(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7599175号
(P7599175)

(45)発行日　令和6年12月13日(2024.12.13)

(24)登録日　令和6年12月5日(2024.12.5)

(51)国際特許分類		FI		
C07F 5/02 (2006.01)		C07F	5/02	FCSP
C09K 11/06 (2006.01)		C09K	11/06	660
G09F 9/30 (2006.01)		C09K	11/06	690
H01L 21/336 (2006.01)		G09F	9/30	365
H01L 29/78 (2006.01)		H01L	29/78	

請求項の数　29　（全812頁）　最終頁に続く

(21)出願番号　特願2021-526175(P2021-526175)
(86)(22)出願日　令和2年6月12日(2020.6.12)
(86)国際出願番号　PCT/JP2020/023312
(87)国際公開番号　WO2020/251049
(87)国際公開日　令和2年12月17日(2020.12.17)
審査請求日　令和5年5月1日(2023.5.1)
(31)優先権主張番号　特願2019-111587(P2019-111587)
(32)優先日　令和1年6月14日(2019.6.14)
(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)
(31)優先権主張番号　特願2019-142577(P2019-142577)
(32)優先日　令和1年8月1日(2019.8.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)
(31)優先権主張番号　特願2019-189741(P2019-189741)
最終頁に続く

(73)特許権者　503092180
学校法人関西学院
兵庫県西宮市上ケ原一番町１番１５５号
(73)特許権者　521180485
エスケーマテリアルズジェイエヌシー株式会社
大韓民国キョンギ道ファソン市ドンタンキフン路５６０、１１階
(74)代理人　110000109
弁理士法人特許事務所サイクス
(72)発明者　畠山　琢次
兵庫県三田市学園２丁目１番地　関西学院大学理工学部内
(72)発明者　馬場　大輔
千葉県市原市五井海岸５番地の１　ＪＮ
最終頁に続く

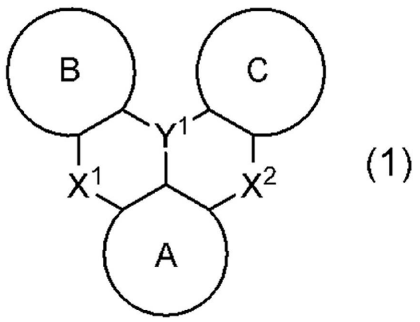
(54)【発明の名称】　多環芳香族化合物

(57)【特許請求の範囲】

【請求項１】

下記式（１）で表される多環芳香族化合物。

【化１】



(1)

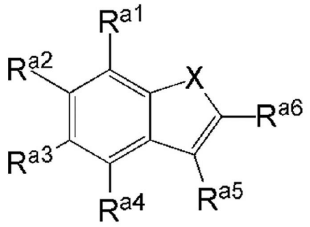
（式（１）中、

Ａ環、Ｂ環およびＣ環は、それぞれ独立して、炭素数６～３０のアリール環または炭素数２～３０のヘテロアリール環であり、これらの環における少なくとも１つの水素は、置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル、置換も

しくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、アルキルジシクロアルキルシリル、トリアリールシリル、ジアルキルアリールシリル、およびアルキルジアリールシリルからなる群より選択される置換基で置換されていてもよく、これらの基が置換基を有する場合の置換基は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキル、またはジアリールアミノであり、

ただし、Ａ環、Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される少なくとも一つの環は式（ＢＨｅｔ）で表される環であり、

【化２】



BHet

式（ＢＨｅｔ）において、R^{a1}～R^{a6}は水素または置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、アルキルジシクロアルキルシリル、トリアリールシリル、ジアルキルアリールシリル、およびアルキルジアリールシリルからなる群より選択される置換基であり、これらの基が置換基を有する場合の置換基は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、ただしR^{a1}～R^{a6}のうち、隣接するいずれかの２つまたは３つは、式（１）中のY^1ならびにX^1および／またはX^2との結合手となり、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒまたは＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲはそれぞれ独立して、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成していてもよく、

Y^1は、Ｂ、Ｐ＝Ｏ、またはＰ＝Ｓであり、

X^1およびX^2は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－ＲのＲは、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、前記Ａ環、Ｂ環、およびＣ環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、前記－Ｃ（－Ｒ）$_2$－のＲは、水素、アルキル、またはシクロアルキルであり、

式（１）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つの炭素数３～２４のシクロアルカンで縮合

されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよく、

式（１）で表される化合物における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノ、またはハロゲンで置換されていてもよく、

式（１）で表される化合物において、アリールはいずれも炭素数６～３０のアリールであり、ヘテロアリールはいずれも炭素数２～３０のヘテロアリールであり、アルキルはいずれも炭素数１～２４のアルキルであり、シクロアルキルはいずれも炭素数３～２４のシクロアルキルであり、

前記多環芳香族化合物は（Ａ）～（Ｅ）の少なくとも１つを満たす：

（Ａ）Ｘ^{1}またはＸ^{2}として、Ｒが置換されていてもよい２－ビフェニリルまたは置換されていてもよいテルフェニル－２'－イルである＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む；

（Ｂ）式（１）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つの炭素数３～２４のシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい；

（Ｃ）Ｘ^{1}またはＸ^{2}として、Ｒがアリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリールである＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む；

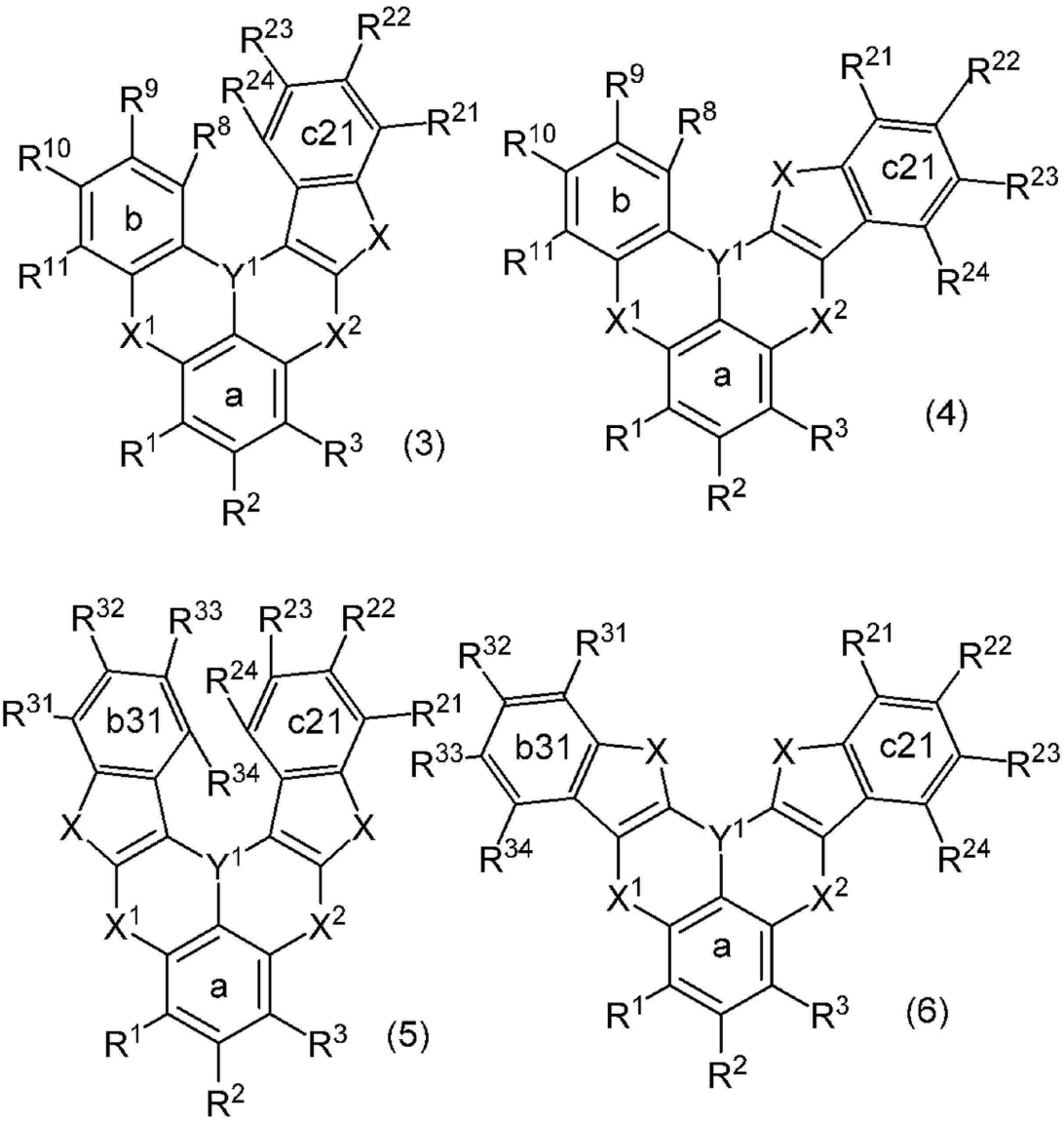
（Ｄ）Ｘ^{1}またはＸ^{2}として、Ｒがシクロアルキルで置換されている炭素数２～１５のアリールである＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む；

（Ｅ）Ａ環におけるアリール環またはヘテロアリール環が置換アリールで置換されている。）

【請求項２】

式（１）で表される多環芳香族化合物が下記式（３）、式（４）、式（５）、または式（６）で表される、請求項１に記載の多環芳香族化合物。

【化４】



（式（３）、式（４）、式（５）、および式（６）中、

Ｒ^{1}～Ｒ^{17}、Ｒ^{21}～Ｒ^{24}、およびＲ^{31}～Ｒ^{34}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、アルキルジシクロアルキルシリル、トリアリールシリル、ジアルキルアリールシリル、またはアルキルジアリールシリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、また、Ｒ^{1}～Ｒ^{3}のうちの隣接する基同士が結合してａ環と共に、Ｒ^{8}～Ｒ^{11}のうちの隣接する基同士が結合してｂ環と共に、Ｒ^{4}～Ｒ^{7}のうちの隣接する基同士が結合してｃ環と共に、Ｒ^{12}～Ｒ^{14}のうちの隣接する基同士が結合してａ１２環と共に、Ｒ^{15}～Ｒ^{17}のうちの隣接する基同士が結合してｂ１５環と共に、Ｒ^{21}～Ｒ^{24}のうちの隣接する基同士が結合してｃ２１環と共に、Ｒ^{31}～Ｒ^{34}のうちの隣接する基同士が結合してｂ３１環と共に、それぞれ、炭素数６～３０のアリール環または炭素数２～３０のヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、またはアルキルジシクロアルキ

ルシリルで置換されていてもよく、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、

Ｘは、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒまたは＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲはそれぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、

Ｙ^{1}は、それぞれ独立して、Ｂ、Ｐ＝Ｏ、またはＰ＝Ｓであり、

Ｘ^{1}およびＸ^{2}は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒのは、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環と縮合する５員環、およびｂ３１環と縮合する５員環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、

式（３）、式（４）、式（５）、または式（６）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つの炭素数３～２４のシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよく、

式（３）、式（４）、式（５）、または式（６）で表される化合物における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノ、またはハロゲンで置換されていてもよく、

前記多環芳香族化合物は（Ａ’）～（Ｅ’）の少なくとも１つを満たす：

（Ａ’）Ｘ^{1}またはＸ^{2}として、Ｒが置換されていてもよい２－ビフェニリルまたは置換されていてもよいテルフェニル－２’－イルである＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む；

（Ｂ’）式（３）、（４）、（５）、または（６）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つの炭素数３～２４のシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい；

（Ｃ’）Ｘ^{1}またはＸ^{2}として、Ｒがアリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリールである＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む；

（Ｄ’）Ｘ^{1}またはＸ^{2}として、Ｒがシクロアルキルで置換されている炭素数２～１５のアリールである＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む；

（Ｅ’）Ｒ^{2}が２，６－ジイソプロピルまたは２，４，６－トリメチルである。）

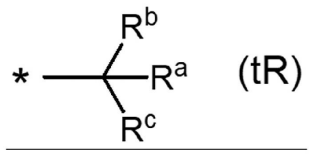
【請求項３】

Ｘが＞Ｏまたは＞Ｓである、請求項１または２に記載の多環芳香族化合物。

【請求項４】

下記式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキルを少なくとも１つ含む、請求項１～３のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

【化３】



（式（ｔＲ）中、R^a、R^bおよびR^cはそれぞれ独立して炭素数１～２４のアルキルであり、前記アルキルにおける任意の－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよく、＊は結合位置である。）

【請求項５】

X^1およびX^2がいずれも＞Ｎ－Ｒであり、X^1およびX^2における＞Ｎ－Ｒの少なくとも１つのＲが置換されていてもよい２－ビフェニリルもしくは置換されていてもよいテルフェニル－２’－イルである、請求項１～４のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

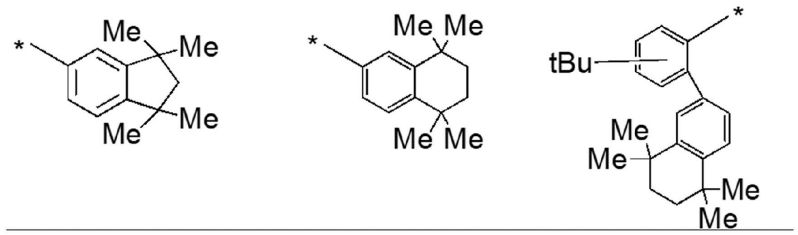
【請求項６】

式（１）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つの炭素数３～２４のシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい、請求項１～５のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

【請求項７】

X^1またはX^2として、Ｒが以下のいずれかの基である＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む、請求項１～６のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

【化１２】

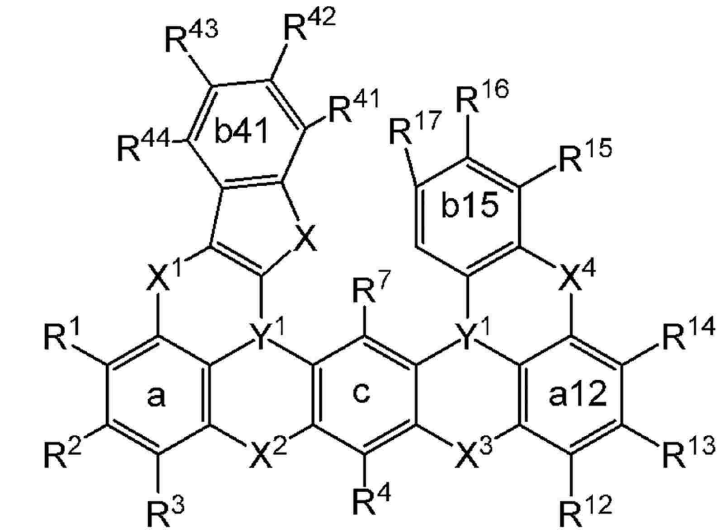


（Ｍｅはメチル、ｔＢｕはｔ－ブチル、＊は結合位置を示す。）

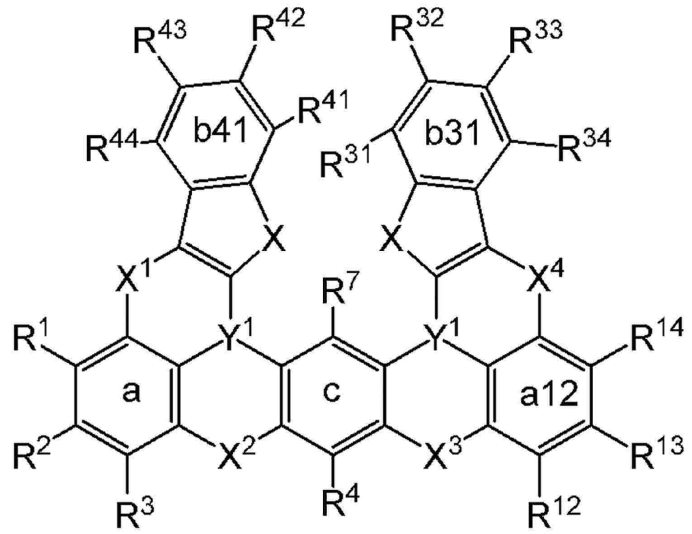
【請求項８】

下記式（８）または式（９）で表される、多環芳香族化合物。

【化５】



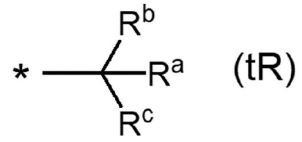
(8)



(9)

（式（８）および式（９）中、
R^{1}～R^{17}、R^{31}～R^{34}、およびR^{41}～R^{44}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、アルキルジシクロアルキルシリル、トリアリールシリル、ジアルキルアリールシリル、またはアルキルジアリールシリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、また、R^{1}～R^{3}のうちの隣接する基同士が結合してａ環と共に、R^{4}～R^{7}のうちの隣接する基同士が結合してｃ環と共に、R^{12}～R^{14}のうちの隣接する基同士が結合してａ１２環と共に、R^{15}～R^{17}のうちの隣接する基同士が結合してｂ１５環と共に、R^{31}～R^{34}のうちの隣接する基同士が結合してｂ３１環と共に、およびR^{41}～R^{44}のうちの隣接する基同士が結合してｂ４１環と共に、それぞれ、炭素数６～３０のアリール環または炭素数２～３０のヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、またはアルキルジシクロアルキルシリルで置換されていてもよく、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキ

ルで置換されていてもよく、
Ｘは、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒまたは＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲはそれぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、
Ｙ^{1}は、それぞれ独立して、Ｂ、Ｐ＝Ｏ、またはＰ＝Ｓであり、
Ｘ^1、Ｘ^2、Ｘ^3、およびＸ^{4}は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－ＲのＲは、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、ａ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｂ３１環と縮合する５員環、およびｂ４１環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、
式（８）または（９）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つの炭素数３～２４のシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよく、
式（８）または式（９）で表される化合物における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノ、またはハロゲンで置換されていてもよく、
式（８）または式（９）で表される化合物において、炭素数について記載のない場合、アリールはいずれも炭素数６～３０のアリールであり、ヘテロアリールはいずれも炭素数２～３０のヘテロアリールであり、アルキルはいずれも炭素数１～２４のアルキルであり、シクロアルキルはいずれも炭素数３～２４のシクロアルキルである。
【請求項９】
Ｘがそれぞれ独立して＞Ｏまたは＞Ｓである、請求項８に記載の多環芳香族化合物。
【請求項１０】
下記式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキルを少なくとも１つ含む、請求項８または９に記載の多環芳香族化合物。
【化６】



(tR)

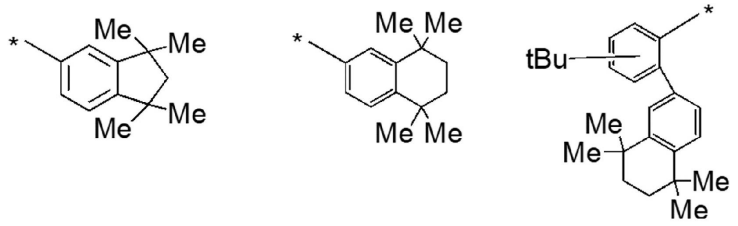
（式（ｔＲ）中、Ｒ^a、Ｒ^{b}およびＲ^{c}はそれぞれ独立して炭素数１～２４のアルキルであり、前記アルキルにおける任意の－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよく、＊は結合位置である。）
【請求項１１】
式（８）および式（９）におけるＸ^1、Ｘ^2、Ｘ^{3}およびＸ^{4}がいずれも＞Ｎ－Ｒであり、Ｘ^1、Ｘ^2、Ｘ^{3}またはＸ^{4}として、Ｒが置換されていてもよい２－ビフェニリルまたは置換されていてもよいテルフェニル－２’－イルである＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む、請求項８～１０のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。
【請求項１２】
式（８）または式（９）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環か

らなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つの炭素数３～２４のシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい、請求項８～１１のいずれか一項に記載する多環芳香族化合物。

【請求項１３】

Ｘ^1、Ｘ^2、Ｘ^{3}またはＸ^{4}として、Ｒが以下のいずれかの基である＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む、請求項８～１２のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

【化１２】



（Ｍｅはメチル、ｔＢｕはｔ－ブチル、＊は結合位置を示す。）

【請求項１４】

Ｙ^{1}がＢである、請求項１～１３のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

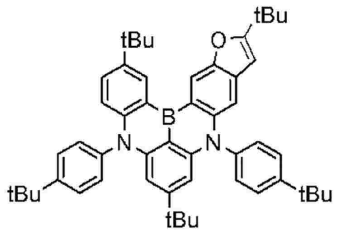
【請求項１５】

前記ハロゲンはフッ素である、請求項１～１４のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

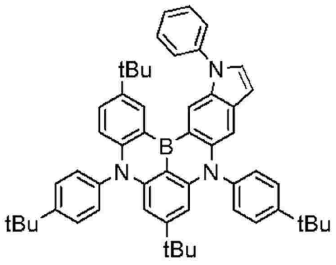
【請求項１６】

下記構造式のいずれかで表される、多環芳香族化合物。

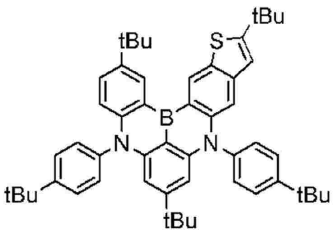
【化１３】



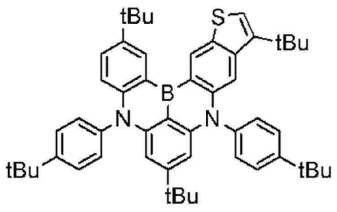
(1F-1)



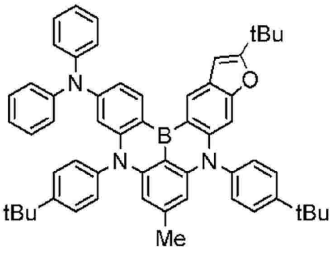
(1F-2)



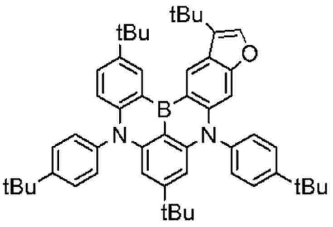
(1F-3)



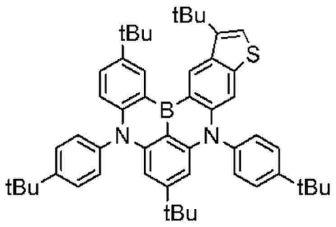
(1F-4)



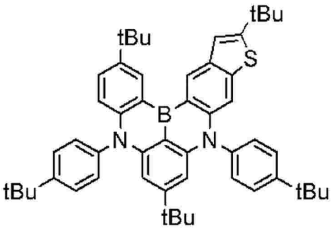
(1F-5)



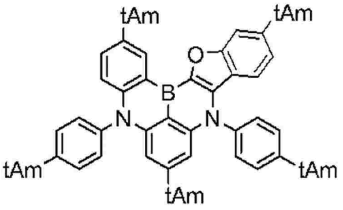
(1F-6)



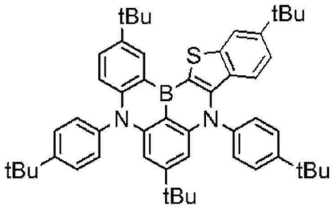
(1F-7)



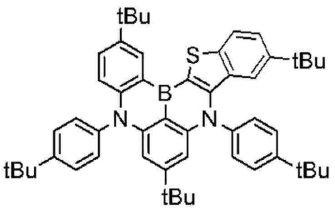
(1F-8)



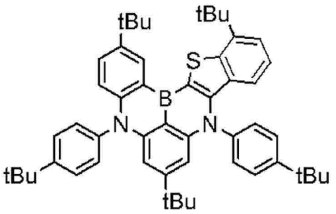
(1F-9)



(1F-10)

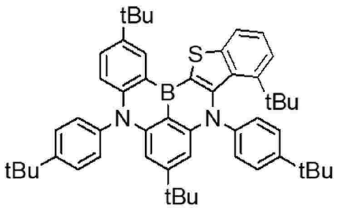


(1F-11)

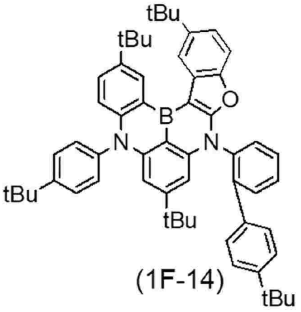


(1F-12)

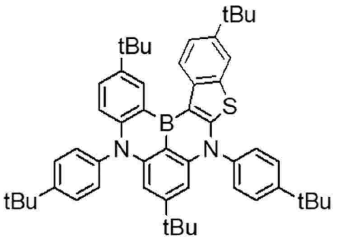
【化１４】



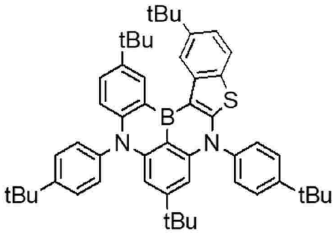
(1F-13)



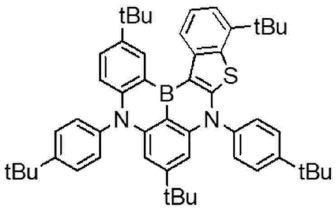
(1F-14)



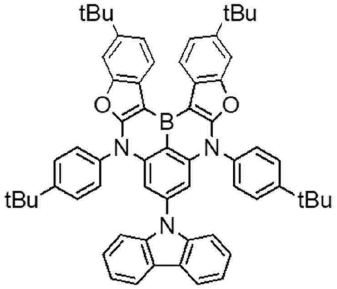
(1F-15)



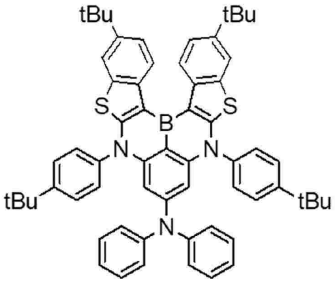
(1F-16)



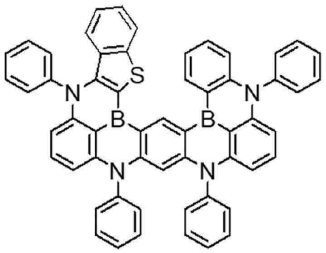
(1F-17)



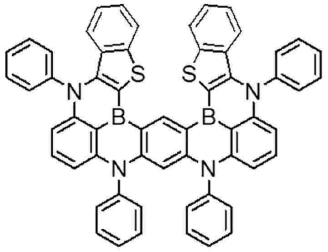
(1F-18)



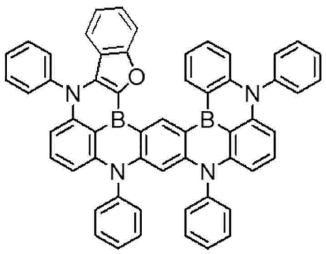
(1F-19)



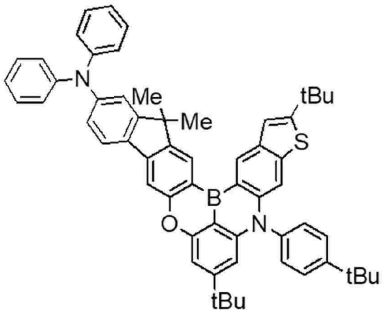
(1F-20)



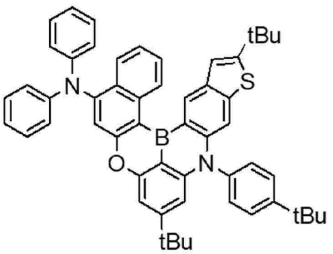
(1F-21)



(1F-22)

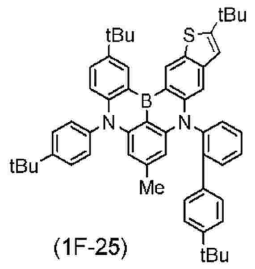


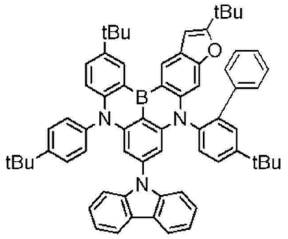
(1F-23)

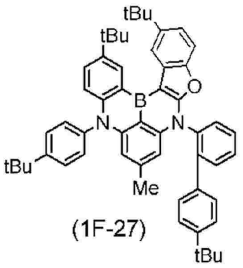


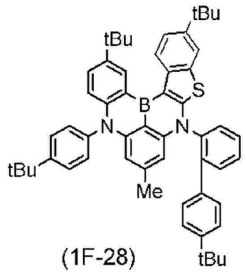
(1F-24)

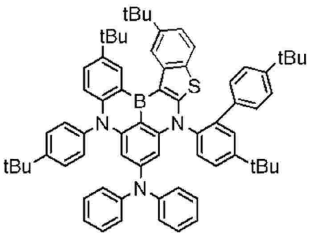
【化１５】

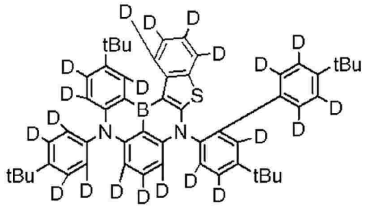

(1F-25)

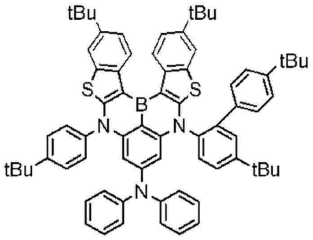

(1F-26)

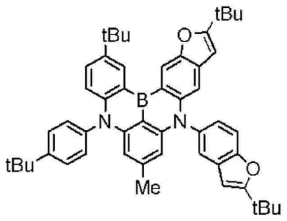

(1F-27)

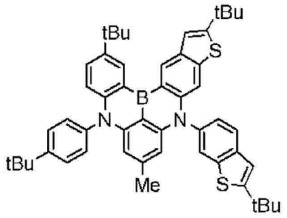

(1F-28)

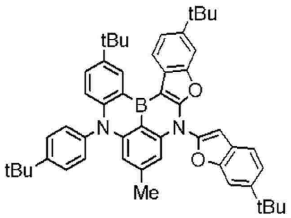

(1F-29)

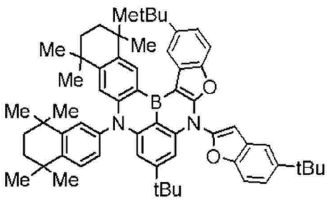

(1F-30)

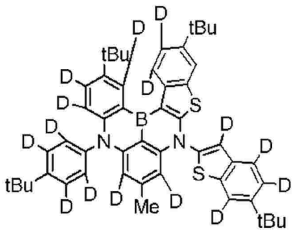

(1F-31)

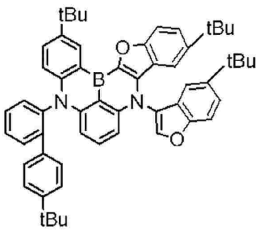

(1F-32)

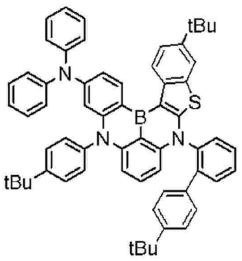

(1F-33)


(1F-34)

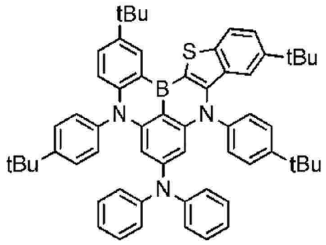

(1F-35)


(1F-36)

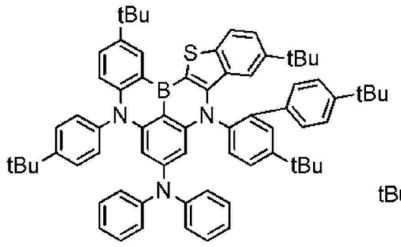

(1F-37)


(1F-38)

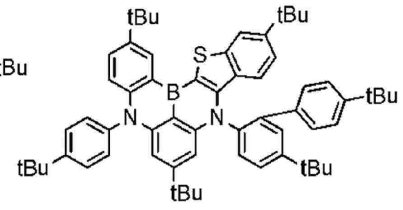
【化１６】



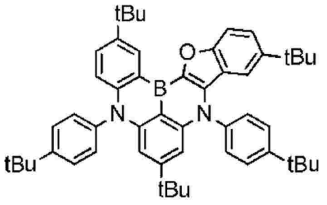
(1F-39)



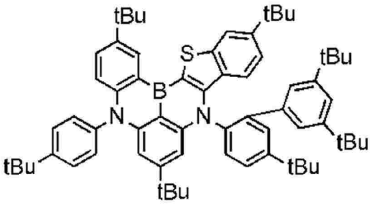
(1F-40)



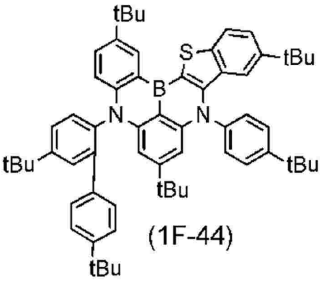
(1F-41)



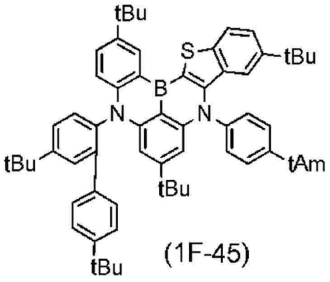
(1F-42)



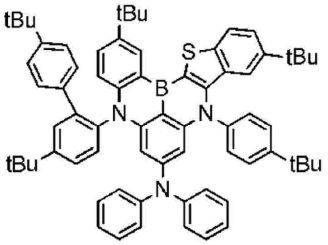
(1F-43)



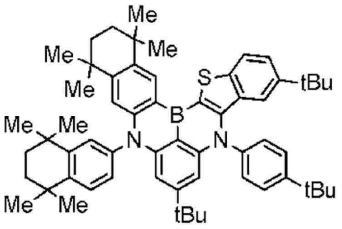
(1F-44)



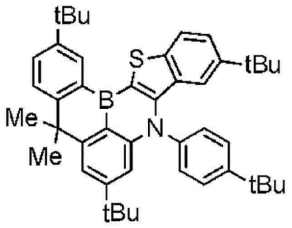
(1F-45)



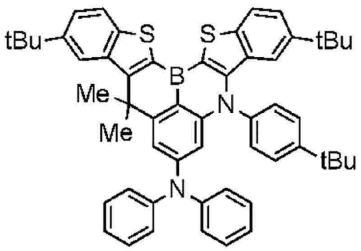
(1F-46)



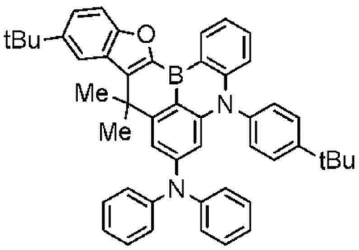
(1F-47)



(1F-60)

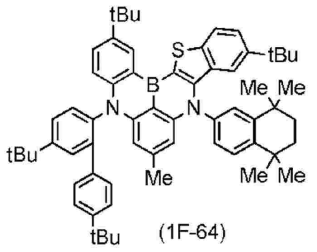


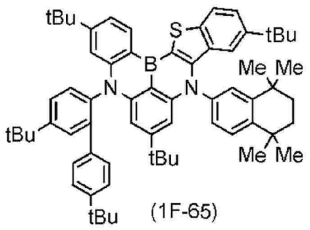
(1F-62)

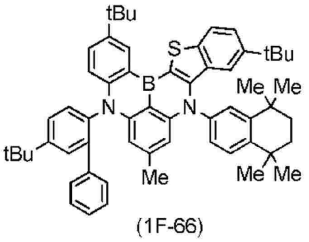


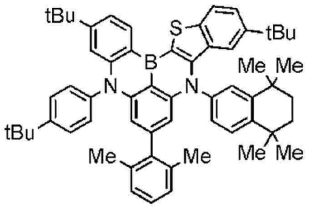
(1F-63)

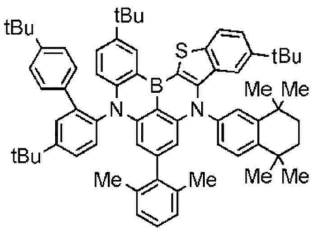
【化１７】

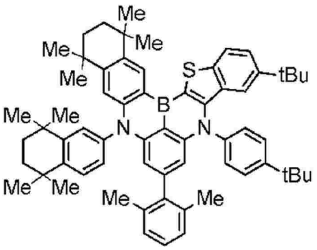

(1F-64)

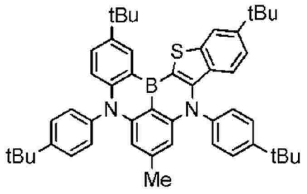

(1F-65)

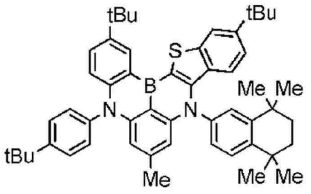

(1F-66)

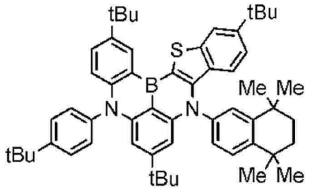

(1F-67)

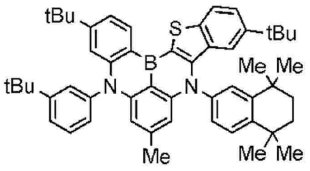

(1F-68)

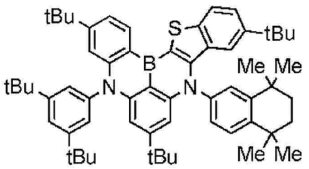

(1F-69)

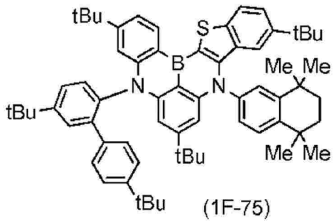

(1F-70)

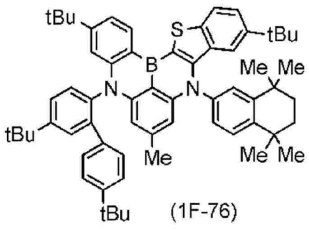

(1F-71)

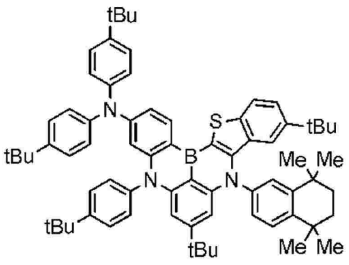

(1F-72)


(1F-73)

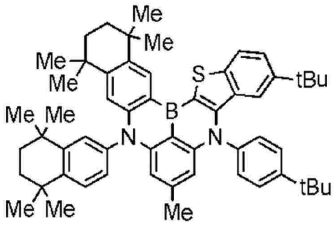

(1F-74)


(1F-75)

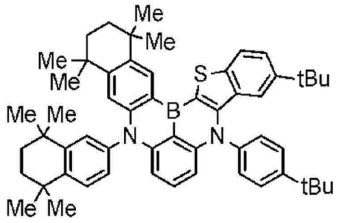

(1F-76)


(1F-77)

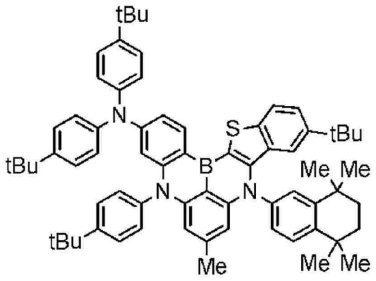
【化１８】



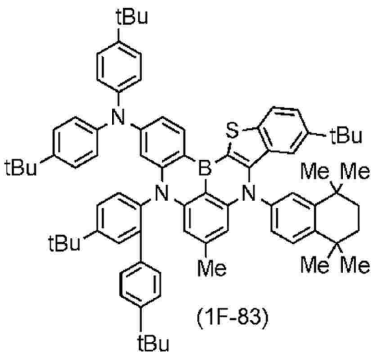
(1F-80)



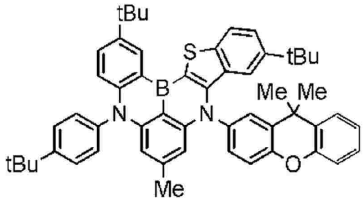
(1F-81)



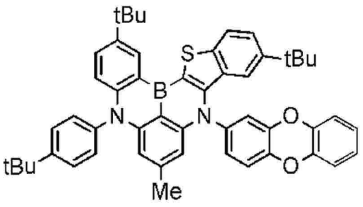
(1F-82)



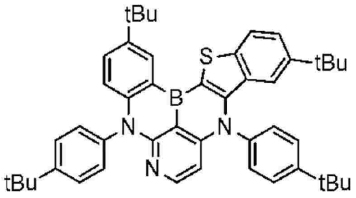
(1F-83)



(1F-84)

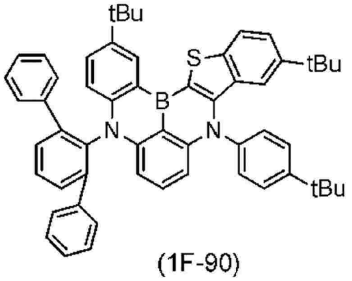


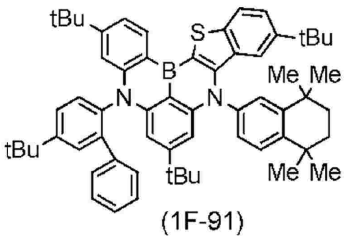
(1F-85)

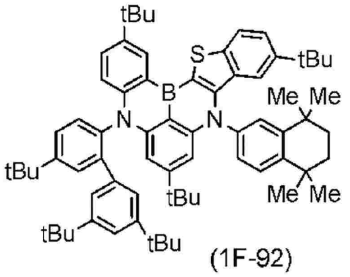


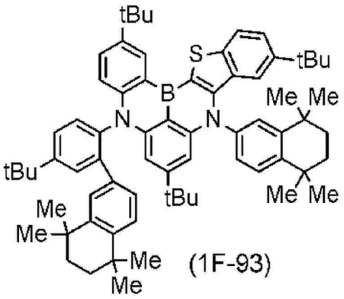
(1F-86)

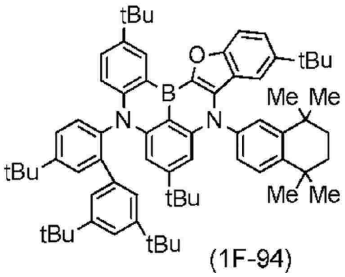
【化１９】

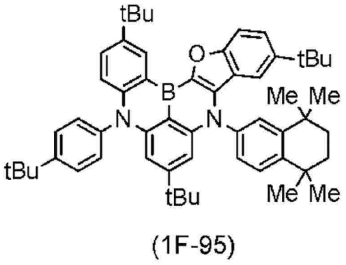

(1F-90)


(1F-91)

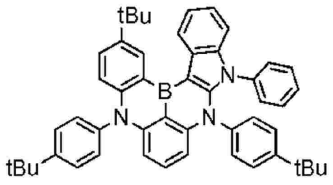

(1F-92)


(1F-93)

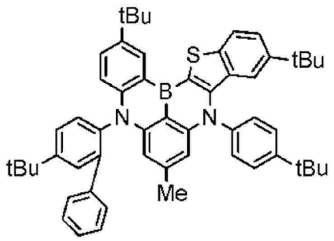

(1F-94)


(1F-95)

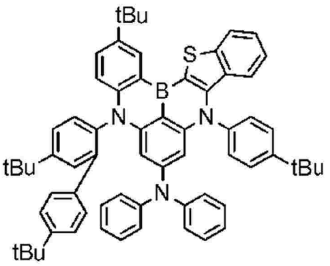
【化２０】



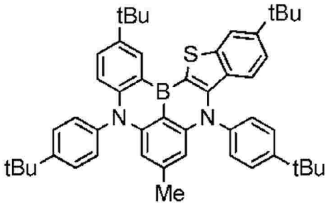
(1F-96)



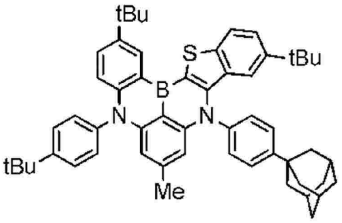
(1F-98)



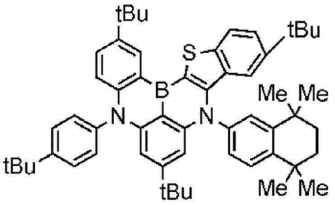
(1F-99)



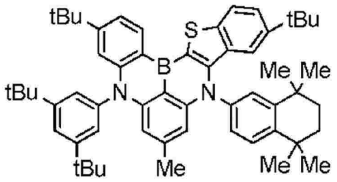
(1F-100)



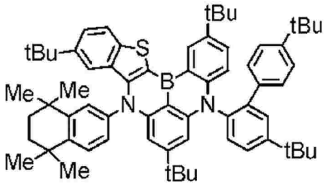
(1F-101)



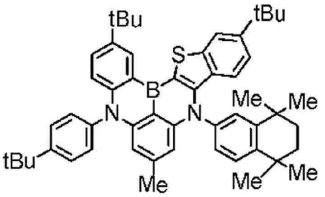
(1F-104)



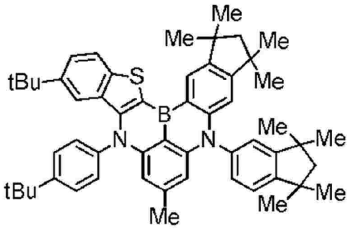
(1F-105)



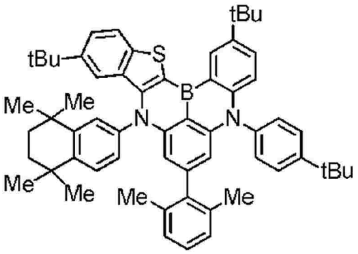
(1F-106)



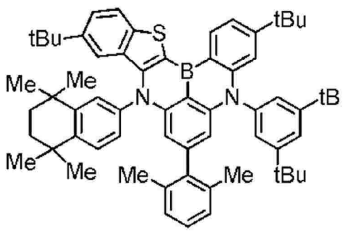
(1F-107)



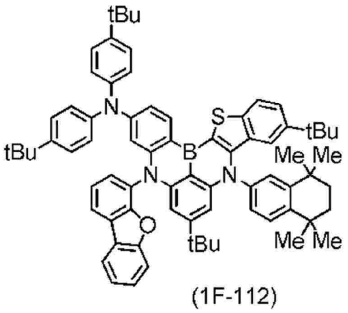
(1F-108)



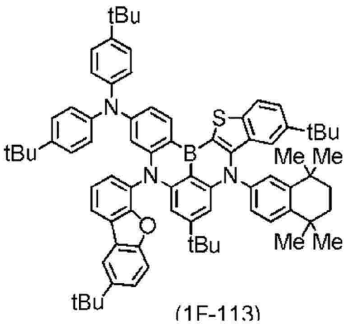
(1F-109)



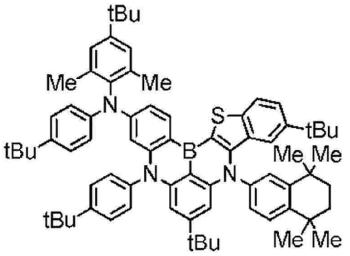
(1F-110)



(1F-112)

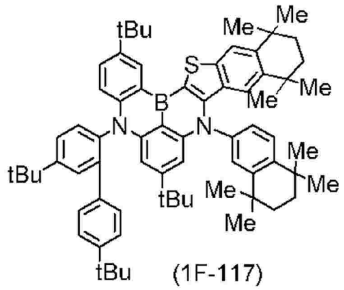


(1F-113)

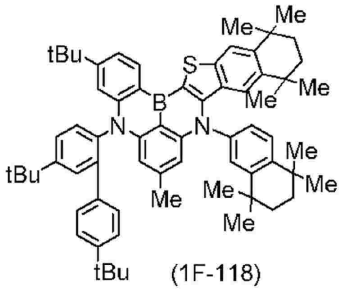


(1F-114)

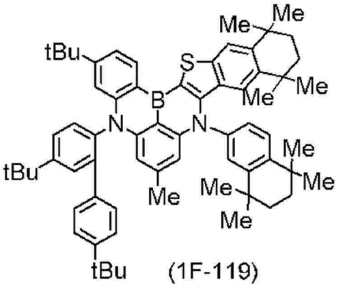
【化２１】



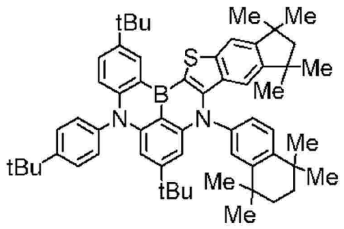
(1F-117)



(1F-118)



(1F-119)



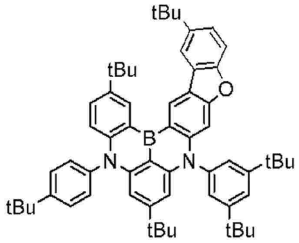
(1F-120)

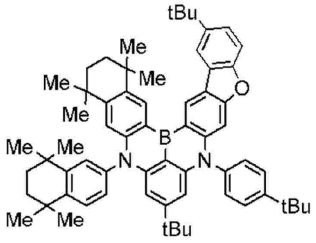
（上記構造式中、「Ｄ」は重水素、「Ｍｅ」はメチル、「ｔＢｕ」はｔ－ブチル、「ｔＡｍ」はｔ－アミルを示す。）

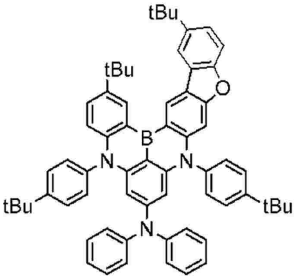
【請求項１７】

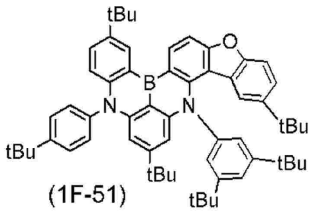
下記構造式のいずれかで表される、多環芳香族化合物。

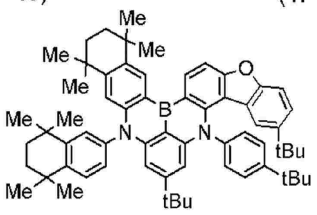
【化２２】

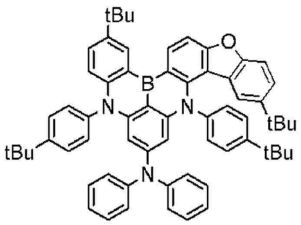

(1F-48)

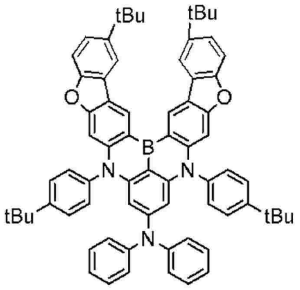

(1F-49)

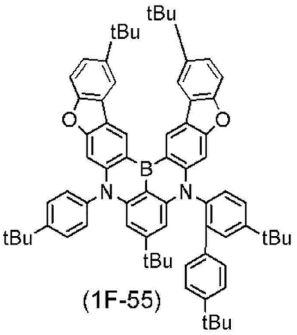

(1F-50)

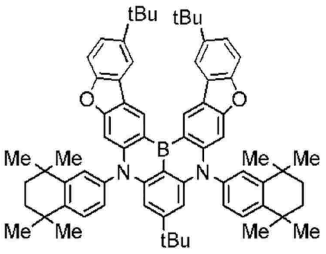

(1F-51)

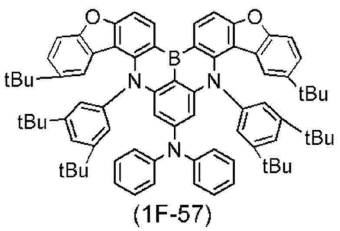

(1F-52)

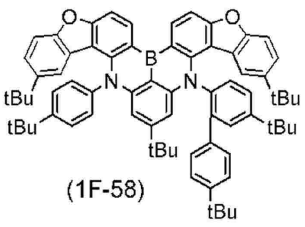

(1F-53)

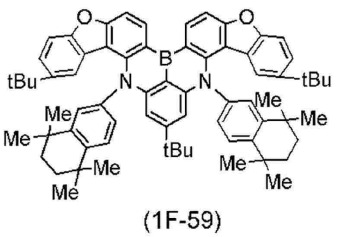

(1F-54)


(1F-55)

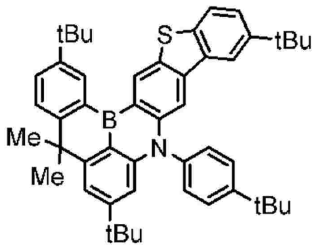

(1F-56)


(1F-57)

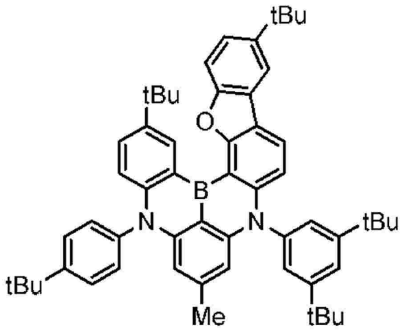

(1F-58)


(1F-59)

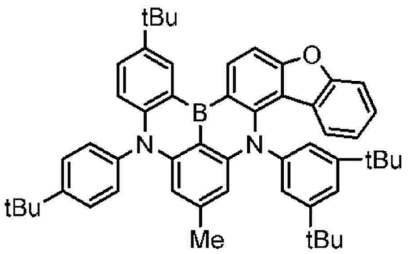
【化２３】



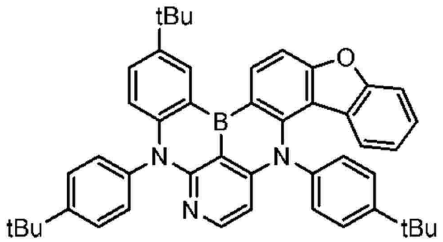
(1F-61)



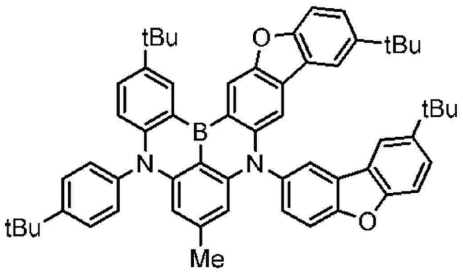
(1F-78)



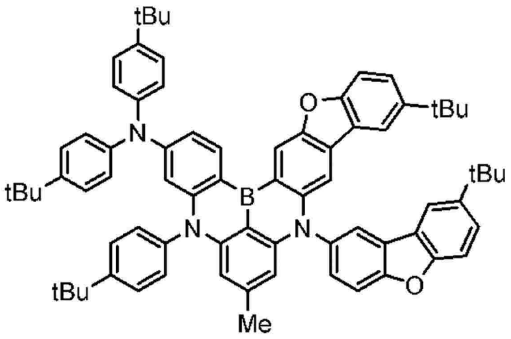
(1F-79)



(1F-87)

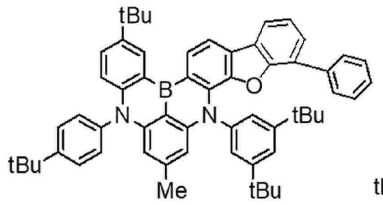


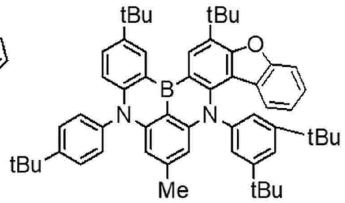
(1F-88)

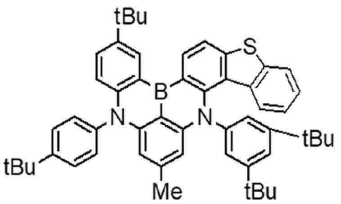


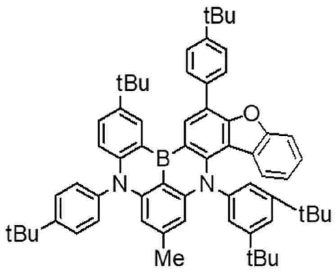
(1F-89)

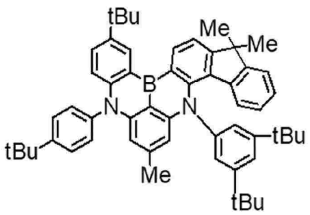
【化２４】


(1F-97)


(1F-102)


(1F-103)


(1F-111)

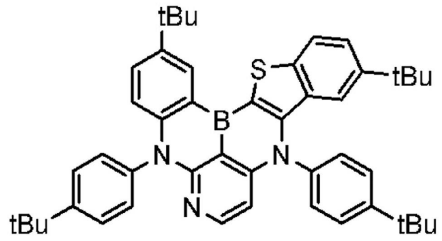

(1F-115)

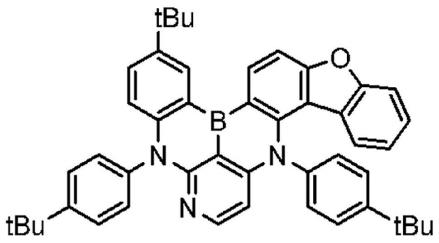
（上記構造式中、「Ｍｅ」はメチル、「ｔＢｕ」はｔ－ブチルを示す。）

【請求項１８】

下記構造式のいずれかで表される、多環芳香族化合物。

【化２５】


(1F-86)


(1F-87)

【請求項１９】

請求項１～１８のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物を含有する、有機デバイス用材料。

【請求項２０】

前記有機デバイス用材料が、有機電界発光素子用材料、有機電界効果トランジスタ用材料または有機薄膜太陽電池用材料である、請求項１９に記載の有機デバイス用材料。

【請求項２１】

前記有機電界発光素子用材料が発光層用材料である、請求項２０に記載の有機デバイス用材料。

【請求項２２】

請求項１～１８のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物と、有機溶媒とを含む、組成物。

【請求項２３】

陽極および陰極からなる一対の電極と、該一対の電極間に配置され、請求項１～１８のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物を含有する有機層とを有する、有機電界発光素子。

【請求項２４】

陽極および陰極からなる一対の電極と、該一対の電極間に配置され、請求項１～１８のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物を含有する発光層とを有する、有機電界発光素子。

