

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関  
国際事務局

(43) 国際公開日  
2025年1月16日(16.01.2025)



(10) 国際公開番号

WO 2025/013872 A1

(51) 国際特許分類:

C07C 211/58 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
C07C 211/54 (2006.01) H10K 50/11 (2023.01)  
C07C 211/57 (2006.01) H10K 50/12 (2023.01)  
C07C 211/61 (2006.01) H10K 50/15 (2023.01)  
C07D 209/86 (2006.01) H10K 50/16 (2023.01)  
C07D 307/77 (2006.01) H10K 50/17 (2023.01)  
C07D 307/91 (2006.01) H10K 50/18 (2023.01)  
C07D 405/12 (2006.01) H10K 59/10 (2023.01)  
C07D 405/14 (2006.01) H10K 85/60 (2023.01)  
C07D 409/12 (2006.01) H10K 101/10 (2023.01)  
C07D 409/14 (2006.01)

(30) 優先権データ:

特願 2023-114431 2023年7月12日(12.07.2023) JP  
特願 2024-015029 2024年2月2日(02.02.2024) JP  
特願 2024-043983 2024年3月19日(19.03.2024) JP

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

(72) 発明者: 高橋 佑典 (TAKAHASHI Yusuke); 〒1008321 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 Tokyo (JP). 水谷 清香(MIZUTANI Sayaka); 〒1008321 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 Tokyo (JP). 田中 将太(TANAKA Shota); 〒1008321 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 Tokyo (JP). 澤藤 司(SAWATO Tsukasa); 〒1008321

(21) 国際出願番号: PCT/JP2024/024827

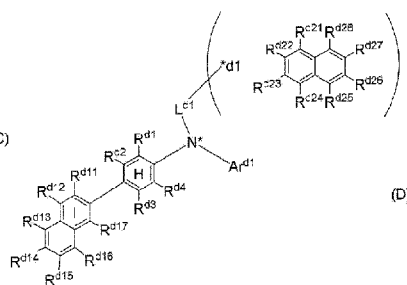
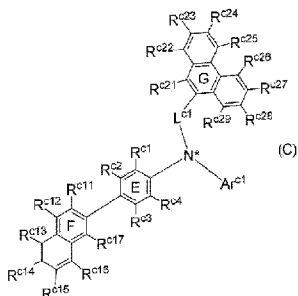
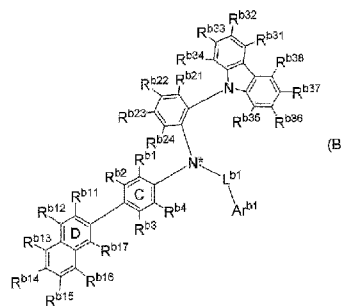
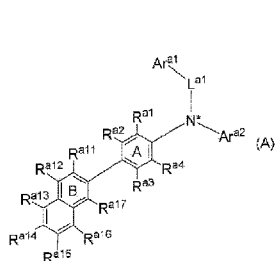
(22) 国際出願日: 2024年7月9日(09.07.2024)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

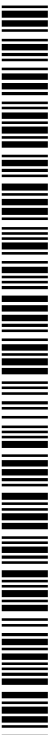
(54) Title: COMPOUND, MATERIAL FOR ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, AND ELECTRONIC DEVICE

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



(57) Abstract: Provided is a compound represented by formula (A), (B), (C) or (D). (Symbols in the formulas are as defined in the Description.) Also provided are: an organic electroluminescent element comprising the compound; and an electronic device comprising the organic electroluminescent element.

(57) 要約: 下記式 (A)、(B)、(C) 又は (D) で表される化合物。(各式中の各記号は明細書において定義したとおり。)、該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子、及びそのような有機エレクトロルミネッセンス素子を含む電子機器。



WO 2025/013872 A1

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 Tokyo (JP).

- (74) 代理人: 弁理士法人大谷特許事務所(OHTANI PATENT OFFICE); 〒1050001 東京都港区虎ノ門三丁目25番2号 虎ノ門Eビル7階 Tokyo (JP).
- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

- 一 国際調査報告 (条約第21条(3))

## 明 細 書

発明の名称：

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

### 技術分野

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

### 背景技術

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

[0003] 特許文献1～11には、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として使用する化合物が開示されている。

### 先行技術文献

#### 特許文献

[0004] 特許文献1：国際公開第2012/177006

特許文献2：韓国公開特許第10-2016-0035971

特許文献3：国際公開第2016/208862

特許文献4：国際公開第2020/175948

特許文献5：韓国公開特許第10-2020-0131929

特許文献6：国際公開第2022/71424

特許文献7：米国特許出願公開第2018/0226585号明細書

特許文献8：国際公開第2022/230967

特許文献9：国際公開第2022/71350

特許文献10：国際公開第2022/250028

特許文献11：国際公開第2023/013575

## 発明の概要

### 発明が解決しようとする課題

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

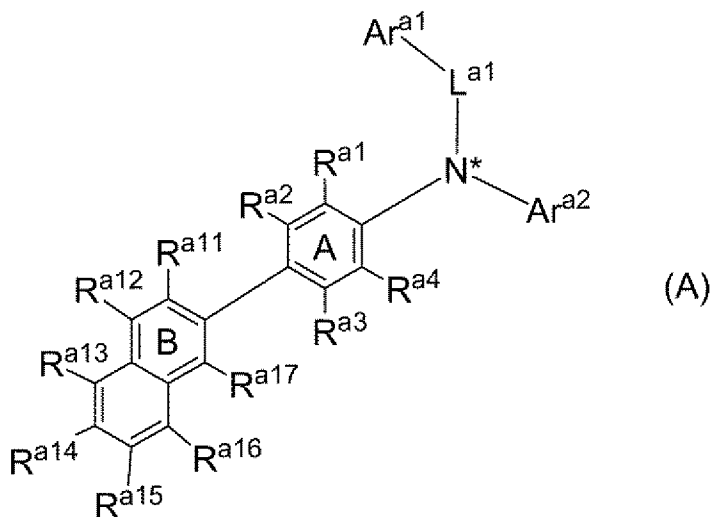
[0006] 本発明は、前記の課題を解決するためになされたもので、有機EL素子の性能をより改善する化合物、素子性能がより改善された有機EL素子、そのような有機EL素子を含む電子機器を提供すること目的とする。

### 課題を解決するための手段

[0007] 本発明者らは、上記特許文献に記載の化合物及びその他の化合物を含む有機EL素子の性能について鋭意研究を重ねた結果、下記式(A)、(B)、(C)又は(D)で表されるモノアミンが、素子性能がより改善された有機EL素子を提供することを見出した。

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

[化1]



(式(A)中、

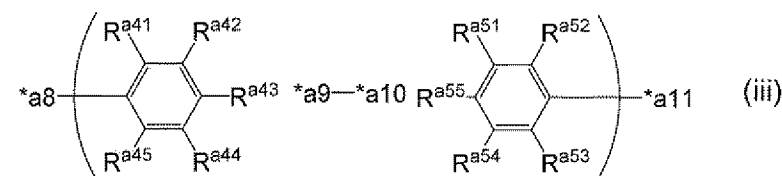
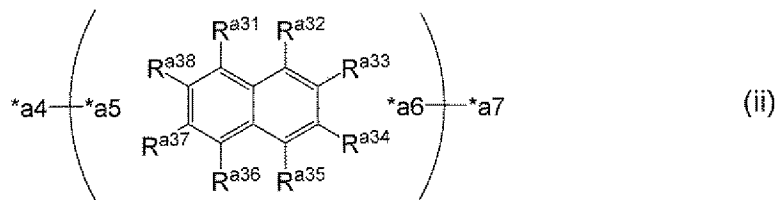
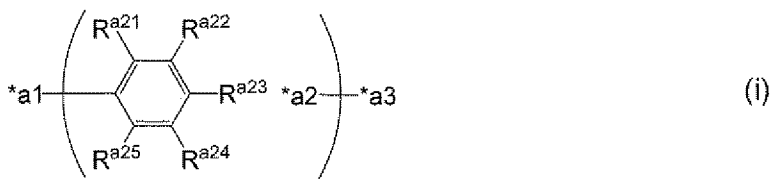
N\*は中心窒素原子である。

L<sup>a1</sup>は、単結合、又は下記式 (i) ~ (iii) で表される基であり、

L<sup>a1</sup>が単結合であるとき、A<sup>r a1</sup>は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のカルbazリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基、又は置換もしくは無置換の1-フェナントリル基であり、

L<sup>a1</sup>が下記式 (i) ~ (iii) で表される基であるとき、A<sup>r a1</sup>は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のカルbazリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、又は置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基である。

[化2]



(式 (i) ~ (iii) 中、

R<sup>a21</sup> ~ R<sup>a25</sup> から選ばれる 1 つは \*a2 に結合する単結合であり、

R<sup>a31</sup> ~ R<sup>a38</sup> から選ばれる 1 つは \*a5 に結合する単結合であり、R<sup>a31</sup>

～ $R^{a38}$ から選ばれる他の1つは\* $a6$ に結合する単結合であり、

$R^{a41} \sim R^{a45}$ から選ばれる1つは\* $a9$ に結合する単結合であり、 $R^{a51} \sim R^{a55}$ から選ばれる他の1つは\* $a10$ に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a51} \sim R^{a55}$ は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～50のアルキル基、無置換の炭素数2～50のアルケニル基、無置換の炭素数2～50のアルキニル基、無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、 $-O-(R_{904})$ 、 $-S-(R_{905})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{905}$ 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2個以上存在する場合、2個以上の $R_{901}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

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

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

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

\* $a1$ 、\* $a4$ 、及び\* $8$ は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表し、

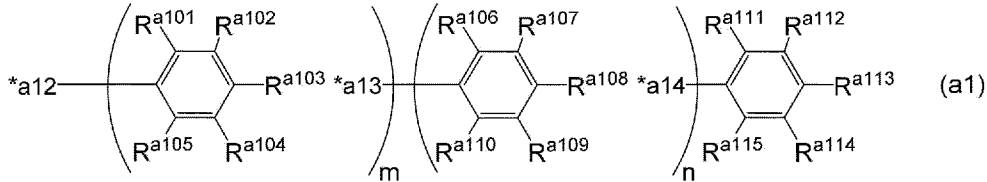
\* $a3$ 、\* $a7$ 、及び\* $11$ は、 $Ar^{a1}$ への結合位置を表す。

前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、

前記単結合ではない $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a51} \sim R^{a55}$ 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。)

$R^{a2}$ は、下記式(a1)～(a3)のいずれかで表される基である。

[化3]



(式(a1)中、

\*a12は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表す。

$R^{a101} \sim R^{a105}$ から選ばれる1つは\*a13に結合する単結合であり、 $R^{a106} \sim R^{a110}$ から選ばれる1つは\*a14に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ 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、無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は無置換の環形成炭素数5～12の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成せず、

前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ 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。

$R^{a111} \sim R^{a115}$ 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の複素環基である。

$R^{a111} \sim R^{a115}$ 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。

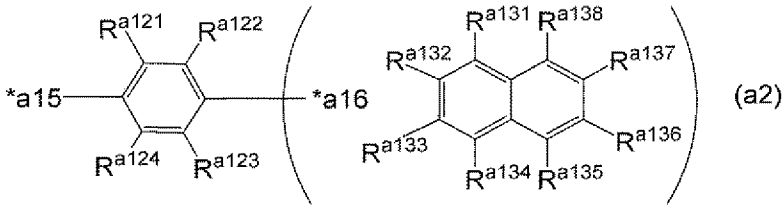
$m$ は0又は1であり、 $n$ は0又は1である。

$m=0$ 、 $n=0$ の場合、\*a14が\*a12を表し、

$m=0$ 、 $n=1$ の場合、\*a13が\*a12を表し、

m = 1、n = 0の場合、\*a14が\*a13を表す。)

[化4]



(式(a2)中、

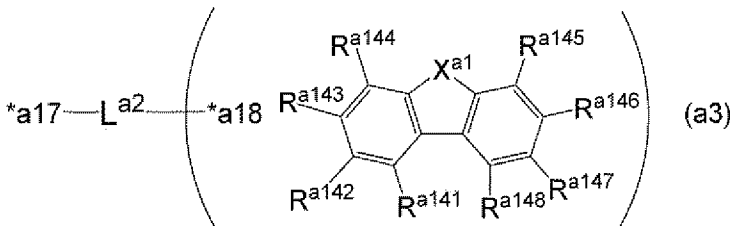
\*a15は、中心窒素原子N\*への結合位置を表す。

R<sup>a131</sup>~R<sup>a138</sup>から選ばれる1つは\*a16に結合する単結合である。

R<sup>a121</sup>~R<sup>a124</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a131</sup>~R<sup>a138</sup>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の複素環基である。

R<sup>a121</sup>~R<sup>a124</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a131</sup>~R<sup>a138</sup>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5]



(式(a3)中、

\*a17は、中心窒素原子N\*への結合位置を表す。

L<sup>a2</sup>は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の2価の複素環基である。

X<sup>a1</sup>は、酸素原子又は硫黄原子である。

R<sup>a141</sup>~R<sup>a148</sup>から選ばれる1つは\*a18に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>a141</sup>~R<sup>a148</sup>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の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{a141} \sim R^{a148}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環構造を形成しなくてもよい。

$R^{a1} \sim R^{a4}$ は、水素原子である。

$R^{a11} \sim R^{a17}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基であり、

前記 $R^{a11} \sim R^{a17}$ 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。

環Aと環Bは架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

環Aと環Bが架橋する場合、

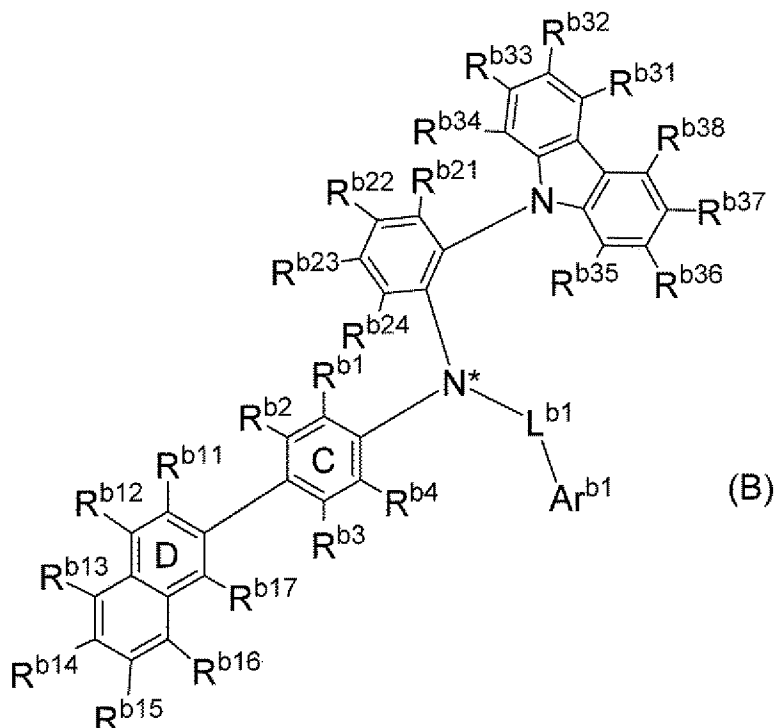
前記環Aと前記環Bが架橋して形成される環構造は、少なくとも1つの重水素原子を有し、

環Aと環Bが架橋しない場合、

$R^{a1} \sim R^{a4}$ から選ばれる少なくとも1つは重水素原子である。) )

[0009] 他の態様において、本発明は下記式(B)で表される化合物を提供する。

[化6]

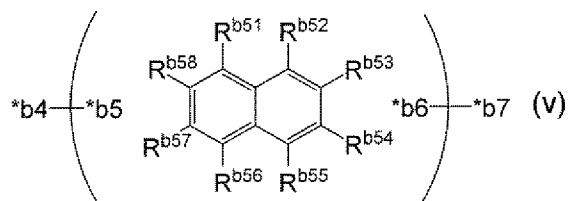
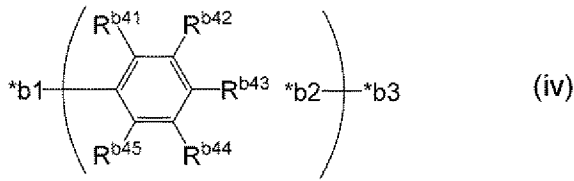


(式 (B) 中、

N\*は中心窒素原子である。

L<sup>b1</sup>は、単結合、下記式 (iv) 又は (v) で表される基である。

[化7]



(式 (iv) 及び (v) 中、

R<sup>b41</sup> ~ R<sup>b45</sup>から選ばれる1つは\*b2に結合する単結合であり、

R<sup>b51</sup> ~ R<sup>b58</sup>から選ばれる1つは\*b5に結合する単結合であり、R<sup>b51</sup> ~ R<sup>b58</sup>から選ばれる他の1つは\*b6に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>b41</sup> ~ R<sup>b45</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>b51</sup> ~ R<sup>b58</sup>は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、無置換の炭素数2 ~ 50のアルケニル基、無置換の炭素数2 ~ 50のアルキニル基、無置換の環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、-Si(R<sub>901</sub>)(R<sub>902</sub>)(R<sub>903</sub>)、-O-(R<sub>904</sub>)、-S-(R<sub>905</sub>)、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5 ~ 50の複素環基であり、

R<sub>901</sub> ~ R<sub>905</sub>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<sub>901</sub>が2個以上存在する場合、2個以上のR<sub>901</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

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

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

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

\*b1、及び\*b4は、中心窒素原子N\*への結合位置を表し、

\*b3、及び\*b7は、 $A r^{b1}$ への結合位置を表す。

前記単結合ではない $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{b51} \sim R^{b58}$ 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。)

$A R^{b1}$ 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の複素環基である。

$R^{b1} \sim R^{b4}$ は、水素原子である。

$R^{b11} \sim R^{b17}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基であり、

前記 $R^{b11} \sim R^{b17}$ 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。

環Cと環Dは架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

$R^{b21} \sim R^{b24}$ 及び $R^{b31} \sim R^{b38}$ は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～50のアルキル基、無置換の炭素数2～50のアルケニル基、無置換の炭素数2～50のアルキニル基、無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、 $-S i (R_{901}) (R_{902}) (R_{903})$ 、 $-O-$  ( $R_{904}$ )、 $-S-$  ( $R_{905}$ )、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{905}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素

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

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

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

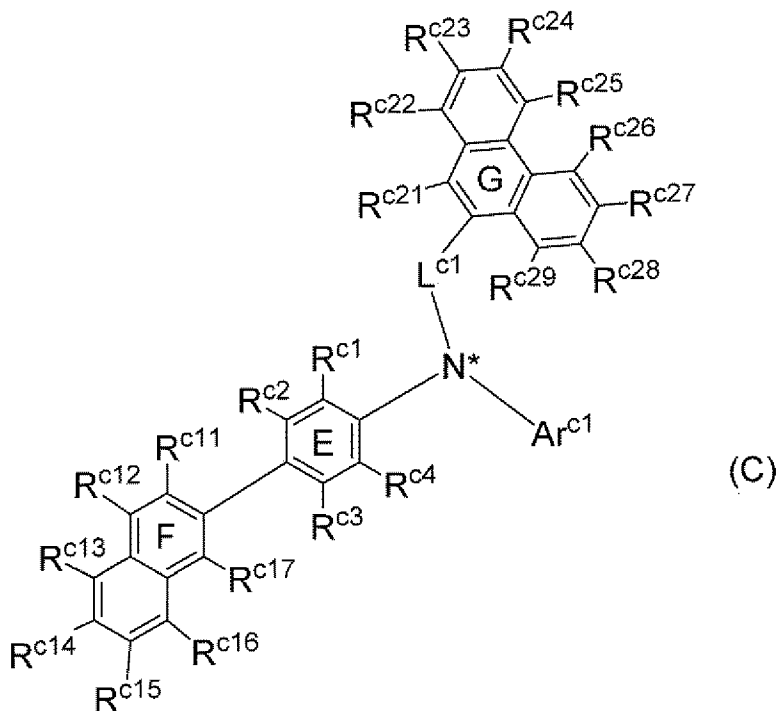
$R_{903}$  が 2 個以上存在する場合、2 個以上の  $R_{903}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

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

[0010] さらに他の態様において、本発明は下記式 (C) で表される化合物を提供する。

[化8]

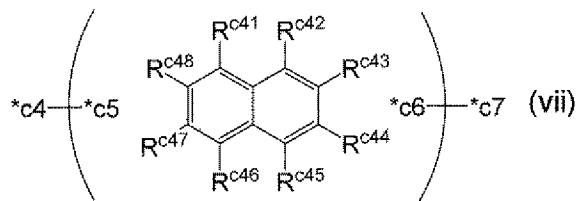
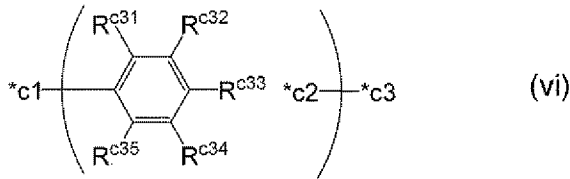


(式 (C) 中、

N\*は中心窒素原子である。

L<sup>c1</sup>は、単結合、下記式 (v i) 又は (v i i) で表される基である。

[化9]



(式 (v i) 及び (v i i) 中、

R<sup>c31</sup>～R<sup>c35</sup>から選ばれる1つは\*c2に結合する単結合であり、

R<sup>c41</sup>～R<sup>c48</sup>から選ばれる1つは\*c5に結合する単結合であり、R<sup>c41</sup>～R<sup>c48</sup>から選ばれる他の1つは\*c6に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>c31</sup>～R<sup>c35</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>c41</sup>～R<sup>c48</sup>は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～50のアルキル基、無置換の炭素数2～50のアルケニル基、無置換の炭素数2～50のアルキニル基、無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 、 $-\text{O}-$ (R<sub>904</sub>)、 $-\text{S}-$ (R<sub>905</sub>)、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R<sub>901</sub>～R<sub>905</sub>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<sub>901</sub>が2個以上存在する場合、2個以上のR<sub>901</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>902</sub>が2個以上存在する場合、2個以上のR<sub>902</sub>は、互いに同一であるか

、又は異なり、

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

、又は異なり、

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

、又は異なり、

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

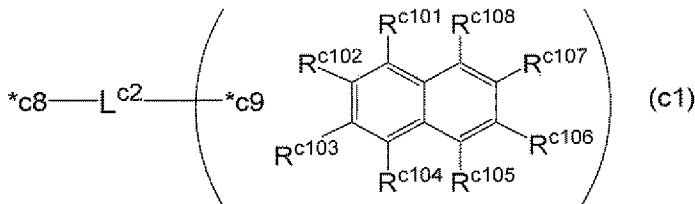
\*c1、及び\*c4は、中心窒素原子N\*への結合位置を表し、

\*c3、及び\*c7は、環Gへの結合位置を表す。

前記単結合ではない $R^{c31} \sim R^{c35}$ 、及び前記単結合ではない $R^{c41} \sim R^{c48}$ 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。)

$A r^{c1}$ は、下記式(c1)又は(c2)で表される基である。

[化10]



(式(c1)中、

\*c8は、中心窒素原子N\*への結合位置を表す。

$L^{c2}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基である。

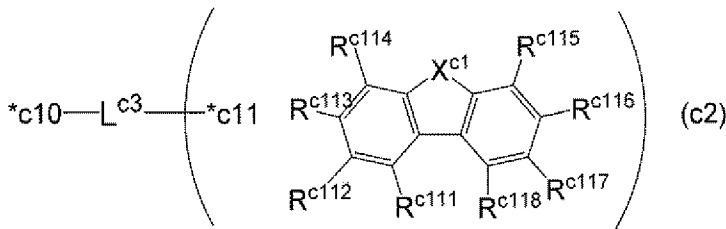
$R^{c101} \sim R^{c108}$ から選ばれる1つは\*c9に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{c101} \sim R^{c108}$ 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の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{c101} \sim R^{c108}$ 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。

ただし、 $L^{c2}$ が置換もしくは無置換のフェニレン基であり、 $R^{c101}$ 、 $R^{c104}$ 、 $R^{c105}$ 及び $R^{c108}$ から選ばれる1つが $*c9$ に結合する単結合であるとき、 $L^{c2}$ が表す前記置換もしくは無置換のフェニレン基は、置換もしくは無置換の $o$ -フェニレン基、又は置換もしくは無置換の $m$ -フェニレン基である。) )

[化11]



(式(c2)中、

$*c10$ は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表す。

$L^{c3}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の2価の複素環基である。

$X^{ct}$ は、酸素原子又は硫黄原子である。

$R^{c111}$ ~ $R^{c118}$ から選ばれる1つは $*c11$ に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{c111}$ ~ $R^{c118}$ 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の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{c111}$ ~ $R^{c118}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環構造を形成しなくてもよい。) )

$R^{c1}$ ~ $R^{c4}$ は、水素原子である。

$R^{c11}$ ~ $R^{c17}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基であり、

前記 $R^{c11}$ ~ $R^{c17}$ 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。

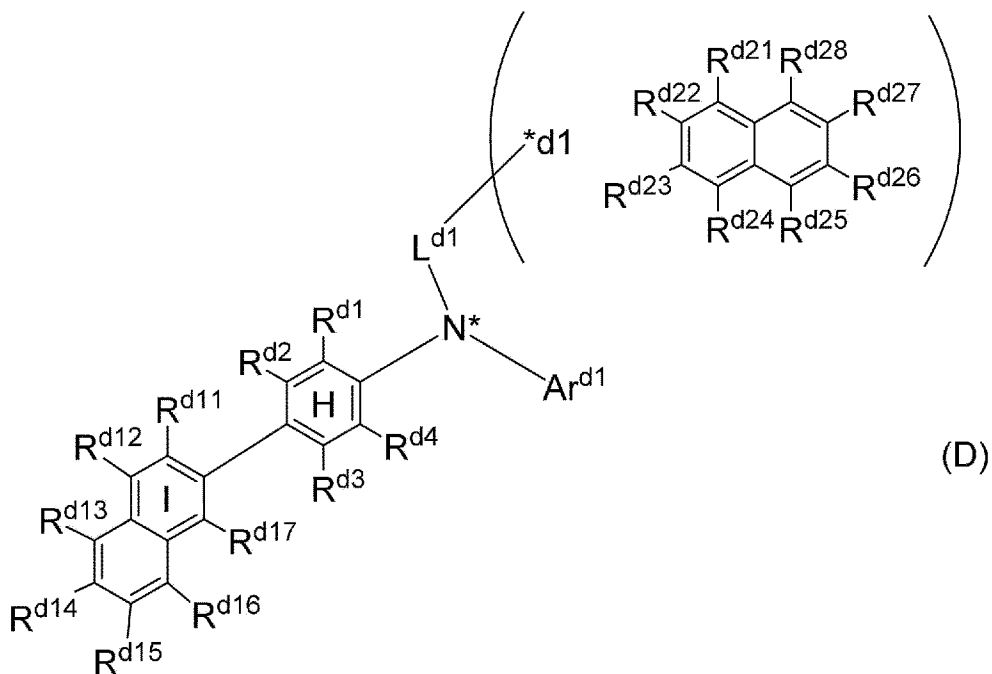
環Eと環Fは架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

$R^{c21}$ は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基である。

$R^{c22} \sim R^{c29}$ 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の複素環基である。）

[0011] さらに他の態様において、本発明は下記式(D)で表される化合物を提供する。

[化12]

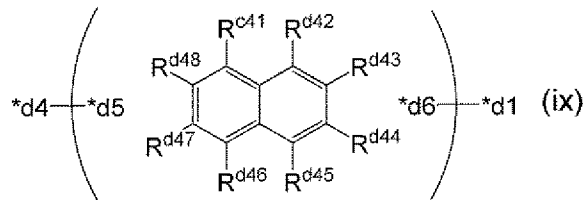
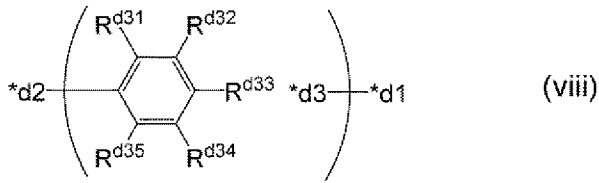


(式(D)中、

$N^*$ は中心窒素原子である。

$L^{d1}$ は、下記式(viii)で表される基である。

[化13]



(式(viii)中、

$R^{d31}$ 及び $R^{d35}$ から選ばれる1つは $*d3$ に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{d31}$ 及び $R^{d35}$ は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～50のアルキル基、無置換の炭素数2～50のアルケニル基、無置換の炭素数2～50のアルキニル基、無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、 $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、 $-\text{O}- (R_{904})$ 、 $-\text{S}- (R_{905})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{905}$ 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2個以上存在する場合、2個以上の $R_{901}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

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

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

、又は異なり、

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

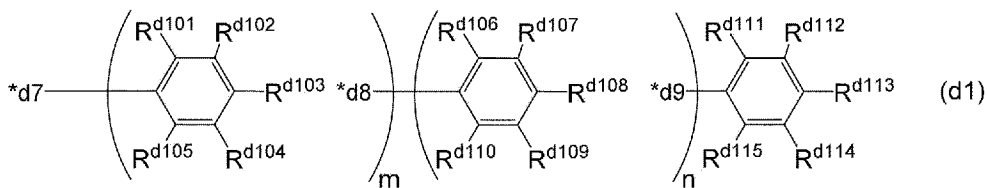
\*d2は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表し

\*d1は、 $R^{d21} \sim R^{d28}$ から選ばれる1つに結合する。

前記単結合ではない $R^{d31} \sim R^{d35}$ 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。)

$A r^{d1}$ は、下記式(d1)～(d3)のいずれかで表される基である。

[化14]



(式(d1)中、

\*d7は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表す。

$R^{d101} \sim R^{d105}$ から選ばれる1つは\*d8に結合する単結合であり、 $R^{d106} \sim R^{d110}$ から選ばれる1つは\*d9に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{d101} \sim R^{d105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{d106} \sim R^{d110}$ 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、無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は無置換の環形成炭素数5～12の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{d101} \sim R^{d105}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成せず、

前記単結合ではない $R^{d106} \sim R^{d110}$ 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。

$R^{d111} \sim R^{d115}$ 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の複素環基である。

$R^{d111} \sim R^{d115}$ 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。

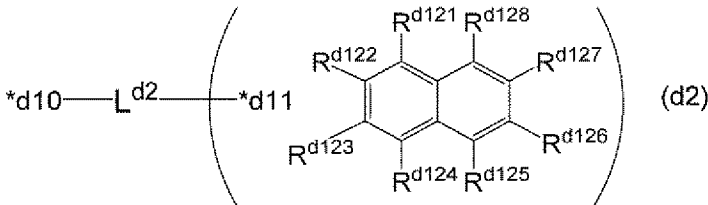
$m$ は0又は1であり、 $n$ は0又は1である。

$m=0$ 、 $n=0$ の場合、\*d9が\*d7を表し、

$m=0$ 、 $n=1$ の場合、\*d8が\*d7を表し、

$m=1$ 、 $n=0$ の場合、\*d9が\*d8を表す。)

[化15]



(式 (d2) 中、

\*d10は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表す。

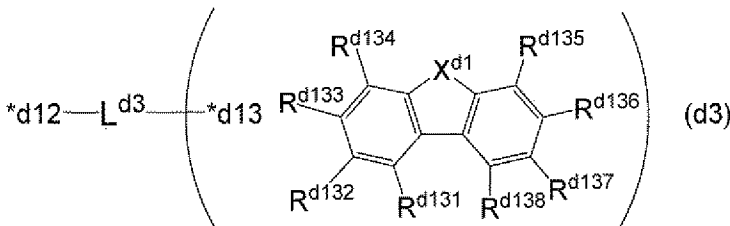
$L^{d2}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基である。

$R^{d121} \sim R^{d128}$ から選ばれる1つは\*d11に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{d121} \sim R^{d128}$ 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の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{d121} \sim R^{d128}$ 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16]



(式 (d3) 中、

\* d 1 2 は、中心窒素原子 N\* への結合位置を表す。

L<sup>d3</sup> は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の 2 価の複素環基である。

X<sup>d1</sup> は、酸素原子又は硫黄原子である。

R<sup>d131</sup> ~ R<sup>d138</sup> から選ばれる 1 つは \* a 1 4 に結合する単結合である。

前記単結合ではない R<sup>d131</sup> ~ R<sup>d138</sup> 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 の複素環基である。

前記単結合ではない R<sup>d131</sup> ~ R<sup>d138</sup> から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環構造を形成しなくてもよい。) )

R<sup>d1</sup> ~ R<sup>d4</sup> は、水素原子である。

R<sup>d11</sup> ~ R<sup>d17</sup> は、それぞれ独立して、水素原子、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基であり、

前記 R<sup>d11</sup> ~ R<sup>d17</sup> 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。

環 H と環 I は架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

\* d 1 に結合する単結合ではない R<sup>d21</sup> ~ R<sup>d28</sup> は、それぞれ独立して、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 のアリール基であり、

\* d 1 に結合する単結合ではない R<sup>d21</sup> ~ R<sup>d28</sup> から選ばれる少なくとも 1 つは、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 のアリール基である。) )

[0012] さらに他の態様において、本発明は前記式 (A)、(B)、(C) 又は (D) で表される化合物を含む有機 EL 素子用材料を提供する。

[0013] さらに他の態様において、本発明は、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 (A)、(B)、(C) 又は (D) 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。

[0014] 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

[0015] 前記式 (A)、(B)、(C) 又は (D) 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

[0016] [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

[0017] [定義]

本明細書において、水素原子とは、中性子数が異なる同位体、即ち、軽水素 (protium)、重水素 (deuterium)、及び三重水素 (tritium) を包含する。

[0018] 本明細書において、化学構造式中、「R」等の記号や重水素原子を表す「D」が明示されていない結合可能位置には、水素原子、即ち、軽水素原子、重水素原子、又は三重水素原子が結合しているものとする。

[0019] 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。

[0020] 本明細書において、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造（例えば、単環、縮合環、及び環集合）の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、及び複素環化合物）の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子（例えば、環を構成する原子の結合を終端する水素原子）や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。以下で記される「環形成原子数」については、別途記載のない限り同様とする。例えば、ピリジン環の環形成原子数は6であり、キナゾリン環の環形成原子数は10であり、フラン環の環形成原子数は5である。例えば、ピリジン環に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子の数は、ピリジン環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているピリジン環の環形成原子数は、6である。また、例えば、キナゾリン環の炭素原子に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子については、キナゾリン環の環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているキナゾリン環の環形成原子数は10である。

[0021] 本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数XX~YYのZZ基」という表現における「炭素数XX~YY」は、ZZ基が無置換である場合の炭素数を表し、置換されている場合の置換基の炭素数を含めない。ここで、

「 $Y Y$ 」は、「 $X X$ 」よりも大きく、「 $X X$ 」は、1以上の整数を意味し、「 $Y Y$ 」は、2以上の整数を意味する。

[0022] 本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数 $X X \sim Y Y$ の $Z Z$ 基」という表現における「原子数 $X X \sim Y Y$ 」は、 $Z Z$ 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、「 $Y Y$ 」は、「 $X X$ 」よりも大きく、「 $X X$ 」は、1以上の整数を意味し、「 $Y Y$ 」は、2以上の整数を意味する。

[0023] 本明細書において、無置換の $Z Z$ 基とは「置換もしくは無置換の $Z Z$ 基」が「無置換の $Z Z$ 基」である場合を表し、置換の $Z Z$ 基とは「置換もしくは無置換の $Z Z$ 基」が「置換の $Z Z$ 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 $Z Z$ 基」という場合における「無置換」とは、 $Z Z$ 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 $Z Z$ 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 $Z Z$ 基」という場合における「置換」とは、 $Z Z$ 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。「 $A A$ 基で置換された $B B$ 基」という場合における「置換」も同様に、 $B B$ 基における1つ以上の水素原子が、 $A A$ 基と置き換わっていることを意味する。

[0024] 「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。

[0025] 本明細書に記載の「無置換のアリール基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30、より好ましくは6～18である。

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

本明細書に記載の「無置換のアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記

載のない限り、1～50であり、好ましくは1～20、より好ましくは1～6である。

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

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

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

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

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

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

[0026] ・「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G 1 Aの「無置換のアリール基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び下記具体例群G 1 Bの置換のアリール基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のアリール基」の例、及び「置換のアリール基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアリール基」には、下記具体例群G 1 Bの「置換のアリール基」におけるアリール基自体の炭素原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び下記具体例群G 1 Bの「置換のアリール基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0027] ・無置換のアリール基（具体例群G 1 A）：

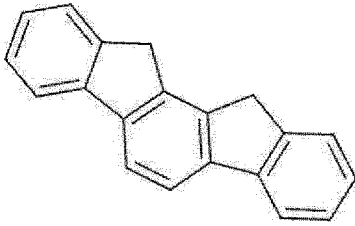
フェニル基、  
p-ビフェニル基、  
m-ビフェニル基、  
o-ビフェニル基、  
p-ターフェニル-4-イル基、  
p-ターフェニル-3-イル基、  
p-ターフェニル-2-イル基、  
m-ターフェニル-4-イル基、  
m-ターフェニル-3-イル基、  
m-ターフェニル-2-イル基、  
o-ターフェニル-4-イル基、  
o-ターフェニル-3-イル基、  
o-ターフェニル-2-イル基、  
1-ナフチル基、  
2-ナフチル基、  
アントリル基、

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

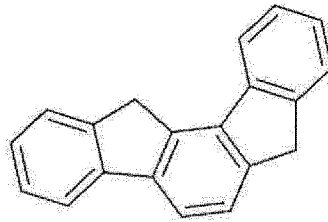
下記一般式 (TEMP-1) ~ (TEMP-15) で表される環構造から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 1 価のアリール基。

[0028]

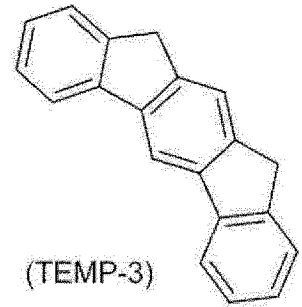
[化17]



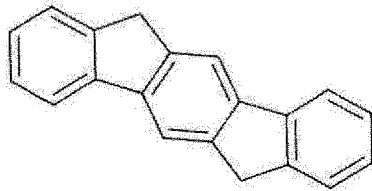
(TEMP-1)



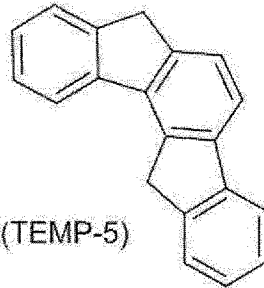
(TEMP-2)



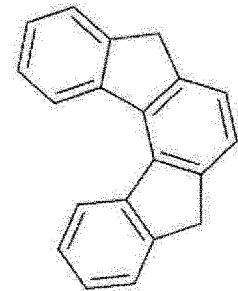
(TEMP-3)



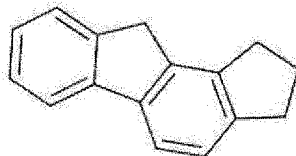
(TEMP-4)



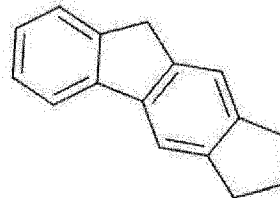
(TEMP-5)



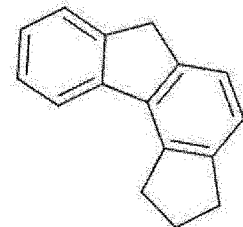
(TEMP-6)



(TEMP-7)

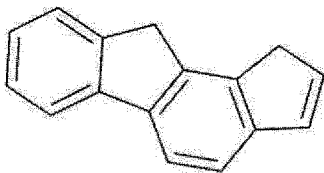


(TEMP-8)

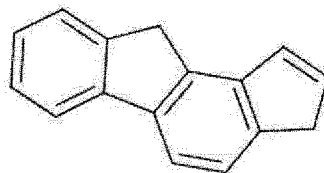


(TEMP-9)

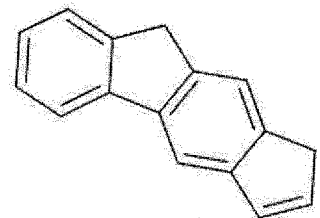
[0029] [化18]



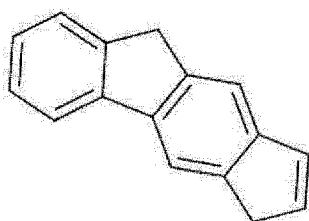
(TEMP-10)



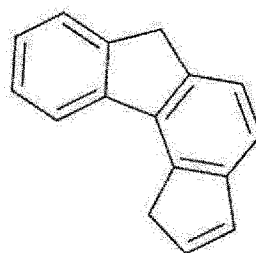
(TEMP-11)



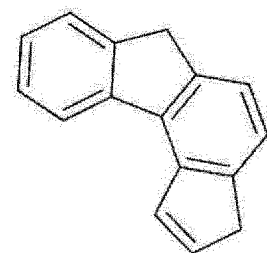
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

[0030] ・置換のアリール基（具体例群G 1 B）：

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

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

[0031] ・「置換もしくは無置換の複素環基」

本明細書に記載の「複素環基」は、環形成原子にヘテロ原子を少なくとも

1つ含む環状の基である。ヘテロ原子の具体例としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、及びホウ素原子が挙げられる。

本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基である。

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

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

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

[0032] 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。

[0033] 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。

[0034] ・窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 1）：

ピロリル基、  
イミダゾリル基、  
ピラゾリル基、  
トリアゾリル基、  
テトラゾリル基、  
オキサゾリル基、  
イソオキサゾリル基、  
オキサジアゾリル基、  
チアゾリル基、  
イソチアゾリル基、  
チアジアゾリル基、  
ピリジル基、  
ピリダジニル基、  
ピリミジニル基、  
ピラジニル基、  
トリアジニル基、  
インドリル基、  
イソインドリル基、  
インドリジニル基、  
キノリジニル基、  
キノリル基、

イソキノリル基、  
シンノリル基、  
フタラジニル基、  
キナゾリニル基、  
キノキサリニル基、  
ベンゾイミダゾリル基、  
インダゾリル基、  
フェナントロリニル基、  
フェナントリジニル基、  
アクリジニル基、  
フェナジニル基、  
カルバゾリル基、  
ベンゾカルバゾリル基、  
モルホリノ基、  
フェノキサジニル基、  
フェノチアジニル基、  
アザカルバゾリル基、及びジアザカルバゾリル基。

[0035] ・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、  
キサントニル基、  
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、

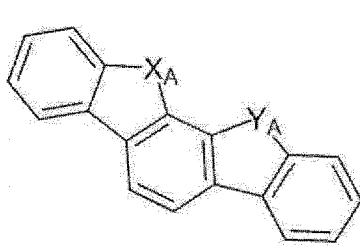
ベンゾイソキサゾリル基、  
フェノキサジニル基、  
モルホリノ基、  
ジナフトフラニル基、  
アザジベンゾフラニル基、  
ジアザジベンゾフラニル基、  
アザナフトベンゾフラニル基、及び  
ジアザナフトベンゾフラニル基。

[0036] ・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 3）：

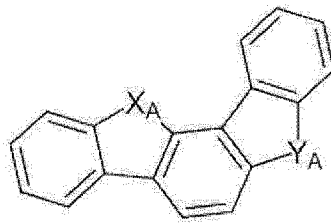
チエニル基、  
チアゾリル基、  
イソチアゾリル基、  
チアジアゾリル基、  
ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基）、  
イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基）、  
ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、  
ナフトベンゾチオフェニル基（ナフトベンゾチエニル基）、  
ベンゾチアゾリル基、  
ベンゾイソチアゾリル基、  
フェノチアジニル基、  
ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、  
アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、  
ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、  
アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフ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

[0037] ・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）：

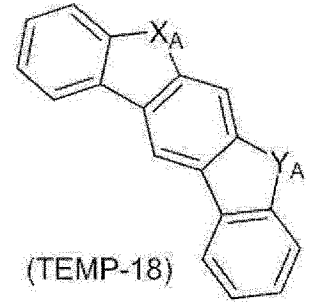
[0038] [化19]



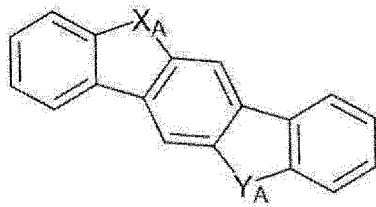
(TEMP-16)



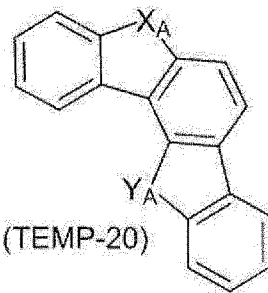
(TEMP-17)



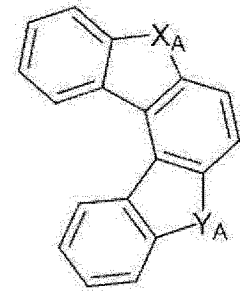
(TEMP-18)



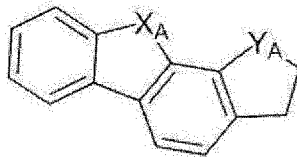
(TEMP-19)



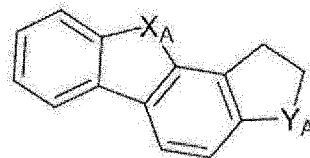
(TEMP-20)



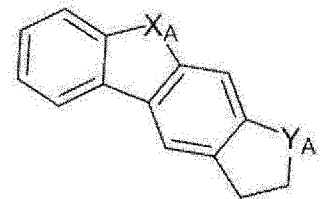
(TEMP-21)



(TEMP-22)



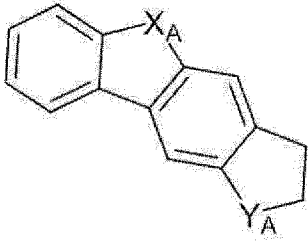
(TEMP-23)



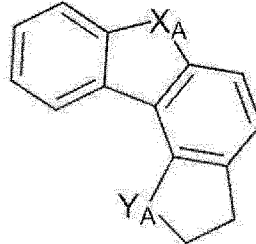
(TEMP-24)

[0039]

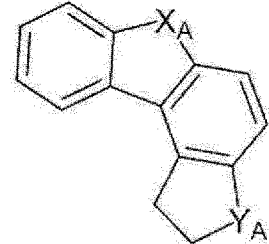
[化20]



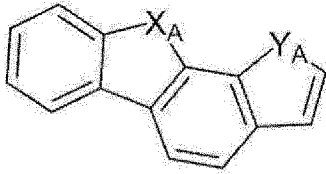
(TEMP-25)



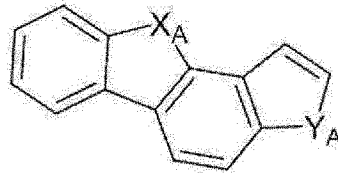
(TEMP-26)



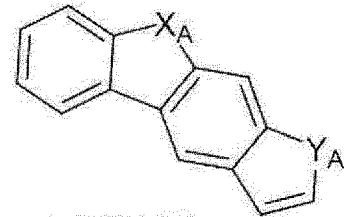
(TEMP-27)



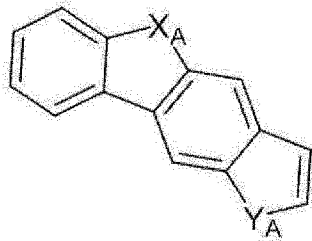
(TEMP-28)



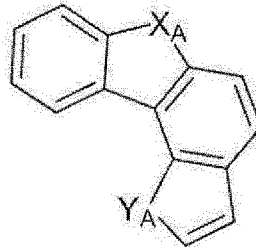
(TEMP-29)



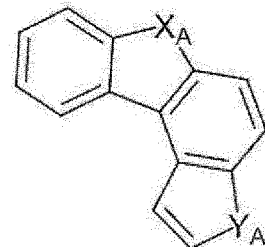
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

[0040] 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。

[0041] ・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。

[0042] ・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 2）：

フェニルジベンゾフラニル基、  
メチルジベンゾフラニル基、  
t-ブチルジベンゾフラニル基、及び  
スピロ [9H-キサンテン-9, 9' - [9H]フルオレン] の1価の残基。  
。

[0043] ・硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 3）：

フェニルジベンゾチオフェニル基、  
メチルジベンゾチオフェニル基、  
t-ブチルジベンゾチオフェニル基、及び  
スピロ [9H-チオキサンテン-9, 9' - [9H]フルオレン] の1価の  
残基。

[0044] ・前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) で表される環構造から誘導される1価の複素環基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群G 2 B 4）：

[0045] 前記「1価の複素環基の1つ以上の水素原子」とは、該1価の複素環基の

環形成炭素原子に結合している水素原子、X A及びY Aの少なくともいずれかがNHである場合の窒素原子に結合している水素原子、及びX A及びY Aの一方がCH<sub>2</sub>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。

[0046] ・「置換もしくは無置換のアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」の具体例（具体例群G 3）としては、以下の無置換のアルキル基（具体例群G 3 A）及び置換のアルキル基（具体例群G 3 B）が挙げられる。（ここで、無置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「無置換のアルキル基」である場合を指し、置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「置換のアルキル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキル基」という場合は、「無置換のアルキル基」と「置換のアルキル基」の両方を含む。

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

[0047] ・無置換のアルキル基（具体例群G 3 A）：

メチル基、

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

[0048] ・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。

[0049] ・「置換もしくは無置換のアルケニル基」

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

）本明細書において、単に「アルケニル基」という場合は、「無置換のアルケニル基」と「置換のアルケニル基」の両方を含む。

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

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

[0050] ・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。

[0051] ・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。

[0052] ・「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。

[0053] ・無置換のアルキニル基（具体例群G 5 A）：

## エチニル基

## [0054] ・「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」

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

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

## [0055] ・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。

[0056] ・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。

[0057] ・「 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$  で表される基」

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

$-Si(G1)(G1)(G1)$ 、  
 $-Si(G1)(G2)(G2)$ 、  
 $-Si(G1)(G1)(G2)$ 、  
 $-Si(G2)(G2)(G2)$ 、  
 $-Si(G3)(G3)(G3)$ 、及び  
 $-Si(G6)(G6)(G6)$

が挙げられる。ここで、

G 1は、具体例群G 1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2は、具体例群G 2に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3は、具体例群G 3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

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

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

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

$-Si(G1)(G1)(G2)$  における複数のG 1は、互いに同一であ

るか、又は異なる。

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

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

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

[0058] ・「−O− (R<sub>904</sub>) で表される基」

本明細書に記載の−O− (R<sub>904</sub>) で表される基の具体例 (具体例群G 8) としては、

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

が挙げられる。

ここで、

G 1は、具体例群G 1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2は、具体例群G 2に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3は、具体例群G 3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

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

[0059] ・「−S− (R<sub>905</sub>) で表される基」

本明細書に記載の−S− (R<sub>905</sub>) で表される基の具体例 (具体例群G 9) としては、

−S (G 1)、

−S (G 2)、  
−S (G 3)、及び  
−S (G 6)

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

[0060] ・「−N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基」

本明細書に記載の−N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>) で表される基の具体例 (具体例群 G 10) としては、

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

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

る。

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

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

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

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

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

[0061] ・「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。

[0062] ・「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも1つの水素原子がフッ素原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がフッ素原子で置き換わった基（パーフルオロ基）も含む。「無置換のフルオロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。「置換のフルオロアルキル基」は、「フルオロアルキル基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のフルオロアルキル基」には、「置換のフルオロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のフルオロアルキル基」における置換基の1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も

含まれる。「無置換のフルオロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群G3）における1つ以上の水素原子がフッ素原子と置き換わった基の例等が挙げられる。

[0063] ・「置換もしくは無置換のハロアルキル基」

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

[0064] ・「置換もしくは無置換のアルコキシ基」

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

[0065] ・「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」の具体例とし

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

[0066] ・「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」

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

[0067] ・「置換もしくは無置換のアリールチオ基」

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

[0068] ・「置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基」

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

[0069] ・「置換もしくは無置換のアラルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、 $-(G3)-(G1)$  で表される基であり、ここで、 $G3$  は、具体例群  $G3$  に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」であり、 $G1$  は、具体例

群G 1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。したがって、「アラルキル基」は、「アルキル基」の水素原子が置換基としての「アリール基」と置き換わった基であり、「置換のアルキル基」の一態様である。「無置換のアラルキル基」は、「無置換のアリール基」が置換した「無置換のアルキル基」であり、「無置換のアラルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、7～50であり、好ましくは7～30であり、より好ましくは7～18である。

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

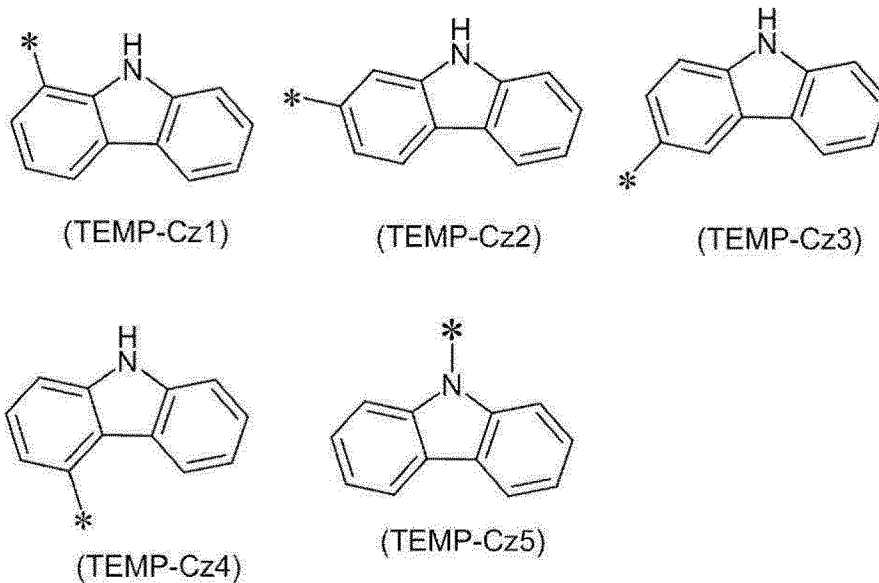
[0070] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリール基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはフェニル基、p-ビフェニル基、m-ビフェニル基、o-ビフェニル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-ターフェニル-4-イル基、o-ターフェニル-3-イル基、o-ターフェニル-2-イル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9, 9'-スピロビフルオレニル基、9, 9-ジメチルフルオレニル基、及び9, 9-ジフェニルフルオレニル基等である。

[0071] 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。

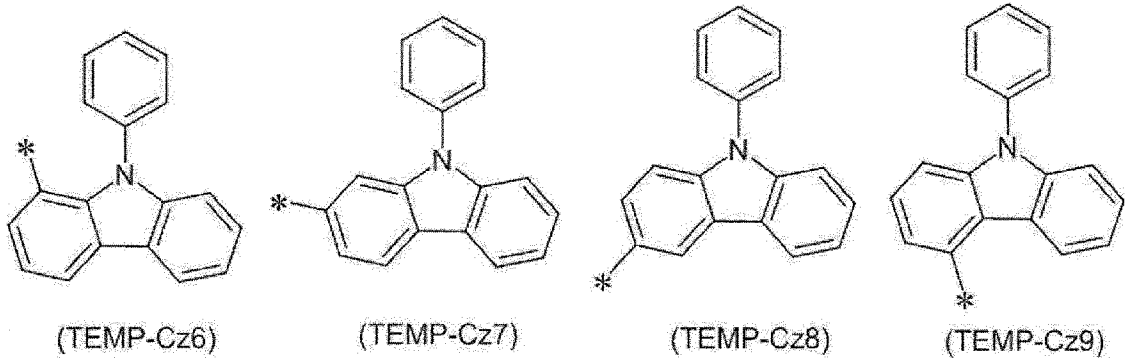
[0072] 本明細書において、カルバゾリル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

[0073] [化21]



[0074] 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。

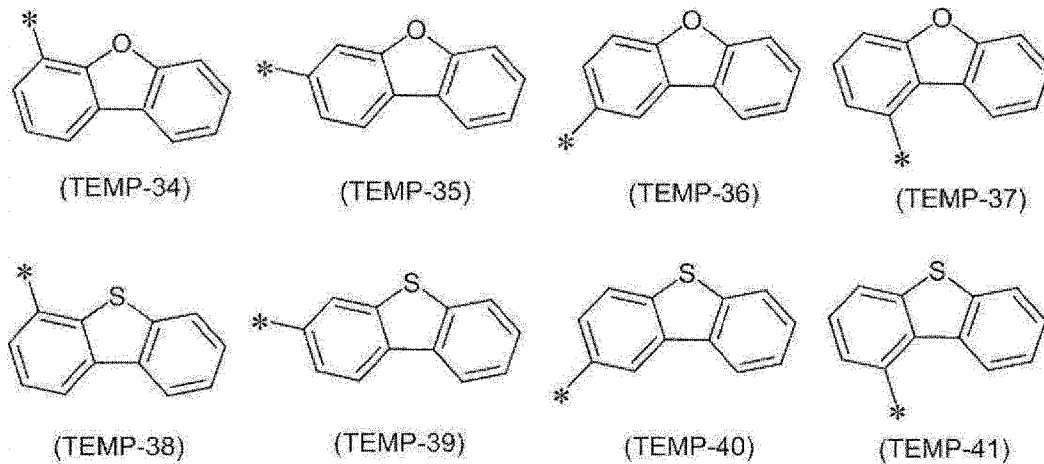
[0075] [化22]



[0076] 前記一般式 (TEMP-Cz1) ~ (TEMP-Cz9) 中、\*は、結合位置を表す。

[0077] 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。

[0078] [化23]



[0079] 前記一般式 (TEMP-34) ~ (TEMP-41) 中、\*は、結合位置を表す。

[0080] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアルキル基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、及び*t*-ブチル基等である。

[0081] ・「置換もしくは無置換のアリーレン基」

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

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

[0082] ・「置換もしくは無置換の2価の複素環基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換の2価の複素環基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換の2価の複素環基」の具体例（具体例群G 1 3）としては、具体例群G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

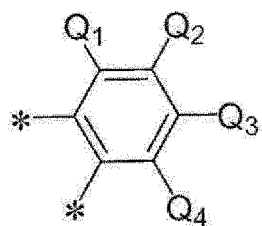
[0083] ・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

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

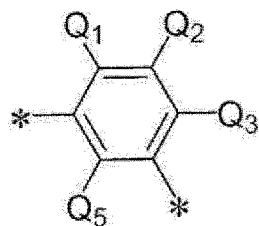
[0084] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式（TEMP-4 2）～（TEMP-6 8）のいずれかの基である。

[0085]

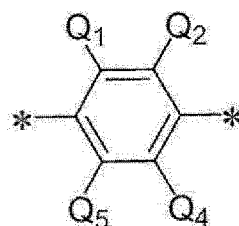
[化24]



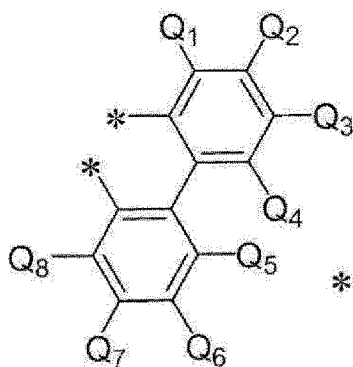
(TEMP-42)



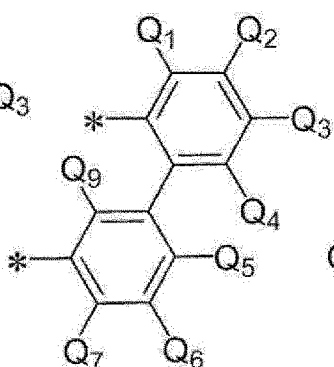
(TEMP-43)



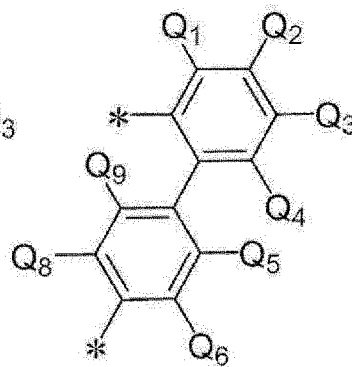
(TEMP-44)



(TEMP-45)

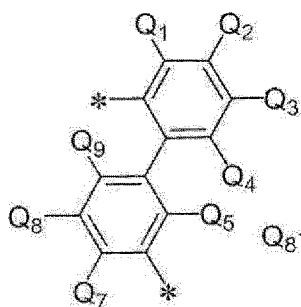


(TEMP-46)

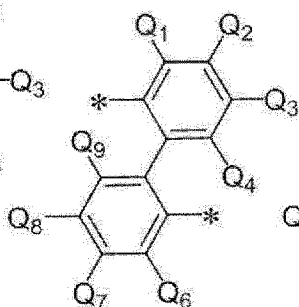


(TEMP-47)

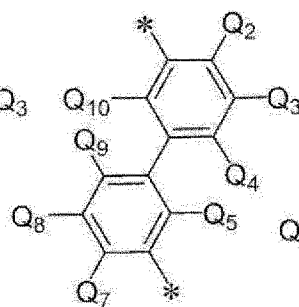
[0086] [化25]



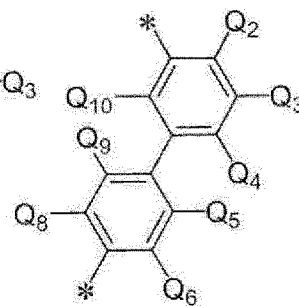
(TEMP-48)



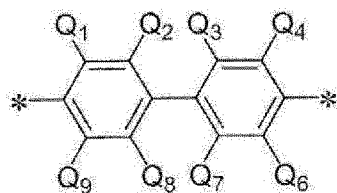
(TEMP-49)



(TEMP-50)



(TEMP-51)



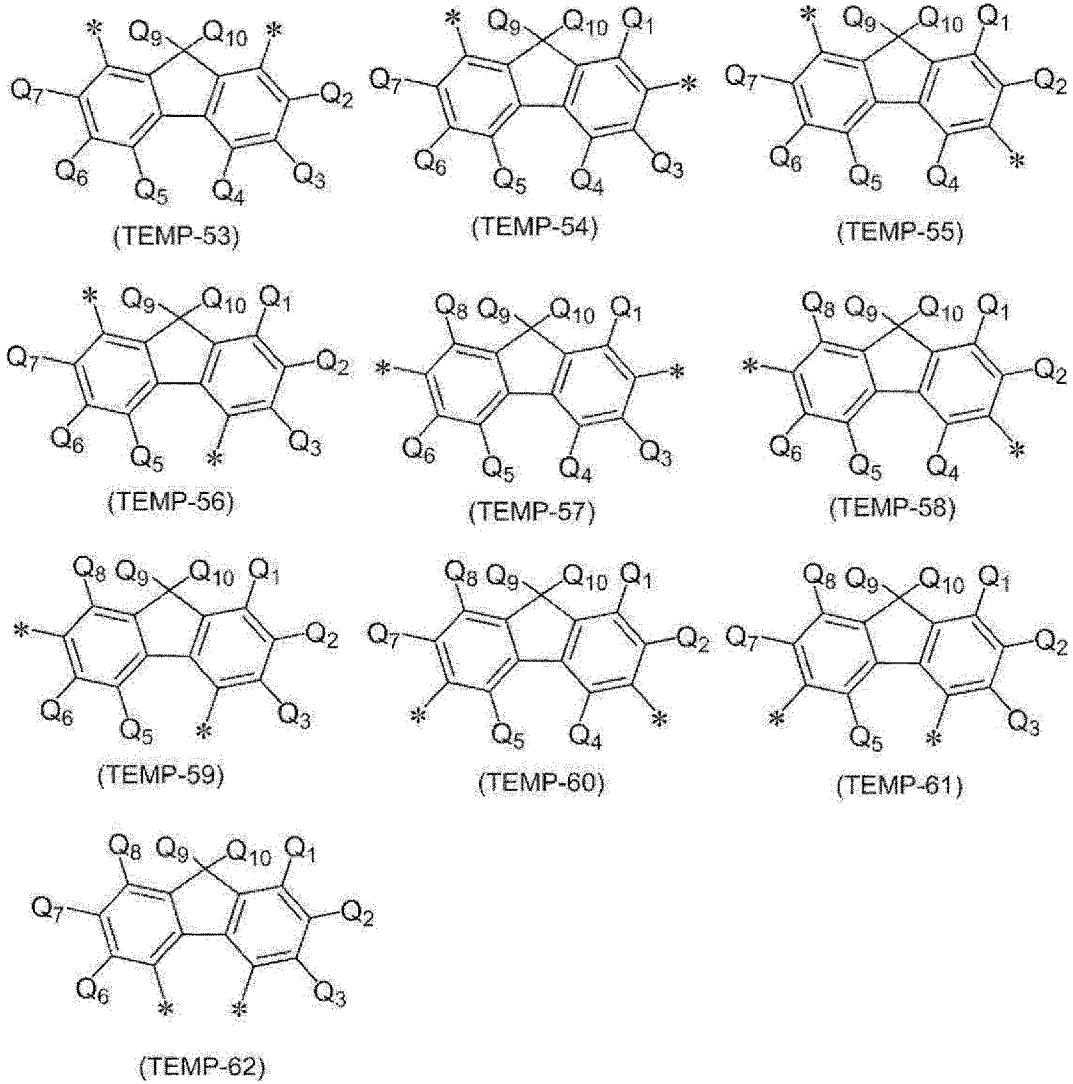
(TEMP-52)

[0087] 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。

[0088] [化26]



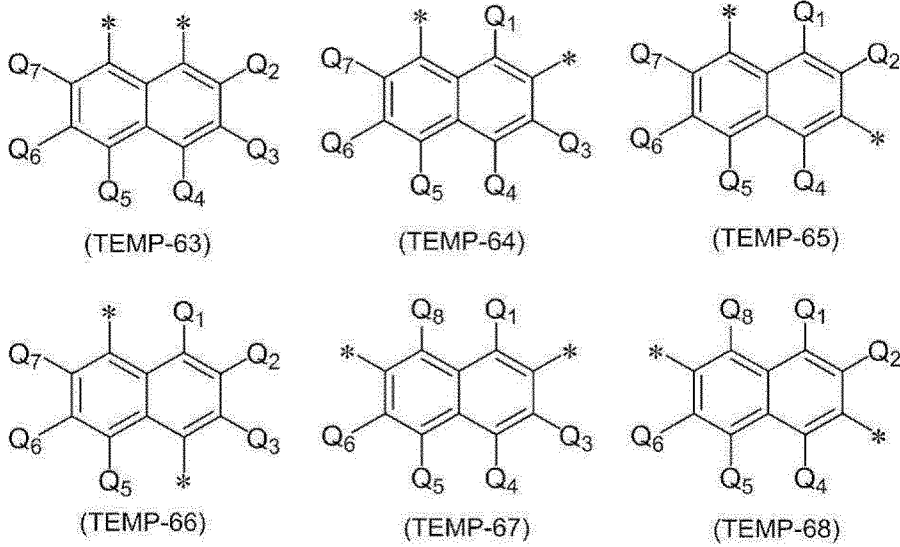
[0089] 前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、 $Q_1 \sim Q_{10}$  は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

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。

[0090]

[化27]

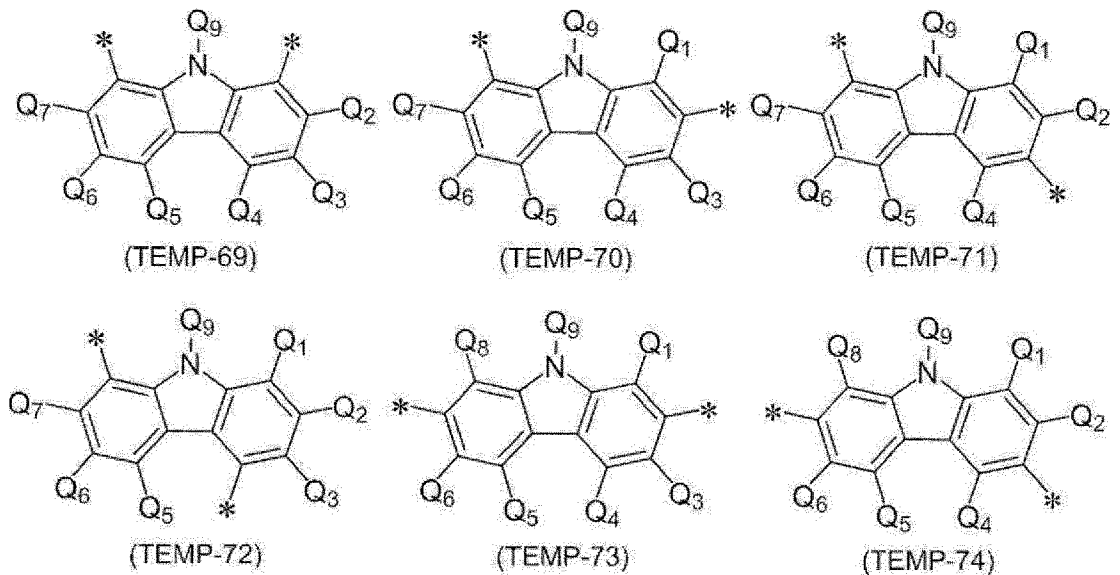


[0091] 前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、 $Q_1 \sim Q_8$  は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

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

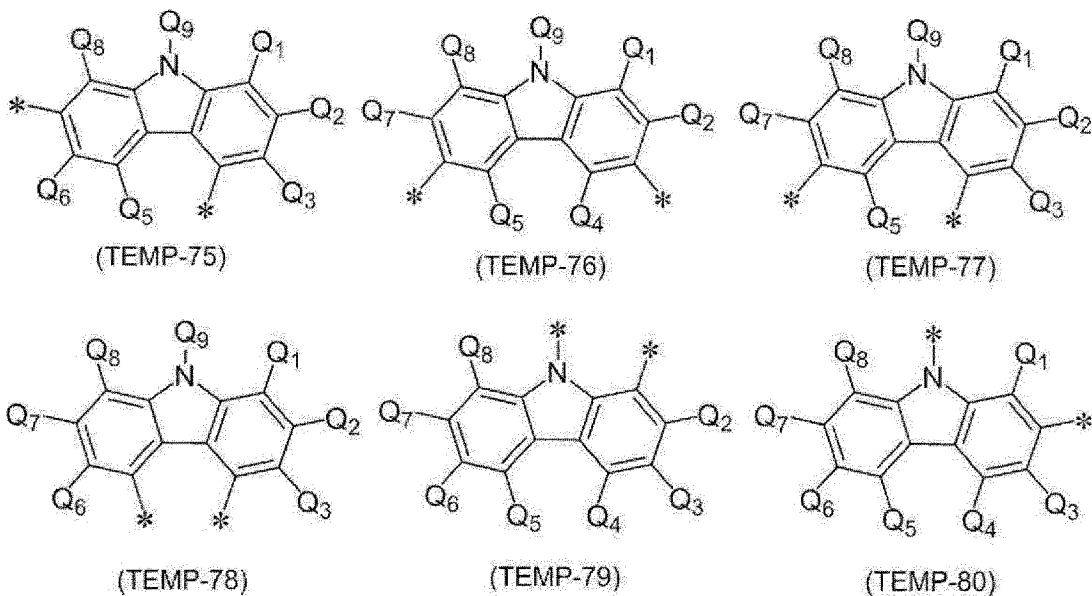
[0092] 本明細書に記載の置換もしくは無置換の2価の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-102) のいずれかの基である。

[0093] [化28]

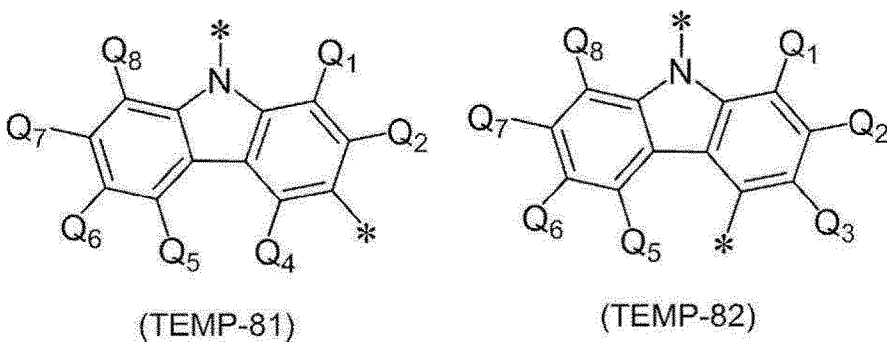


[0094]

[化29]

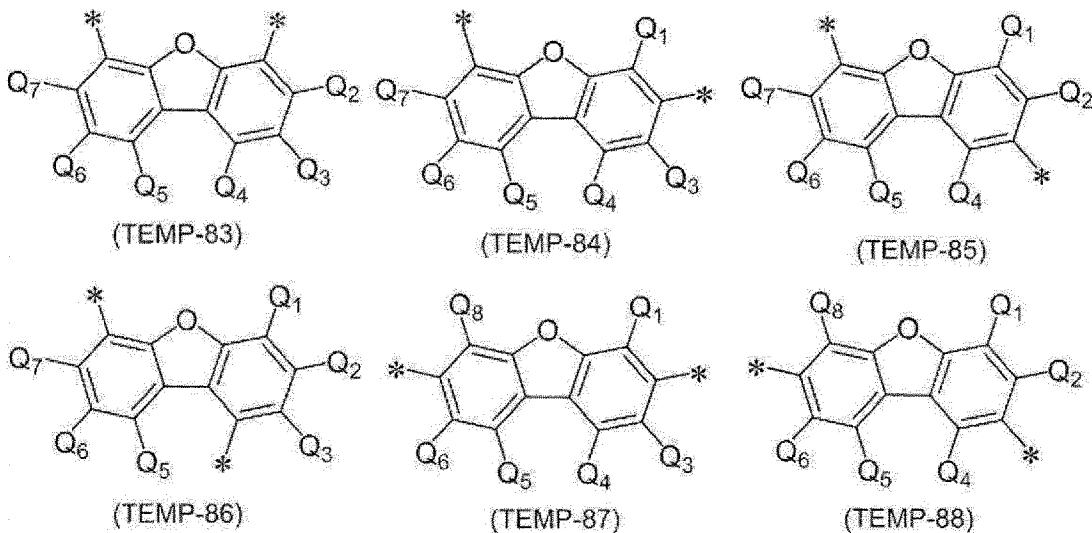


[0095] [化30]

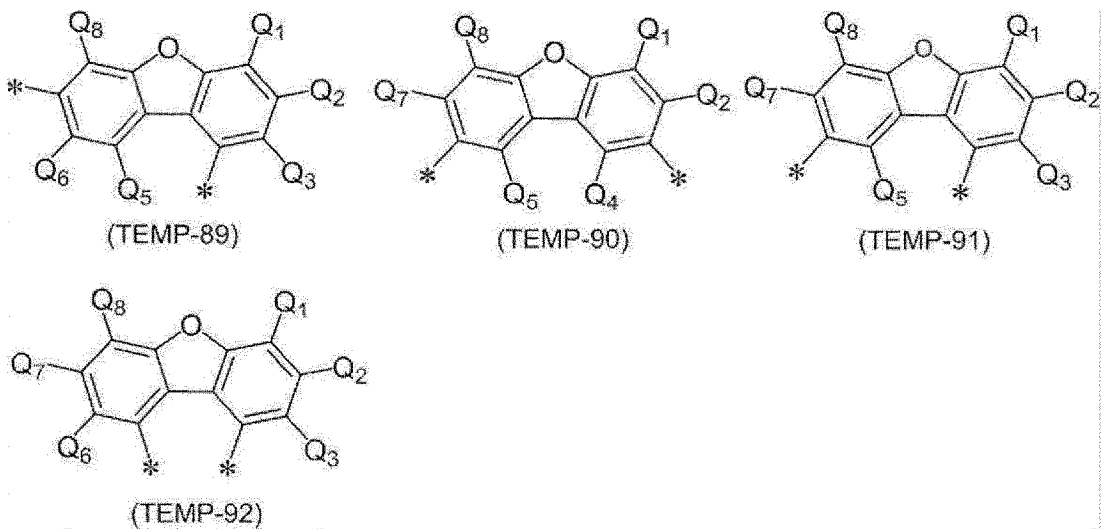


[0096] 前記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-82) 中、 $Q_1 \sim Q_9$  は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

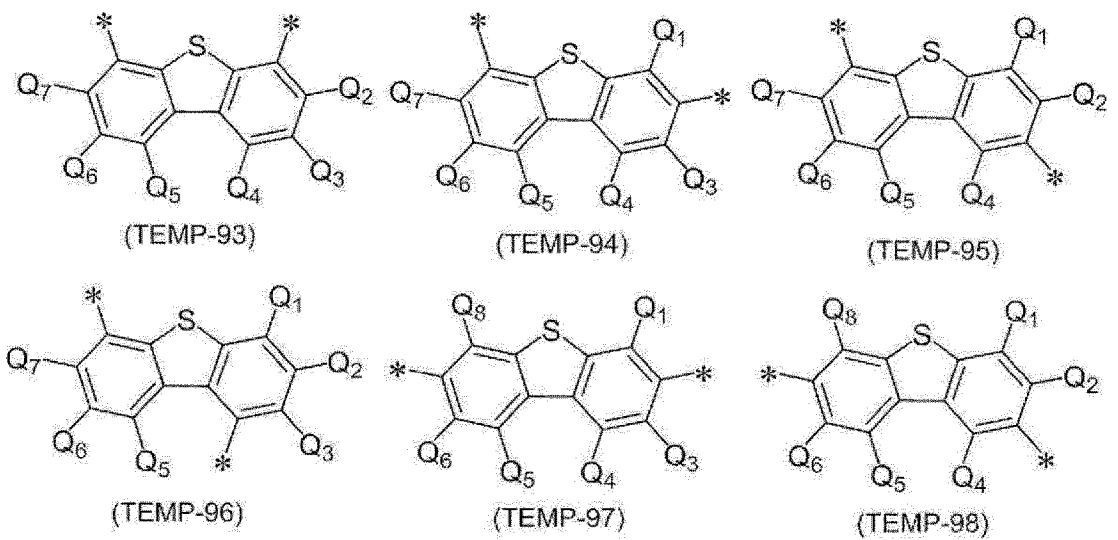
[0097] [化31]



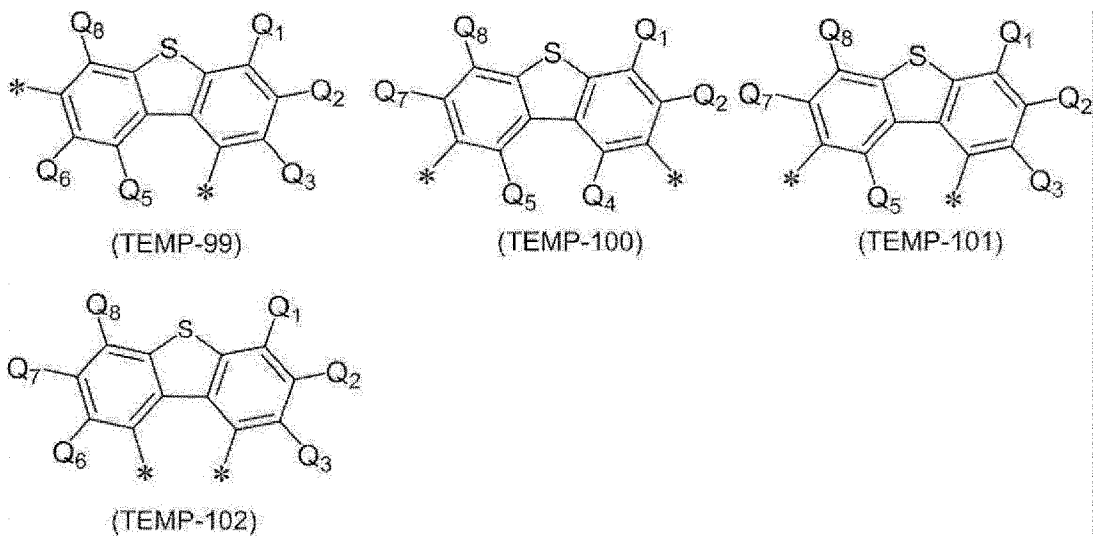
[0098] [化32]



[0099] [化33]



[0100] [化34]



[0101] 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。

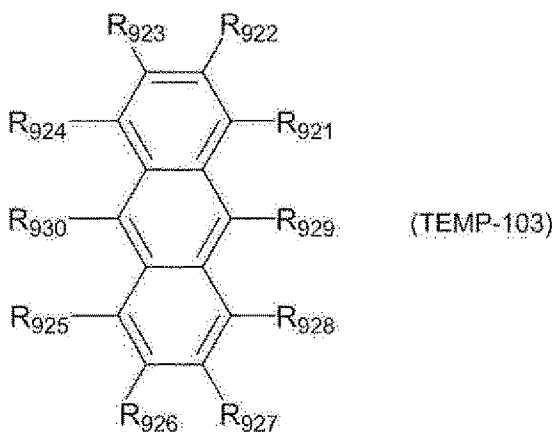
[0102] 以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

[0103] ・「結合して環を形成する場合」

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

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

[0104] [化35]

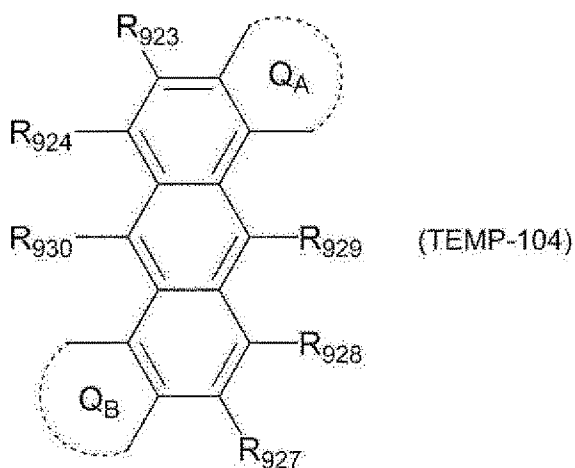


[0105] 例えば、 $R_{921} \sim R_{930}$  のうちの「隣接する2つ以上からなる組の1組以上

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。

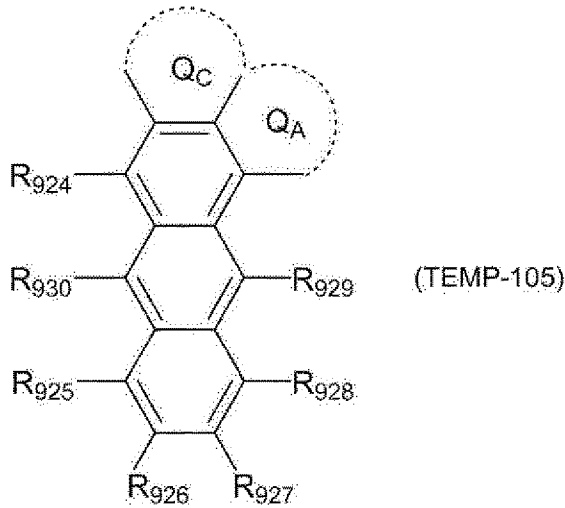
[0106] 上記「1組以上」とは、上記隣接する2つ以上からなる組の2組以上が同時に環を形成してもよいことを意味する。例えば、 $R_{921}$ と $R_{922}$ とが互いに結合して環 $Q_A$ を形成し、同時に $R_{925}$ と $R_{926}$ とが互いに結合して環 $Q_B$ を形成した場合は、前記一般式(TEMP-103)で表されるアントラセン化合物は、下記一般式(TEMP-104)で表される。

[0107] [化36]



[0108] 「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。

[0109] [化37]



[0110] 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。

[0111] 「不飽和の環」とは、芳香族炭化水素環、又は芳香族複素環を意味する。

「飽和の環」とは、脂肪族炭化水素環、又は非芳香族複素環を意味する。

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

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

脂肪族炭化水素環の具体例としては、具体例群G6において具体例として

挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

「環を形成する」とは、母骨格の複数の原子のみ、あるいは母骨格の複数の原子とさらに1以上の任意の元素で環を形成することを意味する。例えば、前記一般式(TEMP-104)に示す、 $R_{921}$ と $R_{922}$ とが互いに結合して形成された環 $Q_A$ は、 $R_{921}$ が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、 $R_{922}$ が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、1以上の任意の元素とで形成する環を意味する。具体例としては、 $R_{921}$ と $R_{922}$ とで環 $Q_A$ を形成する場合において、 $R_{921}$ が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、 $R_{922}$ とが結合するアントラセン骨格の炭素原子と、4つの炭素原子とで単環の不飽和の環を形成する場合、 $R_{921}$ と $R_{922}$ とで形成する環は、ベンゼン環である。

[0112] 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、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。

[0113] 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。

[0114] ・「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(R<sub>901</sub>)(R<sub>902</sub>)(R<sub>903</sub>)、  
—O—(R<sub>904</sub>)、  
—S—(R<sub>905</sub>)、

—N (R<sub>906</sub>) (R<sub>907</sub>)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、及び

無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基

からなる群から選択される基等であり、

ここで、R<sub>901</sub>～R<sub>907</sub>は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基である。

R<sub>901</sub>が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>901</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>902</sub>が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>902</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>903</sub>が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>903</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>904</sub>が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>904</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>905</sub>が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>905</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>906</sub>が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>906</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>907</sub>が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R<sub>907</sub>は、互いに同一であるか又は異なる。

[0115] 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。

[0116] 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。

[0117] 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。

[0118] 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。

[0119] 本明細書において、「AA ~ BB」を用いて表される数値範囲は、「AA ~ BB」の前に記載される数値 AA を下限値とし、「AA ~ BB」の後に記載される数値 BB を上限値として含む範囲を意味する。

[0120] 以下、本発明の化合物を説明する。

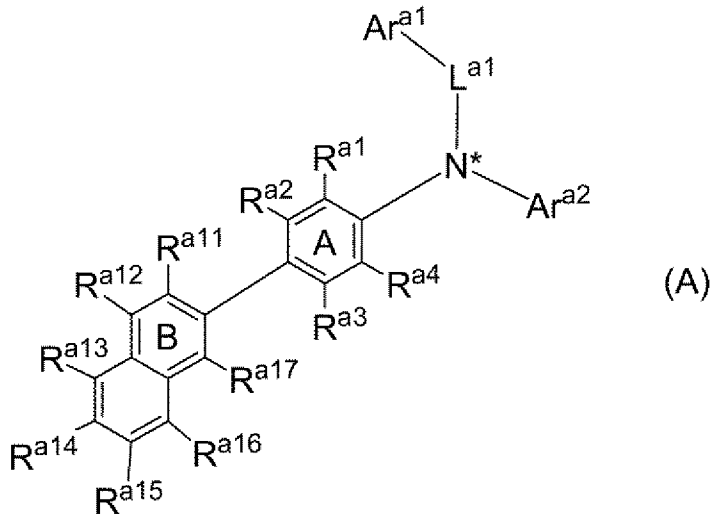
本発明の化合物は、前記式 (A) 又は (B) 又は (C) 又は (D) で表される。以下、式 (A) 又は (B) 又は (C) 又は (D)、及び式 (A) 又は (B) 又は (C) 又は (D) に含まれる後述する各式中の記号を説明する。特に断らない限り、同じ記号は同じ意味を有する。

式 (A) 又は (B) 又は (C) 又は (D)、及び式 (A) 又は (B) 又は

(C) 又は (D) に含まれる後述する式で表される本発明の化合物を“発明化合物”と称することがある。

[0121] 本発明の第1の化合物（発明化合物（A））は下記式（A）で表される。

[0122] [化38]



[0123] 式（A）中、

$N^*$ は中心窒素原子である。

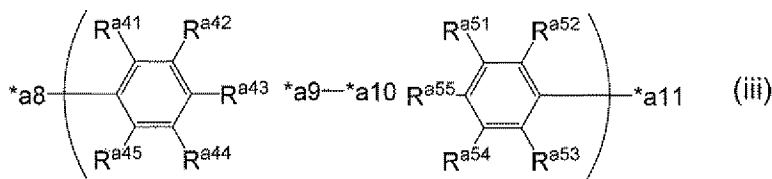
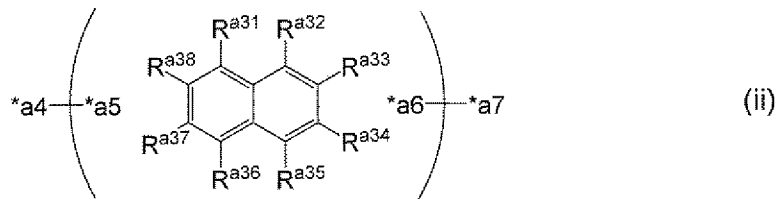
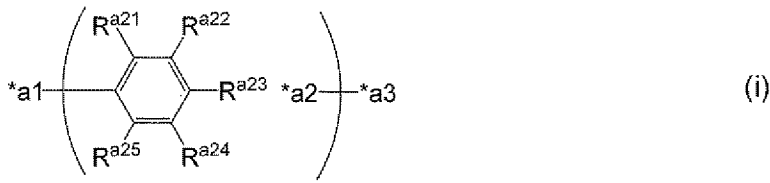
$L^{a1}$ は、単結合、又は下記式（i）～（iii）で表される基であり、

$L^{a1}$ が単結合であるとき、 $A r^{a1}$ は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基、又は置換もしくは無置換の1-フェナントリル基であり、

$L^{a1}$ が下記式（i）～（iii）で表される基であるとき、 $A r^{a1}$ は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、又は置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基である。

[0124]

[化39]



[0125] 式(i)～(iii)中、

$R_{a21} \sim R_{a25}$ から選ばれる1つは $*a2$ に結合する単結合であり、

$R_{a31} \sim R_{a38}$ から選ばれる1つは $*a5$ に結合する単結合であり、 $R_{a31} \sim R_{a38}$ から選ばれる他の1つは $*a6$ に結合する単結合であり、

$R_{a41} \sim R_{a45}$ から選ばれる1つは $*a9$ に結合する単結合であり、 $R_{a51} \sim R_{a55}$ から選ばれる他の1つは $*a10$ に結合する単結合である。

[0126] 本発明の一態様において、好ましくは $R_{a21}$ 、 $R_{a22}$ 、 $R_{a24}$ 、又は $R_{a25}$ は $a2$ に結合する単結合であり、より好ましくは $R_{a22}$ 又は $R_{a24}$ は $*a2$ に結合する単結合である。

[0127] 前記単結合ではない $R_{a21} \sim R_{a25}$ 、前記単結合ではない $R_{a31} \sim R_{a38}$ 、前記単結合ではない $R_{a41} \sim R_{a45}$ 、及び前記単結合ではない $R_{a51} \sim R_{a55}$ は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～50、好ましくは1～20、より好ましくは1～6のアルキル基、無置換の炭素数2～50、好ましくは2～20、より好ましくは2～6のアルケニル基、無置換の炭素数2～50、好ましくは2～20、より好ましくは2～6のアルキニル基、無置換の環形成炭素数3～50、好ましくは3～20、より好ましくは3～6のシクロアルキル基、 $-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、 $-\text{O}- (R_{90})$

4)、 $-S-$  ( $R_{905}$ )、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、好ましくは6~30、より好ましくは6~18のアリール基、又は無置換の環形成原子数5~50、好ましくは5~30、より好ましくは5~18の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{905}$ 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、好ましくは1~20、より好ましくは1~6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50、好ましくは3~20、より好ましくは3~6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、好ましくは6~30、より好ましくは6~18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~50、好ましくは5~30、より好ましくは5~18の複素環基であり、

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

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

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

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

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

\*a1、\*a4、及び\*8は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表し、

\*a3、\*a7、及び\*11は、 $Ar^{a1}$ への結合位置を表す。

前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a51} \sim R^{a55}$ 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。

[0128] 前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a51} \sim R^{a55}$

が表す無置換の炭素数 1～50 のアルキル基の詳細は「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

該無置換のアルキル基は、好ましくはメチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、又は *t*-ブチル基であり、より好ましくはメチル基、イソプロピル基、又は *t*-ブチル基である。

[0129] 前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない  $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a51} \sim R^{a55}$  が表す無置換の炭素数 2～50 アルケニル基の詳細は、「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

[0130] 前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない  $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a51} \sim R^{a55}$  が表す無置換の 2～50 のアルキニル基の詳細は、「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

[0131] 前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない  $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a51} \sim R^{a55}$  が表す無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基の詳細は「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

該無置換のシクロアルキル基は、好ましくはシクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、又はアダマンチル基である。

[0132] 前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない  $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a51} \sim R^{a55}$  が表すハロゲン原子の詳細は「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりであり、好ましくはフッ素原子である。

[0133] 前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない  $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a51} \sim R^{a55}$  が表す無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基の詳細は、「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

該無置換のアリール基は、好ましくはフェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、又はフルオレニル基である。

[0134] 前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a51} \sim R^{a55}$ が表す無置換の環形成原子数5～50の複素環基の詳細は、「本明細書に記載の置換基」の項において上記したとおりである。

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

[0135] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の炭素数1～50のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0136] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0137] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成炭素数6～50のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0138] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成原子数5～50の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0139] 前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a51} \sim R^{a55}$ は、それぞれ独立して、好ましくは水素原子、無置換の炭素数1～50のアルキル基、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

[0140] 前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ が全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ が、全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない $R^{a41} \sim R^{a45}$ が、全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない

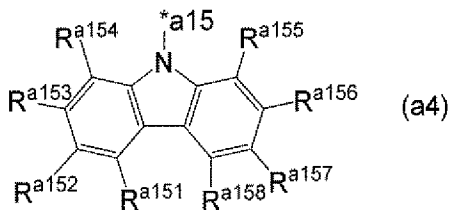
$R^{a51} \sim R^{a55}$ が、全て水素原子であってもよい。

[0141] 本発明の一態様において、 $L^{a1}$ は、単結合であることが好ましい。

本発明の他の態様において、 $L^{a1}$ は、前記式 (i) で表される基であることが好ましい。

[0142] 本発明の一態様において、 $Ar^{a1}$ は、好ましくは置換もしくは無置換のナフチル基、又は置換もしくは無置換のカルバゾリル基であり、より好ましくは置換もしくは無置換の1-ナフチル基、又は下記式 (a4) で表される基である。

[0143] [化40]



[0144] 式 (a4) 中、

\* a 1 5 は、 $L^{a1}$ への結合位置を表す。

$R^{a151} \sim R^{a158}$ 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、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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の複素環基である。

$R^{a151} \sim R^{a158}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず、したがって環構造を形成しない。

[0145] 本発明の一態様において、 $L^{a1}$ は、単結合であり、 $Ar^{a1}$ は、置換もしくは無置換のナフチル基であることが好ましい。

本発明の他の態様において、 $L^{a1}$ は、前記式 (i) で表される基であり、 $Ar^{a1}$ は、置換もしくは無置換のカルバゾリル基であることが好ましく、 $L^{a1}$ は、前記式 (i) で表される基であり、 $Ar^{a1}$ は、前記式 (a4) で表される基であることがより好ましい。

[0146] 前記  $R^{a151} \sim R^{a158}$ が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及

びその好ましい例は、後述の前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基に関して記載したとおりである。

[0147] 前記 $R^{a151} \sim R^{a158}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、後述の前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基に関して記載したとおりである。

[0148] 前記 $R^{a151} \sim R^{a158}$ が表す無置換の環形成原子数5～13の複素環基は、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、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、カルバゾリル基であり、好ましくはピロリル基、フリル基、チエニル基、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、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、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、カルバゾリル基（9-カルバゾリル基、又は、1-、2-

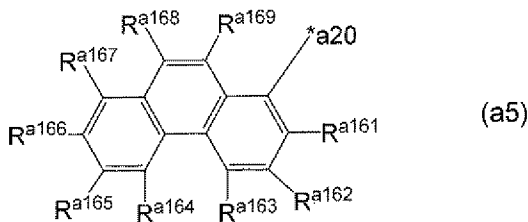
、3-又は4-カルバゾリル基)である。

置換された環形成原子数5~13の複素環基は、例えば、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、フェニルジベンゾフランニル基、又はフェニルジベンゾチオフェニル基(フェニルジベンゾチエニル基、以下同様)である。

前記置換もしくは無置換の環形成原子数5~13の複素環基は、存在する場合には異性体基を含む。

[0149] 本発明の他の態様において、 $A r^{a1}$ は、好ましくは置換もしくは無置換の1-フェナントリル基であり、より好ましくは下記式(a5)で表される基である。

[0150] [化41]



[0151] 式(a5)中、

\* a20は、 $L^{a1}$ への結合位置を表す。

$R^{a161} \sim R^{a169}$ 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、好ましくは1~6、より好ましくは1~3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の複素環基である。

$R^{a161} \sim R^{a169}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず、したがって環構造を形成しない。

[0152] 前記 $R^{a161} \sim R^{a169}$ が表す無置換の炭素数1~10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、後述の前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が表す無置換の炭素数1~10のアルキル基に関して記載したとおりである。

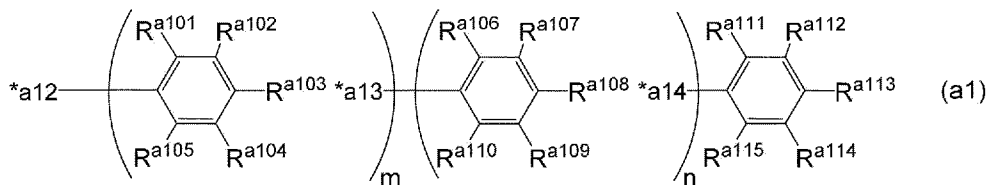
[0153] 前記  $R^{a161} \sim R^{a169}$  が表す無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基の詳細及びその好ましい例は、後述の前記単結合ではない  $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a106} \sim R^{a110}$  が表す無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基に関して記載したとおりである。

[0154] 前記  $R^{a161} \sim R^{a169}$  が表す無置換の環形成原子数 5 ～ 13 の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記  $R^{a151} \sim R^{a158}$  が表す無置換の環形成原子数 5 ～ 13 の複素環基に関して記載したとおりである。

[0155] 本発明の一態様において、 $R^{a161} \sim R^{a169}$  は、水素原子であることが好ましい。

[0156]  $A r^{a2}$  は、下記式 (a1) ～ (a3) のいずれかで表される基である。

[0157] [化42]



[0158] 式 (a1) 中、

\*a12 は、中心窒素原子  $N^*$  への結合位置を表す。

$R^{a101} \sim R^{a105}$  から選ばれる 1 つは \*a13 に結合する単結合であり、 $R^{a106} \sim R^{a110}$  から選ばれる 1 つは \*a14 に結合する単結合である。

前記単結合ではない  $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a106} \sim R^{a110}$  は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数 1 ～ 10、好ましくは 1 ～ 6、より好ましくは 1 ～ 3 のアルキル基、無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基、又は無置換の環形成炭素数 5 ～ 12 の複素環基である。

前記単結合ではない  $R^{a101} \sim R^{a105}$  から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合せず環を形成せず、

前記単結合ではない  $R^{a106} \sim R^{a110}$  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。

[0159] 前記単結合ではない  $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a106} \sim$

$R^{a110}$ が表す無置換の炭素数1～10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、又はデシル基であり、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、ペンチル基、又はヘキシル基であり、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、メチル基又は*t*-ブチル基であり、よりさらに好ましくは*t*-ブチル基である。

[0160] 前記単結合ではない $R^{a101}$ ～ $R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106}$ ～ $R^{a110}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12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、より好ましくは、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、フェニル基である。

[0161] 前記単結合ではない $R^{a101}$ ～ $R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106}$ ～ $R^{a110}$ が表す無置換の環形成原子数5～12の複素環基は、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、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、カルバゾリル基であり、好ましくはピロリル基、フリル基、チエニル基、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、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、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、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)である。

置換された環形成原子数5~12の複素環基は、例えば、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、フェニルジベンゾフラニル基、又はフェニルジベンゾチオフェニル基(フェニルジベンゾチエニル基、以下同様)である。

前記置換もしくは無置換の環形成原子数5~12の複素環基は、存在する場合には異性体基を含む。

[0162]  $R^{a111} \sim R^{a115}$ 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、好ましくは1~6、より好ましくは1~3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の複素環基である。

$R^{a111} \sim R^{a115}$ 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。

[0163] 前記 $R^{a111} \sim R^{a115}$ が表す無置換の炭素数1~10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0164] 前記 $R^{a111} \sim R^{a115}$ が表す無置換の環形成炭素数6~12のアリール基の

詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0165] 前記 $R^{a111} \sim R^{a115}$ が表す無置換の環形成原子数5～13の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が表す環形成原子数5～12の複素環基に関して上記したとおりである。

[0166] 前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ が全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が全て水素原子であってもよく、 $R^{a111} \sim R^{a115}$ が全て水素原子であってもよい。

[0167]  $m$ は0又は1であり、 $n$ は0又は1である。

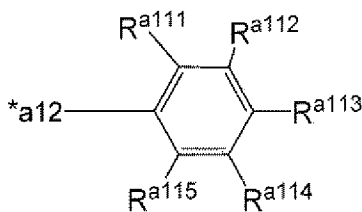
$m=0$ 、 $n=0$ の場合、 $*a14$ が $*a12$ を表し、

$m=0$ 、 $n=1$ の場合、 $*a13$ が $*a12$ を表し、

$m=1$ 、 $n=0$ の場合、 $*a14$ が $*a13$ を表す。

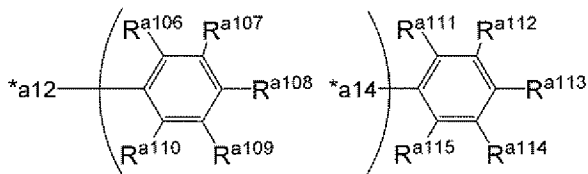
[0168] 本発明の一態様において、 $m$ は0、 $n$ は0である。この場合、 $*a14$ が $*a12$ を表し、式(a1)は下記式で表される。

[0169] [化43]



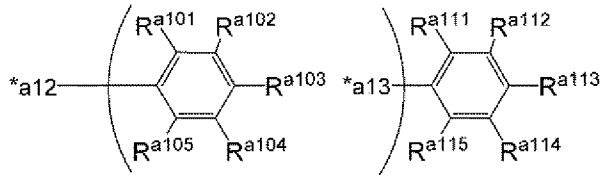
[0170] 本発明の他の態様において、 $m$ は0、 $n$ は1である。この場合、 $*a13$ が $*a12$ を表し、式(a1)は下記式で表される。

[0171] [化44]



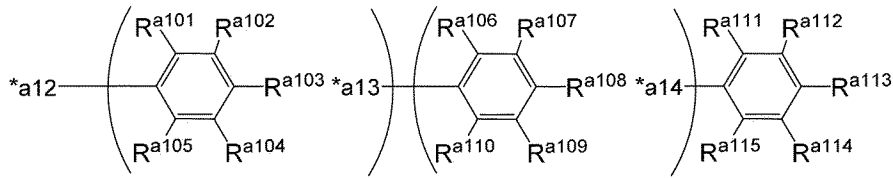
[0172] 本発明の他の態様において、 $m$ は1、 $n$ は0である。この場合、 $*a14$ が $*a13$ を表し、式(a1)は下記式で表される。

[0173] [化45]



[0174] 本発明の他の態様において、mは1、nは1である。この場合、式(a1)は下記式で表される。

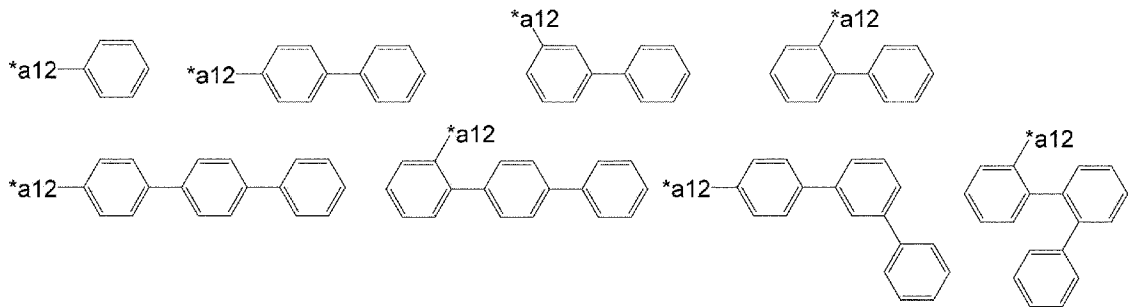
[0175] [化46]



[0176] 式(a1)で表される基は、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。

Rは、前記単結合ではないRa101~Ra105、及び前記単結合ではないRa106~Ra110、又は前記Ra111~Ra115と同一である。

[0177] [化47]

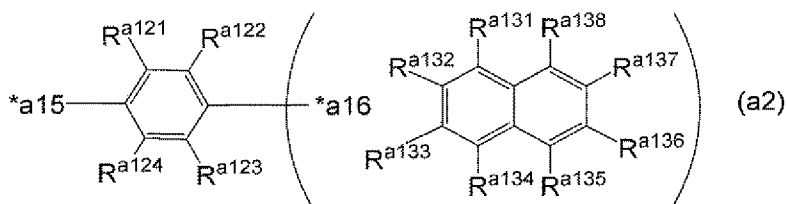


[0178] 式(a1)で表される基は、より好ましくは下記式で表される。

[0179] [化48]



[0180] [化49]



[0181] 式 (a 2) 中、

\* a 1 5 は、中心窒素原子 N\* への結合位置を表す。

R a 1 3 1 ~ R a 1 3 8 から選ばれる 1 つは \* a 1 6 に結合する単結合である。

R a 1 2 1 ~ R a 1 2 4、及び前記単結合ではない R a 1 3 1 ~ R a 1 3 8 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 ~ 1 0、好ましくは 1 ~ 6、より好ましくは 1 ~ 3 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 2 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 1 3 の複素環基である。

R a 1 2 1 ~ R a 1 2 4、及び前記単結合ではない R a 1 3 1 ~ R a 1 3 8 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。

[0182] 前記 R a 1 2 1 ~ R a 1 2 4、及び前記単結合ではない R a 1 3 1 ~ R a 1 3 8 が表す無置換の炭素数 1 ~ 1 0 のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない R a 1 0 1 ~ R a 1 0 5、及び前記単結合ではない R a 1 0 6 ~ R a 1 1 0 に関して上記したとおりである。

[0183] 前記 R a 1 2 1 ~ R a 1 2 4、及び前記単結合ではない R a 1 3 1 ~ R a 1 3 8 が表す無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 2 のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない R a 1 0 1 ~ R a 1 0 5、及び前記単結合ではない R a 1 0 6 ~ R a 1 1 0 に関して上記したとおりである。

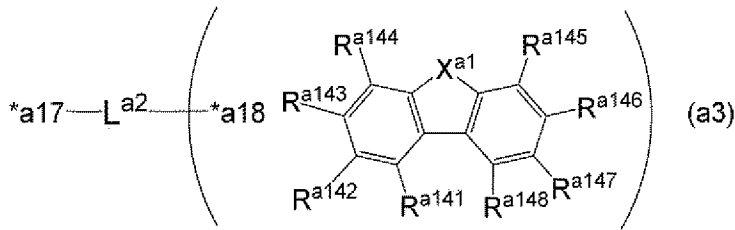
[0184] 前記 R a 1 2 1 ~ R a 1 2 4、及び前記単結合ではない R a 1 3 1 ~ R a 1 3 8 が表す無置換の環形成原子数 5 ~ 1 3 の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない R a 1 0 1 ~ R a 1 0 5、及び前記単結合ではない R a 1 0 6 ~ R a 1 1 0 が表す環形成原子数 5 ~ 1 2 の複素環基に関して上記したとおりである。

[0185] 本発明の一態様において、R a 1 3 2、R a 1 3 3、R a 1 3 6、及び R a 1 3 7 から選ばれる 1 つは \* a 1 6 に結合する単結合であることが好ましい。

[0186] 前記 R a 1 2 1 ~ R a 1 2 4 が全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない R a 1 3 1 ~ R a 1 3 8 は、全て水素原子であってもよい。

[0187] 前記 R a 1 2 1 ~ R a 1 2 4 から選ばれる少なくとも 1 つは重水素原子であってもよい。

[0188] [化50]



[0189] 式 (a3) 中、

\*a17は、中心窒素原子N\*への結合位置を表す。

$L^{a2}$ は、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のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30、好ましくは5～18、より好ましくは5～12の2価の複素環基である。

[0190] 前記 $L^{a2}$ が表す無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基は、例えば、フェニレン基、ビフェニレン基、ターフェニレン基、ナフチレン基、アントリレン基、ベンゾアントリレン基、フェナントリレン基、ベンゾフェナントリレン基、フェナレニレン基、ピセニレン基、ペンタフェニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ベンゾクリセニレン基、トリフェニレニレン基、フルオランテニレン基、フルオレニレン基、又は9,9'-スピロビフルオレニレン基であり、好ましくはフェニレン基、ビフェニレン基、ターフェニレン基、又はナフチレン基であり、より好ましくはフェニレン基、又はビフェニレン基であり、さらに好ましくはフェニレン基である。

[0191] 前記 $L^{a2}$ が表す無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基とは、無置換の環形成原子数5～30の複素環基から1個の水素原子を除くことにより得られる2価の基である。

無置換の環形成原子数5～30の複素環基は、例えば、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、チアジアゾリル基、ピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、インドリル基、イソインドリル基、イ

ンドリジニル基、キノリジニル基、キノリル基、イソキノリル基、シンノリル基、フタラジニル基キナゾリニル基、キノキサリニル基、ベンゾイミダゾリル基、インダゾリル基、フェナントロリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナジニル基、カルバゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、フリル基、キサントニル基、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、チエニル基、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、ナフトベンゾチオフェニル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、又はフェノチアジニル基であり、好ましくは、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）、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、又はナフトベンゾチオフェニル基である。

[0192]  $L^{a2}$ は、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、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のアリーレン基、さらに好ましくは置換もしくは無置換のフェニレン基、よりさらに好ましくは無置換のフェニレン基である。

[0193]  $X^{a1}$ 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。

$R^{a141} \sim R^{a148}$ から選ばれる1つは\* $a18$ に結合する単結合である。

[0194] 前記単結合ではない $R^{a141} \sim R^{a148}$ 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、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{a141} \sim R^{a148}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環構造を形成しなくてもよい。

[0195] 前記単結合ではない $R^{a141} \sim R^{a148}$ が表す無置換の炭素数1～10のアル

キル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0196] 前記単結合ではない $R^{a141} \sim R^{a148}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0197] 前記単結合ではない $R^{a141} \sim R^{a148}$ が表す無置換の環形成原子数5～13の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が表す環形成原子数5～12の複素環基に関して上記したとおりである。

[0198] 前記単結合ではない $R^{a141} \sim R^{a148}$ が全て水素原子であってもよい。

[0199]  $A r^{a2}$ は、少なくとも1つの重水素原子を有することが好ましい。  
また、 $A r^{a2}$ は、好ましくは前記式(a2)で表される基である。

[0200]  $R^{a1} \sim R^{a4}$ は、水素原子である。

$R^{a11} \sim R^{a17}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50、好ましくは1～20、より好ましくは1～6のアルキル基であり、

前記 $R^{a11} \sim R^{a17}$ 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。

環Aと環Bは架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

環Aと環Bが架橋する場合、

前記環Aと前記環Bが架橋して形成される環構造は、少なくとも1つの重水素原子を有し、

環Aと環Bが架橋しない場合、

$R^{a1} \sim R^{a4}$ から選ばれる少なくとも1つは重水素原子である。

[0201] なお、「前記環Aと前記環Bが架橋して形成される環構造は少なくとも1つの重水素原子を有し」とは、前記環Aと前記環Bが架橋して形成される環構造を構成する環構成原子に、重水素が直接に結合していることを意味する

