

(19) 日本国特許庁(JP)

再公表特許(A1)

(11) 国際公開番号

WO2019/111971

発行日 令和1年12月12日 (2019. 12. 12)

(43) 国際公開日 令和1年6月13日 (2019. 6. 13)

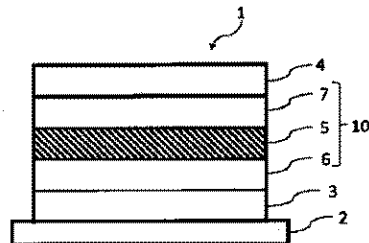
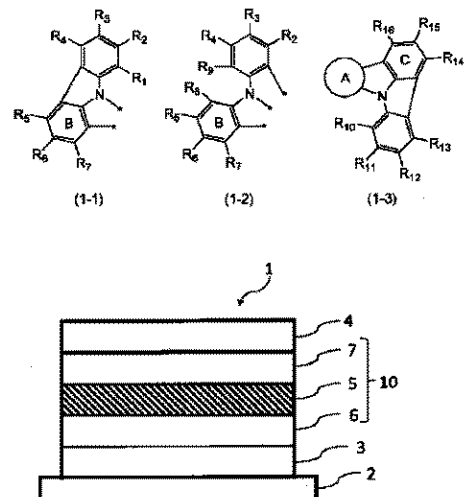
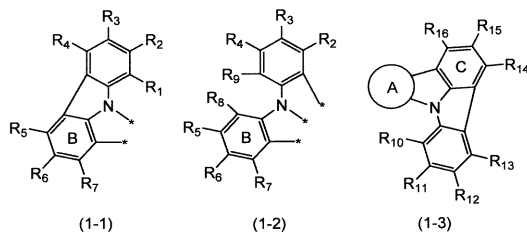
(51) Int. Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14 B	3K107
C07D 487/22 (2006.01)	C07D 487/22	4C050
C09K 11/06 (2006.01)	C09K 11/06 690	
	C09K 11/06 650	
	C09K 11/06 640	
審査請求 有 予備審査請求 未請求 (全 203 頁)		

出願番号	特願2019-513469 (P2019-513469)	(71) 出願人	000183646
(21) 国際出願番号	PCT/JP2018/044792		出光興産株式会社
(22) 国際出願日	平成30年12月5日 (2018. 12. 5)		東京都千代田区丸の内3丁目1番1号
(31) 優先権主張番号	16/043, 074	(74) 代理人	110002354
(32) 優先日	平成30年7月23日 (2018. 7. 23)		特許業務法人平和国際特許事務所
(33) 優先権主張国・地域又は機関	米国 (US)	(72) 発明者	高橋 良多
			千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(31) 優先権主張番号	16/201, 984	(72) 発明者	池田 秀嗣
(32) 優先日	平成30年11月27日 (2018. 11. 27)		千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(33) 優先権主張国・地域又は機関	米国 (US)	(72) 発明者	瀬田 敬太
			千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(31) 優先権主張番号	特願2017-234331 (P2017-234331)	(72) 発明者	中野 裕基
(32) 優先日	平成29年12月6日 (2017. 12. 6)		千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(33) 優先権主張国・地域又は機関	日本国 (JP)		
		最終頁に続く	

(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子及び新規化合物

(57) 【要約】

陰極と、陽極と、前記陰極と前記陽極との間に配置された少なくとも1層の有機層と、を有し、前記少なくとも1層の有機層のうちの少なくとも1層が、下記式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は下記式(1-2)及び(1-3)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。



【特許請求の範囲】

【請求項 1】

陰極と、

陽極と、

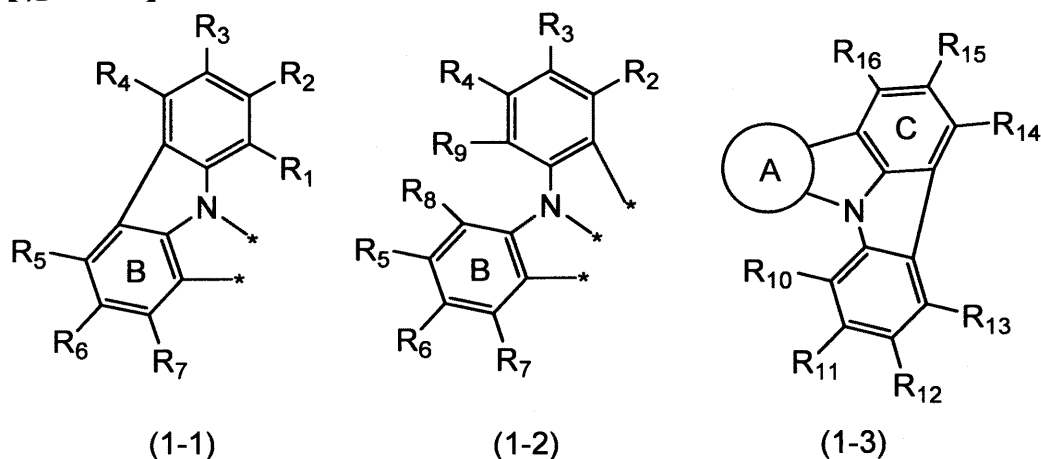
前記陰極と前記陽極との間に配置された少なくとも 1 層の有機層と、
を有し、

前記少なくとも 1 層の有機層のうちの少なくとも 1 層が、

下記式 (1-1) 及び (1-3) で表される化合物、又は下記式 (1-2) 及び (1-3) 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。

【化 135】

10



(前記式 (1-1)、前記式 (1-2) 及び前記式 (1-3) 中、

環 A は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10～50 の縮合アリール環、置換もしくは無置換の環形成原子数 8～50 の縮合複素環、又は下記式 (2) で表されるベンゼン環である。

前記式 (1-1) の 2 つの結合手*は、それぞれ、前記環 A の前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式 (2) で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

30

前記式 (1-2) の 3 つの結合手*は、それぞれ、前記環 A の前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式 (2) で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

R₁～R₁₆ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない R₁～R₁₆ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

40

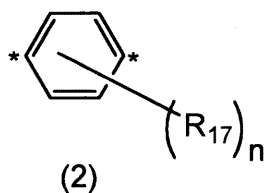
R₃₁～R₃₇ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原

50

子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよく、異なってもよい。）

【化 136】



（前記式（2）中、

2つの*の環形成炭素原子の一方で、前記式（1-1）又は前記式（1-2）のベンゼン環Bから延びる結合手が結合し、他方で前記式（1-3）のベンゼン環Cから延びる結合手が結合する。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(R_{36})$

20

（ R_{37} ）、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

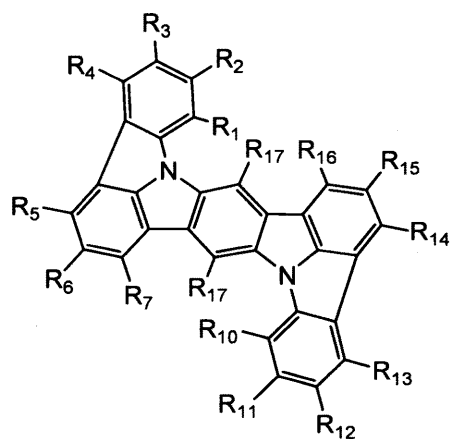
30

n は 1 又は 2 の整数である。 n が 2 である場合、2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。）

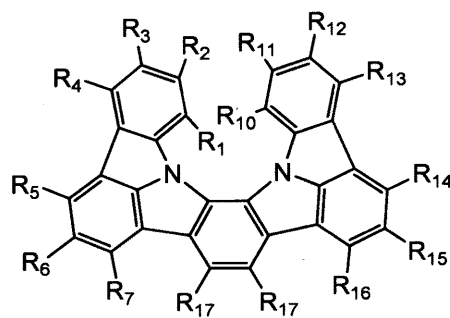
【請求項 2】

前記式（1-1）及び（1-3）で表される化合物、又は前記式（1-2）及び（1-3）で表される化合物が、下記式（3）、式（4）又は式（5）で表される化合物である請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

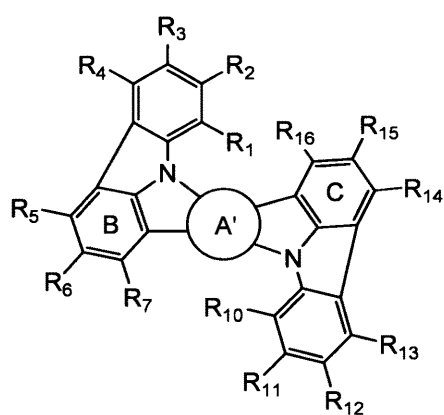
【化 1 3 7】



(3)



(4)



(5)

(前記式(3)、前記式(4)及び前記式(5)中、

環A'は、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環である。

30

R₁～R₇及びR₁₀～R₁₇は、前記式(1-1)、前記式(1-2)、前記式(1-3)及び前記式(2)で定義した通りである。)

【請求項3】

前記置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環が、置換もしくは無置換のナフタレン環、置換もしくは無置換のアントラセン環、又は置換もしくは無置換のフルオレン環であり、前記置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環が、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である請求項1又は2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項4】

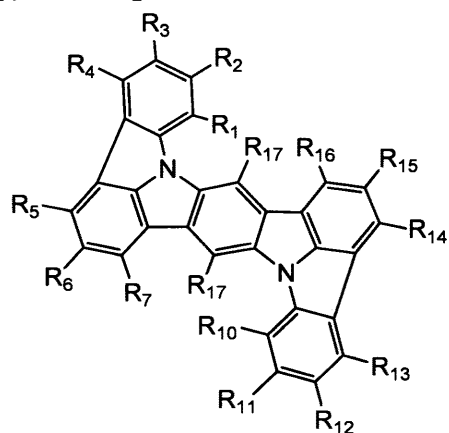
40

前記置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環が、置換もしくは無置換のナフタレン環、又は置換もしくは無置換のフルオレン環であり、前記置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環が、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である請求項1～3のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

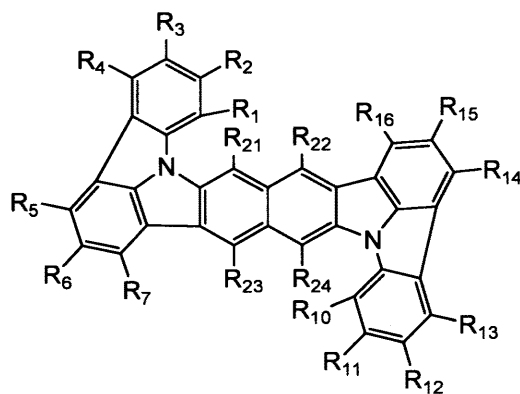
【請求項5】

前記式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は前記式(1-2)及び(1-3)で表される化合物が、下記式(6-1)～式(6-6)で表される化合物からなる群から選択される請求項1～4のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

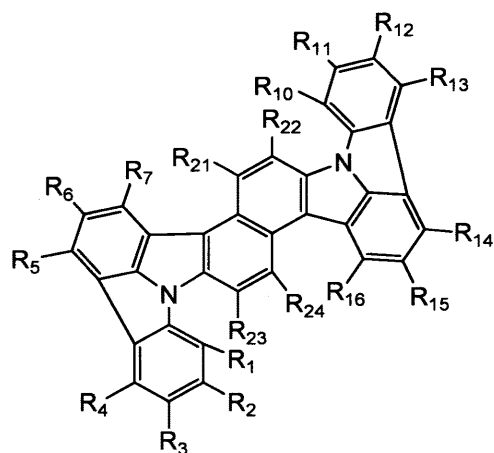
【化 1 3 8】



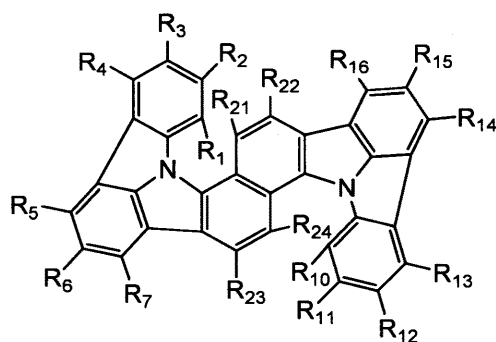
(6-1)



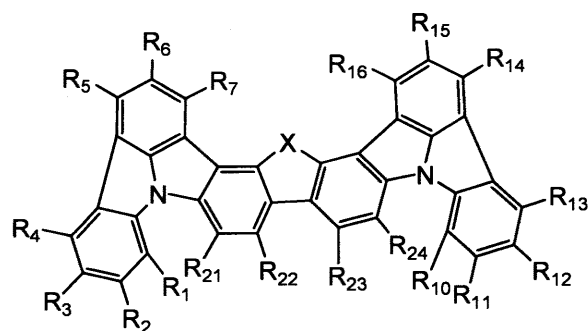
(6-2)



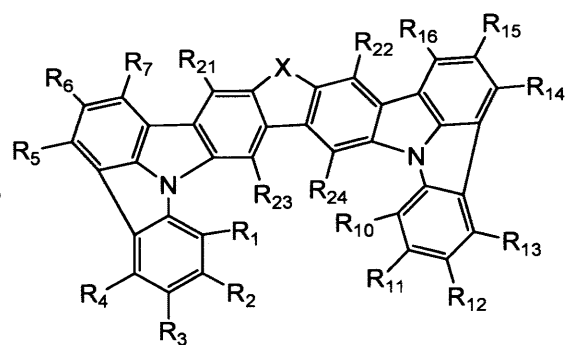
(6-3)



(6-4)



(6-5)



(6-6)

(前記式 (6-1) ~ (6-6) 中、

$R_1 \sim R_{17}$ は、前記式 (1-1)、前記式 (1-2)、前記式 (1-3) 及び前記式 (2) で定義した通りである。

X は、 O 、 NR_{25} 、又は $C(R_{26})(R_{27})$ である。

$R_{21} \sim R_{27}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{21} \sim R_{27}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアル

コキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

10

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項 6】

$\text{R}_1 \sim \text{R}_{17}$ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、及び置換もしくは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請求項 1～5 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 7】

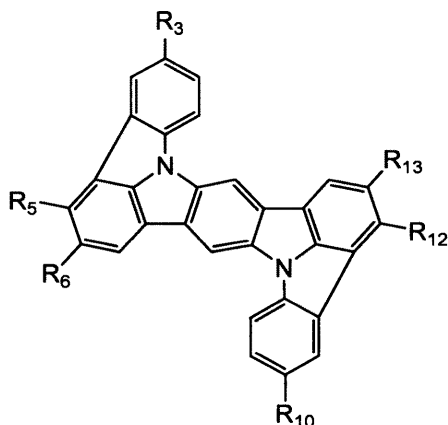
$\text{R}_1 \sim \text{R}_{17}$ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5～18 の複素環基からなる群から選択される請求項 1～6 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【請求項 8】

前記式 (1-1) 及び (1-3) で表される化合物、又は前記式 (1-2) 及び (1-3) で表される化合物が、下記式 (3-2) で表される化合物である請求項 1～7 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 139】



(3-2)

(前記式 (3-2) 中、 R_3 、 R_5 、 R_6 、 R_{10} 、 R_{12} 及び R_{13} は、前記式 (1-1) 及び前記式 (1-3) で定義した通りである。)

40

【請求項 9】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～50 のアルキル基、炭素数 1～50 のハロアルキル基、炭素数 2～50 のアルケニル基、炭素数 2～50 のアルキニル基、環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、炭素数 1～50 のアルコキシ基、炭素数 1～50 のアルキルチオ基、環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{41})$

$(\text{R}_{42})(\text{R}_{43})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{44}$ 、 $-\text{COOR}_{45}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}_{46}$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}_{47})(\text{R}_{48})$ 、 $-\text{Ge}(\text{R}_{49})(\text{R}_{50})(\text{R}_{51})$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{52})(\text{R}_{53})$ (ここで、 $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数 1～

50

50のアルキル基、環形成炭素数6～50のアリール基、又は環形成原子数5～50の1価の複素環基である。R₄₁～R₅₃が2以上存在する場合、2以上のR₄₁～R₅₃のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。）、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、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1価の複素環基からなる群から選択される、請求項1～8のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項10】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、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、又は環形成原子数5～50の1価の複素環基である請求項1～9のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

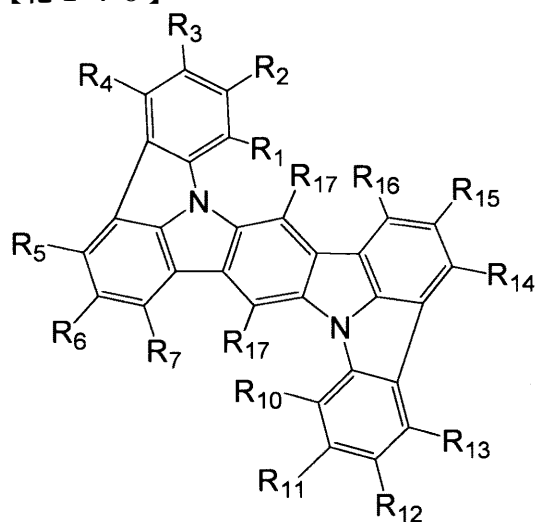
【請求項11】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、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、又は環形成原子数5～18の1価の複素環基である請求項1～10のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項12】

前記式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は前記式(1-2)及び(1-3)で表される化合物が、下記式(3-11)で表される化合物である請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化140】



(3-11)

(前記式(3-11)中、

R₁～R₇及びR₁₀～R₁₆のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないR₁～R₇及びR₁₀～R₁₆は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、-Si(R₃₁)(R₃₂)(R₃₃)、-C(=O)R₃₄、-COOR₃₅、-N(R₃₆)(R₃₇)、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。但し、R₁～R₇及びR₁₀～R₁₆の少なくとも1つは-N(R

40

50

36) (R_{37})である。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})$

(R_{37})、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

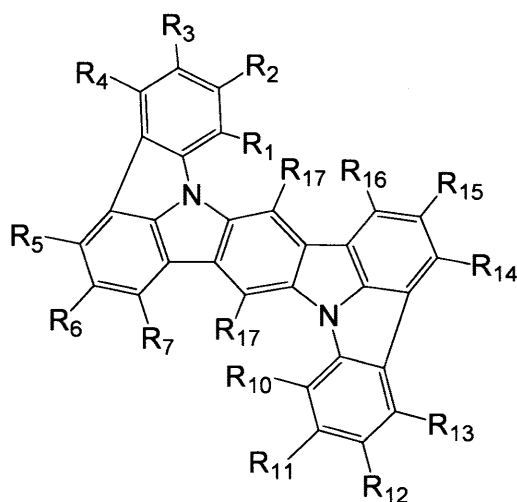
$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項13】

前記式(3-11)で表される化合物が、下記式(3-12)で表される化合物である請求項12に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化141】



(3-12)

(前記式(3-12)中、

$R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-$

$N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。但し、 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のいずれか2つは $-N(R_{36})(R_{37})$ である。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

10

2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

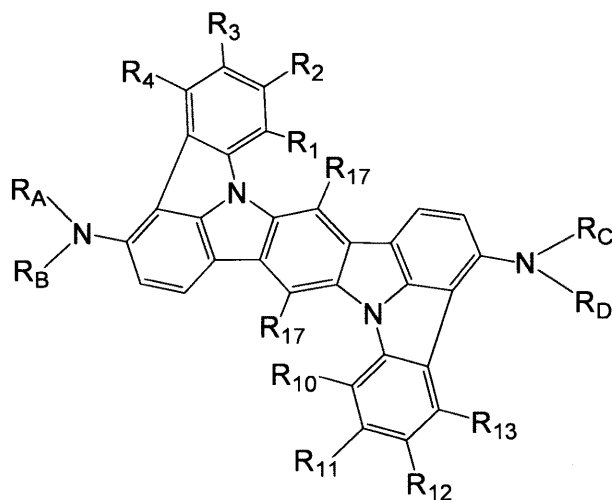
20

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項14】

前記式(3-11)で表される化合物が、下記式(3-13)で表される化合物である請求項12又は13に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化142】



(3-13)

(前記式(3-13)中、

$R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ 、並びに R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～18の1価の複素環基である。2つの R_{17} は互いに同じであってもよく、異なってもよい。

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～18の1価の複素環基

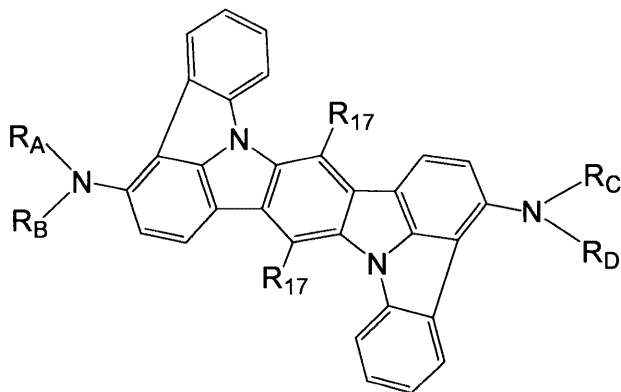
50

である。)

【請求項 15】

前記式 (3-13) で表される化合物が、下記式 (3-14) で表される化合物である請求項 14 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 143】



(3-14)

(前記式 (3-14) 中、 R_{17} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、前記式 (3-13) で定義した通りである。)

20

【請求項 16】

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基である請求項 14 又は 15 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 17】

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である請求項 14 ~ 16 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 18】

前記 2 つの R_{17} が、それぞれ水素原子である請求項 12 ~ 17 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【請求項 19】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、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 1 価の複素環基からなる群から選択される、請求項 12 ~ 18 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 20】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1 ~ 5 のアルキル基である請求項 12 ~ 19 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 21】

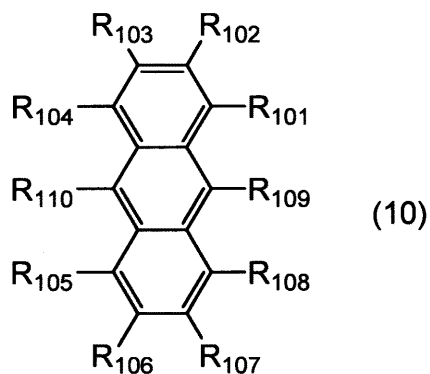
前記少なくとも 1 層の有機層のうちの少なくとも 1 層が発光層である請求項 1 ~ 20 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 22】

前記発光層が、さらに下記式 (10) で表される化合物を含む請求項 21 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 4 4】



〔式 (10) 中、

$R_{101} \sim R_{110}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

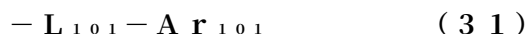
前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{101} \sim R_{110}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{121})(R_{122})(R_{123})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{124}$ 、 $-\text{COOR}_{125}$ 、 $-\text{N}(R_{126})(R_{127})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基、又は下記式(31)で表される基である。

20

$R_{121} \sim R_{127}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。 $R_{121} \sim R_{127}$ が2以上存在する場合、2以上の $R_{121} \sim R_{127}$ のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。

30

但し、前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{101} \sim R_{110}$ の少なくとも1つは、下記式(31)で表される基である。下記式(31)が2以上存在する場合、2以上の下記式(31)で表される基のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。



〔式 (31) 中、

L_{101} は、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基である。

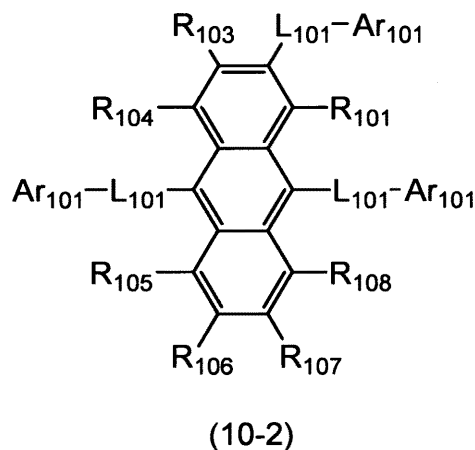
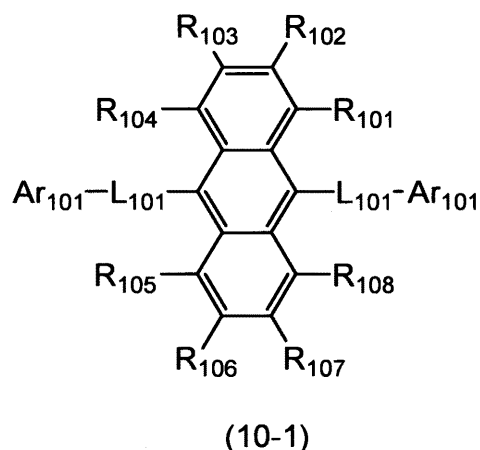
Ar_{101} は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。〕

40

【請求項 2 3】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-1)又は(10-2)で表される請求項22に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 4 5】



(式(10-1)中、R₁₀₁～R₁₀₈、L₁₀₁及びAr₁₀₁は、前記式(10)で定義した通りである。

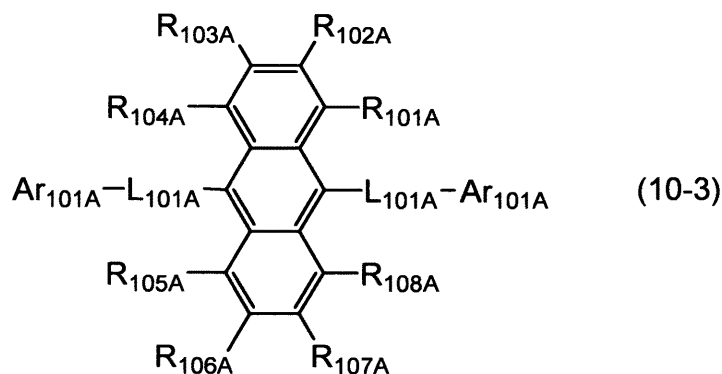
式(10-2)中、R₁₀₁、R₁₀₃～R₁₀₈、L₁₀₁及びAr₁₀₁は、前記式(10)で定義した通りである。)

【請求項 2 4】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-3)で表される請求項 2 2 又は 2 3 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【化 1 4 6】



(式(10-3)中、

R_{101A}～R_{108A}は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基である。

L_{101A}は、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリーレン基である。2つの L_{101A}は、同一でもよく、異なってもよい。

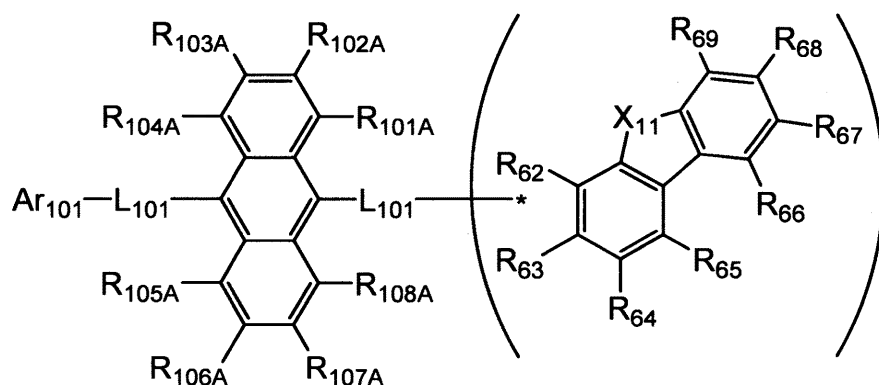
Ar_{101A}は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基である。2つの Ar_{101A}は、同一でもよく、異なってもよい。)

【請求項 2 5】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-4)で表される請求項 2 2 又は 2 3 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【化 1 4 7】



(10-4)

(式 (10-4) 中、

L₁₀₁ 及び A r₁₀₁ は、前記式 (10) で定義した通りである。R_{101A} ~ R_{108A} は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。X₁₁ は、O、S、又は N (R₆₁) である。

20

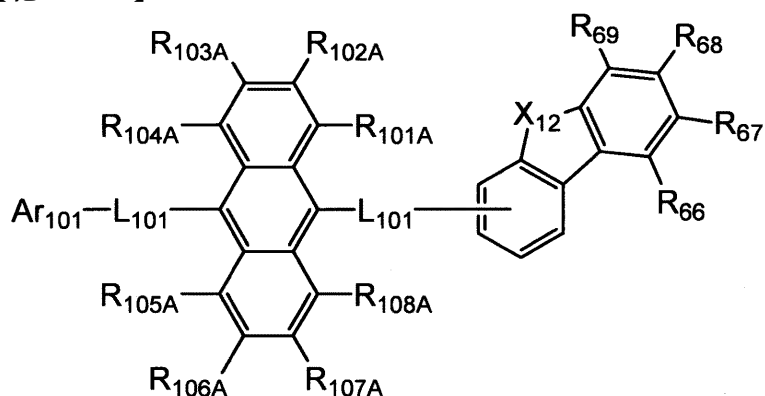
R₆₁ は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。R₆₂ ~ R₆₉ の 1 つは、L₁₀₁ と結合する結合手である。L₁₀₁ と結合しない R₆₂ ~ R₆₉ のうちの隣接する 2 つ以上の 1 組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。L₁₀₁ と結合せず、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない R₆₂ ~ R₆₉ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。)

【請求項 2 6】

前記式 (10) で表される化合物が、下記式 (10-6) で表される請求項 25 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【化 1 4 8】



(10-6)

(式 (10-6) 中、

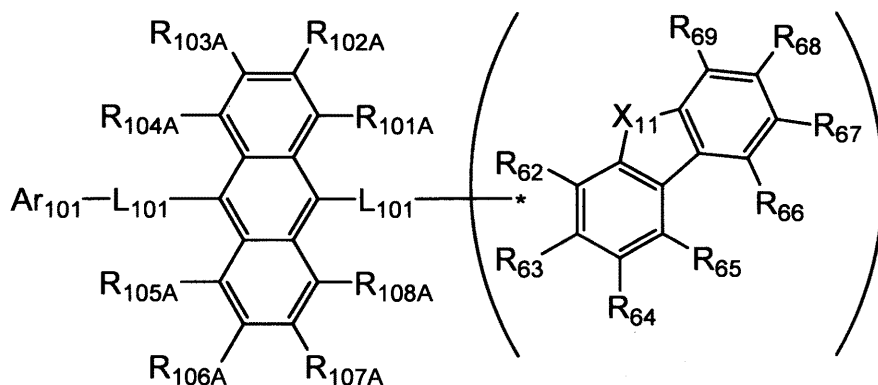
L₁₀₁ 及び A r₁₀₁ は、前記式 (10) で定義した通りである。R_{101A} ~ R_{108A} は、前記式 (10-4) で定義した通りである。R₆₆ ~ R₆₉ は、前記式 (10-4) で定義した通りである。X₁₂ は、O 又は S である。)

50

【請求項 27】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-7)で表される請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化149】



(10-7)

(式(10-7)中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、式(10)で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。

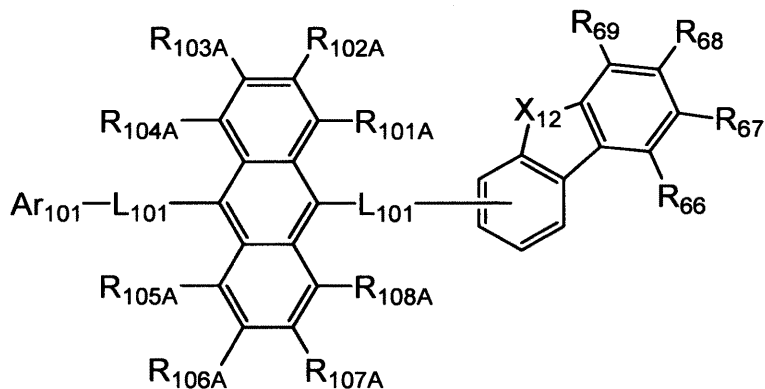
X_{11} は、前記式(10-4)で定義した通りである。

$R_{62} \sim R_{69}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。但し、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、並びに R_{68} 及び R_{69} のいずれか1組は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。)

【請求項 28】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-8)で表される請求項25～27のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化150】



(10-8)

(式(10-8)中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、式(10)で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。

X_{12} は、O又はSである。

$R_{66} \sim R_{69}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。但し、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、又は R_{68} 及び R_{69} のいずれか1組は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。)

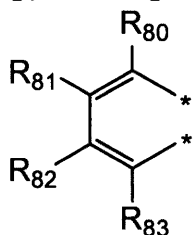
【請求項 29】

R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、又は R_{68} 及び R_{69} のいずれか1組が、互い

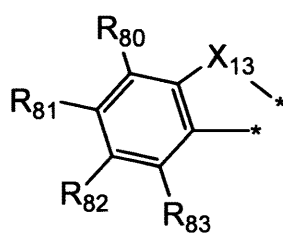
に結合して、下記式(10-8-1)又は(10-8-2)で表される環を形成し、

前記式(10-8-1)又は(10-8-2)で表される環を形成しない $R_{66} \sim R_{69}$ は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない、請求項27又は28に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化151】



(10-8-1)



(10-8-2)

(式(10-8-1)及び(10-8-2)中、

2つの結合手*は、それぞれ、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、又は R_{68} 及び R_{69} の1組と結合する。

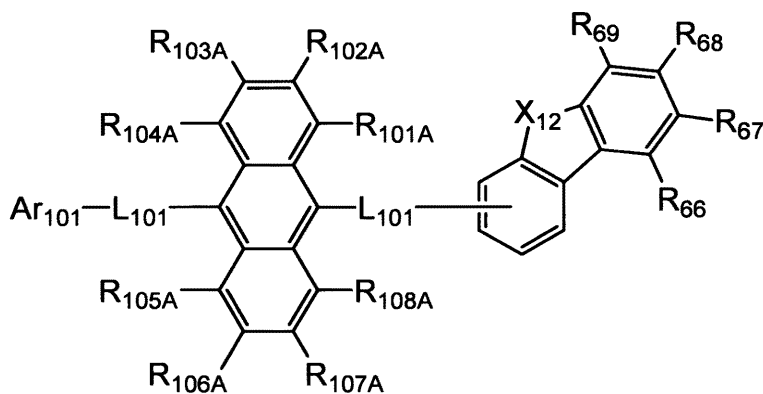
$R_{80} \sim R_{83}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

X_{13} は、O又はSである。)

【請求項30】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-9)で表される請求項25又は26に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化152】



(10-9)

(式(10-9)中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、式(10)で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。

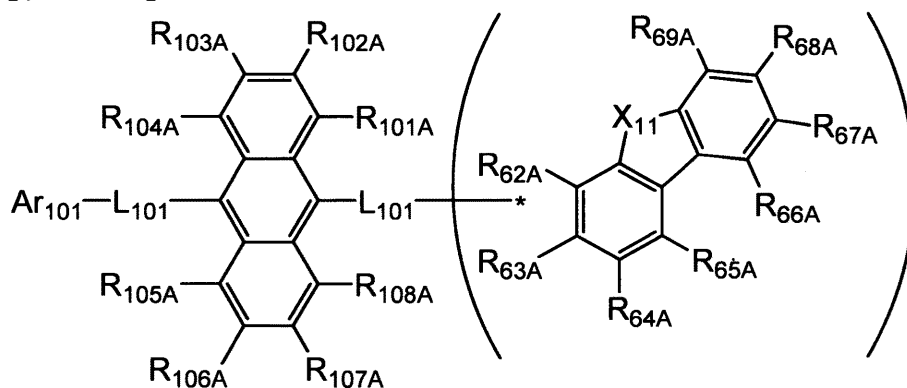
$R_{66} \sim R_{69}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。但し、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、並びに R_{69} 及び R_{67} は、いずれも互いに結合せず、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

X_{12} は、O又はSである。)

【請求項31】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-4A)で表される請求項22又は23に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 5 3】



(10-4A)

(式 (10-4A) 中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、前記式 (10) で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

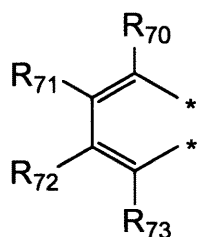
X_{11} は、O、S、又は N (R_{61}) である。

R_{61} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

$R_{62A} \sim R_{69A}$ のうちの隣接する 2 つ以上の 1 組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよく、 $R_{62A} \sim R_{69A}$ のうちの隣接する 2 つは、下記式 (10-4A-1) で表される環を形成する。

置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{62A} \sim R_{69A}$ 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、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。)

【化 1 5 4】



(10-4A-1)

(式 (10-4A-1) 中、

2 つの結合手*のそれぞれは、 $R_{62A} \sim R_{69A}$ のうちの隣接する 2 つと結合する。

$R_{70} \sim R_{73}$ の 1 つは、 L_{101} と結合する結合手である。

L_{101} と結合しない $R_{70} \sim R_{73}$ 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、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。)

【請求項 3 2】

前記陽極と前記発光層との間に正孔輸送層を有する請求項 2 1 ～ 3 1 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 3 3】

前記陰極と前記発光層との間に電子輸送層を有する請求項 2 1 ～ 3 2 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

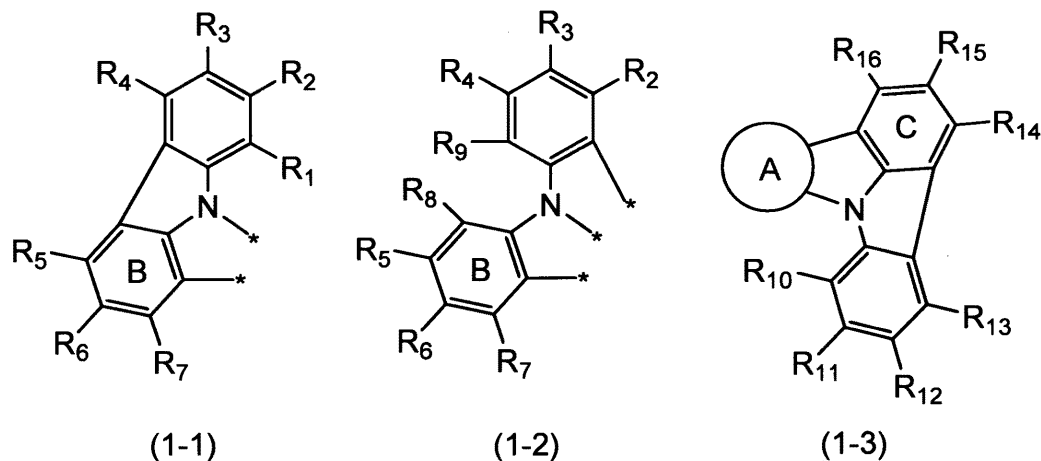
【請求項 3 4】

請求項 1～3 3 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器。

【請求項 3 5】

下記式（1-1）及び（1-3）で表される化合物、又は下記式（1-2）及び（1-3）で表される化合物。

【化 1 5 5】



（前記式（1-1）、前記式（1-2）及び前記式（1-3）中、

環 A は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10～50 の縮合アリール環、置換もしくは無置換の環形成原子数 8～50 の縮合複素環、又は下記式（2）で表されるベンゼン環である。

前記式（1-1）の 2 つの結合手*は、それぞれ、前記環 A の前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式（2）で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

前記式（1-2）の 3 つの結合手*は、それぞれ、前記環 A の前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式（2）で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

R₁～R₁₆ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

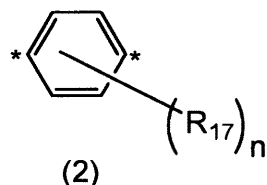
前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない R₁～R₁₆ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

R₃₁～R₃₇ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

R₃₁～R₃₇ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する R₃₁～R₃₇ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

但し、前記環Aが前記式(2)で表されるベンゼン環である場合には、 R_{17} のうち少なくとも1つは、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である；又は、 R_{17} のうち隣接する2つ以上の少なくとも1組が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。)

【化156】



(前記式(2)中、

2つの*の環形成炭素原子の一方で、前記式(1-1)又は前記式(1-2)のベンゼン環Bから延びる結合手が結合し、他方で前記式(1-3)のベンゼン環Cから延びる結合手が結合する。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})$

20

(R_{37})、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

30

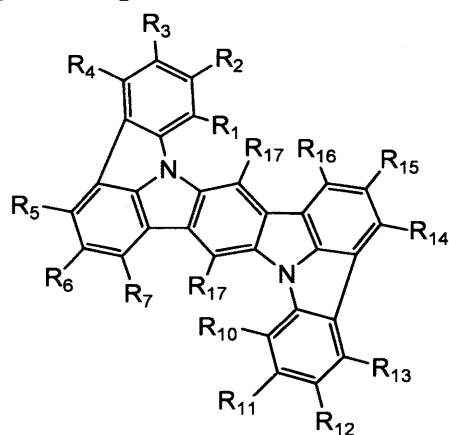
$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

n は1又は2の整数である。 n が2である場合、2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。)

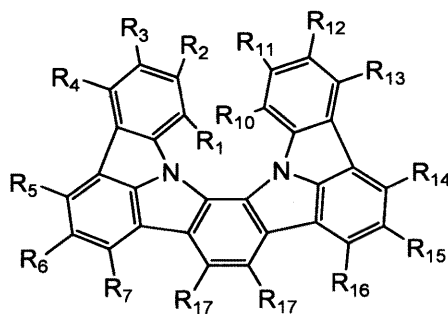
【請求項36】

下記式(3)、式(4)又は式(5)で表される請求項35に記載の化合物。

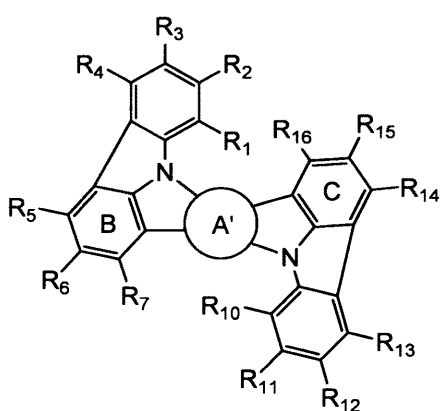
【化 1 5 7】



(3)



(4)



(5)

(前記式(3)、前記式(4)及び前記式(5)中、

環A'は、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環である。

30

R₁～R₇及びR₁₀～R₁₇は、前記式(1-1)、前記式(1-2)、前記式(1-3)及び前記式(2)で定義した通りである。)

【請求項37】

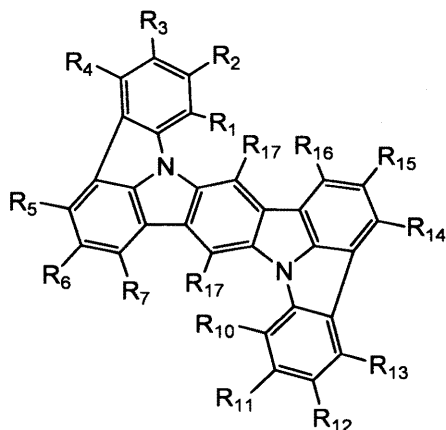
前記置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環が、置換もしくは無置換のナフタレン環又は置換もしくは無置換のフルオレン環であり、前記置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環が、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である請求項35又は36に記載の化合物。

【請求項38】

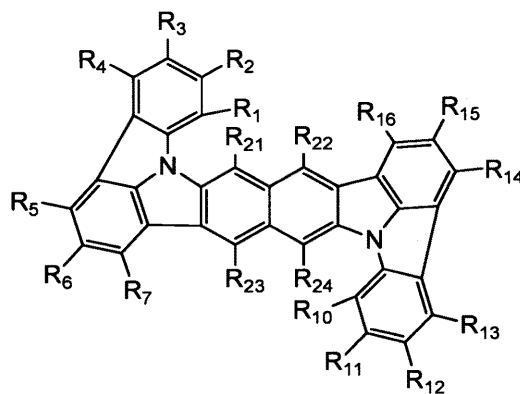
下記式(6-1)～式(6-6)で表される請求項35～37のいずれかに記載の化合物。

40

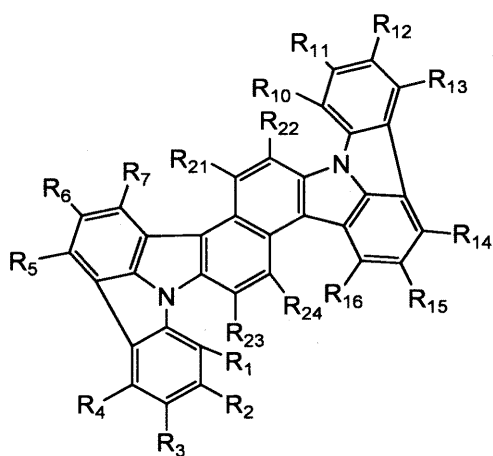
【化 1 5 8】



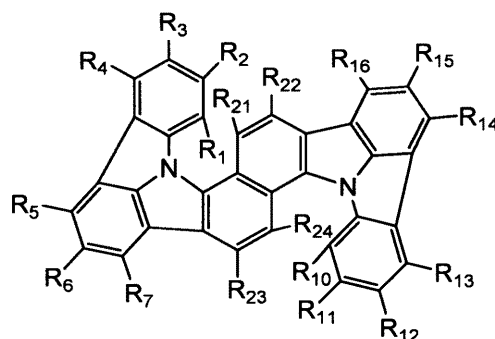
(6-1)



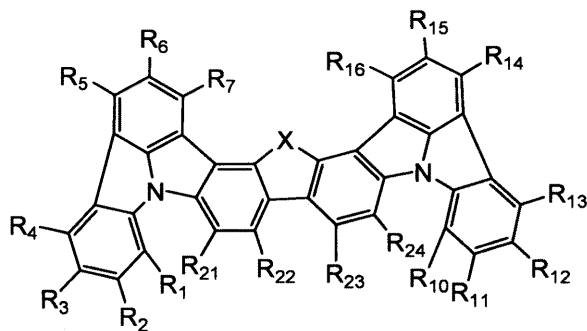
(6-2)



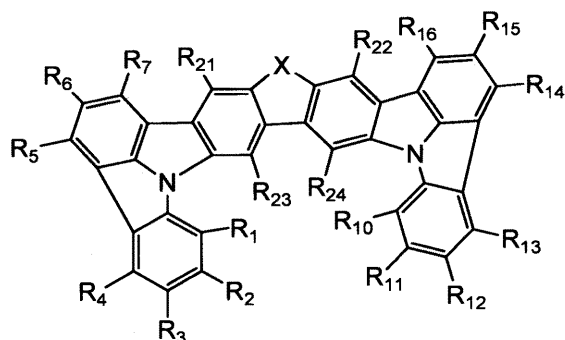
(6-3)



(6-4)



(6-5)



(6-6)

(前記式 (6-1) ~ (6-6) 中、

$R_1 \sim R_{17}$ は、前記式 (1-1)、前記式 (1-2)、前記式 (1-3) 及び前記式 (2) で定義した通りである。

X は、 O 、 NR_{25} 、又は $C(R_{26})(R_{27})$ である。

$R_{21} \sim R_{27}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{21} \sim R_{27}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアル

コキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

10

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項 39】

$\text{R}_1 \sim \text{R}_{17}$ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、及び置換もしくは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請求項 35～38 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 40】

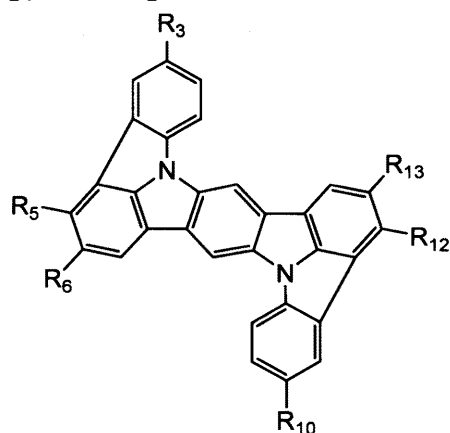
$\text{R}_1 \sim \text{R}_{17}$ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5～18 の複素環基からなる群から選択される請求項 35～39 のいずれかに記載の化合物。

20

【請求項 41】

下記式 (3-2) で表される請求項 35～40 のいずれかに記載の化合物。

【化 159】



(3-2)

(前記式 (3-2) 中、 R_3 、 R_5 、 R_6 、 R_{10} 、 R_{12} 及び R_{13} は、前記式 (1-1) 及び前記式 (1-3) で定義した通りである。)

【請求項 42】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～50 のアルキル基、炭素数 1～50 のハロアルキル基、炭素数 2～50 のアルケニル基、炭素数 2～50 のアルキニル基、環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、炭素数 1～50 のアルコキシ基、炭素数 1～50 のアルキルチオ基、環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{41})$

$(\text{R}_{42})(\text{R}_{43})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{44}$ 、 $-\text{COOR}_{45}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}_{46}$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}_{47})(\text{R}_{48})$ 、 $-\text{Ge}(\text{R}_{49})(\text{R}_{50})(\text{R}_{51})$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{52})(\text{R}_{53})$ (ここで、 $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ は、それぞれ独立に、水素原子、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、又は環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。 $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ が 2 以上存在する場合、2 以上の $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ の

40

50

それぞれは同一でもよく、異なってもよい。)、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、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1価の複素環基からなる群から選択される、請求項35～41のいずれかに記載の化合物。

【請求項43】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、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1価の複素環基からなる群から選択される、である請求項35～42のいずれかに記載の化合物。

【請求項44】

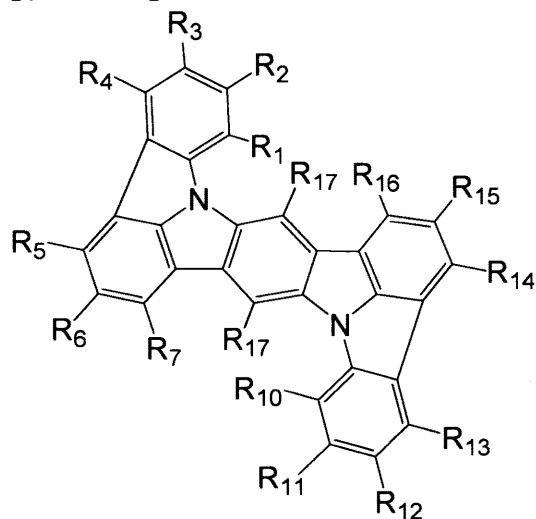
「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数1～18のアルキル基、環形成炭素数6～18のアリール基、及び環形成原子数5～18の1価の複素環基からなる群から選択される、請求項35～43のいずれかに記載の化合物。

10

【請求項45】

下記式(3-11)で表される請求項35に記載の化合物。

【化160】



(3-11)

(前記式(3-11)中、

R₁～R₇及びR₁₀～R₁₆のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないR₁～R₇及びR₁₀～R₁₆は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。但し、R₁～R₇及びR₁₀～R₁₆の少なくとも1つは $-N(R_{36})(R_{37})$ である。

40

R₁₇は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のア

50

ルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})$

(R_{37}) 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

2 つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

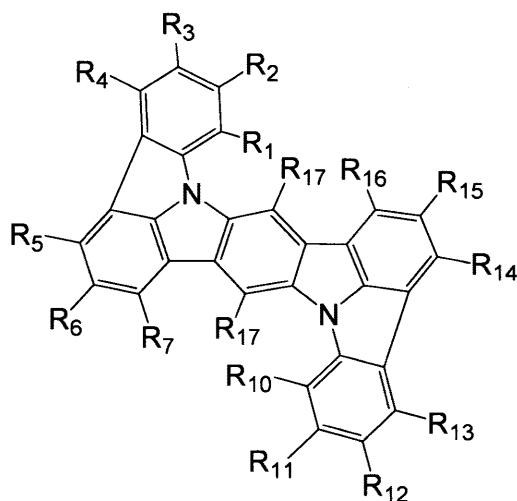
10

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項 46】

下記式 (3-12) で表される請求項 45 に記載の化合物。

【化 161】



(3-12)

(前記式 (3-12) 中、

$\text{R}_1 \sim \text{R}_7$ 及び $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{16}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $\text{R}_1 \sim \text{R}_7$ 及び $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。但し、 $\text{R}_1 \sim \text{R}_7$ 及び $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{16}$ のいずれか 2 つは $-\text{N}(\text{R}_6)(\text{R}_{37})$ である。

40

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のア

50

ルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})$

(R_{37})、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

10

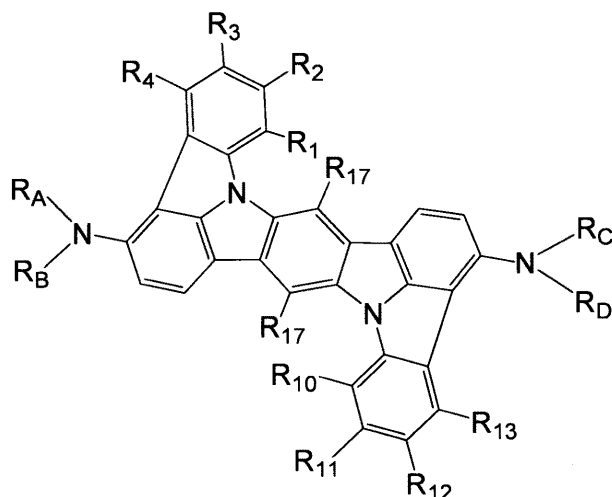
$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項 47】

下記式 (3-13) で表される請求項 45 又は 46 に記載の化合物。

【化 162】



(3-13)

(前記式 (3-13) 中、

$\text{R}_1 \sim \text{R}_4$ 及び $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{13}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $\text{R}_1 \sim \text{R}_4$ 及び $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{13}$ 、並びに R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～18 の 1 価の複素環基である。2つの R_{17} は互いに同じであってもよく、異なってもよい。

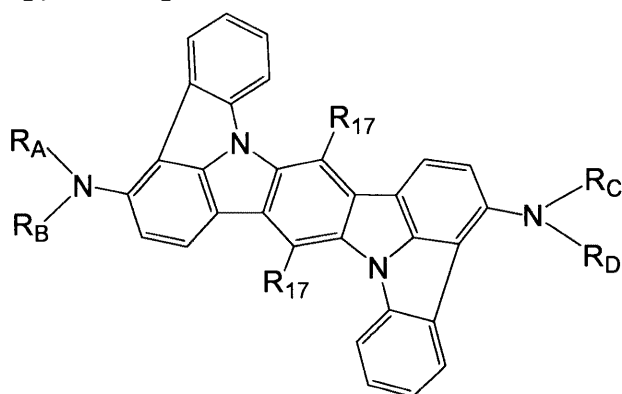
40

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～18 の 1 価の複素環基である。

【請求項 48】

下記式 (3-14) で表される請求項 47 に記載の化合物。

【化 1 6 3】



(3-14)

(前記式 (3-14) 中、 R_{17} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、前記式 (3-13) で定義した通りである。)

【請求項 49】

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基である請求項 47 又は 48 に記載の化合物。

【請求項 50】

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である請求項 47～49 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 51】

前記 2 つの R_{17} が、それぞれ水素原子である請求項 45～50 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 52】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、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 1 価の複素環基からなる群から選択される、請求項 45～51 のいずれかに記載の化合物。

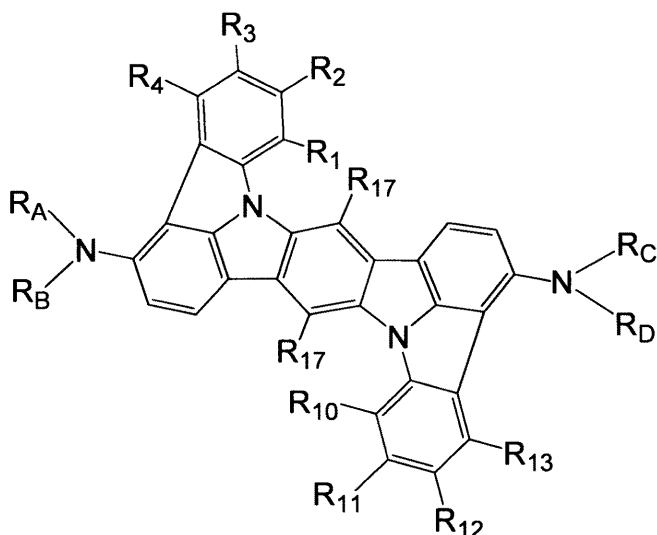
【請求項 53】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～5 のアルキル基である請求項 45～52 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 54】

下記式 (3-21) で表される請求項 35 に記載の化合物。

【化 1 6 4】



(3-21)

(前記式 (3-21) 中、

$R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

20

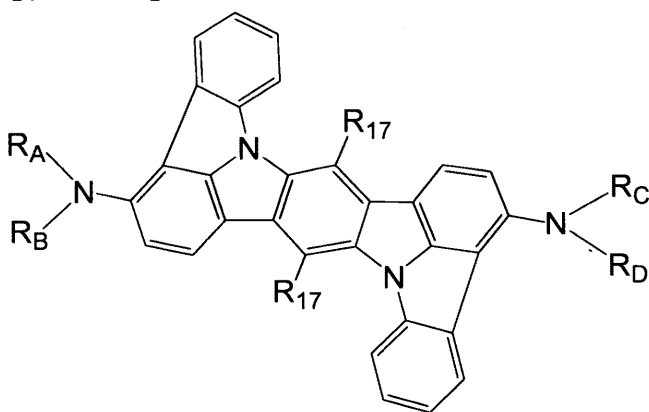
前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ 、並びに R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 20 の 1 価の複素環基である。2 つの R_{17} は互いに同じであってもよく、異なってもよい。

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基である。)

【請求項 5 5】

下記式 (3-22) で表される請求項 5 4 に記載の化合物。

【化 1 6 5】



(3-22)

(前記式 (3-22) 中、 R_{17} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、前記式 (3-21) で定義した通りである。)

【請求項 5 6】

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である請求項 5 4 又は 5 5 に記載の化合物。

【請求項 5 7】

前記 2 つの R_{17} が、それぞれ水素原子である請求項 5 4 ～ 5 6 のいずれかに記載の化合物。

50

【請求項 58】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～20 のアルキル基、環形成炭素数 6～20 のアリール基、及び環形成原子数 5～20 の 1 価の複素環基からなる群から選択される、請求項 54～57 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 59】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～5 のアルキル基である請求項 54～58 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 60】

R_A、R_B、R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、

前記 2 つの R₁₇ が、それぞれ水素原子である請求項 54～59 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 61】

R_A、R_B、R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、

前記 2 つの R₁₇ が、それぞれ水素原子であり、

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～20 のアルキル基、環形成炭素数 6～20 のアリール基、及び環形成原子数 5～20 の 1 価の複素環基からなる群から選択される、請求項 54～60 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 62】

R_A、R_B、R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、

前記 2 つの R₁₇ が、それぞれ水素原子であり、

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～5 のアルキル基である請求項 54～61 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 63】

請求項 35～62 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。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子及び新規化合物に関する。

【背景技術】

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、有機 EL 素子ということがある）に電圧を印加すると、陽極から正孔が、また、陰極から電子が、それぞれ発光層に注入される。そして、発光層において、注入された正孔と電子とが再結合し、励起子が形成される。

【0003】

有機 EL 素子は、陽極と陰極の間に、発光層を含む。また、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層等の有機層を含む積層構造を有する場合もある。

【0004】

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

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【特許文献 1】 国際公開第 2013/077344 号

【特許文献 2】 米国特許 5843607 号

【特許文献 3】 国際公開第 2017/175690 号

【発明の概要】

【0006】

10

20

30

40

50

本発明の目的は、発光効率の高い有機エレクトロルミネッセンス素子、及び発光効率の高い有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として使用できる新規化合物を提供することである。

【0007】

本発明の一態様によれば、

陰極と、

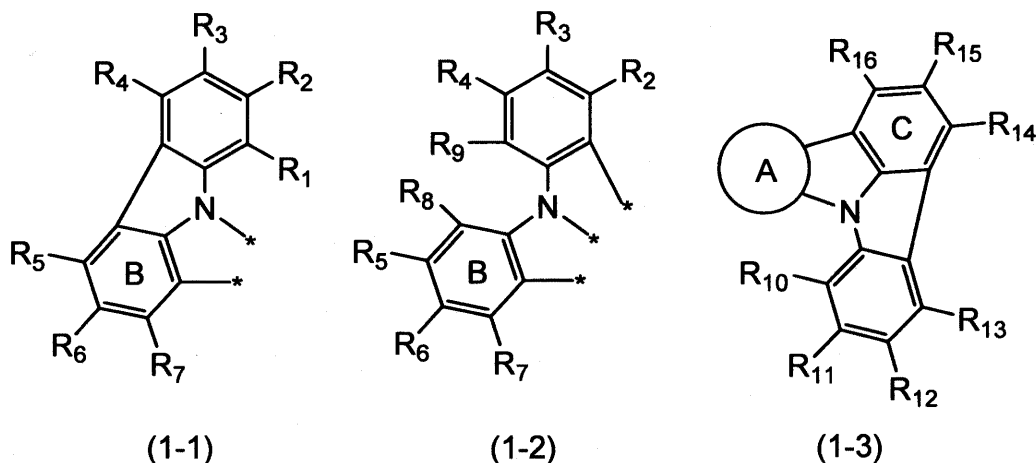
陽極と、

前記陰極と前記陽極との間に配置された少なくとも1層の有機層と、
を有し、

前記少なくとも1層の有機層のうちの少なくとも1層が、

下記式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は下記式(1-2)及び(1-3)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が提供される。

【化1】



(前記式(1-1)、前記式(1-2)及び前記式(1-3)中、

環Aは、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環、置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環、又は下記式(2)で表されるベンゼン環である。

前記式(1-1)の2つの結合手*は、それぞれ、前記環Aの前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

前記式(1-2)の3つの結合手*は、それぞれ、前記環Aの前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

R₁～R₁₆のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないR₁～R₁₆は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

10

30

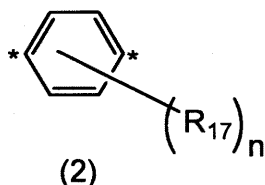
40

50

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよく、異なってもよい。）

【化2】



（前記式（2）中、

2つの*の環形成炭素原子の一方で、前記式（1-1）又は前記式（1-2）のベンゼン環Bから延びる結合手が結合し、他方で前記式（1-3）のベンゼン環Cから延びる結合手が結合する。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})$

20

（ R_{37} ）、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

30

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

n は1又は2の整数である。 n が2である場合、2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。）

【0008】

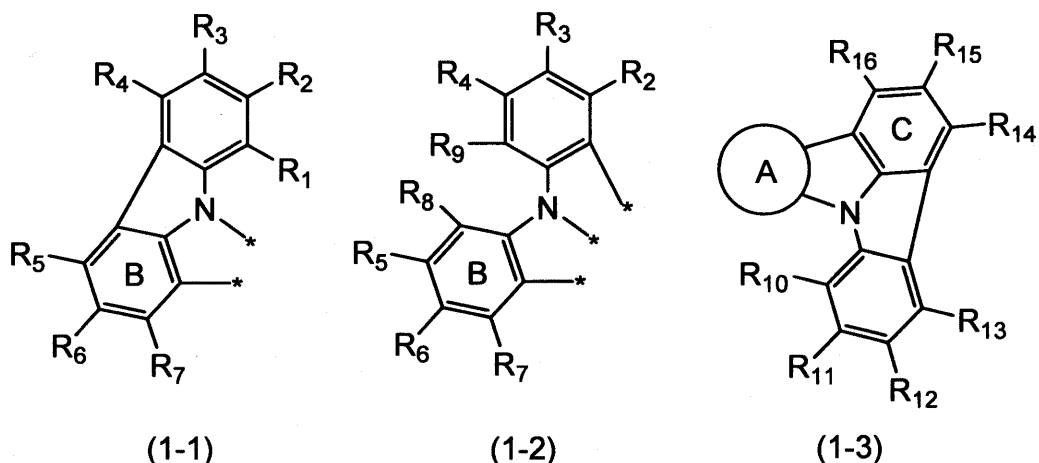
本発明の一態様によれば、前記有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器が提供される。

【0009】

本発明の一態様によれば、下記式（1-1）及び（1-3）で表される化合物、又は下記式（1-2）及び（1-3）で表される化合物が提供される。

40

【化 3】



(前記式(1-1)、前記式(1-2)及び前記式(1-3)中、

環Aは、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環、置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環、又は下記式(2)で表されるベンゼン環である。

前記式(1-1)の2つの結合手*は、それぞれ、前記環Aの前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

20

前記式(1-2)の3つの結合手*は、それぞれ、前記環Aの前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

$R_1 \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

30

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

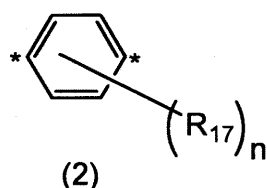
40

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

但し、前記環Aが前記式(2)で表されるベンゼン環である場合には、 $R_1 \sim R_{17}$ のうち少なくとも1つは、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である；又は、 $R_1 \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の少なくとも1組が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。))

50

【化 4】



(前記式 (2) 中、

2つの*の環形成炭素原子の一方で、前記式 (1-1) 又は前記式 (1-2) のベンゼン環Bから延びる結合手が結合し、他方で前記式 (1-3) のベンゼン環Cから延びる結合手が結合する。

10

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7~50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})$

20

(R_{37})、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

n は1又は2の整数である。 n が2である場合、2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

30

【図面の簡単な説明】

【0010】

【図1】本発明の有機EL素子の一実施形態の概略構成を示す図である。

【図2】本発明の有機EL素子の別の実施形態の概略構成を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【0011】

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)、三重水素 (tritium)、を包含する。

【0012】

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、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、特筆し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、ピリジニル基は環形成炭素数5であり、フラニル基は環形成炭素数4である。また、ベンゼン環や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、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合 (スピロフルオレン環を含む)、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

40

50

【0013】

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、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、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手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、特筆し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、キナゾリン環は環形成原子数が10であり、フラン環の環形成原子数が5である。ピリジン環やキナゾリン環の炭素原子にそれぞれ結合している水素原子や置換基を構成する原子については、環形成原子数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の原子数は環形成原子数の数に含めない。

10

【0014】

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

【0015】

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

20

【0016】

「置換もしくは無置換の」という場合における「無置換」とは前記置換基で置換されておらず、水素原子が結合していることを意味する。

【0017】

本明細書における各置換基の具体例としては、以下のものが挙げられる。

無置換の炭素数1～50（好ましくは1～30、より好ましくは1～18、さらに好ましくは1～5）のアルキル基としては、例えば、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、 s -ブチル基、イソブチル基、 t -ブチル基、 n -ペンチル基、 n -ヘキシル基、 n -ヘプチル基、 n -オクチル基等が挙げられる。

30

【0018】

置換された炭素数1～50（好ましくは1～30、より好ましくは1～18、さらに好ましくは1～5）のアルキル基としては、例えば、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨード- t -ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロイソプロピル基、2, 3-ジニトロ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基、1-ピロリルメチル基、2-（1-ピロリル）エチル基、1-ヒ

40

50

ドロキシ-2-フェニルイソプロピル基、1-クロロ-2-フェニルイソプロピル基等が挙げられる。

【0019】

置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基は、上記アルキル基の水素原子の1つ以上がハロゲン原子で置換された基である。置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基としては、上記置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基において、1つ以上のハロゲン原子が置換した基が挙げられる。

【0020】

無置換の炭素数2～50（好ましくは2～30、より好ましくは2～18）のアルケニル基としては、ビニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、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、1, 2-ジメチルアリル基等が挙げられる。

10

【0021】

無置換の炭素数2～50（好ましくは2～30、より好ましくは2～18）のアルキニル基としては、エチニル基等が挙げられる。

【0022】

無置換の環形成炭素数3～50（好ましくは3～30、より好ましくは3～18、さらに好ましくは3～6）のシクロアルキル基としては、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、4-メチルシクロヘキシル基、1-アダマンチル基、2-アダマンチル基、1-ノルボルニル基、2-ノルボルニル基等が挙げられる。

20

【0023】

無置換の炭素数1～50（好ましくは1～30、より好ましくは1～18）のアルコキシ基は-OXで表され、Xとしては、例えば、上記の炭素数1～50のアルキル基が挙げられる。

【0024】

無置換の炭素数1～50の（好ましくは1～30、より好ましくは1～18）のアルキルチオ基は-SXで表され、Xとしては、例えば、上記の炭素数1～50のアルキル基が挙げられる。

【0025】

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）のアリール基としては、例えば、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントリル基、2-アントリル基、9-アントリル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、2-ビフェニルイル基、3-ビフェニルイル基、4-ビフェニルイル基、p-テルフェニル4-イル基、p-テルフェニル3-イル基、p-テルフェニル2-イル基、m-テルフェニル4-イル基、m-テルフェニル3-イル基、m-テルフェニル2-イル基、フルオレニル基等が挙げられる。

30

これらの中で、好ましくはフェニル基、ナフチル基、ビフェニルイル基、テルフェニル基、ピレニル基、フェナントリル基及びフルオレニル基であり、より好ましくはフェニル基、ナフチル基、ビフェニルイル基、テルフェニル基、ピレニル基及びフルオレニル基である。

40

【0026】

置換された環形成炭素数6～50（好ましくは6～30、より好ましくは6～18）のアリール基としては、例えば、o-トリル基、m-トリル基、p-トリル基、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、p-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、4-フェノキシフェニル基、4-メトキシフェニル基、3, 4-ジメトキシフェニル基、3, 4, 5-トリメトキシフェニル基、4-(フェニルスルファニル)フェニル基、4-(メチルスルファニル)フェニル基、N', N'-

50

ジメチル-N-フェニル基、2, 6-ジメチルフェニル基、(2-フェニルプロピル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントリル基、4'-メチルビフェニルイル基、4"-t-ブチル-p-テルフェニル4-イル基、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'-スピロビフルオレニル基、9, 9-ジ(4-メチルフェニル)フルオレニル基、9, 9-ジ(4-イソプロピルフェニル)フルオレニル基、9, 9-ジ(4-t-ブチルフェニル)フルオレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基等が挙げられる。

【0027】

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)のアリーレン基としては、例えば、上記に例示された環形成炭素数6~50のアリール基を構成する芳香族炭化水素環から形成される2価の基が挙げられる。

10

【0028】

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)のアリールオキシ基は-OYで表され、Yとしては、例えば、上記の環形成炭素数6~50のアリール基が挙げられる。

【0029】

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)のアリールチオ基は-SYで表され、Yとしては、例えば、上記の環形成炭素数6~50のアリール基が挙げられる。

【0030】

無置換の炭素数7~50(好ましくは7~30、より好ましくは7~18)のアラルキル基としては、例えば、ベンジル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-t-ブチル基、 α -ナフチルメチル基、1- α -ナフチルエチル基、2- α -ナフチルエチル基、1- α -ナフチルイソプロピル基、2- α -ナフチルイソプロピル基、 β -ナフチルメチル基、1- β -ナフチルエチル基、2- β -ナフチルエチル基、1- β -ナフチルイソプロピル基、2- β -ナフチルイソプロピル基等が挙げられる。

20

【0031】

置換された炭素数7~50(好ましくは7~30、より好ましくは7~18)のアラルキル基としては、例えば、p-メチルベンジル基、m-メチルベンジル基、o-メチルベンジル基、p-クロロベンジル基、m-クロロベンジル基、o-クロロベンジル基、p-ブロモベンジル基、m-ブロモベンジル基、o-ブロモベンジル基、p-ヨードベンジル基、m-ヨードベンジル基、o-ヨードベンジル基、p-ヒドロキシベンジル基、m-ヒドロキシベンジル基、o-ヒドロキシベンジル基、p-ニトロベンジル基、m-ニトロベンジル基、o-ニトロベンジル基、p-シアノベンジル基、m-シアノベンジル基、o-シアノベンジル基等が挙げられる。

30

【0032】

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1価の複素環基としては、ピロリル基、ピラジニル基、ピリジニル基、インドリル基、イソインドリル基、フリル基、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、ジベンゾチオフェニル基、キノリル基、イソキノリル基、キノキサリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、及びチエニル基等、並びにピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、インドール環、キノリン環、アクリジン環、ピロリジン環、ジオキサソール環、ペペリジン環、モルフォリン環、ピペラジン環、カルバゾール環、フラン環、チオフェン環、オキサゾール環、オキサジアゾール環、ベンゾオキサゾール環、チアゾール環、チアジアゾール環、ベンゾチアゾール環、トリアゾール環、イミダゾール環、ベンゾイミダゾール環、ピラン環、ジベンゾフラン環、ベンゾ[a]ジベンゾフラン環、ベンゾ[b]ジベンゾフラン環及びベンゾ[c]ジベンゾフラン環、1, 3-ベンゾジオキサソール環、2, 3-ジヒドロ-1, 4-ベンゾジオキシン環、フェナントロ[4, 5-bcd]フラン環、ベンゾフ

40

50

エノキサジン環等から形成される 1 価の基が挙げられる。

尚、複素環基を構成するヘテロ原子としては、S、O 及び N 等のヘテロ原子の他、Si、Ge 及び Se 等のヘテロ原子も挙げられる。

【0033】

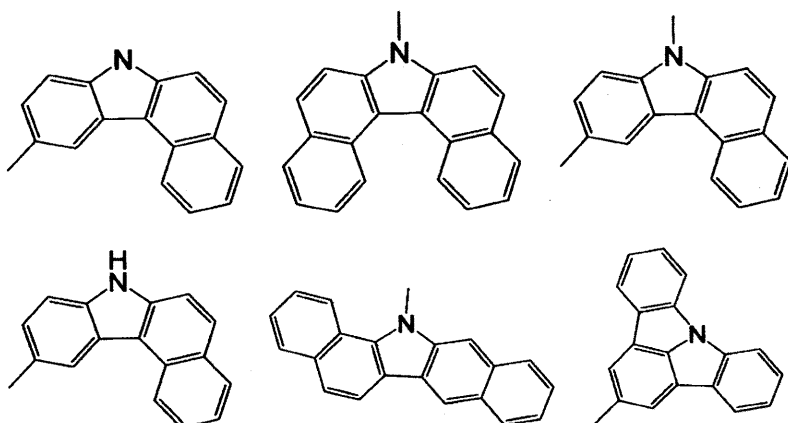
無置換の環形成原子数 5～50（好ましくは 5～30、より好ましくは 5～18）の 2 価の複素環基としては、上記に例示された基及び 1 価の複素環等から形成される 2 価の基が挙げられる。

