(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7554371号
(P7554371)

(45)発行日　令和6年9月19日(2024.9.19)

(24)登録日　令和6年9月10日(2024.9.10)

(51)国際特許分類

Ｃ０７Ｃ　15/38　(2006.01)	Ｃ０７Ｃ	15/38		ＣＳＰ	
Ｃ０９Ｋ　11/06　(2006.01)	Ｃ０９Ｋ	11/06	６１０		
Ｈ１０Ｋ　50/11　(2023.01)	Ｈ１０Ｋ	50/11			
Ｈ１０Ｋ　50/13　(2023.01)	Ｈ１０Ｋ	50/13			
Ｈ１０Ｋ　50/15　(2023.01)	Ｈ１０Ｋ	50/15			

請求項の数　12　（全293頁）　最終頁に続く

(21)出願番号　特願2023-571039(P2023-571039)
(86)(22)出願日　令和4年12月26日(2022.12.26)
(86)国際出願番号　PCT/JP2022/048063
(87)国際公開番号　WO2023/127845
(87)国際公開日　令和5年7月6日(2023.7.6)
審査請求日　令和6年6月18日(2024.6.18)
(31)優先権主張番号　特願2021-212989(P2021-212989)
(32)優先日　令和3年12月27日(2021.12.27)
(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)
(31)優先権主張番号　特願2022-125649(P2022-125649)
(32)優先日　令和4年8月5日(2022.8.5)
(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)
早期審査対象出願

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

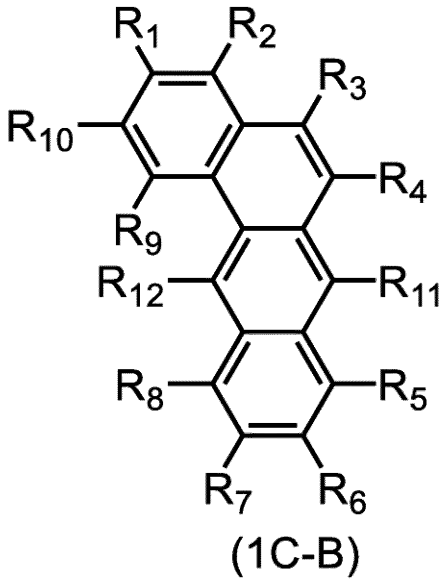
(54)【発明の名称】　化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子、及び電子機器

(57)【特許請求の範囲】

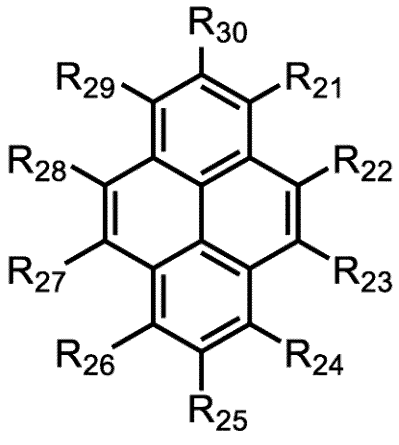
【請求項１】

下記一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物。

【化３】



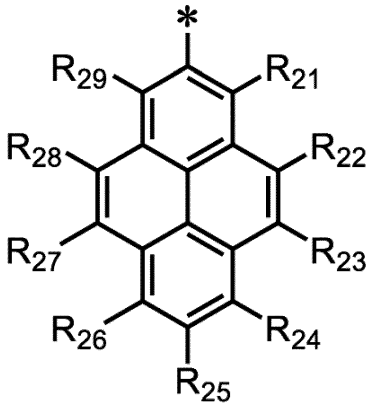
(1C-B)



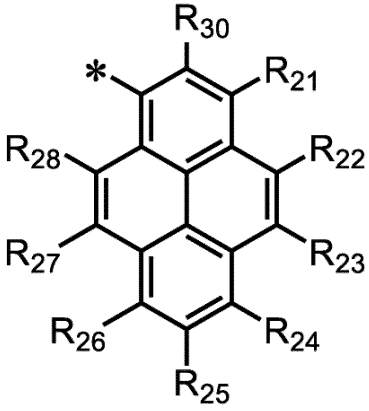
(1D-B)

（前記一般式（１Ｃ－Ｂ）において、
Ｒ１１は、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であるか、又は、Ｒ１２は、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であり、
Ｒ１～Ｒ３、Ｒ４～Ｒ６、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ９、及びＲ１０は、それぞれ独立に、
軽水素原子、
重水素原子、又は
無置換のフェニル基であり、
Ｒ１１が前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基である場合、Ｒ１２は軽水素原子、重水素原子または無置換のフェニル基であり、
Ｒ１２が前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基である場合、Ｒ１１は無置換のフェニル基であり、
前記一般式（１Ｄ－Ｂ）において、Ｒ２１～Ｒ３０のうちの１つが前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、当該結合位置ではない前記一般式（１Ｄ－Ｂ）中のＲ２１～Ｒ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が互いに結合せず、
前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではない前記一般式（１Ｄ－Ｂ）中のＲ２１～Ｒ３０は、それぞれ独立に、
軽水素原子、
重水素原子、又は
無置換のフェニル基である。）
【請求項２】
請求項１に記載の化合物において、
前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基が、下記一般式（１Ｄ－Ｂ１）、（１Ｄ－Ｂ２）又は（１Ｄ－Ｂ３）で表される基である、
化合物。

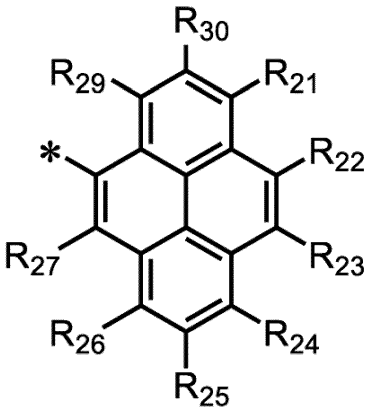
【化４】



(1D-B1)



(1D-B2)



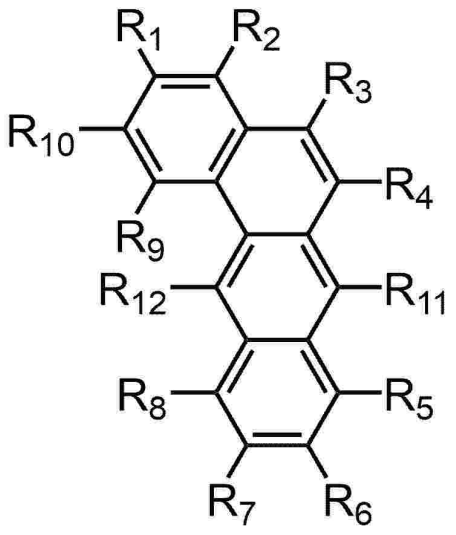
(1D-B3)

（前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）において、
Ｒ２１～Ｒ２９のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が互いに結合せず、
Ｒ２１～Ｒ２９は、それぞれ独立に、
軽水素原子、
重水素原子、又は
無置換フェニル基であり、
＊は前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、
前記一般式（１Ｄ－Ｂ２）において、
Ｒ２１～Ｒ２８、及びＲ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が互いに結合せず、
Ｒ２１～Ｒ２８、及びＲ３０は、それぞれ独立に、前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）におけるＲ２１～Ｒ２９と同義であり、
＊は前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、
前記一般式（１Ｄ－Ｂ３）において、
Ｒ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が互いに結合せず、
Ｒ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０は、それぞれ独立に、前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）におけるＲ２１～Ｒ２９と同義であり、
＊は前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示す。）

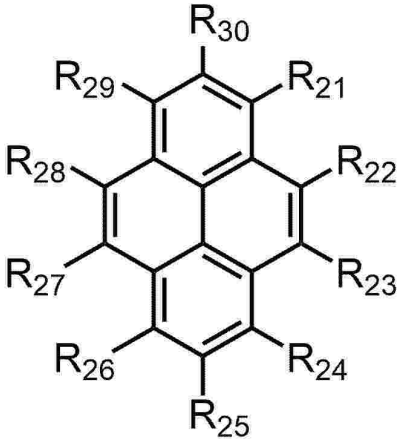
【請求項３】
請求項２に記載の化合物において、
前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）で表される基である、

化合物。
【請求項４】
請求項１に記載の化合物において、
R_{11}が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基である、
化合物。
【請求項５】
請求項１に記載の化合物において、
R_{12}が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基である、
化合物。
【請求項６】
請求項１に記載の化合物において、
R_{11}が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であり、R_{12}が、無置換のフェニル基である、
化合物。
【請求項７】
請求項１から請求項４のいずれか一項に記載の化合物において、
R_7、及びR_{12}が軽水素原子又は重水素原子である、
化合物。
【請求項８】
請求項１から請求項６のいずれか一項に記載の化合物において、
分子内に、１つ以上の重水素原子を有する、
化合物。
【請求項９】
請求項１から請求項６のいずれか一項に記載の化合物を含有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。
【請求項１０】
請求項９に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子であって、
陽極と、
陰極と、
前記陽極及び前記陰極の間に配置された有機層と、を有し、
前記有機層は、発光領域を有し、
前記発光領域は、少なくとも１つの発光層を含み、
前記発光層は、前記化合物を含有する、
有機エレクトロルミネッセンス素子。
【請求項１１】
請求項１０に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記発光領域は、第一の発光層及び第二の発光層を含み、
前記第一の発光層は、第一の化合物として前記化合物を含有し、
前記第二の発光層は、第二の化合物を含有し、
前記第一の化合物の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と前記第二の化合物の三重項エネルギーT_1（Ｈ２）とが、下記数式（数１）の関係を満たす、
有機エレクトロルミネッセンス素子。
T_1（Ｈ１）＞T_1（Ｈ２）　…（数１）
【請求項１２】
請求項９に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。
【発明の詳細な説明】
【技術分野】
【０００１】
本発明は、化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子、及び電子機器に関する。
【背景技術】

【０００２】
有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「有機ＥＬ素子」という場合がある。）は、携帯電話及びテレビ等のフルカラーディスプレイへ応用されている。有機ＥＬ素子に電圧を印加すると、陽極から正孔が発光層に注入され、また陰極から電子が発光層に注入される。そして、発光層において、注入された正孔と電子とが再結合し、励起子が形成される。このとき、電子スピンの統計則により、一重項励起子が２５％の割合で生成し、及び三重項励起子が７５％の割合で生成する。
有機ＥＬ素子の性能向上を図るため、有機ＥＬ素子に用いる化合物について様々な検討がなされている（例えば、特許文献１及び特許文献２を参照）。有機ＥＬ素子の性能としては、例えば、輝度、発光波長、色度、発光効率、駆動電圧、及び寿命が挙げられる。
【先行技術文献】
【特許文献】
【０００３】
【文献】国際公開第２０２１／１３２５３５号
【文献】国際公開第２００９／０８１７７４号
【発明の概要】
【発明が解決しようとする課題】
【０００４】
本発明の目的の一つは、有機エレクトロルミネッセンス素子の寿命を向上させることができる化合物、当該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子、及び当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することである。
また、本発明の別の目的の一つは、寿命が向上した有機エレクトロルミネッセンス素子、及び当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することである。
【課題を解決するための手段】
【０００５】
本発明の一態様によれば、下記一般式（１Ｃ－Ａ）で表される化合物が提供される。
【０００６】
【化１】



(1C-A)



(1D-A)

【０００７】
（前記一般式（１Ｃ－Ａ）において、
Ｒ４～Ｒ８及びＲ１０～Ｒ１２のうちの１つは、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基であり、

R_1～R_3、R_9、並びに前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基以外のR_4～R_8及びR_{10}～R_{12}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、
－Ｏ－（R_{904}）で表される基、
－Ｓ－（R_{905}）で表される基、
置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、
－Ｃ（＝Ｏ）R_{801}で表される基、
－ＣＯＯR_{802}で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
R_{11}が前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基である場合、R_{12}は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
R_{12}が前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基である場合、R_{11}は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
前記一般式（１Ｄ－Ａ）において、R_{21}～R_{30}のうちの１つが前記一般式（１Ｃ－Ａ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、当該結合位置ではない前記一般式（１Ｄ－Ａ）中のR_{21}～R_{30}のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記一般式（１Ｃ－Ａ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ａ）中のR_{21}～R_{30}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、
－Ｏ－（R_{904}）で表される基、
－Ｓ－（R_{905}）で表される基、
－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
ただし、R_{21}～R_{30}の少なくとも一つは水素原子以外であり、
前記一般式（１Ｃ－Ａ）で表される化合物において、R_{901}、R_{902}、R_{903}、R_{904}、R_{905}、R_{906}、R_{907}、R_{801}、及びR_{802}は、それぞれ独立に、
水素原子、

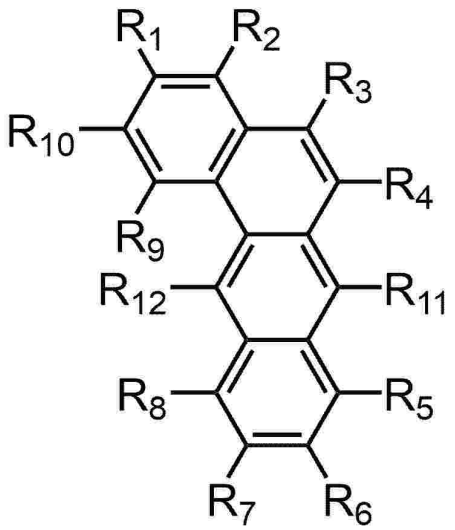
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
R_{901}が複数存在する場合、複数のR_{901}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{902}が複数存在する場合、複数のR_{902}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{903}が複数存在する場合、複数のR_{903}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{904}が複数存在する場合、複数のR_{904}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{905}が複数存在する場合、複数のR_{905}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{906}が複数存在する場合、複数のR_{906}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{907}が複数存在する場合、複数のR_{907}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{801}が複数存在する場合、複数のR_{801}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{802}が複数存在する場合、複数のR_{802}は、互いに同一であるか又は異なる。）

【０００８】

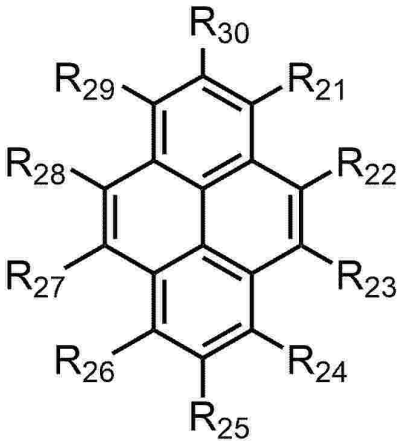
本発明の一態様によれば、下記一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物が提供される。

【０００９】

【化２】



(1C-B)



(1D-B)

【００１０】

（前記一般式（１Ｃ－Ｂ）において、

R_4～R_6、R_8、及びR_{10}～R_{12}のうちの１つは、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であり、

R_1～R_3、R_7、R_9、並びに前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基以外のR_4～R_6、R_8、及びR_{10}～R_{12}は、それぞれ独立に、

水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、
－Ｏ－（R_{904}）で表される基、
－Ｓ－（R_{905}）で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、
－Ｃ（＝Ｏ）Ｒ８０１で表される基、
－ＣＯＯＲ８０２で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ１１が前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基である場合、Ｒ１２は水素原子または無置換のフェニル基であり、
Ｒ１２が前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基である場合、Ｒ１１は置換もしくは無置換のフェニル基であり、
前記一般式（１Ｄ－Ｂ）において、Ｒ２１～Ｒ３０のうちの１つが前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、当該結合位置ではない前記一般式（１Ｄ－Ｂ）中のＲ２１～Ｒ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｂ）中のＲ２１～Ｒ３０は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
前記一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物において、Ｒ９０１、Ｒ９０２、Ｒ９０３、Ｒ９０４、Ｒ９０５、Ｒ９０６、Ｒ９０７、Ｒ８０１、及びＲ８０２は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ９０１が複数存在する場合、複数のＲ９０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０２が複数存在する場合、複数のＲ９０２は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０３が複数存在する場合、複数のＲ９０３は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０４が複数存在する場合、複数のＲ９０４は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０５が複数存在する場合、複数のＲ９０５は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０６が複数存在する場合、複数のＲ９０６は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０７が複数存在する場合、複数のＲ９０７は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０１が複数存在する場合、複数のＲ８０１は、互いに同一であるか又は異なり、

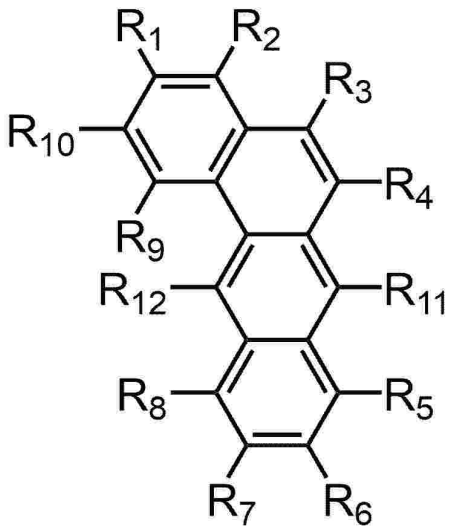
Ｒ８０２が複数存在する場合、複数のＲ８０２は、互いに同一であるか又は異なる。）

【００１１】

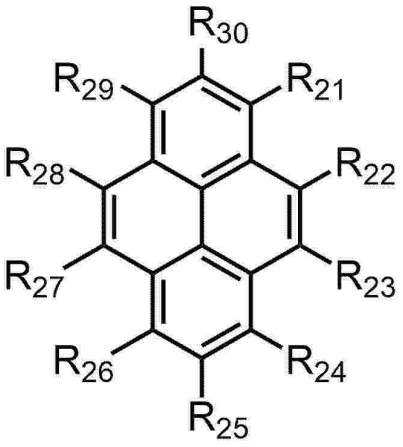
本発明の一態様によれば、下記一般式（１Ｃ－Ｃ）で表される化合物が提供される。

【００１２】

【化３】



(1C-C)



(1D-C)

【００１３】

（前記一般式（１Ｃ－Ｃ）において、

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

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、

－Ｃ（＝Ｏ）Ｒ８０１で表される基、

－ＣＯＯＲ８０２で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

Ｒ１１が前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基である場合、Ｒ１２は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、

Ｒ１２が前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基である場合、Ｒ１１は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、

前記一般式（１Ｄ－Ｃ）において、Ｒ２２、Ｒ２３、Ｒ２５、Ｒ２７、Ｒ２８、及びＲ３０のうちの１つが前記一般式（１Ｃ－Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、Ｒ２１、Ｒ２４、Ｒ２６、及びＲ２９、並びに当該結合位置ではない前記一般式（１Ｄ－Ｃ）中のＲ２２、Ｒ２３、Ｒ２５、Ｒ２７、Ｒ２８、及びＲ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

前記一般式（１Ｃ－Ｃ）で表される化合物において、Ｒ９０１、Ｒ９０２、Ｒ９０３、Ｒ９０４、Ｒ９０５、Ｒ９０６、Ｒ９０７、Ｒ８０１、及びＲ８０２は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

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

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

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

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

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

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

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

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

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

【００１４】

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

【００１５】

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

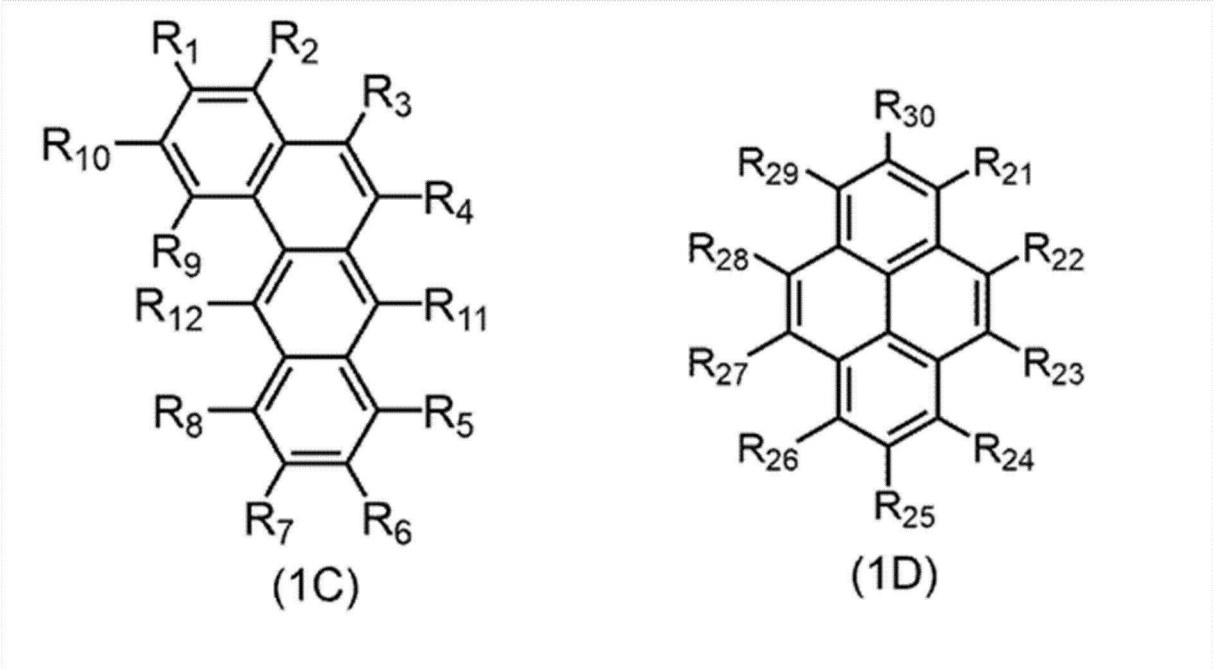
【００１６】

本発明の一態様によれば、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された有

機層と、を有し、前記有機層は、発光領域を有し、前記発光領域は、第一の発光層及び第二の発光層を含み、前記第一の発光層は、下記一般式（１Ｃ）で表される第一の化合物を含有し、前記第二の発光層は、第二の化合物を含有する、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

【００１７】

【化４】



【００１８】

（前記一般式（１Ｃ）において、

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

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、

－Ｃ（＝Ｏ）Ｒ８０１で表される基、

－ＣＯＯＲ８０２で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

Ｒ１１が前記一般式（１Ｄ）で表される基である場合、Ｒ１２は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、

Ｒ１２が前記一般式（１Ｄ）で表される基である場合、Ｒ１１は水素原子または置換もし

くは無置換のフェニル基であり、
前記一般式（１Ｄ）において、Ｒ２１～Ｒ３０のうちの１つが前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、当該結合位置ではない前記一般式（１Ｄ）中のＲ２１～Ｒ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ）中のＲ２１～Ｒ３０は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
前記一般式（１Ｃ）で表される化合物において、Ｒ９０１、Ｒ９０２、Ｒ９０３、Ｒ９０４、Ｒ９０５、Ｒ９０６、Ｒ９０７、Ｒ８０１、及びＲ８０２は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ９０１が複数存在する場合、複数のＲ９０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０２が複数存在する場合、複数のＲ９０２は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０３が複数存在する場合、複数のＲ９０３は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０４が複数存在する場合、複数のＲ９０４は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０５が複数存在する場合、複数のＲ９０５は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０６が複数存在する場合、複数のＲ９０６は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０７が複数存在する場合、複数のＲ９０７は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０１が複数存在する場合、複数のＲ８０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０２が複数存在する場合、複数のＲ８０２は、互いに同一であるか又は異なる。）

【００１９】

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

【００２０】

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

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

【図面の簡単な説明】

【００２１】
【図１】本発明の一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の概略構成を示す図である。
【図２】本発明の一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の別の一例の概略構成を示す図である。
【発明を実施するための形態】
【００２２】
［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。
【００２３】
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。
【００２４】
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。
【００２５】
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。
【００２６】
本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数ＸＸ～ＹＹのＺＺ基」という表現における「炭素数ＸＸ～ＹＹ」は、ＺＺ基が無置換である場合の炭素数を表し、置換されている場合の置換基の炭素数を含めない。ここで、「ＹＹ」は、「ＸＸ」よりも大きく、「ＸＸ」は、１以上の整数を意味し、「ＹＹ」は、２以上の整数を意味する。
【００２７】

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

【００２８】

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。

【００２９】

「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。

【００３０】

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。

【００３１】

・「置換もしくは無置換のアリール基」

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

「置換のアリール基」は、「無置換のアリール基」の１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアリール基」としては、例えば、下記具体例群Ｇ１Ａの「無置換のアリール基」の１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び下記具体例群Ｇ１Ｂの置換のアリール基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のア

リール基」の例、及び「置換のアリール基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアリール基」には、下記具体例群Ｇ１Ｂの「置換のアリール基」におけるアリール基自体の炭素原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び下記具体例群Ｇ１Ｂの「置換のアリール基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

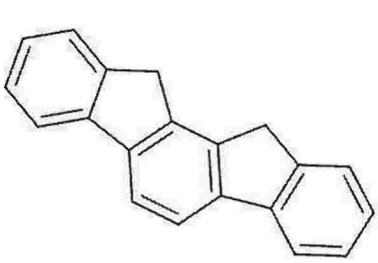
【００３２】

・無置換のアリール基（具体例群Ｇ１Ａ）：

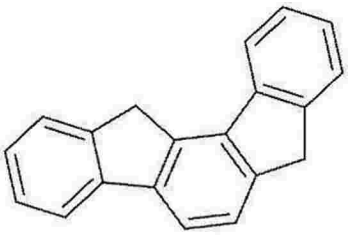
フェニル基、
ｐ－ビフェニル基、
ｍ－ビフェニル基、
ｏ－ビフェニル基、
ｐ－ターフェニル－４－イル基、
ｐ－ターフェニル－３－イル基、
ｐ－ターフェニル－２－イル基、
ｍ－ターフェニル－４－イル基、
ｍ－ターフェニル－３－イル基、
ｍ－ターフェニル－２－イル基、
ｏ－ターフェニル－４－イル基、
ｏ－ターフェニル－３－イル基、
ｏ－ターフェニル－２－イル基、
１－ナフチル基、
２－ナフチル基、
アントリル基、
ベンゾアントリル基、
フェナントリル基、
ベンゾフェナントリル基、
フェナレニル基、
ピレニル基、
クリセニル基、
ベンゾクリセニル基、
トリフェニレニル基、
ベンゾトリフェニレニル基、
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。

【００３３】

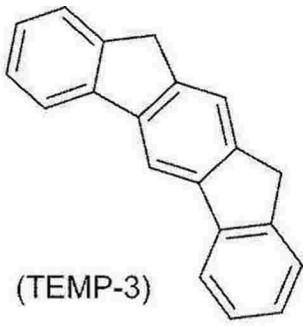
【化５】



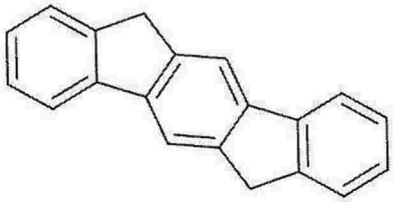
(TEMP-1)



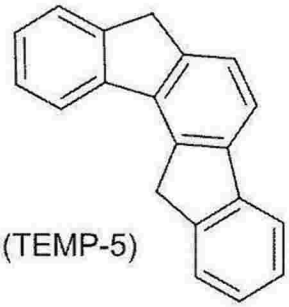
(TEMP-2)



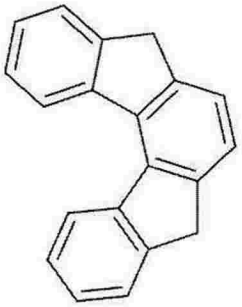
(TEMP-3)



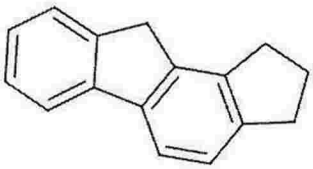
(TEMP-4)



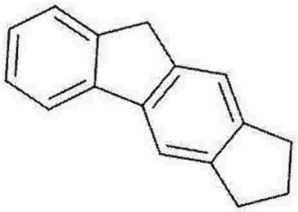
(TEMP-5)



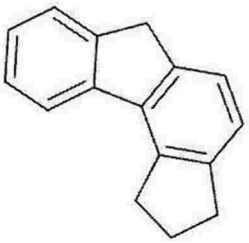
(TEMP-6)



(TEMP-7)



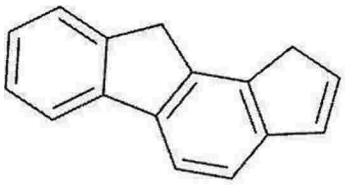
(TEMP-8)



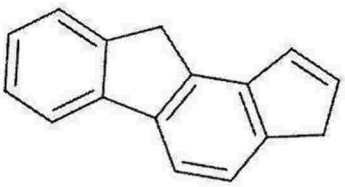
(TEMP-9)

【００３４】

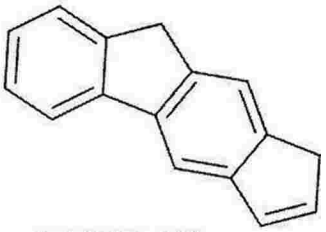
【化６】



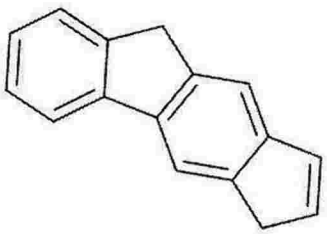
(TEMP-10)



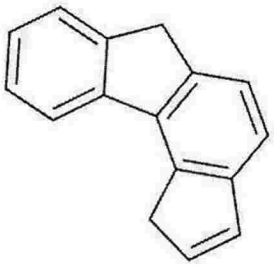
(TEMP-11)



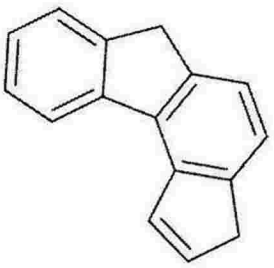
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

【００３５】
・置換のアリール基（具体例群Ｇ１Ｂ）：
ｏ－トリル基、
ｍ－トリル基、
ｐ－トリル基、
パラ－キシリル基、
メタ－キシリル基、
オルト－キシリル基、
パラ－イソプロピルフェニル基、
メタ－イソプロピルフェニル基、
オルト－イソプロピルフェニル基、
パラ－ｔ－ブチルフェニル基、
メタ－ｔ－ブチルフェニル基、
オルト－ｔ－ブチルフェニル基、
３，４，５－トリメチルフェニル基、
９，９－ジメチルフルオレニル基、
９，９－ジフェニルフルオレニル基、
９，９－ビス（４－メチルフェニル）フルオレニル基、
９，９－ビス（４－イソプロピルフェニル）フルオレニル基、
９，９－ビス（４－ｔ－ブチルフェニル）フルオレニル基、
シアノフェニル基、
トリフェニルシリルフェニル基、
トリメチルシリルフェニル基、
フェニルナフチル基、
ナフチルフェニル基、及び
前記一般式（ＴＥＭＰ－１）～（ＴＥＭＰ－１５）で表される環構造から誘導される１価の基の１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基。
【００３６】
・「置換もしくは無置換の複素環基」
本明細書に記載の「複素環基」は、環形成原子にヘテロ原子を少なくとも１つ含む環状の基である。ヘテロ原子の具体例としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、及びホウ素原子が挙げられる。
本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基である。
本明細書に記載の「複素環基」は、芳香族複素環基であるか、又は非芳香族複素環基である。
本明細書に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」の具体例（具体例群Ｇ２）としては、以下の無置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ）、及び置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ）等が挙げられる。（ここで、無置換の複素環基とは「置換もしくは無置換の複素環基」が「無置換の複素環基」である場合を指し、置換の複素環基とは「置換もしくは無置換の複素環基」が「置換の複素環基」である場合を指す。）本明細書において、単に「複素環基」という場合は、「無置換の複素環基」と「置換の複素環基」の両方を含む。
「置換の複素環基」は、「無置換の複素環基」の１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換の複素環基」の具体例は、下記具体例群Ｇ２Ａの「無置換の複素環基」の水素原子が置き換わった基、及び下記具体例群Ｇ２Ｂの置換の複素環基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換の複素環基」の例や「置換の複素環基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換の複素環基」には、具体例群Ｇ２Ｂの「置換の複素環基」における複素環基自体の環形成原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群Ｇ２Ｂの「置換の複素環基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。
【００３７】

具体例群Ｇ２Ａ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Ｇ２Ａ１）、酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ２）、硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ３）、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Ｇ２Ａ４）を含む。

【００３８】

具体例群Ｇ２Ｂ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Ｇ２Ｂ１）、酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ２）、硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ３）、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Ｇ２Ｂ４）を含む。

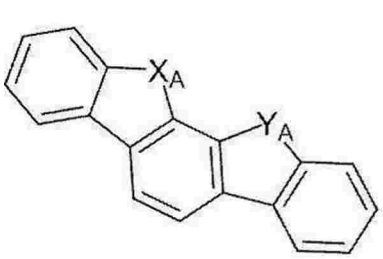
【００３９】

・窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ１）：

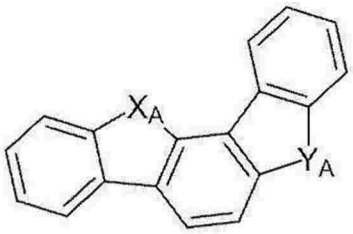
ピロリル基、
イミダゾリル基、
ピラゾリル基、
トリアゾリル基、
テトラゾリル基、
オキサゾリル基、
イソオキサゾリル基、
オキサジアゾリル基、
チアゾリル基、
イソチアゾリル基、
チアジアゾリル基、
ピリジル基、
ピリダジニル基、
ピリミジニル基、
ピラジニル基、
トリアジニル基、
インドリル基、
イソインドリル基、
インドリジニル基、
キノリジニル基、
キノリル基、
イソキノリル基、
シンノリル基、
フタラジニル基、
キナゾリニル基、
キノキサリニル基、
ベンゾイミダゾリル基、
インダゾリル基、
フェナントロリニル基、
フェナントリジニル基、
アクリジニル基、
フェナジニル基、
カルバゾリル基、
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。
【００４０】
・酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ２）：
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。
【００４１】
・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ３）：
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）。
【００４２】
・下記一般式（ＴＥＭＰ－１６）～（ＴＥＭＰ－３３）で表される環構造から１つの水素原子を除くことにより誘導される１価の複素環基（具体例群Ｇ２Ａ４）：
【００４３】

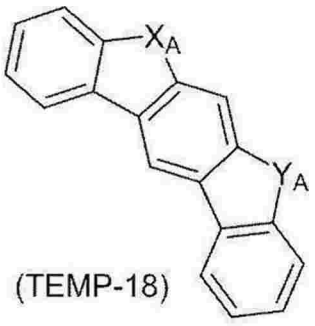
【化７】



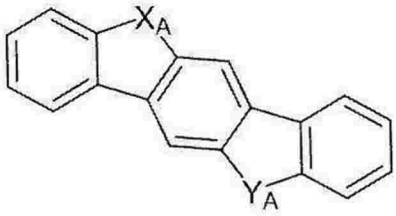
(TEMP-16)



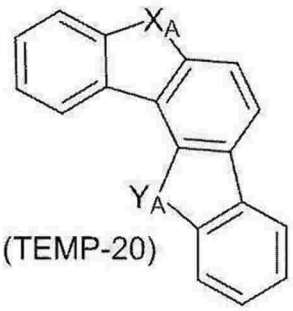
(TEMP-17)



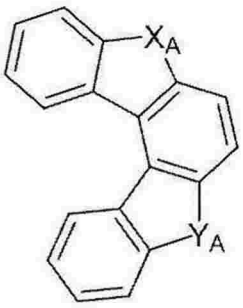
(TEMP-18)



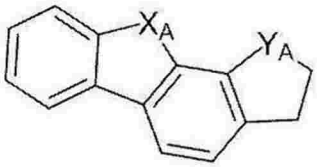
(TEMP-19)



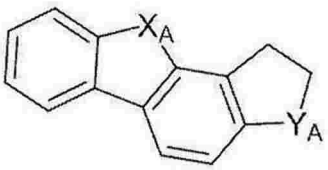
(TEMP-20)



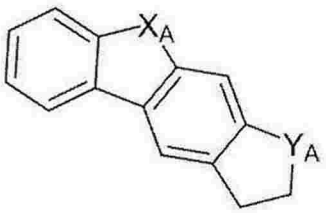
(TEMP-21)



(TEMP-22)



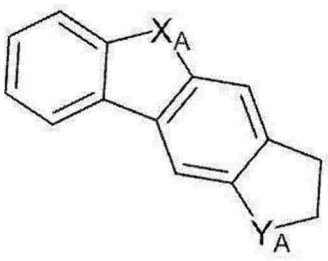
(TEMP-23)



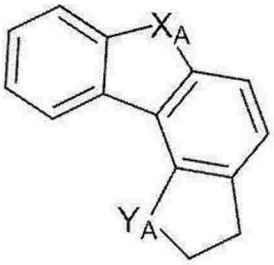
(TEMP-24)

【００４４】

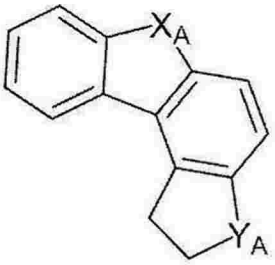
【化８】



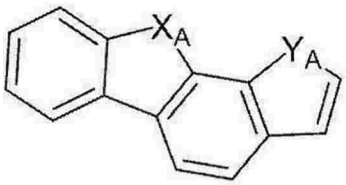
(TEMP-25)



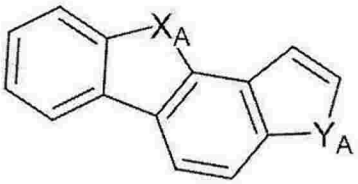
(TEMP-26)



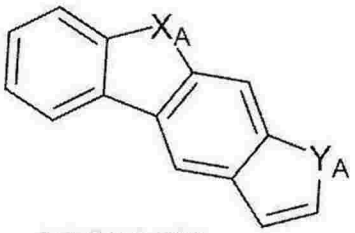
(TEMP-27)



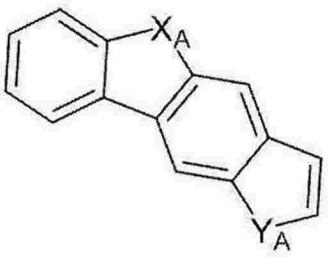
(TEMP-28)



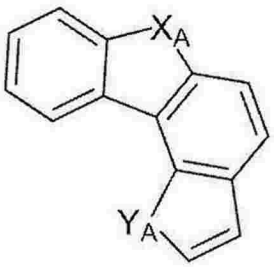
(TEMP-29)



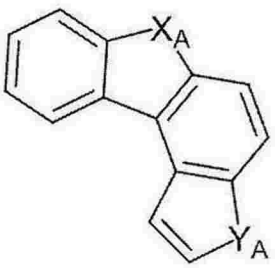
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

【００４５】

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。

【００４６】

・窒素原子を含む置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ１）：

（９－フェニル）カルバゾリル基、

（９－ビフェニリル）カルバゾリル基、

（９－フェニル）フェニルカルバゾリル基、

（９－ナフチル）カルバゾリル基、

ジフェニルカルバゾール－９－イル基、

フェニルカルバゾール－９－イル基、

メチルベンゾイミダゾリル基、

エチルベンゾイミダゾリル基、

フェニルトリアジニル基、

ビフェニリルトリアジニル基、

ジフェニルトリアジニル基、
フェニルキナゾリニル基、及びビフェニリルキナゾリニル基。
【００４７】
・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ２）：
フェニルジベンゾフラニル基、
メチルジベンゾフラニル基、
ｔ－ブチルジベンゾフラニル基、及び
スピロ［９Ｈ－キサンテン－９，９’－［９Ｈ］フルオレン］の１価の残基。
【００４８】
・硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群Ｇ２Ｂ３）：
フェニルジベンゾチオフェニル基、
メチルジベンゾチオフェニル基、
ｔ－ブチルジベンゾチオフェニル基、及び
スピロ［９Ｈ－チオキサンテン－９，９’－［９Ｈ］フルオレン］の１価の残基。
【００４９】
・前記一般式（ＴＥＭＰ－１６）～（ＴＥＭＰ－３３）で表される環構造から誘導される１価の複素環基の１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群Ｇ２Ｂ４）：
【００５０】
前記「１価の複素環基の１つ以上の水素原子」とは、該１価の複素環基の環形成炭素原子に結合している水素原子、X_A及びY_Aの少なくともいずれかがＮＨである場合の窒素原子に結合している水素原子、及びX_A及びY_Aの一方がCH_2である場合のメチレン基の水素原子から選ばれる１つ以上の水素原子を意味する。
【００５１】
・「置換もしくは無置換のアルキル基」
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」の具体例（具体例群Ｇ３）としては、以下の無置換のアルキル基（具体例群Ｇ３Ａ）及び置換のアルキル基（具体例群Ｇ３Ｂ）が挙げられる。（ここで、無置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「無置換のアルキル基」である場合を指し、置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「置換のアルキル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキル基」という場合は、「無置換のアルキル基」と「置換のアルキル基」の両方を含む。
「置換のアルキル基」は、「無置換のアルキル基」における１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキル基」（具体例群Ｇ３Ａ）における１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のアルキル基（具体例群Ｇ３Ｂ）の例等が挙げられる。本明細書において、「無置換のアルキル基」におけるアルキル基は、鎖状のアルキル基を意味する。そのため、「無置換のアルキル基」は、直鎖である「無置換のアルキル基」、及び分岐状である「無置換のアルキル基」が含まれる。尚、ここに列挙した「無置換のアルキル基」の例や「置換のアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルキル基」には、具体例群Ｇ３Ｂの「置換のアルキル基」におけるアルキル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群Ｇ３Ｂの「置換のアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。
【００５２】
・無置換のアルキル基（具体例群Ｇ３Ａ）：
メチル基、
エチル基、
ｎ－プロピル基、
イソプロピル基、
ｎ－ブチル基、
イソブチル基、
ｓ－ブチル基、及び

ｔ－ブチル基。
【００５３】
・置換のアルキル基（具体例群Ｇ３Ｂ）：
ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、
ペンタフルオロエチル基、
２，２，２－トリフルオロエチル基、及び
トリフルオロメチル基。
【００５４】
・「置換もしくは無置換のアルケニル基」
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルケニル基」の具体例（具体例群Ｇ４）としては、以下の無置換のアルケニル基（具体例群Ｇ４Ａ）、及び置換のアルケニル基（具体例群Ｇ４Ｂ）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルケニル基とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「無置換のアルケニル基」である場合を指し、「置換のアルケニル基」とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「置換のアルケニル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「アルケニル基」という場合は、「無置換のアルケニル基」と「置換のアルケニル基」の両方を含む。
「置換のアルケニル基」は、「無置換のアルケニル基」における１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルケニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルケニル基」（具体例群Ｇ４Ａ）が置換基を有する基、及び置換のアルケニル基（具体例群Ｇ４Ｂ）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「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Ｇ４Ｂの「置換のアルケニル基」におけるアルケニル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群Ｇ４Ｂの「置換のアルケニル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。
【００５５】
・無置換のアルケニル基（具体例群Ｇ４Ａ）：
ビニル基、
アリル基、
１－ブテニル基、
２－ブテニル基、及び
３－ブテニル基。
【００５６】
・置換のアルケニル基（具体例群Ｇ４Ｂ）：
１，３－ブタンジエニル基、
１－メチルビニル基、
１－メチルアリル基、
１，１－ジメチルアリル基、
２－メチルアリル基、及び
１，２－ジメチルアリル基。
【００５７】
・「置換もしくは無置換のアルキニル基」
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキニル基」の具体例（具体例群Ｇ５）としては、以下の無置換のアルキニル基（具体例群Ｇ５Ａ）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルキニル基とは、「置換もしくは無置換のアルキニル基」が「無置換のアルキニル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキニル基」という場合は、「無置換のアルキニル基」と「置換のアルキニル基」の両方を含む。
「置換のアルキニル基」は、「無置換のアルキニル基」における１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキニル基」（具体例群Ｇ５Ａ）における１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基等が挙げられる。

【００５８】
・無置換のアルキニル基（具体例群Ｇ５Ａ）：
エチニル基。
【００５９】
・「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」の具体例（具体例群Ｇ６）としては、以下の無置換のシクロアルキル基（具体例群Ｇ６Ａ）、及び置換のシクロアルキル基（具体例群Ｇ６Ｂ）等が挙げられる。（ここで、無置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「無置換のシクロアルキル基」である場合を指し、置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「置換のシクロアルキル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「シクロアルキル基」という場合は、「無置換のシクロアルキル基」と「置換のシクロアルキル基」の両方を含む。
「置換のシクロアルキル基」は、「無置換のシクロアルキル基」における１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のシクロアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のシクロアルキル基」（具体例群Ｇ６Ａ）における１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のシクロアルキル基（具体例群Ｇ６Ｂ）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のシクロアルキル基」の例や「置換のシクロアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のシクロアルキル基」には、具体例群Ｇ６Ｂの「置換のシクロアルキル基」におけるシクロアルキル基自体の炭素原子に結合する１つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び具体例群Ｇ６Ｂの「置換のシクロアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。
【００６０】
・無置換のシクロアルキル基（具体例群Ｇ６Ａ）：
シクロプロピル基、
シクロブチル基、
シクロペンチル基、
シクロヘキシル基、
１－アダマンチル基、
２－アダマンチル基、
１－ノルボルニル基、及び
２－ノルボルニル基。
【００６１】
・置換のシクロアルキル基（具体例群Ｇ６Ｂ）：
４－メチルシクロヘキシル基。
【００６２】
・「－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基」
本明細書に記載の－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基の具体例（具体例群Ｇ７）としては、
－Ｓｉ（Ｇ１）（Ｇ１）（Ｇ１）、
－Ｓｉ（Ｇ１）（Ｇ２）（Ｇ２）、
－Ｓｉ（Ｇ１）（Ｇ１）（Ｇ２）、
－Ｓｉ（Ｇ２）（Ｇ２）（Ｇ２）、
－Ｓｉ（Ｇ３）（Ｇ３）（Ｇ３）、及び
－Ｓｉ（Ｇ６）（Ｇ６）（Ｇ６）
が挙げられる。ここで、
Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。
Ｇ２は、具体例群Ｇ２に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。
Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

Ｇ６は、具体例群Ｇ６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Ｇ１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Ｇ２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Ｇ１は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｓｉ（Ｇ２）（Ｇ２）（Ｇ２）における複数のＧ２は、互いに同一であるか、又は異なる。
－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。
－Ｓｉ（Ｇ６）（Ｇ６）（Ｇ６）における複数のＧ６は、互いに同一であるか、又は異なる。

【００６３】

・「－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Ｇ８）としては、
－Ｏ（Ｇ１）、
－Ｏ（Ｇ２）、
－Ｏ（Ｇ３）、及び
－Ｏ（Ｇ６）
が挙げられる。
ここで、
Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。
Ｇ２は、具体例群Ｇ２に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。
Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。
Ｇ６は、具体例群Ｇ６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。

【００６４】

・「－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Ｇ９）としては、
－Ｓ（Ｇ１）、
－Ｓ（Ｇ２）、
－Ｓ（Ｇ３）、及び
－Ｓ（Ｇ６）
が挙げられる。
ここで、
Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。
Ｇ２は、具体例群Ｇ２に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。
Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。
Ｇ６は、具体例群Ｇ６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。

【００６５】

・「－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Ｇ１０）としては、
－Ｎ（Ｇ１）（Ｇ１）、
－Ｎ（Ｇ２）（Ｇ２）、
－Ｎ（Ｇ１）（Ｇ２）、
－Ｎ（Ｇ３）（Ｇ３）、及び
－Ｎ（Ｇ６）（Ｇ６）
が挙げられる。
ここで、

Ｇ１は、具体例群Ｇ１に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。
Ｇ２は、具体例群Ｇ２に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。
Ｇ３は、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。
Ｇ６は、具体例群Ｇ６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（Ｇ１）（Ｇ１）における複数のＧ１は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｎ（Ｇ２）（Ｇ２）における複数のＧ２は、互いに同一であるか、又は異なる。
－Ｎ（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。
－Ｎ（Ｇ６）（Ｇ６）における複数のＧ６は、互いに同一であるか、又は異なる。

【００６６】

・「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Ｇ１１）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。

【００６７】

・「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Ｇ３）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。

【００６８】

・「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。

【００６９】

・「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。

【００７０】
・「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。
【００７１】
・「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。
【００７２】
・「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。
【００７３】
・「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。
【００７４】
・「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。
【００７５】
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’－スピロビフルオレニル基、９，９－ジメチルフルオレニル基、及び９，９－ジフェニルフルオレニル基等である。

【００７６】

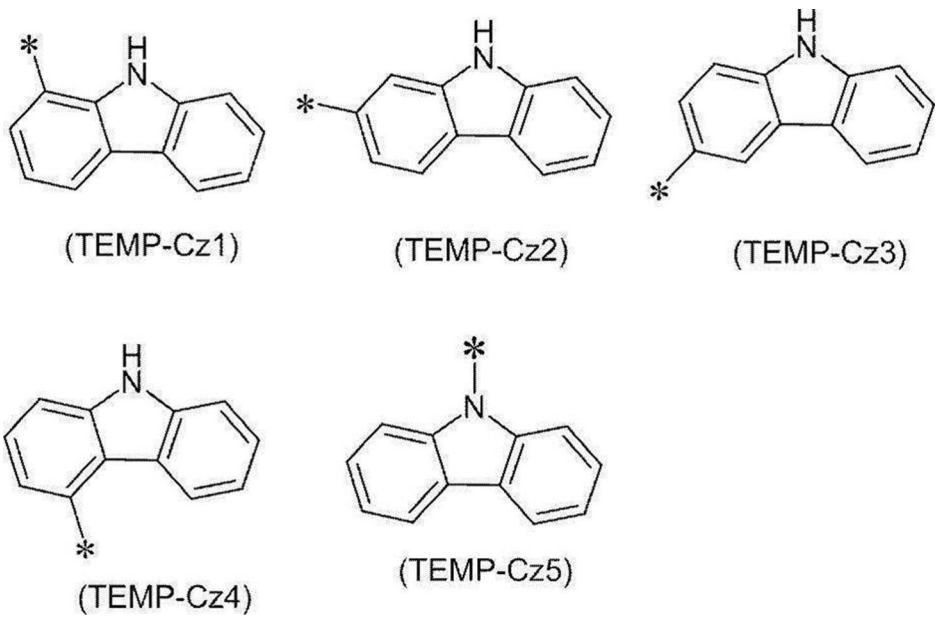
本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基、カルバゾリル基（１－カルバゾリル基、２－カルバゾリル基、３－カルバゾリル基、４－カルバゾリル基、又は９－カルバゾリル基）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ジアザジベンゾチオフ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

【００７７】

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。

【００７８】

【化９】

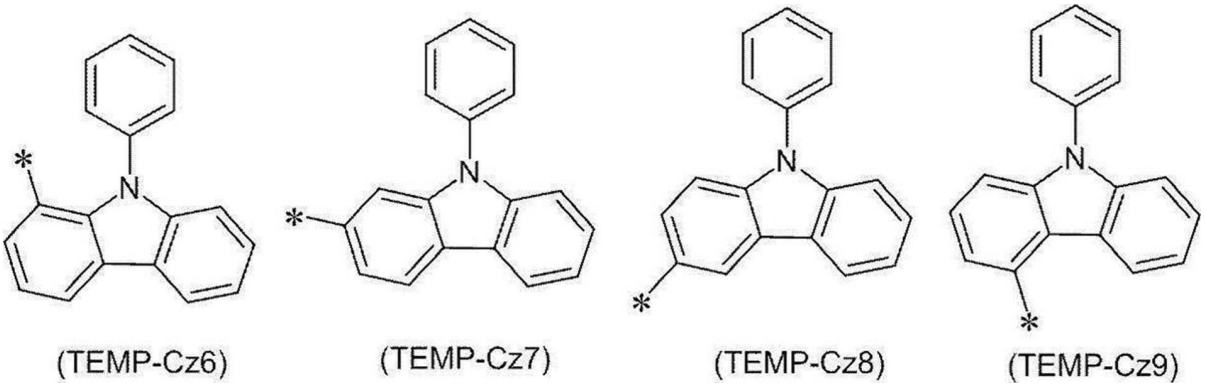


【００７９】

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。

【００８０】

【化１０】



【００８１】

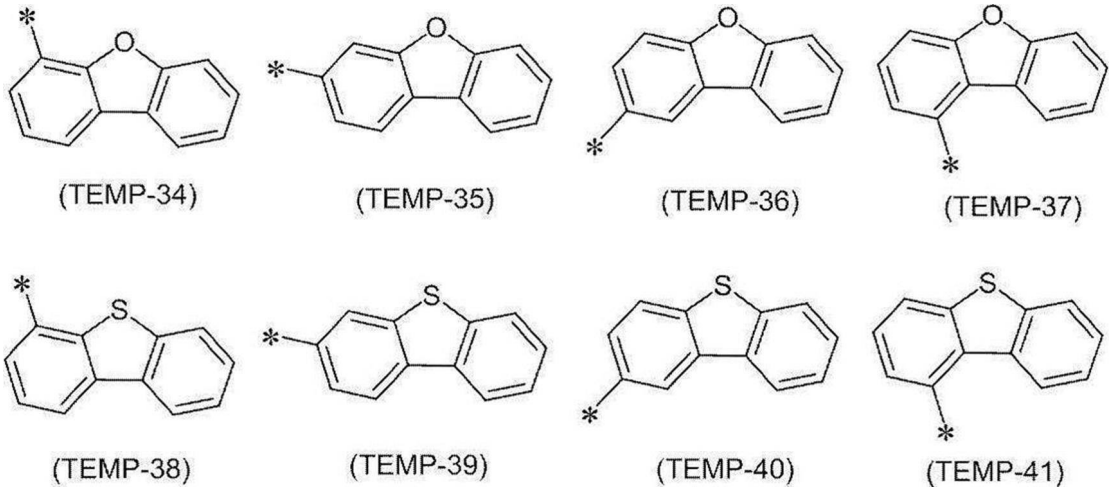
前記一般式（ＴＥＭＰ－Ｃｚ１）～（ＴＥＭＰ－Ｃｚ９）中、＊は、結合位置を表す。

【００８２】

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。

【００８３】

【化１１】



【００８４】

前記一般式（ＴＥＭＰ－３４）～（ＴＥＭＰ－４１）中、＊は、結合位置を表す。

【００８５】

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。

【００８６】

・「置換もしくは無置換のアリーレン基」

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

【００８７】

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

【００８８】

・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

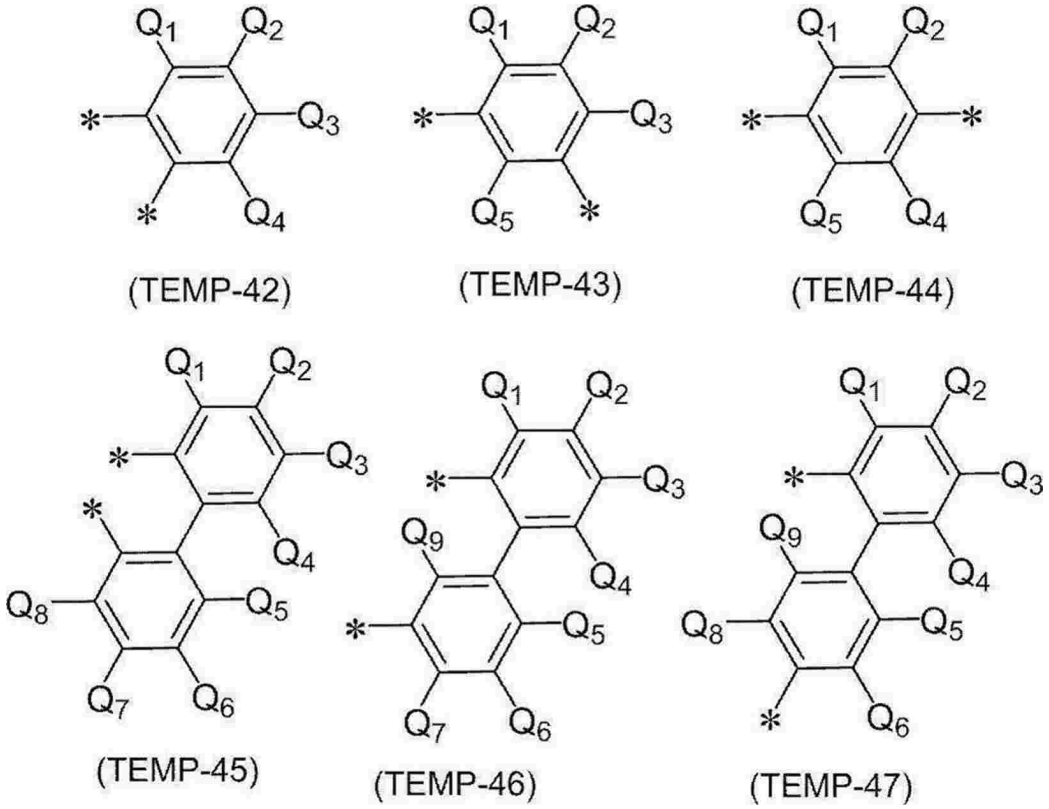
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の１つの水素原子を除くことにより誘導される２価の基である。「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群Ｇ１４）としては、具体例群Ｇ３に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の１つの水素原子を除くことにより誘導される２価の基等が挙げられる。

【００８９】

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。

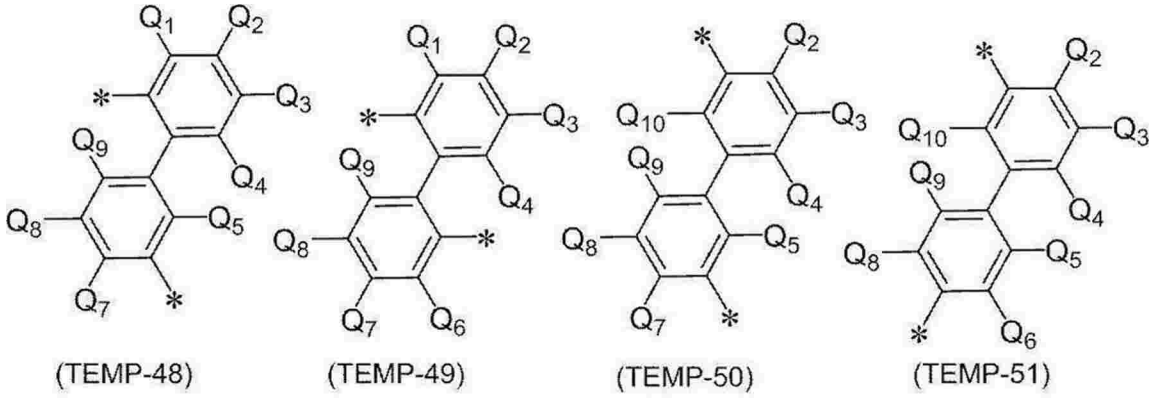
【００９０】

【化１２】

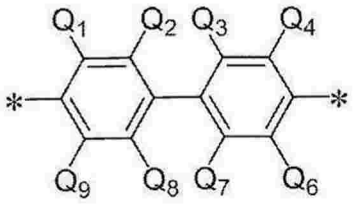


【００９１】

【化１３】



(TEMP-48) (TEMP-49) (TEMP-50) (TEMP-51)



(TEMP-52)

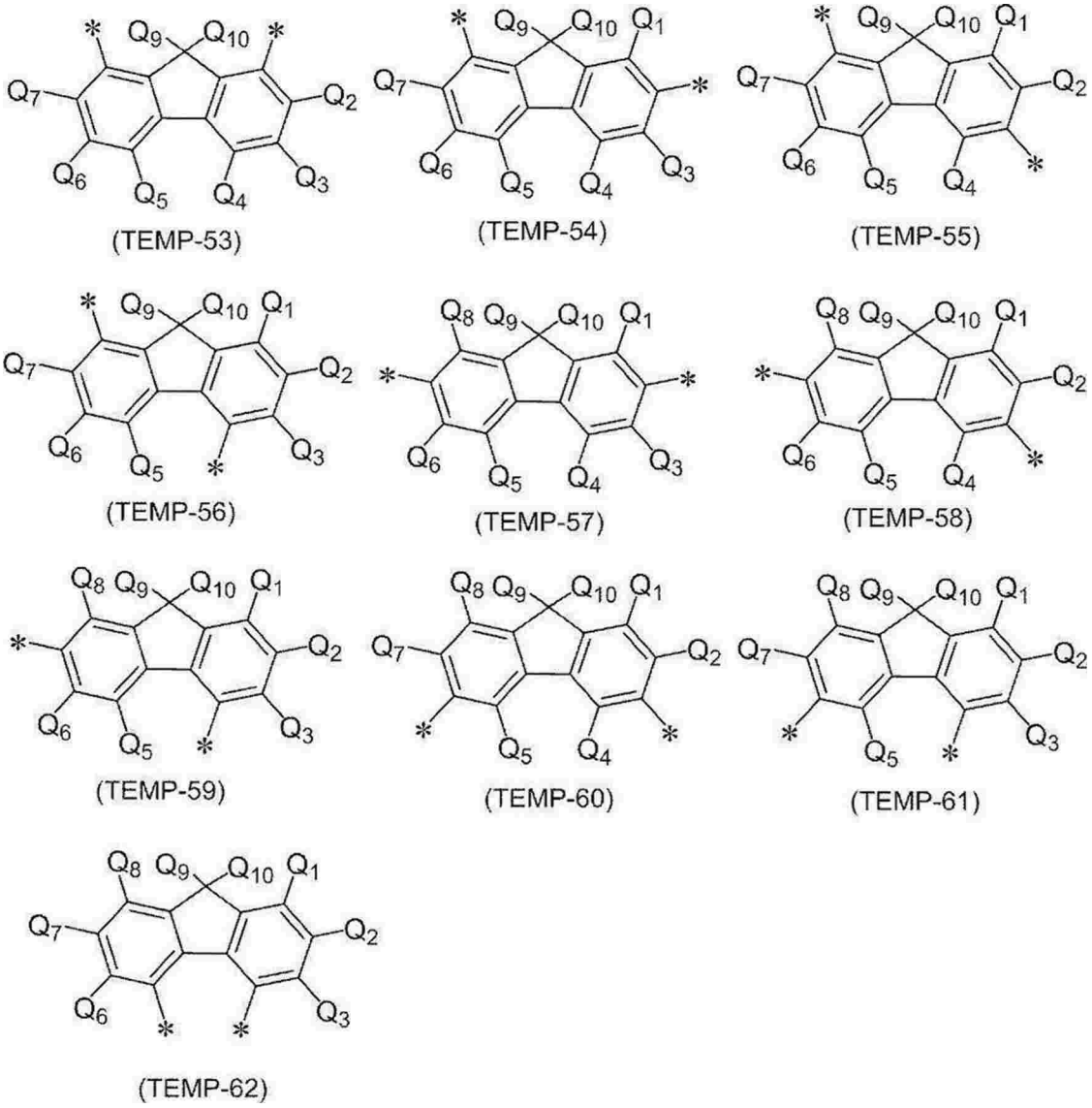
【００９２】

前記一般式（ＴＥＭＰ－４２）～（ＴＥＭＰ－５２）中、Q_1～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。

【００９３】

【化１４】



【００９４】

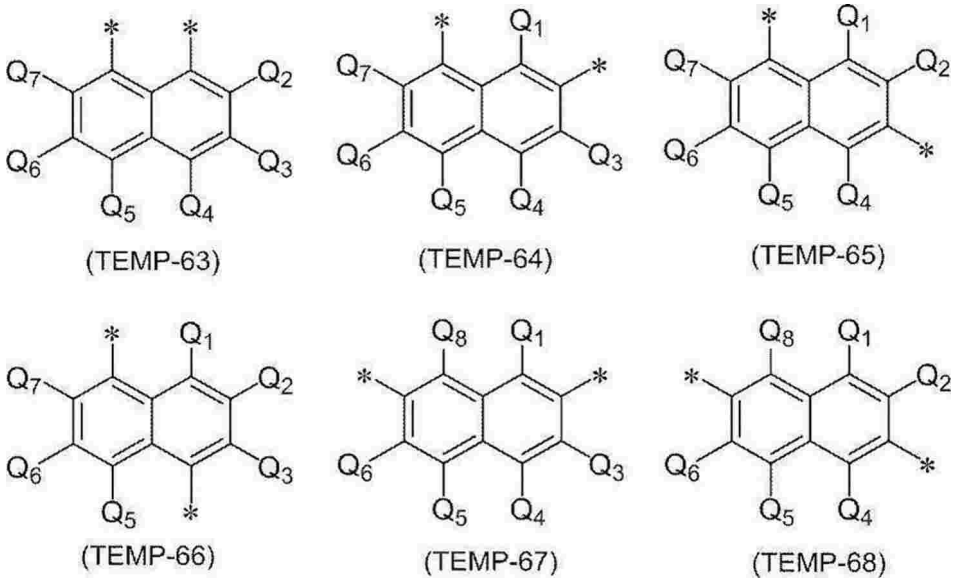
前記一般式（ＴＥＭＰ－５３）～（ＴＥＭＰ－６２）中、Q_1～Q_{10}は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

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。

【００９５】

【化１５】



【００９６】

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

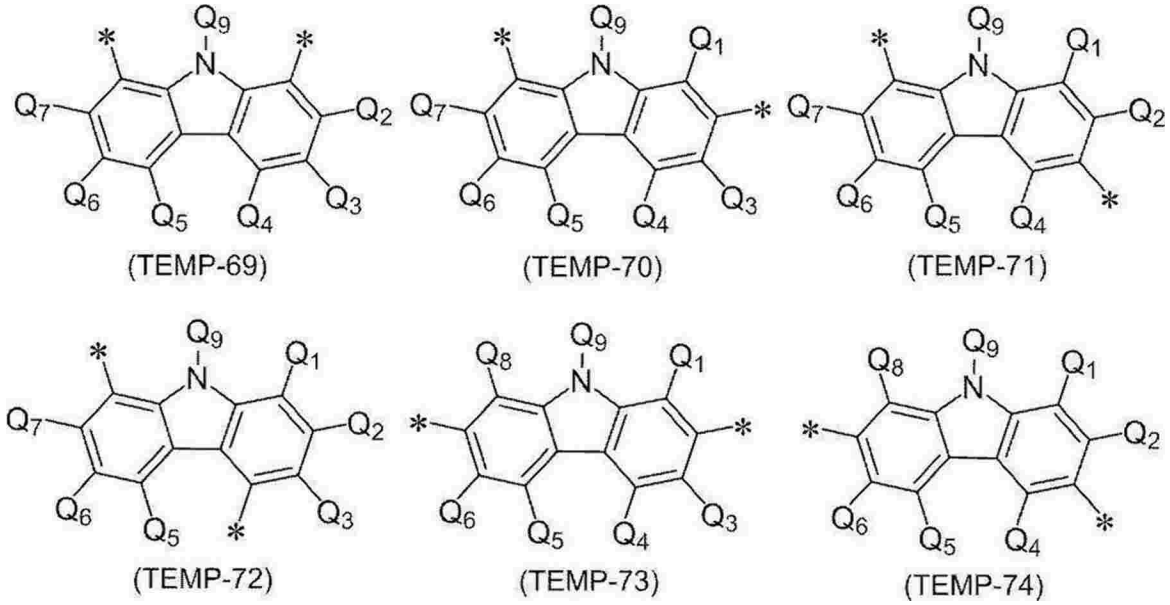
前記一般式（ＴＥＭＰ－６３）～（ＴＥＭＰ－６８）中、＊は、結合位置を表す。

【００９７】

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。

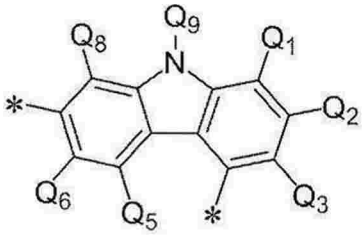
【００９８】

【化１６】

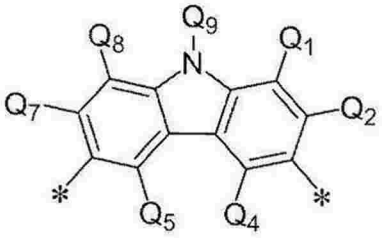


【００９９】

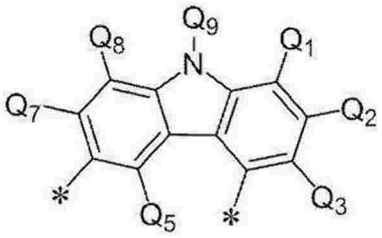
【化１７】



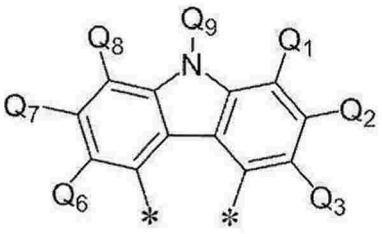
(TEMP-75)



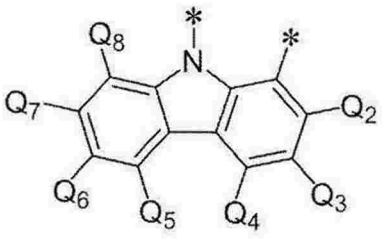
(TEMP-76)



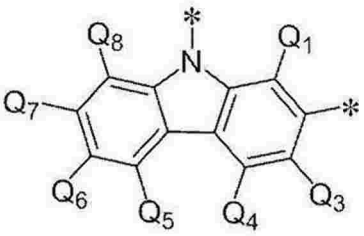
(TEMP-77)



(TEMP-78)



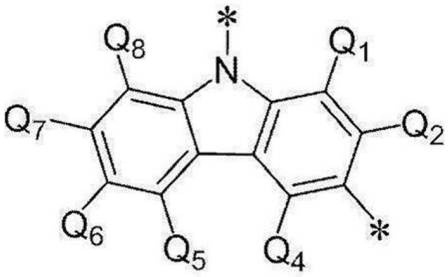
(TEMP-79)



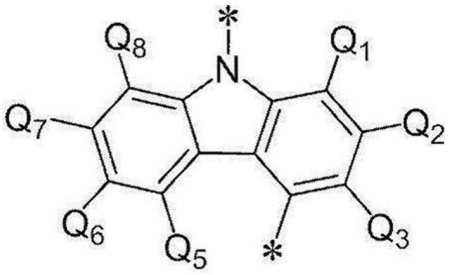
(TEMP-80)

【０１００】

【化１８】



(TEMP-81)



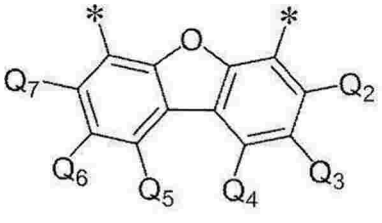
(TEMP-82)

【０１０１】

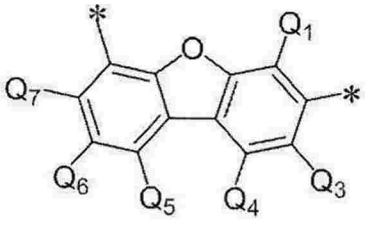
前記一般式（ＴＥＭＰ－６９）～（ＴＥＭＰ－８２）中、Q_1～Q_9は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

【０１０２】

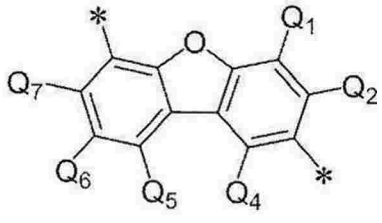
【化１９】



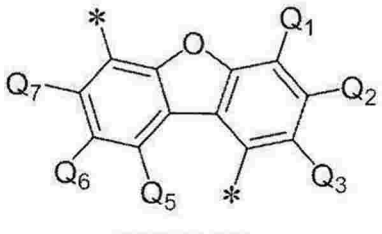
(TEMP-83)



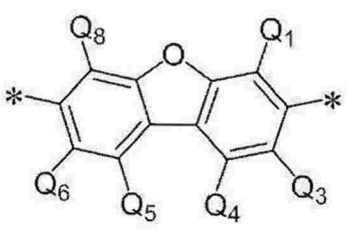
(TEMP-84)



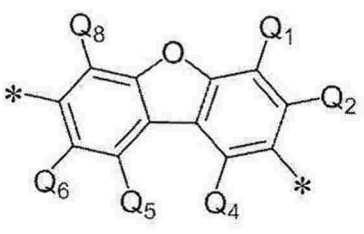
(TEMP-85)



(TEMP-86)

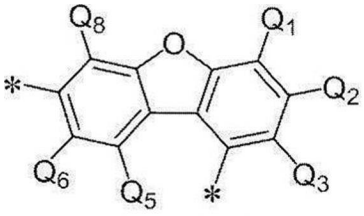


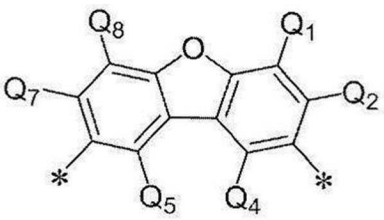
(TEMP-87)

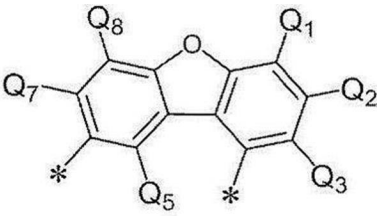


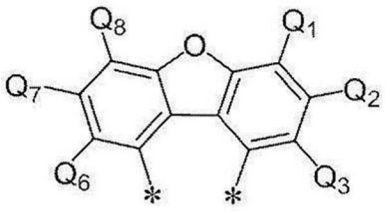
(TEMP-88)

【０１０３】
【化２０】

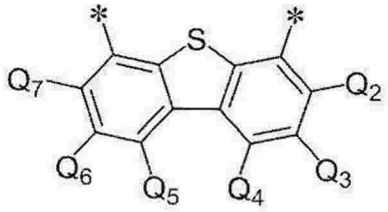

(TEMP-89)

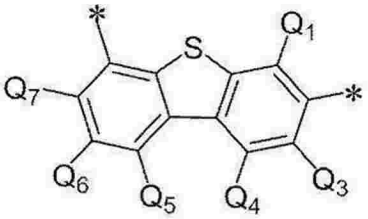

(TEMP-90)

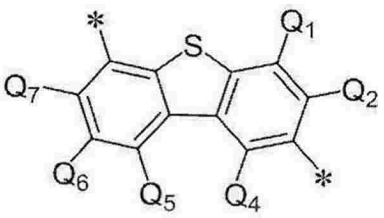

(TEMP-91)

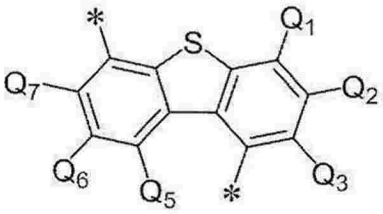

(TEMP-92)

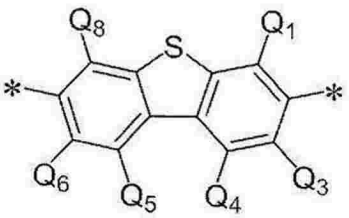
【０１０４】
【化２１】

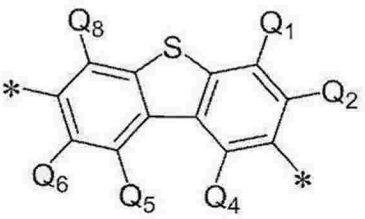

(TEMP-93)


(TEMP-94)


(TEMP-95)

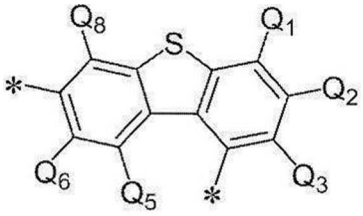

(TEMP-96)


(TEMP-97)

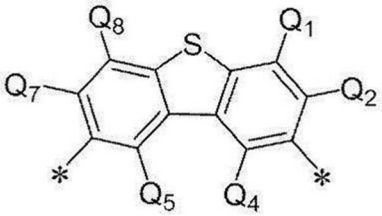

(TEMP-98)

【０１０５】

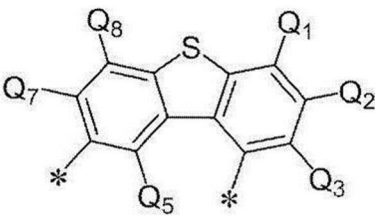
【化２２】



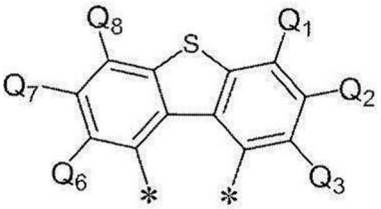
(TEMP-99)



(TEMP-100)



(TEMP-101)



(TEMP-102)

【０１０６】

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

【０１０７】

以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

【０１０８】

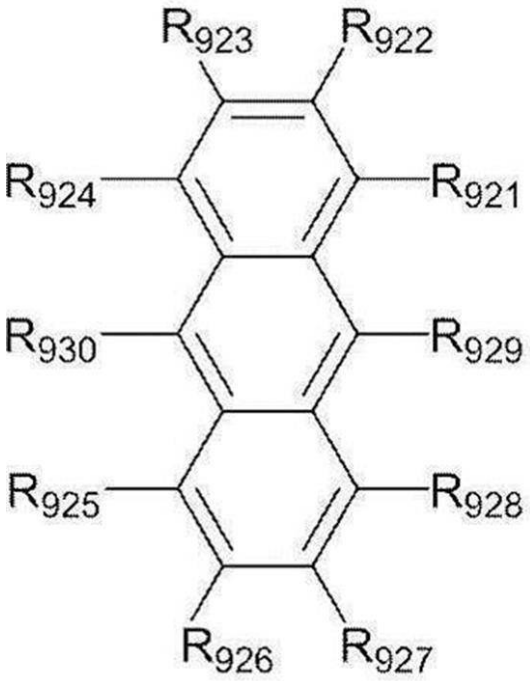
・「結合して環を形成する場合」

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。

【０１０９】

【化２３】



(TEMP-103)

【０１１０】

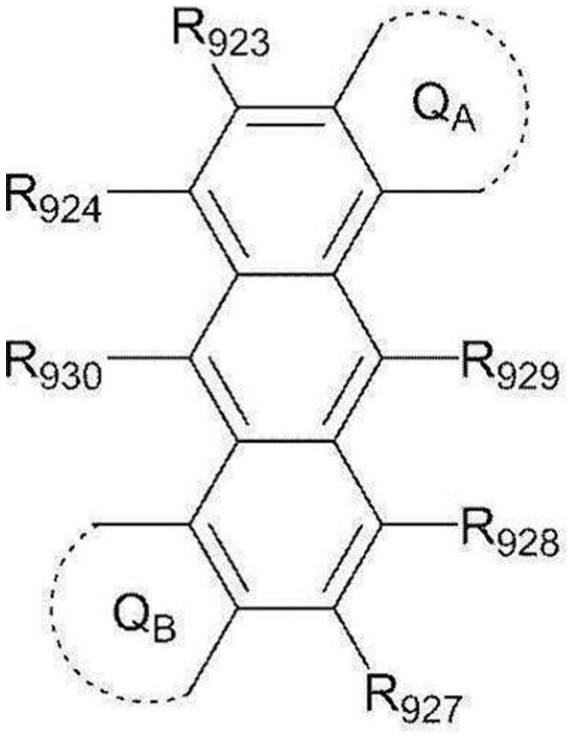
例えば、Ｒ９２１～Ｒ９３０のうちの「隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、互いに結合して、環を形成する」場合において、１組となる隣接する２つからなる組とは、Ｒ９２１とＲ９２２との組、Ｒ９２２とＲ９２３との組、Ｒ９２３とＲ９２４との組、Ｒ９２４とＲ９３０との組、Ｒ９３０とＲ９２５との組、Ｒ９２５とＲ９２６との組、Ｒ９２６とＲ９２７との組、Ｒ９２７とＲ９２８との組、Ｒ９２８とＲ９２９との組、並びにＲ９２９とＲ９２１との組である。

【０１１１】

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

【０１１２】

【化２４】



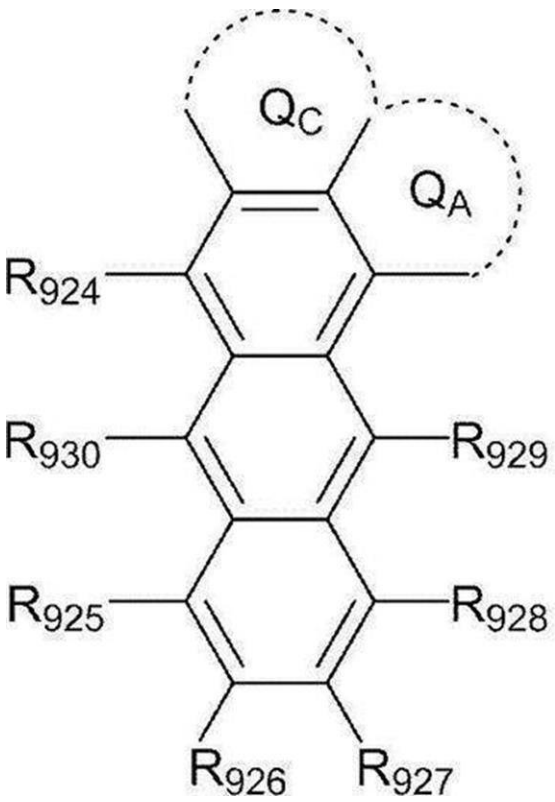
(TEMP-104)

【０１１３】

「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。

【０１１４】

【化２５】



(TEMP-105)

【０１１５】

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（ＴＭＥＰ－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（ＴＭＥＰ－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。

【０１１６】

「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。

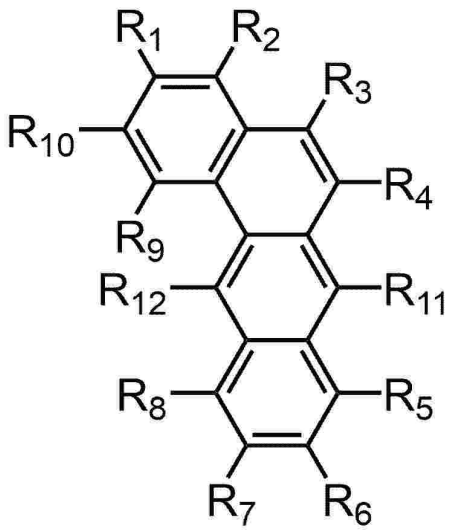
脂肪族炭化水素環の具体例としては、具体例群Ｇ６において具体例として挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

「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。

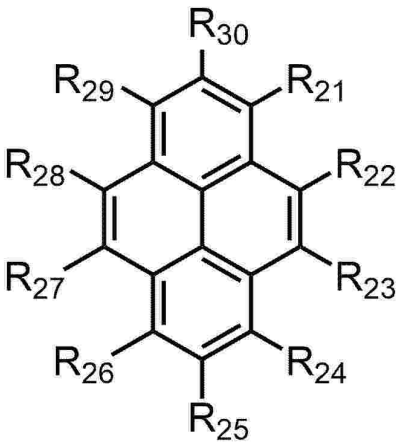
【０１１７】
ここで、「任意の元素」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、炭素元素、窒素元素、酸素元素、及び硫黄元素からなる群から選択される少なくとも１種の元素である。任意の元素において（例えば、炭素元素、又は窒素元素の場合）、環を形成しない結合は、水素原子等で終端されてもよいし、後述する「任意の置換基」で置換されてもよい。炭素元素以外の任意の元素を含む場合、形成される環は複素環である。
単環または縮合環を構成する「１以上の任意の元素」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは２個以上１５個以下であり、より好ましくは３個以上１２個以下であり、さらに好ましくは３個以上５個以下である。
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。
【０１１８】
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。
【０１１９】
・「置換もしくは無置換の」という場合の置換基
本明細書における一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基（本明細書において、「任意の置換基」と呼ぶことがある。）は、例えば、
無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）、
－Ｏ－（Ｒ９０４）、
－Ｓ－（Ｒ９０５）、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）、
ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、
無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、及び
無置換の環形成原子数５～５０の複素環基からなる群から選択される基等であり、
ここで、Ｒ９０１～Ｒ９０７は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。
　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。
【０１２０】
　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。
【０１２１】
　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。
【０１２２】
　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。
【０１２３】
　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。
【０１２４】
　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。
【０１２５】
〔第一実施形態〕
（化合物）
　本実施形態に係る化合物は、下記一般式（１Ｃ－Ａ）で表される化合物である。
【０１２６】

【化２６】



(1C-A)



(1D-A)

【０１２７】

（前記一般式（１Ｃ－Ａ）において、

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

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、

－Ｃ（＝Ｏ）Ｒ８０１で表される基、

－ＣＯＯＲ８０２で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

Ｒ１１が前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基である場合、Ｒ１２は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、

Ｒ１２が前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基である場合、Ｒ１１は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、

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

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記一般式（１Ｃ－Ａ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ａ）中のＲ２１～Ｒ３０は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
ただし、Ｒ２１～Ｒ３０の少なくとも一つは水素原子以外であり、
前記一般式（１Ｃ－Ａ）で表される化合物において、Ｒ９０１、Ｒ９０２、Ｒ９０３、Ｒ９０４、Ｒ９０５、Ｒ９０６、Ｒ９０７、Ｒ８０１、及びＲ８０２は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ９０１が複数存在する場合、複数のＲ９０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０２が複数存在する場合、複数のＲ９０２は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０３が複数存在する場合、複数のＲ９０３は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０４が複数存在する場合、複数のＲ９０４は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０５が複数存在する場合、複数のＲ９０５は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０６が複数存在する場合、複数のＲ９０６は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０７が複数存在する場合、複数のＲ９０７は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０１が複数存在する場合、複数のＲ８０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０２が複数存在する場合、複数のＲ８０２は、互いに同一であるか又は異なる。）

【０１２８】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基における前記一般式（１Ｃ－Ａ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、水素原子ではない前記一般式（１Ｄ－Ａ）中のＲ２１～Ｒ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることも好ましい。

【０１２９】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基における前記一般式（１Ｃ－Ａ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、水素原子ではない前記一般式（１Ｄ－Ａ）中のＲ２１～Ｒ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。

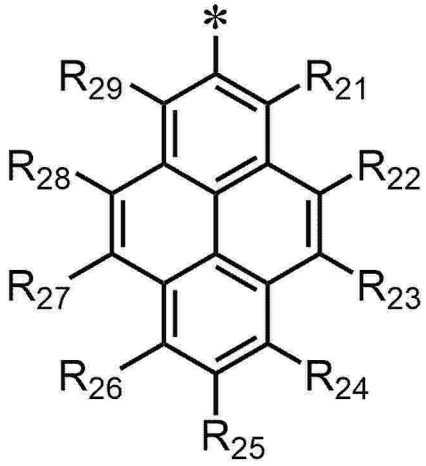
【０１３０】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基が、下記一般

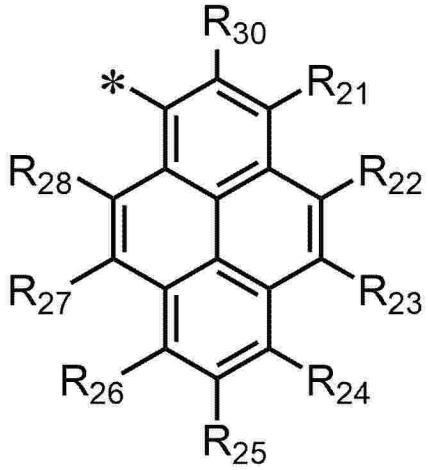
式（１Ｄ－Ａ１）、（１Ｄ－Ａ２）又は（１Ｄ－Ａ３）で表される基であることも好ましい。

【０１３１】

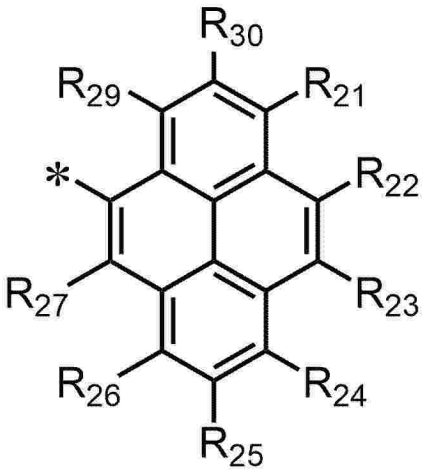
【化２７】



(1D-A1)



(1D-A2)



(1D-A3)

【０１３２】

（前記一般式（１Ｄ－Ａ１）において、

Ｒ２１～Ｒ２９のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないＲ２１～Ｒ２９は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
ただし、Ｒ２１～Ｒ２９の少なくとも一つは水素原子以外であり、
＊は前記一般式（１Ｃ－Ａ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、
前記一般式（１Ｄ－Ａ２）において、
Ｒ２１～Ｒ２８、及びＲ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないＲ２１～Ｒ２８、及びＲ３０は、それぞれ独立に、前記一般式（１Ｄ－Ａ１）におけるＲ２１～Ｒ２９と同義であり、
ただし、Ｒ２１～Ｒ２８、及びＲ３０の少なくとも一つは水素原子以外であり、
＊は前記一般式（１Ｃ－Ａ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、
前記一般式（１Ｄ－Ａ３）において、
Ｒ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０は、それぞれ独立に、前記一般式（１Ｄ－Ａ１）におけるＲ２１～Ｒ２９と同義であり、
ただし、Ｒ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも一つは水素原子以外であり、
＊は前記一般式（１Ｃ－Ａ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示す。）

【０１３３】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ａ１）、（１Ｄ－Ａ２）又は（１Ｄ－Ａ３）で表される基における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、水素原子ではない、前記一般式（１Ｄ－Ａ１）中のＲ２１～Ｒ２９の少なくとも１つ、前記一般式（１Ｄ－Ａ２）中のＲ２１～Ｒ２８、及びＲ３０の少なくとも１つ、又は前記一般式（１Ｄ－Ａ３）中のＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることも好ましい。

【０１３４】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ａ１）、（１Ｄ－Ａ２）又は（１Ｄ－Ａ３）で表される基における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、水素原子ではない、前記一般式（１Ｄ－Ａ１）中のＲ２１～Ｒ２９の少なくとも１つ、前記一般式（１Ｄ－Ａ２）中のＲ２１～Ｒ２８、及びＲ３０の少なくとも１つ、又は前記一般式（１Ｄ－Ａ３）中のＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。

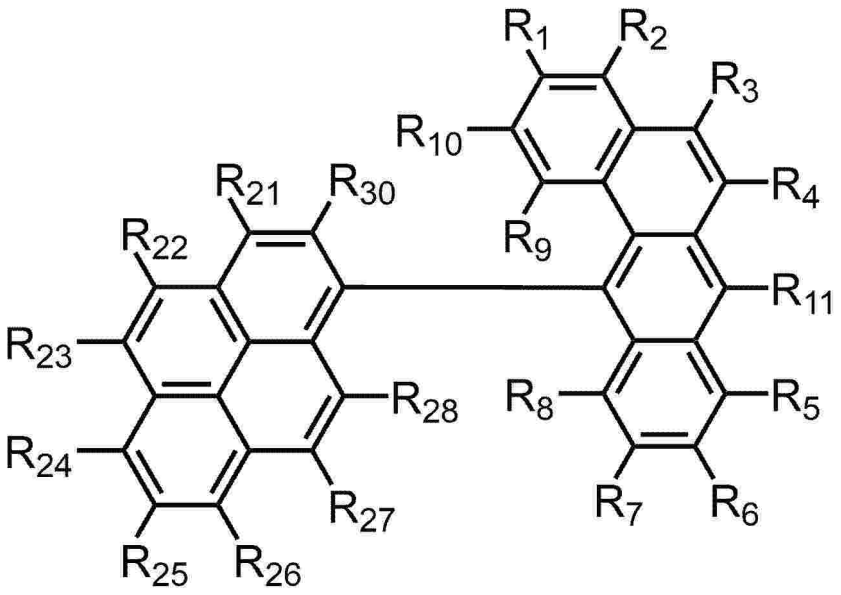
【０１３５】

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

【０１３６】

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

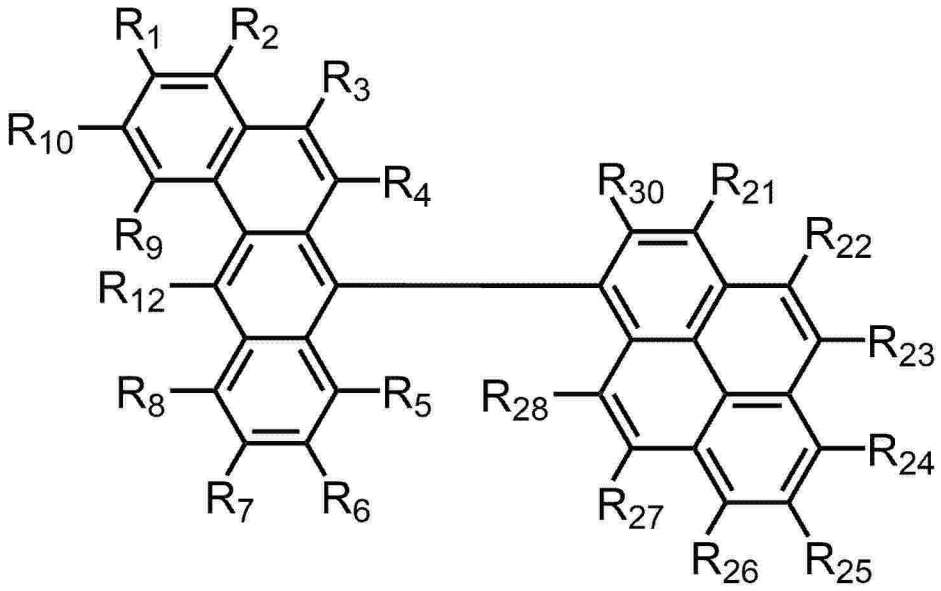
【０１３７】
本実施形態に係る化合物において、R_6、R_7、R_{11}、及びR_{12}のうちの１つが、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基であることも好ましい。
【０１３８】
本実施形態に係る化合物において、R_{11}が、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基であることも好ましい。
【０１３９】
本実施形態に係る化合物において、R_{12}が、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基である化合物であることも好ましい。
【０１４０】
本実施形態に係る化合物において、R_{11}が、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基であり、R_{12}が、無置換のフェニル基であるか、又は、R_{12}が、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基であり、R_{11}が、無置換のフェニル基であることも好ましい。
【０１４１】
本実施形態に係る化合物において、R_{11}が、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基であり、R_{12}が、無置換のフェニル基であることも好ましい。
【０１４２】
本実施形態に係る化合物において、R_{12}が、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基であり、R_{11}が、無置換のフェニル基であることも好ましい。
【０１４３】
本実施形態に係る化合物は、下記一般式（１Ｃ－Ａ－１）で表される化合物であることも好ましい。
本実施形態に係る化合物は、下記一般式（１Ｃ－Ａ－２）で表される化合物であることも好ましい。
【０１４４】
【化２８】



(1C-A-1)

【０１４５】

【化２９】



(1C-A-2)

【０１４６】

（前記一般式（１Ｃ－Ａ－１）におけるR_1～R_{11}並びに前記一般式（１Ｃ－Ａ－２）におけるR_1～R_{10}及びR_{12}は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、

－Ｏ－（R_{904}）で表される基、

－Ｓ－（R_{905}）で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、

－Ｃ（＝Ｏ）R_{801}で表される基、

－ＣＯＯR_{802}で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

前記一般式（１Ｃ－Ａ－１）及び（１Ｃ－Ａ－２）におけるR_{21}～R_{28}及びR_{30}は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、

－Ｏ－（R_{904}）で表される基、

－Ｓ－（R_{905}）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
ただし、Ｒ２１～Ｒ２８、及びＲ３０の少なくとも一つは水素原子以外である。）

【０１４７】
本実施形態に係る化合物において、Ｒ１２が水素原子であることも好ましい。

【０１４８】
本実施形態に係る化合物において、分子内に、１つ以上の重水素原子を有することが好ましい。

【０１４９】
本実施形態に係る化合物において、水素原子である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基以外の水素原子である場合のＲ４～Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子である場合のＲ２１～Ｒ３０の１つ以上は、重水素原子であることも好ましい。
本実施形態に係る化合物において、水素原子である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基以外の水素原子である場合のＲ４～Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子である場合のＲ２１～Ｒ３０の全ては、重水素原子であることも好ましい。

【０１５０】
本実施形態に係る化合物において、水素原子以外である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基以外の水素原子以外である場合のＲ４～Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子以外である場合のＲ２１～Ｒ３０が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の１つ以上は、重水素原子であることも好ましい。
本実施形態に係る化合物において、水素原子以外である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基以外の水素原子以外である場合のＲ４～Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子以外である場合のＲ２１～Ｒ３０が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の全ては、重水素原子であることも好ましい。

【０１５１】
本実施形態に係る化合物において、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、及びＲ８のうちの１つが、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基である場合、Ｒ２及びＲ３が水素原子であることも好ましい。

【０１５２】
本実施形態に係る化合物において、分子中にヘテロ原子を含まない化合物であることも好ましい。

【０１５３】
本実施形態に係る化合物において、前記「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であり、前記「置換もしくは無置換」と記載された環は、いずれも「無置換」の環であることも好ましい。

【０１５４】
・本実施形態に係る化合物の製造方法
本実施形態に係る化合物は、後述する実施例に記載の合成方法に従って製造できる。また、本実施形態に係る化合物は、当該合成方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。

【０１５５】
・本実施形態に係る化合物の具体例
本実施形態に係る化合物の具体例としては、例えば、後述の第四実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子に用いられる第一の化合物としての一般式（１Ｃ）で表され

る化合物において例示される化合物のうち、本実施形態に係る化合物の範囲内の化合物が、本実施形態に係る化合物の具体例である。

【０１５６】

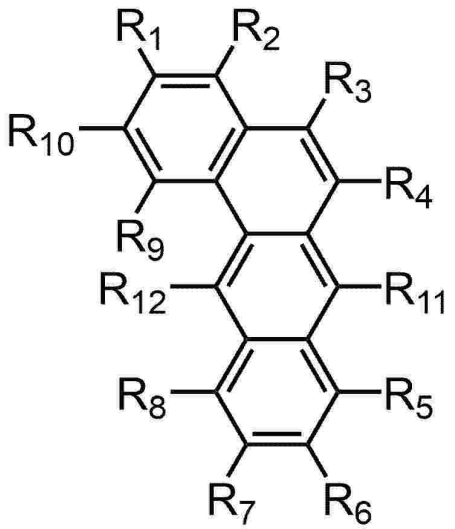
〔第二実施形態〕

（化合物）

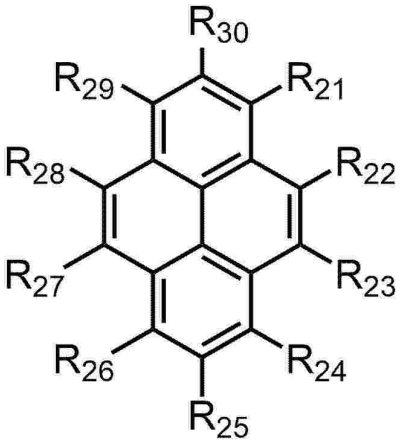
本実施形態に係る化合物は、下記一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物である。

【０１５７】

【化３０】



(1C-B)



(1D-B)

【０１５８】

（前記一般式（１Ｃ－Ｂ）において、

R_4～R_6、R_8、及びR_{10}～R_{12}のうちの１つは、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であり、

R_1～R_3、R_7、R_9、並びに前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基以外のR_4～R_6、R_8、及びR_{10}～R_{12}は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、

－Ｏ－（R_{904}）で表される基、

－Ｓ－（R_{905}）で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、

－Ｃ（＝Ｏ）R_{801}で表される基、

－ＣＯＯR_{802}で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

R_{11}が前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基である場合、R_{12}は水素原子または無置

換のフェニル基であり、
　Ｒ１２が前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基である場合、Ｒ１１は置換もしくは無置換のフェニル基であり、
　前記一般式（１Ｄ－Ｂ）において、Ｒ２１～Ｒ３０のうちの１つが前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、当該結合位置ではない前記一般式（１Ｄ－Ｂ）中のＲ２１～Ｒ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
　　互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
　　互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
　　互いに結合せず、
　前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｂ）中のＲ２１～Ｒ３０は、それぞれ独立に、
　　水素原子、
　　置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
　　置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
　　置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
　　置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
　　－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
　　－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
　　－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
　　－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
　　ハロゲン原子、
　　シアノ基、
　　ニトロ基、
　　置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
　　置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
　前記一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物において、Ｒ９０１、Ｒ９０２、Ｒ９０３、Ｒ９０４、Ｒ９０５、Ｒ９０６、Ｒ９０７、Ｒ８０１、及びＲ８０２は、それぞれ独立に、
　　水素原子、
　　置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
　　置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
　　置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
　　置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
　Ｒ９０１が複数存在する場合、複数のＲ９０１は、互いに同一であるか又は異なり、
　Ｒ９０２が複数存在する場合、複数のＲ９０２は、互いに同一であるか又は異なり、
　Ｒ９０３が複数存在する場合、複数のＲ９０３は、互いに同一であるか又は異なり、
　Ｒ９０４が複数存在する場合、複数のＲ９０４は、互いに同一であるか又は異なり、
　Ｒ９０５が複数存在する場合、複数のＲ９０５は、互いに同一であるか又は異なり、
　Ｒ９０６が複数存在する場合、複数のＲ９０６は、互いに同一であるか又は異なり、
　Ｒ９０７が複数存在する場合、複数のＲ９０７は、互いに同一であるか又は異なり、
　Ｒ８０１が複数存在する場合、複数のＲ８０１は、互いに同一であるか又は異なり、
　Ｒ８０２が複数存在する場合、複数のＲ８０２は、互いに同一であるか又は異なる。）
【０１５９】
　本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基における前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｂ）中のＲ２１～Ｒ３０の少なくとも１つが、水素原子以外であることも好ましい。
【０１６０】
　本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基における前記

一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｂ）中のＲ２１～Ｒ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることも好ましい。

【０１６１】

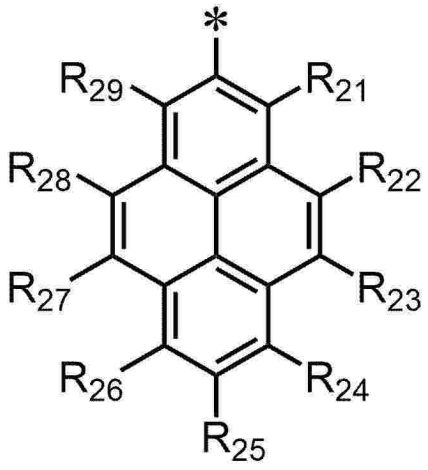
本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基における前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｂ）中のＲ２１～Ｒ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。

【０１６２】

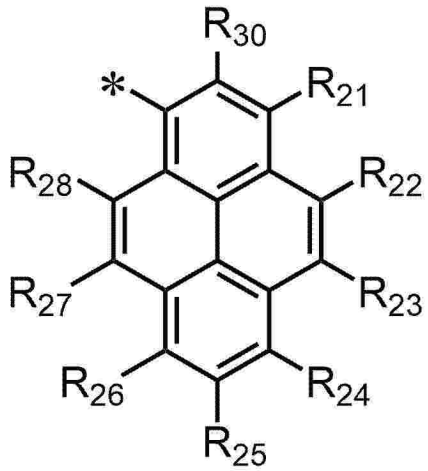
本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基が、下記一般式（１Ｄ－Ｂ１）、（１Ｄ－Ｂ２）又は（１Ｄ－Ｂ３）で表される基であることも好ましい。

【０１６３】

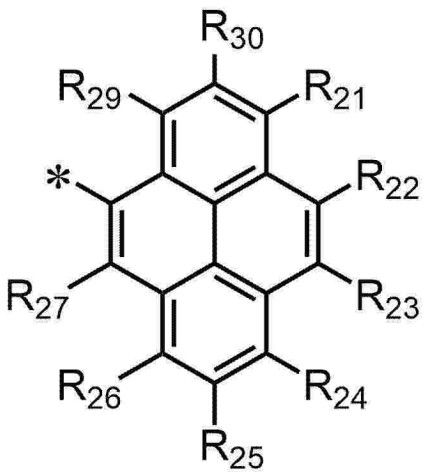
【化３１】



(1D-B1)



(1D-B2)



(1D-B3)

【０１６４】

（前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）において、

Ｒ２１～Ｒ２９のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR_{21}～R_{29}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、
－Ｏ－（R_{904}）で表される基、
－Ｓ－（R_{905}）で表される基、
－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
＊は前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、
前記一般式（１Ｄ－Ｂ２）において、
R_{21}～R_{28}、及びR_{30}のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR_{21}～R_{28}、及びR_{30}は、それぞれ独立に、前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）におけるR_{21}～R_{29}と同義であり、
＊は前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、
前記一般式（１Ｄ－Ｂ３）において、
R_{21}～R_{27}、R_{29}、及びR_{30}のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR_{21}～R_{27}、R_{29}、及びR_{30}は、それぞれ独立に、前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）におけるR_{21}～R_{29}と同義であり、
＊は前記一般式（１Ｃ－Ｂ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示す。）

