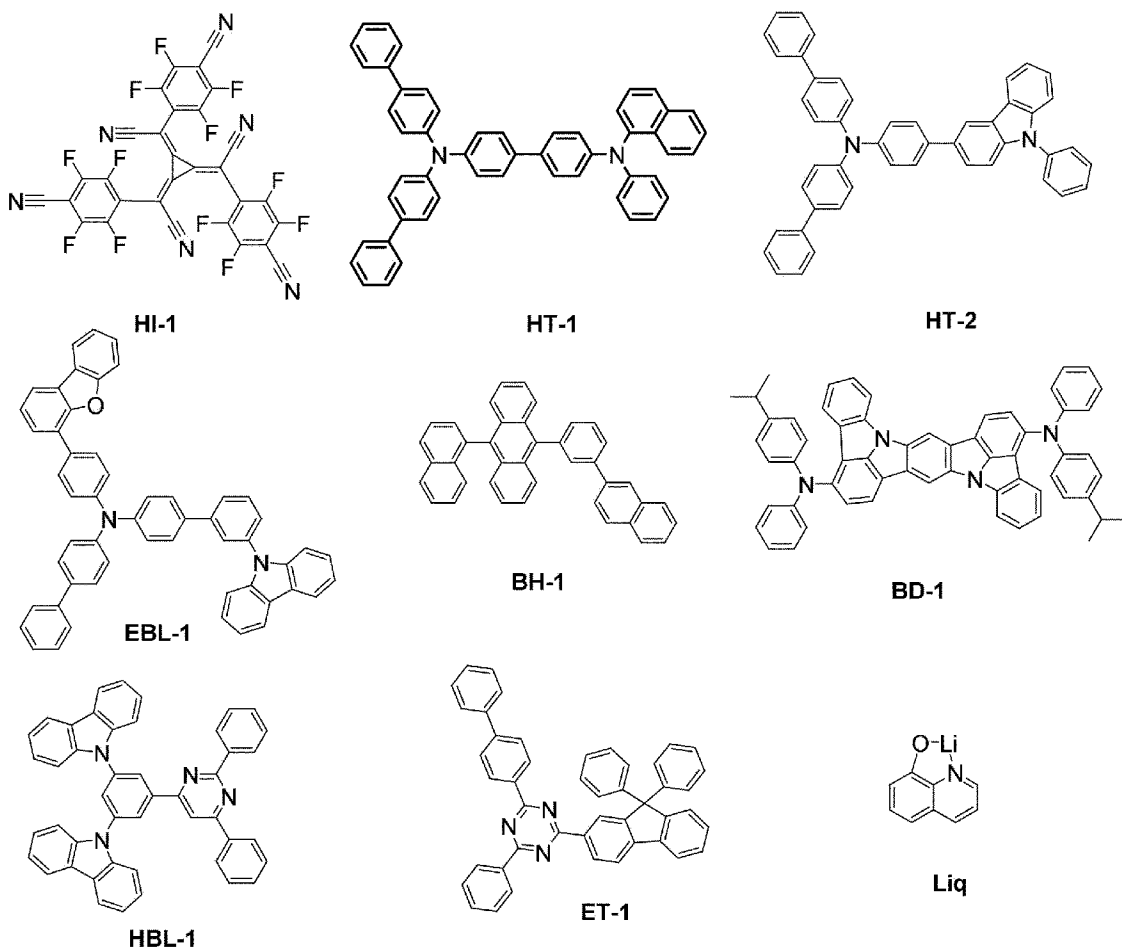
[0423] 実施例１～２の有機ＥＬ素子（１）の製造に用いた発明化合物

[化236]



[0424] 有機ＥＬ素子（１）の製造に用いた他の化合物

[化237]



[0425] 有機EL素子 (I) の作製

実施例 1

25 mm × 75 mm × 1.1 mm のITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）を、イソプロピルアルコール中で5分間超音波洗浄した後、30分間UVオゾン洗浄した。ITOの膜厚は、130 nm とした。

洗浄後のITO透明電極付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-1と化合物HI-1を共蒸着し、膜厚10 nmの正孔注入層を形成した。化合物HT-1と化合物HI-1の質量比（HT-1 : HI-1）は97 : 3であった。

次に、正孔注入層上に化合物HT-1を蒸着し、膜厚80 nmの第1正孔

輸送層を形成した。

次に、この第1正孔輸送層上にEBL-1を蒸着し、膜厚5nmの第2正孔輸送層を形成した。

次に、この第2正孔輸送層上に、化合物BH-1（ホスト材料）と化合物BD-1（ドーパント材料）を共蒸着し、膜厚20nmの発光層を形成した。化合物BH-1と化合物BD-1の質量比（BH-1：BD-1）は99：1であった。

次に、この発光層の上に、化合物1を蒸着して膜厚5nmの第1電子輸送層を形成した。

次に、この第1電子輸送層上に、化合物ET-1とLiqを共蒸着し、膜厚25nmの第2電子輸送層を形成した。化合物ET-1とLiqの質量比（ET-1：Liq）は50：50であった。

次に、この第2電子輸送層上に、Ybを蒸着して膜厚1nmの電子注入性電極を形成した。

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

このようにして得られた実施例1の有機EL素子（1）の層構成を以下に示す。

ITO(130)/HT-1:HI-1=97:3 (10)/HT-1(80)/EBL-1(5)/BH-1:BD-1=99:1(20)/化合物1(5)/ET-1:Liq=50:50(25)/Yb(1)/Al(80)

上記層構成において、括弧内の数字は膜厚（nm）であり、比は質量比である。

[0426] 素子寿命（LT95）の測定

得られた有機EL素子（1）を室温下、電流密度50mA/cm²で直流駆動し、輝度が初期輝度の95%に減少するまでの時間（h）を測定し、これを95%寿命（LT95）とした。結果を表1に示す。

[0427] 実施例2

第1電子輸送層材料を、化合物1から化合物2に変えた以外は、実施例1

と同様にして有機EL素子（I）を作製し、LT95を測定した。結果を表1に示す。

[0428] [表1]

表1

	第1電子輸送層材料	LT95(h) @50mA/cm ²
実施例1	化合物1	253
実施例2	化合物2	180

[0429] 表1の結果から、本発明の化合物は素子寿命が改善された有機EL素子を提供することが分かる。

[0430] 有機EL素子（II）の作製

実施例3

25mm×75mm×1.1mmのITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）を、イソプロピルアルコール中で5分間超音波洗浄した後、30分間UVオゾン洗浄した。ITOの膜厚は、130nmとした。

洗浄後のITO透明電極付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-2と化合物HI-1を共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層を形成した。化合物HT-2と化合物HI-1の質量比（HT-2：HI-1）は97：3であった。

次に、正孔注入層上に化合物HT-2を蒸着し、膜厚80nmの第1正孔輸送層を形成した。

次に、この第1正孔輸送層上にEBL-1を蒸着し、膜厚5nmの第2正孔輸送層を形成した。

次に、この第2正孔輸送層上に、化合物BH-1（ホスト材料）と化合物BD-1（ドーパント材料）を共蒸着し、膜厚20nmの発光層を形成した。化合物BH-1と化合物BD-1の質量比（BH-1：BD-1）は99：1であった。

次に、この発光層の上に、化合物1を蒸着して膜厚5 nmの第1電子輸送層を形成した。

次に、この第1電子輸送層上に、化合物ET-1とLiqを共蒸着し、膜厚25 nmの第2電子輸送層を形成した。化合物ET-1とLiqの質量比(ET-1:Liq)は50:50であった。

次に、この第2電子輸送層上に、Ybを蒸着して膜厚1 nmの電子注入性電極を形成した。

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

このようにして得られた実施例3の有機EL素子(II)のLT95を、実施例1と同様にして測定した。その結果を表2に示し、実施例3の有機EL素子(II)の層構成を以下に示す。

ITO(130)/HT-2:HI-1=97:3(10)/HT-2(80)/EBL-1(5)/BH-1:BD-1=99:1(20)/化合物1(5)/ET-1:Liq=50:50(25)/Yb(1)/Al(80)

上記層構成において、括弧内の数字は膜厚(nm)であり、比は質量比である。

[0431] 実施例4

第1電子輸送層材料を、化合物1から化合物2に変えた以外は、実施例3と同様にして有機EL素子(II)を作製し、LT95を測定した。結果を表2に示す。

[0432] [表2]

表2

	第1電子輸送層材料	LT95(h) @50mA/cm ²
実施例3	化合物1	284
実施例4	化合物2	215

[0433] 表2の結果から、本発明の化合物は素子寿命が改善された有機EL素子を提供することが分かる。

[0434] 有機EL素子(III)の作製

実施例 5

25 mm×75 mm×1.1 mmのITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）を、イソプロピルアルコール中で5分間超音波洗浄した後、30分間UVオゾン洗浄した。ITOの膜厚は、130 nmとした。

洗浄後のITO透明電極付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-1と化合物HI-1を共蒸着し、膜厚10 nmの正孔注入層を形成した。化合物HT-1と化合物HI-1の質量比（HT-1：HI-1）は97：3であった。

次に、正孔注入層上に化合物HT-1を蒸着し、膜厚80 nmの第1正孔輸送層を形成した。

次に、この第1正孔輸送層上にEBL-1を蒸着し、膜厚5 nmの第2正孔輸送層を形成した。

次に、この第2正孔輸送層上に、化合物BH-1（ホスト材料）と化合物BD-1（ドーパント材料）を共蒸着し、膜厚20 nmの発光層を形成した。化合物BH-1と化合物BD-1の質量比（BH-1：BD-1）は99：1であった。

次に、この発光層の上に、HBL-1を蒸着して膜厚5 nmの第1電子輸送層を形成した。

次に、この第1電子輸送層上に、化合物1とLi qを共蒸着し、膜厚25 nmの第2電子輸送層を形成した。化合物1とLi qの質量比（化合物1：Li q）は50：50であった。

次に、この第2電子輸送層上に、Ybを蒸着して膜厚1 nmの電子注入性電極を形成した。

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

このようにして得られた実施例5の有機EL素子（111）のLT95を

、実施例 1 と同様にして測定した。その結果を表 3 に示し、実施例 5 の有機 EL 素子 (I I I) の層構成を以下に示す。

ITO(130)/HT-1:HI-1=97:3(10)/HT-1(80)/EBL-1(5)/BH-1:BD-1=99:1(20)/HBL-1(5)/化合物1:Liq=50:50(25)/Yb(1)/Al(80)

上記層構成において、括弧内の数字は膜厚 (n m) であり、比は質量比である。

[0435] 実施例 6

第 2 電子輸送層材料を、化合物 1 から化合物 2 に変えた以外は、実施例 5 と同様にして有機 EL 素子 (I I I) を作製し、LT95 を測定した。結果を表 3 に示す。

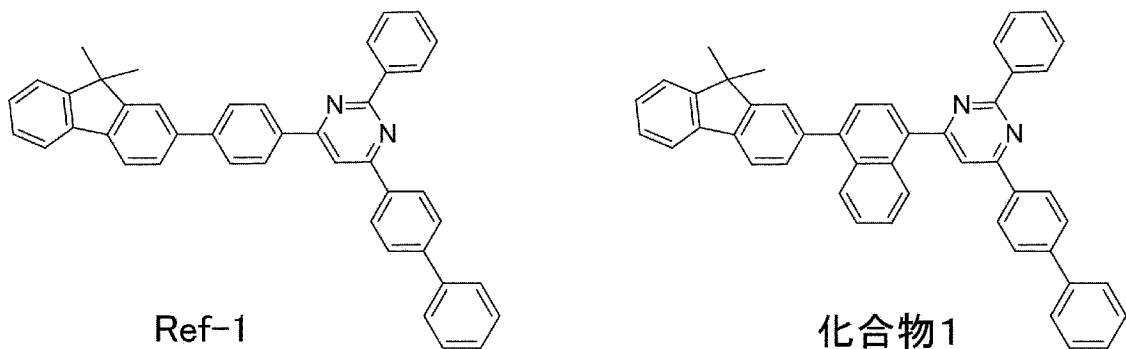
[0436] [表3]

表3

	第2電子輸送層材料	LT95(h) @50mA/cm ²
実施例5	化合物1	174
実施例6	化合物2	192

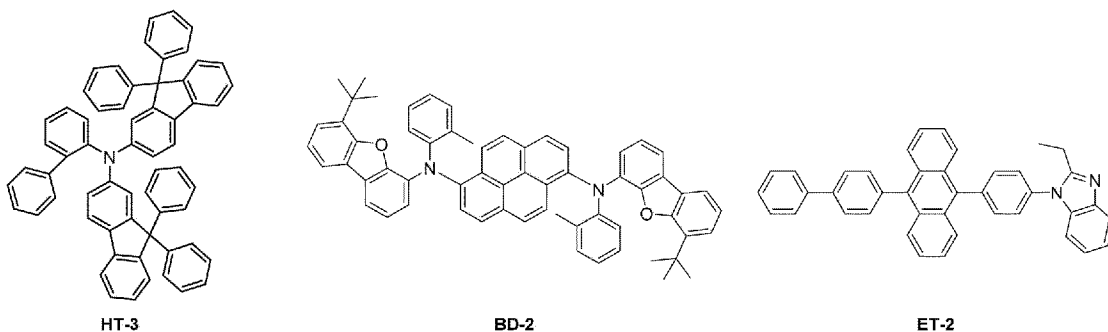
[0437] 表 3 の結果から、本発明の化合物は素子寿命が改善された有機 EL 素子を提供することが分かる。

[0438] 比較例 1 及び実施例 7 の有機 EL 素子 (I V) の製造に用いた発明化合物 [化238]



[0439] 有機 EL 素子 (I V) の製造に用いた他の化合物 (有機 EL 素子 (I) の製造に用いた上述の「他の化合物」以外の化合物を示す)

[化239]



[0440] 有機EL素子（I V）の作製

比較例 1

25 mm×75 mm×1.1 mmのITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）を、イソプロピルアルコール中で5分間超音波洗浄した後、30分間UVオゾン洗浄した。ITOの膜厚は、130 nmとした。

洗浄後のITO透明電極付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-3と化合物HI-1を共蒸着し、膜厚10 nmの正孔注入層を形成した。化合物HT-3と化合物HI-1の質量比（HT-3：HI-1）は97：3であった。

次に、正孔注入層上に化合物HT-3を蒸着し、膜厚80 nmの第1正孔輸送層を形成した。

次に、この第1正孔輸送層上にEBL-1を蒸着し、膜厚10 nmの第2正孔輸送層を形成した。

次に、この第2正孔輸送層上に、化合物BH-1（ホスト材料）と化合物BD-2（ドーパント材料）を共蒸着し、膜厚25 nmの発光層を形成した。化合物BH-1と化合物BD-2の質量比（BH-1：BD-2）は96：4であった。

次に、この発光層の上に、Ref-1を蒸着して膜厚10 nmの第1電子輸送層を形成した。

次に、この第1電子輸送層上に、化合物ET-2を蒸着し、膜厚15 nm

の第2電子輸送層を形成した。

次に、この第2電子輸送層上に、LiFを蒸着して膜厚1nmの電子注入性電極を形成した。

そして、この電子注入性電極上に金属Alを蒸着して膜厚50nmの金属陰極を形成した。

このようにして得られた比較例1の有機EL素子(IV)のLT95を、実施例1と同様にして測定した。その結果を表4に示し、比較例1の有機EL素子(IV)の層構成を以下に示す。

ITO(130)/HT-3:HI-1=97:3(10)/HT-3(80)/EBL-1(10)/BH-1:BD-2=96:4(25)/Ref-1(10)/ET-2(15)/LiF(1)/Al(50)