【0034】

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基としては、以下の基も含まれる。また、環形成原子数 5～50 の 2 価の複素環基としては、以下の基を 2 価の基にした基も含まれる。

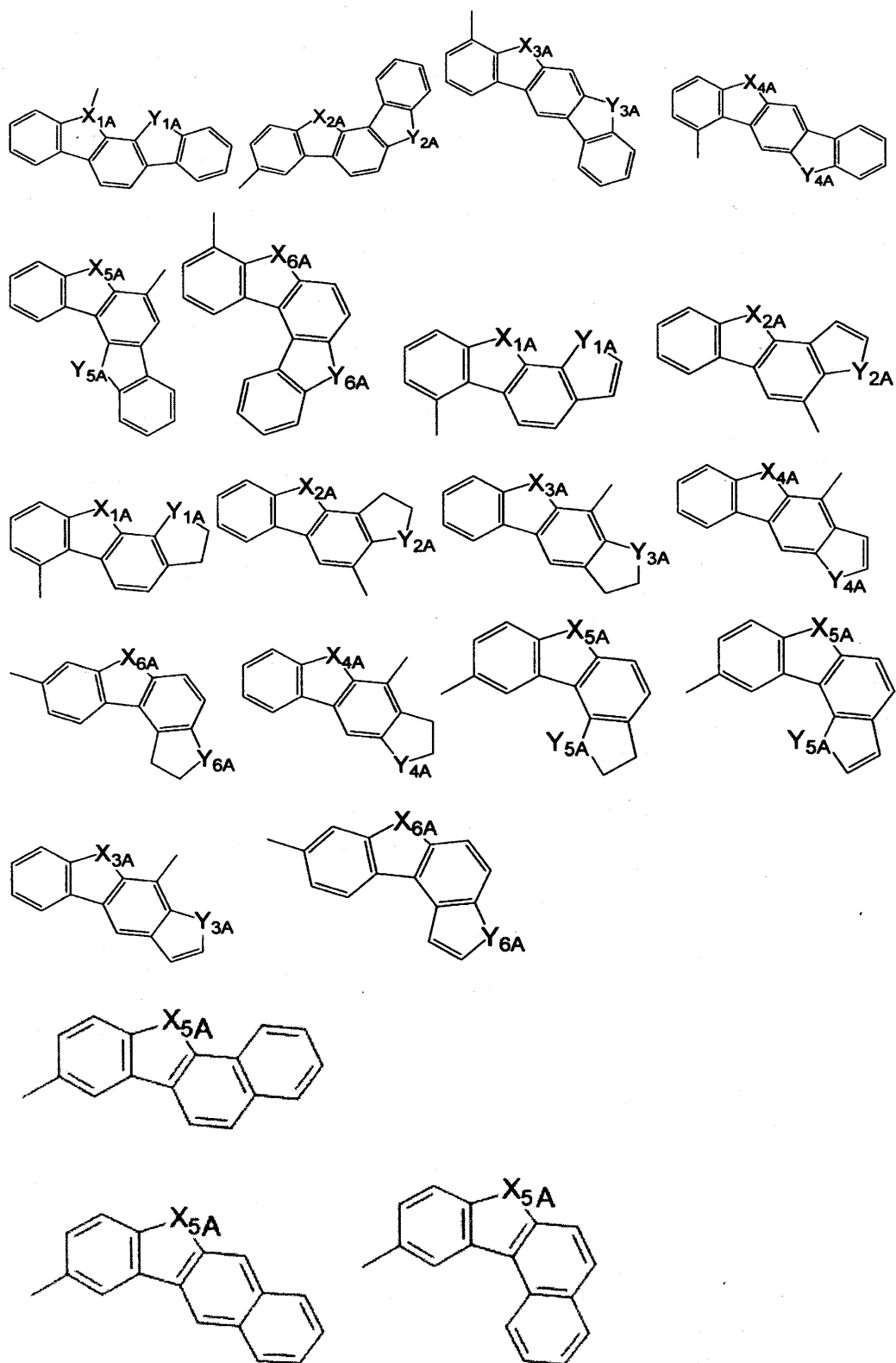
【0035】

【化 5】



【0036】

【化 6】



(式中、X_{1A}~X_{6A}、Y_{1A}~Y_{6A}はそれぞれ酸素原子、硫黄原子、-NZ-基、又は-NH-基である。Zは、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の1価の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基である。Zが2以上存在する場合、2以上のZは同一でもよく、異なってもよい。)

【0037】

ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等が挙げられる。

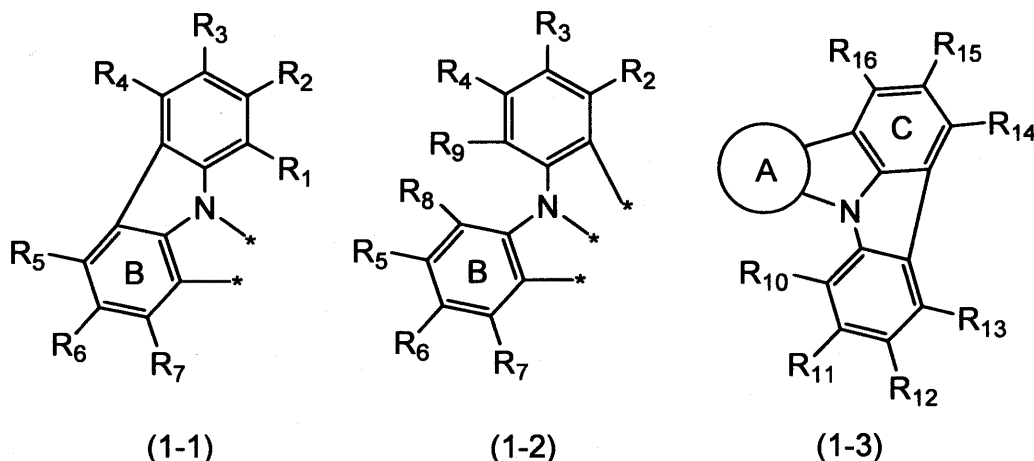
【0038】

<有機エレクトロルミネッセンス素子>

本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子は、陰極と、陽極と、前記陰極と前記陽極との間に配置された少なくとも1層の有機層と、を有する。

上記少なくとも1層の有機層のうちの少なくとも1層が、下記式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は下記式(1-2)及び(1-3)で表される化合物を含む。

【化7】



(前記式(1-1)、前記式(1-2)及び前記式(1-3)中、

環Aは、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環、置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環、又は下記式(2)で表されるベンゼン環である。

前記式(1-1)の2つの結合手*は、それぞれ、前記環Aの前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

前記式(1-2)の3つの結合手*は、それぞれ、前記環Aの前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

R₁～R₁₆のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないR₁～R₁₆は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

R₃₁～R₃₇は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

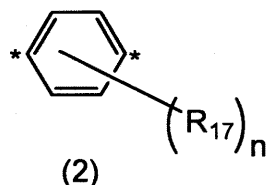
30

40

50

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。）

【化 8】



（前記式（2）中、

2つの*の環形成炭素原子の一方で、前記式（1-1）又は前記式（1-2）のベンゼン環Bから延びる結合手が結合し、他方で前記式（1-3）のベンゼン環Cから延びる結合手が結合する。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-\text{Si}$ (R_{31}) (R_{32}) (R_{33})、 $-\text{C}(=\text{O}) R_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}$ (R_{36})

(R_{37})、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

n は1又は2の整数である。 n が2である場合、2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。）

【0039】

式（1-1）、式（1-2）及び式（1-3）において、縮合アリール環とは、複数の芳香族環が縮合した環である。従って、例えば、2つの芳香族環が単結合で結合したビフェニルは縮合アリール環に含まれない。

式（1-1）、式（1-2）及び式（1-3）において、縮合複素環とは、複数の複素環が縮合した環、又は複素環と芳香族環が縮合した環である。

【0040】

「 $R_1 \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい」について説明する。

「 $R_1 \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の1組」は、例えば、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_3 と R_4 、 R_5 と R_6 、 R_6 と R_7 、 R_1 と R_2 と R_3 等の組合せである。

上記飽和又は不飽和の環に対する「置換もしくは無置換の」の「置換」のときの置換基は、後述する「置換もしくは無置換の」という場合における置換基と同様である。

【0041】

「飽和又は不飽和の環」とは、例えば R_1 と R_2 で環を形成する場合には、 R_1 が結合する炭素原子と、 R_2 が結合する炭素原子と、1以上の任意の元素とで形成する環を意味する。具体的には、 R_1 と R_2 で環を形成する場合において、 R_1 が結合する炭素原子と、 R_2 が結合する炭素原子と、4つの炭素原子とで不飽和の環を形成する場合、 R_1 と R

10

20

30

40

50

₂とで形成する環はベンゼン環となる。

【0042】

「任意の元素」は、好ましくは、C元素、N元素、O元素、S元素である。任意の元素において（例えばC元素又はN元素の場合）、環を形成しない結合手は、水素原子等で終端されてもよい。

「1以上の任意の元素」は、好ましくは2個以上15個以下、より好ましくは3個以上12個以下、さらに好ましくは、3個以上5個以下の任意の元素である。

以下、「X～Yのうち隣接する2つ以上の1組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい」という表現は、Xを上記R₁に、Yを上記R₁₆に置き換えたときと同じ意味である。

【0043】

以下、式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、及び式(1-2)及び(1-3)で表される化合物について説明する。

【0044】

式(1-1)中の「*」（アスタリスク）は、式(1-3)の環Aと結合する結合手である。式(1-1)には、2つの「*」があるが、2つの「*」は、それぞれ、環Aの縮合アリール環の環形成炭素原子、縮合複素環の環形成原子、又は式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合して、化合物を構成する。

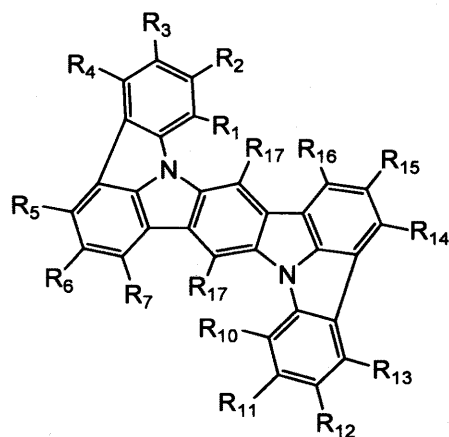
式(1-2)中の「*」（アスタリスク）も、式(1-3)の環Aと結合する結合手である。式(1-2)には、3つの「*」があるが、3つの「*」は、それぞれ、環Aの縮合アリール環の環形成炭素原子、縮合複素環の環形成原子、又は式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合して、化合物を構成する。

式(2)中の「*」（アスタリスク）は、結合位置を示す。2つの*の環形成炭素原子の一方で、式(1-1)又は式(1-2)のベンゼン環Bから延びる結合手が結合し、他方で式(1-3)のベンゼン環Cから延びる結合手が結合する。

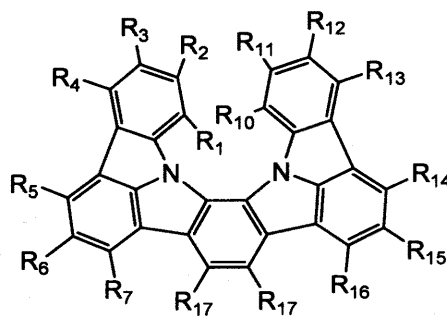
【0045】

一実施形態においては、式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は式(1-2)及び(1-3)で表される化合物は、下記式(3)、式(4)又は式(5)で表される化合物である。

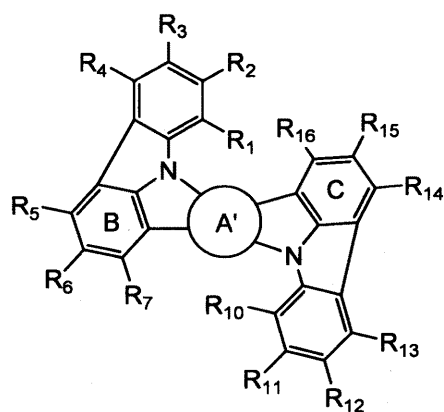
【化 9】



(3)



(4)



(5)

(式 (3)、式 (4) 及び式 (5) 中、

環 A' は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10～50 の縮合アリール環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8～50 の縮合複素環である。

30

R₁～R₇ 及び R₁₀～R₁₇ は、式 (1-1)、式 (1-2)、式 (1-3) 及び式 (2) で定義した通りである。)

【0046】

一実施形態においては、式 (1-3) の環 A 及び式 (5) の環 A' の置換もしくは無置換の環形成炭素数 10～50 の縮合アリール環は、置換もしくは無置換のナフタレン環、又は置換もしくは無置換のフルオレン環である。

【0047】

一実施形態においては、式 (1-3) の環 A 及び式 (5) の環 A' の置換もしくは無置換の環形成炭素数 10～50 の縮合アリール環の環形成炭素数は、例えば、10～30、10～20 又は 10～14 であってもよく、当該縮合アリール環の具体例としては、置換もしくは無置換のナフタレン環、置換もしくは無置換のアントラセン環、又は置換もしくは無置換のフルオレン環が挙げられる。

40

【0048】

一実施形態においては、式 (1-3) の環 A 及び式 (5) の環 A' の置換もしくは無置換の環形成原子数 8～50 の縮合複素環は、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である。

【0049】

一実施形態においては、式 (1-3) の環 A 及び式 (5) の環 A' の置換もしくは無置換の環形成原子数 8～50 の縮合複素環は、置換もしくは無置換のジベンゾフラン骨格含

50

有構造（例えば、置換もしくは無置換のジベンゾフラン、置換もしくは無置換のナフトベンゾフラン、置換もしくは無置換のジナフトフラン等）、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフエン骨格含有構造（例えば、置換もしくは無置換のジベンゾチオフエン、置換もしくは無置換のナフトベンゾチオフエン、置換もしくは無置換のジナフトチオフエン等）である。

【0050】

一実施形態においては、式（1-3）の環A及び式（5）の環A'の置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環は、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフエン環である。

【0051】

一実施形態においては、式（1-3）の環A及び式（5）の環A'の置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環は、置換のカルバゾール骨格含有構造（例えば置換のカルバゾール環）であり、置換基は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。上記置換基のアリール基又は1価の複素環基は上記カルバゾール環と結合しない。

【0052】

一実施形態においては、式（1-3）の環A及び式（5）の環A'の置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環は、置換のカルバゾール骨格含有構造（例えば置換のカルバゾール環）であり、当該カルバゾール骨格含有構造はカルバゾール環の9位に置換基を有し、当該置換基は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基であり、当該置換基が無置換のフェニル基である場合、当該無置換のフェニル基が当該カルバゾール骨格含有構造と結合することはない。

【0053】

一実施形態においては、式（5）で表される化合物において、R₅とR₆、R₆とR₇、R₁₄とR₁₅、及びR₁₅とR₁₆のうち少なくとも1組が置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。当該形成される環構造としては、環B又は環Cを一端とする置換もしくは無置換のフルオレン環構造、又は環B又は環Cを一端とする置換もしくは無置換のナフタレン環構造等が挙げられる。

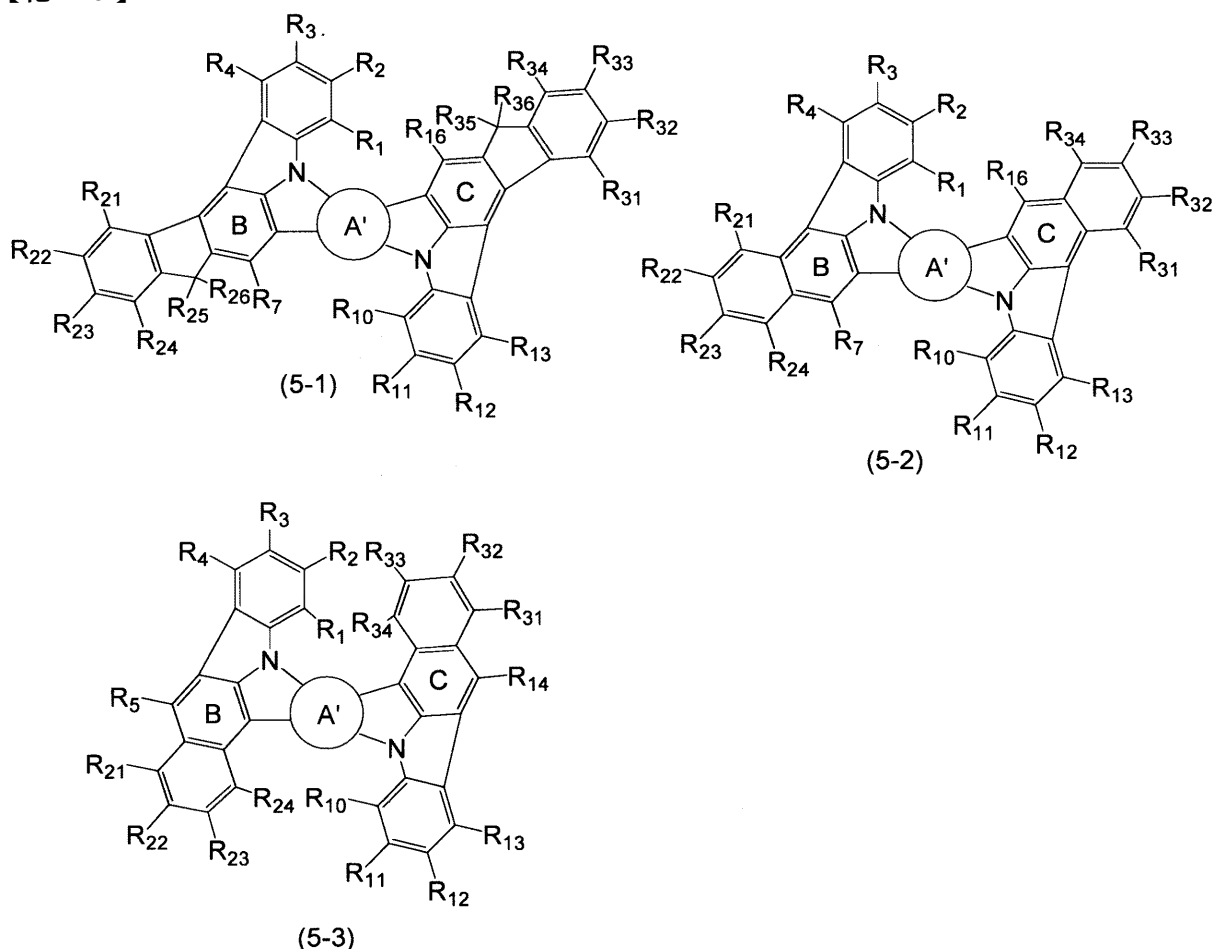
【0054】

一実施形態においては、式（5）で表される化合物において、R₁とR₂、R₂とR₃、R₃とR₄、R₁₀とR₁₁、R₁₁とR₁₂、及びR₁₂とR₁₃のうち少なくとも1組が置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。当該形成される環構造としては、R₁～R₄が結合するベンゼン環又はR₁₀～R₁₃が結合するベンゼン環を一端とする置換もしくは無置換のフルオレン環構造、又はR₁～R₄が結合するベンゼン環又はR₁₀～R₁₃が結合するベンゼン環を一端とする置換もしくは無置換のナフタレン環構造等が挙げられる。

【0055】

一実施形態においては、式（5）で表される化合物は下記式（5-1）～（5-3）のいずれかで表される化合物である。

【化 10】



(式 (5-1) ~ (5-3) 中、

環 A' は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合アリール環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合複素環である。

R₁ ~ R₅、R₇、R₁₀ ~ R₁₄、R₁₆ は、式 (1-1)、式 (1-2)、式 (1-3) 及び式 (2) で定義した通りである。

30

R₂₁ ~ R₂₆、及び R₃₁ ~ R₃₆ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、-Si(R₃₁)(R₃₂)(R₃₃)、-C(=O)R₃₄、-COOR₃₅、-N(R₃₆)(R₃₇)、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

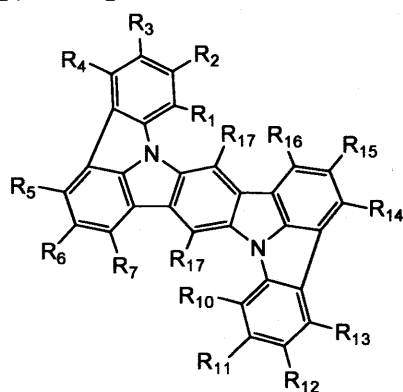
40

R₃₁ ~ R₃₇ は、式 (1-1)、式 (1-2)、式 (1-3) 及び式 (2) で定義した通りである。

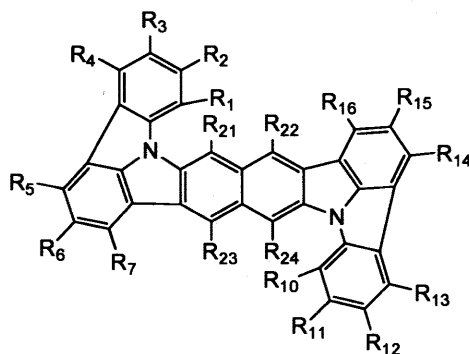
【0056】

一実施形態においては、式 (1-1) 及び (1-3) で表される化合物、又は式 (1-2) 及び (1-3) で表される化合物は、下記式 (6-1) ~ 式 (6-7) で表される化合物からなる群から選択される。

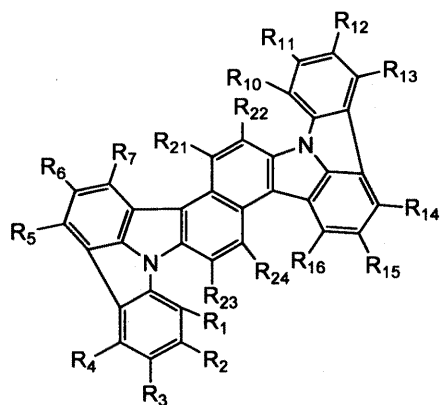
【化 1 1】



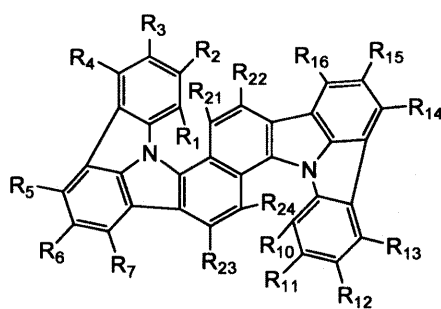
(6-1)



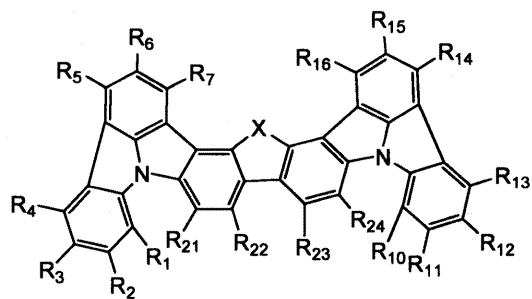
(6-2)



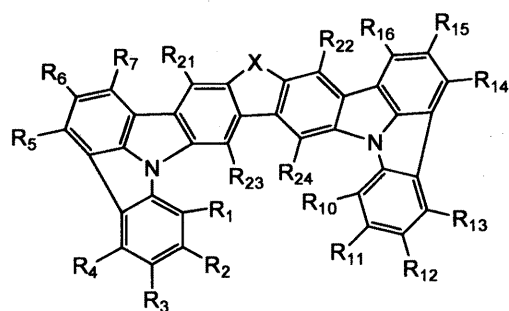
(6-3)



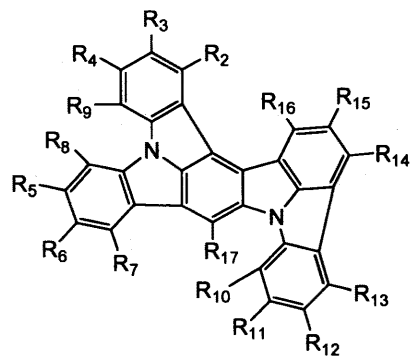
(6-4)



(6-5)



(6-6)



(6-7)

(式(6-1)～(6-7)中、

$R_1 \sim R_{17}$ は、式(1-1)、式(1-2)、式(1-3)及び式(2)で定義した通りである。

Xは、O、NR₂₅、又はC(R₂₆)(R₂₇)である。

R₂₁～R₂₇のうち隣接する2つ以上の1組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないR₂₁～R₂₇は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

10

R₃₁～R₃₇は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

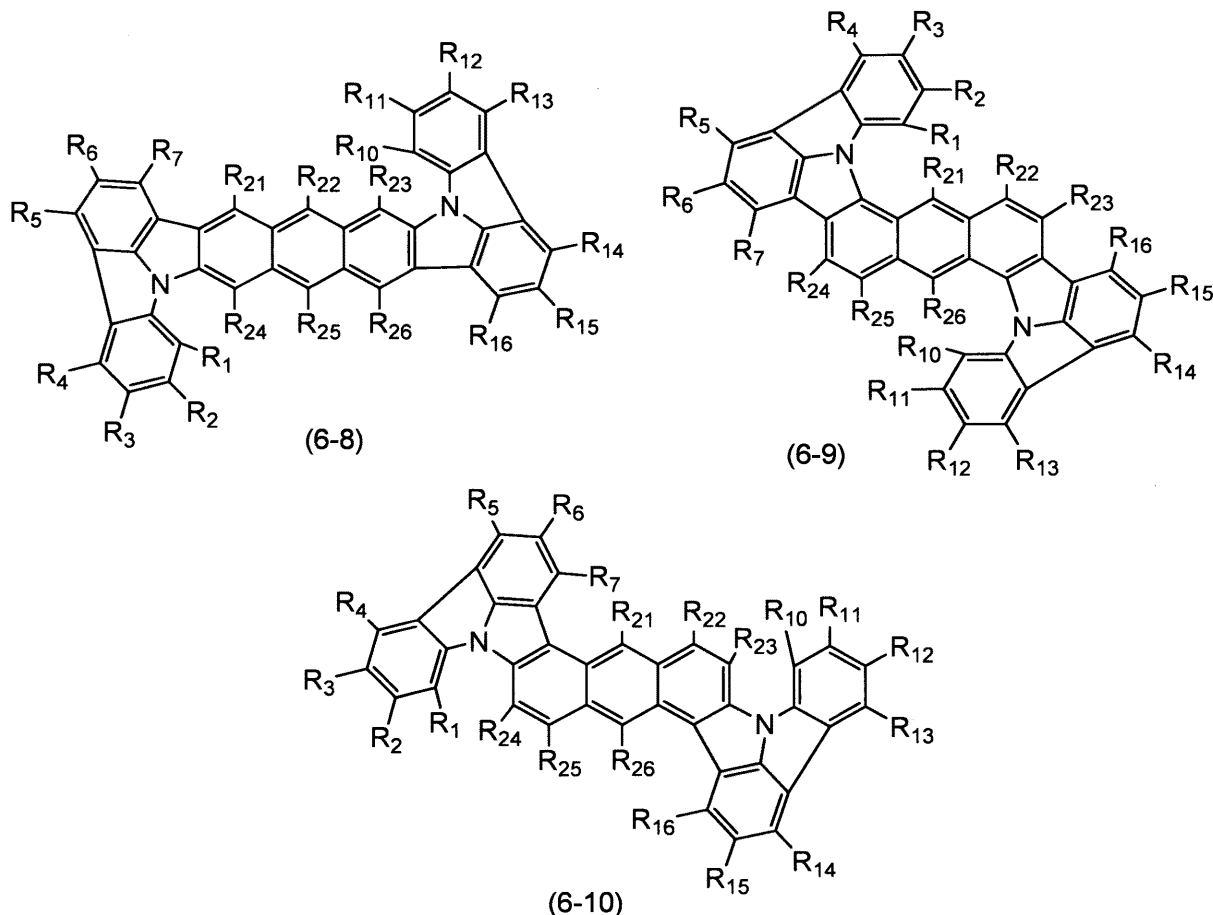
20

R₃₁～R₃₇のそれぞれが複数存在する場合、複数存在するR₃₁～R₃₇のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【0057】

一実施形態においては、式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は式(1-2)及び(1-3)で表される化合物は、下記式(6-8)～式(6-10)で表される化合物からなる群から選択される。

【化12】



(式(6-8)～(6-10)中、

$R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ は、式(1-1)、式(1-2)、式(1-3)及び式(2)で定義した通りである。

$R_{21} \sim R_{26}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{21} \sim R_{26}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

10

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

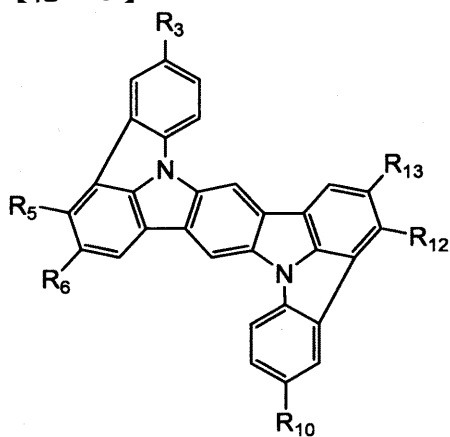
20

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【0058】

一実施形態においては、式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は式(1-2)及び(1-3)で表される化合物は、下記式(3-2)で表される化合物である。

【化13】



(3-2)

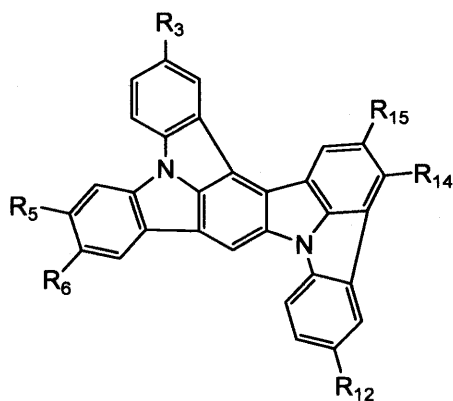
(式(3-2)中、

R_3 、 R_5 、 R_6 、 R_{10} 、 R_{12} 及び R_{13} は、式(1-1)及び式(1-3)で定義した通りである。)

【0059】

一実施形態においては、式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は式(1-2)及び(1-3)で表される化合物は、下記式(7)で表される化合物である。

【化 1 4】



(7)

(式 (7) 中、

R_3 、 R_5 、 R_6 、 R_{12} 、 R_{14} 及び R_{15} は、式 (1-2) 及び式 (1-3) で定義した通りである。)

【0060】

一実施形態においては、 $R_1 \sim R_{17}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、及び置換もしくは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。

20

【0061】

一実施形態においては、 $R_1 \sim R_{17}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5～18 の複素環基からなる群から選択される。

【0062】

式 (1-1) 及び (1-3) で表される化合物、及び式 (1-2) 及び (1-3) で表される化合物における、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、炭素数 1～50 のアルキル基、炭素数 1～50 のハロアルキル基、炭素数 2～50 のアルケニル基、炭素数 2～50 のアルキニル基、環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、炭素数 1～50 のアルコキシ基、炭素数 1～50 のアルキルチオ基、環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{41})(R_{42})(R_{43})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{44}$ 、 $-\text{COOR}_{45}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2R_{46}$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(R_{47})(R_{48})$ 、 $-\text{Ge}(R_{49})(R_{50})$

30

(R_{51}) 、 $-\text{N}(R_{52})(R_{53})$ (ここで、 $R_{41} \sim R_{53}$ は、それぞれ独立に、水素原子、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、又は環形成原子数 5～50 の複素環基である。 $R_{41} \sim R_{53}$ が 2 以上存在する場合、2 以上の $R_{41} \sim R_{53}$ のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。)、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、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 1 価の複素環基からなる群から選択される。

【0063】

一実施形態においては、式 (1-1) 及び (1-3) で表される化合物、及び式 (1-2) 及び (1-3) で表される化合物における「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 1 価の複素環基である。

40

【0064】

一実施形態においては、式 (1-1) 及び (1-3) で表される化合物、及び式 (1-2) 及び (1-3) で表される化合物における「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 1 価の複素環基からなる群から選択される。

【0065】

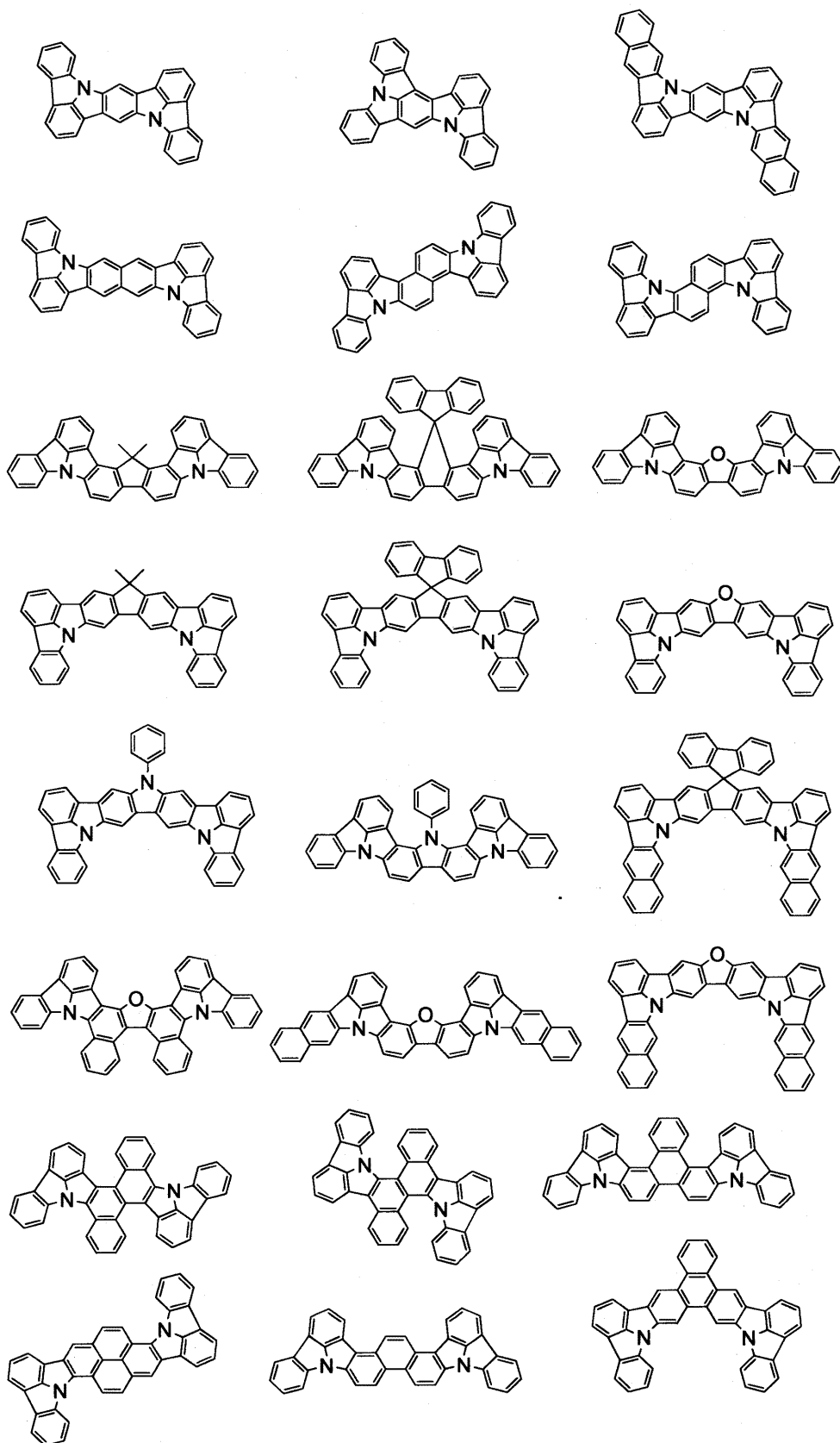
50

式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、及び式(1-2)及び(1-3)で表される化合物の各置換基、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基及びハロゲン原子の具体例は、それぞれ前述したものと同様である。

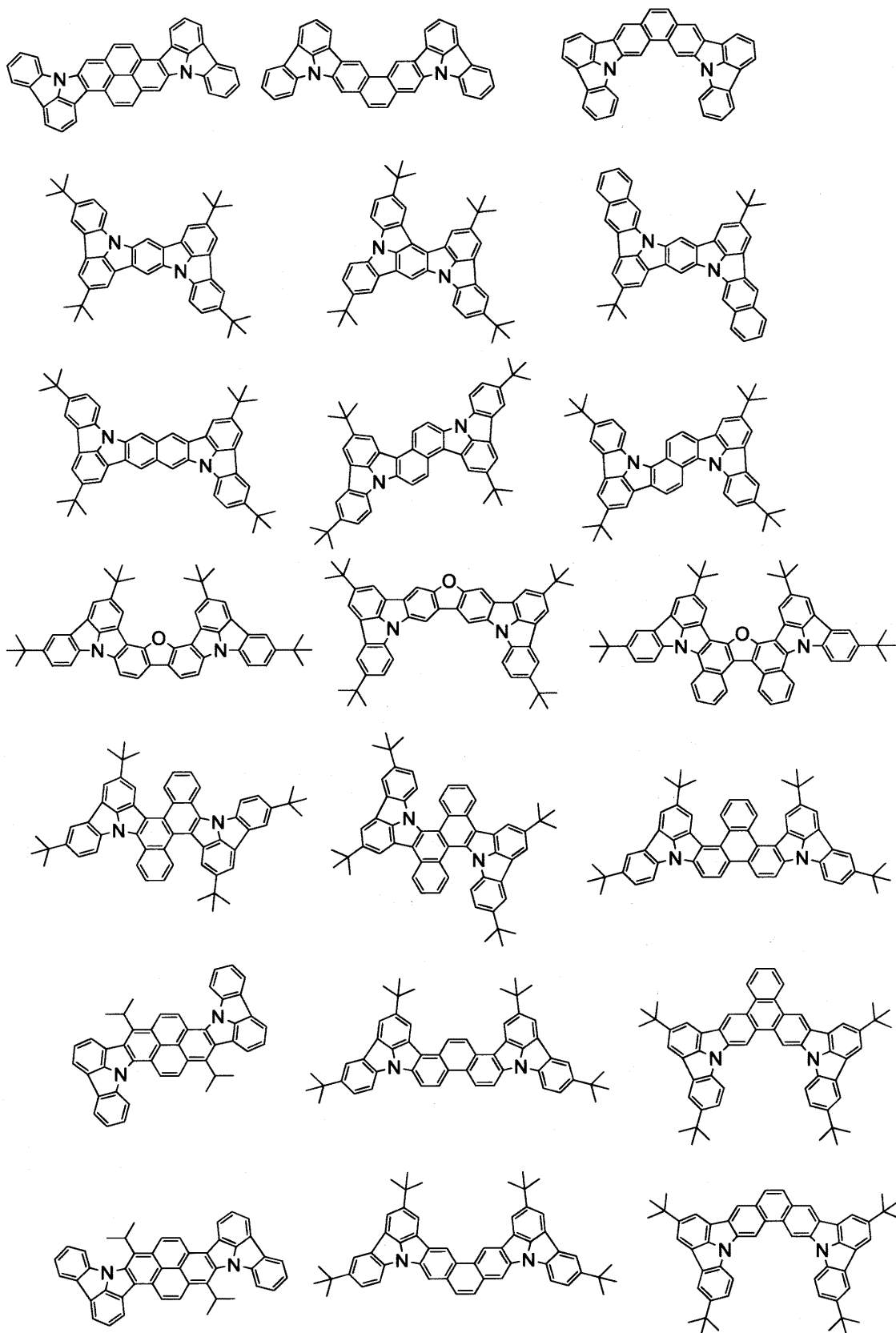
【0066】

式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、及び式(1-2)及び(1-3)で表される化合物の具体例としては、例えば、以下に示す化合物が挙げられる。

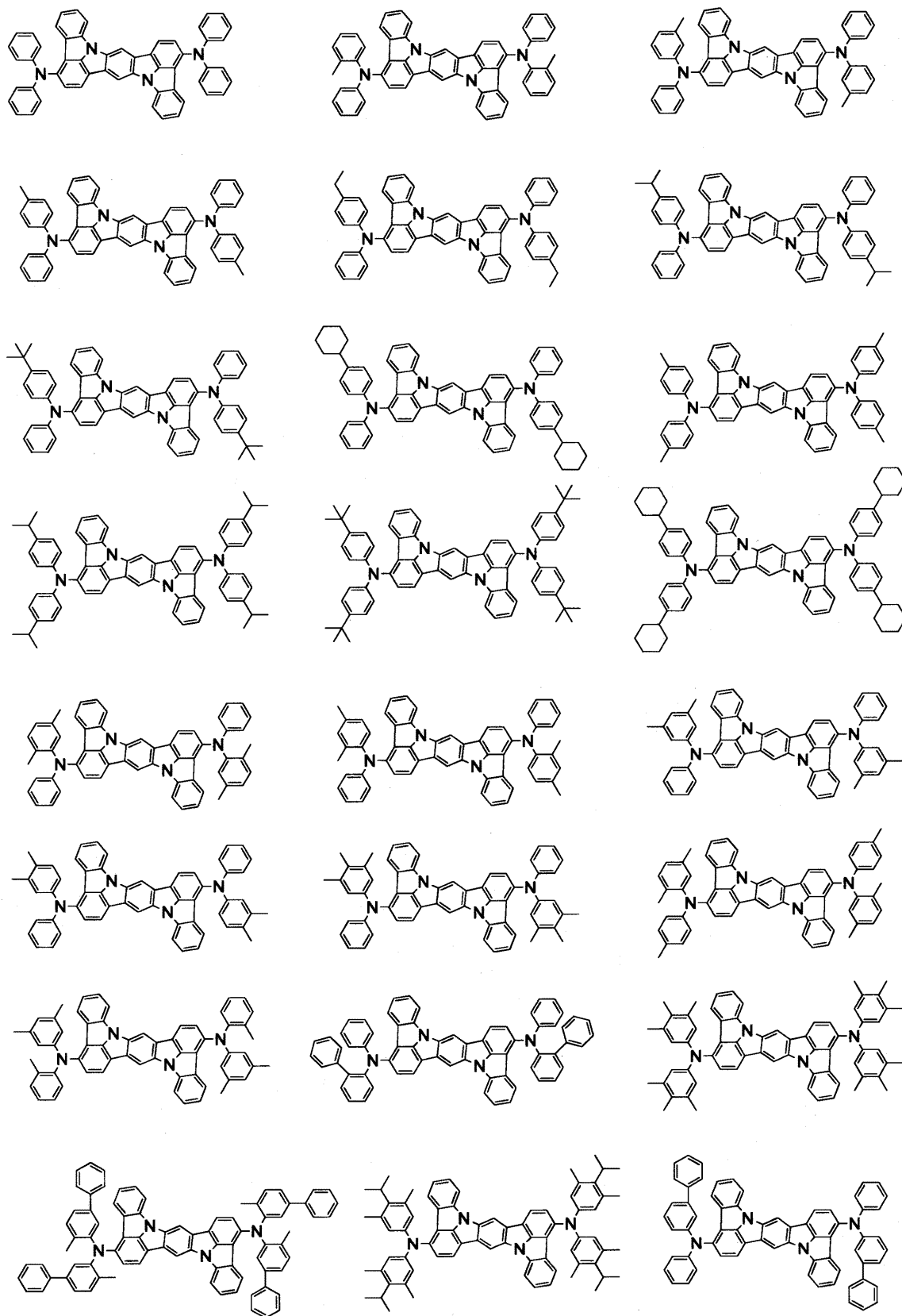
【化 15】



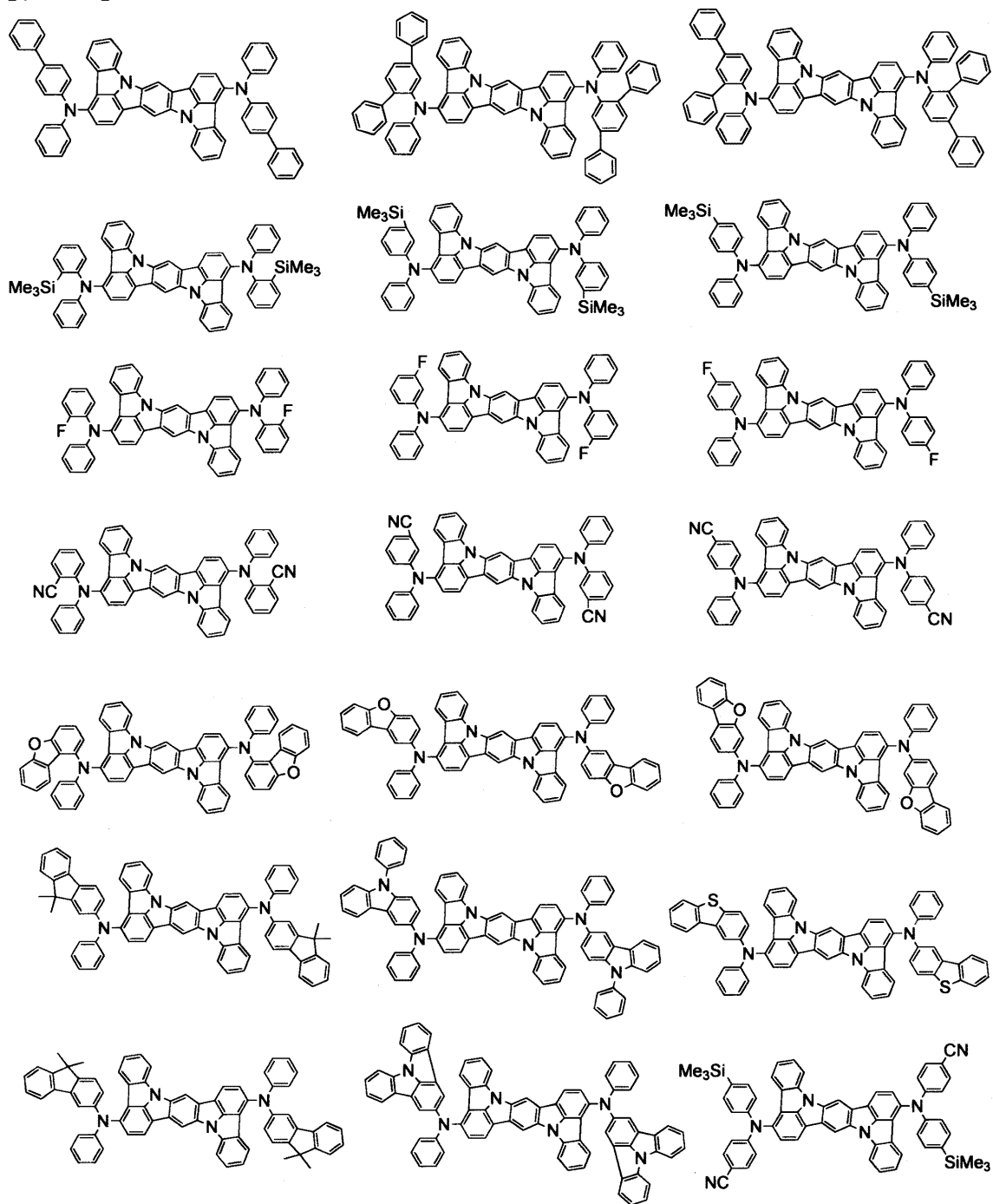
【化 1 6】



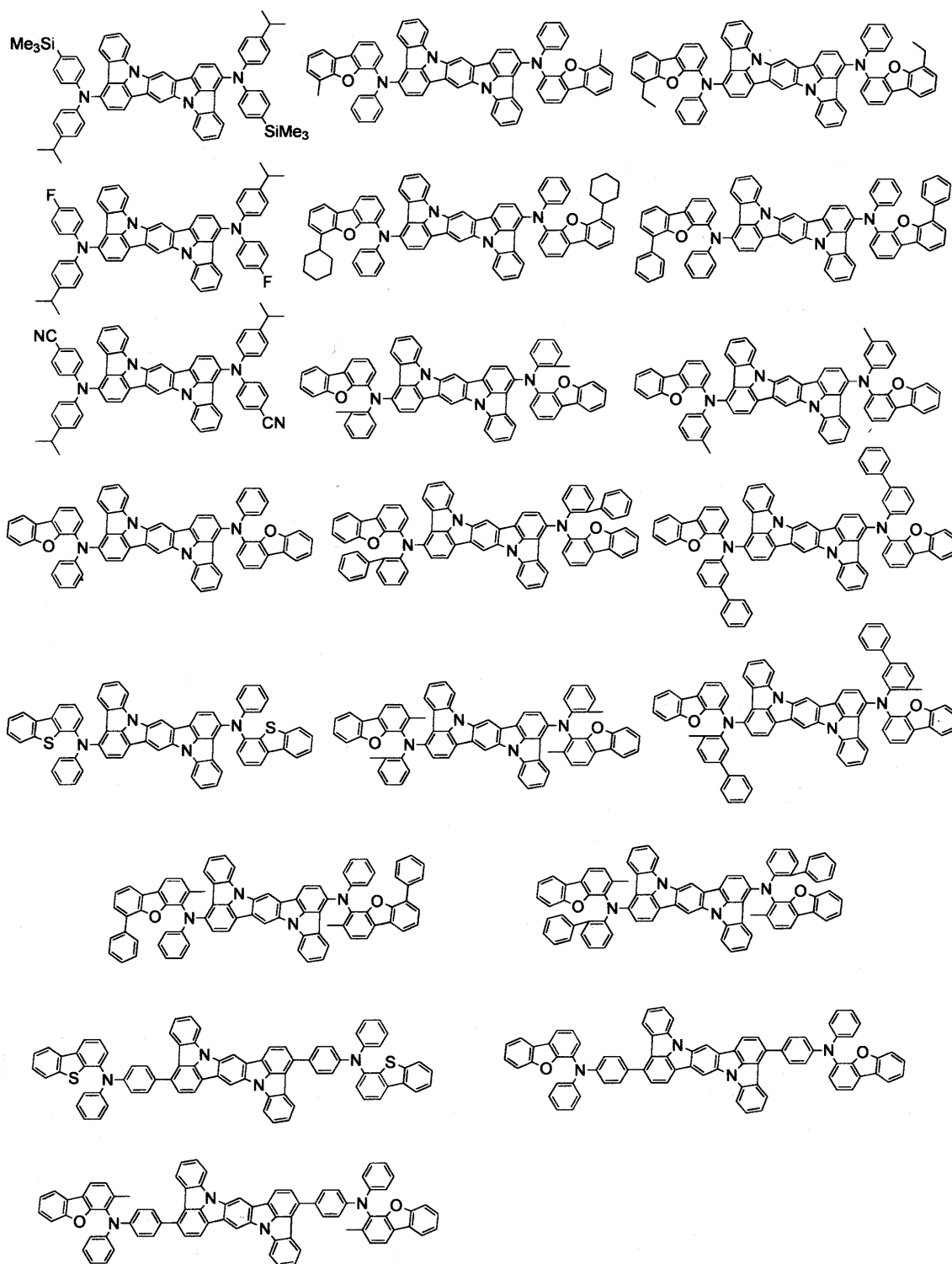
【化 17】



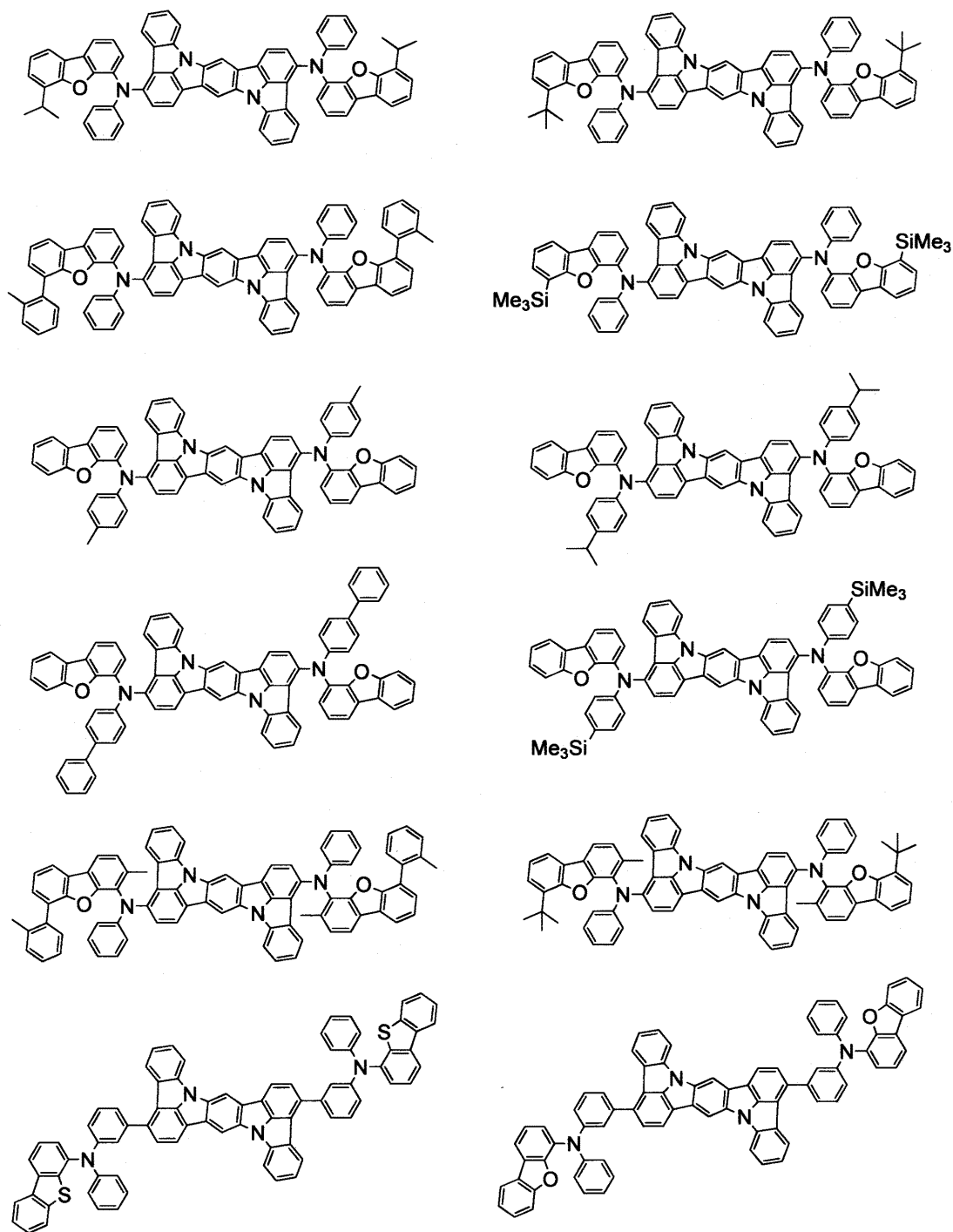
【化 18】



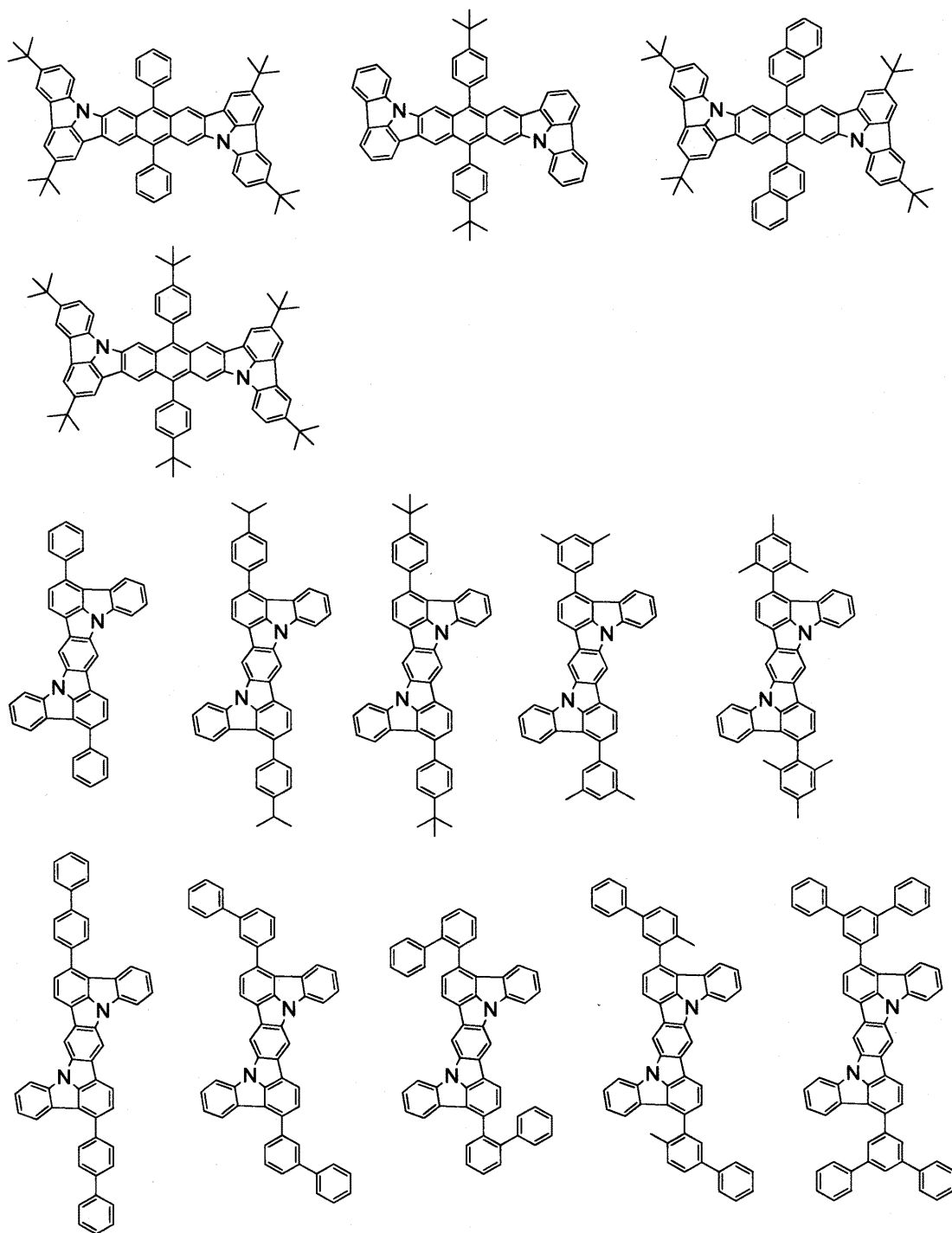
【化 19】



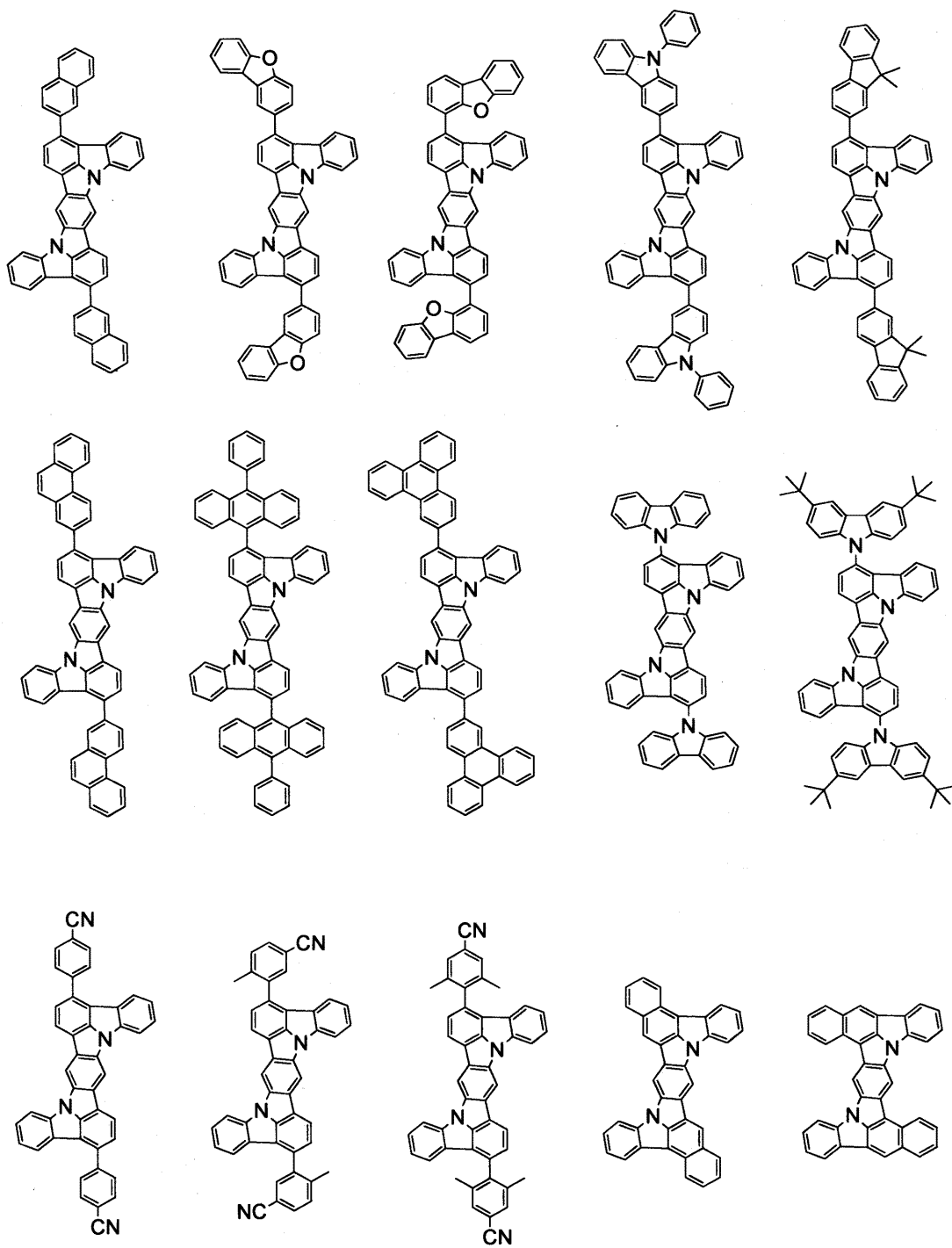
【化 20】



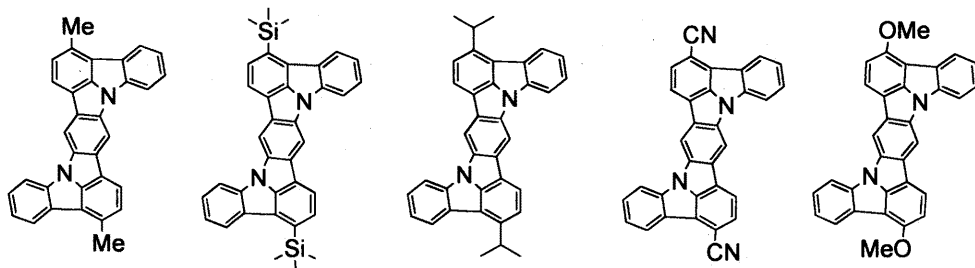
【化 2 1】



【化 2 2】

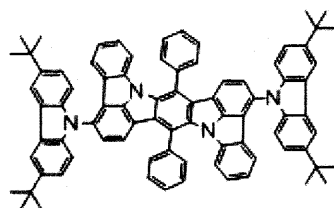
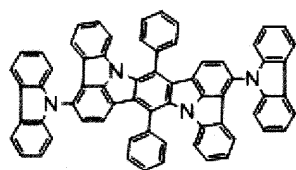
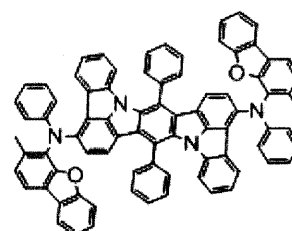
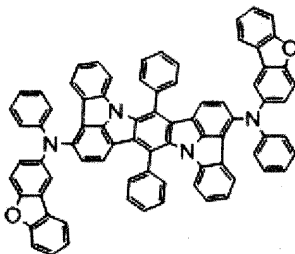
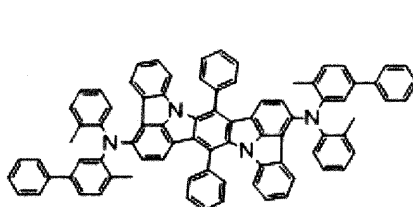
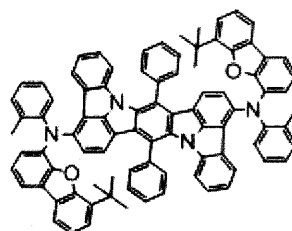
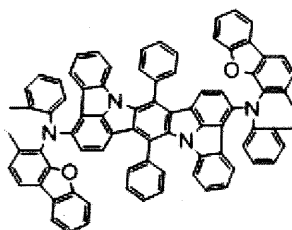
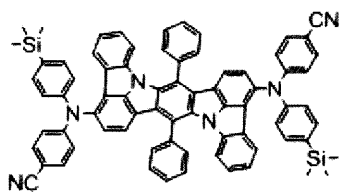
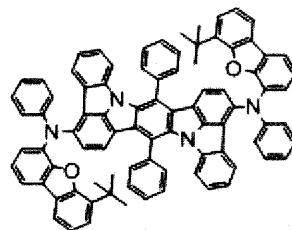
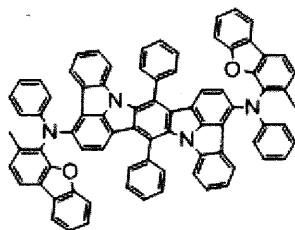
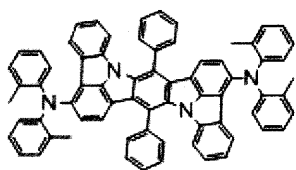
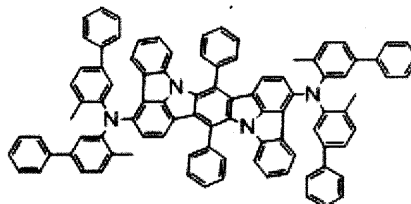
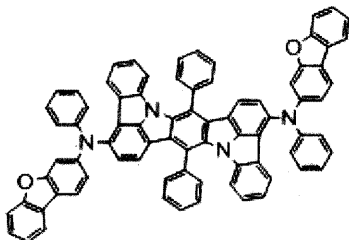
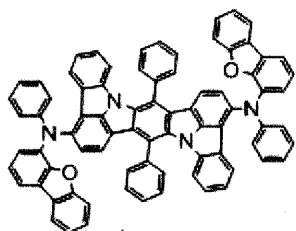
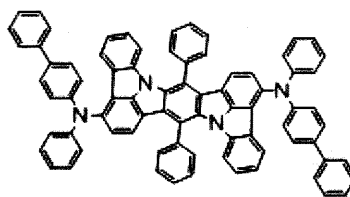
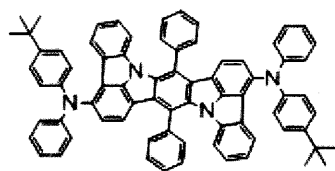


【化 2 3】

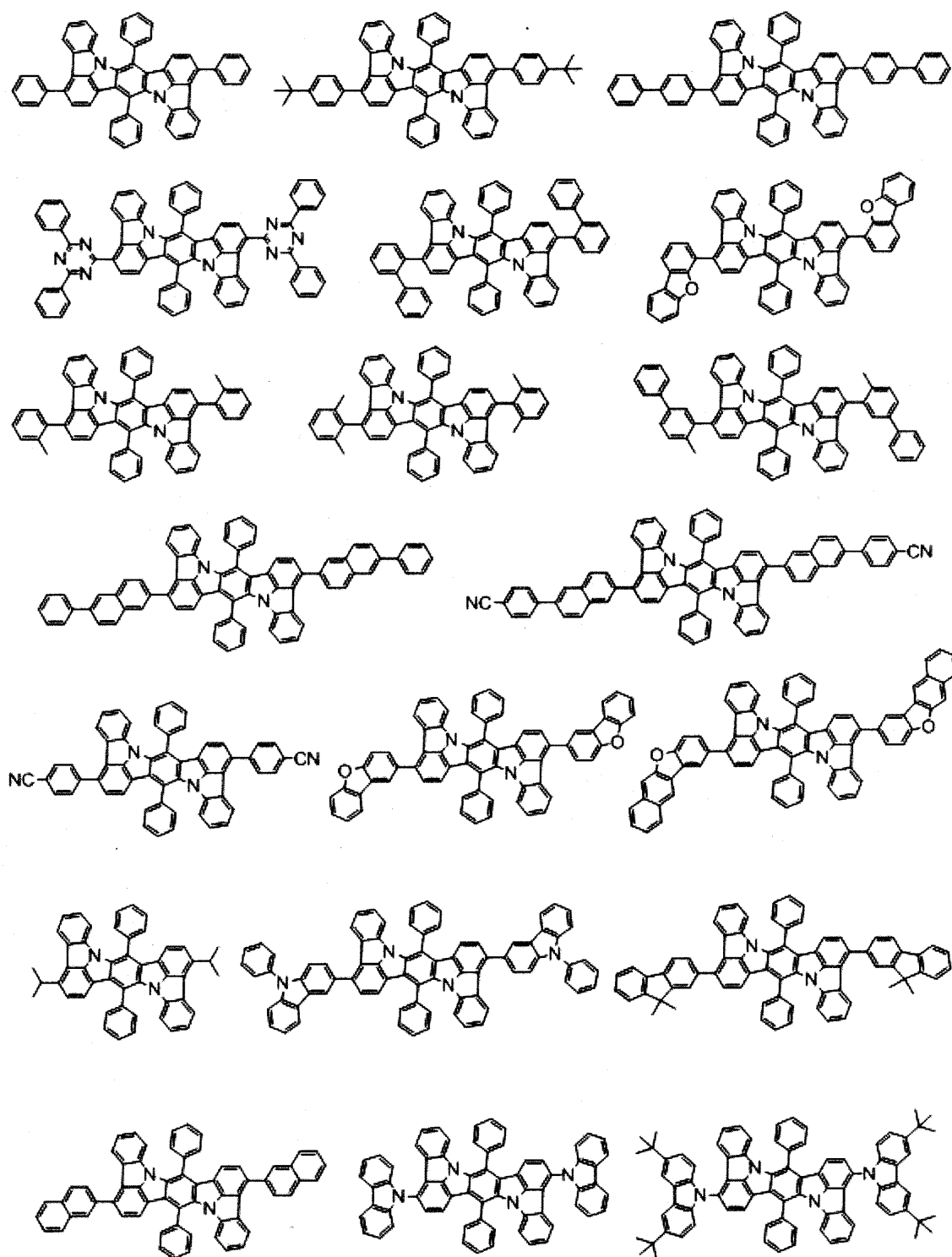


【化 24】

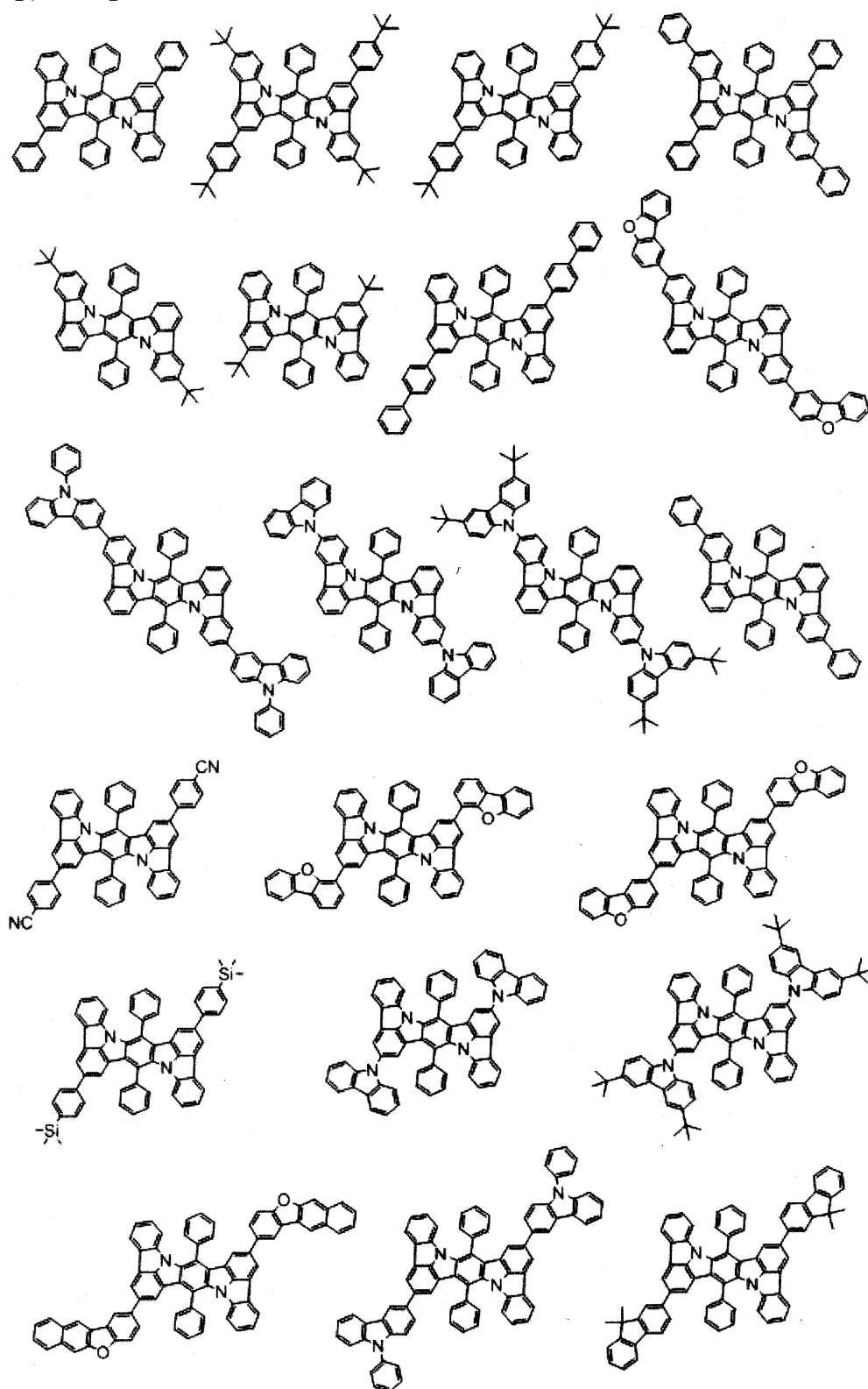
The chemical structure of compound 24 is a bis-indole derivative. It features a central benzene ring substituted at the 1 and 3 positions with two indole-3-yl groups. Each indole-3-yl group is further substituted at its 6-position with a diphenylamino group (-NPh₂). The overall structure is symmetrical.