。

[0202] 前記  $R^{a11} \sim R^{a17}$  が表す無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

[0203] 前記  $R^{a11} \sim R^{a17}$  は、全て水素原子であってもよい。

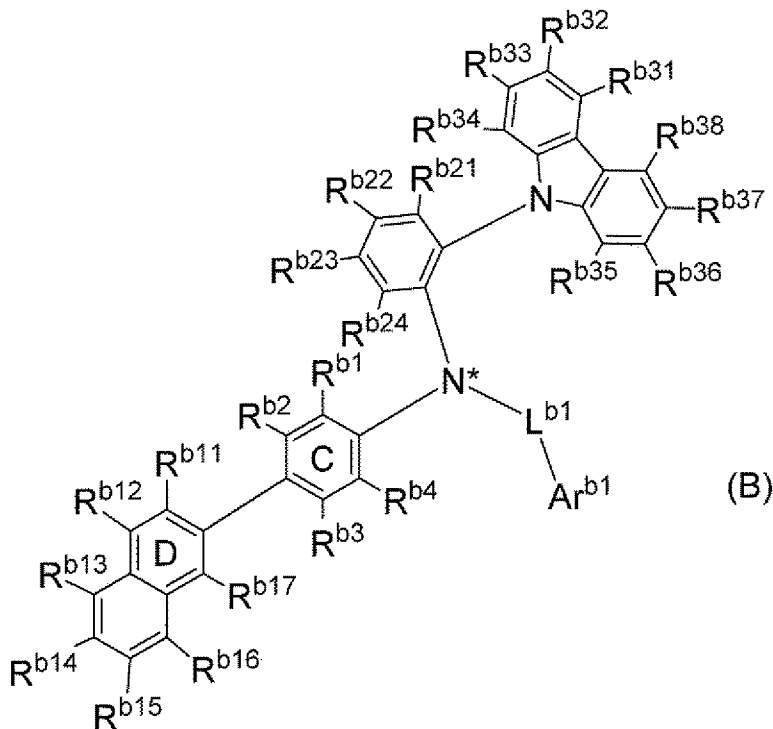
[0204] 環 A と環 B が架橋して形成される環構造としては、例えば、ジベンゾフラン構造、ジベンゾチオフェン構造、カルバゾール構造、又はフルオランテン構造であり、好ましくはジベンゾフラン構造である。

[0205] 本発明の一態様において、 $R^{a1} \sim R^{a4}$  は全て重水素原子であり、 $Ar^{a2}$  は、前記式 (a2) で表される基であり、 $R^{a121} \sim R^{a124}$  は全て重水素原子であることが好ましい。

[0206] 前記式 (A) で表される化合物が有する水素原子が、全て重水素原子であってもよい。

[0207] 本発明の第 2 の化合物 (発明化合物 (B)) は下記式 (B) で表される。

[0208] [化51]

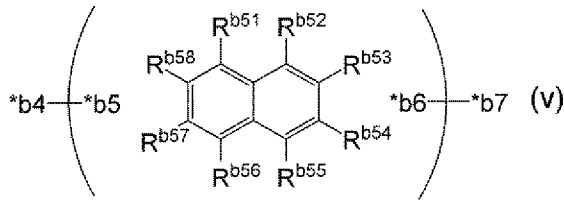
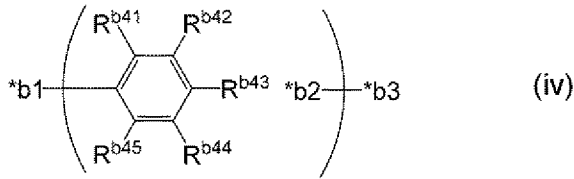


[0209] 式 (B) 中、

N\*は中心窒素原子である。

L<sup>b1</sup>は、単結合、下記式 (iv) 又は (v) で表される基である。

[0210] [化52]



[0211] 式 (iv) 及び (v) 中、

R<sup>b41</sup>～R<sup>b45</sup>から選ばれる1つは\*b2に結合する単結合であり、

R<sup>b51</sup>～R<sup>b58</sup>から選ばれる1つは\*b5に結合する単結合であり、R<sup>b51</sup>～R<sup>b58</sup>から選ばれる他の1つは\*b6に結合する単結合である。

[0212] 本発明の一態様において、好ましくはR<sup>b43</sup>が\*b2に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>b41</sup>～R<sup>b45</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>b51</sup>～R<sup>b58</sup>は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～50、好ましくは1～20、より好ましくは1～6のアルキル基、無置換の炭素数2～50、好ましくは2～20、より好ましくは2～6のアルケニル基、無置換の炭素数2～50、好ましくは2～20、より好ましくは2～6のアルキニル基、無置換の環形成炭素数3～50、好ましくは3～20、より好ましくは3～6のシクロアルキル基、-Si(R<sub>901</sub>)(R<sub>902</sub>)(R<sub>903</sub>)、-O-(R<sub>904</sub>)、-S-(R<sub>905</sub>)、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、好ましくは6～30、より好ましくは6～18のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～18の複素環基であり、

R<sub>901</sub>～R<sub>905</sub>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、好ましくは 1～20、より好ましくは 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50、好ましくは 3～20、より好ましくは 3～6 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、好ましくは 6～30、より好ましくは 6～18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50、好ましくは 5～30、より好ましくは 5～18 の複素環基であり、

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

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

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

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

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

\*b1、及び\*b4 は、中心窒素原子  $N^*$  への結合位置を表し、

\*b3、及び\*b7 は、 $Ar^{b1}$  への結合位置を表す。

前記単結合ではない  $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{b51} \sim R^{b58}$  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。

[0213] 前記単結合ではない  $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{b51} \sim R^{b58}$  が表す無置換の炭素数 1～50 のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

[0214] 前記単結合ではない  $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{b51} \sim R^{b58}$  が表す無置換の炭素数 2～50 アルケニル基の詳細は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

- [0215] 前記単結合ではない $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{b51} \sim R^{b58}$ が表す無置換の2～50のアルキニル基の詳細は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。
- [0216] 前記単結合ではない $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{b51} \sim R^{b58}$ が表す無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。
- [0217] 前記単結合ではない $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{b51} \sim R^{b58}$ が表すハロゲン原子の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。
- [0218] 前記単結合ではない $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{b51} \sim R^{b58}$ が表す無置換の環形成炭素数6～50のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。
- [0219] 前記単結合ではない $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{b51} \sim R^{b58}$ が表す無置換の環形成原子数5～50の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。
- [0220] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の炭素数1～50のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。
- [0221] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。
- [0222] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成炭素数6～50のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結

合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

[0223] 前記  $R_{901} \sim R_{905}$  が表す無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

[0224] 前記単結合ではない  $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{b51} \sim R^{b58}$  は、それぞれ独立して、好ましくは水素原子、無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基である。

[0225] 前記単結合ではない  $R^{b41} \sim R^{b45}$  が、全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない  $R^{b51} \sim R^{b58}$  が、全て水素原子であってもよい。

[0226] 本発明の一態様において、 $L^{b1}$  は、単結合であることが好ましい。

本発明の他の態様において、 $L^{b1}$  は、前記式 (iv) で表される基であることが好ましい。

[0227]  $A^{r^{b1}}$  は、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 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30、好ましくは 5～18、より好ましくは 5～13 の複素環基である。

[0228] 前記  $A^{r^{b1}}$  が表す無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基は、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、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、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、*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*-

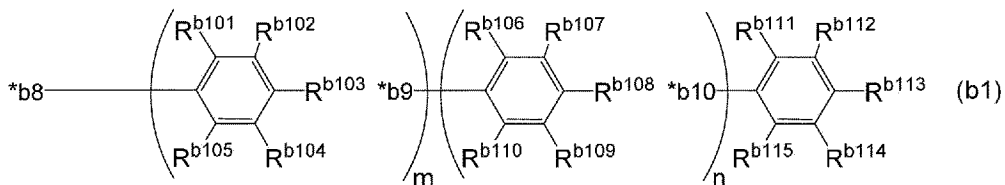
ーターフェニルー2ーイル基、もしくは、1ー又は2ーナフチル基であり、更に好ましくは、フェニル基、pービフェニル基、mービフェニル基、oービフェニル基、もしくは、1ー又は2ーナフチル基である。

[0229] 前記A r<sup>b1</sup>が表す無置換の環形成原子数5～30の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記L<sup>a2</sup>に関して上記したとおりである。

[0230] 本発明の一態様において、A r<sup>b1</sup>は、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、よ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、さらに好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基であり、よりさらに好ましくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基である。

[0231] 本発明の他の態様において、A r<sup>b1</sup>は、好ましくは下記式(b1)～(b6)のいずれかで表される基であり、より好ましくは下記式(b2)で表される基である。

[0232] [化53]



[0233] 式(b1)中、

\*b8はL<sup>b1</sup>への結合位置である。

R<sup>b101</sup>～R<sup>b105</sup>から選ばれる1つは\*b9に結合する単結合であり、R<sup>b106</sup>～R<sup>b110</sup>から選ばれる1つは\*b10に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>b101</sup>～R<sup>b105</sup>、及びR<sup>b106</sup>～R<sup>b110</sup>は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～10、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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<sup>b101</sup>～R<sup>b105</sup>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<sup>b106</sup>～R<sup>b110</sup>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。

[0234] 前記単結合ではない $R^{b101} \sim R^{b105}$ 、及び $R^{b106} \sim R^{b110}$ が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0235] 前記単結合ではない $R^{b101} \sim R^{b105}$ 、及び $R^{b106} \sim R^{b110}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0236]  $R^{b111} \sim R^{b115}$ 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、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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の複素環基である。

$R^{b111} \sim R^{b115}$ 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。

[0237] 前記 $R^{b111} \sim R^{b115}$ が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0238] 前記 $R^{b111} \sim R^{b115}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0239] 前記 $R^{b111} \sim R^{b115}$ が表す無置換の環形成原子数5～13の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が表す環形成原子数5～12の複素環基に関して上記したとおりである。

[0240] 前記単結合ではない $R^{b101} \sim R^{b105}$ が全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない $R^{b106} \sim R^{b110}$ が全て水素原子であってもよく、 $R^{b111} \sim R^{b115}$ が全て水素原子であってもよい。

[0241] mは0、1又は2であり、nは0又は1である。

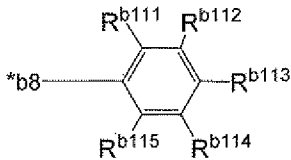
m=0、n=0の場合、\*b10が\*b8を表す。

m=0、n=1の場合、\*b9が\*b8を表す。

m=1、n=0の場合、\*b10が\*b9を表す。

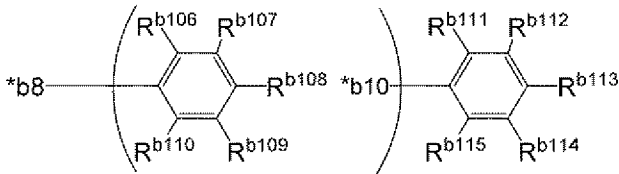
[0242] 本発明の一態様において、mは0、nは0である。この場合、\*b10が\*b8を表し、式(b1)は下記式で表される。

[0243] [化54]



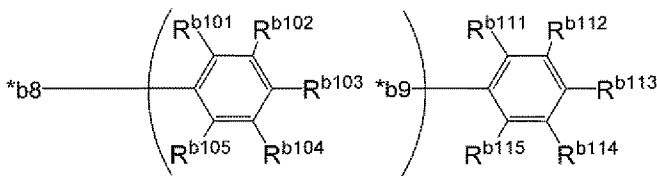
[0244] 本発明の他の態様において、mは0、nは1である。この場合、\*b9が\*b8を表し、式(b1)は下記式で表される。

[0245] [化55]



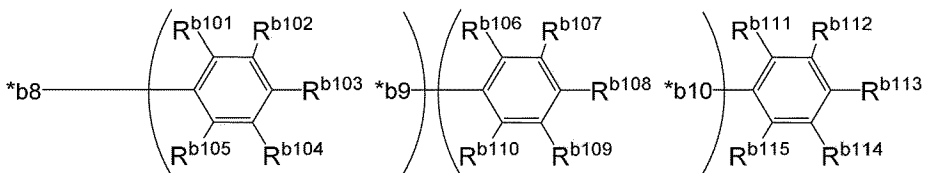
[0246] 本発明の他の態様において、mは1、nは0である。この場合、\*b10が\*b9を表し、式(b1)は下記式で表される。

[0247] [化56]



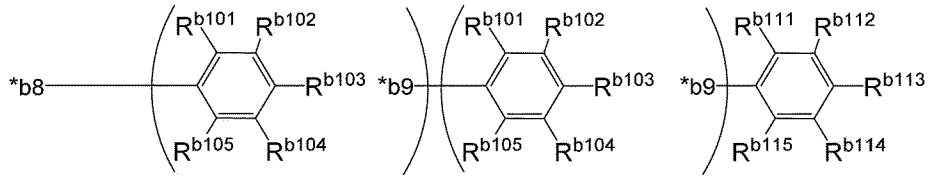
[0248] 本発明の他の態様において、mは1、nは1である。この場合、式(b1)は下記式で表される。

[0249] [化57]



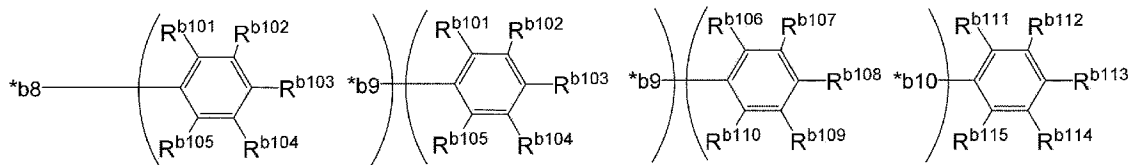
[0250] 本発明の他の態様において、 $m$ は2、 $n$ は0である。この場合、\*b10が\*b9を表し、式(b1)は下記式で表される。

[0251] [化58]



[0252] 本発明の他の態様において、 $m$ は2、 $n$ は1である。この場合、式(b1)は下記式で表される。

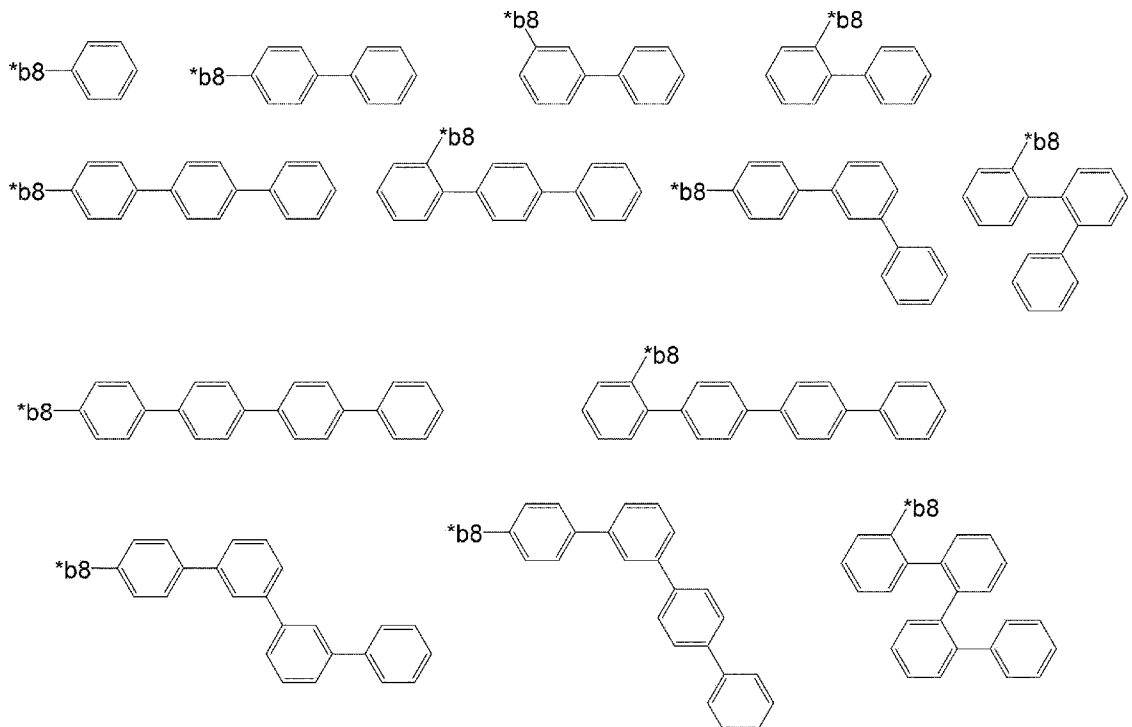
[0253] [化59]



[0254] 式(b1)で表される基は、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。

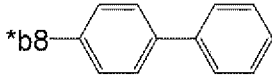
Rは、前記 $R^{b101} \sim R^{b105}$ 及び $R^{b106} \sim R^{b110}$ 、又は $R^{b111} \sim R^{b115}$ と同一である。

[0255] [化60]

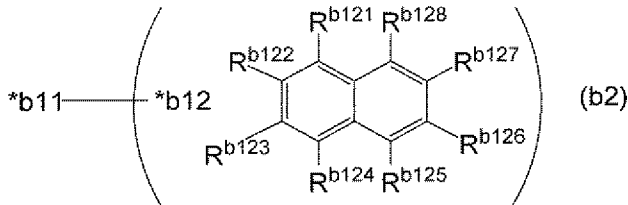


[0256] 式 (b1) で表される基は、より好ましくは下記式で表される。

[0257] [化61]



[0258] [化62]



[0259] 式 (b2) 中、

\*b11 は  $L^{b1}$  への結合位置である。

$R^{b121} \sim R^{b128}$  から選ばれる 1 つは \*b12 に結合する単結合である。

前記単結合ではない  $R^{b121} \sim R^{b128}$  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、好ましくは 1 ~ 6、より好ましくは 1 ~ 3 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。

前記単結合ではない  $R^{b121} \sim R^{b128}$  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。

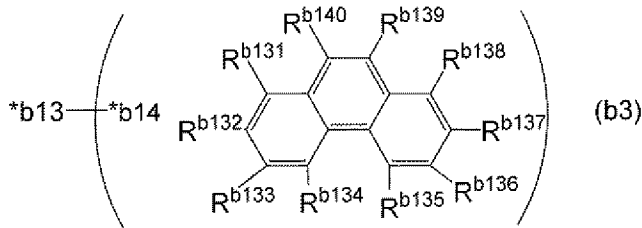
[0260] 前記単結合ではない  $R^{b121} \sim R^{b128}$  が表す無置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a106} \sim R^{a110}$  に関して上記したとおりである。

[0261] 前記単結合ではない  $R^{b121} \sim R^{b128}$  が表す無置換の環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a106} \sim R^{a110}$  に関して上記したとおりである。

[0262] 本発明の一態様において、好ましくは  $R^{b122}$ 、 $R^{b123}$ 、 $R^{b126}$ 、及び  $R^{b127}$  から選ばれる 1 つは \*b12 に結合する単結合である。

[0263] \*b12 に結合する単結合でない  $R^{b121} \sim R^{b128}$  は、全て水素原子であってもよい。

[0264] [化63]



[0265] 式 (b3) 中、

\*b13はL<sup>b1</sup>への結合位置である。

R<sup>b131</sup>～R<sup>b140</sup>から選ばれる1つは\*b14に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>b131</sup>～R<sup>b140</sup>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、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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。

前記単結合ではないR<sup>b131</sup>～R<sup>b140</sup>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。

[0266] 前記単結合ではないR<sup>b131</sup>～R<sup>b140</sup>が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a101</sup>～R<sup>a105</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a106</sup>～R<sup>a110</sup>に関して上記したとおりである。

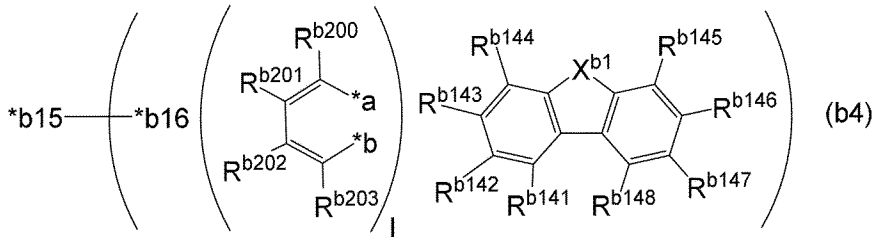
[0267] 前記単結合ではないR<sup>b131</sup>～R<sup>b140</sup>が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a101</sup>～R<sup>a105</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a106</sup>～R<sup>a110</sup>に関して上記したとおりである。

[0268] 本発明の一態様において、好ましくはR<sup>b137</sup>、R<sup>b138</sup>及びR<sup>b139</sup>から選ばれる1つは\*b14に結合する単結合である。

[0269] \*b14に結合する単結合ではないR<sup>b131</sup>～R<sup>b140</sup>は、全て水素原子であってもよい。

[0270]

[化64]



[0271] 式 (b4) 中、

\*b15はL<sup>b1</sup>への結合位置である。X<sup>b1</sup>は酸素原子、硫黄原子、C R<sup>A</sup> R<sup>B</sup>、又はN R<sup>C</sup>である。

R<sup>A</sup>及びR<sup>B</sup>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1～30、好ましくは1～18、より好ましくは1～10、さらに好ましくは1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50、好ましくは3～18、より好ましくは3～10、さらにより好ましくは3～6のシクロアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30、好ましくは6～18、より好ましくは6～12のアリール基であり、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造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。

[0272] 前記R<sup>A</sup>及びR<sup>B</sup>が表す無置換の炭素数1～30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、さらにより好ましくは、メチル基、エチル基、イソプロピル基又はt-ブチル基であり、よりさらに好ましくはメチル基である。

[0273] 前記R<sup>A</sup>及びR<sup>B</sup>が表す無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a21</sup>～R<sup>a25</sup>、及び前記

単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

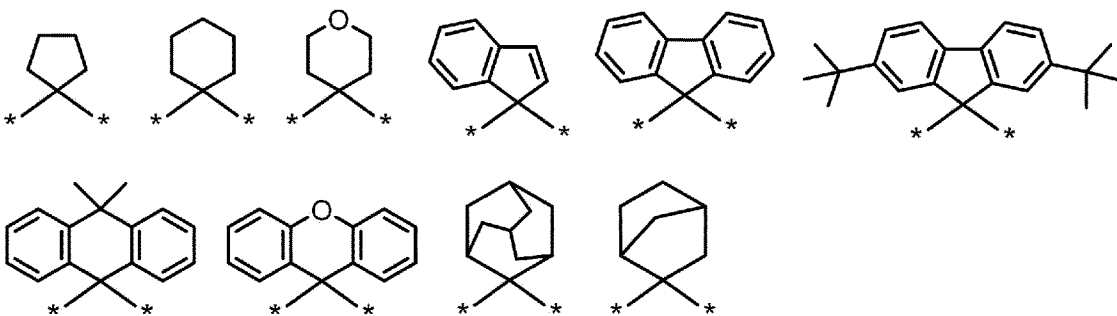
[0274] 前記  $R^A$  及び  $R^B$  が表す無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記  $R^{b1}$  に関して上記したとおりである。

[0275] 前記  $R^A$  及び  $R^B$  によって形成される無置換の単環は、例えば、ベンゼン環、シクロペンタン環、シクロヘキサン環である。

前記  $R^A$  及び  $R^B$  によって形成される無置換の縮合環は、例えば、ナフタレン環、アントラセン環である。

また、 $R^A$  及び  $R^B$  が、互いに結合して無置換の単環又は無置換の縮合環を形成する場合、 $R^A$  及び  $R^B$  は、これらが結合しているフルオレン骨格とともに環形成し、スピロ環を形成してもよい。前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。

[0276] [化65]



[0277]  $R^C$  は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～30、好ましくは 1～18、より好ましくは 1～10、さらに好ましくは 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30、好ましくは 6～18、より好ましくは 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 5～30、好ましくは 5～18、より好ましくは 5～13 の複素環基である。

[0278] 前記  $R^C$  が表す無置換の炭素数 1～30 のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記  $R^A$  及び  $R^B$  に関して上記した通りである。

[0279] 前記  $R^C$  が表す無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基の詳細及びその

好ましい例は、前記  $R^{b1}$  に関して上記したとおりである。

[0280] 前記  $R^c$  が表す無置換の環形成炭素数 5 ~ 30 の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記  $L^{a2}$  に関して上記したとおりである。

[0281]  $l$  は 0 又は 1 である。

$l$  が 0 のとき、 $R^A$ 、 $R^B$ 、 $R^C$ 、及び  $R^{b141} \sim R^{b148}$  から選ばれる 1 つは \*b16 に結合する単結合であるか、又は、 $R^A$  もしくは  $R^B$  が表し得る置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、 $R^A$  もしくは  $R^B$  が互いに結合して形成し得る置換もしくは無置換の環構造、又は  $R^C$  が表し得る置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基が、単結合を介して \*b16 に結合する。

$l$  が 1 のとき、 $R^{b141}$  と  $R^{b142}$ 、 $R^{b142}$  と  $R^{b143}$ 、又は  $R^{b143}$  と  $R^{b144}$  の一方が \*a に結合する単結合、他方が \*b に結合する単結合であり、\*a 及び \*b に結合する単結合ではない  $R^{b141} \sim R^{b144}$ 、 $R^{b145} \sim R^{b148}$ 、 $R^A$ 、 $R^B$ 、 $R^C$ 、及び  $R^{b200} \sim R^{b203}$  から選ばれる 1 つは \*b16 に結合する単結合であるか、又は、 $R^A$  もしくは  $R^B$  が表し得る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  $R^A$  もしくは  $R^B$  が互いに結合して形成し得る置換もしくは無置換の環構造、又は  $R^C$  が表し得る置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基が、単結合を介して \*b16 に結合する。

前記単結合ではない  $R^{b141} \sim R^{b148}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{b200} \sim R^{b203}$  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 の複素環基である。

前記単結合ではない  $R^{b141} \sim R^{b148}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{b200} \sim R^{b203}$  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。

[0282] 前記単結合ではない  $R^{b141} \sim R^{b148}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{b200} \sim R^{b203}$  が表す無置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a10}$

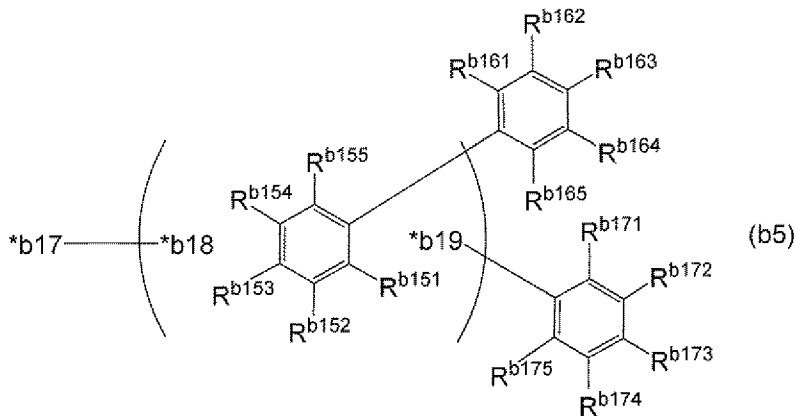
6～R<sup>a110</sup>に関して上記したとおりである。

[0283] 前記単結合ではないR<sup>b141</sup>～R<sup>b148</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>b200</sup>～R<sup>b203</sup>が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a101</sup>～R<sup>a105</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a106</sup>～R<sup>a110</sup>に関して上記したとおりである。

[0284] 前記単結合ではないR<sup>b141</sup>～R<sup>b148</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>b200</sup>～R<sup>b203</sup>が表す無置換の環形成原子数5～13の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a101</sup>～R<sup>a105</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a106</sup>～R<sup>a110</sup>が表す環形成原子数5～12の複素環基に関して上記したとおりである。

[0285] 前記単結合ではないR<sup>b141</sup>～R<sup>b148</sup>は、全て水素原子であってもよく、前記単結合ではないR<sup>b200</sup>～R<sup>b203</sup>は、全て水素原子であってもよい。

[0286] [化66]



[0287] 式 (b5) 中、

\*b17はL<sup>b1</sup>への結合位置である。

R<sup>b151</sup>～R<sup>b155</sup>から選ばれる1つは\*b18に結合する単結合であり、R<sup>b151</sup>～R<sup>b155</sup>から選ばれる他の1つは\*b19に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>b151</sup>～R<sup>b155</sup>は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～10、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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<sup>b151</sup>～R<sup>b155</sup>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。

[0288] 前記単結合ではない $R^{b151} \sim R^{b155}$ が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0289]  $R^{b161} \sim R^{b165}$ 及び $R^{b171} \sim R^{b175}$ は、それぞれ独立して、水素原子又は無置換の炭素数1～10、好ましくは1～6、より好ましくは1～3のアルキル基である。

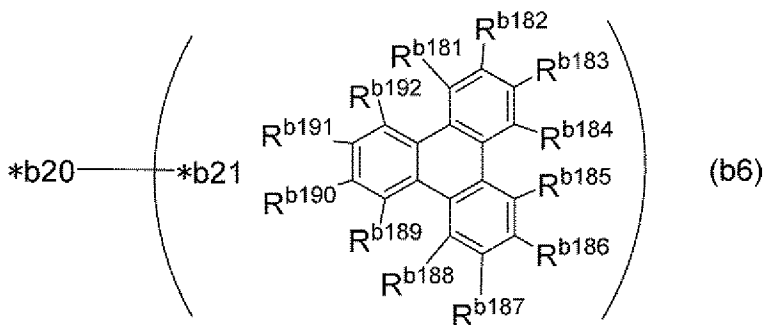
$R^{b161} \sim R^{b165}$ から選ばれる少なくとも1つの隣接する2つは、互いに結合して、1又は複数の無置換のベンゼン環を形成してもよいし、互いに結合せず環を形成しなくてもよい。

$R^{b171} \sim R^{b175}$ 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。

[0290] 前記 $R^{b161} \sim R^{b165}$ 及び $R^{b171} \sim R^{b175}$ が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0291] 前記単結合ではない $R^{b151} \sim R^{b155}$ が全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない $R^{b161} \sim R^{b165}$ が全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない $R^{b171} \sim R^{b175}$ が全て水素原子であってもよい。

[0292] [化67]



[0293] 式(b6)中、

\*b20は $L^{b1}$ への結合位置である。

$R^{b181} \sim R^{b192}$ から選ばれる1つは\* $b21$ に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{b181} \sim R^{b192}$ 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、好ましくは1~6、より好ましくは1~3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。

前記単結合ではない $R^{b181} \sim R^{b192}$ 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。

[0294] 前記単結合ではない $R^{b181} \sim R^{b192}$ が表す無置換の炭素数1~10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0295] 前記単結合ではない $R^{b181} \sim R^{b192}$ が表す無置換の環形成炭素数6~12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0296] 前記単結合ではない $R^{b181} \sim R^{b192}$ が全て水素原子であってもよい。

[0297]  $R^{b1} \sim R^{b4}$ は、水素原子である。

$R^{b11} \sim R^{b17}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50、好ましくは1~20、より好ましくは1~6のアルキル基であり、

前記 $R^{b11} \sim R^{b17}$ 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。

環Cと環Dは架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

[0298] 前記 $R^{b11} \sim R^{b17}$ が表す無置換の炭素数1~50のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0299] 前記 $R^{b11} \sim R^{b17}$ が、全て水素原子であってもよい。

[0300] 環Cと環Dが架橋して形成される環構造としては、例えば、ジベンゾフラン構造、ジベンゾチオフエン構造、カルバゾール構造、又はフルオランテン

構造であり、好ましくはジベンゾフラン構造である。

[0301]  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数 1～50、好ましくは 1～20、より好ましくは 1～6 のアルキル基、無置換の炭素数 2～50、好ましくは 2～20、より好ましくは 2～6 のアルケニル基、無置換の炭素数 2～50、好ましくは 2～20、より好ましくは 2～6 のアルキニル基、無置換の環形成炭素数 3～50、好ましくは 3～20、より好ましくは 3～6 のシクロアルキル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、 $-O-(R_{904})$ 、 $-S-(R_{905})$ 、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、好ましくは 6～30、より好ましくは 6～18 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5～50、好ましくは 5～30、より好ましくは 5～18 の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{905}$  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、好ましくは 1～20、より好ましくは 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50、好ましくは 3～20、より好ましくは 3～6 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、好ましくは 6～30、より好ましくは 6～18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50、好ましくは 5～30、より好ましくは 5～18 の複素環基であり、

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

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

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

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

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

- [0302] 前記  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  が表す無置換の炭素数 1～50 のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。
- [0303] 前記  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  が表す無置換の炭素数 2～50 アルケニル基の詳細は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。
- [0304] 前記  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  が表す無置換の 2～50 のアルキニル基の詳細は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。
- [0305] 前記  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  が表す無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。
- [0306] 前記  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  が表すハロゲン原子の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。
- [0307] 前記  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  が表す無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。
- [0308] 前記  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  が表す無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。
- [0309] 前記  $R_{901} \sim R_{905}$  が表す無置換の炭素数 1～50 のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。
- [0310] 前記  $R_{901} \sim R_{905}$  が表す無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前

記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

[0311] 前記  $R_{901} \sim R_{905}$  が表す無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

[0312] 前記  $R_{901} \sim R_{905}$  が表す無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

[0313] 前記  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  は、それぞれ独立して、好ましくは水素原子、無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基である。

[0314] 前記単結合ではない  $R^{b21} \sim R^{b24}$  が、全て水素原子であってもよく、 $R^{b31} \sim R^{b38}$  が、全て水素原子であってもよい。

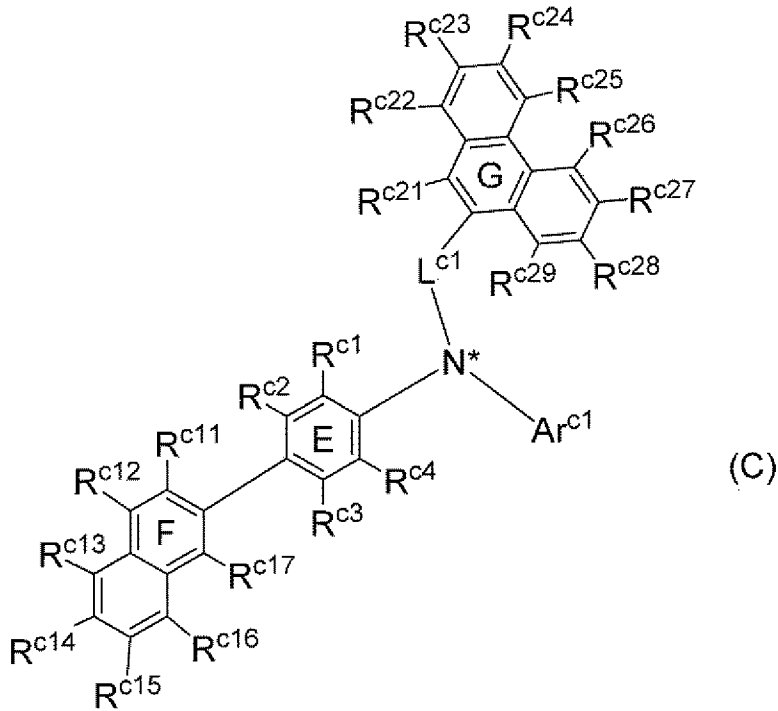
[0315] 前記式 (B) で表される化合物は、少なくとも 1 つの重水素原子を含んでもよい。

前記式 (B) で表される化合物が、重水素原子を含む場合、 $R^{b1} \sim R^{b4}$  から選ばれる少なくとも 1 つは重水素原子であり、 $L^{b1}$  は少なくとも 1 つの重水素原子を有してもよく、 $R^{b1} \sim R^{b4}$  は全て重水素原子であり、 $L^{b1}$  が式 (iv) で表される基であり、 $R^{b41} \sim R^{b45}$  が全て重水素原子であってもよい。

[0316] 本発明の第 3 の化合物 (発明化合物 (C)) は下記式 (C) で表される。

[0317]

[化68]

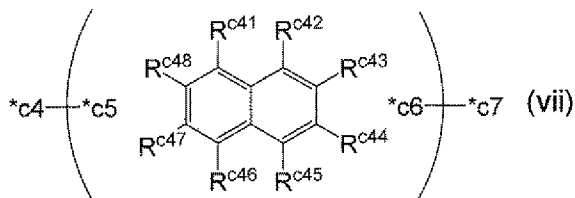
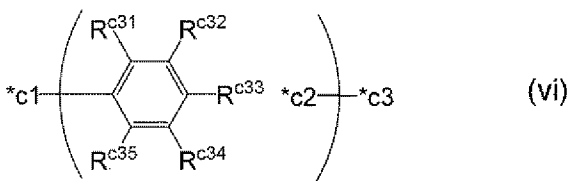


[0318] 式 (C) 中、

N\*は中心窒素原子である。

L<sup>c1</sup>は、単結合、下記式 (v i) 又は (v i i) で表される基である。

[0319] [化69]



[0320] 式 (v i) 及び (v i i) 中、

R<sup>c31</sup> ~ R<sup>c35</sup>から選ばれる1つは\*c2に結合する単結合であり、

R<sup>c41</sup> ~ R<sup>c48</sup>から選ばれる1つは\*c5に結合する単結合であり、R<sup>c41</sup> ~ R<sup>c48</sup>から選ばれる他の1つは\*c6に結合する単結合である。

[0321] 本発明の一態様において、好ましくはR<sup>c33</sup>が\*c2に結合する単結合であ

る。

[0322] 前記単結合ではない  $R^{c31} \sim R^{c35}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{c41} \sim R^{c48}$  は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数 1～50、好ましくは 1～20、より好ましくは 1～6 のアルキル基、無置換の炭素数 2～50、好ましくは 2～20、より好ましくは 2～6 のアルケニル基、無置換の炭素数 2～50、好ましくは 2～20、より好ましくは 2～6 のアルキニル基、無置換の環形成炭素数 3～50、好ましくは 3～20、より好ましくは 3～6 のシクロアルキル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、 $-O-(R_{904})$ 、 $-S-(R_{905})$ 、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、好ましくは 6～30、より好ましくは 6～18 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5～50、好ましくは 5～30、より好ましくは 5～18 の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{905}$  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、好ましくは 1～20、より好ましくは 1～6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50、好ましくは 3～20、より好ましくは 3～6 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、好ましくは 6～30、より好ましくは 6～18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50、好ましくは 5～30、より好ましくは 5～18 の複素環基であり、

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

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

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

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

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

又は異なる。

\*c 1、及び\*c 4は、中心窒素原子N\*への結合位置を表し、

\*c 3、及び\*c 7は、環Gへの結合位置を表す。

前記単結合ではないR<sup>c31</sup>~R<sup>c35</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>c41</sup>~R<sup>c48</sup>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。

[0323] 前記単結合ではないR<sup>c31</sup>~R<sup>c35</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>c41</sup>~R<sup>c48</sup>が表す無置換の炭素数1~50のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a21</sup>~R<sup>a25</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a31</sup>~R<sup>a38</sup>に関して上記したとおりである。

[0324] 前記単結合ではないR<sup>c31</sup>~R<sup>c35</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>c41</sup>~R<sup>c48</sup>が表す無置換の炭素数2~50アルケニル基の詳細は、前記単結合ではないR<sup>a21</sup>~R<sup>a25</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a31</sup>~R<sup>a38</sup>に関して上記したとおりである。

[0325] 前記単結合ではないR<sup>c31</sup>~R<sup>c35</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>c41</sup>~R<sup>c48</sup>が表す無置換の2~50のアルキニル基の詳細は、前記単結合ではないR<sup>a21</sup>~R<sup>a25</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a31</sup>~R<sup>a38</sup>に関して上記したとおりである。

[0326] 前記単結合ではないR<sup>c31</sup>~R<sup>c35</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>c41</sup>~R<sup>c48</sup>が表す無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a21</sup>~R<sup>a25</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a31</sup>~R<sup>a38</sup>に関して上記したとおりである。

[0327] 前記単結合ではないR<sup>c31</sup>~R<sup>c35</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>c41</sup>~R<sup>c48</sup>が表すハロゲン原子の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a21</sup>~R<sup>a25</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a31</sup>~R<sup>a38</sup>に関して上記したとおりである。

[0328] 前記単結合ではないR<sup>c31</sup>~R<sup>c35</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>c41</sup>~R<sup>c48</sup>が表す無置換の環形成炭素数6~50のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a21</sup>~R<sup>a25</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a31</sup>~

$R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0329] 前記単結合ではない $R^{c31} \sim R^{c35}$ 、及び前記単結合ではない $R^{c41} \sim R^{c48}$ が表す無置換の環形成原子数5～50の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0330] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の炭素数1～50のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0331] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0332] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成炭素数6～50のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0333] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成原子数5～50の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0334] 前記単結合ではない $R^{c31} \sim R^{c35}$ 、及び前記単結合ではない $R^{c41} \sim R^{c48}$ は、それぞれ独立して、好ましくは水素原子、無置換の炭素数1～50のアルキル基、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

[0335] 前記単結合ではない $R^{c31} \sim R^{c35}$ が、全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない $R^{c41} \sim R^{c48}$ が、全て水素原子であってもよい。

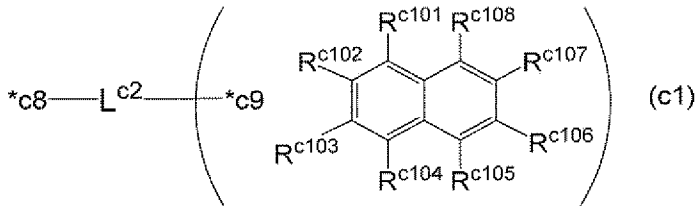
[0336] 本発明の一態様において、 $L^{o1}$ は、単結合であることが好ましい。

本発明の他の態様において、 $L^{o1}$ は、前記式(v i)で表される基であることが好ましい。

[0337]  $A r^{o1}$ は、下記式(c 1)又は(c 2)で表される基である。

[0338]

[化70]



[0339] 式(c1)中、

\*c8は、中心窒素原子N\*への結合位置を表す。

L<sup>c2</sup>は、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のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30、好ましくは5～18、より好ましくは5～12の2価の複素環基である。

[0340] 前記L<sup>c2</sup>が表す無置換の環形成炭素6～30のアリーレン基の詳細及びその好ましい例は、前記L<sup>a2</sup>に関して上記したとおりである。

[0341] 前記L<sup>c2</sup>が表す無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記L<sup>a2</sup>に関して上記したとおりである。

[0342] L<sup>c2</sup>は、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、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のアリーレン基、さらに好ましくは置換もしくは無置換のフェニレン基、よりさらに好ましくは置換もしくは無置換のp-フェニレン基、よりさらに好ましくは無置換のp-フェニレン基である。

[0343] R<sup>c101</sup>～R<sup>c108</sup>から選ばれる1つは\*c9に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>c101</sup>～R<sup>c108</sup>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、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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の複素環基である。

前記単結合ではないR<sup>c101</sup>～R<sup>c108</sup>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。

ただし、L<sup>c2</sup>が置換もしくは無置換のフェニレン基であり、R<sup>c101</sup>、R<sup>c1</sup>

04、 $R^{c105}$ 及び $R^{c108}$ から選ばれる1つが $*c9$ に結合する単結合であるとき、 $L^{c2}$ が表す前記置換もしくは無置換のフェニレン基は、置換もしくは無置換の $o$ -フェニレン基、又は置換もしくは無置換の $m$ -フェニレン基である。

[0344] 本発明の一態様において、 $R^{c102}$ 、 $R^{c103}$ 、 $R^{c106}$ 、及び $R^{c107}$ から選ばれる1つは $*c9$ に結合する単結合であることが好ましい。

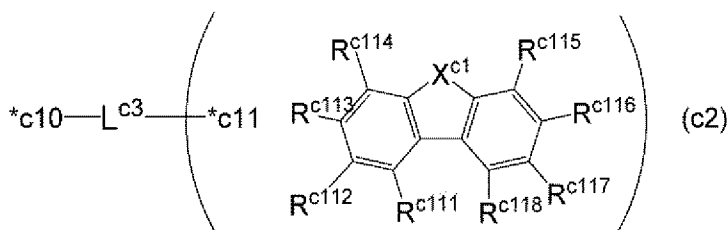
[0345] 前記単結合ではない $R^{c101}$ ～ $R^{c108}$ が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101}$ ～ $R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106}$ ～ $R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0346] 前記単結合ではない $R^{c101}$ ～ $R^{c108}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101}$ ～ $R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106}$ ～ $R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0347] 前記単結合ではない $R^{c101}$ ～ $R^{c108}$ が表す無置換の環形成原子数5～13の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101}$ ～ $R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106}$ ～ $R^{a110}$ が表す環形成原子数5～12の複素環基に関して上記したとおりである。

[0348] 前記単結合ではない $R^{c101}$ ～ $R^{c108}$ が全て水素原子であってもよい。

[0349] [化71]



[0350] 式(c2)中、

$*c10$ は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表す。

$L^{c3}$ は、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のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30、好ましくは5～18、より好ましくは5～12の2価

の複素環基である。

- [0351] 前記L<sup>c3</sup>が表す無置換の環形成炭素6～30のアリーレン基の詳細及びその好ましい例は、前記L<sup>a2</sup>に関して上記したとおりである。
- [0352] 前記L<sup>c3</sup>が表す無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記L<sup>a2</sup>に関して上記したとおりである。
- [0353] L<sup>c3</sup>は、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、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のアリーレン基、さらに好ましくは置換もしくは無置換のフェニレン基、よりさらに好ましくは置換もしくは無置換のp-フェニレン基、よりさらに好ましくは無置換のp-フェニレン基である。
- [0354] Ar<sup>c1</sup>は、好ましくは前記式(c1)で表される基である。
- [0355] X<sup>c1</sup>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。
- [0356] R<sup>c111</sup>～R<sup>c118</sup>から選ばれる1つは\*c11に結合する単結合である。  
前記単結合ではないR<sup>c111</sup>～R<sup>c118</sup>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、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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の複素環基である。  
前記単結合ではないR<sup>c111</sup>～R<sup>c118</sup>から選ばれる隣接する2つは、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環構造を形成しなくてもよい。
- [0357] 前記単結合ではないR<sup>c111</sup>～R<sup>c118</sup>が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a101</sup>～R<sup>a105</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a106</sup>～R<sup>a110</sup>に関して上記したとおりである。
- [0358] 前記単結合ではないR<sup>c111</sup>～R<sup>c118</sup>が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではないR<sup>a101</sup>～R<sup>a105</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a106</sup>～R<sup>a110</sup>に関して上記したとおりである。
- [0359] 前記単結合ではないR<sup>c111</sup>～R<sup>c118</sup>が表す無置換の環形成原子数5～13

の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が表す環形成原子数5～12の複素環基に関して上記したとおりである。

[0360] 前記単結合ではない $R^{c111} \sim R^{c118}$ が全て水素原子であってもよい。

[0361]  $R^{c1} \sim R^{c4}$ は、水素原子である。

$R^{c11} \sim R^{c17}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50、好ましくは1～20、より好ましくは1～6のアルキル基であり、

前記 $R^{c11} \sim R^{c17}$ 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。

環Eと環Fは架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

[0362] 前記 $R^{c11} \sim R^{c17}$ が表す無置換の炭素数1～50のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0363] 前記 $R^{c11} \sim R^{c17}$ が、全て水素原子であってもよい。

[0364] 環Eと環Fが架橋して形成される環構造としては、例えば、ジベンゾフラン構造、ジベンゾチオフエン構造、カルバゾール構造、又はフルオランテン構造であり、好ましくはジベンゾフラン構造である。

[0365]  $R^{c21}$ は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフエニル基である。

[0366]  $R^{c21}$ は、好ましくは置換もしくは無置換のフェニル基、より好ましくは無置換のフェニル基である。

[0367]  $R^{c22} \sim R^{c29}$ 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、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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の複素環基である。

[0368] 前記 $R^{c22} \sim R^{c29}$ が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及び

その好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0369] 前記 $R^{c22} \sim R^{c29}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0370] 前記 $R^{c22} \sim R^{c29}$ が表す無置換の環形成原子数5～13の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が表す環形成原子数5～12の複素環基に関して上記したとおりである。

[0371] 前記 $R^{c22} \sim R^{c29}$ が全て水素原子であってもよい。

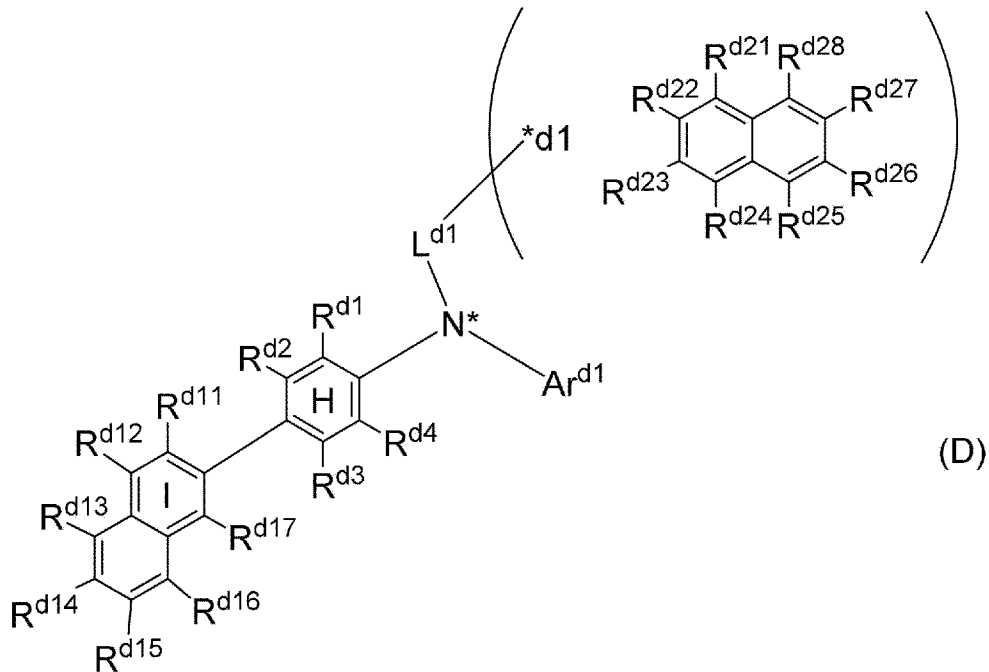
[0372] 前記式(C)で表される化合物は、少なくとも1つの重水素原子を含んでもよい。

前記式(C)で表される化合物が、重水素原子を含む場合、 $R^{c1} \sim R^{c4}$ から選ばれる少なくとも1つは重水素原子であり、 $Ar^{c1}$ は前記式(c1)で表される基であり、 $L^{c2}$ は少なくとも1つの重水素原子を有してもよく、 $R^{c1} \sim R^{c4}$ は全て重水素原子であり、 $Ar^{c1}$ は前記式(c1)で表される基であり、 $L^{c2}$ は無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基であり、該 $L^{c2}$ が表す無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基が有する水素原子が、全て重水素原子であってもよい。

[0373] 本発明の第4の化合物(発明化合物(D))は下記式(D)で表される。

[0374]

[化72]

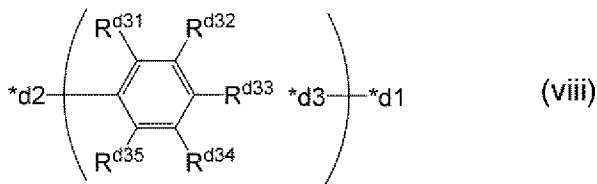


[0375] 式 (D) 中、

N\*は中心窒素原子である。

L<sup>d1</sup>は、下記式 (viii) で表される基である。

[0376] [化73]



[0377] 式 (viii) 中、

R<sup>d31</sup>及びR<sup>d35</sup>から選ばれる1つは\*d3に結合する単結合である。

[0378] 前記単結合ではないR<sup>d31</sup>~R<sup>d35</sup>は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1~50、好ましくは1~20、より好ましくは1~6のアルキル基、無置換の炭素数2~50、好ましくは2~20、より好ましくは2~6のアルケニル基、無置換の炭素数2~50、好ましくは2~20、より好ましくは2~6のアルキニル基、無置換の環形成炭素数3~50、好ましくは3~20、より好ましくは3~6のシクロアルキル基、-Si(R<sub>901</sub>)(R<sub>902</sub>)(R<sub>903</sub>)、-O-(R<sub>904</sub>)、-S-(R<sub>905</sub>)、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、好ましくは6～30、より好ましくは6～18のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～18の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{905}$ 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、好ましくは1～20、より好ましくは1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50、好ましくは3～20、より好ましくは3～6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、好ましくは6～30、より好ましくは6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～18の複素環基であり、

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

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

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

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

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

\* d 2 は、中心窒素原子N\*への結合位置を表し、

\* d 1 は、 $R^{d21} \sim R^{d28}$ から選ばれる1つに結合する。

前記単結合ではない $R^{d31} \sim R^{d35}$ 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。

[0379] 前記単結合ではない $R^{d31} \sim R^{d35}$ が表す無置換の炭素数1～50のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0380] 前記単結合ではない $R^{d31} \sim R^{d35}$ が表す無置換の炭素数2～50アルケニ

ル基の詳細は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0381] 前記単結合ではない $R^{d31} \sim R^{d35}$ が表す無置換の2～50のアルキニル基の詳細は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0382] 前記単結合ではない $R^{d31} \sim R^{d35}$ が表す無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0383] 前記単結合ではない $R^{d31} \sim R^{d35}$ が表すハロゲン原子の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0384] 前記単結合ではない $R^{d31} \sim R^{d35}$ が表す無置換の環形成炭素数6～50のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0385] 前記単結合ではない $R^{d31} \sim R^{d35}$ が表す無置換の環形成原子数5～50の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0386] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の炭素数1～50のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0387] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0388] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成炭素数6～50のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ に関して上記したとおりである。

[0389] 前記 $R_{901} \sim R_{905}$ が表す無置換の環形成原子数5～50の複素環基の詳細

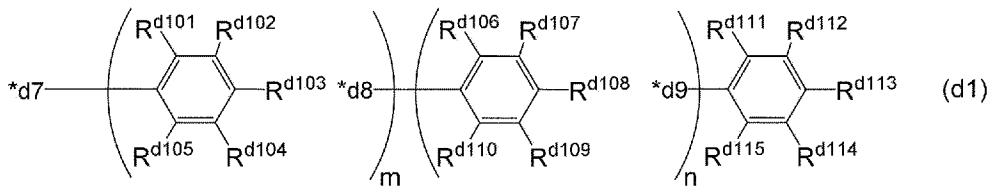
及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

[0390] 前記単結合ではない  $R^{d31} \sim R^{d35}$  は、それぞれ独立して、好ましくは水素原子、無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基である。

[0391] 前記単結合ではない  $R^{d31} \sim R^{d35}$  が、全て水素原子であってもよい。

[0392]  $A r^{d1}$  は、下記式 (d1)～(d3) のいずれかで表される基であり、好ましくは下記式 (d2) で表される基である。

[0393] [化74]



[0394] 式 (d1) 中、

\*d7 は、中心窒素原子  $N^*$  への結合位置を表す。

$R^{d101} \sim R^{d105}$  から選ばれる 1 つは \*d8 に結合する単結合であり、 $R^{d106} \sim R^{d110}$  から選ばれる 1 つは \*d9 に結合する単結合である。

前記単結合ではない  $R^{d101} \sim R^{d105}$ 、及び  $R^{d106} \sim R^{d110}$  は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数 1～10、好ましくは 1～6、より好ましくは 1～3 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  $R^{d101} \sim R^{d105}$  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  $R^{d106} \sim R^{d110}$  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。

[0395] 前記単結合ではない  $R^{d101} \sim R^{d105}$ 、及び  $R^{d106} \sim R^{d110}$  が表す無置換の炭素数 1～10 のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a106} \sim R^{a110}$  に関して上記したとおりである。

[0396] 前記単結合ではない $R^{d101} \sim R^{d105}$ 、及び $R^{d106} \sim R^{d110}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0397]  $R^{d111} \sim R^{d115}$ 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、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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の複素環基である。

$R^{d111} \sim R^{d115}$ 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。

[0398] 前記 $R^{d111} \sim R^{d115}$ が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0399] 前記 $R^{d111} \sim R^{d115}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0400] 前記 $R^{d111} \sim R^{d115}$ が表す無置換の環形成原子数5～13の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が表す環形成原子数5～12の複素環基に関して上記したとおりである。

[0401] 前記単結合ではない $R^{d101} \sim R^{d105}$ が全て水素原子であってもよく、前記単結合ではない $R^{d106} \sim R^{d110}$ が全て水素原子であってもよく、 $R^{d111} \sim R^{d115}$ が全て水素原子であってもよい。

[0402]  $m$ は0又は1であり、 $n$ は0又は1である。

$m=0$ 、 $n=0$ の場合、\*d9が\*d7を表し、

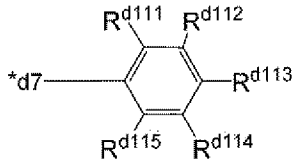
$m=0$ 、 $n=1$ の場合、\*d8が\*d7を表し、

$m=1$ 、 $n=0$ の場合、\*d9が\*d8を表す。

[0403] 本発明の一態様において、 $m$ は0、 $n$ は0である。この場合、\*d9が\*

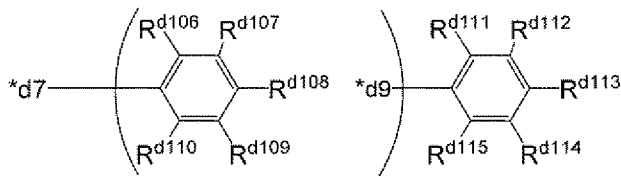
d 7 を表し、式 ( d 1 ) は下記式で表される。

[0404] [化75]



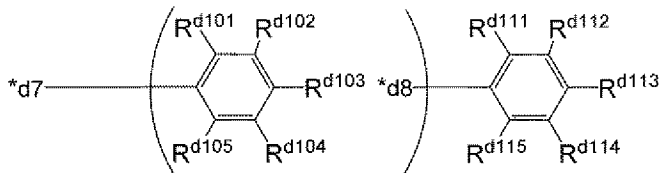
[0405] 本発明の他の態様において、mは0、nは1である。この場合、\*d8が\*d7を表し、式 ( d 1 ) は下記式で表される。

[0406] [化76]



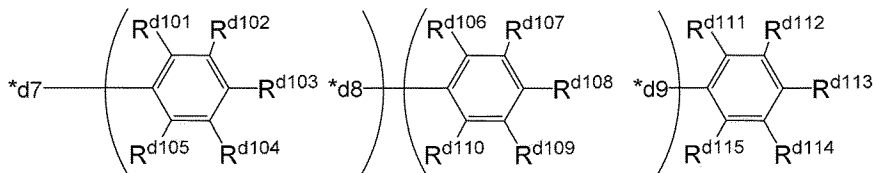
[0407] 本発明の他の態様において、mは1、nは0である。この場合、\*d9が\*d8を表し、式 ( d 1 ) は下記式で表される。

[0408] [化77]



[0409] 本発明の他の態様において、mは1、nは1である。この場合、式 ( d 1 ) は下記式で表される。

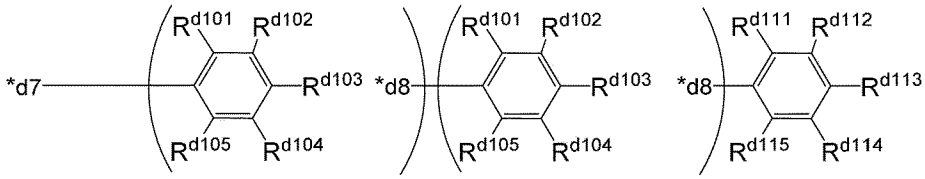
[0410] [化78]



[0411] 本発明の他の態様において、mは2、nは0である。この場合、\*d9が\*d8を表し、式 ( d 1 ) は下記式で表される。

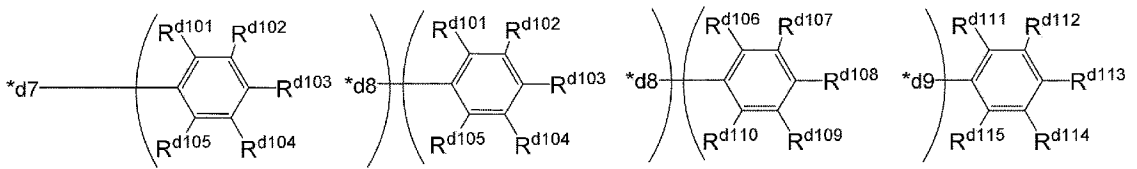
[0412]

[化79]



[0413] 本発明の他の態様において、mは2、nは1である。この場合、式(d1)は下記式で表される。

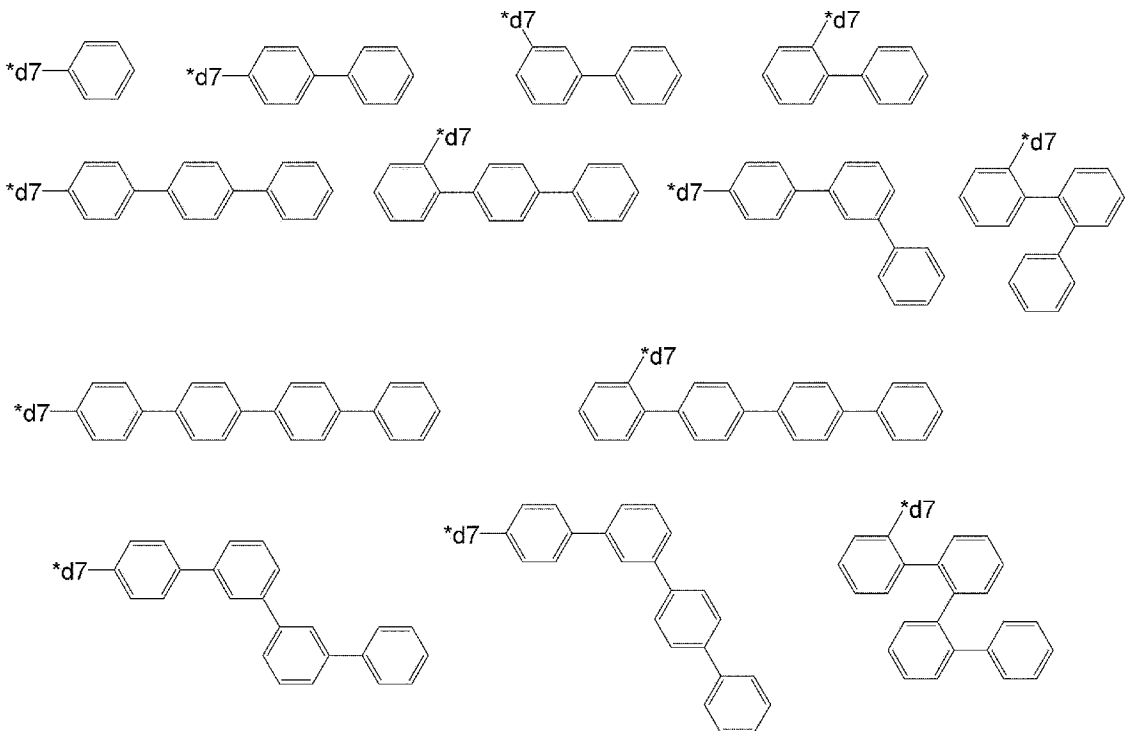
[0414] [化80]



[0415] 式(d1)で表される基は、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。

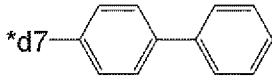
Rは、前記R<sup>d101</sup>~R<sup>d105</sup>及びR<sup>d106</sup>~R<sup>d110</sup>、又はR<sup>d111</sup>~R<sup>d115</sup>と同一である。

[0416] [化81]

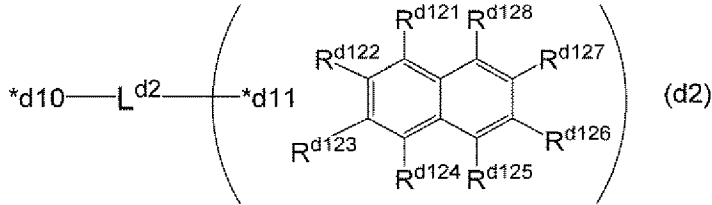


[0417] 式(d1)で表される基は、より好ましくは下記式で表される。

[0418] [化82]



[0419] [化83]



[0420] 式 (d2) 中、

\*d10は、中心窒素原子N\*への結合位置を表す。

L<sup>d2</sup>は、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のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30、好ましくは5～18、より好ましくは5～12の2価の複素環基である。

[0421] 前記L<sup>d2</sup>が表す無置換の環形成炭素6～30のアリーレン基の詳細及びその好ましい例は、前記L<sup>a2</sup>に関して上記したとおりである。

[0422] 前記L<sup>d2</sup>が表す無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記L<sup>a2</sup>に関して上記したとおりである。

[0423] L<sup>d2</sup>は、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、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のアリーレン基、さらに好ましくは置換もしくは無置換のフェニレン基、よりさらに好ましくは置換もしくは無置換のp-フェニレン基、よりさらに好ましくは無置換のp-フェニレン基である。

[0424] 前記単結合ではないR<sup>d121</sup>～R<sup>d128</sup>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、好ましくは1～6、より好ましくは1～3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。

前記単結合ではないR<sup>d121</sup>～R<sup>d128</sup>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。

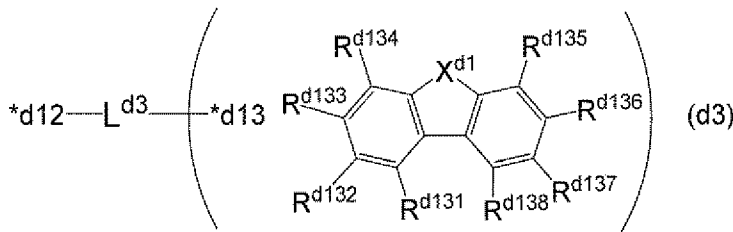
[0425] 前記単結合ではない $R^{d121} \sim R^{d128}$ が表す無置換の炭素数1～10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0426] 前記単結合ではない $R^{d121} \sim R^{d128}$ が表す無置換の環形成炭素数6～12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0427] 本発明の一態様において、好ましくは $R^{d122}$ 、 $R^{d123}$ 、 $R^{d126}$ 、及び $R^{d127}$ から選ばれる1つは\* $b12$ に結合する単結合である。

[0428] \* $d11$ に結合する単結合でない $R^{d121} \sim R^{d128}$ は、全て水素原子であってもよい。

[0429] [化84]



[0430] 式(d3)中、

\* $d12$ は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表す。

$L^{d3}$ は、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のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30、好ましくは5～18、より好ましくは5～12の2価の複素環基である。

[0431] 前記 $L^{d3}$ が表す無置換の環形成炭素6～30のアリーレン基の詳細及びその好ましい例は、前記 $L^{a2}$ に関して上記したとおりである。

[0432] 前記 $L^{d3}$ が表す無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記 $L^{a2}$ に関して上記したとおりである。

[0433]  $L^{d3}$ は、好ましくは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、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

ーレン基、さらに好ましくは置換もしくは無置換のフェニレン基、よりさらに好ましくは置換もしくは無置換のp-フェニレン基、よりさらに好ましくは無置換のp-フェニレン基である。

[0434]  $X^{d1}$ 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。

[0435]  $R^{d131} \sim R^{d138}$ から選ばれる1つは\* c 1 1に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{d131} \sim R^{d138}$ 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、好ましくは1~6、より好ましくは1~3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の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{d131} \sim R^{d138}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環構造を形成しなくてもよい。

[0436] 前記単結合ではない $R^{d131} \sim R^{d138}$ が表す無置換の炭素数1~10のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0437] 前記単結合ではない $R^{d131} \sim R^{d138}$ が表す無置換の環形成炭素数6~12のアリール基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ に関して上記したとおりである。

[0438] 前記単結合ではない $R^{d131} \sim R^{d138}$ が表す無置換の環形成原子数5~13の複素環基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない $R^{a101} \sim R^{a105}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a106} \sim R^{a110}$ が表す環形成原子数5~12の複素環基に関して上記したとおりである。

[0439] 前記単結合ではない $R^{d131} \sim R^{d138}$ が全て水素原子であってもよい。

[0440]  $R^{d1} \sim R^{d4}$ は、水素原子である。

$R^{d11} \sim R^{d17}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50、好ましくは1~20、より好ましくは1~6のアルキル基であり、

前記  $R^{d11} \sim R^{d17}$  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。

環 H と環 I は架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

[0441] 前記  $R^{d11} \sim R^{d17}$  が表す無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基の詳細及びその好ましい例は、前記単結合ではない  $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、及び前記単結合ではない  $R^{a31} \sim R^{a38}$  に関して上記したとおりである。

[0442] 前記  $R^{d11} \sim R^{d17}$  が、全て水素原子であってもよい。

[0443] 環 H と環 I が架橋して形成される環構造としては、例えば、ジベンゾフラン構造、ジベンゾチオフエン構造、カルバゾール構造、又はフルオランテン構造であり、好ましくはジベンゾフラン構造である。

[0444] \* d 1 に結合する単結合ではない  $R^{d21} \sim R^{d28}$  は、それぞれ独立して、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 のアリール基であり、

\* d 1 に結合する単結合ではない  $R^{d21} \sim R^{d28}$  から選ばれる少なくとも 1 つは、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 のアリール基である。

[0445] 前記  $R^{d21} \sim R^{d28}$  が表す無置換の環形成炭素数 6 のアリール基としては、例えば、フェニル基である。

[0446] 本発明の一態様において、 $R^{d21}$ 、 $R^{d24}$ 、 $R^{d25}$ 、及び  $R^{d28}$  から選ばれる少なくとも 1 つが、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 のアリール基であることが好ましく、 $R^{d21}$ 、 $R^{d24}$ 、 $R^{d25}$ 、及び  $R^{d28}$  から選ばれる 1 つが、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 のアリール基であることがより好ましい。

[0447] 前記式 (D) で表される化合物は、少なくとも 1 つの重水素原子を含んでもよい。

前記式 (D) で表される化合物が、重水素原子を含む場合、 $R^{d1} \sim R^{d4}$  から選ばれる少なくとも 1 つは重水素原子であってもよく、 $A r^{d1}$  は前記式 (d 2) で表される基であり、 $L^{d2}$  は少なくとも 1 つの重水素原子を有してもよく、 $R^{d1} \sim R^{d4}$  は全て重水素原子であり、 $A r^{d1}$  は前記式 (d 2) で表される基であり、 $L^{d2}$  は無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基であり

、該 $L^{d2}$ が表す無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基が有する水素原子が、全て重水素原子であってもよい。

[0448] 上記したように、本明細書において使用する「水素原子」は軽水素原子、重水素原子、及び三重水素原子を包含する。従って、発明化合物は天然由来の重水素原子を含んでいてもよい。

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、発明化合物に重水素原子を意図的に導入してもよい。発明化合物は、式(A)で表される化合物であって、該化合物に含まれる水素原子の少なくとも1つが重水素原子である化合物であってもよく、発明化合物は、式(B)で表される化合物であって、該化合物に含まれる水素原子の少なくとも1つが重水素原子である化合物であってもよく、発明化合物は、式(C)で表される化合物であって、該化合物に含まれる水素原子の少なくとも1つが重水素原子である化合物であってもよく、発明化合物は、式(D)で表される化合物であって、該化合物に含まれる水素原子の少なくとも1つが重水素原子である化合物であってもよい。

[0449] 下記の水素原子から選ばれる少なくとも1つの水素原子が重水素原子であってもよい。なお、以下において“置換もしくは無置換”、炭素数及び原子数は省略した。

式(A)の $L^{a1}$ が表す式(i)～(iii)のいずれかで表される基が有する水素原子；

式(A)の $Ar^{a1}$ が表すフェニル基、ナフチル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾフラニル基、又はナフトベンゾチオフェニル基が有する水素原子；

式(A)の $Ar^{a2}$ が表す式(a1)～(a3)のいずれかで表される基が有する水素原子；

式(A)の $R^{a1} \sim R^{a4}$ のいずれかが表わす水素原子；

式(A)の $R^{a11} \sim R^{a17}$ のいずれかが表わす水素原子；

式(A)の $R^{a11} \sim R^{a17}$ のいずれかがアルキル基であるとき、該アルキル

基が有する水素原子；

式 (A) の環 A と環 B が架橋して形成される環構造が有する水素原子；

式 (B) の  $L^{b1}$  が表す式 (i v) 又は (v) で表される基が有する水素原子；

式 (B) の  $A_{r^{b1}}$  が表すアリール基、又は複素環基が有する水素原子；

式 (B) の  $R^{b1} \sim R^{b4}$  のいずれかが表わす水素原子；

式 (B) の  $R^{b11} \sim R^{b17}$  のいずれかが表わす水素原子；

式 (B) の  $R^{b11} \sim R^{b17}$  のいずれかがアルキル基であるとき、該アルキル基が有する水素原子；

式 (B) の環 C と環 D が架橋して形成される環構造が有する水素原子；

式 (B) の  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  のいずれかが表わす水素原子；

式 (B) の  $R^{b21} \sim R^{b24}$  及び  $R^{b31} \sim R^{b38}$  のいずれかがアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$  で表される基、 $-O-(R_{904})$  で表される基、 $-S-(R_{905})$ 、アリール基、又は複素環基であるとき、これらが有する水素原子；

式 (C) の  $L^{c1}$  が表す式 (v i) 又は (v i i) で表される基が有する水素原子；

式 (C) の  $A_{r^{c1}}$  が表す式 (c 1) 又は (c 2) で表される基が有する水素原子；

式 (C) の  $R^{c1} \sim R^{c4}$  のいずれかが表わす水素原子；

式 (C) の  $R^{c11} \sim R^{c17}$  のいずれかが表わす水素原子；

式 (C) の  $R^{c11} \sim R^{c17}$  のいずれかがアルキル基であるとき、該アルキル基が有する水素原子；

式 (C) の環 E と環 F が架橋して形成される環構造が有する水素原子；

式 (C) の  $R^{c21}$  が表すフェニル基、ナフチル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾフラニル基、又はナフトベンゾチオフェニル基が有する水素原子；

式 (C) の  $R^{c22} \sim R^{c29}$  のいずれかが表わす水素原子；

式 (C) の  $R^{c22} \sim R^{c29}$  のいずれかがアルキル基、アリール基、又は複素環基であるとき、これらが有する水素原子；

式 (D) の  $L^{d1}$  が表す式 (v i i i) で表される基が有する水素原子；

式 (D) の  $A r^{d1}$  が表す式 (d 1) ~ (d 3) で表される基が有する水素原子；

式 (D) の  $R^{d1} \sim R^{d4}$  のいずれかが表わす水素原子；

式 (D) の  $R^{d11} \sim R^{d17}$  のいずれかが表わす水素原子；

式 (D) の  $R^{d11} \sim R^{d17}$  のいずれかがアルキル基であるとき、該アルキル基が有する水素原子；

式 (D) の環 H と環 I が架橋して形成される環構造が有する水素原子；

式 (D) の  $R^{d21} \sim R^{d28}$  のいずれかが表わす水素原子；

式 (D) の  $R^{d21} \sim R^{d28}$  のいずれかがアリール基であるとき、該アリール基が有する水素原子；

[0450] 発明化合物の重水素化率は、使用する原料化合物の重水素化率に依存する。所定の重水素化率の原料を用いたとしても、天然由来の一定の割合で軽水素同位体が含まれ得る。従って、発明化合物の重水素化率の態様は、単に化学式で表される重水素原子の数をカウントして求められる割合に対し、天然由来の微量の同位体を考慮した比率が含まれる。

発明化合物の重水素化率は、好ましくは 1% 以上、より好ましくは 3% 以上、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。

[0451] 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、発明化合物中の全水素原子数に対する重水素原子数の割合は、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。

[0452] 上記各式の定義に含まれる「置換もしくは無置換のXX基」が置換XX基である場合、該置換基の詳細は、「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り、好ましくは炭素数1～6のアルキル基、環形成炭素数6～12のアリール基、又は環形成原子数5～13の複素環基（ヘテロアリール基）であり、より好ましくは炭素数1～6のアルキル基又は環形成炭素数6～12のアリール基である。各基（アルキル基、アリール基、複素環基）の詳細は上記したとおりである。

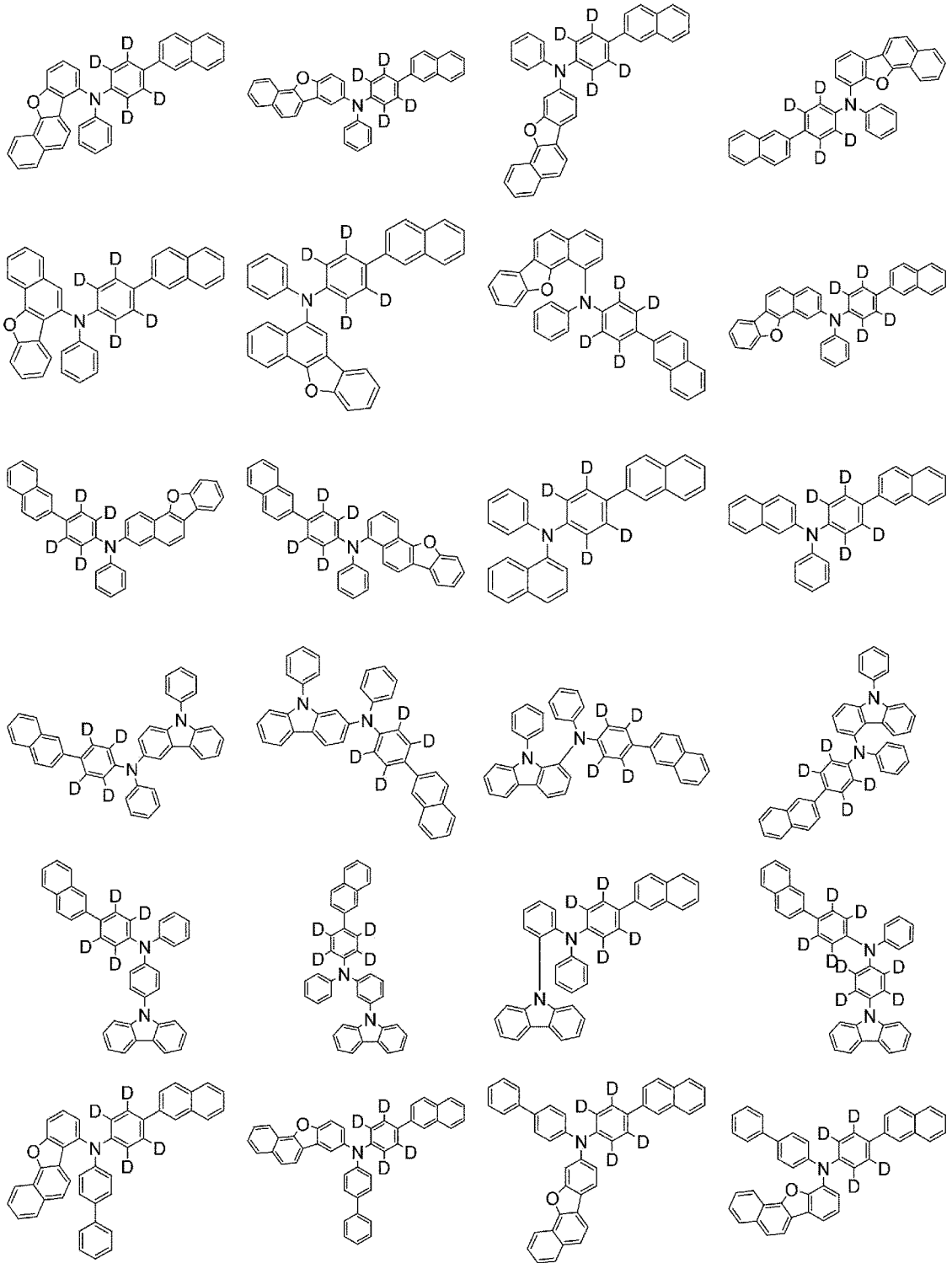
[0453] 発明化合物は、当業者であれば、下記合成例及び公知の合成方法を参考にして容易に製造することができる。

[0454] 以下に発明化合物の具体例を示すが、以下の例示化合物に限定されるものではない。

下記具体例中、Dは重水素原子を示す。

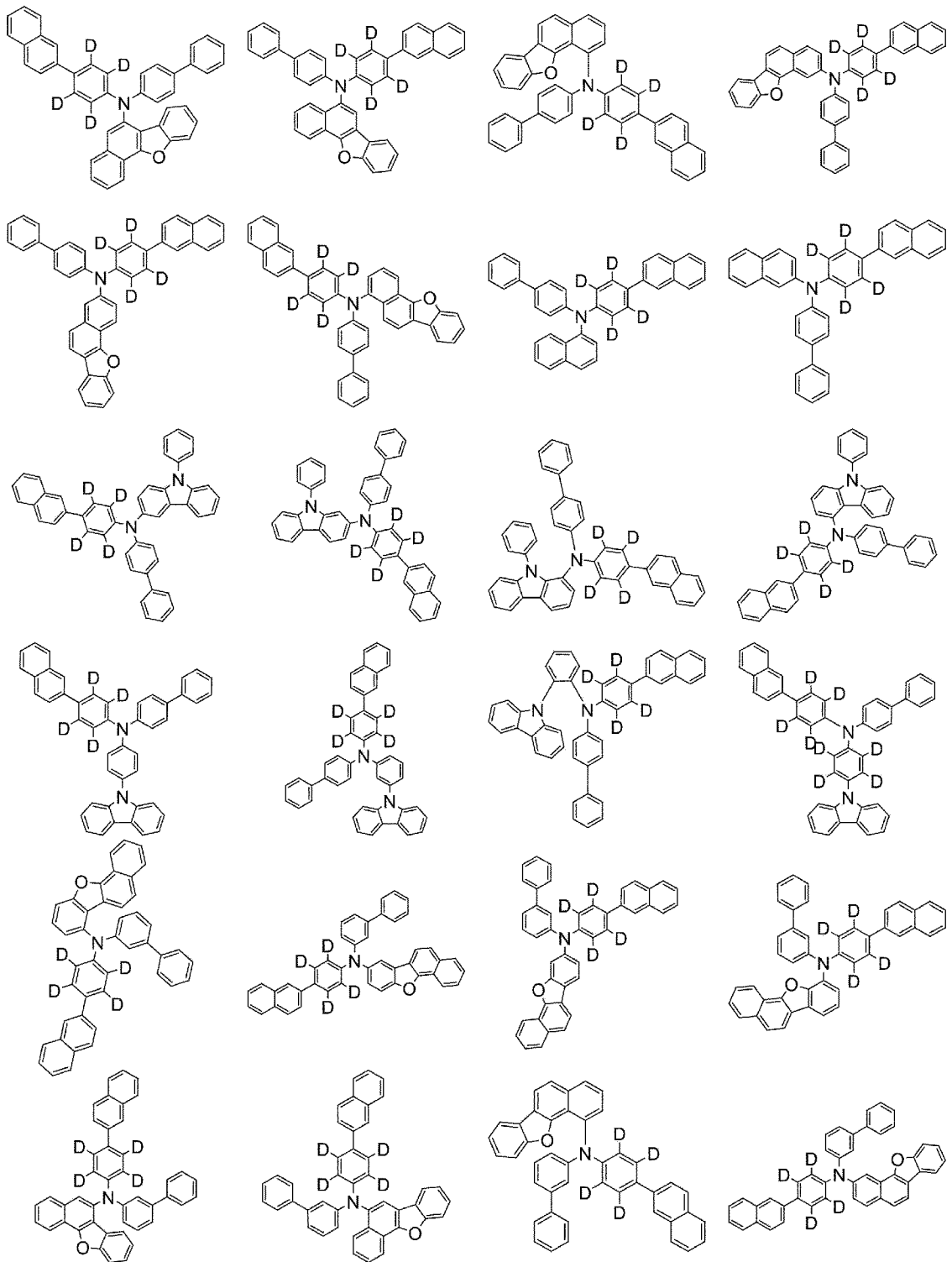
[0455] 式(A)の例示化合物

[化85]



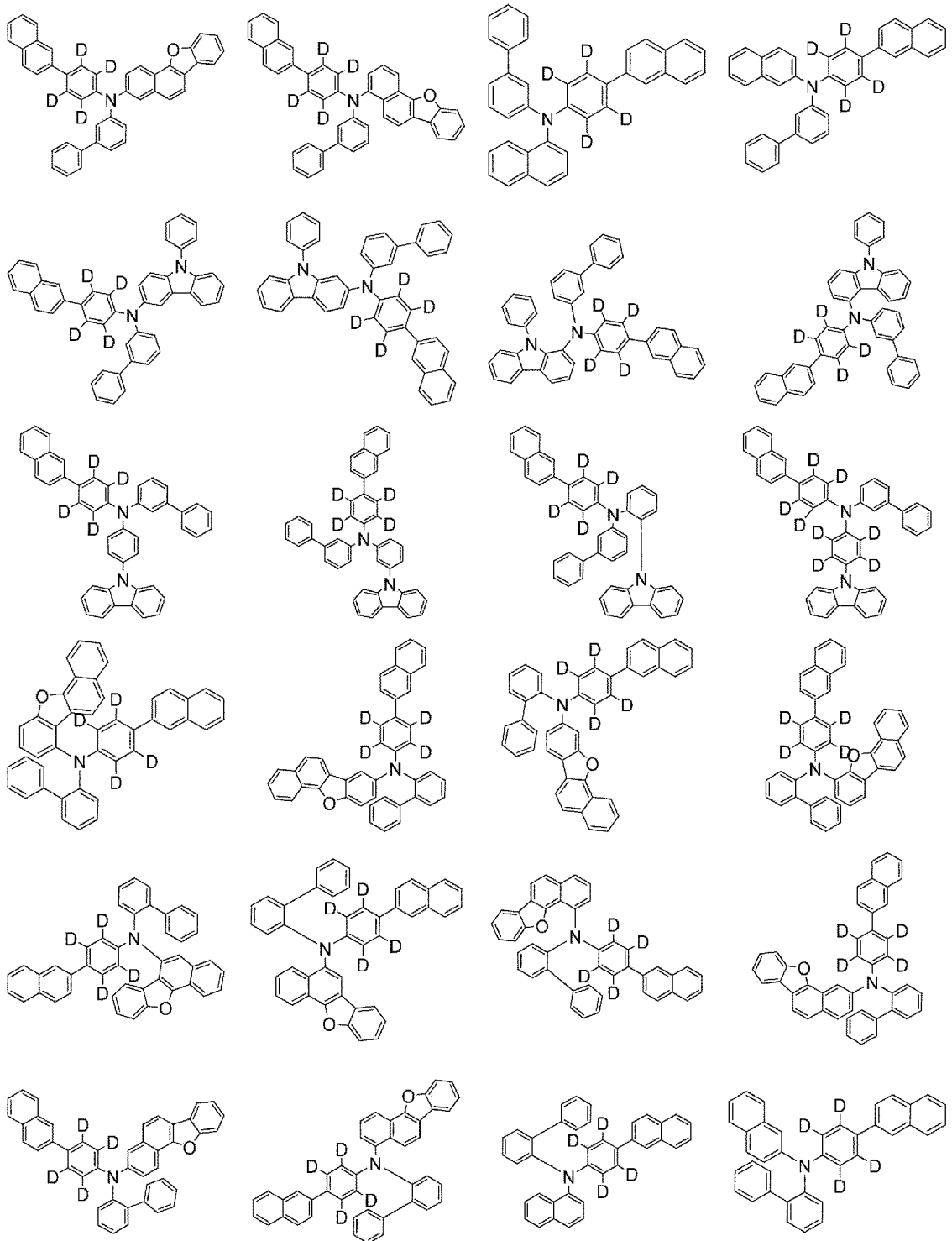
[0456]

[化86]



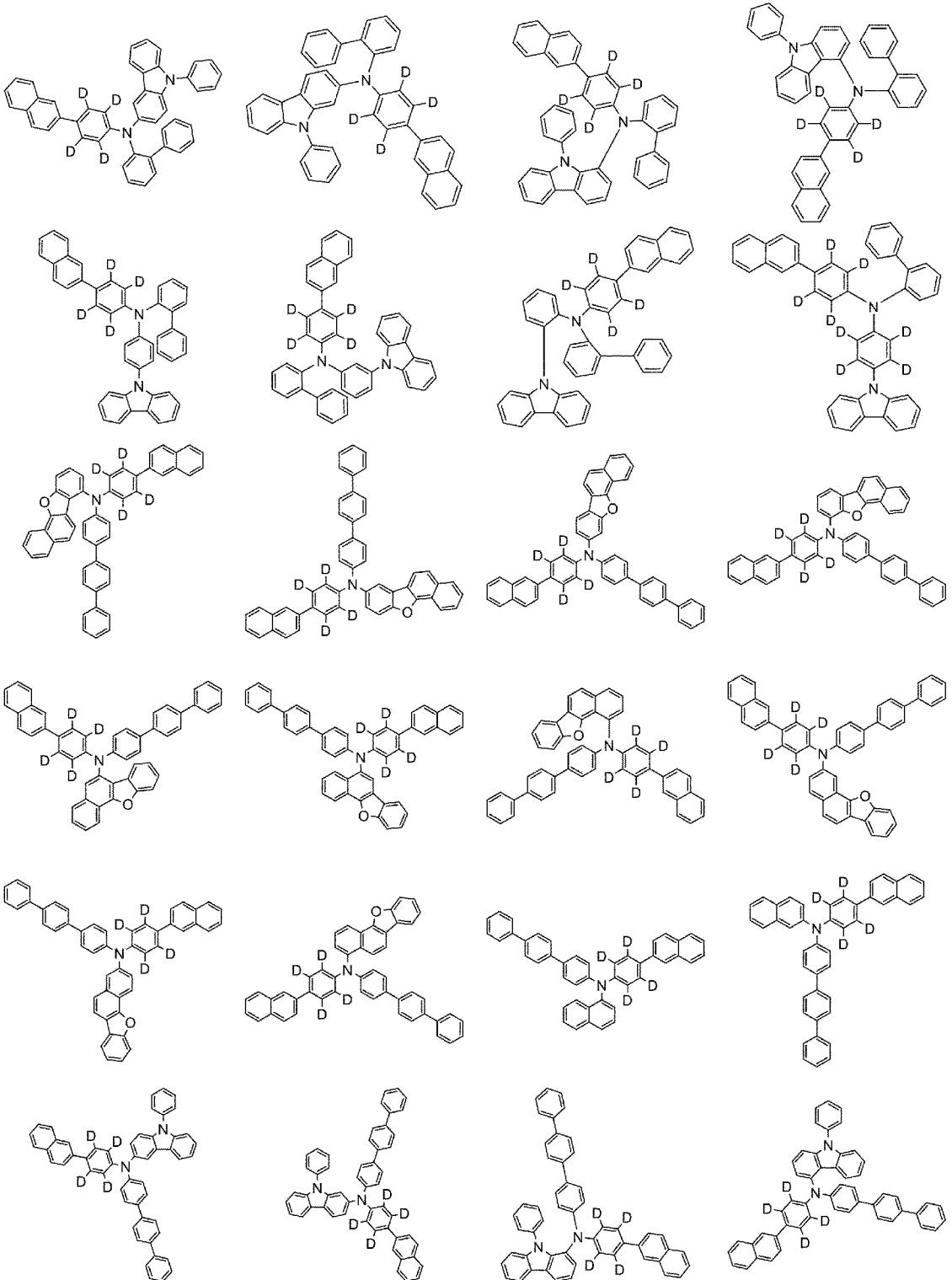
[0457]

[化87]



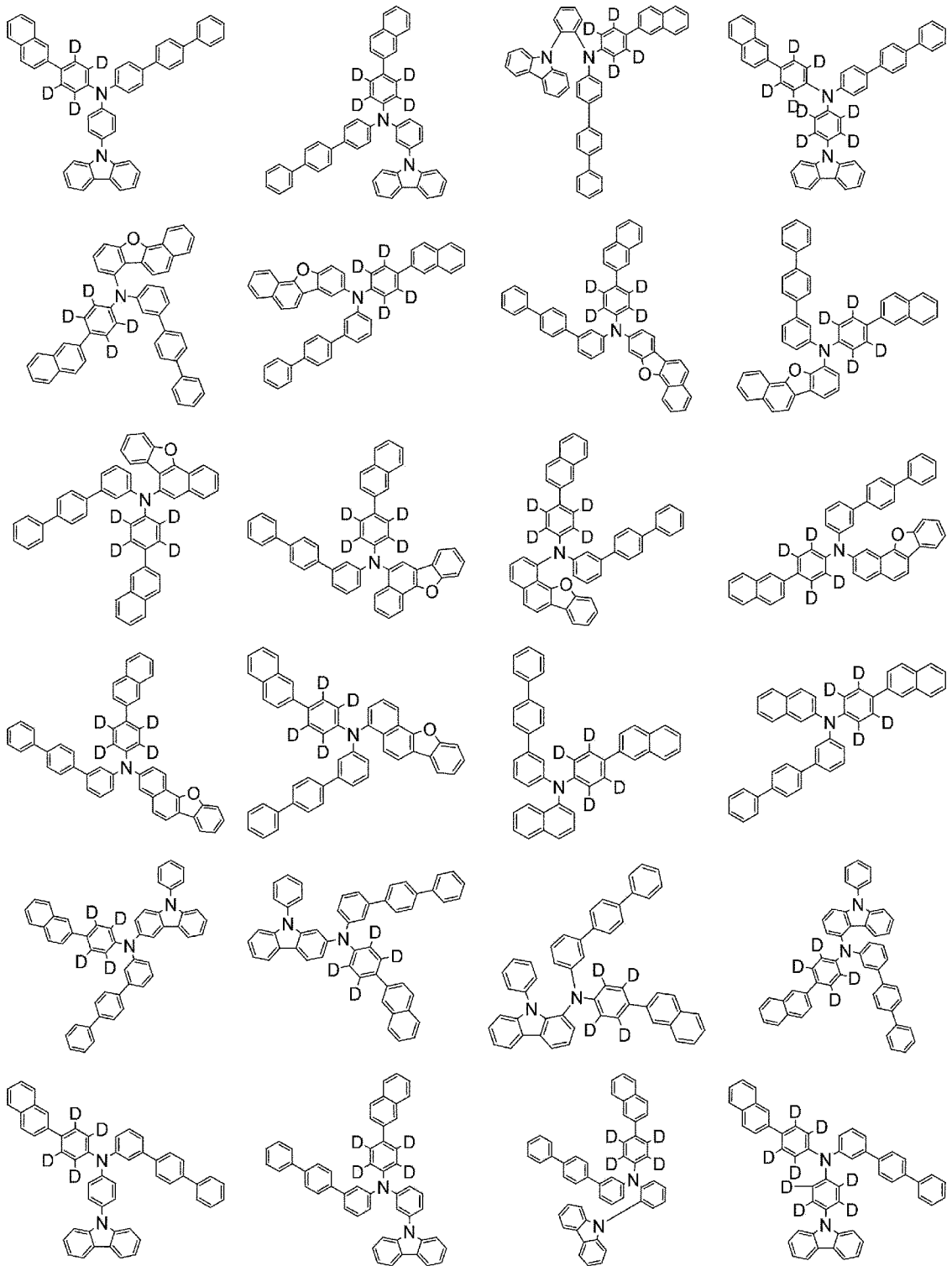
[0458]

[化88]



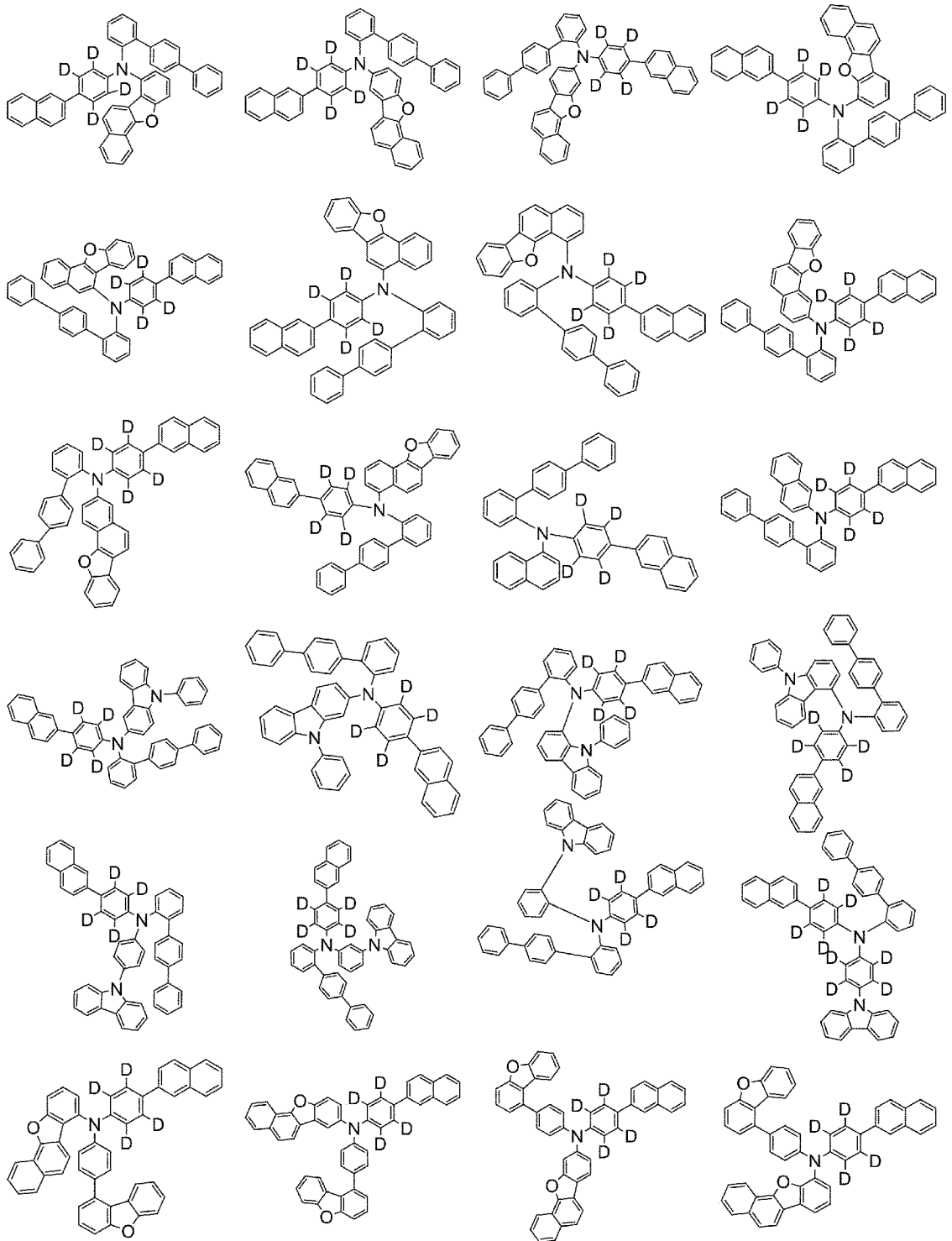
[0459]

[化89]



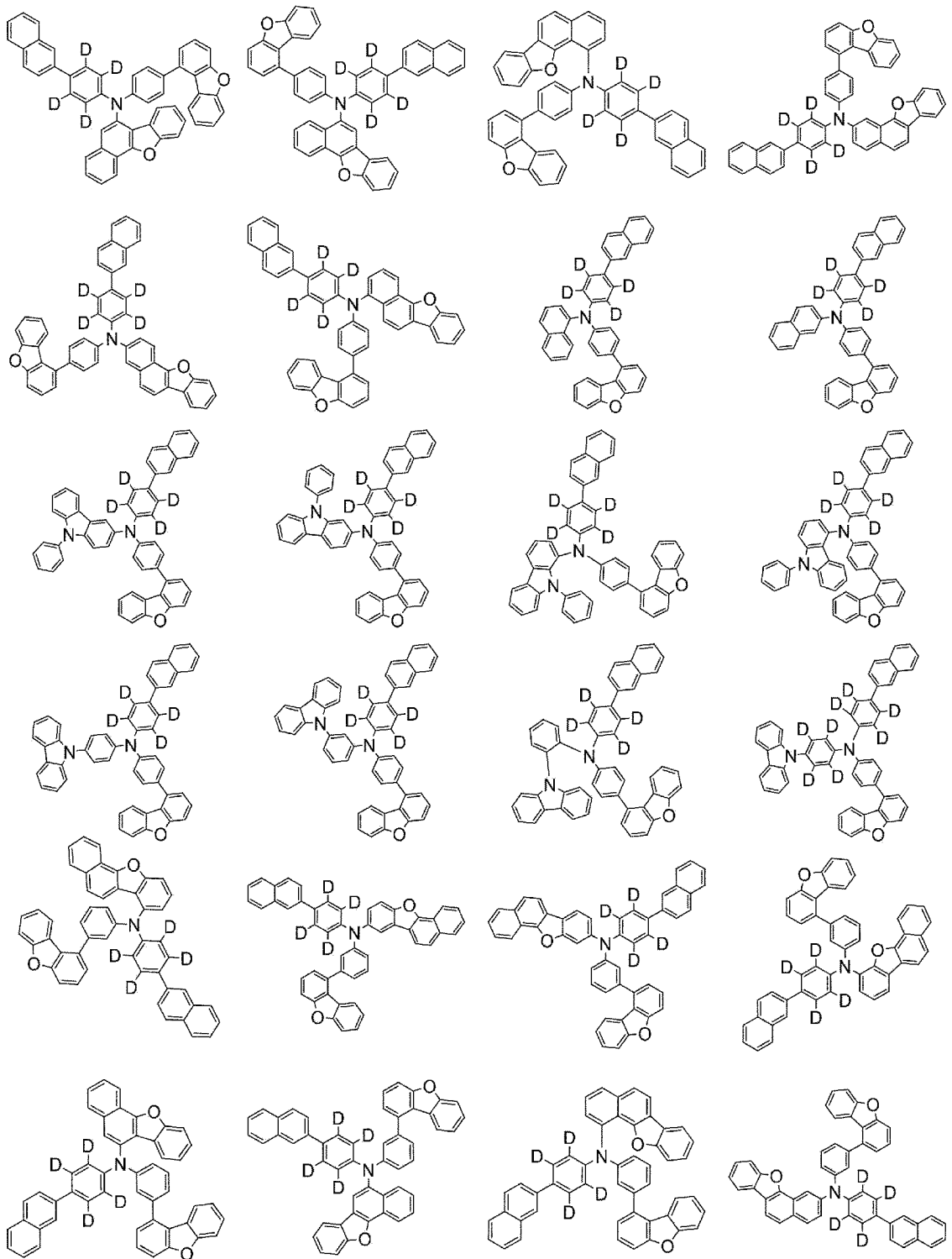
[0460]

[化90]



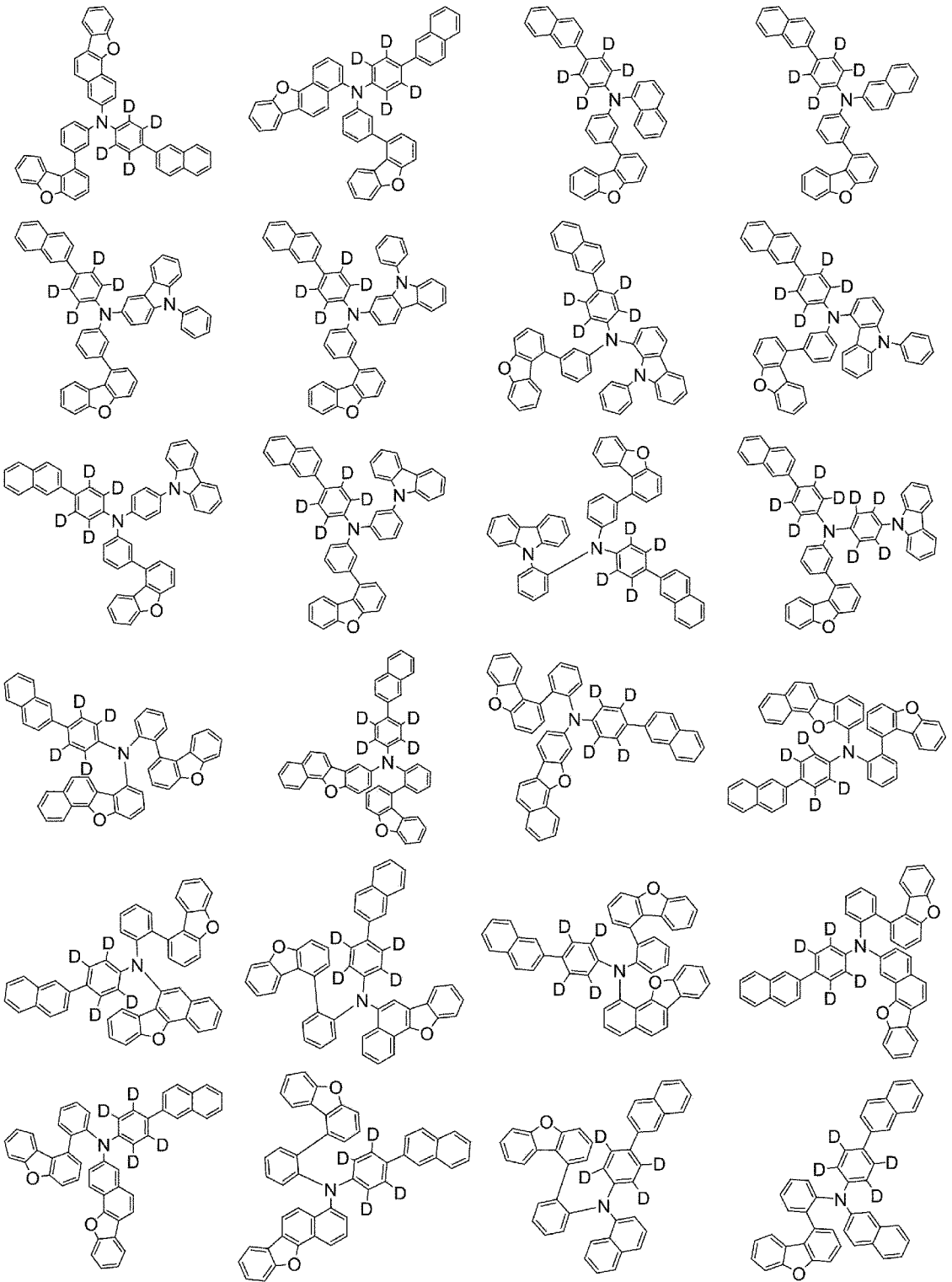
[0461]

[化91]



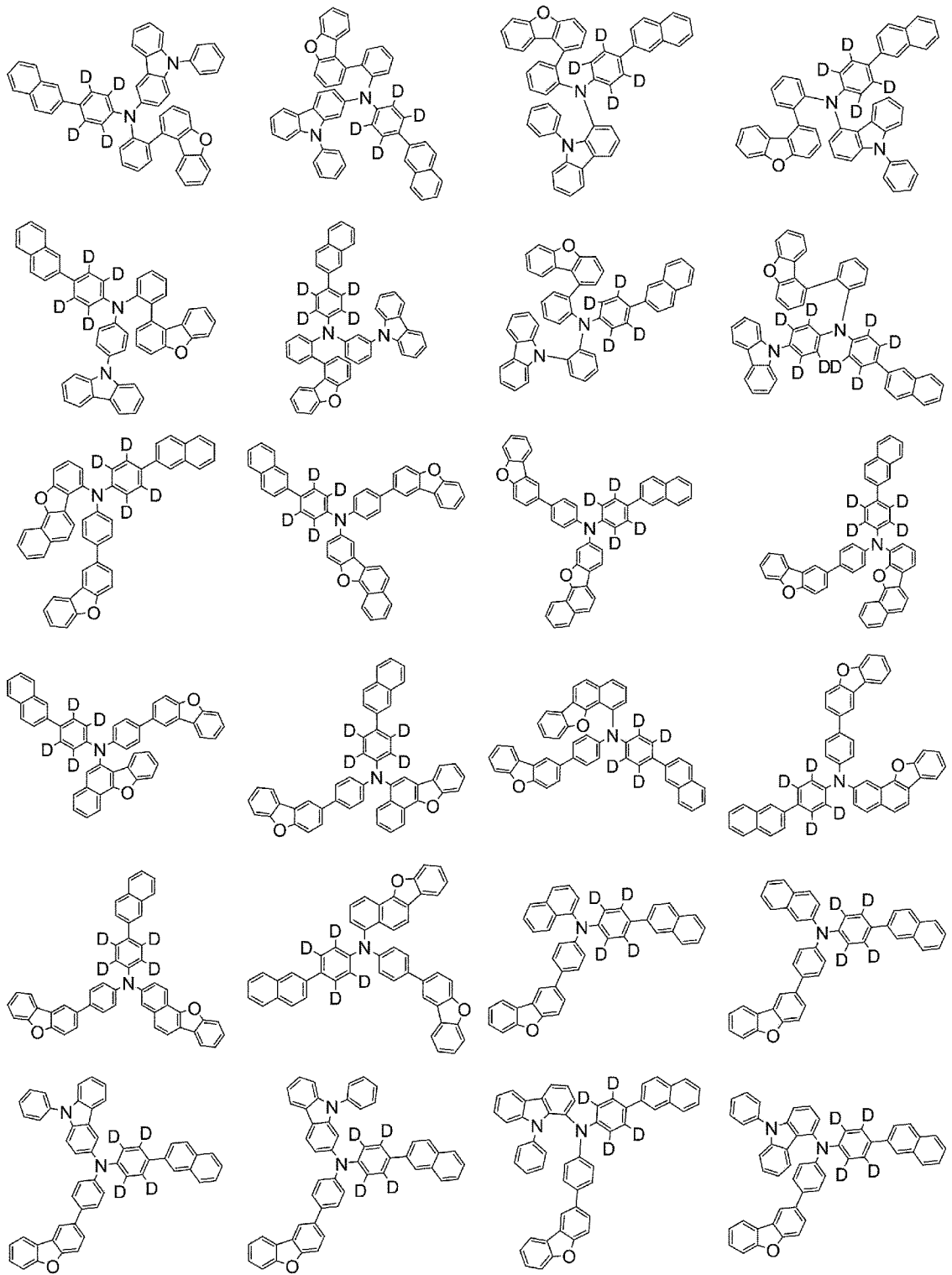
[0462]

[化92]