【０１６５】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）、（１Ｄ－Ｂ２）又は（１Ｄ－Ｂ３）で表される基における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）中のR_{21}～R_{29}の少なくとも１つ、前記一般式（１Ｄ－Ｂ２）中のR_{21}～R_{28}、及びR_{30}の少なくとも１つ、又は前記一般式（１Ｄ－Ｂ３）中のR_{21}～R_{27}、R_{29}、及びR_{30}の少なくとも１つが、水素原子以外であることも好ましい。

【０１６６】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）、（１Ｄ－Ｂ２）又は（１Ｄ－Ｂ３）で表される基における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）中のR_{21}～R_{29}の少なくとも１つ、前記一般式（１Ｄ－Ｂ２）中のR_{21}～R_{28}、及びR_{30}の少なくとも

１つ、又は前記一般式（１Ｄ－Ｂ３）中のＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることも好ましい。

【０１６７】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）、（１Ｄ－Ｂ２）又は（１Ｄ－Ｂ３）で表される基における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）中のＲ２１～Ｒ２９の少なくとも１つ、前記一般式（１Ｄ－Ｂ２）中のＲ２１～Ｒ２８、及びＲ３０の少なくとも１つ、又は前記一般式（１Ｄ－Ｂ３）中のＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。

【０１６８】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ１）で表される基であることも好ましい。

【０１６９】

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

【０１７０】

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

【０１７１】

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

【０１７２】

本実施形態に係る化合物において、Ｒ１２が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であることも好ましい。

本実施形態に係る化合物において、Ｒ１１が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であり、Ｒ１２が、無置換のフェニル基であるか、又は、Ｒ１２が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であり、Ｒ１１が、無置換のフェニル基であることも好ましい。

【０１７３】

本実施形態に係る化合物において、Ｒ１１が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であり、Ｒ１２が、無置換のフェニル基であることも好ましい。

【０１７４】

本実施形態に係る化合物において、Ｒ１２が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であり、Ｒ１１が、無置換のフェニル基であることも好ましい。

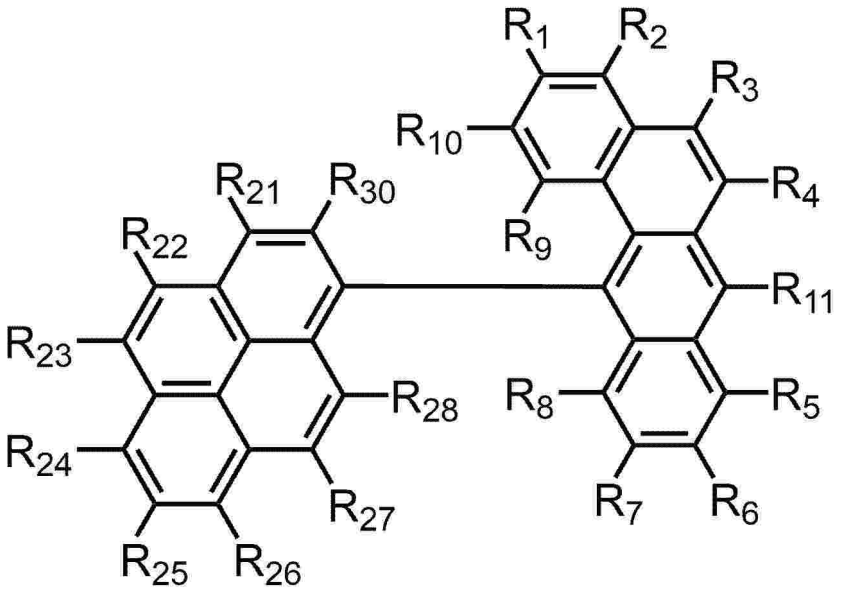
【０１７５】

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

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

【０１７６】

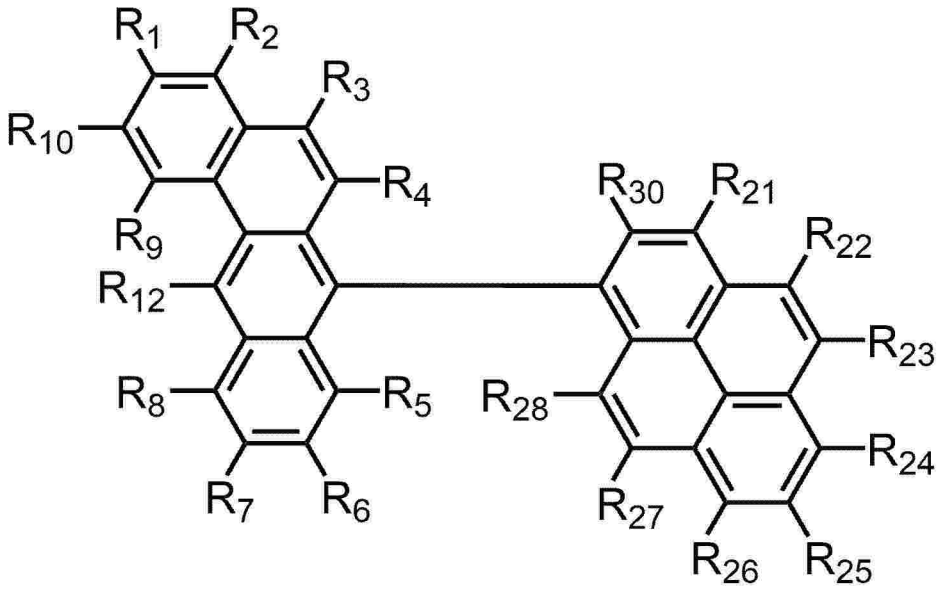
【化３２】



(1C-B-1)

【０１７７】

【化３３】



(1C-B-2)

【０１７８】

（前記一般式（１Ｃ－Ｂ－１）におけるR_1～R_{10}並びに前記一般式（１Ｃ－Ｂ－２）におけるR_1～R_{10}は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、
－Ｃ（＝Ｏ）Ｒ８０１で表される基、
－ＣＯＯＲ８０２で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
前記一般式（１Ｃ－Ｂ－１）及び（１Ｃ－Ｂ－２）におけるＲ２１～Ｒ２８及びＲ３０は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
前記一般式（１Ｃ－Ｂ－１）におけるＲ１１は、置換もしくは無置換のフェニル基であり、
前記一般式（１Ｃ－Ｂ－２）におけるＲ１２は、水素原子または無置換のフェニル基である。）

【０１７９】
本実施形態に係る化合物において、Ｒ７、及びＲ１２が水素原子であることも好ましい。

【０１８０】
本実施形態に係る化合物において、分子内に、１つ以上の重水素原子を有することも好ましい。

【０１８１】
本実施形態に係る化合物において、水素原子である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ７、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基以外の水素原子である場合のＲ４～Ｒ６、Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子である場合のＲ２１～Ｒ３０の１つ以上は、重水素原子であることも好ましい。
本実施形態に係る化合物において、水素原子である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ７、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基以外の水素原子である場合のＲ４～Ｒ６、Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子である場合のＲ２１～Ｒ３０の全ては、重水素原子であることも好ましい。

【０１８２】
本実施形態に係る化合物において、水素原子以外である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ７、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基以外の水素原子以外である場合のＲ４～Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子以外である場合のＲ２１～Ｒ３０が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の１つ以上は、重水素原子であることも好ましい。

本実施形態に係る化合物において、水素原子以外である場合のR_1～R_3、R_7、R_9、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基以外の水素原子以外である場合のR_4～R_8、及びR_{10}～R_{12}、並びに、水素原子以外である場合のR_{21}～R_{30}が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の全ては、重水素原子であることも好ましい。

【０１８３】

本実施形態に係る化合物において、分子中にヘテロ原子を含まない化合物であることも好ましい。

【０１８４】

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

【０１８５】

・本実施形態に係る化合物の製造方法

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

【０１８６】

・本実施形態に係る化合物の具体例

本実施形態に係る化合物の具体例としては、例えば、後述の第四実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子に用いられる第一の化合物としての一般式（１Ｃ）で表される化合物において例示される化合物のうち、本実施形態に係る化合物の範囲内の化合物が、本実施形態に係る化合物の具体例である。

【０１８７】

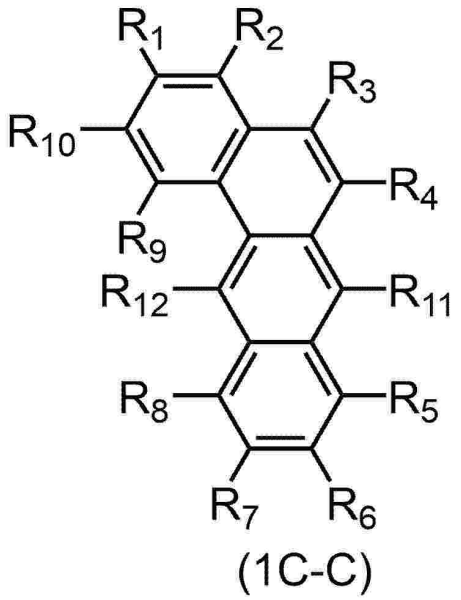
〔第三実施形態〕

（化合物）

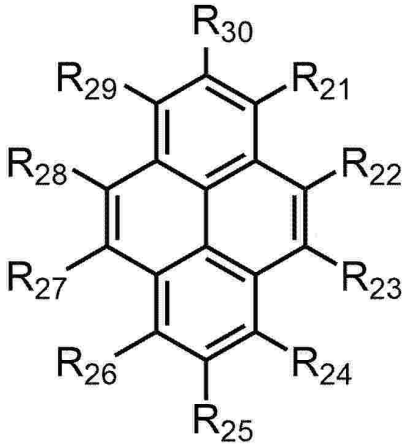
本実施形態に係る化合物は、下記一般式（１Ｃ－Ｃ）で表される化合物である。

【０１８８】

【化３４】



(1C-C)



(1D-C)

【０１８９】

（前記一般式（１Ｃ－Ｃ）において、

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

R_1～R_3、R_9、並びに前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基以外のR_4～R_8及びR_{10}～R_{12}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、
－Ｏ－（R_{904}）で表される基、
－Ｓ－（R_{905}）で表される基、
置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、
－Ｃ（＝Ｏ）R_{801}で表される基、
－ＣＯＯR_{802}で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
R_{11}が前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基である場合、R_{12}は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
R_{12}が前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基である場合、R_{11}は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
前記一般式（１Ｄ－Ｃ）において、R_{22}、R_{23}、R_{25}、R_{27}、R_{28}、及びR_{30}のうちの１つが前記一般式（１Ｃ－Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、R_{21}、R_{24}、R_{26}、及びR_{29}、並びに当該結合位置ではない前記一般式（１Ｄ－Ｃ）中のR_{22}、R_{23}、R_{25}、R_{27}、R_{28}、及びR_{30}のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記一般式（１Ｃ－Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｃ）中のR_{21}～R_{30}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、
－Ｏ－（R_{904}）で表される基、
－Ｓ－（R_{905}）で表される基、
－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
前記一般式（１Ｃ－Ｃ）で表される化合物において、R_{901}、R_{902}、R_{903}、R_{904}、R_{905}、R_{906}、R_{907}、R_{801}、及びR_{802}は、それぞれ独立に、

水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
R_{901}が複数存在する場合、複数のR_{901}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{902}が複数存在する場合、複数のR_{902}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{903}が複数存在する場合、複数のR_{903}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{904}が複数存在する場合、複数のR_{904}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{905}が複数存在する場合、複数のR_{905}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{906}が複数存在する場合、複数のR_{906}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{907}が複数存在する場合、複数のR_{907}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{801}が複数存在する場合、複数のR_{801}は、互いに同一であるか又は異なり、
R_{802}が複数存在する場合、複数のR_{802}は、互いに同一であるか又は異なる。）

【０１９０】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基における前記一般式（１Ｃ－Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｃ）中のR_{21}～R_{30}の少なくとも１つが、水素原子以外であることも好ましい。

【０１９１】

本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基における前記一般式（１Ｃ－Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｃ）中のR_{21}～R_{30}の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることも好ましい。

【０１９２】

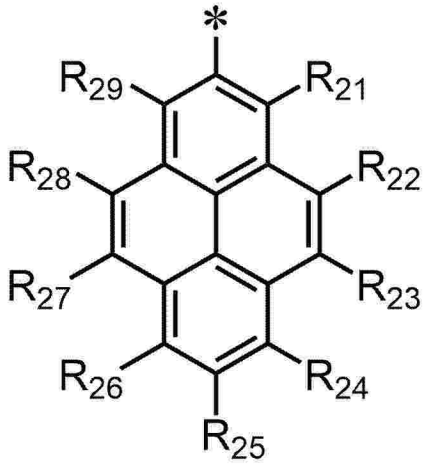
本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基における前記一般式（１Ｃ－Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｃ）中のR_{21}～R_{30}の少なくとも１つが、前記置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。

【０１９３】

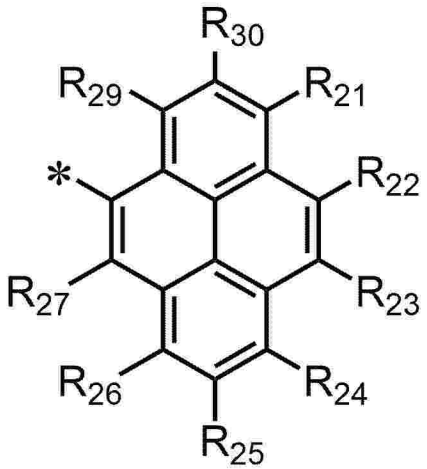
本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基が、下記一般式（１Ｄ－Ｃ１）、又は（１Ｄ－Ｃ３）で表される基であることも好ましい。

【０１９４】

【化３５】



(1D-C1)



(1D-C3)

【０１９５】

（前記一般式（１Ｄ－Ｃ１）において、

Ｒ２１～Ｒ２９のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないＲ２１～Ｒ２９は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

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

前記一般式（１Ｄ－Ｃ３）において、

Ｒ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

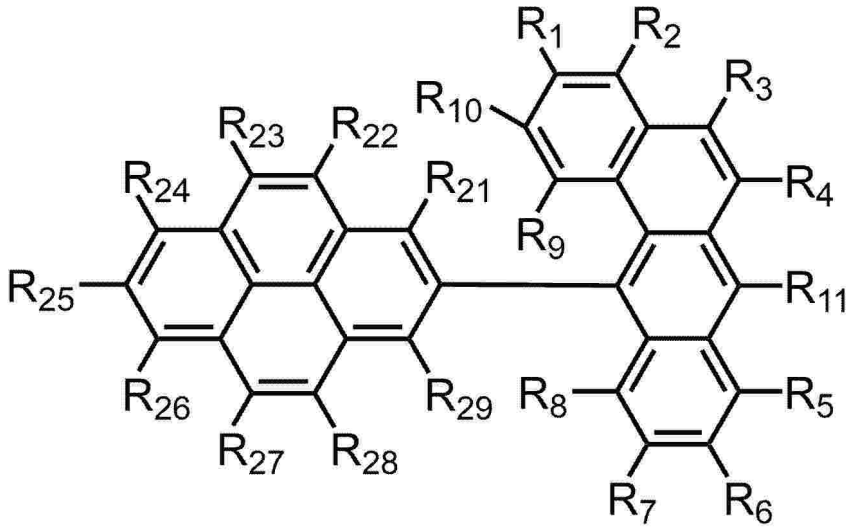
互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０は、それぞれ独立に、前記一般式（１Ｄ－Ｃ１）におけるＲ２１～Ｒ２９と同義であり、

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

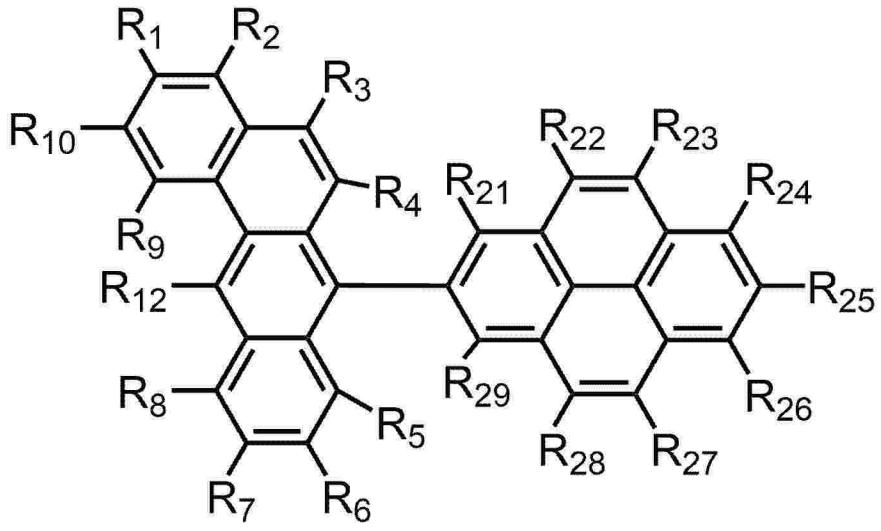
【０１９６】
本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｃ１）、又は（１Ｄ－Ｃ３）で表される基における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｃ１）中のＲ２１～Ｒ２９の少なくとも１つ、又は前記一般式（１Ｄ－Ｃ３）中のＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも１つが、水素原子以外であることも好ましい。
【０１９７】
本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｃ１）、又は（１Ｄ－Ｃ３）で表される基における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｃ１）中のＲ２１～Ｒ２９の少なくとも１つ、又は前記一般式（１Ｄ－Ｃ３）中のＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることも好ましい。
【０１９８】
本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｃ１）、又は（１Ｄ－Ｃ３）で表される基における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－Ｃ１）中のＲ２１～Ｒ２９の少なくとも１つ、又は前記一般式（１Ｄ－Ｃ３）中のＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。
【０１９９】
本実施形態に係る化合物において、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基が、前記一般式（１Ｄ－Ｃ１）で表される基であることも好ましい。ある、
化合物。
【０２００】
本実施形態に係る化合物において、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ１１、及びＲ１２のうちの１つが、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基であることも好ましい。
【０２０１】
本実施形態に係る化合物において、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ１１、及びＲ１２のうちの１つが、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基であることも好ましい。
【０２０２】
本実施形態に係る化合物において、Ｒ１１が、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基であることも好ましい。
【０２０３】
本実施形態に係る化合物において、Ｒ１２が、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基であることも好ましい。
【０２０４】
本実施形態に係る化合物において、Ｒ１１が、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基であり、Ｒ１２が、無置換のフェニル基であるか、又は、Ｒ１２が、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基であり、Ｒ１１が、無置換のフェニル基であることも好ましい。
【０２０５】
本実施形態に係る化合物において、Ｒ１１が、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基であり、Ｒ１２が、無置換のフェニル基であることも好ましい。
【０２０６】
本実施形態に係る化合物において、Ｒ１２が、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基であり、Ｒ１１が、無置換のフェニル基であることも好ましい。
【０２０７】
本実施形態に係る化合物は、下記一般式（１Ｃ－Ｃ－１）で表される化合物であることも好ましい。
本実施形態に係る化合物は、下記一般式（１Ｃ－Ｃ－２）で表される化合物であることも好ましい。
【０２０８】

【化３６】



(1C-C-1)

【０２０９】
【化３７】



(1C-C-2)

【０２１０】
（前記一般式（１Ｃ－Ｃ－１）におけるR_1～R_{11}並びに前記一般式（１Ｃ－Ｃ－２）におけるR_1～R_{10}及びR_{12}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、
－Ｃ（＝Ｏ）Ｒ８０１で表される基、
－ＣＯＯＲ８０２で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

前記一般式（１Ｃ－Ｃ－１）及び（１Ｃ－Ｃ－２）におけるＲ２１～Ｒ２９は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０２１１】

本実施形態に係る化合物において、Ｒ１２が水素原子であることも好ましい。

【０２１２】

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

【０２１３】

本実施形態に係る化合物において、水素原子である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基以外の水素原子である場合のＲ４～Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子である場合のＲ２１～Ｒ３０の１つ以上は、重水素原子であることも好ましい。

本実施形態に係る化合物において、水素原子である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基以外の水素原子である場合のＲ４～Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子である場合のＲ２１～Ｒ３０の全ては、重水素原子であることも好ましい。

【０２１４】

本実施形態に係る化合物において、水素原子以外である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基以外の水素原子以外である場合のＲ４～Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子以外である場合のＲ２１～Ｒ３０が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の１つ以上は、重水素原子であることも好ましい。

本実施形態に係る化合物において、水素原子以外である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ９、並びに、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基以外の水素原子以外である場合のＲ４～Ｒ８、及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子以外である場合のＲ２１～Ｒ３０が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の全ては、重水素原子であることも好ましい。

【０２１５】
本実施形態に係る化合物において、分子中にヘテロ原子を含まない化合物であることも好ましい。
【０２１６】
本実施形態に係る化合物において、前記「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であり、前記「置換もしくは無置換」と記載された環は、いずれも「無置換」の環であることも好ましい。
【０２１７】
・本実施形態に係る化合物の製造方法
本実施形態に係る化合物は、後述する実施例に記載の合成方法に従って製造できる。また、本実施形態に係る化合物は、当該合成方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。
【０２１８】
・本実施形態に係る化合物の具体例
本実施形態に係る化合物の具体例としては、例えば、後述の第四実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子に用いられる第一の化合物としての一般式（１Ｃ）で表される化合物において例示される化合物のうち、本実施形態に係る化合物の範囲内の化合物が、本実施形態に係る化合物の具体例である。
【０２１９】
〔第四実施形態〕
（有機エレクトロルミネッセンス素子）
本実施形態に係る有機ＥＬ素子について説明する。
本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、一態様において、第一実施形態、第二実施形態、又は第三実施形態に係る化合物を含有する。
本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、一態様において、陽極と、陰極と、陽極および陰極の間に配置された有機層と、を有する。この有機層は、有機化合物で構成される層を少なくとも一つ含む。あるいは、この有機層は、有機化合物で構成される複数の層が積層されてなる。有機層は、無機化合物をさらに含んでいてもよい。
【０２２０】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子の一態様において、有機層の少なくとも一層が、第一実施形態に係る化合物を含有する。
本実施形態に係る有機ＥＬ素子の一態様において、有機層の少なくとも一層が、第二実施形態に係る化合物を含有する。
本実施形態に係る有機ＥＬ素子の一態様において、有機層の少なくとも一層が、第三実施形態に係る化合物を含有する。
【０２２１】
本実施形態の有機ＥＬ素子において、有機層のうち少なくとも一層は、発光領域を有することが好ましい。本実施形態の有機ＥＬ素子において、発光領域は、少なくとも１つの発光層を含有することが好ましい。一実施形態において、発光層は、前記一般式（１Ｃ－Ａ）で表される化合物を含有する。一実施形態において、発光層は、前記一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物を含有する。一実施形態において、発光層は、前記一般式（１Ｃ－Ｃ）で表される化合物を含有する。
【０２２２】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された発光領域と、を有し、前記発光領域は第一の発光層及び第二の発光層を含み、前記第一の発光層は、第一の化合物として前記一般式（１Ｃ－Ａ）で表される化合物を含有し、前記第二の発光層は、第二の化合物を含有することも好ましい。
本実施形態の有機ＥＬ素子において、前記一般式（１Ｃ－Ａ）で表される化合物と第二の化合物とは、互いに異なる化合物である。
【０２２３】

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

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

【０２２４】

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

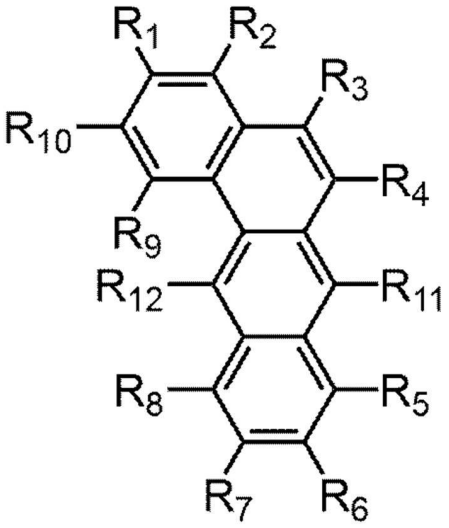
本実施形態の有機ＥＬ素子において、前記一般式（１Ｃ－Ｃ）で表される化合物と第二の化合物とは、互いに異なる化合物である。

【０２２５】

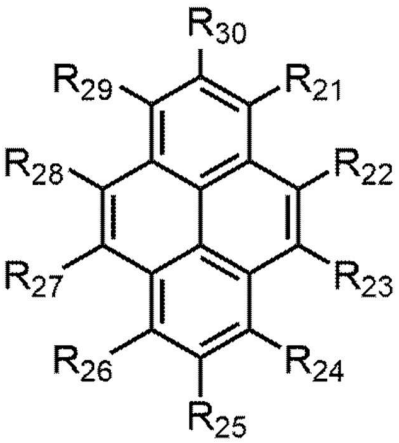
本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、一態様において、陽極と、陰極と、前記陽極及び前記陰極の間に配置された有機層と、を有し、前記有機層は、発光領域を有し、前記発光領域は、第一の発光層及び第二の発光層を含み、前記第一の発光層は、下記一般式（１Ｃ）で表される第一の化合物を含有し、前記第二の発光層は、第二の化合物を含有する。

【０２２６】

【化３８】



(1C)



(1D)

【０２２７】

（前記一般式（１Ｃ）において、

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

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、
－Ｃ（＝Ｏ）Ｒ８０１で表される基、
－ＣＯＯＲ８０２で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ１１が前記一般式（１Ｄ）で表される基である場合、Ｒ１２は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
Ｒ１２が前記一般式（１Ｄ）で表される基である場合、Ｒ１１は水素原子または置換もしくは無置換のフェニル基であり、
前記一般式（１Ｄ）において、Ｒ２１～Ｒ３０のうちの１つが前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、当該結合位置ではない前記一般式（１Ｄ）中のＲ２１～Ｒ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ）中のＲ２１～Ｒ３０は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
前記一般式（１Ｃ）で表される化合物において、Ｒ９０１、Ｒ９０２、Ｒ９０３、Ｒ９０４、Ｒ９０５、Ｒ９０６、Ｒ９０７、Ｒ８０１、及びＲ８０２は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ９０１が複数存在する場合、複数のＲ９０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０２が複数存在する場合、複数のＲ９０２は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０３が複数存在する場合、複数のＲ９０３は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０４が複数存在する場合、複数のＲ９０４は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０５が複数存在する場合、複数のＲ９０５は、互いに同一であるか又は異なり、

Ｒ９０６が複数存在する場合、複数のＲ９０６は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０７が複数存在する場合、複数のＲ９０７は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０１が複数存在する場合、複数のＲ８０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０２が複数存在する場合、複数のＲ８０２は、互いに同一であるか又は異なる。）

【０２２８】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ）中のＲ２１～Ｒ３０の少なくとも１つが、水素原子以外であることも好ましい。

【０２２９】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ）中のＲ２１～Ｒ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることも好ましい。

。

【０２３０】

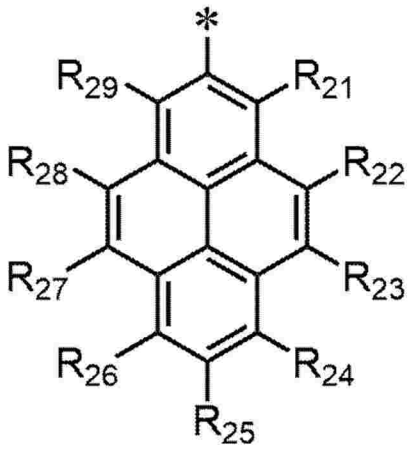
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ）中のＲ２１～Ｒ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。

【０２３１】

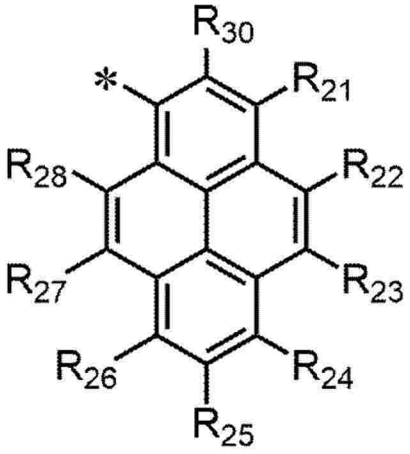
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｄ）で表される基が、下記一般式（１Ｄ－１）、（１Ｄ－２）又は（１Ｄ－３）で表される基であることも好ましい。

【０２３２】

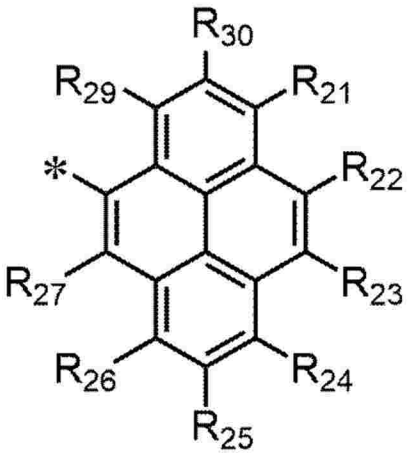
【化３９】



(1D-1)



(1D-2)



(1D-3)

【０２３３】

（前記一般式（１Ｄ－１）において、

Ｒ２１～Ｒ２９のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないＲ２１～Ｒ２９は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
＊は前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、
前記一般式（１Ｄ－２）において、
Ｒ２１～Ｒ２８、及びＲ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないＲ２１～Ｒ２８、及びＲ３０は、それぞれ独立に、前記一般式（１Ｄ－１）におけるＲ２１～Ｒ２９と同義であり、
＊は前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示し、
前記一般式（１Ｄ－３）において、
Ｒ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０は、それぞれ独立に、前記一般式（１Ｄ－１）におけるＲ２１～Ｒ２９と同義であり、
＊は前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置を示す。）

【０２３４】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－１）中のＲ２１～Ｒ２９の少なくとも１つ、前記一般式（１Ｄ－２）中のＲ２１～Ｒ２８、及びＲ３０の少なくとも１つ、又は前記一般式（１Ｄ－３）中のＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも１つが、水素原子以外であることも好ましい。

【０２３５】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－１）中のＲ２１～Ｒ２９の少なくとも１つ、前記一般式（１Ｄ－２）中のＲ２１～Ｒ２８、及びＲ３０の少なくとも１つ、又は前記一般式（１Ｄ－３）中のＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることも好ましい。

【０２３６】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ－１）中のＲ２１～Ｒ２９の少なくとも１つ、前記一般式（１Ｄ－２）中のＲ２１～Ｒ２８、及びＲ３０の少なくとも１つ、又は前記一般式（１Ｄ－３）中のＲ２１～Ｒ２７、Ｒ２９、及びＲ３０の少なくとも１つが、置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。

【０２３７】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｄ）で表される基が、前記一般式（１Ｄ－１）で表される基であることも好ましい。

【０２３８】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ１１、及びＲ１２のうちの１つが、前記一般式（１Ｄ）で表される基であることも好ましい。

【０２３９】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ１１、及びＲ１２のうちの１つが、前記一般式（１Ｄ）で表される基であることも好ましい。

【０２４０】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、Ｒ１１が、前記一般式（１Ｄ）で表される基であることも好ましい。

【０２４１】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、Ｒ１２が、前記一般式（１Ｄ）で表される基であることも好ましい。

【０２４２】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、Ｒ１１が、前記一般式（１Ｄ）で表される基であり、Ｒ１２が、無置換のフェニル基であるか、又は、Ｒ１２が、前記一般式（１Ｄ）で表される基であり、Ｒ１１が、無置換のフェニル基であることも好ましい。

【０２４３】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、Ｒ１１が、前記一般式（１Ｄ）で表される基であり、Ｒ１２が、無置換のフェニル基であることも好ましい。

【０２４４】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、Ｒ１２が、前記一般式（１Ｄ）で表される基であり、Ｒ１１が、無置換のフェニル基であることも好ましい。

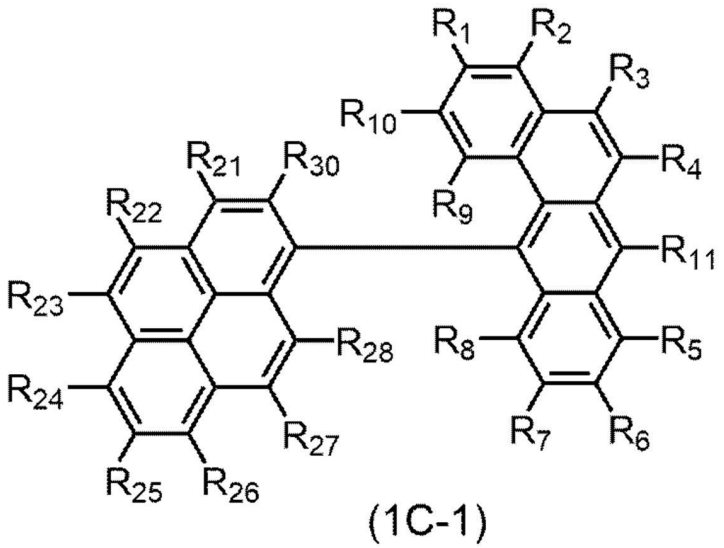
【０２４５】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物は、下記一般式（１Ｃ－１）で表される化合物であることも好ましい。

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物は、下記一般式（１Ｃ－２）で表される化合物であることも好ましい。

【０２４６】

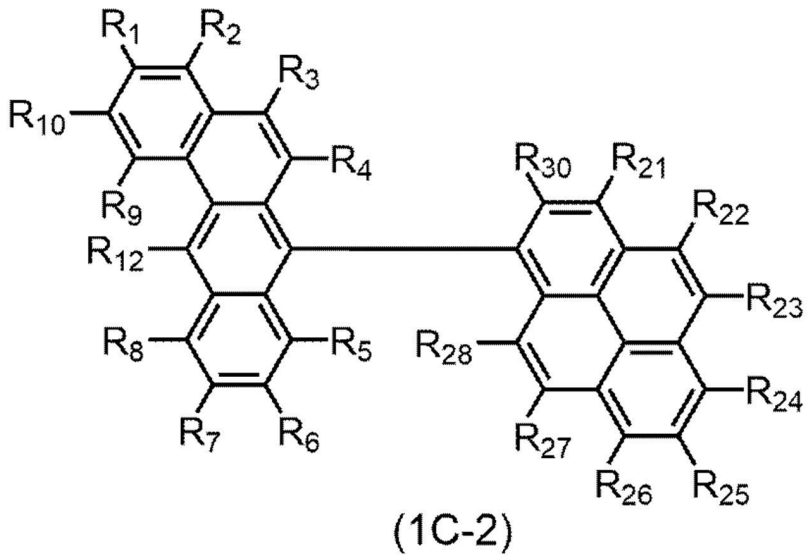
【化４０】



(1C-1)

【０２４７】

【化４１】



(1C-2)

【０２４８】

（前記一般式（１Ｃ－１）におけるR_1～R_{11}並びに前記一般式（１Ｃ－２）におけるR_1～R_{10}及びR_{12}は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、

－Ｏ－（R_{904}）で表される基、

－Ｓ－（R_{905}）で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、

－Ｃ（＝Ｏ）R_{801}で表される基、

－ＣＯＯR_{802}で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

前記一般式（１Ｃ－１）及び（１Ｃ－２）におけるR_{21}～R_{28}及びR_{30}は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、

－Ｏ－（R_{904}）で表される基、

－Ｓ－（R_{905}）で表される基、

－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

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

【０２４９】
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、R_{12}が、前記一般式（１Ｄ）で表される基であり、R_{11}が、水素原子であることも好ましい。
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、R_{12}が、前記一般式（１Ｄ）で表される基であり、R_{11}が、置換もしくは無置換のフェニル基であることも好ましい。

【０２５０】
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、R_1～R_3、R_9、並びに前記一般式（１Ｄ）で表される基以外のR_4～R_8及びR_{10}～R_{12}は、それぞれ独立に、水素原子、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ことも好ましい。

【０２５１】
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）中のベンズ［ａ］アントラセン環との結合位置ではなく、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない前記一般式（１Ｄ）中のR_{21}～R_{30}は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることも好ましい。

【０２５２】
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子は、分子中にヘテロ原子を含まない化合物であることも好ましい。

【０２５３】
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であり、前記「置換もしくは無置換」と記載された環は、いずれも「無置換」の環であることも好ましい。

【０２５４】
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中のR_{12}が水素原子であることも好ましい。

【０２５５】
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物が、分子内に、１つ以上の重水素原子を有することも好ましい。

【０２５６】
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、水素原子である場合のR_1～R_3、R_9、前記一般式（１Ｄ）で表される基以外の水素原子であるR_4～R_8及びR_{10}～R_{12}、並びに、水素原子である場合のR_{21}～R_{30}の１つ以上は、重水素原子であることも好ましい。
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、水素原子である場合のR_1～R_3、R_9、前記一般式（１Ｄ）で表される基以外の水素原子であるR_4～R_8及びR_{10}～R_{12}、並びに、水素原子である場合のR_{21}～R_{30}の全ては、重水素原子であることも好ましい。

【０２５７】
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中、水素原子以外である場合のR_1～R_3、R_9、前記一般式（１Ｄ）で表される基以外の水素原子以外であるR_4～R_8及びR_{10}～R_{12}、並びに、水素原子以外である場合のR_{21}～R_{30}が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の１つ以上は、重水素原子であることも好ましい。
本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（

１Ｃ）で表される化合物中、水素原子以外である場合のＲ１～Ｒ３、Ｒ９、前記一般式（１Ｄ）で表される基以外の水素原子以外であるＲ４～Ｒ８及びＲ１０～Ｒ１２、並びに、水素原子以外である場合のＲ２１～Ｒ３０が、それぞれ、水素原子を有する場合、当該水素原子の全ては、重水素原子であることも好ましい。

【０２５８】

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ）で表される化合物中のＲ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ１０、Ｒ１１、又はＲ１２が、前記一般式（１Ｄ）で表される基である。

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ－Ａ）で表される化合物中のＲ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ１０、Ｒ１１、又はＲ１２が、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基である。

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物中のＲ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ８、Ｒ１０、Ｒ１１、又はＲ１２が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基である。

本実施形態の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記一般式（１Ｃ－Ｃ）で表される化合物中のＲ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ１０、Ｒ１１、又はＲ１２が、前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基である。

ＨＯＭＯ及びＬＵＭＯのより電子密度の大きい位置又は一重項エネルギーＳ１がより小さくなる部位であるＲ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ７、Ｒ８、Ｒ１０、Ｒ１１、又はＲ１２が、前記一般式（１Ｄ）で表される基、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基、及び前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基からなる群から選択されるいずれかの基であることにより、励起耐性が向上しやすく、有機ＥＬ素子の長寿命化効果が得られやすくなる。

ＨＯＭＯ及びＬＵＭＯのより電子密度の大きい位置又は一重項エネルギーＳ１がより小さくなる部位であるＲ４、Ｒ５、Ｒ６、Ｒ８、Ｒ１０、Ｒ１１、又はＲ１２が、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基であることにより、励起耐性が向上しやすく、有機ＥＬ素子の長寿命化効果が得られやすくなる。

【０２５９】

第一の発光層に用いられる第一の化合物が、前記一般式（１Ｄ）で表される基、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基、又は前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基と、ベンズ［ａ］アントラセン環とが直結した構造を有する場合、ベンズ［ａ］アントラセン環と、前記一般式（１Ｄ）で表される基、前記一般式（１Ｄ－Ａ）で表される基、前記一般式（１Ｄ－Ｂ）で表される基、及び前記一般式（１Ｄ－Ｃ）で表される基におけるピレン骨格との両方に三重項エネルギーＴ１が分布するため、長寿命化すると考えられる。

【０２６０】

・一般式（１Ｃ）で表される化合物の製造方法

一般式（１Ｃ）で表される化合物は、後述する実施例に記載の合成方法に従って製造できる。また、一般式（１Ｃ）で表される化合物は、当該合成方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。

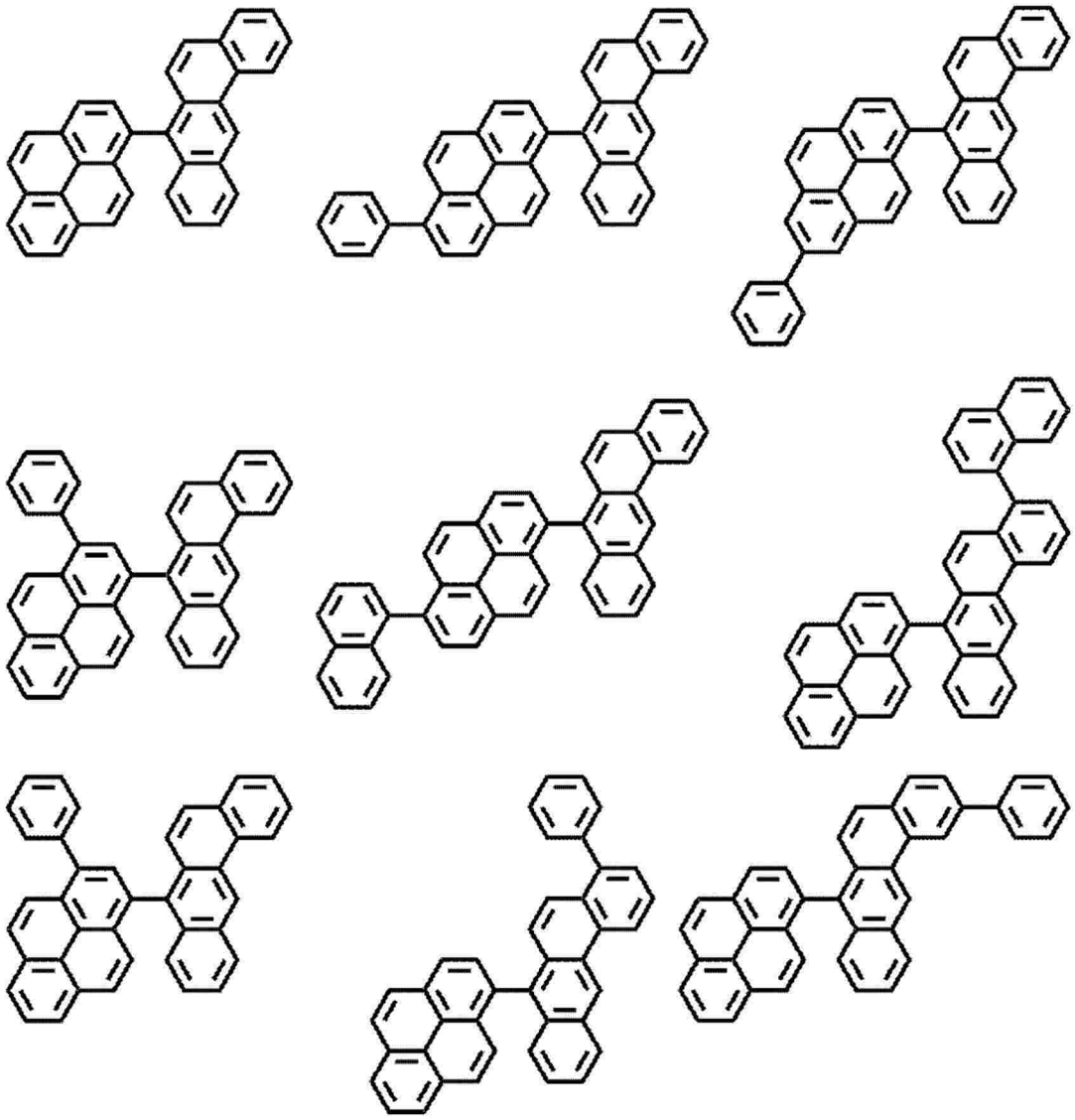
【０２６１】

・一般式（１Ｃ）で表される化合物の具体例

一般式（１Ｃ）で表される化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら具体例に限定されない。本明細書において、重水素原子は、化学式中でＤと表記し、軽水素原子は、Ｈと表記するか又は記載を省略する。

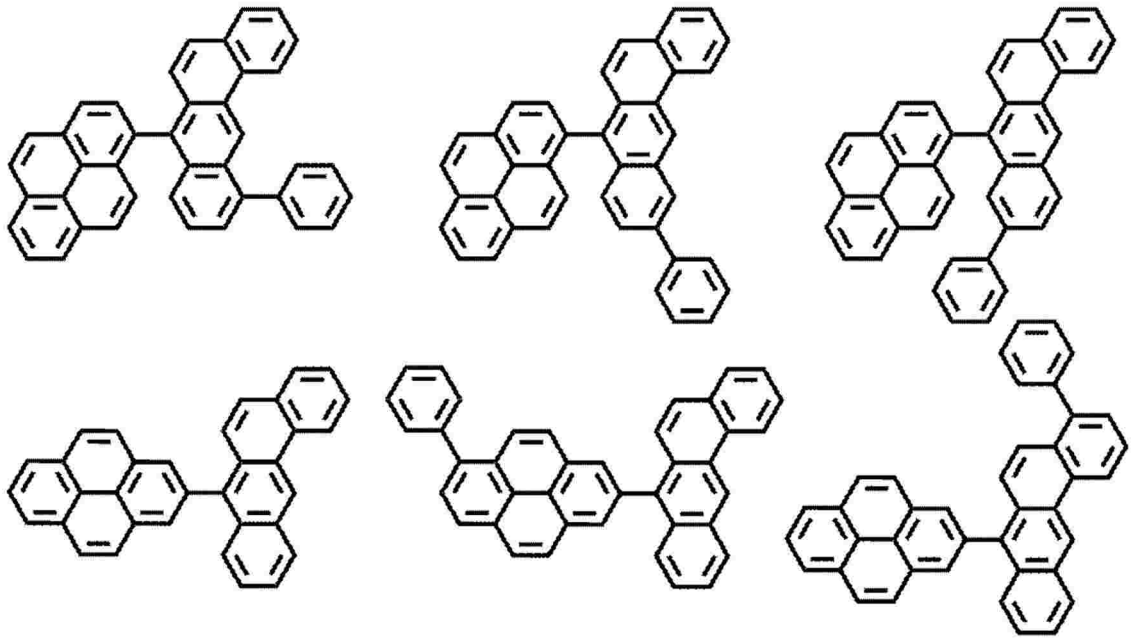
【０２６２】

【化４２】



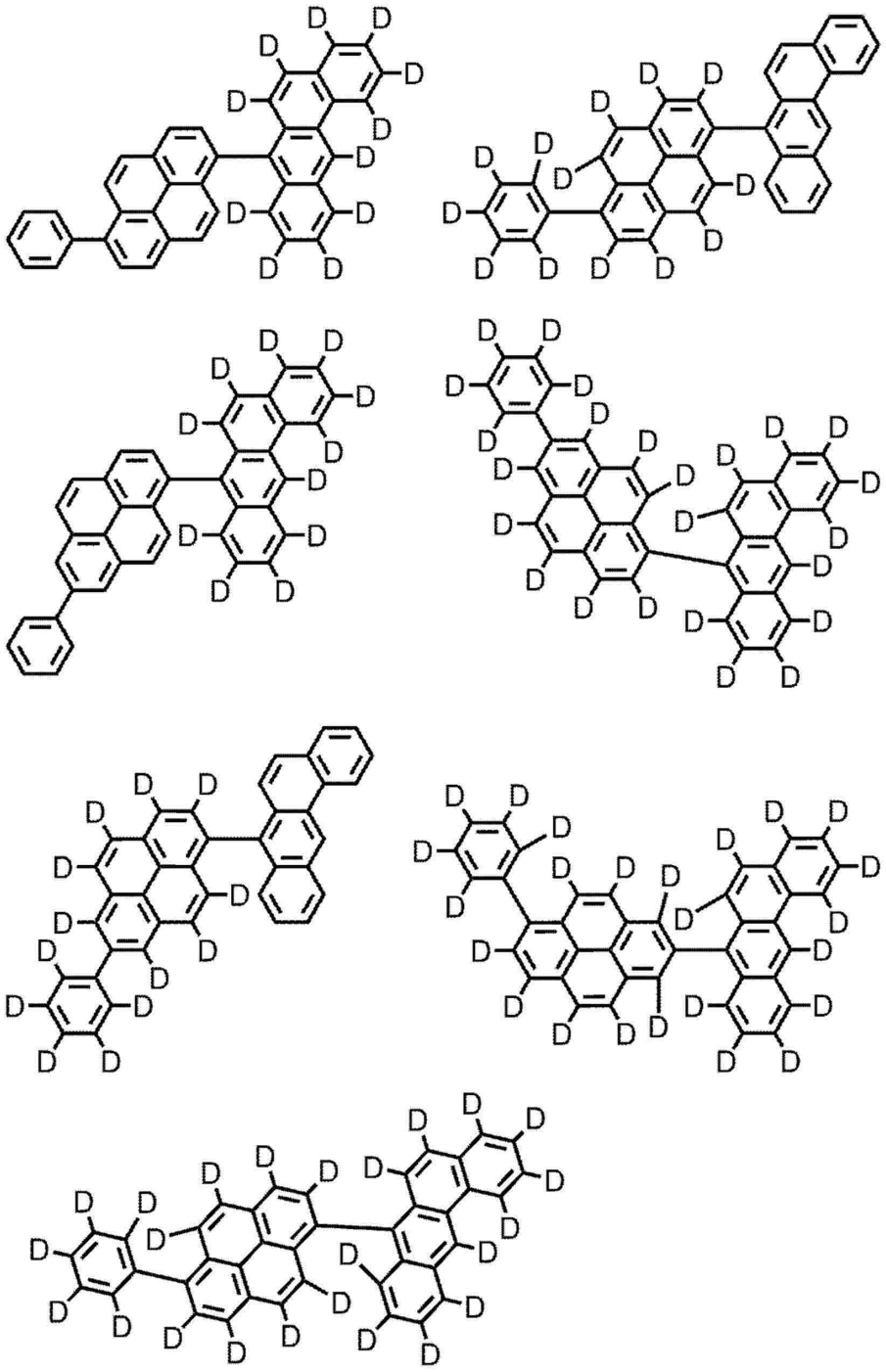
【０２６３】

【化４３】



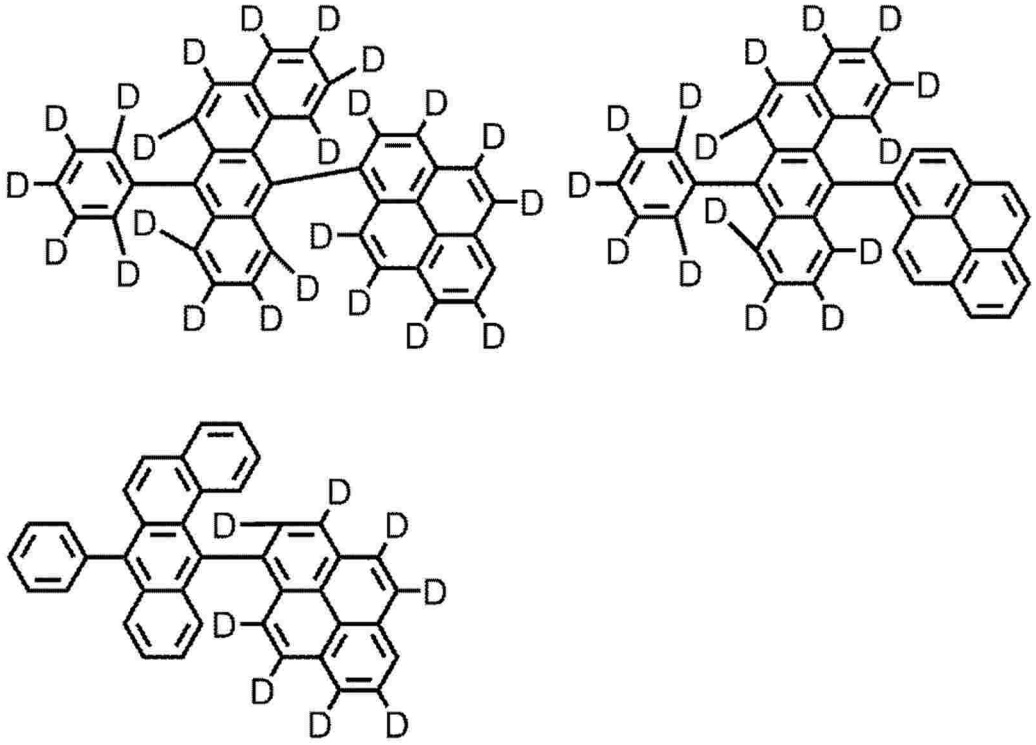
【０２６４】

【化４４】



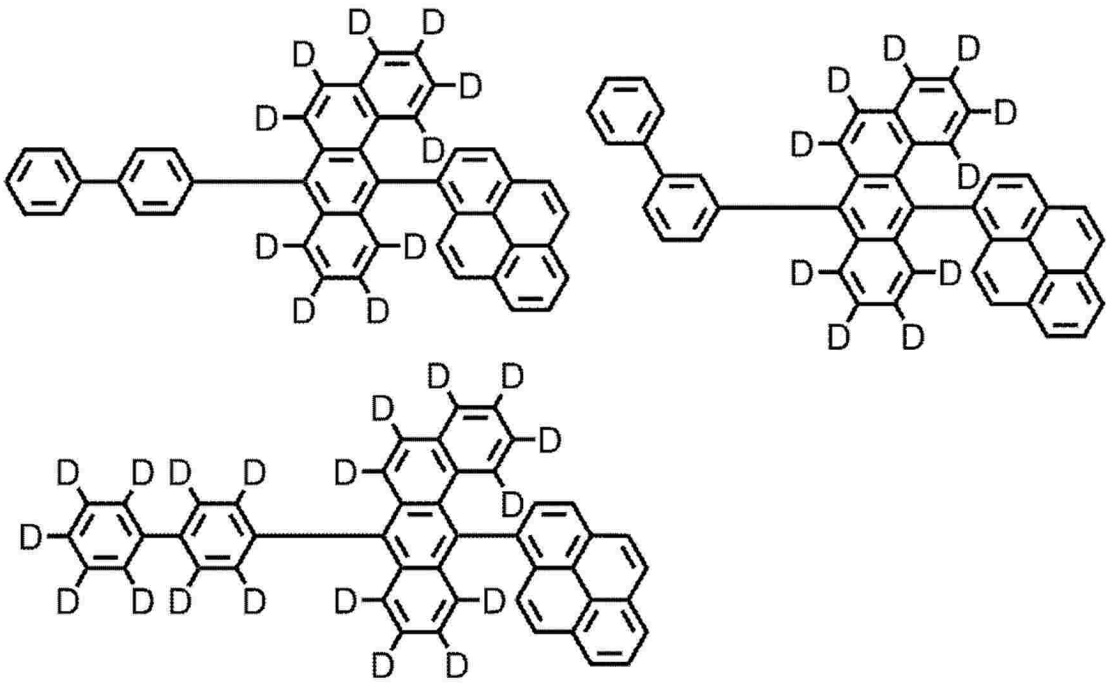
【０２６５】

【化４５】



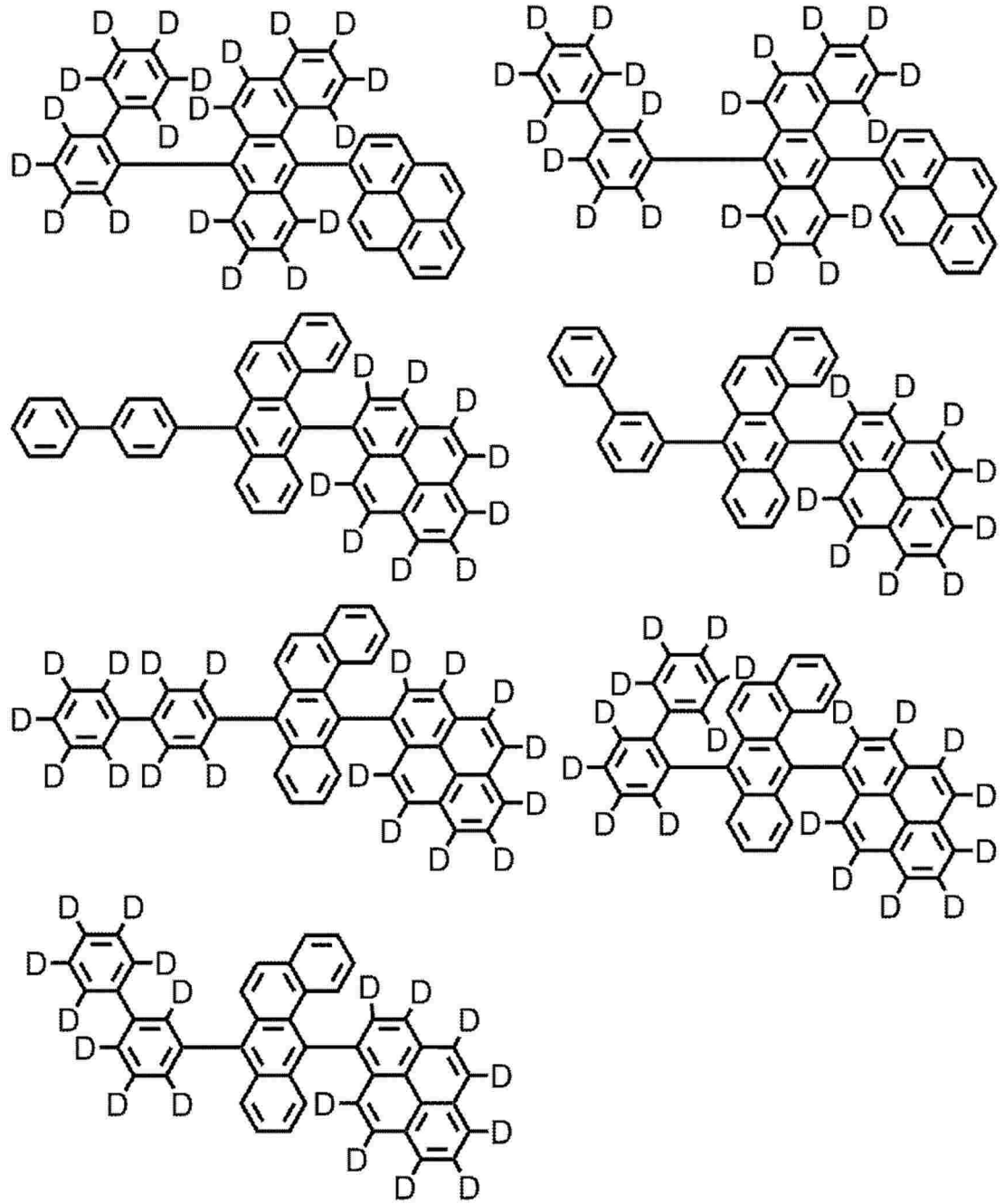
【０２６６】

【化４６】



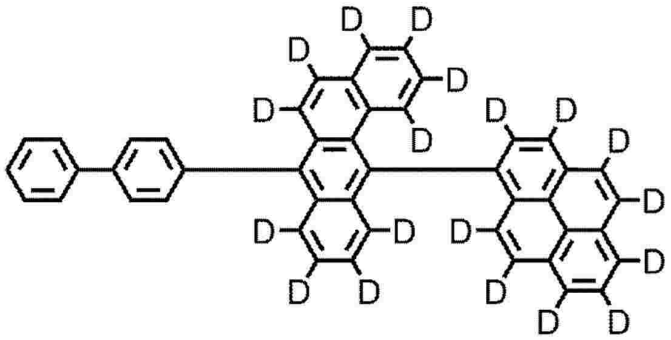
【０２６７】

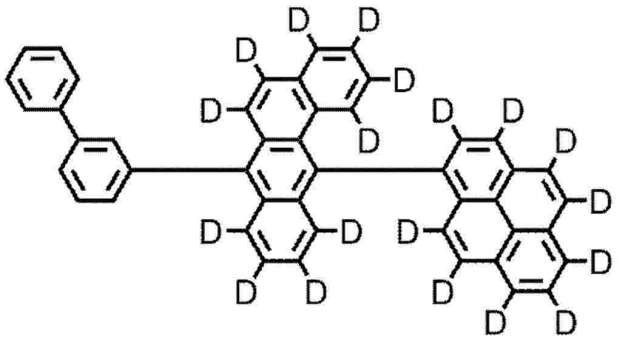
【化４７】

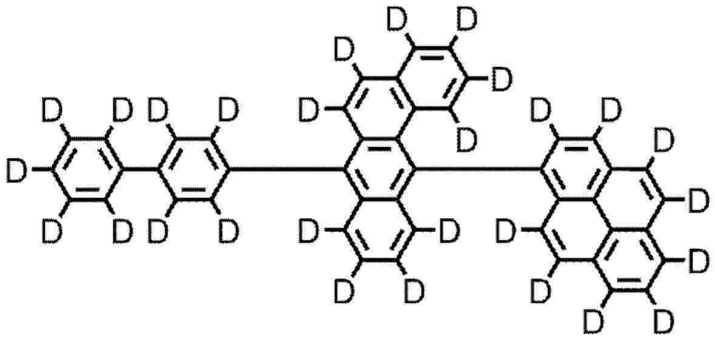


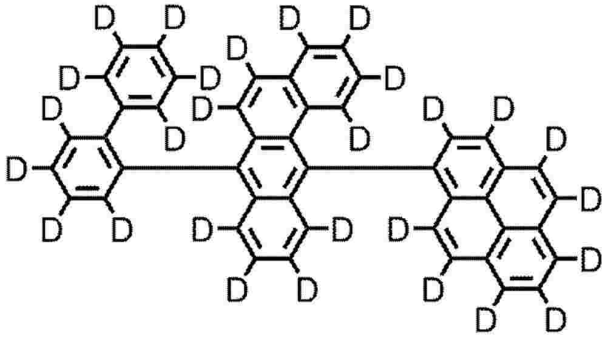
【０２６８】

【化４８】



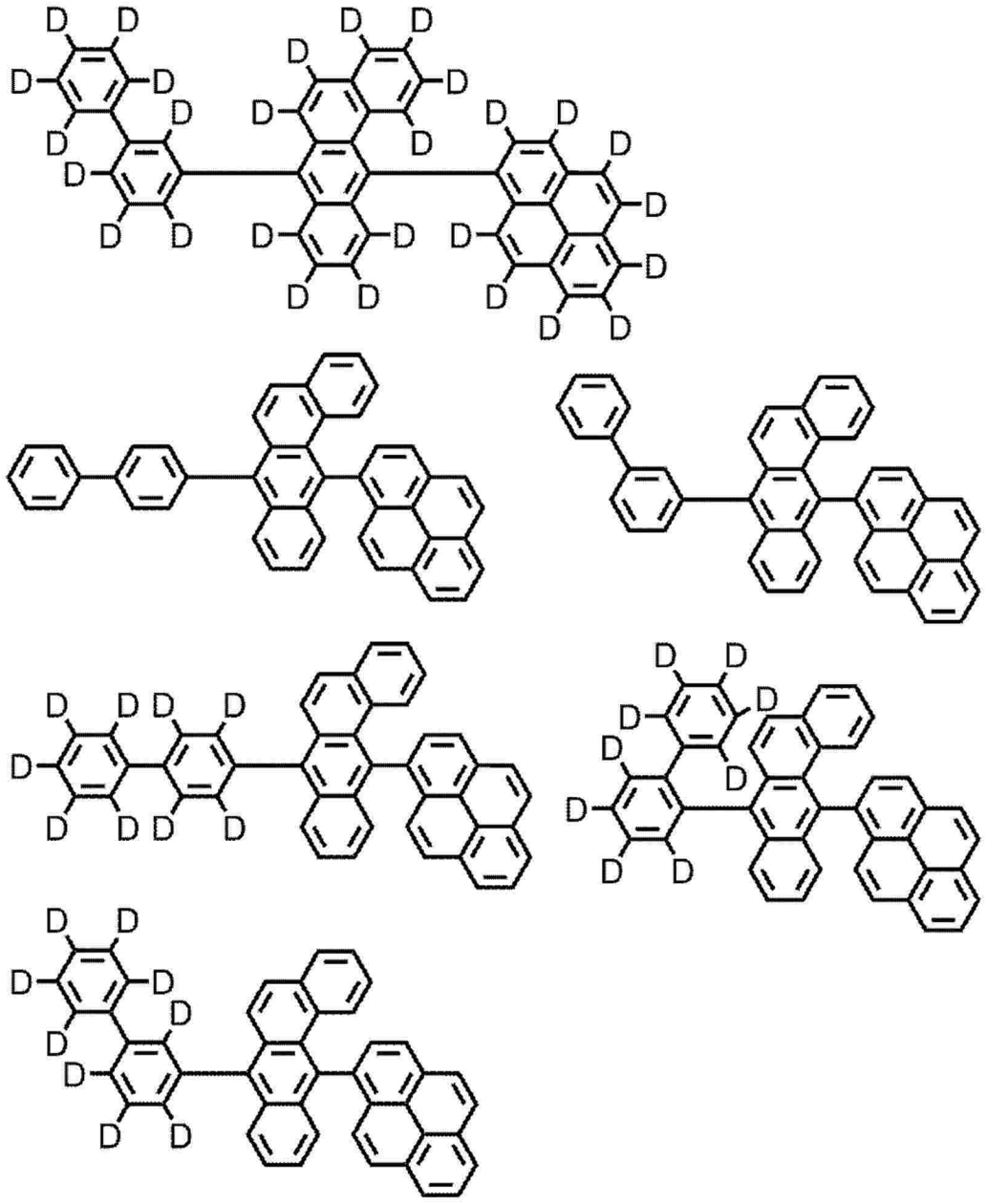






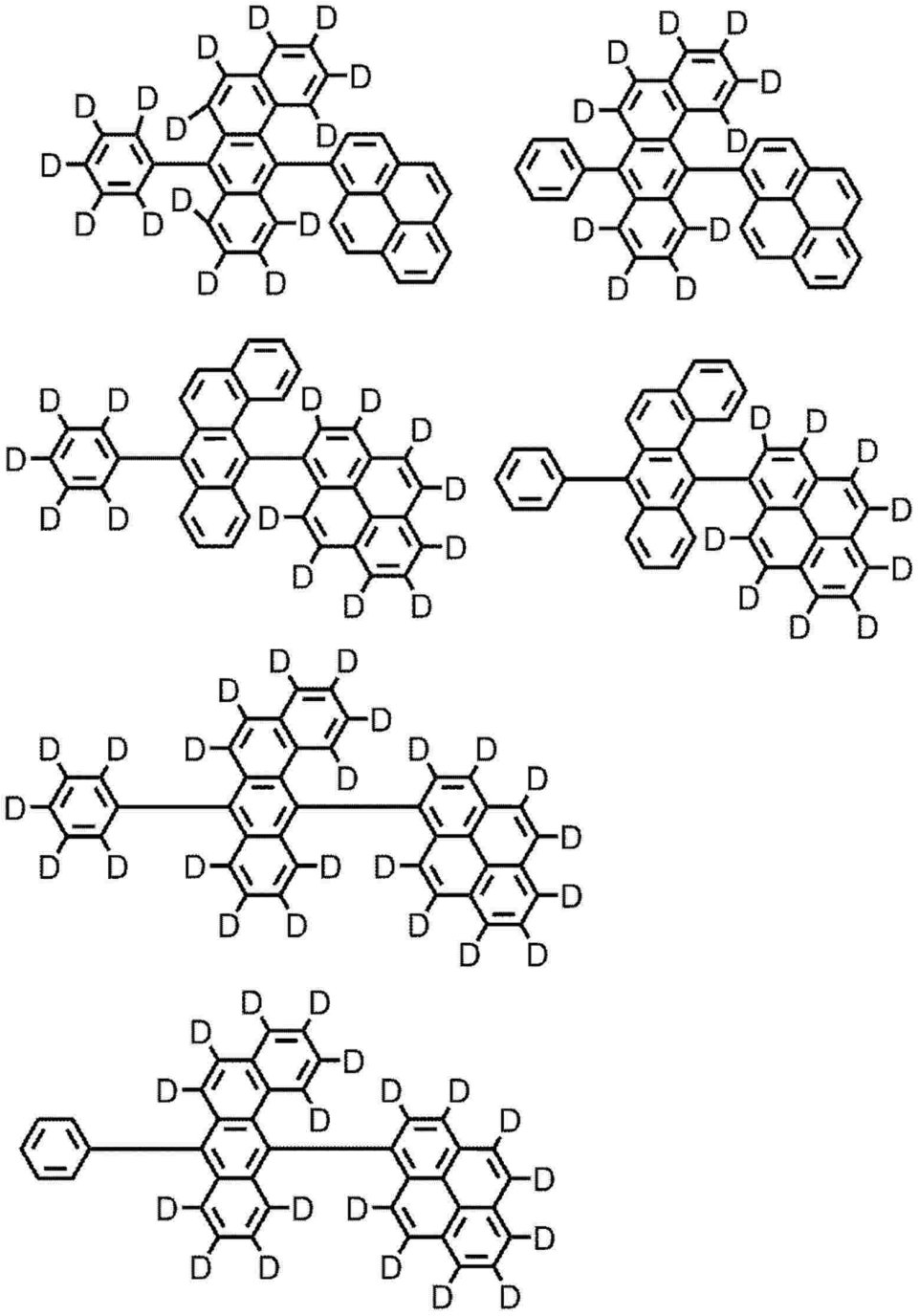
【０２６９】

【化４９】



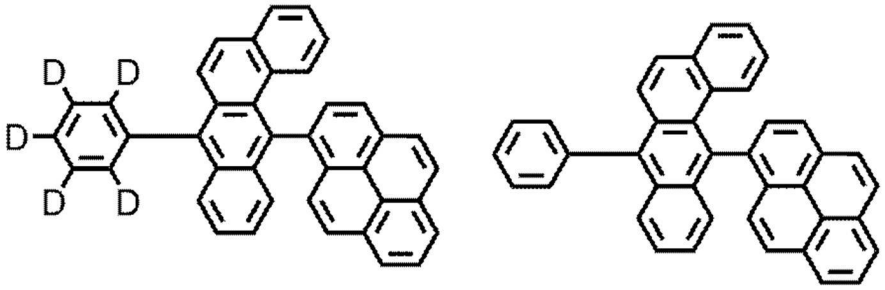
【０２７０】

【化５０】



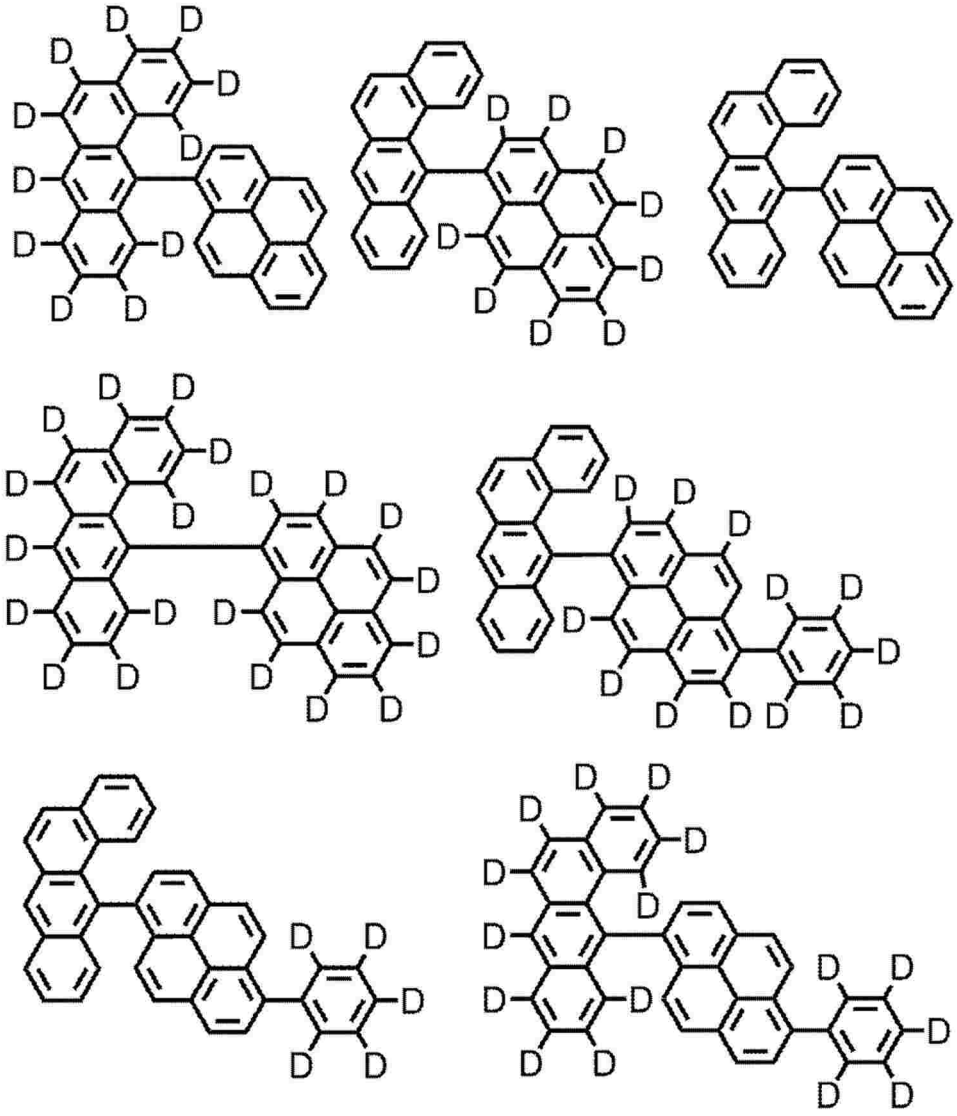
【０２７１】

【化５１】



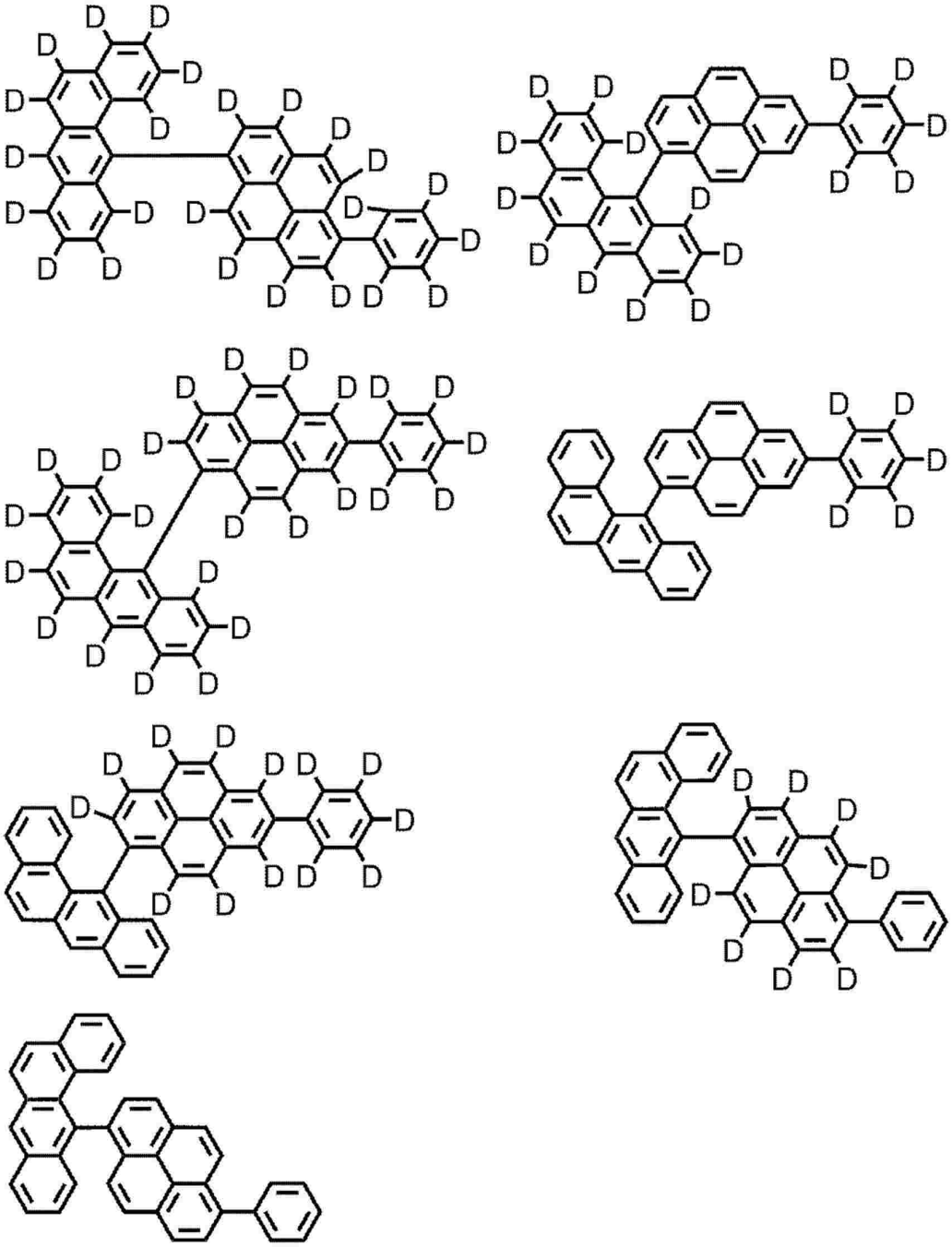
【０２７２】

【化５２】



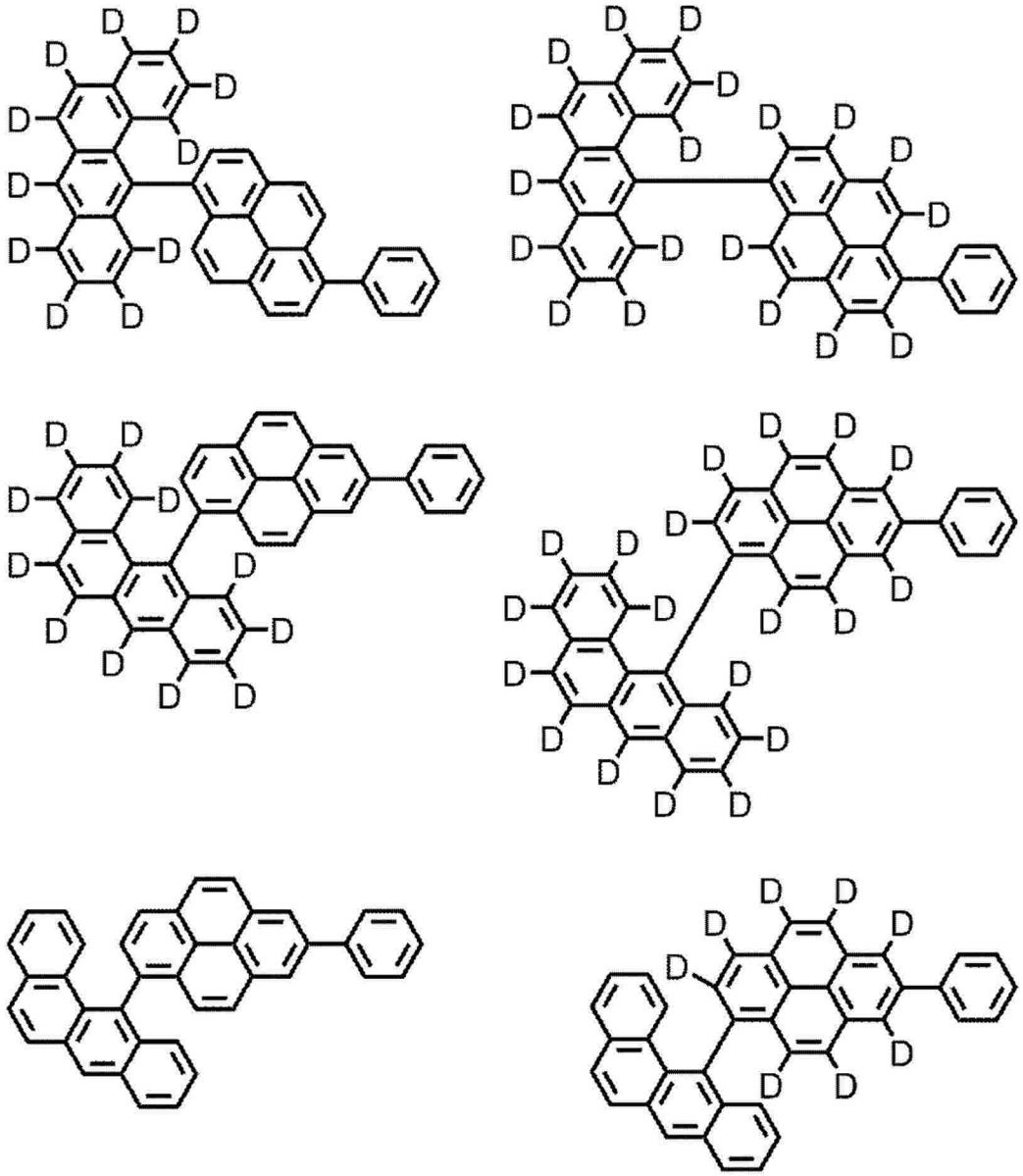
【０２７３】

【化５３】



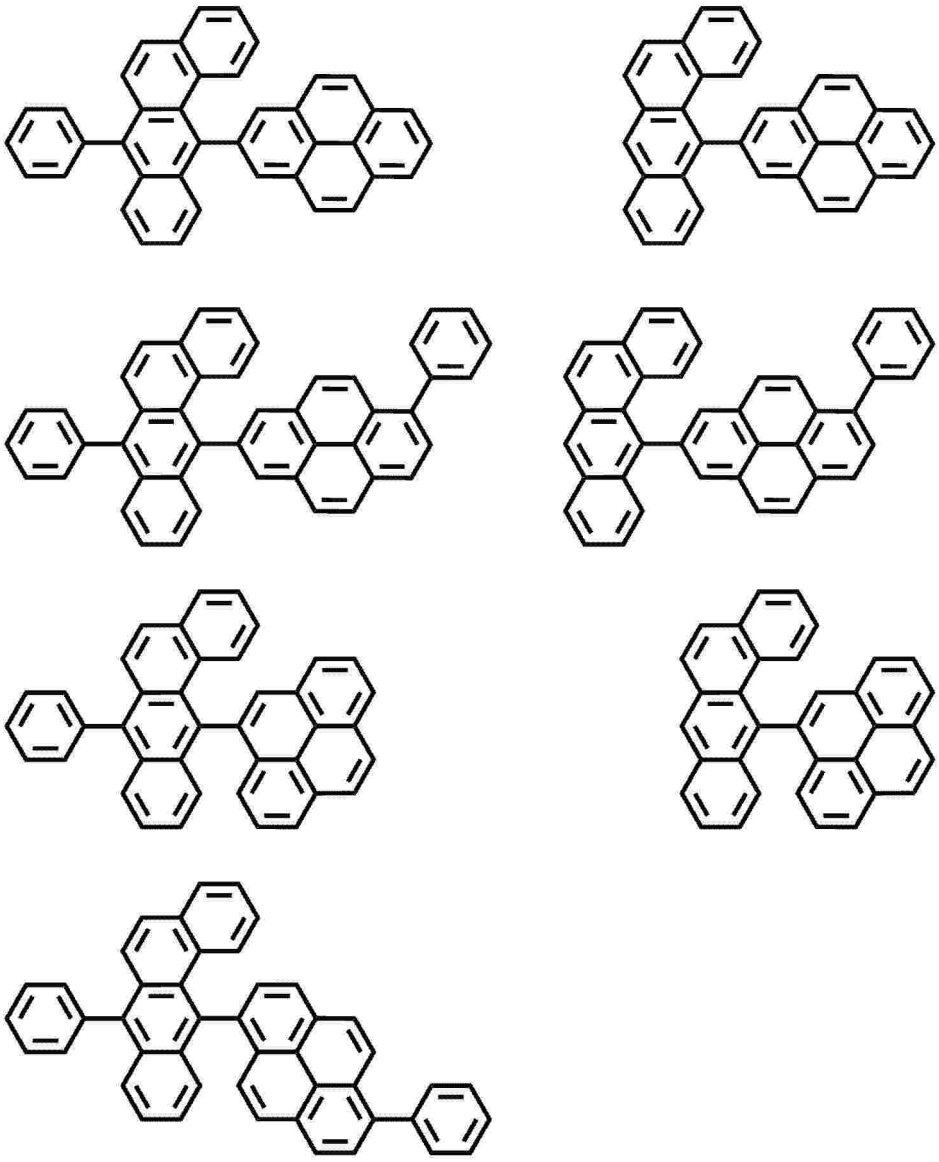
【０２７４】

【化５４】



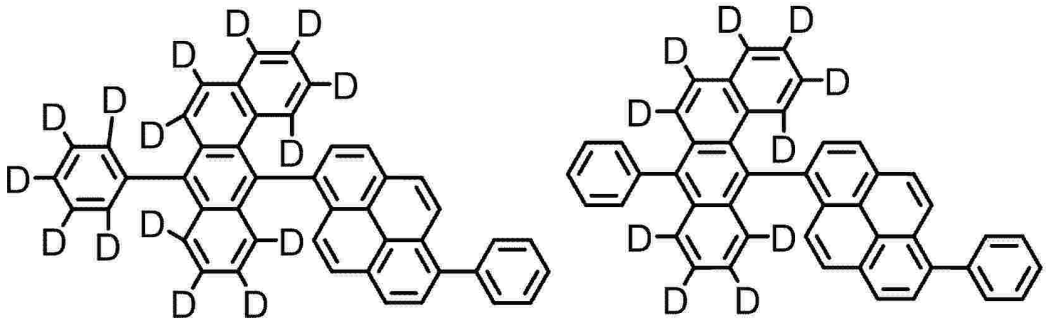
【０２７５】

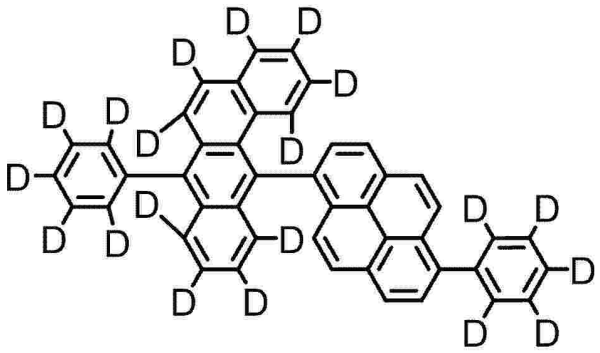
【化５５】

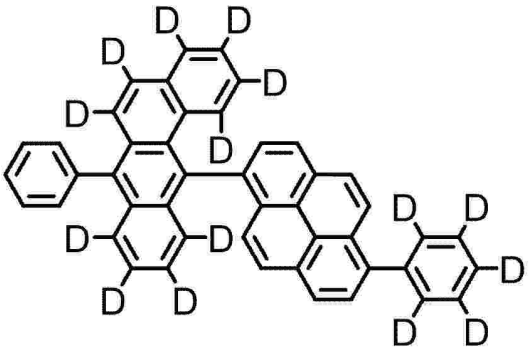


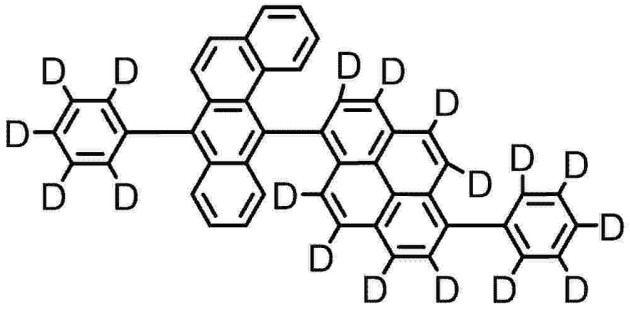
【０２７６】

【化５６】



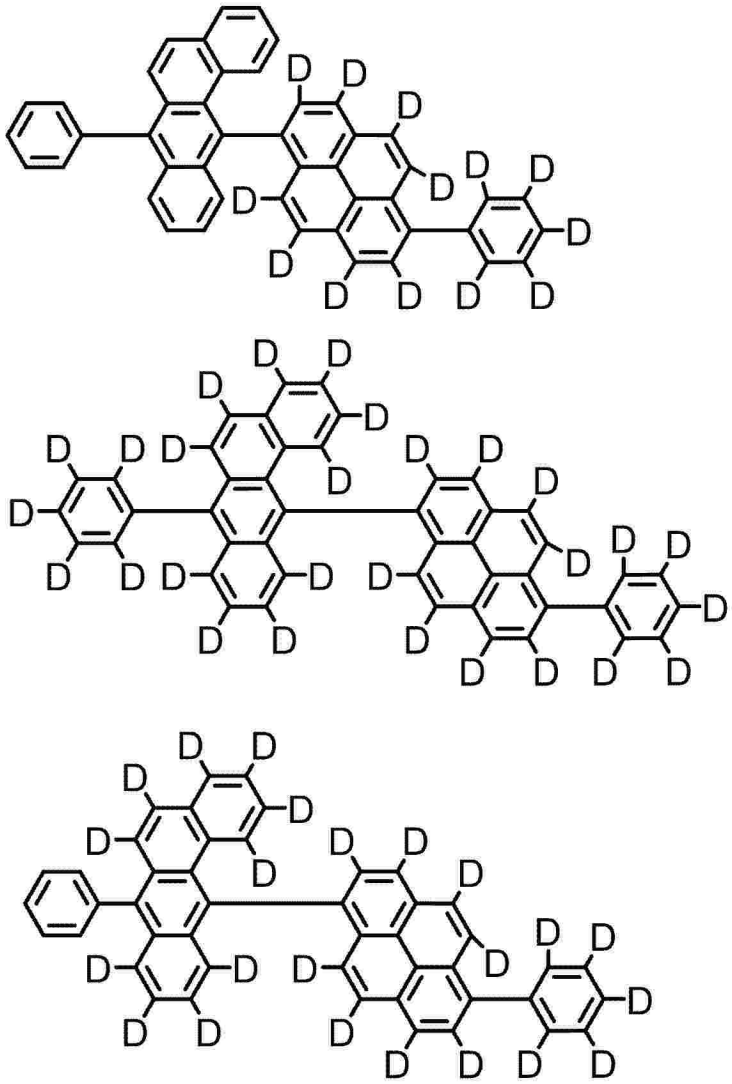






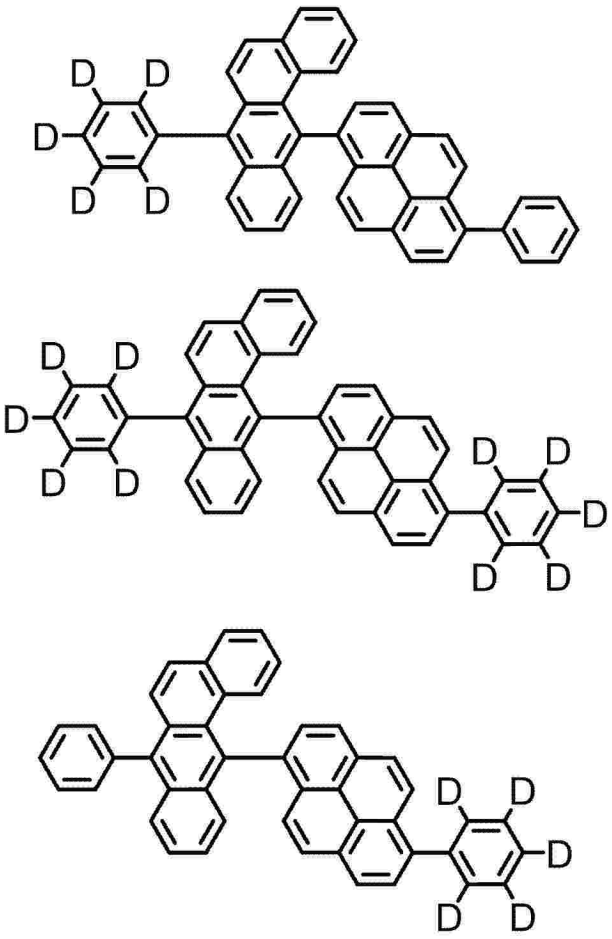
【０２７７】

【化５７】



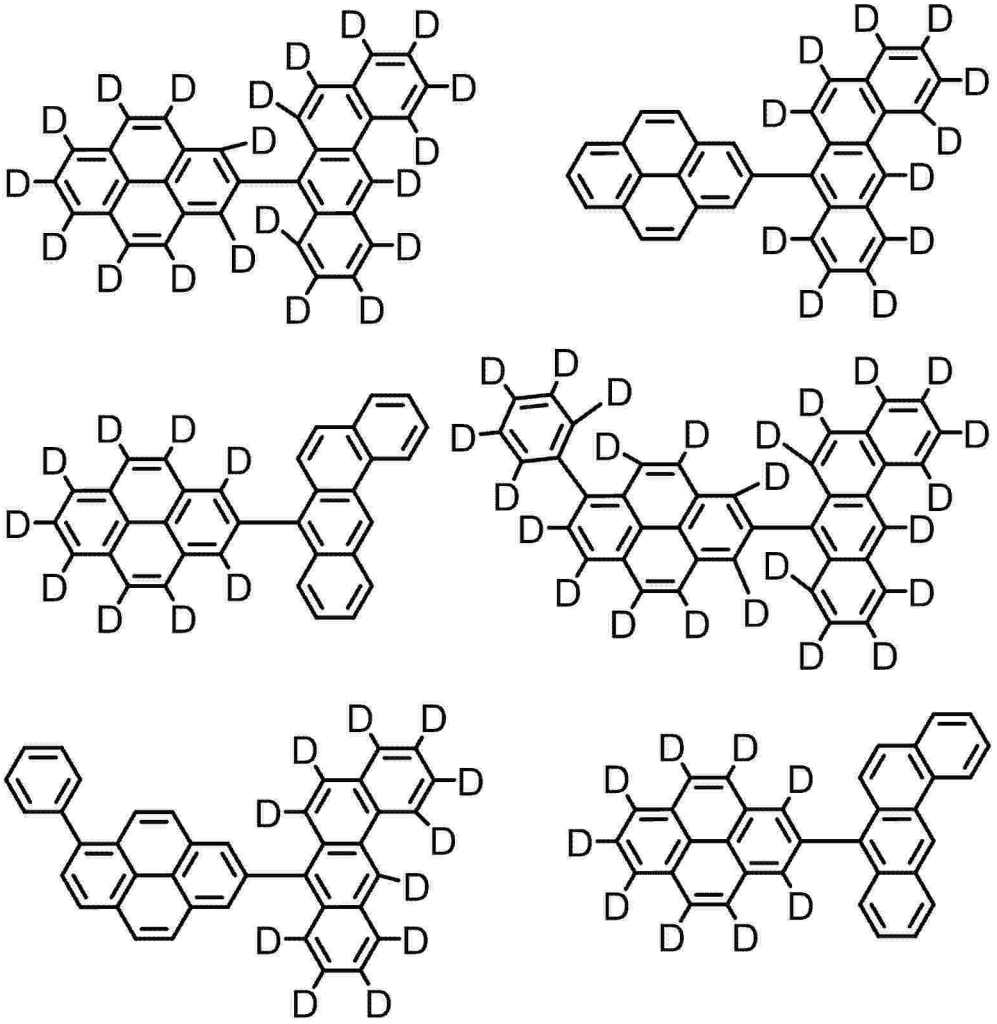
【０２７８】

【化５８】



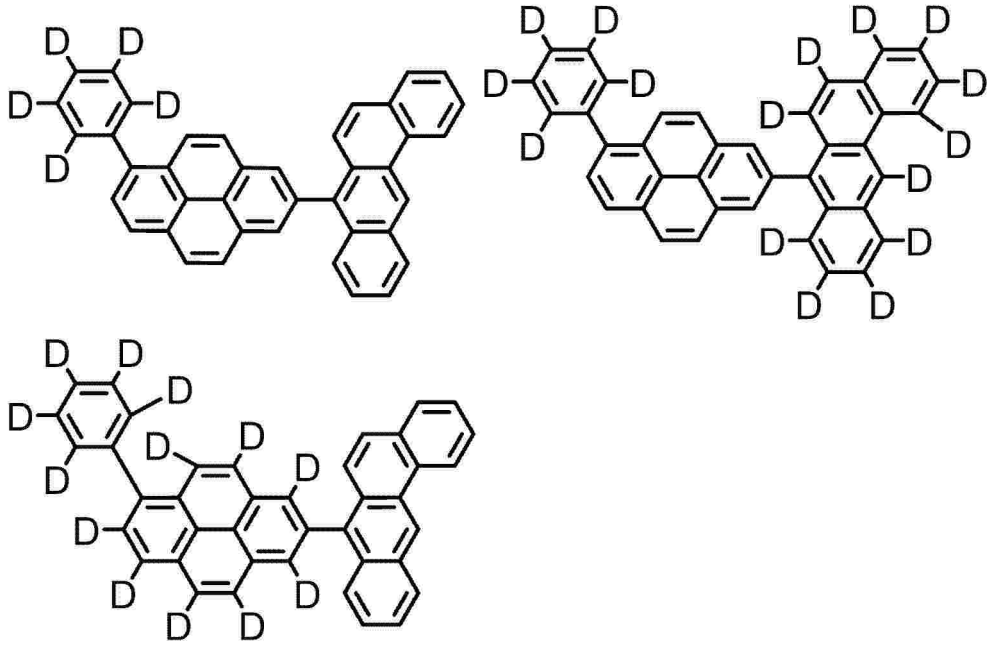
【０２７９】

【化５９】



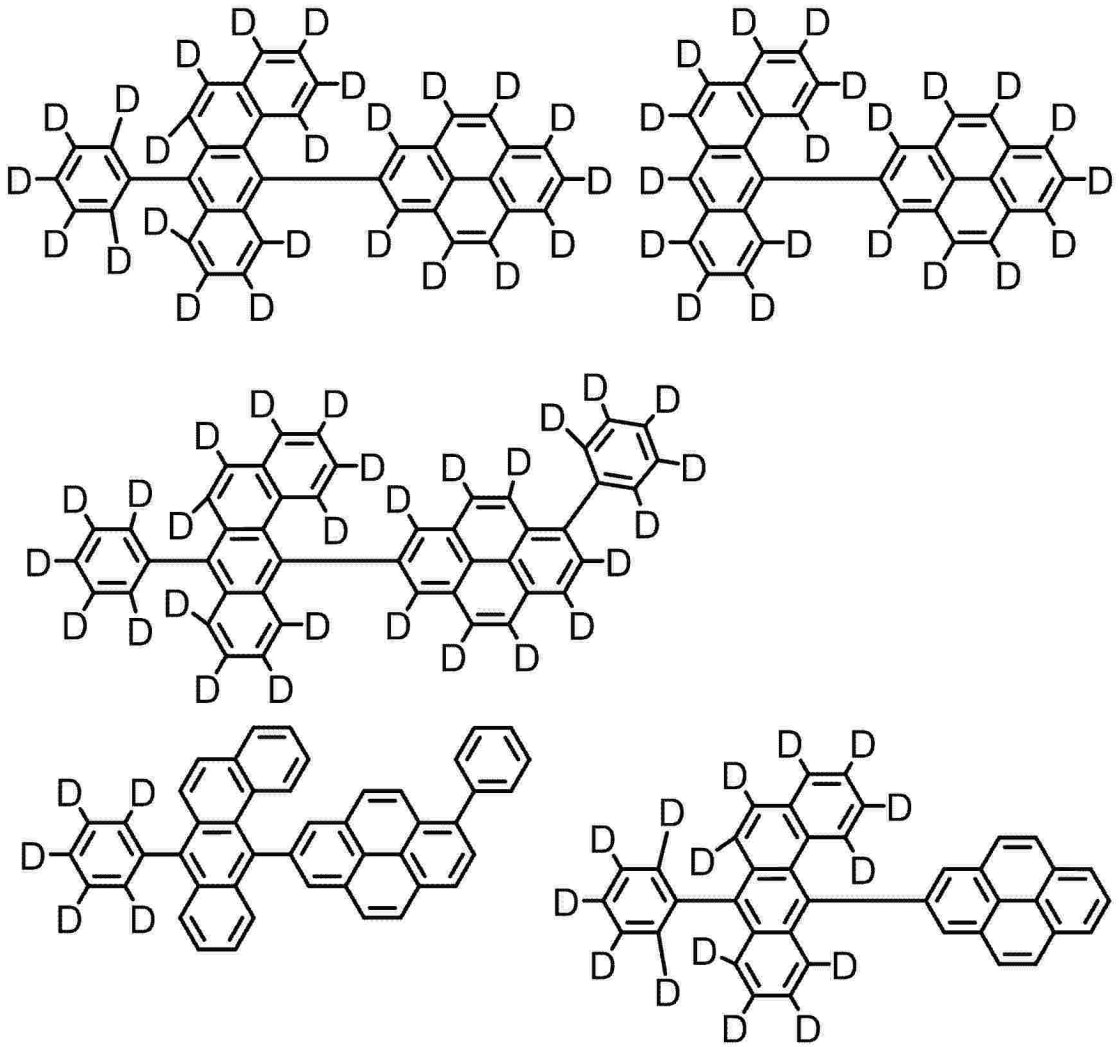
【０２８０】

【化６０】



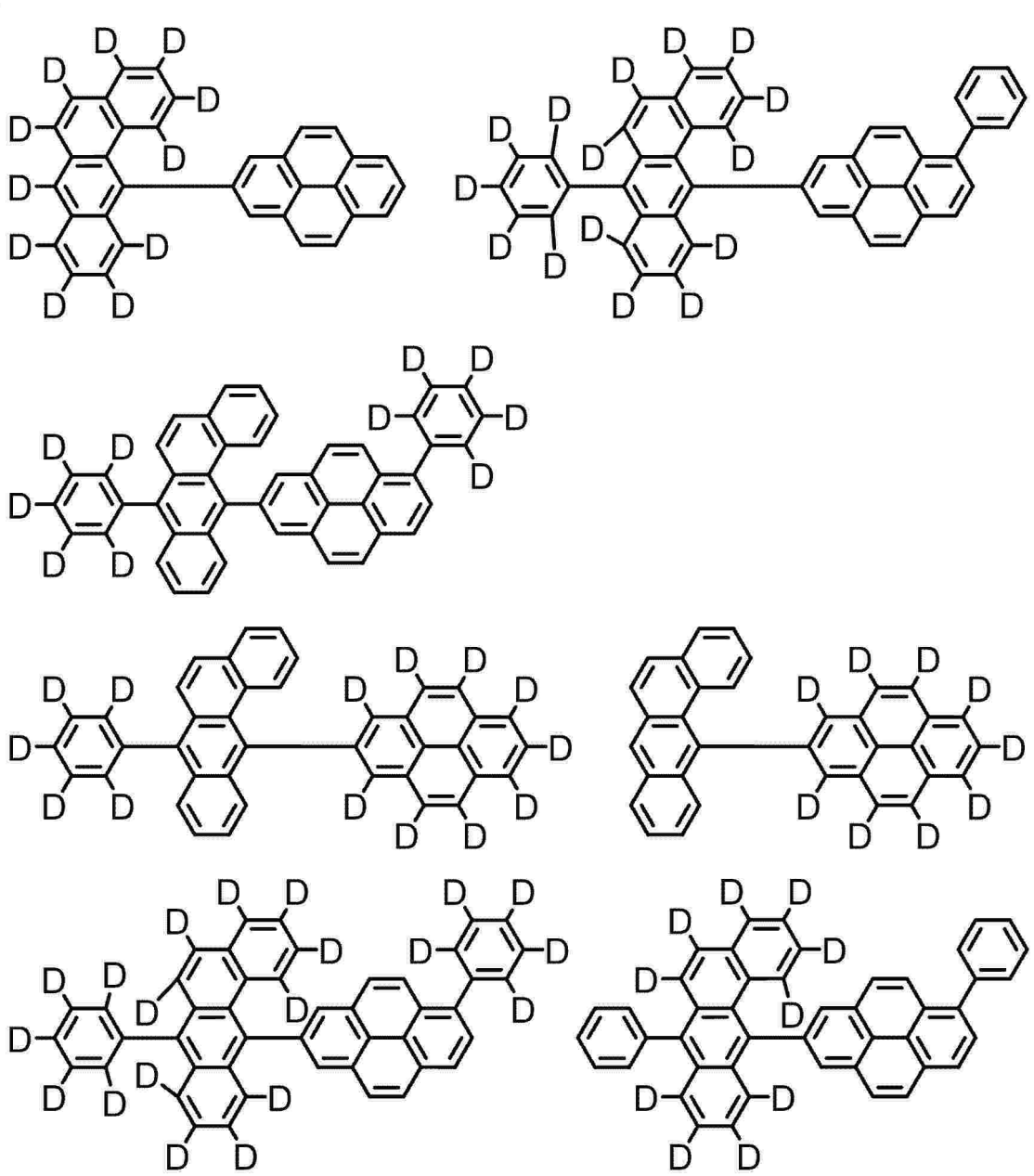
【０２８１】

【化６１】



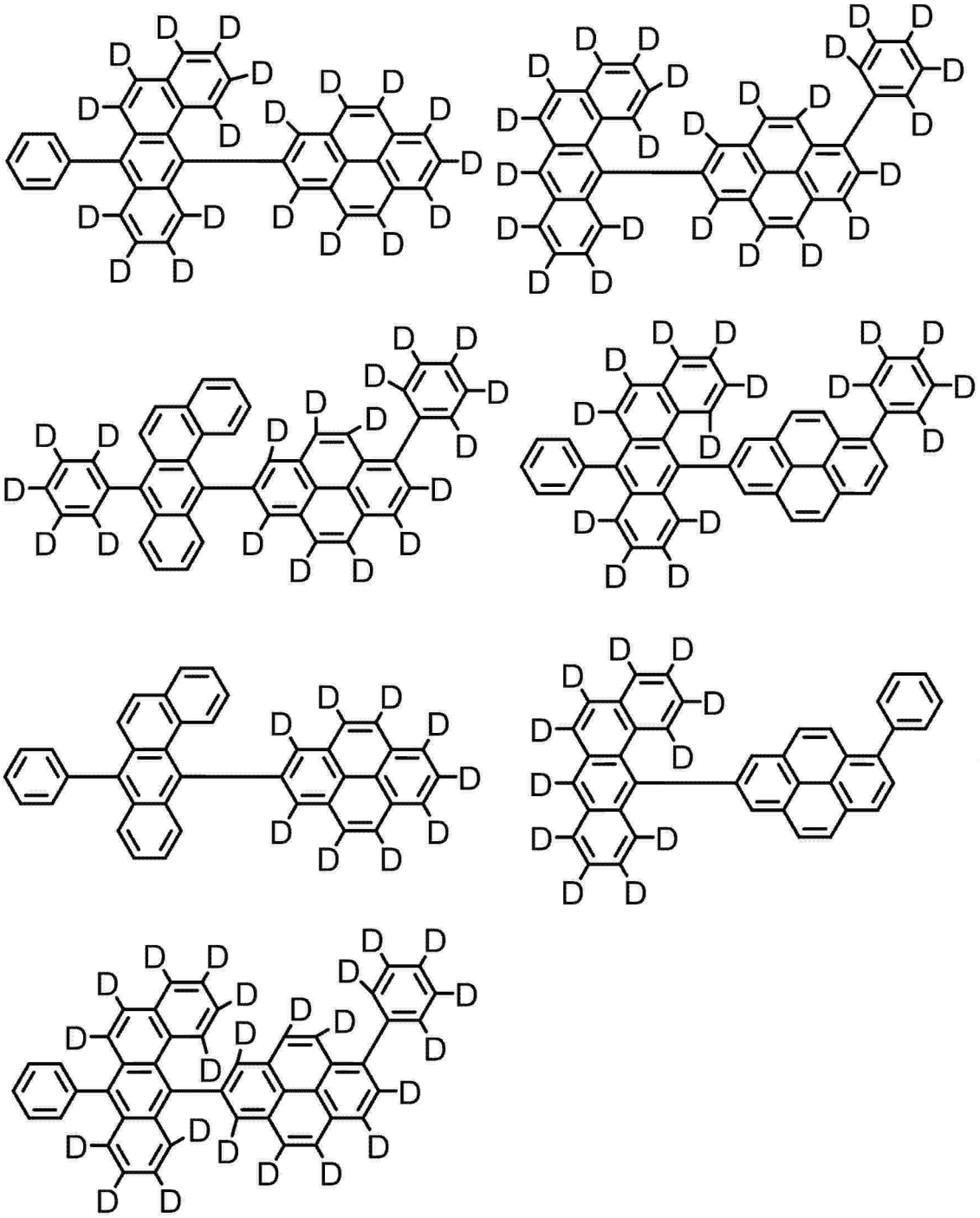
【０２８２】

【化６２】



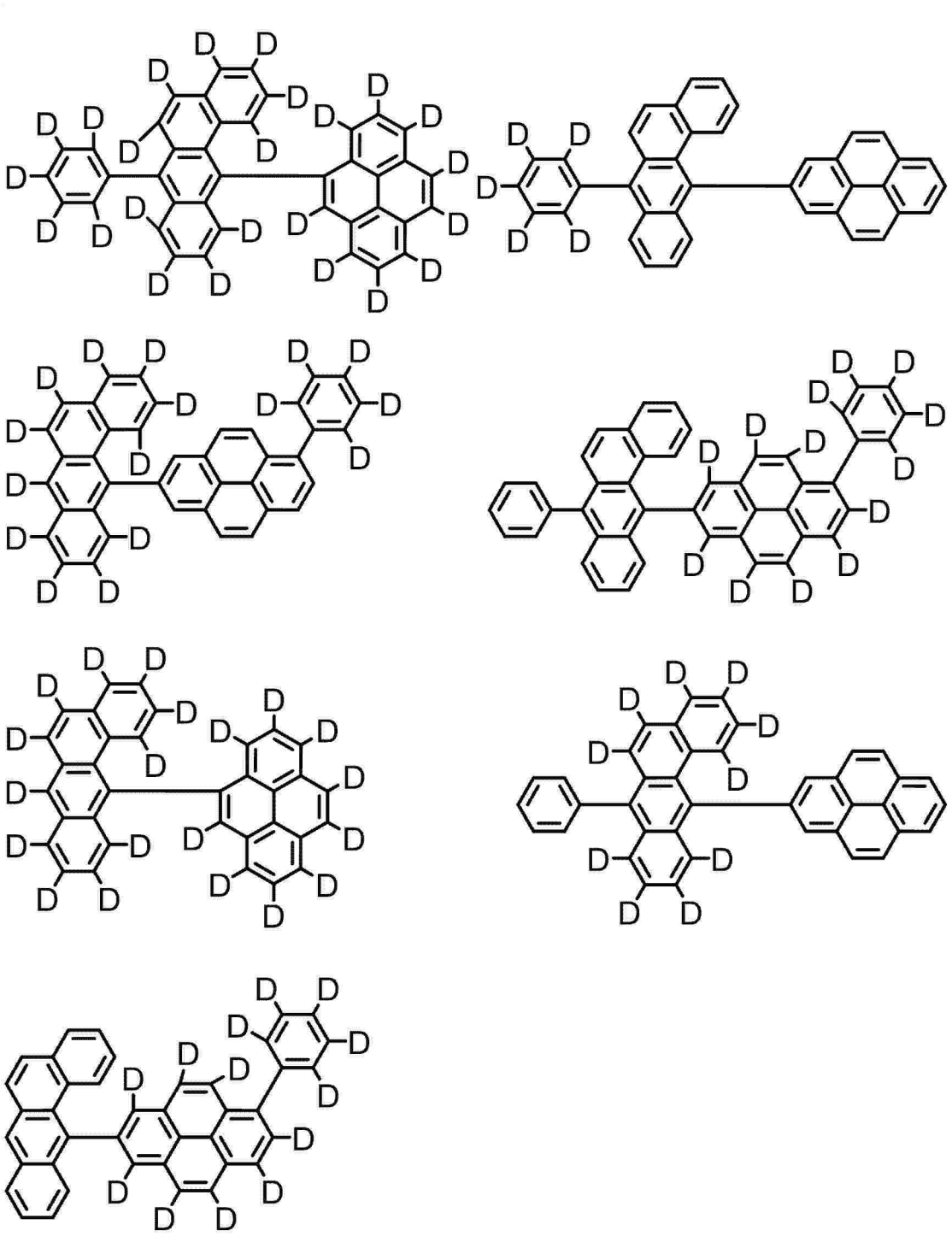
【０２８３】

【化６３】



【０２８４】

【化６４】



【０２８５】
発光領域が第一の発光層及び第二の発光層を含む場合、本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、例えば、陽極と、第一の発光層と、第二の発光層と、陰極とをこの順に有していることもできるが、第一の発光層と第二の発光層の順序を逆にし、陽極と、第二の発光層と、第一の発光層と、陰極とをこの順に有することもできる。
【０２８６】
発光領域が第一の発光層及び第二の発光層を含む場合、本実施形態に係る有機ＥＬ素子は、陽極と陰極との間に第二の発光層を含み、陽極と第二の発光層との間に第一の発光層が配置されていることも好ましい。