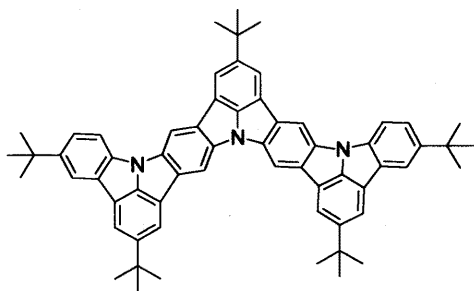
【化 2 5】



【化 2 6】

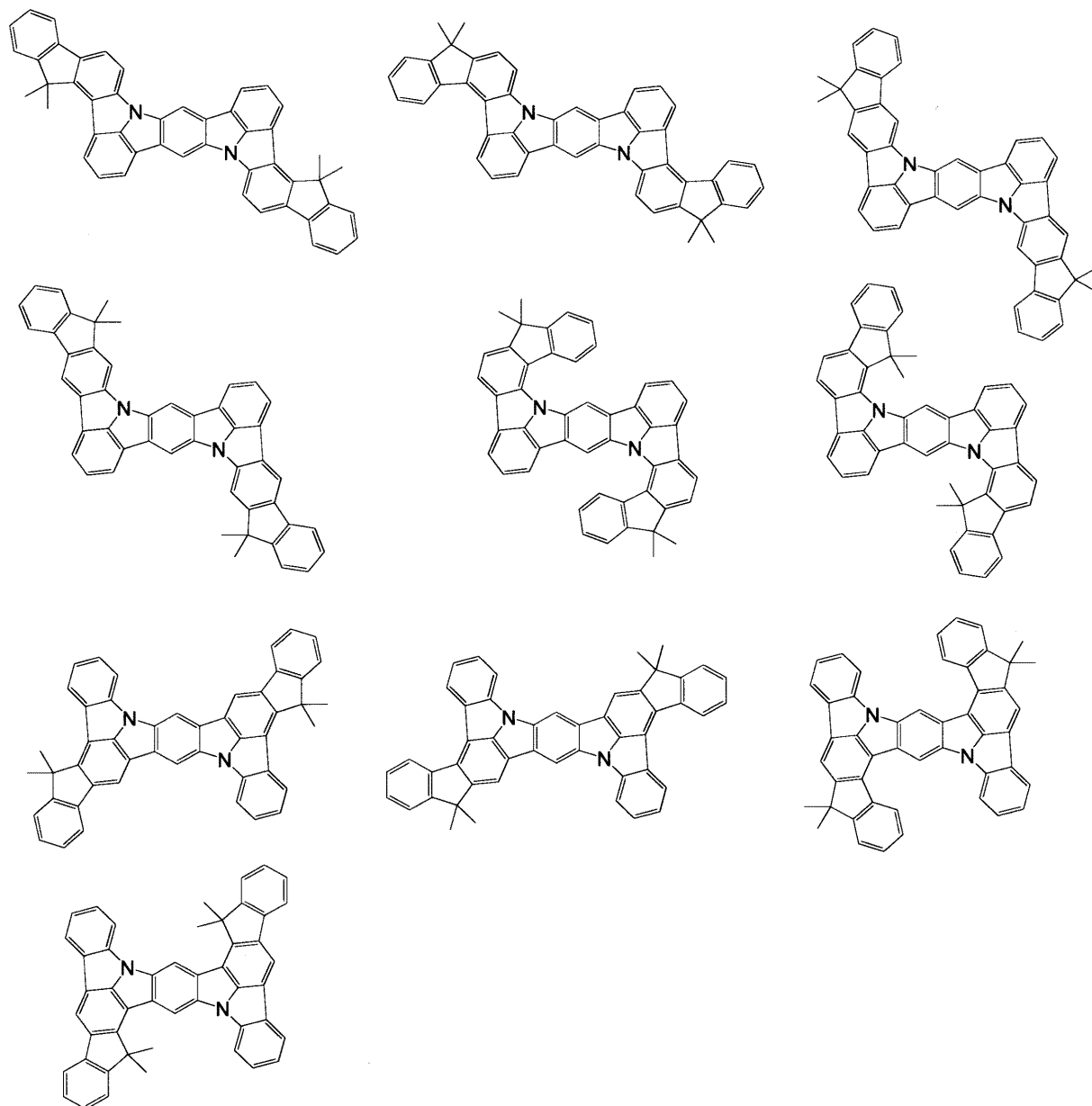


【化 2 7】

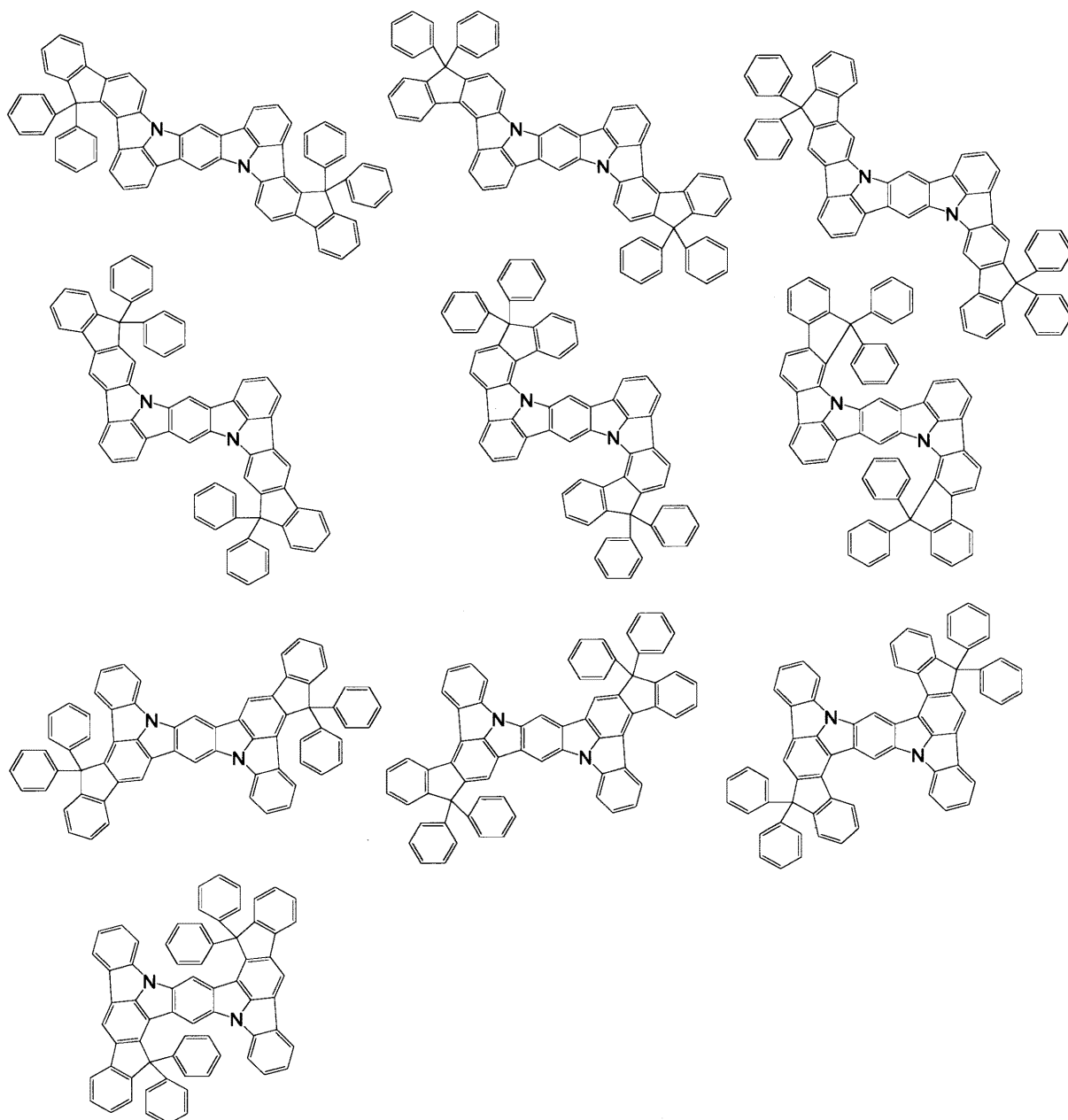


【化 2 8】

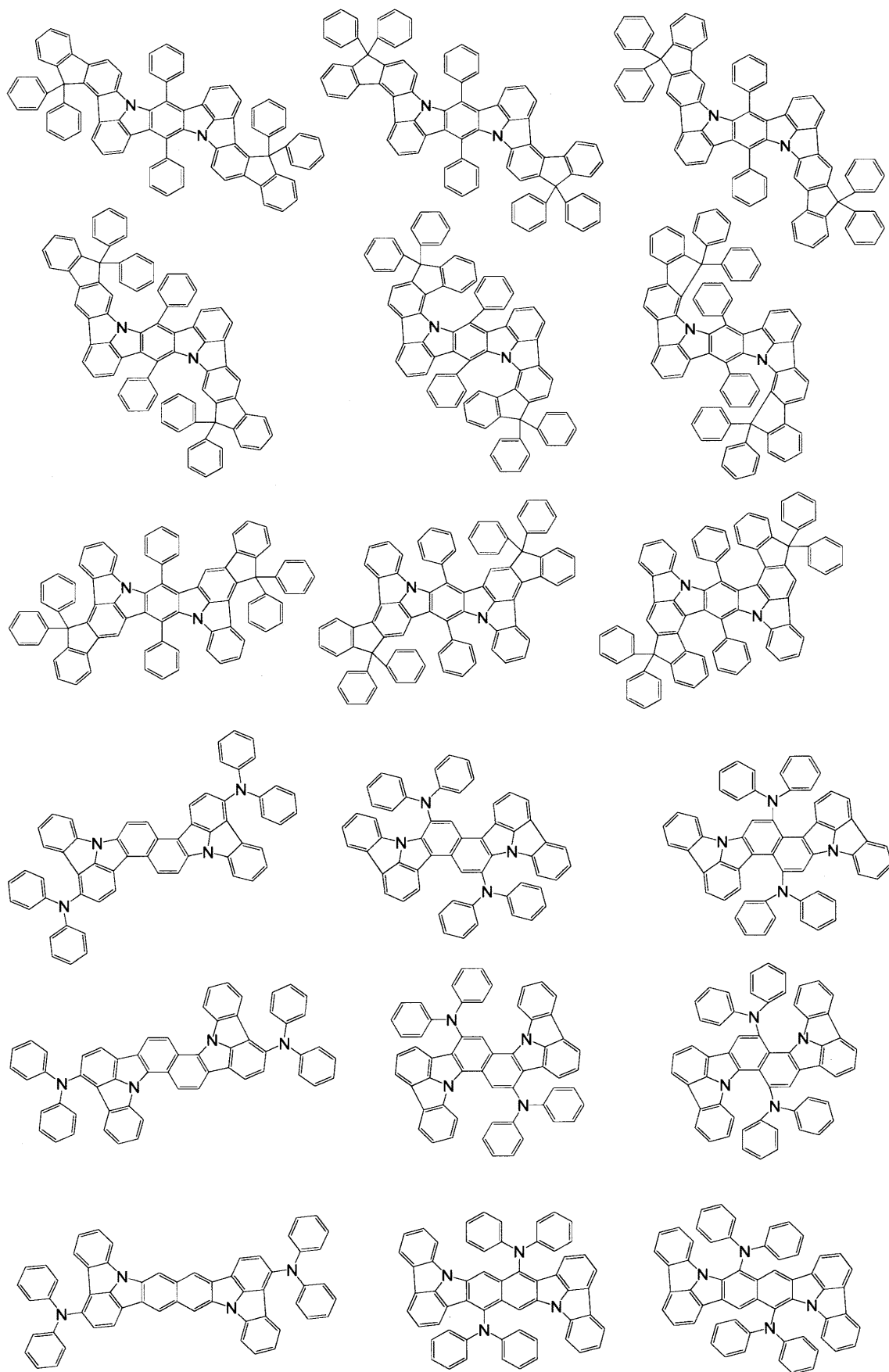
10



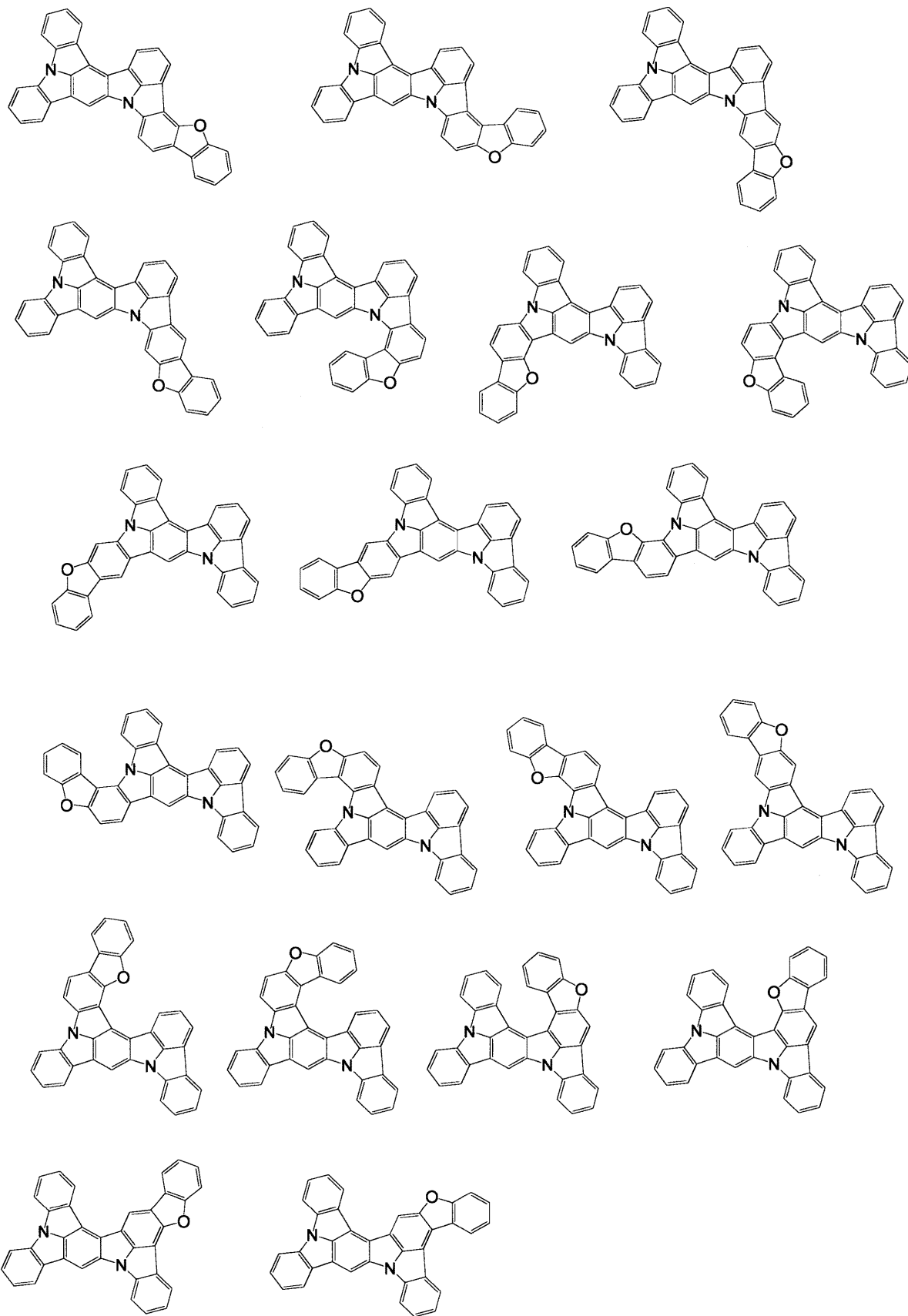
【化 2 9】



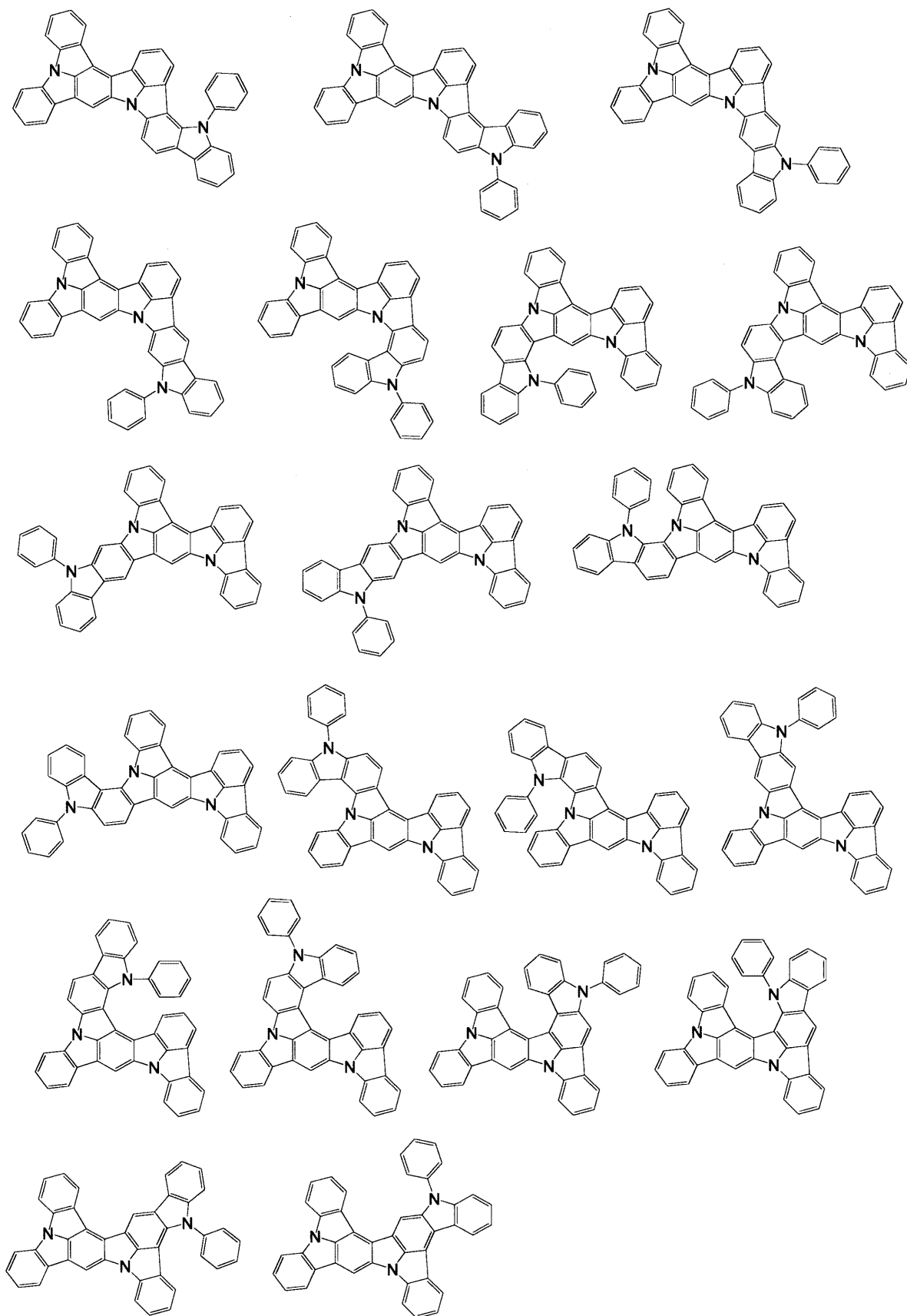
【化 3 0】



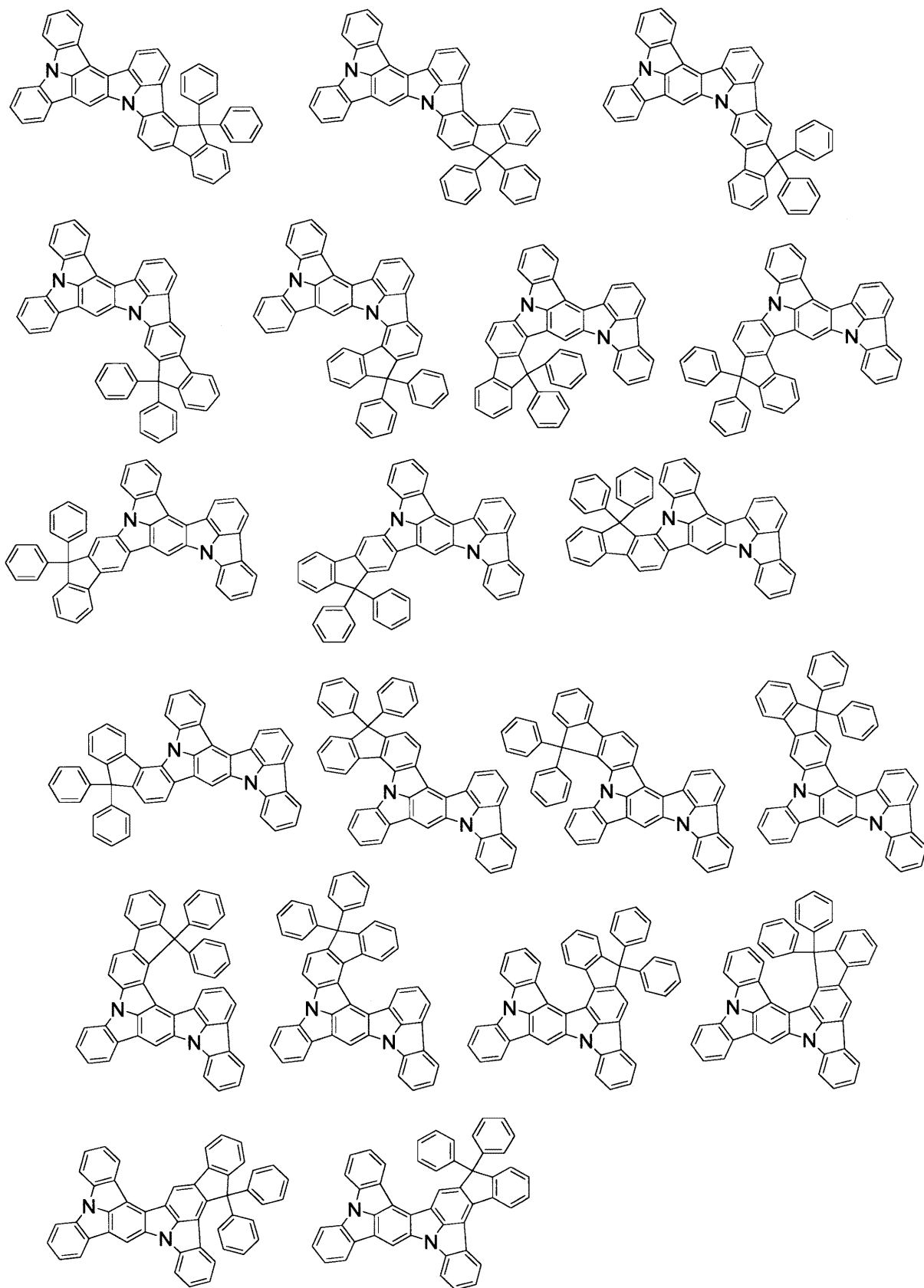
【化 3 1】



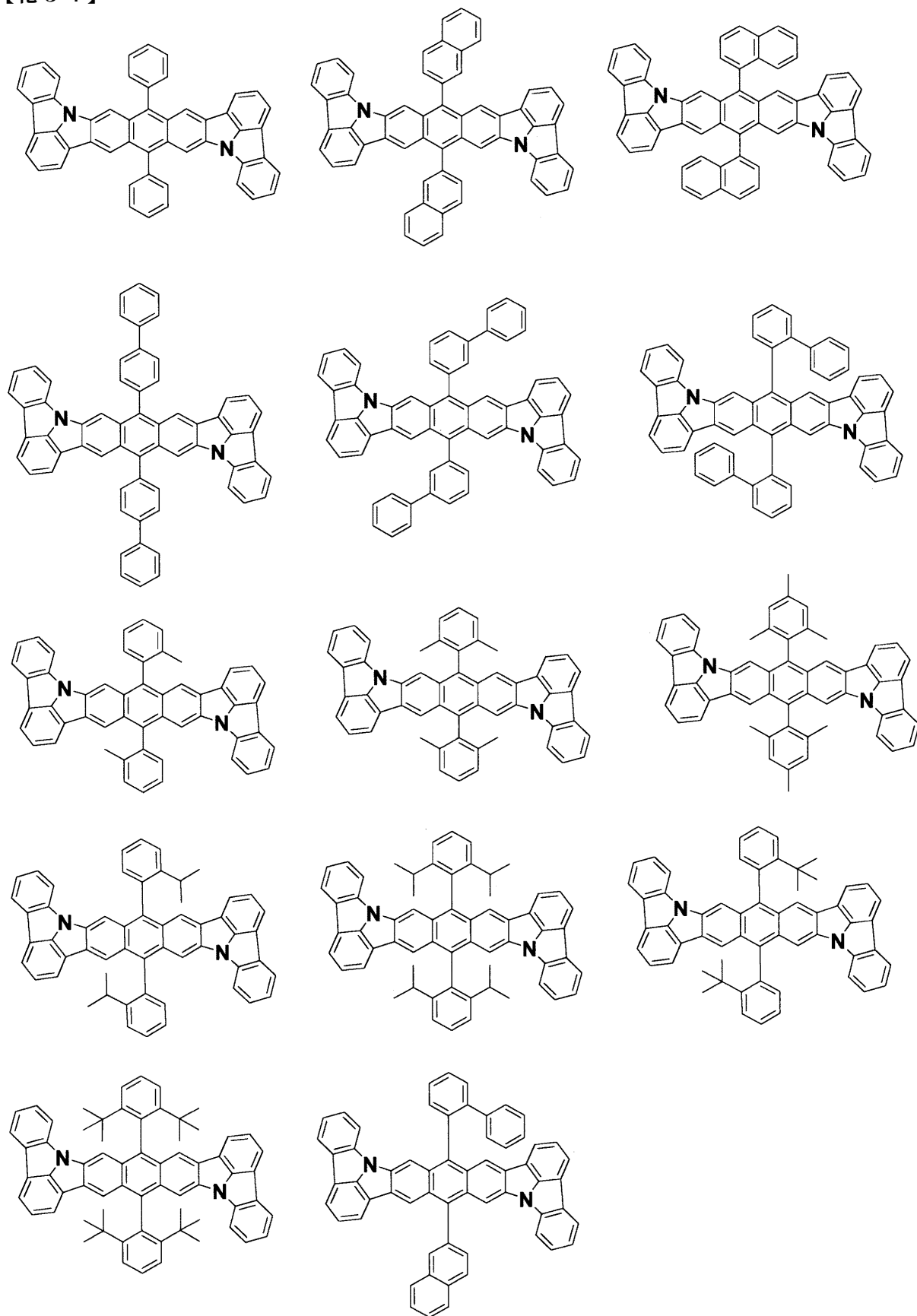
【化 3 2】



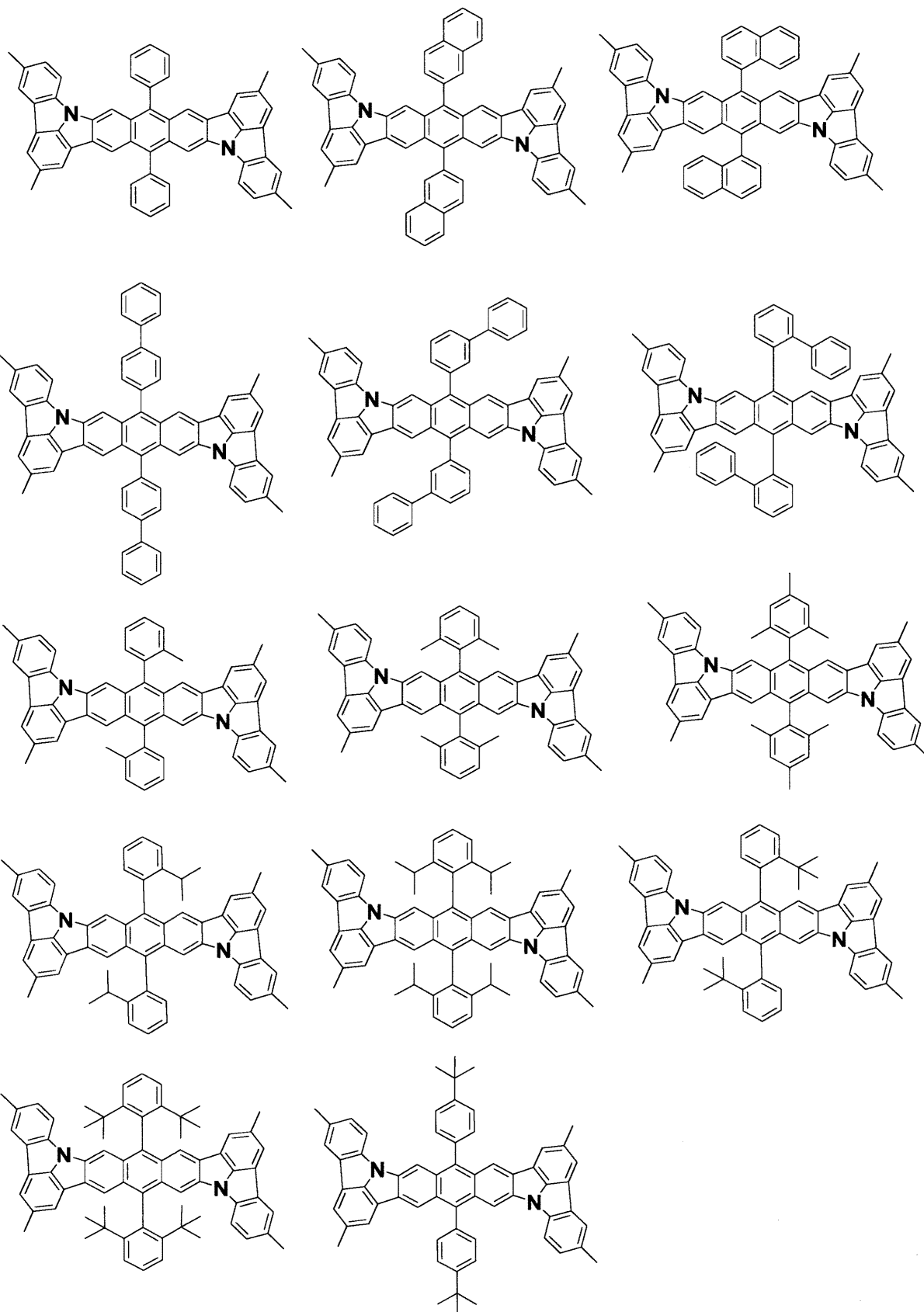
【化 3 3】



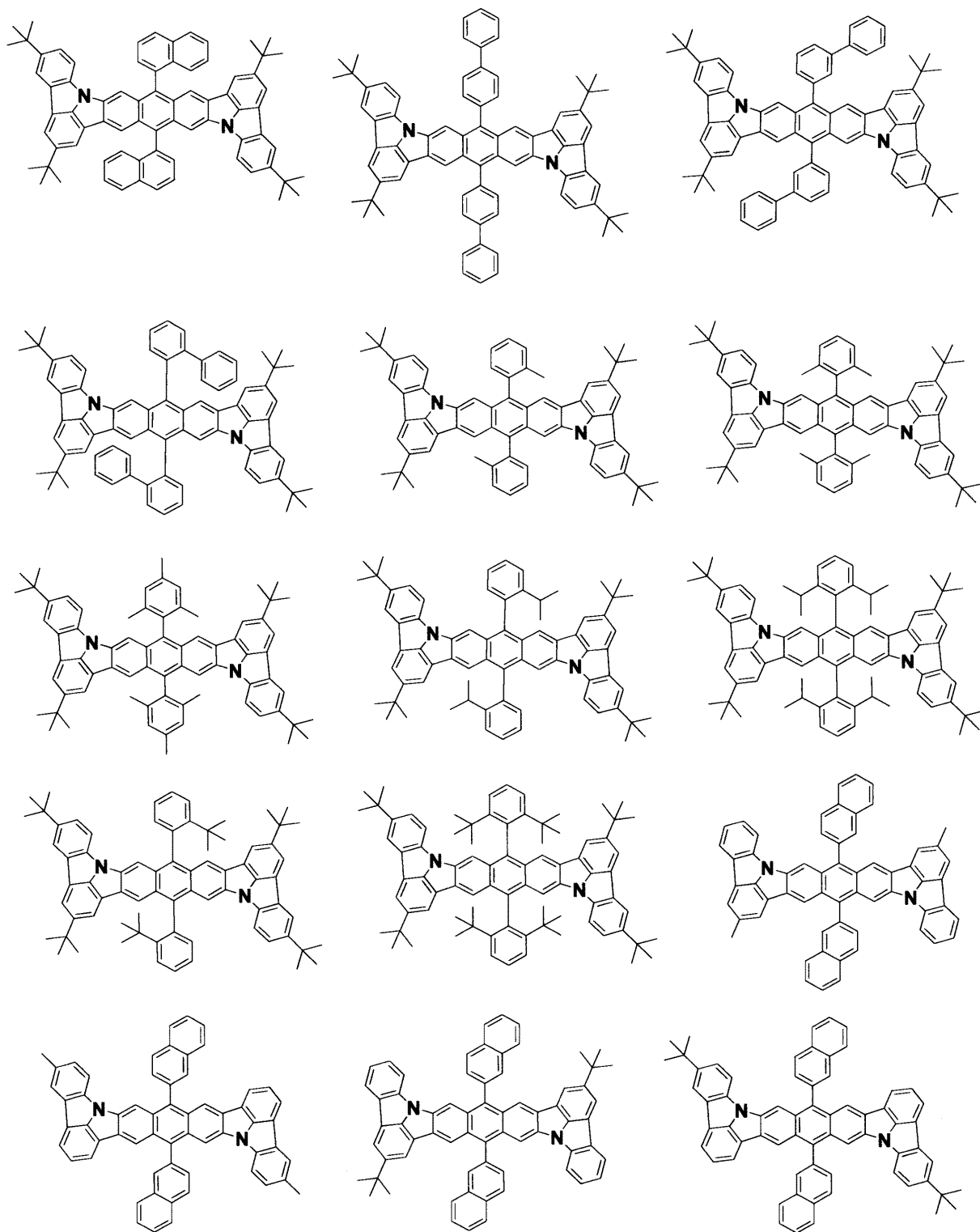
【化 3 4】



【化 3 5】



【化 3 6】



【0067】

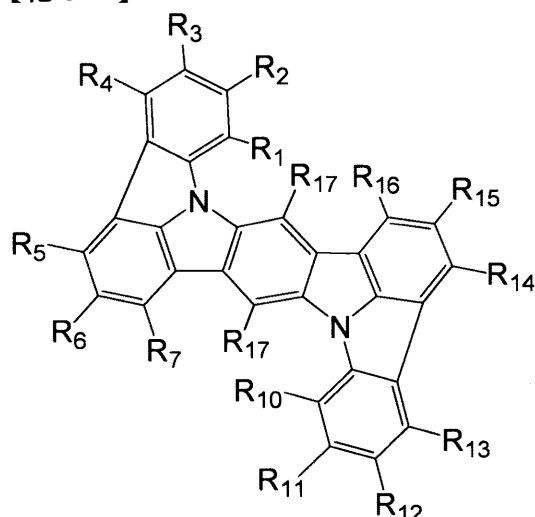
式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、及び式(1-2)及び(1-3)で表される化合物は、例えば、後述する実施例の反応に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応や原料を用いて合成することができる。

【0068】

本発明の他の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子は、陰極と、陽極と、前記陰極と前記陽極との間に配置された少なくとも1層の有機層と、を有する。

上記少なくとも1層の有機層のうちの少なくとも1層が、下記式(3-11)で表される化合物を含む。

【化 3 7】



(3-11)

(前記式 (3-11) 中、

$R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

20

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。但し、 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ の少なくとも 1 つは $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$ である。

30

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

40

2 つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれ

50

れは、同じであってもよいし、異なってもよい。)

【0069】

「 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい」について説明する。

「 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組」は、例えば、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_3 と R_4 、 R_5 と R_6 、 R_6 と R_7 、 R_1 と R_2 と R_3 等の組合せである。

上記飽和又は不飽和の環に対する「置換もしくは無置換の」の「置換」のときの置換基は、後述する「置換もしくは無置換の」という場合における置換基と同様である。

【0070】

「飽和又は不飽和の環」とは、例えば R_1 と R_2 で環を形成する場合には、 R_1 が結合する炭素原子と、 R_2 が結合する炭素原子と、1 以上の任意の元素とで形成する環を意味する。具体的には、 R_1 と R_2 で環を形成する場合において、 R_1 が結合する炭素原子と、 R_2 が結合する炭素原子と、4 つの炭素原子とで不飽和の環を形成する場合、 R_1 と R_2 とで形成する環はベンゼン環となる。

【0071】

「任意の元素」は、好ましくは、C 元素、N 元素、O 元素、S 元素である。任意の元素において（例えば C 元素又は N 元素の場合）、環を形成しない結合手は、水素原子等で終端されてもよい。

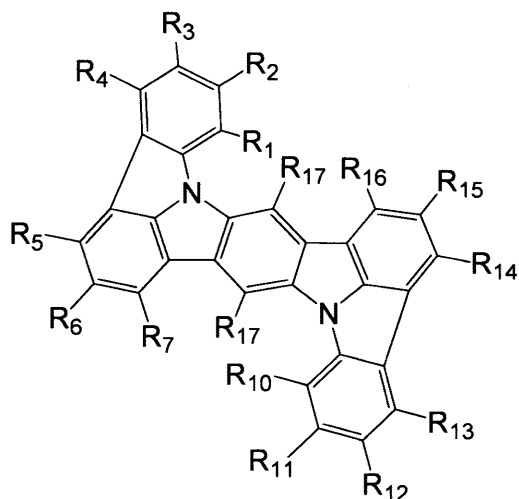
「1 以上の任意の元素」は、好ましくは 2 個以上 15 個以下、より好ましくは 3 個以上 12 個以下、さらに好ましくは、3 個以上 5 個以下の任意の元素である。

以下、「 $X \sim Y$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい」という表現は、 X を上記 R_1 に、 Y を上記 R_{16} に置き換えたときと同じ意味である。

【0072】

一実施形態においては、式 (3-11) で表される化合物は、下記式 (3-12) で表される化合物である。

【化 38】



(3-12)

(前記式 (3-12) 中、 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ は、式 (3-12) で定義した通りである。但し、 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のいずれか 2 つは $-N(R_{36})(R_{37})$ である。)

【0073】

一実施形態においては、 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、及び置換もしくは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。

【0074】

一実施形態においては、 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5～18 の複素環基からなる群から選択される。

【0075】

式 (3-11) で表される化合物における、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、炭素数 1～50 のアルキル基、炭素数 1～50 のハロアルキル基、炭素数 2～50 のアルケニル基、炭素数 2～50 のアルキニル基、環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、炭素数 1～50 のアルコキシ基、炭素数 1～50 のアルキルチオ基、環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-Si(R_{41})(R_{42})(R_{43})$ 、 $-C(=O)R_{44}$ 、 $-COOR_{45}$ 、 $-S(=O)_2R_{46}$ 、 $-P(=O)(R_{47})(R_{48})$ 、 $-Ge(R_{49})(R_{50})(R_{51})$ 、 $-N(R_{52})(R_{53})$ (ここで、 $R_{41} \sim R_{53}$ は、それぞれ独立に、水素原子、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、又は環形成原子数 5～50 の複素環基である。 $R_{41} \sim R_{53}$ が 2 以上存在する場合、2 以上の $R_{41} \sim R_{53}$ のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。) 、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、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 1 価の複素環基からなる群から選択される。

【0076】

一実施形態においては、式 (3-11) で表される化合物における「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 1 価の複素環基である。

【0077】

一実施形態においては、式 (3-11) で表される化合物における「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 1 価の複素環基からなる群から選択される。

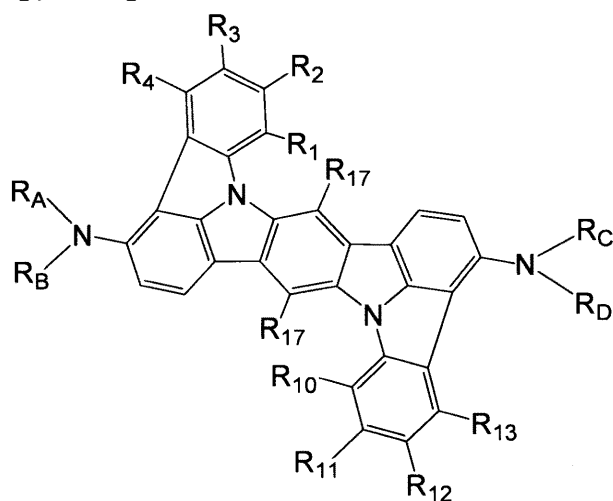
【0078】

式 (3-11) で表される化合物の各置換基、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基及びハロゲン原子の具体例は、それぞれ前述したものと同様である。

【0079】

一実施形態においては、式 (3-11) で表される化合物は、下記式 (3-13) で表される化合物である。

【化 39】



(3-13)

(前記式 (3-13) 中、

$R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無

10

20

30

50

置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ 、並びに R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数6～18の1価の複素環基である。2つの R_{17} は互いに同じであってもよく、異なってもよい。

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数6～18の1価の複素環基である。)

【0080】

「 $R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい」について説明する。

10

「 $R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ のうち隣接する2つ以上の1組」は、例えば、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_3 と R_4 、 R_1 と R_2 と R_3 等の組合せである。

上記飽和又は不飽和の環に対する「置換もしくは無置換の」の「置換」のときの置換基は、後述する「置換もしくは無置換の」という場合における置換基と同様である。

【0081】

「飽和又は不飽和の環」は、上記式(3-11)で説明した通りである。

【0082】

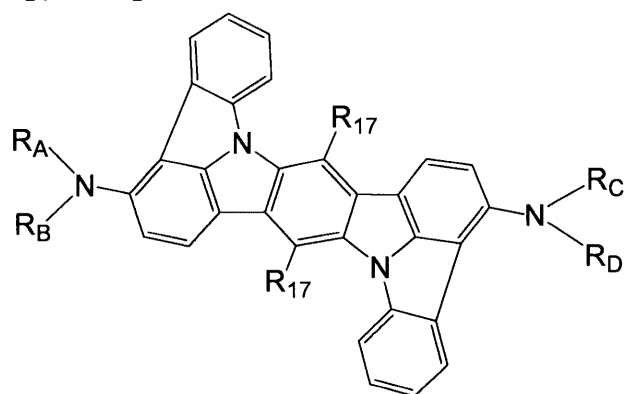
式(3-13)で表される化合物では、 $R_1 \sim R_4$ 、 $R_{10} \sim R_{13}$ 及び R_{17} のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよく、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しなくてもよい。式(3-13)で表される化合物では、 $R_1 \sim R_4$ 、 $R_{10} \sim R_{13}$ 及び R_{17} のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないと好ましい。

20

【0083】

一実施形態においては、式(3-13)で表される化合物は、下記式(3-14)で表される化合物である。

【化40】



(3-14)

(前記式(3-14)中、 R_{17} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、前記式(3-13)で定義した通りである。)

【0084】

一実施形態においては、式(3-13)で表される化合物及び式(3-14)で表される化合物の R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基である。

【0085】

一実施形態においては、式(3-13)で表される化合物及び式(3-14)で表される化合物の R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である。

50

【0086】

一実施形態においては、式(3-13)で表される化合物及び式(3-14)で表される化合物の2つの R_{17} は、それぞれ水素原子である。

【0087】

式(3-13)で表される化合物及び式(3-14)で表される化合物における、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、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1価の複素環基からなる群から選択される。

【0088】

一実施形態においては、式(3-13)で表される化合物及び式(3-14)で表される化合物における、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基は、炭素数1~5のアルキル基である。

10

【0089】

式(3-13)で表される化合物及び式(3-14)で表される化合物の各置換基及び「置換もしくは無置換の」という場合における置換基の具体例は、それぞれ前述したものと同様である。

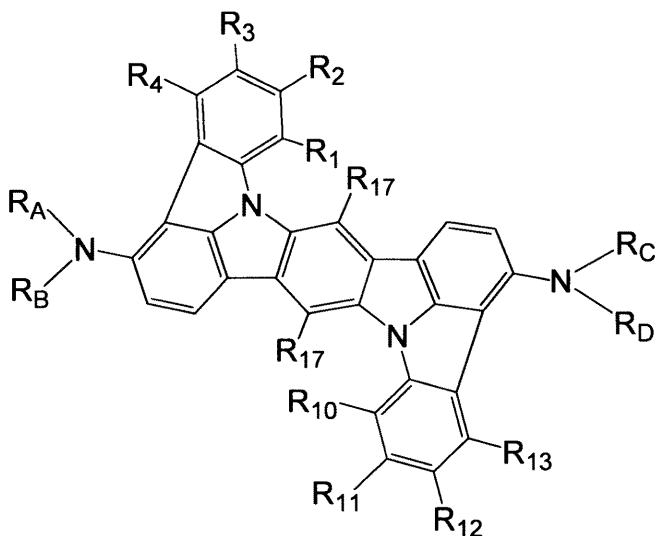
【0090】

本発明の他の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子は、陰極と、陽極と、前記陰極と前記陽極との間に配置された少なくとも1層の有機層と、を有する。

上記少なくとも1層の有機層のうちの少なくとも1層が、下記式(3-21)で表される化合物を含む。

20

【化41】



(3-21)

(前記式(3-21)中、

$R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

40

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ 、並びに R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~20のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~20の1価の複素環基である。2つの R_{17} は互いに同じであってもよく、異なってもよい。

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~20のアリール基である。)

【0091】

「 $R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい」については、上記式(3-13)で説明

50

した通りである。

上記飽和又は不飽和の環に対する「置換もしくは無置換の」の「置換」のときの置換基は、後述する、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基と同様である。

【0092】

「飽和又は不飽和の環」は、上記式(3-11)で説明した通りである。

【0093】

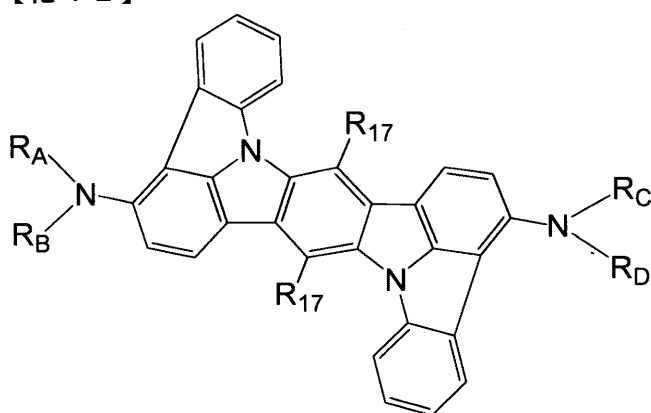
式(3-21)で表される化合物では、 $R_1 \sim R_4$ 、 $R_{10} \sim R_{13}$ 及び R_{17} のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよく、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しなくてもよい。式(3-21)で表される化合物では、 $R_1 \sim R_4$ 、 $R_{10} \sim R_{13}$ 及び R_{17} のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないと好ましい。

10

【0094】

一実施形態においては、式(3-21)で表される化合物は下記式(3-22)で表される化合物である。

【化42】



(3-22)

(前記式(3-22)中、 R_{17} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、前記式(3-21)で定義した通りである。)

30

【0095】

一実施形態においては、式(3-21)及び式(3-22)で表される化合物において、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である。

【0096】

一実施形態においては、式(3-21)及び式(3-22)で表される化合物において、2つの R_{17} が、それぞれ水素原子である。

【0097】

一実施形態においては、式(3-21)及び式(3-22)で表される化合物において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数1~20のアルキル基、環形成炭素数6~20のアリール基、及び環形成原子数5~20の1価の複素環基からなる群から選択される。

40

【0098】

一実施形態においては、式(3-21)及び式(3-22)で表される化合物において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数1~5のアルキル基である。

【0099】

一実施形態においては、式(3-21)及び式(3-22)で表される化合物において、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、2つの R_{17} が、それぞれ水素原子である。

50

【0100】

一実施形態においては、式(3-21)及び式(3-22)で表される化合物において、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、2つの R_{17} が、それぞれ水素原子であり、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数1~20のアルキル基、環形成炭素数6~20のアリール基、及び環形成原子数5~20の1価の複素環基からなる群から選択される。

【0101】

一実施形態においては、式(3-21)及び式(3-22)で表される化合物において、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、前記2つの R_{17} が、それぞれ水素原子であり、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数1~5のアルキル基である。

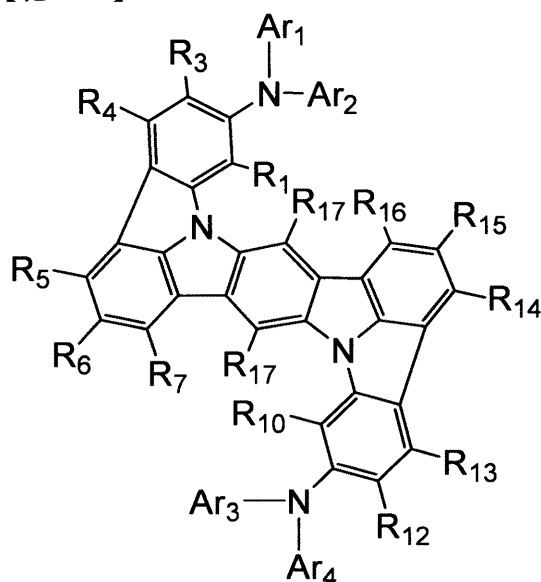
10

【0102】

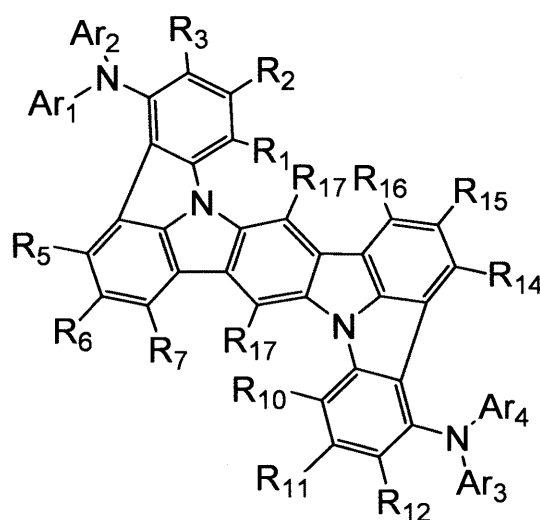
本発明の他の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子は、陰極と、陽極と、前記陰極と前記陽極との間に配置された少なくとも1層の有機層と、を有する。

上記少なくとも1層の有機層のうちの少なくとも1層が、下記式(3-31)又は(3-32)で表される化合物を含む。

【化43】



(3-31)



(3-32)

(式(3-31)及び(3-32)中、

$R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

R_{17} 、及び前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~20のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~20の1価の複素環基である。

40

2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

$Ar_1 \sim Ar_4$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~20のアリール基である。)

【0103】

「 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい」について説明する。

「 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の1組」は、式(3-31)においては、例えば、 R_3 と R_4 、 R_5 と R_6 、 R_6 と R_7 、 R_5 と R_6 と R_7 等の組合

50

せであり、式(3-32)においては、例えば、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_5 と R_6 、 R_6 と R_7 、 R_1 と R_2 と R_3 等の組合せである。

上記飽和又は不飽和の環に対する「置換もしくは無置換の」の「置換」のときの置換基は、後述する「置換もしくは無置換の」という場合における置換基と同様である。

【0104】

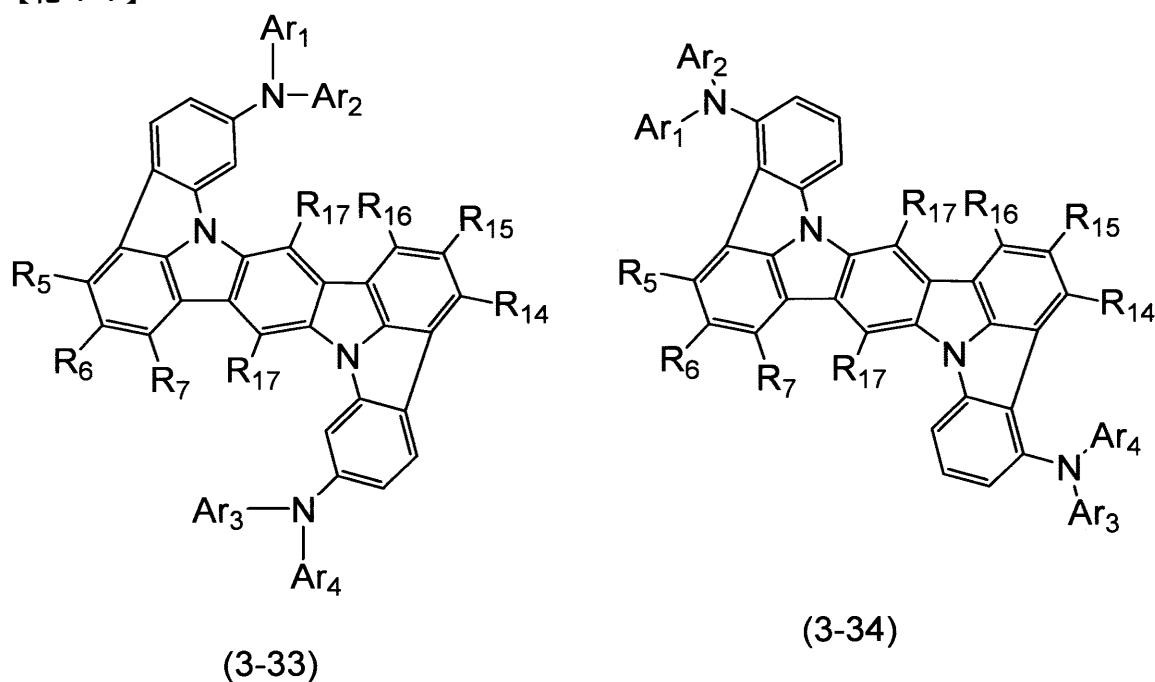
「飽和又は不飽和の環」は、上記式(3-11)で説明した通りである。

式(3-31)又は(3-32)で表される化合物は、 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しなくてもよい。

【0105】

一実施形態においては、式(3-31)又は(3-32)で表される化合物は、下記式(3-33)又は(3-34)で表される。

【化44】



(式(3-33)及び(3-34)中、 $R_5 \sim R_7$ 、 $R_{14} \sim R_{17}$ 及び $Ar_1 \sim Ar_4$ は、前記式(3-31)及び(3-32)で定義した通りである。)

【0106】

一実施形態においては、式(3-31)～(3-34)で表される化合物において、 $Ar_1 \sim Ar_4$ が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である。

【0107】

一実施形態においては、式(3-31)～(3-34)で表される化合物において、2つの R_{17} が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～20のアリール基である。

【0108】

一実施形態においては、式(3-31)～(3-34)で表される化合物において、2つの R_{17} が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である。

【0109】

一実施形態においては、式(3-31)～(3-34)で表される化合物において、2つの R_{17} が水素原子である。

【0110】

一実施形態においては、式(3-31)～(3-34)で表される化合物において、 $R_5 \sim R_7$ 及び $R_{14} \sim R_{16}$ が水素原子である。

【0111】

一実施形態においては、式(3-31)～(3-34)で表される化合物において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数1～20のアルキル基、環形成炭素数6～20のアリール基、及び環形成原子数5～20の1価の複素環基からなる群から選択される。

【0112】

一実施形態においては、式(3-31)～(3-34)で表される化合物において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数1～5のアルキル基である。

【0113】

一実施形態においては、式(3-31)～(3-34)で表される化合物において、Ar₁～Ar₄が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、2つのR₇が水素原子である。

10

【0114】

一実施形態においては、式(3-31)～(3-34)で表される化合物において、Ar₁～Ar₄が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、2つのR₇が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～20のアリール基であり、R₅～R₇及びR₁₄～R₁₆が水素原子であり、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数1～20のアルキル基、環形成炭素数6～20のアリール基、及び環形成原子数5～20の1価の複素環基からなる群から選択される。

20

【0115】

一実施形態においては、式(3-31)～(3-34)で表される化合物において、Ar₁～Ar₄が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、2つのR₇が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、R₅～R₇及びR₁₄～R₁₆が水素原子であり、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数1～5のアルキル基である。

【0116】

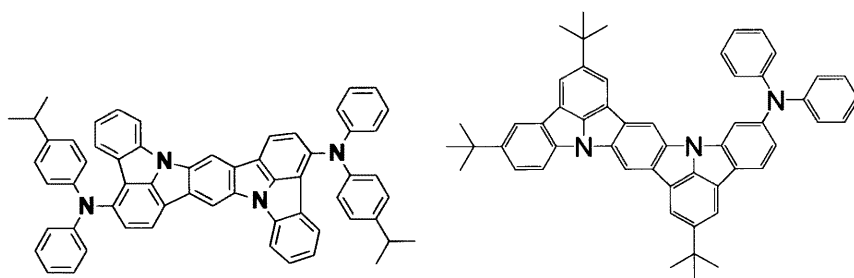
式(3-31)～(3-34)で表される化合物の各置換基及び「置換もしくは無置換の」という場合における置換基の具体例は、それぞれ前述したものと同様である。

【0117】

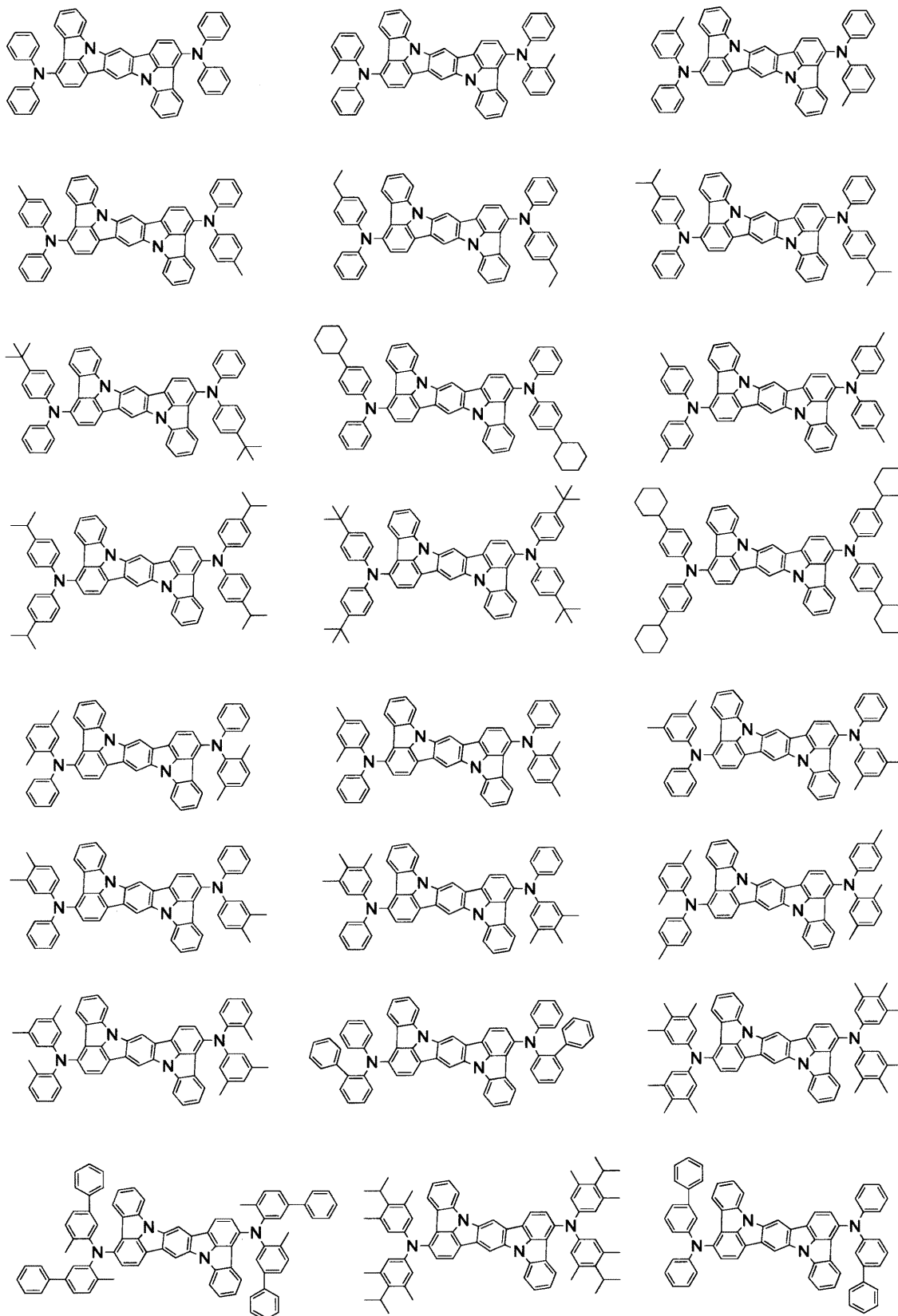
式(3-11)～(3-14)、(3-21)、(3-22)、(3-31)～(3-34)で表される化合物の具体例としては、例えば、以下に示す化合物が挙げられる。

