

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7636640号
(P7636640)

(45)発行日 令和7年2月26日(2025.2.26)

(24)登録日 令和7年2月17日(2025.2.17)

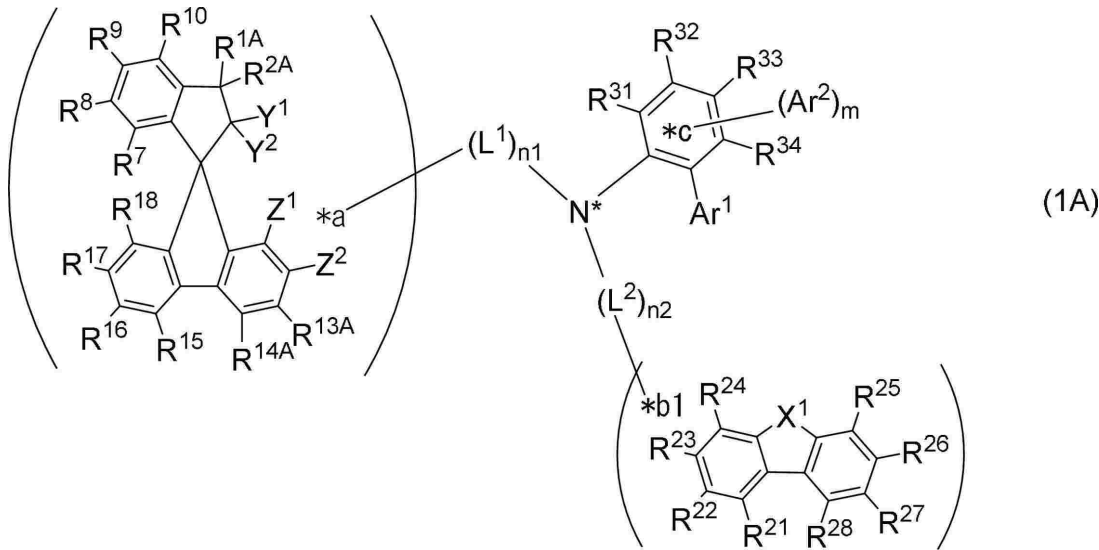
(51)国際特許分類	F I	
C 0 7 C 211/61 (2006.01)	C 0 7 C 211/61	C S P
C 0 9 K 11/06 (2006.01)	C 0 9 K 11/06	6 9 0
C 0 7 D 307/91 (2006.01)	C 0 7 D 307/91	
H 1 0 K 50/15 (2023.01)	H 1 0 K 50/15	
H 1 0 K 85/60 (2023.01)	H 1 0 K 85/60	
請求項の数 28 (全183頁) 最終頁に続く		

(21)出願番号	特願2024-537628(P2024-537628)	(73)特許権者	000183646
(86)(22)出願日	令和5年7月19日(2023.7.19)		出光興産株式会社
(86)国際出願番号	PCT/JP2023/026420		東京都千代田区大手町一丁目2番1号
(87)国際公開番号	WO2024/024591	(74)代理人	110002620
(87)国際公開日	令和6年2月1日(2024.2.1)		弁理士法人大谷特許事務所
審査請求日	令和6年9月11日(2024.9.11)	(72)発明者	田中 将太
(31)優先権主張番号	特願2022-121880(P2022-121880)		東京都千代田区大手町一丁目2番1号
(32)優先日	令和4年7月29日(2022.7.29)		出光興産株式会社内
(33)優先権主張国・地域又は機関	日本国(JP)	(72)発明者	糸井 裕亮
早期審査対象出願			東京都千代田区大手町一丁目2番1号
			出光興産株式会社内
		(72)発明者	高橋 佑典
			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	澤藤 司
			最終頁に続く

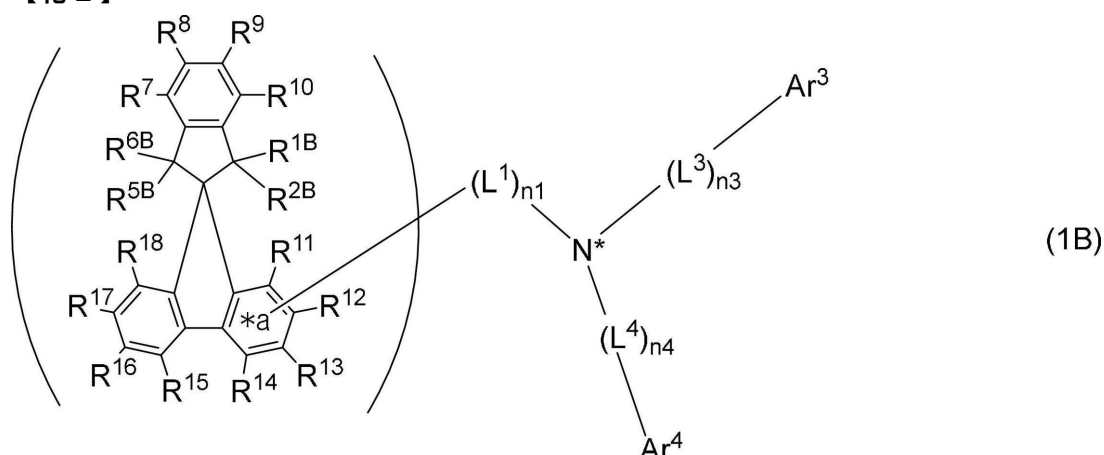
(54)【発明の名称】 化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】
下記式(1A)又は(1B)で表される化合物。
【化1】



【化 2】



[式 (1A) 中、

N^* は中心窒素原子である。

Z^1 及び Z^2 から選択される一つは、*a に結合する単結合である。

前記単結合ではない Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ 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 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基である。

Z^1 、 Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、及び $R^7 \sim R^{10}$ が表す、前記アルキル基、前記アリール基、及び前記ヘテロアリール基が有し得る置換基は、炭素数 1～18 のアルキル基、環形成炭素数 6～12 のアリール基、及び環形成原子数 5～18 のヘテロアリール基から選択される。

前記単結合ではない Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、及び R^{14A} は、互いに結合して環を形成しない。

$R^7 \sim R^{10}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成しない。

$R^{15} \sim R^{18}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成しない。

R^{1A} 、 R^{2A} 、 Y^1 、及び Y^2 は、軽水素原子である。

L^1 は、無置換の環形成炭素数 6～12 のアリーレン基である。

n_1 は、0 又は 1 である。

n_1 が 0 のとき、 Z^1 及び Z^2 から選択される一つが、中心窒素原子 N^* に結合する。

X^1 は、 $=C R^A R^B$ である。

$R^{21} \sim R^{24}$ から選択される一つは、*b1 に結合する単結合である。

R^A 及び R^B は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基である。 R^A 及び R^B は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

R^A 及び R^B が表す、前記アルキル基、及び前記アリール基が有し得る置換基は、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 のヘテロアリール基から選択される。

前記単結合ではない $R^{21} \sim R^{24}$ 、及び $R^{25} \sim R^{28}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基である。

$R^{21} \sim R^{28}$ が表す、前記アルキル基、前記アリール基、及び前記ヘテロアリール基が有し得る置換基は、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 のヘテロアリール基から選択される。

前記単結合ではない $R^{21} \sim R^{24}$ は互いに結合して環を形成せず、また、 $R^{25} \sim R^{28}$ は互いに結合して環を形成しない。

L^2 は、無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基である。

n_2 は、0又は1である。

n_2 が0のとき、 $R^{21} \sim R^{24}$ から選択される一つが、中心窒素原子 N^* に結合する。

Ar^1 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基である。

Ar^1 が表す、前記アリール基、及び前記ヘテロアリール基が有し得る置換基は、炭素数1～18のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリール基、及び環形成原子数5～18のヘテロアリール基から選択される。

Ar^2 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基である。

m は0である。

$R^{31} \sim R^{34}$ は、水素原子である。

式(1B)中、

$R^{11} \sim R^{14}$ から選択される一つは、 $*a$ に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{11} \sim R^{14}$ 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、及び $R^7 \sim R^{10}$ は、水素原子であるか、前記単結合ではない $R^{11} \sim R^{14}$ 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、及び $R^7 \sim R^{10}$ のうち一つが無置換の炭素数1～30のアルキル基、又は、無置換の環形成炭素数6～12のアリール基であり、他は水素原子である。

前記単結合ではない $R^{11} \sim R^{14}$ は、互いに結合して環を形成しない。

$R^7 \sim R^{10}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成しない。

$R^{15} \sim R^{18}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成しない。

R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、及び R^{6B} は、水素原子である。

R^{1B} 及び R^{2B} は、互いに結合して環を形成しない。

R^{5B} 及び R^{6B} は、互いに結合して環を形成しない。

L^3 は、無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基である。

n_3 は、0又は1である。

n_3 が0のとき、 Ar^3 が中心窒素原子 N^* に結合する。

Ar^3 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基である。 Ar^3 が表す前記アリール基が有し得る置換基は、炭素数1～18のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリール基、及び環形成原子数5～18のヘテロアリール基から選択される。

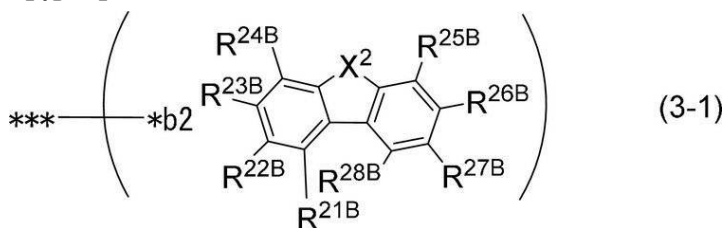
L^4 は、無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基である。

n_4 は、0又は1である。

n_4 が0のとき、 Ar^4 が中心窒素原子 N^* に結合する。

Ar^4 は、下記式(3-1)で表される基である。

【化3】



(式(3-1)中、

$***$ は、 L^4 への結合位置を表す。

X^2 は、 $=CR^C R^D$ である。

$R^{21B} \sim R^{24B}$ から選択される一つは $*b_2$ に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{21B} \sim R^{24B}$ 、 $R^{25B} \sim R^{28B}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基である。 $R^{21B} \sim R^{28B}$ が表す、前記アルキル基が有し得る置換基は、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のヘテロアリール基から選択される。

前記単結合ではない $R^{21B} \sim R^{24B}$ は、互いに結合して環を形成せず、また、 R^{25B}

～ R^{28B} は互いに結合して環を形成しない。

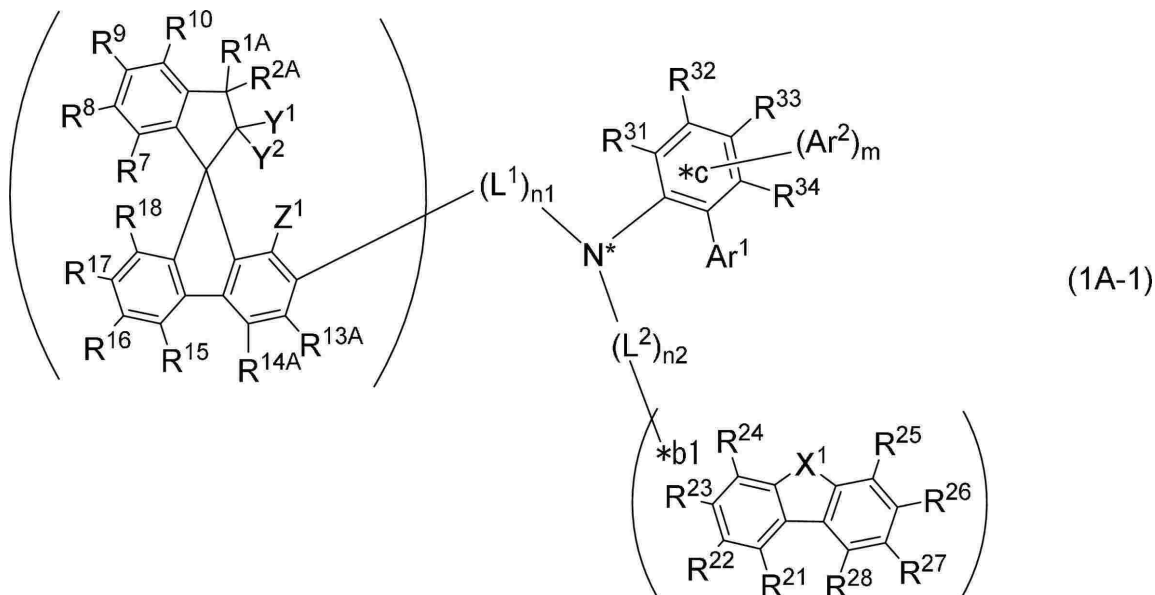
R^C 及び R^D は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基である。 R^C 及び R^D が表す、前記アルキル基が有し得る置換基は、炭素数1～18のアルキル基、環形成炭素数6～18のアリール基、及び環形成原子数5～18のヘテロアリール基から選択される。

式(1B)中、 N^* 、 L^1 、及び $n1$ は式(1A)で規定したのと同義である。]

【請求項2】

下記式(1A-1)で表される、請求項1に記載の化合物。

【化4】



[式(1A-1)中、 R^{1A} 、 R^{2A} 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 Z^1 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^{21} \sim R^{28}$ 、 X^1 、 $R^{31} \sim R^{34}$ 、 N^* 、 Ar^1 、 Ar^2 、 L^1 、 L^2 、 $*b1$ 、 $*c$ 、 m 、 $n1$ 、及び $n2$ は、前記式(1A)において定義したとおりである。]

【請求項3】

R^{21} 、 R^{22} 、及び R^{24} のうち一つが $*b1$ に結合する単結合である、請求項2に記載の化合物。

【請求項4】

前記式(1A)、又は式(1A-1)で表され、 $n1$ が1のとき L^1 はフェニレン基であり、 $n2$ が1のとき L^2 はフェニレン基である、請求項1～3のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項5】

下記式(1A-3)～式(1A-5)のいずれかで表される、請求項1に記載の化合物。

10

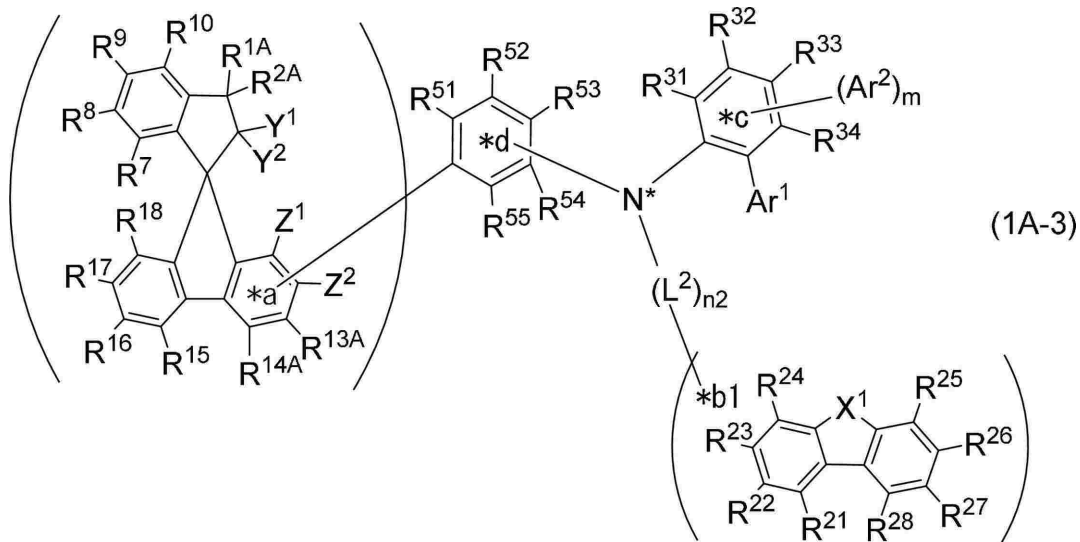
20

30

40

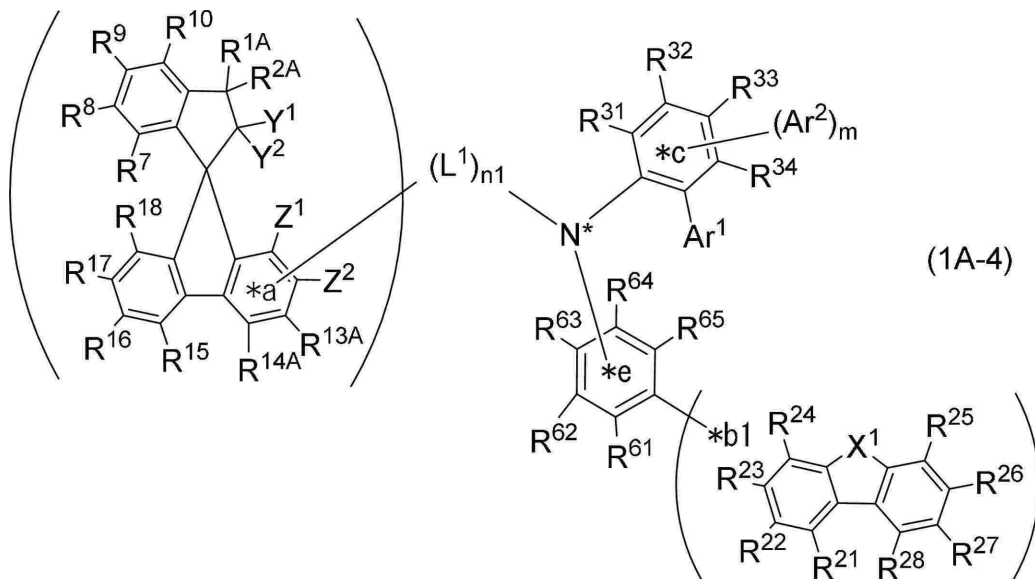
50

【化 5】



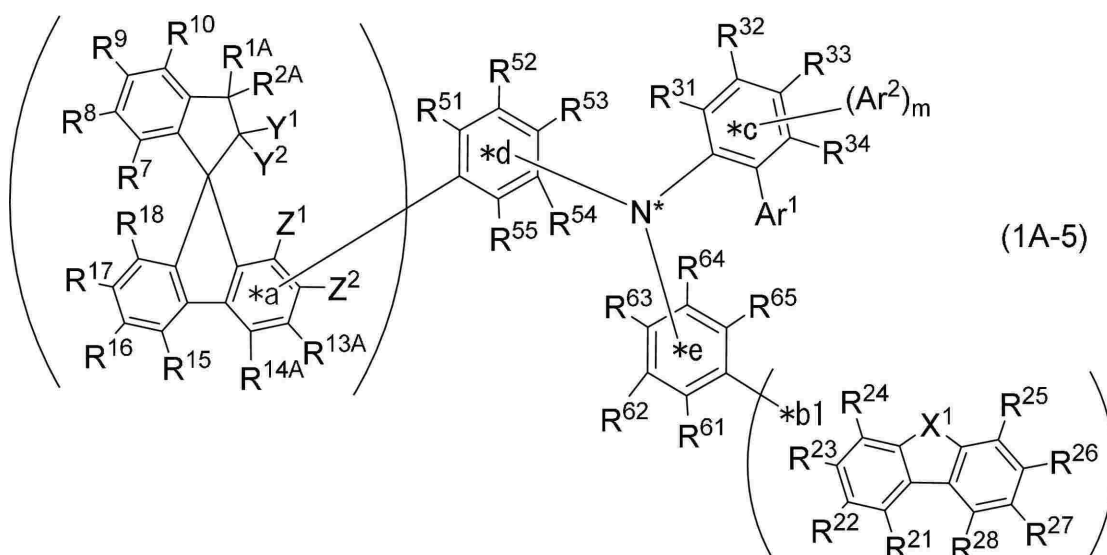
10

【化 6】



20

【化 7】



30

40

【式 (1A-3) 及び式 (1A-5) 中、 $R^{51} \sim R^{55}$ は、それぞれ独立に、水素原子、

50

無置換の炭素数 1 ～ 6 のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基である。但し、 $R^{51} \sim R^{55}$ から選択される一つは、*d に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{51} \sim R^{55}$ のうち隣り合う 1 組は、互いに結合せず環を形成しない。

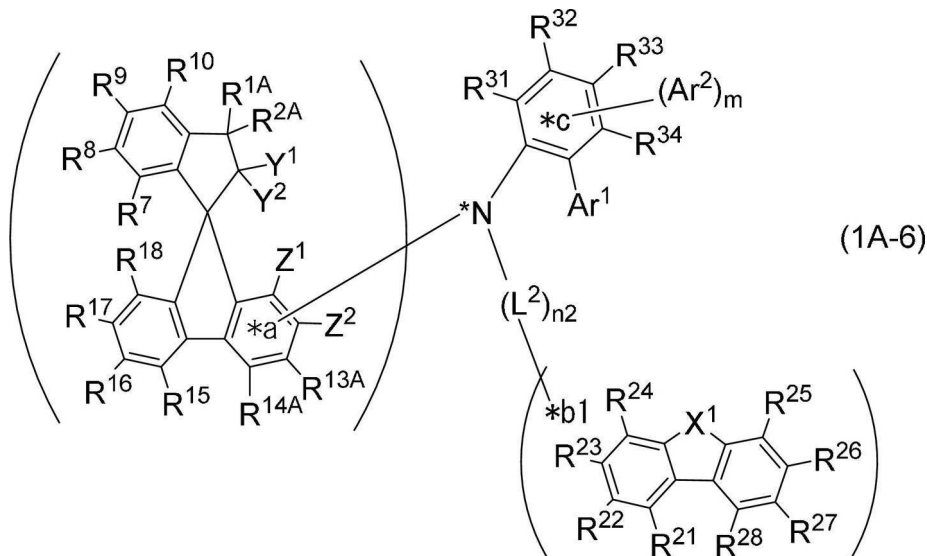
式 (1A-4) 及び式 (1A-5) 中、 $R^{61} \sim R^{65}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数 1 ～ 6 のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基である。但し、 $R^{61} \sim R^{65}$ から選択される一つは、*e に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{61} \sim R^{65}$ のうち隣り合う 1 組は、互いに結合せず環を形成しない。

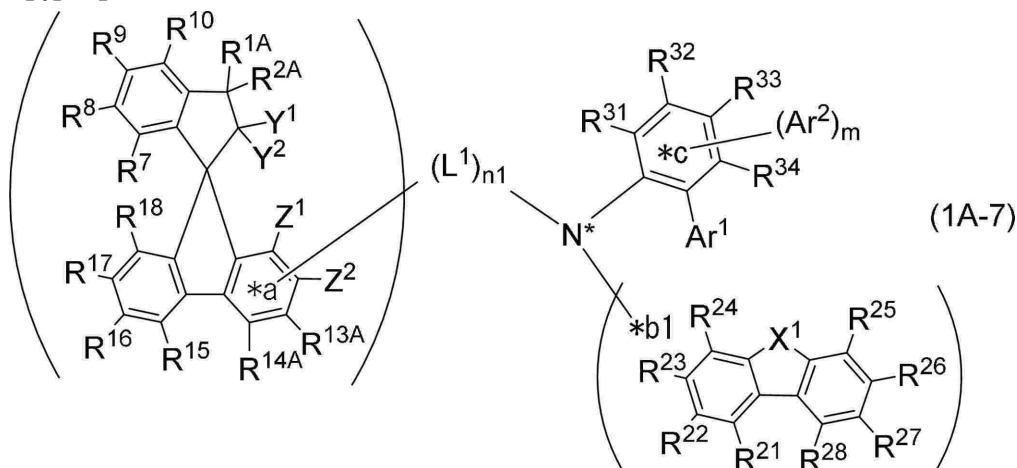
式 (1A-3) ～ 式 (1A-5) 中、 R^{1A} 、 R^{2A} 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 Z^1 、 Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^{21} \sim R^{28}$ 、 X^1 、 $R^{31} \sim R^{34}$ 、 N^* 、 Ar^1 、 Ar^2 、 L^1 、 L^2 、*a、*b1、*c、m、n1、及び n2 は、前記式 (1A) において定義したとおりである。]

【請求項 6】

下記式 (1A-6) ～ 式 (1A-8) のいずれかで表される、請求項 1 に記載の化合物。
【化 8】



【化 9】



10

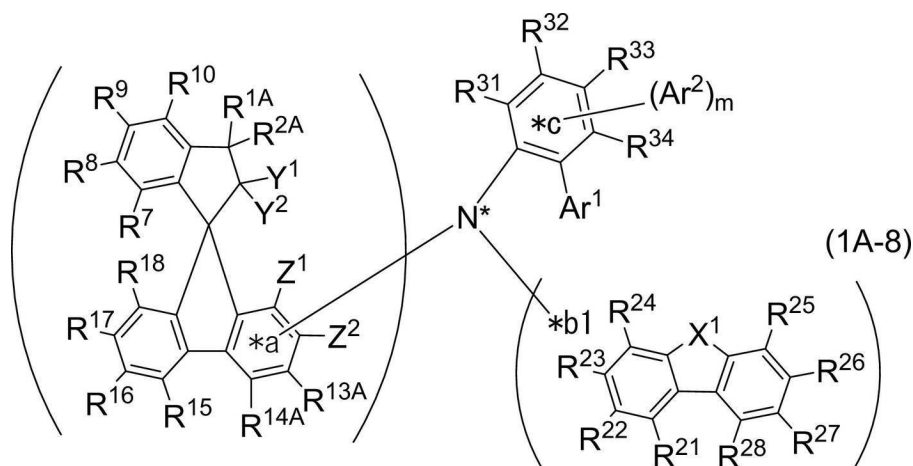
20

30

40

50

【化 10】



【式 (1A-6) ~ (1A-8) 中、 R^{1A} 、 R^{2A} 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 Z^1 、 Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^{21} \sim R^{28}$ 、 X^1 、 $R^{31} \sim R^{34}$ 、 N^* 、 Ar^1 、 Ar^2 、 L^1 、 L^2 、 $*a$ 、 $*b1$ 、 $*c$ 、 m 、 $n1$ 、及び $n2$ は、前記式 (1A) において定義したとおりである。】

【請求項 7】

前記式 (1A)、式 (1A-1)、及び、式 (1A-3) ~ 式 (1A-8) のいずれかで表され、 Ar^1 が置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である、請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

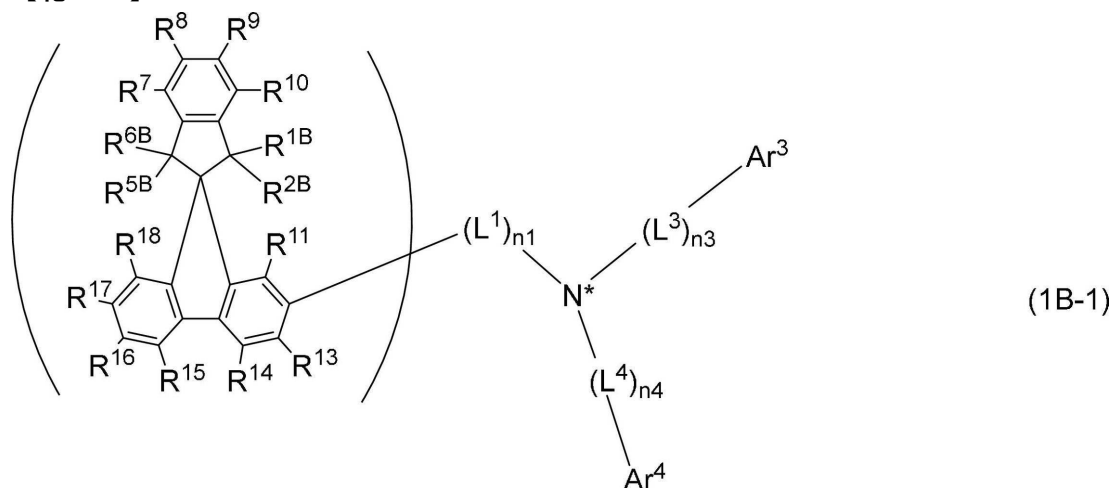
【請求項 8】

前記式 (1A)、式 (1A-1)、及び、式 (1A-3) ~ 式 (1A-8) のいずれかで表され、 Ar^1 及び Ar^2 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 のアリール基である、請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 9】

下記式 (1B-1) で表される、請求項 1 に記載の化合物。

【化 11】



【式 (1B-1) 中、 R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、 R^{6B} 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 R^{11} 、 $R^{13} \sim R^{18}$ 、 N^* 、 Ar^3 、 Ar^4 、 L^1 、 L^3 、 L^4 、 $n1$ 、 $n3$ 、及び $n4$ は、前記式 (1B) において定義したとおりである。】

【請求項 10】

Ar^3 は、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、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 11】

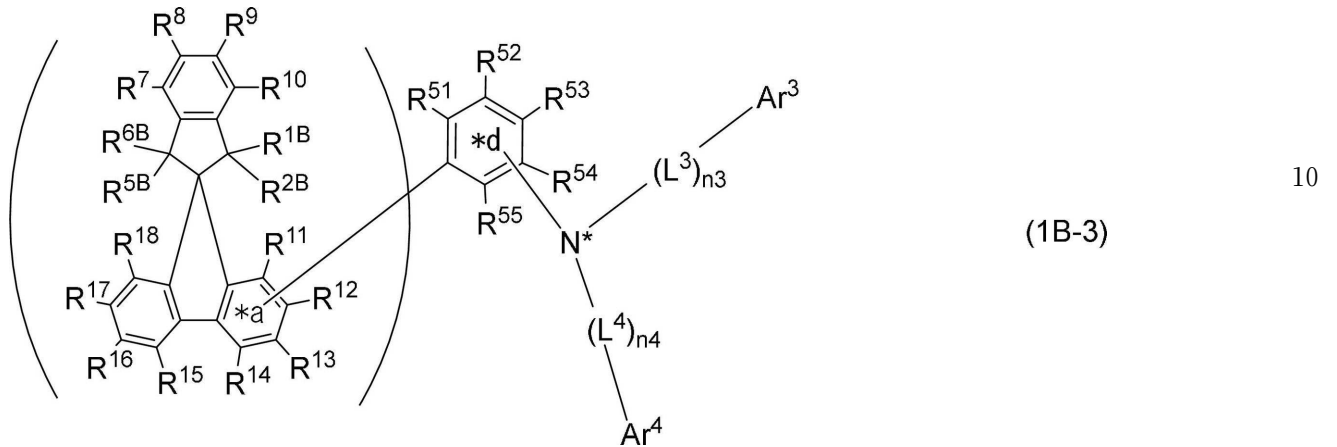
前記式 (1B)、及び式 (1B-1) のいずれかで表され、 $n1$ が 1 のとき L^1 はフェ

ニレン基であり、 n_3 が1のとき L^3 はフェニレン基であり、 n_4 が1のとき L^4 はフェニレン基である、請求項1に記載の化合物。

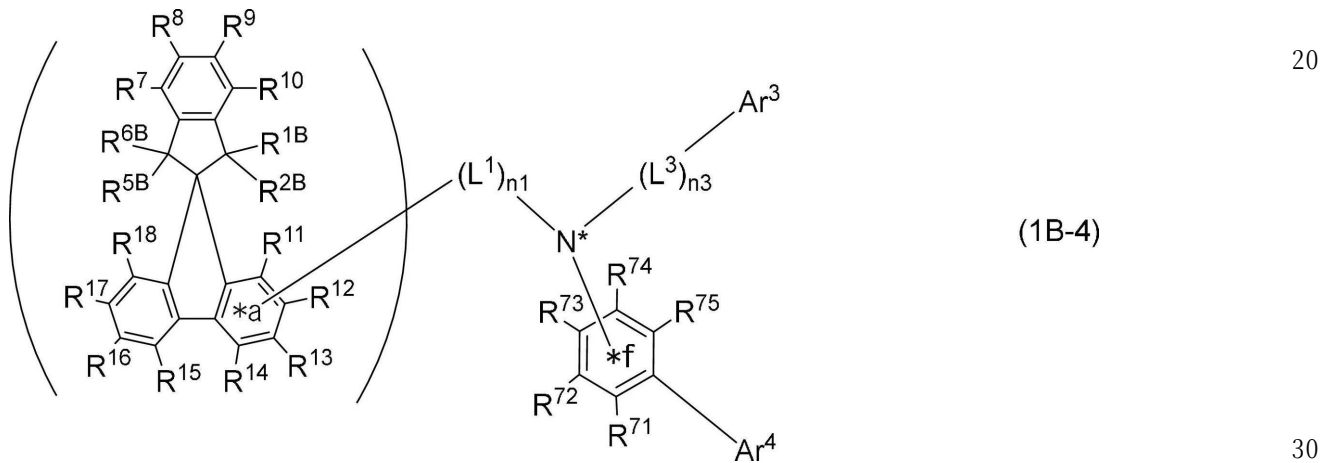
【請求項12】

下記式(1B-3)～式(1B-9)のいずれかで表される、請求項1に記載の化合物。

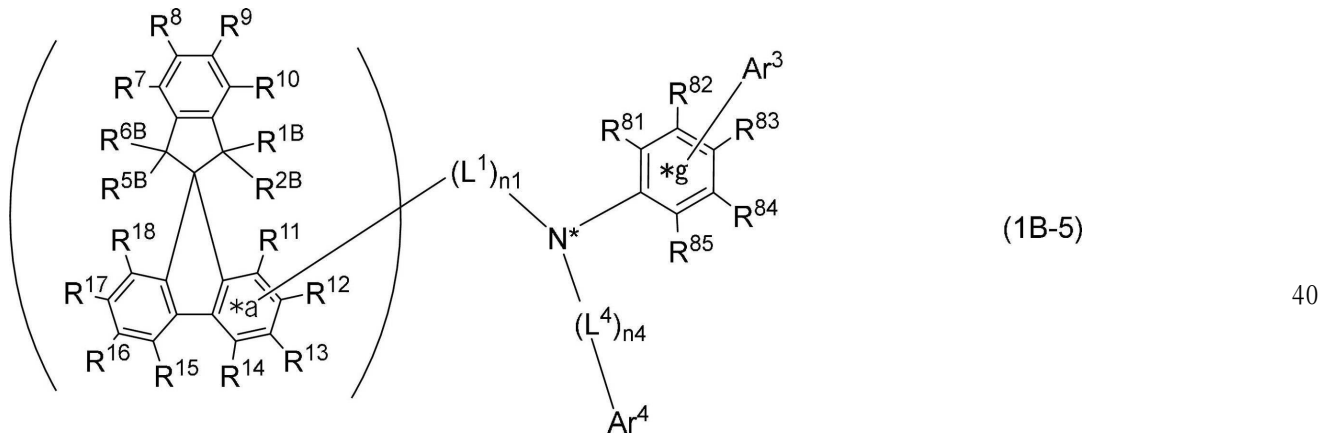
【化12】



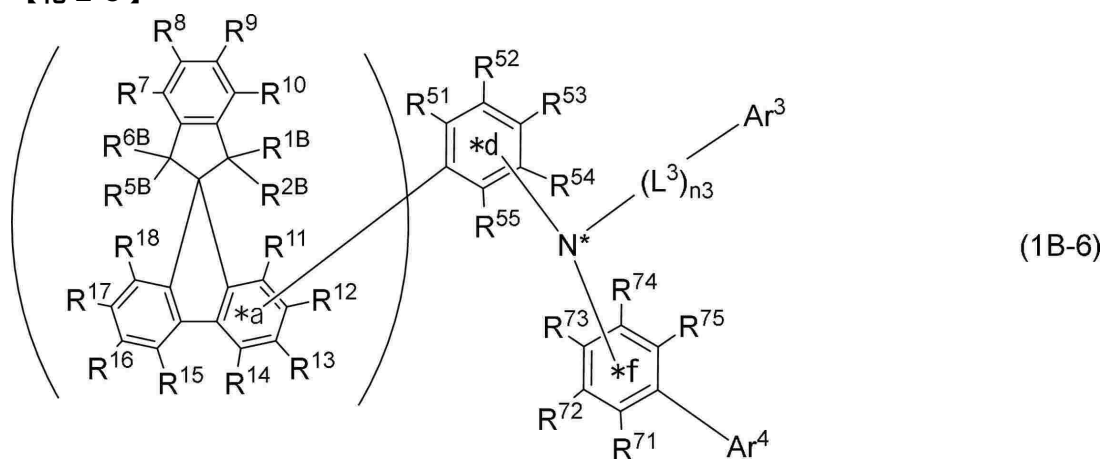
【化13】



【化14】

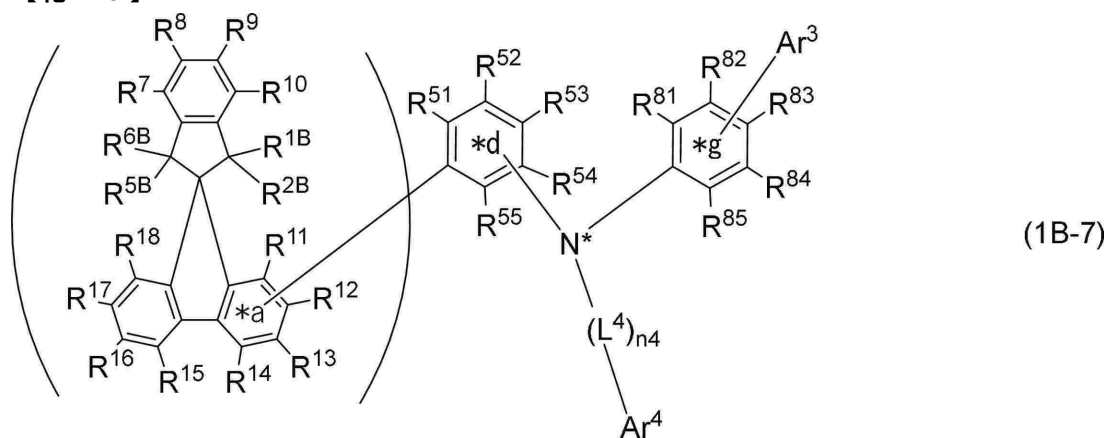


【化 1 5】



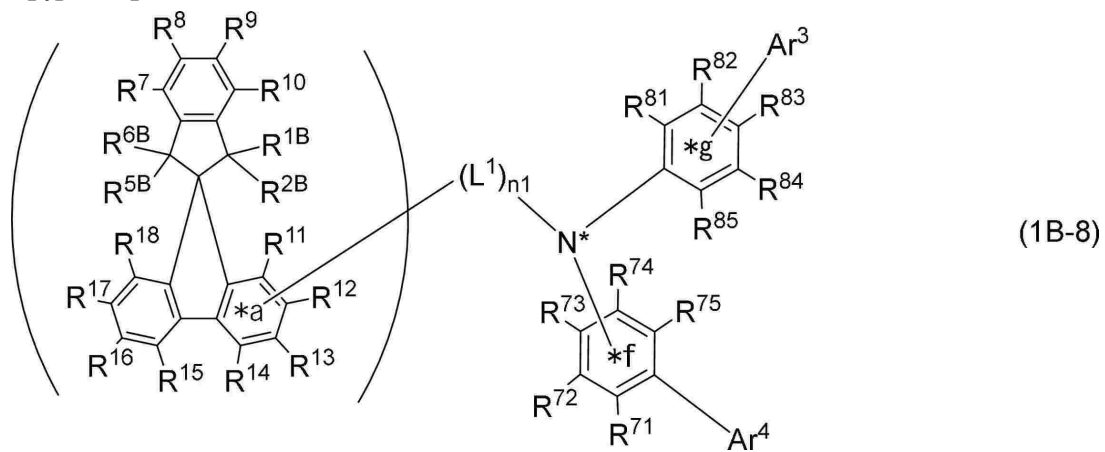
10

【化 1 6】



20

【化 1 7】

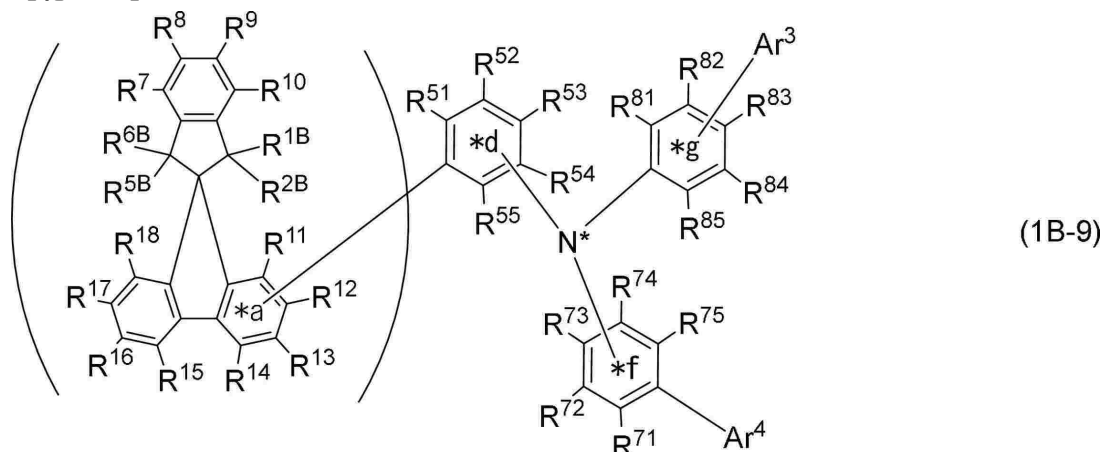


30

40

50

【化 18】



10

〔式 (1B-3)、式 (1B-6)、式 (1B-7)、及び式 (1B-9) 中、 $R^{51} \sim R^{55}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基である。但し、 $R^{51} \sim R^{55}$ から選択される一つは、*d に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{51} \sim R^{55}$ のうち隣り合う一組は、互いに結合せず環を形成しない。

20

式 (1B-4)、式 (1B-6)、式 (1B-8)、及び式 (1B-9) 中、 $R^{71} \sim R^{75}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基である。但し、 $R^{71} \sim R^{75}$ から選択される一つは、*f に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{71} \sim R^{75}$ のうち隣り合う一組は、互いに結合せず環を形成しない。

式 (1B-5)、及び式 (1B-7)～式 (1B-9) 中、 $R^{81} \sim R^{85}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基である。但し、 $R^{81} \sim R^{85}$ から選択される一つは、*g に結合する単結合である。

30

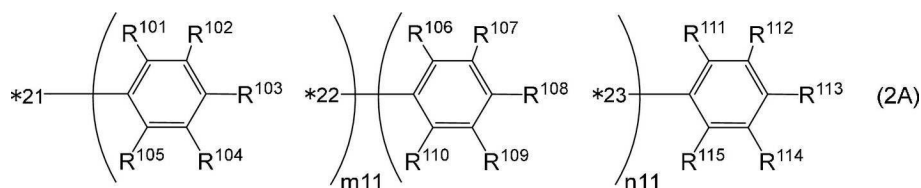
前記単結合ではない $R^{81} \sim R^{85}$ のうち隣り合う一組は、互いに結合せず環を形成しない。

式 (1B-3)～(1B-9) 中、 R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、 R^{6B} 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 $R^{11} \sim R^{18}$ 、 N^* 、 Ar^3 、 Ar^4 、 L^1 、 L^3 、 L^4 、*a、n1、n3、及び n4 は、前記式 (1B) において定義したとおりである。]

【請求項 13】

前記式 (1B)、式 (1B-1)、及び式 (1B-3)～式 (1B-9) のいずれかで表され、 Ar^3 は、下記の式 (2A)～(2F) のいずれかで表される、請求項 1 に記載の化合物。

【化 19】



40

(式 (2A) 中、

・*21 は L^3 への結合位置である。

・ $R^{101} \sim R^{105}$ から選ばれる 1 つは *22 に結合する単結合であり、 $R^{106} \sim R^{110}$ から選ばれる 1 つは *23 に結合する単結合である。

50

・前記単結合ではない $R^{101} \sim R^{105}$ 及び $R^{106} \sim R^{110}$ は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～10のアルキル基、又は、無置換の環形成炭素数6～12のアリール基である。

・前記単結合ではない $R^{101} \sim R^{105}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成しない。

・前記単結合ではない $R^{106} \sim R^{110}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成しない。

・ $R^{111} \sim R^{115}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～10のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は、置換もしくは無置換の環形成原子数5～13のヘテロアリール基である。 $R^{111} \sim R^{115}$ が表す、前記アルキル基、前記アリール基、及び前記ヘテロアリール基が有し得る置換基は、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のヘテロアリール基から選択される。

・ $R^{111} \sim R^{115}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成しない。

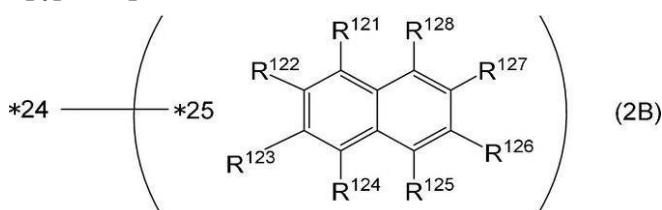
・ m_{11} は0、1又は2であり、 n_{11} は0又は1である。 m_{11} が2であり、かつ、 n_{11} が0である場合を除く。

・ $m_{11}=0$ 、 $n_{11}=0$ の場合、*23が*21を表す。

・ $m_{11}=0$ 、 $n_{11}=1$ の場合、*22が*21を表す。

・ $m_{11}=1$ 、 $n_{11}=0$ の場合、*23が*22を表す。)

【化20】



(式(2B)中、

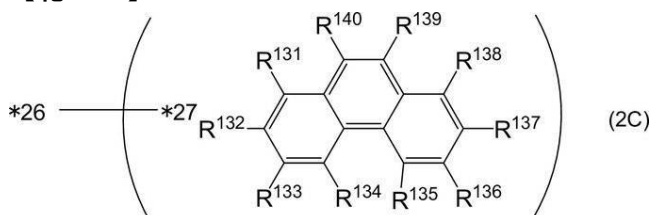
・*24は L^3 への結合位置である。

・ $R^{121} \sim R^{128}$ から選ばれる1つは*25に結合する単結合である。

・前記単結合ではない $R^{121} \sim R^{128}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～10のアルキル基、又は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基である。 $R^{121} \sim R^{128}$ が表す、前記アルキル基、及び前記アリール基が有し得る置換基は、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のヘテロアリール基から選択される。

・前記単結合ではない $R^{121} \sim R^{128}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成しない。)

【化21】



(式(2C)中、

・*26は L^3 への結合位置である。

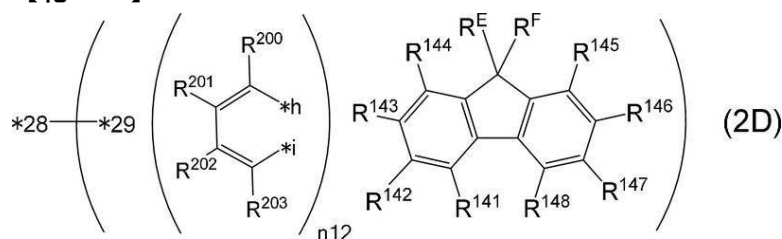
・ $R^{131} \sim R^{140}$ から選ばれる1つは*27に結合する単結合である。

・前記単結合ではない $R^{131} \sim R^{140}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～10のアルキル基、又は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基である。 $R^{131} \sim R^{140}$ が表す、前記アルキル基、及び前記アリール基

が有し得る置換基は、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 のヘテロアリール基から選択される。

・前記単結合ではない $R^{131} \sim R^{140}$ から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成しない。)

【化 2 2】



10

(式 (2 D) 中、

・ * 2 8 は L^3 への結合位置である。

・ $n 1 2$ は 0 である。

・ $R^{141} \sim R^{144}$ から選ばれる一つは * 2 9 に結合する単結合である。

・前記単結合ではない $R^{141} \sim R^{144}$ 、 $R^{145} \sim R^{148}$ 、及び $R^{200} \sim R^{203}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 10 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基、又は、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 13 のヘテロアリール基である。 $R^{141} \sim R^{148}$ が表す、前記アルキル基、前記アリール基、及び前記ヘテロアリール基が有し得る置換基は、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 のヘテロアリール基から選択される。

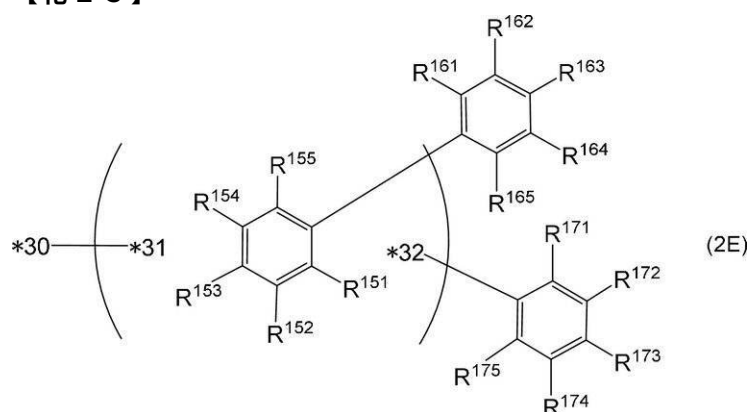
20

・前記単結合ではない $R^{141} \sim R^{144}$ 、 $R^{145} \sim R^{148}$ 、及び $R^{200} \sim R^{203}$ から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成しない。

・ R^E 及び R^F は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリール基であり、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。但し、 R^E 及び R^F から選択される一つがアリール基である場合、両者が結合して、 R^E 及び R^F が結合しているフルオレン環とともに 1', 3'-ジヒドロスピロ [フルオレン-9, 2'-インデン] を形成しない。 R^E 及び R^F が表す、前記アルキル基、及び前記アリール基が有し得る置換基は、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 のヘテロアリール基から選択される。)

30

【化 2 3】



40

(式 (2 E) 中、

・ * 3 0 は L^3 への結合位置である。

・ $R^{151} \sim R^{155}$ から選ばれる 1 つは * 3 1 に結合する単結合であり、 $R^{151} \sim R^{155}$ から選ばれる他の 1 つは * 3 2 に結合する単結合である。

・前記単結合ではない $R^{151} \sim R^{155}$ は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素

50

数 1 ～ 10 のアルキル基、又は、無置換のフェニル基である。

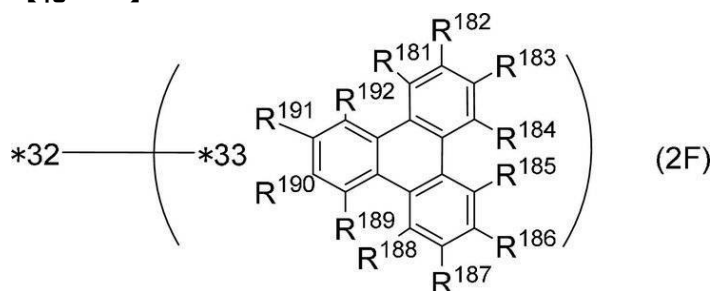
・前記単結合ではない $R^{151} \sim R^{155}$ から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成しない。

・ $R^{161} \sim R^{165}$ 及び $R^{171} \sim R^{175}$ は、それぞれ独立して、水素原子又は無置換の炭素数 1 ～ 10 のアルキル基である。

・水素原子ではない $R^{161} \sim R^{165}$ から選ばれる少なくとも 1 つの隣接する 2 つは、互いに結合して、1 又は複数の無置換のベンゼン環を形成してもよいし、互いに結合せず環を形成しなくてもよい。

・水素原子ではない $R^{171} \sim R^{175}$ から選ばれる少なくとも 1 つの隣接する 2 つは、互いに結合して、1 又は複数の無置換のベンゼン環を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環を形成しなくてもよい。) 10

【化 2 4】



(式 (2 F) 中、

・ * 3 2 は L^3 への結合位置である。

・ $R^{181} \sim R^{192}$ から選ばれる 1 つは * 3 3 に結合する単結合である。

・前記単結合ではない $R^{181} \sim R^{192}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 10 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 ～ 12 のアリール基である。 $R^{181} \sim R^{192}$ が表す、前記アルキル基、及び前記アリール基が有し得る置換基は、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 のヘテロアリール基から選択される。

・前記単結合ではない $R^{181} \sim R^{192}$ から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成しない。) 30

【請求項 1 4】

Ar^1 が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基である、請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

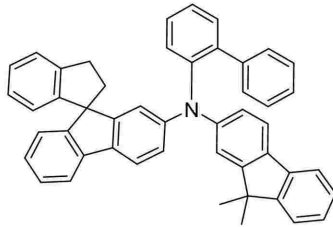
【請求項 1 5】

前記式 (1 A) 又は式 (1 B) で表される化合物が少なくとも 1 個の重水素原子を含む、請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

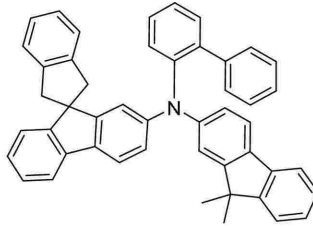
【請求項 1 6】

下記の化合物 1、2、4 ～ 8 のいずれか一つからなる、請求項 1 に記載の化合物。

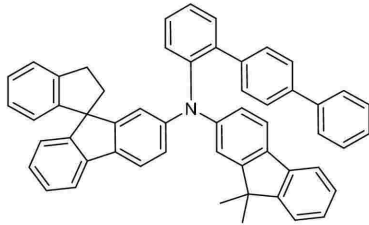
【化 2 5】



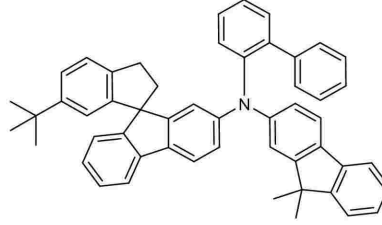
化合物1



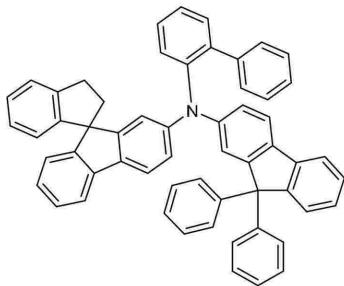
化合物2



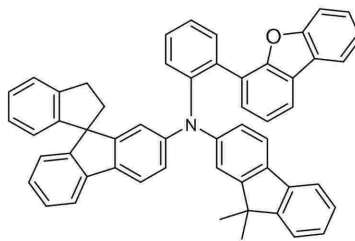
化合物4



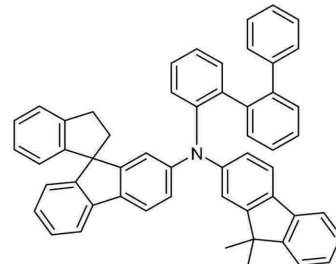
化合物5



化合物6



化合物7



化合物8

【請求項 1 7】

請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 1 8】

前記化合物が正孔輸送層材料である、請求項 1 7 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 1 9】

陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に有機層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該有機層が発光層を含む単一又は複数の層からなり、該有機層を構成する単一の層及び複数の層からなる群より選択される少なくとも 1 層が請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 0】

前記有機層が前記陽極と前記発光層の間に正孔輸送帯域を含み、該正孔輸送帯域が前記化合物を含む、請求項 1 9 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 1】

前記正孔輸送帯域が陽極側の第 1 正孔輸送層と陰極側の第 2 正孔輸送層を含み、
前記第 1 正孔輸送層及び前記第 2 正孔輸送層の少なくとも一方が前記化合物を含む、請求項 2 0 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 2】

前記第 2 正孔輸送層が前記化合物を含む、請求項 2 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 3】

10

20

30

40

50

前記発光層と前記第 2 正孔輸送層とが直接接している、請求項 2 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 4】

前記第 1 正孔輸送層の厚さと前記第 2 正孔輸送層の厚さの合計が、3 0 n m 以上、1 5 0 n m 以下である、請求項 2 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 5】

前記正孔輸送帯域が陽極側の第 1 正孔輸送層と陰極側の第 2 正孔輸送層と更に陰極側の第 3 層とを含み、

前記第 1 正孔輸送層及び前記第 2 正孔輸送層の少なくとも一方が前記化合物を含む、請求項 2 0 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 6】

前記発光層は主ピーク波長が 5 0 0 n m 以下の蛍光発光を示す発光性化合物を含有する層を含む、請求項 2 0 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 7】

前記発光層が単一の層である、請求項 1 9 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 8】

請求項 1 9 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、電子機器。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0 0 0 1】

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

【背景技術】

【0 0 0 2】

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

【0 0 0 3】

特許文献 1 ～ 3 には、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として使用する化合物が開示されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0 0 0 4】

【文献】米国特許第 7 5 9 8 6 6 7 号明細書

【文献】中国特許出願公開第 1 1 4 1 3 3 3 3 3 号明細書

【文献】米国特許出願公開第 2 0 2 2 / 0 0 5 9 7 7 1 号明細書

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0 0 0 5】

従来、多くの有機 E L 素子用の化合物が報告されているが、有機 E L 素子の性能をさらに向上させる化合物が依然として求められている。

【0 0 0 6】

本発明は、前記の課題を解決するためになされたもので、有機 E L 素子の性能をより改善する化合物及び有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、素子性能がより改善された有機 E L 素子、並びに、そのような有機 E L 素子を含む電子機器を提供することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

本発明者らは、新規な化合物を含む有機 E L 素子の性能について鋭意研究を重ねた結果、下記式 (1 A) 又は式 (1 B) で表される化合物を含む有機 E L 素子は、性能がより改善されることを見出した。

一態様において、本発明は、下記式（１Ａ）又は式（１Ｂ）で表される化合物を提供する。

(1A)

[illegible]

Z^1 及び Z^2 から選択される一つは、 $*a$ に結合する単結合である。

前記単結合ではない Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ 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1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～13のヘテロアリール基である。

前記単結合ではない Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、及び R^{14A} は、互いに結合して環を形成しない。

$R^7 \sim R^{10}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

$R^{15} \sim R^{18}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

R^1A 及び R^2A は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 のヘテロアリール基である。

R^1A 及び R^2A は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

Y^1 及び Y^2 は、水素原子である。

L^1 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリーレン基である。

n_1 は、0 又は 1 である。

n_1 が 0 のとき、 Z^1 及び Z^2 から選択される一つが、中心窒素原子 N^* に結合する。

X^1 は、酸素原子、硫黄原子、又は $=CR^AR^B$ である。

R^A 、 R^B 、及び $R^{21} \sim R^{28}$ から選択される一つは、 $*b_1$ に結合する単結合であるか、又は R^A 及び R^B から選択される一つは $*b_1$ に結合する 2 価の基である。

前記単結合ではなく、前記 $*b_1$ に結合する 2 価の基ではない R^A 及び R^B は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 のヘテロアリール基である。前記単結合ではなく、前記 $*b_1$ に結合する 2 価の基ではない R^A 及び R^B は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

前記 $*b_1$ に結合する基ではない $R^{21} \sim R^{28}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基である。

$R^{21} \sim R^{24}$ から選択される一つが $*b_1$ に結合する基である場合、前記 b_1 に結合する基ではない $R^{21} \sim R^{24}$ は互いに結合して環を形成せず、また、 $R^{25} \sim R^{28}$ は互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

$R^{25} \sim R^{28}$ から選択される一つが $*b_1$ に結合する基である場合、前記 b_1 に結合する基ではない $R^{25} \sim R^{28}$ は互いに結合して環を形成せず、また、 $R^{21} \sim R^{24}$ は互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

L^2 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリーレン基である。

n_2 は、0 又は 1 である。

n_2 が 0 のとき、 $R^{21} \sim R^{28}$ から選択される一つが、中心窒素原子 N^* に結合する。

Ar^1 は、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 のヘテロアリール基である。

Ar^2 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基である。

m は、0、1、2、3、又は 4 である。但し、 Ar^1 が水素原子のとき、 m は 0 である。

m が 1～4 の場合、 $R^{31} \sim R^{34}$ から選択される一つ～四つは、 $*c$ に結合する単結合である。 m が 2～4 の場合、複数存在する Ar^2 は同じでもよいし、互いに異なっているもよい。

前記単結合ではない $R^{31} \sim R^{34}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基である。

水素原子ではない Ar^1 、及び水素原子ではない $R^{34} \sim R^{24}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

【0009】

式 (1B) 中、

N^* は中心窒素原子である。

$R^{11} \sim R^{14}$ から選択される一つは、 $*a$ に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{11} \sim R^{14}$ 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、及び $R^7 \sim R^{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、又は、無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基である。

前記単結合ではない $R^{11} \sim R^{14}$ は、互いに結合して環を形成しない。

$R^7 \sim R^{10}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成

10

20

30

40

50

しなくてもよい。

$R^{15} \sim R^{18}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、及び R^{6B} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基である。

R^{1B} 及び R^{2B} は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

R^{5B} 及び R^{6B} は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

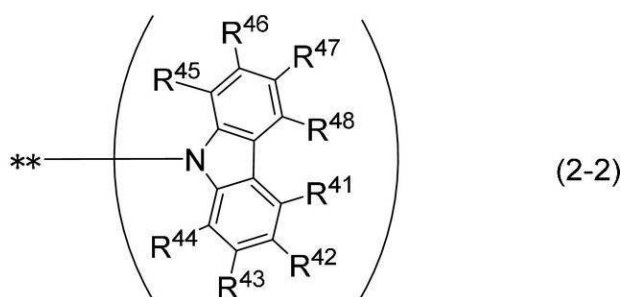
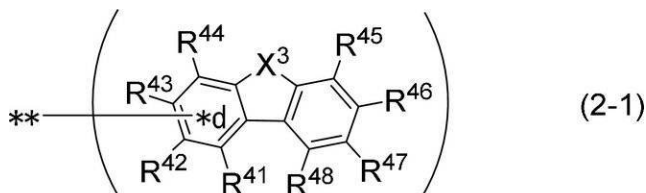
L^3 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基である。

n_3 は、0又は1である。

n_3 が0のとき、 Ar^3 が中心窒素原子 N^* に結合する。

Ar^3 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、下記式(2-1)で表される基、又は下記式(2-2)で表される基である。

【化3】



式(2-1)中、

**は、 L^3 への結合位置を表す。

X^3 は、酸素原子又は硫黄原子である。

$R^{41} \sim R^{44}$ から選択される一つは、*dに結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{41} \sim R^{44}$ 、 $R^{45} \sim R^{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～13のヘテロアリール基である。

前記単結合ではない $R^{41} \sim R^{44}$ のうち隣り合う一対の基、及び $R^{45} \sim R^{48}$ のうち隣り合う一対の基は、それぞれ互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

式(2-2)中、

**は、 L^3 への結合位置を表す。

$R^{41} \sim R^{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～13のヘテロアリール基である。

$R^{41} \sim R^{48}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

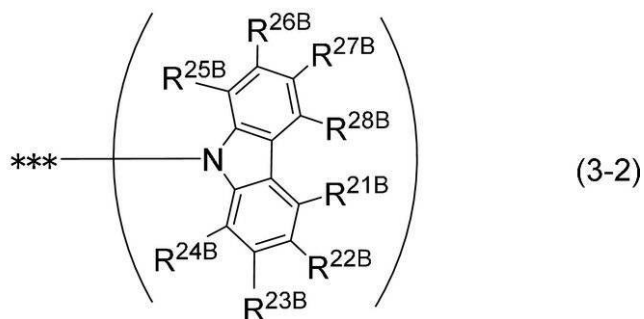
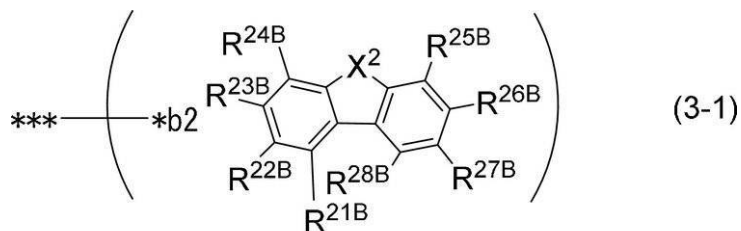
L^4 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基である。

n_4 は、0又は1である。

n_4 が 0 のとき、 Ar^4 が中心窒素原子 N^* に結合する。

Ar^4 は、下記式 (3-1) で表される基、又は下記式 (3-2) で表される基である。

【化 4】



式 (3-1) 中、

*** は、 L^4 への結合位置を表す。

X^2 は、酸素原子、硫黄原子、又は $=C^C R^D$ である。

$R^{21B} \sim R^{24B}$ 、 R^C 、及び R^D から選択される一つは、*b2 に結合する単結合であるか、又は R^C 及び R^D から選択される一つは *b2 に結合する 2 価の基である。

前記単結合ではない $R^{21B} \sim R^{24B}$ 、 $R^{25B} \sim R^{28B}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基である。

$R^{21B} \sim R^{24B}$ から選択される一つが *b2 に結合する単結合である場合、前記単結合ではない $R^{21B} \sim R^{24B}$ は、互いに結合して環を形成せず、また、 $R^{25B} \sim R^{28B}$ は互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

$R^{25B} \sim R^{28B}$ から選択される一つが *b2 に結合する単結合である場合、前記単結合ではない $R^{25B} \sim R^{28B}$ は、互いに結合して環を形成せず、また、 $R^{21B} \sim R^{24B}$ は互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

前記単結合ではなく、前記 *b2 に結合する 2 価の基ではない R^C 及び 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 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 のヘテロアリール基であり、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。但し、 R^C 及び R^D から選択される一つがアリール基である場合、両者が結合して、 R^C 及び R^D が結合しているフルオレン環とともに 1', 3'-ジヒドロスピロ [フルオレン-9, 2'-インデン] を形成しない。

X^2 が酸素原子又は硫黄原子である場合、 n_4 は 1 である。

式 (3-2) 中、

*** は、 L^4 への結合位置を表す。

$R^{21B} \sim R^{28B}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基である。

$R^{21B} \sim R^{24B}$ のうち隣り合う一対の基、及び $R^{25B} \sim R^{28B}$ のうち隣り合う一対の基は、それぞれ互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

式(1B)中、 L^1 及び $n1$ は式(1A)で規定したのと同義である。]

【0010】

他の態様において、本発明は、前記式(1A)又は式(1B)で表される化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を提供する。

【0011】

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

【0012】

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

【発明の効果】

【0013】

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

【図面の簡単な説明】

【0014】

【図1】本発明の一態様に係る有機EL素子の層構成の一例を示す概略図である。

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

【図3】本発明の一態様に係る有機EL素子の層構成のさらに他の例を示す概略図である。

【発明を実施するための形態】

【0015】

【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、すなわち、軽水素(*protium*)、重水素(*deuterium*)、及び三重水素(*tritium*)を包含する。

【0016】

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、すなわち、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。

【0017】

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。

【0018】

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

10

20

30

40

50

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。

10

【0019】

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

【0020】

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

20

【0021】

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。

30

【0022】

「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。別途記載のない限り、本明細書に記載の各置換基は以下のように定義される。

【0023】

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。

40

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

50

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。

【0024】

・「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。

【0025】

・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、

m-ターフェニル-3'-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、

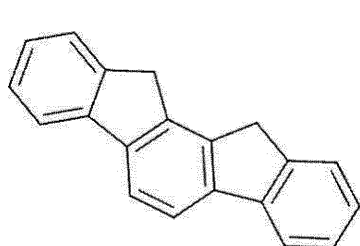
ベンゾトリフェニレニル基、

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

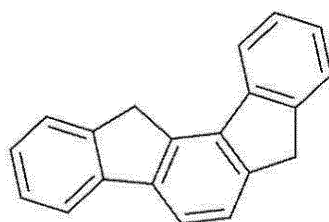
下記一般式 (TEMP-1) ~ (TEMP-15) で表される環構造から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 1 価のアリール基。

【0026】

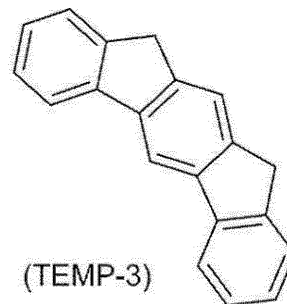
【化5】



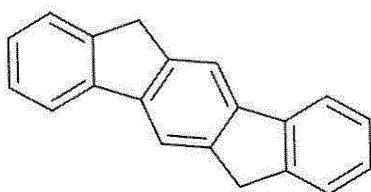
(TEMP-1)



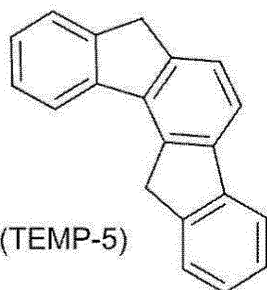
(TEMP-2)



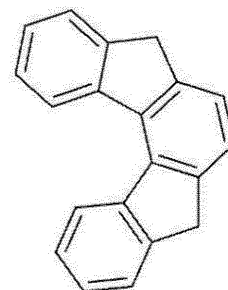
(TEMP-3)



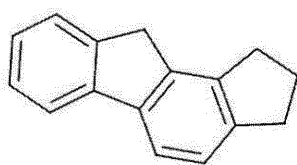
(TEMP-4)



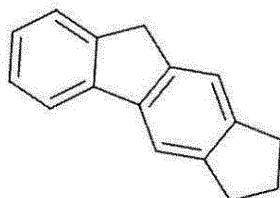
(TEMP-5)



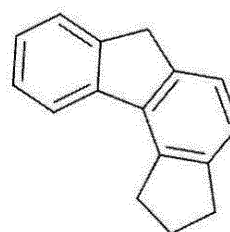
(TEMP-6)



(TEMP-7)



(TEMP-8)



(TEMP-9)

【0027】

10

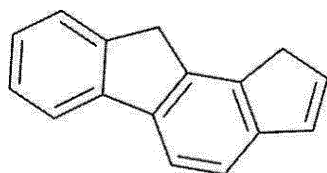
20

30

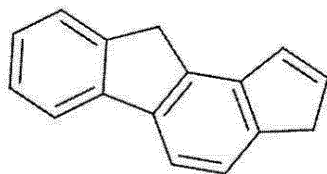
40

50

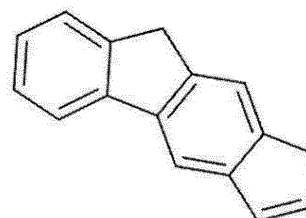
【化 6】



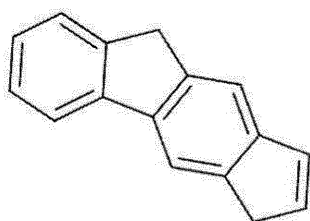
(TEMP-10)



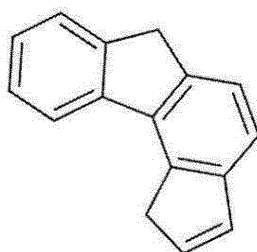
(TEMP-11)



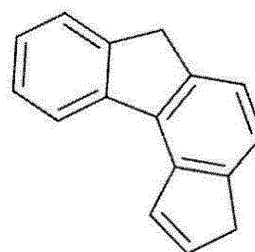
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

【 0 0 2 8 】

・置換のアリール基（具体例群 G 1 B）：

o-トリル基、

m-トリル基、

p-トリル基、

パラ-キシリル基、

メタ-キシリル基、

オルト-キシリル基、

パラ-イソプロピルフェニル基、

メタ-イソプロピルフェニル基、

オルト-イソプロピルフェニル基、

パラ-tert-ブチルフェニル基、

メタ-tert-ブチルフェニル基、

オルト-tert-ブチルフェニル基、

3, 4, 5-トリメチルフェニル基、

9, 9-ジメチルフルオレニル基、

9, 9-ジフェニルフルオレニル基

9, 9-ビス（4-メチルフェニル）フルオレニル基、

9, 9-ビス（4-イソプロピルフェニル）フルオレニル基、

9, 9-ビス（4-tert-ブチルフェニル）フルオレニル基、

シアノフェニル基、

トリフェニルシリルフェニル基、

トリメチルシリルフェニル基、

フェニルナフチル基、

ナフチルフェニル基、及び

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

【 0 0 2 9 】

・「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

10

20

30

40

50

、リン原子、及びホウ素原子が挙げられる。本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基である。

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

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

10

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

【0030】

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

20

【0031】

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

30

【0032】

・窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 1）：

ピロリル基、

イミダゾリル基、

ピラゾリル基、

トリアゾリル基、

テトラゾリル基、

オキサゾリル基、

イソオキサゾリル基、

オキサジアゾリル基、

チアゾリル基、

イソチアゾリル基、

チアジアゾリル基、

ピリジル基、

ピリダジニル基、

ピリミジニル基、

ピラジニル基、

トリアジニル基、

インドリル基、

イソインドリル基、

40

50

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。

10

【0033】

20

・酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 2）：

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

30

【0034】

40

・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 3）：

チエニル基、
チアゾリル基、
イソチアゾリル基、
チアジアゾリル基、
ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基）、
イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基）、
ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、
ナフトベンゾチオフェニル基（ナフトベンゾチエニル基）、
ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、