[0441] 実施例7

第1電子輸送層材料を、Ref-1から化合物1に変えた以外は、比較例1と同様にして有機EL素子(IV)を作製し、LT95を測定した。結果を表4に示す。

[0442] [表4]

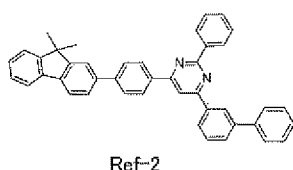
表4

	第1電子輸送層材料	LT95(h) @50mA/cm ²
比較例1	Ref-1	131
実施例7	化合物1	158

[0443] 比較例2

第1電子輸送層材料を、Ref-1からRef-2に変えた以外は、比較例1と同様にして有機EL素子(IV)を作製し、LT95を測定した。結果を表5に示す。

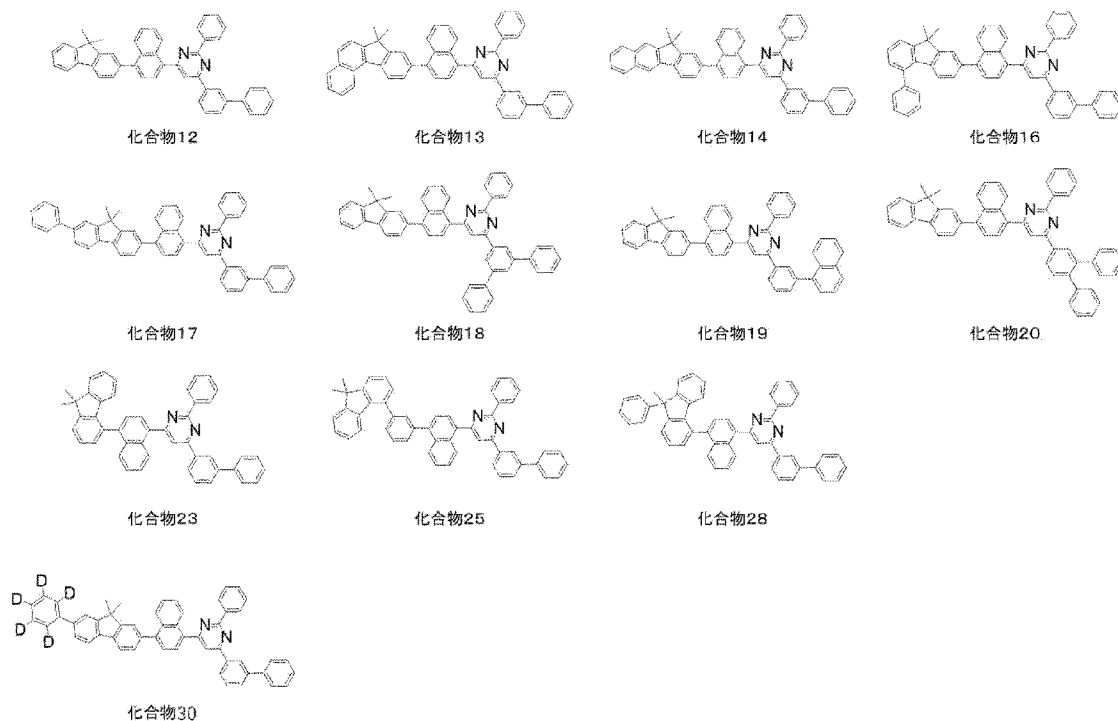
[化240]



[0444] 実施例8～19

第1電子輸送層材料を、R e f - 1 から化合物12～20、23、25、28、30のいずれか1つに変えた以外は、比較例1と同様にして有機EL素子（I V）を作製し、L T 95を測定した。結果を表5に示す。

[化241]



[0445] [表5]

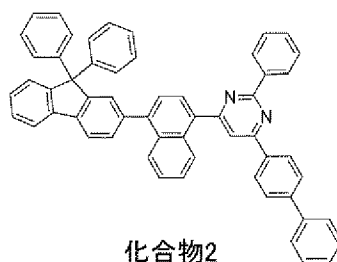
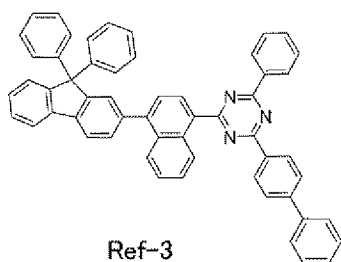
表5

	第1電子輸送材料	LT95(h) @50mA/cm ²
比較例2	R e f - 2	94
実施例8	化合物12	133
実施例9	化合物13	132
実施例10	化合物14	100
実施例11	化合物16	107
実施例12	化合物17	110
実施例13	化合物18	143
実施例14	化合物19	129
実施例15	化合物20	212
実施例16	化合物23	141
実施例17	化合物25	118
実施例18	化合物28	112
実施例19	化合物30	113

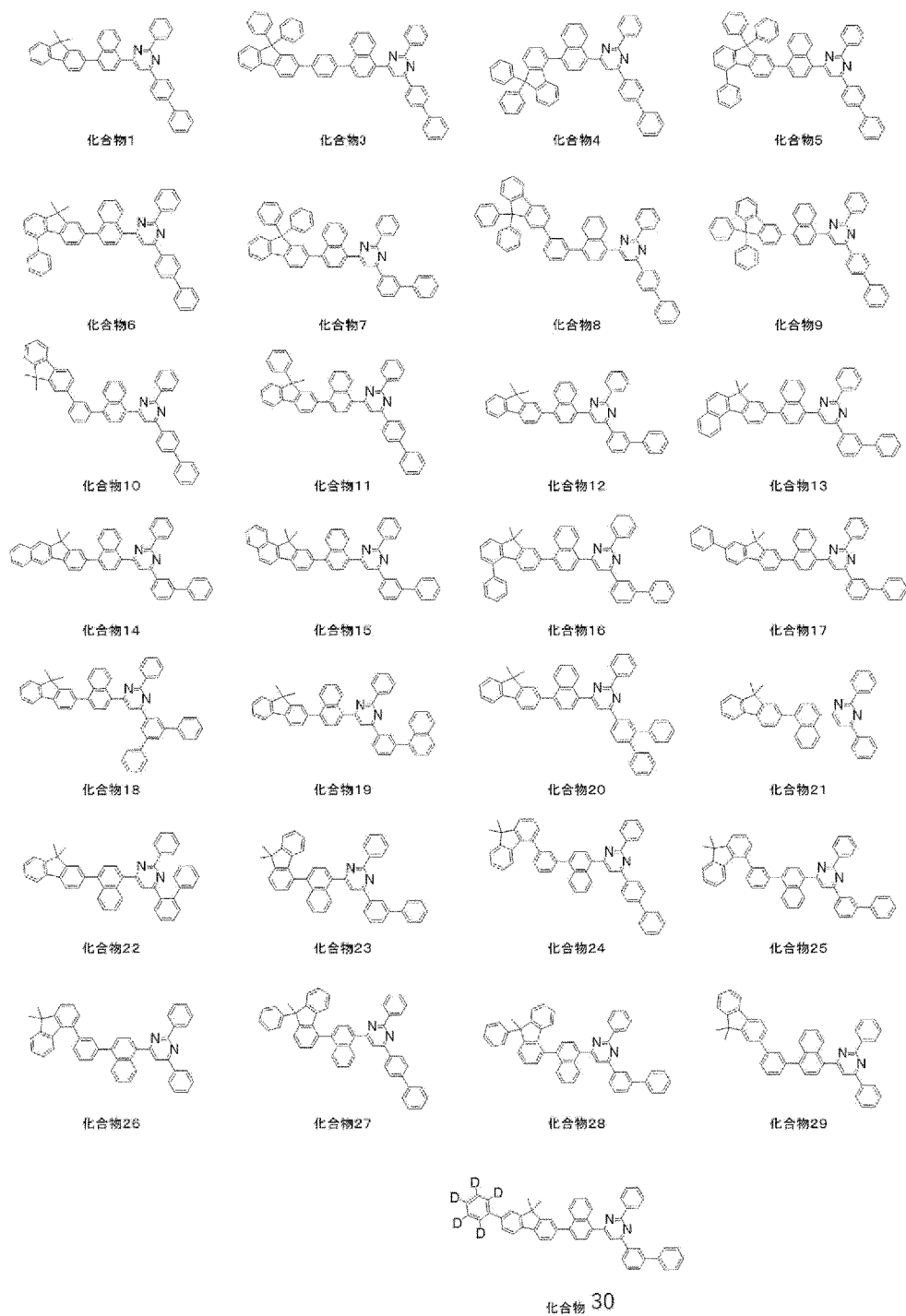
[0446] 比較例3及び実施例20～49の有機EL素子（V）の製造に用いた発明

化合物

[化242]

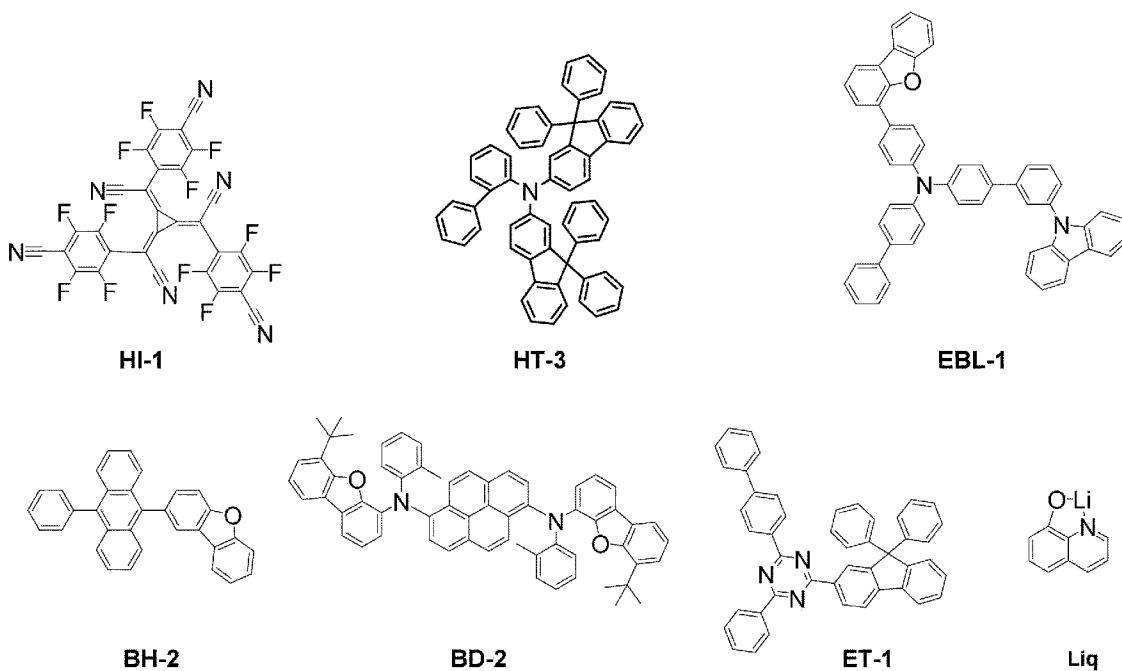


[化243]



[0447] 有機EL素子（V）の製造に用いた他の化合物（有機EL素子（V）の製造に用いた上述の「他の化合物」以外の化合物を示す）

[化244]



[0448] 有機EL素子（V）の作製

比較例3

25 mm×75 mm×1.1 mmのITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）を、イソプロピルアルコール中で5分間超音波洗浄した後、30分間UVオゾン洗浄した。ITOの膜厚は、130 nmとした。

洗浄後のITO透明電極付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-3と化合物HI-1を共蒸着し、膜厚10 nmの正孔注入層を形成した。化合物HT-3と化合物HI-1の質量比（HT-3：HI-1）は97：3であった。

次に、正孔注入層上に化合物HT-3を蒸着し、膜厚80 nmの第1正孔輸送層を形成した。

次に、この第1正孔輸送層上に化合物EBL-1を蒸着し、膜厚5 nmの第2正孔輸送層を形成した。

次に、この第2正孔輸送層上に、化合物BH-2（ホスト材料）と化合物

B D - 2 (ドーパント材料) を共蒸着し、膜厚 25 nm の発光層を形成した。化合物 B H - 2 と化合物 B D - 2 の質量比 (B H - 2 : B D - 2) は 96 : 4 であった。

次に、この発光層の上に、R e f - 3 を蒸着して膜厚 5 nm の第 1 電子輸送層を形成した。

次に、この第 1 電子輸送層上に、化合物 E T - 1 と化合物 L i q を共蒸着し、膜厚 20 nm の第 2 電子輸送層を形成した。化合物 E T - 1 と化合物 L i q の質量比 (E T - 1 : L i q) は 50 : 50 であった。

次に、この第 2 電子輸送層上に、Y b を蒸着して膜厚 1 nm の電子注入性電極を形成した。

そして、この電子注入性電極上に金属 A l を蒸着して膜厚 50 nm の金属陰極を形成した。

このようにして得られた比較例 1 の有機 E L 素子 (I V) の電圧を、以下のようにして測定した。その結果を表 6 に示し、比較例 3 の有機 E L 素子 (V) の層構成を以下に示す。

<駆動電圧の測定方法>

電流密度が 10 mA / cm² となるように得られた有機 E L 素子に電圧を印加したときの電圧 (単位 : V) を計測した。結果を表 6 に示す。

<比較例 3 の有機 E L 素子 (V) の層構成>

ITO(130)/HT-3:HI-1=97:3(10)/HT-3(80)/EBL-1(5)/BH-2:BD-2=96:4(25)/Ref-3(5)/ET-1:Liq=50:50(20)/Yb(1)/Al(50)

[0449] 実施例 20 ~ 49

第 1 電子輸送層材料を、R e f - 3 から化合物 2、1、30 のいずれか 1 つに変えた以外は、比較例 3 と同様にして有機 E L 素子 (V) を作製し、電圧 (V) を測定した。結果を表 6 に示す。

[0450]

[表6]

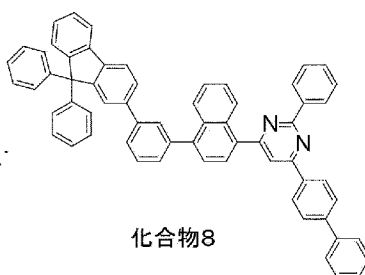
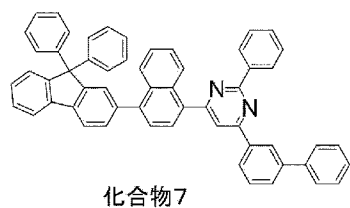
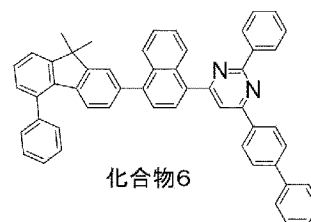
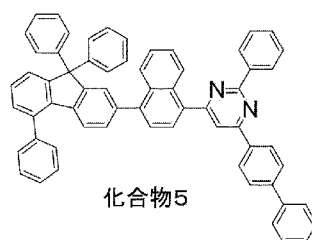
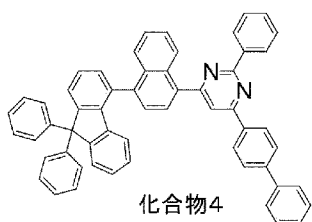
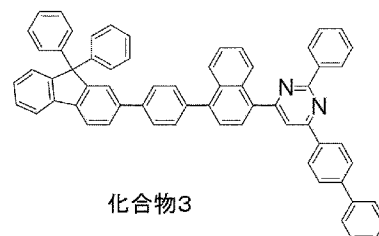
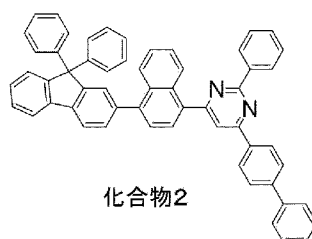
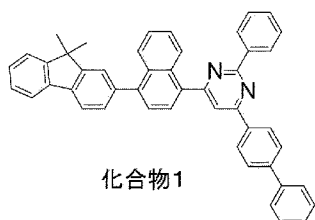
表 6