30

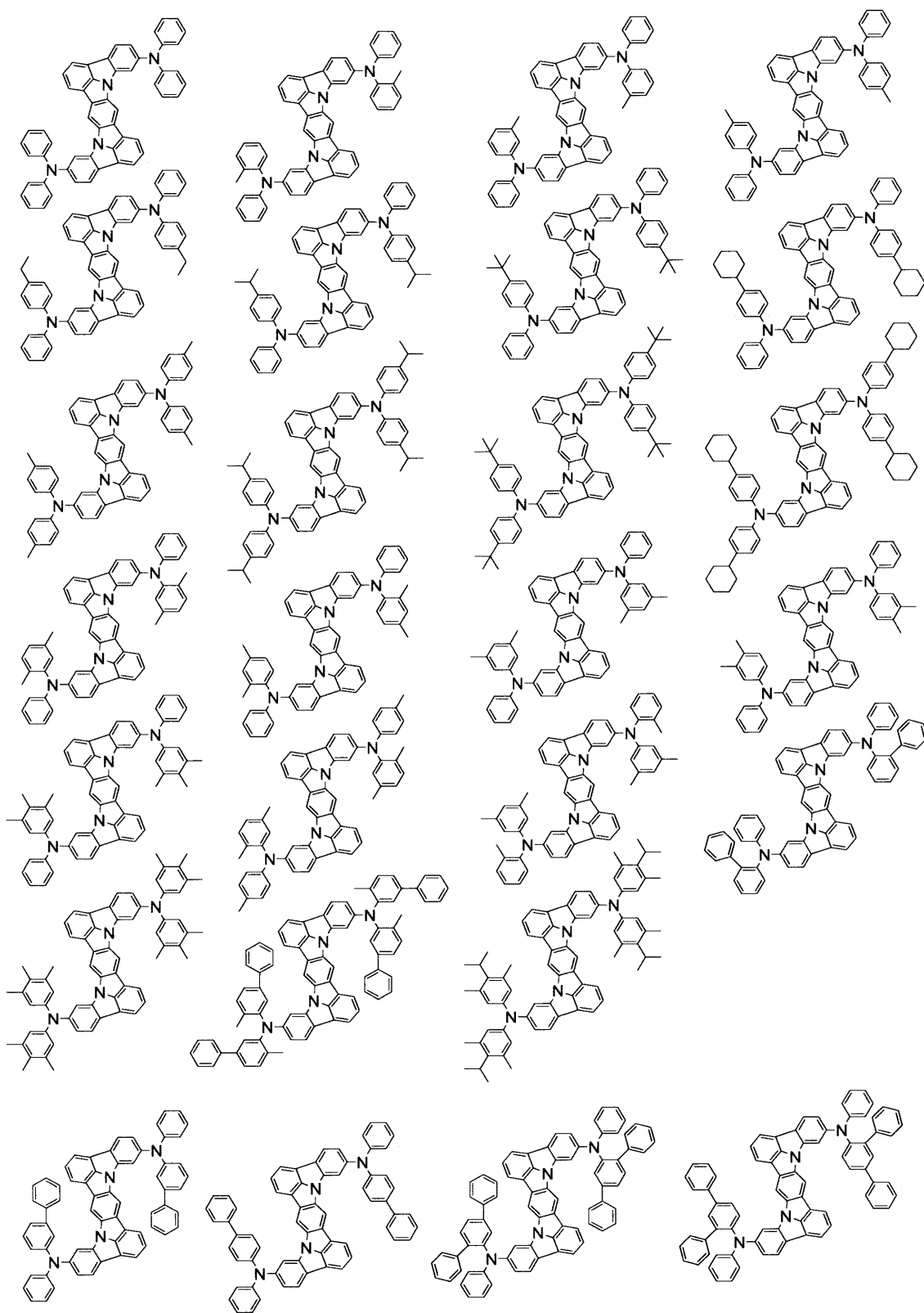
【化45】



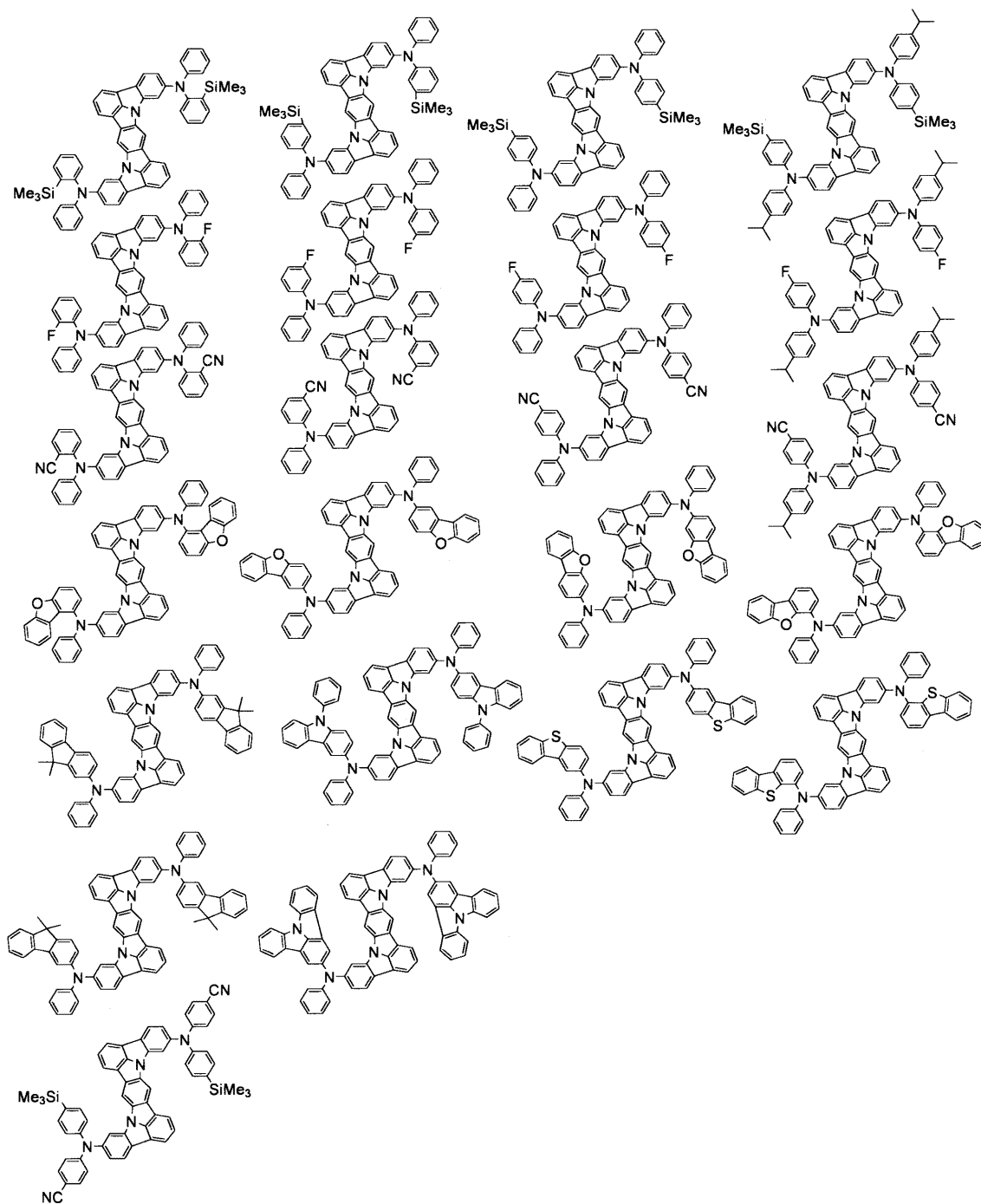
【化 4 6】



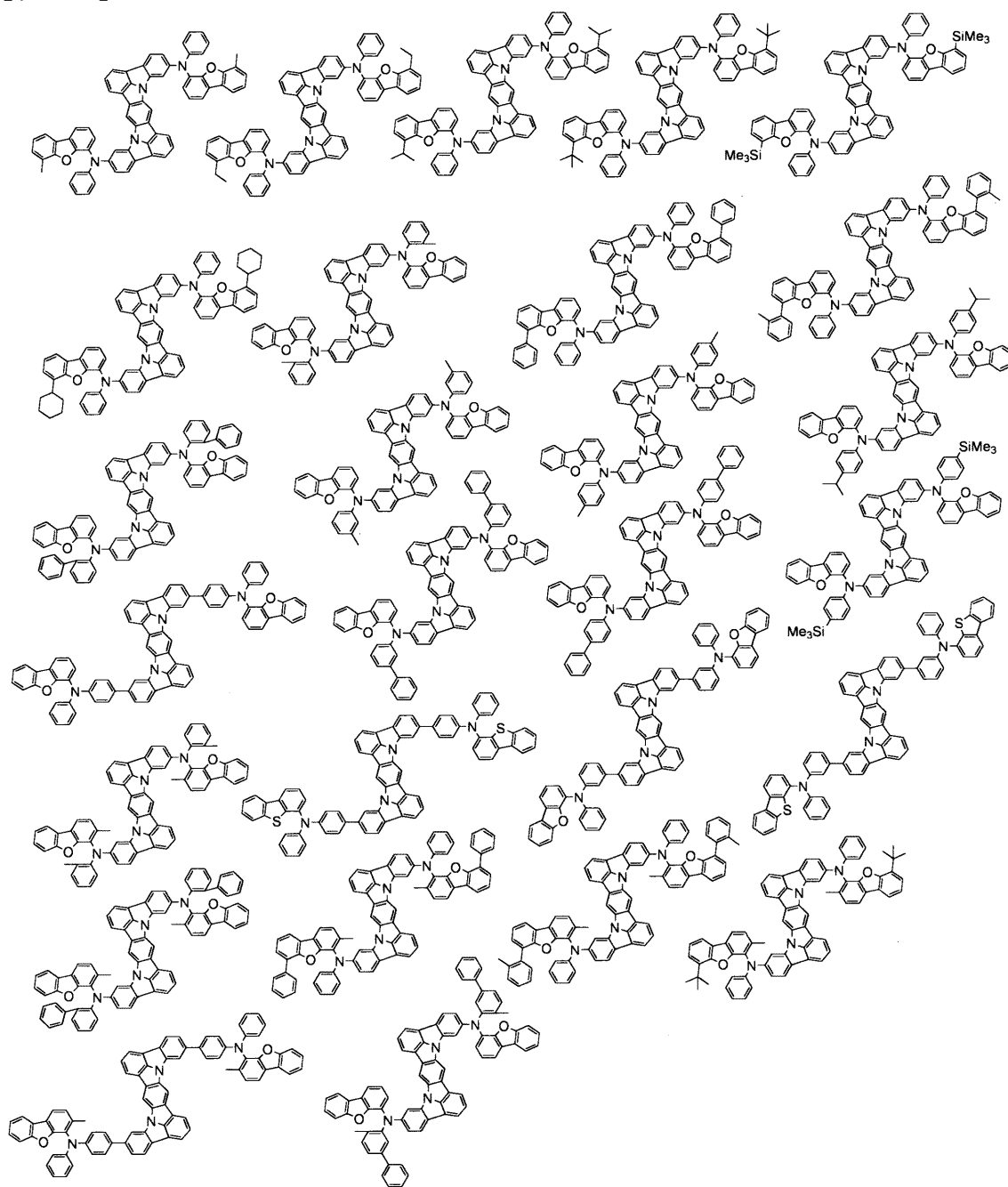
【化 4 7】



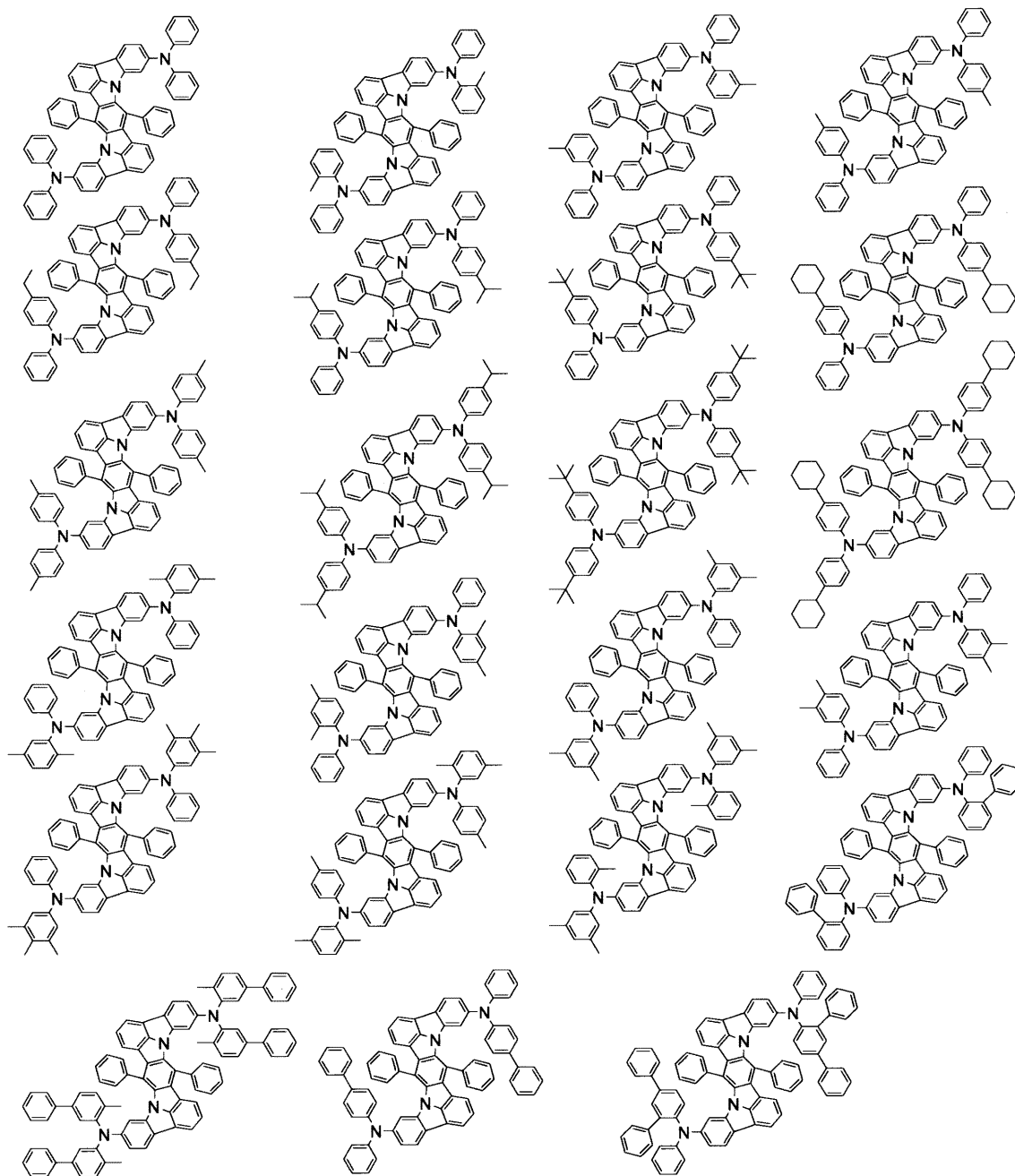
【化 4 8】



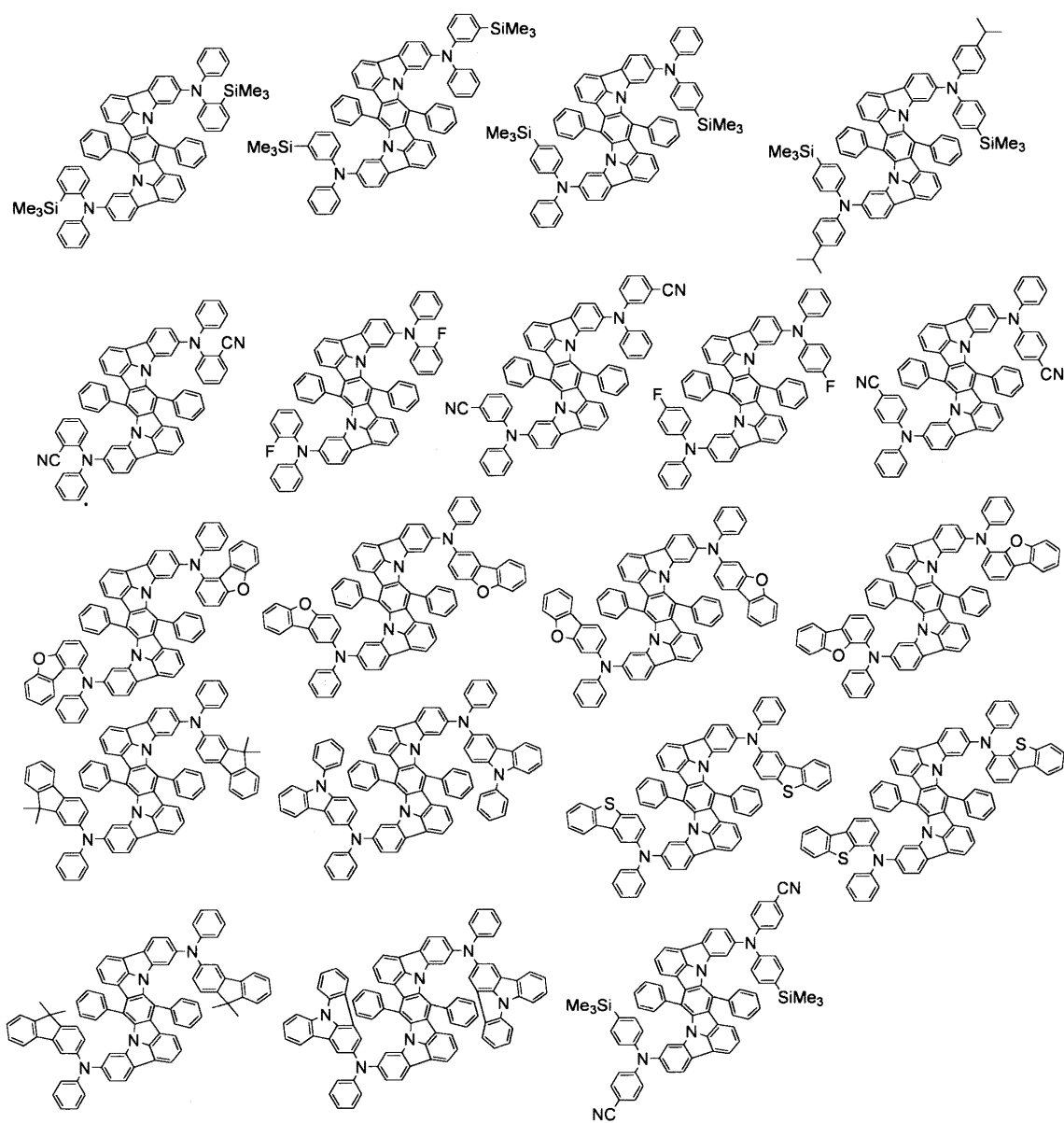
【化 4 9】



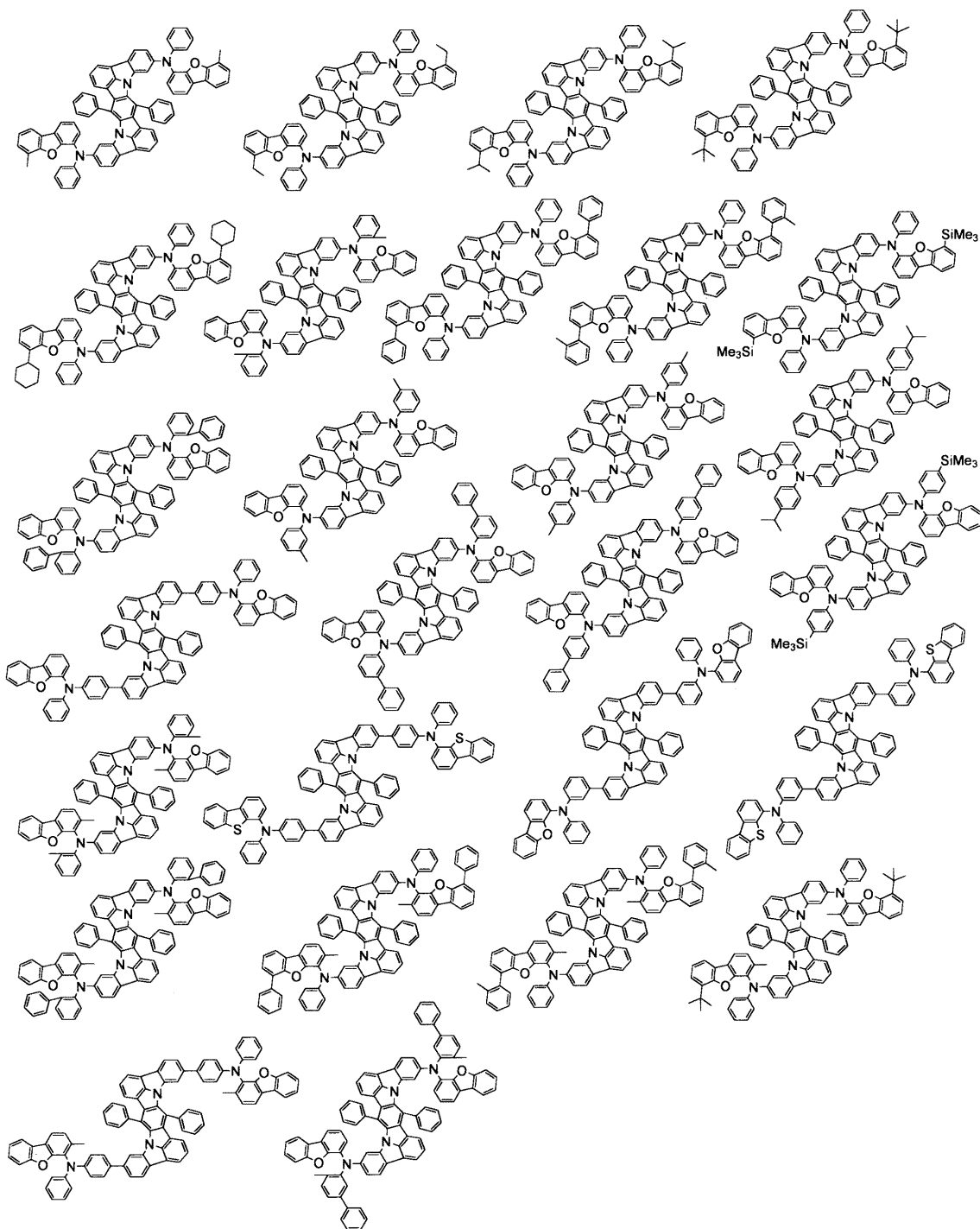
【化 5 0】



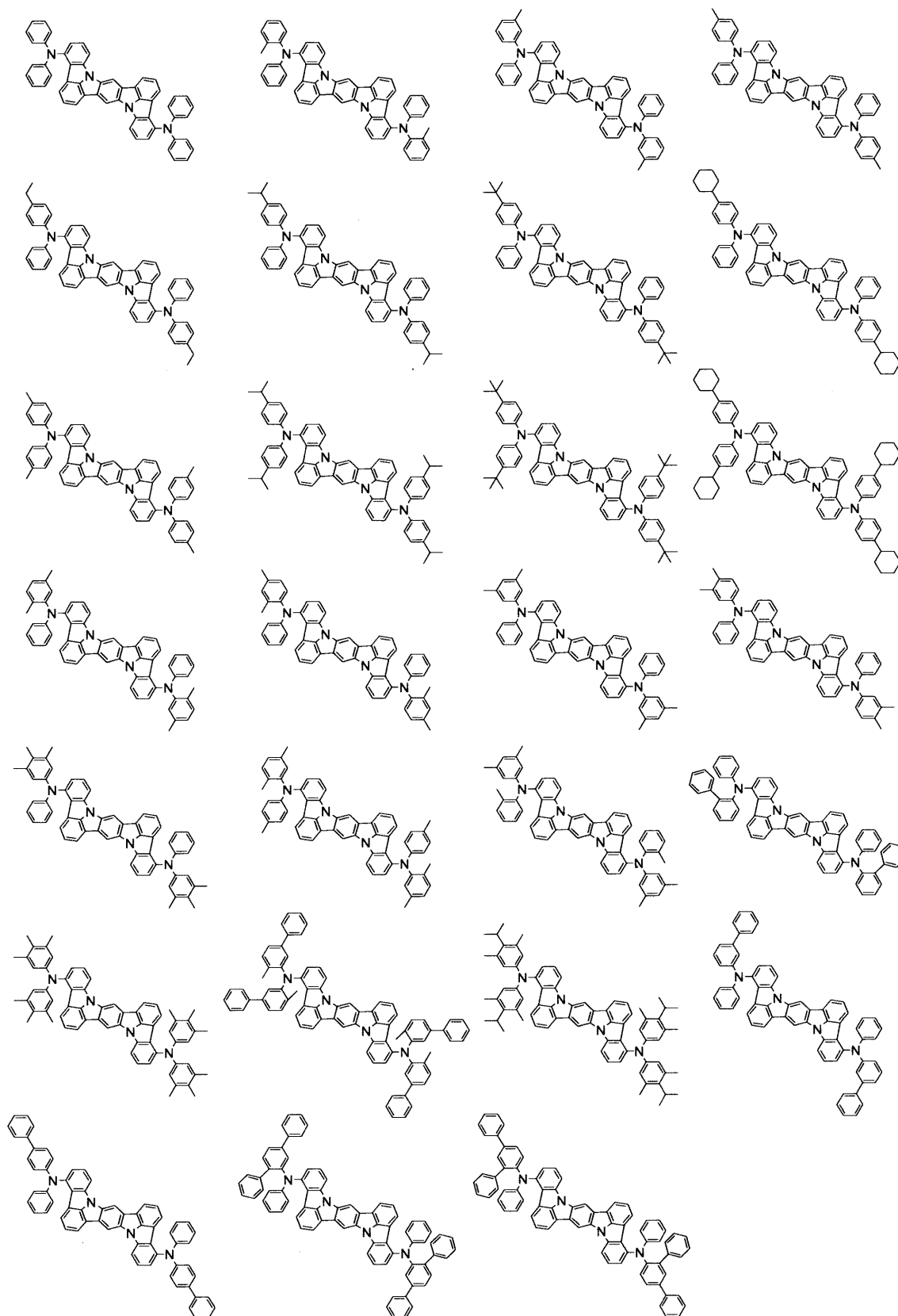
【化 5 1】



【化 5 2】

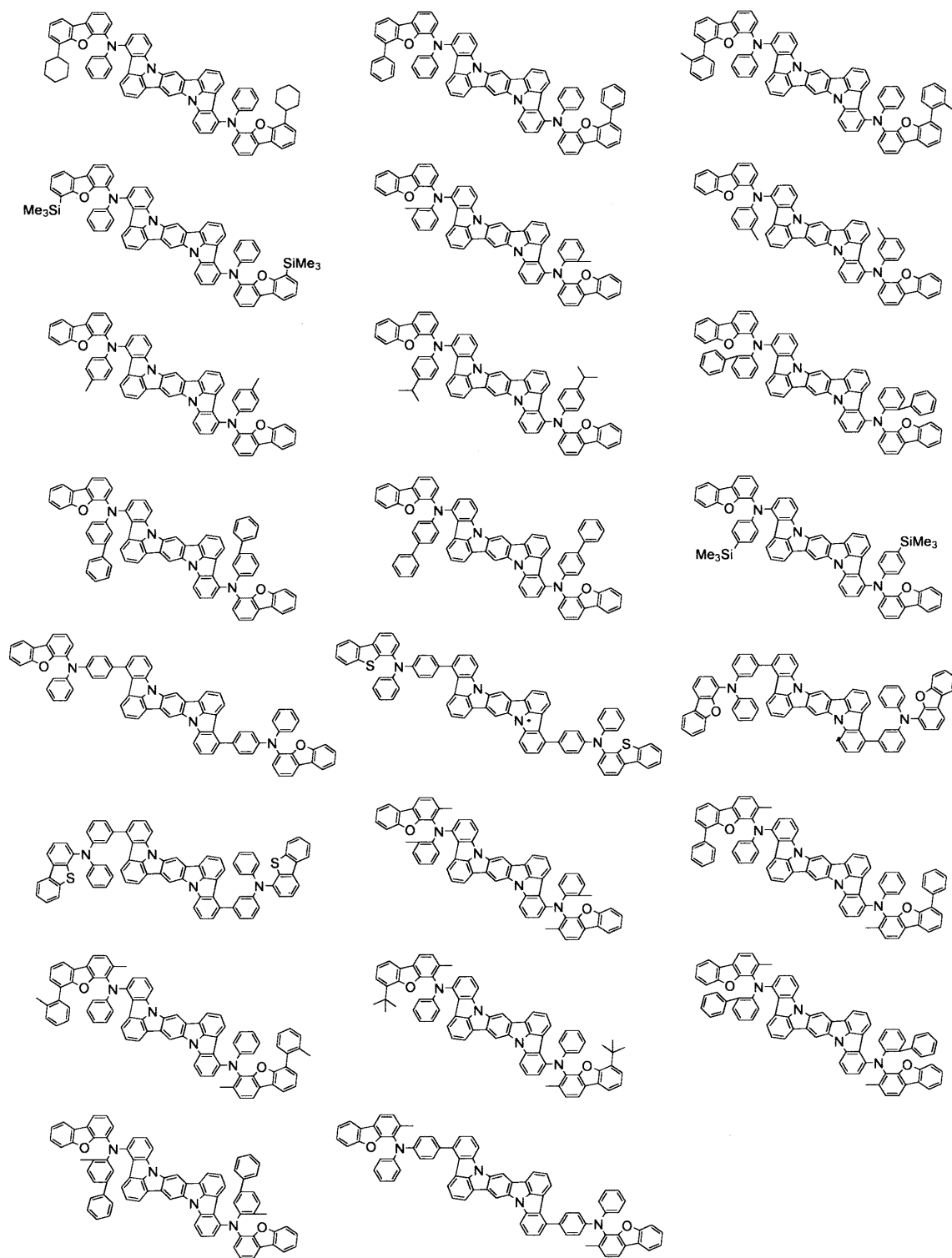


【化 5 3】

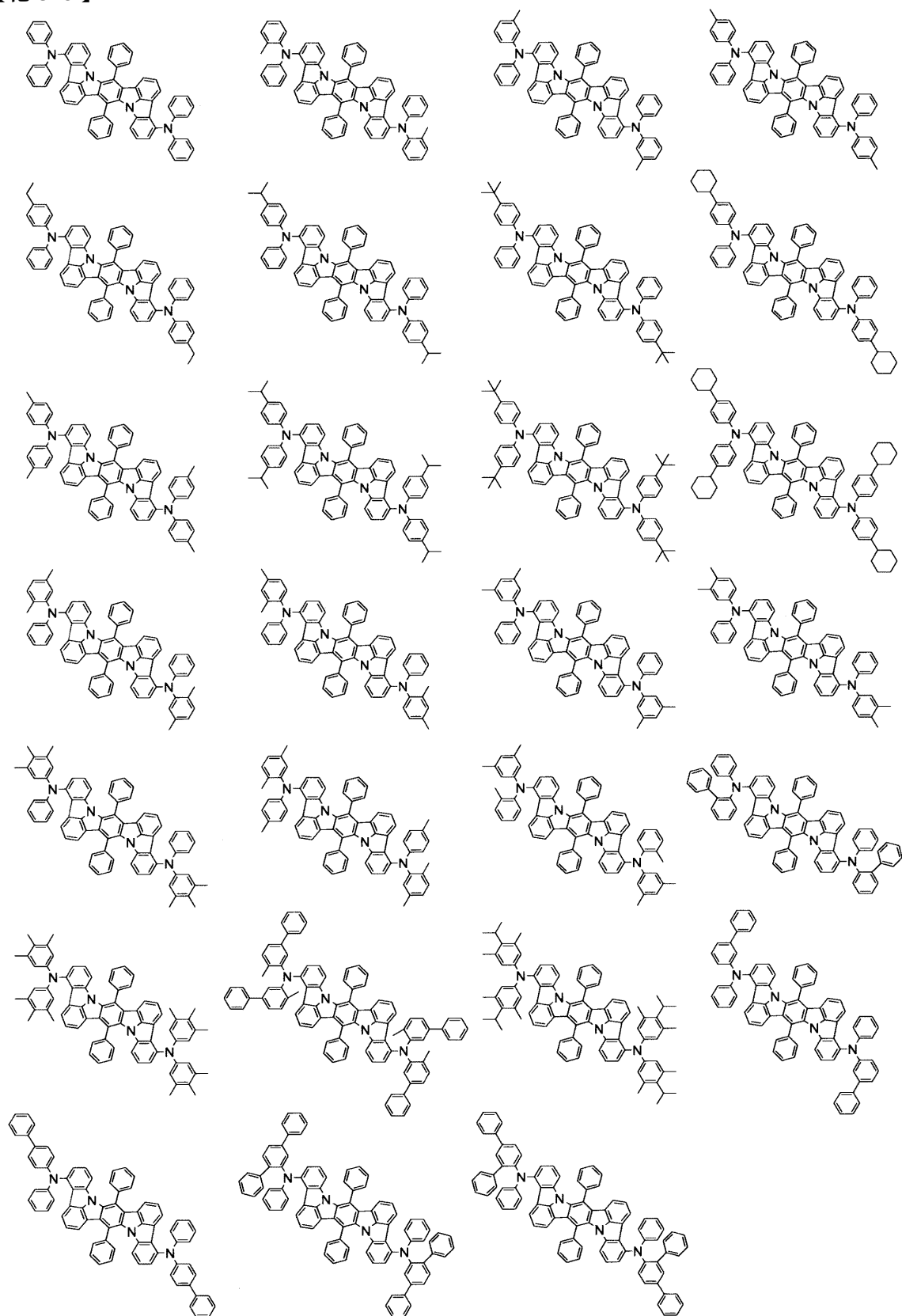


[illegible]

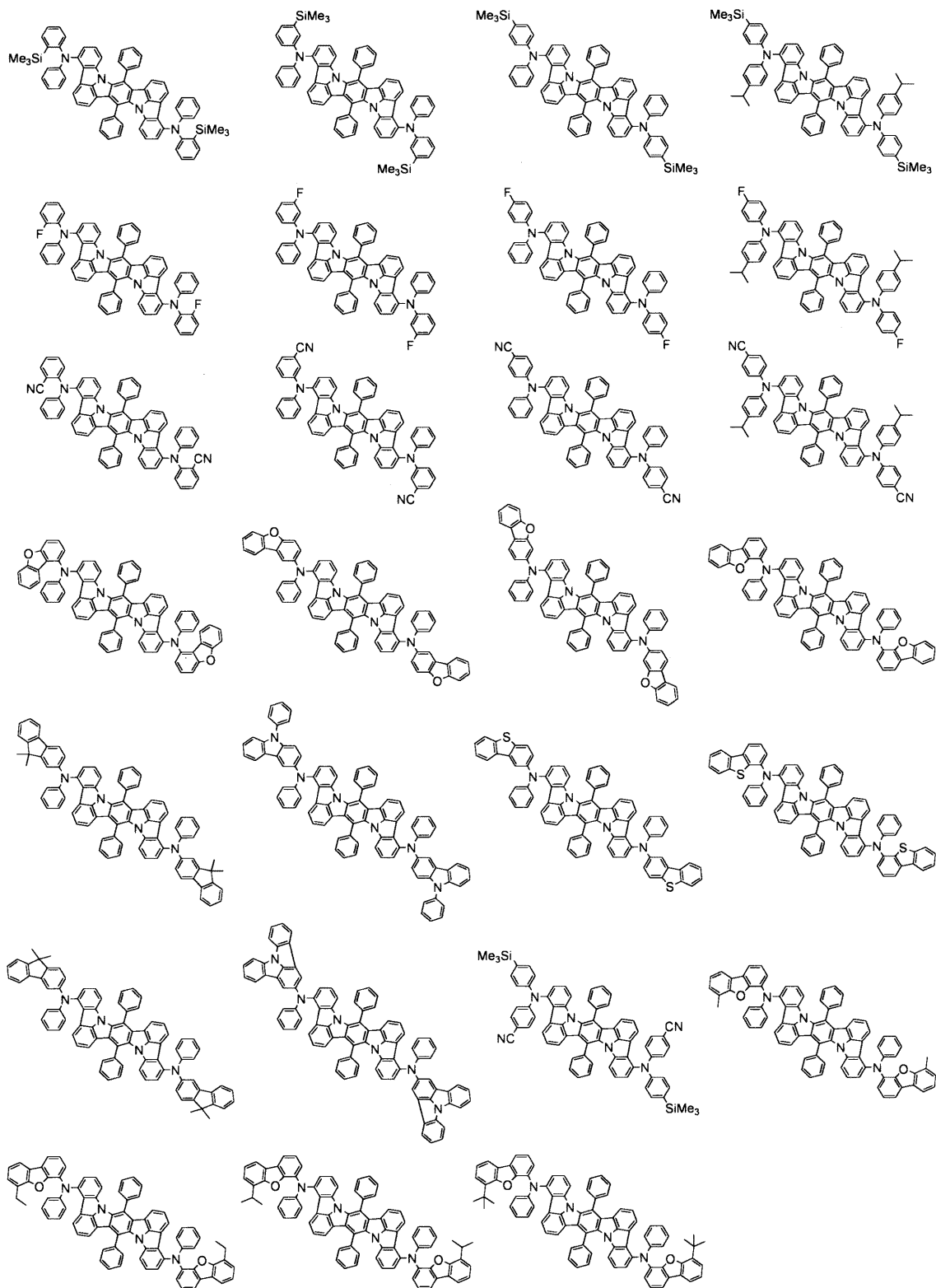
【化 5 5】



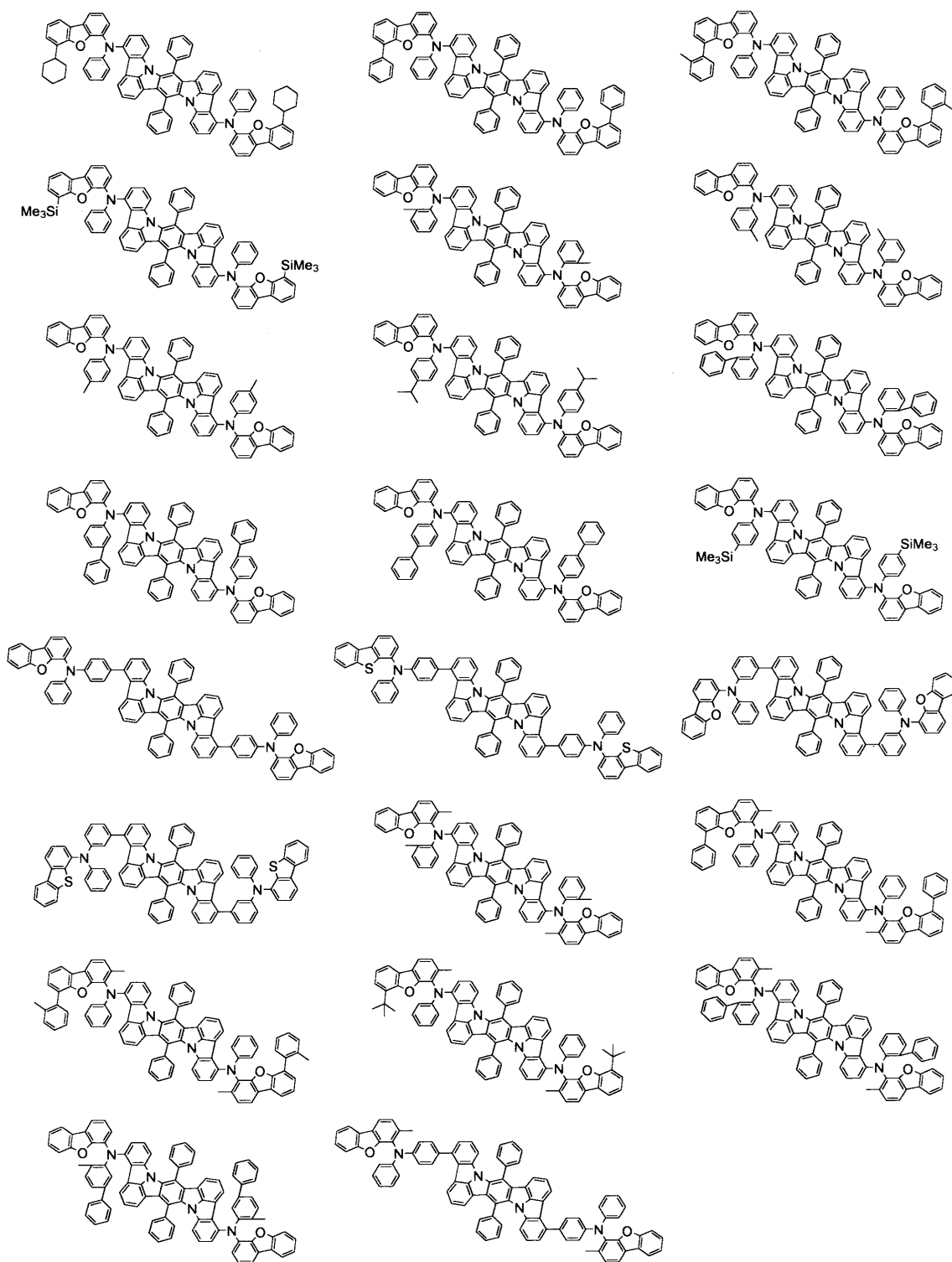
【化 5 6】



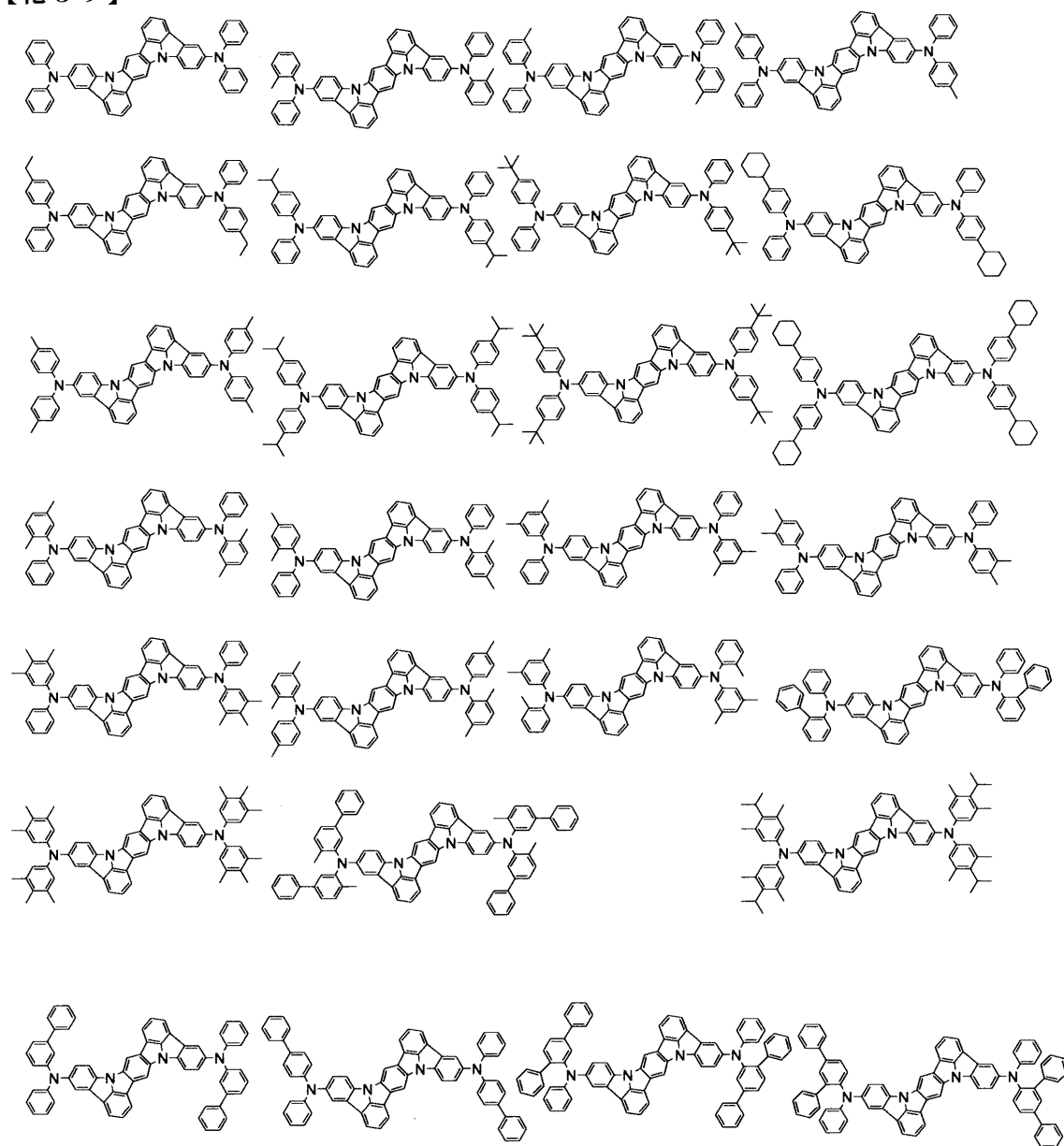
【化 5 7】



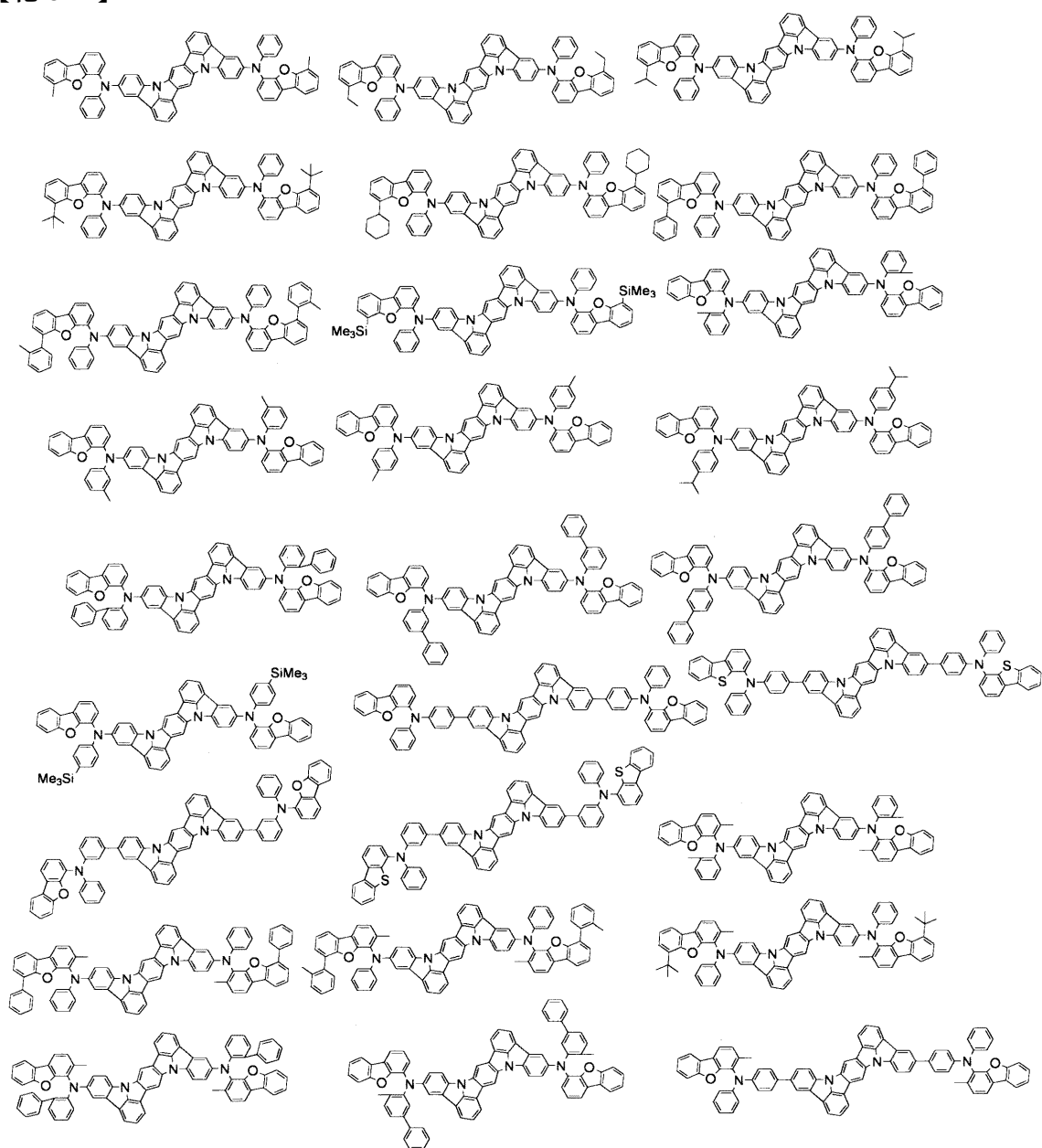
【化 5 8】



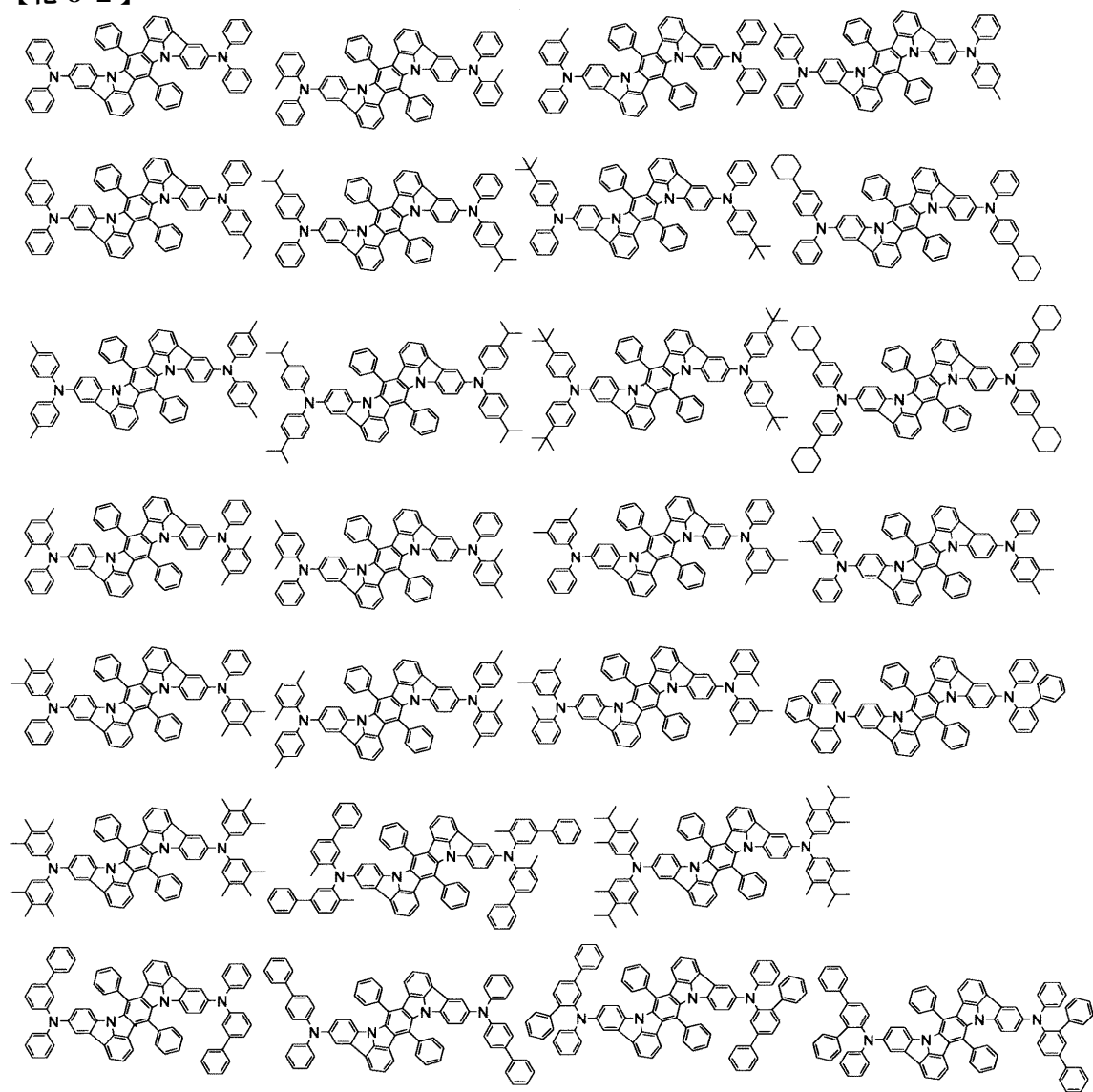
【化 5 9】



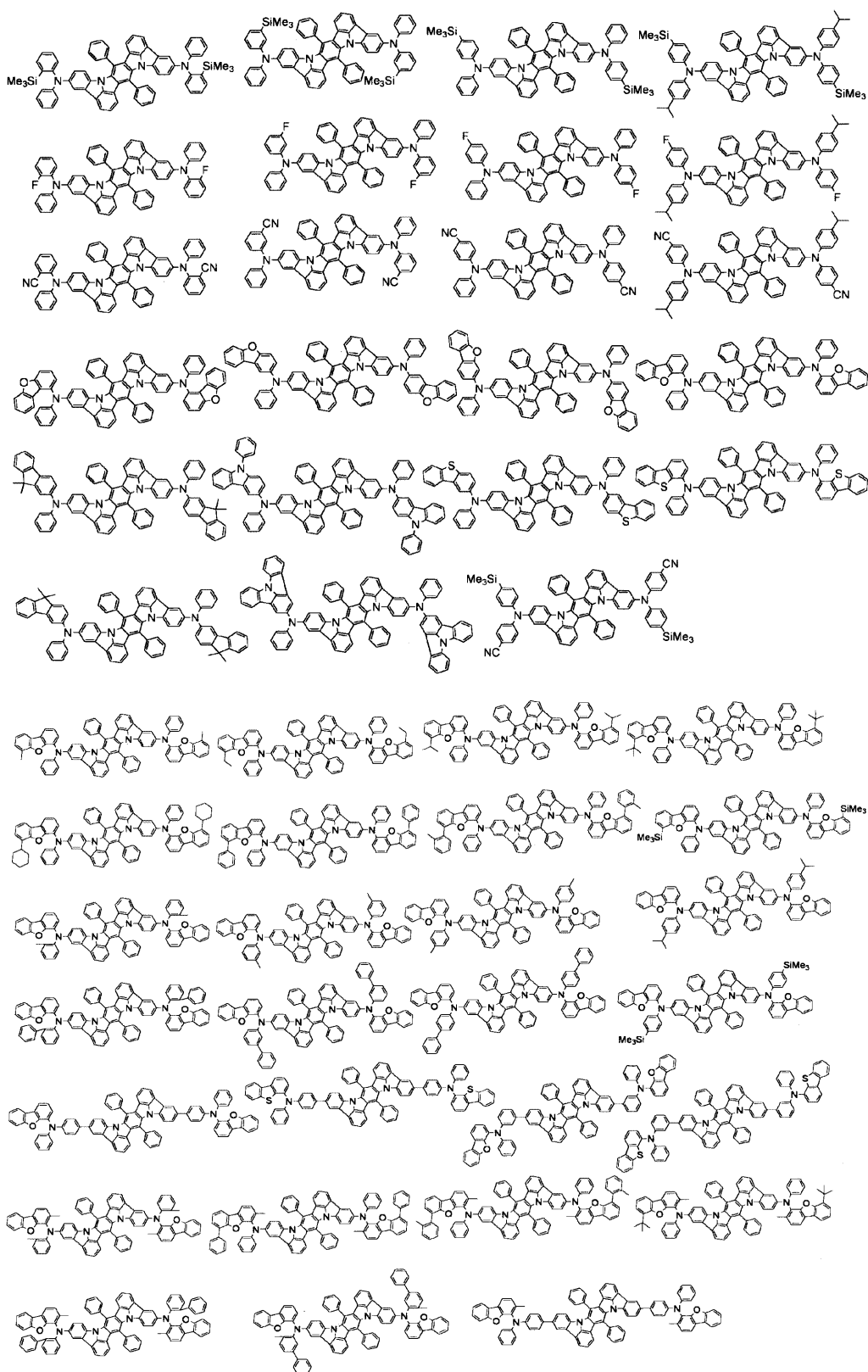
【化 6 1】



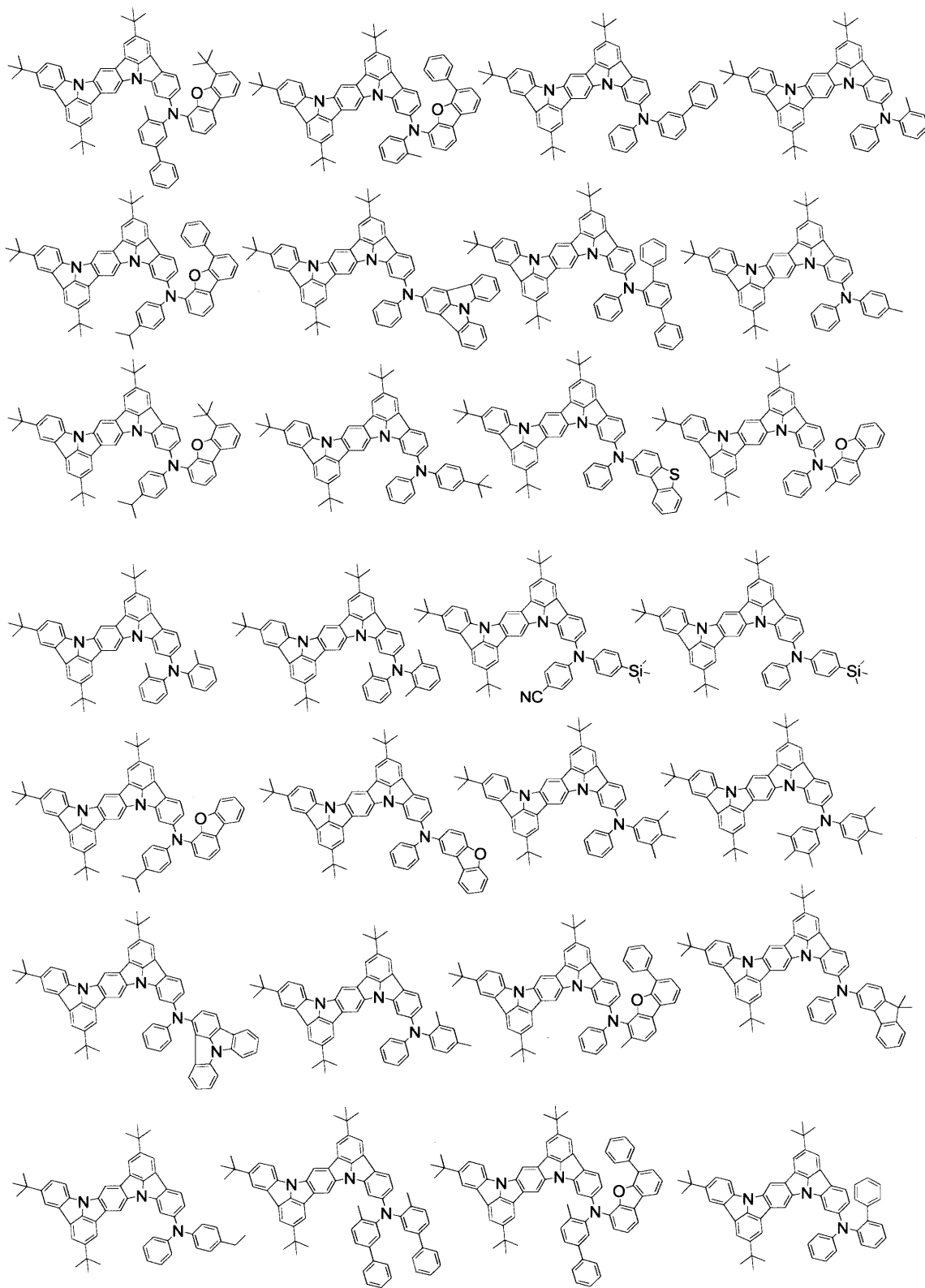
【化 6 2】



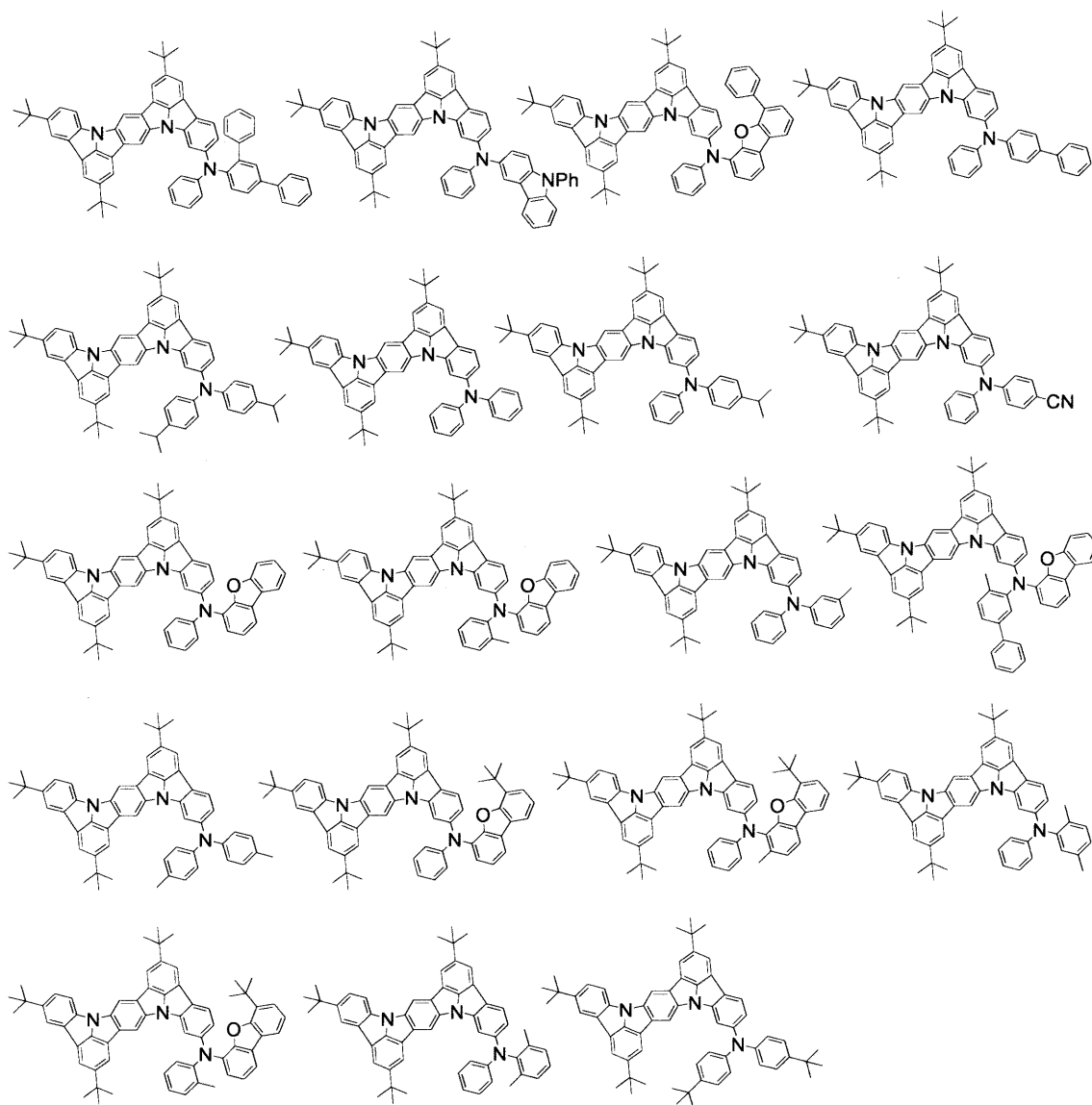
【化 6 3】



【化 6 4】



【化 6 5】



【0118】

本明細書において「陰極と陽極との間に配置された少なくとも1層の有機層」とは、陰極と陽極の間に1層の有機層が存在する場合にはその層を指し、複数の有機層が存在する場合には、そのうちの少なくとも1層を指す。

また、「少なくとも1層の有機層が発光層を含む」とは、陰極と陽極の間に1層の有機層が存在する場合には、当該層が発光層であり、複数の有機層が存在する場合には、そのうちの少なくとも1つが発光層であることを意味する。

【0119】

一実施形態においては、有機EL素子は、前記陽極と前記発光層との間に正孔輸送層を有する。

一実施形態においては、有機EL素子は、前記陰極と前記発光層との間に電子輸送層を有する。

【0120】

本明細書において「発光層と陽極の間にある少なくとも1層」は、発光層と陽極の間に1層の有機層が存在する場合にはその層を指し、複数の有機層が存在する場合にはそのうちの少なくとも1層を指す。例えば、発光層と陽極の間に2つ以上の有機層が存在する場合、発光層に近い側の有機層を「正孔輸送層」と呼び、陽極に近い側の有機層を「正孔注入層」と呼ぶ。「正孔輸送層」及び「正孔注入層」はそれぞれ1層であってもよいし、それぞれ2層以上であってもよいし、一方が1層であり、他方が2層以上であってもよい。

【0121】

同様に、「発光層と陰極の間にある少なくとも1層」は、発光層と陰極の間に1層の有機層が存在する場合にはその層を指し、複数の有機層が存在する場合にはそのうちの少なくとも1層を指す。例えば、発光層と陰極の間に2つ以上の有機層が存在する場合、発光層に近い側の有機層を「電子輸送層」と呼び、陰極に近い側の有機層を「電子注入層」と呼ぶ。「電子輸送層」及び「電子注入層」はそれぞれ1層であってもよいし、それぞれ2層以上であってもよいし、一方が1層であり、他方が2層以上であってもよい。

【0122】

一実施形態においては、上記「少なくとも1層の有機層」が発光層を含み、当該発光層が、式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は式(1-2)及び(1-3)で表される化合物を含む。式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は式(1-2)及び(1-3)で表される化合物は蛍光発光材料として機能でき、有機EL素子の発光効率を高めることができる。

10

【0123】

一実施形態においては、上記「少なくとも1層の有機層」が発光層を含み、当該発光層が、式(3-11)で表される化合物を含む。式(3-11)で表される化合物は蛍光発光材料として機能でき、有機EL素子の発光効率を高めることができる。

【0124】

一実施形態においては、上記「少なくとも1層の有機層」が発光層を含み、当該発光層が、式(3-21)で表される化合物を含む。式(3-21)で表される化合物は蛍光発光材料として機能でき、有機EL素子の発光効率を高めることができる。

20

【0125】

一実施形態においては、上記「少なくとも1層の有機層」が発光層を含み、当該発光層が、式(3-31)又は(3-32)で表される化合物を含む。式(3-31)又は(3-32)で表される化合物は蛍光発光材料として機能でき、有機EL素子の発光効率を高めることができる。

【0126】

一実施形態においては、上記「少なくとも1層の有機層」が、式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は式(1-2)及び(1-3)で表される化合物を含む。式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は式(1-2)及び(1-3)で表される化合物は発光材料として含まれ、有機EL素子の発光効率を高めることができる。

30

【0127】

一実施形態においては、上記「少なくとも1層の有機層」が、式(3-11)で表される化合物を含む。式(3-11)で表される化合物は発光材料として含まれ、有機EL素子の発光効率を高めることができる。

【0128】

一実施形態においては、上記「少なくとも1層の有機層」が、式(3-21)で表される化合物を含む。式(3-21)で表される化合物は発光材料として含まれ、有機EL素子の発光効率を高めることができる。

【0129】

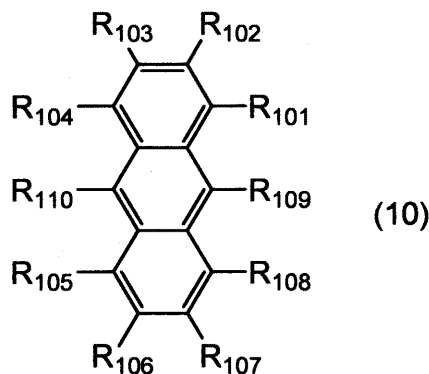
一実施形態においては、上記「少なくとも1層の有機層」が、式(3-31)又は(3-32)で表される化合物を含む。式(3-31)又は(3-32)で表される化合物は発光材料として含まれ、有機EL素子の発光効率を高めることができる。

40

【0130】

一実施形態においては、前記発光層が、さらに下記式(10)で表される化合物(以下、化合物(10)ということがある)を含む。

【化 6 6】



〔式 (10) 中、

$R_{101} \sim R_{110}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

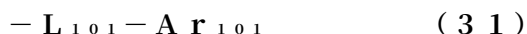
前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{101} \sim R_{110}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{121})(R_{122})(R_{123})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{124}$ 、 $-\text{COOR}_{125}$ 、 $-\text{N}(R_{126})(R_{127})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基、又は下記式(31)で表される基である。

20

$R_{121} \sim R_{127}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。 $R_{121} \sim R_{127}$ が2以上存在する場合、2以上の $R_{121} \sim R_{127}$ のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。

30

但し、前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{101} \sim R_{110}$ の少なくとも1つは、下記式(31)で表される基である。下記式(31)が2以上存在する場合、2以上の下記式(31)で表される基のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。



〔式 (31) 中、

L_{101} は、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基である。

Ar_{101} は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。)]

40

【0131】

化合物(10)の各置換基、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基及びハロゲン原子の具体例は、それぞれ前述したものと同様である。

【0132】

以下、「 $R_{101} \sim R_{110}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい」について説明する。

「 $R_{101} \sim R_{110}$ のうち隣接する2つ以上の1組」は、例えば、 R_{101} と R_{102} 、 R_{102} と R_{103} 、 R_{103} と R_{104} 、 R_{105} と R_{106} 、 R_{106} と R_{107} 、 R_{107} と R_{108} 、 R_{108} と R_{109} 、 R_{101} と R_{102} と R_{103} 等の組合

50

せである。

上記飽和又は不飽和の環に対する「置換もしくは無置換の」の「置換」のときの置換基は、式(10)における上記「置換もしくは無置換の」という場合における置換基と同様である。

【0133】

「飽和又は不飽和の環」とは、例えば R_{101} と R_{102} で環を形成する場合には、 R_{101} が結合する炭素原子と、 R_{102} が結合する炭素原子と、1以上の任意の元素とで形成する環を意味する。具体的には、 R_{101} と R_{102} で環を形成する場合において、 R_{101} が結合する炭素原子と、 R_{102} が結合する炭素原子と、4つの炭素原子とで不飽和の環を形成する場合、 R_{101} と R_{102} とで形成する環はベンゼン環となる。

10

【0134】

「任意の元素」は、好ましくは、C元素、N元素、O元素、S元素である。任意の元素において(例えばC元素又はN元素の場合)、環を形成しない結合手は、水素原子等で終端されてもよい。

「1以上の任意の元素」は、好ましくは2個以上15個以下、より好ましくは3個以上12個以下、さらに好ましくは、3個以上5個以下の任意の元素である。

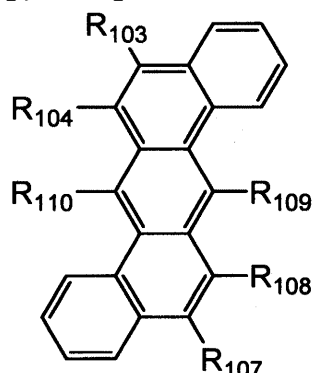
【0135】

例えば、 R_{101} と R_{102} が環を形成し、同時に R_{105} と R_{106} が環を形成してもよい。その場合、式(10)で表される化合物は、例えば下記式(10A)で表される化合物となる。

20

【0136】

【化67】



(10A)

【0137】

一実施形態においては、 $R_{101} \sim R_{110}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基、又は式(31)で表される基である。

【0138】

一実施形態においては、 $R_{101} \sim R_{110}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の複素環基、又は式(31)で表される基である。

40

【0139】

一実施形態においては、 $R_{101} \sim R_{110}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~18のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~18の複素環基、又は式(31)で表される基である。

【0140】

一実施形態において、 R_{109} 及び R_{110} の少なくとも1つは、式(31)で表される基である。

【0141】

一実施形態において、 R_{109} 及び R_{110} は、それぞれ独立に、式(31)で表され

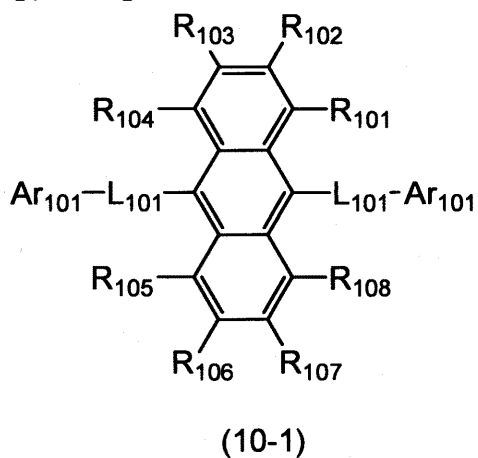
50

る基である。

【0142】

一実施形態においては、化合物(10)は、下記式(10-1)で表される化合物である。

【化68】



【0143】

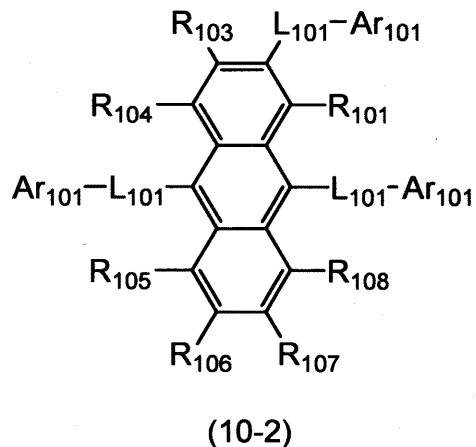
式(10-1)中、 $R_{101} \sim R_{108}$ 、 L_{101} 及び Ar_{101} は、式(10)で定義した通りである。

20

【0144】

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

【化69】



【0145】

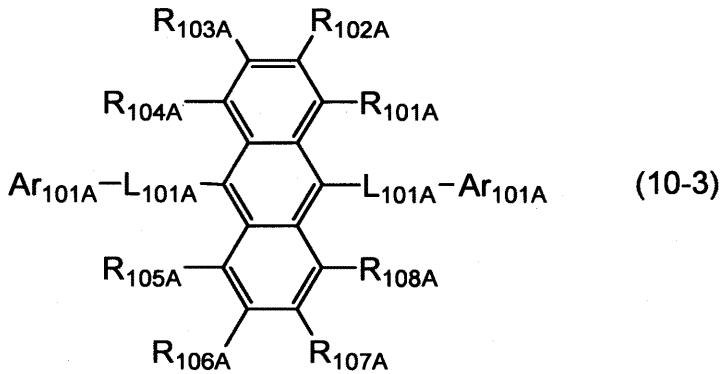
式(10-2)中、 R_{101} 、 $R_{103} \sim R_{108}$ 、 L_{101} 及び Ar_{101} は、式(10)で定義した通りである。

40

【0146】

一実施形態においては、化合物(10)は、下記式(10-3)で表される化合物である。

【化 7 0】



【0147】

式 (10-3) 中、

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

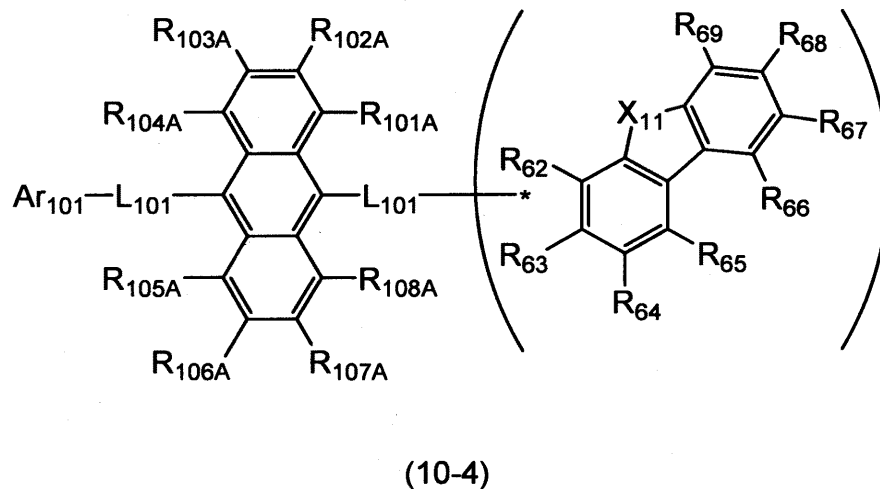
L_{101A} は、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基である。2 つの L_{101A} は、同一でもよく、異なってもよい。

Ar_{101A} は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。2 つの Ar_{101A} は、同一でもよく、異なってもよい。

【0148】

一実施形態においては、化合物 (10) は、下記式 (10-4) で表される化合物である。

【化 7 1】



【0149】

式 (10-4) 中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、前記式 (10) で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

X_{11} は、O、S、又は N (R_{61}) である。

R_{61} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

$R_{62} \sim R_{69}$ の 1 つは、 L_{101} と結合する結合手である。

L_{101} と結合しない $R_{62} \sim R_{69}$ のうちの隣接する 1 組以上は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

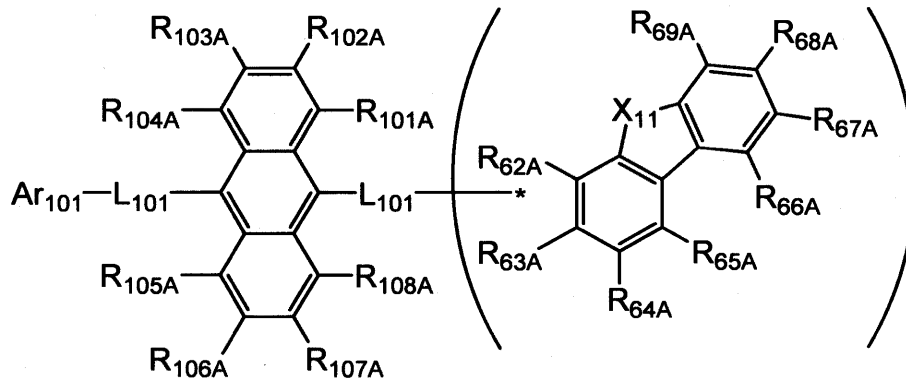
L_{101} と結合せず、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{62} \sim R_{69}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 の

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

【0150】

一実施形態においては、化合物 (10) は、下記式 (10-4A) で表される化合物である。

【化72】



(10-4A)

【0151】

式 (10-4A) 中、

L₁₀₁ 及び A_{r101} は、前記式 (10) で定義した通りである。

R_{101A} ～ R_{108A} は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

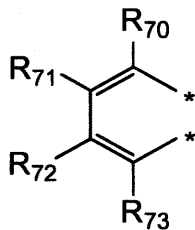
X₁₁ は、O、S、又は N (R₆₁) である。

R₆₁ は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

R_{62A} ～ R_{69A} のうちの隣接する 2 つ以上の 1 組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよく、R_{62A} ～ R_{69A} のうちの隣接する 2 つは、下記式 (10-4A-1) で表される環を形成する。

置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない R_{62A} ～ R_{69A} 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、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

【化73】



(10-4A-1)

(式 (10-4A-1) 中、

2 つの結合手*のそれぞれは、R_{62A} ～ R_{69A} のうちの隣接する 2 つと結合する。

R₇₀ ～ R₇₃ の 1 つは、L₁₀₁ と結合する結合手である。

L₁₀₁ と結合しない R₇₀ ～ R₇₃ 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、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。)

【0152】

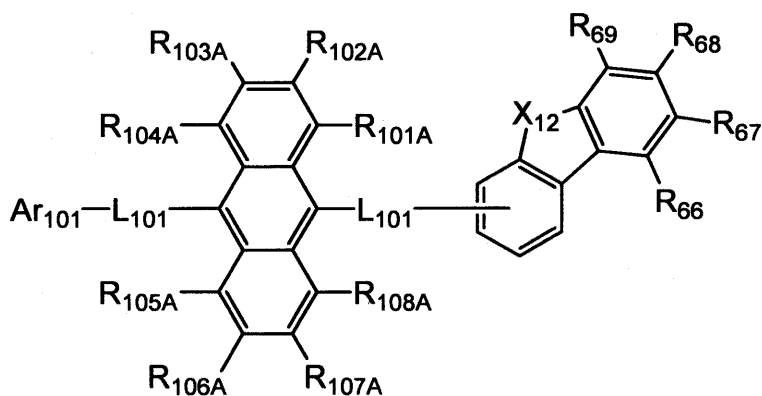
20

30

50

一実施形態においては、化合物(10)は、下記式(10-6)で表される化合物である。

【化74】



(10-6)

【0153】

式(10-6)中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、前記式(10)で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。

$R_{66} \sim R_{69}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。

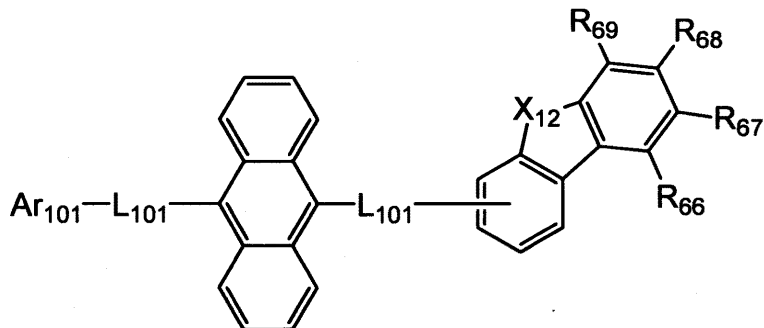
X_{12} は、O又はSである。

20

【0154】

一実施形態においては、前記式(10-6)で表される化合物は、下記式(10-6H)で表される化合物である。

【化75】



(10-6H)

【0155】

式(10-6H)中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、前記式(10)で定義した通りである。

$R_{66} \sim R_{69}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。

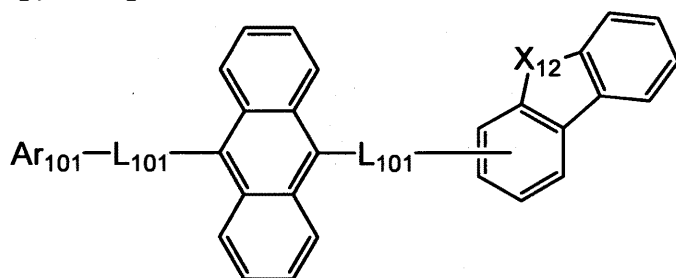
X_{12} は、O又はSである。

40

【0156】

一実施形態においては、前記式(10-6)及び(10-6H)で表される化合物は、下記式(10-6Ha)で表される化合物である。

【化 7 6】



(10-6Ha)