50

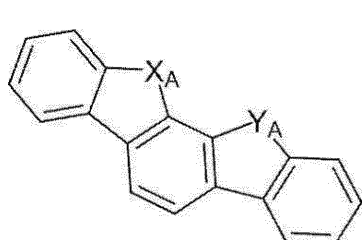
フェノチアジニル基、
 ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、
 アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、
 ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、
 アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフトベンゾチエニル基）、及び
 ジアザナフトベンゾチオフェニル基（ジアザナフトベンゾチエニル基）。

【0035】

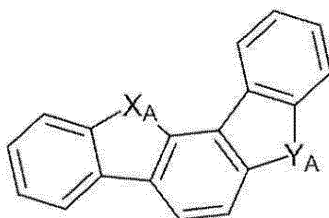
・下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群G2A4）：

【0036】

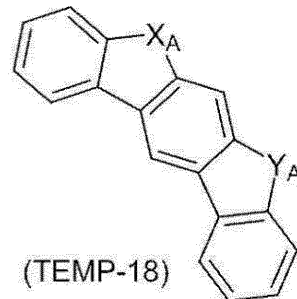
【化7】



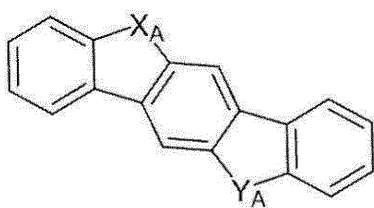
(TEMP-16)



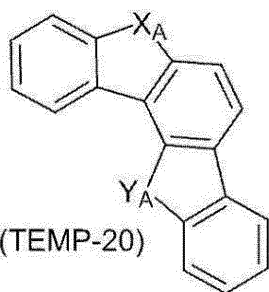
(TEMP-17)



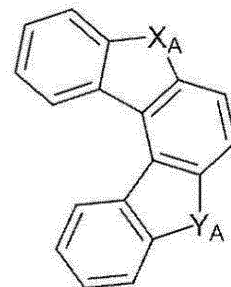
(TEMP-18)



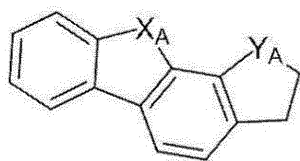
(TEMP-19)



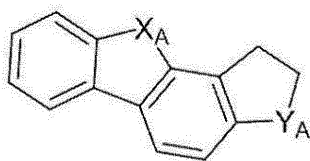
(TEMP-20)



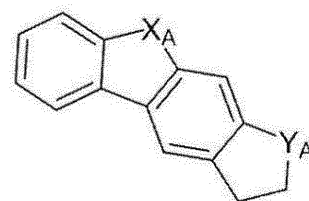
(TEMP-21)



(TEMP-22)



(TEMP-23)



(TEMP-24)

【0037】

10

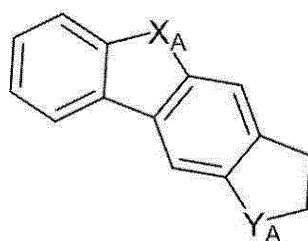
20

30

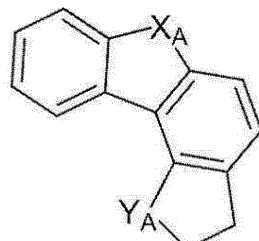
40

50

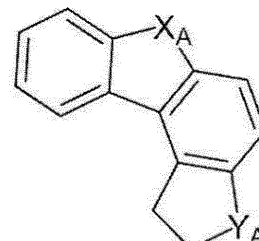
【化 8】



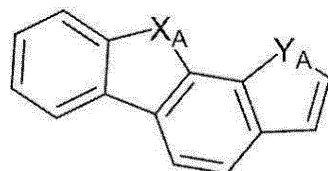
(TEMP-25)



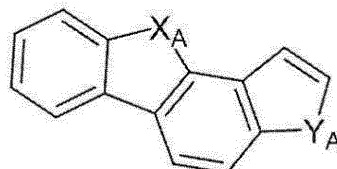
(TEMP-26)



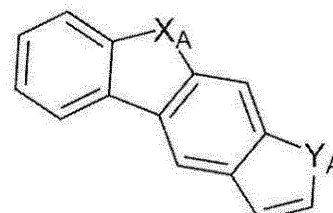
(TEMP-27)



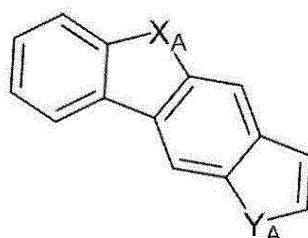
(TEMP-28)



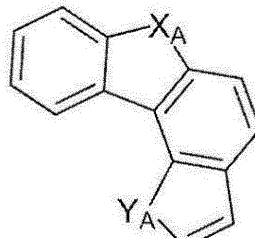
(TEMP-29)



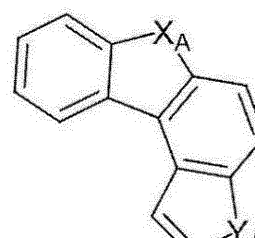
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

【0038】

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。

【0039】

・窒素原子を含む置換の複素環基（具体例群G2B1）：

（9-フェニル）カルバゾリル基、

（9-ビフェニル）カルバゾリル基、

（9-フェニル）フェニルカルバゾリル基、

（9-ナフチル）カルバゾリル基、

ジフェニルカルバゾール-9-イル基、

フェニルカルバゾール-9-イル基、

メチルベンゾイミダゾリル基、

エチルベンゾイミダゾリル基、

フェニルトリアジニル基、

ビフェニルトリアジニル基、

ジフェニルトリアジニル基、

フェニルキナゾリニル基、及びビフェニルキナゾリニル基。

【0040】

・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G2B2）：

フェニルジベンゾフラニル基、

メチルジベンゾフラニル基、

ｾｰﾌﾞチルジベンゾフラニル基、及び

スピロ〔9H-キサンテン-9,9'-〔9H〕フルオレン〕の1価の残基。

【0041】

・硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群G2B3）：

フェニルジベンゾチオフェニル基、

メチルジベンゾチオフェニル基、

ｾｰﾌﾞチルジベンゾチオフェニル基、及び

スピロ〔9H-チオキサンテン-9,9'-〔9H〕フルオレン〕の1価の残基。

【0042】

・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）：

【0043】

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

【0044】

・「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。

【0045】

・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。

【0046】

・置換のアルキル基（具体例群 G 3 B）：
ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、
ペンタフルオロエチル基、
2，2，2－トリフルオロエチル基、及び
トリフルオロメチル基。

【0047】

・「置換もしくは無置換のアルケニル基」

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

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

【0048】

・無置換のアルケニル基（具体例群 G 4 A）：

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

【0049】

・置換のアルケニル基（具体例群 G 4 B）：

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

【0050】

・「置換もしくは無置換のアルキニル基」

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

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

【0051】

・無置換のアルキニル基（具体例群 G 5 A）：

エチニル基

【0052】

- ・「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」

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

10

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

20

【0053】

- ・無置換のシクロアルキル基（具体例群 G 6 A）：

シクロプロピル基、

シクロブチル基、

シクロペンチル基、

シクロヘキシル基、

1-アダマンチル基、

2-アダマンチル基、

1-ノルボルニル基、及び

2-ノルボルニル基。

30

【0054】

- ・置換のシクロアルキル基（具体例群 G 6 B）：

4-メチルシクロヘキシル基。

【0055】

- ・「-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 G 7）としては、

-Si(G₁)(G₁)(G₁)、-Si(G₁)(G₂)(G₂)、

40

-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 G 1 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 G 2 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 G 3 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 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

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

50

る。

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

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

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

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

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

10

【 0 0 5 6 】

・「－O－ (R 9 0 4) で表される基」

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

－O (G 1) 、

－O (G 2) 、

－O (G 3) 、及び

－O (G 6)

が挙げられる。

ここで、

20

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

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

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

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

【 0 0 5 7 】

・「－S－ (R 9 0 5) で表される基」

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

－S (G 1) 、

－S (G 2) 、

－S (G 3) 、及び

－S (G 6)

が挙げられる。

30

ここで、

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

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

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

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

【 0 0 5 8 】

・「－N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基」

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

－N (G 1) (G 1) 、

－N (G 2) (G 2) 、

－N (G 1) (G 2) 、

－N (G 3) (G 3) 、及び

－N (G 6) (G 6)

が挙げられる。 ここで、

40

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

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

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

50

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

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

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

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

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

【 0 0 5 9 】

・「ハロゲン原子」

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

【 0 0 6 0 】

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

【 0 0 6 1 】

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

【 0 0 6 2 】

・「置換もしくは無置換のアルコキシ基」

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

【 0 0 6 3 】

・「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 (

10

20

30

40

50

G 3) で表される基であり、ここで、G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルキルチオ基」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。

【0064】

・「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 (G 1) で表される基であり、ここで、G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールオキシ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

10

【0065】

・「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 (G 1) で表される基であり、ここで、G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「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。

【0066】

・「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 (G 3) (G 3) (G 3) で表される基であり、ここで、G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。-Si (G 3) (G 3) (G 3) における複数の G 3 は、互いに同一であるか、又は異なる。「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。

20

【0067】

・「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、-(G 3)-(G 1) で表される基であり、ここで、G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」であり、G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。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。

30

「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-tert-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。

40

【0068】

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

50

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'-スプロピルフルオレニル基、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。

【0069】

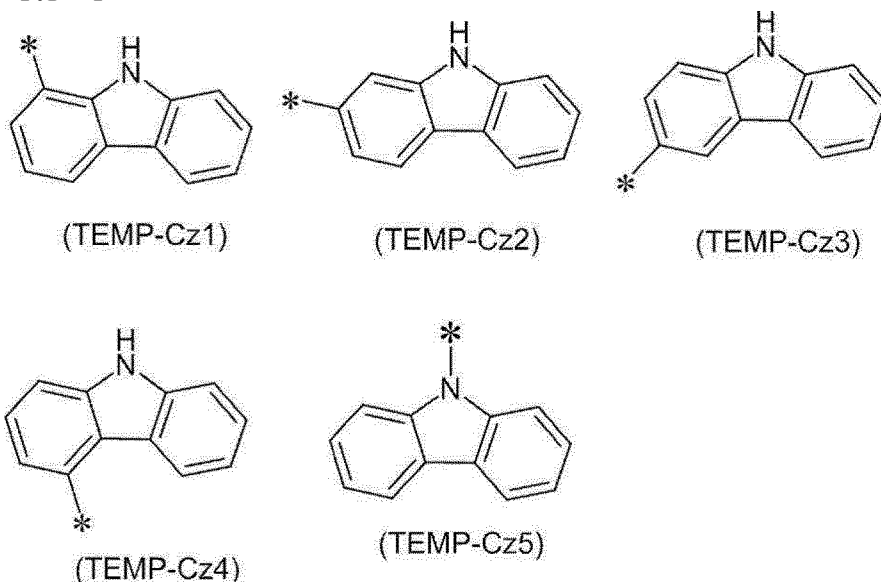
本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基、カルバゾリル基（1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、又は9-カルバゾリル基）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ジアザジベンゾチオフ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

【0070】

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。

【0071】

【化9】



【0072】

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。

【0073】

10

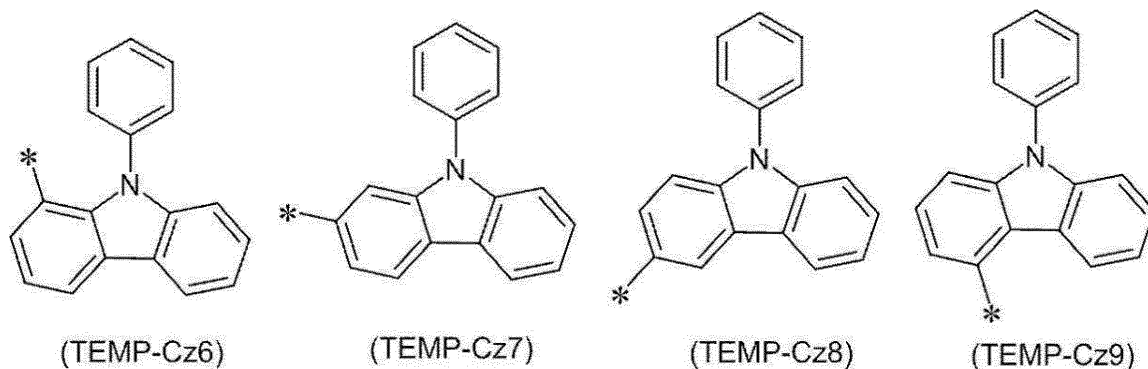
20

30

40

50

【化 10】



10

【0074】

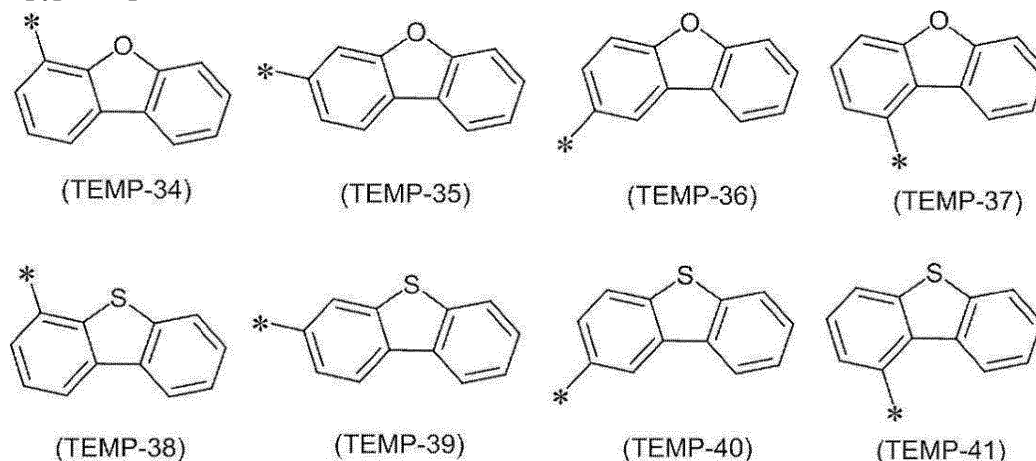
前記一般式 (TEMP-Cz1) ~ (TEMP-Cz9) 中、*は、結合位置を表す。

【0075】

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。

【0076】

【化 11】



20

30

【0077】

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

【0078】

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

【0079】

・「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。

40

【0080】

・「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

50

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。

【0081】

・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

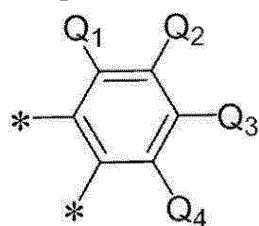
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群G14）としては、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

【0082】

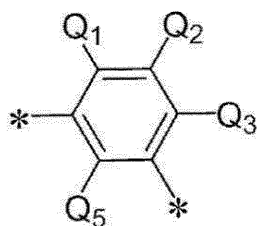
本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式（TEMP-42）～（TEMP-68）のいずれかの基である。

【0083】

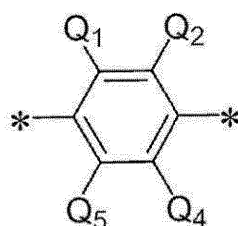
【化12】



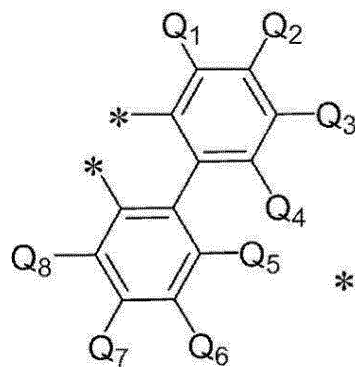
(TEMP-42)



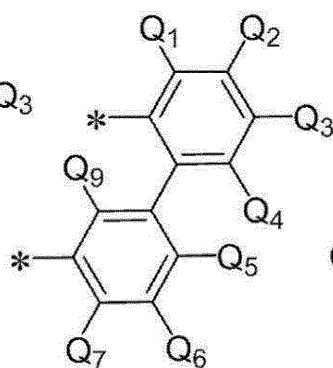
(TEMP-43)



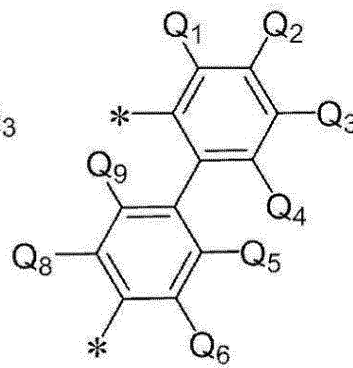
(TEMP-44)



(TEMP-45)



(TEMP-46)



(TEMP-47)

【0084】

10

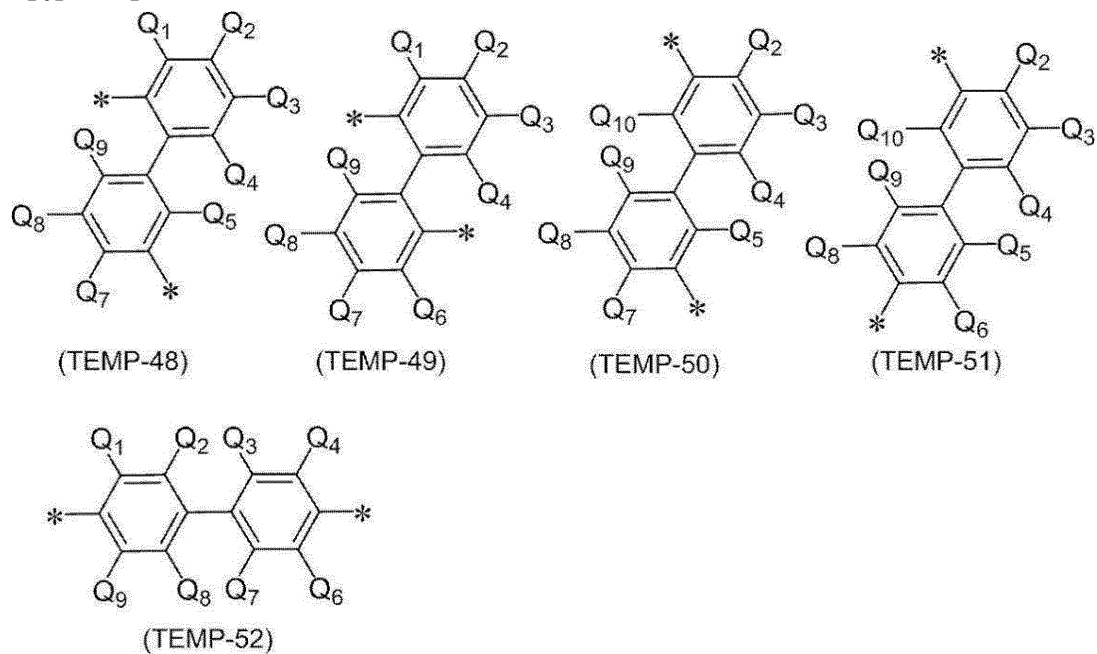
20

30

40

50

【化 1 3】



10

【 0 0 8 5】

20

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

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

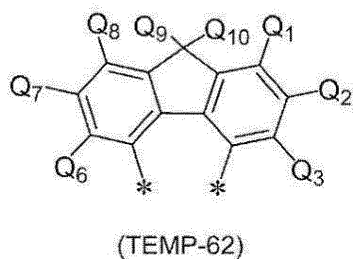
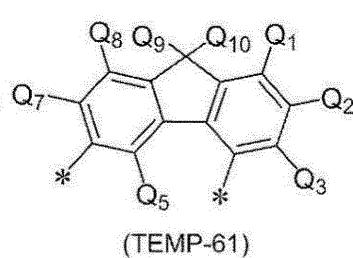
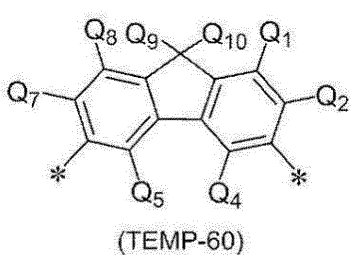
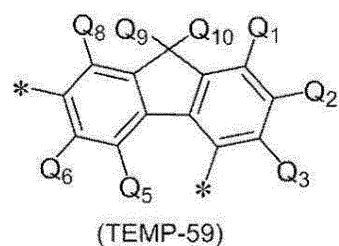
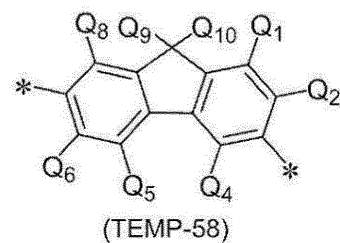
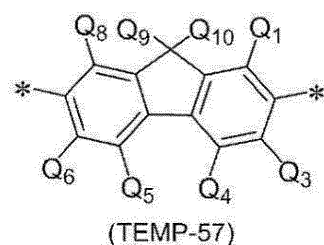
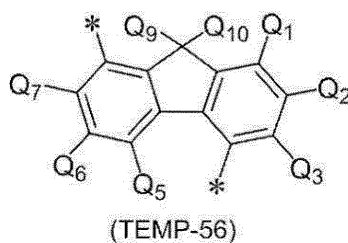
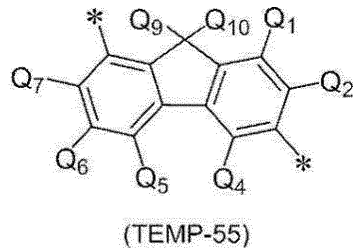
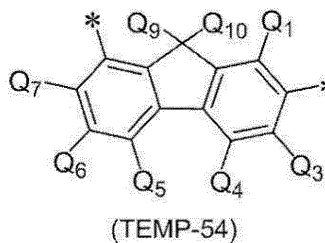
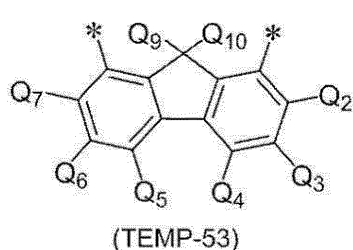
【 0 0 8 6】

30

40

50

【化 1 4】



【 0 0 8 7 】

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

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

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

【 0 0 8 8 】

10

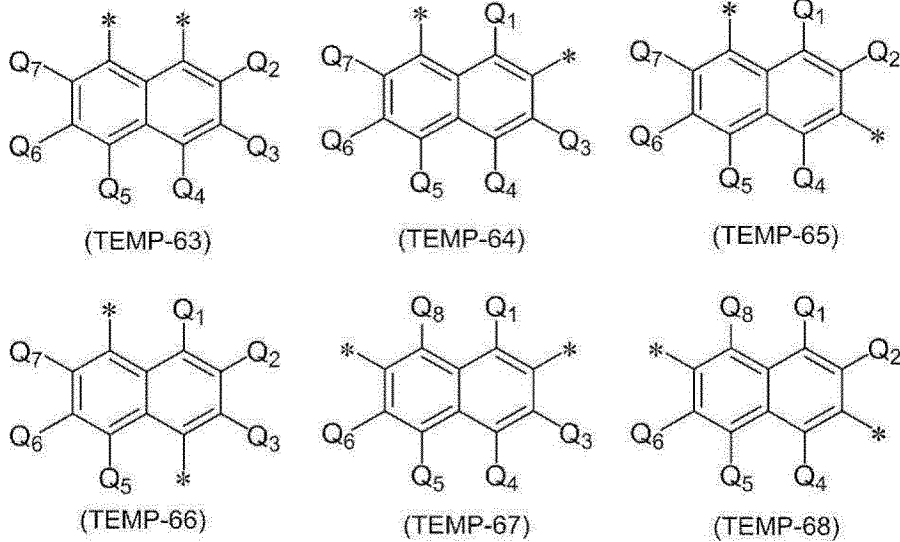
20

30

40

50

【化 1 5】



10

【0089】

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

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

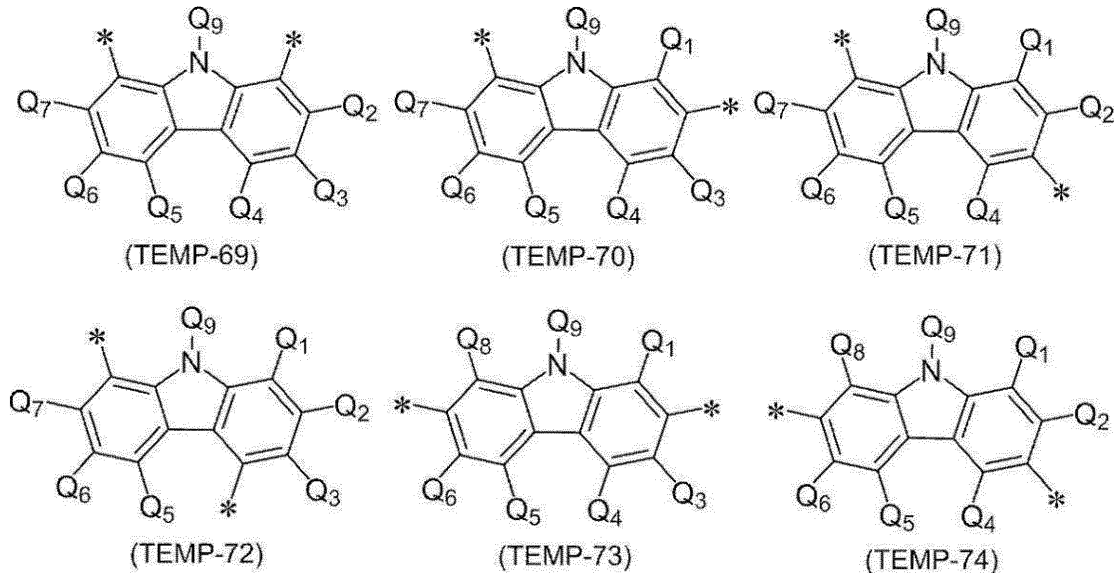
20

【0090】

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。

【0091】

【化 1 6】



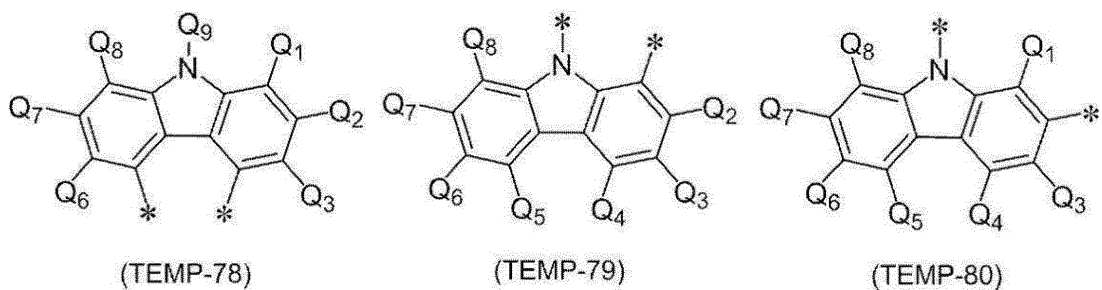
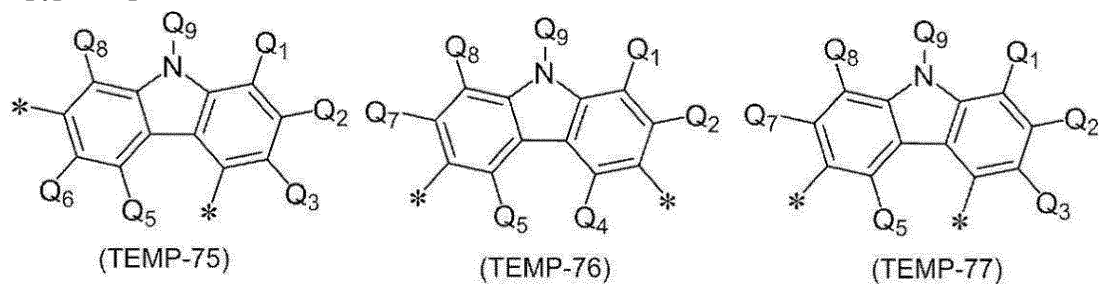
30

40

【0092】

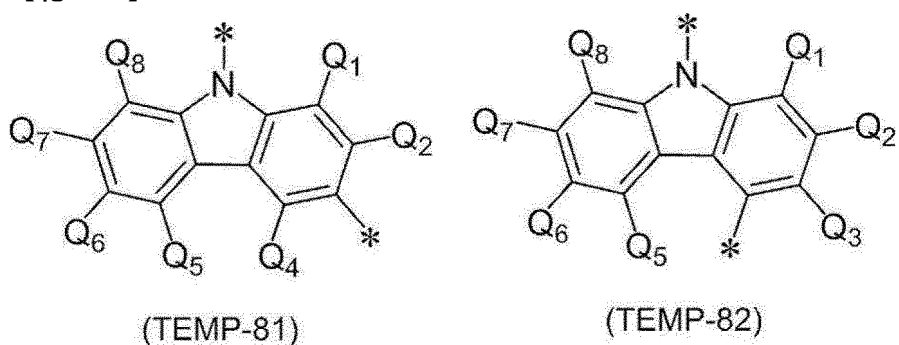
50

【化 1 7】



【 0 0 9 3】

【化 1 8】

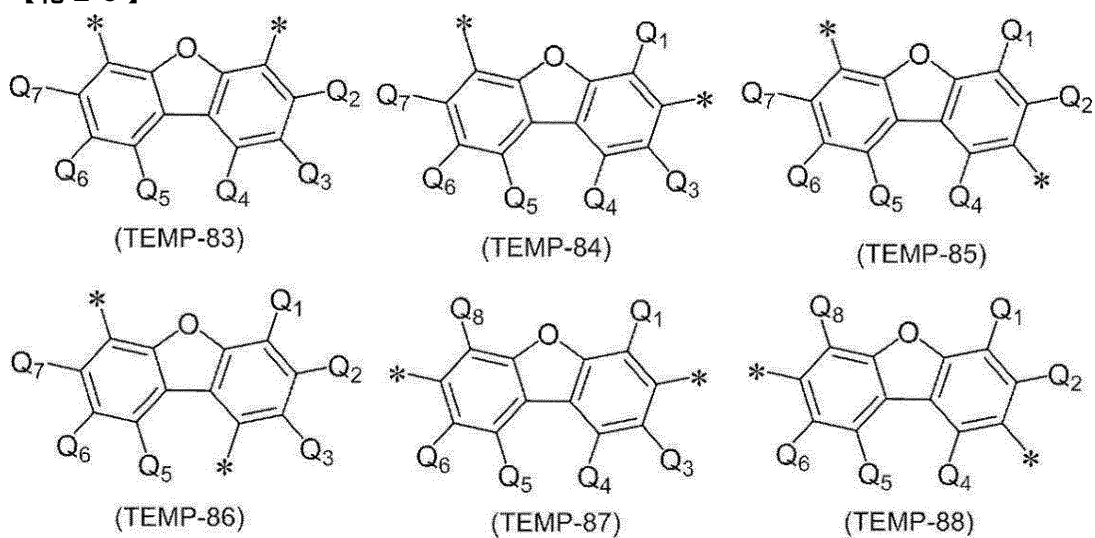


【 0 0 9 4】

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

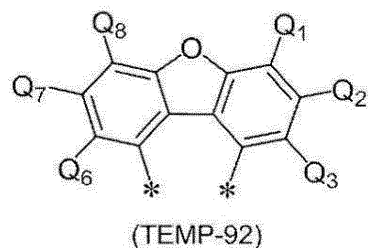
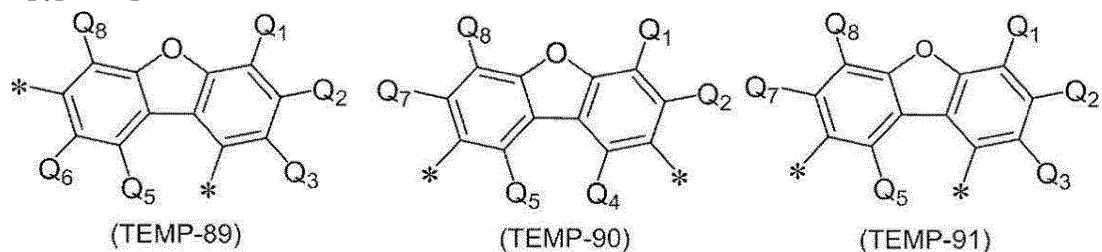
【 0 0 9 5】

【化 1 9】



【 0 0 9 6】

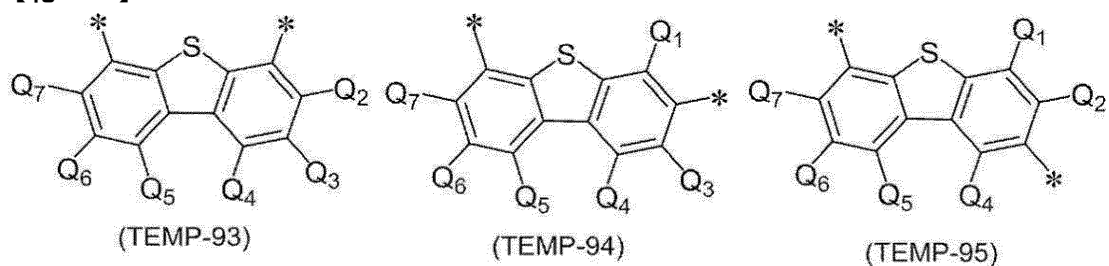
【化 2 0】



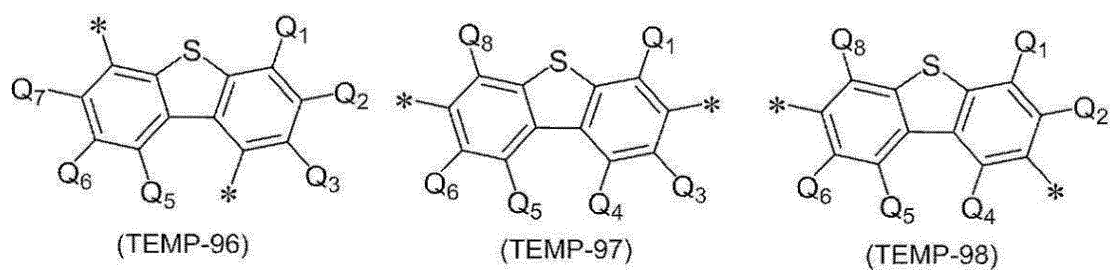
10

【 0 0 9 7】

【化 2 1】



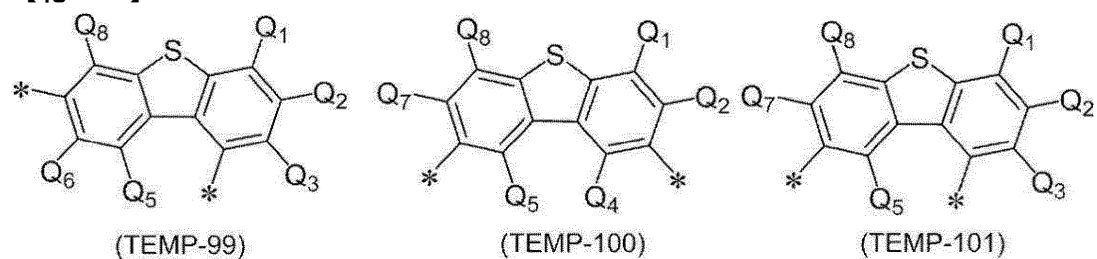
20



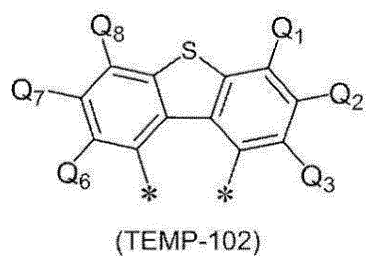
30

【 0 0 9 8】

【化 2 2】



40



【 0 0 9 9】

50

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

【0100】

以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

【0101】

・「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。

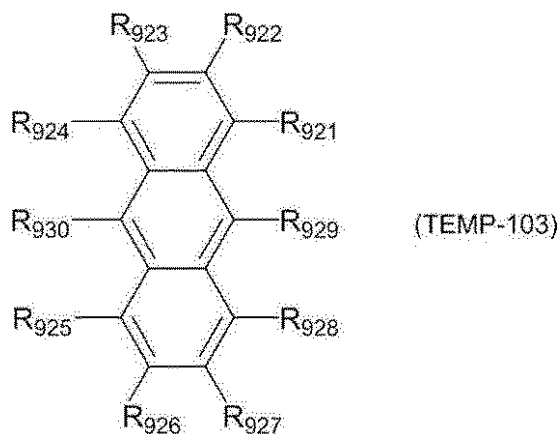
10

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。

【0102】

20

【化23】



30

【0103】

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

40

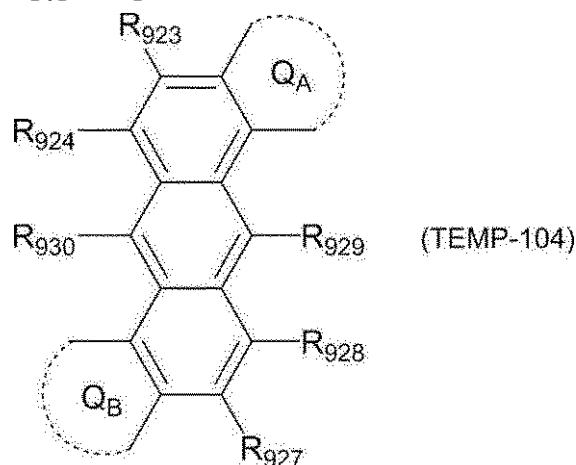
【0104】

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

【0105】

50

【化 2 4】



10

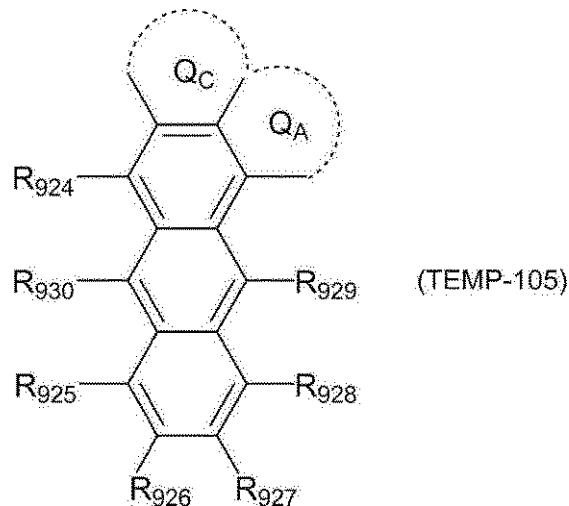
【0106】

「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。

20

【0107】

【化 2 5】



30

【0108】

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

40

50

【0109】

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

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

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

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

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

【0110】

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。

【0111】

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。

【0112】

・「置換もしくは無置換の」という場合の置換基

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

無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、
無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、
無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、
— Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃)、
— O — (R₉₀₄)、
— S — (R₉₀₅)、
— N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、
ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、
無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、及び
無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基
からなる群から選択される基等であり、

ここで、R₉₀₁ ～ R₉₀₇ は、それぞれ独立に、
水素原子、

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

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

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

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

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

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

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

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

【0113】

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

【0114】

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。

【0115】

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。

10

20

30

40

50

【0116】

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。

【0117】

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

10

【0118】

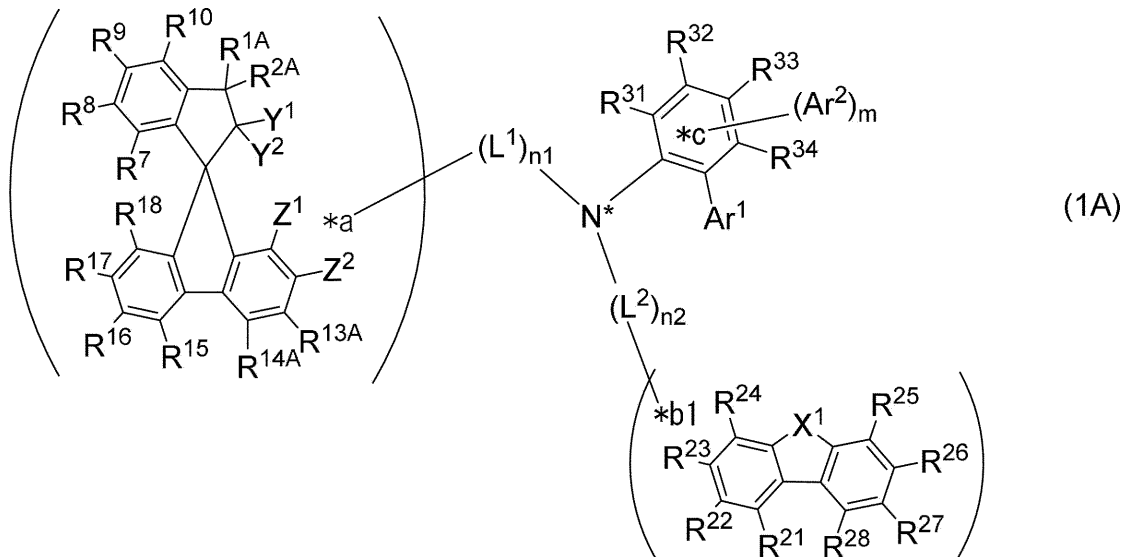
以下、本発明の化合物を説明する。

本発明の一態様に係る化合物は下記式(1A)又は式(1B)で表される。

ただし、以下、式(1A)及び後述する式(1A)に含まれる各式で表される本発明の化合物を単に“化合物(1A)”、“発明化合物(1A)”又は“第1の発明化合物”と称することがある。また、式(1B)及び後述する式(1B)に含まれる各式で表される本発明の化合物を単に“化合物(1B)”、“発明化合物(1B)”又は“第2の発明化合物”と称することがある。さらに、上記第1及び第2の発明化合物を総称して単に“発明化合物”と称することがある。

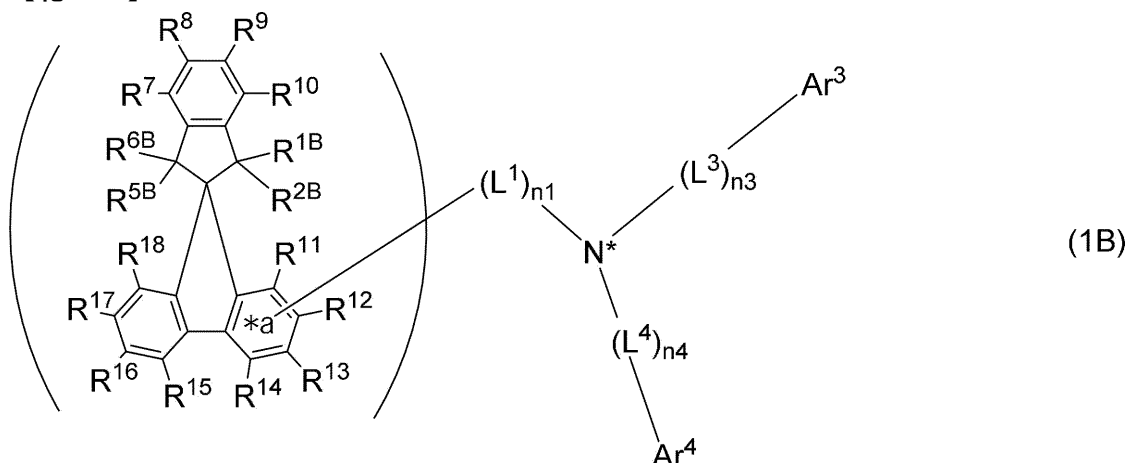
20

【化26】



30

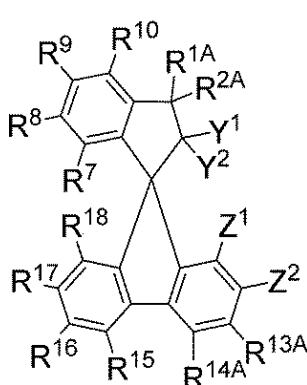
【化27】



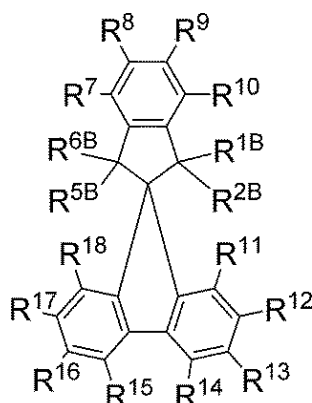
【0119】

以下、式(1A)及び後述する式(1A)に含まれる各式中の記号、及び、式(1B)及び後述する式(1B)に含まれる各式中の記号を説明する。なお、同じ記号は同じ意味を有する。また、本明細書において、以下に示すように、式(1A)において、*aに結合する部分構造を「部分構造A」と称することがある。また、式(1B)において、*aに結合する部分構造を「部分構造B」と称することがある。

【化28】



部分構造A



部分構造B

【0120】

<化合物(1A)>

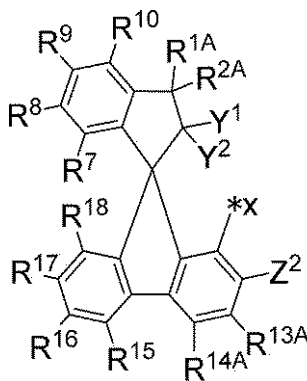
式(1A)中、N*は中心窒素原子である。

【0121】

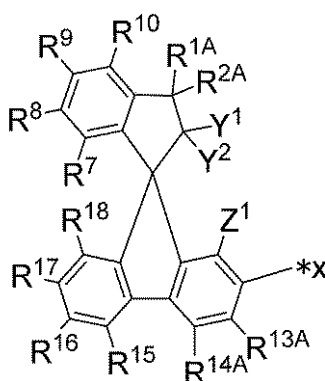
式(1A)中、Z¹及びZ²から選択される一つは、*aに結合する単結合であり、好ましくはZ²が*aに結合する単結合である。

別言すれば、上記式(1A)中の部分構造Aは、下記式(1x-1)又は(1x-2)で表され、好ましくは下記式(1x-2)で表される。部分構造Aが下記式(1x-2)で表される場合、化合物(1A)は、後述する式(1A-1)で表される。

【化29】



(1x-1)



(1x-2)

【0122】

式(1x-1)～(1x-2)中、*xは*aへの結合位置を示す。Z¹及びZ²の詳細、及び他の記号は、以下で説明するとおりである。

【0123】

上記単結合ではないZ¹及びZ²、R^{13A}、R^{14A}、及びR¹⁵～R¹⁸、R⁷～R¹⁰は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形

成原子数 5～13 のヘテロアリール基（芳香族複素環基）であり、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 1～6 のアルキル基、環形成炭素数 6～12 のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

上記単結合ではない Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記単結合ではない Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、及び R^{14A} は、互いに結合して環を形成しない。

$R^7 \sim R^{10}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

$R^{15} \sim R^{18}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

10

【0124】

上記置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキル基の無置換のアルキル基は、例えば、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、又はヘキシル基であり；

好ましくは、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、又はペンチル基であり；

より好ましくは、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、又は *t*-ブチル基であり；

さらに好ましくは、メチル基、エチル基、イソプロピル基又は *t*-ブチル基であり；

20

特に好ましくはメチル基である。

【0125】

上記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基の無置換のアリール基は、例えば、

フェニル基、ビフェニル基、又はナフチル基であり；

好ましくは、フェニル基、2-、3-、又は 4-ビフェニル基、又は、1-又は 2-ナフチル基であり；

特に好ましくは、フェニル基である。

【0126】

上記置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基は、例えば、

30

ピロリル基、フリル基、チエニル基、ピリジル基、イミダゾピリジル基、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、イミダゾリル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、ピラゾリル基、イソオキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、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、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、インダゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、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、ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基、以下同様）、イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基、以下同様）、ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基、以下同様）、又はカルバゾリル基（9-カルバゾリル基、又は、1-、2-、3-又は 4-カルバゾリル基を含む。以下、同様。）であり；

40

好ましくは、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、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチオフェニル基、ジベンゾチオフェニル基、又はカルバゾリル基であり、

より好ましくは、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、又はカルバゾリル基である。

【0127】

式 (1A) 中、 R^{1A} 及び R^{2A} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基

50

、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリアル基であり、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1～6のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリアル基であり、より好ましくは水素原子である。

R^1A 及び R^2A が水素原子であってもよい。

R^1A 及び R^2A は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

【0128】

上記置換もしくは無置換の炭素数1～30、好ましくは炭素数1～6のアルキル基の無置換のアルキル基は、例えば、

メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、ノニル基、デシル基、ウンデシル基、又はドデシル基であり；

好ましくは、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、又はペンチル基であり；

より好ましくは、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、又は*t*-ブチル基であり；

さらに好ましくは、メチル基、エチル基、イソプロピル基又は*t*-ブチル基であり；

特に好ましくはメチル基である。

【0129】

上記置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30、好ましくは6～18、より好ましくは6～12のアリアル基の無置換のアリアル基は、例えば、

フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、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、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾクリセニル基、フルオレニル基、フルオランテニル基、ペリレニル基、又はトリフェニレニル基であり；

好ましくは、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、又は、ナフチル基であり；

より好ましくは、フェニル基、2-、3-、又は4-ビフェニル基、2-、3-、又は4-*o*-ターフェニル基、2-、3-、又は4-*m*-ターフェニル基、2-、3-、又は4-*p*-ターフェニル基、又は、1-又は2-ナフチル基であり；

さらに好ましくは、フェニル基、2-、3-、又は4-ビフェニル基、又は、1-又は2-ナフチル基であり；

特に好ましくは、フェニル基である。

【0130】

上記置換もしくは無置換の環形成原子数5～30、好ましくは5～20、より好ましくは5～13のヘテロアリアル基は、例えば、

ピロリル基、フリル基、チエニル基、ピリジル基、イミダゾピリジル基、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、イミダゾリル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、ピラゾリル基、イソオキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、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、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、インダゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基、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、ナフトベンゾフラニル基、ジベンゾフラニル基、ベンゾチオフエニル基（ベンゾチエニル基、以下同様）、イソベンゾチオフエニル基（イソベンゾチエニル基、以下同様）、ナフトベンゾチオフエニル基（ナフトベンゾチエニル基、以下同様）、ジベンゾチオフエニル基（ジベンゾチエニル基、以下同様）、又はカルバゾリル基（9-カルバゾリル基、又は、1-、2-、3-又は4-カルバゾリル基を含む。以下、同様。）であり；

好ましくは、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、ジ

10

20

30

40

50

ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、ジベンゾチオフェニル基、又はカルバゾリル基であり、

より好ましくは、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、又はカルバゾリル基である。

【0131】

式(1A)中、 Y^1 及び Y^2 は、水素原子である。

【0132】

式(1A)中、 L^1 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基であり、好ましくは、置換もしくは無置換のフェニレン基、置換もしくは無置換のナフチレン基、又は置換もしくは無置換のビフェニレン基であり、好ましくは置換もしくは無置換のフェニレン基、又は置換もしくは無置換のビフェニレン基であり、より好ましくは置換もしくは無置換のフェニレン基である。

10

【0133】

上記フェニレン基は、*o*-フェニレン基、*m*-フェニレン基、又は*p*-フェニレン基であり、*p*-フェニレン基が好ましい。

上記ビフェニレン基は、4, 2'-ビフェニレン基、4, 3'-ビフェニレン基、4, 4'-ビフェニレン基、3, 2'-ビフェニレン基、3, 3'-ビフェニレン基、又は2, 2'-ビフェニレン基であり、好ましくは4, 2'-ビフェニレン基、4, 3'-ビフェニレン基、4, 4'-ビフェニレン基、又は3, 3'-ビフェニレン基であり、より好ましくは4, 4'-ビフェニレン基である。

20

上記ナフチレン基は、好ましくは1, 4-ナフチレン基、2, 6-ナフチレン基、1, 5-ナフチレン基、又は1, 8-ナフチレン基である。

【0134】

アリーレン基である L^1 の置換基は、無置換の炭素数1～6のアルキル基及び環形成炭素数6～12のアリール基から選択され、置換基同士で結合せず環を形成しない。

上記置換基である無置換の炭素数1～6のアルキル基の詳細、及び、上記置換基である無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細は、式(1A)の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

【0135】

式(1A)中、 n_1 は、0又は1である。

30

n_1 が0のとき、 Z^1 及び Z^2 から選択される一つが、中心窒素原子 N^* に結合する。

【0136】

式(1A)中、 X^1 は、酸素原子、硫黄原子、又は $=CR^A R^B$ であり、好ましくは酸素原子、又は $=CR^A R^B$ であり、より好ましくは酸素原子である。

R^A 、 R^B 、及び $R^{21} \sim R^{28}$ から選択される一つは、*b1に結合する単結合であるか、又は R^A 及び R^B から選択される一つは*b1に結合する2価の基であり、好ましくは、 R^{22} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{27} 、 R^C 、及び R^D から選択される一つが*b1に結合する単結合であるか、又は R^A 及び R^B から選択される一つが*b1に結合する2価の基である。

X^1 が $=CR^A R^B$ である場合、化合物(1A)は後述する式(1A-2)で表される。

40

【0137】

上記単結合ではなく、上記*b1に結合する2価の基ではない R^A 及び R^B は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、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1～6のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

上記単結合ではなく、上記*b1に結合する2価の基ではない R^A 及び R^B が水素原子であってもよい。

R^A 及び R^B が表す置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは

50

無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 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 ～ 30 のヘテロアリール基の詳細は、式 (1A) の R^{1A} 及び R^{2A} に関して記載したとおりである。

R^A 及び R^B が表す上記 *b1 に結合する 2 価の基は、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 30 のアルキレン基、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 のヘテロアリーレン基である。

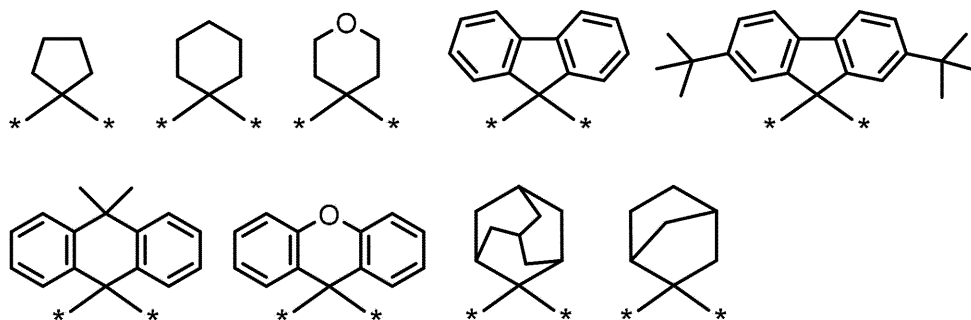
R^A 及び R^B が表す上記アルキレン基、アリーレン基、及びヘテロアリーレン基としては、 R^A 及び R^B が表す上記アルキル基、アリール基、及びヘテロアリール基に関して記載した各基の 2 価の残基が挙げられ、好ましいものについても同様である。

【0138】

上記単結合ではなく、上記 *b1 に結合する 2 価の基ではない R^A 及び R^B は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

上記単結合ではなく、上記 *b1 に結合する 2 価の基ではない R^A 及び R^B が互いに結合して形成する環は、置換もしくは無置換のスピロ環である。上記スピロ環は、炭化水素環又は複素環であり、単環、縮合環、橋かけビシクロ環、橋かけトリシクロ環から選ばれる。置換もしくは無置換のスピロ環の例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。*はフルオレン骨格のベンゼン環への結合位置を示す。

【化30】



【0139】

一態様において、化合物 (1A) の L^2 に結合する部分構造は、下記式 (1-a1) ～ (1-a5) のいずれかで表される。

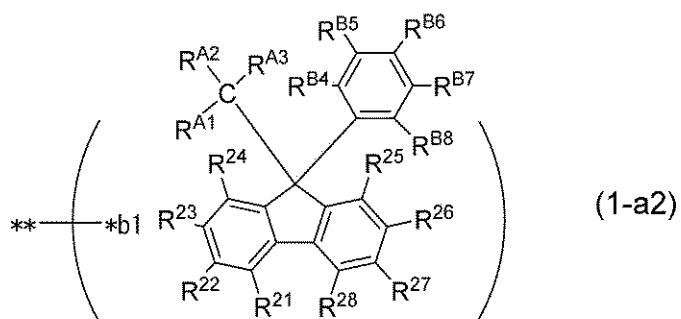
$$\begin{array}{c}
 \text{R}^{\text{A}2} \quad \text{R}^{\text{A}3} \quad \text{R}^{\text{B}1} \quad \text{R}^{\text{B}2} \\
 \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \\
 \text{C} \quad \text{C} \\
 \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \\
 \text{R}^{\text{A}1} \quad \text{R}^{\text{B}3}
 \end{array}$$

$$\begin{array}{c}
 \text{R}^{24} \quad \text{R}^{25} \\
 \diagdown \quad \diagup \\
 \text{C} \quad \text{C} \\
 \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \\
 \text{R}^{23} \quad \text{R}^{26} \\
 \text{R}^{22} \quad \text{R}^{21} \quad \text{R}^{28} \quad \text{R}^{27}
 \end{array}$$

$$\text{**} \text{---} \text{*b1} \text{---} \text{(1-a1)}$$

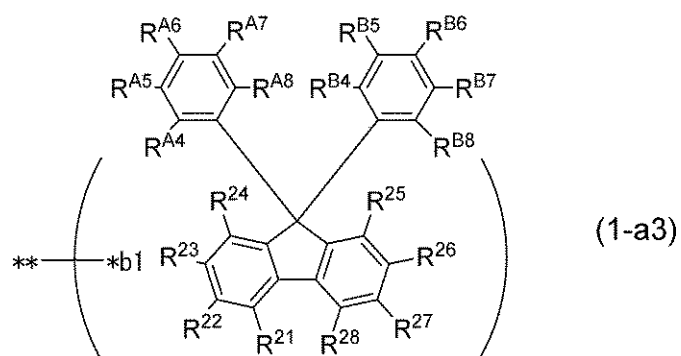
(1-a1)

10



(1-a2)

20

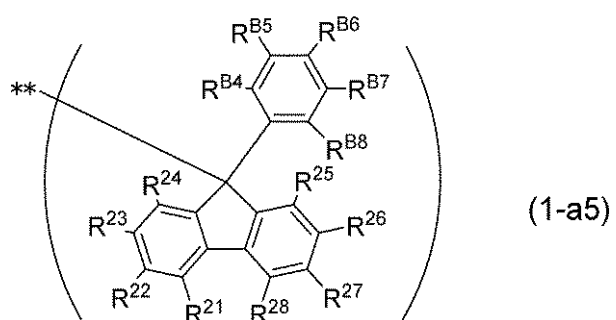


(1-a3)

(1-a4)

(1-a4)

30



(1-a5)

40

式 (1-a1) ~ (1-a5) 中、**は L^2 への結合位置を表す。

50

$R^{21} \sim R^{28}$ 、及び $*b1$ は、上記式(1A)において定義したとおりである。

式(1-a1)～(1-a5)中、 $R^{A1} \sim R^{A3}$ 、 $R^{A4} \sim R^{A8}$ 、 $R^{B1} \sim R^{B3}$ 、及び $R^{B4} \sim R^{B8}$ は水素原子である。

【0141】

上記単結合ではない $R^{21} \sim R^{28}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～13のヘテロアリール基であり、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1～6のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

上記単結合ではない $R^{21} \sim R^{28}$ の全てが水素原子であってもよい。

$R^{21} \sim R^{28}$ が表す置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～13のヘテロアリール基の詳細は、式(1A)の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

【0142】

式(1A)中、 $R^{21} \sim R^{24}$ から選択される一つが $*b1$ に結合する単結合である場合、上記単結合ではない $R^{21} \sim R^{24}$ は互いに結合して環を形成せず、また、 $R^{25} \sim R^{28}$ は互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

$R^{25} \sim R^{28}$ から選択される一つが $*b1$ に結合する単結合である場合、上記単結合ではない $R^{25} \sim R^{28}$ は互いに結合して環を形成せず、また、 $R^{21} \sim R^{24}$ は互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

【0143】

式(1A)中、 L^2 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基である。

L^2 が表す置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基の詳細は、式(1A)の L^1 に関して記載したとおりである。

【0144】

式(1A)中に L^1 と L^2 が存在する場合、両者は同一であってもよいし、互いに異なってもよい。 L^1 と L^2 のうち一方のみが存在してもよく(つまり、 m 又は n の一方が0で他方が1であってもよく)、 L^1 と L^2 の両方が存在しなくてもよい(つまり、 m 及び n が0であってもよい)。

好ましくは、化合物(1A)における上記「 $-(L^1)_{n1}-$ 」と「 $-(L^2)_{n2}-$ 」の組合せは、以下に示す組合せ[k1]～[k4]のいずれかで表される。

- ・ [k1] : 単結合／単結合
- ・ [k2] : 単結合／フェニレン
- ・ [k3] : フェニレン／単結合
- ・ [k4] : フェニレン／フェニレン

【0145】

式(1A)中、 $n2$ は、0又は1である。

$n2$ が0のとき、 $R^{21} \sim R^{28}$ から選択される一つが、中心窒素原子 N^* に結合する。

一態様においては、 $n1$ と $n2$ がともに0であり、他の態様においては、 $n1$ と $n2$ がともに1であり、さらに他の態様においては、 $n1$ が0、 $n2$ が1であり、さらに他の態様においては、 $n1$ が1、 $n2$ が0である。

【0146】

式(1A)中、 Ar^1 は、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、好ましくは、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

Ar^1 が表す置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基の詳細は、式(1A)の R^{1A} 及

び R^{2A} に関して記載したとおりである。

【0147】

式(1A)中、 Ar^2 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であり、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基であり、より好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基である。

Ar^1 が表す置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基の詳細は、式(1A)の R^{1A} 及び R^{2A} に関して記載したとおりである。

【0148】

式(1A)中、 m は、0、1、2、3、又は4であり、好ましくは0、1、2、又は3であり、好ましくは0、1、又は2であり、より好ましくは0又は1である。但し、 Ar^1 が水素原子のとき、 m は0である。

m が1～4の場合、 $R^{31} \sim R^{34}$ から選択される一つ～四つは、*cに結合する単結合である。 m が2～4の場合、複数存在する Ar^2 は同じでもよいし、互いに異なっているもよい。

【0149】

式(1A)中、上記単結合ではない $R^{31} \sim R^{34}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～13のヘテロアリール基であり、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1～6のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

上記単結合ではない $R^{31} \sim R^{34}$ の全てが水素原子であってもよい。

$R^{31} \sim R^{34}$ が表す置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～13のヘテロアリール基の詳細は、式(1A)の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

【0150】

式(1A)中、水素原子ではない Ar^1 、及び水素原子ではない $R^{34} \sim R^{24}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

【0151】

<化合物(1B)>

式(1B)中、 N^* は中心窒素原子である。

【0152】

式(1B)中、 $R^{11} \sim R^{14}$ から選択される一つは、*aに結合する単結合であり、好ましくは $R^{12} \sim R^{14}$ から選択される一つが*aに結合する単結合であり、より好ましくは、 R^{12} 又は R^{14} が*aに結合する単結合であり、さらに好ましくは、 R^{12} が*aに結合する単結合である。

別言すれば、上記式(1B)中の部分構造Bは、下記式(1y-1)～(1y-4)のいずれかで表され、好ましくは下記式(1y-2)～(1y-4)のいずれかで表され、より好ましくは下記式(1y-2)又は式(1y-4)で表され、さらに好ましくは下記式(1y-2)で表される。

10

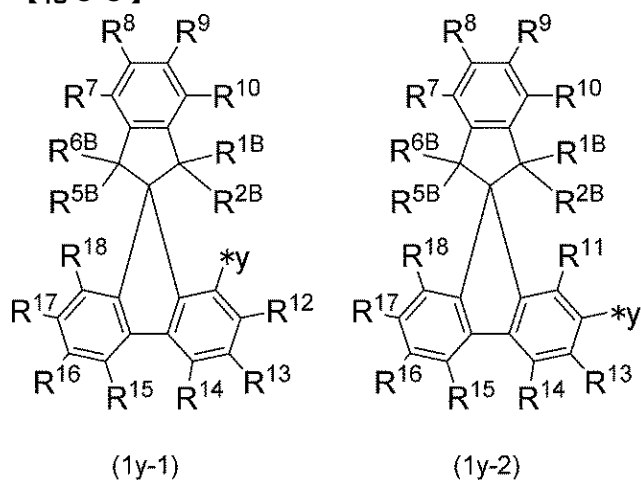
20

30

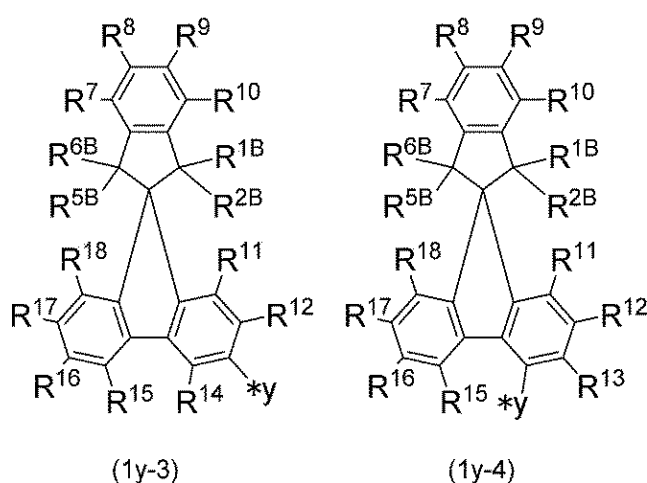
40

50

【化 3 3】



10



20

【 0 1 5 3 】

式 (1y-1) ~ (1y-4) 中、*y は *a への結合位置を示す。R¹¹ ~ R¹⁴ の詳細、及び他の記号は、以下で説明するとおりである。

30

【 0 1 5 4 】

上記単結合ではない R¹¹ ~ R¹⁴、R¹⁵ ~ R¹⁸、及び R⁷ ~ R¹⁰ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、又は、無置換の環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基であり、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 ~ 6 のアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

上記単結合ではない R¹¹ ~ R¹⁴、R¹⁵ ~ R¹⁸、及び R⁷ ~ R¹⁰ の全てが水素原子であってもよい。

上記単結合ではない R¹¹ ~ R¹⁴ は、互いに結合して環を形成しない。

40

R⁷ ~ R¹⁰ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

R¹⁵ ~ R¹⁸ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

R¹¹ ~ R¹⁴ が表す置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、及び置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基の詳細は、式 (1A) の Z¹ 及び Z²、R^{13A}、R^{14A}、及び R¹⁵ ~ R¹⁸、R⁷ ~ R¹⁰ に関して記載したとおりである。

【 0 1 5 5 】

式 (1B) 中、R^{1B}、R^{2B}、R^{5B}、及び R^{6B} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6

50

～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、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1～6のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、及び R^{6B} の全てが水素原子であってもよい。

R^{1B} 及び R^{2B} は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

R^{5B} 及び R^{6B} は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、及び R^{6B} が表す置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基の詳細は、式(1A)の R^{1A} 及び R^{2A} に関して記載したとおりである。

10

【0156】

式(1B)中、 L^3 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基である。

上記置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基の詳細は、式(1A)の L^1 に関して記載したとおりである。

【0157】

式(1B)中、 n_3 は、0又は1である。

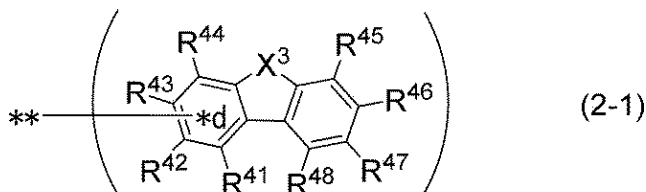
n_3 が0のとき、 Ar^3 が中心窒素原子 N^* に結合する。

【0158】

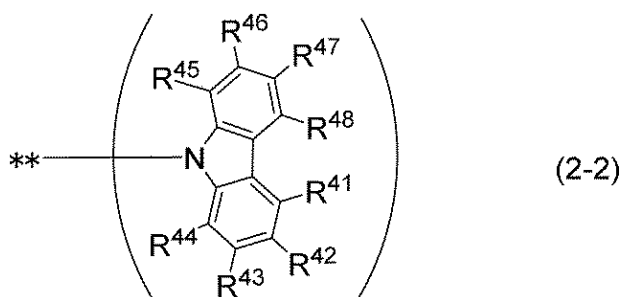
式(1B)中、 Ar^3 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、下記式(2-1)で表される基、又は下記式(2-2)で表される基であり、好ましくは、環形成炭素数6～18のアリール基、下記式(2-1)で表される基、又は下記式(2-2)で表される基であり、より好ましくは環形成炭素数6～12のアリール基である。

20

【化34】



30



40

【0159】

式(2-1)中、**は、 L^3 への結合位置を表す。

【0160】

式(2-1)中、 X^3 は、酸素原子又は硫黄原子であり、好ましくは酸素原子である。

【0161】

式(2-1)中、 R^{41} ～ R^{44} から選択される一つは、*dに結合する単結合であり、好ましくは R^{41} 、 R^{42} 、及び R^{44} から選択される一つが、*dに結合する単結合であり、より好ましくは R^{41} 又は R^{44} が、*dに結合する単結合であり、さらに好ましくは、 R^{44} が、*dに結合する単結合である。

50

上記単結合ではない $R^{41} \sim R^{44}$ 、 $R^{45} \sim R^{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基であり、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 1～6 のアルキル基、環形成炭素数 6～12 のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

上記単結合ではない $R^{41} \sim R^{44}$ 、 $R^{45} \sim R^{48}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記単結合ではない $R^{41} \sim R^{44}$ のうち隣り合う一対の基、及び $R^{45} \sim R^{48}$ のうち隣り合う一対の基は、それぞれ互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

$R^{41} \sim R^{48}$ が表す置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基の詳細は、式 (1A) の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

【0162】

式 (2-2) 中、** は、 L^3 への結合位置を表す。

【0163】

式 (2-2) 中、 $R^{41} \sim R^{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基であり、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 1～6 のアルキル基、環形成炭素数 6～12 のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

$R^{41} \sim R^{48}$ の全てが水素原子であってもよい。

$R^{41} \sim R^{48}$ のうち隣り合う一対の基は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

$R^{41} \sim R^{48}$ が表す置換もしくは無置換の炭素数 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基の詳細は、式 (1A) の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

Ar^3 が上記式 (2-2) で表される場合、 n_3 は 1 であることが好ましい。

【0164】

式 (1B) 中、 L^4 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリーレン基である。

L^4 が表す置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリーレン基の詳細は、式 (1A) の L^1 に関して記載したとおりである。

【0165】

式 (1B) 中、 n_4 は、0 又は 1 である。

n_4 が 0 のとき、 Ar^4 が中心窒素原子 N^* に結合する。

一態様においては、 n_1 、 n_3 、 n_4 が全て 0 であり、他の態様においては、 n_1 、 n_3 、 n_4 が全て 1 であり、さらに他の態様においては、 n_1 及び n_3 が 0、 n_4 が 1 であり、さらに他の態様においては、 n_1 及び n_4 が 0、 n_3 が 1 であり、さらに他の態様においては、 n_3 及び n_4 が 0、 n_1 が 1 であり、さらに他の態様においては、 n_1 が 0、 n_3 及び n_4 が 1 であり、さらに他の態様においては、 n_3 が 0、 n_1 及び n_4 が 1 であり、さらに他の態様においては、 n_4 が 0、 n_1 及び n_3 が 1 である。

【0166】

式 (1B) 中、 Ar^4 は、下記式 (3-1) で表される基、又は下記式 (3-2) で表される基である。

10

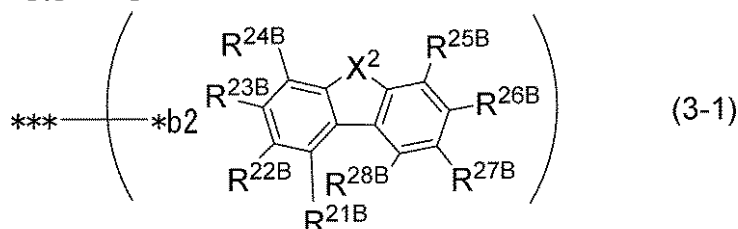
20

30

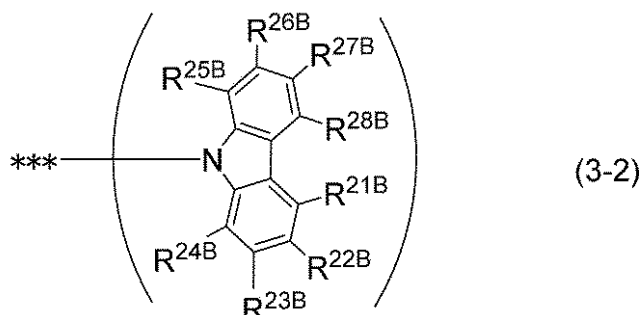
40

50

【化 3 5】



(3-1)