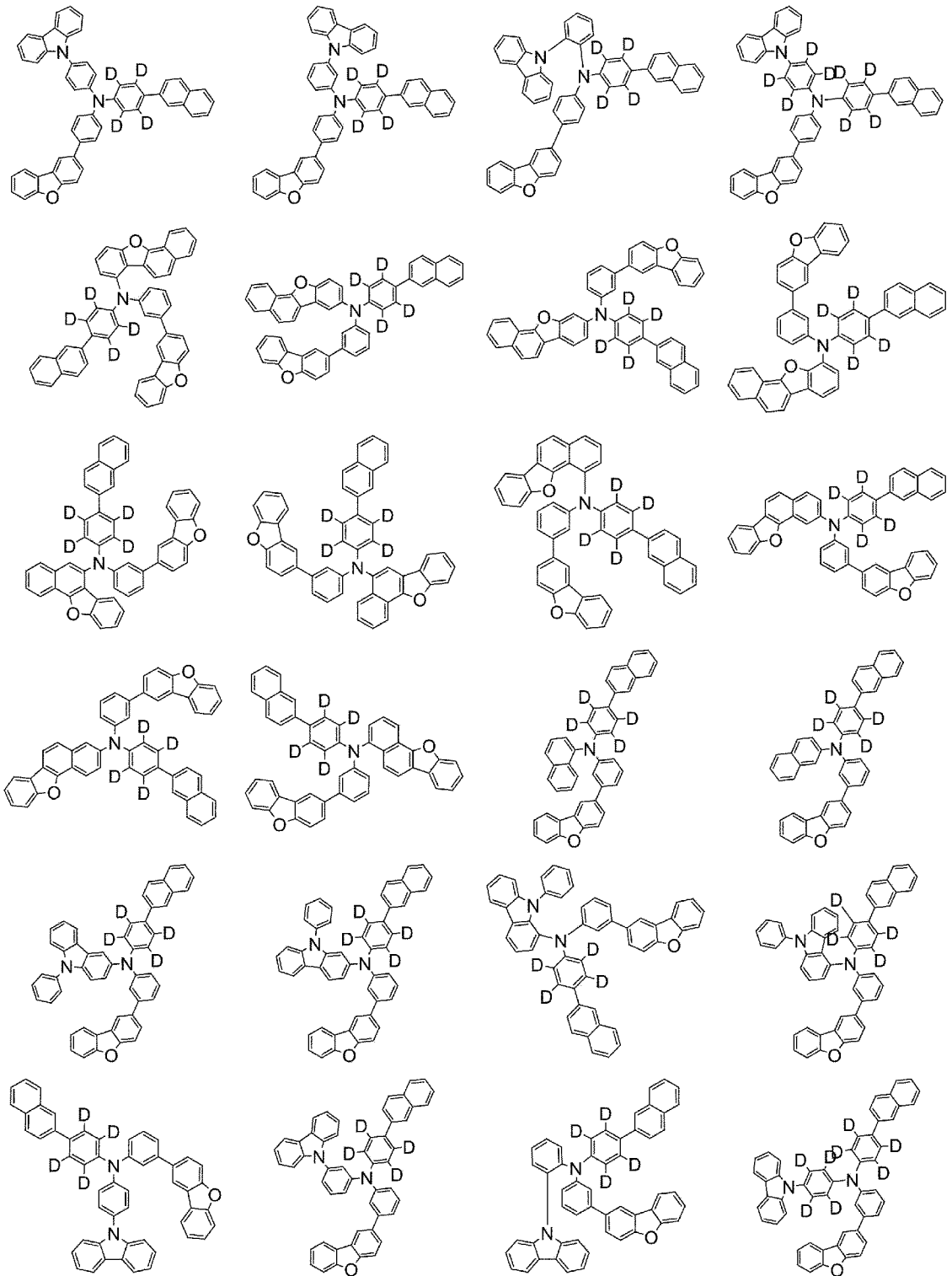
[0463]

[化93]



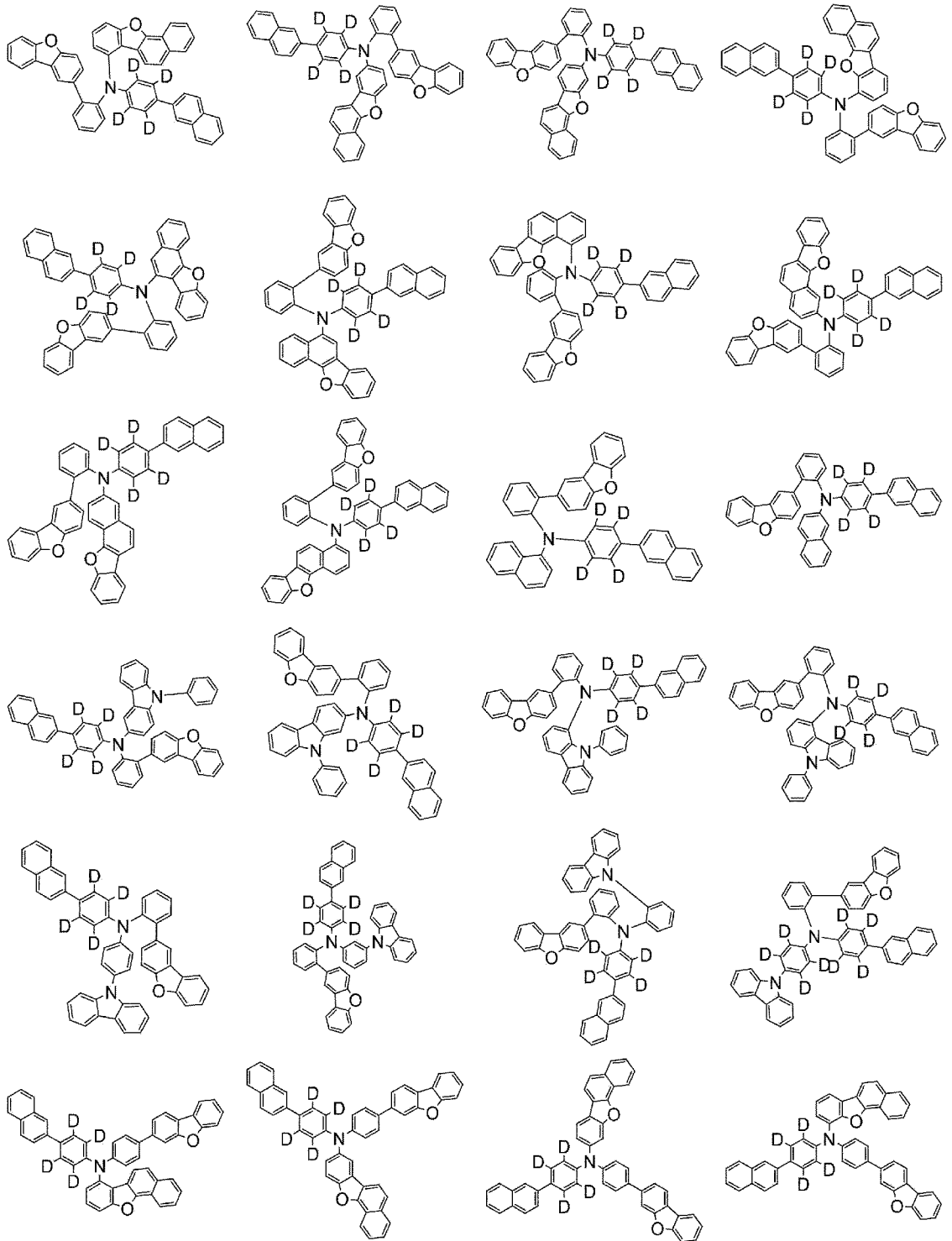
[0464]

[化94]



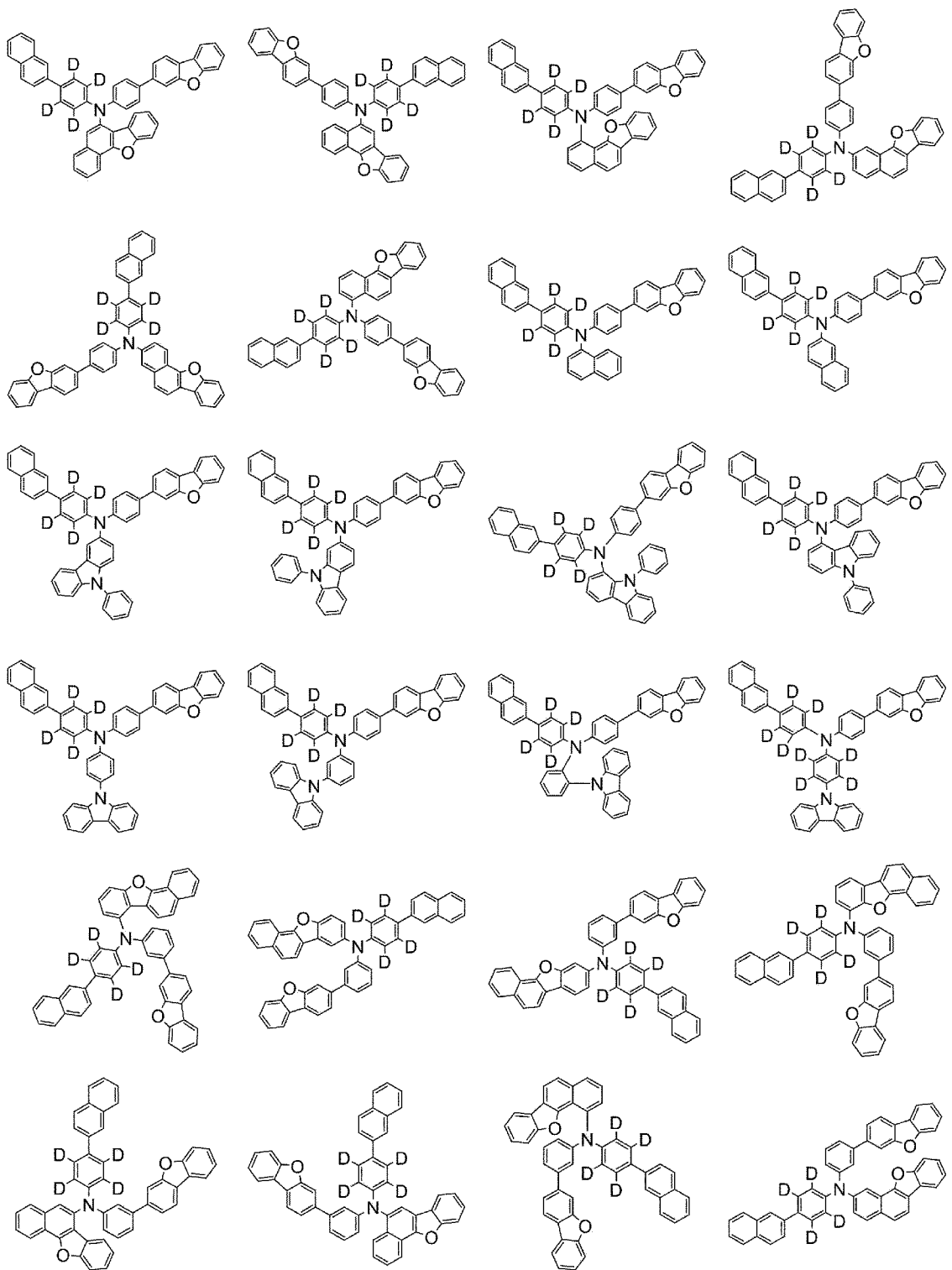
[0465]

[化95]



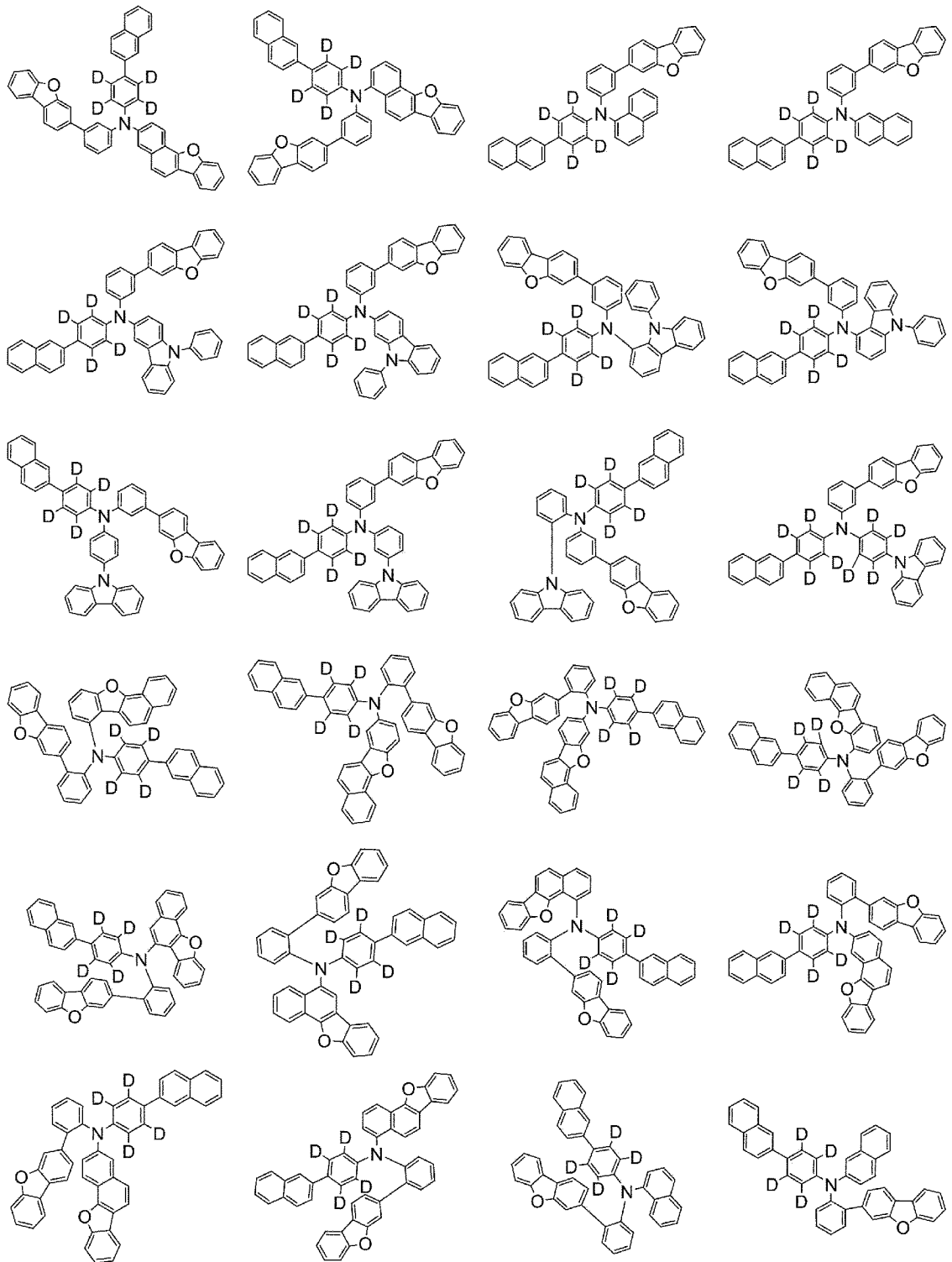
[0466]

[化96]



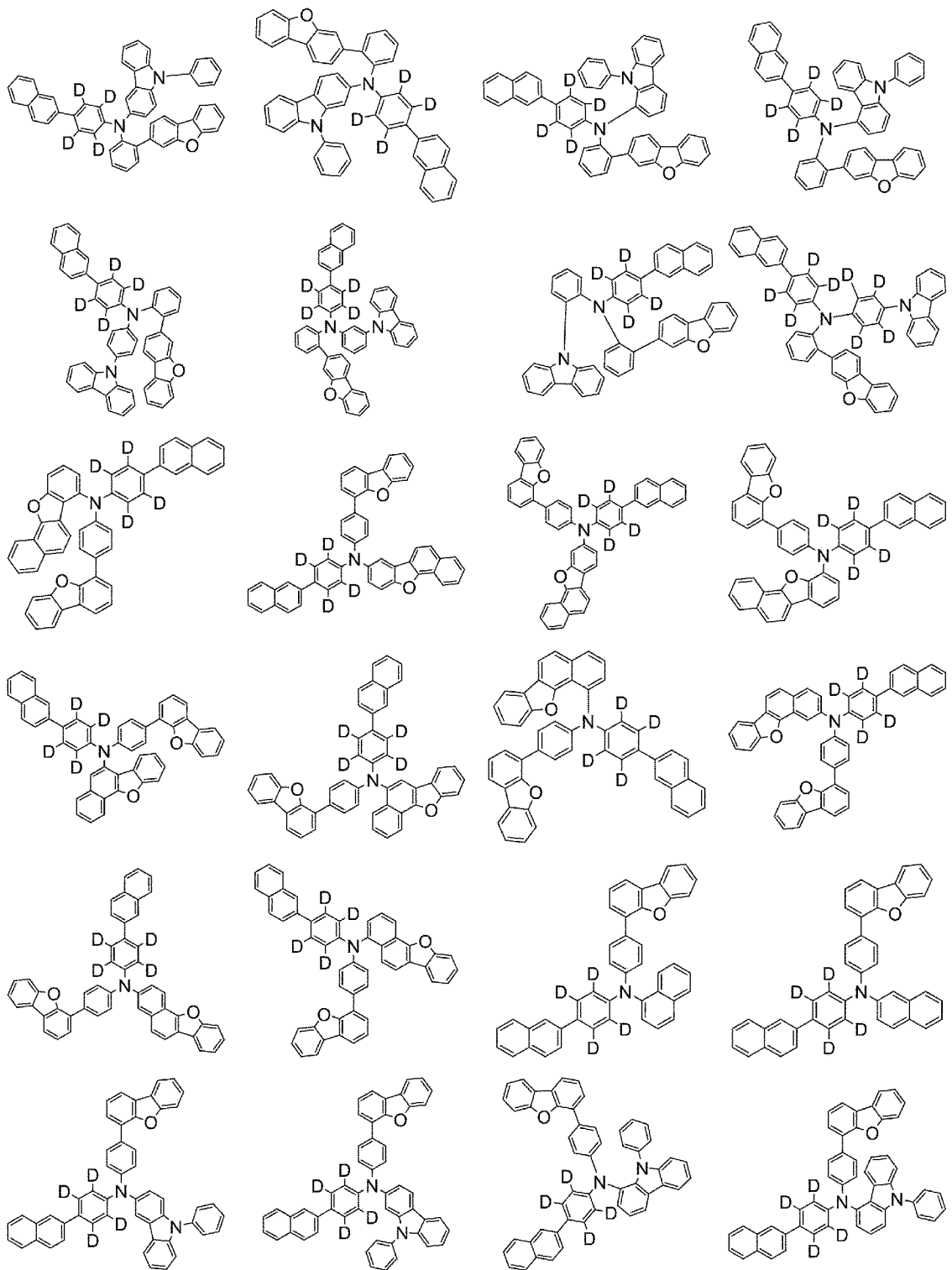
[0467]

[化97]



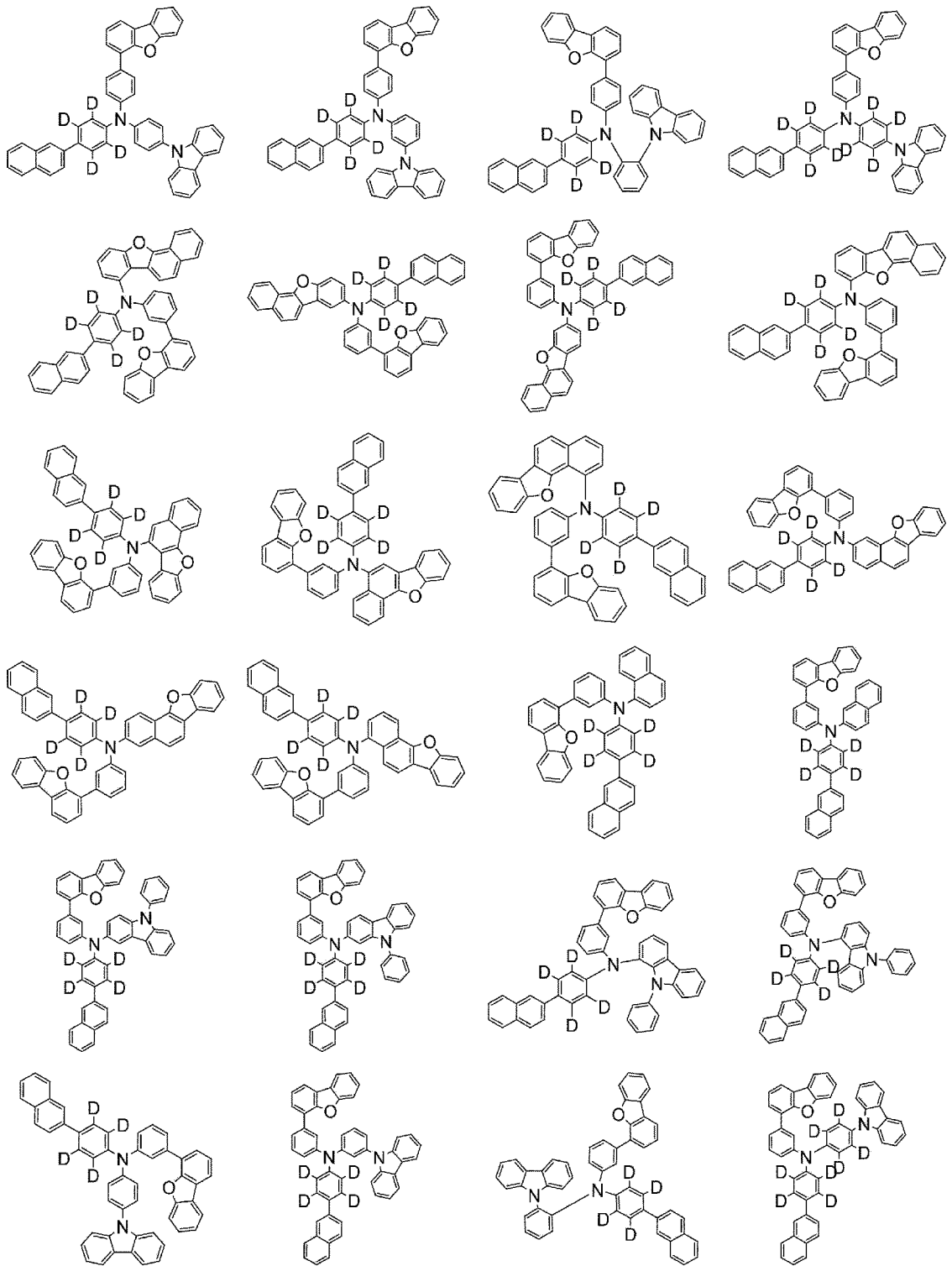
[0468]

[化98]



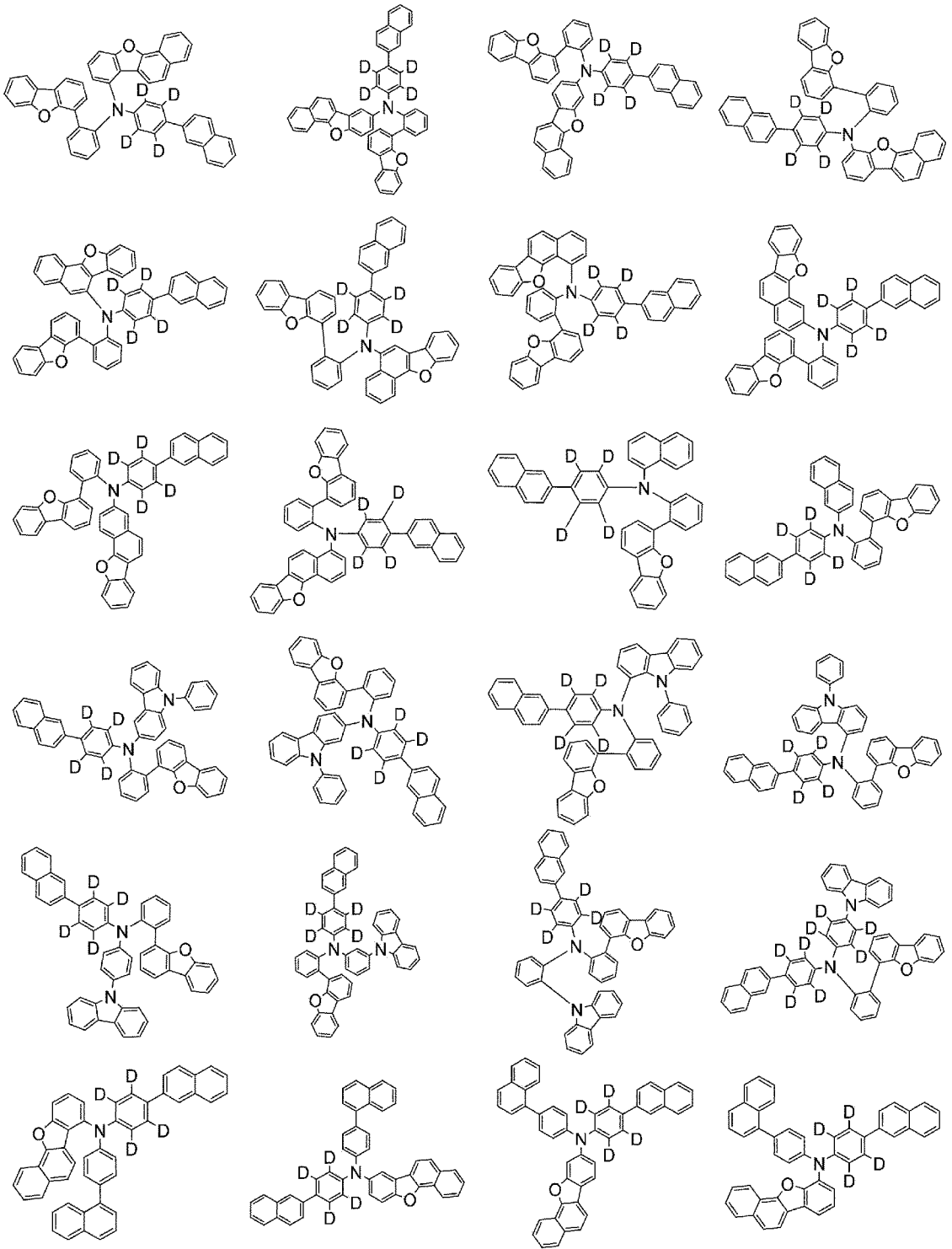
[0469]

[化99]



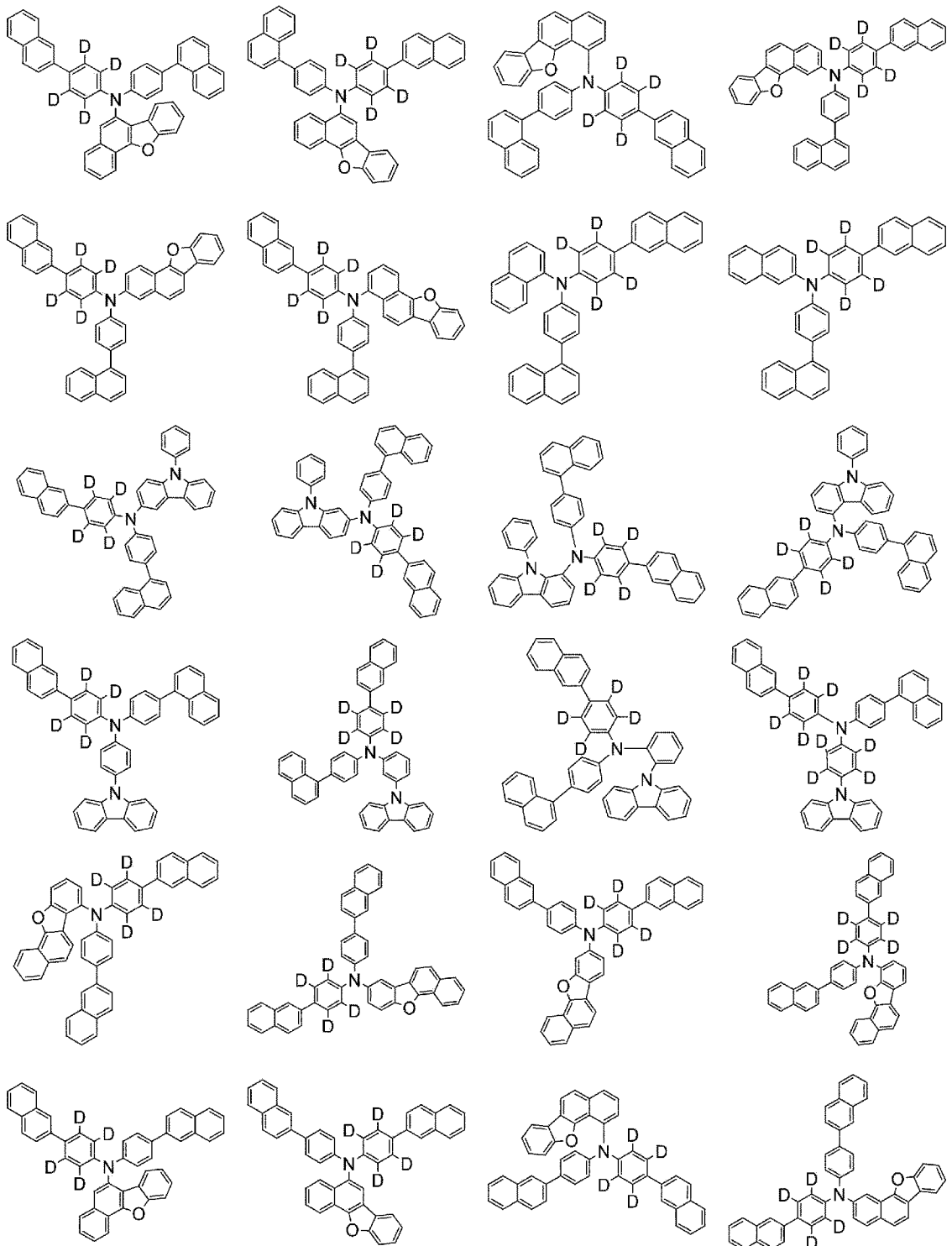
[0470]

[化100]



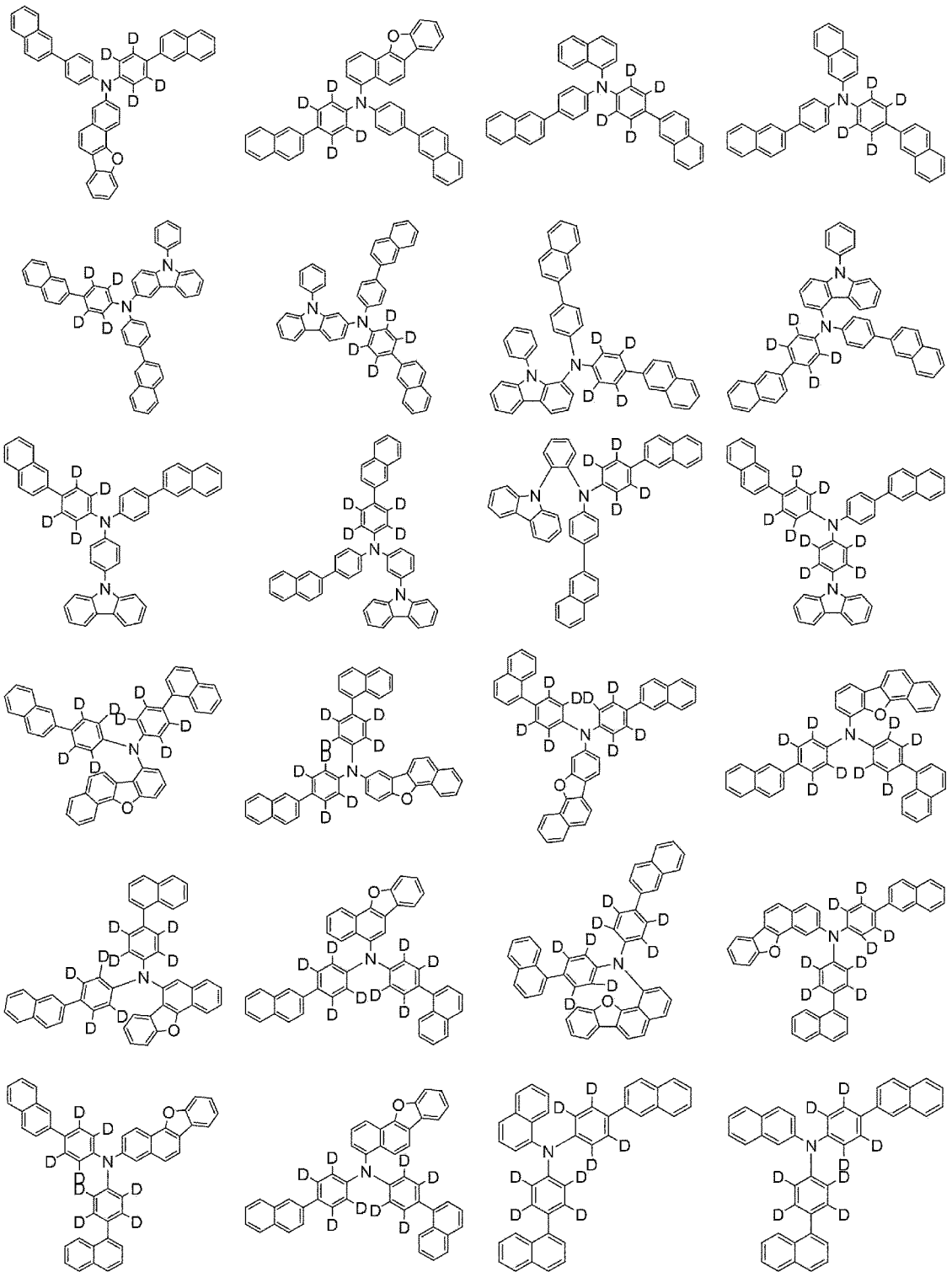
[0471]

[化101]



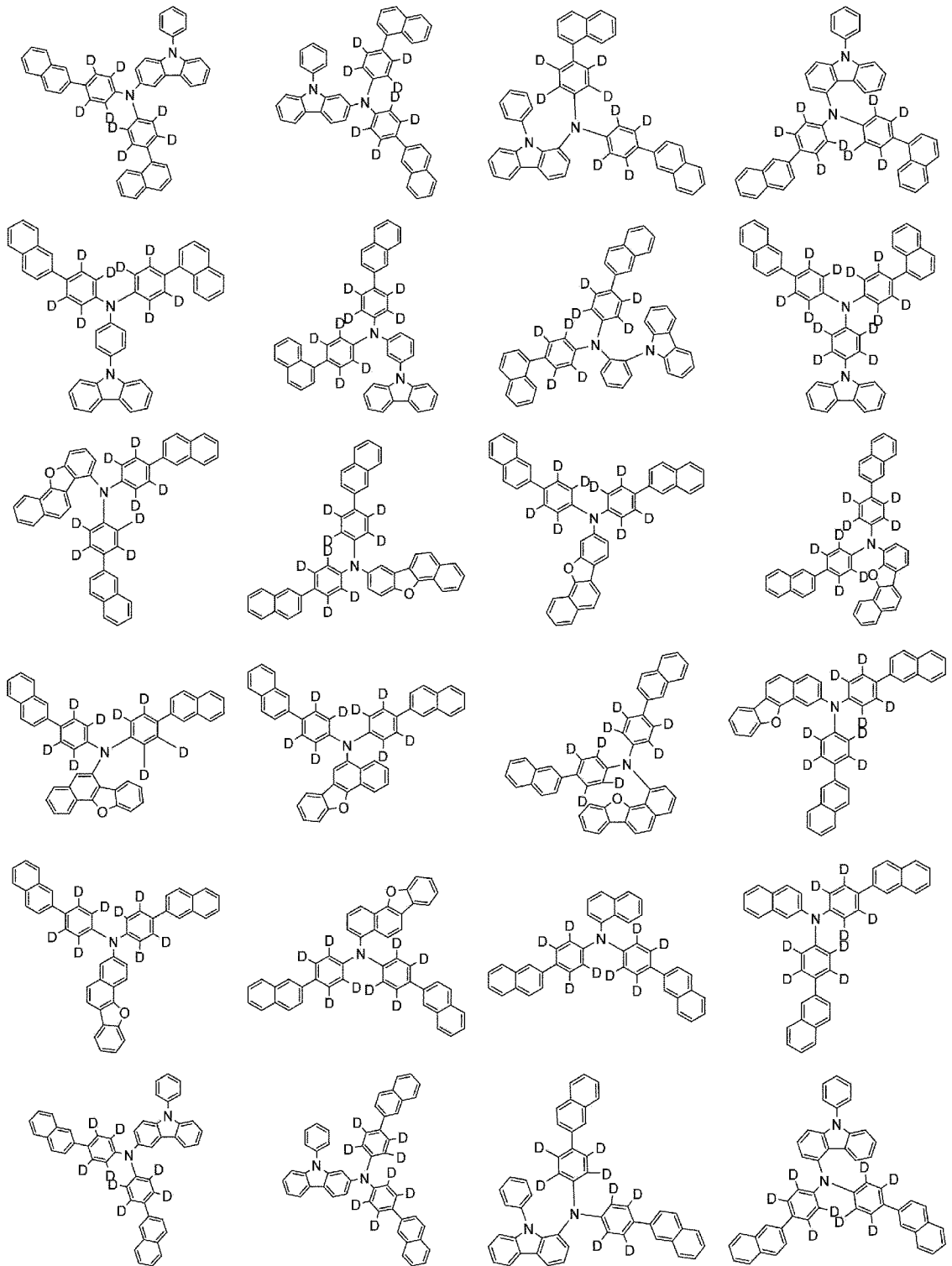
[0472]

[化102]



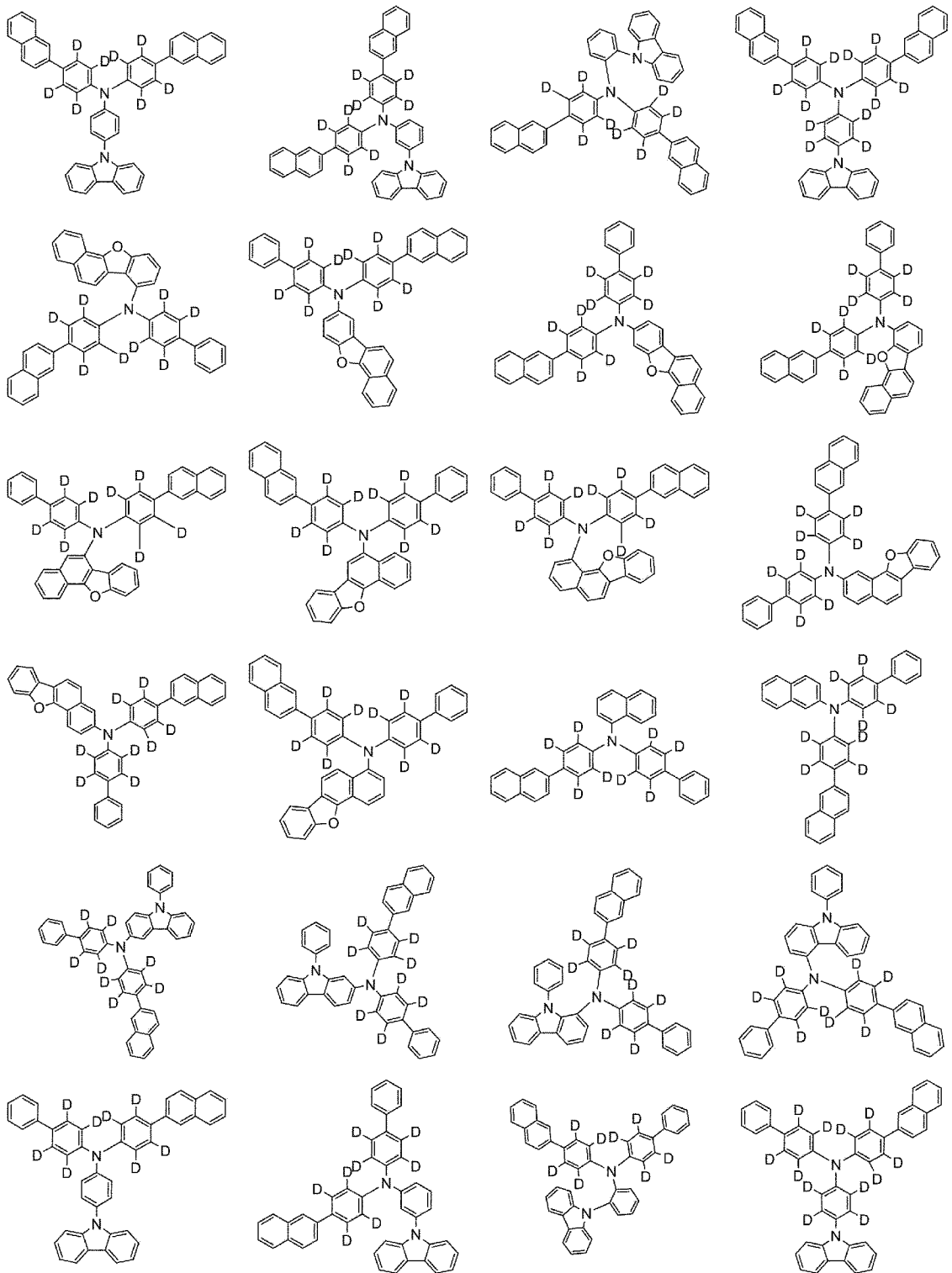
[0473]

[化103]



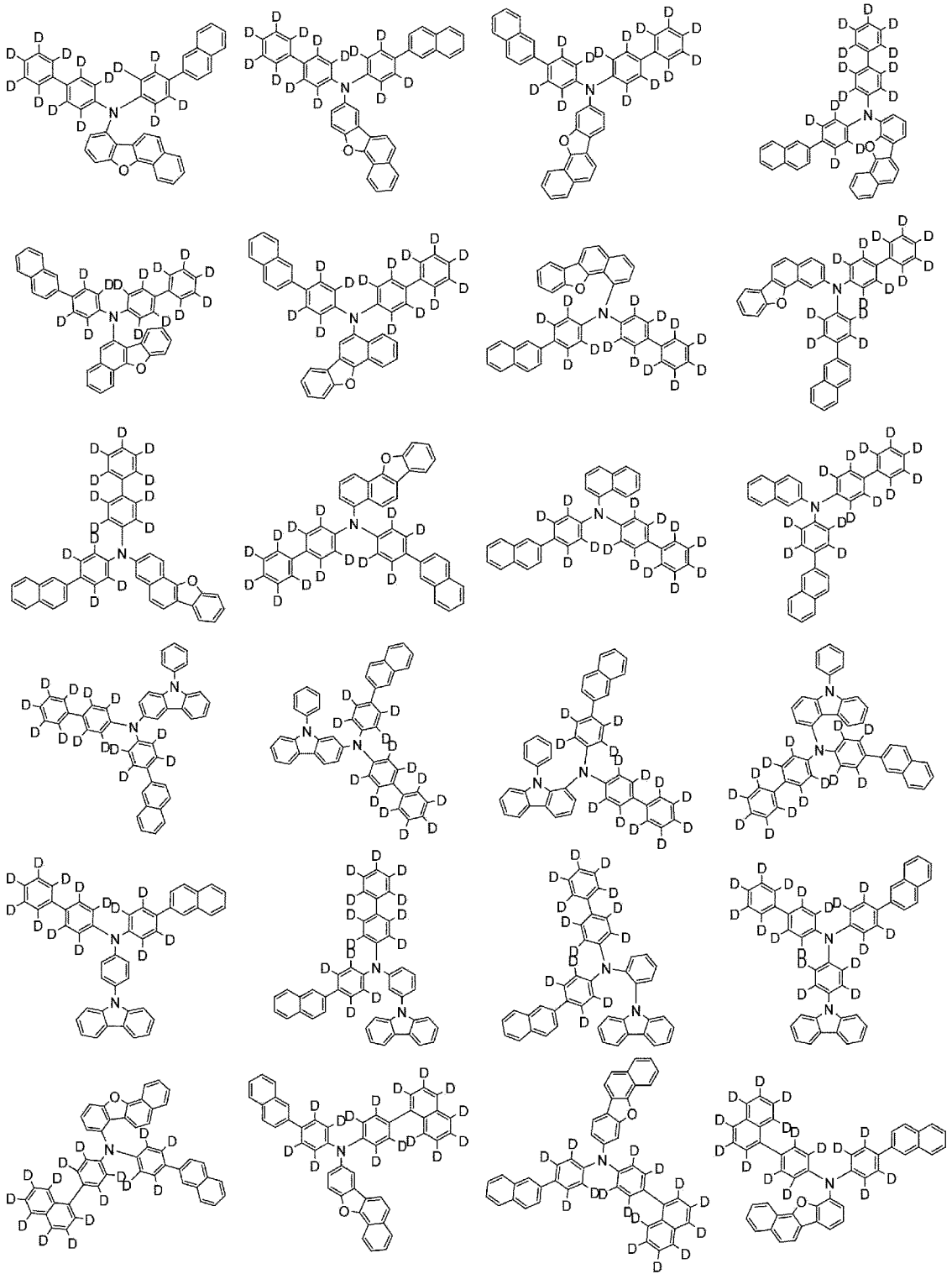
[0474]

[化104]



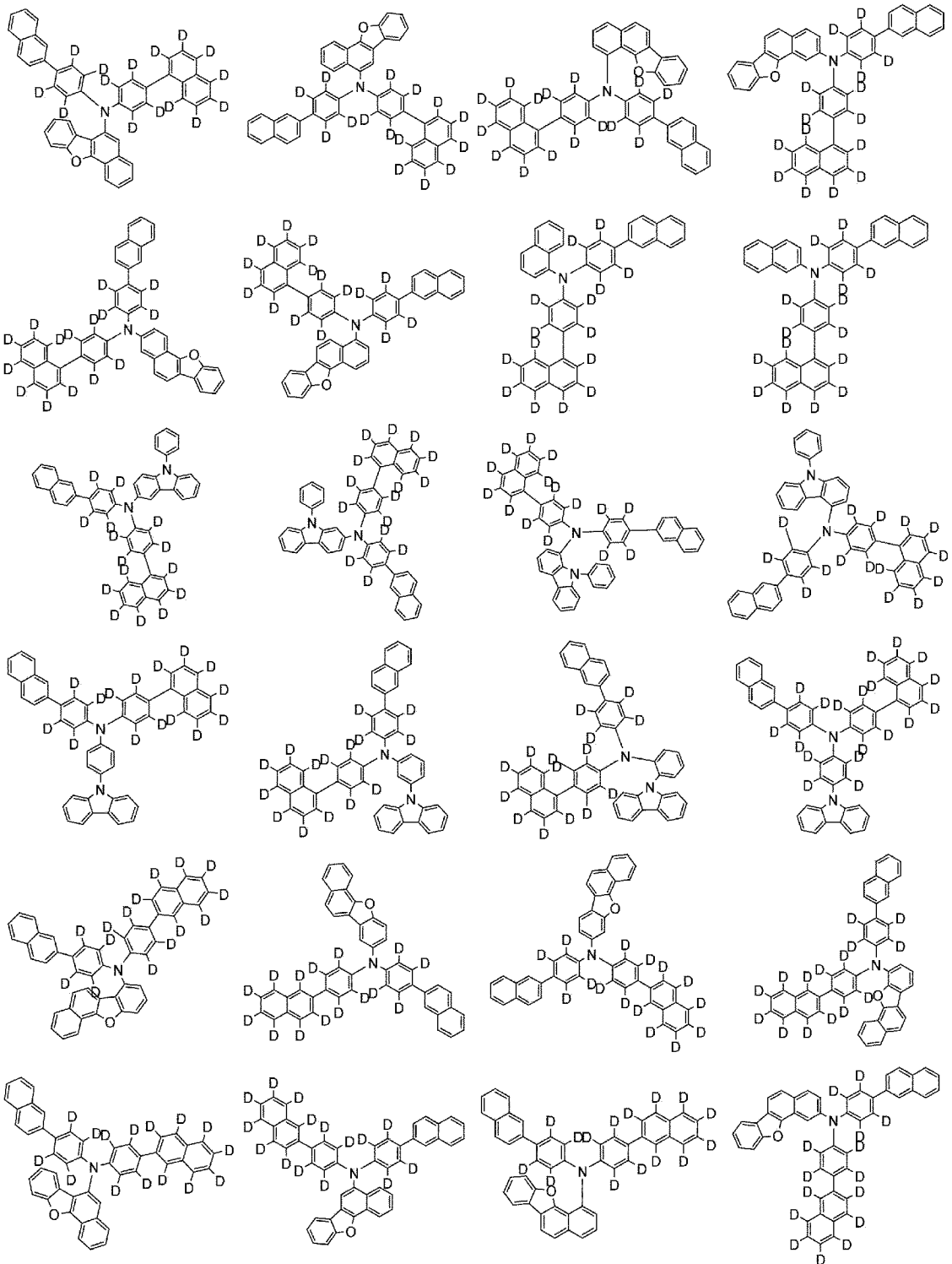
[0475]

[化105]



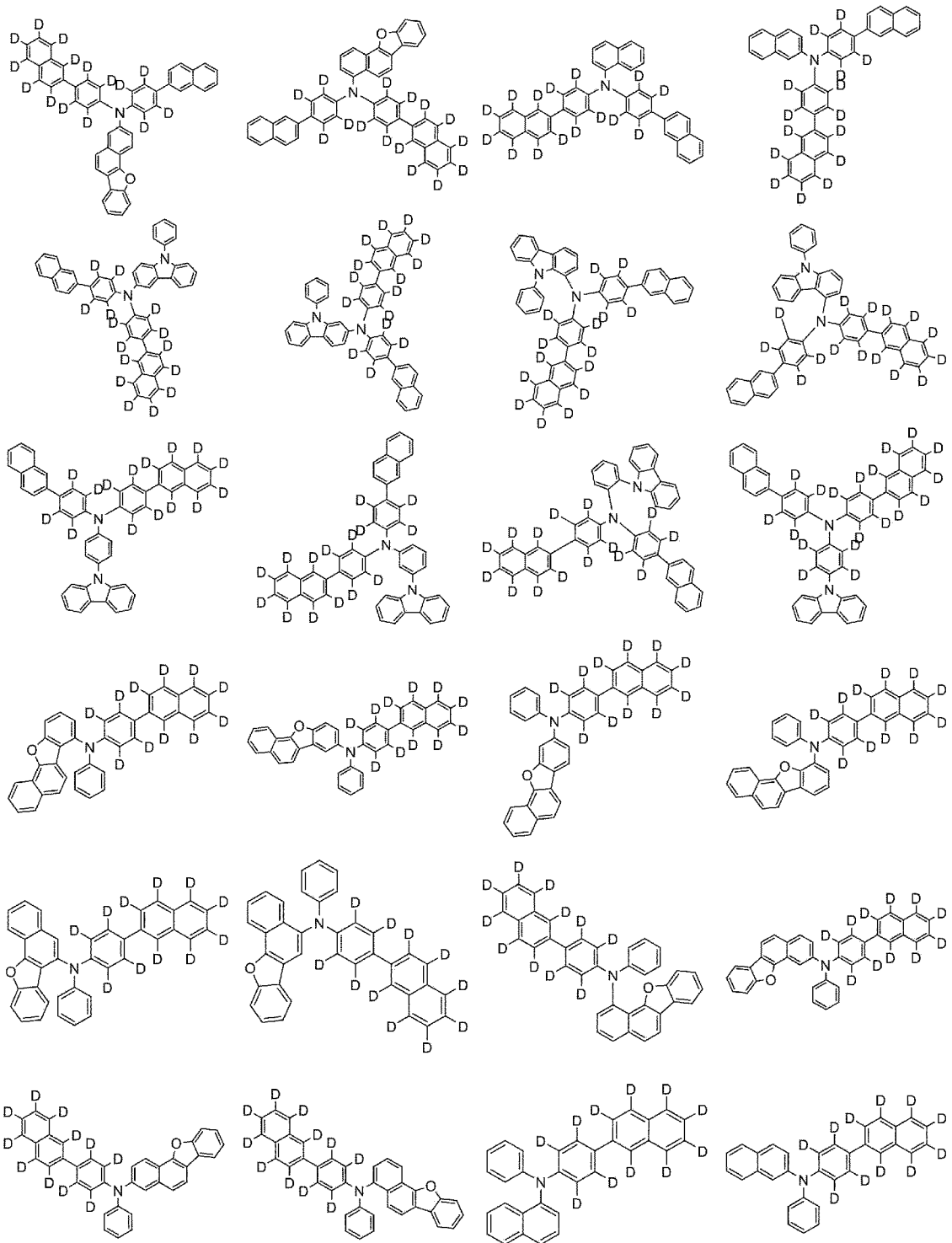
[0476]

[化106]



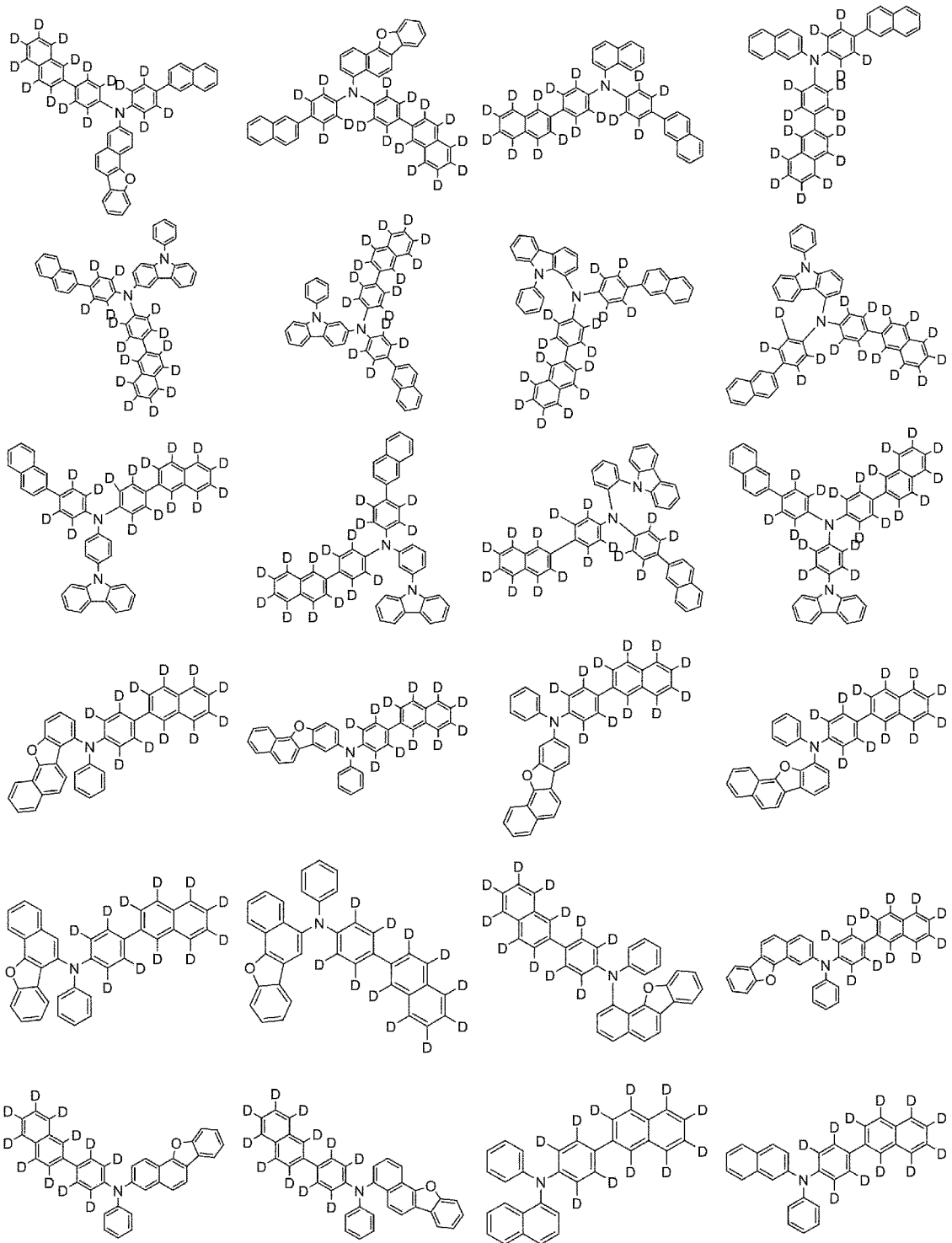
[0477]

[化107]



[0478]

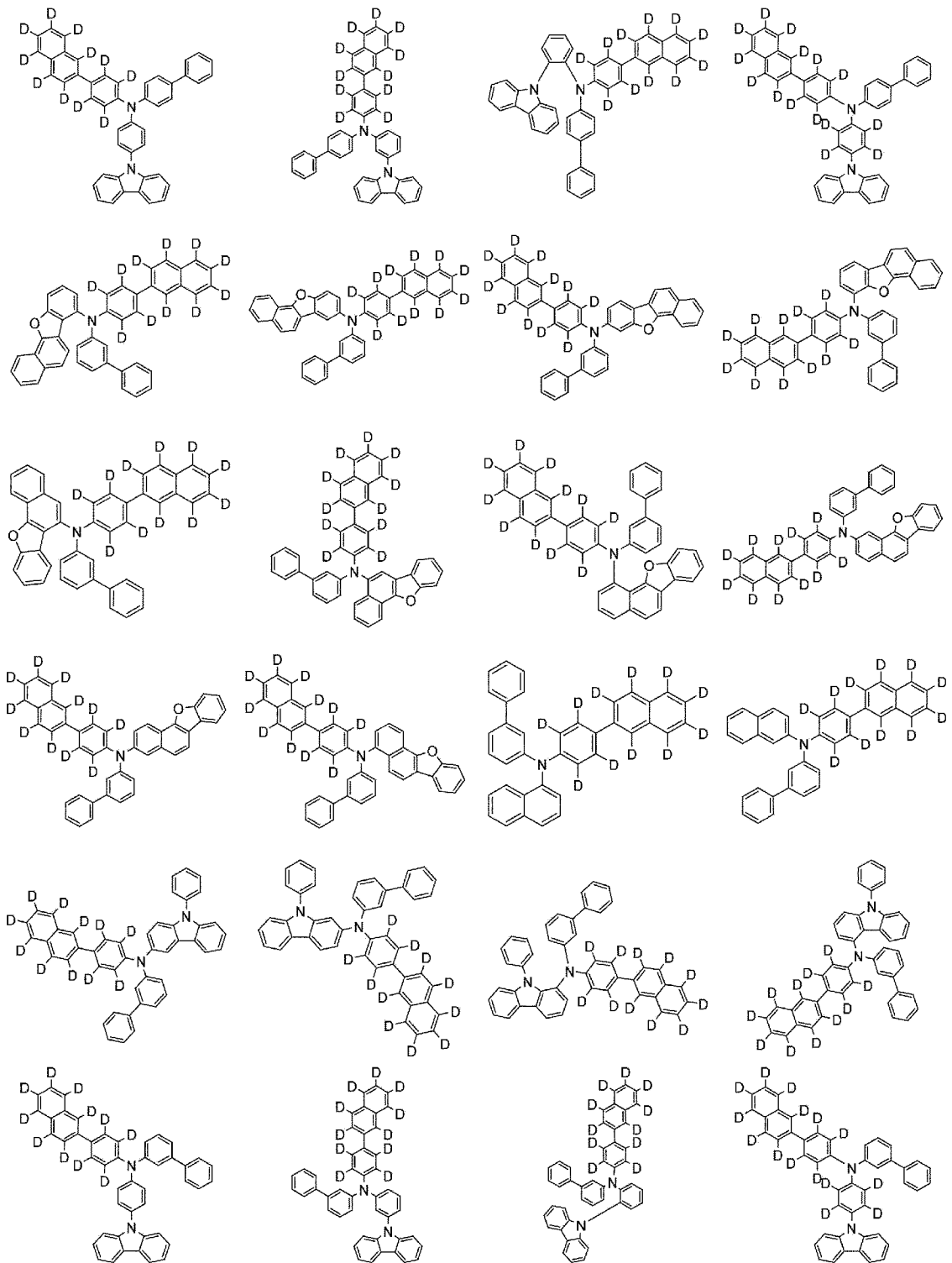
[化108]



[0479]

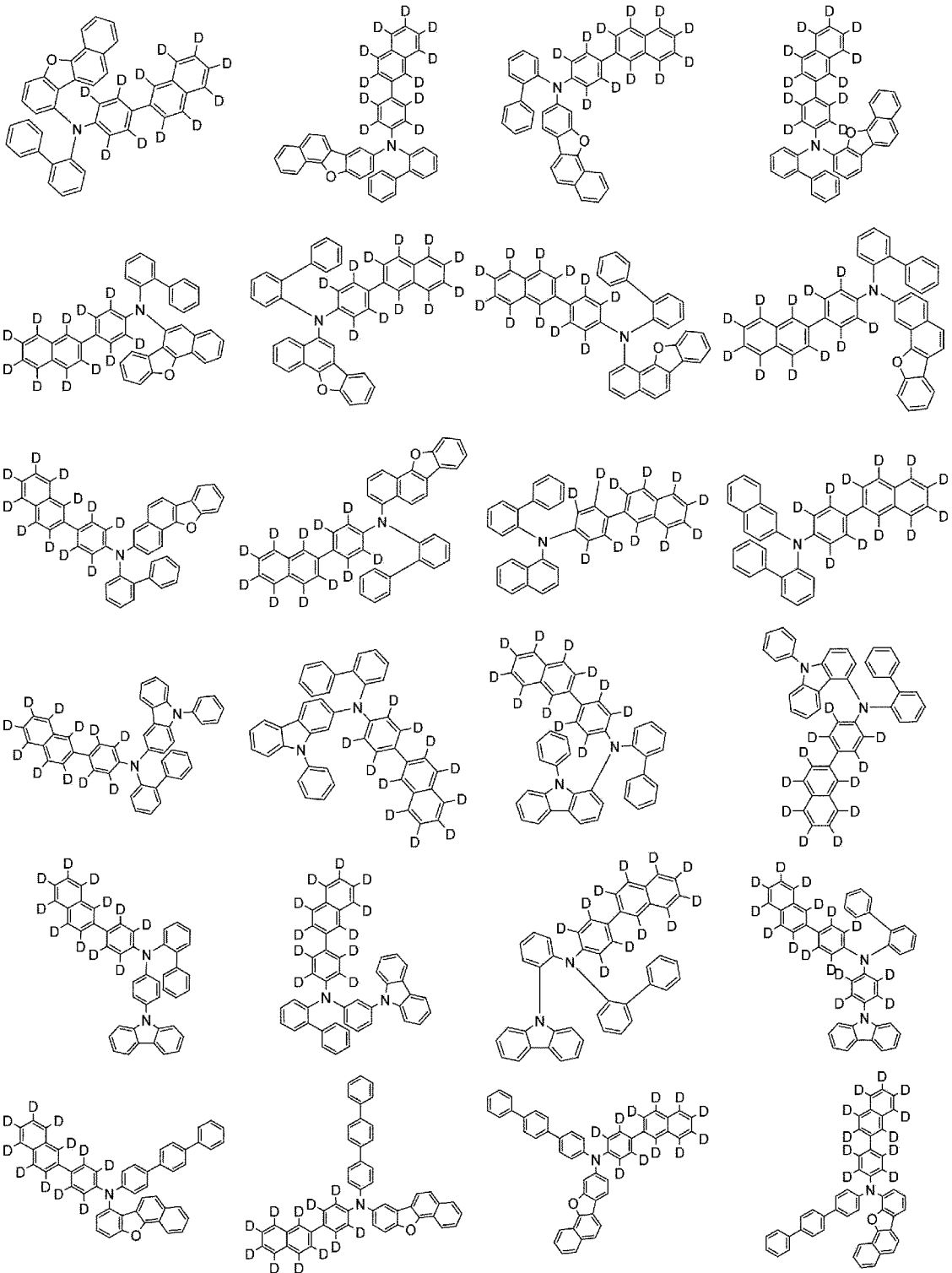


[化110]



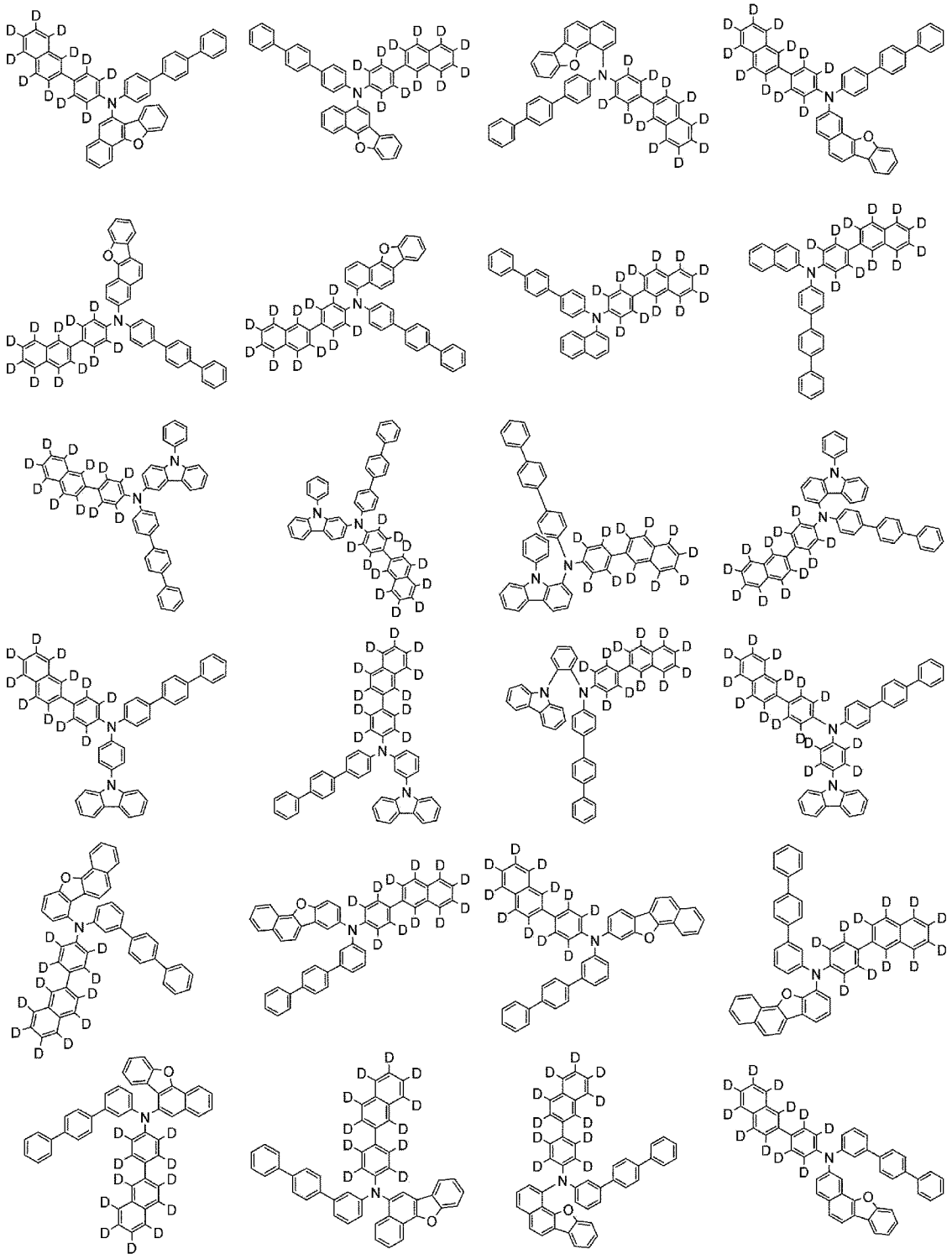
[0481]

[化111]



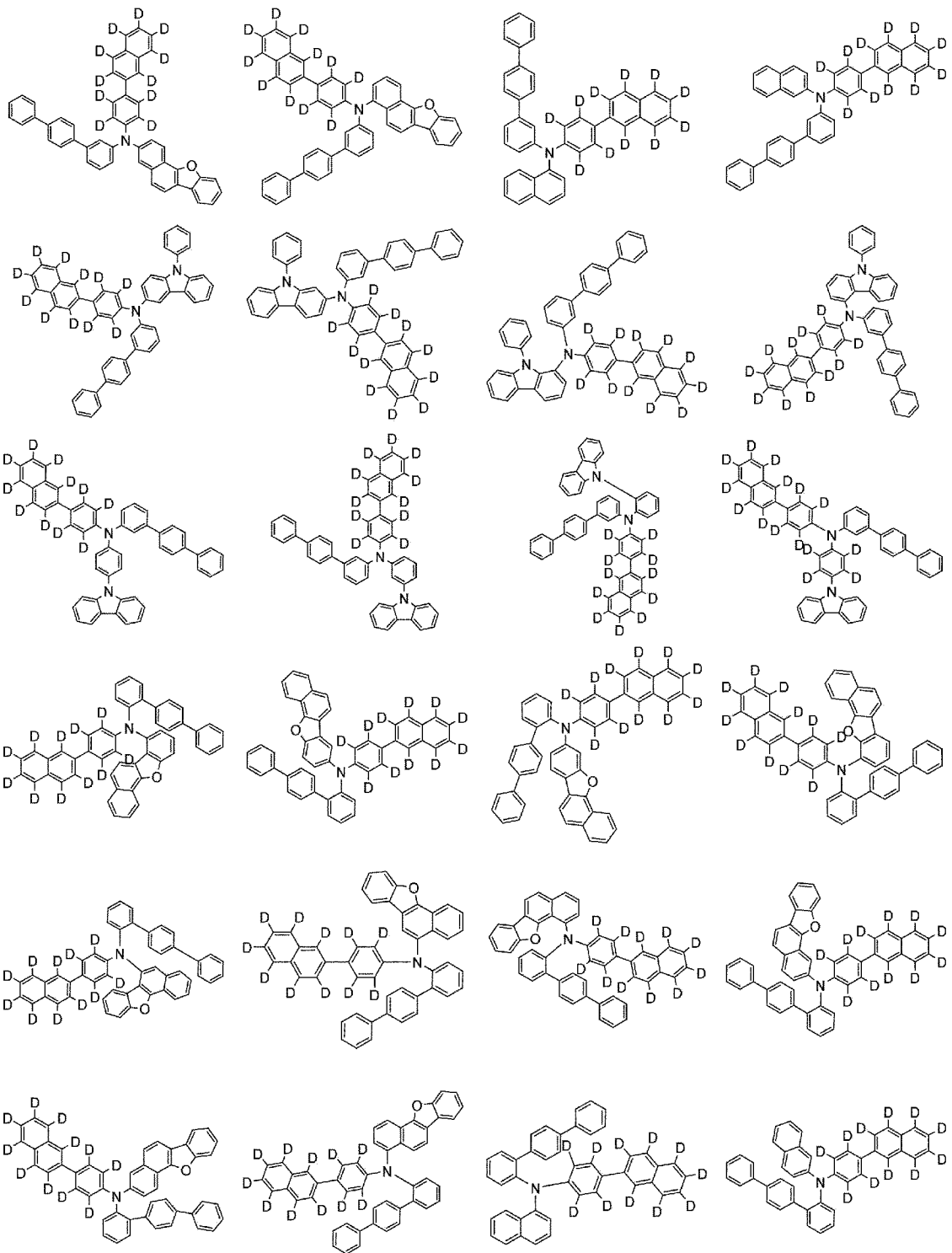
[0482]

[化112]



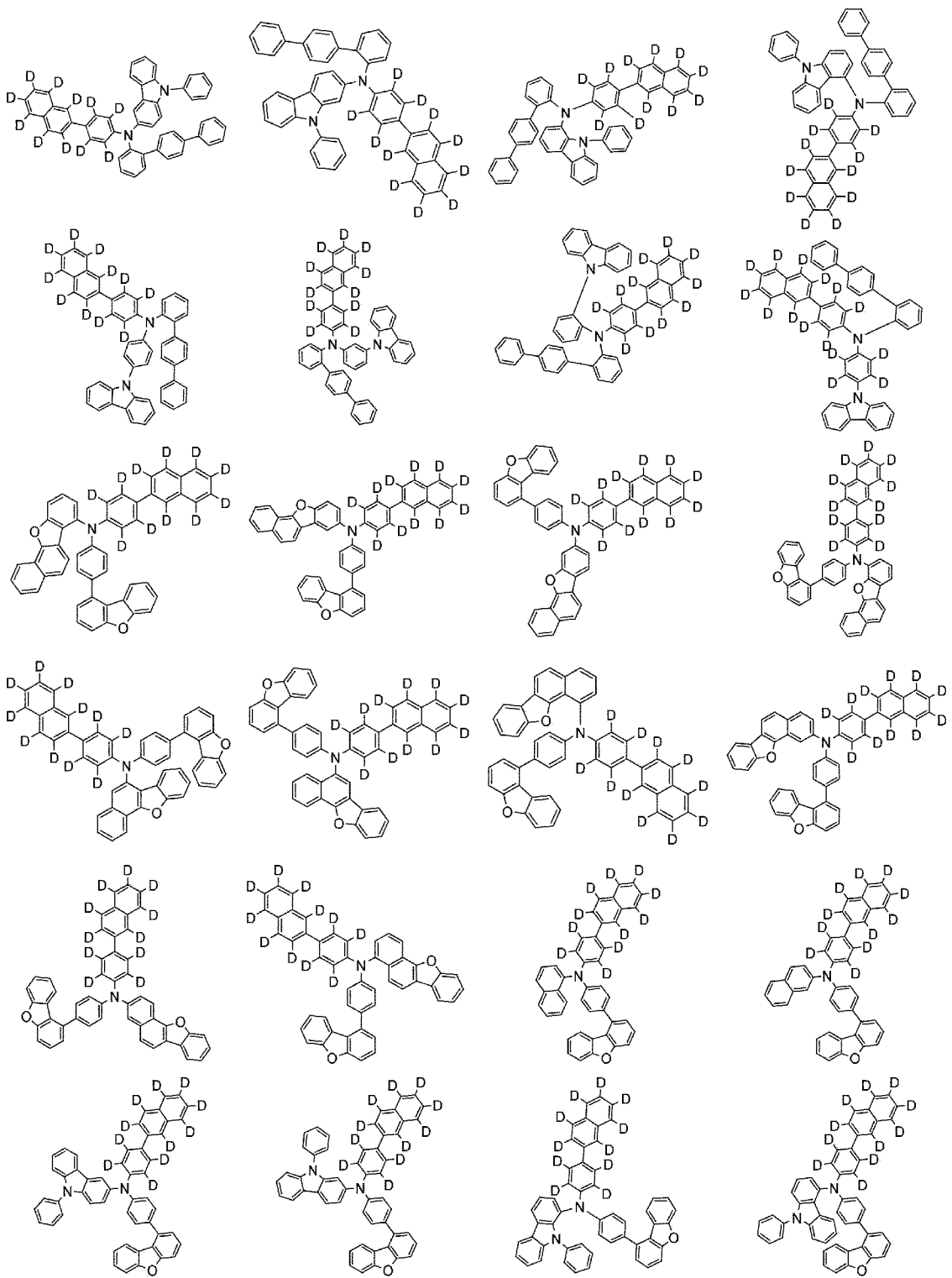
[0483]

[化113]



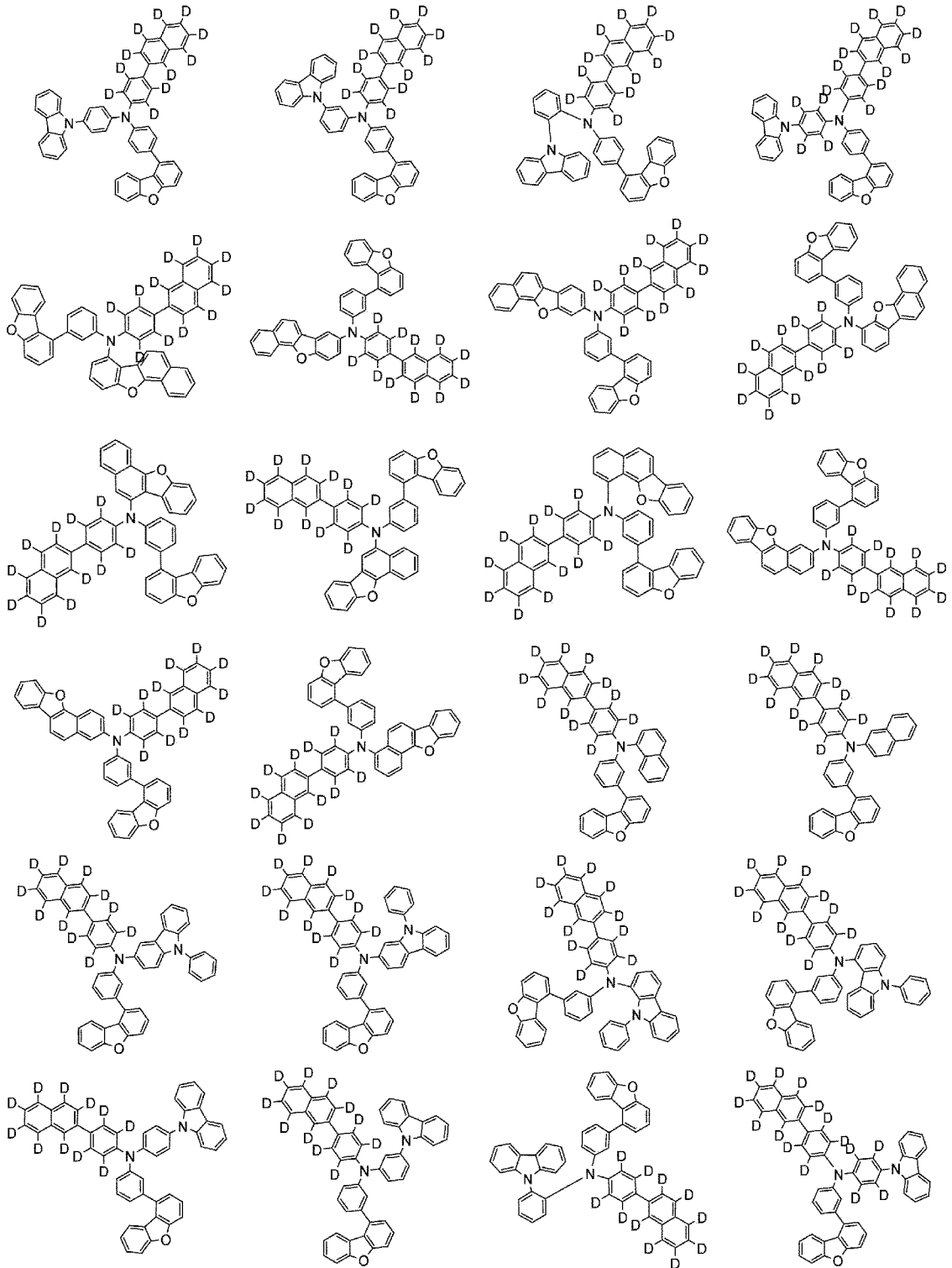
[0484]

[化114]



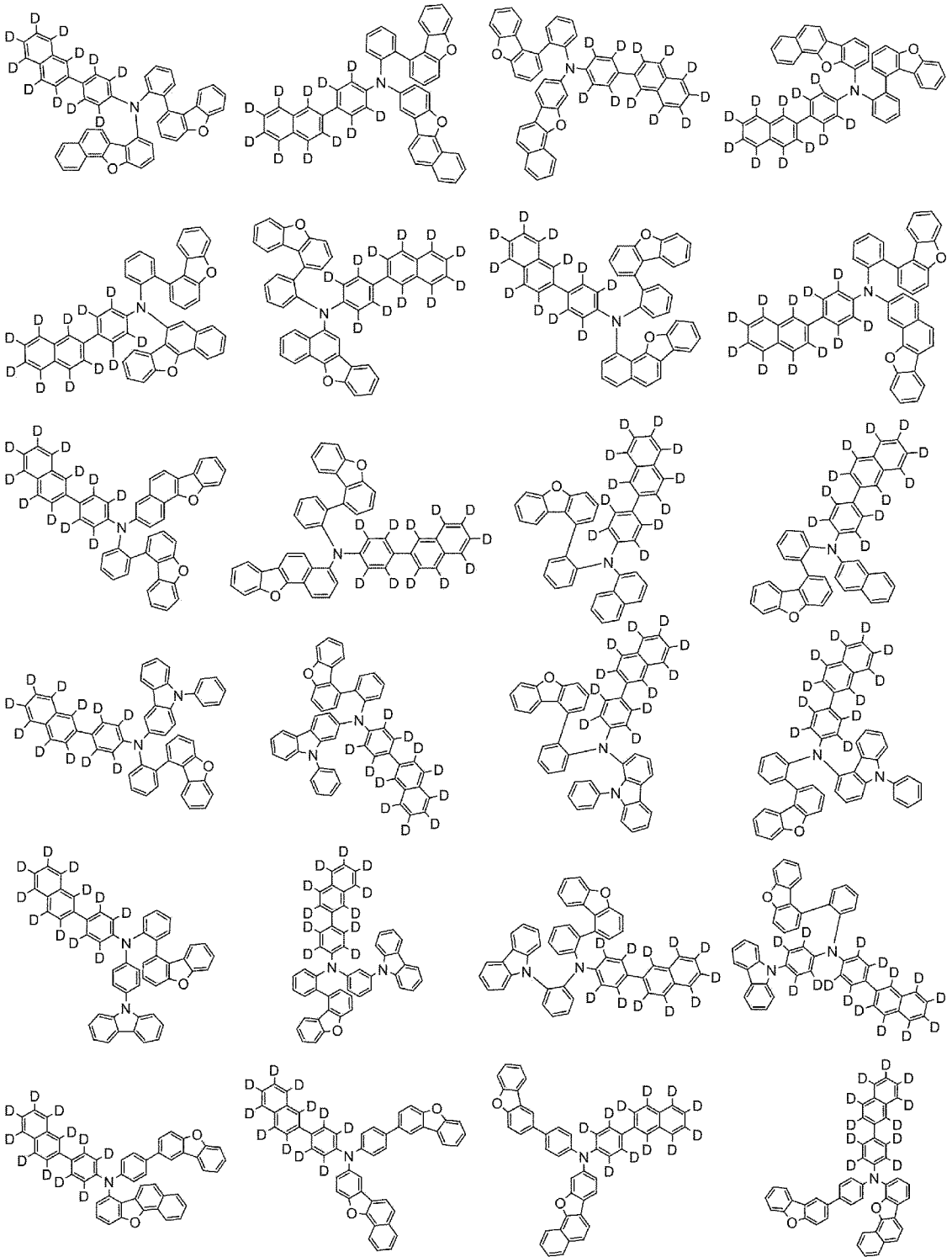
[0485]

[化115]



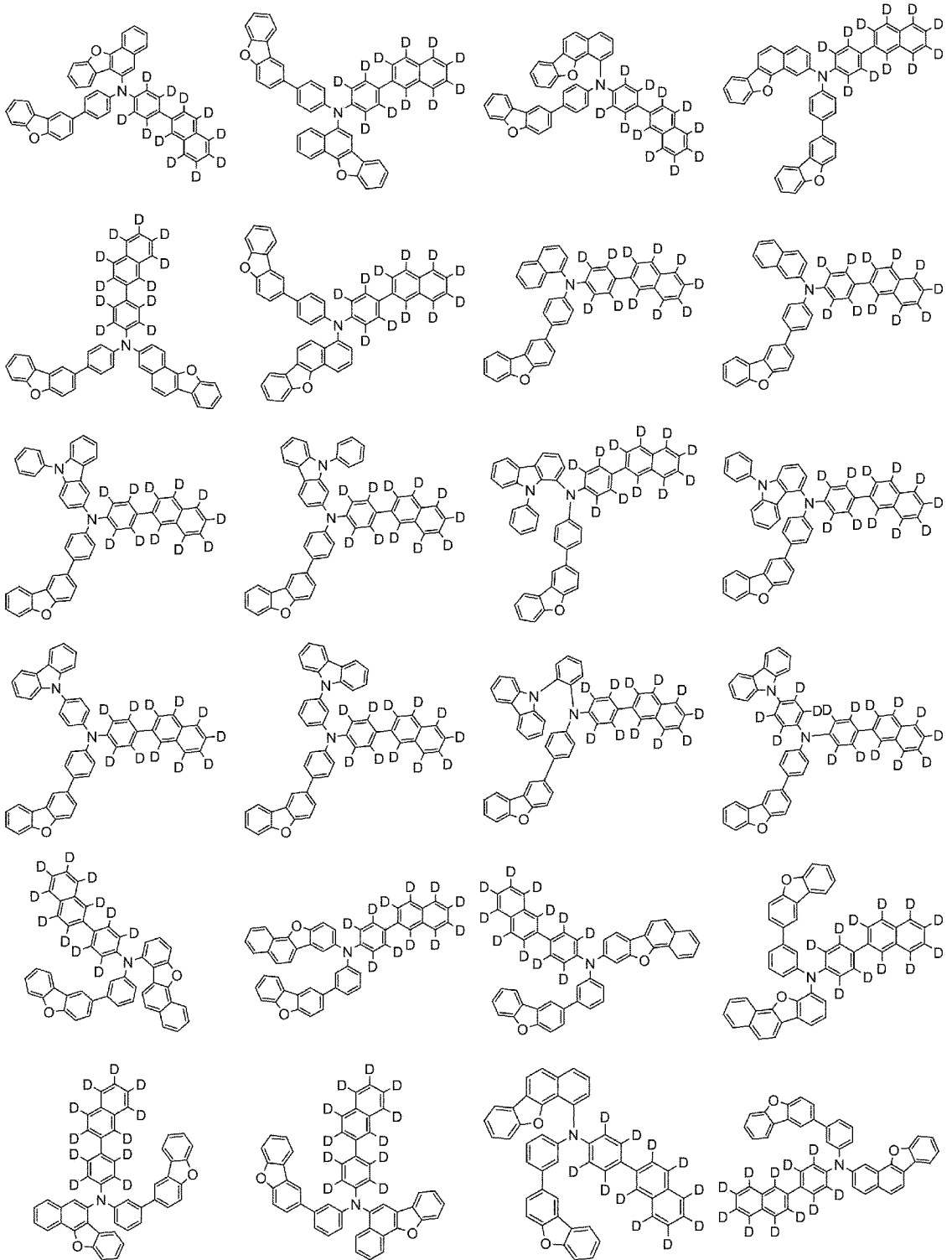
[0486]

[化116]



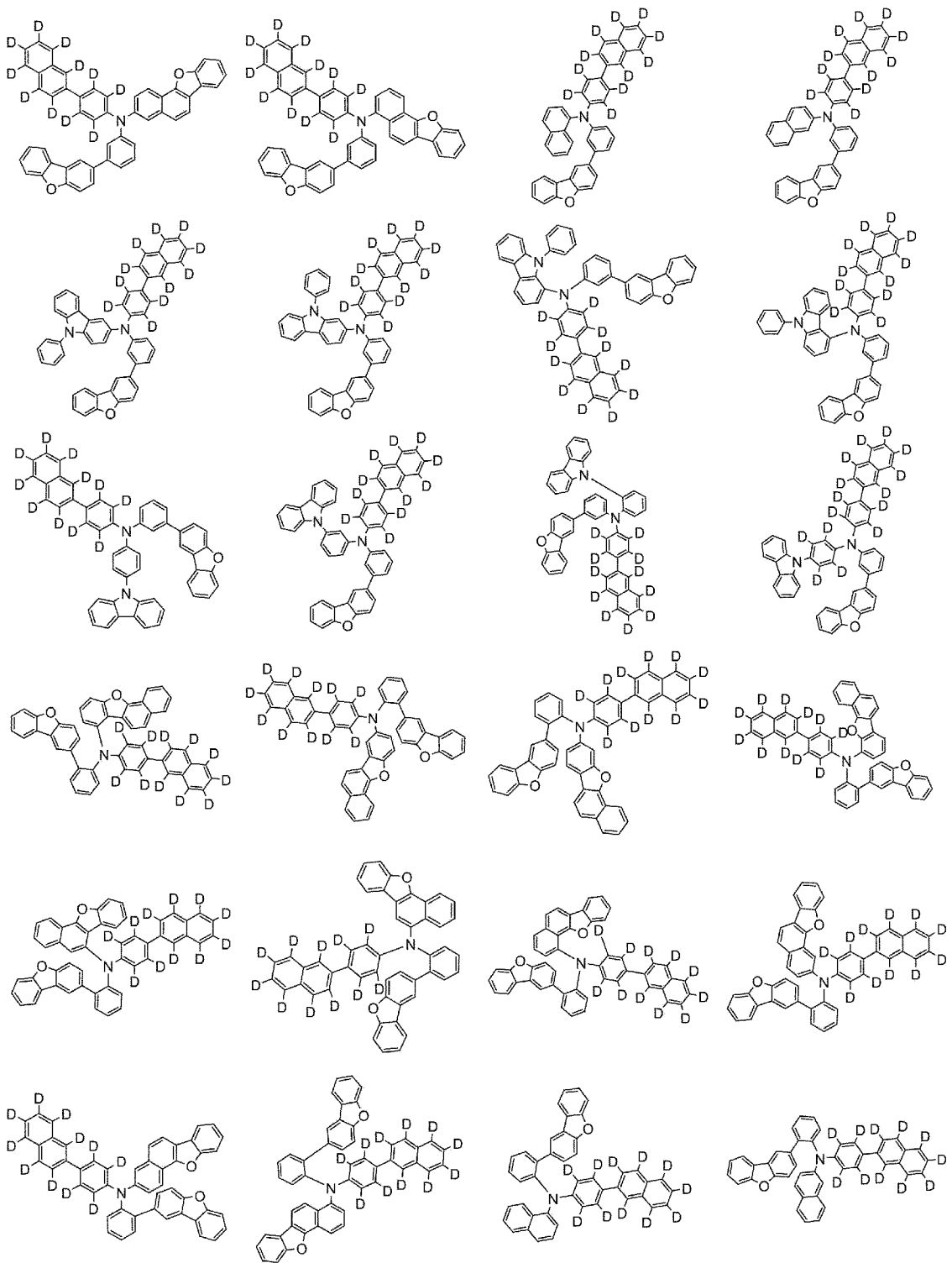
[0487]

[化117]



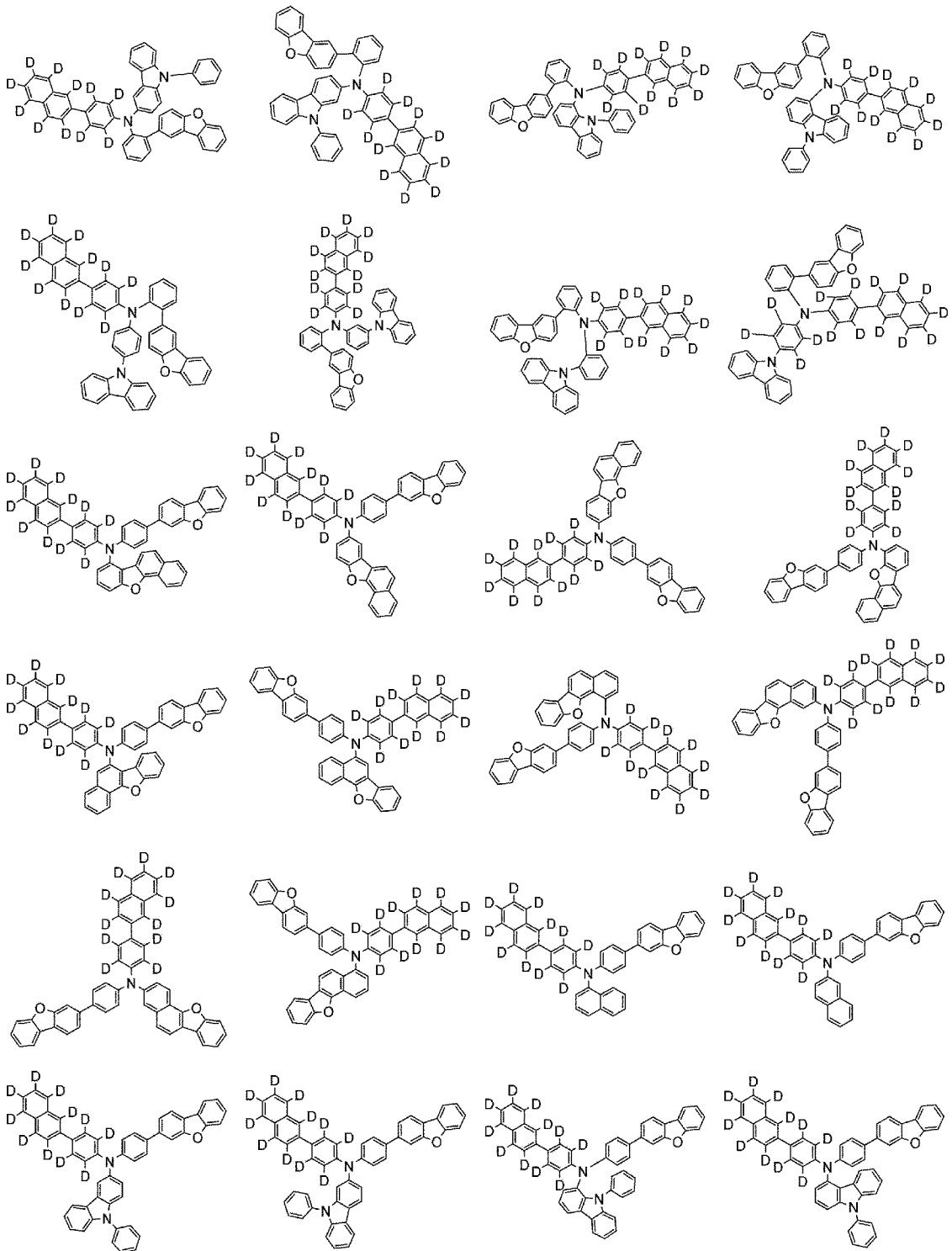
[0488]

[化118]



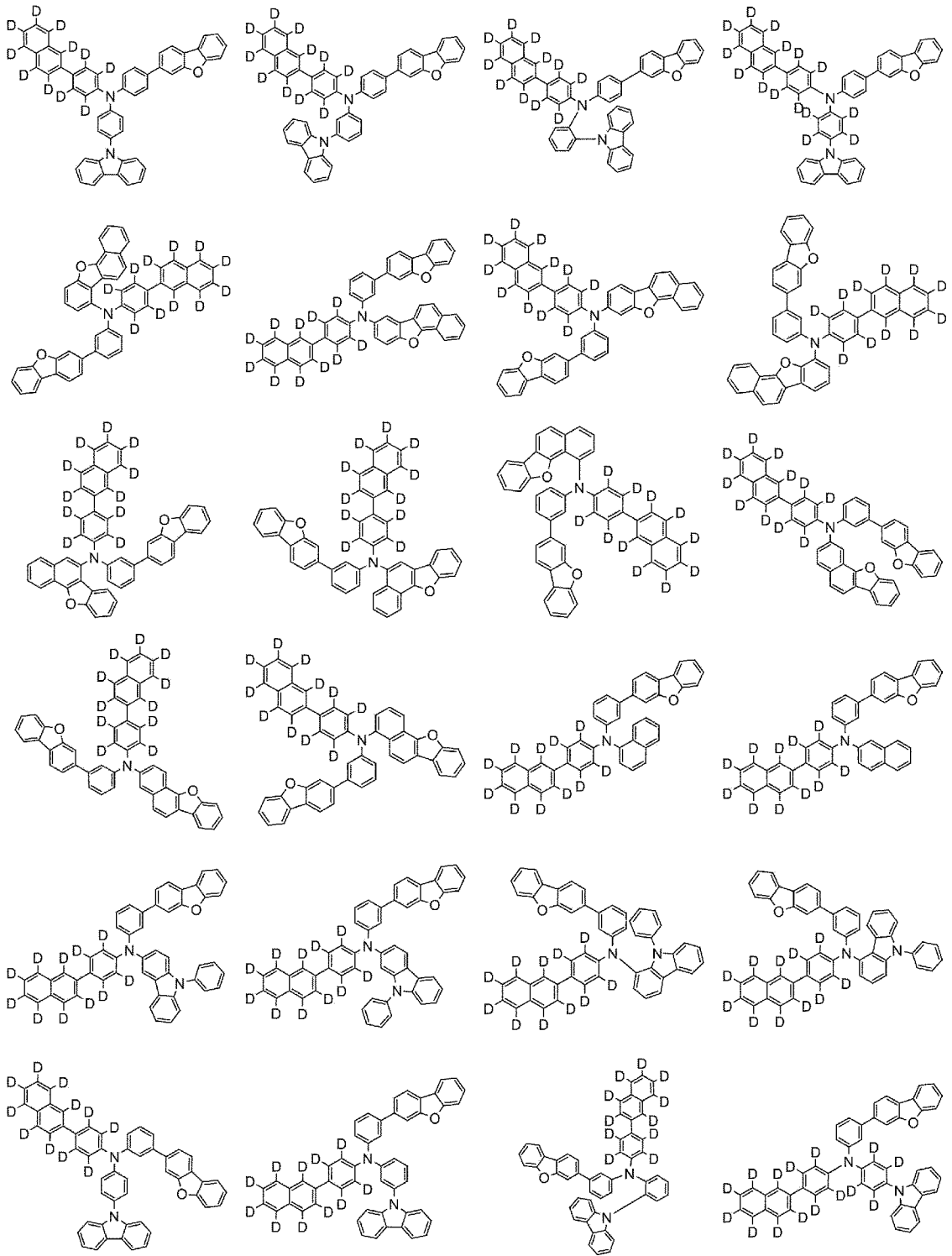
[0489]

[化119]



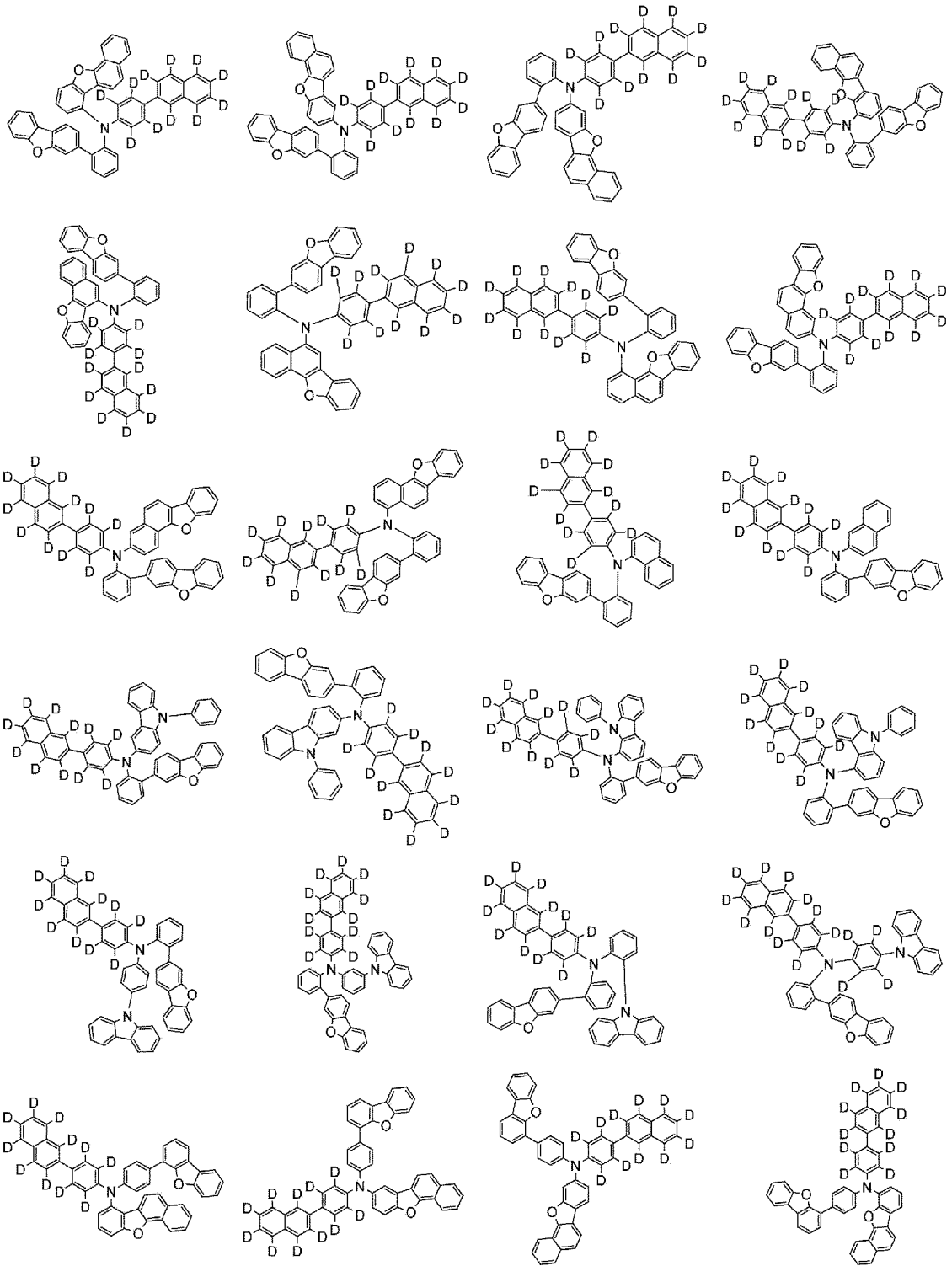
[0490]

[化120]



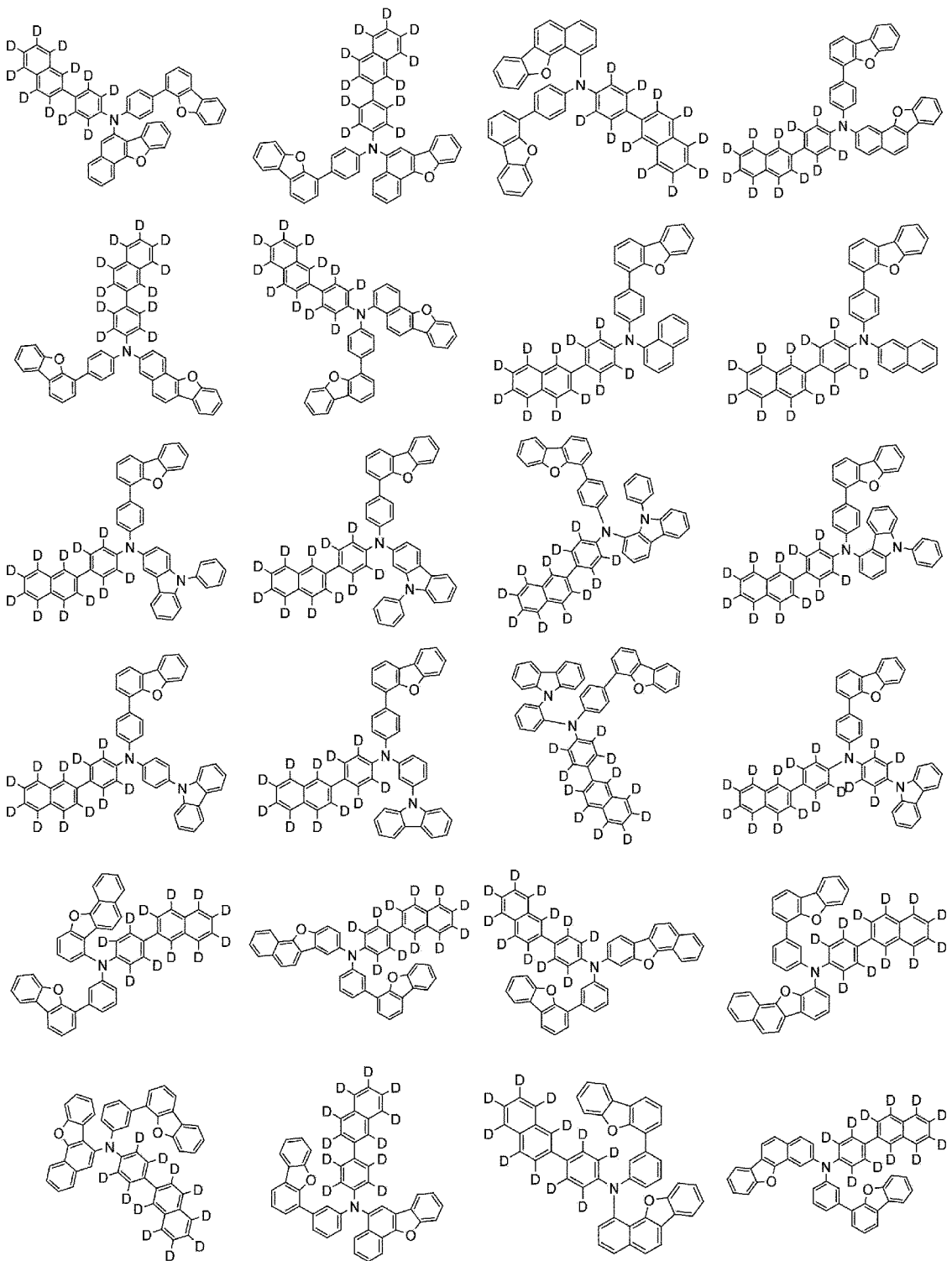
[0491]

[化121]



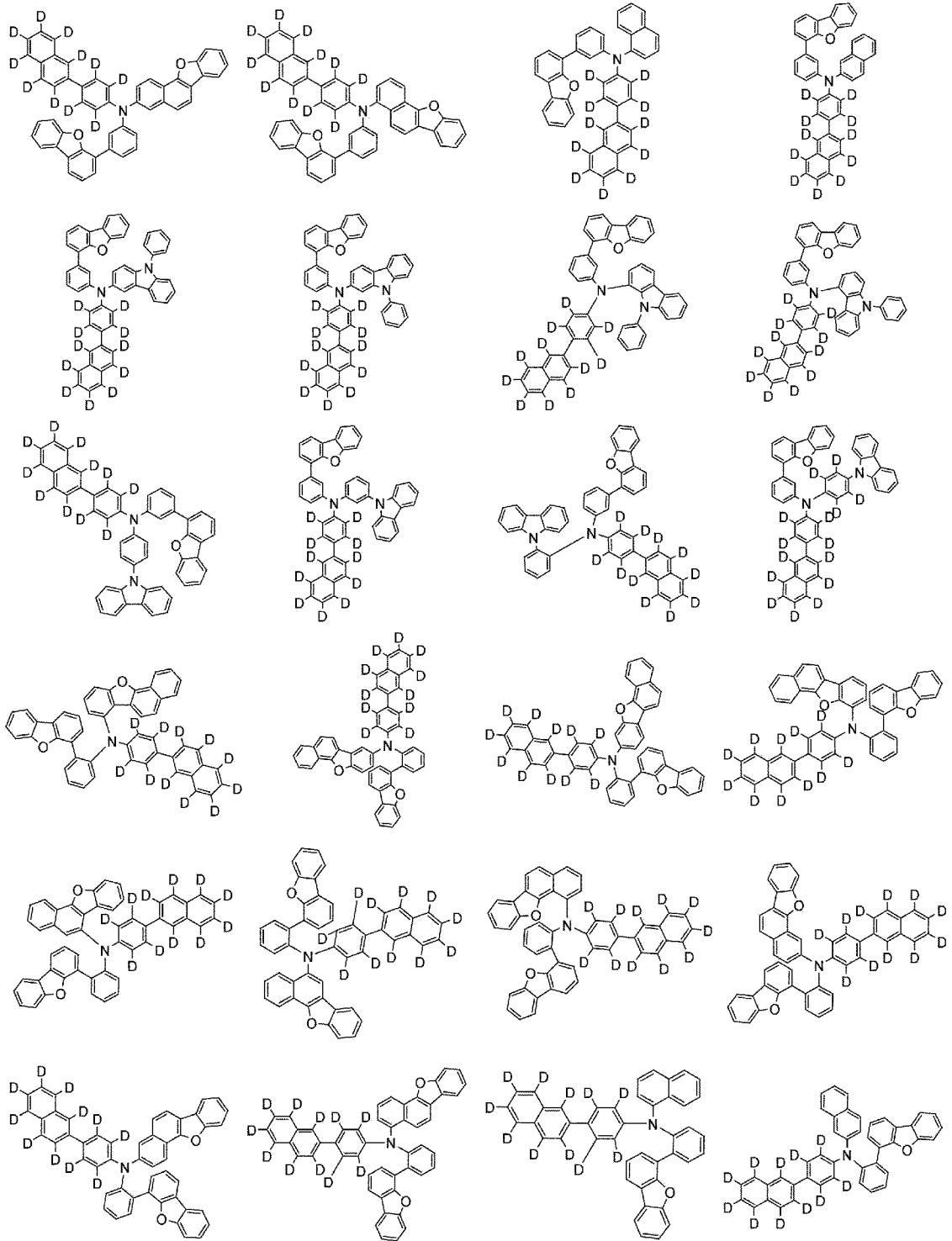
[0492]

[化122]



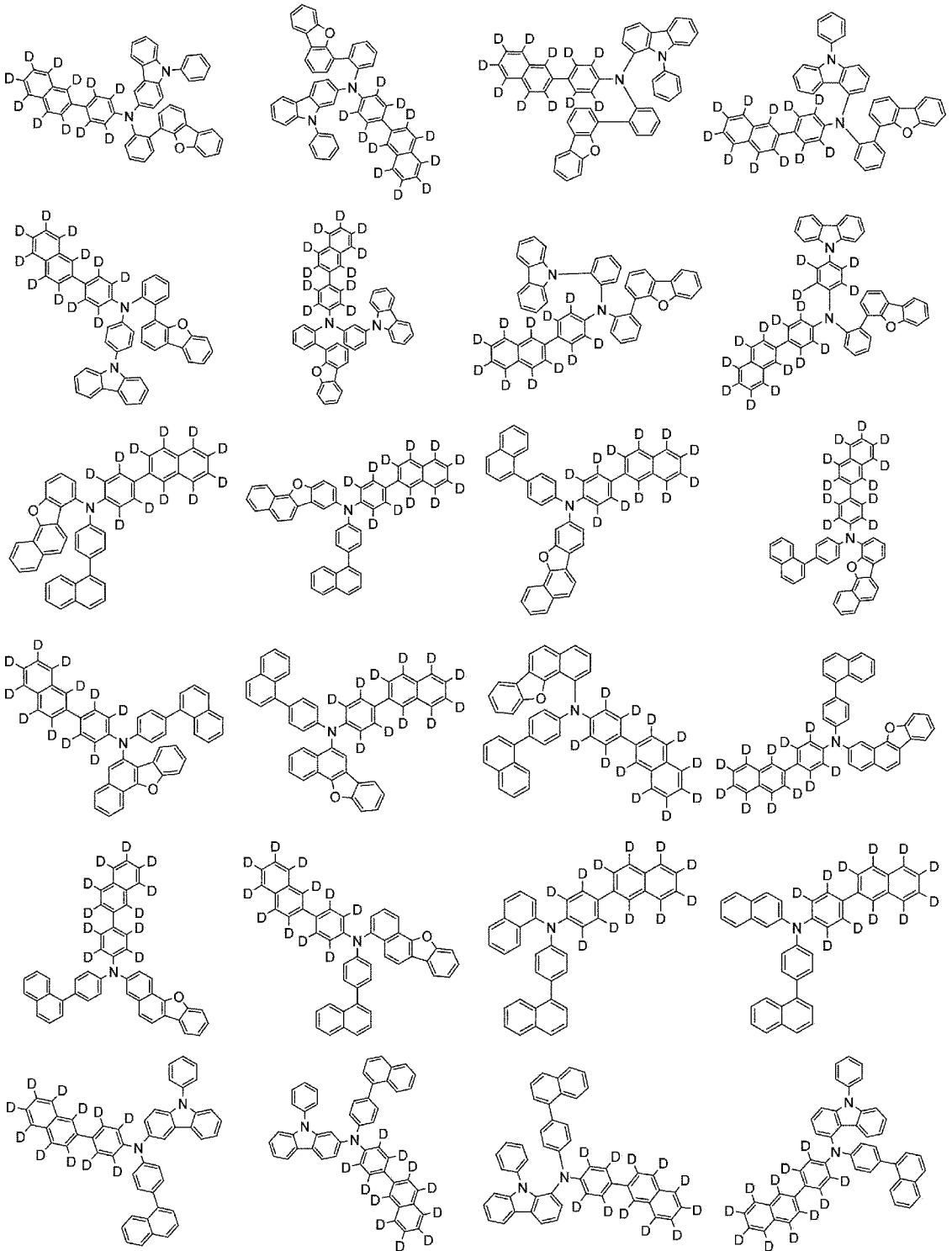
[0493]

[化123]