	第1電子輸送材料	電圧(V) @10mA/cm ²
比較例3	Ref-3	4.1
実施例20	化合物2	3.4
実施例21	化合物1	3.7
実施例22	化合物3	3.5
実施例23	化合物4	3.4
実施例24	化合物5	3.4
実施例25	化合物6	3.5
実施例26	化合物7	3.4
実施例27	化合物8	3.4
実施例28	化合物9	3.5
実施例29	化合物10	3.6
実施例30	化合物11	3.4
実施例31	化合物12	3.6
実施例32	化合物13	3.6
実施例33	化合物14	3.6
実施例34	化合物15	3.5
実施例35	化合物16	3.6
実施例36	化合物17	3.6
実施例37	化合物18	3.9
実施例38	化合物19	3.7
実施例39	化合物20	4.0
実施例40	化合物21	3.5
実施例41	化合物22	3.6
実施例42	化合物23	3.7
実施例43	化合物24	3.8
実施例44	化合物25	3.7
実施例45	化合物26	3.6
実施例46	化合物27	3.8
実施例47	化合物28	3.6
実施例48	化合物29	3.5
実施例49	化合物30	3.6

[0451] 表6の結果から、本発明の化合物は電圧が改善された有機EL素子を提供することが分かる。

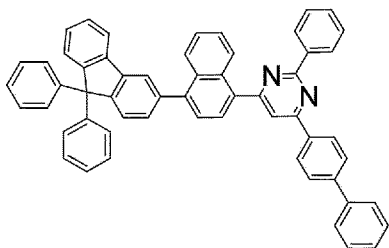
[0452] 合成例で合成した化合物

[化245]

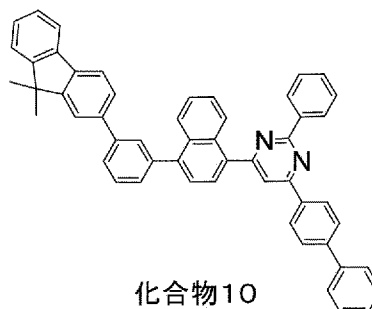


[0453]

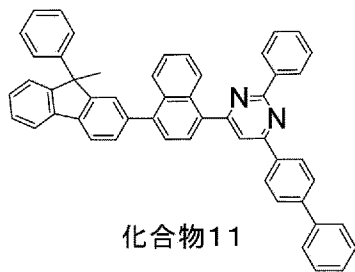
[化246]



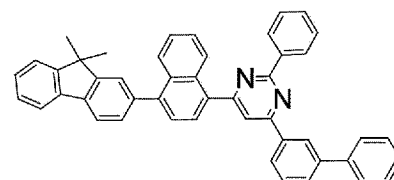
化合物9



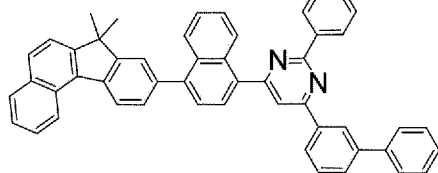
化合物10



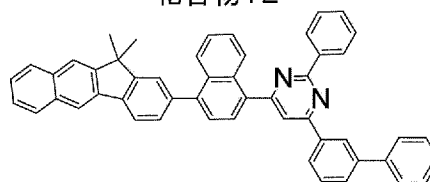
化合物11



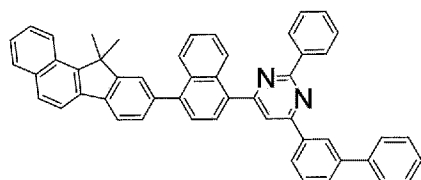
化合物12



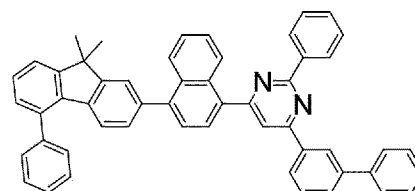
化合物13



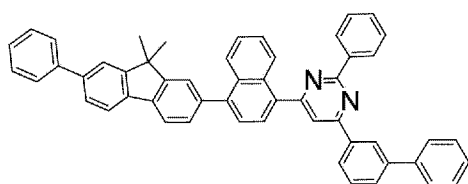
化合物14



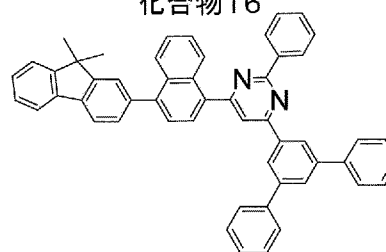
化合物15



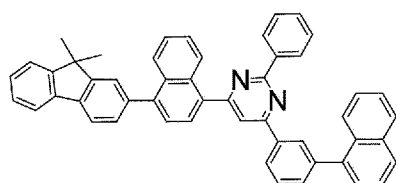
化合物16



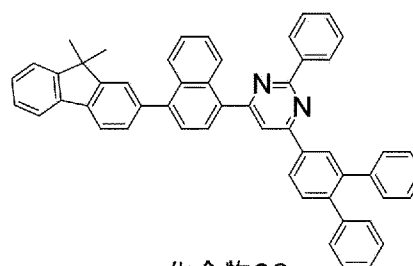
化合物17



化合物18



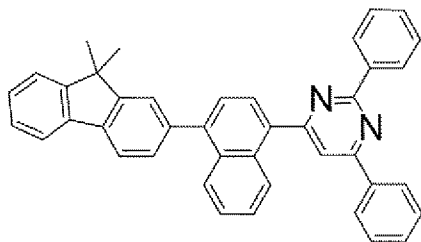
化合物19



化合物20

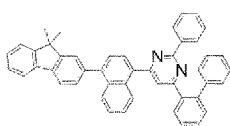
[0454]

[化247]

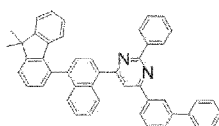


化合物21

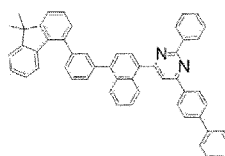
[0455] [化248]



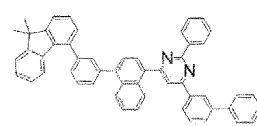
化合物22



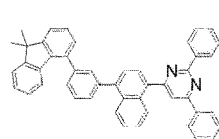
化合物23



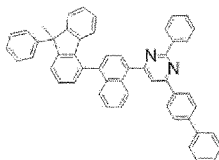
化合物24



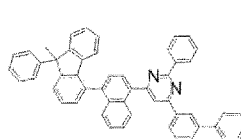
化合物25



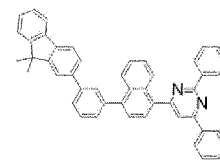
化合物26



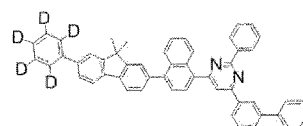
化合物27



化合物28



化合物29

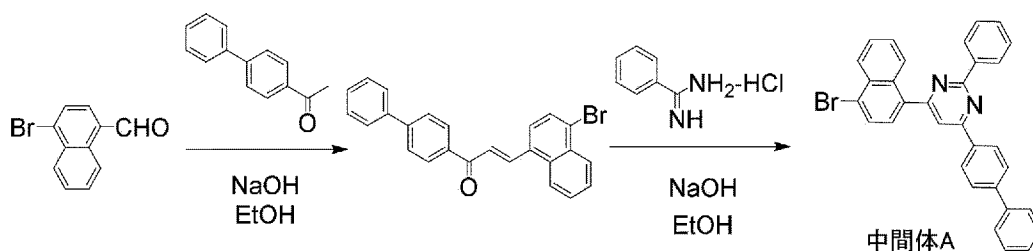


化合物 30

[0456] 合成実施例 1 : 化合物 1 の合成

(1-1) 中間体 A の合成

[化249]

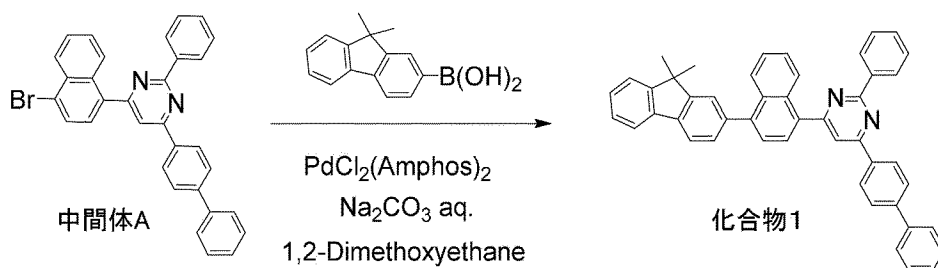


4-ブロモ-1-ナフトアルデヒド (8.0 g)、4-アセチルビフェニル (7.0 g)、水酸化ナトリウム (0.27 g) をエタノール 600 mL に加えて、室温で 5 時間攪拌した。次いで、ベンズアミジン塩酸塩 (8.0

g)、水酸化ナトリウム(2.7g)を添加して、70℃で5時間攪拌した。反応終了後、析出物を濾別し、シリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒;ヘキサン/トルエン)で精製し、中間体Aを白色固体(5.0g、収率28%)として得た。

[0457] (1-2) 化合物1の合成

[化250]

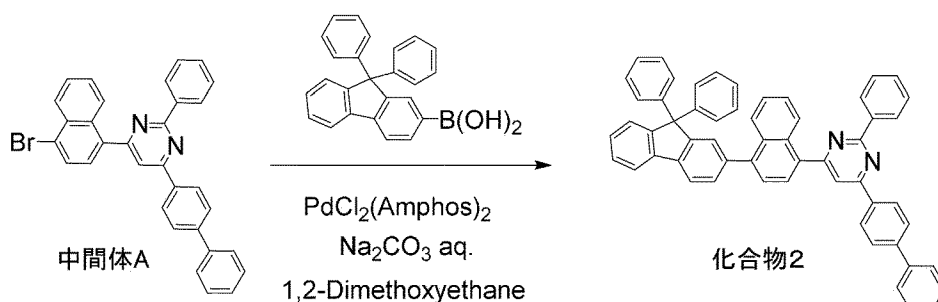


中間体A(5.0g)と、9,9-ジメチルフルオレン-2-ボロン酸(2.8g)を1,2-ジメトキシエタン(100mL)に加え、溶液にアルゴンガスを5分通じた。これにジクロロビス[ジー-tert-ブチル(p-ジメチルアミノフェニル)ホスフィノ]パラジウム(II)($\text{PdCl}_2(\text{Amphos})_2$)(0.28g)と炭酸ナトリウム水溶液(2M、12mL)を加え、アルゴン雰囲気下で攪拌しながら75℃で24時間加熱した。反応溶液を溶媒留去し、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒;ヘキサン/トルエン)により精製することにより化合物1を白色固体(5.0g、収率82%)として得た。

マスマスペクトル分析の結果、分子量626.80に対して $m/e = 626$ であり、目的物であると同定した。

[0458] 合成実施例2：化合物2の合成

[化251]

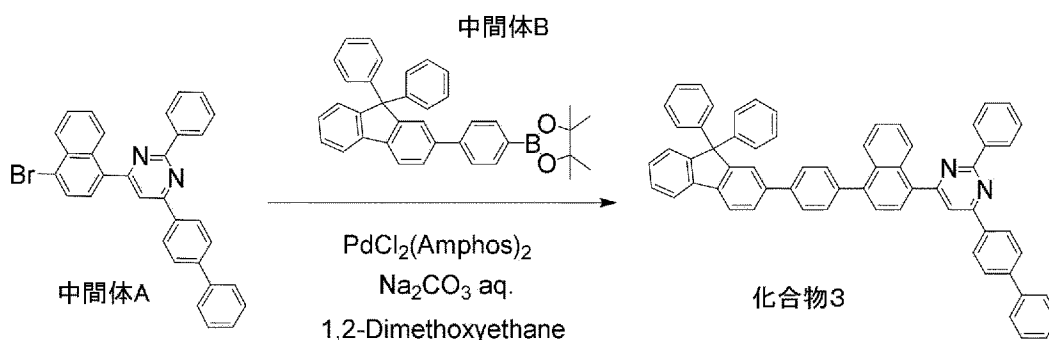


中間体 A (5.0 g) と、9,9-ジフェニルフルオレン-2-ボロン酸 (4.2 g) をそれぞれ用いて合成実施例 1 の「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 2 を白色固体 (6.7 g、収率 91%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 750.95 に対して $m/e = 750$ であり、目的物であると同定した。

[0459] 合成実施例 3：化合物 3 の合成

[化252]

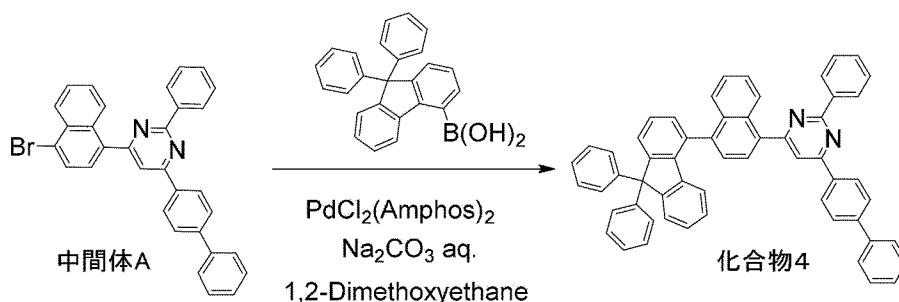


中間体 A (5.0 g) と、韓国公開特許第 10-2015-013726 6 公報に記載の方法で合成した中間体 B (5.2 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 の「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 3 を白色固体 (4.5 g、収率 56%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 827.04 に対して $m/e = 827$ であり、目的物であると同定した。

[0460] 合成実施例 4：化合物 4 の合成

[化253]



中間体 A (5.0 g) と、9,9-ジフェニルフルオレン-4-ボロン酸

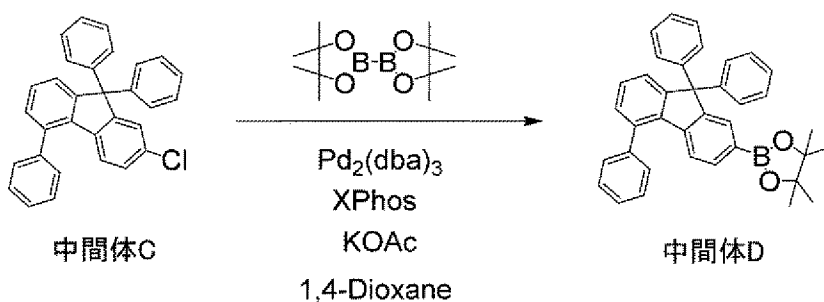
(4. 2 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 の「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 4 を白色固体 (4. 0 g、収率 55%) として得た。

マスマスペクトル分析の結果、分子量 750. 95 に対して $m/e = 750$ であり、目的物であると同定した。

[0461] 合成実施例 5：化合物 5 の合成

(5-1) 中間体 D の合成

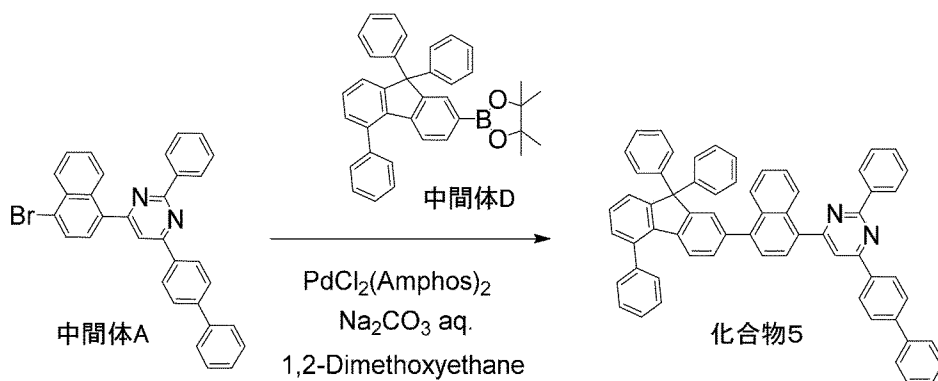
[化254]