(3-2)

【0167】

式(3-1)中、***は、L⁴への結合位置を表す。

【0168】

式(3-1)中、X²は、酸素原子、硫黄原子、又は=C^{R^C}R^Dであり、好ましくは酸素原子、又は=C^{R^C}R^Dであり、より好ましくは酸素原子である。

【0169】

式(3-1)中、R^{21B}~R^{24B}、R^C、及びR^Dから選択される一つは、*b2に結合する単結合であるか、又はR^C及びR^Dから選択される一つは*b2に結合する2価の基である。

X²が、酸素原子又は硫黄原子のとき、R^{21B}~R^{28B}から選択される一つが*b2に結合する単結合であり、好ましくはR^{21B}、R^{22B}、R^{24B}、R^{25B}、R^{27B}、及びR^{28B}から選択される一つが*b2に結合する単結合であり、より好ましくはR^{21B}、R^{24B}、R^{25B}、及びR^{27B}から選択される一つが*b2に結合する単結合であり、さらに好ましくはR^{24B}又はR^{25B}が*b2に結合する単結合である。

X²が、=C^{R^C}R^Dのとき、好ましくはR^{21B}~R^{23B}、R^{26B}~R^{28B}、R^C、及びR^Dから選択される一つが*b2に結合する単結合であるか、又はR^C及びR^Dから選択される一つは*b2に結合する2価の基であり、より好ましくはR^{23B}、R^{26B}、R^C、又はR^Dから選択される一つが*b2に結合する単結合であるか、又はR^C及びR^Dから選択される一つは*b2に結合する2価の基である。

上記単結合ではないR^{21B}~R^{24B}、R^{25B}~R^{28B}は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~13のヘテロアリール基であり、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1~6のアルキル基、環形成炭素数6~12のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

上記単結合ではないR^{21B}~R^{24B}、R^{25B}~R^{28B}の全てが水素原子であってもよい。

R^{21B}~R^{28B}が表す置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~12のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5~13のヘテロアリール基の詳細は、式(1A)のZ¹及びZ²、R^{13A}、R^{14A}、及びR¹⁵~R¹⁸、R⁷~R¹⁰に関して記載したとおりである。

【0170】

式(3-1)中、 $R^{21B} \sim R^{24B}$ から選択される一つが $*b2$ に結合する単結合である場合、前記単結合ではない $R^{21B} \sim R^{24B}$ は、互いに結合して環を形成せず、また、 $R^{25B} \sim R^{28B}$ は互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

$R^{25B} \sim R^{28B}$ から選択される一つが $*b2$ に結合する単結合である場合、前記単結合ではない $R^{25B} \sim R^{28B}$ は、互いに結合して環を形成せず、また、 $R^{21B} \sim R^{24B}$ は互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

【0171】

式(3-1)中、上記単結合ではなく、上記 $*b2$ に結合する2価の基ではない R^C 及び 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1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、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1～6のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

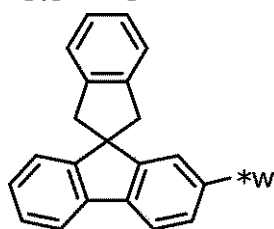
上記単結合ではなく、上記 $*b2$ に結合する2価の基ではない R^C 及び R^D が水素原子であってもよい。

上記単結合ではなく、上記 $*b2$ に結合する2価の基ではない R^C 及び R^D は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

R^C 及び R^D が表す置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基の詳細は、式(1A)の R^{1A} 及び R^{2A} に関して記載したとおりである。

但し、 R^C 及び R^D から選択される一つがアリール基である場合、両者が結合して、 R^C 及び R^D が結合しているフルオレン環とともに1', 3'-ジヒドロスピロ[フルオレン-9, 2'-インデン]を形成しない。別言すれば、 R^C 及び R^D は、互いに結合して下記式で表される構造を形成しない。なお、下記式において、 $*w$ はL4への結合位置を示す。また、下記式においてRは簡略化のため省略した。

【化36】



【0172】

式(3-1)中、 X^2 が酸素原子又は硫黄原子である場合、 $n4$ は1である。

【0173】

式(3-2)中、 $***$ は、L4への結合位置を表す。

【0174】

式(3-2)中、 $R^{21B} \sim R^{28B}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～13のヘテロアリール基であり、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1～6のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

$R^{21B} \sim R^{28B}$ の全てが水素原子であってもよい。

$R^{21B} \sim R^{24B}$ のうち隣り合う一対の基、及び $R^{25B} \sim R^{28B}$ のうち隣り合う一対の基は、それぞれ互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

$R^{21} \sim R^{28}$ が表す置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～13のヘテロアリール基の詳細は、式(1A)の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び

$R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

【0175】

式(3-2)中、 $*N^*$ 、 L^1 、 n_1 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ は式(1A)で規定したのと同義である。

Ar^4 が上記式(3-2)で表される場合、 n_4 は1であることが好ましい。

【0176】

式(1B)中に、 L^1 と L^2 と L^3 が存在する場合、三者は同一であってもよいし、互いに異なってもよいし、三者のうち二つが同一で他の一つが異なってもよい。

式(1B)中に、 L^1 と L^2 と L^3 のうちいずれか2つのみが存在してもよく(つまり、 n_1 、 n_3 、及び n_4 のうち二つが1で他の一つが0であってもよく)、この場合、存在する両者は同一であってもよいし、互いに異なってもよい。

式(1B)中に、 L^1 と L^2 と L^3 のうちいずれか1つのみが存在してもよく(つまり、 n_1 、 n_3 、及び n_4 のうち二つが0で他の一つが1であってもよく)、 $L^1 \sim L^3$ の全てが存在しなくてもよい(つまり、 n_1 、 n_3 、及び n_4 が0であってもよい)。

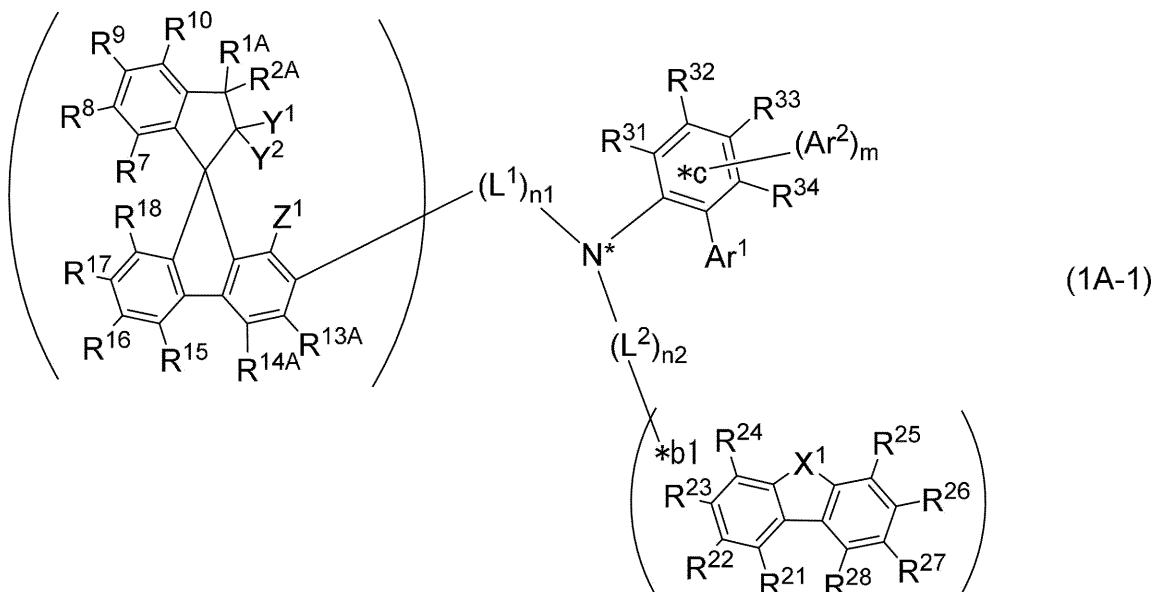
好ましくは、化合物(1A)における上記「 $-(L^1)_{n_1}-$ 」と「 $-(L^3)_{n_3}-$ 」と「 $-(L^4)_{n_4}-$ 」の組合せは、以下に示す組合せ[k11]～[k18]のいずれかで表される。

- ・ [k11] : 単結合／単結合／単結合
- ・ [k12] : 単結合／単結合／フェニレン
- ・ [k13] : 単結合／フェニレン／単結合
- ・ [k14] : フェニレン／単結合／単結合
- ・ [k15] : 単結合／フェニレン／フェニレン
- ・ [k16] : フェニレン／単結合／フェニレン
- ・ [k17] : フェニレン／フェニレン／単結合
- ・ [k18] : フェニレン／フェニレン／フェニレン

【0177】

好適な一態様において、上記化合物(1A)は、下記式(1A-1)で表される。

【化37】



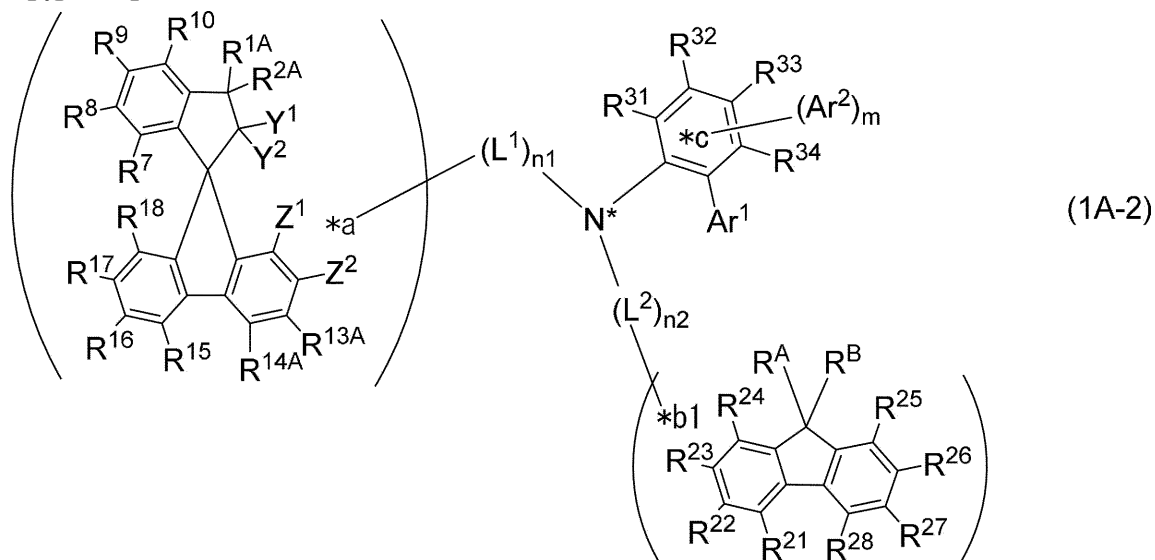
【0178】

式(1A-1)中、 R^{1A} 、 R^{2A} 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 Z^1 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^{21} \sim R^{28}$ 、 X^1 、 $R^{31} \sim R^{34}$ 、 N^* 、 Ar^1 、 Ar^2 、 L^1 、 L^2 、 $*b1$ 、 $*c$ 、 m 、 n_1 、及び n_2 は、上記式(1A)において定義したとおりである。

【0179】

一態様において、上記化合物（１Ａ）は、下記式（１Ａ－２）で表される。

【化３８】



10

【０１８０】

式（１Ａ－２）中、 R^{1A} 、 R^{2A} 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 Z^1 、 Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^{21} \sim R^{28}$ 、 R^A 、 R^B 、 $R^{31} \sim R^{34}$ 、 N^* 、 Ar^1 、 Ar^2 、 L^1 、 L^2 、 $*a$ 、 $*b1$ 、 $*c$ 、 m 、 $n1$ 、及び $n2$ は、前記式（１Ａ）において定義したとおりである。

20

【０１８１】

一態様において、式（１Ａ－２）中、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{27} 、及び R^{28} のうち一つが $*b1$ に結合する単結合であり、他の態様において、 R^{21} 、 R^{24} 、 R^{25} 、及び R^{28} のうち一つが $*b1$ に結合する単結合であり、さらに他の態様において、 R^{24} 又は R^{28} が $*b1$ に結合する単結合である。

【０１８２】

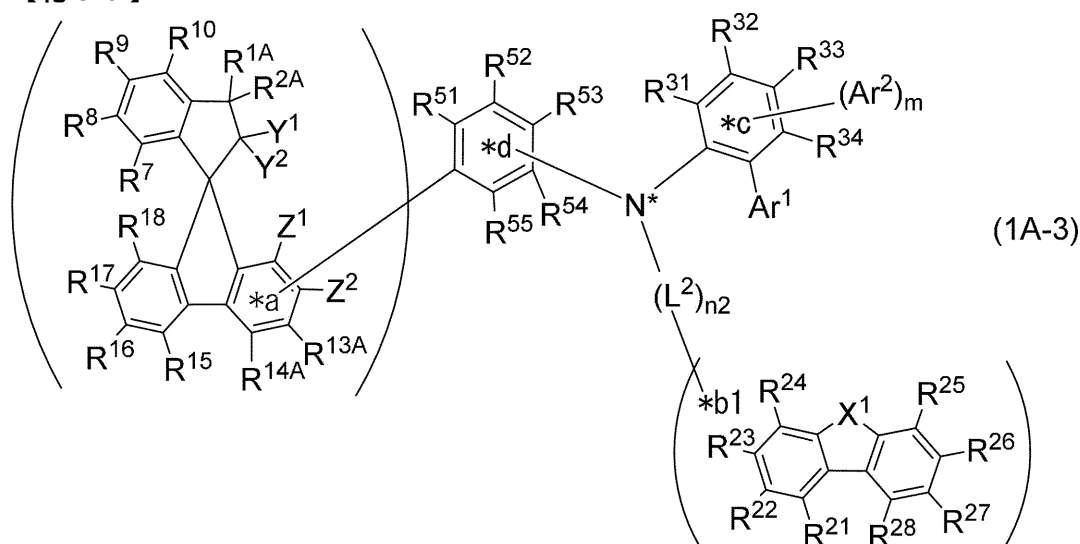
一態様において、化合物（１Ａ）が、上記式（１Ａ）、式（１Ａ－１）、又は式（１Ａ－２）で表され、 $n1$ が１のとき L^1 はフェニレン基であり、 $n2$ が１のとき L^2 はフェニレン基である。

30

【０１８３】

一態様において、上記化合物（１Ａ）は、下記式（１Ａ－３）～式（１Ａ－５）のいずれかで表される。

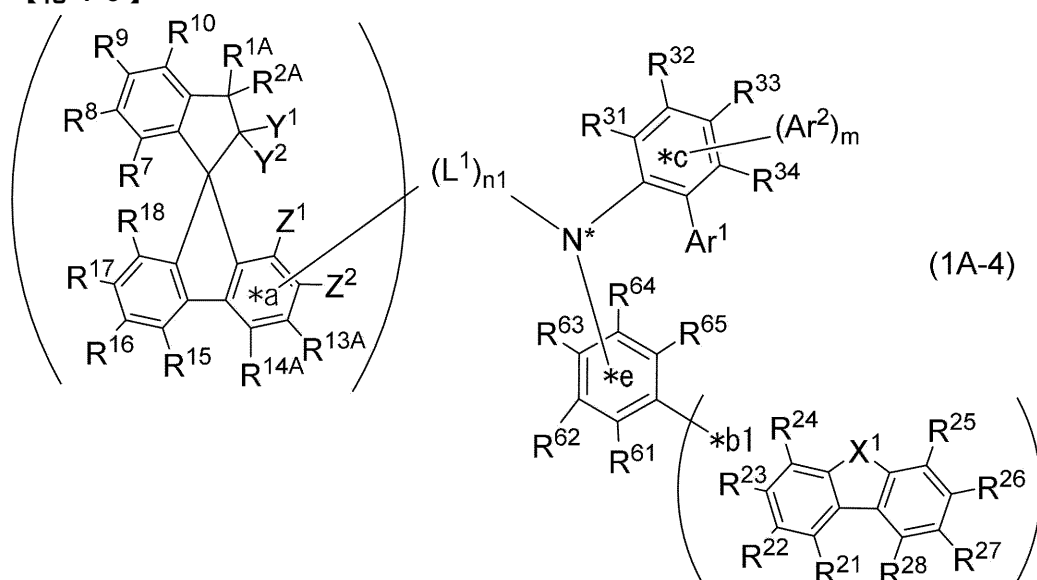
【化３９】



40

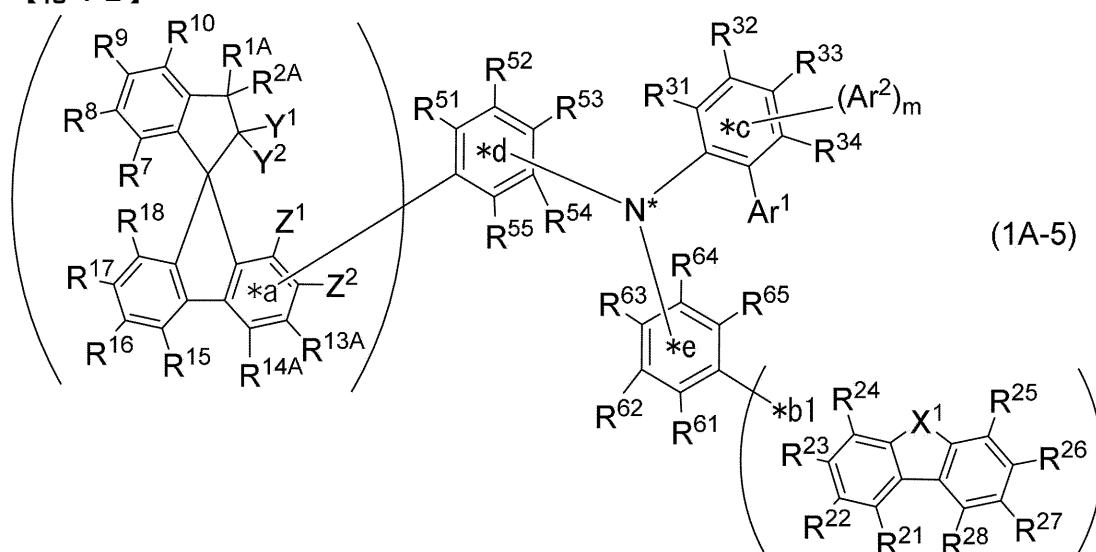
50

【化 4 0】



10

【化 4 1】



20

30

【0184】

式(1A-3)及び式(1A-5)中、 $R^{51} \sim R^{55}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1～6のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数6～12のアリール基であり、好ましくは水素原子である。但し、 $R^{51} \sim R^{55}$ から選択される一つは、*dに結合する単結合である。*dに結合する単結合ではない $R^{51} \sim R^{55}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記単結合ではない $R^{51} \sim R^{55}$ のうち隣り合う1組は、互いに結合せず環を形成しない。

40

式(1A-4)及び式(1A-5)中、 $R^{61} \sim R^{65}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1～6のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数6～12のアリール基であり、好ましくは水素原子である。但し、 $R^{61} \sim R^{65}$ から選択される一つは、*eに結合する単結合である。*eに結合する単結合ではない $R^{61} \sim R^{65}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記単結合ではない $R^{61} \sim R^{65}$ のうち隣り合う1組は、互いに結合せず環を形成しない。

【0185】

$R^{51} \sim R^{55}$ 、及び $R^{61} \sim R^{65}$ が表す、無置換の炭素数1～6のアルキル基、及び

50

無置換の環形成炭素数6～12のアリール基は、式(1A)の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

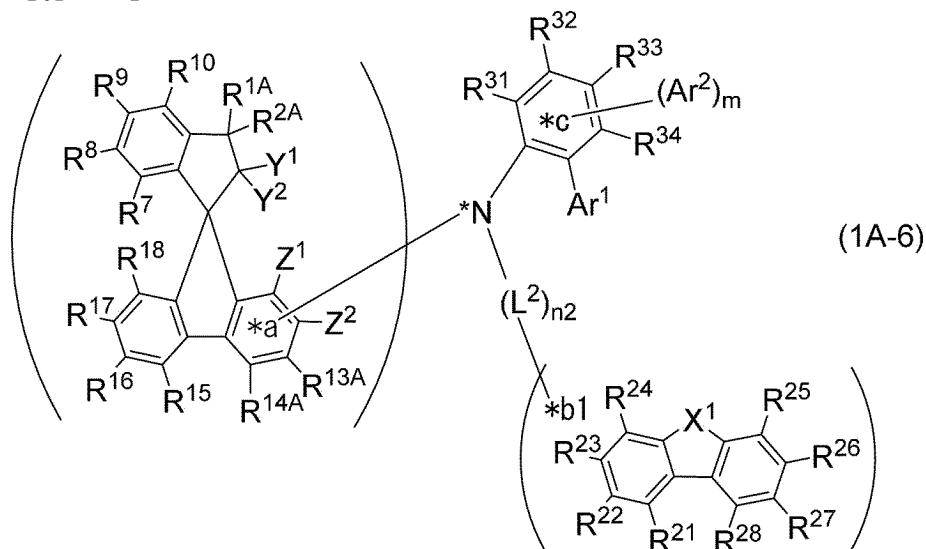
【0186】

式(1A-3)～式(1A-5)中、 R^{1A} 、 R^{2A} 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 Z^1 、 Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^{21} \sim R^{28}$ 、 X^1 、 $R^{31} \sim R^{34}$ 、 N^* 、 Ar^1 、 Ar^2 、 L^1 、 L^2 、 $*a$ 、 $*b1$ 、 $*c$ 、 m 、 $n1$ 、及び $n2$ は、前記式(1A)において定義したとおりである。

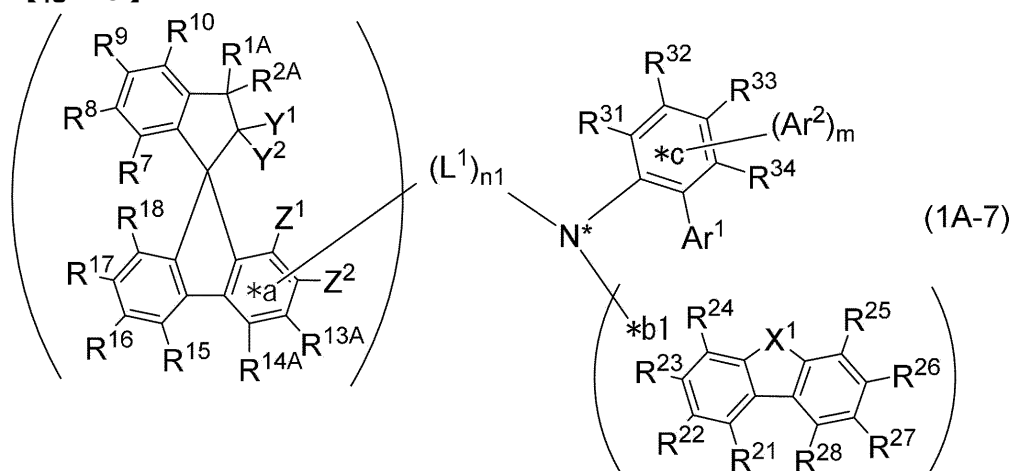
【0187】

一態様において、上記化合物(1A)は、下記式(1A-6)～式(1A-8)のいずれかで表される。

【化42】



【化43】



10

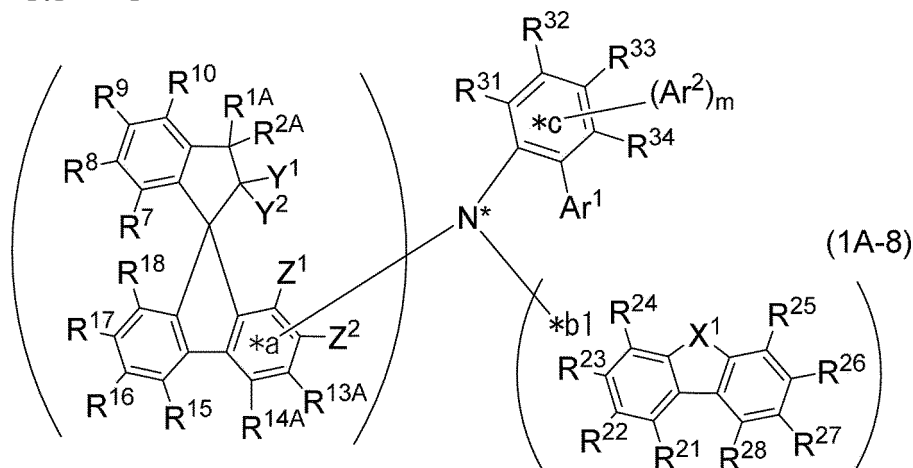
20

30

40

50

【化 4 4】



10

【0188】

式(1A-6)～(1A-8)中、 R^{1A} 、 R^{2A} 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 Z^1 、 Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^{21} \sim R^{28}$ 、 X^1 、 $R^{31} \sim R^{34}$ 、 N^* 、 Ar^1 、 Ar^2 、 L^1 、 L^2 、 $*a$ 、 $*b1$ 、 $*c$ 、 m 、 $n1$ 、及び $n2$ は、前記式(1A)において定義したとおりである。

【0189】

一態様において、上記化合物(1A)は、上記式(1A)、及び、式(1A-1)～式(1A-8)のいずれかで表され、

- ・ Ar^1 が水素原子であり、かつ m が0であるか、
- ・ Ar^1 が置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であり、かつ m が0であるか、又は、
- ・ Ar^1 が置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であり、かつ m が1である。

20

【0190】

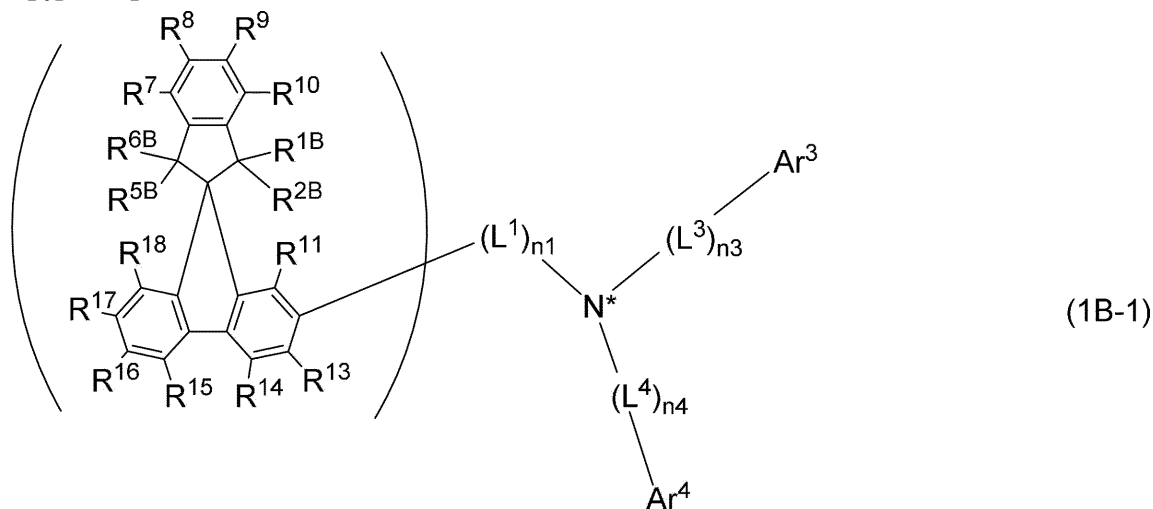
一態様において、上記化合物(1A)は、上記式(1A)、及び、式(1A-1)～式(1A-8)のいずれかで表され、 Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基である。

30

【0191】

一態様において、上記化合物(1B)は、下記式(1B-1)で表される。

【化 4 5】



40

【0192】

式(1B-1)中、 R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、 R^{6B} 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 R^{11} 、 $R^{13} \sim R$

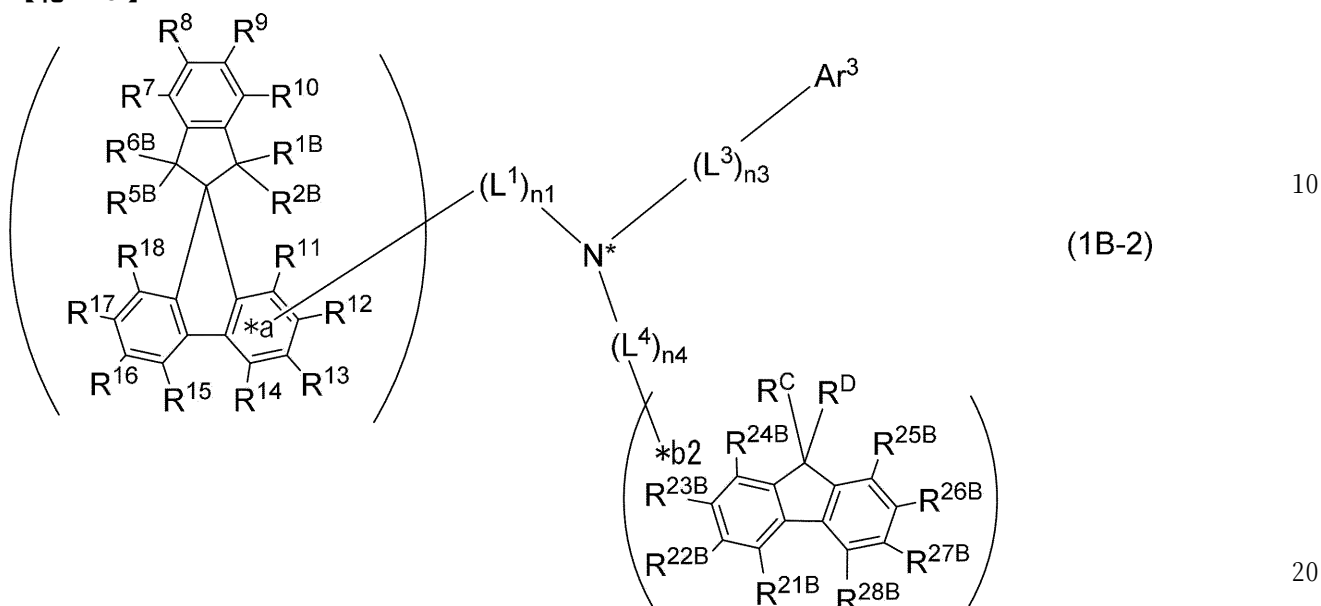
50

18、 N^* 、 Ar^3 、 Ar^4 、 L^1 、 L^3 、 L^4 、 $n1$ 、 $n3$ 、及び $n4$ は、上記式(1B)において定義したとおりである。

【0193】

一態様において、上記化合物(1B)は、下記式(1B-2)で表される。

【化46】



【0194】

式(1B-2)中、 R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、 R^{6B} 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 $R^{11} \sim R^{18}$ 、 $R^{21B} \sim R^{28B}$ 、 R^C 、 R^D 、 N^* 、 Ar^3 、 L^1 、 L^3 、 L^4 、 $*a$ 、 $*b2$ 、 $n1$ 、 $n3$ 、及び $n4$ は、前記式(1B)において定義したとおりである。

【0195】

一態様において、式(1B-2)中、 Ar^3 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基である。

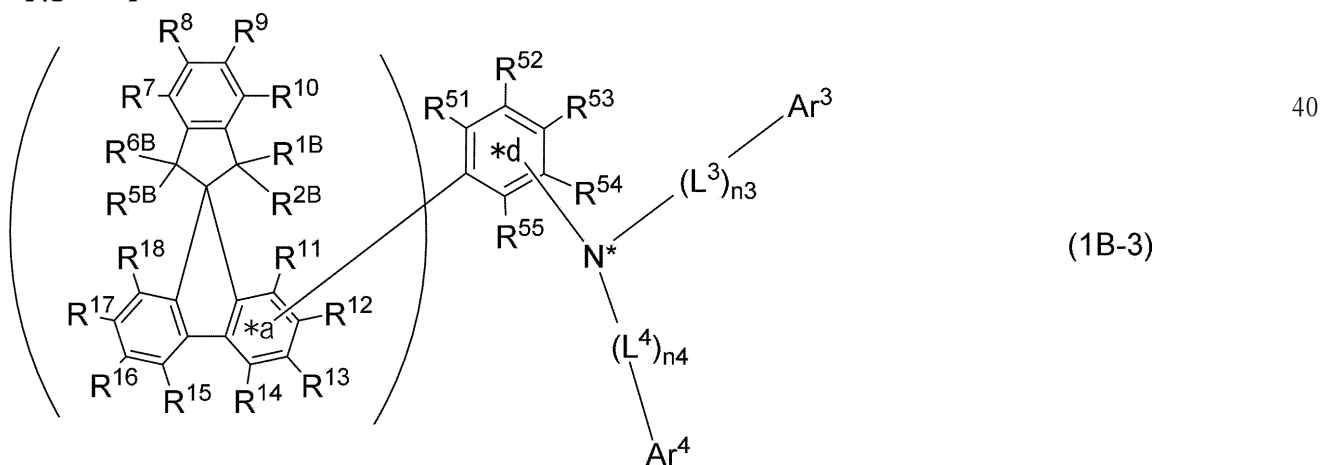
【0196】

一態様において、上記式(1B)、式(1B-1)、及び式(1B-2)のいずれかで表され、 $n1$ が1のとき L^1 はフェニレン基であり、 $n3$ が1のとき L^3 はフェニレン基であり、 $n4$ が1のとき L^4 はフェニレン基である。

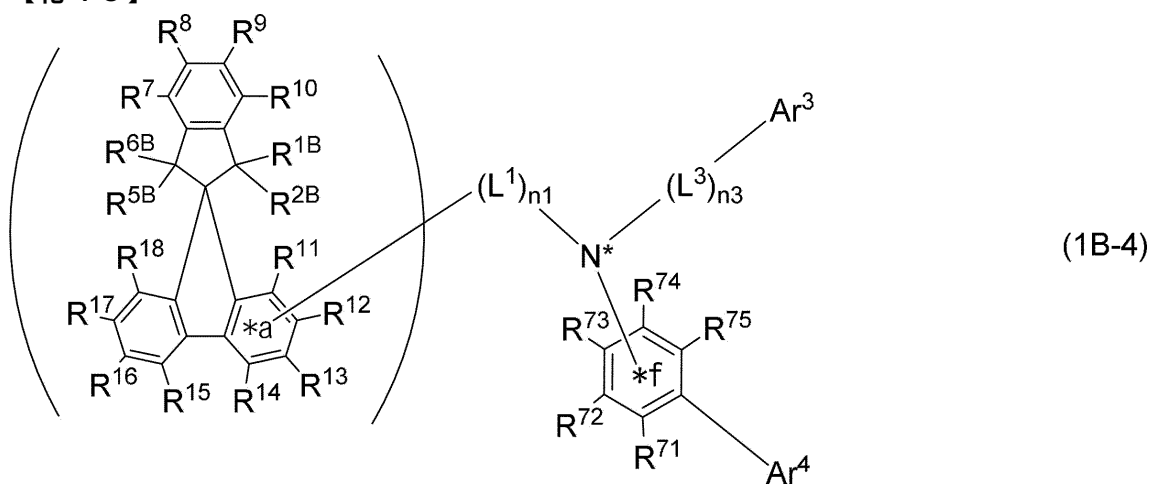
【0197】

一態様において、上記化合物(1B)は、下記式(1B-3)～式(1B-9)のいずれかで表される。

【化47】

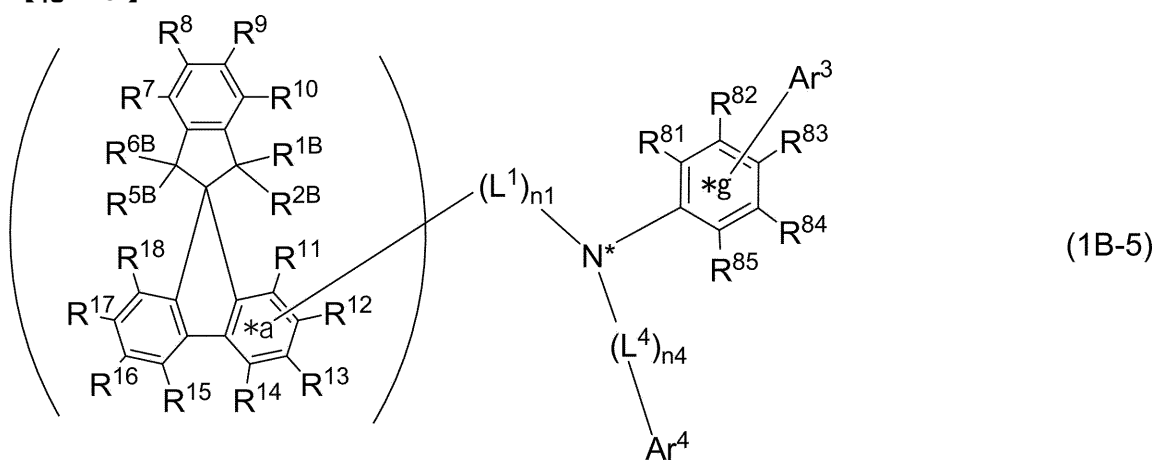


【化 4 8】



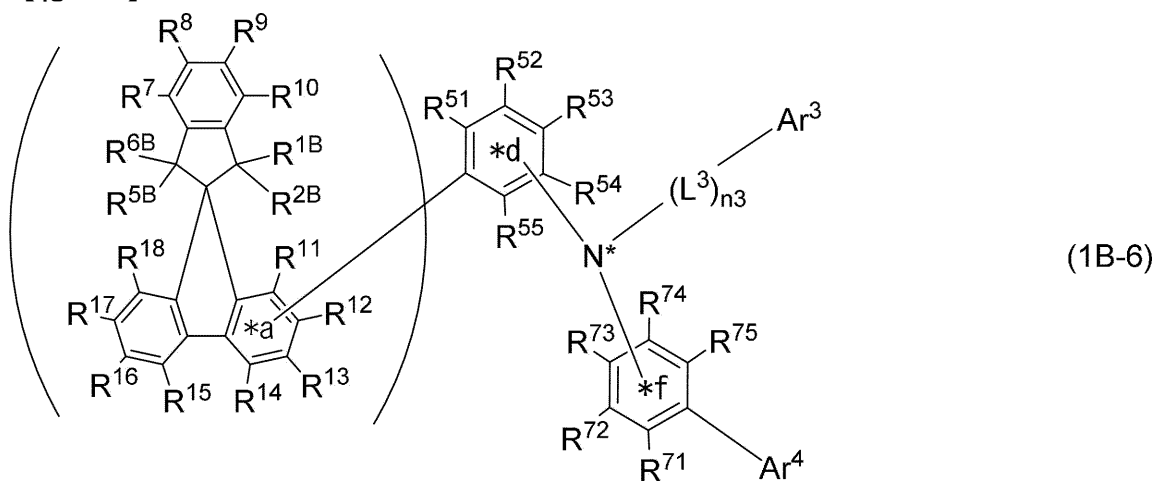
10

【化 4 9】



20

【化 5 0】

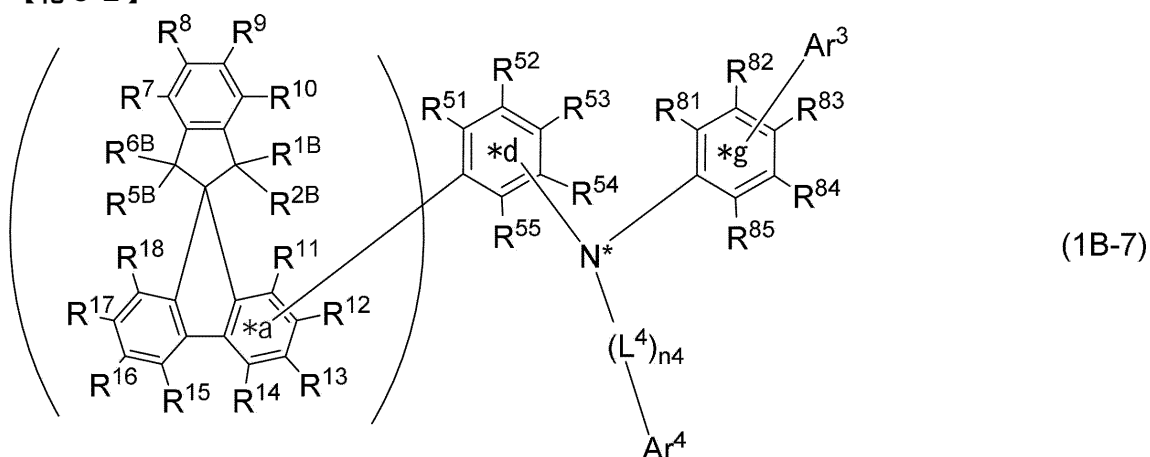


30

40

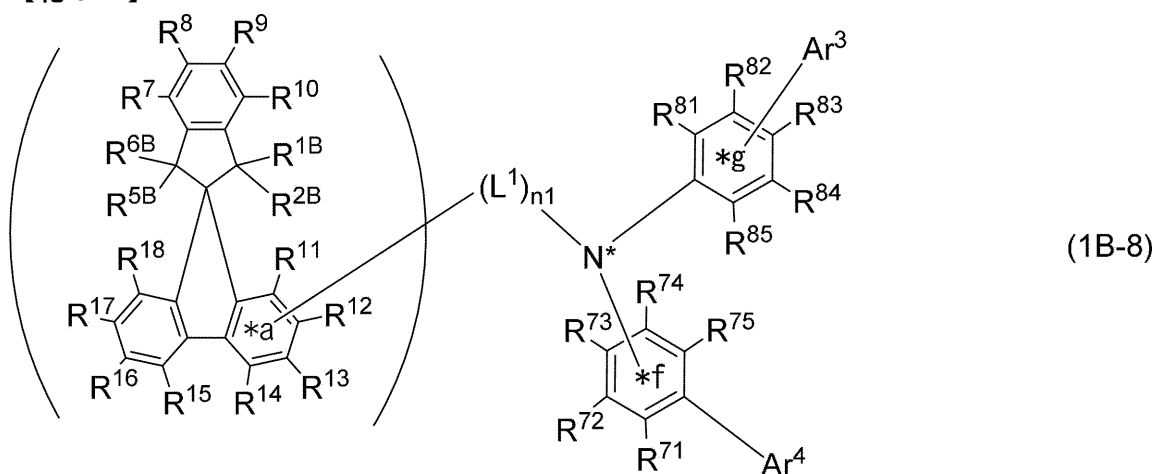
50

【化 5 1】



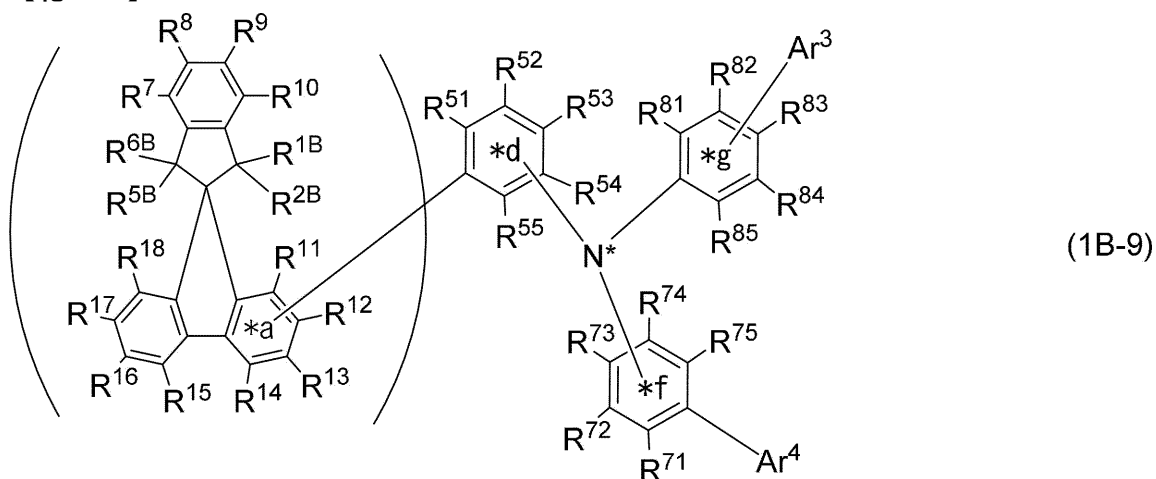
10

【化 5 2】



20

【化 5 3】



30

40

【0198】

式(1B-3)、式(1B-6)、式(1B-7)、及び式(1B-9)中、 $R^{51} \sim R^{55}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1～6のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数6～12のアリール基であり、好ましくは水素原子である。但し、 $R^{51} \sim R^{55}$ から選択される一つは、*dに結合する単結合である。*dに結合する単結合ではない $R^{51} \sim R^{55}$ の全てが水素原子であってもよい。

前記単結合ではない $R^{51} \sim R^{55}$ のうち隣り合う一組は、互いに結合せず環を形成しない。

50

式(1B-4)、式(1B-6)、式(1B-8)、及び式(1B-9)中、 $R^{71} \sim R^{75}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1～6のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数6～12のアリール基であり、好ましくは水素原子である。但し、 $R^{71} \sim R^{75}$ から選択される一つは、*fに結合する単結合である。*fに結合する単結合ではない $R^{71} \sim R^{75}$ の全てが水素原子であってもよい。

前記単結合ではない $R^{71} \sim R^{75}$ のうち隣り合う一組は、互いに結合せず環を形成しない。

式(1B-5)、及び式(1B-7)～式(1B-9)中、 $R^{81} \sim R^{85}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1～6のアルキル基、又は無置換の環形成炭素数6～12のアリール基であり、好ましくは水素原子である。但し、 $R^{81} \sim R^{85}$ から選択される一つは、*gに結合する単結合である。*gに結合する単結合ではない $R^{81} \sim R^{85}$ の全てが水素原子であってもよい。

前記単結合ではない $R^{81} \sim R^{85}$ のうち隣り合う一組は、互いに結合せず環を形成しない。

【0199】

$R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{71} \sim R^{75}$ 、及び $R^{81} \sim R^{85}$ が表す、無置換の炭素数1～6のアルキル基、及び無置換の環形成炭素数6～12のアリール基は、式(1A)の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

【0200】

式(1B-3)～(1B-9)中、 R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、 R^{6B} 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 $R^{11} \sim R^{18}$ 、 N^* 、 Ar^3 、 Ar^4 、 L^1 、 L^3 、 L^4 、*a、n1、n3、及びn4は、前記式(1B)において定義したとおりである。

【0201】

一態様において、上記化合物(1B)は、上記式(1B)、式(1B-1)、及び、式(1B-3)～式(1B-9)のいずれかで表され、

Ar^3 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であり、

Ar^4 は、上記式(3-1)で表される基であり、かつ、 X^2 は、酸素原子又は硫黄原子であるか、又は、上記式(3-2)で表される基である。

【0202】

一態様において、上記化合物(1B)は、上記式(1B)で表され、

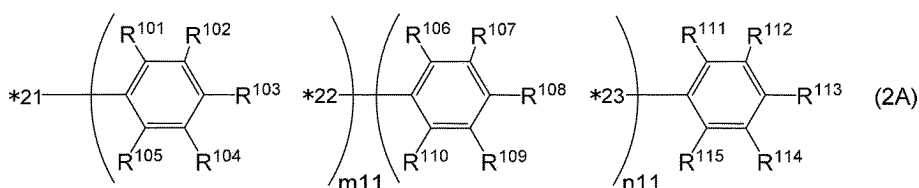
Ar^3 は、上記式(2-1)又は式(2-2)で表される基であり、

Ar^4 は、上記式(3-1)で表される基であり、かつ、 X^2 は、酸素原子又は硫黄原子であるか、又は、上記式(3-2)で表される基である。

【0203】

一態様において、上記化合物(1B)は、上記式(1B)、及び式(1B-1)～式(1B-9)のいずれかで表され、 Ar^3 は、下記の式(2A)～(2F)のいずれかで表される。

【化54】



【0204】

式(2A)中、*21は L^3 への結合位置である。

【0205】

式(2A)中、 $R^{101} \sim R^{105}$ から選ばれる一つは*22に結合する単結合であり、 $R^{106} \sim R^{110}$ から選ばれる一つは*23に結合する単結合である。

上記単結合ではない $R^{101} \sim R^{105}$ 及び $R^{106} \sim R^{110}$ は、それぞれ独立して、水

素原子、無置換の炭素数 1～10 のアルキル基、又は、無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基であり、好ましくは水素原子である。

上記単結合ではない $R^{101} \sim R^{105}$ 及び $R^{106} \sim R^{110}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記置換もしくは無置換の炭素数 1～10 のアルキル基の詳細は、炭素数が 1～10 であることを除いて式 (1A) の R^1A 及び R^2A に関して記載したとおりである。

上記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基の詳細は、式 (1A) の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

前記単結合ではない $R^{101} \sim R^{105}$ から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成しない。

前記単結合ではない $R^{106} \sim R^{110}$ から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成しない。

【0206】

式 (2A) 中、 $R^{111} \sim R^{115}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～10 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、又は、置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基であり、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 1～6 のアルキル基、環形成炭素数 6～12 のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

$R^{111} \sim R^{115}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記置換もしくは無置換の炭素数 1～10 のアルキル基の詳細は、炭素数が 1～10 であることを除いて式 (1A) の R^1A 及び R^2A に関して記載したとおりである。

上記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基の詳細、及び、上記置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基の詳細は、式 (1A) の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

$R^{111} \sim R^{115}$ から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成しない。

【0207】

式 (2A) 中、 m_{11} は 0、1 又は 2 であり、 n_{11} は 0 又は 1 である。 m_{11} が 2 であり、かつ、 n_{11} が 0 である場合を除く。

$m_{11} = 0$ 、 $n_{11} = 0$ の場合、*23 が *21 を表す。

$m_{11} = 0$ 、 $n_{11} = 1$ の場合、*22 が *21 を表す。

$m_{11} = 1$ 、 $n_{11} = 0$ の場合、*23 が *22 を表す。

Ar^3 が式 (2A) で表される場合、 n_3 が 0 であることが好ましい。

また、 Ar^3 が式 (2A) で表され、 m_{11} が 0 で n_{11} が 1 の場合、 $R^{106} \sim R^{110}$ は、水素原子又は無置換の炭素数 1～10 のアルキル基であることが好ましい。

さらに、 Ar^3 が式 (2A) で表され、 m_{11} が 1 で n_{11} が 0 の場合、*22 に結合する単結合ではない $R^{101} \sim R^{105}$ は、水素原子又は無置換の炭素数 1～10 のアルキル基であることが好ましい。

【0208】

式 (2A) で表わされる基は、好ましくは下記式で表される。下記式において R は簡略化のために省略した。

10

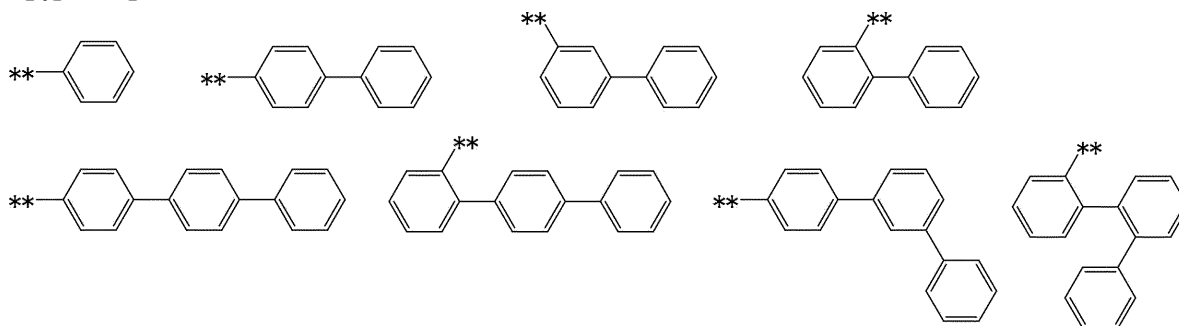
20

30

40

50

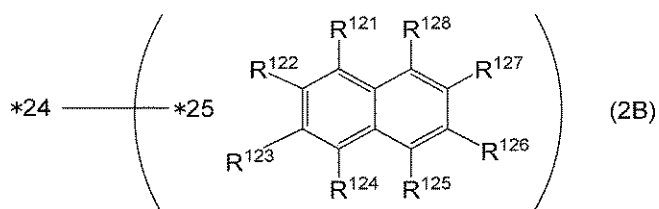
【化 5 5】



10

【 0 2 0 9】

【化 5 6】



【 0 2 1 0】

式 (2B) 中、*24 は L^3 への結合位置である。

20

【 0 2 1 1】

式 (2B) 中、 $R^{121} \sim R^{128}$ から選ばれる 1 つは *25 に結合する単結合である。

上記単結合ではない $R^{121} \sim R^{128}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 10 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 ~ 12 のアリール基であり、好ましくは水素原子である。

$R^{111} \sim R^{115}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基の詳細は、炭素数が 1 ~ 10 であることを除いて式 (1A) の R^{1A} 及び R^{2A} に関して記載したとおりである。

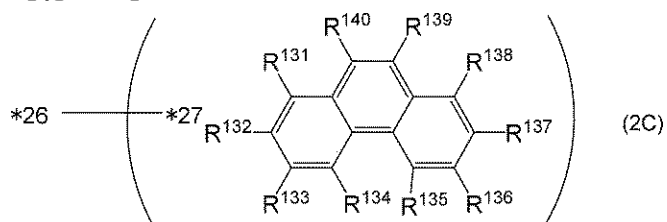
上記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基の詳細は、式 (1A) の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

30

上記単結合ではない $R^{121} \sim R^{128}$ から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成しない。

【 0 2 1 2】

【化 5 7】



40

【 0 2 1 3】

式 (2C) 中、*26 は L^3 への結合位置である。

【 0 2 1 4】

式 (2C) 中、 $R^{131} \sim R^{140}$ から選ばれる 1 つは *27 に結合する単結合である。

上記単結合ではない $R^{131} \sim R^{140}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 10 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 ~ 12 のアリール基であり、好ましくは水素原子である。

上記単結合ではない $R^{131} \sim R^{140}$ の全てが水素原子であってもよい。

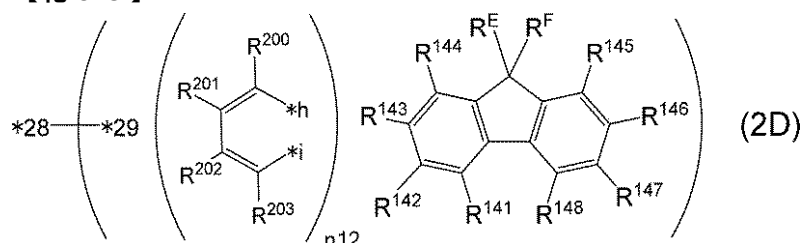
50

上記置換もしくは無置換の炭素数 1～10 のアルキル基の詳細は、炭素数が 1～10 であることを除いて式 (1A) の R^{1A} 及び R^{2A} に関して記載したとおりである。

上記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基の詳細は、式 (1A) の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

上記単結合ではない $R^{131} \sim R^{140}$ から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成しない。

【化 58】



10

【0215】

式 (2D) 中、*28 は L^3 への結合位置である。

【0216】

式 (2D) 中、 n_{12} は 0 又は 1 である。

n_{12} が 0 のとき、 $R^{141} \sim R^{148}$ 、 R^E 、及び R^F から選ばれる 1 つは *29 に結合する単結合であるか、又は R^E 及び R^F から選択される一つは *29 に結合する 2 価の基である。

20

n_{12} が 1 のとき、 R^{141} と R^{142} 、 R^{142} と R^{143} 、又は R^{143} と R^{144} の一方が *h に結合する単結合、他方が *i に結合する単結合であり、*h 及び *i に結合する単結合ではない $R^{141} \sim R^{144}$ 、 $R^{145} \sim R^{148}$ 、 $R^{200} \sim R^{203}$ 、 R^E 、及び R^F から選ばれる 1 つは *29 に結合する単結合であるか、又は R^E 及び R^F から選択される一つは *29 に結合する 2 価の基である。

【0217】

式 (2D) 中、上記単結合ではない $R^{141} \sim R^{148}$ 及び前記単結合ではない $R^{200} \sim R^{203}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～10 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基、又は、置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基であり、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 1～6 のアルキル基、環形成炭素数 6～12 のアリール基であり、より好ましくは水素原子である。

30

上記単結合ではない $R^{141} \sim R^{148}$ 及び上記単結合ではない $R^{200} \sim R^{203}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記置換もしくは無置換の炭素数 1～10 のアルキル基の詳細は、炭素数が 1～10 であることを除いて式 (1A) の R^{1A} 及び R^{2A} に関して記載したとおりである。

上記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリール基の詳細、及び、上記置換もしくは無置換の環形成原子数 5～13 のヘテロアリール基の詳細は、式 (1A) の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

40

上記単結合ではない $R^{141} \sim R^{148}$ 及び上記単結合ではない $R^{200} \sim R^{203}$ から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成しない。

【0218】

式 (2D) 中、上記単結合ではなく、上記 *29 に結合する 2 価の基ではない R^E 及び R^F は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 のヘテロアリール基であり、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 1～6 のアルキル基、環形成炭素数 6～12 のアリール

50

基であり、より好ましくは水素原子である。

上記単結合ではなく、上記*29に結合する2価の基ではない R^E 及び R^F が水素原子であってもよい。

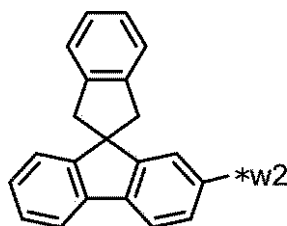
上記置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基の詳細は、式(1A)の R^{1A} 及び R^{2A} に関して記載したとおりである。

上記置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基の詳細、及び、上記置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基の詳細は、式(1A)の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

上記単結合ではなく、上記*29に結合する2価の基ではない R^E 及び R^F は、互いに結合して環を形成してもよいし環を形成しなくてもよい。

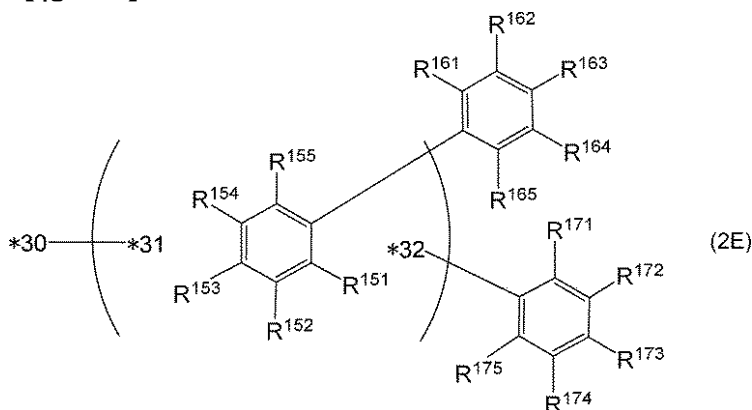
但し、 R^E 及び R^F から選択される一つがアリール基である場合、両者が結合して、 R^E 及び R^F が結合しているフルオレン環とともに1', 3'-ジヒドロスピロ[フルオレン-9, 2'-インデン]を形成しない。別言すれば、 R^E 及び R^F は、互いに結合して下記式で表される構造を形成しない。なお、下記式において、*w2はL3への結合位置を示す。また、下記式においてRは簡略化のため省略した。

【化59】



【0219】

【化60】



【0220】

式(2E)中、*30はL3への結合位置である。

【0221】

式(2E)中、 $R^{151} \sim R^{155}$ から選ばれる1つは*31に結合する単結合であり、 $R^{151} \sim R^{155}$ から選ばれる他の1つは*32に結合する単結合である。

上記単結合ではない $R^{151} \sim R^{155}$ は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～10のアルキル基、又は、無置換のフェニル基であり、好ましくは水素原子である。上記単結合ではない $R^{151} \sim R^{155}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記置換もしくは無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細は、炭素数が1～10であることを除いて式(1A)の R^{1A} 及び R^{2A} に関して記載したとおりである。

上記単結合ではない $R^{151} \sim R^{155}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成しない。

【0222】

式(2E)中、 $R^{161} \sim R^{165}$ 及び $R^{171} \sim R^{175}$ は、それぞれ独立して、水素原子又は無置換の炭素数1～10のアルキル基であり、好ましくは水素原子である。

$R^{161} \sim R^{165}$ 及び $R^{171} \sim R^{175}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記置換もしくは無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細は、炭素数が1～10であることを除いて式(1A)の R^{1A} 及び R^{2A} に関して記載したとおりである。

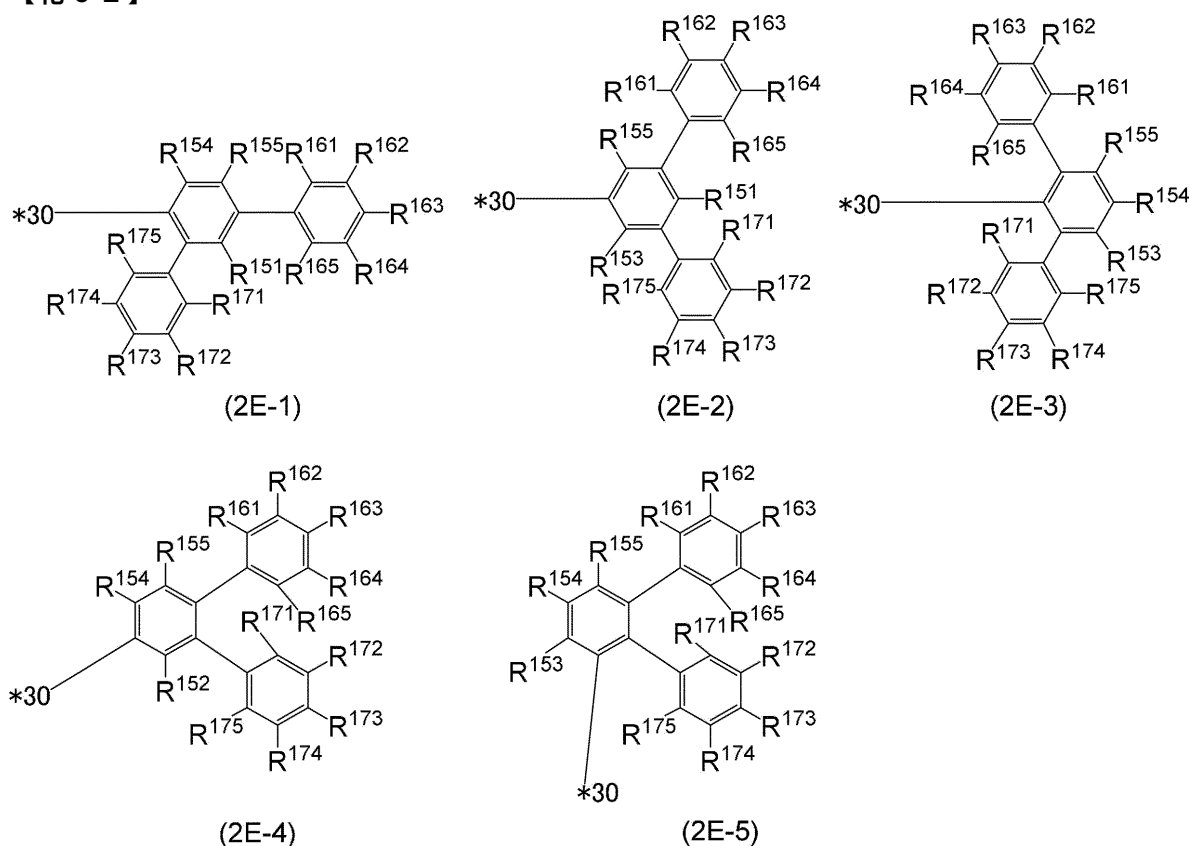
水素原子ではない $R^{161} \sim R^{165}$ から選ばれる少なくとも1つの隣接する2つは、互いに結合して、1又は複数の無置換のベンゼン環を形成してもよいし、互いに結合せず環を形成しなくてもよい。

水素原子ではない $R^{171} \sim R^{175}$ から選ばれる少なくとも1つの隣接する2つは、互いに結合して、1又は複数の無置換のベンゼン環を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環を形成しなくてもよい。

【0223】

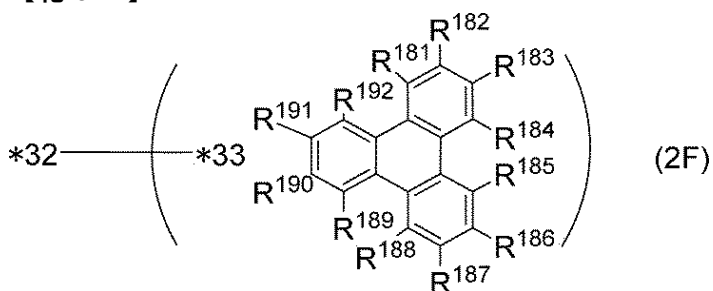
式(2E)は、下記式(2E-1)～(2E-5)で表される基を含み、式(2E-1)、(2E-2)、又は(2E-5)が好ましい。

【化61】



【0224】

【化62】



【0225】

式(2F)中、*32は L^3 への結合位置である。

【0226】

式(2F)中、 $R^{181} \sim R^{192}$ から選ばれる1つは*33に結合する単結合である。

上記単結合ではない $R^{181} \sim R^{192}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～10のアルキル基、又は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基であり、好ましくは水素原子である。

上記単結合ではない $R^{181} \sim R^{192}$ の全てが水素原子であってもよい。

上記置換もしくは無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細は、炭素数が1～10であることを除いて式(1A)の R^1A 及び R^2A に関して記載したとおりである。

上記置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細は、式(1A)の Z^1 及び Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、及び $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ に関して記載したとおりである。

10

前記単結合ではない $R^{181} \sim R^{192}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成しない。

【0227】

一態様において、発明化合物が上記式(1A)、式(1A-1)、及び式(1A-3)～(1A-5)のいずれかで表され、 X^1 が酸素原子である。

【0228】

一態様において、発明化合物が上記式(1B)、式(1B-1)、及び式(1B-3)～(1B-9)のいずれかで表され、 X^2 が酸素原子である。

【0229】

一態様において、発明化合物が上記式(1B)、式(1B-1)、及び式(1B-3)～(1B-9)のいずれかで表され、 X^3 が酸素原子である。

20

【0230】

一態様において、 R^1A 、 R^2A 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、上記単結合ではない Z^1 及び Z^2 、上記単結合ではない $R^{31} \sim R^{34}$ 、 Ar^1 、上記単結合ではない $R^{21} \sim R^{28}$ 、上記単結合ではなく* b_1 に結合する2価の基ではない R^A 及び R^B 、 R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、 R^{6B} 、上記単結合ではない $R^{11} \sim R^{14}$ 、上記単結合ではない $R^{41} \sim R^{44}$ 、 $R^{45} \sim R^{48}$ 、上記単結合ではない $R^{21B} \sim R^{28B}$ 、上記単結合ではなく* b_2 に結合する2価の基ではない R^C 及び R^D 、上記単結合ではない $R^{101} \sim R^{105}$ 、上記単結合ではない $R^{106} \sim R^{110}$ 、 $R^{111} \sim R^{115}$ 、上記単結合ではない $R^{121} \sim R^{128}$ 、上記単結合ではない $R^{131} \sim R^{140}$ 、上記単結合ではない $R^{141} \sim R^{148}$ 、上記単結合ではない $R^{200} \sim R^{203}$ 、上記単結合ではない $R^{151} \sim R^{155}$ 、 $R^{161} \sim R^{165}$ 、 $R^{171} \sim R^{175}$ 、及び上記単結合ではない $R^{181} \sim R^{192}$ の全てが水素原子である。

30

【0231】

一態様において、式(1A)又は式(1B)で表される化合物が少なくとも1個の重水素原子を含む。

化合物(1A)及び化合物(1B)に含まれる重水素原子については後ほど詳しく説明する。

【0232】

化合物(1A)及び化合物(1B)の一態様において、下記(1)～(9)のうち少なくとも1つが重水素原子である。

40

(1) R^1A 、 R^2A 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 Z^1 、 Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、 $R^{21} \sim R^{28}$ 、 $R^{31} \sim R^{34}$ 、 RA 、 RB 、 Ar^1 、 $R^{51} \sim R^{55}$ 、 $R^{61} \sim R^{65}$ 、 R^{1B} 、 R^{2B} 、 R^{5B} 、 R^{6B} 、 $R^{11} \sim R^{14}$ 、 $R^{41} \sim R^{48}$ 、 $R^{21B} \sim R^{28B}$ 、 RC 、 RD 、 $R^{71} \sim R^{75}$ 、 $R^{81} \sim R^{85}$ 、 $R^{101} \sim R^{105}$ 、 $R^{106} \sim R^{110}$ 、 $R^{111} \sim R^{115}$ 、 $R^{121} \sim R^{128}$ 、 $R^{131} \sim R^{140}$ 、 $R^{141} \sim R^{148}$ 、 $R^{200} \sim R^{203}$ 、 RE 、 RF 、 $R^{151} \sim R^{155}$ 、 $R^{161} \sim R^{165}$ 、 $R^{171} \sim R^{175}$ 、及び $R^{181} \sim R^{192}$ が表す水素原子；

(2) R^1A 、 R^2A 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 Z^1 、 Z^2 、 R^{13A} 、 R^{14A} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 、 R

50

21~R28、R31~R34、RA、RB、R51~R55、R61~R65、R1B、R2B、R5B、R6B、R11~R14、R41~R48、R21B~R28B、RC、RD、R71~R75、R81~R85、R101~R105、R106~R110、R111~R115、R121~R128、R131~R140、R141~R148、R200~R203、RE、RF、R151~R155、R161~R165、R171~R175、及びR181~R192が表すアルキル基に直結する水素原子；

(3) R1A、R2A、R7~R10、Z1、Z2、R13A、R14A、R7~R10、R15~R18、R21~R28、R31~R34、Ar1、Ar2、RA、RB、R51~R55、R61~R65、R1B、R2B、R5B、R6B、R11~R14、R41~R48、R21B~R28B、RC、RD、R71~R75、R81~R85、R101~R105、R106~R110、R111~R115、R121~R128、R131~R140、R141~R148、R200~R203、RE、RF、R151~R155、及びR181~R192が表すアリール基に直結する水素原子；

(4) R1A、R2A、R7~R10、Z1、Z2、R13A、R14A、R15~R18、R21~R28、R31~R34、Ar1、RA、RB、R1B、R2B、R5B、R6B、R41~R48、R21B~R28B、RC、RD、R111~R115、R141~R148、R200~R203、RE、及びRFが表すヘテロアリール基に直結する水素原子；

(5) R1A、R2A、R7~R10、Z1、Z2、R13A、R14A、R15~R18、R21~R28、R31~R34、RA、RB、R1B、R2B、R5B、R6B、R11~R14、R41~R48、R21B~R28B、RC、RD、R111~R115、R121~R128、R131~R140、R141~R148、R200~R203、RE、RF、及びR181~R192が表すアルキル基が有する置換基に直結する水素原子；

(6) R1A、R2A、R7~R10、Z1、Z2、R13A、R14A、R15~R18、R21~R28、R31~R34、Ar1、Ar2、RA、RB、R1B、R2B、R5B、R6B、R11~R14、R41~R48、R21B~R28B、RC、RD、R111~R115、R121~R128、R131~R140、R141~R148、R200~R203、RE、RF、及びR181~R192が表すアリール基が有する置換基に直結する水素原子；

(7) R1A、R2A、R7~R10、Z1、Z2、R13A、R14A、R15~R18、R21~R28、R31~R34、Ar1、RA、RB、R1B、R2B、R5B、R6B、R41~R48、R21B~R28B、RC、RD、R111~R115、R141~R148、R200~R203、RE、及びRFが表すヘテロアリール基が有する置換基に直結する水素原子；

(8) L1~L4が表すアリーレン基に直結する水素原子；及び

(9) L1~L4が表すアリーレン基が有する置換基に直結する水素原子。

【0233】

上記したように、本明細書において使用する「水素原子」は軽水素原子、重水素原子、及び三重水素原子を包含する。第1又は第2の発明化合物は天然由来の重水素原子を含んでいてもよい。

また、原料化合物の一部又は全てに重水素化した化合物を使用することにより、第1又は第2の発明化合物に重水素原子を意図的に導入してもよい。

【0234】

第1又は第2の発明化合物の重水素化率は使用する原料化合物の重水素化率に依存する。所定の重水素化率の原料を用いたとしても、天然由来の一定の割合で軽水素同位体が含まれ得る。したがって、下記で示される発明化合物の重水素化率の態様は、単に化学式で表される重水素原子の数をカウントして求められる割合に対し、天然由来の微量の同位体を考慮した比率が含まれる。