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

【０２８７】

（有機ＥＬ素子の発光波長）

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

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

【０２８８】

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

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

【０２８９】

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

【０２９０】

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

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

【０２９１】

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

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

【０２９２】

図１に、本実施形態に係る有機ＥＬ素子の一例の概略構成を示す。

図１に示す有機ＥＬ素子１Ａは、基板２と、陽極３と、陰極４と、陽極３と陰極４との間に配置された有機層１０Ａと、を含む。有機層１０Ａは、陽極３側から順に、正孔輸送

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

【０２９３】

（発光層）

発光層５は、第一実施形態に係る化合物、第二実施形態に係る化合物、又は第三実施形態に係る化合物を含有する。

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

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

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

【０２９４】

（発光性化合物）

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

【０２９５】

発光層５が含有する発光性化合物は、

下記一般式（３）で表される化合物、

下記一般式（４）で表される化合物、

下記一般式（５）で表される化合物、

下記一般式（６）で表される化合物、

下記一般式（７）で表される化合物、

下記一般式（８）で表される化合物、

下記一般式（９）で表される化合物、及び

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

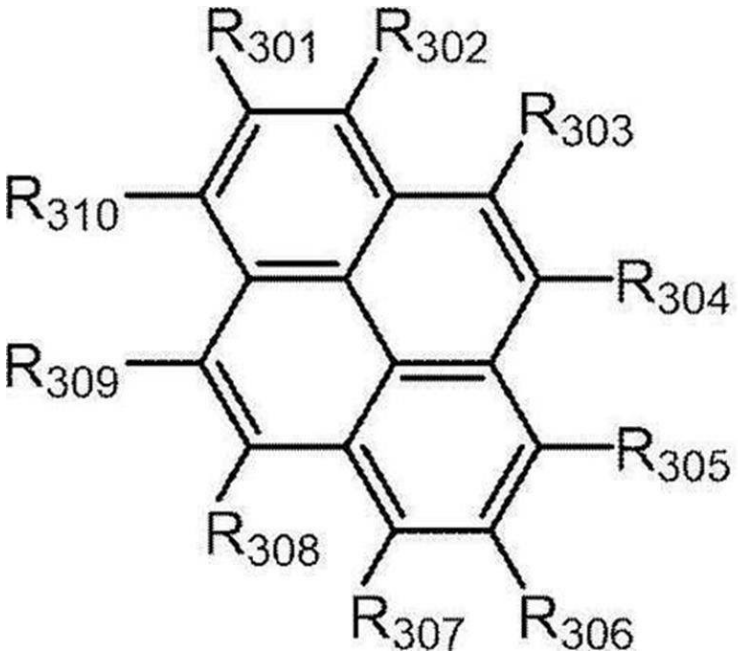
【０２９６】

（一般式（３）で表される化合物）

一般式（３）で表される化合物について説明する。

【０２９７】

【化６５】



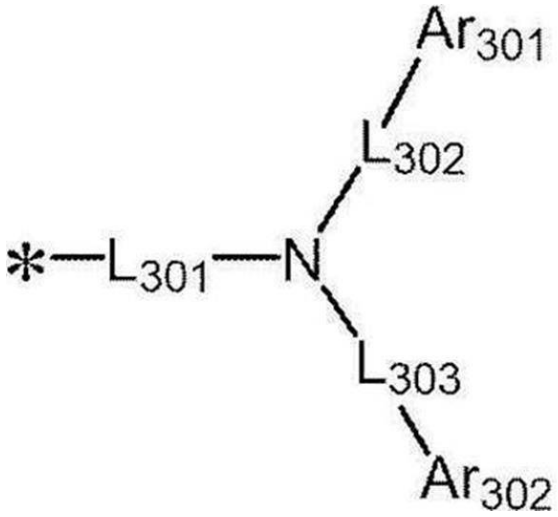
(3)

【０２９８】

（前記一般式（３）において、
Ｒ３０１～Ｒ３１０のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
Ｒ３０１～Ｒ３１０の少なくとも１つは下記一般式（３１）で表される１価の基であり、
前記単環を形成せず、前記縮合環を形成せず、かつ下記一般式（３１）で表される１価の基ではないＲ３０１～Ｒ３１０は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０２９９】

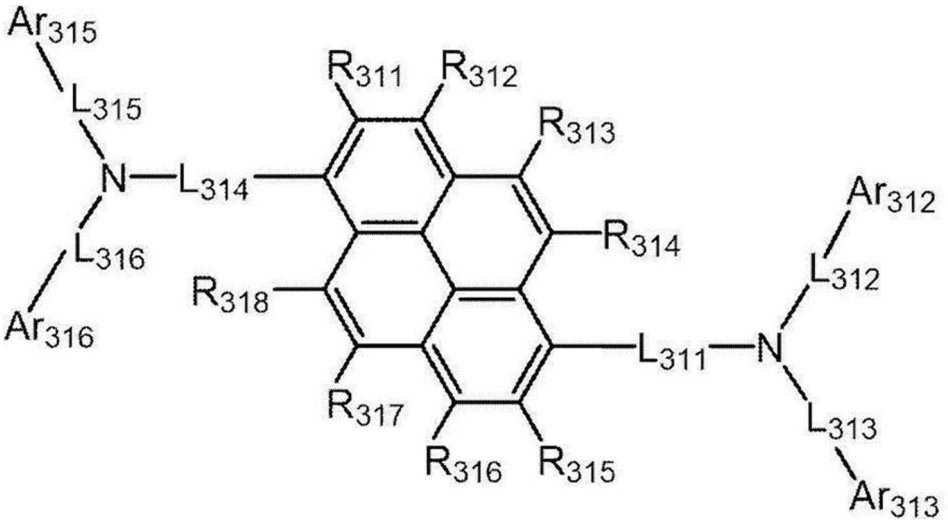
【化６６】



(31)

【０３００】
（前記一般式（３１）において、
Ａｒ３０１及びＡｒ３０２は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｌ３０１～Ｌ３０３は、それぞれ独立に、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の２価の複素環基であり、
＊は、前記一般式（３）中のピレン環における結合位置を示す。）
【０３０１】
発光性化合物中、Ｒ９０１、Ｒ９０２、Ｒ９０３、Ｒ９０４、Ｒ９０５、Ｒ９０６及びＲ９０７は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であり、
Ｒ９０１が複数存在する場合、複数のＲ９０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０２が複数存在する場合、複数のＲ９０２は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０３が複数存在する場合、複数のＲ９０３は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０４が複数存在する場合、複数のＲ９０４は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０５が複数存在する場合、複数のＲ９０５は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０６が複数存在する場合、複数のＲ９０６は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０７が複数存在する場合、複数のＲ９０７は、互いに同一であるか又は異なる。
【０３０２】
前記一般式（３）において、Ｒ３０１～Ｒ３１０のうち２つが前記一般式（３１）で表される基であることが好ましい。
【０３０３】
一実施形態において、前記一般式（３）で表される化合物は、下記一般式（３３）で表される化合物である。
【０３０４】

【化６７】



(33)

【０３０５】

（前記一般式（３３）において、

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

Ｌ３１１～Ｌ３１６は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の２価の複素環基であり、

Ａｒ３１２、Ａｒ３１３、Ａｒ３１５及びＡｒ３１６は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０３０６】

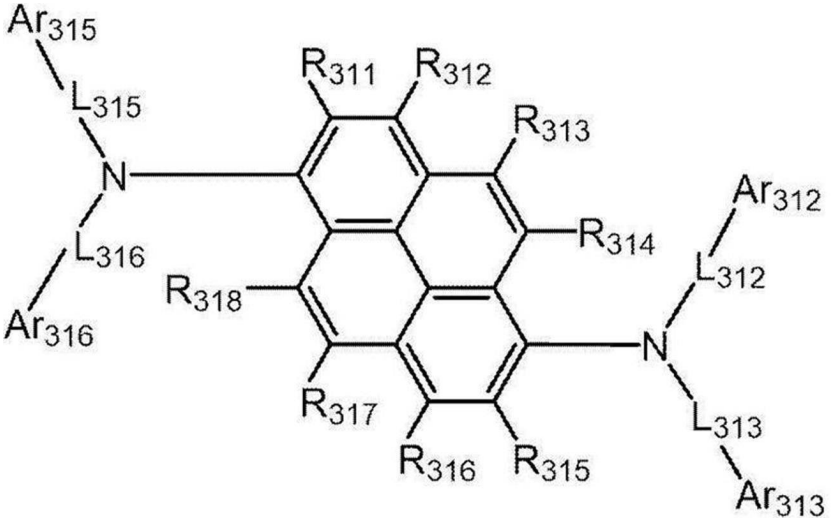
前記一般式（３１）において、Ｌ３０１は、単結合であることが好ましく、Ｌ３０２及びＬ３０３は単結合であることが好ましい。

【０３０７】

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

【０３０８】

【化６８】



(34)

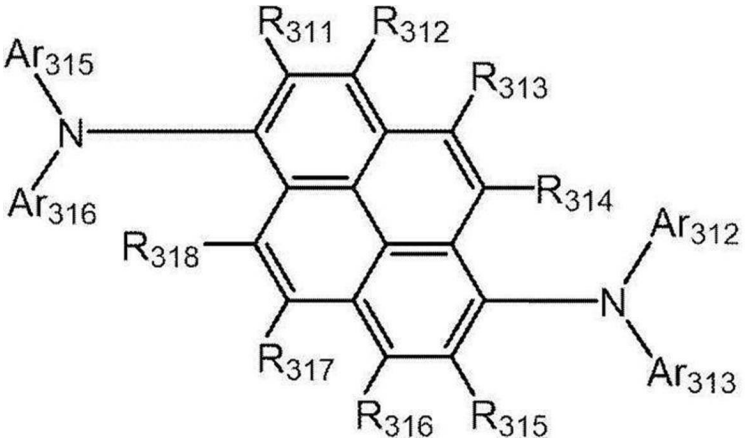
【０３０９】

（前記一般式（３４）において、

Ｒ３１１～Ｒ３１８は、それぞれ独立に、前記一般式（３）における、前記一般式（３１）で表される１価の基ではないＲ３０１～Ｒ３１０と同義であり、
Ｌ３１２、Ｌ３１３、Ｌ３１５及びＬ３１６は、それぞれ独立に、前記一般式（３３）におけるＬ３１２、Ｌ３１３、Ｌ３１５及びＬ３１６と同義であり、
Ａｒ３１２、Ａｒ３１３、Ａｒ３１５及びＡｒ３１６は、それぞれ独立に、前記一般式（３３）におけるＡｒ３１２、Ａｒ３１３、Ａｒ３１５及びＡｒ３１６と同義である。）

【０３１０】

【化６９】



(35)

【０３１１】

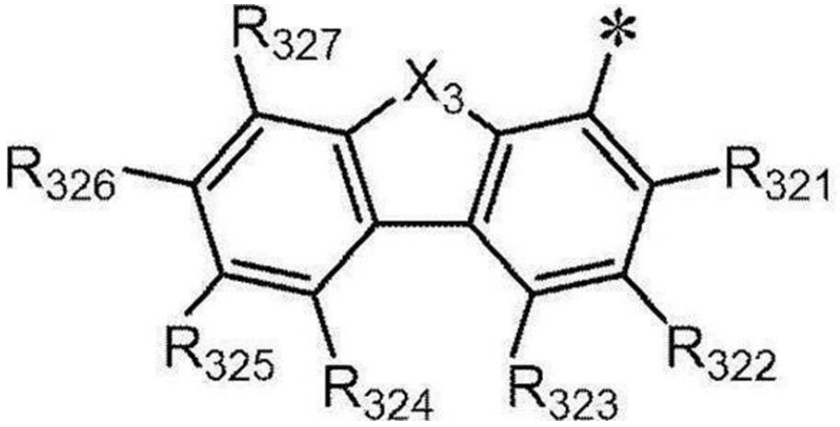
（前記一般式（３５）において、
Ｒ３１１～Ｒ３１８は、それぞれ独立に、前記一般式（３）における、前記一般式（３１）で表される１価の基ではないＲ３０１～Ｒ３１０と同義であり、
Ａｒ３１２、Ａｒ３１３、Ａｒ３１５及びＡｒ３１６は、それぞれ独立に、前記一般式（３３）におけるＡｒ３１２、Ａｒ３１３、Ａｒ３１５及びＡｒ３１６と同義である。）

【０３１２】

前記一般式（３１）において、好ましくは、Ａｒ３０１及びＡｒ３０２のうち少なくとも１つが下記一般式（３６）で表される基である。
前記一般式（３３）～一般式（３５）において、好ましくは、Ａｒ３１２及びＡｒ３１３のうち少なくとも１つが下記一般式（３６）で表される基である。
前記一般式（３３）～一般式（３５）において、好ましくは、Ａｒ３１５及びＡｒ３１６のうち少なくとも１つが下記一般式（３６）で表される基である。

【０３１３】

【化７０】



(36)

【０３１４】

（前記一般式（３６）において、
Ｘ３は、酸素原子又は硫黄原子を示し、

Ｒ３２１～Ｒ３２７のうち隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないＲ３２１～Ｒ３２７は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
＊は、Ｌ３０２、Ｌ３０３、Ｌ３１２、Ｌ３１３、Ｌ３１５又はＬ３１６との結合位置を示す。）

【０３１５】

Ｘ３は、酸素原子であることが好ましい。

【０３１６】

Ｒ３２１～Ｒ３２７のうち少なくとも１つは、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であることが好ましい。

【０３１７】

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

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

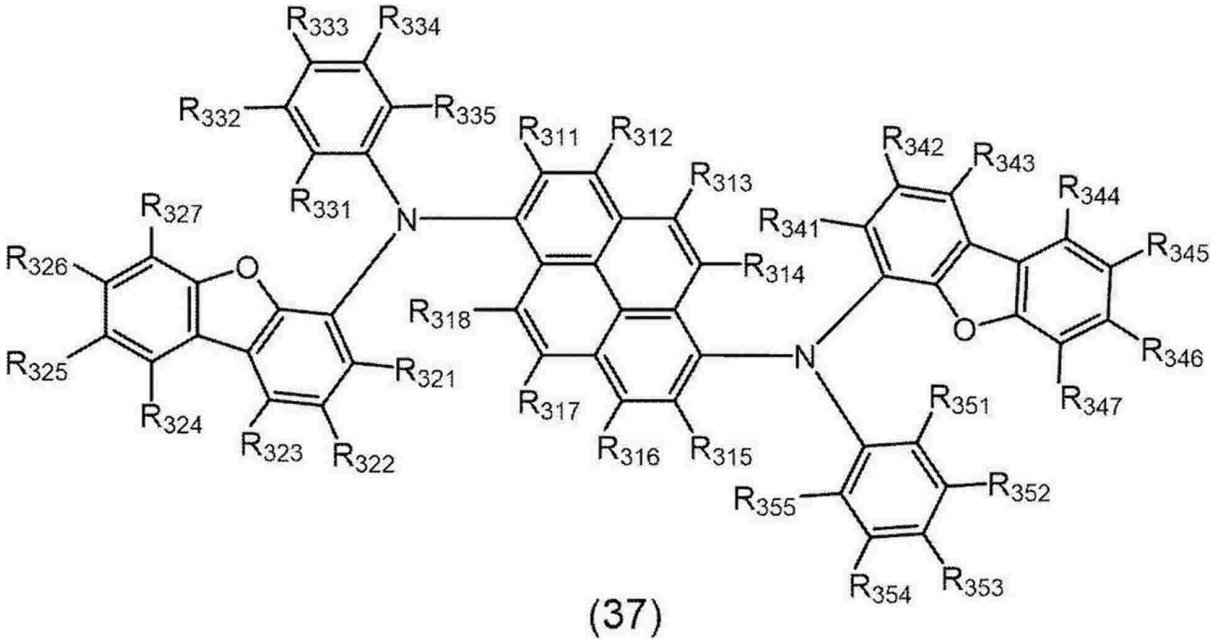
前記一般式（３３）～一般式（３５）において、Ａｒ３１５が前記一般式（３６）で表される基であり、Ａｒ３１６が置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることが好ましい。

【０３１８】

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

【０３１９】

【化７１】



(37)

【０３２０】

（前記一般式（３７）において、

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

Ｒ３２１～Ｒ３２７のうち隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

Ｒ３４１～Ｒ３４７のうち隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

Ｒ３３１～Ｒ３３５並びにＲ３５１～Ｒ３５５は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

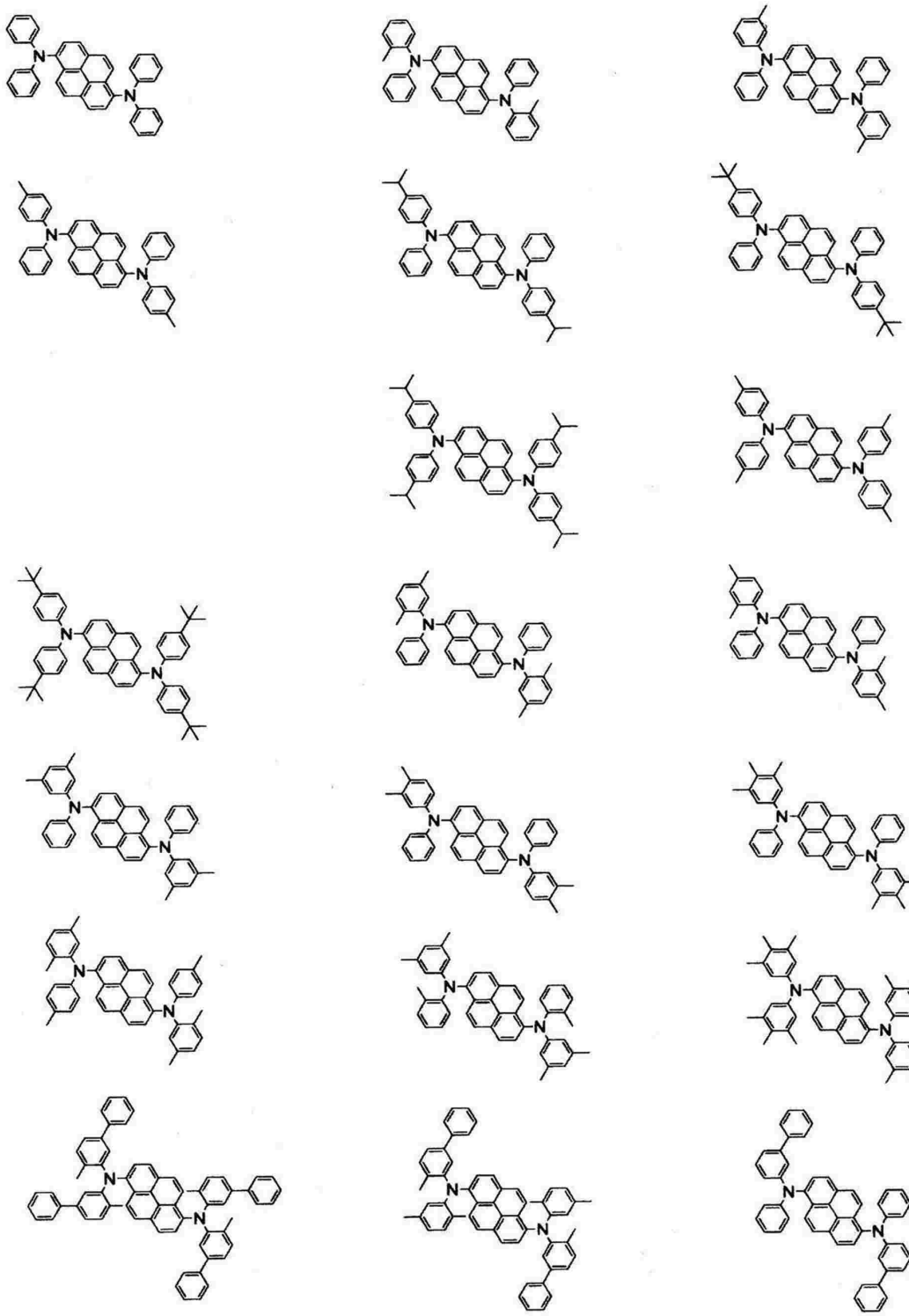
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０３２１】

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

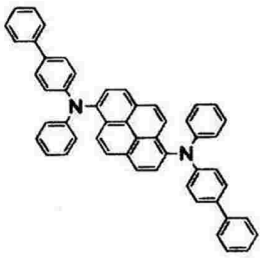
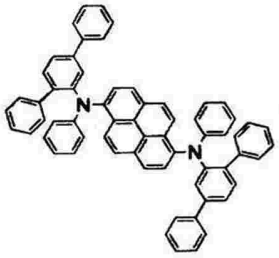
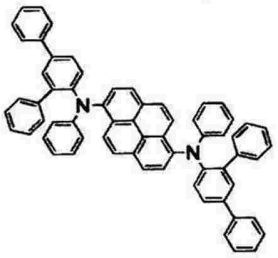
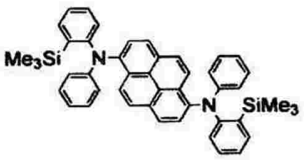
【０３２２】

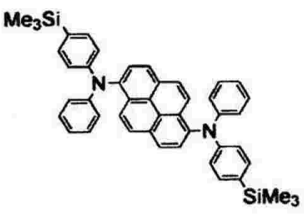
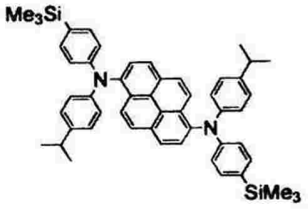
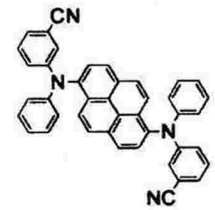
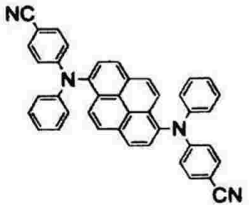
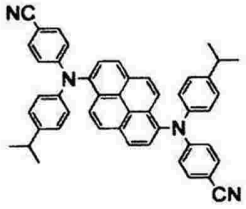
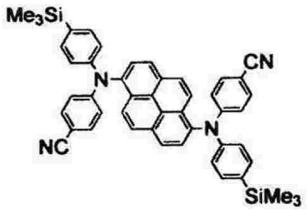
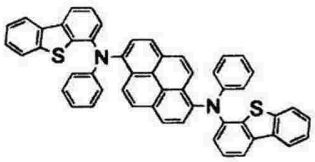
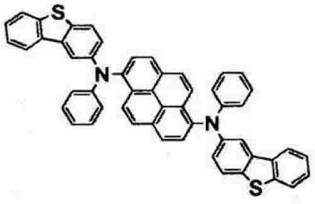
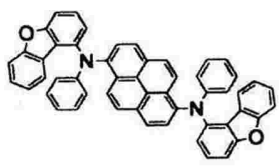
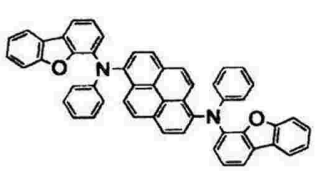
【化７２】

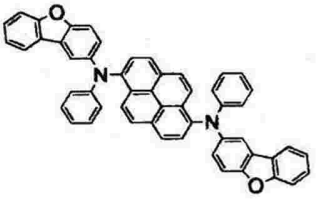


【０３２３】

【化７３】

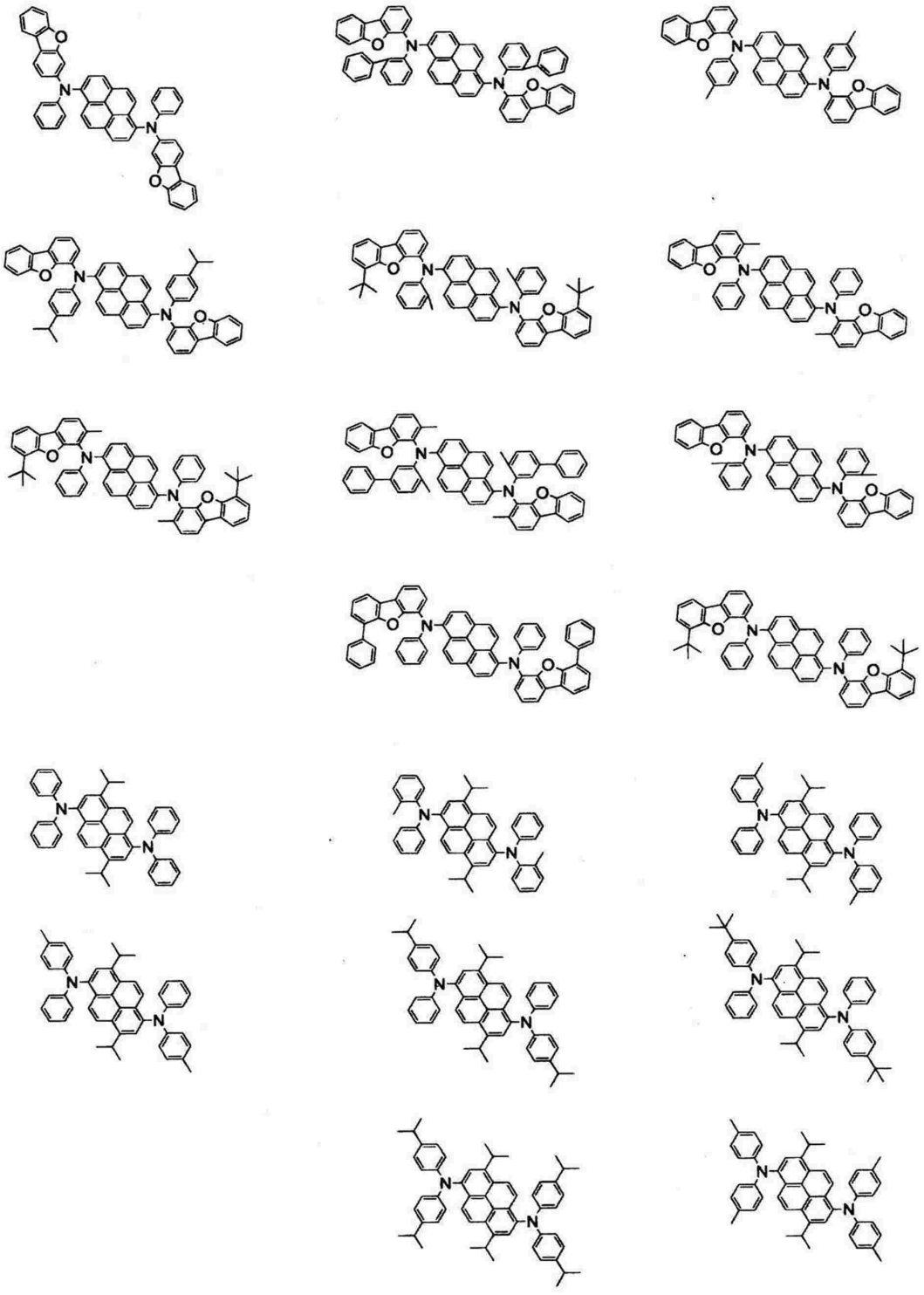







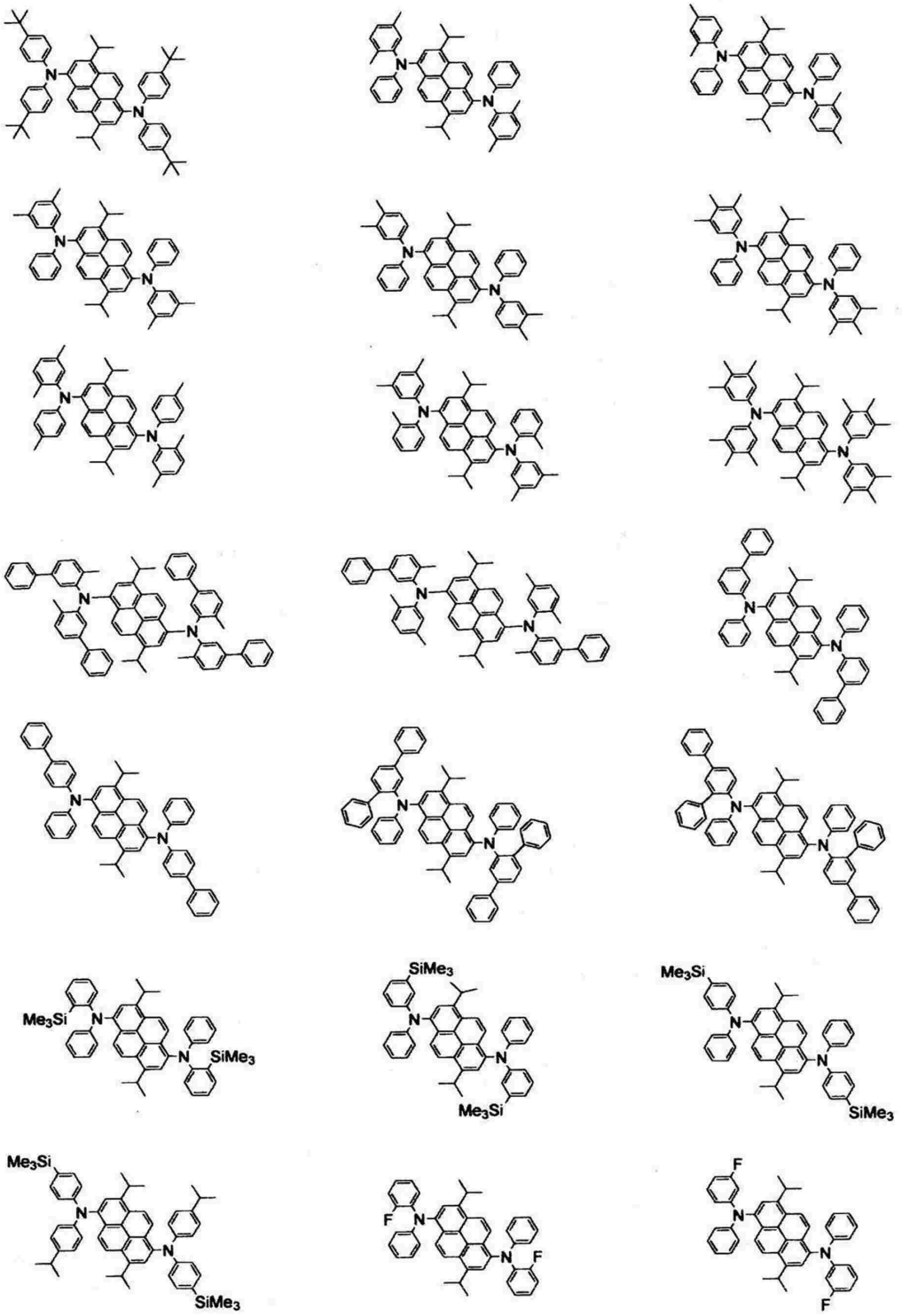
【０３２４】

【化７４】



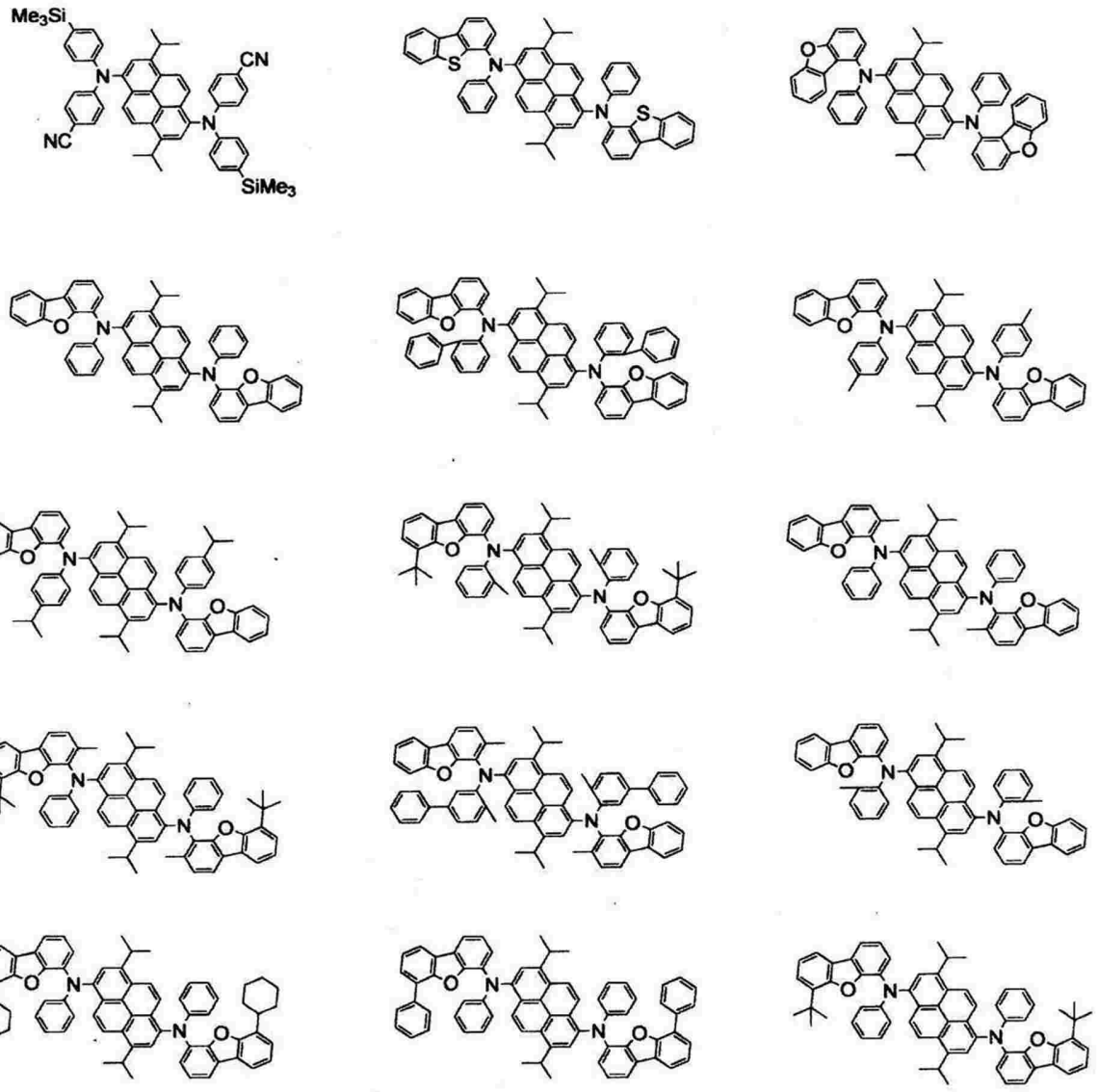
【０３２５】

【化７５】



【０３２６】

【化７６】



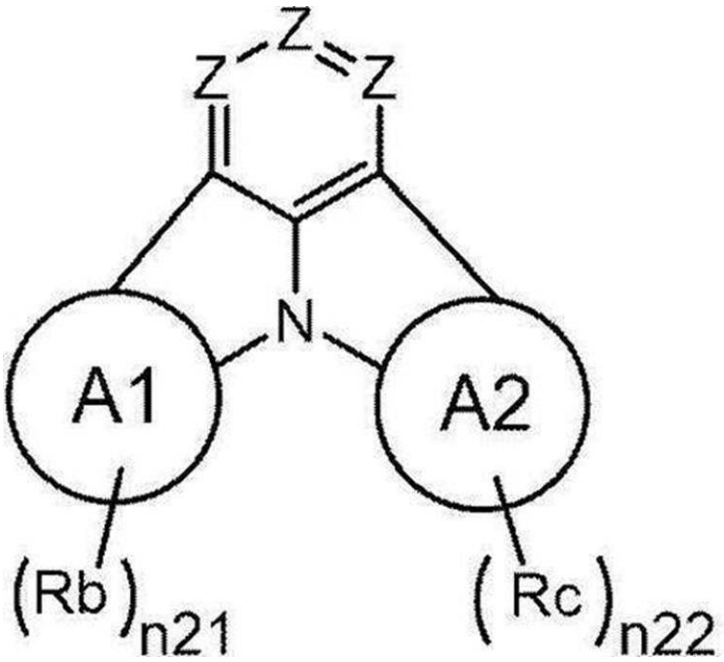
【０３２７】

（一般式（４）で表される化合物）

一般式（４）で表される化合物について説明する。

【０３２８】

【化７７】



(4)

【０３２９】

（前記一般式（４）において、
Ｚは、それぞれ独立に、ＣＲａ又は窒素原子であり、
Ａ１環及びＡ２環は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０の芳香族炭化水素環、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環であり、
Ｒａが複数存在する場合、複数のＲａのうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
ｎ２１及びｎ２２は、それぞれ独立に、０、１、２、３又は４であり、
Ｒｂが複数存在する場合、複数のＲｂのうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
Ｒｃが複数存在する場合、複数のＲｃのうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないＲａ、Ｒｂ及びＲｃは、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
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。）

【０３３０】

Ａ１環及びＡ２環の「芳香族炭化水素環」は、上述した「アリール基」に水素原子を導入した化合物と同じ構造である。

Ａ１環及びＡ２環の「芳香族炭化水素環」は、前記一般式（４）中央の縮合２環構造上の炭素原子２つを環形成原子として含む。

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

【０３３１】

Ａ１環及びＡ２環の「複素環」は、上述した「複素環基」に水素原子を導入した化合物と同じ構造である。

Ａ１環及びＡ２環の「複素環」は、前記一般式（４）中央の縮合２環構造上の炭素原子２つを環形成原子として含む。

「置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環」の具体例としては、具体例群Ｇ２に記載の「複素環基」に水素原子を導入した化合物等が挙げられる。

【０３３２】

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

【０３３３】

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

【０３３４】

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

【０３３５】

【化７８】

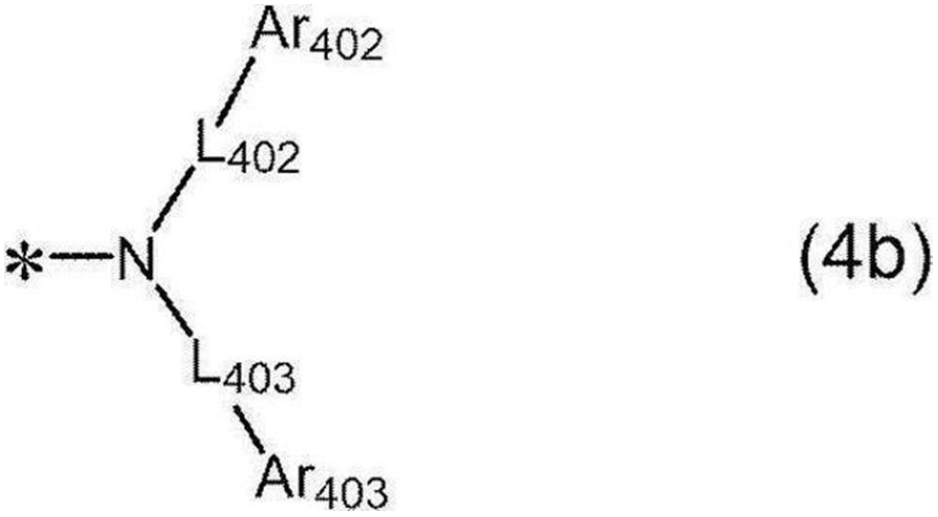


【０３３６】

（前記一般式（４ａ）において、
L_{401}は、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の２価の複素環基であり、
Ar_{401}は、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基、又は
下記一般式（４ｂ）で表される基である。）

【０３３７】

【化７９】



(4b)

【０３３８】

（前記一般式（４ｂ）において、

Ｌ４０２及びＬ４０３は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の２価の複素環基であり、

Ａｒ４０２及びＡｒ４０３からなる組は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

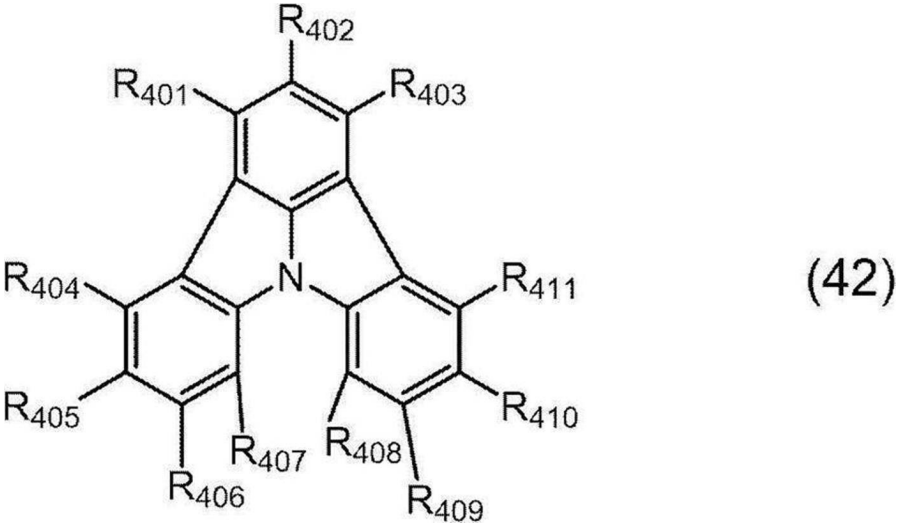
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０３３９】

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

【０３４０】

【化８０】



(42)

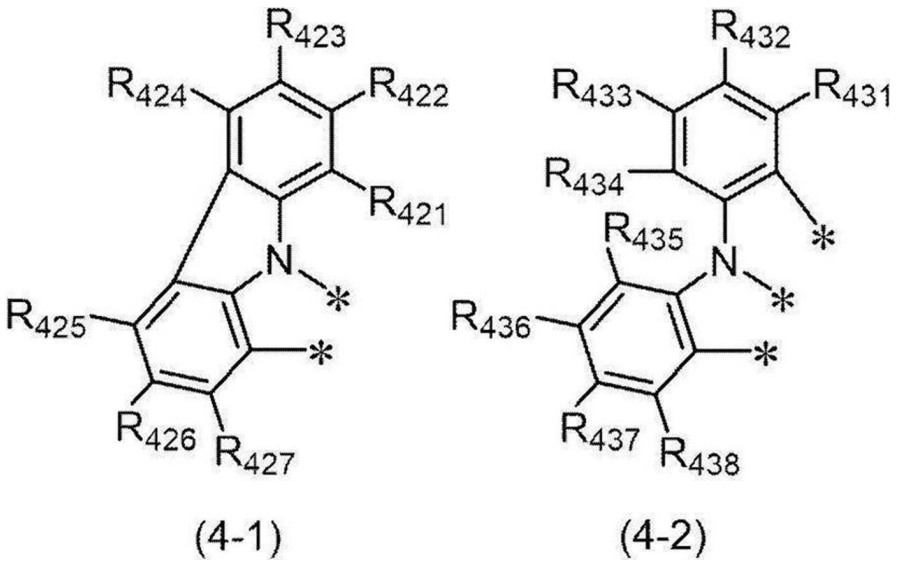
【０３４１】

（前記一般式（４２）において、
Ｒ４０１～Ｒ４１１のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないＲ４０１～Ｒ４１１は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０３４２】
Ｒ４０１～Ｒ４１１のうち、少なくとも１つが、前記一般式（４ａ）で表される基であることが好ましく、少なくとも２つ前記一般式（４ａ）で表される基であることがより好ましい。
Ｒ４０４及びＲ４１１が前記一般式（４ａ）で表される基であることが好ましい。

【０３４３】
一実施形態において、前記一般式（４）で表される化合物は、Ａ１環に下記一般式（４－１）又は一般式（４－２）で表される構造が結合した化合物である。
また、一実施形態において、前記一般式（４２）で表される化合物は、Ｒ４０４～Ｒ４０７が結合する環に下記一般式（４－１）又は一般式（４－２）で表される構造が結合した化合物である。

【０３４４】
【化８１】



【０３４５】

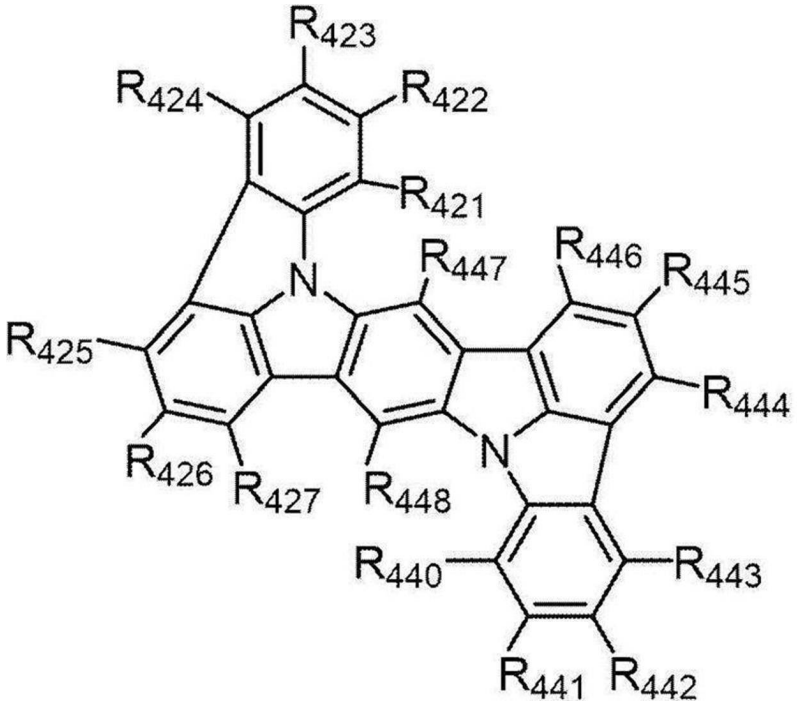
（前記一般式（４－１）において、２つの＊は、それぞれ独立に、前記一般式（４）のＡ１環としての芳香族炭化水素環の環形成炭素原子もしくは複素環の環形成原子と結合するか、又は前記一般式（４２）のＲ４０４～Ｒ４０７のいずれかと結合し、
前記一般式（４－２）の３つの＊は、それぞれ独立に、前記一般式（４）のＡ１環としての芳香族炭化水素環の環形成炭素原子もしくは複素環の環形成原子と結合するか、又は前記一般式（４２）のＲ４０４～Ｒ４０７のいずれかと結合し、
Ｒ４２１～Ｒ４２７のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
Ｒ４３１～Ｒ４３８のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないＲ４２１～Ｒ４２７並びにＲ４３１～Ｒ４３８は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０３４６】

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

【０３４７】

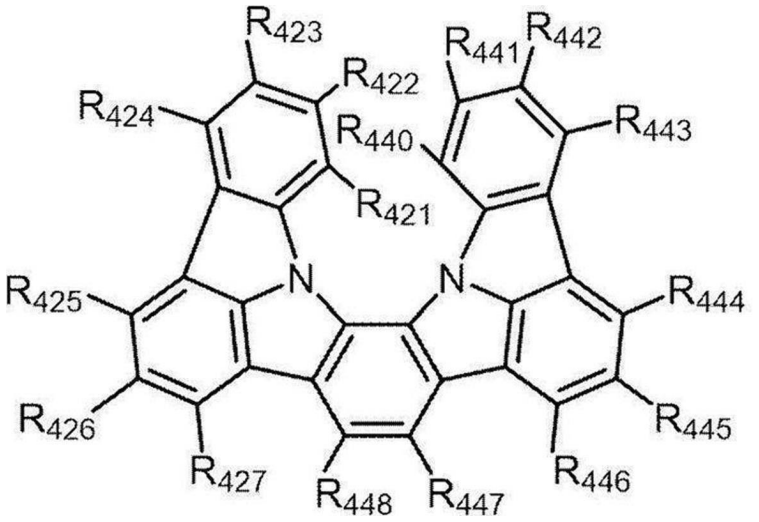
【化８２】



(41-3)

【０３４８】

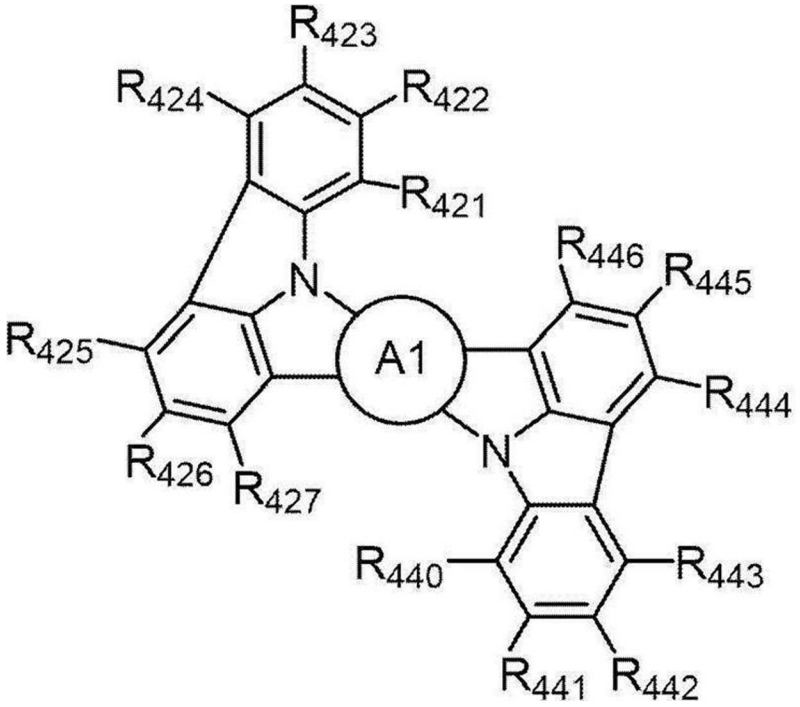
【化８３】



(41-4)

【０３４９】

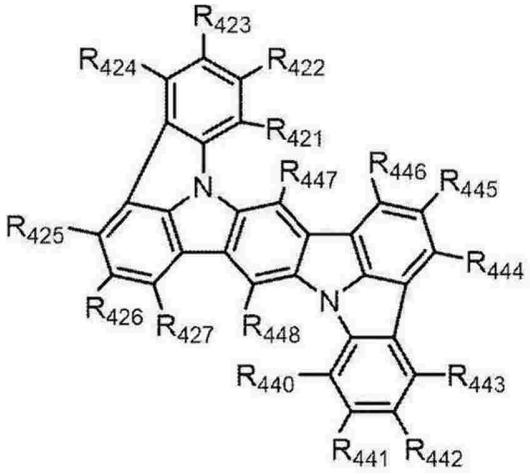
【化８４】



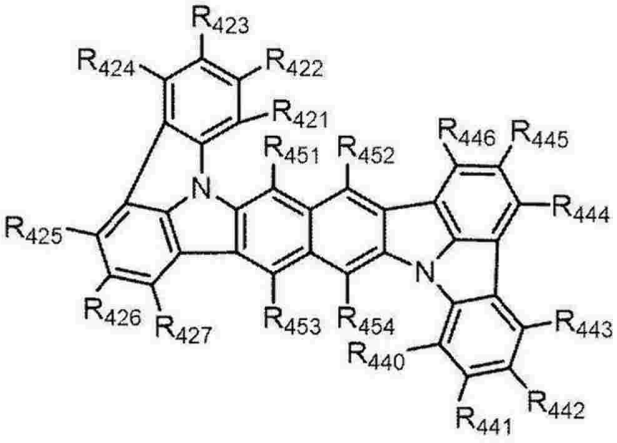
(41-5)

【０３５０】
（前記一般式（４１－３）、一般式（４１－４）及び一般式（４１－５）中、
Ａ１環は、前記一般式（４）で定義した通りであり、
R_{421}～R_{427}は、それぞれ独立に、前記一般式（４－１）におけるR_{421}～R_{427}と同義であり、
R_{440}～R_{448}は、それぞれ独立に、前記一般式（４２）におけるR_{401}～R_{411}と同義である。）
【０３５１】
一実施形態においては、前記一般式（４１－５）のＡ１環としての置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０の芳香族炭化水素環は、
置換もしくは無置換のナフタレン環、又は
置換もしくは無置換のフルオレン環である。
【０３５２】
一実施形態においては、前記一般式（４１－５）のＡ１環としての置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環は、
置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、
置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は
置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。
【０３５３】
一実施形態においては、前記一般式（４）又は前記一般式（４２）で表される化合物は、下記一般式（４６１）～一般式（４６７）で表される化合物からなる群から選択される。
【０３５４】

【化８５】



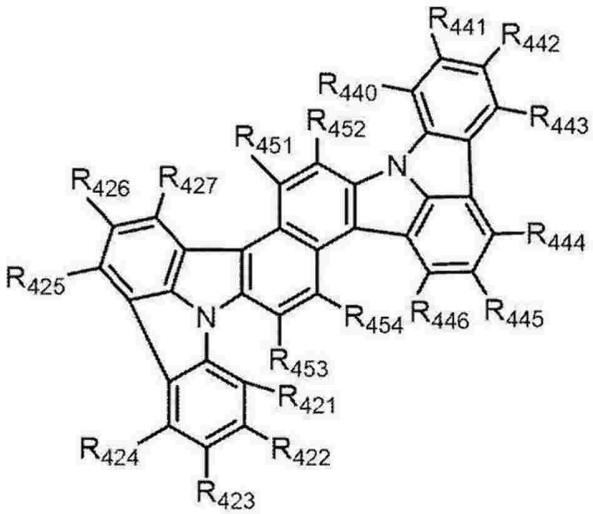
(461)



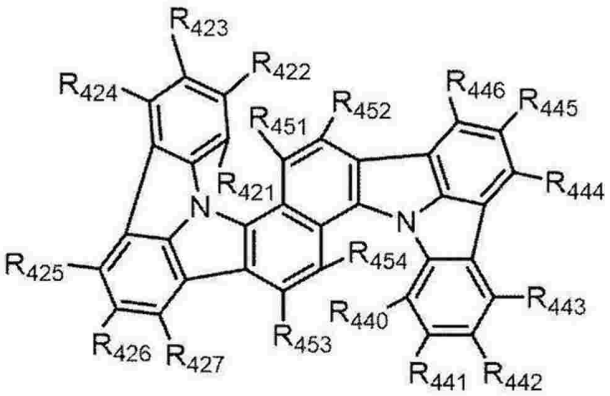
(462)

【０３５５】

【化８６】



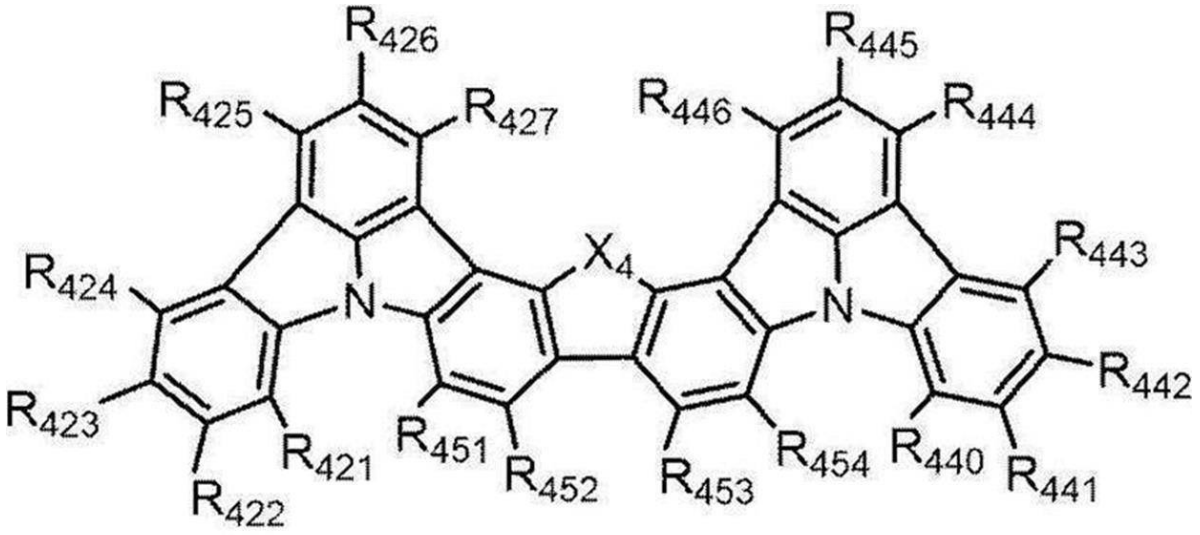
(463)



(464)

【０３５６】

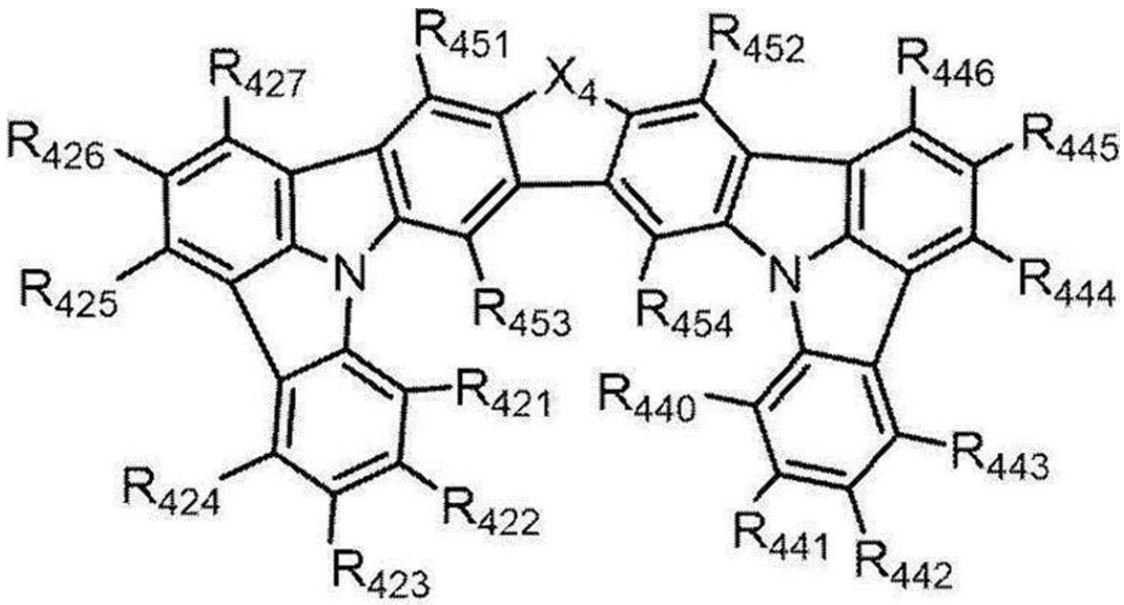
【化８７】



(465)

【０３５７】

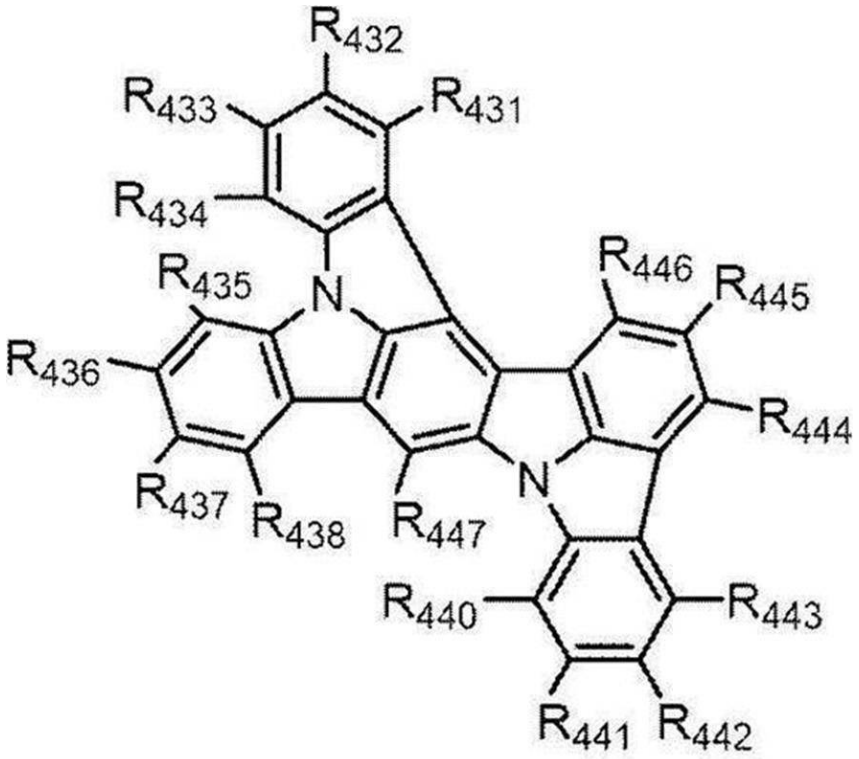
【化８８】



(466)

【０３５８】

【化８９】



(467)

【０３５９】

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

R_{421}～R_{427}は、それぞれ独立に、前記一般式（４－１）におけるR_{421}～R_{427}と同義であり、

R_{431}～R_{438}は、それぞれ独立に、前記一般式（４－２）におけるR_{431}～R_{438}と同義であり、

R_{440}～R_{448}並びにR_{451}～R_{454}は、それぞれ独立に、前記一般式（４２）におけるR_{401}～R_{411}と同義であり、

X_4は、酸素原子、NR_{801}、又はC（R_{802}）（R_{803}）であり、

R_{801}、R_{802}及びR_{803}は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であり、

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

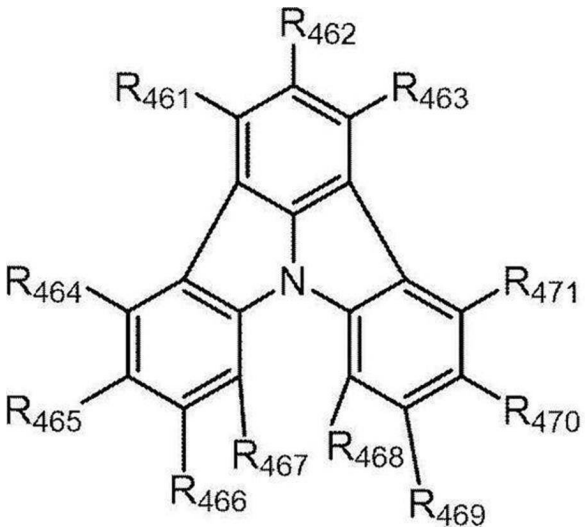
R_{802}が複数存在する場合、複数のR_{802}は、互いに同一であるか又は異なり、

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

【０３６０】

一実施形態において、前記一般式（４２）で表される化合物は、R_{401}～R_{411}のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、又は互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成し、当該実施形態について、以下一般式（４５）で表される化合物として詳述する。

【０３６１】
（一般式（４５）で表される化合物）
一般式（４５）で表される化合物について説明する。
【０３６２】
【化９０】



(45)

【０３６３】
（前記一般式（４５）において、
R_{461}とR_{462}とからなる組、R_{462}とR_{463}とからなる組、R_{464}とR_{465}とからなる組、R_{465}とR_{466}とからなる組、R_{466}とR_{467}とからなる組、R_{468}とR_{469}とからなる組、R_{469}とR_{470}とからなる組、及び、R_{470}とR_{471}とからなる組からなる群から選択される組のうち２以上は、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環又は置換もしくは無置換の縮合環を形成し、
ただし、
R_{461}とR_{462}とからなる組及びR_{462}とR_{463}とからなる組；
R_{464}とR_{465}とからなる組及びR_{465}とR_{466}とからなる組；
R_{465}とR_{466}とからなる組及びR_{466}とR_{467}とからなる組；
R_{468}とR_{469}とからなる組及びR_{469}とR_{470}とからなる組；並びに
R_{469}とR_{470}とからなる組及びR_{470}とR_{471}とからなる組が、同時に環を形成することはなく、
R_{461}～R_{471}が形成する２つ以上の環は、互いに同一であるか、又は異なり、
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR_{461}～R_{471}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、
－Ｏ－（R_{904}）で表される基、
－Ｓ－（R_{905}）で表される基、
－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０３６４】

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

【０３６５】

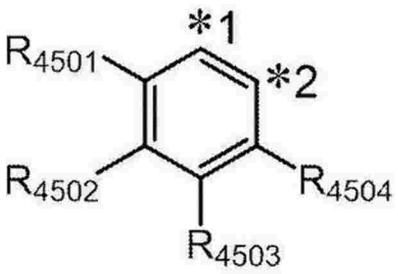
前記一般式（４５）で表される化合物における上記の環構造の数は、例えば、２つ、３つ、又は４つである。２つ以上の環構造は、それぞれ前記一般式（４５）の母骨格上の同一のベンゼン環上に存在してもよいし、異なるベンゼン環上に存在してもよい。例えば、環構造を３つ有する場合、前記一般式（４５）の３つのベンゼン環のそれぞれに１つずつ環構造が存在してもよい。

【０３６６】

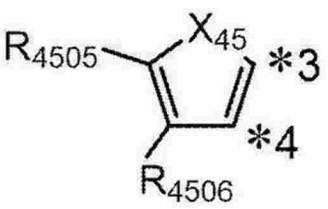
前記一般式（４５）で表される化合物における上記の環構造としては、例えば、下記一般式（４５１）～（４６０）で表される構造等が挙げられる。

【０３６７】

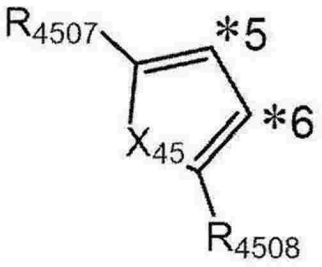
【化９１】



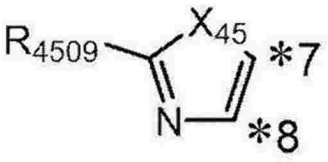
(451)



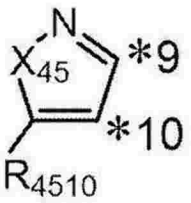
(452)



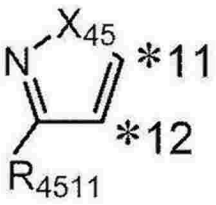
(453)



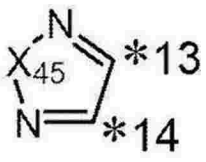
(454)



(455)



(456)



(457)

【０３６８】

（前記一般式（４５１）～（４５７）において、

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

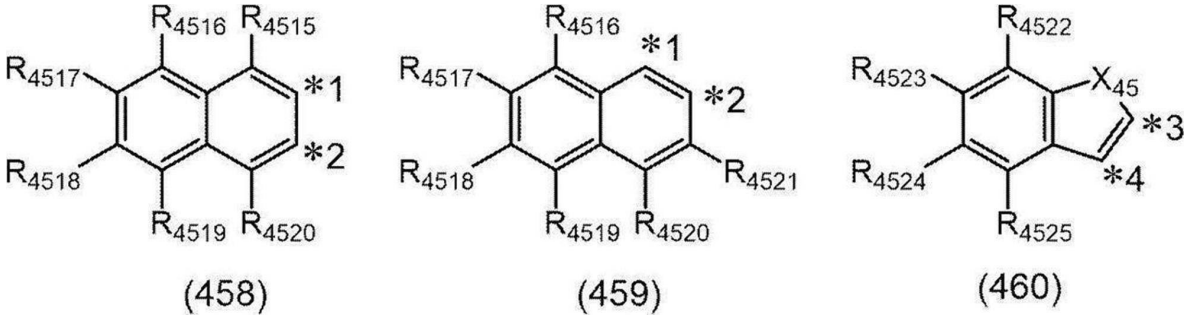
R_nが結合する環形成炭素原子は、＊１と＊２、＊３と＊４、＊５と＊６、＊７と＊８、＊９と＊１０、＊１１と＊１２及び＊１３と＊１４が表す２つの環形成炭素原子のどちらであってもよく、

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

R_{4501}～R_{4506}及びR_{4512}～R_{4513}のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR_{4501}～R_{4514}は、それぞれ独立に、前記一般式（４５）におけるR_{461}～R_{471}と同義である。）

【０３６９】

【化９２】



【０３７０】

（前記一般式（４５８）～（４６０）において、
＊１と＊２、及び＊３と＊４のそれぞれは、R_nとR_{n+1}が結合する前記２つの環形成炭素原子を表し、
R_nが結合する環形成炭素原子は、＊１と＊２、又は＊３と＊４が表す２つの環形成炭素原子のどちらであってもよく、
X_{45}は、Ｃ（R_{4512}）（R_{4513}）、NR_{4514}、酸素原子又は硫黄原子であり、
R_{4512}～R_{4513}及びR_{4515}～R_{4525}のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR_{4512}～R_{4513}、R_{4515}～R_{4521}及びR_{4522}～R_{4525}、並びにR_{4514}は、それぞれ独立に、前記一般式（４５）におけるR_{461}～R_{471}と同義である。）

【０３７１】

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

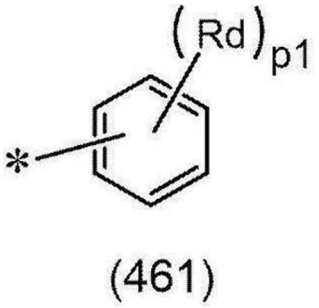
【０３７２】

（ｉ）前記一般式（４５）において、R_nとR_{n+1}により形成される環構造が置換基を有する場合の置換基、
（ｉｉ）前記一般式（４５）において、環構造を形成しないR_{461}～R_{471}、及び
（ｉｉｉ）前記一般式（４５１）～（４６０）におけるR_{4501}～R_{4514}、R_{4515}～R_{4525}は、好ましくは、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、

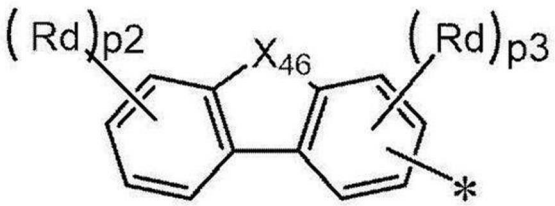
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基、又は
下記一般式（４６１）～一般式（４６４）で表される基からなる群から選択される基のいずれかである。

【０３７３】

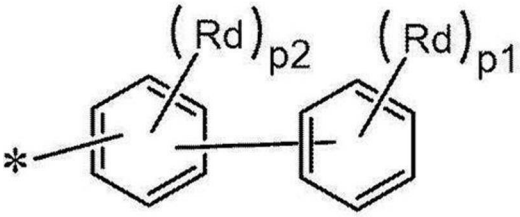
【化９３】



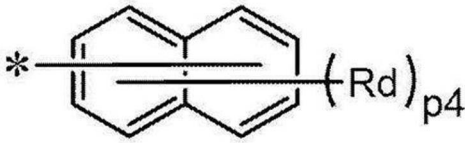
(461)



(462)



(463)



(464)

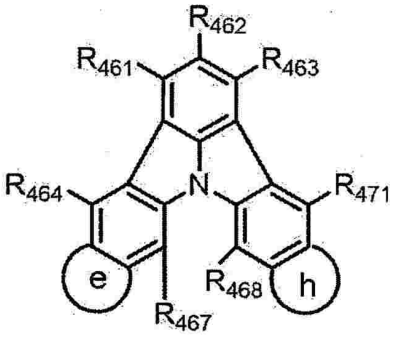
【０３７４】

（前記一般式（４６１）～（４６４）中、
R_dは、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、
－Ｏ－（R_{904}）で表される基、
－Ｓ－（R_{905}）で表される基、
－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
X_{46}は、Ｃ（R_{801}）（R_{802}）、NR_{803}、酸素原子又は硫黄原子であり、
R_{801}、R_{802}及びR_{803}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であり、

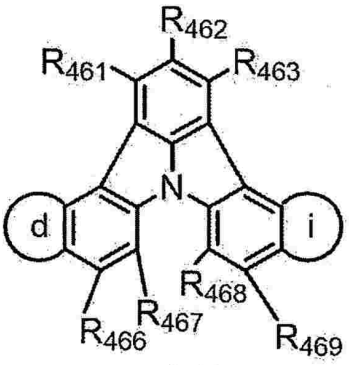
Ｒ８０１が複数存在する場合、複数のＲ８０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０２が複数存在する場合、複数のＲ８０２は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０３が複数存在する場合、複数のＲ８０３は、互いに同一であるか又は異なり、
ｐ１は、５であり、
ｐ２は、４であり、
ｐ３は、３であり、
ｐ４は、７であり、
前記一般式（４６１）～（４６４）中の＊は、それぞれ独立に、環構造との結合位置を示す。）
発光性化合物において、Ｒ９０１～Ｒ９０７は、前述のように定義した通りである。

【０３７５】
一実施形態において、前記一般式（４５）で表される化合物は、下記一般式（４５－１）～（４５－６）のいずれかで表される。

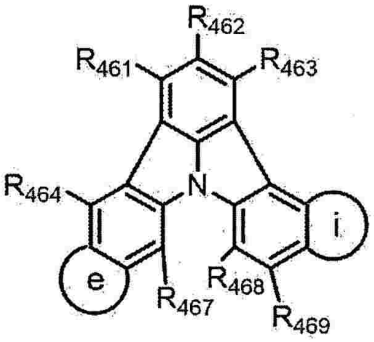
【０３７６】
【化９４】



(45-1)

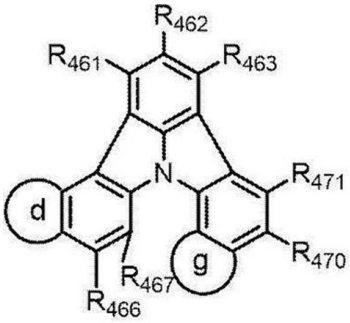


(45-2)

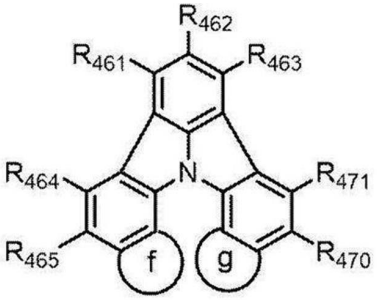


(45-3)

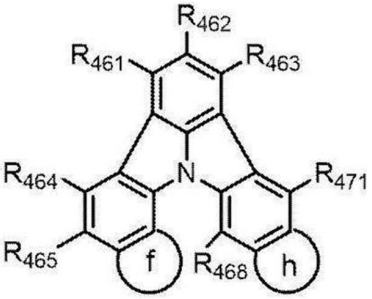
【０３７７】
【化９５】



(45-4)



(45-5)

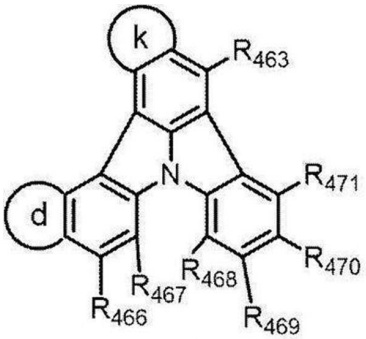


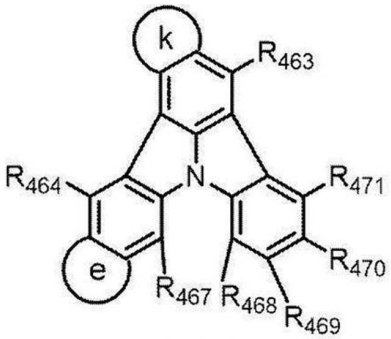
(45-6)

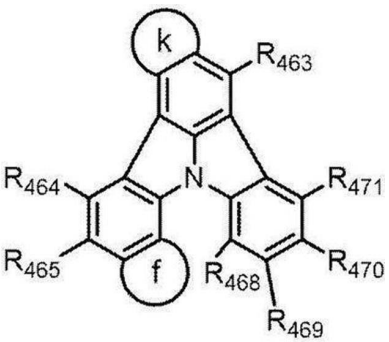
【０３７８】
（前記一般式（４５－１）～（４５－６）において、
環ｄ～ｉは、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の単環又は置換もしくは無置換の縮合環であり、
Ｒ４６１～Ｒ４７１は、それぞれ独立に、前記一般式（４５）におけるＲ４６１～Ｒ４７１と同義である。）

【０３７９】
一実施形態において、前記一般式（４５）で表される化合物は、下記一般式（４５－７）～（４５－１２）のいずれかで表される。

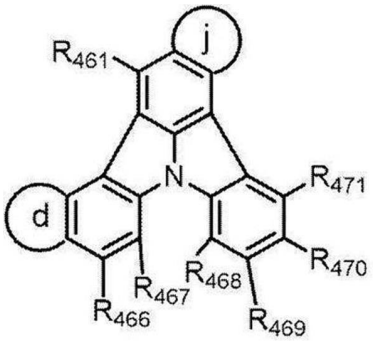
【０３８０】
【化９６】

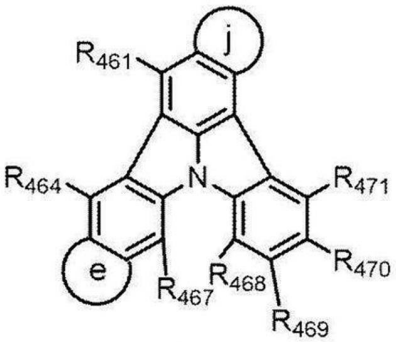

(45-7)

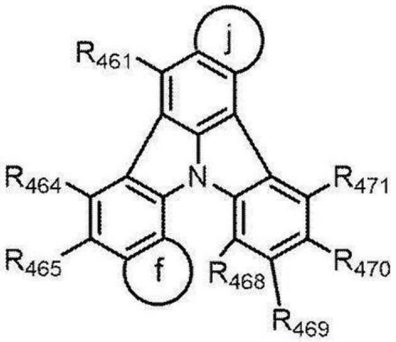

(45-8)


(45-9)

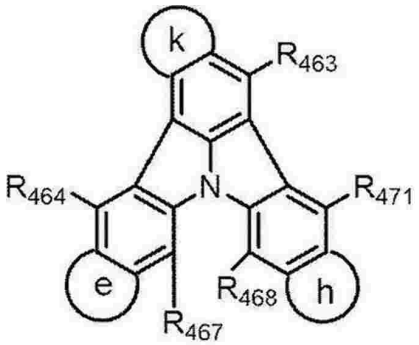
【０３８１】
【化９７】

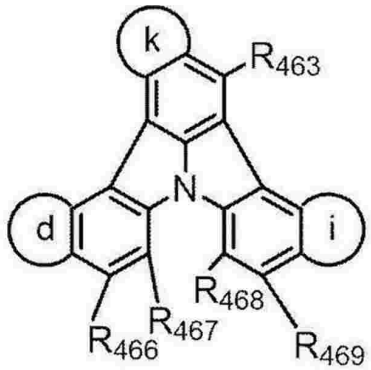

(45-10)

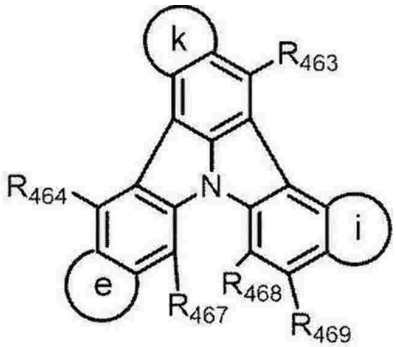

(45-11)


(45-12)

【０３８２】
（前記一般式（４５－７）～（４５－１２）において、
環ｄ～ｆ、ｋ、ｊは、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の単環又は置換もしくは無置換の縮合環であり、
Ｒ４６１～Ｒ４７１は、それぞれ独立に、前記一般式（４５）におけるＲ４６１～Ｒ４７１と同義である。）
【０３８３】
一実施形態において、前記一般式（４５）で表される化合物は、下記一般式（４５－１３）～（４５－２１）のいずれかで表される。
【０３８４】
【化９８】

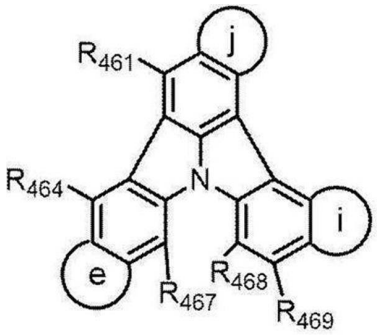

(45-13)


(45-14)

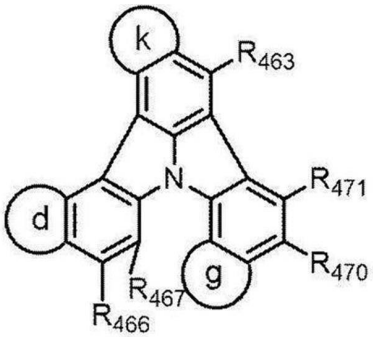

(45-15)

【０３８５】

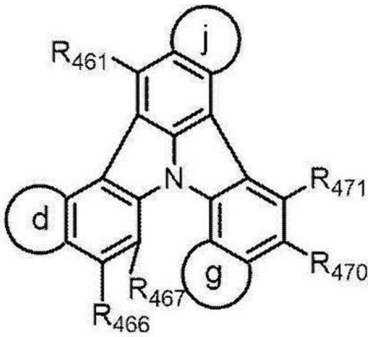
【化９９】



(45-16)



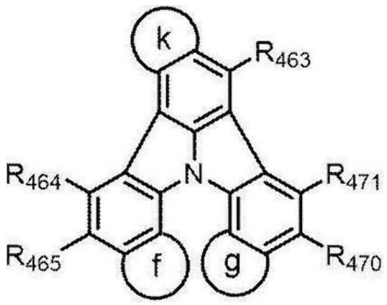
(45-17)



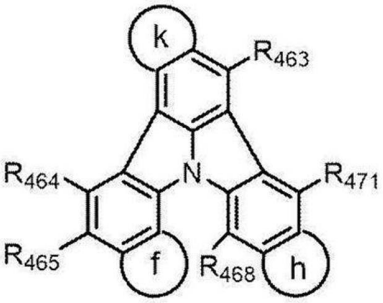
(45-18)

【０３８６】

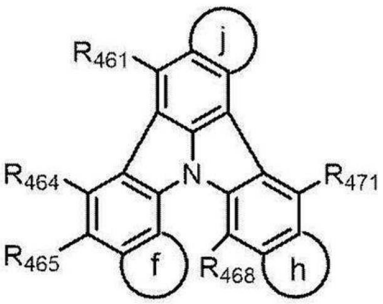
【化１００】



(45-19)



(45-20)



(45-21)

【０３８７】

（前記一般式（４５－１３）～（４５－２１）において、

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

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

【０３８８】

前記環ｇ又は前記環ｈがさらに置換基を有する場合の置換基としては、例えば、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、

前記一般式（４６１）で表される基、

前記一般式（４６３）で表される基、又は

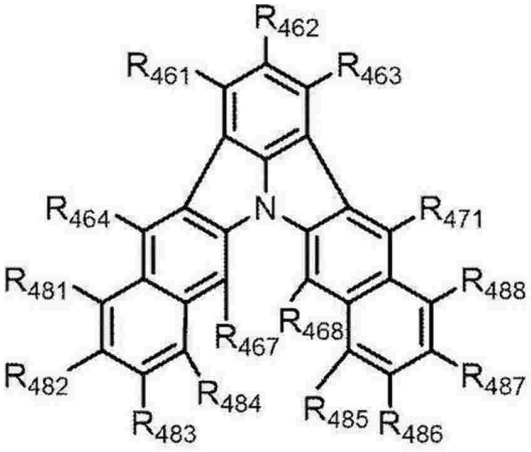
前記一般式（４６４）で表される基が挙げられる。

【０３８９】

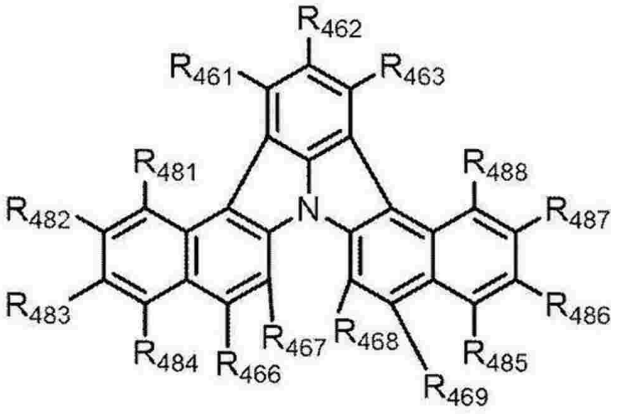
一実施形態において、前記一般式（４５）で表される化合物は、下記一般式（４５－２２）～（４５－２５）のいずれかで表される。

【０３９０】

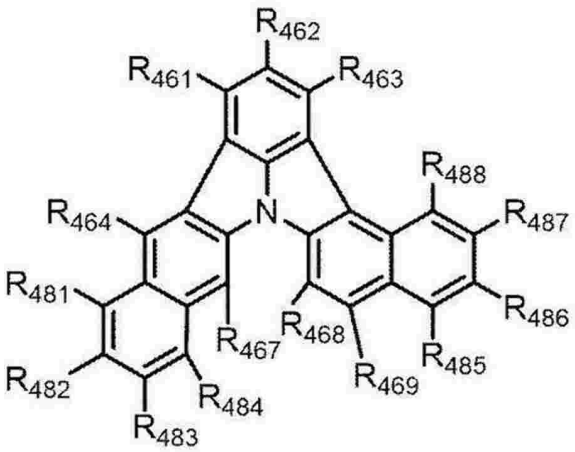
【化１０１】



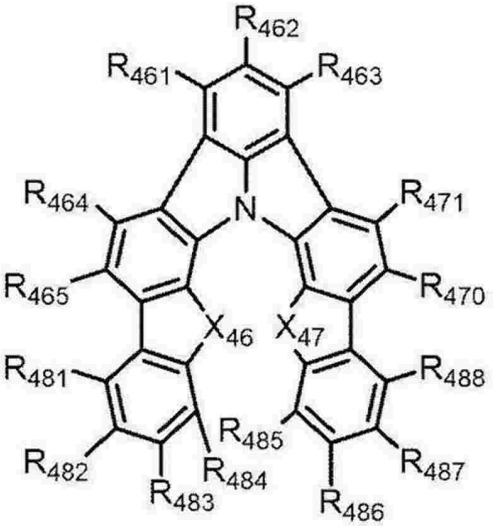
(45-22)



(45-23)



(45-24)



(45-25)

【０３９１】

（前記一般式（４５－２２）～（４５－２５）において、

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

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

Ｒ８０１、Ｒ８０２及びＲ８０３は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であり、

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

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

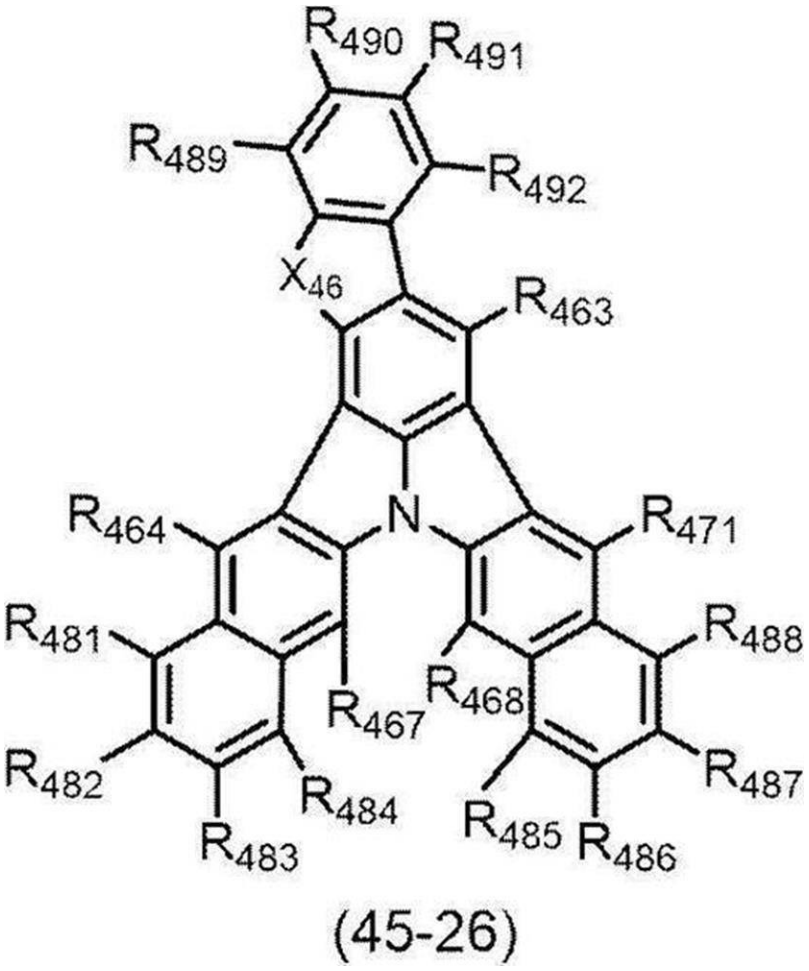
Ｒ８０３が複数存在する場合、複数のＲ８０３は、互いに同一であるか又は異なる。）

【０３９２】

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

【０３９３】

【化１０２】



(45-26)