国際公開第 2019/115577 号公報に記載された方法で合成した中間体 C (5. 0 g)、ビス (ピナコラト) ジボロン (3. 6 g)、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) ($\text{Pd}_2(\text{dba})_3$) (0. 21 g)、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2', 4', 6'-トリイソプロピルビフェニル (XPhos) (0. 45 g)、酢酸カリウム (2. 3 g) を 1, 4-ジオキサン (80 mL) に加え、懸濁液にアルゴンガスを 5 分通じた。アルゴン雰囲気下で攪拌しながら 24 時間 90℃ で加熱した。反応溶液を溶媒留去し、トルエンと水を加えて有機相を分取した。有機相を濃縮し得られた残渣をカラムクロマトグラフィーに付し、中間体 D を得た (4. 5 g、収率 74%)。

[0462] (5-2) 化合物 5 の合成

[化255]



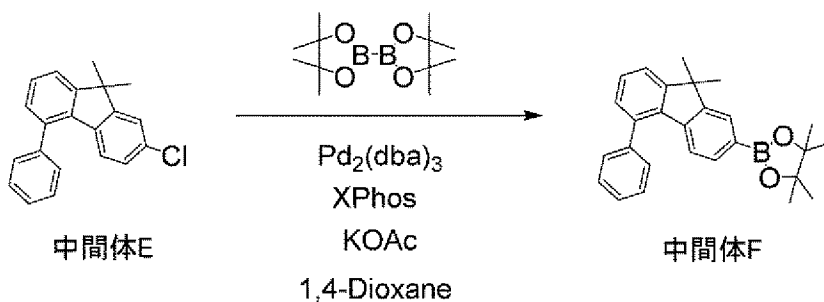
中間体A (4.0 g) と、中間体D (4.2 g) をそれぞれ用いて、合成実施例1の「(1-2) 化合物1の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物5を白色固体 (4.4 g、収率68%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量827.04に対して $m/e = 827$ であり、目的物であると同定した。

[0463] 合成実施例6：化合物6の合成

(6-1) 中間体Fの合成

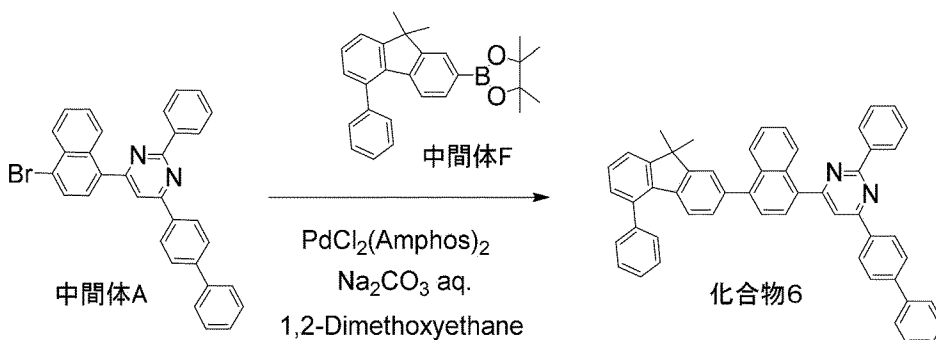
[化256]



国際公開第2019/115577号公報に記載された方法で合成した中間体E (5.0 g) を用いて、合成実施例5の「(5-1) 中間体Dの合成」に記載した条件に従うことにより、中間体Fを得た (4.9 g、収率75%)。

[0464] (6-2) 化合物6の合成

[化257]



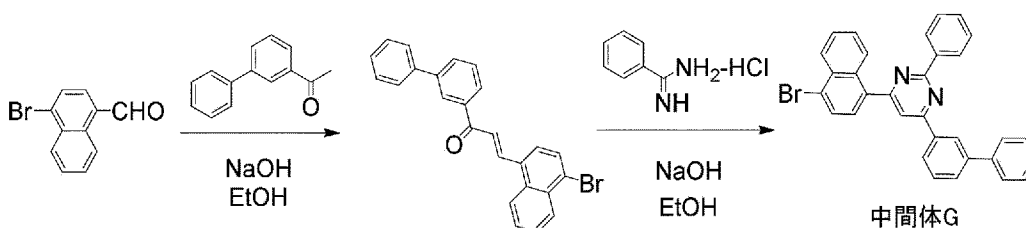
中間体A (4.0 g) と、中間体F (3.2 g) をそれぞれ用いて、合成実施例1の「(1-2) 化合物1の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物6を白色固体 (4.1 g、収率75%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量702.90に対して $m/e = 702$ であり、目的物であると同定した。

[0465] 合成実施例7：化合物7の合成

(7-1) 中間体Gの合成

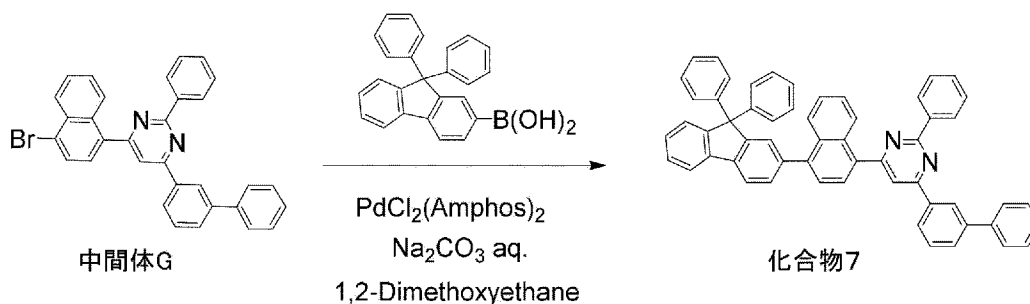
[化258]



4-ブromo-1-ナフトアルデヒド (9.0 g)、3-アセチルビフェニル (7.5 g)、水酸化ナトリウム (0.15 g) をエタノール300 mLに加えて、室温で5時間攪拌した。次いで、ベンズアミジン塩酸塩 (6.0 g)、水酸化ナトリウム (1.8 g) を添加して、70℃で5時間攪拌した。反応終了後、析出物を濾別し、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒；ヘキサン／トルエン) で精製し、中間体Gを白色固体 (5.9 g、収率30%) として得た。

[0466] (7-2) 化合物7の合成

[化259]

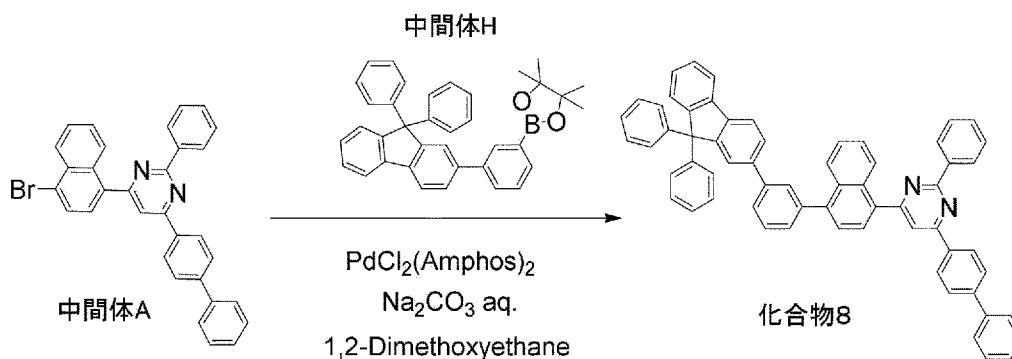


中間体G (5.0 g) と、9,9-ジフェニルフルオレン-2-ボロン酸 (4.2 g) をそれぞれ用いて、合成実施例1の「(1-2) 化合物1の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物7を白色固体 (6.1 g、収率83%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量750.95に対して $m/e = 750$ であり、目的物であると同定した。

[0467] 合成実施例8：化合物8の合成

[化260]

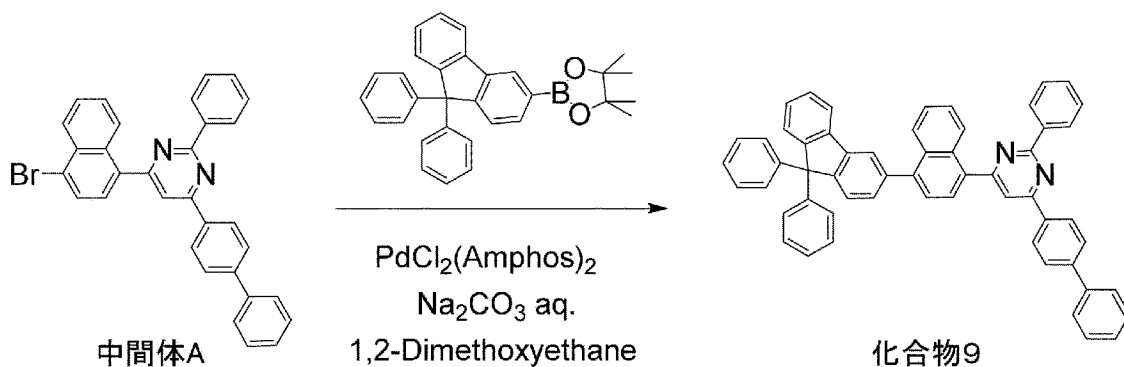


中間体A (5.0 g) と、中間体H (5.2 g) をそれぞれ用いて、合成実施例1の「(1-2) 化合物1の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物8を白色固体 (5.8 g、収率72%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量827.04に対して $m/e = 827$ であり、目的物であると同定した。

[0468] 合成実施例9：化合物9の合成

[化261]

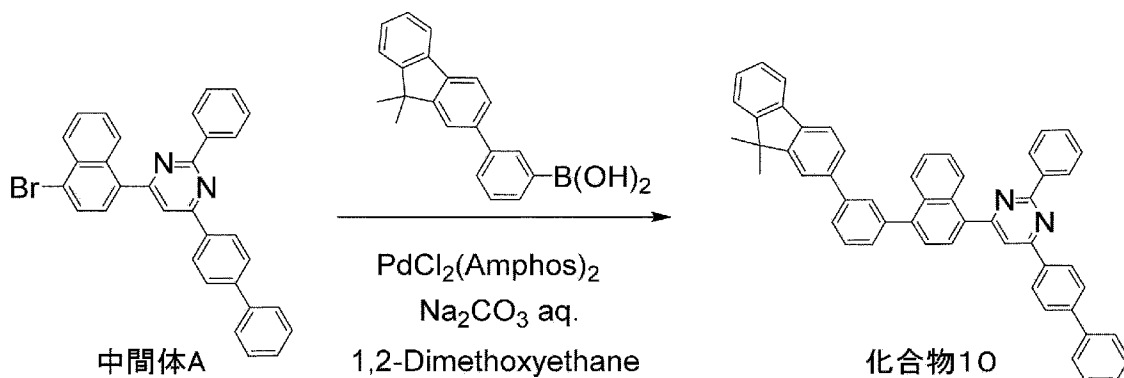


中間体A (3.40 g) と、2-(9,9-ジフェニル-9H-フルオレン-3-イル)-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン (3.53 g) をそれぞれ用いて、合成実施例1における「(1-2) 化合物1の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物9を白色固体 (4.74 g、収率95%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量750.95に対して $m/e = 751$ であり、目的物であると同定した。

[0469] 合成実施例10：化合物10の合成

[化262]

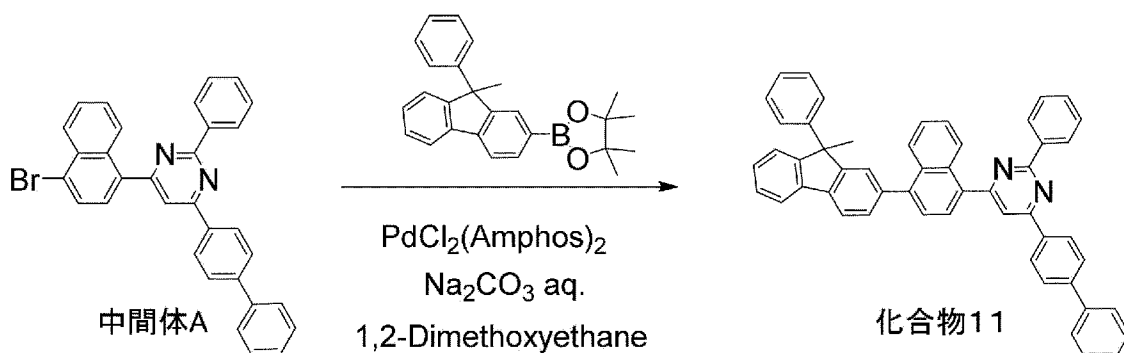


中間体A (5.00 g) と、[3-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)フェニル] ボロン酸 (3.37 g) をそれぞれ用いて、合成実施例1における「(1-2) 化合物1の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物10を白色固体 (3.95 g、収率58%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量702.901に対して $m/e = 703$ であり、目的物であると同定した。

[0470] 合成実施例 11：化合物 11 の合成

[化263]

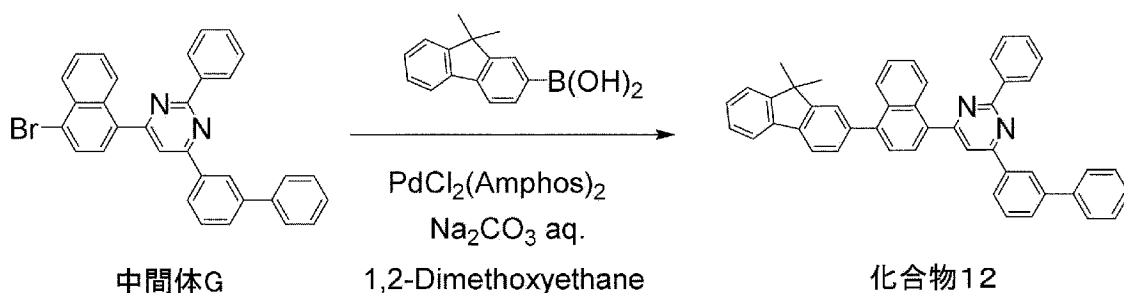


中間体 A (3.60 g) と、4,4,5,5-テトラメチル-2-(9-メチル-9-フェニル-9H-フルオレン-2-イル)-1,3,2-ジオキサボロラン (3.22 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 における「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 11 を白色固体 (1.56 g、収率 32%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 688.874 に対して $m/e = 689$ であり、目的物であると同定した。

[0471] 合成実施例 12：化合物 12 の合成

[化264]