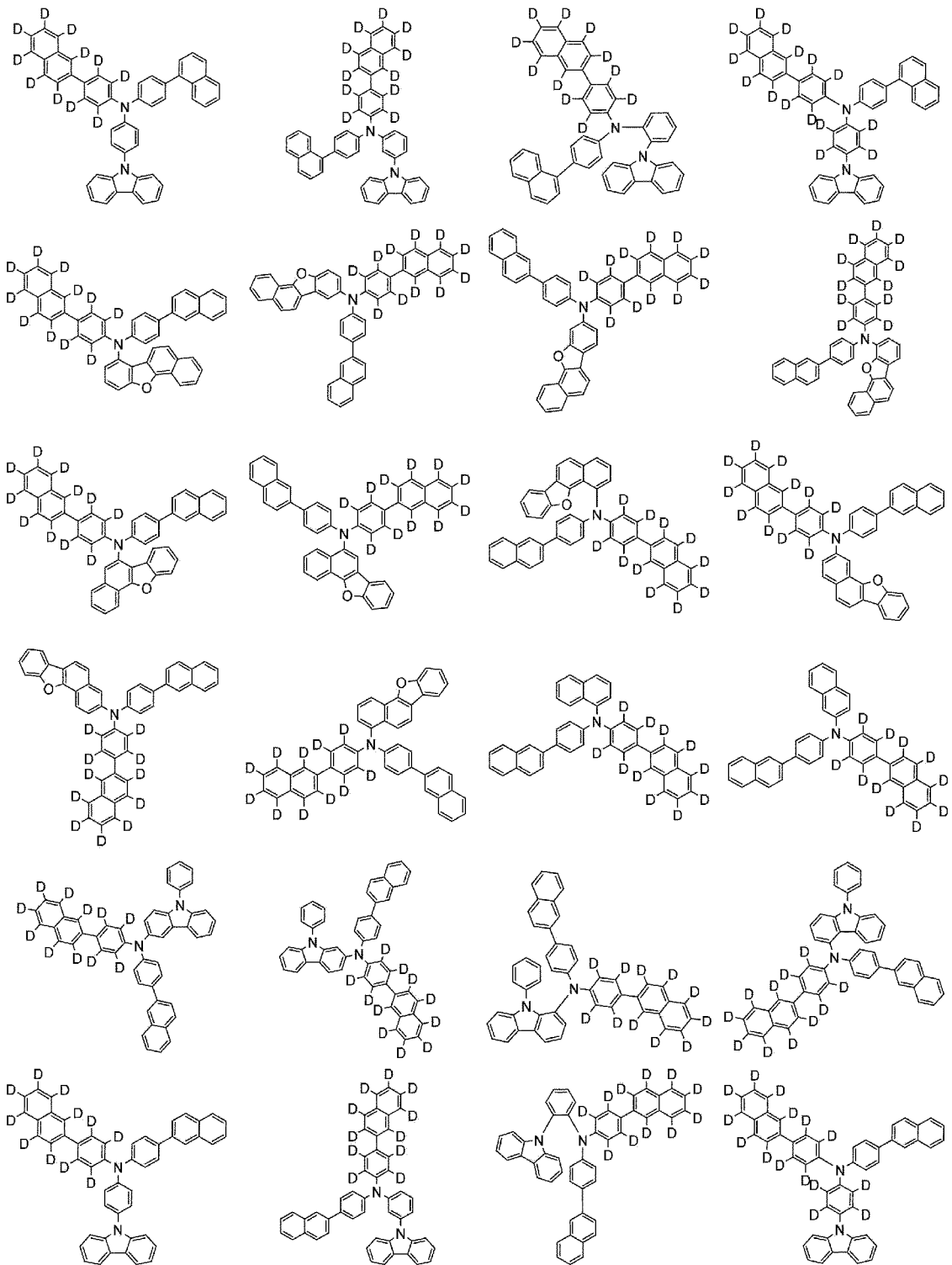
[0494]

[化124]



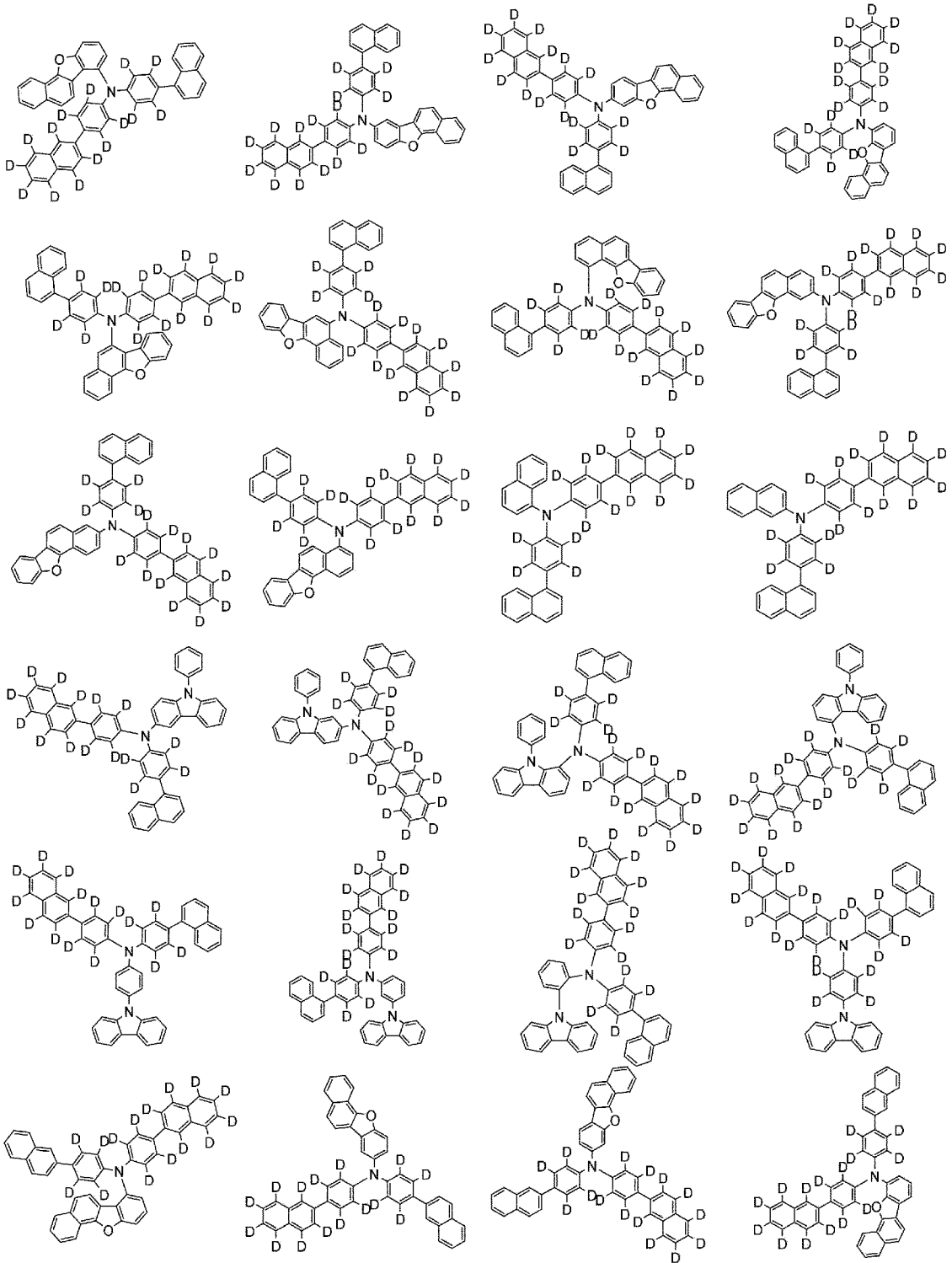
[0495]

[化125]



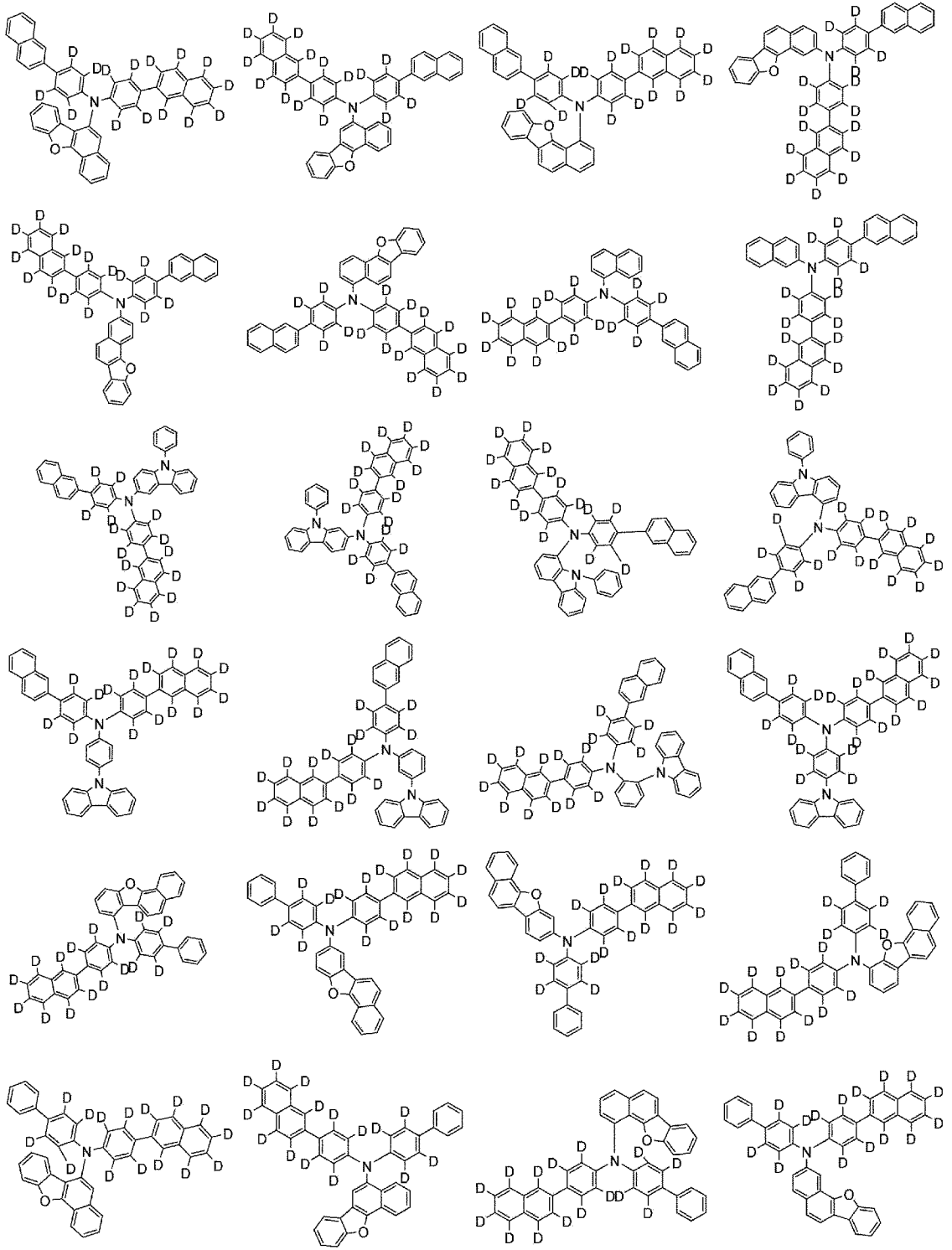
[0496]

[化126]



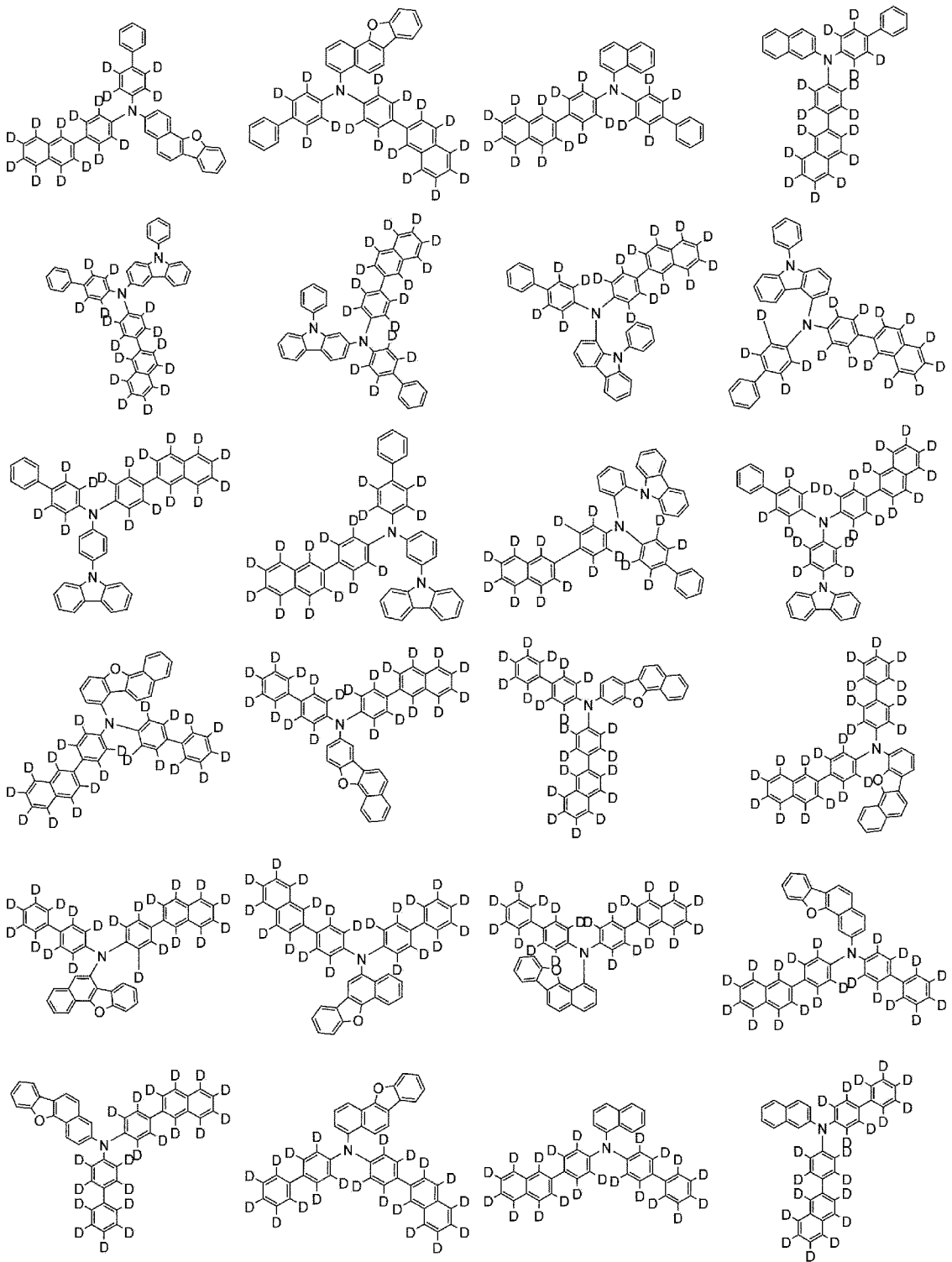
[0497]

[化127]



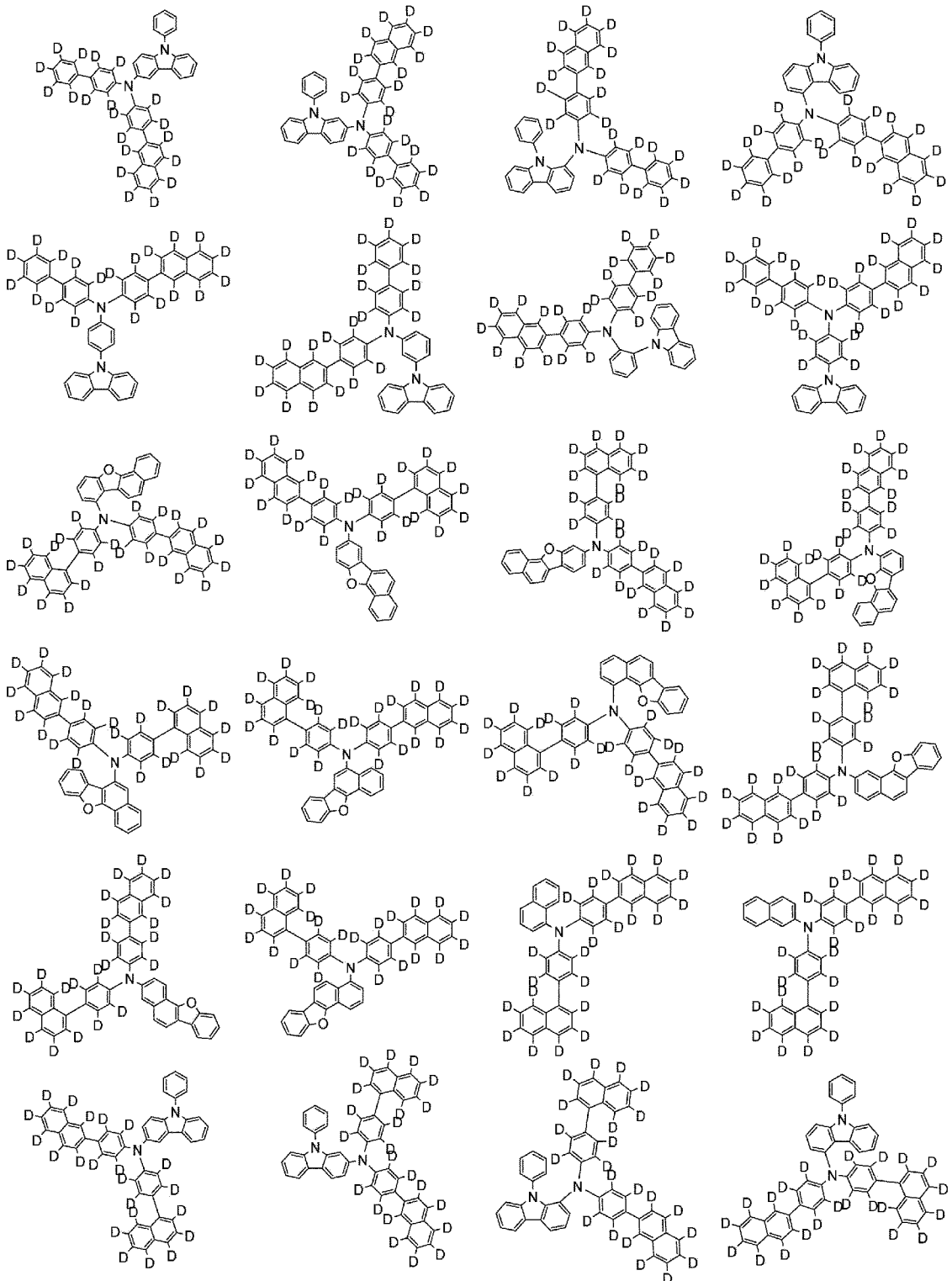
[0498]

[化128]



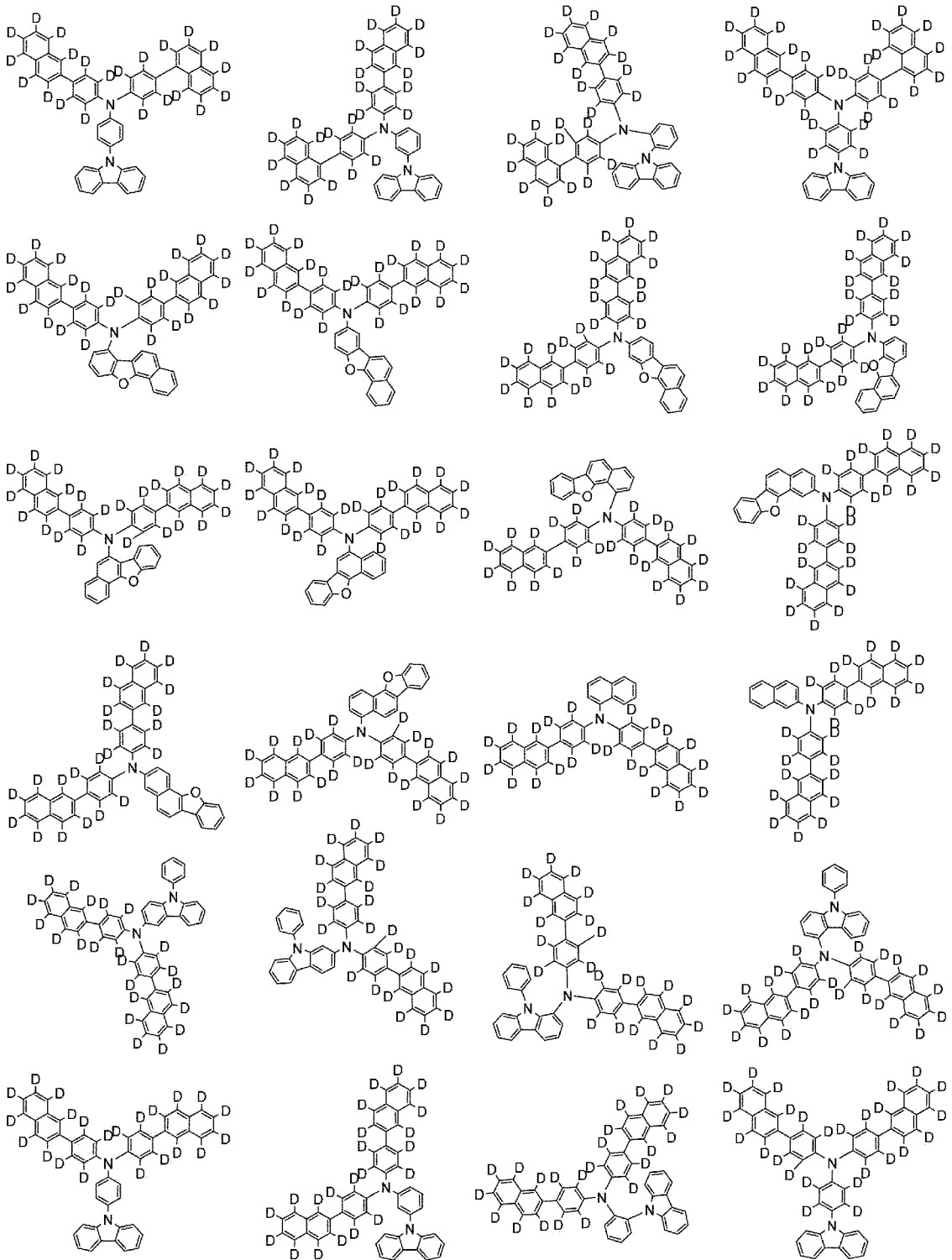
[0499]

[化129]



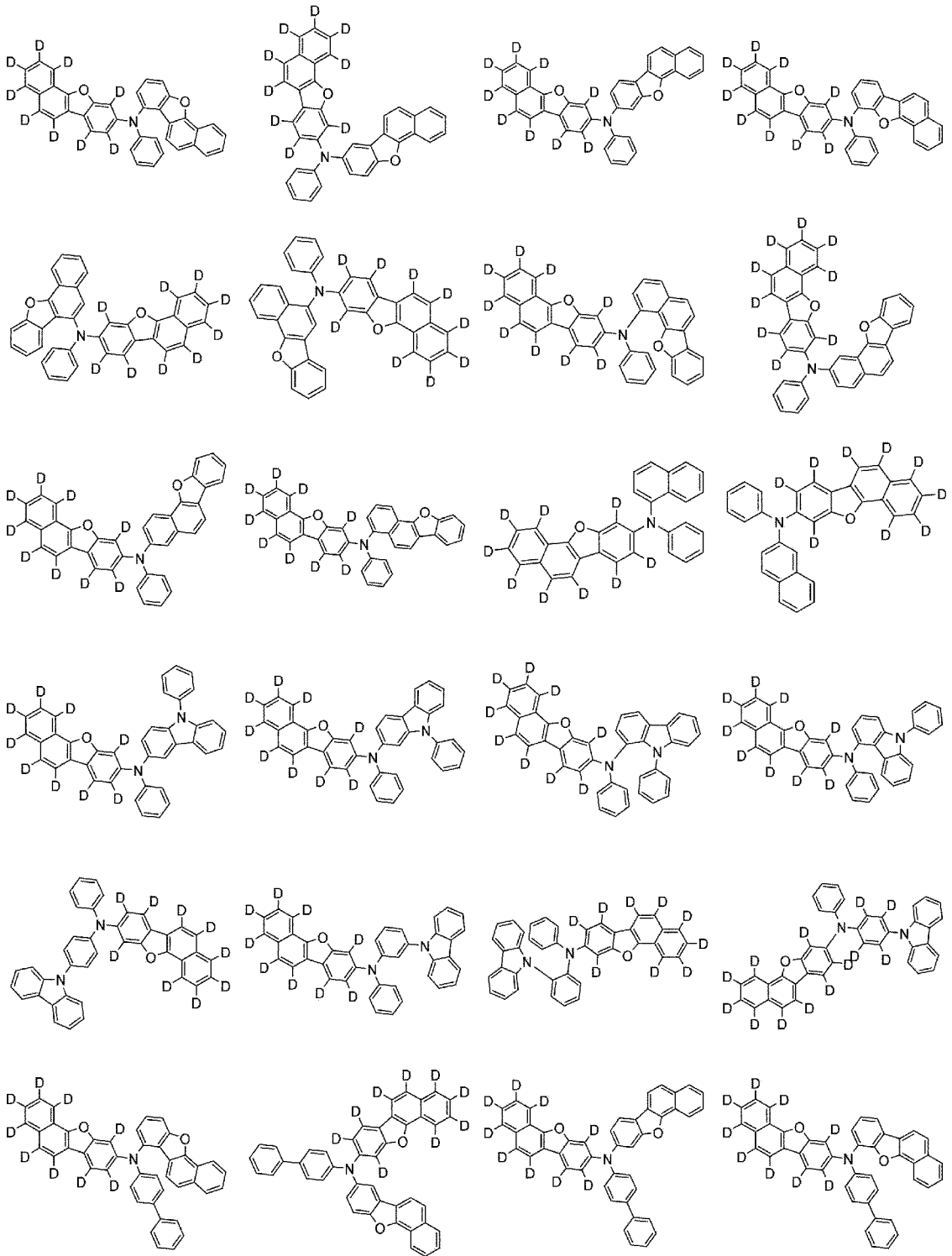
[0500]

[化130]



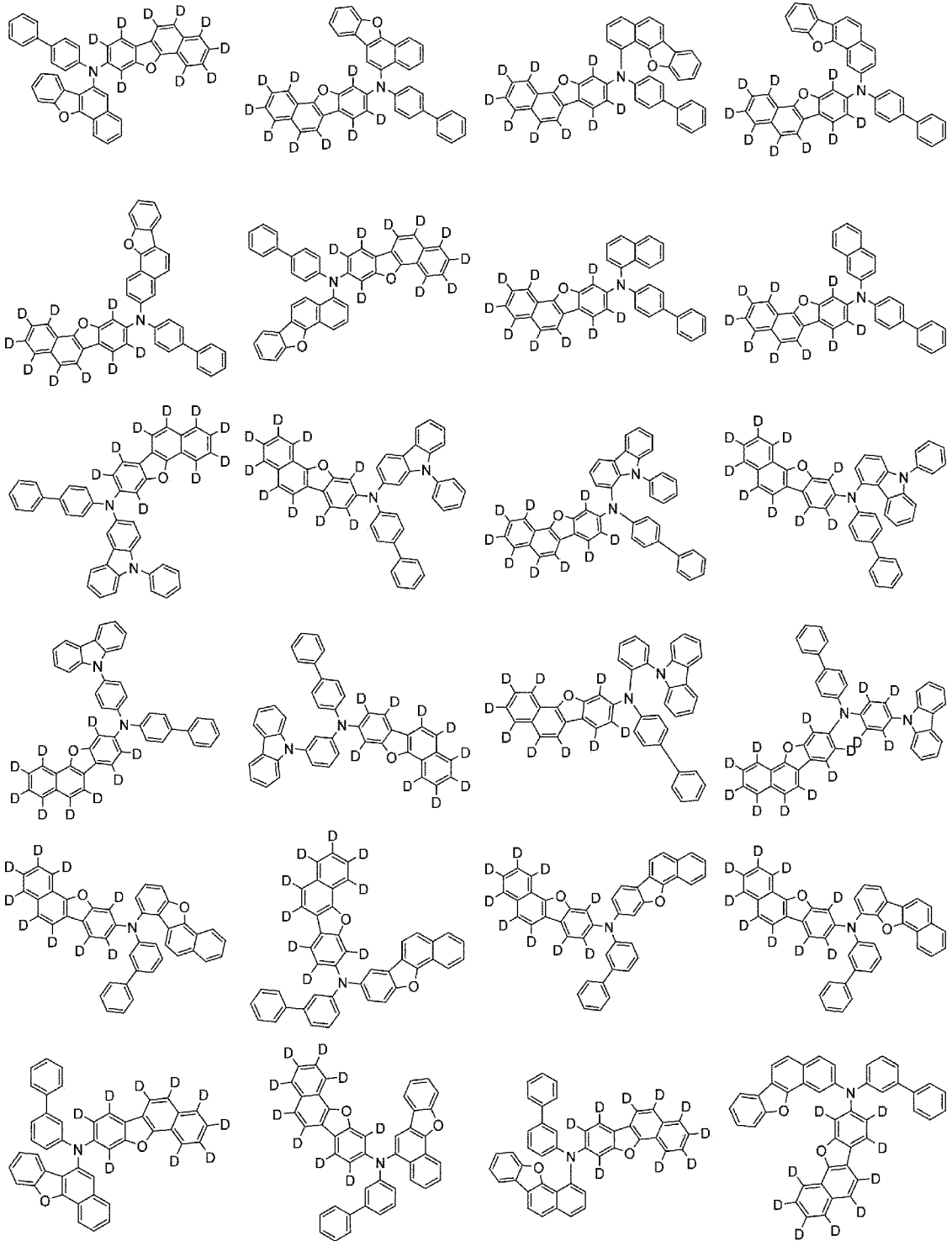
[0501]

[化131]



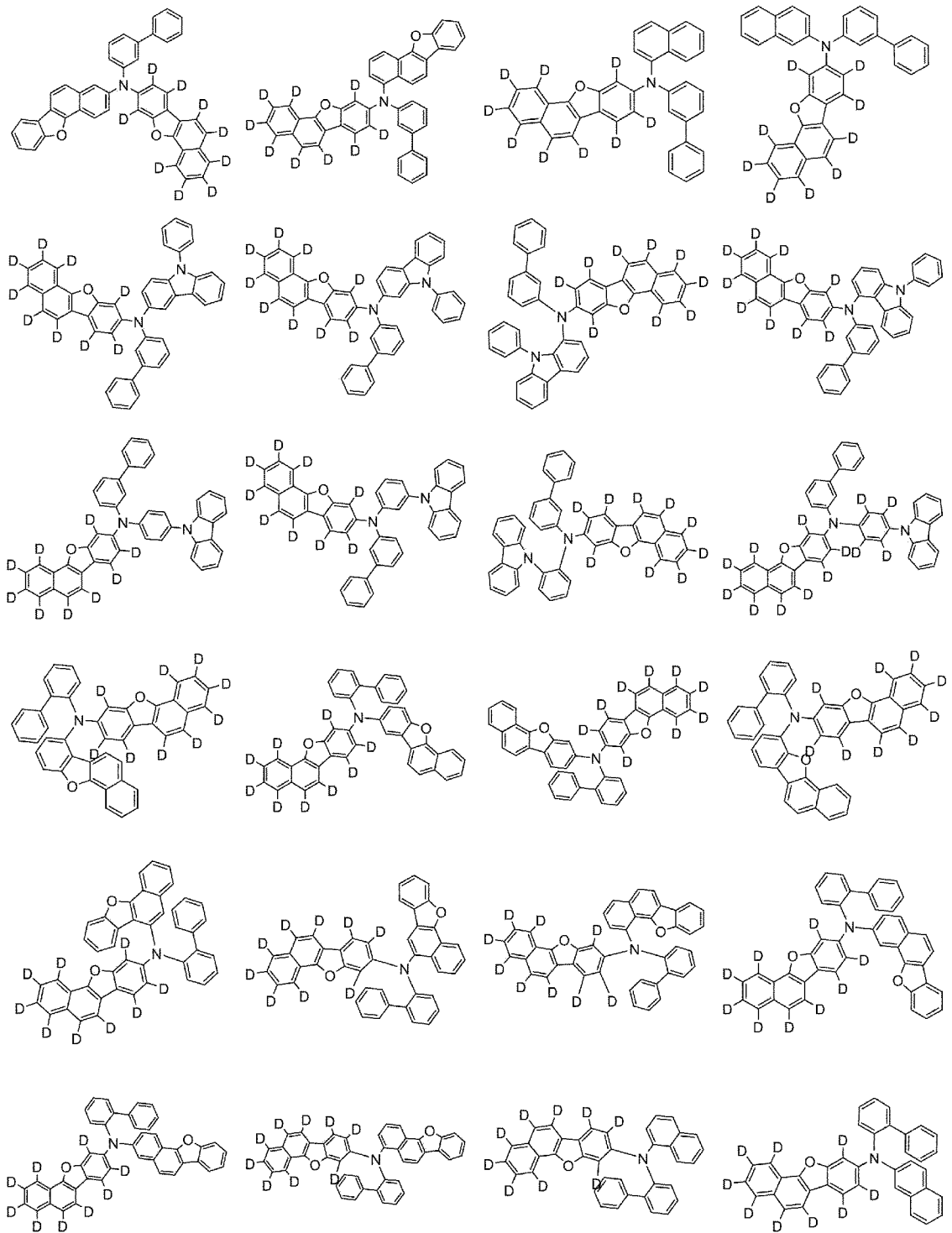
[0502]

[化132]



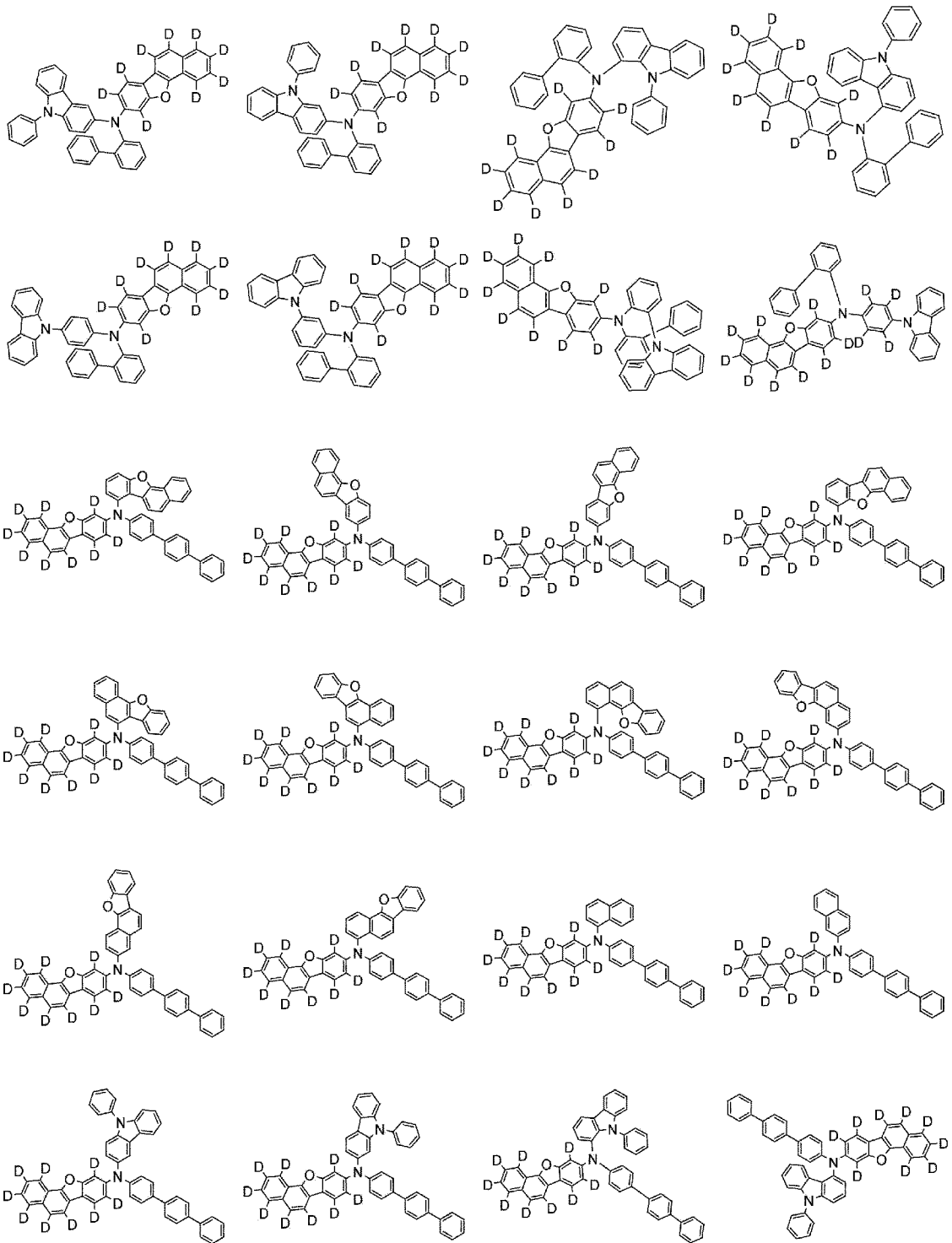
[0503]

[化133]



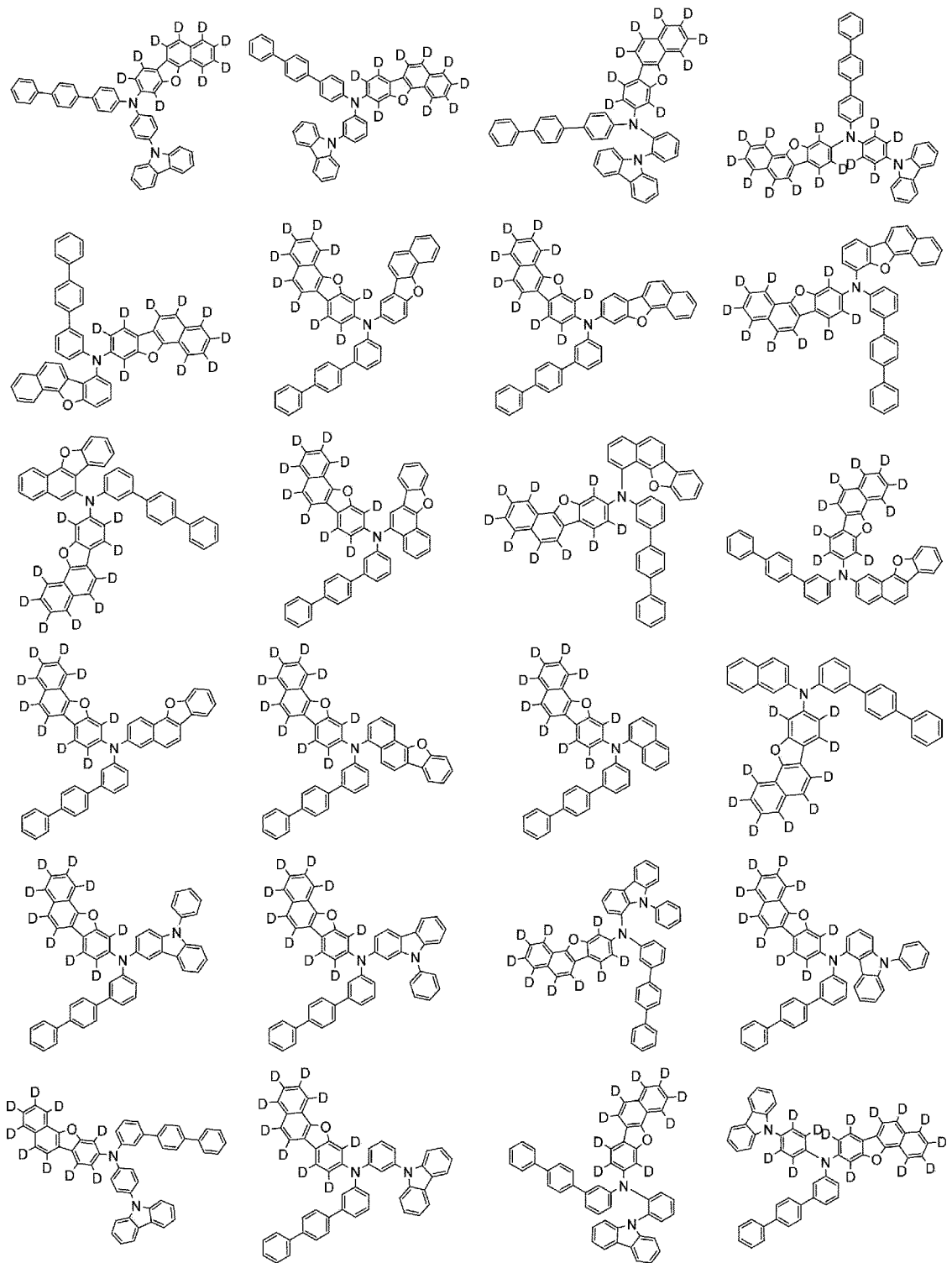
[0504]

[化134]



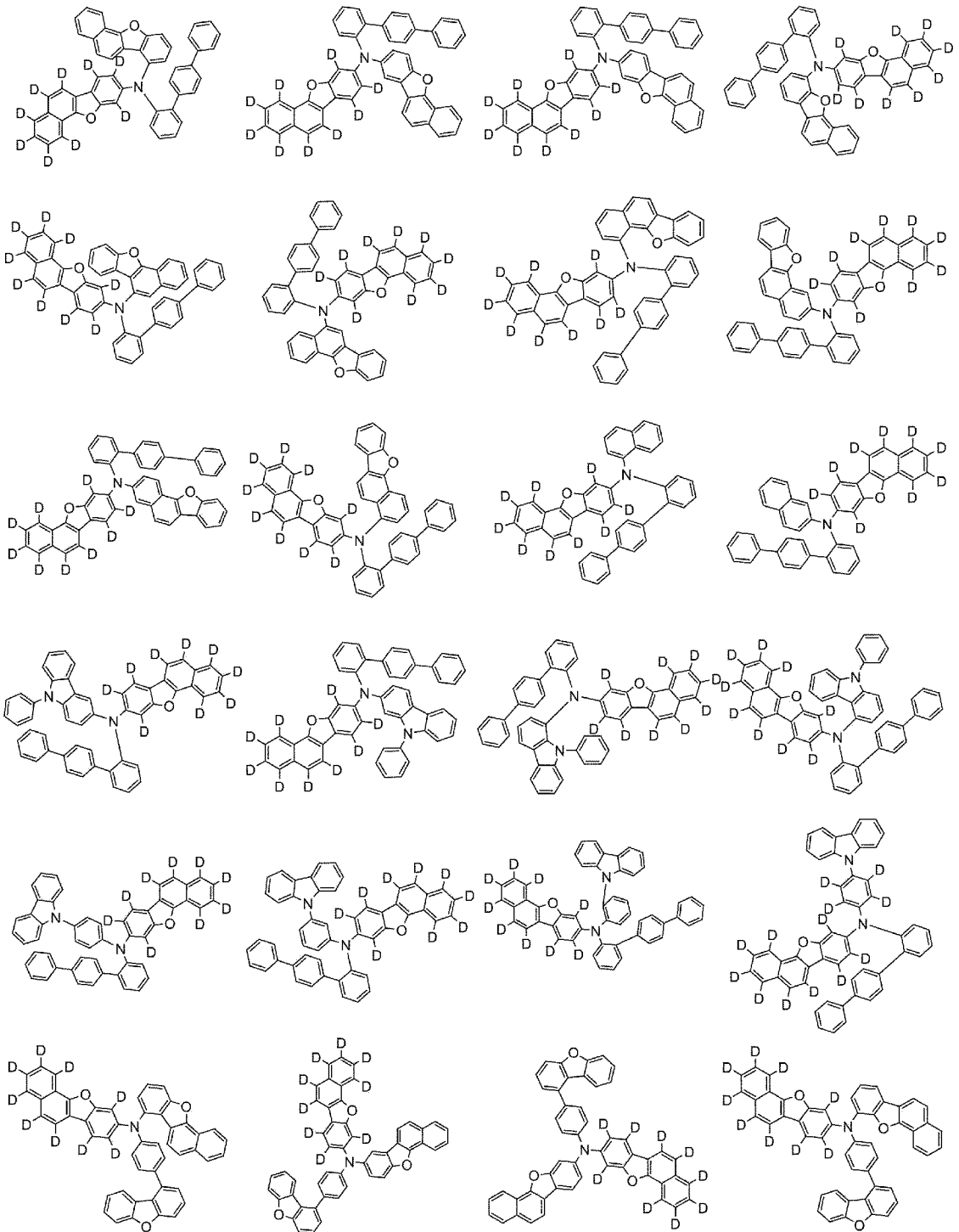
[0505]

[化135]



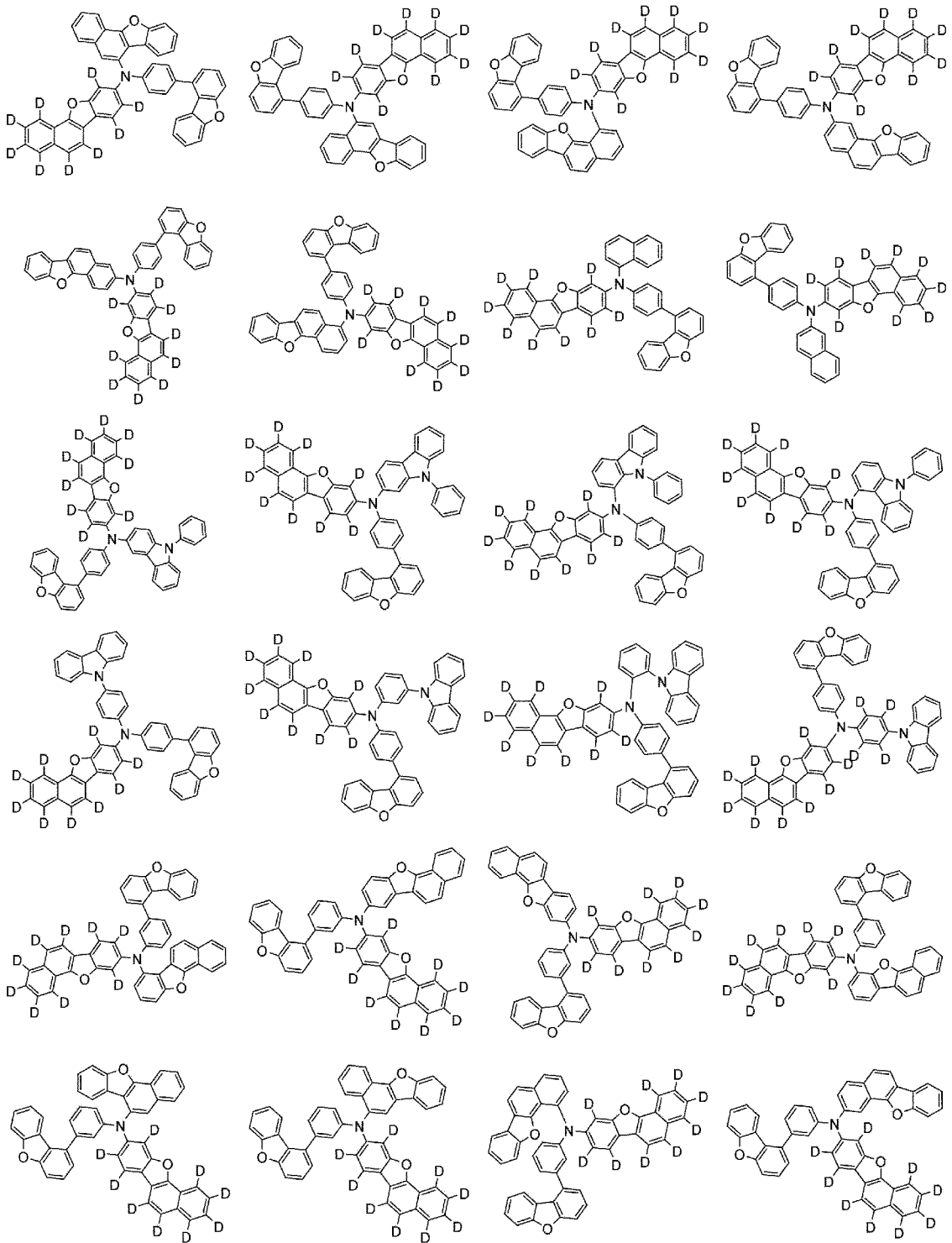
[0506]

[化136]



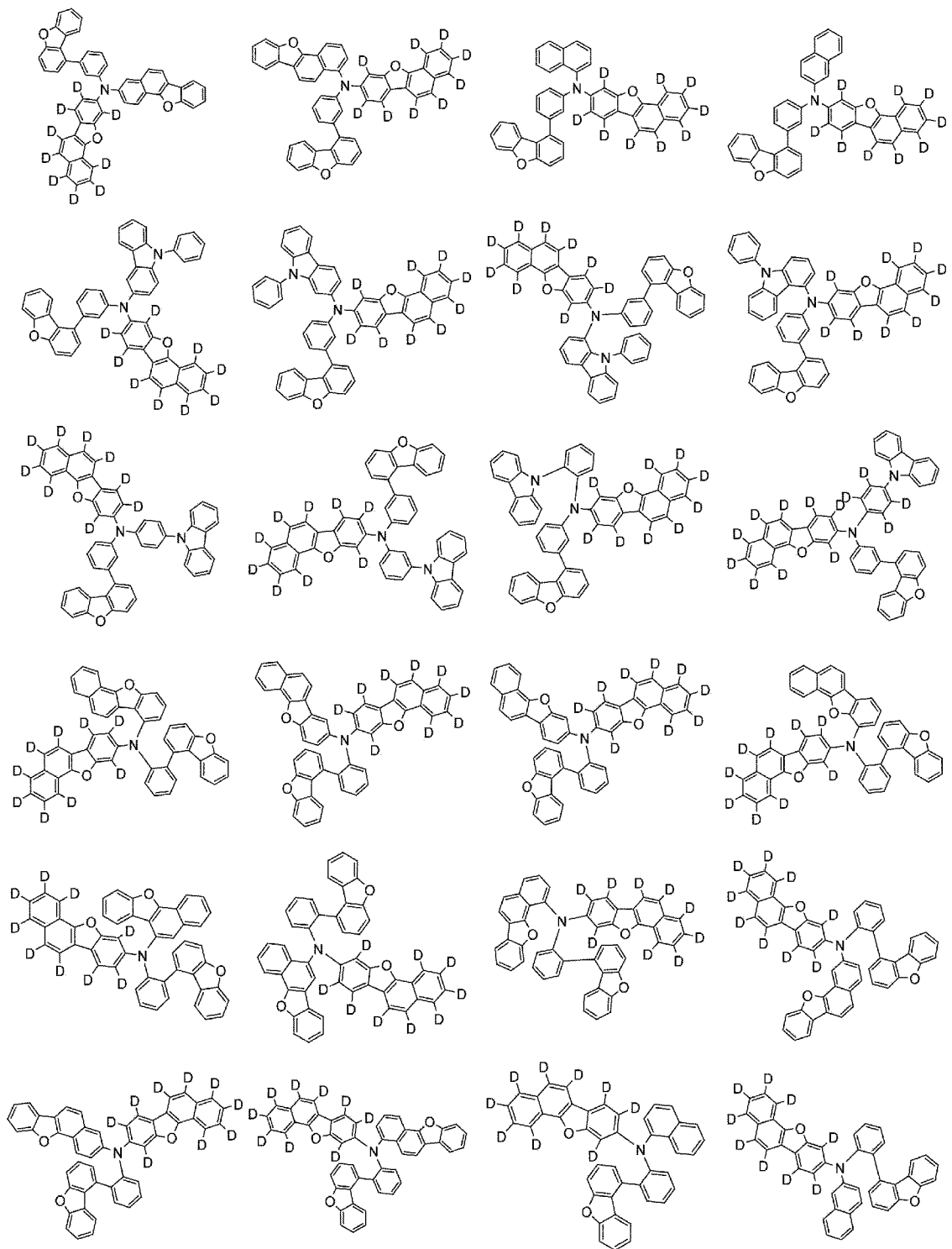
[0507]

[化137]



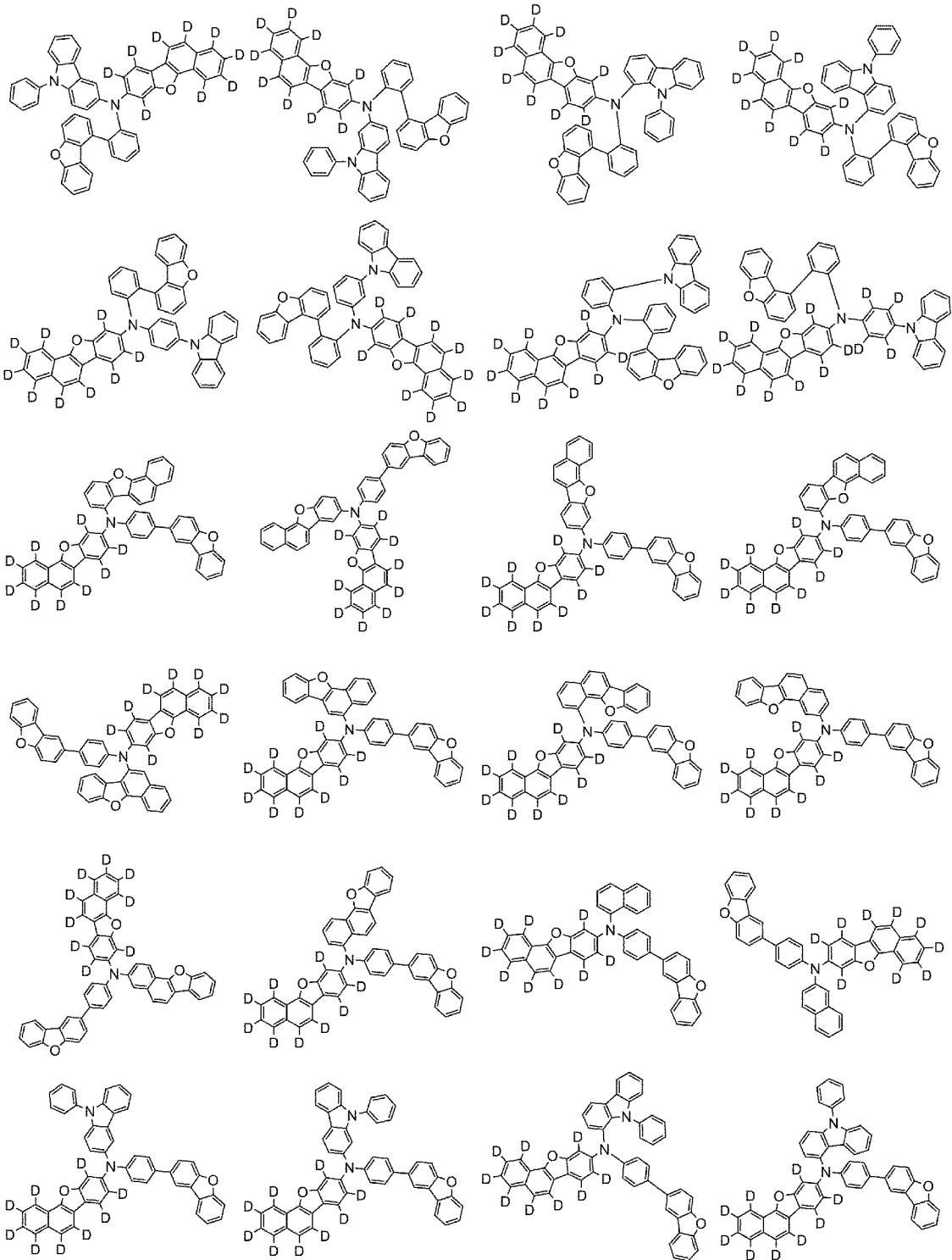
[0508]

[化138]



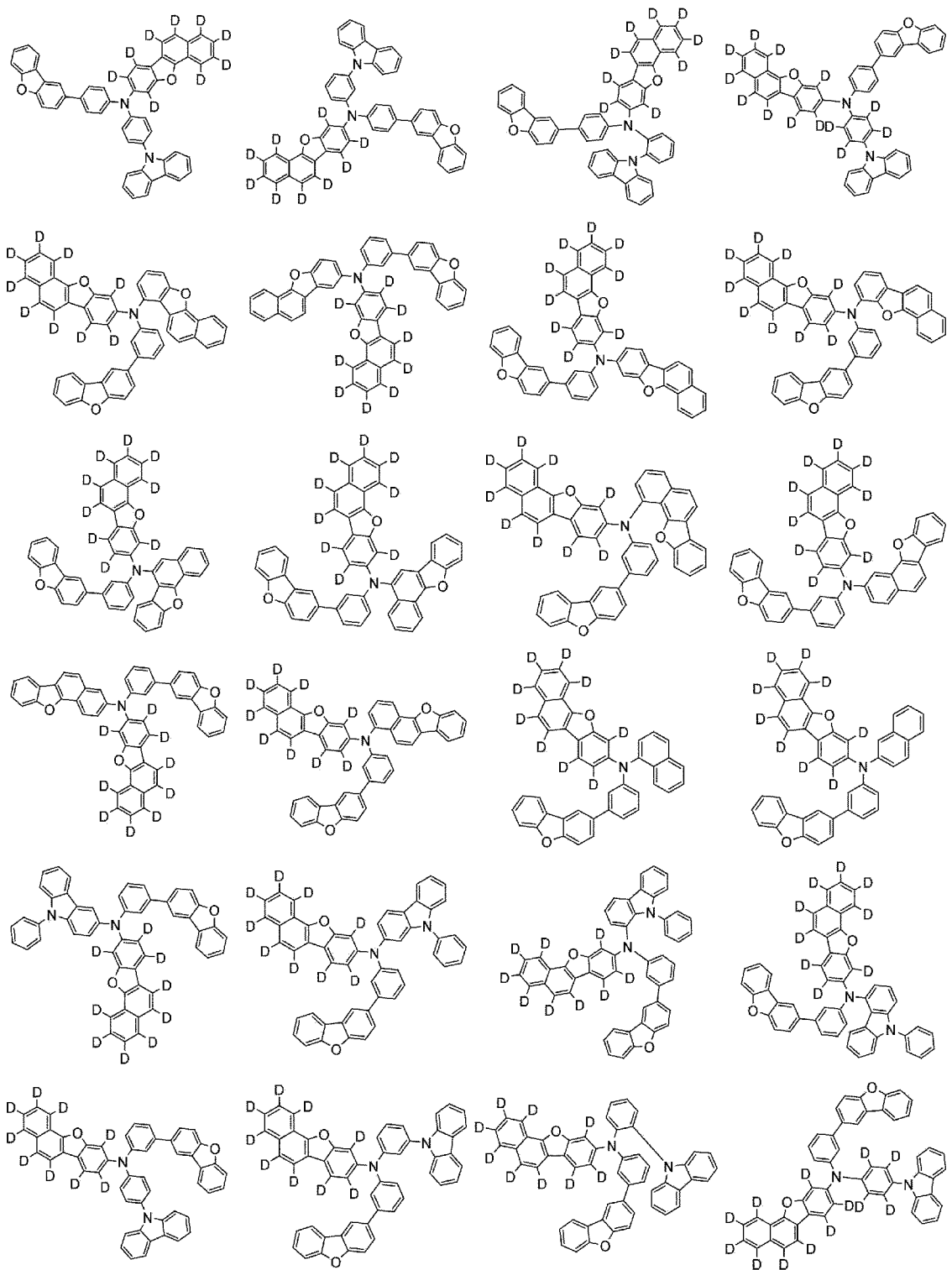
[0509]

[化139]



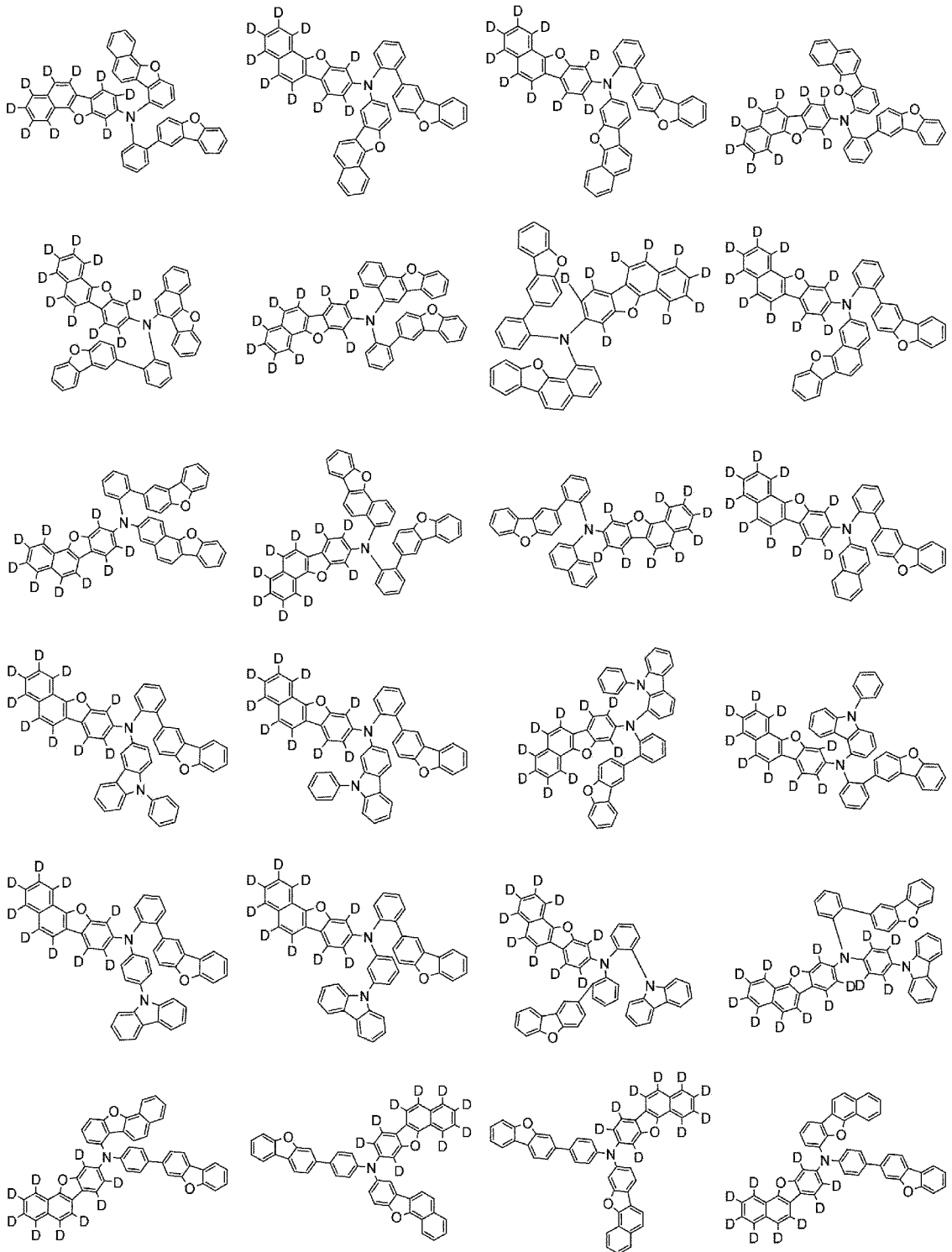
[0510]

[化140]



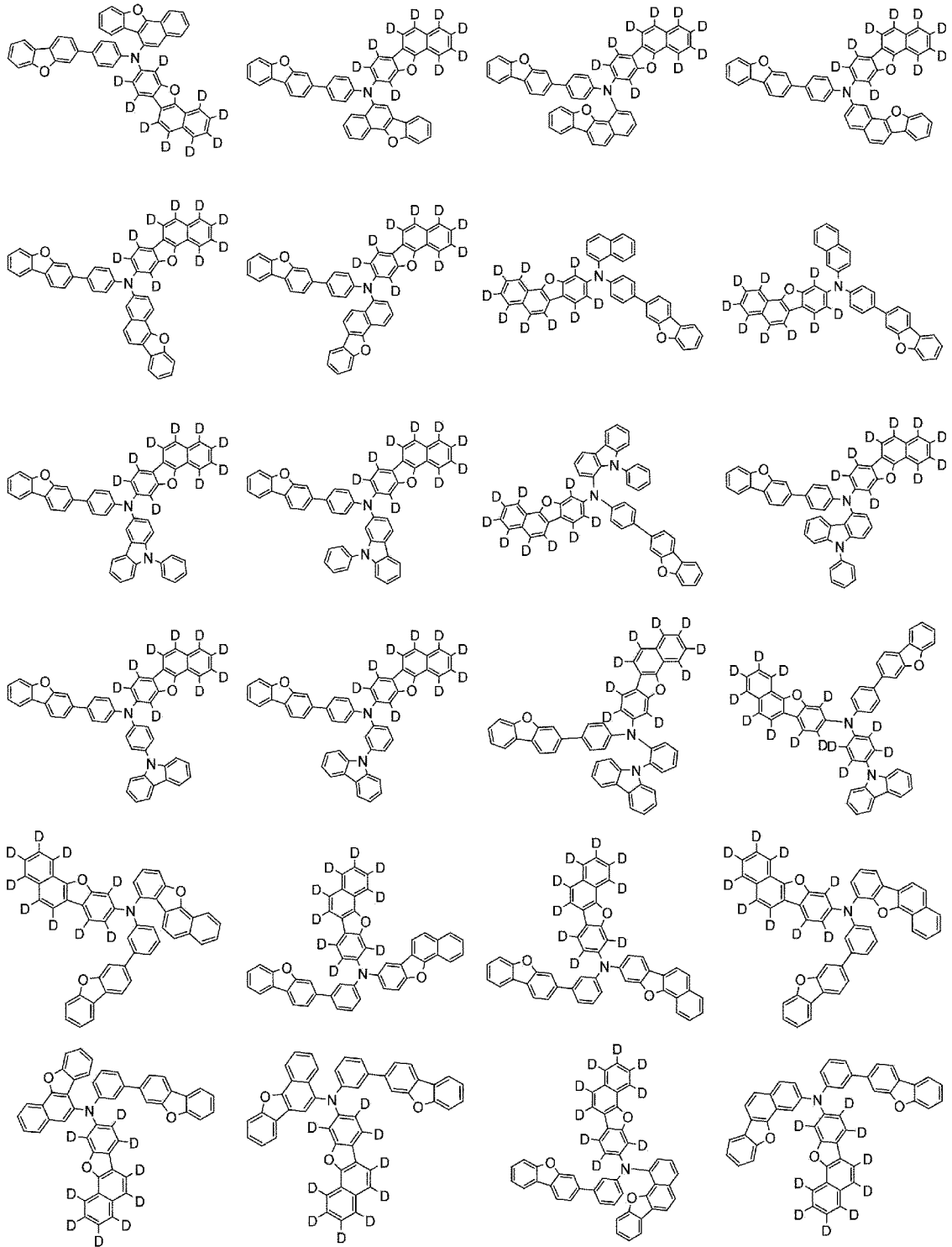
[0511]

[化141]



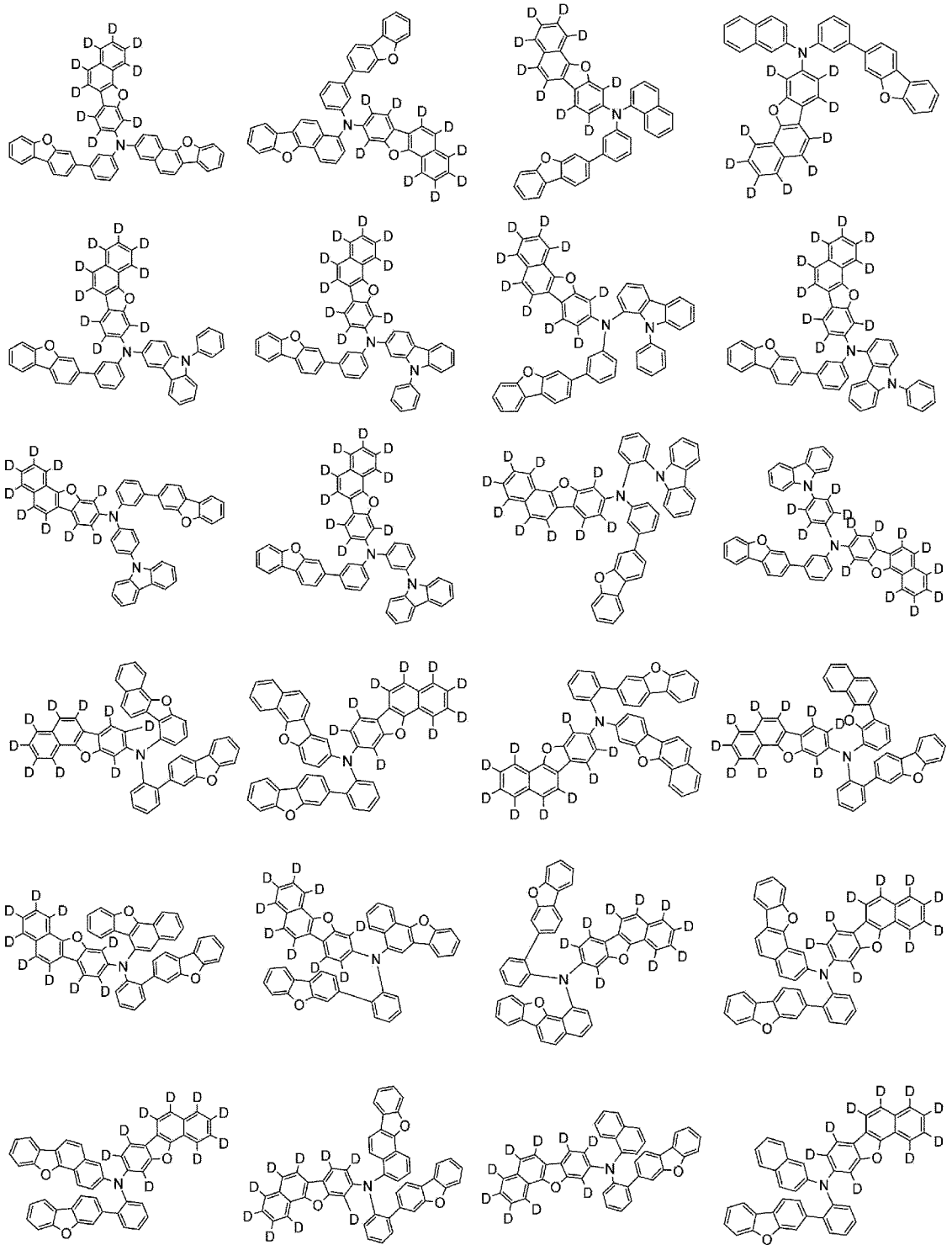
[0512]

[化142]



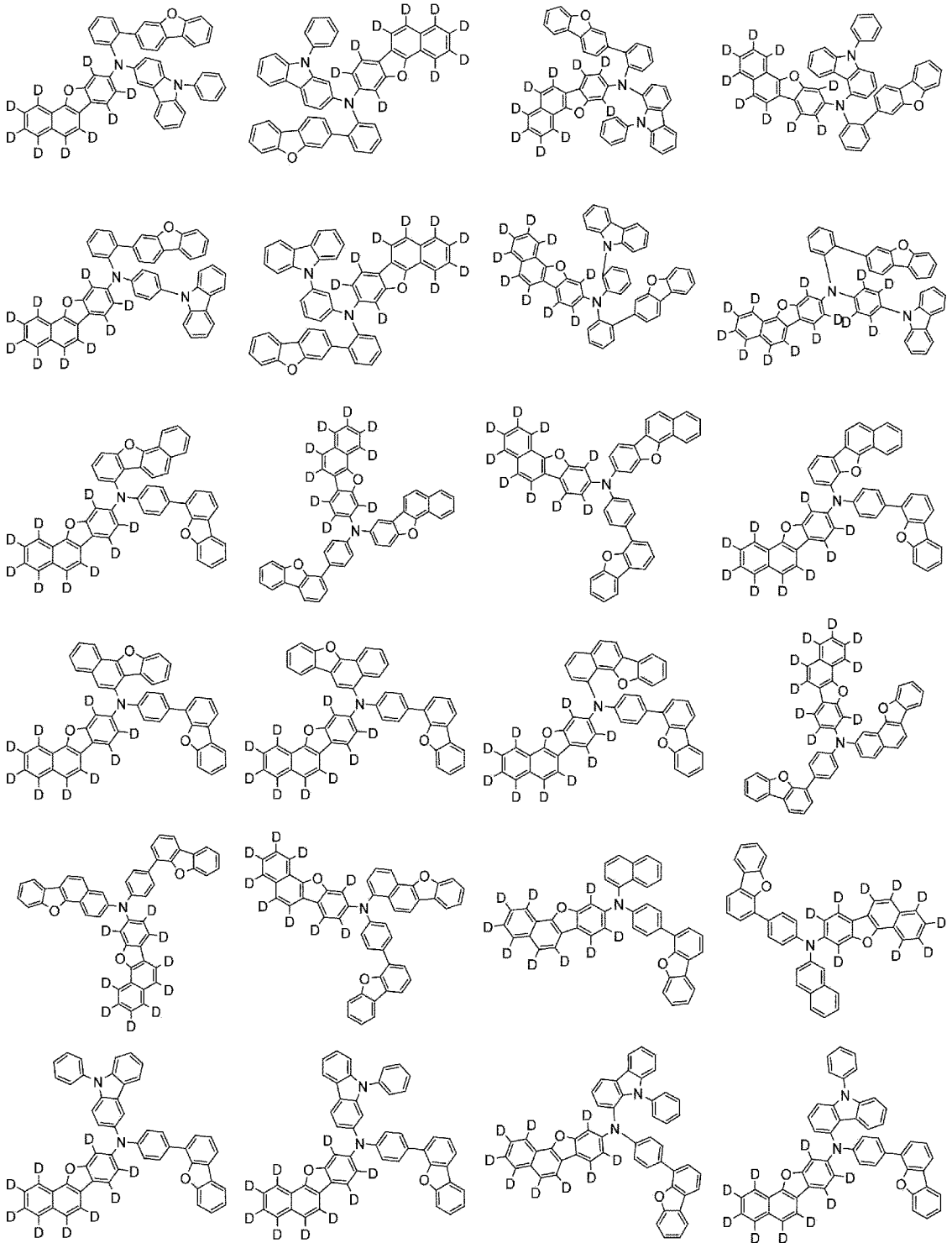
[0513]

[化143]



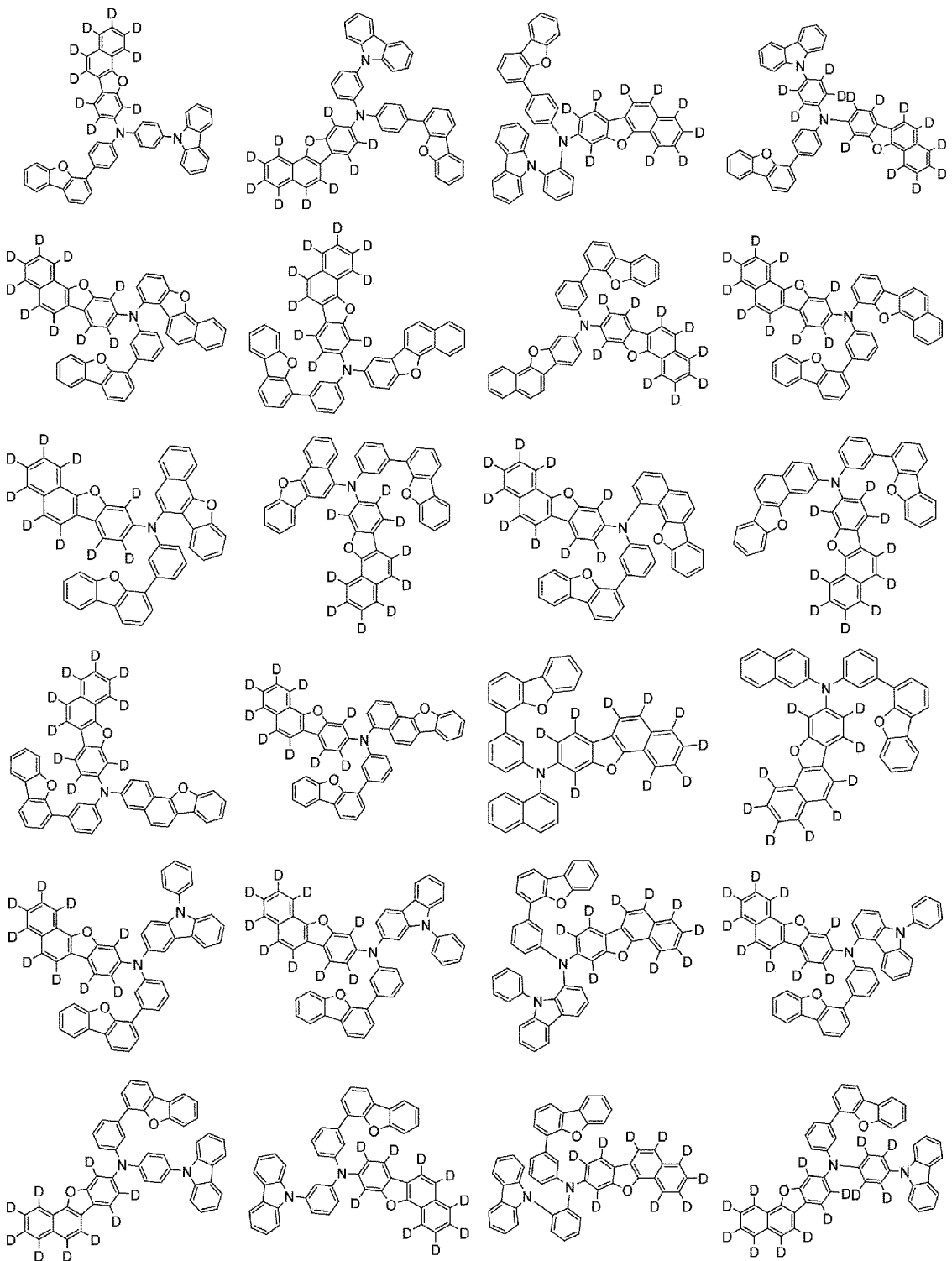
[0514]

[化144]



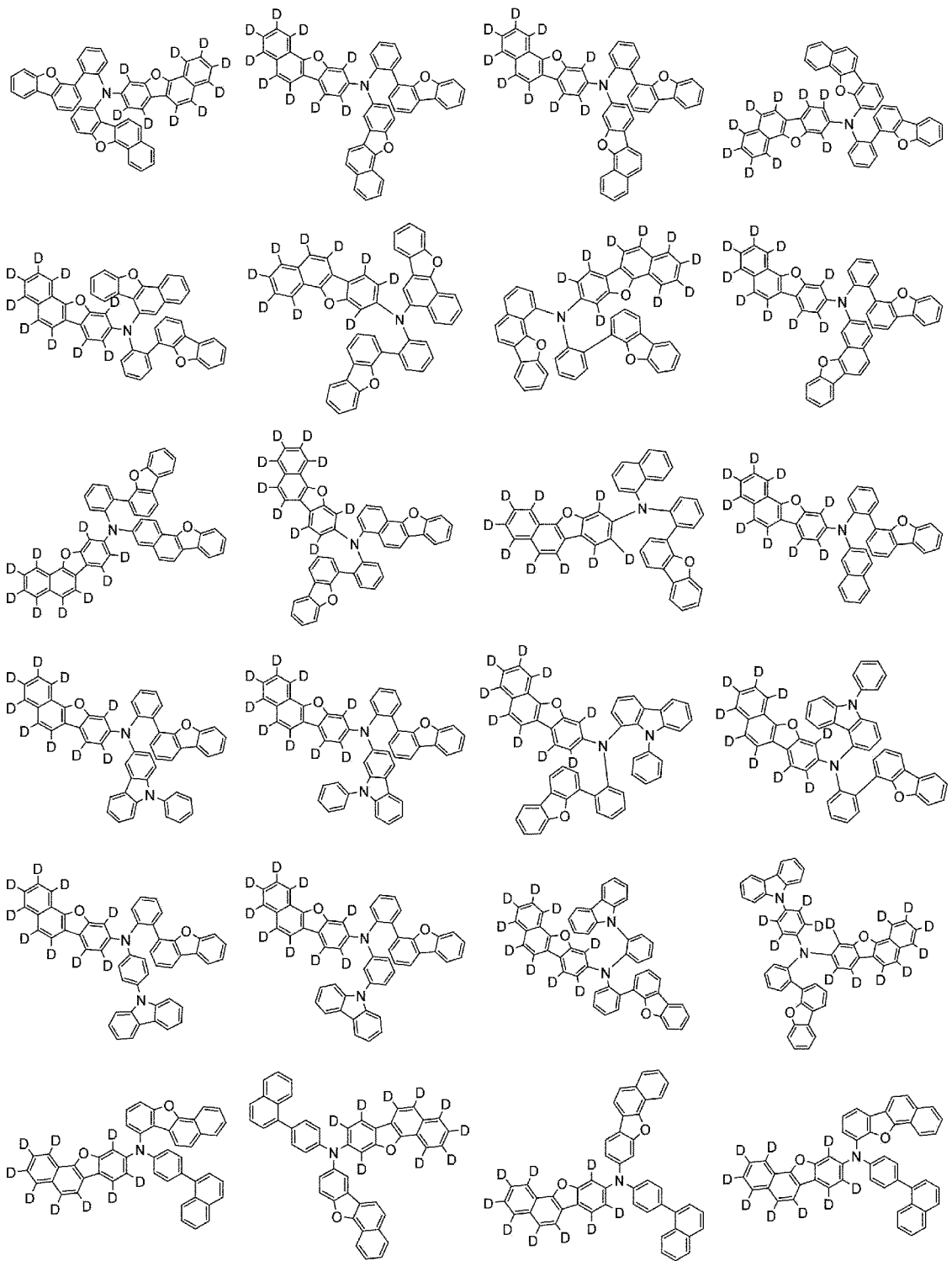
[0515]

[化145]



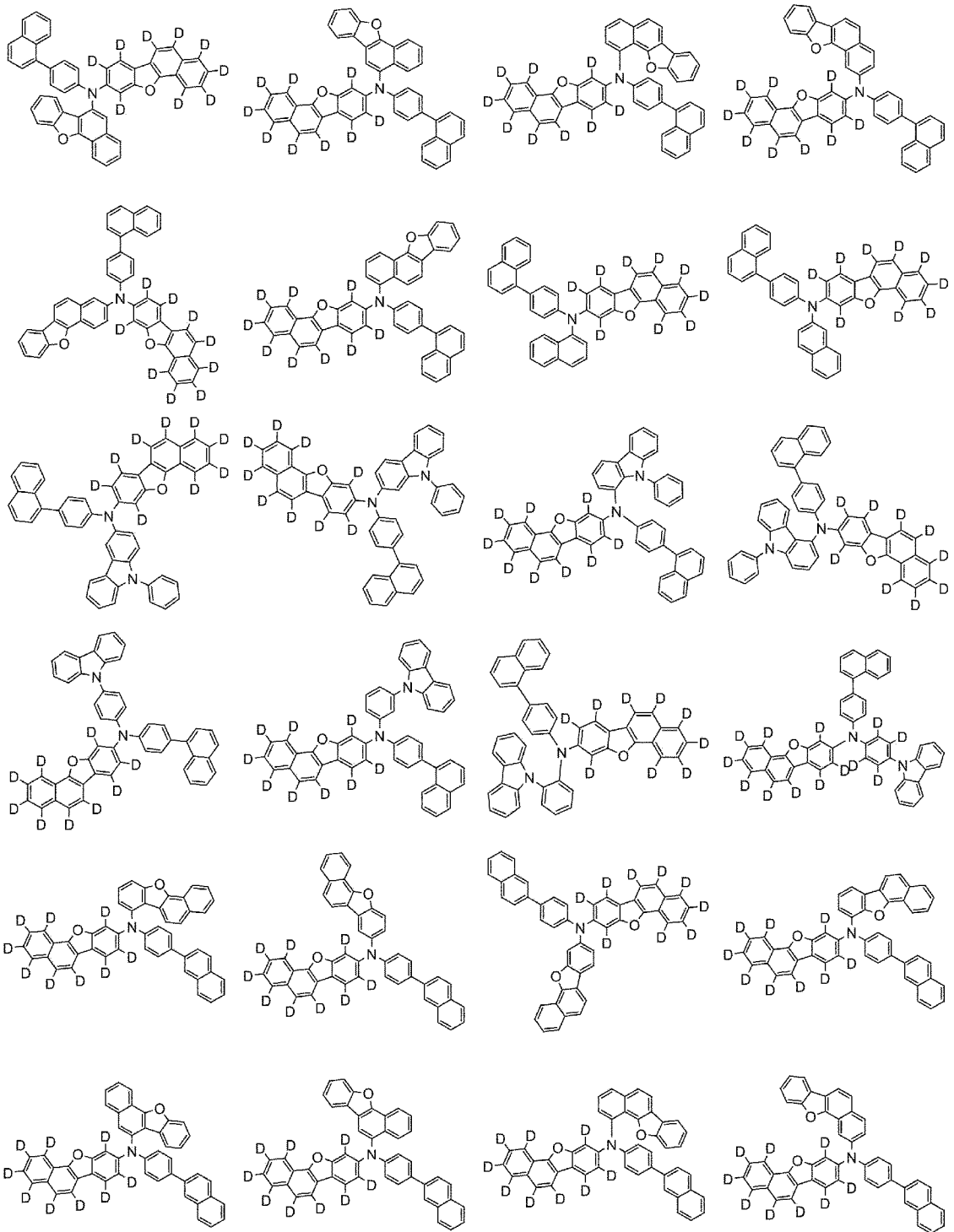
[0516]

[化146]



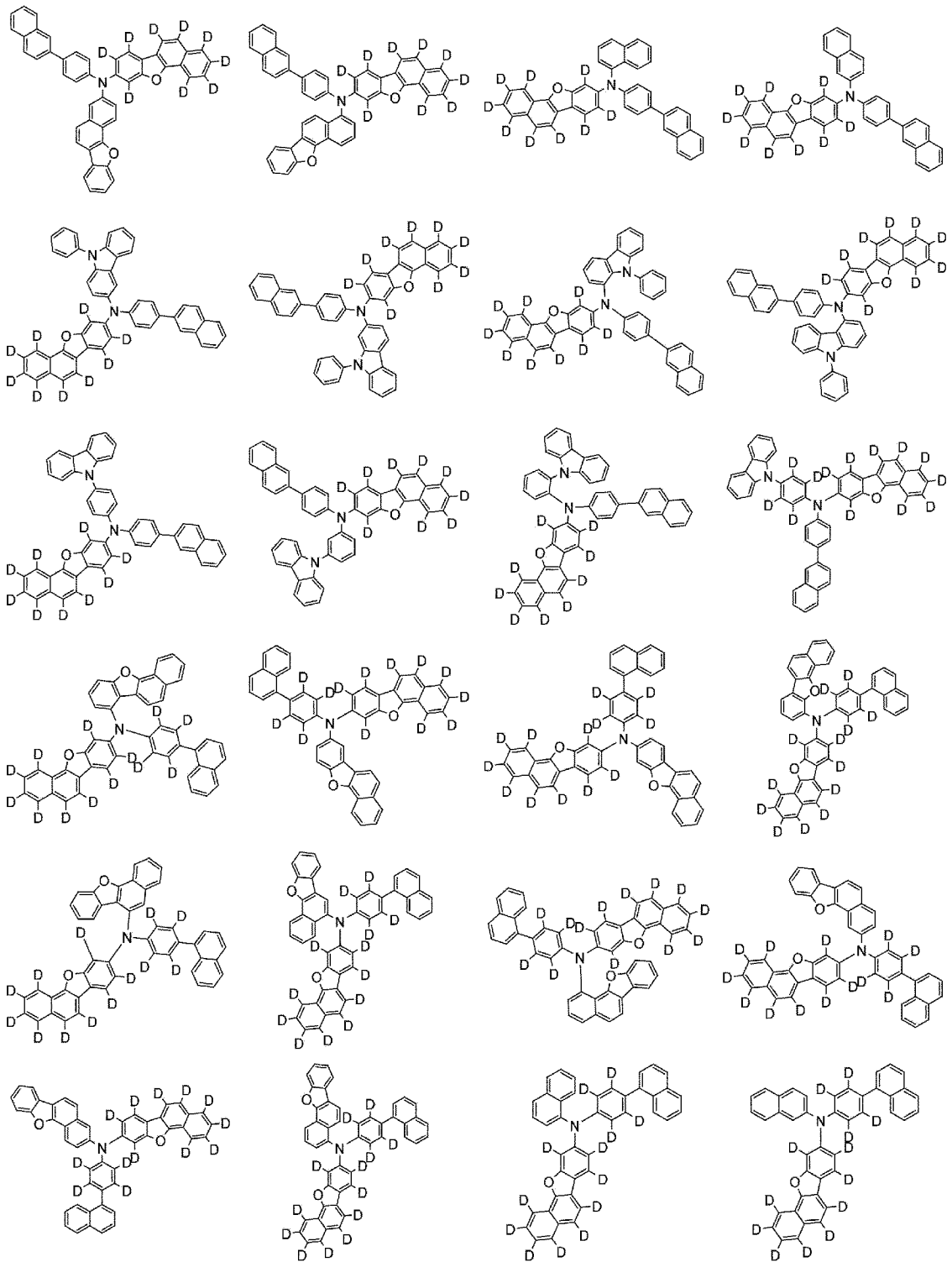
[0517]

[化147]



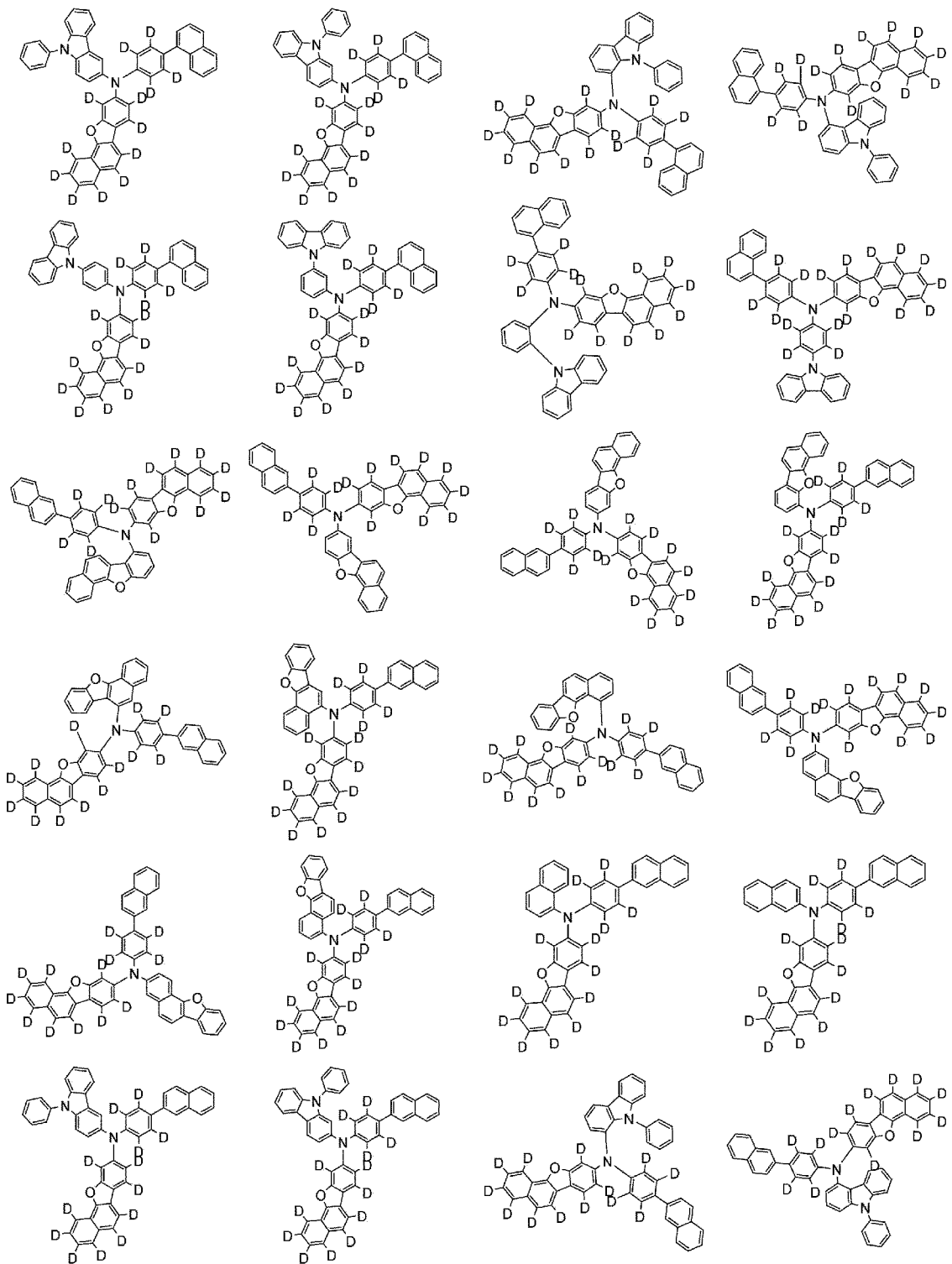
[0518]

[化148]



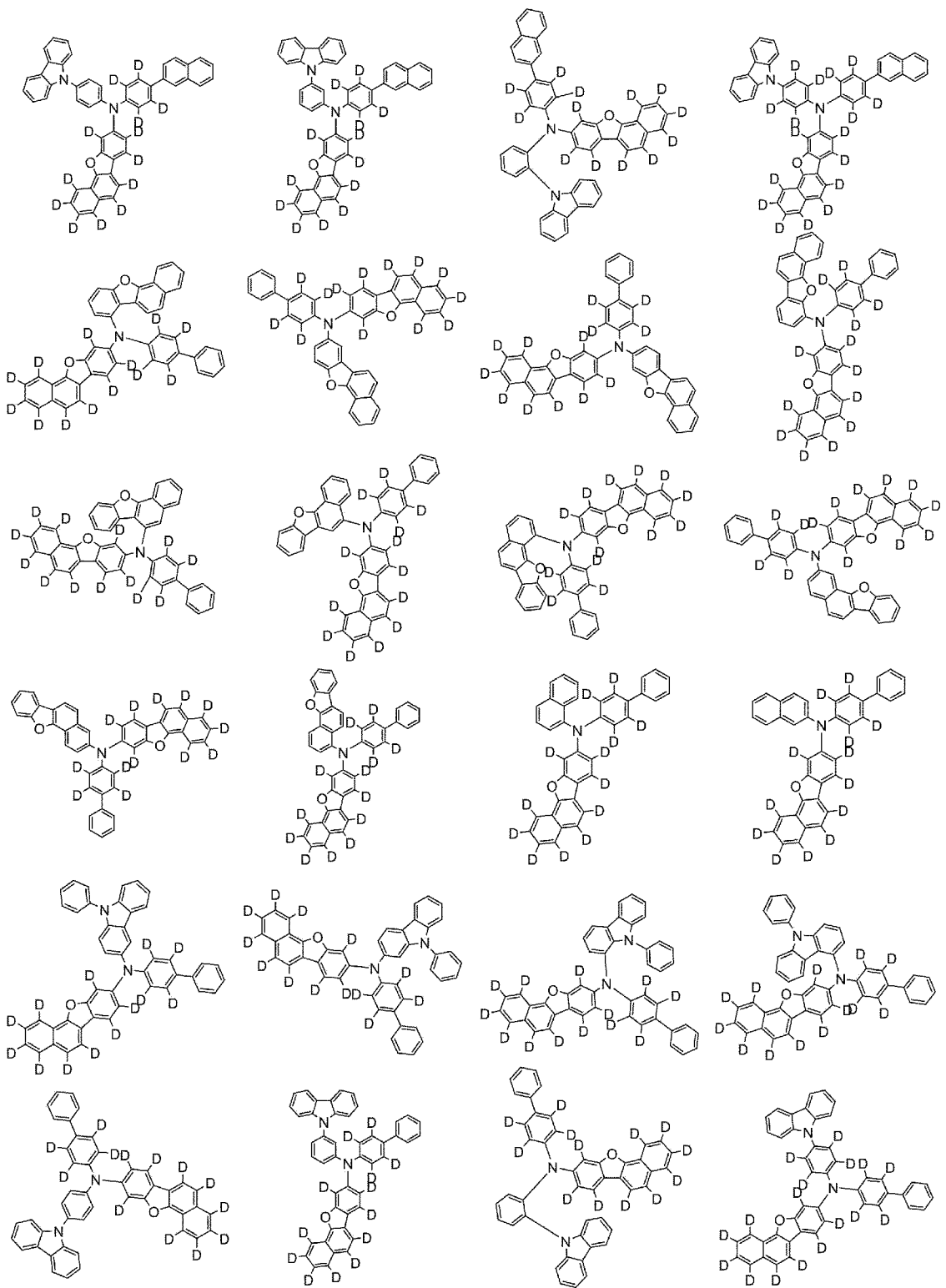
[0519]

[化149]



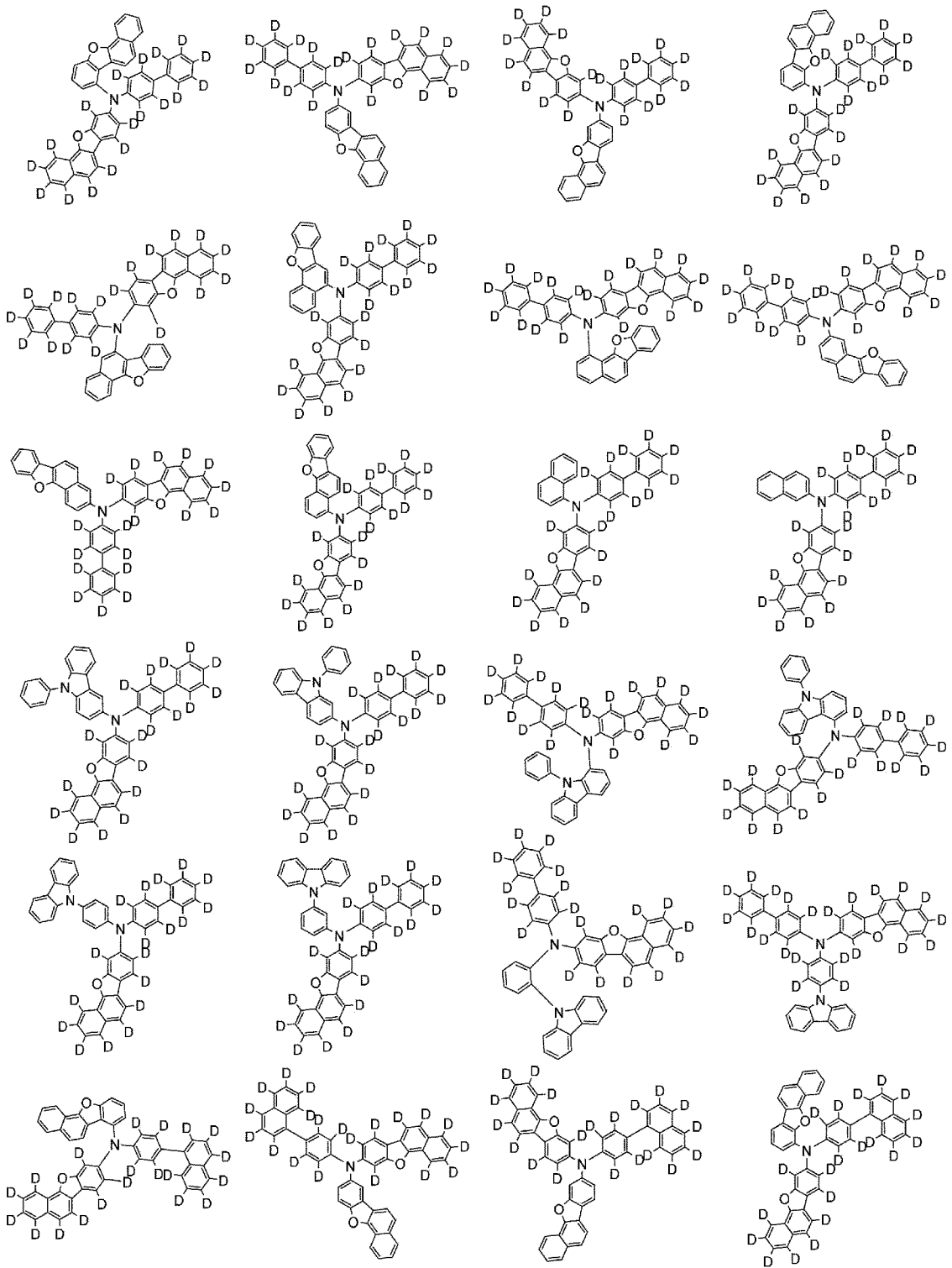
[0520]

[化150]



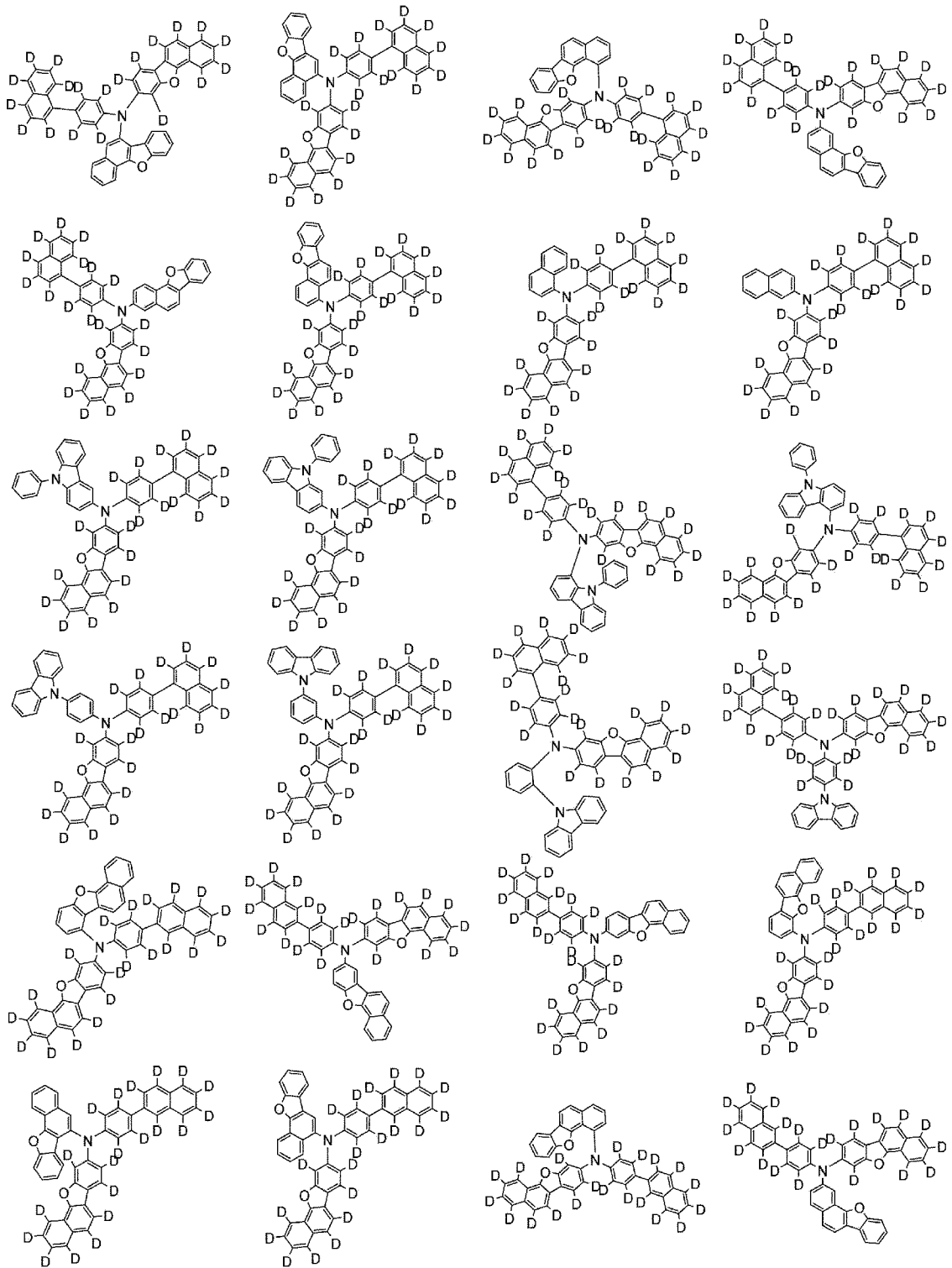
[0521]

[化151]



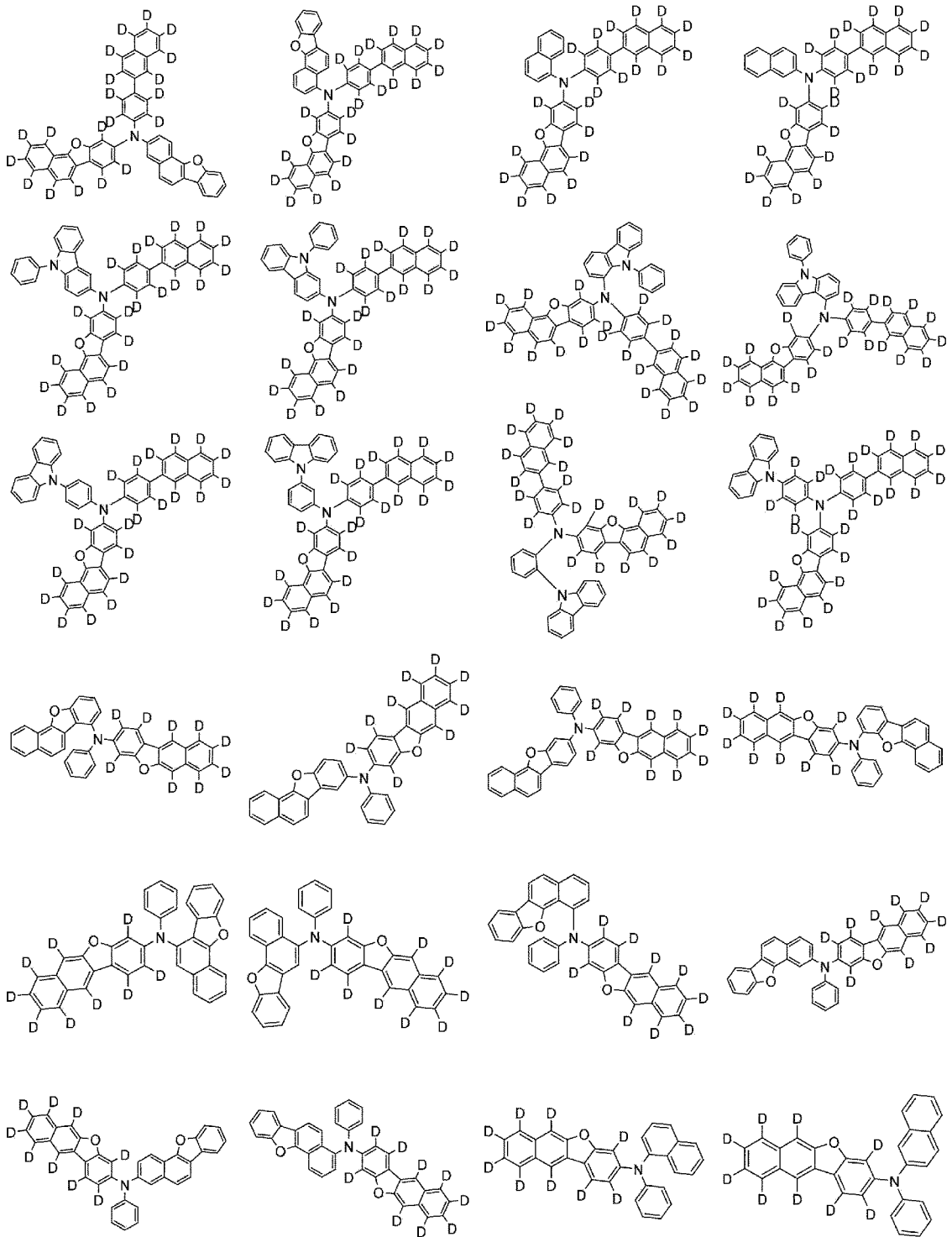
[0522]

[化152]



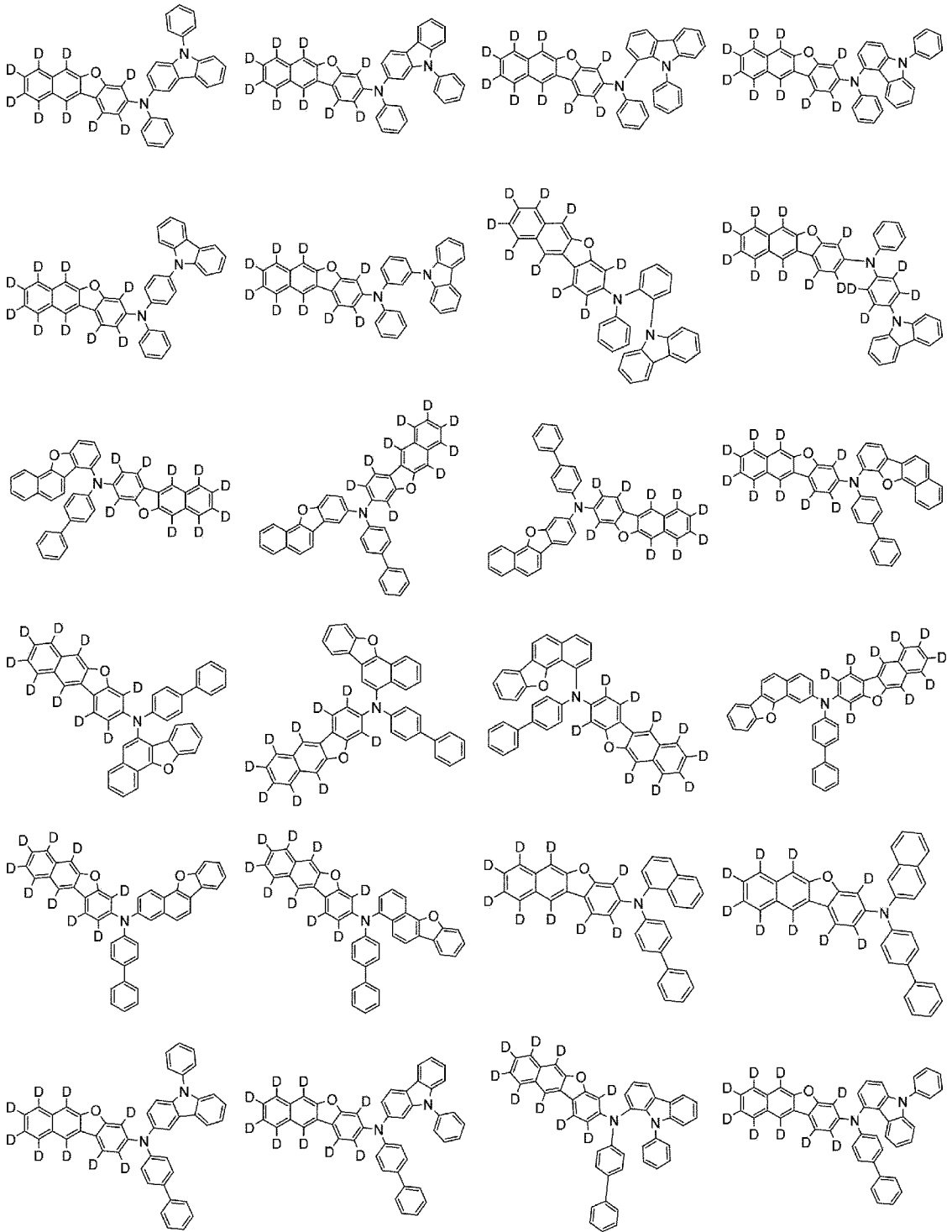
[0523]