【0157】

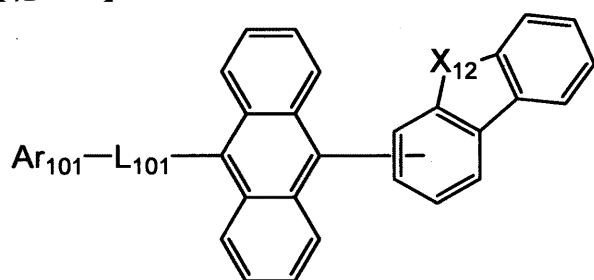
式 (10-6Ha) 中、

 L_{101} 及び Ar_{101} は、前記式 (10) で定義した通りである。 X_{12} は、O 又は S である。

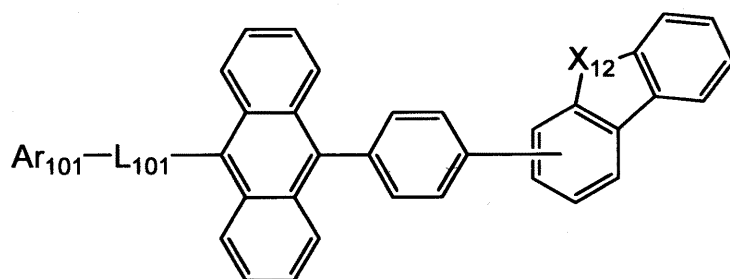
【0158】

一実施形態においては、前記式 (10-6)、(10-6H) 及び (10-6Ha) で表される化合物は、下記式 (10-6Ha-1) 又は (10-6Ha-2) で表される化合物である。

【化 7 7】



(10-6Ha-1)



(10-6Ha-2)

【0159】

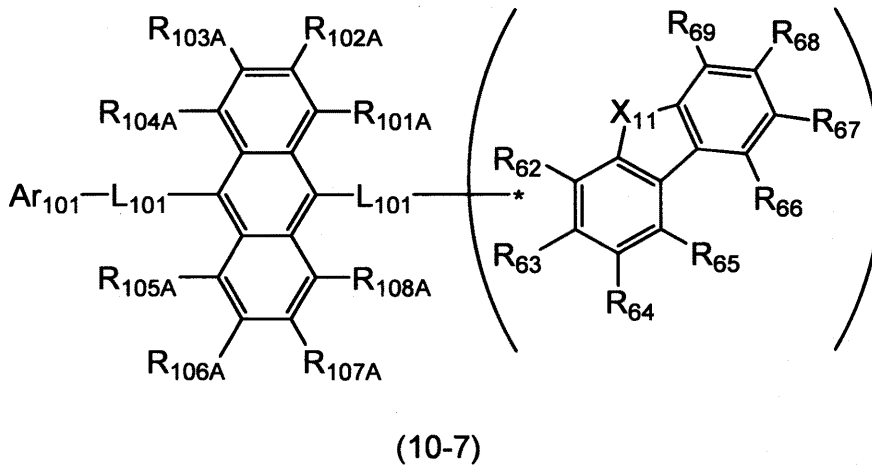
式 (10-6Ha-1) 及び (10-6Ha-2) 中、

 L_{101} 及び Ar_{101} は、前記式 (10) で定義した通りである。 X_{12} は、O 又は S である。

【0160】

一実施形態においては、化合物 (10) は、下記式 (10-7) で表される化合物である。

【化 7 8】



【0161】

式 (10-7) 中、

L₁₀₁ 及び A r₁₀₁ は、式 (10) で定義した通りである。R_{101A} ~ R_{108A} は、前記式 (10-4) で定義した通りである。X₁₁ は、前記式 (10-4) で定義した通りである。

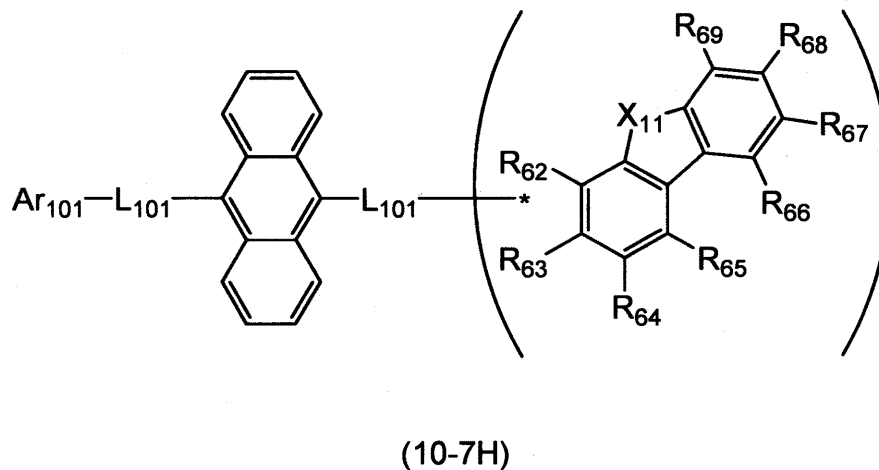
R₆₂ ~ R₆₉ は、前記式 (10-4) で定義した通りである。但し、R₆₆ 及び R₆₇、R₆₇ 及び R₆₈、並びに R₆₈ 及び R₆₉ のいずれか 1 組は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。

20

【0162】

一実施形態においては、化合物 (10) は、下記式 (10-7H) で表される化合物である。

【化 7 9】



【0163】

式 (10-7H) 中、

L₁₀₁ 及び A r₁₀₁ は、式 (10) で定義した通りである。X₁₁ は、前記式 (10-4) で定義した通りである。

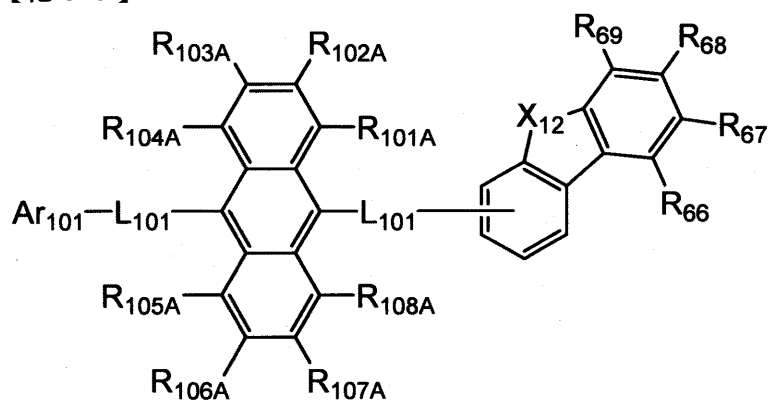
R₆₂ ~ R₆₉ は、前記式 (10-4) で定義した通りである。但し、R₆₆ 及び R₆₇、R₆₇ 及び R₆₈、並びに R₆₈ 及び R₆₉ のいずれか 1 組は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。

40

【0164】

一実施形態においては、化合物 (10) は、下記式 (10-8) で表される化合物である。

【化 8 0】



(10-8)

【0165】

式 (10-8) 中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、式 (10) で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、前記式 (10-4) で定義した通りである。

X_{12} は、O 又は S である。

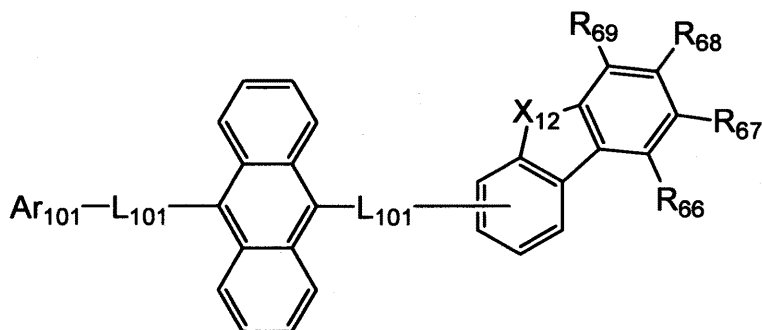
$R_{66} \sim R_{69}$ は、前記式 (10-4) で定義した通りである。但し、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、並びに R_{68} 及び R_{69} のいずれか 1 組は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。

20

【0166】

一実施形態においては、化合物 (10-8) で表される化合物は、下記式 (10-8H) で表される化合物である。

【化 8 1】



(10-8H)

【0167】

式 (10-8H) 中、 L_{101} 及び Ar_{101} は、式 (10) で定義した通りである。

40

$R_{66} \sim R_{69}$ は、前記式 (10-4) で定義した通りである。但し、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、並びに R_{68} 及び R_{69} のうちのいずれか 1 組は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、並びに R_{68} 及び R_{69} のうちのいずれか 1 組は、互いに結合して、無置換のベンゼン環を形成することが好ましい。

X_{12} は、O 又は S である。

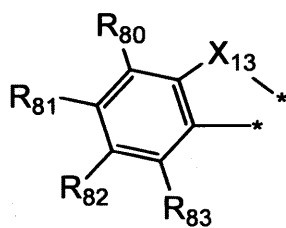
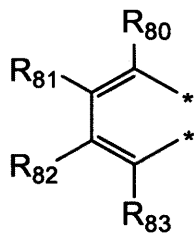
【0168】

一実施形態において、前記式 (10-7)、(10-8) 又は (10-8H) で表される化合物は、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、並びに R_{68} 及び R_{69} のいずれか 1 組が、互いに結合して、下記式 (10-8-1) 又は (10-8-2) で表される環を

50

形成し、前記式(10-8-1)又は(10-8-2)で表される環を形成しない R_{66} ～ R_{69} は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

【化82】



(10-8-1)

(10-8-2)

(式(10-8-1)及び(10-8-2)中、

2つの結合手*は、それぞれ、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、又は R_{68} 及び R_{69} の1組と結合する。

R_{80} ～ R_{83} 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、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

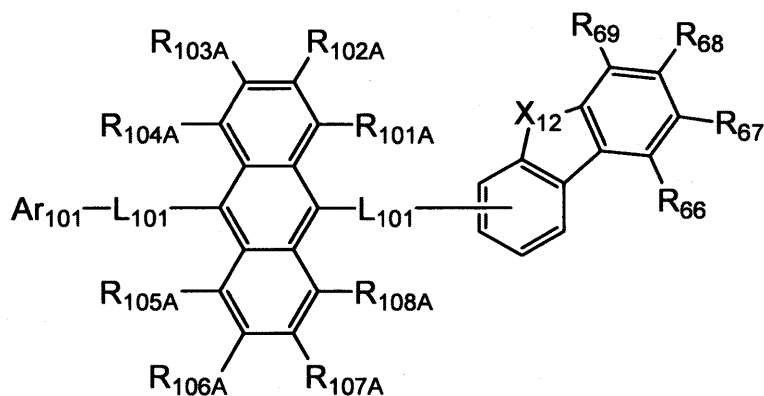
X_{13} は、O又はSである。)

【0169】

一実施形態においては、化合物(10)は、下記式(10-9)で表される化合物である。

20

【化83】



(10-9)

【0170】

式(10-9)中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、式(10)で定義した通りである。

R_{101A} ～ R_{108A} は、前記式(10-4)で定義した通りである。

R_{66} ～ R_{69} は、前記式(10-4)で定義した通りである。但し、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、並びに R_{68} 及び R_{69} は、いずれも互いに結合せず、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

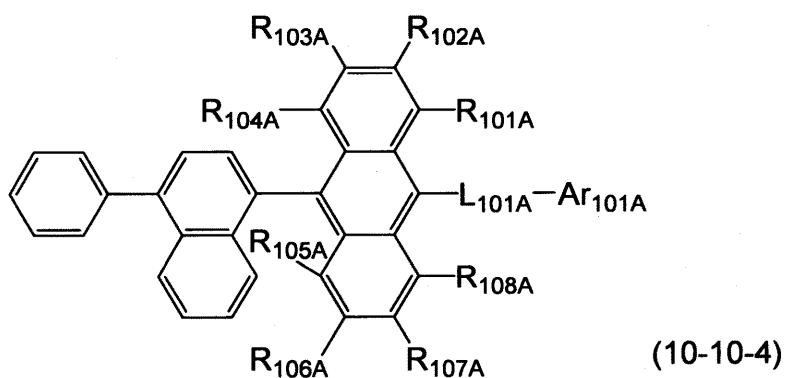
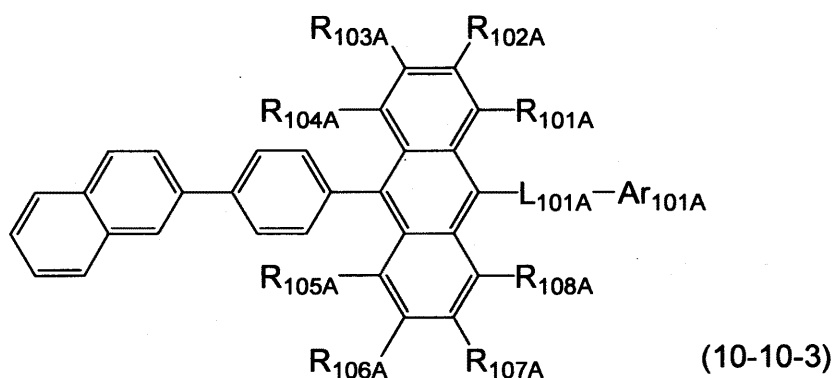
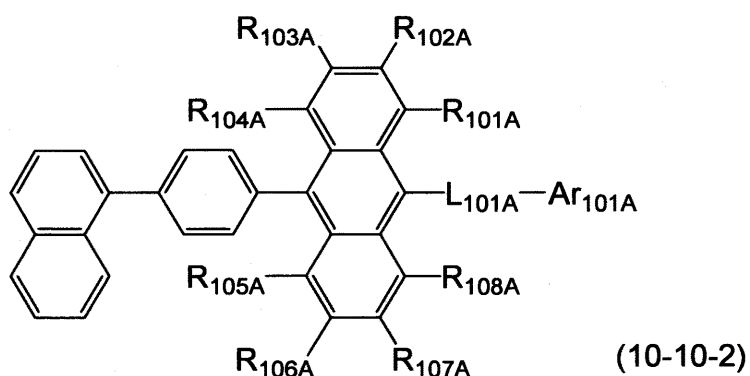
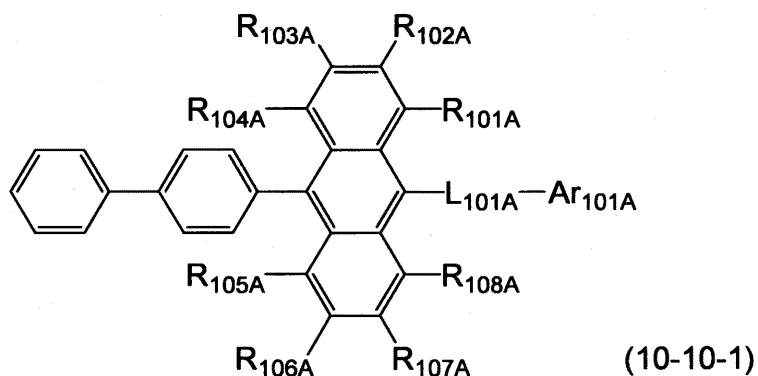
X_{12} は、O又はSである。

【0171】

一実施形態においては、化合物(10)は、下記式(10-10-1)～(10-10-4)で表される化合物からなる群から選択される。

40

【化 8 4】



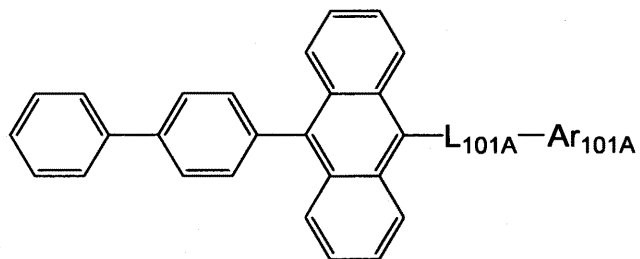
【0172】

式(10-10-1)～(10-10-4)中、 L_{101A} 、 Ar_{101A} 及び $R_{101A} \sim R_{108A}$ は、前記式(10-3)で定義した通りである。

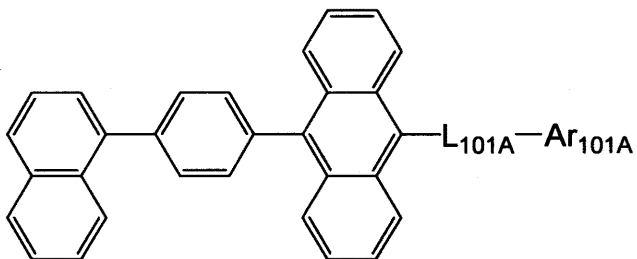
【0173】

一実施形態においては、上記式(10-10-1)～(10-10-4)で表される化

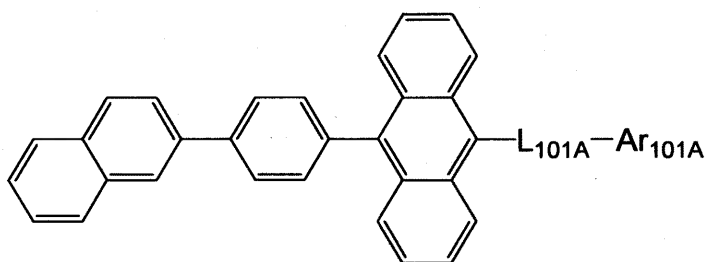
化合物は、下記式 (10-10-1H) ~ (10-10-4H) で表される化合物である。
【化 8 5】



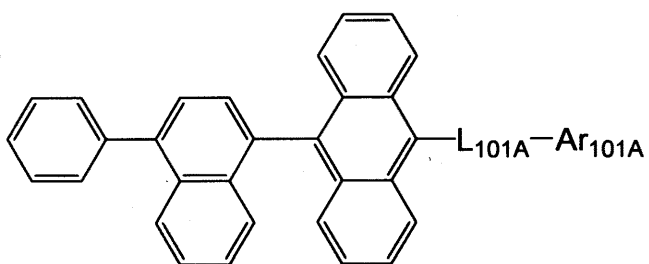
(10-10-1H)



(10-10-2H)



(10-10-3H)



(10-10-4H)

【0174】

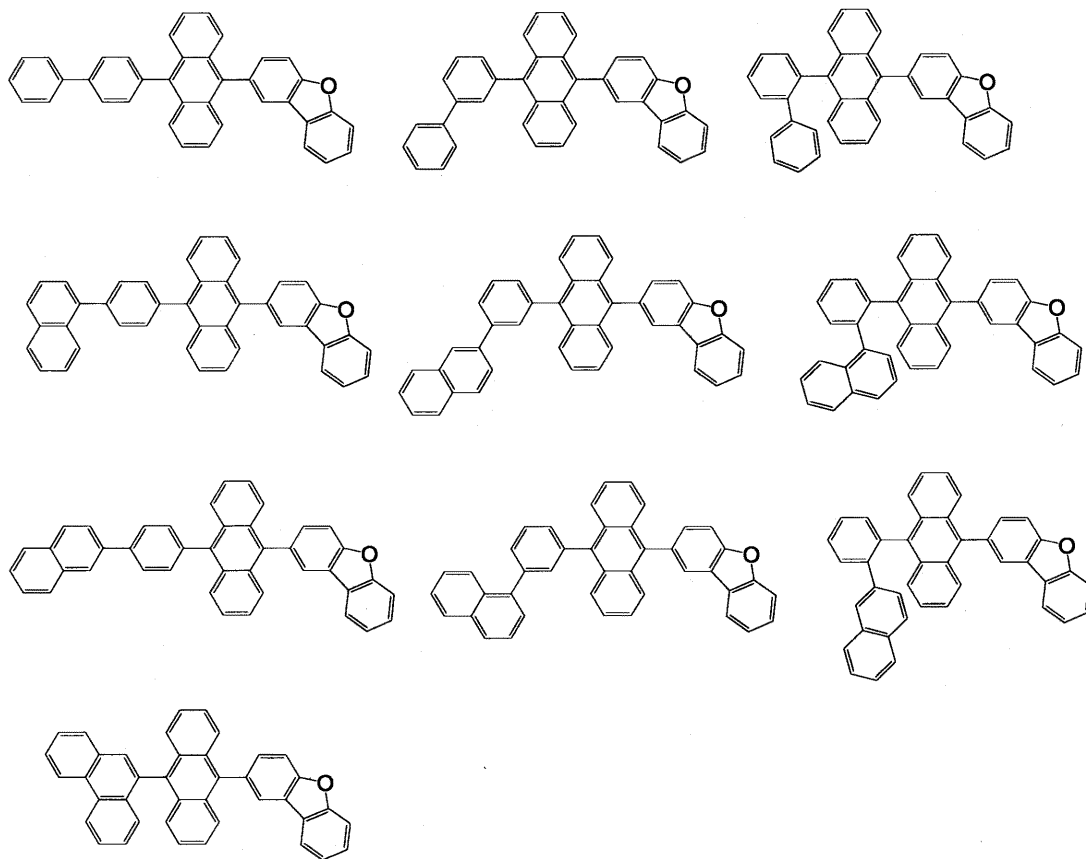
式 (10-10-1H) ~ (10-10-4H) 中、 L_{101A} 及び Ar_{101A} は、
前記式 (10-3) で定義した通りである。

【0175】

式 (10) で表される化合物は、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

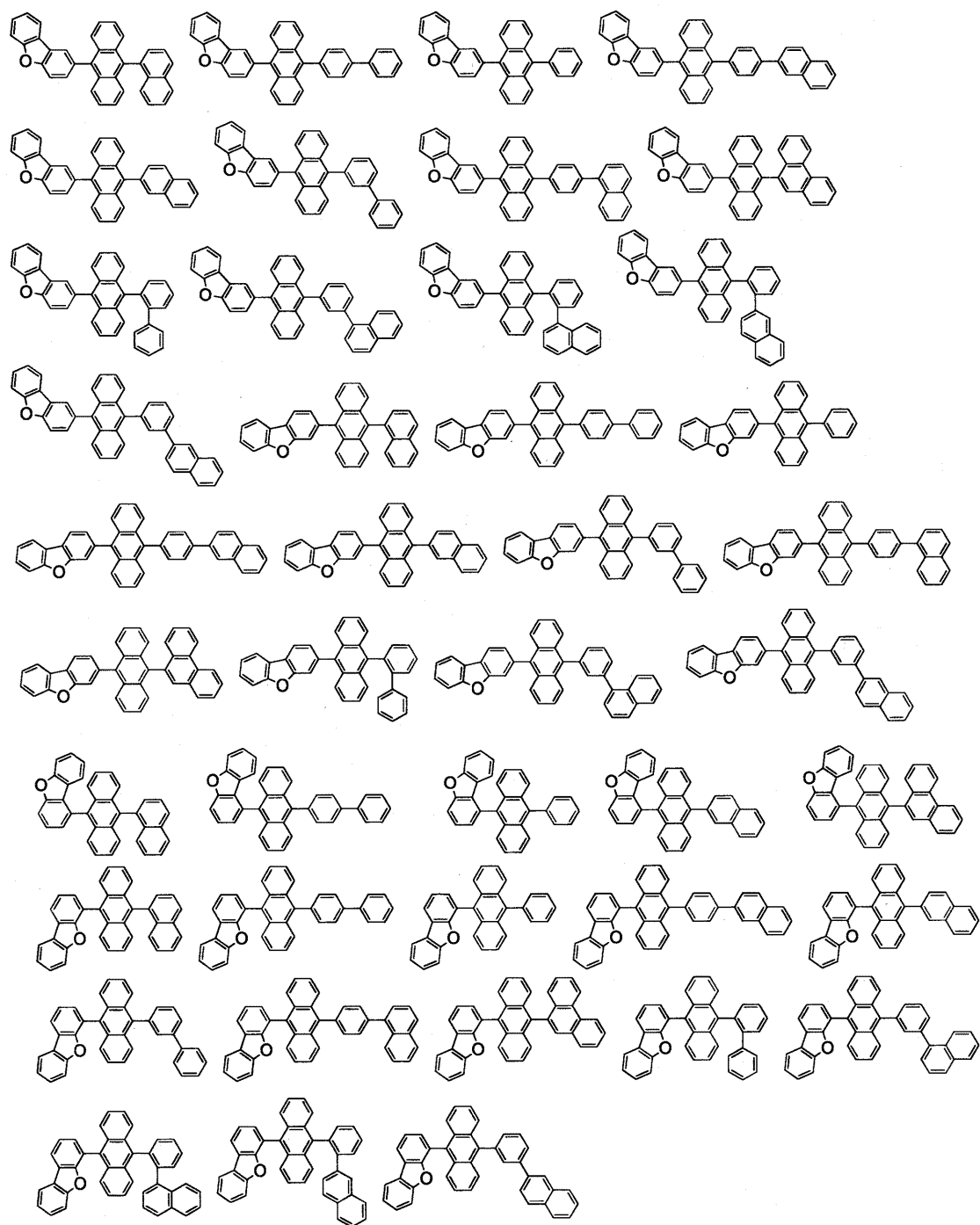
【0176】

【化 8 6】



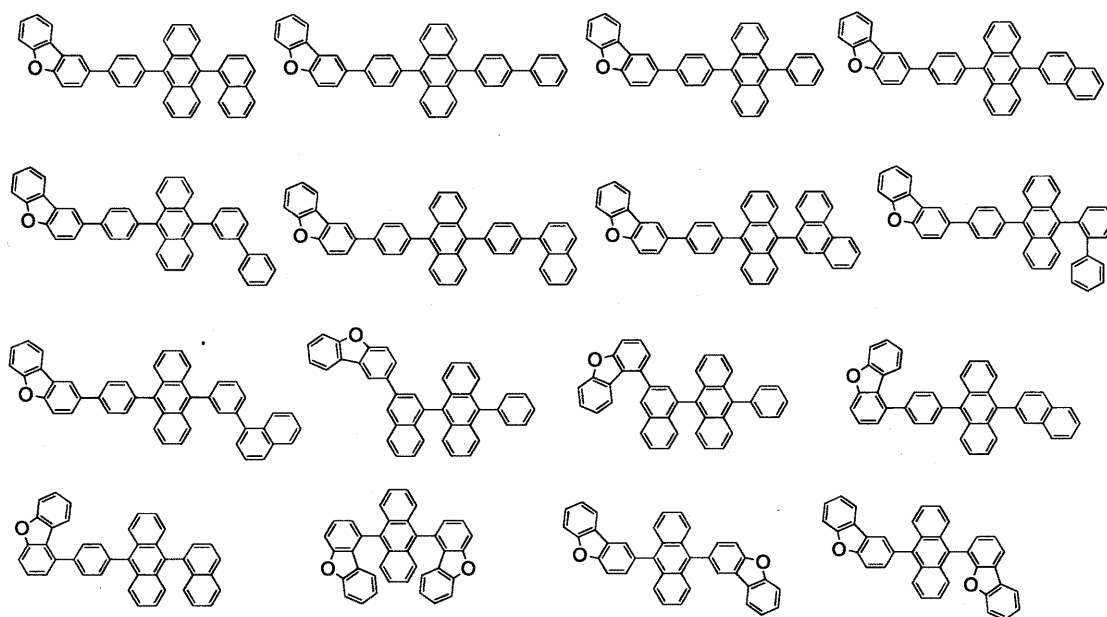
【 0 1 7 7】

【化 8 7】



【0 1 7 8】

【化 8 8】

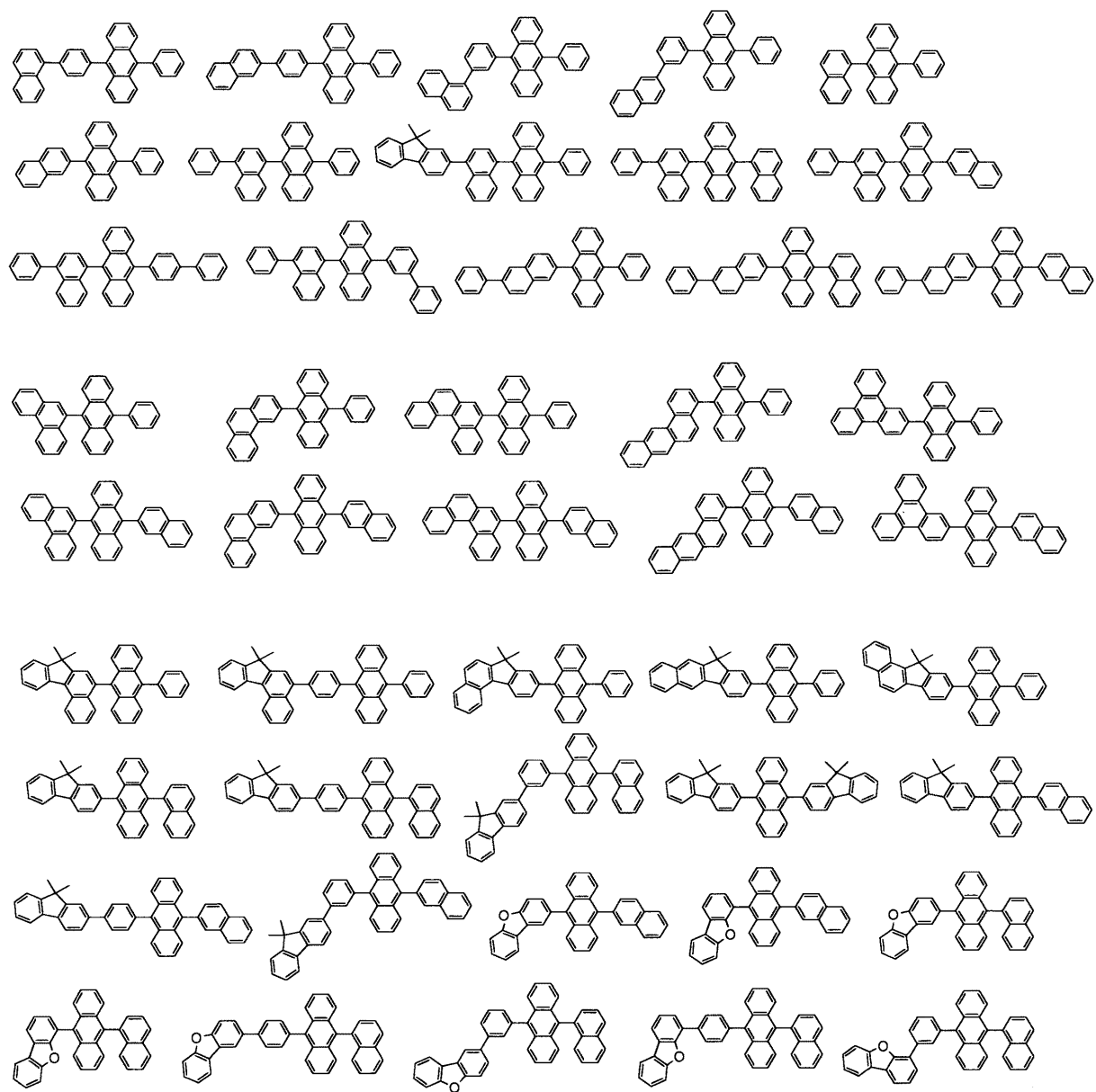


【 0 1 7 9】

This image displays a collection of 50 skeletal structures of various polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). The structures are arranged in a grid-like fashion, showing a variety of ring systems and substituents. The molecules include linear and branched fused ring systems, as well as various substituted benzenes and naphthalenes. The structures are drawn using a skeletal representation where carbon atoms are at the vertices and bonds are lines, with hydrogen atoms implied at the remaining valences.

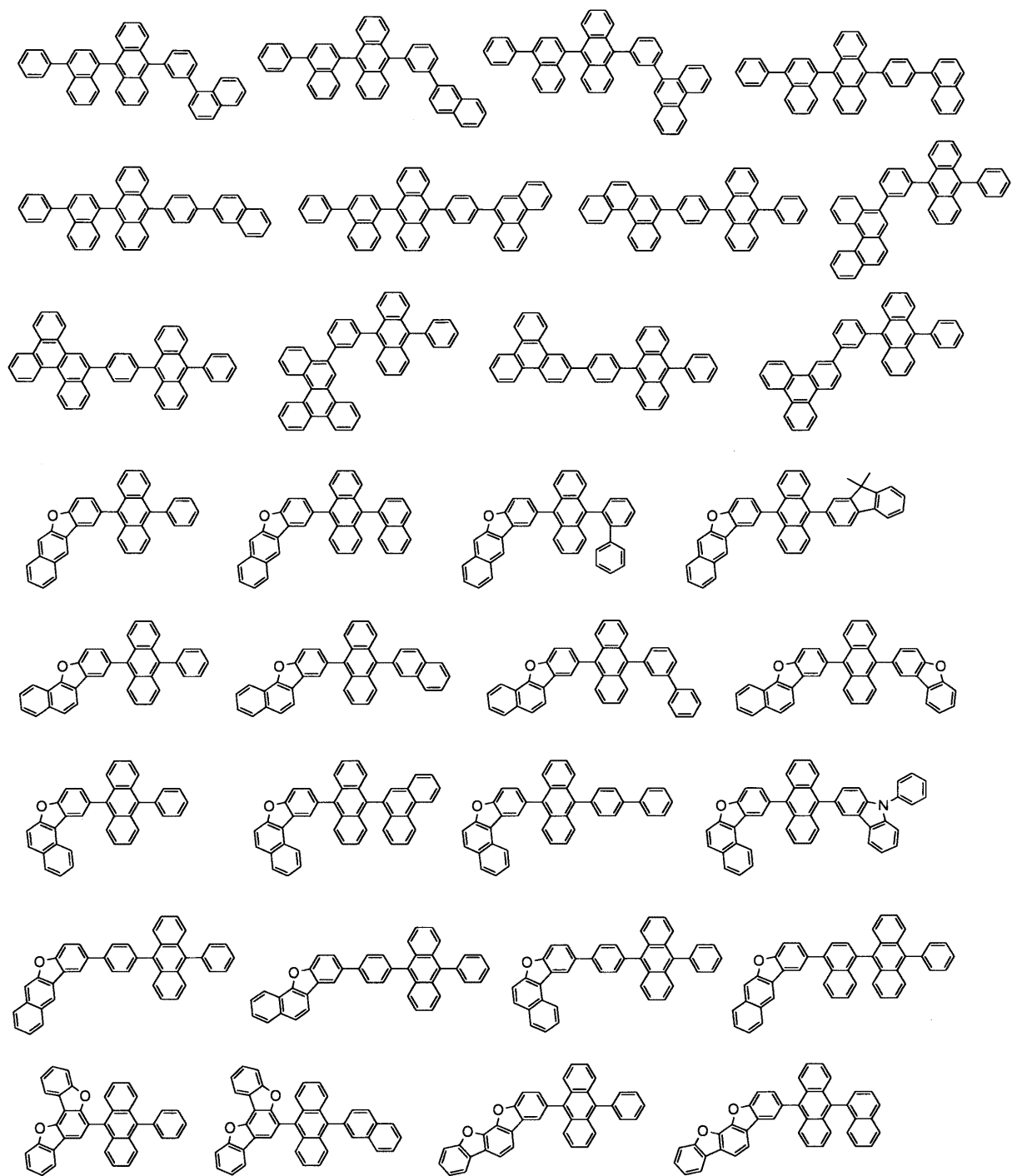
【 0 1 8 0 】

【化 9 0】



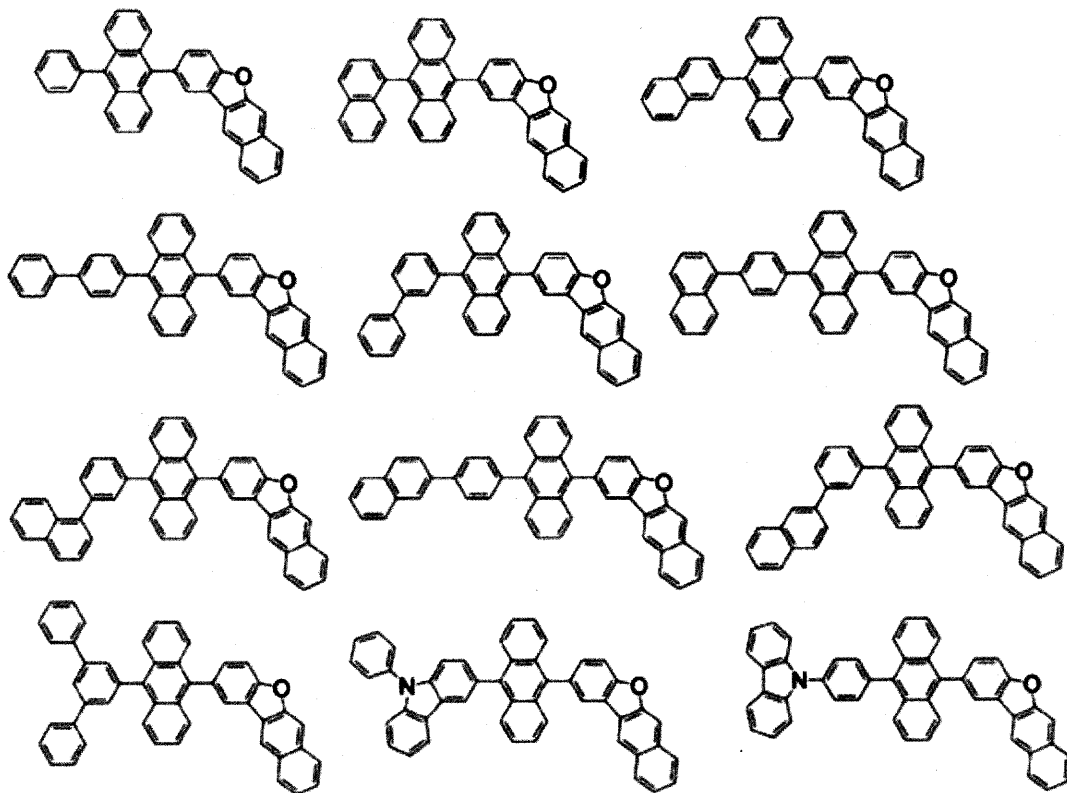
【 0 1 8 1】

【化 9 1】



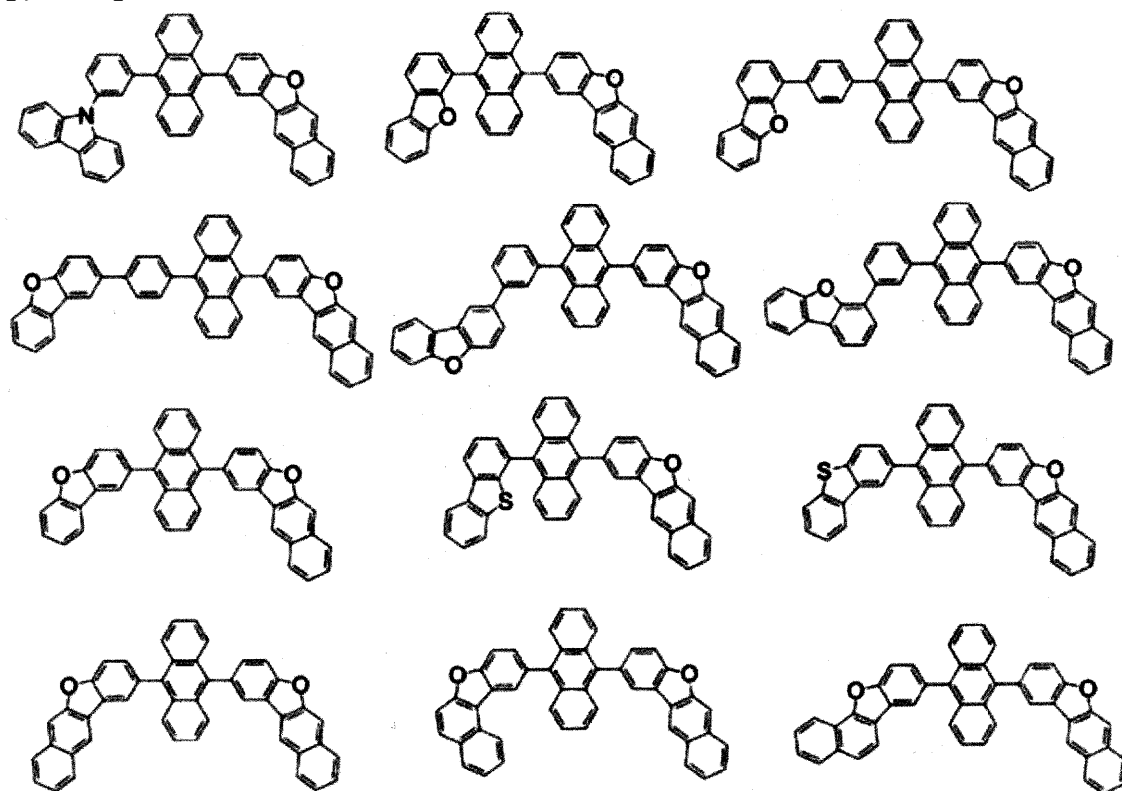
【0 1 8 2】

【化 9 2】



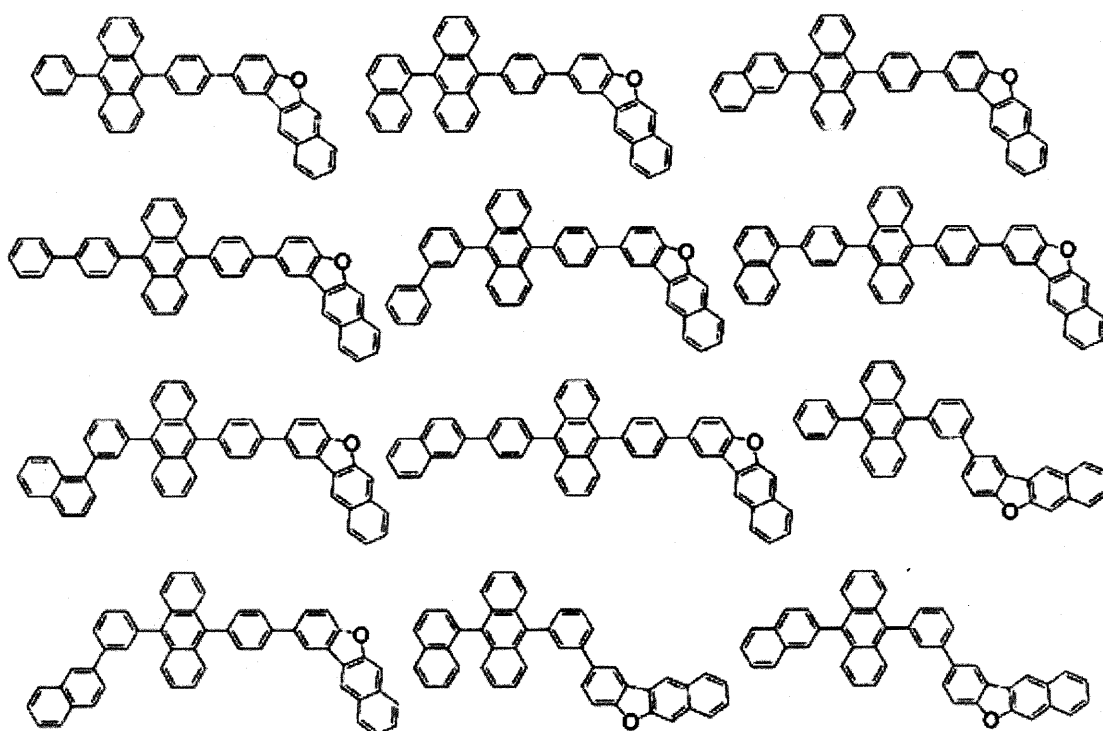
【 0 1 8 3】

【化 9 3】



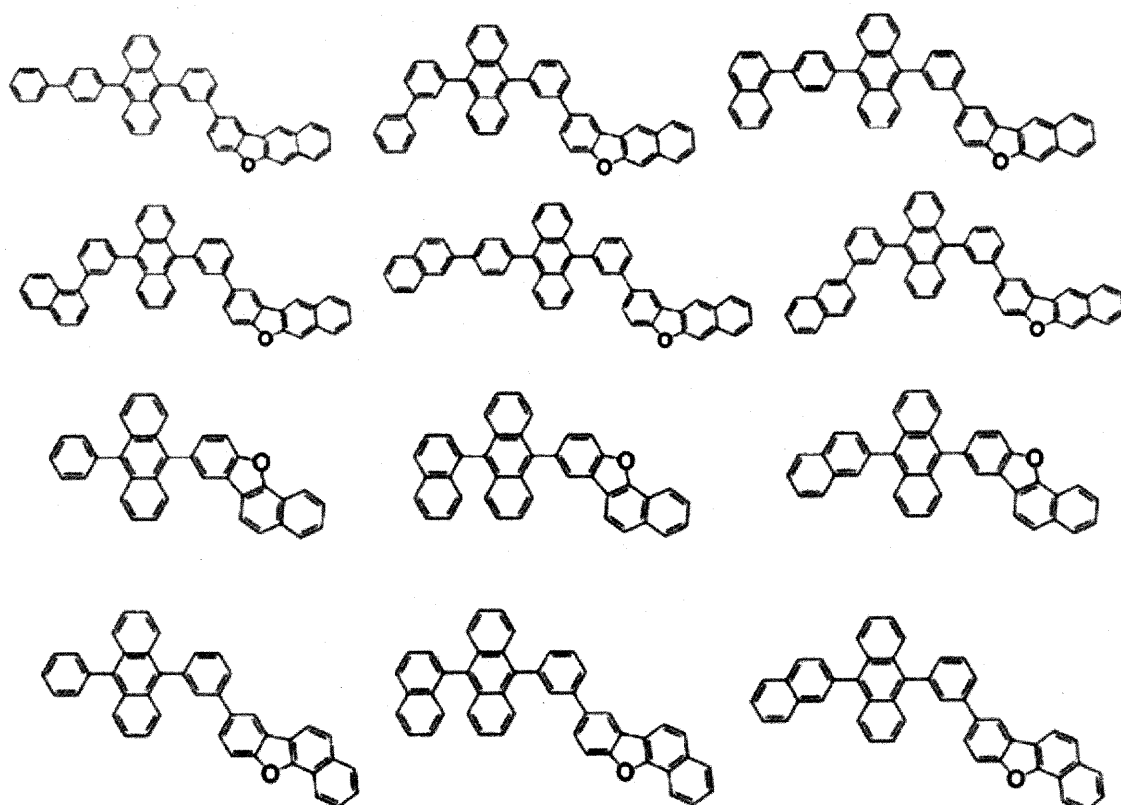
【 0 1 8 4】

【化 9 4】



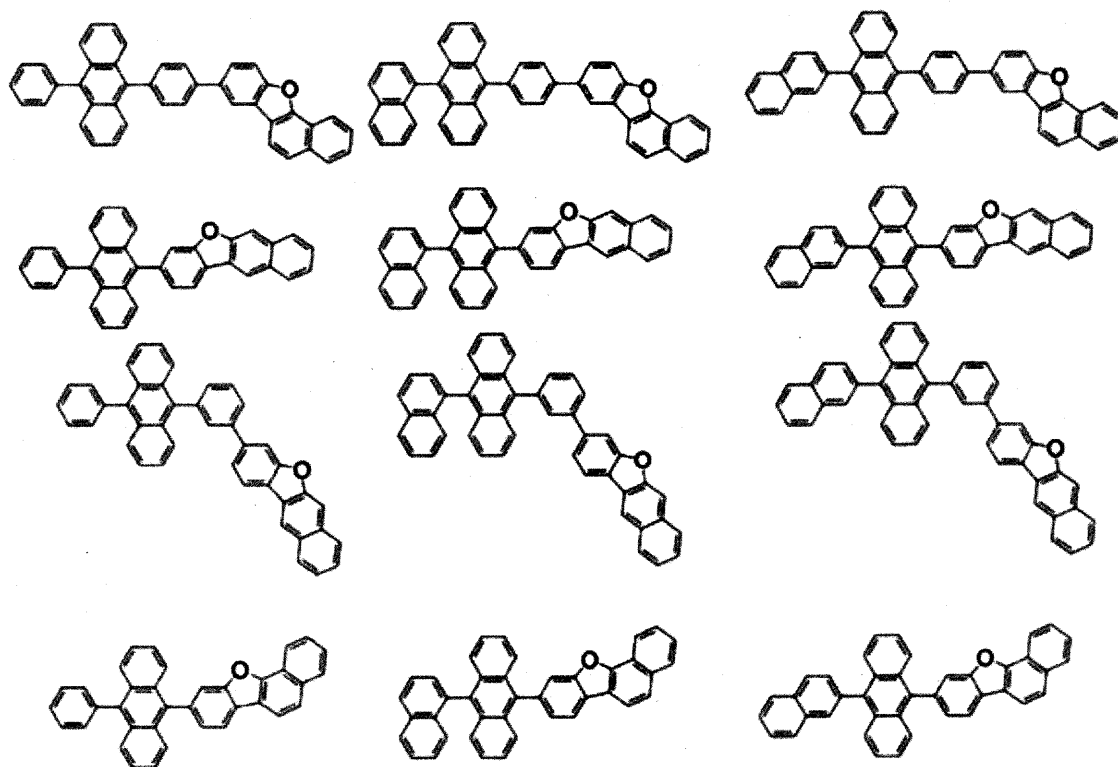
【0 1 8 5】

【化 9 5】



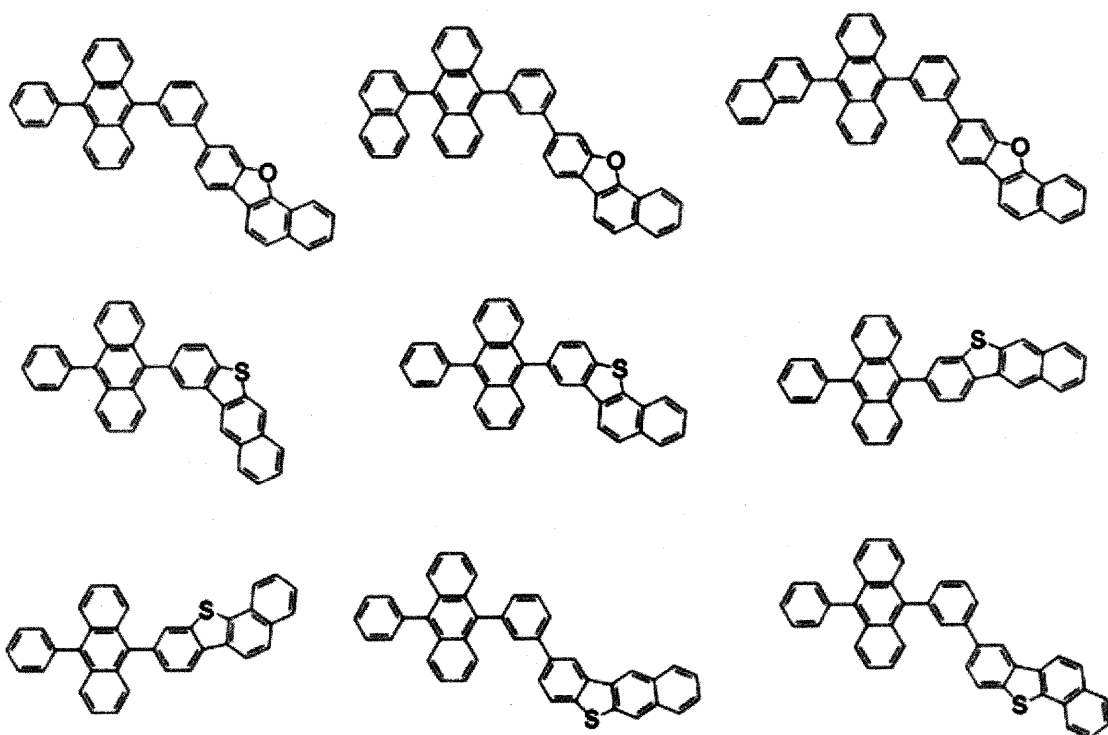
【0 1 8 6】

【化 9 6】



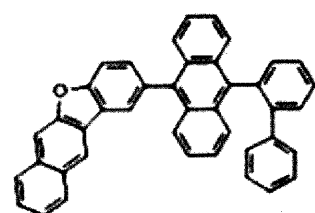
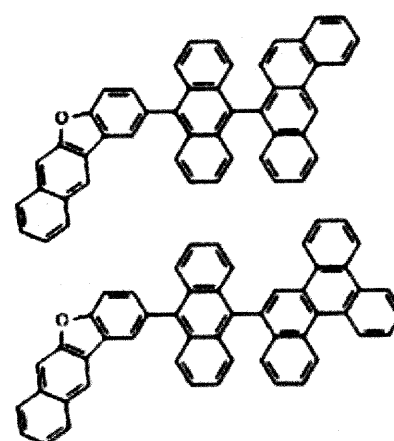
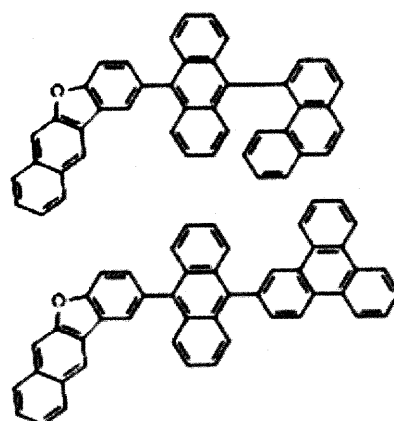
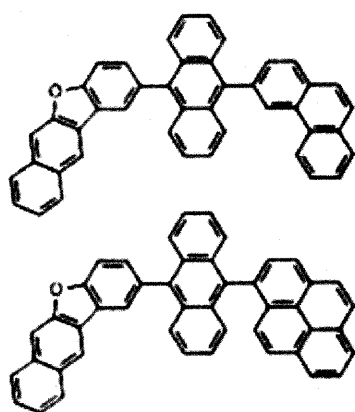
【0 1 8 7】

【化 9 7】



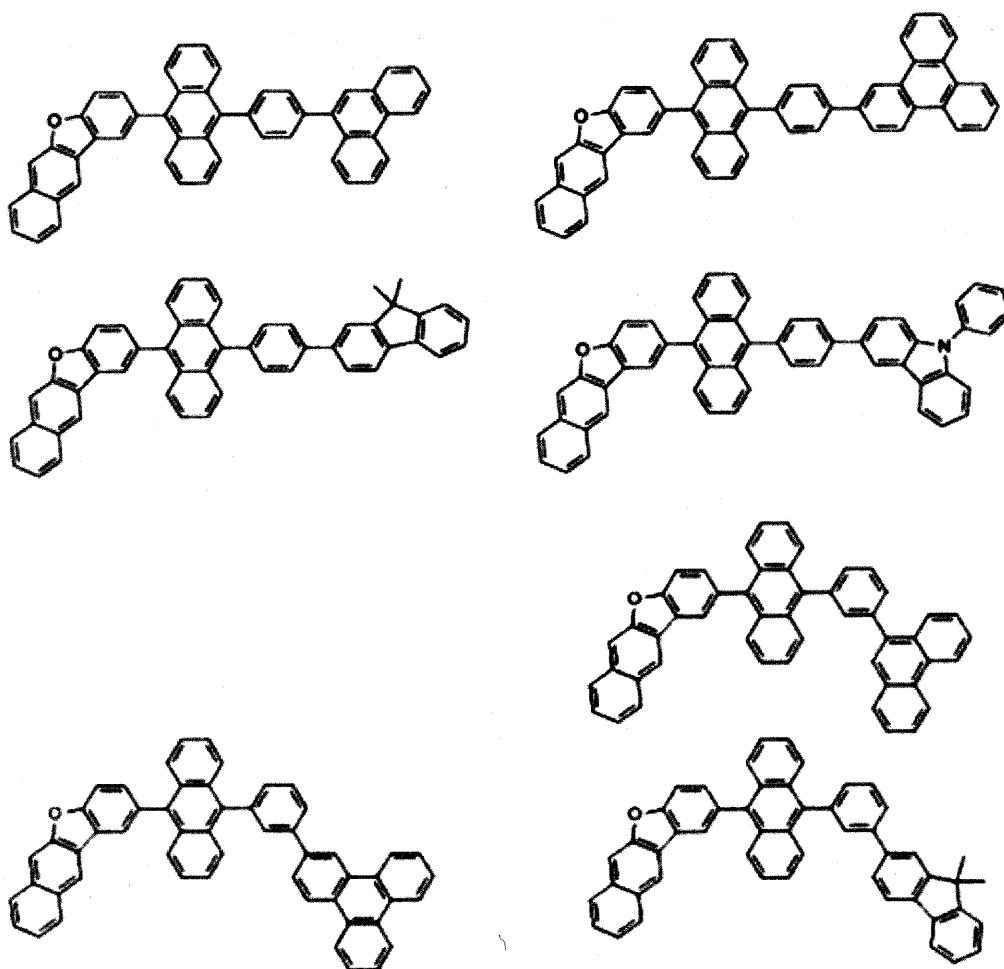
【0 1 8 8】

【化 9 8】



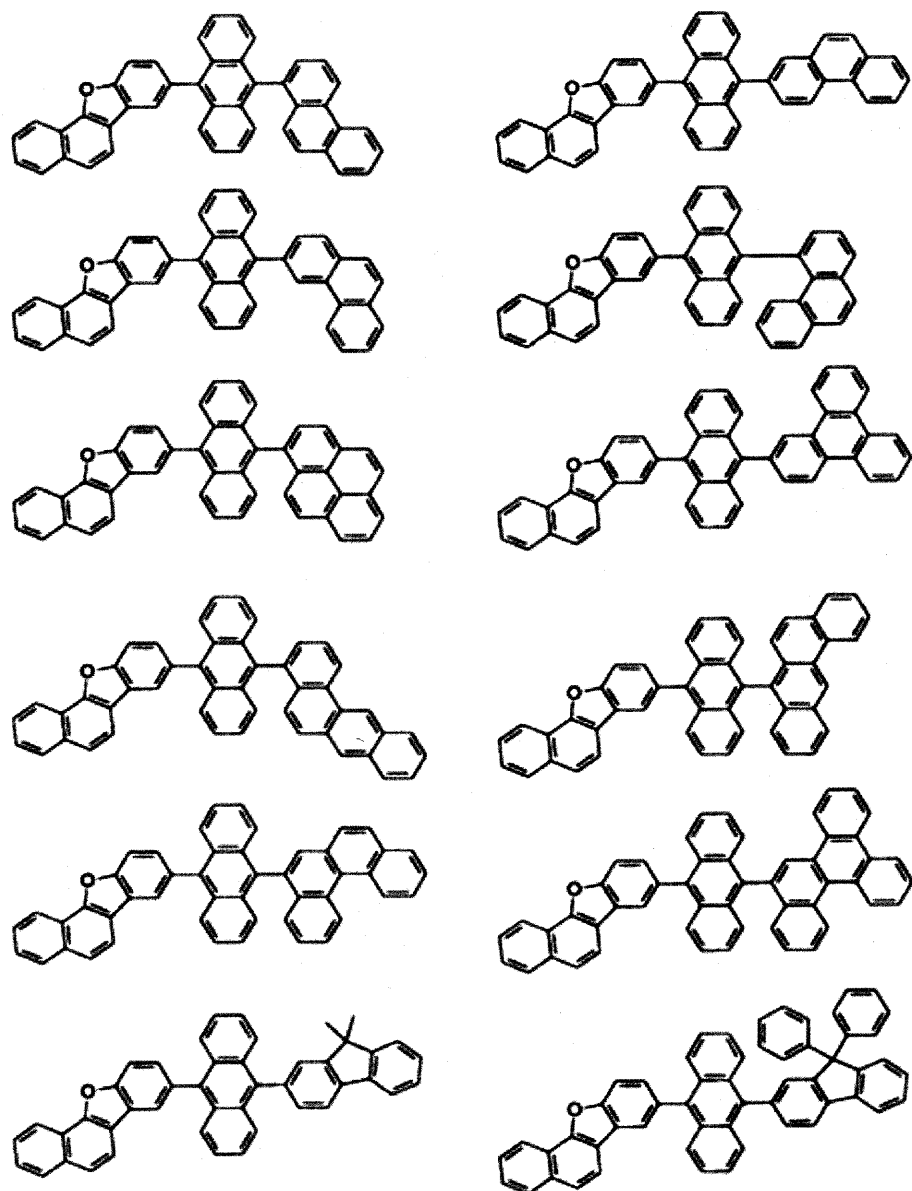
【 0 1 8 9】

【化 9 9】



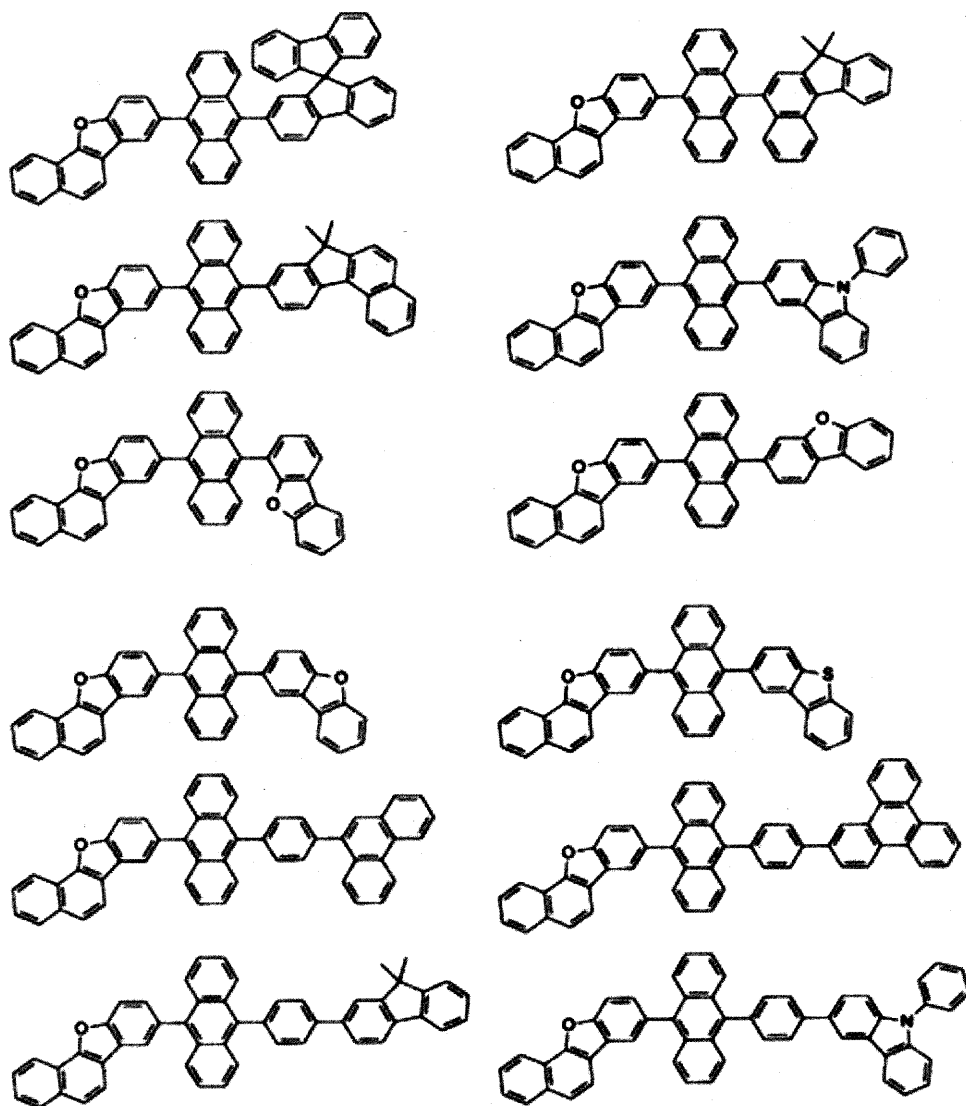
【0 1 9 0】

【化 1 0 0】



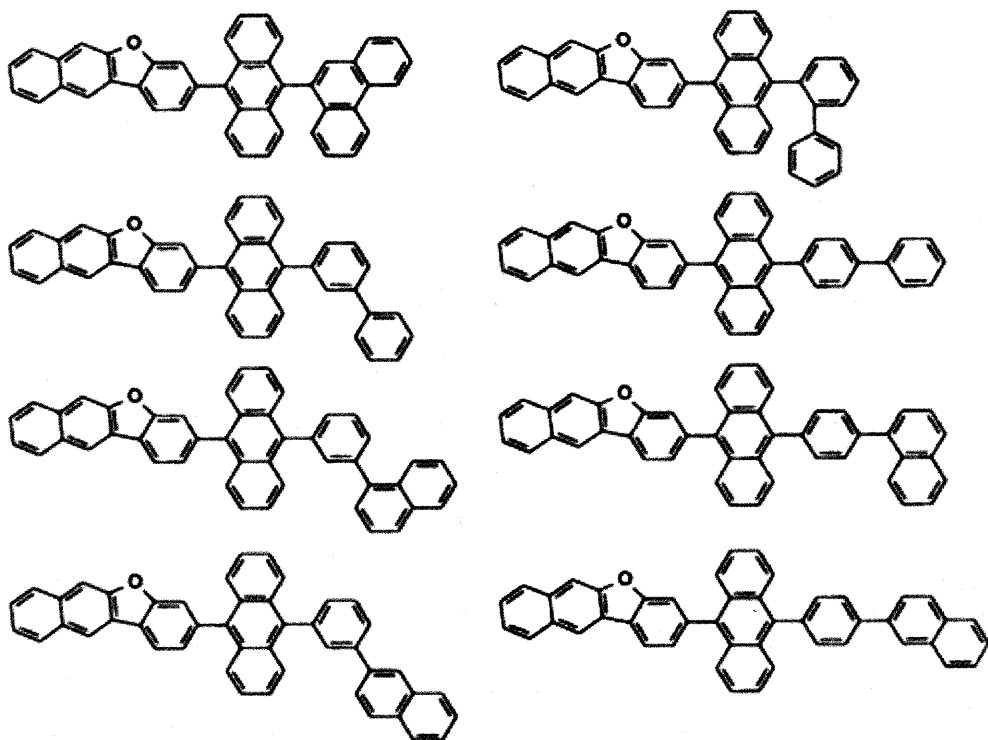
【0 1 9 1】

【化 1 0 1】



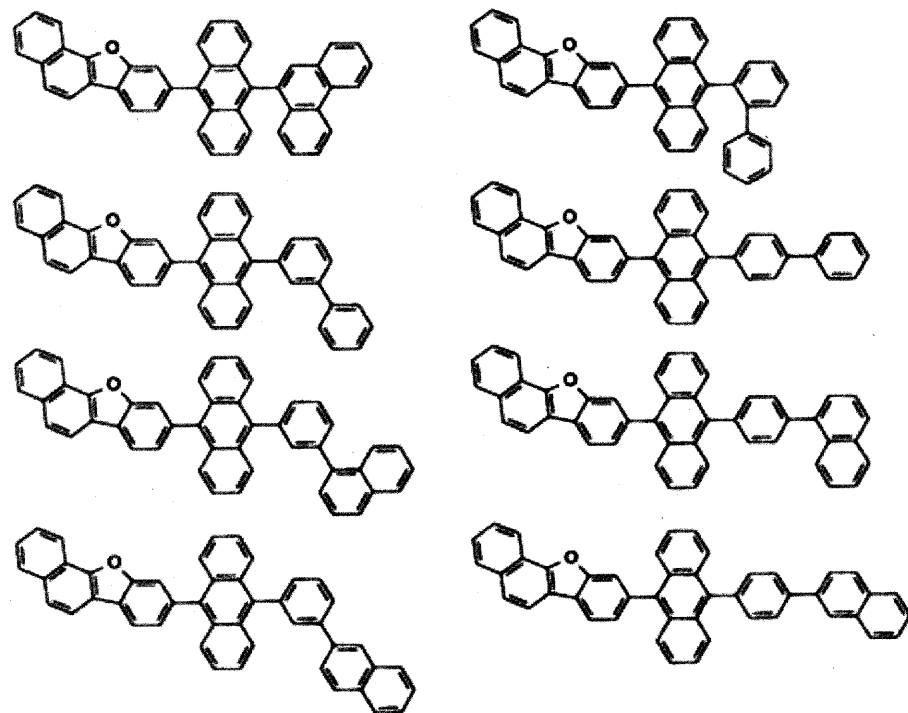
【 0 1 9 2】

【化 1 0 2】



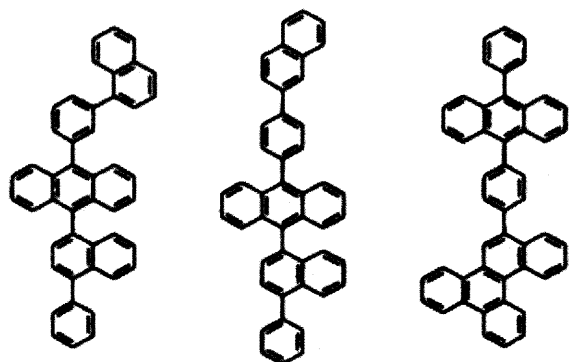
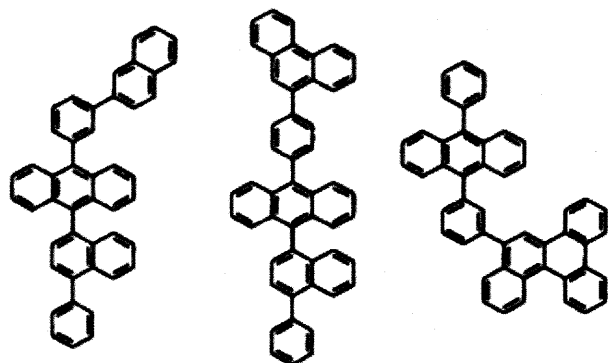
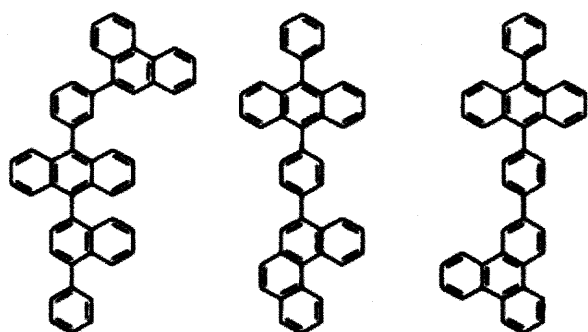
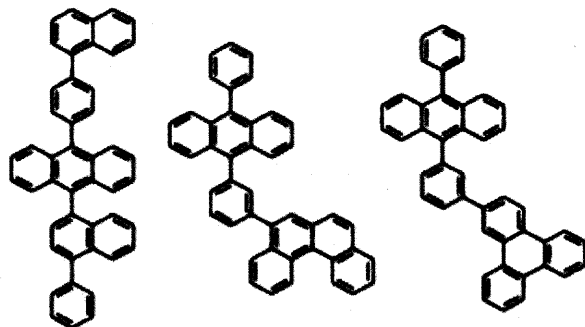
【 0 1 9 3】