第1又は第2の発明化合物の重水素化率は、好ましくは1%以上、より好ましくは3%以上、さらに好ましくは5%以上、よりさらに好ましくは10%以上、よりさらに好ましくは50%以上である。

第1又は第2の発明化合物は、全ての水素原子が重水素原子である（すなわち、発明化

10

20

30

40

50

合物の重水素化率が100%である)重水素体であってもよい。

【0235】

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

また、第1又は第2の発明化合物中の全水素原子数に対する重水素原子数のそれぞれの割合は、好ましくは1%以上、より好ましくは3%以上、さらに好ましくは5%以上、よりさらに好ましくは10%以上、かつ、100%以下である。

10

【0236】

上記各式の定義に含まれる「置換もしくは無置換の」という場合の置換基(任意の置換基)の詳細は、「置換もしくは無置換の」という場合の置換基」において記載したとおりである。

【0237】

第1又は第2の発明化合物は、当業者であれば、後述する合成例及び公知の合成方法を参考にして容易に製造することができる。

【0238】

以下に第1又は第2の発明化合物の具体例を示すが、以下の例示化合物に限定されるものではない。

20

下記具体例中、Dは重水素原子を示す。

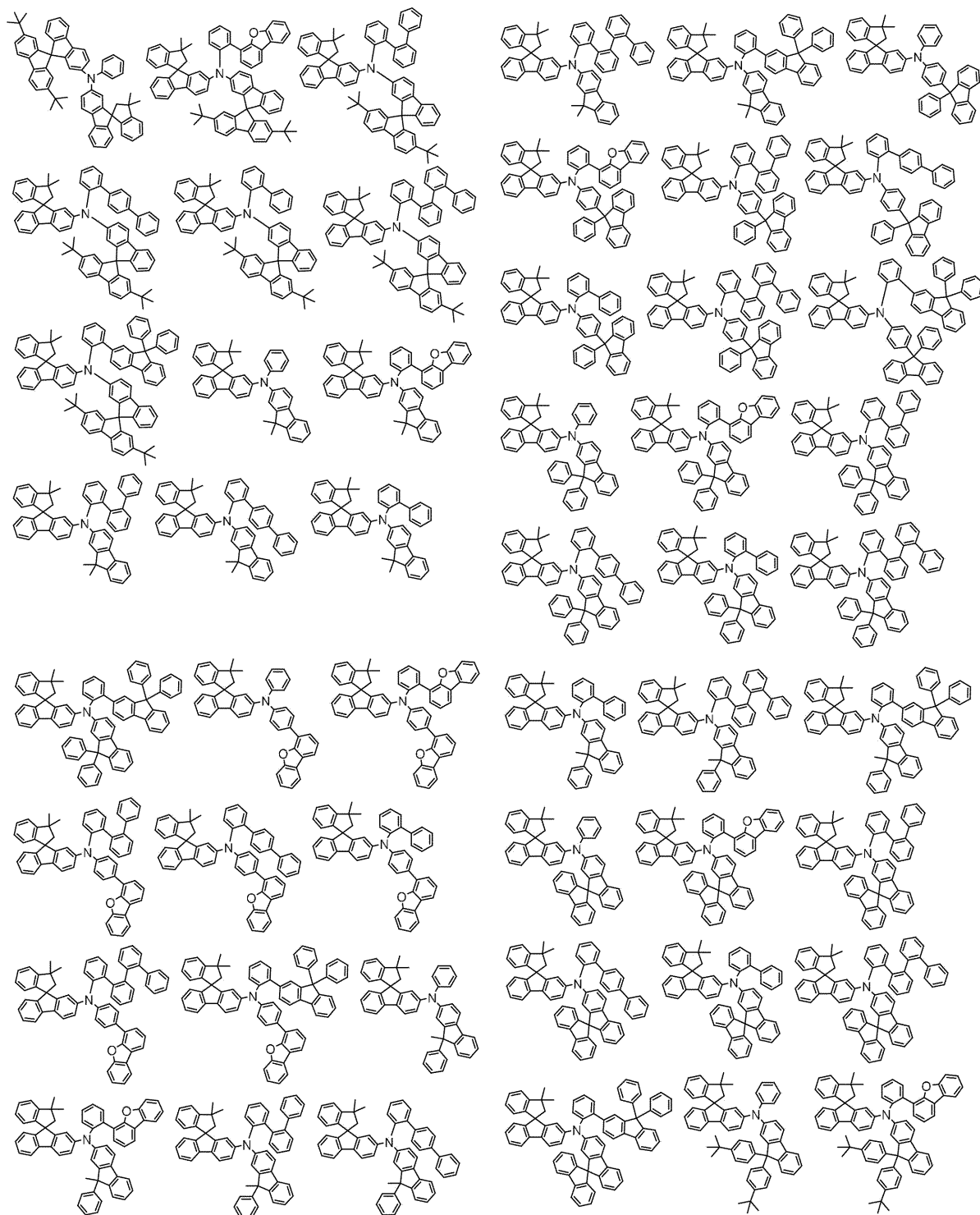
【0239】

30

40

50

【化 6 3】



【 0 2 4 0 】

10

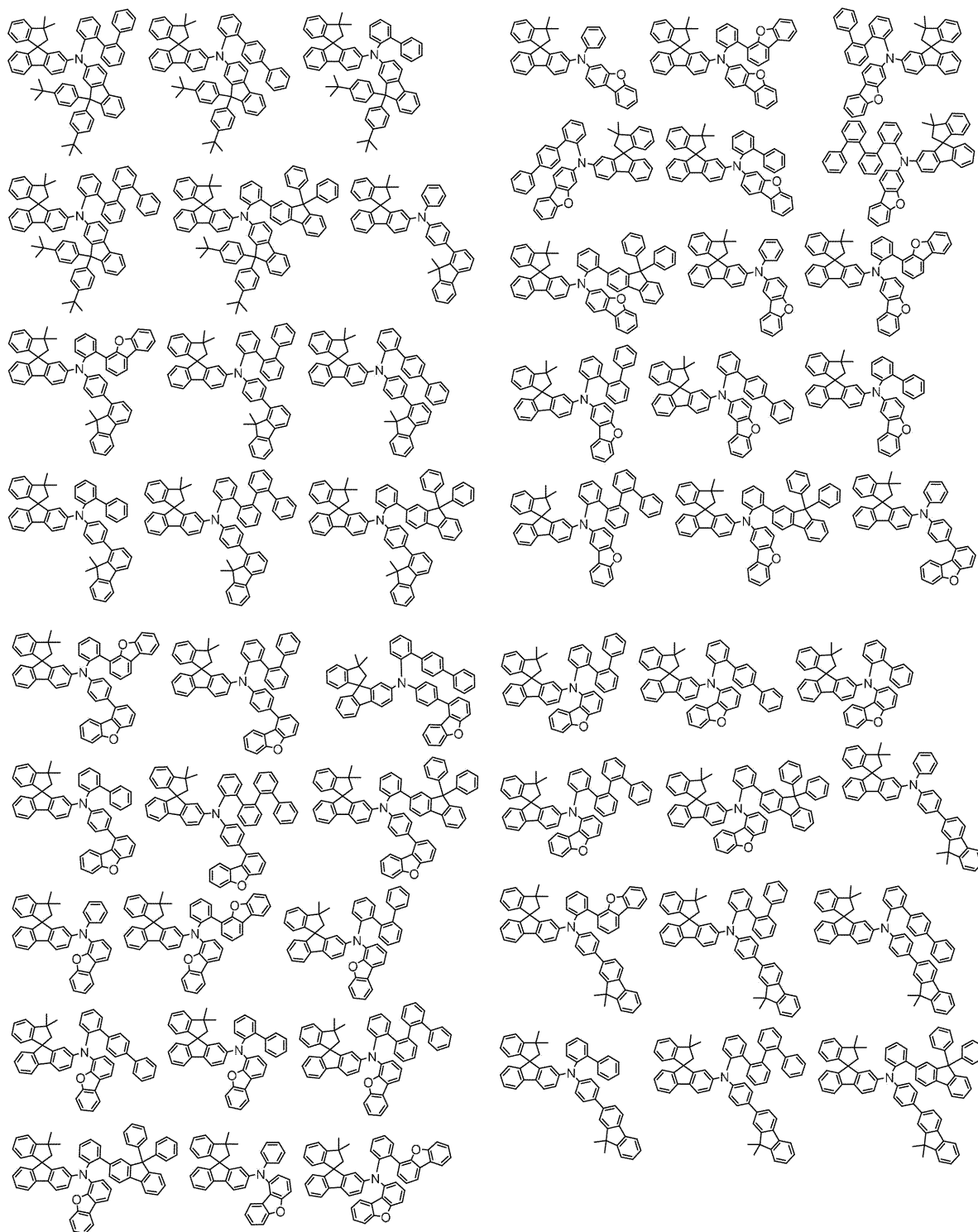
20

30

40

50

【化 6 4】



【 0 2 4 1】

10

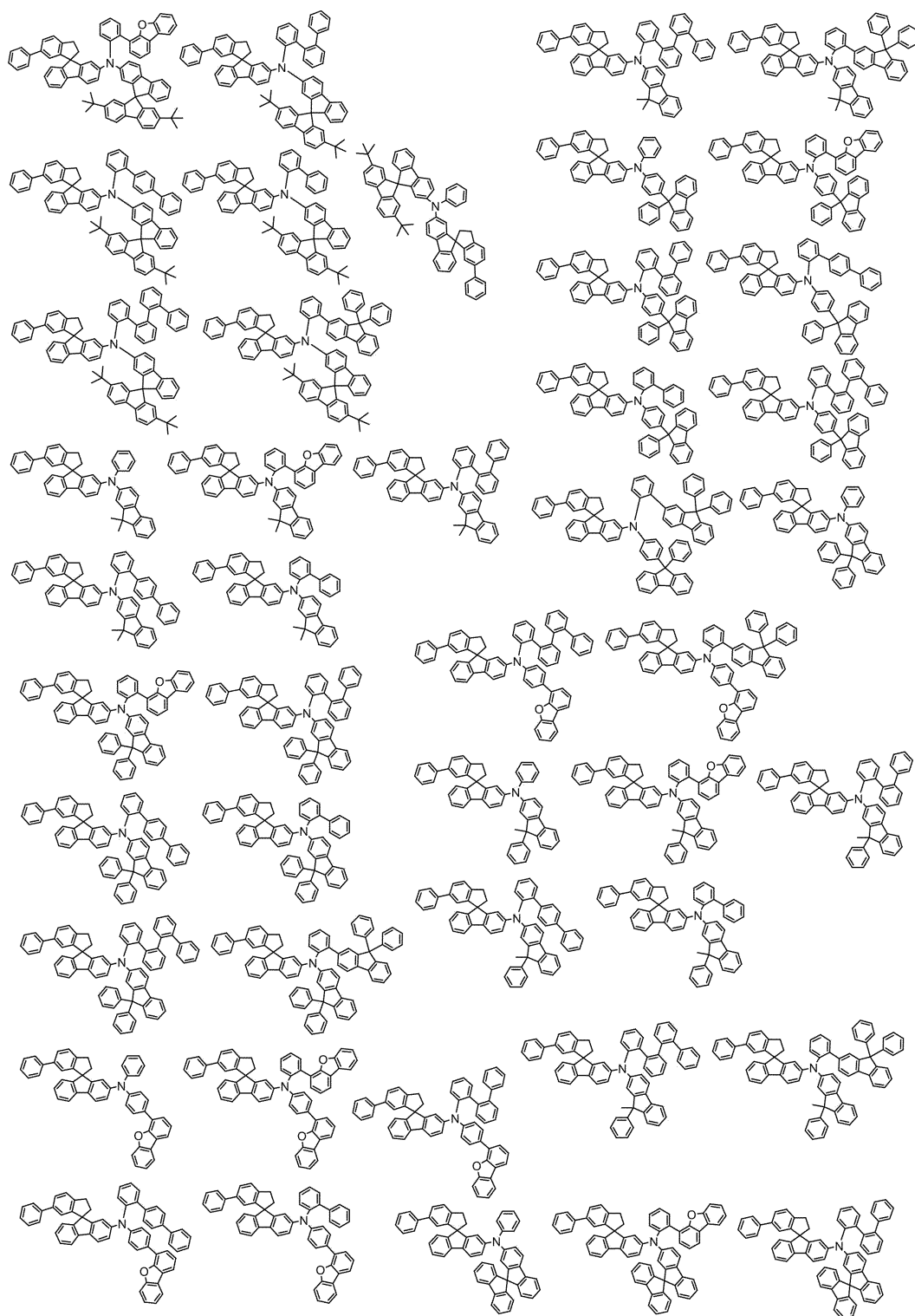
20

30

40

50

【化 6 5】



【 0 2 4 2】

10

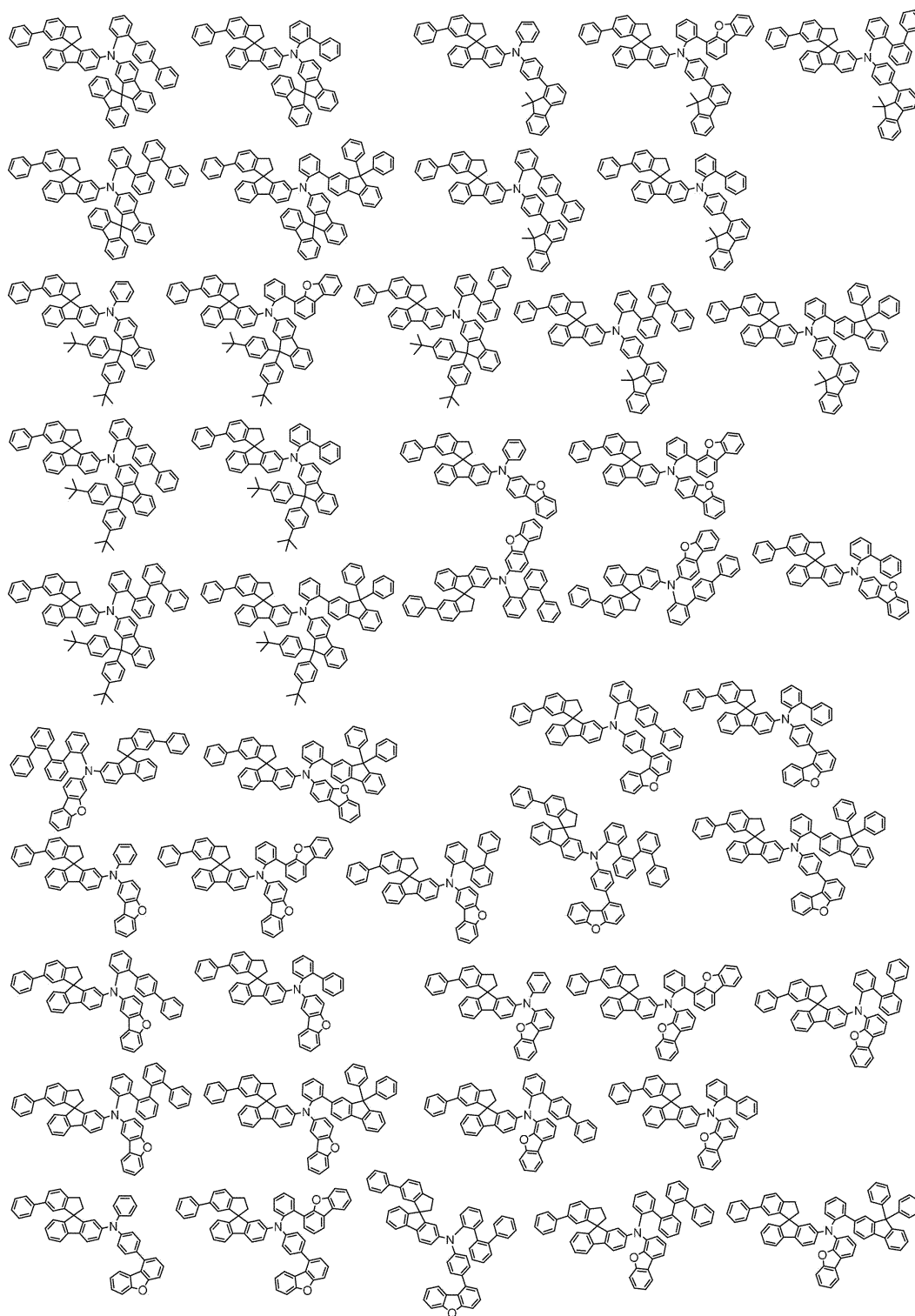
20

30

40

50

【化 6 6】



【 0 2 4 3】

10

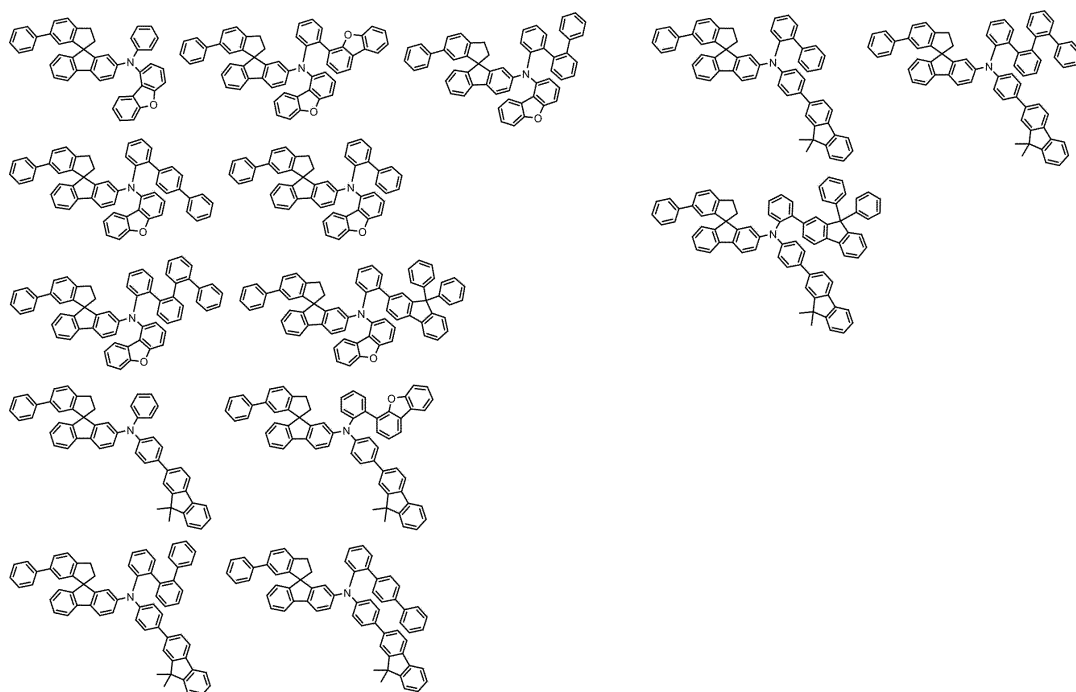
20

30

40

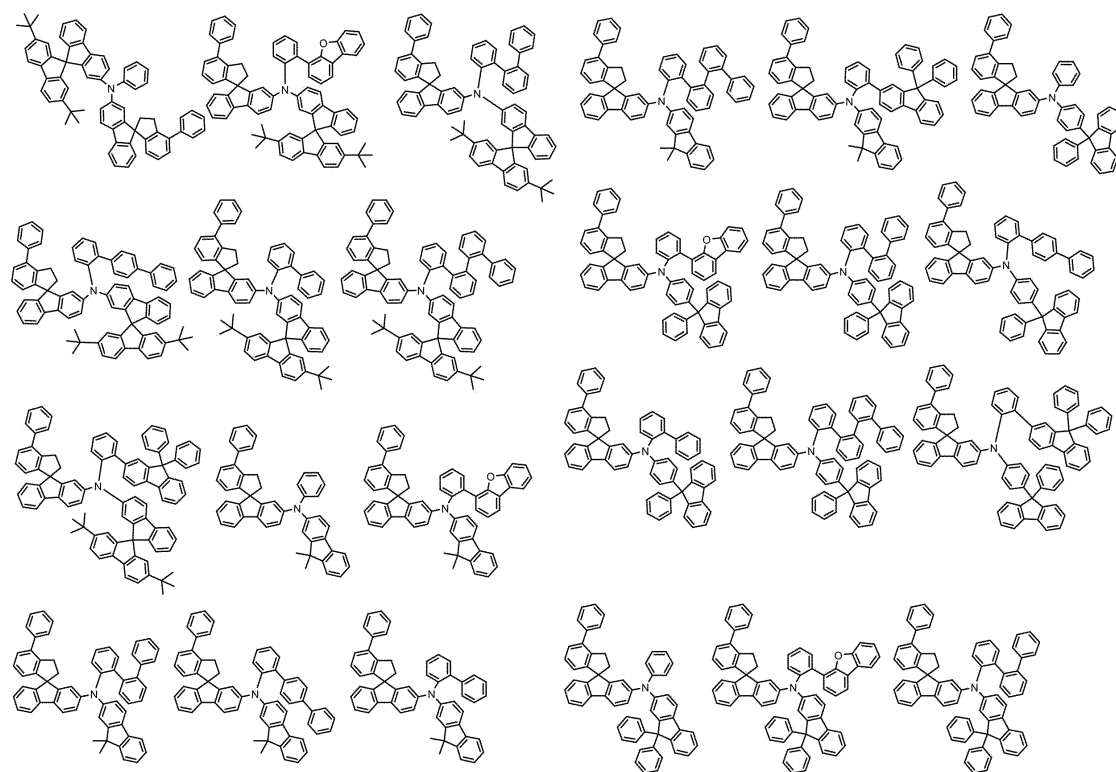
50

【化 6 7】



10

20



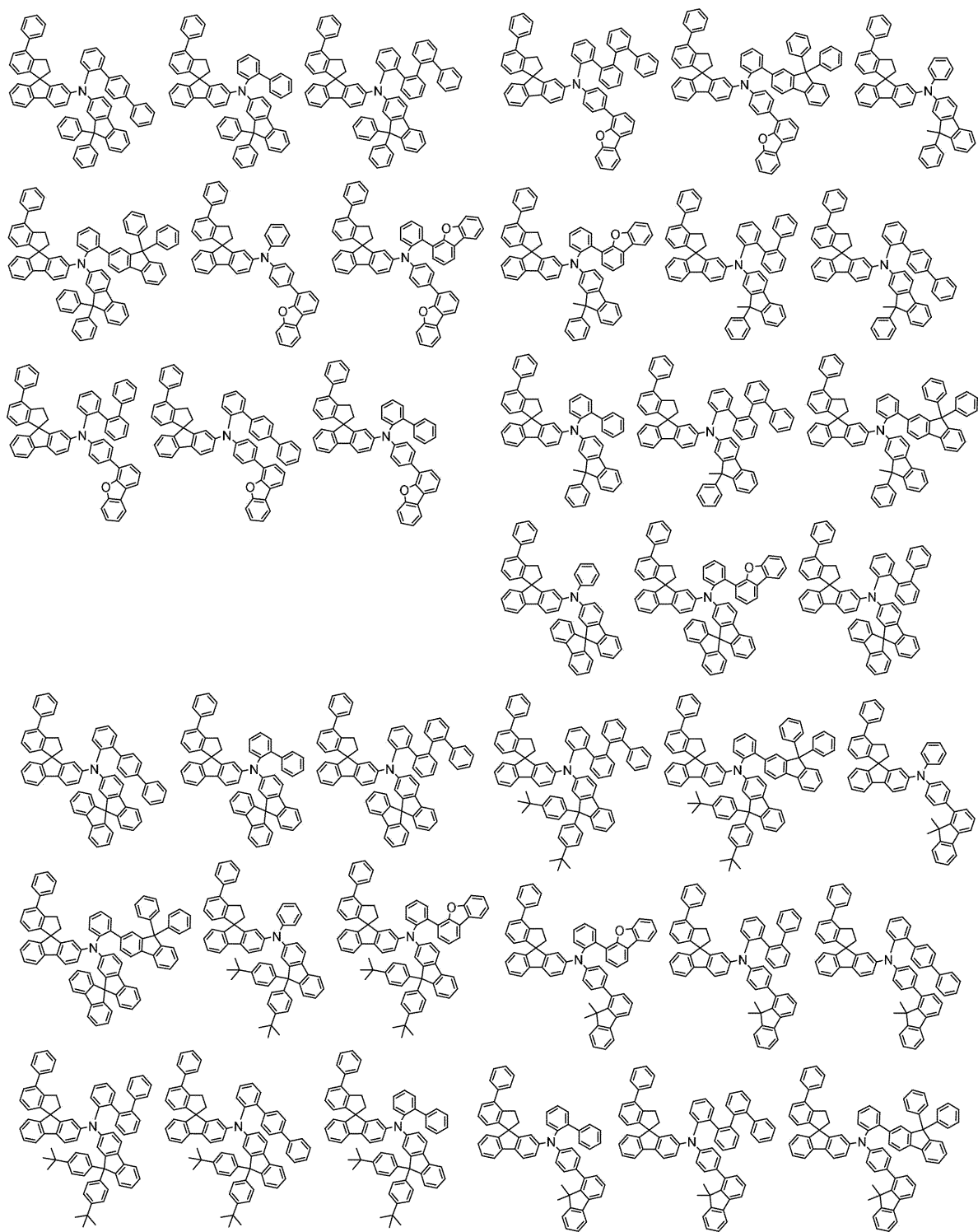
30

40

【 0 2 4 4】

50

【化 6 8】



【 0 2 4 5】

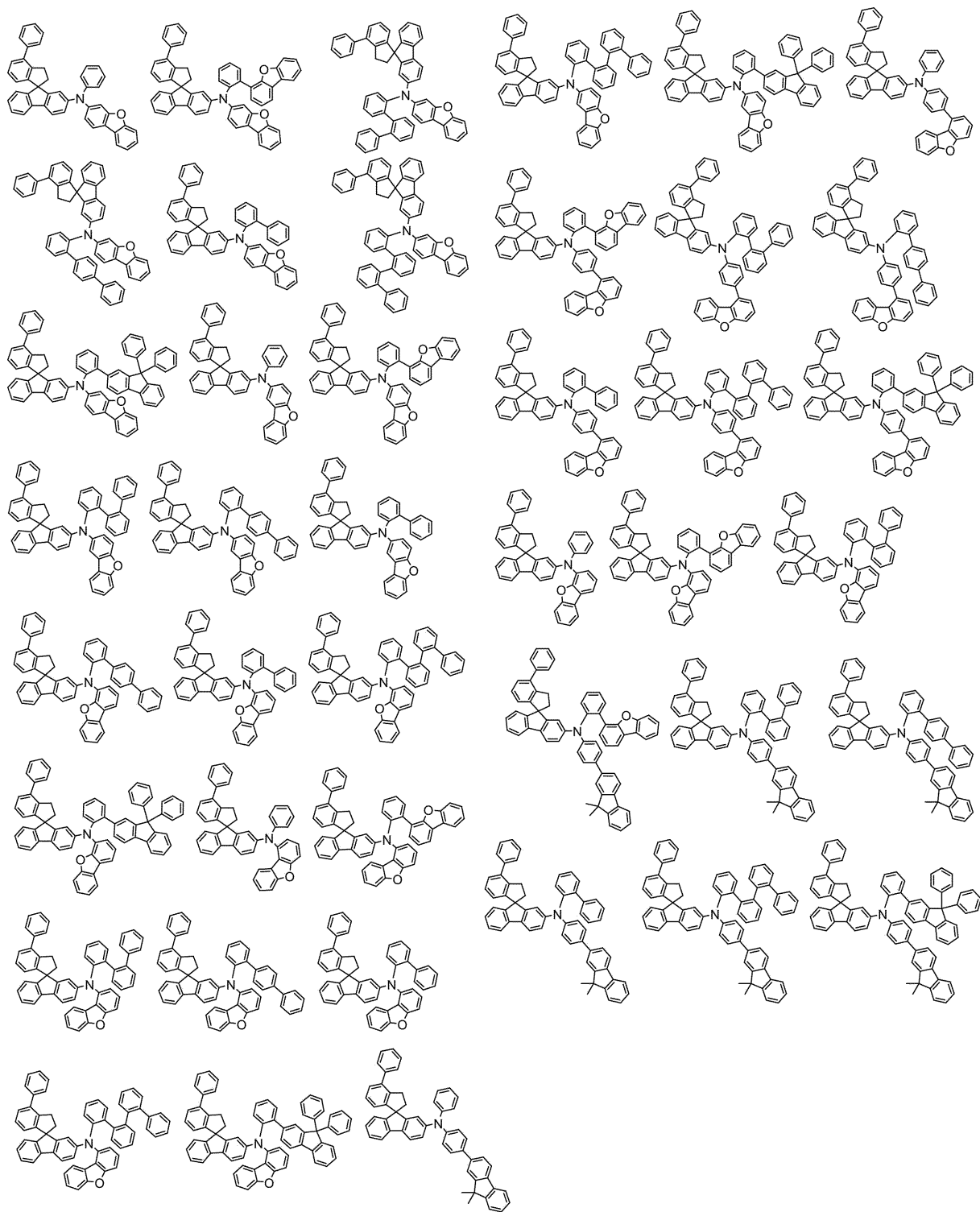
10

20

30

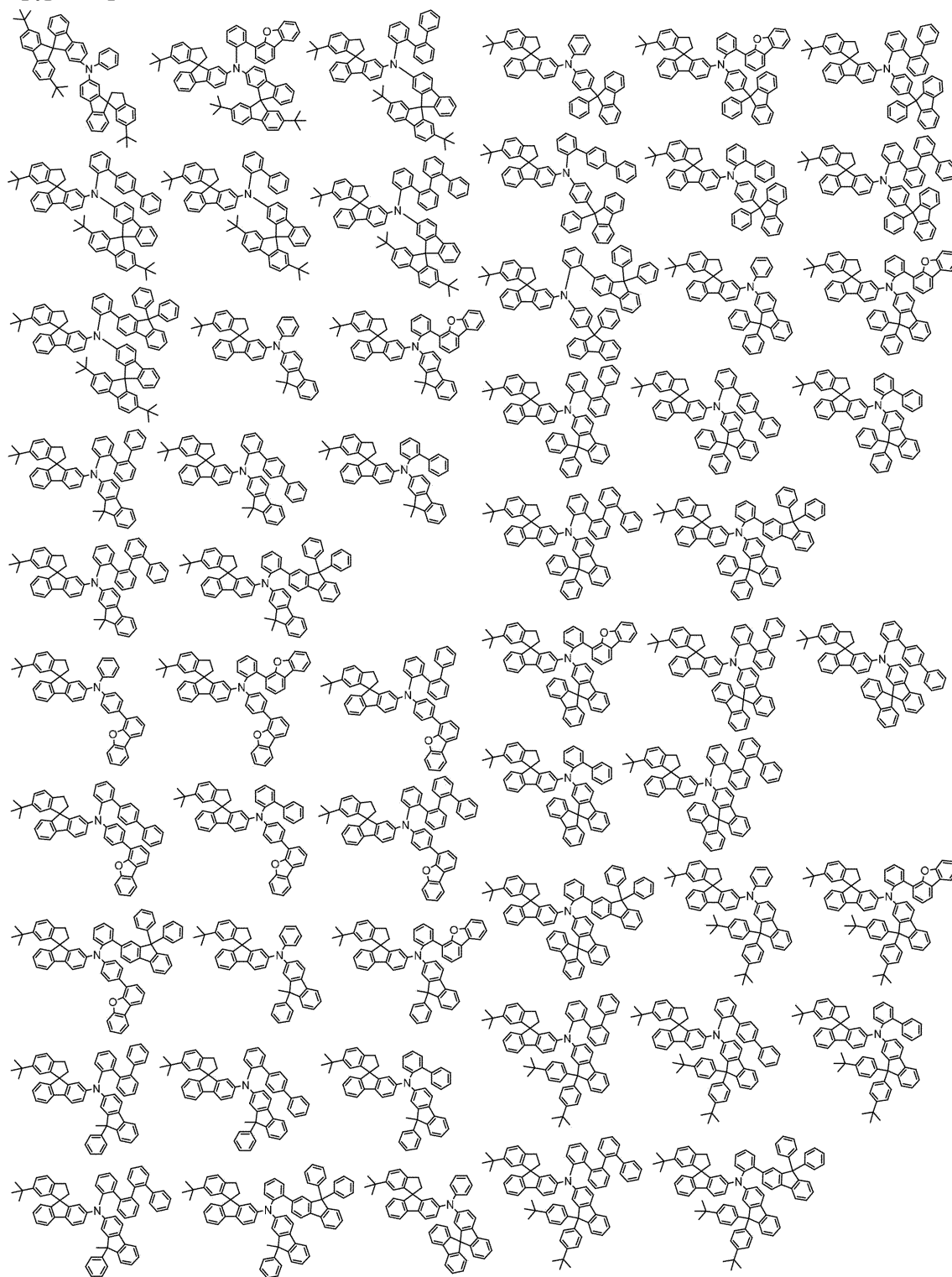
40

【化 6 9】



【 0 2 4 6】

【化 7 0】



【 0 2 4 7 】

10

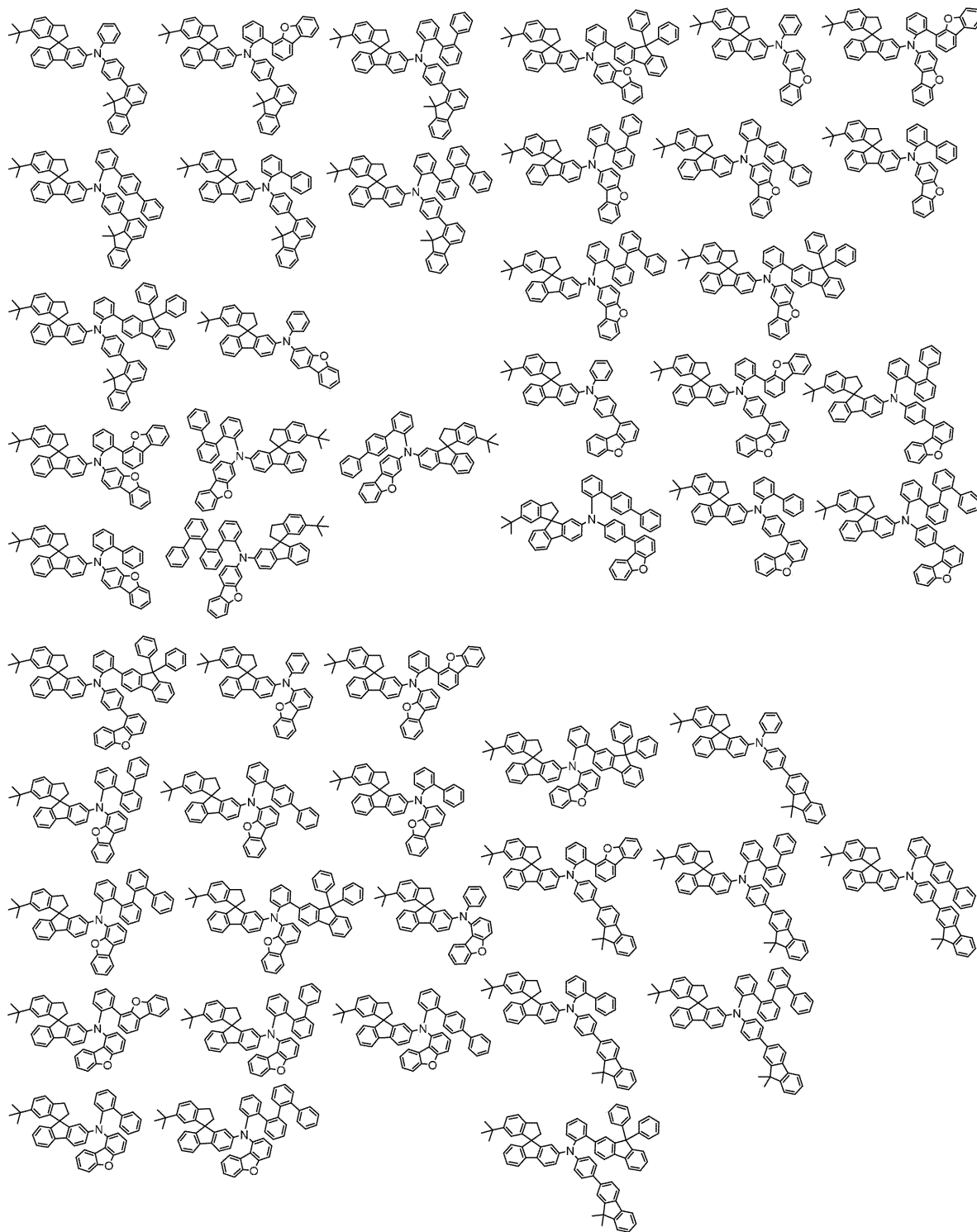
20

30

40

50

【化 7 1】



【 0 2 4 8 】

10

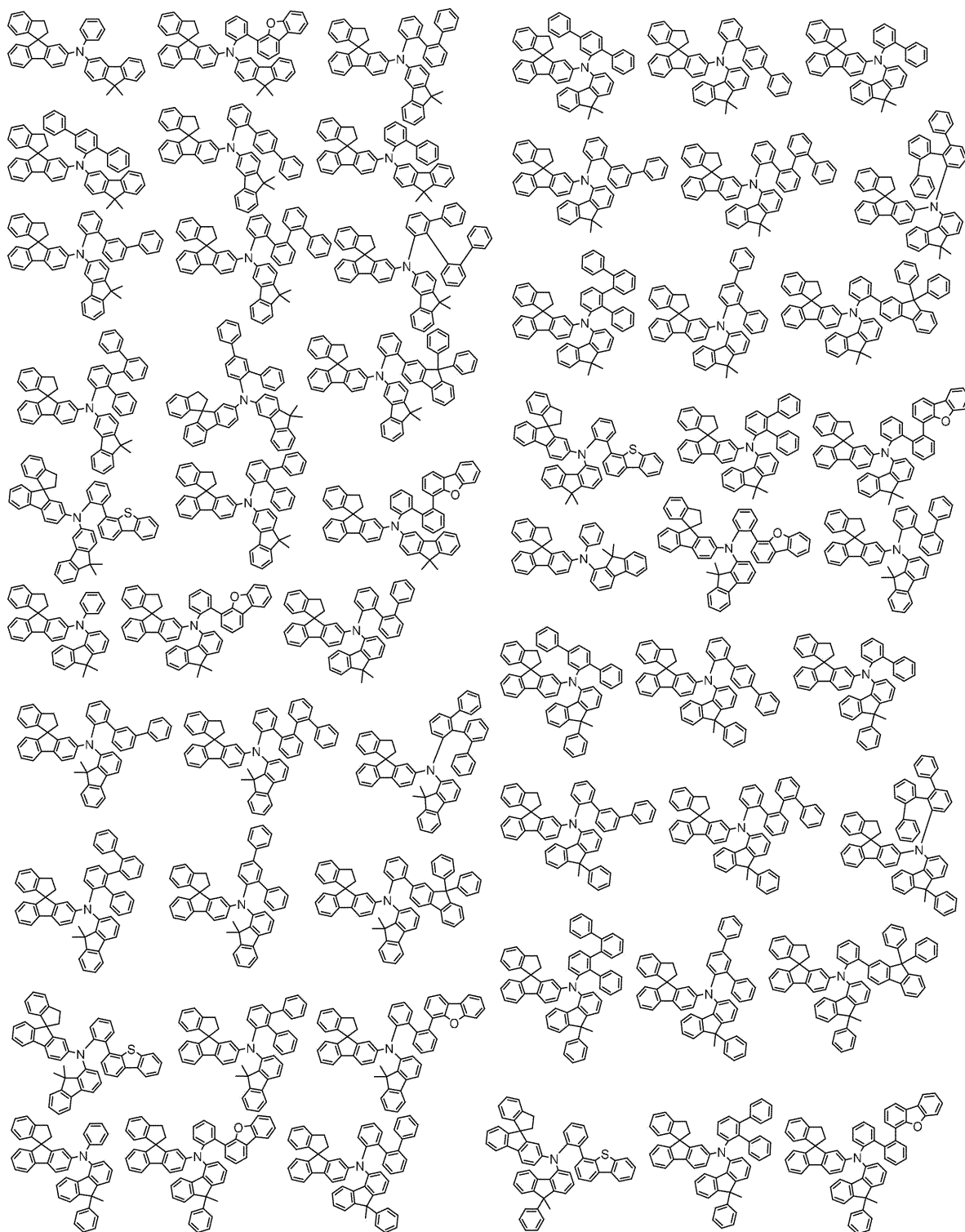
20

30

40

50

【化 7 2】



【 0 2 4 9 】

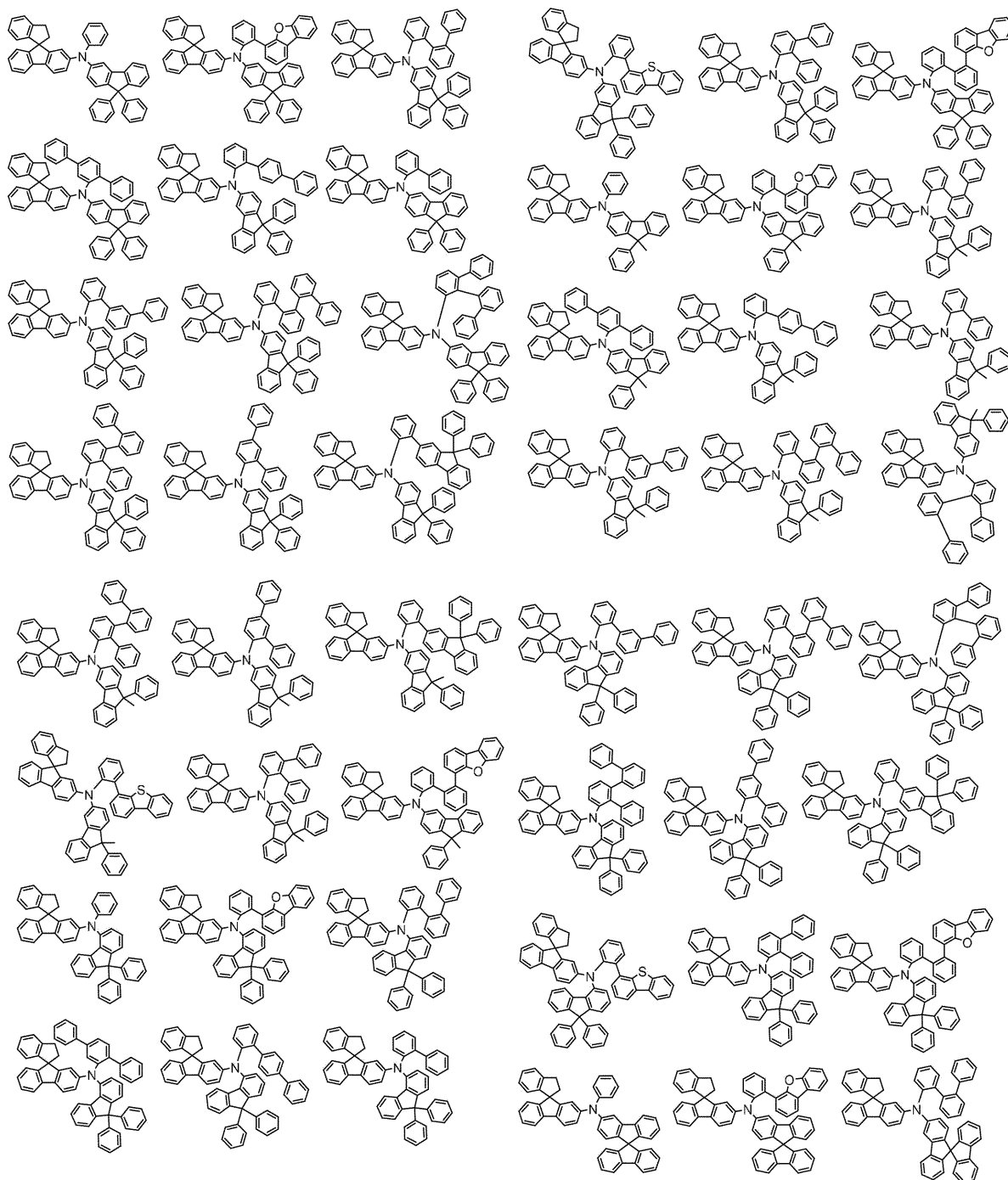
10

20

30

40

【化 7 3】



【 0 2 5 0 】

10

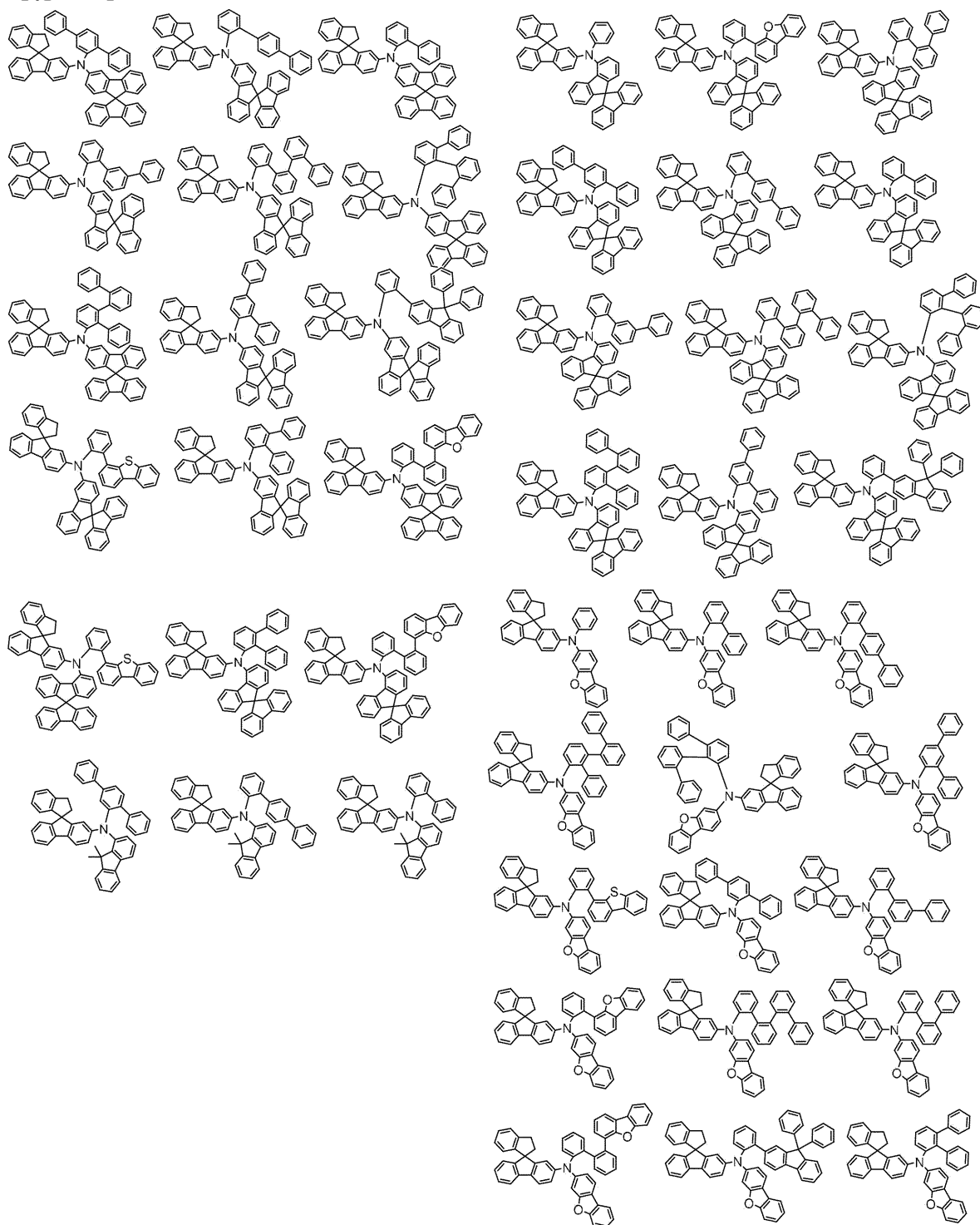
20

30

40

50

【化 7 4】



10

20

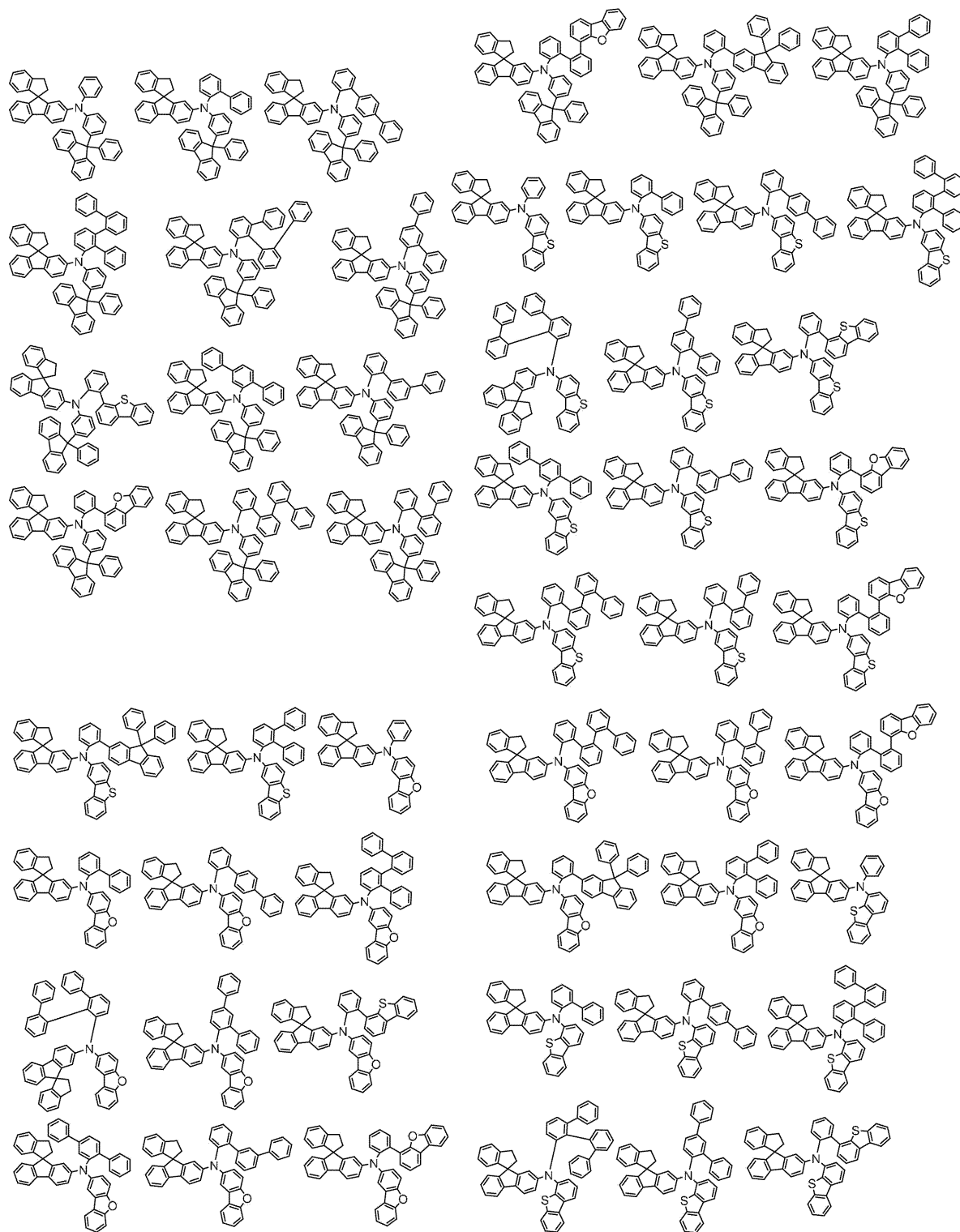
30

40

【 0 2 5 1】

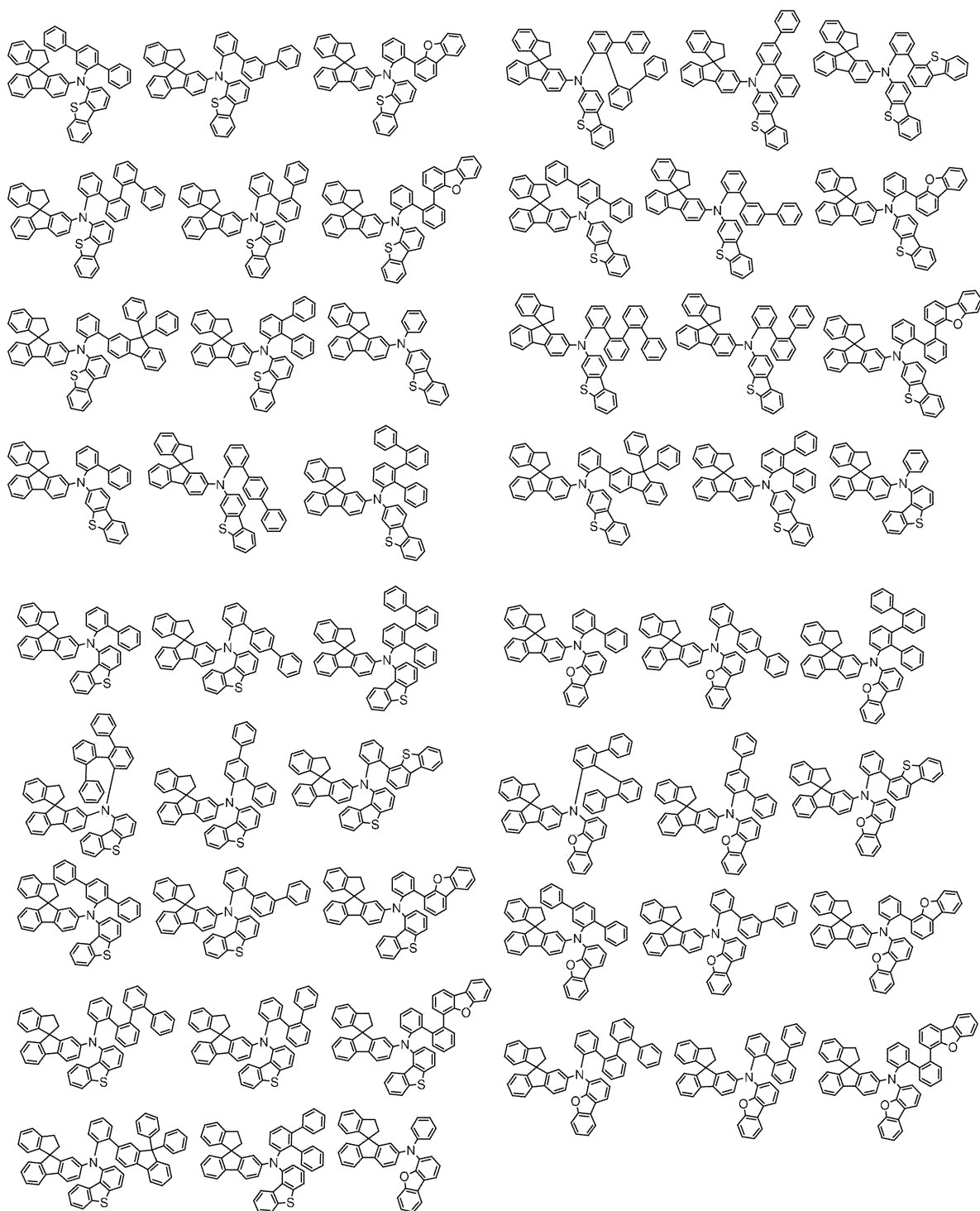
50

【化 7 5】



【 0 2 5 2】

【化 7 6】



10

20

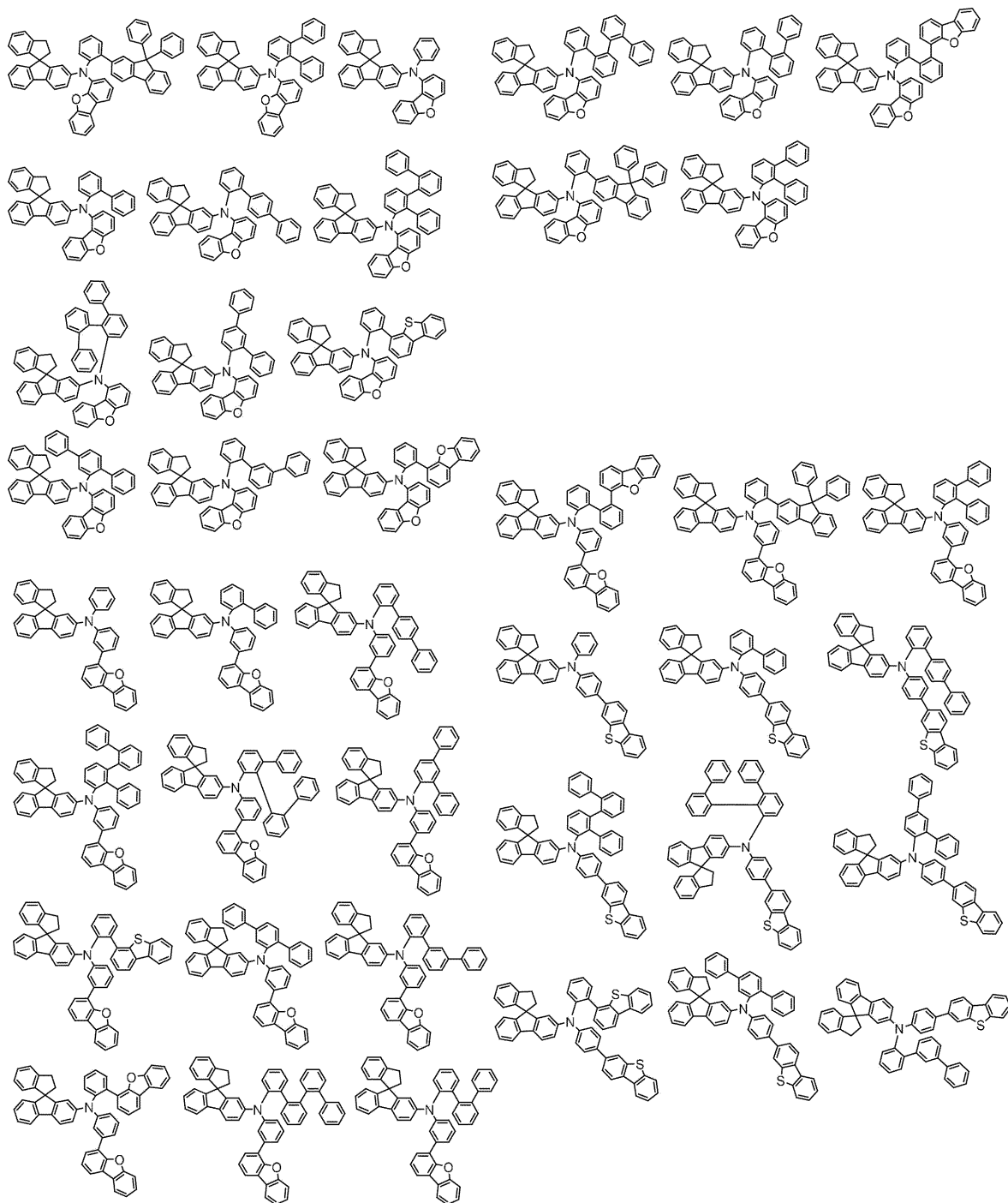
30

40

【 0 2 5 3 】

50

【化 7 7】



10

20

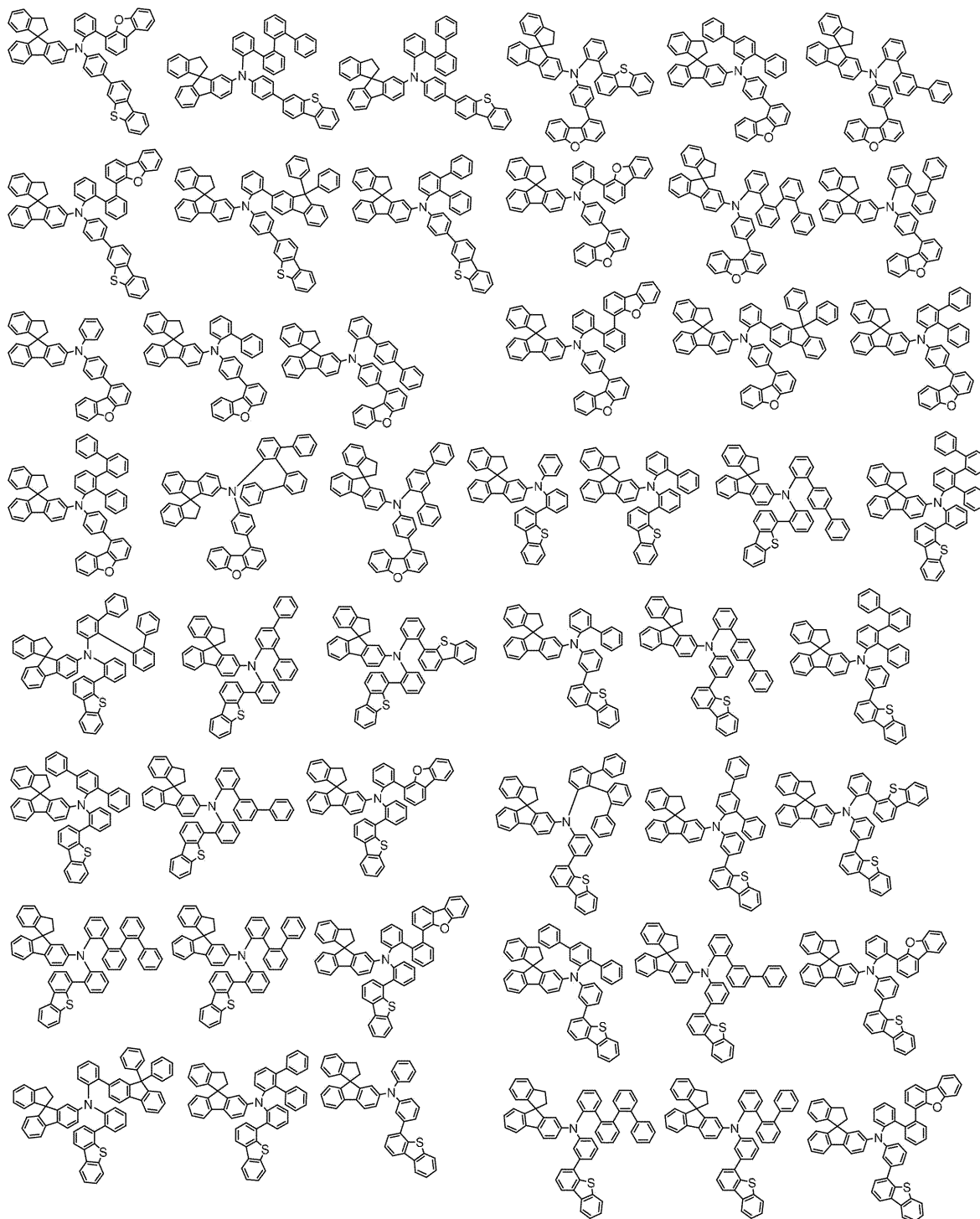
30

【 0 2 5 4】

40

50

【化 7 8】



10

20

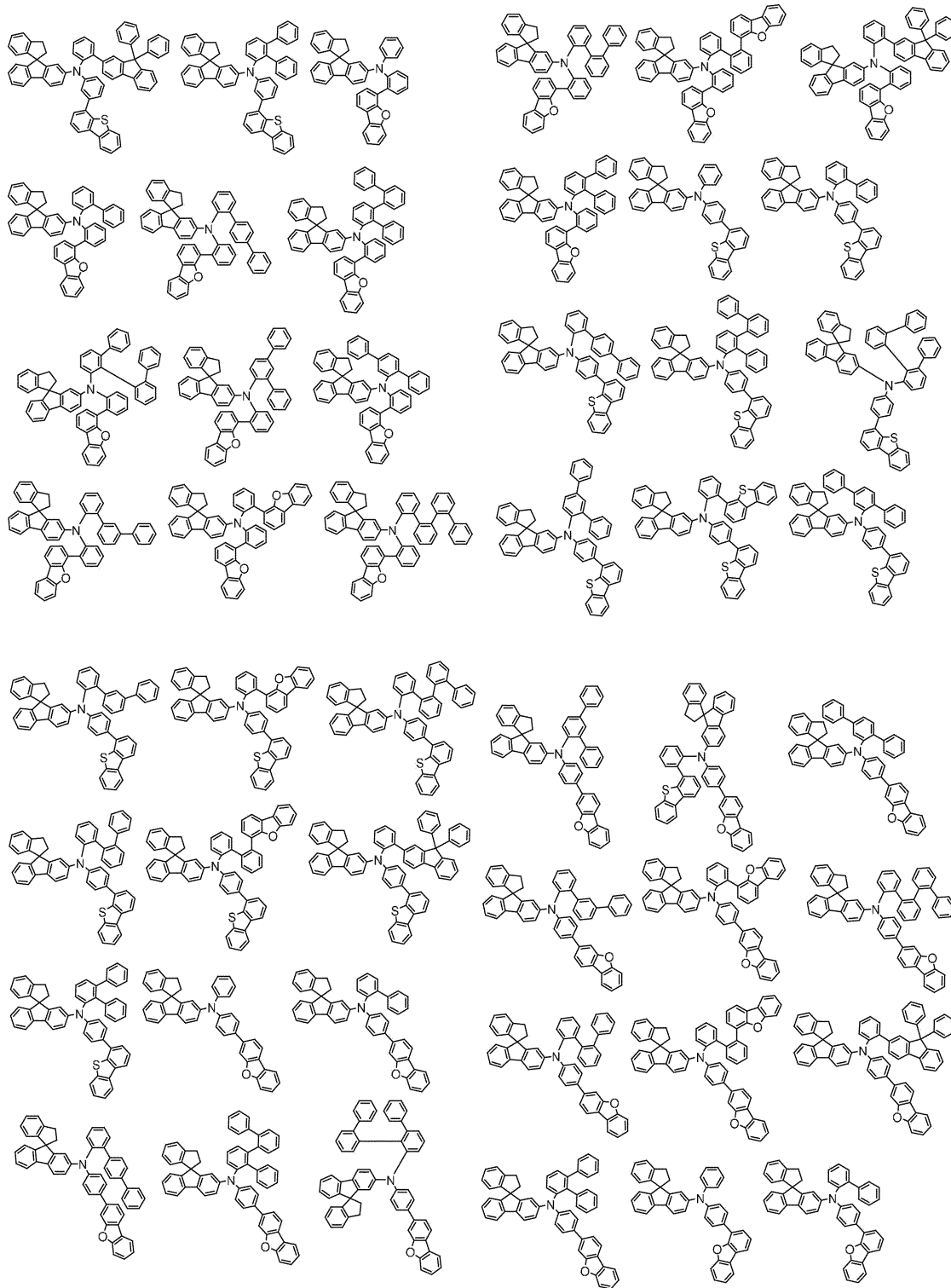
30

【 0 2 5 5】

40

50

【化 7 9】



【0 2 5 6】

10

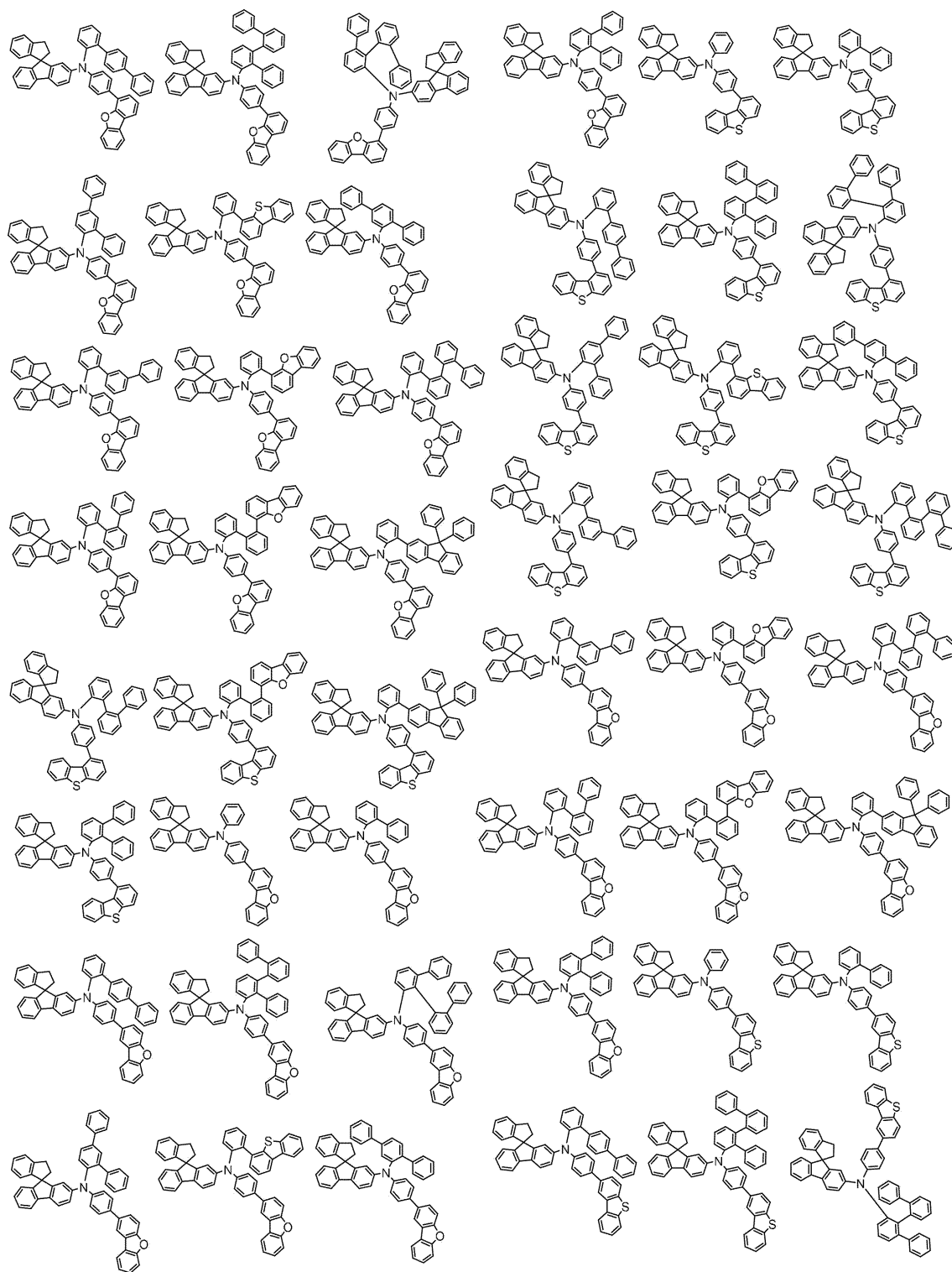
20

30

40

50

【化 8 0】



【 0 2 5 7】

10

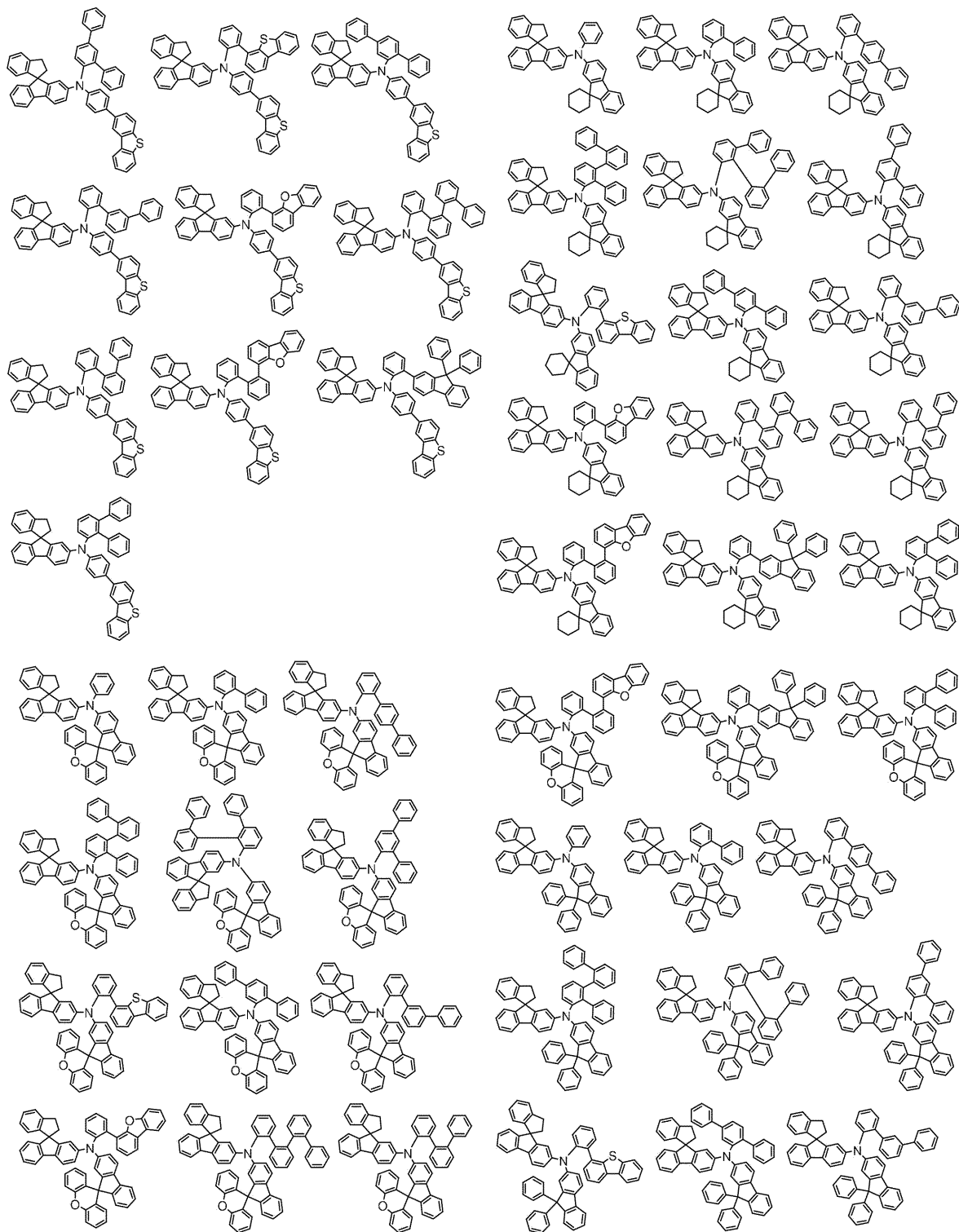
20

30

40

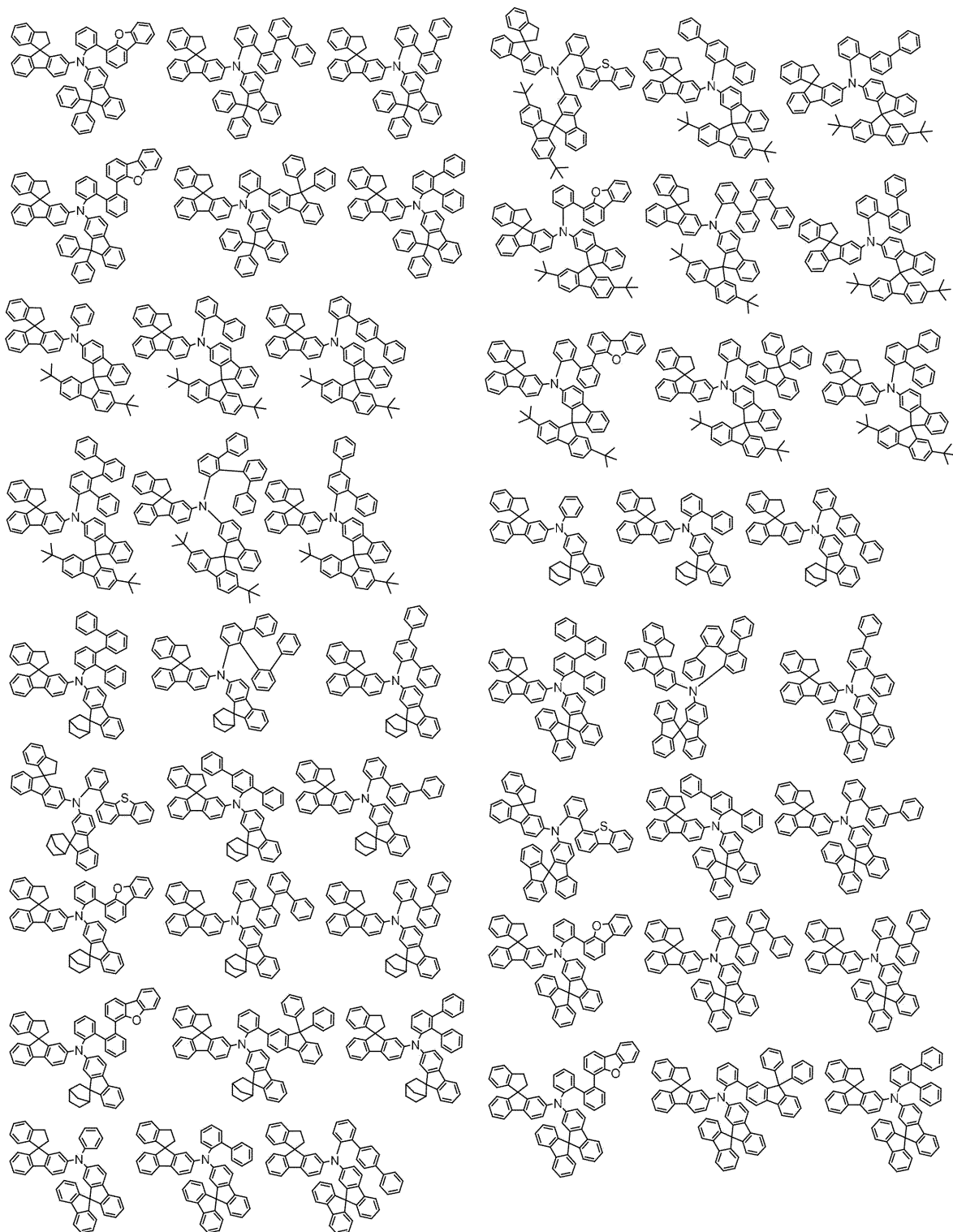
50

【化 8 1】



【 0 2 5 8 】

【化 8 2】



【 0 2 5 9 】

10

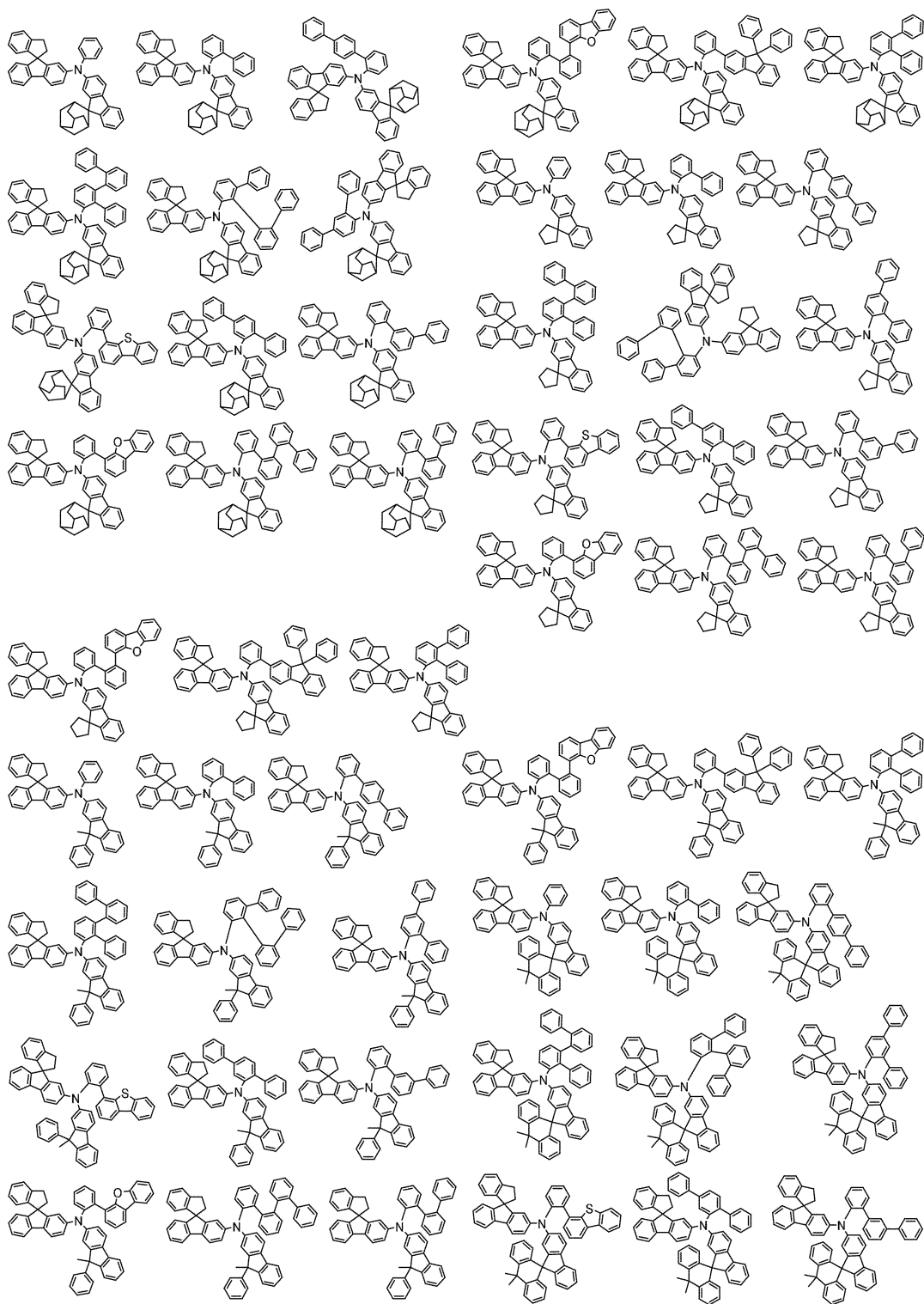
20

30

40

50

【化 8 3】



10

20

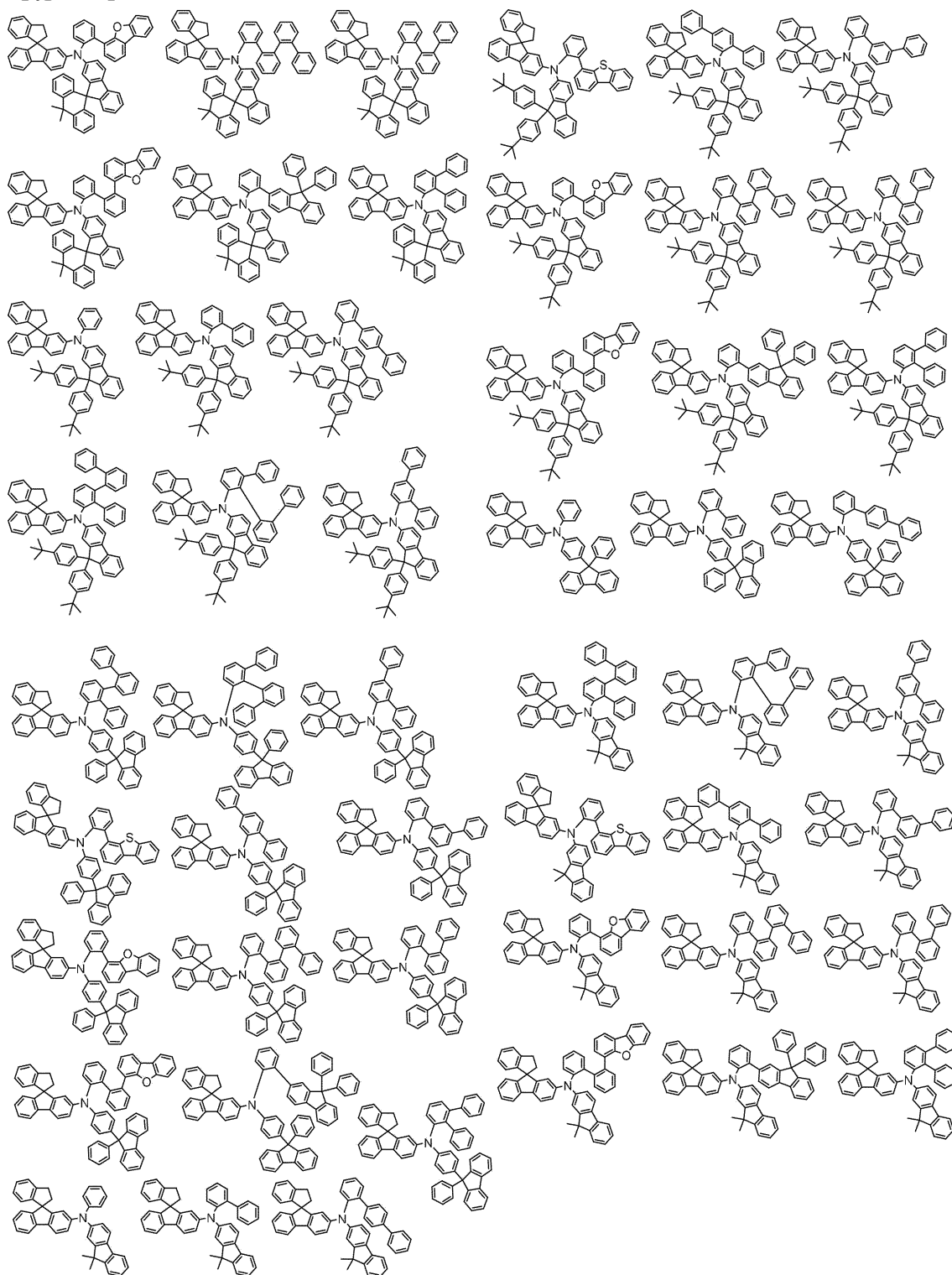
30

40

【 0 2 6 0】

50

【化 8 4】



【 0 2 6 1】

10

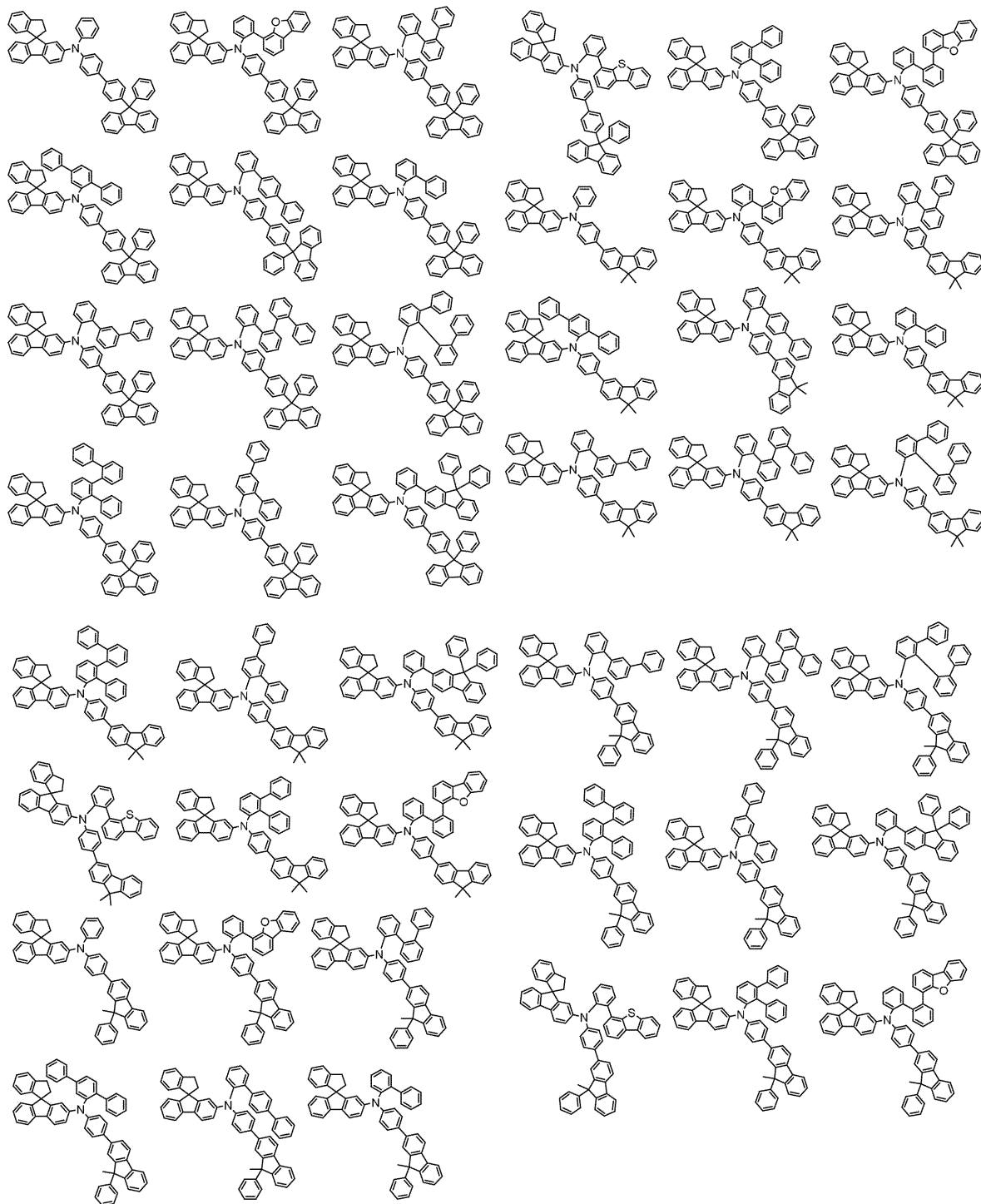
20

30

40

50

【化 8 5】



10

20

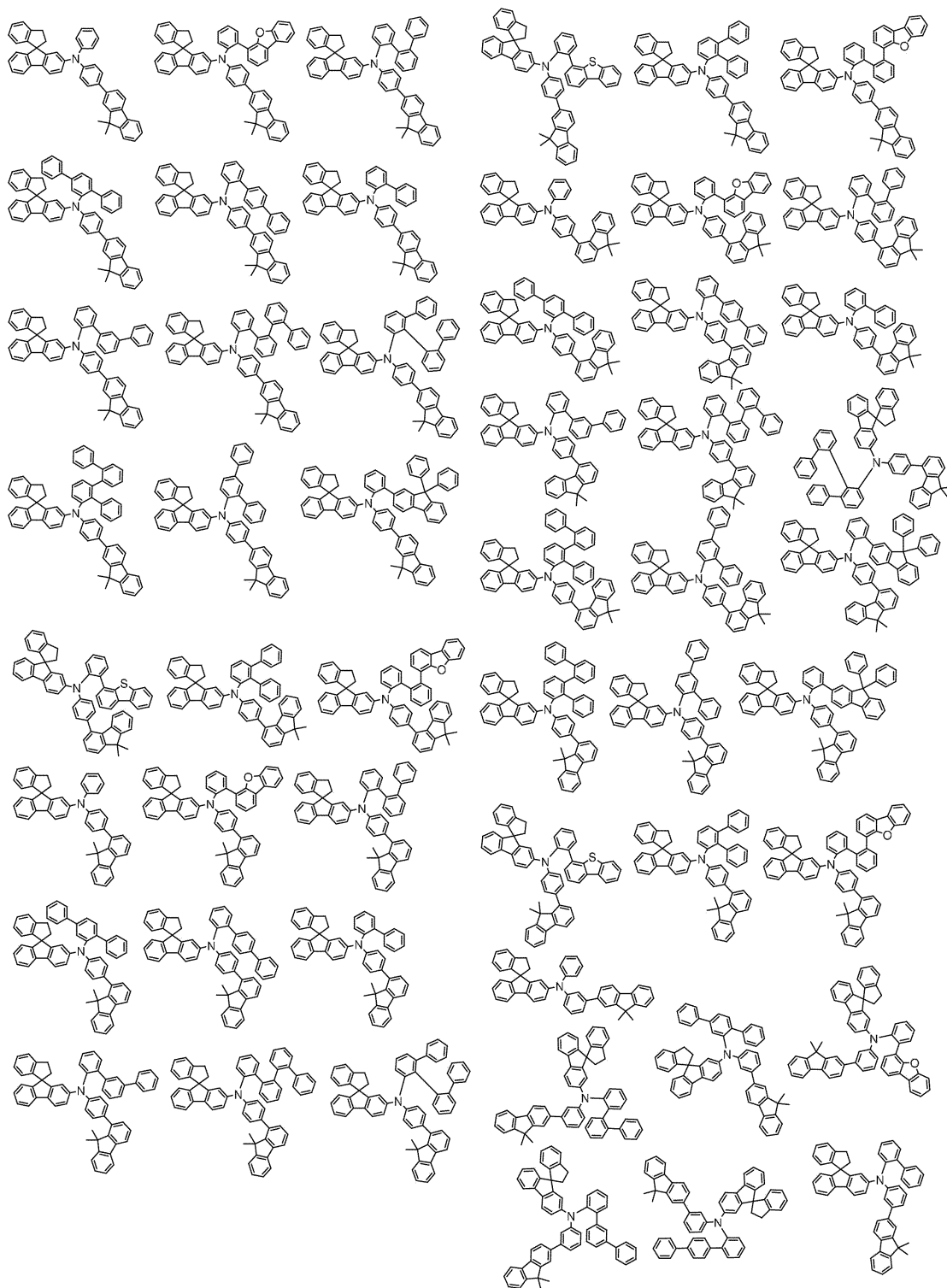
30

【 0 2 6 2】

40

50

【化 8 6】



【 0 2 6 3】

10

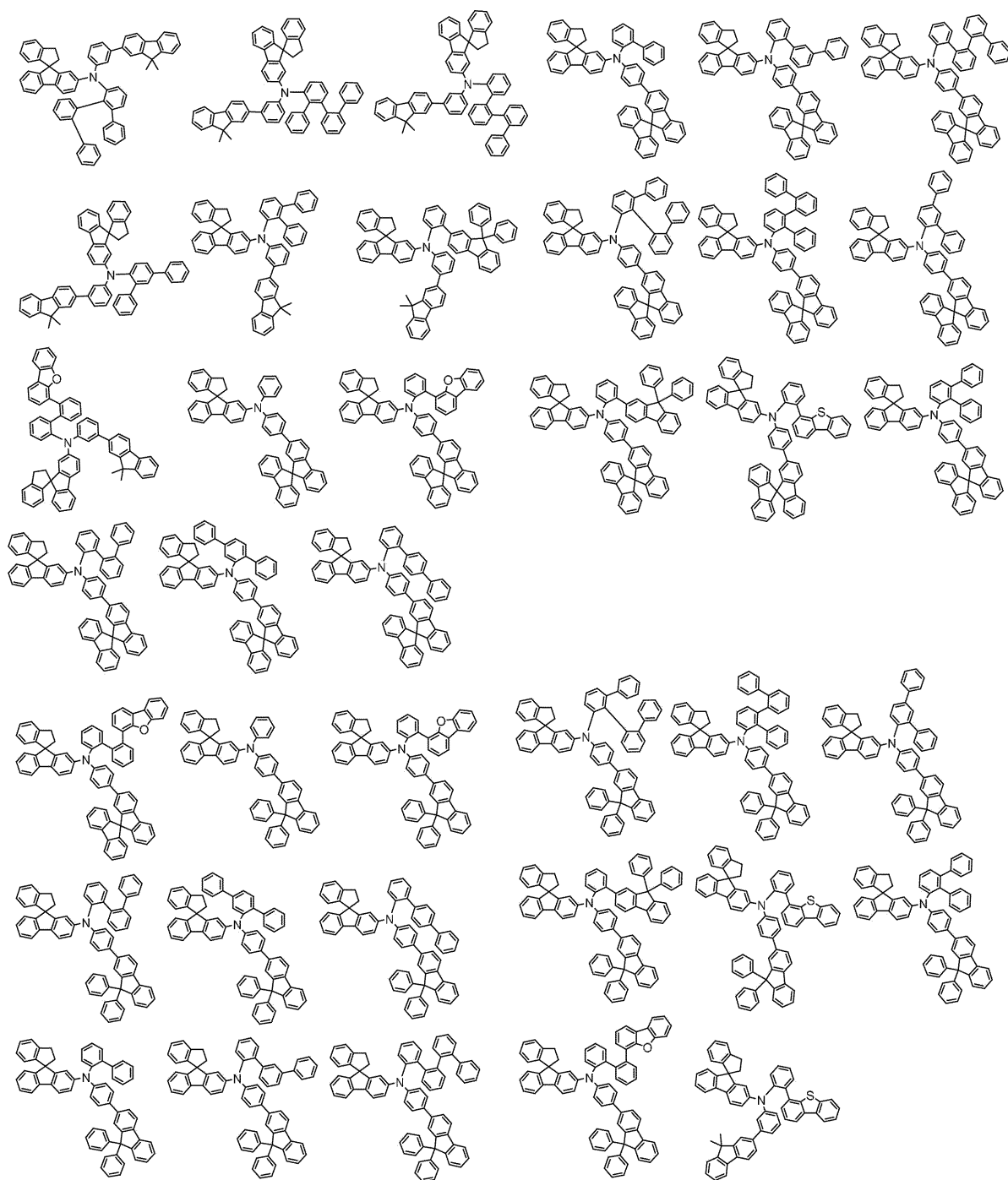
20

30

40

50

【化 8 7】



【 0 2 6 4 】

10

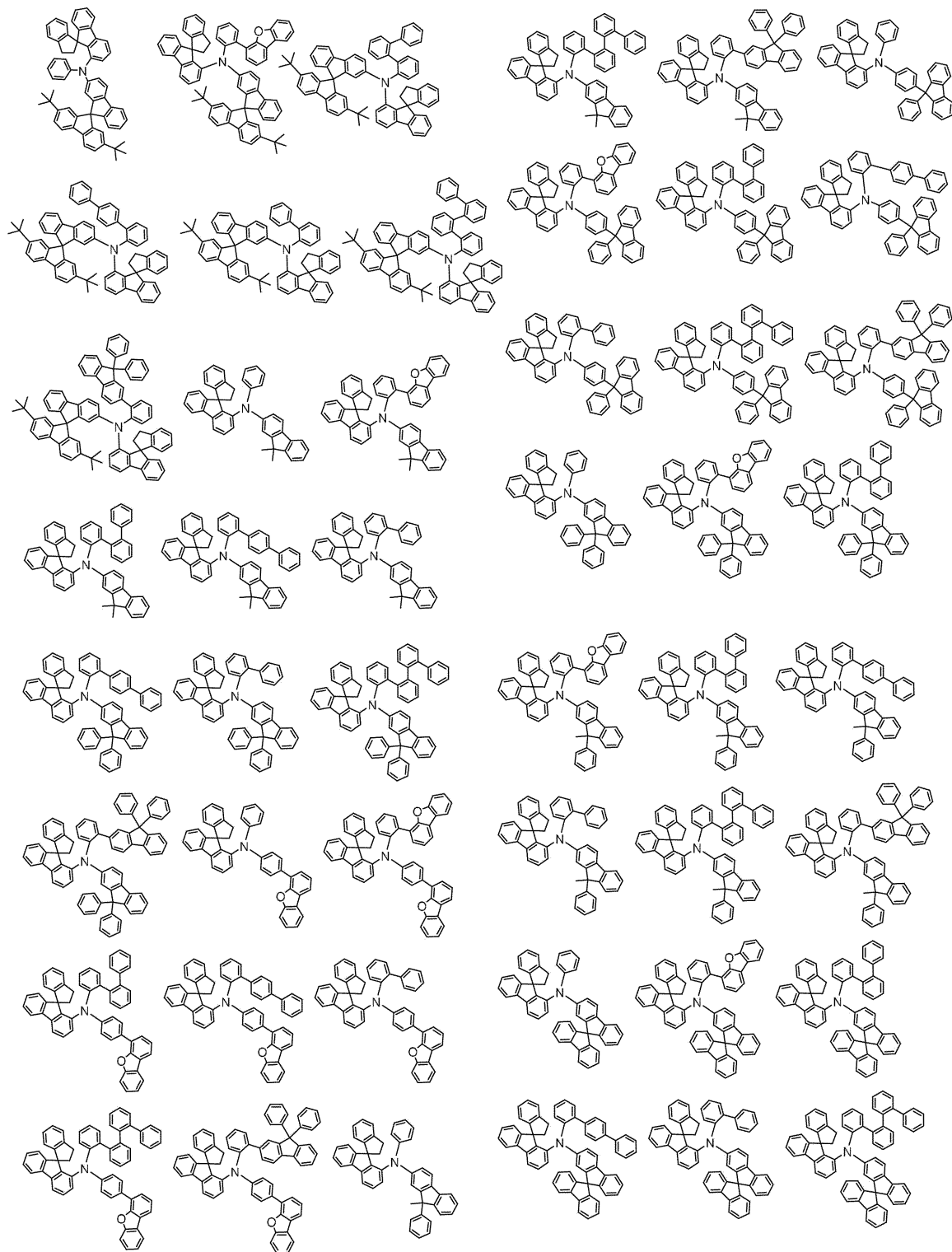
20

30

40

50

【化 8 8】



【 0 2 6 5】

10

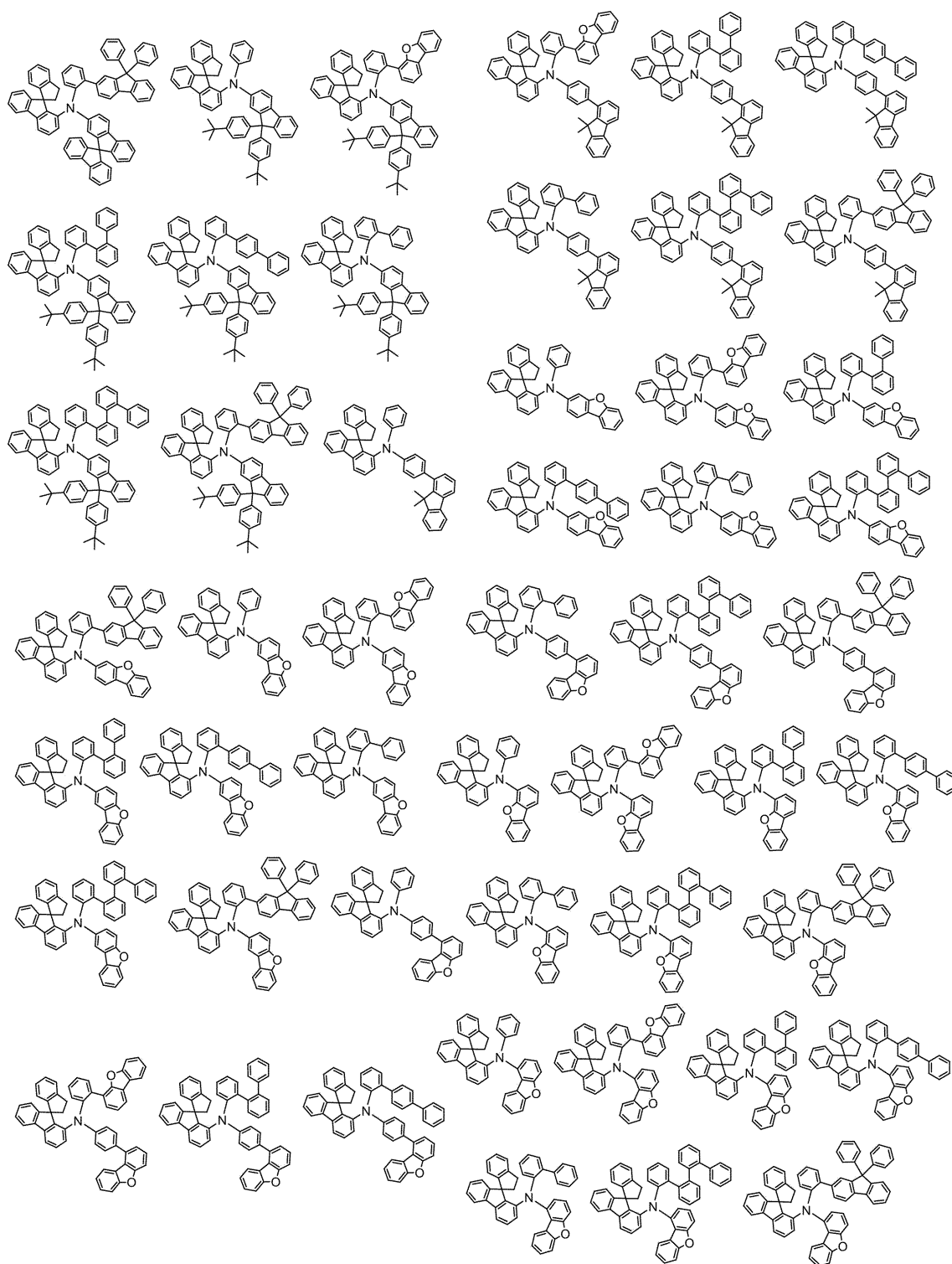
20

30

40

50

【化 8 9】



【 0 2 6 6】

10

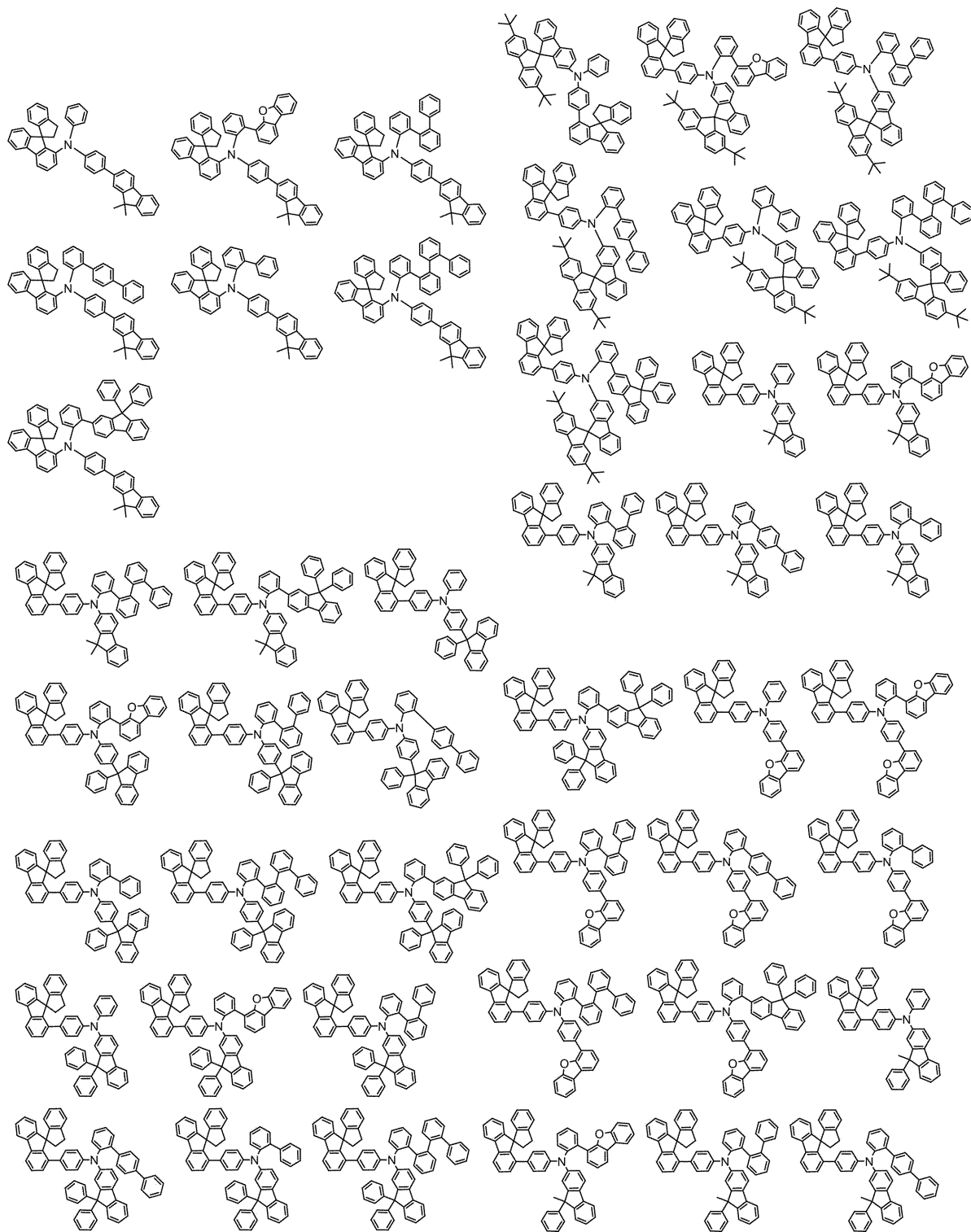
20

30

40

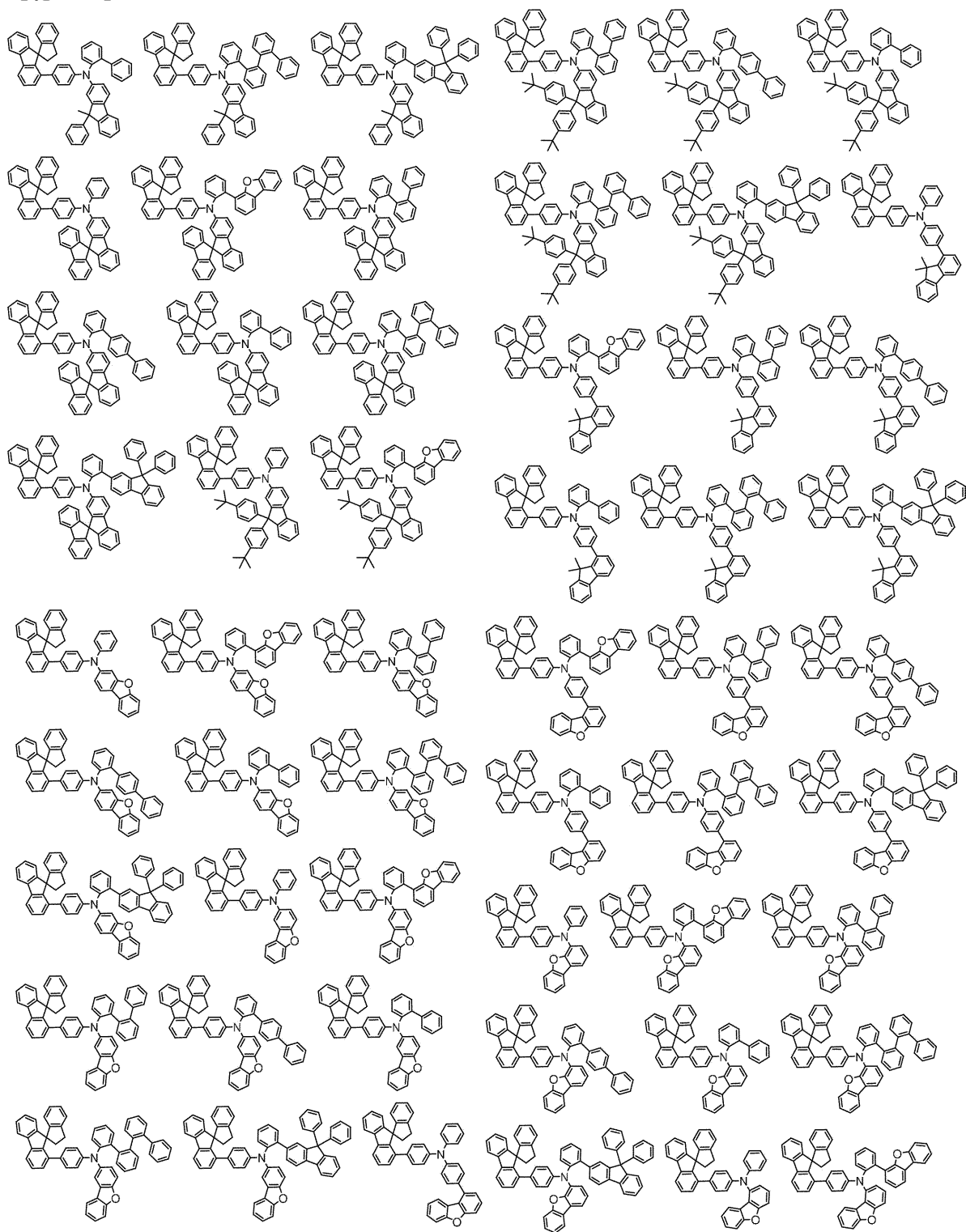
50

【化 9 0】



【 0 2 6 7】

【化 9 1】



【 0 2 6 8 】

10

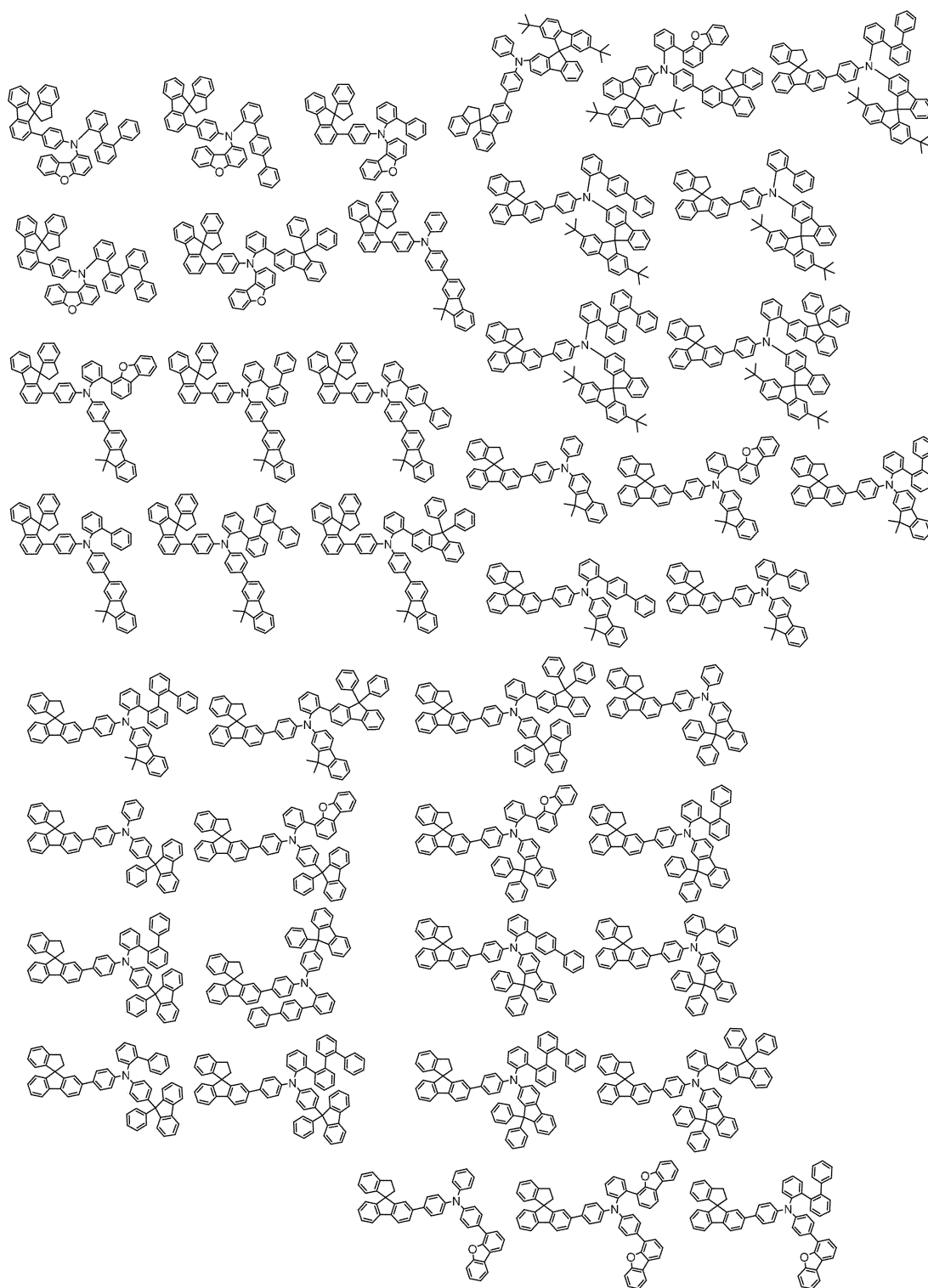
20

30

40

50

【化 9 2】



【 0 2 6 9 】

10

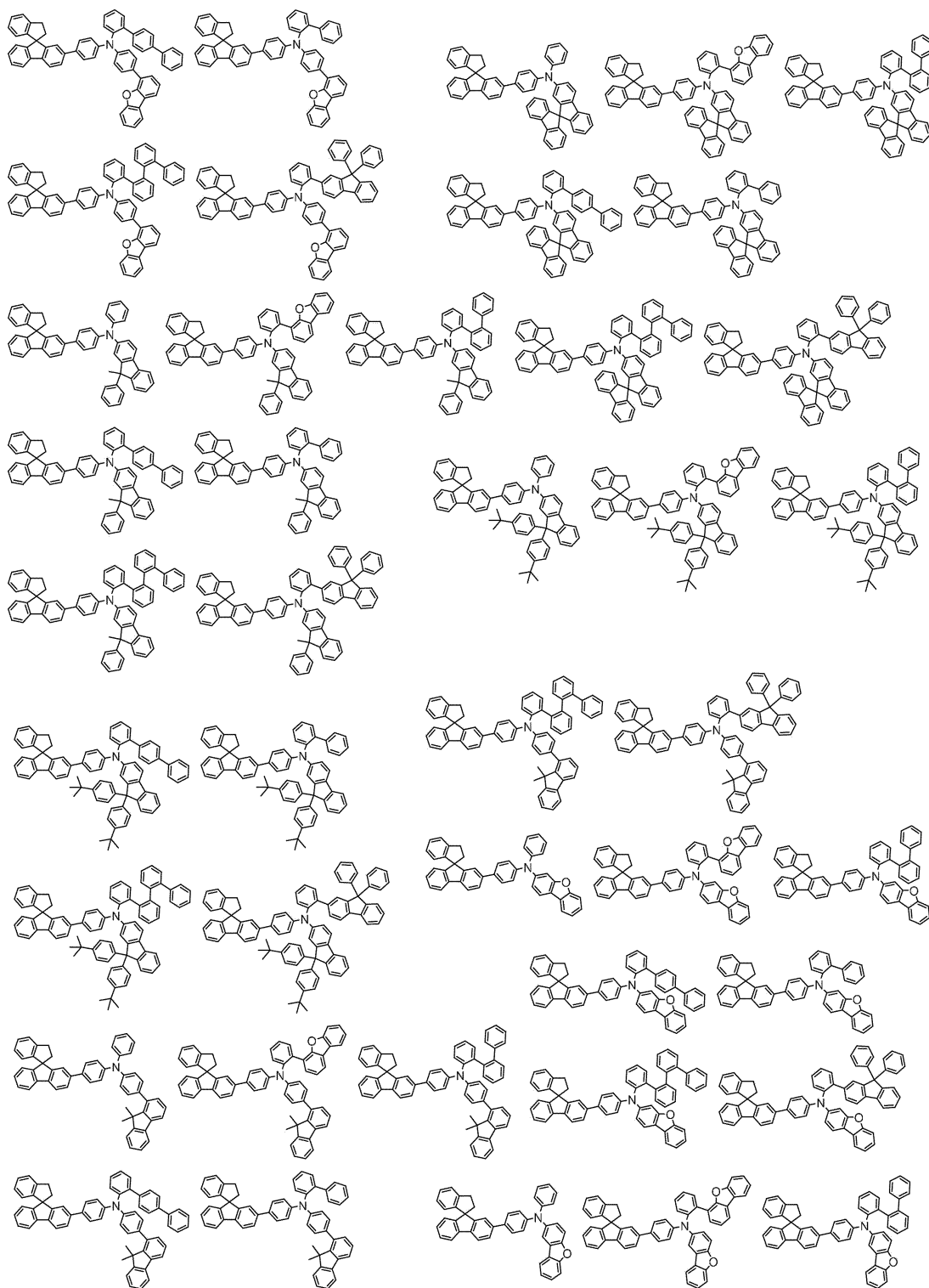
20

30

40

50

【化 9 3】



【 0 2 7 0】

10

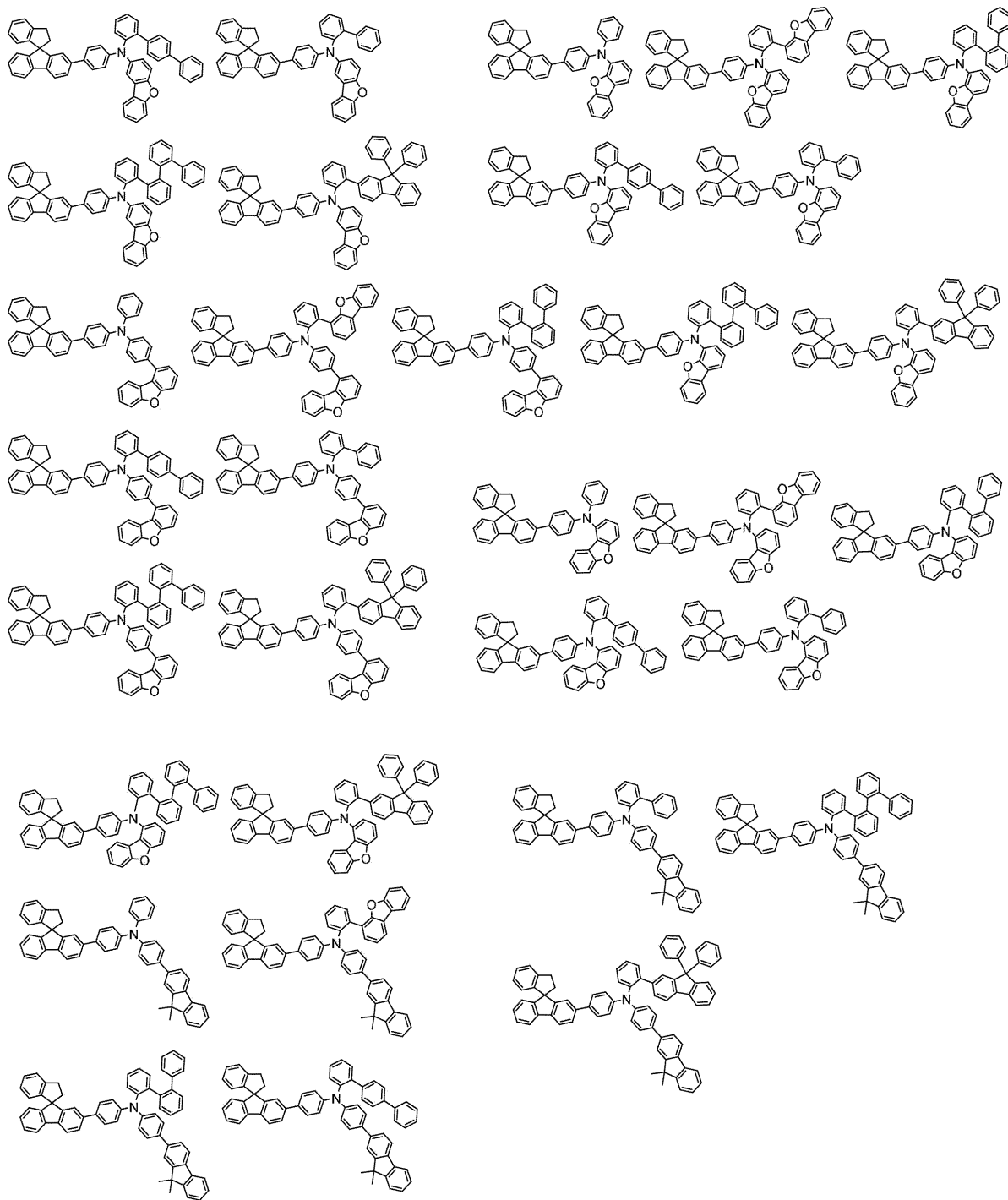
20

30

40

50

【化 9 4】



【 0 2 7 1】

10

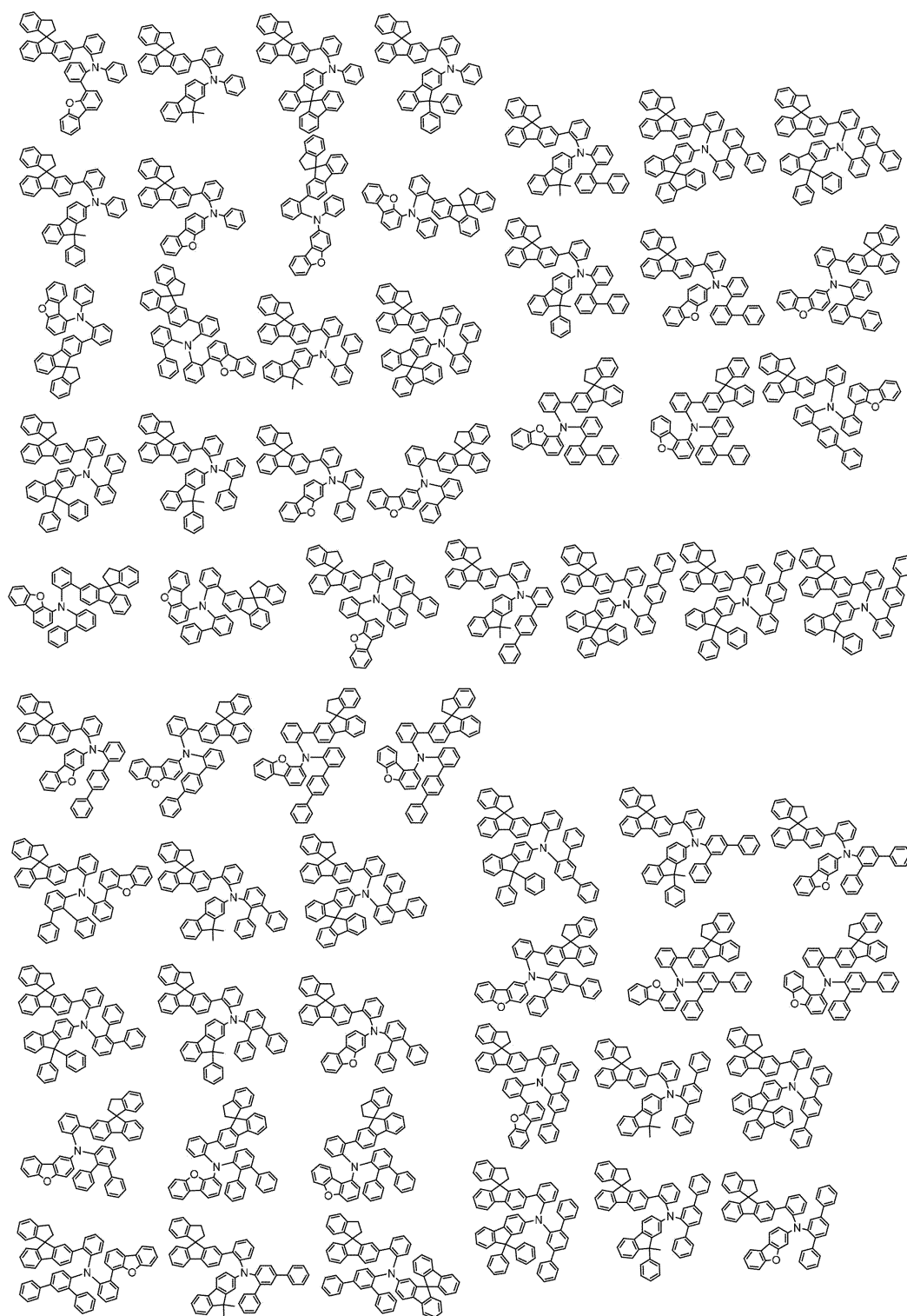
20

30

40

50

【化 9 5】



【 0 2 7 2】

10

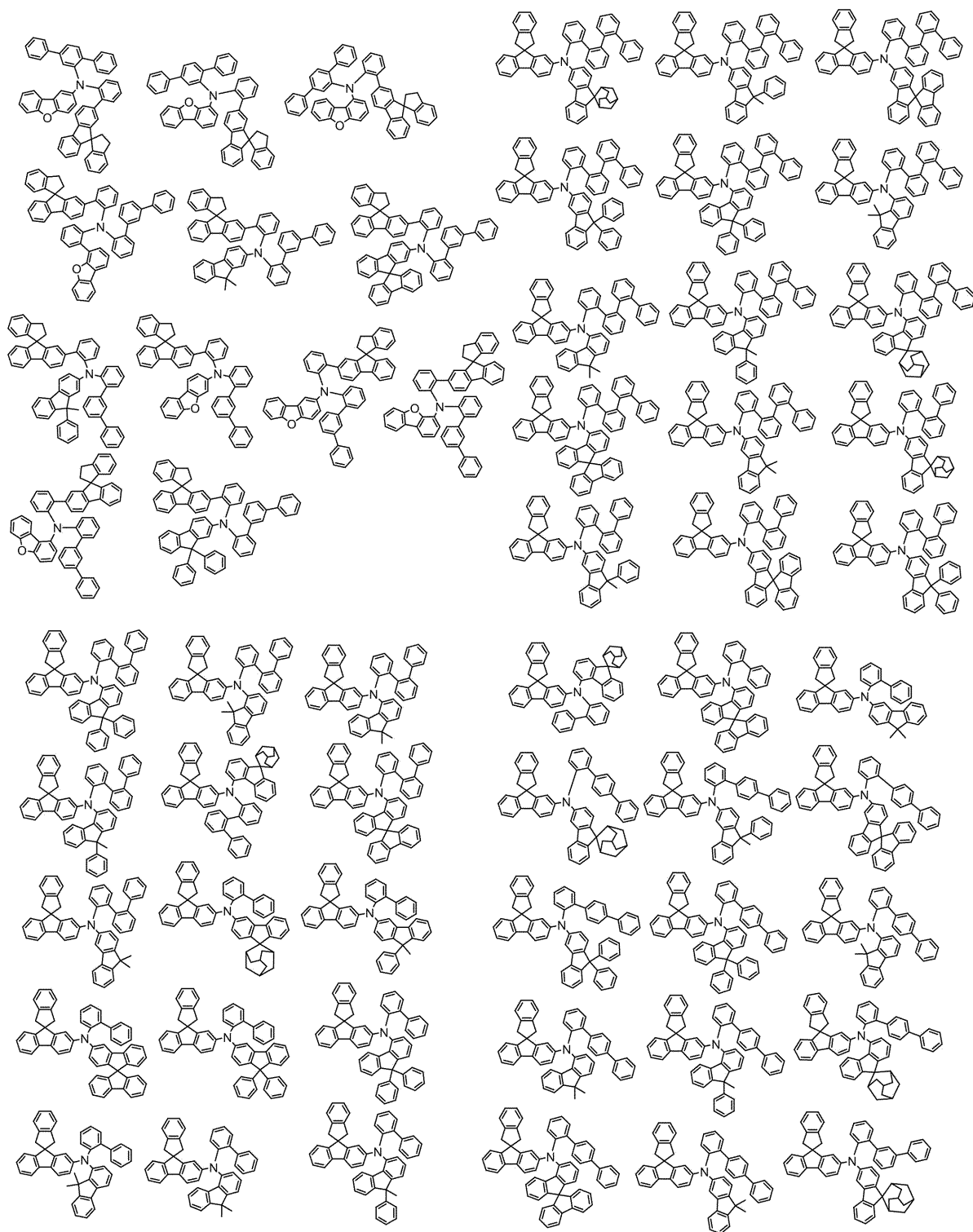
20

30

40

50

【化 9 6】



【 0 2 7 3】

10

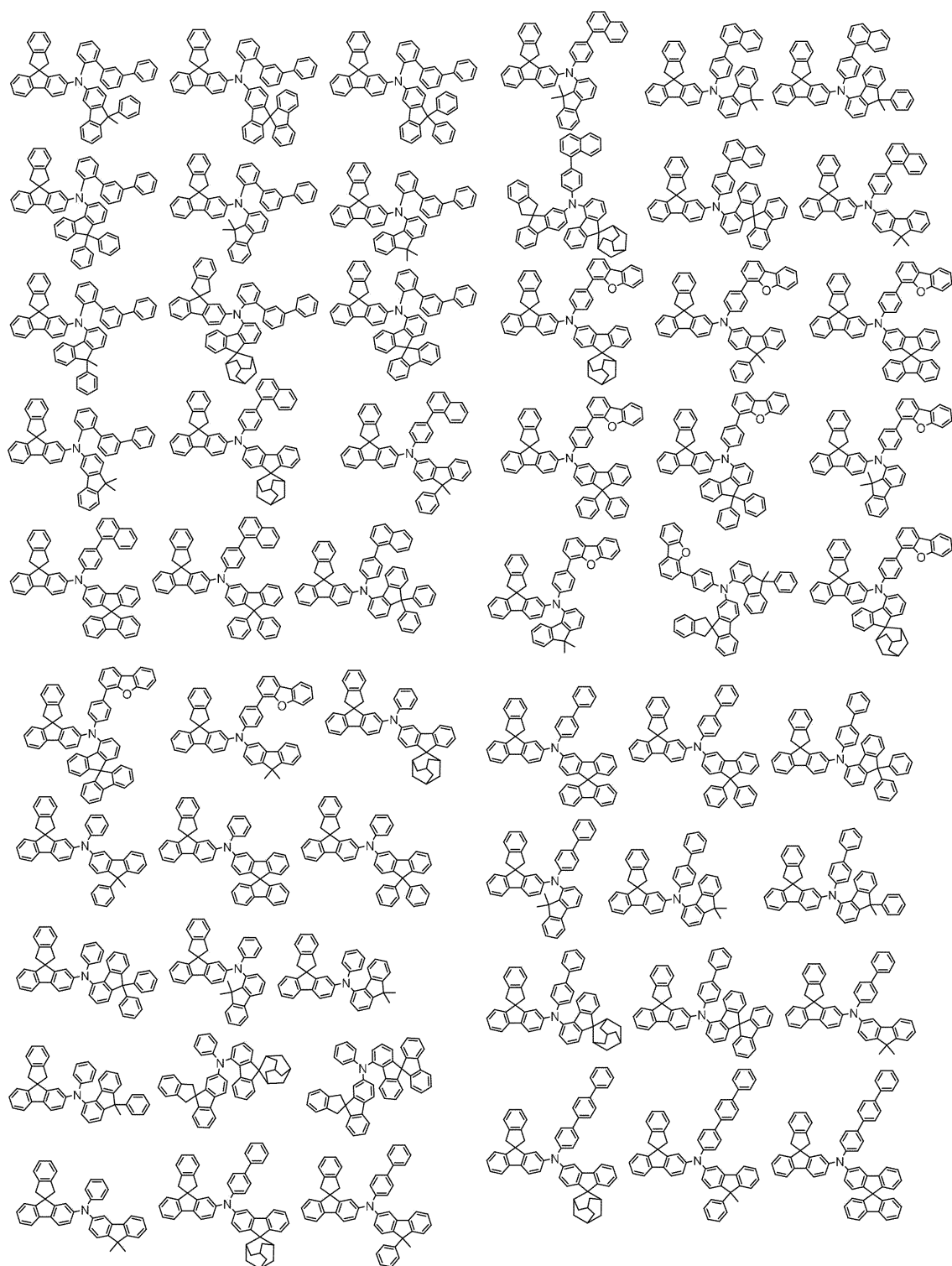
20

30

40

50

【化 9 7】



【 0 2 7 4】

10

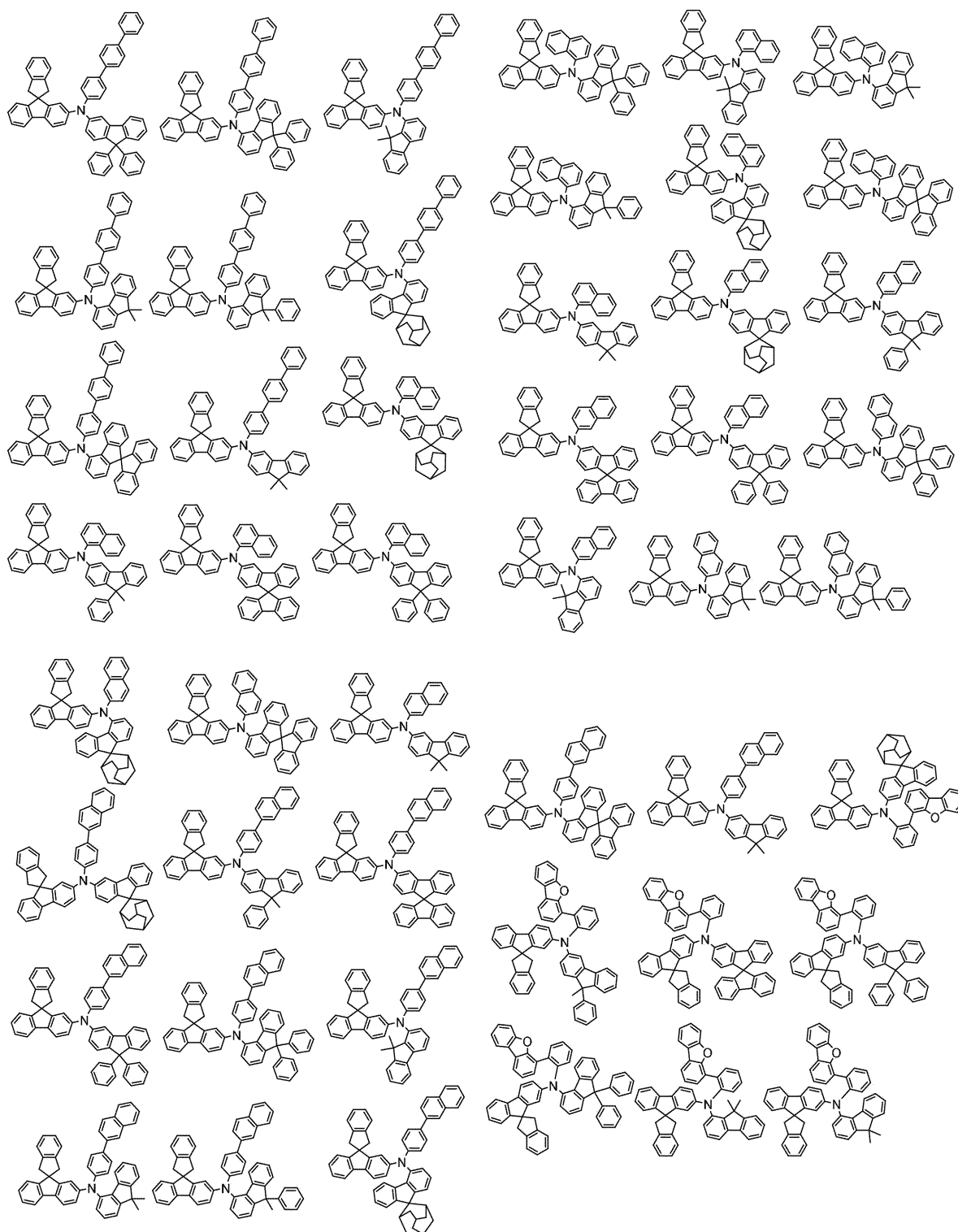
20

30

40

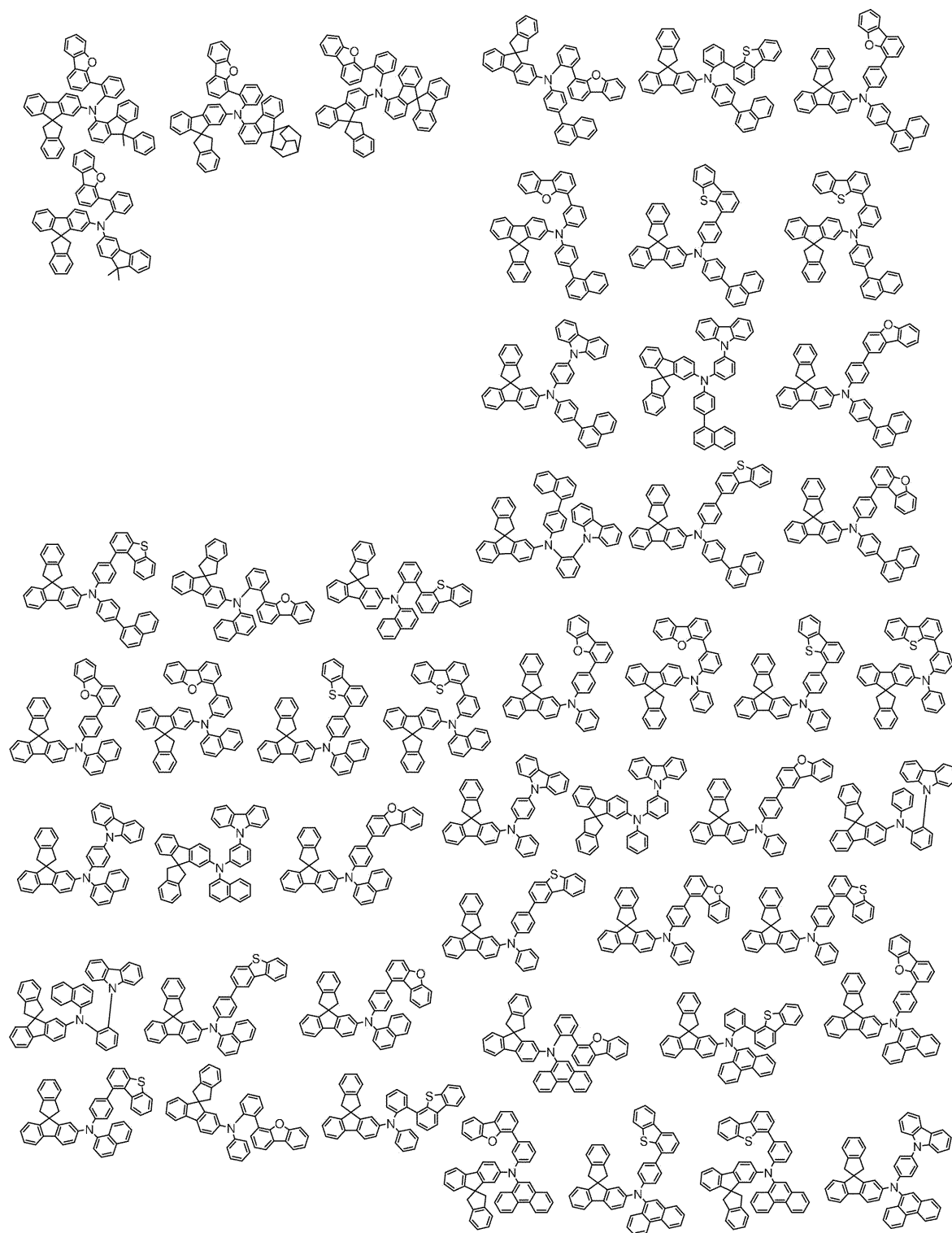
50

【化 9 8】



【 0 2 7 5】

【化 9 9】



【 0 2 7 6】

10

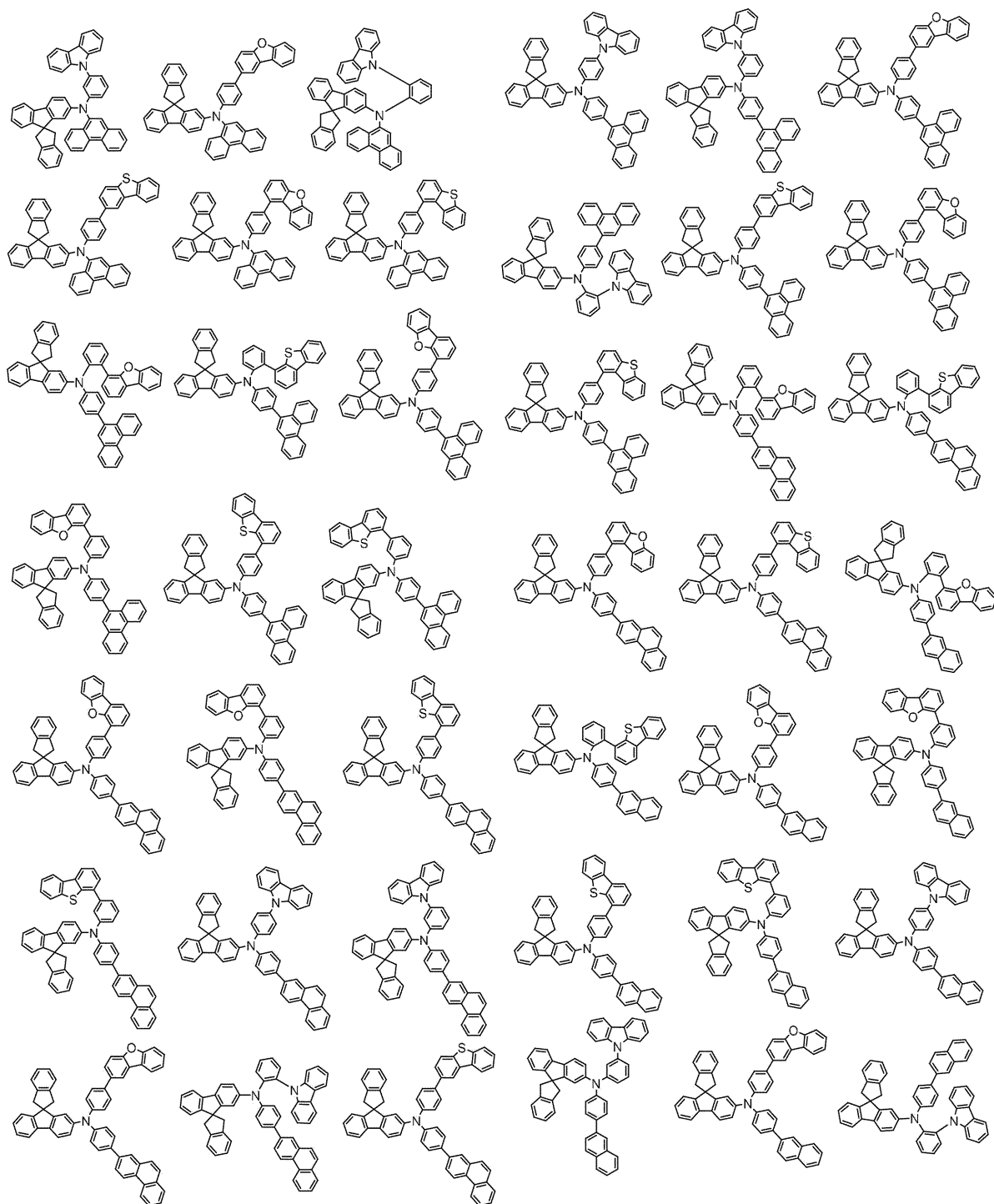
20

30

40

50

【化 1 0 0】



【 0 2 7 7】

10

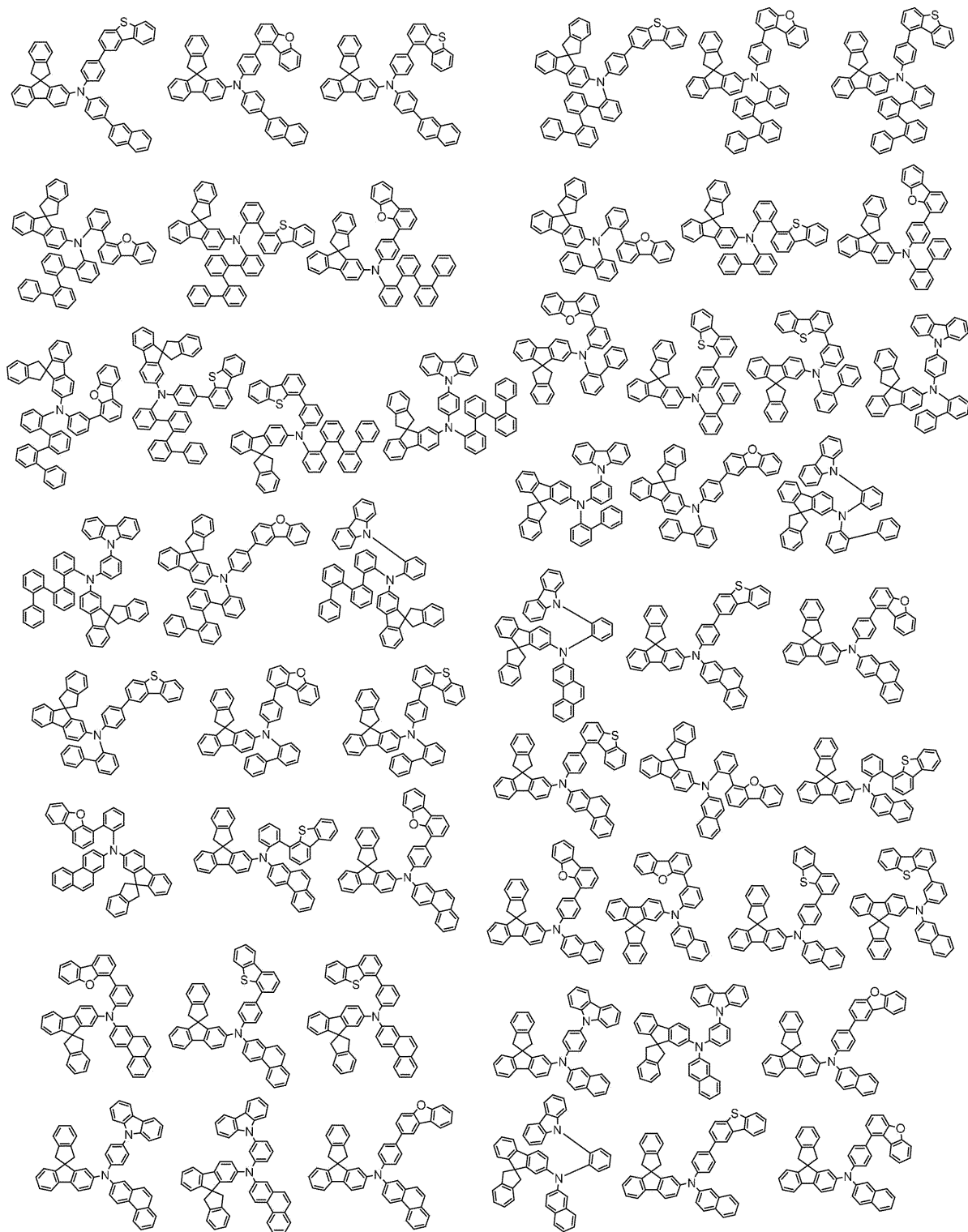
20

30

40

50

【化 1 0 1】



【 0 2 7 8 】

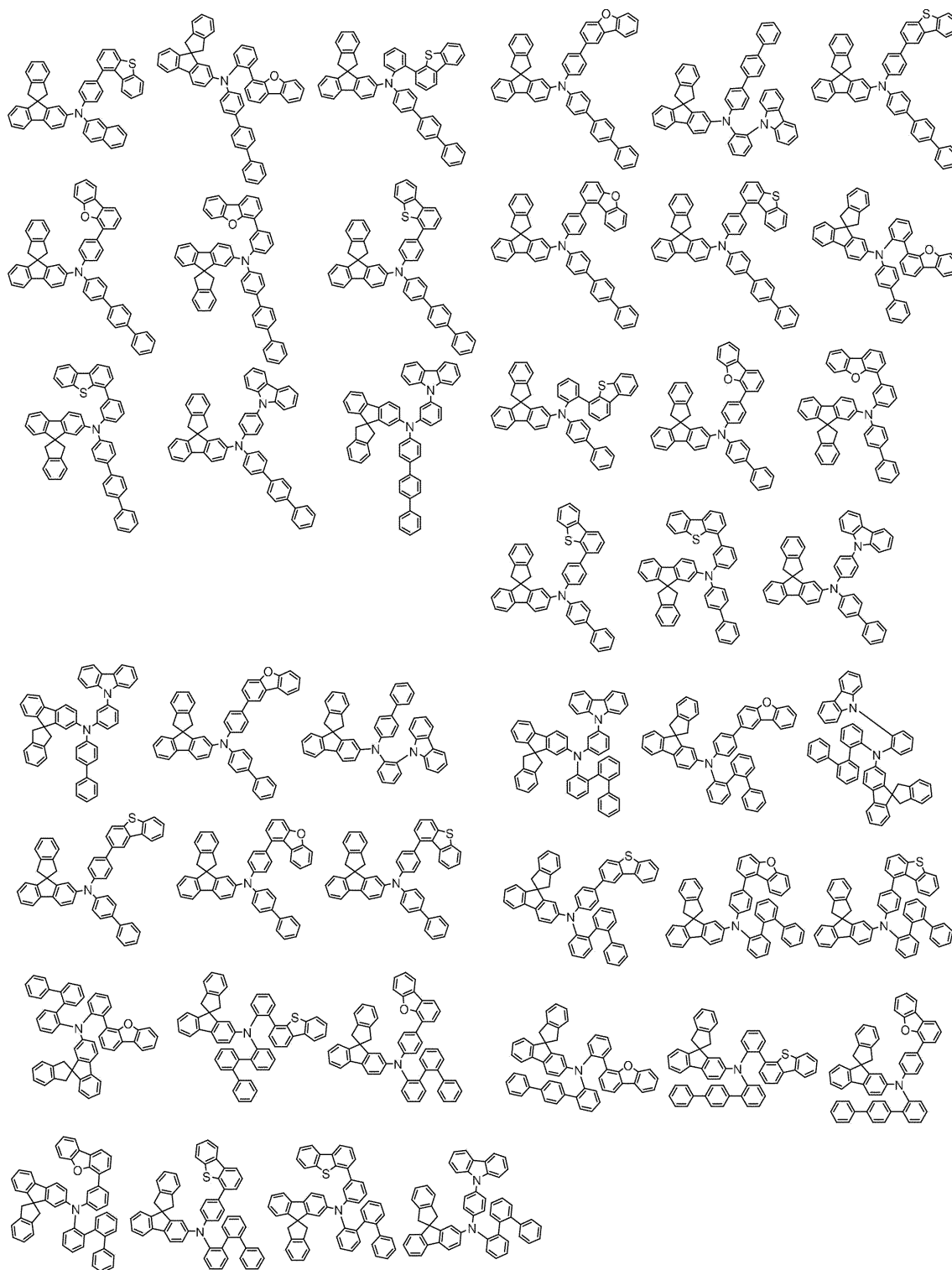
10

20

30

40

【化 1 0 2】



【 0 2 7 9】

10

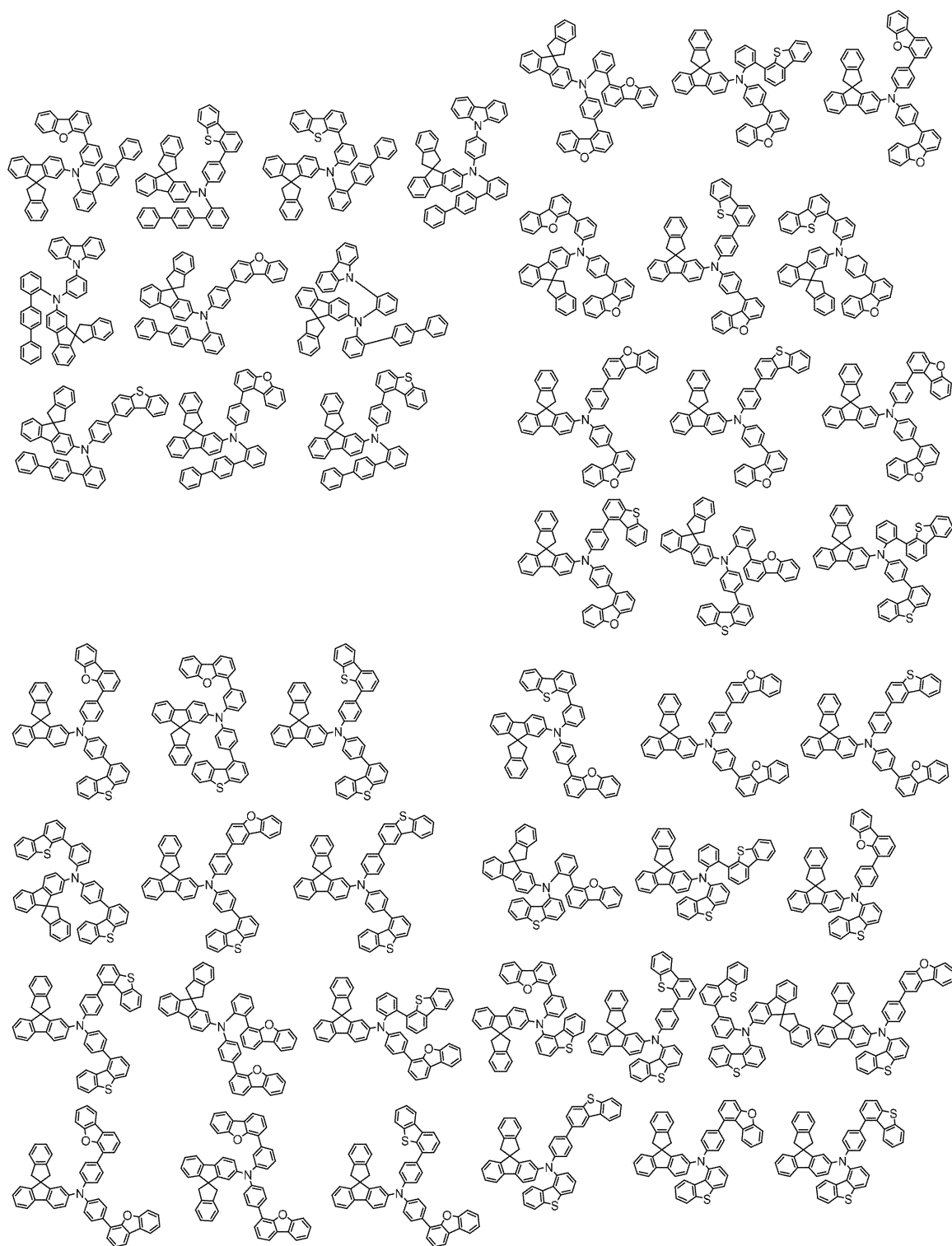
20

30

40

50

【化 1 0 3】



【 0 2 8 0】

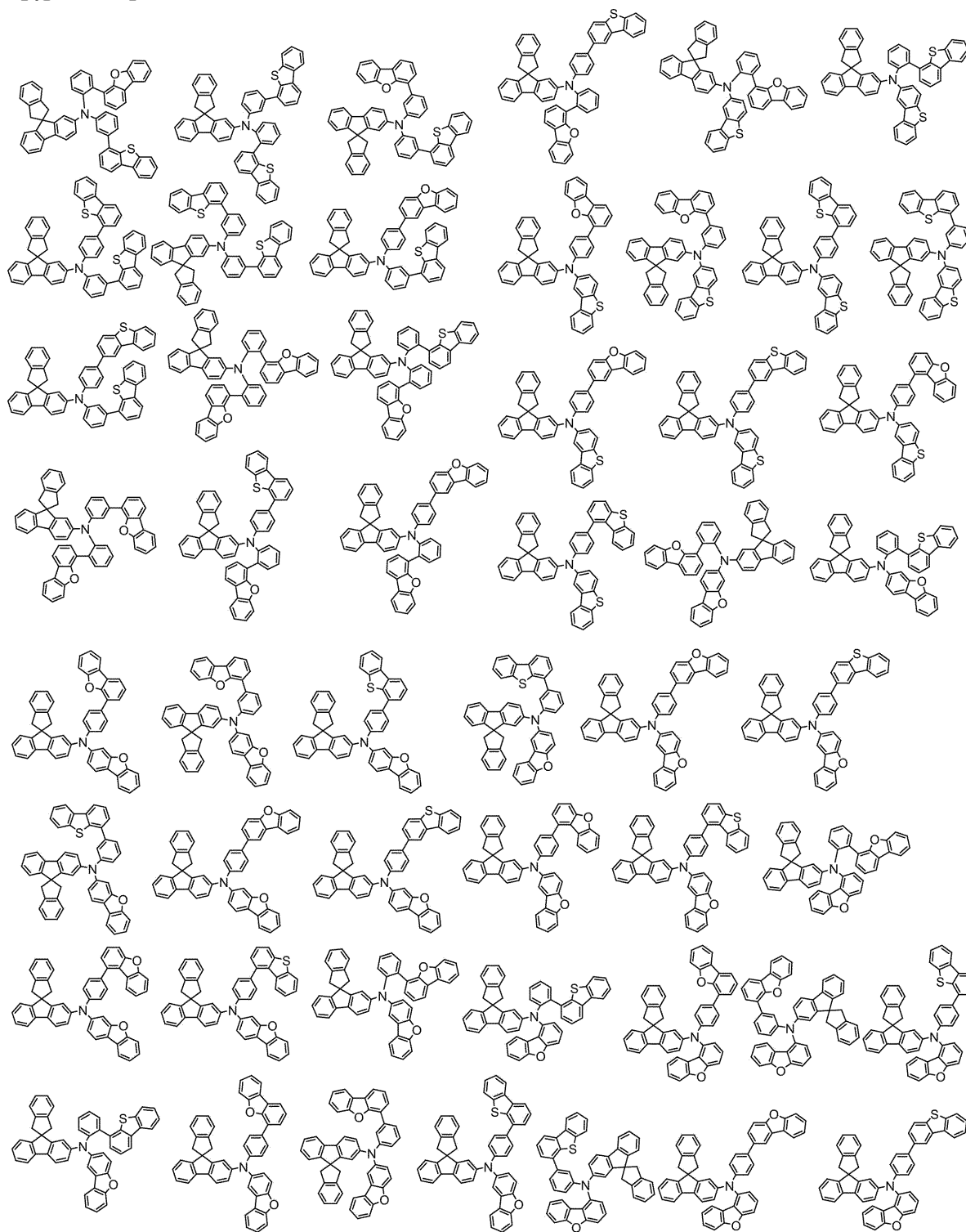
10

20

30

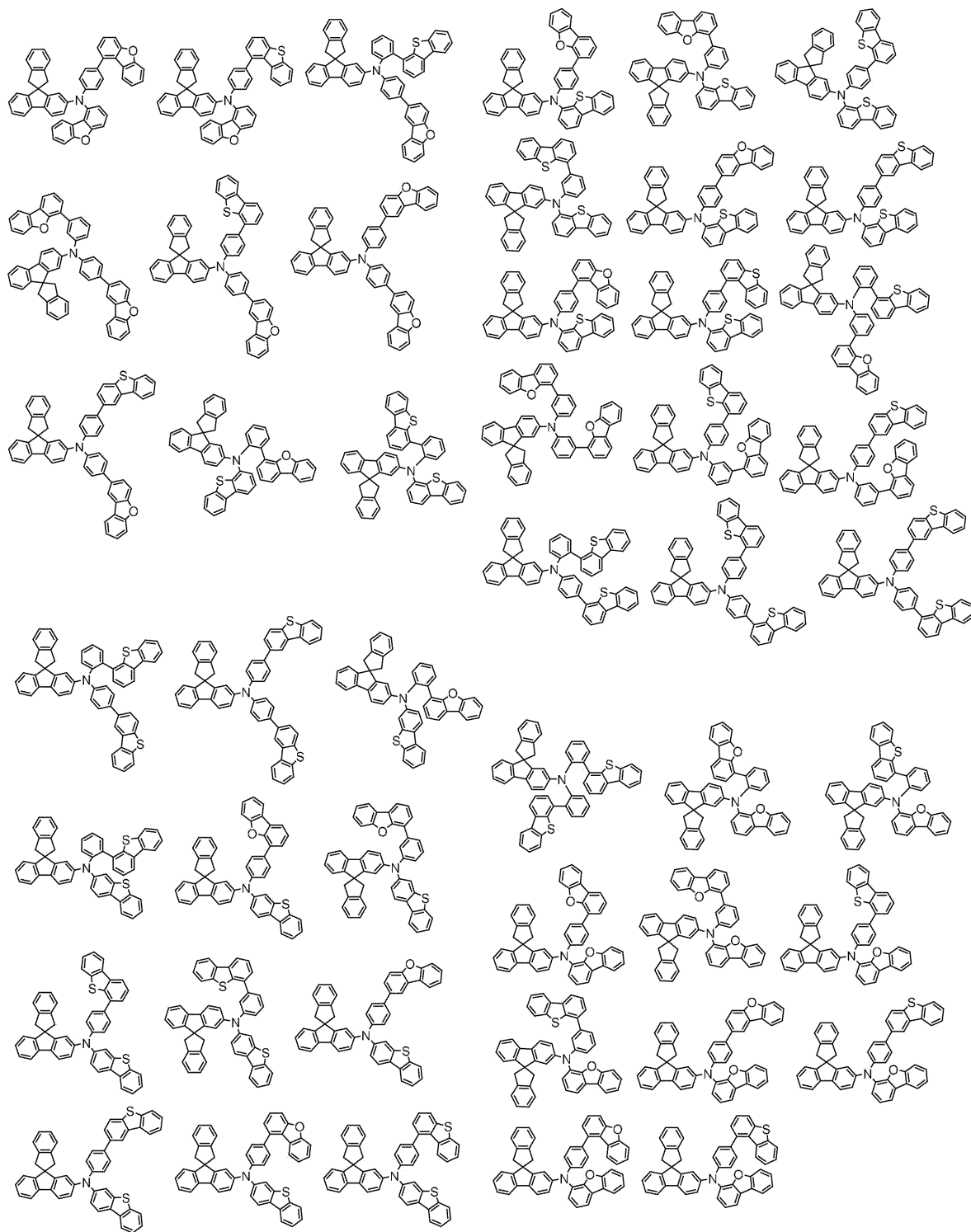
40

【化 1 0 4】



【 0 2 8 1】

【化 1 0 5】



【 0 2 8 2】

10

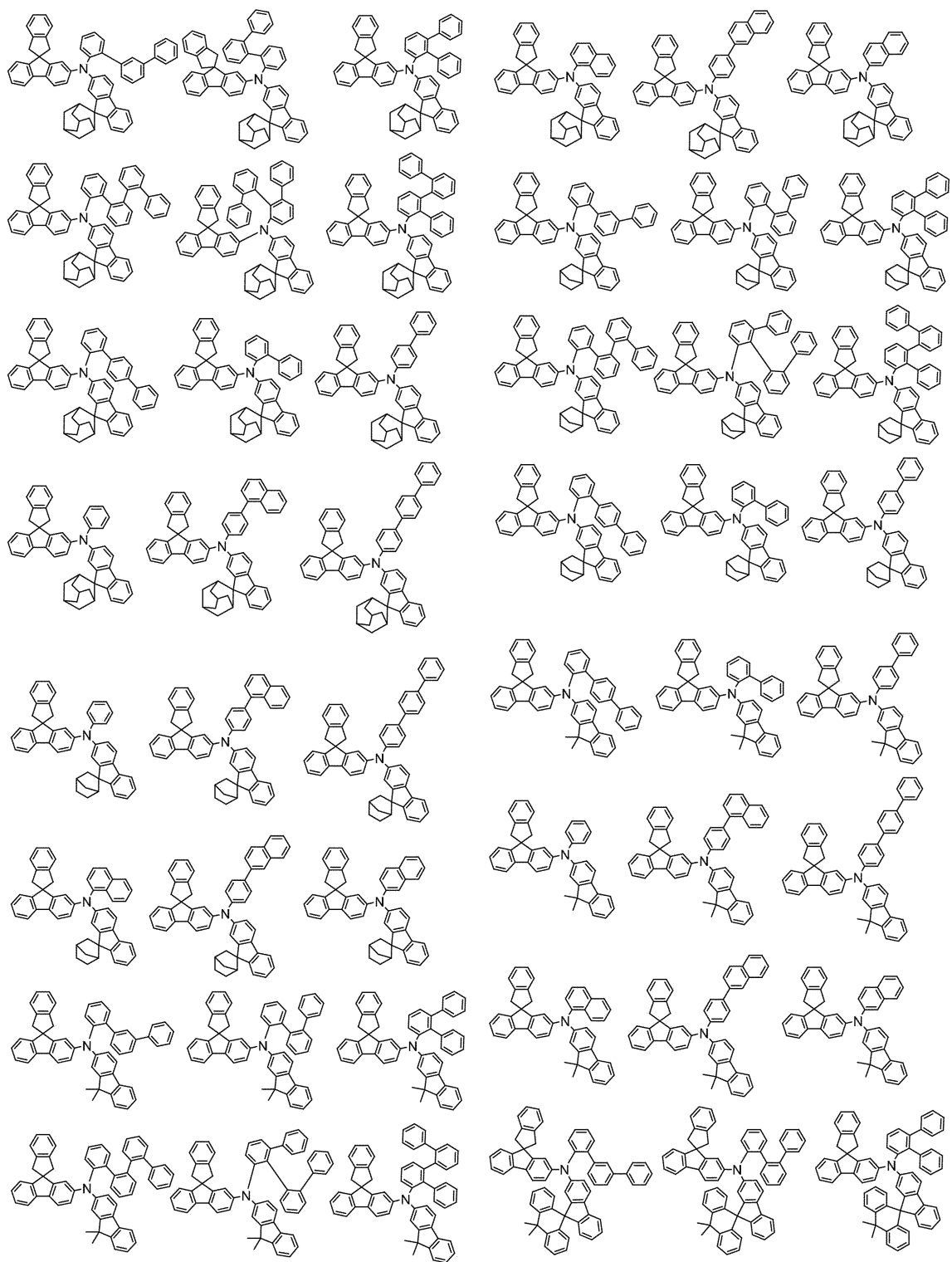
20

30

40

50

【化 1 0 6】



10

20

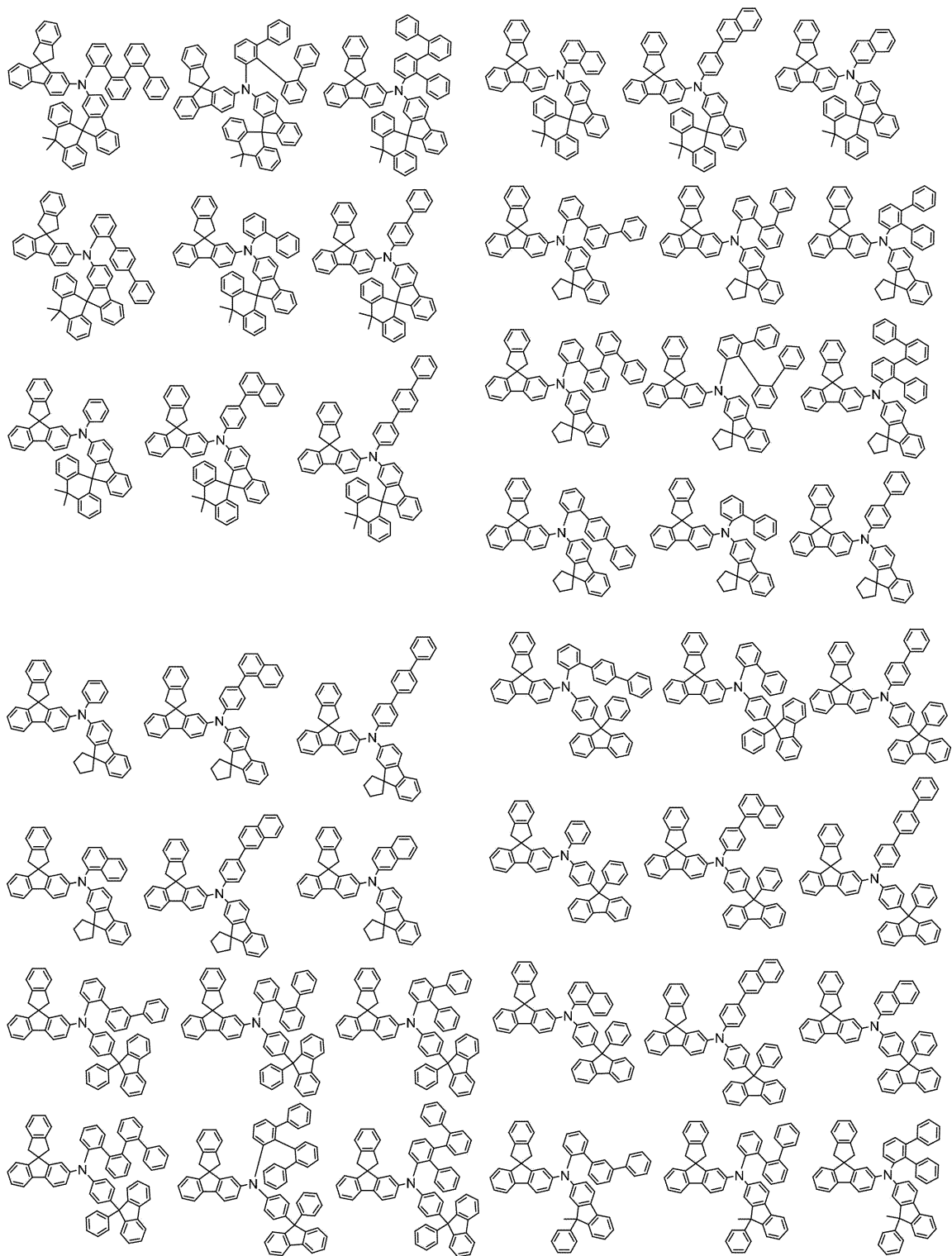
30

40

【 0 2 8 3】

50

【化 1 0 7】



【 0 2 8 4】

10

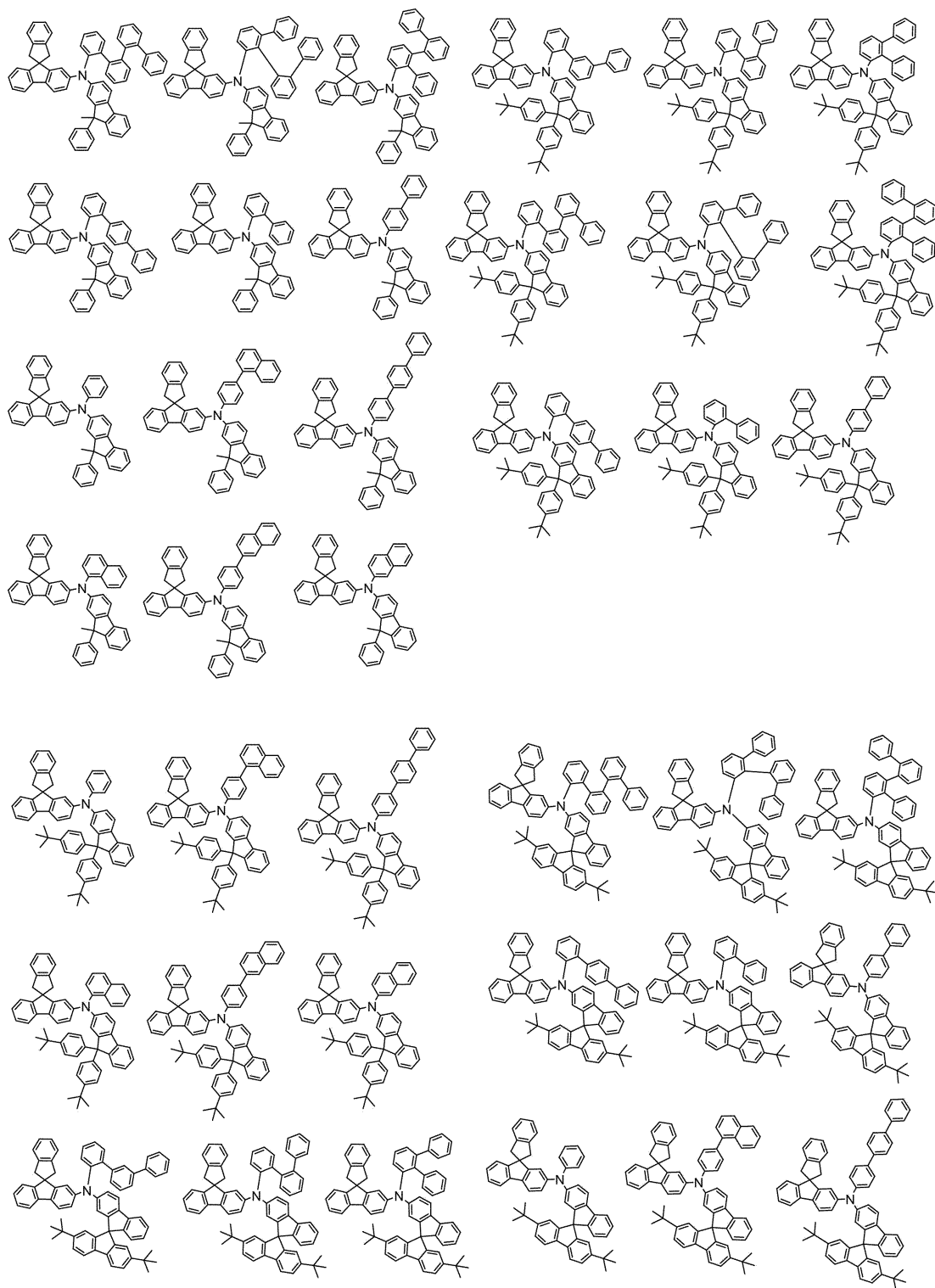
20

30

40

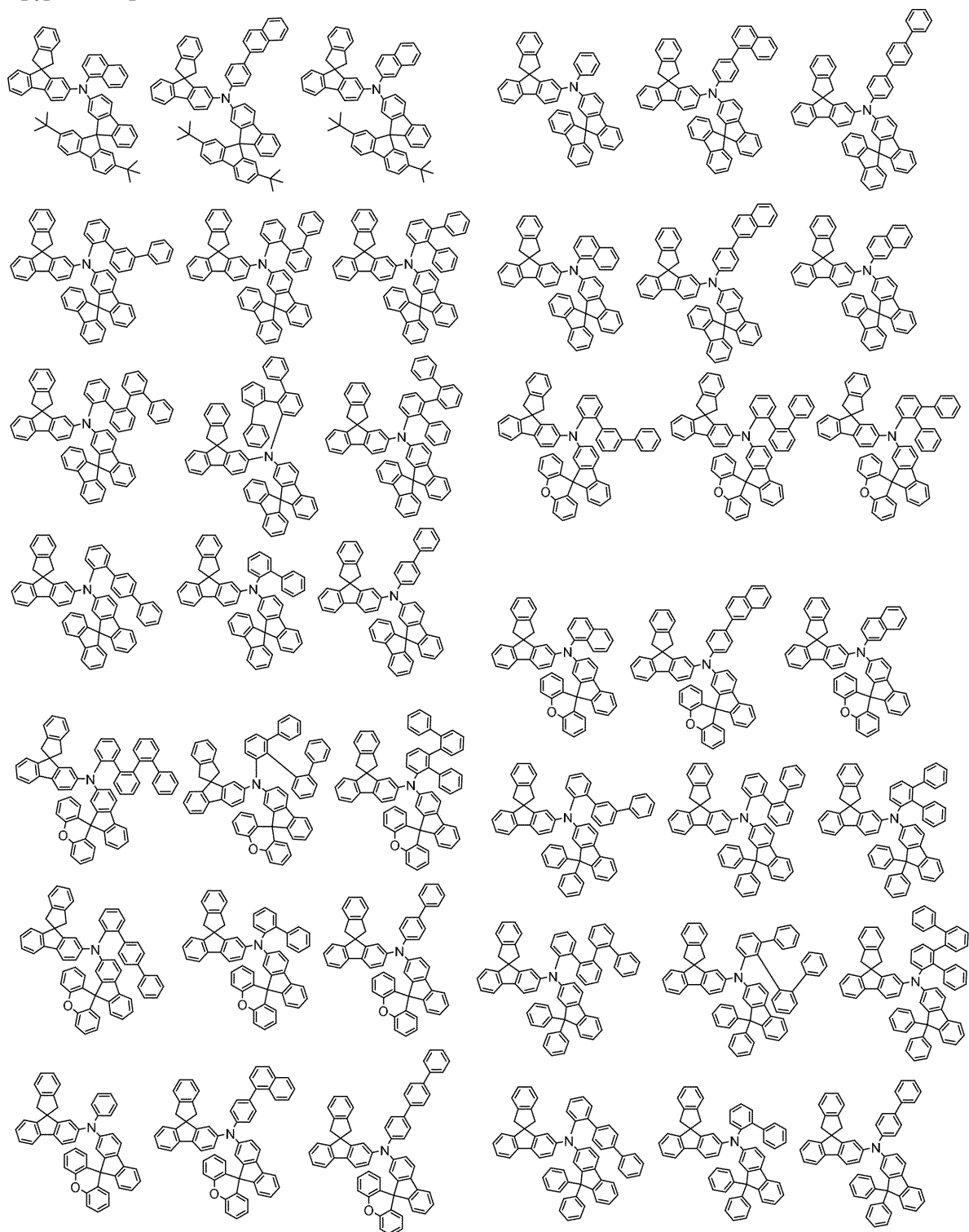
50

【化 1 0 8】



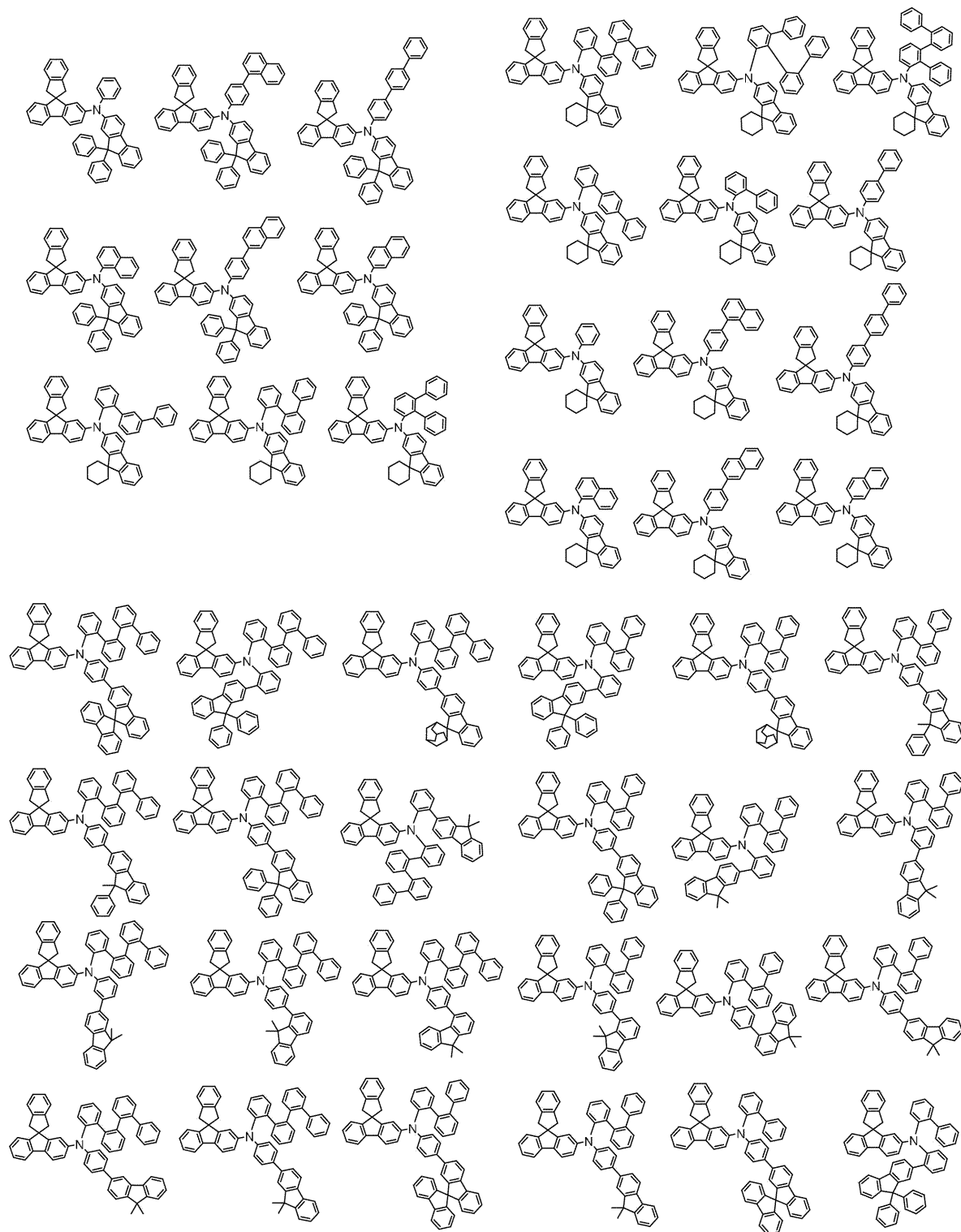