【０３９４】

（前記一般式（４５－２６）において、

Ｘ４６は、Ｃ（Ｒ８０１）（Ｒ８０２）、ＮＲ８０３、酸素原子又は硫黄原子であり、

Ｒ４６３、Ｒ４６４、Ｒ４６７、Ｒ４６８、Ｒ４７１、及びＲ４８１～Ｒ４９２は、それぞれ独立に、前記一般式（４５）におけるＲ４６１～Ｒ４７１と同義である。

Ｒ８０１、Ｒ８０２及びＲ８０３は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であり、

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

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

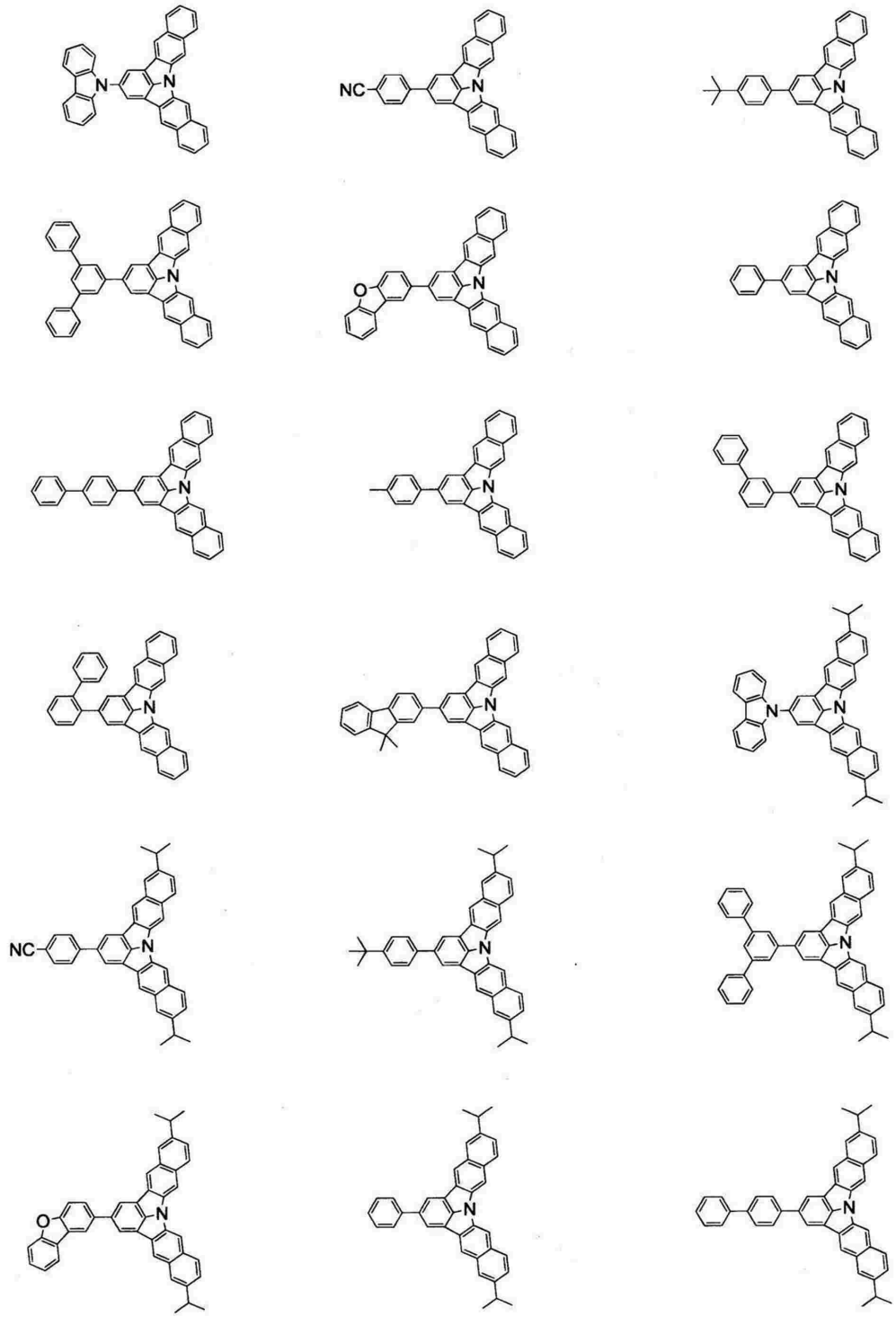
Ｒ８０３が複数存在する場合、複数のＲ８０３は、互いに同一であるか又は異なる。）

【０３９５】

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

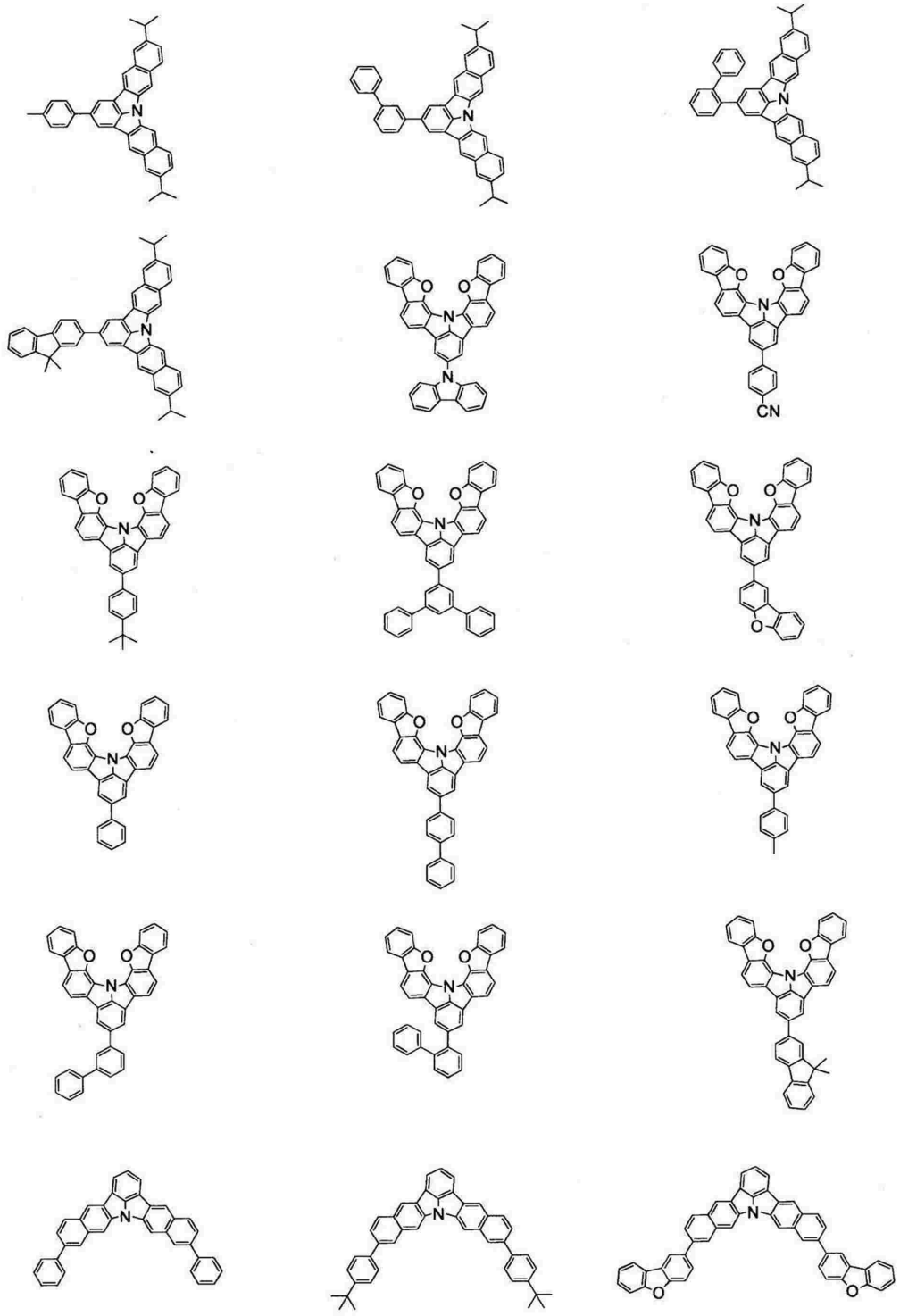
【０３９６】

【化１０３】



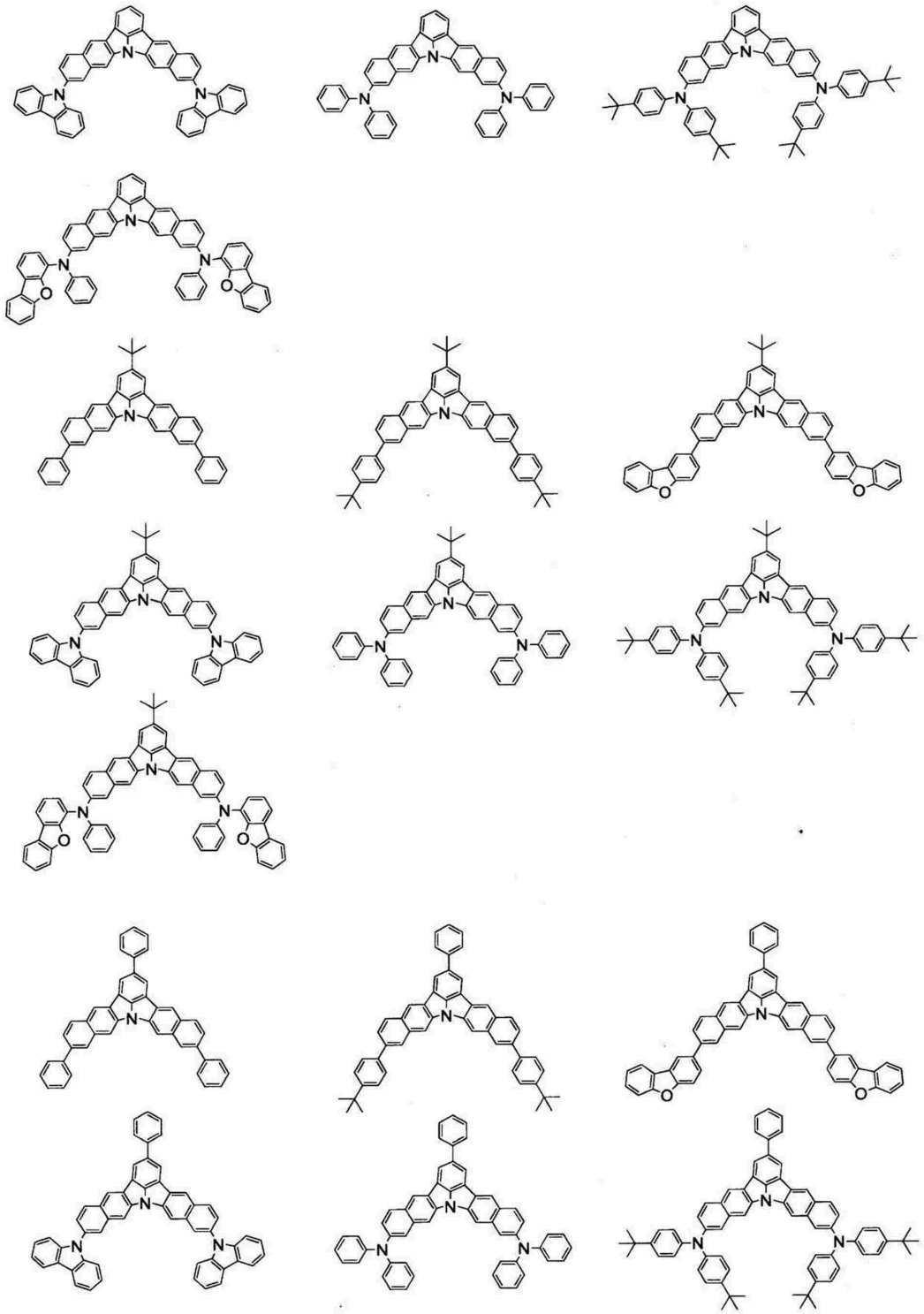
【０３９７】

【化１０４】



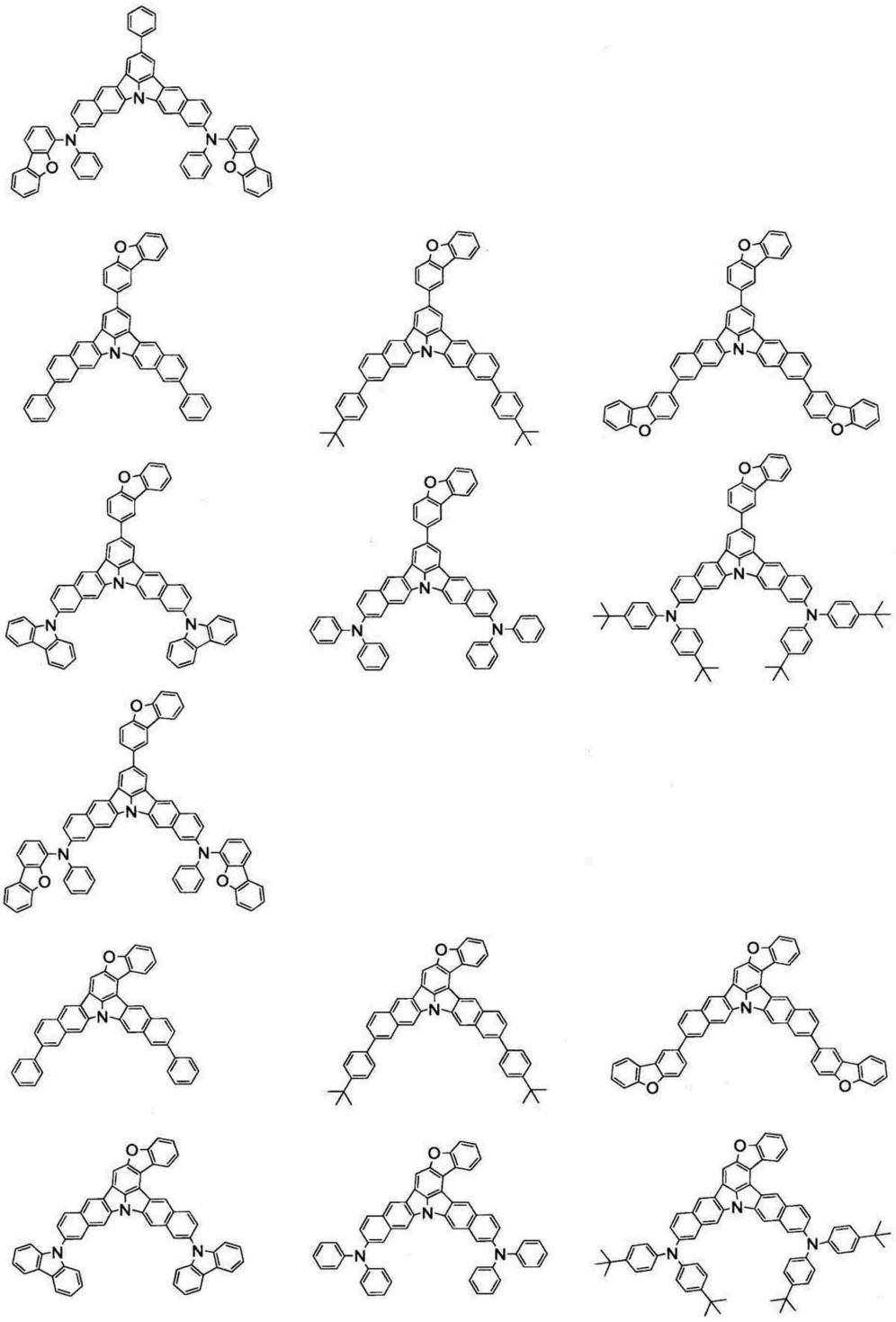
【０３９８】

【化１０５】



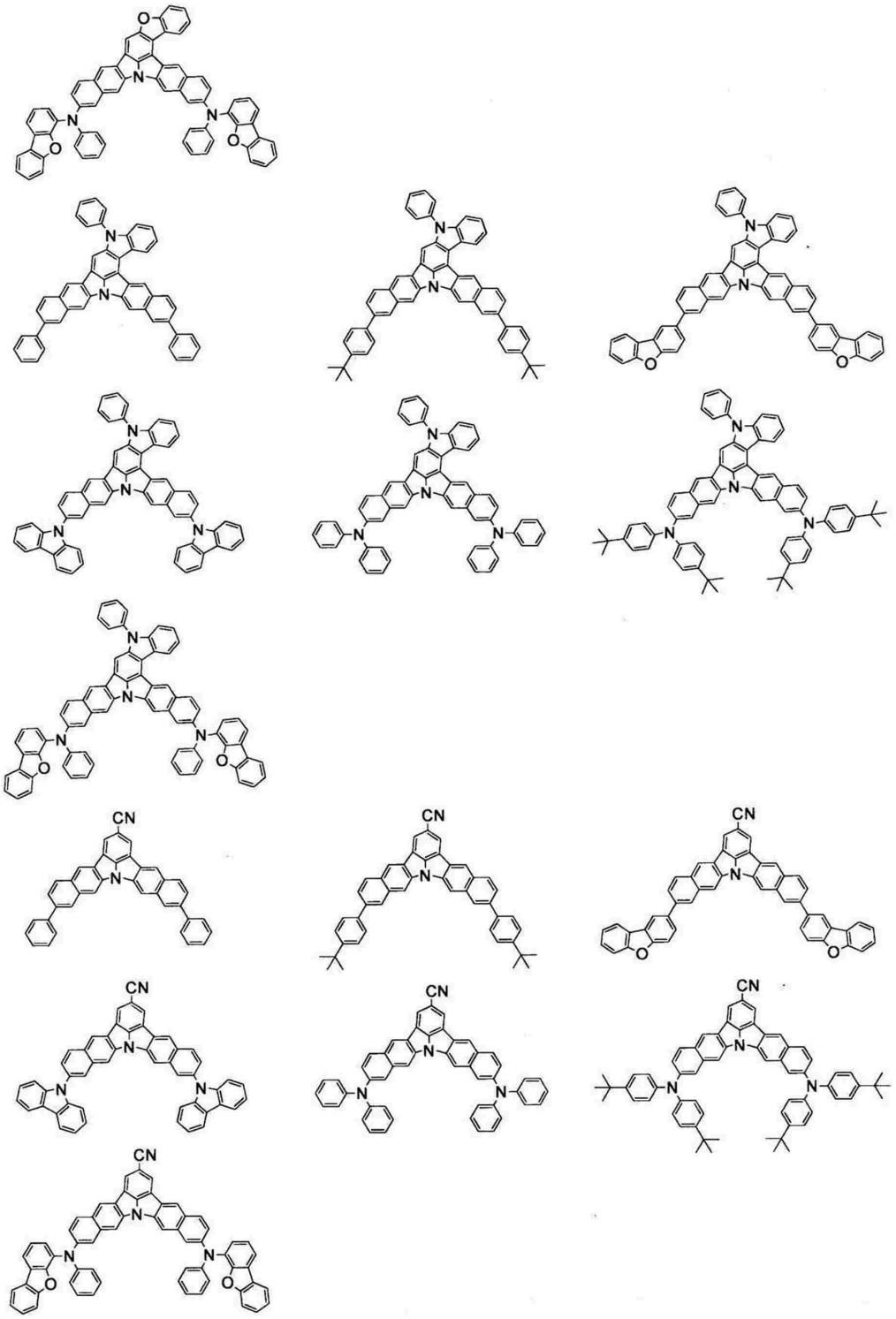
【０３９９】

【化１０６】



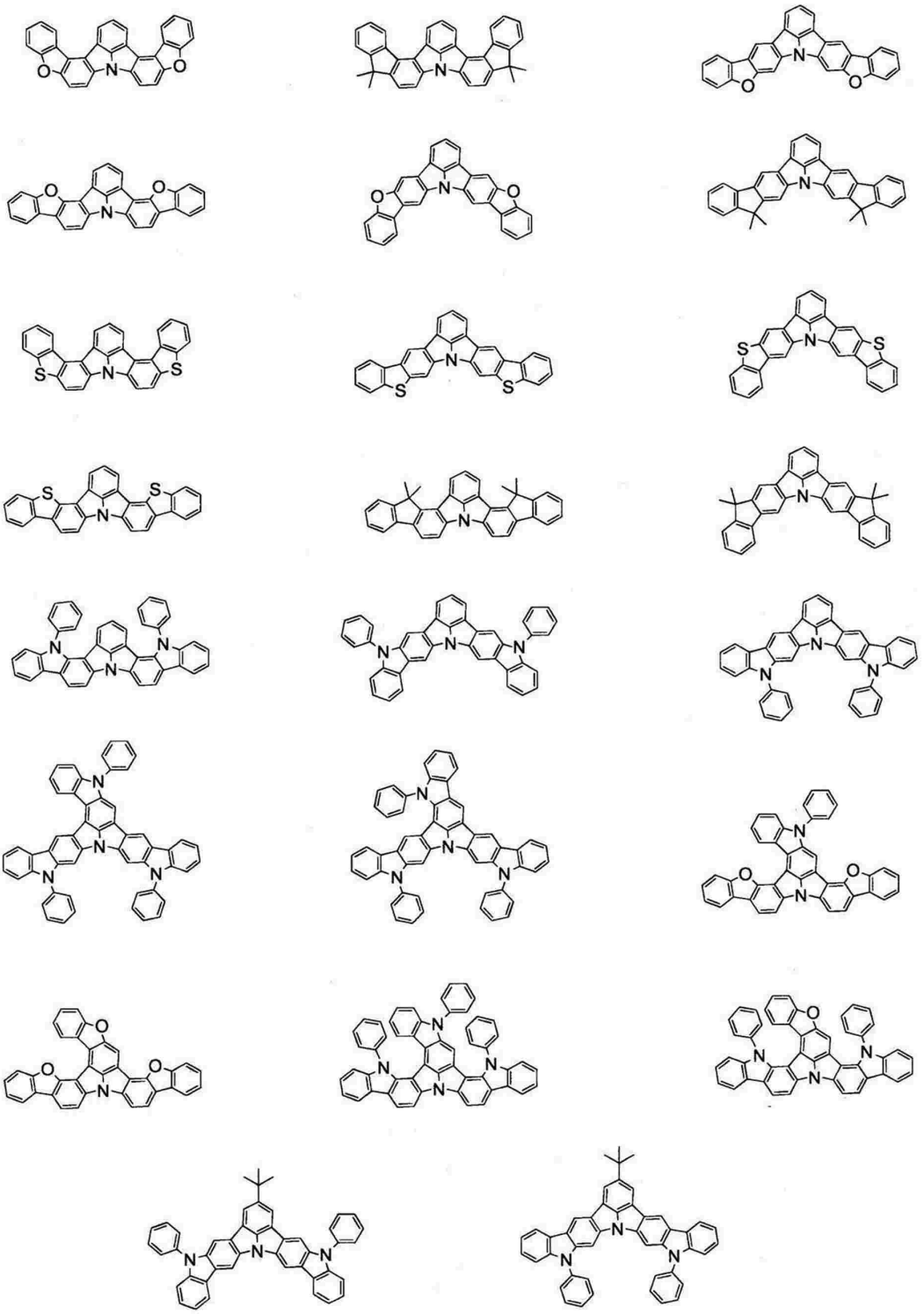
【０４００】

【化１０７】



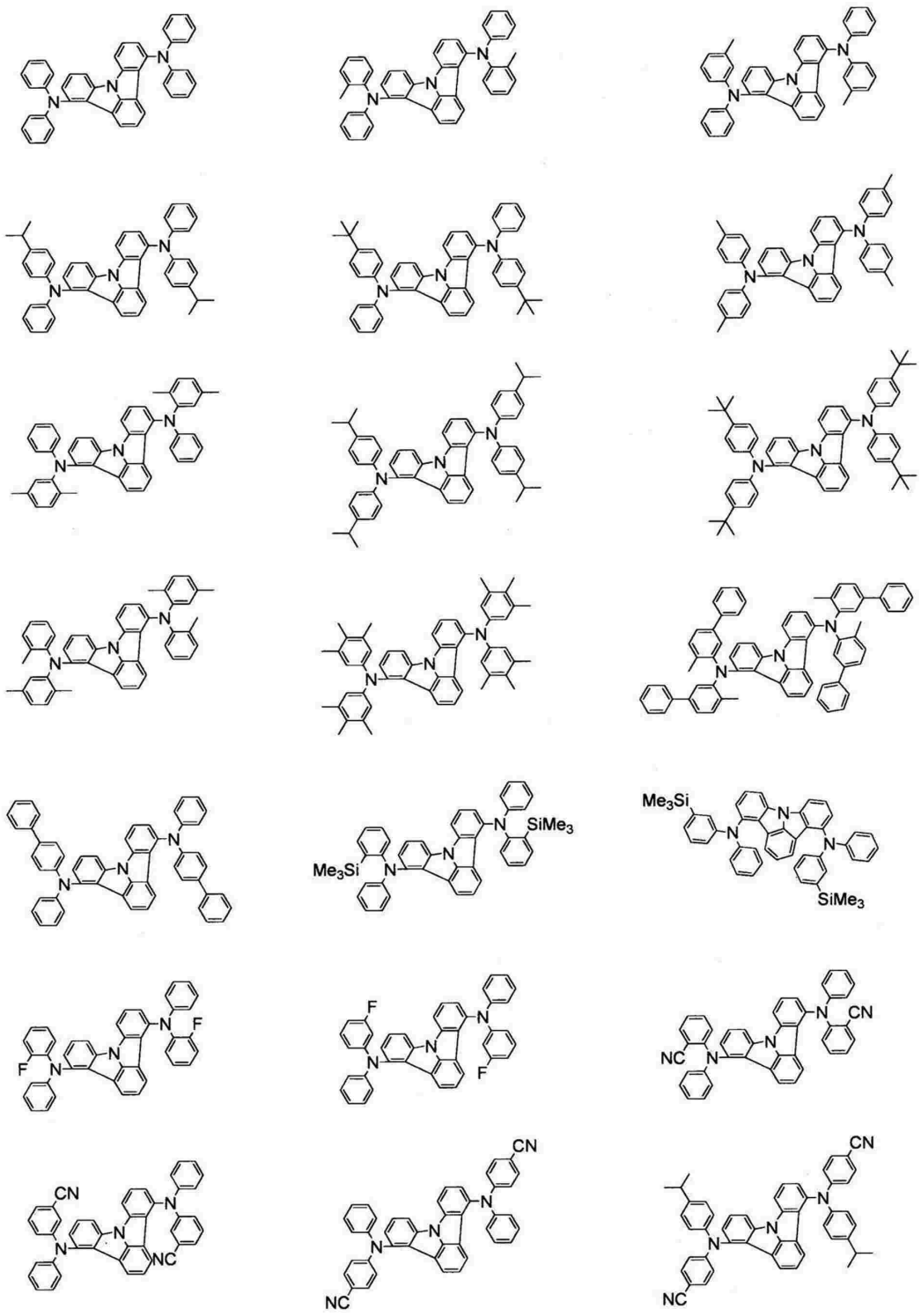
【０４０１】

【化１０８】



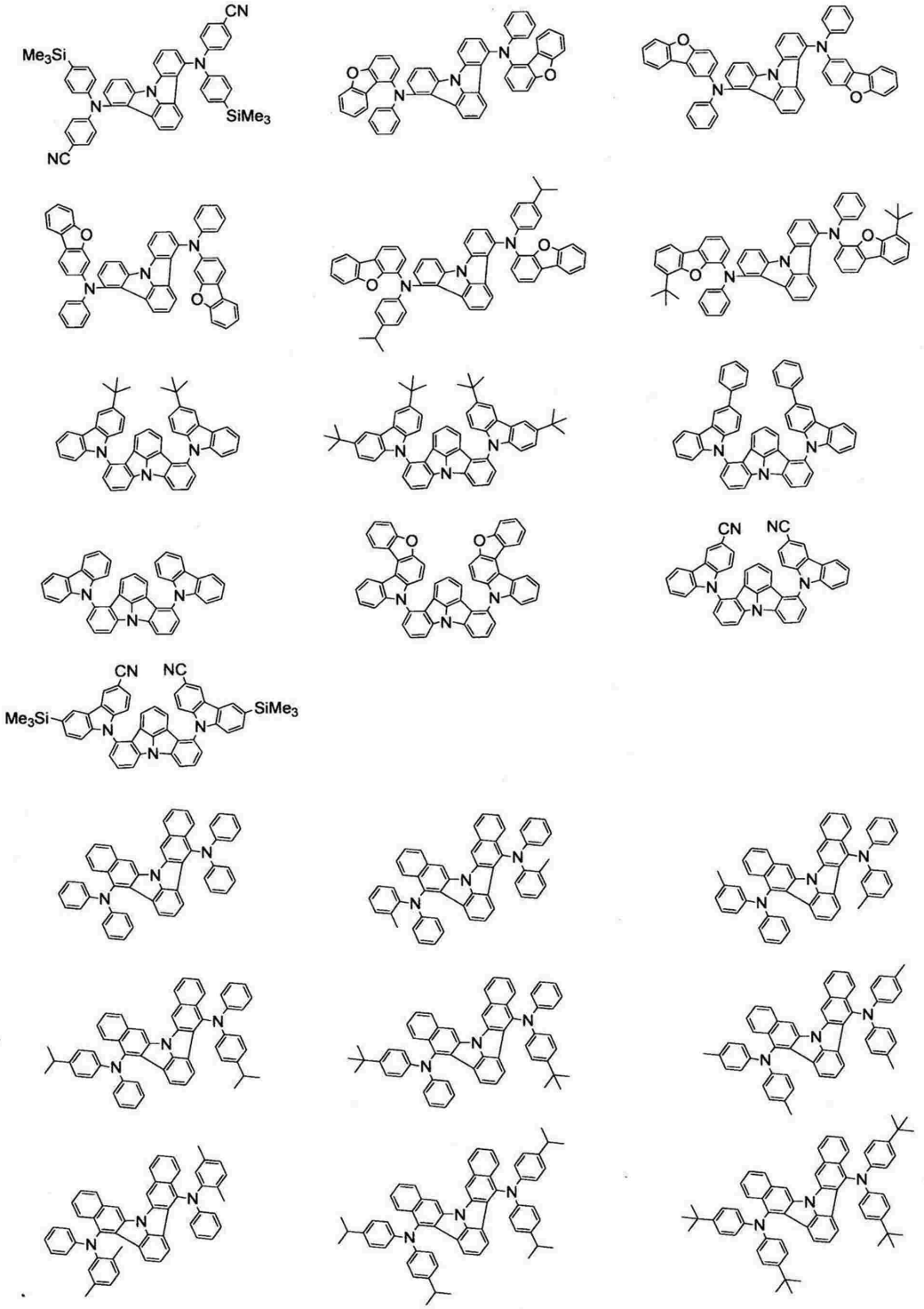
【０４０２】

【化１０９】



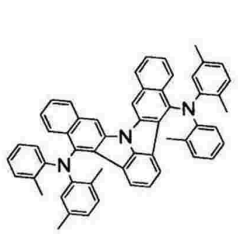
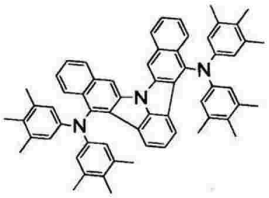
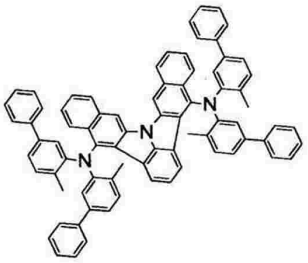
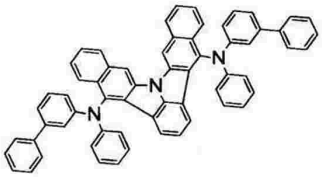
【０４０３】

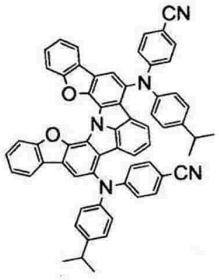
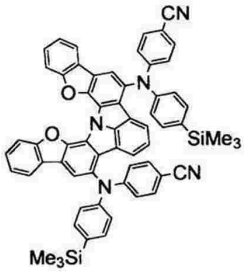
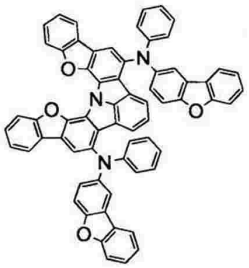
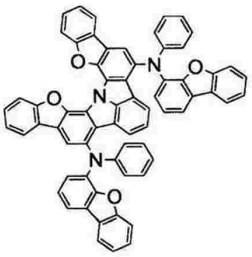
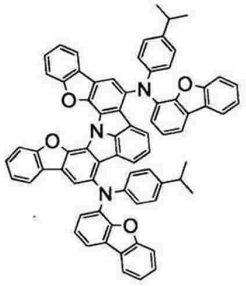
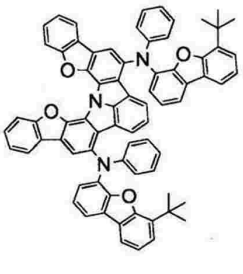
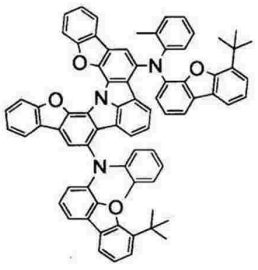
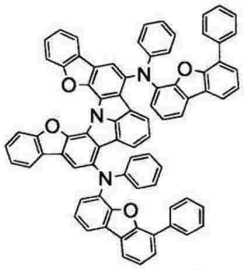
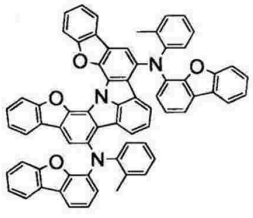
【化１１０】



【０４０４】

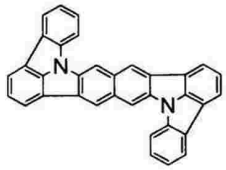
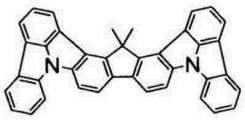
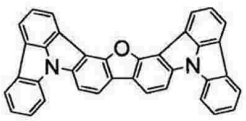
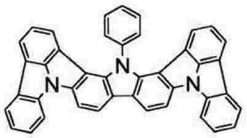
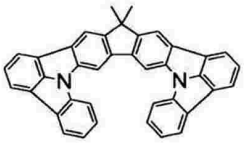
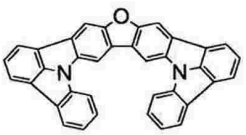
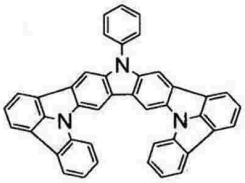
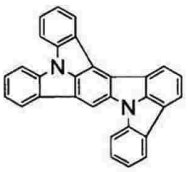
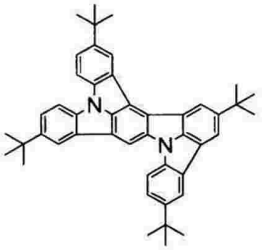
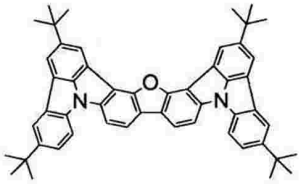
【化１１１】

【０４０５】

【化１１２】

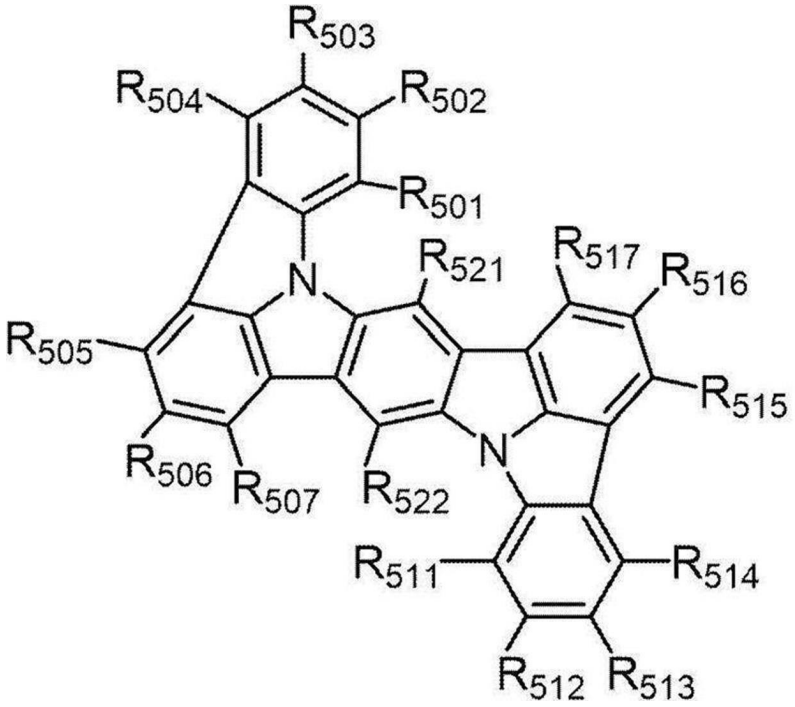
【０４０６】

（一般式（５）で表される化合物）

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

【０４０７】

【化１１３】



(5)

【０４０８】

（前記一般式（５）において、

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

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないＲ５０１～Ｒ５０７及びＲ５１１～Ｒ５１７は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。

Ｒ５２１及びＲ５２２は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

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

【０４０９】

「Ｒ５０１～Ｒ５０７及びＲ５１１～Ｒ５１７のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組」は、例えば、Ｒ５０１とＲ５０２からなる組、Ｒ５０２とＲ５０３からなる組、Ｒ５０３とＲ５０４からなる組、Ｒ５０５とＲ５０６からなる組、Ｒ５０６とＲ５０７からなる組、Ｒ５０１とＲ５０２とＲ５０３からなる組等の組合せである。

【０４１０】

一実施形態において、Ｒ５０１～Ｒ５０７及びＲ５１１～Ｒ５１７の少なくとも１つ、好ましくは２つが－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基である。

【０４１１】

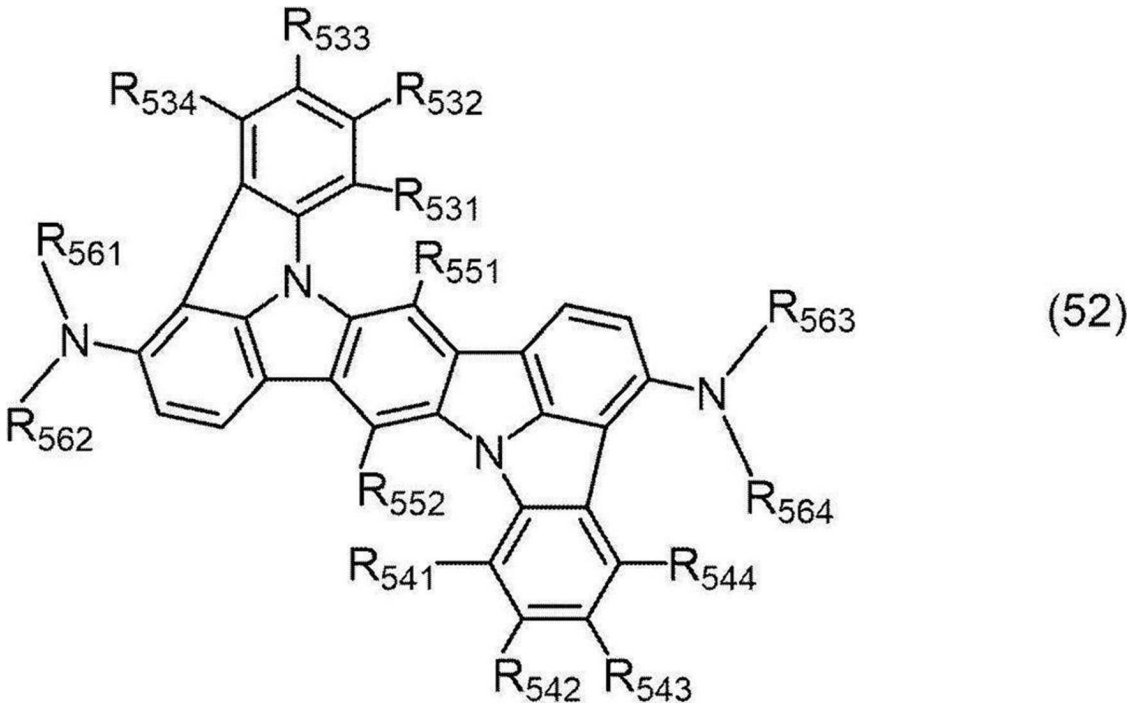
一実施形態においては、Ｒ５０１～Ｒ５０７及びＲ５１１～Ｒ５１７は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。

【０４１２】

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

【０４１３】

【化１１４】



【０４１４】

（前記一般式（５２）において、
Ｒ５３１～Ｒ５３４及びＲ５４１～Ｒ５４４のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

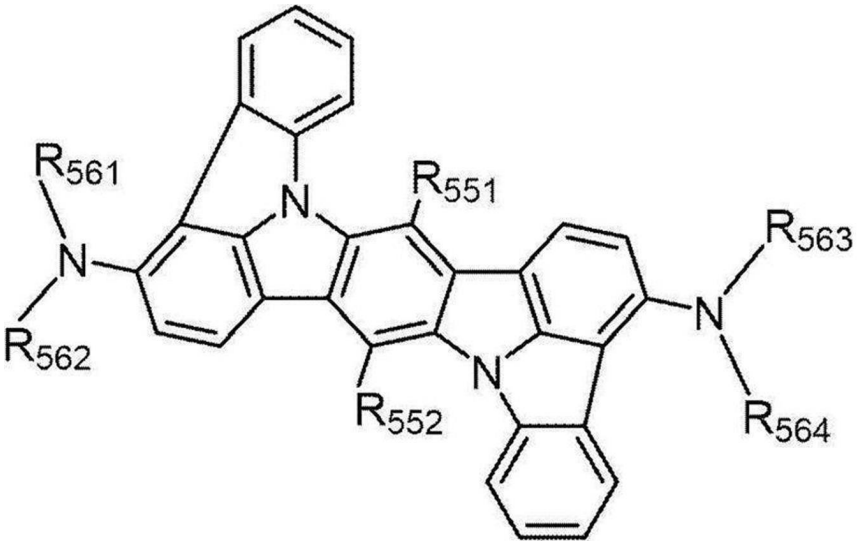
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR_{531}～R_{534}、R_{541}～R_{544}、並びにR_{551}及びR_{552}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
R_{561}～R_{564}は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０４１５】

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

【０４１６】

【化１１５】



(53)

【０４１７】

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

【０４１８】

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

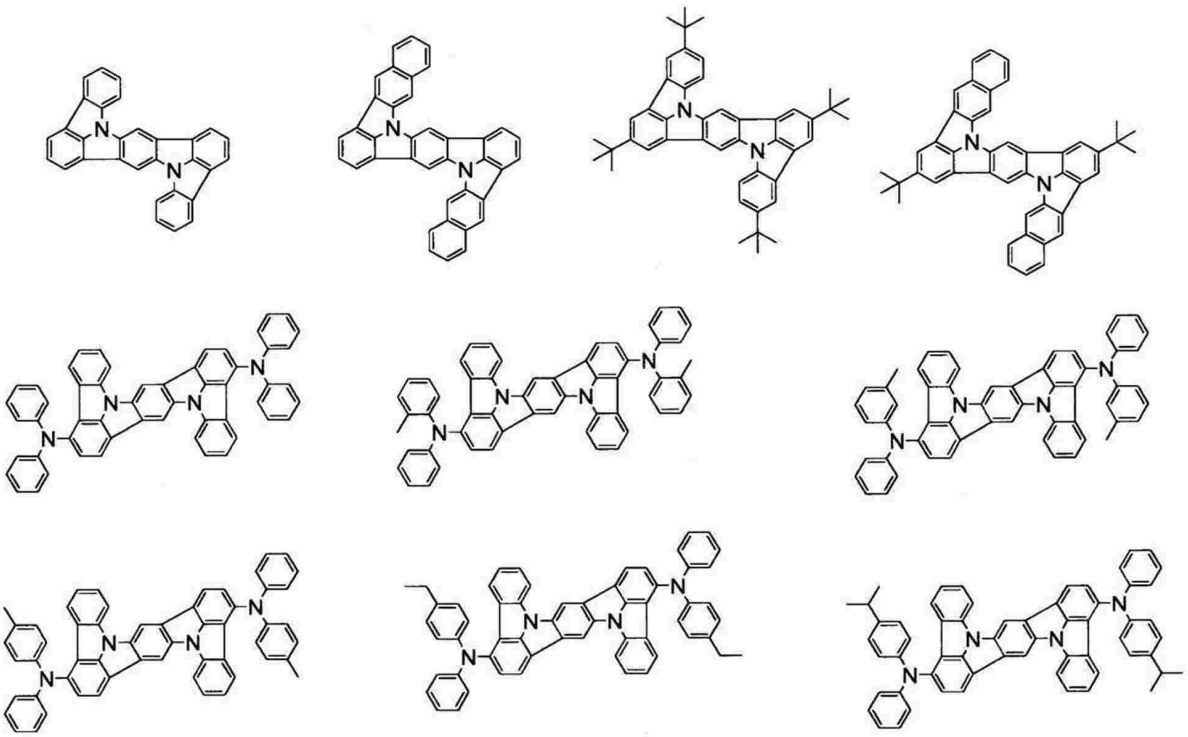
【０４１９】

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

【０４２０】

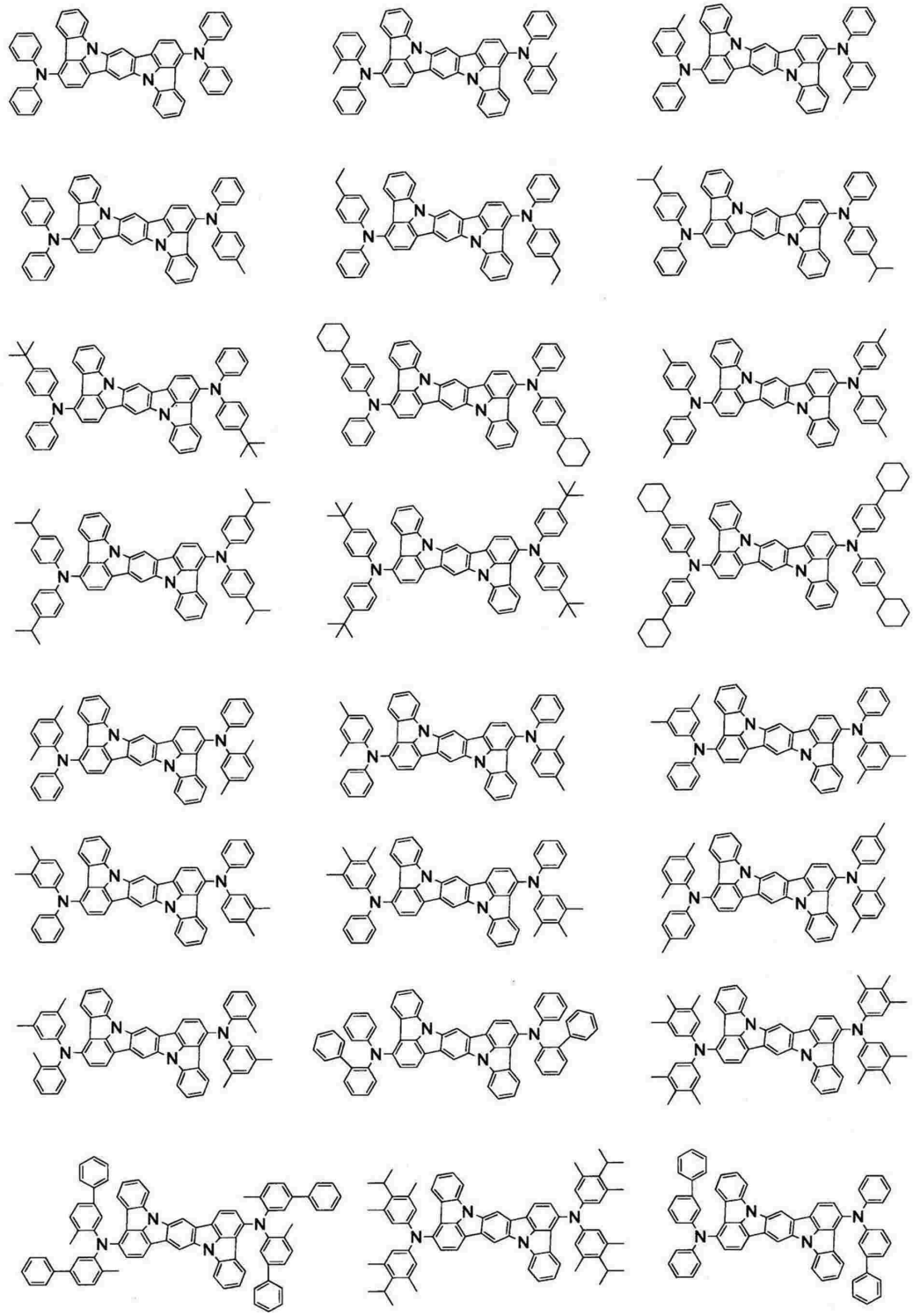
一実施形態においては、前記一般式（５）、一般式（５２）及び一般式（５３）における、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。

【０４２１】
前記一般式（５）で表される化合物としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。
【０４２２】
【化１１６】



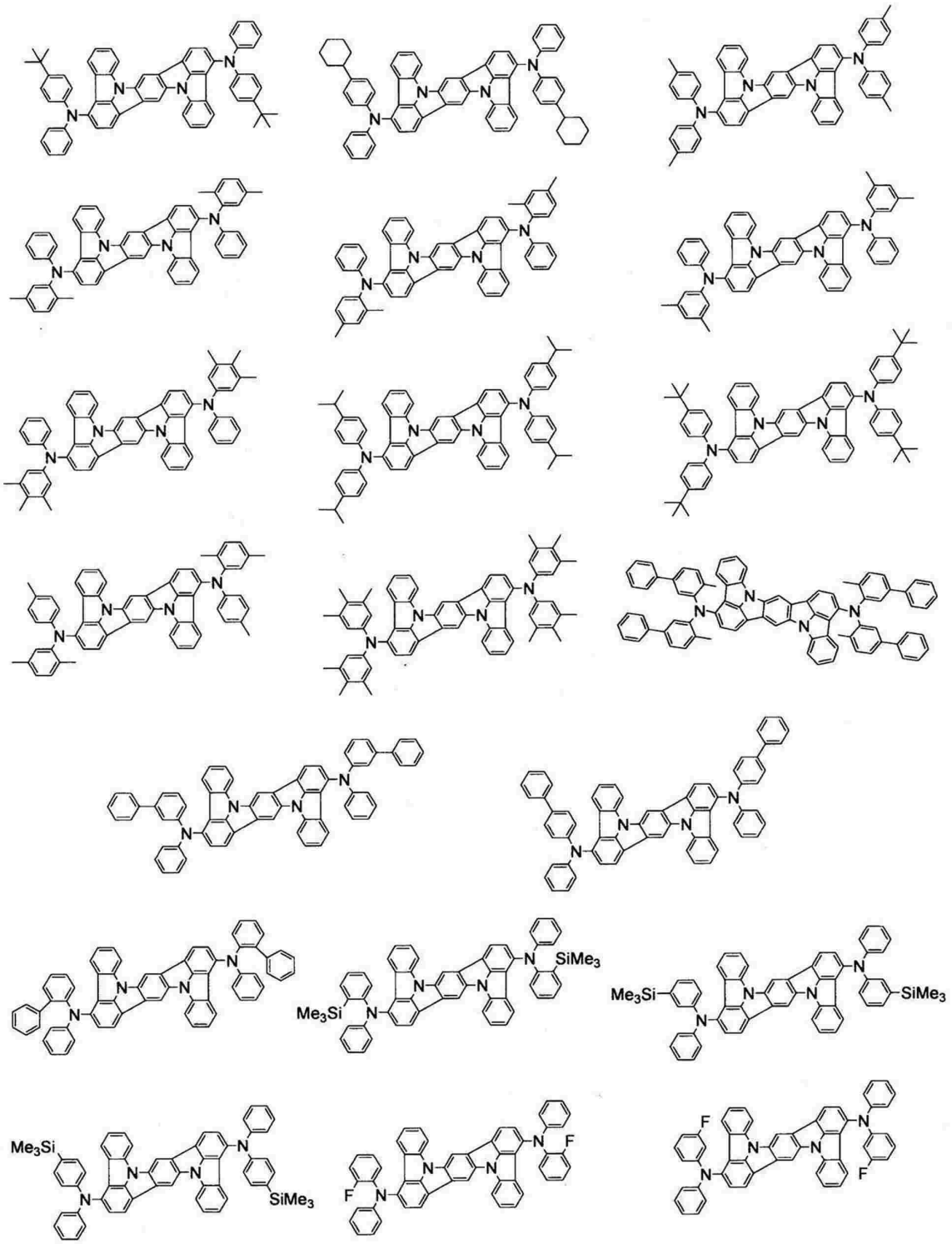
【０４２３】

【化１１７】



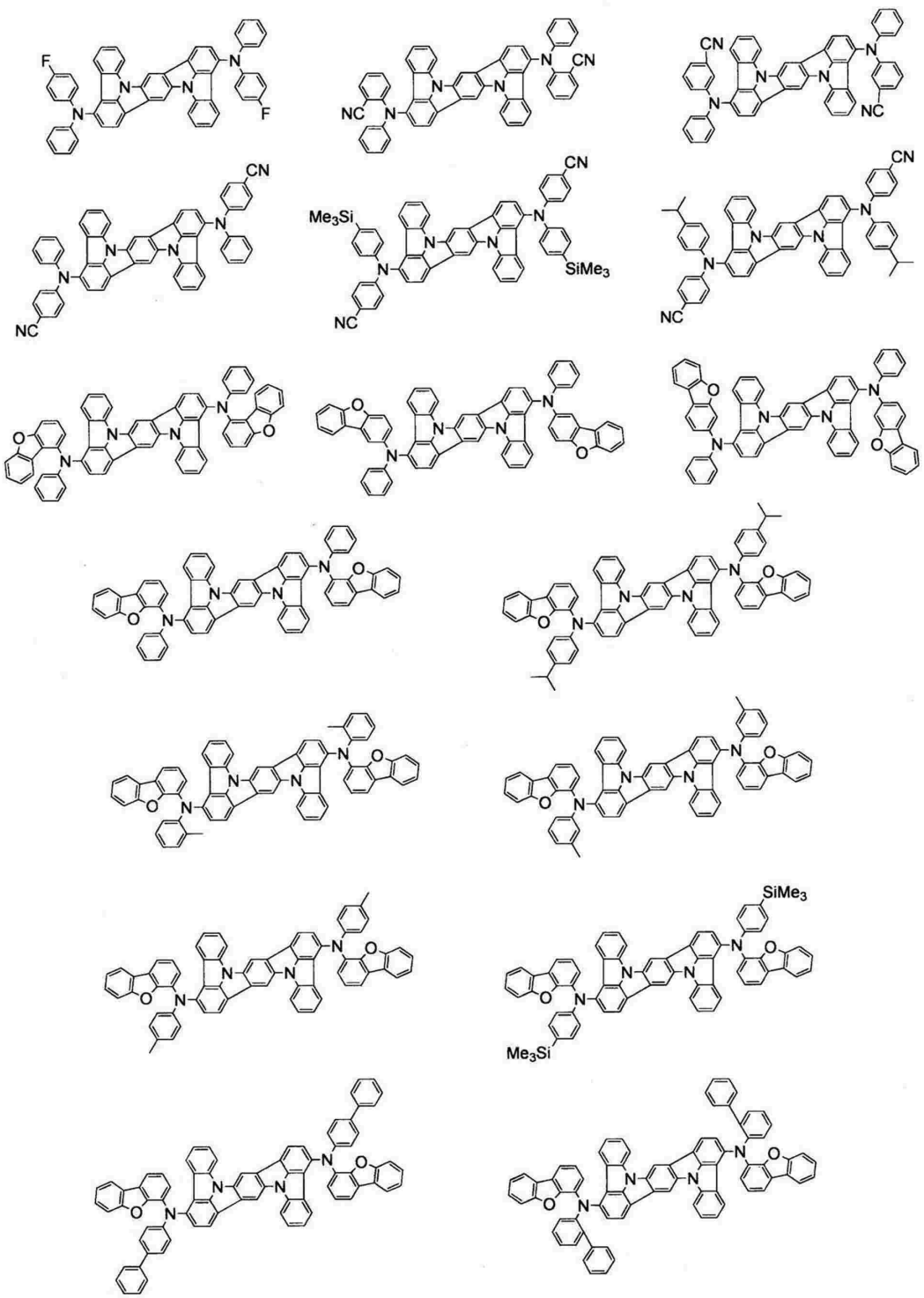
【０４２４】

【化１１８】



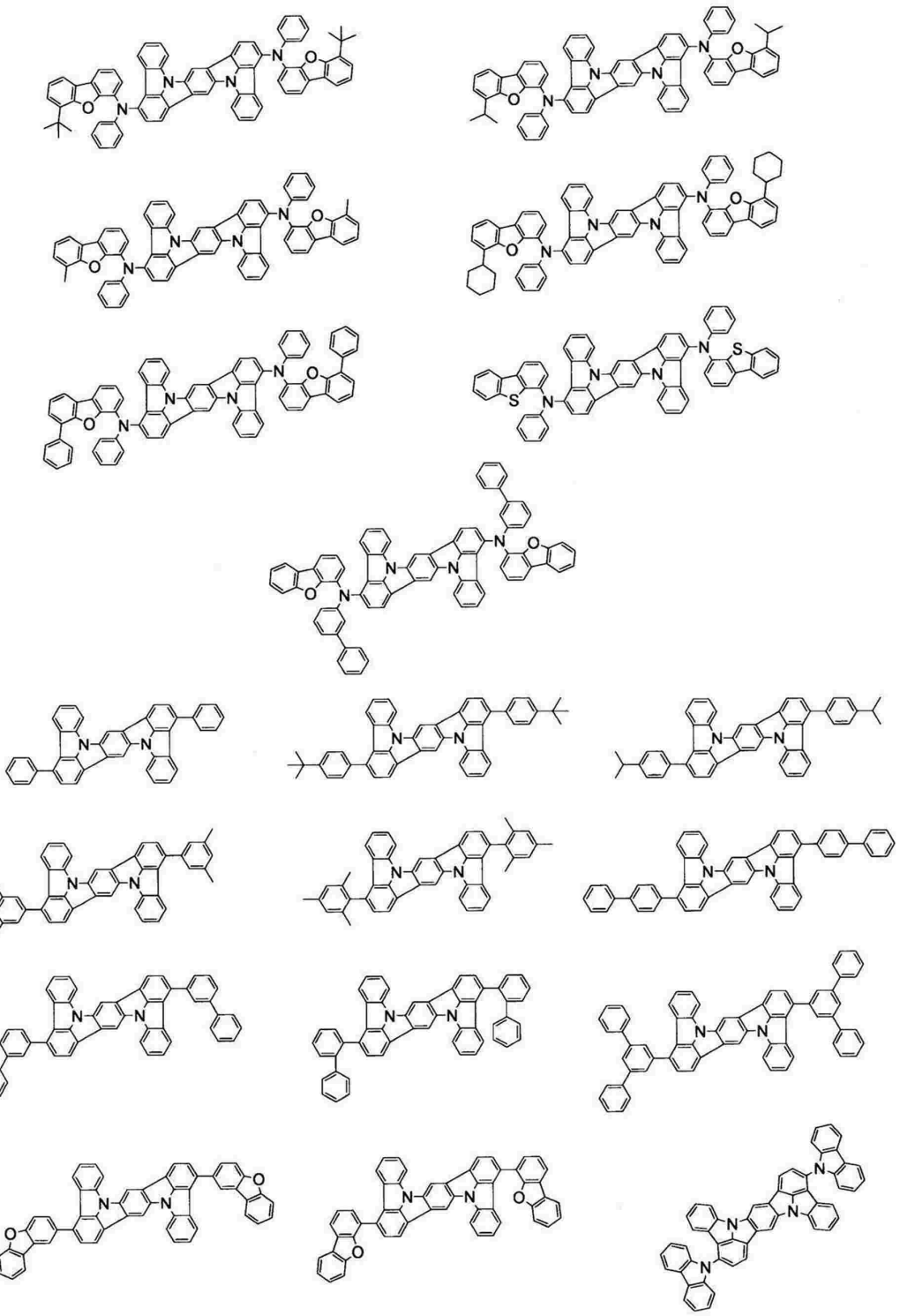
【０４２５】

【化１１９】



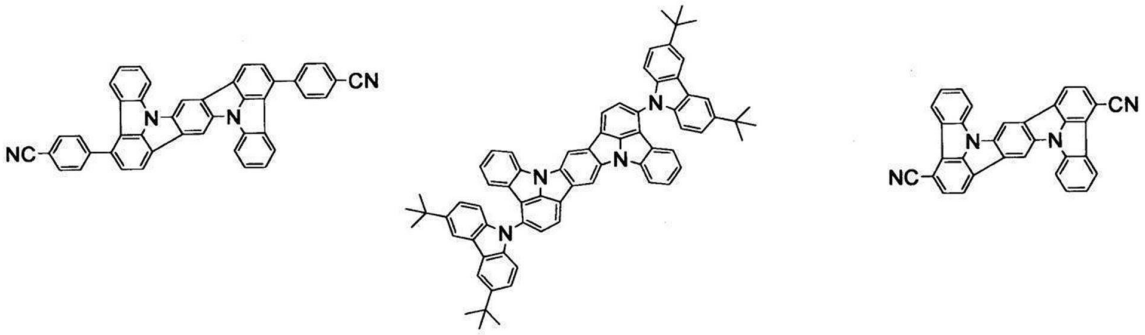
【０４２６】

【化１２０】



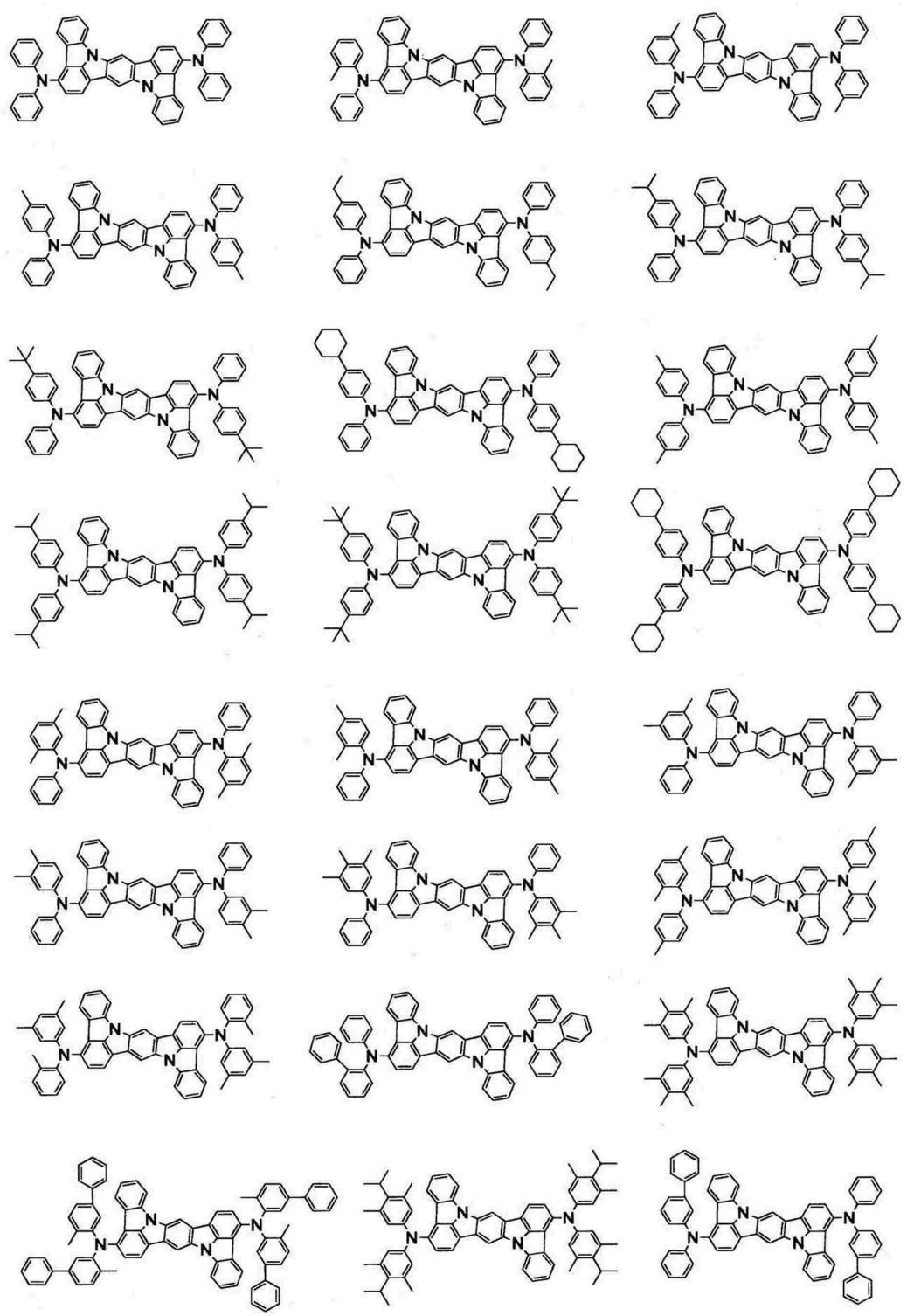
【０４２７】

【化１２１】



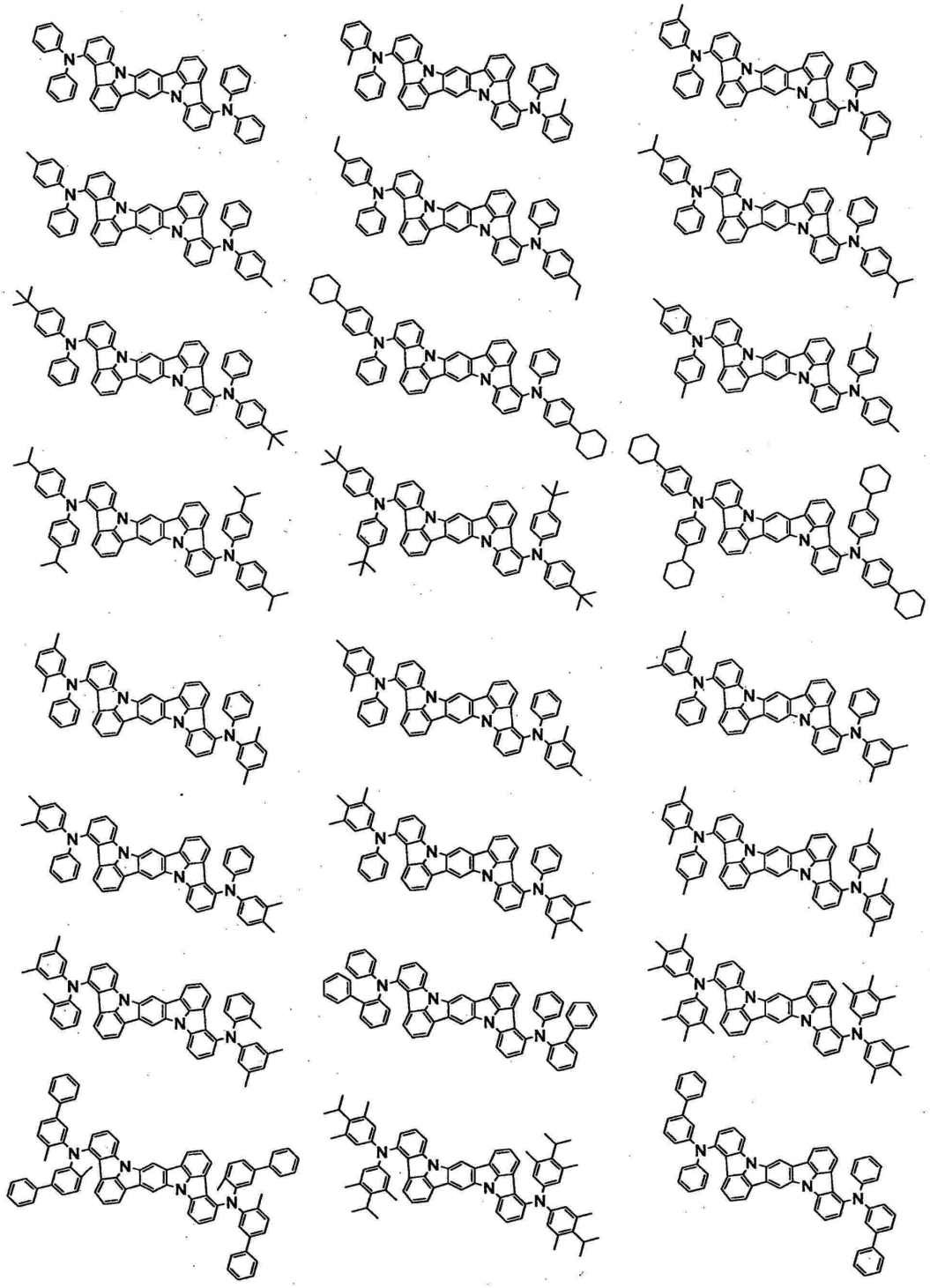
【０４２８】

【化１２２】



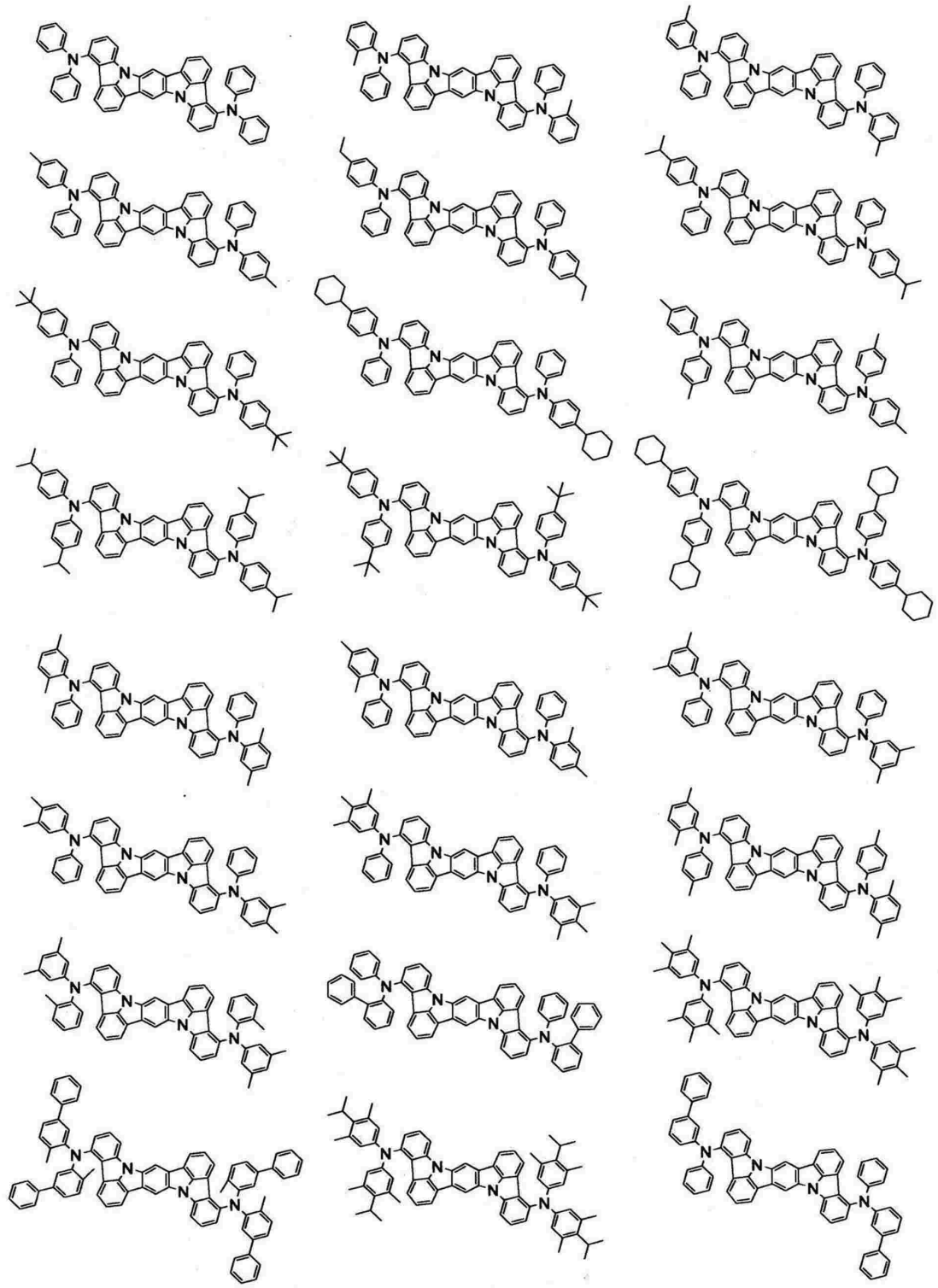
【０４２９】

【化１２３】



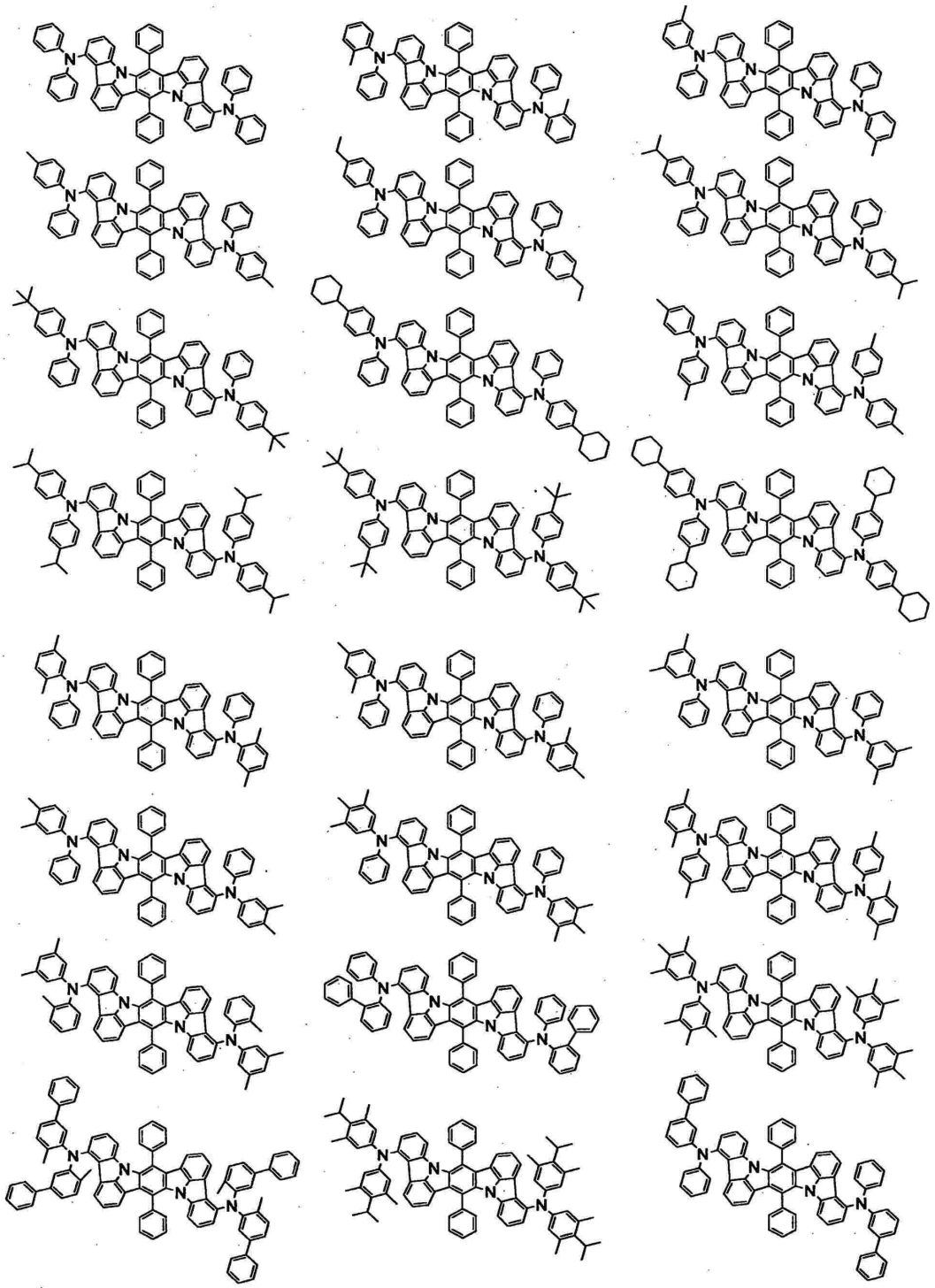
【０４３０】

【化１２４】



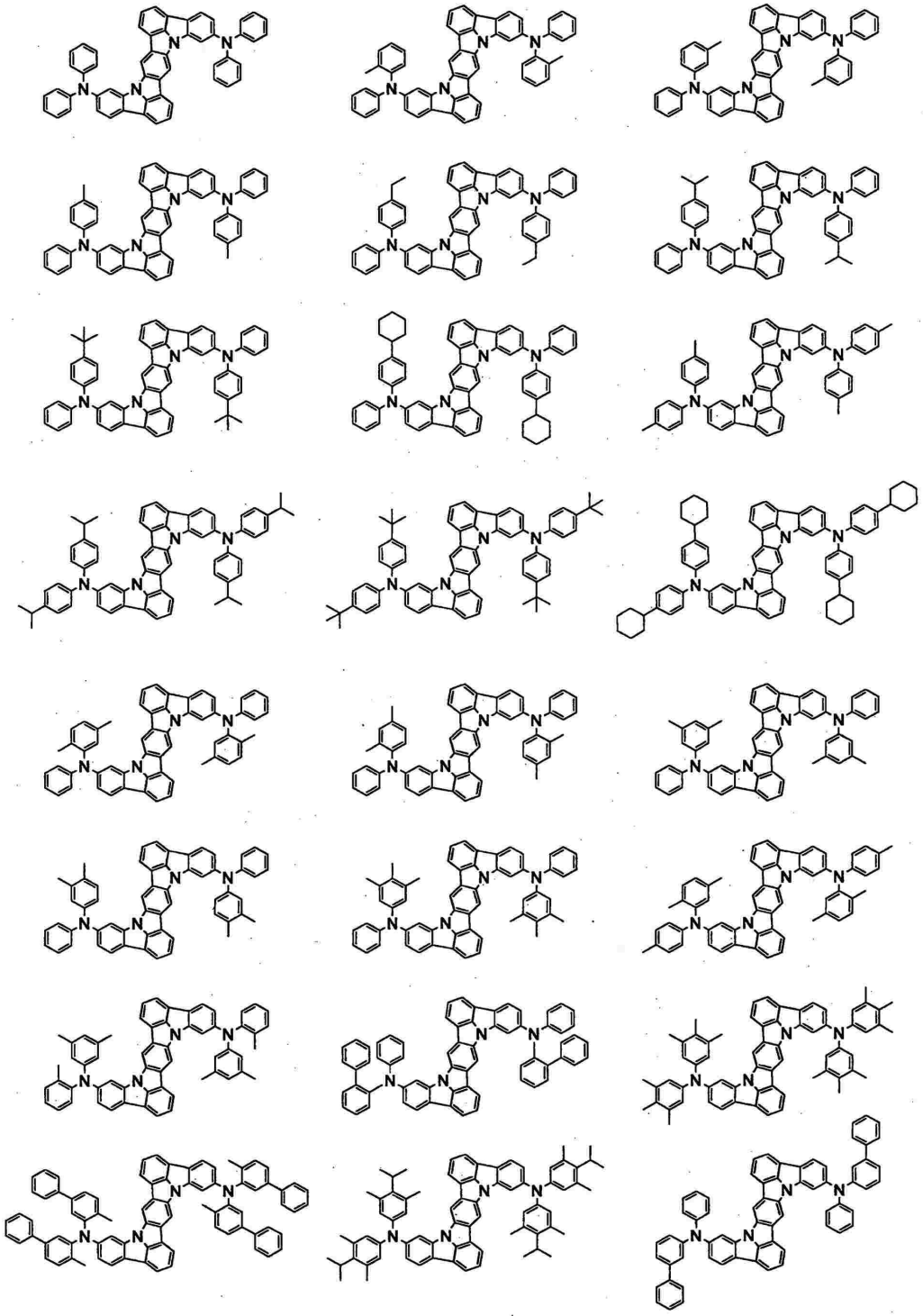
【０４３１】

【化１２５】



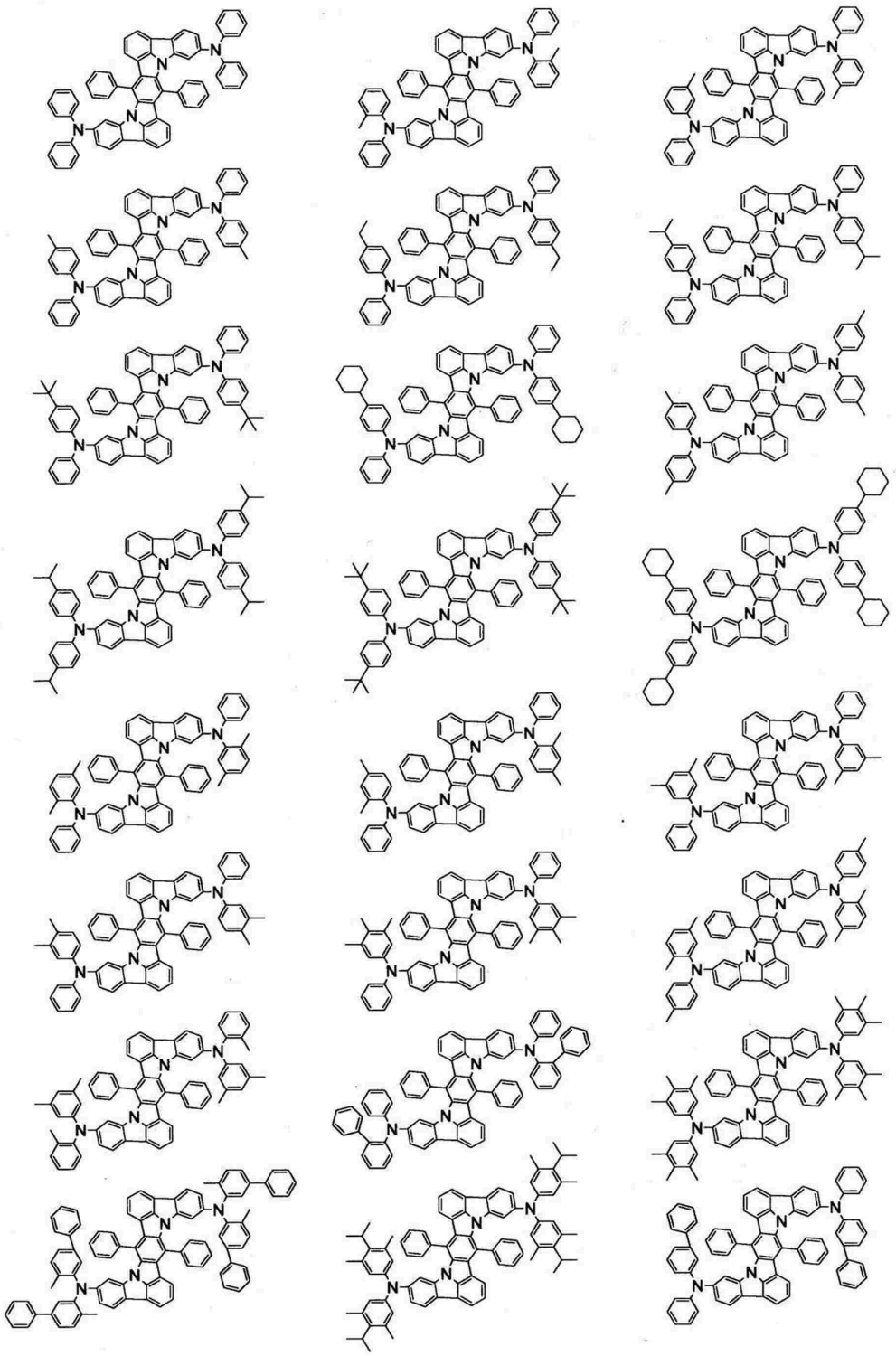
【０４３２】

【化１２６】



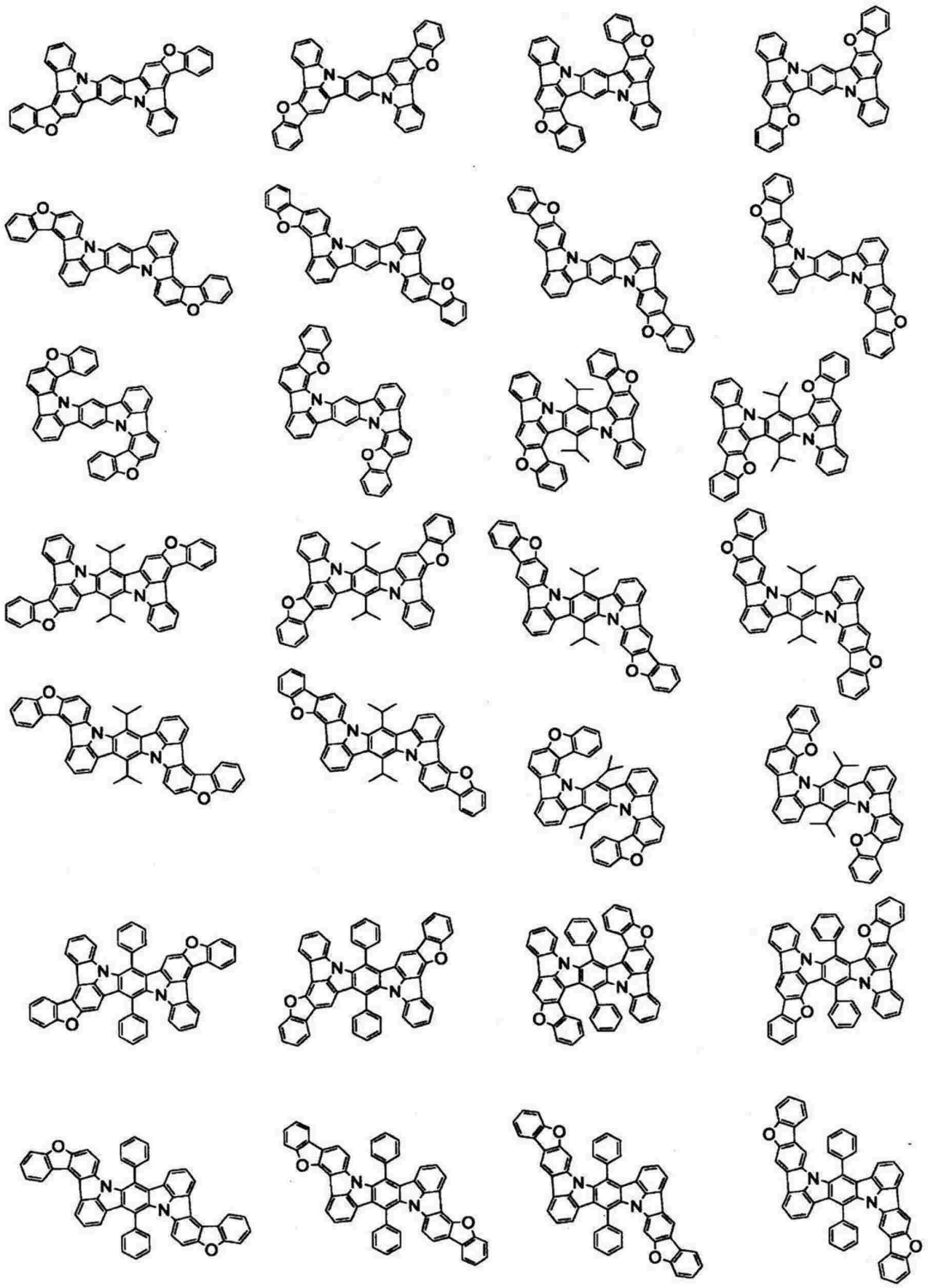
【０４３３】

【化１２７】



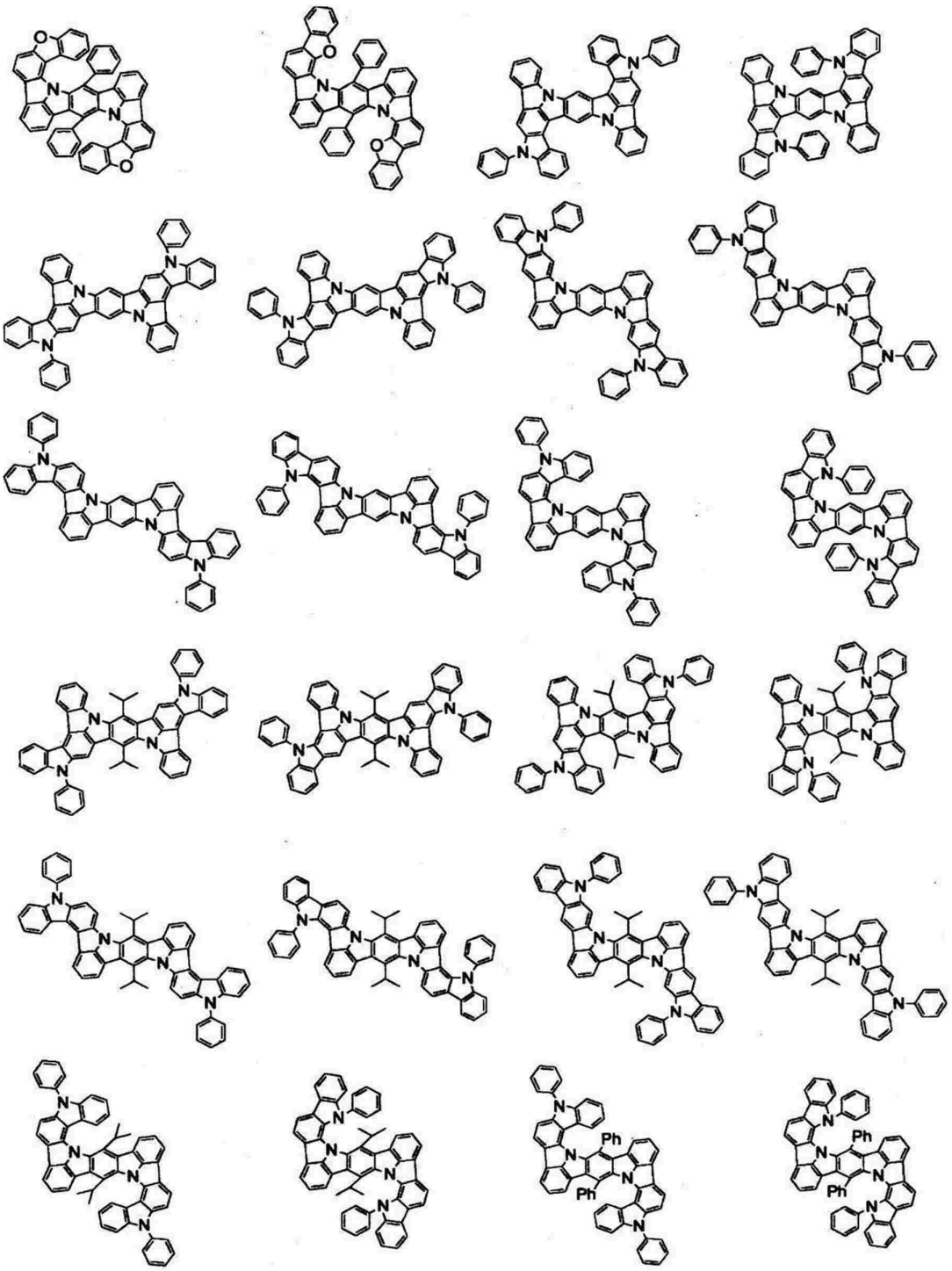
【０４３４】

【化１２８】



【０４３５】

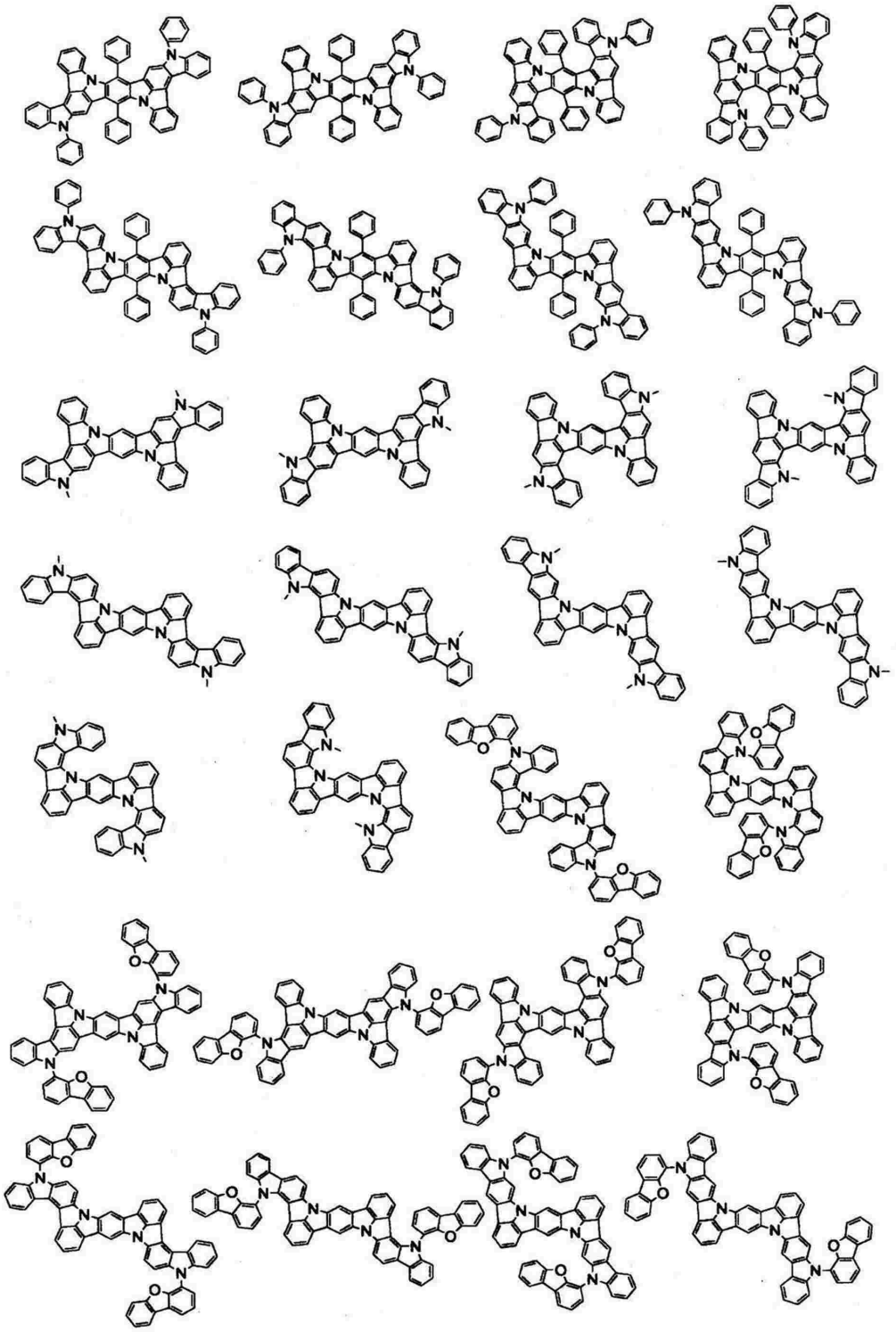
【化１２９】



（式中、Ｐｈはフェニル基である）

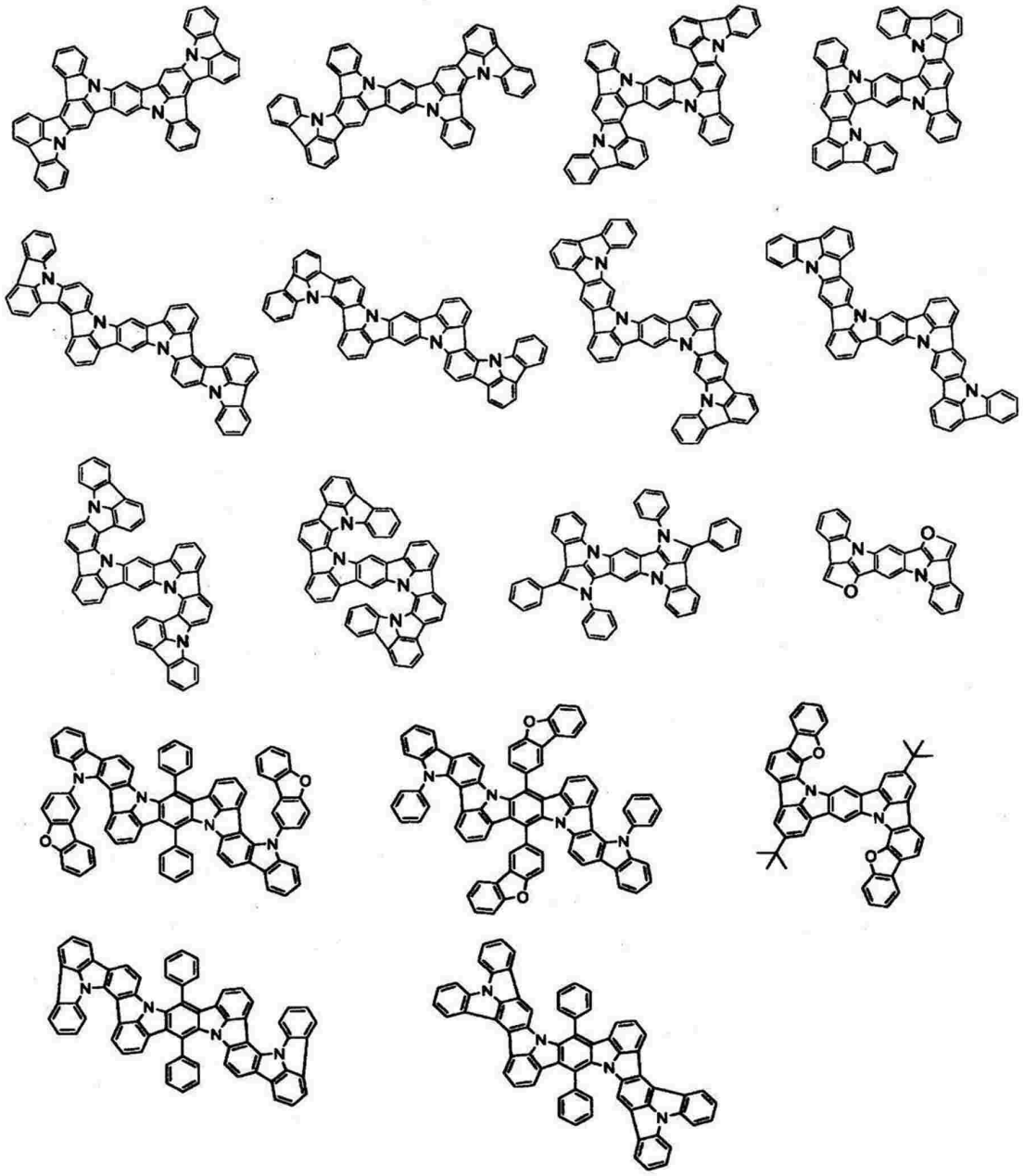
【０４３６】

【化１３０】



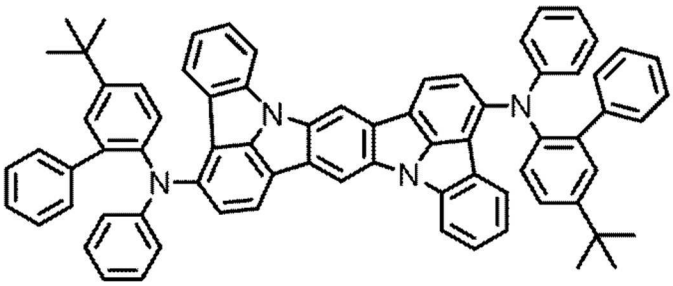
【０４３７】

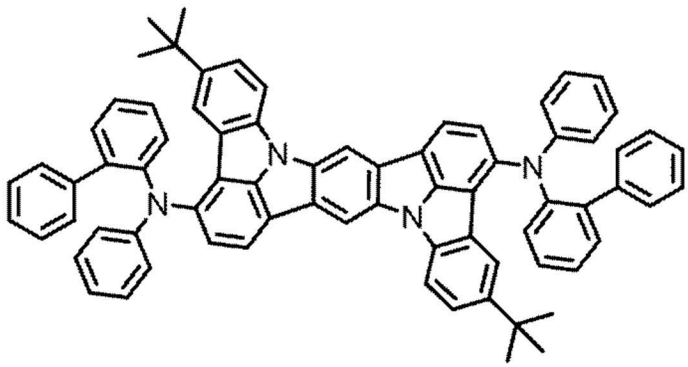
【化１３１】



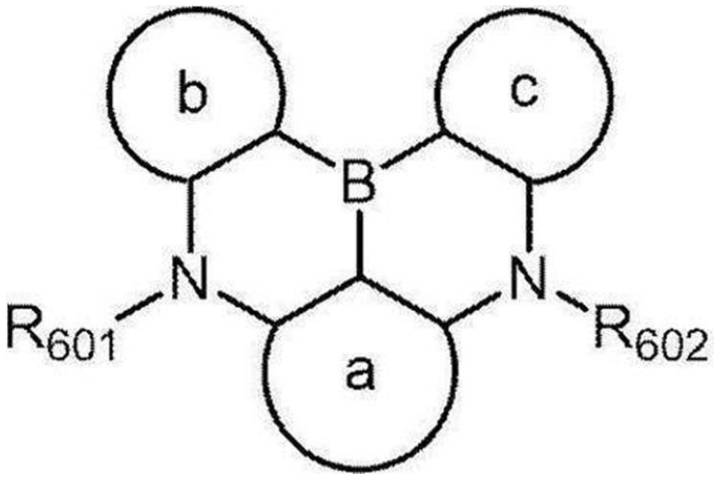
【０４３８】

【化１３２】





【０４３９】
（一般式（６）で表される化合物）
一般式（６）で表される化合物について説明する。
【０４４０】
【化１３３】



(6)

【０４４１】
（前記一般式（６）において、
ａ環、ｂ環及びｃ環は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０の芳香族炭化水素環、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環であり、
R_{601}及びR_{602}は、それぞれ独立に、前記ａ環、ｂ環又はｃ環と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、
前記置換もしくは無置換の複素環を形成しないR_{601}及びR_{602}は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

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

【０４４２】

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

【０４４３】

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

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

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

【０４４４】

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

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

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

【０４４５】

R_{601}及びR_{602}は、それぞれ独立に、ａ環、ｂ環又はｃ環と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成してもよい。この場合における複素環は、前記一般式（６）中央の縮合２環構造上の窒素原子を含む。この場合における複素環は、窒素原子以外のヘテロ原子を含んでいてもよい。R_{601}及びR_{602}がａ環、ｂ環又はｃ環と結合するとは、具体的には、ａ環、ｂ環又はｃ環を構成する原子とR_{601}及びR_{602}を構成する原子が結合することを意味する。例えば、R_{601}がａ環と結合して、R_{601}を含む環とａ環が縮合した２環縮合（又は３環縮合以上）の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群Ｇ２のうち、窒素を含む２環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。

R_{601}がｂ環と結合する場合、R_{602}がａ環と結合する場合、及びR_{602}がｃ環と結合する場合も上記と同じである。

【０４４６】

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

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

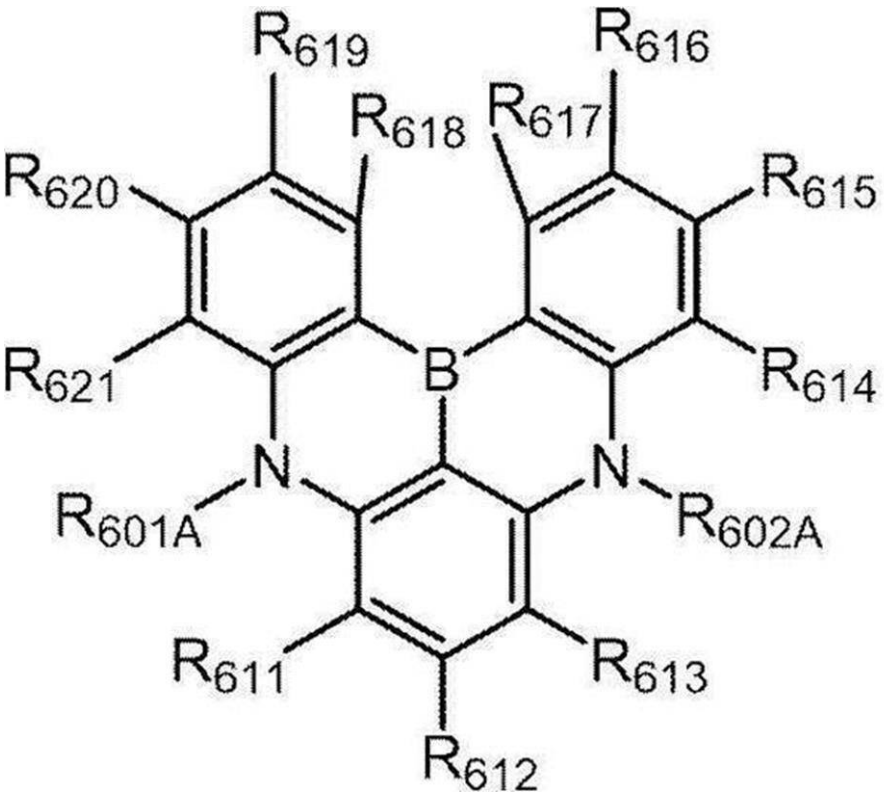
【０４４７】

一実施形態において、前記一般式（６）におけるR_{601}及びR_{602}は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。

【０４４８】

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

【０４４９】
【化１３４】



(62)

【０４５０】
（前記一般式（６２）において、
Ｒ６０１Ａは、Ｒ６１１及びＲ６２１からなる群から選択される１以上と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、
Ｒ６０２Ａは、Ｒ６１３及びＲ６１４からなる群から選択される１以上と結合して、置換もしくは無置換の複素環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の複素環を形成せず、
前記置換もしくは無置換の複素環を形成しないＲ６０１Ａ及びＲ６０２Ａは、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ６１１～Ｒ６２１のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記置換もしくは無置換の複素環を形成せず、前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないＲ６１１～Ｒ６２１は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

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

【０４５１】

前記一般式（６２）のＲ６０１Ａ及びＲ６０２Ａは、それぞれ、前記一般式（６）のＲ６０１及びＲ６０２に対応する基である。

例えば、Ｒ６０１ＡとＲ６１１が結合して、これらを含む環とａ環に対応するベンゼン環が縮合した２環縮合（又は３環縮合以上）の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群Ｇ２のうち、窒素を含む２環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。Ｒ６０１ＡとＲ６２１が結合する場合、Ｒ６０２ＡとＲ６１３が結合する場合、及びＲ６０２ＡとＲ６１４が結合する場合も上記と同じである。

【０４５２】

Ｒ６１１～Ｒ６２１のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、又は
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成してもよい。

例えば、Ｒ６１１とＲ６１２が結合して、これらが結合する６員環に対して、ベンゼン環、インドール環、ピロール環、ベンゾフラン環又はベンゾチオフェン環等が縮合した構造を形成してもよく、形成された縮合環は、ナフタレン環、カルバゾール環、インドール環、ジベンゾフラン環又はジベンゾチオフェン環となる。

【０４５３】

一実施形態において、環形成に寄与しないＲ６１１～Ｒ６２１は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数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。

【０４５４】

一実施形態において、環形成に寄与しないＲ６１１～Ｒ６２１は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数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。

【０４５５】

一実施形態において、環形成に寄与しないＲ６１１～Ｒ６２１は、それぞれ独立に、
水素原子、又は
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基である。

【０４５６】

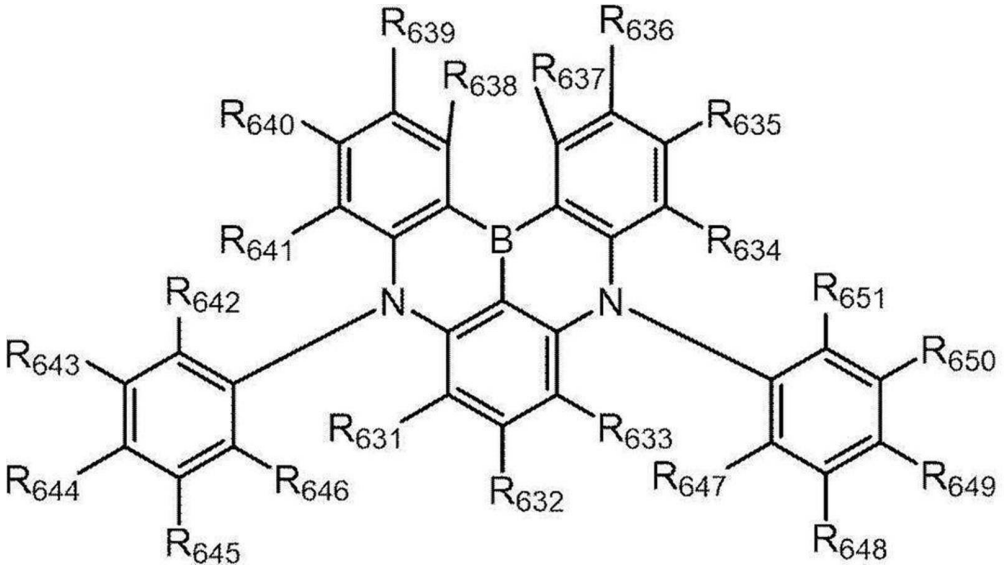
一実施形態において、環形成に寄与しないＲ６１１～Ｒ６２１は、それぞれ独立に、
水素原子、又は
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基であり、
Ｒ６１１～Ｒ６２１のうち少なくとも１つは、置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基である。

【０４５７】

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

【０４５８】

【化１３５】



(63)

【０４５９】

（前記一般式（６３）において、

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

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

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

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

Ｒ６３１～Ｒ６５１のうちの隣接する２つ以上からなる組の１組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０４６０】

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

環に対応するベンゼン環とが縮合した３環縮合以上の含窒素複素環を形成してもよい。当該含窒素複素環の具体例としては、具体例群Ｇ２のうち、窒素を含む３環縮合以上の複素環基に対応する化合物等が挙げられる。R_{633}とR_{647}が結合する場合、R_{634}とR_{651}が結合する場合、及びR_{641}とR_{642}が結合する場合も上記と同じである。

【０４６１】

一実施形態において、環形成に寄与しないR_{631}～R_{651}は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。

【０４６２】

一実施形態において、環形成に寄与しないR_{631}～R_{651}は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。

【０４６３】

一実施形態において、環形成に寄与しないR_{631}～R_{651}は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基である。

【０４６４】

一実施形態において、環形成に寄与しないR_{631}～R_{651}は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基であり、

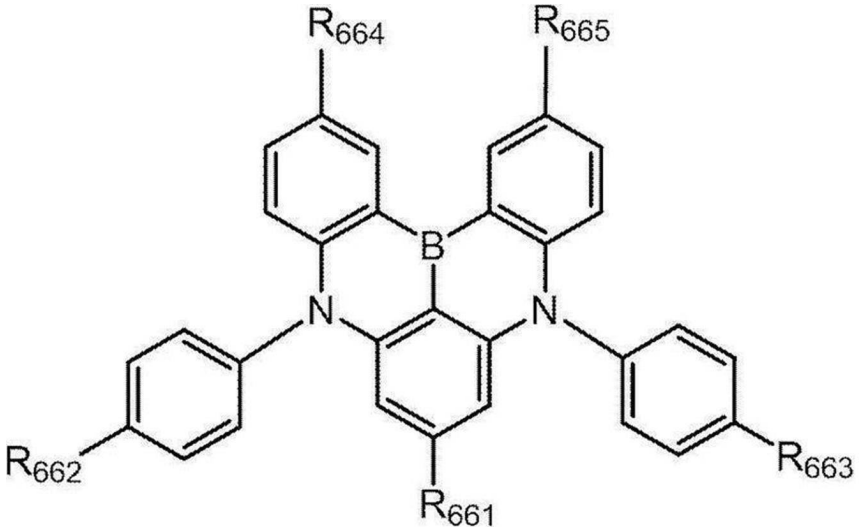
R_{631}～R_{651}のうち少なくとも１つは置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基である。

【０４６５】

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

【０４６６】

【化１３６】



(63A)

【０４６７】

（前記一般式（６３Ａ）において、

R_{661}は、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であり、
R_{662}～R_{665}は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。）

【０４６８】

一実施形態において、R_{661}～R_{665}は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。

【０４６９】

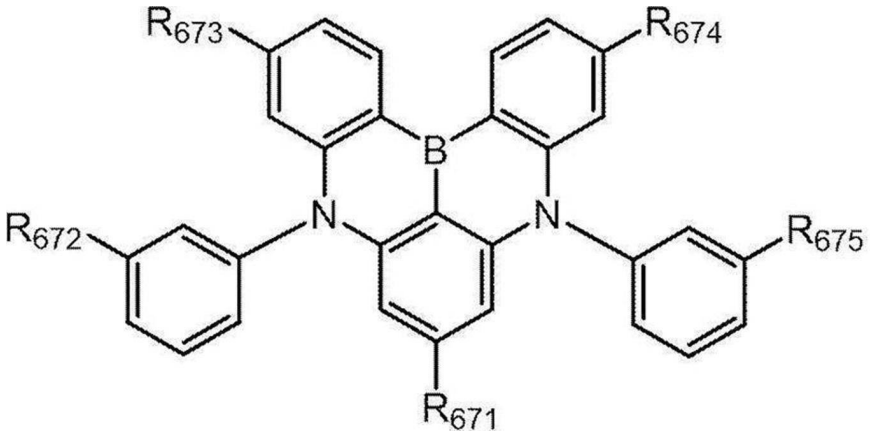
一実施形態において、R_{661}～R_{665}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基である。