【請求項２５】

前記発光層が、ホストと、ドーパントとしての前記多環芳香族化合物とを含む、請求項２４に記載の有機電界発光素子。
【請求項２６】
前記ホストが、アントラセン系化合物、フルオレン系化合物またはジベンゾクリセン系化合物である、請求項２５に記載の有機電界発光素子。
【請求項２７】
前記陰極と前記発光層との間に配置される電子輸送層および／または電子注入層を有し、該電子輸送層および電子注入層の少なくとも１つは、ボラン誘導体、ピリジン誘導体、フルオランテン誘導体、ＢＯ系誘導体、アントラセン誘導体、ベンゾフルオレン誘導体、ホスフィンオキサイド誘導体、ピリミジン誘導体、アリールニトリル誘導体、トリアジン誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、フェナントロリン誘導体、キノリノール系金属錯体、チアゾール誘導体、ベンゾチアゾール誘導体、シロール誘導体およびアゾリン誘導体からなる群から選択される少なくとも１つを含有する、請求項２４～２６のいずれか一項に記載の有機電界発光素子。
【請求項２８】
前記電子輸送層および／または電子注入層が、さらに、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属の有機錯体、アルカリ土類金属の有機錯体および希土類金属の有機錯体からなる群から選択される少なくとも１つを含有する、請求項２７に記載の有機電界発光素子。
【請求項２９】
請求項２３～２８のいずれか一項に記載の有機電界発光素子を備えた表示装置または照明装置。
【発明の詳細な説明】
【技術分野】
【０００１】
本発明は、多環芳香族化合物に関する。本発明はまた、上記多環芳香族化合物を用いた有機電界発光素子、有機電界効果トランジスタおよび有機薄膜太陽電池、並びに、表示装置および照明装置に関する。
【背景技術】
【０００２】
従来、電界発光する発光素子を用いた表示装置は、省電力化や薄型化が可能なことから、種々研究され、さらに、有機材料から成る有機電界発光素子（本明細書中で「有機ＥＬ素子」または単に「素子」と表記することがある。）は、軽量化や大型化が容易なことから活発に検討されてきた。特に、光の三原色の一つである青色などの発光特性を有する有機材料の開発、および正孔、電子などの電荷輸送能（半導体や超電導体となる可能性を有する）を備えた有機材料の開発については、高分子化合物、低分子化合物を問わずこれまで活発に研究されてきた。
【０００３】
有機ＥＬ素子は、陽極および陰極からなる一対の電極と、当該一対の電極間に配置され、有機化合物を含む一層または複数の層とからなる構造を有する。有機化合物を含む層には、発光層や、正孔、電子などの電荷を輸送または注入する電荷輸送／注入層などがあるが、これらの層に適当な種々の有機材料が開発されている。
【０００４】
発光層用材料としては、例えばベンゾフルオレン系化合物などが開発されている（特許文献１）。また、正孔輸送材料としては、例えばトリフェニルアミン系化合物などが開発されている（特許文献２）。また、電子輸送材料としては、例えばアントラセン系化合物などが開発されている（特許文献３）。
【０００５】

また、近年では有機ＥＬ素子や有機薄膜太陽電池に使用する材料としてトリフェニルアミン誘導体を改良した材料も報告されている（特許文献４）。この材料は既に実用化されていたＮ，Ｎ’－ジフェニル－Ｎ，Ｎ’－ビス（３－メチルフェニル）－１，１’－ビフェニル－４，４’－ジアミン（ＴＰＤ）を参考にして、トリフェニルアミンを構成する芳香環同士を連結することでその平面性を高めたことを特徴とする材料である。この文献では例えばＮＯ連結系化合物（６３頁の化合物１）の電荷輸送特性が評価されているが、ＮＯ連結系化合物以外の材料の製造方法については記載されておらず、また、連結する元素が異なれば化合物全体の電子状態が異なるため、ＮＯ連結系化合物以外の材料から得られる特性も未だ知られていない。このような化合物の例は他にも見られる（特許文献５）。例えば、三重項励起子のエネルギー（Ｔ１）が大きい共役構造を有する化合物は、より短い波長の燐光を発することができるため、青色の発光層用材料として有益である。また、発光層を挟む電子輸送材料や正孔輸送材料としてもＴ１が大きい新規共役構造を有する化合物が求められている。

【０００６】

有機ＥＬ素子のホスト材料は、一般に、ベンゼンやカルバゾールなどの既存の芳香環を単結合やリン原子やケイ素原子で複数連結した分子である。これは、比較的共役系の小さな芳香環を多数連結することで、ホスト材料に必要とされる大きなＨＯＭＯ－ＬＵＭＯギャップ（薄膜におけるバンドギャップＥｇ）が担保されるからである。さらに、燐光材料や熱活性型遅延蛍光材料を用いた有機ＥＬ素子のホスト材料には、高い三重項励起エネルギー（E_T）も必要となるが、分子にドナーあるいはアクセプター性の芳香環や置換基を連結することで、三重項励起状態（Ｔ１）のＳＯＭＯ１およびＳＯＭＯ２を局在化させ、両軌道間の交換相互作用を小さくすることで、三重項励起エネルギー（E_T）を向上させることが可能となる。しかし、共役系の小さな芳香環はレドックス安定性が十分ではなく、既存の芳香環を連結していった分子をホスト材料として用いた素子は寿命が十分ではない。一方、拡張π共役系を有する多環芳香族化合物は、一般に、レドックス安定性は優れているが、ＨＯＭＯ－ＬＵＭＯギャップ（薄膜におけるバンドギャップＥｇ）や三重項励起エネルギー（E_T）が低いため、ホスト材料に不向きと考えられてきた。

【先行技術文献】

【特許文献】

【０００７】

【文献】国際公開第２００４／０６１０４７号

【文献】特開２００１－１７２２３２号公報

【文献】特開２００５－１７０９１１号公報

【文献】国際公開第２０１２／１１８１６４号

【文献】国際公開第２０１１／１０７１８６号

【文献】国際公開第２０１５／１０２１１８号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【０００８】

上述するように、有機ＥＬ素子に用いられる材料としては種々の材料が開発されているが、有機ＥＬ素子用材料の選択肢を増やすために、従来とは異なる化合物からなる材料の開発が望まれている。特に、特許文献１～４で報告されたＮＯ連結系化合物以外の材料から得られる有機ＥＬ特性やその製造方法は未だ知られていない。

【０００９】

また、特許文献６では、ホウ素を含む多環芳香族化合物とそれを用いた有機ＥＬ素子が報告されているが、更に素子特性を向上させるべく、発光効率や素子寿命を向上させることができる発光層用材料、特にドーパント材料が求められている。

【課題を解決するための手段】

【００１０】

本発明者らは、上記課題を解決するため鋭意検討した結果、特許文献６に記載の多環芳

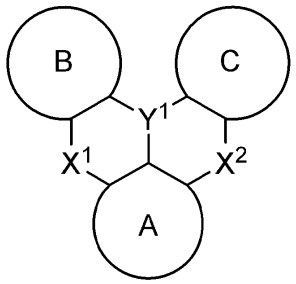
香族化合物において、さらに縮合環を導入した構造を有する多環芳香族化合物を発光層用材料として有機ＥＬ素子を構成することにより、発光効率および素子寿命を向上させることができることを見出した。本発明はこの知見に基づき本発明を完成させたものである。

具体的には、本発明は、以下の構成を有する。

【００１１】

＜１＞　下記式（１）で表される多環芳香族化合物、または下記式（１）で表される構造を複数有する多環芳香族化合物の多量体。

【化１】



(1)

（式（１）中、

Ａ環、Ｂ環およびＣ環は、それぞれ独立して、アリール環またはヘテロアリール環であり、これらの環における少なくとも１つの水素は置換されていてもよく、ただし、Ａ環、Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される少なくとも一つの環は単環のアリール環、単環のヘテロアリール環、およびシクロペンタジエン環からなる群より選択される２つ以上の環で構成される縮合環であり、この縮合環における少なくとも１つの水素は置換されていてもよく、

Ｂ環およびＣ環は単結合または連結基を介して結合していてもよく、

Y^1は、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、Ａｌ、Ｇａ、Ａｓ、Ｓｉ－Ｒ、またはＧｅ－Ｒであり、前記Ｓｉ－ＲおよびＧｅ－ＲのＲは、アリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、

X^1およびX^2は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅであり、前記＞Ｎ－ＲのＲは、水素、置換されていてもよいアリール（ただし置換基としてアミノを除く）、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは連結基または単結合により前記Ａ環、Ｂ環、およびＣ環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、

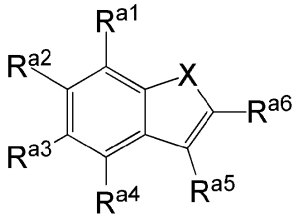
式（１）で表される化合物または構造におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよく、

式（１）で表される化合物または構造における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノ、またはハロゲンで置換されていてもよい。）

【００１２】

＜２＞　Ａ環、Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される少なくとも一つの環は硫黄原子または酸素原子を含有するヘテロアリール環である縮合環であり、この縮合環における少

なくとも１つの水素は置換されていてもよい、
＜１＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
【００１３】
＜３＞　Ａ環、Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される少なくとも一つの環は式（ＢＨｅｔ）で表される環である＜１＞または＜２＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
【化２】



BHet

【００１４】
（式（ＢＨｅｔ）において、Ｒａ１～Ｒａ６は水素または置換基であり、ただしＲａ１～Ｒａ６のうち、隣接するいずれかの２つまたは３つは、式（１）中のＹ１ならびにＸ１および／またはＸ２との結合手となり、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲはそれぞれ独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成していてもよい。）
【００１５】
＜４＞　Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される少なくとも一つの環は式（ＢＨｅｔ）で表される環であり、
式（ＢＨｅｔ）において、Ｒａ１～Ｒａ６のうち、隣接するいずれかの２つは式（１）中のＹ１ならびにＸ１またはＸ２との結合手となり、
その他のＲａ１～Ｒａ６は水素、置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、または置換シリルであり、
Ａ環、ならびにＢ環およびＣ環のうち前記縮合環でない環において、アリール環またはヘテロアリール環の水素が置換されていてもよい置換基は、置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、および置換シリルからなる群より選択される１つ以上であり、
Ａ環、Ｂ環、およびＣ環はいずれもＹ１、Ｘ１、およびＸ２から構成される式（１）中央の縮合２環構造と結合を共有する５員環または６員環を含み、
Ｂ環およびＣ環は、単結合、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓまたは＞Ｓｅを介して結合していてもよく、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲ

は、それぞれ独立して、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－または単結合により、前記Ｂ環およびＣ環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、前記－Ｃ（－Ｒ）$_2$－のＲは、水素、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、

Ｘ^{1}およびＸ^{2}は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅであり、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、前記Ａ環、Ｂ環、およびＣ環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、前記－Ｃ（－Ｒ）$_2$－のＲは、水素、アルキル、またはシクロアルキルであり、

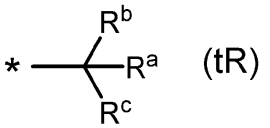
多量体の場合には、式（１）で表される構造を２個または３個有する２量体または３量体である、

＜３＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

【００１６】

＜５＞　下記式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキルを少なくとも１つ含む、＜３＞または＜４＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

【化３】



（式（ｔＲ）中、Ｒ^a、Ｒ^{b}およびＲ^{c}はそれぞれ独立して炭素数１～２４のアルキルであり、前記アルキルにおける任意の－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよく、＊は結合位置である。）

【００１７】

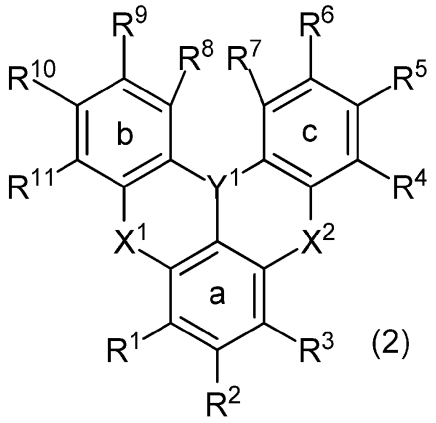
＜６＞　Ｘ^{1}およびＸ^{2}がいずれも＞Ｎ－Ｒであり、Ｘ^{1}およびＸ^{2}における＞Ｎ－Ｒの少なくとも１つのＲが置換されていてもよい２－ビフェニリルもしくは置換されていてもよいテルフェニル－２’－イルである、＜３＞～＜５＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

＜７＞　式（１）で表される化合物または構造におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい、＜３＞～＜６＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

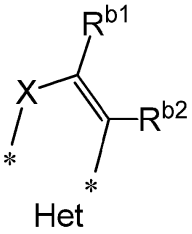
【００１８】

＜８＞　下記式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、または（９）で表される、＜１＞または＜２＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

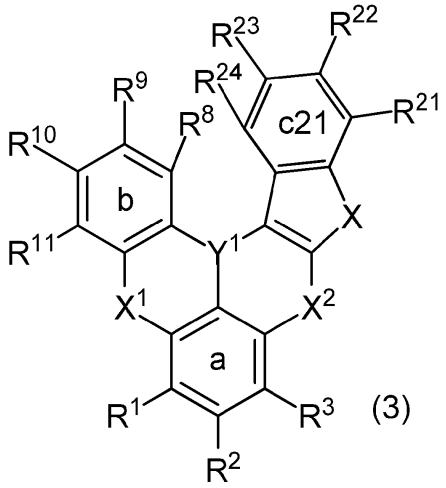
【化４】



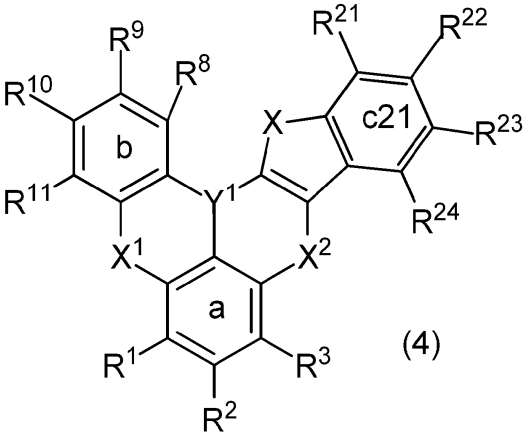
(2)



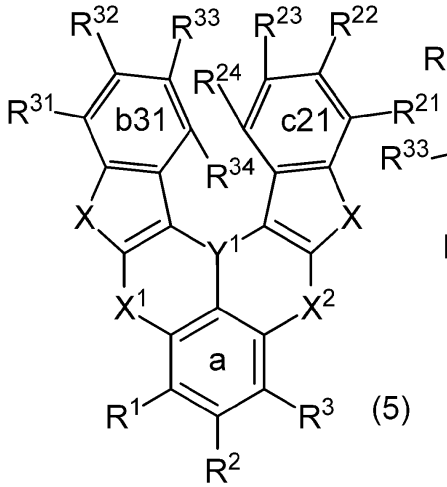
Het



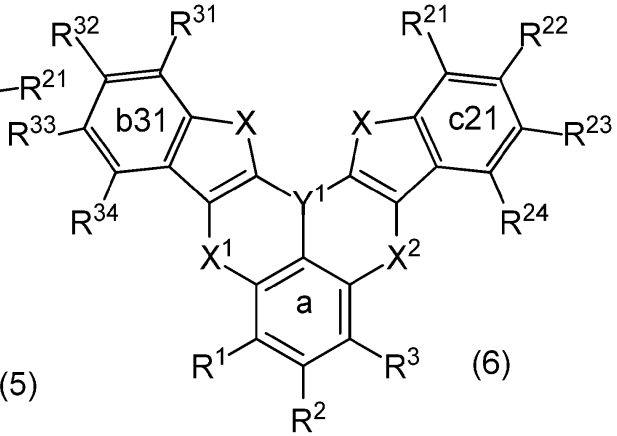
(3)



(4)



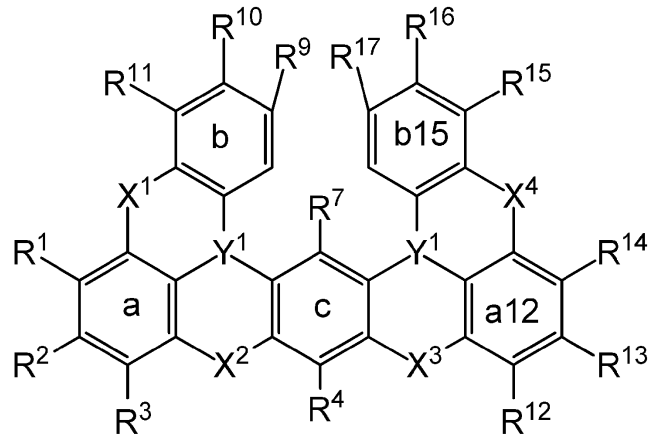
(5)



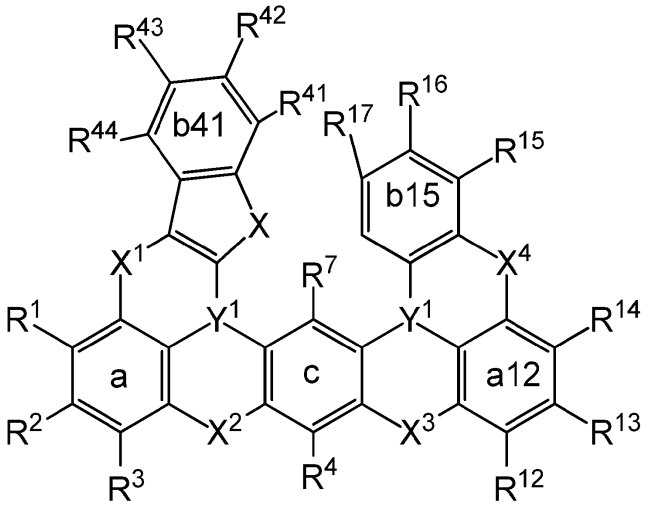
(6)

【００１９】

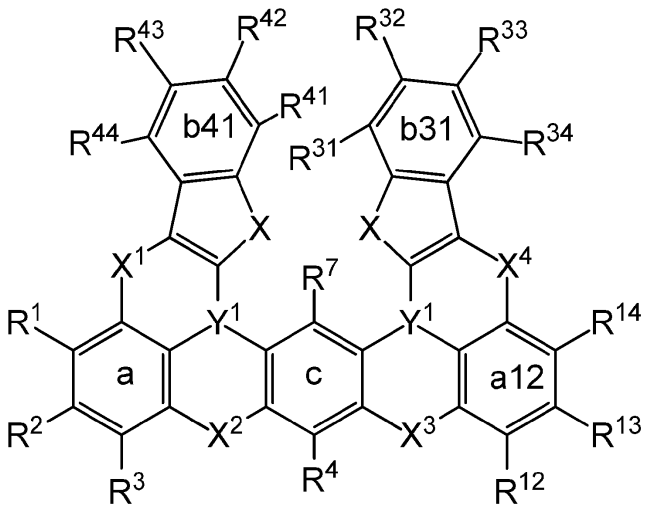
【化５】



(7)



(8)



(9)

【００２０】

（式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、および（９）中、

R^{1}～R^{17}、R^{21}～R^{24}、R^{31}～R^{34}、およびR^{41}～R^{44}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、または置換シリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、また、R^{1}～R^{3}のうちの隣接する基同士が結合してａ環と共に、R^{8}～R^{11}のうちの隣接する基同士が結

合してｂ環と共に、R^4～R^7のうちの隣接する基同士が結合してｃ環と共に、R^{12}～R^{14}のうちの隣接する基同士が結合してａ１２環と共に、R^{15}～R^{17}のうちの隣接する基同士が結合してｂ１５環と共に、R^{21}～R^{24}のうちの隣接する基同士が結合してｃ２１環と共に、R^{31}～R^{34}のうちの隣接する基同士が結合してｂ３１環と共に、およびR^{41}～R^{44}のうちの隣接する基同士が結合してｂ４１環と共に、それぞれ、アリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、またはアルキルジシクロアルキルシリルで置換されていてもよく、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、

ただし、式（２）において、R^1～R^{11}のうち少なくとも一組の隣接する２つの基は、結合して式（Ｈｅｔ）で表される２価の基を構成しており、ここで、R^4およびR^5とR^6およびR^7とが同時に式（Ｈｅｔ）で表される２価の基を構成していることはなく、R^8およびR^9とR^{10}およびR^{11}とが同時に式（Ｈｅｔ）で表される２価の基を構成していることはなく、また、式（７）において、R^1～R^3およびR^9～R^{17}のうち少なくとも一組の隣接する２つの基は、結合して式（Ｈｅｔ）で表される２価の基を構成しており、

式（Ｈｅｔ）中、R^{b1}およびR^{b2}は、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、または置換シリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、＊は結合位置を表し、

Ｘは、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲはそれぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、

式（２）におけるR^7およびR^8、式（３）におけるR^8およびR^{24}、または式（５）におけるR^{34}およびR^{24}は結合して、単結合、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅとなっていてもよく、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、炭素数６～１２のアリール、炭素数２～１５のヘテロアリール、炭素数１～６のアルキル、または炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、炭素数６～１２のアリール、炭素数２～１５のヘテロアリール、炭素数１～６のアルキル、または炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、前記ｂ環、ｂ３１環、ｃ環、およびｃ２１環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、

Y^1は、それぞれ独立して、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、Ａｌ、Ｇａ、Ａｓ、Ｓｉ－Ｒ、またはＧｅ－Ｒであり、前記Ｓｉ－ＲおよびＧｅ－ＲのＲは、炭素数６～１２のアリール、炭素数１～６のアルキル、または炭素数３～１４のシクロアルキルであり、

X^1、X^2、X^3、およびX^4は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅであり、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換さ

れていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環と縮合する５員環、ｂ３１環と縮合する５員環、およびｂ４１環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、

式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、または（９）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、炭素数３～２４の、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、炭素数１～２４のアルキル、または炭素数３～２４のシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよく、

式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、または（９）で表される化合物における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノ、またはハロゲンで置換されていてもよい。）

【００２１】

＜９＞　Ｒ^1～Ｒ^{17}、Ｒ^{21}～Ｒ^{24}、Ｒ^{31}～Ｒ^{34}、およびＲ^{41}～Ｒ^{44}は、それぞれ独立して、水素、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数６～１２のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数６～１２のアリールであり、２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数１～２４のアルキル、炭素数３～２４のシクロアルキルまたはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～６のアルキル）であり、また、Ｒ^1～Ｒ^{3}のうちの隣接する基同士が結合してａ環と共に、Ｒ^8～Ｒ^{11}のうちの隣接する基同士が結合してｂ環と共に、Ｒ^4～Ｒ^{7}のうちの隣接する基同士が結合してｃ環と共に、Ｒ^{12}～Ｒ^{14}のうちの隣接する基同士が結合してａ１２環と共に、Ｒ^{15}～Ｒ^{17}のうちの隣接する基同士が結合してｂ１５環と共に、Ｒ^{21}～Ｒ^{24}のうちの隣接する基同士が結合してｃ２１環と共に、Ｒ^{31}～Ｒ^{34}のうちの隣接する基同士が結合してｂ３１環、およびＲ^{41}～Ｒ^{44}のうちの隣接する基同士が結合してｂ４１環と共に、それぞれ、炭素数９～１６のアリール環または炭素数６～１５のヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素は、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～１２のアルキル、炭素数３～１６のシクロアルキルまたはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～４のアルキル）で置換されていてもよく、

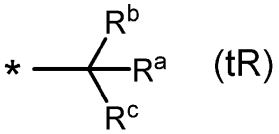
式（Ｈｅｔ）中、Ｒ^{b1}およびＲ^{b2}は水素、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数６～１２のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数６～１２のアリールであり、２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数１～２４のアルキル、炭素数３～２４のシクロアルキル、またはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～６のアルキル）であり、

Ｘは、それぞれ独立して、＞Ｏ，＞Ｓ，＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、炭素数１～２４のアルキル、または炭素数３～２４のシクロアルキルであり、

Ｒ^{7}およびＲ^8、またはＲ^{15}およびＲ^{16}は結合して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｓとなっていてもよく、前記＞Ｎ－ＲのＲは、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～４のアルキルまたは炭素数５～１０のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～４のアルキル、または炭素数５～１０のシクロアルキルであり、

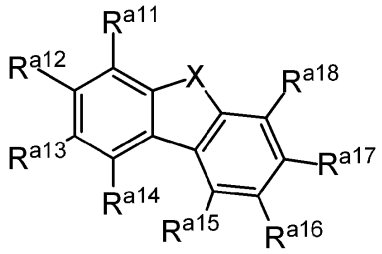
Ｙ^{1}は、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、またはＳｉ－Ｒであり、前記Ｓｉ－ＲのＲは、炭素

数６～１０のアリール、炭素数１～４のアルキル、または炭素数５～１０のシクロアルキルであり、
　X^1、X^2、X^3およびX^4は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｓであり、前記＞Ｎ－ＲのＲは、置換されていてもよい炭素数６～１０のアリール、置換されていてもよい炭素数１～４のアルキル、または置換されていてもよい炭素数５～１０のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～４のアルキル、または炭素数５～１０のシクロアルキルであり、
　式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、および（９）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、炭素数３～２０の、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は、炭素数６～１６のアリール、炭素数２～２２のヘテロアリール、炭素数１～１２のアルキル、または炭素数３～１６のシクロアルキルで置換されていてもよく、
　式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、または（９）で表される化合物における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノ、またはハロゲンで置換されていてもよい
　＜８＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
【００２２】
＜１０＞　下記式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキルを少なくとも１つ含む、＜８＞または＜９＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
【化６】



（式（ｔＲ）中、R^a、R^bおよびR^cはそれぞれ独立して炭素数１～２４のアルキルであり、前記アルキルにおける任意の－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよく、＊は結合位置である。）
【００２３】
＜１１＞　式（２）、（３）、（４）、（５）、および（６）におけるX^1およびX^2ならびに式（７）、（８）、および（９）におけるX^1、X^2、X^3およびX^4がいずれも＞Ｎ－Ｒであり、X^1、X^2、X^3またはX^4として、Ｒが置換されていてもよい２－ビフェニリルまたは置換されていてもよいテルフェニル－２’－イルである＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む、＜８＞～＜１０＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
＜１２＞　式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、または（９）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい、＜８＞～＜１１＞のいずれかに記載する多環芳香族化合物またはその多量体。
【００２４】
＜１３＞　Ａ環、Ｂ環、およびＣ環からなる群より選択される少なくとも一つの環は式（ＤＢＨｅｔ）で表される環である、＜１＞または＜２＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

【化７】



DBHet

【００２５】

（式（ＤＢＨｅｔ）において、Ｒａ１１～Ｒａ１８は水素または置換基であり、ただし、Ｒａ１１～Ｒａ１８のうち、隣接するいずれかの２つまたは３つは式（１）中のＹ１ならびにＸ１および／またはＸ２との結合手となり、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよい。）

【００２６】

＜１４＞　Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される少なくとも一つの環は式（ＤＢＨｅｔ）で表される環であり、Ｒａ１１～Ｒａ１８のうち、隣接するいずれかの２つは式（１）中のＹ１ならびにＸ１またはＸ２との結合手となり、

式（ＤＢＨｅｔ）において、その他のＲａ１１～Ｒａ１８は、水素、置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、または置換シリルであり、

Ａ環、ならびにＢ環およびＣ環のうち前記縮合環でない環における、アリール環またはヘテロアリール環の水素が置換されていてもよい置換基は、置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、および置換シリルからなる群より選択される１つ以上であり、

Ａ環、Ｂ環、およびＣ環はいずれもＹ１、Ｘ１、およびＸ２から構成される式（１）中央の縮合２環構造と結合を共有する５員環または６員環を含み、

Ｂ環およびＣ環は、単結合、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅを介して結合していてもよく、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つに

おけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、前記Ｂ環およびＣ環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、前記－Ｃ（－Ｒ）$_2$－のＲは、水素、アルキル、またはシクロアルキルであり、

Ｘ^{1}およびＸ^{2}は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅであり、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、前記Ａ環、Ｂ環、およびＣ環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、前記－Ｃ（－Ｒ）$_2$－のＲは、水素、アルキル、またはシクロアルキルであり、

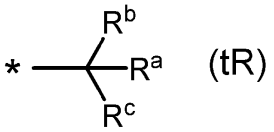
多量体の場合には、式（１）で表される構造を２個または３個有する２量体または３量体である、

＜１３＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

【００２７】

＜１５＞　下記式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキルを少なくとも１つ含む、＜１３＞または＜１４＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

【化８】



（式（ｔＲ）中、Ｒ^a、Ｒ^{b}およびＲ^{c}はそれぞれ独立して炭素数１～２４のアルキルであり、前記アルキルにおける任意の－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよく、＊は結合位置である。）

【００２８】

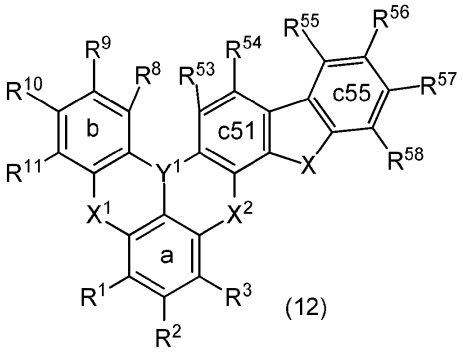
＜１６＞　Ｘ^{1}およびＸ^{2}がいずれも＞Ｎ－Ｒであり、Ｘ^{1}およびＸ^{2}における＞Ｎ－Ｒの少なくとも１つのＲが置換されていてもよい２－ビフェニリルもしくは置換されていてもよいテルフェニル－２’－イルである、＜１３＞～＜１５＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

＜１７＞　式（１）で表される化合物または構造におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい、＜１３＞～＜１６＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

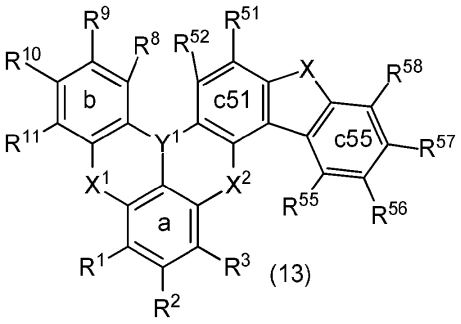
【００２９】

＜１８＞　下記式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、または（１９）で表される、＜１＞または＜２＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

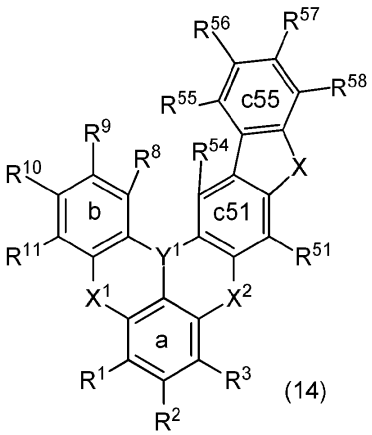
【化９】



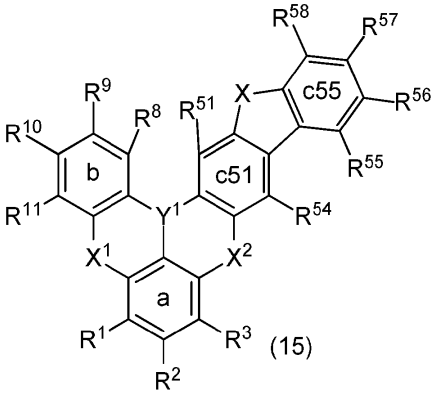
(12)



(13)



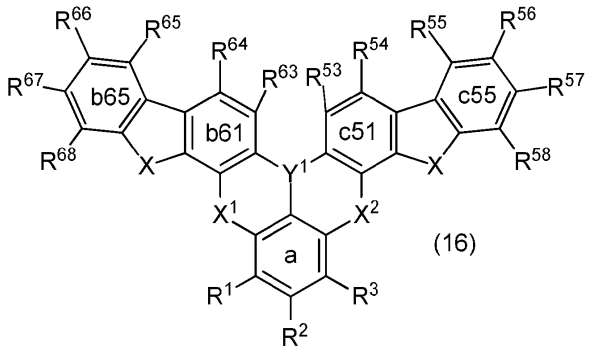
(14)



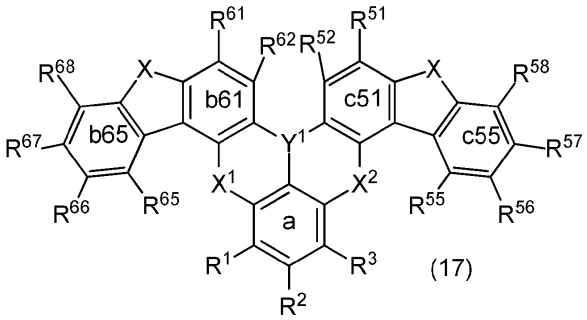
(15)

【００３０】

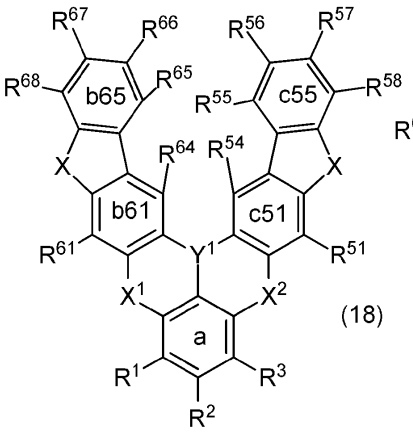
【化１０】



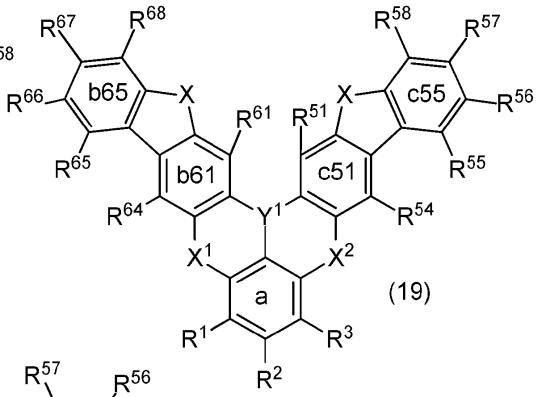
(16)



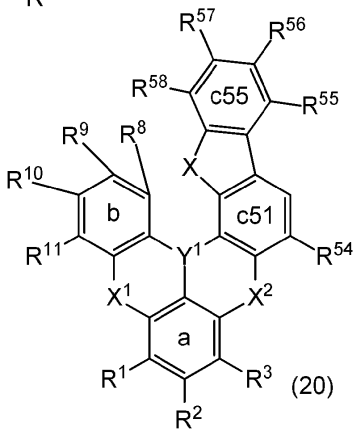
(17)



(18)



(19)



(20)

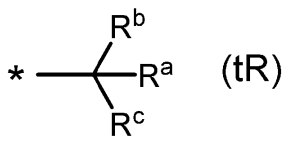
【００３１】

（式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、および（２０）中、

R^1～R^3およびR^8～R^{11}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、またはアルキルジシクロアルキルシリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されて

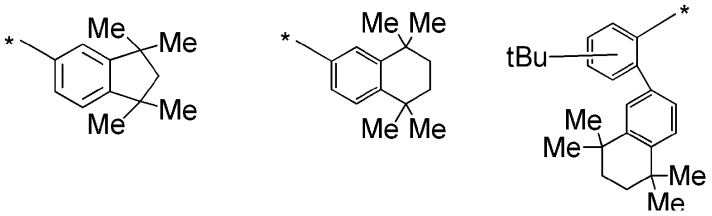
いてもよく、
　R^{51}～R^{58}およびR^{61}～R^{68}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、または置換シリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、
　R^{1}～R^{3}のうちの隣接する基同士が結合してａ環と共に、R^{8}～R^{11}のうちの隣接する基同士が結合してｂ環と共に、R^{51}～R^{54}のうちの隣接する基同士が結合してｃ５１環と共に、R^{55}～R^{58}のうちの隣接する基同士が結合してｃ５５環と共に、R^{61}～R^{64}のうちの隣接する基同士が結合してｂ６１環と共に、およびR^{65}～R^{68}のうちの隣接する基同士が結合してｂ６５環と共に、それぞれ、アリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、または置換シリルで置換されていてもよく、
　Ｘは、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲはそれぞれ独立して水素、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、
　Y^{1}は、それぞれ独立して、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、Ａｌ、Ｇａ、Ａｓ、Ｓｉ－Ｒ、またはＧｅ－Ｒであり、前記Ｓｉ－ＲおよびＧｅ－ＲのＲは、炭素数６～１２のアリール、炭素数１～６のアルキルまたは炭素数３～１４のシクロアルキルであり、
　X^{1}およびX^{2}は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅであり、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の２つのＲは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－または単結合により、ａ環、ｂ環、ｃ５１環、およびｂ６１環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、
　式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、または（２０）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、炭素数３～２４の、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、炭素数１～２４のアルキル、または炭素数３～２４のシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－CH_2－は－Ｏ－で置換されていてもよく、
　式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、および（２０）で表される化合物における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノ、またはハロゲンで置換されていてもよい。）
＜１９＞　R^{1}～R^{3}およびR^{8}～R^{11}は、それぞれ独立して、水素、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数６～１２のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数６～１２のアリー

ルであり、２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、または炭素数１～２４のアルキルであり、
　R^{51}～R^{58}およびR^{61}～R^{68}は、それぞれ独立して、水素、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数６～１２のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数６～１２のアリールであり、２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数１～２４のアルキル、炭素数３～２４のシクロアルキル、またはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～６のアルキル）であり、
　R^{1}～R^{3}のうちの隣接する基同士が結合してａ環と共に、R^{8}～R^{11}のうちの隣接する基同士が結合してｂ環と共に、R^{51}～R^{54}のうちの隣接する基同士が結合してｃ５１環と共に、R^{55}～R^{58}のうちの隣接する基同士が結合してｃ５５環と共に、R^{61}～R^{64}のうちの隣接する基同士が結合してｂ６１環と共に、およびR^{65}～R^{68}のうちの隣接する基同士が結合してｂ６５環と共に、それぞれ、炭素数９～１６のアリール環または炭素数６～１５のヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素は、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～１２のアルキル、または炭素数３～１６のシクロアルキルまたはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～４のアルキル）で置換されていてもよく、
　Ｘは、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、炭素数１～２４のアルキル、または炭素数３～２４のシクロアルキルであり、
　Y^{1}は、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝ＳまたはＳｉ－Ｒであり、前記Ｓｉ－ＲのＲは、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～４のアルキル、または炭素数５～１０のシクロアルキルであり、
　X^{1}およびX^{2}は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｓであり、前記＞Ｎ－ＲのＲは、置換されていてもよい炭素数６～１０のアリール、置換されていてもよい炭素数１～４のアルキル、または置換されていてもよい炭素数５～１０のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～４のアルキル、または炭素数５～１０のシクロアルキルであり、
　式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、および（２０）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、炭素数３～２０の、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は、炭素数６～１６のアリール、炭素数２～２２のヘテロアリール、炭素数１～１２のアルキル、または炭素数３～１６のシクロアルキルで置換されていてもよく、
　式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、または（２０）で表される化合物における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノ、またはハロゲンで置換されていてもよい
　＜１８＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
【００３２】
＜２０＞　下記式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキルを少なくとも１つ含む、＜１８＞または＜１９＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
【化１１】



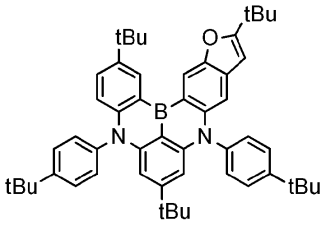
（式（ｔＲ）中、R^{a}、R^{b}およびR^{c}はそれぞれ独立して炭素数１～２４のアルキルであり、前記アルキルにおける任意の－CH_2－は－Ｏ－で置換されていてもよく、＊は結合

位置である。）
【００３３】
＜２１＞　X^1およびX^2がいずれも＞Ｎ－Ｒであり、X^1およびX^2における＞Ｎ－Ｒの少なくとも１つのＲが置換されていてもよい２－ビフェニリルもしくは置換されていてもよいテルフェニル－２’－イルである、＜１８＞～＜２０＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
＜２２＞　式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、または（１９）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つは、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの$-CH_2-$は－Ｏ－で置換されていてもよい、＜１８＞～＜２１＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
＜２３＞　Ａ環がピリジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、または１，２，３－トリアジン環である＜１＞～＜７＞および＜１３＞～＜１７＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
＜２４＞　Y^1がＢである＜１＞～＜２３＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
【００３４】
＜２５＞　X^1、X^2、X^3またはX^4として、Ｒが以下のいずれかの基である＞Ｎ－Ｒを少なくとも１つ含む、＜１＞～＜２４＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
【化１２】

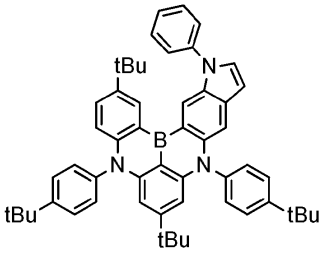


（Ｍｅはメチル、ｔＢｕはｔ－ブチル、＊は結合位置を示す。）
【００３５】
＜２６＞　前記ハロゲンはフッ素である、＜１＞～＜２５＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体。
【００３６】
＜２７＞　下記構造式のいずれかで表される、＜１＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

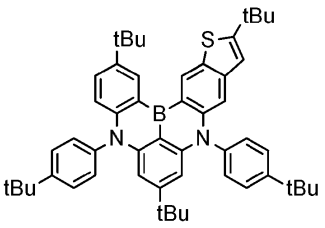
【化１３】



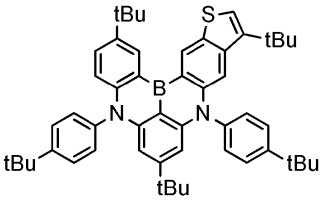
(1F-1)



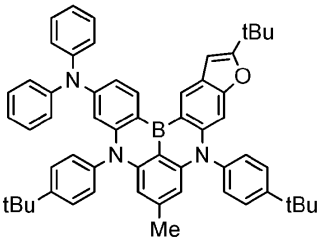
(1F-2)



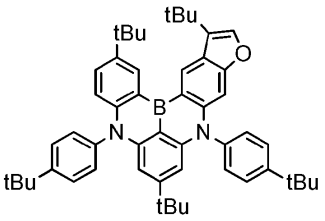
(1F-3)



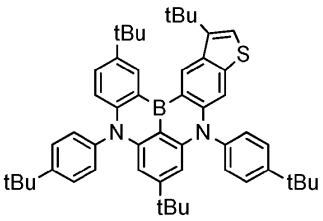
(1F-4)



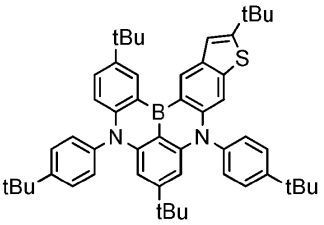
(1F-5)



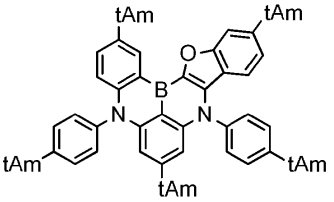
(1F-6)



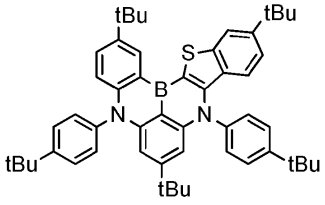
(1F-7)



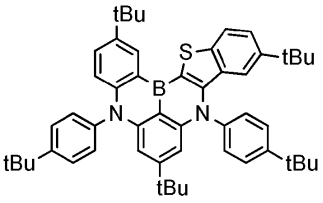
(1F-8)



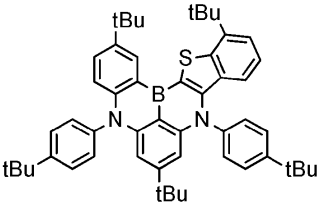
(1F-9)



(1F-10)



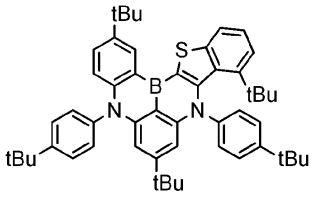
(1F-11)



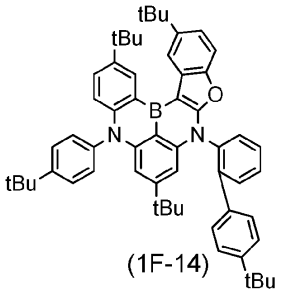
(1F-12)

【００３７】

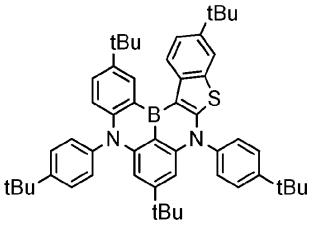
【化１４】



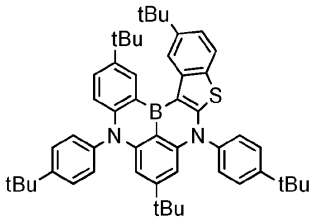
(1F-13)



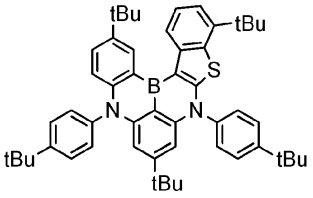
(1F-14)



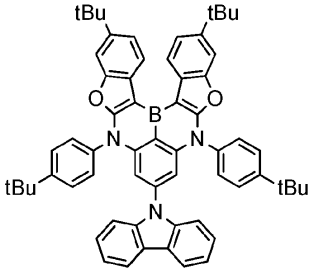
(1F-15)



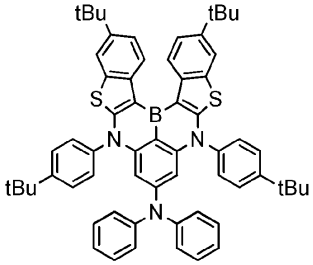
(1F-16)



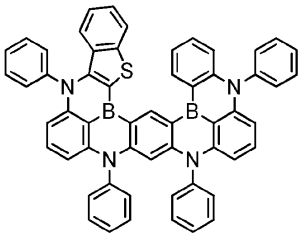
(1F-17)



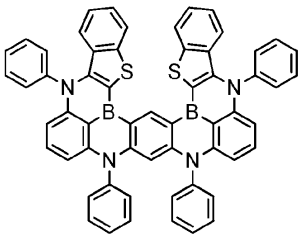
(1F-18)



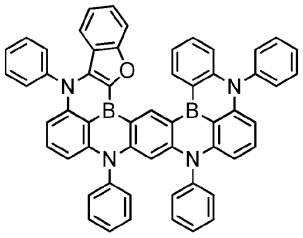
(1F-19)



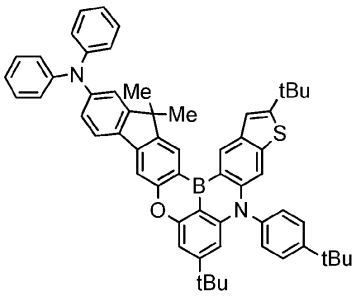
(1F-20)



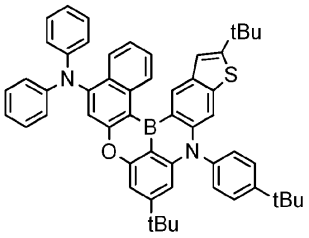
(1F-21)



(1F-22)



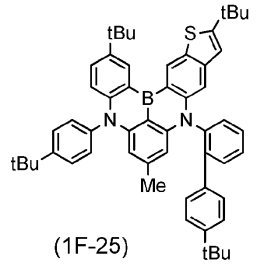
(1F-23)

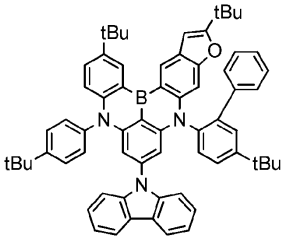


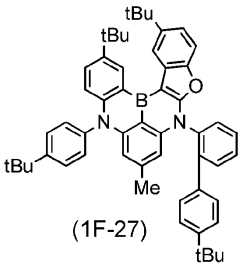
(1F-24)

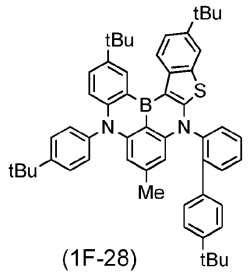
【００３８】

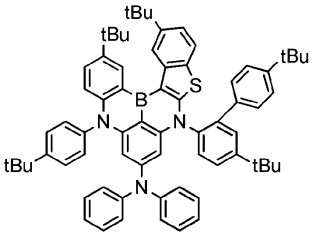
【化１５】

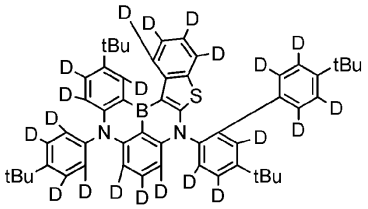

(1F-25)

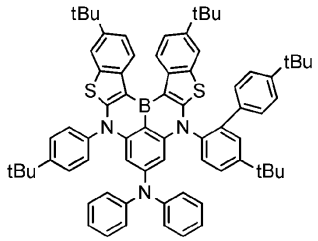

(1F-26)

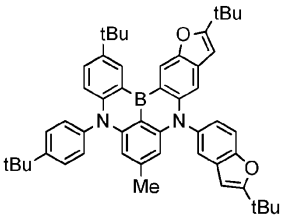

(1F-27)

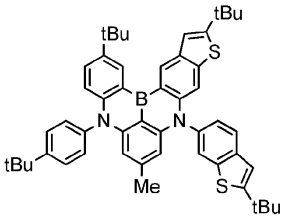

(1F-28)

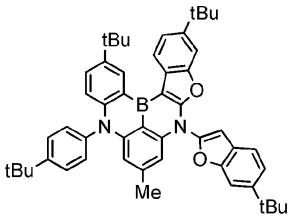

(1F-29)

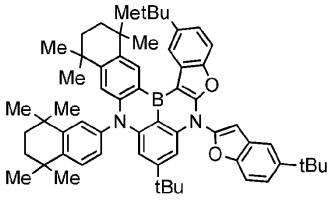

(1F-30)

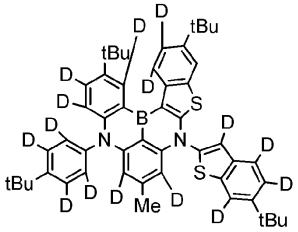

(1F-31)

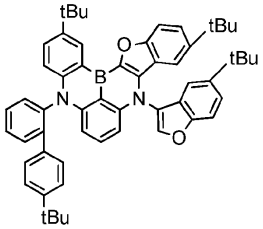

(1F-32)

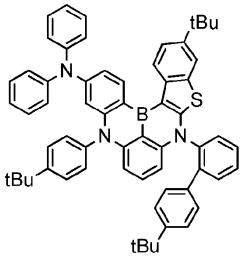

(1F-33)


(1F-34)


(1F-35)

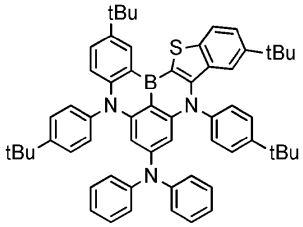

(1F-36)


(1F-37)

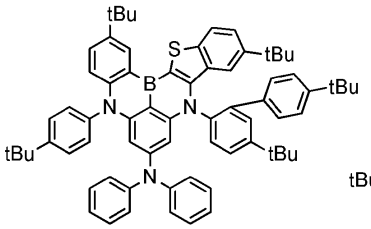

(1F-38)

【００３９】

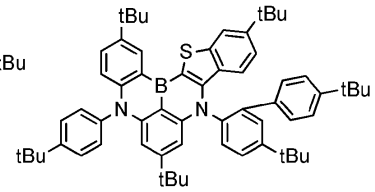
【化１６】



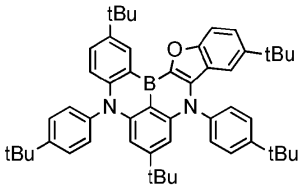
(1F-39)



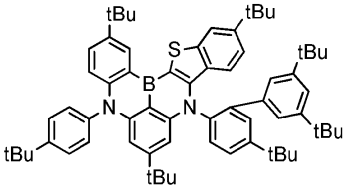
(1F-40)



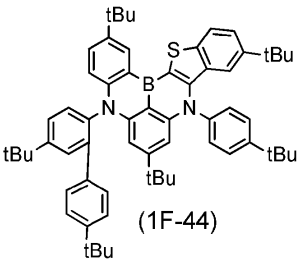
(1F-41)



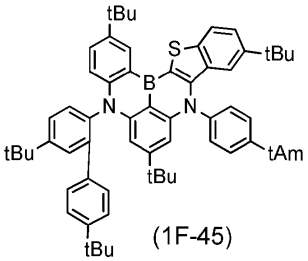
(1F-42)



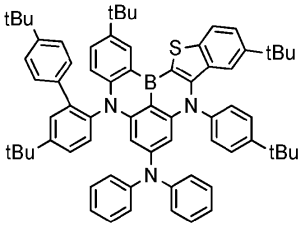
(1F-43)



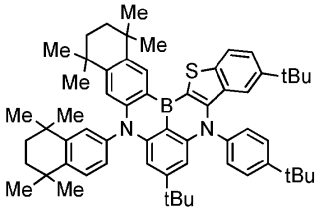
(1F-44)



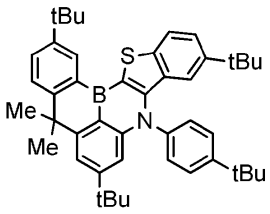
(1F-45)



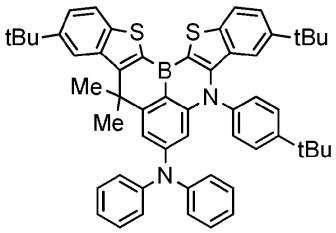
(1F-46)



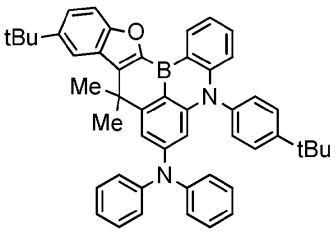
(1F-47)



(1F-60)



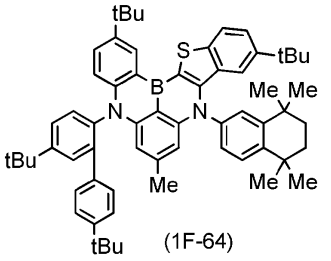
(1F-62)

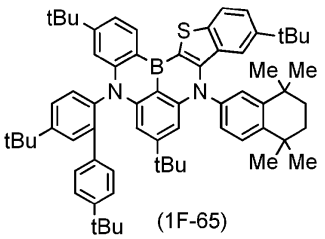


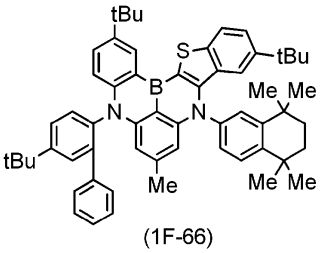
(1F-63)

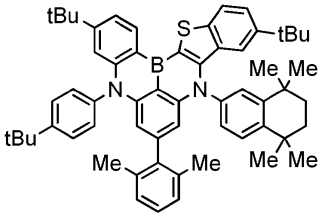
【００４０】

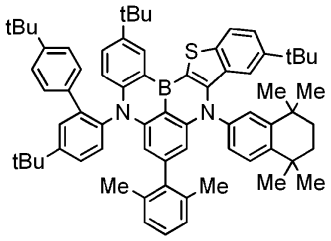
【化１７】

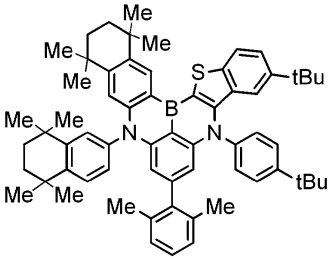

(1F-64)

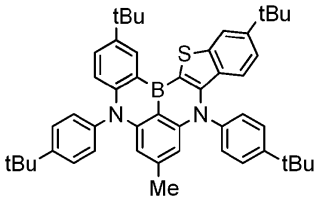

(1F-65)

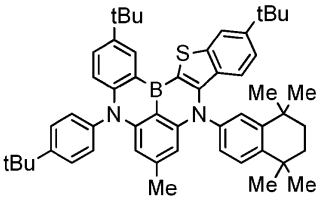

(1F-66)

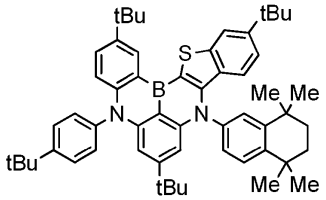

(1F-67)

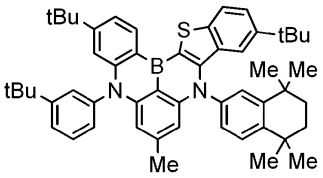

(1F-68)

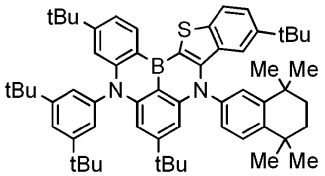

(1F-69)

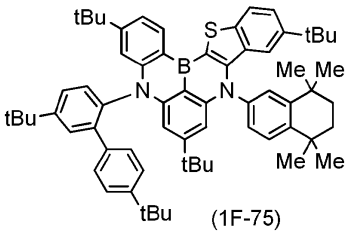

(1F-70)

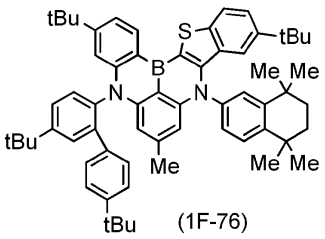

(1F-71)

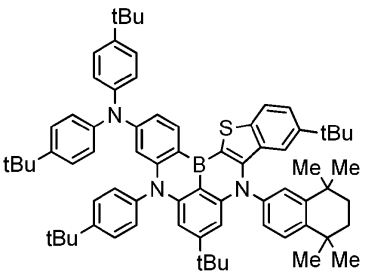

(1F-72)


(1F-73)


(1F-74)

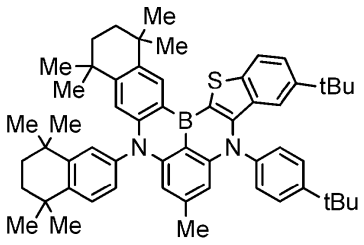

(1F-75)


(1F-76)

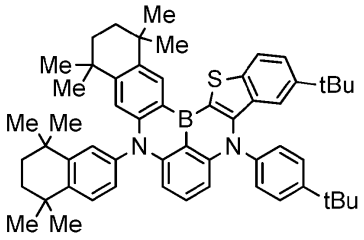

(1F-77)

【００４１】

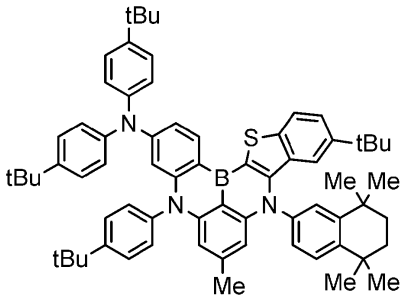
【化１８】



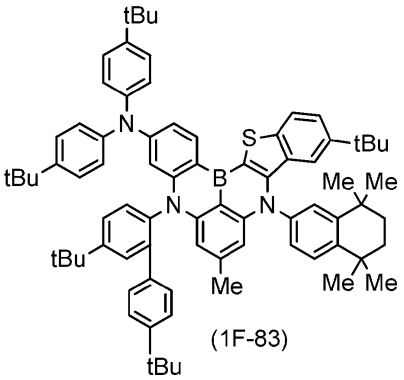
(1F-80)



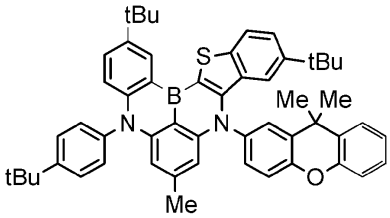
(1F-81)



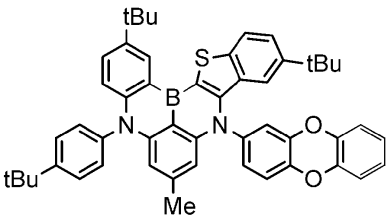
(1F-82)



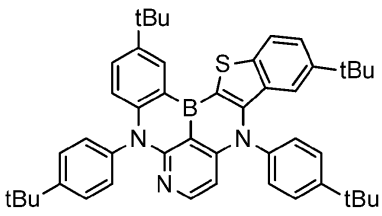
(1F-83)