【 0 2 8 5】

【化 1 0 9】



【 0 2 8 6】

【化 1 1 0】



【 0 2 8 7】

10

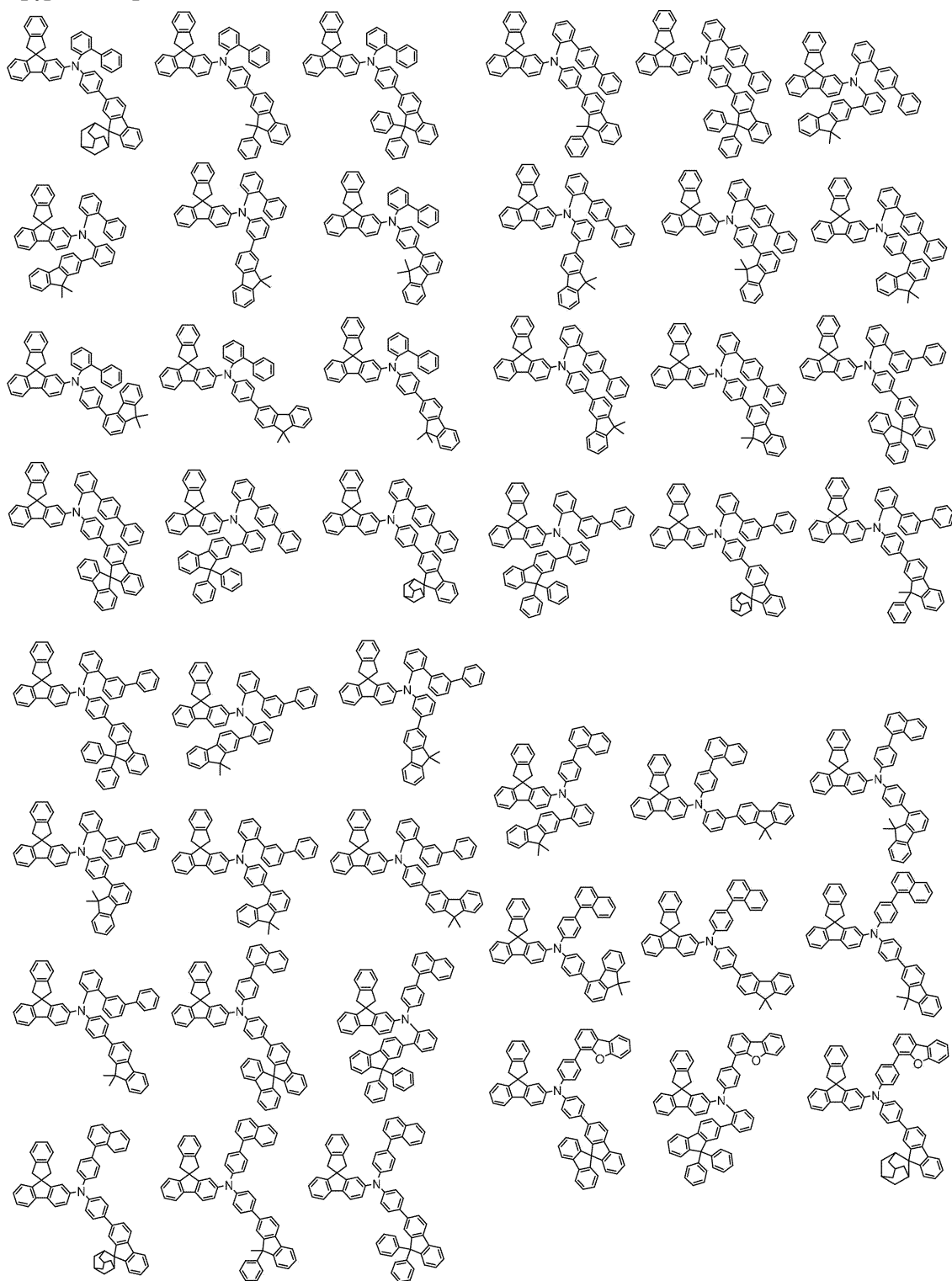
20

30

40

50

【化 1 1 1】



【 0 2 8 8 】

10

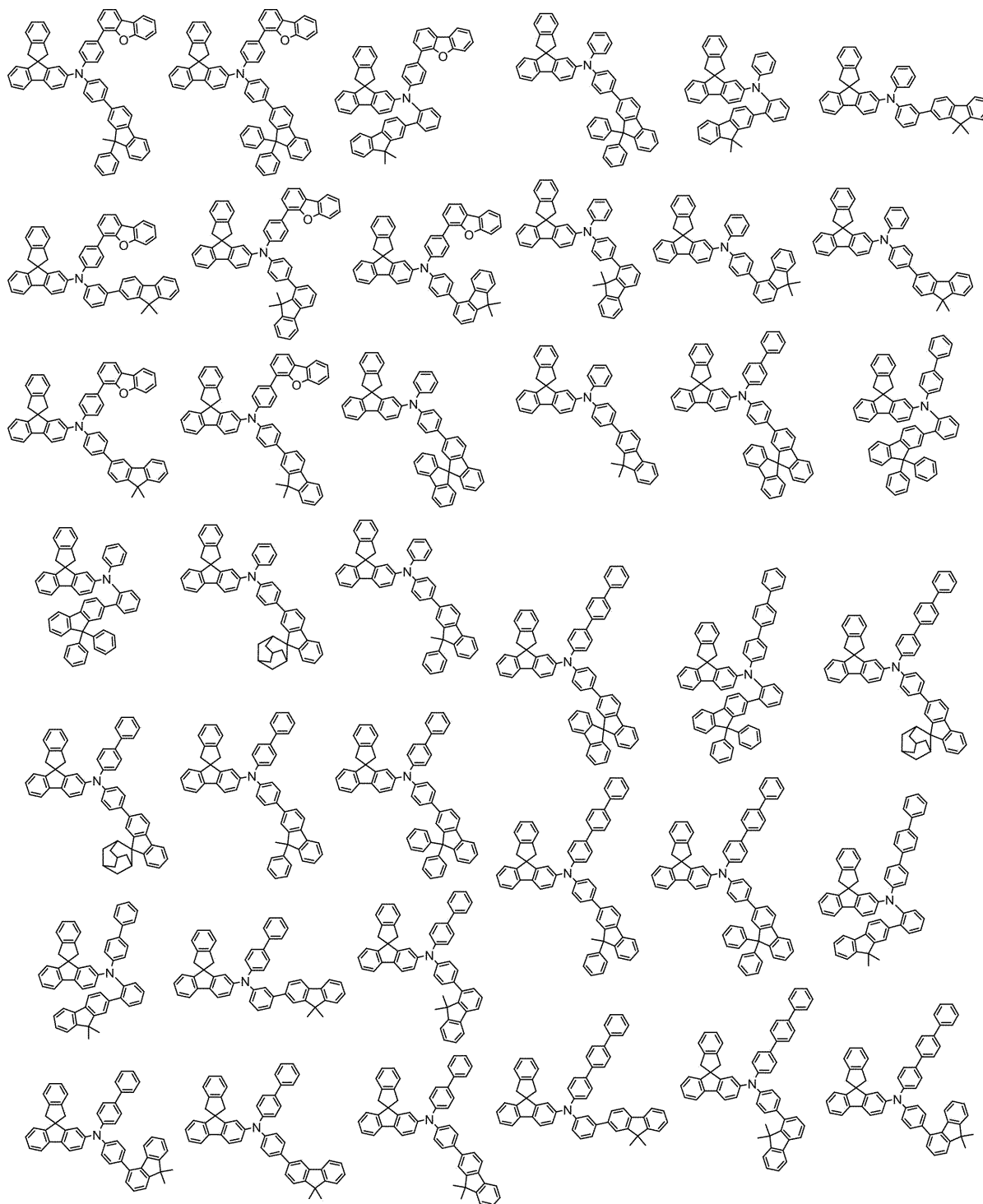
20

30

40

50

【化 1 1 2】



10

20

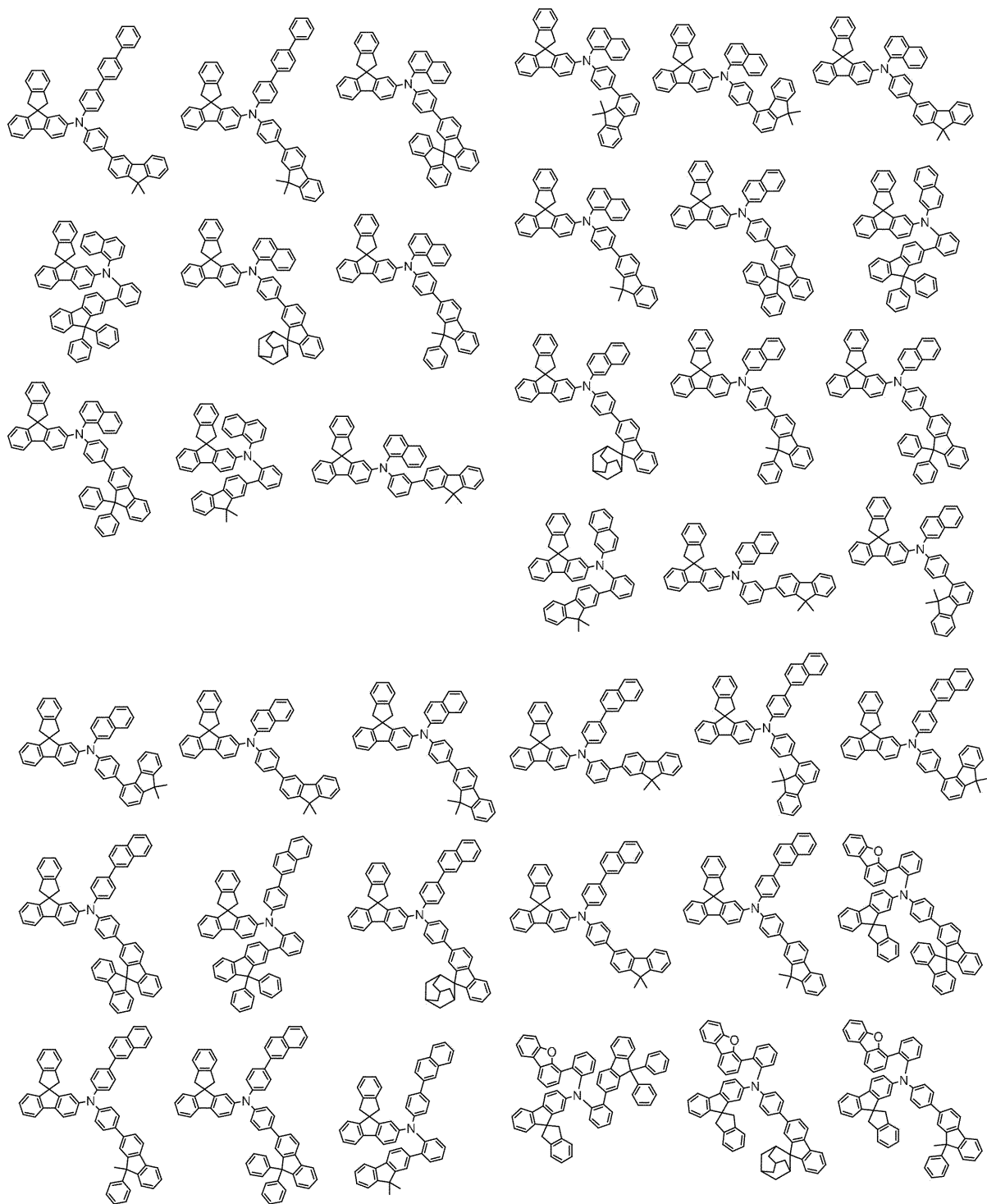
30

40

【 0 2 8 9 】

50

【化 1 1 3】



【0 2 9 0】

10

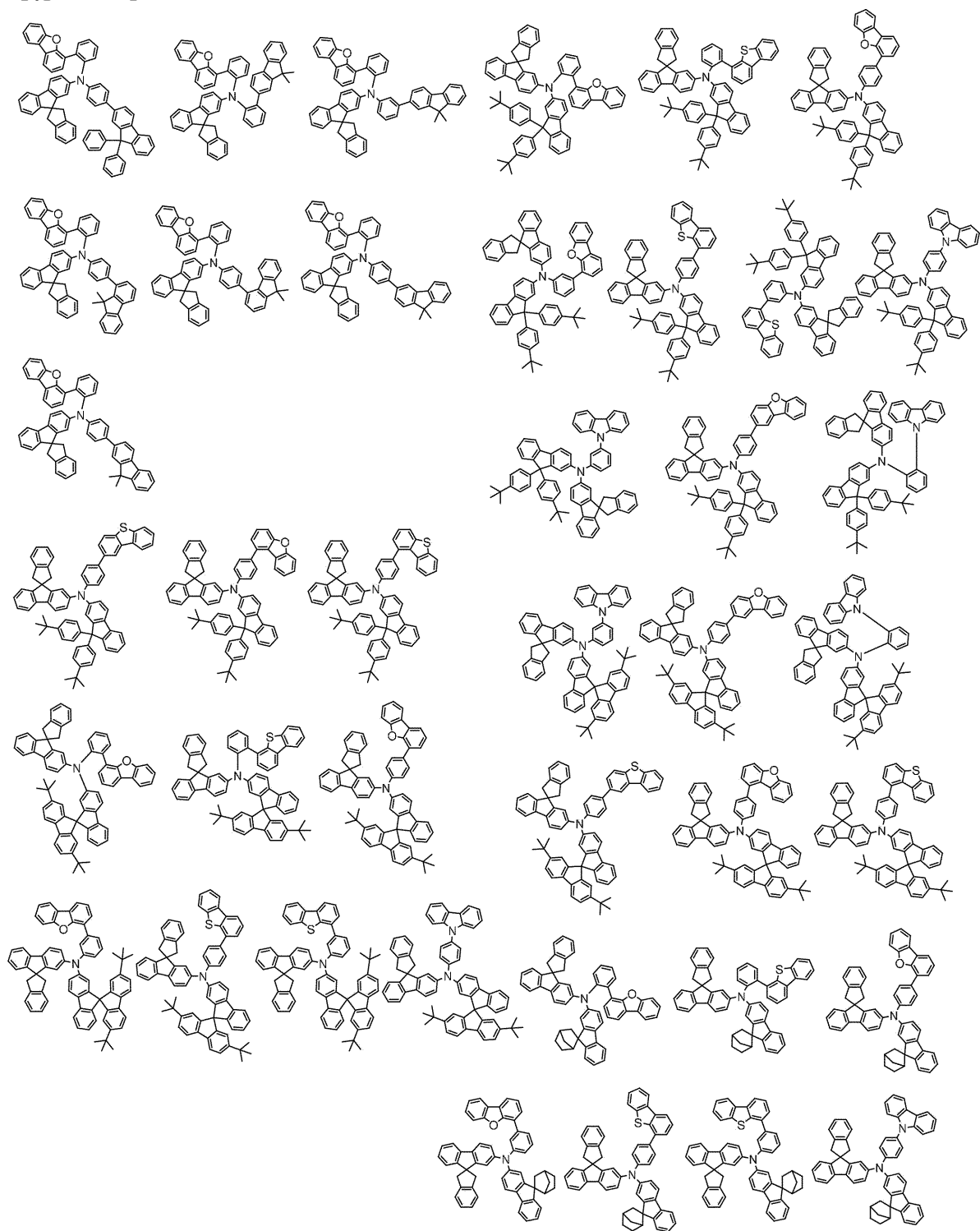
20

30

40

50

【化 1 1 4】



【 0 2 9 1】

10

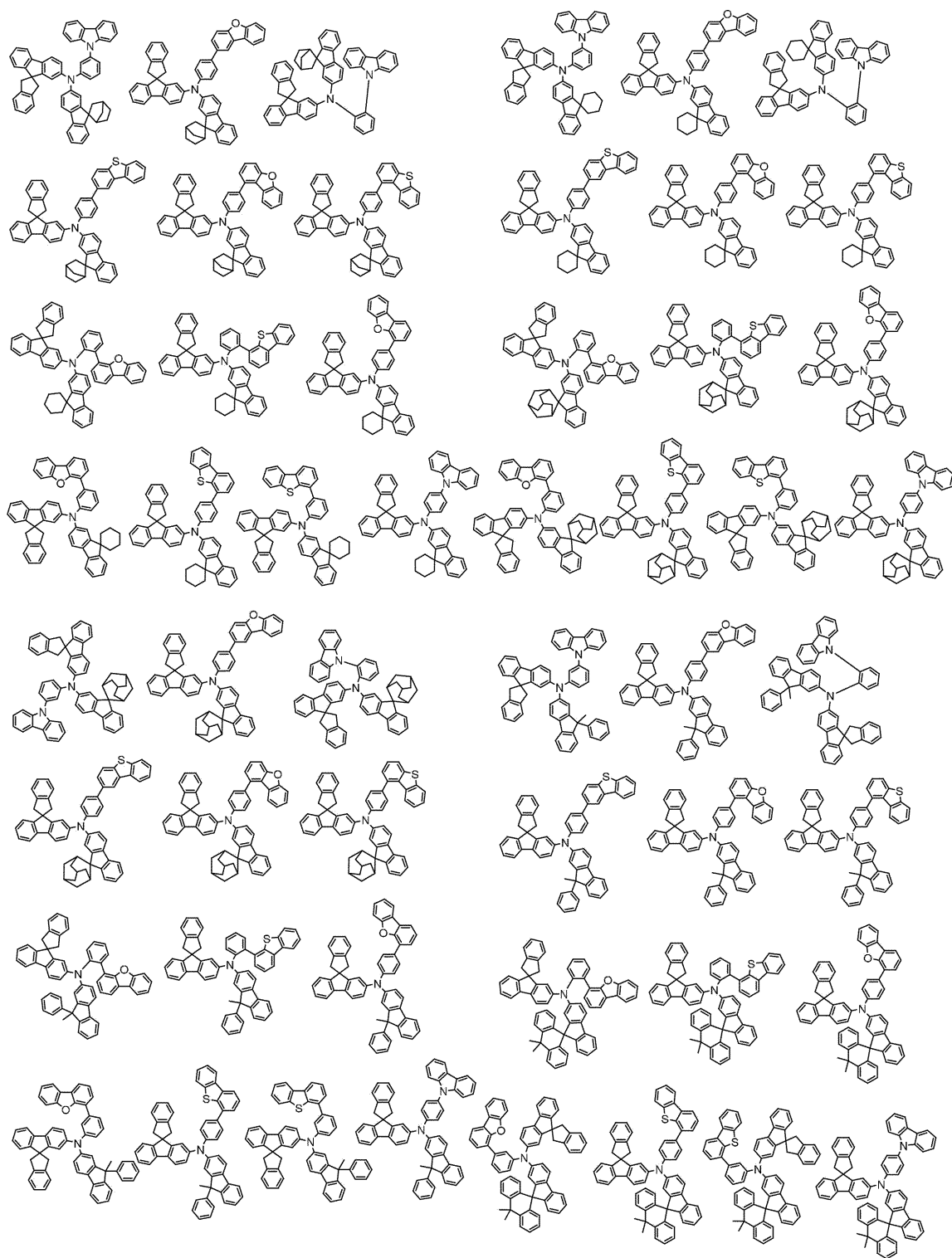
20

30

40

50

【化 1 1 5】



【 0 2 9 2】

10

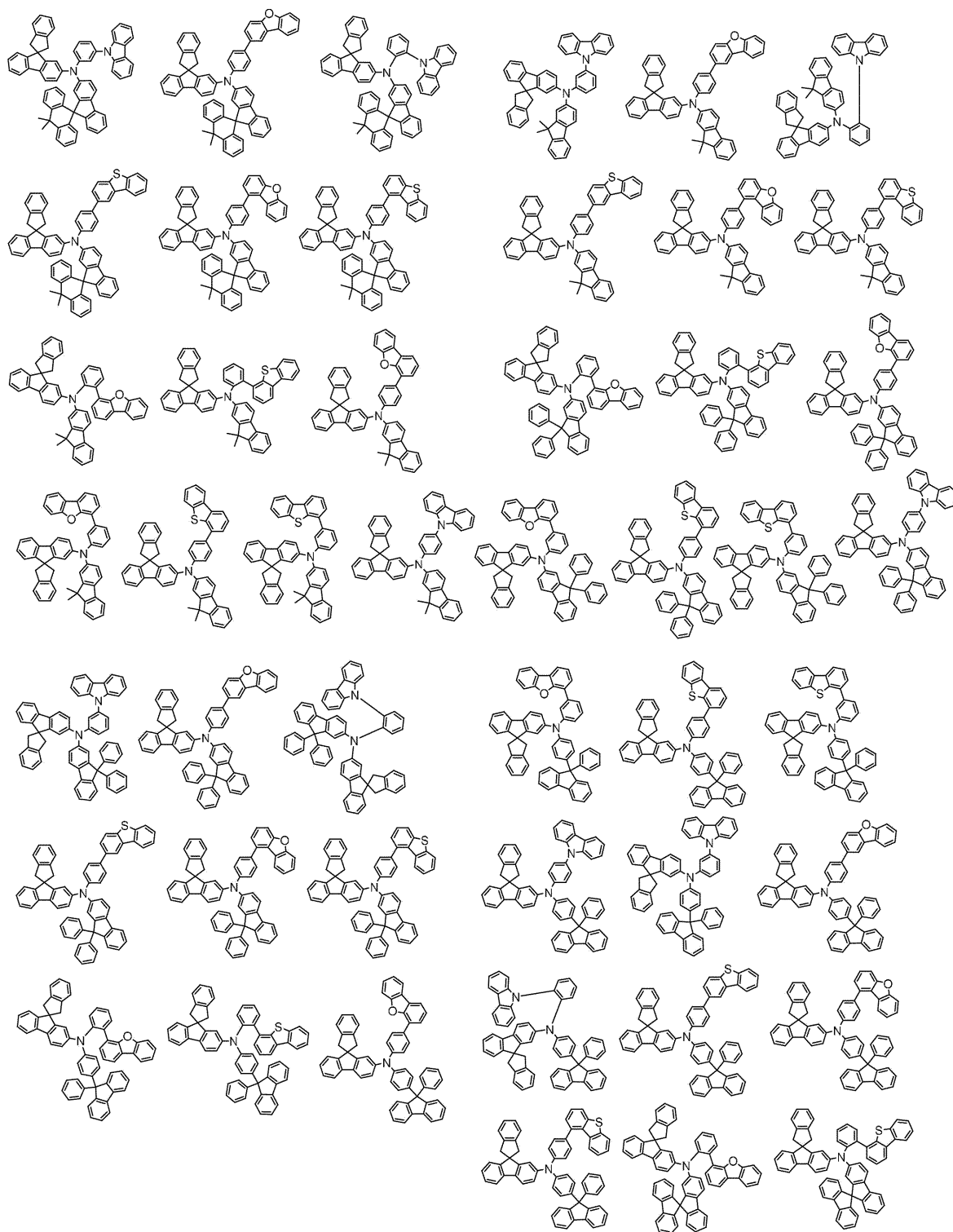
20

30

40

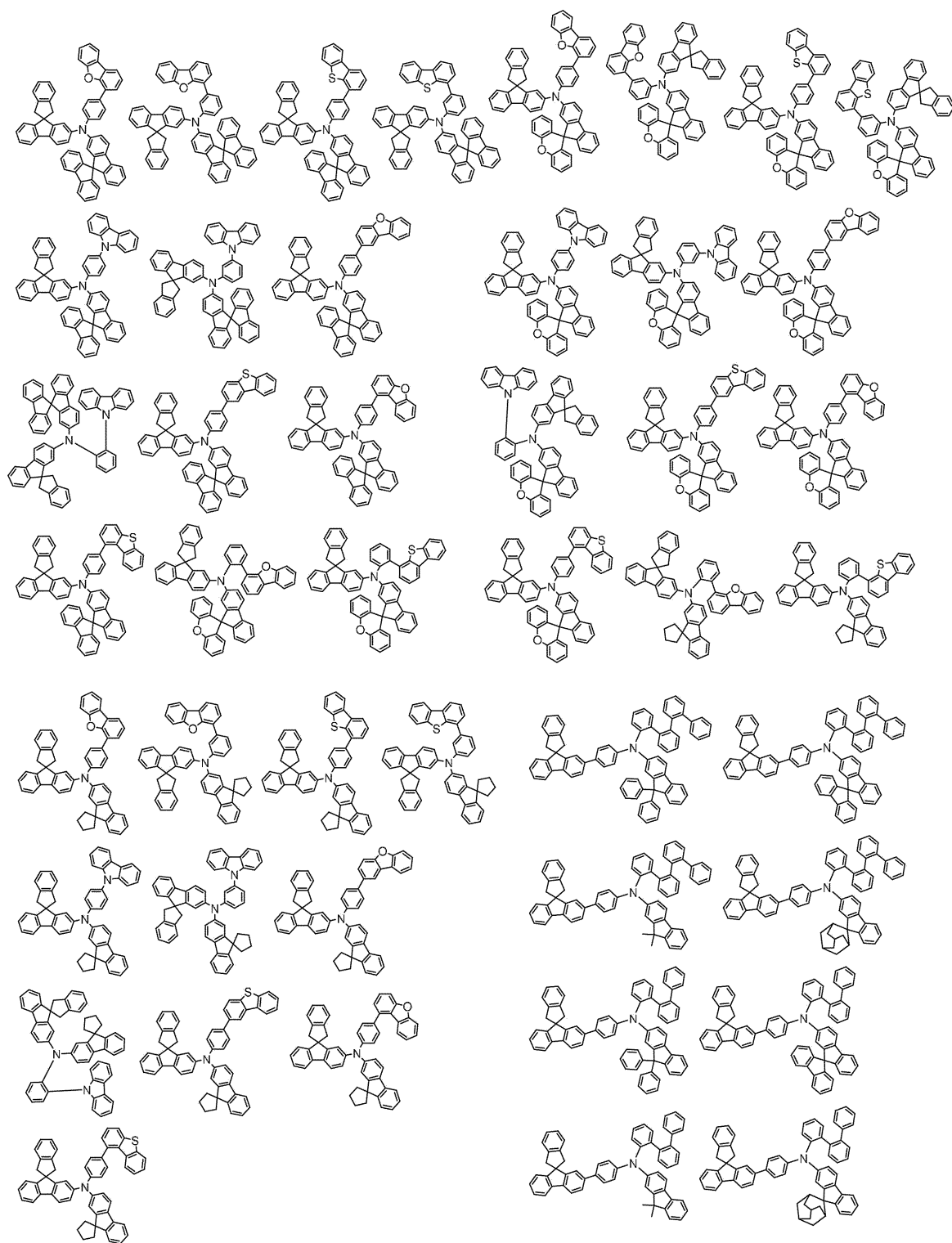
50

【化 1 1 6】



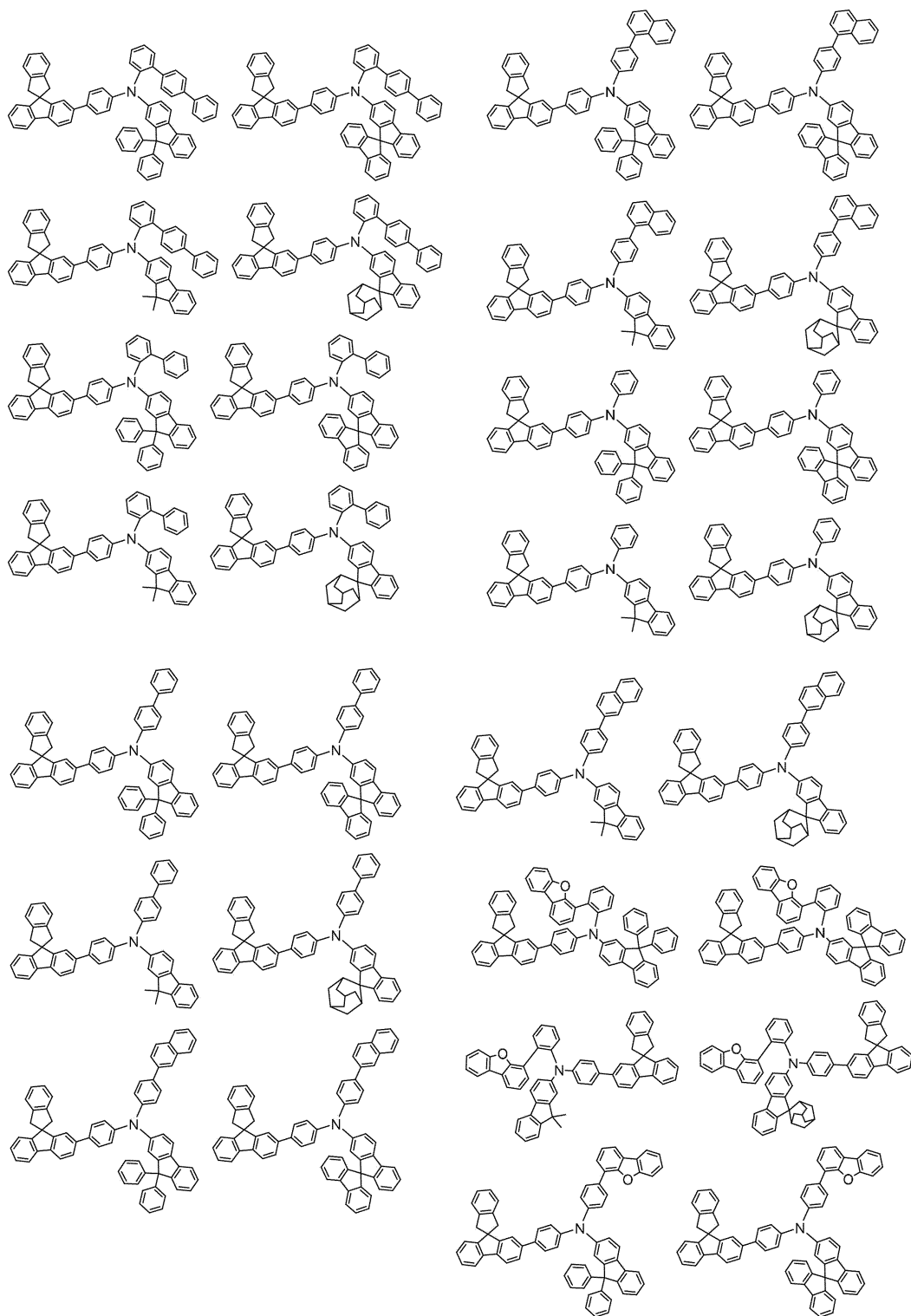
【 0 2 9 3】

【化 1 1 7】



【 0 2 9 4】

【化 1 1 8】



【 0 2 9 5】

10

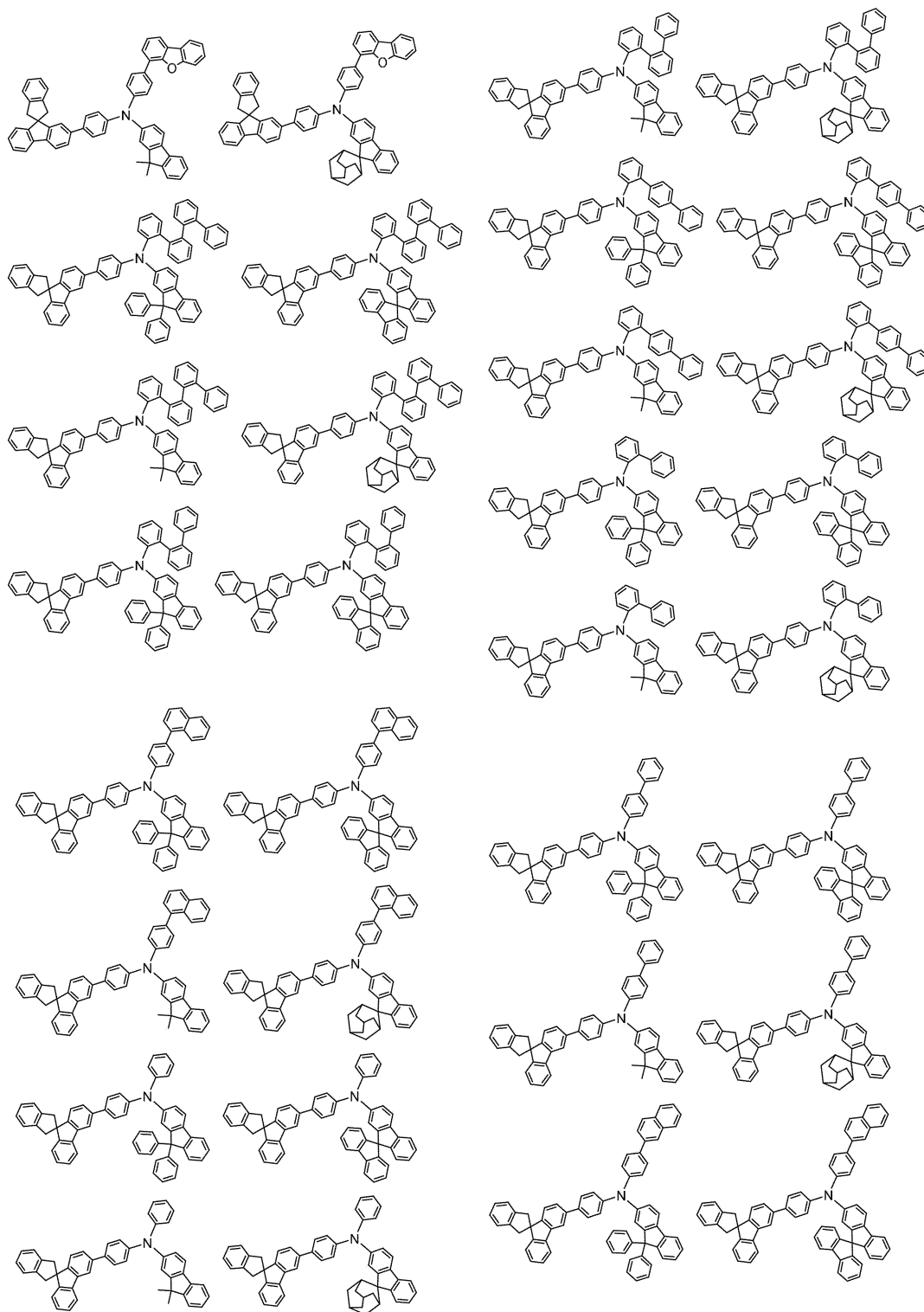
20

30

40

50

【化 1 1 9】



【0 2 9 6】

10

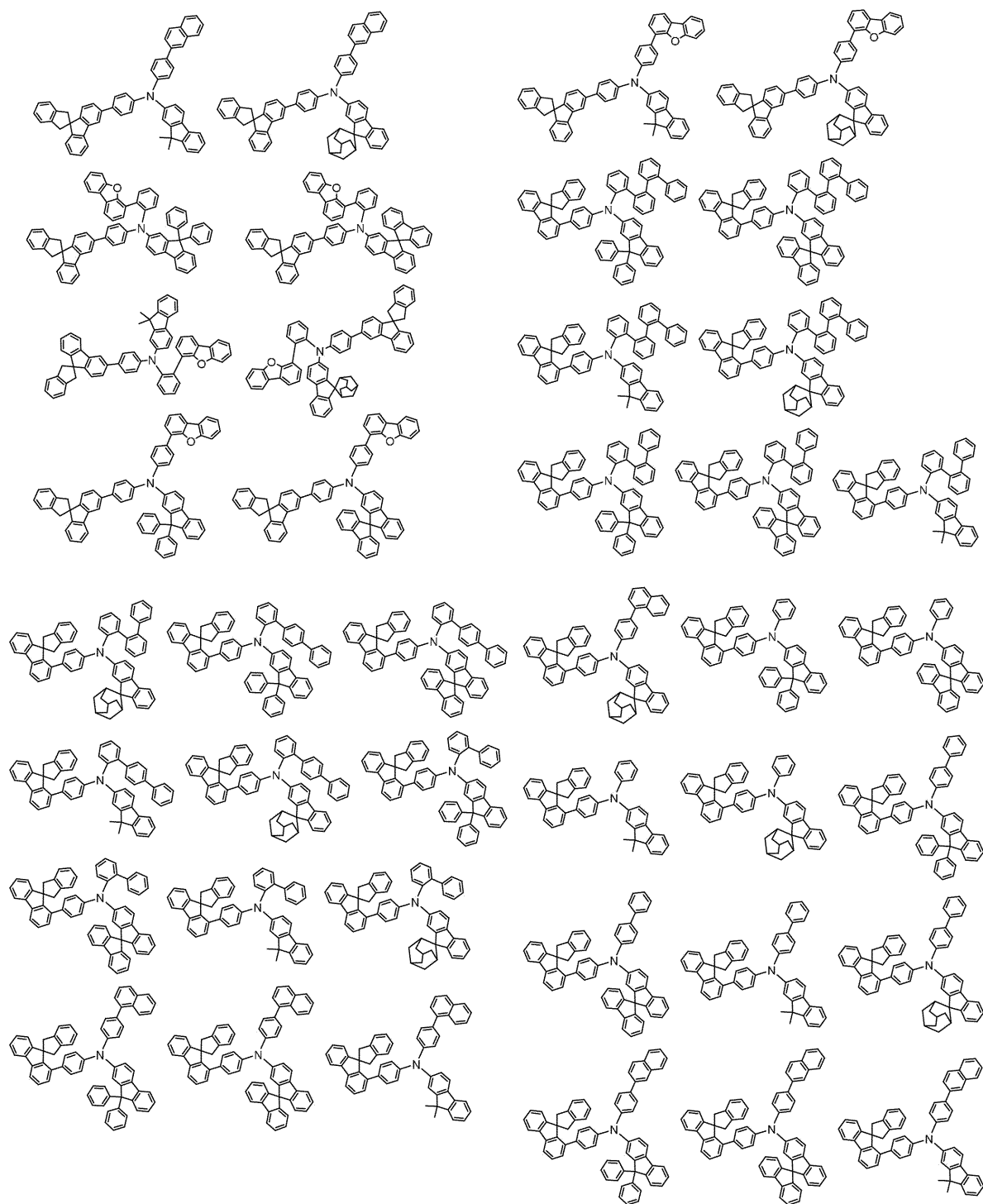
20

30

40

50

【化 1 2 0】



10

20

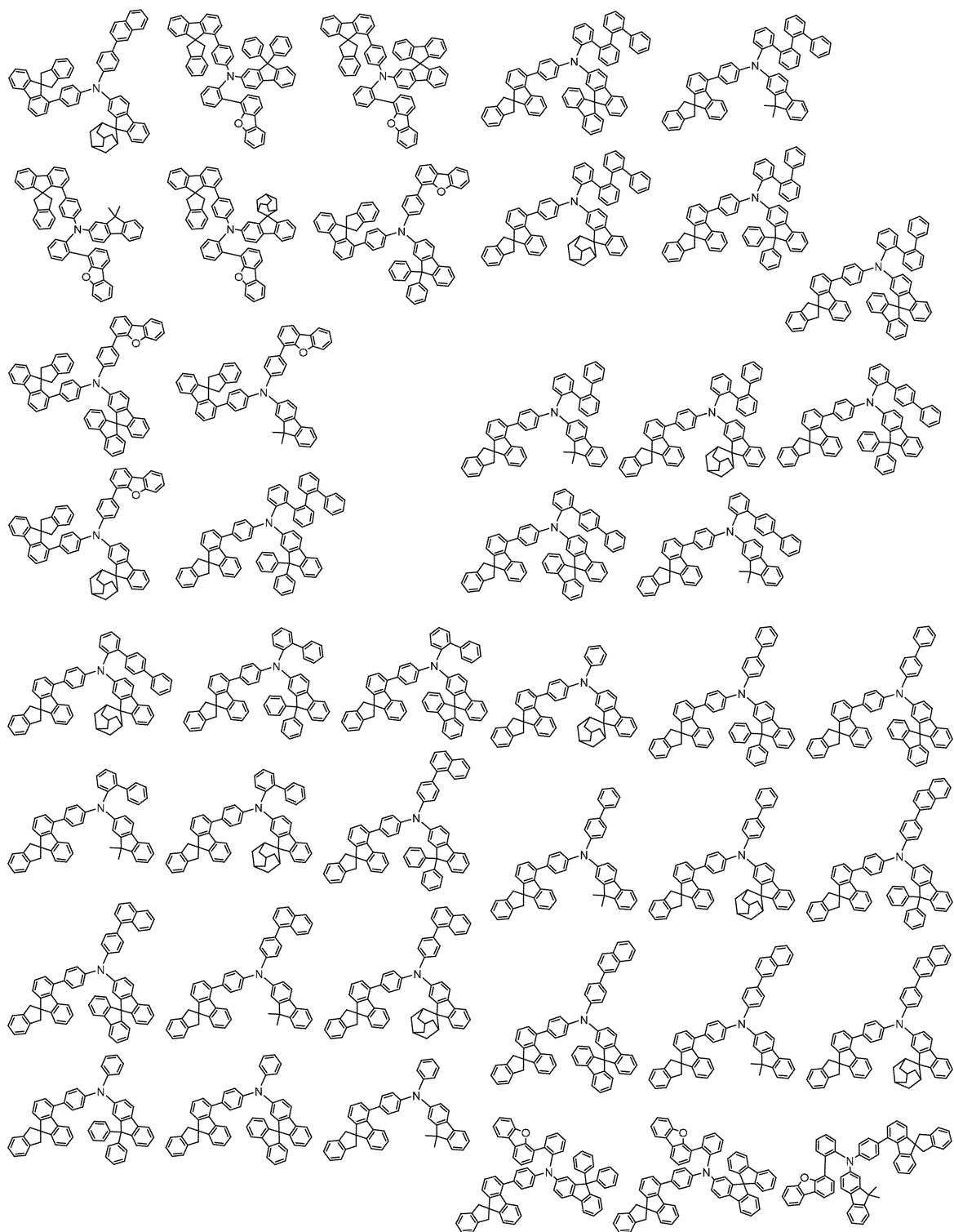
30

【 0 2 9 7】

40

50

【化 1 2 1】



【 0 2 9 8】

10

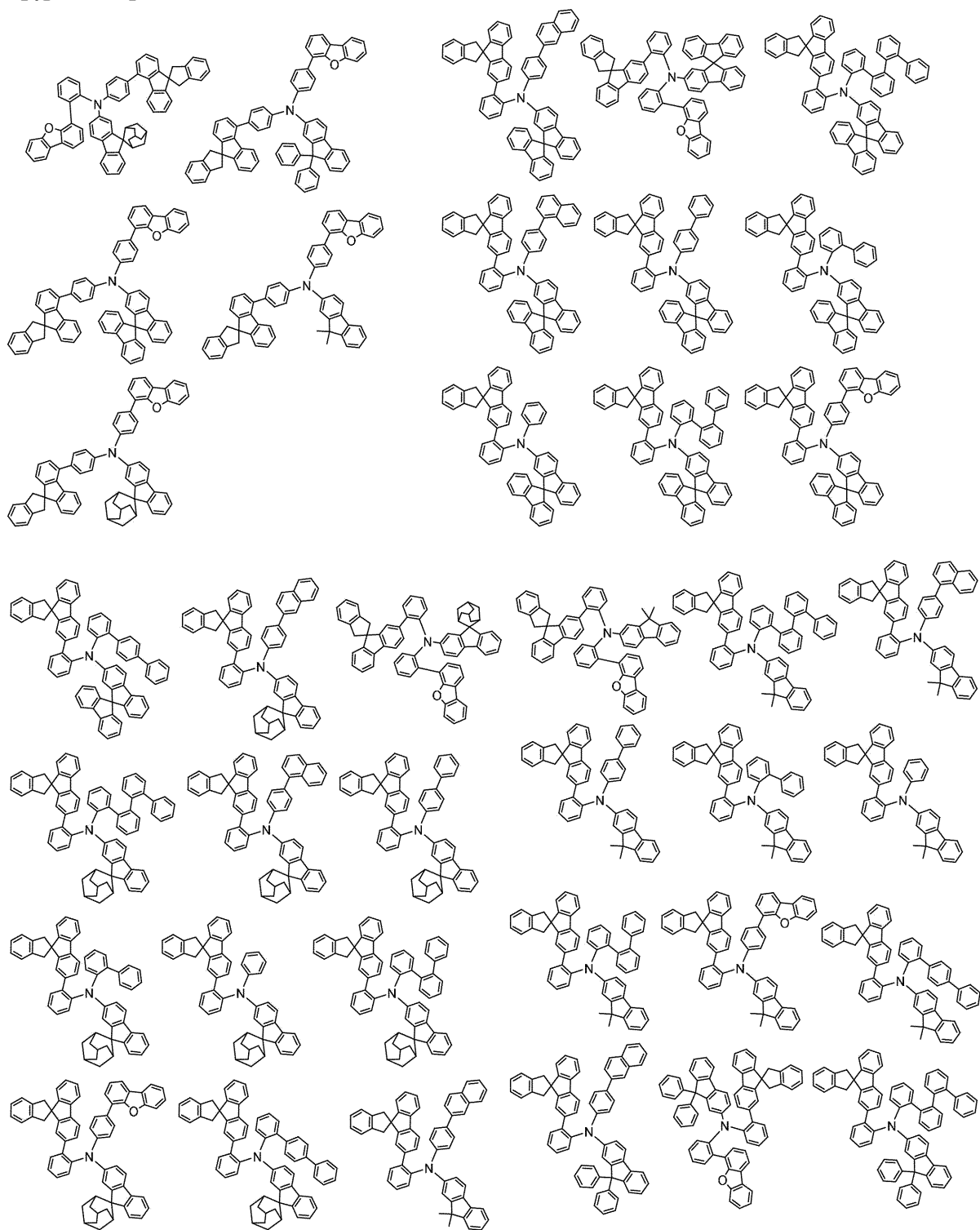
20

30

40

50

【化 1 2 2】



【 0 2 9 9】

10

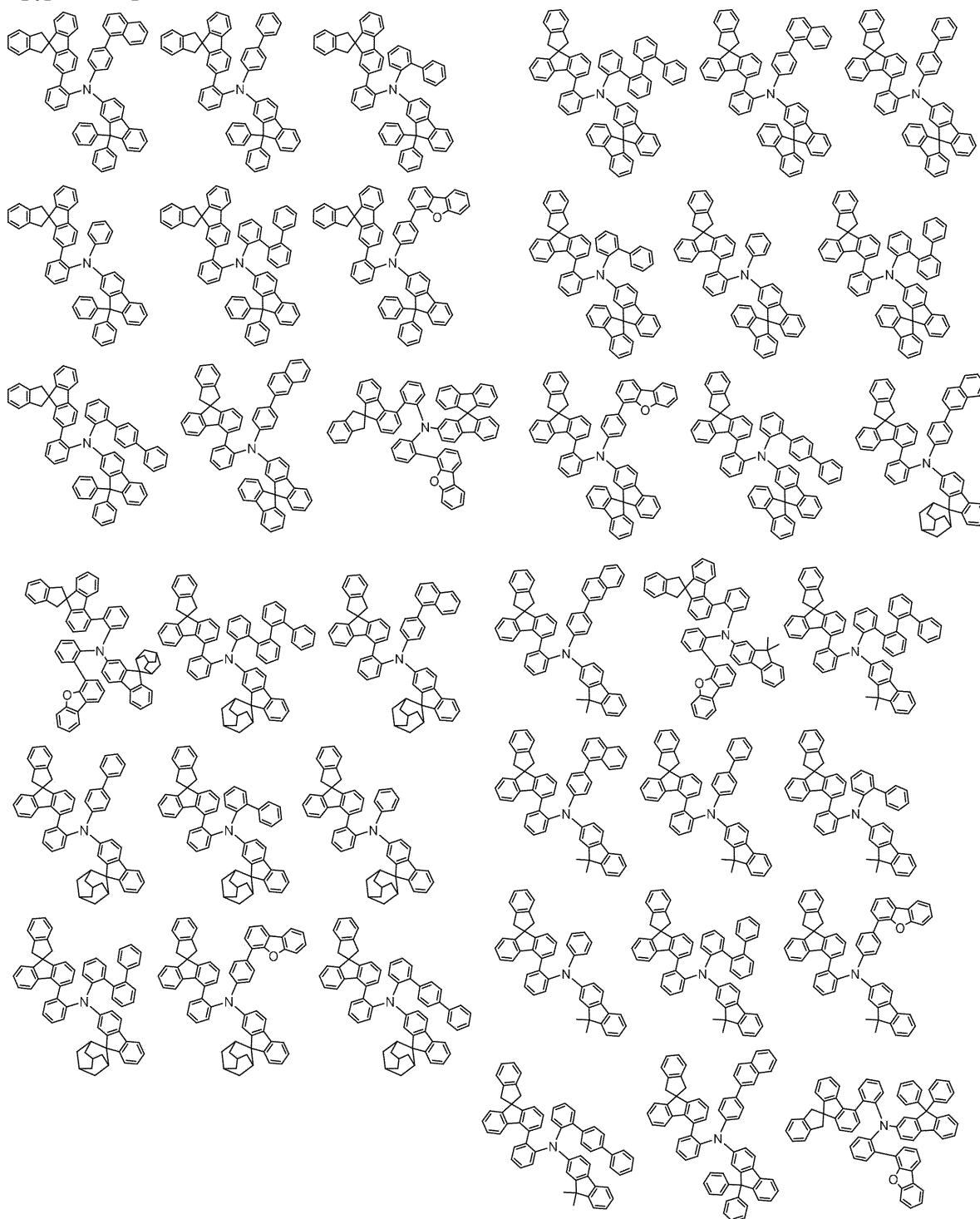
20

30

40

50

【化 1 2 3】

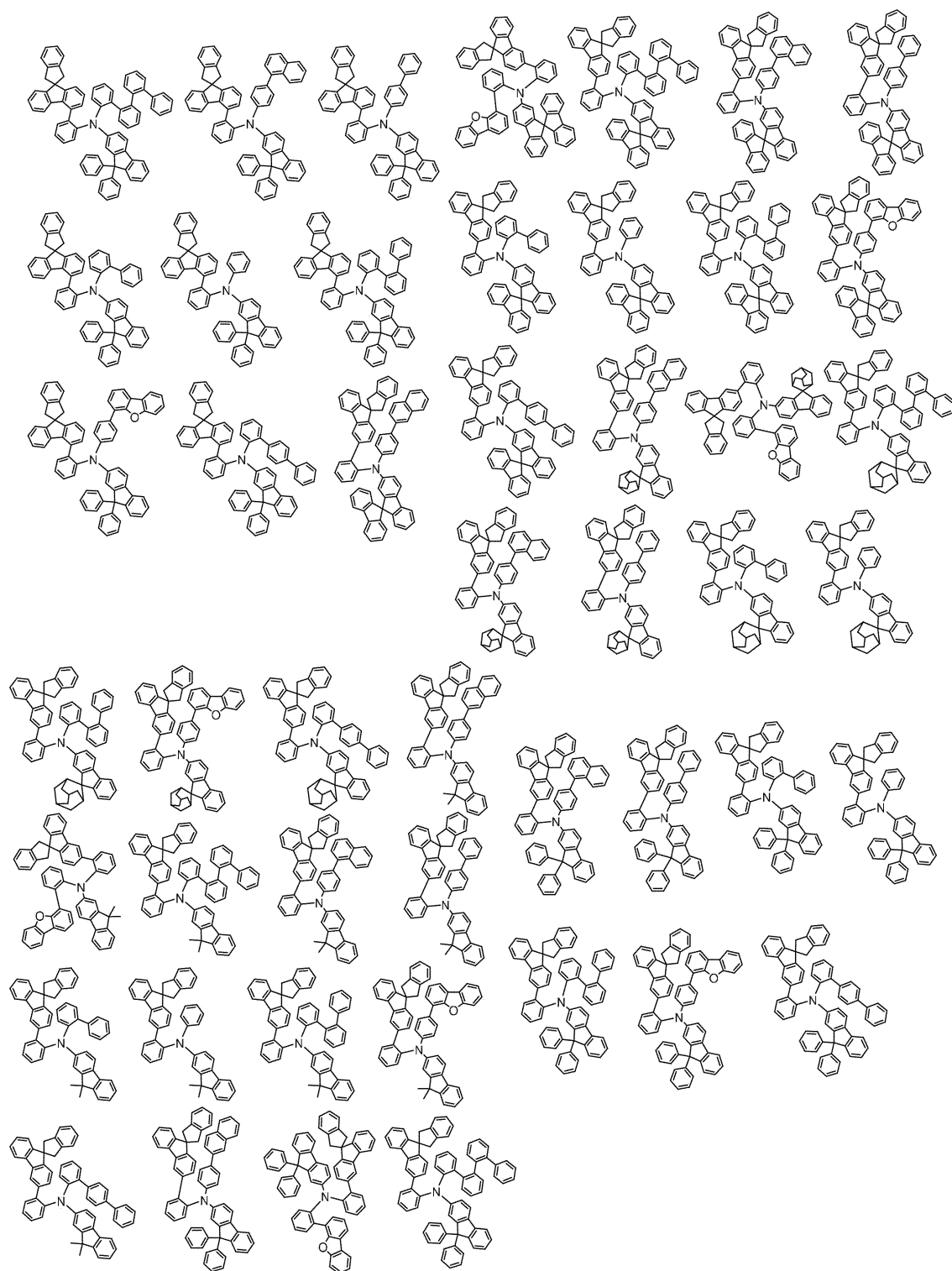


【0 3 0 0】

40

50

【化 1 2 4】



10

20

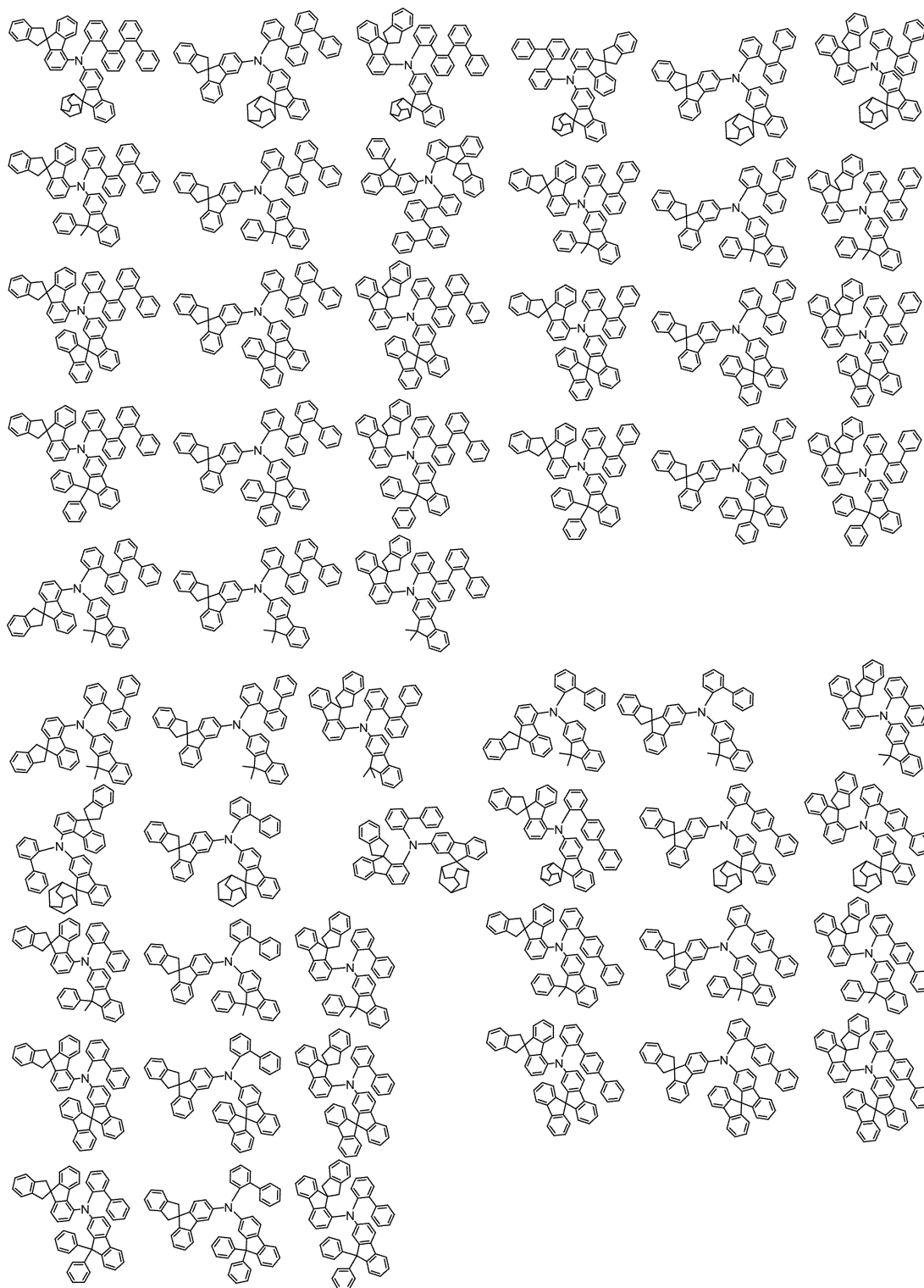
30

40

【0 3 0 1】

50

【化 1 2 5】



10

20

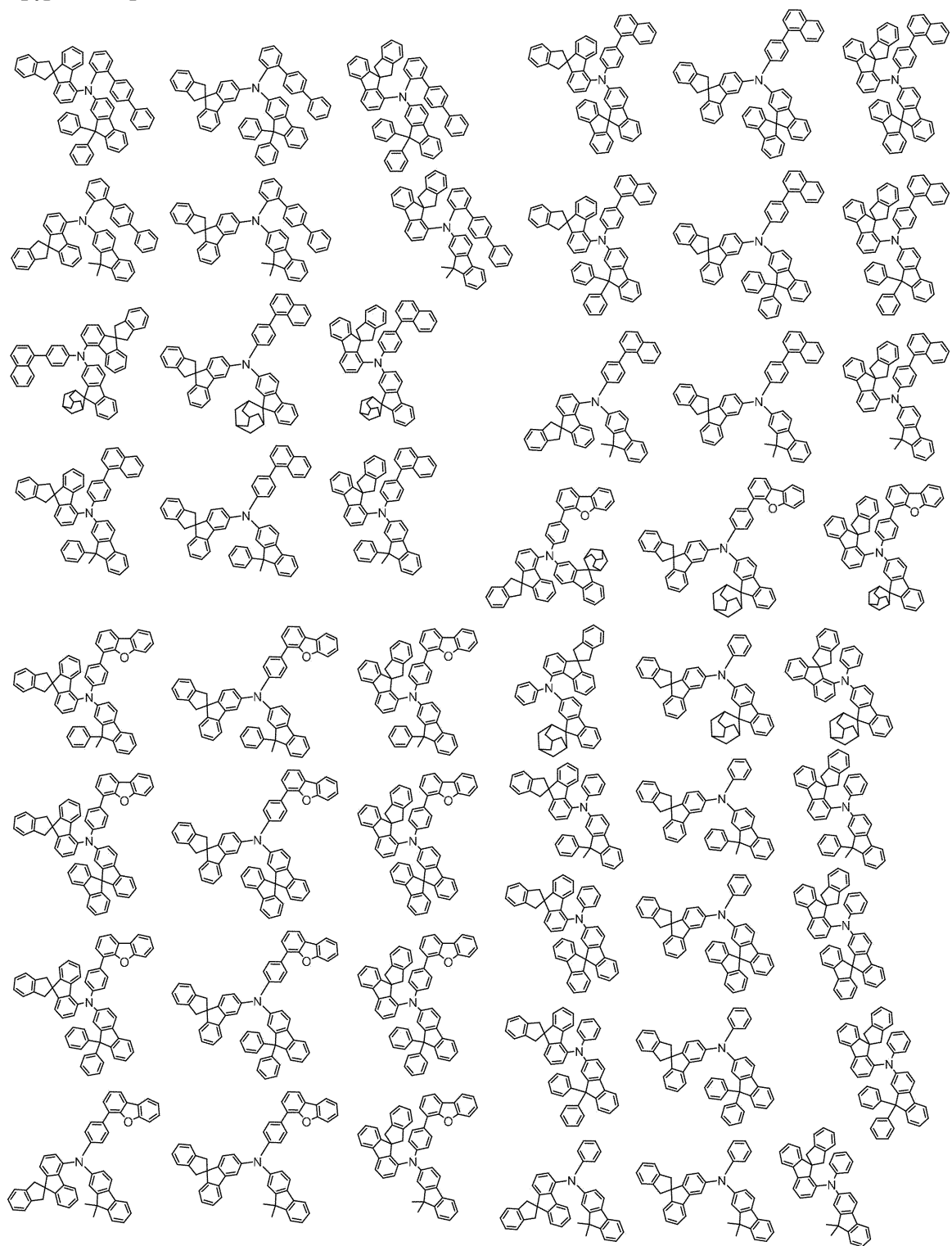
30

40

【 0 3 0 2】

50

【化 1 2 6】



【 0 3 0 3】

10

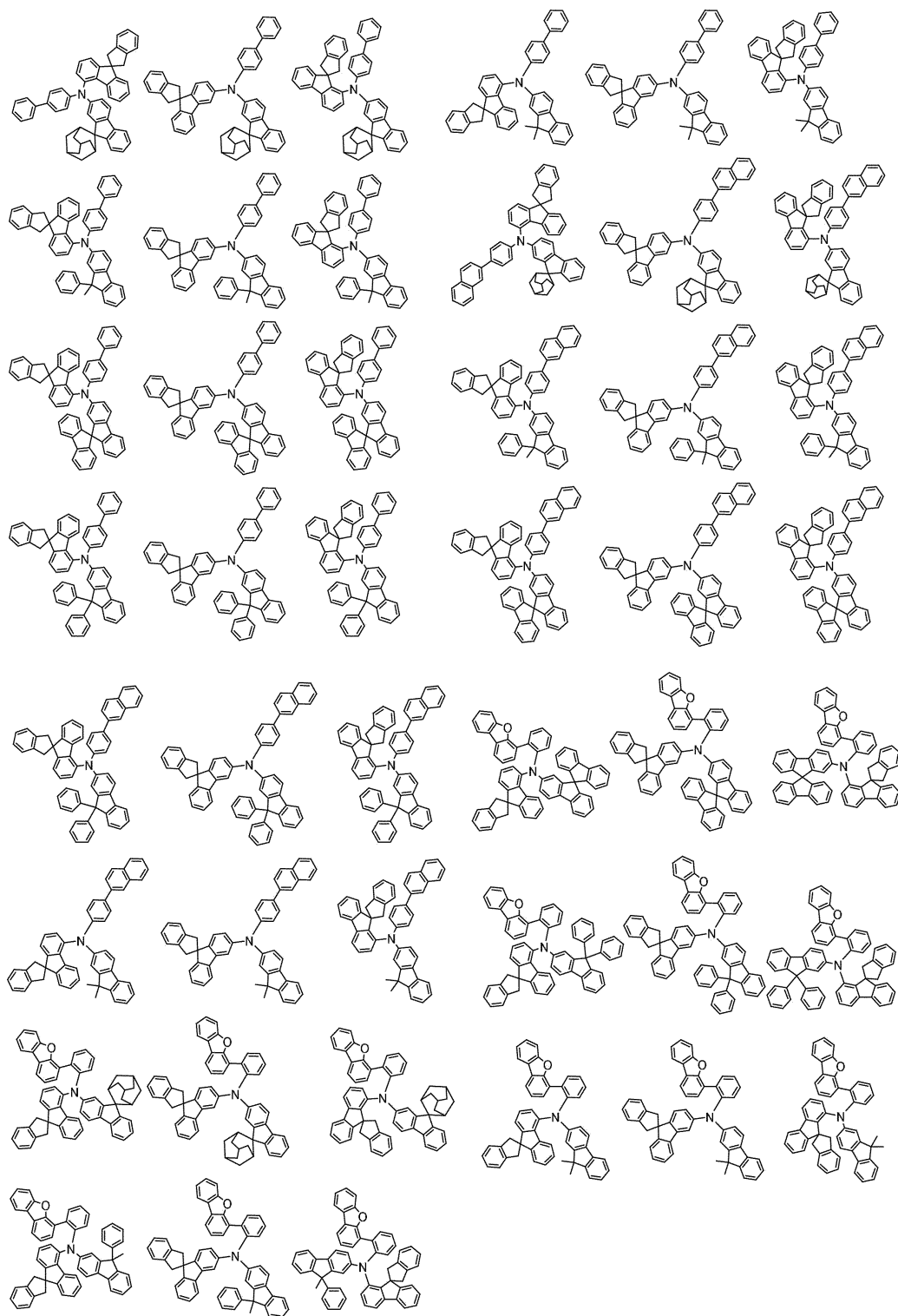
20

30

40

50

【化 1 2 7】



10

20

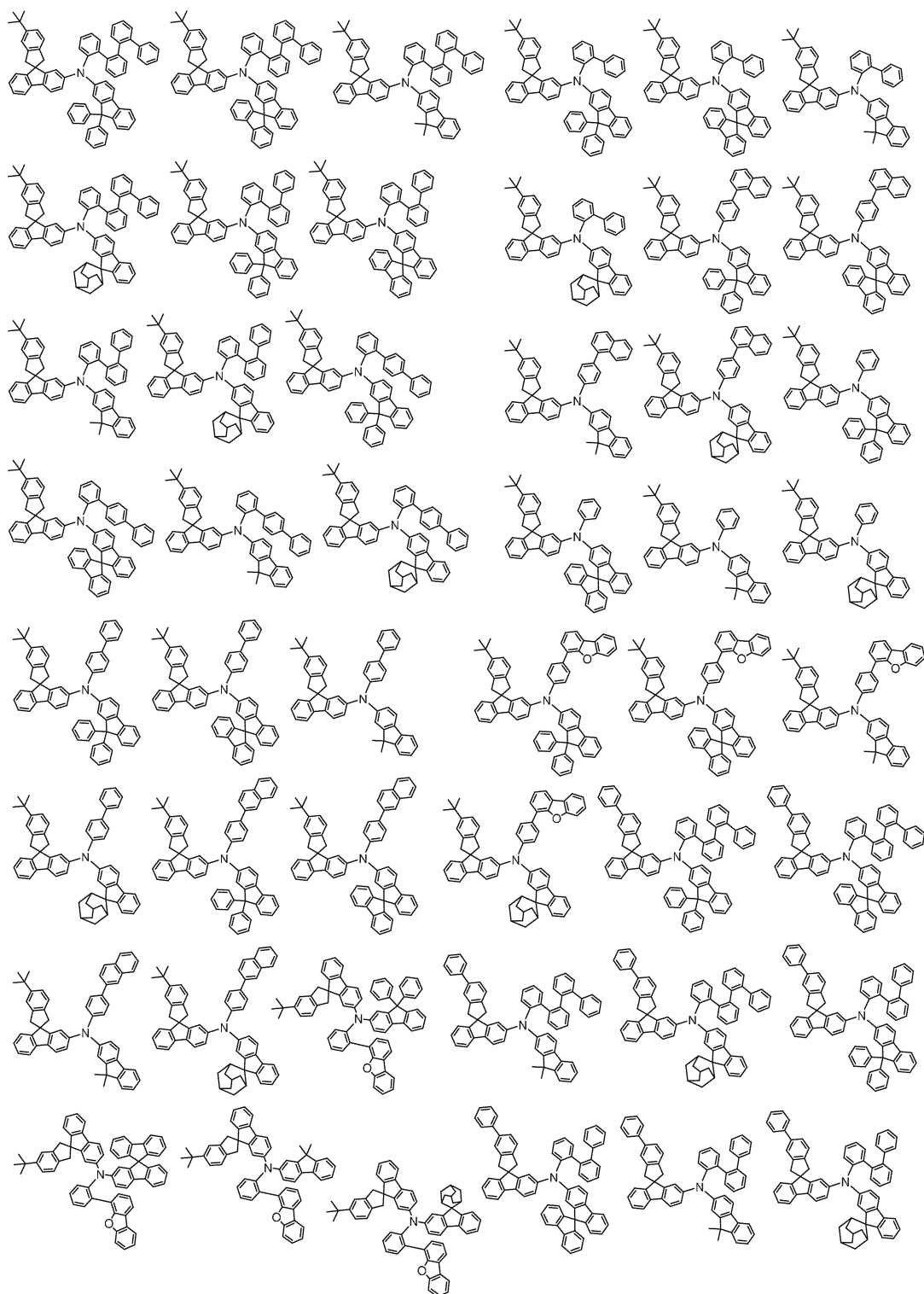
30

40

【 0 3 0 4】

50

【化 1 2 8】



10

20

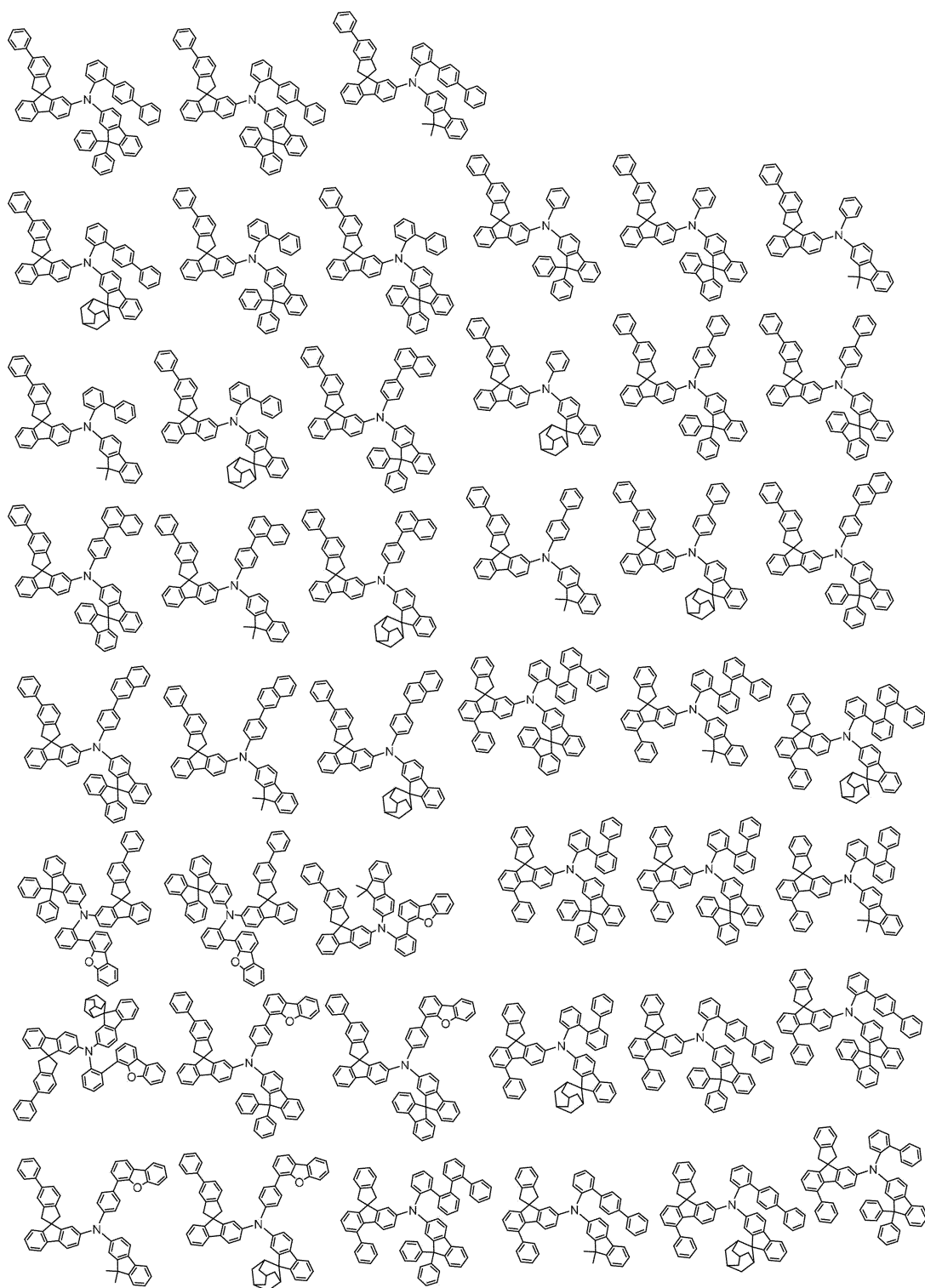
30

40

【 0 3 0 5】

50

【化 1 2 9】



【 0 3 0 6】

10

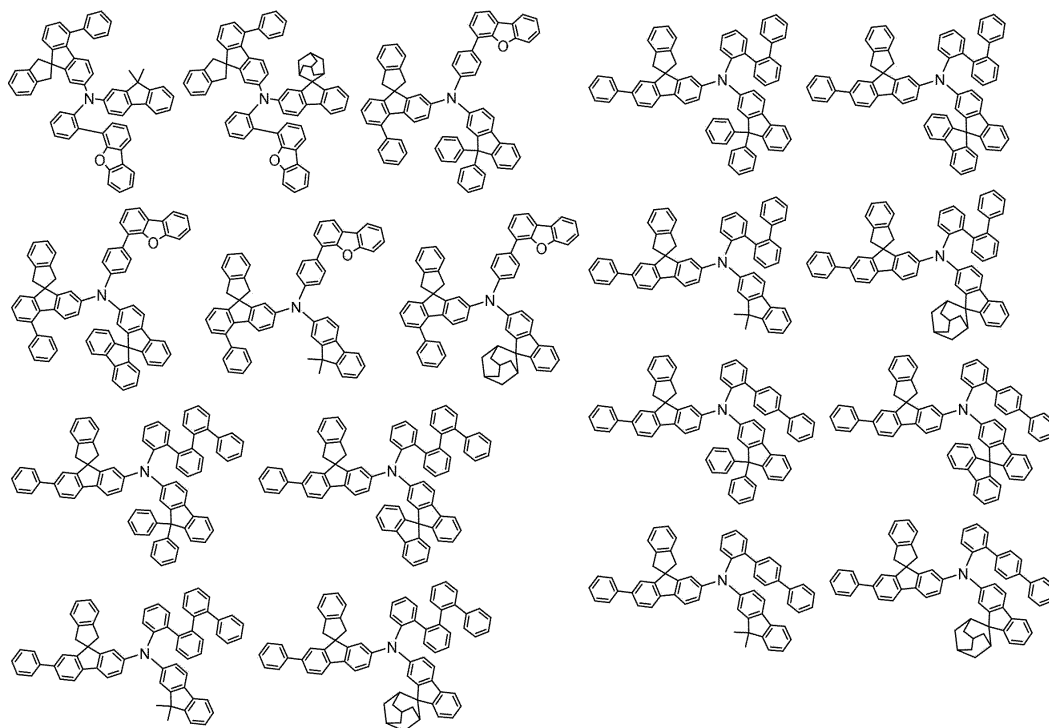
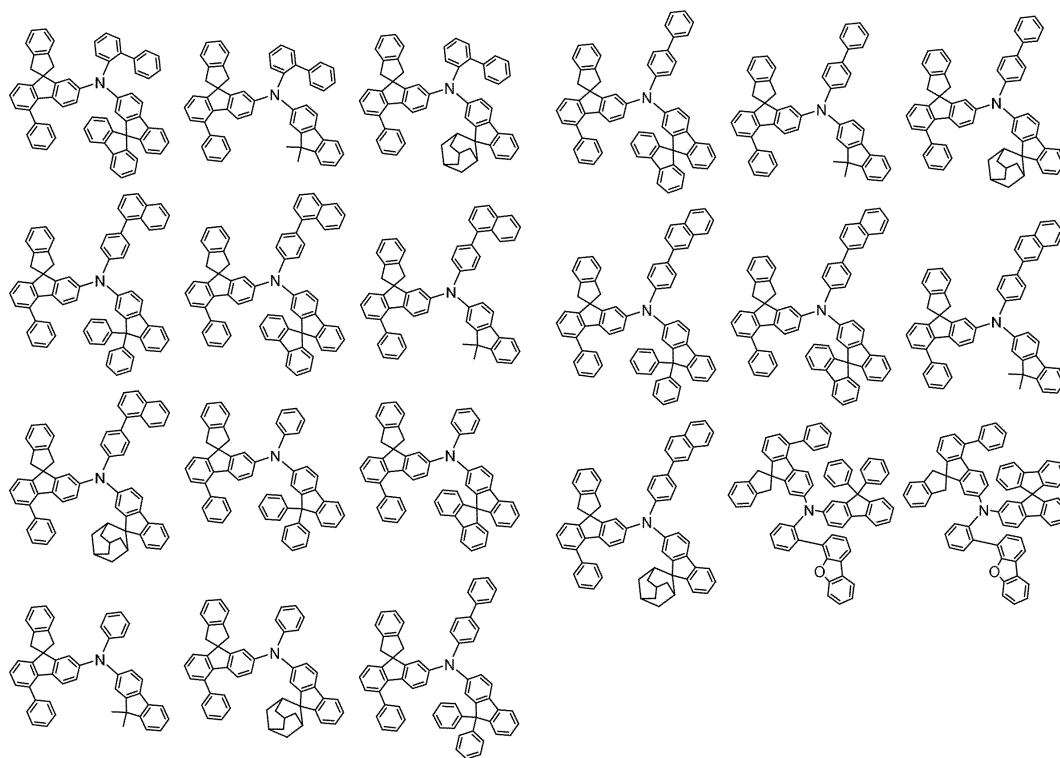
20

30

40

50

【化 1 3 0】



【 0 3 0 7】

10

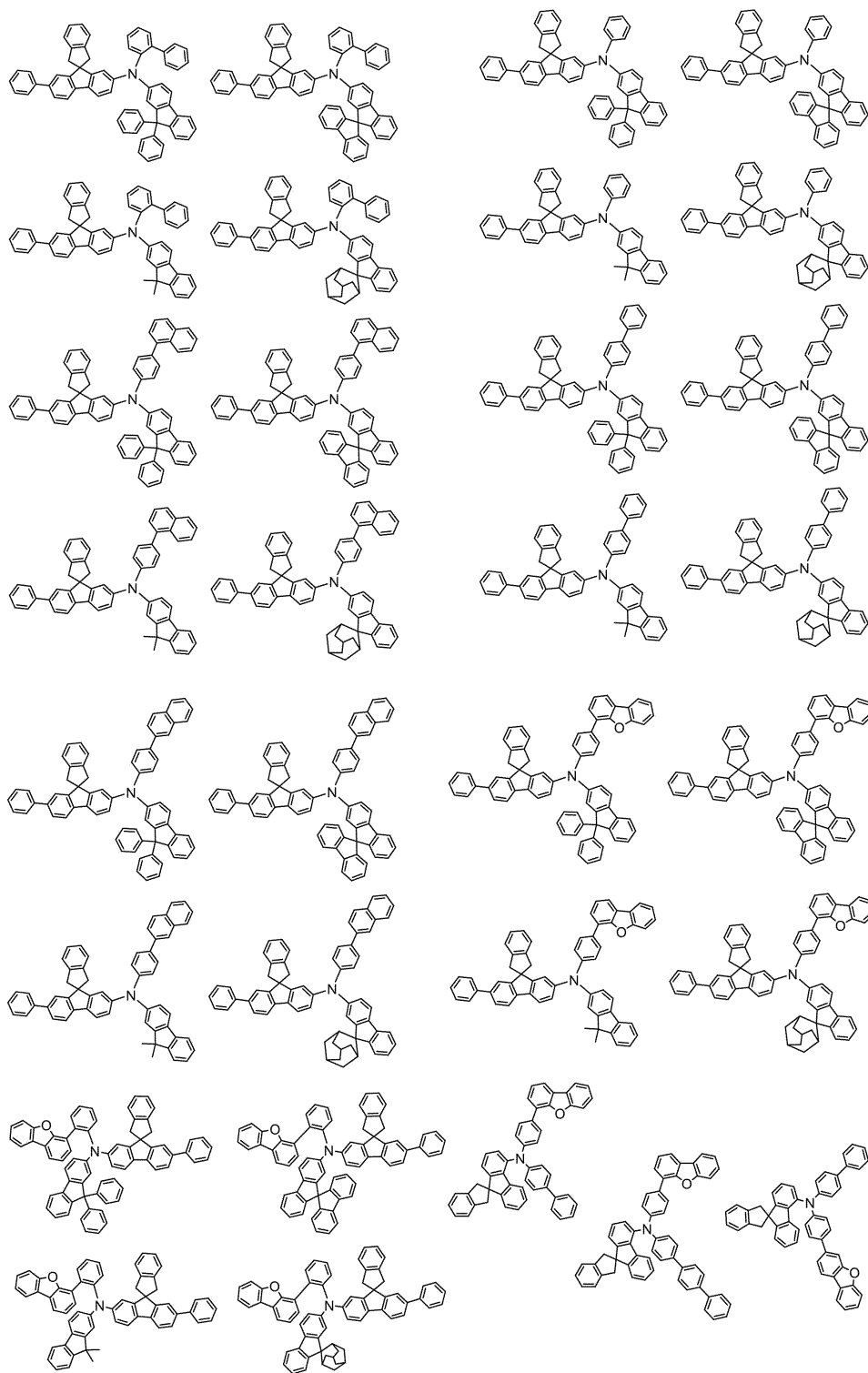
20

30

40

50

【化 1 3 1】



【0 3 0 8】

10

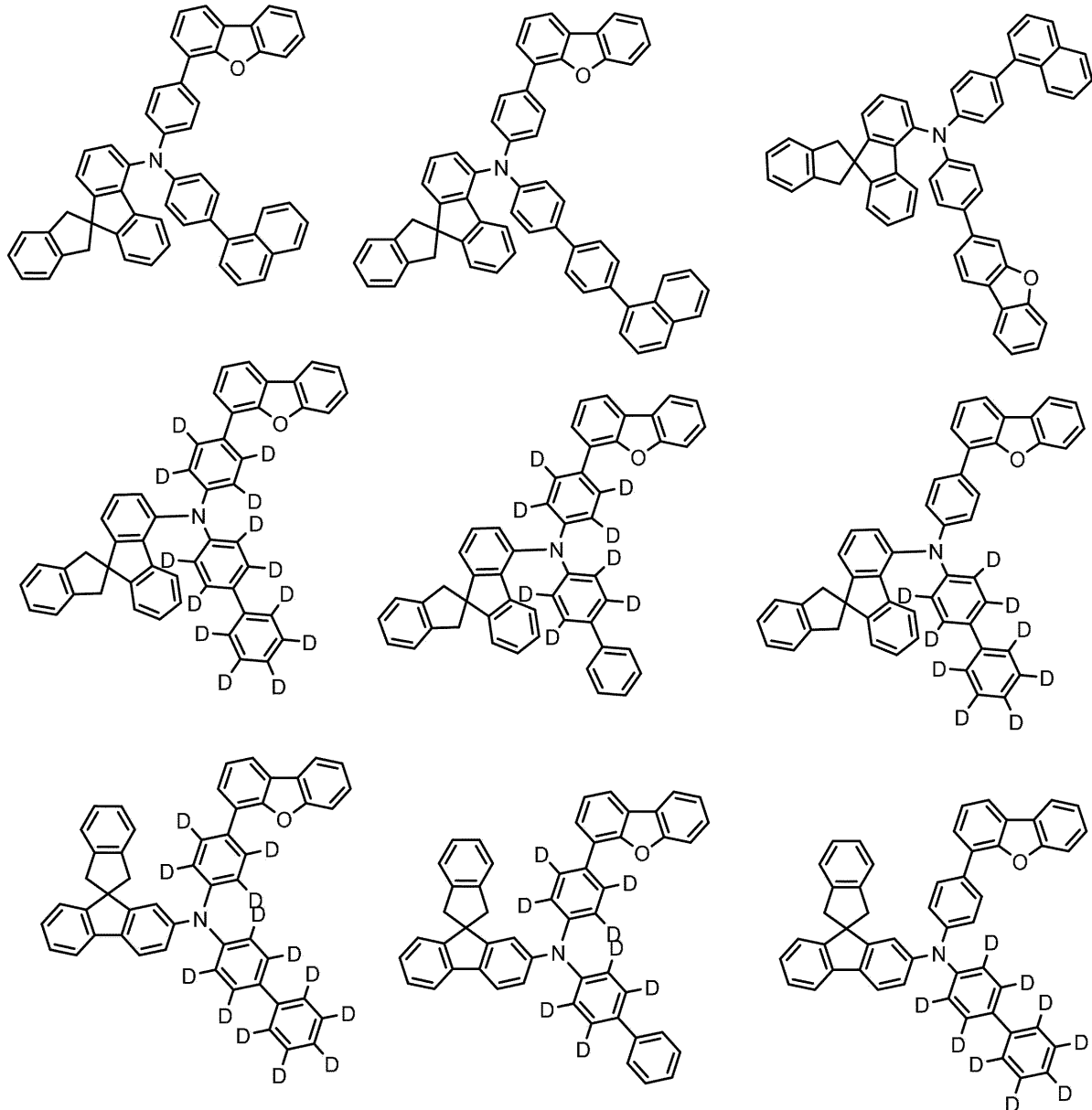
20

30

40

50

【化 1 3 2】



10

20

30

【 0 3 0 9 】

有機 E L 素子用材料

本発明の一態様である有機 E L 素子用材料は第 1 又は第 2 の発明化合物を含む。有機 E L 素子用材料における第 1 又は第 2 の発明化合物の含有量は、1 質量%以上（100%を含む）であり、10 質量%以上（100%を含む）であることが好ましく、50 質量%以上（100%を含む）であることがより好ましく、80 質量%以上（100%を含む）であることがさらに好ましく、90 質量%以上（100%を含む）であることが特に好ましい。本発明の一態様である有機 E L 素子用材料は、有機 E L 素子の製造に有用である。

40

本発明の一態様において、第 1 又は第 2 の発明化合物が正孔輸送層材料であることが好ましい。

【 0 3 1 0 】

本発明の一態様において、有機 E L 素子用材料は、第 1 又は第 2 の発明化合物の軽水素体をさらに含むことが好ましい。前記軽水素体とは、第 1 又は第 2 の発明化合物中の全ての水素原子が軽水素原子である化合物のことである。

第 1 又は第 2 の発明化合物と、第 1 又は第 2 の発明化合物の軽水素体との混合モル比率（発明化合物：軽水素体）は、10：90～90：10であることが好ましく、20：80～80：20であることがより好ましく、30：70～70：30であることがさらに

50

好ましく、40:60~60:40であることが特に好ましい。

【0311】

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用材料は、正孔輸送層材料である。

有機エレクトロルミネッセンス素子用材料における発明化合物の含有量は、1質量%以上（100%を含む）であることが好ましく、10質量%以上（100%を含む）であることがより好ましく、50質量%以上（100%を含む）であることがさらに好ましく、80質量%以上（100%を含む）であることがよりさらに好ましく、90質量%以上（100%を含む）であることが特に好ましい。

【0312】

有機EL素子

本発明の一態様である有機EL素子は陽極、陰極、及び該陽極と陰極の間に配置された有機層を含む。該有機層は発光層を含み、該有機層の少なくとも一層が発明化合物を含む。

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

【0313】

本発明の一態様である有機EL素子は、蛍光又は燐光発光型の単色発光素子であっても、蛍光／燐光ハイブリッド型の白色発光素子であってもよいし、単独の発光ユニットを有するシンプル型であっても、複数の発光ユニットを有するタンデム型であってもよく、中でも、蛍光発光型の素子であることが好ましい。ここで、「発光ユニット」とは、有機層を含み、そのうちの少なくとも一層が発光層であり、注入された正孔と電子が再結合することにより発光する最小単位をいう。

【0314】

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

（1）陽極／発光ユニット／陰極

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

（a）（正孔注入層／）正孔輸送層／蛍光発光層／電子輸送層（／電子注入層）

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

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

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

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

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

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

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

10

20

30

40

50

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

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

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

【0315】

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

10

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

【0316】

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

(2) 陽極／第1発光ユニット／中間層／第2発光ユニット／陰極

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

20

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

【0317】

図1は本発明の一態様に係る有機EL素子の構成の一例を示す概略図である。有機EL素子1は、基板2、陽極3、陰極4、及び該陽極3と陰極4との間に配置された発光ユニット10を有する。発光ユニット10は、発光層5を有する。発光層5と陽極3との間に正孔輸送帯域6(正孔注入層、正孔輸送層等)、発光層5と陰極4との間に電子輸送帯域7(電子注入層、電子輸送層等)を有する。また、発光層5の陽極3側に電子阻止層(図示せず)を、発光層5の陰極4側に正孔阻止層(図示せず)を、それぞれ設けてもよい。これにより、電子や正孔を発光層5に閉じ込めて、発光層5における励起子の生成効率をさらに高めることができる。