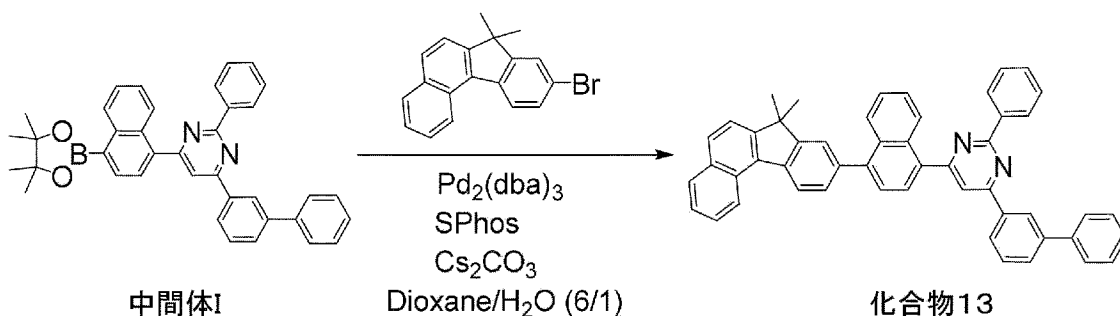


中間体 G (5.00 g) と、(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル) ボロン酸 (2.55 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 における「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 12 を白色固体 (4.36 g、収率 71%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 626.803 に対して $m/e = 627$ であり、目的物であると同定した。

[0472] 合成実施例 13 : 化合物 13 の合成

[化265]

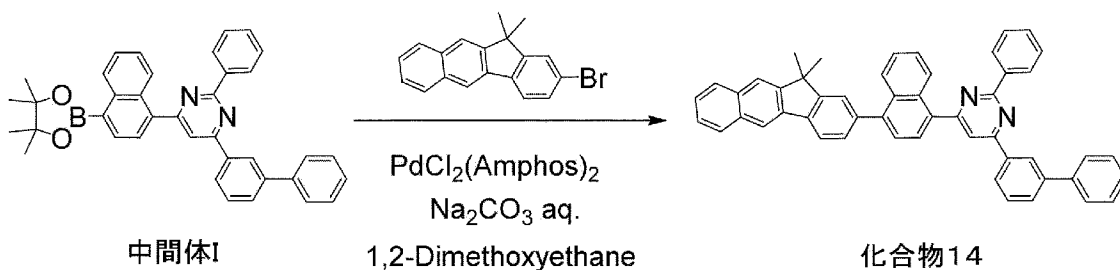


中間体 I (5.00 g) と、9-ブロモ-7,7-ジメチル-7H-ベンゾ[c]フルオレン (3.03 g)、Pd₂(dba)₃ (0.16 g)、SPhos (0.29 g)、炭酸セシウム (5.81 g)、をフラスコに入れ、アルゴンガスで置換した後、1,4-ジオキサン (38 mL)、H₂O (6.3 mL) を加え、90℃で18時間加熱攪拌した。反応溶液を溶媒留去し、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒; ヘキサン/トルエン) により精製した後に、シクロヘキサンで洗浄することで、化合物 13 を白色固体 (4.45 g、収率 74%) として得た。

マスマスペクトル分析の結果、分子量 676.863 に対して $m/e = 677$ であり、目的物であると同定した。

[0473] 合成実施例 14 : 化合物 14 の合成

[化266]

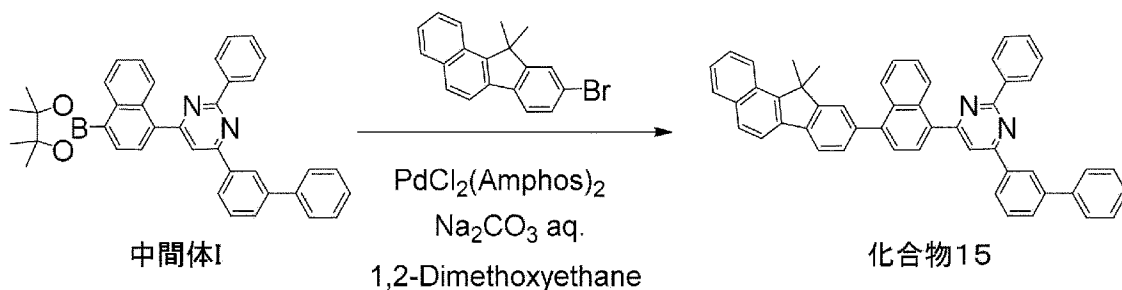


中間体 I (5.00 g) と、2-ブロモ-11,11-ジメチル-11H-ベンゾ[b]フルオレン (3.17 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 における「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 14 を白色固体 (2.91 g、収率 48%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 676.863 に対して $m/e = 677$ であり、目的物であると同定した。

[0474] 合成実施例 15：化合物 15 の合成

[化267]

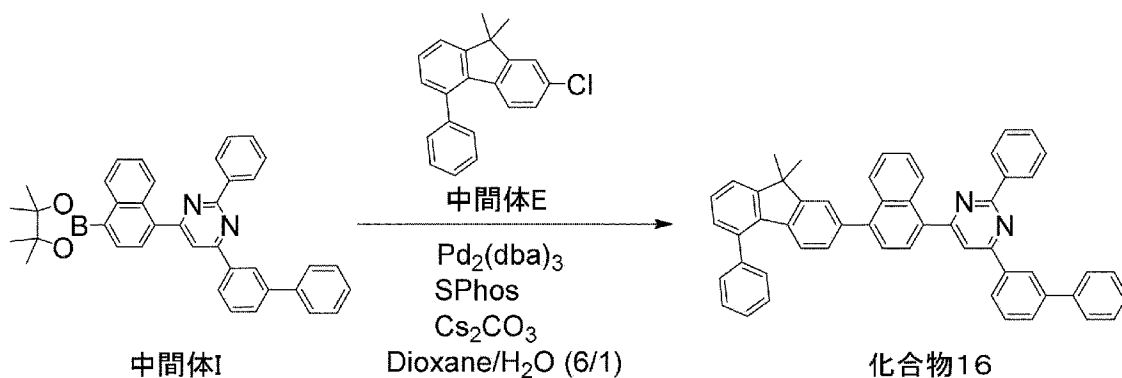


中間体 I (5.00 g) と、9-ブロモ-11,11-ジメチル-11H-ベンゾ [a] フルオレン (3.17 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 における「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 15 を白色固体 (3.77 g、収率 62%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 676.863 に対して $m/e = 677$ であり、目的物であると同定した。

[0475] 合成実施例 16：化合物 16 の合成

[化268]



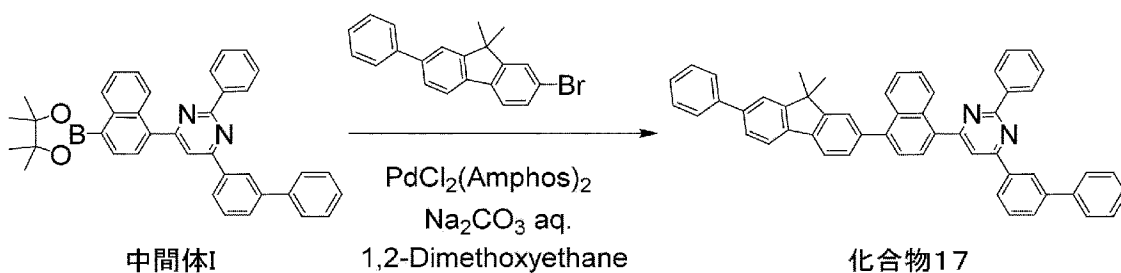
中間体 I (5.50 g) と、2-クロロ-9,9-ジメチル-5-フェニル-9H-フルオレン (3.14 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 13 における「化合物 13 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 16 を白色固体 (4.51 g、収率 59%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 702.901 に対して $m/e = 70$

3であり、目的物であると同定した。

[0476] 合成実施例 17：化合物 17 の合成

[化269]

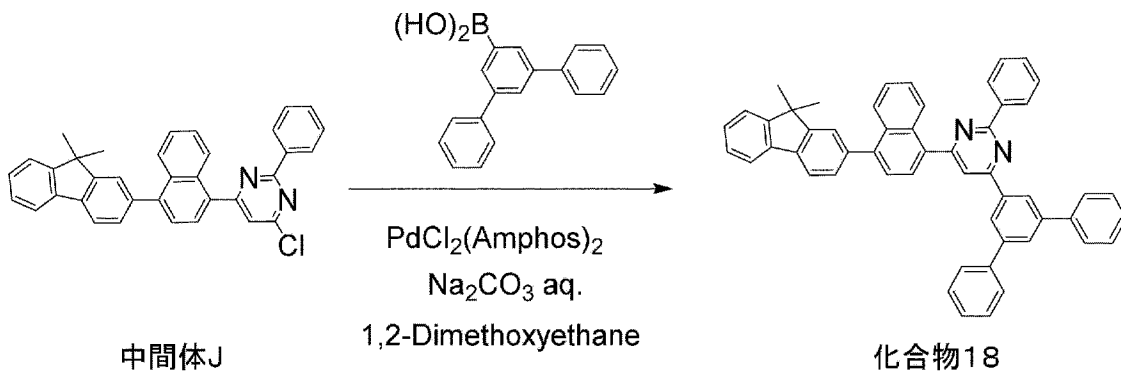


中間体 I (5.61 g) と、2-ブロモ-9,9-ジメチル-7-フェニル 9H-フルオレン (3.84 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 における「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 17 を白色固体 (3.79 g、収率 54%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 702.901 に対して $m/e = 703$ であり、目的物であると同定した。

[0477] 合成実施例 18：化合物 18 の合成

[化270]

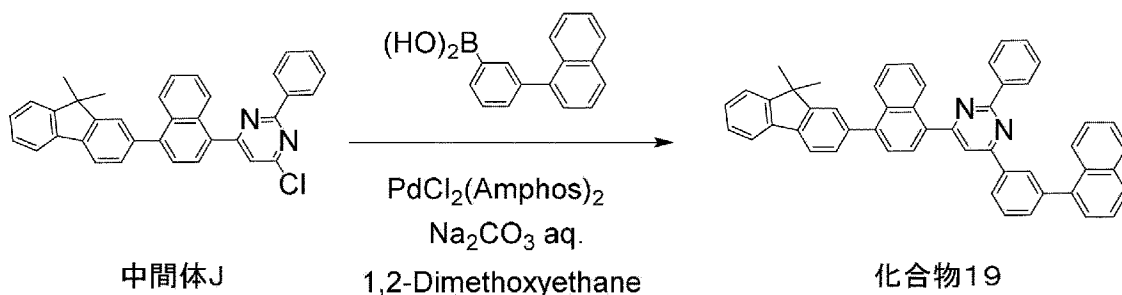


中間体 J (4.00 g) と、(3,5-ジフェニルフェニル) ボロン酸 (2.37 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 における「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 18 を白色固体 (4.77 g、収率 86%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 702.901 に対して $m/e = 703$ であり、目的物であると同定した。

[0478] 合成実施例 19 : 化合物 19 の合成

[化271]

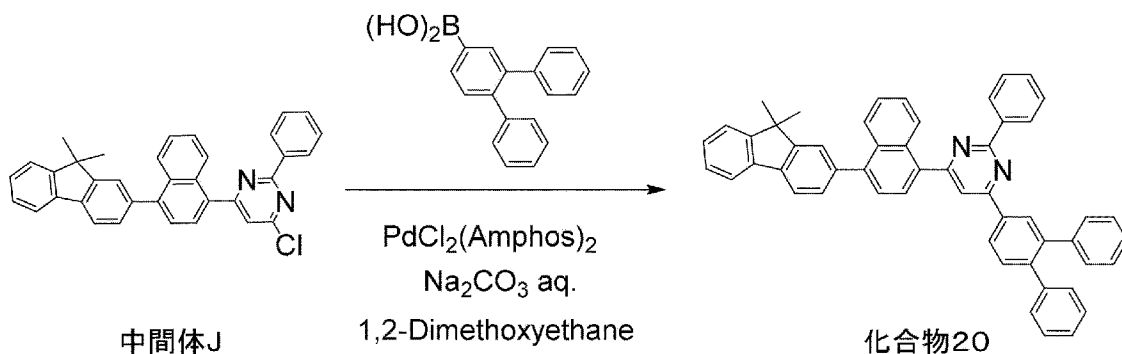


中間体 J (4.00 g) と、[3-(ナフタレン-1-イル)フェニル]ボロン酸 (2.14 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 における「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 19 を白色固体 (5.02 g、収率 94%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 676.863 に対して $m/e = 677$ であり、目的物であると同定した。

[0479] 合成実施例 20 : 化合物 20 の合成

[化272]

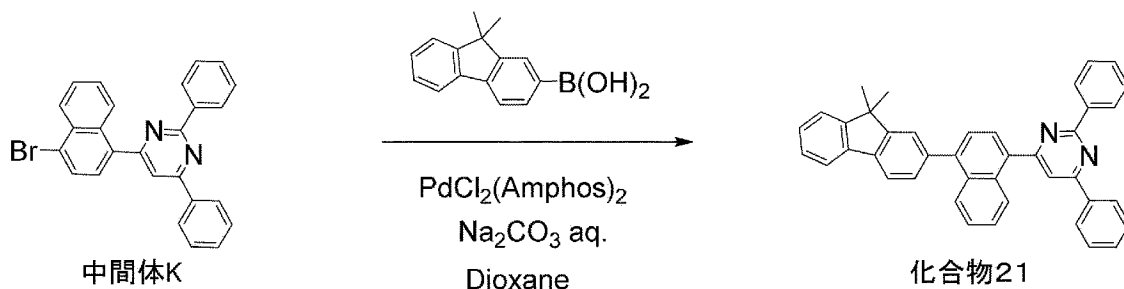


中間体 J (4.00 g) と、[1,1'-2,1'-ターフェニル]-4-ボロン酸 (2.37 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 における「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 20 を白色固体 (4.84 g、収率 88%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 702.901 に対して $m/e = 703$ であり、目的物であると同定した。

[0480] 合成実施例 21 : 化合物 21 の合成

[化273]



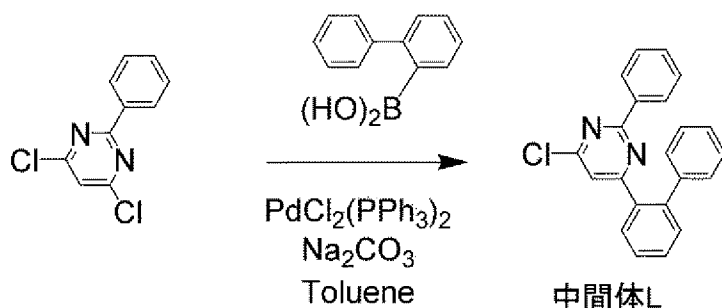
中間体K（6.00 g）と、9,9-ジメチルフルオレン-2-ボロン酸（4.25 g）をそれぞれ用いて、反応溶媒にジオキサンを用いた他は、合成実施例1の「(1-2) 化合物1の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物21を白色固体（4.84 g、収率88%）として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量550.705に対して $m/e = 551$ であり、目的物であると同定した。

[0481] 合成実施例22：化合物22の合成

(22-1)：中間体Lの合成

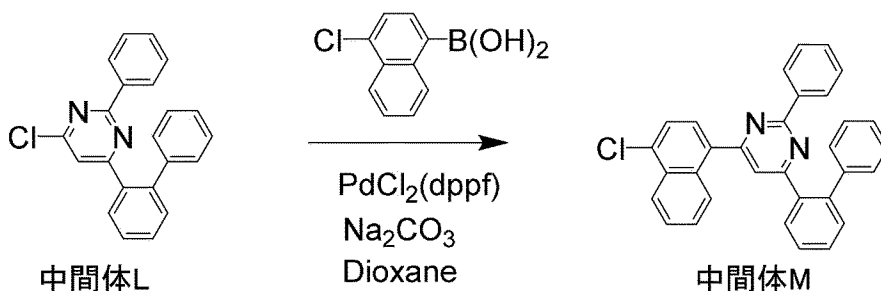
[化274]



4,6-ジクロロ-2-フェニルピリミジン（17.0 g）と2-ビフェニルボロン酸（19.4 g）、 $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ （1.3 g）を加えた反応容器をアルゴン置換し、トルエン755 mLと炭酸ナトリウム水溶液（2 M、113 mL）を加え、攪拌しながら86℃で6時間加熱した。反応溶液を留去し、メタノールを加えて析出した固体を濾取し、メタノールと水で洗浄した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（展開溶媒；ヘキサン／ジクロロメタン）により精製することにより中間体Lを白色固体（20.1 g、収率71%）として得た。