(1F-84)



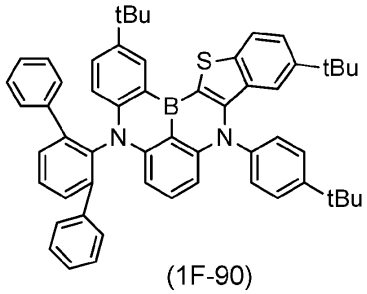
(1F-85)

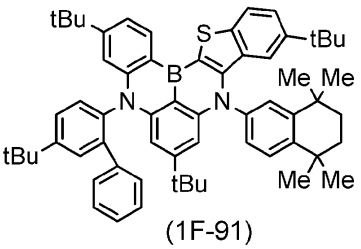


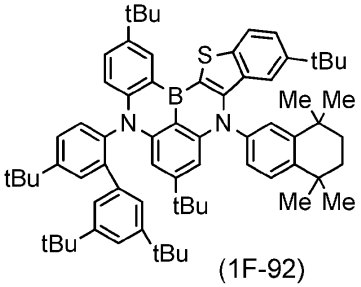
(1F-86)

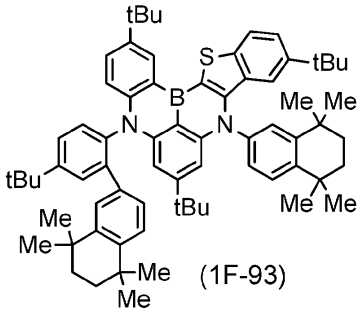
【００４２】

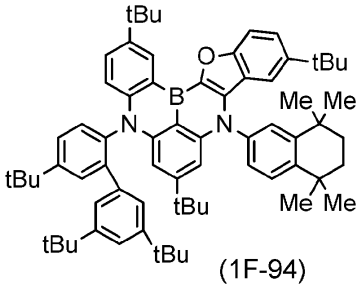
【化１９】

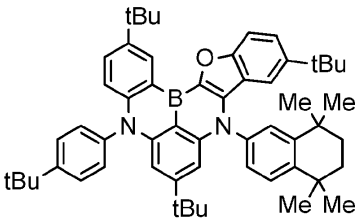

(1F-90)


(1F-91)


(1F-92)

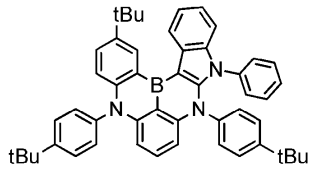

(1F-93)


(1F-94)

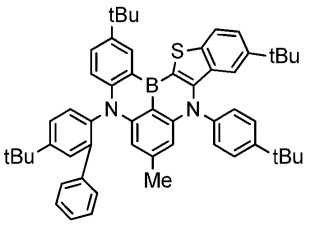

(1F-95)

【００４３】

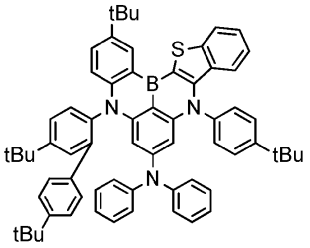
【化２０】



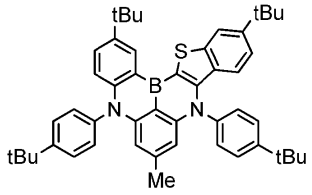
(1F-96)



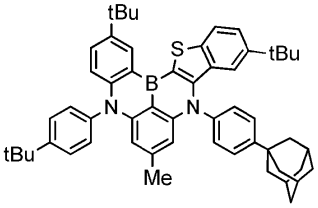
(1F-98)



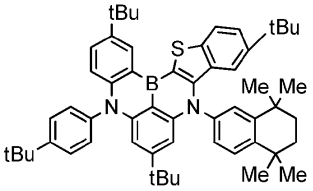
(1F-99)



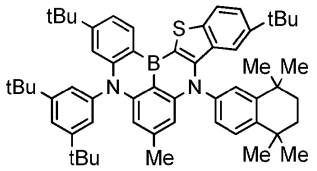
(1F-100)



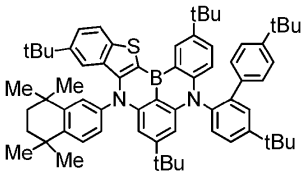
(1F-101)



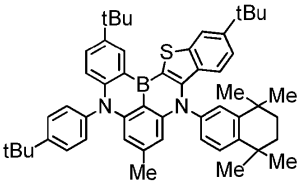
(1F-104)



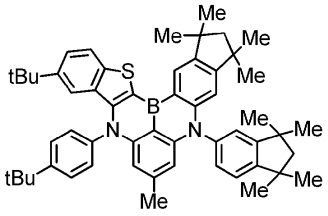
(1F-105)



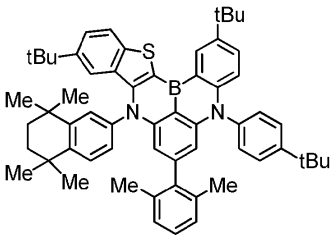
(1F-106)



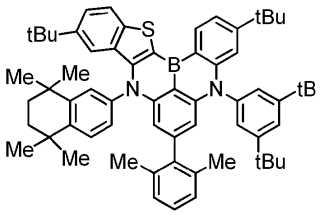
(1F-107)



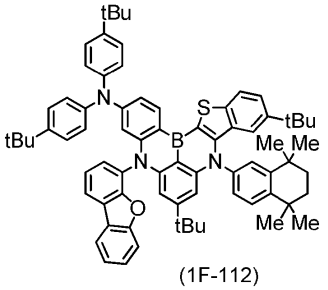
(1F-108)



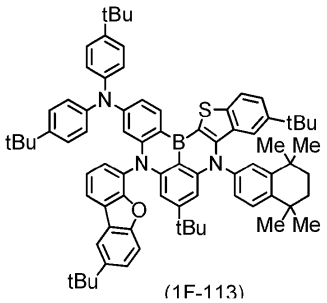
(1F-109)



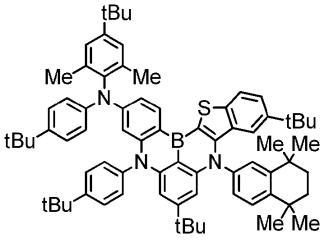
(1F-110)



(1F-112)



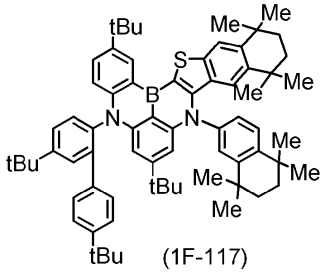
(1F-113)



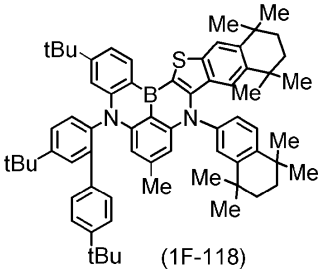
(1F-114)

【００４４】

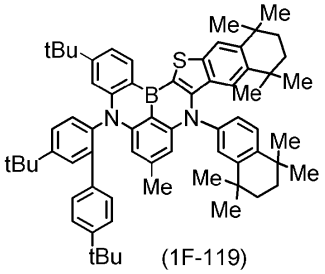
【化２１】



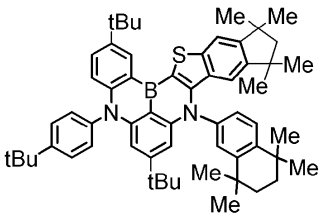
(1F-117)



(1F-118)



(1F-119)



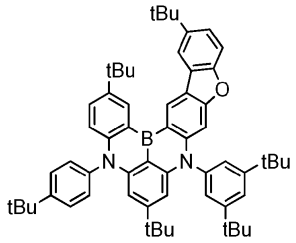
(1F-120)

（上記構造式中、「Ｄ」は重水素、「Ｍｅ」はメチル、「ｔＢｕ」はｔ－ブチル、「ｔＡｍ」はｔ－アミルを示す。）

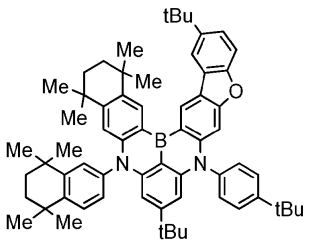
【００４５】

＜２８＞　下記構造式のいずれかで表される、＜１＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

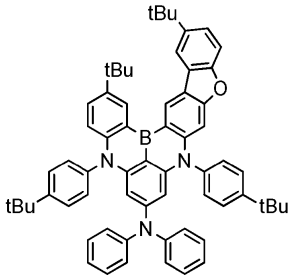
【化２２】



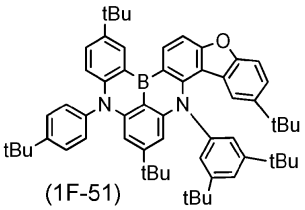
(1F-48)



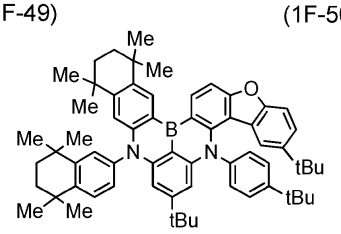
(1F-49)



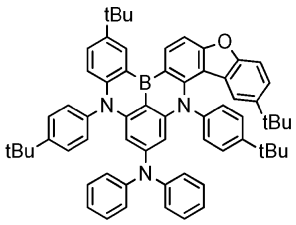
(1F-50)



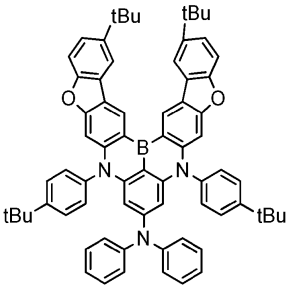
(1F-51)



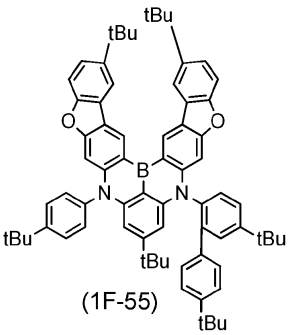
(1F-52)



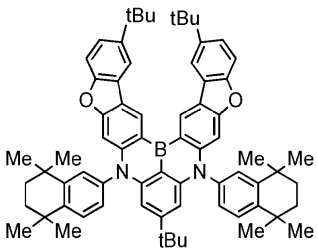
(1F-53)



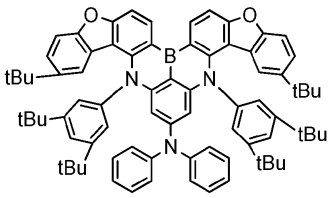
(1F-54)



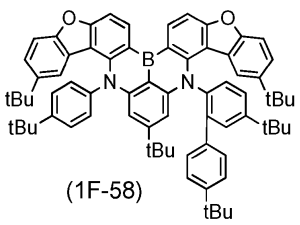
(1F-55)



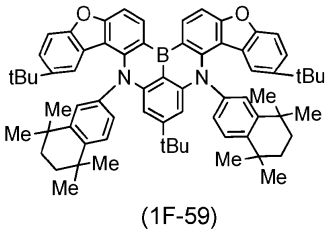
(1F-56)



(1F-57)



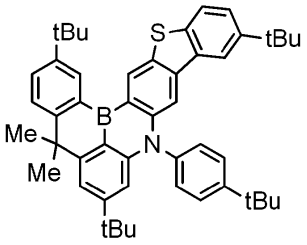
(1F-58)



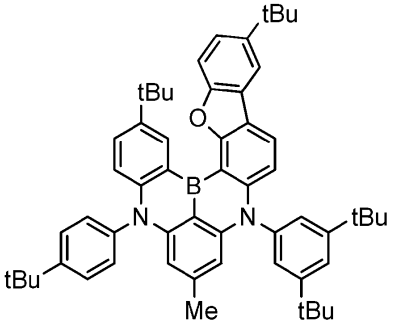
(1F-59)

【００４６】

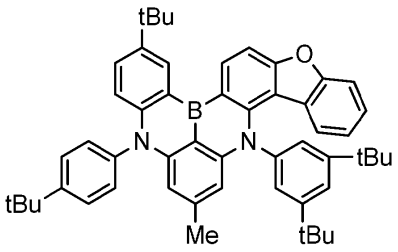
【化２３】



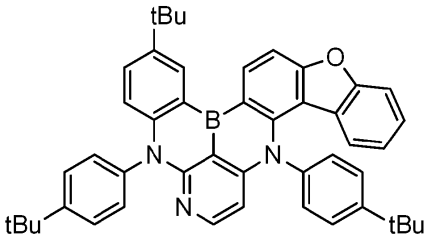
(1F-61)



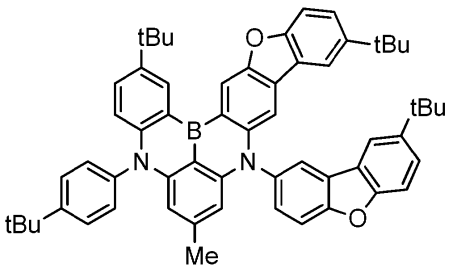
(1F-78)



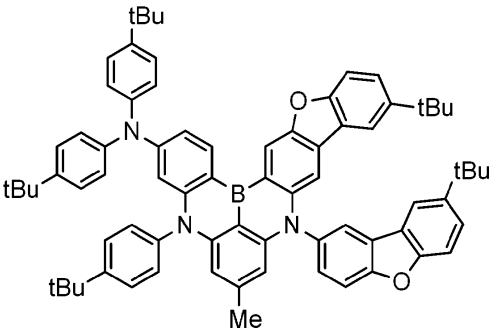
(1F-79)



(1F-87)



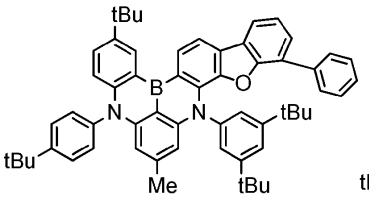
(1F-88)

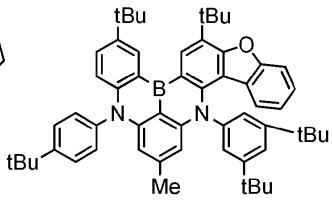


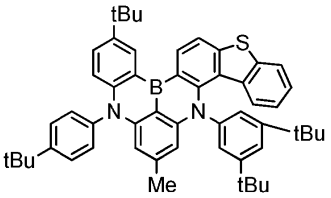
(1F-89)

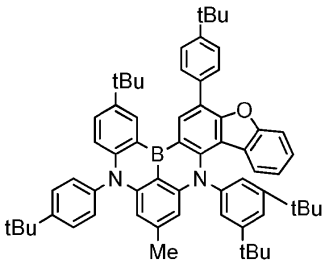
【００４７】

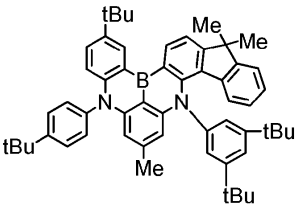
【化２４】


(1F-97)


(1F-102)


(1F-103)


(1F-111)

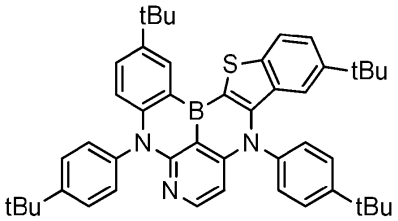

(1F-115)

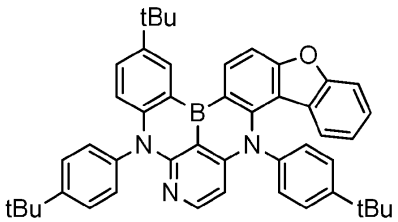
（上記構造式中、「Ｍｅ」はメチル、「ｔＢｕ」はｔ－ブチルを示す。）

【００４８】

＜２９＞　下記構造式のいずれかで表される、＜１＞に記載の多環芳香族化合物またはその多量体。

【化２５】


(1F-86)


(1F-87)

【００４９】

＜３０＞　＜１＞～＜２９＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体に反応性置換基が置換した、反応性化合物。

＜３１＞　＜３０＞に記載の反応性化合物をモノマーとして高分子化させた高分子化合物、または、当該高分子化合物をさらに架橋させた高分子架橋体。

＜３２＞　主鎖型高分子に＜３０＞に記載の反応性化合物を置換させたペンダント型高分子化合物、または、当該ペンダント型高分子化合物をさらに架橋させたペンダント型高分子架橋体。

＜３３＞　＜１＞～＜２９＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体を含有する、有機デバイス用材料。

＜３４＞　＜３０＞に記載の反応性化合物を含有する、有機デバイス用材料。

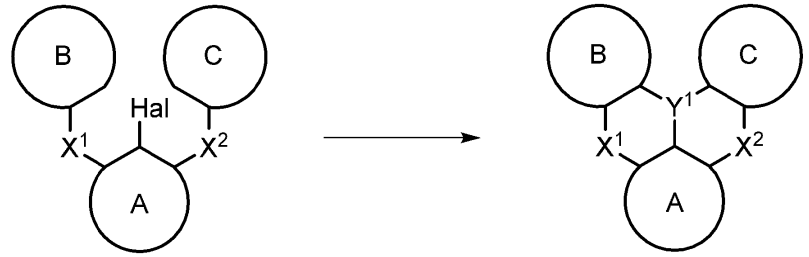
＜３５＞　＜３４＞に記載の高分子化合物または高分子架橋体を含有する、有機デバイス用材料。

＜３６＞　＜３２＞に記載のペンダント型高分子化合物またはペンダント型高分子架橋体を含有する、有機デバイス用材料。

＜３７＞　前記有機デバイス用材料が、有機電界発光素子用材料、有機電界効果トランジスタ用材料または有機薄膜太陽電池用材料である、＜３３＞～＜３６＞のいずれかに記載

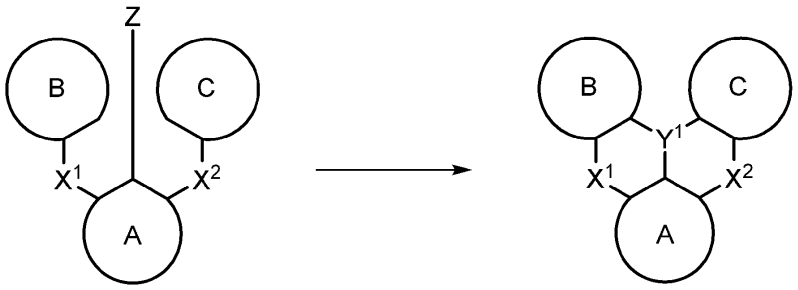
の有機デバイス用材料。
＜３８＞　前記有機電界発光素子用材料が発光層用材料である、＜３７＞に記載の有機デバイス用材料。
＜３９＞　＜１＞～＜３２＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物またはその多量体と、有機溶媒とを含む、組成物。
＜４０＞　＜３０＞に記載の反応性化合物と有機溶媒とを含む組成物。
＜４１＞　主鎖型高分子と＜３３＞に記載の反応性化合物と有機溶媒とを含む組成物。
＜４２＞　＜３１＞に記載の高分子化合物または高分子架橋体と有機溶媒とを含む組成物。
＜４３＞　＜３２＞に記載のペンダント型高分子化合物またはペンダント型高分子架橋体と有機溶媒とを含む組成物。
【００５０】
＜４４＞　陽極および陰極からなる一対の電極と、該一対の電極間に配置され、＜１＞～＜２９＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物もしくはその多量体、＜３０＞に記載の反応性化合物、＜３１＞に記載の高分子化合物もしくは高分子架橋体、または、＜３２＞に記載のペンダント型高分子化合物もしくはペンダント型高分子架橋体を含有する有機層とを有する、有機電界発光素子。
＜４５＞　陽極および陰極からなる一対の電極と、該一対の電極間に配置され、＜１＞～＜２９＞のいずれかに記載の多環芳香族化合物もしくはその多量体、＜３０＞に記載の反応性化合物、＜３１＞に記載の高分子化合物もしくは高分子架橋体、または、＜３２＞に記載のペンダント型高分子化合物もしくはペンダント型高分子架橋体を含有する発光層とを有する、有機電界発光素子。
＜４６＞　前記発光層が、ホストと、ドーパントとしての前記多環芳香族化合物、その多量体、反応性化合物、高分子化合物、高分子架橋体、ペンダント型高分子化合物またはペンダント型高分子架橋体とを含む、＜４５＞に記載の有機電界発光素子。
＜４７＞　前記ホストが、アントラセン系化合物、フルオレン系化合物またはジベンゾクリセン系化合物である、＜４６＞に記載の有機電界発光素子。
【００５１】
＜４８＞　前記陰極と前記発光層との間に配置される電子輸送層および／または電子注入層を有し、該電子輸送層および電子注入層の少なくとも１つは、ボラン誘導体、ピリジン誘導体、フルオランテン誘導体、ＢＯ系誘導体、アントラセン誘導体、ベンゾフルオレン誘導体、ホスフィンオキサイド誘導体、ピリミジン誘導体、アリールニトリル誘導体、トリアジン誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、フェナントロリン誘導体、キノリノール系金属錯体、チアゾール誘導体、ベンゾチアゾール誘導体、シロール誘導体およびアゾリン誘導体からなる群から選択される少なくとも１つを含有する、＜４５＞～＜４７＞のいずれかに記載の有機電界発光素子。
＜４９＞　前記電子輸送層および／または電子注入層が、さらに、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属の有機錯体、アルカリ土類金属の有機錯体および希土類金属の有機錯体からなる群から選択される少なくとも１つを含有する、＜４８＞に記載の有機電界発光素子。
＜５０＞　正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層および電子注入層のうちの少なくとも１つの層が、各層を形成し得る低分子化合物をモノマーとして高分子化させた高分子化合物、もしくは、当該高分子化合物をさらに架橋させた高分子架橋体、または、各層を形成し得る低分子化合物を主鎖型高分子と反応させたペンダント型高分子化合物、もしくは、当該ペンダント型高分子化合物をさらに架橋させたペンダント型高分子架橋体を含む、＜４４＞～＜４９＞のいずれかに記載の有機電界発光素子。
＜５１＞　＜４４＞～＜５０＞のいずれかに記載の有機電界発光素子を備えた表示装置または照明装置。
【００５２】

＜５２＞　有機アルカリ化合物を用いて下記中間体－１におけるX^1とX^2の間のハロゲン原子（Ｈａｌ）をメタル化する反応工程と、
　Y^1のハロゲン化物、Y^1のアミノ化ハロゲン化物、Y^1のアルコキシ化物およびY^1のアリールオキシ化物からなる群から選択される試薬を用いて前記メタルとY^1とを交換する反応工程と、
　ブレンステッド塩基を用いて連続的な芳香族求電子置換反応により前記Y^1でＢ環とＣ環とを結合する反応工程と
　を含む、＜１＞に記載の式（１）で表される多環芳香族化合物または式（１）で表される構造を複数有する多環芳香族化合物の多量体の製造方法。
【化２６】



（中間体-1）　（１）

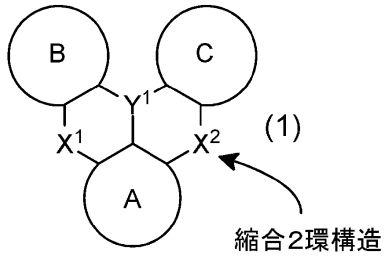
【００５３】
＜５３＞　さらにルイス酸を加えて反応を促進させることを特徴とする、＜５２＞に記載の製造方法。
＜５４＞　下記、中間体－２に酸を作用させる反応工程を含む、＜１＞に記載の式（１）で表される多環芳香族化合物または式（１）で表される構造を複数有する多環芳香族化合物の多量体の製造方法。
【化２７】



（中間体-2）　（１）

（中間体－２において、Ｚは、エステル化されていてもよい－Ｂ（ＯＨ）$_2$である。）
【発明の効果】
【００５４】
　本発明により、新規な多環芳香族化合物が提供される。本発明の多環芳香族化合物は有機デバイス用材料、特に有機電界発光素子の発光層形成のための発光層用材料として有用である。本発明の化合物を発光層に用いることで、高効率、長寿命な有機ＥＬ素子を提供することができる。
【図面の簡単な説明】
【００５５】
【図１】有機ＥＬ素子の例を示す概略断面図である。
【図２】バンクを有する基板にインクジェット法を用いて有機ＥＬ素子を作製する方法を説明する図である。
【発明を実施するための形態】

【００５６】
以下において、本発明について詳細に説明する。以下に記載する構成要件の説明は、代表的な実施形態や具体例に基づいてなされることがあるが、本発明はそのような実施形態に限定されるものではない。なお、本明細書において「～」を用いて表される数値範囲は「～」前後に記載される数値を下限値および上限値として含む範囲を意味する。また、本明細書において構造式の説明における「水素」は「水素原子（Ｈ）」を意味する。
【００５７】
本明細書において化学構造や置換基を炭素数で表すことがあるが、化学構造に置換基が置換した場合や、置換基にさらに置換基が置換した場合などにおける炭素数は、化学構造や置換基それぞれの炭素数を意味し、化学構造と置換基の合計の炭素数や、置換基と置換基の合計の炭素数を意味するものではない。例えば、「炭素数Ｘの置換基Ａで置換された炭素数Ｙの置換基Ｂ」とは、「炭素数Ｙの置換基Ｂ」に「炭素数Ｘの置換基Ａ」が置換することを意味し、炭素数Ｙは置換基Ａおよび置換基Ｂの合計の炭素数ではない。また例えば、「置換基Ａで置換された炭素数Ｙの置換基Ｂ」とは、「炭素数Ｙの置換基Ｂ」に「（炭素数限定がない）置換基Ａ」が置換することを意味し、炭素数Ｙは置換基Ａおよび置換基Ｂの合計の炭素数ではない。
【００５８】
<u>１．多環芳香族化合物およびその多量体</u>
本発明の化合物は、下記式（１）で表される多環芳香族化合物、または下記式（１）で表される構造を複数有する多環芳香族化合物の多量体である。
【００５９】
【化２８】



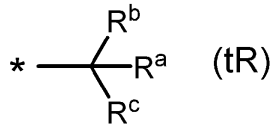
式（１）において「Ａ」～「Ｃ」は環構造を示す符号である。
【００６０】
式（１）におけるＡ環、Ｂ環、およびＣ環は、それぞれ独立して、アリール環またはヘテロアリール環であり、ただし、Ａ環、Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される少なくとも一つの環は単環であるアリール環、単環であるヘテロアリール環、およびシクロペンタジエン環からなる群より選択される２つ以上の環で構成される縮合環である。これらの環における少なくとも１つの水素は、置換基で置換されていてもよい。この置換基は、置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ（アリールとヘテロアリールを有するアミノ）、置換もしくは無置換のジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、または置換シリルが好ましい。これらの基が置換基を有する場合の置換基としては、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキル、またはジアリールアミノがあげられる。
【００６１】
Ａ環、Ｂ環およびＣ環は少なくともいずれかが少なくとも１つの置換基を有する環であることが好ましく、Ａ環、Ｂ環およびＣ環のいずれも少なくとも１つの置換基を有する環であることがより好ましく、Ａ環、Ｂ環およびＣ環それぞれが１つの置換基を有する環であることがさらに好ましい。

置換基としては、置換もしくは無置換のアルキル（特に、ネオペンチル）、アダマンチルのようなシクロアルキルが好ましく、また、ターシャリーアルキル（ｔＲ）が、好ましい。このような嵩高い置換基により分子間距離が増加するため発光量子収率（ＰＬＱＹ）が向上するからである。また、置換基としては、ジアリールアミノも好ましい。

【００６２】

前記ターシャリーアルキルは下記式（ｔＲ）で表される。

【化２９】



【００６３】

式（ｔＲ）中、R^a、R^b、およびR^cはそれぞれ独立して炭素数１～２４のアルキルであり、前記アルキルにおける任意の－CH_2－は－Ｏ－で置換されていてもよく、式（ｔＲ）で表される基は＊において式（１）で表される化合物または構造における少なくとも１つの水素と置換する。

【００６４】

R^a、R^bおよびR^cの「炭素数１～２４のアルキル」としては、直鎖および分岐鎖のいずれでもよく、例えば、炭素数１～２４の直鎖アルキルまたは炭素数３～２４の分岐鎖アルキル、炭素数１～１８のアルキル（炭素数３～１８の分岐鎖アルキル）、炭素数１～１２のアルキル（炭素数３～１２の分岐鎖アルキル）、炭素数１～６のアルキル（炭素数３～６の分岐鎖アルキル）、炭素数１～４のアルキル（炭素数３～４の分岐鎖アルキル）があげられる。

【００６５】

式（１）の式（ｔＲ）におけるR^a、R^b、およびR^cの炭素数の合計は炭素数３～２０が好ましく、炭素数３～１０が特に好ましい。

【００６６】

R^a、R^b、およびR^cの具体的なアルキルとしては、メチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｎ－ブチル、イソブチル、ｓ－ブチル、ｔ－ブチル、ｎ－ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ｔ－ペンチル、ｎ－ヘキシル、１－メチルペンチル、４－メチル－２－ペンチル、３，３－ジメチルブチル、２－エチルブチル、ｎ－ヘプチル、１－メチルヘキシル、ｎ－オクチル、ｔ－オクチル、１－メチルヘプチル、２－エチルヘキシル、２－プロピルペンチル、ｎ－ノニル、２，２－ジメチルヘプチル、２，６－ジメチル－４－ヘプチル、３，５，５－トリメチルヘキシル、ｎ－デシル、ｎ－ウンデシル、１－メチルデシル、ｎ－ドデシル、ｎ－トリデシル、１－ヘキシルヘプチル、ｎ－テトラデシル、ｎ－ペンタデシル、ｎ－ヘキサデシル、ｎ－ヘプタデシル、ｎ－オクタデシル、ｎ－エイコシルなどがあげられる。

【００６７】

式（ｔＲ）で表される基としては、例えばｔ－ブチル、ｔ－アミル、１－エチル－１－メチルプロピル、１，１－ジエチルプロピル、１，１－ジメチルブチル、１－エチル－１－メチルブチル、１，１，３，３－テトラメチルブチル、１，１，４－トリメチルペンチル、１，１，２－トリメチルプロピル、１，１－ジメチルオクチル、１，１－ジメチルペンチル、１，１－ジメチルヘプチル、１，１，５－トリメチルヘキシル、１－エチル－１－メチルヘキシル、１－エチル－１，３－ジメチルブチル、１，１，２，２－テトラメチルプロピル、１－ブチル－１－メチルペンチル、１，１－ジエチルブチル、１－エチル－１－メチルペンチル、１，１，３－トリメチルブチル、１－プロピル－１－メチルペンチル、１，１，２－トリメチルプロピル、１－エチル－１，２，２－トリメチルプロピル、１－プロピル－１－メチルブチル、１，１－ジメチルヘキシルなどがあげられる。これらのうち、ｔ－ブチルおよびｔ－アミルが好ましい。

【００６８】
Ａ環、Ｂ環、およびＣ環における置換基の他の好ましい例としては、例えば、式（ｔＲ）の基で置換されたジアリールアミノ、式（ｔＲ）の基で置換されたカルバゾリル（好ましくは、Ｎ－カルバゾリル）または式（ｔＲ）の基で置換されたベンゾカルバゾリル（好ましくは、Ｎ－ベンゾカルバゾリル）があげられる。「ジアリールアミノ」については下記「第１の置換基」として説明する基があげられる。ジアリールアミノ、カルバゾリルおよびベンゾカルバゾリルへの式（ｔＲ）の基の置換形態としては、これらの基におけるアリール環またはベンゼン環の一部または全ての水素が式（ｔＲ）の基で置換された例があげられる。
上記の好ましい置換基についての説明は式（２）～（９）および（１２）～（１９）それぞれで表される多環芳香族化合物およびその多量体においても同様にあてはまる。
【００６９】
Ａ環、Ｂ環およびＣ環におけるアリール環、ヘテロアリール環、または縮合環は、Y^1、X^1およびX^2から構成される式（１）中央の縮合２環構造と結合を共有する５員環または６員環を有していてもよい。
ここで、「縮合２環構造」とは、式（１）の中央に示した、Y^1、X^1およびX^2を含んで構成される２つの飽和炭化水素環が縮合した構造を意味する。また、「縮合２環構造と結合を共有する６員環」とは、前記縮合２環構造に縮合した６員環（例えばベンゼン環））を意味する。また、「（Ａ環である）アリール環またはヘテロアリール環がこの６員環を有する」とは、この６員環だけでＡ環が形成されるか、または、この６員環を含むようにこの６員環にさらに他の環などが縮合してＡ環が形成されることを意味する。言い換えれば、ここで言う「６員環を有する（Ａ環である）アリール環またはヘテロアリール環」とは、Ａ環の全部または一部を構成する６員環が、前記縮合２環構造に縮合していることを意味する。「Ｂ環」、「Ｃ環」、また「５員環」についても同様の説明が当てはまる。
【００７０】
式（１）におけるＡ環、Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される少なくとも一つの環は単環のアリール環、シクロペンタジエン環、単環のヘテロアリール環からなる群より選択される２つ以上の環で構成される縮合環（以下「縮合環Ｆ」ということがある。」である。この縮合環における少なくとも１つの水素は置換されていてもよい。本発明者らはこのような縮合環を有する多環芳香族化合物を発光層用材料として有機ＥＬ素子を構成することにより、発光効率および素子寿命を向上させることができることを見出した。
【００７１】
式（１）において、Ａ環、Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される１つまたは２つの環が縮合環Ｆであることが好ましく、Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される１つまたは２つの環が縮合環Ｆであることがより好ましい。
【００７２】
縮合環Ｆを構成する環の数は特に限定されないが、２～５であることが好ましく、２または３であることがより好ましい。縮合環Ｆの構成例としては、単環であるアリール環１つと単環であるヘテロアリール環１つとの縮合環、単環であるアリール環１つとシクロペンタジエン環１つとの縮合環、単環であるアリール環２つと単環であるヘテロアリール環１つとの縮合環、単環であるアリール環２つとシクロペンタジエン環１つとの縮合環などがあげられる。このときの単環であるアリール環はベンゼン環であることが好ましい。単環であるヘテロアリール環としてはフラン環、チオフェン環、ピロール環、ピリジン環、ピリミジン環、およびピリダジン環などがあげられる。
【００７３】
縮合環Ｆは６員環と５員環との組み合わせであることが好ましい。このとき、６員環が上記の縮合２環構造と結合を共有していてもよく、５員環が上記の縮合２環構造と結合を共有していてもよい。なお、縮合環Ｆはシクロペンタジエン環のみで構成されることはない。シクロペンタジエン環は１，１－ジメチル－２，４－シクロペンタジエン環であることが好ましい。

式（１）において、Ａ環、Ｂ環、およびＣ環のうち、縮合環Ｆであるもの以外は、単環であるアリール環または単環であるヘテロアリール環であることが好ましく、ベンゼン環、ピリジン環、またはピリミジン環であることがより好ましく、ベンゼン環であることがさらに好ましい。

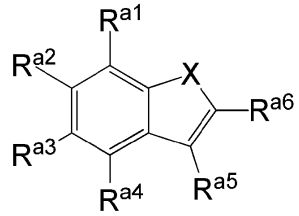
【００７４】

一態様として、縮合環Ｆは、硫黄原子または酸素原子を含有するヘテロアリール環を含んで構成されていることが好ましい。

また、縮合環Ｆは、式（ＢＨｅｔ）で表される環、式（ＤＢＨｅｔ）で表される環、式（ＰＢＨｅｔ）で表される環、または式（ＰＰＨｅｔ）で表される環であることが好ましく、式（ＢＨｅｔ）で表される環または式（ＤＢＨｅｔ）で表される環であることがより好ましい。すなわち、式（１）で表される多環芳香族化合物およびその多量体は、式（ＢＨｅｔ）で表される環、式（ＤＢＨｅｔ）で表される環、式（ＰＢＨｅｔ）で表される環、および式（ＰＰＨｅｔ）で表される環からなる群より選択される少なくとも一つの縮合環を含んでいることが好ましく、式（ＢＨｅｔ）で表される環および式（ＤＢＨｅｔ）で表される環からなる群より選択される少なくとも一つの縮合環を含んでいることがより好ましい。式（１）で表される多環芳香族化合物およびその多量体は、縮合環Ｆとして、式（ＢＨｅｔ）で表される環、式（ＤＢＨｅｔ）で表される環、式（ＰＢＨｅｔ）で表される環、および式（ＰＰＨｅｔ）で表される環からなる群より選択されるいずれか一種の縮合環を含んでいてもよく、いずれか二種以上の縮合環を含んでいてもよい。

【００７５】

【化３０】



BHet

【００７６】

式（ＢＨｅｔ）において、Ｒａ１～Ｒａ６は水素または置換基であり、ただしＲａ１～Ｒａ６のうち、隣接するいずれかの２つまたは３つは式（１）中のＹ１ならびにＸ１および／またはＸ２との結合手となり、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）２、または＞Ｃ（－Ｒ）２である。Ｘとしての＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）２、または＞Ｃ（－Ｒ）２のＲは独立して水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキルまたは置換されていてもよいシクロアルキルであり、２つのＲは互いに結合して環を形成していてもよい。

【００７７】

Ｒａ１～Ｒａ６は水素、または置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、または置換シリルであることが好ましい。Ｒａ１～Ｒａ６のうち０～２個が置換基（水素以外）でありその他（上記結合手となっているものを除く）が水素であることが好ましく、Ｒａ１～Ｒａ６のうち０～１個が置換基でありその他が水素であることがより好ましい。このときの置換基としては上述の式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキル（ｔ－ブチル、ｔ－アミルなど）

、ネオペンチル、またはアダマンチルを含む置換基が好ましい。

【００７８】

式（ＢＨｅｔ）において、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であることが好ましく、＞Ｏ、＞Ｓ、または＞Ｎ－Ｒであることがより好ましく、＞Ｓであることがさらに好ましい。＞Ｎ－Ｒにおける Ｒは置換されていてもよいアリールであることが好ましく、無置換のアリールであることがより好ましく、無置換のフェニルであることがさらに好ましい。＞Ｃ（－Ｒ）$_2$における Ｒはいずれも置換されていてもよいアルキルであることが好ましく、いずれも無置換のアルキルであることがより好ましく、いずれも無置換のメチルであることがさらに好ましい。

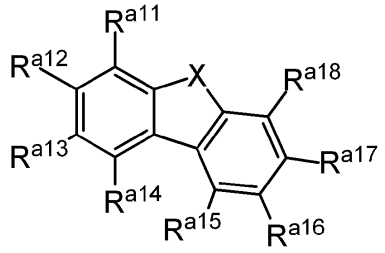
【００７９】

Ｙ^{1}とＸ^{1}および／またはＸ^{2}との結合手となる隣接する２つのＲ^{a1}～Ｒ^{a6}としては、Ｒ^{a5}およびＲ^{a6}、Ｒ^{a2}およびＲ^{a3}、Ｒ^{a1}およびＲ^{a2}、ならびにＲ^{a3}およびＲ^{a4}などがあげられる。Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される１つまたは２つの環が式（ＢＨｅｔ）で表される環であるとき、Ｒ^{a5}およびＲ^{a6}、Ｒ^{a2}およびＲ^{a3}、Ｒ^{a1}およびＲ^{a2}、またはＲ^{a3}およびＲ^{a4}が結合手となっていることが好ましく、Ｒ^{a5}およびＲ^{a6}が結合手となっていることがより好ましい。

式（１）におけるＡ環が式（ＢＨｅｔ）で表される環であるとき、式（ＢＨｅｔ）はＹ^1、Ｘ^1、およびＸ^{2}と結合し、Ｒ^{a1}、Ｒ^{a2}、およびＲ^{a3}、またはＲ^{a2}、Ｒ^{a3}、およびＲ^{a4}が結合手となる。

【００８０】

【化３１】



DBHet

【００８１】

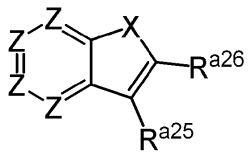
式（ＤＢＨｅｔ）において、Ｒ^{a11}～Ｒ^{a18}は水素または置換基であり、ただし、Ｒ^{a11}～Ｒ^{a18}のうち、隣接するいずれかの２つまたは３つは式（１）中のＹ^{1}ならびにＸ^{1}および／またはＸ^{2}との結合手となり、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルであり、２つのＲは結合して環を形成していてもよい。）

Ｒ^{a11}～Ｒ^{a18}は水素、または置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、または置換シリルであることが好ましい。Ｒ^{a11}～Ｒ^{a18}のうち０～２個が置換基（水素以外）でありその他（上記結合手となっているものを除く）が水素であることが好ましく、Ｒ^{a11}～Ｒ^{a18}のうち０～１個が置換基でありその他が水素であることがより好ましい。このときの置換基としては上述の式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキル（ｔ－ブチル、ｔ－アミルなど）、ネオペンチル、またはアダマンチルを含む置換基が好ましい。

【００８２】
式（ＤＢＨｅｔ）において、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であることが好ましく、＞Ｏ、＞Ｓ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であることがより好ましく、＞Ｓ、または＞Ｏであることがさらに好ましい。＞Ｎ－Ｒにおける Ｒは置換されていてもよいアリールであることが好ましく、無置換のアリールであることがより好ましく、無置換のフェニルであることがさらに好ましい。＞Ｃ（－Ｒ）$_2$における Ｒはいずれも置換されていてもよいアルキルであることが好ましく、いずれも無置換のアルキルであることがより好ましく、いずれも無置換のメチルであることがさらに好ましい。

【００８３】
Y^1とX^1および／またはX^2との結合手となる隣接する２つのR^{a11}～R^{a18}としては、R^{a11}およびR^{a12}、R^{a12}およびR^{a13}、R^{a13}およびR^{14}、R^{a15}およびR^{16}、R^{a16}およびR^{17}、ならびにR^{a17}およびR^{18}があげられる。Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される１つまたは２つの環が式（ＤＢＨｅｔ）で表される環であるとき、R^{a11}およびR^{a12}、R^{a12}およびR^{a13}、R^{a13}およびR^{14}、R^{a15}およびR^{16}、R^{a16}およびR^{17}、またはR^{a17}およびR^{18}が結合手となっていることが好ましい。
式（１）におけるＡ環が式（ＢＨｅｔ）で表される環であるとき、式（ＤＢＨｅｔ）はY^1、X^1、およびX^2と結合し、R^{a11}、R^{a12}、およびR^{a13}、R^{a12}、R^{13}、およびR^{14}、R^{a15}、R^{16}、およびR^{a16}、またはR^{16}、R^{a17}、およびR^{18}が結合手となる。

【００８４】
【化３２】



PBHet

【００８５】
式（ＰＢＨｅｔ）において、Ｚはそれぞれ独立してＣ－R^zまたはＮであり、少なくとも１つのＺはＮであり、R^z、R^{a26}およびR^{a25}は水素または置換基であり、ただし、R^z、R^{a26}およびR^{a25}のうち、隣接するいずれかの２つまたは３つは式（１）中のY^1ならびにX^1および／またはX^2との結合手となるが、好ましくはR^{a26}およびR^{a25}が結合手となり、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルである。

【００８６】
式（ＰＢＨｅｔ）における４つのＺのうち１つまたは２つがＮであることが好ましく、１つがＮであることがより好ましい。２つがＮであるとき、２つのＮは互いに隣接していないことが好ましい。

【００８７】
R^z、R^{a26}およびR^{a25}は水素、または置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、または置換シリルであることが好ましい。

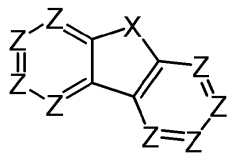
Ｒ^{z}、Ｒ^{a26}およびＲ^{a25}のうち０～２個が置換基（水素以外）でありその他（上記結合手となっているものを除く）が水素であることが好ましく、Ｒ^{z}、Ｒ^{a26}およびＲ^{a25}のうち０～１個が置換基でありその他が水素であることがより好ましい。このときの置換基としては上述の式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキル（ｔ－ブチル、ｔ－アミルなど）、ネオペンチル、またはアダマンチルを含む置換基が好ましい。

【００８８】

式（ＰＢＨｅｔ）において、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_{2}$であることが好ましく、＞Ｏ、＞Ｓ、または＞Ｎ－Ｒであることがより好ましく、＞Ｓ、または＞Ｏであることがさらに好ましい。＞Ｎ－ＲにおけるＲは置換されていてもよいアリールであることが好ましく、無置換のアリールであることがより好ましく、無置換のフェニルであることがさらに好ましい。＞Ｃ（－Ｒ）$_{2}$におけるＲはいずれも置換されていてもよいアルキルであることが好ましく、いずれも無置換のアルキルであることがより好ましく、いずれも無置換のメチルであることがさらに好ましい。

【００８９】

【化３３】



PPHet

【００９０】

式（ＰＰＨｅｔ）において、Ｚはそれぞれ独立してＣ－Ｒ^{z}またはＮであり、少なくとも１つのＺはＮであり、Ｒ^{z}は水素または置換基であり、ただしＲ^{z}のうち、隣接するいずれかの２つまたは３つは式（１）中のＹ^{1}ならびにＸ^{1}および／またはＸ^{2}との結合手となるが、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_{2}$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_{2}$であり、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_{2}$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_{2}$のＲは独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルである。

【００９１】

式（ＰＢＨｅｔ）におけるＺのうち１つまたは２つがＮであることが好ましく、１つがＮであることがより好ましい。２つがＮであるとき、２つのＮは互いに隣接していないことが好ましい。

Ｒ^{z}は水素、または置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、または置換シリルであることが好ましい。Ｒ^{z}のうち０～２個が置換基（水素以外）でありその他（上記結合手となっているものを除く）が水素であることが好ましく、Ｒ^{z}、Ｒ^{a26}およびＲ^{a25}のうち０～１個が置換基でありその他が水素であることがより好ましい。このときの置換基としては上述の式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキル（ｔ－ブチル、ｔ－アミルなど）、ネオペンチル、またはアダマンチルを含む置換基が好ましい。

【００９２】

式（ＰＰＨｅｔ）において、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_{2}$であることが好ましく、＞Ｏ、＞Ｓ、または＞Ｎ－Ｒであることがより好ましく、＞Ｓ、または＞Ｏであることがさらに好ましい。＞Ｎ－ＲにおけるＲは置換されていてもよいアリールであることが好ましく、無置換のアリールであることがより好ましく、無置換のフェニル

であることがさらに好ましい。＞Ｃ（－Ｒ）$_2$におけるＲはいずれも置換されていてもよいアルキルであることが好ましく、いずれも無置換のアルキルであることがより好ましく、いずれも無置換のメチルであることがさらに好ましい。

【００９３】

式（１）におけるＹ^{1}は、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、Ａｌ、Ｇａ、Ａｓ、Ｓｉ－Ｒ、またはＧｅ－Ｒであり、前記Ｓｉ－ＲおよびＧｅ－ＲのＲはアリール、アルキル、またはシクロアルキルである。Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、Ｓｉ－Ｒ、またはＧｅ－Ｒの場合には、Ａ環、Ｂ環、またはＣ環と結合する原子はＰ、Ｓｉ、またはＧｅである。Ｙ^{1}は、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、またはＳｉ－Ｒが好ましく、Ｂが特に好ましい。

【００９４】

式（１）におけるＸ^{1}およびＸ^{2}は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅである。式（１）におけるＸ^{1}およびＸ^{2}は、少なくともいずれかが＞Ｎ－Ｒであることが好ましく、いずれも＞Ｎ－ＲであることまたはＸ^{1}およびＸ^{2}のいずれか一方が＞Ｎ－Ｒであり他方が＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であることがより好ましい。

Ｘ^{1}およびＸ^{2}における＞Ｎ－ＲのＲは、水素、置換されていてもよいアリール（ただし置換基としてアミノを除く）、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキルまたは置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキルまたは置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルであり、２つのＲは同一であることが好ましく、そして２つのＲは結合して環を形成していてもよい。

【００９５】

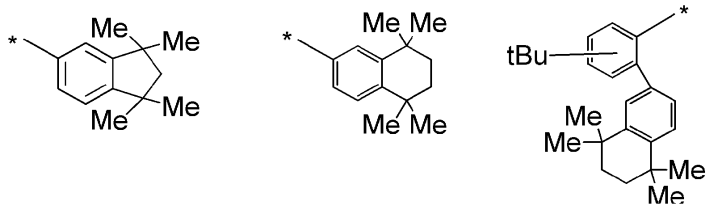
Ｘ^{1}およびＸ^{2}における＞Ｎ－ＲのＲは置換されていてもよいアリールまたは置換されていてもよいヘテロアリールであることが好ましい。ここで、アリールとしては、フェニル、ビフェニリル（特に、２－ビフェニリル）、およびテルフェニリル（特に、テルフェニル－２’－イル）が好ましく、ヘテロアリールとしては、ベンゾチエニル（２－ベンゾチエニル、６－ベンゾチエニルなど）、ベンゾフラニル（２－ベンゾフラニル、３－ベンゾフラニル、５－ベンゾフラニルなど）、ジベンゾフラニル（４－ジベンゾフラニルなど）、ジメチルキサンテニル（２－ジメチルキサンテニルなど）、ジベンゾジオキシニルなどが好ましい。置換基としては上記式（ｔＲ）で表されるターシャリ－アルキル（特に、ｔ－ブチル）、またはシクロアルキル（特に、アダマンチル）が好ましい。アリールおよびヘテロアリールにおける置換基数は０～２つが好ましく、１つまたは２つがより好ましく、１つがさらに好ましい。上記のアリールにおけるアリール環が後述のようにシクロアルカンで縮合されている場合も好ましい。

【００９６】

Ｘ^{1}およびＸ^{2}における＞ＮＲのＲとして特に好ましい例としては、置換されていてもよい２－ビフェニリル、置換されていてもよいテルフェニル－２’－イル、およびシクロアルカンで縮合されているアリール（置換されていてもよい）があげられる。置換されていてもよい２－ビフェニリルとしては、１～３つのｔ－ブチルで置換されている２－ビフェニリルが特に好ましい。置換されていてもよいテルフェニル－２’－イルとしては、無置換の［１，１’：３’，１’’－テルフェニル］－２’－イルが特に好ましい。シクロアルカンで縮合されているアリールとしては、特に以下が好ましい。

【００９７】

【化３４】



（ＭｅはメチＬ、ｔＢｕはｔ－ブチル、＊は結合位置を示す。）

【００９８】

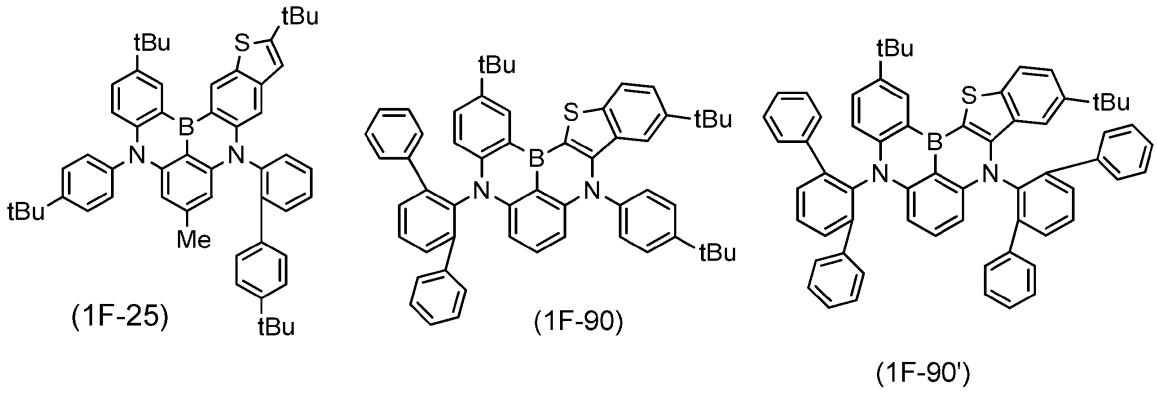
上記の好ましい範囲のＲである＞Ｎ－ＲをＸ^{1}またはＸ^{2}として有する本発明の化合物を発光材料として用いることにより、さらに発光効率や素子寿命を向上させることができる。

【００９９】

Ｘ^{1}およびＸ^{2}の双方が＞Ｎ－Ｒであるとき、Ｘ^{1}およびＸ^{2}における＞Ｎ－Ｒのいずれか片方のＲのみが、置換されていてもよい２－ビフェニリル、あるいはＸ^{1}およびＸ^{2}における＞Ｎ－Ｒのいずれか片方のＲのみ、あるいは両側の＞Ｎ－ＲのＲが置換されていてもよいテルフェニル－２’－イルであることがさらに好ましい。テルフェニル－２’－イルとしては［１，１’：３’，１’’－テルフェニル］－２’－イルが好ましい。Ｘ^{1}およびＸ^{2}における＞Ｎ－Ｒのいずれか片方のＲのみが、置換されていてもよい２－ビフェニリルまたは置換されていてもよいテルフェニル－２’－イルであるときの他方の＞Ｎ－ＲのＲは置換されていてもよいフェニルが好ましい。このような化合物としては下記の化合物（１Ｆ－２５）、化合物（１Ｆ－９０）、および化合物（１Ｆ－９０’）のような化合物などがあげられる。

【０１００】

【化３５】



【０１０１】

Ｘ^{1}およびＸ^{2}の双方が＞Ｎ－Ｒであるとき、Ｘ^{1}およびＸ^{2}における＞Ｎ－Ｒのいずれか一方のＲが、シクロアルカンで縮合されているアリール（置換されていてもよい）であることも好ましい。このとき、他方の＞Ｎ－ＲのＲは置換されていてもよいフェニルであることが好ましい。

また、Ｘ^{1}およびＸ^{2}における＞Ｎ－Ｒのいずれか一方のＲが、置換されていてもよい２－ビフェニリルであり、他方の＞Ｎ－ＲのＲがシクロアルカンで縮合されているアリール（置換されていてもよい）であることも好ましい。

【０１０２】

Ｘ^{1}およびＸ^{2}における＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_{2}$および＞Ｃ（－Ｒ）$_{2}$の少なくとも１つにおけるＲは連結基または単結合により前記Ａ環、Ｂ環、およびＣ環の少なくとも１つの環と結合していてもよい。連結基としては、－Ｏ－、－Ｓ－、または－Ｃ（－Ｒ）$_{2}$－が好ましい。なお、前記「－Ｃ（－Ｒ）$_{2}$－」のＲは、水素、アルキルまたはシクロア

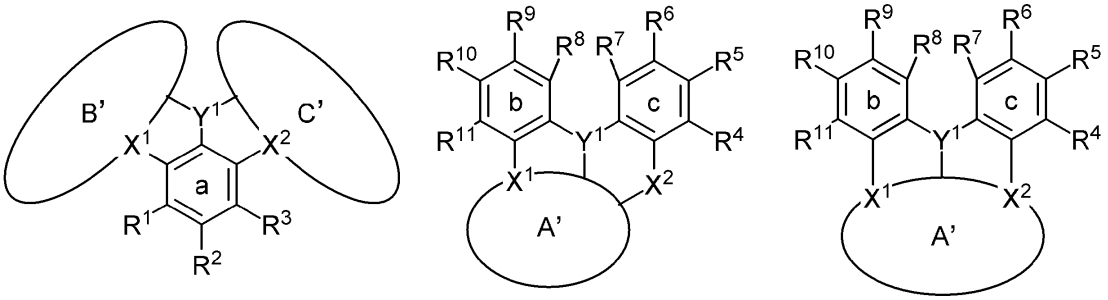
ルキルである。この規定は、下記式（２－３－１）で表される、X^1やX^2が縮合環Ｂ’および縮合環Ｃ’に取り込まれた環構造を有する化合物で表現できる。すなわち、例えば後述の式（２）におけるｂ環（またはｃ環）であるベンゼン環に対してX^1（またはX^2）を取り込むようにして他の環が縮合して形成されるＢ’環（またはＣ’環）を有する化合物である。形成されてできた縮合環Ｂ’（または縮合環Ｃ’）は例えば、カルバゾール環、フェノキサジン環、フェノチアジン環またはアクリジン環である。

【０１０３】

また、上記規定は、下記式（２－３－２）や式（２－３－３）で表される、X^1および／またはX^2が縮合環Ａ’に取り込まれた環構造を有する化合物でも表現できる。すなわち、例えば式（２）におけるａ環であるベンゼン環に対してX^1（および／またはX^2）を取り込むようにして他の環が縮合して形成されるＡ’環を有する化合物である。形成されてできた縮合環Ａ’は例えば、カルバゾール環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、またはアクリジン環である。

【０１０４】

【化３６】



(2-3-1) (2-3-2) (2-3-3)

【０１０５】

式（１）において、Ｂ環、およびＣ環は単結合または連結基を介して結合していてもよい。連結基としては、例えば、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅなどがあげられ、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキル、または置換されていてもよいシクロアルキルである。また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは連結基または単結合により前記Ｂ環およびＣ環の少なくとも１つの環と結合していてもよく、連結基としては、－Ｏ－、－Ｓ－、または－Ｃ（－Ｒ）$_2$－が好ましい。なお、前記「－Ｃ（－Ｒ）$_2$－」のＲは、水素、アルキル、またはシクロアルキルである。前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは連結基または単結合により前記Ｂ環およびＣ環の少なくとも１つの環と結合している形態の詳細については、上述したX^1やX^2についての式（２－３－１）、式（２－３－２）、および式（２－３－３）を用いた説明を引用することができる。

【０１０６】

Ｂ環およびＣ環が連結基を介して結合するとき、上記の連結基はＢ環およびＣ環中のアリール環およびヘテロアリール環を直接結合させていることが好ましい。Ｂ環およびＣ環中のアリール環およびヘテロアリール環の置換基が単結合を介して結合していることも好ましい。

【０１０７】

X^1、X^2、ならびに、Ｂ環およびＣ環を結合する連結基として、具体的な＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅの中では、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｓが好ましく、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$が

より好ましく、＞Ｏまたは＞Ｎ－Ｒが特に好ましい。

【０１０８】

式（１）のＡ環、Ｂ環、およびＣ環である「アリール環」としては、例えば、炭素数６～３０のアリール環があげられ、炭素数６～１６のアリール環が好ましく、炭素数６～１２のアリール環がより好ましく、炭素数６～１０のアリール環が特に好ましい。

【０１０９】

具体的な「アリール環」としては、単環系であるベンゼン環、二環系であるビフェニル環、縮合二環系であるナフタレン環、インデン環、三環系であるテルフェニル環（ｍ－テルフェニル、ｏ－テルフェニル、ｐ－テルフェニル）、縮合三環系である、アセナフチレン環、フルオレン環、フェナレン環、フェナントレン環、アントラセン環、縮合四環系であるトリフェニレン環、ピレン環、ナフタセン環、クリセン環、縮合五環系であるペリレン環、ペンタセン環などがあげられる。また、フルオレン環、ベンゾフルオレン環、インデン環には、それぞれフルオレン環、ベンゾフルオレン環、シクロペンタン環などがスピロ結合した構造も含まれる。なお、フルオレン環、ベンゾフルオレン環およびインデン環は、メチレンの２つの水素のうちの２つがそれぞれ後述の第１の置換基としてのメチルなどのアルキルに置換して、ジメチルフルオレン環、ジメチルベンゾフルオレン環およびジメチルインデン環などとなっているものも含まれる。