30

【0318】

図2は、本発明の一態様に係る有機EL素子の他の構成を示す概略図である。有機EL素子11は、基板2、陽極3、陰極4、及び該陽極3と陰極4との間に配置された発光ユニット20を有する。発光ユニット20は、発光層5を有する。陽極3と発光層5の間に配置された正孔輸送帯域は、正孔注入層6a、第1正孔輸送層6b及び第2正孔輸送層6cから形成されている。また、発光層5と陰極4の間に配置された電子輸送帯域は、第1電子輸送層7a及び第2電子輸送層7bから形成されている。

40

【0319】

図3は、本発明の一態様に係る有機EL素子の更に他の構成を示す概略図である。有機EL素子12は、基板2、陽極3、陰極4、及び該陽極3と陰極4との間に配置された発光ユニット30を有する。発光ユニット30は発光層5を有する。陽極3と発光層5との間に配置された正孔輸送帯域は、正孔注入層6a、第1正孔輸送層6b、第2正孔輸送層6c、及び第3正孔輸送層6dから形成されている。また、発光層5と陰極4との間に配置された電子輸送帯域は、第1電子輸送層7a及び第2電子輸送層7bから形成されている。

【0320】

図1～図3において、発光層5は少なくとも1層の発光層を含む。発光層5は、単独の

50

層であってもよいし、複数の層（例えば、複数の発光層、複数の発光層とスペース層）を含むものであってもよい。

【0321】

なお、本発明において、蛍光ドーパント材料（蛍光発光材料）と組み合わせられたホストを蛍光ホストと称し、燐光ドーパント材料と組み合わせられたホストを燐光ホストと称する。蛍光ホストと燐光ホストは分子構造のみにより区分されるものではない。すなわち、燐光ホストとは、燐光ドーパントを含有する燐光発光層を形成する材料を意味し、蛍光発光層を形成する材料として利用できないことを意味しているわけではない。蛍光ホストについても同様である。

【0322】

基板

基板は、有機EL素子の支持体として用いられる。基板としては、例えば、ガラス、石英、プラスチックなどの板を用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板としては、例えば、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエーテルスルホン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニルからなるプラスチック基板等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。

【0323】

陽極

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

【0324】

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

【0325】

正孔輸送帯域

上述したように、前記有機層が前記陽極と前記発光層の間に正孔輸送帯域を含んでいてもよい。正孔輸送帯域は、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層等から構成される。正孔輸送帯域が発明化合物を含むことが好ましい。正孔輸送層を構成するこれらの層のうち少なくとも一つの層に発明化合物を含むことが好ましく、特に正孔輸送層に発明化合物を含むことがより好ましい。

【0326】

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

仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第1族または第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（Y

10

20

30

40

50

b) 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。

【0327】

正孔注入層

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

【0328】

発明化合物以外の正孔注入性材料としては、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、マンガン酸化物等を用いることができる。

【0329】

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も正孔注入層材料として挙げられる。

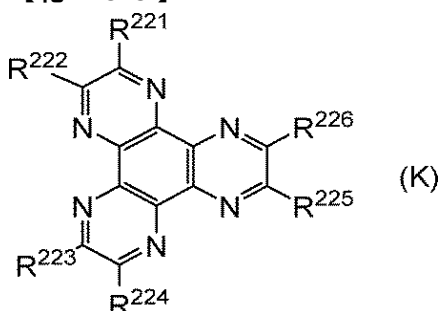
【0330】

高分子化合物（オリゴマー、 dendrimer、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。

【0331】

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

【化133】



10

20

30

40

50

【0332】

(上記式中、 $R^{221} \sim R^{226}$ は、それぞれ独立にシアノ基、 $-\text{CONH}_2$ 、カルボキシル基、又は $-\text{COOR}^{227}$ (R^{227} は炭素数1~20のアルキル基又は炭素数3~20のシクロアルキル基を表す)を表す。また、 R^{221} 及び R^{222} 、 R^{223} 及び R^{224} 、及び R^{225} 及び R^{226} から選ばれる隣接する2つが互いに結合して $-\text{CO}-\text{O}-\text{CO}-$ で示される基を形成してもよい。)

R^{227} としては、メチル基、エチル基、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、イソブチル基、 t -ブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等が挙げられる。

【0333】

正孔輸送層

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い材料(正孔輸送性材料)を含む層であり、陽極と発光層の間、又は、存在する場合には、正孔注入層と発光層の間に形成される。発明化合物を単独で又は下記の化合物と組み合わせて正孔輸送層に用いてもよい。

【0334】

正孔輸送層は、単層構造でもよく、2以上の層を含む多層構造でもよい。例えば、正孔輸送層は第1正孔輸送層(陽極側)と第2正孔輸送層(陰極側)を含む2層構造であってもよい。つまり、上記正孔輸送帯域が陽極側の第1正孔輸送層と陰極側の第2正孔輸送層を含んでいてもよい。また、正孔輸送層は陽極側から順に第1正孔輸送層と第2正孔輸送層と第3正孔輸送層を含む3層構造であってもよい。つまり、第2正孔輸送層と発光層との間に、第3正孔輸送層が配置されていてもよい。

本発明の一態様において、前記単層構造の正孔輸送層は発光層に隣接していることが好ましく、また、前記多層構造中の最も陰極に近い正孔輸送層、例えば、上記2層構造の第2正孔輸送層や上記3層構造の第3正孔輸送層は発光層に隣接していることが好ましい。本発明の他の態様において、前記単層構造の正孔輸送層と発光層の間に、又は、前記多層構造中の最も発光層に近い正孔輸送層と発光層の間に、後述する電子阻止層などを介在させてもよい。

本発明に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一態様において、前記第1正孔輸送層及び前記第2正孔輸送層の少なくとも一方が発明化合物を含む。具体的には、前記2層構造の正孔輸送層において、発明化合物は第1正孔輸送層と第2正孔輸送層の一方に含まれていてもよいし、双方に含まれていてもよい。また、他の態様において、上記第1~第3正孔輸送層のうち少なくとも一つが発明化合物を含む。具体的には、上記3層構造の正孔輸送層において、発明化合物は第1~第3正孔輸送層のうち一つのみに含まれていてもよいし、いずれか2つのみに含まれていてもよいし、全てに含まれていてもよい。

本発明の一態様においては、発明化合物が第2正孔輸送層に含まれるのが好ましく、具体的には、発明化合物が第2正孔輸送層のみに含まれるか、発明化合物が第1正孔輸送層と第2正孔輸送層に含まれるのが好ましい。

本発明の一態様において、前記第1正孔輸送層と前記第2正孔輸送層の一方又は双方に含まれる発明化合物や、前記第1~第3正孔輸送層のうち少なくとも一つ又は複数に含まれる発明化合物は、製造コストの観点から、軽水素体であることが好ましい。

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

したがって、本発明は、前記第1正孔輸送層と前記第2正孔輸送層の一方又は双方や、前記第1~第3正孔輸送層のうち少なくとも一つ又は複数が実質的に軽水素体のみからなる発明化合物を含む有機EL素子を含む。「実質的に軽水素体のみからなる発明化合物」とは、発明化合物の総量に対する軽水素体の含有割合が、90モル%以上、好ましくは95モル%以上、より好ましくは99モル%以上(それぞれ100%を含む)であることを意味する。

【0335】

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

10

20

30

40

50