(22-2) : 中間体Mの合成

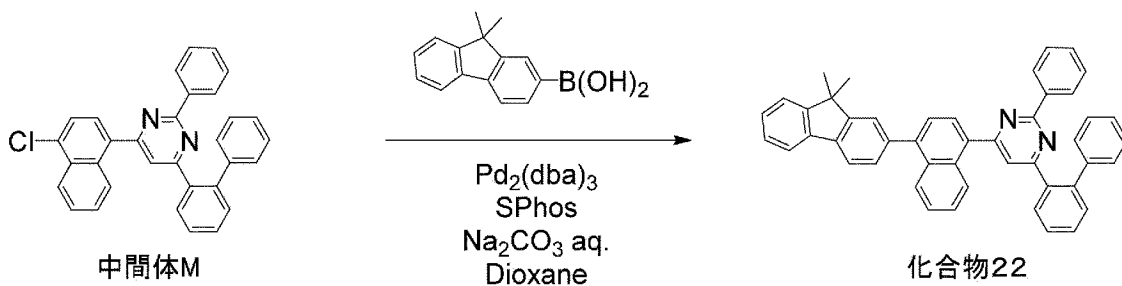
[化275]



中間体L (6.0 g) と 9,9-ジメチルフルオレン-2-ボロン酸 (3.73 g)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.22 g)、SPhos (0.40 g) を加えた反応容器をアルゴン置換し、ジオキサン 120 mL と炭酸ナトリウム水溶液 (2 M、15 mL) を加え、攪拌しながら 80℃ で 7 時間加熱した。反応溶液を留去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒; ヘキサン/ジクロロメタン) により精製することにより中間体Mを白色固体 (5.65 g、収率 69%) として得た。

(22-3) : 化合物22の合成

[化276]

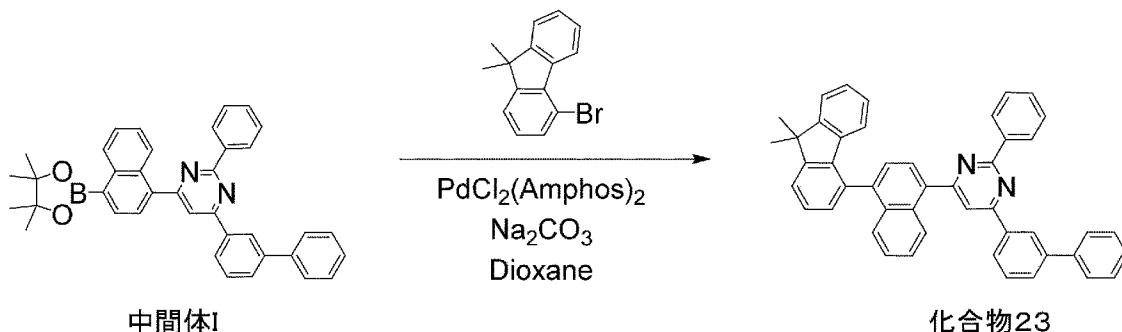


中間体M (5.65 g) と (4-クロロナフタレン-1-イル) ボロン酸 (3.8 g)、 $\text{PdCl}_2(\text{dppf})$ (0.52 g) を加えた反応容器をアルゴン置換し、ジオキサン 175 mL と炭酸ナトリウム水溶液 (2 M、22 mL) を加え、攪拌しながら 86℃ で 7 時間加熱した。反応溶液を留去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒; ヘキサン/ジクロロメタン) と酢酸エチルとヘキサンを用いた再結晶で精製することにより化合物22を白色固体 (5.83 g、収率 77%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 626.80 に対して $m/e = 627$ であり、目的物であると同定した。

[0482] 合成実施例 23：化合物 23 の合成

[化277]



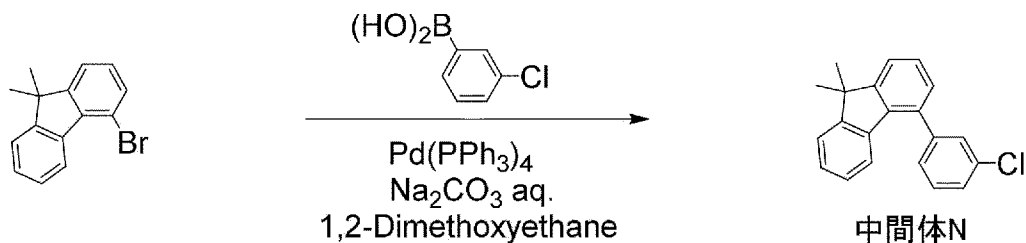
中間体 I (6.00 g) と、4-ブロモ-9,9-ジメチル-9H-フルオレン (3.80 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 の「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 23 を白色固体 (4.74 g、収率 70%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 626.80 に対して $m/e = 627$ であり、目的物であると同定した。

[0483] 合成実施例 24：化合物 24 の合成

(24-1)：中間体 N の合成

[化278]

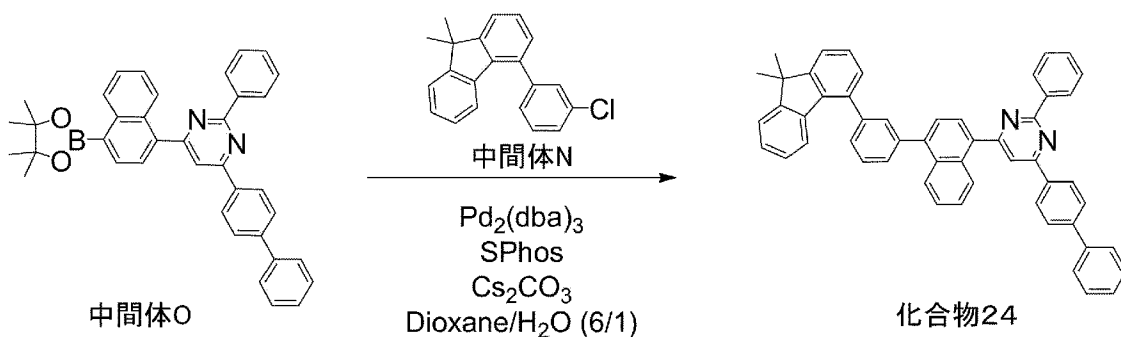


4-ブロモ-9,9-ジメチル-9H-フルオレン (10.0 g) と (3-クロロフェニル) ボロン酸 (5.8 g)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.85 g) を加えた反応容器をアルゴン置換し、1,2-ジメトキシエタン 366 mL と炭酸ナトリウム水溶液 (2M、55 mL) を加え、攪拌しながら 7 時間加熱還流した。反応溶液を留去した後、メタノールを加えて析出した固体を

濾取した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（展開溶媒；ヘキサン／ジクロロメタン）で精製することにより中間体Nを白色固体（8.33g、収率75%）として得た。

（24-2）：化合物24の合成

[化279]

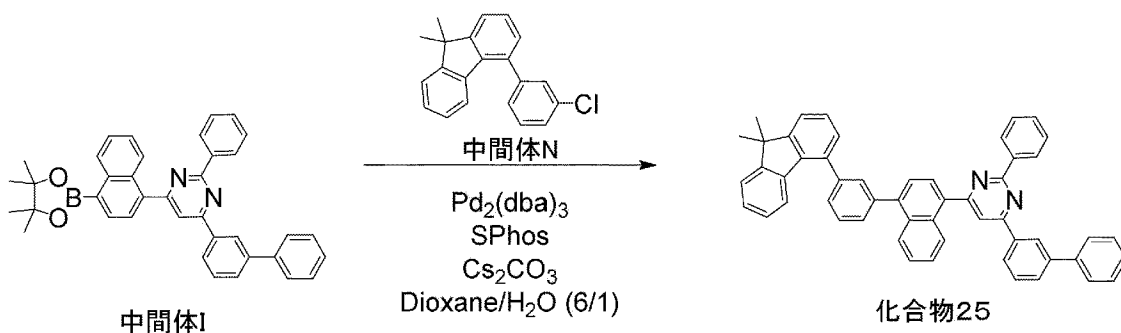


中間体O（5.61g）と、中間体N（3.66g）をそれぞれ用いて、合成実施例13における「化合物13の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物24を白色固体（4.68g、収率66%）として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量702.91に対して $m/e = 703$ であり、目的物であると同定した。

[0484] 合成実施例25：化合物25の合成

[化280]

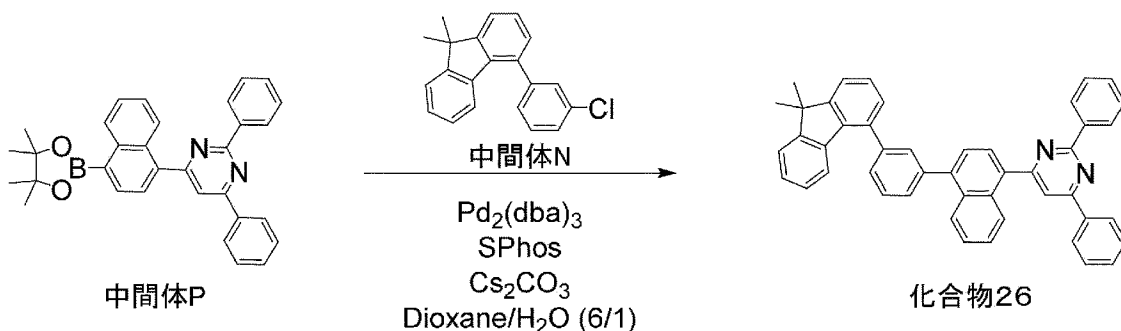


中間体I（4.50g）と、中間体N（2.94g）をそれぞれ用いて、合成実施例13における「化合物13の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物25を白色固体（4.64g、収率82%）として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量702.91に対して $m/e = 703$ であり、目的物であると同定した。

[0485] 合成実施例 26 : 化合物 26 の合成

[化281]

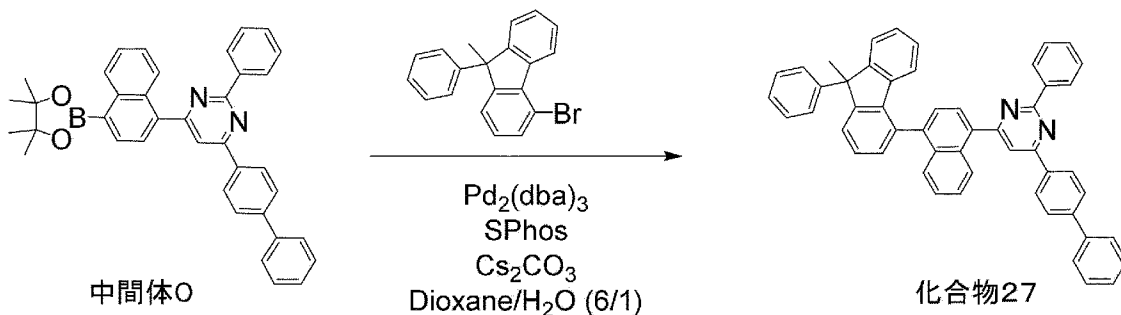


中間体 P (4.50 g) と、中間体 N (3.68 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 13 における「化合物 13 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 26 を白色固体 (4.91 g、収率 84%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 626.80 に対して $m/e = 627$ であり、目的物であると同定した。

[0486] 合成実施例 27 : 化合物 27 の合成

[化282]

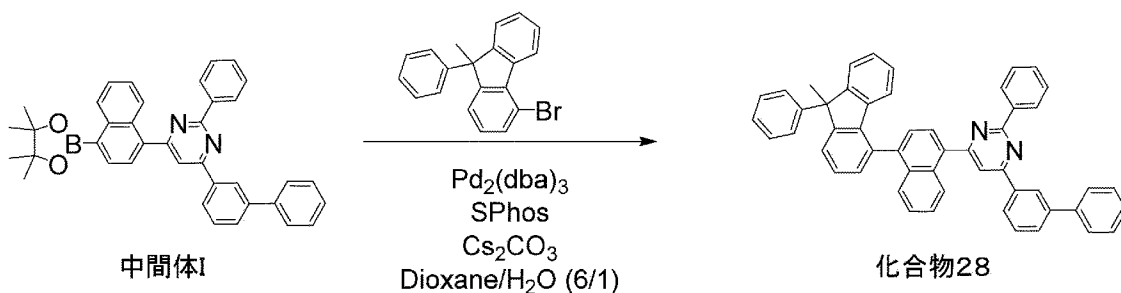


中間体 O (5.61 g) と、4-ブロモ-9-メチル-9-フェニル-9H-フルオレン (4.02 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 13 における「化合物 13 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 27 を白色固体 (3.16 g、収率 46%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 688.87 に対して $m/e = 689$ であり、目的物であると同定した。

[0487] 合成実施例 28 : 化合物 28 の合成

[化283]

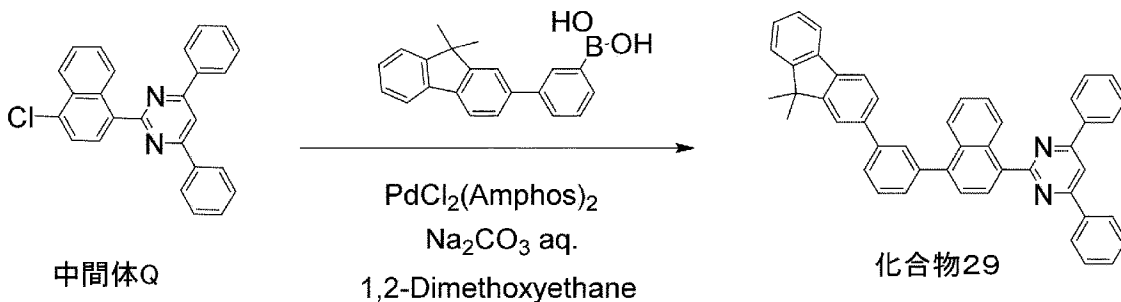


中間体 I (5.61 g) と、4-ブロモ-9-メチル-9-フェニル-9H-フルオレン (4.02 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 13 における「化合物 13 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 28 を白色固体 (1.87 g、収率 27%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 688.87 に対して $m/e = 689$ であり、目的物であると同定した。

[0488] 合成実施例 29：化合物 29 の合成

[化284]

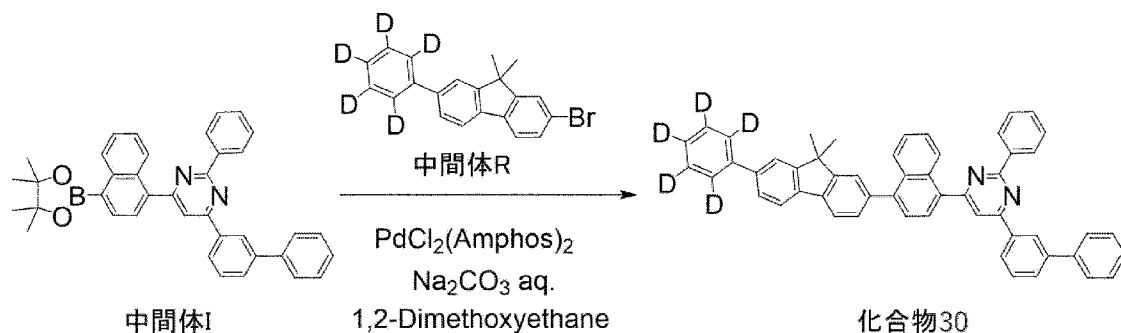


中間体 Q (5.00 g) と、B-[3-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)フェニル] ボロン酸 (4.4 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 の「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 29 を白色固体 (6.2 g、収率 78%) として得た。