【化 1 0 3】



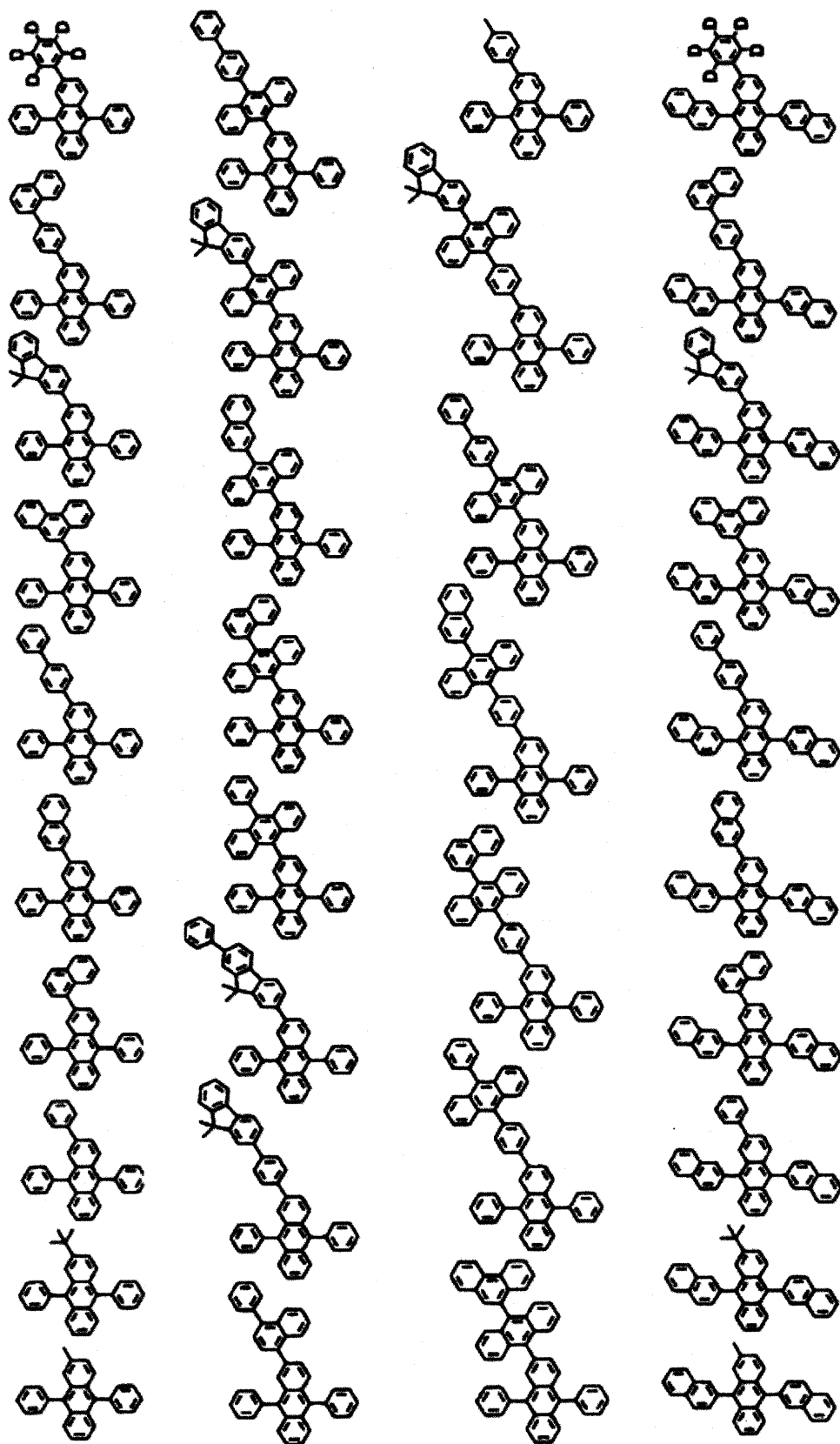
【 0 1 9 4】

【化 1 0 4】



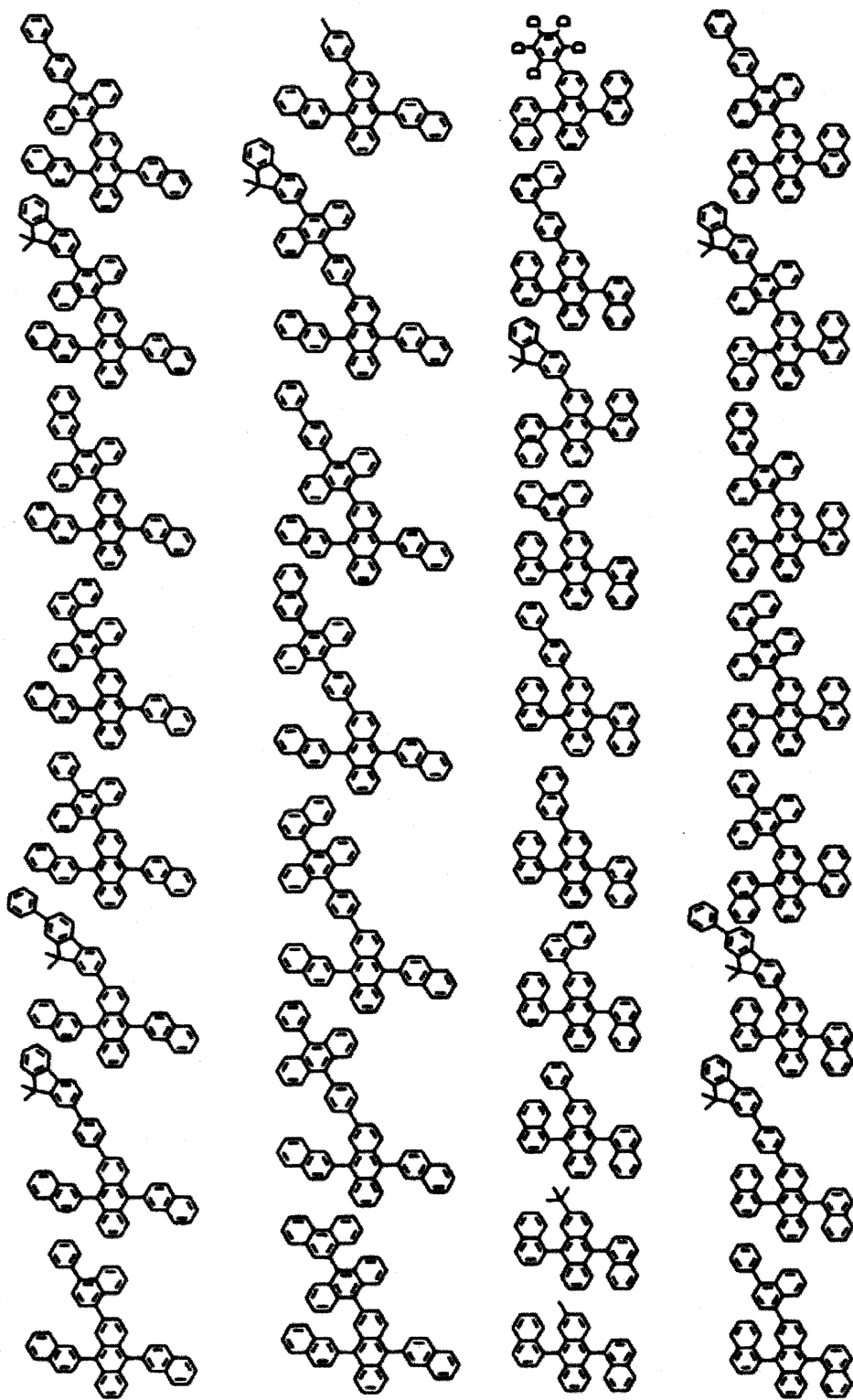
【 0 1 9 5】

【化 1 0 5】



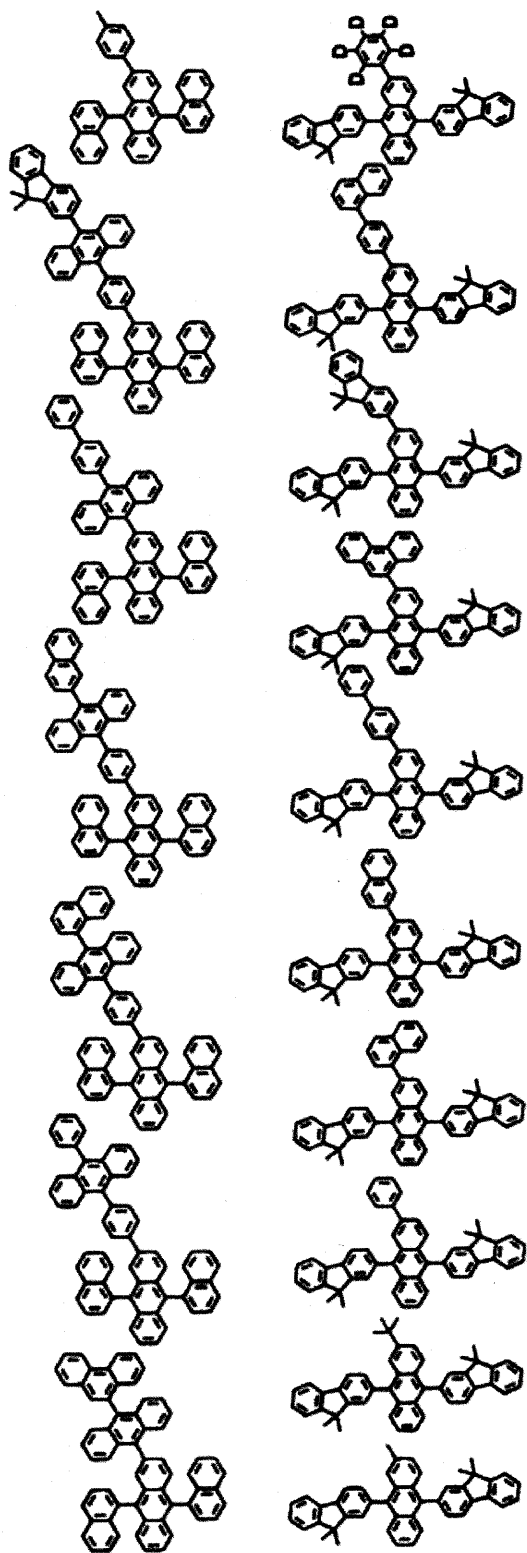
【 0 1 9 6】

【化 1 0 6】



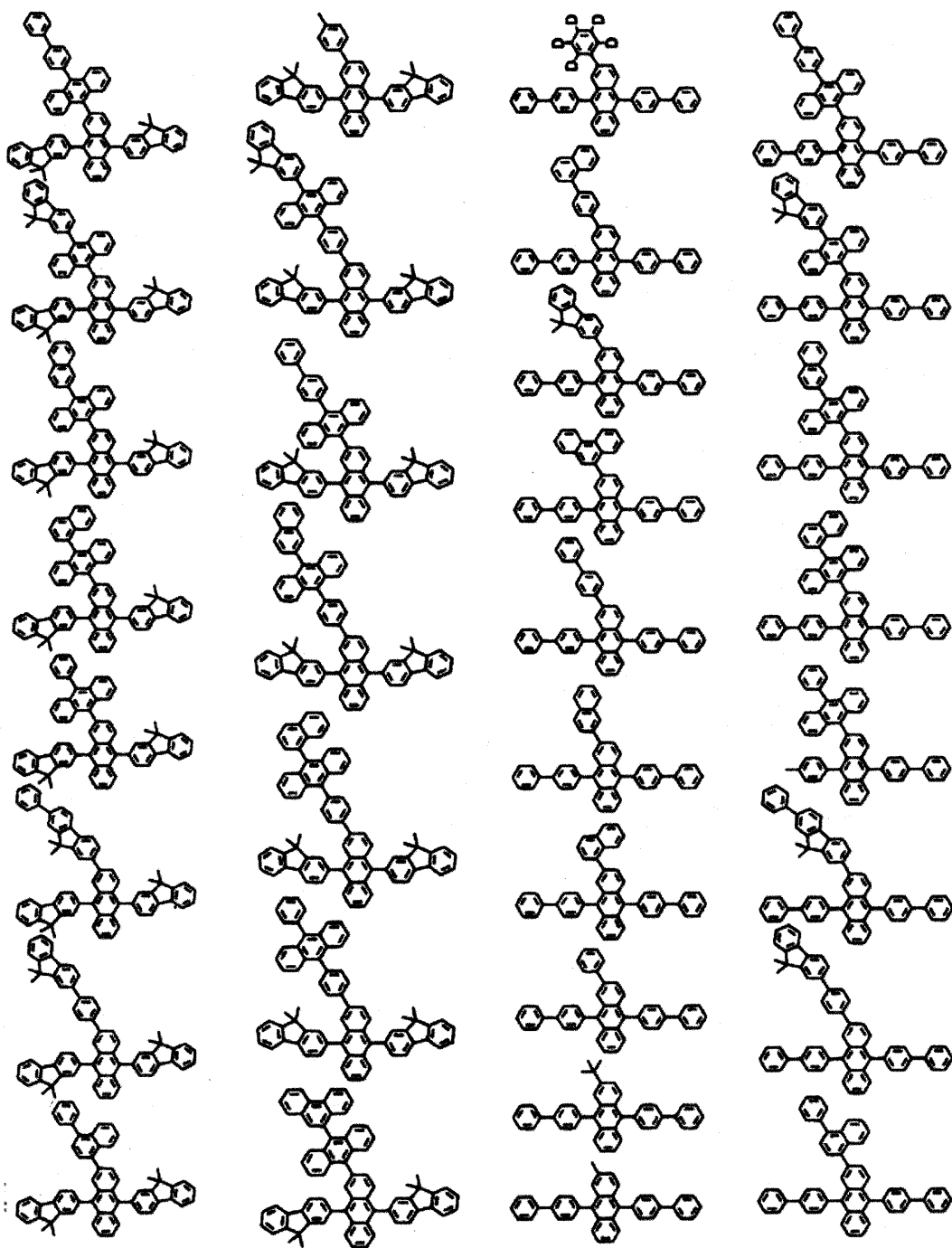
【 0 1 9 7】

【化 1 0 7】



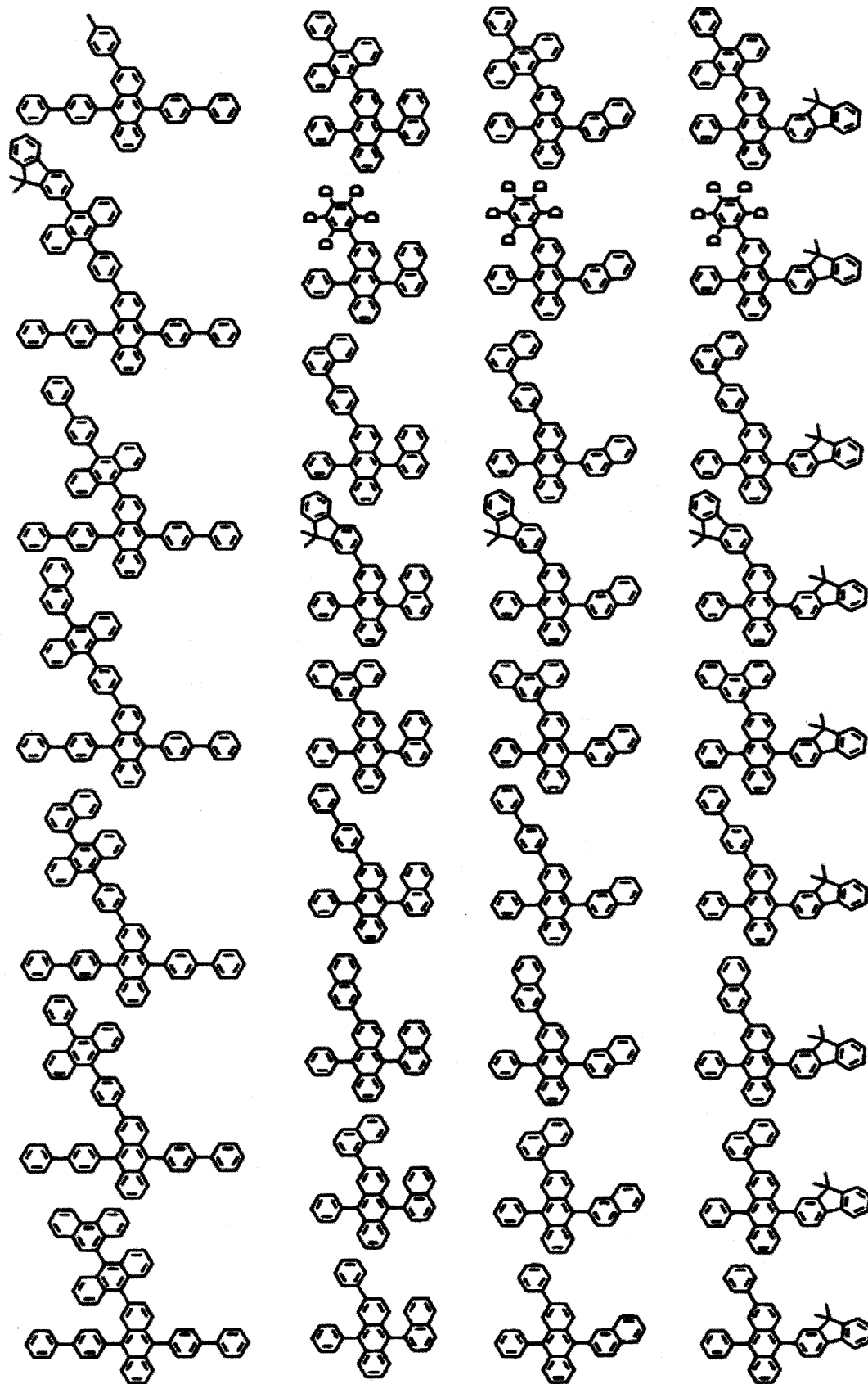
【 0 1 9 8】

【化 1 0 8】



【 0 1 9 9】

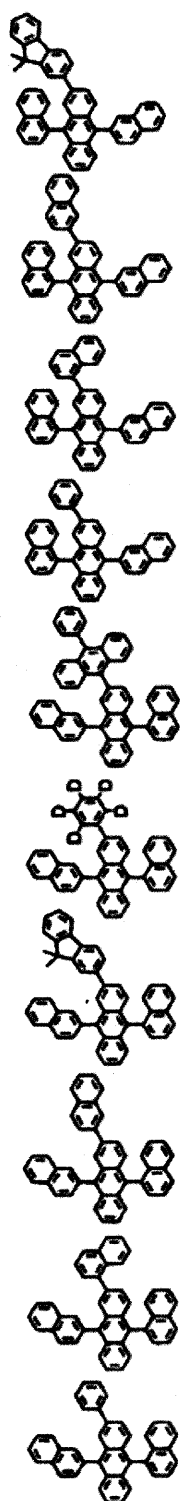
【化 1 0 9】



【 0 2 0 0】

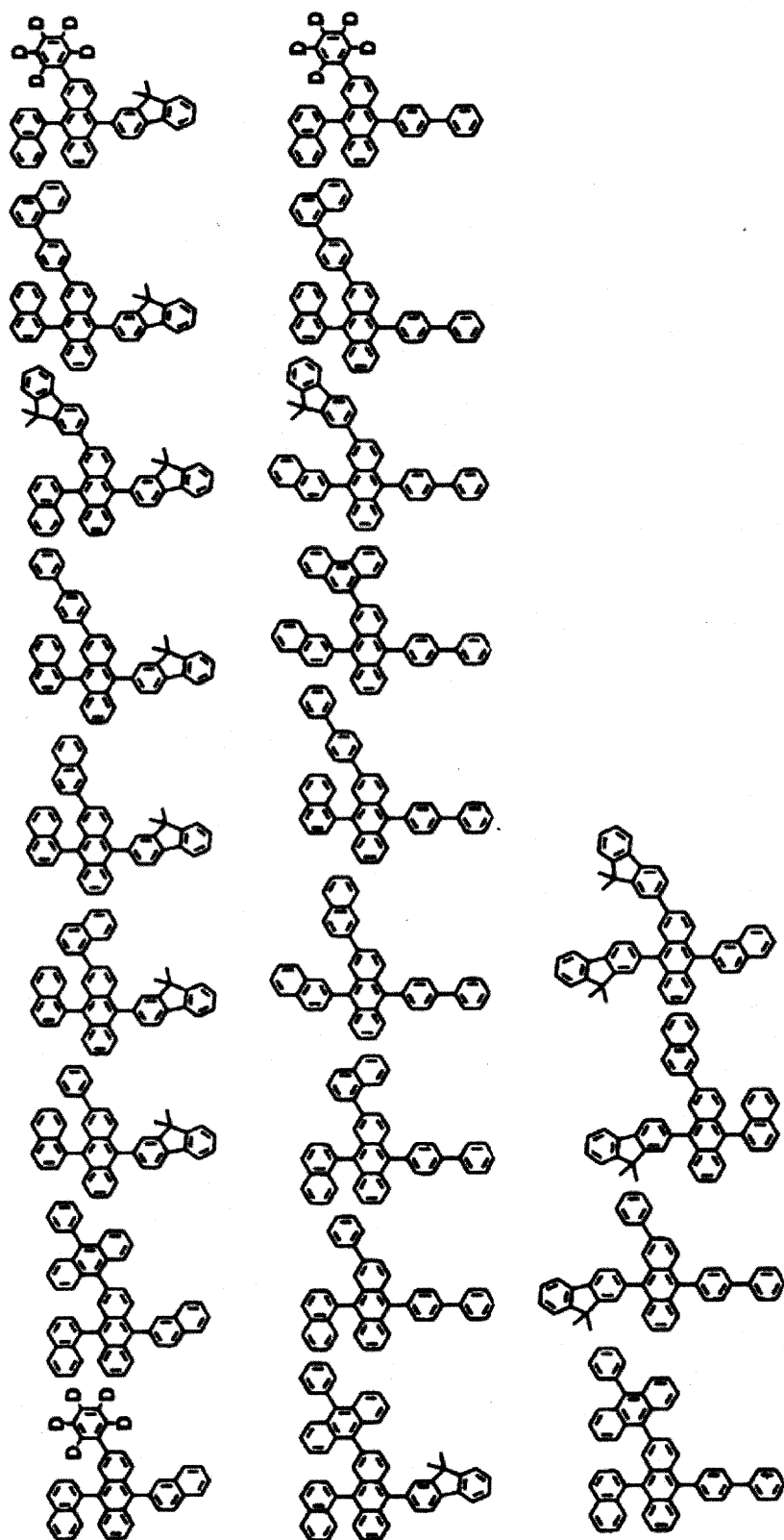
Chemical structures of polymers 1-10 are shown. The structures are arranged vertically, with polymer 1 at the top and polymer 10 at the bottom. The structures are as follows:

- 1: A polymer with a central benzene ring substituted with a phenyl group, a 4-phenylphenyl group, and a 4-(4-phenylphenyl)phenyl group.
- 2: A polymer with a central benzene ring substituted with a phenyl group, a 4-phenylphenyl group, and a 4-(4-phenylphenyl)phenyl group.
- 3: A polymer with a central benzene ring substituted with a phenyl group, a 4-phenylphenyl group, and a 4-(4-phenylphenyl)phenyl group.
- 4: A polymer with a central benzene ring substituted with a phenyl group, a 4-phenylphenyl group, and a 4-(4-phenylphenyl)phenyl group.
- 5: A polymer with a central benzene ring substituted with a phenyl group, a 4-phenylphenyl group, and a 4-(4-phenylphenyl)phenyl group.
- 6: A polymer with a central benzene ring substituted with a phenyl group, a 4-phenylphenyl group, and a 4-(4-phenylphenyl)phenyl group.
- 7: A polymer with a central benzene ring substituted with a phenyl group, a 4-phenylphenyl group, and a 4-(4-phenylphenyl)phenyl group.
- 8: A polymer with a central benzene ring substituted with a phenyl group, a 4-phenylphenyl group, and a 4-(4-phenylphenyl)phenyl group.
- 9: A polymer with a central benzene ring substituted with a phenyl group, a 4-phenylphenyl group, and a 4-(4-phenylphenyl)phenyl group.
- 10: A polymer with a central benzene ring substituted with a phenyl group, a 4-phenylphenyl group, and a 4-(4-phenylphenyl)phenyl group.



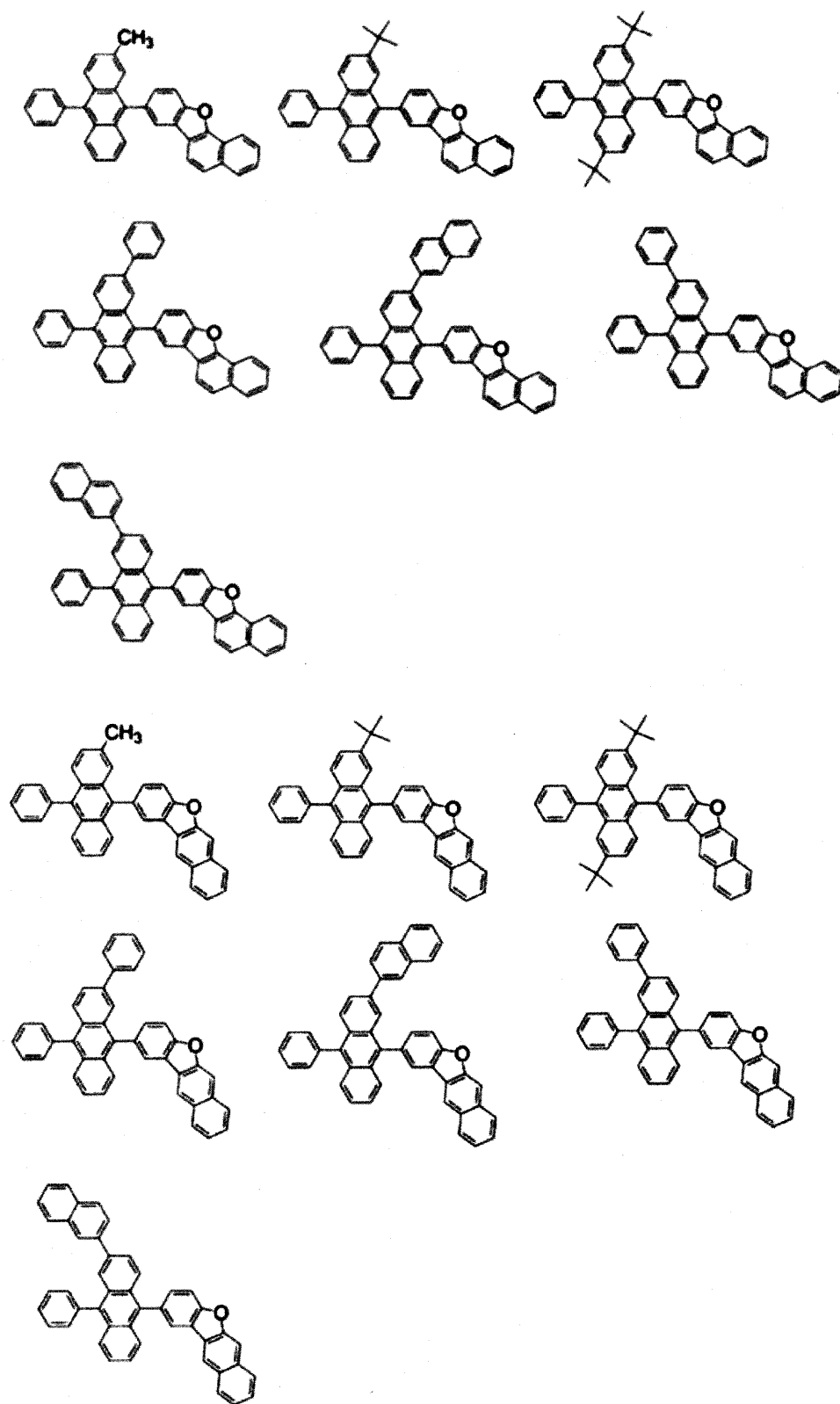
【 0 2 0 1 】

【化 1 1 1】



【0 2 0 2】

【化 1 1 2】



【0 2 0 3】

一実施形態においては、発光層が、式（1-1）及び（1-3）で表される化合物又は式（1-2）及び（1-3）で表される化合物と、式（10）で表される化合物とを含む場合、式（1-1）及び（1-3）で表される化合物、又は下記式（1-2）及び（1-3）で表される化合物の含有量は、発光層全体に対して、1質量%以上20質量%以下が好ましい。

また、一実施形態においては、発光層が、式（1-1）及び（1-3）で表される化合

物、又は式（１－２）及び（１－３）で表される化合物と、式（１０）で表される化合物とを含む場合、式（１０）で表される化合物の含有量は、発光層全体に対して、８０質量％以上９９質量％以下が好ましい。

【０２０４】

一実施形態においては、発光層が、式（３－１１）で表される化合物と、式（１０）で表される化合物とを含む場合、式（３－１１）で表される化合物の含有量は、発光層全体に対して、１質量％以上２０質量％以下が好ましい。

また、一実施形態においては、発光層が、式（３－１１）で表される化合物と、式（１０）で表される化合物とを含む場合、式（１０）で表される化合物の含有量は、発光層全体に対して、８０質量％以上９９質量％以下が好ましい。

10

【０２０５】

一実施形態においては、発光層が、式（３－２１）で表される化合物と、式（１０）で表される化合物とを含む場合、式（３－２１）で表される化合物の含有量は、発光層全体に対して、１質量％以上２０質量％以下が好ましい。

また、一実施形態においては、発光層が、式（３－２１）で表される化合物と、式（１０）で表される化合物とを含む場合、式（１０）で表される化合物の含有量は、発光層全体に対して、８０質量％以上９９質量％以下が好ましい。

【０２０６】

一実施形態においては、発光層が、式（３－３１）又は（３－３２）で表される化合物と、式（１０）で表される化合物とを含む場合、式（３－３１）又は（３－３２）で表される化合物の含有量は、発光層全体に対して、１質量％以上２０質量％以下が好ましい。

20

また、一実施形態においては、発光層が、式（３－３１）又は（３－３２）で表される化合物と、式（１０）で表される化合物とを含む場合、式（１０）で表される化合物の含有量は、発光層全体に対して、８０質量％以上９９質量％以下が好ましい。

【０２０７】

以下、本発明の一態様に係る有機ＥＬ素子の層構成について説明する。

本発明の一態様に係る有機ＥＬ素子は、陰極及び陽極からなる１対の電極間に有機層を備えている。有機層は、有機化合物で構成される層を少なくとも１層含む。あるいはまた、有機層は、有機化合物で構成される複数の層が積層されてなる。有機層は、有機化合物に加えて、無機化合物をさらに含んでもよい。

30

一実施形態においては、有機層のうちの少なくとも１層が、発光層である。有機層は、例えば、１層の発光層として構成されていてもよく、また、有機ＥＬ素子の層構成で採用され得る他の層を含んでもよい。有機ＥＬ素子の層構成で採用され得る層としては、特に限定されるものではないが、例えば、陽極と発光層との間に設けられる正孔輸送帯域（正孔輸送層、正孔注入層、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（電子輸送層、電子注入層、正孔阻止層等）等が挙げられる。

【０２０８】

本発明の一態様に係る有機ＥＬ素子は、例えば、蛍光又は燐光発光型の単色発光素子であってもよく、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。また、単独の発光ユニットを有するシンプル型であってもよく、複数の発光ユニットを有するタンデム型であってもよい。

40

なお、本明細書に記載の「発光ユニット」とは、有機層を含み、該有機層のうちの少なくとも１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言う。

また、本明細書に記載の「発光層」とは、発光機能を有する有機層である。発光層は、例えば、燐光発光層、蛍光発光層等であり、また、１層でも複数層でもよい。

発光ユニットは、燐光発光層や蛍光発光層を複数有する積層型であってもよく、この場合、例えば、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ためのスペース層を各発光層の間に有していてもよい。

50

【0209】

シンプル型有機EL素子としては、例えば、陽極／発光ユニット／陰極のような素子構成が挙げられる。

発光ユニットの代表的な層構成を以下に示す。カッコ内の層は任意である。

- (a) (正孔注入層／) 正孔輸送層／蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (b) (正孔注入層／) 正孔輸送層／燐光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (c) (正孔注入層／) 正孔輸送層／第1 蛍光発光層／第2 蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (d) (正孔注入層／) 正孔輸送層／第1 燐光発光層／第2 燐光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (e) (正孔注入層／) 正孔輸送層／燐光発光層／スペース層／蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (f) (正孔注入層／) 正孔輸送層／第1 燐光発光層／第2 燐光発光層／スペース層／蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (g) (正孔注入層／) 正孔輸送層／第1 燐光発光層／スペース層／第2 燐光発光層／スペース層／蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (h) (正孔注入層／) 正孔輸送層／燐光発光層／スペース層／第1 蛍光発光層／第2 蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (i) (正孔注入層／) 正孔輸送層／電子阻止層／蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (j) (正孔注入層／) 正孔輸送層／電子阻止層／燐光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (k) (正孔注入層／) 正孔輸送層／励起子阻止層／蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (l) (正孔注入層／) 正孔輸送層／励起子阻止層／燐光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (m) (正孔注入層／) 第1 正孔輸送層／第2 正孔輸送層／蛍光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (n) (正孔注入層／) 第1 正孔輸送層／第2 正孔輸送層／蛍光発光層 (／第1 電子輸送層／第2 電子輸送層／電子注入層)
- (o) (正孔注入層／) 第1 正孔輸送層／第2 正孔輸送層／燐光発光層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (p) (正孔注入層／) 第1 正孔輸送層／第2 正孔輸送層／燐光発光層 (／第1 電子輸送層／第2 電子輸送層／電子注入層)
- (q) (正孔注入層／) 正孔輸送層／蛍光発光層／正孔阻止層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (r) (正孔注入層／) 正孔輸送層／燐光発光層／正孔阻止層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (s) (正孔注入層／) 正孔輸送層／蛍光発光層／励起子阻止層 (／電子輸送層／電子注入層)
- (t) (正孔注入層／) 正孔輸送層／燐光発光層／励起子阻止層 (／電子輸送層／電子注入層)

【0210】

ただし、本発明の一態様に係る有機EL素子の層構成は、これらに限定されるものではない。例えば、有機EL素子が、正孔注入層及び正孔輸送層を有する場合には、正孔輸送層と陽極との間に正孔注入層が設けられていることが好ましい。また、有機EL素子が、電子注入層及び電子輸送層を有する場合には、電子輸送層と陰極との間に電子注入層が設けられていることが好ましい。また、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層、及び電子注入層のそれぞれは、1層で構成されていてもよく、複数の層で構成されていてもよい。

【0211】

10

20

30

40

50

複数の燐光発光層、及び、燐光発光層と蛍光発光層は、それぞれ互いに異なる色の発光層であってもよい。例えば、前記発光ユニット（f）は、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）／電子輸送層とすることもできる。

なお、各発光層と、正孔輸送層又はスペース層との間に、電子阻止層を設けてもよい。また、各発光層と電子輸送層との間に、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により、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。

【0212】

タンデム型有機EL素子の代表的な素子構成としては、例えば、陽極／第1発光ユニット／中間層／第2発光ユニット／陰極のような素子構成が挙げられる。

第1発光ユニット及び第2発光ユニットは、例えば、それぞれ独立に、上述した発光ユニットから選択することができる。

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、コネクタ層、又は中間絶縁層とも呼ばれる。中間層は、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層であり、公知の材料により形成することができる。

【0213】

図1に、有機EL素子の層構成の一例の概略を示す。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（有機層）10とを有する。発光ユニット10は、少なくとも1つの発光層5を有する。

発光層5と陽極3との間に正孔輸送帯域（正孔注入層、正孔輸送層等）6、発光層5と陰極4との間に電子輸送帯域（電子注入層、電子輸送層等）7を形成してもよい。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。

【0214】

図2に、有機EL素子の層構成の他の一例の概略を示す。図2に示す有機EL素子11では、発光ユニット20において、図1の有機EL素子1の発光ユニット10の正孔輸送帯域6の正孔輸送層、及び電子輸送帯域7の電子輸送層を、それぞれ2層構造としている。正孔輸送帯域6は、陽極側の第1正孔輸送層6a、及び陰極側の第2正孔輸送層6bを有している。電子輸送帯域7は、陽極側の第1電子輸送層7a、及び陰極側の第2正孔輸送層7bを有している。なお、その他の符号については、図1と同じであるため、説明を省略する。

【0215】

以下、本明細書に記載の有機EL素子の各層の機能や材料等について説明する。

【0216】

（基板）

基板は、有機EL素子の支持体として用いられる。基板は、波長400～700nmの可視光領域の光の透過率が50%以上であることが好ましく、また、平滑な基板が好ましい。基板の材料としては、例えば、ソーダライムガラス、アルミノシリケートガラス、石英ガラス、プラスチック等が挙げられる。また、基板として、可撓性基板を用いることができる。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブルな）基板を指し、例えば、プラスチック基板等が挙げられる。プラスチック基板を形成する材料の具体例としては、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエーテルスルホン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニル、ポリイミド、ポリエチレンナフタレート等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。

【0217】

（陽極）

陽極としては、例えば、金属、合金、導電性化合物、及びこれらの混合物等であって、仕事関数の大きい（具体的には、4.0eV以上）ものを用いることが好ましい。陽極の

材料の具体例としては、酸化インジウム－酸化スズ（ITO：Indium Tin Oxide）、ケイ素もしくは酸化ケイ素を含有する酸化インジウム－酸化スズ、酸化インジウム－酸化亜鉛、酸化タングステン、酸化亜鉛を含有する酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。また、金、銀、白金、ニッケル、タングステン、クロム、モリブデン、鉄、コバルト、銅、パラジウム、チタン、及びこれらの金属の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

【0218】

陽極は、通常、これらの材料をスパッタリング法により基板上に成膜することにより形成される。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て1～10質量%の酸化亜鉛を添加したターゲットを用いて、スパッタリング法により形成することができる。また、例えば、酸化タングステン、又は酸化亜鉛を含有する酸化インジウムは、酸化インジウムに対して酸化タングステンを0.5～5質量%、又は酸化亜鉛を0.1～1質量%添加したターゲットを用いて、スパッタリング法により形成することができる。

10

陽極の他の形成方法としては、例えば、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、スピコート法等が挙げられる。例えば、銀ペースト等を用いる場合は、塗布法やインクジェット法等を用いることができる。

【0219】

なお、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。このため、陽極には、一般的な電極材料、例えば、金属、合金、導電性化合物、これらの混合物を用いることができる。具体的には、リチウム、セシウム等のアルカリ金属；マグネシウム；カルシウム、ストロンチウム等のアルカリ土類金属；これらの金属を含む合金（例えば、マグネシウム－銀、アルミニウム－リチウム）；ユーロピウム、イッテルビウム等の希土類金属；希土類金属を含む合金等の仕事関数の小さい材料を陽極に用いることもできる。

20

【0220】

（正孔注入層）

正孔注入層は、正孔注入性の高い物質を含む層であり、陽極から有機層に正孔を注入する機能を有する。正孔注入性の高い物質としては、例えば、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、マンガニウム酸化物、芳香族アミン化合物、電子吸引性（アクセプター性）の化合物、高分子化合物（オリゴマー、 dendrimer、ポリマー等）等が挙げられる。これらの中でも、芳香族アミン化合物、アクセプター性の化合物が好ましく、より好ましくはアクセプター性の化合物である。

30

【0221】

芳香族アミン化合物の具体例としては、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）等が挙げられる。

40

【0222】

アクセプター性の化合物としては、例えば、電子吸引基を有する複素環誘導体、電子吸

50

引基を有するキノン誘導体、アリールボラン誘導体、ヘテロアリールボラン誘導体等が好ましく、具体例としては、ヘキサシアノヘキサアザトリフェニレン、2, 3, 5, 6-テトラフルオロ-7, 7, 8, 8-テトラシアノキノジメタン（略称：F4TCNQ）、1, 2, 3-トリス〔（シアノ）（4-シアノ-2, 3, 5, 6-テトラフルオロフェニル）メチレン〕シクロプロパン等が挙げられる。

アクセプター性の化合物を用いる場合、正孔注入層は、さらにマトリックス材料を含むことが好ましい。マトリックス材料としては、有機EL素子用の材料として公知の材料を用いることができ、例えば、電子供与性（ドナー性）の化合物を用いることが好ましく、より好ましくは上述の芳香族アミン化合物が用いられる。

【0223】

（正孔輸送層）

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い物質を含む層であり、陽極から有機層に正孔を輸送する機能を有する。

【0224】

正孔輸送性の高い物質としては、 $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の正孔移動度を有する物質であることが好ましく、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、高分子化合物等が挙げられる。

【0225】

芳香族アミン化合物の具体例としては、4, 4'-ビス〔N-（1-ナフチル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル（略称：NPB）、N, N'-ビス（3-メチルフェニル）-N, N'-ジフェニル〔1, 1'-ビフェニル〕-4, 4'-ジアミン（略称：TPD）、4-フェニル-4'-（9-フェニルフルオレン-9-イル）トリフェニルアミン（略称：BAFLP）、4, 4'-ビス〔N-（9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル（略称：DFLDPBi）、4, 4', 4''-トリス（N, N-ジフェニルアミノ）トリフェニルアミン（略称：TDATA）、4, 4', 4''-トリス〔N-（3-メチルフェニル）-N-フェニルアミノ〕トリフェニルアミン（略称：MTDATA）、4, 4'-ビス〔N-（スピロ-9, 9'-ビフルオレン-2-イル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル（略称：BSPB）等が挙げられる。

【0226】

カルバゾール誘導体の具体例としては、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）、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）等が挙げられる。

【0227】

アントラセン誘導体の具体例としては、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）、9, 10-ジフェニルアントラセン（略称：DPAnth）などが挙げられる。

【0228】

高分子化合物の具体例としては、ポリ（N-ビニルカルバゾール）（略称：PVK）、及びポリ（4-ビニルトリフェニルアミン）（略称：PVTPA）等が挙げられる。

【0229】

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、正孔輸送層に、これら以外の物質を用いてもよい。

【0230】

正孔輸送層は、単層でもよく、2層以上が積層されていてもよい。この場合、発光層に近い側に、正孔輸送性の高い物質のうち、エネルギーギャップのより大きい物質を含む層を配置することが好ましい。

【0231】

（発光層）

10

20

30

40

50

発光層は、発光性の高い物質（ドーパント材料）を含む層である。ドーパント材料としては、種々の材料を用いることができ、例えば、蛍光発光性化合物（蛍光ドーパント）、燐光発光性化合物（燐光ドーパント）等を用いることができる。蛍光発光性化合物とは、一重項励起状態から発光可能な化合物であり、これを含む発光層は蛍光発光層と呼ばれる。また、燐光発光性化合物とは、三重項励起状態から発光可能な化合物であり、これを含む発光層は、燐光発光層と呼ばれる。

【0232】

発光層は、通常、ドーパント材料、及びこれを効率よく発光させるためのホスト材料を含有する。なお、ドーパント材料は、文献によっては、ゲスト材料、エミッター、又は発光材料と称する場合もある。また、ホスト材料は、文献によっては、マトリックス材料と称する場合もある。

10

1つの発光層に、複数のドーパント材料、及び複数のホスト材料を含んでもよい。また、発光層が複数であってもよい。

【0233】

本明細書では、蛍光ドーパントと組み合わされたホスト材料を、「蛍光ホスト」と称し、燐光ドーパントと組み合わされたホスト材料を「燐光ホスト」と称する。なお、蛍光ホストと燐光ホストとは、分子構造のみで区分されるものではない。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であるが、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するものではない。蛍光ホストについても同様である。

【0234】

一実施形態において、発光層には、式（1-1）及び（1-3）で表される化合物、又は式（1-2）及び（1-3）で表される化合物（以下、これら化合物を「化合物（1）」という場合がある）が含まれていることが好ましく、より好ましくはドーパント材料として含まれる。また、化合物（1）は、蛍光ドーパントとして、発光層に含まれることが好ましい。

20

【0235】

一実施形態において、ドーパント材料としての発光層における化合物（1）の含有量は、特に限定されるものではないが、十分な発光及び濃度消光の観点から、例えば、0.1～70質量%であることが好ましく、より好ましくは0.1～30質量%、さらに好ましくは1～30質量%、よりさらに好ましくは1～20質量%、特に好ましくは1～10質量%である。

30

【0236】

一実施形態において、発光層には、式（3-11）で表される化合物が含まれていることが好ましく、より好ましくはドーパント材料として含まれる。また、式（3-11）で表される化合物は、蛍光ドーパントとして、発光層に含まれることが好ましい。

【0237】

一実施形態において、ドーパント材料としての発光層における式（3-11）で表される化合物の含有量は、特に限定されるものではないが、十分な発光及び濃度消光の観点から、例えば、0.1～70質量%であることが好ましく、より好ましくは0.1～30質量%、さらに好ましくは1～30質量%、よりさらに好ましくは1～20質量%、特に好ましくは1～10質量%である。

40

【0238】

一実施形態において、発光層には、式（3-21）で表される化合物が含まれていることが好ましく、より好ましくはドーパント材料として含まれる。また、式（3-21）で表される化合物は、蛍光ドーパントとして、発光層に含まれることが好ましい。

【0239】

一実施形態において、ドーパント材料としての発光層における式（3-21）で表される化合物の含有量は、特に限定されるものではないが、十分な発光及び濃度消光の観点から、例えば、0.1～70質量%であることが好ましく、より好ましくは0.1～30質量%、さらに好ましくは1～30質量%、よりさらに好ましくは1～20質量%、特に好

50

ましくは1～10質量%である。

【0240】

一実施形態において、発光層には、式(3-31)又は(3-32)で表される化合物が含まれていることが好ましく、より好ましくはドーパント材料として含まれる。また、式(3-31)又は(3-32)で表される化合物は、蛍光ドーパントとして、発光層に含まれることが好ましい。

【0241】

一実施形態において、ドーパント材料としての発光層における式(3-31)又は(3-32)で表される化合物の含有量は、特に限定されるものではないが、十分な発光及び濃度消光の観点から、例えば、0.1～70質量%であることが好ましく、より好ましくは0.1～30質量%、さらに好ましくは1～30質量%、よりさらに好ましくは1～20質量%、特に好ましくは1～10質量%である。

【0242】

(蛍光ドーパント)

化合物(1)、式(3-11)で表される化合物、式(3-21)で表される化合物、及び式(3-31)又は(3-32)で表される化合物以外の蛍光ドーパントとしては、例えば、縮合多環芳香族誘導体、スチリルアミン誘導体、縮合環アミン誘導体、ホウ素含有化合物、ピロール誘導体、インドール誘導体、カルバゾール誘導体等が挙げられる。これらの中でも、縮合環アミン誘導体、ホウ素含有化合物、カルバゾール誘導体が好ましい。

縮合環アミン誘導体としては、例えば、ジアミノピレン誘導体、ジアミノクリセン誘導体、ジアミノアントラセン誘導体、ジアミノフルオレン誘導体、ベンゾフロ骨格が1つ以上縮環したジアミノフルオレン誘導体等が挙げられる。

ホウ素含有化合物としては、例えば、ピロメテン誘導体、トリフェニルボラン誘導体等が挙げられる。

【0243】

青色系の蛍光ドーパントとしては、例えば、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、トリアリールアミン誘導体等が挙げられる。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)等が挙げられる。

【0244】

緑色系の蛍光ドーパントとしては、例えば、芳香族アミン誘導体等が挙げられる。具体的には、N-(9, 10-ジフェニル-2-アントリル)-N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン(略称: 2PCAPA)、N-[9, 10-ビス(1, 1'-ビフェニル-2-イル)-2-アントリル]-N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン(略称: 2PCABPhA)、N-(9, 10-ジフェニル-2-アントリル)-N, N', N'-トリフェニル-1, 4-フェニレンジアミン(略称: 2DPAPA)、N-[9, 10-ビス(1, 1'-ビフェニル-2-イル)-2-アントリル]-N, N', N'-トリフェニル-1, 4-フェニレンジアミン(略称: 2DPABPhA)、N-[9, 10-ビス(1, 1'-ビフェニル-2-イル)]-N-[4-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル]-N-フェニルアントラセン-2-アミン(略称: 2YGABPhA)、N, N, 9-トリフェニルアントラセン-9-アミン(略称: DP hA PhA)等が挙げられる。

【0245】

赤色系の蛍光ドーパントとしては、テトラセン誘導体、ジアミン誘導体等が挙げられる。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）等が挙げられる。

【0246】

（燐光ドーパント）

燐光ドーパントとしては、例えば、燐光発光性の重金属錯体、燐光発光性の希土類金属錯体が挙げられる。

重金属錯体としては、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等が挙げられる。重金属錯体は、イリジウム、オスミウム、及び白金から選択される金属のオルトメタル化錯体が好ましい。

10

希土類金属錯体としては、例えば、テルビウム錯体、ユーロピウム錯体等が挙げられる。具体的には、トリス（アセチルアセトナート）（モノフェナントロリン）テルビウム（III）（略称：Tb(acac)₃(Phen)）、トリス（1,3-ジフェニル-1,3-プロパンジオナート）（モノフェナントロリン）ユーロピウム（III）（略称：Eu(DBM)₃(Phen)）、トリス[1-(2-テノイル)-3,3,3-トリフルオロアセトナート]（モノフェナントロリン）ユーロピウム（III）（略称：Eu(TTA)₃(Phen)）等が挙げられる。これらの希土類金属錯体は、異なる多重度間の電子遷移により、希土類金属イオンが発光するため、燐光ドーパントとして好ましい。

【0247】

青色系の燐光ドーパントとしては、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等が挙げられる。具体的には、ビス[2-(4',6'-ジフルオロフェニル)ピリジナート-N,C2']イリジウム（III）テトラキス（1-ピラゾリル）ボラート（略称：FIr6）、ビス[2-(4',6'-ジフルオロフェニル)ピリジナート-N,C2']イリジウム（III）ピコリナート（略称：FIrpic）、ビス[2-(3',5'-ビストリフルオロメチルフェニル)ピリジナート-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)ピリジナート-N,C2']イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：FIracac）等が挙げられる。

20

【0248】

緑色系の燐光ドーパントとしては、例えば、イリジウム錯体等が挙げられる。具体的には、トリス（2-フェニルピリジナート-N,C2'）イリジウム（III）（略称：Ir(ppy)₃）、ビス（2-フェニルピリジナート-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]キノリナート）イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：Ir(bzq)₂(acac)）等が挙げられる。

30

【0249】

赤色系の燐光ドーパントとしては、例えば、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が挙げられる。具体的には、ビス[2-(2'-ベンゾ[4,5-α]チエニル)ピリジナート-N,C3']イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：Ir(btp)₂(acac)）、ビス（1-フェニルイソキノリナート-N,C2'）イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：Ir(piq)₂(acac)）、（アセチルアセトナート）ビス[2,3-ビス（4-フルオロフェニル）キノキサリナート]イリジウム（III）（略称：Ir(Fdpq)₂(acac)）、2,3,7,8,12,13,17,18-オクタエチル-21H,23H-ポルフィリン白金（II）（略称：PtOEP）等が挙げられる。

40

【0250】

（ホスト材料）

ホスト材料としては、例えば、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；インドール誘導体、ピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、トリアジン誘導体、キノ

50

リン誘導体、イソキノリン誘導体、キナゾリン誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフェン誘導体、オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素環化合物；ナフタレン誘導体、トリフェニレン誘導体、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、クリセン誘導体、ナフタセン誘導体、フルオランテン誘導体等の縮合芳香族化合物；トリアリールアミン誘導体、縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族アミン化合物等が挙げられる。ホスト材料は、複数種を併用してもよい。

【0251】

金属錯体の具体例としては、トリス（8-キノリノラト）アルミニウム（III）（略称：A1q）、トリス（4-メチル-8-キノリノラト）アルミニウム（III）（略称：A1mq3）、ビス（10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト）ベリリウム（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：BA1q）、ビス（8-キノリノラト）亜鉛（II）（略称：Znq）、ビス〔2-（2-ベンゾオキサゾリル）フェノラト〕亜鉛（II）（略称：ZnPBO）、ビス〔2-（2-ベンゾチアゾリル）フェノラト〕亜鉛（II）（略称：ZnBTZ）等が挙げられる。

10

【0252】

複素環化合物の具体例としては、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）等が挙げられる。

20

【0253】

縮合芳香族化合物の具体例としては、9-〔4-（10-フェニル-9-アントリル）フェニル〕-9H-カルバゾール（略称：CzPA）、3,6-ジフェニル-9-〔4-（10-フェニル-9-アントリル）フェニル〕-9H-カルバゾール（略称：DPczPA）、9,10-ビス（3,5-ジフェニルフェニル）アントラセン（略称：DPPA）、9,10-ジ（2-ナフチル）アントラセン（略称：DNA）、2-tert-ブチル-9,10-ジ（2-ナフチル）アントラセン（略称：t-BuDNA）、9,9'-ビアントリル（略称：BANT）、9,9'-（スチルベン-3,3'-ジイル）ジフェナントレン（略称：DPNS）、9,9'-（スチルベン-4,4'-ジイル）ジフェナントレン（略称：DPNS2）、3,3',3''-（ベンゼン-1,3,5-トリイル）トリピレン（略称：TPB3）、9,10-ジフェニルアントラセン（略称：DPAnth）、6,12-ジメトキシ-5,11-ジフェニルクリセン等が挙げられる。

30

【0254】

芳香族アミン化合物の具体例としては、N,N-ジフェニル-9-〔4-（10-フェニル-9-アントリル）フェニル〕-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：CzA1PA）、4-（10-フェニル-9-アントリル）トリフェニルアミン（略称：DPhPA）、N,9-ジフェニル-N-〔4-（10-フェニル-9-アントリル）フェニル〕-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：PCAPA）、N,9-ジフェニル-N-〔4-〔4-（10-フェニル-9-アントリル）フェニル〕フェニル〕-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：PCAPBA）、N-（9,10-ジフェニル-2-アントリル）-N,9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：2PCAPA）、4,4'-ビス〔N-（1-ナフチル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル（略称：NPBまたはα-NPD）、N,N'-ビス（3-メチルフェニル）-N,N'-ジフェニル-〔1,1'-ビフェニル〕-4,4'-ジアミン（略称：TPD）、4,4'-ビス〔N-（9,9-ジメチルフルオレン-2-イル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル（略

40

50

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)等が挙げられる。

【0255】

蛍光ホストとしては、蛍光ドーパントよりも高い一重項準位を有する化合物が好ましく、例えば、複素環化合物、縮合芳香族化合物等が挙げられる。縮合芳香族化合物としては、例えば、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、クリセン誘導体、ナфтаセン誘導体等が好ましい。

【0256】

燐光ホストとしては、燐光ドーパントよりも高い三重項準位を有する化合物が好ましく、例えば、金属錯体、複素環化合物、縮合芳香族化合物等が挙げられる。これらの中でも、例えば、インドール誘導体、カルバゾール誘導体、ピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、トリアジン誘導体、キノリン誘導体、イソキノリン誘導体、キナゾリン誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフェン誘導体、ナфтаレン誘導体、トリフェニレン誘導体、フェナントレン誘導体、フルオランテン誘導体等が好ましい。

【0257】

(電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送性の高い物質としては、 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上の電子移動度を有する物質であることが好ましく、例えば、金属錯体、芳香族複素環化合物、芳香族炭化水素化合物、高分子化合物等が挙げられる。

【0258】

金属錯体としては、例えば、アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等が挙げられる。具体的には、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム(III)(略称：Alq)、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(略称：Almq3)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(略称：BeBq2)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(4-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)(略称：BALq)、ビス(8-キノリノラト)亜鉛(II)(略称：Znq)、ビス[2-(2-ベンゾオキサゾリル)フェノラト]亜鉛(II)(略称：ZnPBO)、ビス[2-(2-ベンゾチアゾリル)フェノラト]亜鉛(II)(略称：ZnBTZ)等が挙げられる。

【0259】

芳香族複素環化合物としては、例えば、ベンズイミダゾール誘導体、イミダゾピリジン誘導体、ベンズイミダゾフェナントリジン誘導体等のイミダゾール誘導体；ピリミジン誘導体、トリアジン誘導体等のアジン誘導体；キノリン誘導体、イソキノリン誘導体、フェナントロリン誘導体等の含窒素六員環構造を含む化合物(複素環にホスフィンオキサイド系の置換基を有するものも含む。)等が挙げられる。具体的には、2-(4-ビフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称：PBD)、1,3-ビス[5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称：OXD-7)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称：TAZ)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-(4-エチルフェニル)-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称：p-EtTAZ)、バソフェナントロリン(略称：BPhen)、バソキュプロイン(略称：BCP)、4,4'-ビス(5-メチルベンゾオキサゾール-2-イル)スチルベン(略称：BzOs)等が挙げられる。

【0260】

芳香族炭化水素化合物としては、例えば、アントラセン誘導体、フルオランテン誘導体等が挙げられる。

【0261】

高分子化合物の具体例としては、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'-

10

20

30

40

50

ージイル)] (略称: P F - B P y) 等が挙げられる。

【0262】

正孔輸送性よりも電子輸送性の方が高い化合物であれば、電子輸送層に、これら以外の物質を用いてもよい。

【0263】

電子輸送層は、単層でもよく、2層以上が積層されていてもよい。この場合、発光層に近い側に、電子輸送性の高い物質のうち、エネルギーギャップのより大きい物質を含む層を配置することが好ましい。

例えば、図2に示すように、陽極側の第1電子輸送層7a、及び陰極側の第2電子輸送層7bを含む構成であってもよい。

【0264】

電子輸送層には、例えば、アルカリ金属、マグネシウム、アルカリ土類金属、これらのうちの2以上の金属を含む合金等の金属；8-キノリノラトリチウム（略称: L i q）等のアルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物等の金属化合物が含まれていてもよい。

アルカリ金属、マグネシウム、アルカリ土類金属、又はこれらのうちの2以上の金属を含む合金等の金属が、電子輸送層に含まれる場合、その含有量は、特に限定されるものではないが、0.1~50質量%であることが好ましく、より好ましくは0.1~20質量%、さらに好ましくは1~10質量%である。

アルカリ金属化合物、又はアルカリ土類金属化合物等の金属化合物の金属化合物が電子輸送層に含まれる場合、その含有量は、1~99質量%であることが好ましく、より好ましくは10~90質量%である。なお、電子輸送層が複数層である場合の発光層側にある層は、これらの金属化合物のみで形成することもできる。

【0265】

（電子注入層）

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層であり、陰極から発光層へ効率よく電子注入する機能を有する。電子注入性の高い物質としては、例えば、アルカリ金属、マグネシウム、アルカリ土類金属、これらの化合物等が挙げられる。具体的には、リチウム、セシウム、カルシウム、フッ化リチウム、フッ化セシウム、フッ化カルシウム、リチウム酸化物等が挙げられる。その他、電子輸送性を有する物質に、アルカリ金属、マグネシウム、アルカリ土類金属、又はこれらの化合物を含有させたもの、例えば、A l q にマグネシウムを含有させたもの等を用いることもできる。

【0266】

また、電子注入層には、有機化合物及びドナー性の化合物を含む複合材料を用いることもできる。有機化合物がドナー性の化合物から電子を受け取るため、このような複合材料は電子注入性及び電子輸送性に優れている。

有機化合物としては、受け取った電子の輸送性に優れた物質が好ましく、例えば、上述した電子輸送性の高い物質である金属錯体や芳香族複素環化合物等を用いることができる。

ドナー性の化合物としては、有機化合物に電子を供与することができる物質であればよく、例えば、アルカリ金属、マグネシウム、アルカリ土類金属、希土類金属等が挙げられる。具体的には、リチウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、エルビウム、イット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、具体的には、リチウム酸化物、カルシウム酸化物、バリウム酸化物等が挙げられる。また、酸化マグネシウムのようなルイス塩基を用いることもできる。また、テトラチアフルバレン（略称: T T F）等の有機化合物を用いることもできる。

【0267】

（陰極）

陰極は、金属、合金、導電性化合物、及びこれらの混合物等であって、仕事関数の小さい（具体的には、3.8eV以下）ものを用いることが好ましい。陰極の材料としては、例えば、リチウム、セシウム等のアルカリ金属；マグネシウム；カルシウム、ストロンチ

10

20

30

40

50

ウム等のアルカリ土類金属；これらの金属を含む合金（例えば、マグネシウム－銀、アルミニウム－リチウム）；ユーロピウム、イッテルビウム等の希土類金属；希土類金属を含む合金等が挙げられる。

陰極は、通常、真空蒸着法やスパッタリング法で形成される。また、銀ペースト等を用いる場合は、塗布法やインクジェット法等を用いることができる。

【0268】

また、電子注入層が設けられる場合、仕事関数の大小に関わらず、アルミニウム、銀、ITO、グラフェン、ケイ素もしくは酸化ケイ素を含有する酸化インジウム－酸化スズ等、種々の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、スピコート法を用いて成膜することができる。

10

【0269】

（絶縁層）

有機EL素子は、薄膜に電界を印加するため、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、一對の電極間に薄膜絶縁層を挿入してもよい。

絶縁層に用いられる物質の具体例としては、酸化アルミニウム、フッ化リチウム、酸化リチウム、フッ化セシウム、酸化セシウム、酸化マグネシウム、フッ化マグネシウム、酸化カルシウム、フッ化カルシウム、窒化アルミニウム、酸化チタン、酸化ケイ素、酸化ゲルマニウム、窒化ケイ素、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。絶縁層には、これらの混合物を用いることもでき、また、これらの物質を含む複数の層の積層体とすることもできる。

20

【0270】

（スペース層）

スペース層は、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の蛍光発光層への拡散の防止や、キャリアバランスの調整のために、両層間に設けられる。スペース層は、複数の燐光発光層の間等に設けることもできる。

スペース層は、複数の発光層間に設けられるため、電子輸送性及び正孔輸送性を兼ね備えた物質で形成することが好ましい。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止する観点から、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物質としては、上述した正孔輸送層に用いられる物質と同様のものが挙げられる。

30

【0271】

（電子阻止層、正孔阻止層、励起子阻止層）

発光層に隣接して、電子阻止層、正孔阻止層、励起子（トリプレット）阻止層等を設けてもよい。

電子阻止層とは、発光層から正孔輸送層へ電子が漏出することを阻止する機能を有する層である。正孔阻止層とは、発光層から電子輸送層へ正孔が漏出することを阻止する機能を有する層である。励起子阻止層は、発光層で生成した励起子が隣接する層へ拡散することを阻止し、励起子を発光層内に閉じ込める機能を有する層である。

【0272】

（層形成方法）

有機EL素子の各層の形成方法は、別途の記載がない限り、特に限定されるものではない。形成方法としては、乾式成膜法、湿式成膜法等の公知の方法を用いることができる。乾式成膜法の具体例としては、真空蒸着法、スパッタリング法、プラズマ法、イオンプレーティング法等が挙げられる。湿式成膜法の具体例としては、スピコート法、ディッピング法、フローコーティング法、インクジェット法等の各種塗布法が挙げられる。

40

【0273】

（膜厚）

有機EL素子の各層の膜厚は、別途の記載がない限り、特に限定されるものではない。膜厚が小さすぎると、ピンホール等の欠陥が生じやすく、十分な発光輝度が得られない。一方、膜厚が大きすぎると、高い駆動電圧が必要となり、効率が低下する。このような観

50

点から、膜厚は、通常、5 nm～10 μmが好ましく、より好ましくは10 nm～0.2 μmである。

【0274】

[電子機器]

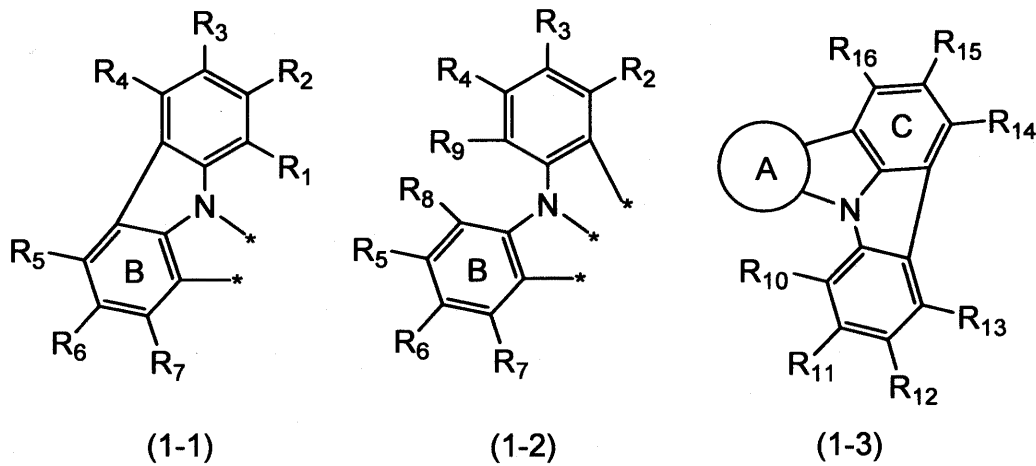
本発明の一態様に係る電子機器は、上述した本発明の一態様に係る有機EL素子を備えている。電子機器の具体例としては、有機ELパネルモジュール等の表示部品；テレビ、携帯電話、スマートフォン、パーソナルコンピュータ等の表示装置；照明、車両用灯具の発光装置等が挙げられる。

【0275】

[新規化合物]

本発明の一態様による新規化合物は、下記式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は下記式(1-2)及び(1-3)で表される化合物である。

【化113】



(前記式(1-1)、前記式(1-2)及び前記式(1-3)中、

環Aは、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環、置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環、又は下記式(2)で表されるベンゼン環である。

前記式(1-1)の2つの結合手*は、それぞれ、前記環Aの前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

前記式(1-2)の3つの結合手*は、それぞれ、前記環Aの前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

R1～R16のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないR1～R16は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

R31～R37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

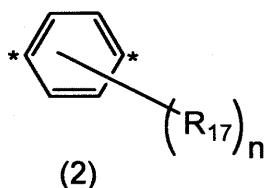
のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよく、異なってもよい。

但し、前記環Aが前記式(2)で表されるベンゼン環である場合には、 $R_1 \sim R_{17}$ のうち少なくとも1つは、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である；又は、 $R_1 \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の少なくとも1組が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。)

10

【化114】



(前記式(2)中、

2つの*の環形成炭素原子の一方で、前記式(1-1)又は前記式(1-2)のベンゼン環Bから延びる結合手が結合し、他方で前記式(1-3)のベンゼン環Cから延びる結合手が結合する。

20

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(R_{36})$

30

(R_{37})、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

n は1又は2の整数である。 n が2である場合、2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。)

40

【0276】

上記新規化合物では、環Aが式(2)で表されるベンゼン環である場合には、 $R_1 \sim R_{17}$ のうち少なくとも1つは、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である；又は、 $R_1 \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の少なくとも1組が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。

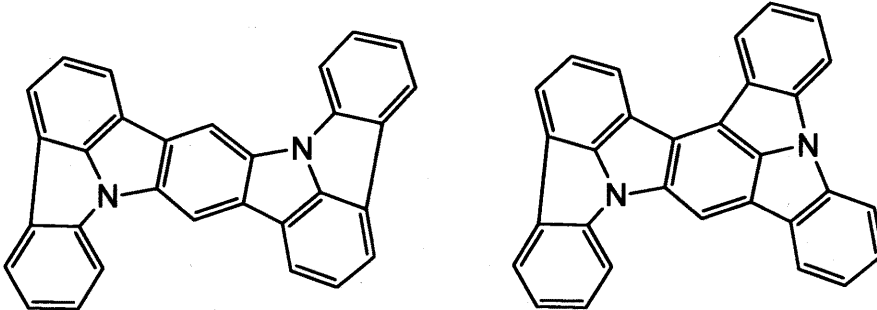
この点で、本態様に係る新規化合物は、上述した本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の有機層を含む、式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、並

50

びに式(1-2)及び(1-3)で表される化合物とは異なる。一方で、この点以外は同じである。

従って、本態様に係る新規化合物の、他の実施形態に係る構造、各置換基、製造方法は、本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の有機層を含む、式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、並びに式(1-2)及び(1-3)で表される化合物と同じである。また、具体例についても、下記化合物を除いて同じである。

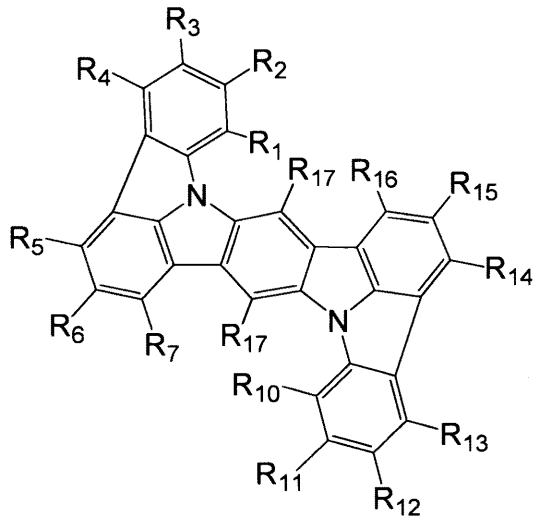
【化115】



【0277】

本発明の他の一態様による新規化合物は、下記式(3-11)で表される化合物である。

【化116】



(3-11)

(前記式(3-11)中、

$R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1

価の複素環基である。但し、 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ の少なくとも 1 つは $-N(R_{36})(R_{37})$ である。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})$

10

(R_{37}) 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

2 つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

20

【0278】

上記新規化合物は、上述した本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の有機層を含む式 (3-11) で表される化合物と同じである。

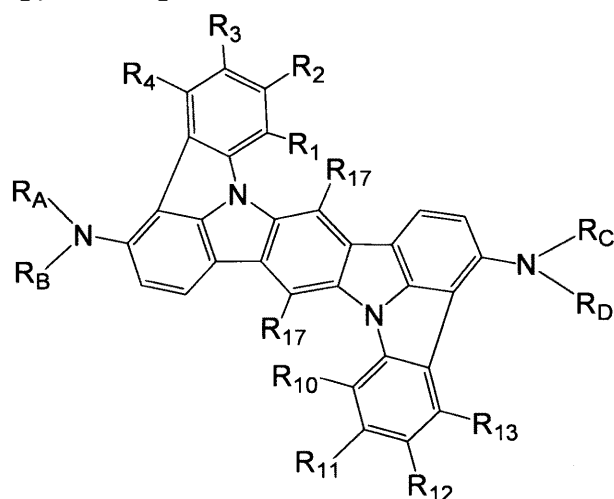
従って、本態様に係る新規化合物の、他の実施形態に係る構造、各置換基、製造方法は、本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の有機層を含む、式 (3-11) で表される化合物と同じである。また、式 (3-11) で表される化合物の具体例についても同じである。

【0279】

一実施形態においては、式 (3-11) で表される化合物は、下記式 (3-13) で表される化合物である。

30

【化117】



(3-13)

(前記式 (3-13) 中、

$R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$

50

₁₃、並びにR₁₇は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～18の1価の複素環基である。2つのR₁₇は互いに同じであってもよく、異なってもよい。

R_A、R_B、R_C及びR_Dは、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～18の1価の複素環基である。)

【0280】

上記新規化合物は、上述した本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の有機層を含む式(3-13)で表される化合物と同じである。

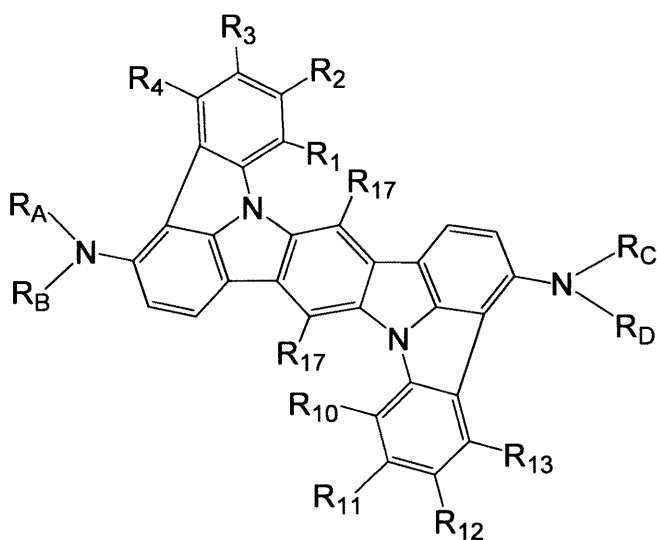
従って、本態様に係る新規化合物の、他の実施形態に係る構造、各置換基、製造方法は、本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の有機層を含む、式(3-13)で表される化合物と同じである。また、式(3-13)で表される化合物の具体例についても同じである。

10

【0281】

本発明の他の一態様による新規化合物は、下記式(3-21)で表される化合物である。

【化118】



(3-21)

(前記式(3-21)中、

R₁～R₄及びR₁₀～R₁₃のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないR₁～R₄及びR₁₀～R₁₃、並びにR₁₇は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～20のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～20の1価の複素環基である。2つのR₁₇は互いに同じであってもよく、異なってもよい。

40

R_A、R_B、R_C及びR_Dは、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～20のアリール基である。)

【0282】

上記新規化合物は、上述した本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の有機層を含む式(3-21)で表される化合物と同じである。

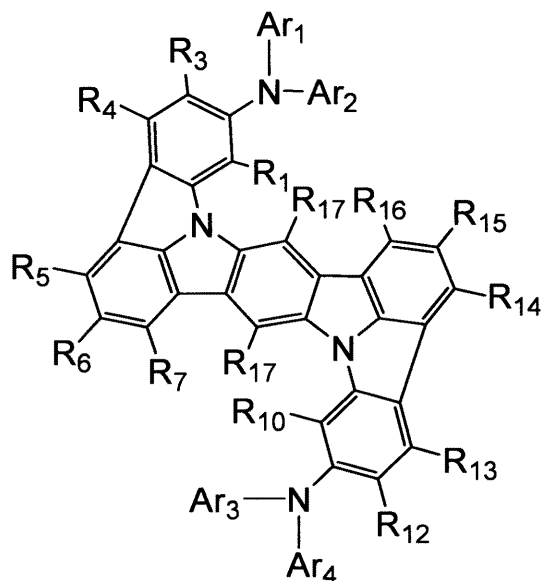
従って、本態様に係る新規化合物の、他の実施形態に係る構造、各置換基、製造方法は、本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の有機層を含む、式(3-21)で表される化合物と同じである。また、式(3-21)で表される化合物の具体例についても同じである。

【0283】

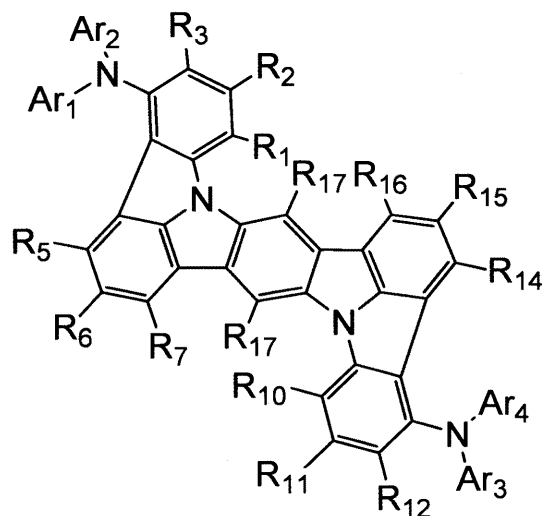
50

本発明の他の一態様による新規化合物は、下記式（３－３１）又は（３－３２）で表される化合物である。

【化１１９】



(3-31)