【０１１０】

式（１）のＡ環、Ｂ環、およびＣ環である「ヘテロアリール環」としては、例えば、炭素数２～３０のヘテロアリール環があげられ、炭素数２～２５のヘテロアリール環が好ましく、炭素数２～２０のヘテロアリール環がより好ましく、炭素数２～１５のヘテロアリール環がさらに好ましく、炭素数２～１０のヘテロアリール環が特に好ましい。また、「ヘテロアリール環」としては、例えば環構成原子として炭素以外に酸素、硫黄および窒素から選ばれるヘテロ原子を１ないし５個含有する複素環などがあげられる。なお、この「ヘテロアリール環」は、後述の式（２）で規定された「R^{1}～R^{11}のうちの隣接する基同士が結合してａ環、ｂ環またはｃ環と共に形成されたヘテロアリール環」に対応し、また、ａ環（またはｂ環、ｃ環）がすでに炭素数６のベンゼン環で構成されているため、これに５員環が縮合した縮合環の合計炭素数６が下限の炭素数となる。

【０１１１】

具体的な「ヘテロアリール環」としては、例えば、ピロール環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、イミダゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、トリアゾール環、テトラゾール環、ピラゾール環、ピリジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、ピラジン環、トリアジン環、インドール環、イソインドール環、１Ｈ－インダゾール環、ベンゾイミダゾール環、ベンゾオキサゾール環、ベンゾチアゾール環、１Ｈ－ベンゾトリアゾール環、キノリン環、イソキノリン環、シンノリン環、キナゾリン環、キノキサリン環、フタラジン環、ナフチリジン環、プリン環、プテリジン環、カルバゾール環、アクリジン環、フェノキサチイン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、フェナジン環、フェナザシリン環、インドリジン環、フラン環、ベンゾフラン環、イソベンゾフラン環、ジベンゾフラン環、チオフェン環、ベンゾチオフェン環、ジベンゾチオフェン環、フラザン環、チアントレン環、インドロカルバゾール環、ベンゾインドロカルバゾール環、ベンゾベンゾインドロカルバゾール環、ナフトベンゾフラン環、ジオキシン環、ジヒドロアクリジン環、キサンテン環、チオキサンテン環、ジベンゾジオキシン環などがあげられる。また、ジヒドロアクリジン環、キサンテン環、チオキサンテン環、は、メチレンの２つの水素のうちの２つがそれぞれ後述の第１の置換基としてのメチルなどのアルキルに置換して、ジメチルジヒドロアクリジン環、ジメチルキサンテン環、ジメチルチオキサンテン環などとなっているものも好ましい。また二環系であるビピリジン環、フェニルピリジン環、ピリジルフェニル環、三環系であるテルピリジル環、ビスピリジルフェニル環、ピリジルビフェニル環も「ヘテロアリール環」としてあげられる。また、「ヘテロアリール環」にはピラン環も含まれるものとする。

【０１１２】

上記「アリール環」または「ヘテロアリール環」における少なくとも１つの水素は、第１の置換基である、置換もしくは無置換の「アリール」、置換もしくは無置換の「ヘテロアリール」、置換もしくは無置換の「ジアリールアミノ」、置換もしくは無置換の「ジヘテロアリールアミノ」、置換もしくは無置換の「アリールヘテロアリールアミノ」、置換もしくは無置換の「ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）」、置換もしくは無置換の「アルキル」、置換もしくは無置換の「シクロアルキル」、置換もしくは無置換の「アルコキシ」、置換もしくは無置換の「アリールオキシ」、または、置換の「シリル」で置換されていてもよいが、この第１の置換基としての「アリール」や「ヘテロアリール」、「ジアリールアミノ」のアリール、「ジヘテロアリールアミノ」のヘテロアリール、「アリールヘテロアリールアミノ」のアリールとヘテロアリール、「ジアリールボリル」のアリール、また「アリールオキシ」のアリールとしては上述した「アリール環」または「ヘテロアリール環」の一価の基があげられる。

【０１１３】

具体的に「アリール」としては、例えば、炭素数６～３０のアリールが挙げられ、炭素数６～２４のアリールが好ましく、炭素数６～２０のアリールがより好ましく、炭素数６～１６のアリールがさらに好ましく、炭素数６～１２のアリールが特に好ましく、炭素数６～１０のアリールが最も好ましい。

【０１１４】

具体的なアリールとしては、例えば、単環系アリールであるフェニル、二環系アリールである（２－，３－，４－）ビフェニリル、縮合二環系アリールである（１－，２－）ナフチル、（２－、３－、４－、５－、６－、７－）インデニル、三環系アリールであるテルフェニリル（ｍ－テルフェニル－２’－イル、ｍ－テルフェニル－４’－イル、ｍ－テルフェニル－５’－イル、ｏ－テルフェニル－３’－イル、ｏ－テルフェニル－４’－イル、ｐ－テルフェニル－２’－イル、ｍ－テルフェニル－２－イル、ｍ－テルフェニル－３－イル、ｍ－テルフェニル－４－イル、ｏ－テルフェニル－２－イル、ｏ－テルフェニル－３－イル、ｏ－テルフェニル－４－イル、ｐ－テルフェニル－２－イル、ｐ－テルフェニル－３－イル、ｐ－テルフェニル－４－イル）、縮合三環系アリールである、アセナフチレン－（１－，３－，４－，５－）イル、フルオレン－（１－，２－，３－，４－，９－）イル、フェナレン－（１－，２－）イル、（１－，２－，３－，４－，９－）フェナントリル、四環系アリールであるクアテルフェニリル（５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－２－イル、５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－３－イル、５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－４－イル、ｍ－クアテルフェニリル）、縮合四環系アリールであるトリフェニレン－（１－，２－）イル、ピレン－（１－，２－，４－）イル、ナフタセン－（１－，２－，５－）イル、縮合五環系アリールであるペリレン－（１－，２－，３－）イル、ペンタセン－（１－，２－，５－，６－）イルなどがあげられる。

【０１１５】

また、「ヘテロアリール」としては、例えば、炭素数２～３０のヘテロアリールが挙げられ、炭素数２～２５のヘテロアリールが好ましく、炭素数２～２０のヘテロアリールがより好ましく、炭素数２～１５のヘテロアリールがさらに好ましく、炭素数２～１０のヘテロアリールが特に好ましい。また、ヘテロアリールとしては、例えば環構成原子として炭素以外に酸素、硫黄および窒素から選ばれるヘテロ原子を１ないし５個含有する複素環などが挙げられる。

【０１１６】

具体的なヘテロアリールとしては、例えば、フリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、オキサジアゾリル、フラザニル、チアジアゾリル、トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリミジニル、ピリダジニル、ピラジニル、トリアジニル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ジベンゾフラニル、ベンゾ［ｂ］チエニル、ジベンゾチエニル、インドリル、イソインドリル、１Ｈ－インダゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、１Ｈ－ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリル、キナ

ゾリル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、プリニル、プテリジニル、カルバゾリル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、インドリジニルなどがあげられる。

【０１１７】

また第１の置換基としての「アルキル」としては、直鎖および分岐鎖のいずれでもよく、例えば、炭素数１～２４の直鎖アルキルまたは炭素数３～２４の分岐鎖アルキルがあげられる。炭素数１～１８のアルキル（炭素数３～１８の分岐鎖アルキル）が好ましく、炭素数１～１２のアルキル（炭素数３～１２の分岐鎖アルキル）がより好ましく、炭素数１～８のアルキル（炭素数３～８の分岐鎖アルキル）がさらに好ましく、炭素数１～６のアルキル（炭素数３～６の分岐鎖アルキル）が特に好ましく、炭素数１～５のアルキル（炭素数３～５の分岐鎖アルキル）が最も好ましい。

【０１１８】

具体的なアルキルとしては、メチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｎ－ブチル、イソブチル、ｓ－ブチル、ｔ－ブチル、ｎ－ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ｔ－ペンチル（ｔ－アミル）、ｎ－ヘキシル、１－メチルペンチル、４－メチル－２－ペンチル、３，３－ジメチルブチル、２－エチルブチル、ｎ－ヘプチル、１－メチルヘキシル、ｎ－オクチル、ｔ－オクチル（１，１，３，３－テトラメチルブチル）、１－メチルヘプチル、２－エチルヘキシル、２－プロピルペンチル、ｎ－ノニル、２，２－ジメチルヘプチル、２，６－ジメチル－４－ヘプチル、３，５，５－トリメチルヘキシル、ｎ－デシル、ｎ－ウンデシル、１－メチルデシル、ｎ－ドデシル、ｎ－トリデシル、１－ヘキシルヘプチル、ｎ－テトラデシル、ｎ－ペンタデシル、ｎ－ヘキサデシル、ｎ－ヘプタデシル、ｎ－オクタデシル、ｎ－エイコシルなどがあげられる。

また、例えば、１－エチル－１－メチルプロピル、１，１－ジエチルプロピル、１，１－ジメチルブチル、１－エチル－１－メチルブチル、１，１，４－トリメチルペンチル、１，１，２－トリメチルプロピル、１，１－ジメチルオクチル、１，１－ジメチルペンチル、１，１－ジメチルヘプチル、１，１，５－トリメチルヘキシル、１－エチル－１－メチルヘキシル、１－エチル－１，３－ジメチルブチル、１，１，２，２－テトラメチルプロピル、１－ブチル－１－メチルペンチル、１，１－ジエチルブチル、１－エチル－１－メチルペンチル、１，１，３－トリメチルブチル、１－プロピル－１－メチルペンチル、１，１，２－トリメチルプロピル、１－エチル－１，２，２－トリメチルプロピル、１－プロピル－１－メチルブチル、１，１－ジメチルヘキシルなどもあげられる。

【０１１９】

また第１の置換基としての「シクロアルキル」としては、炭素数３～２４のシクロアルキル、炭素数３～２０のシクロアルキル、炭素数３～１６のシクロアルキル、炭素数３～１４のシクロアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキル、炭素数５～８のシクロアルキル、炭素数５～６のシクロアルキル、炭素数５のシクロアルキルなどがあげられる。

【０１２０】

具体的なシクロアルキルとしては、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、およびこれらの炭素数１～５のアルキル（特にメチル）置換体や、ノルボルネニル、ビシクロ［１．０．１］ブチル、ビシクロ［１．１．１］ペンチル、ビシクロ［２．０．１］ペンチル、ビシクロ［１．２．１］ヘキシル、ビシクロ［３．０．１］ヘキシル、ビシクロ［２．１．２］ヘプチル、ビシクロ［２．２．２］オクチル、アダマンチル、ジアマンチル、デカヒドロナフタレニル、デカヒドロアズレニルなどがあげられる。

【０１２１】

また第１の置換基としての「アルコキシ」としては、例えば、炭素数１～２４の直鎖または炭素数３～２４の分岐鎖のアルコキシがあげられる。炭素数１～１８のアルコキシ（炭素数３～１８の分岐鎖のアルコキシ）が好ましく、炭素数１～１２のアルコキシ（炭素数３～１２の分岐鎖のアルコキシ）がより好ましく、炭素数１～６のアルコキシ（炭素数３～６の分岐鎖のアルコキシ）がさらに好ましく、炭素数１～５のアルコキシ（炭素数３

～５の分岐鎖のアルコキシ）が特に好ましい。
【０１２２】
具体的なアルコキシとしては、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソプロポキシ、ブトキシ、イソブトキシ、ｓ－ブトキシ、ｔ－ブトキシ、ｔ－アミルオキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、ヘプチルオキシ、オクチルオキシなどがあげられる。
【０１２３】
また第１の置換基としての「置換シリル」としては、例えば、アルキル、シクロアルキル、およびアリールからなる群より選択される３つの置換基で置換されたシリルがあげられる。例えば、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、アルキルジシクロアルキルシリル、トリアリールシリル、ジアルキルアリールシリル、およびアルキルジアリールシリルがあげられる。
【０１２４】
「トリアルキルシリル」としては、シリル基における３つの水素がそれぞれ独立してアルキルで置換された基があげられ、このアルキルは上述した第１の置換基における「アルキル」として説明した基を引用することができる。置換するのに好ましいアルキルは、炭素数１～５のアルキルであり、具体的にはメチル、エチル、プロピル、ｉ－プロピル、ブチル、ｓｅｃ－ブチル、ｔ－ブチル、ｔ－アミルなどがあげられる。
【０１２５】
具体的なトリアルキルシリルとしては、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリｉ－プロピルシリル、トリブチルシリル、トリｓｅｃ－ブチルシリル、トリｔ－ブチルシリル、トリｔ－アミルシリル、エチルジメチルシリル、プロピルジメチルシリル、ｉ－プロピルジメチルシリル、ブチルジメチルシリル、ｓｅｃ－ブチルジメチルシリル、ｔ－ブチルジメチルシリル、ｔ－アミルジメチルシリル、メチルジエチルシリル、プロピルジエチルシリル、ｉ－プロピルジエチルシリル、ブチルジエチルシリル、ｓｅｃ－ブチルジエチルシリル、ｔ－ブチルジエチルシリル、ｔ－アミルジエチルシリル、メチルジプロピルシリル、エチルジプロピルシリル、ブチルジプロピルシリル、ｓｅｃ－ブチルジプロピルシリル、ｔ－ブチルジプロピルシリル、ｔ－アミルジプロピルシリル、メチルジｉ－プロピルシリル、エチルジｉ－プロピルシリル、ブチルジｉ－プロピルシリル、ｓｅｃ－ブチルジｉ－プロピルシリル、ｔ－ブチルジｉ－プロピルシリル、ｔ－アミルジｉ－プロピルシリルなどがあげられる。
【０１２６】
「トリシクロアルキルシリル」としては、シリル基における３つの水素がそれぞれ独立してシクロアルキルで置換された基があげられ、このシクロアルキルは上述した第１の置換基における「シクロアルキル」として説明した基を引用することができる。置換するのに好ましいシクロアルキルは、炭素数５～１０のシクロアルキルであり、具体的にはシクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、ビシクロ［１．１．１］ペンチル、ビシクロ［２．０．１］ペンチル、ビシクロ［１．２．１］ヘキシル、ビシクロ［３．０．１］ヘキシル、ビシクロ［２．１．２］ヘプチル、ビシクロ［２．２．２］オクチル、アダマンチル、デカヒドロナフタレニル、デカヒドロアズレニルなどがあげられる。
【０１２７】
具体的なトリシクロアルキルシリルとしては、トリシクロペンチルシリル、トリシクロヘキシルシリルなどがあげられる。
【０１２８】
２つのアルキルと１つのシクロアルキルが置換したジアルキルシクロアルキルシリルと、１つのアルキルと２つのシクロアルキルが置換したアルキルジシクロアルキルシリルの具体例としては、上述した具体的なアルキルおよびシクロアルキルから選択される基が置換したシリルがあげられる。
【０１２９】
２つのアルキルと１つのアリールが置換したジアルキルアリールシリル、１つのアルキ

ルと２つのアリールが置換したアルキルジアリールシリル、および３つのアリールが置換したトリアリールシリルの具体例としては、上述した具体的なアルキルおよびアリールから選択される基が置換したシリルがあげられる。トリアリールシリルの具体例としては、特にトリフェニルシリルがあげられる。

【０１３０】

また第１の置換基の「ジアリールボリル」中の「アリール」としては、上述したアリールの説明を引用できる。また、この２つのアリールは単結合または連結基（例えば＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｏ、＞Ｓまたは＞Ｎ－Ｒ）を介して結合していてもよい。ここで、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$および＞Ｎ－ＲのＲは、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、アルキル、シクロアルキル、アルコキシまたはアリールオキシ（以上、第１置換基）であり、当該第１置換基にはさらにアリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキル（以上、第２置換基）が置換していてもよく、これらの基の具体例としては、上述した第１置換基としてのアリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、またはアリールオキシの説明を引用できる。

【０１３１】

第１の置換基である、置換もしくは無置換の「アリール」、置換もしくは無置換の「ヘテロアリール」、置換もしくは無置換の「ジアリールアミノ」、置換もしくは無置換の「ジヘテロアリールアミノ」、置換もしくは無置換の「アリールヘテロアリールアミノ」、置換もしくは無置換の「ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）」、置換もしくは無置換の「アルキル」、置換もしくは無置換の「シクロアルキル」、置換もしくは無置換の「アルコキシ」、置換もしくは無置換の「アリールオキシ」、または、置換の「シリル」は、置換または無置換と説明されているとおり、それらにおける少なくとも１つの水素が第２の置換基で置換されていてもよい。この第２の置換基としては、例えば、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルがあげられ、それらの具体例は、上述した「アリール環」または「ヘテロアリール環」の一価の基、また第１の置換基としての「アルキル」または「シクロアルキル」の説明を参照することができる。また、第２の置換基としてのアリールやヘテロアリールには、それらにおける少なくとも１つの水素が、フェニルなどのアリール（具体例は上述した基）、メチル、ｔ－ブチルなどのアルキル（具体例は上述した基）またはシクロヘキシルなどのシクロアルキル（具体例は上述した基）で置換された構造も第２の置換基としてのアリールやヘテロアリールに含まれる。その一例としては、第２の置換基がカルバゾリルの場合には、９位における少なくとも１つの水素が、フェニルなどのアリール、メチルなどのアルキルまたはシクロヘキシルなどのシクロアルキルで置換されたカルバゾリルも第２の置換基としてのヘテロアリールに含まれる。

【０１３２】

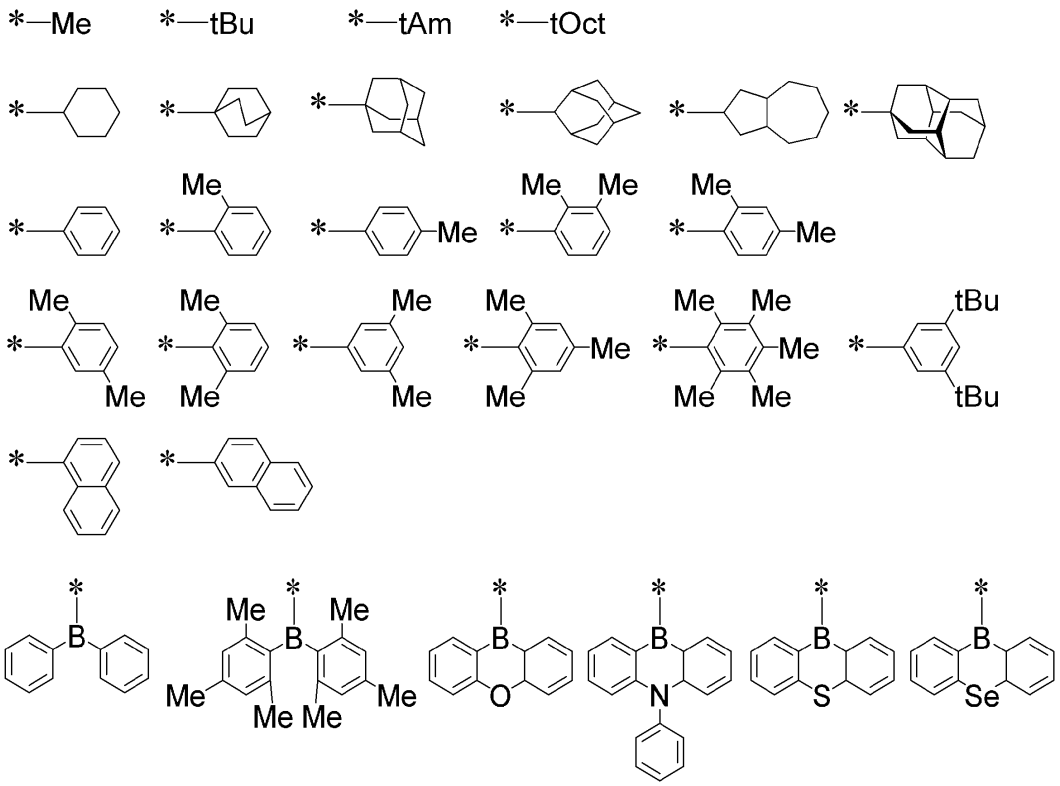
第１置換基の構造の立体障害性、電子供与性および電子吸引性によって、発光波長を調整することができる。好ましくは以下の構造式で表される基であり、より好ましくは、メチル、ｔ－ブチル、ｔ－アミル、ｔ－オクチル、ネオペンチル、アダマンチル、フェニル、ｏ－トリル、ｐ－トリル、２，４－キシリル、２，５－キシリル、２，６－キシリル、２，４，６－メシチル、ジフェニルアミノ、ジ－ｐ－トリルアミノ、ビス（ｐ－（ｔ－ブチル）フェニル）アミノ、カルバゾリル、３，６－ジメチルカルバゾリル、３，６－ジ－ｔ－ブチルカルバゾリルおよびフェノキシであり、さらに好ましくは、メチル、ｔ－ブチル、ｔ－アミル、ｔ－オクチル、ネオペンチル、アダマンチル、フェニル、ｏ－トリル、２，６－キシリル、２，４，６－メシチル、ジフェニルアミノ、ジ－ｐ－トリルアミノ、ビス（ｐ－（ｔ－ブチル）フェニル）アミノ、カルバゾリル、３，６－ジメチルカルバゾリルおよび３，６－ジ－ｔ－ブチルカルバゾリルである。合成の容易さの観点からは、立体障害が大きい方が選択的な合成のために好ましく、具体的には、ｔ－ブチル、ｔ－アミル、ｔ－オクチル、アダマンチル、ｏ－トリル、ｐ－トリル、２，４－キシリル、２，５－キシリル、２，６－キシリル、２，４，６－メシチル、ジ－ｐ－トリルアミノ、ビス（ｐ－（ｔ－ブチル）フェニル）アミノ、３，６－ジメチルカルバゾリルおよび３，６－ジ

－ｔ－ブチルカルバゾリルが好ましい。

【０１３３】

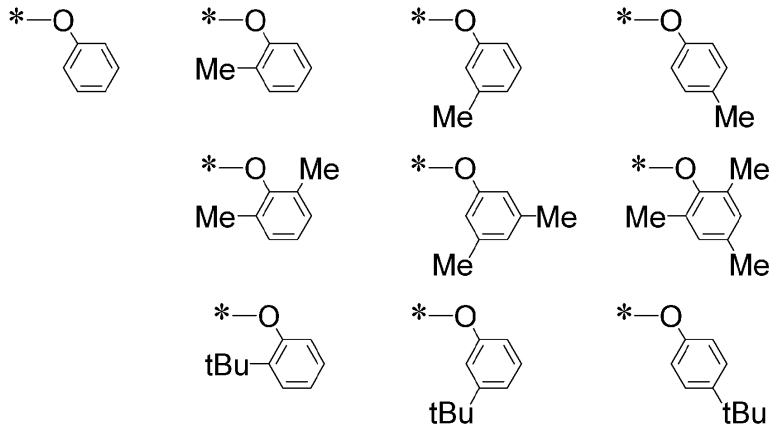
下記構造式において、「Ｍｅ」はメチル、「ｔＢｕ」はｔ－ブチル、「ｔＡｍ」はｔ－アミル、「ｔＯｃｔ」はｔ－オクチル、＊は結合位置を表す。

【化３７】



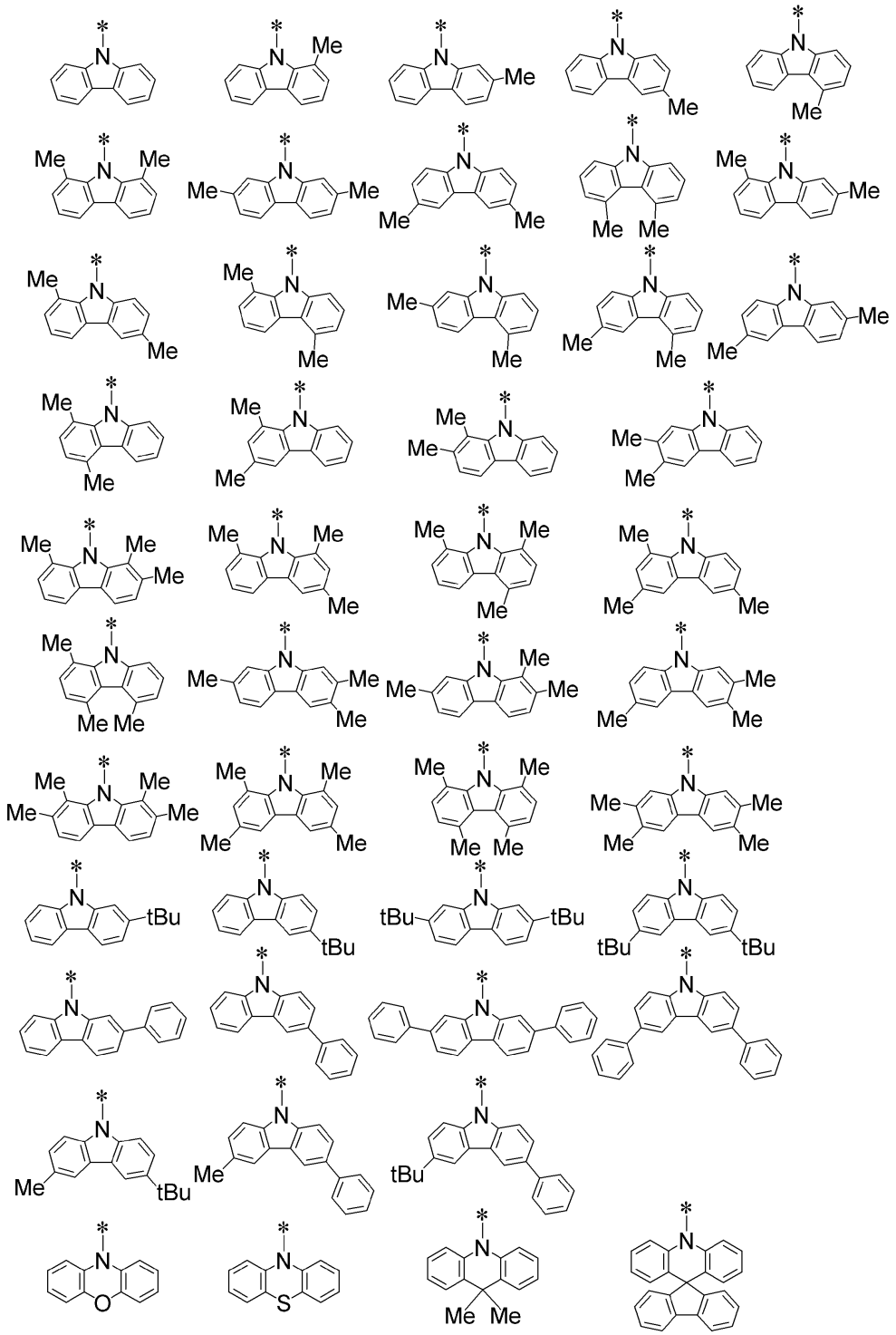
【０１３４】

【化３８】



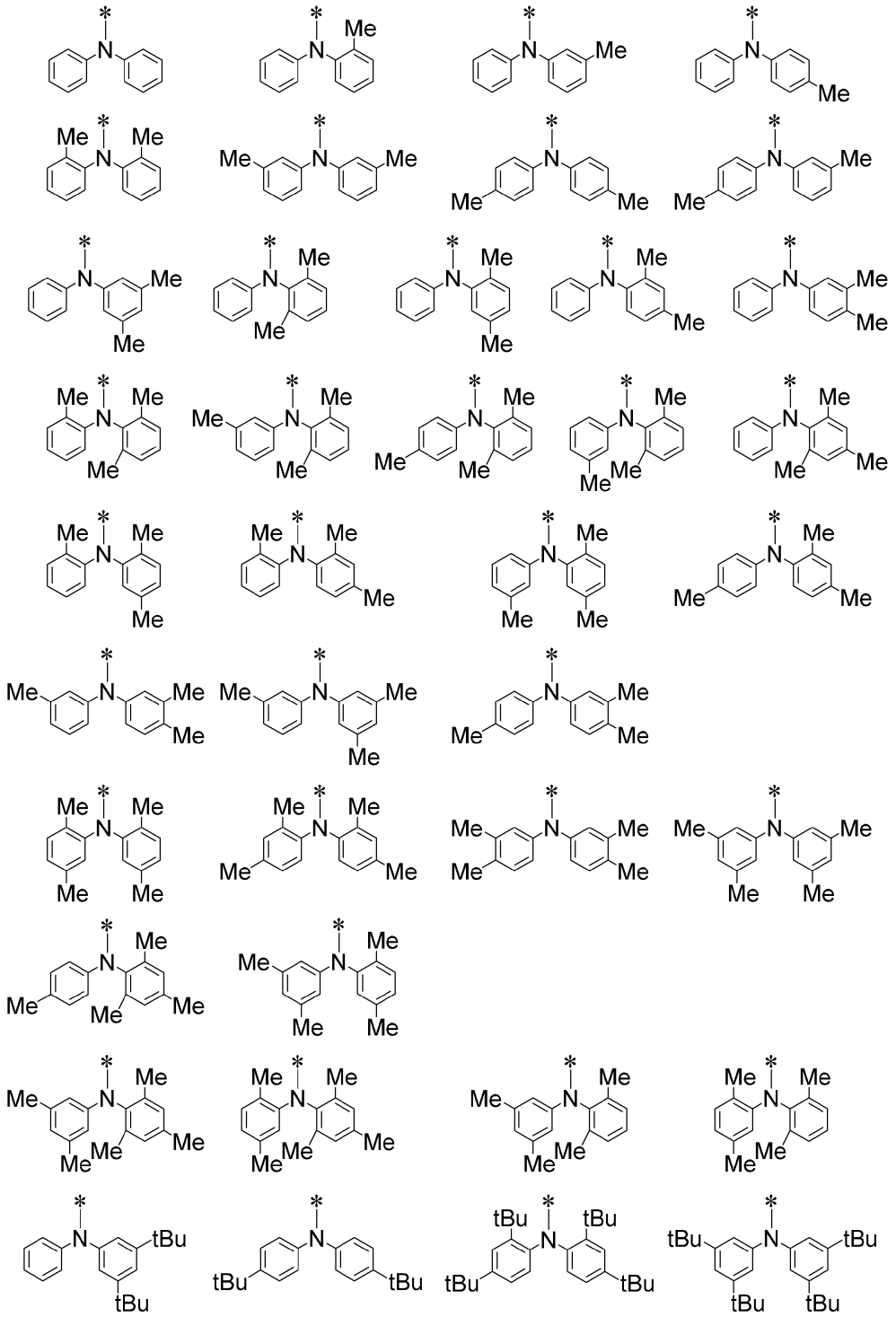
【０１３５】

【化３９】



【０１３６】

【化４０】



【０１３７】

式（１）のＹ[1]におけるＳｉ－ＲおよびＧｅ－ＲのＲは、アリール、アルキルまたはシクロアルキルであるが、このアリール、アルキルまたはシクロアルキルとしては上述する基があげられる。特に炭素数６～１０のアリール（例えばフェニル、ナフチルなど）、炭素数１～５のアルキル（例えばメチル、エチルなど）または炭素数５～１０のシクロアルキル（好ましくはシクロヘキシルやアダマンチル）が好ましい。この説明は後述の式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－

１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）におけるY^1も同じである。

【０１３８】

式（１）のX^1およびX^2における＞Ｎ－ＲのＲ、ならびに、Ｂ環およびＣ環を結合する連結基としての＞Ｎ－ＲのＲは、上述した第２の置換基で置換されていてもよい、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルである（ただし、X^1およびX^2における＞Ｎ－ＲのＲとしてのアリールにはアミノは置換しない）。このアリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルとしては上述する基があげられる。また、このときの第２の置換基としては、例えば、メチル、ターシャリーブチル、アミルなどのアルキル、ｐ－ターシャリーブチルフェニルなどが好ましい。アルキルの置換位置は上記Ｎの置換位置に対してパラ位が好ましい。＞Ｎ－ＲのＲとしては、特に第２の置換基で置換されていてもよい炭素数６～１０のアリール（例えばフェニル、ナフチルなど）、第２の置換基で置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール（例えばカルバゾリルなど）、炭素数１～５のアルキル（例えばメチル、エチルなど）または炭素数５～１０のシクロアルキル（好ましくはシクロヘキシルやアダマンチル）が好ましい。この説明は、後述の式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）におけるX^1、X^2、X^3、およびX^4でも同じであり、式（２）におけるR^7およびR^8、式（３）におけるR^8およびR^{24}、または式（５）におけるR^{34}およびR^{24}が結合し形成される連結基でも、同じである。

【０１３９】

X^1およびX^2における＞Ｎ－ＲのＲは、特に式（１）のX^1およびX^2における＞Ｎ－ＲのＲとして上述した範囲が好ましく、上述の好ましい範囲は式（７）、（８）、（９）、（７－１）、（８－１）、（９－１）におけるX^3およびX^4でも同じである。

【０１４０】

式（１）のX^1およびX^2における＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲ、ならびに、Ｂ環およびＣ環を結合する連結基としての＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、上述した第２の置換基で置換されていてもよい、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルである。このアリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルとしては上述する基があげられる。特に炭素数６～１０のアリール（例えばフェニル、ナフチルなど）、炭素数２～１５のヘテロアリール（例えばカルバゾリルなど）、炭素数１～５のアルキル（例えばメチル、エチルなど）または炭素数５～１０のシクロアルキル（好ましくはシクロヘキシルやアダマンチル）が好ましい。この説明は、後述の式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）におけるX^1、X^2、X^3、およびX^4でも同じであり、式（２）におけるR^7およびR^8、式（３）におけるR^8およびR^{24}、または式（５）におけるR^{34}およびR^{24}が結合し形成される連結基でも、同じである。

【０１４１】

式（１）のX^1およびX^2における＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲ、ならびに、Ｂ環およびＣ環を結合する連結基としての＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、上述した第２の置換基で置換されていてもよい、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルである。このアリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルとしては上述する基があげられ

る。特に炭素数６～１０のアリール（例えばフェニル、ナフチルなど）、炭素数２～１５のヘテロアリール（例えばカルバゾリルなど）、炭素数１～５のアルキル（例えばメチル、エチルなど）または炭素数５～１０のシクロアルキル（好ましくはシクロヘキシルやアダマンチル）が好ましい。この説明は、後述の式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）におけるX^1、X^2、X^3、およびX^4でも、式（２）におけるR^7およびR^8、式（３）におけるR^8およびR^{24}、または式（５）におけるR^{34}およびR^{24}が結合し形成される連結基でも、同じである。

【０１４２】

式（１）における、X^1、X^2、または、Ｂ環およびＣ環を結合する連結基がＡ環、Ｂ環、およびＣ環の少なくとも１つの環と結合する場合の連結基としては、例えば－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－または単結合などがあげられ、これらの中の「－Ｃ（－Ｒ）$_2$－」のＲは、水素、アルキル、またはシクロアルキルであるが、このアルキルまたはシクロアルキルとしては上述する基があげられる。特に炭素数１～５のアルキル（例えばメチル、エチルなど）または炭素数５～１０のシクロアルキル（好ましくはシクロヘキシルやアダマンチル）が好ましい。この説明は後述の式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）における連結基である「－Ｃ（－Ｒ）$_2$－」でも同じである。

【０１４３】

また、本発明は、式（１）で表される単位構造を複数有する多環芳香族化合物の多量体、好ましくは、後述の式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）で表される単位構造を複数有する多環芳香族化合物の多量体に関する。多量体は、２～６量体が好ましく、２～３量体がより好ましく、２量体が特に好ましい。多量体は、一つの化合物の中に上記単位構造を複数有する形態であればよく、例えば、上記単位構造が単結合、炭素数１～３のアルキレン、フェニレン、ナフチレンなどの連結基で複数結合した形態（連結型多量体）に加えて、上記単位構造に含まれる任意の環（Ａ環、Ｂ環もしくはＣ環、またはａ環、ｂ環もしくはｃ環等）を複数の単位構造で共有するようにして結合した形態（環共有型多量体）であってもよく、また、上記単位構造に含まれる任意の環（Ａ環、Ｂ環もしくはＣ環、またはａ環、ｂ環もしくはｃ環）同士が縮合するようにして結合した形態（環縮合型多量体）であってもよいが、環共有型多量体および環縮合型多量体が好ましく、環共有型多量体がより好ましい。

多量体の構造の例としては、後述の式（９）で表される構造をあげることができる。

【０１４４】

また、式（１）で表される多環芳香族化合物およびその多量体の化学構造中の水素は、その全てまたは一部が重水素、シアノ、またはハロゲンであってもよい。例えば、式（１）においては、Ａ環、Ｂ環、Ｃ環（Ａ～Ｃ環はアリール環またはヘテロアリール環）、Ａ～Ｃ環への置換基、Y^1がＳｉ－ＲまたはＧｅ－Ｒであるときの Ｒ（＝アルキル、シクロアルキル、アリール）、ならびに、X^1およびX^2が＞Ｎ－Ｒ、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$であるときのＲ（＝アルキル、シクロアルキル、アリール）における水素

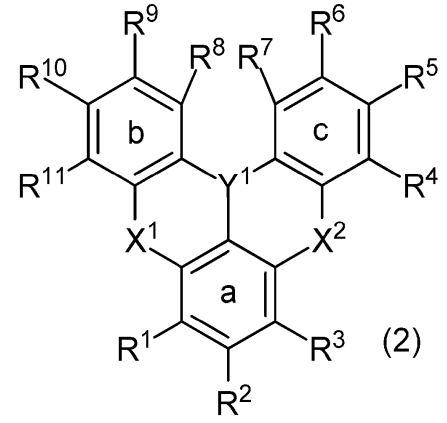
が重水素、シアノまたはハロゲンで置換されうるが、これらの中でもアリールやヘテロアリールにおける全てまたは一部の水素が重水素、シアノ、またはハロゲンで置換された態様があげられる。ハロゲンは、フッ素、塩素、臭素またはヨウ素であり、好ましくはフッ素、塩素、または臭素、より好ましくはフッ素または塩素であり、フッ素がさらに好ましい。また耐久性の観点から、式（１）で表される多環芳香族化合物およびその多量体の化学構造中の水素は、その全てまたは一部が重水素されていることも好ましい。

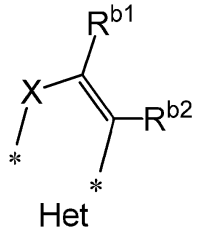
【０１４５】

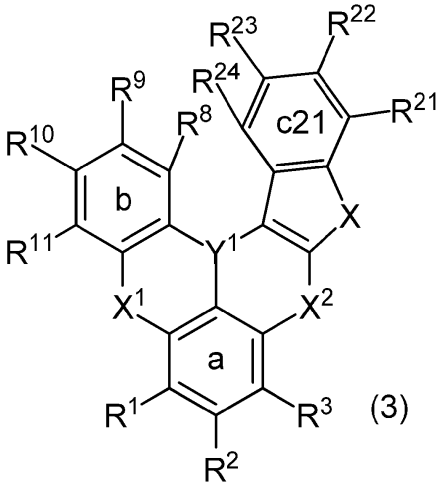
式（１）で表される多環芳香族化合物およびその多量体の好ましい例として、下記式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）または（９）で表される多環芳香族化合物およびその多量体、ならびに下記式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）で表される多環芳香族化合物およびその多量体があげられる。なお、式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）における置換基や含まれる環の構造については、対応する式（１）の各説明を参照できる。

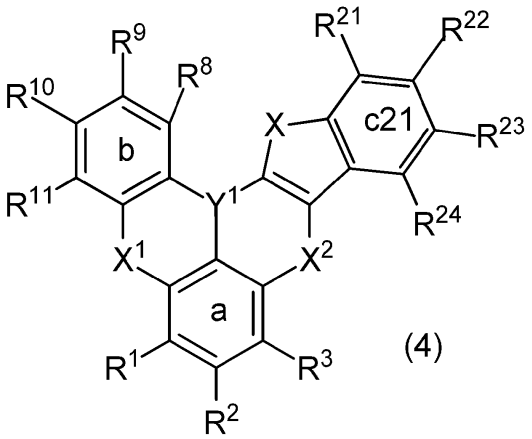
【０１４６】

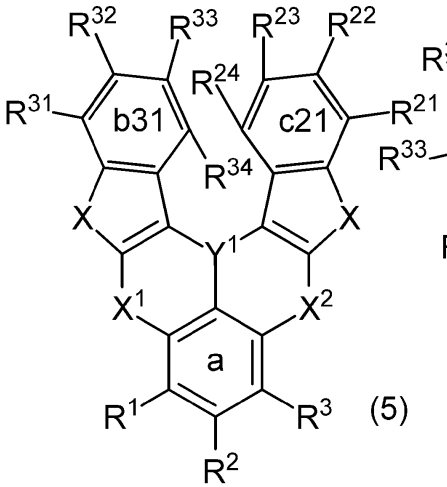
【化４１】

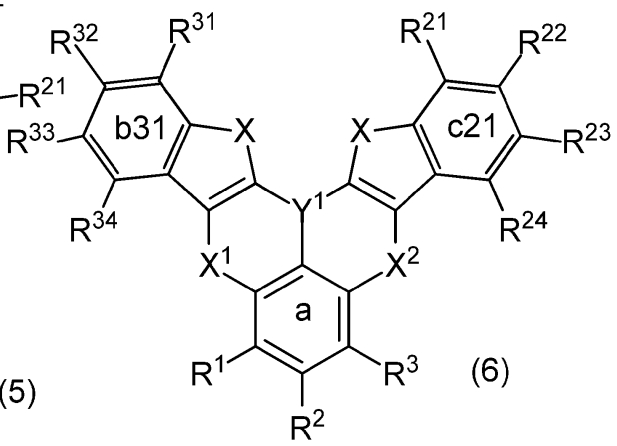






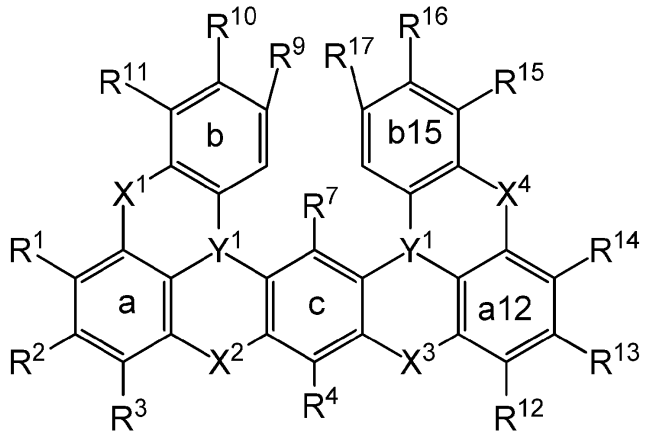




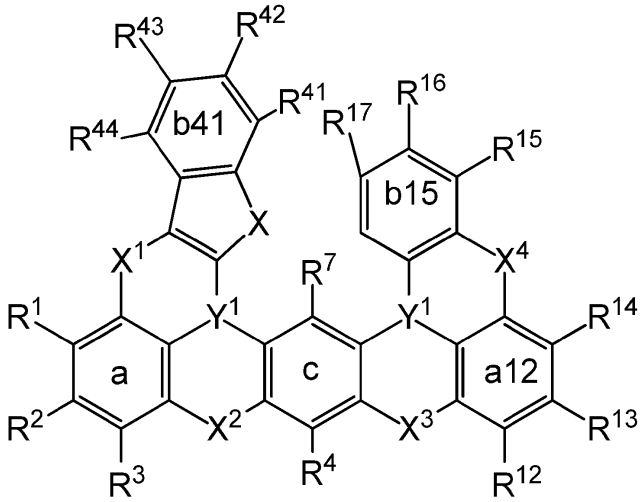


【０１４７】

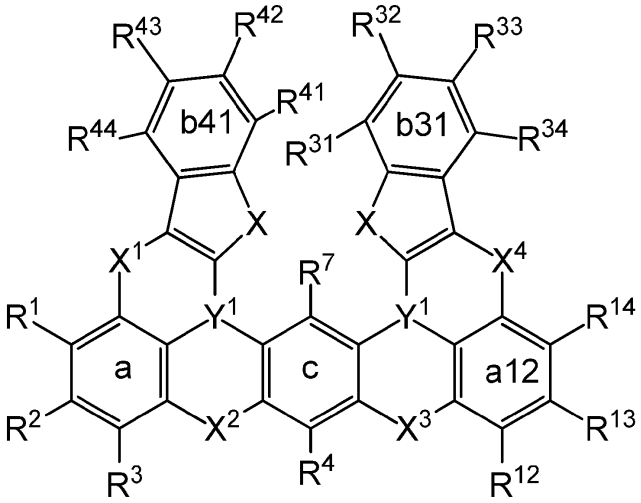
【化４２】



(7)



(8)



(9)

【０１４８】

式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、および（９）中、R^{1}～R^{17}、R^{21}～R^{24}、R^{31}～R^{34}、およびR^{41}～R^{44}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、または置換シリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよい。また、R^{1}～R^{3}のうちの隣接する基同士が結合してａ環と共に、R^{8}～R^{11}のうちの隣接する基同士が結合し

てｂ環と共に、R^4～R^7のうちの隣接する基同士が結合してｃ環と共に、R^{12}～R^{14}のうちの隣接する基同士が結合してａ１２環と共に、R^{15}～R^{17}のうちの隣接する基同士が結合してｂ１５環と共に、R^{21}～R^{24}のうちの隣接する基同士が結合してｃ２１環と共に、R^{31}～R^{34}のうちの隣接する基同士が結合してｂ３１環と共に、およびR^{41}～R^{44}のうちの隣接する基同士が結合してｂ４１環と共に、それぞれ、アリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルまたはアルキルジシクロアルキルシリルで置換されていてもよく、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよい。

【０１４９】

式（２）においては、R^1～R^{11}のうち少なくとも一組の隣接する２つの基は、結合して式（Ｈｅｔ）で表される２価の基を構成している。ただし、R^4およびR^5とR^6およびR^7とが同時に式（Ｈｅｔ）で表される２価の基を構成している場合、ならびにR^8およびR^9とR^{10}およびR^{11}とが同時に式（Ｈｅｔ）で表される２価の基を構成している場合は除かれる。すなわち、ｂ環、ｃ環のいずれも、２つ以上の式（Ｈｅｔ）で表される２価の基が２つ結合して３環の縮合環を形成することはない。

式（７）においては、R^1～R^3およびR^9～R^{17}のうち少なくとも一組の隣接する２つの基は、結合して式（Ｈｅｔ）で表される２価の基を構成している。

【０１５０】

式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、および（９）中、R^1～R^{17}、R^{21}～R^{24}、R^{31}～R^{34}、およびR^{41}～R^{44}は、それぞれ独立して、水素、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数６～１２のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数６～１２のアリールであり、２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数１～２４のアルキル、炭素数３～２４のシクロアルキルまたはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～６のアルキル）であることが好ましい。また、R^1～R^3のうちの隣接する基同士が結合してａ環と共に、R^8～R^{11}のうちの隣接する基同士が結合してｂ環と共に、R^4～R^7のうちの隣接する基同士が結合してｃ環と共に、R^{12}～R^{14}のうちの隣接する基同士が結合してａ１２環と共に、R^{15}～R^{17}のうちの隣接する基同士が結合してｂ１５環と共に、R^{21}～R^{24}のうちの隣接する基同士が結合してｃ２１環と共に、R^{31}～R^{34}のうちの隣接する基同士が結合してｂ３１環、およびR^{41}～R^{44}のうちの隣接する基同士が結合してｂ４１環と共に、それぞれ、炭素数９～１６のアリール環または炭素数６～１５のヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素は、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～１２のアルキル、炭素数３～１６のシクロアルキルまたはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～４のアルキル）で置換されていてもよい。

【０１５１】

式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）におけるR^2は、アルキル（メチル、ｔ－ブチル等）、置換フェニル（２，６，ジメチルフェニル等）、ジアリールアミノ（ジフェニルアミノ等）またはカルバゾリル（Ｎ－カルバゾリル等）であることが好ましい。また、ａ環におけるR^2以外の基であるR^1、R^3はそれぞれ水素であることが好ましい。

【０１５２】

式（２）（式（Ｈｅｔ））、式（３）、式（４）、式（５）、式（６）、式（７）（式（Ｈｅｔ））、式（８）、および式（９）中、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$である。Ｘとしての＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換され

ていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキルまたは置換されていてもよいシクロアルキルであり、置換されていてもよい炭素数６～３０のアリール、置換されていてもよい炭素数２～３０のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～２４のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～２４のシクロアルキルであることが好ましい。＞Ｎ－Ｒにおける Ｒは置換されていてもよいアリールであることが好ましく、無置換のアリールであることがより好ましく、無置換のフェニルであることがさらに好ましい。＞Ｃ（－Ｒ）$_2$における Ｒはいずれも置換されていてもよいアルキルであることが好ましく、いずれも無置換のアルキルであることがより好ましく、いずれも無置換のメチルであることがさらに好ましい。また、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であることが好ましく、＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒであることがより好ましく、＞Ｓ、または＞Ｏであることがさらに好ましい。

【０１５３】

式（Ｈｅｔ）中、Ｒ^{b1}およびＲ^{b2}は、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、または置換シリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよく、＊は結合位置（置換基としての結合手）を表し、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であり、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲはアリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルである。式（Ｈｅｔ）中、Ｒ^{b1}およびＲ^{b2}は水素、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数６～１２のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数６～１２のアリールであり、２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数１～２４のアルキル、炭素数３～２４のシクロアルキル、またはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～６のアルキル）であることが好ましい。

【０１５４】

式（２）におけるＲ^{7}およびＲ^{8}、式（３）におけるＲ^{8}およびＲ^{24}、または式（５）におけるＲ^{34}およびＲ^{24}は結合して、単結合、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅ（好ましくは、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｓ）となっていてもよい。これは式（１）において、Ｂ環およびＣ環が結合する場合の一例である。例えば、Ｒ^{7}およびＲ^{8}が結合する形態は、Ｙ^{1}と、ｃ環（の一部）と、Ｒ^{7}およびＲ^{8}の結合部位と、ｂ環（の一部）とから６員環が形成された形態に相当する。また、Ｙ^{1}と、ｃ環であるベンゼン環の一辺と、Ｒ^{7}およびＲ^{8}の結合部位と、ｂ環であるベンゼン環の一辺とにより囲まれた５員環または６員環が形成された形態ともいえる。前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、炭素数６～１２のアリール、炭素数２～１５のヘテロアリール、炭素数１～６のアルキル、または炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、炭素数６～１２のアリール、炭素数２～１５のヘテロアリール、炭素数１～６のアルキル、または炭素数３～１４のシクロアルキルであり、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、前記ｂ環およびｃ環の少なくとも１つの環と結合していてもよい。前記＞Ｎ－ＲのＲは、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～４のアルキルまたは炭素数５～１０のシクロアルキルであることが好ましい。前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～４のアルキル、または炭素数５～１０のシクロアルキルであることが好ましい。

【０１５５】

式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）および（９）中のＹ^{1}は、それぞれ独立して、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、Ａｌ、Ｇａ、Ａｓ、Ｓｉ－Ｒ、またはＧｅ－Ｒであり、前記Ｓｉ－ＲおよびＧｅ－ＲのＲは、炭素数６～１２のアリール、炭素数

１～６のアルキル、または炭素数３～１４のシクロアルキルである。Y^1は、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、またはＳｉ－Ｒが好ましく、Ｂが特に好ましい。

【０１５６】

式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）中のX^1、X^2、ならびに、（７）、（８）および（９）中のX^1、X^2、X^3およびX^4は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅであり、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキルまたは炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルである。また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環と縮合する５員環、およびｂ３１環と縮合する５員環からなる群より選択される少なくとも１つの環と結合していてもよい。

【０１５７】

ここで、式（１）における「前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは連結基または単結合により前記Ａ環、Ｂ環およびＣ環の少なくとも１つの環と結合している」との規定は、式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）または（９）では「前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－または単結合により、ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環と縮合する５員環、およびｂ３１環と縮合する５員環、およびｂ４１環からなる群より選択される少なくとも１つの環と結合している」との規定に対応する。

【０１５８】

X^1、X^2、X^3、およびX^4は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｓであり、前記＞Ｎ－ＲのＲは、置換されていてもよい炭素数６～１０のアリール、置換されていてもよい炭素数１～４のアルキルまたは置換されていてもよい炭素数５～１０のシクロアルキルであることが好ましく、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、置換されていてもよい炭素数６～１０のアリール、置換されていてもよい炭素数１～４のアルキル、または置換されていてもよい炭素数５～１０のシクロアルキルであることが好ましい。

【０１５９】

式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、および（９）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つ（ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環、ｂ３１環、およびｂ４１環、前記形成された環、前記アリールおよび前記ヘテロアリールの少なくとも１つ）は、炭素数３～２４の、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、炭素数１～２４のアルキルまたは炭素数３～２４のシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい。

【０１６０】

式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、または（９）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つが少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されている場合、少なくとも１つのシクロアルカンは、炭素数３～２０のシクロアルカンであって、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素が、炭素数６～１６のアリール、炭素数２～２２のヘテロアリール、炭素数１～１２のアルキルまたは炭素数３～１６のシクロアルキルで置換されていても

よいシクロアルカンであることが好ましい。

【０１６１】

式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、または（９）で表される化合物における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよい。

【０１６２】

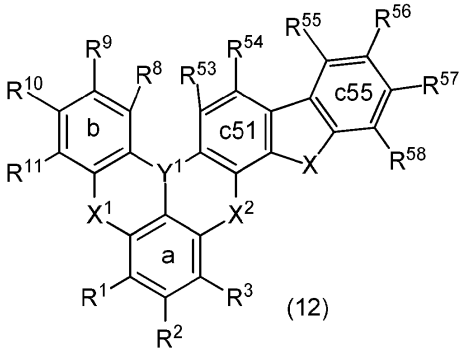
式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、および（９）で表される化合物はそれぞれ、上述の式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキルを少なくとも１つ含む構造であることが好ましい。特に、式（２）、（７）それぞれにおけるR^{b1}、R^{b2}、および式Ｈｅｔが結合している環の置換基のいずれか１つ以上、式（３）、（４）それぞれにおけるR^{21}～R^{24}のいずれか１つ以上、式（５）、（６）それぞれにおけるR^{21}～R^{24}、R^{31}～R^{34}のいずれか１つ以上、式（８）におけるR^{41}～R^{44}のいずれか１つ以上、および式（９）におけるR^{31}～R^{34}およびR^{41}～R^{44}のいずれか１つ以上が上述の式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキル（ｔ－ブチルあるいはｔ－アミルなど）、ネオペンチルまたはアダマンチルを含む置換基であることが好ましい。

【０１６３】

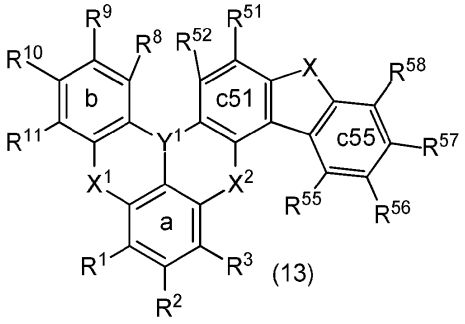
式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、または（９）で表される多環芳香族化合物またはその多量体のうち、式（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、または（９）で表される多環芳香族化合物またはその多量体がより好ましく、式（３）、（４）で表される多環芳香族化合物またはその多量体がさらに好ましい。

【０１６４】

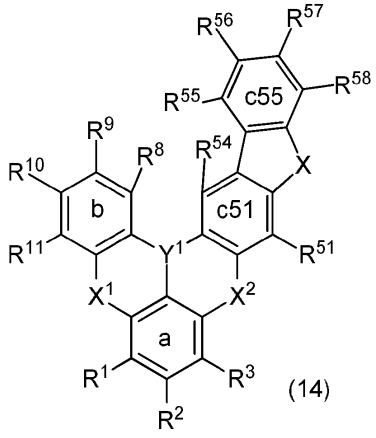
【化４３】



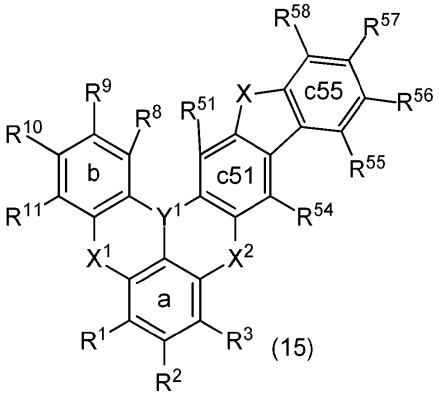
(12)



(13)



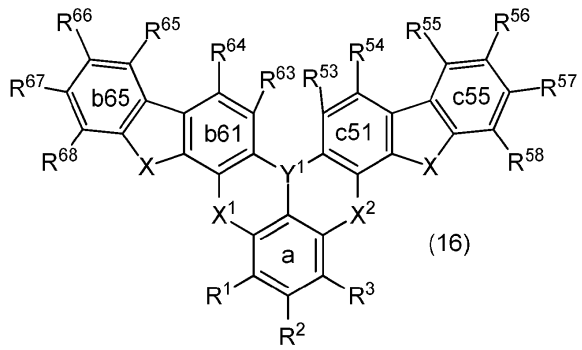
(14)



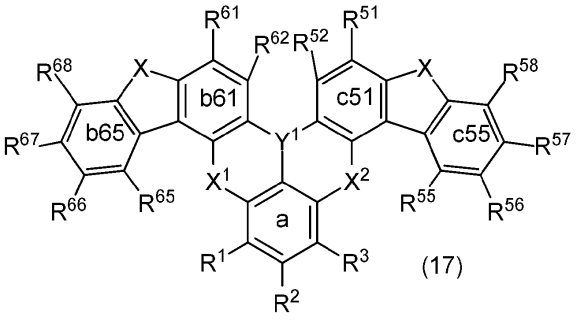
(15)

【０１６５】

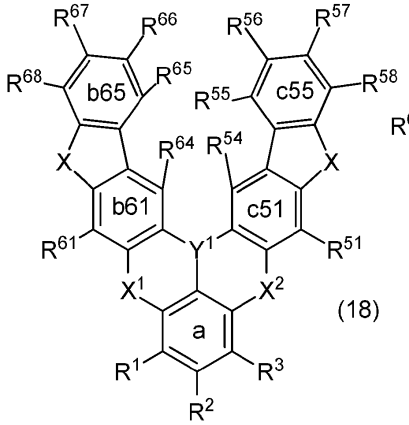
【化４４】



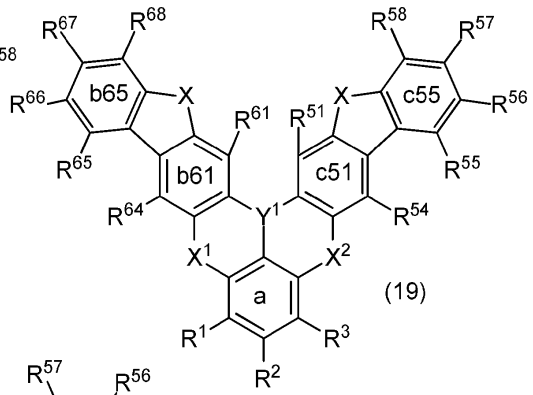
(16)



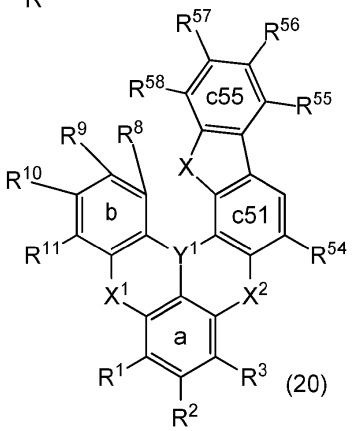
(17)