【０４７０】

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

【０４７１】

【化１３７】



(63B)

【０４７２】

（前記一般式（６３Ｂ）において、
R_{671}及びR_{672}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であり、
R_{673}～R_{675}は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、又は

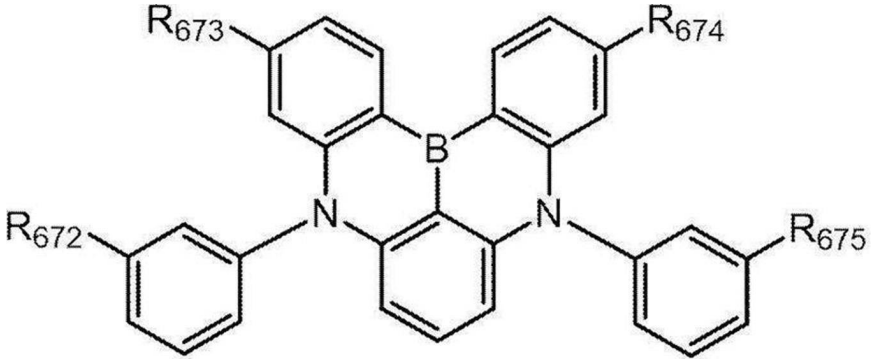
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。）

【０４７３】

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

【０４７４】

【化１３８】



(63B')

【０４７５】

（前記一般式（６３Ｂ’）において、R_{672}～R_{675}は、それぞれ独立に、前記一般式（６３Ｂ）におけるR_{672}～R_{675}と同義である。）

【０４７６】

一実施形態において、R_{671}～R_{675}のうち少なくとも１つは、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。

【０４７７】

一実施形態において、

R_{672}は、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であり、

R_{671}及びR_{673}～R_{675}は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、又は

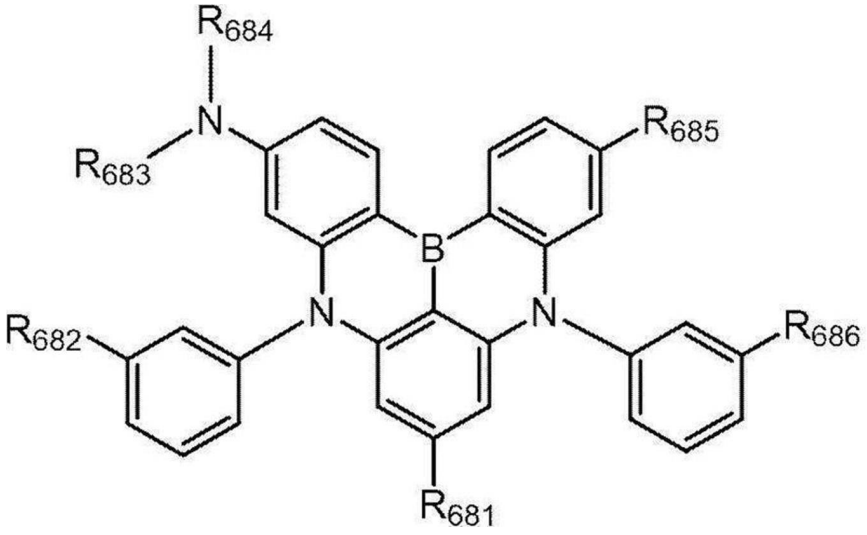
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。

【０４７８】

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

【０４７９】

【化１３９】



(63C)

【０４８０】

（前記一般式（６３Ｃ）において、

Ｒ６８１及びＲ６８２は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。

Ｒ６８３～Ｒ６８６は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、又は

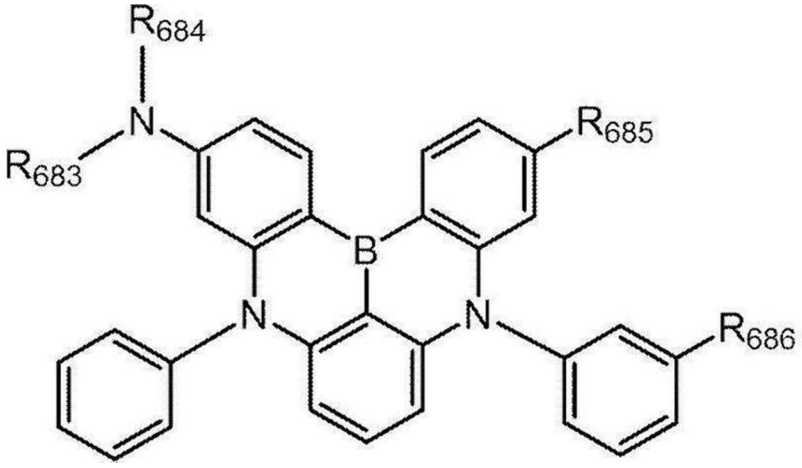
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。）

【０４８１】

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

【０４８２】

【化１４０】



(63C')

【０４８３】

（前記一般式（６３Ｃ’）において、R_{683}～R_{686}は、それぞれ独立に、前記一般式（６３Ｃ）におけるR_{683}～R_{686}と同義である。）

【０４８４】

一実施形態において、R_{681}～R_{686}は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。

【０４８５】

一実施形態において、R_{681}～R_{686}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。

【０４８６】

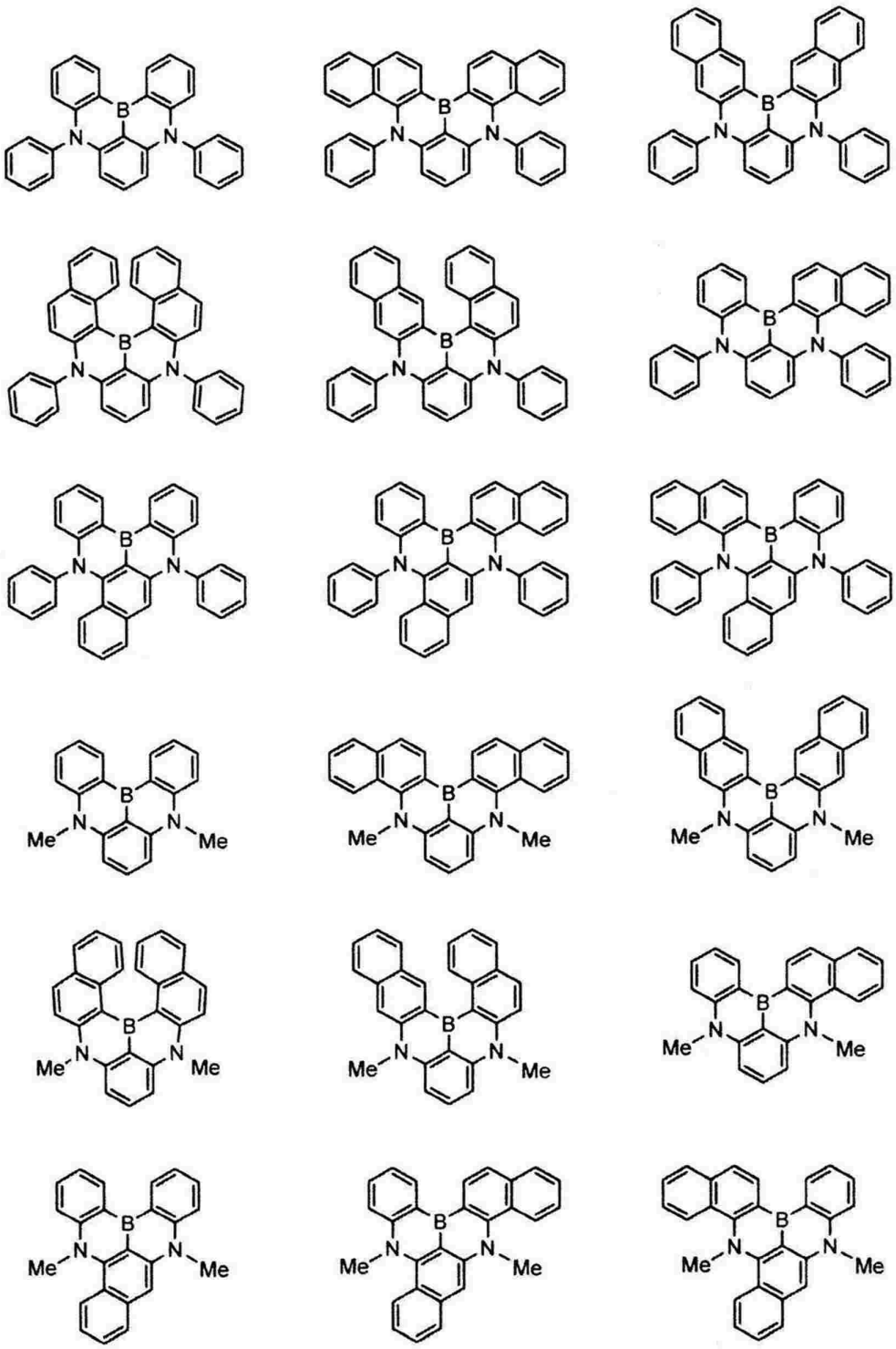
前記一般式（６）で表される化合物は、まずａ環、ｂ環及びｃ環を連結基（Ｎ－R_{601}を含む基及びＮ－R_{602}を含む基）で結合させることで中間体を製造し（第１反応）、ａ環、ｂ環及びｃ環を連結基（ホウ素原子を含む基）で結合させることで最終生成物を製造することができる（第２反応）。第１反応ではバッハブルト－ハートウィッグ反応等のアミノ化反応を適用できる。第２反応では、タンデムヘテロフリーデルクラフツ反応等を適用できる。

【０４８７】

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

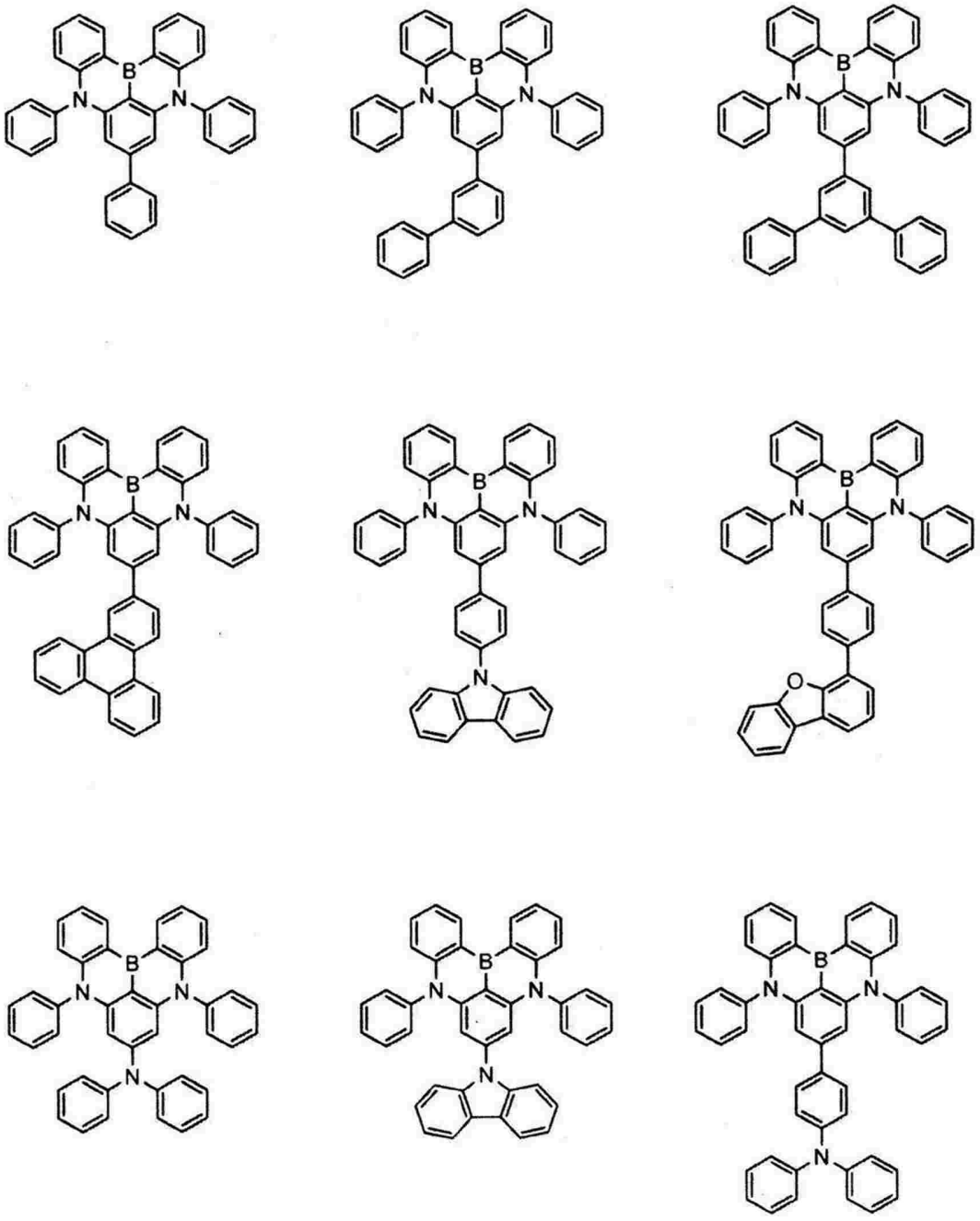
【０４８８】

【化１４１】



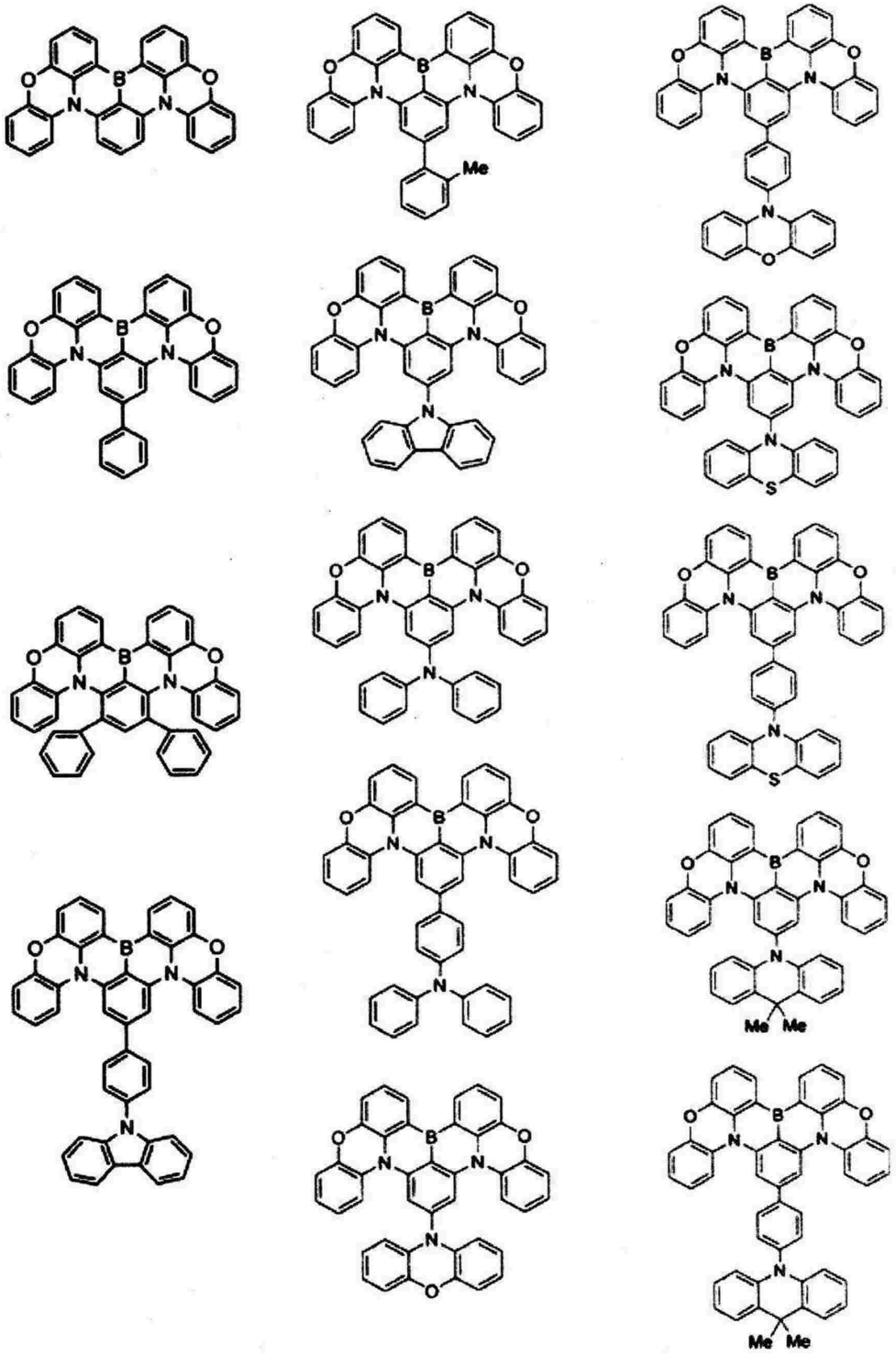
【０４８９】

【化１４２】



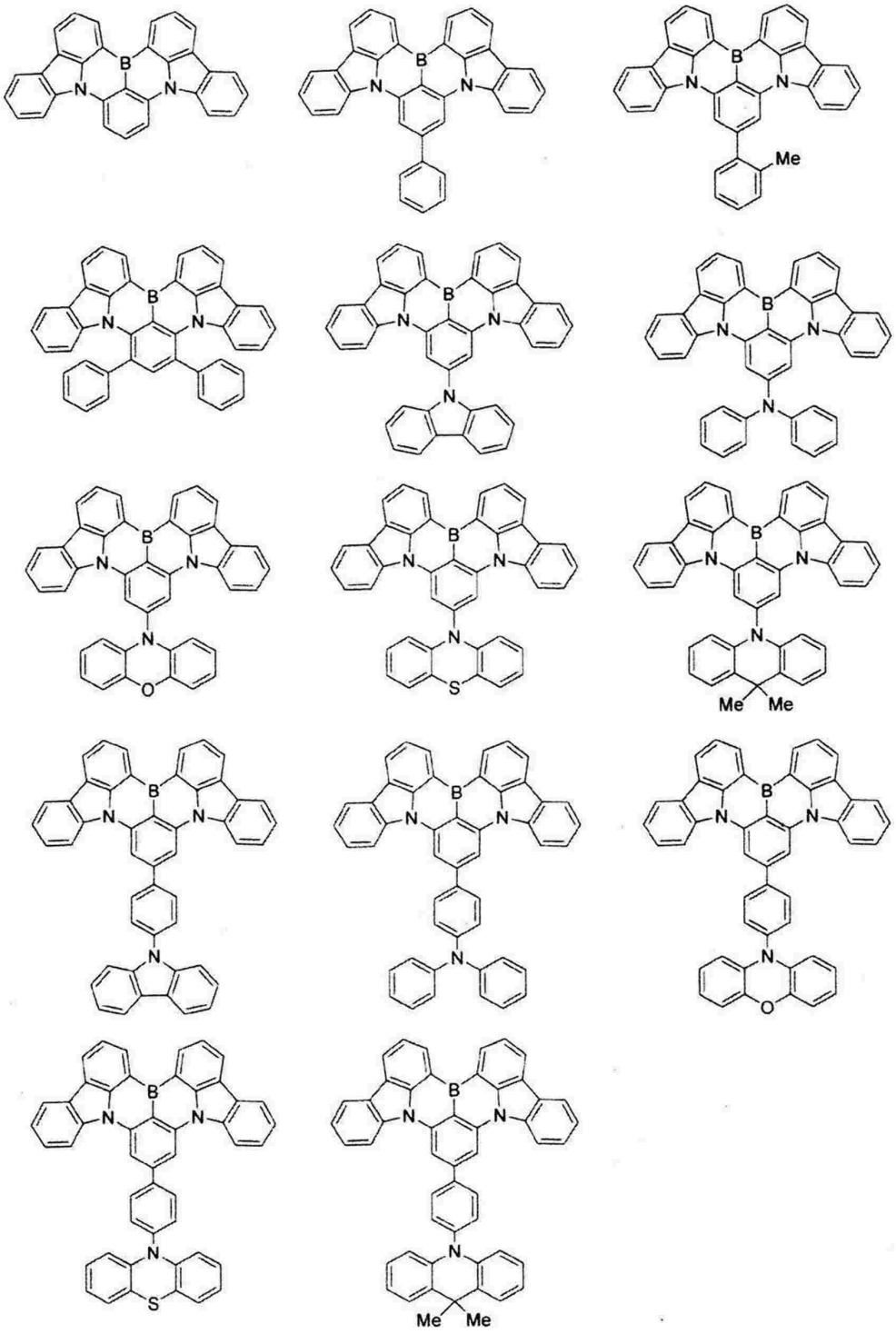
【０４９０】

【化１４３】



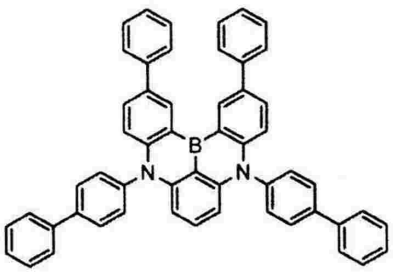
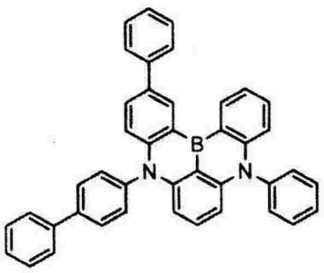
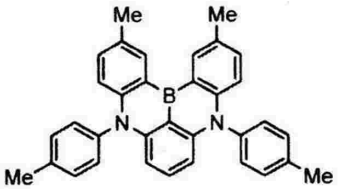
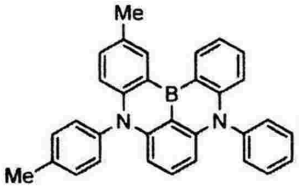
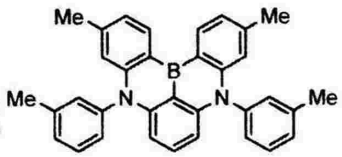
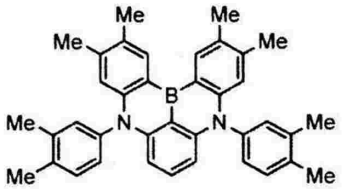
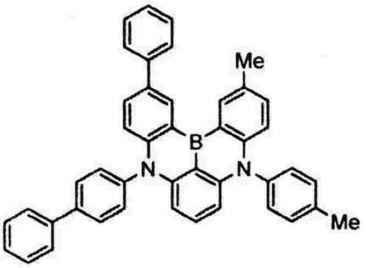
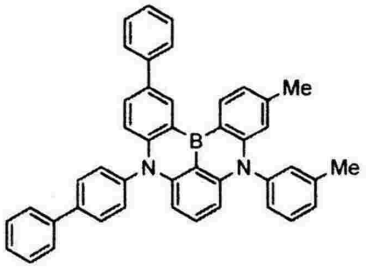
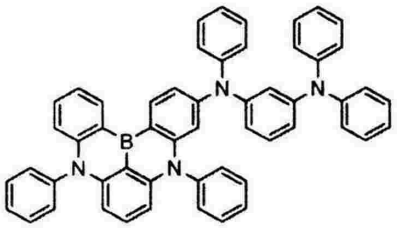
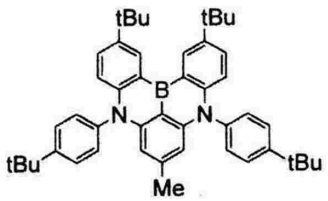
【０４９１】

【化１４４】



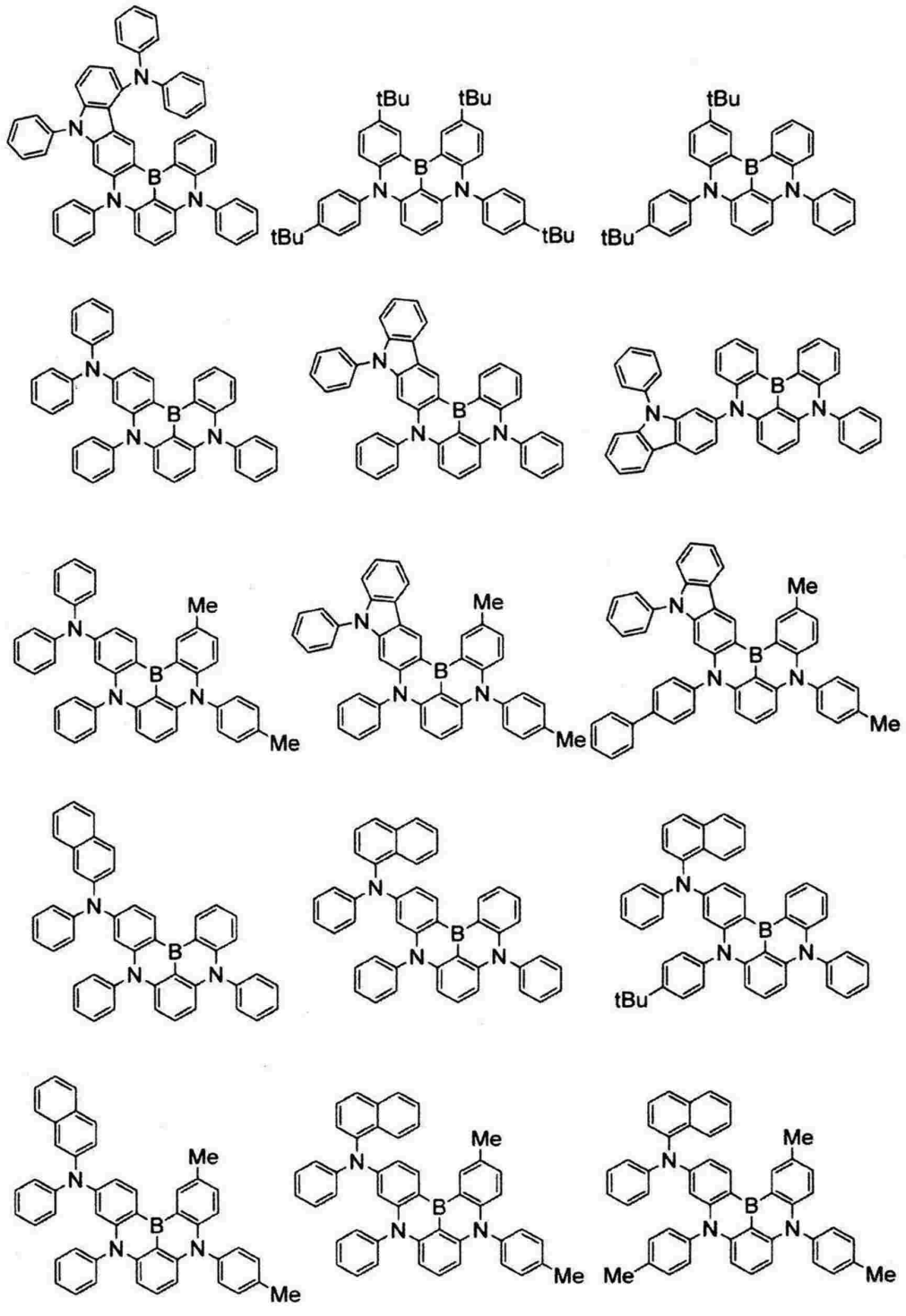
【０４９２】

【化１４５】

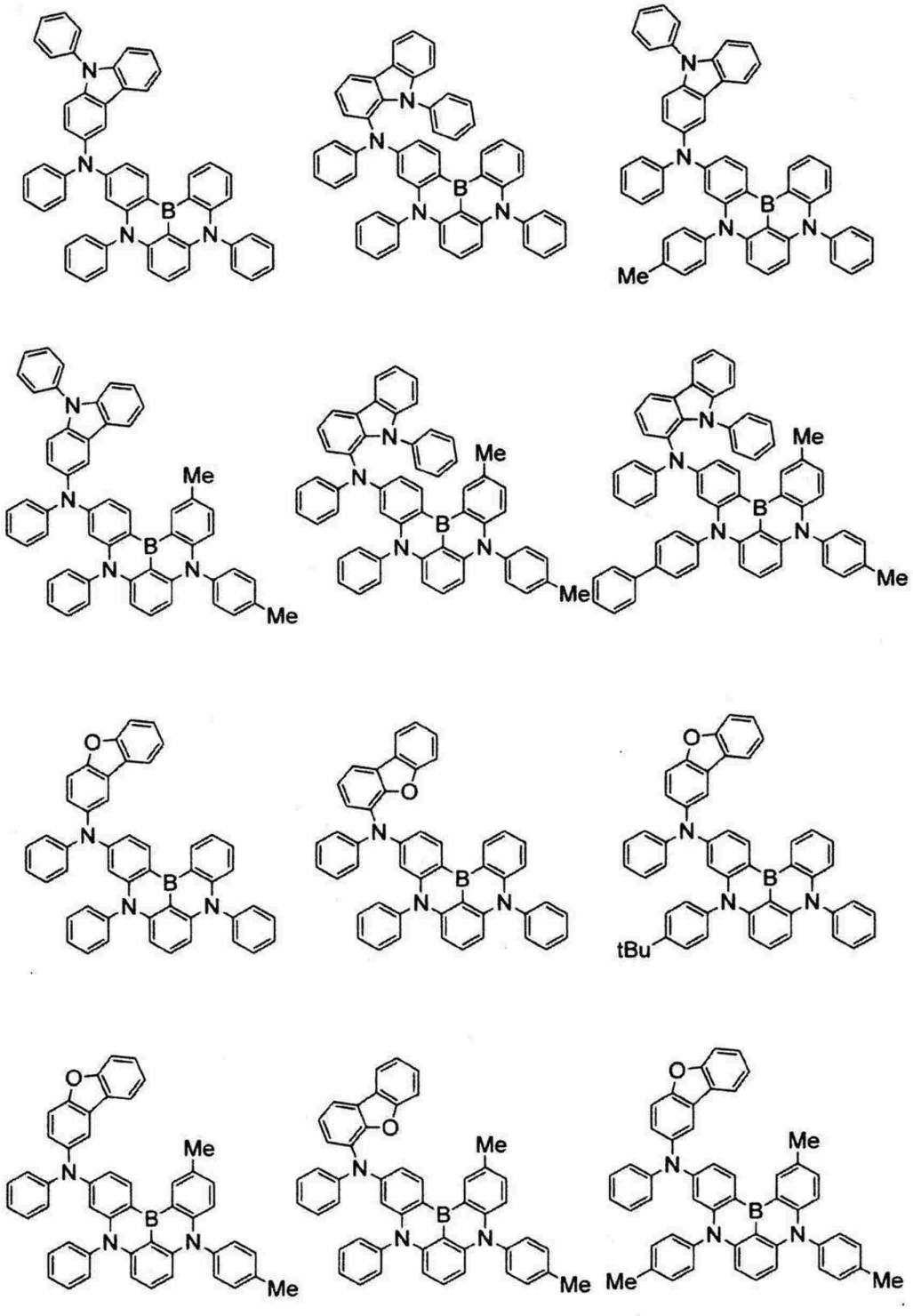
【０４９３】

【化１４６】



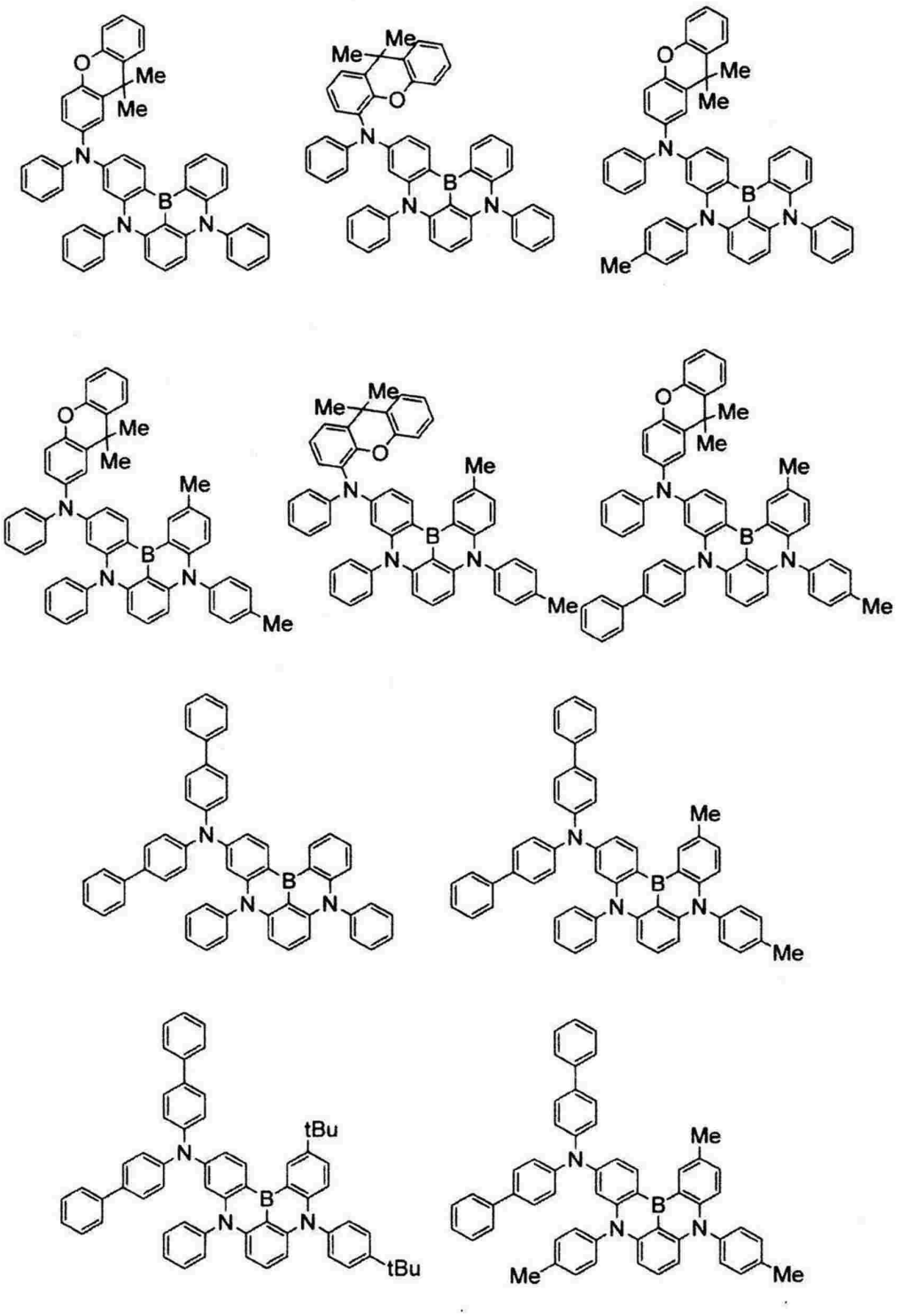
【０４９４】

【化１４７】



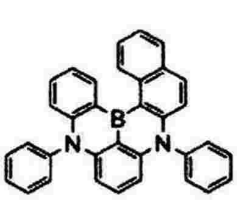
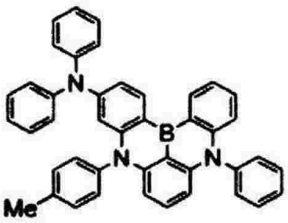
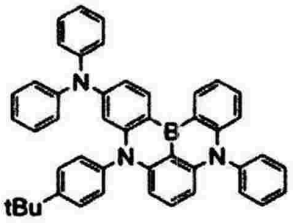
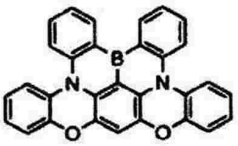
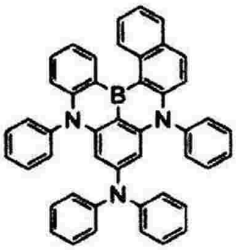
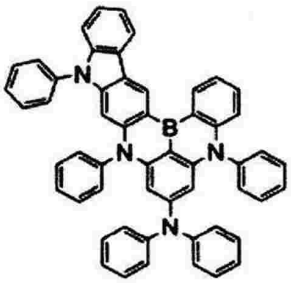
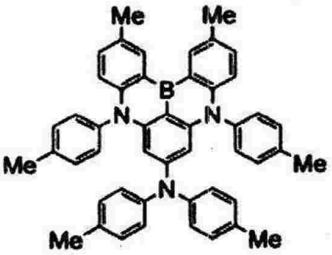
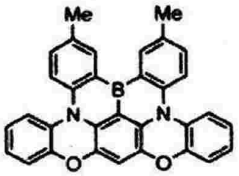
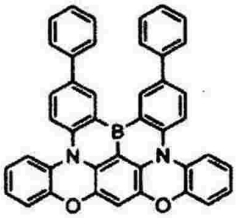
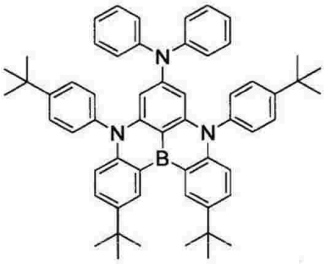
【０４９５】

【化１４８】



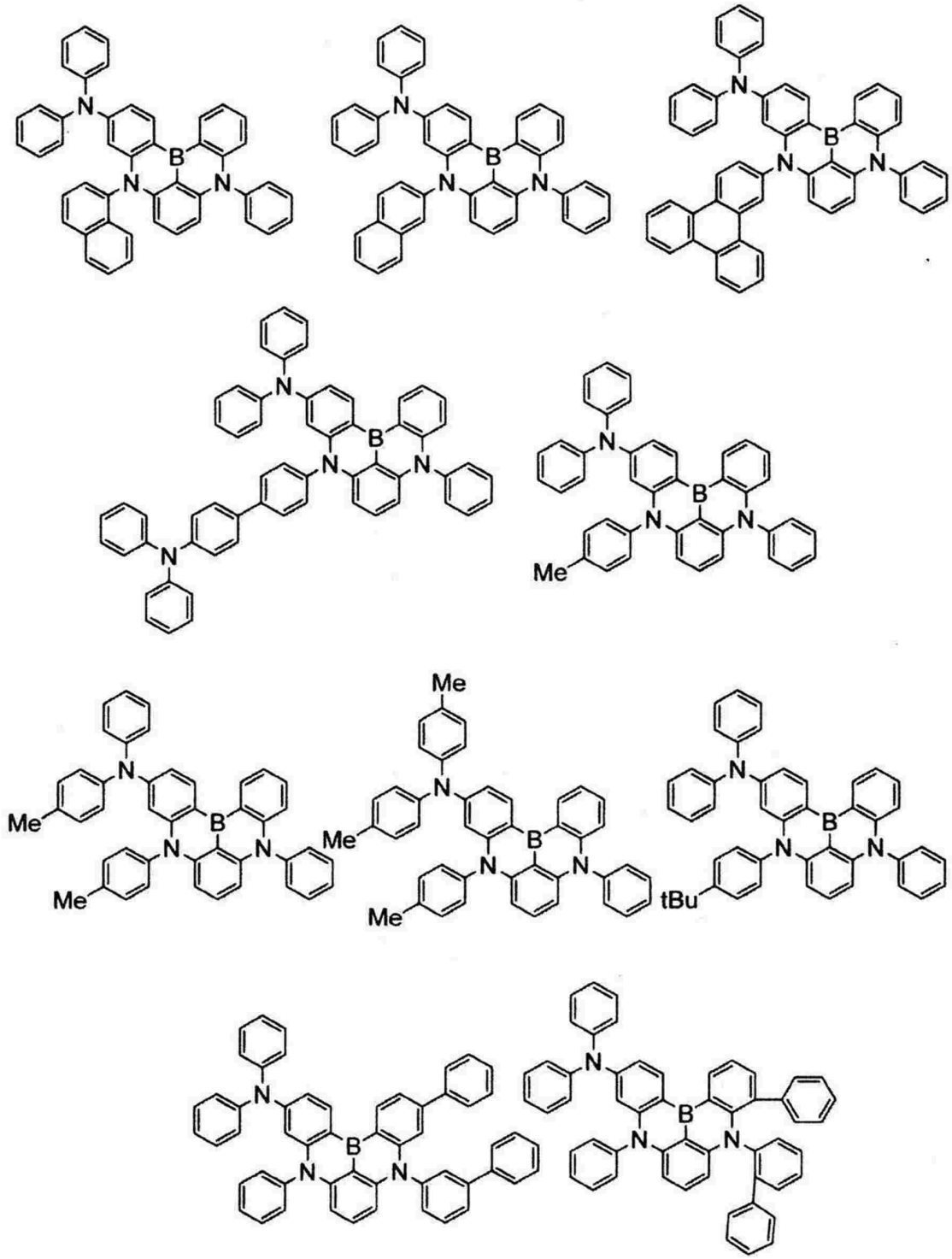
【０４９６】

【化１４９】

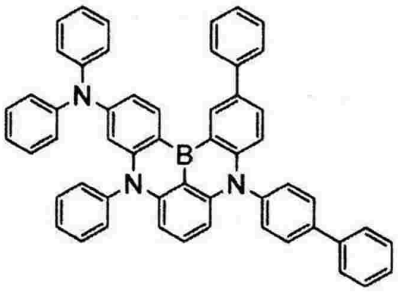
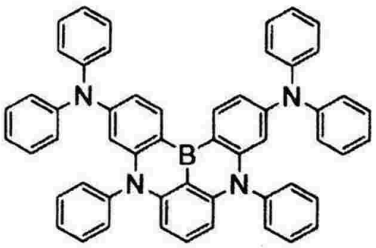
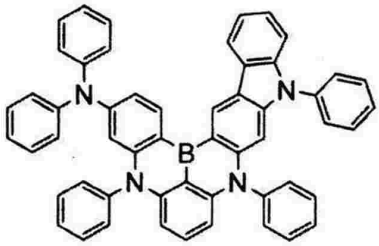
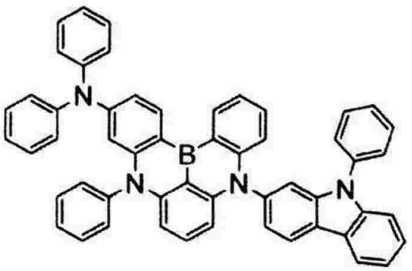
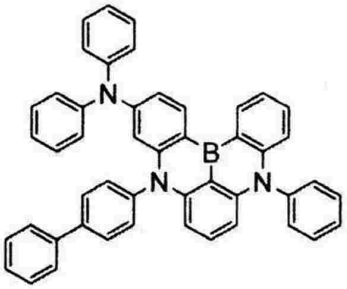
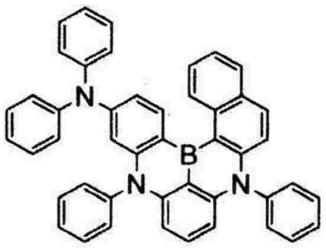
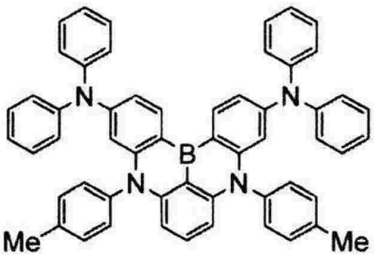
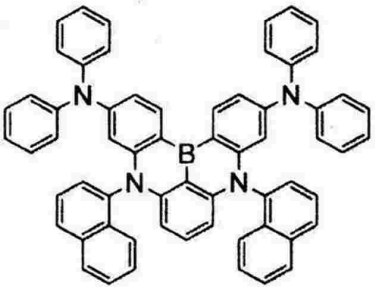
【０４９７】

【化１５０】



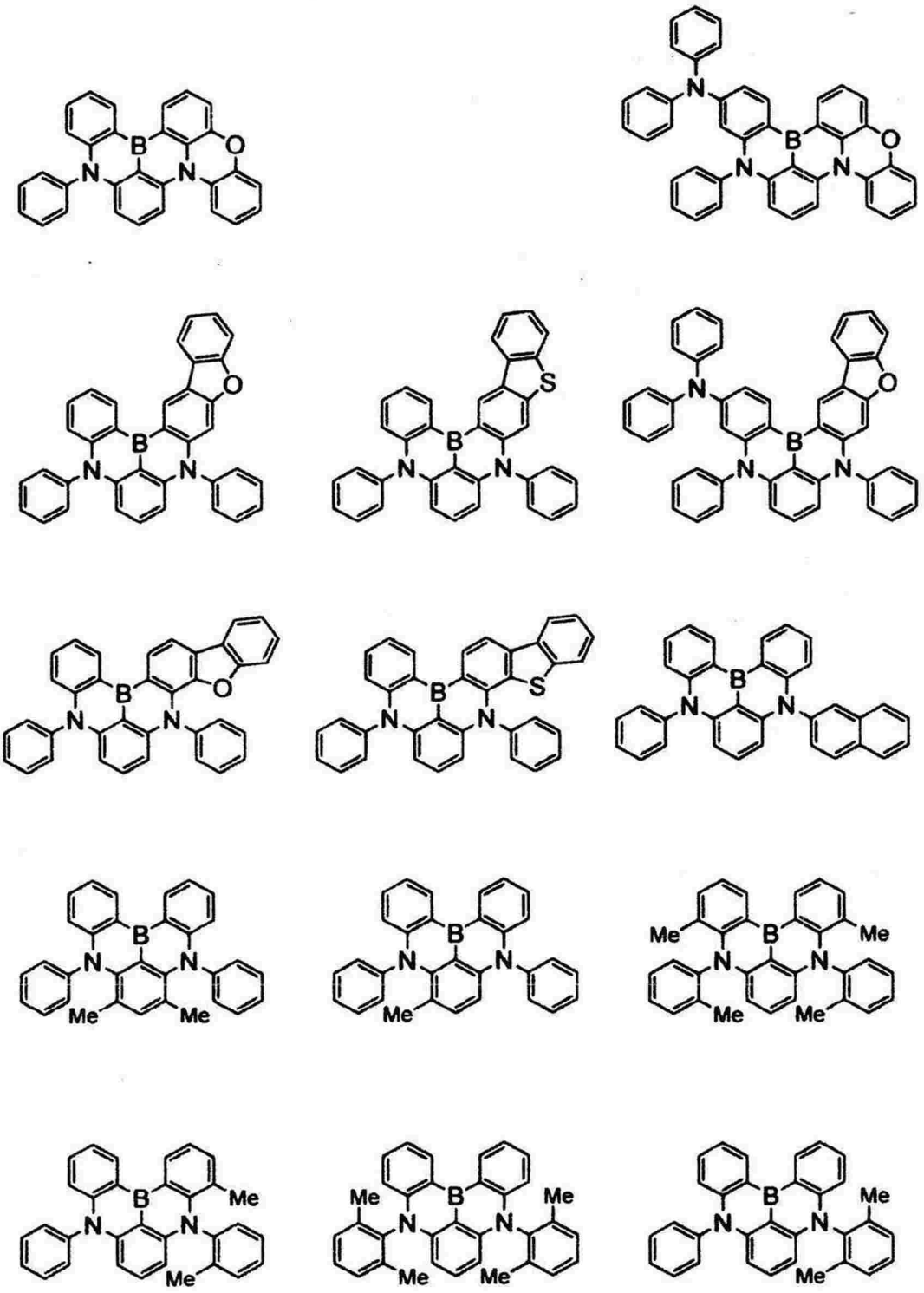
【０４９８】

【化１５１】

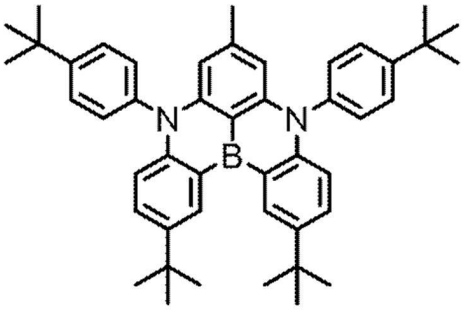
【０４９９】

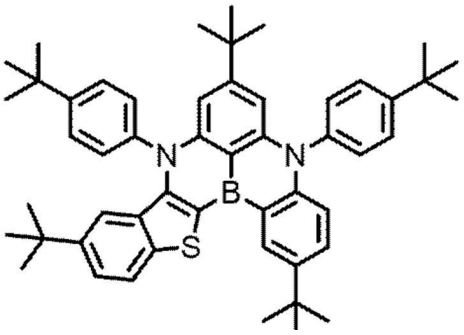
【化１５２】



【０５００】

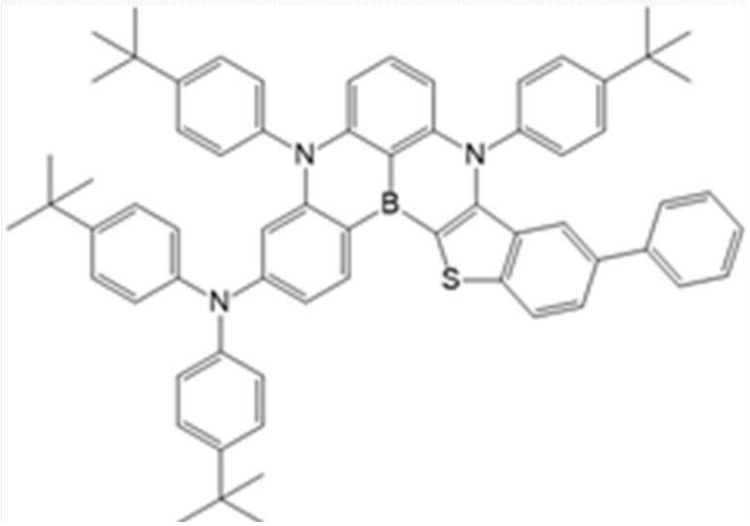
【化１５３】





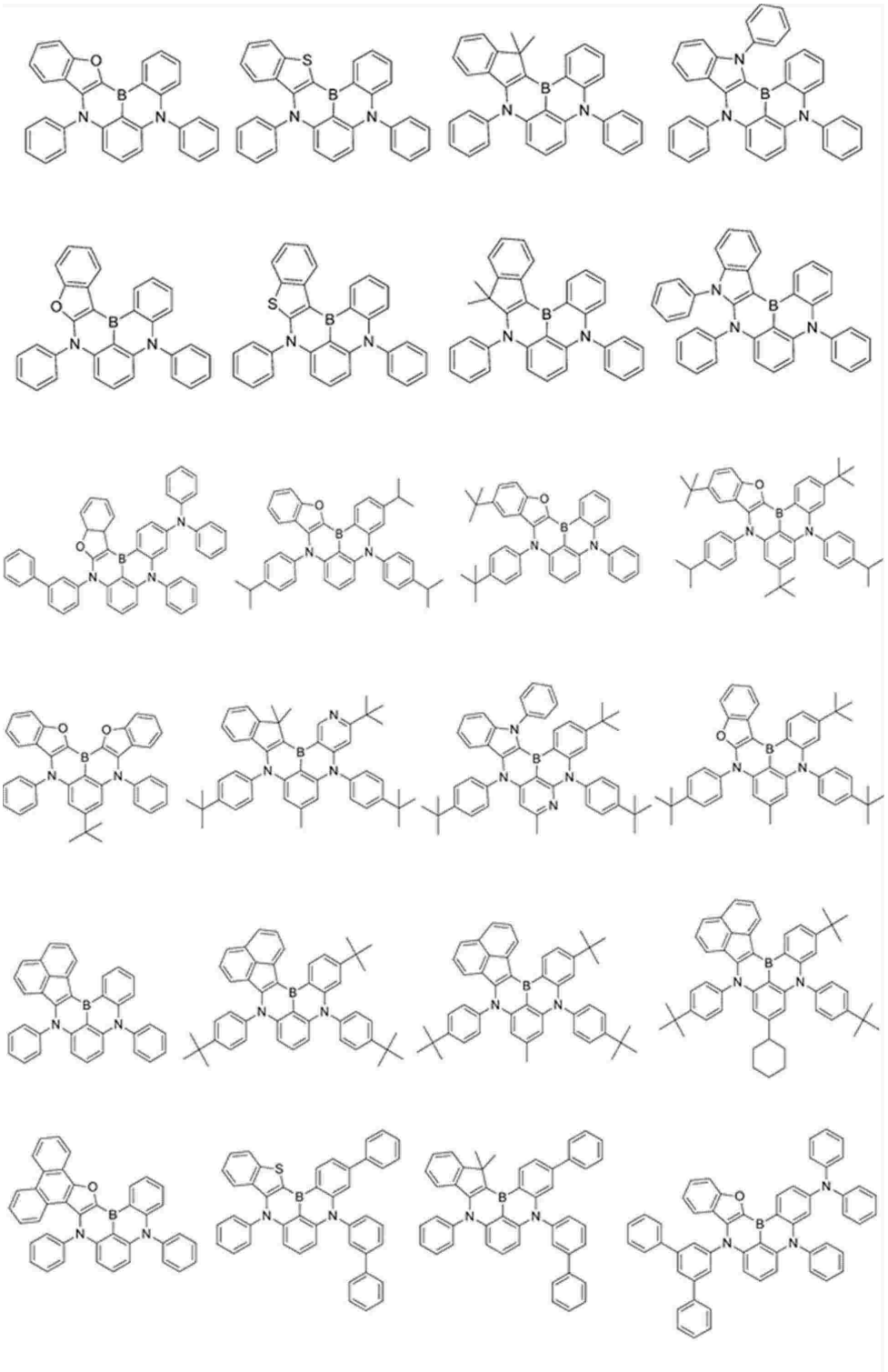
【０５０１】

【化１５４】



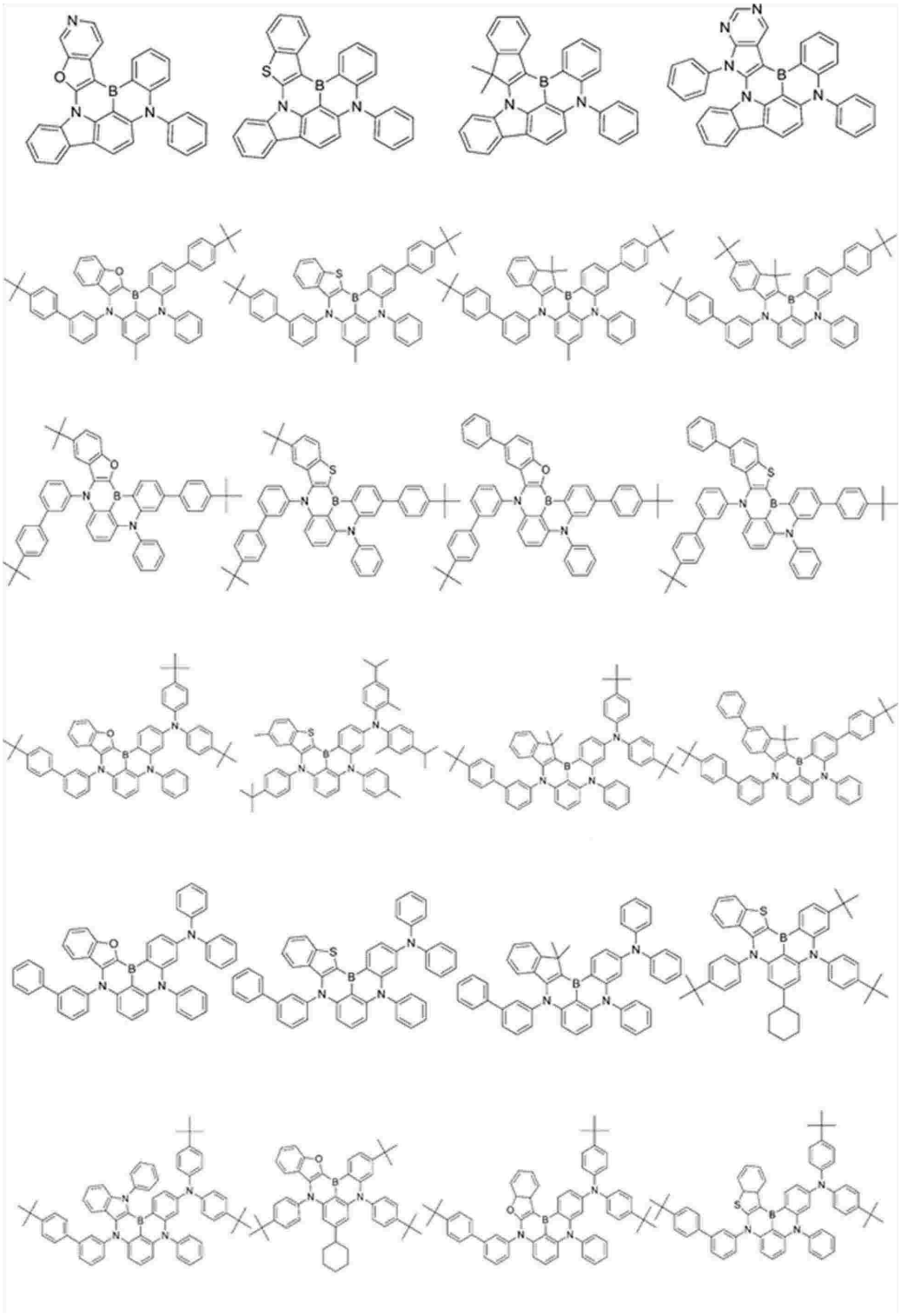
【０５０２】

【化１５５】



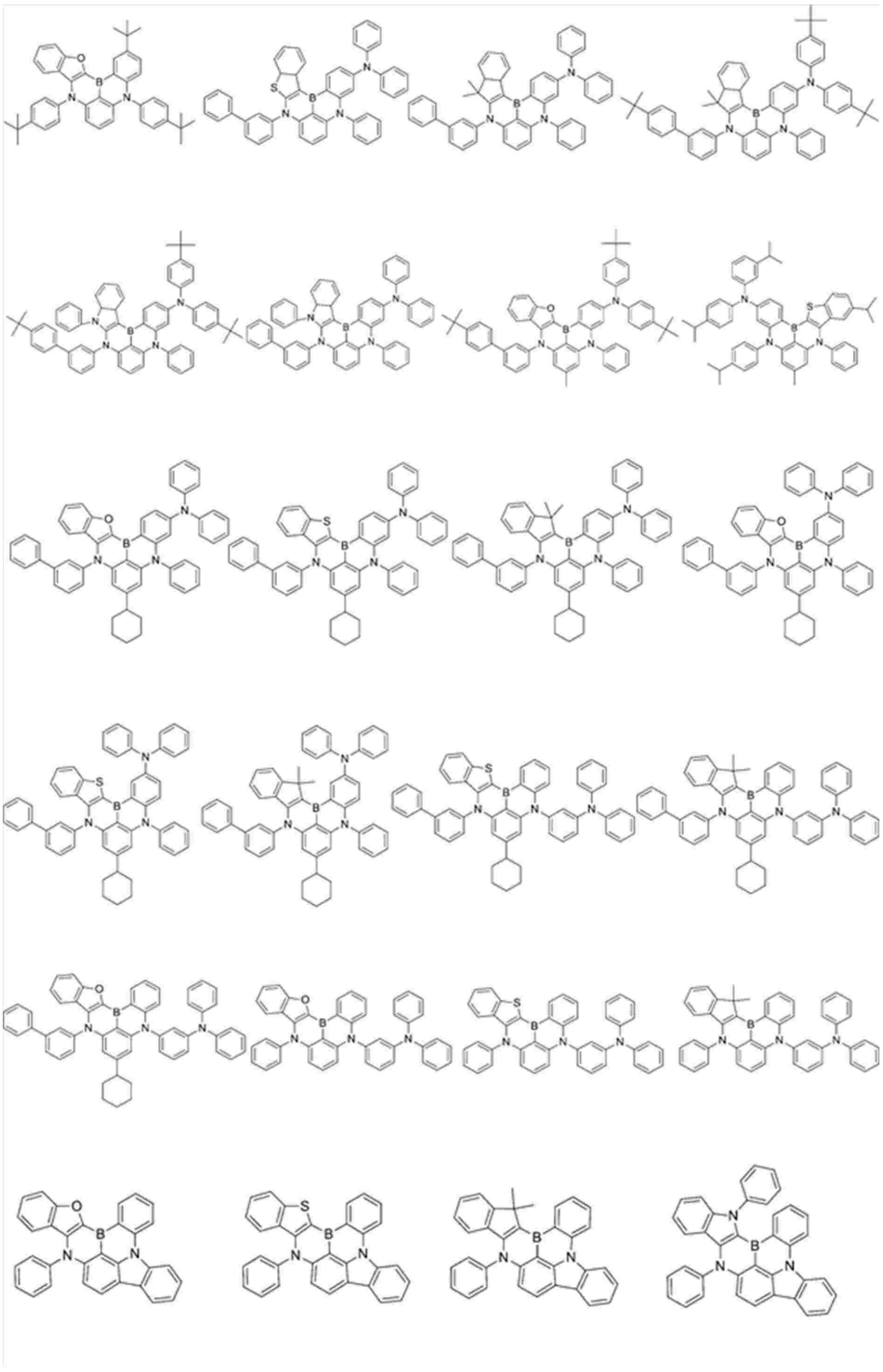
【０５０３】

【化１５６】



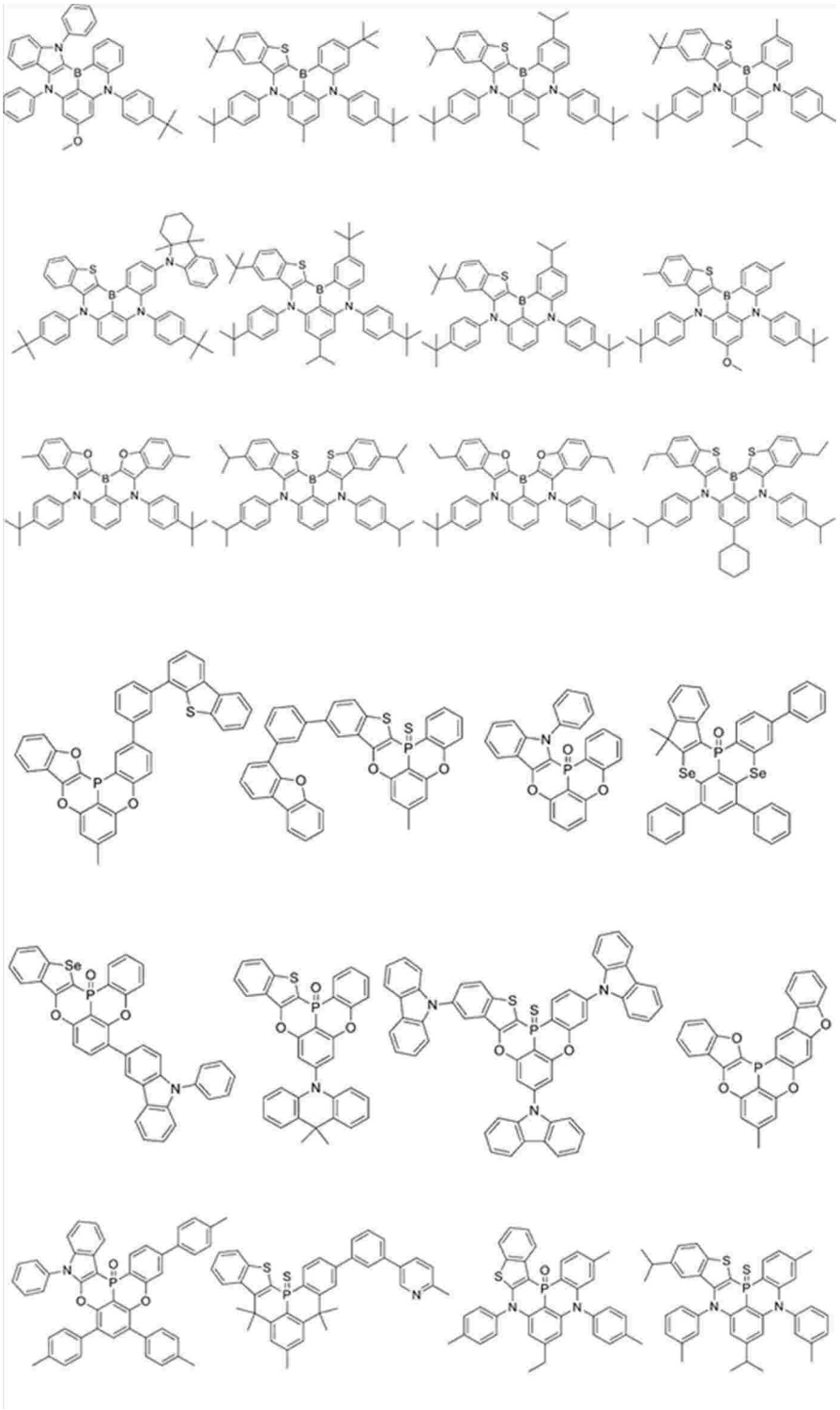
【０５０４】

【化１５７】



【０５０５】

【化１５８】



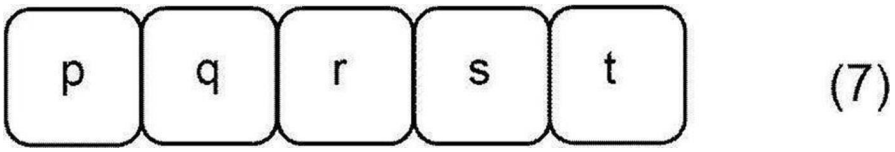
【０５０６】

（一般式（７）で表される化合物）

一般式（７）で表される化合物について説明する。

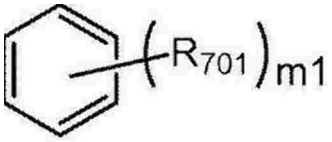
【０５０７】

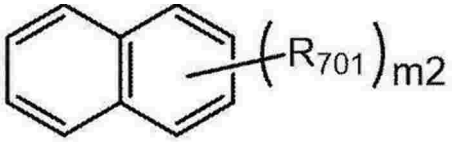
【化１５９】

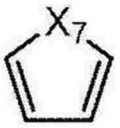


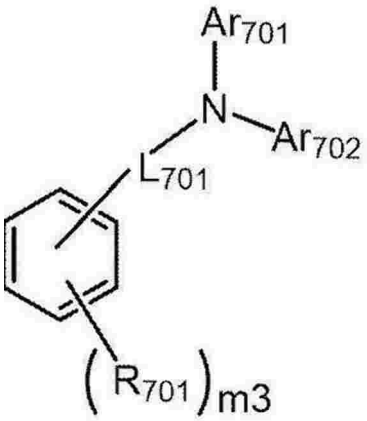
(7)

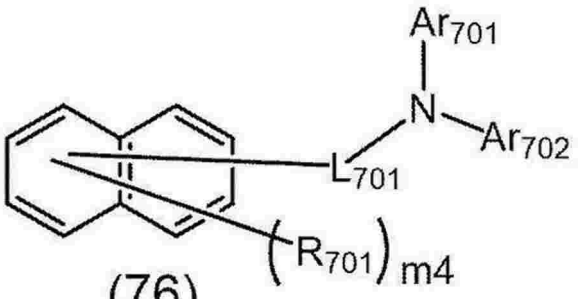
【０５０８】
【化１６０】


(72)


(73)


(74)


(75)


(76)

【０５０９】
（前記一般式（７）において、
ｒ環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式（７２）又は一般式（７３）で表される環であり、
ｑ環及びｓ環は、それぞれ独立に、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式（７４）で表される環であり、
ｐ環及びｔ環は、それぞれ独立に、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式（７５）又は一般式（７６）で表される構造であり、
X_7は、酸素原子、硫黄原子、又はNR_{702}である。
R_{701}が複数存在する場合、隣接する複数のR_{701}は、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないR_{701}及びR_{702}は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、
－Ｏ－（R_{904}）で表される基、
－Ｓ－（R_{905}）で表される基、
－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ar_{701}及びAr_{702}は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
L_{701}は、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキレン基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニレン基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニレン基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキレン基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の２価の複素環基であり、
$m1$は、０、１又は２であり、
$m2$は、０、１、２、３又は４であり、
$m3$は、それぞれ独立に、０、１、２又は３であり、
$m4$は、それぞれ独立に、０、１、２、３、４又は５であり、
R_{701}が複数存在する場合、複数のR_{701}は、互いに同一であるか、又は異なり、
X_7が複数存在する場合、複数のX_7は、互いに同一であるか、又は異なり、
R_{702}が複数存在する場合、複数のR_{702}は、互いに同一であるか、又は異なり、
Ar_{701}が複数存在する場合、複数のAr_{701}は、互いに同一であるか、又は異なり、
Ar_{702}が複数存在する場合、複数のAr_{702}は、互いに同一であるか、又は異なり、
L_{701}が複数存在する場合、複数のL_{701}は、互いに同一であるか、又は異なる。）

【０５１０】

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

【０５１１】

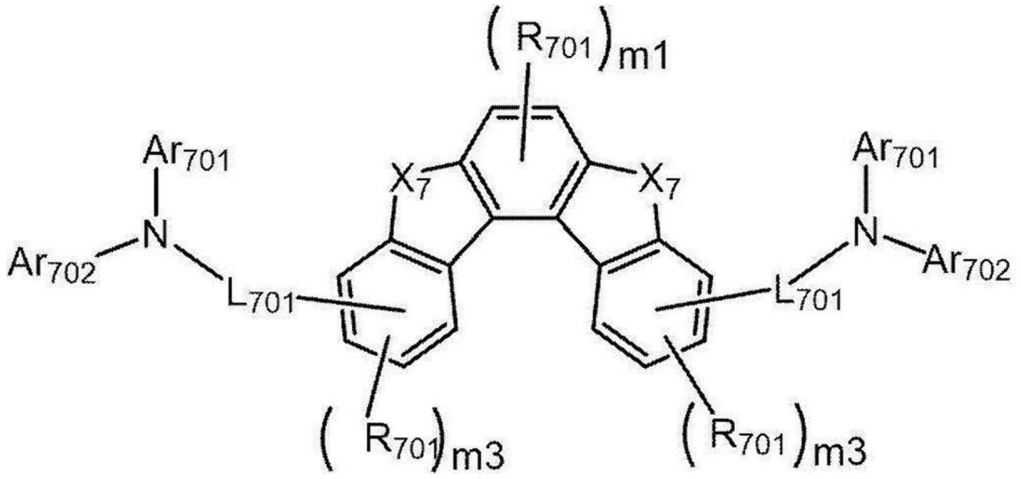
一実施形態において、ｒ環としての前記一般式（７２）又は一般式（７３）において、$m1=0$又は$m2=0$である。

【０５１２】

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

【０５１３】

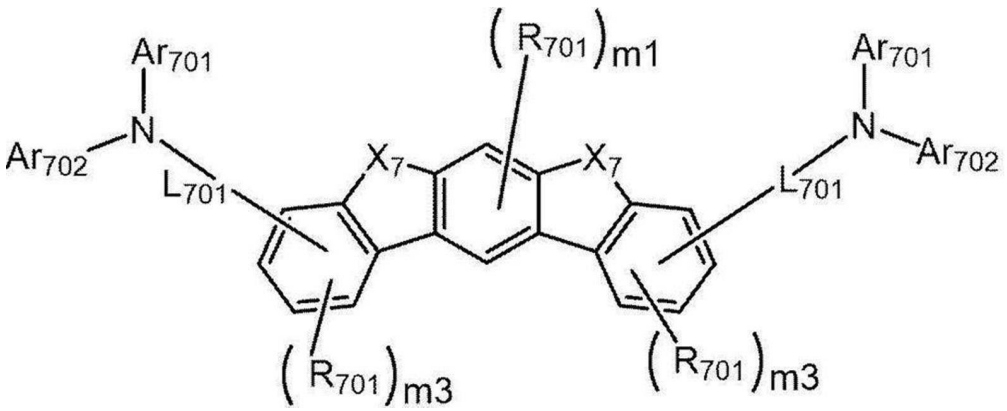
【化１６１】



(71-1)

【０５１４】

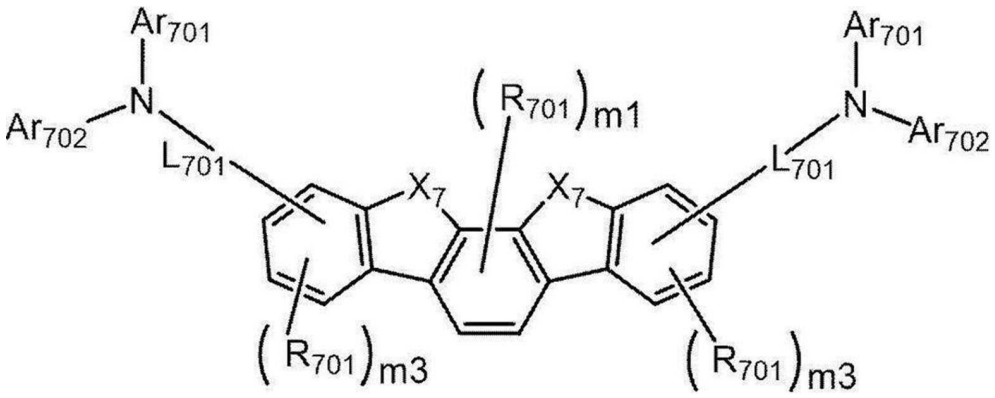
【化１６２】



(71-2)

【０５１５】

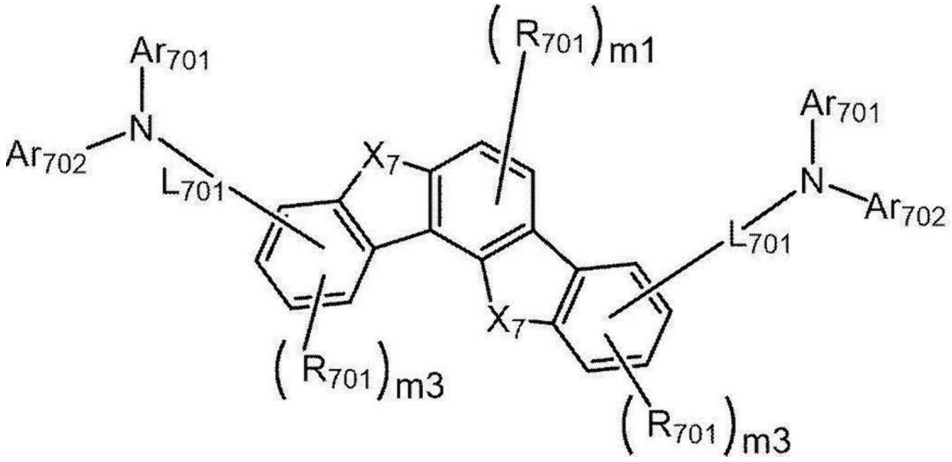
【化１６３】



(71-3)

【０５１６】

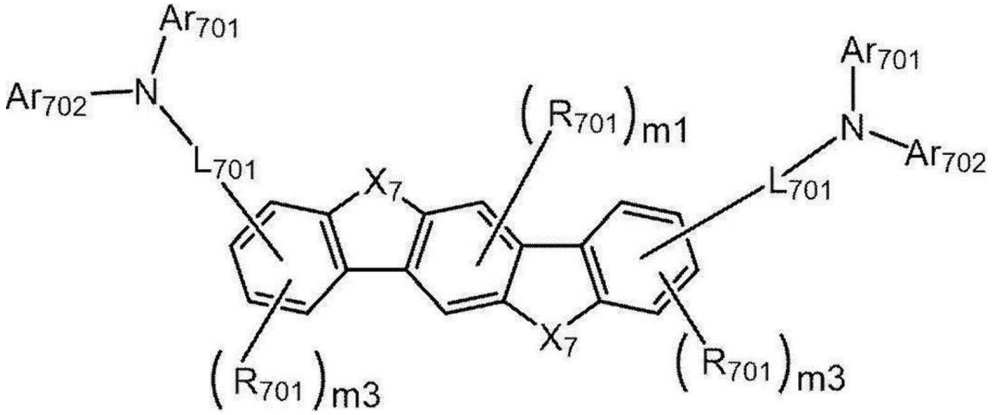
【化１６４】



(71-4)

【０５１７】

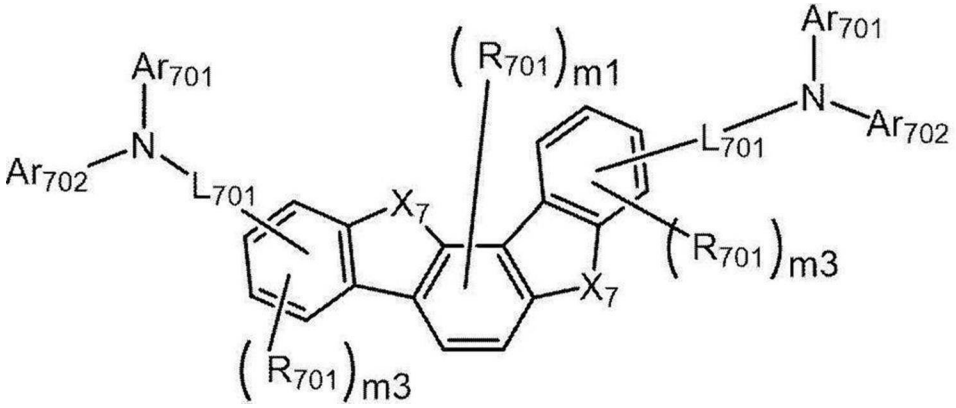
【化１６５】



(71-5)

【０５１８】

【化１６６】



(71-6)

【０５１９】

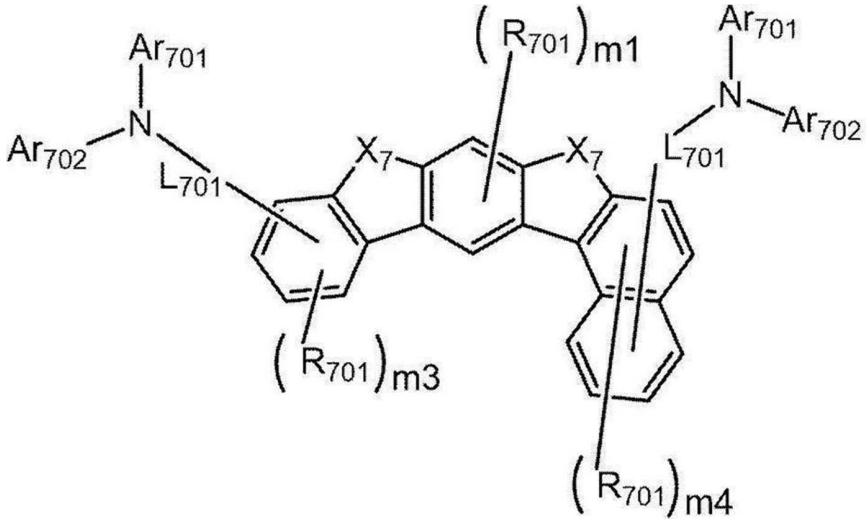
（前記一般式（７１－１）～一般式（７１－６）において、R_{701}、X_7、Ar_{701}、Ar_{702}、L_{701}、ｍ１及びｍ３は、それぞれ、前記一般式（７）におけるR_{701}、X_7、Ar_{701}、Ar_{702}、L_{701}、ｍ１及びｍ３と同義である。）

【０５２０】

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

【０５２１】

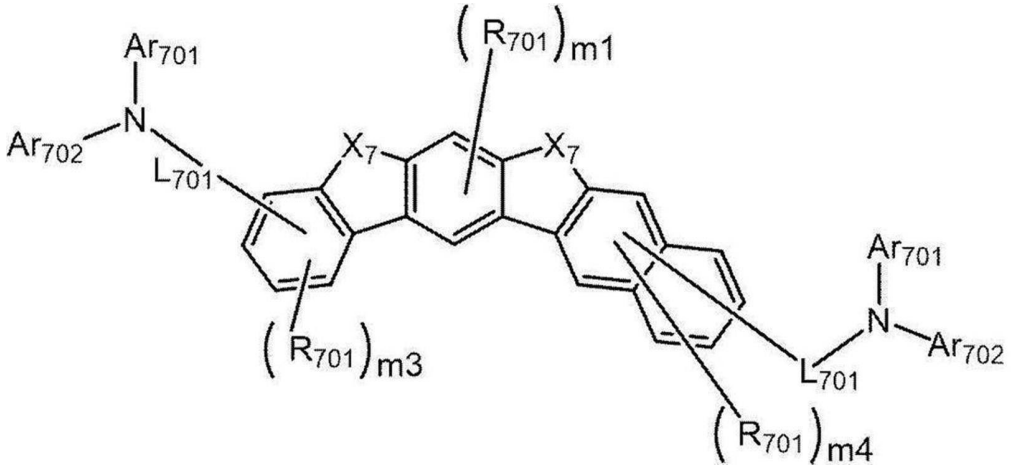
【化１６７】



(71-11)

【０５２２】

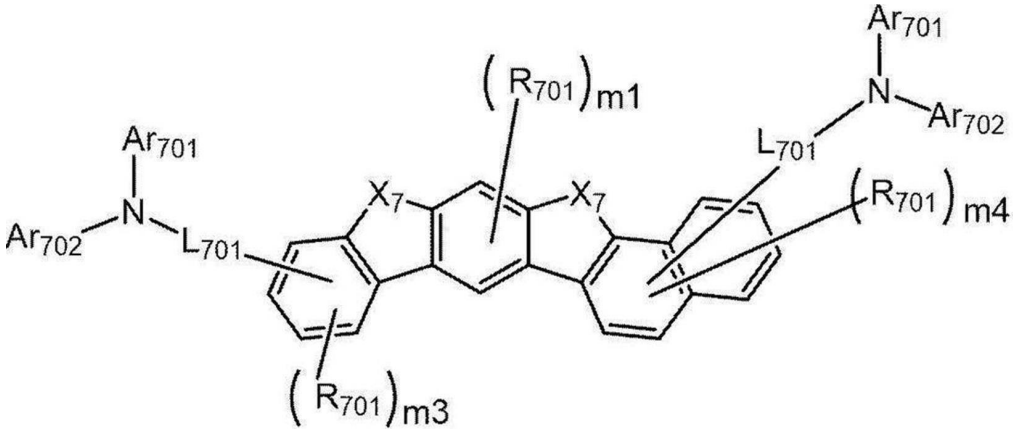
【化１６８】



(71-12)

【０５２３】

【化１６９】



(71-13)

【０５２４】

（前記一般式（７１－１１）～一般式（７１－１３）において、R_{701}、X_7、Ar_{701}、Ar_{702}、L_{701}、ｍ１、ｍ３及びｍ４は、それぞれ、前記一般式（７）におけるR_{701}、X_7、Ar_{701}、Ar_{702}、L_{701}、ｍ１、ｍ３及びｍ４と同義である。）

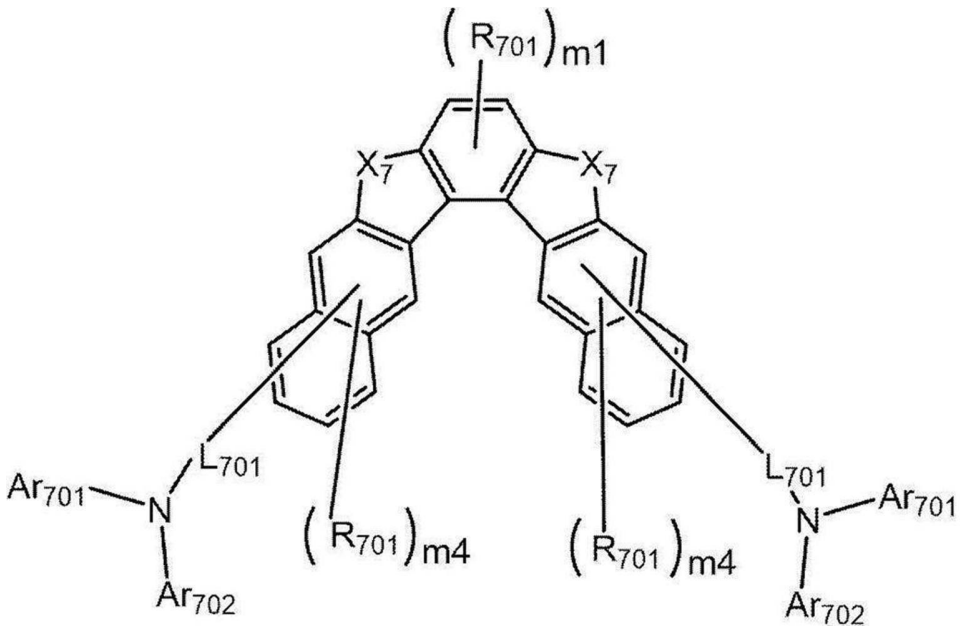
【０５２５】

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

～（７１－２５）のいずれかで表される。

【０５２６】

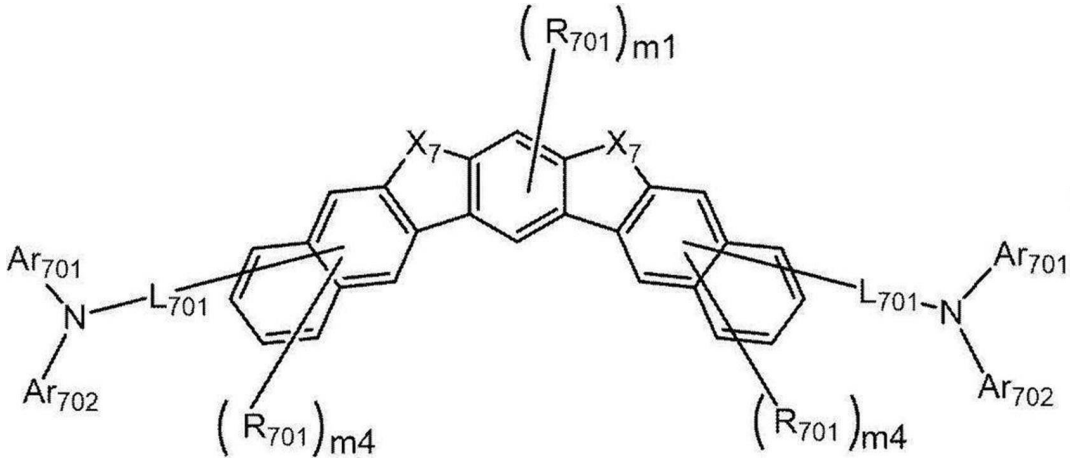
【化１７０】



(71-21)

【０５２７】

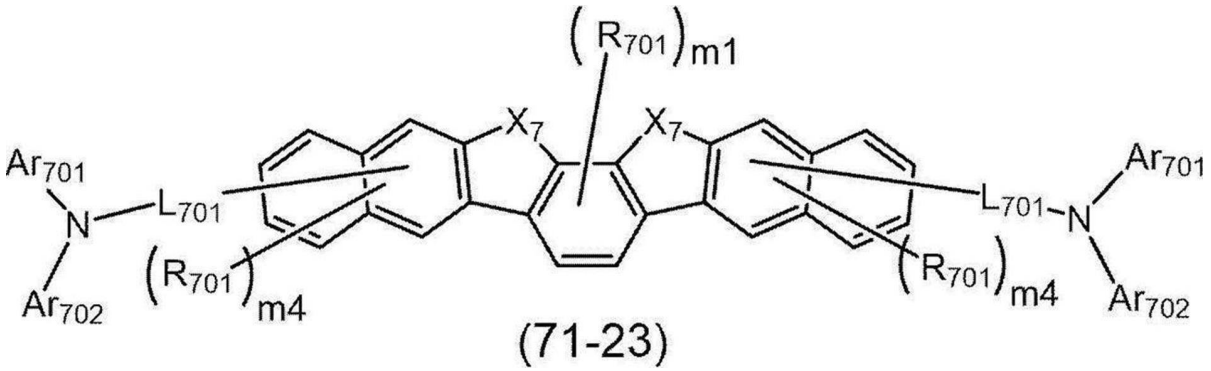
【化１７１】



(71-22)

【０５２８】

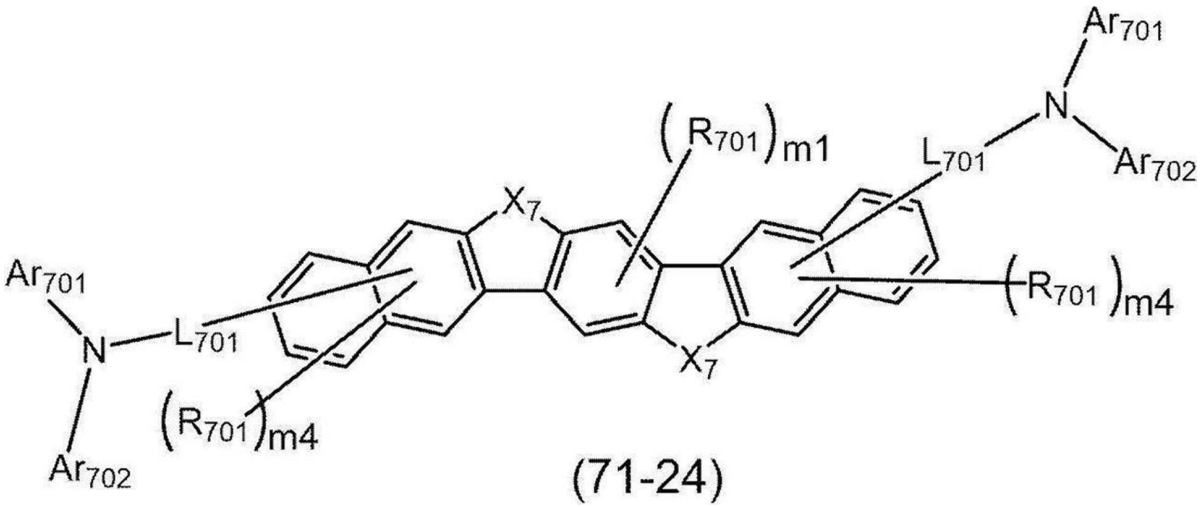
【化１７２】



(71-23)

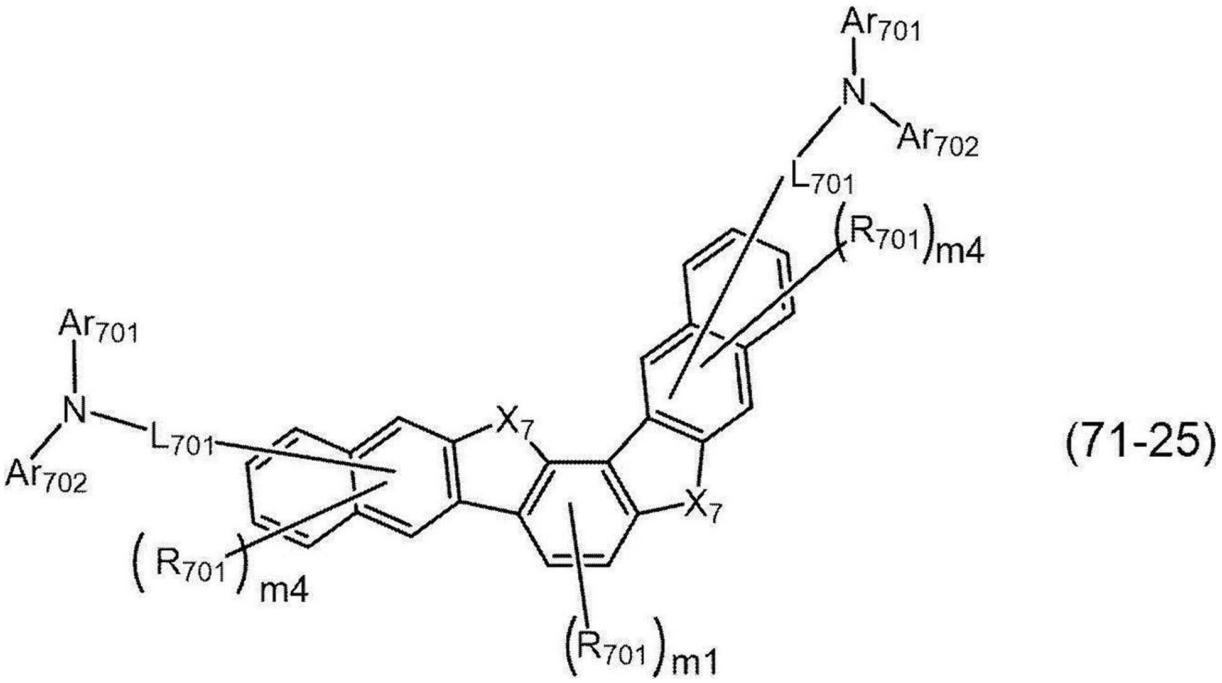
【０５２９】

【化１７３】



【０５３０】

【化１７４】



【０５３１】

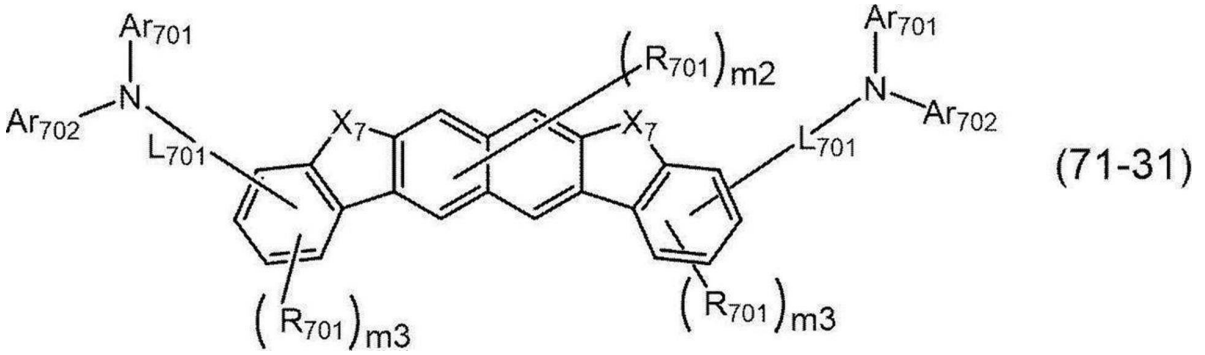
（前記一般式（７１－２１）～一般式（７１－２５）において、R_{701}、X_7、Ar_{701}、Ar_{702}、L_{701}、ｍ１及びｍ４は、それぞれ、前記一般式（７）におけるR_{701}、X_7、Ar_{701}、Ar_{702}、L_{701}、ｍ１及びｍ４と同義である。）

【０５３２】

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

【０５３３】

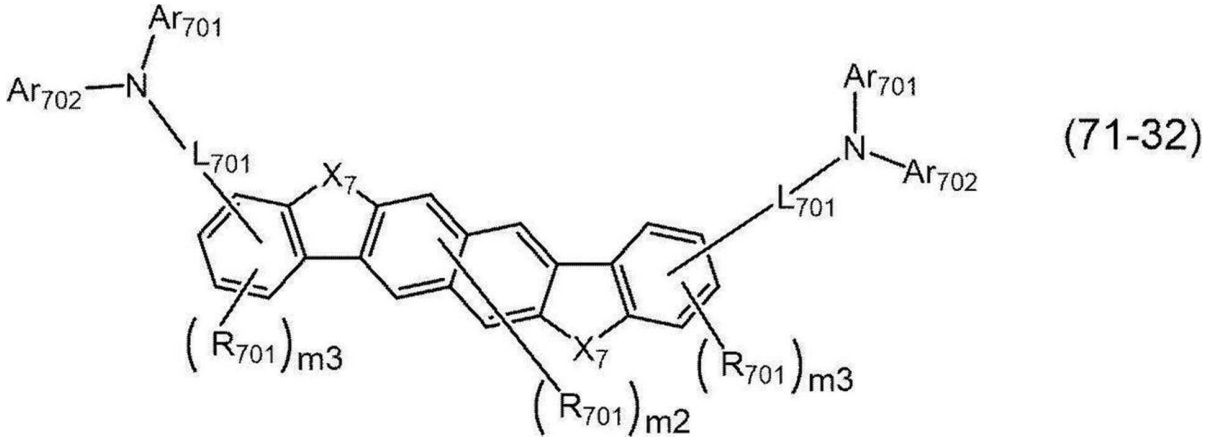
【化１７５】



(71-31)

【０５３４】

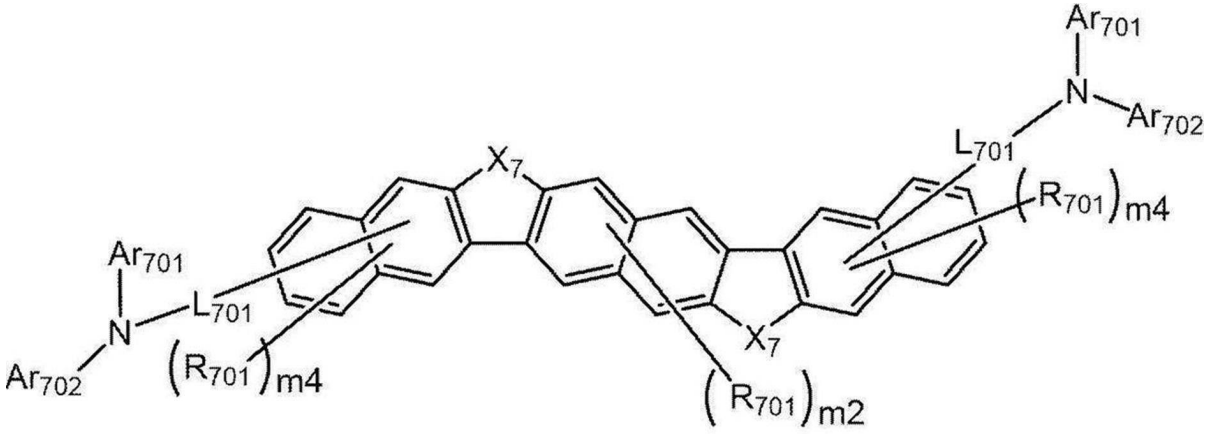
【化１７６】



(71-32)

【０５３５】

【化１７７】



(71-33)

【０５３６】

（前記一般式（７１－３１）～一般式（７１－３３）において、R_{701}、X_7、Ar_{701}、Ar_{702}、L_{701}、ｍ２～ｍ４は、それぞれ、前記一般式（７）におけるR_{701}、X_7、Ar_{701}、Ar_{702}、L_{701}、ｍ２～ｍ４と同義である。）

【０５３７】

一実施形態においては、Ar_{701}及びAr_{702}が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。

【０５３８】

一実施形態においては、Ar_{701}及びAr_{702}の一方が置換もしくは無置換の環形成

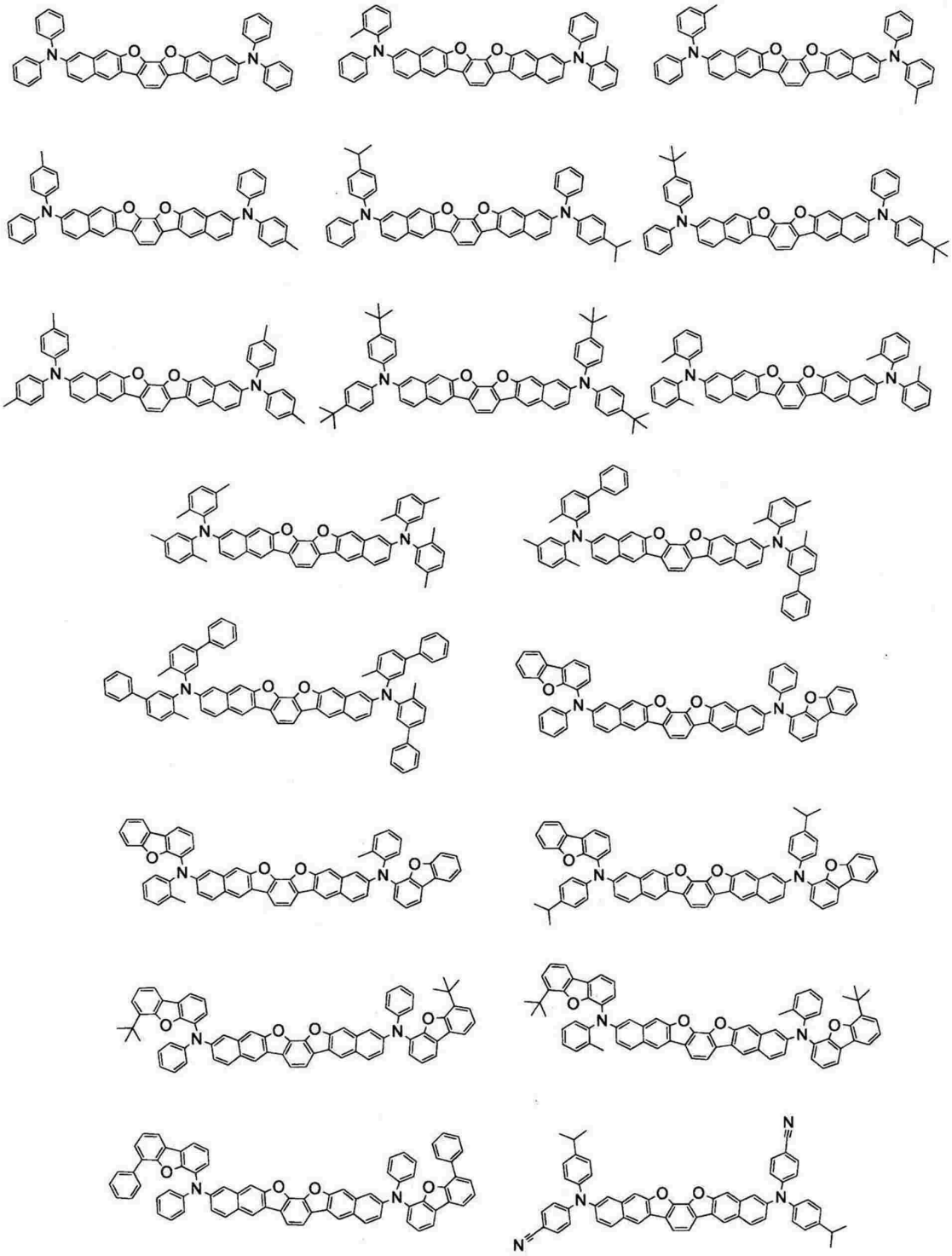
炭素数６～５０のアリール基であり、Ａｒ７０１及びＡｒ７０２の他方が置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。