芳香族アミン化合物としては、例えば、4, 4'-ビス [N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: NPB) や N, N'-ビス (3-メチルフェニル)-N, N'-ジフェニル- [1, 1'-ビフェニル]-4, 4'-ジアミン (略称: TPD)、4-フェニル-4'-(9-フェニルフルオレン-9-イル) トリフェニルアミン (略称: BAFAP)、4, 4'-ビス [N-(9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: DF LDPBi)、4, 4', 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: MTDA TA)、及び、4, 4'-ビス [N-(スピロ-9, 9'-ビフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: BSPB) が挙げられる。上記化合物は、 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上の正孔移動度を有する。

【0336】

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

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

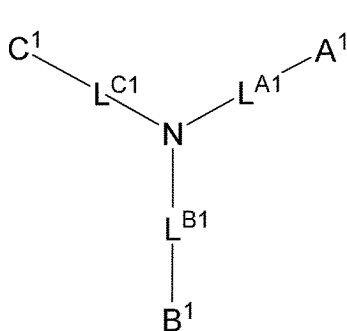
ポリ (N-ビニルカルバゾール) (略称: PVK) やポリ (4-ビニルトリフェニルアミン) (略称: PVTPA) 等の高分子化合物を用いることもできる。

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

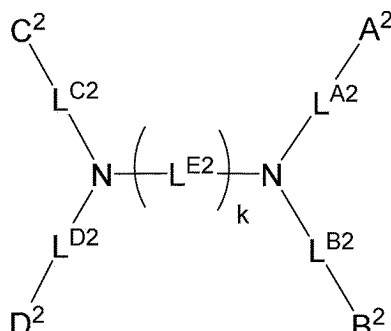
【0337】

本発明に係る有機 EL 素子の一態様において、前記第 1 正孔輸送層が、下記の式 (21) 又は式 (22) で表される化合物を含む。

【化 134】



(21)



(22)

[前記式 (21) 及び式 (22) 中、

$L A 1$ 、 $L B 1$ 、 $L C 1$ 、 $L A 2$ 、 $L B 2$ 、 $L C 2$ 及び $L D 2$ は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基であり、

k は、1、2、3 又は 4 であり、

k が 1 の場合、 $L E 2$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基であり、

k が 2、3 又は 4 の場合、複数の $L E 2$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

k が 2、3 又は 4 の場合、複数の $L E 2$ 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 L^{E2} は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 2 価の複素環基であり、

A^1 、 B^1 、 C^1 、 A^2 、 B^2 、 C^2 、及び D^2 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、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 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ であり、

R_{901} 、 R_{902} 及び R_{903} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基であり、

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

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、又は異なる。

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

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であり、

R_{901} が複数ある場合、複数の R_{901} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{902} が複数ある場合、複数の R_{902} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{903} が複数ある場合、複数の R_{903} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{904} が複数ある場合、複数の R_{904} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{905} が複数ある場合、複数の R_{905} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{906} が複数ある場合、複数の R_{906} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{907} が複数ある場合、複数の R_{907} は、互いに同一であるか、又は異なる。]

【0338】

なお、前記第 1 正孔輸送層は、式 (21) 及び式 (22) で表される化合物を 1 種含有していてもよいし、式 (21) 及び式 (22) で表される化合物を複数種含有していてもよい。

【0339】

式 (21) 及び式 (22) において、 A^1 、 B^1 、 C^1 、 A^2 、 B^2 、 C^2 、及び D^2 は、好ましくは、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニレン基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンソフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフエニル基、及び、置換もしくは無置換のカルバゾリル基から選択される。

また、より好ましくは、式 (21) において、 A^1 、 B^1 及び C^1 のうち少なくとも一つ、及び、式 (22) において、 A^2 、 B^2 、 C^2 及び D^2 のうち少なくとも一つが、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のジベンソフラニル基、又は、置換もしくは無置換のジベンゾチオフエニル基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基である。

【0340】

A^1 、 B^1 、 C^1 、 A^2 、 B^2 、 C^2 、及び D^2 がとり得るフルオレニル基は、9 位に置換基を有していてもよく、例えば、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であってもよい。また、9 位の置換基同士で環を形成していてもよく、例えば、9 位の置換基同士でフルオレン骨格やキサントレン骨格を形成してもよい。

【0341】

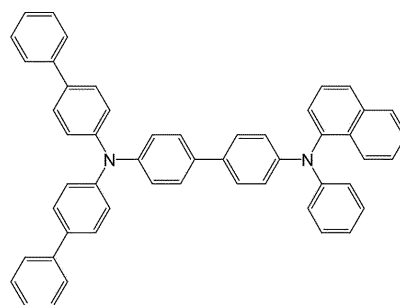
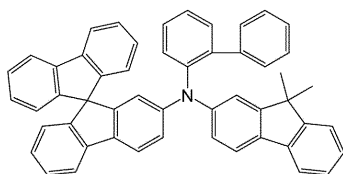
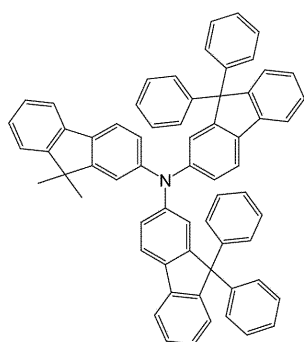
L^{A1} 、 L^{B1} 、 L^{C1} 、 L^{A2} 、 L^{B2} 、 L^{C2} 及び L^{D2} は、好ましくは、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～12 のアリーレン基である。

【0342】

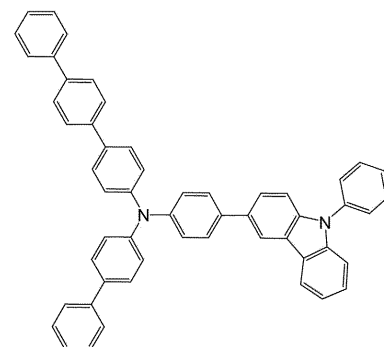
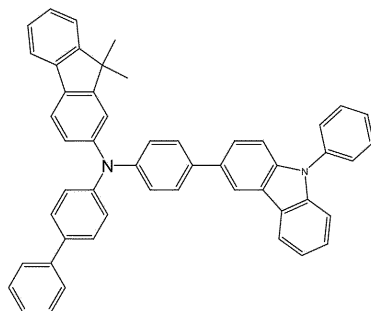
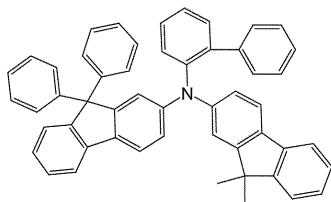
式 (21) 及び式 (22) で表される化合物の具体例としては、例えば、以下の化合物

が挙げられる。

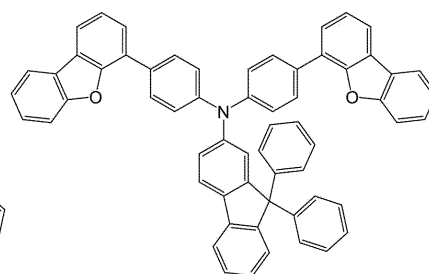
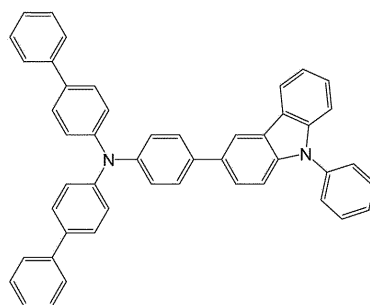
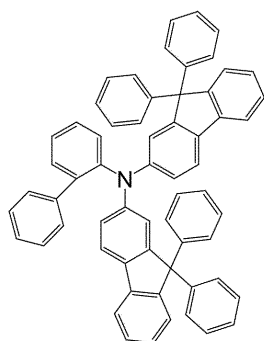
【化 1 3 5】



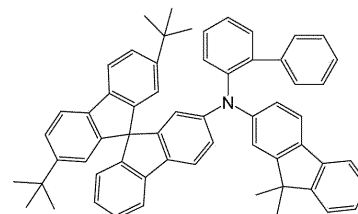
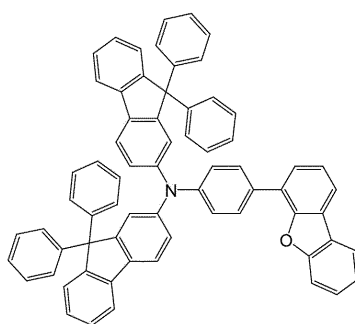
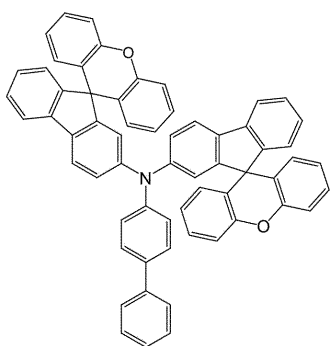
10



20



30



40

【 0 3 4 3】

発光層のドーパント材料

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

本発明に係る有機EL素子の一態様において、発光層は単一の層である。

また、本発明に係る有機EL素子の他の一態様において、発光層は第1の発光層と第2の発光層とを含む。

50

【0344】

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

【0345】

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

【0346】

発光層に用いることができる赤色系の蛍光発光材料として、テトラセン誘導体、ジアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N，N，N′，N′-テトラキス（4-メチルフェニル）テトラセン-5，11-ジアミン（略称：p-mPhTD）、7，14-ジフェニル-N，N，N′，N′-テトラキス（4-メチルフェニル）アセナフト〔1，2-a〕フルオランテン-3，10-ジアミン（略称：p-mPhAFD）などが挙げられる。