マスペクトル分析の結果、分子量 626.8 に対して $m/e = 627$ であり、目的物であると同定した。

[0489] 合成実施例 30：化合物 30 の合成

[化285]



中間体 I (5.50 g) と、中間体 R (4.17 g) をそれぞれ用いて、合成実施例 1 の「(1-2) 化合物 1 の合成」に記載した条件に従うことにより、化合物 30 を白色固体 (4.31 g、収率 62%) として得た。

マススペクトル分析の結果、分子量707.93に対して $m/e=708$ であり、目的物であると同定した。

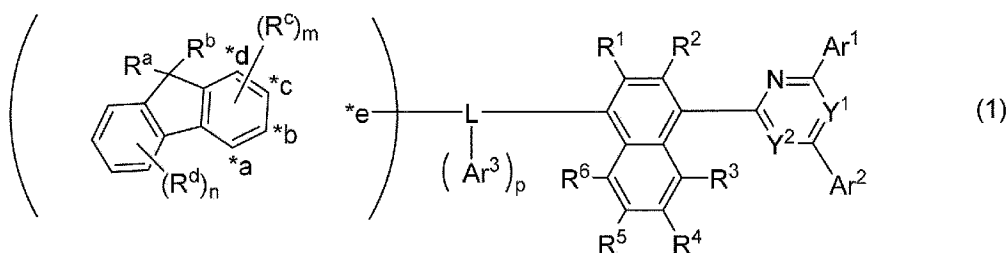
符号の説明

- [0490] 1、 1 1 有機 E L 素子
- 2 基板
- 3 陽極
- 4 陰極
- 5 発光層
- 6 正孔輸送帯域（正孔輸送層）
- 6 a 正孔注入層
- 6 b 第 1 正孔輸送層
- 6 c 第 2 正孔輸送層
- 7 電子輸送帯域（電子輸送層）
- 7 a 第 1 電子輸送層
- 7 b 第 2 電子輸送層
- 1 0、 2 0 発光ユニット

請求の範囲

[請求項1] 下記式（１）で表される化合物。

[化1]



（式（１）中、

Y^1 及び Y^2 は、いずれか一方が窒素原子であり、他方が CR^{10} である。

$Ar^1 \sim Ar^3$ は、それぞれ独立して、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。

L は、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 の（ $2 + p$ ）価の芳香族炭化水素環である。

p は、0 ～ 3 の整数であり、 L が単結合である場合、 p は 0 であり、 L が置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 の（ $2 + p$ ）価の芳香族炭化水素環である場合、 p は 0 ～ 3 の整数である。

Ar^3 が 2 個以上存在する場合、2 個以上の Ar^3 は、互いに同一であるか又は異なり、

$R^1 \sim R^6$ 、 R^{10} 、 R^c 、及び R^d は、それぞれ独立して、

水素原子、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

—O—(R₉₀₄)で表される基、

—S—(R₉₀₅)で表される基、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立して、

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り、

R^a及びR^bは、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置

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

R^1 と R^2 、 R^a と R^b 、及び隣接する 2 つの R^c は、互いに結合して環を形成せず、

R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、及び隣接する 2 つの R^d から選ばれる 1 以上の組において、隣接する 2 つが互いに結合して置換もしくは無置換の環を形成してもよい。

m は、3 である。

n は、4 である。

R^c は、互いに同一であるか又は異なり、

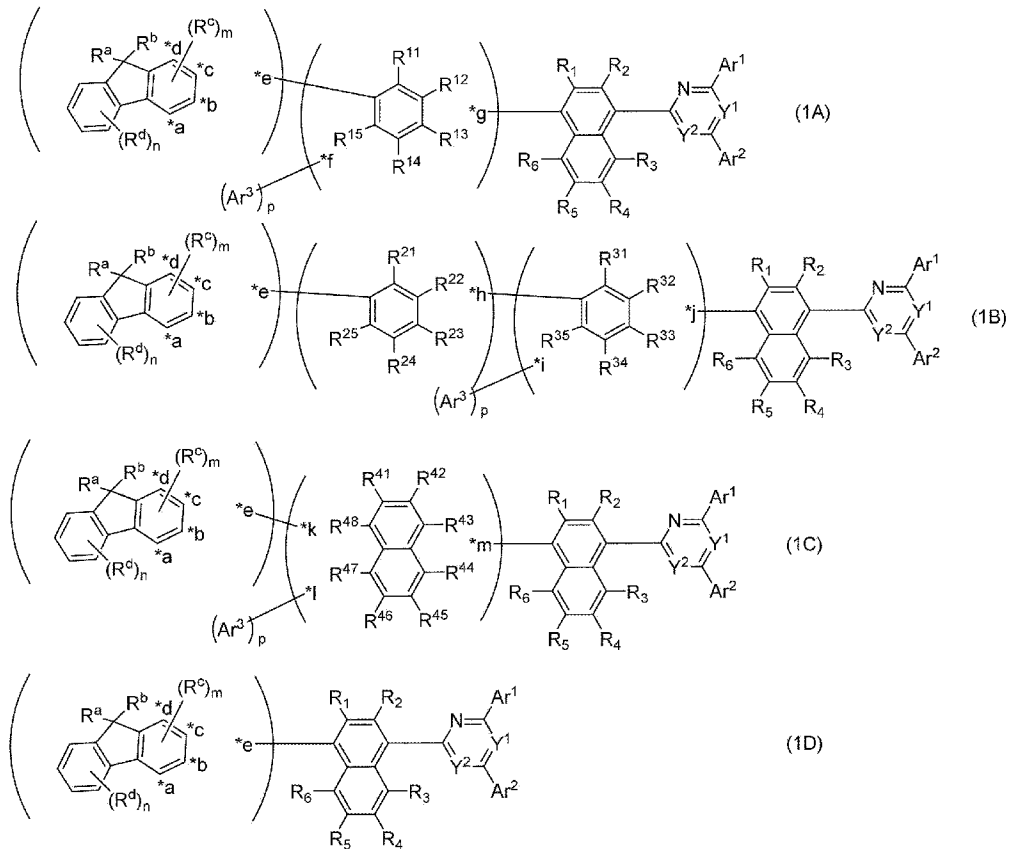
R^d は、互いに同一であるか又は異なり、

* e は、炭素原子 * a 、* b 、* c 及び * d から選ばれる一つに結合する。)

[請求項2] R^{10} が水素原子である、請求項 1 に記載の化合物。

[請求項3] 下記式 (1 A) ～ (1 D) のいずれかで表される、請求項 1 又は 2 に記載の化合物。

[化2]



(式 (1A) ~ (1D) 中、

$R^{11} \sim R^{15}$ 、 $R^{21} \sim R^{25}$ 、 $R^{31} \sim R^{35}$ 及び $R^{41} \sim R^{48}$ は、それぞれ独立して、

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}) で表される基、

—O—(R_{904}) で表される基、

— S — (R_{905}) で表される基、

— N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

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。

ただし、

式 (1A) 中、

p が 0 の場合、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる 1 つは *g に結合する単結合であり、

p が 1 の場合、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる 1 つは *f に結合する単結合であり、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる他の 1 つは *g に結合する単結合であり、

p が 2 の場合、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる 2 つは *f に結合する単結合であり、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる他の 1 つは *g に結合する単結合であり、

p が 3 の場合、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる 3 つは *f に結合する単結合であり、 $R^{11} \sim R^{15}$ から選ばれる他の 1 つは *g に結合する単結合であり、

式 (1B) 中、

p が 0 の場合、 $R^{21} \sim R^{25}$ から選ばれる 1 つは *h に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる 1 つは *j に結合する単結合であり、

p が 1 の場合、 $R^{21} \sim R^{25}$ から選ばれる 1 つは *h に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる 1 つは *i に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる他の 1 つは *j に結合する単結合であり、

p が 2 の場合、 $R^{21} \sim R^{25}$ から選ばれる 1 つは *h に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる 2 つは *i に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる他の 1 つは *j に結合する単結合

であり、

p が 3 の場合、 $R^{21} \sim R^{25}$ から選ばれる 1 つは $*h$ に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる 3 つは $*i$ に結合する単結合であり、 $R^{31} \sim R^{35}$ から選ばれる他の 1 つは $*j$ に結合する単結合であり、

式 (1C) 中、

p が 0 の場合、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる 1 つは $*k$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる他の 1 つは $*m$ に結合する単結合であり、

p が 1 の場合、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる 1 つは $*l$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる他の 1 つは $*k$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれるさらに他の 1 つは $*m$ に結合する単結合であり、

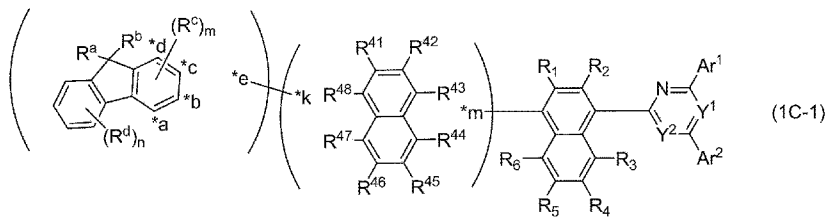
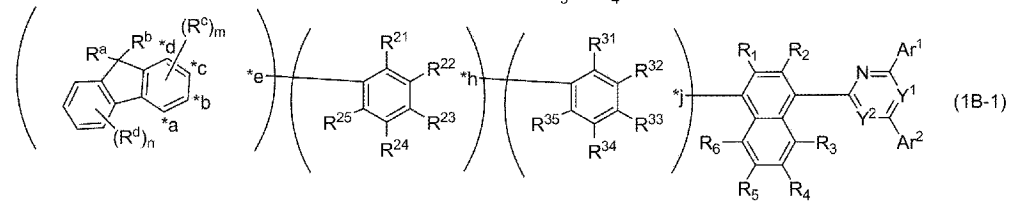
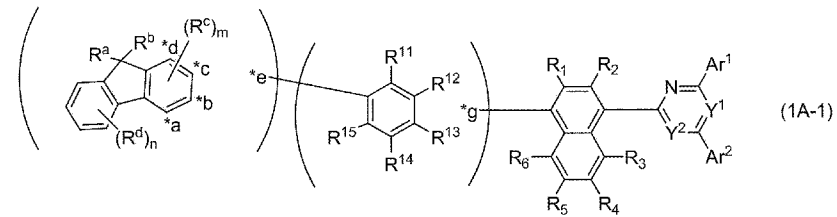
p が 2 の場合、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる 2 つは $*l$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる他の 1 つは $*k$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれるさらに他の 1 つは $*m$ に結合する単結合であり、

p が 3 の場合、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる 3 つは $*l$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれる他の 1 つは $*k$ に結合する単結合であり、 $R^{41} \sim R^{48}$ から選ばれるさらに他の 1 つは $*m$ に結合する単結合である。

Y^1 、 Y^2 、 $A_{r1} \sim A_{r3}$ 、 p 、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 $*a$ 、 $*b$ 、 $*c$ 、 $*d$ 、 $*e$ 、 n 、 m 、及び $R_{901} \sim R_{907}$ は式 (1) において定義したとおりである。))

[請求項4] 下記式 (1A-1)、(1B-1)、又は (1C-1) で表される、請求項3に記載の化合物。

[化3]



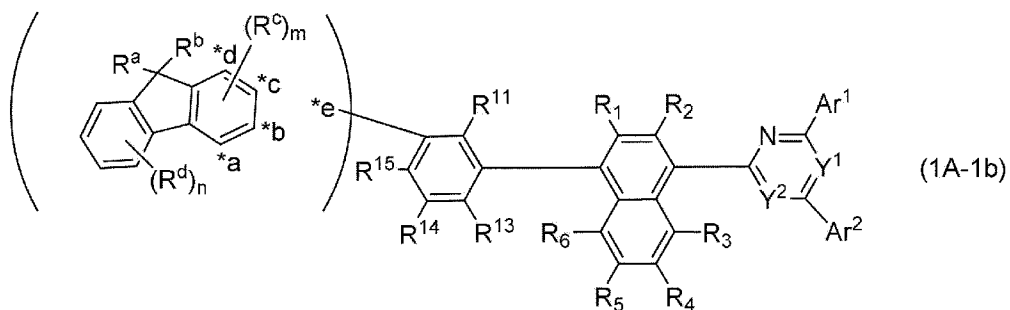
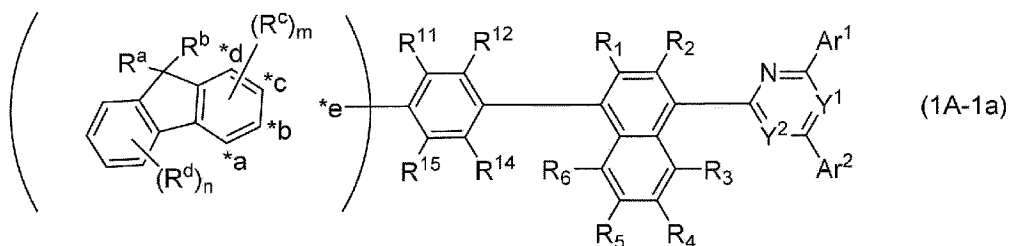
(式(1A-1)、(1B-1)、及び(1C-1)中、

Y^1 、 Y^2 、 Ar^1 、 Ar^2 、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 $*a$ 、 $*b$ 、 $*c$ 、 $*d$ 、 $*e$ 、 n 、及び m は式(1)において定義したとおりであり、 $R^{11} \sim R^{15}$ 、及び $*g$ は式(1A)で定義したとおりであり、 $R^{21} \sim R^{25}$ 、 $R^{31} \sim R^{35}$ 、 $*h$ 、及び $*j$ は式(1B)で定義したとおりであり、 $R^{41} \sim R^{48}$ 、 $*k$ 、及び $*m$ は式(1C)で定義したとおりである。)

[請求項5]

下記式(1A-1a)又は(1A-1b)で表される、請求項3又は4に記載の化合物。

[化4]



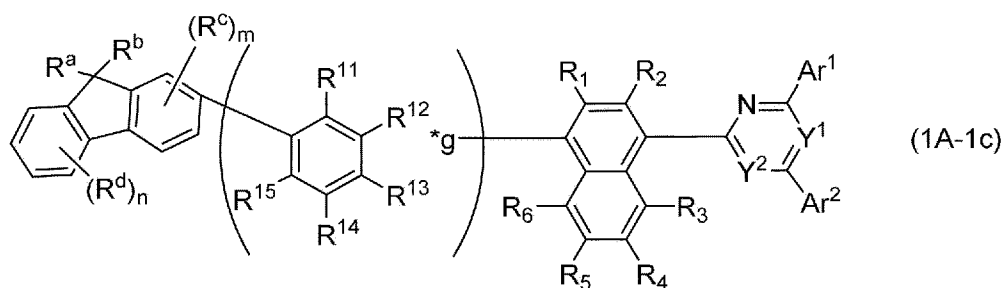
(式 (1A-1a) 及び (1A-1b) 中、

Y^1 、 Y^2 、 Ar^1 、 Ar^2 、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 $*a$ 、 $*b$ 、 $*c$ 、 $*d$ 、 $*e$ 、 n 、及び m は式 (1) において定義したとおりであり、 $R^{11} \sim R^{15}$ は式 (1A) で定義したとおりである。

)

[請求項6] 下記式 (1A-1c) で表される、請求項3又は4に記載の化合物。

[化5]