【０５３９】

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

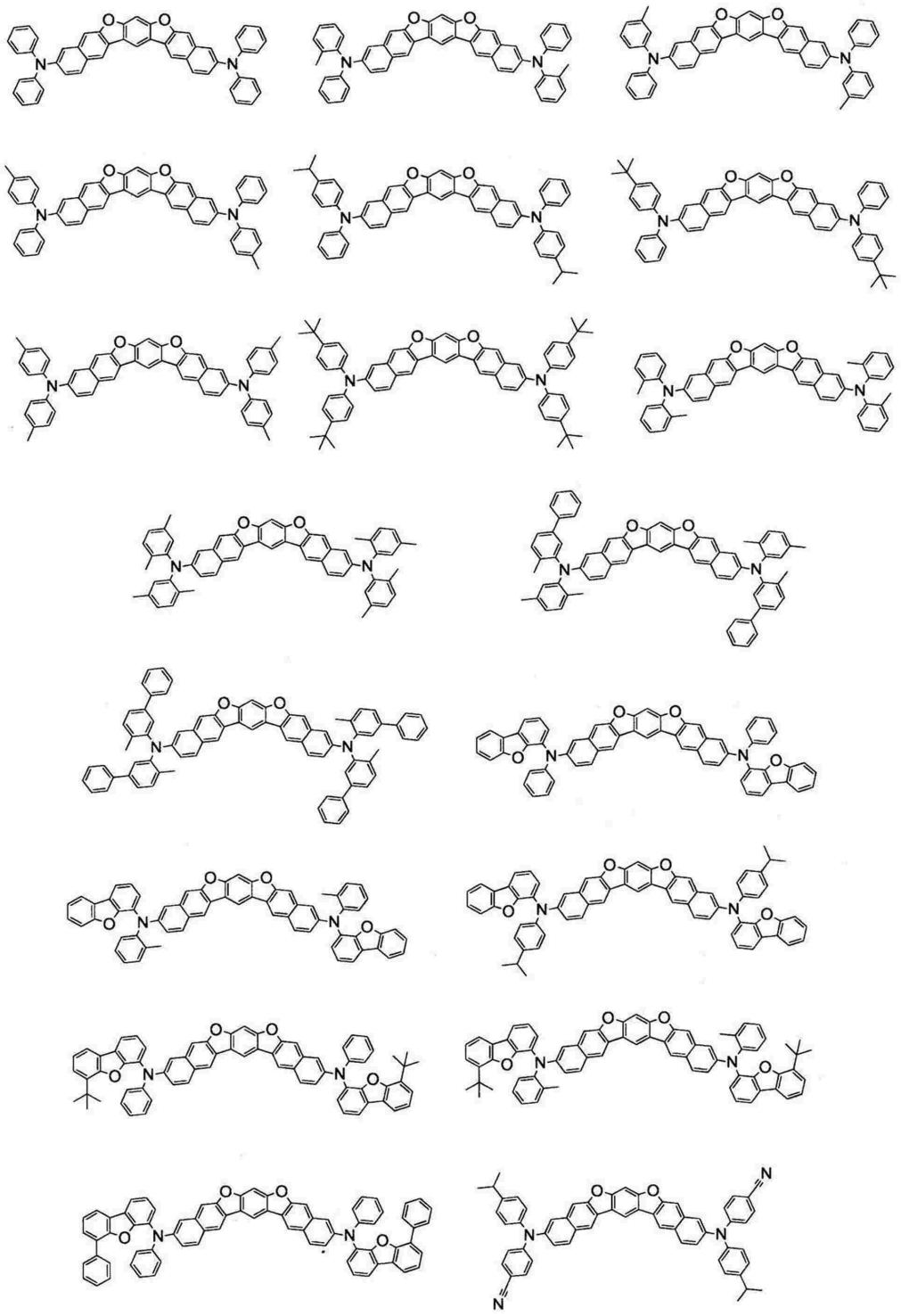
【０５４０】

【化１７８】



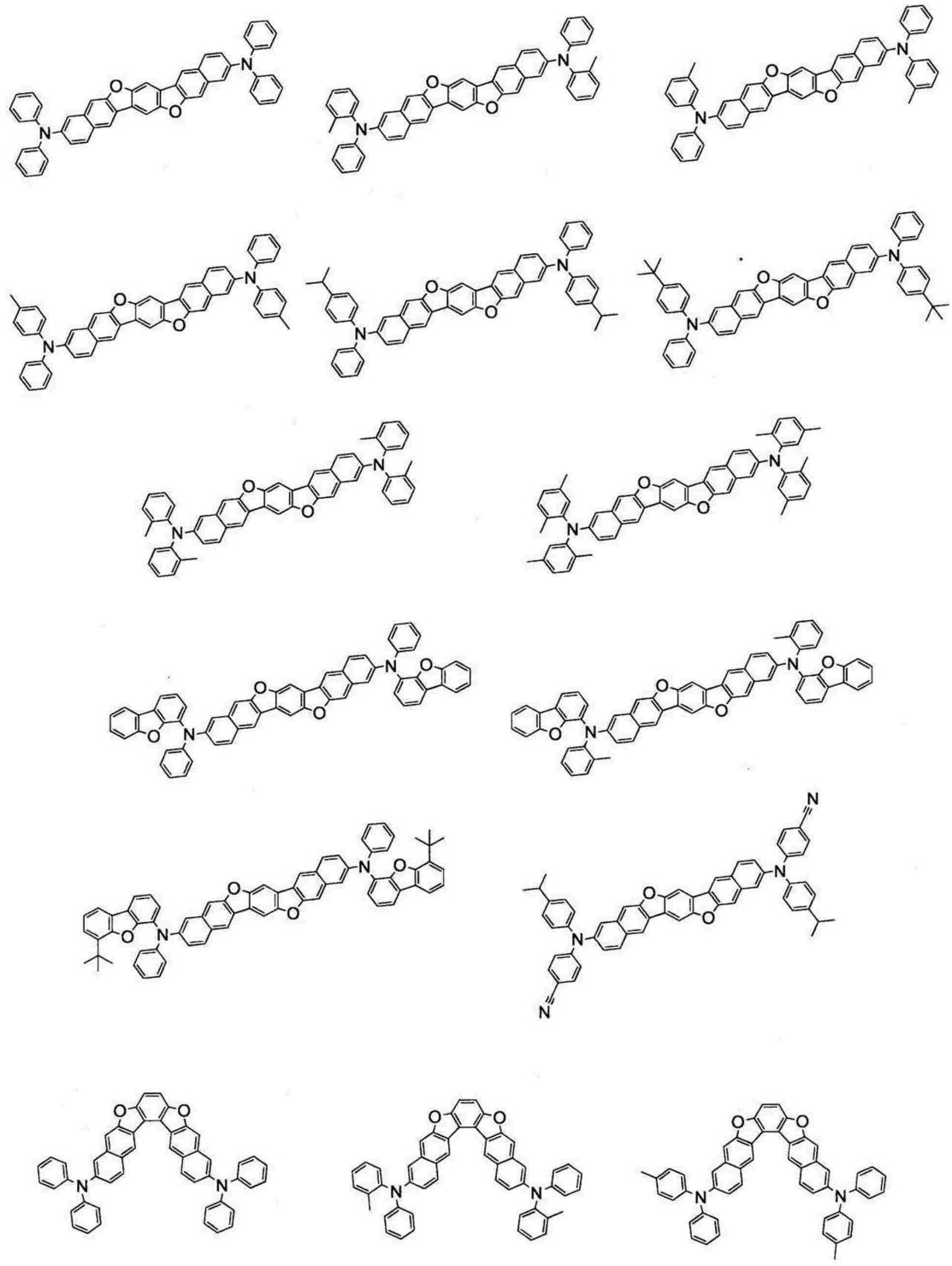
【０５４１】

【化１７９】



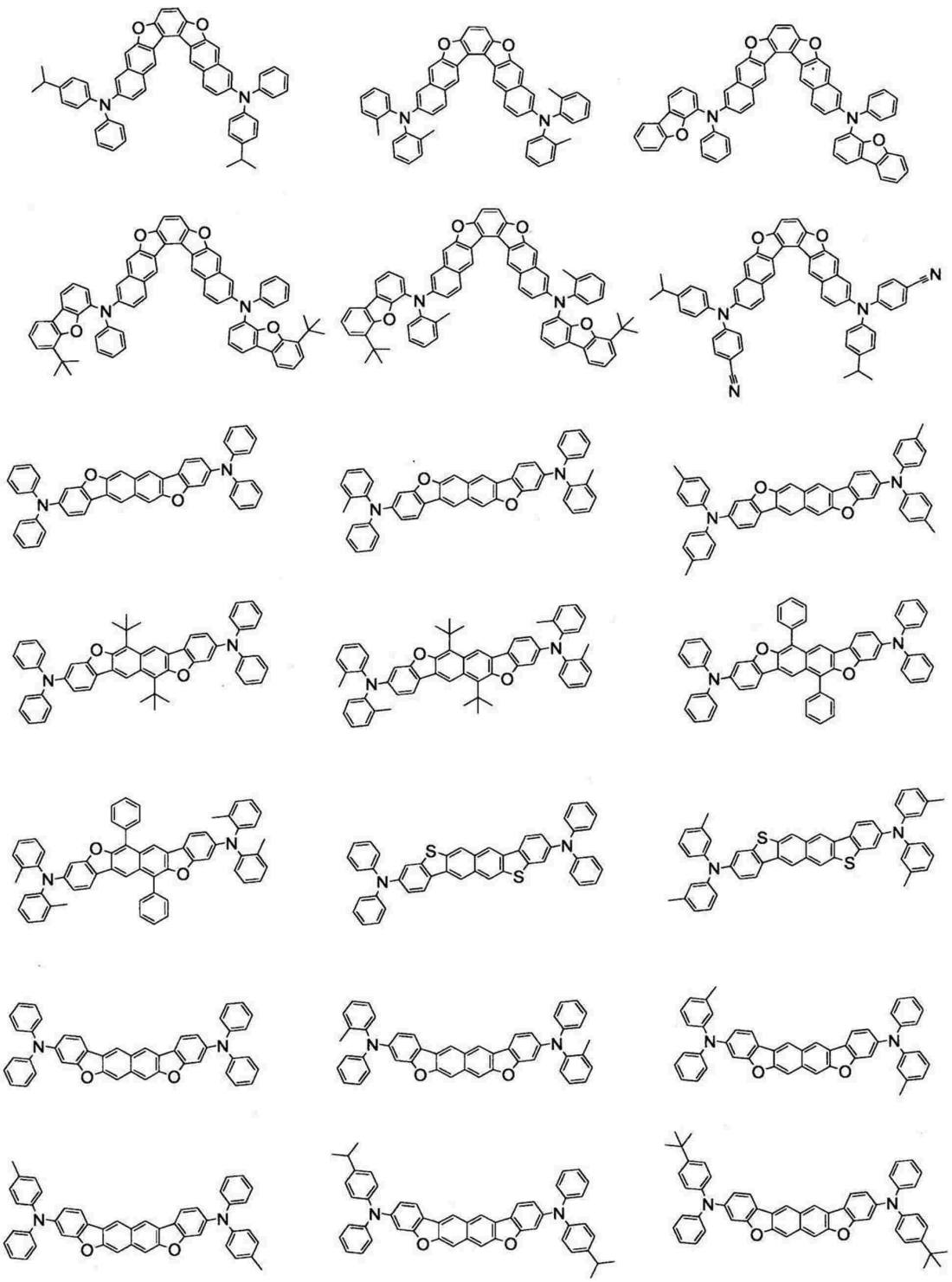
【０５４２】

【化１８０】



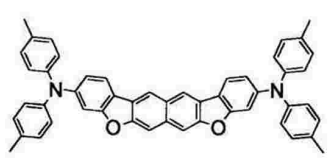
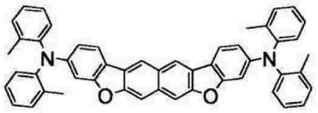
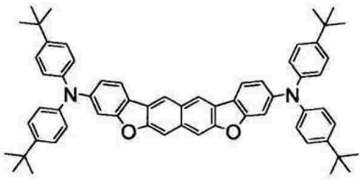
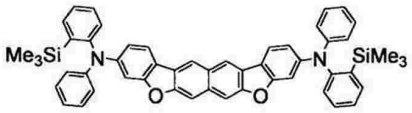
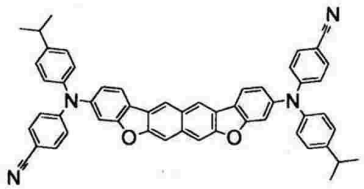
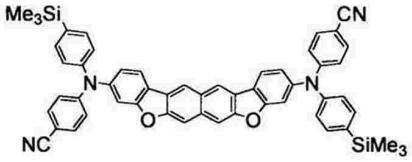
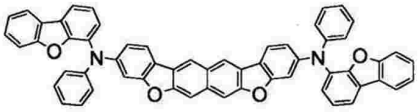
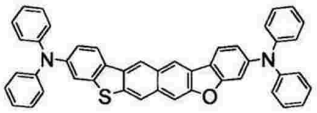
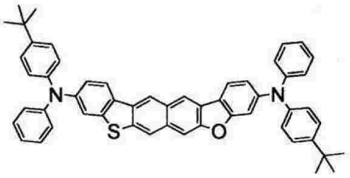
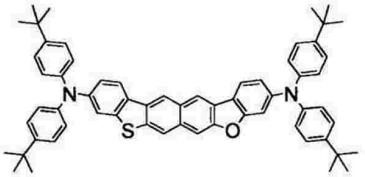
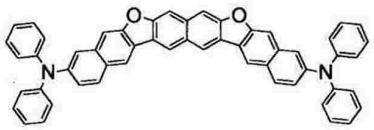
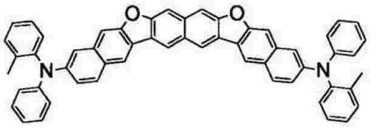
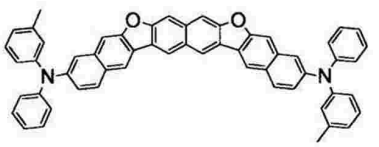
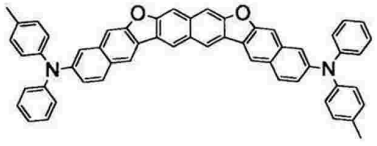
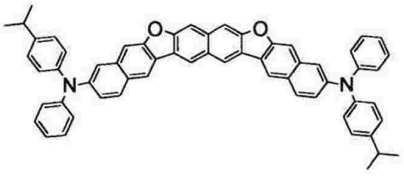
【０５４３】

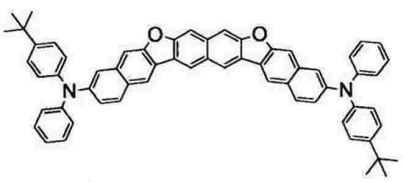
【化１８１】



【０５４４】

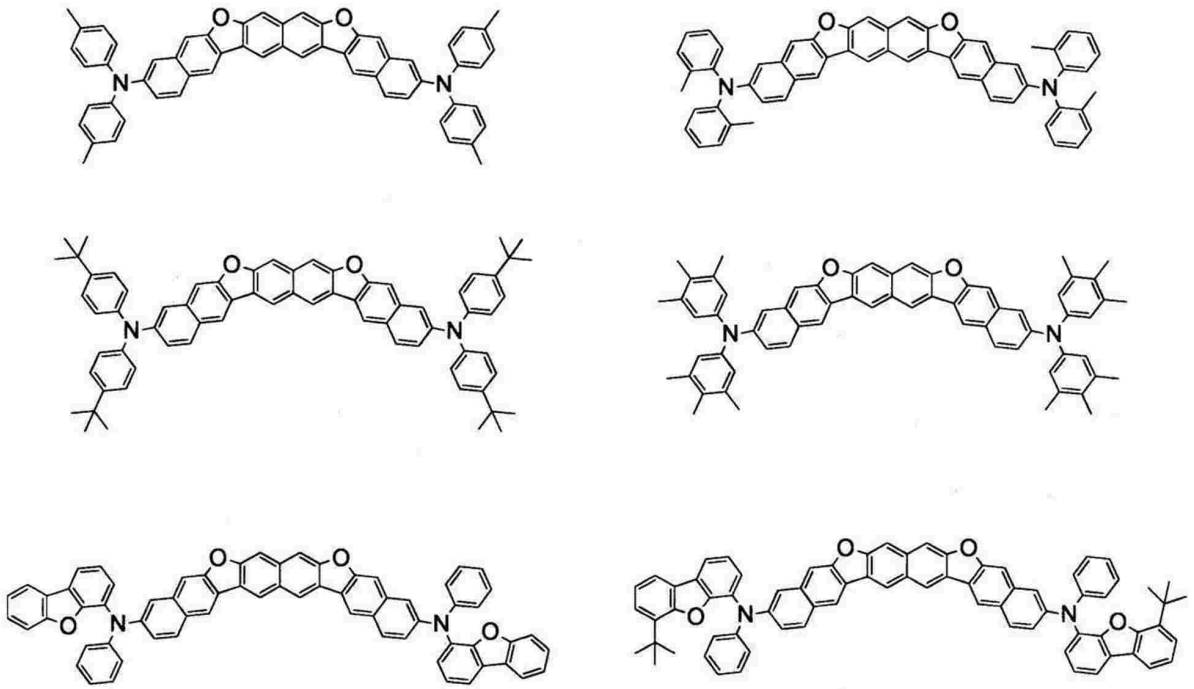
【化１８２】



【０５４５】

【化１８３】



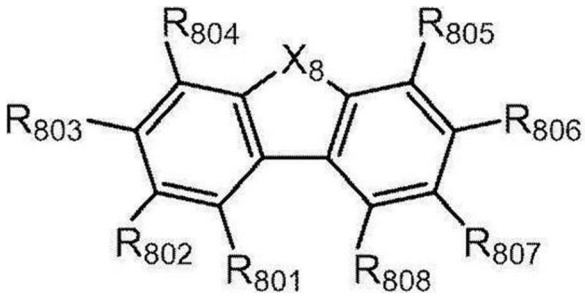
【０５４６】

（一般式（８）で表される化合物）

一般式（８）で表される化合物について説明する。

【０５４７】

【化１８４】



(8)

【０５４８】

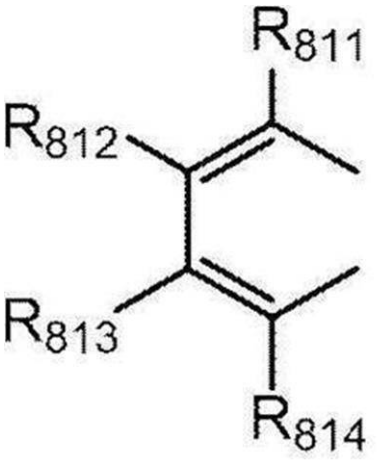
（前記一般式（８）において、

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

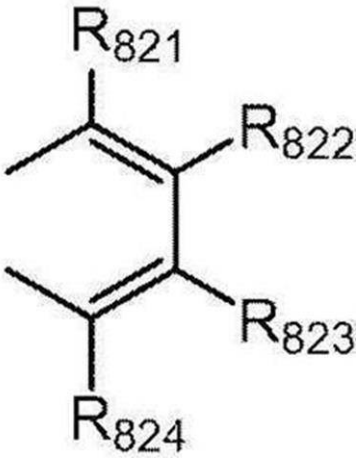
R_{805}とR_{806}、R_{806}とR_{807}、及びR_{807}とR_{808}の少なくとも一組は、互いに結合して下記一般式（８３）で示される２価の基を形成する。）

【０５４９】

【化１８５】



(82)



(83)

【０５５０】

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

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

X_8は、酸素原子、硫黄原子、又はNR_{809}であり、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、

－Ｏ－（R_{904}）で表される基、

－Ｓ－（R_{905}）で表される基、

－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

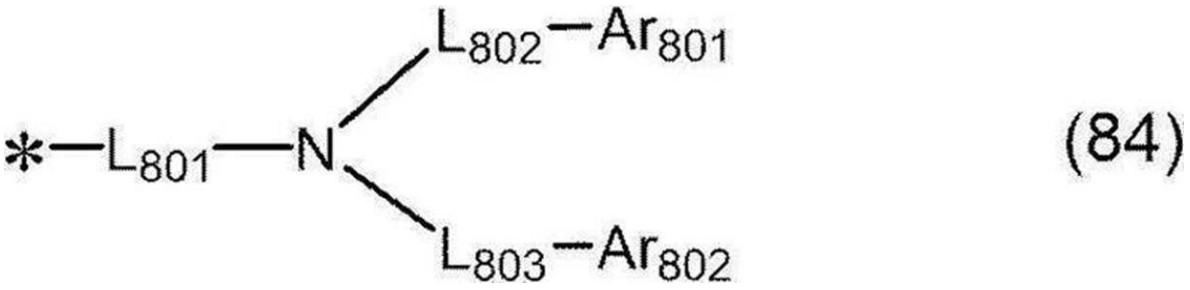
ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０５５１】

【化１８６】



(84)

【０５５２】

（前記一般式（８４）において、

Ａｒ８０１及びＡｒ８０２は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

Ｌ８０１～Ｌ８０３は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の２価の複素環基、又は

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

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

【０５５３】

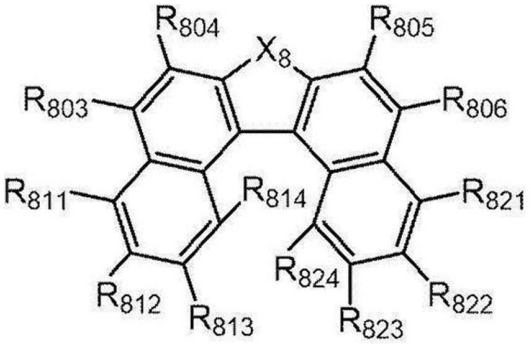
前記一般式（８）において、前記一般式（８２）で示される２価の基及び一般式（８３）で示される２価の基が形成される位置は特に限定されず、Ｒ８０１～Ｒ８０８の可能な位置において当該基を形成し得る。

【０５５４】

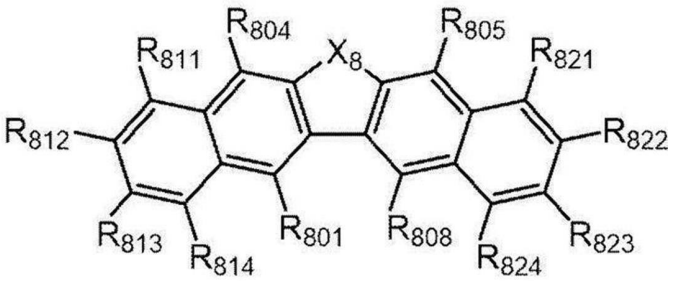
一実施形態において、前記一般式（８）で表される化合物は、下記一般式（８１－１）～（８１－６）のいずれかで表される。

【０５５５】

【化１８７】



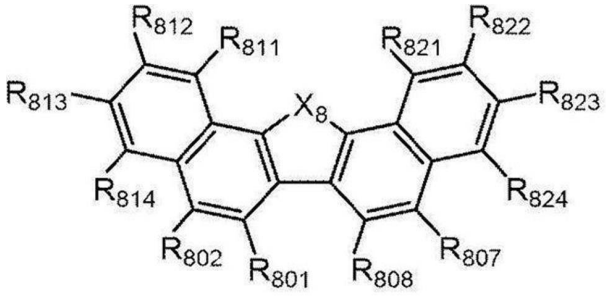
(81-1)



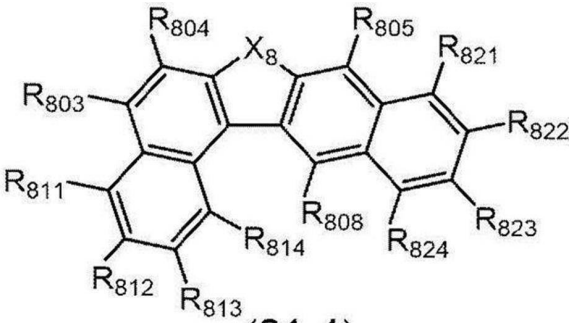
(81-2)

【０５５６】

【化１８８】



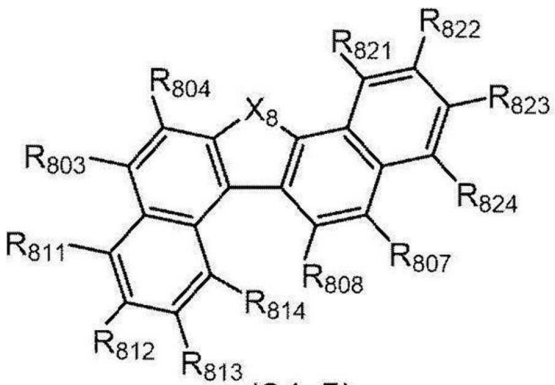
(81-3)



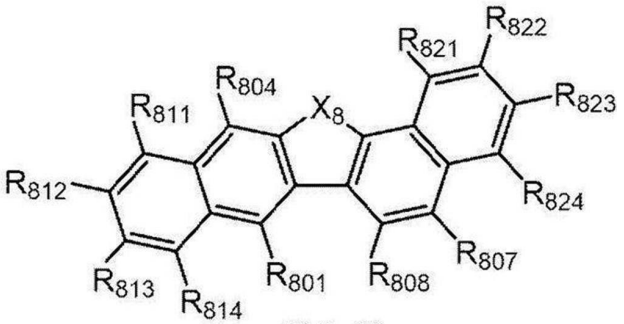
(81-4)

【０５５７】

【化１８９】



(81-5)



(81-6)

【０５５８】

（前記一般式（８１－１）～一般式（８１－６）において、

Ｘ８は、前記一般式（８）におけるＸ８と同義であり、

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

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

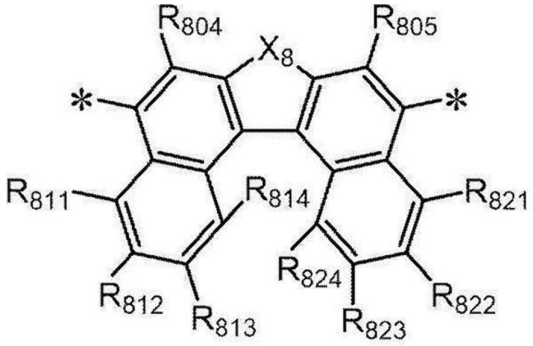
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０５５９】

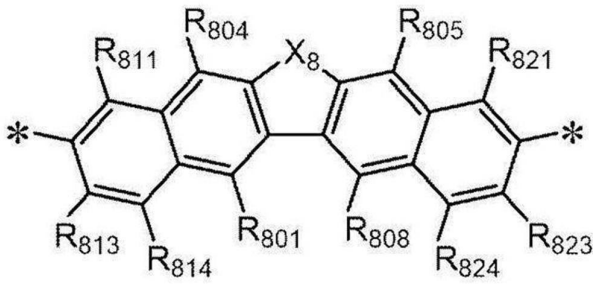
一実施形態において、前記一般式（８）で表される化合物は、下記一般式（８１－７）～（８１－１８）のいずれかで表される。

【０５６０】

【化１９０】



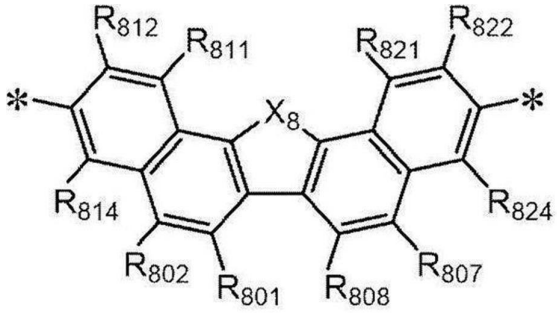
(81-7)



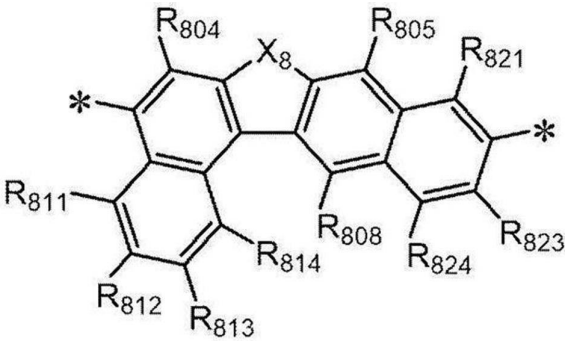
(81-8)

【０５６１】

【化１９１】



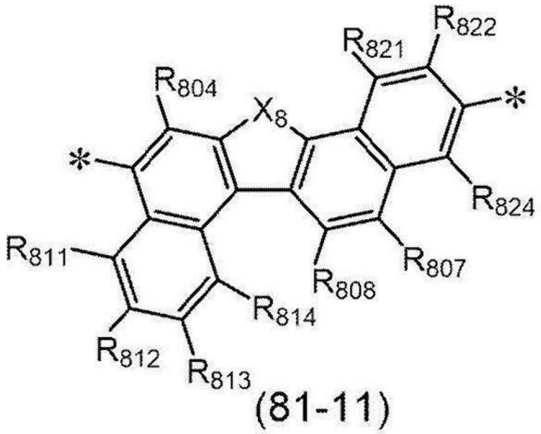
(81-9)



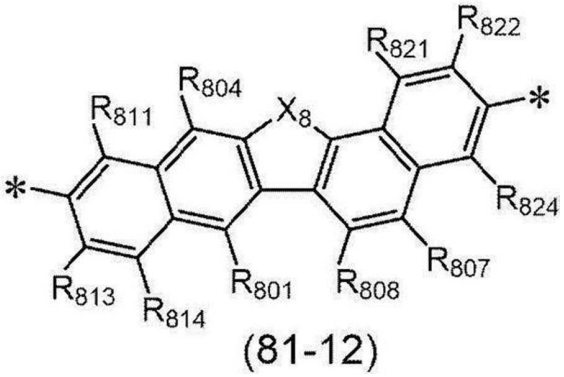
(81-10)

【０５６２】

【化１９２】



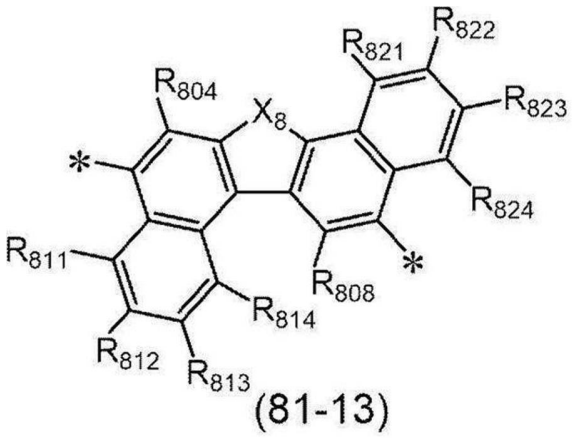
(81-11)



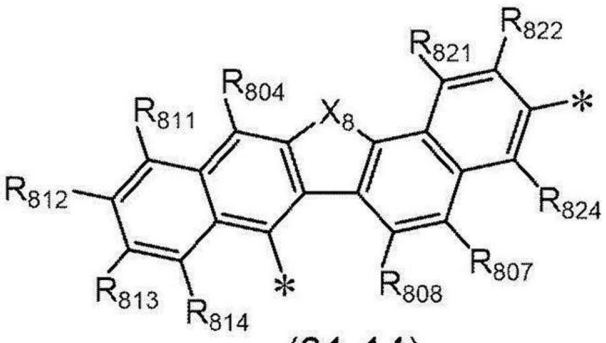
(81-12)

【０５６３】

【化１９３】



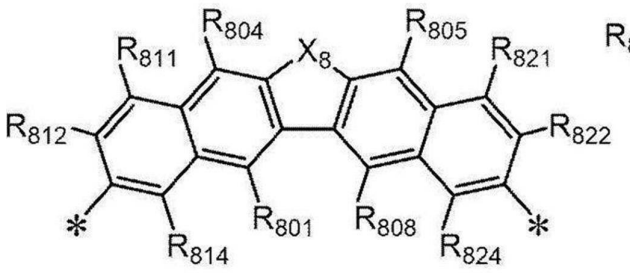
(81-13)



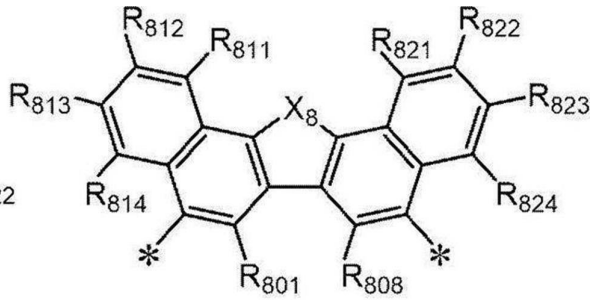
(81-14)

【０５６４】

【化１９４】



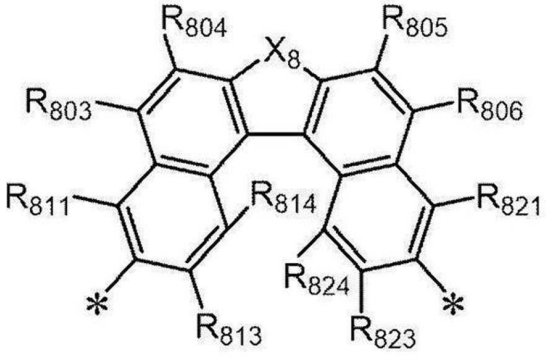
(81-15)



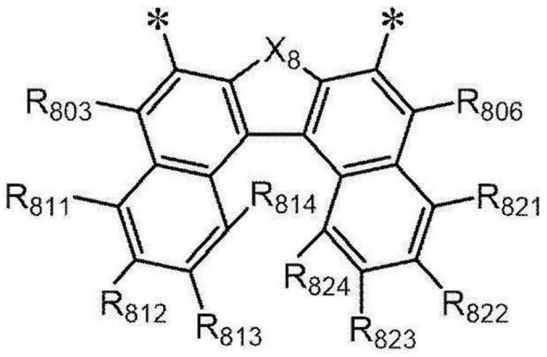
(81-16)

【０５６５】

【化１９５】



(81-17)



(81-18)

【０５６６】

（前記一般式（８１－７）～一般式（８１－１８）において、

Ｘ８は、前記一般式（８）におけるＸ８と同義であり、

＊は、前記一般式（８４）で表される１価の基と結合する単結合であり、

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

【０５６７】

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

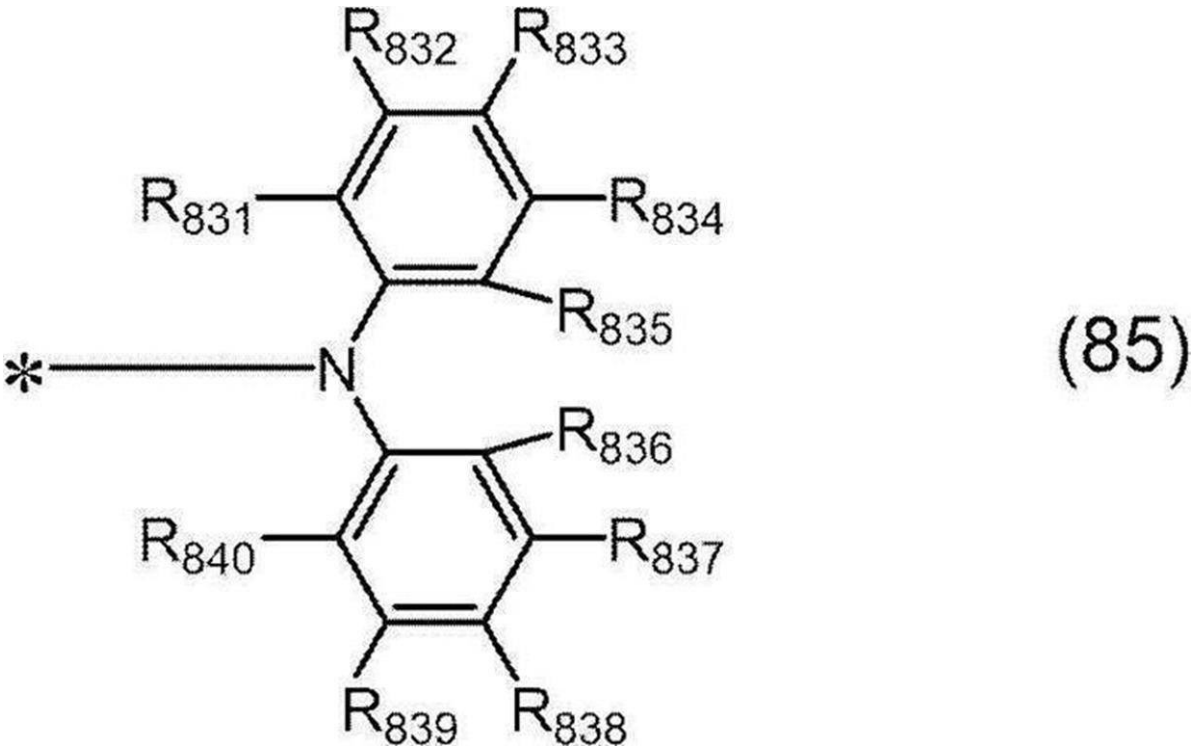
で表される１価の基ではないＲ８１１～Ｒ８１４及びＲ８２１～Ｒ８２４は、好ましくは、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。

【０５６８】

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

【０５６９】

【化１９６】

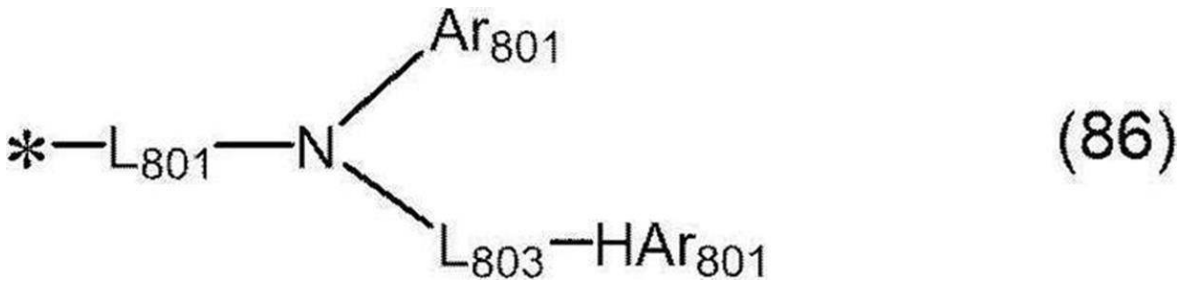


(85)

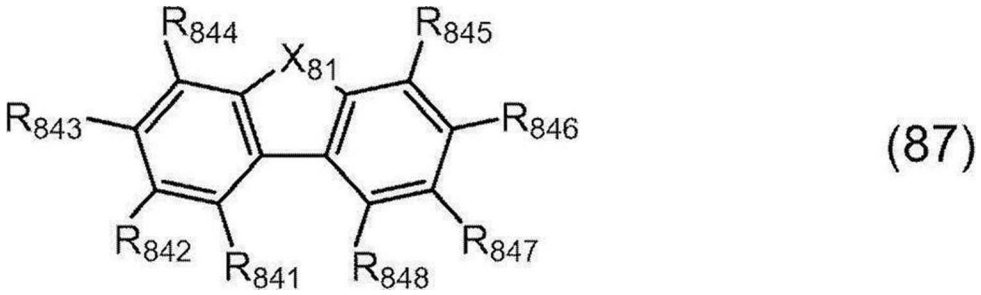
【０５７０】

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

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
前記一般式（８５）中の＊は、前記一般式（８４）中の＊と同義である。）
【０５７１】
【化１９７】

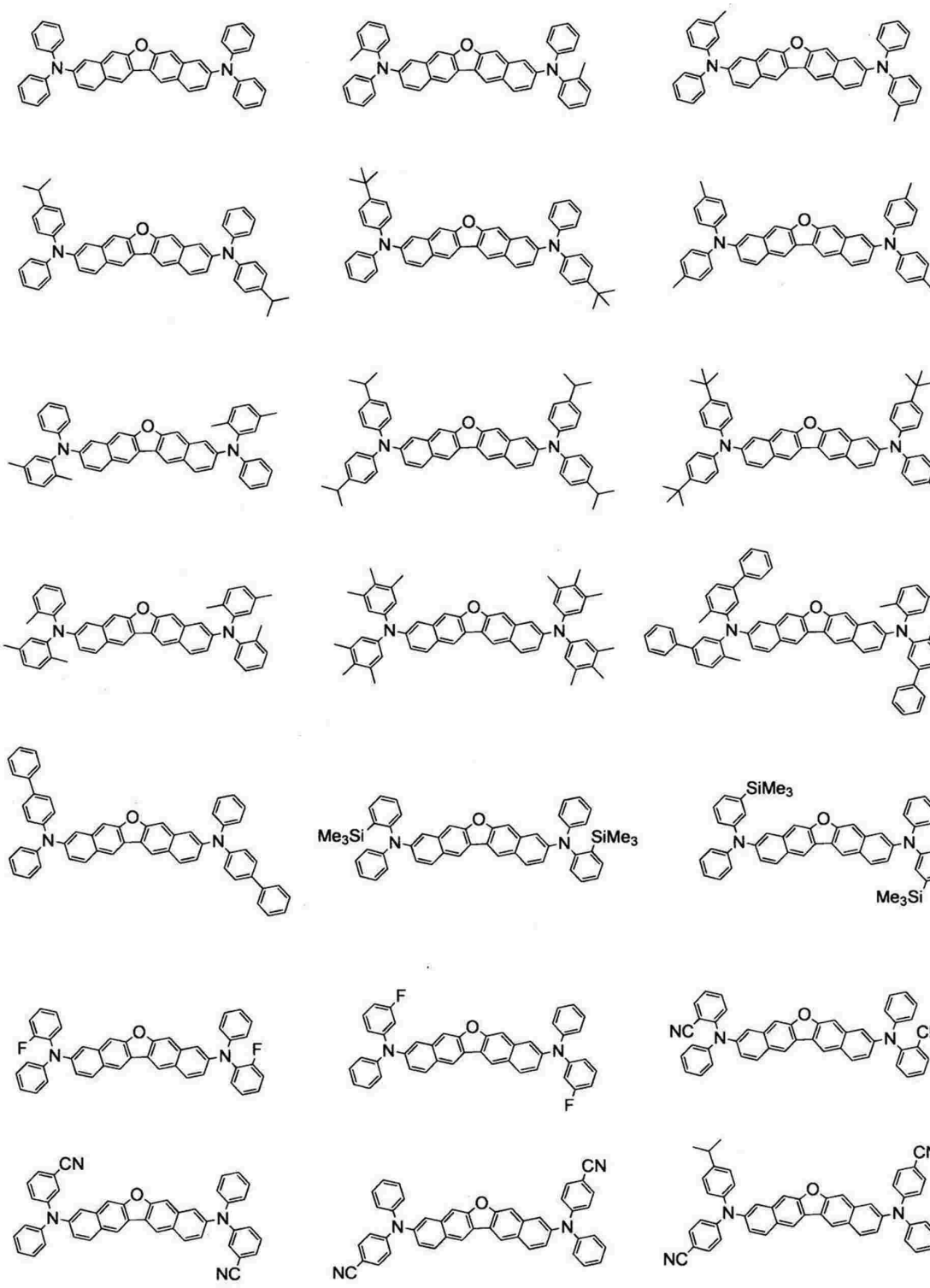


【０５７２】
（前記一般式（８６）において、
Ar_{801}、L_{801}及びL_{803}は、前記一般式（８４）におけるAr_{801}、L_{801}及びL_{803}と同義であり、
HAr_{801}は、下記一般式（８７）で表される構造である。）
【０５７３】
【化１９８】



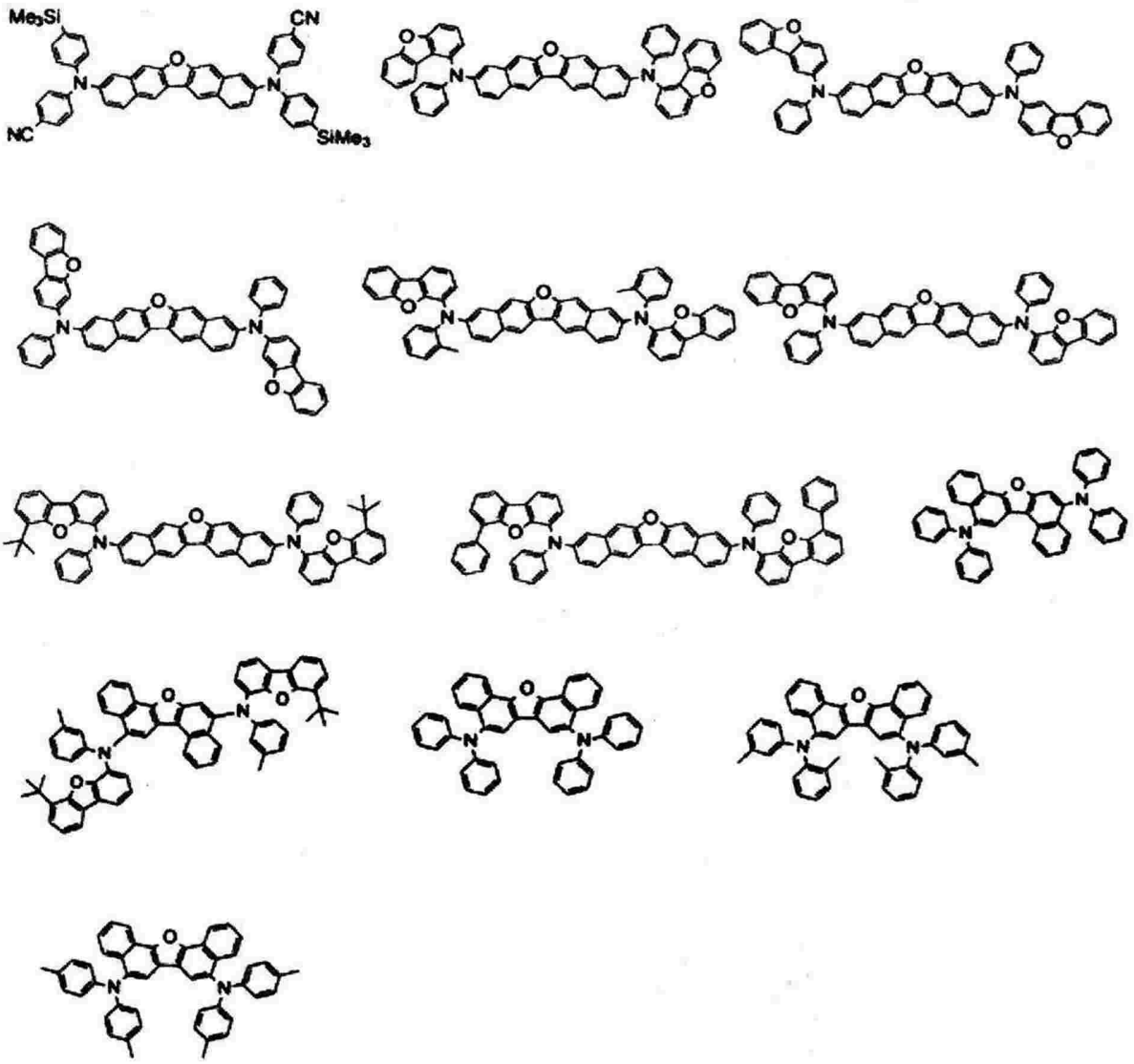
【０５７４】
（前記一般式（８７）において、
X_{81}は、酸素原子又は硫黄原子であり、
R_{841}～R_{848}のいずれか１つは、L_{803}に結合する単結合であり、
単結合ではないR_{841}～R_{848}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（R_{901}）（R_{902}）（R_{903}）で表される基、
－Ｏ－（R_{904}）で表される基、
－Ｓ－（R_{905}）で表される基、
－Ｎ（R_{906}）（R_{907}）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）
【０５７５】
前記一般式（８）で表される化合物としては、国際公開第２０１４／１０４１４４号に記載の化合物の他、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

【０５７６】
【化１９９】



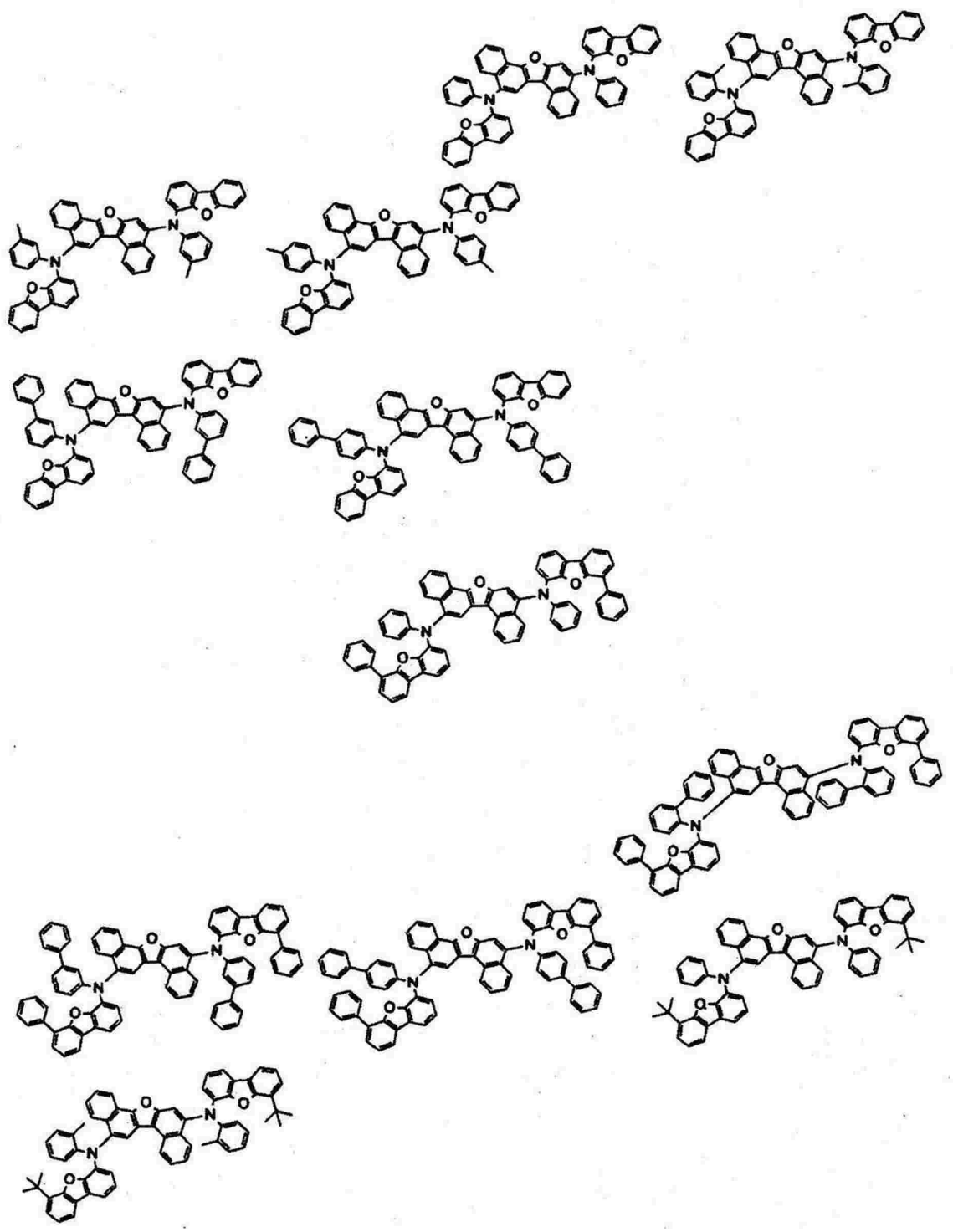
【０５７７】

【化２００】



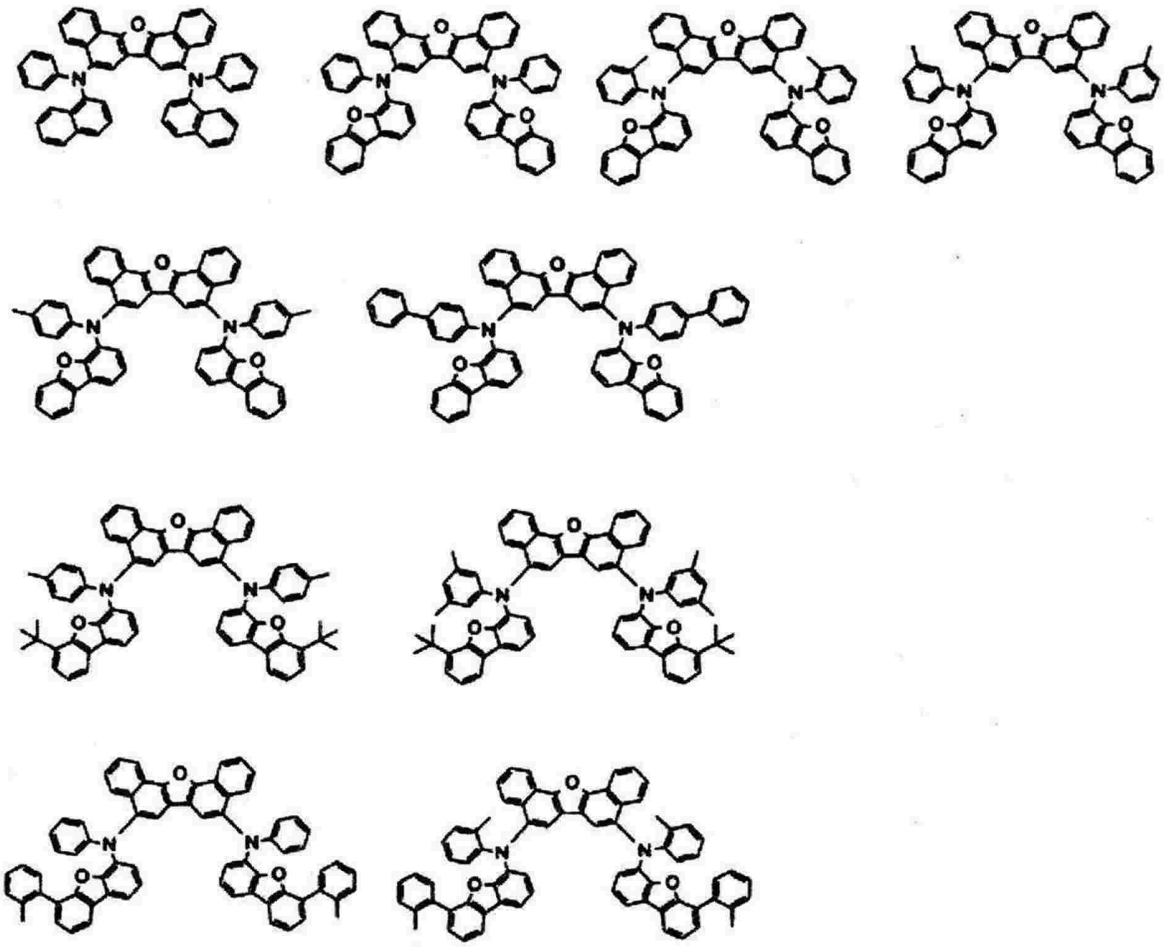
【０５７８】

【化２０１】



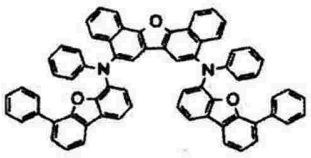
【０５７９】

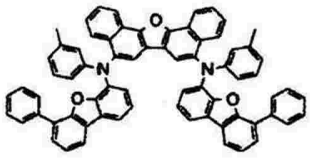
【化２０２】

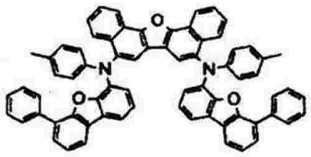


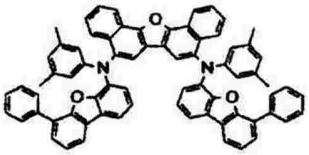
【０５８０】

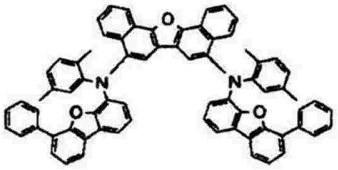
【化２０３】

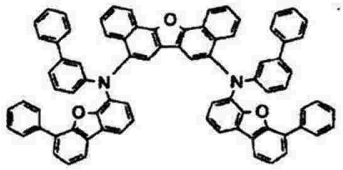


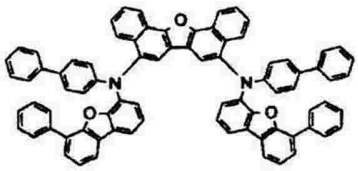


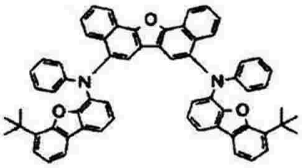






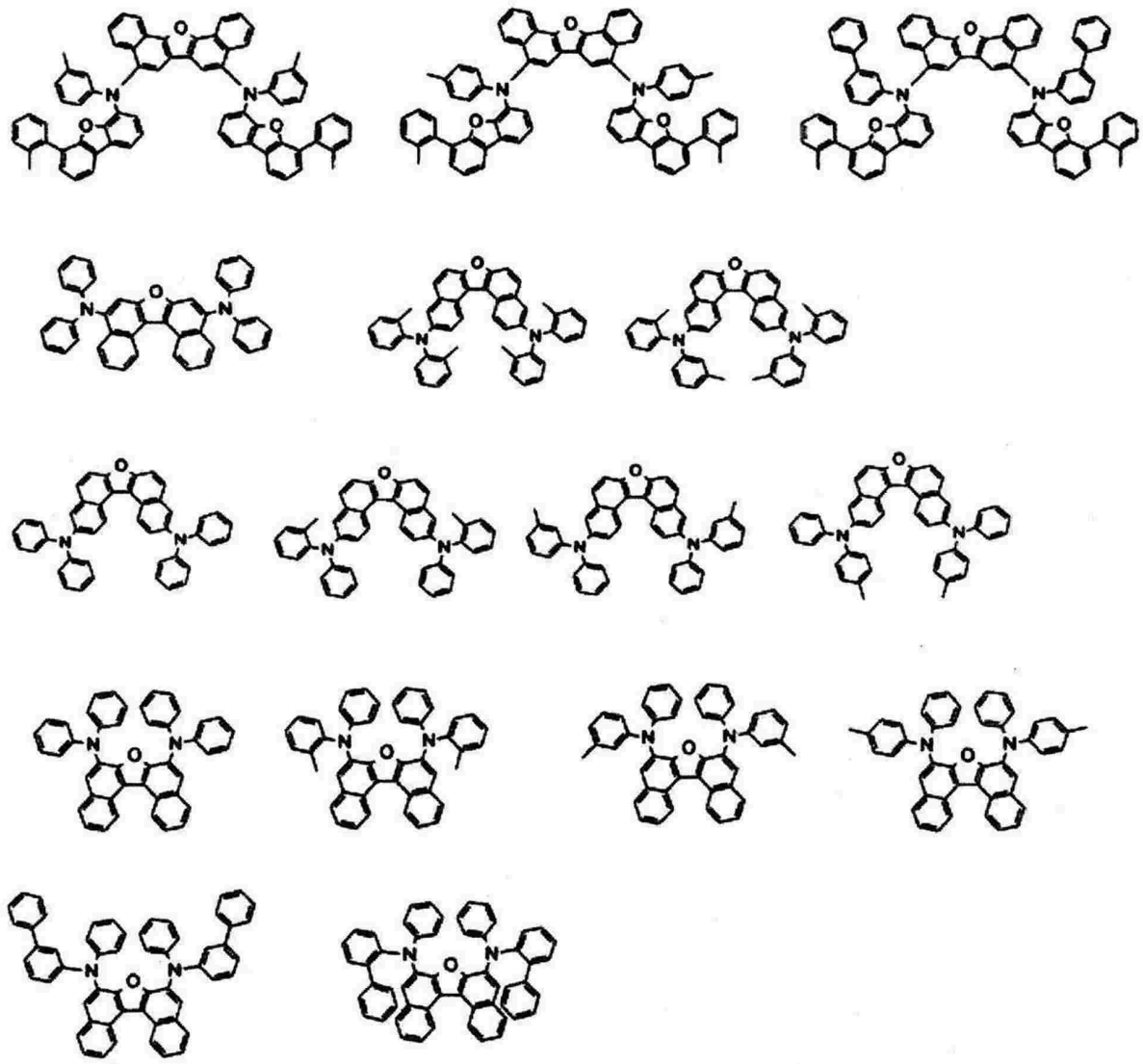






【０５８１】

【化２０４】



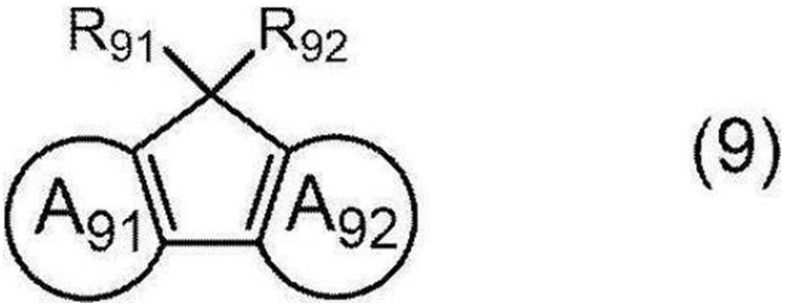
【０５８２】

（一般式（９）で表される化合物）

一般式（９）で表される化合物について説明する。

【０５８３】

【化２０５】



(9)

【０５８４】

（前記一般式（９）において、

Ａ９１環及びＡ９２環は、それぞれ独立に、

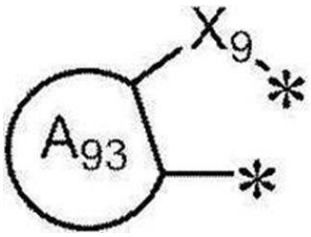
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０の芳香族炭化水素環、又は、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環であり、

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

【０５８５】

【化２０６】



(92)

【０５８６】

（前記一般式（９２）において、
Ａ９３環は、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０の芳香族炭化水素環、又は、
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環であり、
Ｘ９は、ＮＲ９３、Ｃ（Ｒ９４）（Ｒ９５）、Ｓｉ（Ｒ９６）（Ｒ９７）、Ｇｅ（Ｒ９８）（Ｒ９９）、酸素原子、硫黄原子又はセレン原子であり、
Ｒ９１及びＲ９２は、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、
前記単環を形成せず、かつ前記縮合環を形成しないＲ９１及びＲ９２、並びにＲ９３～Ｒ９９は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０５８７】

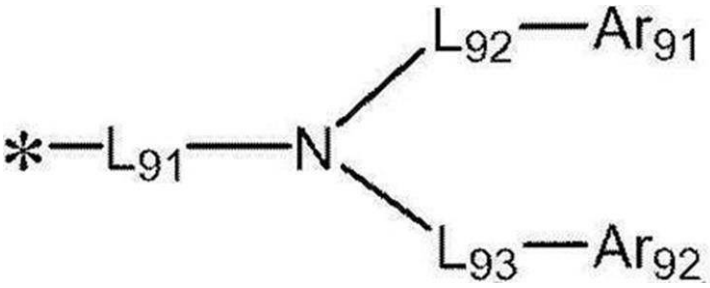
Ａ９１環及びＡ９２環からなる群から選択される１以上の環は、前記一般式（９２）で表される構造の＊と結合する。即ち、一実施形態において、Ａ９１環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式（９２）で表される構造の＊と結合する。また、一実施形態において、Ａ９２環の前記芳香族炭化水素環の環形成炭素原子、又は前記複素環の環形成原子は、前記一般式（９２）で表される構造の＊と結合する。

【０５８８】

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

【０５８９】

【化２０７】



(93)

【０５９０】

（前記一般式（９３）において、

Ａｒ$_{91}$及びＡｒ$_{92}$は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

Ｌ$_{91}$～Ｌ$_{93}$は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の２価の複素環基、又は

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

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

【０５９１】

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

【０５９２】

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

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

【０５９３】

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

【０５９４】

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

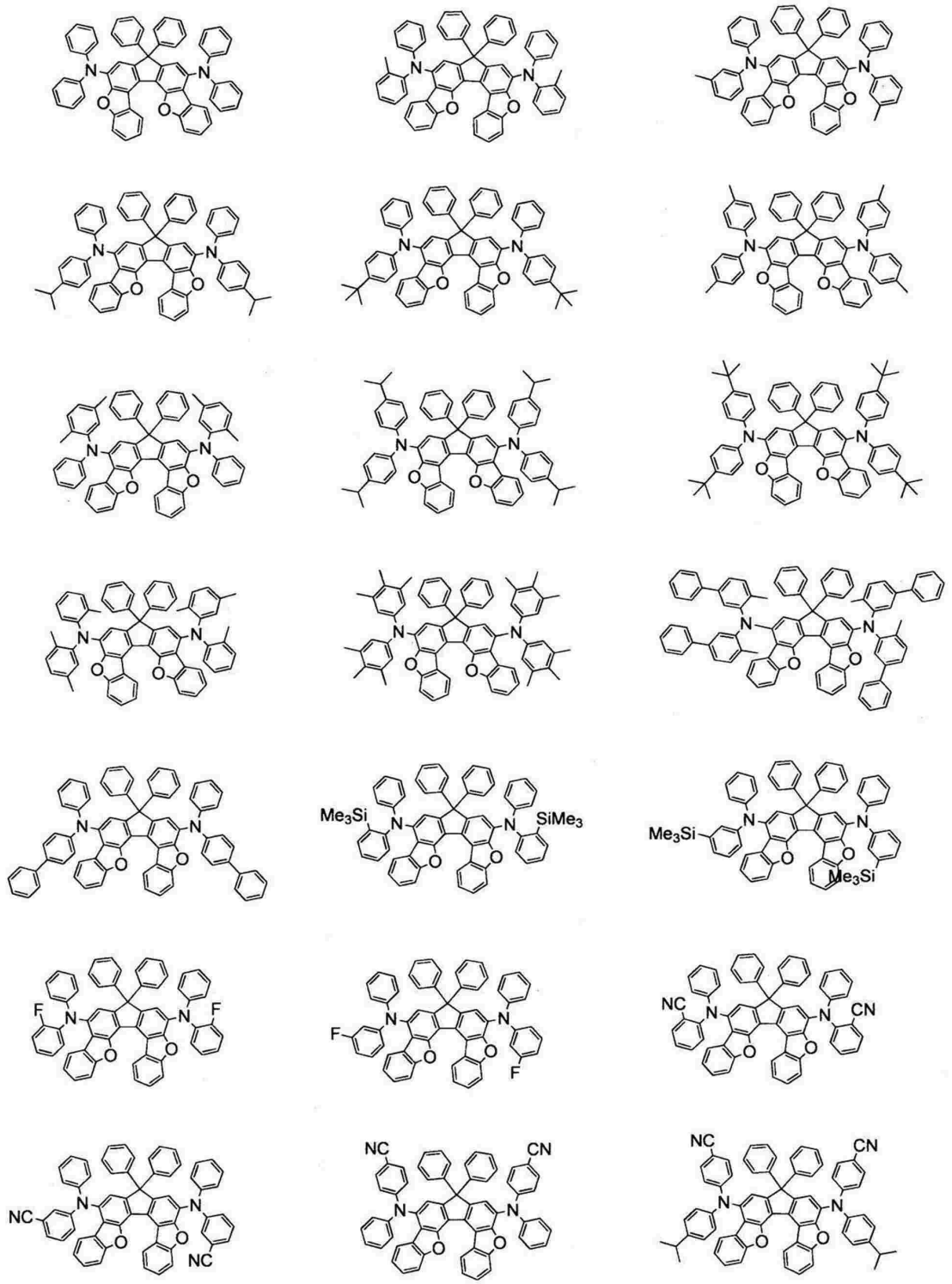
一実施形態において、Ｘ$_{9}$は、酸素原子又は硫黄原子である。

【０５９５】

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

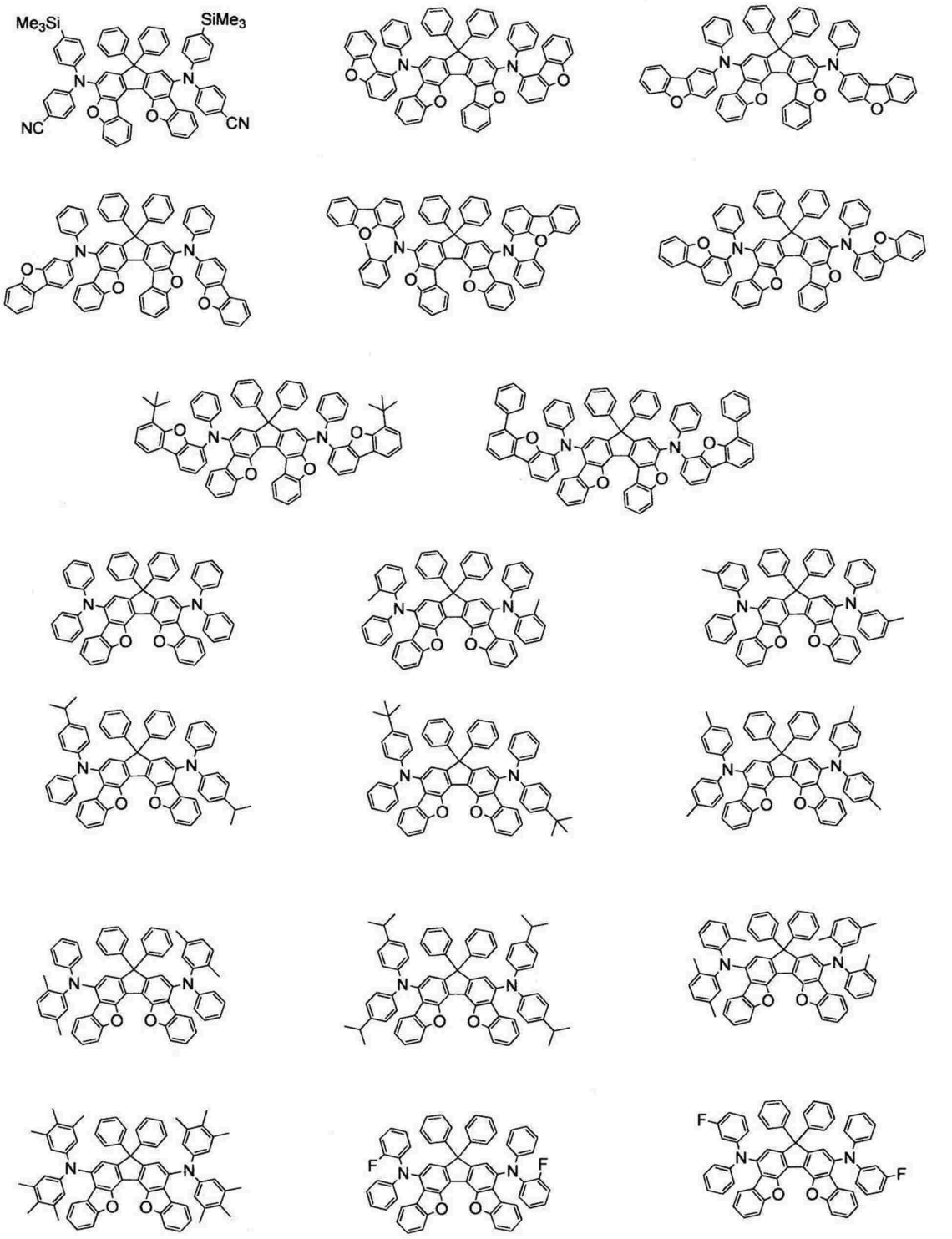
【０５９６】

【化２０８】



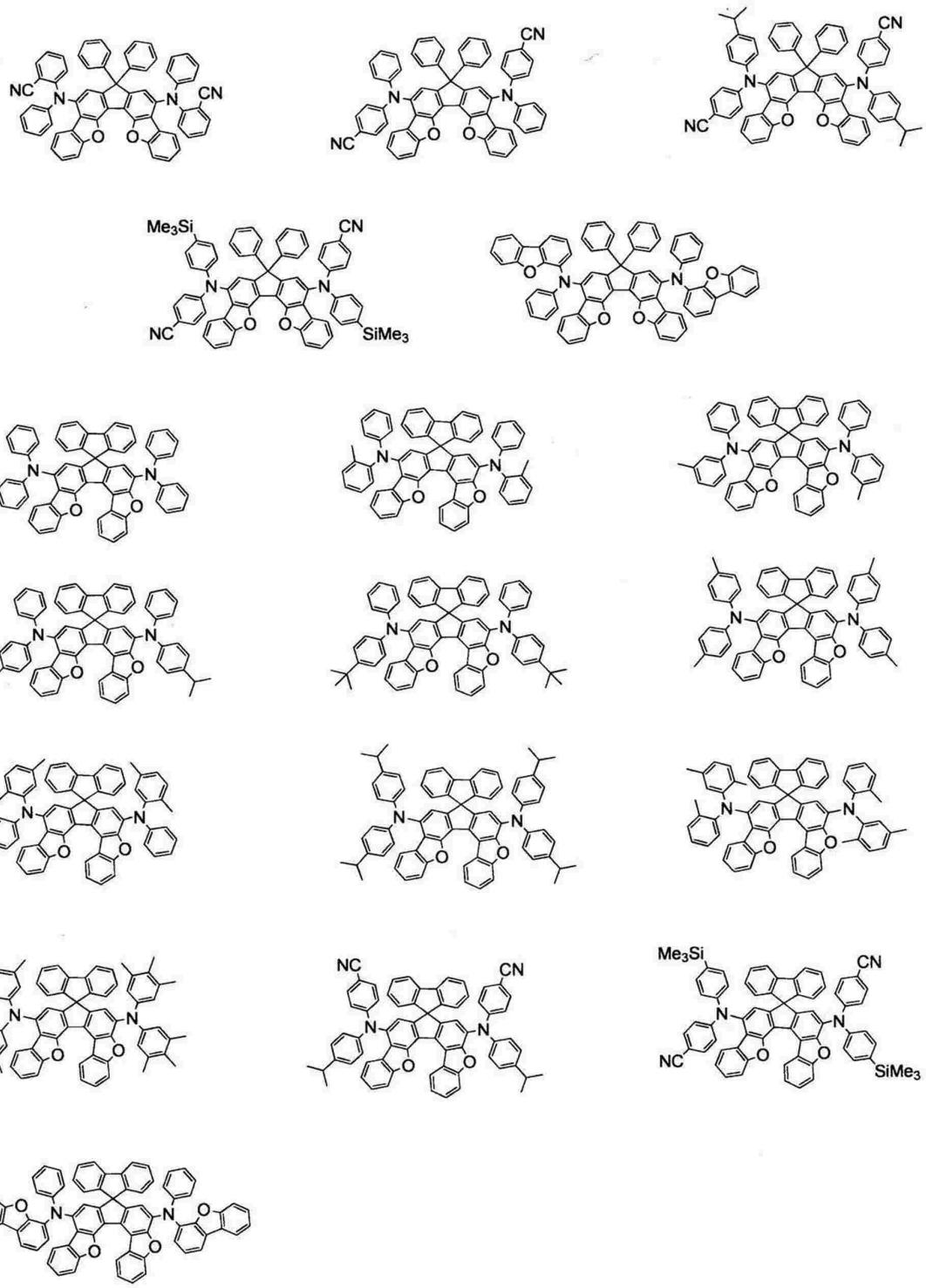
【０５９７】

【化２０９】



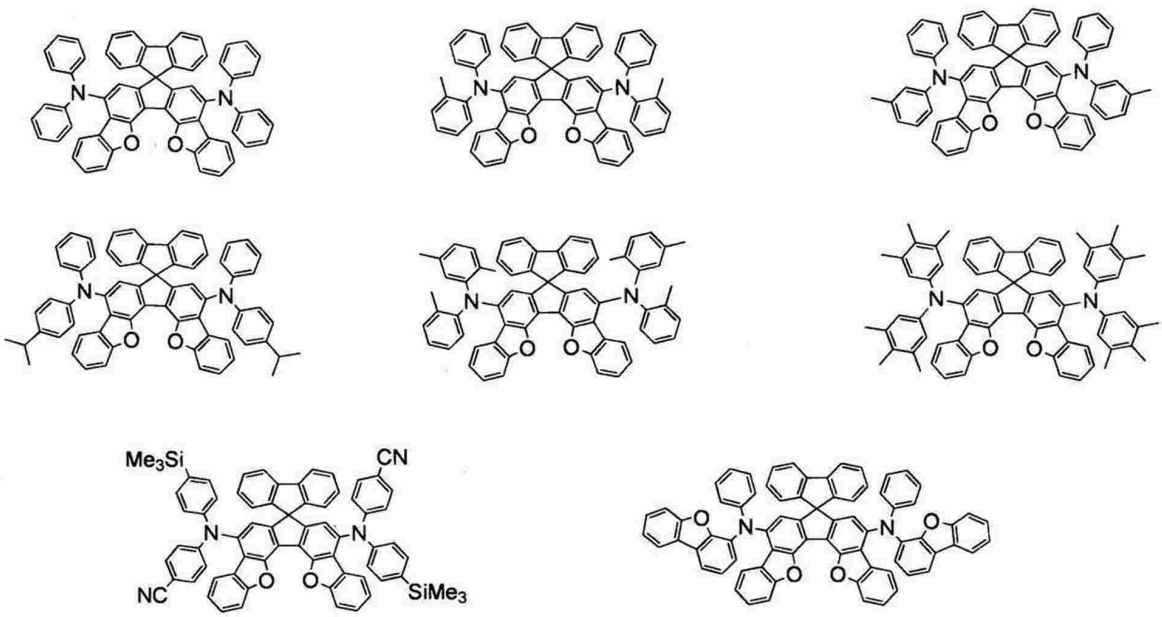
【０５９８】

【化２１０】



【０５９９】

【化２１１】



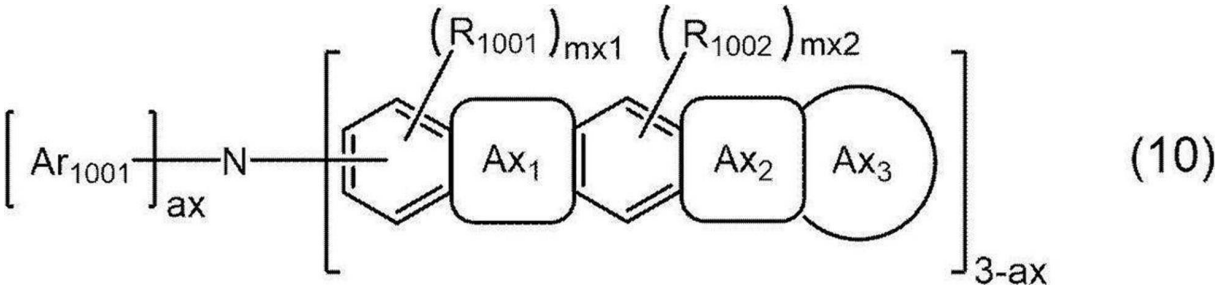
【０６００】

（一般式（１０）で表される化合物）

一般式（１０）で表される化合物について説明する。

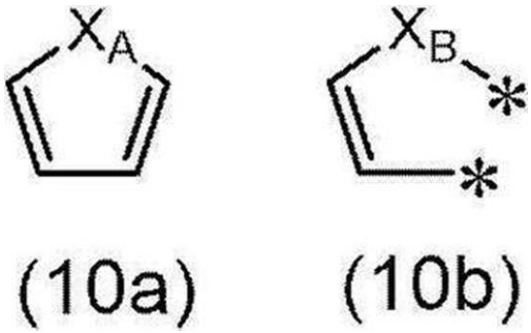
【０６０１】

【化２１２】



【０６０２】

【化２１３】



【０６０３】

（前記一般式（１０）において、

Ax_1環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式（１０ａ）で表される環であり、

Ax_2環は、隣接環の任意の位置で縮合する前記一般式（１０ｂ）で表される環であり、

前記一般式（１０ｂ）中の２つの＊は、Ax_3環の任意の位置と結合し、

X_A及びX_Bは、それぞれ独立に、Ｃ（R_{1003}）（R_{1004}）、Ｓｉ（R_{1005}）（R_{1006}）、酸素原子又は硫黄原子であり、

Ａｘ３環は、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０の芳香族炭化水素環、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環であり、
Ａｒ１００１は、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ１００１～Ｒ１００６は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
ｍｘ１は、３であり、ｍｘ２は、２であり、
複数のＲ１００１は、互いに同一であるか、又は異なり、
複数のＲ１００２は、互いに同一であるか、又は異なり、
ａｘは、０、１又は２であり、
ａｘが０又は１の場合、「３－ａｘ」で示されるカッコ内の構造は、互いに同一であるか、又は異なり、
ａｘが２の場合、複数のＡｒ１００１は、互いに同一であるか、又は異なる。）

【０６０４】

一実施形態において、Ａｒ１００１は、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基である。

【０６０５】

一実施形態において、Ａｘ３環は、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０の芳香族炭化水素環であり、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン環、置換もしくは無置換のナフタレン環、又は置換もしくは無置換のアントラセン環である。

【０６０６】

一実施形態において、Ｒ１００３及びＲ１００４は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基である。

【０６０７】

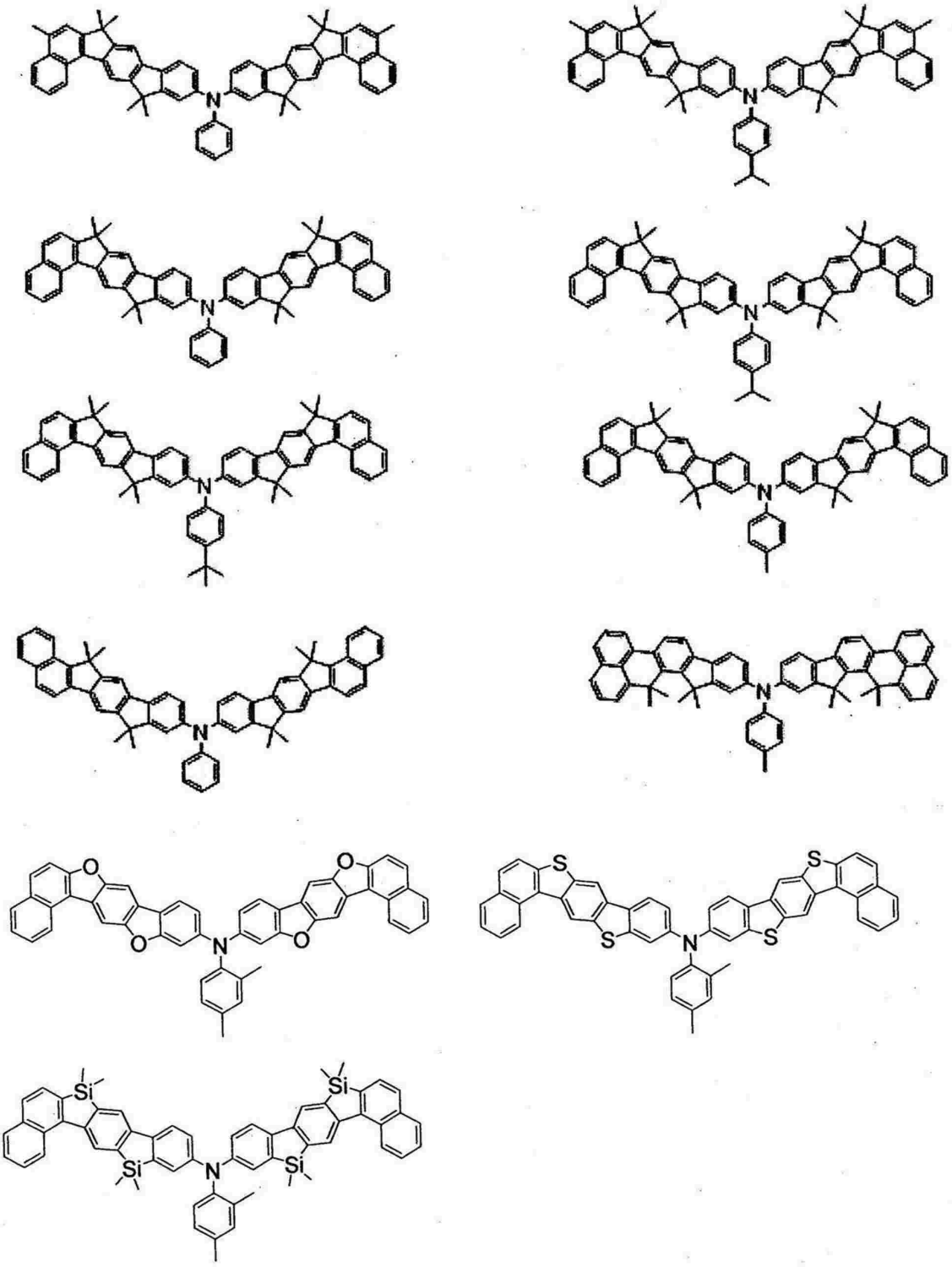
一実施形態において、ａｘは１である。

【０６０８】

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

【０６０９】

【化２１４】



【０６１０】

一実施形態においては、発光層５が、発光性化合物として、

前記一般式（４）で表される化合物、

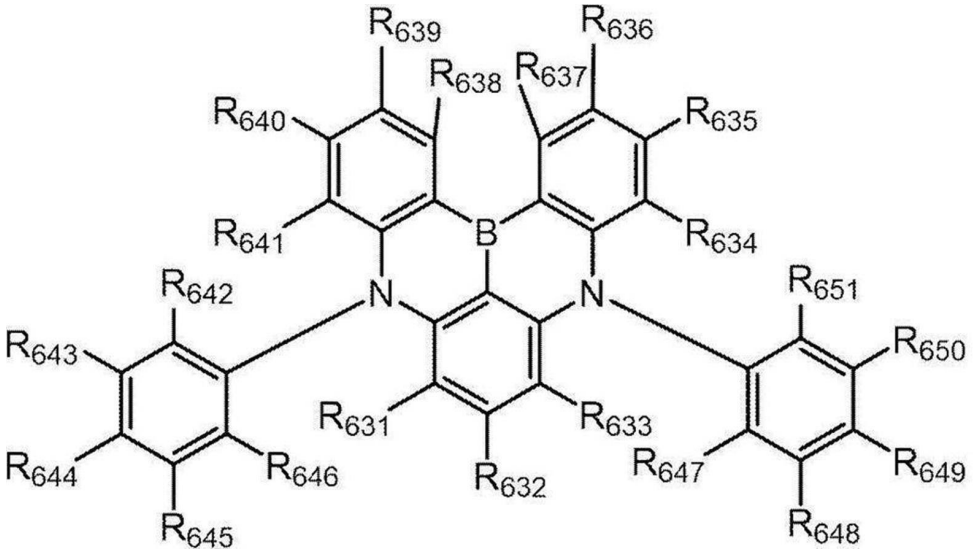
前記一般式（５）で表される化合物、

前記一般式（６）で表される化合物、及び

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

【０６１１】

【化２１５】



(63a)

【０６１２】

（前記一般式（６３ａ）において、

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

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

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

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

Ｒ６３１～Ｒ６５１のうちの隣接する２つ以上の１組以上は、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、

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

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

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０６１３】

一実施形態においては、前記一般式（４）で表される化合物が、前記一般式（４１－３）、一般式（４１－４）又は一般式（４１－５）で表される化合物であり、前記一般式（４１－５）中のＡ１環が、置換もしくは無置換の環形成炭素数１０～５０の縮合芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数８～５０の縮合複素環である。

【０６１４】

一実施形態においては、前記一般式（４１－３）、一般式（４１－４）、及び一般式（４１－５）における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数１０～５０の縮合芳香族炭化水素環が、
置換もしくは無置換のナフタレン環、
置換もしくは無置換のアントラセン環、又は
置換もしくは無置換のフルオレン環であり、
前記置換もしくは無置換の環形成原子数８～５０の縮合複素環が、
置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、
置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は
置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

【０６１５】

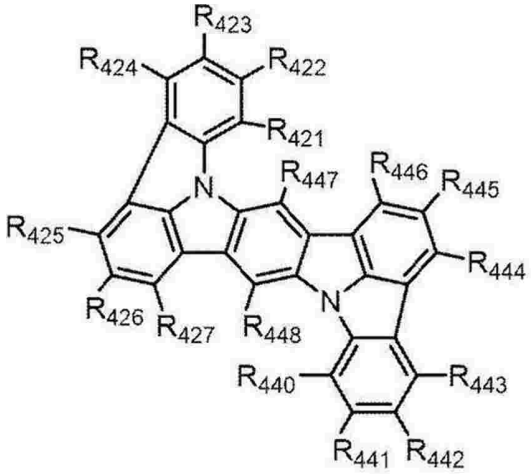
一実施形態においては、前記一般式（４１－３）、一般式（４１－４）又は一般式（４１－５）における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数１０～５０の縮合芳香族炭化水素環が、
置換もしくは無置換のナフタレン環、又は
置換もしくは無置換のフルオレン環であり、
前記置換もしくは無置換の環形成原子数８～５０の縮合複素環が、
置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、
置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は
置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

【０６１６】

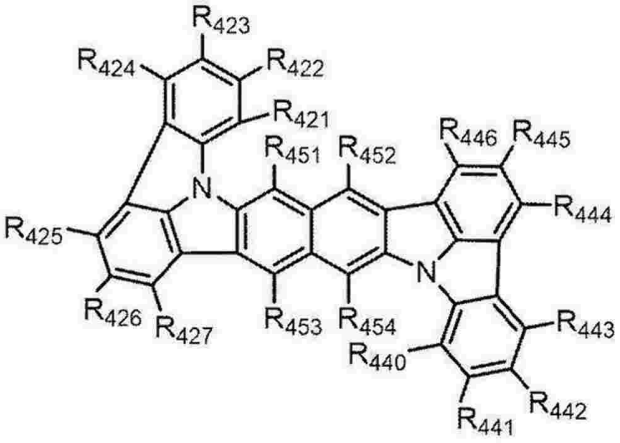
一実施形態においては、前記一般式（４）で表される化合物が、
下記一般式（４６１）で表される化合物、
下記一般式（４６２）で表される化合物、
下記一般式（４６３）で表される化合物、
下記一般式（４６４）で表される化合物、
下記一般式（４６５）で表される化合物、
下記一般式（４６６）で表される化合物、及び
下記一般式（４６７）で表される化合物からなる群から選択される。

【０６１７】

【化２１６】



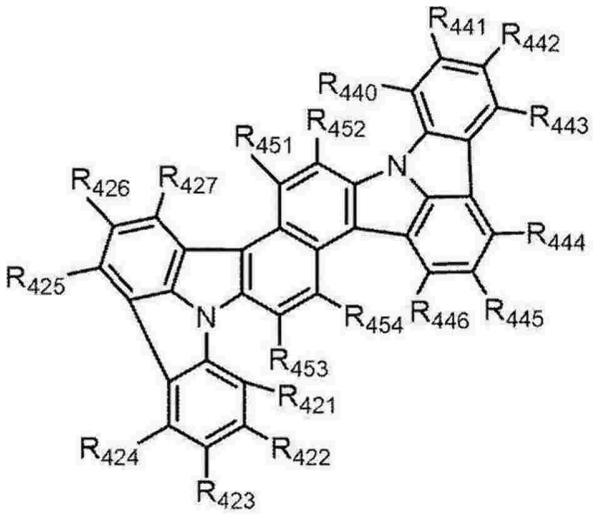
(461)



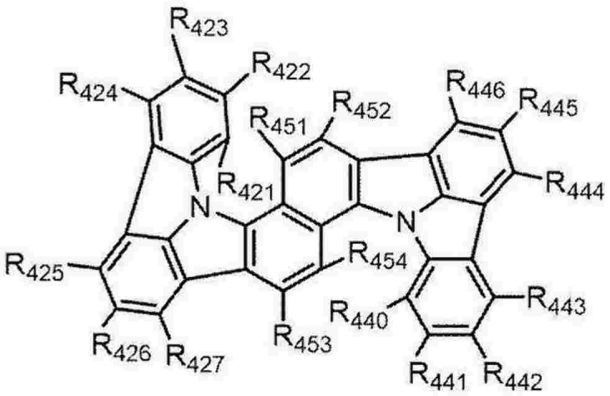
(462)

【０６１８】

【化２１７】



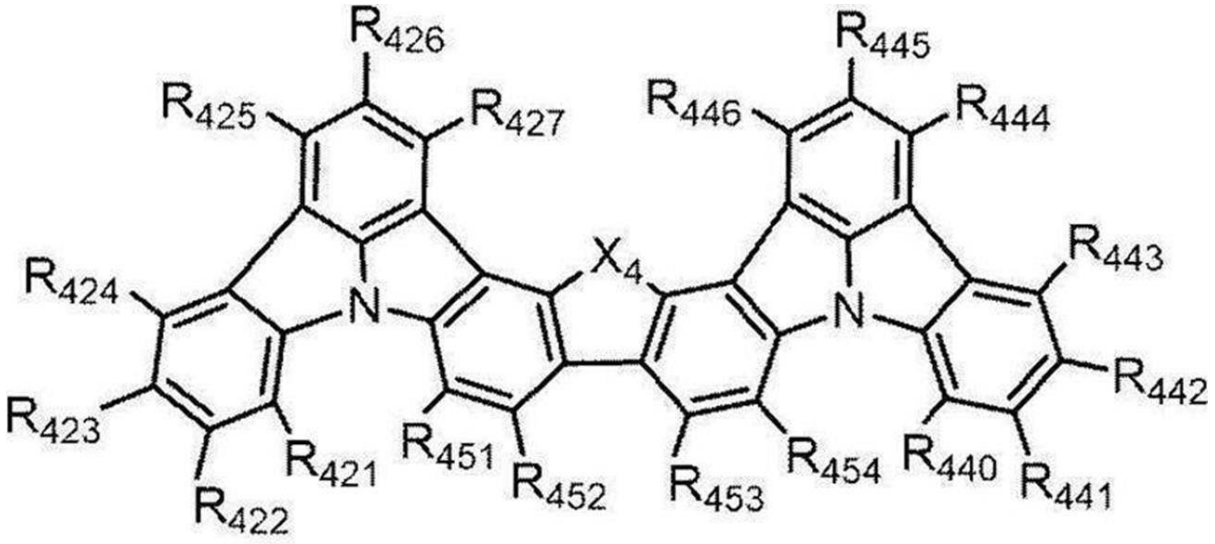
(463)



(464)

【０６１９】

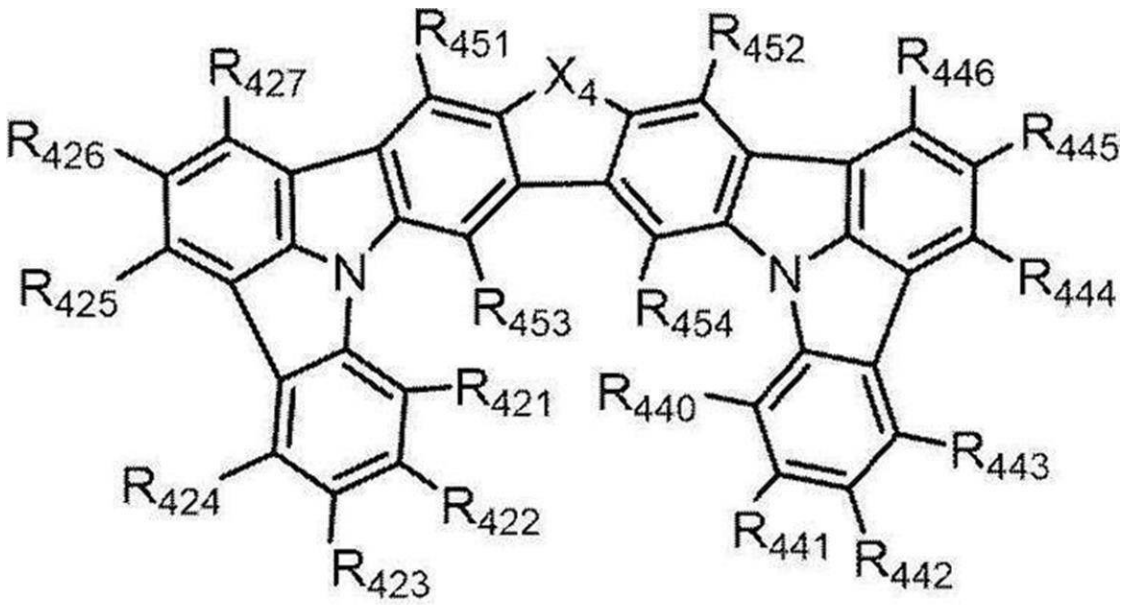
【化２１８】



(465)

【０６２０】

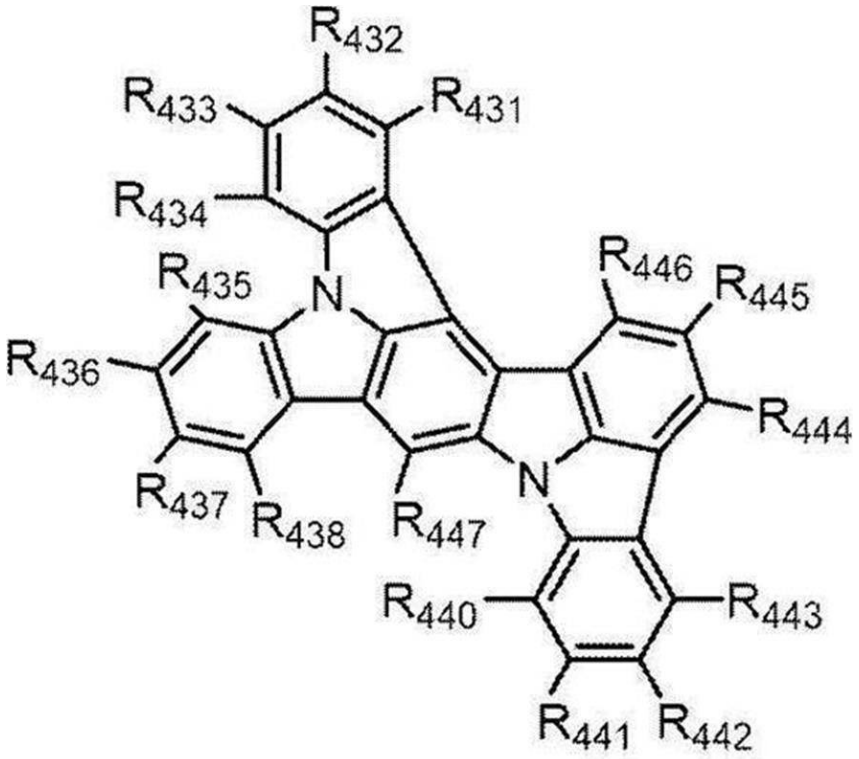
【化２１９】



(466)

【０６２１】

【化２２０】



(467)

【０６２２】

（前記一般式（４６１）～（４６７）中、

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

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、

－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、

－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、

－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、

Ｘ４は、酸素原子、ＮＲ８０１、又はＣ（Ｒ８０２）（Ｒ８０３）であり、

Ｒ８０１、Ｒ８０２及びＲ８０３は、それぞれ独立に、

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

【０６２３】

一実施形態においては、R_{421}～R_{427}及びR_{440}～R_{448}が、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。

【０６２４】

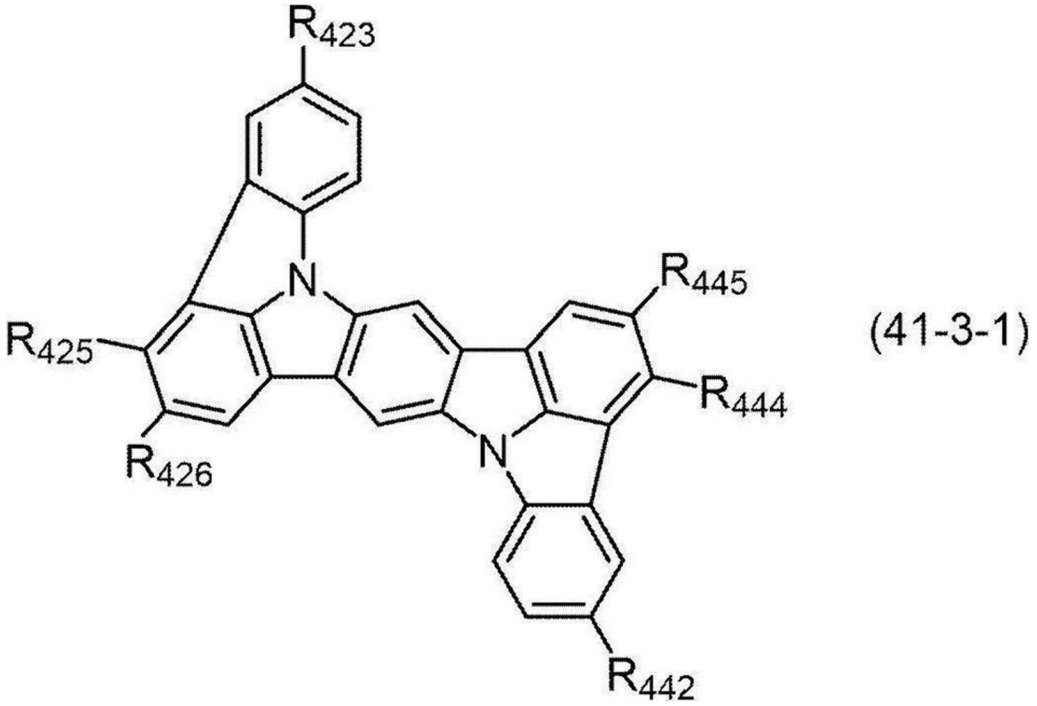
一実施形態においては、R_{421}～R_{427}及びR_{440}～R_{447}が、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～１８のアリール基、及び
置換もしくは無置換の環形成原子数５～１８の複素環基からなる群から選択される。

【０６２５】

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

【０６２６】

【化２２１】



(41-3-1)

【０６２７】

（前記一般式（４１－３－１）中、R_{423}、R_{425}、R_{426}、R_{442}、R_{444}及びR_{445}は、それぞれ独立に、前記一般式（４１－３）におけるR_{423}、R_{425}、R_{426}、R_{442}、R_{444}及びR_{445}と同義である。）

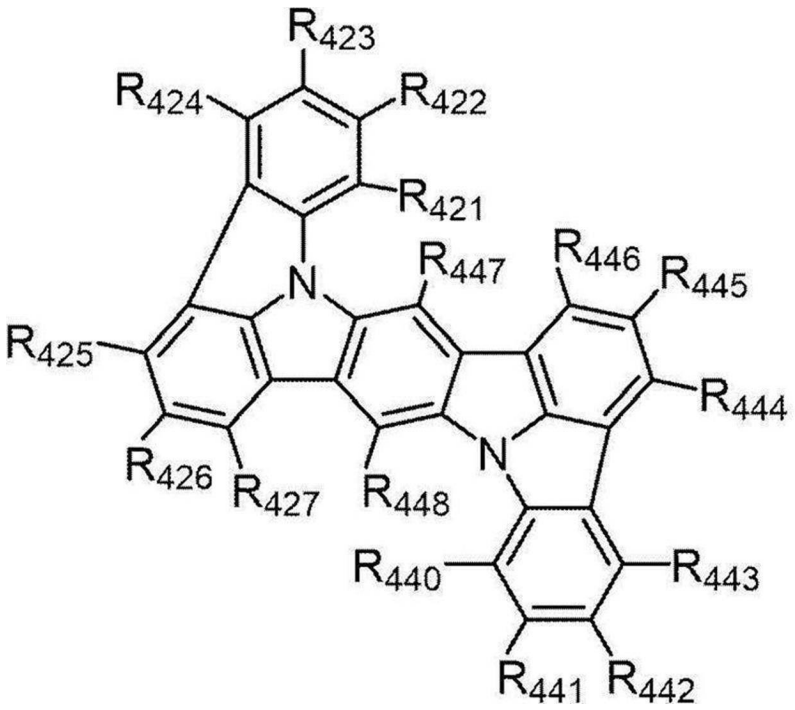
【０６２８】

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

１－３－２）で表される化合物である。

【０６２９】

【化２２２】



(41-3-2)

【０６３０】

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

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

【０６３１】

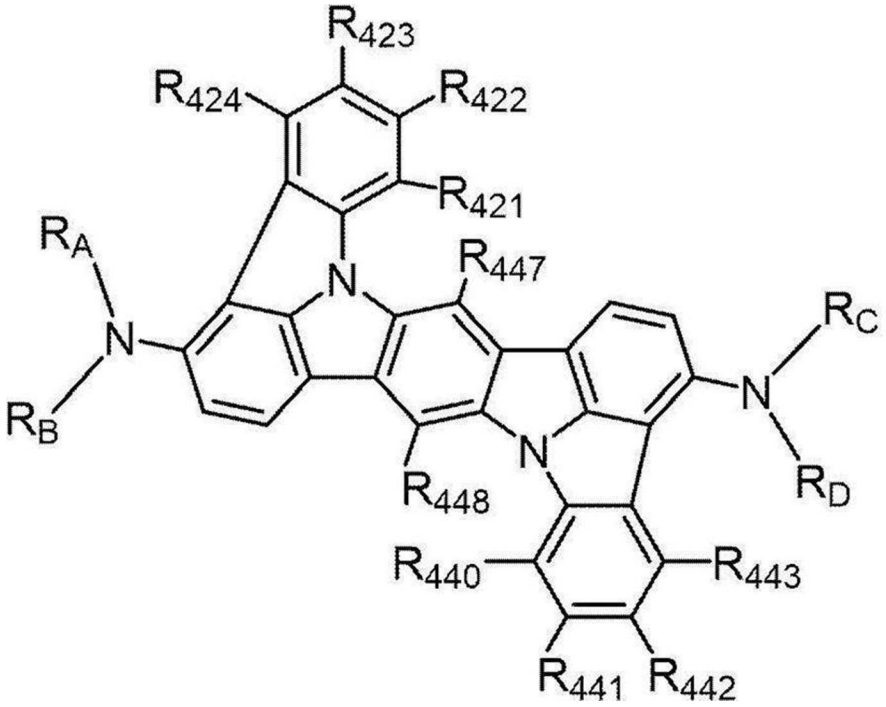
一実施形態においては、前記一般式（４１－３－２）における、Ｒ４２１～Ｒ４２７及びＲ４４０～Ｒ４４６のいずれか２つが、－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基である。

【０６３２】

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

【０６３３】

【化２２３】



(41-3-3)

【０６３４】

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

R_A、R_B、R_C及びR_Dは、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数６～１８のアリール基、又は

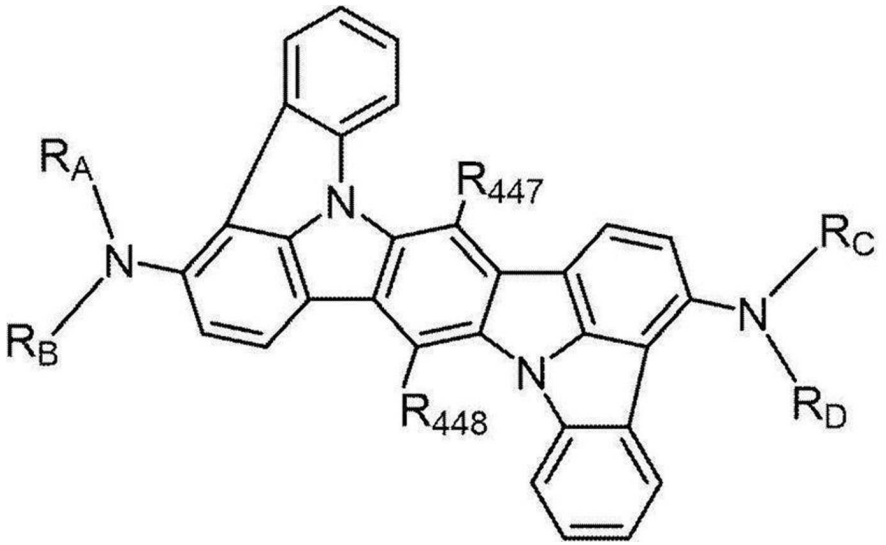
置換もしくは無置換の環形成原子数５～１８の複素環基である。）

【０６３５】

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

【０６３６】

【化２２４】



(41-3-4)