【0347】

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

【0348】

発光層に用いることができる青色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体が使用される。具体的には、ビス〔2-（4′，6′-ジフルオロフェニル）ピリジナト-N，C2′〕イリジウム（III）テトラキス（1-ピラゾリル）ボラート（略称：FIr6）、ビス〔2-（4′，6′-ジフルオロフェニル）ピリジナト-N，C2′〕イリジウム（III）ピコリナート（略称：FIrpic）、ビス〔2-（3′，5′-ビストリフルオロメチルフェニル）ピリジナト-N，C2′〕イリジウム（III）ピコリナート（略称：Ir（CF3ppy）2（pic））、ビス〔2-（4′，6′-ジフルオロフェニル）ピリジナト-N，C2′〕イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：FIracac）などが挙げられる。

【0349】

発光層に用いることができる緑色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体等が使用される。トリス（2-フェニルピリジナト-N，C2′）イリジウム（III）（略称：Ir（ppy）3）、ビス（2-フェニルピリジナト-N，C2′）イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：Ir（ppy）2（acac））、ビス（1，2-ジフェニル-1H-ベンゾイミダゾラト）イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：Ir（pbi）2（acac））、ビス（ベンゾ〔h〕キノリナト）イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：Ir（bzq）2（acac））などが挙げられる。

【0350】

発光層に用いることができる赤色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、白金錯体、テルビウム錯体、ユーロピウム錯体等の金属錯体が使用される。具体的には、ビス〔2-(2'-ベンゾ〔4,5- α 〕チエニル)ピリジナト-N, C3']イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(btp)2(acac))、ビス(1-フェニルイソキノリナト-N, C2')イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(piq)2(acac))、(アセチルアセトナート)ビス〔2,3-ビス(4-フルオロフェニル)キノキサリナト〕イリジウム(III)(略称:Ir(Fdpq)2(acac))、2,3,7,8,12,13,17,18-オクタエチル-21H,23H-ポルフィリン白金(II)(略称:PtOEP)等の有機金属錯体が挙げられる。

【0351】

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

【0352】

発光層のホスト材料

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

【0353】

ホスト材料としては、例えば

- (1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、又は亜鉛錯体等の金属錯体、
- (2) オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、又はフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、
- (3) カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、又はクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、
- (4) トリアリールアミン誘導体又は縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族アミン化合物が使用される。

【0354】

例えば、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム(III)(略称:Alq)、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)(略称:Almq3)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(II)(略称:BeBq2)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(4-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)(略称:BAIq)、ビス(8-キノリノラト)亜鉛(II)(略称:Znq)、ビス〔2-(2-ベンゾオキサゾリル)フェノラト〕亜鉛(II)(略称:ZnPBO)、ビス〔2-(2-ベンゾチアゾリル)フェノラト〕亜鉛(II)(略称:ZnBTZ)などの金属錯体；

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-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル〕ベンゼン(略称:OXD-7)、3-(4-ビフェニリル)-4-フェニル-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称:TAZ)、2,2',2''-(1,3,5-ベンゼントリイル)トリス(1-フェニル-1H-ベンゾイミダゾール)(略称:TPBI)、バソフェナントロリン(略称:BPhen)、バソキュプロイン(略称:BCP)などの複素環化合物；
9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称:CzPA)、3,6-ジフェニル-9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称:DPCzPA)、9,10-ビス(3,5-ジ

10

20

30

40

50

フェニルフェニル) アントラセン (略称: DPPA)、9, 10-ジ(2-ナフチル) アントラセン (略称: DNA)、2-tert-ブチル-9, 10-ジ(2-ナフチル) アントラセン (略称: t-BuDNA)、9, 9'-ビアントリル (略称: BANT)、9, 9'-(スチルベン-3, 3'-ジイル) ジフェナントレン (略称: DPNS)、9, 9'-(スチルベン-4, 4'-ジイル) ジフェナントレン (略称: DPNS2)、3, 3', 3'', 3'''-(ベンゼン-1, 3, 5-トリイル) トリピレン (略称: TPB3)、9, 10-ジフェニルアントラセン (略称: DPAnth)、6, 12-ジメトキシ-5, 11-ジフェニルクリセンなどの縮合芳香族化合物; 及び

N, N-ジフェニル-9-[4-(10-フェニル-9-アントリル) フェニル]-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: CzA1PA)、4-(10-フェニル-9-アントリル) トリフェニルアミン (略称: DPhPA)、N, 9-ジフェニル-N-[4-(10-フェニル-9-アントリル) フェニル]-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: PCAPA)、N, 9-ジフェニル-N-{4-[4-(10-フェニル-9-アントリル) フェニル] フェニル}-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: PCAPBA)、N-(9, 10-ジフェニル-2-アントリル)-N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: 2PCAPA)、4, 4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: NPBまたは α -NPD)、N, N'-ビス(3-メチルフェニル)-N, N'-ジフェニル-[1, 1'-ビフェニル]-4, 4'-ジアミン (略称: TPD)、4, 4'-ビス[N-(9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: DFLDPBi)、4, 4'-ビス[N-(スピロ-9, 9'-ビフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (略称: BSPB) などの芳香族アミン化合物を用いることができる。ホスト材料は複数種用いてもよい。

【0355】

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

【0356】

10

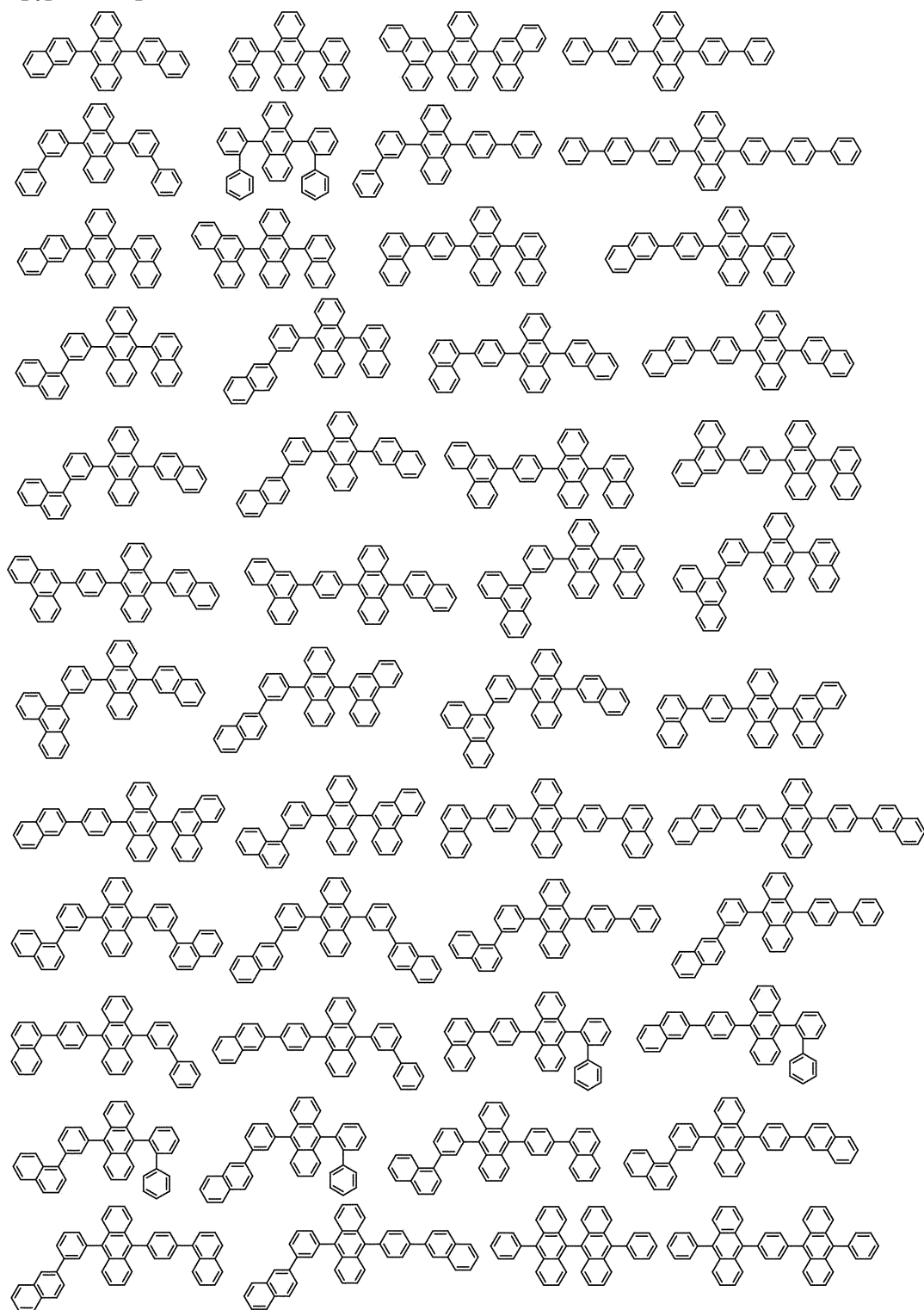
20

30

40

50

【化 1 3 6】



10

20

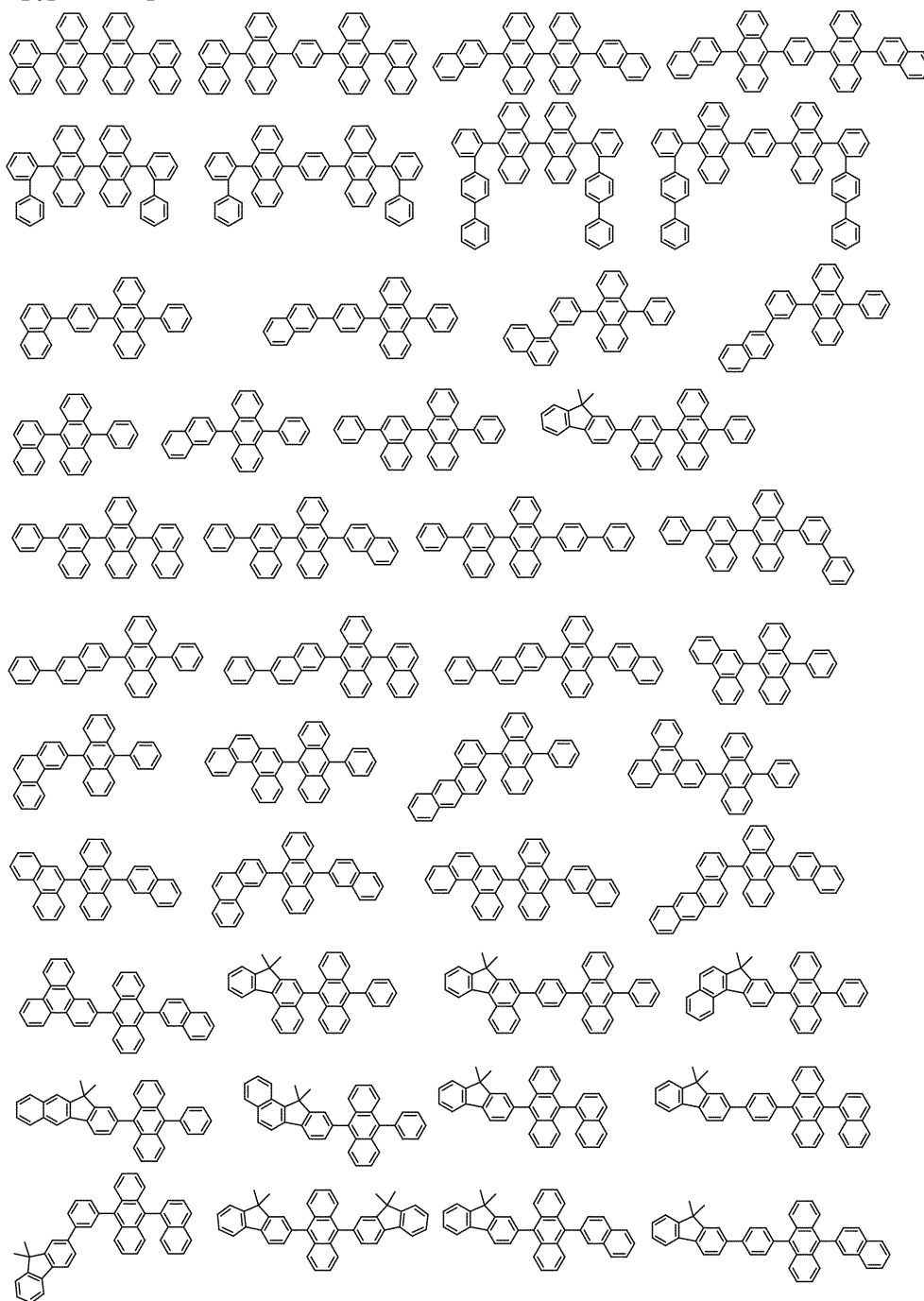
30

40

【0 3 5 7】

50

【化 1 3 7】



10

20

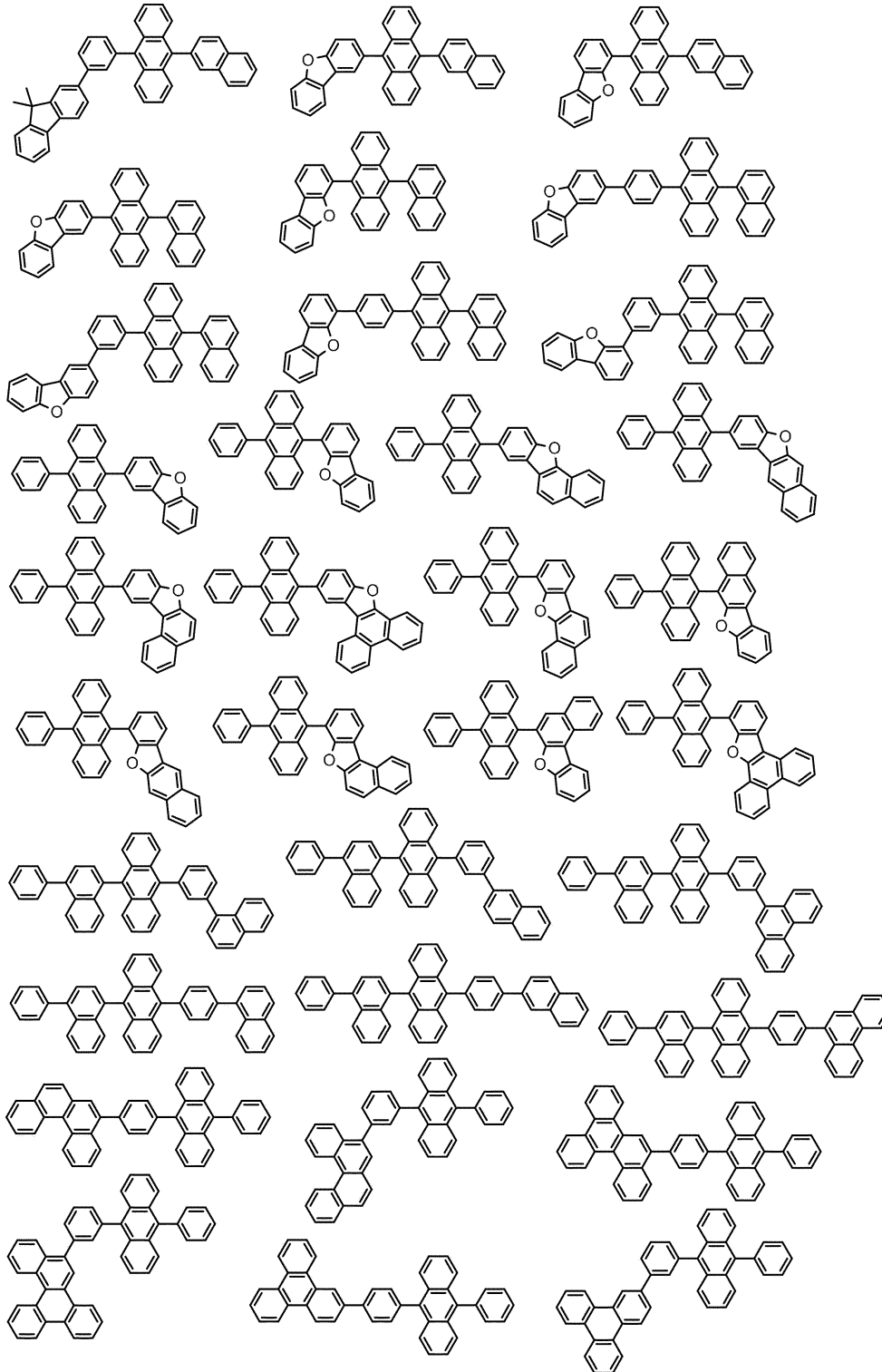
30

【 0 3 5 8】

40

50

【化 1 3 8】



10

20

30

40

【0 3 5 9】

本発明に係る有機EL素子の一態様において、発光層が第1の発光層と第2の発光層とを含む場合、第1の発光層を構成する成分の少なくとも一つが第2の発光層を構成する成分とは異なる。例えば、第1の発光層に含まれるドーパント材料が第2の発光層に含まれるドーパント材料と異なる態様や、第1の発光層に含まれるホスト材料が第2の発光層に含まれるホスト材料と異なる態様が挙げられる。

【0 3 6 0】

本実施形態に係る有機EL素子において、発光層は、主ピーク波長が500nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物を含有していてもよい。

50

【0361】

化合物の主ピーク波長の測定方法は、次のとおりである。測定対象となる化合物の5 μ mol/Lトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（300 K）でこの試料の発光スペクトル（縦軸：発光強度、横軸：波長とする。）を測定する。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主ピーク波長とする。なお、本明細書において、主ピーク波長を蛍光発光主ピーク波長（F L - p e a k）と称する場合がある。

【0362】

主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物は、上記ドーパント材料であってもよいし、上記ホスト材料であってもよい。

【0363】

発光層が単一の層である場合、ドーパント材料とホスト材料のうち一方のみが主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物であってもよいし、両方の材料の主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物であってもよい。

また、発光層が第1の発光層と第2の発光層とを含む場合、第1の発光層と第2の発光層のうち一方のみが、主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物を含んでいてもよいし、両方の発光層が、主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物を含んでいてもよい。そして、第1の発光層が、主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物を含む場合、第1の発光層に含まれるドーパント材料とホスト材料のうち一方のみが、主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物であってもよいし、両方の材料が、主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物であってもよい。また、第2の発光層が、主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物を含む場合、第2の発光層に含まれるドーパント材料とホスト材料のうち一方のみが、主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物であってもよいし、両方の材料が、主ピーク波長が500 nm以下の蛍光発光を示す発光性化合物であってもよい。

【0364】

電子輸送層

電子輸送層は電子輸送性の高い材料（電子輸送性材料）を含む層であり、発光層と陰極の間、又は、存在する場合は、電子注入層と発光層の間に形成される。

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

【0365】

電子輸送層には、例えば、

- (1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、
- (2) イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、
- (3) 高分子化合物を使用することができる。

【0366】

金属錯体としては、例えば、トリス（8-キノリノラト）アルミニウム（III）（略称：Alq）、トリス（4-メチル-8-キノリノラト）アルミニウム（略称：Almq3）、ビス（10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト）ベリリウム（略称：BeBq2）、ビス（2-メチル-8-キノリノラト）（4-フェニルフェノラト）アルミニウム（

10

20

30

40

50

III) (略称: BA1q)、ビス(8-キノリノラト)亜鉛(II) (略称: Znq)、ビス[2-(2-ベンゾオキサゾリル)フェノラト]亜鉛(II) (略称: ZnPBO)、ビス[2-(2-ベンゾチアゾリル)フェノラト]亜鉛(II) (略称: ZnBTZ)が挙げられる。

【0367】

複素芳香族化合物としては、例えば、2-(4-ビフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称: PBD)、1,3-ビス[5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称: OXD-7)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称: TAZ)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-(4-エチルフェニル)-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称: p-ETTAZ)、バソフェナントロリン(略称: BPhen)、バソキュプロイン(略称: BCP)、4,4'-ビス(5-メチルベンゾオキサゾール-2-イル)スチルベン(略称: BzOs)が挙げられる。

【0368】

高分子化合物としては、例えば、ポリ[(9,9-ジヘキシルフルオレン-2,7-ジイル)-co-(ピリジン-3,5-ジイル)](略称: PF-Py)、ポリ[(9,9-ジオクチルフルオレン-2,7-ジイル)-co-(2,2'-ビピリジン-6,6'-ジイル)](略称: PF-BPy)が挙げられる。

【0369】

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

【0370】

電子注入層

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

その他、電子輸送性を有する材料にアルカリ金属、アルカリ土類金属、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。

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

【0371】

陰極

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

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

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

【0372】

絶縁層

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

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

【0373】

スペース層

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

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

【0374】

阻止層

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

【0375】

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

【0376】

各層の膜厚は特に制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い駆動電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常 $5\text{ nm} \sim 10\text{ }\mu\text{m}$ であり、 $10\text{ nm} \sim 0.2\text{ }\mu\text{m}$ がより好ましい。

10

20

30

40

50

【0377】

本発明の有機EL素子の一態様において、第1正孔輸送層の厚さと第2正孔輸送層の厚さの合計が、30nm以上、150nm以下である。この場合、好ましくは、40nm以上、130nm以下である。

また、本発明の有機EL素子の一態様において、第2正孔輸送層の厚さは20nm以上である。好ましくは25nm以上であり、より好ましくは35nm以上であり、また、好ましくは100nm以下である。

また、本発明の有機EL素子の一態様において、発光層と隣接する正孔輸送層が20nm以上である。好ましくは25nm以上であり、より好ましくは30nm以上であり、また、好ましくは100nm以下である。

また、本発明の有機EL素子の一態様において、第1正孔輸送層の膜厚D1と第2正孔輸送層膜厚D2は、 $0.3 < D2 / D1 < 4.0$ の関係を満たす。好ましくは $0.5 < D2 / D1 < 3.5$ の関係を満たし、より好ましくは $0.75 < D2 / D1 < 3.0$ の関係を満たす。

【0378】

本発明の有機EL素子の実施態様としては、例えば、

上記2層構成の正孔輸送層を有する有機EL素子であって、

- ・第2正孔輸送層が本発明の化合物を含み、第1正孔輸送層が本発明の化合物を含まない第1の実施態様；

- ・第1正孔輸送層及び第2正孔輸送層の双方が本発明の化合物を含む第2の実施態様；

- ・第1正孔輸送層が本発明の化合物を含み、第2正孔輸送層が本発明の化合物を含まない第3の実施態様；

上記3層構成の正孔輸送層を有する有機EL素子であって、

- ・第1正孔輸送層が本発明の化合物を含み、第2及び第3正孔輸送層が本発明の化合物を含まない第4の実施態様；

- ・第2正孔輸送層が本発明の化合物を含み、第1及び第3正孔輸送層が本発明の化合物を含まない第5の実施態様；

- ・第3正孔輸送層が本発明の化合物を含み、第1及び第2正孔輸送層が本発明の化合物を含まない第6の実施態様；

- ・第1及び第2正孔輸送層が本発明の化合物を含み、第3正孔輸送層が本発明の化合物を含まない第7の実施態様；

- ・第1及び第3正孔輸送層が本発明の化合物を含み、第2正孔輸送層が本発明の化合物を含まない第8の実施態様；

- ・第2及び第3正孔輸送層が本発明の化合物を含み、第1正孔輸送層が本発明の化合物を含まない第10の実施態様；

- ・第1～第3正孔輸送層の全てが本発明の化合物を含む第10の実施態様；などが挙げられる。

【0379】

電子機器

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

【実施例】

【0380】

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

【0381】

実施例の有機EL素子の製造に用いた化合物

10

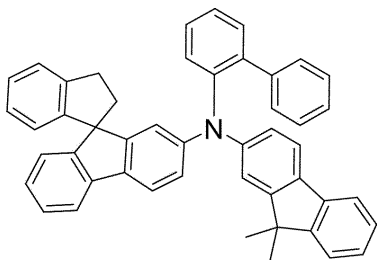
20

30

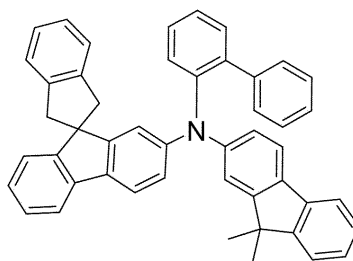
40

50

【化 1 3 9】

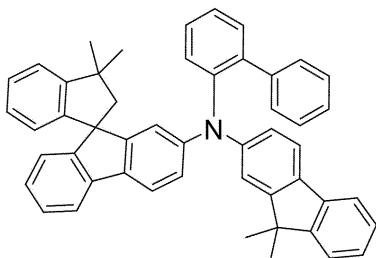


化合物1

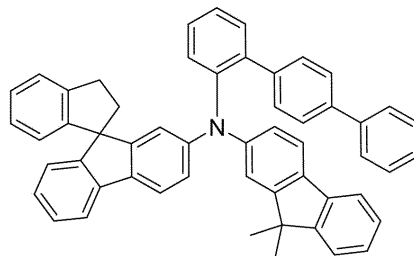


化合物2

10

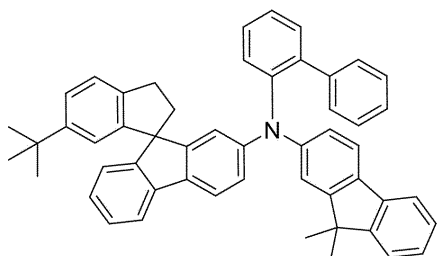


化合物3

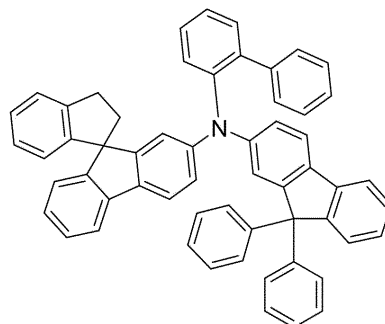


化合物4

20

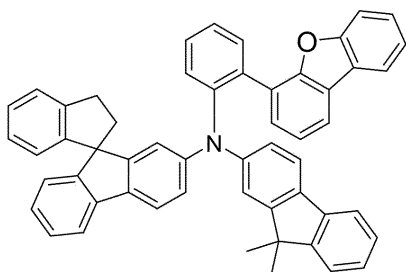


化合物5

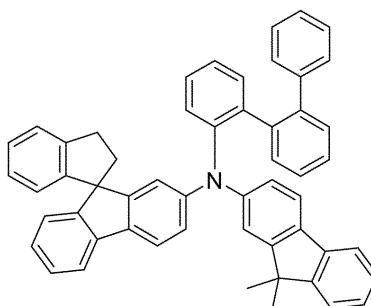


化合物6

30



化合物7



化合物8

40

【 0 3 8 2】

比較例の有機 E L 素子の製造に用いた比較化合物

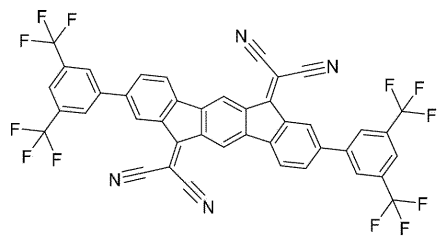
50

Chemical structure of compound 10: A bis-indole derivative. The central nitrogen atom is bonded to two 1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-yl groups (indole-like structures with a saturated ring) and two phenyl rings.

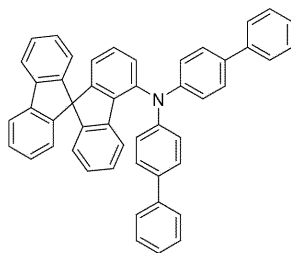
比較化合物 4

実施例及び比較例の有機 E L 素子の製造に用いた他の化合物

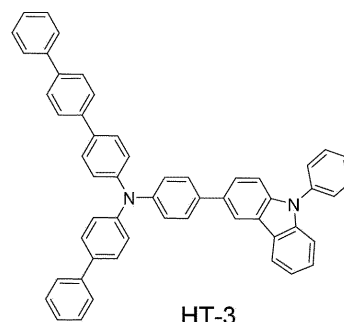
【化 1 4 1】



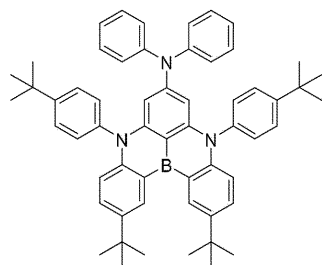
HI-1



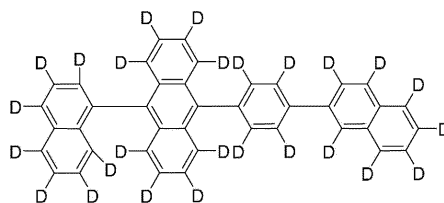
HT-2



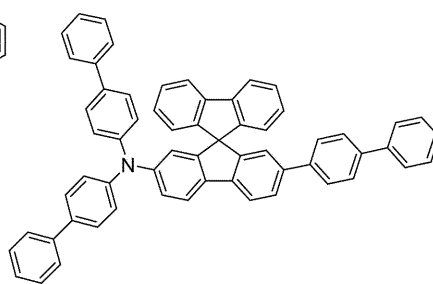
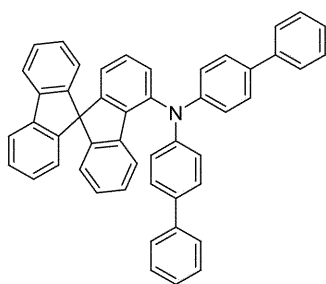
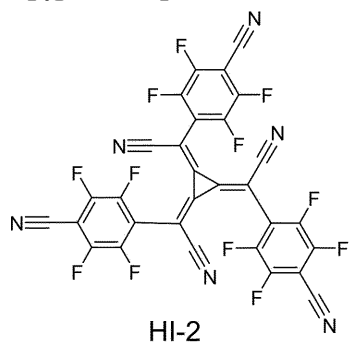
HT-3



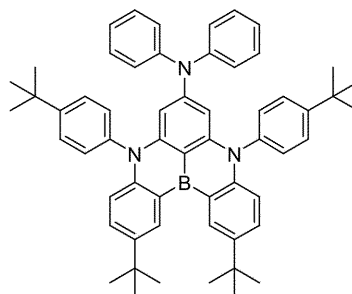
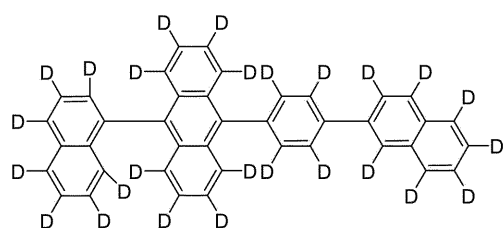
BD-1



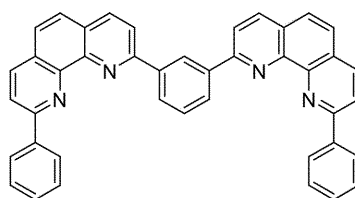
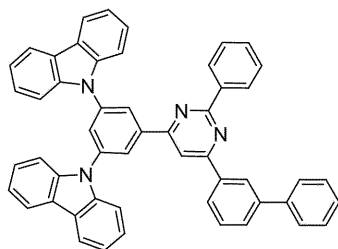
【化 1 4 2】



10



20



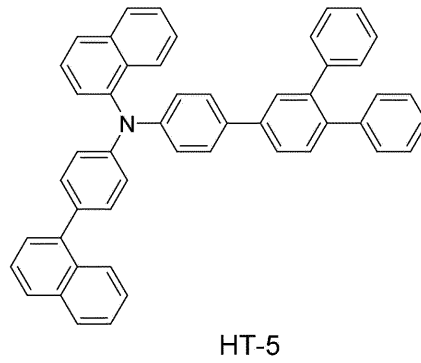
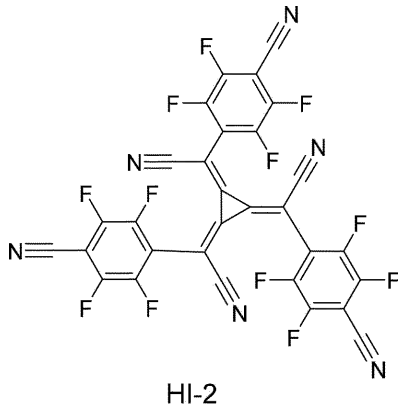
【 0 3 8 5】

30

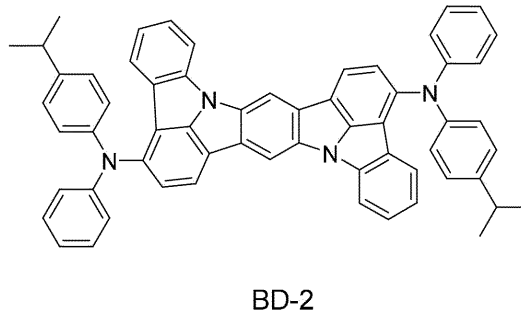
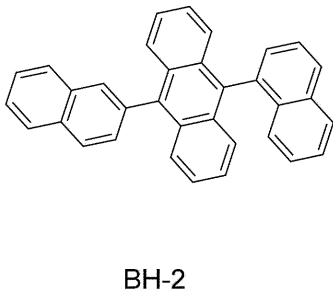
40

50

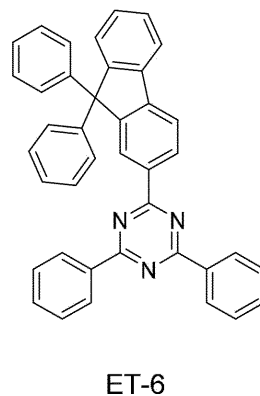
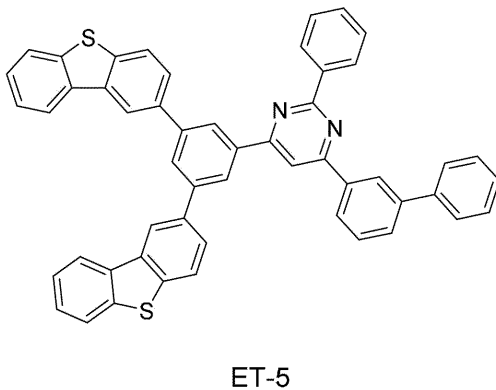
【化 1 4 3】



10



20



30

【0 3 8 6】

有機EL素子の作製

実施例 1-1

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

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

40

次に、正孔注入層上に化合物HT-1として化合物1を蒸着し、膜厚75 nmの第1正孔輸送層を形成した。

次に、この第1正孔輸送層上に化合物HT-2を蒸着し、膜厚15 nmの第2正孔輸送層を形成した。

次に、この第2正孔輸送層上に、化合物BH-1（ホスト材料）と化合物BD-1（ドーパント材料）を共蒸着し、膜厚20 nmの発光層を形成した。化合物BH-1と化合物BD-1の質量比（BH-1：BD-1）は98：2であった。

次に、この発光層の上に、化合物ET-1を蒸着して膜厚15 nmの第1電子輸送層を

50

形成した。

次に、この第1電子輸送層上に、化合物ET-2とLiを共蒸着して膜厚15nmの第2電子輸送層を形成した。化合物ET-2とLiの質量比(ET-2:Li)は96:4であった。

次に、この第2電子輸送層上に金属Alを蒸着して膜厚80nmの金属陰極を形成した。

このようにして得られた実施例1-1の有機EL素子の層構成を以下に示す。

ITO(130)/HI-1(5)/HT-1(75)/HT-2(15)/BH-1:BD-1=98:2(20)/ET-1(15)/ET-2:Li=96:4(15)/Al(80)

なお、上記層構成において、括弧内の数字は膜厚(nm)であり、比は質量比である。
比較例1-1~1-3

第2正孔輸送層材料を、それぞれ化合物1から比較化合物1、2、3に代えたこと以外は実施例1と同様にして有機EL素子を作製した。

【0387】

有機EL素子の評価

実施例1-1及び比較例1-1~1-3で作製した有機EL素子について、電流密度が10mA/cm²となるように有機EL素子に電圧を印加し、外部量子効率(EQE)の評価を行うとともに、そのときの電圧値を測定し、駆動電圧とした。

結果を表1に示す。

【0388】

【表1】

表1

	第1正孔輸送材料 (HT-1)	駆動電圧 [V] @10mA/cm ²	EQE @10mA/cm ²
実施例1-1	化合物1	3.79	9.82
比較例1-1	比較化合物1	4.06	6.55
比較例1-2	比較化合物2	3.98	9.60
比較例1-3	比較化合物3	4.01	6.87

【0389】

表1の結果から明らかなように、本発明の規定を満たしている化合物(実施例1-1の化合物1)が、本発明の規定を満たさないモノアミン(比較例1-1~1-3の比較化合物1、2、3)に比べて、著しく改善された駆動電圧及びEQEの値を示すことが判る。

【0390】

実施例2-1

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

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

次に、正孔注入層上に化合物HT-3を蒸着し、膜厚37.5nmの第1正孔輸送層を形成した。

次に、この第1正孔輸送層上に化合物HT-1として化合物1を蒸着し、膜厚37.5nmの第2正孔輸送層を形成した。

次に、この第2正孔輸送層上に化合物HT-2を蒸着し、膜厚15nmの第3正孔輸送層を形成した。

次に、この第3正孔輸送層上に、化合物BH-1(ホスト材料)と化合物BD-1(ド

ーパント材料)を共蒸着し、膜厚20nmの発光層を形成した。化合物BH-1と化合物BD-1の質量比(BH-1:BD-1)は98:2であった。

次に、この発光層の上に、化合物ET-1を蒸着して膜厚15nmの第1電子輸送層を形成した。

次に、この第1電子輸送層上に、化合物ET-2とLiを共蒸着して膜厚15nmの第2電子輸送層を形成した。化合物ET-2とLiの質量比(ET-2:Li)は96:4であった。

次に、この第2電子輸送層上に金属Alを蒸着して膜厚80nmの金属陰極を形成した。

このようにして得られた実施例2-1の有機EL素子の層構成を以下に示す。

ITO(130)/HI-1(5)/HT-3(37.5)/HT-1(37.5)/HT-2(15)/BH-1:BD-1=98:2(20)/ET-1(15)/ET-2:Li=96:4(15)/Al(80)

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

【0391】

実施例2-2

第2正孔輸送層材料を、化合物1から化合物2に代えたこと以外は実施例2-1と同様にして有機EL素子を作製した。

【0392】

比較例2-1、2-2

第2正孔輸送層材料を、化合物1から比較化合物1、3に代えたこと以外は実施例2-1と同様にして有機EL素子を作製した。

【0393】

有機EL素子の評価

実施例2-1、2-2、比較例2-1、及び比較例2-2で作製した有機EL素子について、電流密度が10mA/cm²となるように有機EL素子に電圧を印加し、外部量子効率(EQE)の評価を行うとともに、そのときの電圧値を測定し、駆動電圧とした。

結果を表2に示す。

【0394】

【表2】

表2

	第2正孔輸送材料 (HT-1)	駆動電圧 [V] @10mA/cm ²	EQE @10mA/cm ²
実施例2-1	化合物1	3.88	10.73
実施例2-2	化合物2	3.92	10.77
比較例2-1	比較化合物1	4.15	7.34
比較例2-2	比較化合物3	4.08	7.76

【0395】

表2の結果から明らかなように、本発明の規定を満たしている化合物(実施例2-1、実施例2-2の化合物1、2)が、本発明の規定を満たさないモノアミン(比較例2-1、比較例2-2の比較化合物1、3)に比べて、著しく改善された駆動電圧及びEQEの値を示すことが判る。

【0396】

実施例3-1

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

洗浄後の透明電極付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透

明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-4及びHI-2を共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層を形成した。化合物HT-4と化合物HI-2の質量比(HI-4:HI-2)は95:5であった。

次に、正孔注入層上に化合物HT-4を蒸着し、膜厚30nmの第1正孔輸送層を形成した。

次に、この第1正孔輸送層上に第2正孔輸送材料HT-1として化合物1を蒸着し、膜厚40nmの第2正孔輸送層を形成した。

次に、この第2正孔輸送層上に化合物HT-2を蒸着し、膜厚15nmの第3正孔輸送層を形成した。

次に、この第3正孔輸送層上に、化合物BH-1(ホスト材料)と化合物BD-1(ドーパント材料)を共蒸着し、膜厚20nmの発光層を形成した。化合物BH-1と化合物BD-1の質量比(BH-1:BD-1)は98:2であった。

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

次に、この第1電子輸送層上に、化合物ET-2とLiを共蒸着して膜厚20nmの第2電子輸送層を形成した。化合物ET-2とLiの質量比(ET-2:Li)は96:4であった。

次に、この第2電子輸送層上に金属Alを蒸着して膜厚80nmの金属陰極を形成した。

このようにして得られた実施例2-1の有機EL素子の層構成を以下に示す。

ITO(130)/HI-4:HI-2=95:5(10)/HT-4(30)/HT-1(40)/HT-2(15)/BH-1:BD-1=98:2(20)/ET-1(10)/ET-2:Li=96:4(20)/Al(80)

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

【0397】

実施例3-2~3-6

第2正孔輸送層材料HT-1を、化合物1から、それぞれ化合物4~8に変更したこと以外は実施例3-1と同様にして有機EL素子を作製した。

【0398】

実施例3-7

第2正孔輸送層材料HT-1を、化合物1から、化合物3に変更したこと以外は実施例3-1と同様にして有機EL素子を作製した。

【0399】

比較例3-1、3-2

第2正孔輸送層材料HT-1を、化合物1から、それぞれ比較化合物1、3に変更したこと以外は実施例3-1と同様にして有機EL素子を作製した。

【0400】

有機EL素子の評価

実施例3-1~3-7、比較例3-1、及び比較例3-2で作製した有機EL素子について、電流密度が10mA/cm²となるように有機EL素子に電圧を印加し、外部量子効率(EQE)の評価を行うとともに、そのときの電圧値を測定し、駆動電圧とした。

結果を表3に示す。

【0401】

10

20

30

40

50

【表 3】

表 3

	第2正孔輸送材料 (HT-1)	駆動電圧 [V] @10mA/cm ²	EQE @10mA/cm ²
実施例3-1	化合物1	3.83	10.3
実施例3-2	化合物4	3.83	10.3
実施例3-3	化合物5	3.80	10.1
実施例3-4	化合物6	3.85	10.6
実施例3-5	化合物7	3.88	10.0
実施例3-6	化合物8	3.83	10.2
実施例3-7	化合物3	4.00	8.5
比較例3-1	比較化合物1	4.10	7.6
比較例3-2	比較化合物3	4.11	7.8

【0402】

表3の結果から明かなように、本発明の規定を満たしている化合物（実施例3-1～3-7の化合物1、化合物4～8、化合物3）が、本発明の規定を満たさないモノアミン（比較例3-1、比較例3-2の比較化合物1、比較化合物3）に比べて、著しく改善された駆動電圧及びEQEの値を示すことが判る。

【0403】

実施例4-1

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

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

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

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

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

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

次に、この第1電子輸送層上に、化合物ET-6とLi qを共蒸着して膜厚25nmの第2電子輸送層を形成した。化合物ET-6とLi qの質量比（ET-6：Li q）は50：50であった。

次に、この第2電子輸送層上に金属Ybを蒸着して膜厚1nmの電子注入層を形成した。

次に、電子注入層上に金属Alを蒸着して膜厚50nmの金属陰極を形成した。

このようにして得られた実施例2-1の有機EL素子の層構成を以下に示す。

ITO (130) / HT-1 : HI-2 = 97 : 3 (10) / HT-1 (80) / HT-5 (5) / BH-2 : BD-2 = 99 : 1 (20) / ET-5 (5) / ET-6 : Li q = 50 : 50 (25) / Yb (1) / Al (50)

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

【0404】

実施例4-2、4-3

正孔注入層に用いる正孔輸送材料及び第1正孔輸送材料を、化合物1から化合物4に変更したこと（実施例4-2）、及び、化合物1から化合物6に変更したこと（実施例4-3）以外は、実施例4-1と同様にして有機EL素子を作製した。

【0405】

比較例4-1、4-2

正孔注入層に用いる正孔輸送材料及び第1正孔輸送材料を、化合物1から比較化合物3に変更したこと（比較例4-1）、及び、化合物1から比較化合物4に変更したこと（比較例4-2）以外は、実施例4-1と同様にして有機EL素子を作製した。

【0406】

有機EL素子の評価

実施例4-1～4-3、比較例4-1、及び比較例4-2で作製した有機EL素子について、電流密度が 10 mA/cm^2 となるように有機EL素子に電圧を印加し、外部量子効率（EQE）の評価を行うとともに、そのときの電圧値を測定し、駆動電圧とした。

結果を表4に示す。

【0407】

【表4】

表4

	正孔注入層中の正孔輸送材料及び第1正孔輸送材料 (HT-1)	駆動電圧 [V] @10mA/cm ²	EQE @10mA/cm ²
実施例4-1	化合物1	3.50	11.9
実施例4-2	化合物4	3.50	11.5
実施例4-3	化合物6	3.50	11.5
比較例4-1	比較化合物3	3.81	9.5
比較例4-2	比較化合物4	3.55	9.4

【0408】

表4の結果から明らかなように、本発明の規定を満たしている化合物（実施例4-1～4-3の化合物1、4、6）が、本発明の規定を満たさないモノアミン（比較例4-1、比較例4-2の比較化合物3、4）に比べて、著しく改善された駆動電圧及びEQEの値を示すことが判る。

【0409】

合成例で合成した化合物

10

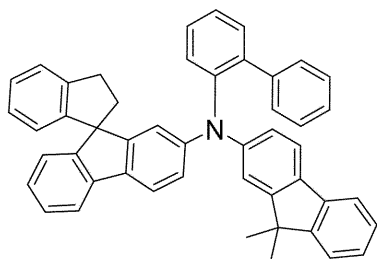
20

30

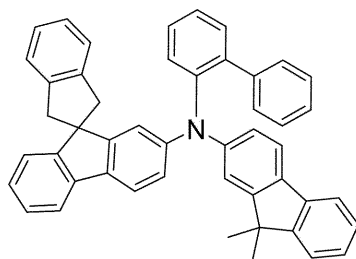
40

50

【化 1 4 4】

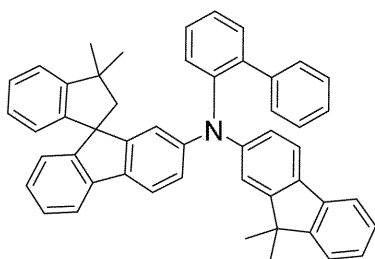


化合物1

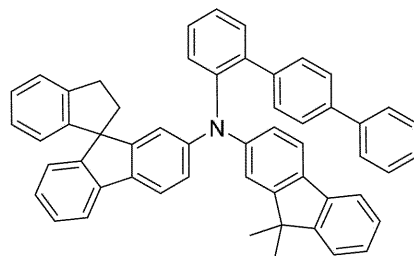


化合物2

10

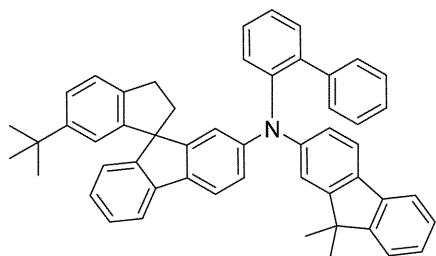


化合物3

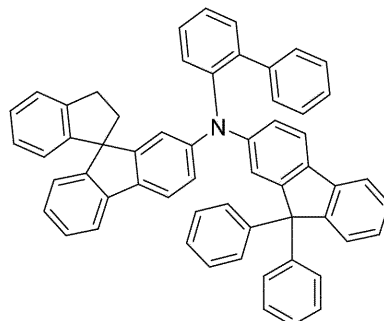


化合物4

20

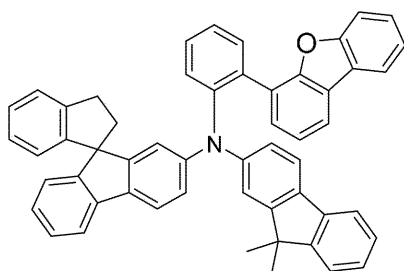


化合物5

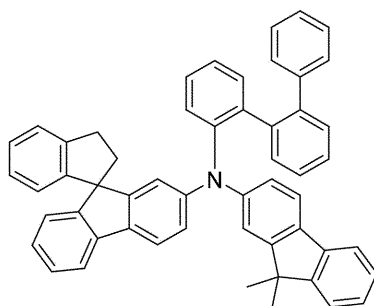


化合物6

30



化合物7



化合物8

40

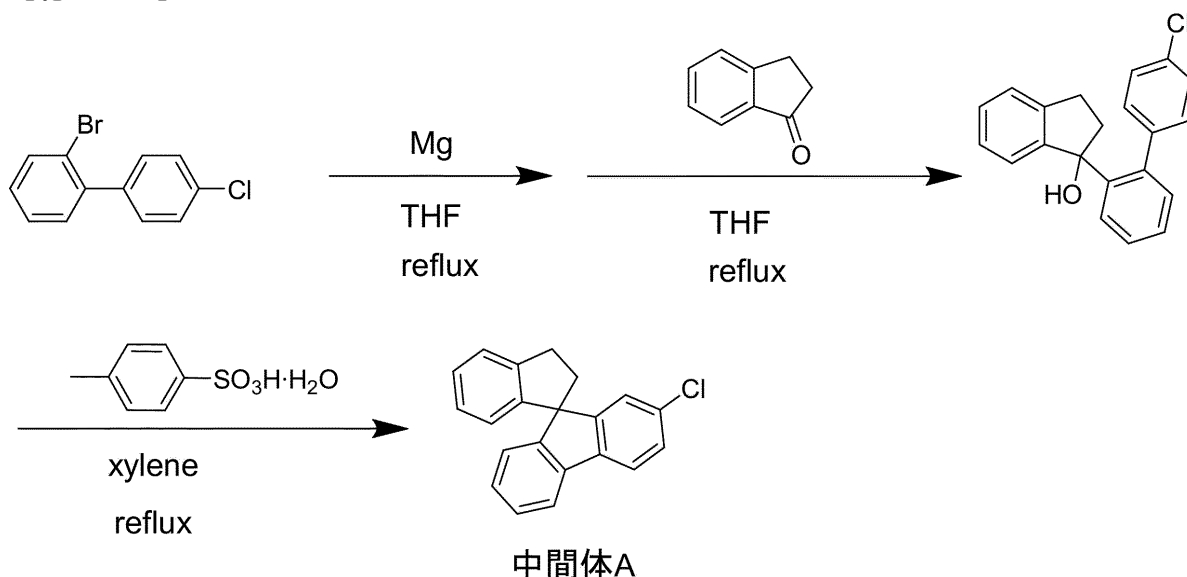
【 0 4 1 0】

<化合物の合成>

中間体合成例 1：中間体 A の合成

50

【化 1 4 5】



10

【0 4 1 1】

アルゴン雰囲気下、マグネシウム（0.656 g、27.0 mmol）を加えた反応器に対して、2-ブロモ-4'-クロロ-1,1'-ビフェニル（4.81 g、18 mmol）のTHF溶液（1.0 M）をゆっくりと滴下し、室温で撹拌を行った。全て加えたのち、還流下1時間撹拌を行い、有機マグネシウム反応剤を調製した。

20

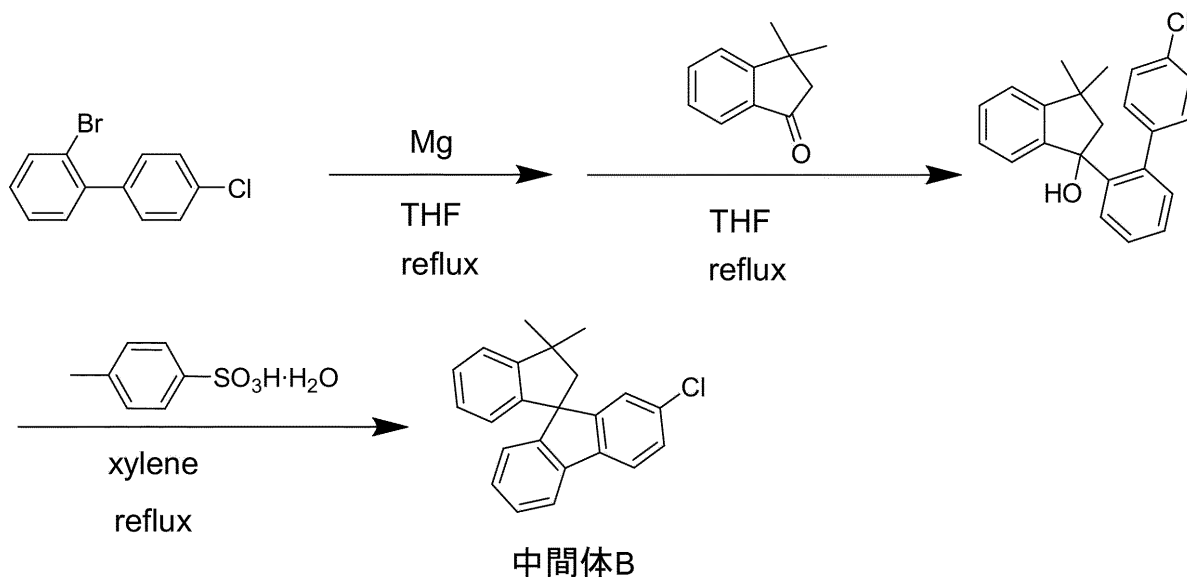
別の反応器に1-インダノン（1.98 g、15 mmol）およびTHF（13 mL）をアルゴン雰囲気下で加え、先に調製した有機マグネシウム反応剤を滴下した。その後、還流下にて5時間撹拌を行った。反応液を室温に冷却し、塩化アンモニウム飽和水溶液および酢酸エチルを加え撹拌を行った。分液漏斗を用いて、水層を除去した後、得られた溶液を減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、オレンジ色のオイルを得た。得られたオイルをキシレン（75 mL）に溶解させ、p-トルエンスルホン酸一水和物（8.56 g、45 mmol）を加え、140℃に昇温後、5時間撹拌を行った。放冷後、水を加え、水層を除去後、得られた溶液を減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、無色固体（1.82 g）の中間体Aを得た。2工程での収率は40%であった。

30

【0 4 1 2】

中間体合成例 2：中間体Bの合成

【化 1 4 6】



40

50

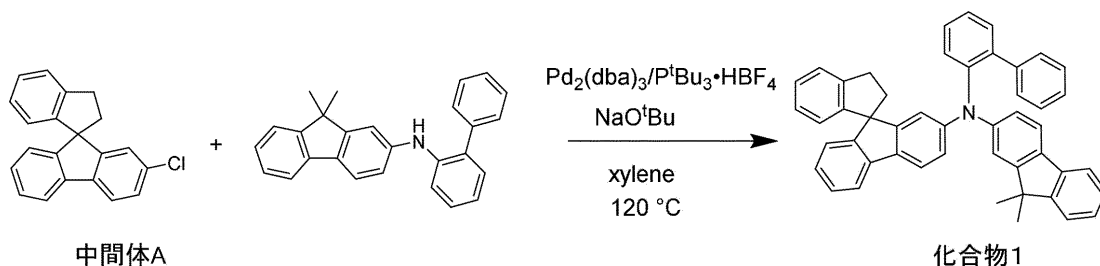
【0413】

中間体合成例1において使用した1-インダンのかわりに3,3-ジメチル-1-インダノンを用いるほかは中間体合成例1と同様の操作を行い、中間体Bを得た。2工程における収率は41%であった。

【0414】

合成例1：化合物1の合成

【化147】



10

【0415】

中間体A (1.82 g、6.01 mmol)、2-(2-ビフェニル)アミノ-9,9-ジメチルフルオレン (2.173 g、6.01 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) (0.11 g、0.120 mmol)、トリ-*n*-ブチルホスホニウムテトラフルオロボウ酸塩 (0.140 g、0.481 mmol)、ナトリウム-*n*-ブトキシド (0.809 g、8.41 mmol)、キシレン (40 mL) の混合物を120 °Cにて5時間攪拌した。反応液を室温に冷却した後、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーおよび再結晶にて精製し、2.98 gの白色固体を得た。収率は79%であった。

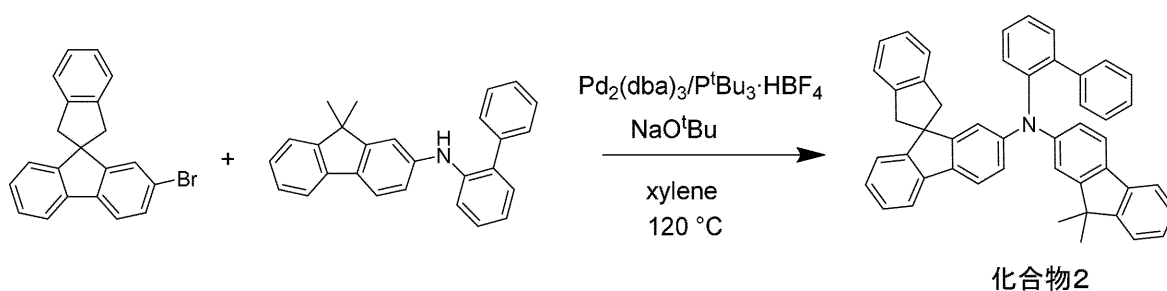
20

得られたものは、マスペクトル分析の結果化合物1であり、分子量627.29に対し $m/e = 627$ であった。

【0416】

合成例2：化合物2の合成

【化148】



30

【0417】

上記合成例1において使用した中間体Aの代わりに、国際公開第2004/110968号に記載の方法と同様の方法にて合成した2-ブromo-1',3'-ジヒドロスピロ[フルオレン-9,2'-インデン]を用いるほかは合成例1と同様の操作を行い、化合物2を得た。

40

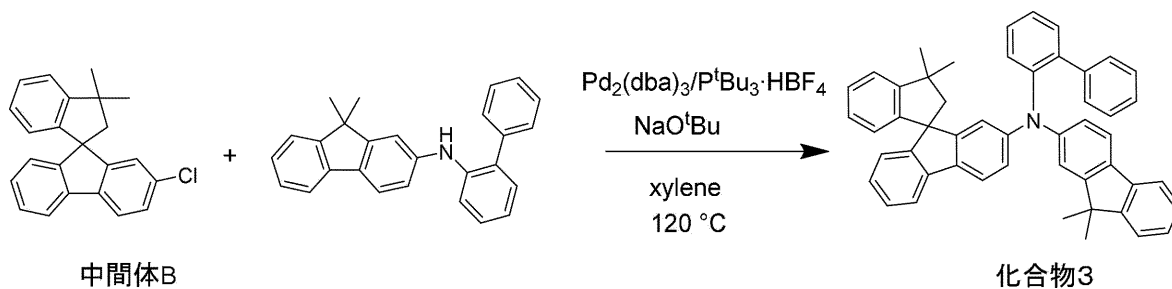
得られたものは、マスペクトル分析の結果、化合物2であり、分子量627.29に対し $m/e = 627$ であった。

【0418】

合成例3：化合物3の合成

50

【化 1 4 9】



【0 4 1 9】

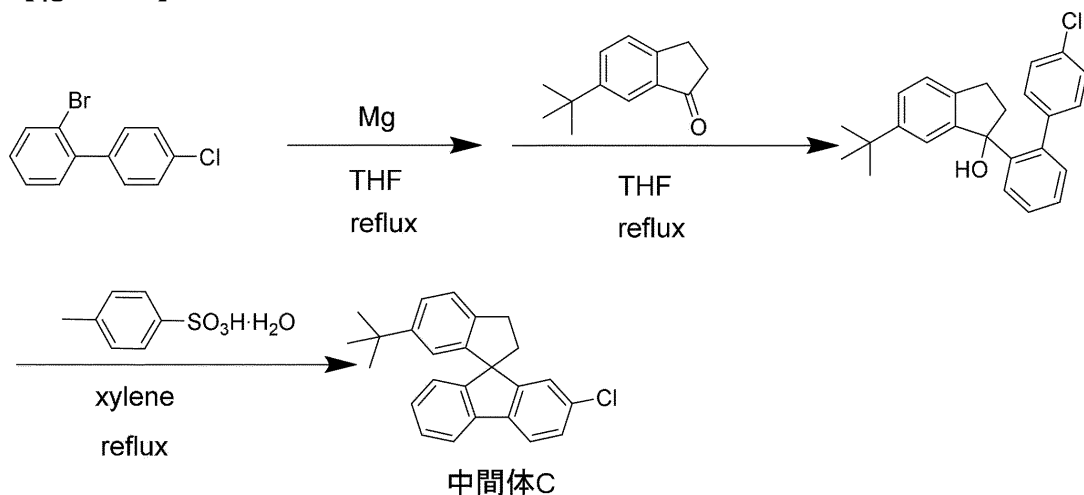
上記合成例 1 において使用した中間体 A の代わりに中間体 B を用いるほかは合成例 1 と同様の操作を行い、化合物 3 を得た。

得られたものは、マスペクトル分析の結果、化合物 3 であり、分子量 655.32 に対し、 $m/e = 655$ であった。

【0 4 2 0】

中間体合成例 3：中間体 C の合成

【化 1 5 0】



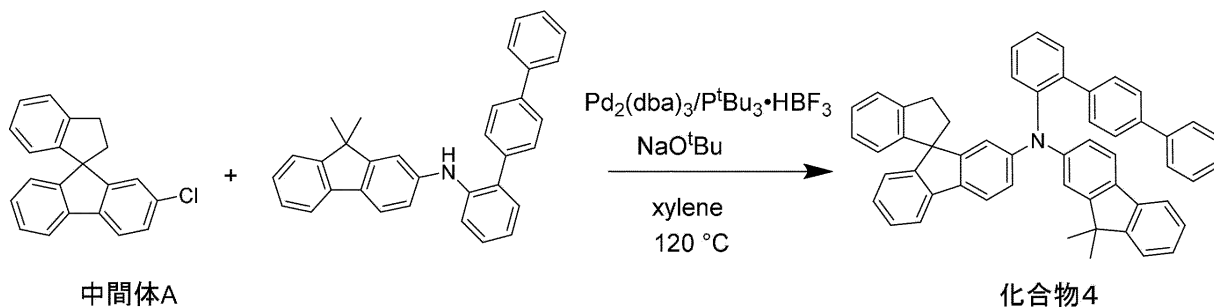
【0 4 2 1】

中間体合成例 1 において使用した 1-インダノンの代わりに、6-(tert-ブチル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-1-オンを用いるほかは中間体合成例 1 と同様の操作を行い、化合物 C を得た。収率は 39% であった。

【0 4 2 2】

合成例 4：化合物 4 の合成

【化 1 5 1】



【0 4 2 3】

合成例 1 において使用した 2-(2-ビフェニリル)アミノ-9,9-ジメチルフルオレンの代わりに N-([1,1':4',1''-ターフェニル]-2-イル)-9,9-ジメ

10

20

30

40

50

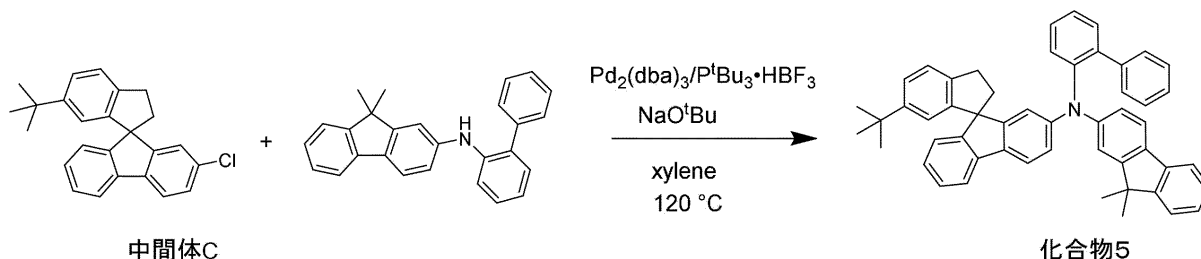
チル-9H-フルオレン-2-アミンを用いるほかは合成例1と同様の操作を行い、化合物4を得た。

得られたものは、マスペクトル分析の結果化合物4であり、分子量703.93に対し $m/e = 704$ であった。

【0424】

合成例5：化合物5の合成

【化152】



【0425】

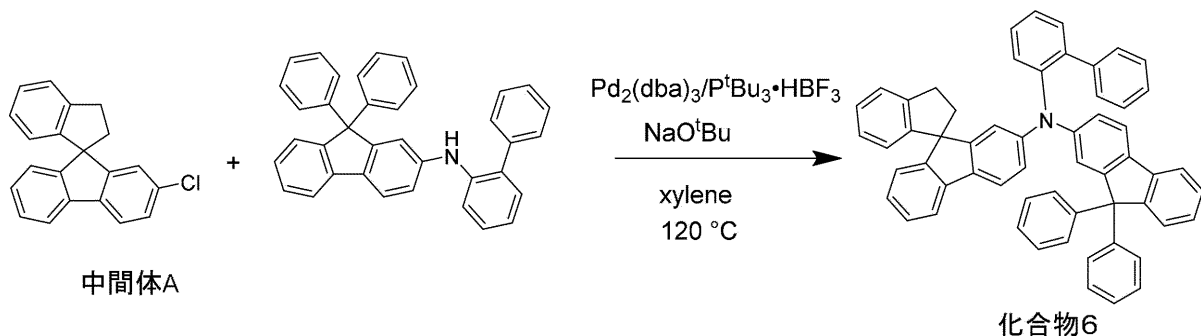
合成例1において使用した中間体Aの代わりに中間体Cを用いるほかは合成例1と同様の操作を行い、化合物5を得た。

得られたものは、マスペクトル分析の結果化合物5であり、分子量683.94に対し $m/e = 684$ であった。

【0426】

合成例6：化合物6の合成

【化153】



【0427】

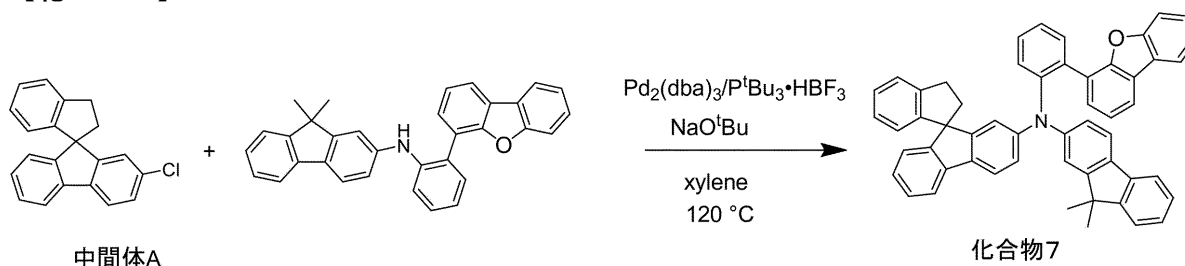
合成例1において使用した2-(2-ビフェニリル)アミノ-9,9-ジメチルフルオレンの代わりにN-([1,1'-ビフェニル]-2-イル)-9,9-ジフェニル-9H-フルオレン-2-アミンを用いるほかは合成例1と同様の操作を行い、化合物6を得た。

得られたものは、マスペクトル分析の結果化合物6であり、分子量751.97に対し $m/e = 752$ であった。

【0428】

合成例7：化合物7の合成

【化154】



10

20

30

40

50

【0429】

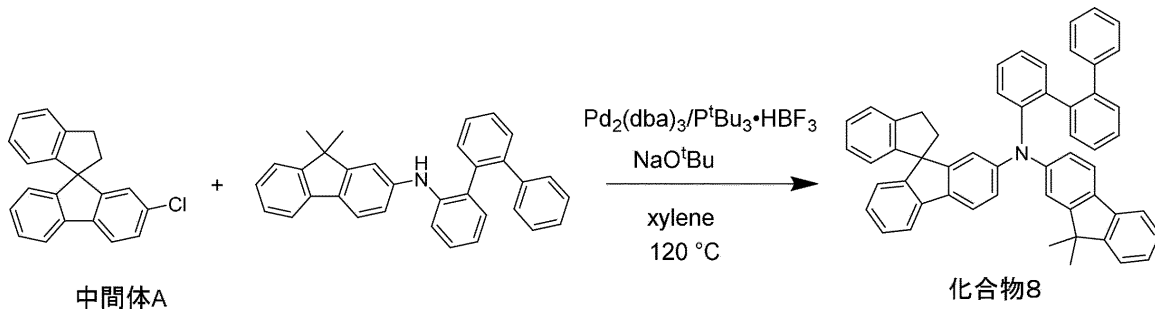
合成例1において使用した2-(2-ビフェニリル)アミノ-9,9-ジメチルフルオレンの代わりにN-(2-(ジベンゾ[b,d]フラン-4-イル)フェニル)-9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-アミンを用いるほかは合成例1と同様の操作を行い、化合物7を得た。

得られたものは、マスペクトル分析の結果化合物7であり、分子量717.91に対し $m/e = 718$ であった。

【0430】

合成例8：化合物8の合成

【化155】



【0431】

合成例1において使用した2-(2-ビフェニリル)アミノ-9,9-ジメチルフルオレンの代わりにN-([1,1':2',1''-ターフェニル]-2-イル)-9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-アミンを用いるほかは合成例1と同様の操作を行い、化合物8を得た。

得られたものは、マスペクトル分析の結果化合物8であり、分子量703.93に対し $m/e = 704$ であった。

【符号の説明】

【0432】

- 1、11、12 有機EL素子
- 2 基板
- 3 陽極
- 4 陰極
- 5 発光層
- 6 正孔輸送帯域（正孔輸送層）
- 6a 正孔注入層
- 6b 第1正孔輸送層
- 6c 第2正孔輸送層
- 6d 第3正孔輸送層
- 7 電子輸送帯域（電子輸送層）
- 7a 第1電子輸送層
- 7b 第2電子輸送層
- 10、20、30 発光ユニット

10

20

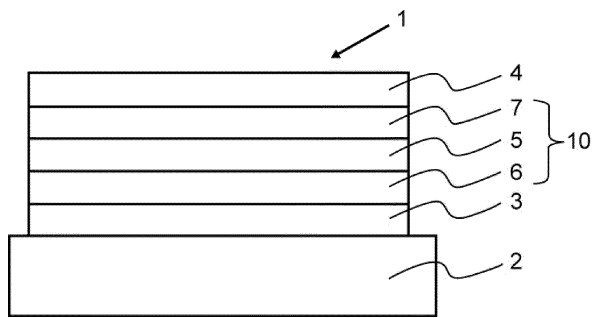
30

40

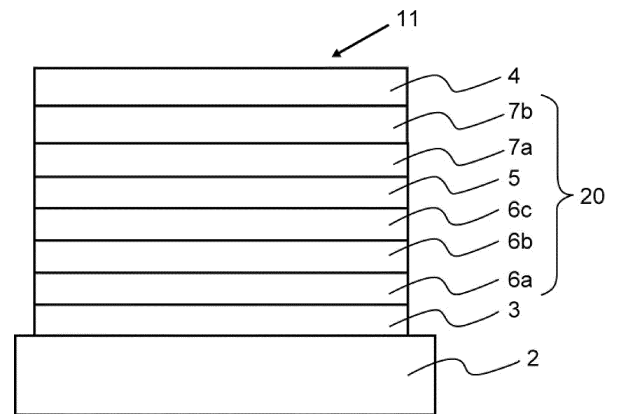
50

【図面】

【図 1】

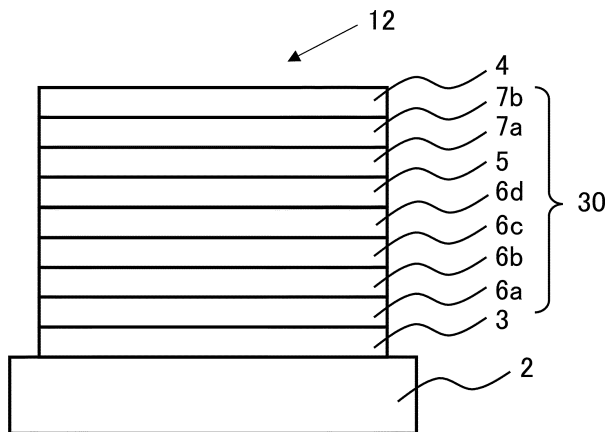


【図 2】



10

【図 3】



20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

H 1 0 K 50/12 (2023.01)**H 1 0 K 50/12****C 0 7 D 333/76 (2006.01)****C 0 7 D 333/76****C 0 7 D 409/12 (2006.01)****C 0 7 D 409/12**

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 リー ヨングク

東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内

審査官 高森 ひとみ

(56)参考文献

中国特許出願公開第114133333 (CN, A)

米国特許出願公開第2022/0059771 (US, A1)

中国特許出願公開第111057005 (CN, A)

国際公開第2022/080490 (WO, A1)

特表2021-506822 (JP, A)

中国特許出願公開第114075117 (CN, A)

特表2012-507590 (JP, A)

(58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

C 0 7 C

C 0 7 D

CAplus/REGISTRY (STN)