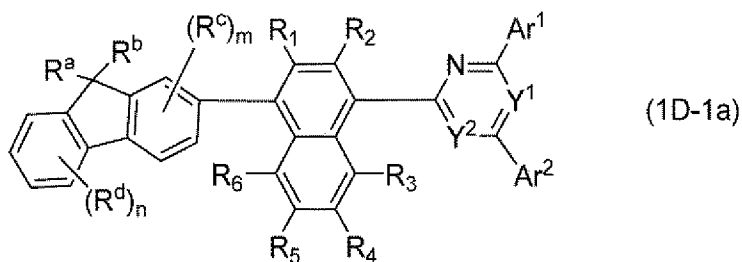


(式 (1A-1c) 中、

Y^1 、 Y^2 、 Ar^1 、 Ar^2 、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 n 、及び m は式 (1) において定義したとおりであり、 $R^{11} \sim R^{15}$ 、及び $*g$ は式 (1A) で定義したとおりである。)

[請求項7] 下記式 (1D-1a) で表される、請求項3に記載の化合物。

[化6]



(式 (1D-1a) 中、

Y^1 、 Y^2 、 Ar^1 、 Ar^2 、 $R^1 \sim R^6$ 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 n 、及び m は式(1)において定義したとおりである。)

[請求項8] Ar^1 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、請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項9] Ar^1 が表す置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基が、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、及びフルオレニル基から選ばれる、請求項8に記載の化合物。

[請求項10] Ar^2 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、請求項1～9のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項11] Ar^2 が表す置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基が、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、及びフルオレニル基から選ばれる、請求項10に記載の化合物。

[請求項12] $R^1 \sim R^6$ が、すべて水素原子である、請求項1～11のいずれか1項に記載の化合物。

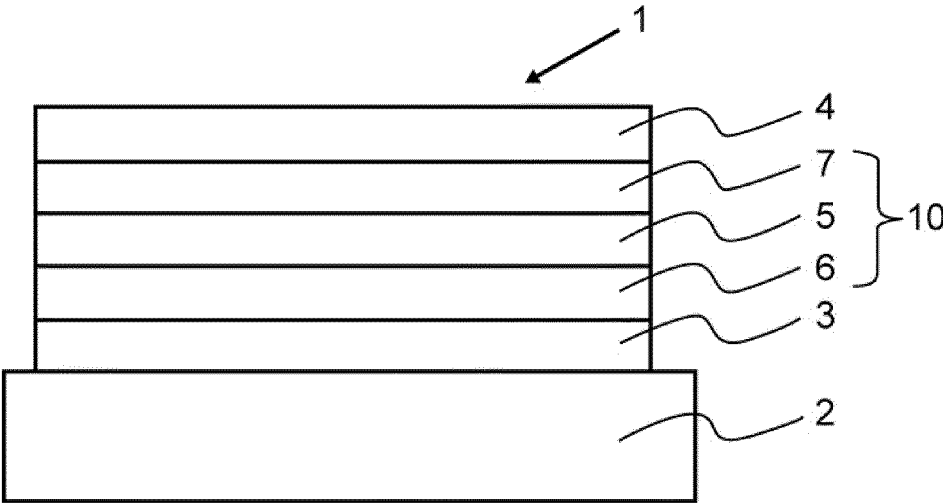
[請求項13] R^c 、及び R^d が、すべて水素原子である、請求項1～12のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項14] R^a 及び R^b は、それぞれ独立して、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である、請求項1～13のいずれか1項に記載の化合物。

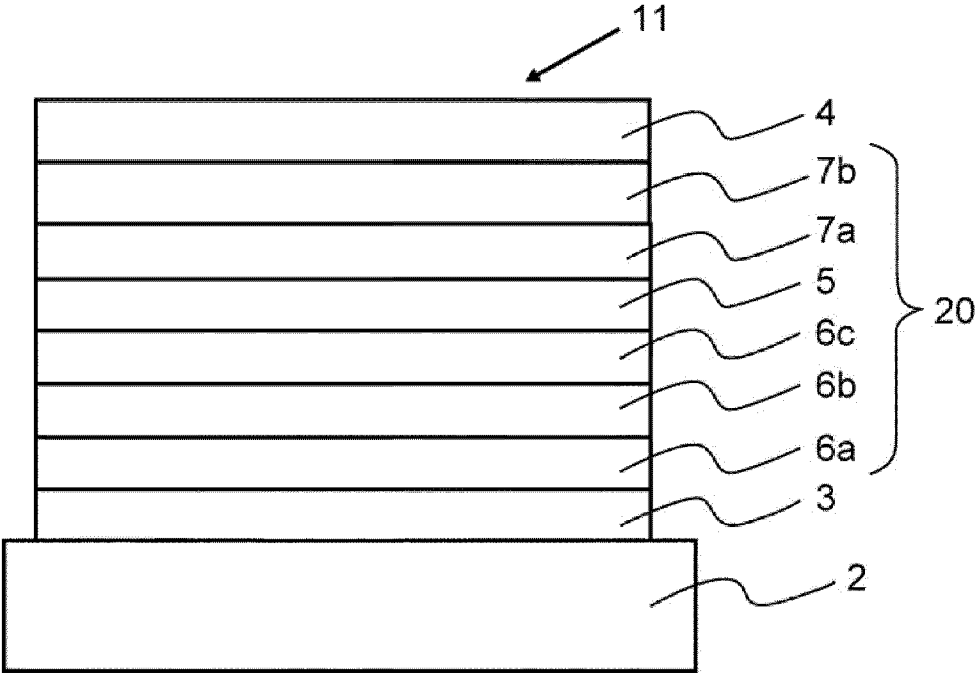
[請求項15] Y^1 が窒素原子である、請求項1～14のいずれか1項に記載の化合物。

- [請求項16] 前記式（１）で表される化合物が少なくとも１個の重水素原子を含む、請求項１～１５のいずれか１項に記載の化合物。
- [請求項17] 請求項１～１６のいずれか１項に記載の化合物を有する有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。
- [請求項18] 陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に有機層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該有機層が発光層を含み、該有機層の少なくとも１層が請求項１～１６のいずれか１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。
- [請求項19] 前記有機層が前記陰極と前記発光層の間に電子輸送帯域を含み、該電子輸送帯域が前記化合物を含む、請求項１８に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項20] 前記電子輸送帯域が陰極側の第１電子輸送層と陰極側の第２電子輸送層を含み、該第１電子輸送層、該第２電子輸送層、又は双方が前記化合物を含む、請求項１９に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項21] 前記電子輸送帯域がさらに陰極側の正孔阻止層を含み、該正孔阻止層が前記化合物を含む、請求項１９又は２０に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項22] 前記正孔阻止層が前記発光層に隣接する、請求項２１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項23] 前記発光層が蛍光ドーパント材料を含む、請求項１８～２２のいずれか１項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項24] 前記発光層が燐光ドーパント材料を含む、請求項１８～２２のいずれか１項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項25] 請求項１８～２４のいずれか１項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、電子機器。

[図1]



[図2]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/002577

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 239/26(2006.01)i; **C07D 401/04**(2006.01)i; **C07D 401/10**(2006.01)i; **C07D 403/04**(2006.01)i; **C07D 405/04**(2006.01)i;
C07D 409/04(2006.01)i; **C09K 11/06**(2006.01)i; **H01L 51/50**(2006.01)i

FI: C07D239/26 CSP; C07D401/04; C07D401/10; C07D403/04; C07D405/04; C07D409/04; C09K11/06 690; H05B33/14 B;
H05B33/22 B

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D239/26; C07D401/04; C07D401/10; C07D403/04; C07D405/04; C07D409/04; C09K11/06; H01L51/50

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

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022
Registered utility model specifications of Japan 1996-2022
Published registered utility model applications of Japan 1994-2022

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

CAPLUS/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2020/153758 A1 (LT MATERIALS CO., LTD.) 30 July 2020 (2020-07-30) claims, paragraph [407], examples	1-3, 7-25
X	WO 2019/156405 A1 (LG CHEM, LTD.) 15 August 2019 (2019-08-15) claims, page 82, lines 3, 4, row 1, examples	1-3, 7-12, 14-25
X	KR 10-2019-0010500 A (LG CHEM, LTD.) 30 January 2019 (2019-01-30) claims, examples	1-3, 7-12, 14-25
X	KR 10-2017-0141144 A (LG CHEM, LTD.) 22 December 2017 (2017-12-22) claims, examples	1-3, 7-25
X	KR 10-2020-0129993 A (LG CHEM, LTD.) 18 November 2020 (2020-11-18) claims, examples	1-3, 7-25
X	WO 2019/017616 A1 (DOOSAN CORPORATION) 24 January 2019 (2019-01-24) claims, examples	1-25



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

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

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

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

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

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

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

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

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

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

28 February 2022

Date of mailing of the international search report

22 March 2022

Name and mailing address of the ISA/JP

**Japan Patent Office (ISA/JP)
3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915
Japan**

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/002577**C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT**

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2017/131380 A1 (LG CHEM, LTD.) 03 August 2017 (2017-08-03) claims, paragraph [82], examples	1-25
X	KR 10-2018-0063710 A (PNH TECH) 12 June 2018 (2018-06-12) claims, examples	1-3, 7-25

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2022/002577

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO	2020/153758	A1	30 July 2020	KR 10-2020-0092633	A
WO	2019/156405	A1	15 August 2019	US 2021/0119137	A1
				claims, pages 140, 141, examples	
				KR 10-2019-0096707	A
				CN 111247130	A
KR	10-2019-0010500	A	30 January 2019	(Family: none)	
KR	10-2017-0141144	A	22 December 2017	(Family: none)	
KR	10-2020-0129993	A	18 November 2020	(Family: none)	
WO	2019/017616	A1	24 January 2019	JP 2020-527578	A
				US 2020/0168805	A1
				claims, examples	
				KR 10-2019-0009994	A
				CN 110944988	A
WO	2017/131380	A1	03 August 2017	CN 107635978	A
				KR 10-2017-0089408	A
KR	10-2018-0063710	A	12 June 2018	(Family: none)	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） C07D 239/26(2006.01)i; C07D 401/04(2006.01)i; C07D 401/10(2006.01)i; C07D 403/04(2006.01)i; C07D 405/04(2006.01)i; C07D 409/04(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i FI: C07D239/26 CSP; C07D401/04; C07D401/10; C07D403/04; C07D405/04; C07D409/04; C09K11/06 690; H05B33/14 B; H05B33/22 B																							
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） C07D239/26; C07D401/04; C07D401/10; C07D403/04; C07D405/04; C07D409/04; C09K11/06; H01L51/50 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2022年</td> </tr> </table> 国際調査で利用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語） CAplus/REGISTRY (STN)			日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2022年	日本国実用新案登録公報	1996-2022年	日本国登録実用新案公報	1994-2022年													
日本国実用新案公報	1922-1996年																						
日本国公開実用新案公報	1971-2022年																						
日本国実用新案登録公報	1996-2022年																						
日本国登録実用新案公報	1994-2022年																						
C. 関連すると認められる文献 <table border="1"> <thead> <tr> <th>引用文献の カテゴリー*</th> <th>引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示</th> <th>関連する 請求項の番号</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>X</td> <td>WO 2020/153758 A1 (LT MATERIALS CO., LTD.) 30.07.2020 (2020-07-30) 請求の範囲, 段落[407], 実施例</td> <td>1-3, 7-25</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>WO 2019/156405 A1 (LG CHEM, LTD.) 15.08.2019 (2019-08-15) 請求の範囲, 第82頁の第3～4行第1列, 実施例</td> <td>1-3, 7-12, 14-25</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>KR 10-2019-0010500 A (LG CHEM, LTD.) 30.01.2019 (2019-01-30) 請求の範囲, 実施例</td> <td>1-3, 7-12, 14-25</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>KR 10-2017-0141144 A (LG CHEM, LTD.) 22.12.2017 (2017-12-22) 特許請求の範囲, 実施例</td> <td>1-3, 7-25</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>KR 10-2020-0129993 A (LG CHEM, LTD.) 18.11.2020 (2020-11-18) 特許請求の範囲, 実施例</td> <td>1-3, 7-25</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>WO 2019/017616 A1 (DOOSAN CORPORATION) 24.01.2019 (2019-01-24) 特許請求の範囲, 実施例</td> <td>1-25</td> </tr> </tbody> </table>			引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号	X	WO 2020/153758 A1 (LT MATERIALS CO., LTD.) 30.07.2020 (2020-07-30) 請求の範囲, 段落[407], 実施例	1-3, 7-25	X	WO 2019/156405 A1 (LG CHEM, LTD.) 15.08.2019 (2019-08-15) 請求の範囲, 第82頁の第3～4行第1列, 実施例	1-3, 7-12, 14-25	X	KR 10-2019-0010500 A (LG CHEM, LTD.) 30.01.2019 (2019-01-30) 請求の範囲, 実施例	1-3, 7-12, 14-25	X	KR 10-2017-0141144 A (LG CHEM, LTD.) 22.12.2017 (2017-12-22) 特許請求の範囲, 実施例	1-3, 7-25	X	KR 10-2020-0129993 A (LG CHEM, LTD.) 18.11.2020 (2020-11-18) 特許請求の範囲, 実施例	1-3, 7-25	X	WO 2019/017616 A1 (DOOSAN CORPORATION) 24.01.2019 (2019-01-24) 特許請求の範囲, 実施例	1-25
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号																					
X	WO 2020/153758 A1 (LT MATERIALS CO., LTD.) 30.07.2020 (2020-07-30) 請求の範囲, 段落[407], 実施例	1-3, 7-25																					
X	WO 2019/156405 A1 (LG CHEM, LTD.) 15.08.2019 (2019-08-15) 請求の範囲, 第82頁の第3～4行第1列, 実施例	1-3, 7-12, 14-25																					
X	KR 10-2019-0010500 A (LG CHEM, LTD.) 30.01.2019 (2019-01-30) 請求の範囲, 実施例	1-3, 7-12, 14-25																					
X	KR 10-2017-0141144 A (LG CHEM, LTD.) 22.12.2017 (2017-12-22) 特許請求の範囲, 実施例	1-3, 7-25																					
X	KR 10-2020-0129993 A (LG CHEM, LTD.) 18.11.2020 (2020-11-18) 特許請求の範囲, 実施例	1-3, 7-25																					
X	WO 2019/017616 A1 (DOOSAN CORPORATION) 24.01.2019 (2019-01-24) 特許請求の範囲, 実施例	1-25																					
☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。																							
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献																							
国際調査を完了した日 28.02.2022		国際調査報告の発送日 22.03.2022																					
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		権限のある職員（特許庁審査官） 神谷 昌克 4P 8379 電話番号 03-3581-1101 内線 3492																					

C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	WO 2017/131380 A1 (LG CHEM, LTD.) 03.08.2017 (2017 - 08 - 03) 請求の範囲, 段落[82]、施例	1-25
X	KR 10-2018-0063710 A (PNH TECH) 12.06.2018 (2018 - 06 - 12) 特許請求の範囲, 実施例	1-3, 7-25

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2022/002577

引用文献			公表日	パテントファミリー文献			公表日
WO	2020/153758	A1	30.07.2020	KR	10-2020-0092633	A	
WO	2019/156405	A1	15.08.2019	US	2021/0119137	A1	
				特許請求の範囲, 第 1 4 0 ～ 1 4 1 頁, 実施例			
				KR	10-2019-0096707	A	
				CN	111247130	A	
KR	10-2019-0010500	A	30.01.2019	(ファミリーなし)			
KR	10-2017-0141144	A	22.12.2017	(ファミリーなし)			
KR	10-2020-0129993	A	18.11.2020	(ファミリーなし)			
WO	2019/017616	A1	24.01.2019	JP	2020-527578	A	
				US	2020/0168805	A1	
				特許請求の範囲, 実施例			
				KR	10-2019-0009994	A	
				CN	110944988	A	
WO	2017/131380	A1	03.08.2017	CN	107635978	A	
				KR	10-2017-0089408	A	
KR	10-2018-0063710	A	12.06.2018	(ファミリーなし)			