[化153]



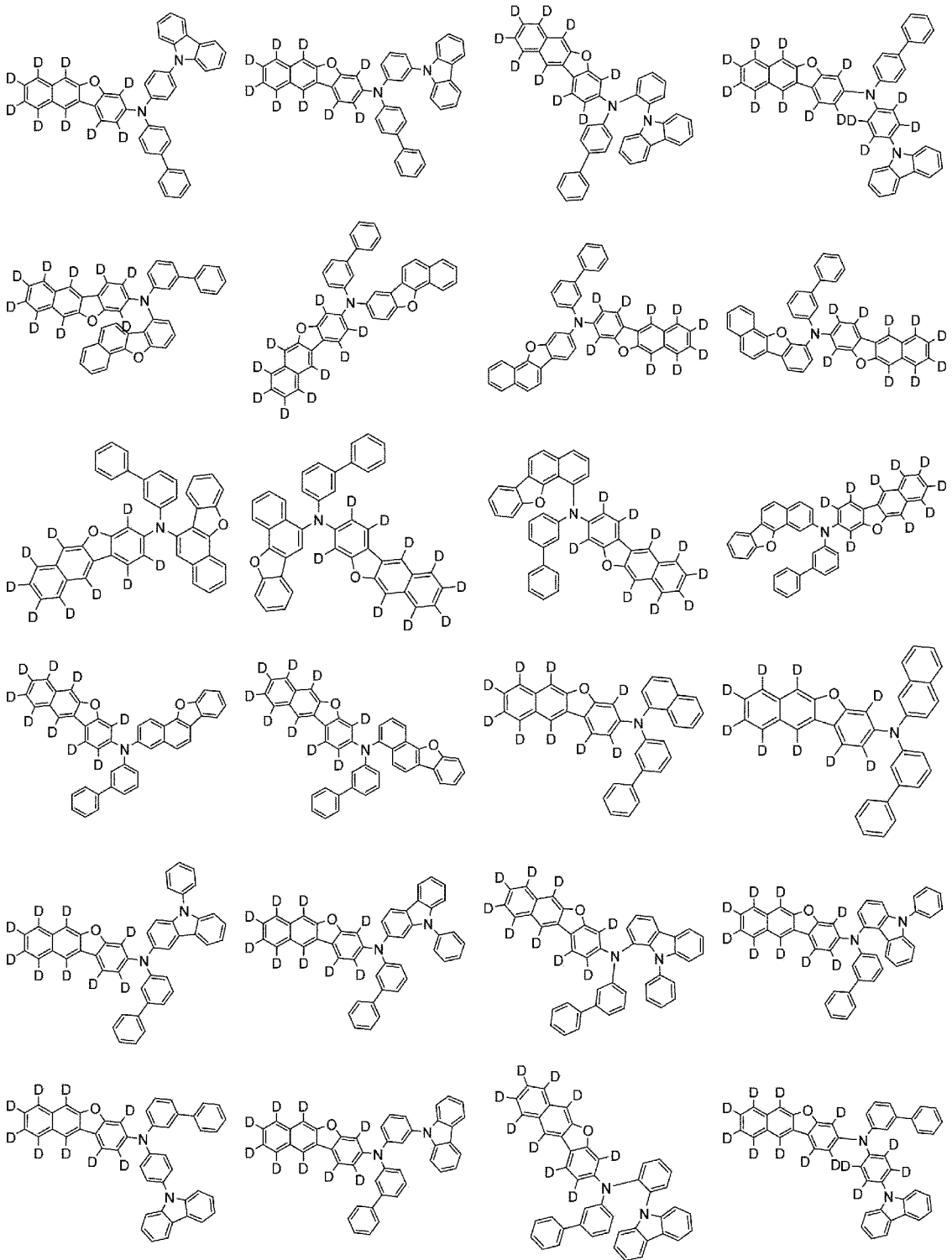
[0524]

[化154]



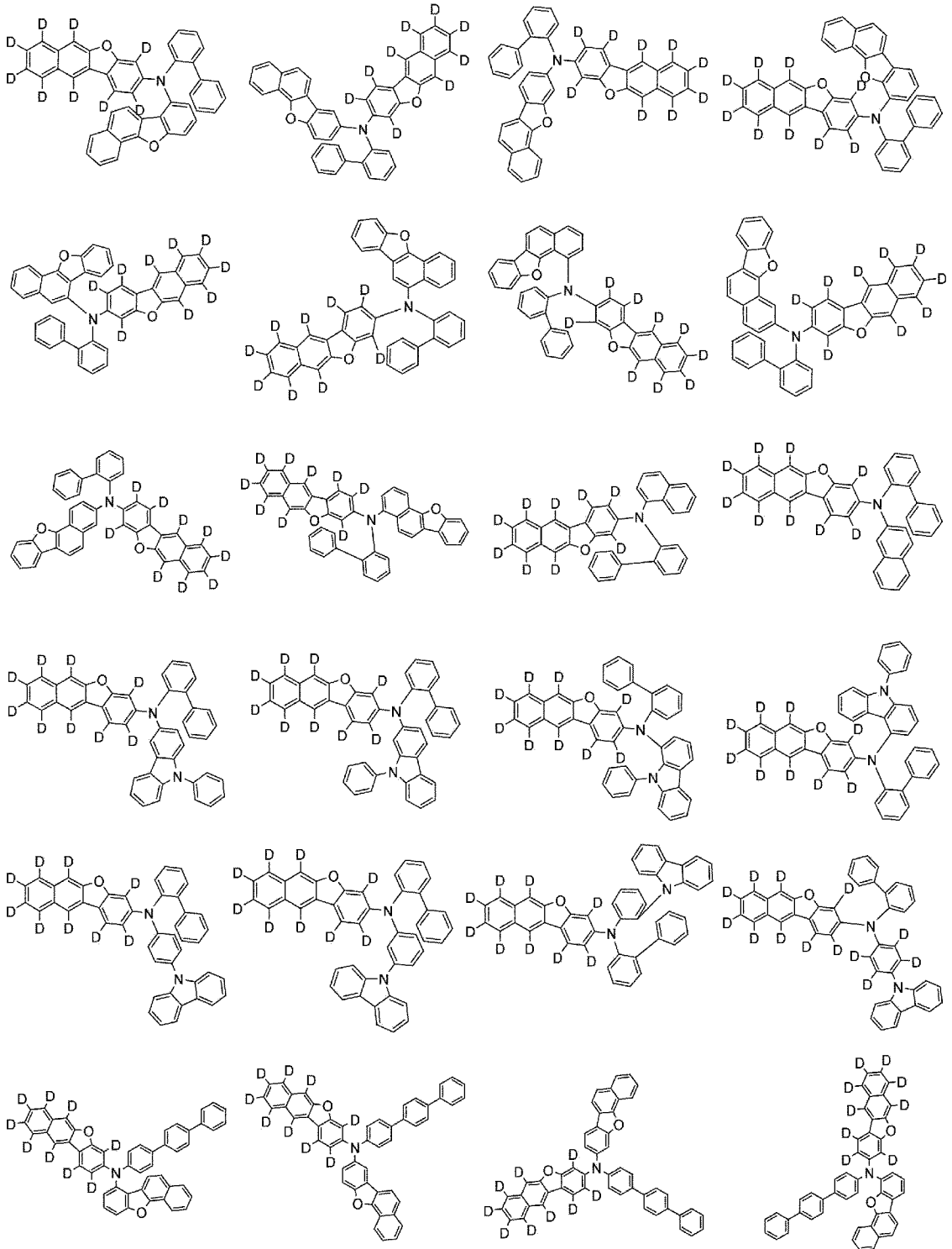
[0525]

[化155]



[0526]

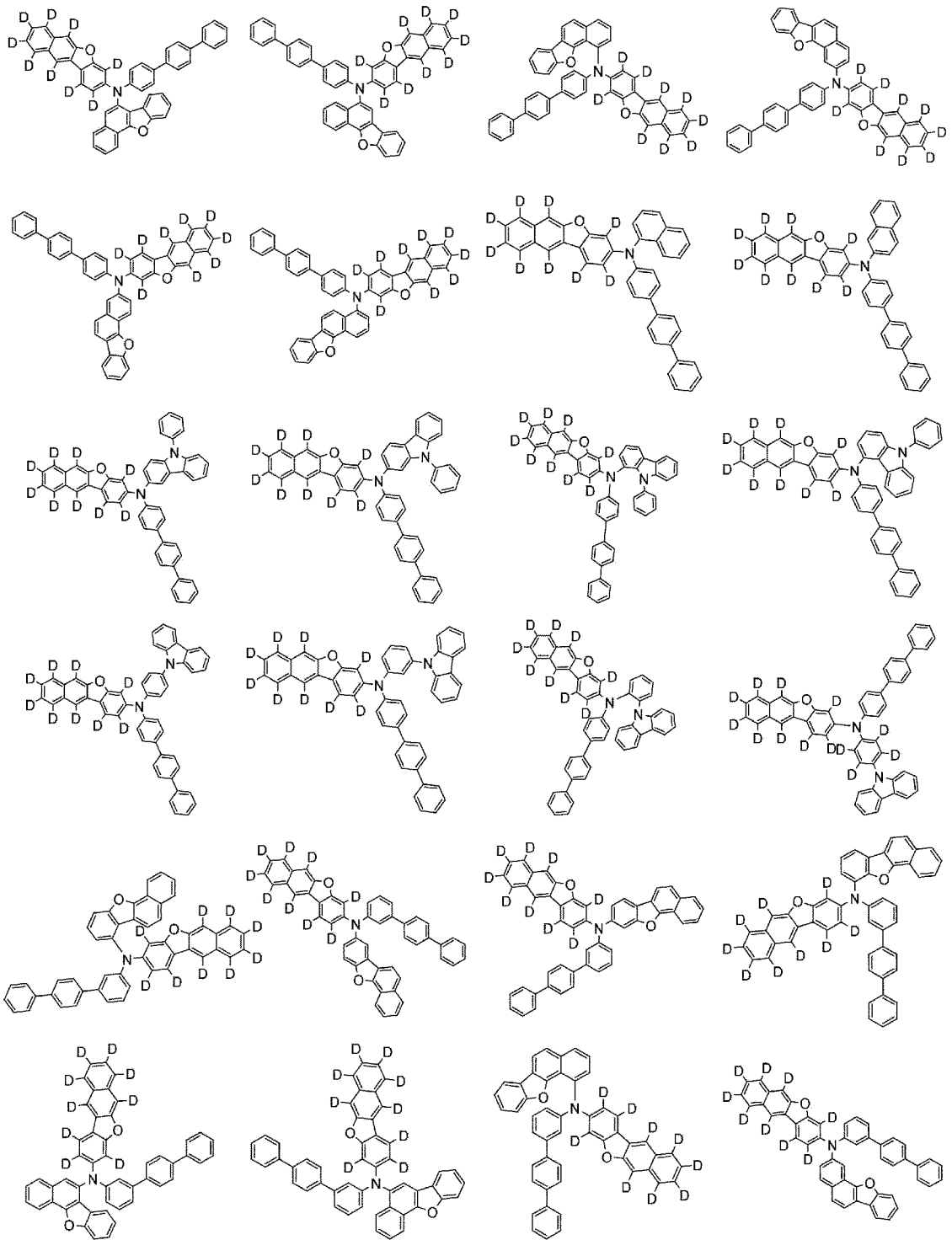
[化156]



[0527]

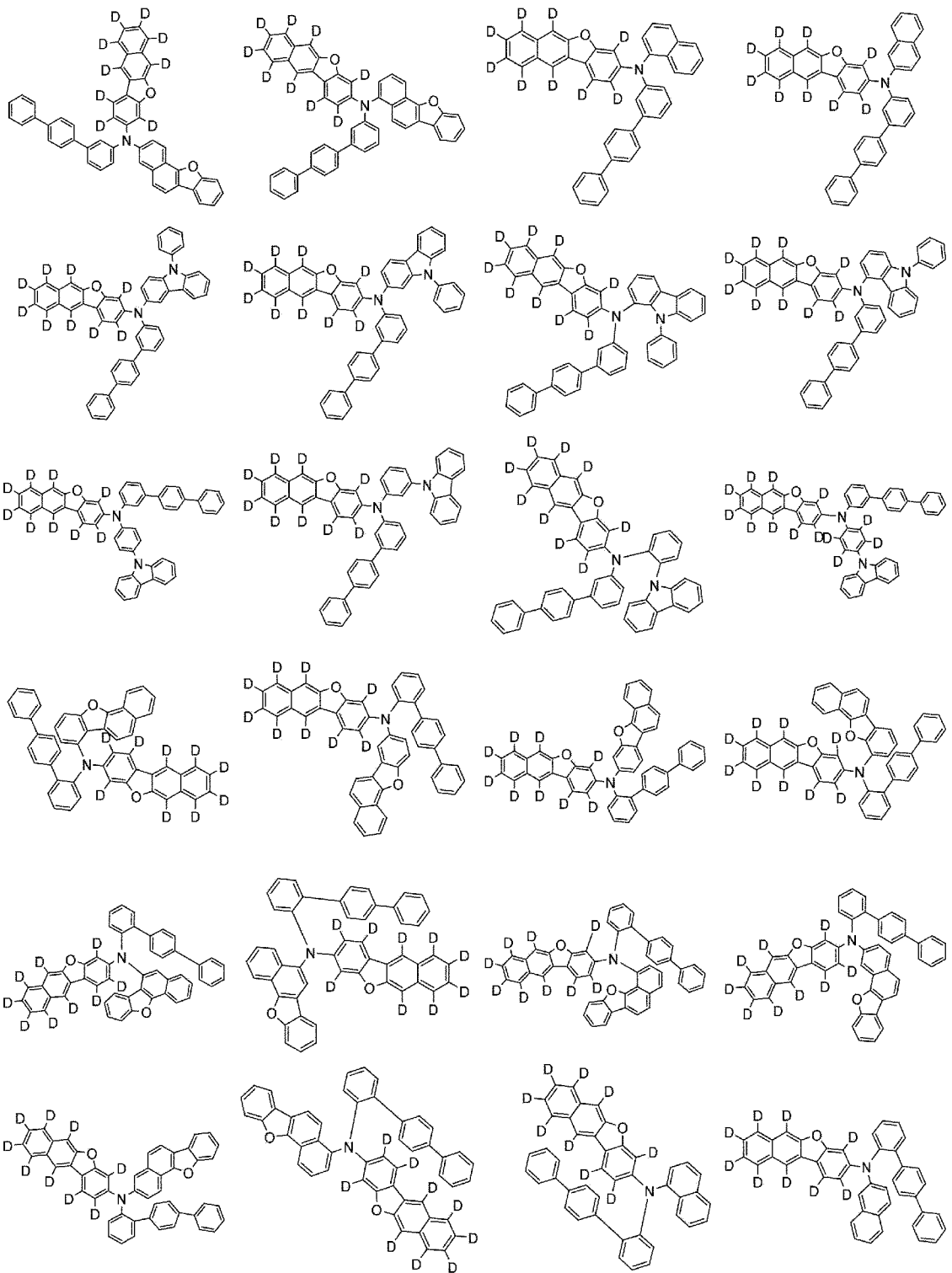
[化157]

Page72



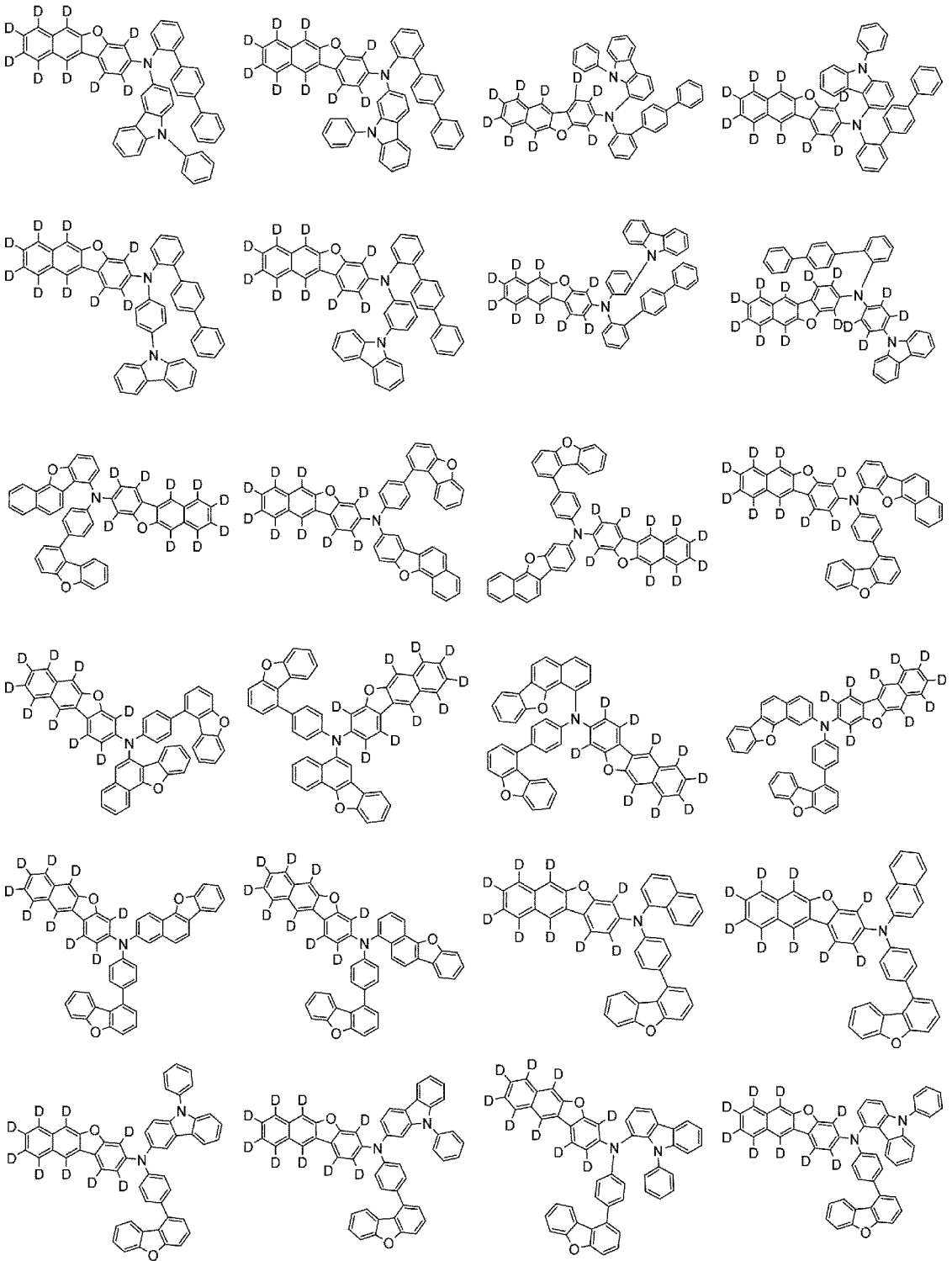
[0528]

[化158]



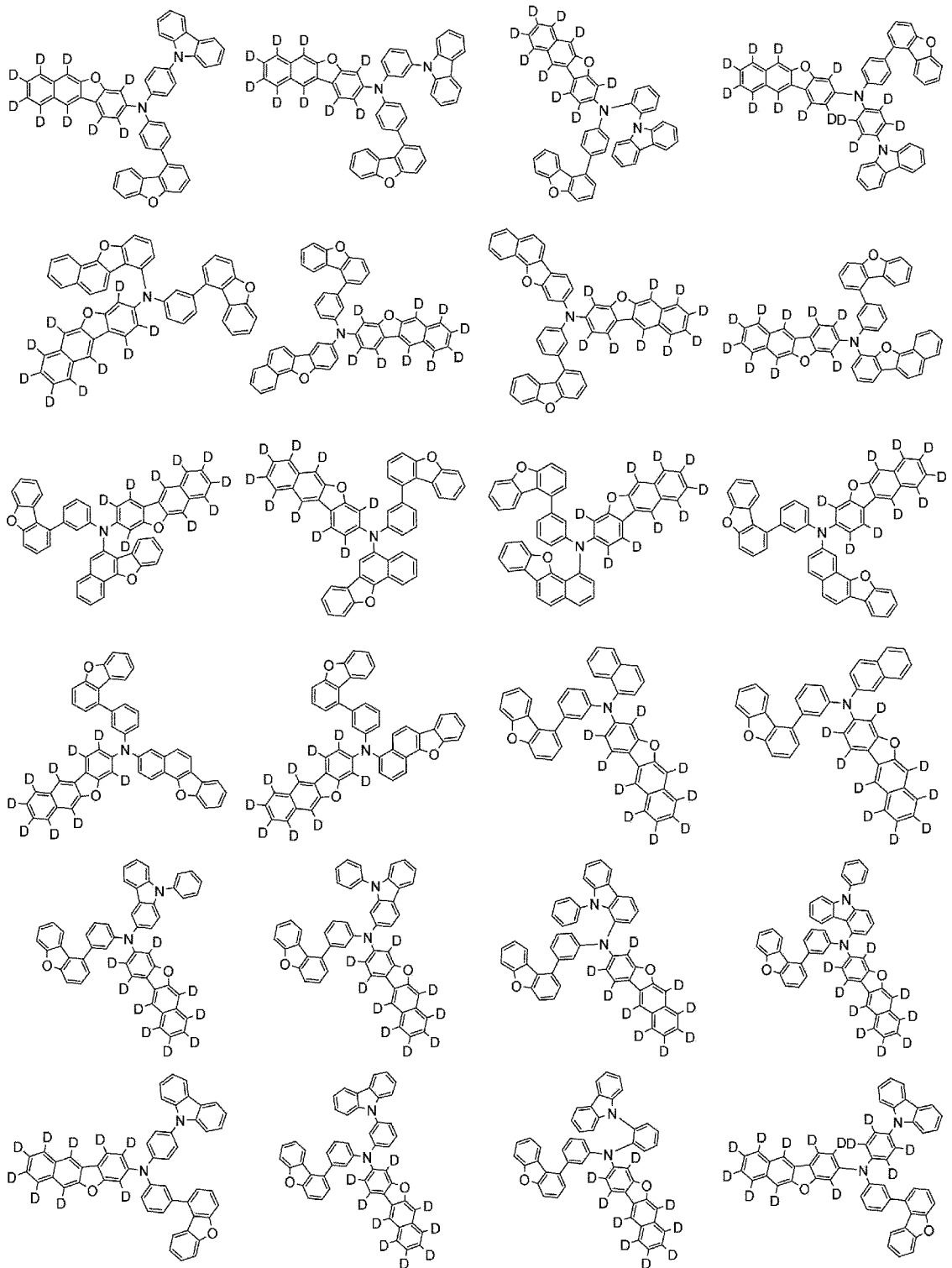
[0529]

[化159]



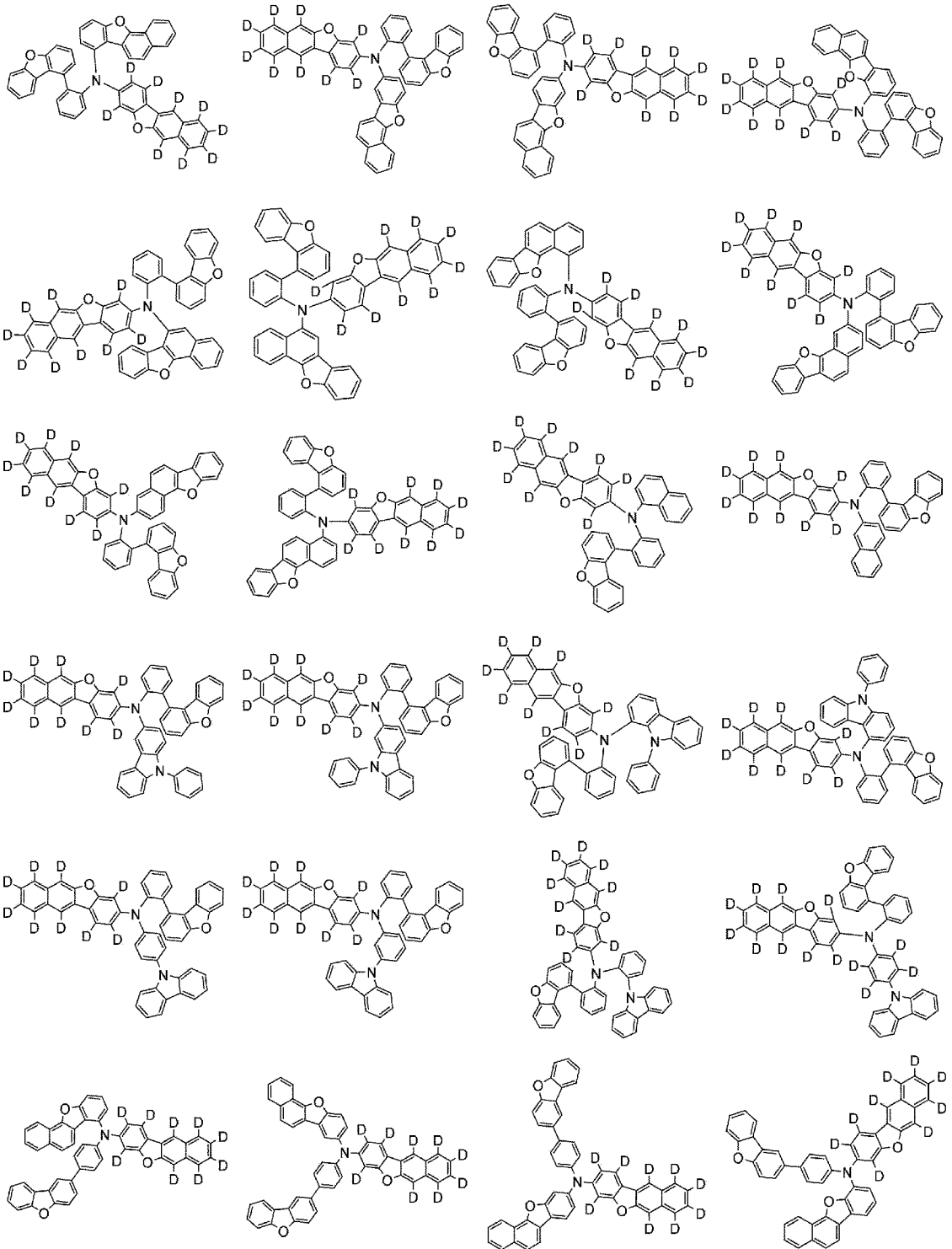
[0530]

[化160]



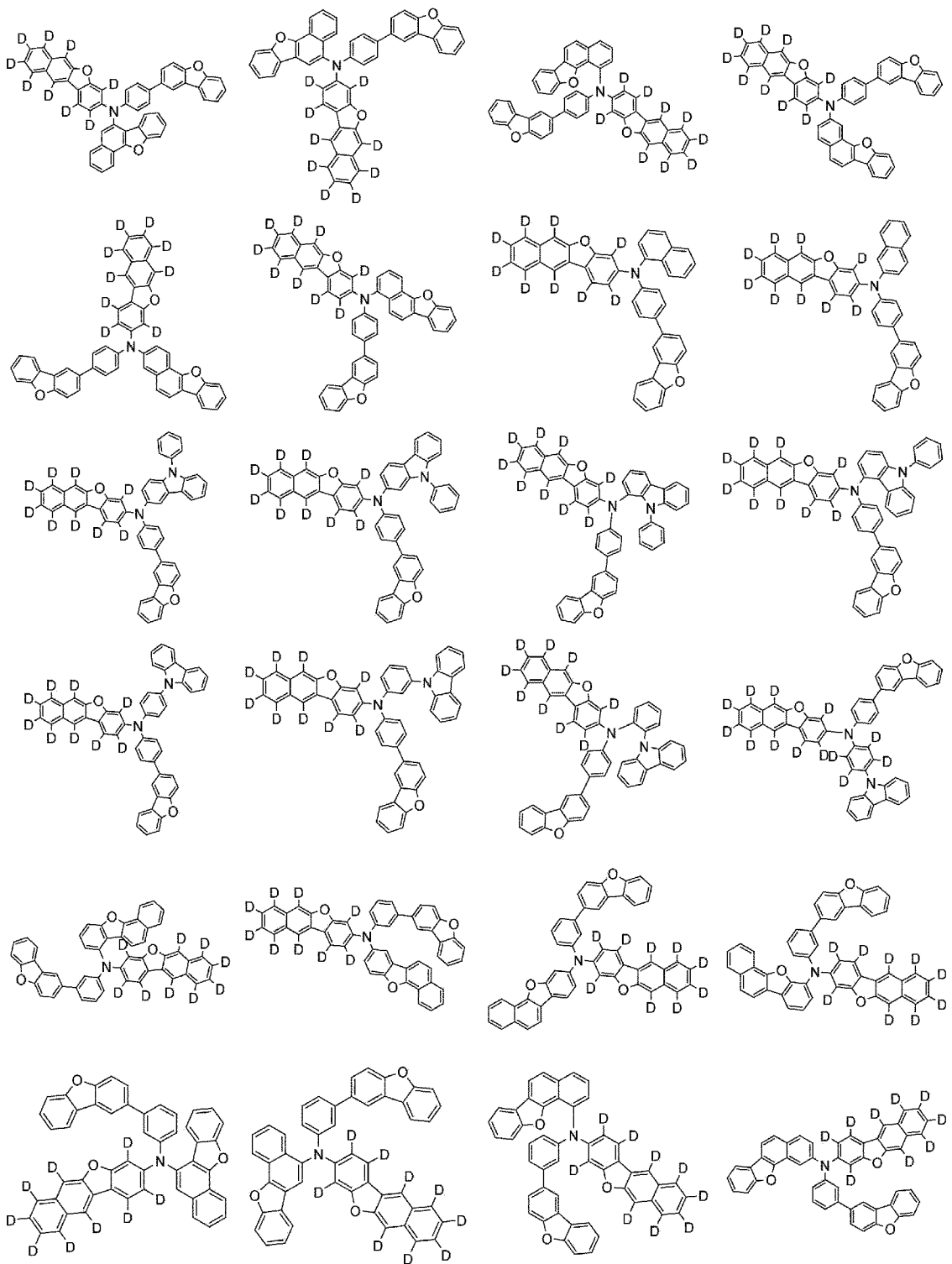
[0531]

[化161]



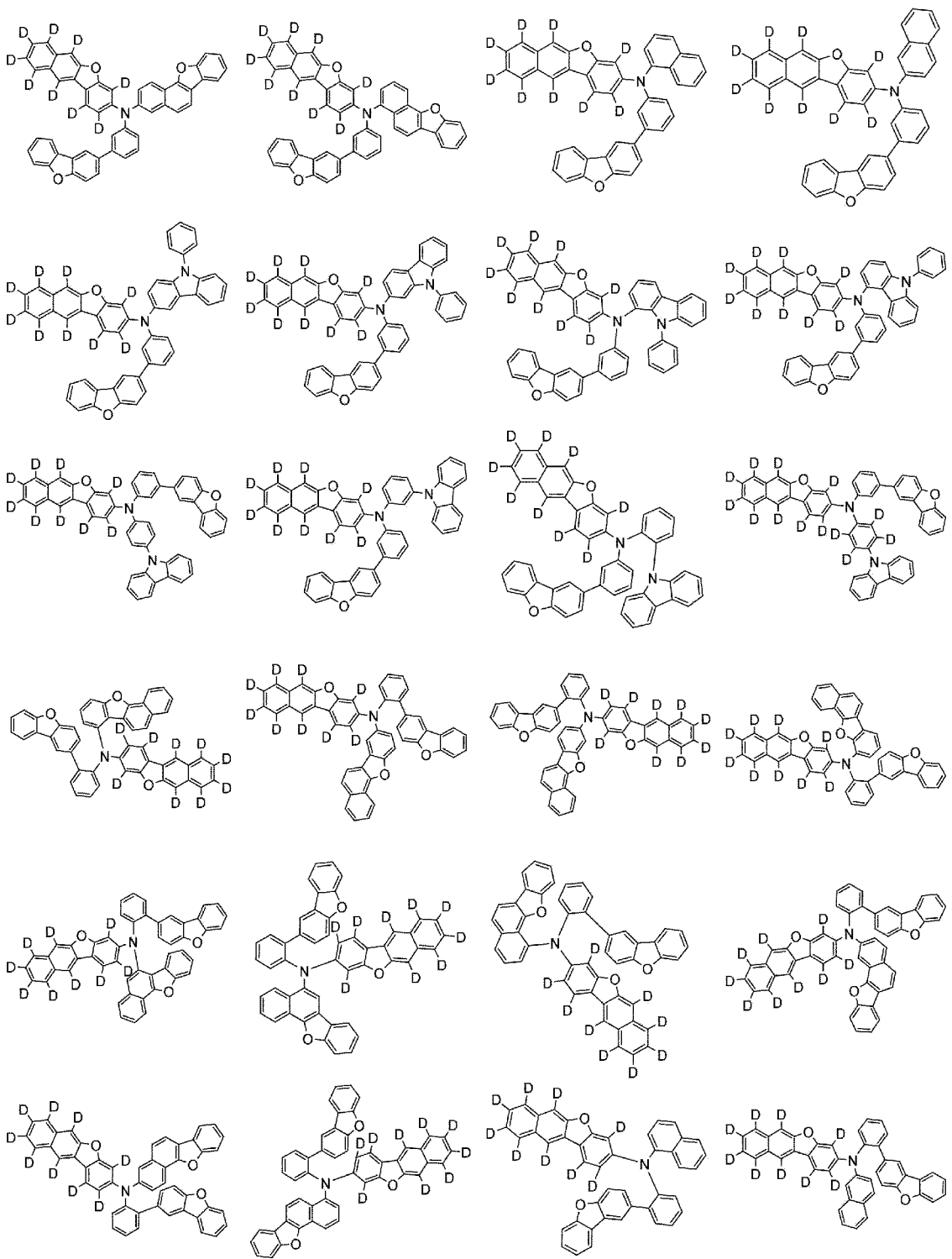
[0532]

[化162]



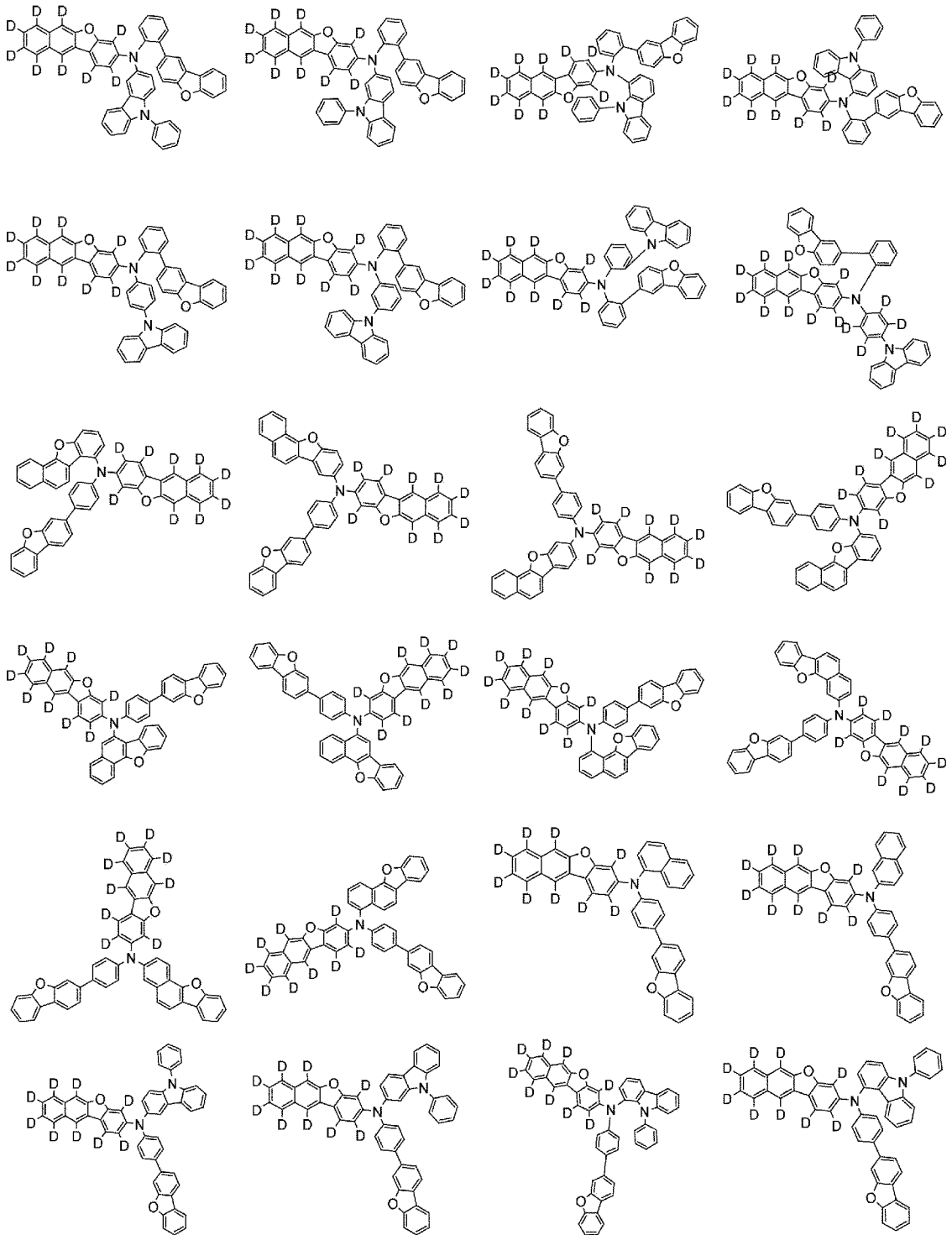
[0533]

[化163]



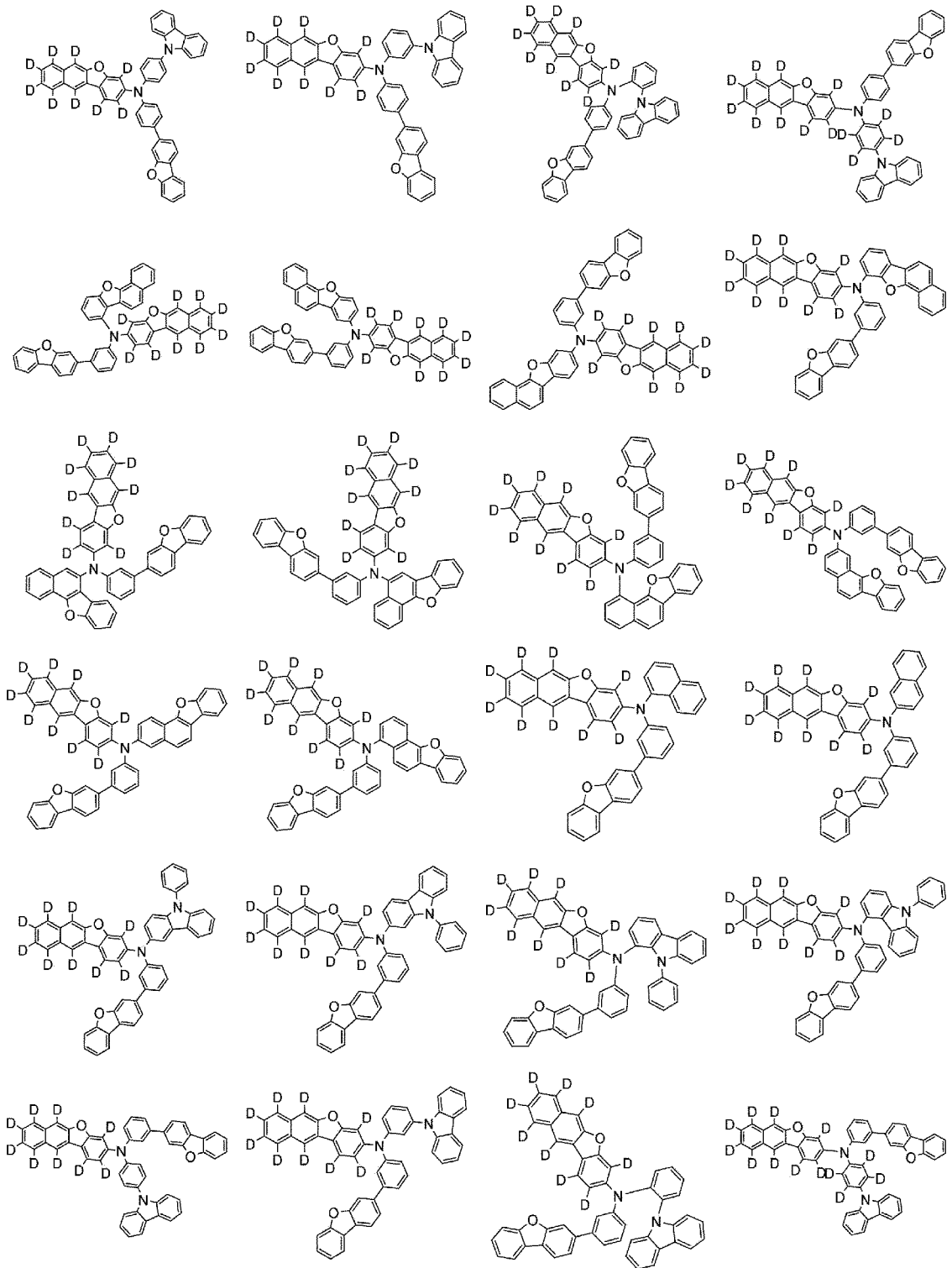
[0534]

[化164]



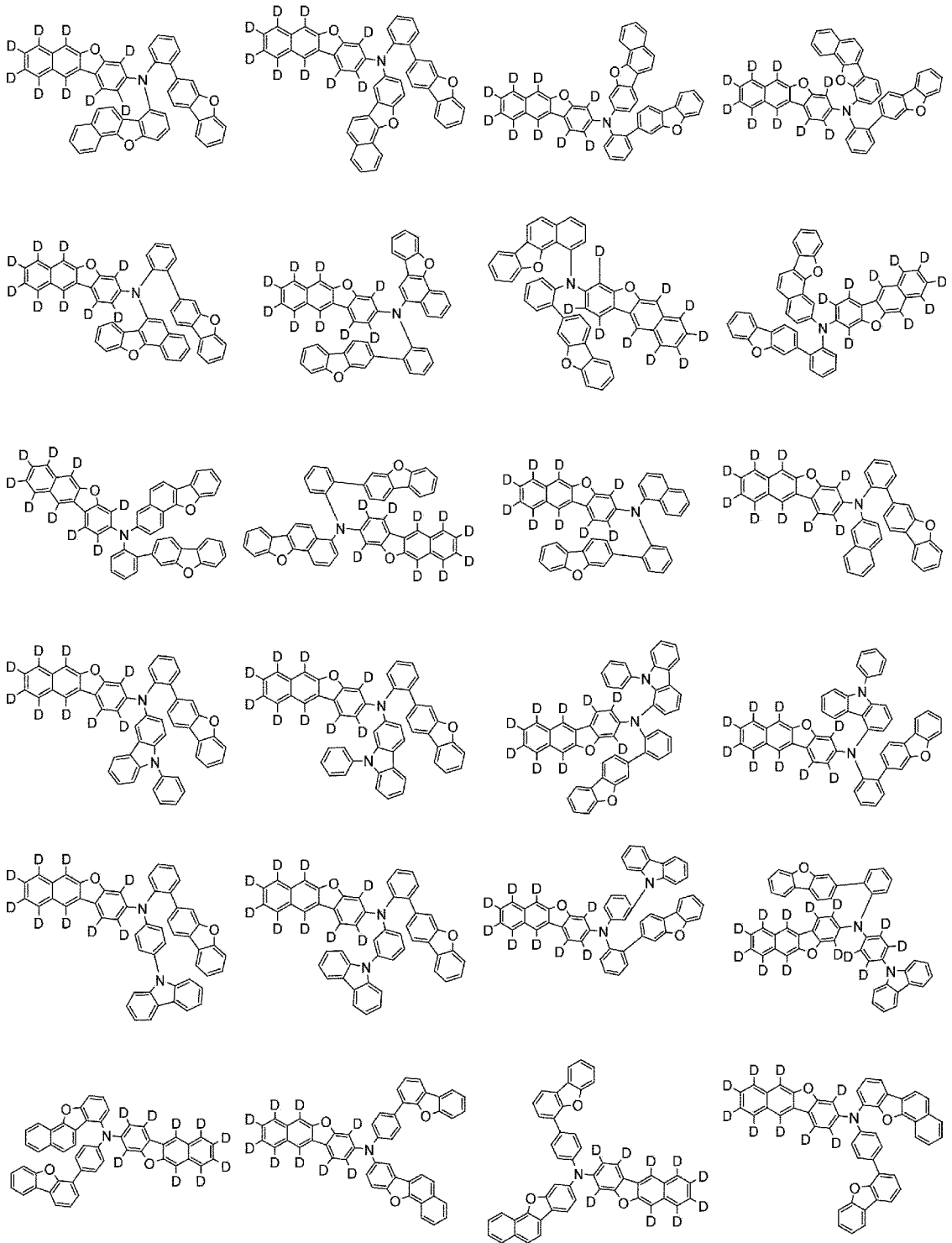
[0535]

[化165]



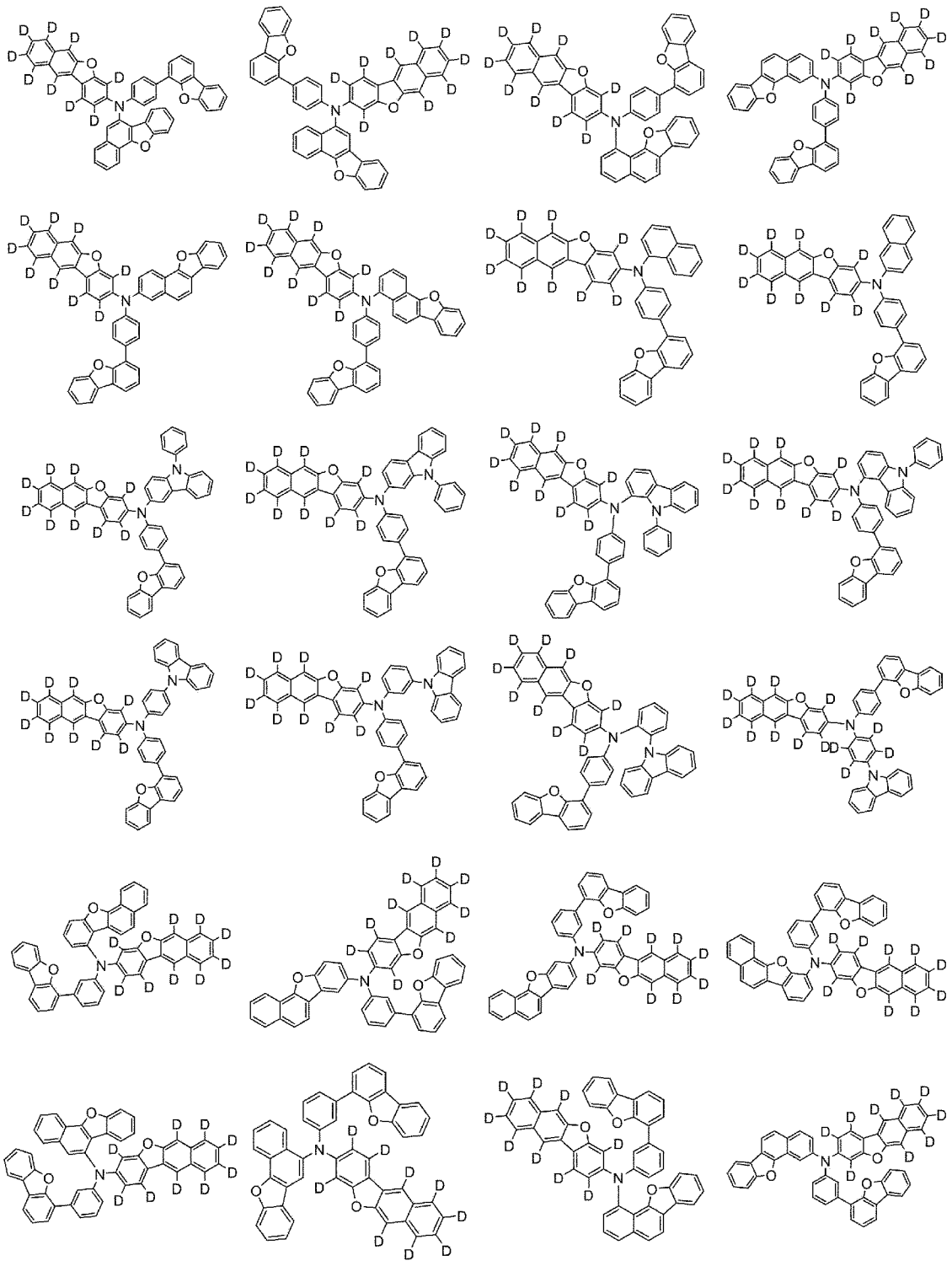
[0536]

[化166]



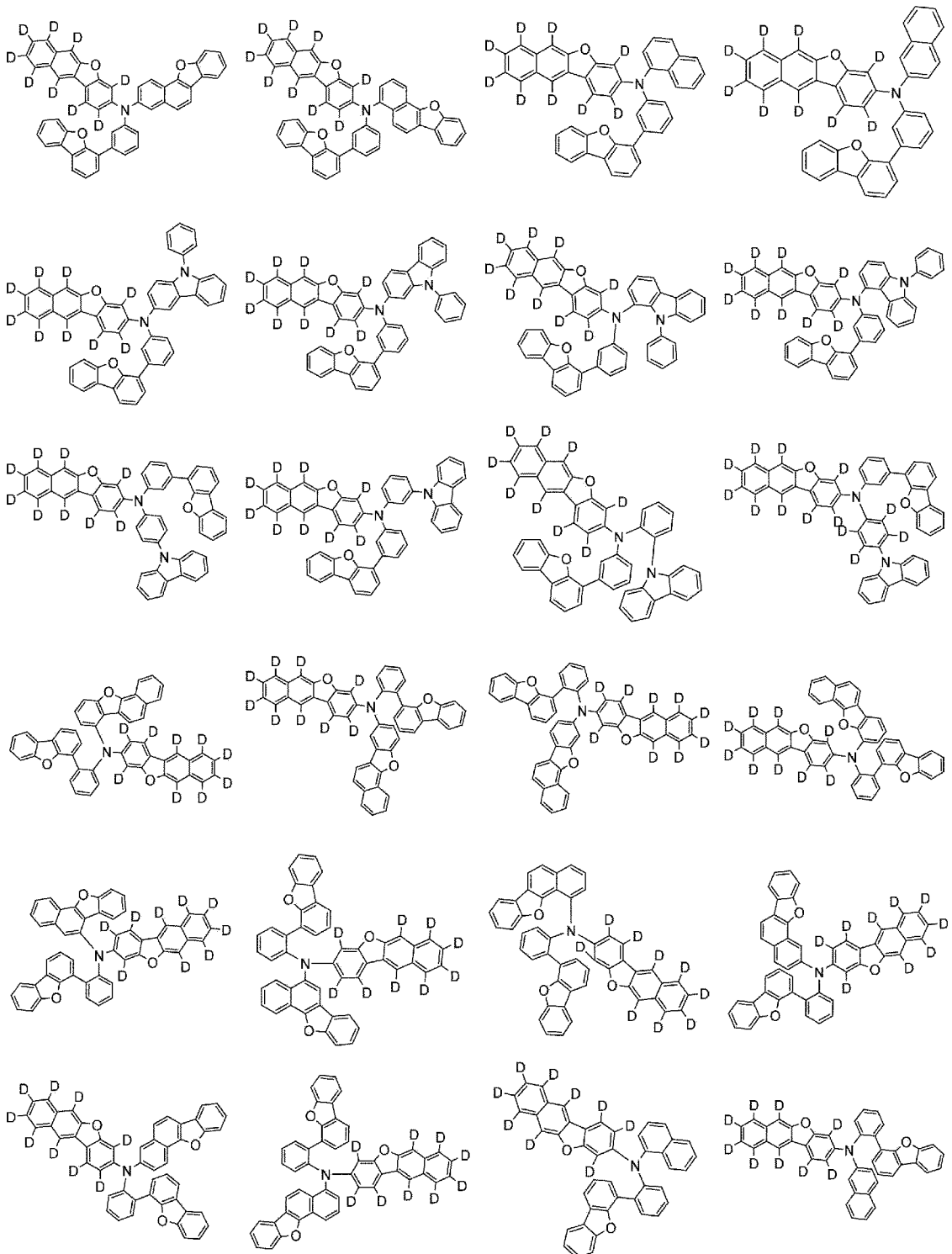
[0537]

[化167]



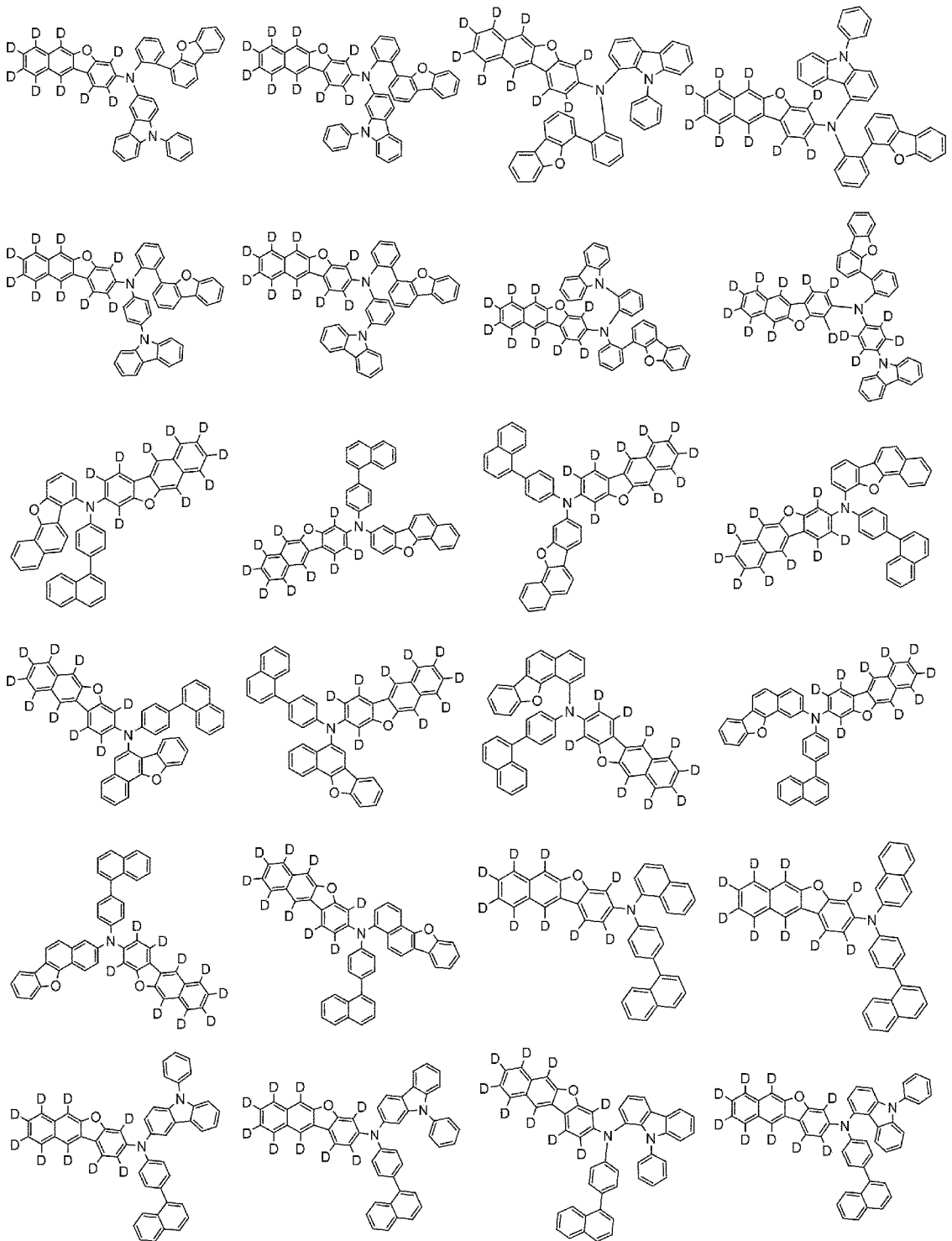
[0538]

[化168]



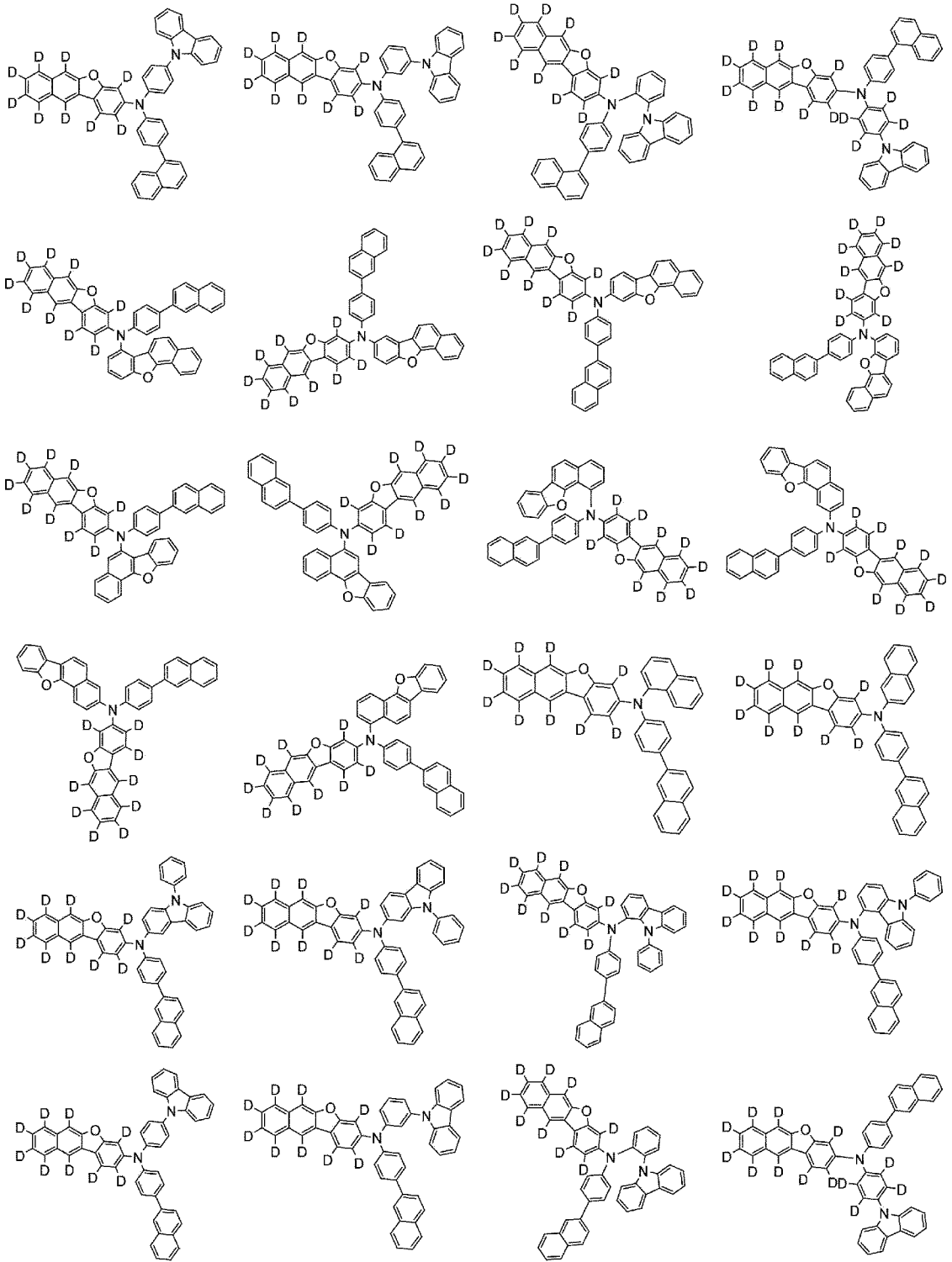
[0539]

[化169]



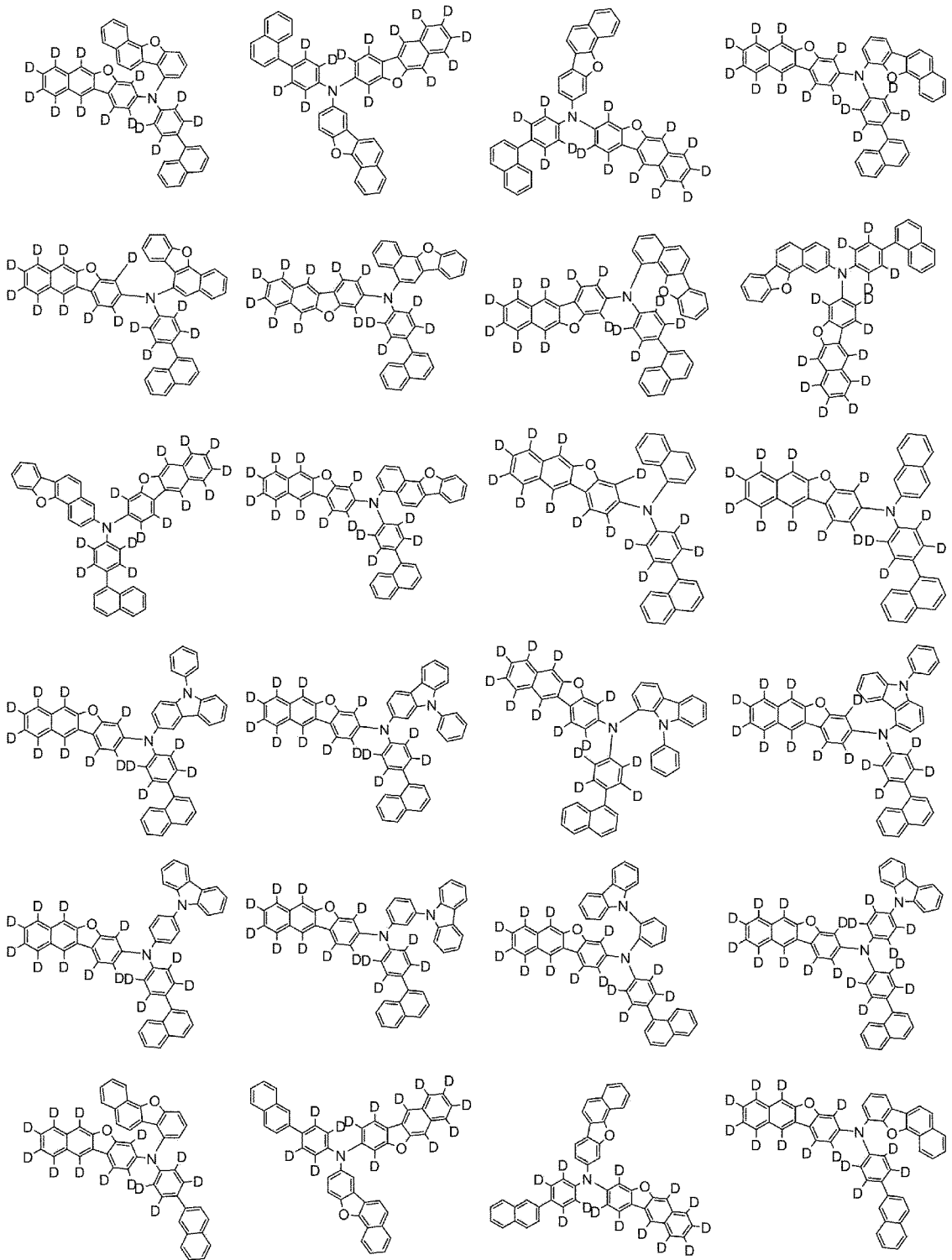
[0540]

[化170]



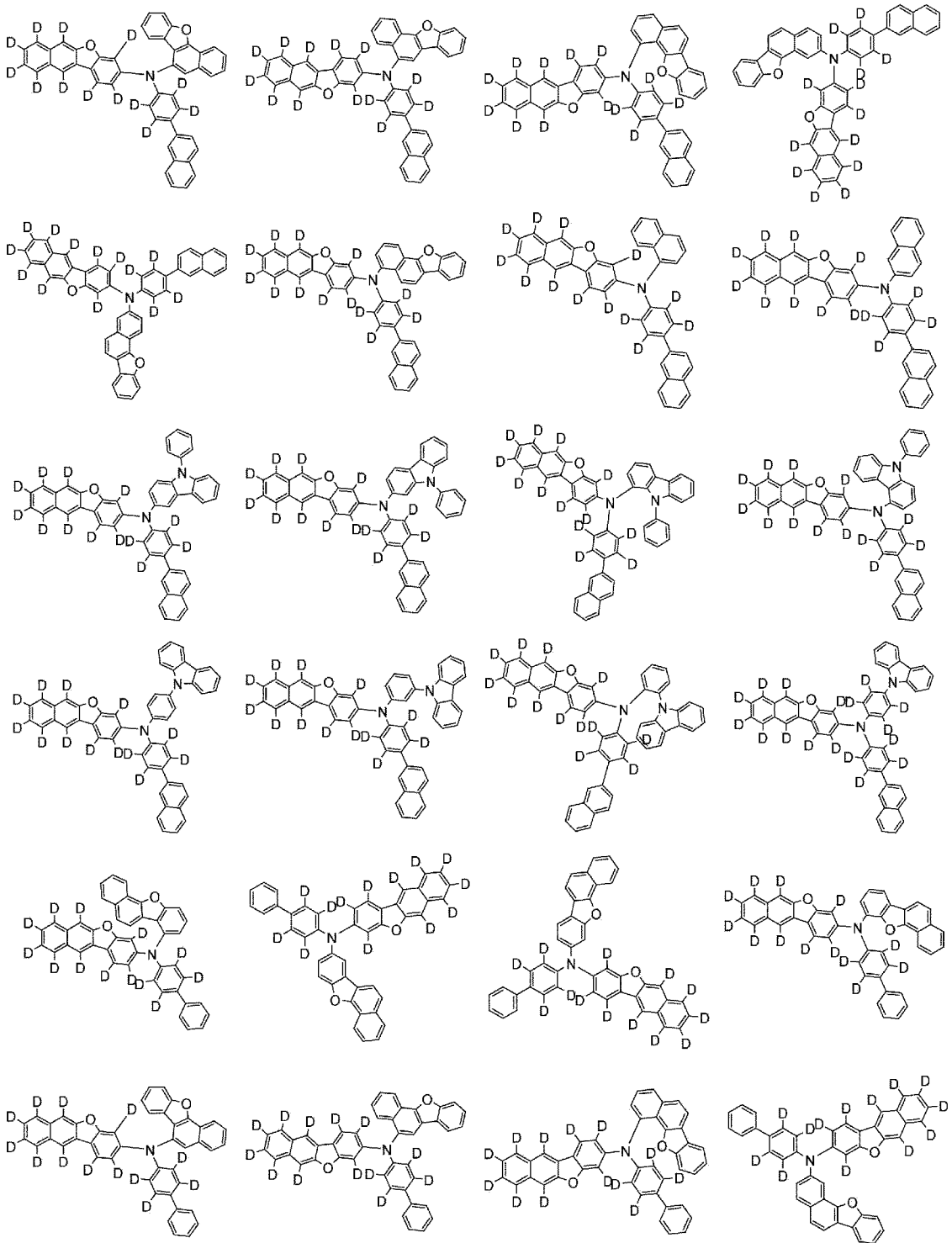
[0541]

[化171]



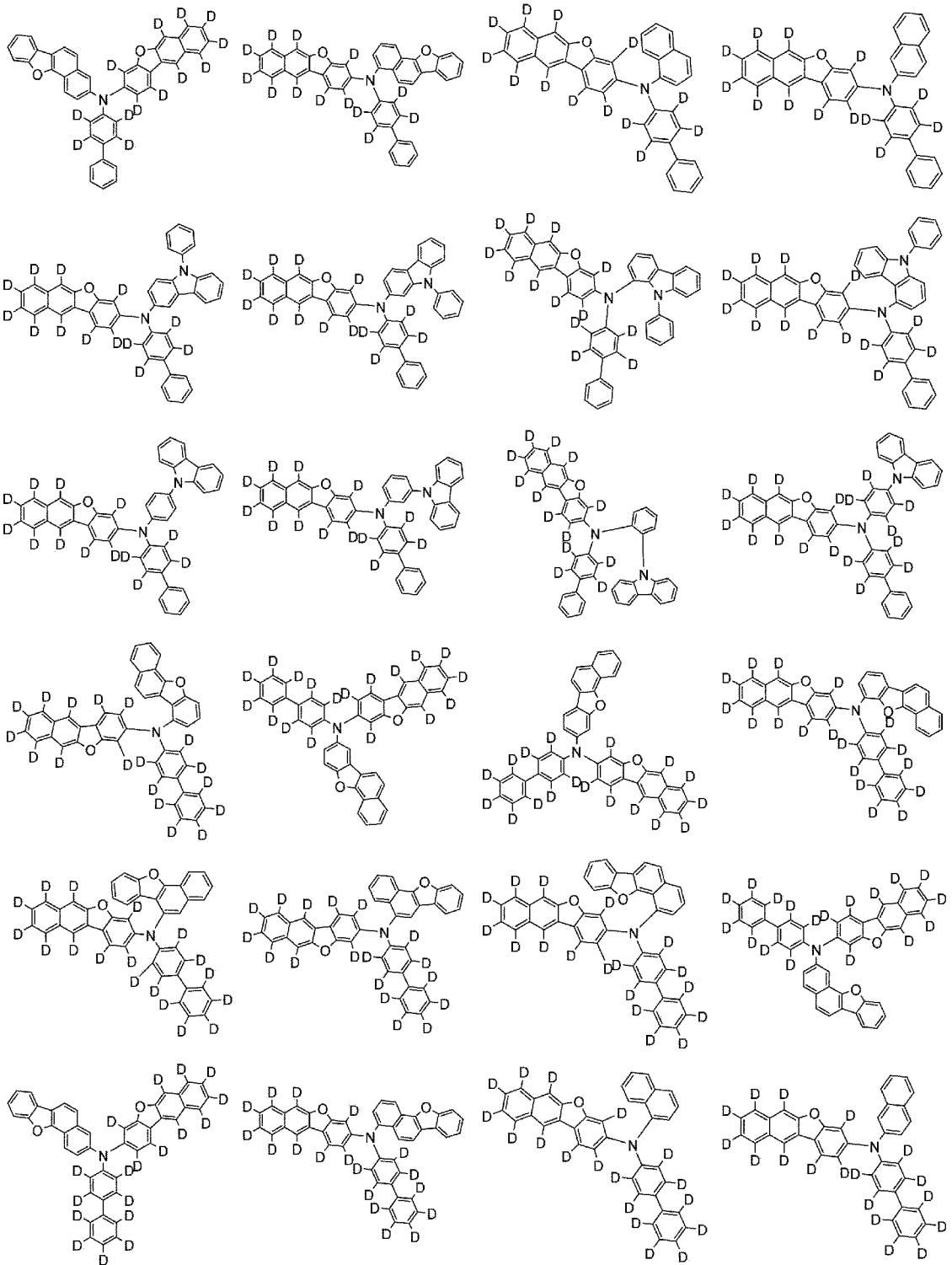
[0542]

[化172]



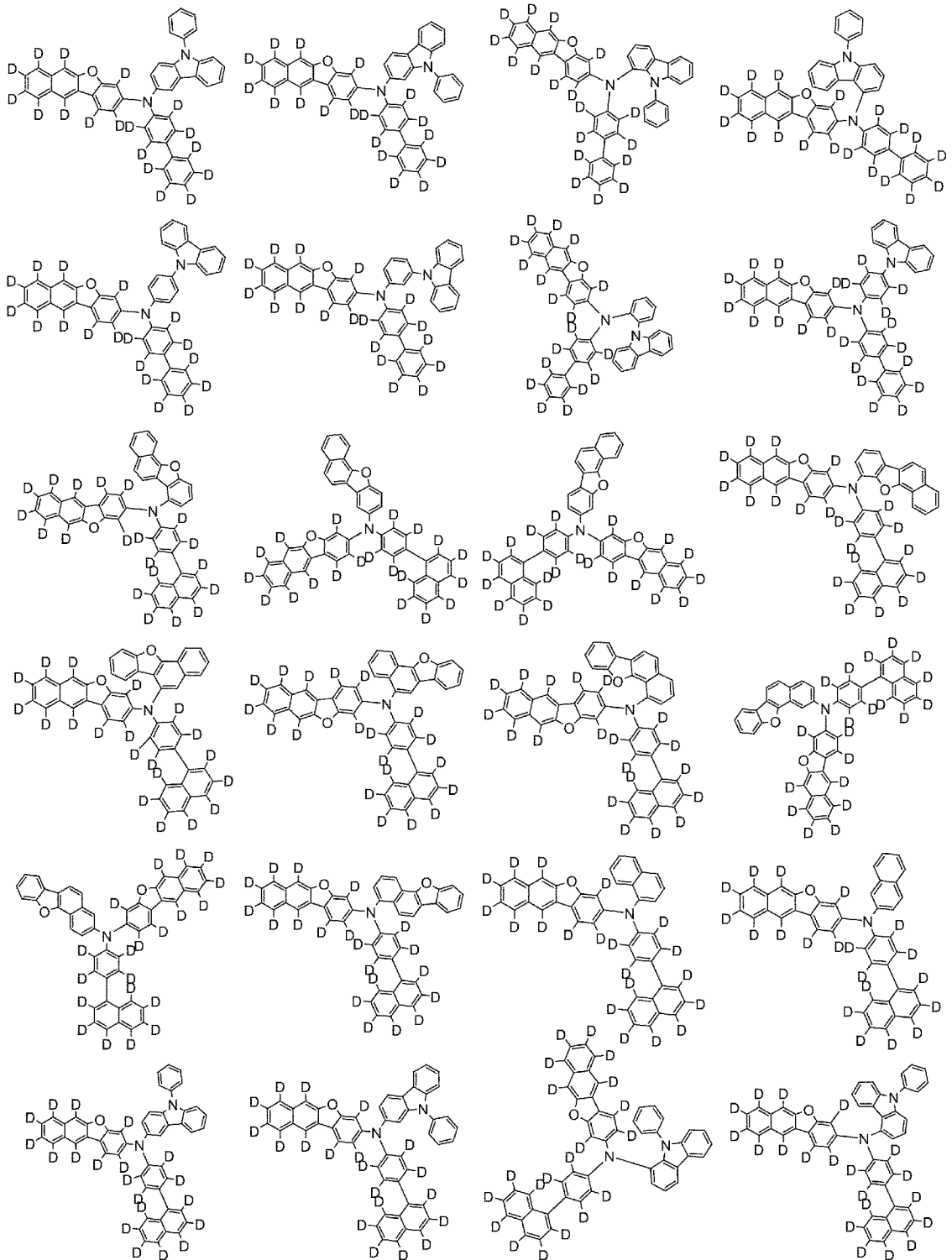
[0543]

[化173]



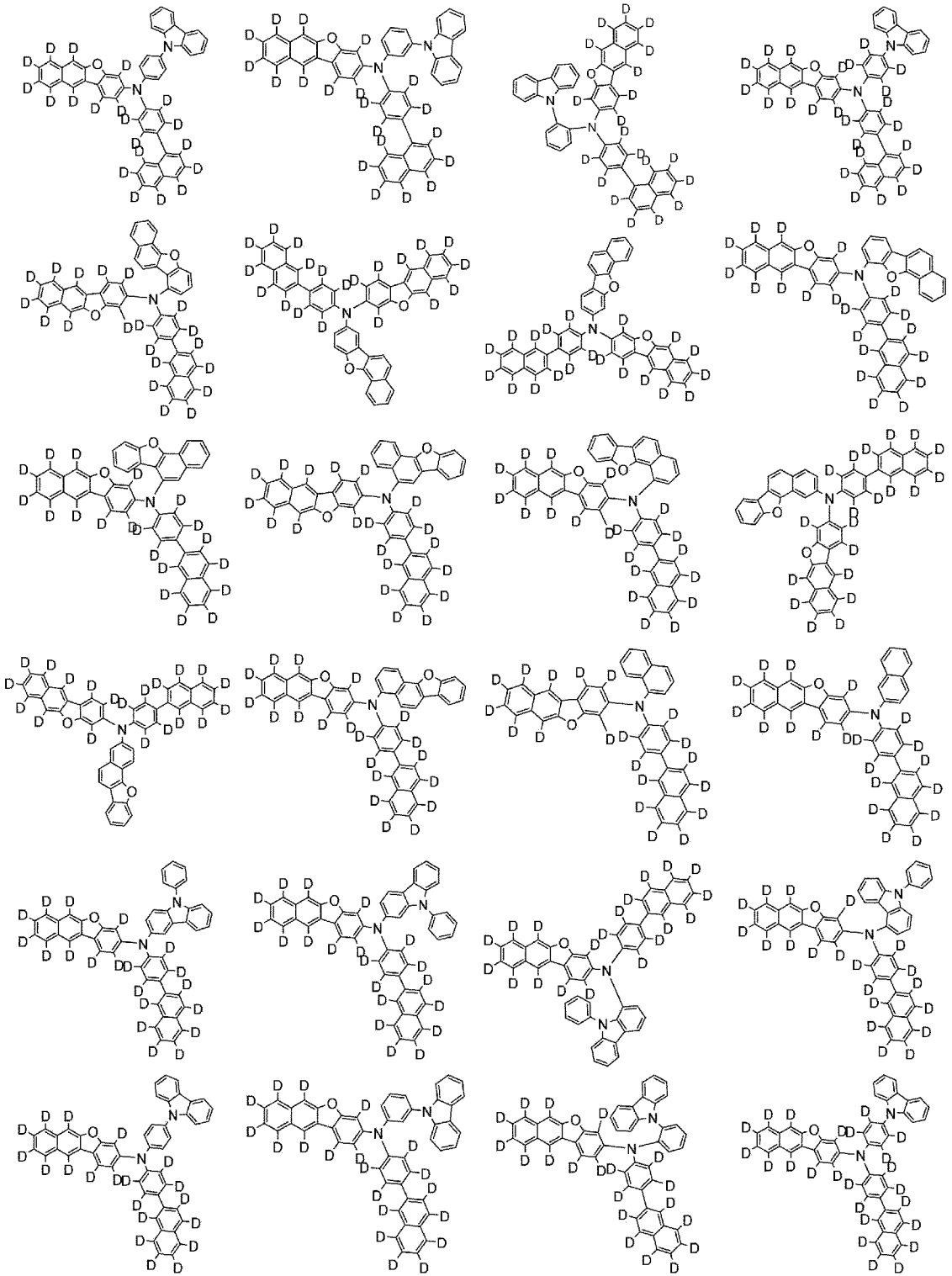
[0544]

[化174]



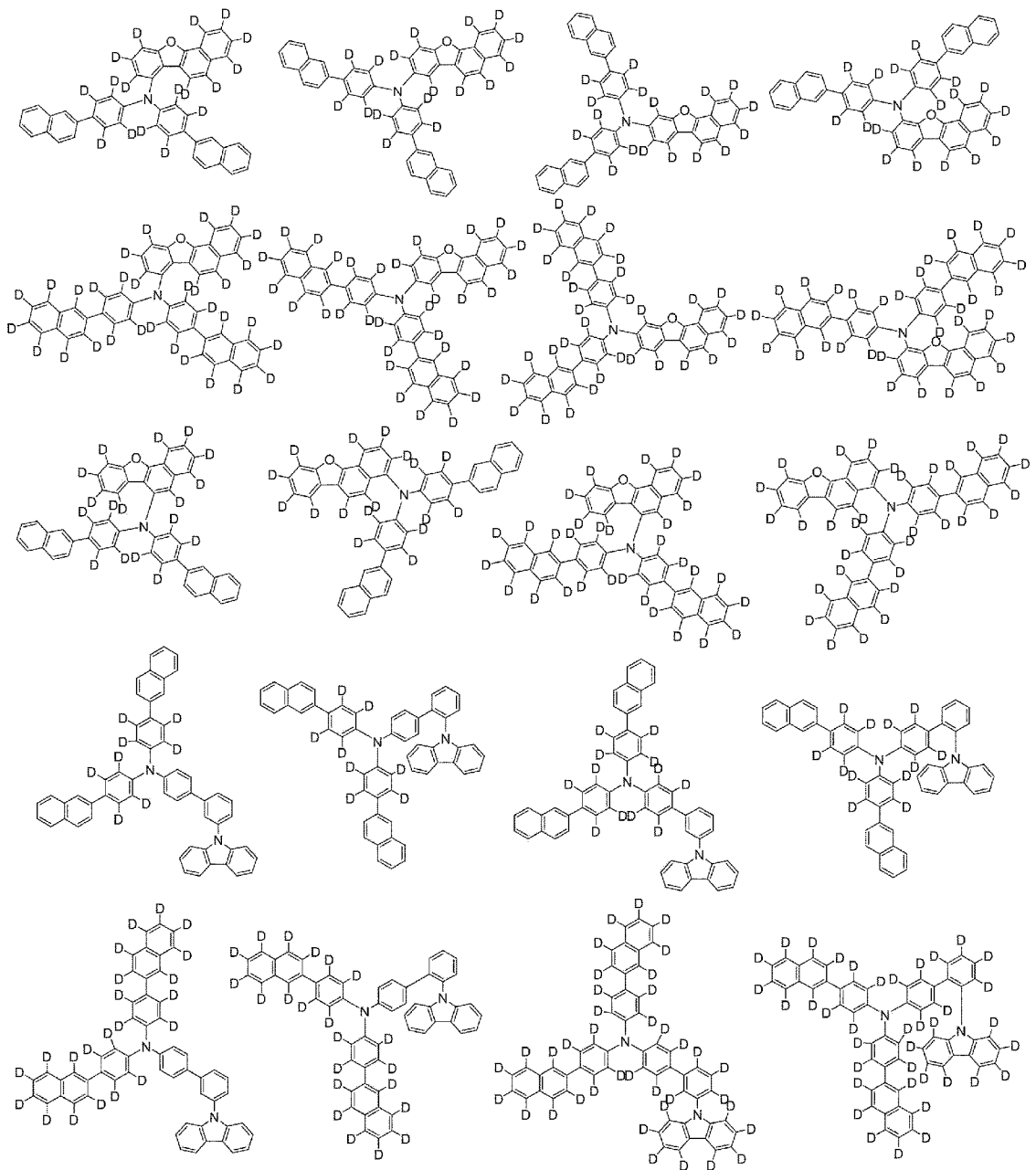
[0545]

[化175]



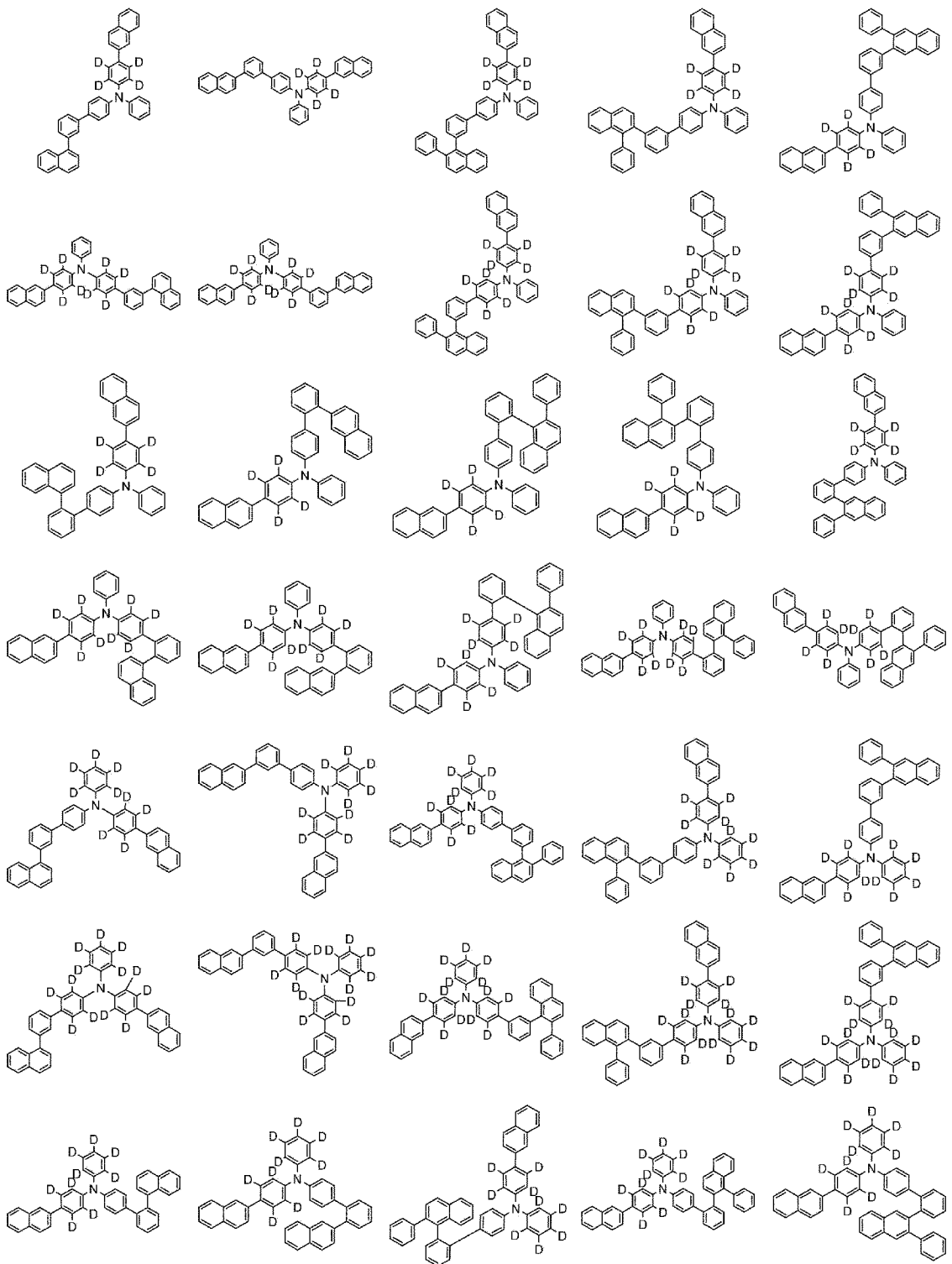
[0546]

[化176]



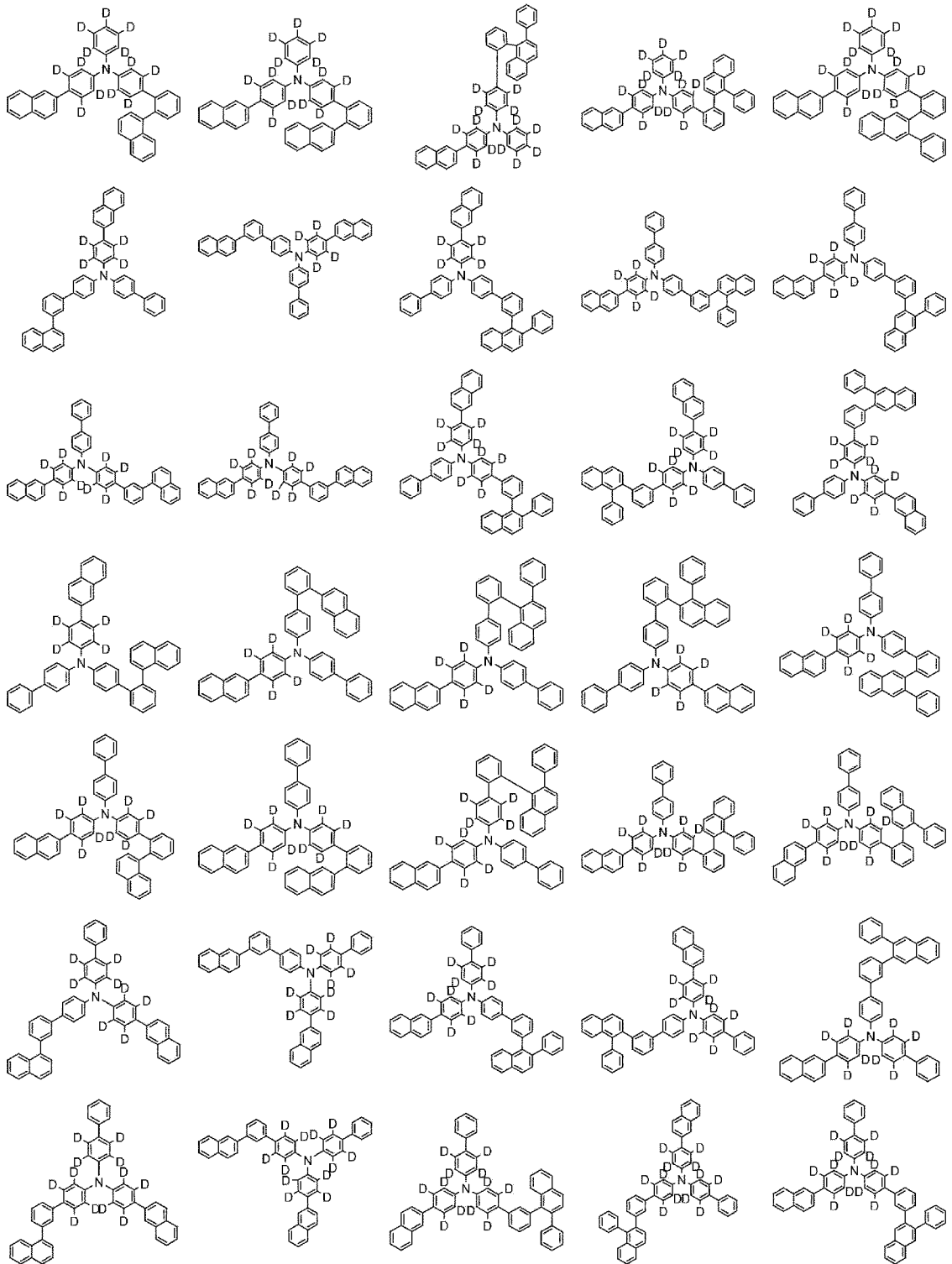
[0547]

[化177]



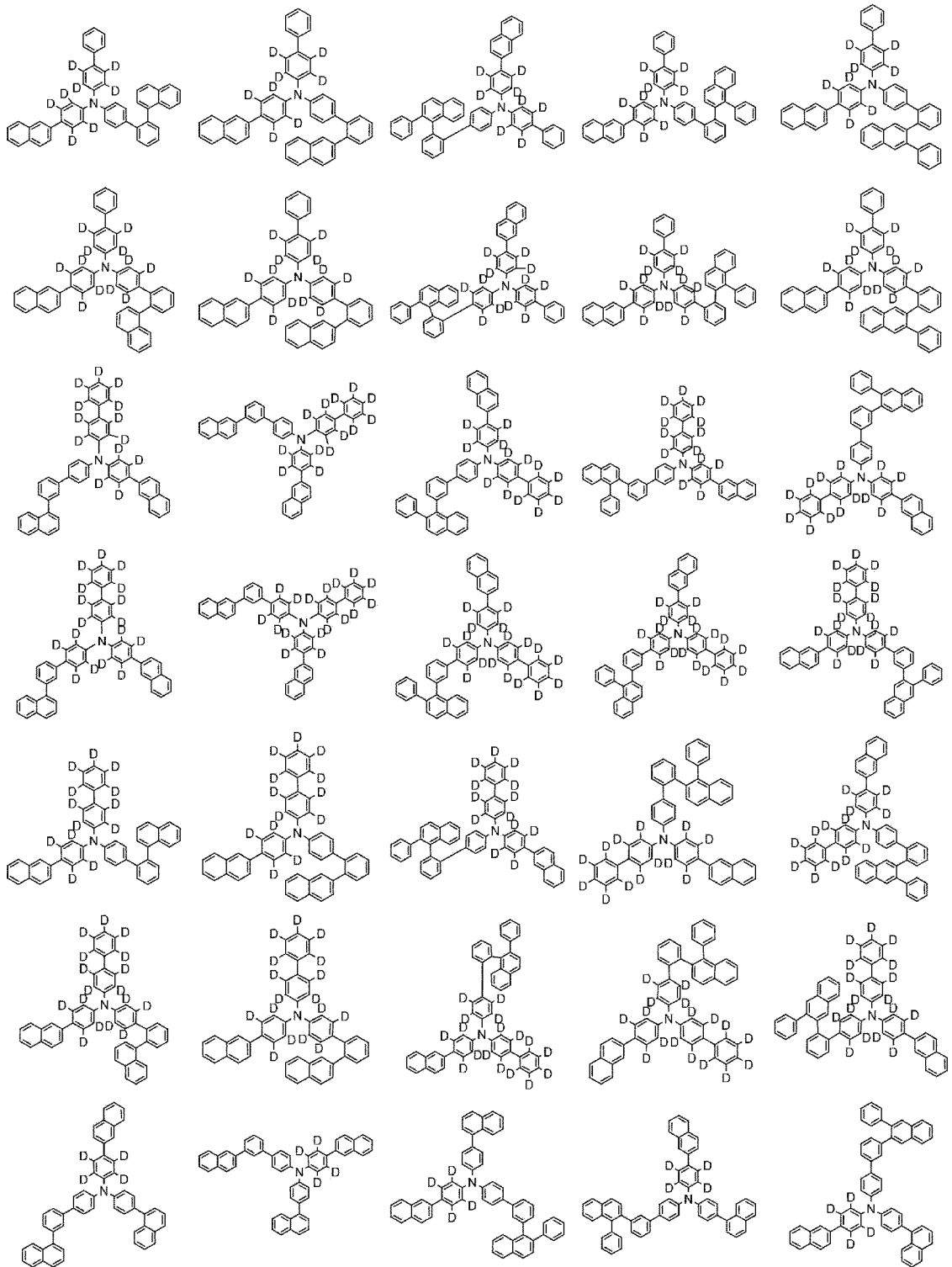
[0548]

[化178]



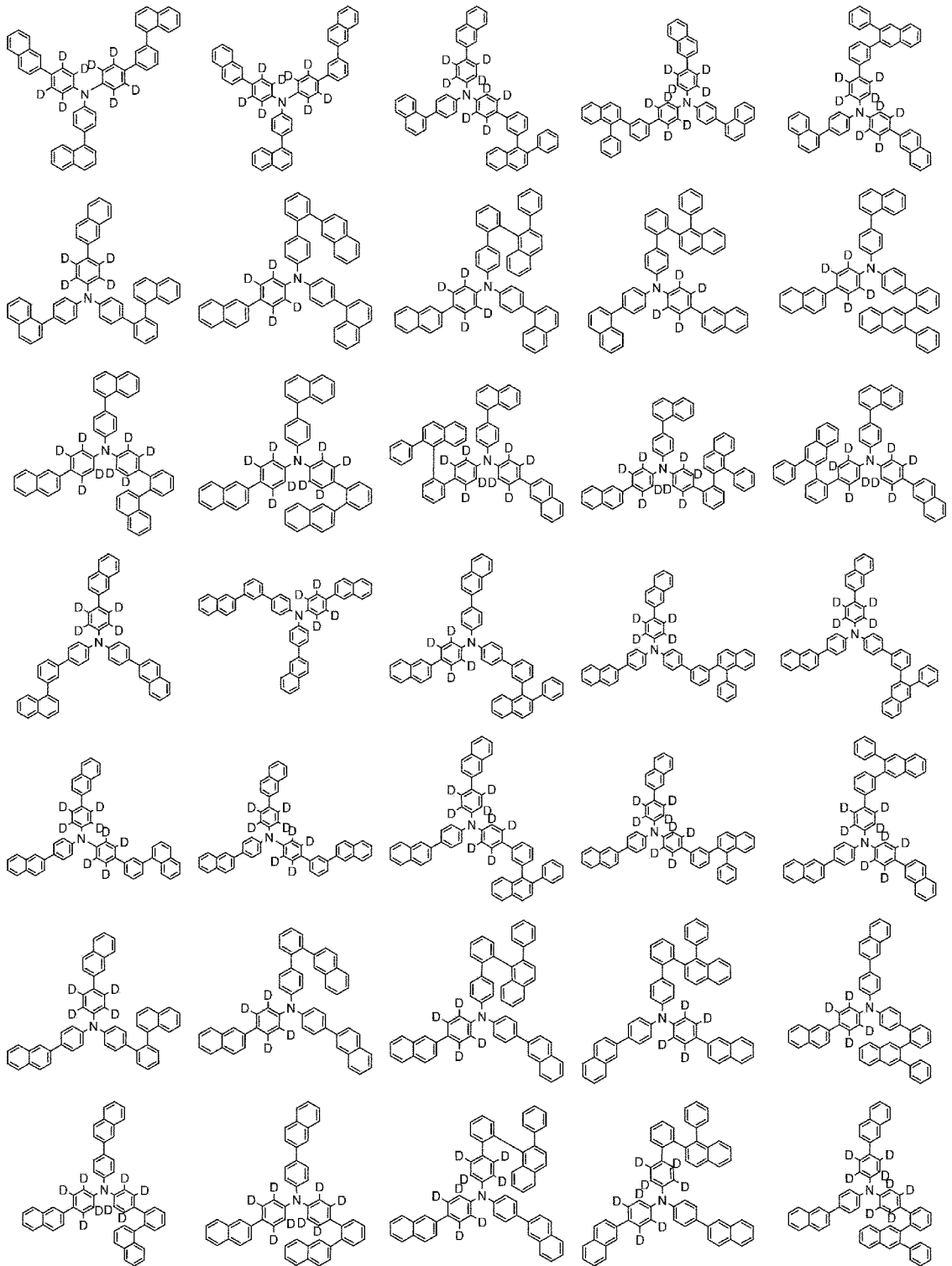
[0549]

[化179]



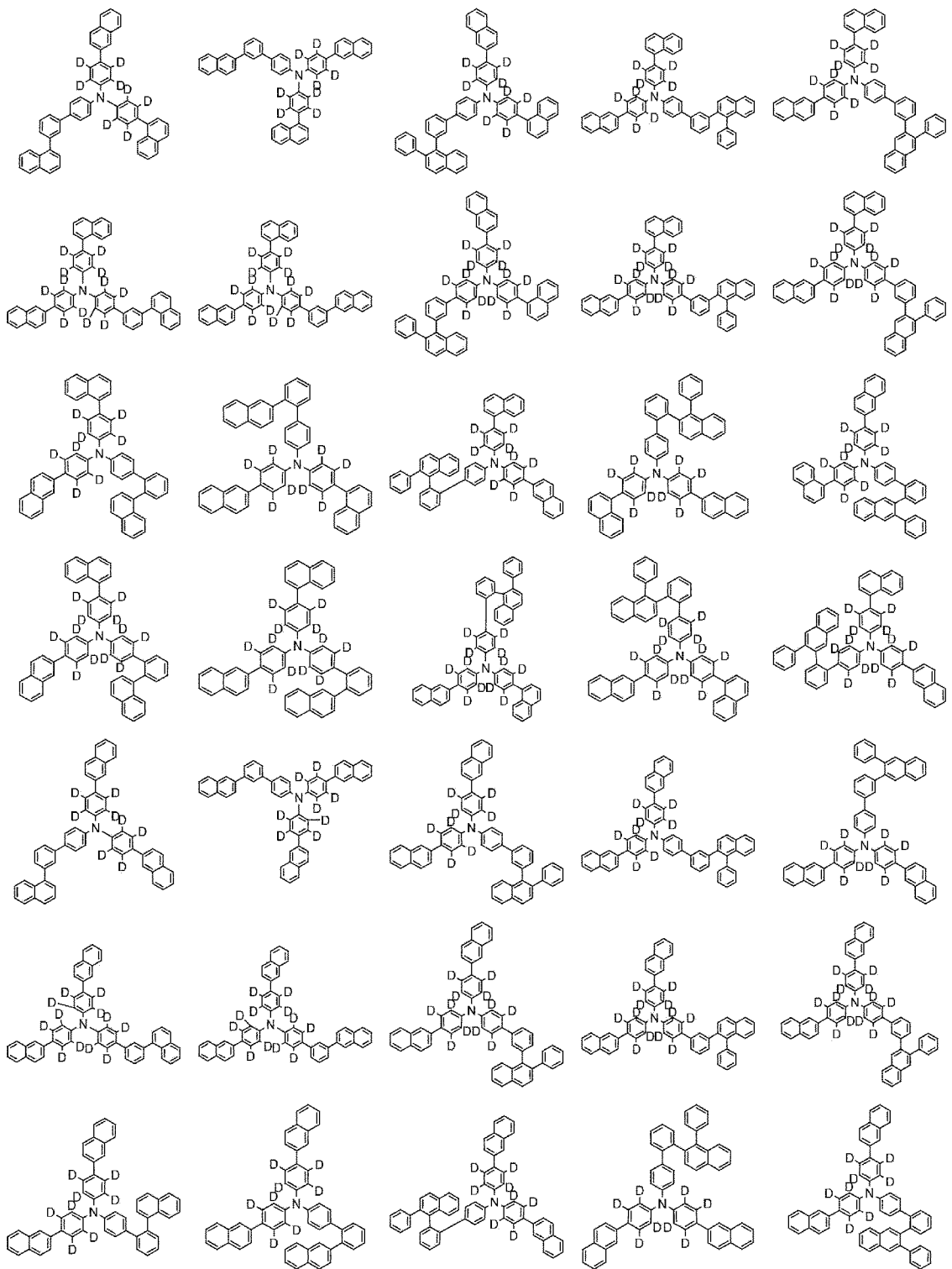
[0550]

[化180]



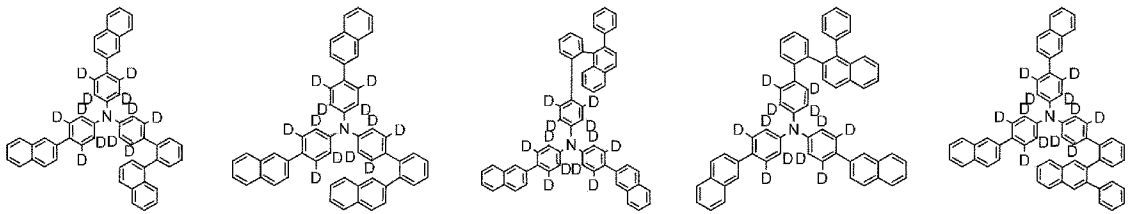
[0551]

[化181]

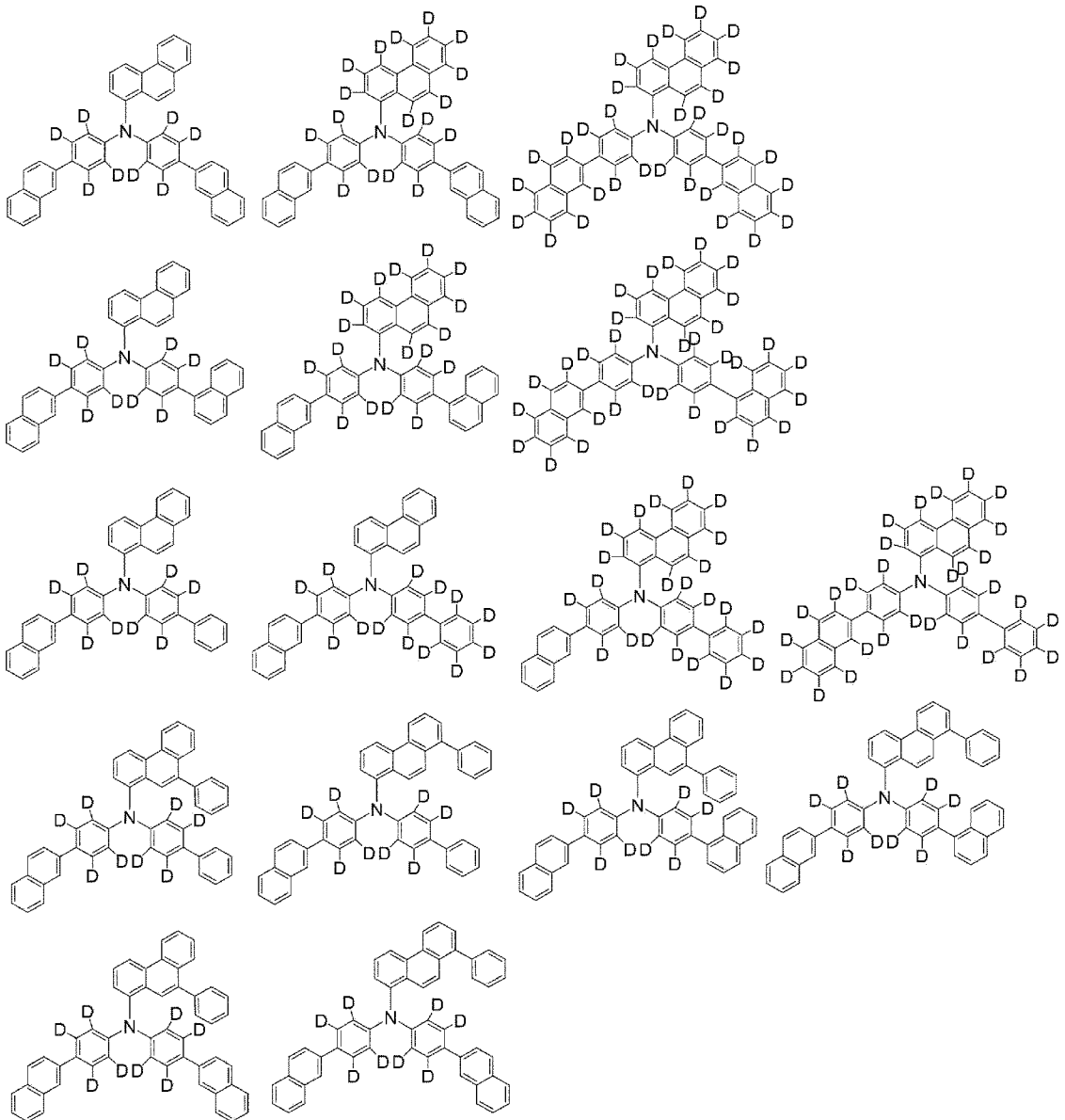


[0552]

[化182]

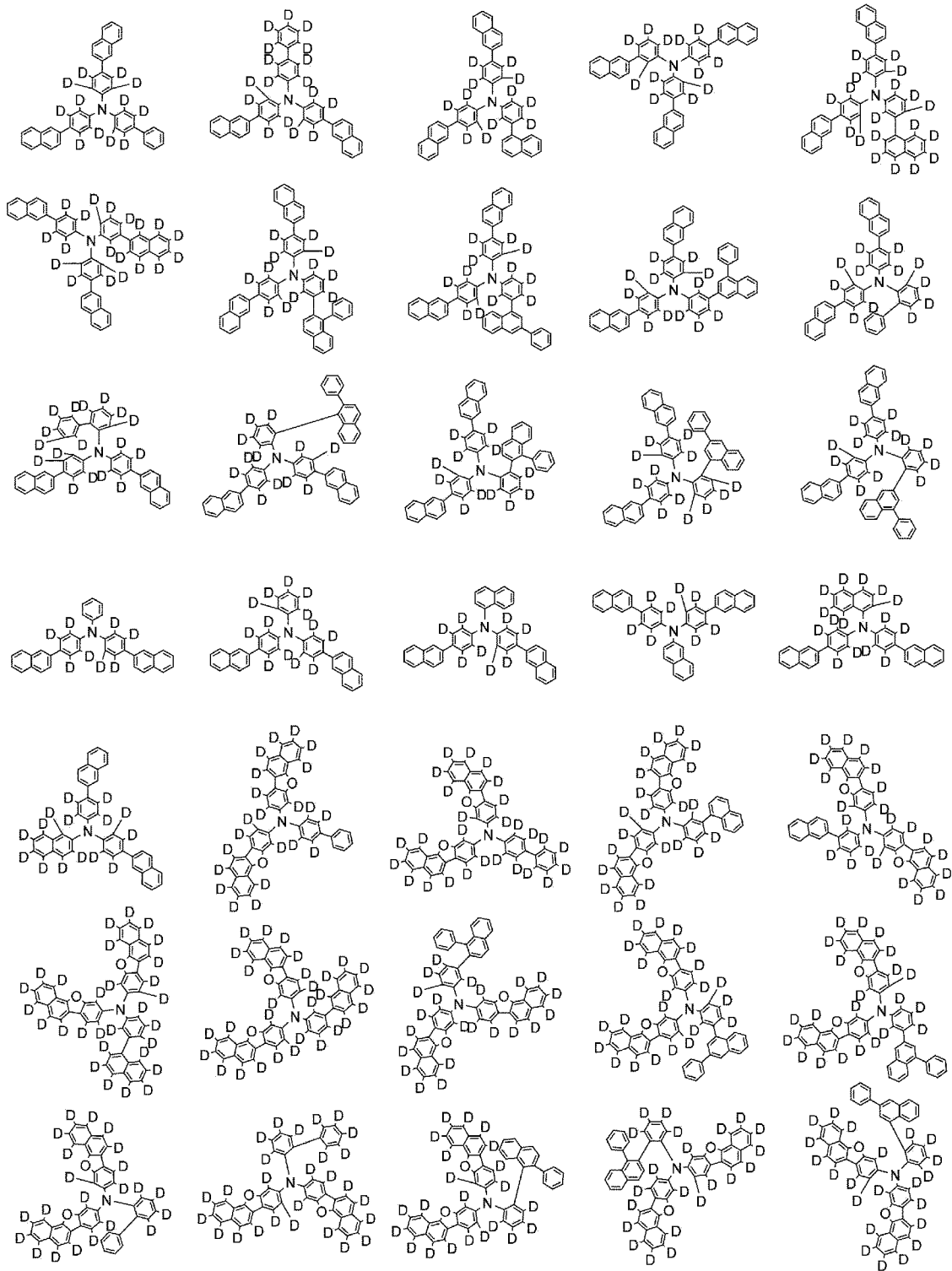


[0553] [化183]