(3-32)

（式（３－３１）及び（３－３２）中、

$R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する２つ以上の１組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

R_{17} 、及び前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 20 の１価の複素環基である。

２つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

$Ar_1 \sim Ar_4$ 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 ～ 20 のアリール基である。）

【０２８４】

上記新規化合物は、上述した本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の有機層を含む式（３－３１）及び（３－３２）で表される化合物と同じである。

従って、本態様に係る新規化合物の、他の実施形態に係る構造、各置換基、製造方法は、本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の有機層を含む、式（３－３１）及び（３－３２）で表される化合物と同じである。また、式（３－３１）及び（３－３２）で表される化合物の具体例についても同じである。

【０２８５】

上記の各態様に係る新規化合物は、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。上記の各態様に係る新規化合物は、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層の材料として有用であり、特に、発光層の蛍光発光材料（蛍光ドーパントともいう）として有用である。上記の各態様に新規化合物は、有機 EL 素子の発光効率を高めることができる。

【実施例】

【０２８６】

次に、合成例、実施例及び比較例を挙げて本発明をさらに詳しく説明するが、本発明はこれらの実施例の記載内容に何ら制限されるものではない。

【０２８７】

実施例 １－１

(有機EL素子の作製)

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

洗浄後の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側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HIを蒸着し、膜厚5nmの化合物HI膜を形成した。このHI膜は、正孔注入層として機能する。

【0288】

このHI膜の成膜に続けて化合物HT1を蒸着し、HI膜上に膜厚80nmのHT1膜を成膜した。このHT1膜は第1の正孔輸送層として機能する。

10

HT1膜の成膜に続けて化合物HT2を蒸着し、HT1膜上に膜厚10nmのHT2膜を成膜した。このHT2膜は第2の正孔輸送層として機能する。

HT2膜上にBH-1(ホスト材料)及びBD-1(ドーパント材料)を化合物BD-1の割合(重量比)が4%となるように共蒸着し、膜厚25nmの発光層を成膜した。

【0289】

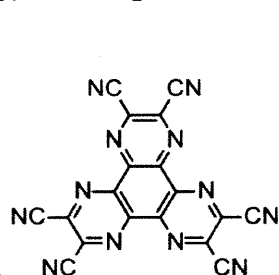
この発光層上に化合物HBLを蒸着し、膜厚10nmの電子輸送層を形成した。この電子輸送層上に電子注入材料である化合物ETを蒸着して、膜厚15nmの電子注入層を形成した。この電子注入層上にLiFを蒸着して、膜厚1nmのLiF膜を形成した。このLiF膜上に金属Alを蒸着して、膜厚80nmの金属陰極を形成した。

20

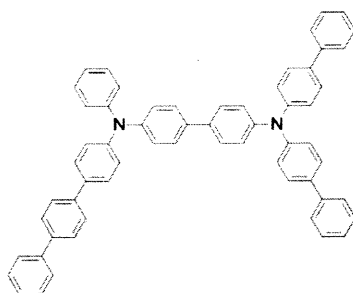
以上のようにして有機EL素子を作製した。用いた化合物を以下に示す。

【0290】

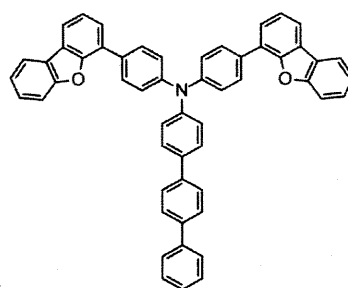
【化120】



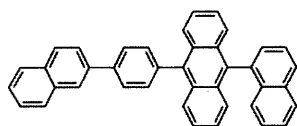
HI



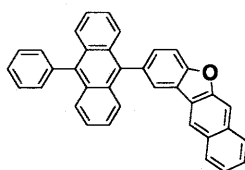
HT1



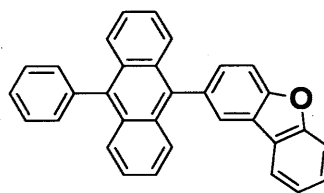
HT2



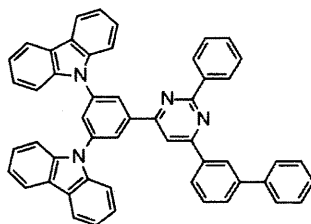
BH-1



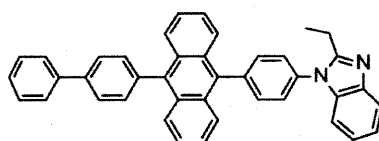
BH-2



BH-3



HBL



ET

【0291】

50

(有機EL素子の評価)

得られた有機EL素子の初期特性を、室温下、DC（直流）定電流 $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ 駆動で測定した。電圧の測定結果を表1に示す。

また、電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように有機EL素子に電圧を印加し、EL発光スペクトルを分光放射輝度計CS-1000（コニカミノルタ株式会社製）にて計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、外部量子効率EQE（%）を算出した。結果を表1に示す。尚、表1中の数値は、比較例1-1、1-2及び1-3をそれぞれ100%とした場合の相対値である。

さらに電流密度が $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように有機EL素子に電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が95%となるまでの時間を測定した寿命LT95の結果を表1に示す。

10

【0292】

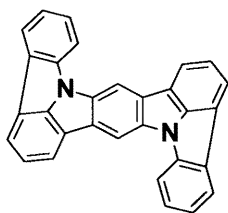
実施例1-2～1-22、及び比較例1-1～1-3

表1に示すドーパント材料とホスト材料の組み合わせで、実施例1-1と同様にして有機EL素子を作製し評価した。結果を表1に示す。

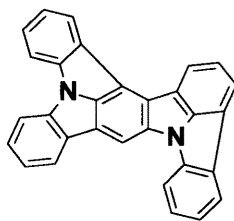
【0293】

用いた化合物を以下に示す。なお、化合物BD-1及び化合物BD-2はDibenzo[2,3:5,6]pyrrolizino[1,7-bc]indolo[1,2,3-lm]carbazole: a new electron donor, New J. Chem., 2010, 34, 1243-1246に記載の合成方法に倣って合成した。化合物BD-4、BD-9及びBD-11～BD-14の合成は、後述する方法で合成した。

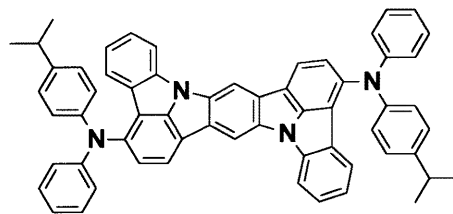
【化 1 2 1】



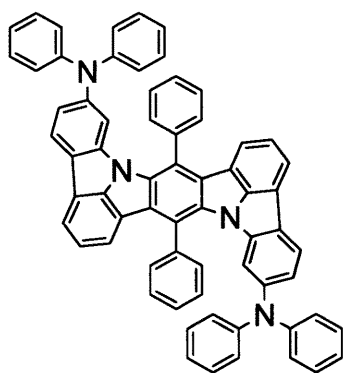
BD-1



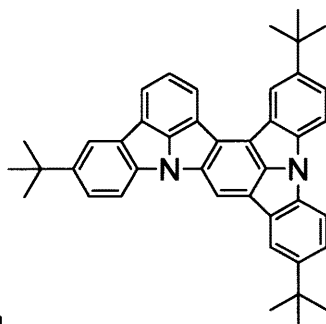
BD-2



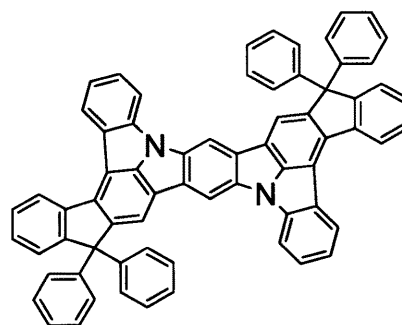
BD-4



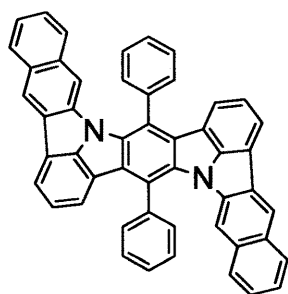
BD-9



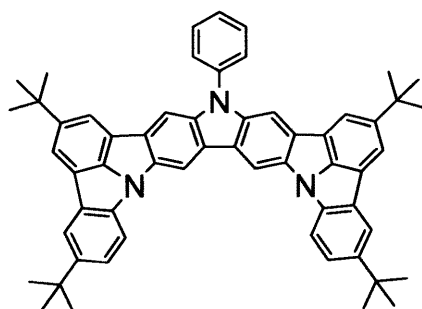
BD-11



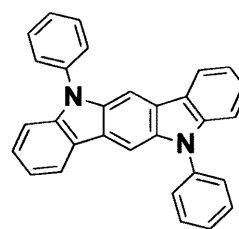
BD-12



BD-13



BD-14



BD-COM

【 0 2 9 4】

【表 1】

	ホスト	ドーパント	駆動電圧 (V)	EQE (%)	LT95 (hr)
実施例1-1	BH-1	BD-1	3.7	135	92
実施例1-2		BD-2	3.7	133	81
実施例1-3		BD-4	3.6	146	87
実施例1-4		BD-9	3.7	140	108
実施例1-5		BD-11	3.7	131	95
実施例1-6		BD-12	3.7	140	80
実施例1-7		BD-13	3.7	129	94
実施例1-8		BD-14	3.6	125	130
比較例1-1		BD-COM	3.7	100	66
実施例1-9	BH-2	BD-1	3.3	144	105
実施例1-10		BD-2	3.3	144	94
実施例1-11		BD-4	3.3	150	85
実施例1-12		BD-9	3.3	147	102
実施例1-13		BD-11	3.3	145	93
実施例1-14		BD-12	3.3	154	90
実施例1-15		BD-13	3.3	140	99
実施例1-16		BD-14	3.3	141	105
比較例1-2		BD-COM	3.3	100	75
実施例1-17	BH-3	BD-4	3.7	143	95
実施例1-18		BD-9	3.7	132	122
実施例1-19		BD-11	3.7	127	100
実施例1-20		BD-12	3.7	129	103
実施例1-21		BD-13	3.7	124	105
実施例1-22		BD-14	3.6	119	139
比較例1-3		BD-COM	3.7	100	70

【0295】

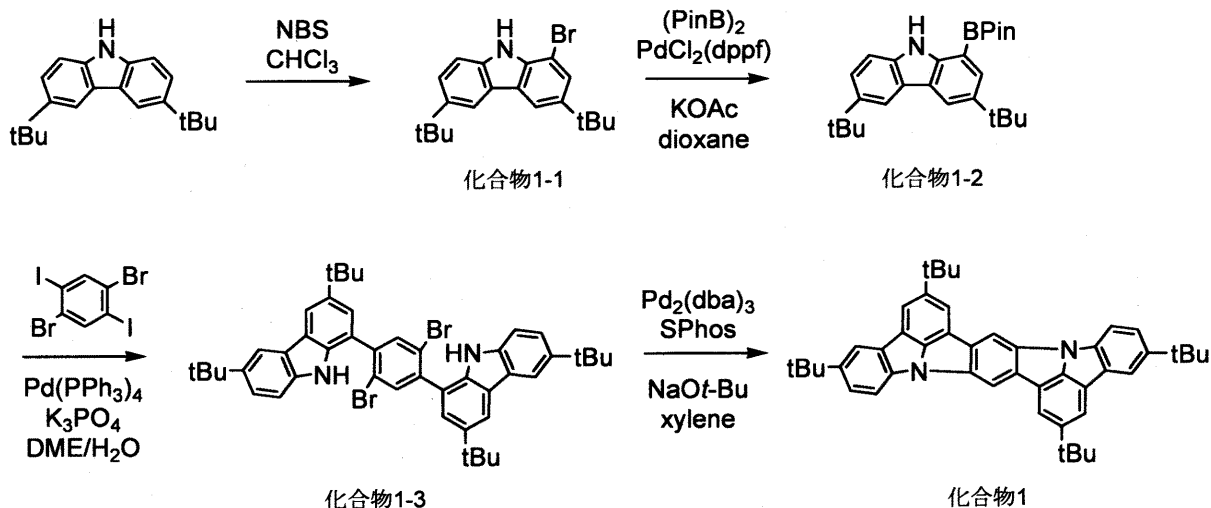
表1の結果から、BD-1、BD-2、BD-4、BD-9及びBD-11～BD-14は縮環したことにより、化合物の熱振動による励起子の失活を抑えられたと共に化合物の安定性も高まったため、BD-COMより高効率かつ長寿命になったと言える。

【0296】

実施例2-1

下記合成経路で、化合物 1 を合成した。

【化 1 2 2】



【0 2 9 7】

化合物 1-1 の合成

アルゴン雰囲気下、3, 6-ジ-tert-ブチルカルバゾール (11.2 g、40 mmol) をクロロホルム (200 mL) に溶解させ、N-ブロモスクシンイミド (7.12 g) を加えて、室温で 5 時間攪拌した。反応終了後、溶媒を濃縮し、残渣をカラムクロマトグラフィで精製してアモルファス状固体 (14.4 g) を得た。得られた固体は目的物である化合物 1-1 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 358 に対し、 $m/e = 358$ であった。

【0 2 9 8】

化合物 1-2 の合成

アルゴン雰囲気下、化合物 1-1 (14.4 g)、ビス (ピナコラト) ジボロン (15.2 g、60 mmol、1.5 eq.)、 $\text{PdCl}_2(\text{dppf})$ (1.46 g、2.0 mmol、5% Pd)、酢酸カリウム (7.85 g、80 mmol) をジオキサン (200 mL) に懸濁させ、7 時間還流した。反応終了後、ショートパスシリカゲルカラムクロマトグラフィを通し、溶媒を濃縮した。得られた固体をヘキサン/酢酸エチル (9:1) で再結晶し白色固体 (12.1 g、収率 75%) を得た。得られた固体は目的物である化合物 1-2 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 405 に対し、 $m/e = 405$ であった。

【0 2 9 9】

化合物 1-3 の合成

アルゴン雰囲気下、ジブロモジヨードベンゼン (4.00 g、8.20 mmol)、化合物 1-2 (6.81 g、16.8 mmol、1.05 eq.)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (474 mg、0.41 mmol、5% Pd) を 1, 2-ジメトキシエタン (800 mL) に溶解し、これに K_3PO_4 (10.4 g、49.2 mmol) を溶解した水 (200 mL) を加え 50 °C で 24 時間加熱攪拌した。反応終了後、酢酸エチルを用いて抽出し、溶媒を濃縮した。得られた固体をカラムクロマトグラフィで精製して白色固体 (5.0 g、収率 77%) を得た。得られた固体は目的物である化合物 1-3 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 790 に対し、 $m/e = 790$ であった。

【0 3 0 0】

化合物 1 の合成

アルゴン雰囲気下、化合物 1-3 (2.00 g)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (232 mg)、SPhos (415 mg)、 NaOt-Bu (973 mg) をキシレン (200 mL) に懸濁し、8 時間還流した。反応終了後、シリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、黄色固体 (450 mg、収率 28%) を得た。得られた固体は目的物である化合物 1 であ

20

30

40

50

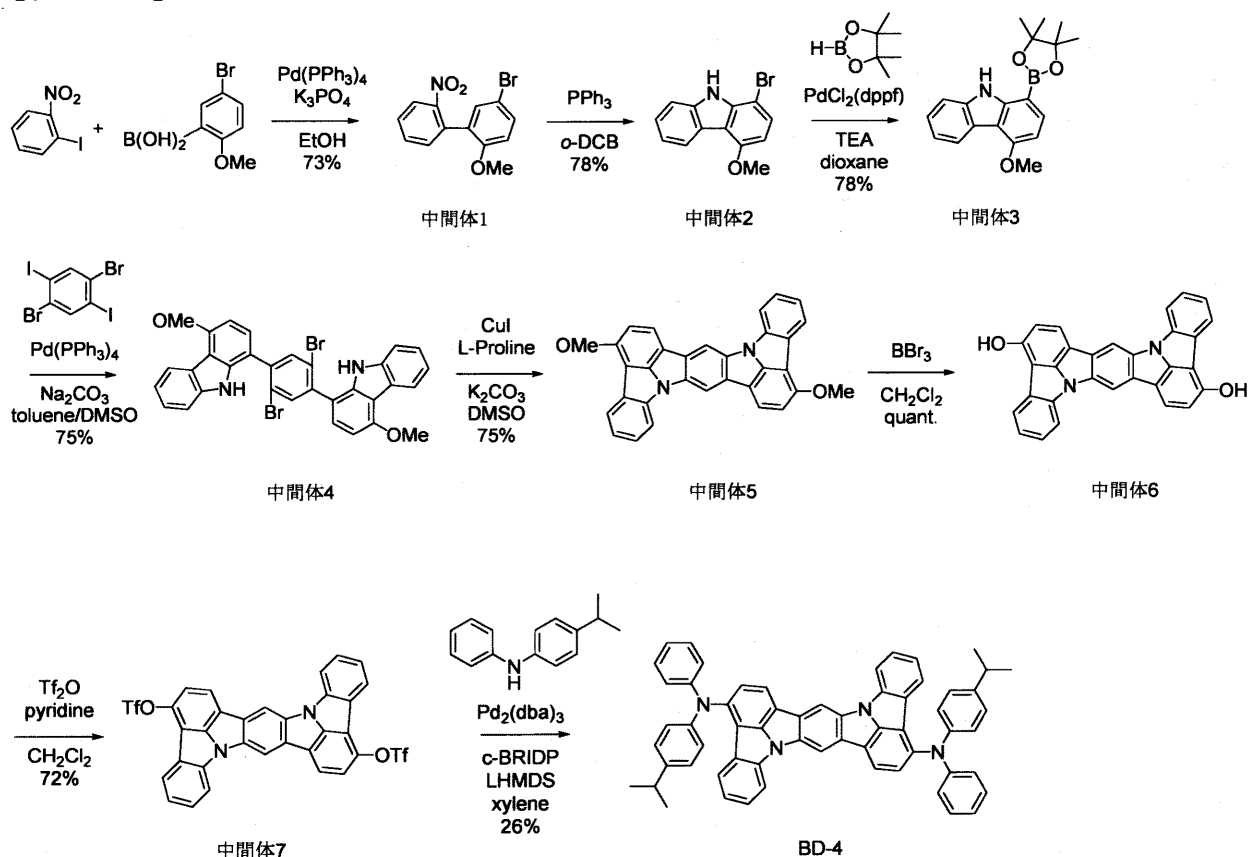
り、マスペクトル分析の結果、分子量 628 に対し、 $m/e = 628$ であった。

【0301】

実施例 2-2

下記合成経路で、BD-4 を合成した。

【化123】



【0302】

中間体 1 の合成

アルゴン雰囲気下、2-ヨードニトロベンゼン (9.7 g、39 mmol)、5-ブromo-2-メトキシフェニルボロン酸 (9.2 g、40 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 、1.1 g、0.975 mmol)、 K_3PO_4 (21 g、97 mmol) をエタノール (95 mL) に溶解させ、8 時間還流した。反応終了後、溶媒を濃縮し、残渣をカラムクロマトグラフィーで精製して黄色固体 (8.8 g、収率 73%) を得た。得られた固体は目的物である中間体 1 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 308 に対し、 $m/e = 308$ であった。

【0303】

中間体 2 の合成

中間体 1 (7.00 g、22.7 mmol) を *o*-ジクロロベンゼン (80 mL) に溶解させ、トリフェニルホスフィン (14.9 g、56.8 mmol) を加え、12 時間還流した。反応終了後、溶媒を濃縮し、残渣をカラムクロマトグラフィーで精製して白色固体 (5.7 g、収率 78%) を得た。得られた固体は目的物である中間体 2 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 276 に対し、 $m/e = 276$ であった。

【0304】

中間体 3 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 2 (5.7 g、21 mmol)、ピナコールボラン (7.9 g、62 mmol)、ジクロロ[1,1'-ビス(ジフェニルフォスフィノ)フェロセン]パラジウム ($\text{PdCl}_2(\text{dppf})$ 、1.5 g、2.0 mmol) をジオキサン (250 mL) に溶解させ、トリエチルアミン (11.5 mL、83 mmol) を加え、5 時

間還流した。反応終了後、溶媒を濃縮し、残渣をカラムクロマトグラフィで精製して黄色固体（5.0 g、収率75%）を得た。得られた固体は目的物である中間体3であり、マ
ススペクトル分析の結果、分子量323に対し、 $m/e = 323$ であった。

【0305】

中間体4の合成

アルゴン雰囲気下、ジブロモジヨードベンゼン（2.5 g、5.1 mmol）、中間体
3（4.97 g、15.4 mmol）、 $Pd(PPh_3)_4$ （237 mg、0.205 m
mol）をトルエン（250 mL）とジメチルスルホキシド（DMSO、50 mL）に溶
解し、これに2 M Na_2CO_3 水溶液（13 mL）を加え90℃で24時間加熱撹拌し
た。反応終了後、減圧下トルエンを除去し沈殿した固体をろ別した。この固体をメタノール
と酢酸エチルで洗浄し白色固体（2.5 g、収率75%）を得た。得られた固体は目的
物である中間体4であり、マ
ススペクトル分析の結果、分子量626に対し、 $m/e = 6$
26であった。

10

【0306】

中間体5の合成

アルゴン雰囲気下、中間体4（2.5 g、3.99 mmol）、CuI（76 mg、0
.40 mmol）、L-プロリン（92 mg、0.80 mmol）、 K_2CO_3 （1.3
8 g、10 mmol）をDMSO（80 mL）に懸濁し、150℃で6時間加熱撹拌した
。反応終了後、沈殿した固体をろ別した。この固体をメタノールと酢酸エチルで洗浄し茶
色固体（1.4 g、収率75%）を得た。得られた固体は目的物である化合物5であり、
マ
ススペクトル分析の結果、分子量464に対し、 $m/e = 464$ であった。

20

【0307】

中間体6の合成

中間体5（1.4 g、3.0 mmol）をジクロロメタン（150 mL）に溶解させ、
1 Mの BBr_3 のジクロロメタン溶液（15 mL、15 mmol）を加え、8時間還流し
た。反応終了後、氷水（50 mL）を加え、沈殿をろ別した。この固体をメタノールで洗
浄し白色固体（1.4 g）を得た。得られた固体は目的物である中間体6であり、マ
ススペクトル分析の結果、分子量436に対し、 $m/e = 436$ であった。

【0308】

中間体7の合成

中間体6（1.4 g、3.2 mmol）をジクロロメタン（75 mL）とピリジン（7
5 mL）に懸濁させ、無水トリフラート（3.8 mL、22.5 mmol）を加え室温で
8時間撹拌した。反応終了後、水（50 mL）を加え、沈殿をろ別した。この固体をメタ
ノールと酢酸エチルで洗浄し白色固体（1.8 g、収率72%）を得た。得られた固体は
目的物である中間体7であり、マ
ススペクトル分析の結果、分子量700に対し、 $m/e = 700$ であった。

30

【0309】

BD-4の合成

アルゴン雰囲気下、中間体7（1.00 g、1.43 mmol）、4-iPr-N-フ
ェニルアニリン（754 mg、3.57 mmol）、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジ
パラジウム(0) ($Pd_2(dba)_3$ 、26 mg、0.029 mmol)、ジ-ter
t-ブチル（1-メチル-2, 2-ジフェニルシクロプロピル）ホスフィン（40 mg、
0.11 mmol）をキシレン（120 mL）に溶解し、1 Mのリチウムビス（トリメチ
ルシリル）アミドのテトラヒドロフラン溶液（3.6 mL、3.6 mmol）を加え、8
時間還流した。反応終了後セライトろ過し、溶媒を留去して得られた固体をカラムクロ
マトグラフィで精製し黄色固体（300 mg、収率26%）を得た。得られた固体は目的物
であるBD-4であり、マ
ススペクトル分析の結果、分子量823に対し、 $m/e = 82$
3であった。

40

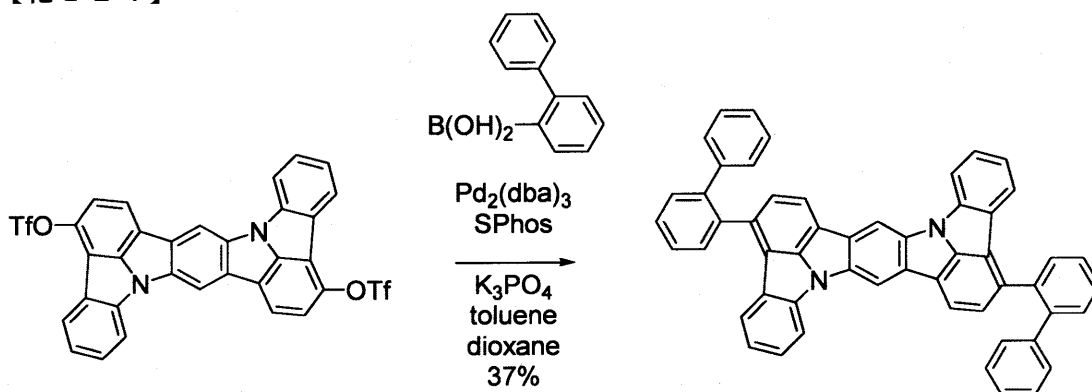
【0310】

実施例2-3

50

下記合成経路で、BD-5を合成した。

【化124】



BD-5

【0311】

BD-5の合成

アルゴン雰囲気下、中間体7 (50 mg、0.071 mmol)、2-ビフェニルボロン酸 (113 mg、0.571 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.6 mg、0.0028 mmol)、2-ジシクロヘキシルフォスフィノ-2',6'-ジメトキシビフェニル (SPhos, 4.7 mg、0.011 mmol)、 K_3PO_4 (151 mg、0.714 mmol) をトルエン (3 mL) とジオキサン (3 mL) に溶解し、90℃で6時間加熱撹拌した。反応終了後、加熱したクロロベンゼンを加えセライトろ過した。溶媒を留去して得られた固体をジメトキシエタンで洗浄し黄色固体 (18.5 mg、収率37%) を得た。得られた固体は目的物であるBD-5であり、マスペクトル分析の結果、分子量708に対し、 $m/e = 708$ であった。

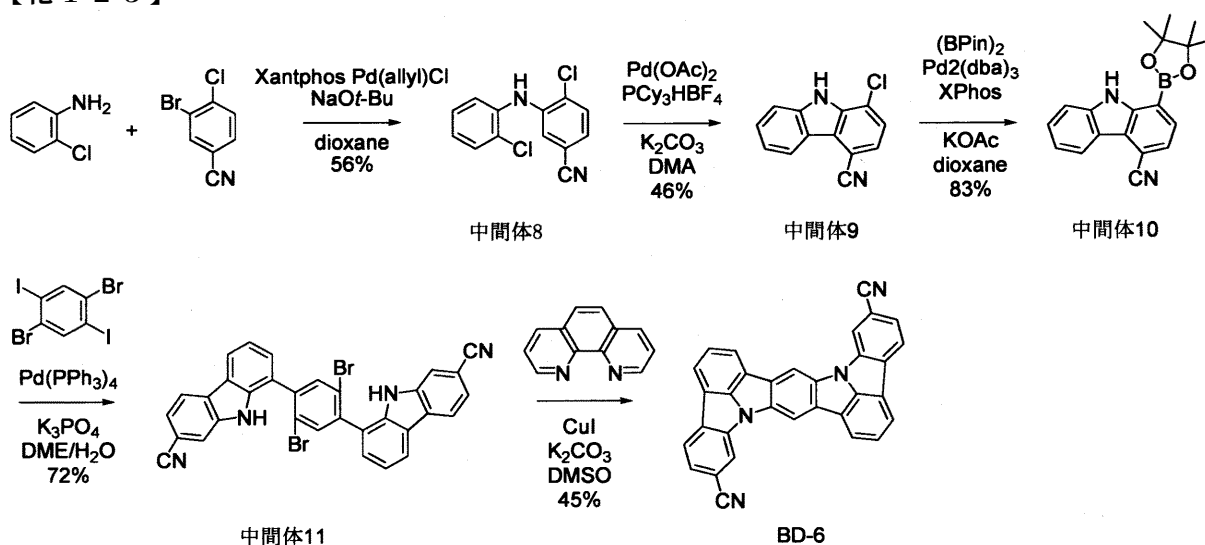
20

【0312】

実施例2-4

下記合成経路で、BD-6を合成した。

【化125】



30

【0313】

中間体8の合成

アルゴン雰囲気下、2-クロロアニリン (10.0 g、46.2 mmol)、3-ブromo-4-クロロベンズニトリル (5.89 g、46.2 mmol)、(4,5-ビス(ジフェニルホスフィノ)-9,9-ジメチルキサンテン) (アリル) パラジウムクロリド (

50

352 mg、0.462 mmol)、ナトリウム *tert*-ブトキシド (4.44 g、46.2 mmol) をジオキサン (250 mL) に懸濁させ、100℃で8時間加熱撹拌した。反応終了後、セライトろ過し溶媒を留去した。得られた残渣をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色固体 (6.8 g、収率56%) を得た。得られた固体は目的物である中間体8であり、マススペクトル分析の結果、分子量263に対し、 $m/e = 263$ であった。

【0314】

中間体9の合成

アルゴン雰囲気下、中間体8 (6.50 g、24.7 mmol)、酢酸パラジウム (277 mg、1.24 mmol)、トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボレート (910 mg、2.47 mmol)、炭酸カリウム (K_2CO_3 、6.83 g、49.4 mmol) をN,N-ジメチルアセトアミド (DMA、250 mL) に懸濁させ、140℃で5時間加熱撹拌した。反応終了後、セライトろ過し溶媒を留去した。得られた残渣をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色固体 (2.5 g、収率45%) を得た。得られた固体は目的物である中間体9であり、マススペクトル分析の結果、分子量226に対し、 $m/e = 226$ であった。

【0315】

中間体10の合成

アルゴン雰囲気下、中間体9 (1.30 g、5.74 mmol)、ビス (ピナコラト) ジボロン (2.91 g、11.5 mmol)、 $Pd_2(dba)_3$ (105 mg、0.115 mmol)、2-ジシクロヘキシルフォスフィノ-2',4',6'-トリイソプロピルビフェニル (XPhos、0.219 g、0.459 mmol)、酢酸カリウム (1.69 g、17.2 mmol) をジオキサン (250 mL) に溶解させ、100℃で5時間加熱撹拌した。反応終了後、ショートパスカラムクロマトグラフィーを通し、溶媒を留去して得られた残渣をヘキサンで再結晶し白色固体 (1.52 g、収率83%) を得た。得られた固体は目的物である中間体10であり、マススペクトル分析の結果、分子量318に対し、 $m/e = 318$ であった。

【0316】

中間体11の合成

アルゴン雰囲気下、ジブロモジヨードベンゼン (400 mg、0.820 mmol)、中間体10 (535 mg、1.68 mmol)、 $Pd(PPh_3)_4$ (47 mg、0.041 mmol)、リン酸カリウム (1.05 g、4.92 mmol) をジメトキシエタン (80 mL) と水 (20 mL) に溶解し、50℃で24時間加熱撹拌した。反応終了後、沈殿をろ別した。この固体を水とメタノールで洗浄し、白色固体 (365 mg、収率72%) を得た。得られた固体は目的物である中間体11であり、マススペクトル分析の結果、分子量616に対し、 $m/e = 616$ であった。

【0317】

BD-6の合成

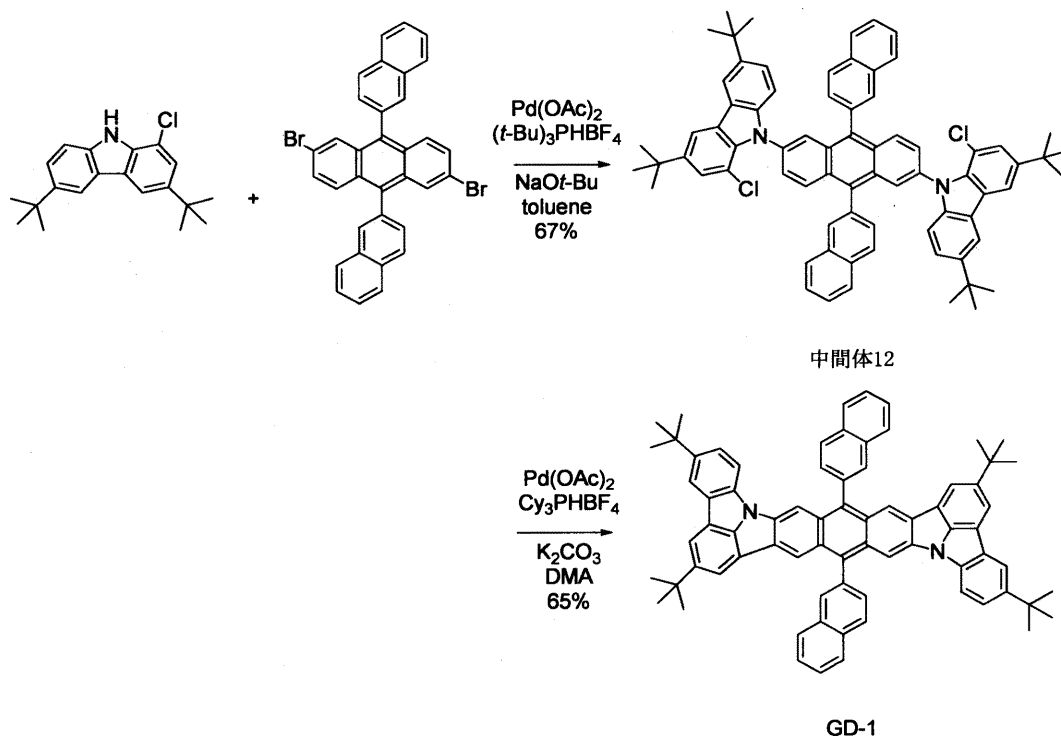
アルゴン雰囲気下、中間体11 (150 mg、0.243 mmol)、CuI (9 mg、0.05 mmol)、1,10-フェナントロリン1水和物 (48 mg、0.24 mmol)、 K_2CO_3 (135 mg、0.974 mmol) をジメチルスルホキシド (20 mL) に懸濁し、150℃で8時間加熱撹拌した。反応終了後、沈殿した固体をろ別した。この固体をメタノールと酢酸エチルで洗浄し黄色固体 (50 mg、収率45%) を得た。得られた固体は目的物であるBD-6であり、マススペクトル分析の結果、分子量454に対し、 $m/e = 454$ であった。

【0318】

実施例2-5

下記合成経路で、GD-1を合成した。

【化 1 2 6】



【0 3 1 9】

中間体 1 2 の合成

アルゴン雰囲気下、2, 6-ジブromo-9, 10-ビス(2-ナフチル)アントラセン(3. 30 g、5. 61 mmol)、3, 6-ジ-tert-ブチル-1-クロロ-9H-カルバゾール(3. 70 g、11. 8 mmol)、酢酸パラジウム(63 mg、0. 28 mmol)、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート(163 mg、0. 561 mmol)、ナトリウムtert-ブトキシド(2. 16 g、22. 4 mmol)をトルエン(80 mL)に懸濁させ、100℃で8時間加熱撹拌した。反応終了後、セライトろ過し溶媒を留去した。得られた残渣をカラムクロマトグラフィで精製し、黄色固体(3. 95 g、収率67%)を得た。得られた固体は目的物である中間体12であり、マスペクトル分析の結果、分子量1054に対し、 $m/e = 1054$ であった。

30

【0 3 2 0】

GD-1 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体12(3. 50 g、3. 32 mmol)、酢酸パラジウム(37 mg、0. 166 mmol)、トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート(122 mg、0. 332 mmol)、炭酸カリウム(1. 84 g、13. 3 mmol)をN, N-ジメチルアセトアミド(170 mL)に懸濁させ、140℃で8時間加熱撹拌した。反応終了後、沈殿をろ別した。この固体を加熱したクロロベンゼンで洗浄し橙色固体(2. 1 g、収率65%)を得た。得られた固体は目的物であるGD-1であり、マスペクトル分析の結果、分子量981に対し、 $m/e = 981$ であった。

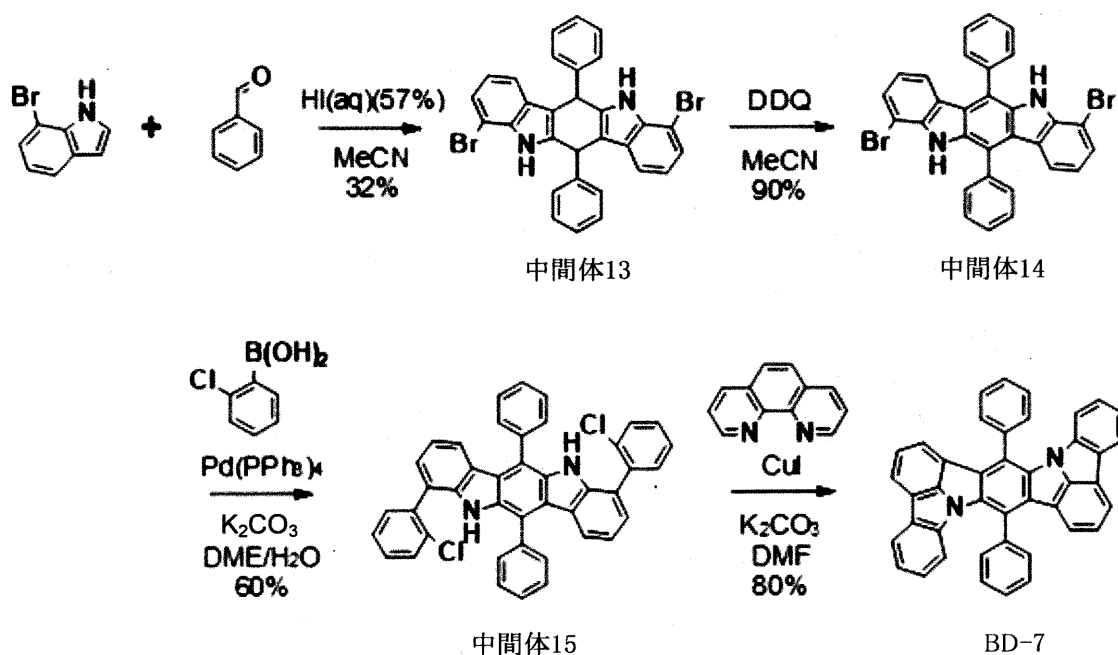
40

【0 3 2 1】

実施例 2-6

下記合成経路で、BD-7を合成した。

【化 1 2 7】



【0 3 2 2】

20

中間体 1 3 の合成

7-ブromo-1H-インドール (10.0 g、51.0 mmol)、ベンズアルデヒド (5.41 g、51.0 mmol) をアセトニトリル (200 mL) に溶解させ、攪拌しながら 57% ヨウ化水素酸 (2 mL) を滴下し、80℃で8時間加熱攪拌した。反応終了後、析出した固体をろ別、アセトニトリルで洗浄し、淡黄色固体 (4.60 g、収率 32%) を得た。得られた固体は目的物である中間体 13 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 568 に対し、 $m/e = 568$ であった。

【0 3 2 3】

中間体 1 4 の合成

中間体 13 (4.50 g、7.92 mmol) をアセトニトリルに懸濁させ、攪拌しながら 2,3-ジクロロ-5,6-ジシアノ-p-ベンゾキノン (DDQ、4.49 g、19.8 mmol) を加えた後、80℃で6時間加熱攪拌した。反応終了後、沈殿をろ別した。この固体をアセトニトリルで洗浄し、黄色固体 (4.02 g、収率 90%) を得た。得られた固体は目的物である中間体 14 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 566 に対し、 $m/e = 566$ であった。

30

【0 3 2 4】

中間体 1 5 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 14 (1.50 g、2.65 mmol)、2-クロロフェニルボロン酸 (1.24 g、7.95 mmol)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (153 mg、0.132 mmol)、炭酸カリウム (2.20 g、15.9 mmol) をジメトキシエタン (20 mL) と水 (5 mL) に溶解し、80℃で8時間加熱攪拌した。反応終了後、沈殿をろ別した。この固体をトルエンで加熱懸洗し、淡黄色固体 (1.00 g、収率 60%) を得た。得られた固体は目的物である中間体 15 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 629 に対し、 $m/e = 629$ であった。

40

【0 3 2 5】

BD-7 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 15 (900 mg、1.43 mmol)、 CuI (136 mg、0.715 mmol)、1,10-フェナントロリン 1 水和物 (142 mg、0.715 mmol)、 K_2CO_3 (790 mg、5.72 mmol) を N,N-ジメチルホルムアミド (30 mL) に懸濁し、150℃で8時間加熱攪拌した。反応終了後、ショート

50

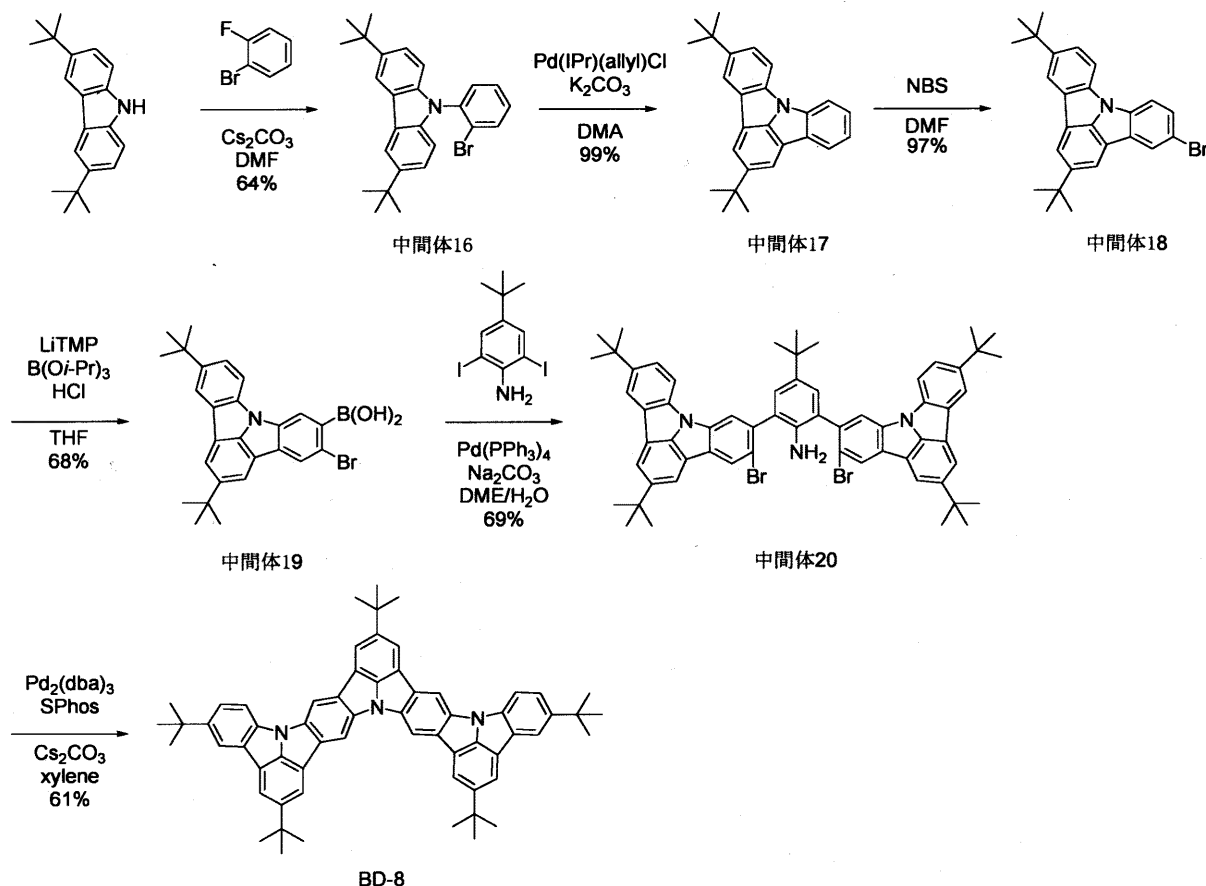
パスカラムクロマトグラフィを通した。溶媒を留去後、得られた固体をシクロヘキサノンで再結晶し黄色固体（505mg、収率63%）を得た。得られた固体は目的物であるBD-7であり、マスペクトル分析の結果、分子量556に対し、 $m/e = 556$ であった。

【0326】

実施例2-7

下記合成経路で、BD-8を合成した。

【化128】



【0327】

中間体16の合成

3,6-ジ-tert-ブチル-9H-カルバゾール（15.0g、53.7mmol）、1-ブロモ-2-フルオロベンゼン（18.8g、107mmol）、炭酸セシウム（35.0g、107mmol）をN,N-ジメチルホルムアミド（190mL）に懸濁し、150℃で22時間加熱攪拌した。反応終了後、水を加え沈殿をろ別した。この固体をカラムクロマトグラフィで精製し白色固体（21.7g、収率93%）を得た。得られた固体は目的物である中間体16であり、マスペクトル分析の結果、分子量434に対し、 $m/e = 434$ であった。

【0328】

中間体17の合成

アルゴン雰囲気下、中間体16（21.7g、50.0mmol）、アリルクロロ[1,3-ビス（2,6-ジイソプロピルフェニル）イミダゾール-2-イリデン]パラジウム（570mg、0.996mmol）炭酸カリウム（13.8g、100mmol）をN,N-ジメチルアセトアミド（250mL）に懸濁させ、130℃で11時間加熱攪拌した。反応終了後、水を加え沈殿をろ別した。この固体をカラムクロマトグラフィで精製し白色固体（15.5g、収率88%）を得た。得られた固体は目的物である中間体17であり、マスペクトル分析の結果、分子量353に対し、 $m/e = 353$ であった。

【0329】

中間体18の合成

中間体17 (4.10 g、11.6 mmol) をN, N-ジメチルホルムアミドに溶解させ、攪拌しながらN-ブロモスクシンイミド (NBS、2.20 g、12.36 mmol) を加えた後、室温で10時間攪拌した。反応終了後、沈殿をろ別した。この固体をカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 (4.87 g、収率97%) を得た。得られた固体は目的物である中間体18であり、マスペクトル分析の結果、分子量432に対し、 $m/e = 432$ であった。

【0330】

中間体19の合成

2, 2, 6, 6-テトラメチルピペリジン (3.20 g、22.7 mmol) をテトラヒドロフランに溶解させ、 -50°C で攪拌しながらn-ブチルリチウムヘキサン溶液 (1.55 M、14.6 mL) を加えて、リチウムテトラメチルピペリジド (LiTMP) とした。同温で20分攪拌した後、 -73°C に冷却し、ホウ酸トリイソプロピル (8.00 mL、34.7 mmol) を加えた。この溶液を5分攪拌した後、中間体18 (4.83 g、11.2 mmol) のテトラヒドロフラン (30 mL) 溶液を滴下した。室温まで徐々に昇温しながら10時間攪拌した後、10%塩酸 (100 mL) を加えて30分攪拌した。反応終了後、酢酸エチルを加え抽出し、有機層を集め溶媒を留去した。得られた残渣をカラムクロマトグラフィで精製し、黄色固体 (3.62 g、収率68%) を得た。得られた固体は目的物である中間体19であり、マスペクトル分析の結果、分子量476に対し、 $m/e = 476$ であった。

【0331】

中間体20の合成

アルゴン雰囲気下、4-tert-ブチル-2, 6-ジヨードアニリン (1.39 g、3.47 mmol)、中間体19 (3.62 g、7.60 mmol)、Pd (PPh₃)₄ (400 mg、0.346 mmol)、炭酸水素ナトリウム (2.30 g、27.4 mmol) をジメトキシエタン (50 mL) と水 (25 mL) に溶解し、 80°C で10時間加熱攪拌した。反応終了後、塩化メチレンで抽出し、有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた。固体をろ過で除き、溶媒を留去して得られた残渣をカラムクロマトグラフィで精製し、黄色固体 (2.41 g、収率69%) を得た。得られた固体は目的物である中間体20であり、マスペクトル分析の結果、分子量1010に対し、 $m/e = 1010$ であった。

【0332】

BD-8の合成

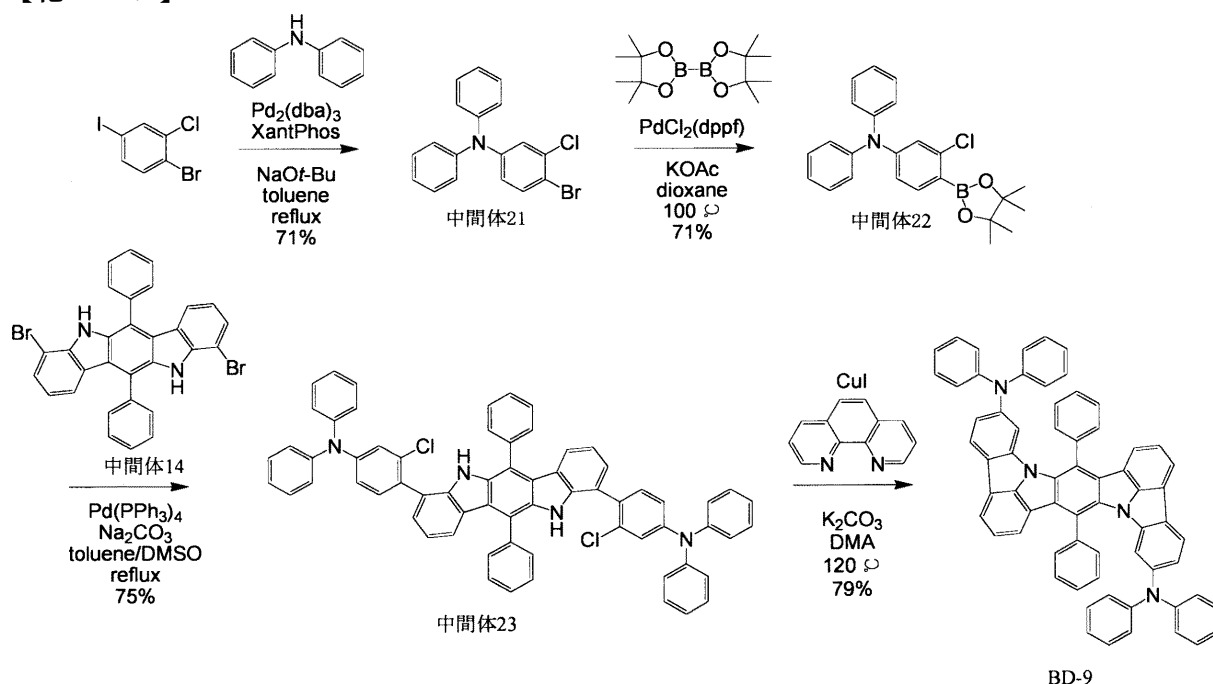
アルゴン雰囲気下、中間体20 (2.41 g、2.39 mmol)、Pd₂ (dba)₃ (90 mg、0.098 mmol)、SPhos (16 mg、0.39 mmol)、炭酸セシウム (4.7 g、14.4 mmol) をキシレン (240 mL) に懸濁し、 140°C で10時間加熱攪拌した。反応終了後、析出固体をろ別し、水とメタノールで洗浄した。この固体をカラムクロマトグラフィで精製し、黄色固体 (1.24 g、収率61%) を得た。得られた固体は目的物であるBD-8であり、マスペクトル分析の結果、分子量848に対し、 $m/e = 848$ であった。

【0333】

実施例2-8

下記合成経路で、BD-9を合成した。

【化 1 2 9】



【0 3 3 4】

20

中間体 2 1 の合成

アルゴン雰囲気下、1-ブロモ-2-クロロ-4-ヨードベンゼン (17.0 g、53.6 mmol)、ジフェニルアミン (9.07 g、53.6 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (981 mg、1.07 mmol)、4,5'-ビス(ジフェニルホスフィノ)-9,9'-ジメチルキサンテン (XantPhos、1.24 g、2.14 mmol)、NaOt-Bu (5.15 g、53.6 mmol) をトルエン (500 mL) 中で8時間還流した。反応終了後、セライトろ過し、濃縮して得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 (13.6 g、収率71%) を得た。得られた固体は目的物である中間体 2 1 であり、マスマスペクトル分析の結果、分子量358.6に対し、 $m/e = 359$ であった。

30

【0 3 3 5】

中間体 2 2 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 2 1 (13.6 g、38.0 mmol)、ビス(ピナコラト)ジボロン (19.3 g、76.0 mmol)、 $\text{PdCl}_2(\text{dppf})$ (621 mg、0.761 mmol)、酢酸カリウム (7.46 g、76 mmol) をジオキサン (400 mL) に懸濁させ、7時間還流した。反応終了後、ショートパスシリカゲルカラムクロマトグラフィを通し、溶媒を濃縮した。得られた固体をメタノールで洗浄し白色固体 (18.5 g、収率71%) を得た。得られた固体は目的物である中間体 2 2 であり、マスマスペクトル分析の結果、分子量405.7に対し、 $m/e = 406$ であった。

【0 3 3 6】

40

中間体 2 3 の合成

アルゴン雰囲気下、ジブロモ体 (中間体 1 4) (5.00 g、8.83 mmol)、ボロン酸エステル (中間体 2 2) (10.8 g、26.5 mmol)、 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (1.02 g、0.883 mmol) をトルエン (250 mL) とジメチルスルホキシド (500 mL) に溶解し、これに2Mの Na_2CO_3 (130 mL) を加え100 $^\circ\text{C}$ で6時間加熱攪拌した。反応終了後、ショートパスシリカゲルカラムクロマトグラフィを通し、溶媒を濃縮した。得られた残渣を酢酸エチルとトルエンで洗浄して黄色固体 (6.39 g、収率75%) を得た。得られた固体は目的物である中間体 2 3 であり、マスマスペクトル分析の結果、分子量964.0に対し、 $m/e = 965$ であった。

【0 3 3 7】

50

BD-9の合成

アルゴン雰囲気下、中間体23 (6.24 g、6.47 mmol)、ヨウ化銅 (I) (1.48 g、7.77 mmol)、1,10-フェナントロリン (1.40 g、7.77 mmol)、炭酸カリウム (7.16 g、51.8 mmol) をN, N-ジメチルアセトアミド (1.2 L) に懸濁し、15時間120℃で加熱撹拌した。反応終了後、ショートパスシリカゲルカラムクロマトグラフィを通し、溶媒を濃縮した。得られた残渣をクロロベンゼンで再結晶し、トルエンとメタノールで洗浄し、黄色固体 (4.54 g、収率79%) を得た。得られた固体は目的物であるBD-9であり、マスペクトル分析の結果、分子量891.1に対し、 $m/e = 892$ であった。

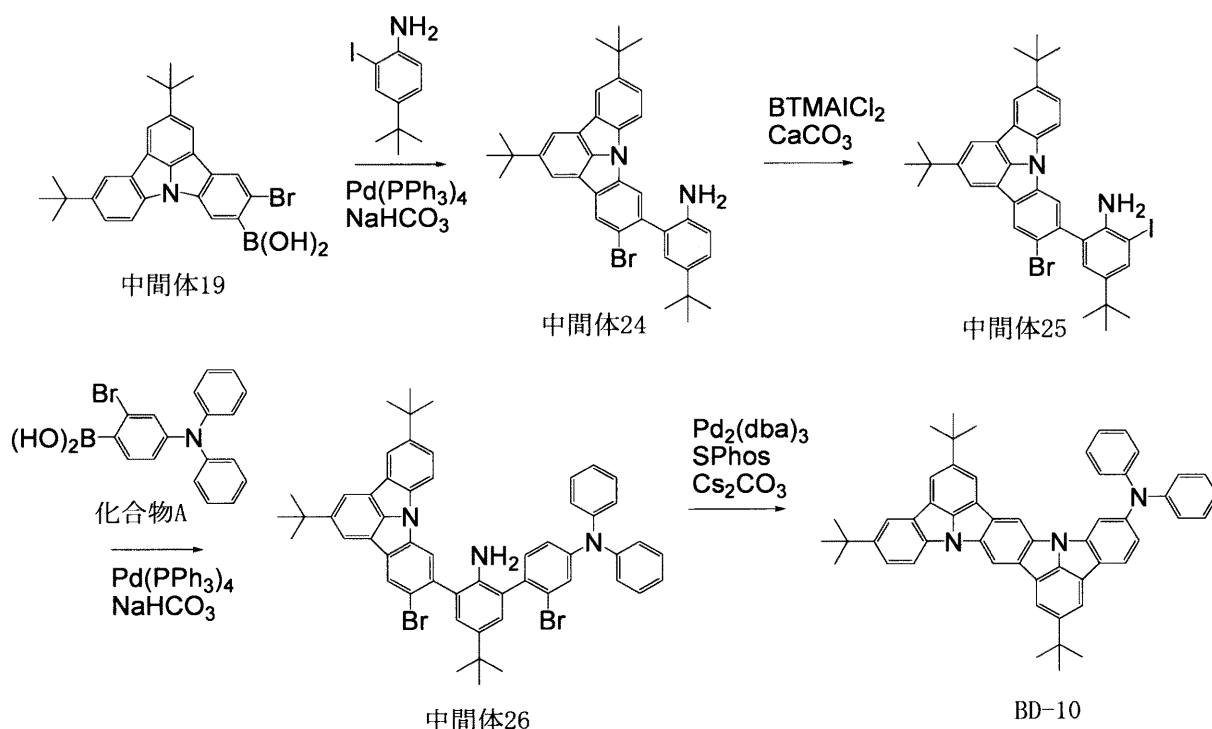
【0338】

10

実施例2-9

下記合成経路で、BD-10を合成した。

【化130】



【0339】

中間体24の合成

アルゴン雰囲気下、4-tert-ブチル-2-ヨードアニリン (2.00 g、7.27 mmol)、中間体19 (3.00 g、6.30 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (420 mg、0.364 mmol)、炭酸水素ナトリウム (1.90 g、22.6 mmol) をジメトキシエタン (40 mL) と水 (20 mL) に溶解し、80℃で10時間加熱撹拌した。反応終了後、塩化メチレンで抽出し、有機相を硫酸マグネシウムで乾燥させた。固体をろ過で除き、溶媒を留去して得られた残渣をカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 (2.95 g、収率81%) を得た。得られた固体は目的物である中間体24であり、マスペクトル分析の結果、分子量579.6に対し、 $m/e = 580$ であった。

【0340】

中間体25の合成

中間体24 (2.95 g、5.09 mmol) を塩化メチレン (50 mL) とメタノール (20 mL) に溶解させ、撹拌しながら炭酸カルシウム (0.80 g、8.0 mmol) とベンジルトリメチルアンモニウムジクロロヨード (1.80 g、5.17 mmol) を加え、室温で10時間撹拌した。反応終了後、飽和チオ硫酸ナトリウム水溶液を加え、少し撹拌した後、塩化メチレンで抽出した。有機相を濃縮し得られた固体をカラムクロ

40

50

マトグラフィーで精製し、白色固体（3.16 g、収率88%）を得た。得られた固体は目的物である中間体25であり、マスペクトル分析の結果、分子量705.5に対し、 $m/e = 706$ であった。

【0341】

中間体26の合成

アルゴン雰囲気下、ヨード中間体（中間体25）（3.16 g、4.48 mmol）、ボロン酸化合物A（2.00 g、5.43 mmol）、 $Pd(PPh_3)_4$ （260 mg、0.225 mmol）、炭酸水素ナトリウム（1.60 g、19.1 mmol）をジメトキシエタン（40 mL）と水（20 mL）に溶解し、80℃で10時間加熱撹拌した。反応終了後、塩化メチレンで抽出し、有機相を硫酸マグネシウムで乾燥させた。固体をろ過で除き、溶媒を留去して得られた残渣をカラムクロマトグラフィーで精製し、黄色固体（3.93 g、収率97%）を得た。得られた固体は目的物である中間体26であり、マスペクトル分析の結果、分子量901.8に対し、 $m/e = 902$ であった。

【0342】

BD-10の合成

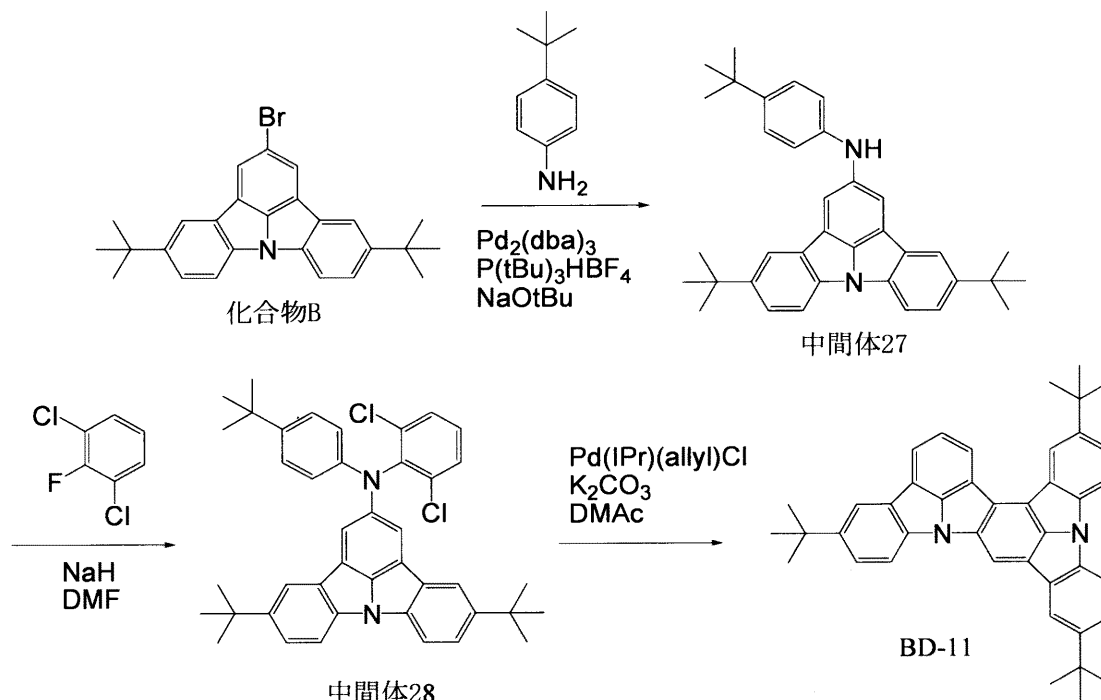
アルゴン雰囲気下、中間体26（3.93 g、2.39 mmol）、 $Pd_2(dba)_3$ （160 mg、0.175 mmol）、SPhos（290 mg、0.706 mmol）、炭酸セシウム（8.4 g、26 mmol）をキシレン（360 mL）に懸濁し、140℃で10時間加熱撹拌した。反応終了後、析出固体をろ別し、水とメタノールで洗浄した。この固体をカラムクロマトグラフィーで精製し、黄色固体（1.35 g、収率42%）を得た。得られた固体は目的物であるBD-10であり、マスペクトル分析の結果、分子量740.0に対し、 $m/e = 741$ であった。

【0343】

実施例2-10

下記合成経路で、BD-11を合成した。

【化131】



【0344】

中間体27の合成

アルゴン雰囲気下、化合物B（3.00 g、6.94 mmol）、4-tert-ブチルアニリン（1.20 g、8.04 mmol）、 $Pd_2(dba)_3$ （60 mg、0.066 mmol）、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート（80

10

20

50

mg、0.276 mmol)、ナトリウム *tert*-ブトキシド (0.94 g、9.8 mmol) をトルエン (25 mL) に懸濁させ、100 °C で10時間加熱撹拌した。反応終了後、セライトろ過し溶媒を留去した。得られた残渣をカラムクロマトグラフィーで精製し、黄色固体 (3.20 g、収率92%) を得た。得られた固体は目的物である中間体27であり、マスペクトル分析の結果、分子量500.7に対し、 $m/e = 508$ であった。

【0345】

中間体28の合成

中間体27 (3.20 g、6.39 mmol) をN, N-ジメチルホルムアミド (20 mL) に溶かし、流動パラフィンに分散した約60%水素化ナトリウム (0.77 g、1.9 mmol) を加え20分撹拌した。この溶液に1, 3-ジクロロ-2-フルオロベンゼン (1.6 g、9.7 mmol) を加え50 °C で10時間加熱撹拌した。反応終了後、析出した固体を濾別しメタノールで洗浄した。得られた固体をカラムクロマトグラフィーで精製し、黄色固体 (3.44 g、収率79%) を得た。得られた固体は目的物である中間体28であり、マスペクトル分析の結果、分子量645.7に対し、 $m/e = 646$ であった。

【0346】

BD-11の合成

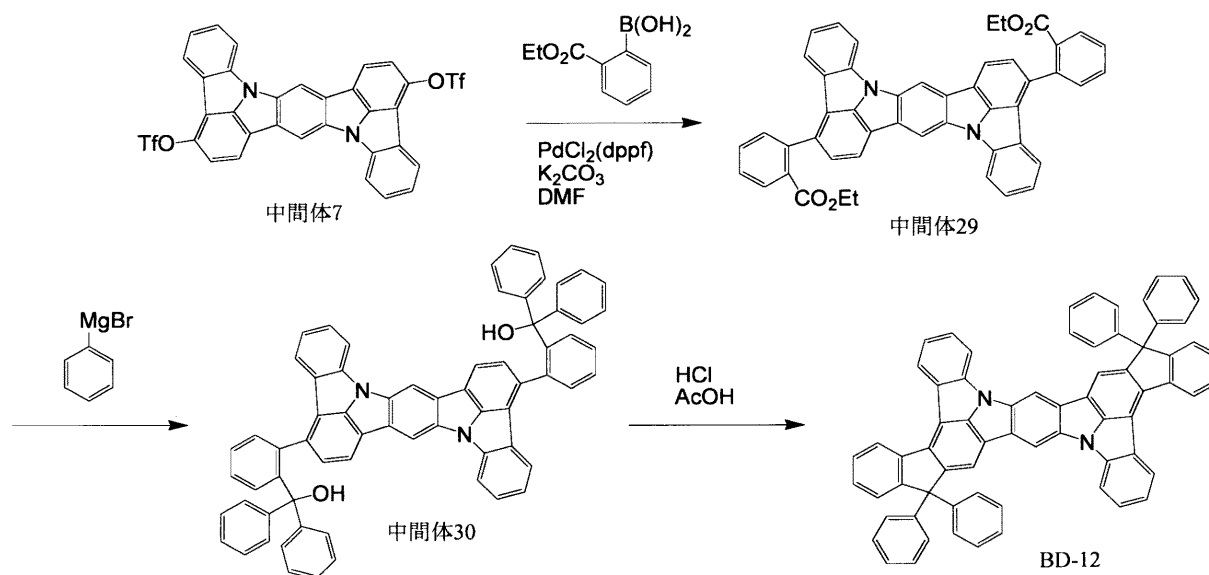
アルゴン雰囲気下、中間体28 (3.44 g、5.33 mmol)、アリル [1, 3-ビス (2, 6-ジイソプロピルフェニル) イミダゾール-2-イリデン] クロロパラジウム (120 mg、0.210 mmol)、炭酸カリウム (2.94 g、21.5 mmol) をN, N-ジメチルアセトアミド (30 mL) に懸濁させ、150 °C で10時間加熱撹拌した。反応終了後、水を加え固体を濾別した。得られた固体をカラムクロマトグラフィーと再結晶で精製し、黄色固体 (1.87 g、収率61%) を得た。得られた固体は目的物であるBD-11であり、マスペクトル分析の結果、分子量572.8に対し、 $m/e = 573$ であった。

【0347】

実施例2-11

下記合成経路で、BD-12を合成した。

【化132】



【0348】

中間体29の合成

アルゴン雰囲気下、中間体7 (3.00 g、4.28 mmol)、2-(エトキシカルボニル)フェニル硼酸 (2.50 g、12.9 mmol)、[1, 1'-ビス (ジフ

エニルホスフィノ) フェロセン] ジクロロパラジウム (157 mg、0.214 mmol)、炭酸カリウム (2.37 g、17.1 mmol) を N, N-ジメチルホルムアミド (200 mL) に懸濁し、130℃で8時間加熱撹拌した。反応終了後、水を加え沈殿を濾別、メタノールで洗浄した。得られた固体をカラムクロマトグラフィで精製し黄色固体 (2.40 g、収率80%) を得た。得られた固体は目的物である中間体29であり、マスペクトル分析の結果、分子量700.8に対し、 $m/e = 701$ であった。

【0349】

中間体30の合成

アルゴン雰囲気下、中間体29 (2.35 g、3.35 mmol) をテトラヒドロフラン (300 mL) に溶解し、0℃で1Mフェニルマグネシウムブロミド/THF溶液 (30 mL、30 mmol) を滴下した。滴下終了後、室温まで昇温し5時間撹拌した。反応終了後、水を加え酢酸エチルで抽出した。有機層を濃縮し、得られた固体をカラムクロマトグラフィで精製して黄色固体 (2.10 g、収率68%) を得た。得られた固体は目的物である中間体30であり、マスペクトル分析の結果、分子量921.1に対し、 $m/e = 922$ であった。

【0350】

BD-12の合成

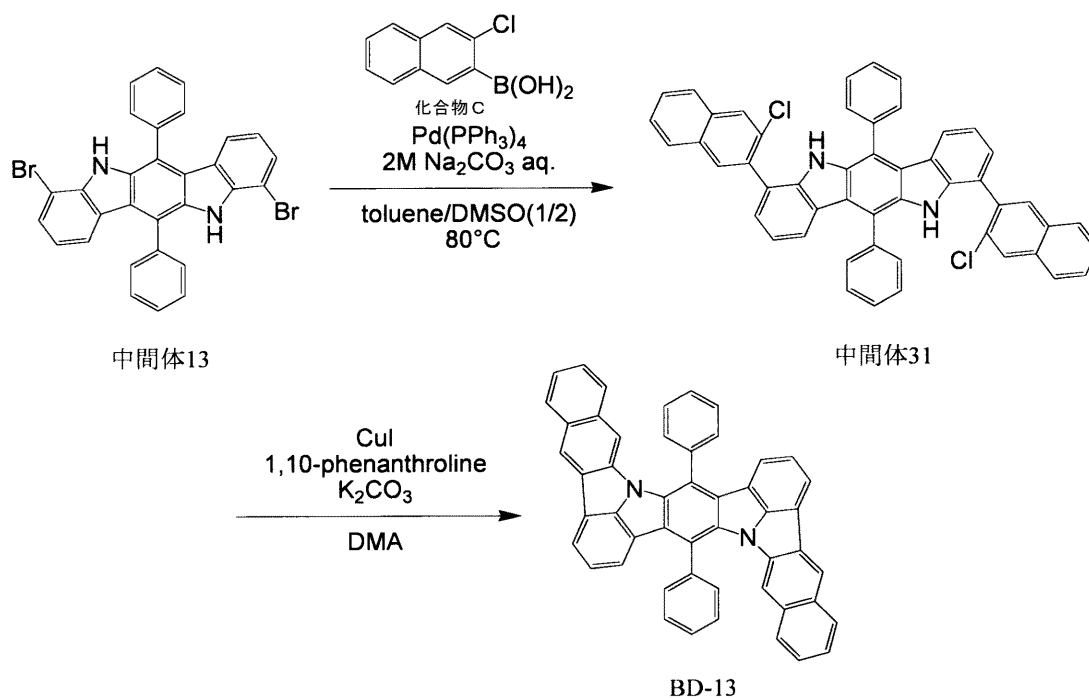
中間体30 (2.00 g、2.17 mmol) に酢酸 (50 mL) と濃塩酸 (3 mL) を加え100℃で6時間加熱撹拌した。反応終了後、水を加え固体を濾別した。得られた固体をカラムクロマトグラフィで精製して黄色固体 (0.82 g、収率43%) を得た。得られた固体は目的物であるBD-12であり、マスペクトル分析の結果、分子量885.1に対し、 $m/e = 886$ であった。

【0351】

実施例2-12

下記合成経路で、BD-13を合成した。

【化133】



【0352】

中間体31の合成

アルゴン雰囲気下、ジブromo体中間体13 (500 mg、0.88 mmol)、ボロン酸化合物C (380 mg、1.85 mmol)、 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (40 mg、0.035 mmol) をトルエン (5 mL) とジメチルスルホキシド (10 mL) に溶解し、こ

れに 2 M の Na_2CO_3 (2 mL) を加え 80 °C で 6 時間加熱撹拌した。反応終了後、ショートパスシリカゲルカラムクロマトグラフィを通し、溶媒を濃縮した。得られた残渣を酢酸エチルとトルエンで洗浄して黄色固体 (320 mg、収率 50 %) を得た。得られた固体は目的物である中間体 31 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 729.7 に対し、 $m/e = 730$ であった。