(18)



(19)



(20)

【０１６６】

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）および（２０）中、R^1～R^3およびR^8～R^{11}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、またはアルキルジシクロアルキルシリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよい。R^1～R^3およびR^8～R^{11}は、それぞれ独立して、

水素、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数６～１２のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数６～１２のアリールであり、２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、または炭素数１～２４のアルキルであることが好ましい。

【０１６７】

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）および（２０）中、R^{51}～R^{58}およびR^{61}～R^{68}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、または置換シリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよい。R^{51}～R^{58}およびR^{61}～R^{68}は、それぞれ独立して、水素、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数６～１２のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数６～１２のアリールであり、２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数１～２４のアルキル、炭素数３～２４のシクロアルキル、またはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～６のアルキル）であることが好ましい。

【０１６８】

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）および（２０）中、R^{1}～R^{3}のうちの隣接する基同士が結合してａ環と共に、R^{8}～R^{11}のうちの隣接する基同士が結合してｂ環と共に、R^{51}～R^{54}のうちの隣接する基同士が結合してｃ５１環と共に、R^{55}～R^{58}のうちの隣接する基同士が結合してｃ５５環と共に、R^{61}～R^{64}のうちの隣接する基同士が結合してｂ６１環と共に、およびR^{65}～R^{68}のうちの隣接する基同士が結合してｂ６５環と共に、それぞれ、アリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、または置換シリルで置換されていてもよい。形成されるアリール環またはヘテロアリール環は炭素数９～１６のアリール環または炭素数６～１５のヘテロアリール環であることが好ましく、形成された環における少なくとも１つの水素は、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～１２のアルキル、または炭素数３～１６のシクロアルキルまたはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～４のアルキル）で置換されていてもよい。

【０１６９】

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）および（２０）におけるR^{2}は、アルキル（メチル、ｔ－ブチル等）、置換フェニル（２，６，ジメチルフェニル等）、ジアリールアミノ（ジフェニルアミノ等）またはカルバゾリル（Ｎ－カルバゾリル等）であることが好ましい。また、ａ環におけるR^{2}以外の基であるR^{1}、R^{3}はそれぞれ水素であることが好ましい。

【０１７０】

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）および（２０）中、Ｘは、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$である。前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは水素、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、好ましくは、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、炭素数１～２４のアルキル、または炭素数３～２４のシクロアルキルである。＞Ｎ－Ｒにおける Ｒは置換されていてもよいアリールであることが好ましく、無置換のアリールであることがより好ましく、無置換のフェニルであることがさらに好ましい。＞Ｃ（－Ｒ）$_2$における Ｒはいずれも置換されていてもよいアルキルであることが好ましく、いずれも無置換の

アルキルであることがより好ましく、いずれも無置換のメチルであることがさらに好ましい。また、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であることが好ましく、＞Ｏ、＞Ｓ、または＞Ｎ－Ｒであることがより好ましく、＞Ｏまたは＞Ｓであることがさらに好ましい。

【０１７１】

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）および（２０）中、Ｙ^{1}は、それぞれ独立して、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、Ａｌ、Ｇａ、Ａｓ、Ｓｉ－Ｒ、またはＧｅ－Ｒであり、前記Ｓｉ－ＲおよびＧｅ－ＲのＲは、炭素数６～１２のアリール、炭素数１～６のアルキル、または炭素数３～１４のシクロアルキルである。Ｙ^{1}は、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、またはＳｉ－Ｒが好ましく、Ｂが特に好ましい。

【０１７２】

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）および（２０）中、Ｘ^{1}およびＸ^{2}は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅであり、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、ａ環、ｂ環、ｃ５１環、およびｂ６１環からなる群より選択される少なくとも１つの環と結合していてもよい。

【０１７３】

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）または（２０）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つ（ａ環、ｂ環、ｃ５１環、ｃ５５環、ｂ６１環、ｂ６５環、前記形成された環、前記アリール、および前記ヘテロアリールの少なくとも１つ）は、炭素数３～２４の、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、炭素数１～２４のアルキルまたは炭素数３～２４のシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい。

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）または（２０）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つが少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されている場合、少なくとも１つのシクロアルカンは、炭素数３～２０のシクロアルカンであって、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素が、炭素数６～１６のアリール、炭素数２～２２のヘテロアリール、炭素数１～１２のアルキルまたは炭素数３～１６のシクロアルキルで置換されていてもよいシクロアルカンであることが好ましい。

【０１７４】

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）または（２０）で表される化合物における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよい。

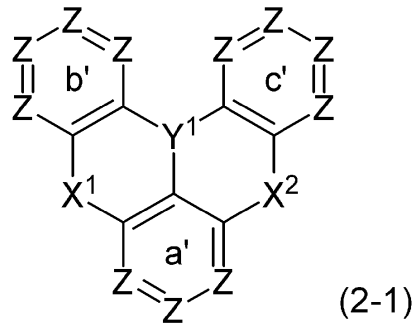
【０１７５】

式（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）または（２０）で表される化合物は、上述の式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキルを少なくとも１つ含む構造であることが好ましい。特に、式（１２）、（１３）、（１

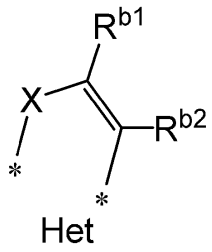
４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）および（２０）のそれぞれにおいて、Ｒ^{51}～Ｒ^{58}およびＲ^{61}～Ｒ^{68}のいずれかが上述の式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキル（ｔ－ブチル、ｔ－アミルなど）、ネオペンチル、またはアダマンチルを含む置換基であることが好ましい。

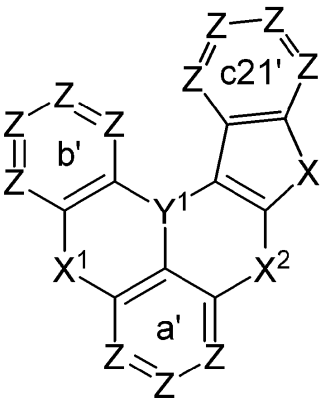
【０１７６】

【化４５】

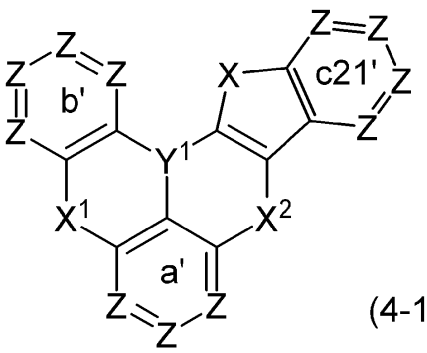


(2-1)

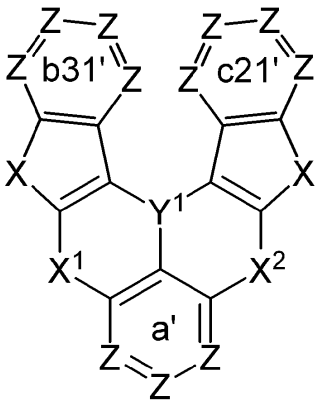




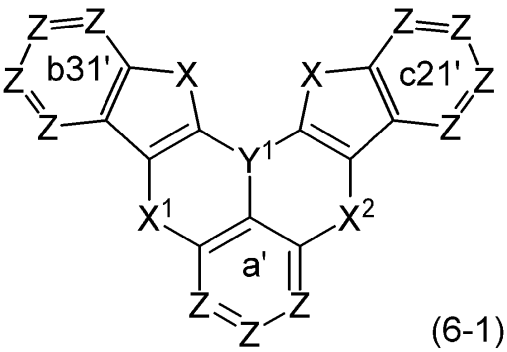
(3-1)



(4-1)



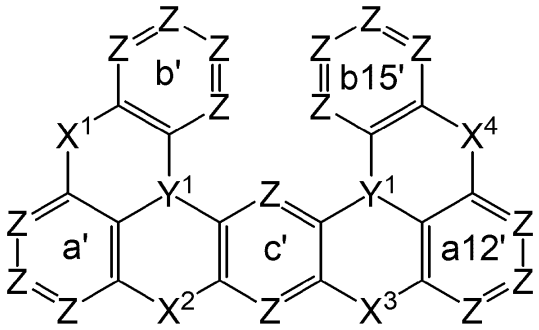
(5-1)



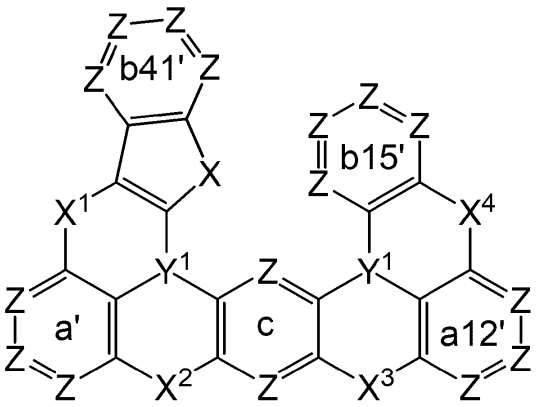
(6-1)

【０１７７】

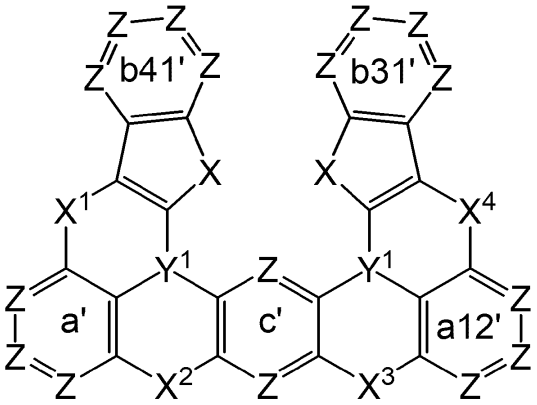
【化４６】



(7-1)



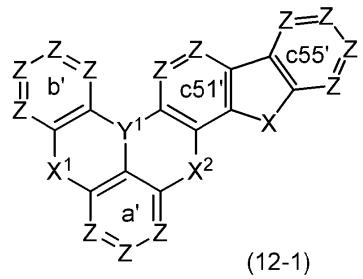
(8-1)



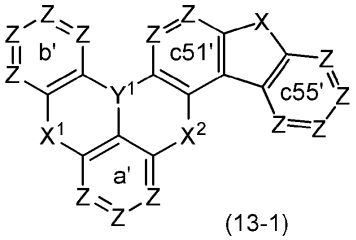
(9-1)

【０１７８】

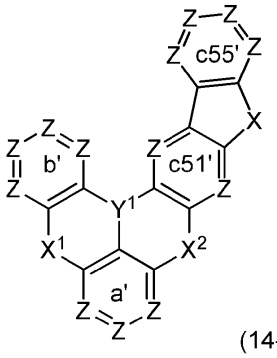
【化４７】



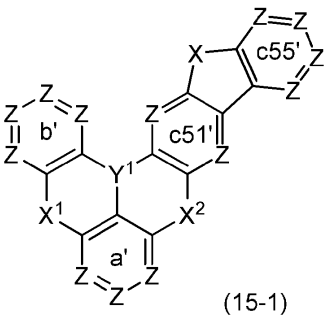
(12-1)



(13-1)



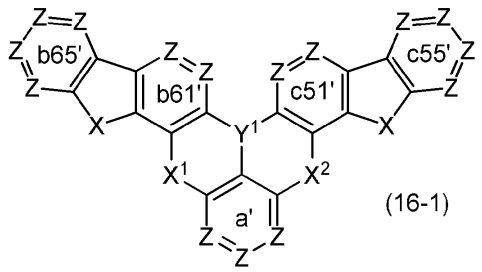
(14-1)



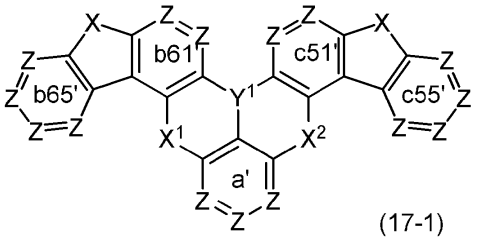
(15-1)

【０１７９】

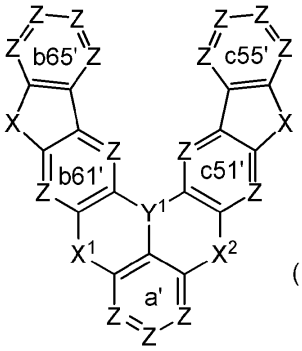
【化４８】



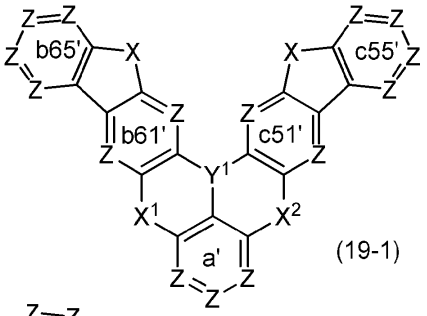
(16-1)



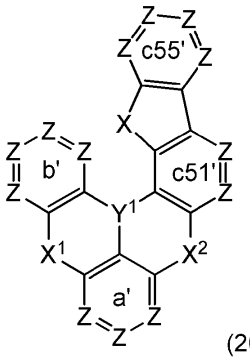
(17-1)



(18-1)



(19-1)



(20-1)

【０１８０】

式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）中、ＺはそれぞれＣ－Ｒ^{z}あるいはＮであり、少なくとも１つのＺはＮであり、Ｒ^{z}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、または置換シリルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルで置換されていてもよい。Ｒ^{z}は、それぞれ独立して、水素、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数６～１２のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数６～１２のアリールであり、２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、または炭素数１～２４のアルキルであることが好ましい。

【０１８１】
式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）中、ａ’環中のR^zのうちの隣接する基同士が結合してａ’環と共に、ｂ’環中のR^zのうちの隣接する基同士が結合してｂ’環と共に、ｃ’環中の^zRのうちの隣接する基同士が結合してｃ’環と共に、ｃ２１’環中の^zRのうちの隣接する基同士が結合してｃ２１’環と共に、ｂ３１’環中の^zRのうちの隣接する基同士が結合してｂ３１’環と共に、ｂ１５’環中のR^zのうちの隣接する基同士が結合してｂ１５’環と共に、ａ１２’環中の^zRのうちの隣接する基同士が結合してａ１２’環と共に、ｂ４１’環中の^zRのうちの隣接する基同士が結合してｂ４１’環と共に、ｃ５１’環中の^zRのうちの隣接する基同士が結合してｃ５１’環と共に、ｃ５５’環中の^zRのうちの隣接する基同士が結合してｃ５５’環と共に、ｂ６１’環中のR^zのうちの隣接する基同士が結合してｂ６１’環と共に、ｂ６５’環中のR^zのうちの隣接する基同士が結合してｂ６５’環と共に、ｃ７０’環中の^zRのうちの隣接する基同士が結合してｃ７０’環と共に、ｂ７０’環中の^zRのうちの隣接する基同士が結合してｂ７０’環と共に、それぞれ、アリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、または置換シリルで置換されていてもよい。形成されるアリール環またはヘテロアリール環は炭素数９～１６のアリール環または炭素数６～１５のヘテロアリール環であることが好ましく、形成された環における少なくとも１つの水素は、炭素数６～１０のアリール、炭素数１～１２のアルキル、または炭素数３～１６のシクロアルキルまたはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数１～４のアルキル）で置換されていてもよい。
【０１８２】
式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、および（２０－１）それぞれにおいて、Ｎであるｚを含む環（単環）は１～４個であることが好ましく、１～３個であることがより好ましく、１～２個であることがさらに好ましく、１個であることが特に好ましい。式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、および（２０－１）それぞれにおいて、少なくともａ’環がＮであるｚを含む環であることが好ましく、ａ’環のみがＮであるｚを含む環であることがより好ましい。また、式（７－１）、（８－１）、および（９－１）それぞれにおいて、少なくともａ’環およびａ１２’環がＮであるｚを含む環であることが好ましく、ａ’環およびａ１２’環のみがＮであるｚを含む環であることがより好ましい。式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、および（２０－１）中、Ｎであるｚを含む環（単環）においては、複数のｚのうち１つまたは２つがＮであることが好ましく、２つがＮであるとき、２つのＮは互いに隣接していないことが好ましい。Ｎであるｚを含む環（単環）はピリジン環またはピリミジン環が好ましい。ａ’環がＮであるｚを含む環であるときは、ピリジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、または１，２，３－トリアジン環が好ましく、ピリジン環またはピリミジン環がより好ましい。
【０１８３】
式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１

４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、および（２０－１）中、Ｘは、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｓｅ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$である。前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲはそれぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、２つのＲはそれぞれ結合して環を形成してもよく、好ましくは、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、炭素数１～２４のアルキル、または炭素数３～２４のシクロアルキルである。＞Ｎ－Ｒにおけるは置換されていてもよいアリールであることが好ましく、無置換のアリールであることがより好ましく、無置換のフェニルであることがさらに好ましい。＞Ｃ（－Ｒ）$_2$におけるＲはいずれも置換されていてもよいアルキルであることが好ましく、いずれも無置換のアルキルであることがより好ましく、いずれも無置換のメチルであることがさらに好ましい。また、Ｘは＞Ｏ、＞Ｓ、＞Ｎ－Ｒ、または＞Ｃ（－Ｒ）$_2$であることが好ましく、＞Ｏ、＞Ｓ、または＞Ｎ－Ｒであることがより好ましく、＞Ｏまたは＞Ｓであることがさらに好ましい。

【０１８４】

式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、および（２０－１）中、Ｙ^{1}は、それぞれ独立して、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、Ａｌ、Ｇａ、Ａｓ、Ｓｉ－Ｒ、またはＧｅ－Ｒであり、前記Ｓｉ－ＲおよびＧｅ－ＲのＲは、炭素数６～１２のアリール、炭素数１～６のアルキル、または炭素数３～１４のシクロアルキルである。Ｙ^{1}は、Ｂ、Ｐ、Ｐ＝Ｏ、Ｐ＝Ｓ、またはＳｉ－Ｒが好ましく、Ｂが特に好ましい。

【０１８５】

式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、および（２０－１）中のＸ^{1}およびＸ^2、ならびに、式（７－１）、（８－１）、および（９－１）中のＸ^1、Ｘ^2、Ｘ^3、およびＸ^{4}は、それぞれ独立して、＞Ｏ、＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、＞Ｃ（－Ｒ）$_2$、＞Ｓ、または＞Ｓｅであり、前記＞Ｎ－Ｒおよび＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$のＲは、それぞれ独立して、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、前記＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲは、水素、置換されていてもよい炭素数６～１２のアリール、置換されていてもよい炭素数２～１５のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数１～６のアルキル、または置換されていてもよい炭素数３～１４のシクロアルキルであり、また、前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$、および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－、または単結合により、ａ’環、ｂ’環、ｃ’環、ａ１２’環、ｂ１５’環、ｃ２１’環と縮合する５員環、ｂ３１’環と縮合する５員環、ｃ５１’環、およびｂ６１’環からなる群より選択される少なくとも１つの環と結合していてもよい。

【０１８６】

式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）または（２０－１）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つ（ａ’環、ｂ’環、ｃ’環中、ｃ２１’、ｂ３１’環、ｂ１５’環、ａ１２’環、ｂ４１’環、ｃ５１’環、ｃ５５’環中、ｂ６１’環、ｂ６５’環、前記形成された環、前記アリール、および前記ヘテロアリールの少なくとも１つ）は、炭素数３～２４の、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は、炭素数６～３０のアリール、炭素数２～３０のヘテロアリール、炭素数１～２４のアルキルまたは炭素数３～２４のシクロアルキルで置換されて

いてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい。

【０１８７】

式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）または（２０－１）で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも１つが少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されている場合、少なくとも１つのシクロアルカンは、炭素数３～２０のシクロアルカンであって、当該シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素が、炭素数６～１６のアリール、炭素数２～２２のヘテロアリール、炭素数１～１２のアルキルまたは炭素数３～１６のシクロアルキルで置換されていてもよいシクロアルカンであることが好ましい。

【０１８８】

式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）および（２０－１）で表される化合物における少なくとも１つの水素は、重水素、シアノ、またはハロゲンで置換されていてもよい。

【０１８９】

式（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）または（２０－１）で表される化合物は、上述の式（ｔＲ）で表されるターシャリーアルキル（ｔ－ブチル、ｔ－アミルなど）、ネオペンチル、またはアダマンチルを少なくとも１つ含む構造であることが好ましい。

【０１９０】

実施例の化合物（１Ｆ－８６）および化合物（１Ｆ－８７）は、それぞれ式（４－１）および式（１３－１）において、ａ’環のみがＮであるＺを含む環（ピリジン環）である化合物に該当する。実施例（表２）に示すように、これらの化合物を発光層に用いた有機ＥＬ素子では高輝度を保持する時間が長く、素子寿命を向上させることができることがわかる。

【０１９１】

上述のように、式（１）、または式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）もしくは（２０－１）で表される多環芳香族化合物およびその多量体の化学構造中のアリール環およびヘテロアリール環の少なくとも１つは、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよい。このような構造を有する本発明の化合物を発光材料として用いることにより、さらに発光効率や素子寿命を向上させることができる。

【０１９２】

例えば、Ａ環、Ｂ環、Ｃ環、ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環、ｂ３１環、ｂ４１環、ｃ５１環、ｃ５５環、ｂ６１環、ｂ６５環、ａ’環、ｂ’環、ｃ’環、ｃ２１’環、ｂ３１’環、ｂ１５’環、ａ１２’環、ｂ４１’環、ｃ５１’環、ｃ５５’環中、ｂ６１’環、ｂ６５’環であるアリール環およびヘテロアリール環、縮合環中のアリール環およびヘテロアリール環、Ａ環～Ｃ環中の第１および第２の置換基としてのアリール（アリール、ジアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリルまたはアリールオキシにおけるアリール部分）およびヘテロアリール（ヘテロアリール、ジヘテロアリールアミノまたはアリールヘテロアリールアミノにおけるヘテロアリール部分）、ａ環、ｂ環

、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環、ｂ３１環、ｂ４１環、ｃ５１環、ｃ５５環、ｂ６１環、ｂ６５環への第１および第２の置換基としてのアリール（上記と同様）およびヘテロアリール（上記と同様）、Y^1であるＳｉ－ＲおよびＧｅ－ＲのＲとしてのアリール（上記と同様）、ならびに、X^1、X^2、X^3、X^4である＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲとしてのアリール（上記と同様）およびヘテロアリール（上記と同様）のうちの少なくとも１つが、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよい。

【０１９３】

好ましくは、Ａ環、Ｂ環、Ｃ環、ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環、ｂ３１環、ｂ４１環、ｃ５１環、ｃ５５環、ｂ６１環、ｂ６５環、ａ’環、ｂ’環、ｃ’環、ｃ２１’環、ｂ３１’環、ｂ１５’環、ａ１２’環、ｂ４１’環、ｃ５１’環、ｃ５５’環中、ｂ６１’環、ｂ６５’環であるアリール環およびヘテロアリール環、Ａ環～Ｃ環中の第１の置換基としてのアリール（アリール、ジアリールアミノ、ジアリールボリルまたはアリールオキシにおけるアリール部分）およびヘテロアリール（ヘテロアリールまたはジヘテロアリールアミノにおけるヘテロアリール部分）、ａ環～ｃ環への第１の置換基としてのアリール（上記と同様）およびヘテロアリール（上記と同様）、ならびに、X^1、X^2、X^3、X^4である＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲとしてのアリール（上記と同様）およびヘテロアリール（上記と同様）のうちの少なくとも１つが、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよい。

【０１９４】

より好ましくは、Ａ環、Ｂ環、Ｃ環、ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環、ｂ３１環、ｂ４１環、ｃ５１環、ｃ５５環、ｂ６１環、ｂ６５環、ａ’環、ｂ’環、ｃ’環、ｃ２１’環、ｂ３１’環、ｂ１５’環、ａ１２’環、ｂ４１’環、ｃ５１’環、ｃ５５’環中、ｂ６１’環、ｂ６５’環であるアリール環、Ａ環～Ｃ環中の第１の置換基としてのアリール（アリールまたはジアリールアミノにおけるアリール部分）およびヘテロアリール（ヘテロアリールにおけるヘテロアリール部分）、ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環、ｂ３１環、ｂ４１環、ｃ５１環、ｃ５５環、ｂ６１環、ｂ６５環、ａ’環、ｂ’環、ｃ’環、ｃ２１’環、ｂ３１’環、ｂ１５’環、ａ１２’環、ｂ４１’環、ｃ５１’環、ｃ５５’環中、ｂ６１’環、ｂ６５’環への第１の置換基としてのアリール（上記と同様）およびヘテロアリール（上記と同様）、ならびに、X^1、X^2、X^3、X^4である＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲとしてのアリール（上記と同様）のうちの少なくとも１つが、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよい。

【０１９５】

さらに好ましくは、Ａ環、Ｂ環、Ｃ環、ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環、ｂ３１環、ｂ４１環、ｃ５１環、ｃ５５環、ｂ６１環、ｂ６５環、ａ’環、ｂ’環、ｃ’環、ｃ２１’環、ｂ３１’環、ｂ１５’環、ａ１２’環、ｂ４１’環、ｃ５１’環、ｃ５５’環中、ｂ６１’環、ｂ６５’環であるアリール環、Ａ環～Ｃ環中の第１の置換基としてのアリール（アリールまたはジアリールアミノにおけるアリール部分）、ａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環、ｂ３１環、ｂ４１環、ｃ５１環、ｃ５５環、ｂ６１環、ｂ６５環、ａ’環、ｂ’環、ｃ’環、ｃ２１’環、ｂ３１’環、ｂ１５’環、ａ１２’環、ｂ４１’環、ｃ５１’環、ｃ５５’環中、ｂ６１’環、ｂ６５’環への第１の置換基としてのアリール（上記と同様）、ならびに、X^1、X^2、X^3、X^4である＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$のＲとしてのアリール（上記と同様）のうちの少なくとも１つが、少なくとも１つのシクロアルカンで縮合されていてもよい。

【０１９６】

「シクロアルカン」としては、炭素数３～２４のシクロアルカン、炭素数３～２０のシクロアルカン、炭素数３～１６のシクロアルカン、炭素数３～１４のシクロアルカン、炭素数５～１０のシクロアルカン、炭素数５～８のシクロアルカン、炭素数５～６のシクロアルカン、炭素数５のシクロアルカンなどがあげられる。

【０１９７】

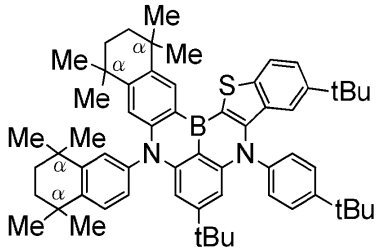
具体的なシクロアルカンとしては、シクロプロパン、シクロブタン、シクロペンタン、シクロヘキサン、シクロヘプタン、シクロオクタン、シクロノナン、シクロデカン、ノルボルネン、ビシクロ［１．０．１］ブタン、ビシクロ［１．１．１］ペンタン、ビシクロ［２．０．１］ペンタン、ビシクロ［１．２．１］ヘキサン、ビシクロ［３．０．１］ヘキサン、ビシクロ［２．１．２］ヘプタン、ビシクロ［２．２．２］オクタン、アダマンタン、ジアマンタン、デカヒドロナフタレンおよびデカヒドロアズレン、ならびに、これらの炭素数１～５のアルキル（特にメチル）置換体、ハロゲン（特にフッ素）置換体および重水素置換体などがあげられる。

【０１９８】

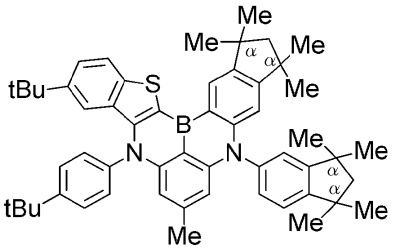
これらの中でも、例えば下記構造式に示すような、シクロアルカンのα位の炭素（アリール環またはヘテロアリール環に縮合するシクロアルキルにおいて、縮合部位の炭素に隣接する位置の炭素）における少なくとも１つの水素が置換された構造が好ましく、α位の炭素における２つの水素が置換された構造がより好ましく、２つのα位の炭素における合計４つの水素が置換された構造がさらに好ましい。この置換基としては、炭素数１～５のアルキル（特にメチル）置換体、ハロゲン（特にフッ素）置換体および重水素置換体などがあげられる。

【０１９９】

【化４９】



(1F-47)

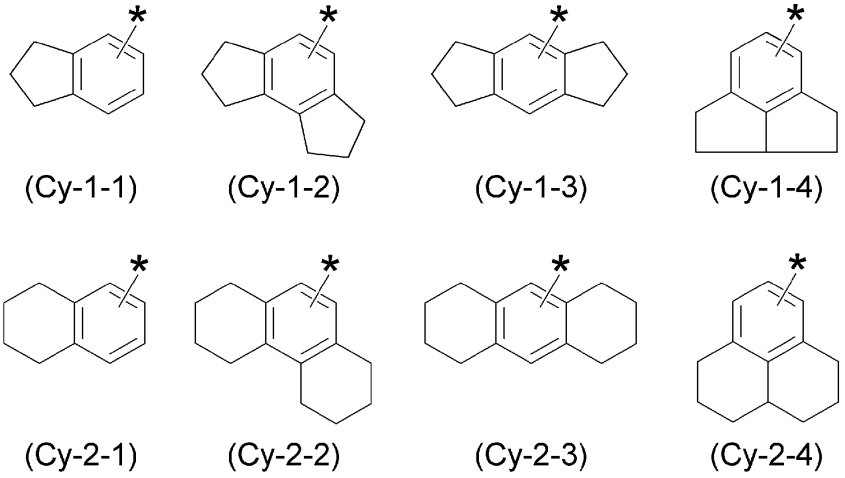


(1F-108)

【０２００】

１つのアリール環またはヘテロアリール環に縮合するシクロアルカンの数は、１～３個が好ましく、１個または２個がより好ましく、１個がさらに好ましい。例えば１つのベンゼン環（フェニル）に１個または複数のシクロアルカンが縮合した例を以下に示す。＊は結合位置を示し、ベンゼン環を構成しかつシクロアルカンを構成していない炭素のいずれであってもよい。式（Ｃｙ－１－４）および式（Ｃｙ－２－４）のように縮合したシクロアルカン同士が縮合してもよい。縮合される環（基）がベンゼン環（フェニル）以外の他のアリール環またはヘテロアリール環の場合であっても、縮合するシクロアルカンがシクロペンタンまたはシクロヘキサン以外の他のシクロアルカンの場合であっても、同様である。

【化５０】

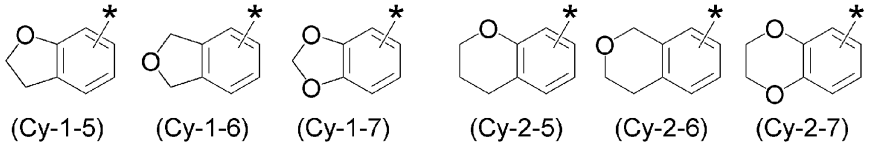


【０２０１】

シクロアルカンにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－で置換されていてもよい。例えば１つのベンゼン環（フェニル）に縮合したシクロアルカンにおける１個または複数の－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置換された例を以下に示す。縮合される環（基）がベンゼン環（フェニル）以外の他の芳香族環または複素芳香族環の場合であっても、縮合するシクロアルカンがシクロペンタンまたはシクロヘキサン以外の他のシクロアルカンの場合であっても、同様である。

【０２０２】

【化５１】

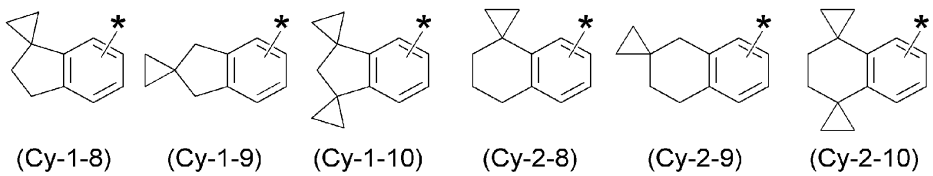


【０２０３】

シクロアルカンにおける少なくとも１つの水素は置換されていてもよく、この置換基としては、例えば、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（２つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、置換シリル、重水素、シアノまたはハロゲンがあげられ、これらの詳細は、上述した第１の置換基の説明を引用することができる。これらの置換基の中でも、アルキル（例えば炭素数１～６のアルキル）、シクロアルキル（例えば炭素数３～１４のシクロアルキル）、ハロゲン（例えばフッ素）および重水素などが好ましい。また、シクロアルキルが置換する場合はスピロ構造を形成する置換形態でもよく、この例を以下に示す。

【０２０４】

【化５２】



【０２０５】

シクロアルカン縮合の形態としては、まず、式（１）におけるＡ環、Ｂ環、Ｃ環（式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１

）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、または（２０－１）におけるａ環、ｂ環、ｃ環、ａ１２環、ｂ１５環、ｃ２１環、ｂ３１環、ｂ４１環、ｃ５１環、ｃ５５環、ｂ６１環、ｂ６５環、ａ’環、ｂ’環、ｃ’環、ｃ２１’環、ｂ３１’環、ｂ１５’環、ａ１２’環、ｂ４１’環、ｃ５１’環、ｃ５５’環中、ｂ６１’環、ｂ６５’環）であるアリール環およびヘテロアリール環、縮合環中のアリール環およびヘテロアリール環がシクロアルカンで縮合された形態があげられる。特に、式（３）のｂ環（特にＲ^{9}およびＲ^{10}が結合して環を形成するように）、式（３）のｃ２１環、式（４）のｂ環（特にＲ^{9}およびＲ^{10}が結合して環を形成するように）、式（４）のｃ２１環（特にＲ^{22}およびＲ^{23}が結合して環を形成するように）がシクロアルカンで縮合された形態が好ましくあげられる。

【０２０６】

シクロアルカン縮合の他の形態としては、式（１）または式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、もしくは（２０－１）で表される多環芳香族化合物およびその多量体が、例えば、Ｒがシクロアルカンで縮合されたアリールである＞Ｎ－Ｒ、シクロアルカンで縮合されたジアリールアミノ（このアリール部分へ縮合）、シクロアルカンで縮合されたカルバゾリル（このベンゼン環部分へ縮合）またはシクロアルカンで縮合されたベンゾカルバゾリル（このベンゼン環部分へ縮合）を有する例があげられる。「ジアリールアミノ」については上記「第１の置換基」として説明した基があげられる。

【０２０７】

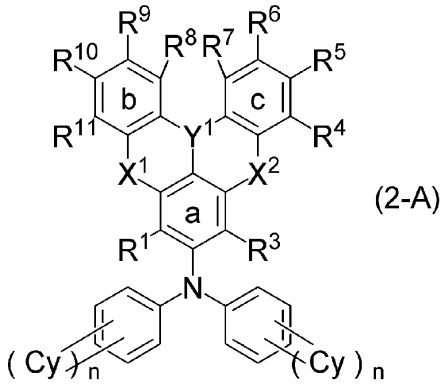
また、さらに具体的な例としては、式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、または（２０－１）で表される多環芳香族化合物およびその多量体におけるＲ^{2}が、シクロアルカンで縮合されたジアリールアミノ（このアリール部分へ縮合）またはシクロアルカンで縮合されたカルバゾリル（このベンゼン環部分へ縮合）である例があげられる。

【０２０８】

この一例として、下記式（２－Ａ）で表される多環芳香族化合物、または下記式（２－Ａ）で表される構造を複数有する多環芳香族化合物の多量体があげられる。Ｃｙはシクロアルカン、ｎは、それぞれ独立して、１～３（好ましくは１）の整数であり、「＝（Ｃｙ）ｎ」はｎ個のシクロアルカンが縮合対象となる構造の任意の位置に縮合すること（下記式（２－Ａ）ではベンゼン環（フェニル）にｎ個のシクロアルカンが縮合すること）を意味し、構造式中の各符号の定義は式（２）中の各符号の定義と同じである。なお、以下の式において、ａ環、ｂ環およびｃ環のうちの少なくとも一つの環は式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、または（２０－１）の規定にしたがって縮合環であるものとする。

【０２０９】

【化５３】



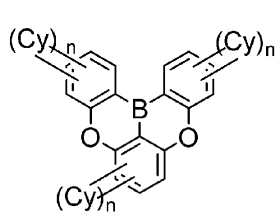
(2-A)

【０２１０】

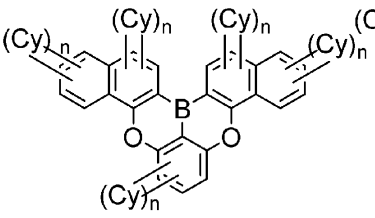
具体的には、以下の式で表される化合物があげられる。下記式中の「Ｃｙ」はシクロアルカンを表し、ｎはそれぞれ独立して０～最大縮合可能な数（ただしすべてのｎが０になることはない）、好ましくは０～２（ただしすべてのｎが０になることはない）、より好ましくは１であり、「＝（Ｃｙ）ｎ」はｎ個のシクロアルカンが縮合対象となる構造の任意の位置に縮合すること（例えば下記式「１－Ｃｙ－（１）」では各ベンゼン環の任意の位置にｎ個のシクロアルカンが縮合すること）を意味する。なお、下記構造式中の「ＯＰｈ」はフェノキシ、「Ｍｅ」はメチルを示し、各化合物は上述した第１の置換基および第２の置換基で置換されていてもよい。なお、以下の式において、式（１）におけるY^1に該当する元素に結合する環の少なくとも一つは、式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、（１９）、（２０）、（２－１）、（３－１）、（４－１）、（５－１）、（６－１）、（７－１）、（８－１）、（９－１）、（１０－１）、（１１－１）、（１２－１）、（１３－１）、（１４－１）、（１５－１）、（１６－１）、（１７－１）、（１８－１）、（１９－１）、または（２０－１）の規定にしたがって、単環のアリール環、単環のヘテロアリール環、およびシクロペンタジエン環からなる群より選択される２つ以上の環で構成される縮合環であるものとする。

【０２１１】

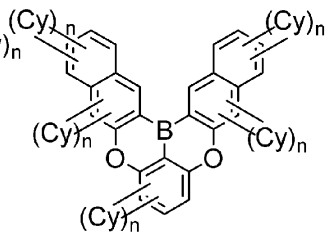
【化５４】



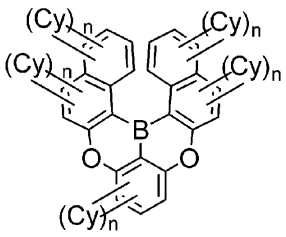
1-Cy-(1)



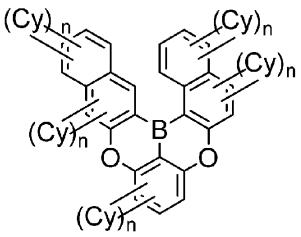
1-Cy-(2)



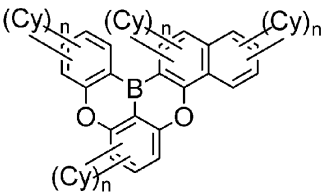
1-Cy-(3)



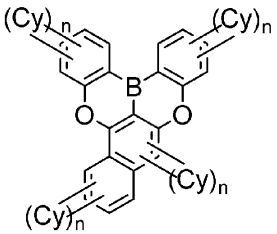
1-Cy-(4)



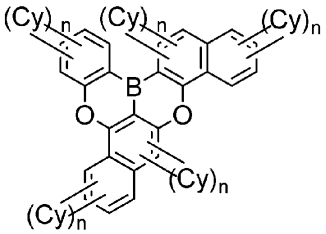
1-Cy-(5)



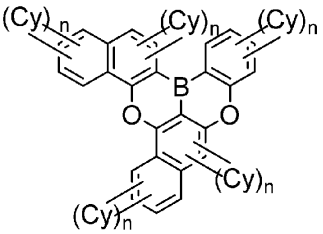
1-Cy-(6)



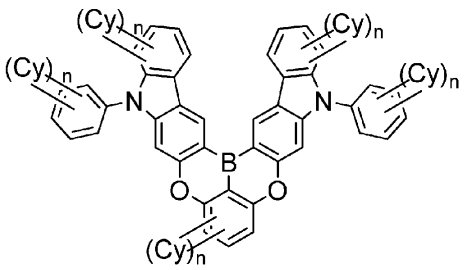
1-Cy-(7)



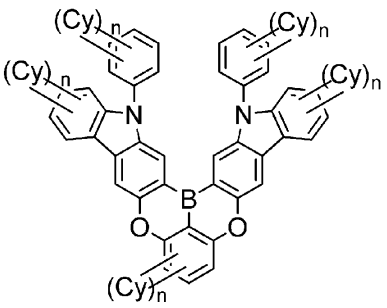
1-Cy-(8)



1-Cy-(9)



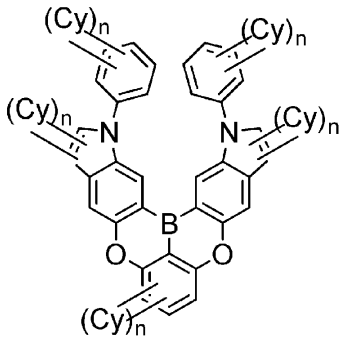
1-Cy-(10)



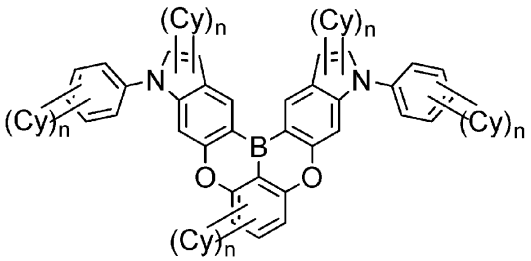
1-Cy-(11)

【０２１２】

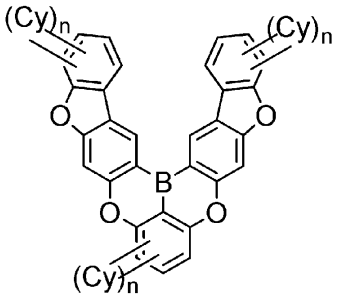
【化５５】



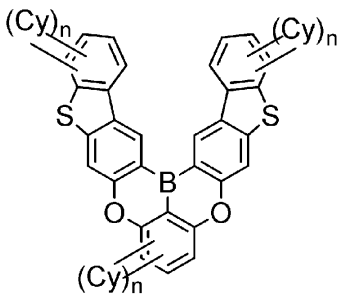
1-Cy-(12)



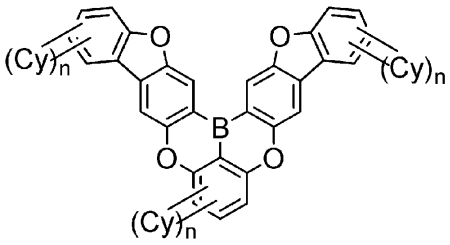
1-Cy-(13)



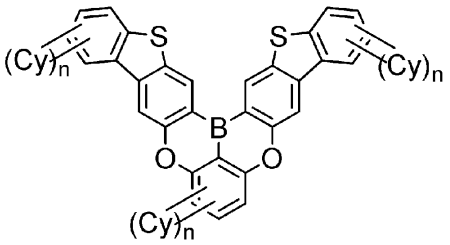
1-Cy-(14)



1-Cy-(15)



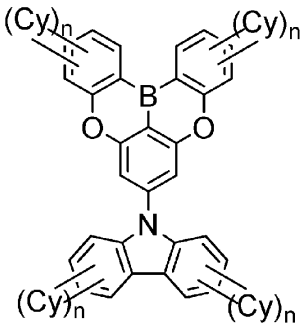
1-Cy-(16)



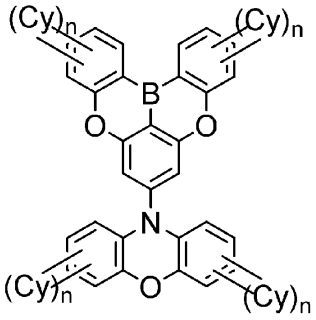
1-Cy-(17)

【０２１３】

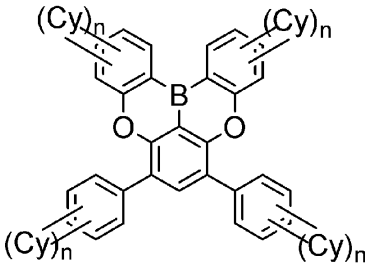
【化５６】



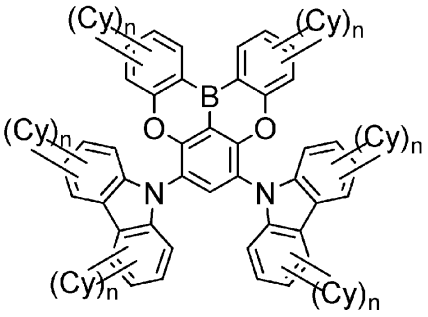
1-Cy-(49)



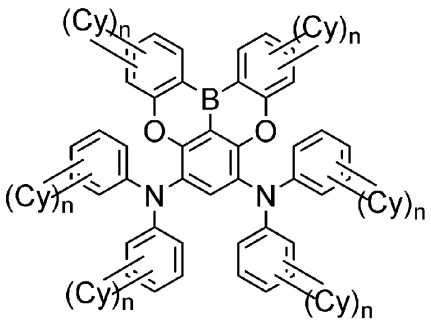
1-Cy-(81)



1-Cy-(91)



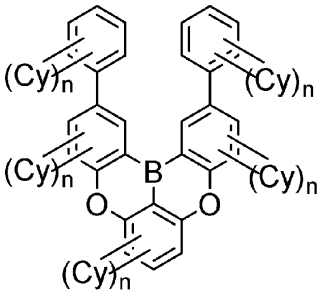
1-Cy-(100)



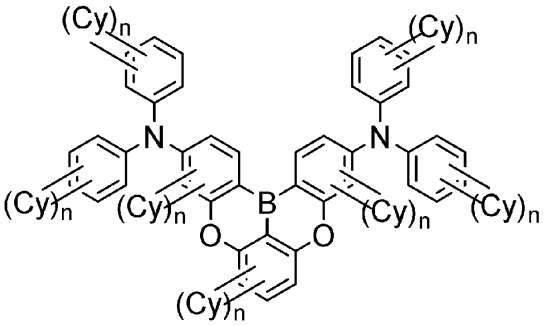
1-Cy-(141)

【０２１４】

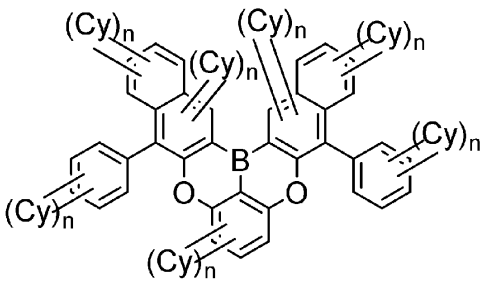
【化５７】



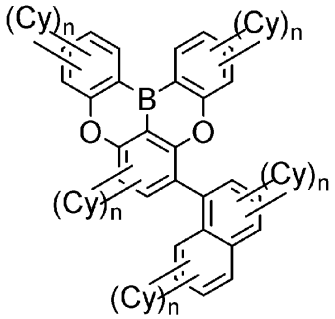
1-Cy-(151)



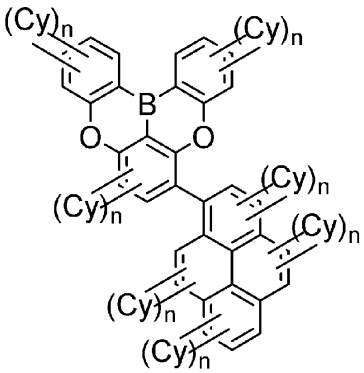
1-Cy-(176)



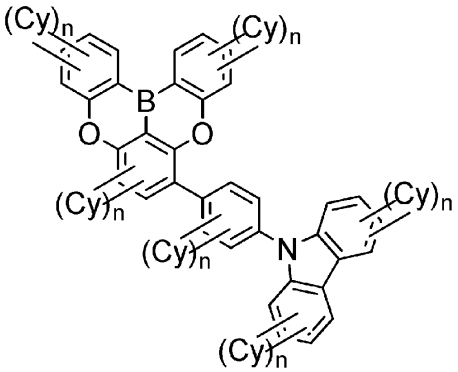
1-Cy-(1271)



1-Cy-(1084)



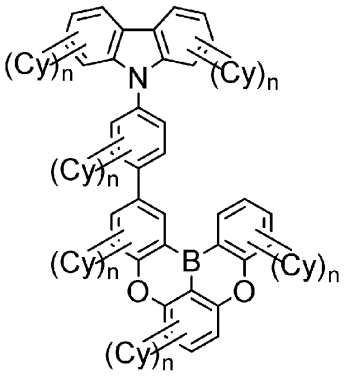
1-Cy-(1090)



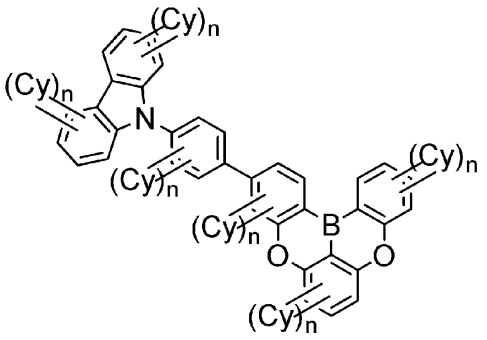
1-Cy-(1092)

【０２１５】

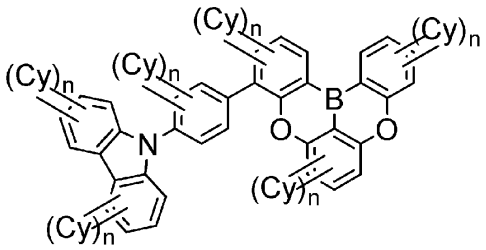
【化５８】



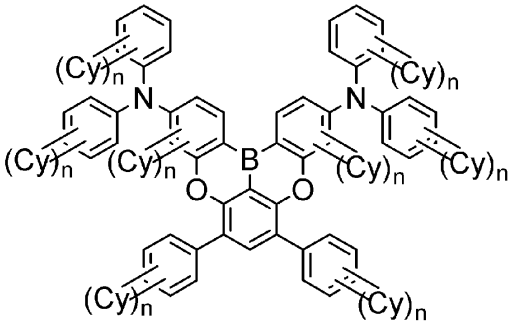
1-Cy-(1101)



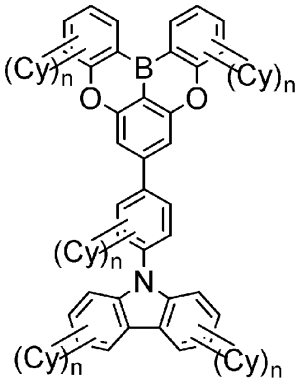
1-Cy-(1102)



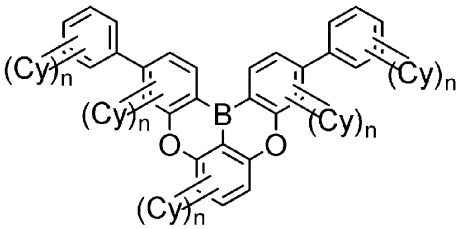
1-Cy-(1103)



1-Cy-(178)



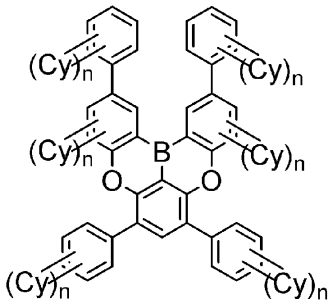
1-Cy-(50)



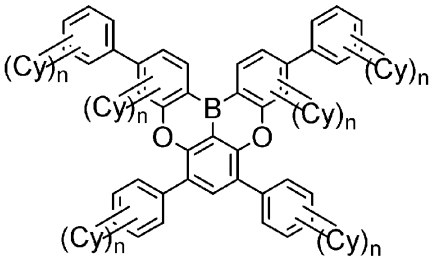
1-Cy-(152)

【０２１６】

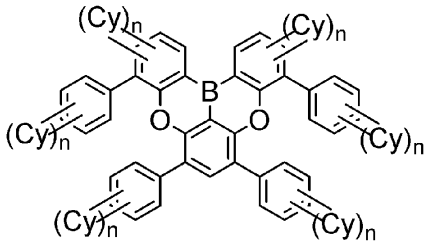
【化５９】



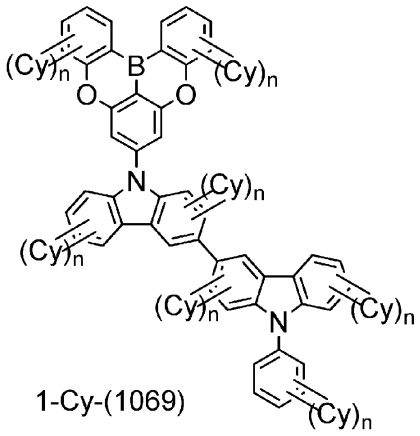
1-Cy-(1048)



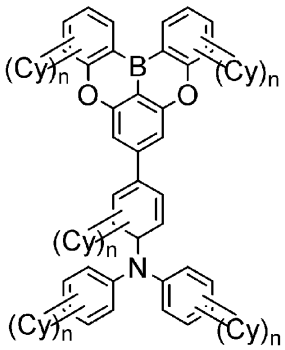
1-Cy-(1049)



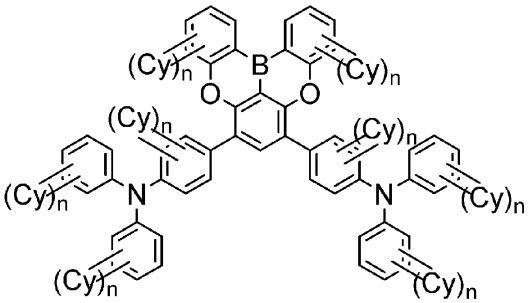
1-Cy-(1050)



1-Cy-(1069)



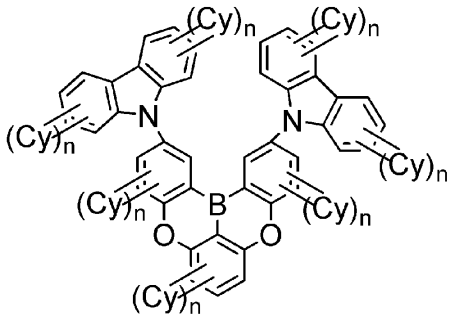
1-Cy-(79)



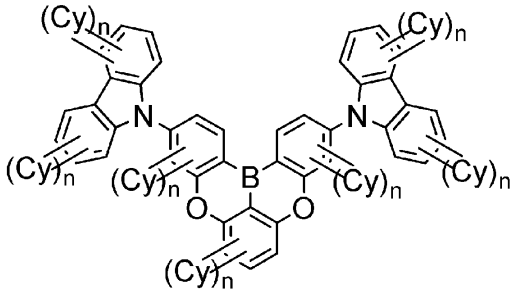
1-Cy-(142)

【０２１７】

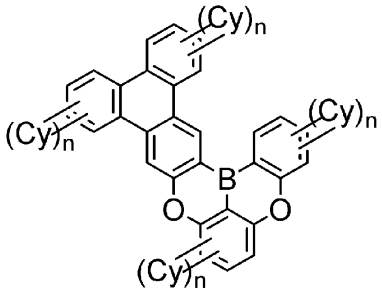
【化６０】



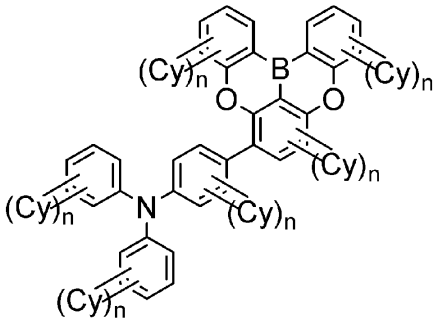
1-Cy-(158)



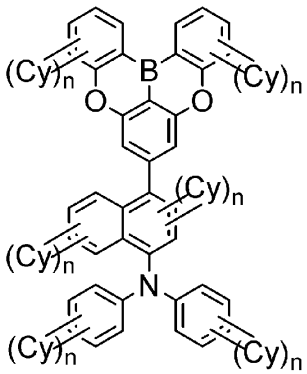
1-Cy-(159)



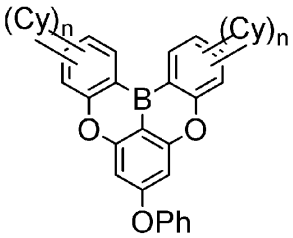
1-Cy-(1006)



1-Cy-(1104)



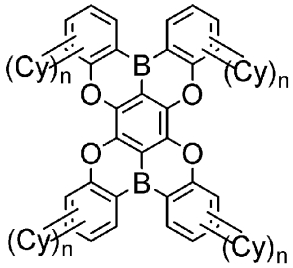
1-Cy-(2305)



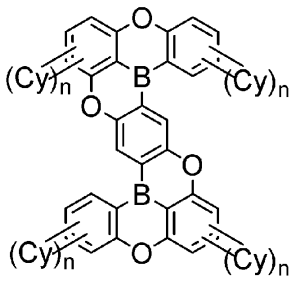
1-Cy-(4401)

【０２１８】

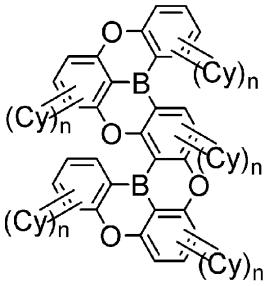
【化６１】



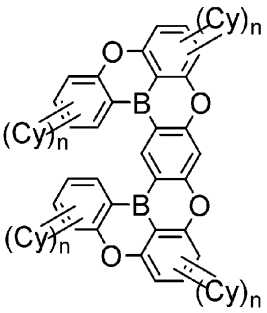
1-Cy-(21)



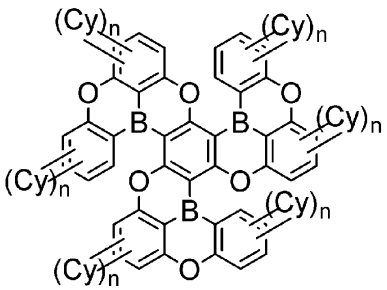
1-Cy-(22)



1-Cy-(23)



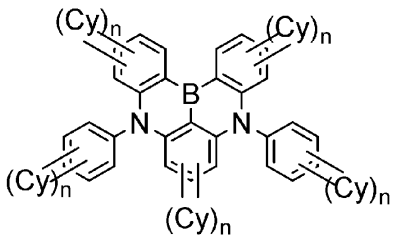
1-Cy-(24)



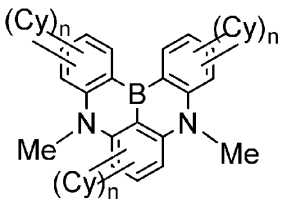
1-Cy-(25)