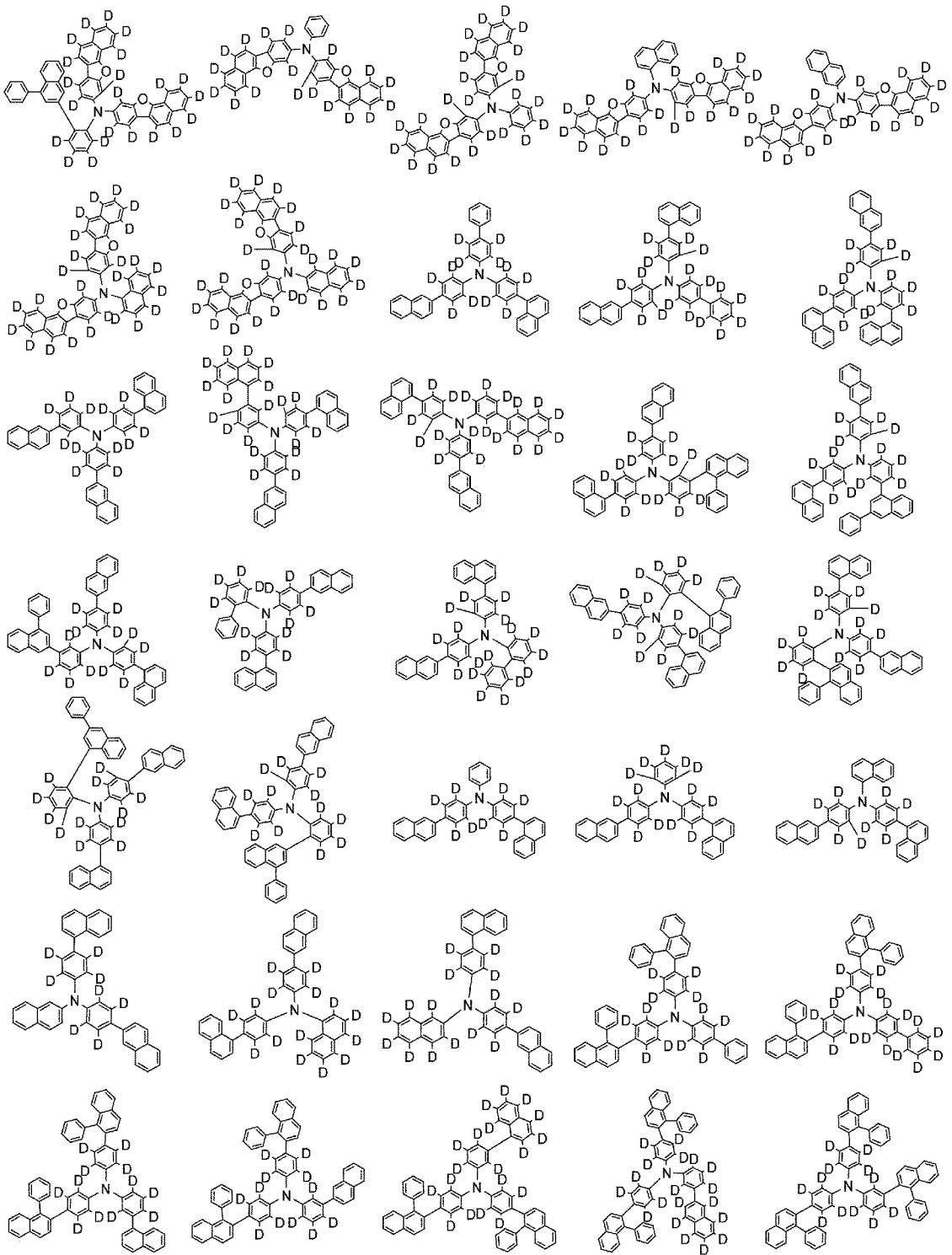
[0554]

[化184]



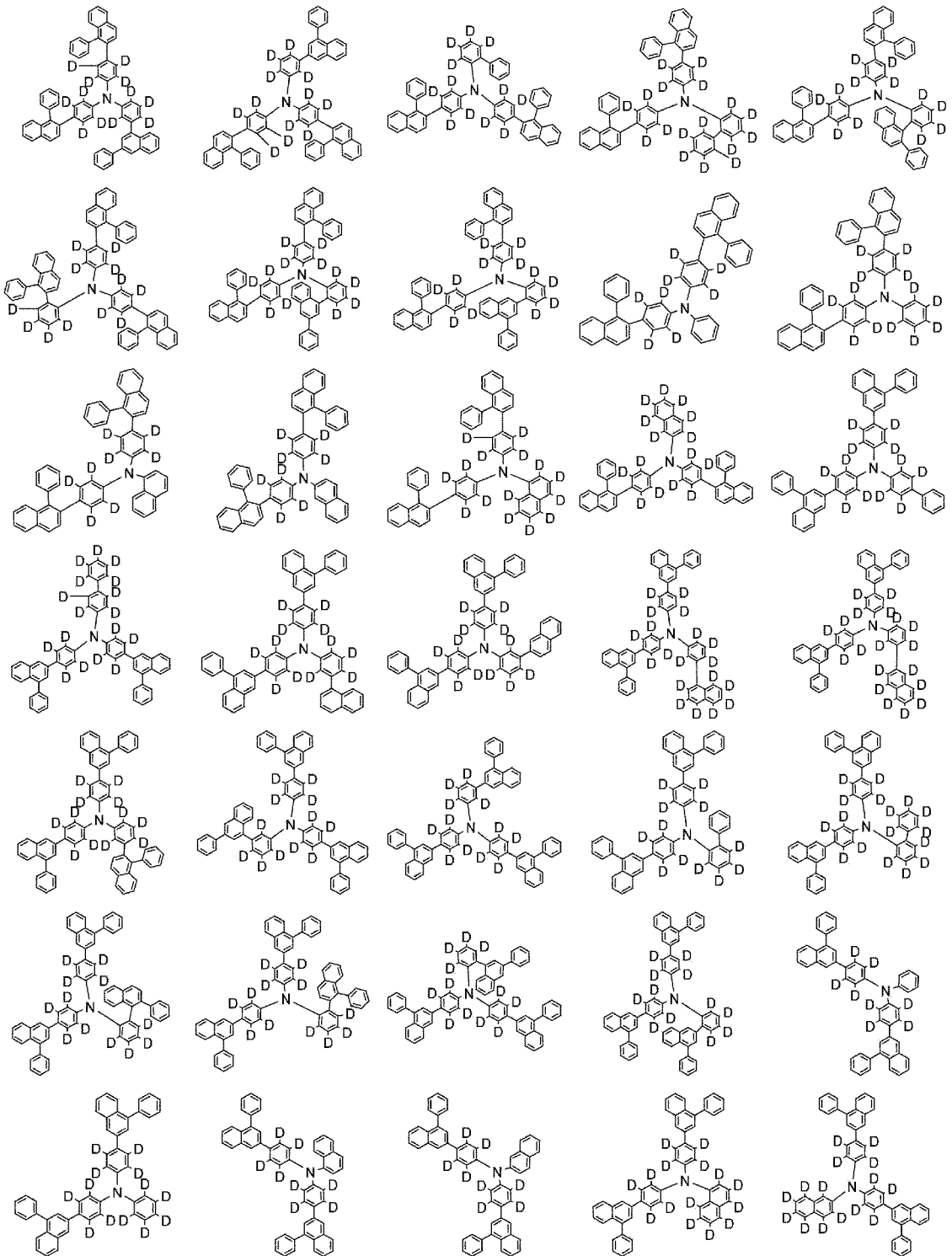
[0555]

[化185]



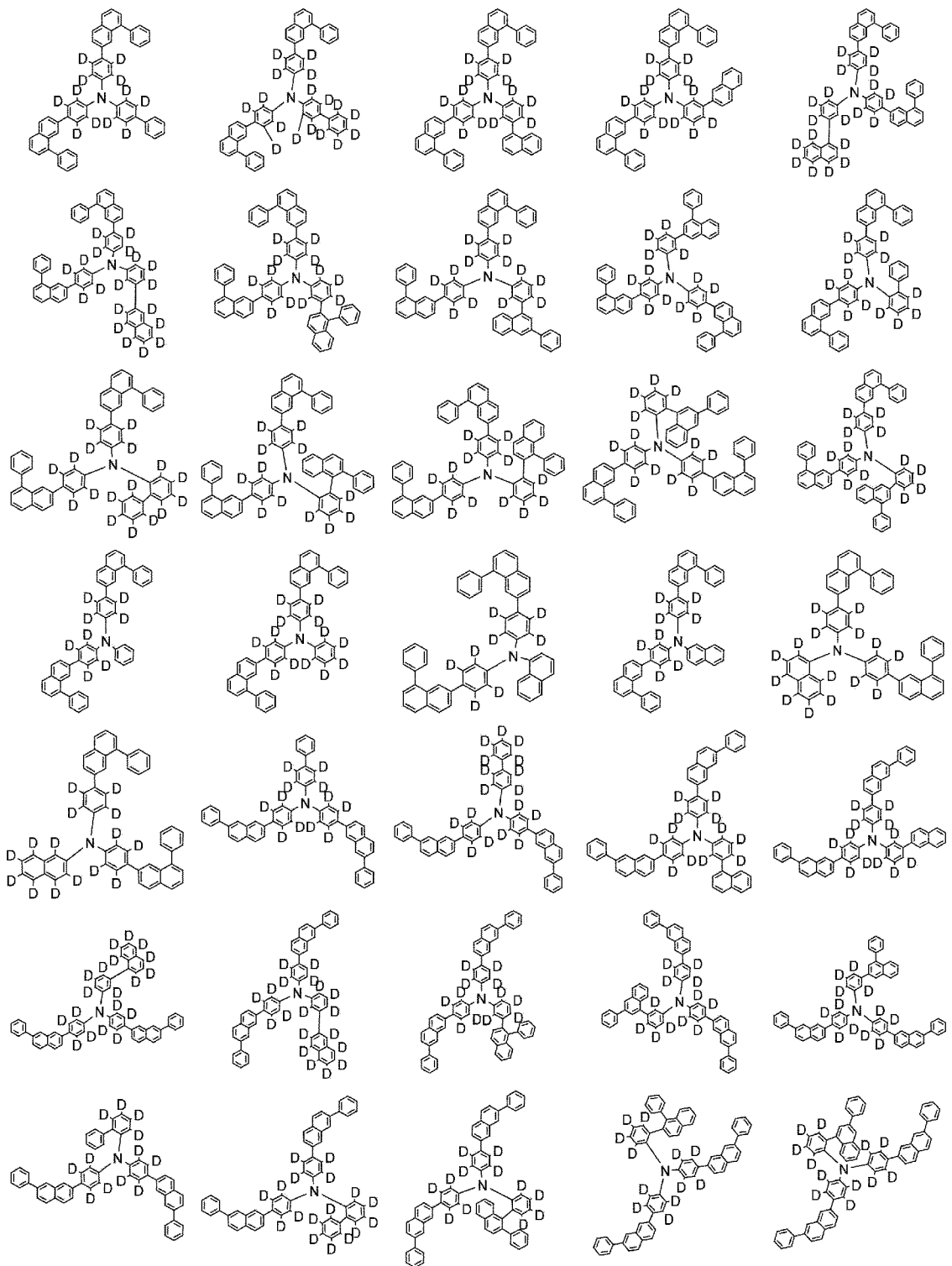
[0556]

[化186]



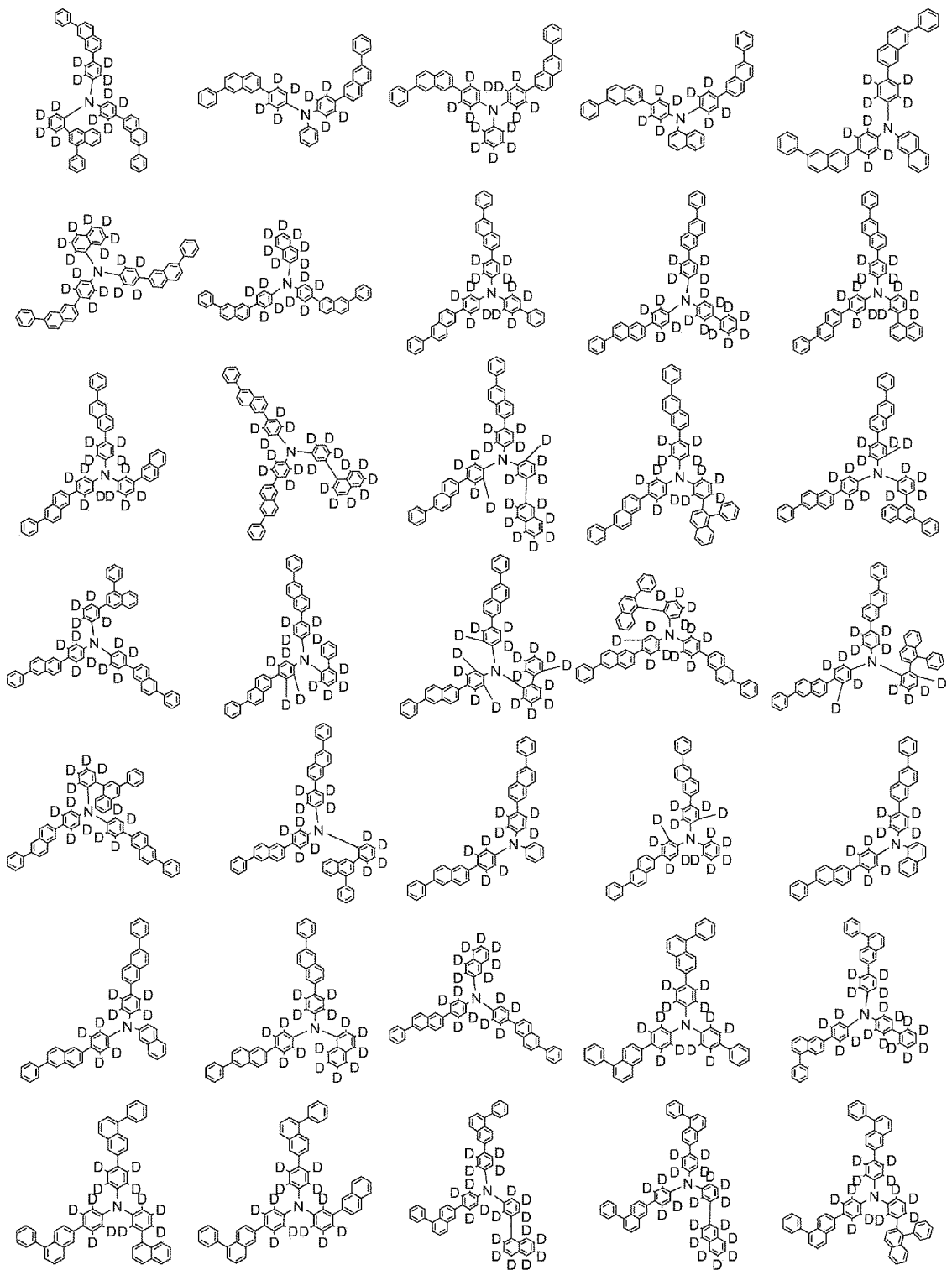
[0557]

[化187]



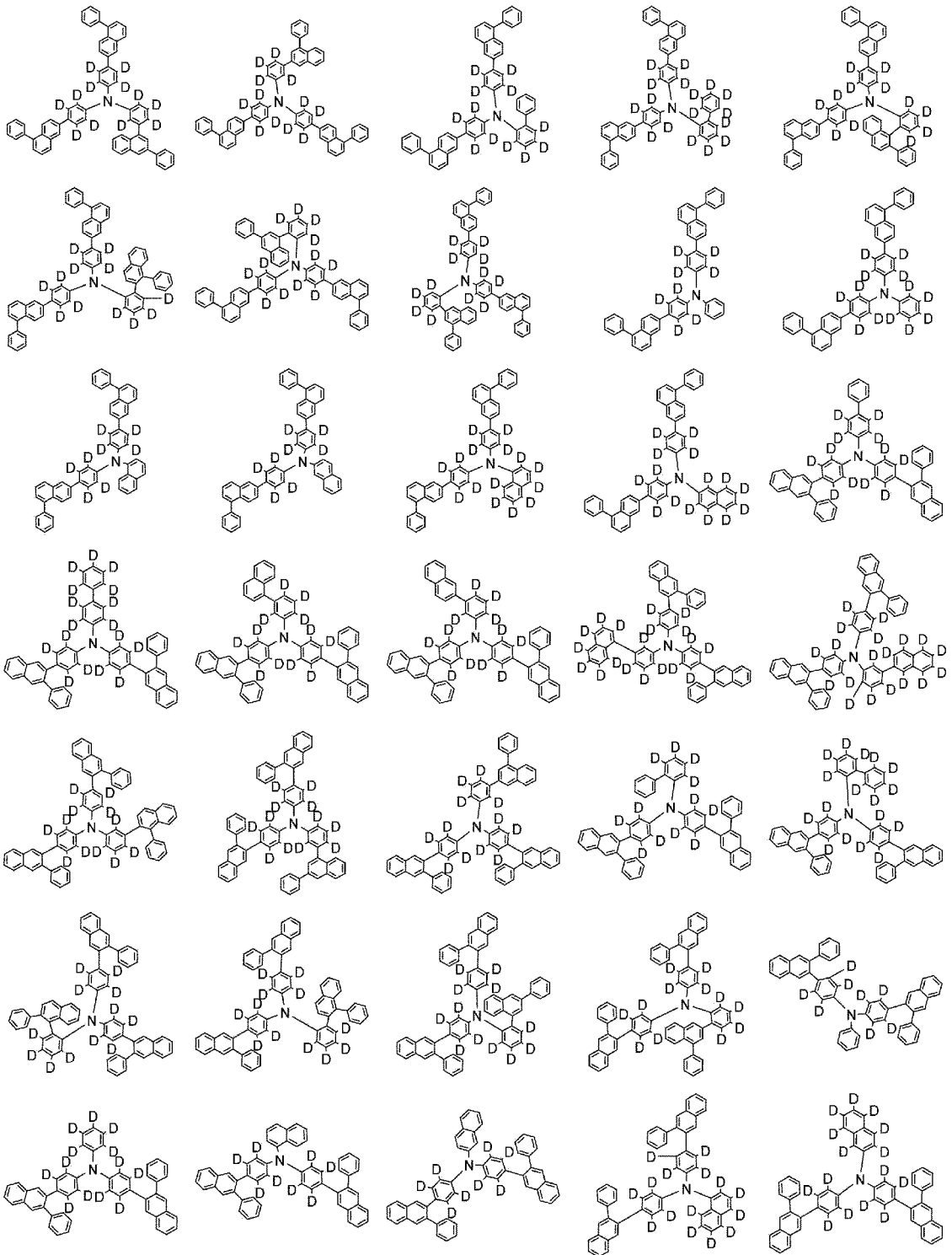
[0558]

[化188]



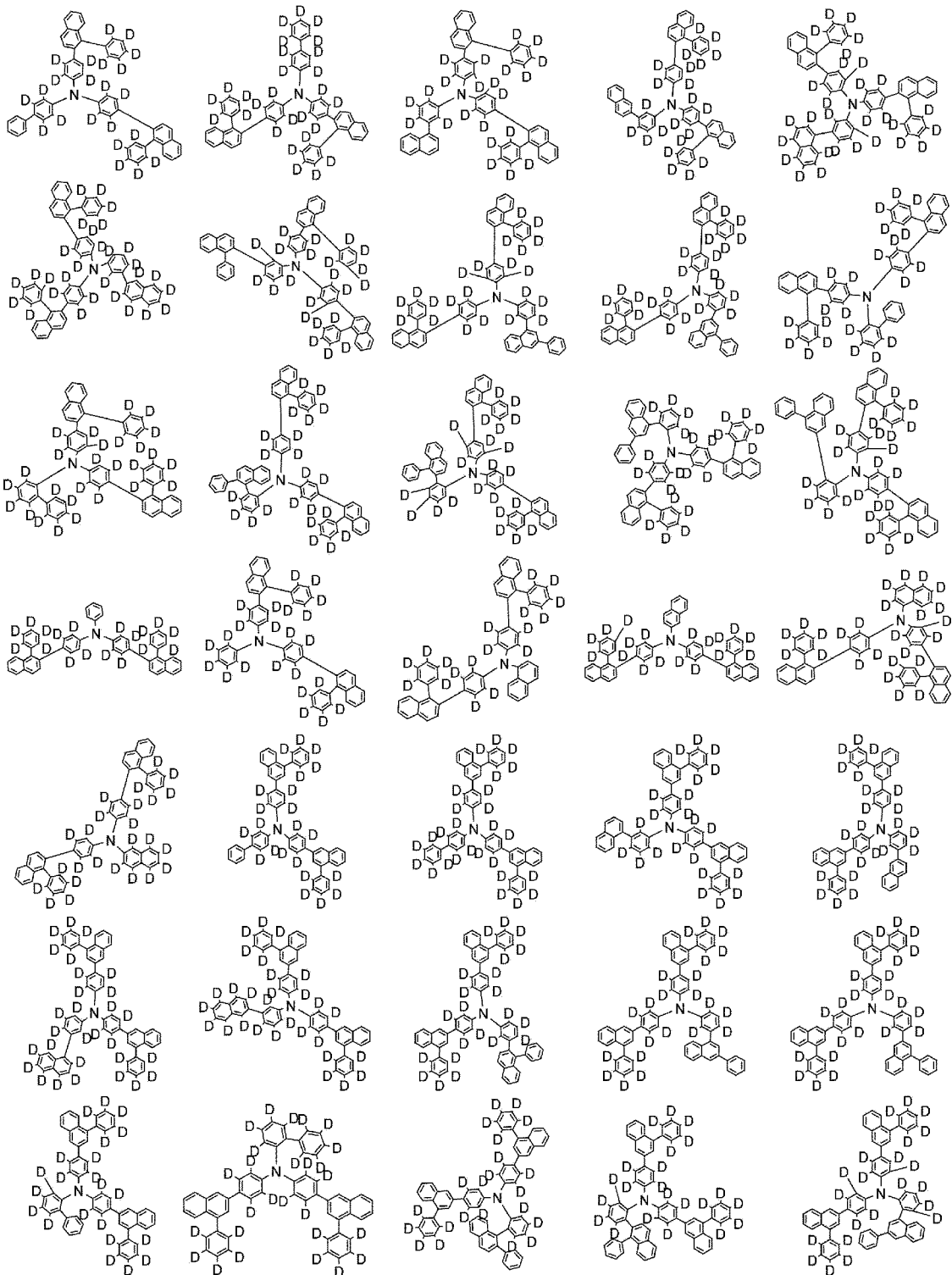
[0559]

[化189]



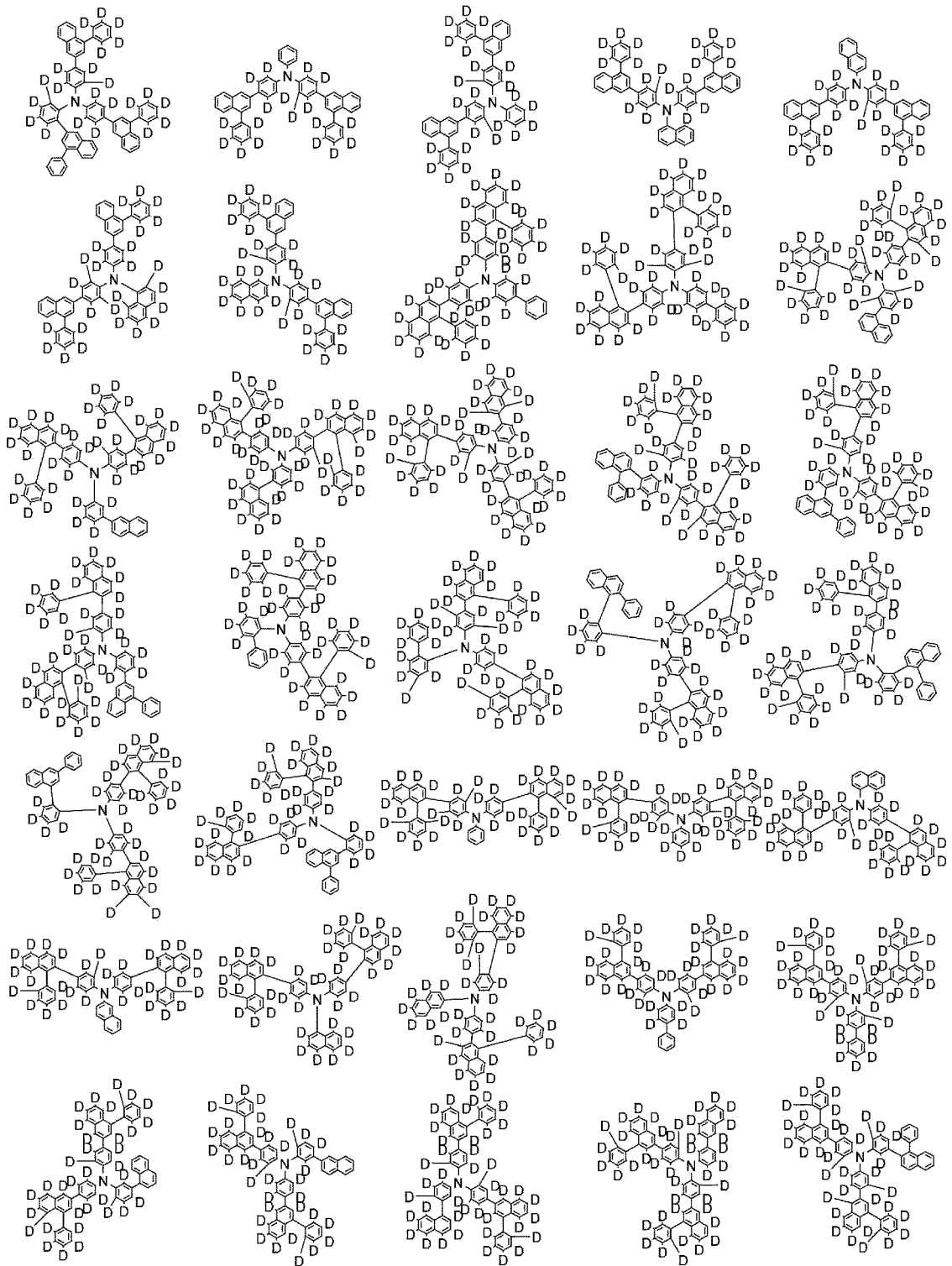
[0560]

[化190]



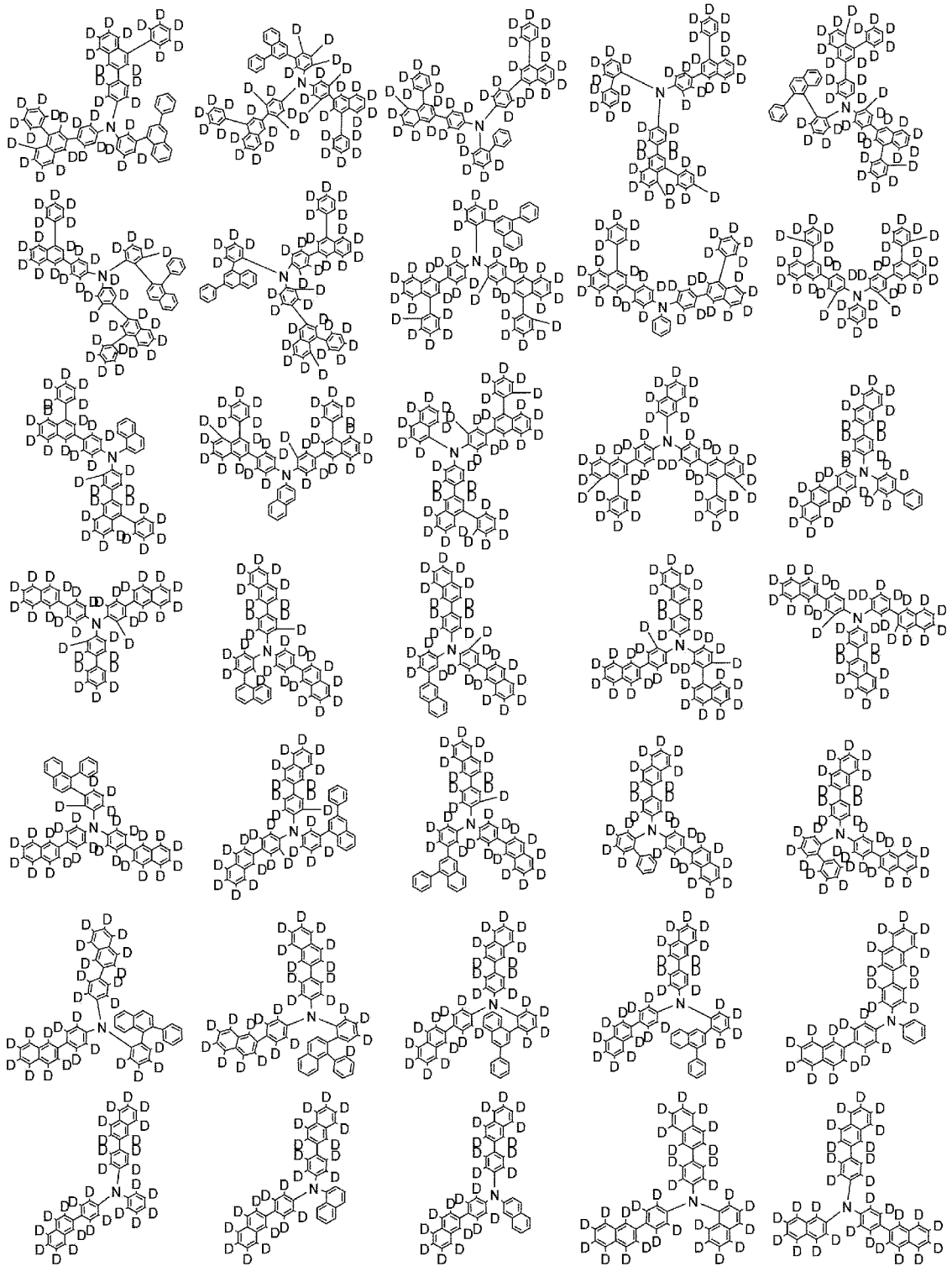
[0561]

[化191]



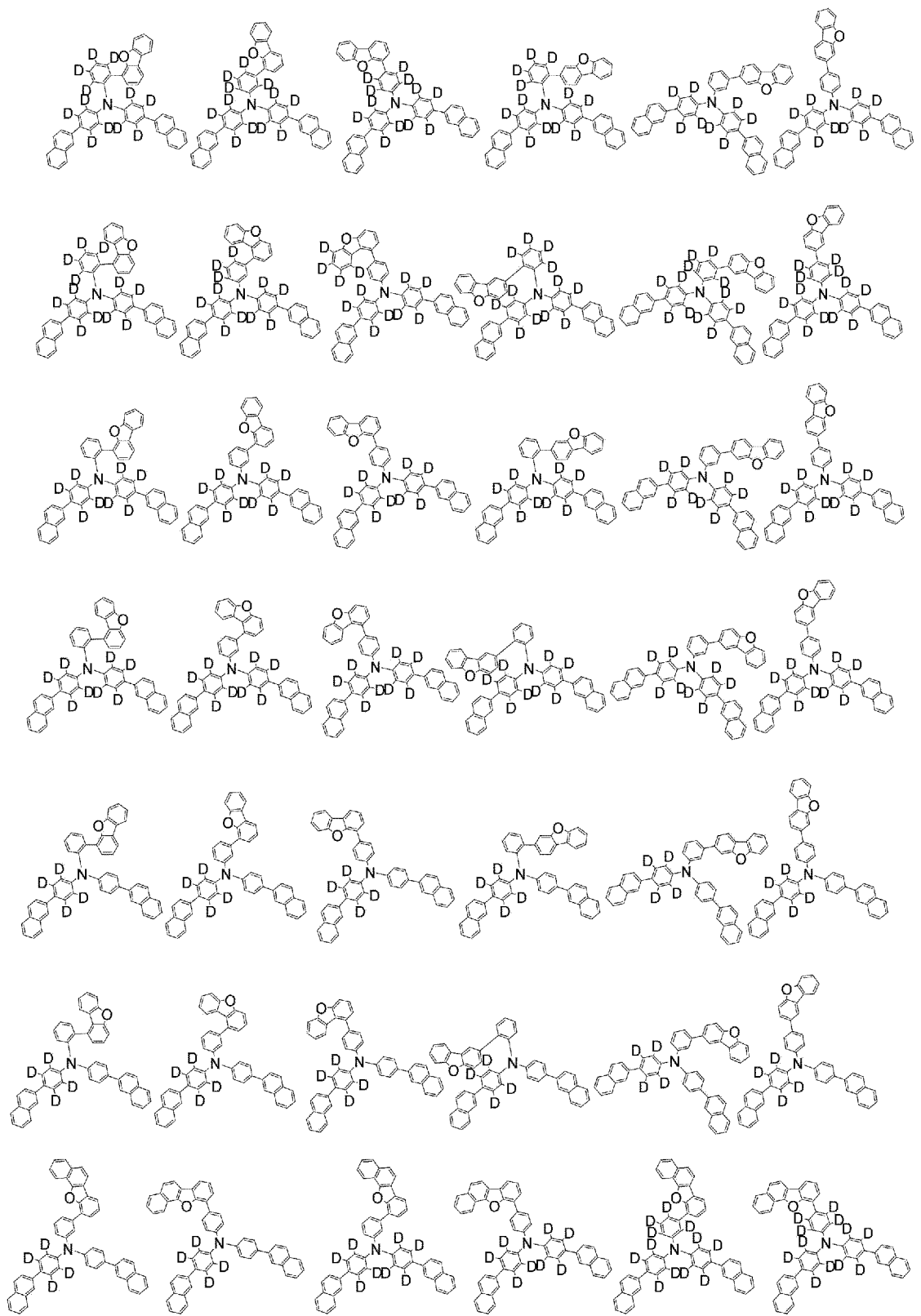
[0562]

[化192]



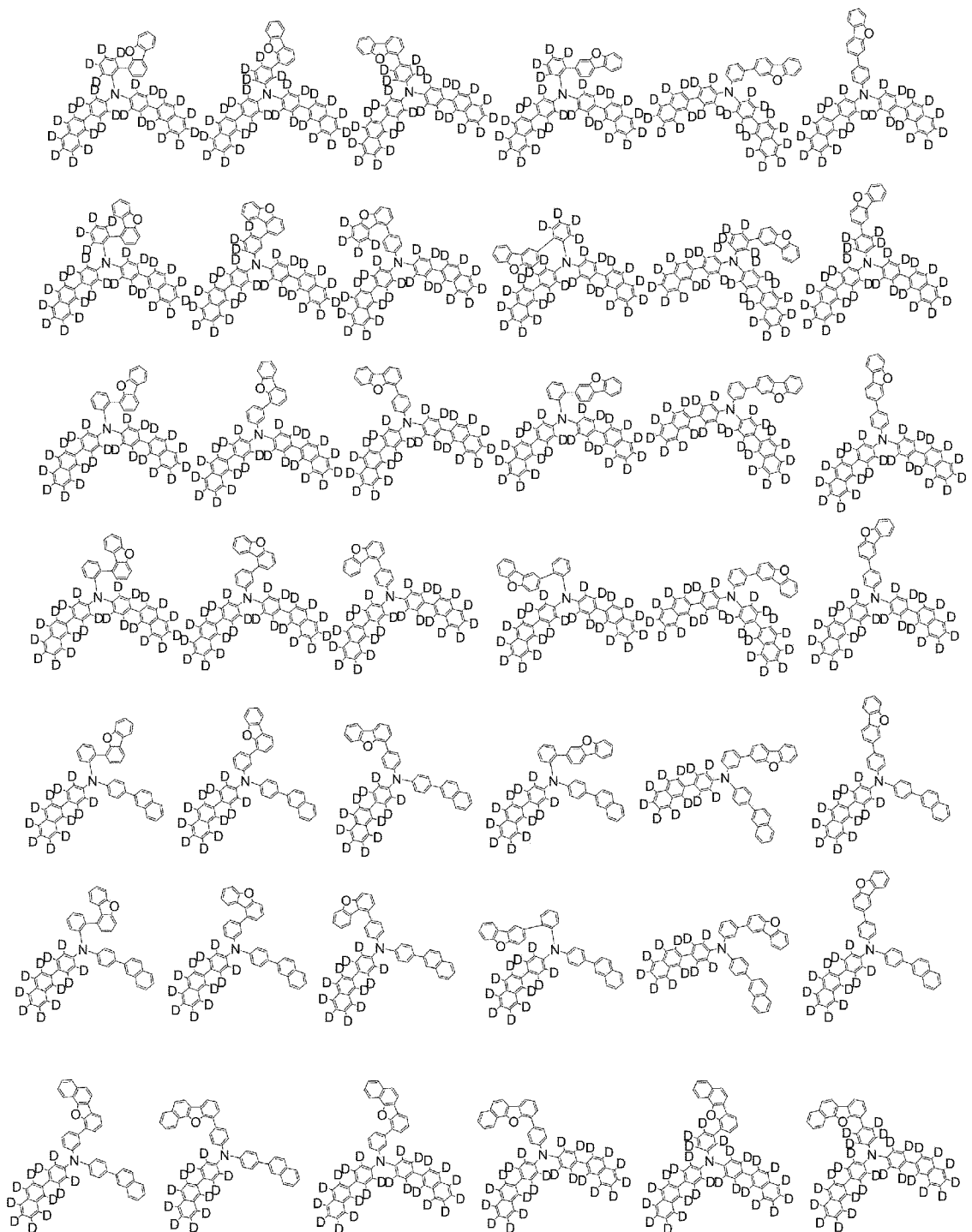
[0563]

[化193]



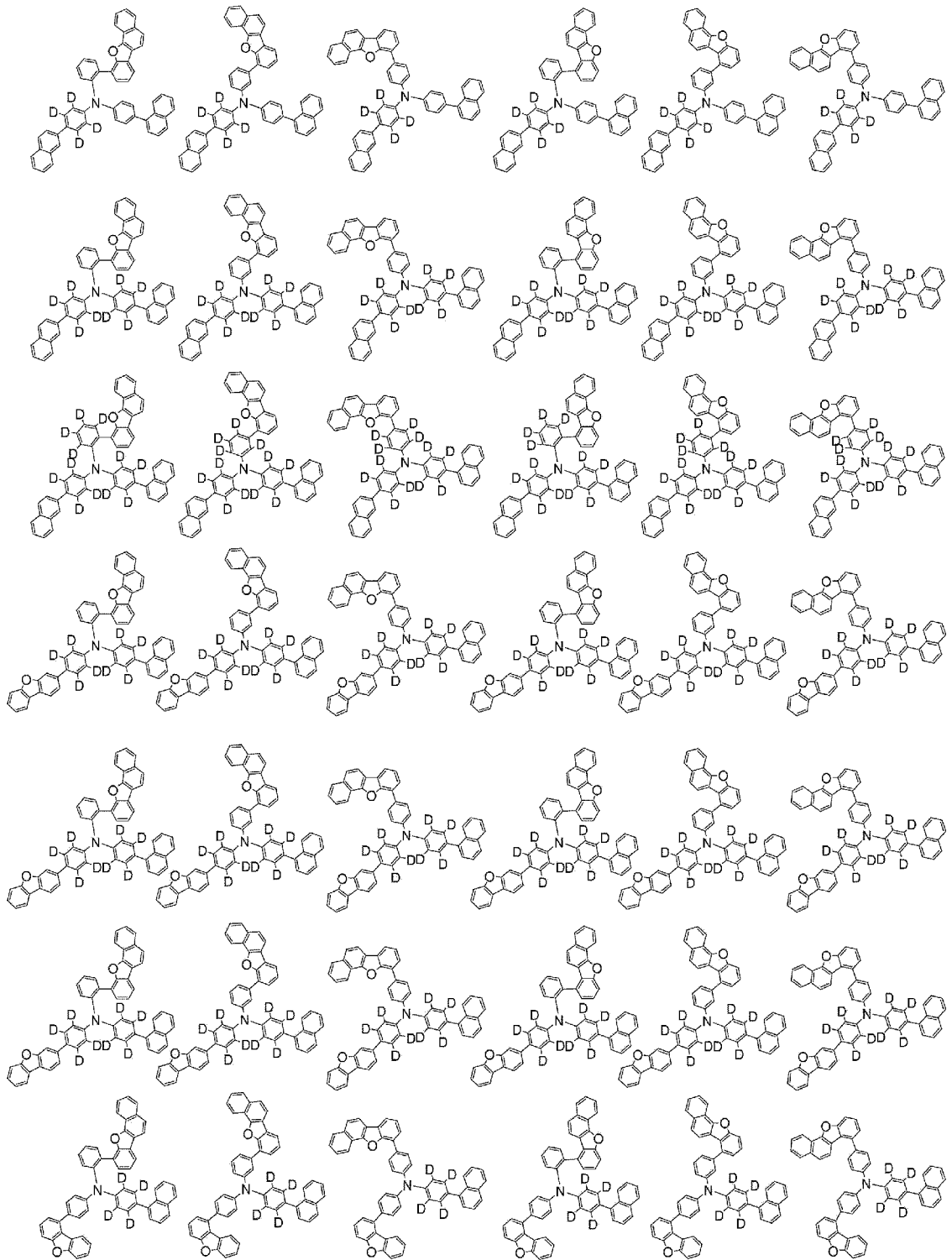
[0564]

[化194]



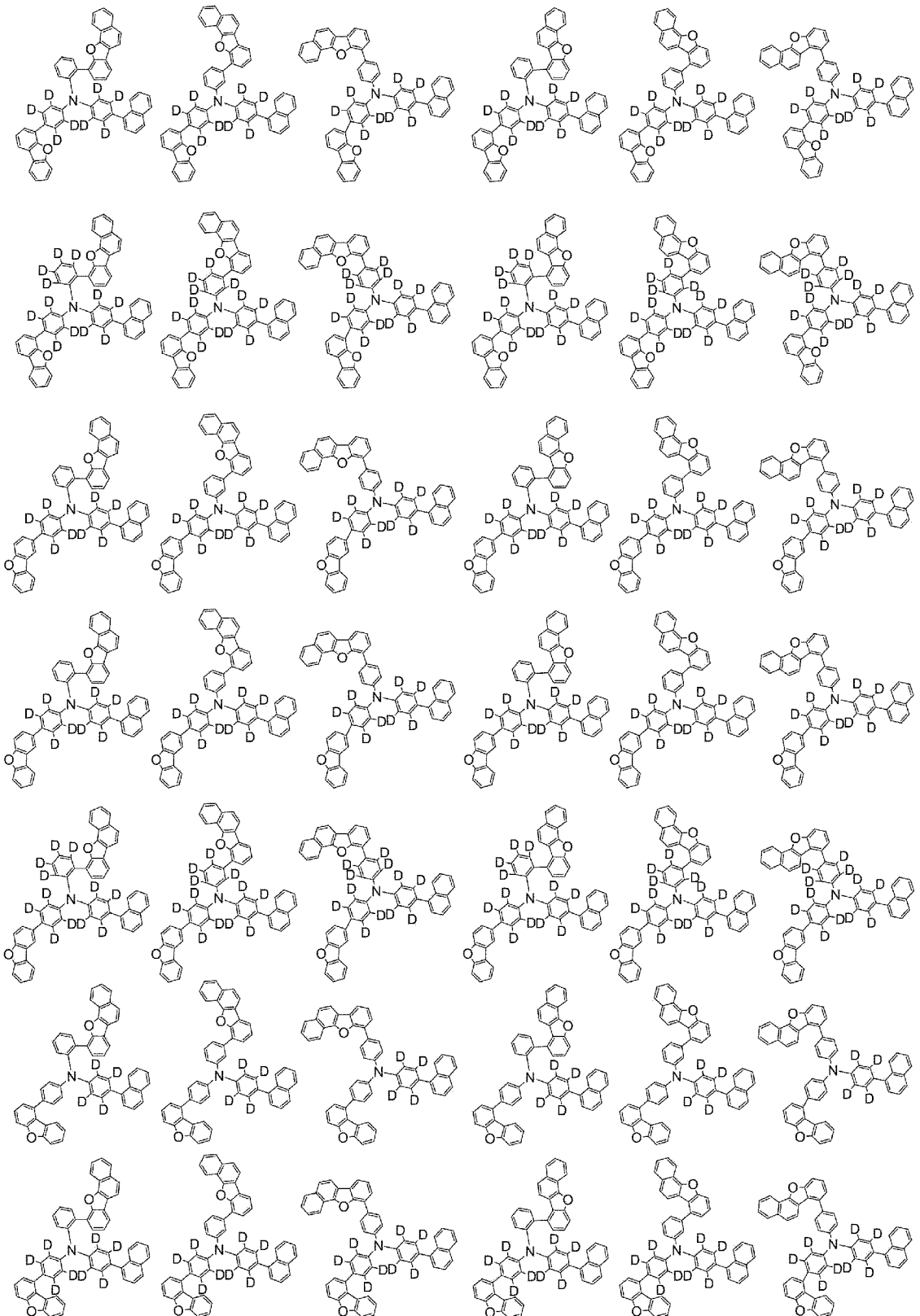
[0565]

[化195]



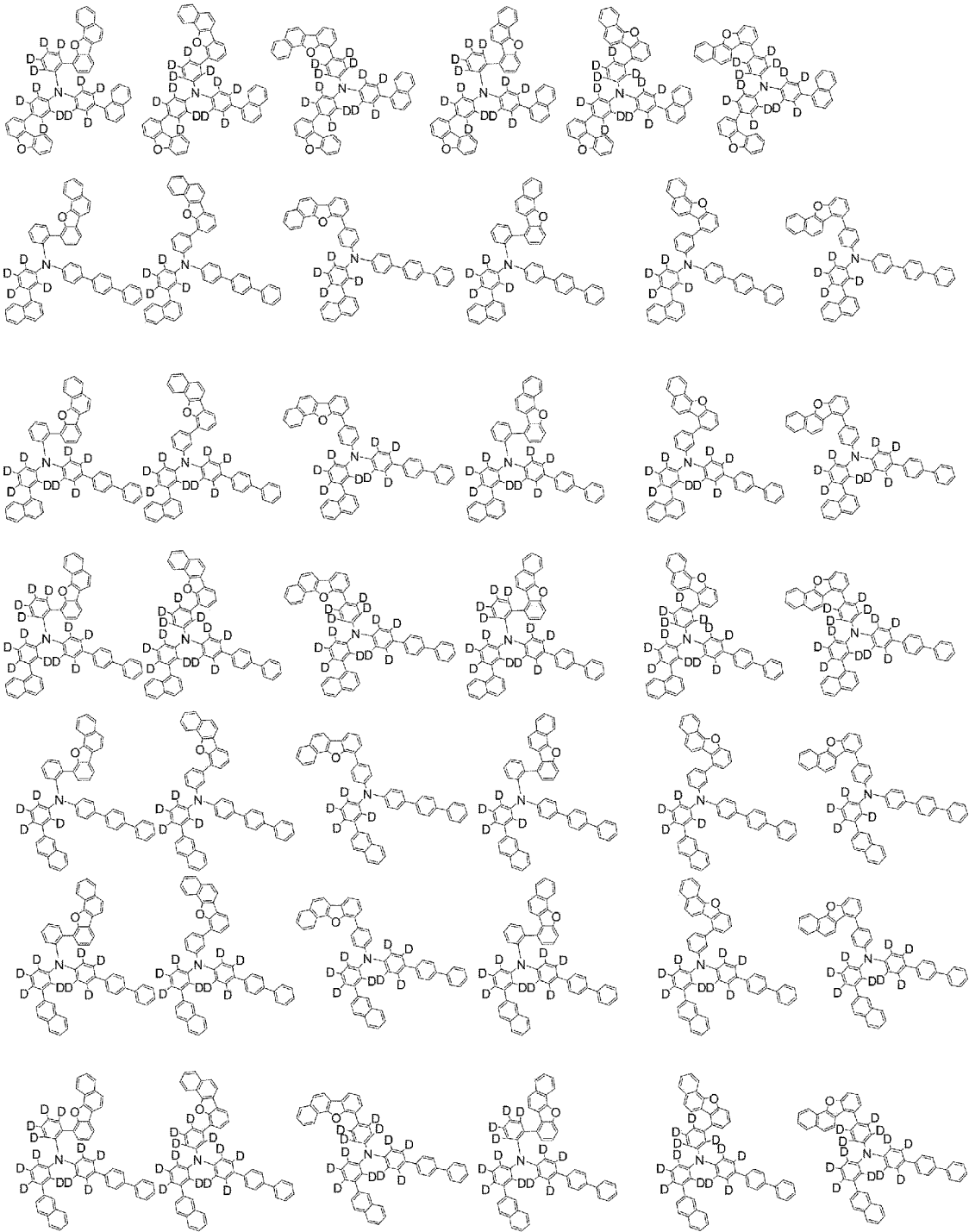
[0566]

[化196]



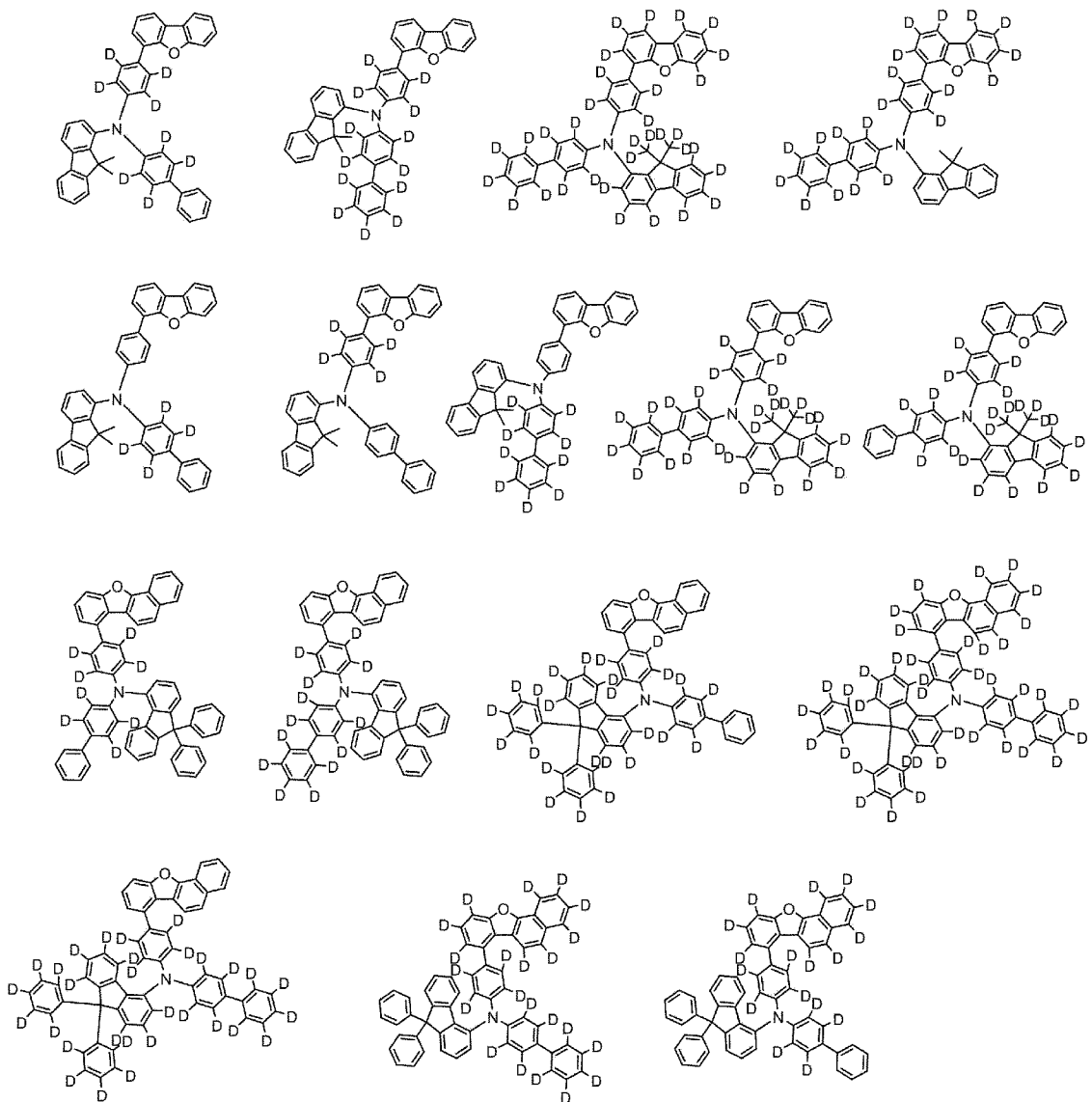
[0567]

[化197]



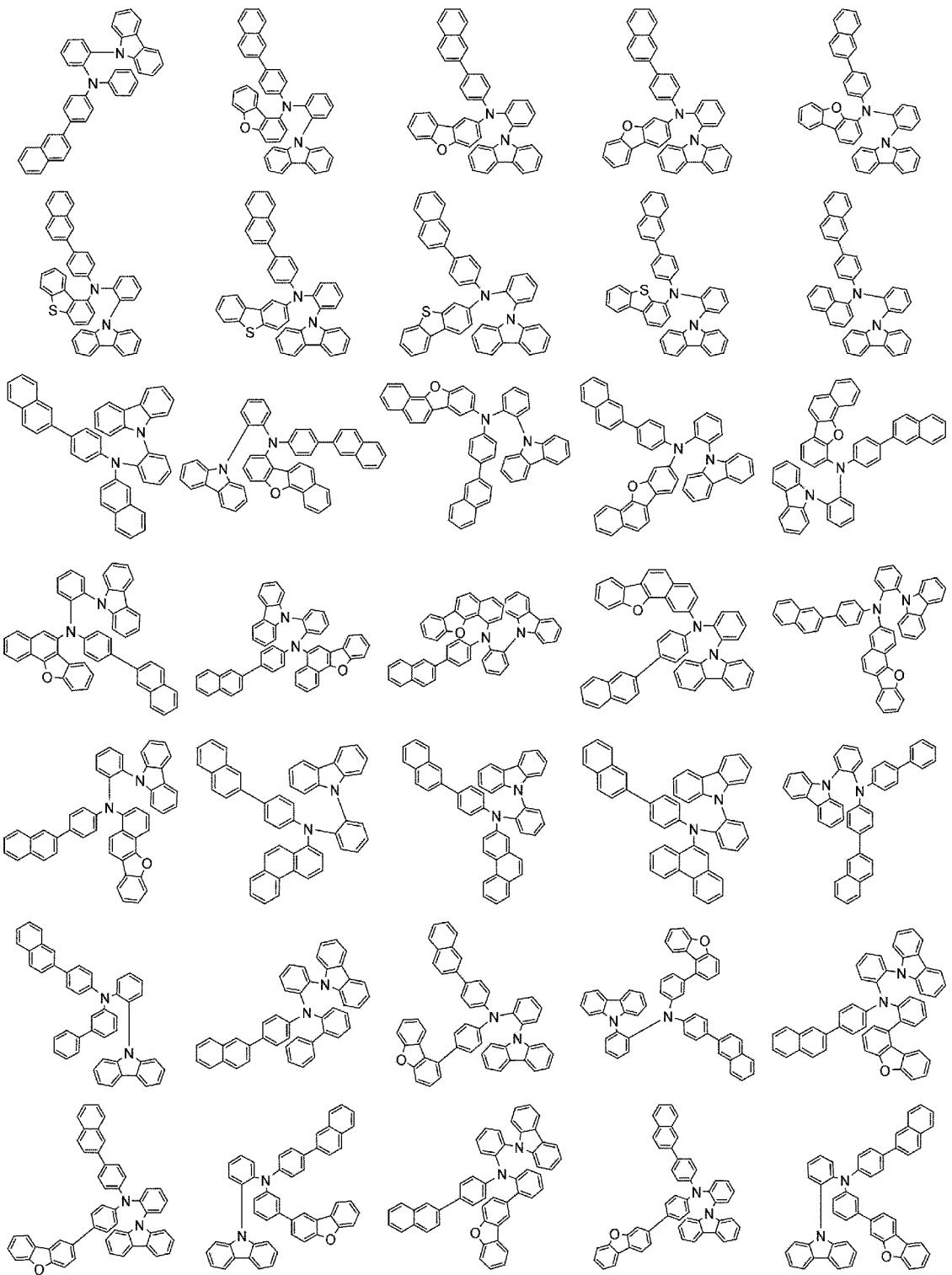
[0568]

[化198]



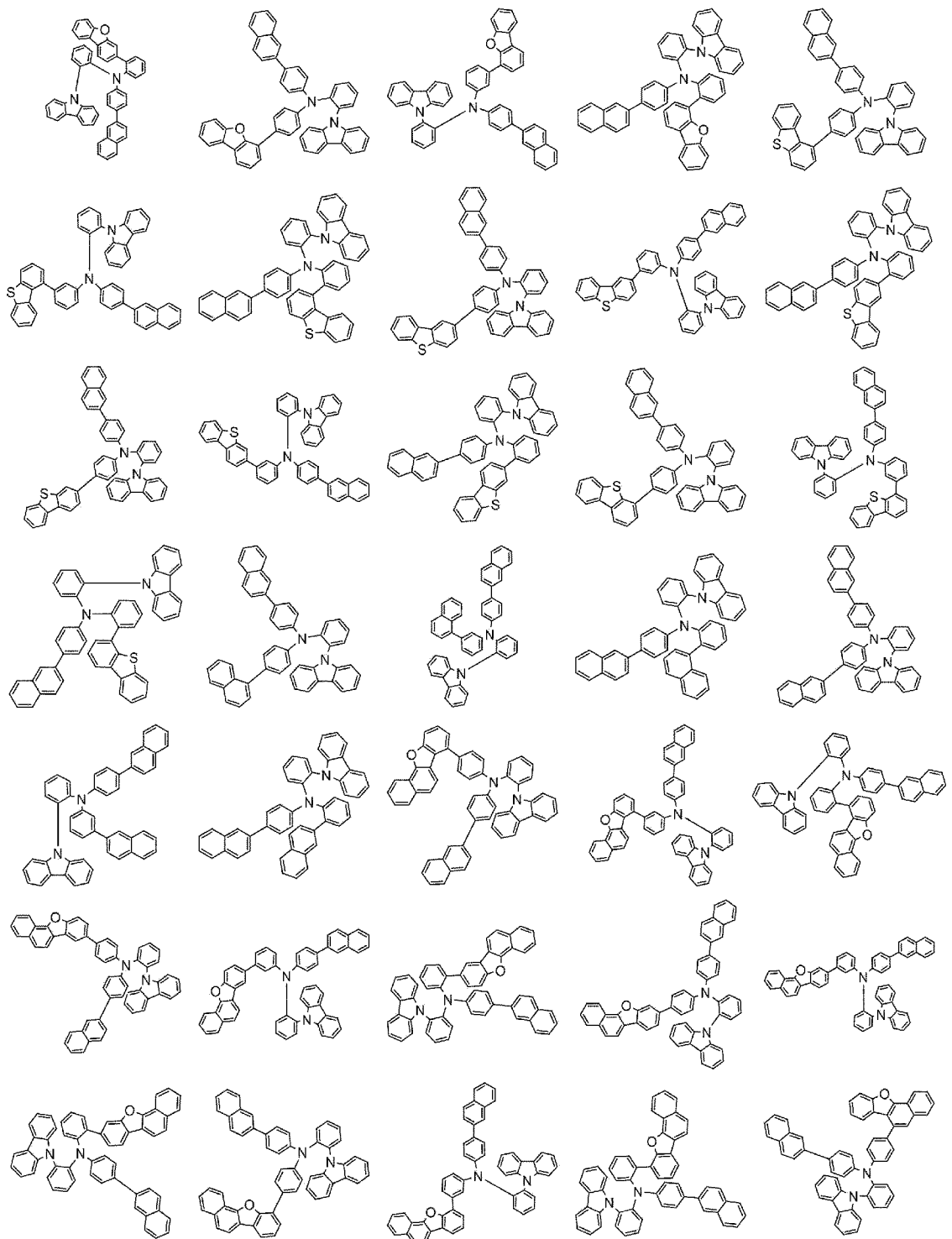
[0569] 式 (B) の例示化合物

[化199]



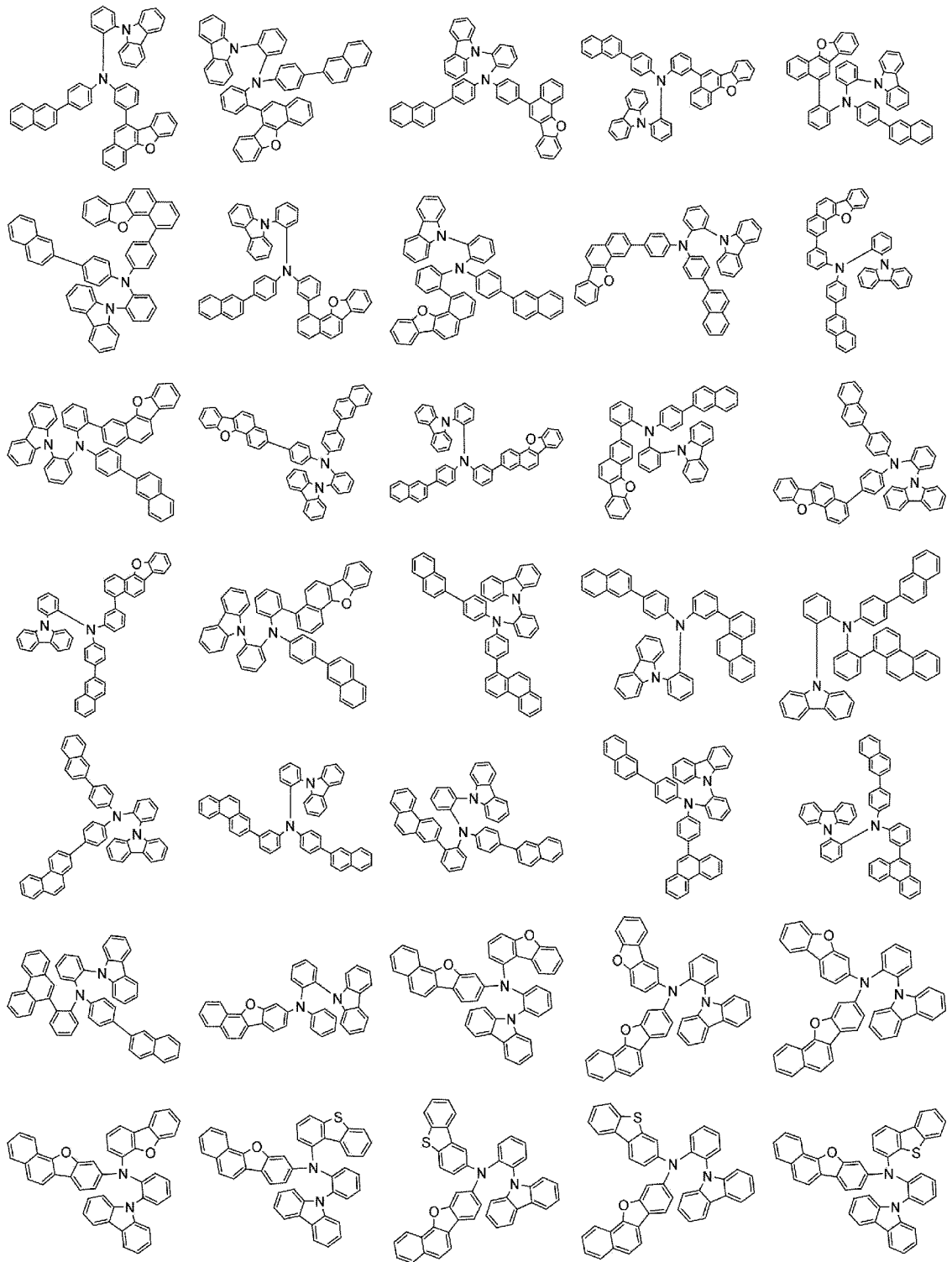
[0570]

[化200]



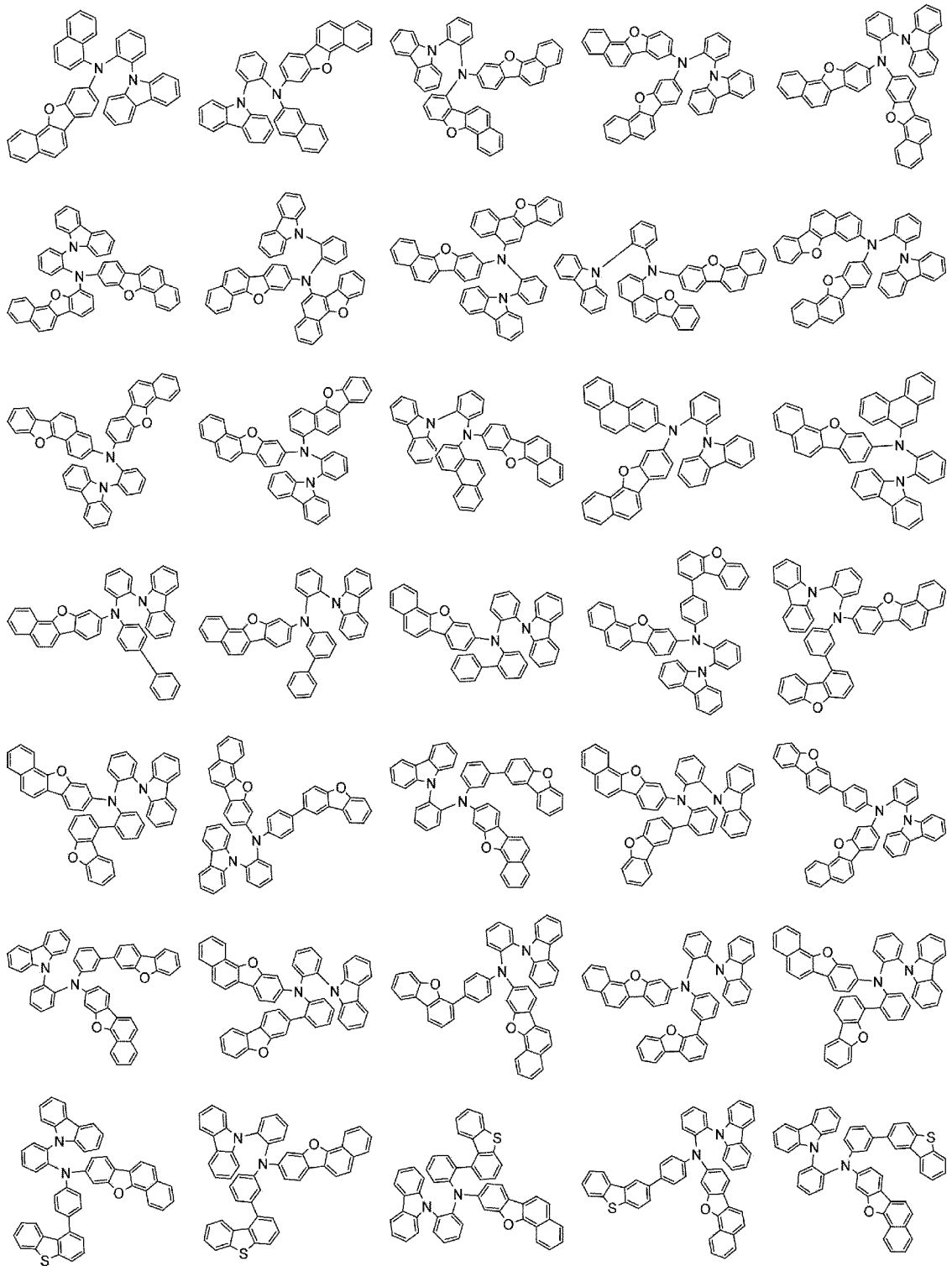
[0571]

[化201]



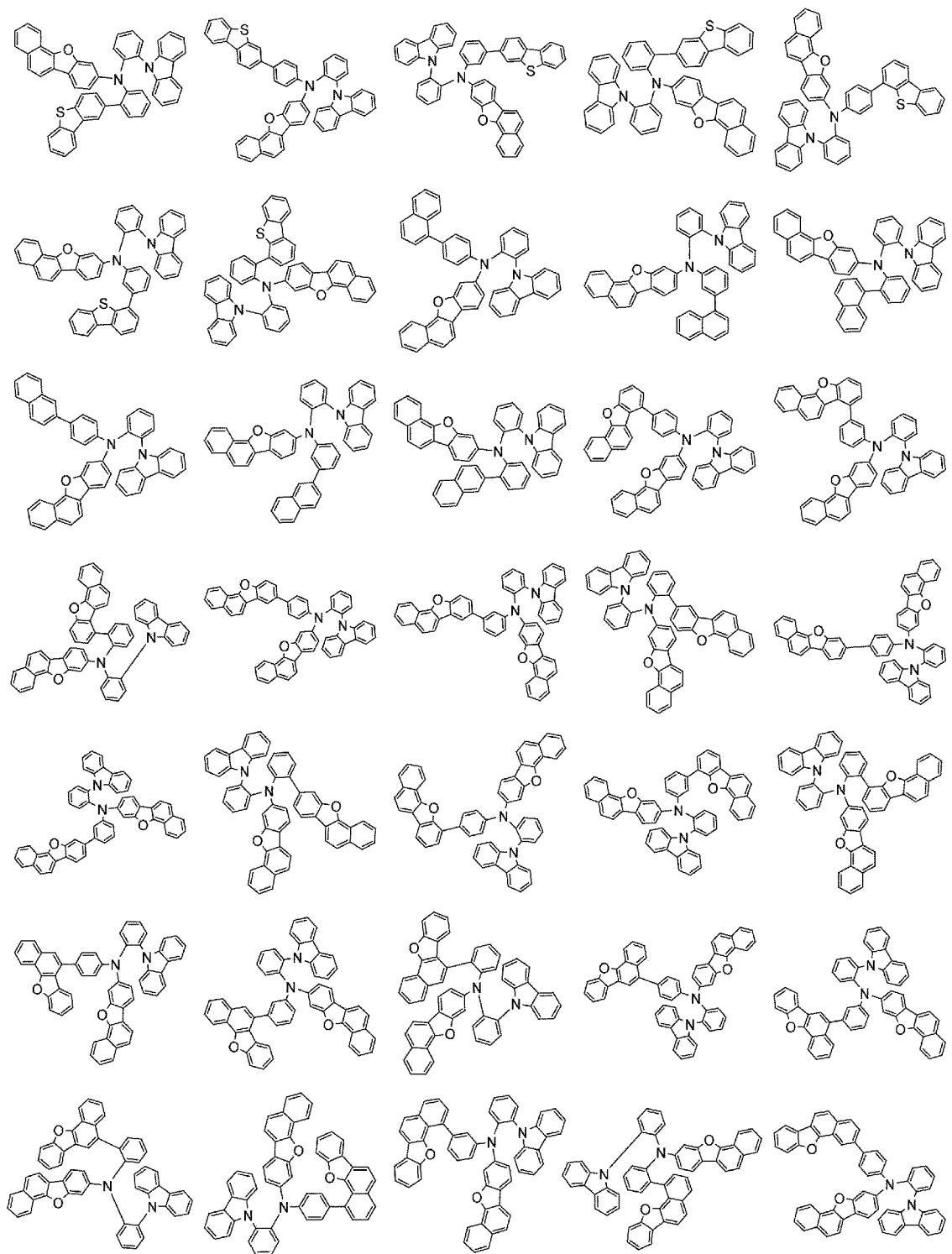
[0572]

[化202]



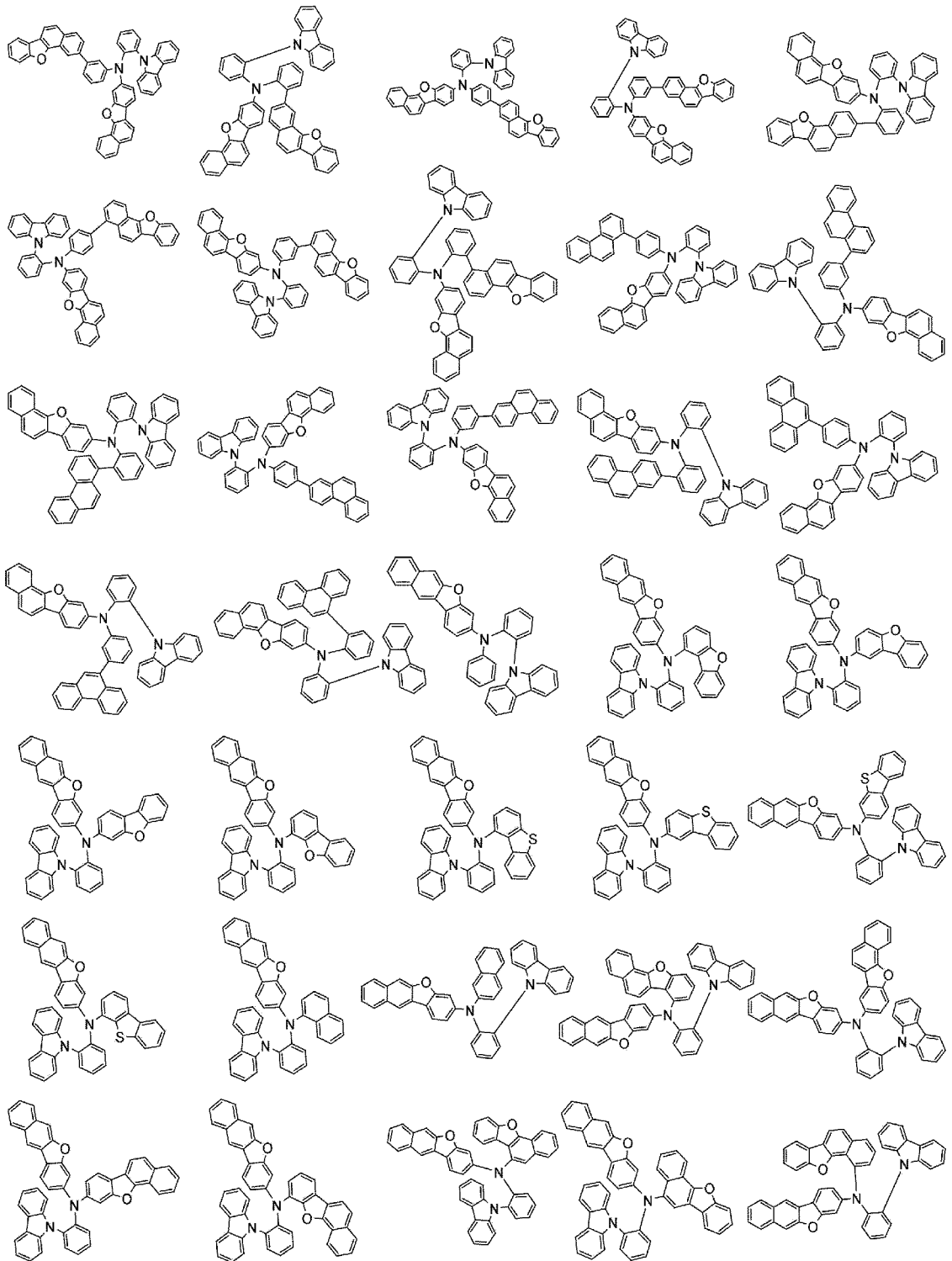
[0573]

[化203]



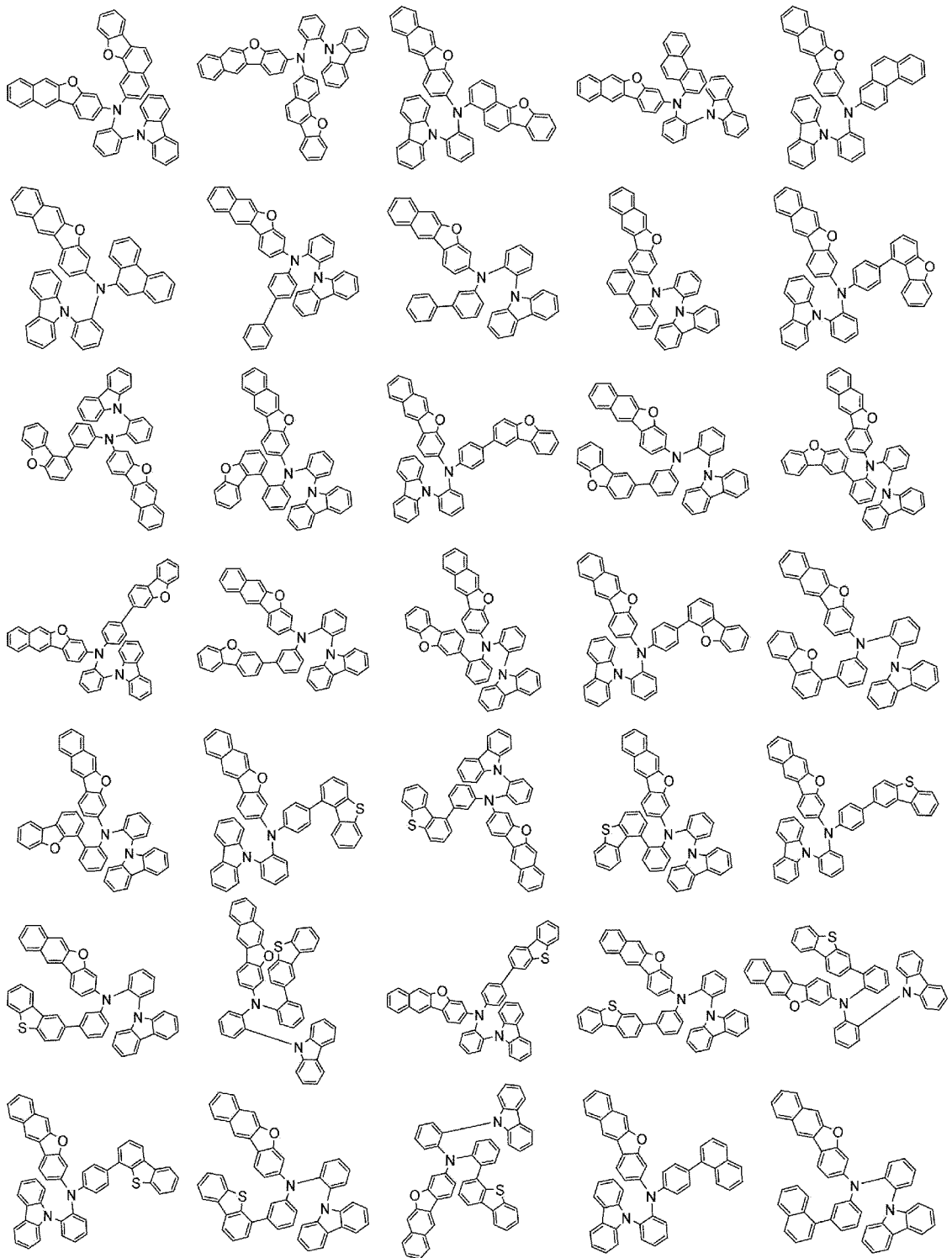
[0574]

[化204]



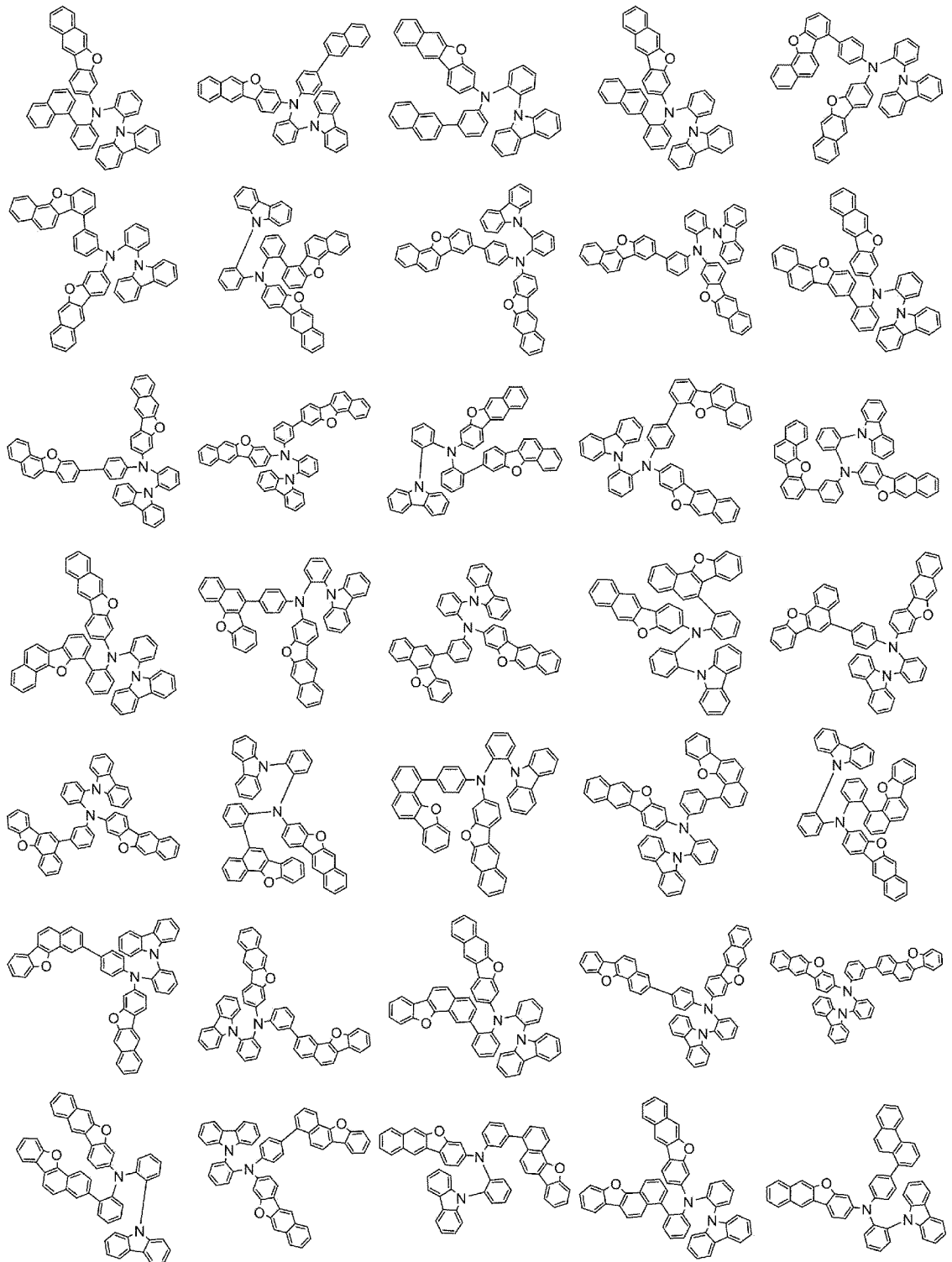
[0575]

[化205]



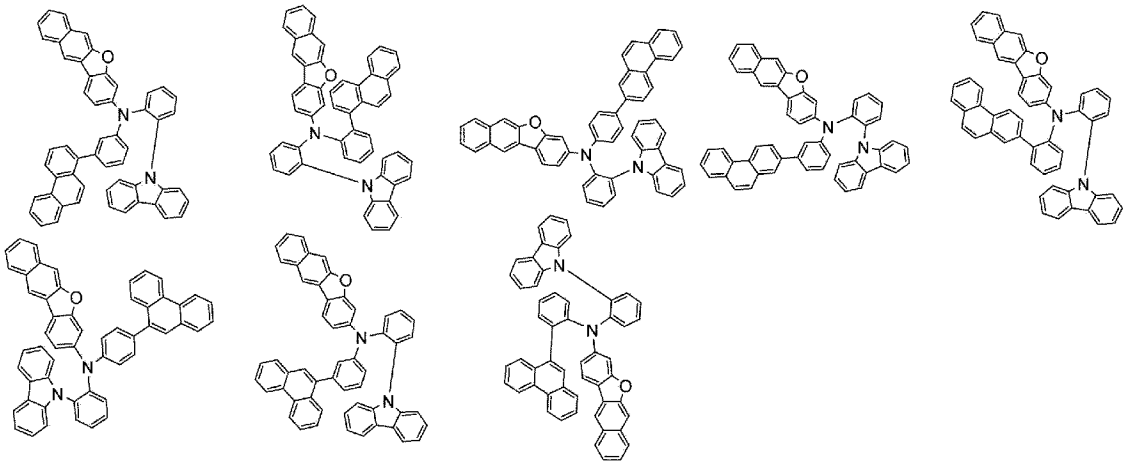
[0576]

[化206]



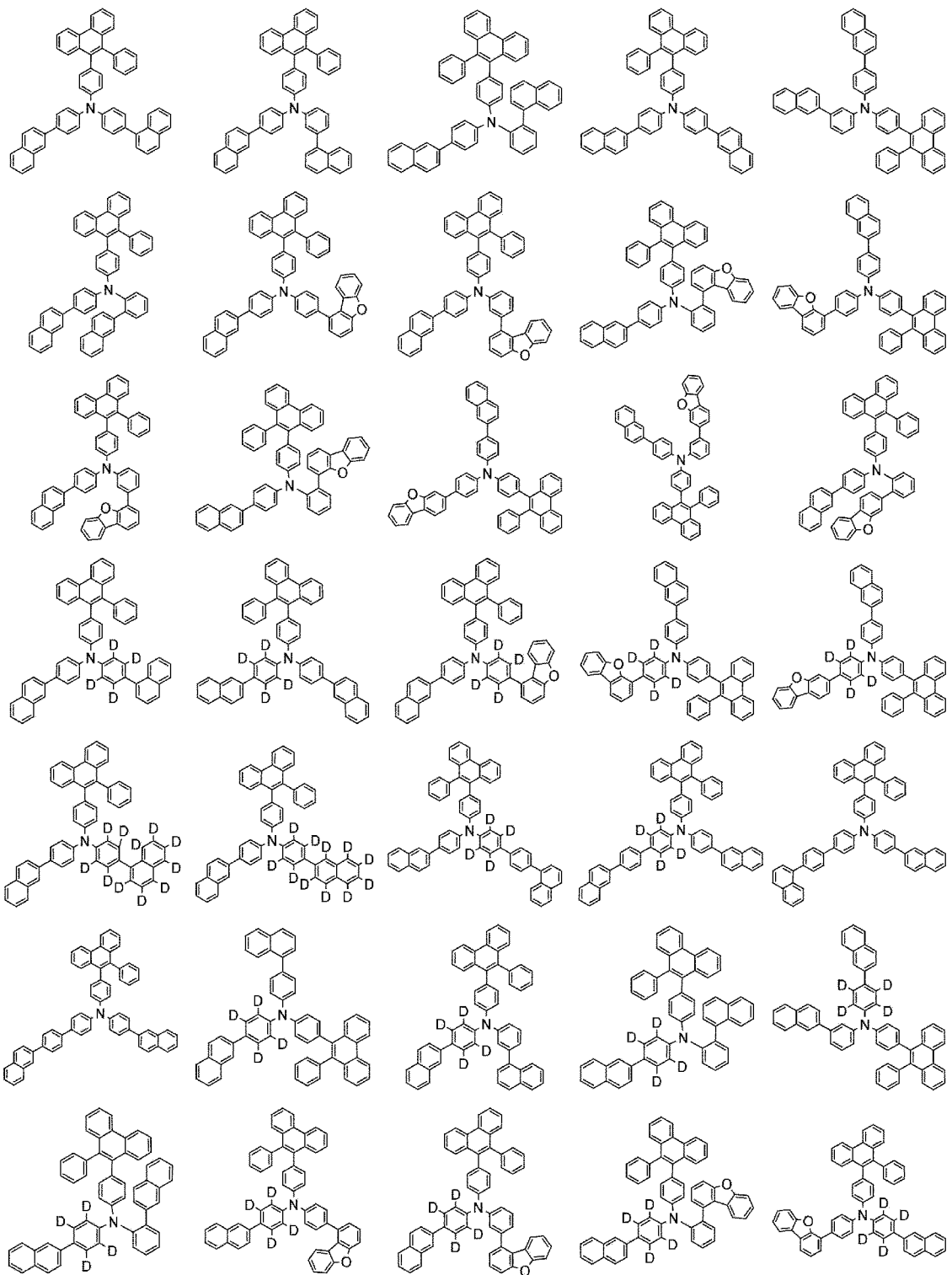
[0577]

[化207]



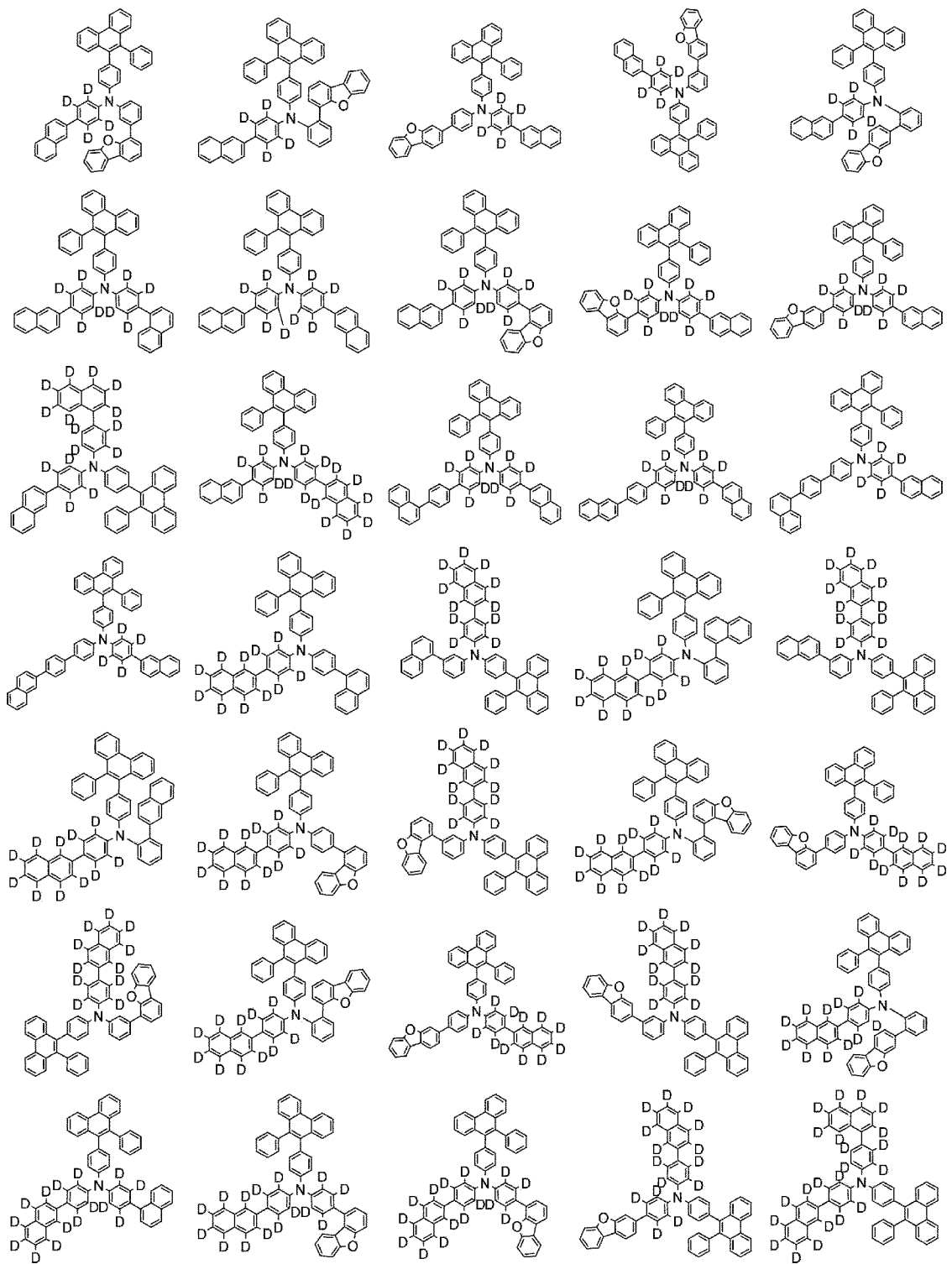
[0578] 式 (C) の例示化合物

[化208]



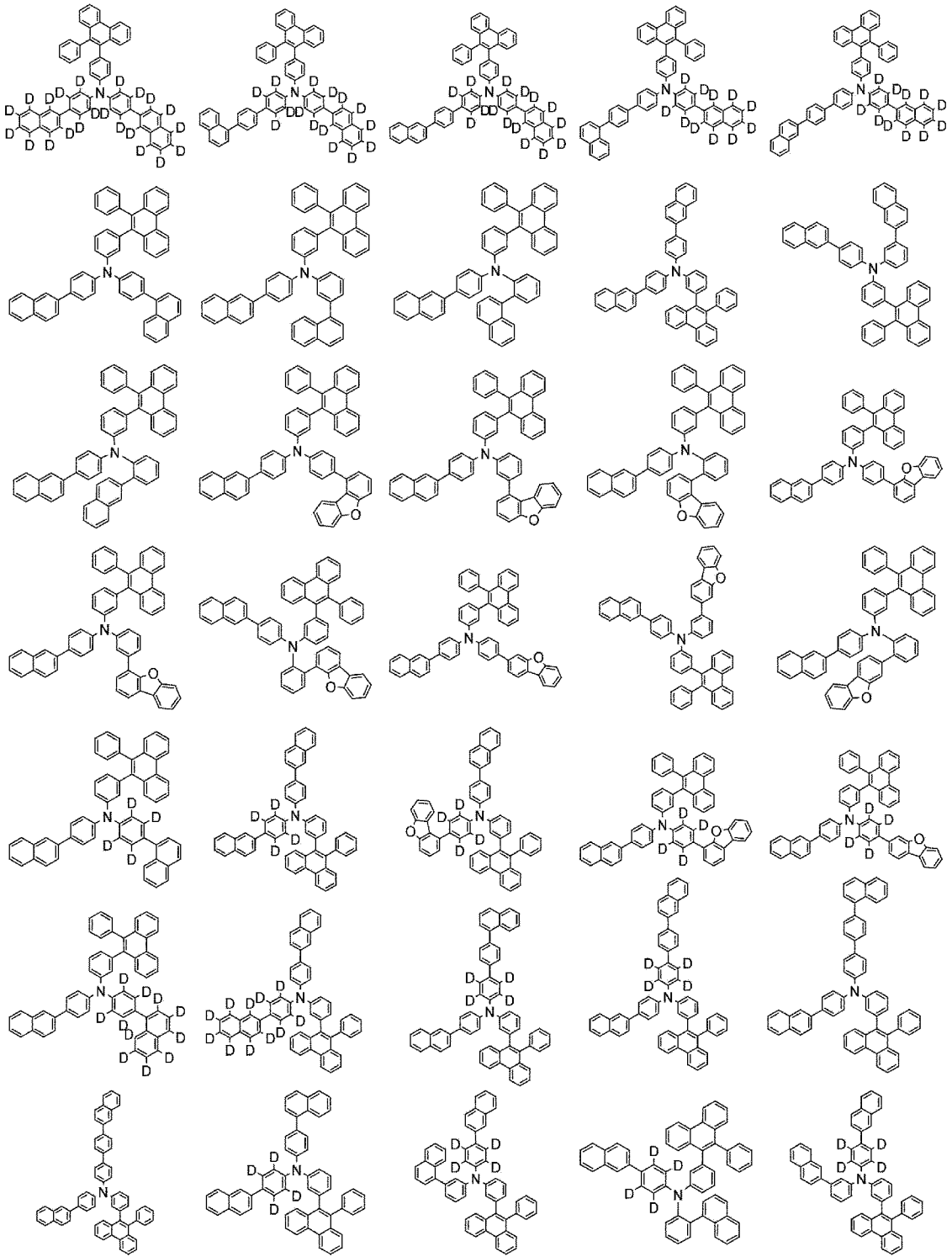
[0579]

[化209]



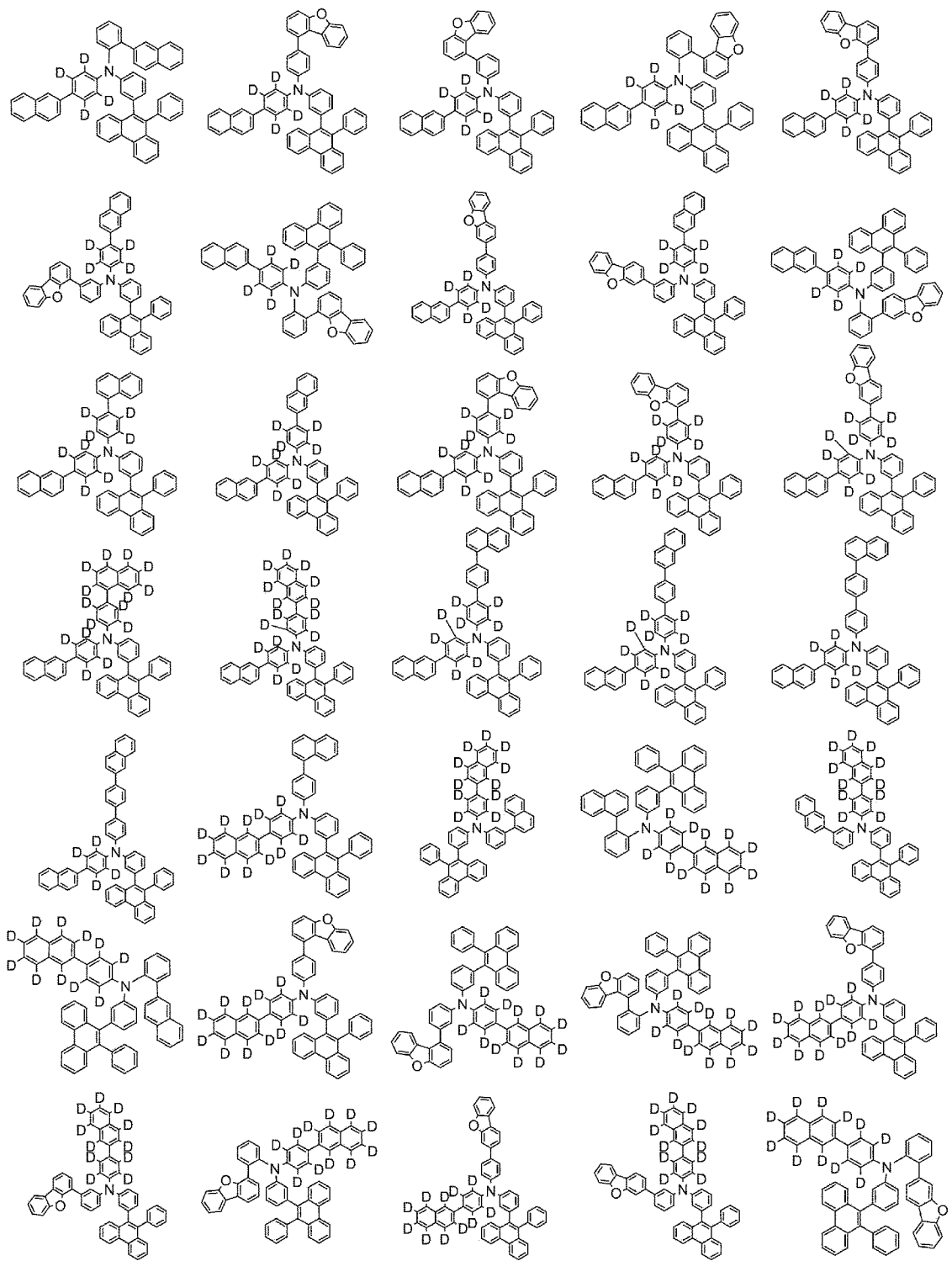
[0580]

[化210]



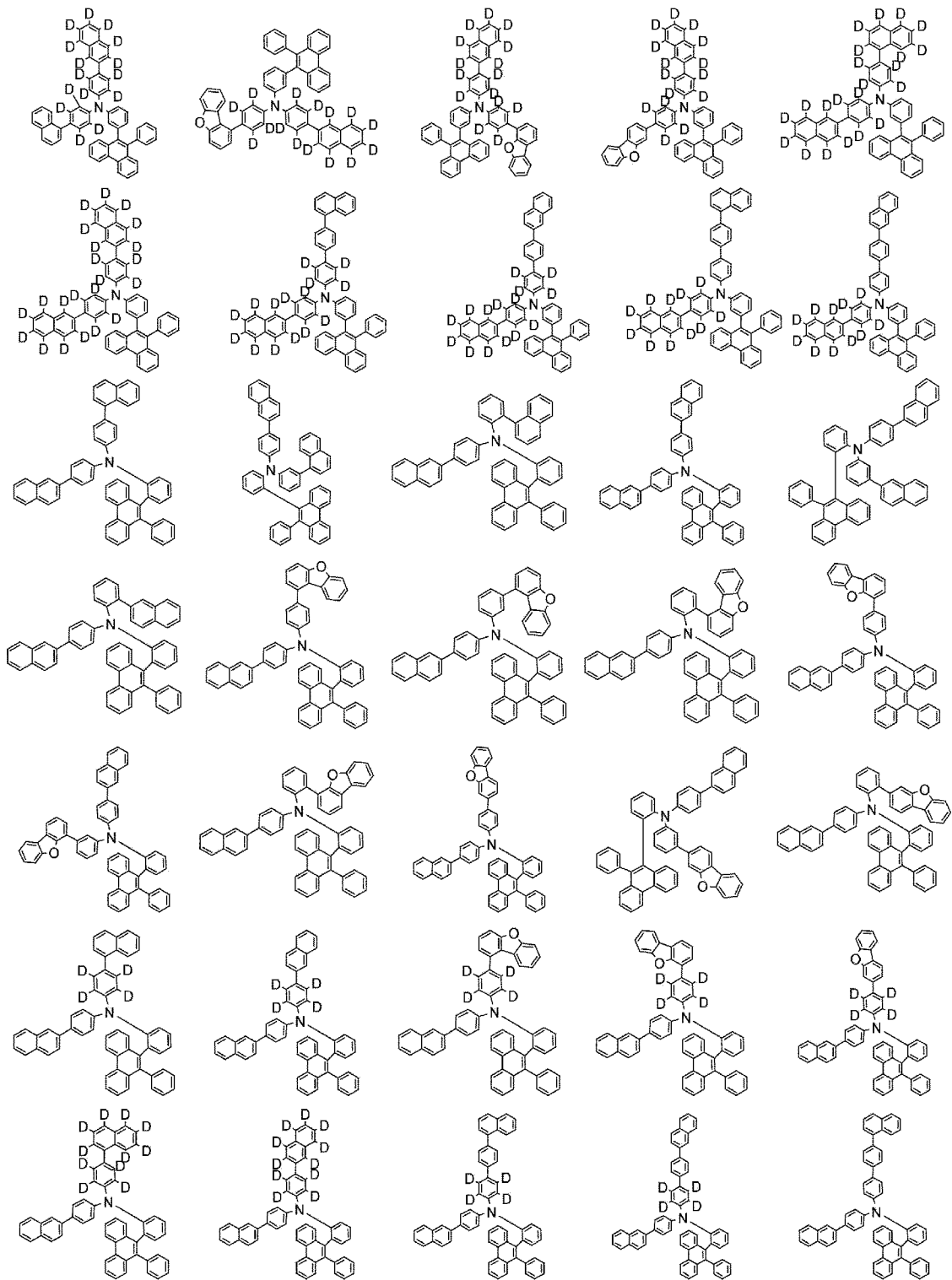
[0581]

[化211]



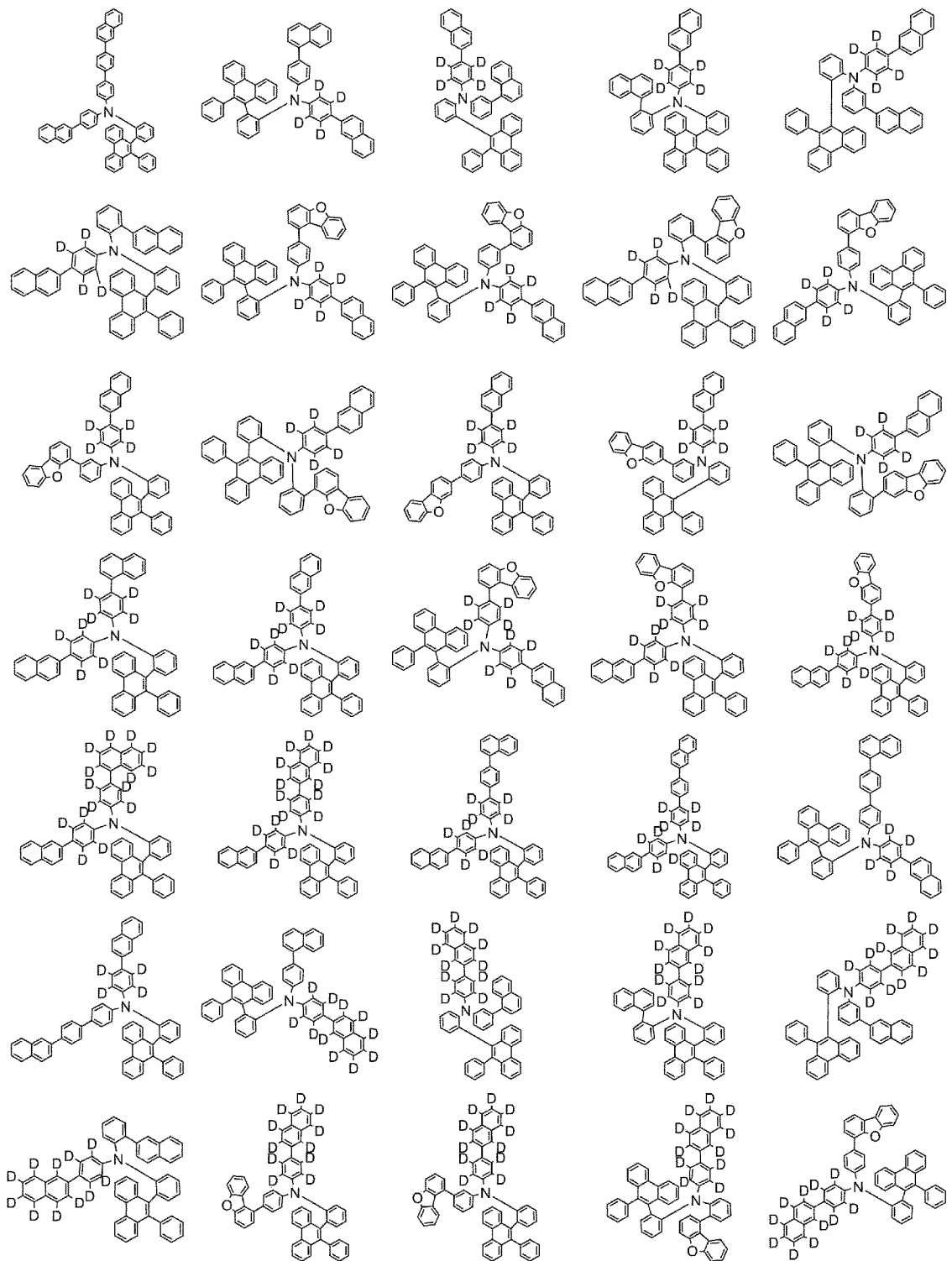
[0582]

[化212]



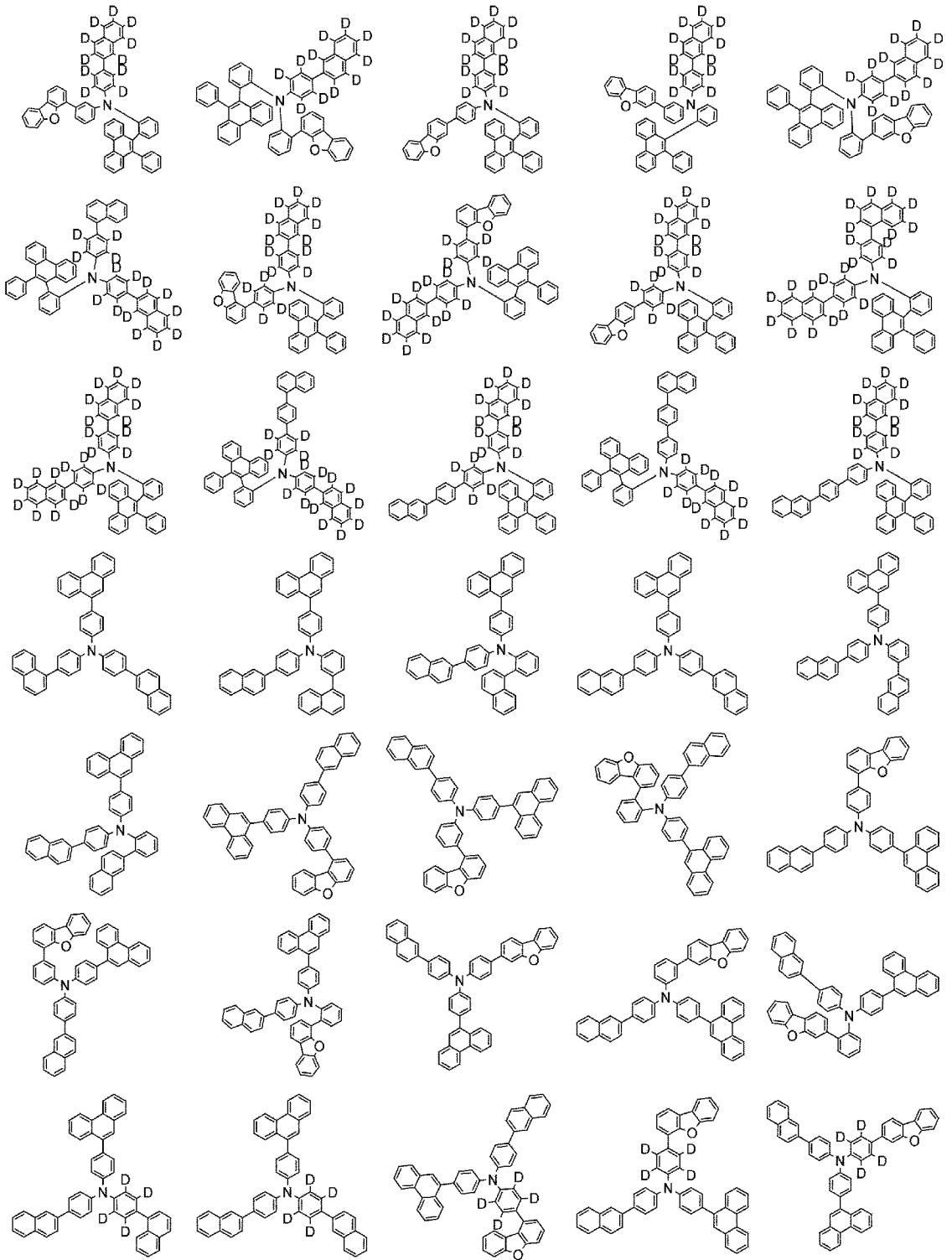
[0583]

[化213]