【0353】

BD-13 の合成

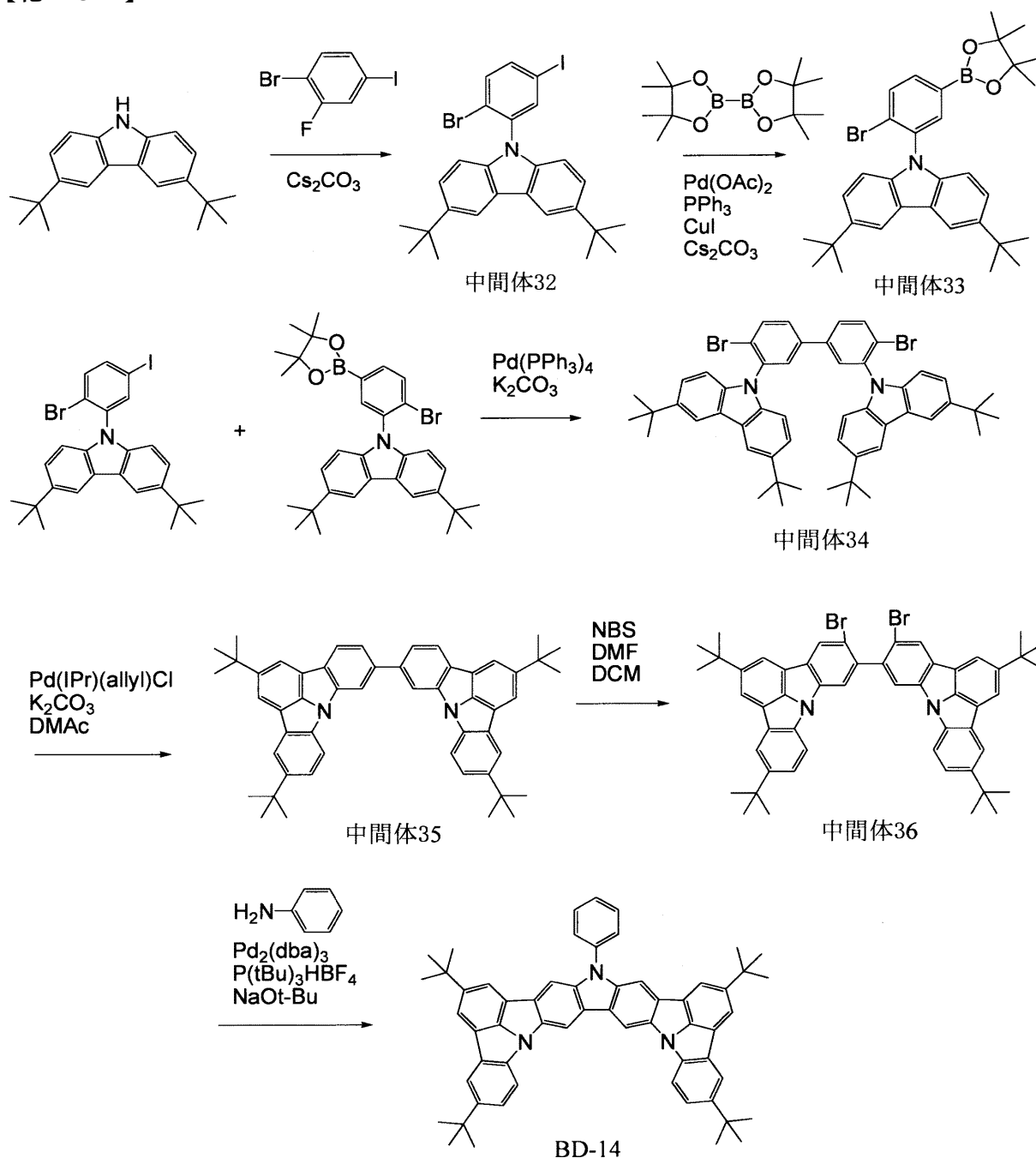
アルゴン雰囲気下、中間体 31 (300 mg、0.411 mmol)、ヨウ化銅 (I) (94 mg、0.49 mmol)、1,10-フェナントロリン (89 mg、0.49 mmol)、炭酸カリウム (450 mg、3.29 mmol) を N,N-ジメチルアセトアミド (20 mL) に懸濁し、15 時間 120 °C で加熱撹拌した。反応終了後、ショートパスシリカゲルカラムクロマトグラフィを通し、溶媒を濃縮した。得られた残渣をトルエンとメタノールで洗浄し、カラムクロマトグラフィで精製し黄色固体 (148 mg、収率 55 %) を得た。得られた固体は目的物である BD-13 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 656.8 に対し、 $m/e = 657$ であった。

【0354】

実施例 2-13

下記合成経路で、BD-14 を合成した。

【化 1 3 4】



【0 3 5 5】

中間体 3 2 の合成

3, 6-ジ-*tert*-ブチル-9H-カルバゾール (11.6 g、41.5 mmol) と 1-ブロモ-2-フルオロ-4-ヨードベンゼン (25 g、83 mmol) と炭酸セシウム (27 g、83 mmol) を *N,N*-ジメチルホルムアミド (145 mL) に懸濁させ、150℃で22時間加熱攪拌した。反応終了後、水を加え、固体を濾別した。この固体をカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 (21.5 g、収率92%) を得た。得られた固体は目的物である中間体 3 2 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 560.3 に対し、 $m/e = 561$ であった。

【0 3 5 6】

中間体 3 3 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 3 2 (5.00 g、8.92 mmol)、ビス(ピナコラト)ジボロン (3.40 g、13.4 mmol)、酢酸パラジウム (40 mg、0.18 mmol)、トリフェニルホスフィン (50 mg、0.19 mmol)、ヨウ化銅 (0.3

4 g、1.79 mmol)、炭酸セシウム (4.4 g、13.5 mmol) をアセトニトリル (50 mL) に懸濁させ、室温で20時間攪拌した。反応終了後、セライトろ過し、溶媒を濃縮した。得られた固体をカラムクロマトグラフィーで精製し白色固体 (3.84 g、収率77%) を得た。得られた固体は目的物である中間体33であり、マスペクトル分析の結果、分子量560.4に対し、 $m/e = 561$ であった。

【0357】

中間体34の合成

アルゴン雰囲気下、ヨウ素中間体32 (3.49 g、6.23 mmol)、ボロン酸中間体33 (3.84 g、6.85 mmol)、 $Pd(PPh_3)_4$ (360 mg、0.312 mmol)、炭酸カリウム (2.60 g、18.8 mmol) をテトラヒドロフラン (90 mL) と水 (20 mL) に溶解し、80℃で10時間加熱攪拌した。反応終了後、塩化メチレンで抽出し、有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させた。固体をろ過で除き、溶媒を留去して得られた残渣をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色固体 (5.33 g、収率99%) を得た。得られた固体は目的物である中間体34であり、マスペクトル分析の結果、分子量866.8に対し、 $m/e = 867$ であった。

【0358】

中間体35の合成

アルゴン雰囲気下、中間体34 (5.33 g、6.15 mmol)、アリル [1,3-ビス (2,6-ジイソプロピルフェニル) イミダゾール-2-イリデン] クロロパラジウム (140 mg、0.245 mmol)、炭酸カリウム (3.40 g、24.6 mmol) をN,N-ジメチルアセトアミド (30 mL) に懸濁させ、130℃で11時間加熱攪拌した。反応終了後、水を加え固体を濾別した。得られた固体をカラムクロマトグラフィーで精製し、黄色固体 (3.0 g、収率69%) を得た。得られた固体は目的物である中間体35であり、マスペクトル分析の結果、分子量705.0に対し、 $m/e = 706$ であった。

【0359】

中間体36の合成

中間体35 (3.00 g、4.26 mmol) をN,N-ジメチルホルムアミド (50 mL) と塩化メチレン (150 mL) に溶解させ、攪拌しながらN-プロモスクシンイミド (1.67 g、9.38 mmol) を加え、室温で11時間攪拌した。反応終了後、塩化メチレンを留去し、残った有機層に水を加え、沈殿を濾別した。この固体をカラムクロマトグラフィーで精製し、白色固体 (3.51 g、収率95%) を得た。得られた固体は目的物である中間体36であり、マスペクトル分析の結果、分子量862.8に対し、 $m/e = 863$ であった。

【0360】

BD-14の合成

アルゴン雰囲気下、中間体36 (3.50 g、4.06 mmol)、 $Pd_2(dba)_3$ (190 mg、0.207 mmol)、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート (240 mg、0.828 mmol)、ナトリウムtert-ブトキシド (1.56 g、16.3 mmol) をトルエン (40 mL) に懸濁させ、アニリン (0.37 mL、4.1 mmol) を加えた。80℃で22時間加熱攪拌した。反応終了後、析出した固体をろ過し、トルエン、メタノールで洗浄した結果、黄色固体 (2.46 g、収率76%) を得た。得られた固体は目的物であるBD-14であり、マスペクトル分析の結果、分子量794.1に対し、 $m/e = 795$ であった。

【0361】

上記に本発明の実施形態及び／又は実施例を幾つか詳細に説明したが、当業者は、本発明の新規な教示及び効果から実質的に離れることなく、これら例示である実施形態及び／又は実施例に多くの変更を加えることが容易である。従って、これらの多くの変更は本発明の範囲に含まれる。

この明細書に記載の文献、及び本願のパリ条約による優先権の基礎となる出願の内容を

10

20

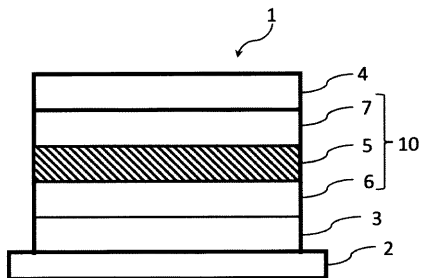
30

40

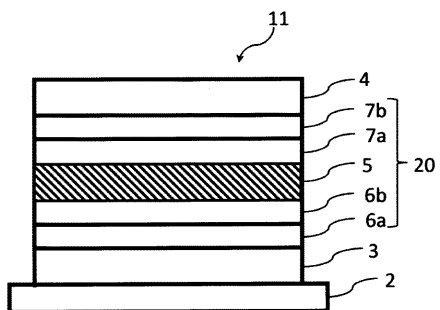
50

全て援用する。

【図 1】



【図 2】



【手続補正書】

【提出日】 令和1年7月18日(2019.7.18)

【手続補正1】

【補正対象書類名】 特許請求の範囲

【補正対象項目名】 全文

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

陰極と、

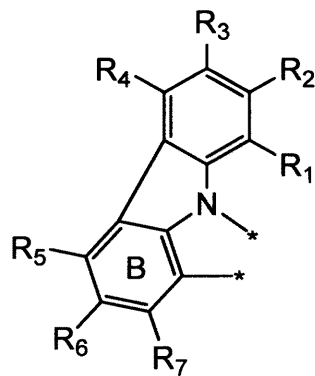
陽極と、

前記陰極と前記陽極との間に配置された少なくとも1層の有機層と、
を有し、

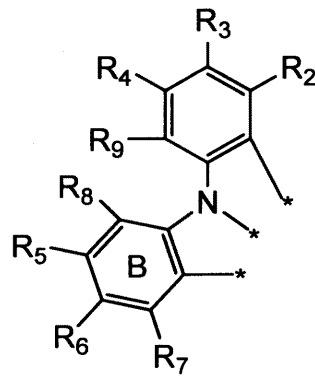
前記少なくとも1層の有機層のうちの少なくとも1層が、

下記式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は下記式(1-2)及び(1-3)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。

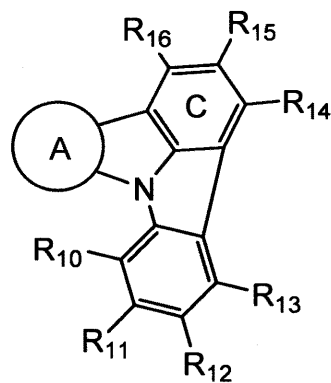
【化135】



(1-1)



(1-2)



(1-3)

(前記式(1-1)、前記式(1-2)及び前記式(1-3)中、

環Aは、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環、置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環、又は下記式(2)で表されるベンゼン環である。

前記式(1-1)の2つの結合手*は、それぞれ、前記環Aの前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

前記式(1-2)の3つの結合手*は、それぞれ、前記環Aの前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式(2)で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

R₁～R₁₆のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

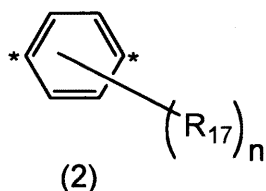
前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないR₁～R₁₆は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、—Si(R₃

1) (R_{32}) (R_{33})、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよく、異なってもよい。) 10

【化136】



(前記式(2)中、

2つの*の環形成炭素原子の一方で、前記式(1-1)又は前記式(1-2)のベンゼン環Bから延びる結合手が結合し、他方で前記式(1-3)のベンゼン環Cから延びる結合手が結合する。 20

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})$ 30

(R_{37})、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。 30

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

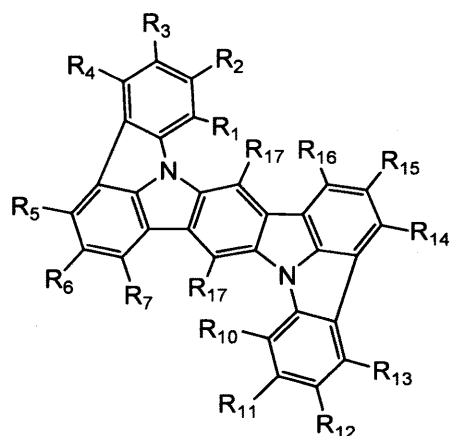
$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

n は1又は2の整数である。 n が2である場合、2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。) 40

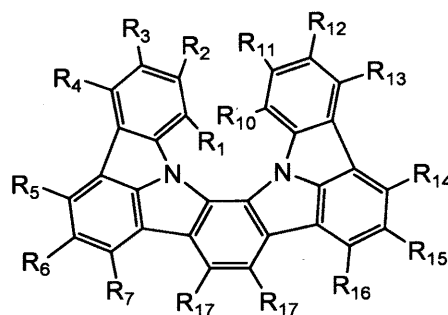
【請求項2】

前記式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は前記式(1-2)及び(1-3)で表される化合物が、下記式(3)、式(4)又は式(5)で表される化合物である請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

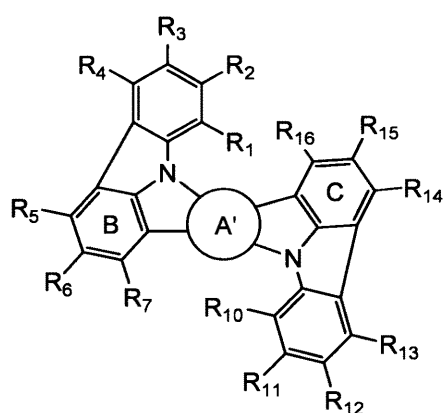
【化 1 3 7】



(3)



(4)



(5)

(前記式(3)、前記式(4)及び前記式(5)中、

環A'は、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環である。

R₁～R₇及びR₁₀～R₁₇は、前記式(1-1)、前記式(1-2)、前記式(1-3)及び前記式(2)で定義した通りである。)

【請求項3】

前記置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環が、置換もしくは無置換のナフタレン環、置換もしくは無置換のアントラセン環、又は置換もしくは無置換のフルオレン環であり、前記置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環が、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である請求項1又は2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

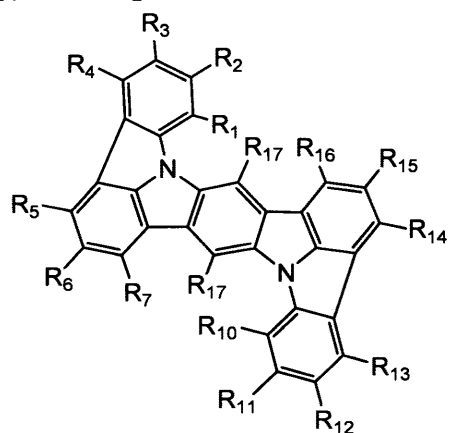
【請求項4】

前記置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環が、置換もしくは無置換のナフタレン環、又は置換もしくは無置換のフルオレン環であり、前記置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環が、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である請求項1～3のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

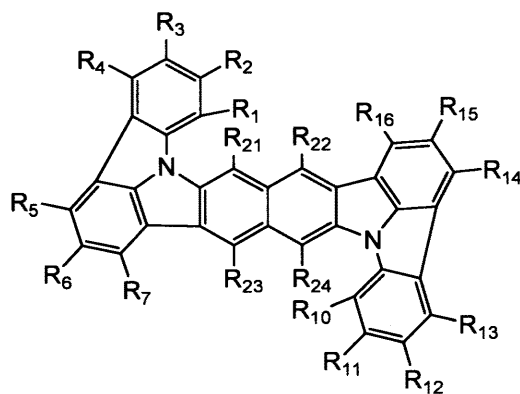
【請求項5】

前記式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は前記式(1-2)及び(1-3)で表される化合物が、下記式(6-1)～式(6-6)で表される化合物からなる群から選択される請求項1～4のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

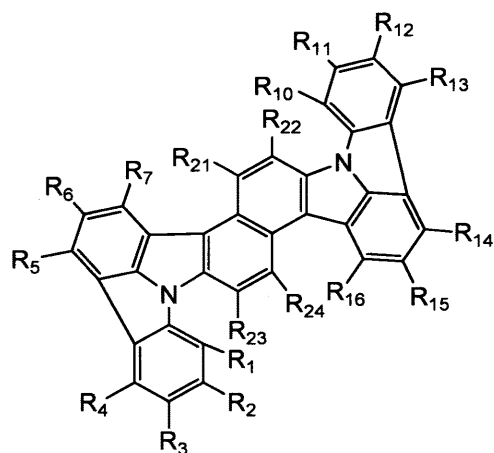
【化 1 3 8】



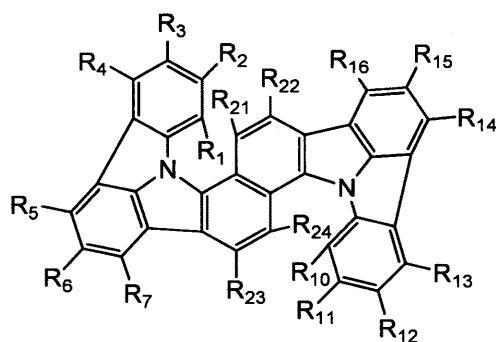
(6-1)



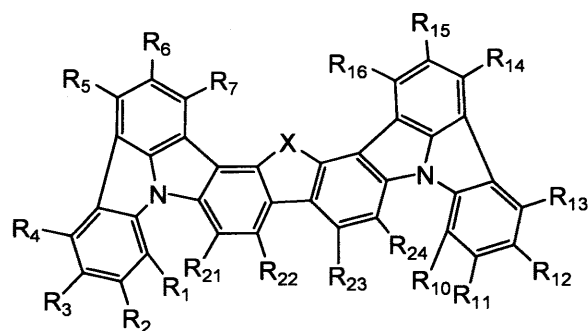
(6-2)



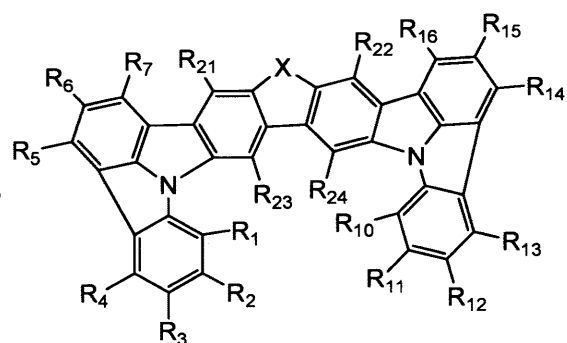
(6-3)



(6-4)



(6-5)



(6-6)

(前記式 (6-1) ~ (6-6) 中、

$R_1 \sim R_{17}$ は、前記式 (1-1)、前記式 (1-2)、前記式 (1-3) 及び前記式 (2) で定義した通りである。

X は、 O 、 NR_{25} 、又は $C(R_{26})(R_{27})$ である。

$R_{21} \sim R_{27}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{21} \sim R_{27}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアル

コキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

10

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項 6】

$\text{R}_1 \sim \text{R}_{17}$ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、及び置換もしくは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請求項 1～5 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 7】

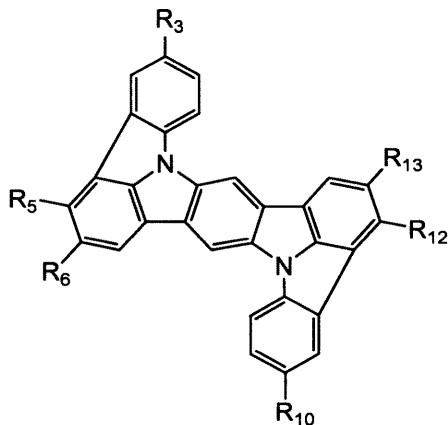
$\text{R}_1 \sim \text{R}_{17}$ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5～18 の複素環基からなる群から選択される請求項 1～6 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【請求項 8】

前記式 (1-1) 及び (1-3) で表される化合物、又は前記式 (1-2) 及び (1-3) で表される化合物が、下記式 (3-2) で表される化合物である請求項 1～7 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 139】



(3-2)

(前記式 (3-2) 中、 R_3 、 R_5 、 R_6 、 R_{10} 、 R_{12} 及び R_{13} は、前記式 (1-1) 及び前記式 (1-3) で定義した通りである。)

40

【請求項 9】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～50 のアルキル基、炭素数 1～50 のハロアルキル基、炭素数 2～50 のアルケニル基、炭素数 2～50 のアルキニル基、環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、炭素数 1～50 のアルコキシ基、炭素数 1～50 のアルキルチオ基、環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{41})$

$(\text{R}_{42})(\text{R}_{43})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{44}$ 、 $-\text{COOR}_{45}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}_{46}$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}_{47})(\text{R}_{48})$ 、 $-\text{Ge}(\text{R}_{49})(\text{R}_{50})(\text{R}_{51})$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{52})(\text{R}_{53})$ (ここで、 $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数 1～

50

50のアルキル基、環形成炭素数6～50のアリール基、又は環形成原子数5～50の1価の複素環基である。R₄₁～R₅₃が2以上存在する場合、2以上のR₄₁～R₅₃のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。）、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、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1価の複素環基からなる群から選択される、請求項1～8のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項10】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、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、又は環形成原子数5～50の1価の複素環基である請求項1～9のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

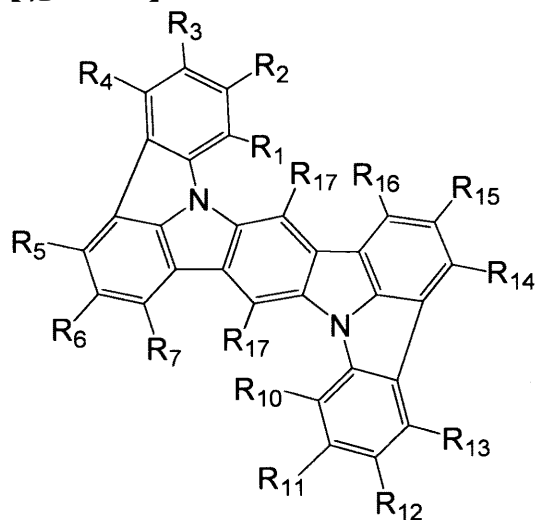
【請求項11】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、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、又は環形成原子数5～18の1価の複素環基である請求項1～10のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項12】

前記式(1-1)及び(1-3)で表される化合物、又は前記式(1-2)及び(1-3)で表される化合物が、下記式(3-11)で表される化合物である請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化140】



(3-11)

(前記式(3-11)中、

R₁～R₇及びR₁₀～R₁₆のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないR₁～R₇及びR₁₀～R₁₆は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、-Si(R₃₁)(R₃₂)(R₃₃)、-C(=O)R₃₄、-COOR₃₅、-N(R₃₆)(R₃₇)、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。但し、R₁～R₇及びR₁₀～R₁₆の少なくとも1つは-N(R

40

50

36) (R_{37})である。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})$

(R_{37})、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

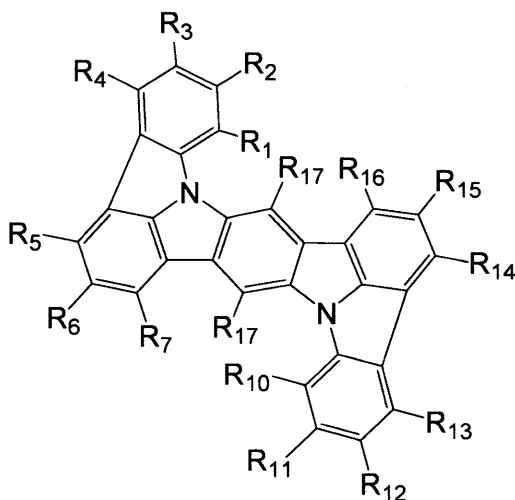
$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項13】

前記式(3-11)で表される化合物が、下記式(3-12)で表される化合物である請求項12に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化141】



(3-12)

(前記式(3-12)中、

$R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-$

$N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。但し、 $R_1 \sim R_7$ 及び $R_{10} \sim R_{16}$ のいずれか2つは $-N(R_{36})(R_{37})$ である。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

10

2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

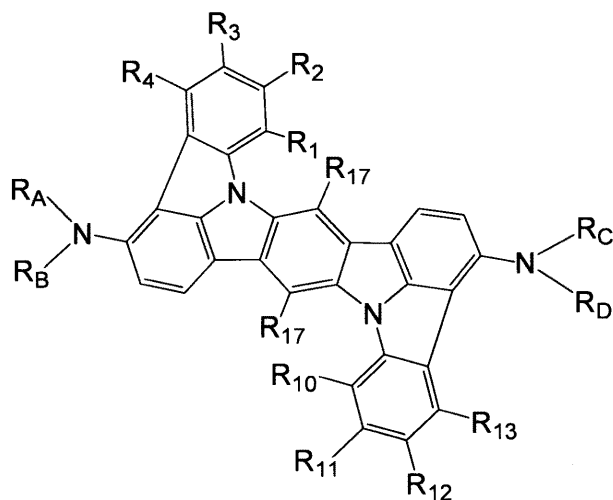
20

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項14】

前記式(3-11)で表される化合物が、下記式(3-13)で表される化合物である請求項12又は13に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化142】



(3-13)

(前記式(3-13)中、

$R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ 、並びに R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～18の1価の複素環基である。2つの R_{17} は互いに同じであってもよく、異なってもよい。

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～18のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～18の1価の複素環基

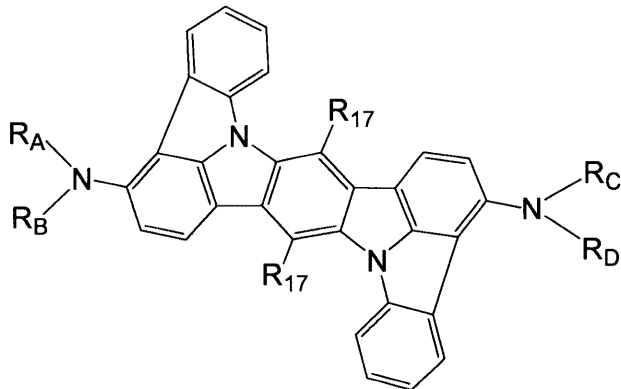
50

である。)

【請求項 15】

前記式 (3-13) で表される化合物が、下記式 (3-14) で表される化合物である請求項 14 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 143】



(3-14)

(前記式 (3-14) 中、 R_{17} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、前記式 (3-13) で定義した通りである。)

20

【請求項 16】

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基である請求項 14 又は 15 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 17】

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である請求項 14 ~ 16 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 18】

前記 2 つの R_{17} が、それぞれ水素原子である請求項 12 ~ 17 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【請求項 19】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、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 1 価の複素環基からなる群から選択される、請求項 12 ~ 18 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 20】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1 ~ 5 のアルキル基である請求項 12 ~ 19 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 21】

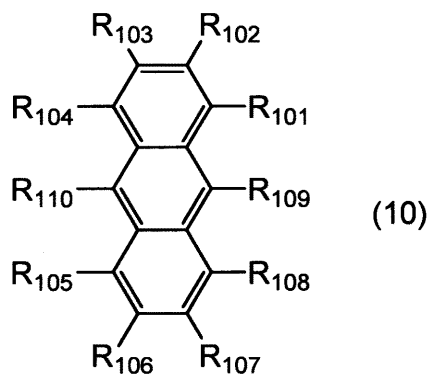
前記少なくとも 1 層の有機層のうちの少なくとも 1 層が発光層である請求項 1 ~ 20 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 22】

前記発光層が、さらに下記式 (10) で表される化合物を含む請求項 21 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 4 4】



〔式 (10) 中、

$R_{101} \sim R_{110}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

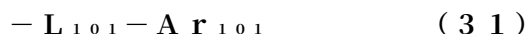
前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{101} \sim R_{110}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{121})(R_{122})(R_{123})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{124}$ 、 $-\text{COOR}_{125}$ 、 $-\text{N}(R_{126})(R_{127})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基、又は下記式(31)で表される基である。

20

$R_{121} \sim R_{127}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。 $R_{121} \sim R_{127}$ が2以上存在する場合、2以上の $R_{121} \sim R_{127}$ のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。

30

但し、前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{101} \sim R_{110}$ の少なくとも1つは、下記式(31)で表される基である。下記式(31)が2以上存在する場合、2以上の下記式(31)で表される基のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。



(式(31)中、

L_{101} は、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の2価の複素環基である。

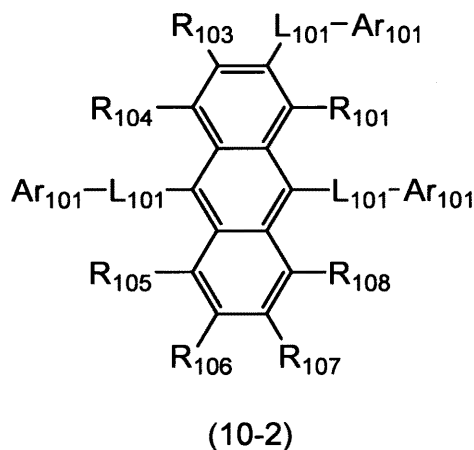
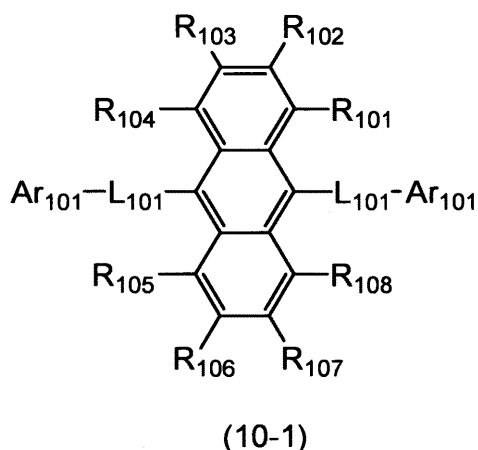
Ar_{101} は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。)

40

【請求項23】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-1)又は(10-2)で表される請求項22に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 4 5】



(式(10-1)中、 $R_{101} \sim R_{108}$ 、 L_{101} 及び Ar_{101} は、前記式(10)で定義した通りである。

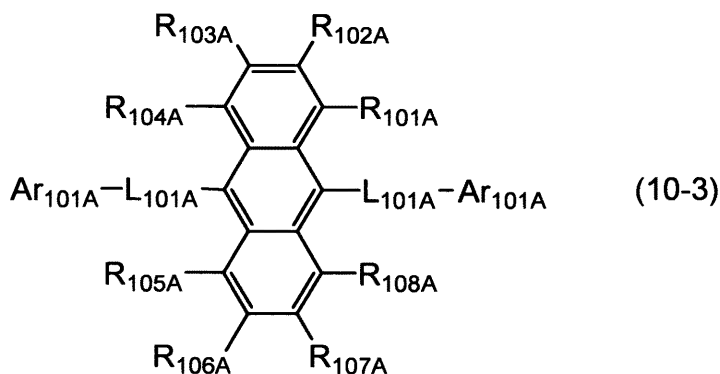
式(10-2)中、 R_{101} 、 $R_{103} \sim R_{108}$ 、 L_{101} 及び Ar_{101} は、前記式(10)で定義した通りである。)

【請求項 2 4】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-3)で表される請求項 2 2 又は 2 3 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【化 1 4 6】



(式(10-3)中、

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

L_{101A} は、単結合、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基である。2つの L_{101A} は、同一でもよく、異なってもよい。

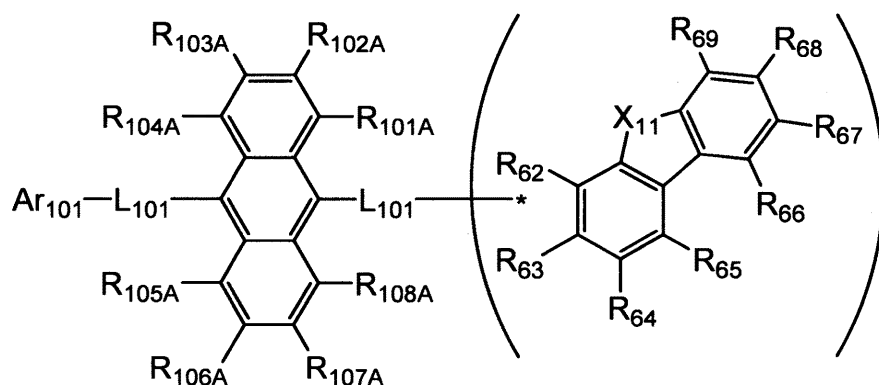
Ar_{101A} は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。2つの Ar_{101A} は、同一でもよく、異なってもよい。)

【請求項 2 5】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-4)で表される請求項 2 2 又は 2 3 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【化 1 4 7】



(10-4)

(式 (10-4) 中、

L₁₀₁ 及び A r₁₀₁ は、前記式 (10) で定義した通りである。R_{101A} ~ R_{108A} は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。X₁₁ は、O、S、又は N (R₆₁) である。

20

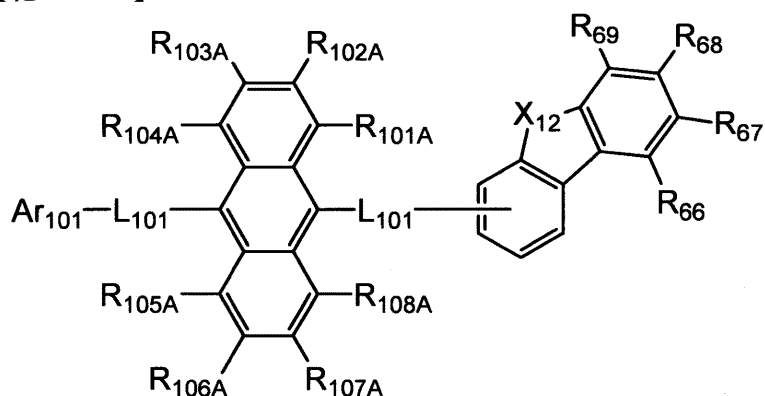
R₆₁ は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。R₆₂ ~ R₆₉ の 1 つは、L₁₀₁ と結合する結合手である。L₁₀₁ と結合しない R₆₂ ~ R₆₉ のうちの隣接する 2 つ以上の 1 組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。L₁₀₁ と結合せず、かつ前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない R₆₂ ~ R₆₉ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。)

【請求項 2 6】

前記式 (10) で表される化合物が、下記式 (10-6) で表される請求項 2 5 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【化 1 4 8】



(10-6)

(式 (10-6) 中、

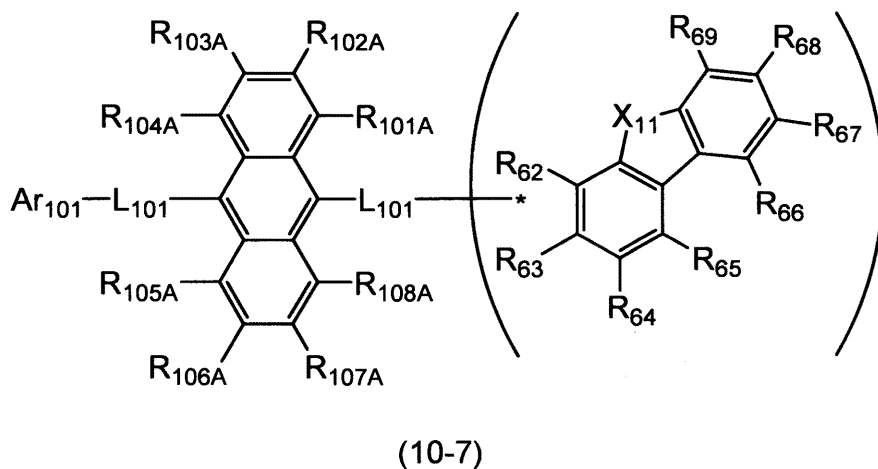
L₁₀₁ 及び A r₁₀₁ は、前記式 (10) で定義した通りである。R_{101A} ~ R_{108A} は、前記式 (10-4) で定義した通りである。R₆₆ ~ R₆₉ は、前記式 (10-4) で定義した通りである。X₁₂ は、O 又は S である。)

50

【請求項 27】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-7)で表される請求項25に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化149】



(式(10-7)中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、式(10)で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。

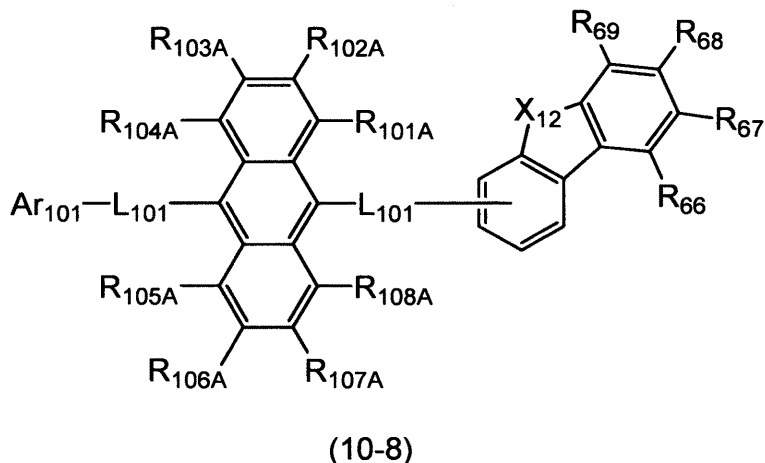
X_{11} は、前記式(10-4)で定義した通りである。

$R_{62} \sim R_{69}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。但し、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、並びに R_{68} 及び R_{69} のいずれか1組は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。)

【請求項 28】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-8)で表される請求項25～27のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化150】



(式(10-8)中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、式(10)で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。

X_{12} は、O又はSである。

$R_{66} \sim R_{69}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。但し、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、又は R_{68} 及び R_{69} のいずれか1組は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。)

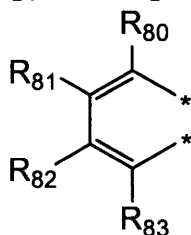
【請求項 29】

R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、又は R_{68} 及び R_{69} のいずれか1組が、互い

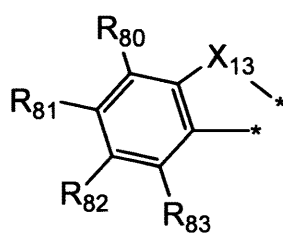
に結合して、下記式(10-8-1)又は(10-8-2)で表される環を形成し、

前記式(10-8-1)又は(10-8-2)で表される環を形成しない $R_{66} \sim R_{69}$ は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない、請求項27又は28に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化151】



(10-8-1)



(10-8-2)

(式(10-8-1)及び(10-8-2)中、

2つの結合手*は、それぞれ、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、又は R_{68} 及び R_{69} の1組と結合する。

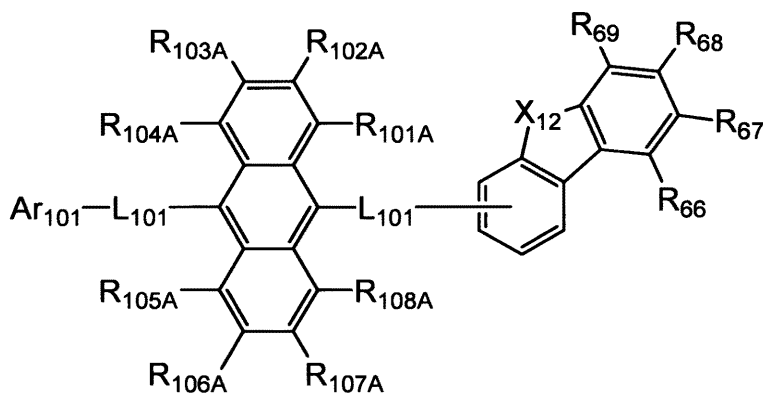
$R_{80} \sim R_{83}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である。

X_{13} は、O又はSである。)

【請求項30】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-9)で表される請求項25又は26に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化152】



(10-9)

(式(10-9)中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、式(10)で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。

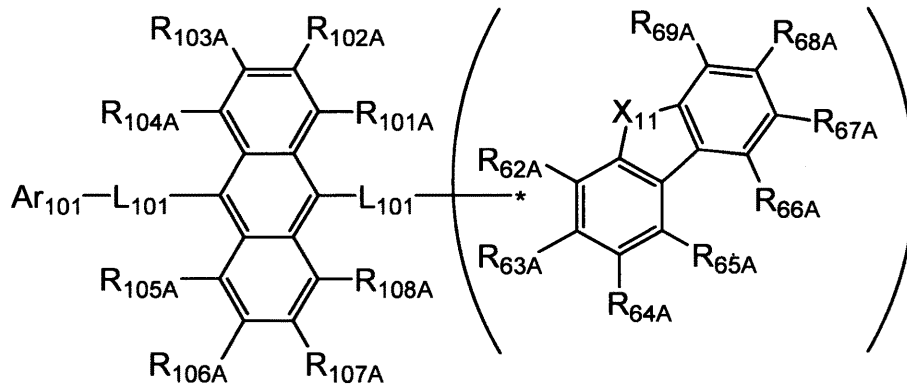
$R_{66} \sim R_{69}$ は、前記式(10-4)で定義した通りである。但し、 R_{66} 及び R_{67} 、 R_{67} 及び R_{68} 、並びに R_{69} 及び R_{67} は、いずれも互いに結合せず、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

X_{12} は、O又はSである。)

【請求項31】

前記式(10)で表される化合物が、下記式(10-4A)で表される請求項22又は23に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 5 3】



(10-4A)

(式 (10-4A) 中、

L_{101} 及び Ar_{101} は、前記式 (10) で定義した通りである。

$R_{101A} \sim R_{108A}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

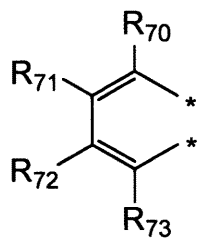
X_{11} は、O、S、又は N (R_{61}) である。

R_{61} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。

$R_{62A} \sim R_{69A}$ のうちの隣接する 2 つ以上の 1 組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよく、 $R_{62A} \sim R_{69A}$ のうちの隣接する 2 つは、下記式 (10-4A-1) で表される環を形成する。

置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{62A} \sim R_{69A}$ 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、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。)

【化 1 5 4】



(10-4A-1)

(式 (10-4A-1) 中、

2 つの結合手*のそれぞれは、 $R_{62A} \sim R_{69A}$ のうちの隣接する 2 つと結合する。

$R_{70} \sim R_{73}$ の 1 つは、 L_{101} と結合する結合手である。

L_{101} と結合しない $R_{70} \sim R_{73}$ 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、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である。)

【請求項 3 2】

前記陽極と前記発光層との間に正孔輸送層を有する請求項 2 1 ～ 3 1 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 3 3】

前記陰極と前記発光層との間に電子輸送層を有する請求項 2 1 ～ 3 2 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

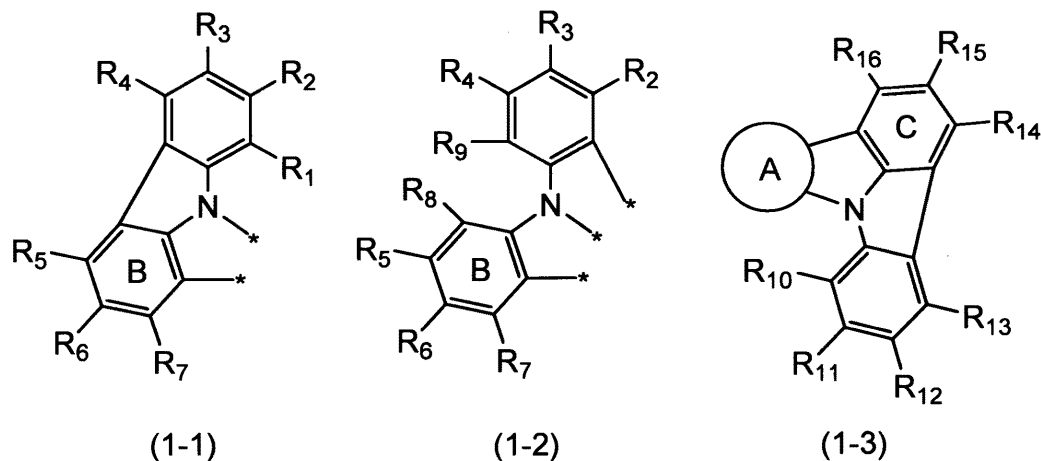
【請求項 3 4】

請求項 1～3 3 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器。

【請求項 3 5】

下記式（1-1）及び（1-3）で表される化合物、又は下記式（1-2）及び（1-3）で表される化合物。

【化 1 5 5】



（前記式（1-1）、前記式（1-2）及び前記式（1-3）中、

環 A は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10～50 の縮合アリール環、置換もしくは無置換の環形成原子数 8～50 の縮合複素環、又は下記式（2）で表されるベンゼン環である。

前記式（1-1）の 2 つの結合手*は、それぞれ、前記環 A の前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式（2）で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

前記式（1-2）の 3 つの結合手*は、それぞれ、前記環 A の前記縮合アリール環の環形成炭素原子、前記縮合複素環の環形成原子、又は前記式（2）で表されるベンゼン環の環形成炭素原子と結合する。

$R_1 \sim R_{16}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

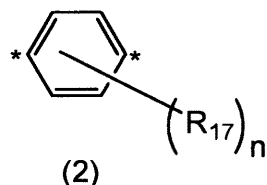
前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})R_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

但し、前記環Aが前記式(2)で表されるベンゼン環である場合には、 R_{17} のうち少なくとも1つは、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である；又は、 R_{17} のうち隣接する2つ以上の少なくとも1組が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。)

【化156】



(前記式(2)中、

2つの*の環形成炭素原子の一方で、前記式(1-1)又は前記式(1-2)のベンゼン環Bから延びる結合手が結合し、他方で前記式(1-3)のベンゼン環Cから延びる結合手が結合する。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})$

20

(R_{37})、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{31} \sim R_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

30

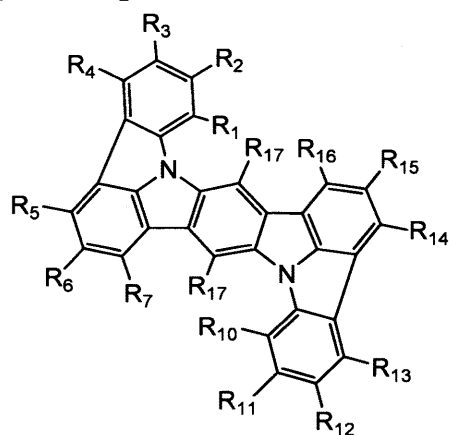
$R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $R_{31} \sim R_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

n は1又は2の整数である。 n が2である場合、2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。)

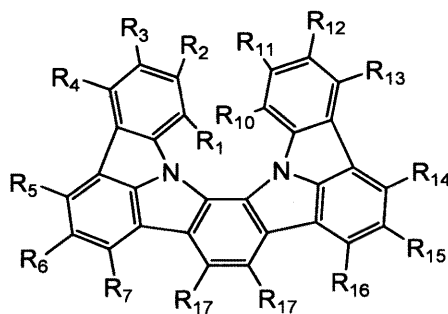
【請求項36】

下記式(3)、式(4)又は式(5)で表される請求項35に記載の化合物。

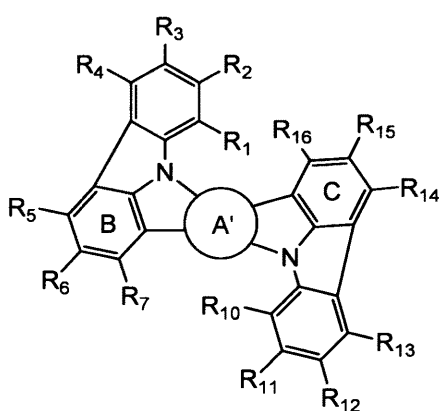
【化 1 5 7】



(3)



(4)



(5)

(前記式(3)、前記式(4)及び前記式(5)中、

環A'は、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環である。

30

R₁～R₇及びR₁₀～R₁₇は、前記式(1-1)、前記式(1-2)、前記式(1-3)及び前記式(2)で定義した通りである。)

【請求項37】

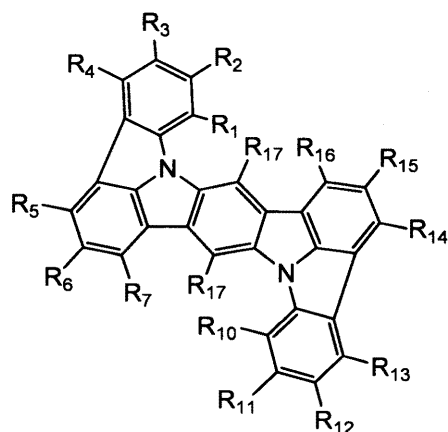
前記置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール環が、置換もしくは無置換のナフタレン環又は置換もしくは無置換のフルオレン環であり、前記置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合複素環が、置換もしくは無置換のジベンゾフラン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環、又は置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環である請求項35又は36に記載の化合物。

【請求項38】

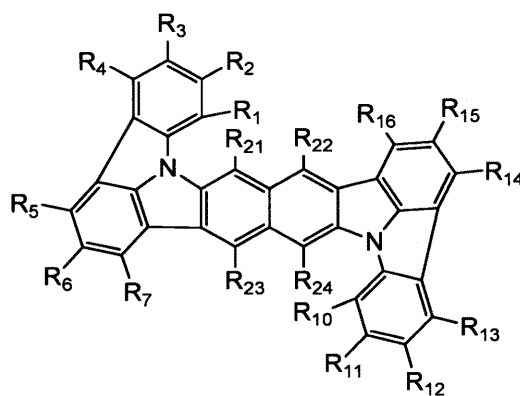
下記式(6-1)～式(6-6)で表される請求項35～37のいずれかに記載の化合物。

40

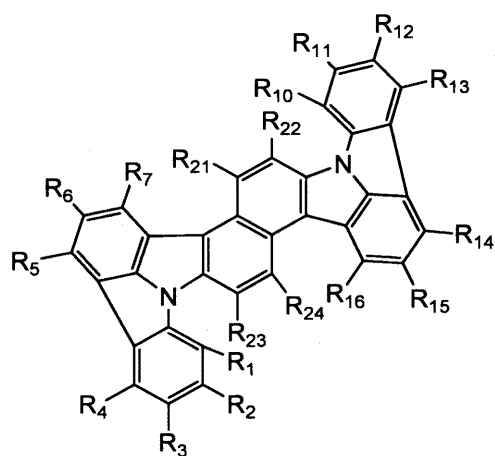
【化 1 5 8】



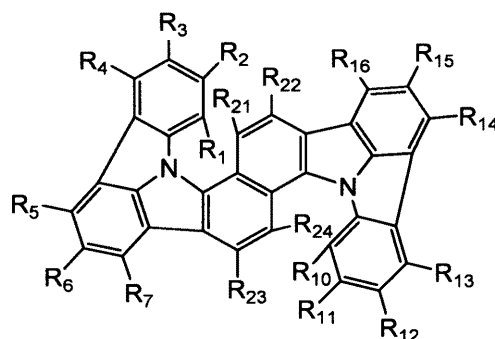
(6-1)



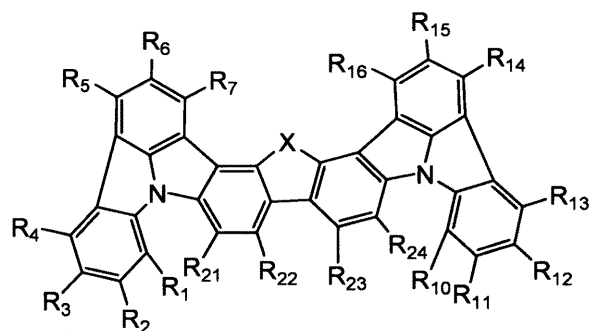
(6-2)



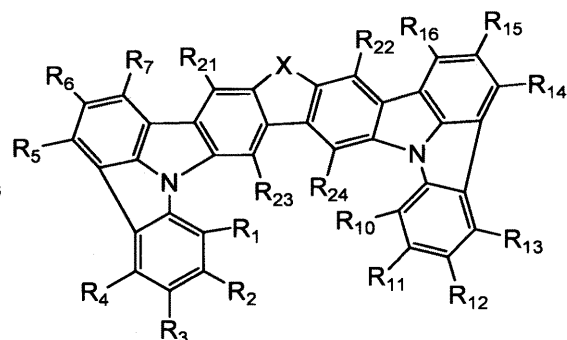
(6-3)



(6-4)



(6-5)



(6-6)

(前記式 (6-1) ~ (6-6) 中、

$R_1 \sim R_{17}$ は、前記式 (1-1)、前記式 (1-2)、前記式 (1-3) 及び前記式 (2) で定義した通りである。

X は、 O 、 NR_{25} 、又は $C(R_{26})(R_{27})$ である。

$R_{21} \sim R_{27}$ のうち隣接する2つ以上の1組以上は、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{21} \sim R_{27}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアル

コキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

10

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項 39】

$\text{R}_1 \sim \text{R}_{17}$ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、及び置換もしくは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請求項 35～38 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 40】

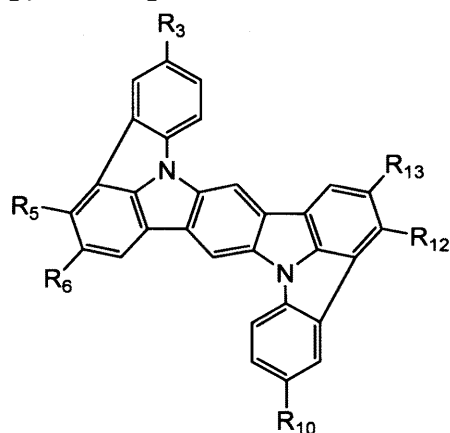
$\text{R}_1 \sim \text{R}_{17}$ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5～18 の複素環基からなる群から選択される請求項 35～39 のいずれかに記載の化合物。

20

【請求項 41】

下記式 (3-2) で表される請求項 35～40 のいずれかに記載の化合物。

【化 159】



(3-2)

(前記式 (3-2) 中、 R_3 、 R_5 、 R_6 、 R_{10} 、 R_{12} 及び R_{13} は、前記式 (1-1) 及び前記式 (1-3) で定義した通りである。)

【請求項 42】

40

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～50 のアルキル基、炭素数 1～50 のハロアルキル基、炭素数 2～50 のアルケニル基、炭素数 2～50 のアルキニル基、環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、炭素数 1～50 のアルコキシ基、炭素数 1～50 のアルキルチオ基、環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{41})$

$(\text{R}_{42})(\text{R}_{43})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{44}$ 、 $-\text{COOR}_{45}$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}_{46}$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}_{47})(\text{R}_{48})$ 、 $-\text{Ge}(\text{R}_{49})(\text{R}_{50})(\text{R}_{51})$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{52})(\text{R}_{53})$ (ここで、 $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ は、それぞれ独立に、水素原子、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、又は環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。 $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ が 2 以上存在する場合、2 以上の $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{53}$ の

50

それぞれは同一でもよく、異なってもよい。)、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、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1価の複素環基からなる群から選択される、請求項35～41のいずれかに記載の化合物。

【請求項43】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、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1価の複素環基からなる群から選択される、である請求項35～42のいずれかに記載の化合物。

【請求項44】

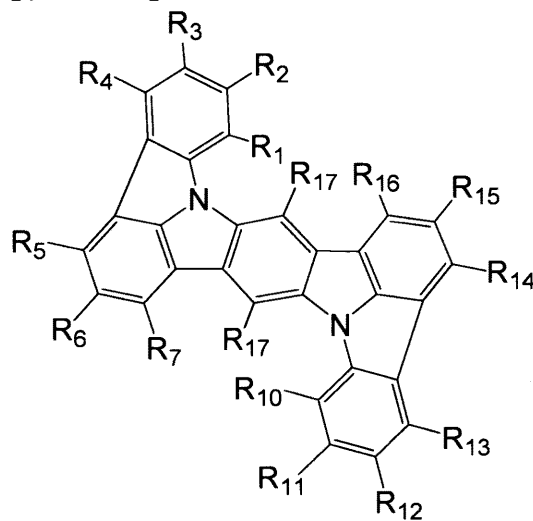
「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数1～18のアルキル基、環形成炭素数6～18のアリール基、及び環形成原子数5～18の1価の複素環基からなる群から選択される、請求項35～43のいずれかに記載の化合物。

10

【請求項45】

下記式(3-11)で表される化合物。

【化160】



(3-11)

(前記式(3-11)中、

R₁～R₇及びR₁₀～R₁₆のうち隣接する2つ以上の1組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しないR₁～R₇及びR₁₀～R₁₆は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、 $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$ 、 $-C(=O)R_{34}$ 、 $-COOR_{35}$ 、 $-N(R_{36})(R_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。但し、R₁～R₇及びR₁₀～R₁₆の少なくとも1つは $-N(R_{36})(R_{37})$ である。

40

R₁₇は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のア

50

ルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})$

(R_{37}) 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

2 つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

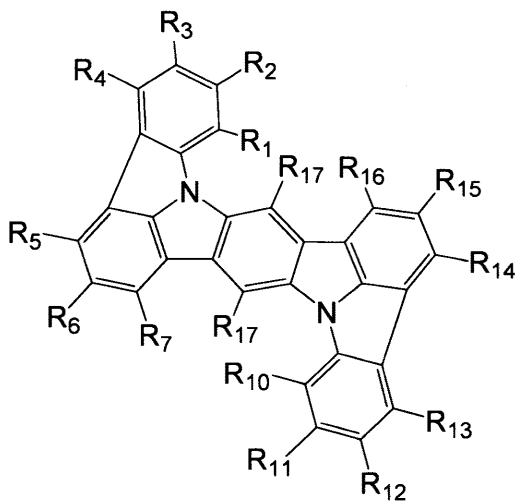
$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項 46】

下記式 (3-12) で表される請求項 45 に記載の化合物。

【化 161】



(3-12)

(前記式 (3-12) 中、

$\text{R}_1 \sim \text{R}_7$ 及び $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{16}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $\text{R}_1 \sim \text{R}_7$ 及び $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})(\text{R}_{37})$ 、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 1 価の複素環基である。但し、 $\text{R}_1 \sim \text{R}_7$ 及び $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{16}$ のいずれか 2 つは $-\text{N}(\text{R}_6)(\text{R}_{37})$ である。

R_{17} は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のア

10

40

50

ルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、 $-\text{Si}(\text{R}_{31})(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_{34}$ 、 $-\text{COOR}_{35}$ 、 $-\text{N}(\text{R}_{36})$

(R_{37})、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

2つの R_{17} は同じであってもよいし、異なってもよい。

10

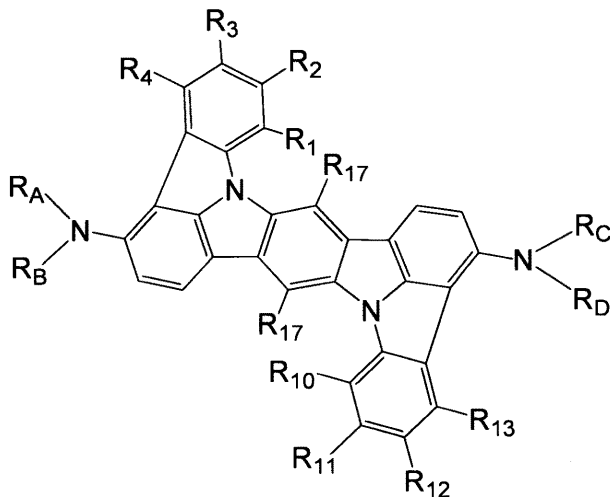
$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の 1 価の複素環基である。

$\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれが複数存在する場合、複数存在する $\text{R}_{31} \sim \text{R}_{37}$ のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

【請求項 47】

下記式 (3-13) で表される請求項 45 又は 46 に記載の化合物。

【化 162】



(3-13)

(前記式 (3-13) 中、

$\text{R}_1 \sim \text{R}_4$ 及び $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{13}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $\text{R}_1 \sim \text{R}_4$ 及び $\text{R}_{10} \sim \text{R}_{13}$ 、並びに R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～18 の 1 価の複素環基である。2つの R_{17} は互いに同じであってもよく、異なってもよい。

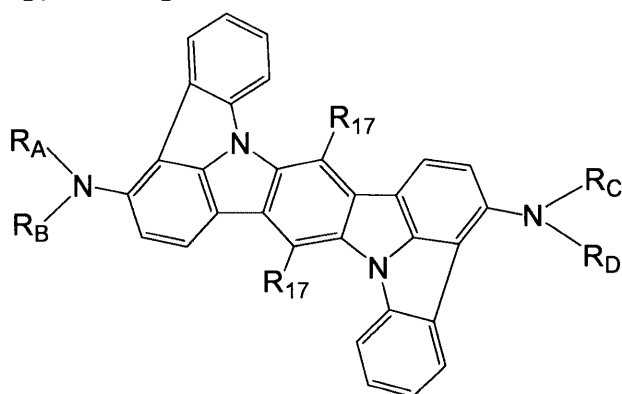
40

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～18 の 1 価の複素環基である。

【請求項 48】

下記式 (3-14) で表される請求項 47 に記載の化合物。

【化 1 6 3】



(3-14)

(前記式 (3-14) 中、 R_{17} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、前記式 (3-13) で定義した通りである。)

【請求項 49】

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～18 のアリール基である請求項 47 又は 48 に記載の化合物。

【請求項 50】

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である請求項 47～49 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 51】

前記 2 つの R_{17} が、それぞれ水素原子である請求項 45～50 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 52】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、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 1 価の複素環基からなる群から選択される、請求項 45～51 のいずれかに記載の化合物。

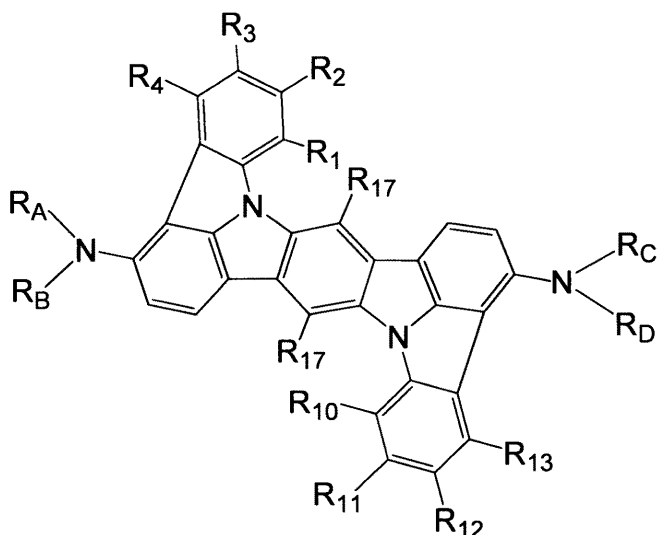
【請求項 53】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～5 のアルキル基である請求項 45～52 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 54】

下記式 (3-21) で表される請求項 45 に記載の化合物。

【化 1 6 4】



(3-21)

(前記式(3-21)中、

$R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成してもよい。

20

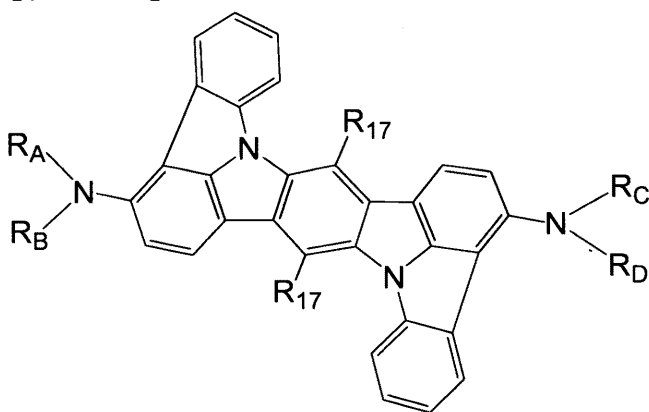
前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_1 \sim R_4$ 及び $R_{10} \sim R_{13}$ 、並びに R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 20 の 1 価の複素環基である。2 つの R_{17} は互いに同じであってもよく、異なってもよい。

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基である。)

【請求項 5 5】

下記式(3-22)で表される請求項 5 4 に記載の化合物。

【化 1 6 5】



(3-22)

(前記式(3-22)中、 R_{17} 、 R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D は、前記式(3-21)で定義した通りである。)

【請求項 5 6】

R_A 、 R_B 、 R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基である請求項 5 4 又は 5 5 に記載の化合物。

【請求項 5 7】

前記 2 つの R_{17} が、それぞれ水素原子である請求項 5 4 ～ 5 6 のいずれかに記載の化合物。

50

【請求項 58】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～20 のアルキル基、環形成炭素数 6～20 のアリール基、及び環形成原子数 5～20 の 1 価の複素環基からなる群から選択される、請求項 54～57 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 59】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～5 のアルキル基である請求項 54～58 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 60】

R_A、R_B、R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、

前記 2 つの R₁₇ が、それぞれ水素原子である請求項 54～59 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 61】

R_A、R_B、R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、

前記 2 つの R₁₇ が、それぞれ水素原子であり、

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～20 のアルキル基、環形成炭素数 6～20 のアリール基、及び環形成原子数 5～20 の 1 価の複素環基からなる群から選択される、請求項 54～60 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 62】

R_A、R_B、R_C 及び R_D が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のフェニル基であり、

前記 2 つの R₁₇ が、それぞれ水素原子であり、

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、炭素数 1～5 のアルキル基である請求項 54～61 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 63】

請求項 35～62 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。

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/JP2018/044792									
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER Int.Cl. H01L51/50(2006.01)i, C07D487/22(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, G09F9/30(2006.01)i, H01L27/32(2006.01)i According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC											
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) Int.Cl. H01L51/50, C07D487/22, C09K11/06, G09F9/30, H01L27/32 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2019 Registered utility model specifications of Japan 1996-2019 Published registered utility model applications of Japan 1994-2019 Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)											
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT <table border="1"> <thead> <tr> <th>Category*</th> <th>Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages</th> <th>Relevant to claim No.</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>X A</td> <td>JP 2015-153911 A (FUJIFILM CORP.) 24 August 2015, paragraph [0063] (Family: none)</td> <td>35, 37, 42-44 1-34, 36, 38-41, 45-63</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>KR 10-2017-0116983 A (LG CHEM, LTD.) 20 October 2017, claim 7 (Family: none)</td> <td>1-63</td> </tr> </tbody> </table>			Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.	X A	JP 2015-153911 A (FUJIFILM CORP.) 24 August 2015, paragraph [0063] (Family: none)	35, 37, 42-44 1-34, 36, 38-41, 45-63	A	KR 10-2017-0116983 A (LG CHEM, LTD.) 20 October 2017, claim 7 (Family: none)	1-63
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.									
X A	JP 2015-153911 A (FUJIFILM CORP.) 24 August 2015, paragraph [0063] (Family: none)	35, 37, 42-44 1-34, 36, 38-41, 45-63									
A	KR 10-2017-0116983 A (LG CHEM, LTD.) 20 October 2017, claim 7 (Family: none)	1-63									
☒ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☐ See patent family annex.											
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family											
Date of the actual completion of the international search 04 February 2019 (04.02.2019)		Date of mailing of the international search report 19 February 2019 (19.02.2019)									
Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan		Authorized officer Telephone No.									

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2018/044792

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2017/138755 A1 (LG CHEM, LTD.) 17 August 2017, entire text all drawings & CN 108602836 A & KR 10-2017-0094767 A	1-63
A	JP 2017-521525 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 30 August 2017, entire text all drawings & US 2017/0179406 A1, entire text all drawings & WO 2016/006925 A1 & KR 10-2016-0006617 A & CN 106536526 A	1-63
A	WO 2017/175690 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 12 October 2017, entire text all drawings & US 2017/0324045 A1, entire text all drawings & EP 3269720 A1 & KR 10-2017-0125046 A & CN 108026106 A	1-63

国際調査報告		国際出願番号 PCT/J P 2 0 1 8 / 0 4 4 7 9 2									
A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (I P C)) Int.Cl. H01L51/50(2006.01)i, C07D487/22(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, G09F9/30(2006.01)i, H01L27/32(2006.01)i											
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (I P C)) Int.Cl. H01L51/50, C07D487/22, C09K11/06, G09F9/30, H01L27/32											
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2019年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2019年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2019年</td> </tr> </table>				日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2019年	日本国実用新案登録公報	1996-2019年	日本国登録実用新案公報	1994-2019年
日本国実用新案公報	1922-1996年										
日本国公開実用新案公報	1971-2019年										
日本国実用新案登録公報	1996-2019年										
日本国登録実用新案公報	1994-2019年										
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) CAplus/REGISTRY (STN)											
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 A	JP 2015-153911 A (富士フイルム株式会社) 2015.08.24, 段落 [0063] (ファミリーなし)	35, 37, 42-44 1-34, 36, 38-41, 45-63									
A	KR 10-2017-0116983 A (LG CHEM, LTD.) 2017.10.20, 請求項 7 (ファミリーなし)	1-63									
☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。											
* 引用文献のカテゴリー 「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの 「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日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矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの 「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの 「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの 「&」 同一パテントファミリー文献											
国際調査を完了した日 04.02.2019		国際調査報告の発送日 19.02.2019									
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁 (I S A / J P) 郵便番号 100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		特許庁審査官 (権限のある職員) 辻本 寛司	20 3908								
		電話番号 03-3581-1101	内線 3271								

国際調査報告		国際出願番号 PCT/J P 2 0 1 8 / 0 4 4 7 9 2
C (続き) . 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
A	WO 2017/138755 A1 (LG CHEM, LTD.) 2017.08.17, 全文全図 & CN 108602836 A & KR 10-2017-0094767 A	1-63
A	JP 2017-521525 A (ローム・アンド・ハース・エレクトロニック・ マテリアルズ・コリア・リミテッド) 2017.08.03, 全文全図 & US 2017/0179406 A1, 全文全図 & WO 2016/006925 A1 & KR 10-2016-0006617 A & CN 106536526 A	1-63
A	WO 2017/175690 A1 (出光興産株式会社) 2017.10.12, 全文全図 & US 2017/0324045 A1, 全文全図 & EP 3269720 A1 & KR 10-2017-0125046 A & CN 108026106 A	1-63

フロントページの続き

(31)優先権主張番号 特願2018-114580(P2018-114580)

(32)優先日 平成30年6月15日(2018.6.15)

(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)

(81)指定国・地域 AP(BW,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,RS,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,KM,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BN,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CZ,DE,DJ,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IR,IS,JO,JP,KE,KG,KH,KN,KP,KR,KW,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LU,LY,MA,MD,ME,MG,MK,MN,MW,MX,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PA,PE,PG,PH,PL,PT,QA,RO,RS,RU,RW,SA,SC,SD,SE,SG,SK,SL,SM,ST,SV,SY,TH,TJ,TM,TN,TR,TT

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 BB08 CC04 CC21 DD53 DD59 DD66 DD69
FF15
4C050 PA20

(注) この公表は、国際事務局(WIPO)により国際公開された公報を基に作成したものである。なおこの公表に係る日本語特許出願(日本語実用新案登録出願)の国際公開の効果は、特許法第184条の10第1項(実用新案法第48条の13第2項)により生ずるものであり、本掲載とは関係ありません。

专利名称(译)	有机电致发光器件和新型化合物		
公开(公告)号	JPWO2019111971A1	公开(公告)日	2019-12-12
申请号	JP2019513469	申请日	2018-12-05
[标]申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
[标]发明人	高橋良多 池田秀嗣 中野裕基		
发明人	高橋 良多 池田 秀嗣 瀬田 敬太 中野 裕基		
IPC分类号	H01L51/50 C07D487/22 C09K11/06		
CPC分类号	C07D487/22 C07D491/22 C09K11/06 H01L51/0061 H01L51/0072 H01L51/5012 C09K2211/1007 C09K2211/1018 H01L51/001 H01L51/0052 H01L51/0058 H01L51/006 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/5016 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5092 H01L51/5206 H01L51/5221 H01L51/56 H01L2251/301 H01L2251/308 H01L2251/558		
FI分类号	H05B33/14.B C07D487/22 C09K11/06.690 C09K11/06.650 C09K11/06.640		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/BB08 3K107/CC04 3K107/CC21 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD66 3K107/DD69 3K107/FF15 4C050/PA20		
优先权	16/043074 2018-07-23 US 16/201984 2018-11-27 US 2017234331 2017-12-06 JP 2018114580 2018-06-15 JP		
其他公开文献	JP6644951B2		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

阴极，阳极和设置在阴极与阳极之间的至少一层有机层，至少一层有机层中的至少一层，下式（1- 一种有机电致发光器件，其包含1）和（1-3）表示的化合物或下式（1-2）和（1-3）表示的化合物。