【０２１９】

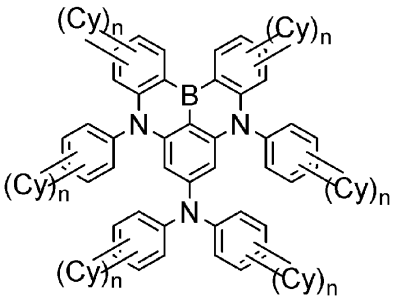
【化６２】



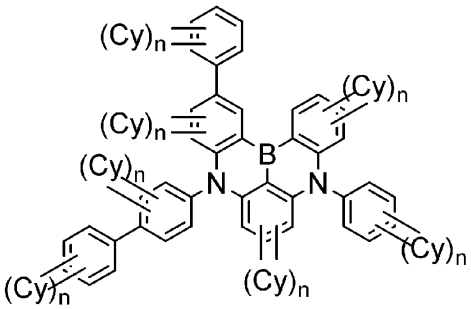
1-Cy-(401)



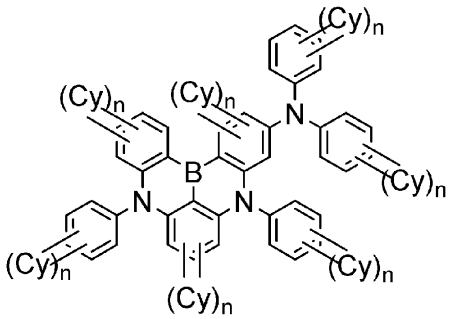
1-Cy-(411)



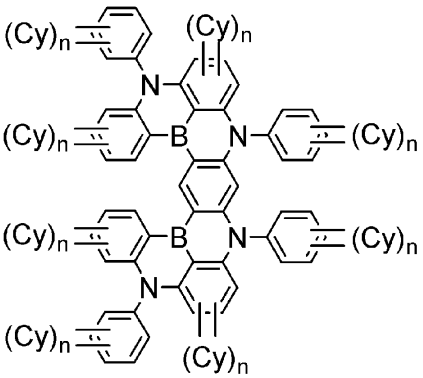
1-Cy-(447)



1-Cy-(1152)



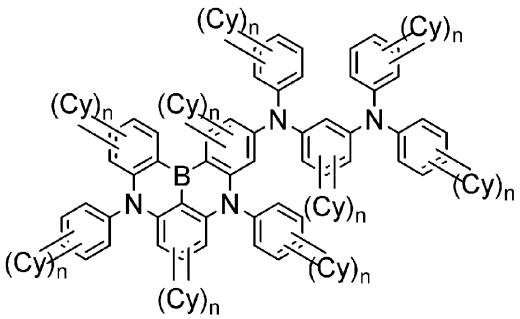
1-Cy-(2623)



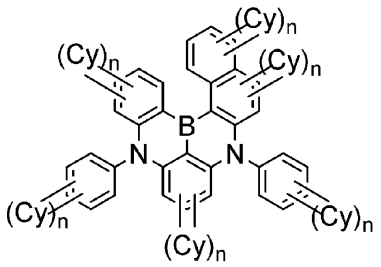
1-Cy-(422)

【０２２０】

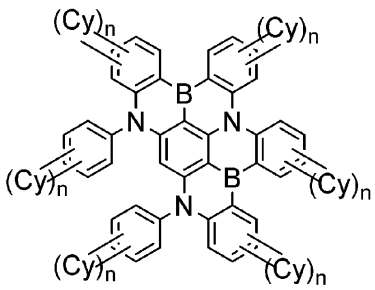
【化６３】



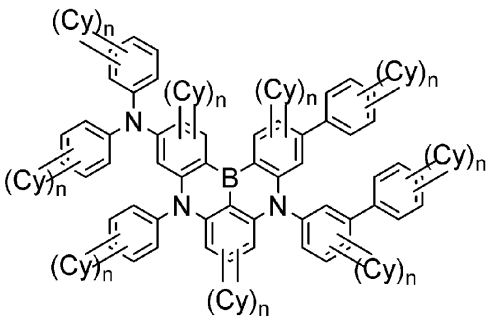
1-Cy-(1159)



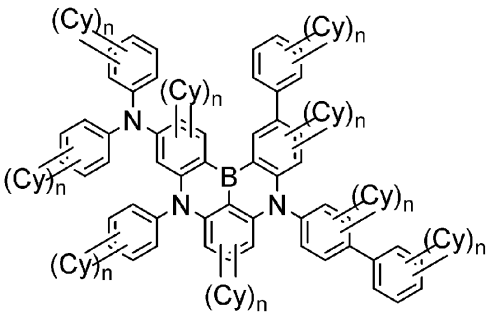
1-Cy-(2657)



1-Cy-(2665)



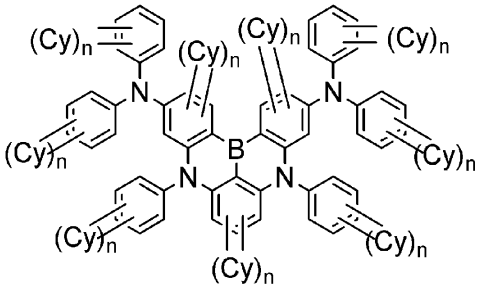
1-Cy-(2676)



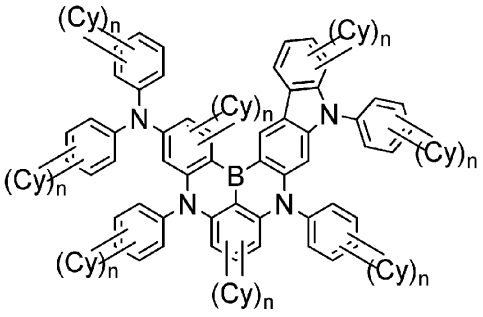
1-Cy-(2679)

【０２２１】

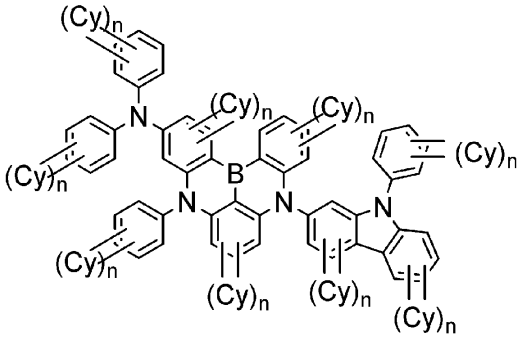
【化６４】



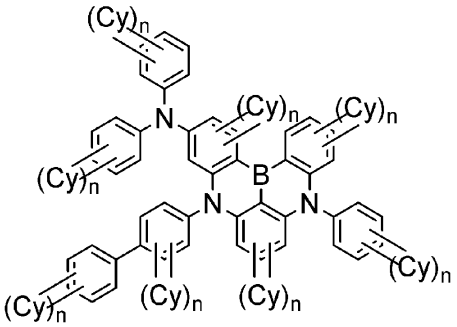
1-Cy-(2680)



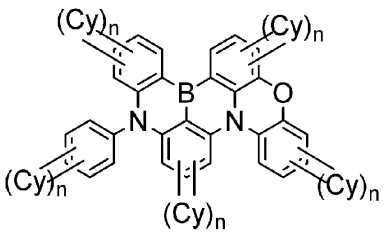
1-Cy-(2681)



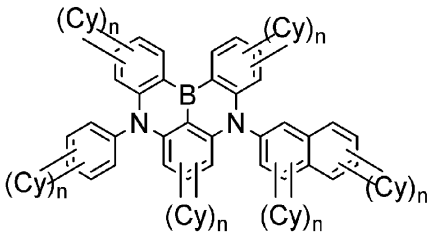
1-Cy-(2682)



1-Cy-(2683)



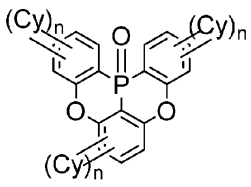
1-Cy-(2691)



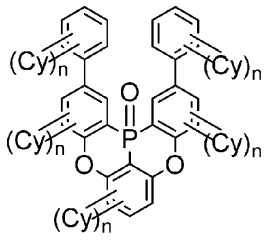
1-Cy-(2699)

【０２２２】

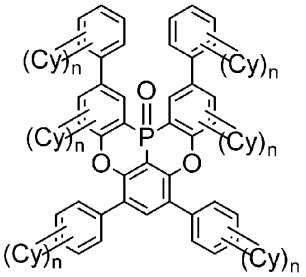
【化６５】



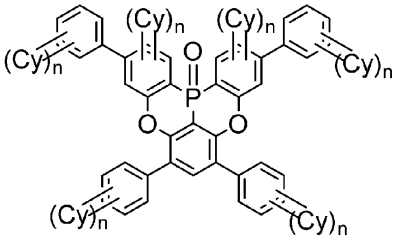
1-Cy-(601)



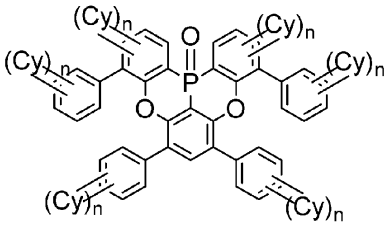
1-Cy-(1187)



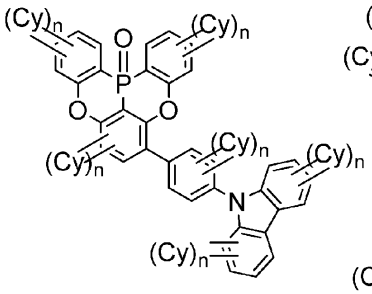
1-Cy-(1190)



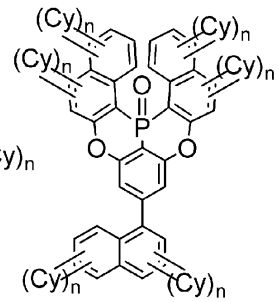
1-Cy-(1191)



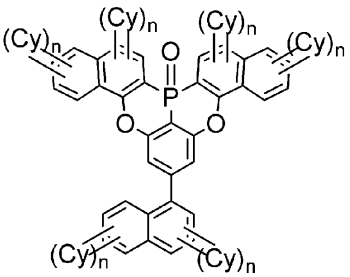
1-Cy-(1192)



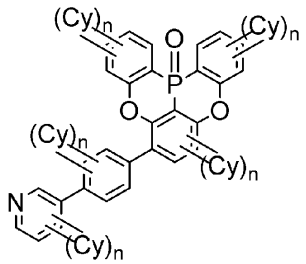
1-Cy-(3588)



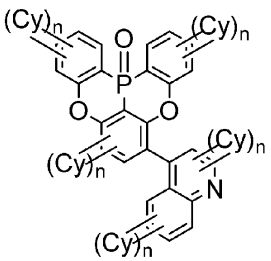
1-Cy-(3654)



1-Cy-(3690)



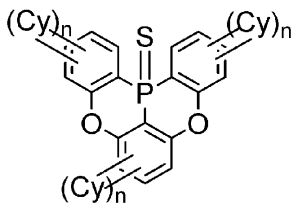
1-Cy-(3806)



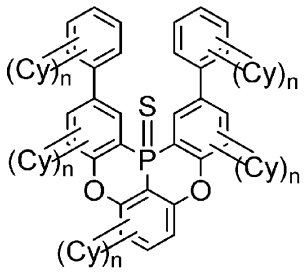
1-Cy-(3824)

【０２２３】

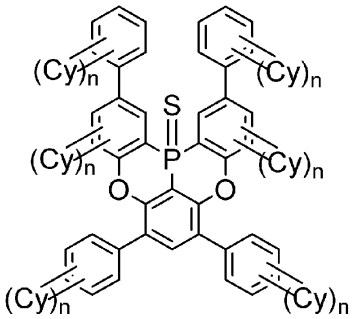
【化６６】



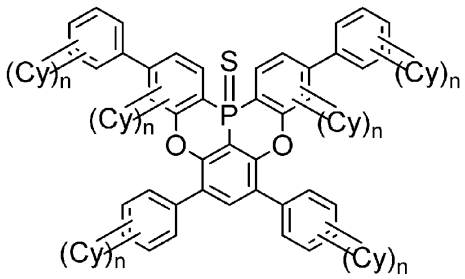
1-Cy-(701)



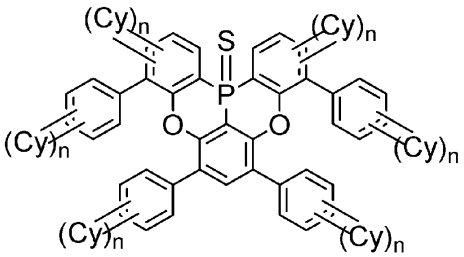
1-Cy-(1247)



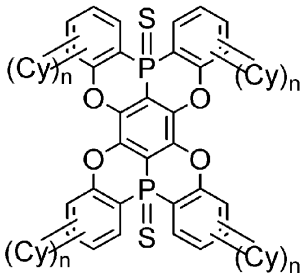
1-Cy-(1250)



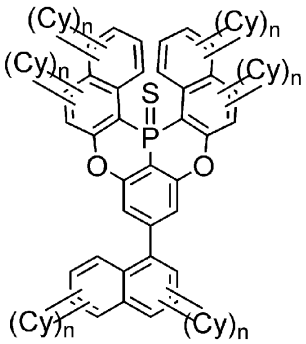
1-Cy-(1251)



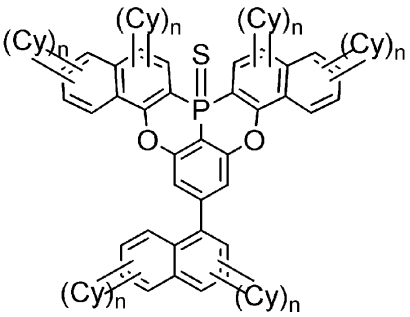
1-Cy-(1252)



1-Cy-(721)



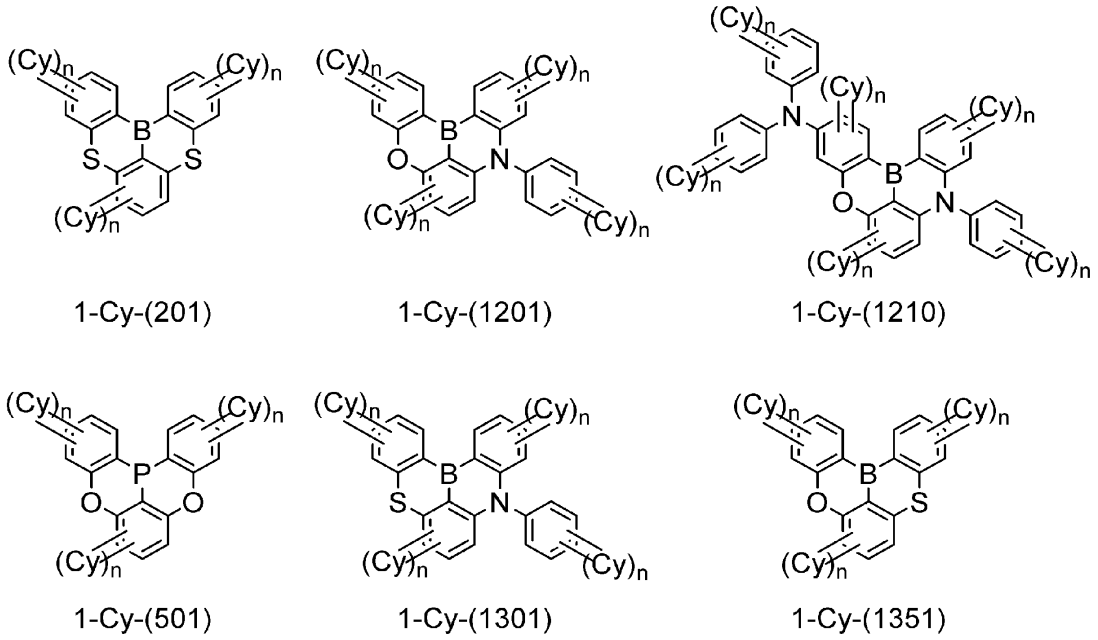
1-Cy-(4114)



1-Cy-(4150)

【０２２４】

【化６７】



【０２２５】

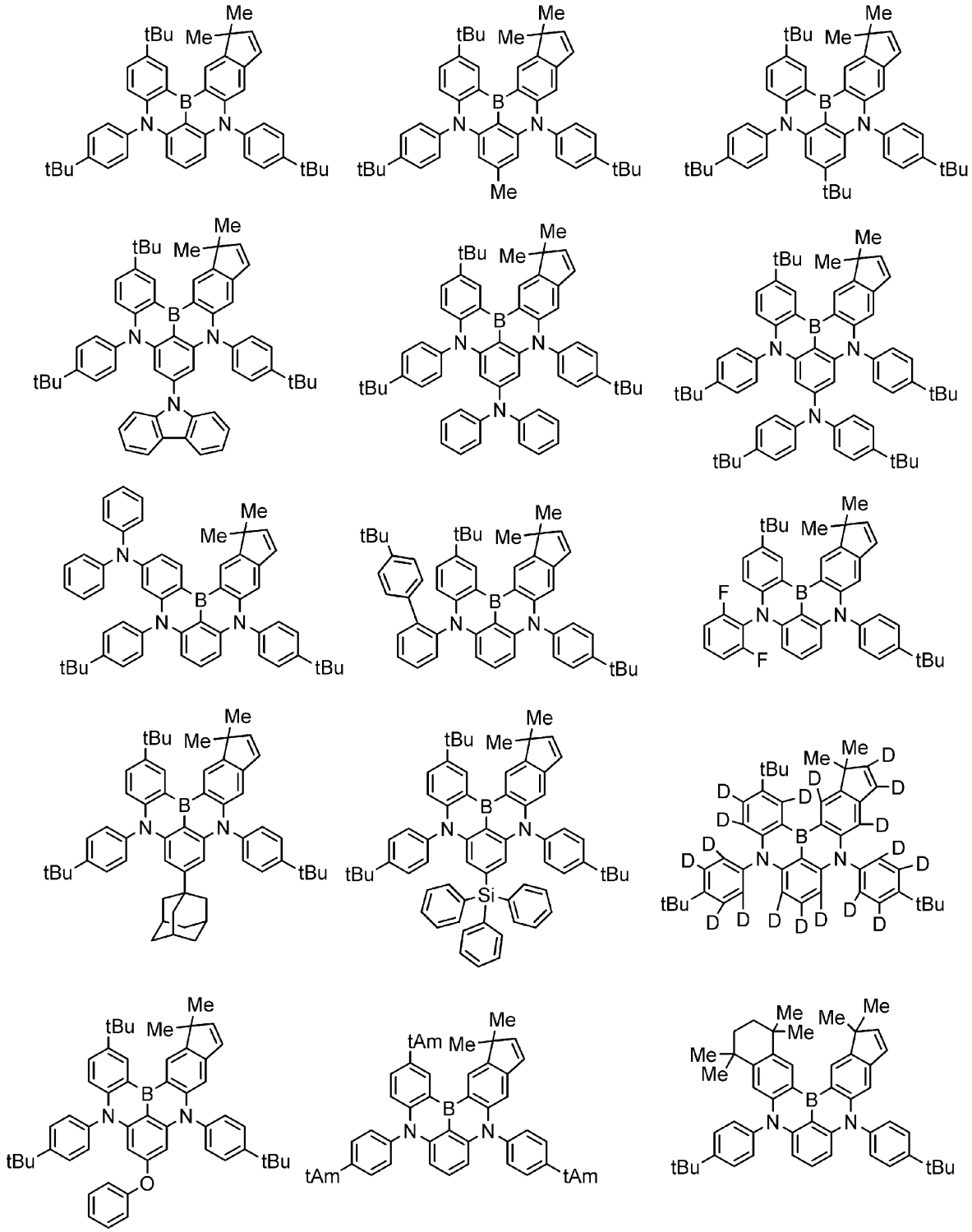
本発明に係る多環芳香族化合物およびその多量体は、有機デバイス用材料として用いることができる。有機デバイスとしては、例えば、有機電界発光素子、有機電界効果トランジスタまたは有機薄膜太陽電池などがあげられる。特に、有機電界発光素子においては、発光層のドーパント材料として、上記いずれかの式において、Y^1がＢ、X^1およびX^2（ならびにX^3およびX^4）が＞Ｎ－Ｒである化合物、Y^1がＢ、X^1（およびX^4またはX^3）が＞Ｏ、X^2（およびX^3またはX^4）が＞Ｎ－Ｒである化合物、Y^1がＢ、X^1およびX^2（ならびにX^3およびX^4）が＞Ｏである化合物、Y^1がＢ、X^1およびX^2（ならびにX^3およびX^4）が＞Ｃ（－Ｒ）$_2$である化合物が好ましく、Y^1がＢ、X^1およびX^2（ならびにX^3およびX^4）が＞Ｎ－Ｒである化合物、Y^1がＢ、X^1およびX^2（ならびにX^3およびX^4）が＞Ｃ（－Ｒ）$_2$である化合物がより好ましく、Y^1がＢ、X^1およびX^2（ならびにX^3およびX^4）が＞Ｎ－Ｒである化合物が最も好ましい。発光層のホスト材料として、Y^1がＢ、X^1（およびX^4またはX^3）が＞Ｏ、X^2（およびX^3またはX^4）が＞Ｎ－Ｒである化合物、Y^1がＢ、X^1およびX^2（ならびにX^3およびX^4）が＞Ｏである化合物が好ましく、電子輸送材料として、Y^1がＢ、X^1およびX^2（ならびにX^3およびX^4）が＞Ｏである化合物、Y^1がＰ＝Ｏ、X^1およびX^2（ならびにX^3およびX^4）が＞Ｏである化合物が好ましく用いられる。

【０２２６】

本発明の多環芳香族化合物のさらに具体的な例としては、以下の構造式で表される化合物があげられる。なお、下記構造式中の「Ｄ」は重水素、「Ｍｅ」はメチル、「ｔＢｕ」はｔ－ブチル、「ｔＡｍ」はｔ－アミルを示す。

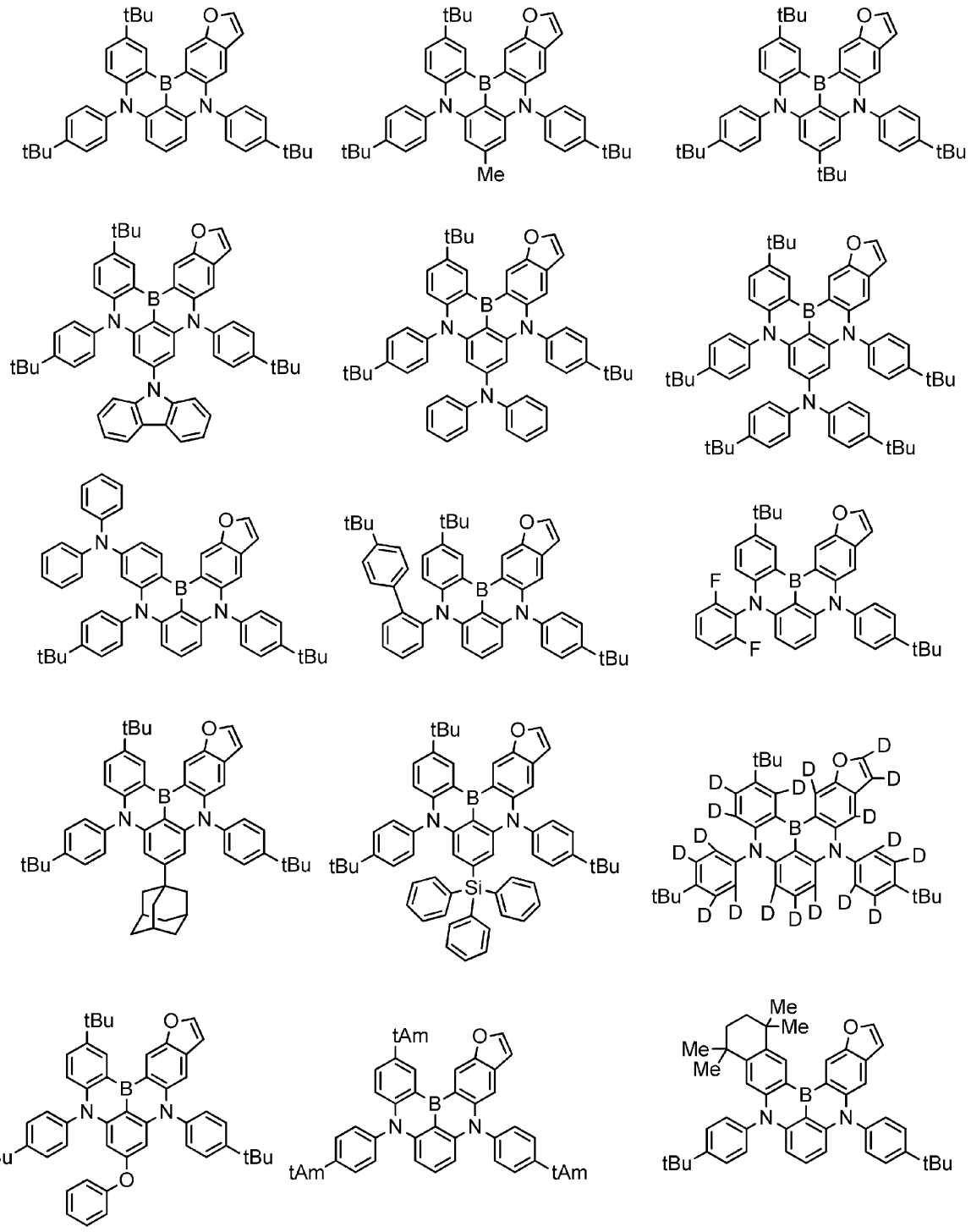
【０２２７】

【化６８】



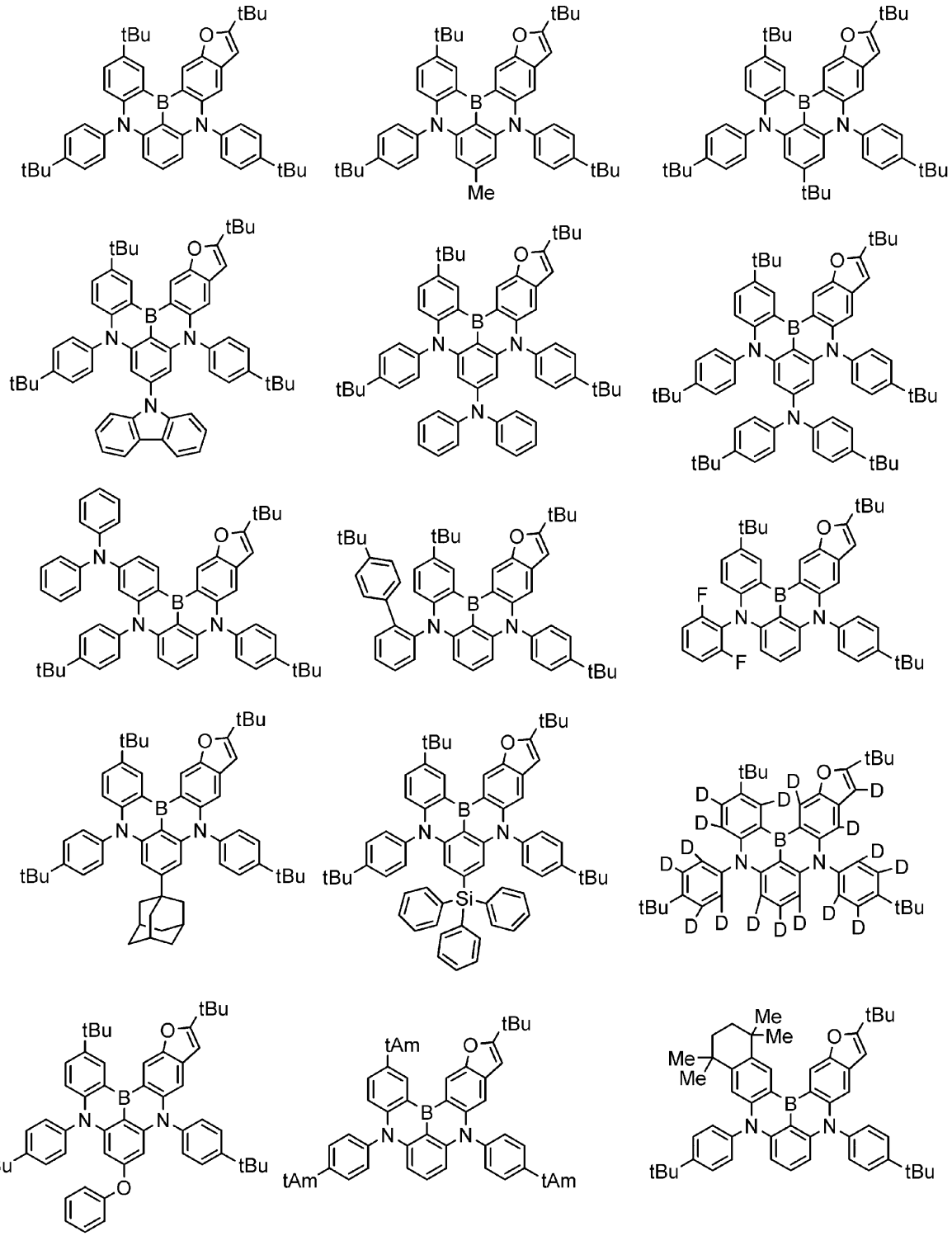
【０２２８】

【化６９】



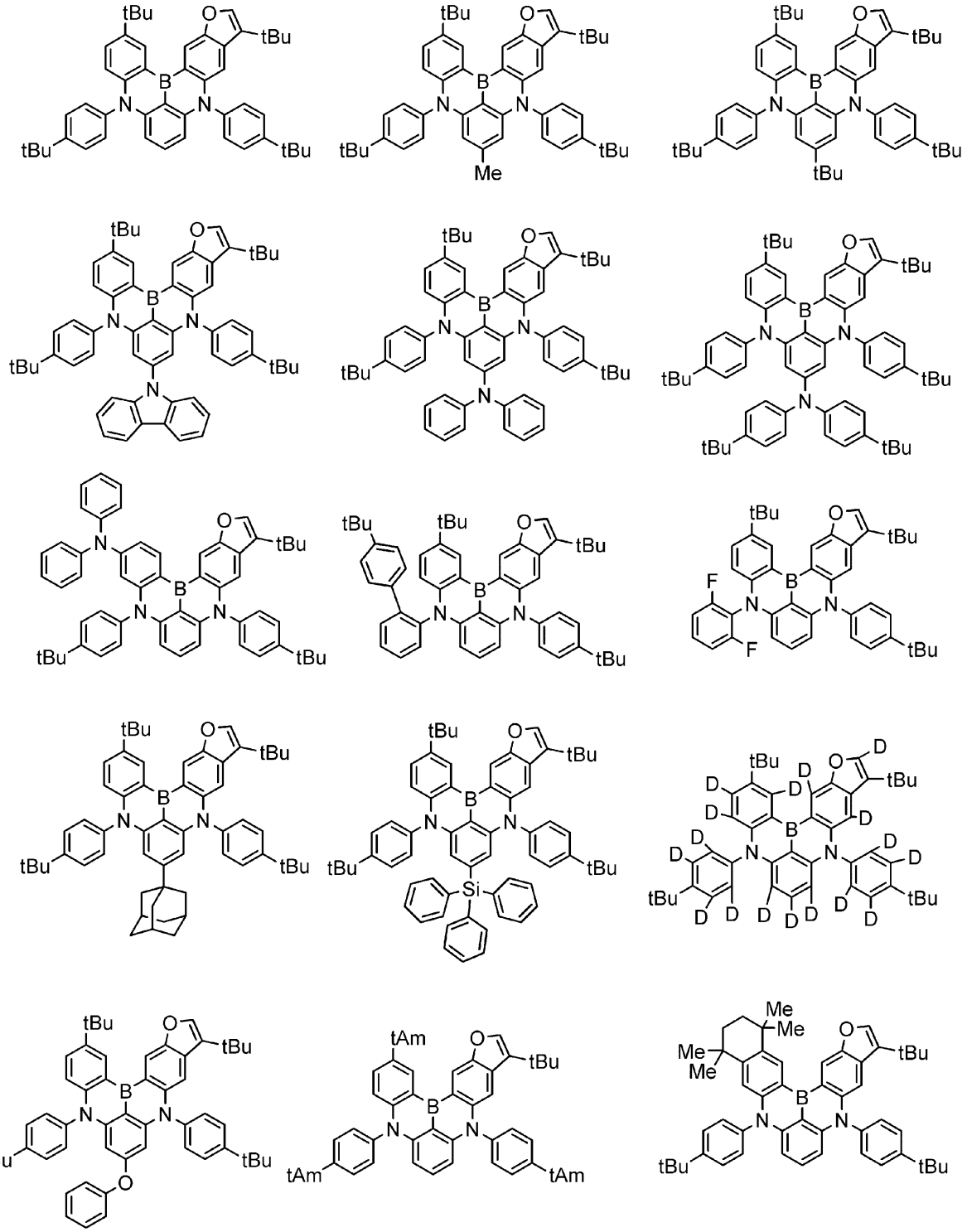
【０２２９】

【化７０】



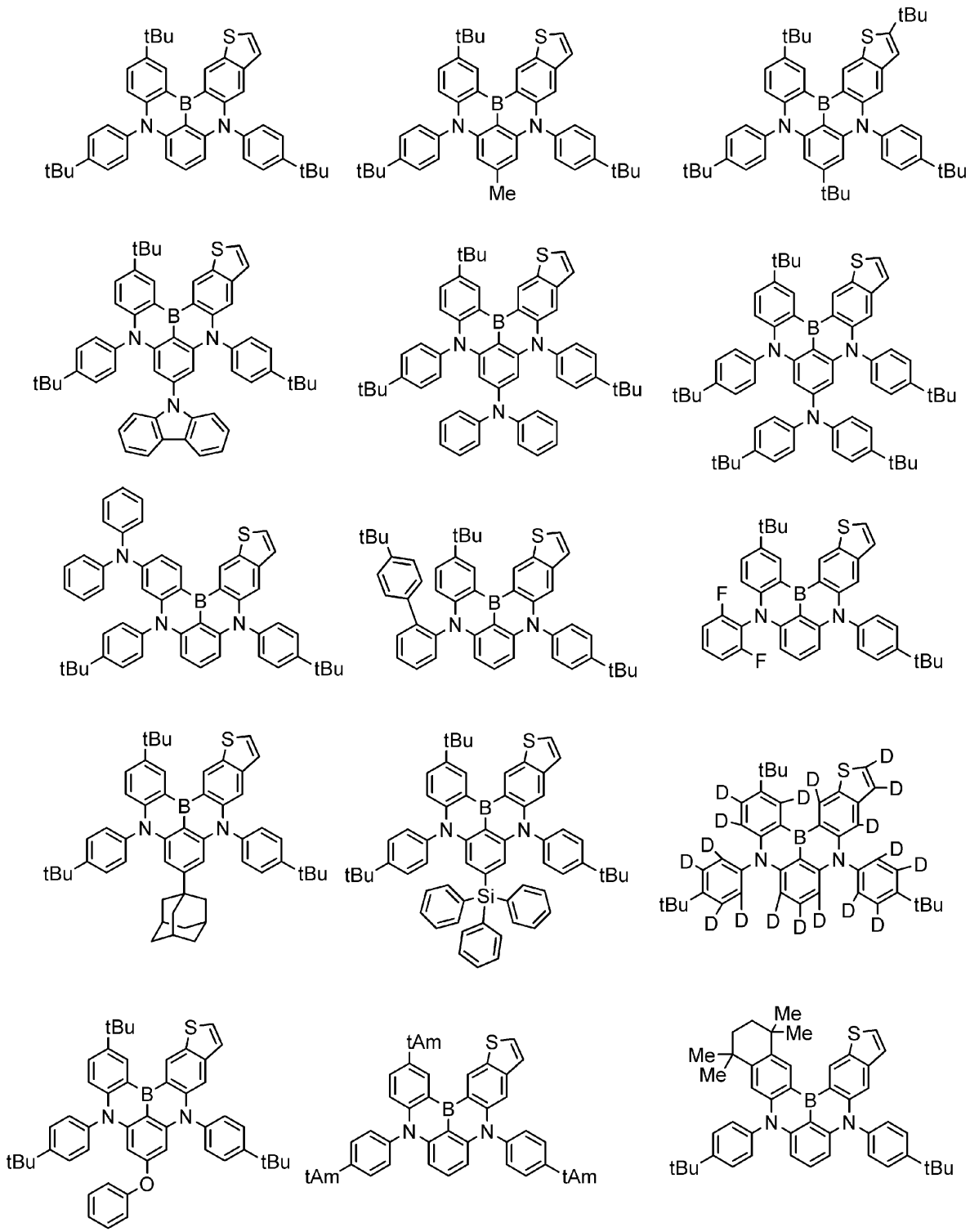
【０２３０】

【化７１】



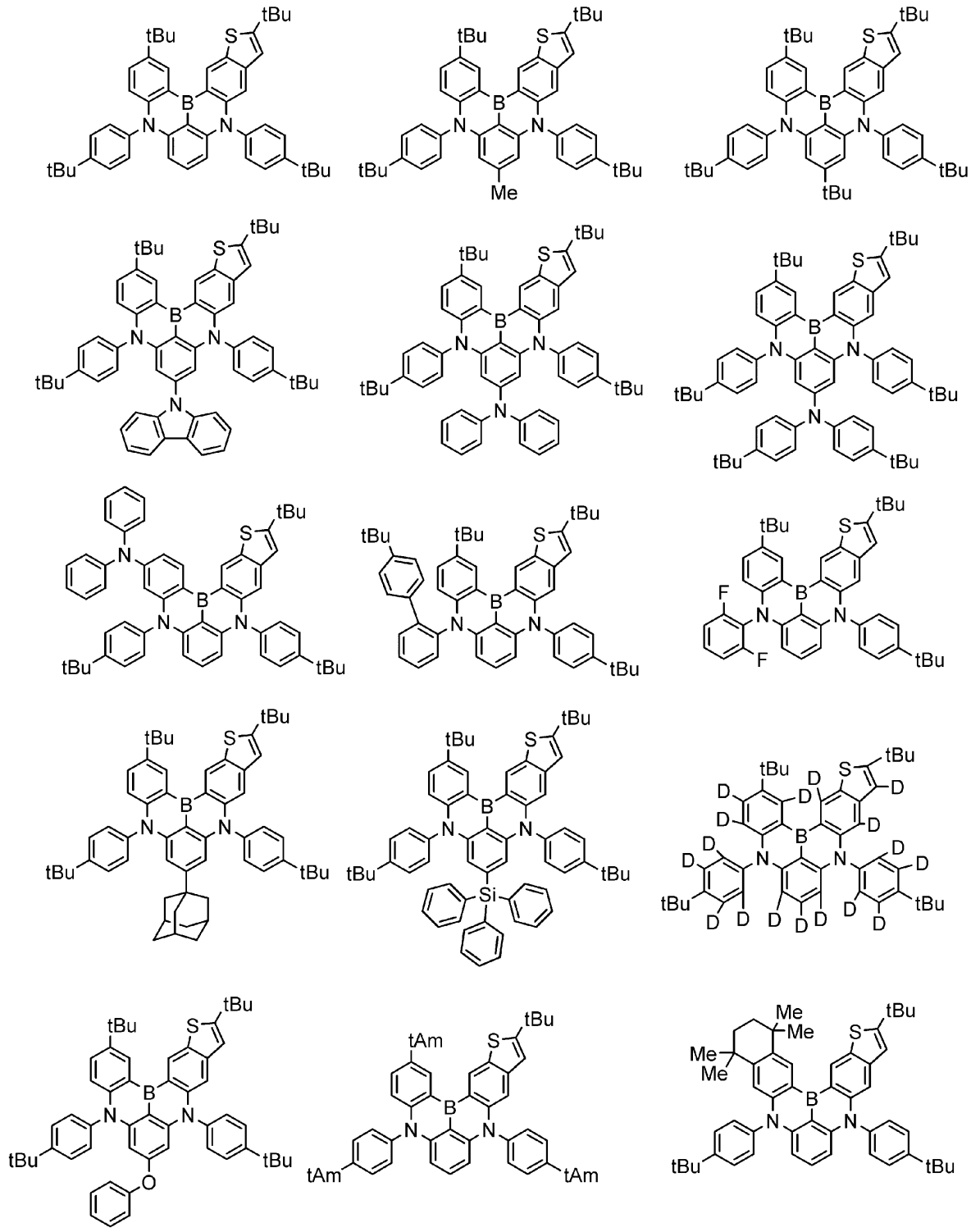
【０２３１】

【化７２】



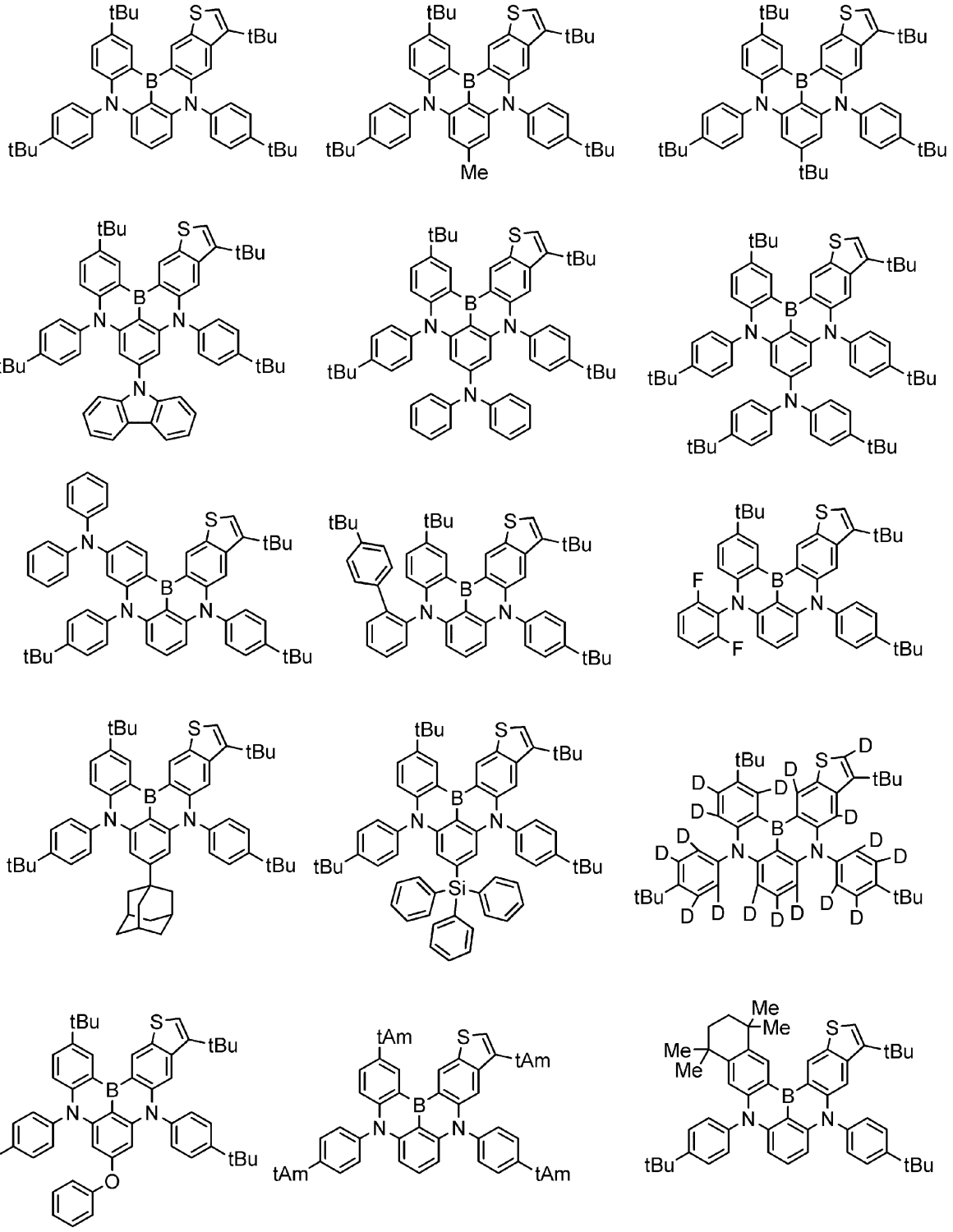
【０２３２】

【化７３】



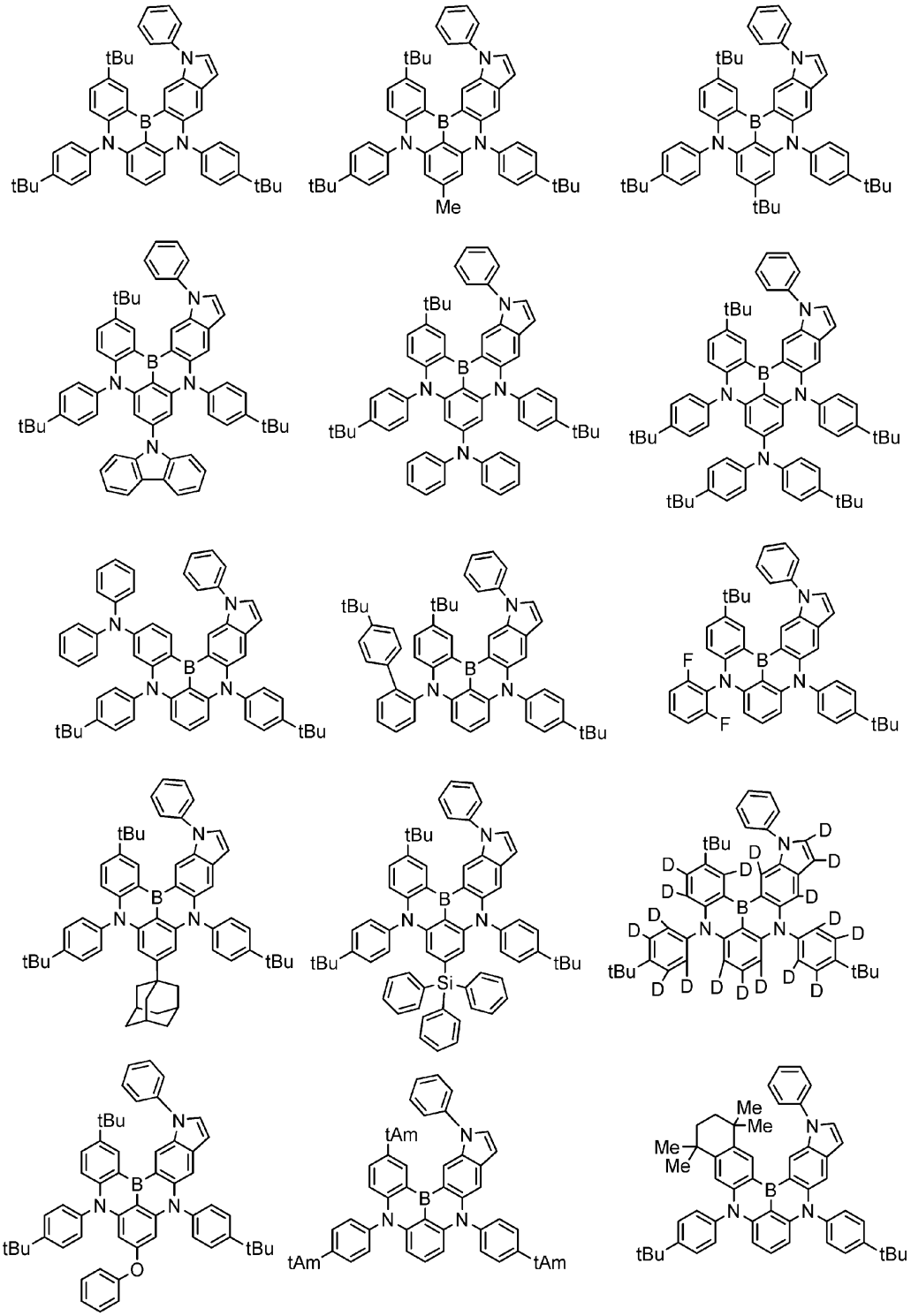
【０２３３】

【化７４】



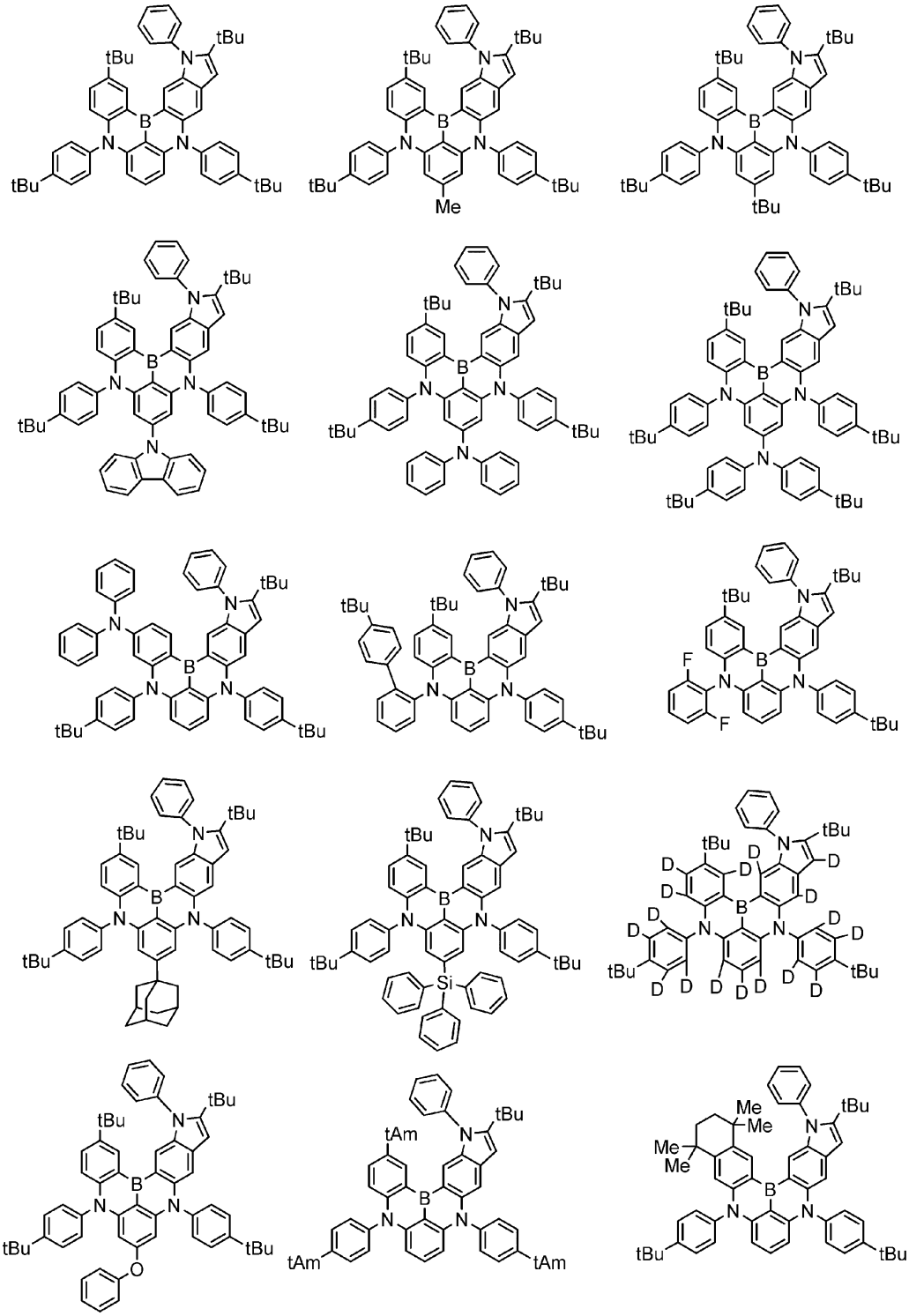
【０２３４】

【化７５】



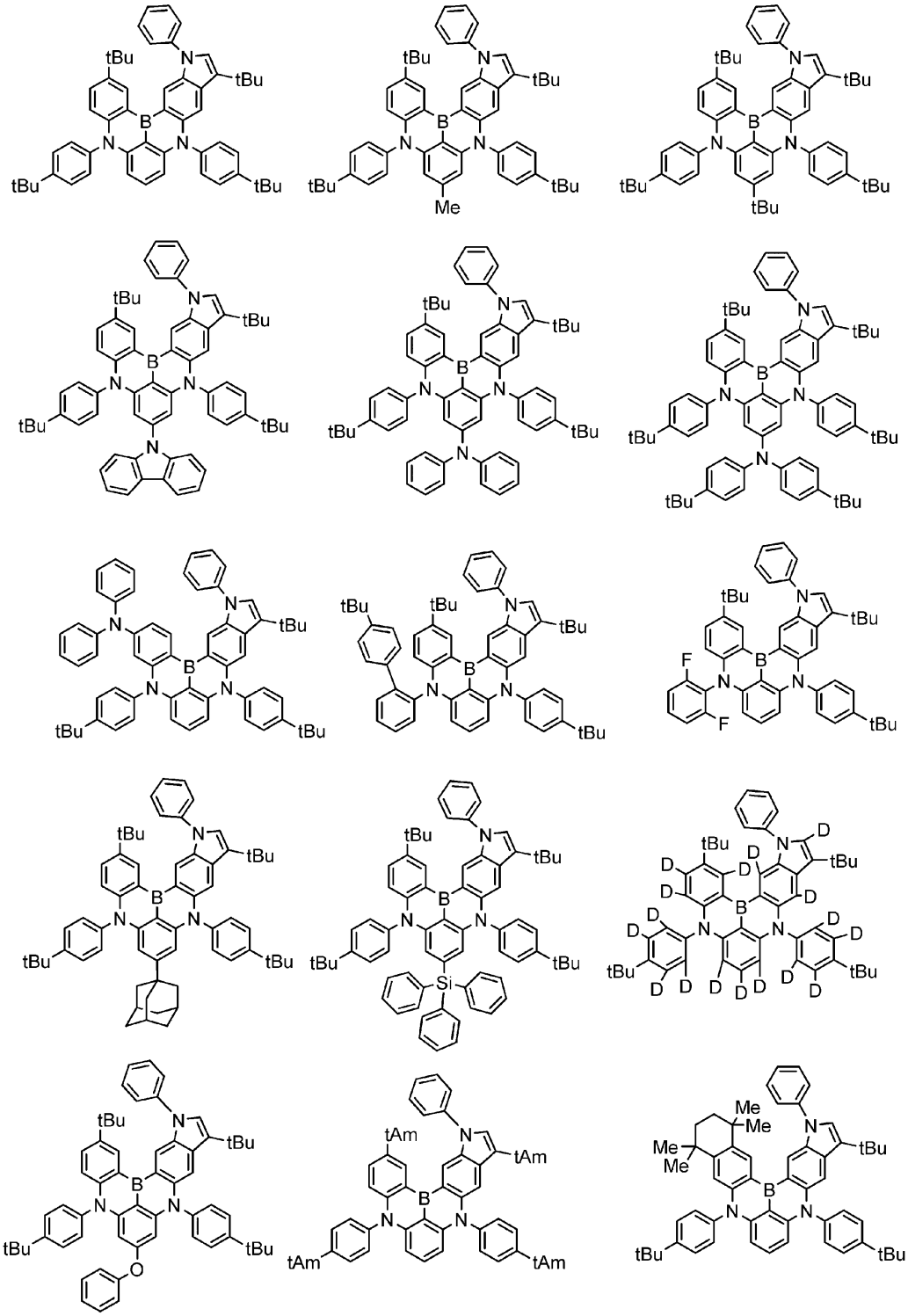
【０２３５】

【化７６】



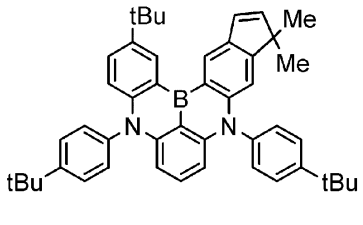
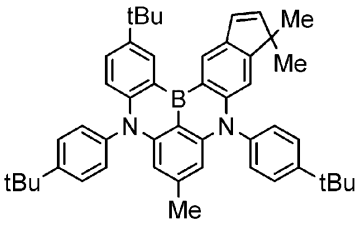
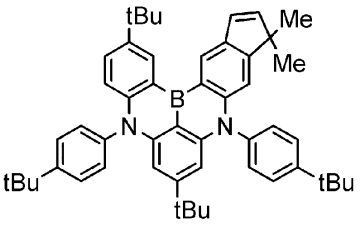
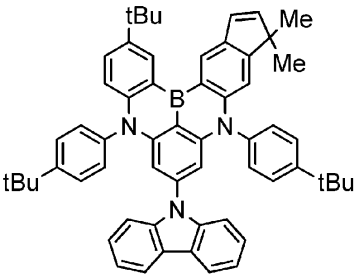
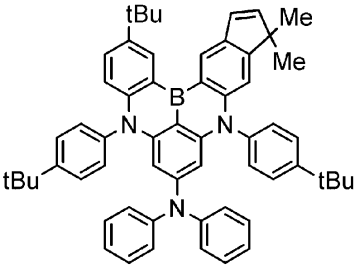
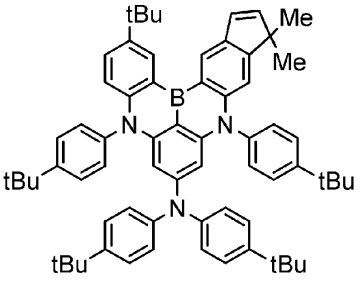
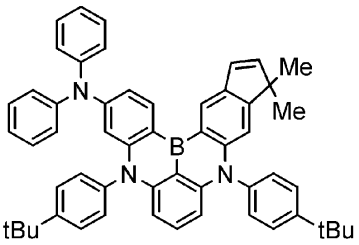
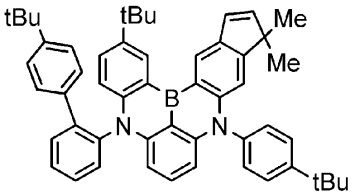
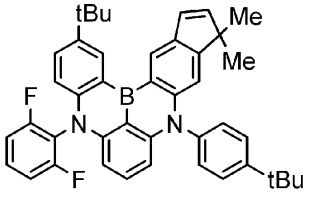
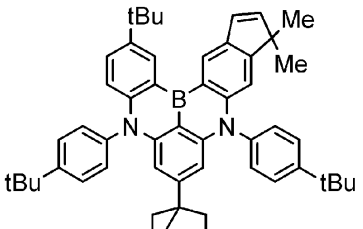
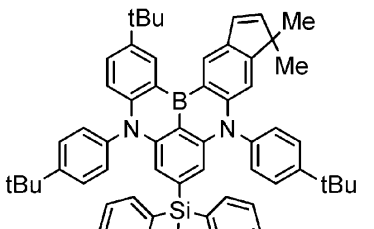
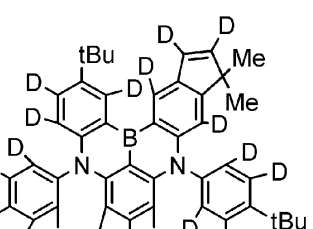
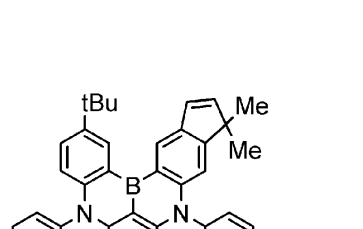
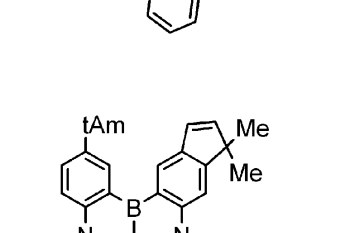
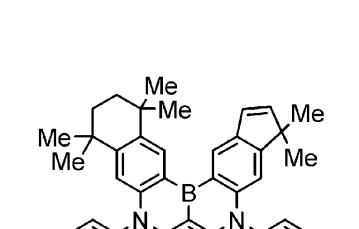
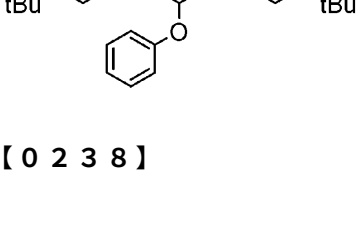
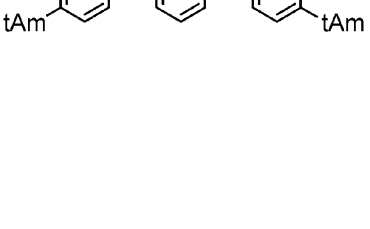
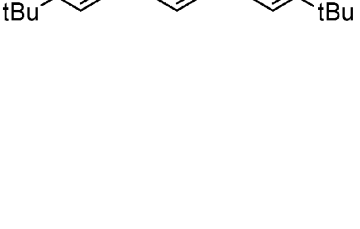
【０２３６】