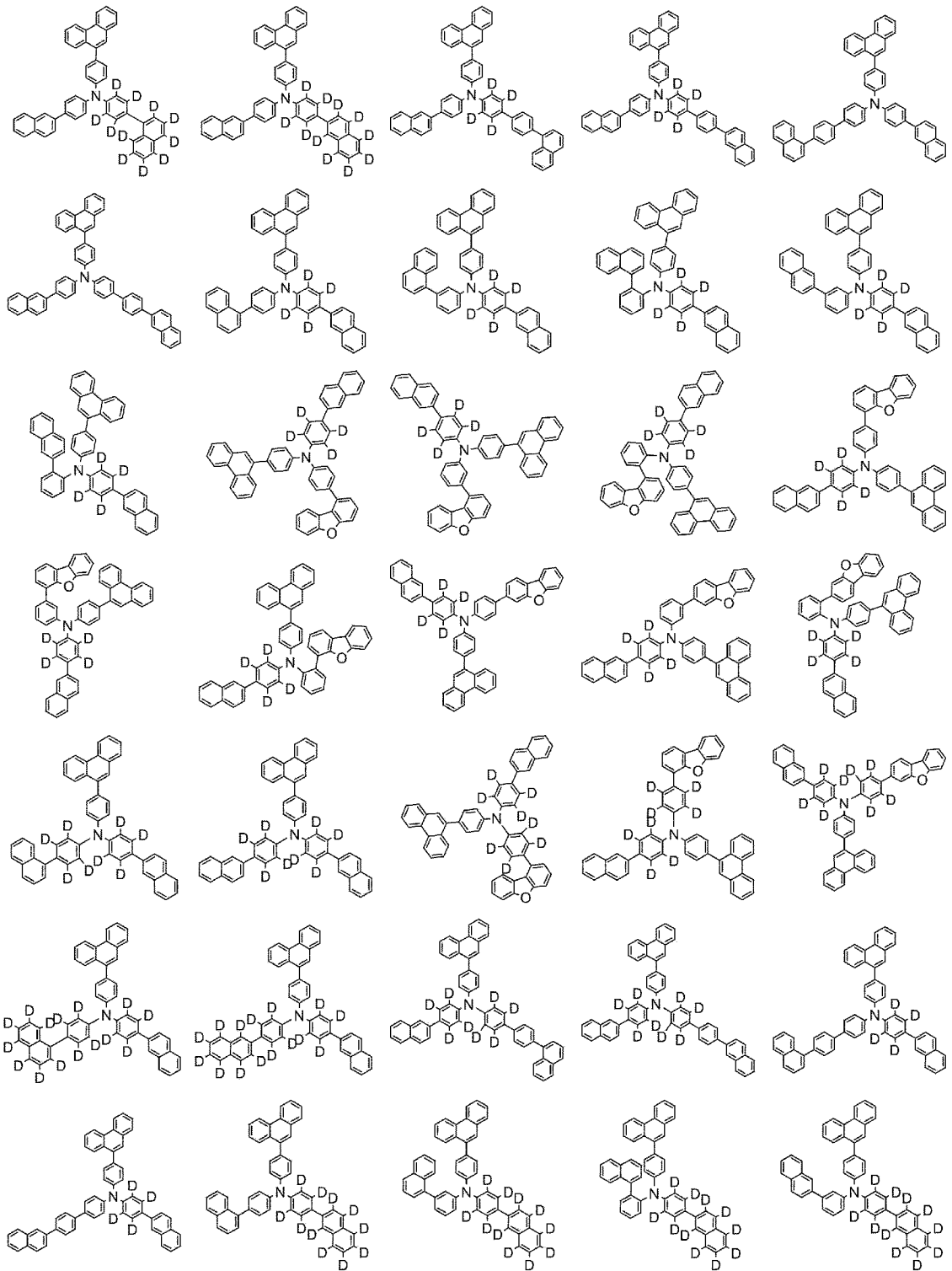
[0584]

[化214]



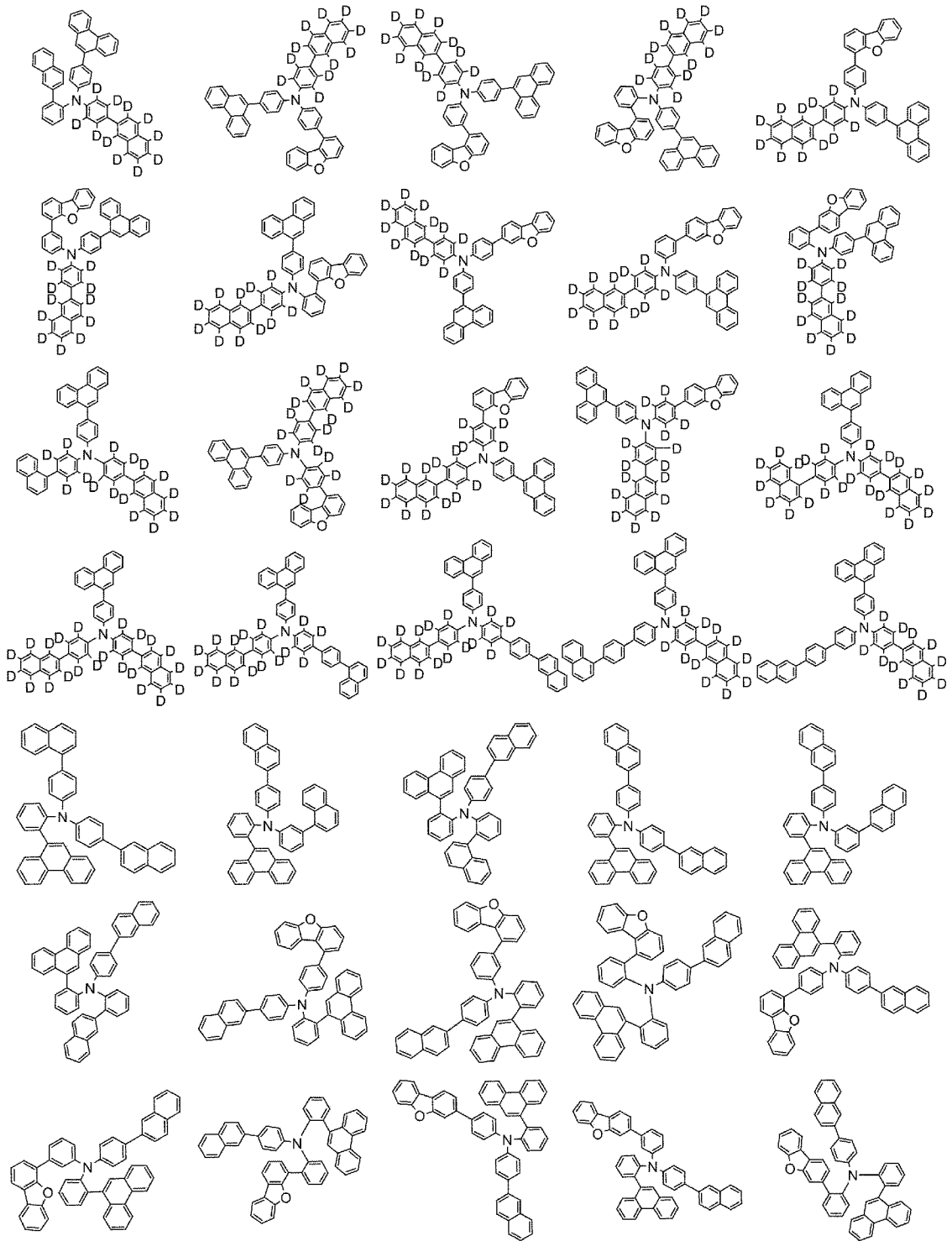
[0585]

[化215]



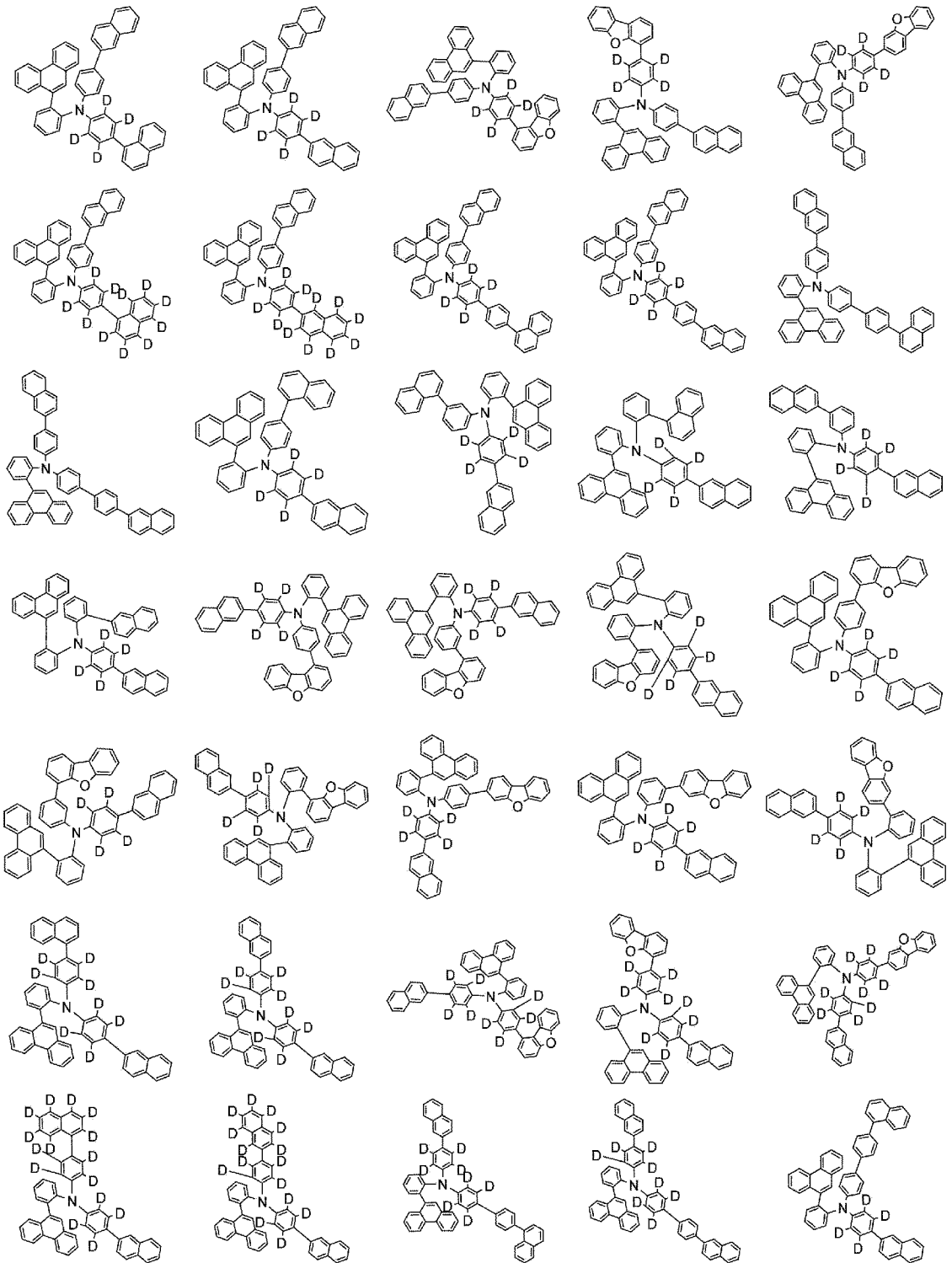
[0586]

[化216]



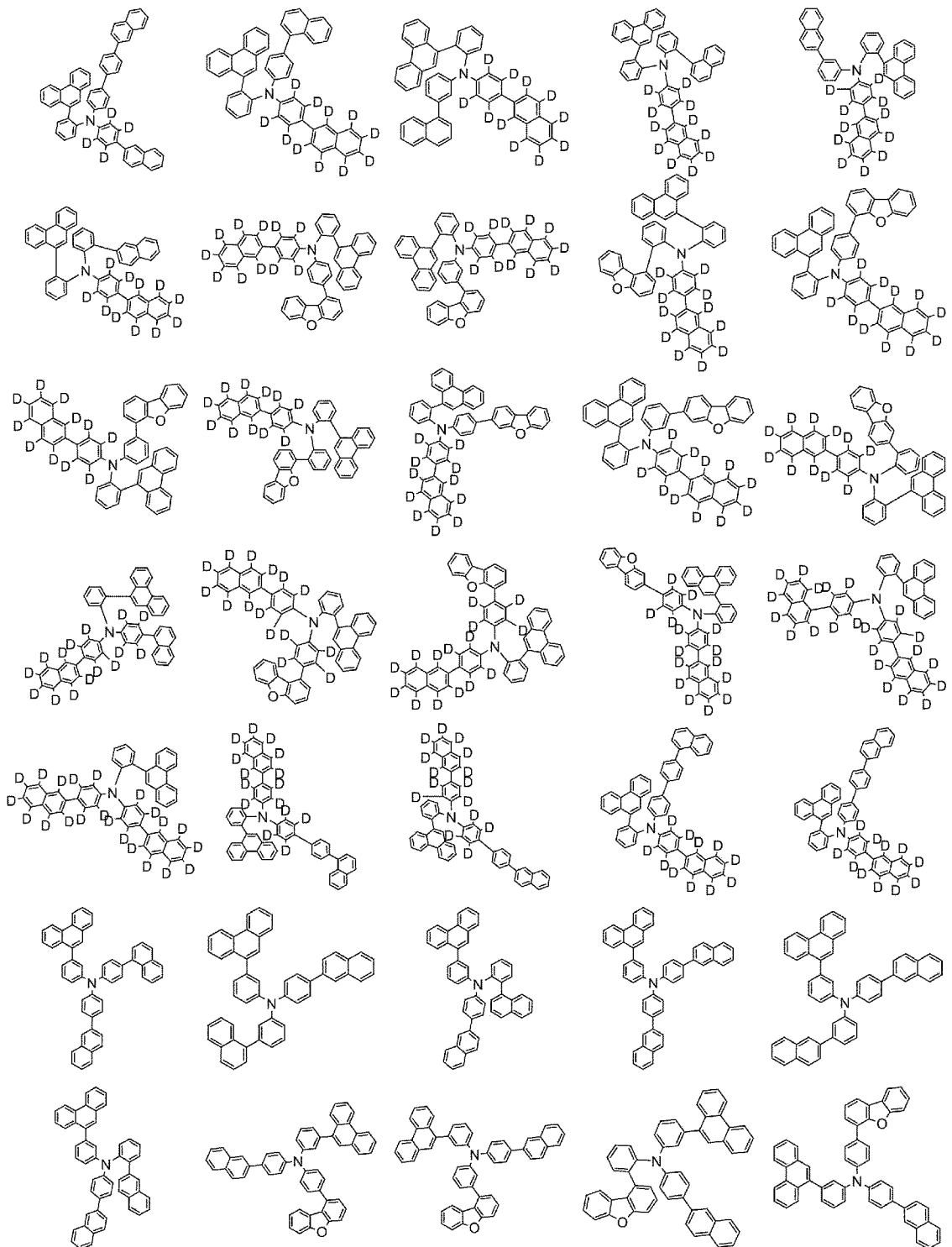
[0587]

[化217]



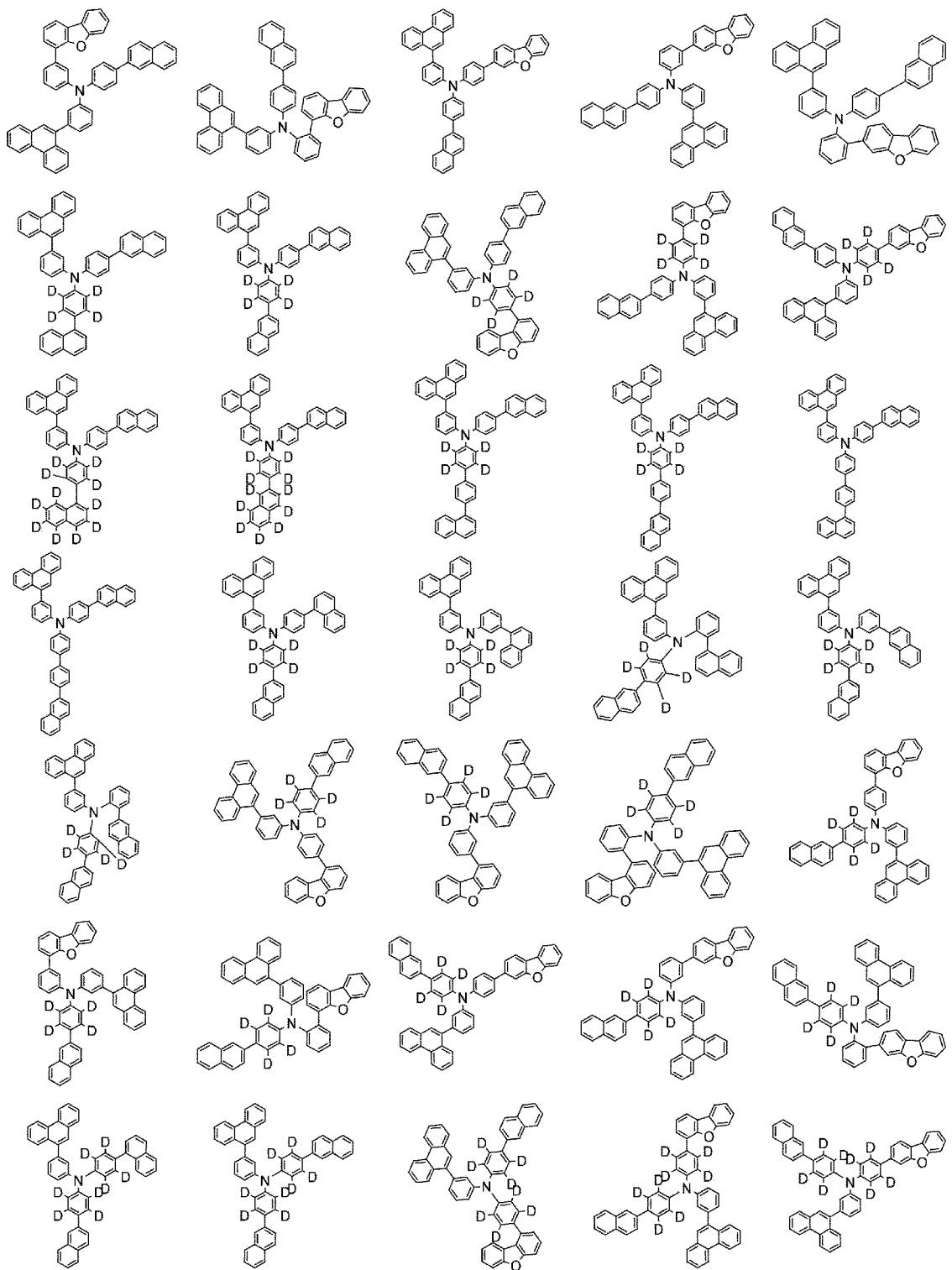
[0588]

[化218]



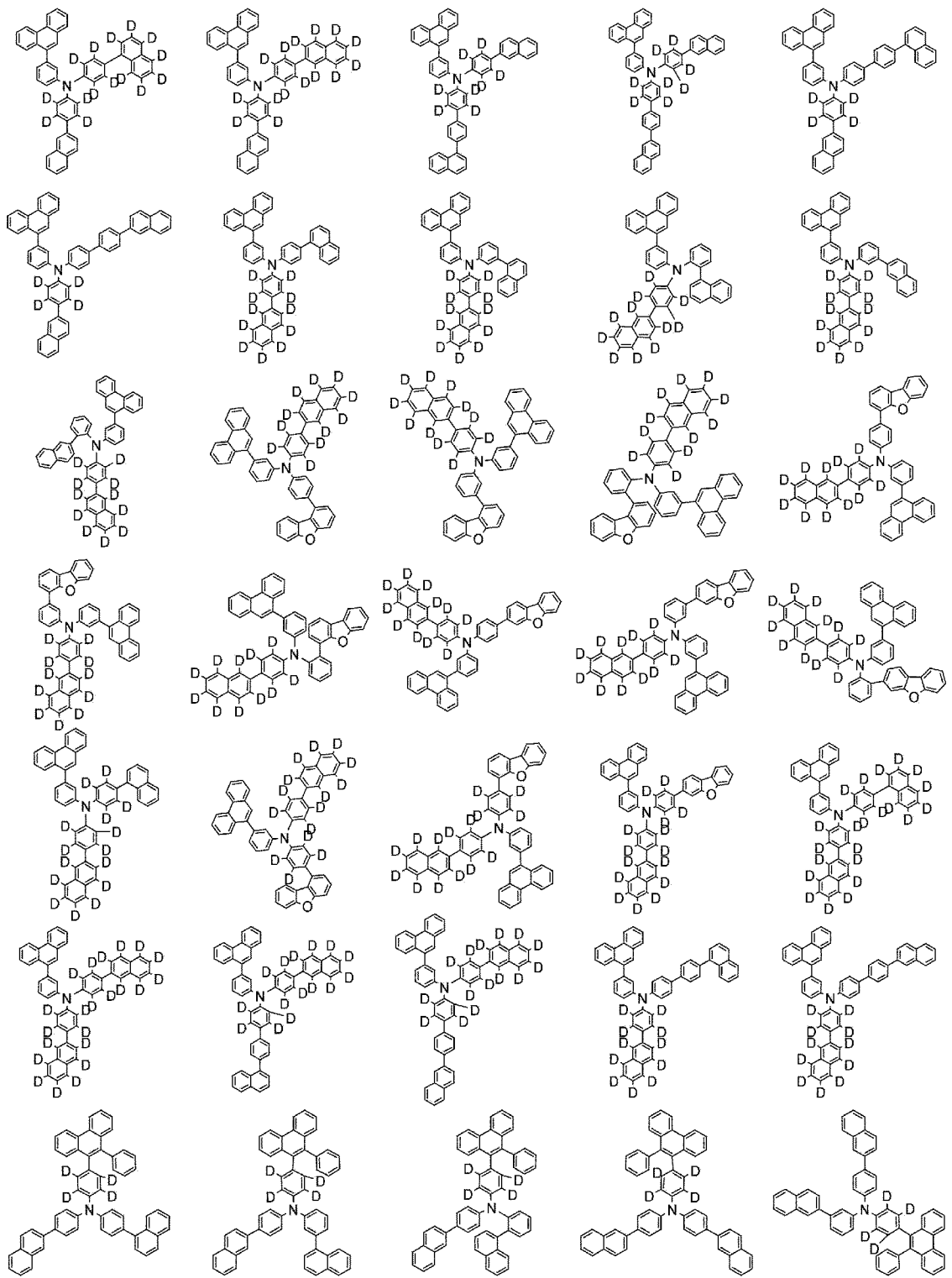
[0589]

[化219]



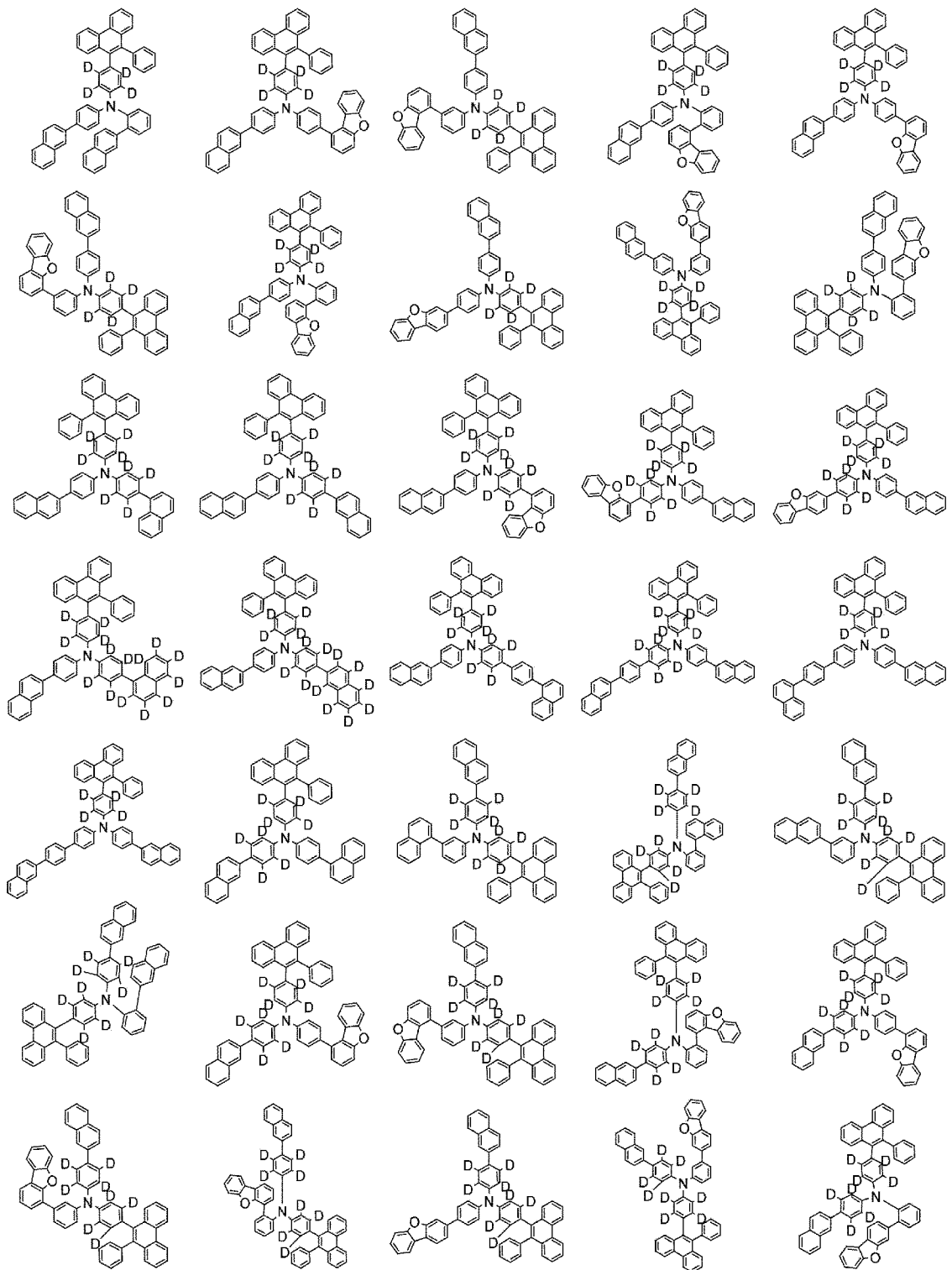
[0590]

[化220]



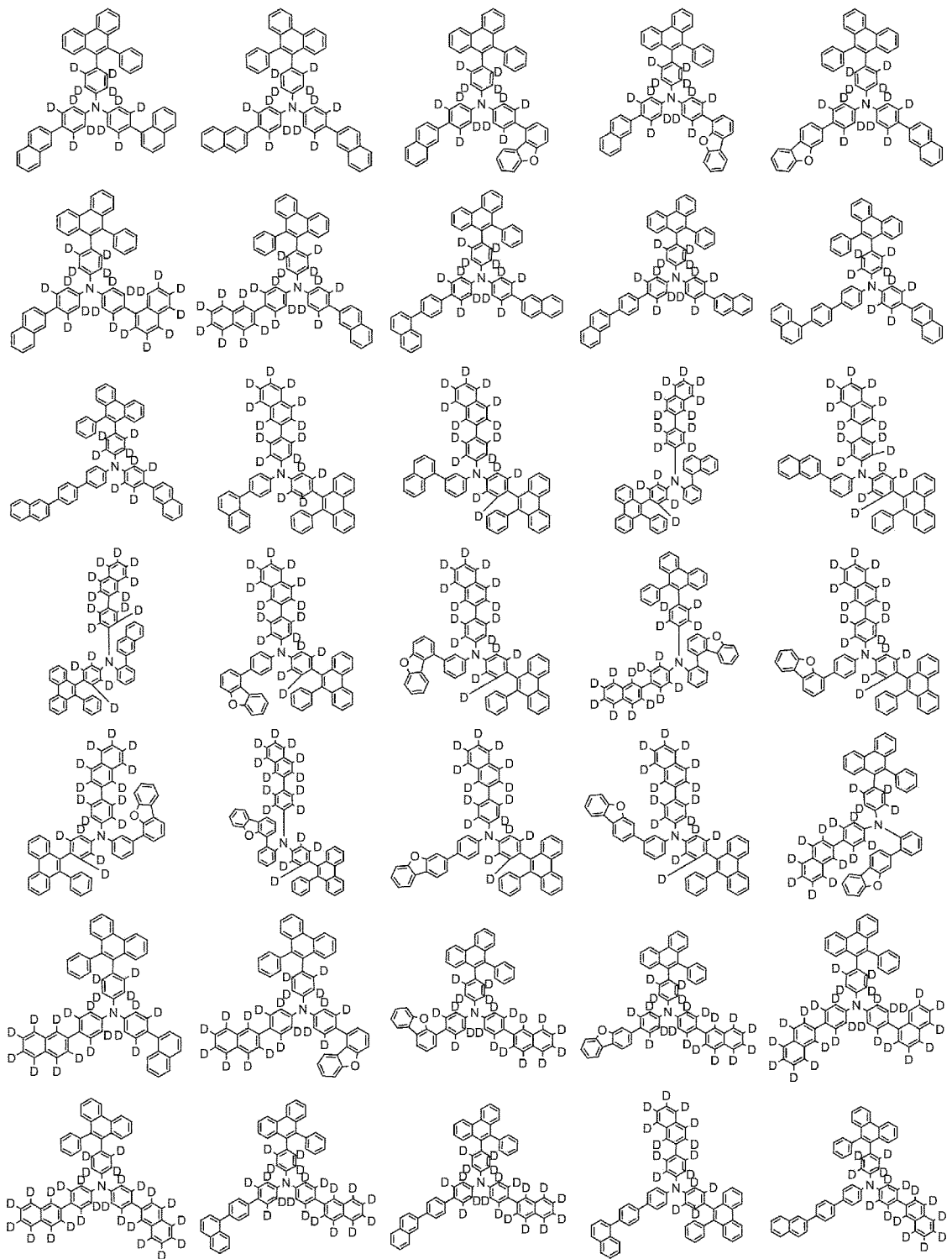
[0591]

[化221]



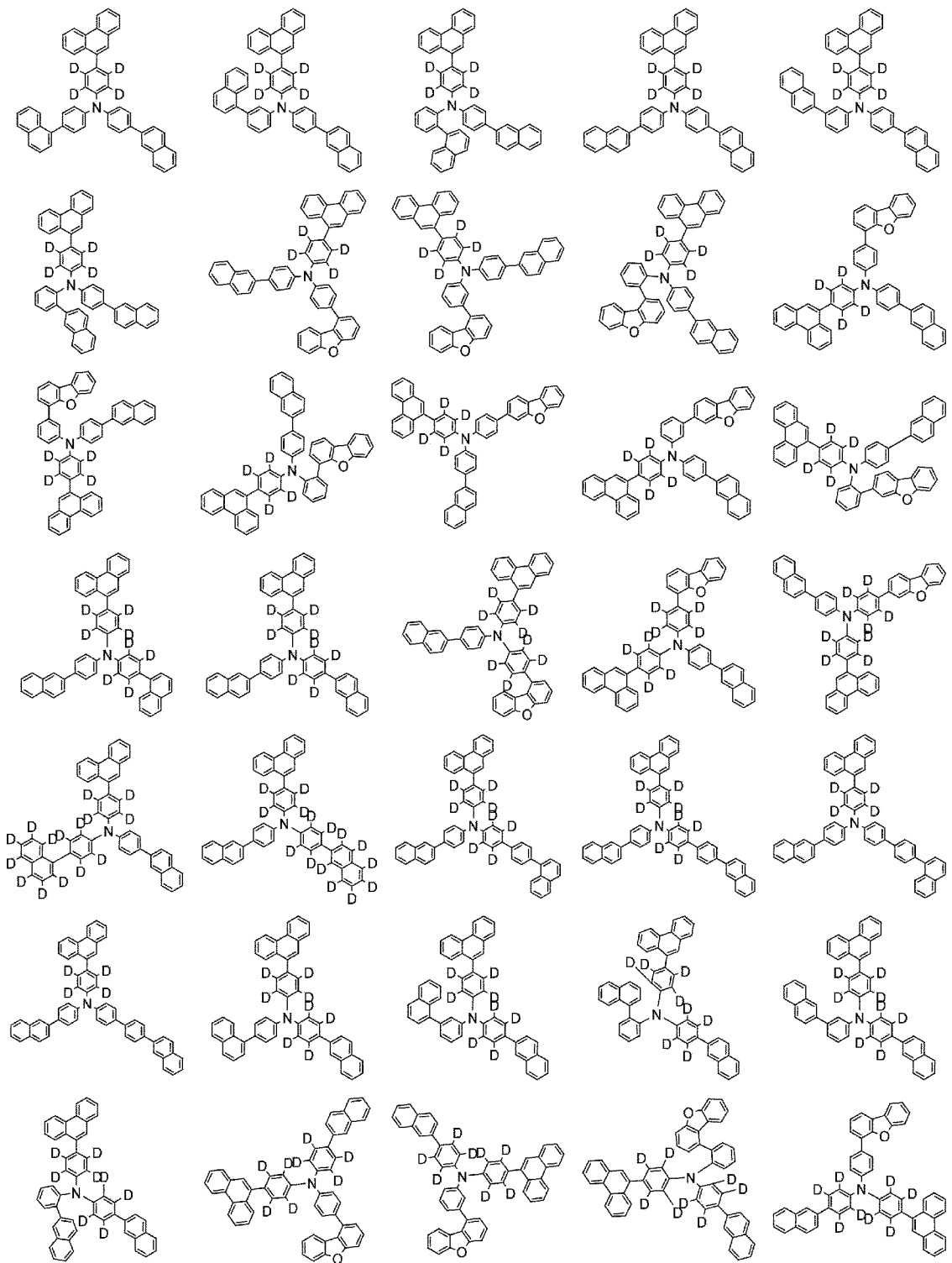
[0592]

[化222]



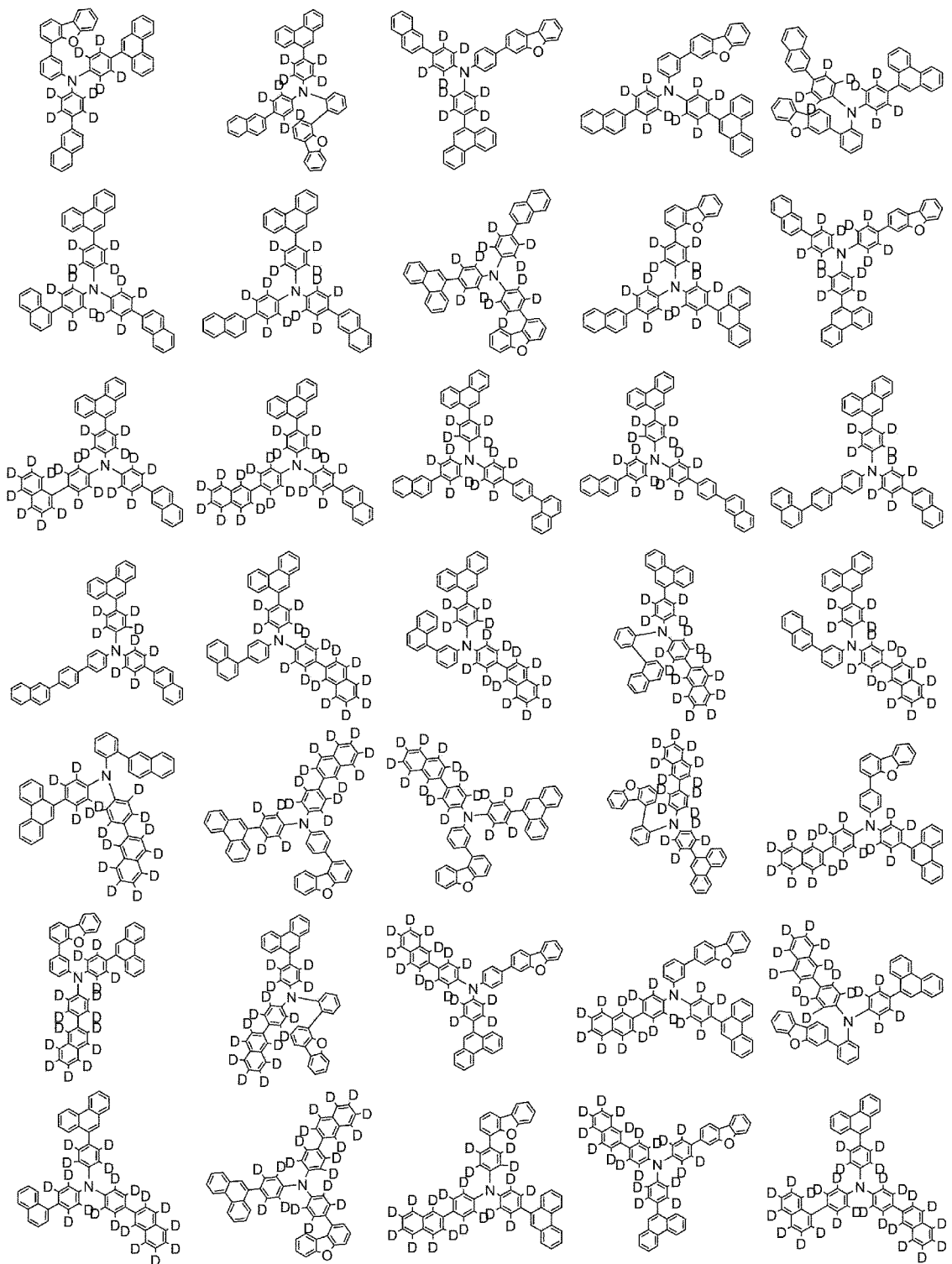
[0593]

[化223]



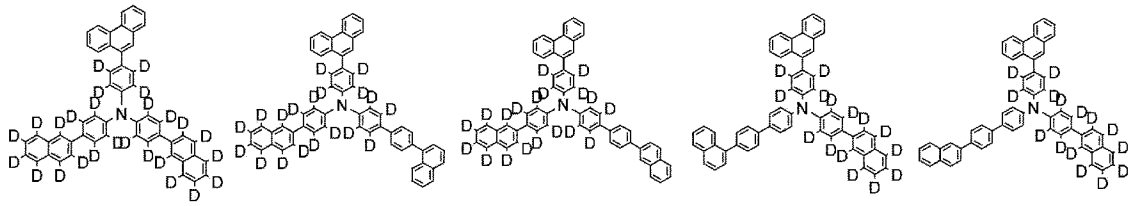
[0594]

[化224]



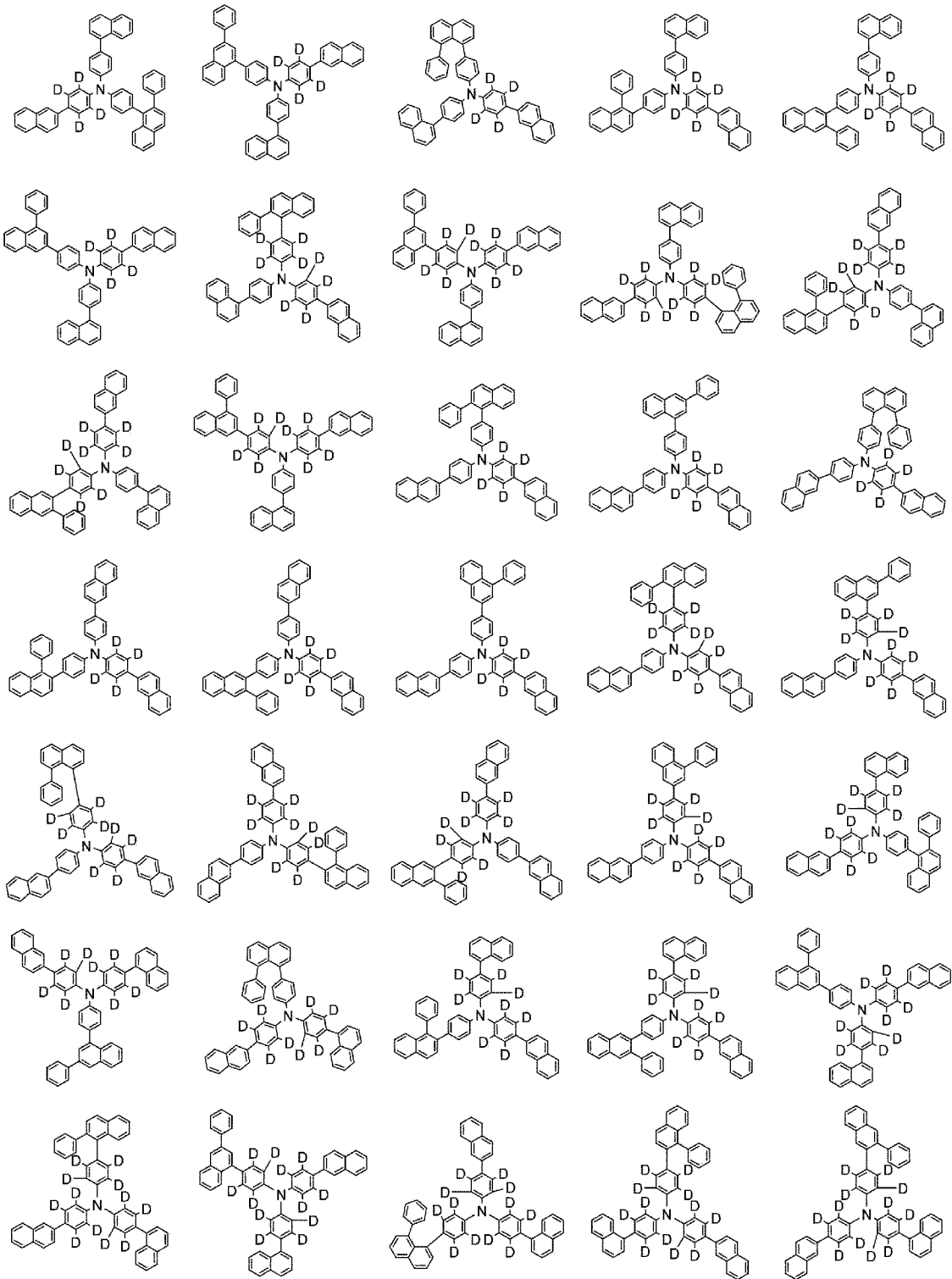
[0595]

[化225]



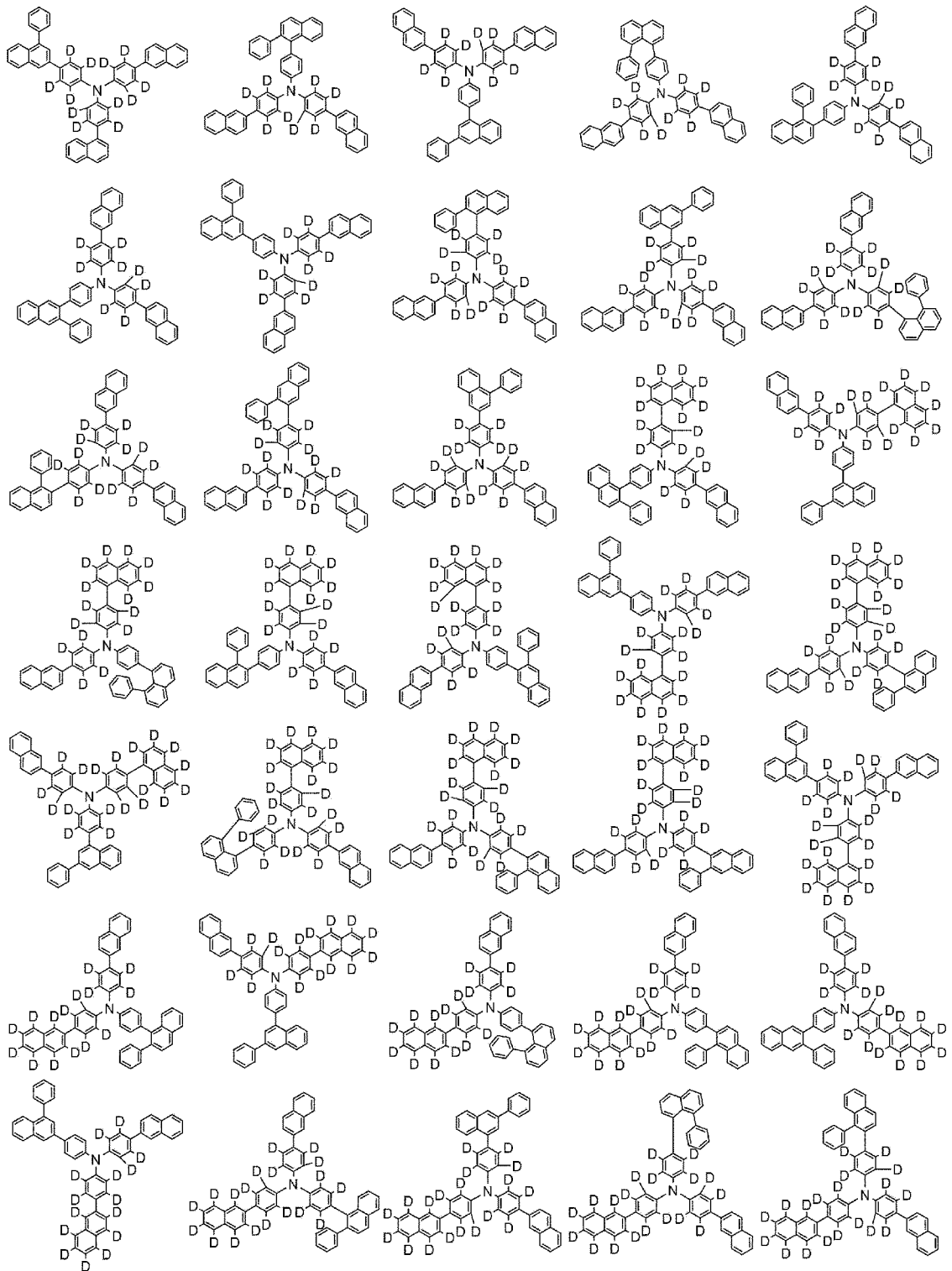
[0596] 式 (D) の例示化合物

[化226]



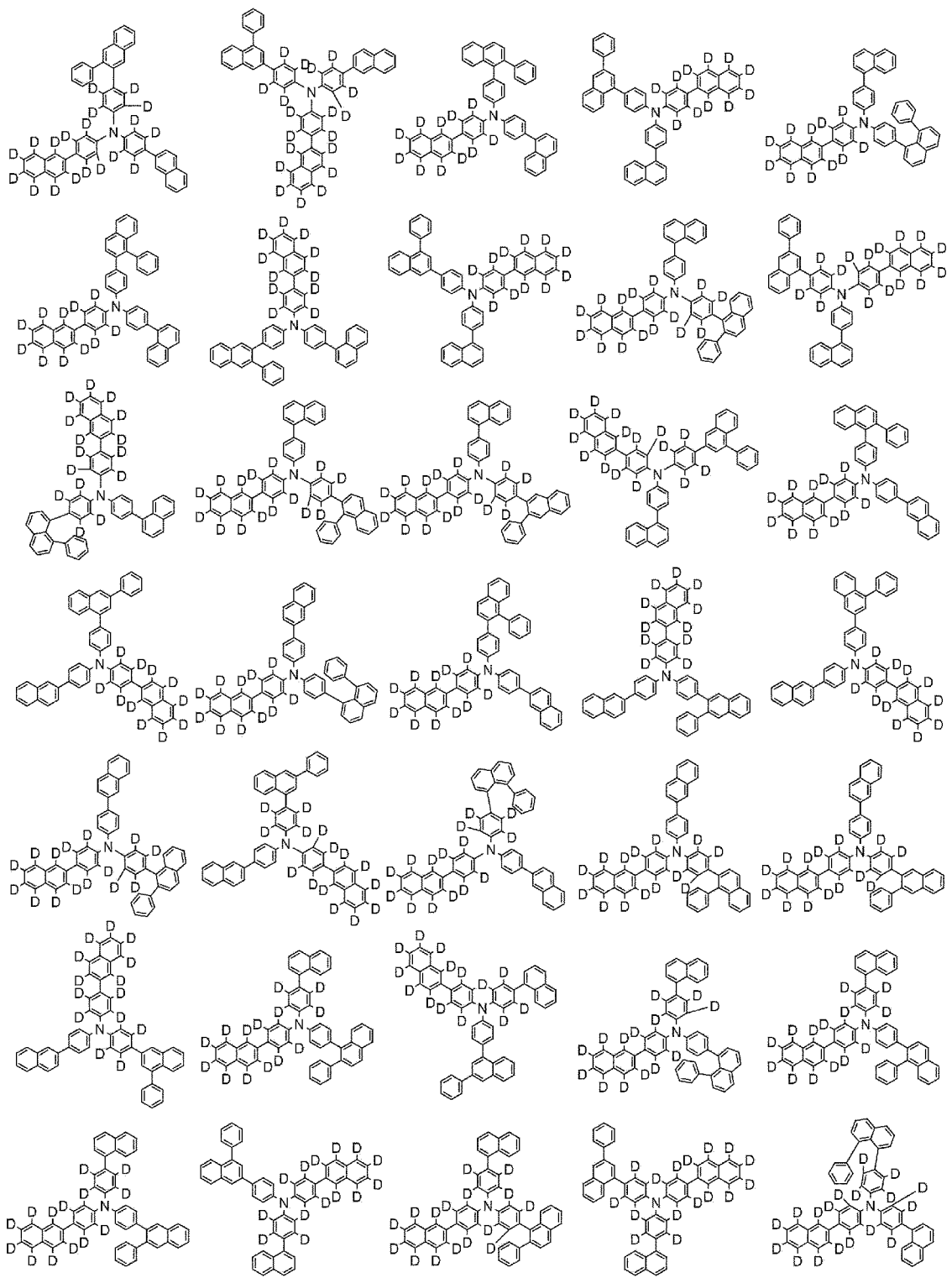
[0597]

[化227]



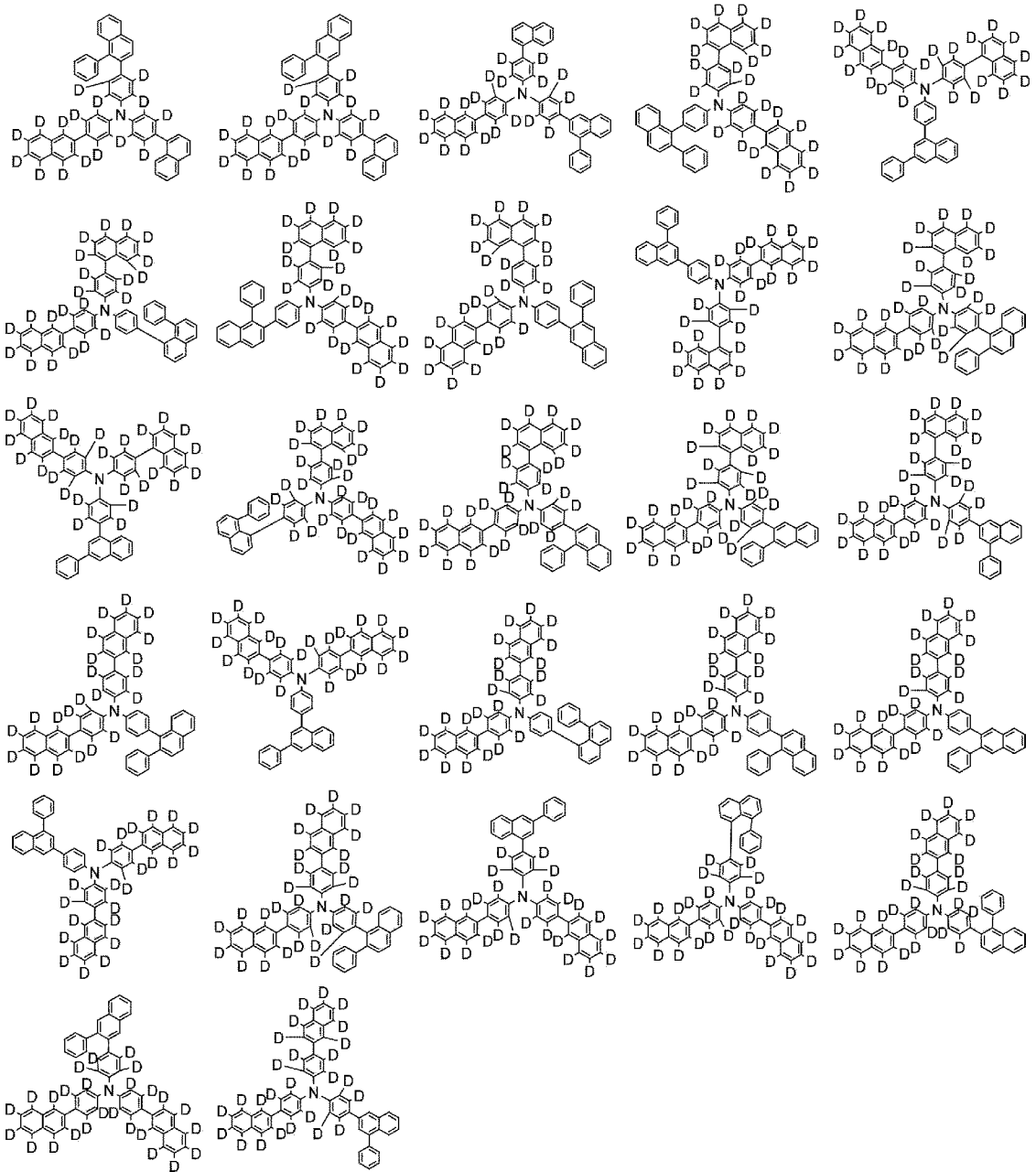
[0598]

[化228]



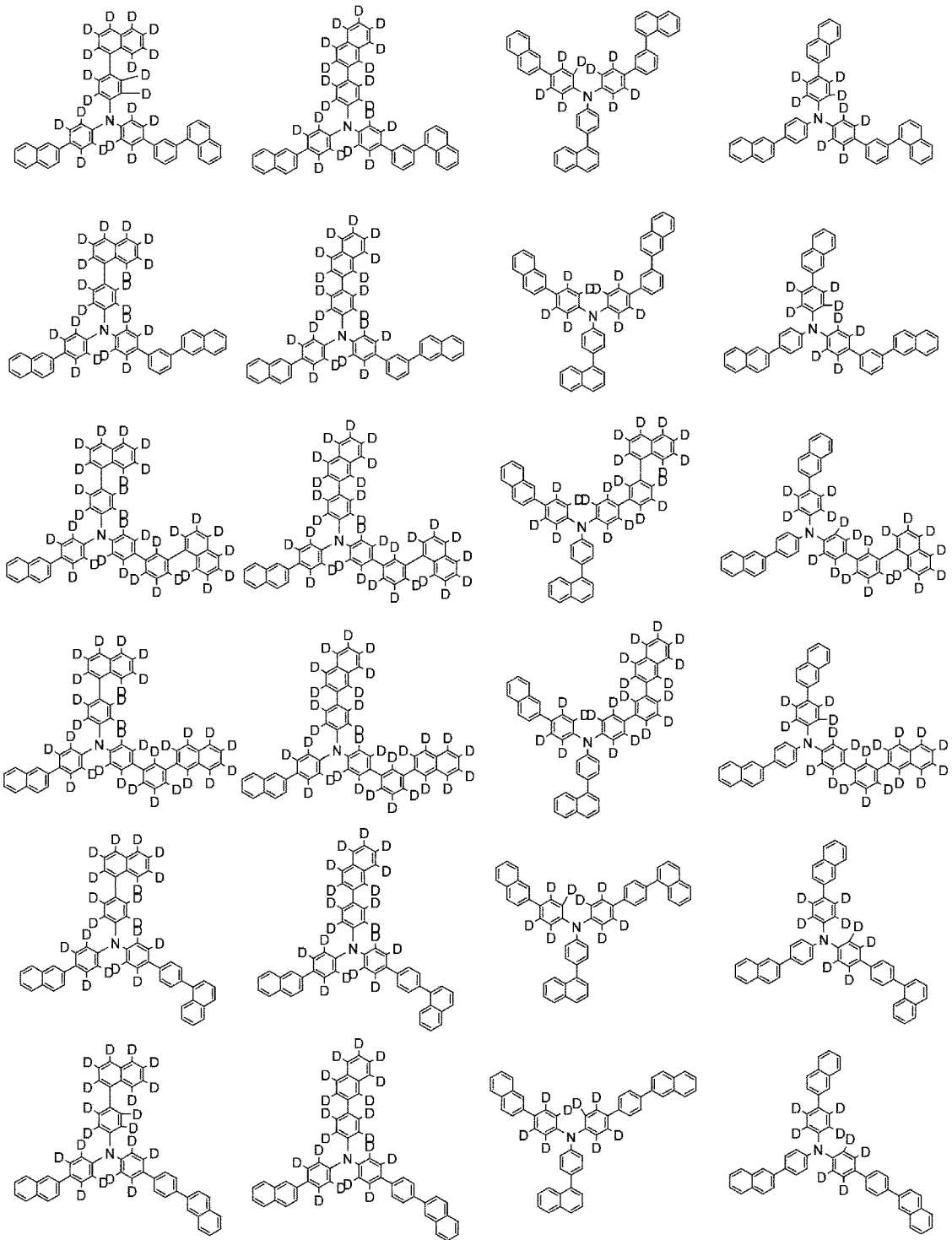
[0599]

[化229]



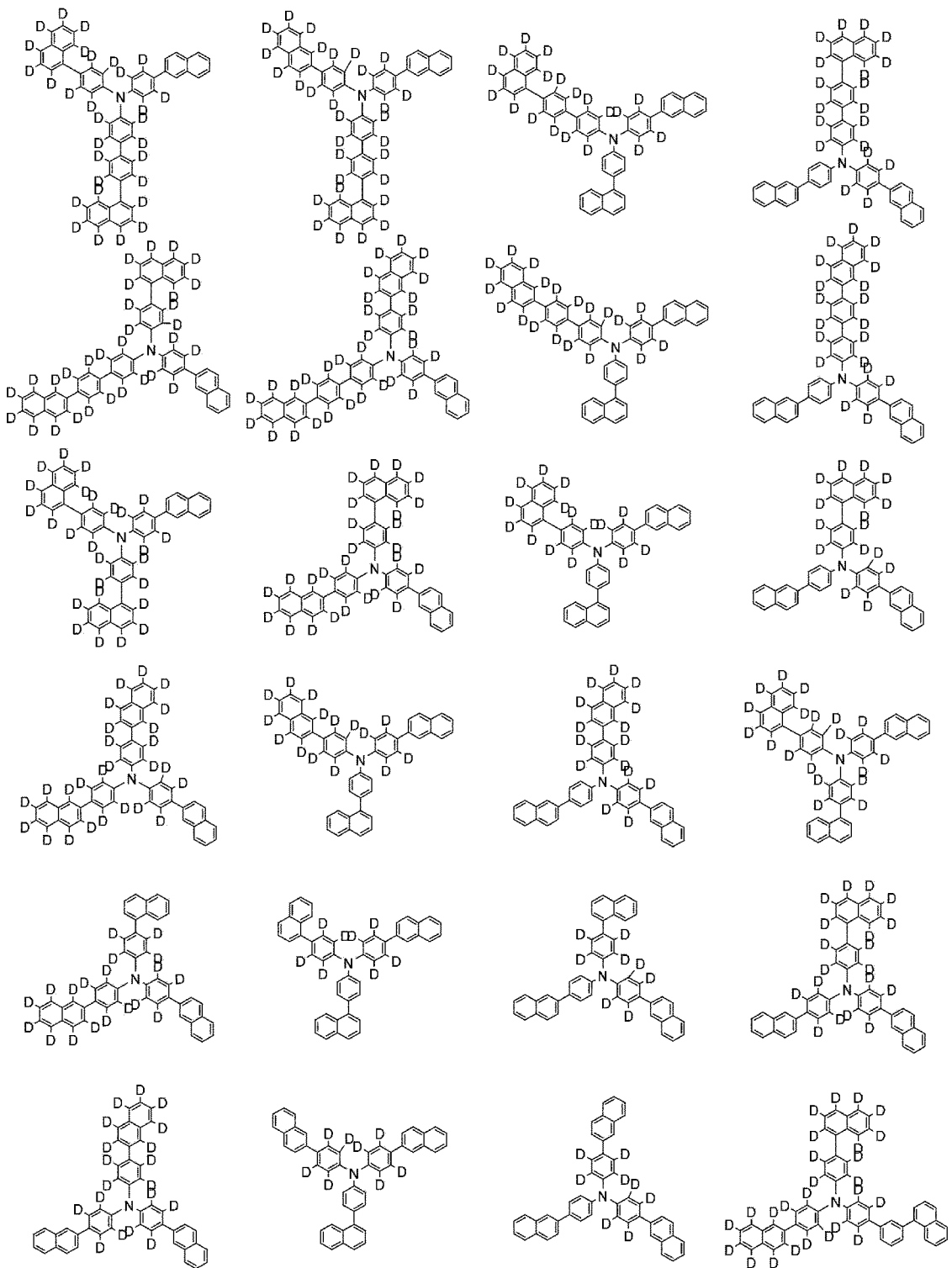
[0600]

[化230]



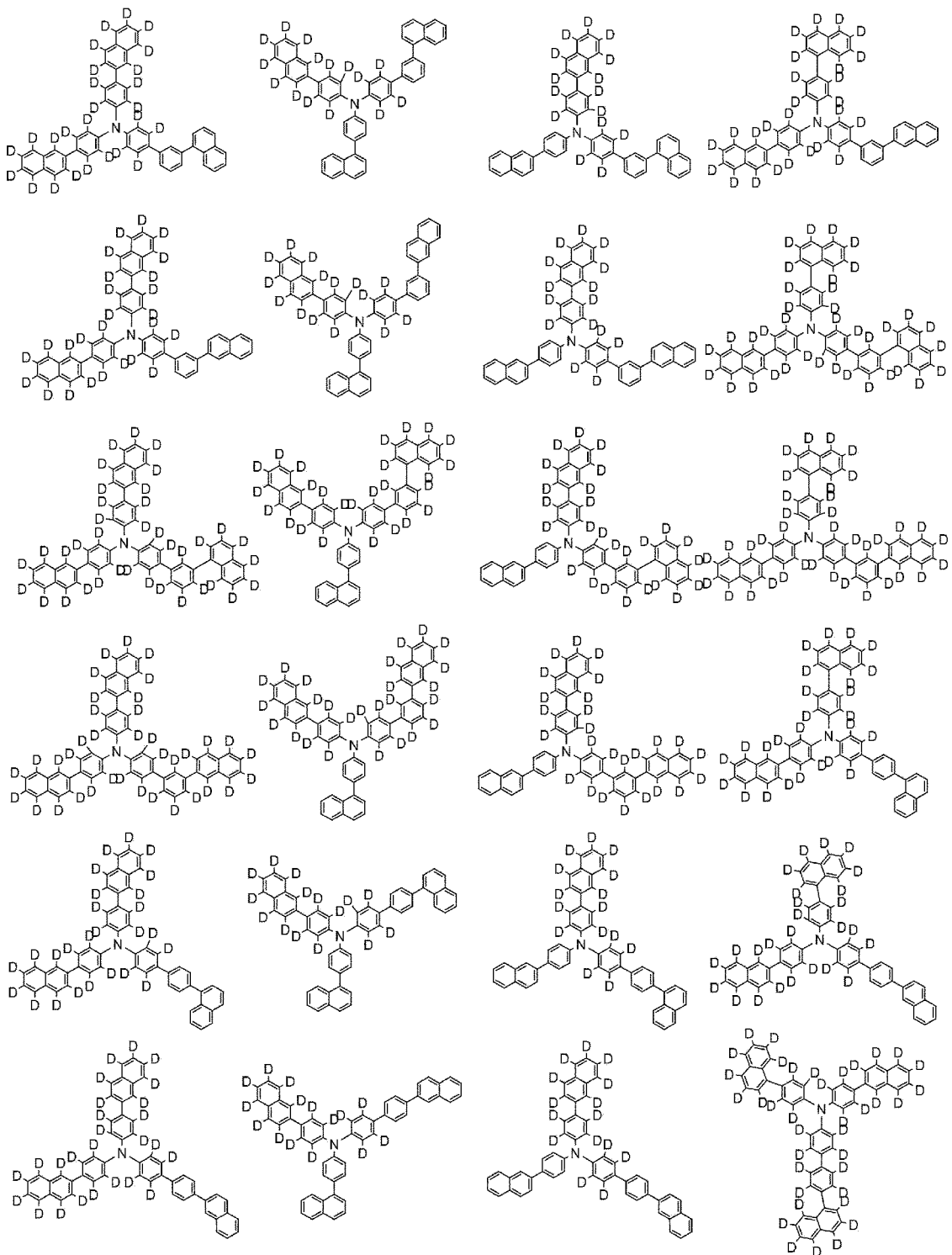
[0601]

[化231]



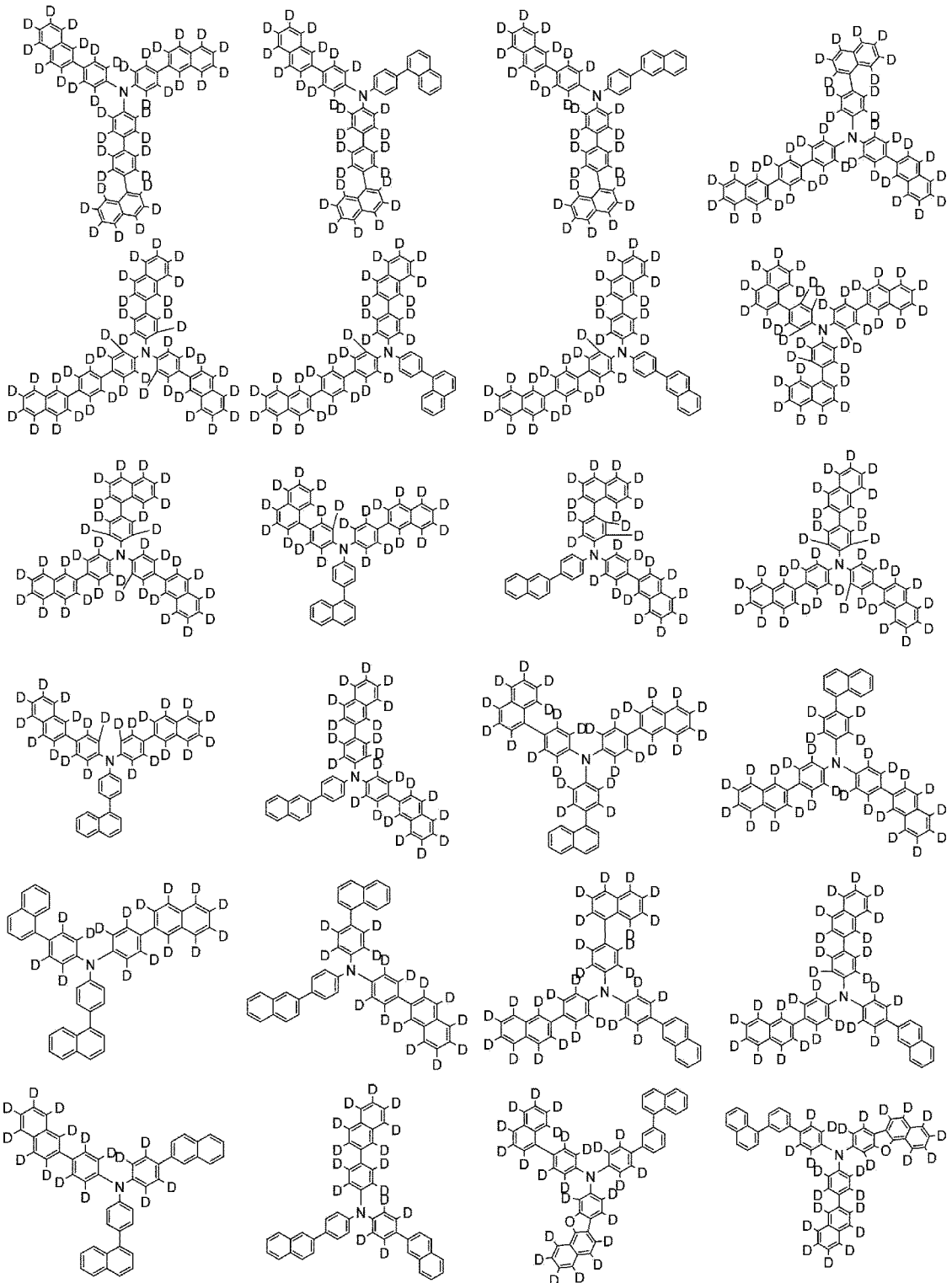
[0602]

[化232]



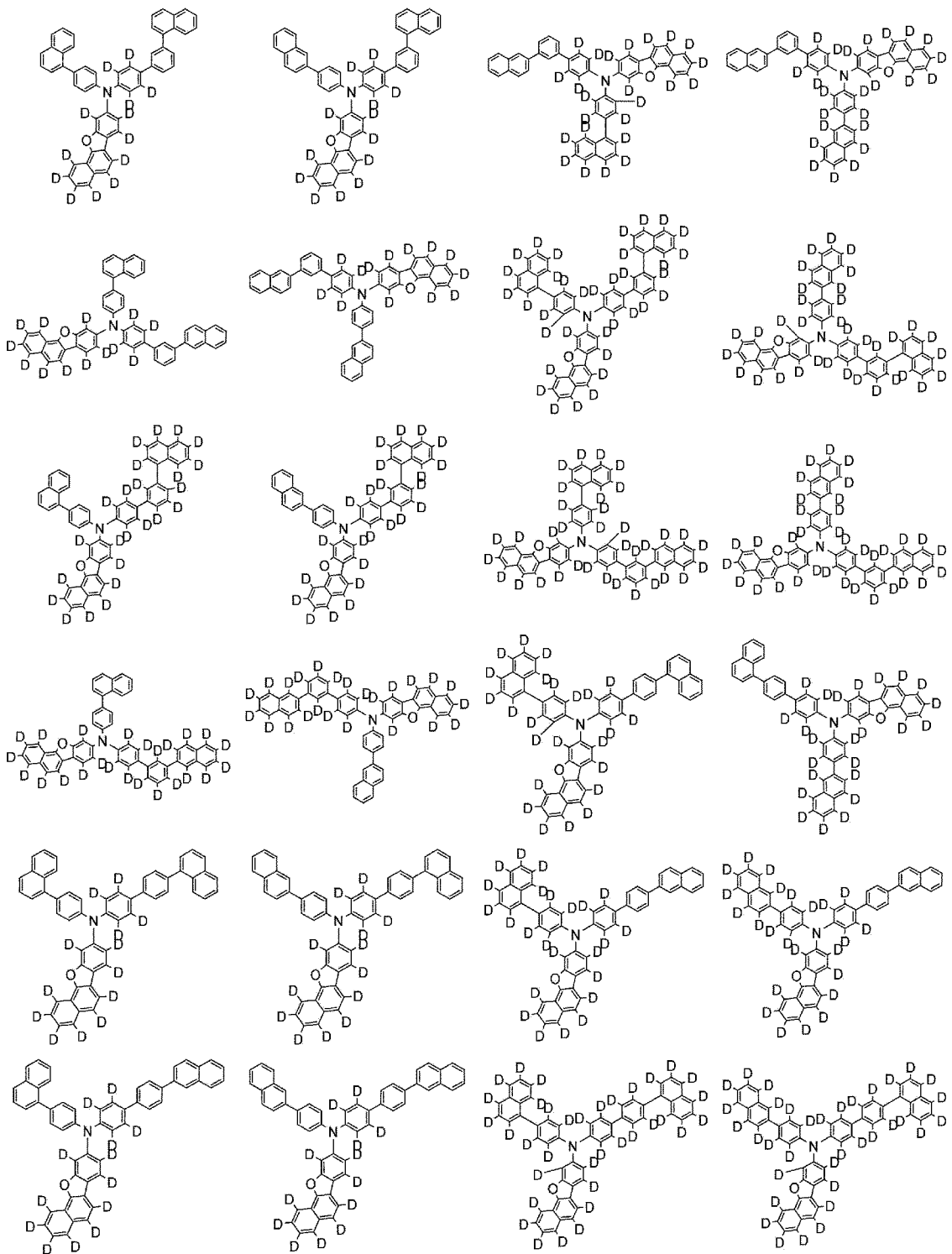
[0603]

[化233]



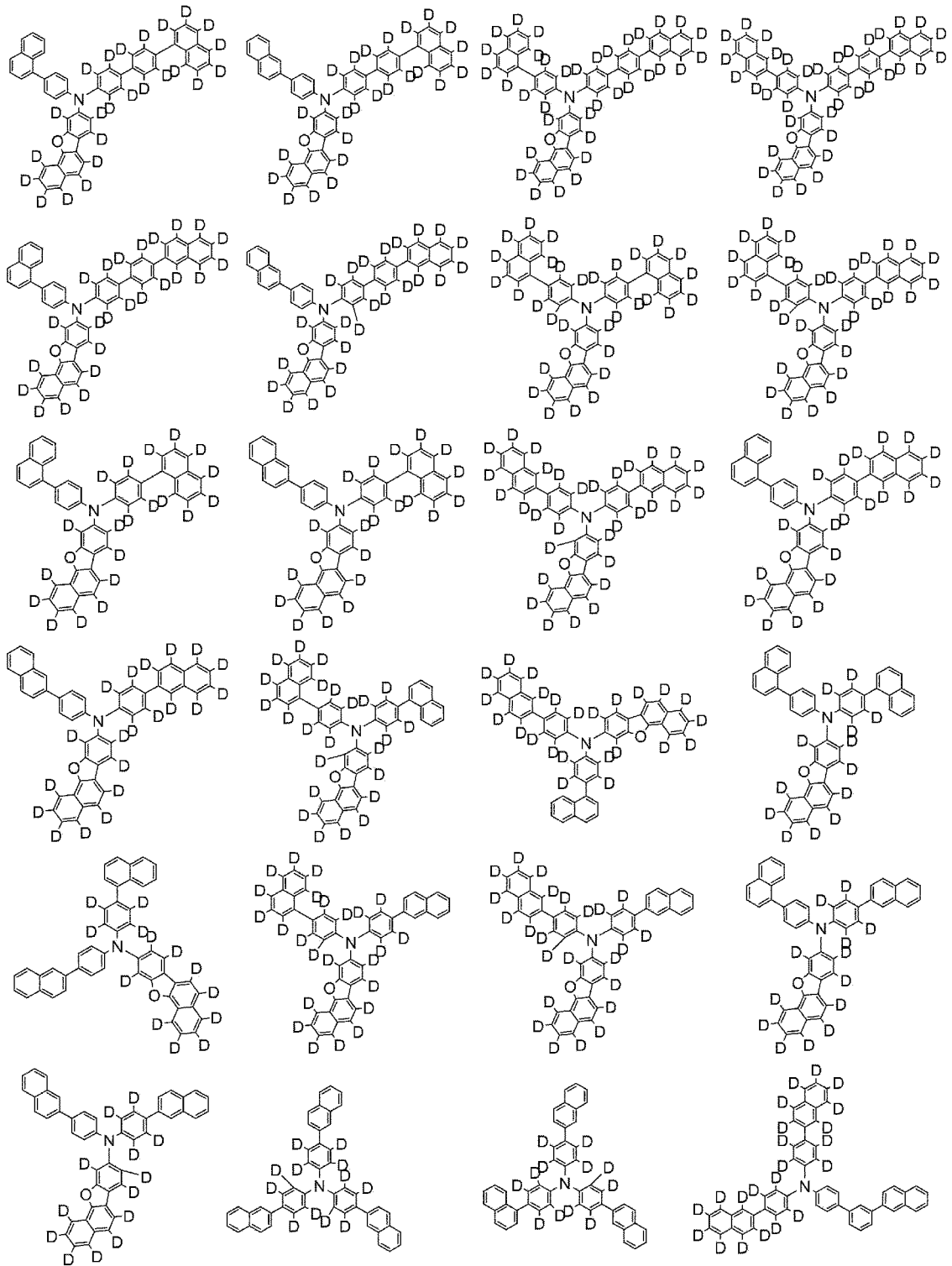
[0604]

[化234]



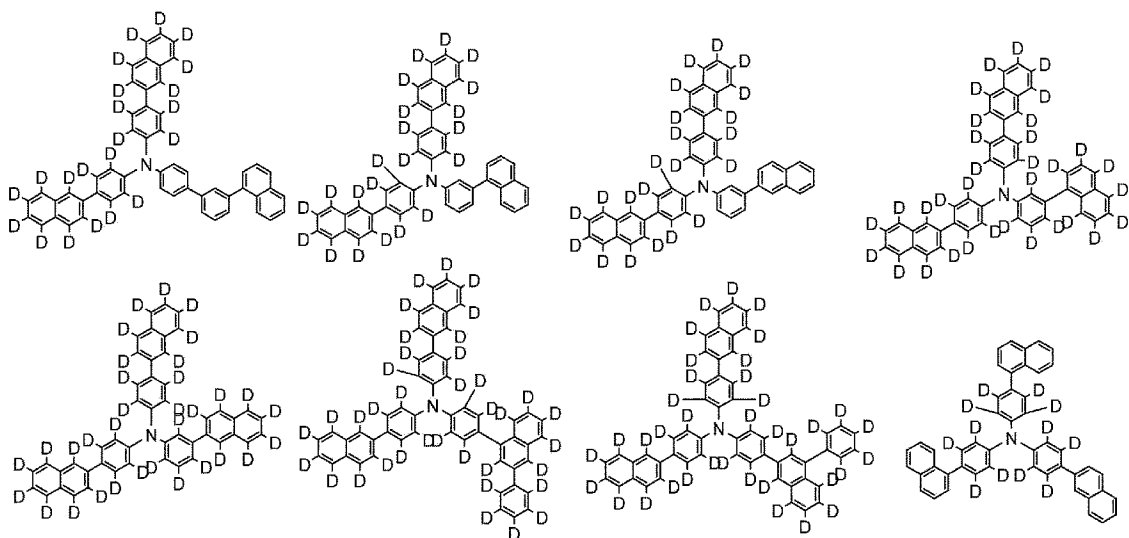
[0605]

[化235]

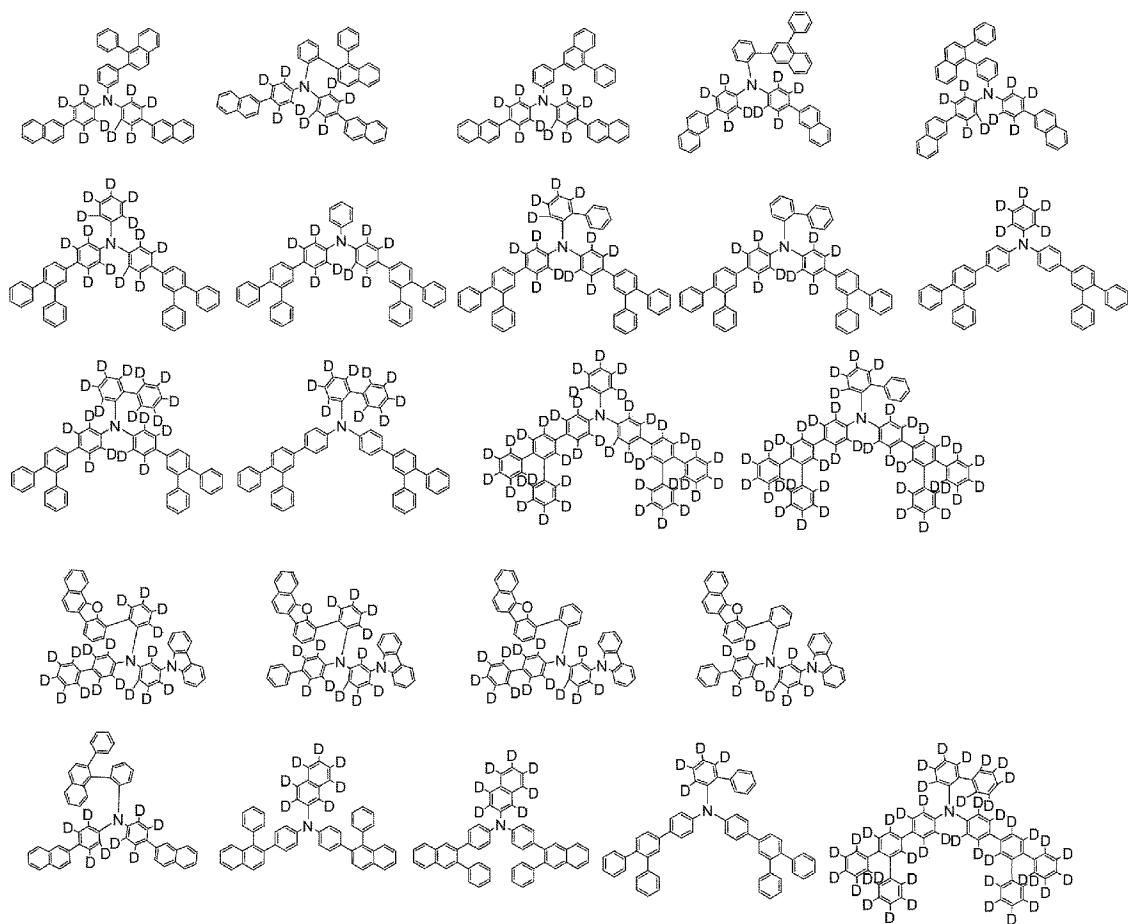


[0606]

[化236]



[0607] [化237]



[0608] 有機EL素子用材料

本発明の有機EL素子用材料は発明化合物を含む。有機EL素子用材料における発明化合物の含有量は、1質量%以上（100%を含む）であり、1

0質量%以上（100%を含む）であることが好ましく、50質量%以上（100%を含む）であることがより好ましく、80質量%以上（100%を含む）であることがさらに好ましく、90質量%以上（100%を含む）であることが特に好ましい。本発明の有機EL素子用材料は、有機EL素子の製造に有用である。

[0609] 有機EL素子

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

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

[0610] 本発明の有機EL素子は、蛍光又は燐光発光型の単色発光素子であっても、蛍光／燐光ハイブリッド型の白色発光素子であってもよいし、単独の発光ユニットを有するシンプル型であっても、複数の発光ユニットを有するタンデム型であってもよく、中でも、蛍光発光型の素子であることが好ましい。ここで、「発光ユニット」とは、有機層を含み、そのうちの少なくとも一層が発光層であり、注入された正孔と電子が再結合することにより発光する最小単位をいう。

[0611] 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)

(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)

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

(m) (正孔注入層／) 第1正孔輸送層／第2正孔輸送層／第3正孔輸送層／第1蛍光発光層／第2蛍光発光層／第1電子輸送層／第2電子輸送層 (／電子注入層)

(n) (正孔注入層／) 第1正孔輸送層／第2正孔輸送層／第3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)

[0612] 上記各燐光又は蛍光発光層は、それぞれ互いに異なる発光色を示すものとすることができる。具体的には、上記発光ユニット (f) において、(正孔注入層／) 正孔輸送層／第1燐光発光層 (赤色発光)／第2燐光発光層 (緑色発光)／スペース層／蛍光発光層 (青色発光)／電子輸送層といった層構成等が挙げられる。

なお、各発光層と正孔輸送層あるいはスペース層との間には、適宜、電子阻止層 (電子ブロック層と記載することもある) 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。

また、2以上の正孔輸送層を含む多層構造中の発光層と隣接する正孔輸送層、例えば、前記2層構造の第2正孔輸送層や前記3層構造の第3正孔輸送層が、電子阻止層としての機能を有してもよい。すなわち、正孔輸送層が2以上の正孔輸送層を含む多層構造である場合、前記多層構造中の発光層と隣接する正孔輸送層は、電子阻止層として用いることもできる。

[0613] タンデム型有機EL素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を挙げることができる。

(2) 陽極／第1発光ユニット／中間層／第2発光ユニット／陰極

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

上記中間層は、一般的に、中間電極、中間導電層、電荷発生層、電子引抜層、接続層、中間絶縁層とも呼ばれ、第1発光ユニットに電子を、第2発光

ユニットに正孔を供給する、公知の材料構成を用いることができる。

[0614] 図1は本発明の有機EL素子の構成の一例を示す概略図である。有機EL素子1は、基板2、陽極3、陰極4、及び該陽極3と陰極4との間に配置された発光ユニット10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。

[0615] 図2は、本発明の有機EL素子の他の構成を示す概略図である。有機EL素子11は、基板2、陽極3、陰極4、及び該陽極3と陰極4との間に配置された発光ユニット20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。

[0616] 図3は、本発明の有機EL素子の他の構成を示す概略図である。有機EL素子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。

[0617] 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。

[0618] 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。

[0619] 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。この他、金（Au）、白金（Pt）、ニッケル（Ni）、タングステン（W）、クロム（Cr）、モリブデン（Mo）、鉄（Fe）、コバルト（Co）、銅（Cu）、パラジウム（Pd）、チタン（Ti）、または前記金属の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

[0620] 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。

## [0621] 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1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。

[0622] 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（Yb）等の希土類金属およびこれらを含む合金等を用いることもできる。なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、およびこれらを含む合金を用いて陽極を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。さらに、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

## [0623] 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。

[0624] 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。

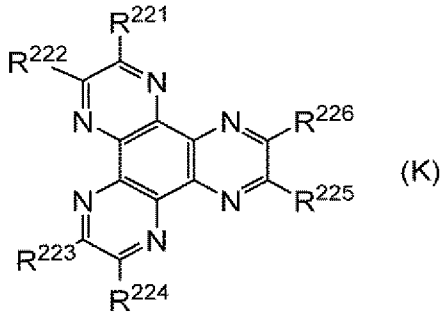
[0625] 低分子の有機化合物である4, 4', 4''-トリス(N, N-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン(略称: TDATA)、4, 4', 4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称: MTDATA)、4, 4'-ビス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称: DPAB)、4, 4'-ビス(N-{4-[N'-(3-メチルフェニル)-N'-フェニルアミノ]フェニル}-N-フェニルアミノ)ビフェニル(略称: DNTPD)、1, 3, 5-トリス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ベンゼン(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。

[0626] 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。

[0627] 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。

[0628] [化238]



[0629] (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。

[0630] 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。

[0631] 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、又、前記多層構造中の最も陰極に近い正孔輸送層、例えば、上記2層構造の第2正孔輸送層や上記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。

正孔輸送層が2層構造である場合、第1正孔輸送層及び第2正孔輸送層の少なくとも一方が発明化合物を含む。すなわち、発明化合物は第1正孔輸送層のみ、第2正孔輸送層のみ、又は第1正孔輸送層と第2正孔輸送層の双方に含まれる。

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い。すなわち、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。

正孔輸送層が3層構造である場合、第1～第3正孔輸送層のうち少なくとも1つが発明化合物を含む。すなわち、発明化合物は第1～第3正孔輸送層から選ばれる1層のみ（第1正孔輸送層のみ、第2正孔輸送層のみ、又は第3正孔輸送層のみ）、第1～第3正孔輸送層から選ばれる2層のみ（第1正孔輸送層と第2正孔輸送層のみ、第1正孔輸送層と第3正孔輸送層のみ、又は第2正孔輸送層と第3正孔輸送層のみ）、又は第1～第3正孔輸送層の全ての層に含まれる。

本発明の一態様においては、発明化合物が第3正孔輸送層に含まれるのが好ましい。すなわち、発明化合物が第3正孔輸送層のみに含まれるか、発明化合物が第3正孔輸送層及び第1正孔輸送層と第2正孔輸送層の一方又は双方に含まれるのが好ましい。

本発明の一態様において、前記各正孔輸送層に含まれる発明化合物は、製造コストの観点から、軽水素体であることが好ましい。前記軽水素体とは、

発明化合物中のすべての水素原子が軽水素原子である発明化合物のことである。

従って、本発明は、第1正孔輸送層と第2正孔輸送層の一方又は双方（2層構造の場合）、第1～第3正孔輸送層のうち少なくとも1つ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。

[0632] 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。

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

[0633] カルバゾール誘導体としては、例えば、4, 4'-ジ(9-カルバゾリル)ビフェニル（略称：CBP）、9-[4-(9-カルバゾリル)フェニル]-10-フェニルアントラセン（略称：CzPA）、及び、9-フェニル-3-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール（略称：PCzPA）が挙げられる。

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

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

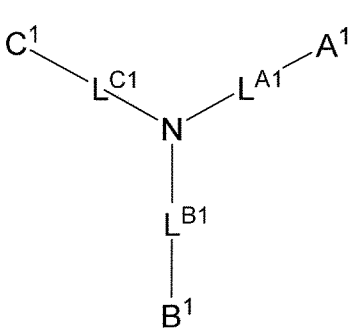
ただし、電子輸送性よりも正孔輸送性の方が高い化合物であれば、上記以外の化合物を用いてもよい。

[0634] 本発明の2層構造の正孔輸送層を有する有機EL素子において、第1正孔輸送層が、下記式(11)又は式(12)で表される1種又は複数種の化合物を含むことが好ましい。

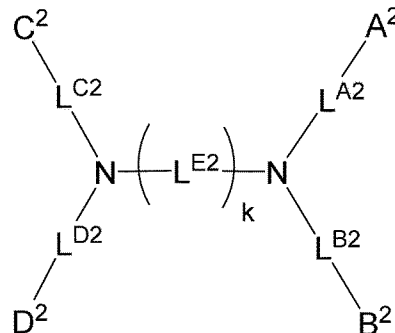
本発明の3層構造の正孔輸送層を有する有機EL素子において、第1正孔輸送層と第2正孔輸送層の一方又は双方が下記式(11)又は(12)で表される1種又は複数種の化合物を含むことが好ましい。

本発明のn層構造(nは4以上の整数)の正孔輸送層を有する有機EL素子において、第1正孔輸送層~第(n-1)正孔輸送層の少なくとも1層が下記式(11)又は式(12)で表される1種又は複数種の化合物を含むことが好ましい。

[0635] [化239]



(11)



(12)

[前記式(11)及び式(12)中、

$L^{A1}$ 、 $L^{B1}$ 、 $L^{C1}$ 、 $L^{A2}$ 、 $L^{B2}$ 、 $L^{C2}$ 及び $L^{D2}$ 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、 $L^{E2}$ 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、

$k$ が2、3又は4の場合、2、3又は4個の $L^{E2}$ 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 $L^{E2}$ 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。]

[0636] 式(11)及び式(12)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ル基、置換もしくは無置換のビフェニル基、置換もしくは無置換のターフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、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ェニル基、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(11)において、A 1、B 1及びC 1のうち少なくとも1つ、及び、式(12)において、A 2、B 2、C 2及びD 2のうち少なくとも1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ェニル基、置換もしくは無置換のカルバゾリル基である。

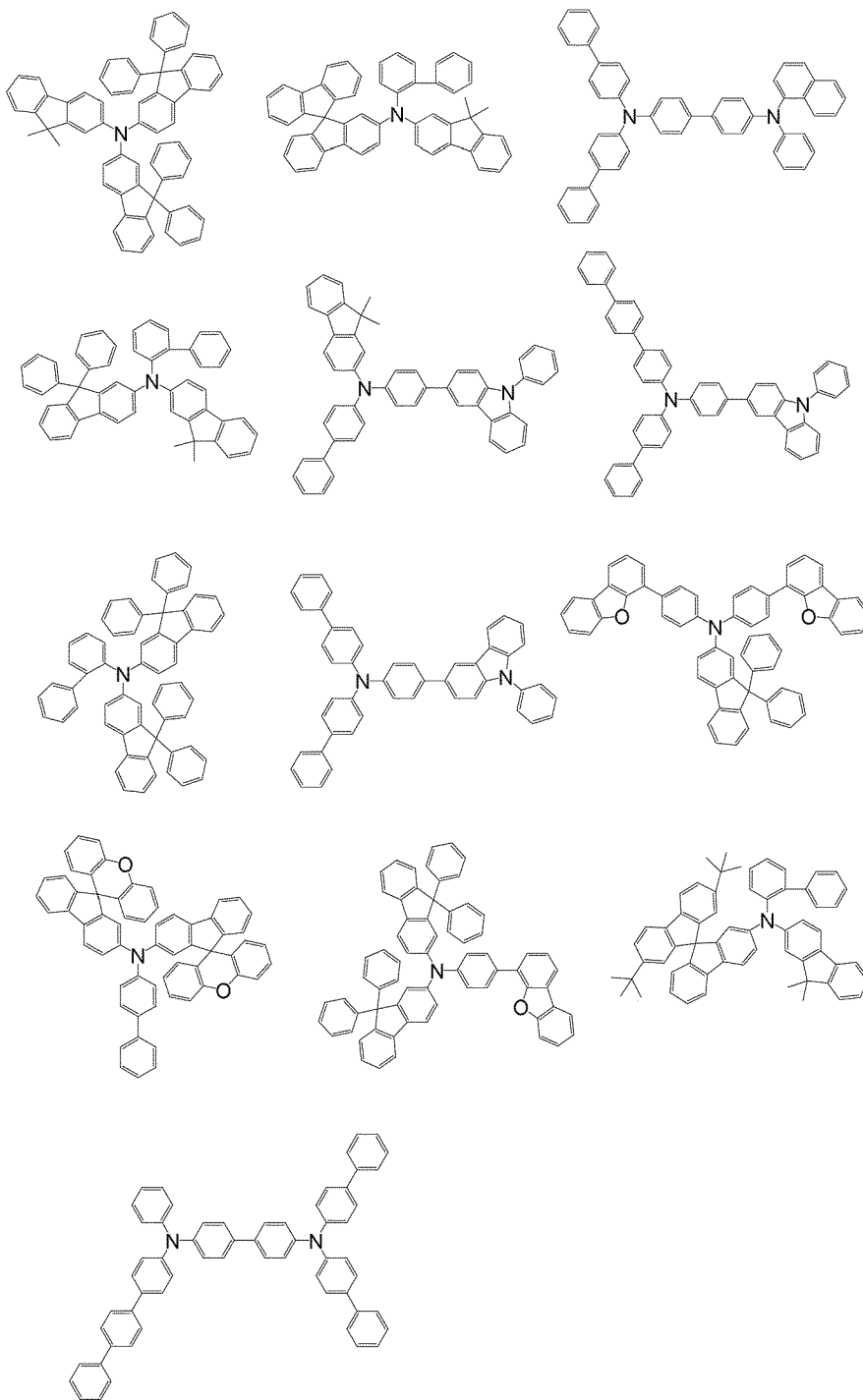
[0637] A 1、B 1、C 1、A 2、B 2、C 2、及びD 2がとり得るフルオレニル基は、9位に置換基を有していてもよく、例えば、9, 9-ジメチルフルオレニル基、9, 9-ジフェニルフルオレニル基であってもよい。また、9位の置換基同士で環を形成していてもよく、例えば、9位の置換基同士でフルオレン骨格やキサントレン骨格を形成してもよい。

[0638] L<sup>A1</sup>、L<sup>B1</sup>、L<sup>C1</sup>、L<sup>A2</sup>、L<sup>B2</sup>、L<sup>C2</sup>及びL<sup>D2</sup>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。

[0639] 式(11)及び式(12)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。

[0640]

[化240]



## [0641] 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ってもよい。

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の発光層とを含んでもよい。

[0642] 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。

[0643] 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: 2

YGABPhA)、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。

[0644] 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。

[0645] 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。

[0646] 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: Flr6)、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: Flrpic)、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: Flracac) などが挙げられる。

[0647] 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)

11) アセチルアセトナート (略称: Ir (bzq) 2 (acac)) などが挙げられる。

[0648] 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- $\alpha$ ] チエニル) ピリジナト-N, C3'] イリジウム (111) 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 (111) 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 (111) (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 (11) (略称: Pt OEP) 等の有機金属錯体が挙げられる。

[0649] 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 (111) (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 (111) (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 (111) (略称: Eu (TTA) 3 (Phen)) 等の希土類金属錯体は、希土類金属イオンからの発光 (異なる多重度の電子遷移) であるため、燐光発光材料として用いることができる。

[0650] 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。

[0651] 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。

[0652] 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: BAAlq)、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: ZnPB0)、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-ビフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称: PBD)、1,3-ビス[5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称: OXD-7)、3-(4-ビフェニル)-4-フェニル-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称: TAZ)、2,2',2''-(1,3,5-ベンゼントリイル)トリス(1-フェニル-1H-ベンゾイミダゾール)(略称: TPBI)、バソフェナントロリン(略称: BPhen)、バソキュプロイン(略称: BCP)などの複素環化合物;

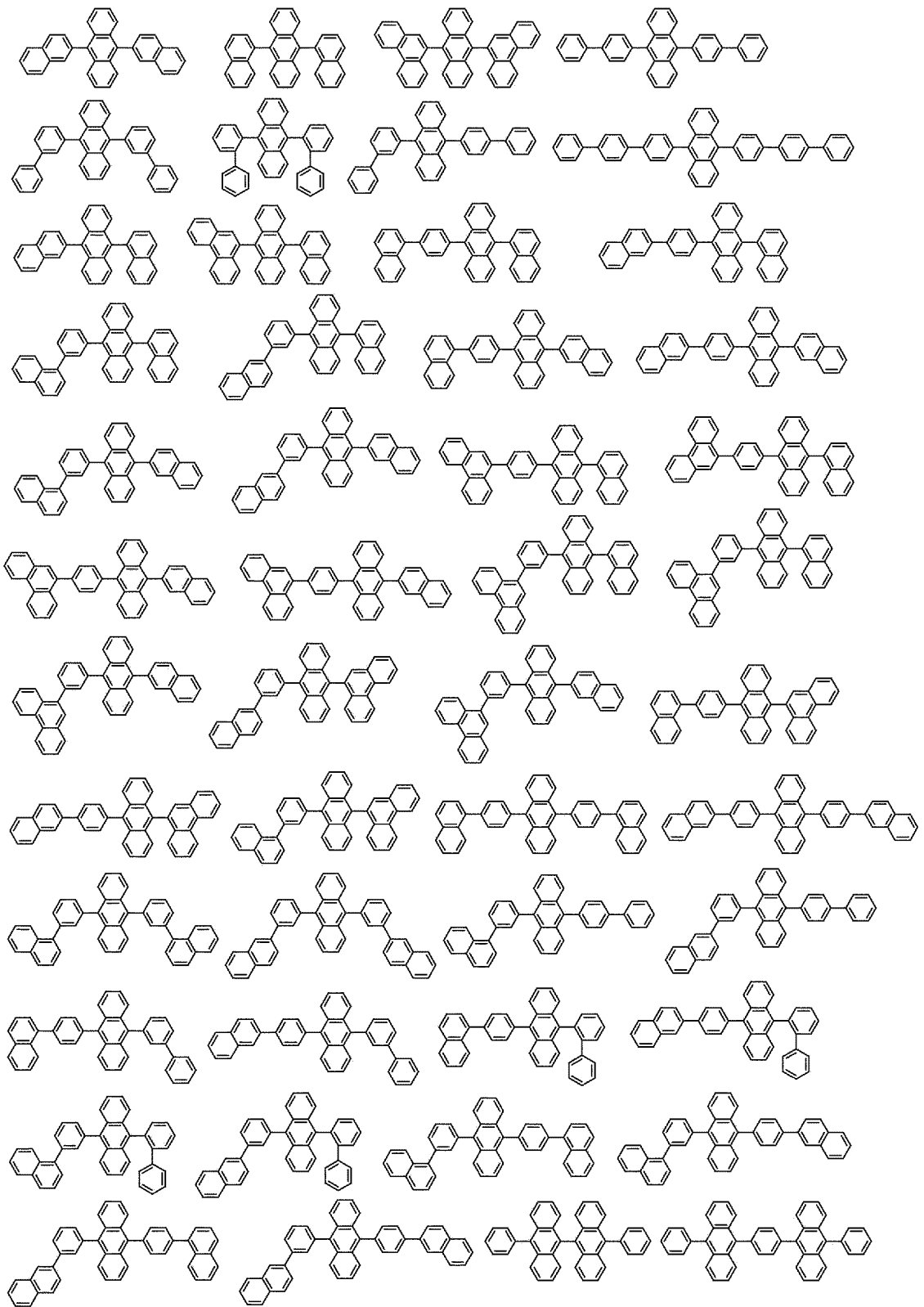
9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称: CzPA)、3,6-ジフェニル-9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称: DP CzPA)、9,10-ビス(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(

略称：DPPA)、9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(略称：DNA)、2-tert-ブチル-9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(略称：t-BuDNA)、9,9'-ビアントリル(略称：BANT)、9,9'-(スチルベン-3,3'-ジイル)ジフェナントレン(略称：DPNS)、9,9'-(スチルベン-4,4'-ジイル)ジフェナントレン(略称：DPNS2)、3,3',3''-(ベンゼン-1,3,5-トリイル)トリピレン(略称：TPB3)、9,10-ジフェニルアントラセン(略称：DPAnt h)、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 $\alpha$ -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。

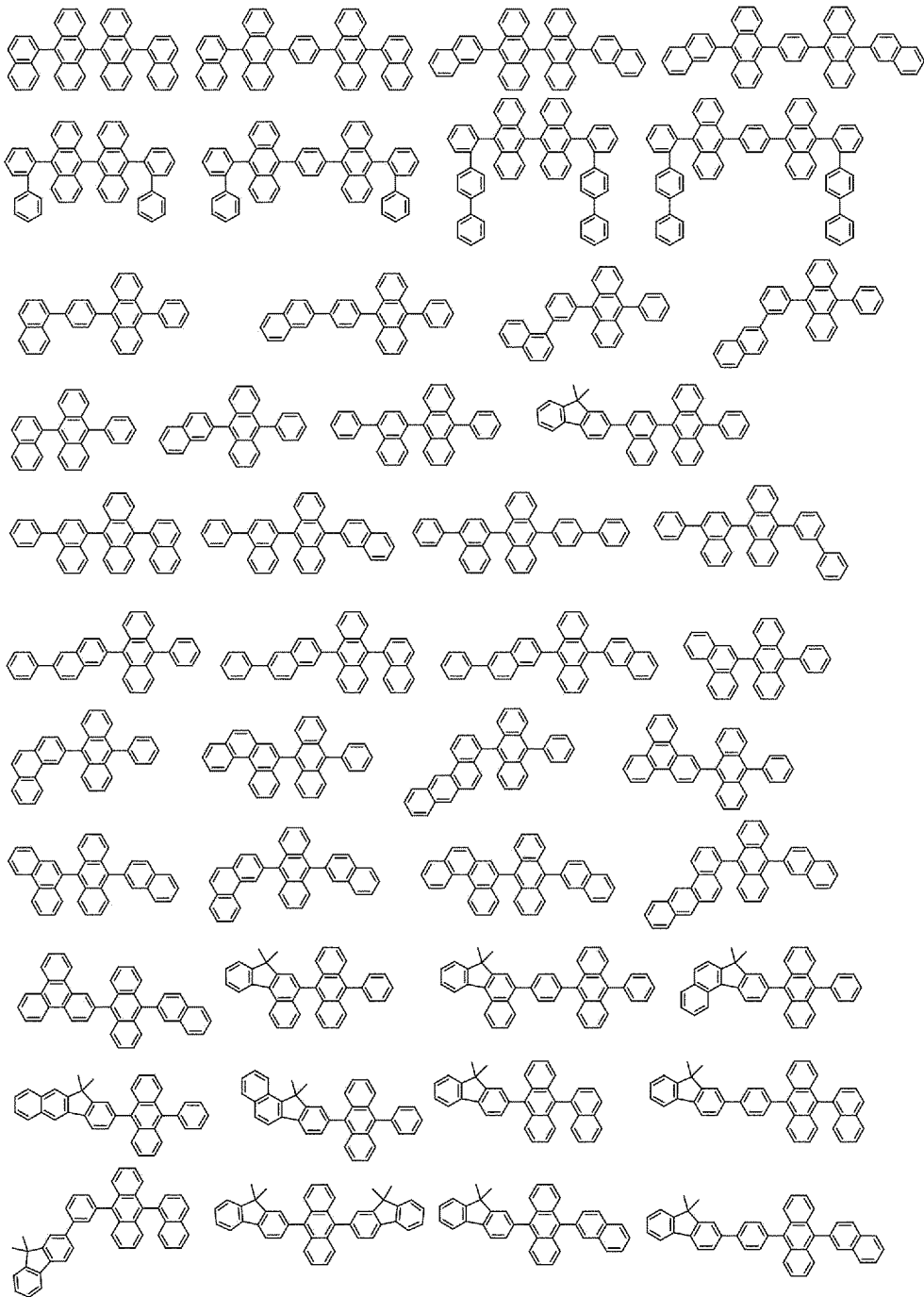
[0653] 特に、青色蛍光素子の場合には、下記のアントラセン化合物をホスト材料として用いることが好ましい。

[0654] [化241]



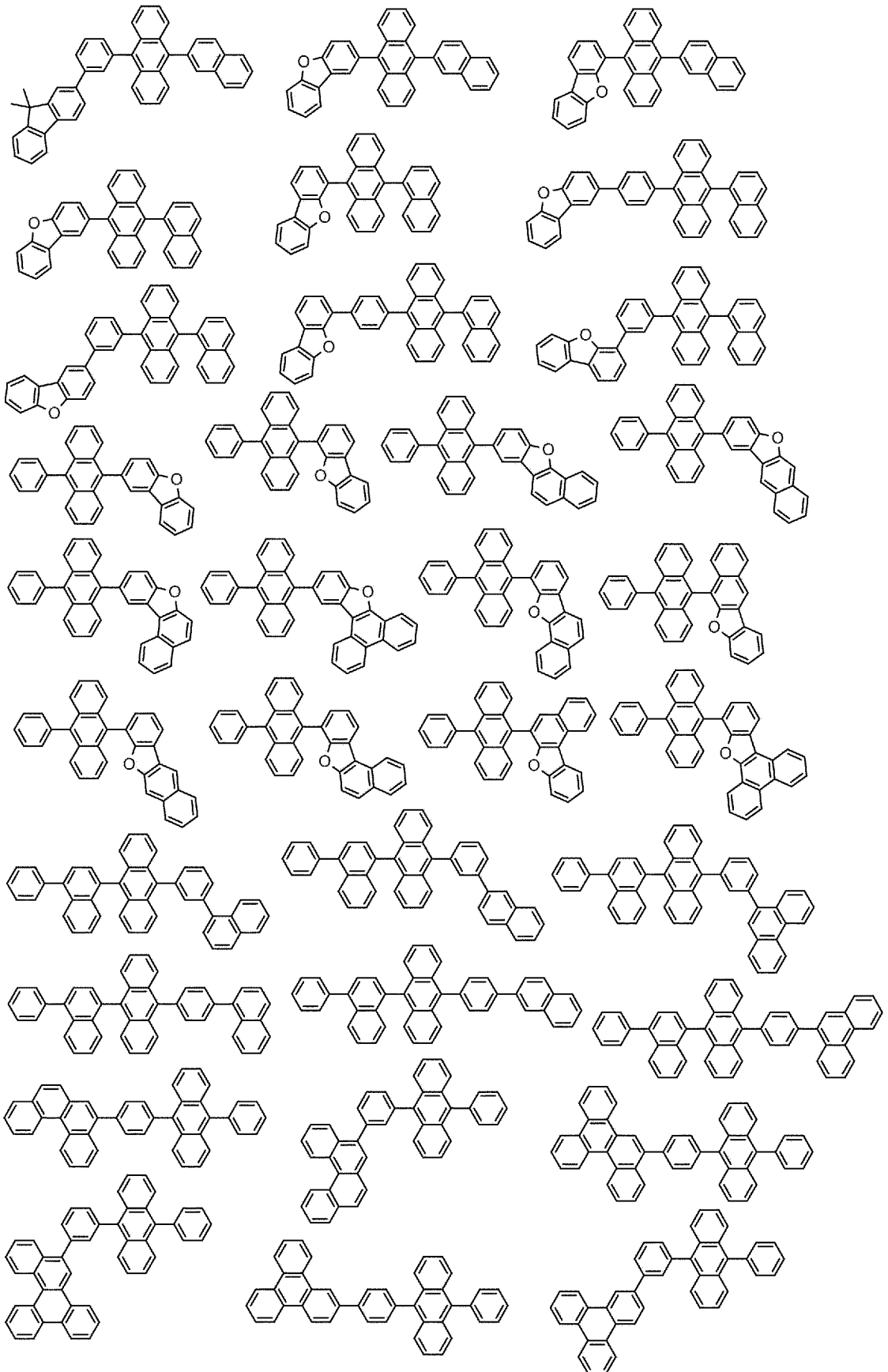
[0655]

[化242]



[0656]

[化243]



[0657] 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1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。

[0658] 本発明の有機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（以下、単に“蛍光発光性化合物”と称することもある）を含有していてもよい。

[0659] 化合物の主ピーク波長の測定方法は、次の通りである。測定対象となる化合物の5  $\mu$ m o l / Lトルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（300K）でこの試料の発光スペクトル（縦軸：発光強度、横軸：波長とする。）を測定する。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（FL-peak）と称する場合がある。

[0660] 前記蛍光発光性化合物は、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。

[0661] 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前記蛍光発光性化合物であってもよいし、両方が前記蛍光発光性化合物であってもよい。

また、発光層が第1発光層（陽極側）と第2発光層（陰極側）とを含む場合、第1発光層と第2発光層のうち一方のみが前記蛍光発光性化合物を含んでいてもよいし、両方の発光層が前記蛍光発光性化合物を含んでいてもよい。第1発光層が前記蛍光発光性化合物を含む場合、第1発光層に含まれるドーパント材料とホスト材料の一方のみが前記蛍光発光性化合物であってもよ

いし、両方が前記蛍光発光性化合物であってもよい。また、第2発光層が前記蛍光発光性化合物を含む場合、第2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前記蛍光発光性化合物であってもよいし、両方が前記蛍光発光性化合物であってもよい。

[0662] 電子輸送帯域

電子輸送帯域は、電子注入層、電子輸送層、正孔阻止層等から構成される。電子輸送帯域のいずれかの層、特に電子輸送層は、好ましくは、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属を含有する有機錯体、アルカリ土類金属を含有する有機錯体、及び希土類金属を含有する有機錯体からなる群から選択される1以上を含有する。

[0663] 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、又、前記多層構造中の最も陽極に近い電子輸送層、例えば、上記2層構造の第1電子輸送層、は発光層に隣接していることが好ましい。本発明の他の態様において、前記単層構造の電子輸送層と発光層の間に、又は、前記多層構造中の最も発光層に近い電子輸送層と発光層の間に、後述する正孔阻止層などを介在させてもよい。

[0664] 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。

[0665] 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(111)(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:Almq<sub>3</sub>)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(略称:BeBq<sub>2</sub>)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(4-フェニルフェノラト)アルミニウム(111)(略称:BAIq)、ビス(8-キノリノラト)亜鉛(11)(略称:Znq)、ビス[2-(2-ベンゾオキサゾリル)フェノラト]亜鉛(11)(略称:ZnPB<sub>2</sub>O)、ビス[2-(2-ベンゾチアゾリル)フェノラト]亜鉛(11)(略称:ZnBTZ)が挙げられる。

[0666] 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-(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。

[0667] 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。

[0668] 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。

#### [0669] 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、テトラシアフルバレン（略称：TTF）等の有機化合物を用いることもできる。

#### [0670] 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、スピコート法等を用いて成膜することができる。

#### [0671] 絶縁層

有機EL素子は、超薄膜に電界を印加するために、リークやショートによる画素欠陥が生じやすい。これを防止するために、一对の電極間に絶縁性の薄膜層からなる絶縁層を挿入してもよい。

絶縁層に用いられる材料としては、例えば、酸化アルミニウム、弗化リチウム、酸化リチウム、弗化セシウム、酸化セシウム、酸化マグネシウム、弗化マグネシウム、酸化カルシウム、弗化カルシウム、窒化アルミニウム、酸化チタン、酸化珪素、酸化ゲルマニウム、窒化珪素、窒化ホウ素、酸化モリ

ブデン、酸化ルテニウム、酸化バナジウム等が挙げられる。なお、これらの混合物や積層物を用いてもよい。

[0672] 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。

[0673] 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よい。電子阻止層とは発光層から正孔輸送層へ電子が漏れることを防ぐ層であり、正孔阻止層とは発光層から電子輸送層へ正孔が漏れることを防ぐ層である。励起子阻止層は発光層で生成した励起子が周辺の層へ拡散することを防止し、励起子を発光層内に閉じ込める機能を有する。

[0674] 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、スピニング法、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。

[0675] 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 nm~10 μmであり、10 nm~0.2 μmがより好ましい。

[0676] 本発明の2層構造又は3層構造の正孔輸送層を有する有機EL素子において、第1正孔輸送層の厚さと第2正孔輸送層の厚さの合計は、好ましくは30nm以上、150nm以下、より好ましくは、40nm以上、130nm以下である。

また、本発明の一態様において、2層構造又は3層構造の第2正孔輸送層の厚さは、好ましくは5nm以上、より好ましくは20nm以上、さらに好ましくは25nm以上、特に好ましくは35nm以上であり、また、好ましくは100nm以下である。