【０６３７】

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

及びR_Dと同義である。）

【０６３８】

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

【０６３９】

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

【０６４０】

一実施形態においては、R_{447}及びR_{448}が、水素原子である。

【０６４１】

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

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

【０６４２】

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

【０６４３】

有機ＥＬ素子１Ａにおいて、発光層５が第二実施形態に係る化合物及び発光性化合物を含む場合、第二実施形態に係る化合物は、ホスト材料（マトリックス材料と称する場合もある。）であることが好ましく、発光性化合物は、ドーパント材料（ゲスト材料、エミッター、又は発光材料と称する場合もある。）であることが好ましい。

【０６４４】

有機ＥＬ素子１Ａにおいて、発光層５が第三実施形態に係る化合物及び発光性化合物を含む場合、第三実施形態に係る化合物は、ホスト材料（マトリックス材料と称する場合もある。）であることが好ましく、発光性化合物は、ドーパント材料（ゲスト材料、エミッター、又は発光材料と称する場合もある。）であることが好ましい。

【０６４５】

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

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

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

【０６４６】

（発光層の膜厚）

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

【０６４７】

（発光層における化合物の含有率）

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

第一実施形態に係る化合物の含有率は、８０質量％以上９９質量％以下であることが好

ましく、９０質量％以上９９質量％以下であることがより好ましく、９５質量％以上９９質量％以下であることがさらに好ましい。
発光性化合物の含有率は、１質量％以上１０質量％以下であることが好ましく、１質量％以上７質量％以下であることがより好ましく、１質量％以上５質量％以下であることがさらに好ましい。
ただし、発光層５における第一実施形態に係る化合物及び発光性化合物の合計含有率の上限は、１００質量％である。
【０６４８】
発光層５が第二実施形態に係る化合物及び発光性化合物を含有する場合、発光層５における第二実施形態に係る化合物及び発光性化合物の含有率は、例えば、それぞれ、以下の範囲であることが好ましい。
第二実施形態に係る化合物の含有率は、８０質量％以上９９質量％以下であることが好ましく、９０質量％以上９９質量％以下であることがより好ましく、９５質量％以上９９質量％以下であることがさらに好ましい。
発光性化合物の含有率は、１質量％以上１０質量％以下であることが好ましく、１質量％以上７質量％以下であることがより好ましく、１質量％以上５質量％以下であることがさらに好ましい。
ただし、発光層５における第二実施形態に係る化合物及び発光性化合物の合計含有率の上限は、１００質量％である。
【０６４９】
発光層５が第三実施形態に係る化合物及び発光性化合物を含有する場合、発光層５における第三実施形態に係る化合物及び発光性化合物の含有率は、例えば、それぞれ、以下の範囲であることが好ましい。
第三実施形態に係る化合物の含有率は、８０質量％以上９９質量％以下であることが好ましく、９０質量％以上９９質量％以下であることがより好ましく、９５質量％以上９９質量％以下であることがさらに好ましい。
発光性化合物の含有率は、１質量％以上１０質量％以下であることが好ましく、１質量％以上７質量％以下であることがより好ましく、１質量％以上５質量％以下であることがさらに好ましい。
ただし、発光層５における第三実施形態に係る化合物及び発光性化合物の合計含有率の上限は、１００質量％である。
【０６５０】
なお、本実施形態は、発光層５に、第一実施形態に係る化合物及び発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。
発光層５は、第一実施形態に係る化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。発光層５は、発光性化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。
【０６５１】
また、本実施形態は、発光層５に、第二実施形態に係る化合物及び発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。
発光層５は、第二実施形態に係る化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。発光層５は、発光性化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。
また、本実施形態は、発光層５に、第三実施形態に係る化合物及び発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。
発光層５は、第三実施形態に係る化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。発光層５は、発光性化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。
【０６５２】
図２に、本実施形態に係る有機ＥＬ素子の別の一例の概略構成を示す。
図２に示す有機ＥＬ素子１Ｂは、有機層１０Ｂが、第一の発光領域５Ｂを含む点で、有機ＥＬ素子１Ａと異なり、その他の点は、有機ＥＬ素子１Ａと同様である。第一の発光領域５Ｂは、陽極３側から順に、第一の発光層５１及び第二の発光層５２を含む。

第一の発光層５１は、第一の化合物を含有し、第二の発光層５２は、第二の化合物を含有する。第一の化合物と第二の化合物とは、互いに異なる化合物である。

【０６５３】

（第一の化合物）

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

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

有機ＥＬ素子１Ｂの一態様において、第一の化合物は、第二実施形態に係る化合物である。

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

有機ＥＬ素子１Ｂの一態様において、第一の化合物は、第三実施形態に係る化合物である。

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

有機ＥＬ素子１Ｂの一態様において、第一の化合物は、前記一般式（１Ｃ）で表されるに係る化合物である。

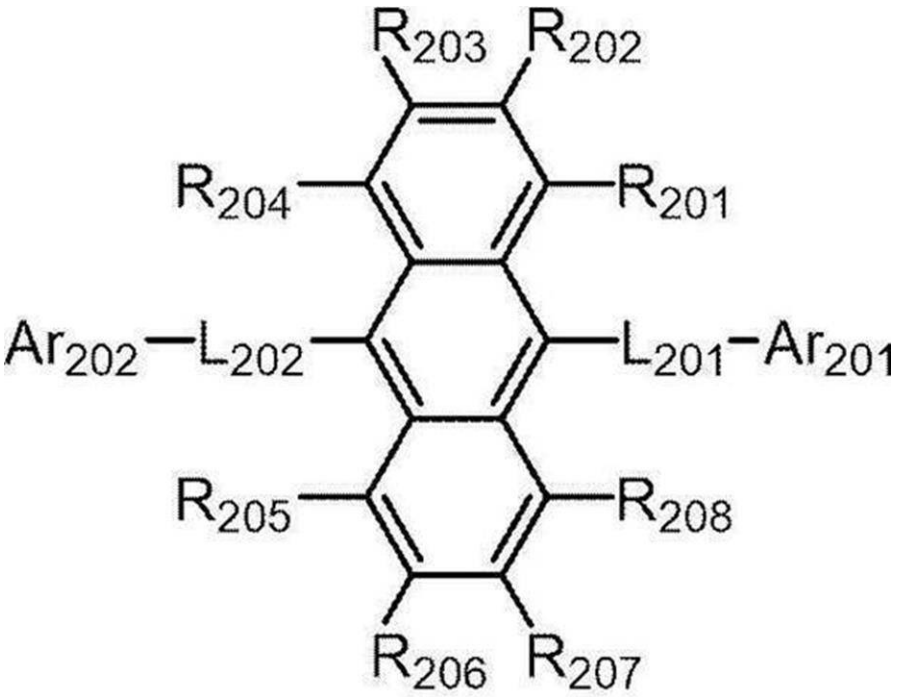
【０６５４】

（第二の化合物）

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

【０６５５】

【化２２５】



(2)

【０６５６】

（前記一般式（２）において、

Ｒ２０１～Ｒ２０８は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、
－Ｃ（＝Ｏ）Ｒ８０１で表される基、
－ＣＯＯＲ８０２で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｌ２０１及びＬ２０２は、それぞれ独立に、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の２価の複素環基であり、
Ａｒ２０１及びＡｒ２０２は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。）

【０６５７】

（本実施形態に係る第二の化合物中、Ｒ９０１、Ｒ９０２、Ｒ９０３、Ｒ９０４、Ｒ９０５、Ｒ９０６、Ｒ９０７、Ｒ８０１及びＲ８０２は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ９０１が複数存在する場合、複数のＲ９０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０２が複数存在する場合、複数のＲ９０２は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０３が複数存在する場合、複数のＲ９０３は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０４が複数存在する場合、複数のＲ９０４は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０５が複数存在する場合、複数のＲ９０５は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０６が複数存在する場合、複数のＲ９０６は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ９０７が複数存在する場合、複数のＲ９０７は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０１が複数存在する場合、複数のＲ８０１は、互いに同一であるか又は異なり、
Ｒ８０２が複数存在する場合、複数のＲ８０２は、互いに同一であるか又は異なる。）

【０６５８】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、
Ｒ２０１～Ｒ２０８は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、

－Ｓｉ（Ｒ９０１）（Ｒ９０２）（Ｒ９０３）で表される基、
－Ｏ－（Ｒ９０４）で表される基、
－Ｓ－（Ｒ９０５）で表される基、
－Ｎ（Ｒ９０６）（Ｒ９０７）で表される基、
置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、
－Ｃ（＝Ｏ）Ｒ８０１で表される基、
－ＣＯＯＲ８０２で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、又は
ニトロ基であり、
Ｌ２０１及びＬ２０２は、それぞれ独立に、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の２価の複素環基であり、
Ａｒ２０１及びＡｒ２０２は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であることが好ましい。

【０６５９】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、
Ｌ２０１及びＬ２０２は、それぞれ独立に、
単結合、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリーレン基であり、
Ａｒ２０１及びＡｒ２０２は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基であることが好ましい。

【０６６０】

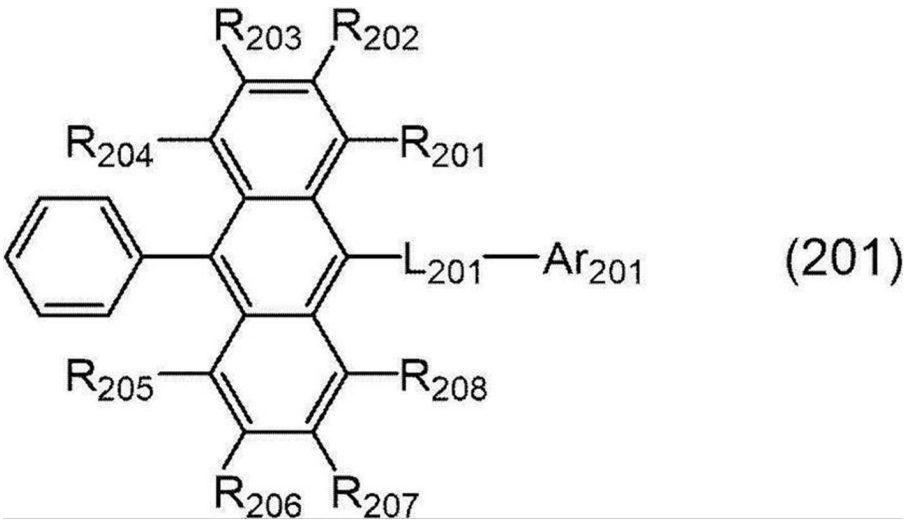
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、
Ａｒ２０１及びＡｒ２０２は、それぞれ独立に、
フェニル基、
ナフチル基、
フェナントリル基、
ビフェニル基、
ターフェニル基、
ジフェニルフルオレニル基、
ジメチルフルオレニル基、
ベンゾジフェニルフルオレニル基、
ベンゾジメチルフルオレニル基、
ジベンゾフラニル基、
ジベンゾチエニル基、
ナフトベンゾフラニル基、又は
ナフトベンゾチエニル基であることが好ましい。

【０６６１】

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

【０６６２】

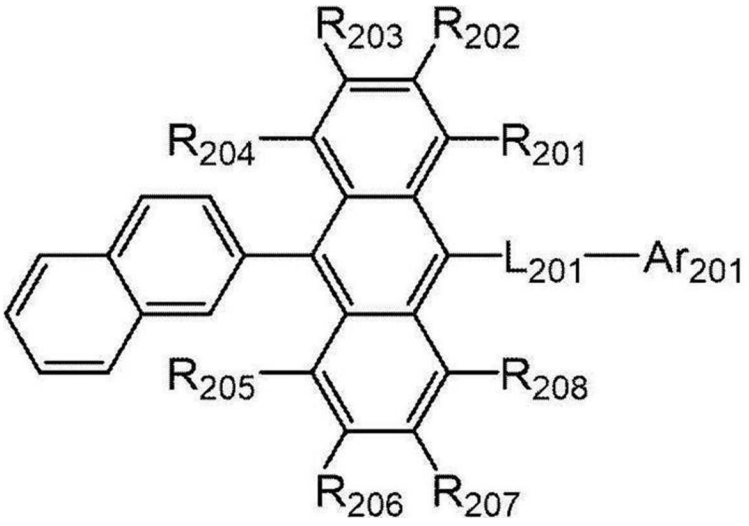
【化２２６】



(201)

【０６６３】

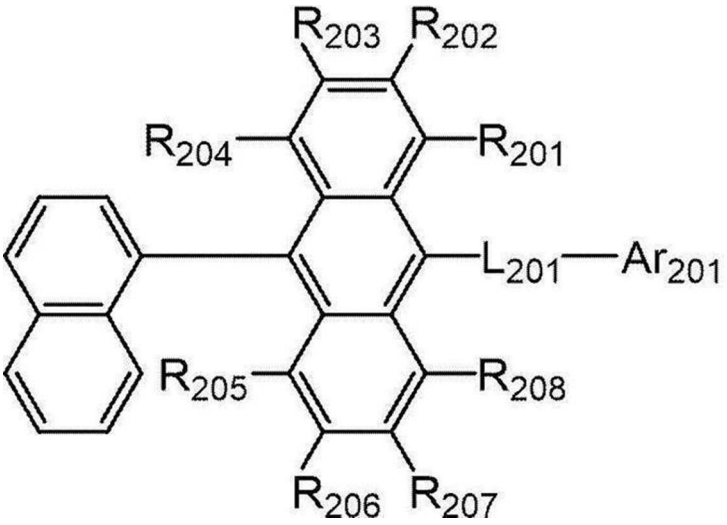
【化２２７】



(202)

【０６６４】

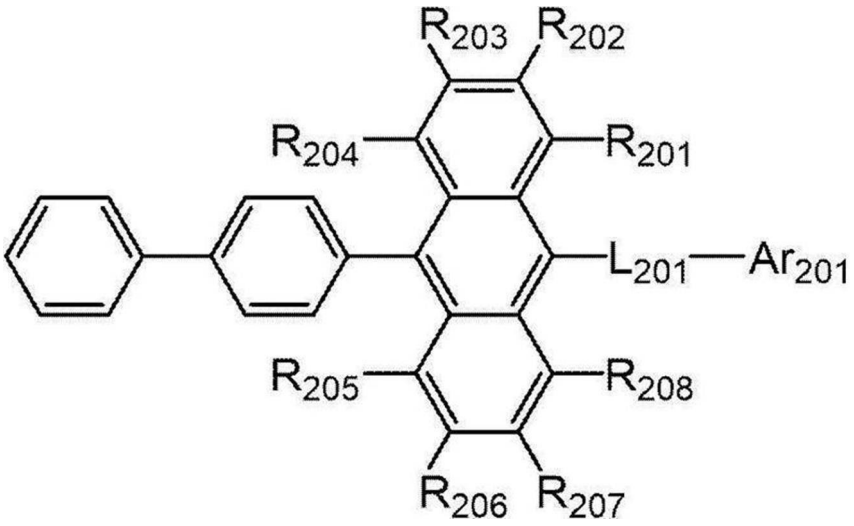
【化２２８】



(203)

【０６６５】

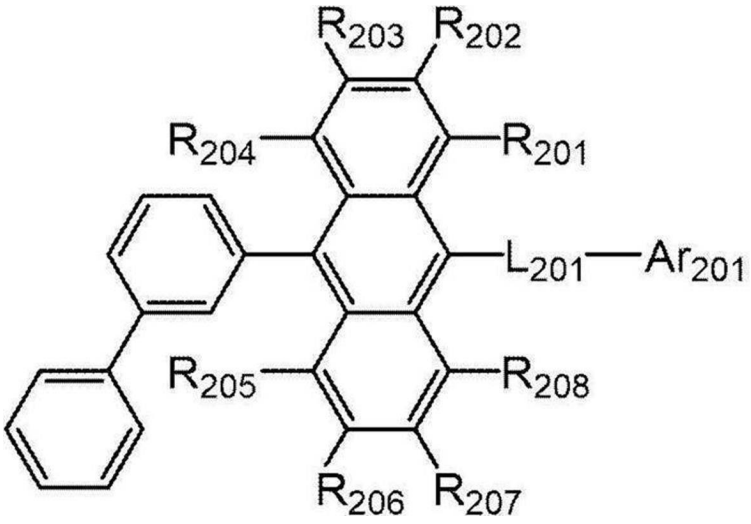
【化２２９】



(204)

【０６６６】

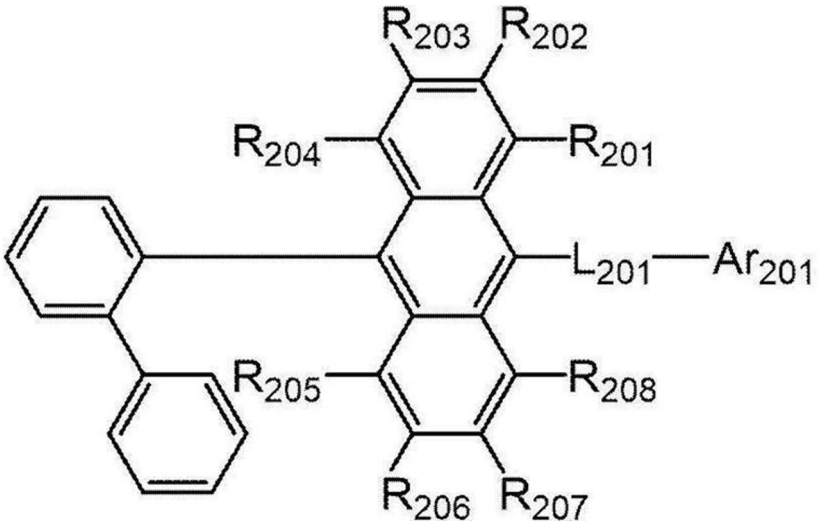
【化２３０】



(205)

【０６６７】

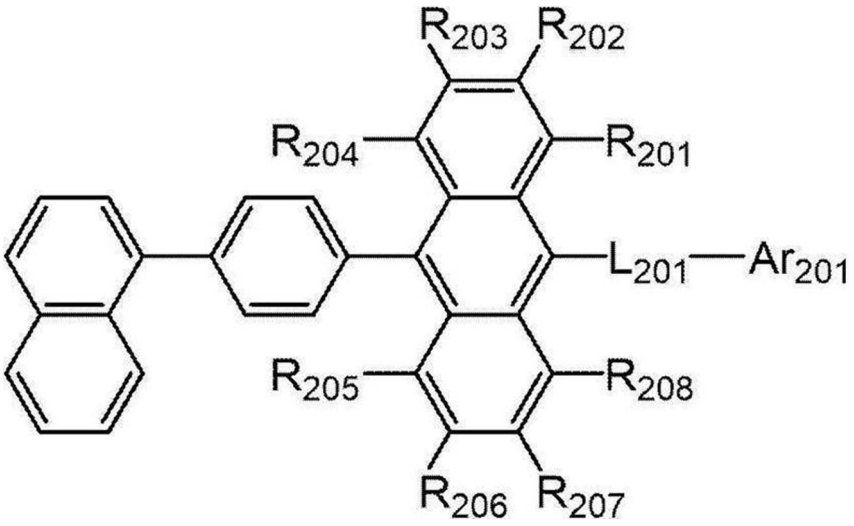
【化２３１】



(206)

【０６６８】

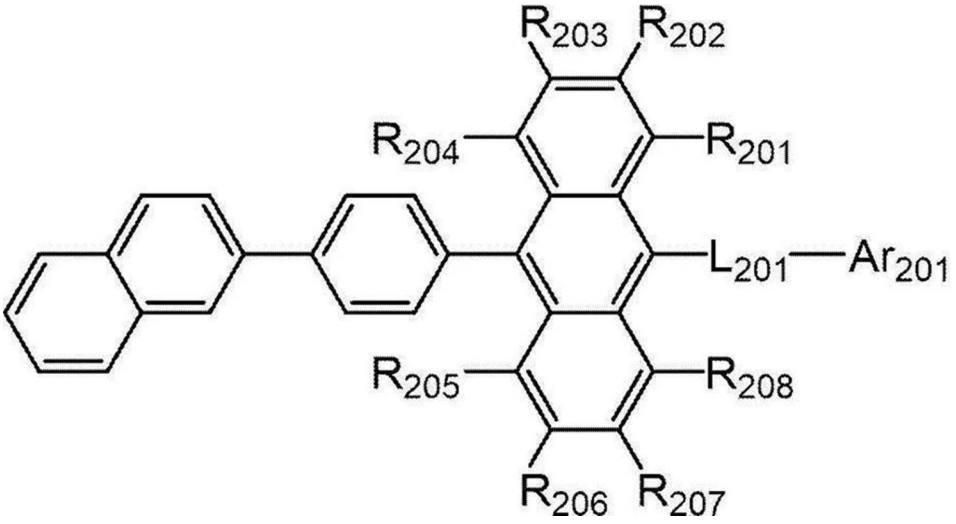
【化２３２】



(207)

【０６６９】

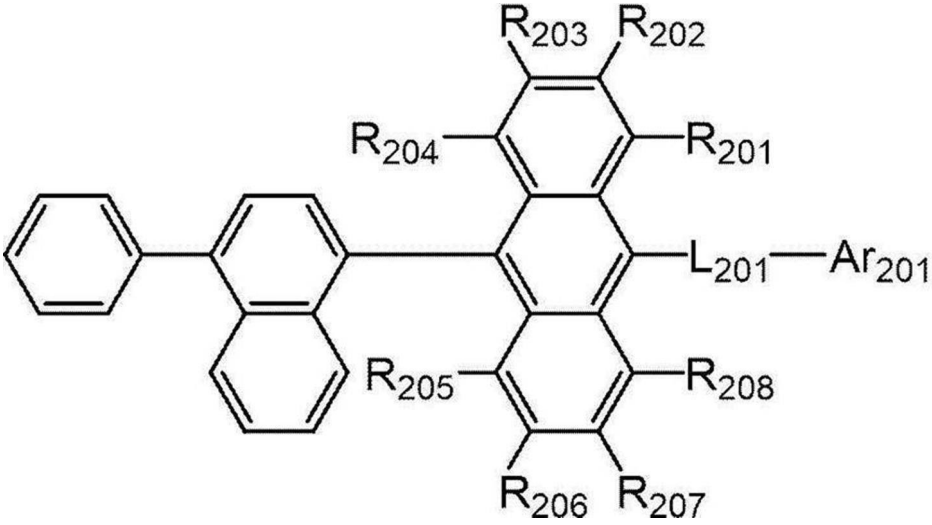
【化２３３】



(208)

【０６７０】

【化２３４】



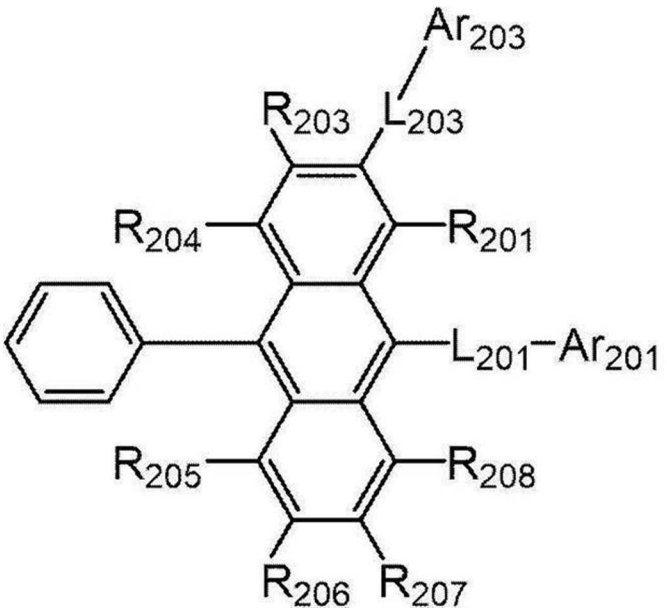
(209)

【０６７１】

（前記一般式（２０１）～（２０９）中、

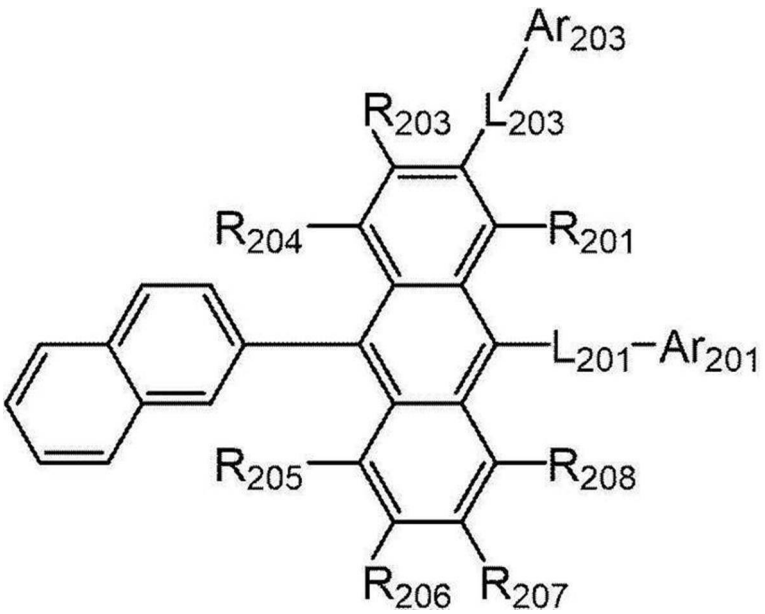
Ｌ２０１及びＡｒ２０１は、前記一般式（２）におけるＬ２０１及びＡｒ２０１と同義であ

り、
　R_{201}～R_{208}は、それぞれ独立に、前記一般式（２）におけるR_{201}～R_{208}と同義である。）
【０６７２】
　前記一般式（２）で表される第二の化合物は、下記一般式（２２１）、一般式（２２２）、一般式（２２３）、一般式（２２４）、一般式（２２５）、一般式（２２６）、一般式（２２７）、一般式（２２８）又は一般式（２２９）で表される化合物であることも好ましい。
【０６７３】
【化２３５】



(221)

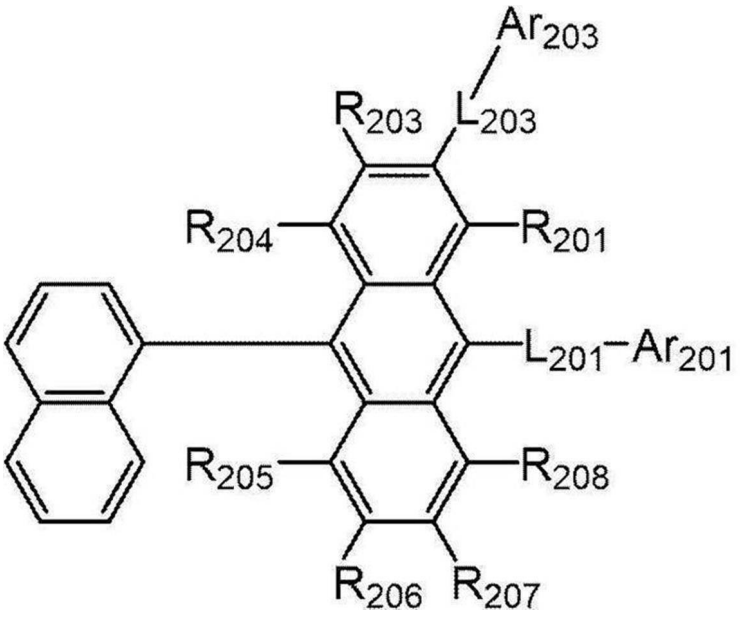
【０６７４】
【化２３６】



(222)

【０６７５】

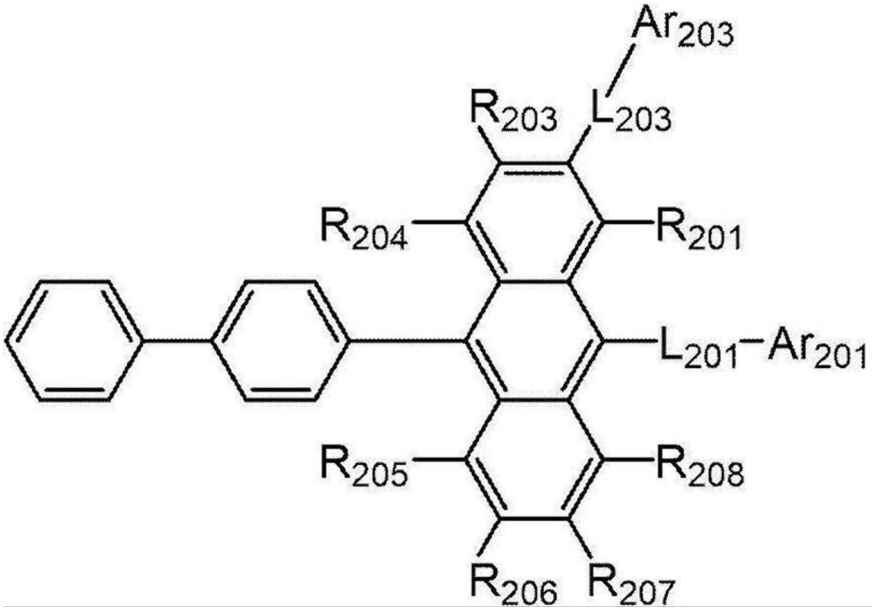
【化２３７】



(223)

【０６７６】

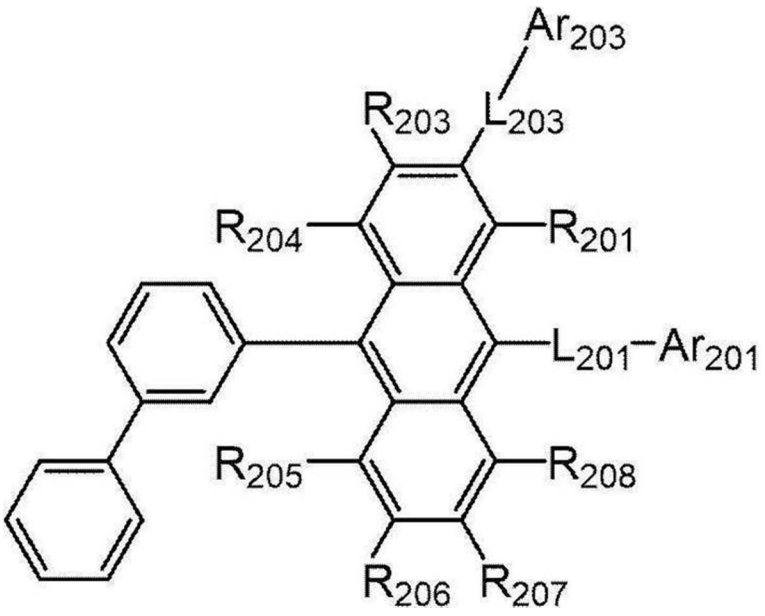
【化２３８】



(224)

【０６７７】

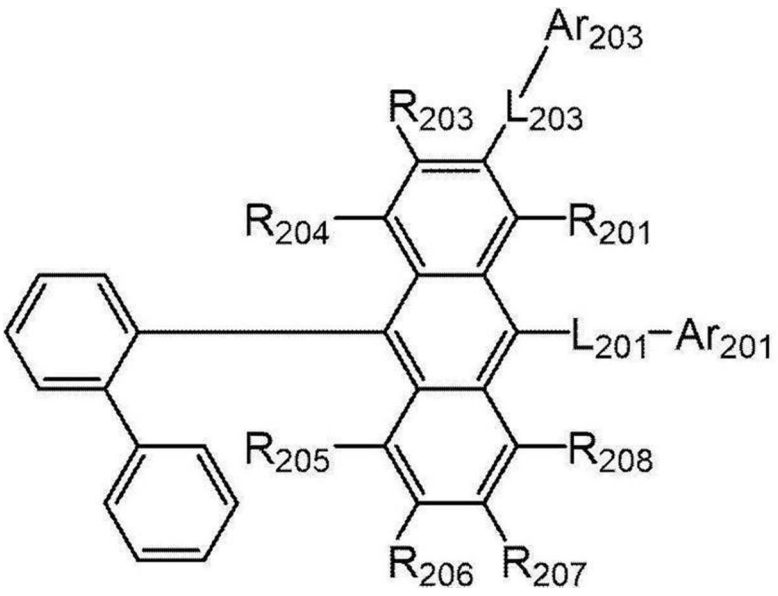
【化２３９】



(225)

【０６７８】

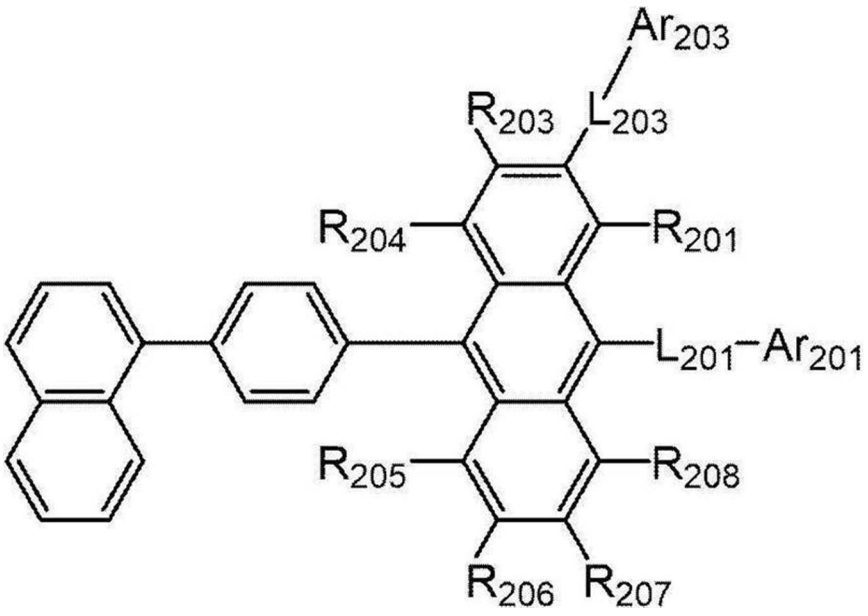
【化２４０】



(226)

【０６７９】

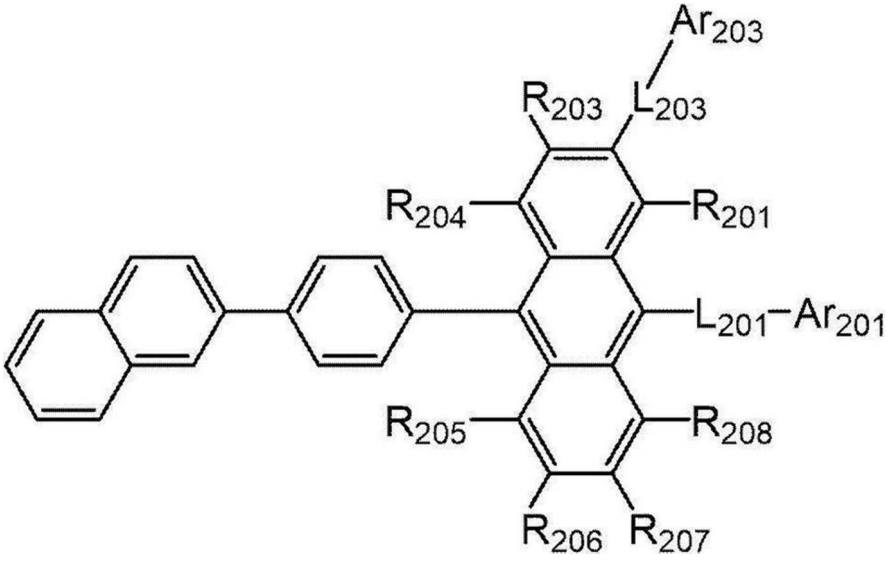
【化２４１】



(227)

【０６８０】

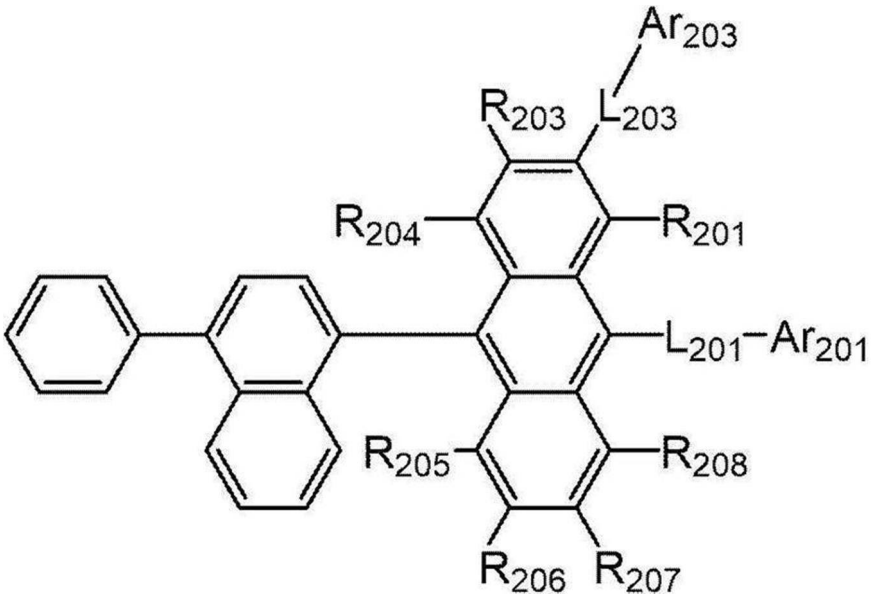
【化２４２】



(228)

【０６８１】

【化２４３】



(229)

【０６８２】

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

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

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

Ｌ２０３は、前記一般式（２）におけるＬ２０１と同義であり、

Ｌ２０３とＬ２０１は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ａｒ２０３は、前記一般式（２）におけるＡｒ２０１と同義であり、

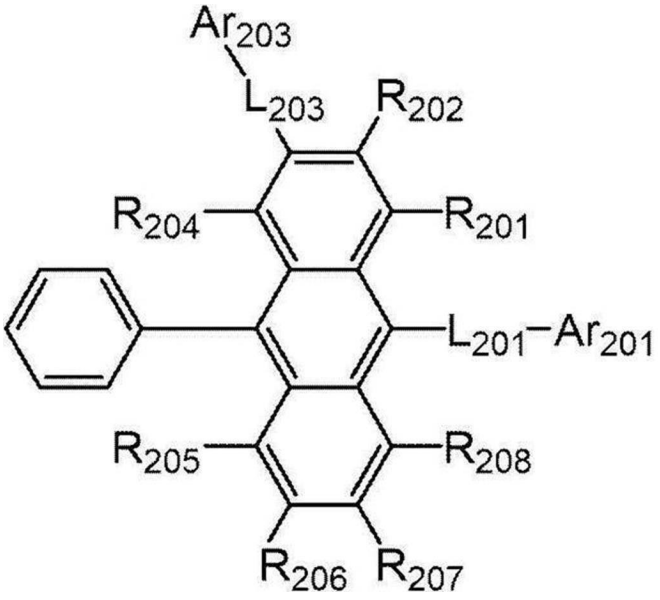
Ａｒ２０３とＡｒ２０１は、互いに同一であるか、又は異なる。）

【０６８３】

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

【０６８４】

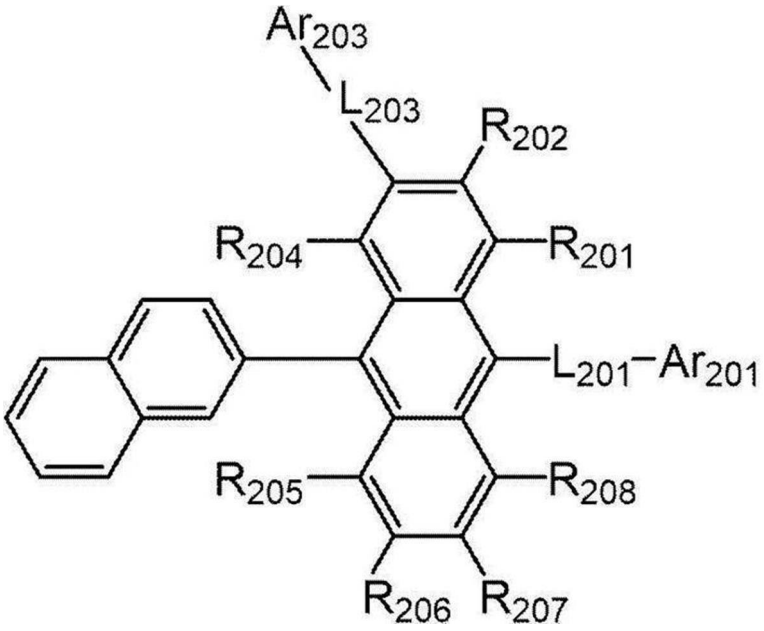
【化２４４】



(241)

【０６８５】

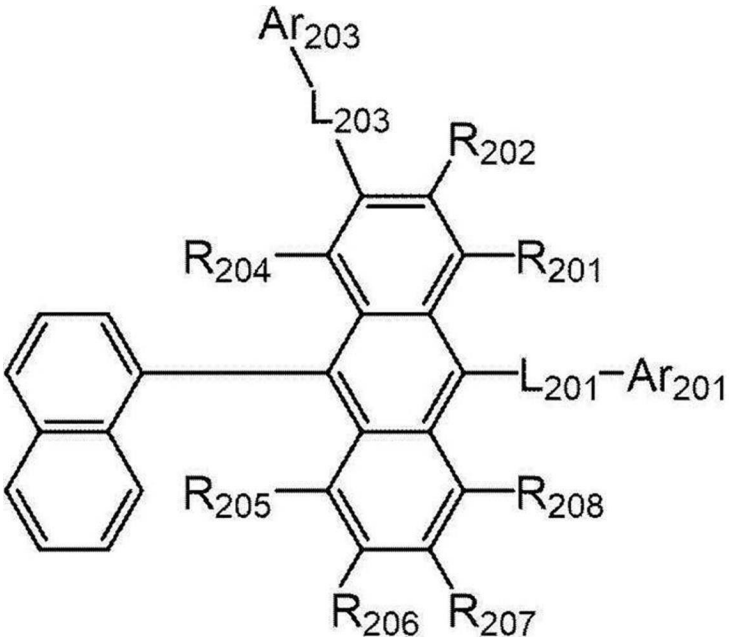
【化２４５】



(242)

【０６８６】

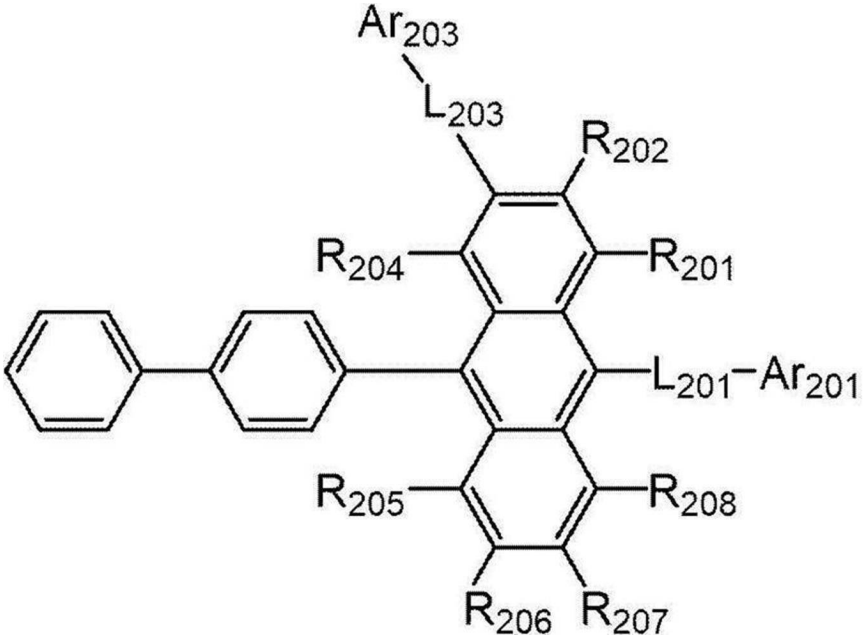
【化２４６】



(243)

【０６８７】

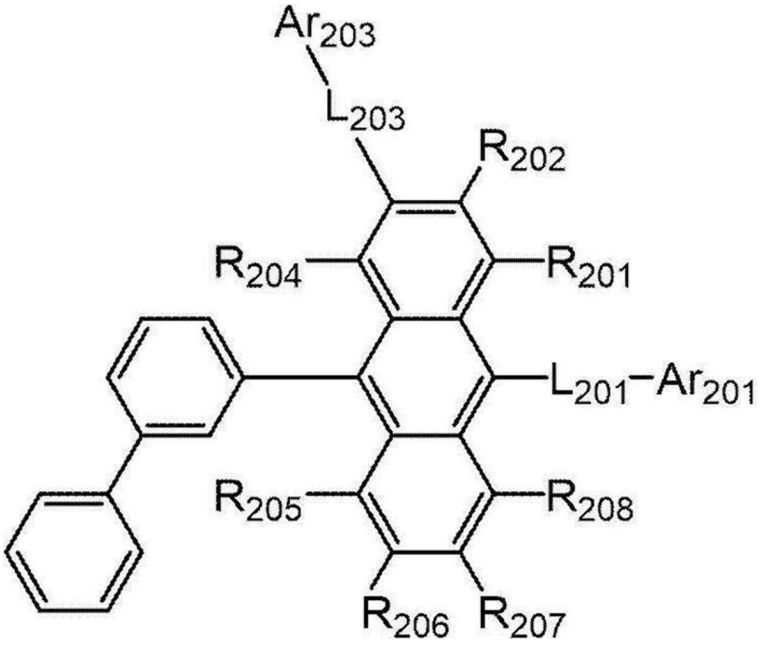
【化２４７】



(244)

【０６８８】

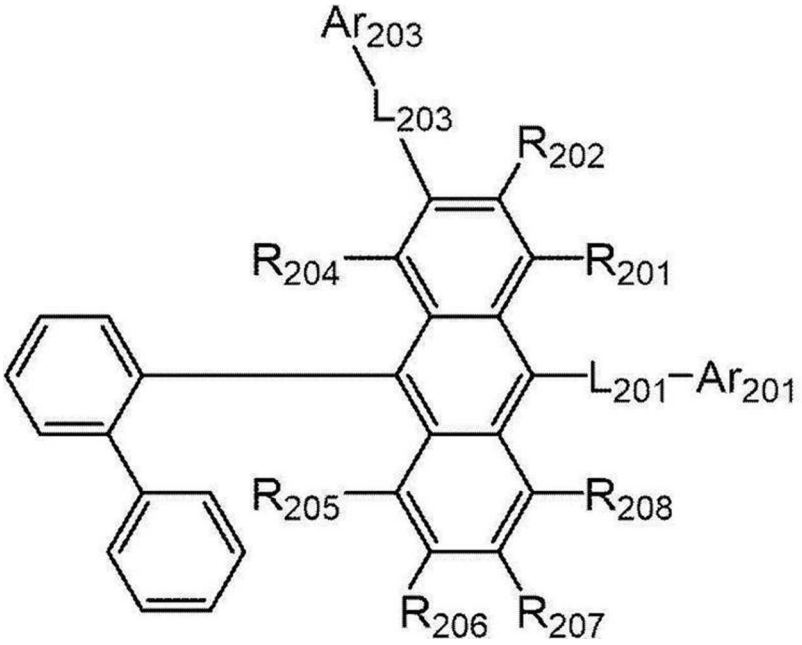
【化２４８】



(245)

【０６８９】

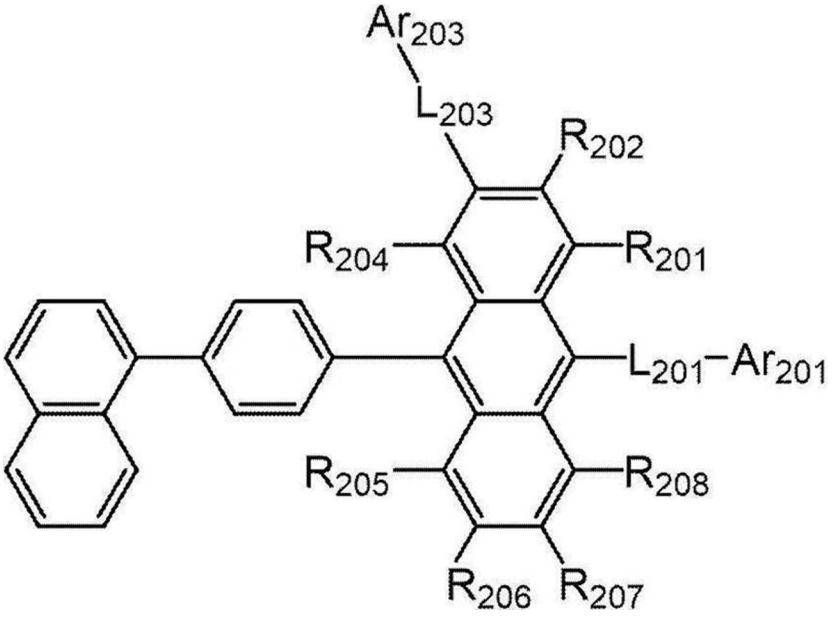
【化２４９】



(246)

【０６９０】

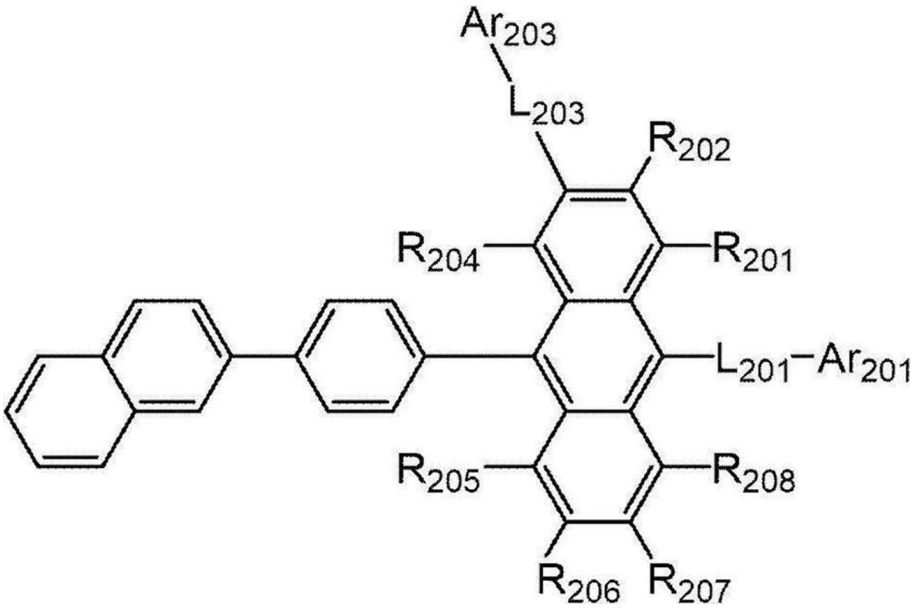
【化２５０】



(247)

【０６９１】

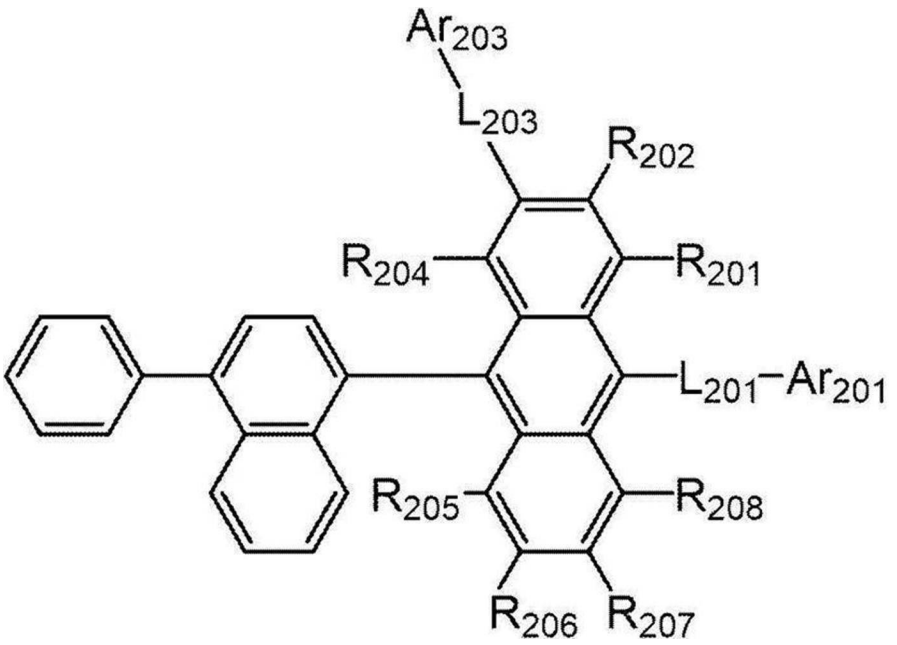
【化２５１】



(248)

【０６９２】

【化２５２】



(249)

【０６９３】

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

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

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

Ｌ２０３は、前記一般式（２）におけるＬ２０１と同義であり、

Ｌ２０３とＬ２０１は、互いに同一であるか、又は異なり、

Ａｒ２０３は、前記一般式（２）におけるＡｒ２０１と同義であり、

Ａｒ２０３とＡｒ２０１は、互いに同一であるか、又は異なる。）

【０６９４】

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、又は

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

【０６９５】

Ｌ２０１は、

単結合、又は

無置換の環形成炭素数６～２２のアリーレン基であり、

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

【０６９６】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、

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

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、又は

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

【０６９７】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、
前記一般式（２）で表される第二の化合物中、Ｒ２０１～Ｒ２０８は、水素原子であることが好ましい。

【０６９８】
前記第二の化合物において、「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であることが好ましい。

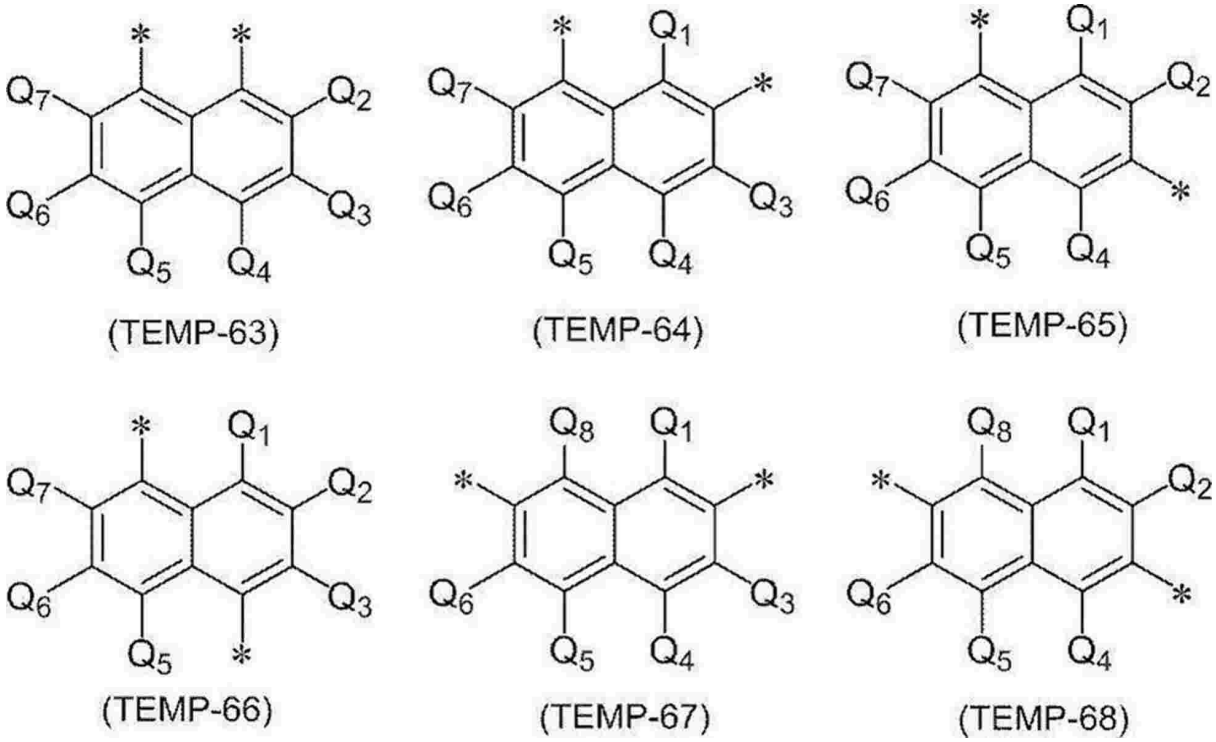
【０６９９】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、例えば、前記一般式（２）で表される第二の化合物中のＡｒ２０１は置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基である。

【０７００】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、例えば、前記一般式（２）で表される第二の化合物中のＡｒ２０１は無置換のジベンゾフラニル基である。

【０７０１】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、例えば、前記一般式（２）で表される第二の化合物は少なくとも１つの水素を含み、前記水素のうち少なくとも１つが重水素である。

【０７０２】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、例えば、前記一般式（２）で表される第二の化合物中のＬ２０１はＴＥＭＰ－６３ないしＴＥＭＰ－６８である。

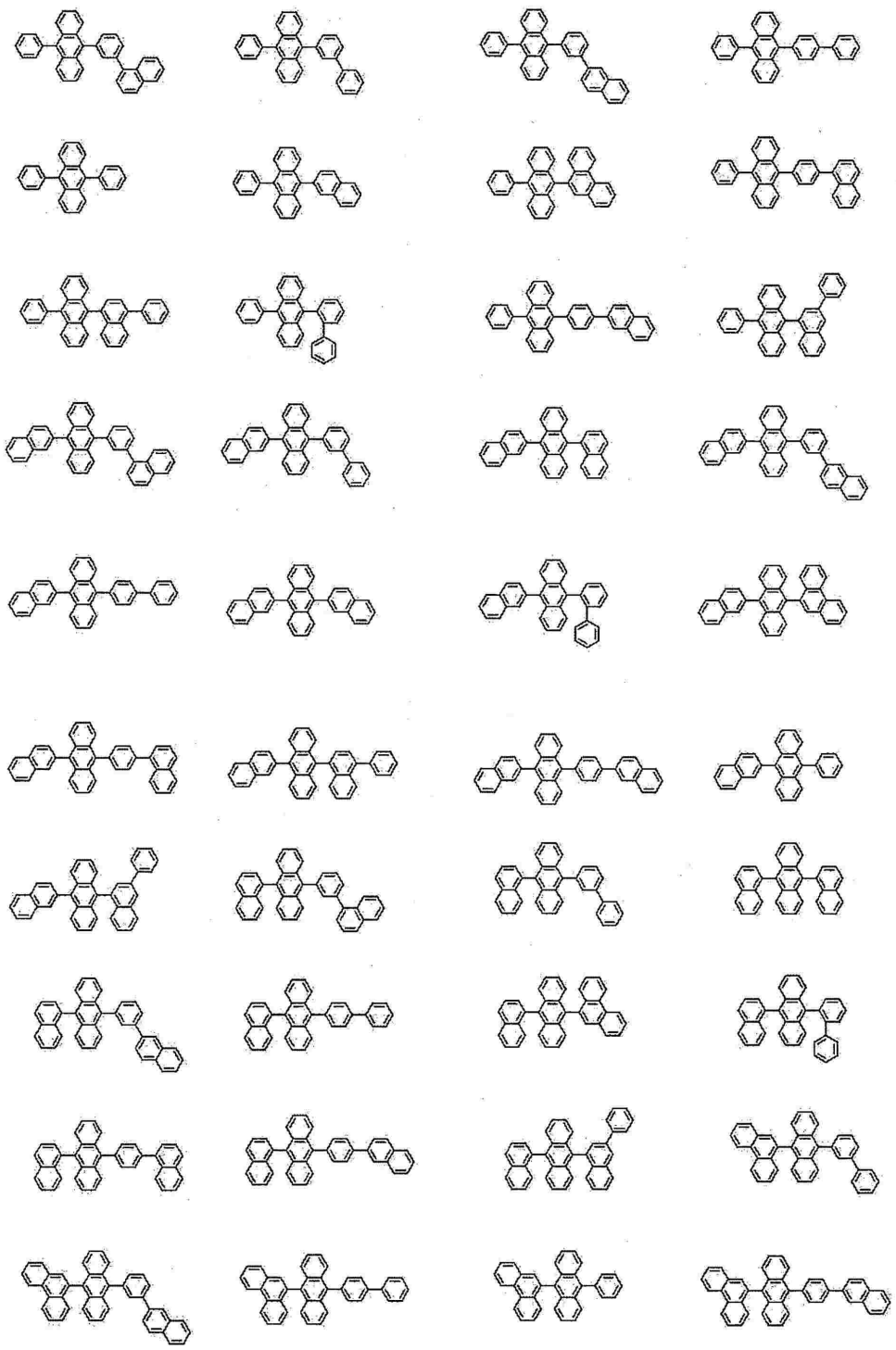
【０７０３】
【化２５３】



【０７０４】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、例えば、前記一般式（２）で表される第二の化合物中のＡｒ２０１は置換もしくは無置換のアントリル基、
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、

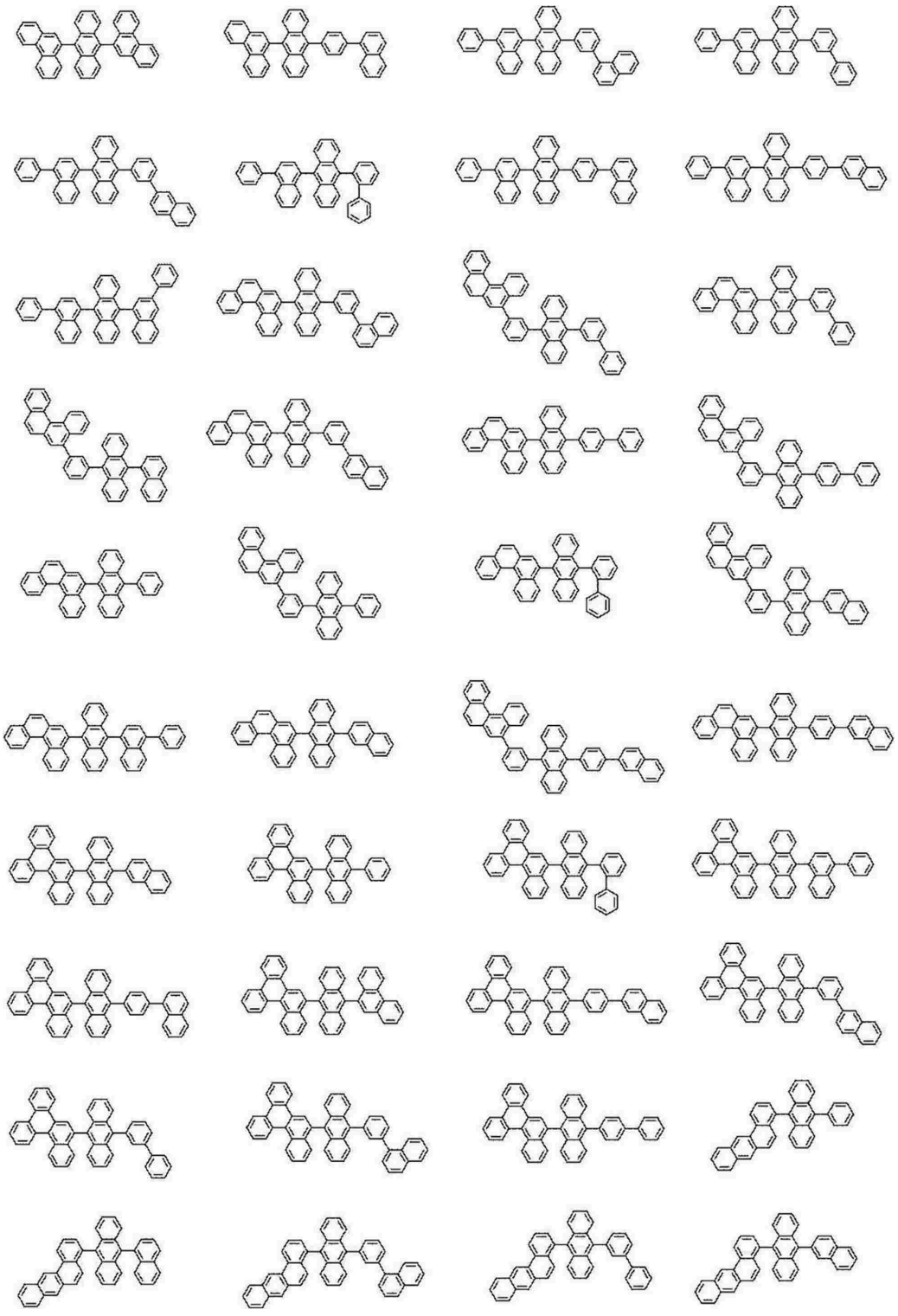
トリフェニレニル基、
ベンゾトリフェニレニル基、
テトラセニル基、
ペンタセニル基、
フルオランテニル基、
ベンゾフルオランテニル基、及び
ペリレニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。
【０７０５】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、例えば、前記一般式（２）で表される第二の化合物中のAr_{201}は置換もしくは無置換のフルオレニル基である。
【０７０６】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、例えば、前記一般式（２）で表される第二の化合物中のAr_{201}は置換もしくは無置換のキサンテニル基である。
【０７０７】
本実施形態に係る有機ＥＬ素子において、例えば、前記一般式（２）で表される第二の化合物中のAr_{201}はベンゾキサンテニル基である。
【０７０８】
（第二の化合物の製造方法）
第二の化合物は、公知の方法により製造できる。また、第二の化合物は、公知の方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。
【０７０９】
（第二の化合物の具体例）
第二の化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら第二の化合物の具体例に限定されない。
【０７１０】

【化２５４】



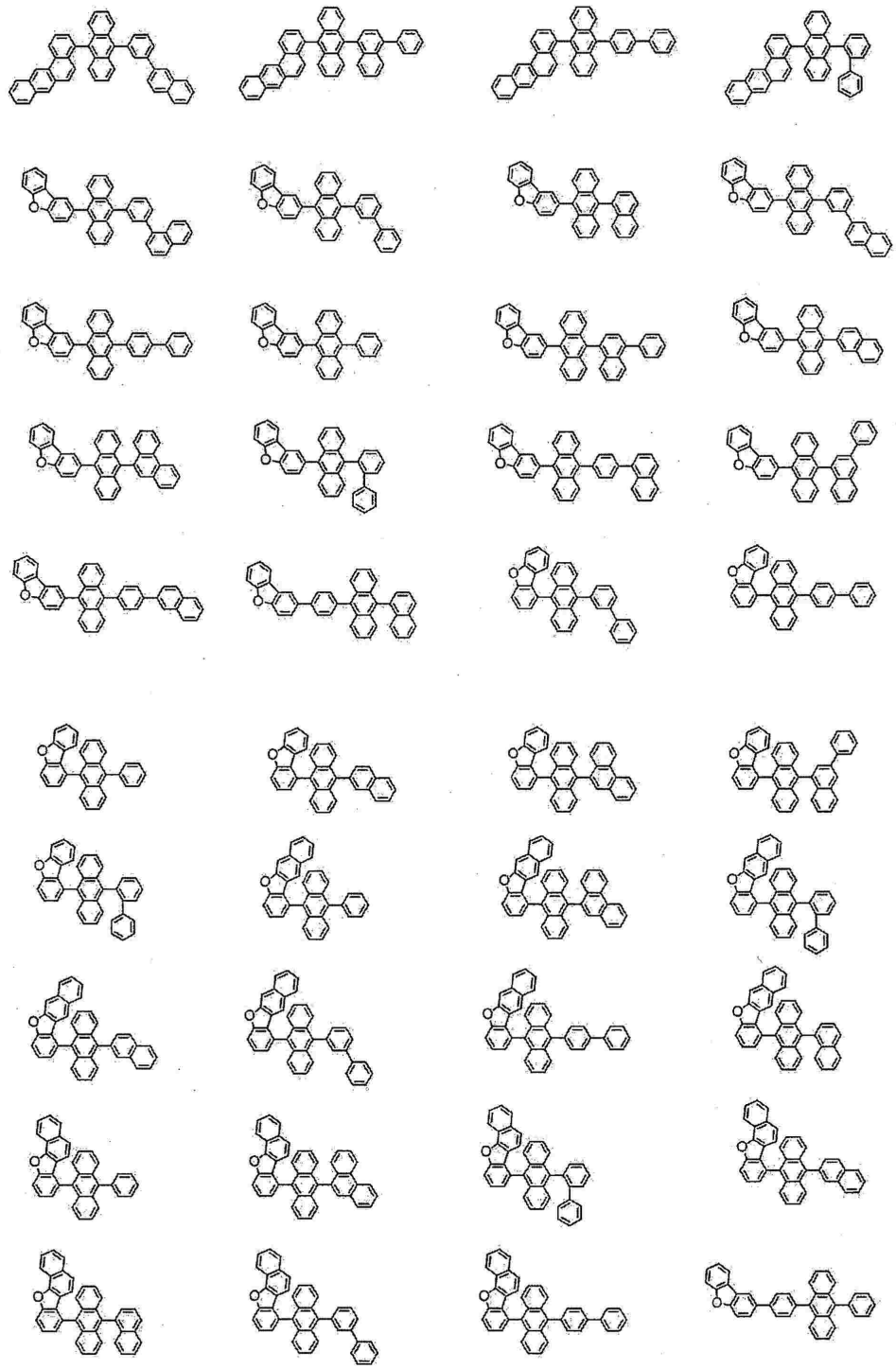
【０７１１】

【化２５５】



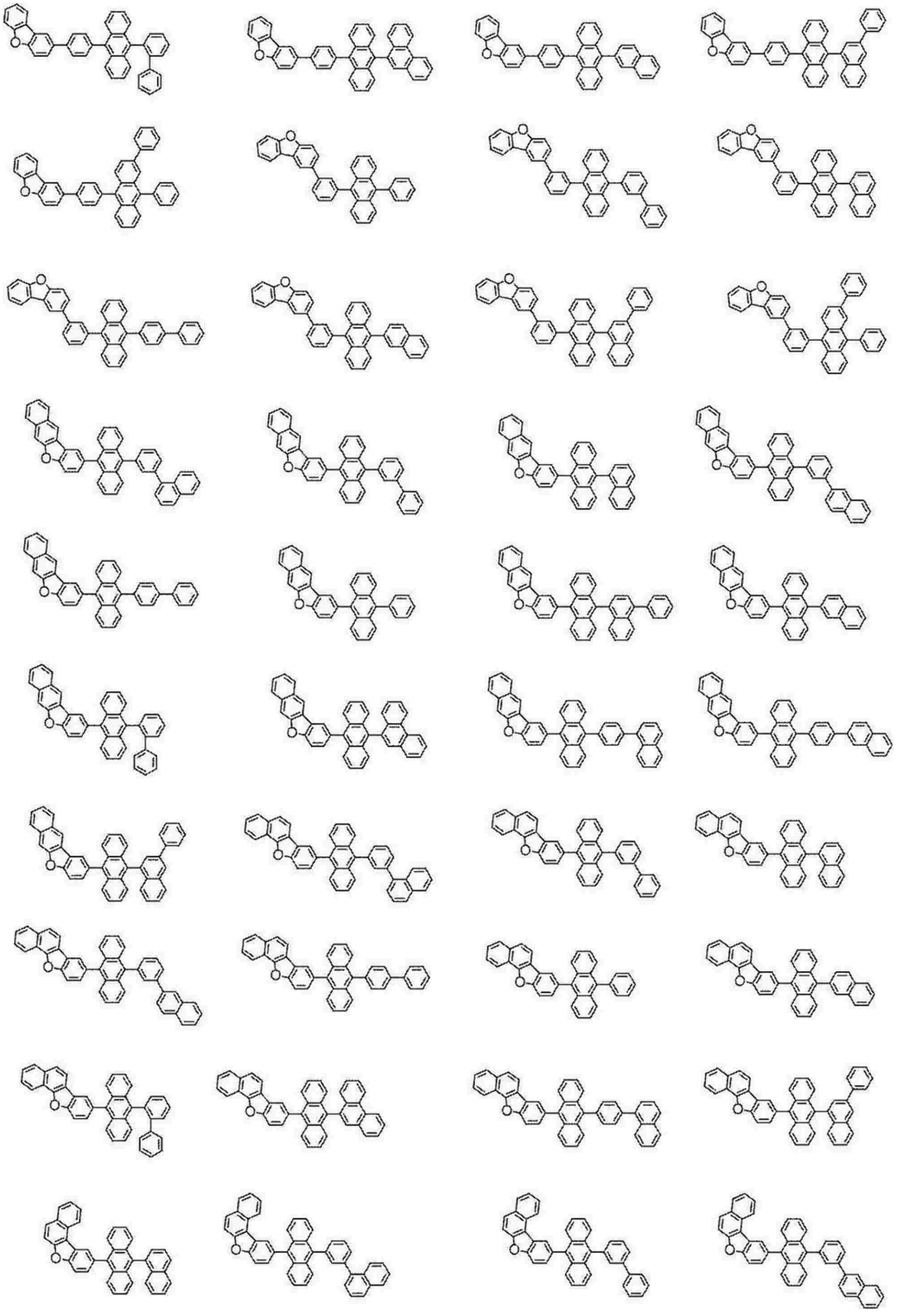
【０７１２】

【化２５６】



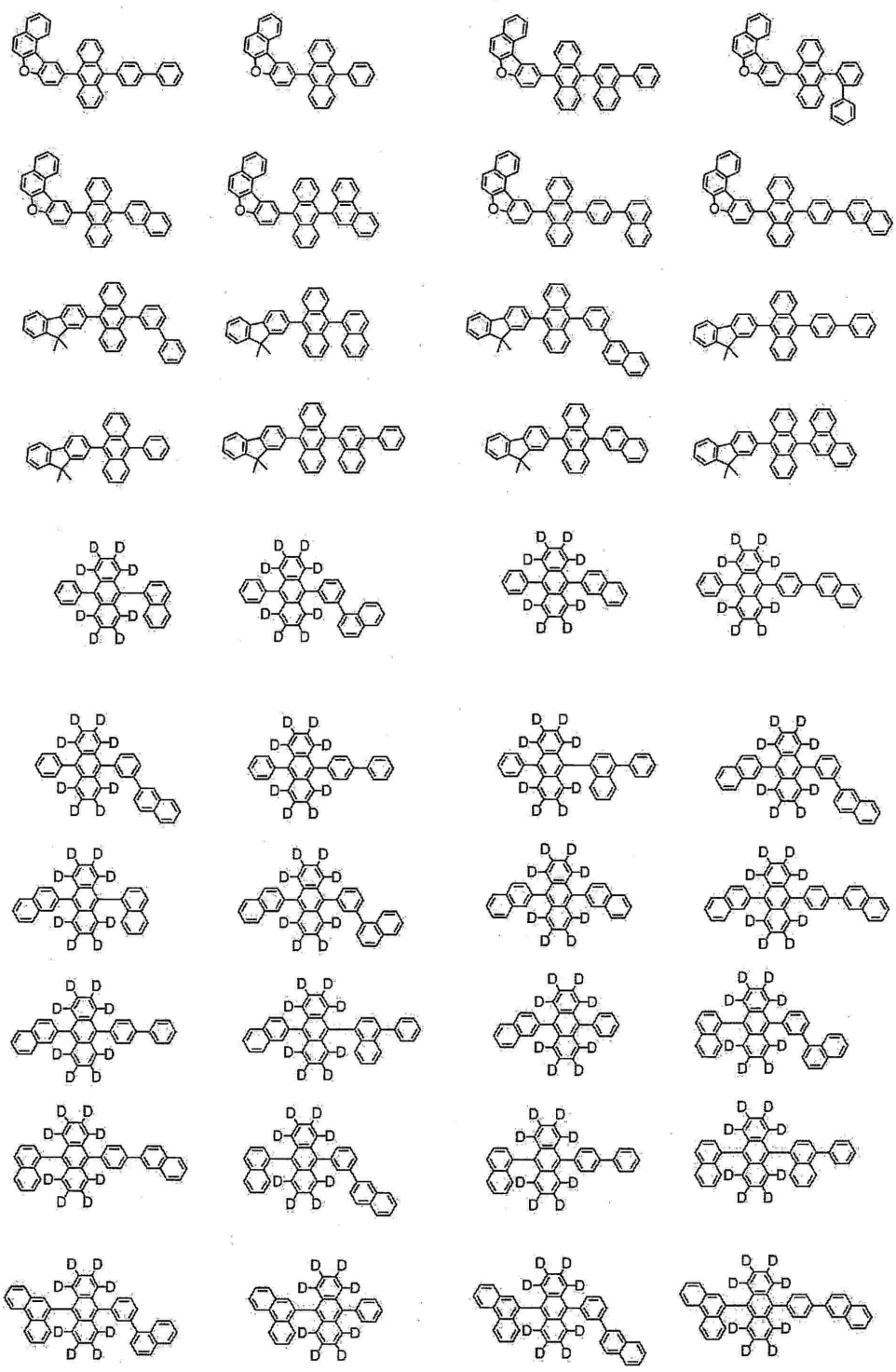
【０７１３】

【化２５７】



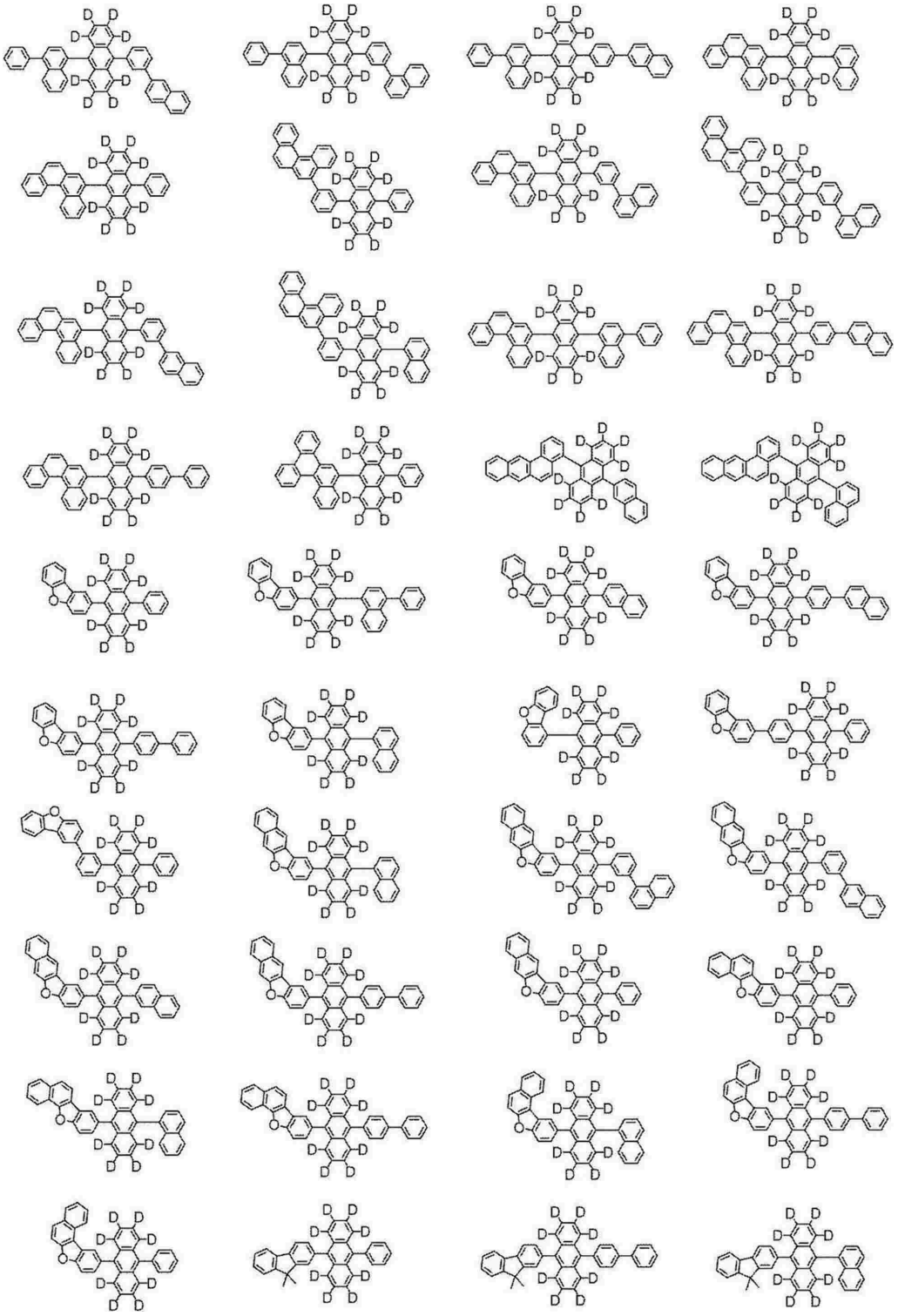
【０７１４】

【化２５８】



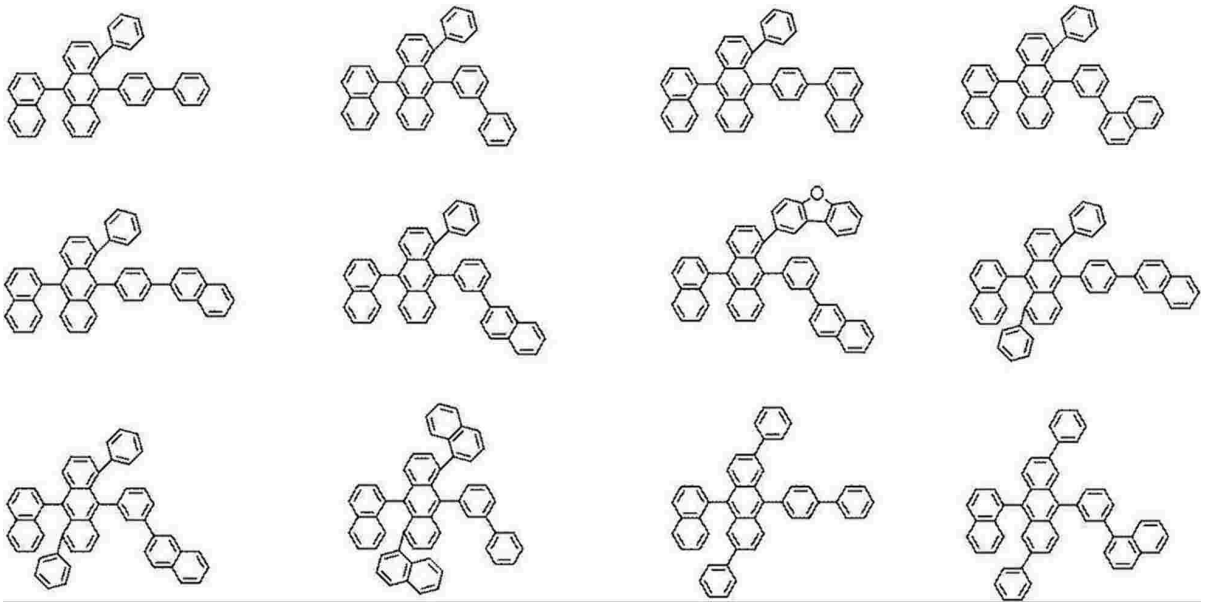
【０７１５】

【化２５９】



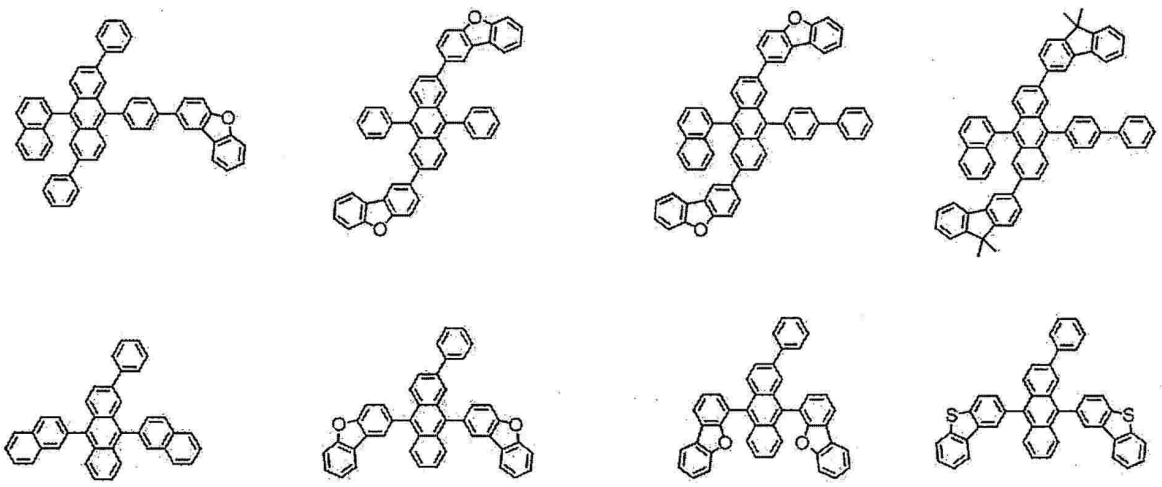
【０７１６】

【化２６０】



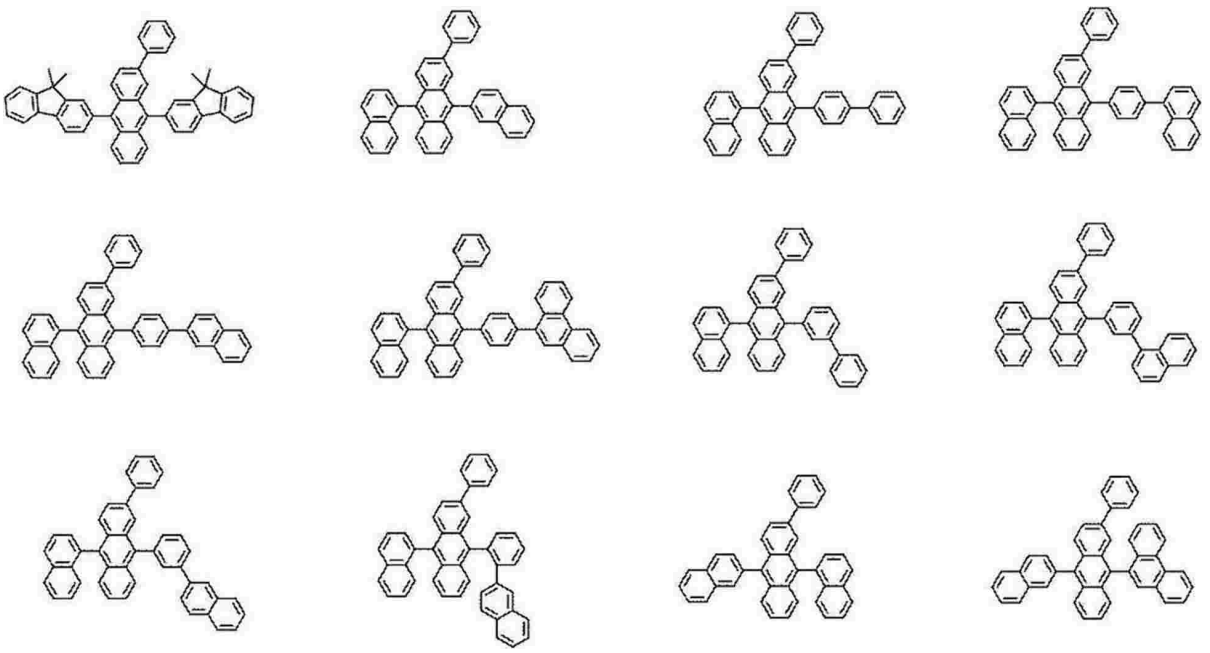
【０７１７】

【化２６１】



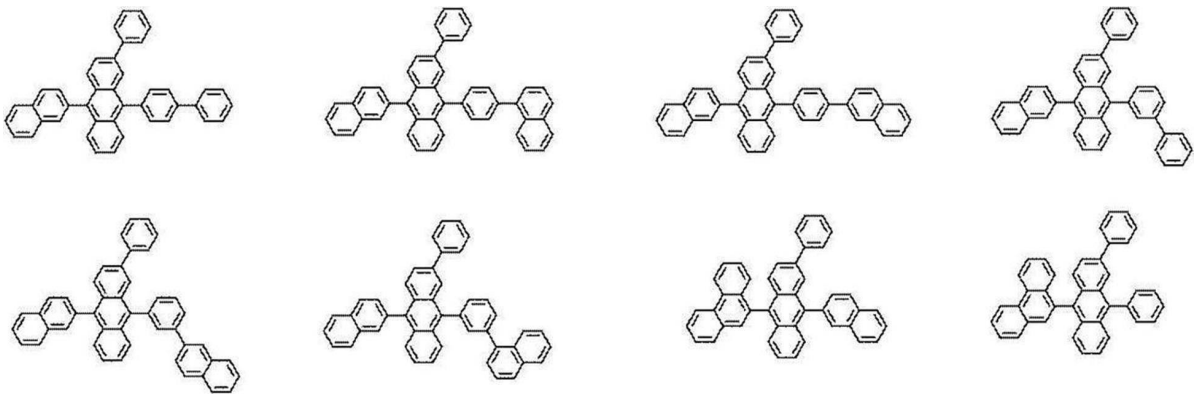
【０７１８】

【化２６２】



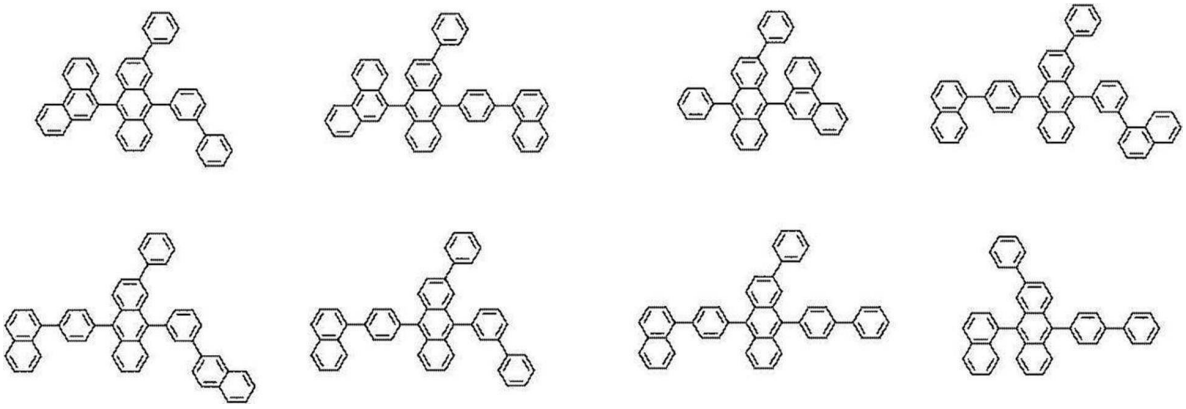
【０７１９】

【化２６３】



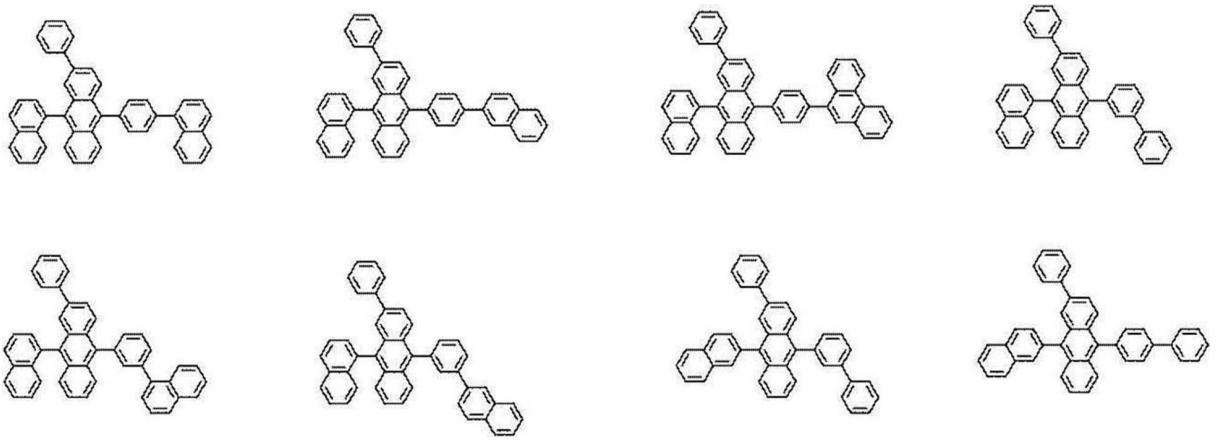
【０７２０】

【化２６４】



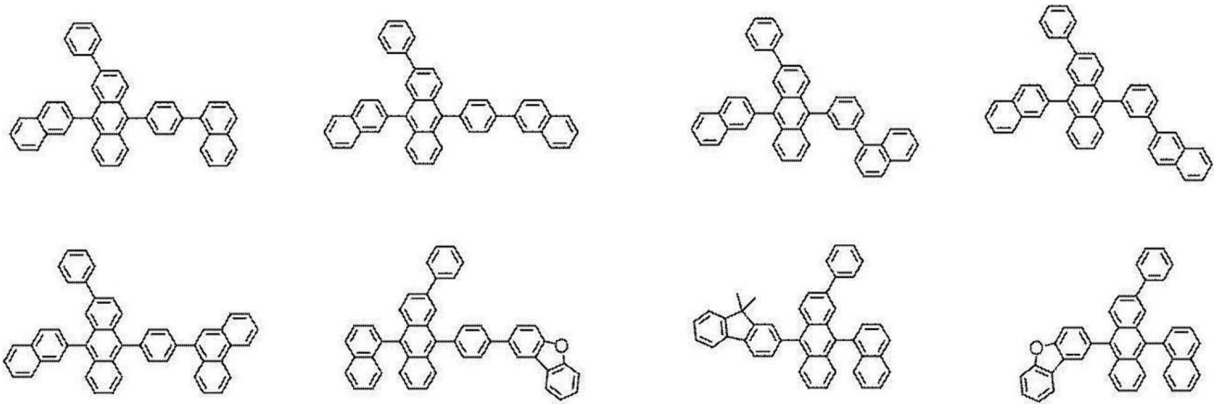
【０７２１】

【化２６５】



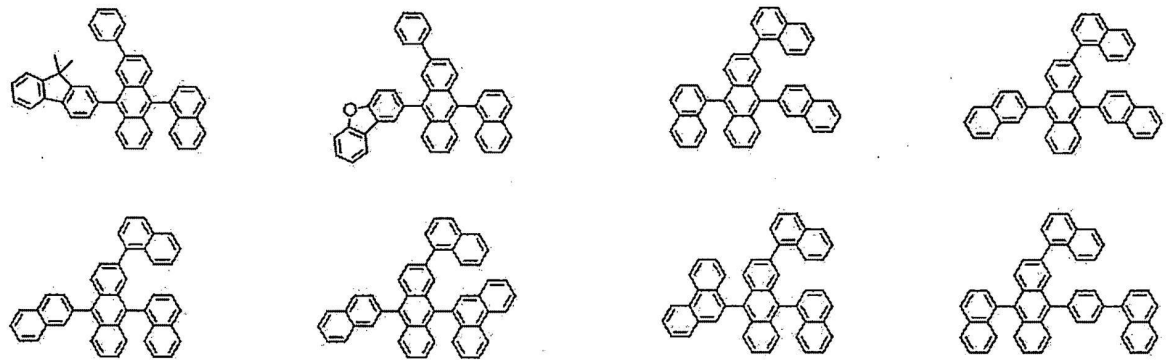
【０７２２】

【化２６６】



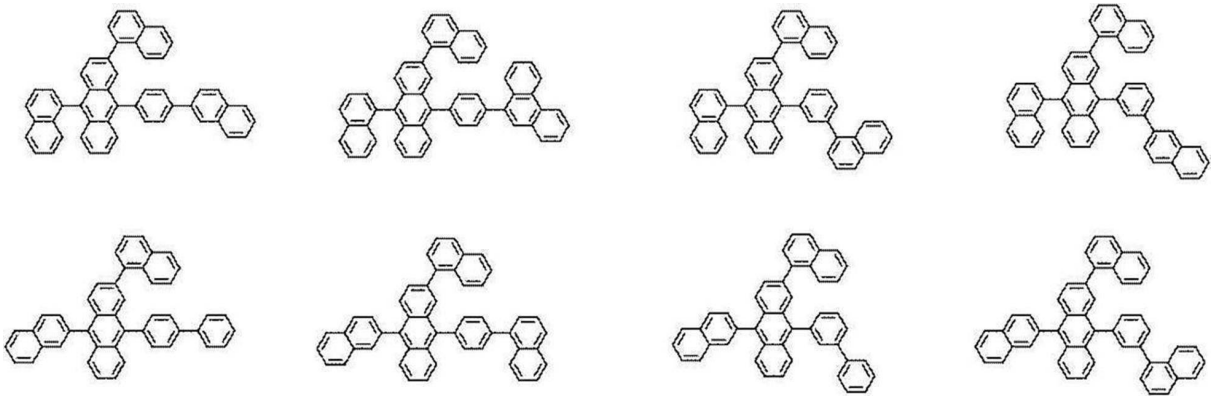
【０７２３】

【化２６７】



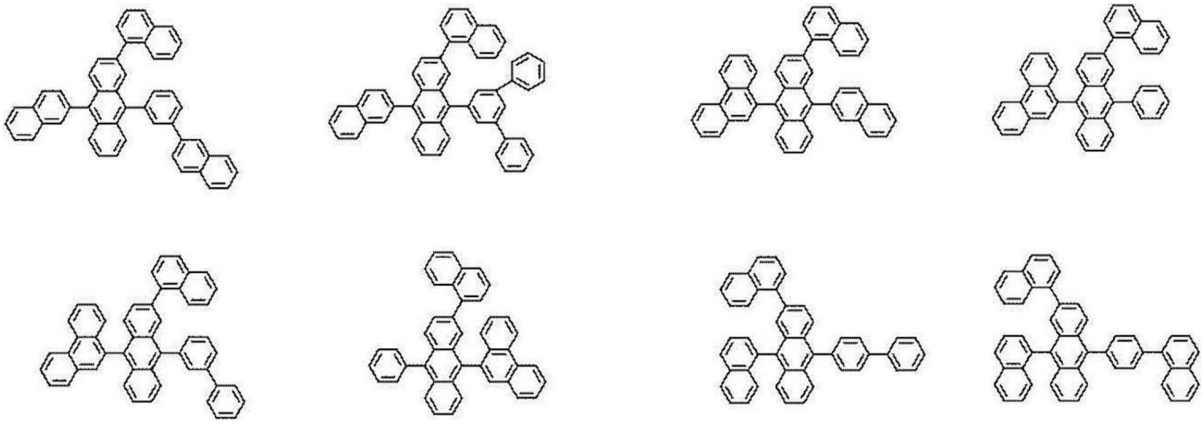
【０７２４】

【化２６８】



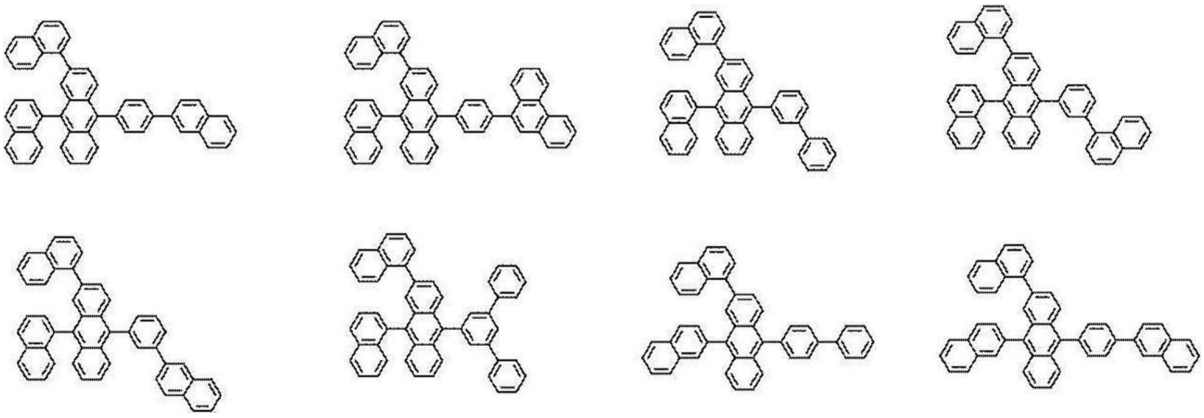
【０７２５】

【化２６９】



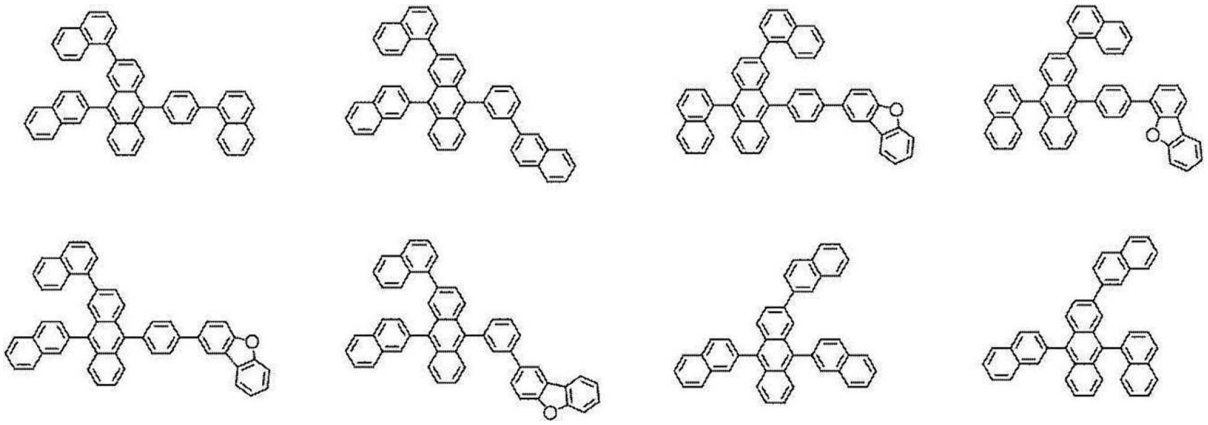
【０７２６】

【化２７０】



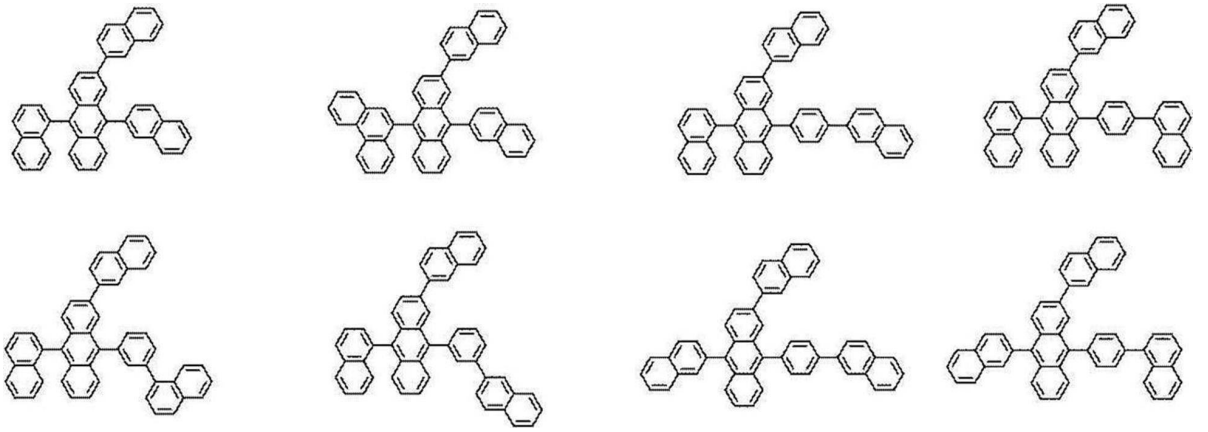
【０７２７】

【化２７１】



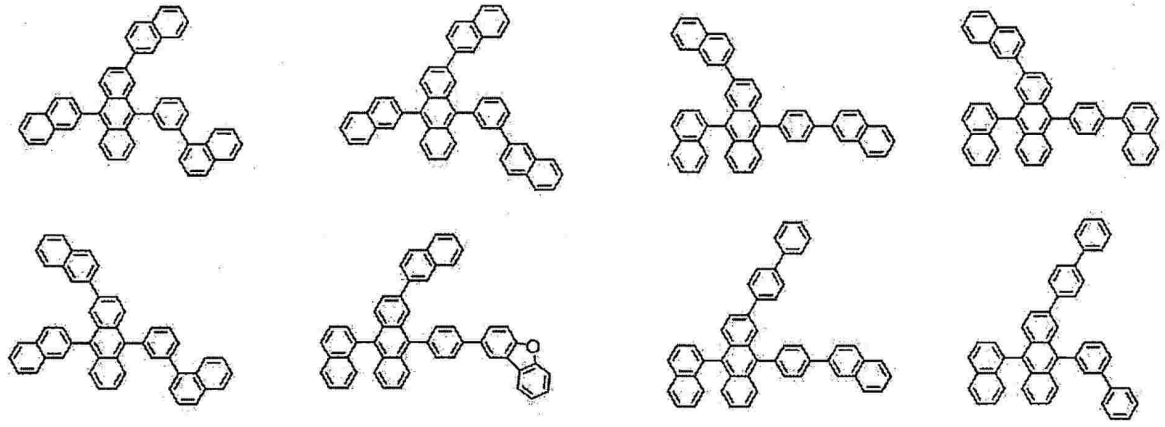
【０７２８】

【化２７２】



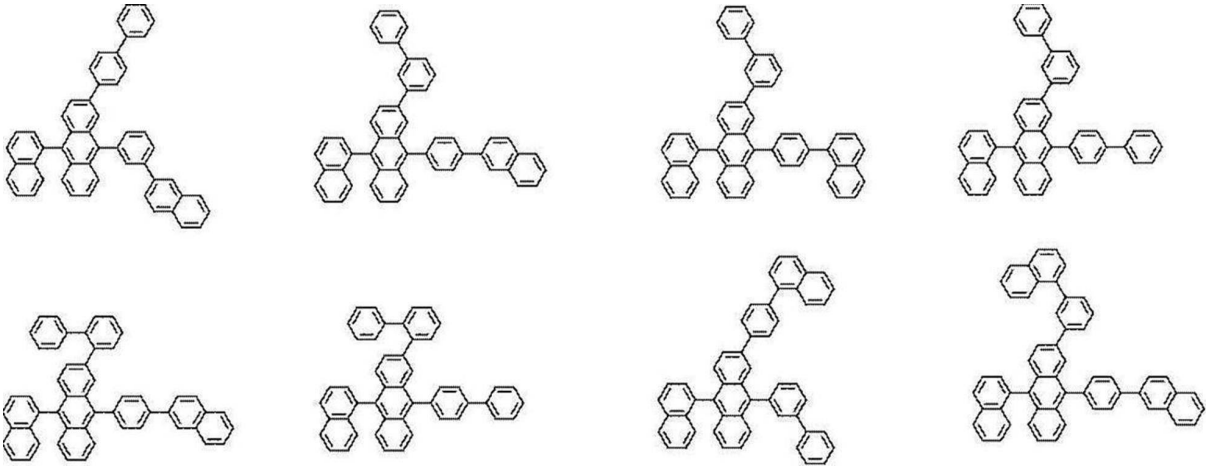
【０７２９】

【化２７３】



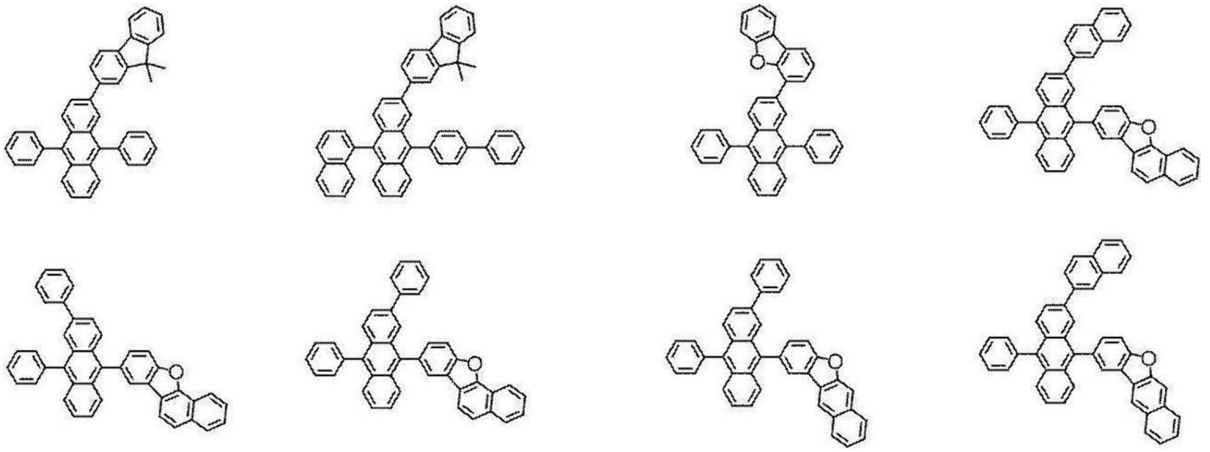
【０７３０】

【化２７４】



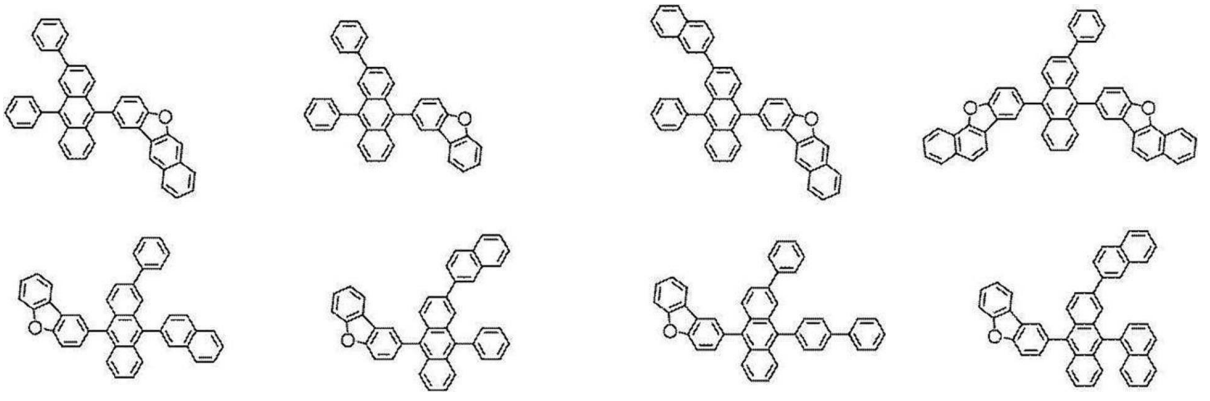
【０７３１】

【化２７５】



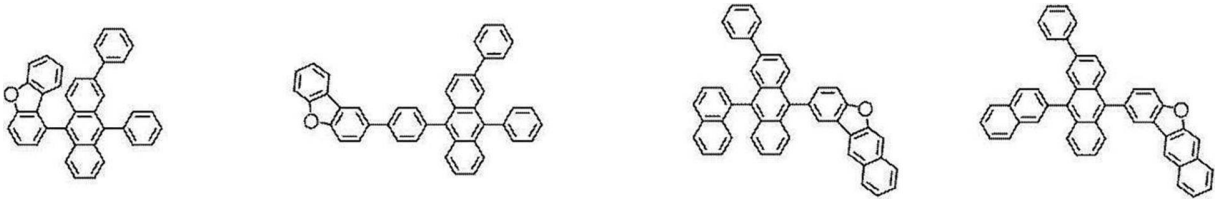
【０７３２】

【化２７６】

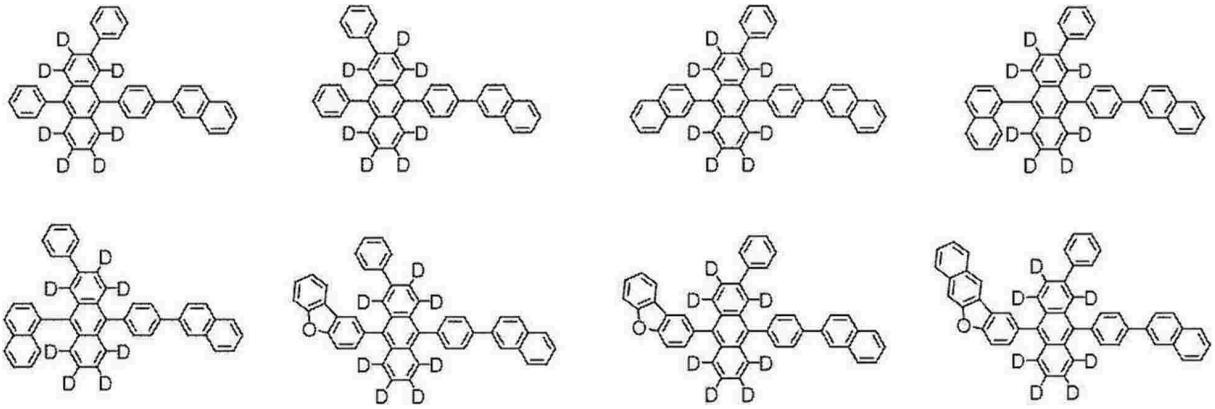


【０７３３】

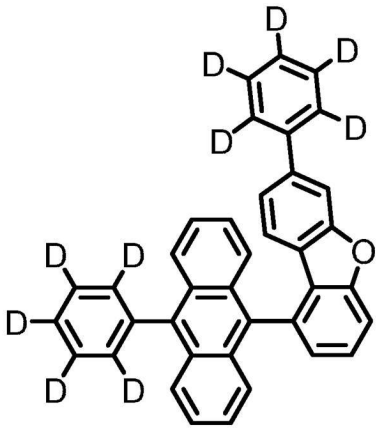
【化２７７】



【０７３４】
【化２７８】



【０７３５】
【化２７９】



【０７３６】
（第一の発光性化合物及び第二の発光性化合物）
有機ＥＬ素子１Ｂにおいて、第一の発光層５１は、第一の発光性化合物（好ましくは蛍光発光性の化合物）をさらに含有することも好ましい。
有機ＥＬ素子１Ｂにおいて、第二の発光層５２は、第二の発光性化合物（好ましくは蛍光発光性の化合物）をさらに含有することも好ましい。
第一の発光層５１が第一の発光性化合物を含有し、かつ第二の発光層５２が第二の発光性化合物を含有する場合、第一の発光性化合物と第二の発光性化合物とは、互いに同一であるか又は異なる。
第一の発光性化合物及び第二の発光性化合物としては、有機ＥＬ素子１Ａにて例示した発光性化合物と同様の例が挙げられる。
【０７３７】
一実施形態においては、有機ＥＬ素子１Ｂは、第一の発光層５１における第一の発光性化合物及び第二の発光層５２における第二の発光性化合物の少なくともいずれかの化合物として、
前記一般式（４）で表される化合物、
前記一般式（５）で表される化合物、
前記一般式（６）で表される化合物、及び
前記一般式（６３ａ）で表される化合物からなる群から選択される１以上の化合物を含有する。
【０７３８】
一実施形態においては、前記各式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置