【化７７】



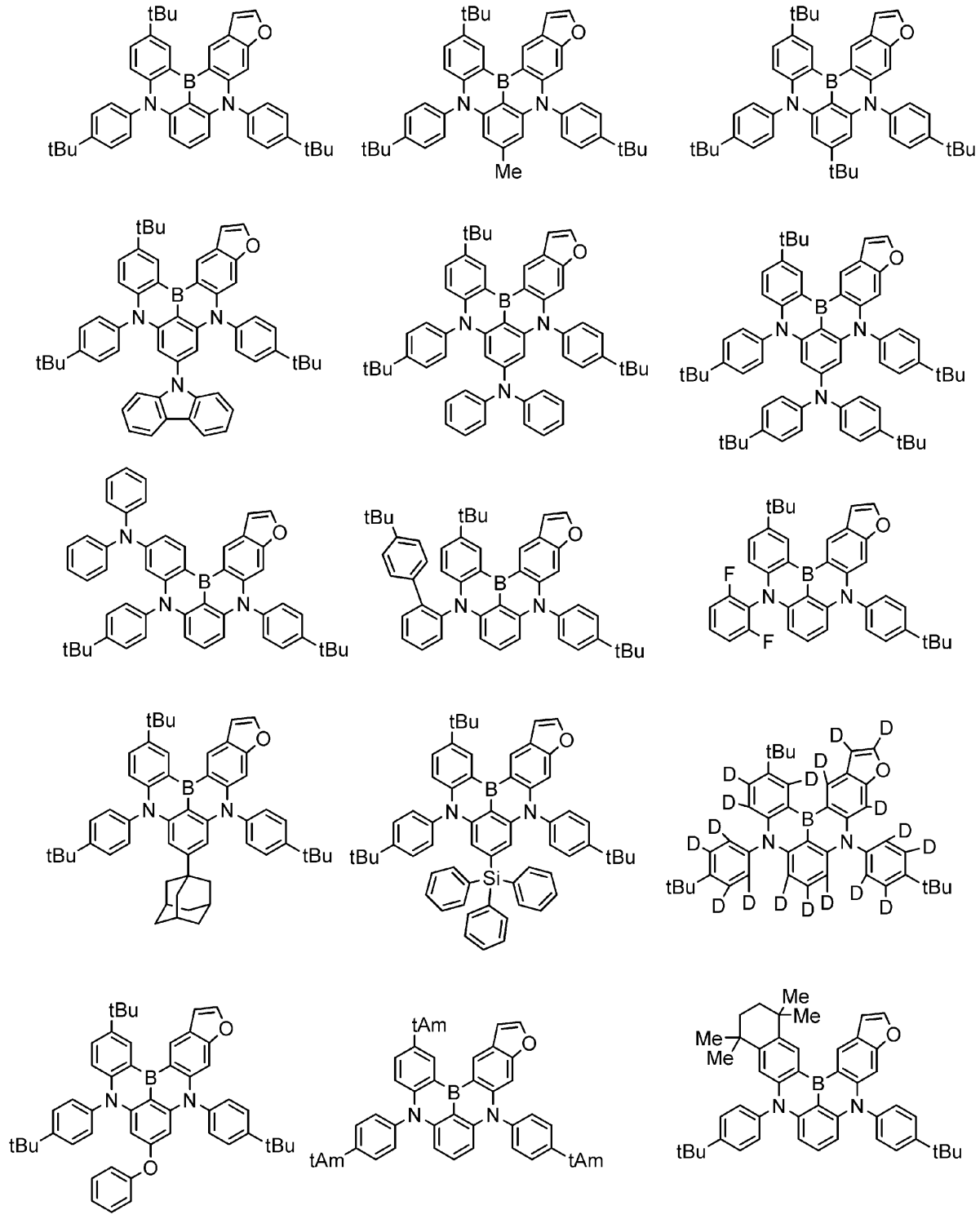
【０２３７】

【化７８】

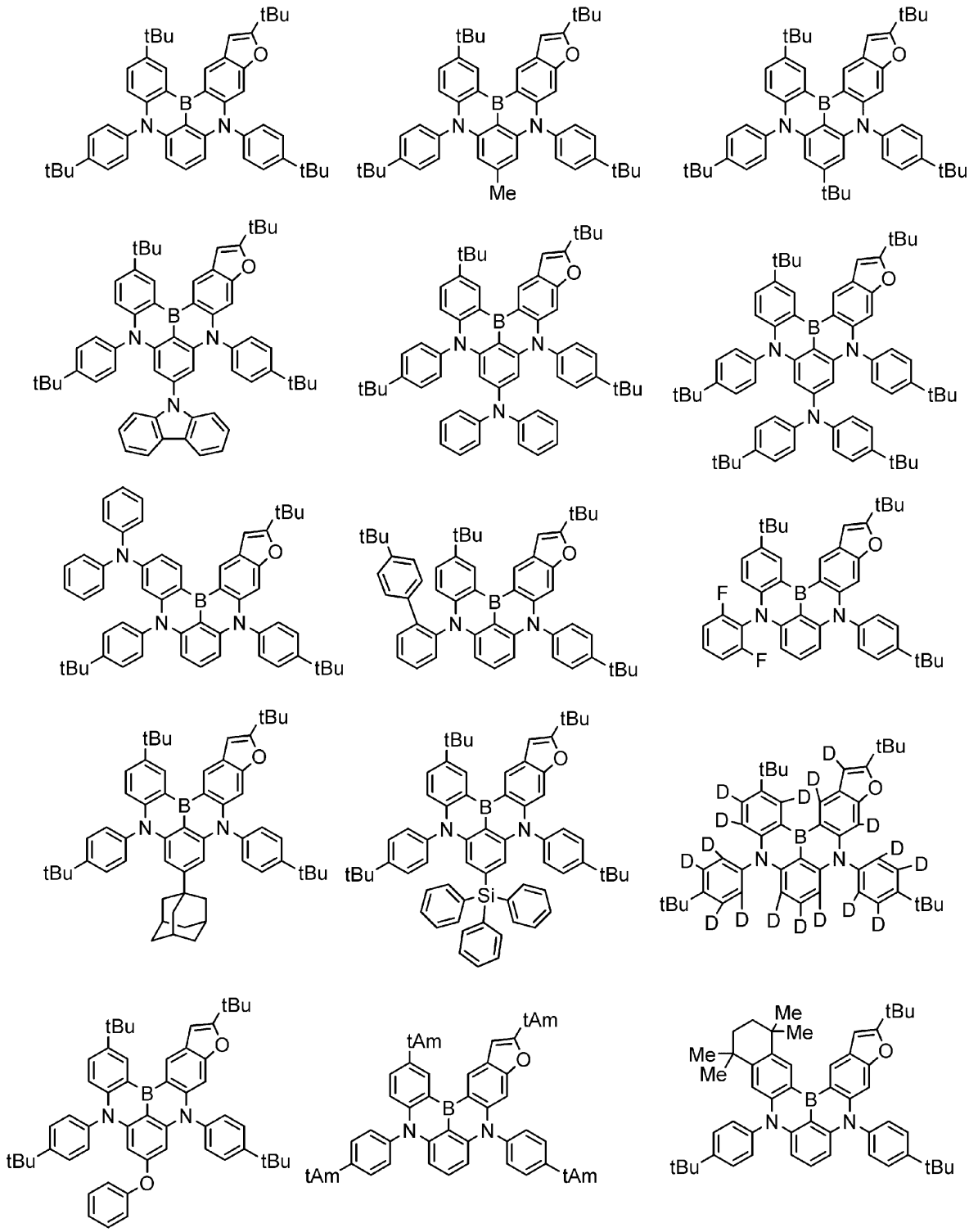
【０２３８】

【化７９】



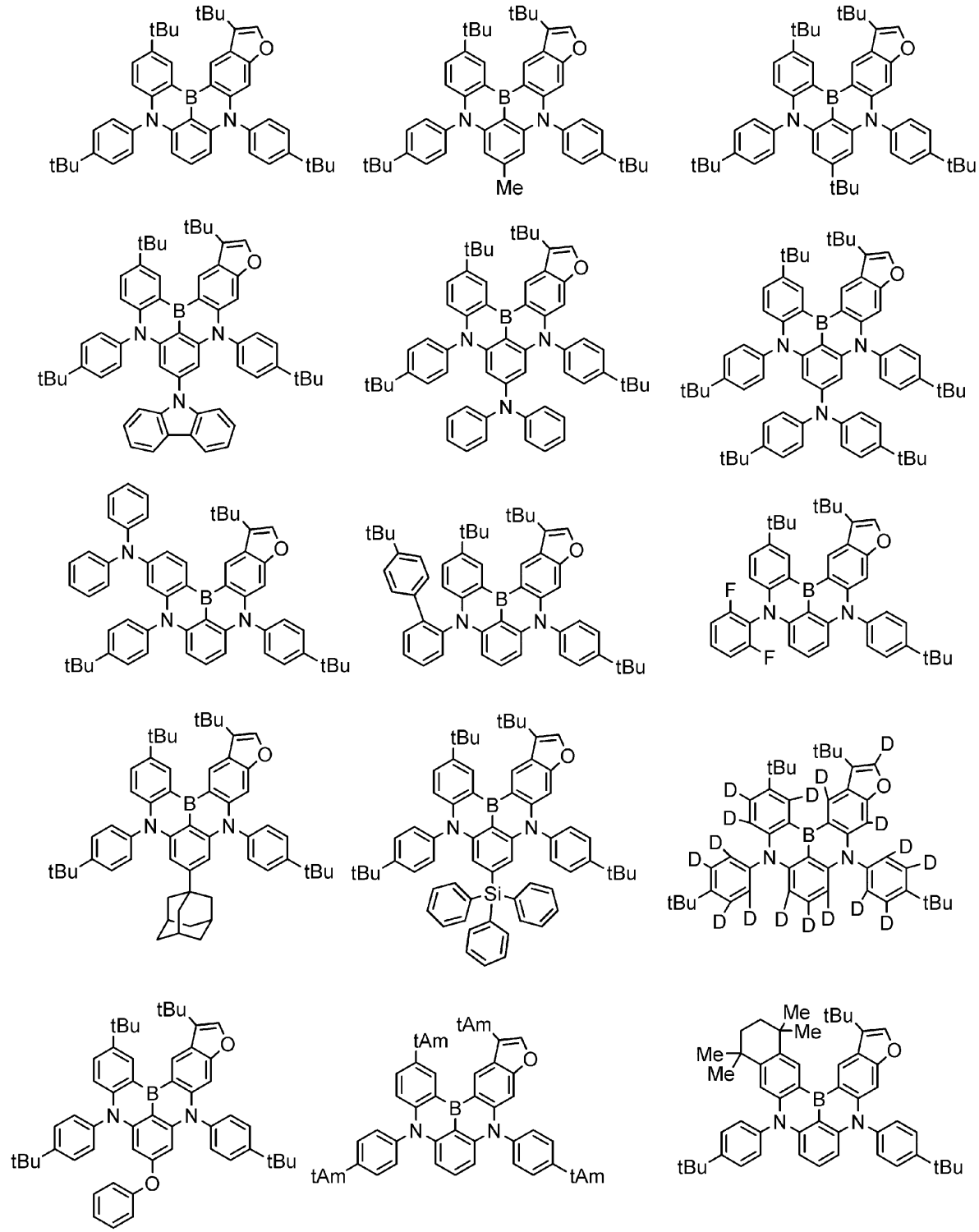
【０２３９】

【化８０】



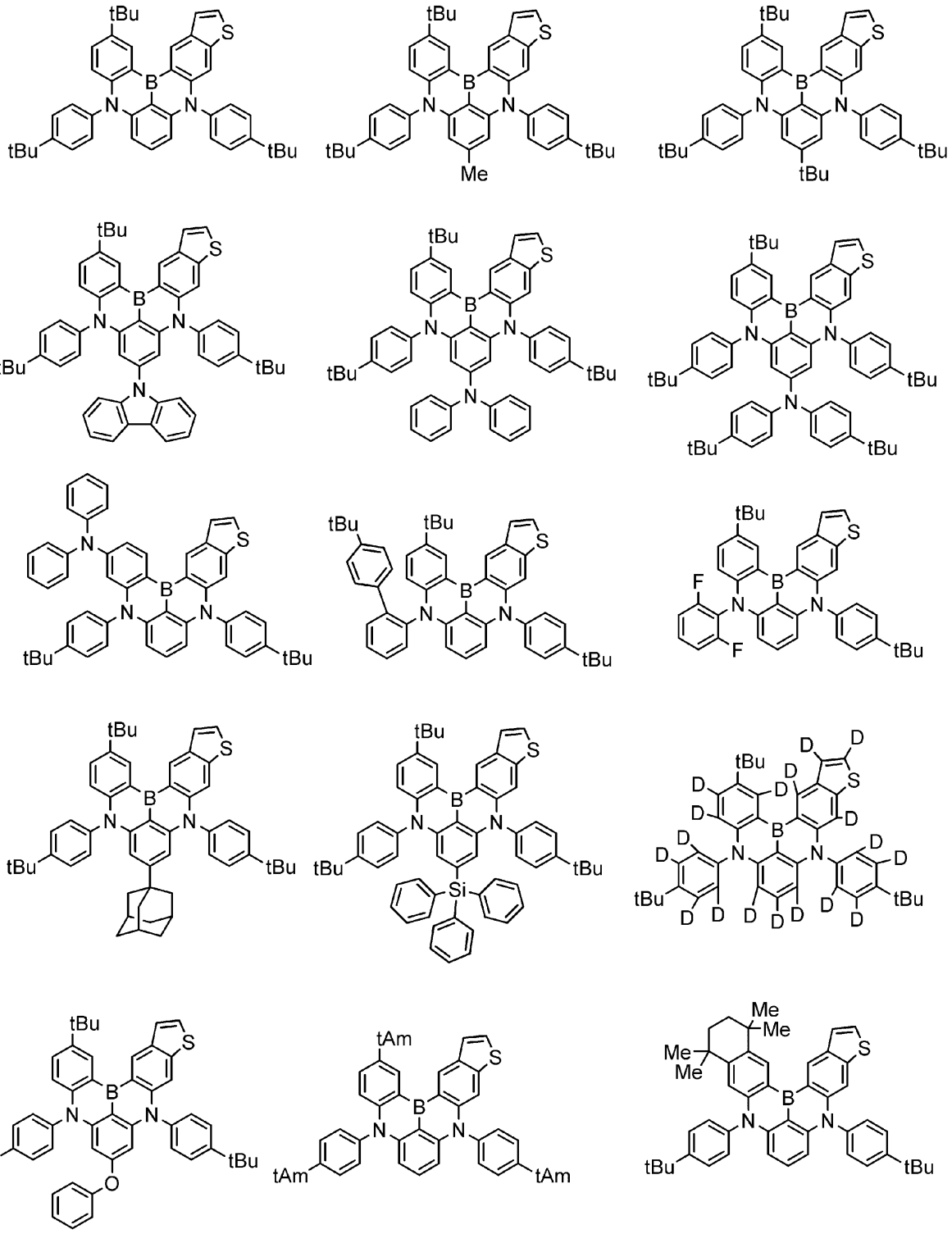
【０２４０】

【化８１】



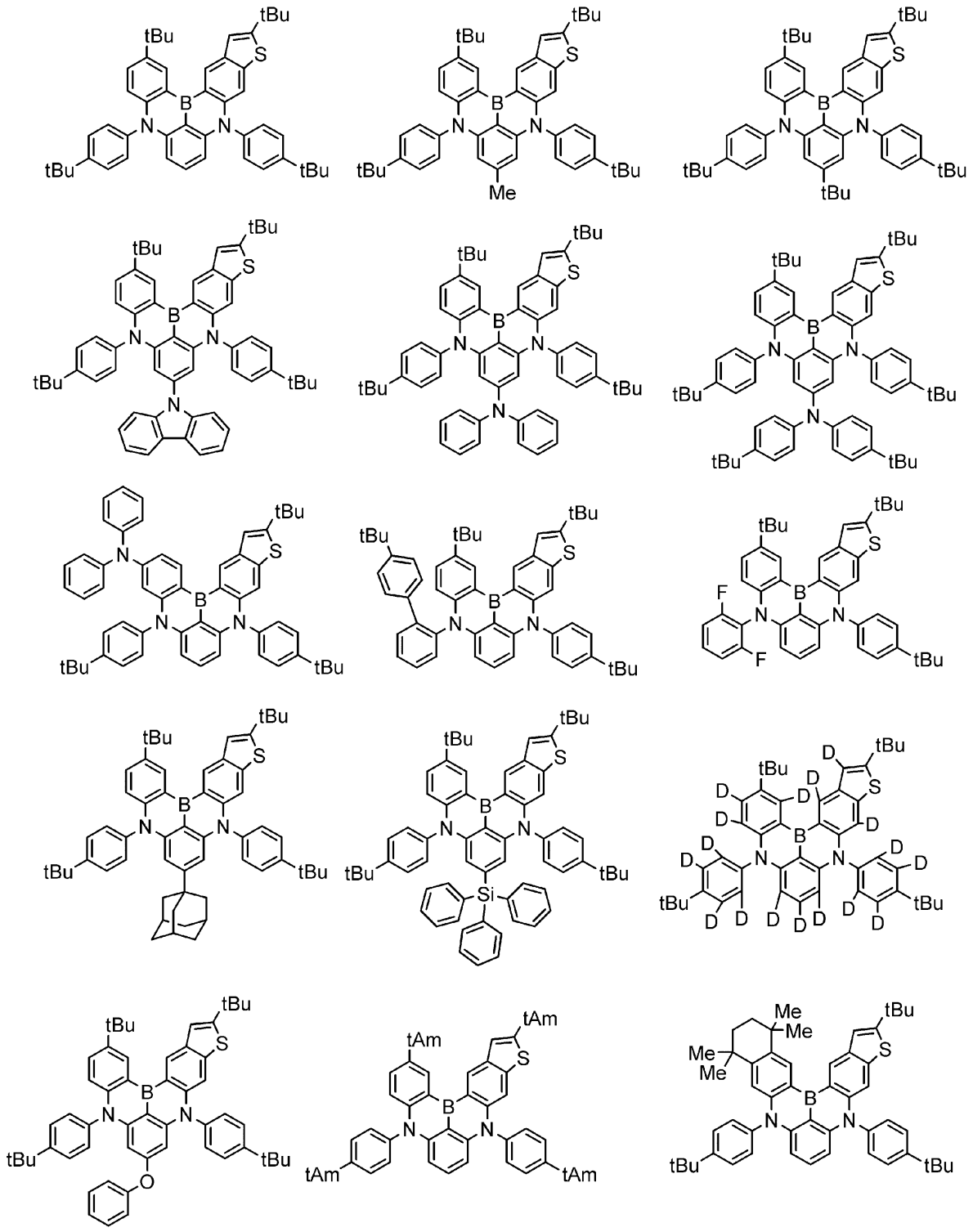
【０２４１】

【化８２】



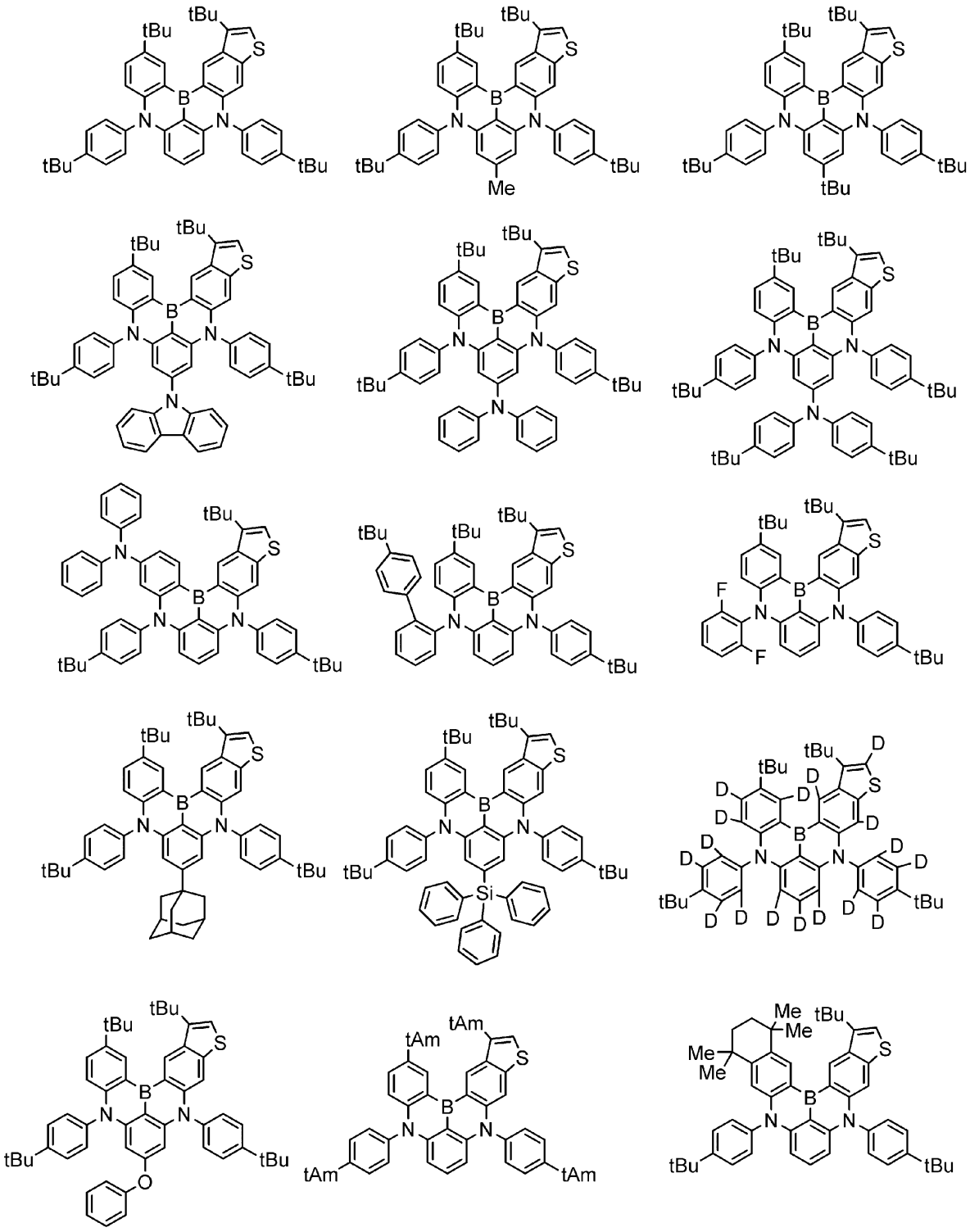
【０２４２】

【化８３】



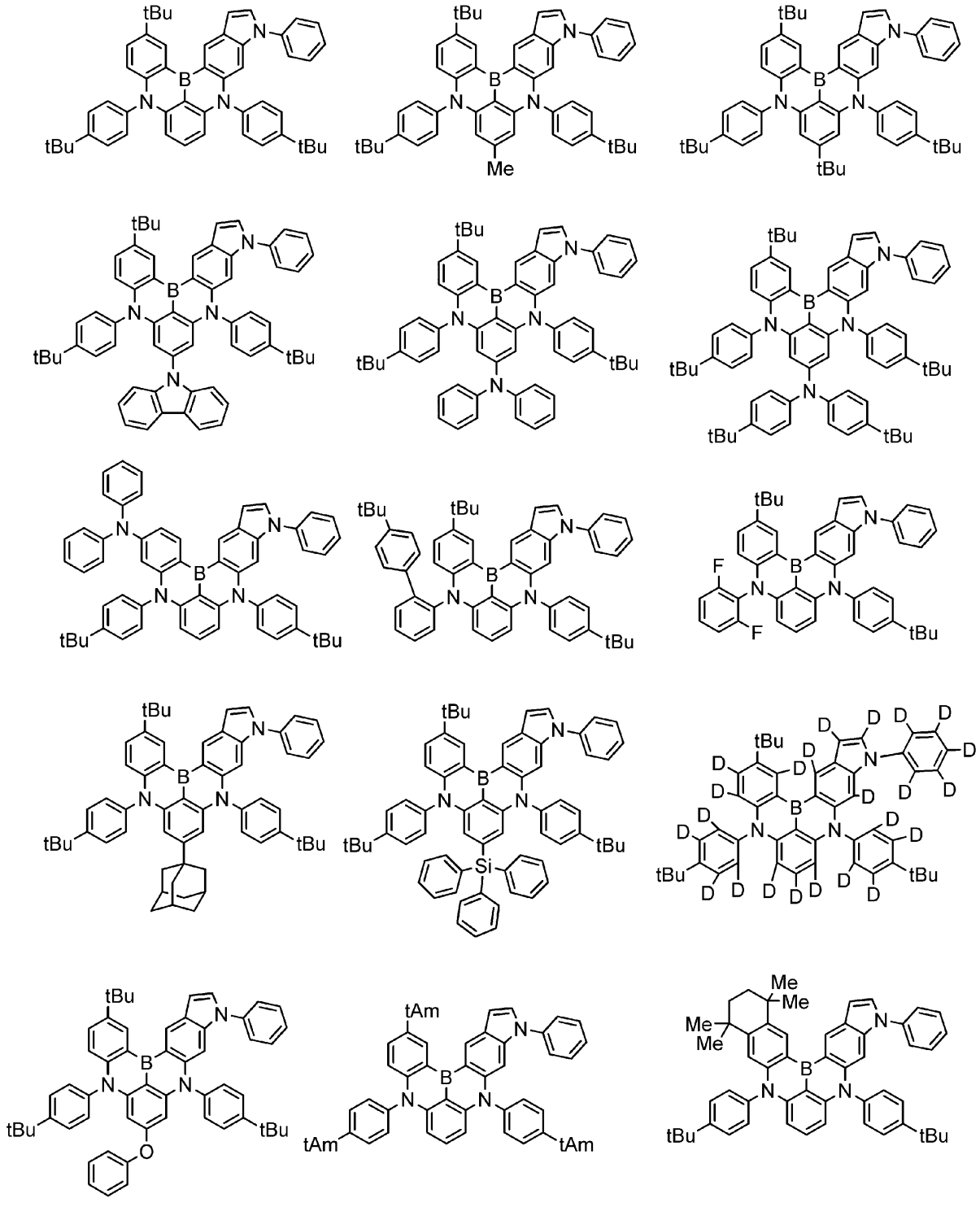
【０２４３】

【化８４】



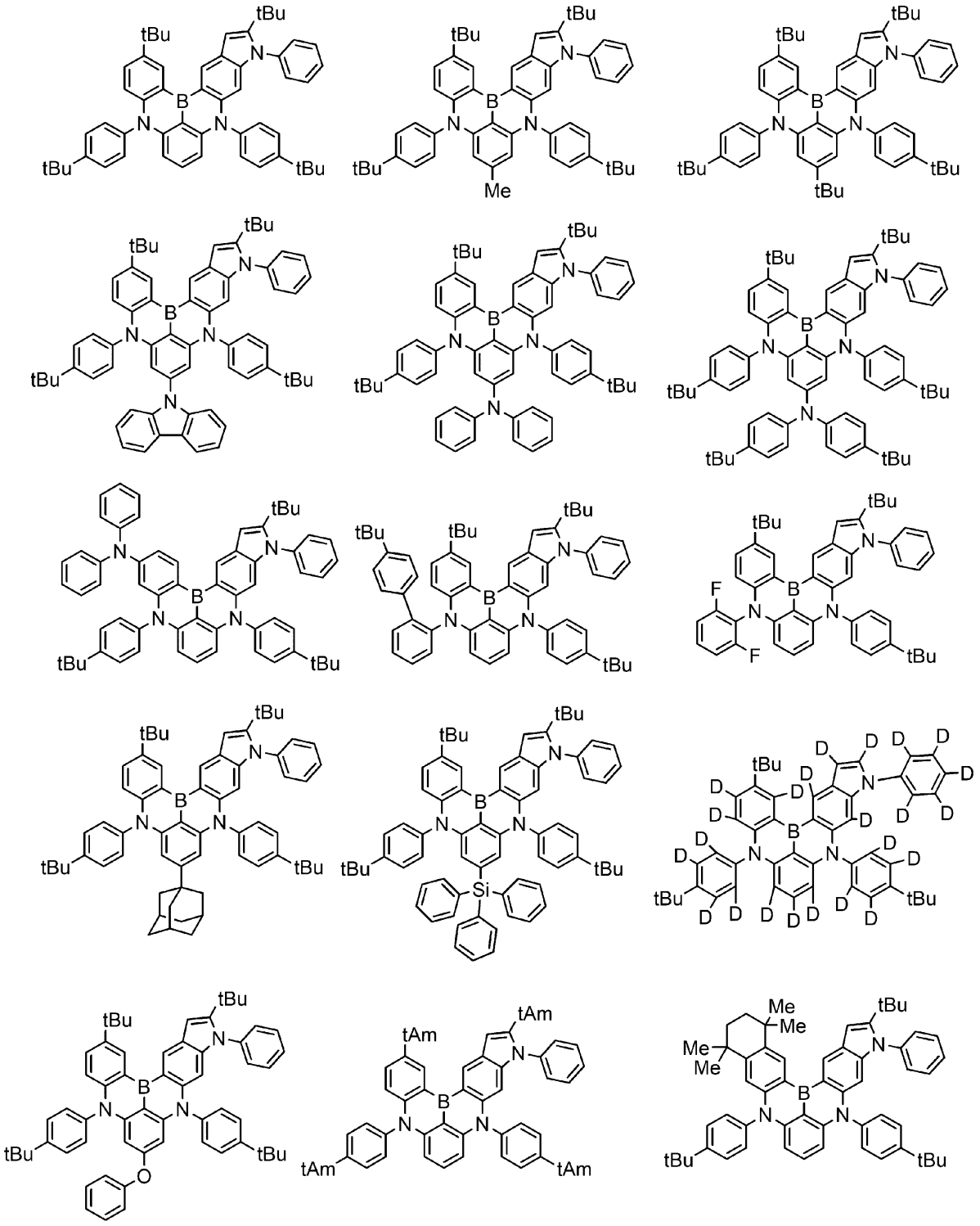
【０２４４】

【化８５】



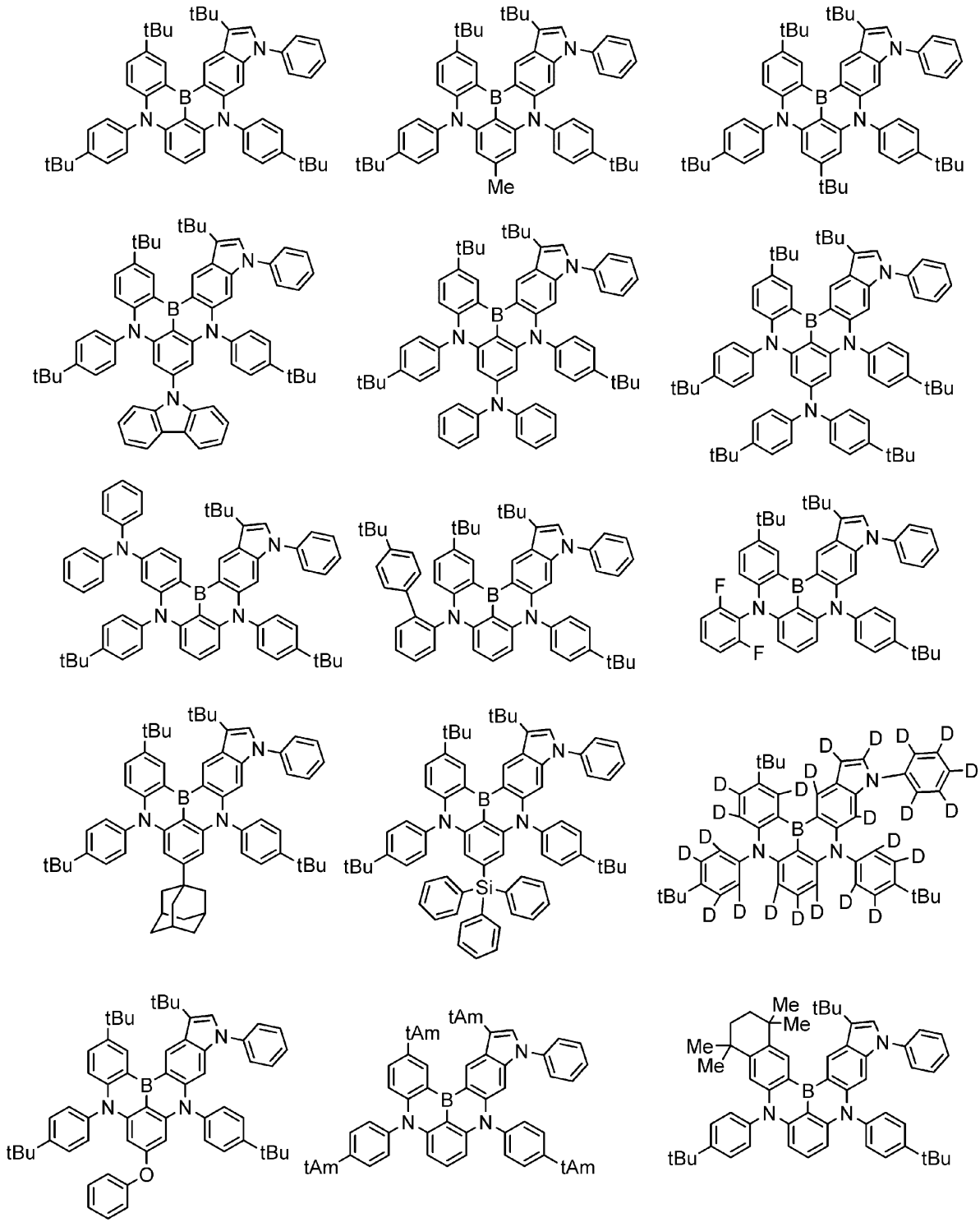
【０２４５】

【化８６】



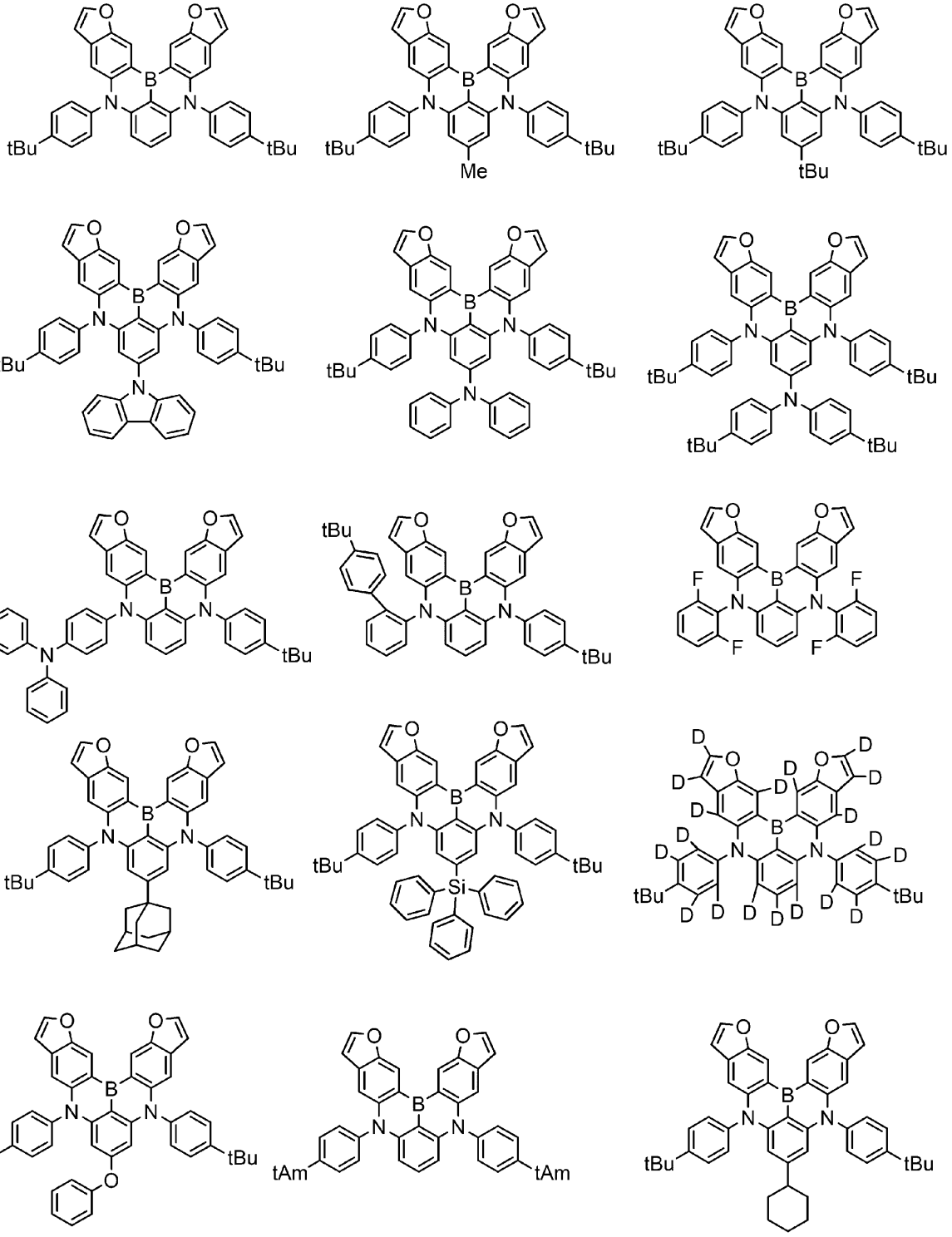
【０２４６】

【化８７】



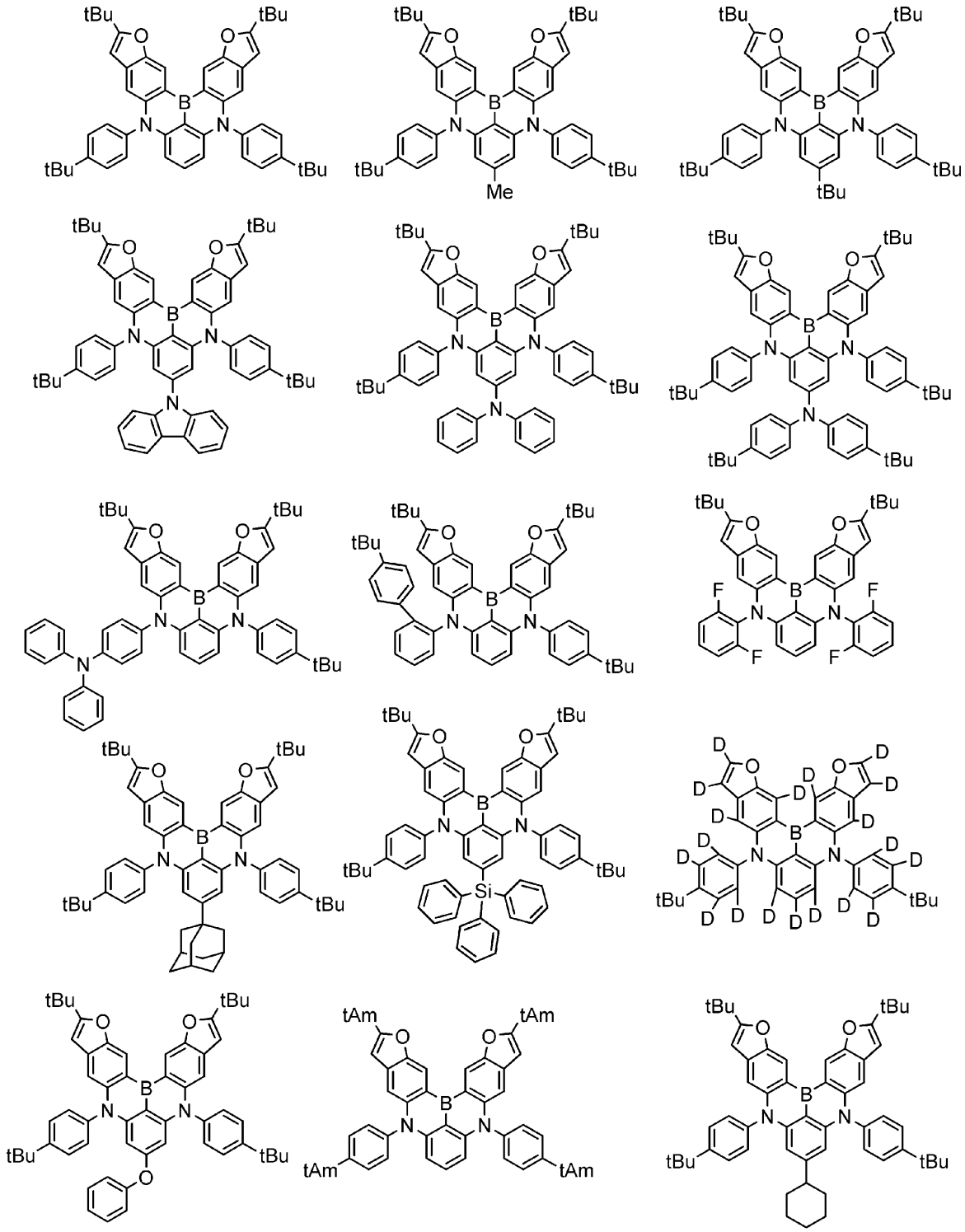
【０２４７】

【化８８】



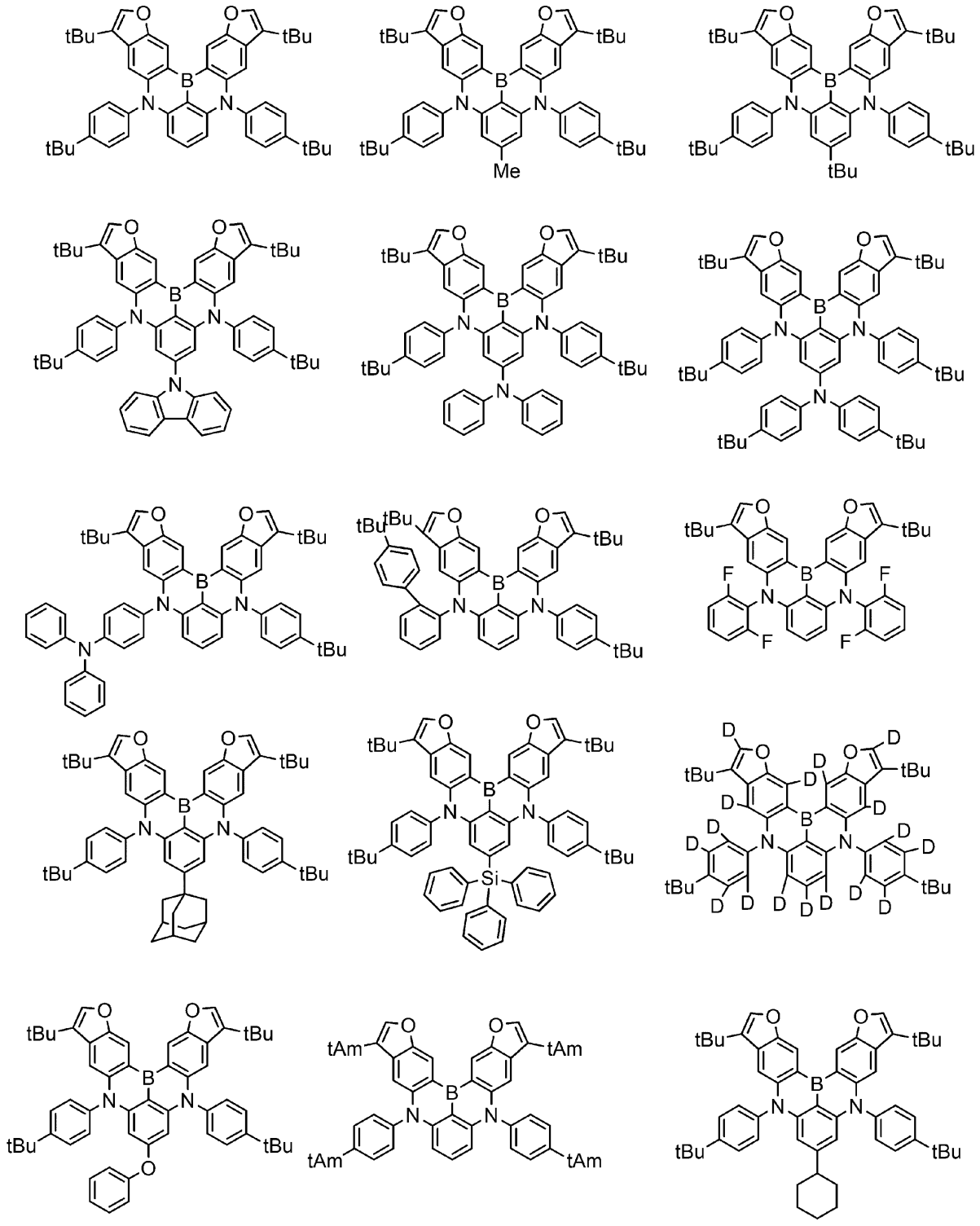
【０２４８】

【化８９】



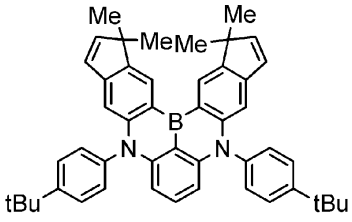
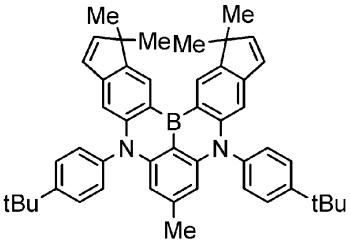
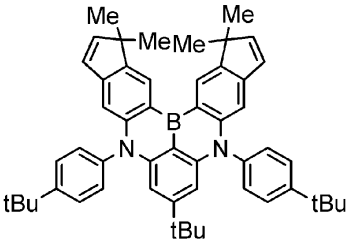
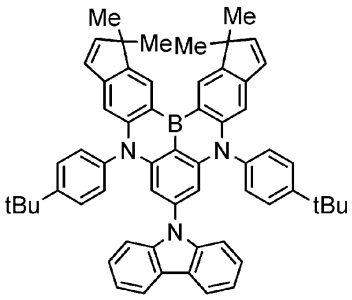
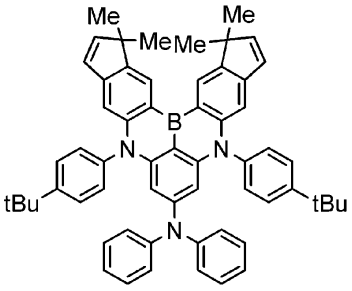
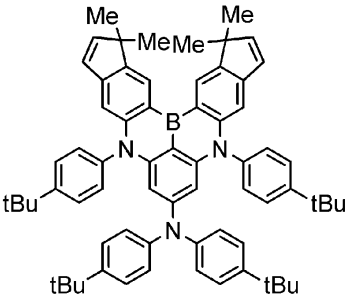
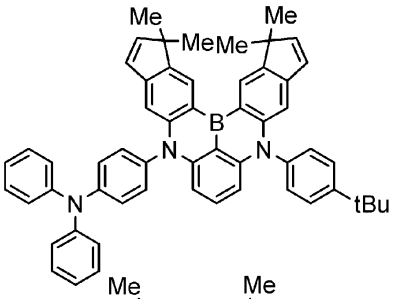
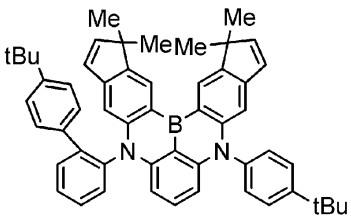
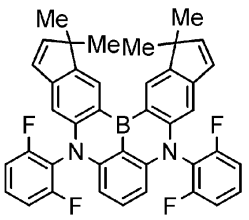
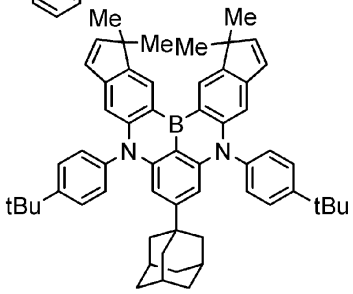
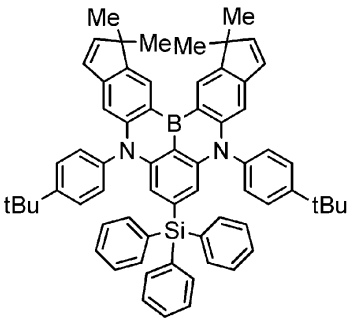
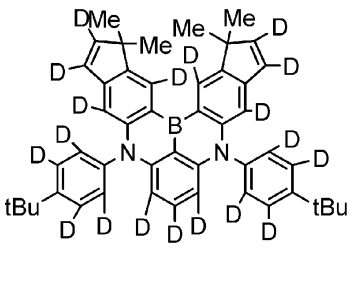
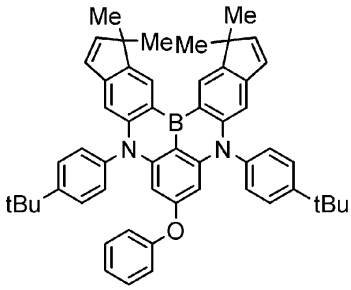
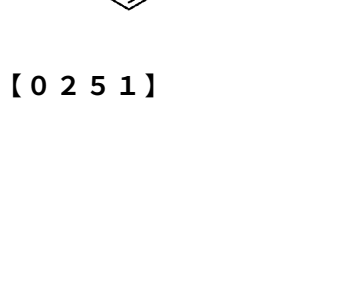
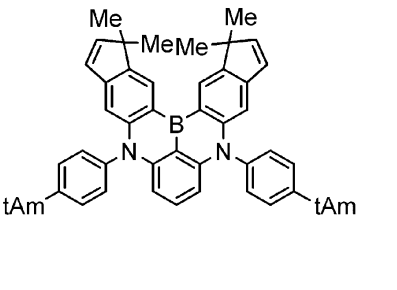
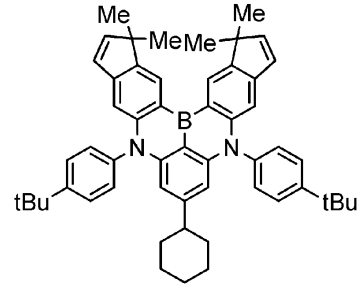
【０２４９】

【化９０】



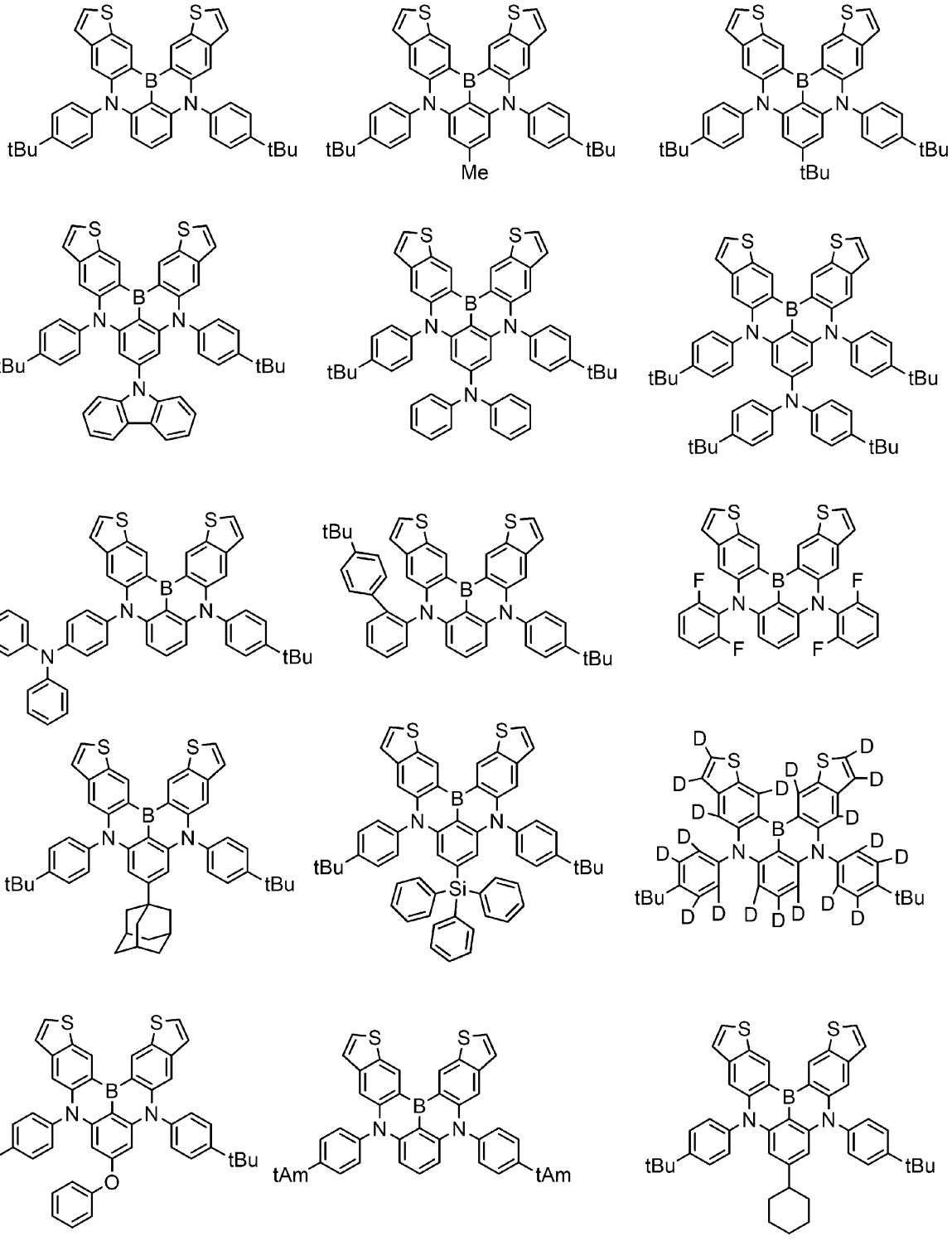
【０２５０】

【化９１】

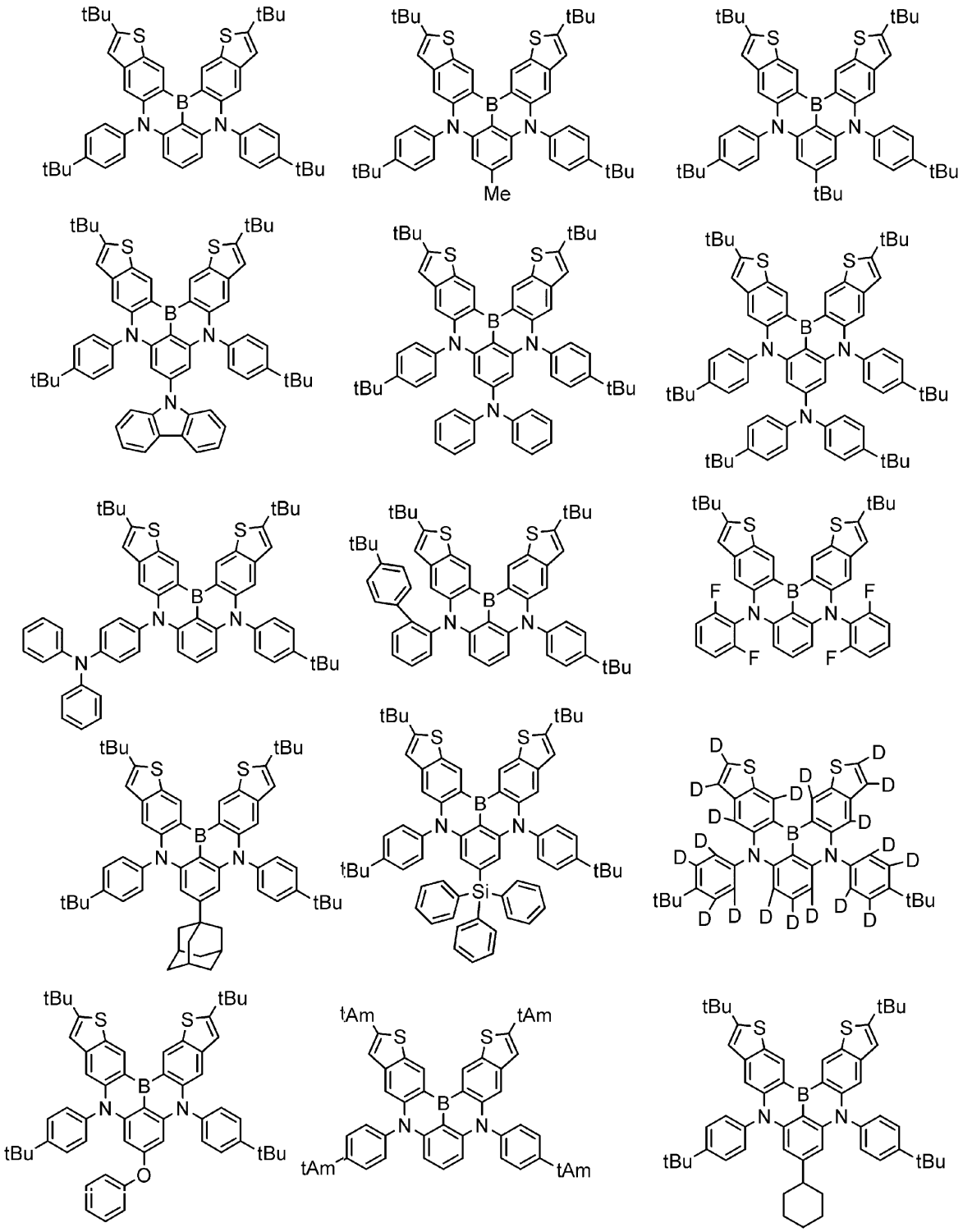
【０２５１】

【化９２】



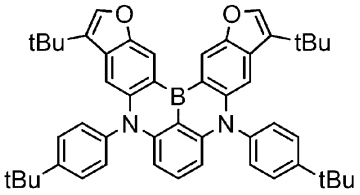
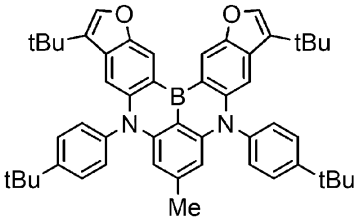
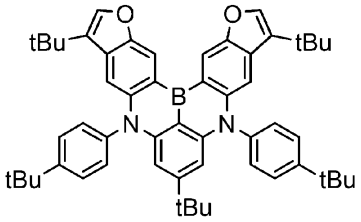
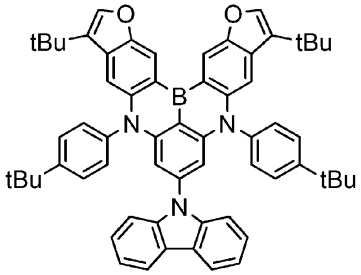
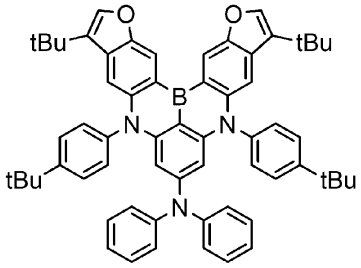
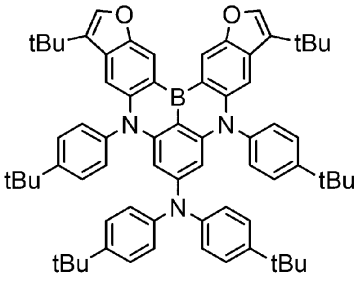
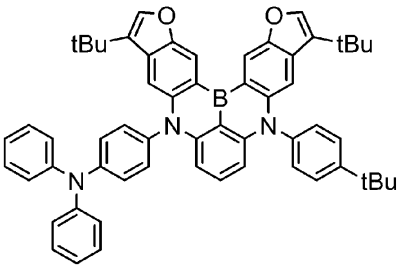
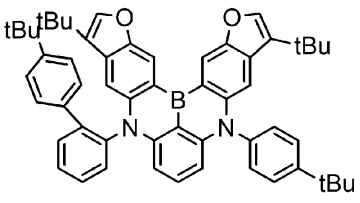
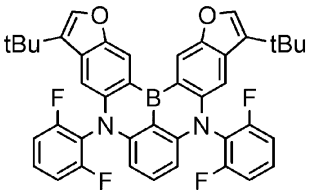
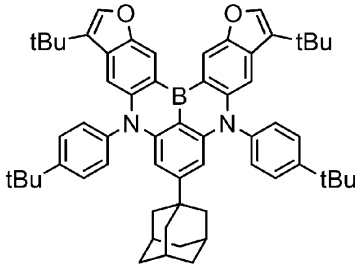
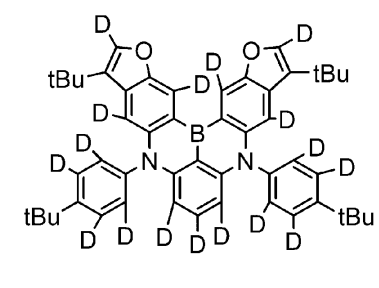
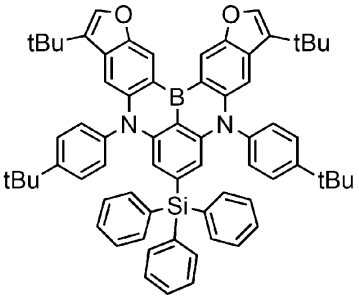
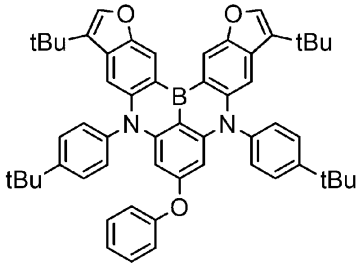
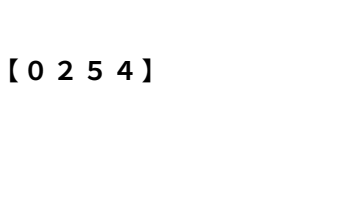
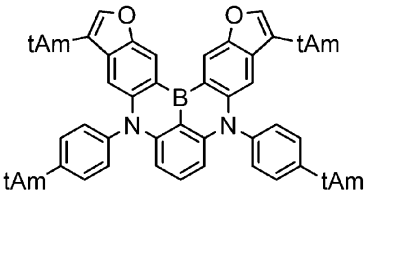
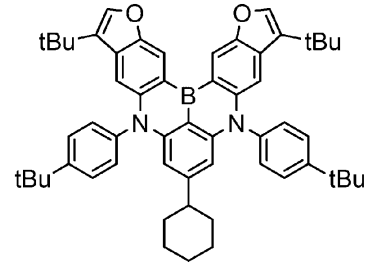
【０２５２】