また、本発明の一態様において、発光層と隣接する正孔輸送層の厚さは、好ましくは5nm以上、より好ましくは20nm以上、さらに好ましくは25nm以上、特に好ましくは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2層構造又は3層構造の正孔輸送層を有する有機EL素子において、第2正孔輸送層膜厚 $D_2$ と第1正孔輸送層の膜厚 $D_1$ の比は、好ましくは $0.3 < D_2 / D_1 < 4.0$ 、より好ましくは $0.5 < D_2 / D_1 < 3.5$ 、さらに好ましくは $0.75 < D_2 / D_1 < 3.0$ である。

[0677] 本発明の有機EL素子の好ましい実施態様としては、例えば、

(1) 2層構成の正孔輸送層を有する有機EL素子

・第2正孔輸送層が発明化合物を含み、第1正孔輸送層が発明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発明化合物を含む第2の実施態様；

・第1正孔輸送層が発明化合物を含み、第2正孔輸送層が発明化合物を含まない第3の実施態様；

(2) 3層構成の正孔輸送層を有する有機EL素子

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

・第2正孔輸送層が発明化合物を含み、第1及び第3正孔輸送層が発明化合物

物を含まない第5の実施態様；

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

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

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

・第2及び第3正孔輸送層が発明化合物を含み、第1正孔輸送層が発明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発明化合物を含む第10の実施態様；などが挙げられる。

#### [0678] 電子機器

本発明の一実施形態に係る有機EL素子は、表示装置や発光装置等の電子機器に使用できる。表示装置としては、例えば、有機ELパネルモジュール等の表示部品、テレビ、携帯電話、タブレットもしくはパーソナルコンピュータ等が挙げられる。発光装置としては、例えば、照明、もしくは車両用灯具等が挙げられる。

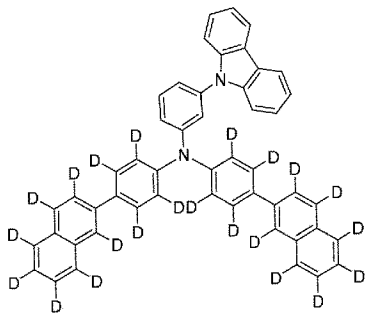
[0679] 前記有機EL素子は、有機ELパネルモジュール等の表示部品、テレビ、携帯電話、パーソナルコンピュータ等の表示装置、及び、照明、車両用灯具の発光装置等の電子機器に使用できる。

#### 実施例

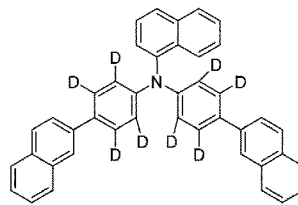
[0680] 以下、実施例を用いて本発明をさらに詳細に説明するが、本発明は以下の実施例に限定されるものではない。

[0681] 実施例1～7の有機EL素子(1)の製造に用いた発明化合物

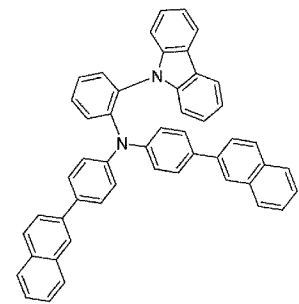
[化244]



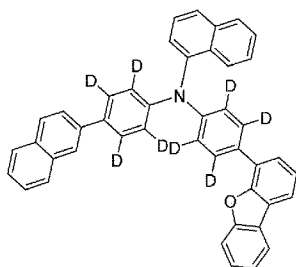
化合物 Inv-1



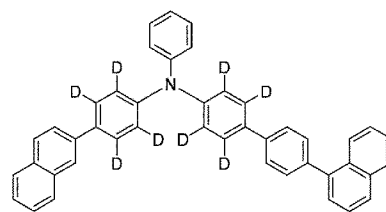
化合物 Inv-2



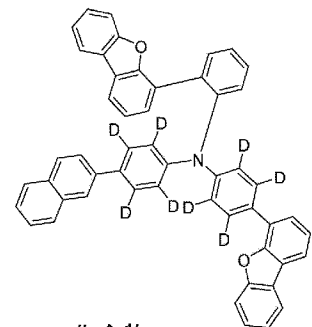
化合物 Inv-3



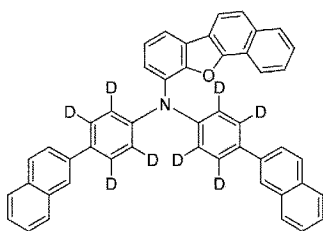
化合物 Inv-13



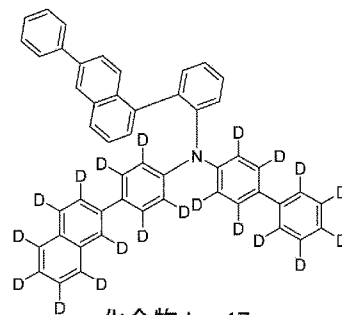
化合物 Inv-14



化合物 Inv-15



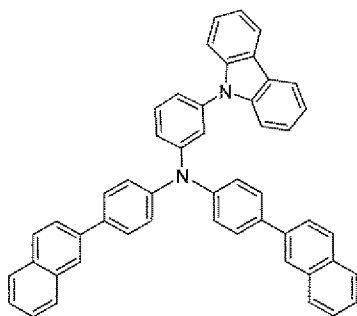
化合物 Inv-16



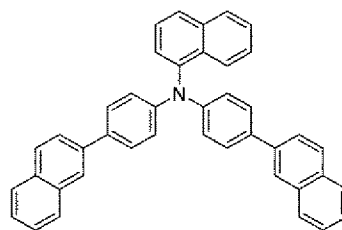
化合物 Inv-17

[0682] 比較例 1 及び 2 の有機 EL 素子 (I) の製造に用いた比較化合物

[化245]



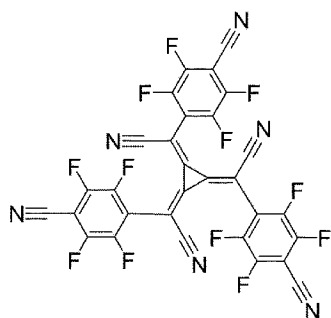
比較化合物 Ref-1



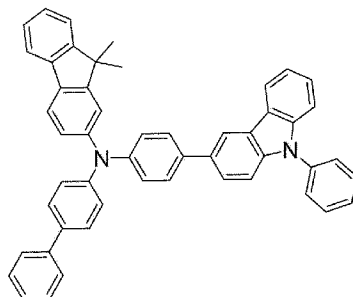
比較化合物 Ref-2

[0683] 実施例 1 ~ 8、並びに比較例 1 及び 2 の有機 EL 素子 (I) の製造に用いた他の化合物

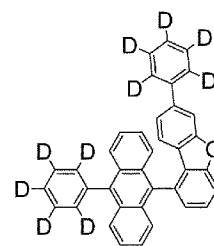
[化246]



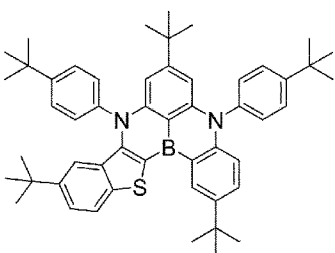
HA



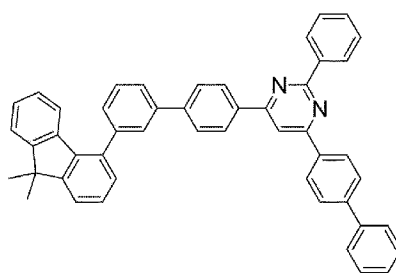
HT-1



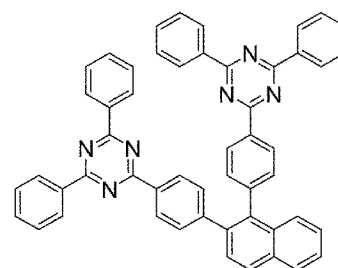
BH-1



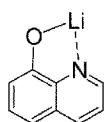
BD-1



ET-1



ET-2



Liq

## [0684] 有機EL素子 (I) の作製

## 実施例 1

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

洗浄後のITO透明電極付き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面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-1と化合物HAとを共蒸着し、膜厚10 nmの正孔注入層を形成した。化合物HT-1と化合物HAの質量比（HT-1 : HA）は97 : 3であった。

次に、正孔注入層上に化合物HT-1を蒸着し、膜厚85nm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Inv-1を蒸着し、膜厚5nmの第2正孔輸送層を形成した。

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

次に、この発光層の上に、化合物ET-1を蒸着し、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-2とLiqとを共蒸着し、膜厚31nmの第2電子輸送層を形成した。化合物ET-2とLiqの質量比（ET-2：Liq）は50：50であった。

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

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

このようにして得られた有機EL素子（1）の層構成を以下に示す。

ITO(130)/HT-1:HA=97:3(10)/HT-1(85)/化合物Inv-1(5)/BH-1:BD-1=99：1(20)  
/ET-1(5)/ET-2:Liq=50:50(31)/Liq(1)/Al(80)

上記層構成において、括弧内の数字は膜厚（nm）であり、比は質量比である。

#### [0685] 実施例2～8、並びに比較例1及び2

第2正孔輸送層材料として、化合物Inv-1の代わりに表1に記載の化合物を用いたこと以外は実施例1と同様にして、有機EL素子（1）を作製した。

#### [0686] 素子寿命（LT95）の測定

得られた有機EL素子（1）を電流密度50mA/cm<sup>2</sup>で直流駆動し、輝

度が初期輝度の95%に減少するまでの時間を測定し、これを95%寿命（LT95）とした。結果を表1に示す。

[0687] [表1]

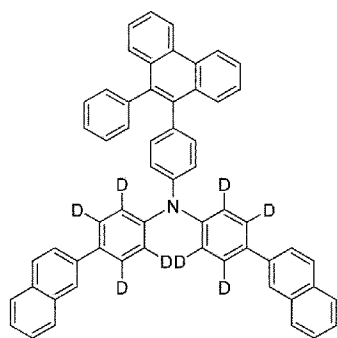
表1

	第2正孔輸送層 材料	LT95(h) @50mA/cm <sup>2</sup>
実施例1	化合物 Inv-1	113
実施例2	化合物 Inv-2	122
実施例3	化合物 Inv-3	106
実施例4	化合物 Inv-13	116
実施例5	化合物 Inv-14	124
実施例6	化合物 Inv-15	105
実施例7	化合物 Inv-16	119
比較例1	比較化合物 Ref-1	89
比較例2	比較化合物 Ref-2	91

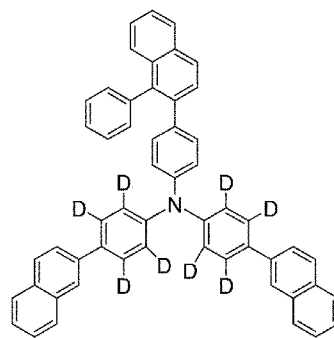
[0688] 表1の結果から明らかなように、発明化合物（化合物Inv-1～化合物Inv-3、化合物Inv-13～化合物Inv-17）を含む有機EL素子（I）は、比較化合物Ref-1又は比較化合物Ref-2を含む有機EL素子（I）よりも、寿命が長いことが分かる。

[0689] 実施例9～16の有機EL素子（II）の製造に用いた発明化合物

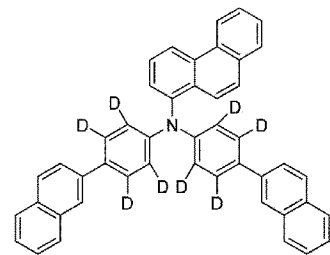
[化247]



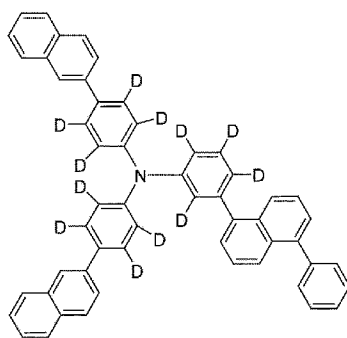
化合物 Inv-4



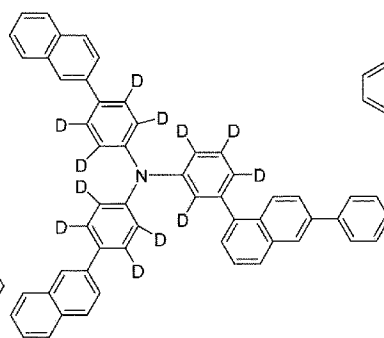
化合物 Inv-6



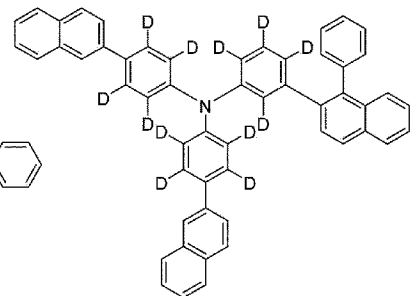
化合物 Inv-7



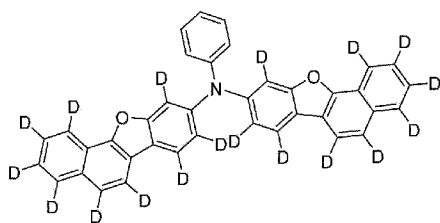
化合物 Inv-8



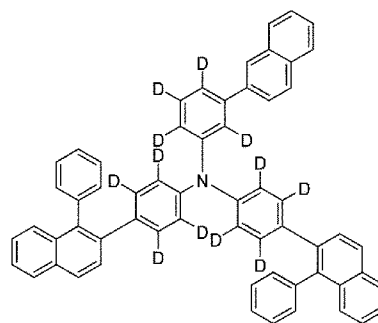
化合物 Inv-9



化合物 Inv-10



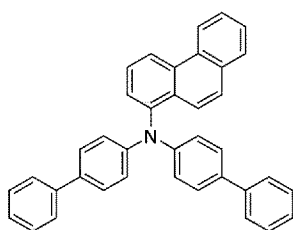
化合物 Inv-11



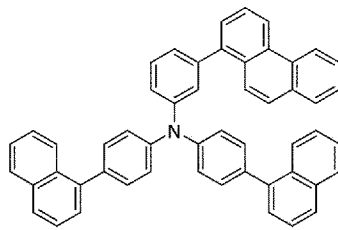
化合物 Inv-12

[0690] 比較例3及び4の有機EL素子(11)の製造に用いた比較化合物

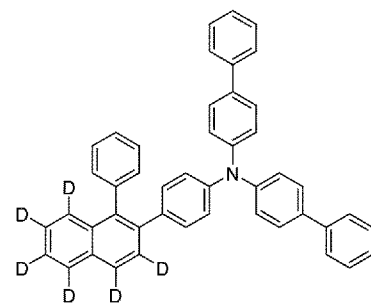
[化248]



比較化合物 Ref-3



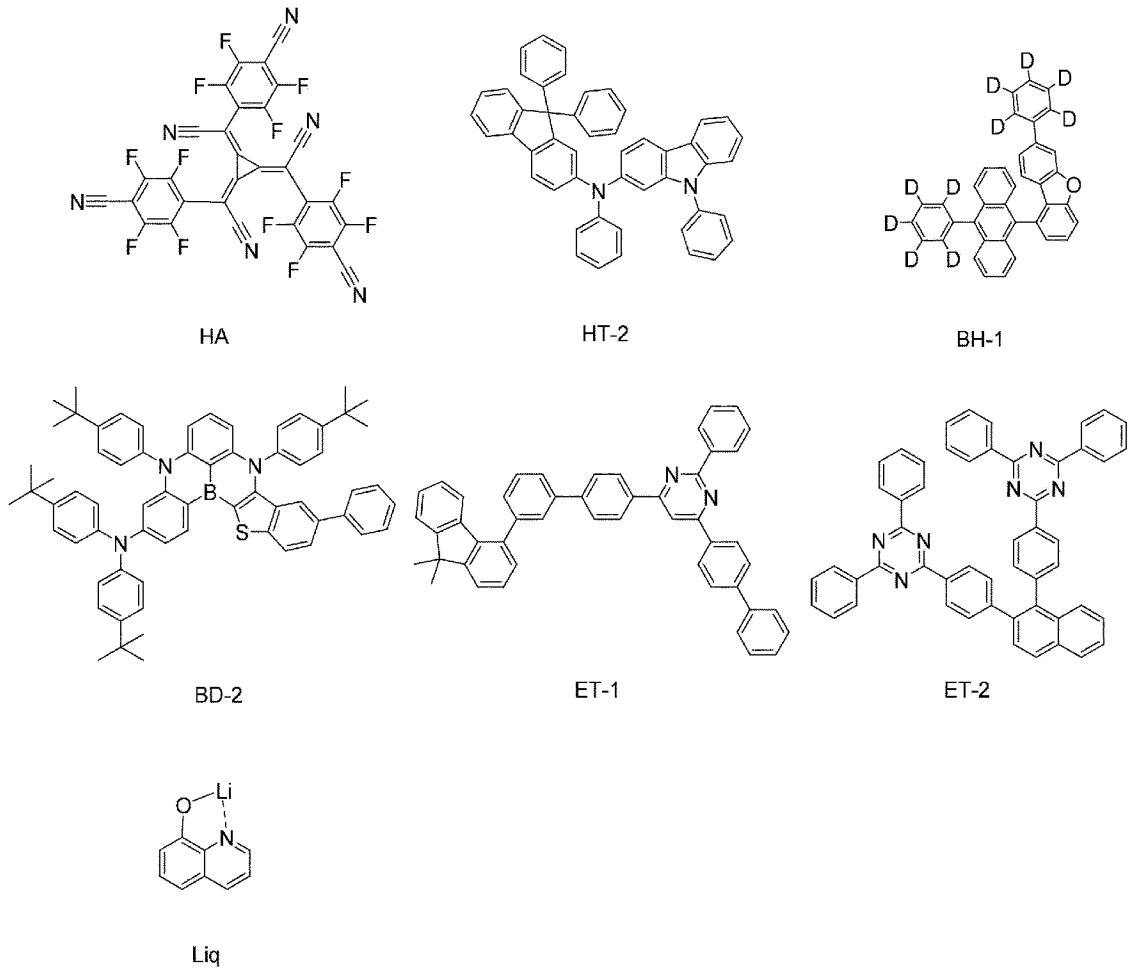
比較化合物 Ref-4



比較化合物 Ref-5

[0691] 実施例 9～16、及び比較例 3～5 の有機 EL 素子 (11) の製造に用いた他の化合物

[化249]



[0692] 有機 EL 素子 (11) の作製

実施例 9

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

洗浄後の ITO 透明電極付き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面上に透明電極を覆うようにして化合物 HT-2 と化合物 HA とを共蒸着し、膜厚 10 nm の正孔注入層を形成した。化合物 HT-2 と化合物 HA の質量比 (HT-2 : HA) は 97 : 3

であった。

次に、正孔注入層上に化合物HT-2を蒸着し、膜厚85nm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Inv-4を蒸着し、膜厚10nmの第2正孔輸送層を形成した。

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

次に、この発光層の上に、化合物ET-1を蒸着し、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-2とLiqとを共蒸着し、膜厚31nmの第2電子輸送層を形成した。化合物ET-2とLiqの質量比（ET-2：Liq）は50：50であった。

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

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

このようにして得られた有機EL素子（11）の層構成を以下に示す。

ITO(130)/HT-2:HA=97:3(10)/HT-2(85)/化合物Inv-4(10)/BH-1:BD-2=99:1(20)/ET-1(5)/ET-2:Liq=50:50(31)/Liq(1)/Al(50)

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。

#### [0693] 実施例10～16、及び比較例3～5

第2正孔輸送層材料として、化合物Inv-4の代わりに表2に記載の化合物を用いたこと以外は実施例9と同様にして、有機EL素子（11）を製作した。

#### [0694] 素子寿命（LT95）の測定

得られた有機EL素子(11)を電流密度 $30\text{mA}/\text{cm}^2$ で直流駆動し、輝度が初期輝度の95%に減少するまでの時間を測定し、これを95%寿命(LT95)とした。結果を表2に示す。

[0695] [表2]

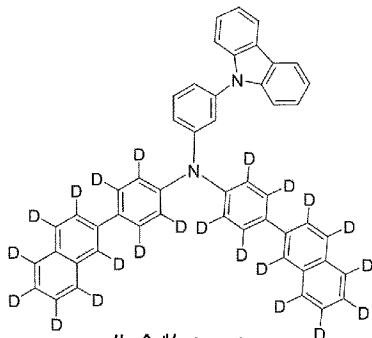
表2

	第2正孔輸送層材料	LT95(h) @30mA/cm <sup>2</sup>
実施例9	化合物 Inv-4	170
実施例10	化合物 Inv-6	162
実施例11	化合物 Inv-7	175
実施例12	化合物 Inv-8	177
実施例13	化合物 Inv-9	168
実施例14	化合物 Inv-10	184
実施例15	化合物 Inv-11	187
実施例16	化合物 Inv-12	179
比較例3	比較化合物 Ref-3	143
比較例4	比較化合物 Ref-4	78
比較例5	比較化合物 Ref-5	136

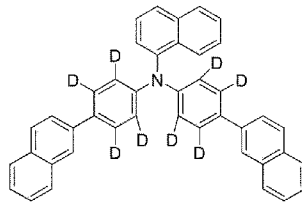
[0696] 表2の結果から明らかなように、発明化合物(化合物Inv-4、Inv-6~Inv-12)を含む有機EL素子(11)は、比較化合物Ref-3又は比較化合物Ref-4又は比較化合物Ref-5を含む有機EL素子(11)よりも、寿命が長いことが分かる。

[0697] 合成例で合成した発明化合物

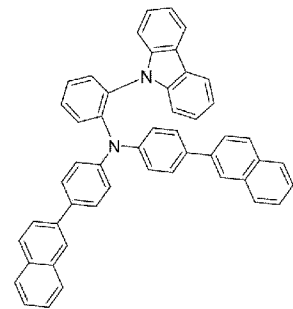
[化250]



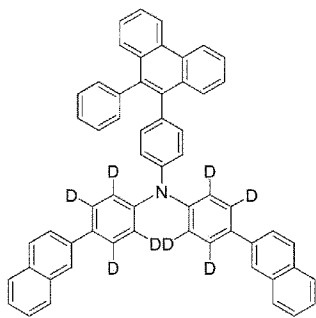
化合物 Inv-1



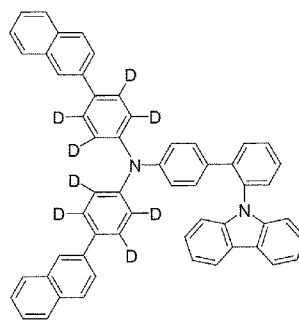
化合物 Inv-2



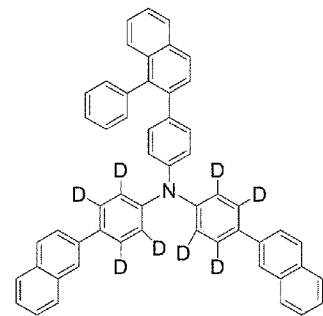
化合物 Inv-3



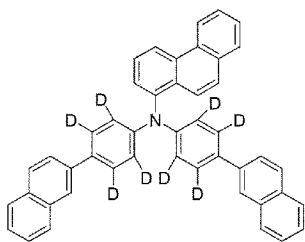
化合物 Inv-4



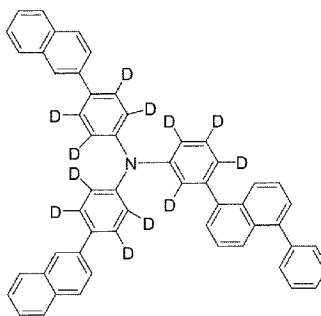
化合物 Inv-5



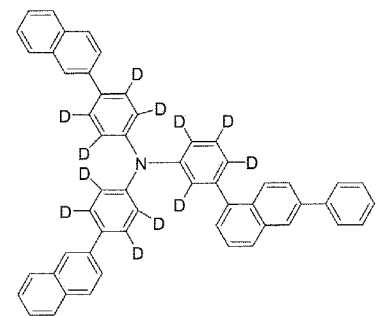
化合物 Inv-6



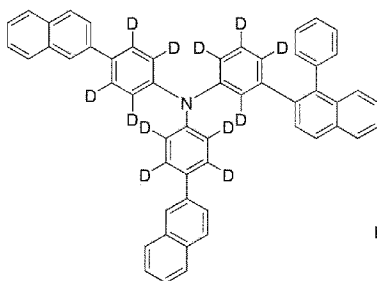
化合物 Inv-7



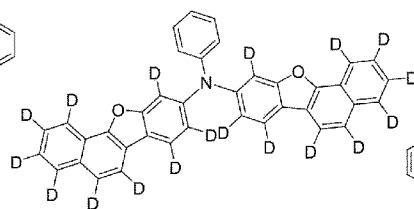
化合物 Inv-8



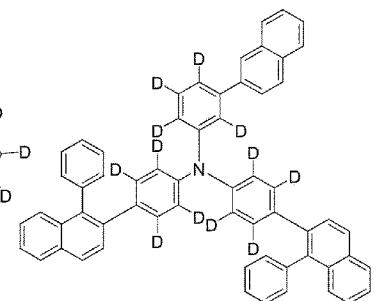
化合物 Inv-9



化合物 Inv-10



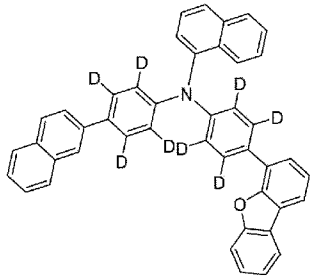
化合物 Inv-11



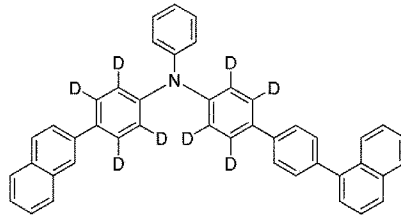
化合物 Inv-12

[0698]

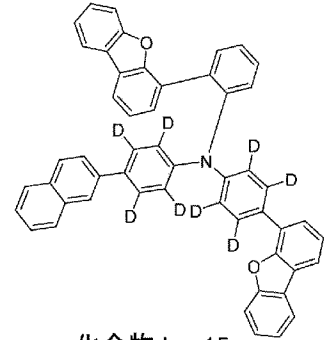
[化251]



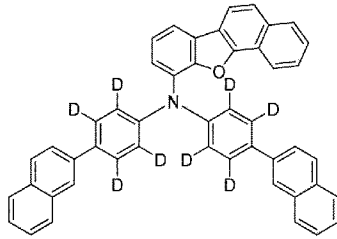
化合物 Inv-13



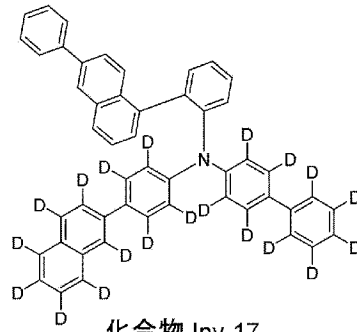
化合物 Inv-14



化合物 Inv-15



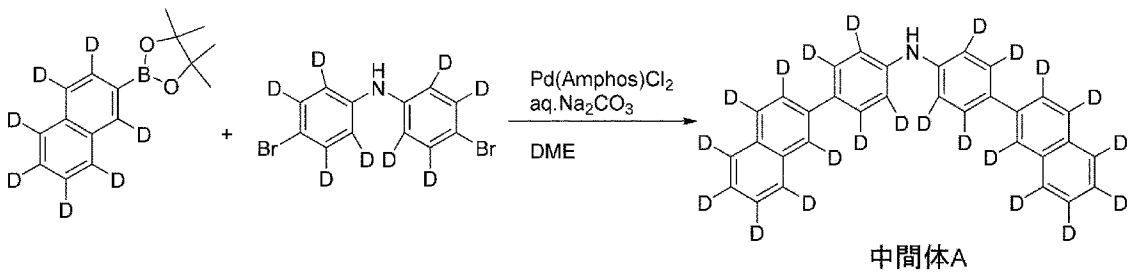
化合物 Inv-16



化合物 Inv-17

[0699] 中間体合成例 1 : 中間体 A の合成

[化252]



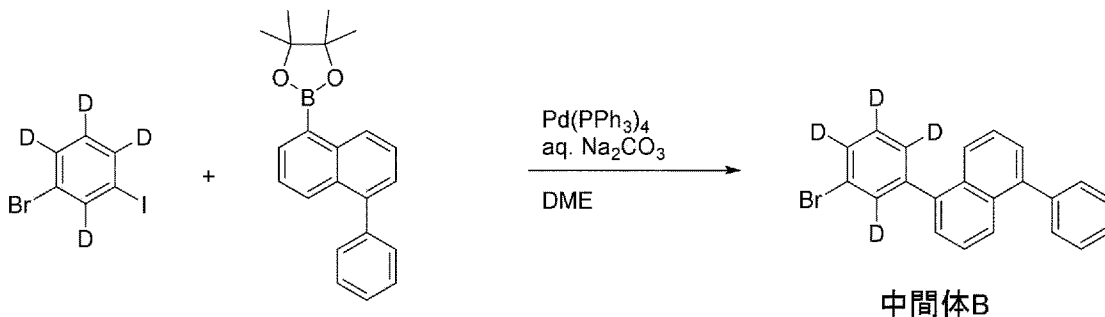
中間体A

[0700] アルゴン雰囲気下、4, 4, 5, 5-テトラメチル-2-(2-ナフタレニル-1, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d7)-1, 3, 2-ジオキサボロラン (原料1) 15.7 g (60.0 mmol)、4-ブロモ-N-(4-ブロモフェニル-2, 3, 5, 6-d4)-ベンゼン-2, 3, 5, 6-d4-アミン (原料2) 10.1 g (30.0 mmol)、ビス(ジ-tert-ブチル(4-ジメチルアミノフェニル)ホスフィン)ジクロロパラジウム(II) 0.673 g (0.9 mmol)、2M炭酸ナトリウム水溶液 45 mL、DME(1, 2-ジメトキシエタン) 200 mLの混合物を7時間沸点還流した。反応液を室温に冷却し、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、11.7 gの白色固体である中間体Aを得た。収率は88%であった。

[0701] 中間体合成例2：中間体Bの合成

[化253]



[0702] アルゴン雰囲気下、1-ブロモ-3-ヨードベンゼン-2,3,4,6-d<sub>4</sub> (原料1) 10.5 g (36.6 mmol)、4,4,5,5-テトラメチル-2-(5-フェニル-1-ナフタレニル)-1,3,2-ジオキサボロラン (原料2) 11.0 g (33.3 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 0.770 g (0.67 mmol)、2M炭酸ナトリウム水溶液 50 mL、DME (1,2-ジメトキシエタン) 222 mLの混合物を7時間沸点還流した。反応液を室温に冷却し、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、7.33 gの白色固体である中間体Bを得た。収率は61%であった。

[0703] 中間体合成例3：中間体Cの合成

中間体合成例2において、原料1及び2を表3に記載の化合物及び量としたこと以外は同様の操作を行い、中間体Cを得た。中間体Cの収率を表3に示す。

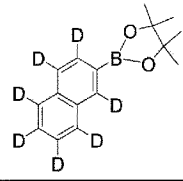
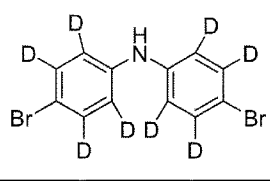
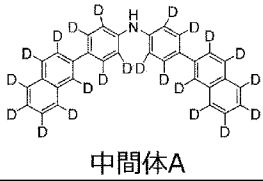
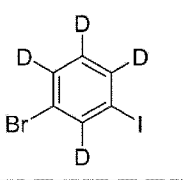
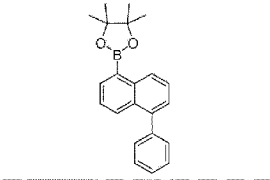
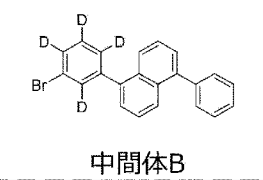
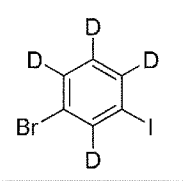
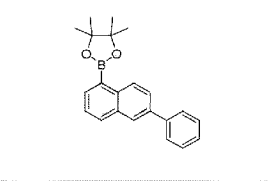
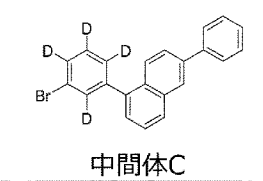
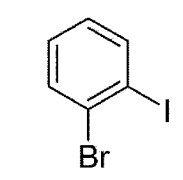
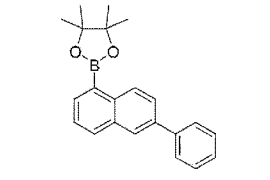

[0704] 中間体合成例4：中間体Dの合成

中間体合成例2において、原料1及び2を表3に記載の化合物及び量としたこと以外は同様の操作を行い、中間体Dを得た。中間体Dの収率を表3に示す。

[0705]

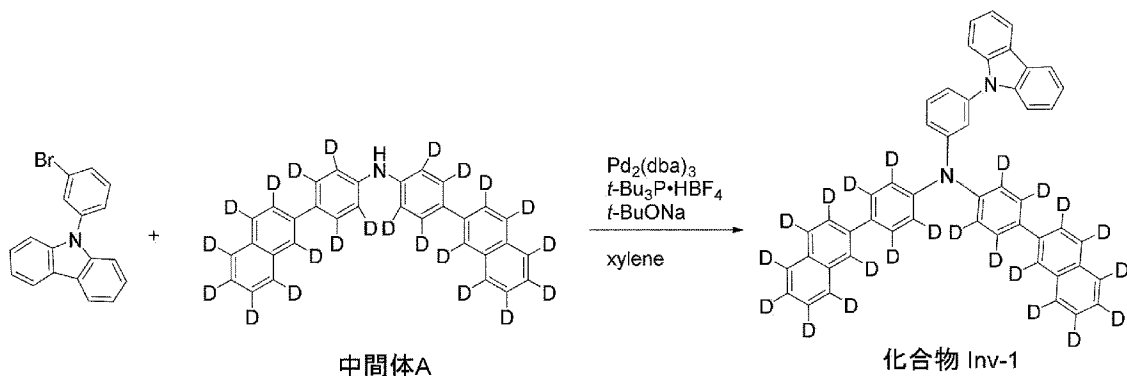
[表3]

表3

	原料1	原料2	中間体	収率(%)
中間体合成例1			 中間体A	88
	15.7g(60.0mmol)	10.1g(30.0mmol)	11.7g	
中間体合成例2			 中間体B	61
	10.5 g(36.6 mmol)	11.0 g(33.3 mmol)	7.33 g	
中間体合成例3			 中間体C	65
	5.76 g(17.4 mmol)	5.00 g(17.4mmol)	4.71 g	
中間体合成例4			 中間体D	72
	4.92 g(17.4 mmol)	5.00 g(17.4mmol)	4.50 g	

[0706] 合成例1 : 化合物 Inv-1 の合成

[化254]



[0707] アルゴン雰囲気下、9-(3-ブロモフェニル)-9H-カルバゾール(中間体1) 3.22g(10.0mmol)、中間体A(中間体2) 4.44g(10.0mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラ

ジウム (0) 0.183 g (0.2 mmol)、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート 0.232 g (0.8 mmol)、ナトリウム-tert-ブトキシド 1.35 g (14.0 mmol)、キシレン 67 mL の混合物を 110°C にて 7 時間攪拌した。反応液を室温に冷却したのち、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及び再結晶にて精製し、5.14 g の白色固体を得た。収率は 73% であった。

得られたものは、マスペクトル分析の結果、化合物 In v-1 であり、分子量 684.97 に対し  $m/e = 685$  であった。

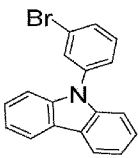
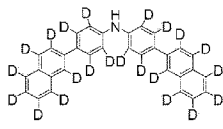
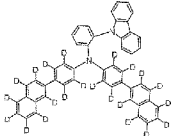
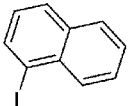
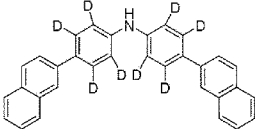
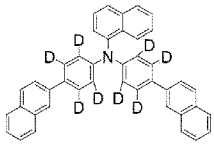
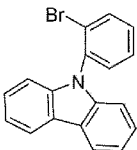
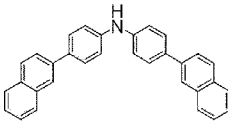
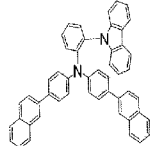
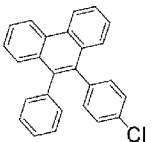
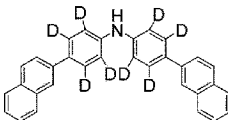
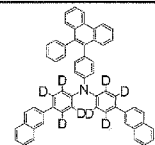
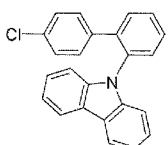
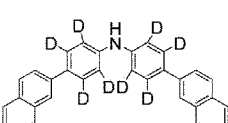
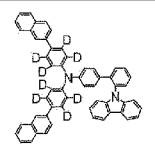
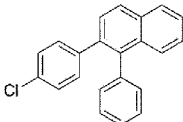
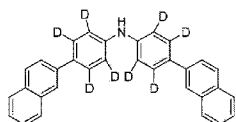
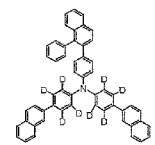
[0708] 合成例 2 ~ 17 : 発明化合物 In v-2 ~ In v-17 の合成

合成例 1 において、中間体 1 及び 2 を表 4 ~ 6 に記載の化合物及び量としたこと以外は同様の操作を行い、発明化合物 In v-2 ~ In v-17 を得た。発明化合物 In v-2 ~ In v-17 のそれぞれの収率を表 4 ~ 6 に示す。

[0709]

[表4]

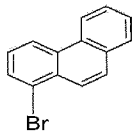
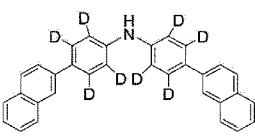
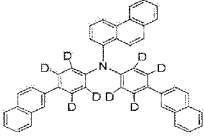

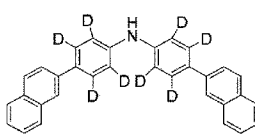
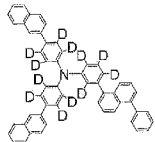
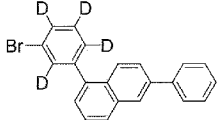
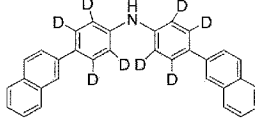
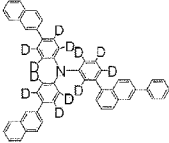
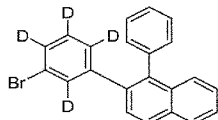
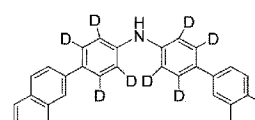
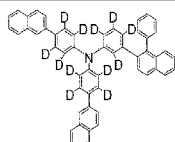
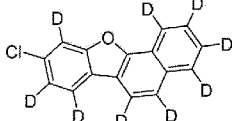
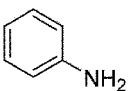
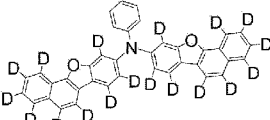
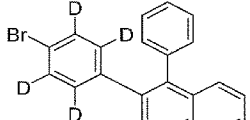
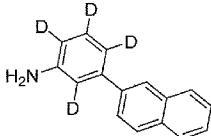
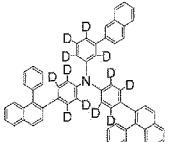
表4

	中間体1	中間体2	発明化合物	収率(%)
合成例1		 中間体A	 化合物 Inv-1	75
	3.22g(10.0mmol)	4.44g(10.0mmol)	5.14g	
合成例2		 中間体A	 化合物 Inv-2	62
	2.54(10.0mmol)	4.30g(10.0mmol)	4.83g	
合成例3		 中間体A	 化合物 Inv-3	70
	3.22(10.0mmol)	4.22g(10.0mmol)	4.63g	
合成例4		 中間体A	 化合物 Inv-4	59
	2.89g(10.0mmol)	4.30g(10.0mmol)	4.47g	
合成例5		 中間体A	 化合物 Inv-5	63
	3.54g(10.0mmol)	4.30g(10.0mmol)	4.70g	
合成例6		 中間体A	 化合物 Inv-6	70
	3.15g(10.0mmol)	4.30g(10.0mmol)	4.96g	

[0710]

[表5]

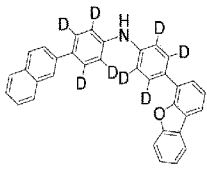
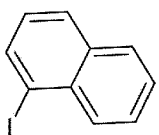
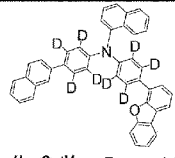
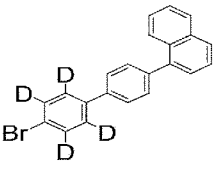
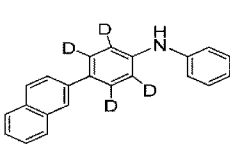
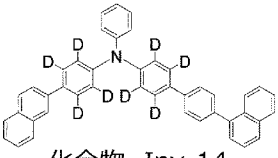
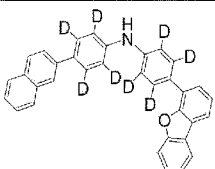
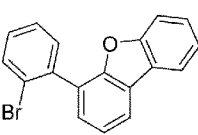
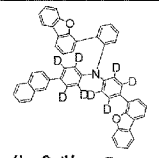
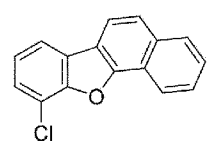
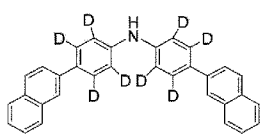
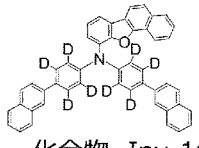
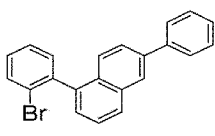
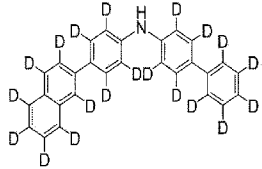
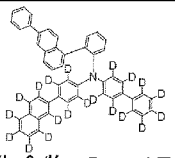
表5

	中間体1	中間体2	発明化合物	収率(%)
合成例7			 化合物 Inv-7	37
	4.83 g(18.8 mmol)	6.44 g(15.0 mmol)	3.36 g	
合成例8	 中間体B		 化合物 Inv-8	65
	7.34 g(20.2mmol)	8.68 g(20.2mmol)	9.36 g	
合成例9	 中間体C		 化合物 Inv-9	71
	4.71 g(13.0 mmol)	5.50 g(12.8 mmol)	6.48 g	
合成例10	 中間体C		 化合物 Inv-10	76
	12.0 g(33.0 mmol)	12.9 g(30.0 mmol)	16.2 g	
合成例11			 化合物 Inv-11	80
	15.7 g(60.0 mmol)	2.79 g(30.0 mmol)	13.0 g	
合成例12			 化合物 Inv-12	61
	22.0 g(60.0 mmol)	8.62 g(30.0 mmol)	14.4 g	

[0711]

[表6]

表6

	中間体1	中間体2	発明化合物	収率(%)
合成例13			 化合物 Inv-13	67
	4.7 g(10.0 mmol)	2.54 g(10.0 mmol)	3.98 g	
合成例14			 化合物 Inv-14	79
	3.63 g(10.0 mmol)	2.99 g(10.0 mmol)	9.36 g	
合成例15			 化合物 Inv-15	53
	4.70 g(10.0 mmol)	3.23 g (10.0 mmol)	3.77 g	
合成例16			 化合物 Inv-16	59
	2.52 g(10.0 mmol)	4.30 g(10.0mmol)	3.81 g	
合成例17			 化合物 Inv-17	55
	3.59 g(10.0 mmol)	3.92 g(10.0mmol)	3.68 g	

## 符号の説明

[0712] 1、11、12 有機EL素子

2 基板

3 陽極

4 陰極

5 発光層

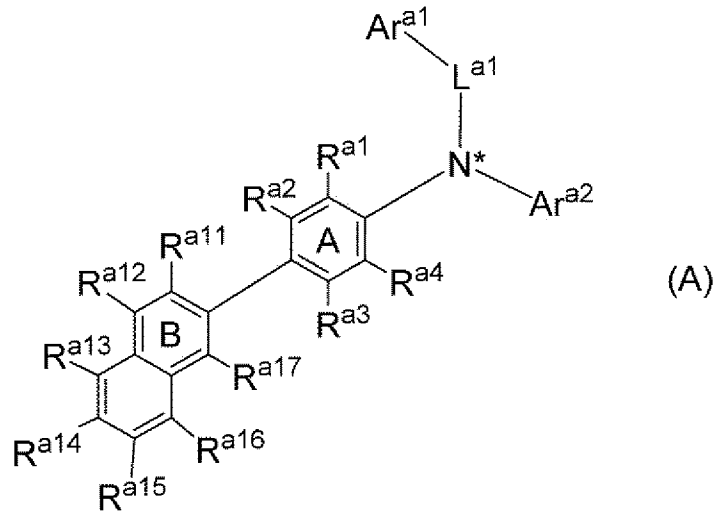
5a 第1発光層

- 5 b 第2発光層
- 6 正孔輸送帯域（正孔輸送層）
  - 6 a 正孔注入層
  - 6 b 第1正孔輸送層
  - 6 c 第2正孔輸送層
  - 6 d 第3正孔輸送層
- 7 電子輸送帯域（電子輸送層）
  - 7 a 第1電子輸送層
  - 7 b 第2電子輸送層
- 10、20、30 発光ユニット

## 請求の範囲

[請求項1] 下記式 (A) で表される化合物。

[化1]



(式 (A) 中、

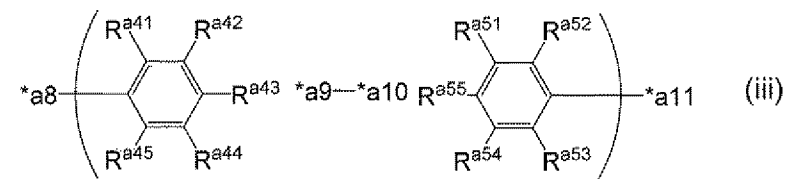
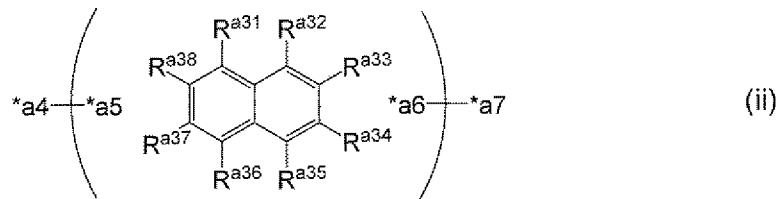
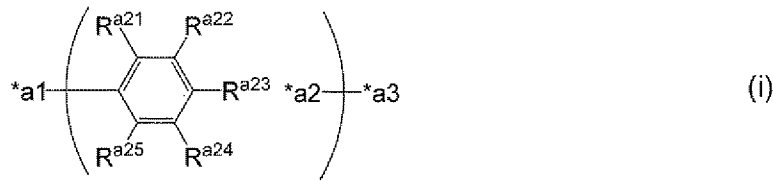
$N^*$ は中心窒素原子である。

$L^{a1}$ は、単結合、又は下記式 (i) ~ (iii) で表される基であり、

$L^{a1}$ が単結合であるとき、 $Ar^{a1}$ は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のカルbazリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基、又は置換もしくは無置換の1-フェナントリル基であり、

$L^{a1}$ が下記式 (i) ~ (iii) で表される基であるとき、 $Ar^{a1}$ は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のカルbazリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラニル基、又は置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフェニル基である。

[化2]



(式 (i) ~ (iii) 中、

R<sup>a21</sup> ~ R<sup>a25</sup> から選ばれる 1 つは \*a2 に結合する単結合であり

、

R<sup>a31</sup> ~ R<sup>a38</sup> から選ばれる 1 つは \*a5 に結合する単結合であり、R<sup>a31</sup> ~ R<sup>a38</sup> から選ばれる他の 1 つは \*a6 に結合する単結合であり、R<sup>a41</sup> ~ R<sup>a45</sup> から選ばれる 1 つは \*a9 に結合する単結合であり、R<sup>a51</sup> ~ R<sup>a55</sup> から選ばれる他の 1 つは \*a10 に結合する単結合である。

前記単結合ではない R<sup>a21</sup> ~ R<sup>a25</sup>、前記単結合ではない R<sup>a31</sup> ~ R<sup>a38</sup>、前記単結合ではない R<sup>a41</sup> ~ R<sup>a45</sup>、及び前記単結合ではない R<sup>a51</sup> ~ R<sup>a55</sup> は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、-Si (R<sub>901</sub>) (R<sub>902</sub>) (R<sub>903</sub>)、-O- (R<sub>904</sub>)、-S- (R<sub>905</sub>)、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は無置換の環

形成原子数5～50の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{905}$ 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2個以上存在する場合、2個以上の $R_{901}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

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

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

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

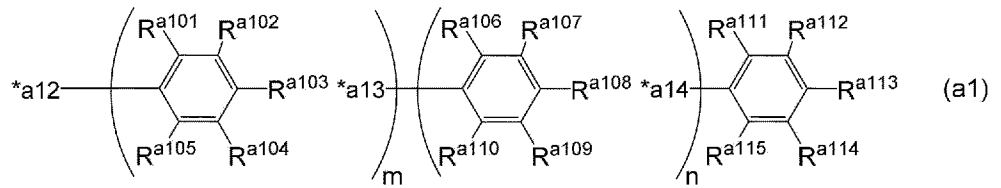
\*a1、\*a4、及び\*8は、中心窒素原子N\*への結合位置を表し、

\*a3、\*a7、及び\*11は、 $Ar^{a1}$ への結合位置を表す。

前記単結合ではない $R^{a21} \sim R^{a25}$ 、前記単結合ではない $R^{a31} \sim R^{a38}$ 、前記単結合ではない $R^{a41} \sim R^{a45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{a51} \sim R^{a55}$ 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。)

$Ar^{a2}$ は、下記式(a1)～(a3)のいずれかで表される基である。

[化3]



(式 (a1) 中、

\*a12 は、中心窒素原子N\*への結合位置を表す。

R<sup>a101</sup>~R<sup>a105</sup>から選ばれる1つは\*a13に結合する単結合であり、R<sup>a106</sup>~R<sup>a110</sup>から選ばれる1つは\*a14に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>a101</sup>~R<sup>a105</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>a106</sup>~R<sup>a110</sup>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、無置換の環形成炭素数6~12のアリール基、又は無置換の環形成炭素数5~12の複素環基である。

前記単結合ではないR<sup>a101</sup>~R<sup>a105</sup>から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成せず、

前記単結合ではないR<sup>a106</sup>~R<sup>a110</sup>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<sup>a111</sup>~R<sup>a115</sup>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の複素環基である。

R<sup>a111</sup>~R<sup>a115</sup>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。

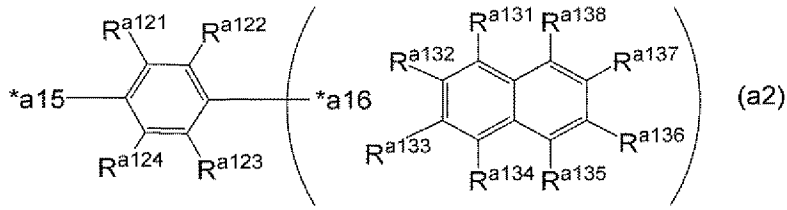
mは0又は1であり、nは0又は1である。

m=0、n=0の場合、\*a14が\*a12を表し、

m=0、n=1の場合、\*a13が\*a12を表し、

m=1、n=0の場合、\*a14が\*a13を表す。) )

[化4]



(式 (a 2) 中、

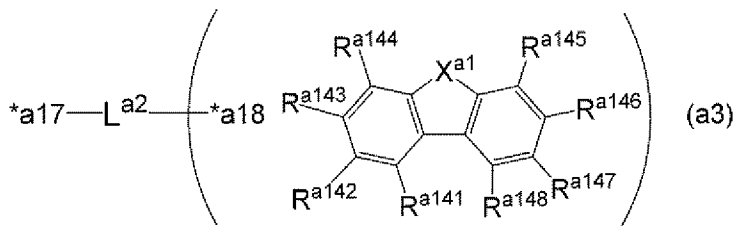
\* a 1 5 は、中心窒素原子 N\* への結合位置を表す。

R a 1 3 1 ~ R a 1 3 8 から選ばれる 1 つは \* a 1 6 に結合する単結合である。

R a 1 2 1 ~ R a 1 2 4、及び前記単結合ではない R a 1 3 1 ~ R a 1 3 8 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 ~ 1 0 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 2 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 1 3 の複素環基である。

R a 1 2 1 ~ R a 1 2 4、及び前記単結合ではない R a 1 3 1 ~ R a 1 3 8 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5]



(式 (a 3) 中、

\* a 1 7 は、中心窒素原子 N\* への結合位置を表す。

L a 2 は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 3 0 の 2 価の複素環基である。

X a 1 は、酸素原子又は硫黄原子である。

R a 1 4 1 ~ R a 1 4 8 から選ばれる 1 つは \* a 1 8 に結合する単結合である。

前記単結合ではない  $R^{a141} \sim R^{a148}$  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 の複素環基である。

前記単結合ではない  $R^{a141} \sim R^{a148}$  から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環構造を形成しなくてもよい。）

$R^{a1} \sim R^{a4}$  は、水素原子である。

$R^{a11} \sim R^{a17}$  は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基であり、

前記  $R^{a11} \sim R^{a17}$  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。

環 A と環 B は架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

環 A と環 B が架橋する場合、

前記環 A と前記環 B が架橋して形成される環構造は少なくとも 1 つの重水素原子を有し、

環 A と環 B が架橋しない場合、

$R^{a1} \sim R^{a4}$  から選ばれる少なくとも 1 つは重水素原子である。）

[請求項2]  $A r^{a2}$  は、少なくとも 1 つの重水素原子を有する、請求項 1 に記載の化合物。

[請求項3]  $A r^{a2}$  は、前記式 (a 2) で表される基である、請求項 1 又は 2 に記載の化合物。

[請求項4]  $R^{a132}$ 、 $R^{a133}$ 、 $R^{a136}$ 、及び  $R^{a137}$  から選ばれる 1 つは \* a 1 6 に結合する単結合である、請求項 3 に記載の化合物。

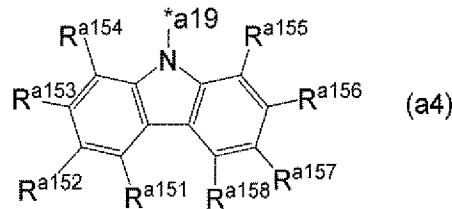
[請求項5]  $R^{a121} \sim R^{a124}$  から選ばれる少なくとも 1 つは重水素原子である、請求項 1～4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

[請求項6]  $L^{a1}$  は、単結合であり、 $A r^{a1}$  は、置換もしくは無置換のナフチル基である、請求項 1～5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

[請求項7]  $L^{a1}$ は、前記式(i)で表される基であり、 $Ar^{a1}$ は、置換もしくは無置換のカルbazリル基である、請求項1～5のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項8]  $Ar^{a1}$ は、下記式(a4)で表される基である、請求項1～5、及び7のいずれか1項に記載の化合物。

[化6]



(式(a4)中、

\*a19は、 $L^{a1}$ への結合位置を表す。

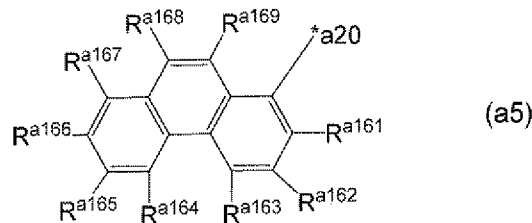
$R^{a151} \sim R^{a158}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～10のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～13の複素環基である。

$R^{a151} \sim R^{a158}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず、したがって環構造を形成しない。)

[請求項9]  $Ar^{a1}$ は、置換もしくは無置換の1-フェナントリル基である、請求項1～5のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項10]  $Ar^{a1}$ は、下記式(a5)で表される基である、請求項1～5、及び9のいずれか1項に記載の化合物。

[化7]



(式(a5)中、

\*a20は、 $L^{a1}$ への結合位置を表す。

$R^{a161} \sim R^{a169}$ 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の複素環基である。

$R^{a161} \sim R^{a169}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず、したがって環構造を形成しない。)

[請求項11]  $R^{a161} \sim R^{a169}$ は、水素原子である、請求項10に記載の化合物。

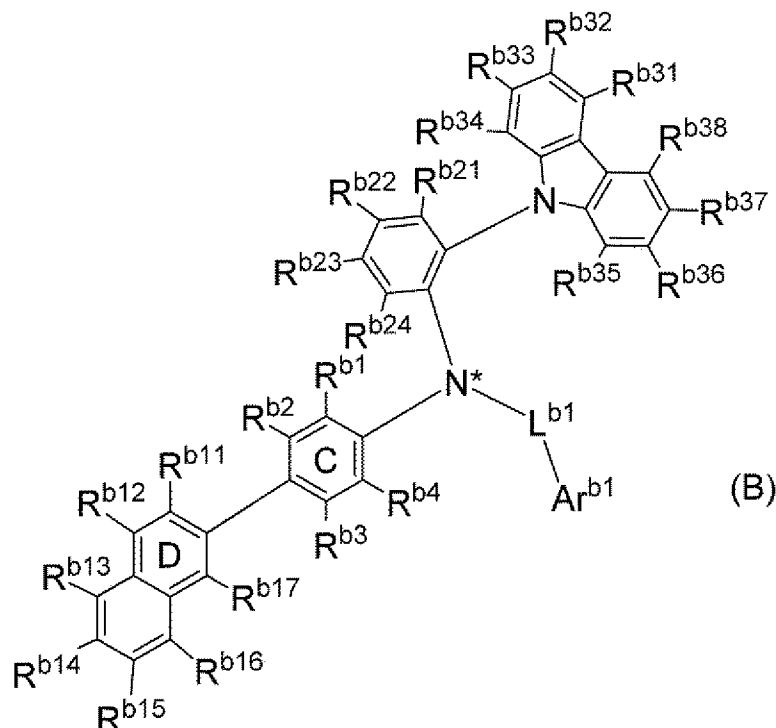
[請求項12]  $R^{a22}$ 又は $R^{a24}$ は\* a 2に結合する単結合である、請求項1～5、7及び8のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項13]  $R^{a1} \sim R^{a4}$ は全て重水素原子であり、 $Ar^{a2}$ は、前記式(a 2)で表される基であり、 $R^{a121} \sim R^{a124}$ は全て重水素原子である、請求項1～12のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項14] 水素原子が、全て重水素原子である、請求項1～13のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項15] 下記式(B)で表される化合物。

[化8]



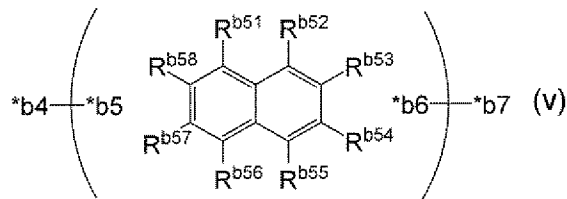
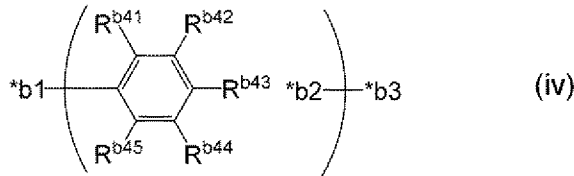
(式 (B) 中、

N\*は中心窒素原子である。

L<sup>b1</sup>は、単結合、下記式 (iv) 又は (v) で表される基である

。

[化9]



(式 (iv) 及び (v) 中、

R<sup>b41</sup>～R<sup>b45</sup>から選ばれる1つは\*b2に結合する単結合であり

、

R<sup>b51</sup>～R<sup>b58</sup>から選ばれる1つは\*b5に結合する単結合であり

、R<sup>b51</sup>～R<sup>b58</sup>から選ばれる他の1つは\*b6に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>b41</sup>～R<sup>b45</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>b51</sup>～R<sup>b58</sup>は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数1～50のアルキル基、無置換の炭素数2～50のアルケニル基、無置換の炭素数2～50のアルキニル基、無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、-Si(R<sub>901</sub>)(R<sub>902</sub>)(R<sub>903</sub>)、-O-(R<sub>904</sub>)、-S-(R<sub>905</sub>)、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R<sub>901</sub>～R<sub>905</sub>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2個以上存在する場合、2個以上の $R_{901}$ は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

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

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

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

\*b1、及び\*b4は、中心窒素原子N\*への結合位置を表し、

\*b3、及び\*b7は、 $A_{r^{b1}}$ への結合位置を表す。

前記単結合ではない $R^{b41} \sim R^{b45}$ 、及び前記単結合ではない $R^{b51} \sim R^{b58}$ 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。)

$A_{r^{b1}}$ 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の複素環基である。

$R^{b1} \sim R^{b4}$ は、水素原子である。

$R^{b11} \sim R^{b17}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基であり、

前記 $R^{b11} \sim R^{b17}$ 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。

環Cと環Dは架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

$R^{b21} \sim R^{b24}$ 及び $R^{b31} \sim R^{b38}$ は、それぞれ独立して、水素原子

、無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、 $-O-(R_{904})$ 、 $-S-(R_{905})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{905}$  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 2 個以上存在する場合、2 個以上の  $R_{901}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

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

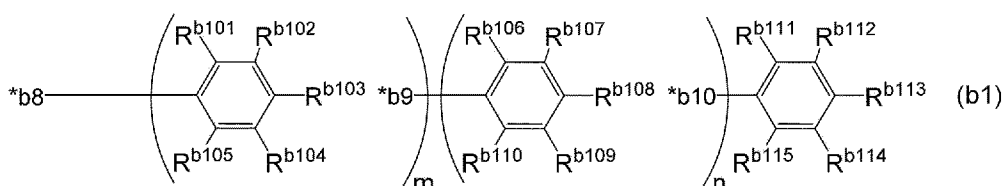
$R_{904}$  が 2 個以上存在する場合、2 個以上の  $R_{904}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

[請求項16]

$Ar^{b1}$  は、下記式 (b1)～(b6) のいずれかで表される基である、請求項 15 に記載の化合物。

[化10]



(式 (b1) 中、

\*b8はL<sup>b1</sup>への結合位置である。

R<sup>b101</sup>～R<sup>b105</sup>から選ばれる1つは\*b9に結合する単結合であり、R<sup>b106</sup>～R<sup>b110</sup>から選ばれる1つは\*b10に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>b101</sup>～R<sup>b105</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>b106</sup>～R<sup>b110</sup>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<sup>b101</sup>～R<sup>b105</sup>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<sup>b106</sup>～R<sup>b110</sup>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<sup>b111</sup>～R<sup>b115</sup>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の複素環基である。

R<sup>b111</sup>～R<sup>b115</sup>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。

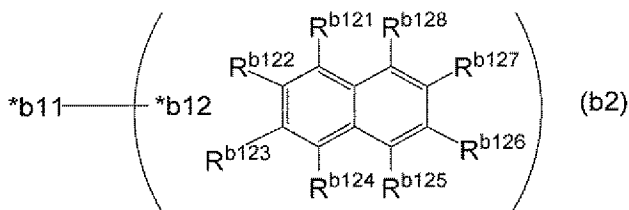
mは0、1又は2であり、nは0又は1である。

m=0、n=0の場合、\*b10が\*b8を表す。

m=0、n=1の場合、\*b9が\*b8を表す。

m=1、n=0の場合、\*b10が\*b9を表す。)

[化11]



(式 (b2) 中、

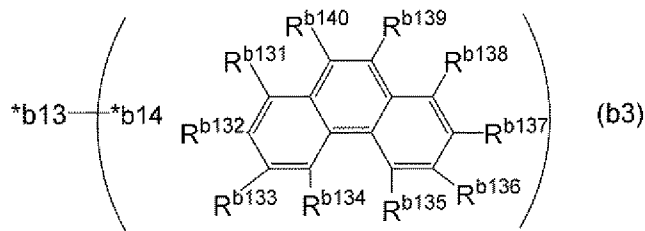
\*b11はL<sup>b1</sup>への結合位置である。

R<sup>b121</sup>～R<sup>b128</sup>から選ばれる1つは\*b12に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>b121</sup>～R<sup>b128</sup>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。

前記単結合ではないR<sup>b121</sup>～R<sup>b128</sup>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12]



(式 (b3) 中、

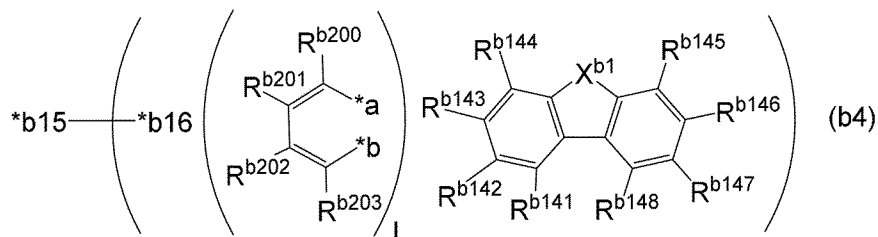
\*b13はL<sup>b1</sup>への結合位置である。

R<sup>b131</sup>～R<sup>b140</sup>から選ばれる1つは\*b14に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>b131</sup>～R<sup>b140</sup>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。

前記単結合ではないR<sup>b131</sup>～R<sup>b140</sup>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13]



(式 (b4) 中、

\*b 1 5 はL<sup>b1</sup>への結合位置である。

X<sup>b1</sup>は酸素原子、硫黄原子、C R<sup>A</sup> R<sup>B</sup>、又はN R<sup>C</sup>である。

R<sup>A</sup>及びR<sup>B</sup>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1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、又は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、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造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。

R<sup>C</sup>は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基である。

lは0又は1である。

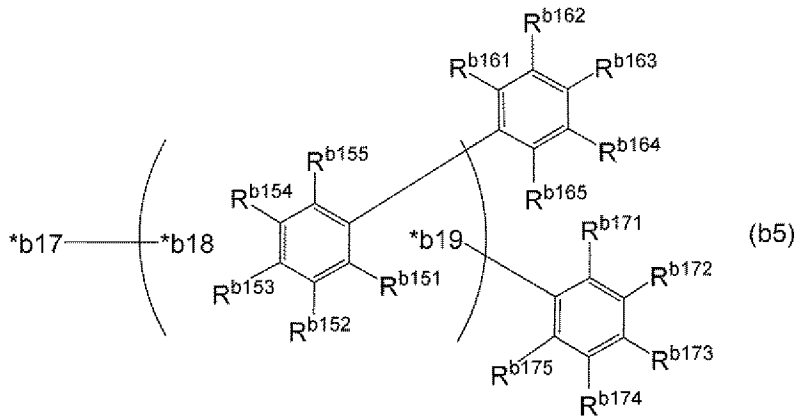
lが0のとき、R<sup>A</sup>、R<sup>B</sup>、R<sup>C</sup>、及びR<sup>b141</sup>～R<sup>b148</sup>から選ばれる1つは\*b 1 6に結合する単結合であるか、又は、R<sup>A</sup>もしくはR<sup>B</sup>が表し得る置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、R<sup>A</sup>もしくはR<sup>B</sup>が互いに結合して形成し得る置換もしくは無置換の環構造、又はR<sup>C</sup>が表し得る置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基が、単結合を介して\*b 1 6に結合する。

lが1のとき、R<sup>b141</sup>とR<sup>b142</sup>、R<sup>b142</sup>とR<sup>b143</sup>、又はR<sup>b143</sup>とR<sup>b144</sup>の一方が\*aに結合する単結合、他方が\*bに結合する単結合であり、\*a及び\*bに結合する単結合ではないR<sup>b141</sup>～R<sup>b144</sup>、R<sup>b145</sup>～R<sup>b148</sup>、R<sup>A</sup>、R<sup>B</sup>、R<sup>C</sup>、及びR<sup>b200</sup>～R<sup>b203</sup>から選ばれる1つは\*b 1 6に結合する単結合であるか、又は、R<sup>A</sup>もしくはR<sup>B</sup>が表し得る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R<sup>A</sup>もしくはR<sup>B</sup>が互いに結合して形成し得る置換もしくは無置換の環構造、又はR<sup>C</sup>が表し得る置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基が、単結合を介して\*b 1 6に結合する。

前記単結合ではない $R^{b141} \sim R^{b148}$ 、及び前記単結合ではない $R^{b200} \sim R^{b203}$ 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の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{b141} \sim R^{b148}$ 、及び前記単結合ではない $R^{b200} \sim R^{b203}$ 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14]



(式 (b5) 中、

\*b17は $L^{b1}$ への結合位置である。

$R^{b151} \sim R^{b155}$ から選ばれる1つは\*b18に結合する単結合であり、 $R^{b151} \sim R^{b155}$ から選ばれる他の1つは\*b19に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{b151} \sim R^{b155}$ 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る。

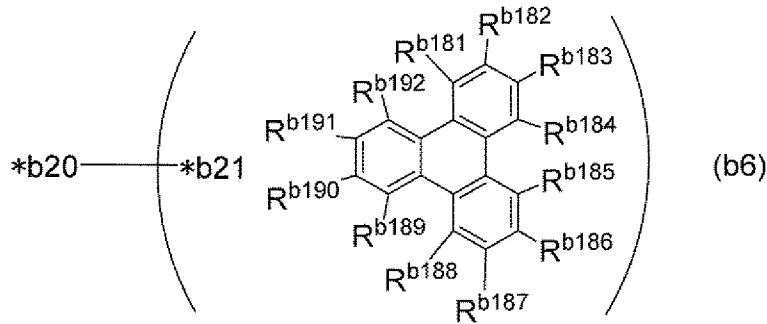
前記単結合ではない $R^{b151} \sim R^{b155}$ から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成しない。

$R^{b161} \sim R^{b165}$ 及び $R^{b171} \sim R^{b175}$ 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。

$R^{b161} \sim R^{b165}$ 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。

$R^{b171} \sim R^{b175}$ 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。)

[化15]



(式 (b6) 中、

\*b20は $L^{b1}$ への結合位置である。

$R^{b181} \sim R^{b192}$ から選ばれる1つは\*b21に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{b181} \sim R^{b192}$ 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。

前記単結合ではない $R^{b181} \sim R^{b192}$ 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。)

[請求項17]  $A^{r^{b1}}$ は、前記式 (b2) で表される基である、請求項16に記載の化合物。

[請求項18]  $R^{b122}$ 、 $R^{b123}$ 、 $R^{b126}$ 、及び $R^{b127}$ から選ばれる1つは\*b12に結合する単結合である、請求項16又は17に記載の化合物。

[請求項19]  $L^{b1}$ は、前記式 (iv) で表される基である、請求項15～18のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項20]  $R^{b43}$ は\*b2に結合する単結合である、請求項15～19のいづ

れか1項に記載の化合物。

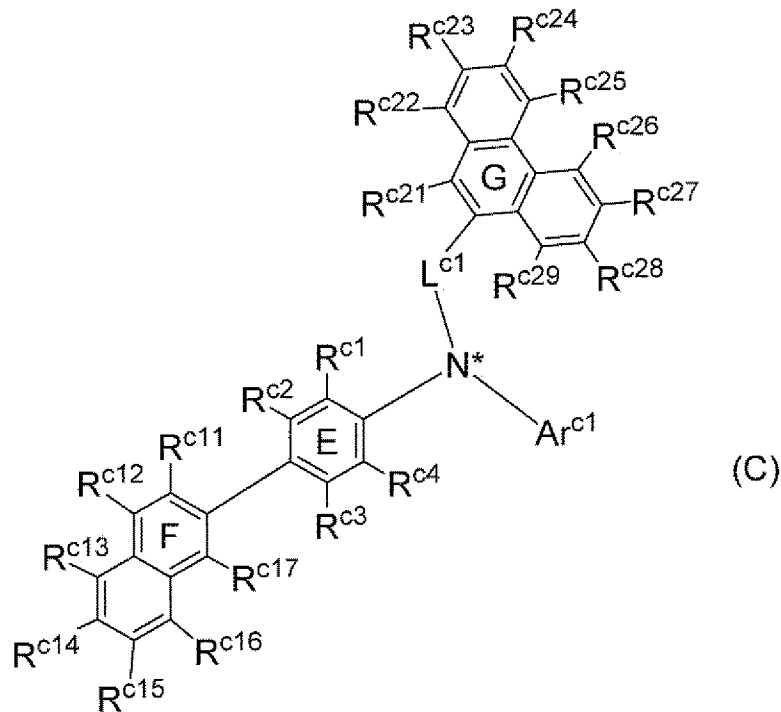
[請求項21] 前記式(B)で表される化合物が、少なくとも1つの重水素原子を含む、請求項15~20のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項22]  $R^{b1} \sim R^{b4}$ から選ばれる少なくとも1つは重水素原子であり、 $L^{b1}$ は少なくとも1つの重水素原子を有する、請求項15~21のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項23]  $R^{b1} \sim R^{b4}$ は全て重水素原子であり、 $L^{b1}$ が式(iv)で表される基であり、 $R^{b41} \sim R^{b45}$ が全て重水素原子である、請求項15~22のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項24] 下記式(C)で表される化合物。

[化16]

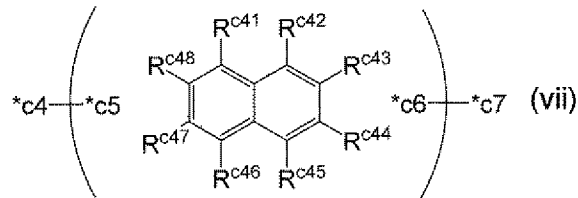
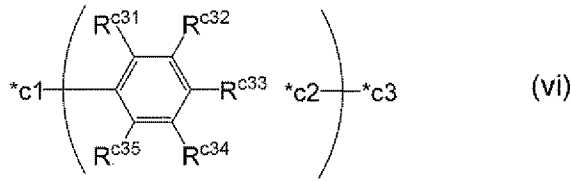


(式(C)中、

$N^*$ は中心窒素原子である。

$L^{c1}$ は、単結合、下記式(vi)又は(vii)で表される基である。

[化17]



(式 (v i) 及び (v i i) 中、

$\text{R}^{\text{c}31} \sim \text{R}^{\text{c}35}$  から選ばれる 1 つは  $^{\text{c}2}$  に結合する単結合であり

$\text{R}^{\text{c}41} \sim \text{R}^{\text{c}48}$  から選ばれる 1 つは  $^{\text{c}5}$  に結合する単結合であり

$\text{R}^{\text{c}41} \sim \text{R}^{\text{c}48}$  から選ばれる他の 1 つは  $^{\text{c}6}$  に結合する単結合である。

前記単結合ではない  $\text{R}^{\text{c}31} \sim \text{R}^{\text{c}35}$ 、及び前記単結合ではない  $\text{R}^{\text{c}41} \sim \text{R}^{\text{c}48}$  は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{901})(\text{R}_{902})(\text{R}_{903})$ 、 $-\text{O}-$  ( $\text{R}_{904}$ )、 $-\text{S}-$  ( $\text{R}_{905}$ )、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基であり、

$\text{R}_{901} \sim \text{R}_{905}$  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、

$\text{R}_{901}$  が 2 個以上存在する場合、2 個以上の  $\text{R}_{901}$  は、互いに同一

であるか、又は異なり、

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

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

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

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

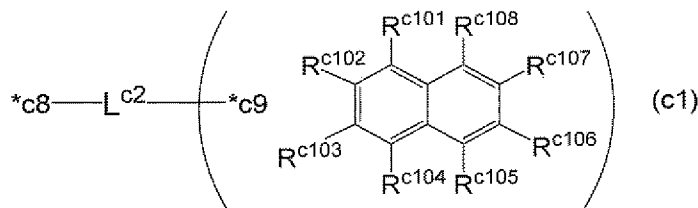
\*c1、及び\*c4は、中心窒素原子N\*への結合位置を表し、

\*c3、及び\*c7は、環Gへの結合位置を表す。

前記単結合ではない $R^{c31} \sim R^{c35}$ 、及び前記単結合ではない $R^{c41} \sim R^{c48}$ 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。) )

$A r^{c1}$ は、下記式(c1)又は(c2)で表される基である。

[化18]



(式(c1)中、

\*c8は、中心窒素原子N\*への結合位置を表す。

$L^{c2}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の2価の複素環基である。

$R^{c101} \sim R^{c108}$ から選ばれる1つは\*c9に結合する単結合である。

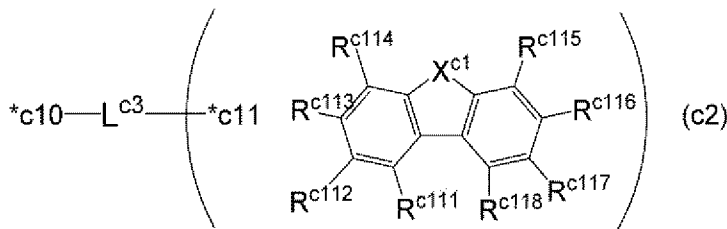
前記単結合ではない $R^{c101} \sim R^{c108}$ は、それぞれ独立して、水素

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の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{c101} \sim R^{c108}$ 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。

ただし、 $L^{c2}$ が置換もしくは無置換のフェニレン基であり、 $R^{c101}$ 、 $R^{c104}$ 、 $R^{c105}$ 及び $R^{c108}$ から選ばれる1つが $*c9$ に結合する単結合であるとき、 $L^{c2}$ が表す前記置換もしくは無置換のフェニレン基は、置換もしくは無置換の $o$ -フェニレン基、又は置換もしくは無置換の $m$ -フェニレン基である。)

[化19]



(式(c2)中、

$*c10$ は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表す。

$L^{c3}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基である。

$X^{c1}$ は、酸素原子又は硫黄原子である。

$R^{c111} \sim R^{c118}$ から選ばれる1つは $*c11$ に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{c111} \sim R^{c118}$ 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の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{c111} \sim R^{c118}$ から選ばれる隣接する2つは

、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環構造を形成しなくてもよい。)

$R^{c1} \sim R^{c4}$ は、水素原子である。

$R^{c11} \sim R^{c17}$ は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基であり、

前記 $R^{c11} \sim R^{c17}$ 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。

環Eと環Fは架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

$R^{c21}$ は、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基である。

$R^{c22} \sim R^{c29}$ 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の複素環基である。)

[請求項25]  $A r^{c1}$ は、前記式(c1)で表される基である、請求項24に記載の化合物。

[請求項26]  $R^{c102}$ 、 $R^{c103}$ 、 $R^{c106}$ 、及び $R^{c107}$ から選ばれる1つは\*c9に結合する単結合である、請求項24又は25に記載の化合物。

[請求項27]  $L^{c2}$ は、置換もしくは無置換のフェニレン基である、請求項24～26のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項28]  $L^{c2}$ は、置換もしくは無置換のp-フェニレン基である、請求項24～27のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項29]  $L^{c1}$ は、前記式(vi)で表される基である、請求項24～28のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項30]  $R^{c33}$ は\*c2に結合する単結合である、請求項24～29のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項31]  $R^{c21}$ は、置換もしくは無置換のフェニル基である、請求項24～

30のいずれか1項に記載の化合物。

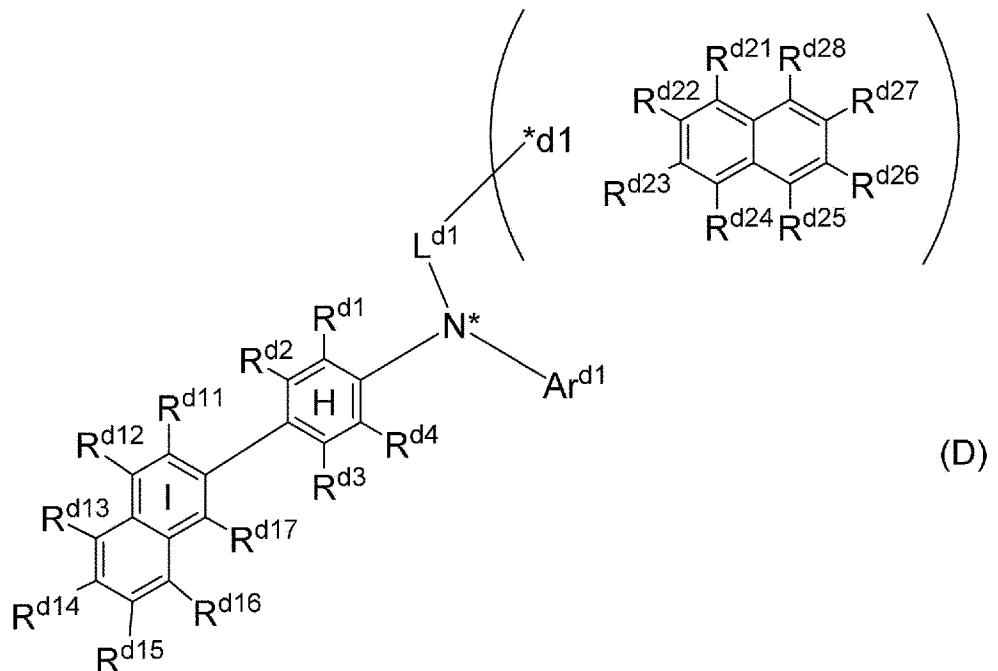
[請求項32] 前記式(C)で表される化合物が、少なくとも1つの重水素原子を含む、請求項24～31のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項33]  $R^{c1} \sim R^{c4}$ から選ばれる少なくとも1つは重水素原子であり、 $Ar^{c1}$ は、前記式(c1)で表される基であり、 $L^{c2}$ は少なくとも1つの重水素原子を有する、請求項24～32のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項34]  $R^{c1} \sim R^{c4}$ は全て重水素原子であり、 $Ar^{c1}$ は前記式(c1)で表される基であり、 $L^{c2}$ は無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基であり、該 $L^{c2}$ が表す無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基が有する水素原子が全て重水素原子である、請求項24～33のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項35] 下記式(D)で表される化合物。

[化20]

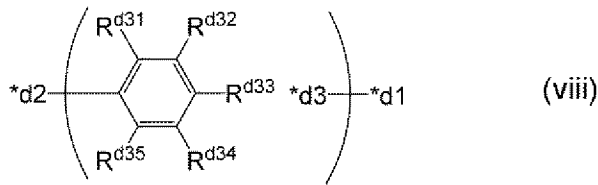


(式(D)中、

$N^*$ は中心窒素原子である。

$L^{d1}$ は、下記式(viii)で表される基である。

[化21]



(式 (viii) 中、

$R^{d31}$  及び  $R^{d35}$  から選ばれる 1 つは  $*d3$  に結合する単結合である。

前記単結合ではない  $R^{d31} \sim R^{d35}$  は、それぞれ独立して、水素原子、無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 、 $-O-(R_{904})$ 、 $-S-(R_{905})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{905}$  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 2 個以上存在する場合、2 個以上の  $R_{901}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

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

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

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

$R_{905}$  が 2 個以上存在する場合、2 個以上の  $R_{905}$  は、互いに同一

であるか又は異なる。

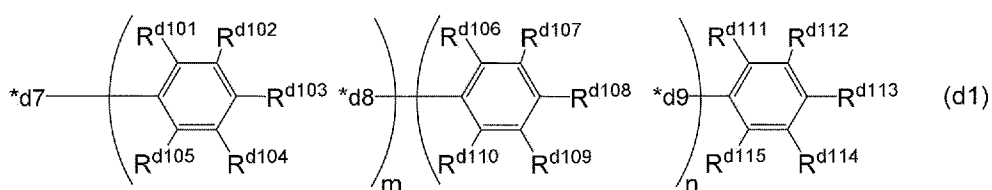
\*d2は、中心窒素原子N\*への結合位置を表し

\*d1は、R<sup>d21</sup>～R<sup>d28</sup>から選ばれる1つに結合する。

前記単結合ではないR<sup>d31</sup>～R<sup>d35</sup>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。)

A r<sup>d1</sup>は、下記式(d1)～(d3)のいずれかで表される基である。

[化22]



(式(d1)中、

\*d7は、中心窒素原子N\*への結合位置を表す。

R<sup>d101</sup>～R<sup>d105</sup>から選ばれる1つは\*d8に結合する単結合であり、R<sup>d106</sup>～R<sup>d110</sup>から選ばれる1つは\*d9に結合する単結合である。

前記単結合ではないR<sup>d101</sup>～R<sup>d105</sup>、及び前記単結合ではないR<sup>d106</sup>～R<sup>d110</sup>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、無置換の環形成炭素数6～12のアリール基、又は無置換の環形成炭素数5～12の複素環基である。

前記単結合ではないR<sup>d101</sup>～R<sup>d105</sup>から選ばれる隣接する2つは、互いに結合せず環を形成せず、

前記単結合ではないR<sup>d106</sup>～R<sup>d110</sup>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<sup>d111</sup>～R<sup>d115</sup>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の複素環基である。

$R^{d111} \sim R^{d115}$ 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。

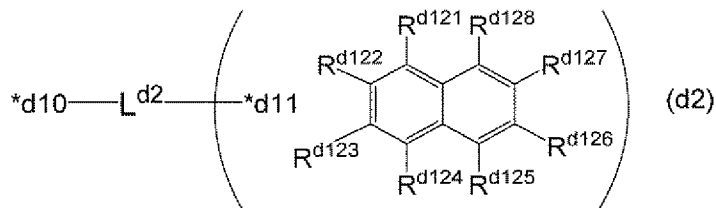
$m$ は0又は1であり、 $n$ は0又は1である。

$m=0$ 、 $n=0$ の場合、\*d9が\*d7を表し、

$m=0$ 、 $n=1$ の場合、\*d8が\*d7を表し、

$m=1$ 、 $n=0$ の場合、\*d9が\*d8を表す。)

[化23]



(式(d2)中、

\*d10は、中心窒素原子 $N^*$ への結合位置を表す。

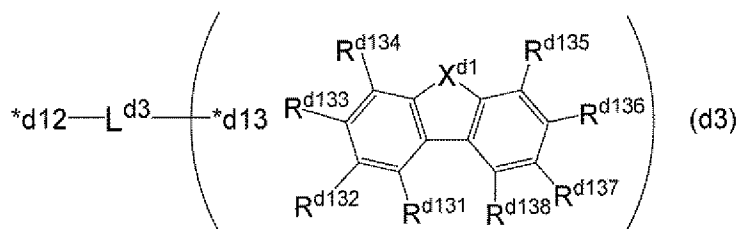
$L^{d2}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基である。

$R^{d121} \sim R^{d128}$ から選ばれる1つは\*d11に結合する単結合である。

前記単結合ではない $R^{d121} \sim R^{d128}$ 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の複素環基である。

前記単結合ではない $R^{d121} \sim R^{d128}$ 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24]



(式 (d 3) 中、

\* d 1 2 は、中心窒素原子 N\* への結合位置を表す。

L<sup>d 3</sup> は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 3 0 の 2 価の複素環基である。

X<sup>d 1</sup> は、酸素原子又は硫黄原子である。

R<sup>d 1 3 1</sup> ~ R<sup>d 1 3 8</sup> から選ばれる 1 つは \* a 1 4 に結合する単結合である。

前記単結合ではない R<sup>d 1 3 1</sup> ~ R<sup>d 1 3 8</sup> 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 ~ 1 0 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 2 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 1 3 の複素環基である。

前記単結合ではない R<sup>d 1 3 1</sup> ~ R<sup>d 1 3 8</sup> から選ばれる隣接する 2 つは、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合せず、したがって環構造を形成しなくてもよい。) )

R<sup>d 1</sup> ~ R<sup>d 4</sup> は、水素原子である。

R<sup>d 1 1</sup> ~ R<sup>d 1 7</sup> は、それぞれ独立して、水素原子、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基であり、

前記 R<sup>d 1 1</sup> ~ R<sup>d 1 7</sup> 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。

環 H と環 I は架橋してもよく、架橋しなくてもよい。

\* d 1 に結合する単結合ではない R<sup>d 2 1</sup> ~ R<sup>d 2 8</sup> は、それぞれ独立して、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 のアリール基であり、

\* d 1 に結合する単結合ではない R<sup>d 2 1</sup> ~ R<sup>d 2 8</sup> から選ばれる少なくとも 1 つは、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 のアリール基である。

[請求項 36]

A r<sup>d 1</sup> は、前記式 (d 2) で表される基である、請求項 3 3 ~ 3

5のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項37]  $L^{d2}$ は、置換もしくは無置換のフェニレン基である、請求項33～36のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項38]  $L^{d2}$ は、置換もしくは無置換のp-フェニレン基である、請求項33～37のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項39] 前記式(D)で表される化合物が、少なくとも1つの重水素原子を含む、請求項33～38のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項40]  $R^{d1} \sim R^{d4}$ から選ばれる少なくとも1つは重水素原子である、請求項33又は34に記載の化合物。

[請求項41]  $Ar^{d1}$ が、前記式(d2)で表される基であり、 $L^{d2}$ は少なくとも1つの重水素原子を有する、請求項33～40のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項42]  $R^{d1} \sim R^{d4}$ は全て重水素原子であり、 $Ar^{d1}$ が前記式(d2)で表される基であり、 $L^{d2}$ は無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基であり、該 $L^{d2}$ が表す無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基が有する水素原子が、全て重水素原子である、請求項33～41のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項43] 請求項1～42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44] 陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に有機層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該有機層が発光層を含み、該有機層の少なくとも1層が請求項1～42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45] 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44に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項46] 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正孔輸送層の一方又は

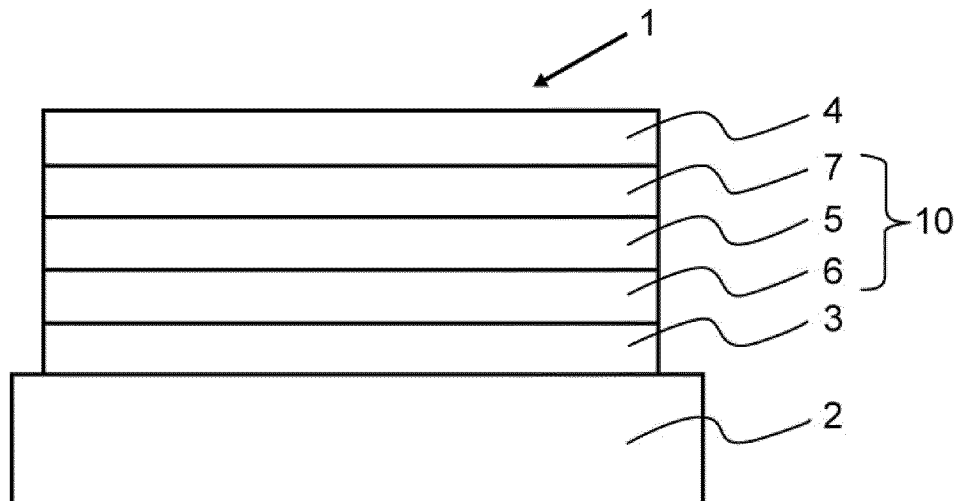
双方が前記化合物を含む請求項45に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項47] 前記発光層が蛍光ドーパント材料を含む、請求項44～46のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

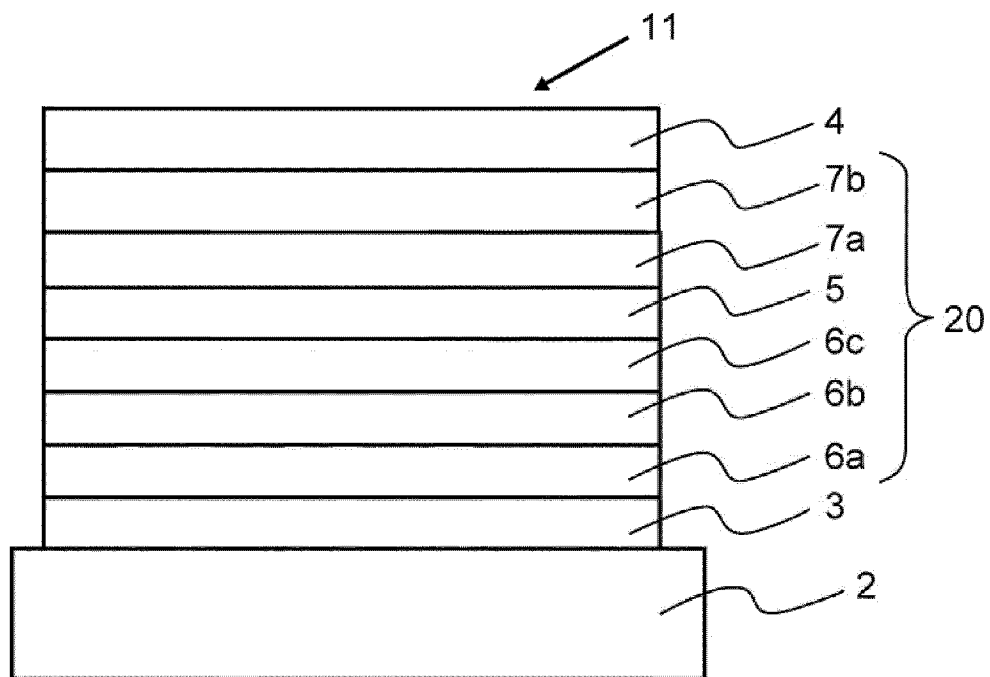
[請求項48] 前記発光層が燐光ドーパント材料を含む、請求項44～46のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項49] 請求項44～48のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、電子機器。

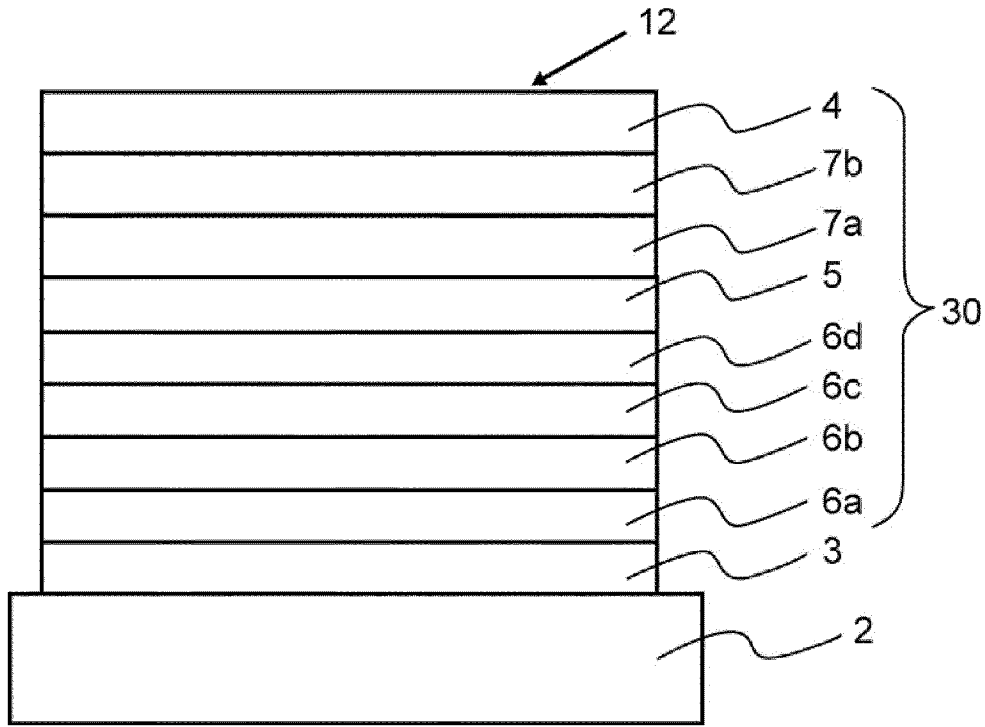
[図1]



[図2]



[図3]



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/024827

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b>		
<p><i>C07C 211/58</i>(2006.01)i; <i>C07C 211/54</i>(2006.01)i; <i>C07C 211/57</i>(2006.01)i; <i>C07C 211/61</i>(2006.01)i; <i>C07D 209/86</i>(2006.01)i; <i>C07D 307/77</i>(2006.01)i; <i>C07D 307/91</i>(2006.01)i; <i>C07D 405/12</i>(2006.01)i; <i>C07D 405/14</i>(2006.01)i; <i>C07D 409/12</i>(2006.01)i; <i>C07D 409/14</i>(2006.01)i; <i>C09K 11/06</i>(2006.01)i; <i>H10K 50/11</i>(2023.01)i; <i>H10K 50/12</i>(2023.01)i; <i>H10K 50/15</i>(2023.01)i; <i>H10K 50/16</i>(2023.01)i; <i>H10K 50/17</i>(2023.01)i; <i>H10K 50/18</i>(2023.01)i; <i>H10K 59/10</i>(2023.01)i; <i>H10K 85/60</i>(2023.01)i; <i>H10K 101/10</i>(2023.01)n</p> <p>FI: C07C211/58 CSP; C07D307/91; C07D307/77; C07D405/12; C07D405/14; C07D409/12; C07D409/14; C07C211/54; H10K85/60; H10K50/15; H10K50/12; C07C211/57; H10K50/17; H10K50/18; H10K50/11; H10K50/16; H10K50/17 171; C07C211/61; C09K11/06 690; C07D209/86 CSP; H10K59/10; H10K101:10</p>		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
<b>B. FIELDS SEARCHED</b>		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)		
C07C211/58; C07C211/54; C07C211/57; C07C211/61; C07D209/86; C07D307/77; C07D307/91; C07D405/12; C07D405/14; C07D409/12; C07D409/14; C09K11/06; H10K50/11; H10K50/12; H10K50/15; H10K50/16; H10K50/17; H10K50/18; H10K59/10; H10K85/60; H10K101/10		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
<p>Published examined utility model applications of Japan 1922-1996</p> <p>Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2024</p> <p>Registered utility model specifications of Japan 1996-2024</p> <p>Published registered utility model applications of Japan 1994-2024</p>		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)		
CAplus/REGISTRY (STN)		
<b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2022/071424 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 07 April 2022 (2022-04-07) claims, examples	1-49
X	WO 2022/230967 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 03 November 2022 (2022-11-03) claims, examples	1-49
X	WO 2022/071350 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 07 April 2022 (2022-04-07) claims, examples	1-49
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
<p>* Special categories of cited documents:</p> <p>“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance</p> <p>“D” document cited by the applicant in the international application</p> <p>“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date</p> <p>“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)</p> <p>“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means</p> <p>“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed</p> <p>“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention</p> <p>“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone</p> <p>“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art</p> <p>“&amp;” document member of the same patent family</p>		
Date of the actual completion of the international search		Date of mailing of the international search report
10 September 2024		24 September 2024
Name and mailing address of the ISA/JP		Authorized officer
Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan		Telephone No.

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/024827

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2022/250028 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 01 December 2022 (2022-12-01) claims, examples	1-49
X	US 2018/0226585 A1 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 09 August 2018 (2018-08-09) claims, examples	1-49
X	WO 2023/013575 A1 (HODOGAYA CHEMICAL CO., LTD.) 09 February 2023 (2023-02-09) claims, examples	1-49
X	KR 10-2020-0131929 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 25 November 2020 (2020-11-25) claims, examples	1-49
X	WO 2012/177006 A2 (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 27 December 2012 (2012-12-27) claims, examples	1-7, 12-14, 43-49
X	KR 10-2016-0035971 A (LG CHEMICAL LTD.) 01 April 2016 (2016-04-01) claims, examples	1-14, 24-49
X	WO 2016/208862 A1 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 29 December 2016 (2016-12-29) claims, examples	1-5, 12-14, 43-49
X	KR 10-2022-0158892 A (LT MAT CO., LTD.) 02 December 2022 (2022-12-02) claims, p. 32, examples	1-5, 12-14, 43-49
X	CN 114989021 A (CHANGCHUN HAIPURUNSI TECH CO., LTD.) 02 September 2022 (2022-09-02) claims, p. 49, examples	1-5, 12-14, 43-49
X	KR 10-2022-0147538 A (LG CHEMICAL LTD.) 03 November 2022 (2022-11-03) claims, p. 202, examples	1-5, 12-14, 43-49
X	CN 113816935 A (SHAANXI LIGHTE OPTOELECTRONICS MAT. CO., LTD.) 21 December 2021 (2021-12-21) claims, p. 38, examples	1-5, 7, 8, 12-23, 43-49
X	KR 10-2020-0081978 A (LG DISPLAY CO., LTD.) 08 July 2020 (2020-07-08) claims, p. 31, examples	1-5, 24-34, 43-49
X	KR 10-2020-0009971 A (DONGJIN SEMICHEM CO., LTD.) 30 January 2020 (2020-01-30) claims, p. 6, examples	1-5, 24-34, 43-49
X	KR 10-2012-0100031 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 12 September 2012 (2012-09-12) claims, p. 38, examples	24-34, 43-49

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
**Information on patent family members**

International application No.

**PCT/JP2024/024827**

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO	2022/071424	A1	07 April 2022	US 2023/0262999 A1 claims, examples EP 4238956 A1 CN 114599633 A KR 10-2023-0074655 A	
WO	2022/230967	A1	03 November 2022	CN 117222629 A KR 10-2024-0004323 A	
WO	2022/071350	A1	07 April 2022	US 2023/0008737 A1 claims, examples EP 4223743 A1 CN 114599637 A KR 10-2023-0078941 A	
WO	2022/250028	A1	01 December 2022	CN 117157276 A KR 10-2024-0012373 A	
US	2018/0226585	A1	09 August 2018	WO 2016/208862 A1 claims, examples KR 10-2017-0001830 A CN 108112250 A	
WO	2023/013575	A1	09 February 2023	CN 117598046 A KR 10-2024-0041870 A TW 202313933 A	
KR	10-2020-0131929	A	25 November 2020	(Family: none)	
WO	2012/177006	A2	27 December 2012	KR 10-1111406 B1 TW 201305106 A	
KR	10-2016-0035971	A	01 April 2016	(Family: none)	
WO	2016/208862	A1	29 December 2016	US 2018/0226585 A1 claims, examples KR 10-2017-0001830 A CN 108112250 A	
KR	10-2022-0158892	A	02 December 2022	EP 4349821 A1 claims, examples WO 2022/250244 A1 TW 202246227 A CN 117355510 A	
CN	114989021	A	02 September 2022	(Family: none)	
KR	10-2022-0147538	A	03 November 2022	US 2024/0164123 A1 claims, examples JP 2023-550374 A WO 2022/231319 A1 EP 4235830 A1 TW 202249275 A CN 116569674 A	
CN	113816935	A	21 December 2021	(Family: none)	
KR	10-2020-0081978	A	08 July 2020	US 2021/0280792 A1 claims, examples WO 2020/138874 A1	
KR	10-2020-0009971	A	30 January 2020	CN 110734379 A	
KR	10-2012-0100031	A	12 September 2012	(Family: none)	

<p>A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））</p> <p>C07C 211/58(2006.01)i; C07C 211/54(2006.01)i; C07C 211/57(2006.01)i; C07C 211/61(2006.01)i;                  C07D 209/86(2006.01)i; C07D 307/77(2006.01)i; C07D 307/91(2006.01)i; C07D 405/12(2006.01)i;                  C07D 405/14(2006.01)i; C07D 409/12(2006.01)i; C07D 409/14(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i;                  H10K 50/11(2023.01)i; H10K 50/12(2023.01)i; H10K 50/15(2023.01)i; H10K 50/16(2023.01)i;                  H10K 50/17(2023.01)i; H10K 50/18(2023.01)i; H10K 59/10(2023.01)i; H10K 85/60(2023.01)i;                  H10K 101/10(2023.01)n                  FI: C07C211/58 CSP; C07D307/91; C07D307/77; C07D405/12; C07D405/14; C07D409/12; C07D409/14;                  C07C211/54; H10K85/60; H10K50/15; H10K50/12; C07C211/57; H10K50/17; H10K50/18; H10K50/11;                  H10K50/16; H10K50/17 171; C07C211/61; C09K11/06 690; C07D209/86 CSP; H10K59/10; H10K101:10</p>														
<p>B. 調査を行った分野</p> <p>調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））</p> <p>C07C211/58; C07C211/54; C07C211/57; C07C211/61; C07D209/86; C07D307/77; C07D307/91; C07D405/12;                  C07D405/14; C07D409/12; C07D409/14; C09K11/06; H10K50/11; H10K50/12; H10K50/15; H10K50/16; H10K50/17;                  H10K50/18; H10K59/10; H10K85/60; H10K101/10</p> <p>最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの</p> <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922 - 1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971 - 2024年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996 - 2024年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994 - 2024年</td> </tr> </table> <p>国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）</p> <p>CAplus/REGISTRY (STN)</p>			日本国実用新案公報	1922 - 1996年	日本国公開実用新案公報	1971 - 2024年	日本国実用新案登録公報	1996 - 2024年	日本国登録実用新案公報	1994 - 2024年				
日本国実用新案公報	1922 - 1996年													
日本国公開実用新案公報	1971 - 2024年													
日本国実用新案登録公報	1996 - 2024年													
日本国登録実用新案公報	1994 - 2024年													
<p>C. 関連すると認められる文献</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>引用文献の カテゴリ*</th> <th>引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示</th> <th>関連する 請求項の番号</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>X</td> <td>WO 2022/071424 A1 (出光興産株式会社) 07.04.2022 (2022 - 04 - 07) 請求の範囲、実施例</td> <td>1-49</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>WO 2022/230967 A1 (出光興産株式会社) 03.11.2022 (2022 - 11 - 03) 請求の範囲、実施例</td> <td>1-49</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>WO 2022/071350 A1 (出光興産株式会社) 07.04.2022 (2022 - 04 - 07) 請求の範囲、実施例</td> <td>1-49</td> </tr> </tbody> </table> <p><input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。</p> <p>* 引用文献のカテゴリ                  “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技术水準を示すもの                  “D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献                  “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの                  “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）                  “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献                  “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献                  “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの                  “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの                  “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの                  “&amp;” 同一パテントファミリー文献</p>			引用文献の カテゴリ*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号	X	WO 2022/071424 A1 (出光興産株式会社) 07.04.2022 (2022 - 04 - 07) 請求の範囲、実施例	1-49	X	WO 2022/230967 A1 (出光興産株式会社) 03.11.2022 (2022 - 11 - 03) 請求の範囲、実施例	1-49	X	WO 2022/071350 A1 (出光興産株式会社) 07.04.2022 (2022 - 04 - 07) 請求の範囲、実施例	1-49
引用文献の カテゴリ*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号												
X	WO 2022/071424 A1 (出光興産株式会社) 07.04.2022 (2022 - 04 - 07) 請求の範囲、実施例	1-49												
X	WO 2022/230967 A1 (出光興産株式会社) 03.11.2022 (2022 - 11 - 03) 請求の範囲、実施例	1-49												
X	WO 2022/071350 A1 (出光興産株式会社) 07.04.2022 (2022 - 04 - 07) 請求の範囲、実施例	1-49												
<p>国際調査を完了した日</p> <p>10.09.2024</p>	<p>国際調査報告の発送日</p> <p>24.09.2024</p>													
<p>名称及びあて先</p> <p>日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号</p>	<p>権限のある職員（特許庁審査官）</p> <p>水島 英一郎 4H 3968</p> <p>電話番号 03-3581-1101 内線 3443</p>													

C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	WO 2022/250028 A1 (出光興産株式会社) 01.12.2022 (2022 - 12 - 01) 請求の範囲、実施例	1-49
X	US 2018/0226585 A1 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 09.08.2018 (2018 - 08 - 09) Claims, Examples	1-49
X	WO 2023/013575 A1 (保土谷化学工業株式会社) 09.02.2023 (2023 - 02 - 09) 請求の範囲、実施例	1-49
X	KR 10-2020-0131929 A (SAMSUNG DISPLAY CO LTD) 25.11.2020 (2020 - 11 - 25) 特許請求の範囲、実施例	1-49
X	WO 2012/177006 A2 (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 27.12.2012 (2012 - 12 - 27) 請求の範囲、実施例	1-7, 12-14, 43-49
X	KR 10-2016-0035971 A (LG CHEMICAL LTD) 01.04.2016 (2016 - 04 - 01) 特許請求の範囲、実施例	1-14, 24-49
X	WO 2016/208862 A1 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 29.12.2016 (2016 - 12 - 29) 請求の範囲、実施例	1-5, 12-14, 43-49
X	KR 10-2022-0158892 A (LT MAT CO LTD) 02.12.2022 (2022 - 12 - 02) 特許請求の範囲、32頁、実施例	1-5, 12-14, 43-49
X	CN 114989021 A (CHANGCHUN HAIPURUNSI TECH CO LTD) 02.09.2022 (2022 - 09 - 02) 特許請求の範囲、49頁、実施例	1-5, 12-14, 43-49
X	KR 10-2022-0147538 A (LG CHEMICAL LTD) 03.11.2022 (2022 - 11 - 03) 特許請求の範囲、202頁、実施例	1-5, 12-14, 43-49
X	CN 113816935 A (SHAANXI LIGHTE OPTOELECTRONICS MAT CO LTD) 21.12.2021 (2021 - 12 - 21) 特許請求の範囲、38頁、実施例	1-5, 7, 8, 12-23, 43-49
X	KR 10-2020-0081978 A (LG DISPLAY CO LTD) 08.07.2020 (2020 - 07 - 08) 特許請求の範囲、31頁、実施例	1-5, 24-34, 43-49
X	KR 10-2020-0009971 A (DONGJIN SEMICHEM CO LTD) 30.01.2020 (2020 - 01 - 30) 特許請求の範囲、6頁、実施例	1-5, 24-34, 43-49
X	KR 10-2012-0100031 A (DUKSAN HIGH METAL CO LTD) 12.09.2012 (2012 - 09 - 12) 特許請求の範囲、38頁、実施例	24-34, 43-49

国際調査報告  
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2024/024827

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO 2022/071424 A1	07.04.2022	US 2023/0262999 A1 Claims, Examples EP 4238956 A1 CN 114599633 A KR 10-2023-0074655 A	
WO 2022/230967 A1	03.11.2022	CN 117222629 A KR 10-2024-0004323 A	
WO 2022/071350 A1	07.04.2022	US 2023/0008737 A1 Claims, Examples EP 4223743 A1 CN 114599637 A KR 10-2023-0078941 A	
WO 2022/250028 A1	01.12.2022	CN 117157276 A KR 10-2024-0012373 A	
US 2018/0226585 A1	09.08.2018	WO 2016/208862 A1 Claims, Examples KR 10-2017-0001830 A CN 108112250 A	
WO 2023/013575 A1	09.02.2023	CN 117598046 A KR 10-2024-0041870 A TW 202313933 A	
KR 10-2020-0131929 A	25.11.2020	(ファミリーなし)	
WO 2012/177006 A2	27.12.2012	KR 10-1111406 B1 TW 201305106 A	
KR 10-2016-0035971 A	01.04.2016	(ファミリーなし)	
WO 2016/208862 A1	29.12.2016	US 2018/0226585 A1 Claims, Examples KR 10-2017-0001830 A CN 108112250 A	
KR 10-2022-0158892 A	02.12.2022	EP 4349821 A1 Claims, Examples WO 2022/250244 A1 TW 202246227 A CN 117355510 A	
CN 114989021 A	02.09.2022	(ファミリーなし)	
KR 10-2022-0147538 A	03.11.2022	US 2024/0164123 A1 Claims, Examples JP 2023-550374 A WO 2022/231319 A1 EP 4235830 A1 TW 202249275 A CN 116569674 A	
CN 113816935 A	21.12.2021	(ファミリーなし)	
KR 10-2020-0081978 A	08.07.2020	US 2021/0280792 A1 Claims, Examples WO 2020/138874 A1	
KR 10-2020-0009971 A	30.01.2020	CN 110734379 A	
KR 10-2012-0100031 A	12.09.2012	(ファミリーなし)	