換基が、
　無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
　無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
　無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
　無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
　－Ｓｉ（Ｒ９０１ａ）（Ｒ９０２ａ）（Ｒ９０３ａ）で表される基、
　－Ｏ－（Ｒ９０４ａ）で表される基、
　－Ｓ－（Ｒ９０５ａ）で表される基、
　－Ｎ（Ｒ９０６ａ）（Ｒ９０７ａ）で表される基、
　ハロゲン原子、
　シアノ基、
　ニトロ基、
　無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
　無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ９０１ａ～Ｒ９０７ａは、それぞれ独立に、
　水素原子、
　無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
　無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
　無置換の環形成原子数５～５０の複素環基であり、
Ｒ９０１ａが２以上存在する場合、２以上のＲ９０１ａは、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０２ａが２以上存在する場合、２以上のＲ９０２ａは、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０３ａが２以上存在する場合、２以上のＲ９０３ａは、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０４ａが２以上存在する場合、２以上のＲ９０４ａは、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０５ａが２以上存在する場合、２以上のＲ９０５ａは、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０６ａが２以上存在する場合、２以上のＲ９０６ａは、互いに同一であるか、又は異なり、
Ｒ９０７ａが２以上存在する場合、２以上のＲ９０７ａは、互いに同一であるか、又は異なる。

【０７３９】
一実施形態においては、前記各式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、
　無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
　無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
　無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。

【０７４０】
一実施形態においては、前記各式中の「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、
　無置換の炭素数１～１８のアルキル基、
　無置換の環形成炭素数６～１８のアリール基、又は
　無置換の環形成原子数５～１８の複素環基である。

【０７４１】
有機ＥＬ素子１Ｂにおいて、第一の発光層５１が含有する第一の発光性化合物は、最大ピーク波長が５００ｎｍ以下の発光を示す化合物であることが好ましく、４３０ｎｍ以上４８０ｎｍ以下の発光を示す化合物であることがより好ましい。
有機ＥＬ素子１Ｂにおいて、第一の発光層５１が含有する第一の発光性化合物は、最大

ピーク波長が５００ｎｍ以下の蛍光発光を示す化合物であることが好ましく、４３０ｎｍ以上４８０ｎｍ以下の蛍光発光を示す化合物であることがより好ましい。

【０７４２】

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

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

【０７４３】

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

【０７４４】

有機ＥＬ素子１Ｂにおいて、第一の化合物の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と第二の化合物の三重項エネルギーT_1（Ｈ２）とが、下記数式（数１）の関係を満たすことが好ましい。

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

【０７４５】

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

【０７４６】

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

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

$$^3A^* + {}^3A^* \rightarrow (4/9)\,{}^1A + (1/9)\,{}^1A^* + (13/9)\,{}^3A^*$$

即ち、$5\,{}^3A^* \rightarrow 4\,{}^1A + 1\,A^*$となり、当初生成した７５％の三重項励起子のうち、１／５即ち２０％が一重項励起子に変化することが予測されている。従って、光として寄与する一重項励起子は、当初生成する２５％分に７５％×（１／５）＝１５％を加えた４０％ということになる。このとき、全発光強度中に占めるＴＴＦ由来の発光比率（ＴＴＦ比率）は、１５／４０、すなわち３７．５％となる。また、当初生成した７５％の三重項励起子のお互いが衝突して一重項励起子が生成した（２つの三重項励起子から１つの一重項励起子が生成した）とすると、当初生成する一重項励起子２５％分に７５％×（１／２）＝３７．５％を加えた６２．５％という非常に高い内部量子効率が得られる。このとき、ＴＴＦ比率は、３７．５／６２．５＝６０％である。

【０７４７】

本実施形態に係る有機ＥＬ素子によれば、第一の発光層で正孔と電子との再結合によって生成した三重項励起子は、当該第一の発光層と直接に接する有機層との界面にキャリア

が過剰に存在していても、第一の発光層と当該有機層との界面に存在する三重項励起子がクエンチされ難くなると考えられる。例えば、再結合領域が、第一の発光層と正孔輸送層又は電子障壁層との界面に局所的に存在する場合には、過剰な電子によるクエンチが考えられる。一方、再結合領域が、第一の発光層と電子輸送層又は正孔障壁層との界面に局所的に存在する場合には、過剰な正孔によるクエンチが考えられる。

有機ＥＬ素子１Ｂは、所定の関係を満たす、少なくとも２つの発光層（すなわち、第一の発光層５１及び第二の発光層５２）を備え、第一の発光層５１中の第一の化合物の三重項エネルギーT_1（Ｈ１）と、第二の発光層５２中の第二の化合物の三重項エネルギーT_1（Ｈ２）とが、前記数式（数１）の関係を満たすように第一の発光層５１及び第二の発光層５２を備えることで、第一の発光層５１で生成した三重項励起子は、過剰キャリアによってクエンチされずに第二の発光層５２へと移動し、また、第二の発光層５２から第一の発光層５１へ逆移動することを抑制できる。その結果、第二の発光層５２において、ＴＴＦメカニズムが発現して、一重項励起子が効率良く生成され、発光効率が向上する。

このように、有機ＥＬ素子１Ｂが、三重項励起子を主に生成させる第一の発光層５１と、第一の発光層５１から移動してきた三重項励起子を活用してＴＴＦメカニズムを主に発現させる第二の発光層５２と、を異なる領域として備え、第二の発光層５２中の第二の化合物として、第一の発光層中の第一の化合物よりも小さな三重項エネルギーを有する化合物を用いて、三重項エネルギーの差を設けることで、発光効率が向上する。

【０７４８】

（三重項エネルギーT_1）

三重項エネルギーT_1の測定方法としては、下記の方法が挙げられる。

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

換算式（Ｆ１）：T_1［ｅＶ］＝１２３９．８５／λ_{edge}

【０７４９】

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

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

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

【０７５０】

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

S_1（Ｈ１）＞S_1（Ｄ３）…（数２）

【０７５１】

（一重項エネルギーS_1）

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

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

換算式（Ｆ２）：S_1［ｅＶ］＝１２３９．８５／λｅｄｇｅ

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

【０７５２】

吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ（つまり縦軸の値が減少するにつれ）、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側（ただし、吸光度が０．１以下となる場合は除く）で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

なお、吸光度の値が０．２以下の極大点は、上記最も長波長側の極大値には含めない。

【０７５３】

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

【０７５４】

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

$$S_1(H2) > S_1(D4) \cdots (数3)$$

【０７５５】

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

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

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

【０７５６】

（発光層の膜厚）

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

【０７５７】

（発光層における化合物の含有率）

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

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

第一の発光性化合物の含有率は、１質量％以上１０質量％以下であることが好ましく、

１質量％以上７質量％以下であることがより好ましく、１質量％以上５質量％以下であることがさらに好ましい。
ただし、第一の発光層５１における第一の化合物及び第一の発光性化合物の合計含有率の上限は、１００質量％である。
【０７５８】
なお、本実施形態は、第一の発光層５１に、第一の化合物及び第一の発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。
第一の発光層５１は、第一の化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。第一の発光層５１は、第一の発光性化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。
【０７５９】
第二の発光層５２が第二の化合物及び第二の発光性化合物を含有する場合、第二の発光層５２における第二の化合物及び第二の発光性化合物の含有率は、例えば、それぞれ、以下の範囲であることが好ましい。
第二の化合物の含有率は、８０質量％以上９９質量％以下であることが好ましく、９０質量％以上９９質量％以下であることがより好ましく、９５質量％以上９９質量％以下であることがさらに好ましい。
第二の発光性化合物の含有率は、１質量％以上１０質量％以下であることが好ましく、１質量％以上７質量％以下であることがより好ましく、１質量％以上５質量％以下であることがさらに好ましい。
ただし、第二の発光層５２における第二の化合物及び第二の発光性化合物の合計含有率の上限は、１００質量％である。
【０７６０】
なお、本実施形態は、第二の発光層５２に、第二の化合物及び第二の発光性化合物以外の材料が含まれることを除外しない。
第二の発光層５２は、第二の化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。第二の発光層５２は、第二の発光性化合物を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。
【０７６１】
有機ＥＬ素子１Ｂにおいて、第一の発光層５１と第二の発光層５２とが、直接、接していることも好ましい。
【０７６２】
有機ＥＬ素子１Ｂにおいて、「第一の発光層５１と第二の発光層５２とが、直接、接している」場合、当該「第一の発光層５１と第二の発光層５２とが、直接、接している」層構造は、例えば、以下の態様（ＬＳ１）、（ＬＳ２）及び（ＬＳ３）のいずれかの態様も含み得る。
（ＬＳ１）第一の発光層５１に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層５２に係る化合物の蒸着の工程を経る過程でホスト材料としての第一の化合物（以下、「第一のホスト材料」という場合がある。）及びホスト材料としての第二の化合物（以下、「第二のホスト材料」という場合がある。）の両方が混在する領域が生じ、当該領域が第一の発光層５１と第二の発光層５２との界面に存在する態様。
（ＬＳ２）第一の発光層５１及び第二の発光層５２が発光性の化合物を含む場合に、第一の発光層５１に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層５２に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で第一のホスト材料、第二のホスト材料及び発光性の化合物が混在する領域が生じ、当該領域が第一の発光層５１と第二の発光層５２との界面に存在する態様。
（ＬＳ３）第一の発光層５１及び第二の発光層５２が発光性の化合物を含む場合に、第一の発光層５１に係る化合物の蒸着の工程と第二の発光層５２に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で当該発光性の化合物からなる領域、第一のホスト材料からなる領域、又は第二のホスト材料からなる領域が生じ、当該領域が第一の発光層５１と第二の発光層５２との界面に存在する態様。

【０７６３】
有機ＥＬ素子１Ｂが第三の発光層を含んでいる場合、第一の発光層５１と第二の発光層５２とが、直接、接しており、第二の発光層５２と前記第三の発光層とが、直接、接していることが好ましい。
【０７６４】
有機ＥＬ素子１Ｂにおいて、「第二の発光層５２と第三の発光層とが、直接、接している」場合、当該「第二の発光層５２と第三の発光層とが、直接、接している」層構造は、例えば、以下の態様（ＬＳ４）、（ＬＳ５）及び（ＬＳ６）のいずれかの態様も含み得る。
（ＬＳ４）第二の発光層５２に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で第二のホスト材料及び第三のホスト材料（第三の発光層が含有するホスト材料）の両方が混在する領域が生じ、当該領域が第二の発光層５２と第三の発光層との界面に存在する態様。
（ＬＳ５）第二の発光層５２及び第三の発光層が発光性の化合物を含む場合に、第二の発光層５２に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で第二のホスト材料、第三のホスト材料及び発光性の化合物が混在する領域が生じ、当該領域が第二の発光層５２と第三の発光層との界面に存在する態様。
（ＬＳ６）第二の発光層５２及び第三の発光層が発光性の化合物を含む場合に、第二の発光層５２に係る化合物の蒸着の工程と第三の発光層に係る化合物の蒸着の工程を経る過程で当該発光性の化合物からなる領域、第二のホスト材料からなる領域、又は第三のホスト材料からなる領域が生じ、当該領域が第二の発光層５２と第三の発光層との界面に存在する態様。
【０７６５】
有機ＥＬ素子１Ｂは、介在層をさらに有することも好ましい。
有機ＥＬ素子１Ｂが介在層を有する場合、前記介在層は、第一の発光層５１と第二の発光層５２との間に配置されていることが好ましい。
【０７６６】
（介在層）
介在層は、ノンドープ層であることが好ましい。介在層は、金属原子を含まないことが好ましい。
介在層は、介在層材料を含む。介在層材料は、発光性化合物ではないことが好ましい。
介在層材料としては、特に限定されないが、発光性化合物以外の材料であることが好ましい。
介在層材料としては、例えば、１）オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、若しくはフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、２）カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、若しくはクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、３）トリアリールアミン誘導体、若しくは縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族アミン化合物が挙げられる。
【０７６７】
介在層材料は、第一の発光層５１が含有する第一の化合物及び第二の発光層５２が含有する第二の化合物の一方、又は両方の化合物であってもよい。
【０７６８】
介在層が複数の介在層材料を含有する場合、それぞれの介在層材料の含有率は、いずれも、介在層の全質量の１０質量％以上であることが好ましい。
介在層は、前記介在層材料を、介在層の全質量の６０質量％以上、含有することが好ましく、介在層の全質量の７０質量％以上、含有することがより好ましく、介在層の全質量の８０質量％以上、含有することがさらに好ましく、介在層の全質量の９０質量％以上、含有することがよりさらに好ましく、介在層の全質量の９５質量％以上、含有することがさらになお好ましい。
介在層は、介在層材料を１種のみ含んでもよいし、２種以上含んでもよい。
介在層が介在層材料を２種以上含有する場合、２種以上の介在層材料の合計含有率の上

限は、１００質量％である。
なお、本実施形態は、介在層に、介在層材料以外の材料が含まれることを除外しない。
【０７６９】
介在層は単層で構成されていてもよいし、二層以上積層されて構成されていてもよい。
【０７７０】
介在層の膜厚は、特に制限は無いが、１層あたり、３ｎｍ以上１５ｎｍ以下であることが好ましく、５ｎｍ以上１０ｎｍ以下であることがより好ましい。
【０７７１】
有機ＥＬ素子１Ａ及び有機ＥＬ素子１Ｂに共通する各層の構成についてさらに説明する。以下、符号の記載は省略することがある。
【０７７２】
（基板）
基板２は、有機ＥＬ素子の支持体として用いられる。基板２としては、例えば、ガラス、石英、及びプラスチック等を用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブル）基板のことであり、例えば、プラスチック基板等が挙げられる。プラスチック基板を形成する材料としては、例えば、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエーテルスルフォン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニル、ポリイミド、及びポリエチレンナフタレート等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。
【０７７３】
（陽極）
基板上に形成される陽極３には、仕事関数の大きい（具体的には４．０ｅＶ以上）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム－酸化スズ（ＩＴＯ：Ｉｎｄｉｕｍ Ｔｉｎ Ｏｘｉｄｅ）、珪素もしくは酸化珪素を含有した酸化インジウム－酸化スズ、酸化インジウム－酸化亜鉛、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。この他、金（Ａｕ）、白金（Ｐｔ）、ニッケル（Ｎｉ）、タングステン（Ｗ）、クロム（Ｃｒ）、モリブデン（Ｍｏ）、鉄（Ｆｅ）、コバルト（Ｃｏ）、銅（Ｃｕ）、パラジウム（Ｐｄ）、チタン（Ｔｉ）、または金属材料の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。
【０７７４】
これらの材料は、通常、スパッタリング法により成膜される。例えば、酸化インジウム－酸化亜鉛は、酸化インジウムに対し１質量％以上１０質量％以下の酸化亜鉛を加えたターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。また、例えば、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウムは、酸化インジウムに対し酸化タングステンを０．５質量％以上５質量％以下、酸化亜鉛を０．１質量％以上１質量％以下含有したターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。その他、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、スピンコート法などにより作製してもよい。
【０７７５】
陽極上に形成されるＥＬ層のうち、陽極に接して形成される正孔注入層は、陽極の仕事関数に関係なく正孔（ホール）注入が容易である複合材料を用いて形成されるため、電極材料として可能な材料（例えば、金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物、その他、元素周期表の第１族または第２族に属する元素も含む）を用いることができる。
【０７７６】
仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第１族または第２族に属する元素、すなわちリチウム（Ｌｉ）やセシウム（Ｃｓ）等のアルカリ金属、およびマグネシウム（Ｍｇ）、カルシウム（Ｃａ）、ストロンチウム（Ｓｒ）等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金（例えば、ＭｇＡｇ、ＡｌＬｉ）、ユーロピウム（Ｅｕ）、イッテルビウム（Ｙｂ）等の希土類金属およびこれらを含む合金等を用いることもできる。なお、アルカリ金

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

【０７７７】

（陰極）

陰極４には、仕事関数の小さい（具体的には３．８ｅＶ以下）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第１族または第２族に属する元素、すなわちリチウム（Ｌｉ）やセシウム（Ｃｓ）等のアルカリ金属、およびマグネシウム（Ｍｇ）、カルシウム（Ｃａ）、ストロンチウム（Ｓｒ）等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金（例えば、ＭｇＡｇ、ＡｌＬｉ）、ユーロピウム（Ｅｕ）、イッテルビウム（Ｙｂ）等の希土類金属およびこれらを含む合金等が挙げられる。

【０７７８】

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。

【０７７９】

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

【０７８０】

（正孔注入層）

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

【０７８１】

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

【０７８２】

また、正孔注入性の高い物質としては、高分子化合物（オリゴマー、デンドリマー、ポリマー等）を用いることもできる。例えば、ポリ（Ｎ－ビニルカルバゾール）（略称：ＰＶＫ）、ポリ（４－ビニルトリフェニルアミン）（略称：ＰＶＴＰＡ）、ポリ［Ｎ－（４－｛Ｎ’－［４－（４－ジフェニルアミノ）フェニル］フェニル－Ｎ’－フェニルアミノ｝フェニル）メタクリルアミド］（略称：ＰＴＰＤＭＡ）、ポリ［Ｎ，Ｎ’－ビス（４－ブチルフェニル）－Ｎ，Ｎ’－ビス（フェニル）ベンジジン］（略称：Ｐｏｌｙ－ＴＰＤ）など

の高分子化合物が挙げられる。また、ポリ（３，４－エチレンジオキシチオフェン）／ポリ（スチレンスルホン酸）（ＰＥＤＯＴ／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。

【０７８３】

（正孔輸送層）

正孔輸送層６２は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層６２には、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用する事ができる。具体的には、４，４’－ビス［Ｎ－（１－ナフチル）－Ｎ－フェニルアミノ］ビフェニル（略称：ＮＰＢ）やＮ，Ｎ’－ビス（３－メチルフェニル）－Ｎ，Ｎ’－ジフェニル－［１，１’－ビフェニル］－４，４’－ジアミン（略称：ＴＰＤ）、４－フェニル－４’－（９－フェニルフルオレン－９－イル）トリフェニルアミン（略称：ＢＡＦＬＰ）、４，４’－ビス［Ｎ－（９，９－ジメチルフルオレン－２－イル）－Ｎ－フェニルアミノ］ビフェニル（略称：ＤＦＬＤＰＢｉ）、４，４’，４’’－トリス（Ｎ，Ｎ－ジフェニルアミノ）トリフェニルアミン（略称：ＴＤＡＴＡ）、４，４’，４’’－トリス［Ｎ－（３－メチルフェニル）－Ｎ－フェニルアミノ］トリフェニルアミン（略称：ＭＴＤＡＴＡ）、４，４’－ビス［Ｎ－（スピロ－９，９’－ビフルオレン－２－イル）－Ｎ－フェニルアミノ］ビフェニル（略称：ＢＳＰＢ）などの芳香族アミン化合物等を用いることができる。ここに述べた物質は、主に10^{-6}ｃｍ^2／（Ｖ・ｓ）以上の正孔移動度を有する物質である。

【０７８４】

正孔輸送層６２には、ＣＢＰ、９－［４－（Ｎ－カルバゾリル）］フェニル－１０－フェニルアントラセン（ＣｚＰＡ）、９－フェニル－３－［４－（１０－フェニル－９－アントリル）フェニル］－９Ｈ－カルバゾール（ＰＣｚＰＡ）のようなカルバゾール誘導体や、ｔ－ＢｕＤＮＡ、ＤＮＡ、ＤＰＡｎｔｈのようなアントラセン誘導体を用いても良い。ポリ（Ｎ－ビニルカルバゾール）（略称：ＰＶＫ）やポリ（４－ビニルトリフェニルアミン）（略称：ＰＶＴＰＡ）等の高分子化合物を用いることもできる。

【０７８５】

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

【０７８６】

（電子輸送層）

電子輸送層７１は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層７１には、１）アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、２）イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、３）高分子化合物を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、Ａｌｑ、トリス（４－メチル－８－キノリノラト）アルミニウム（略称：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$_2$）、ＢＡｌｑ、Ｚｎｑ、ＺｎＰＢＯ、ＺｎＢＴＺなどの金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、２－（４－ビフェニリル）－５－（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）－１，３，４－オキサジアゾール（略称：ＰＢＤ）、１，３－ビス［５－（ｐｔｅｒｔ－ブチルフェニル）－１，３，４－オキサジアゾール－２－イル］ベンゼン（略称：ＯＸＤ－７）、３－（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）－４－フェニル－５－（４－ビフェニリル）－１，２，４－トリアゾール（略称：ＴＡＺ）、３－（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）－４－（４－エチルフェニル）－５－（４－ビフェニリル）－１，２，４－トリアゾール（略称：ｐ－ＥｔＴＡＺ）、バソフェナントロリン（略称：ＢＰｈｅｎ）、バソキュプロイン（略称：ＢＣＰ）、４，４’－ビス（５－メチルベンゾオキサゾール－２－イル）スチルベン（略称：ＢｚＯｓ）などの複素芳香族化合物も用いることができる。本実施態様においては、ベンゾイミダゾール化合物を好適に用いることができる。ここに述べた物質は、主に10^{-6}ｃｍ^2／（Ｖ・ｓ）以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を

電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層で構成されていてもよいし、上記物質からなる層が二層以上積層されて構成されていてもよい。

【０７８７】

また、電子輸送層７１には、高分子化合物を用いることもできる。例えば、ポリ［（９，９－ジヘキシルフルオレン－２，７－ジイル）－ｃｏ－（ピリジン－３，５－ジイル）］（略称：ＰＦ－Ｐｙ）、ポリ［（９，９－ジオクチルフルオレン－２，７－ジイル）－ｃｏ－（２，２’－ビピリジン－６，６’－ジイル）］（略称：ＰＦ－ＢＰｙ）などを用いることができる。

【０７８８】

（電子注入層）

電子注入層７２は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層７２には、リチウム（Ｌｉ）、セシウム（Ｃｓ）、カルシウム（Ｃａ）、フッ化リチウム（ＬｉＦ）、フッ化セシウム（ＣｓＦ）、フッ化カルシウム（CaF_2）、リチウム酸化物（ＬｉＯｘ）等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができる。その他、電子輸送性を有する物質にアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を含有させたもの、具体的にはＡｌｑ中にマグネシウム（Ｍｇ）を含有させたもの等を用いてもよい。なお、この場合には、陰極からの電子注入をより効率良く行うことができる。

【０７８９】

あるいは、電子注入層７２に、有機化合物と電子供与体（ドナー）とを混合してなる複合材料を用いてもよい。このような複合材料は、電子供与体によって有機化合物に電子が発生するため、電子注入性および電子輸送性に優れている。この場合、有機化合物としては、発生した電子の輸送に優れた材料であることが好ましく、具体的には、例えば上述した電子輸送層を構成する物質（金属錯体や複素芳香族化合物等）を用いることができる。電子供与体としては、有機化合物に対し電子供与性を示す物質であればよい。具体的には、アルカリ金属やアルカリ土類金属や希土類金属が好ましく、リチウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、エルビウム、イッテルビウム等が挙げられる。また、アルカリ金属酸化物やアルカリ土類金属酸化物が好ましく、リチウム酸化物、カルシウム酸化物、バリウム酸化物等が挙げられる。また、酸化マグネシウムのようなルイス塩基を用いることもできる。また、テトラチアフルバレン（略称：ＴＴＦ）等の有機化合物を用いることもできる。

【０７９０】

（層形成方法）

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

【０７９１】

（膜厚）

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

【０７９２】

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

【０７９３】

〔第五実施形態〕

（電子機器）

本実施形態に係る電子機器は、上述の実施形態のいずれかの有機ＥＬ素子を搭載している。電子機器としては、例えば、表示装置及び発光装置等が挙げられる。表示装置として

は、例えば、表示部品（例えば、有機ＥＬパネルモジュール等）、テレビ、携帯電話、タブレット、及びパーソナルコンピュータ等が挙げられる。発光装置としては、例えば、照明及び車両用灯具等が挙げられる。

【０７９４】

〔実施形態の変形〕

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

【０７９５】

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

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

【０７９６】

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

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

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

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

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

【０７９７】

その他、本発明の実施における具体的な構造、及び形状等は、本発明の目的を達成できる範囲で他の構造等としてもよい。

【実施例】

【０７９８】

以下、実施例を挙げて本発明をさらに詳細に説明する。本発明はこれら実施例に何ら限定されない。

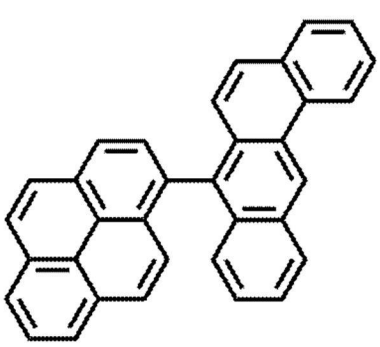
【０７９９】

＜化合物＞

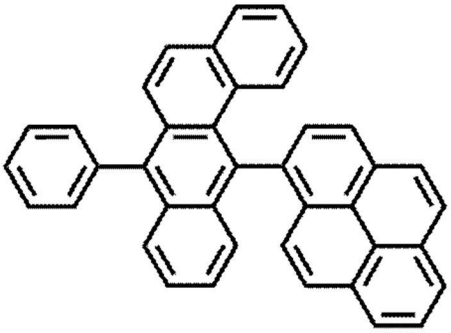
実施例に係る有機ＥＬ素子の製造に用いた、一般式（１Ｃ）で表される化合物、及び一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物の構造を以下に示す。

【０８００】

【化２８０】



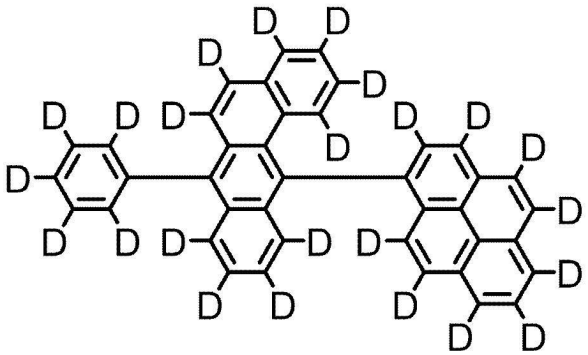
BH1-1



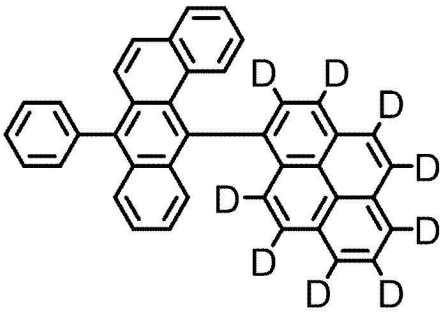
BH1-3

【０８０１】

【化２８１】



BH1-4



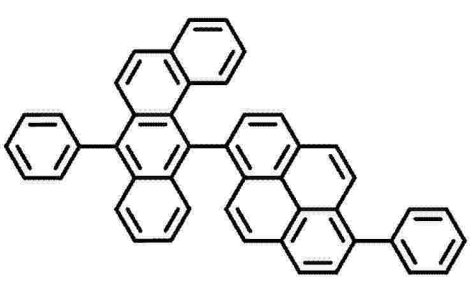
BH1-5

【０８０２】

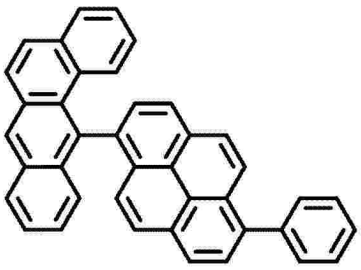
実施例に係る有機ＥＬ素子の製造に用いた、一般式（１Ｃ）で表される化合物、一般式（１Ｃ－Ａ）で表される化合物、及び一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物の構造を以下に示す。

【０８０３】

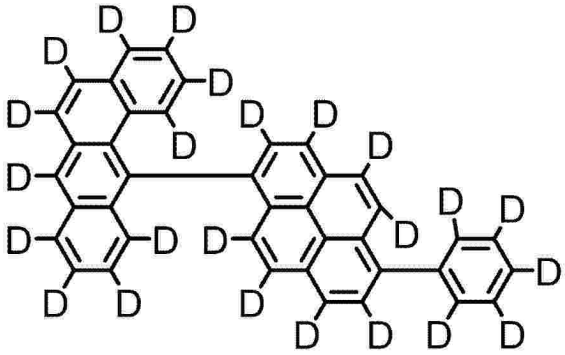
【化２８２】



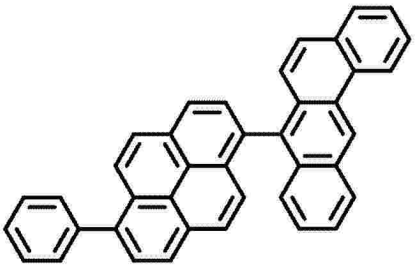
BH1-6



BH1-7



BH1-8



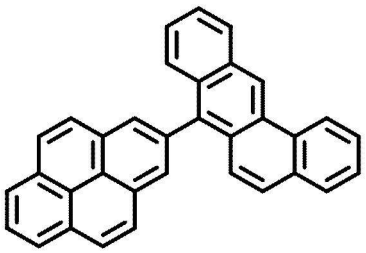
BH1-9

【０８０４】

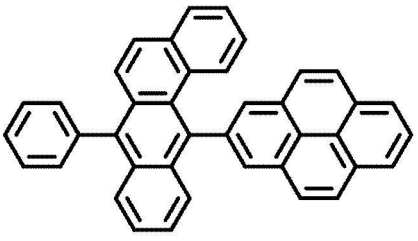
実施例に係る有機ＥＬ素子の製造に用いた、一般式（１Ｃ）で表される化合物、一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物、及び一般式（１Ｃ－Ｃ）で表される化合物の構造を以下に示す。

【０８０５】

【化２８３】



BH1-10



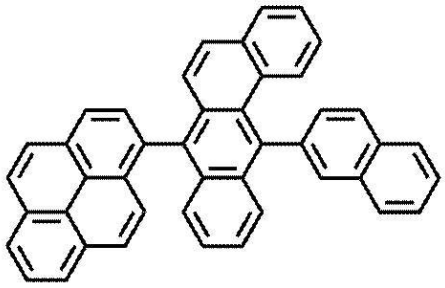
BH1-11

【０８０６】

比較例に係る有機ＥＬ素子の製造に用いた比較化合物の構造を以下に示す。

【０８０７】

【化２８４】



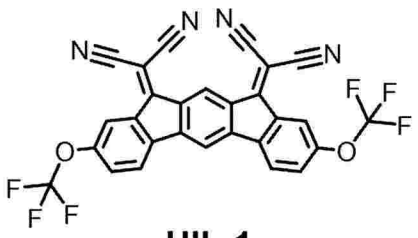
BH1-Ref1

【０８０８】

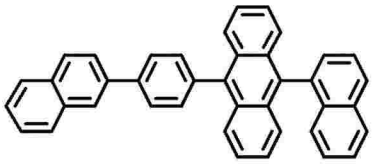
実施例及び比較例に係る有機ＥＬ素子に用いた、他の化合物の構造を以下に示す。

【０８０９】

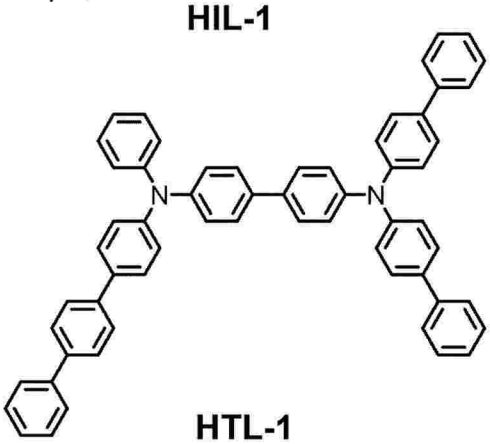
【化２８５】



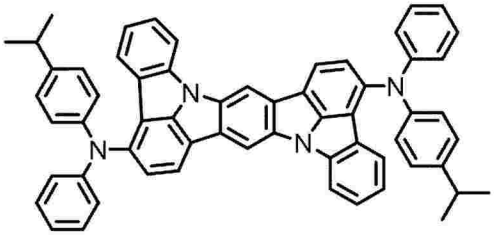
HIL-1



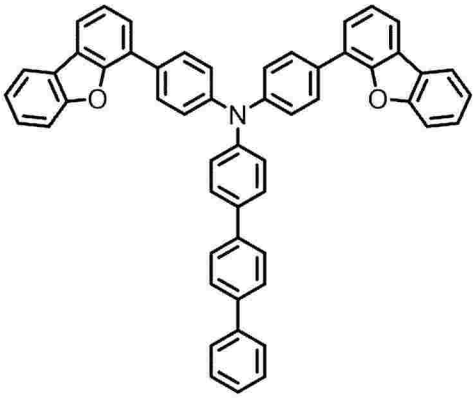
BH-2



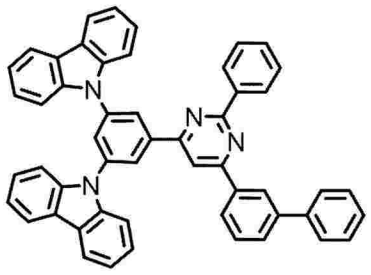
HTL-1



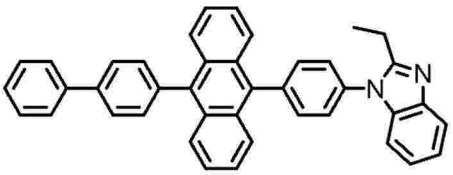
BD-1



EBL-1



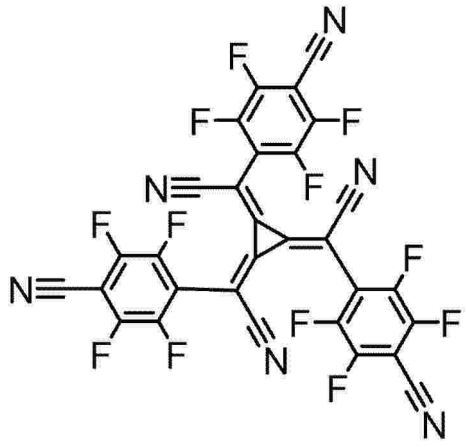
aET-1



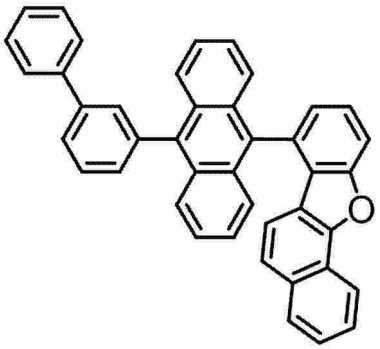
bET-1

【０８１０】

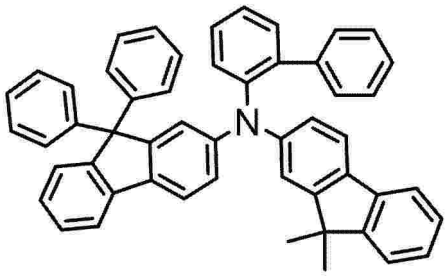
【化２８６】



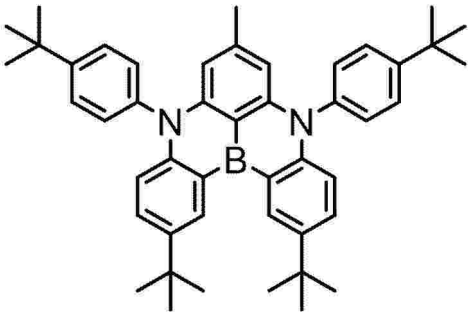
HIL-2



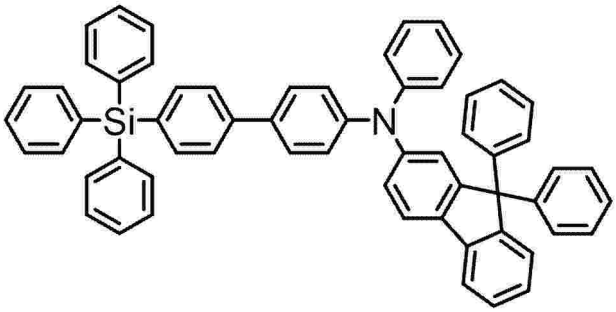
BH-2-4



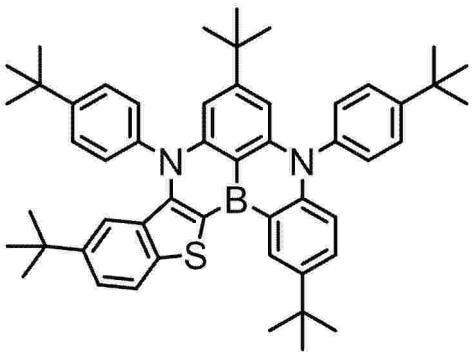
HTL-2



BD-2



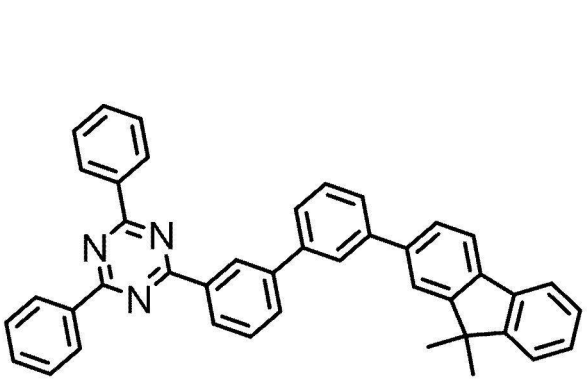
EBL-2



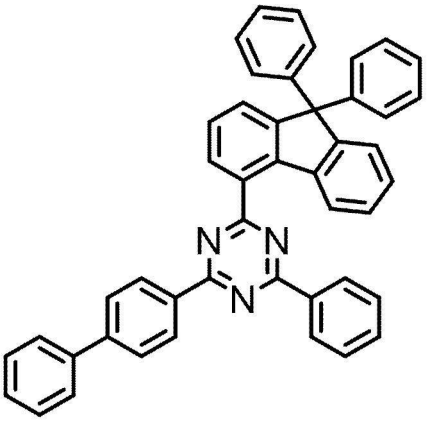
BD-3

【０８１１】

【化２８７】



aET-2



bET-2

【０８１２】

＜有機ＥＬ素子の作製＞

有機ＥＬ素子を以下のように作製し、評価した。

【０８１３】

〔実施例１－１〕

２５ｍｍ×７５ｍｍ×１．１ｍｍ厚のＩＴＯ（Ｉｎｄｉｕｍ　Ｔｉｎ　Ｏｘｉｄｅ）透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を５分間行なった後、ＵＶオゾン洗浄を３０分間行なった。ＩＴＯ透明電極の膜厚は、１３０ｎｍとした。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物ＨＩＬ－１を蒸着し、膜厚５ｎｍの正孔注入層（ＨＩ）を形成した。

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

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

第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物ＢＨ１－１及び第一の発光性化合物としての化合物ＢＤ－１を、化合物ＢＨ１－１の割合が９８質量％及び化合物ＢＤ－１の割合が２質量％となるように共蒸着し、膜厚１２．５ｎｍの第一の発光層を成膜した。

第一の発光層上に第二の化合物としての化合物ＢＨ－２及び第二の発光性化合物としての化合物ＢＤ－１を、化合物ＢＨ－２の割合が９８質量％及び化合物ＢＤ－１の割合が２質量％となるように共蒸着し、膜厚１２．５ｎｍの第二の発光層を成膜した。

第二の発光層上に化合物ａＥＴ－１を蒸着し、膜厚１０ｎｍの第一の電子輸送層（正孔障壁層ともいう）を形成した。

第一の電子輸送層上に化合物ｂＥＴ－１を蒸着し、膜厚１５ｎｍの第二の電子輸送層を形成した。

第二の電子輸送層上にＬｉＦを蒸着して膜厚１ｎｍの電子注入層を形成した。

電子注入層上に金属Ａｌを蒸着して膜厚８０ｎｍの陰極を形成した。

実施例１－１の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HIL-1(5)/HTL-1(80)/EBL-1(10)/BH1-1:BD-1(12.5,98%:2%)/BH-2:BD-1(12.5,98%:2%)/aET-1(10)/bET-1(15)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：ｎｍ）を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（９８％：２％）は、第一の発光層又は第二の発光層における化合物ＢＨ１－１又は化合物ＢＨ－２及び化合物ＢＤ－１の割合（質量％）を示す。

【０８１４】

〔実施例１－２～実施例１－１０〕
実施例１－２～実施例１－１０の有機ＥＬ素子は、それぞれ、第一の発光層の第一の化合物を表１に記載の化合物に変更したこと以外、実施例１－１と同様にして作製した。
【０８１５】
〔比較例１－１〕
比較例１－１の有機ＥＬ素子は、第一の発光層の第一の化合物を表１に記載の化合物に変更したこと以外、実施例１－１と同様にして作製した。
【０８１６】
〔実施例２－１〕
２５ｍｍ×７５ｍｍ×１．１ｍｍ厚のＩＴＯ（Ｉｎｄｉｕｍ　Ｔｉｎ　Ｏｘｉｄｅ）透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を５分間行なった後、ＵＶオゾン洗浄を３０分間行なった。ＩＴＯ透明電極の膜厚は、１３０ｎｍとした。
洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして、化合物ＨＴＬ－２及び化合物ＨＩＬ－２を、化合物ＨＴＬ－２の割合が９０質量％及び化合物ＨＩＬ－２の割合が１０質量％になるように共蒸着し、膜厚１０ｎｍの正孔注入層（ＨＩ）を形成した。
正孔注入層の成膜に続けて化合物ＨＴＬ－２を蒸着し、膜厚８５ｎｍの第一の正孔輸送層を成膜した。
第一の正孔輸送層の成膜に続けて化合物ＥＢＬ－２を蒸着し、膜厚５ｎｍの第二の正孔輸送層（電子障壁層ともいう）を成膜した。
第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物ＢＨ１－１及び第一の発光性化合物としての化合物ＢＤ－２を、化合物ＢＨ１－１の割合が９８質量％及び化合物ＢＤ－２の割合が２質量％となるように共蒸着し、膜厚１０ｎｍの第一の発光層を成膜した。
第一の発光層上に第二の化合物としての化合物ＢＨ－２－４及び第二の発光性化合物としての化合物ＢＤ－２を、化合物ＢＨ－２－４の割合が９８質量％及び化合物ＢＤ－２の割合が２質量％となるように共蒸着し、膜厚１０ｎｍの第二の発光層を成膜した。
第二の発光層上に化合物ａＥＴ－２を蒸着し、膜厚５ｎｍの第一の電子輸送層（正孔障壁層ともいう）を形成した。
第一の電子輸送層上に化合物ｂＥＴ－２及び化合物Ｌｉｑを、化合物ｂＥＴ－２の割合が５０質量％及び化合物Ｌｉｑの割合が５０質量％となるように共蒸着し、膜厚２５ｎｍの電子輸送層を形成した。Ｌｉｑは、（８－キノリノラト）リチウム（（８－Ｑｕｉｎｏｌｉｎｏｌａｔｏ）ｌｉｔｈｉｕｍ）の略称である。
第二の電子輸送層上にＬｉｑを蒸着して膜厚１ｎｍの電子注入層を形成した。
電子注入層上に金属Ａｌを蒸着して膜厚８０ｎｍの陰極を形成した。
実施例２－１の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。
ITO(130)/HTL-2:HIL-2(10,90%:10%)/HTL-2(85)/EBL-2(5)/BH1-1:BD-2(10,98%:2%)/BH-2-4:BD-2(10,98%:2%)/aET-2(5)/bET-2:Liq(25,50%:50%)/Liq(1)/Al(80)
なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：ｎｍ）を示す。
同じく括弧内において、パーセント表示された数字（９０％：１０％）は、化合物ＨＴＬ－２及び化合物ＨＩＬ－２の割合（質量％）を示す。
同じく括弧内において、パーセント表示された数字（９８％：２％）は、第一の発光層又は第二の発光層における化合物ＢＨ１－１又は化合物ＢＨ－２－４及び化合物ＢＤ－２の割合（質量％）を示す。
【０８１７】
〔実施例２－２～実施例２－４〕
実施例２－２～実施例２－４の有機ＥＬ素子は、それぞれ、第一の発光層の第一の化合物を表２に記載の化合物に変更したこと以外、実施例２－１と同様にして作製した。
【０８１８】

〔比較例２－１〕
比較例２－１の有機ＥＬ素子は、第一の発光層の第一の化合物を表２に記載の化合物に変更したこと以外、実施例２－１と同様にして作製した。
【０８１９】
〔実施例３－１〕
２５ｍｍ×７５ｍｍ×１．１ｍｍ厚のＩＴＯ（Ｉｎｄｉｕｍ　Ｔｉｎ　Ｏｘｉｄｅ）透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を５分間行なった後、ＵＶオゾン洗浄を３０分間行なった。ＩＴＯ透明電極の膜厚は、１３０ｎｍとした。
洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして、化合物ＨＴＬ－２及び化合物ＨＩＬ－２を、化合物ＨＴＬ－２の割合が９０質量％及び化合物ＨＩＬ－２の割合が１０質量％になるように共蒸着し、膜厚１０ｎｍの正孔注入層（ＨＩ）を形成した。
正孔注入層の成膜に続けて化合物ＨＴＬ－２を蒸着し、膜厚８５ｎｍの第一の正孔輸送層を成膜した。
第一の正孔輸送層の成膜に続けて化合物ＥＢＬ－２を蒸着し、膜厚５ｎｍの第二の正孔輸送層（電子障壁層ともいう）を成膜した。
第二の正孔輸送層上に第一の化合物としての化合物ＢＨ１－１及び第一の発光性化合物としての化合物ＢＤ－３を、化合物ＢＨ１－１の割合が９８質量％及び化合物ＢＤ－３の割合が２質量％となるように共蒸着し、膜厚１０ｎｍの第一の発光層を成膜した。
第一の発光層上に第二の化合物としての化合物ＢＨ－２－４及び第二の発光性化合物としての化合物ＢＤ－３を、化合物ＢＨ－２－４の割合が９８質量％及び化合物ＢＤ－３の割合が２質量％となるように共蒸着し、膜厚１０ｎｍの第二の発光層を成膜した。
第二の発光層上に化合物ａＥＴ－２を蒸着し、膜厚５ｎｍの第一の電子輸送層（正孔障壁層ともいう）を形成した。
第一の電子輸送層上に化合物ｂＥＴ－２及び化合物Ｌｉｑを、化合物ｂＥＴ－２の割合が５０質量％及び化合物Ｌｉｑの割合が５０質量％となるように共蒸着し、膜厚２５ｎｍの電子輸送層を形成した。
第二の電子輸送層上にＬｉｑを蒸着して膜厚１ｎｍの電子注入層を形成した。
電子注入層上に金属Ａｌを蒸着して膜厚８０ｎｍの陰極を形成した。
実施例３－１の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。
ITO(130)/HTL-2:HIL-2(10,90%:10%)/HTL-2(85)/EBL-2(5)/BH1-1:BD-3(10,98%:2%)/BH-2-4:BD-3(10,98%:2%)/aET-2(5)/bET-2:Liq(25,50%:50%)/Liq(1)/Al(80)
なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：ｎｍ）を示す。
同じく括弧内において、パーセント表示された数字（９０％：１０％）は、化合物ＨＴＬ－２及び化合物ＨＩＬ－２の割合（質量％）を示す。
同じく括弧内において、パーセント表示された数字（９８％：２％）は、第一の発光層又は第二の発光層における化合物ＢＨ１－１又は化合物ＢＨ－２－４及び化合物ＢＤ－３の割合（質量％）を示す。
【０８２０】
〔実施例３－２～実施例３－４〕
実施例３－２～実施例３－４の有機ＥＬ素子は、それぞれ、第一の発光層の第一の化合物を表３に記載の化合物に変更したこと以外、実施例３－１と同様にして作製した。
【０８２１】
〔比較例３－１〕
比較例３－１の有機ＥＬ素子は、第一の発光層の第一の化合物を表３に記載の化合物に変更したこと以外、実施例３－１と同様にして作製した。
【０８２２】
＜有機ＥＬ素子の評価＞

実施例１－１～実施例１－１０、実施例２－１～実施例２－４、及び実施例３－１～実施例３－４、並びに比較例１－１、比較例２－１、及び比較例３－１で作製した有機ＥＬ素子について、以下の評価を行った。評価結果を表１～表３に示す。

【０８２３】

・寿命（ＬＴ９５）

得られた有機ＥＬ素子に、電流密度が５０ｍＡ／ｃｍ^{2}となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が９５％となるまでの時間（ＬＴ９５（単位：時間））を測定した。輝度は、分光放射輝度計ＣＳ－２０００（コニカミノルタ株式会社製）を用いて測定した。

【０８２４】

表１には、各例（実施例１－１～実施例１－１０、及び比較例１－１）のＬＴ９５の測定値、並びに下記数式（数１Ｘ）に基づいて算出した「ＬＴ９５（相対値）」（単位：％）を示す。

ＬＴ９５（相対値）＝（各例のＬＴ９５／比較例１－１のＬＴ９５）×１００…（数１Ｘ）

【０８２５】

表２には、各例（実施例２－１～実施例２－４、及び比較例２－１）のＬＴ９５の測定値、並びに下記数式（数２Ｘ）に基づいて算出した「ＬＴ９５（相対値）」（単位：％）を示す。

ＬＴ９５（相対値）＝（各例のＬＴ９５／比較例２－１のＬＴ９５）×１００…（数２Ｘ）

【０８２６】

表３には、各例（実施例３－１～実施例３－４、及び比較例３－１）のＬＴ９５の測定値、並びに下記数式（数３Ｘ）に基づいて算出した「ＬＴ９５（相対値）」（単位：％）を示す。

ＬＴ９５（相対値）＝（各例のＬＴ９５／比較例３－１のＬＴ９５）×１００…（数３Ｘ）

【０８２７】

【表１】

	第一の発光層							第二の発光層					素子評価
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性化合物	膜厚 [nm]	LT95 (相対値) [%]
	名称	S_1 [eV]	T_1 [eV]	名称	S_1 [eV]	T_1 [eV]		名称	S_1 [eV]	T_1 [eV]	名称		
実施例1-1	BH1-1	3.07	2.07	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	380
実施例1-2	BH1-3	3.02	2.05	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	700
実施例1-3	BH1-4	3.02	2.05	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	750
実施例1-4	BH1-5	3.02	2.05	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	730
実施例1-5	BH1-6	3.01	2.04	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	770
実施例1-6	BH1-7	3.02	2.05	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	700
実施例1-7	BH1-8	3.02	2.05	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	740
実施例1-8	BH1-9	3.07	2.06	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	600
実施例1-9	BH1-10	3.11	2.08	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	400
実施例1-10	BH1-11	3.04	2.06	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	410
比較例1-1	BH1-Ref1	3.04	2.05	BD-1	2.73	2.29	12.5	BH-2	3.01	1.87	BD-1	12.5	100

【０８２８】

【表２】

	第一の発光層							第二の発光層					素子評価
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性化合物	膜厚 [nm]	LT95 (相対値) [%]
	名称	S_1 [eV]	T_1 [eV]	名称	S_1 [eV]	T_1 [eV]		名称	S_1 [eV]	T_1 [eV]	名称		
実施例2-1	BH1-1	3.07	2.07	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	320
実施例2-2	BH1-3	3.02	2.05	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	640
実施例2-3	BH1-8	3.02	2.05	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	660
実施例2-4	BH1-11	3.04	2.06	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	350
比較例2-1	BH1-Ref1	3.04	2.05	BD-2	2.71	2.64	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-2	10	100

【０８２９】

【表３】

	第一の発光層							第二の発光層						素子評価
	第一の化合物			第一の発光性化合物			膜厚 [nm]	第二の化合物			第二の発光性化合物		膜厚 [nm]	LT95 (相対値) [%]
	名称	S_1 [eV]	T_1 [eV]	名称	S_1 [eV]	T_1 [eV]		名称	S_1 [eV]	T_1 [eV]	名称			
実施例3-1	BH1-1	3.07	2.07	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3		10	340
実施例3-2	BH1-3	3.02	2.05	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3		10	600
実施例3-3	BH1-8	3.02	2.05	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3		10	620
実施例3-4	BH1-11	3.04	2.06	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3		10	410
比較例3-1	BH1-Ref1	3.04	2.05	BD-3	2.80	2.45	10	BH-2-4	3.01	1.87	BD-3		10	100

【０８３０】
一般式（１Ｃ－Ａ）で表される化合物、一般式（１Ｃ－Ｂ）で表される化合物、一般式（１Ｃ－Ｃ）で表される化合物、及び一般式（１Ｃ）で表される化合物を用いた実施例１－１～実施例３－４の有機ＥＬ素子によれば、比較例１－１～比較例３－１の有機ＥＬ素子に比べて、長寿命化した。

【０８３１】
＜化合物の評価＞
（三重項エネルギーT_1）
測定対象となる化合物をＥＰＡ（ジエチルエーテル：イソペンタン：エタノール＝５：５：２（容積比））中に、濃度が１０μｍｏｌ／Ｌとなるように溶解して溶液を作製し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とした。この測定試料について、低温（７７［Ｋ］）で燐光スペクトル（縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。）を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値λ_{edge}［ｎｍ］に基づいて、次の換算式（Ｆ１）から算出されるエネルギー量を三重項エネルギーT_1とした。結果は表１及び表２に示す通りである。
なお、三重項エネルギーT_1は、測定条件によっては上下０．０２ｅＶ程度の誤差が生じ得る。
換算式（Ｆ１）：T_1［ｅＶ］＝１２３９．８５／λ_{edge}

【０８３２】
燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ（つまり縦軸が増加するにつれ）、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線（すなわち変曲点における接線）が、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。
なお、スペクトルの最大ピーク強度の１５％以下のピーク強度をもつ極大点は、上述の最も短波長側の極大値には含めず、最も短波長側の極大値に最も近い、傾きの値が極大値をとる点において引いた接線を当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。
燐光の測定には、（株）日立ハイテクノロジー製のＦ－４５００形分光蛍光光度計本体を用いた。

【０８３３】
（一重項エネルギーS_1）
測定対象となる化合物の１０μｍｏｌ／Ｌトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常

温（３００Ｋ）でこの試料の吸収スペクトル（縦軸：吸収強度、横軸：波長とする。）を測定した。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値λｅｄｇｅ［ｎｍ］を次に示す換算式（Ｆ２）に代入して一重項エネルギーS_1を算出した。結果は表１及び表２に示す通りである。

換算式（Ｆ２）：S_1［ｅＶ］＝１２３９．８５／λｅｄｇｅ

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

【０８３４】

吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ（つまり縦軸の値が減少するにつれ）、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側（ただし、吸光度が０．１以下となる場合は除く）で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

なお、吸光度の値が０．２以下の極大点は、上記最も長波長側の極大値には含めない。

【０８３５】

（化合物の最大ピーク波長）

化合物の最大ピーク波長λは、以下の方法により測定した。

測定対象となる化合物の５μｍｏｌ／Ｌトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（３００Ｋ）でこの試料の発光スペクトル（縦軸：発光強度、横軸：波長とする。）を測定した。本実施例では、発光スペクトルを株式会社日立ハイテクサイエンス製の分光蛍光光度計（装置名：Ｆ－７０００）で測定した。なお、発光スペクトル測定装置は、ここで用いた装置に限定されない。発光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を最大ピーク波長λとした。

化合物ＢＤ－１の最大ピーク波長λは、４５２ｎｍであった。

化合物ＢＤ－２の最大ピーク波長λは、４５５ｎｍであった。

化合物ＢＤ－３の最大ピーク波長λは、４５７ｎｍであった。

【０８３６】

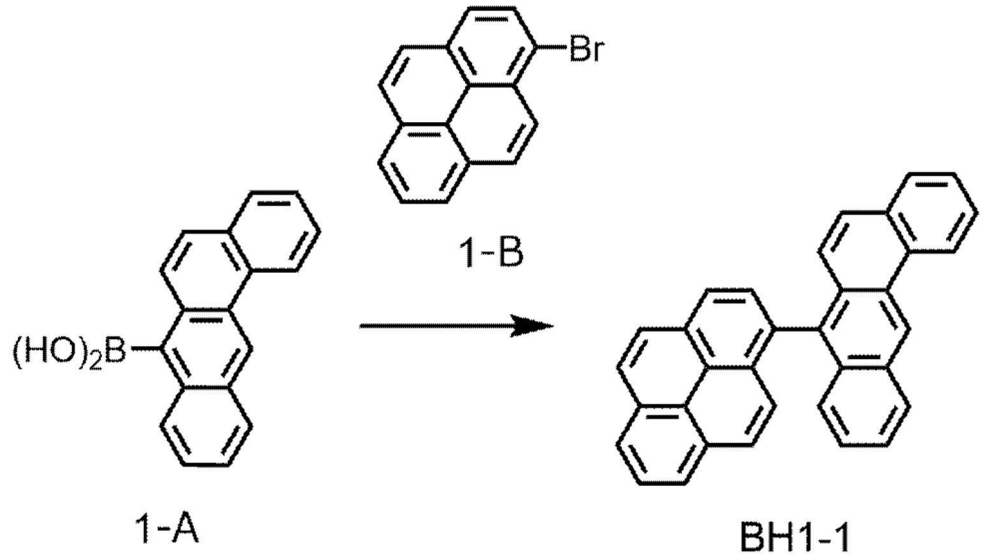
＜化合物の合成＞

［合成例１：化合物ＢＨ１－１の合成］

下記合成経路で、化合物ＢＨ１－１を合成した。

【０８３７】

【化２８８】



【０８３８】

（化合物ＢＨ１－１の合成）

アルゴン雰囲気下、中間体１－Ａ：５.４４ｇ（２０．０ｍｍｏｌ）、中間体１－Ｂ：５．６２ｇ（２０．０ｍｍｏｌ）、ジクロロビスアムフォスパラジウム（２）：０．４６ｇ（０．４ｍｍｏｌ）、２Ｍ炭酸ナトリウム水溶液：３０．０ｍｌ（６０．０ｍｍｏｌ）、及び１，２－ジメトキシエタン：１００ｍｌをフラスコに仕込み、８時間加熱還流攪拌した。攪拌後に室温（２５℃）まで冷却した後、溶媒を留去し、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体５．４ｇ（収率６３％）を得た。

ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該白色固体を化合物ＢＨ１－１と同定した。

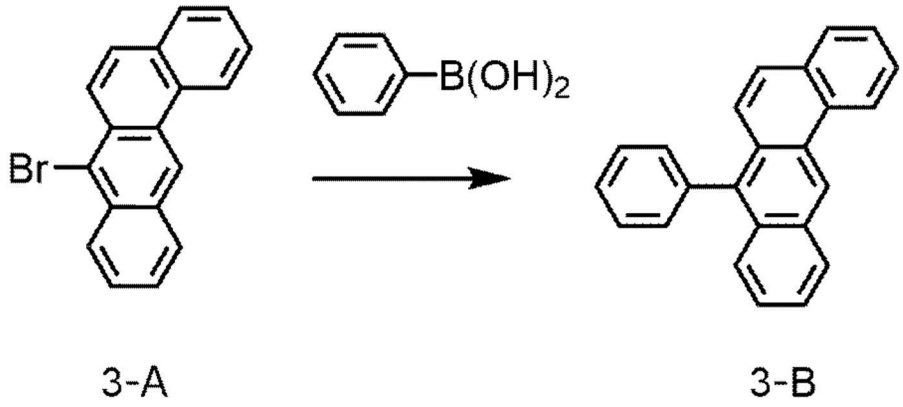
【０８３９】

[合成例２：化合物ＢＨ１－３の合成]

下記合成経路で、化合物ＢＨ１－３を合成した。

【０８４０】

【化２８９】

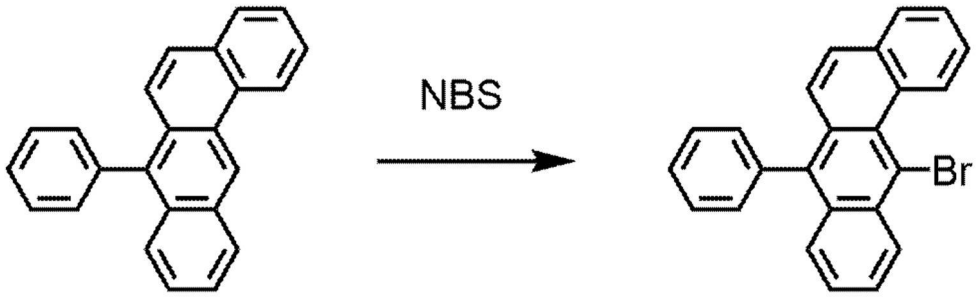


【０８４１】

（中間体３－Ｂの合成）

化合物ＢＨ１－１の合成において、中間体１－Ａ及び中間体１－Ｂの代わりに中間体３

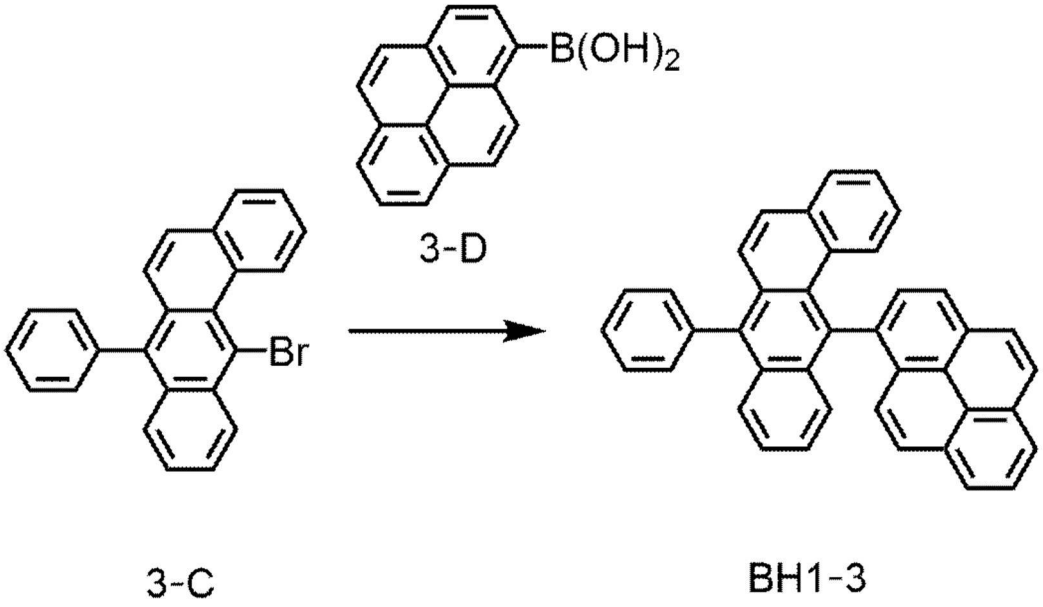
－Ａ及びフェニルボロン酸を用いた以外は、化合物ＢＨ１－１の合成方法と同様の方法で中間体３－Ｂを合成し、白色固体７．０ｇ（収率８７％）を得た。
　ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該白色固体を中間体３－Ｂと同定した。
【０８４２】
【化２９０】



3-B　　3-C

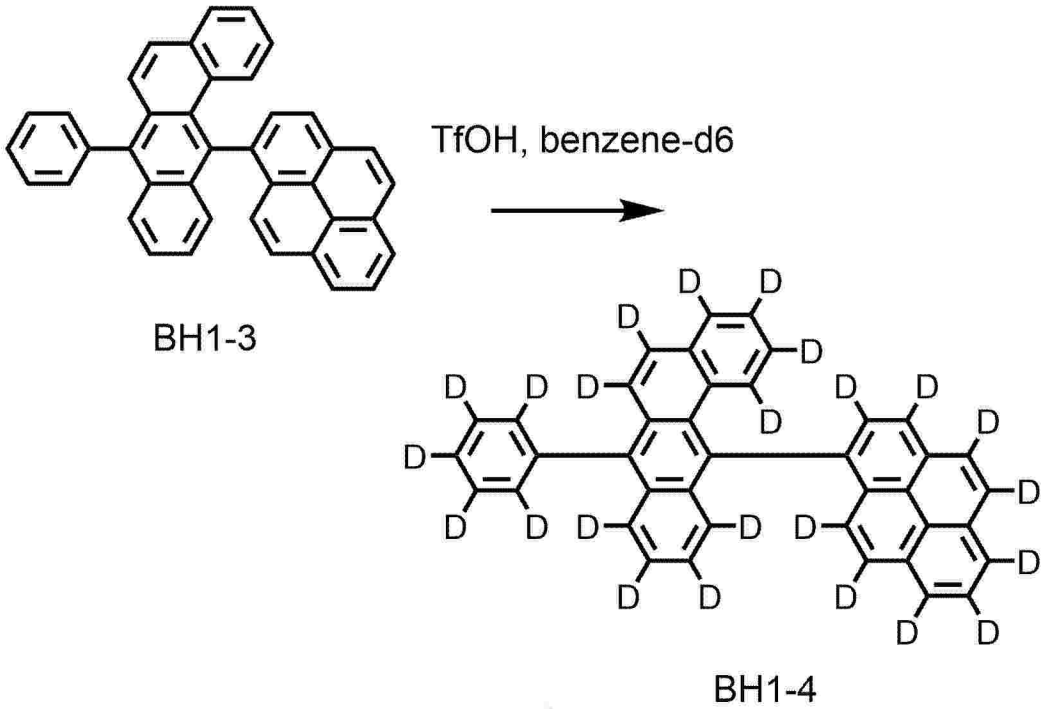
【０８４３】
（中間体３－Ｃの合成）
　アルゴン雰囲気下、中間体３－Ｂ：７．０ｇ（２３．０ｍｍｏｌ）、Ｎ－ブロモスクシンイミド（ＮＢＳ）：４．１ｇ（２３．０ｍｍｏｌ）、及びジクロロメタン：１１５ｍｌをフラスコに仕込み、４８時間加熱還流攪拌した。室温（２５℃）まで冷却後、溶媒を留去し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体５．６ｇ（収率６４％）を得た。
　ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該白色固体を中間体３－Ｃと同定した。
【０８４４】

【化２９１】



【０８４５】
（化合物ＢＨ１－３の合成）
化合物ＢＨ１－１の合成において、中間体１－Ａ及び中間体１－Ｂの代わりに中間体３－Ｃ及び中間体３－Ｄを用いた以外は、化合物ＢＨ１－１の合成方法と同様の方法で化合物ＢＨ１－３を合成し、淡黄色固体０．６ｇ（収率２５％）を得た。
ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該淡黄色固体を化合物ＢＨ１－３と同定した。
【０８４６】
[合成例３：化合物ＢＨ１－４の合成]
下記合成経路で、化合物ＢＨ１－４を合成した。
【０８４７】

【化２９２】



【０８４８】

（化合物ＢＨ１－４の合成）

アルゴン雰囲気下、化合物ＢＨ１－３：５．７ｇ（１１．３ｍｍｏｌ）及びオルトージクロロベンゼン：１００ｍｌをフラスコに仕込み、室温で撹拌しながら完全溶解させた後、ベンゼン－ｄ６：５０ｍｌを加え、１０℃で５分撹拌した。その後トリフルオロメタンスルホン酸：１．９９ｍｌ（２２．５ｍｍｏｌ）を加え、１０℃で２時間撹拌した。その後、重水２００ｍｌを加え、さらに１５分撹拌した。撹拌後、水層を除去し残った有機層を濃縮、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、淡黄色固体０．５ｇ（収率２４％）を得た。

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

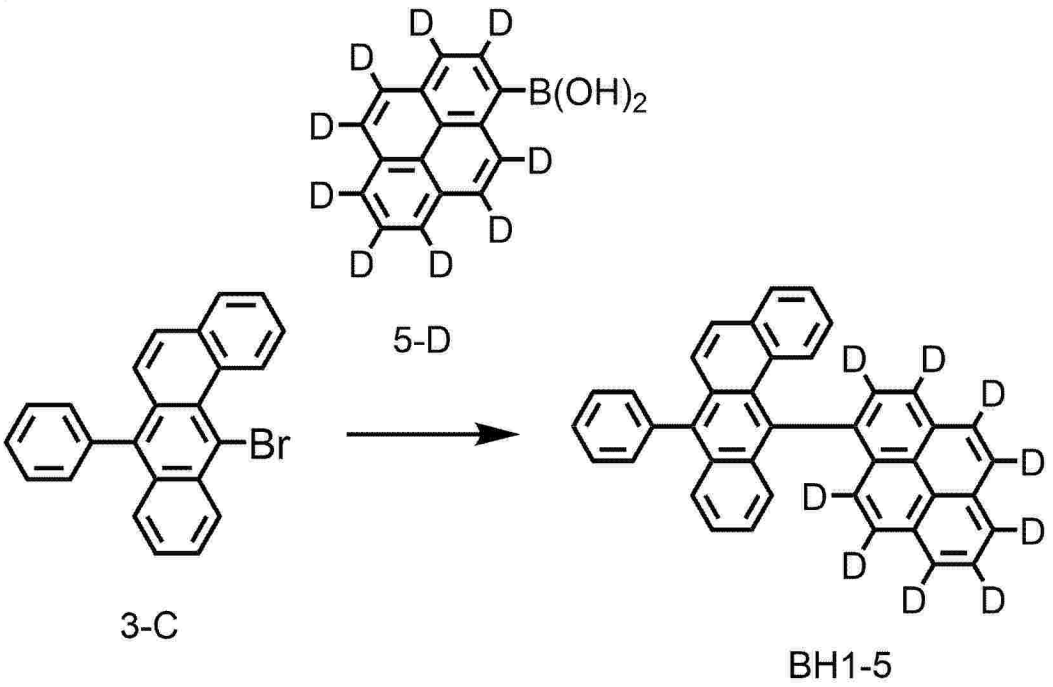
【０８４９】

[合成例４：化合物ＢＨ１－５の合成]

下記合成経路で、化合物ＢＨ１－５を合成した。

【０８５０】

【化２９３】



【０８５１】

（化合物ＢＨ１－５の合成）

化合物ＢＨ１－１の合成において、中間体１－Ａ及び中間体１－Ｂの代わりに、中間体３－Ｃ及び中間体５－Ｄを用いた以外は、化合物ＢＨ１－１の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体０．９ｇ（収率４７％）を得た。

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

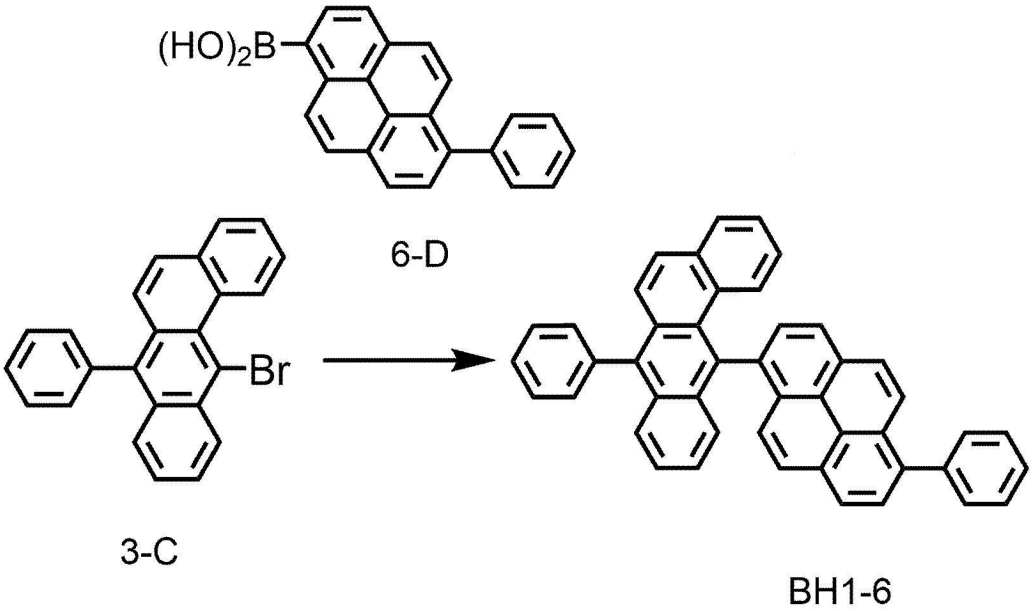
【０８５２】

［合成例５：化合物ＢＨ１－６の合成］

下記合成経路で、化合物ＢＨ１－６を合成した。

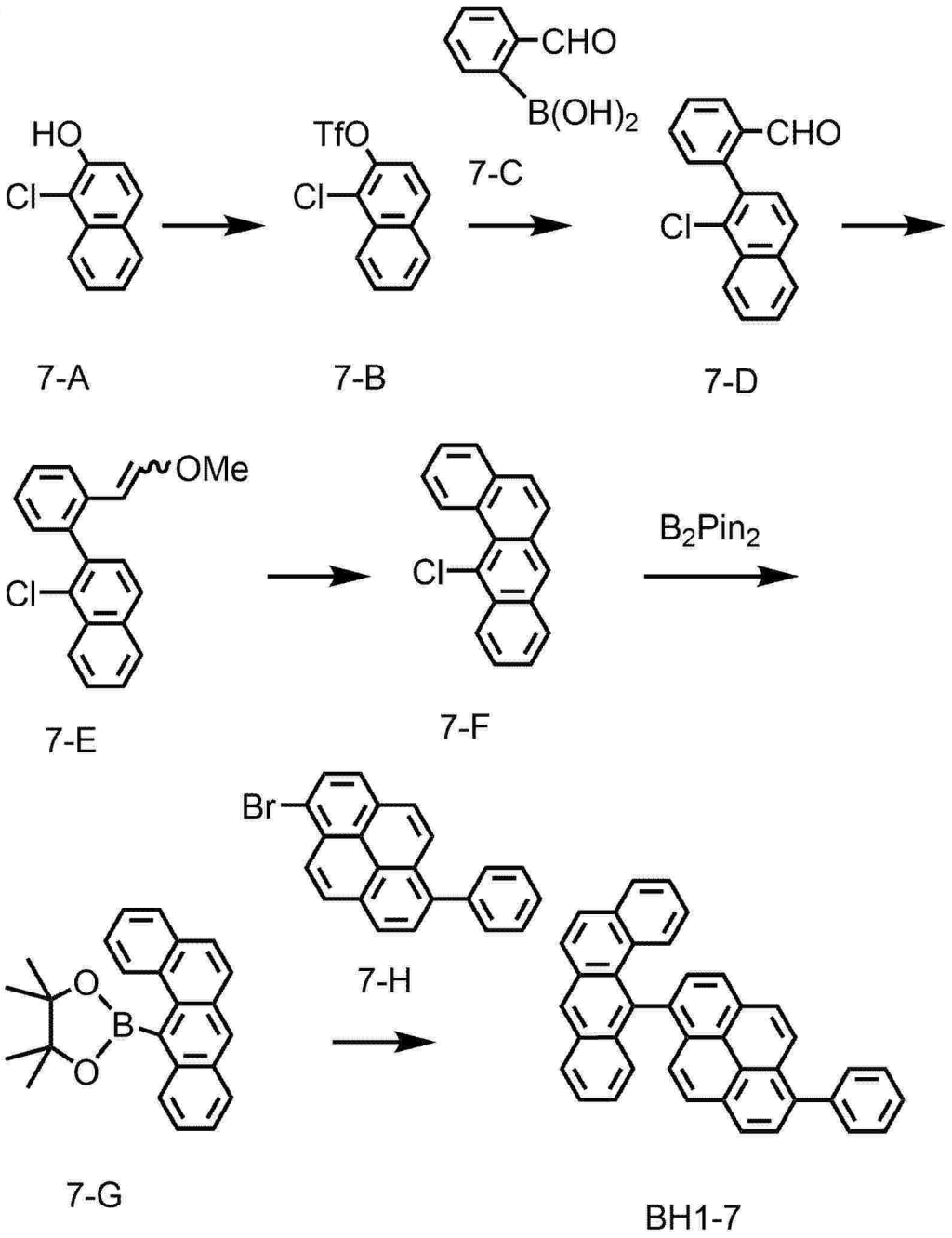
【０８５３】

【化２９４】



【０８５４】
（化合物ＢＨ１－６の合成）
化合物ＢＨ１－１の合成において、中間体１－Ａ及び中間体１－Ｂの代わりに中間体３－Ｃ及び中間体６－Ｄを用いた以外は、化合物ＢＨ１－１の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体１．１ｇ（収率４９％）を得た。
ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該淡黄色固体を化合物ＢＨ１－６と同定した。
【０８５５】
［合成例６：化合物ＢＨ１－７の合成］
下記合成経路で、化合物ＢＨ１－７を合成した。
【０８５６】

【化２９５】



【０８５７】

（中間体７－Ｂの合成）

アルゴン雰囲気下、中間体７－Ａ：１１．６ｇ（４３．２ｍｍｏｌ）、ジクロロメタン：２１５ｍｌをフラスコに仕込み、溶液を０℃まで冷却した後に、ピリジン：４．４ｍｌ（５６．１ｍｍｏｌ）を系中に滴下し、その後、トリフルオロメタンスルホン酸無水物：９．２ｍｌ（５６．１ｍｍｏｌ）を系中に滴下し、そのまま１時間撹拌した。

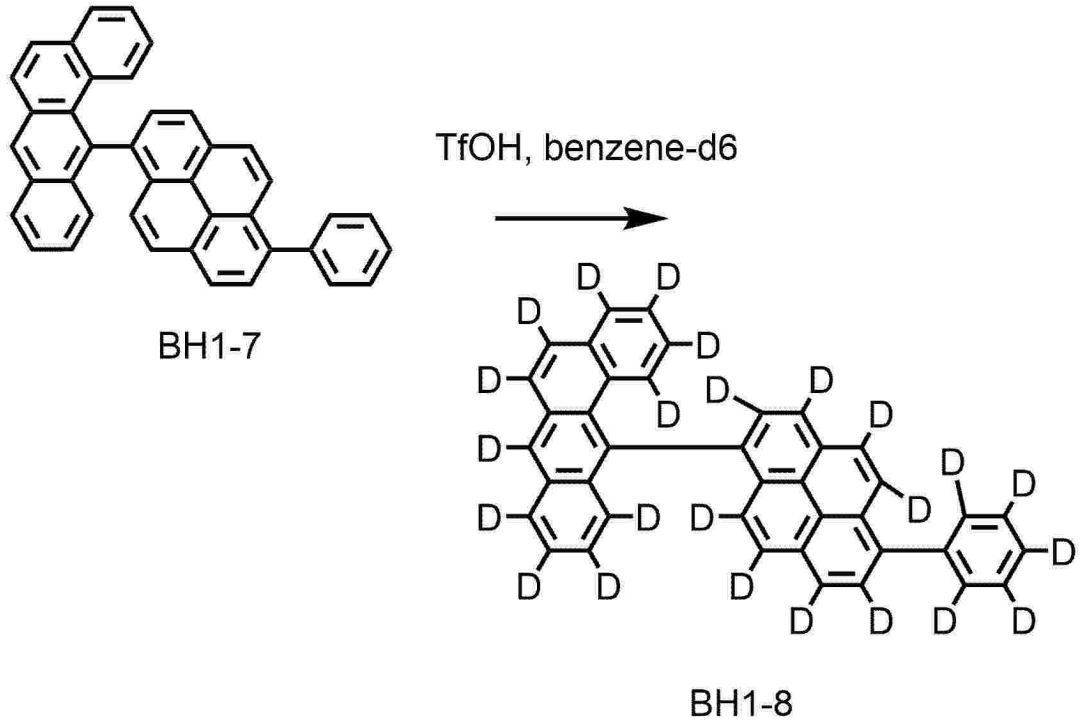
室温（２５℃）に戻しながら、さらに６時間撹拌した後、反応溶液に氷水を加えた。よく撹拌した後、水層を除去し、残った有機層を濃縮、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体２１．３ｇ（収率７３％）を得た。

ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該白色固体を中間体７－Ｂと同定した。

【０８５８】

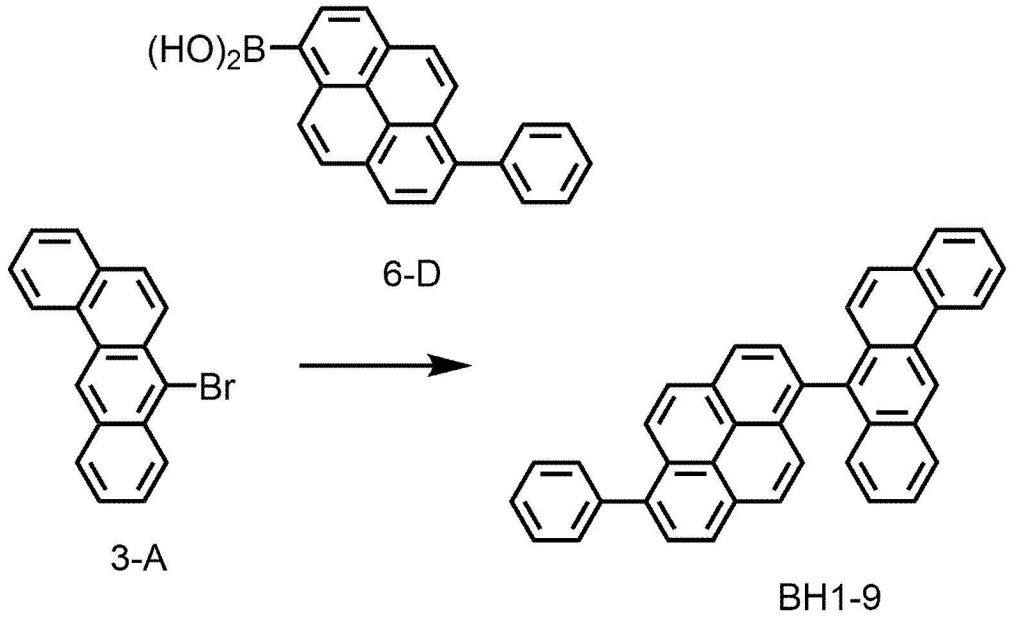
（中間体７－Ｄの合成）
化合物ＢＨ１－１の合成において、中間体１－Ａ及び中間体１－Ｂの代わりに中間体７－Ｂ及び中間体７－Ｃを用いた以外は、化合物ＢＨ１－１の合成方法と同様の方法で合成し、白色固体１９．３ｇ（収率８７％）を得た。
ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該白色固体を中間体７－Ｄと同定した。
【０８５９】
（中間体７－Ｅの合成）
アルゴン雰囲気下、（メトキシメチル）トリフェニルホスホニウムクロリド：２８．１ｇ、テトラヒドフラン：１３０ｍｌをフラスコに仕込み５分撹拌した後、カリウムｔｅｒｔ－ブトキシド１ｍｏｌ／Ｌテトラヒドロフラン溶液：８２ｍｌを加え、１．５時間室温で撹拌した。その後、別途、テトラヒドフラン：３４２ｍｌに溶解させた中間体７－Ｄ：２１．１ｇの溶液を系中に加え、室温で３時間撹拌した。その後、析出した固体をろ過し、ろ液を濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体２２．５ｇ（収率９８％）を得た。
ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該白色固体を中間体７－Ｅと同定した。
【０８６０】
（中間体７－Ｆの合成）
アルゴン雰囲気下、中間体７－Ｅ：２２．５ｇ、ジクロロメタン：６８４ｍｌをフラスコに仕込み０℃で５分撹拌した後、メタンスルホン酸：７ｍｌを加え、そのまま０℃で３時間撹拌した。その後、飽和炭酸水素ナトリウム水溶液で洗浄し水層を除去した後、有機層を濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体９．４ｇ（収率４５％）を得た。
ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該白色固体を中間体７－Ｆと同定した。
【０８６１】
（中間体７－Ｇの合成）
アルゴン雰囲気下、中間体７－Ｆ：６．５ｇ（１９．８ｍｍｏｌ）、ビス（ピナコラート）ジボロン１０．０ｇ（３９．５ｍｍｏｌ）、酢酸パラジウム（ＩＩ）：０．０９ｇ（０．４ｍｍｏｌ）、ＸＰｈｏｓ：０．７５ｇ（１．６ｍｍｏｌ）、酢酸カリウム５．８２ｇ（５９．３ｍｍｏｌ）、及び１，４－ジオキサン１００ｍＬをフラスコに入れ、７時間１００℃で撹拌した。撹拌後、室温まで冷却した。冷却後、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、硫酸ナトリウムを加えて乾燥した。乾燥後、ろ過し、減圧下濃縮した。粗体をシリカゲルクロマトグラフィーで精製し、白色固体５．７ｇ（収率４１％）を得た。
ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該白色固体を中間体７－Ｇと同定した。
【０８６２】
（化合物ＢＨ１－７の合成）
化合物ＢＨ１－１の合成において、中間体１－Ａ及び中間体１－Ｂの代わりに、中間体７－Ｇ及び中間体７－Ｈを用いた以外は、化合物ＢＨ１－１の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体１．９ｇ（収率２５％）を得た。
ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該淡黄色固体を化合物ＢＨ１－７と同定した。
【０８６３】
[合成例７：化合物ＢＨ１－８の合成]
下記合成経路で、化合物ＢＨ１－８を合成した。
【０８６４】

【化２９６】



【０８６５】
（化合物ＢＨ１－８の合成）
化合物ＢＨ１－４の合成において、化合物ＢＨ１－３の代わりに、化合物ＢＨ１－７を用いた以外は、化合物ＢＨ１－４の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体０．２ｇ（収率４３％）を得た。
ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該淡黄色固体を化合物ＢＨ１－８と同定した。
【０８６６】
［合成例８：化合物ＢＨ１－９の合成］
下記合成経路で、化合物ＢＨ１－９を合成した。
【０８６７】

【化２９７】



【０８６８】

（化合物ＢＨ１－９の合成）

化合物ＢＨ１－１の合成において、中間体１－Ａ及び中間体１－Ｂの代わりに、中間体３－Ａ及び中間体６－Ｄを用いた以外は、化合物ＢＨ１－１の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体３．４ｇ（収率８２％）を得た。

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

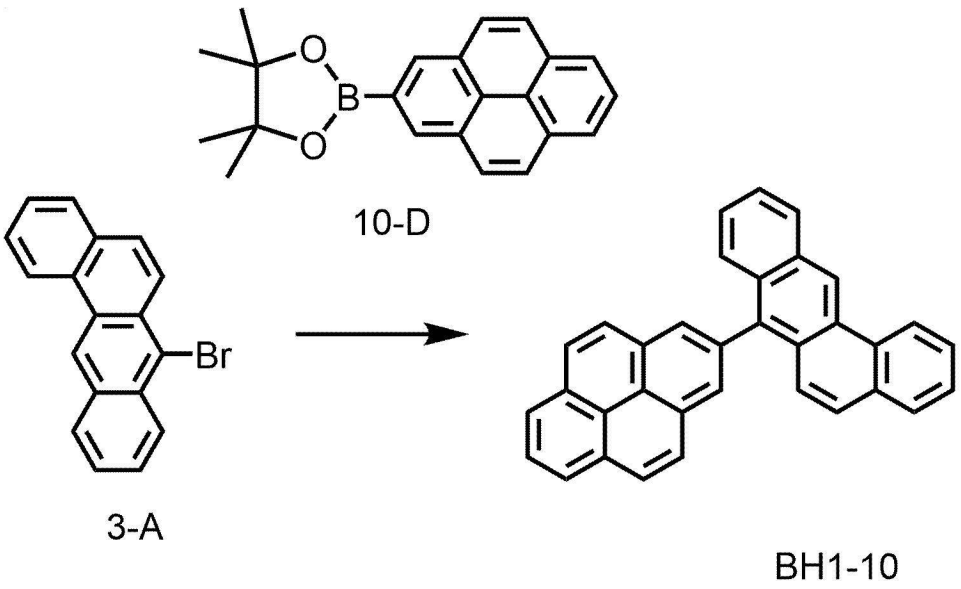
【０８６９】

［合成例９：化合物ＢＨ１－１０の合成］

下記合成経路で、化合物ＢＨ１－１０を合成した。

【０８７０】

【化２９８】



【０８７１】

（化合物ＢＨ１－１０の合成）

化合物ＢＨ１－１の合成において、中間体１－Ａ及び中間体１－Ｂの代わりに、中間体３－Ａ及び中間体１０－Ｄを用いた以外は、化合物ＢＨ１－１の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体２．２ｇ（収率７７％）を得た。

ＬＣ－ＭＳ分析（液体クロマトグラフィー質量分析）により、当該淡黄色固体を化合物ＢＨ１－１０と同定した。

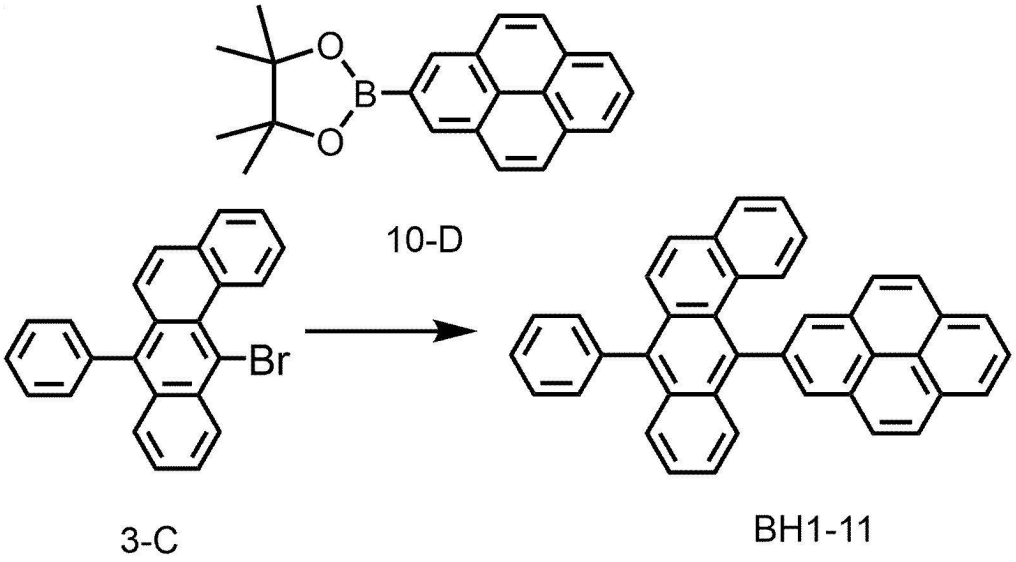
【０８７２】

［合成例１０：化合物ＢＨ１－１１の合成］

下記合成経路で、化合物ＢＨ１－１１を合成した。

【０８７３】

【化２９９】



【０８７４】

（化合物ＢＨ１－１１の合成）

化合物ＢＨ１－１の合成において、中間体１－Ａ及び中間体１－Ｂの代わりに、中間体３－Ｃ及び中間体１０－Ｄを用いた以外は、化合物ＢＨ１－１の合成方法と同様の方法で合成し、淡黄色固体１．７ｇ（収率４０％）を得た。

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

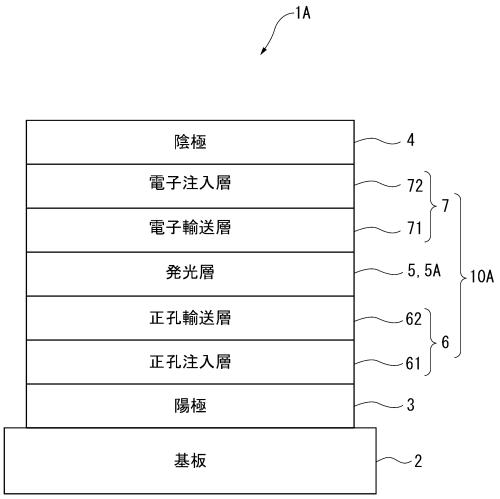
【符号の説明】

【０８７５】

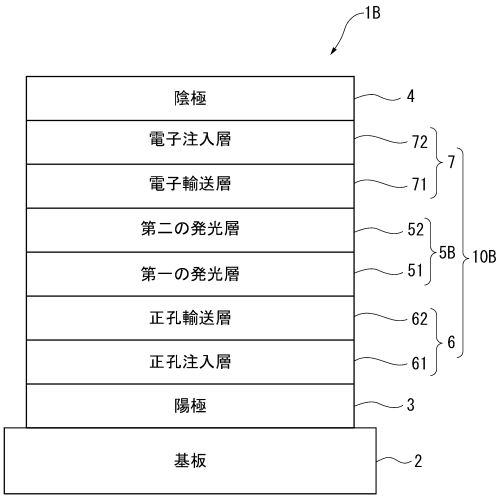
１Ａ，１Ｂ…有機ＥＬ素子、２…基板、３…陽極、４…陰極、５Ａ，５Ｂ…発光領域、５…発光層、５１…第一の発光層、５２…第二の発光層、６…正孔輸送帯域、６１…正孔注入層、６２…正孔輸送層、７…電子輸送帯域、７１…電子輸送層、７２…電子注入層。

【図面】

【図１】


1A
陰極
4
電子注入層
72
電子輸送層
71
7
発光層
5, 5A
10A
正孔輸送層
62
正孔注入層
61
6
陽極
3
基板
2

【図２】


1B
陰極
4
電子注入層
72
電子輸送層
71
7
第二の発光層
52
第一の発光層
51
5B
10B
正孔輸送層
62
正孔注入層
61
6
陽極
3
基板
2

フロントページの続き

(51)国際特許分類			FI		
Ｈ１０Ｋ	*50/16*	*(2023.01)*	Ｈ１０Ｋ	50/16	
Ｈ１０Ｋ	*50/17*	*(2023.01)*	Ｈ１０Ｋ	50/17	
Ｈ１０Ｋ	*50/18*	*(2023.01)*	Ｈ１０Ｋ	50/17	１７１
Ｈ１０Ｋ	*59/10*	*(2023.01)*	Ｈ１０Ｋ	50/18	
Ｈ１０Ｋ	*85/60*	*(2023.01)*	Ｈ１０Ｋ	59/10	
Ｈ１０Ｋ	*101/40*	*(2023.01)*	Ｈ１０Ｋ	85/60	
			Ｈ１０Ｋ	101:40	

東京都千代田区大手町一丁目２番１号 出光興産株式会社内
(72)発明者 吉田 圭
東京都千代田区大手町一丁目２番１号 出光興産株式会社内
(72)発明者 伴 慎太郎
東京都千代田区大手町一丁目２番１号 出光興産株式会社内
(72)発明者 寺田 一輝
東京都千代田区大手町一丁目２番１号 出光興産株式会社内
(72)発明者 糸井 裕亮
東京都千代田区大手町一丁目２番１号 出光興産株式会社内
審査官 阿久津 江梨子

(56)参考文献
国際公開第２００９／０８１７７４（WO，Ａ１）
国際公開第２０２１／１３２５３５（WO，Ａ１）
特開２００９－１６６９３（ＪＰ，Ａ）
韓国公開特許第１０－２０１３－０１０１４４９（ＫＲ，Ａ）
中国特許出願公開第１０２９１１６５６（ＣＮ，Ａ）
中国特許出願公開第１０７１６２８６９（ＣＮ，Ａ）

(58)調査した分野 (Int.Cl.，ＤＢ名)
Ｃ０７Ｃ
Ｃ０９Ｋ
Ｈ１０Ｋ
ＣＡｐｌｕｓ／ＲＥＧＩＳＴＲＹ（ＳＴＮ）