【化９３】



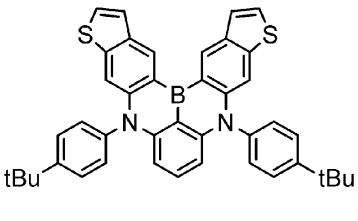
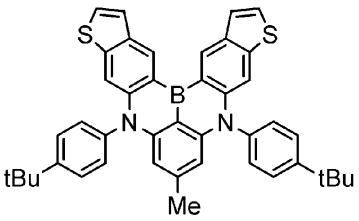
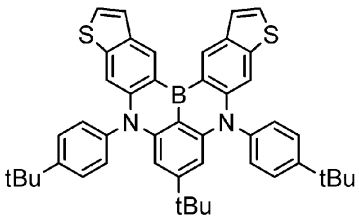
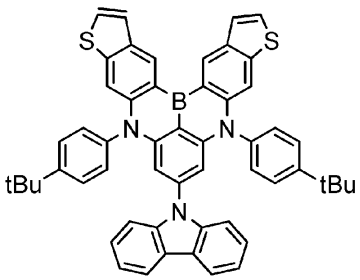
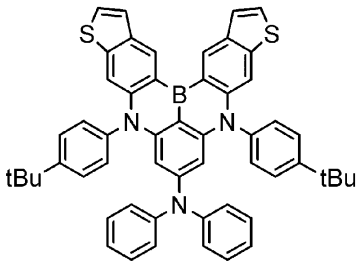
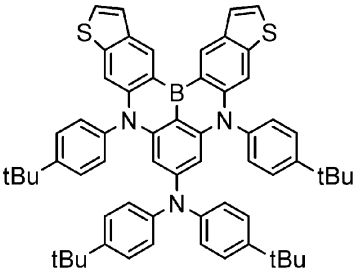
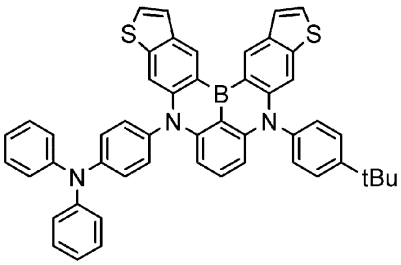
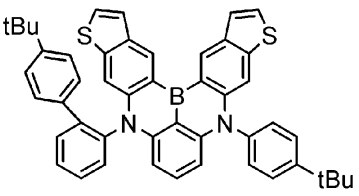
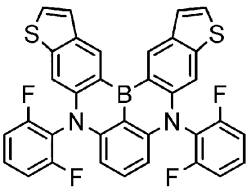
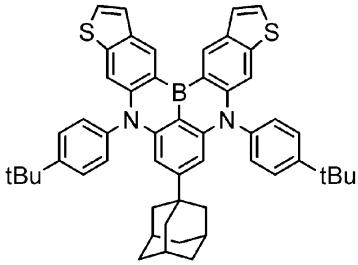
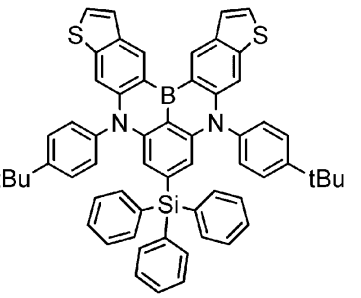
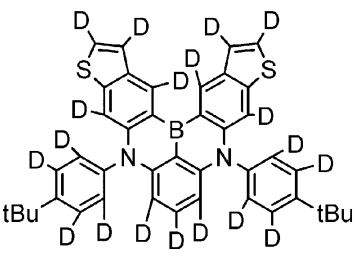
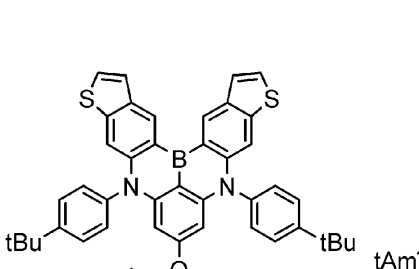
【０２５３】

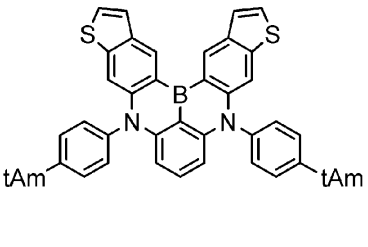
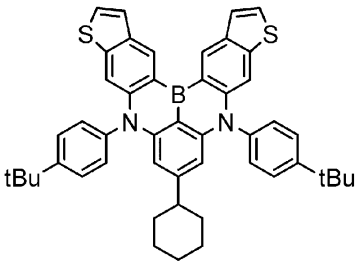
【化９４】

【０２５４】

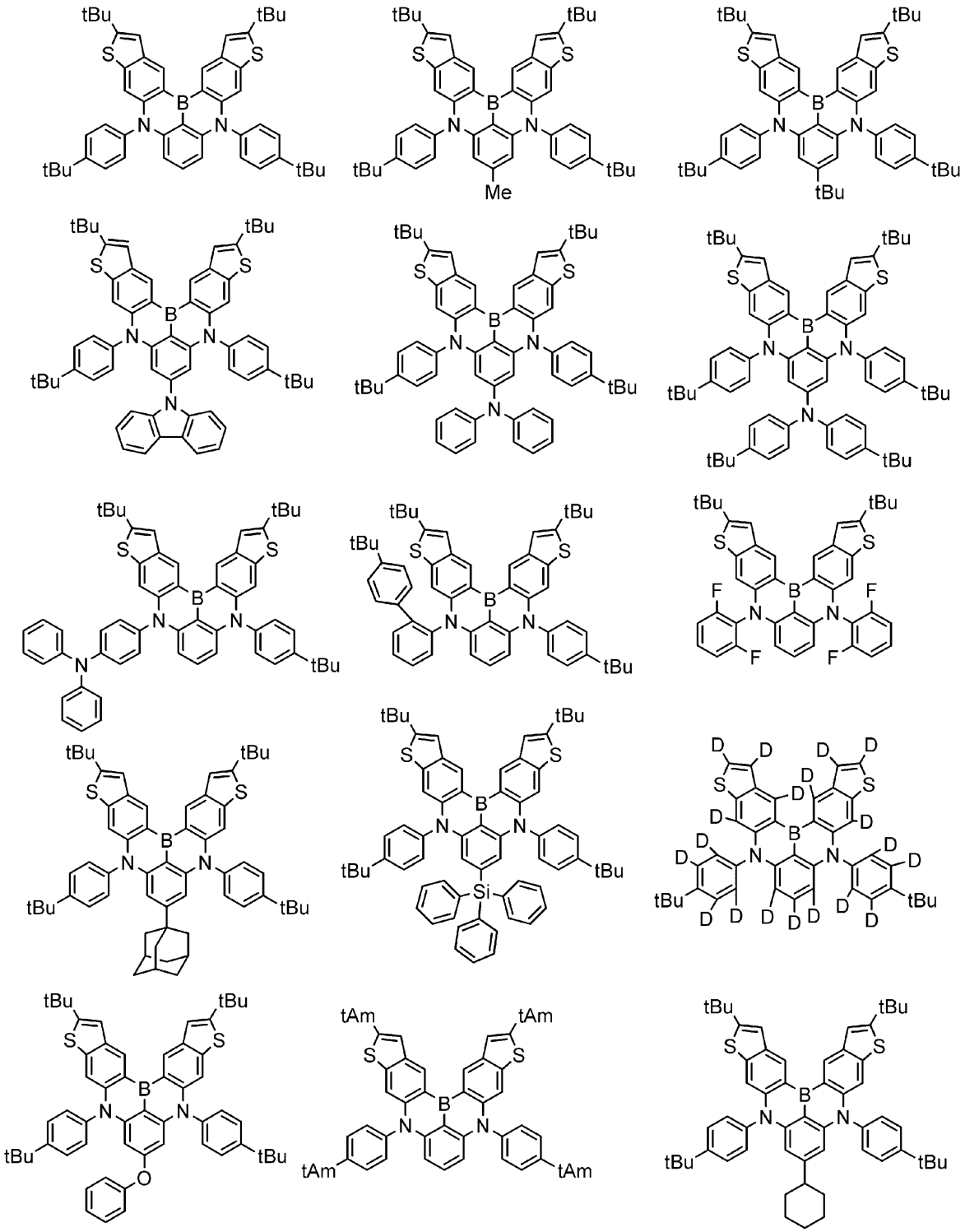
【化９５】

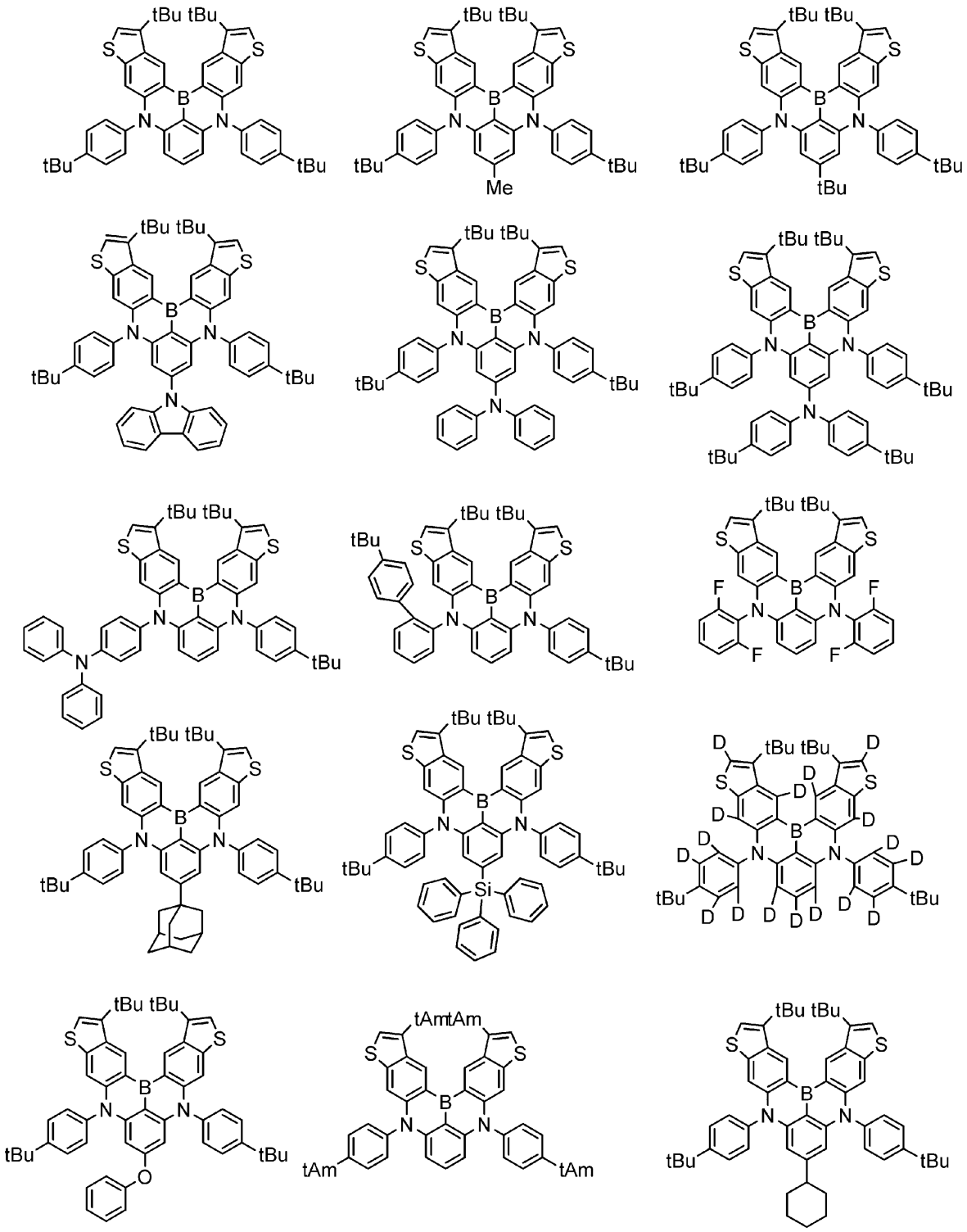
【０２５５】

【化９６】



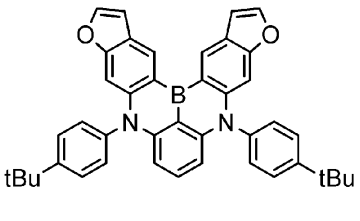
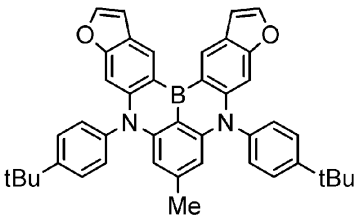
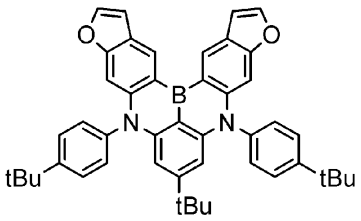
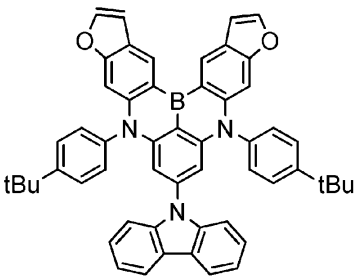
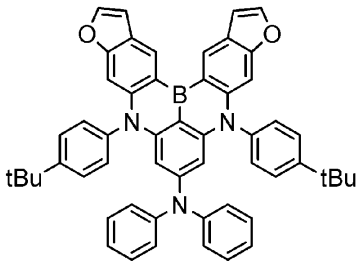
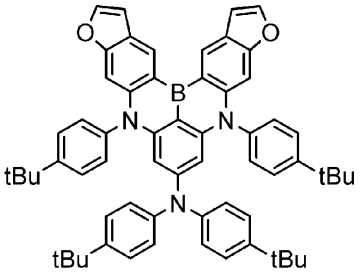
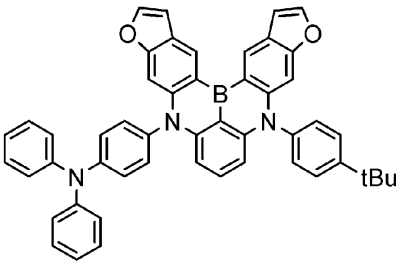
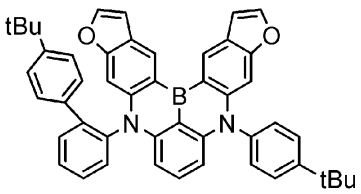
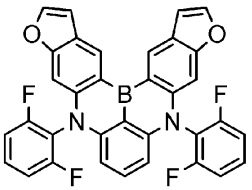
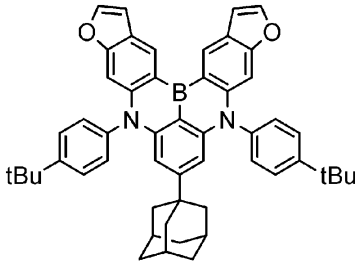
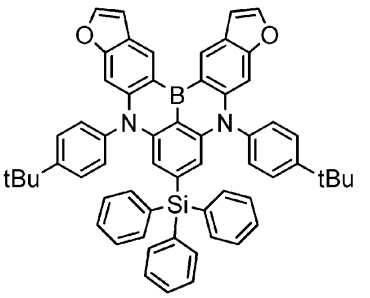
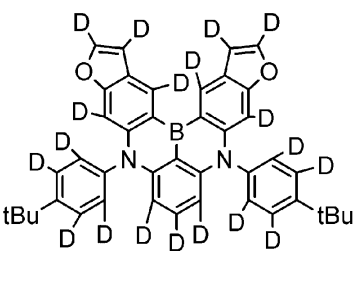
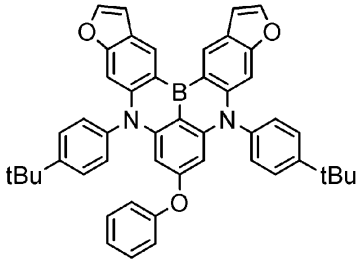
【０２５６】

【化９７】



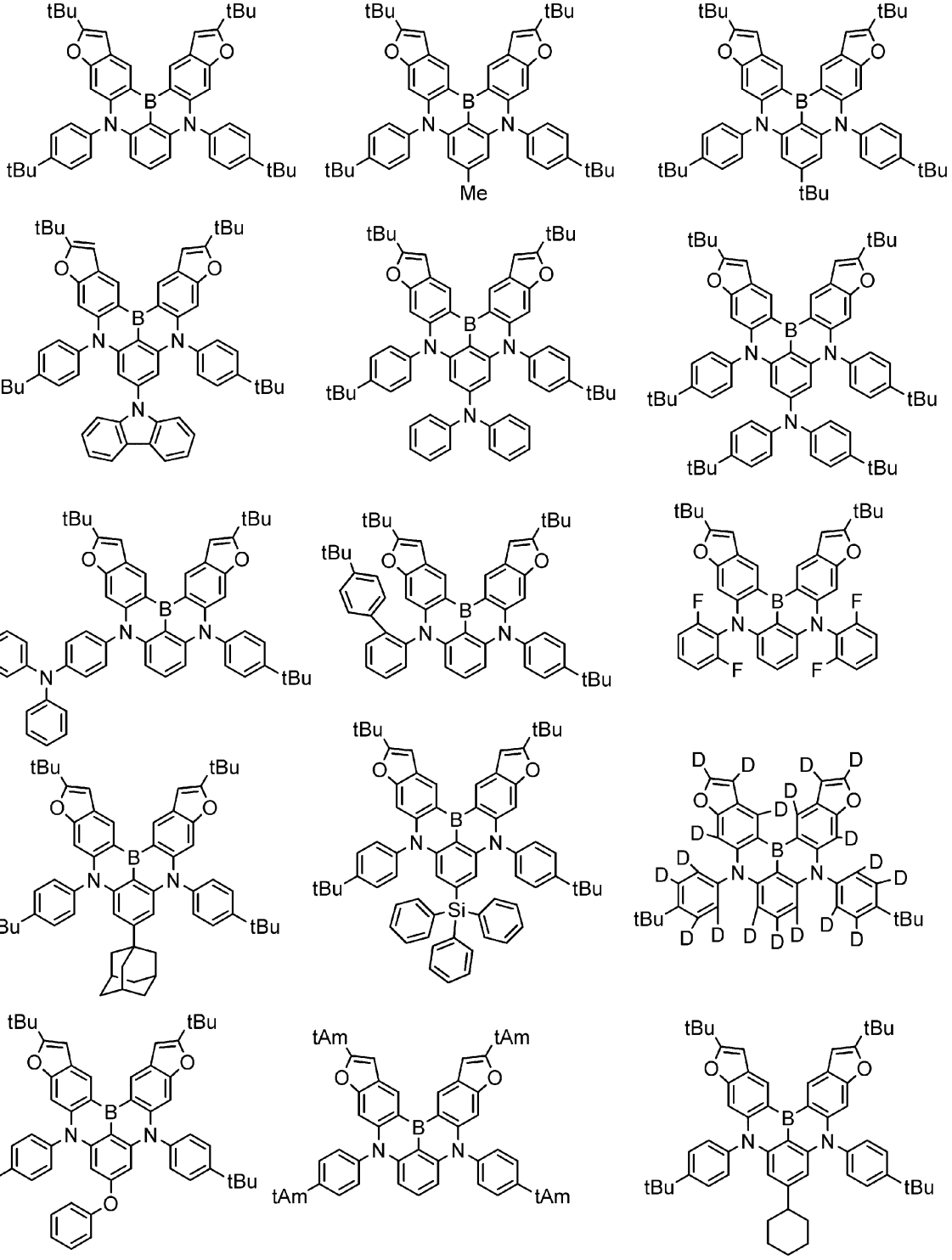
【０２５７】

【化９８】

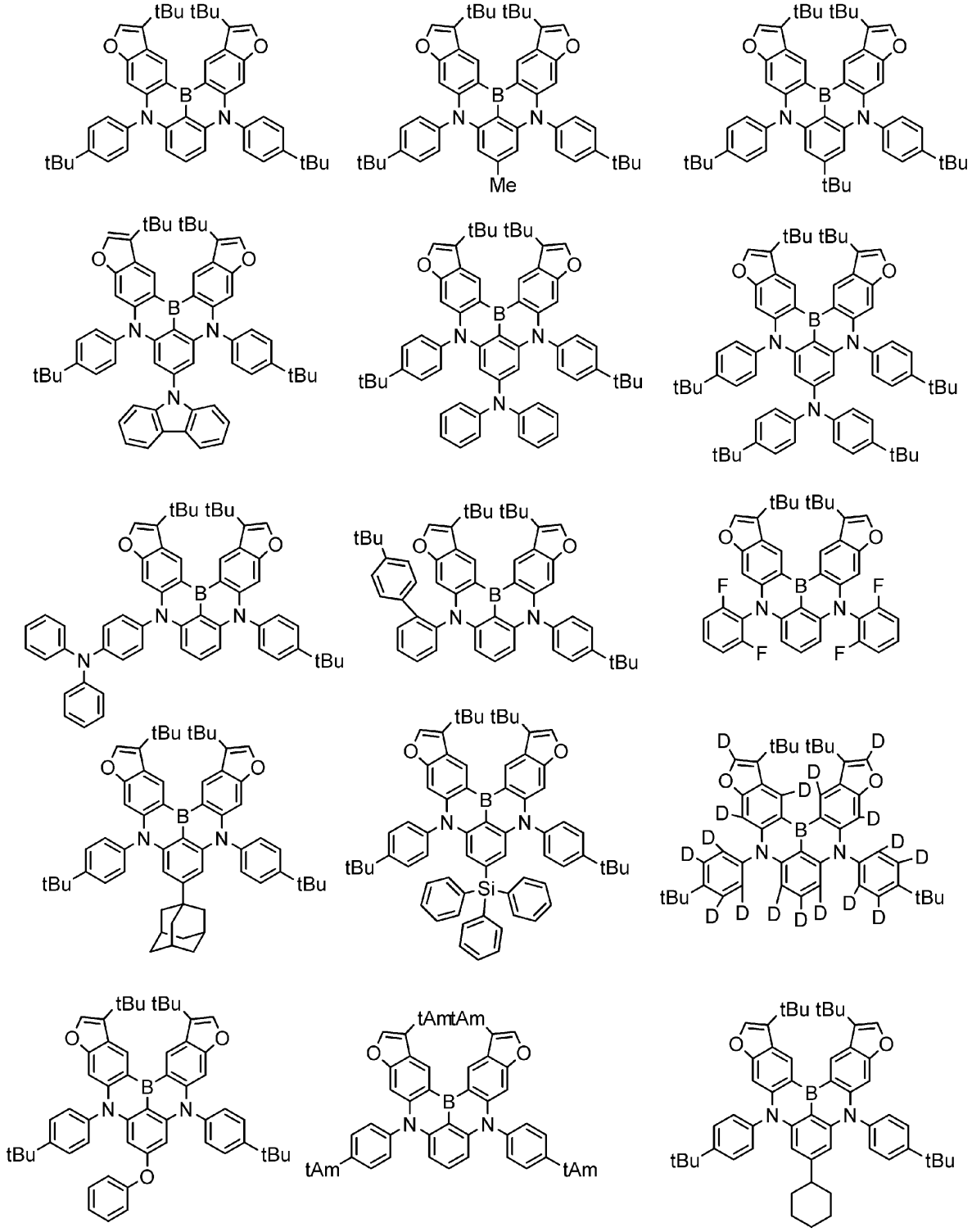
【０２５８】

【化９９】



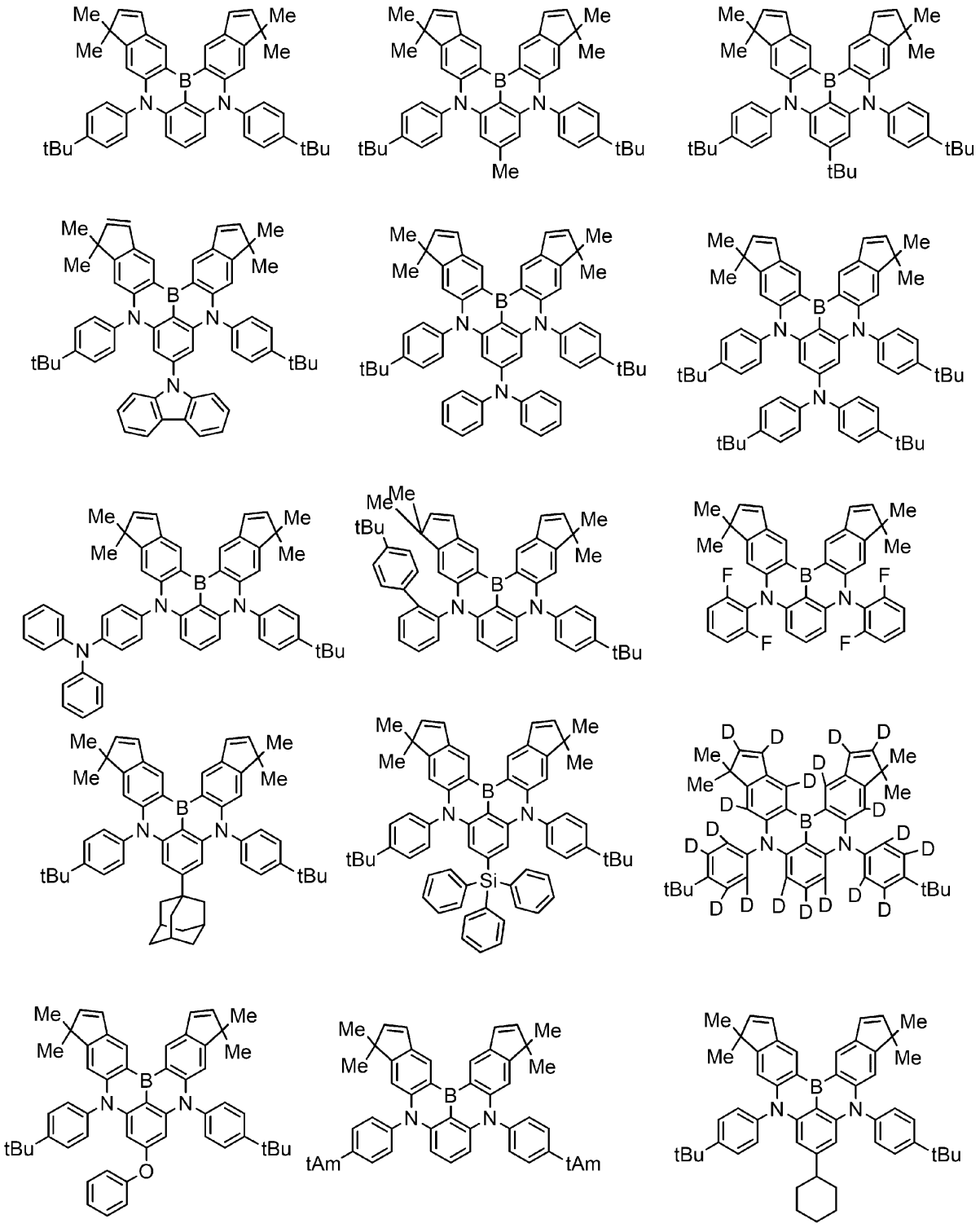
【０２５９】

【化１００】



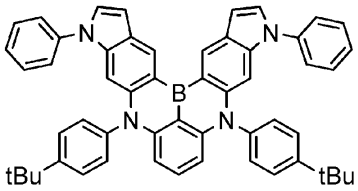
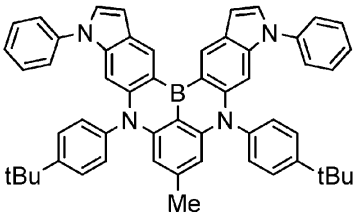
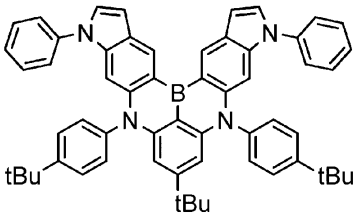
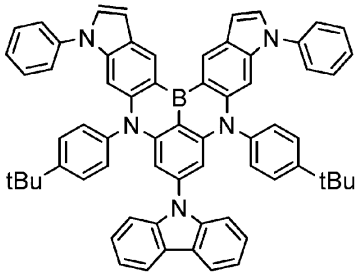
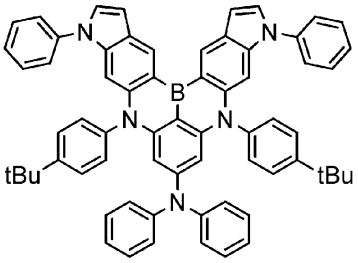
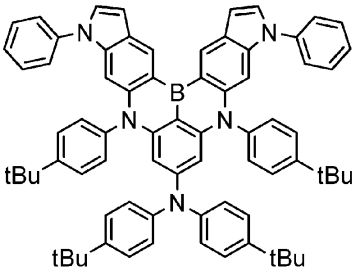
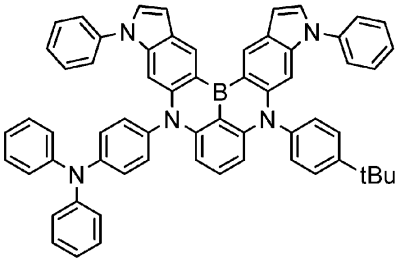
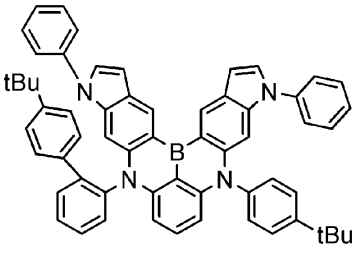
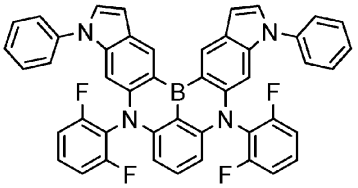
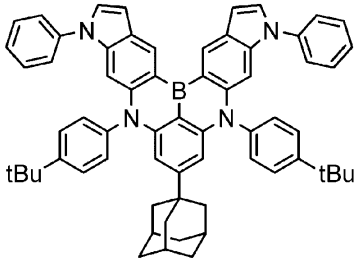
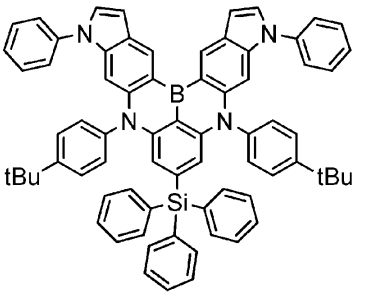
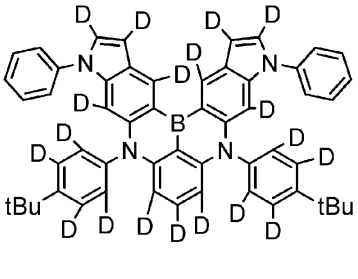
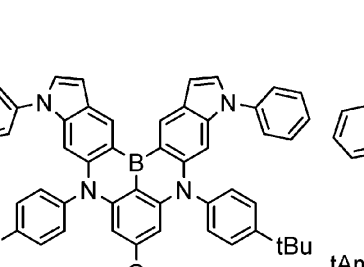
【０２６０】

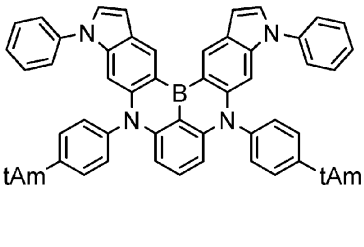
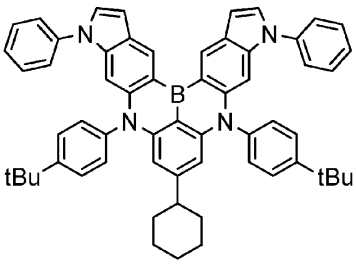
【化１０１】



【０２６１】

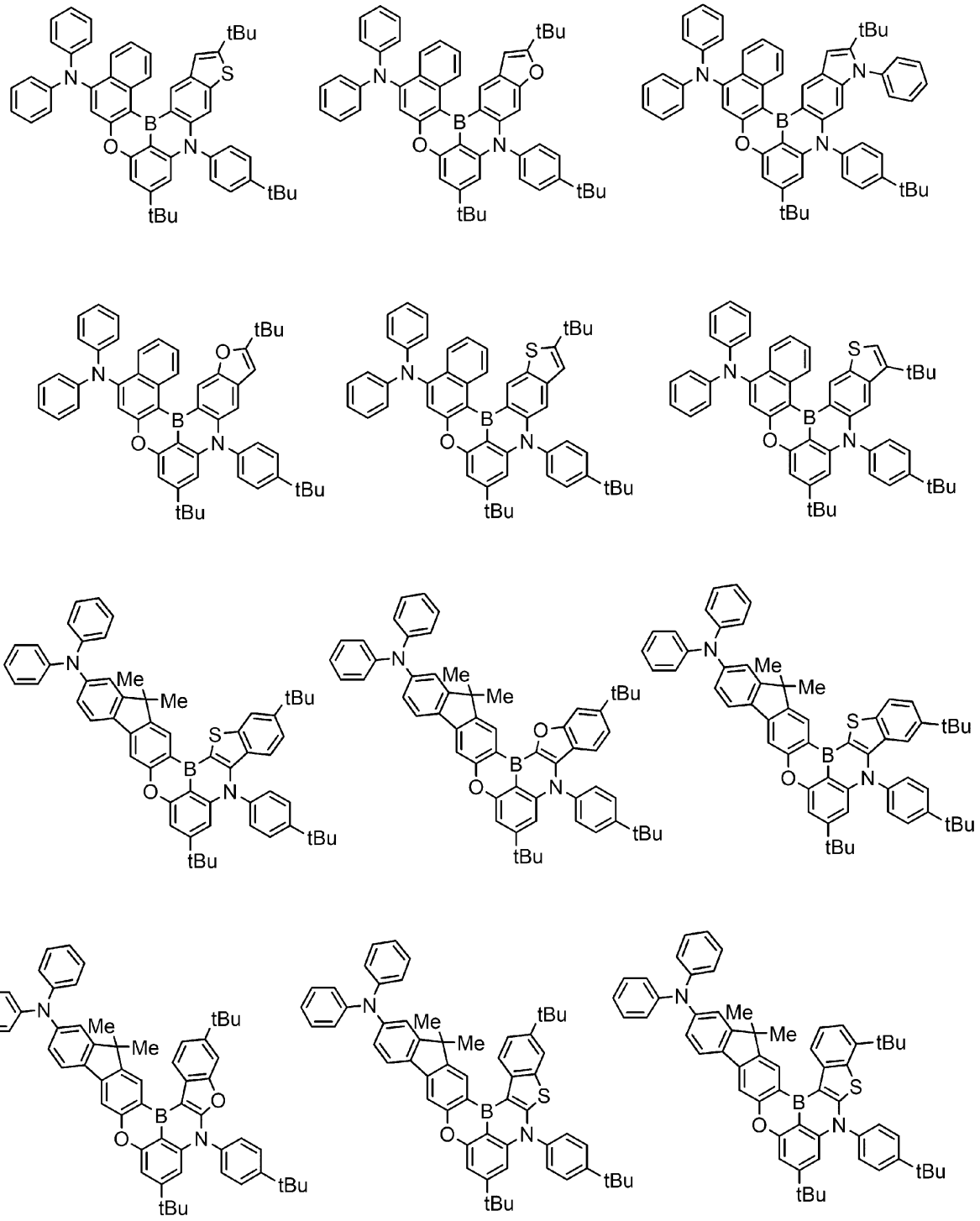
【化１０２】

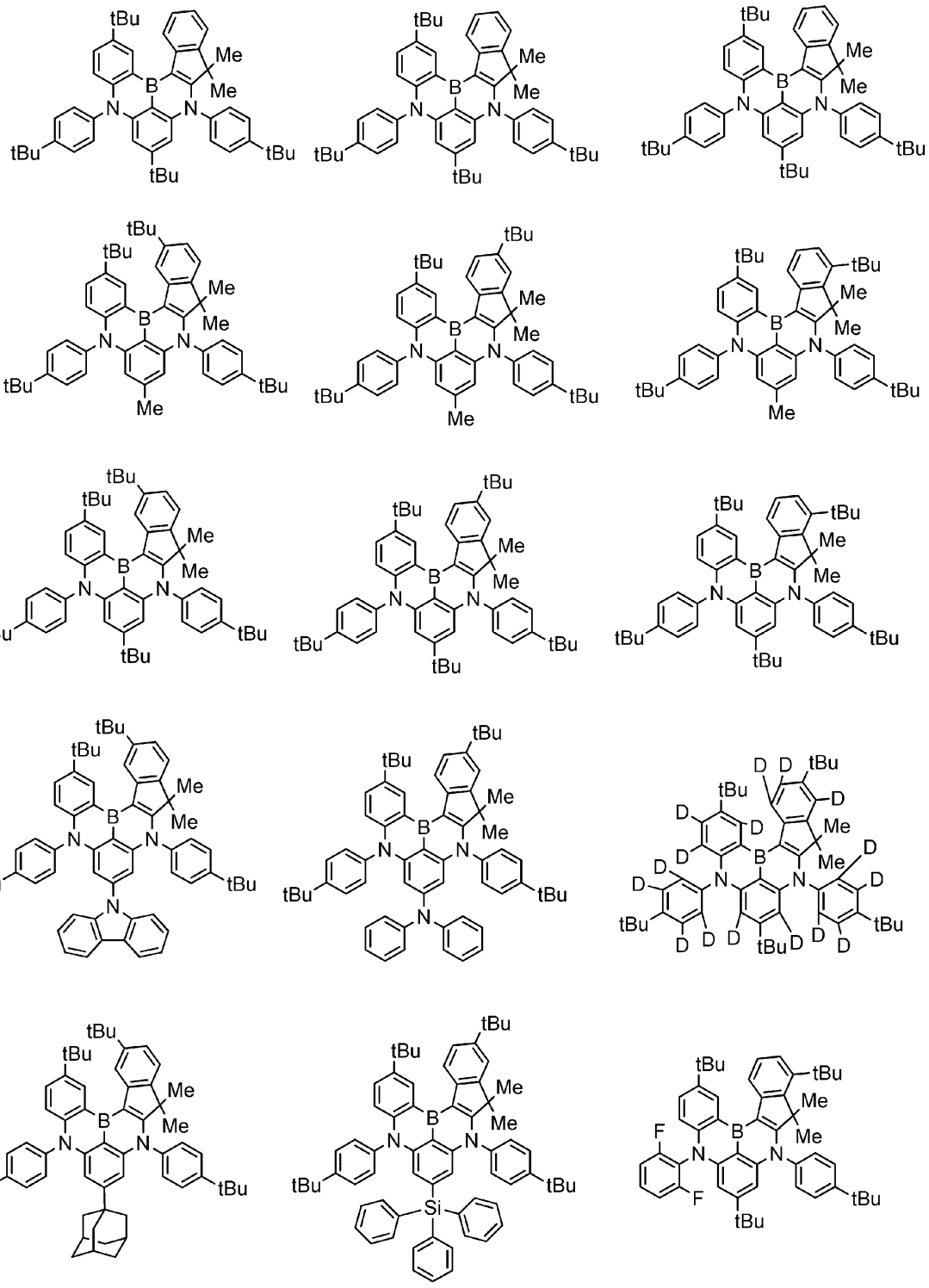
【０２６２】

【化１０３】



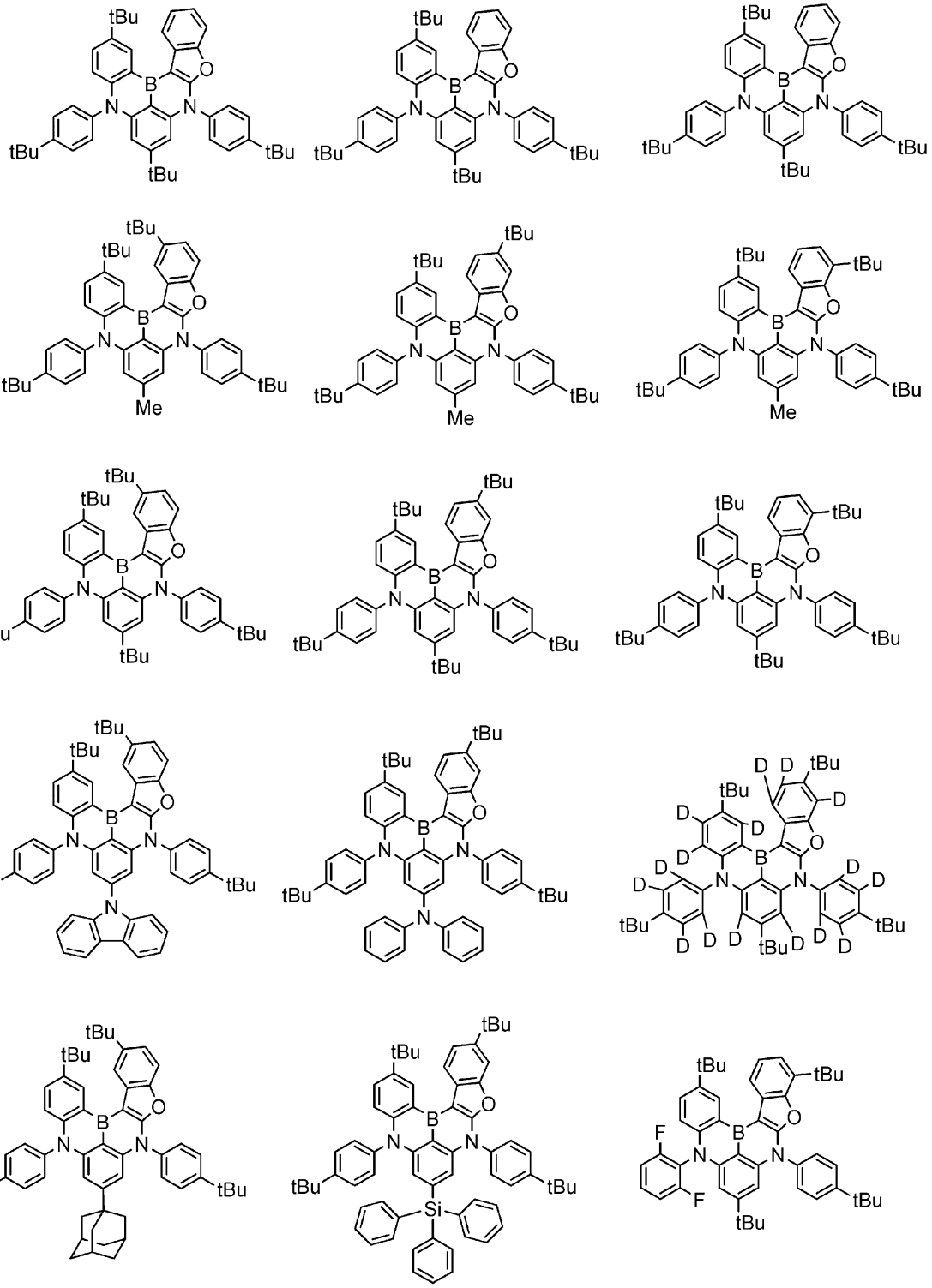
【０２６３】

【化１０４】



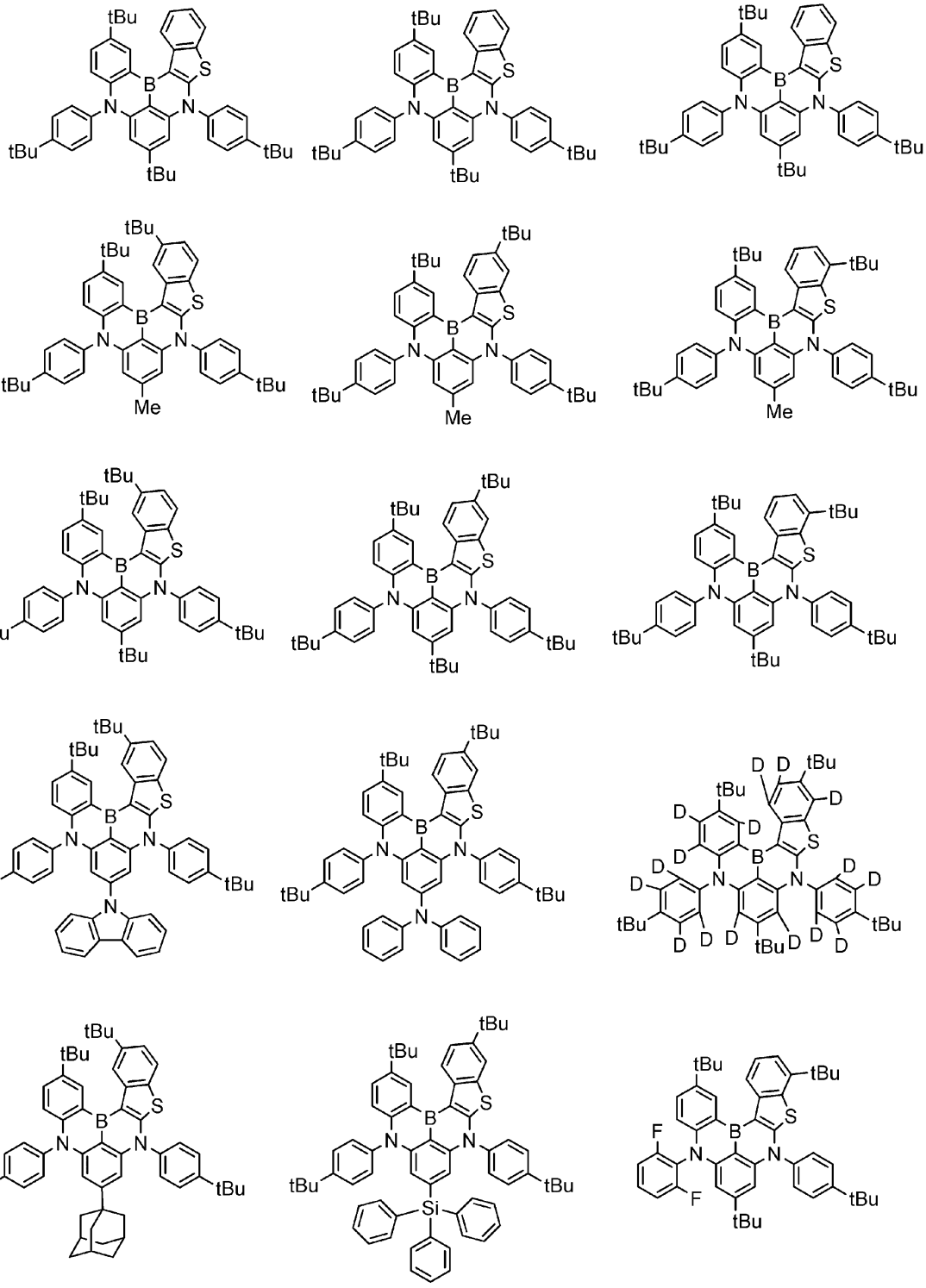
【０２６４】

【化１０５】



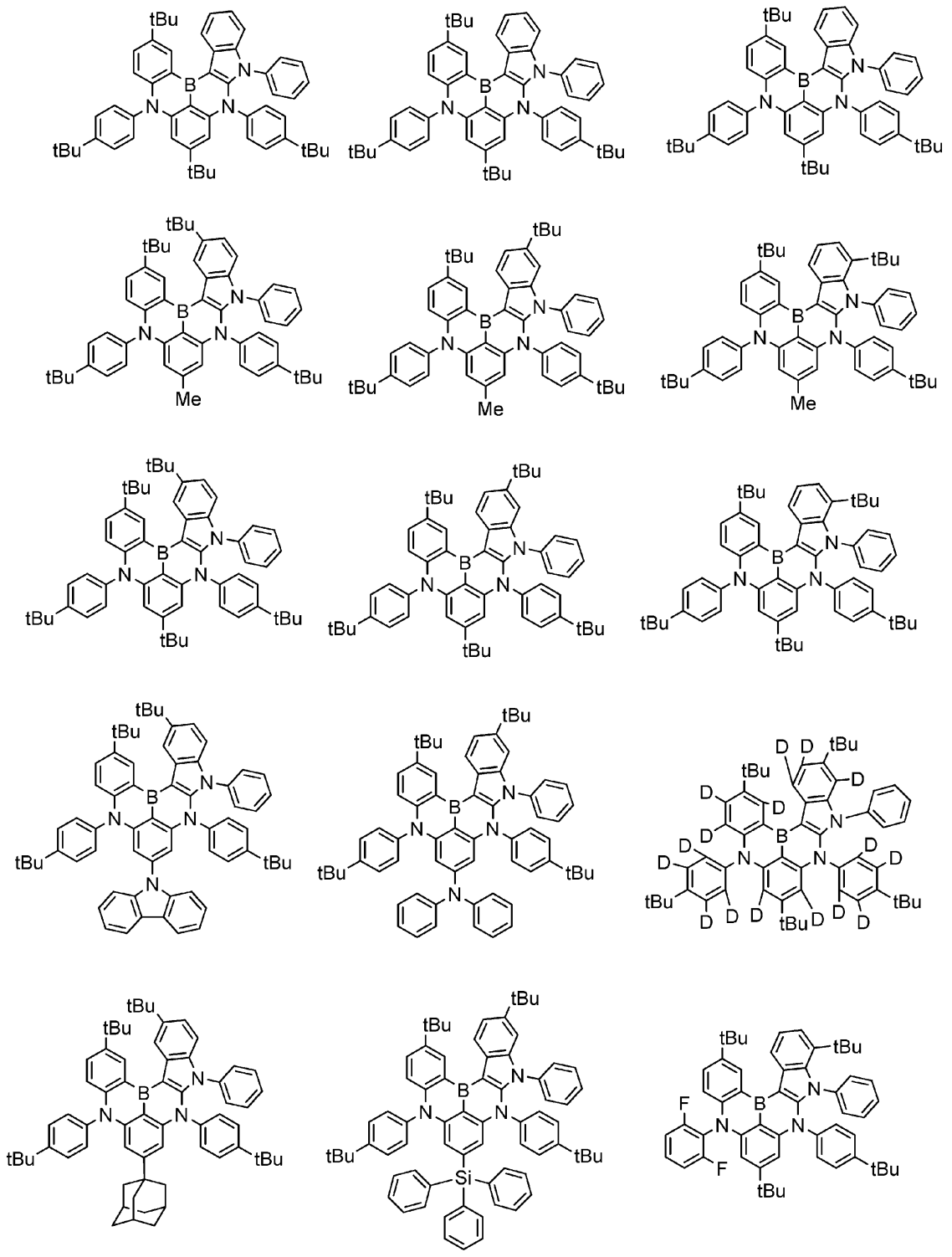
【０２６５】

【化１０６】



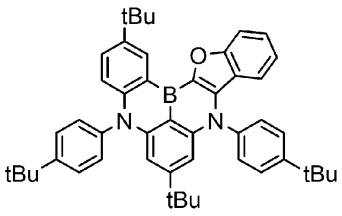
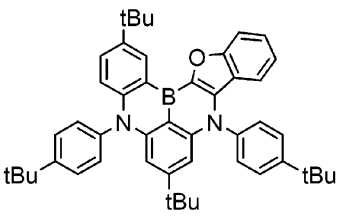
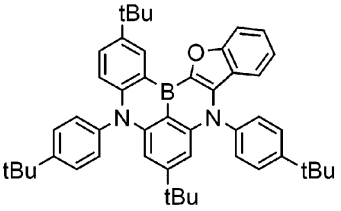
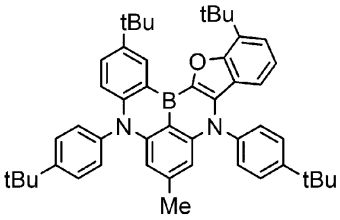
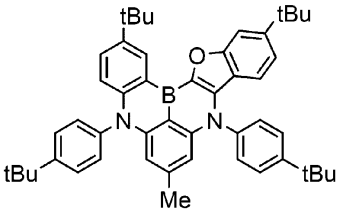
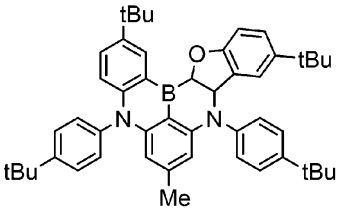
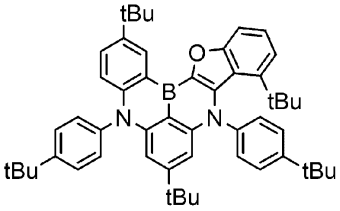
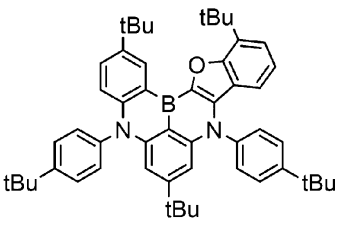
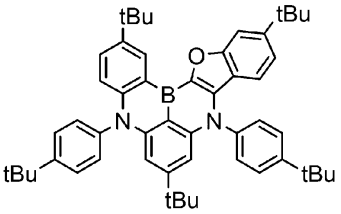
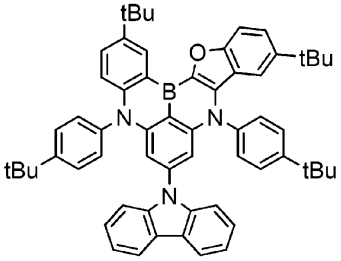
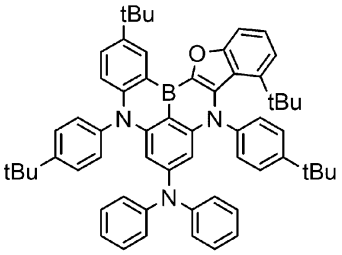
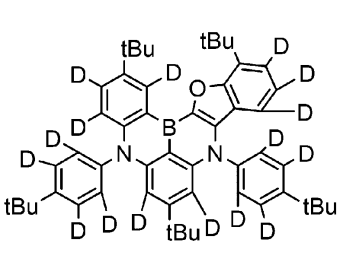
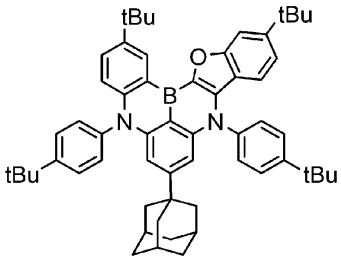
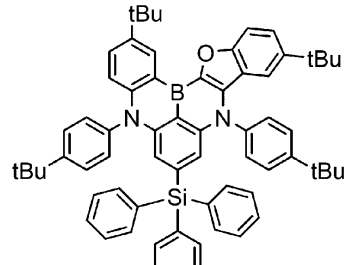
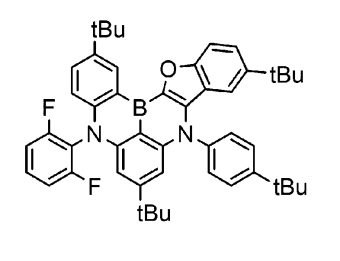
【０２６６】

【化１０７】



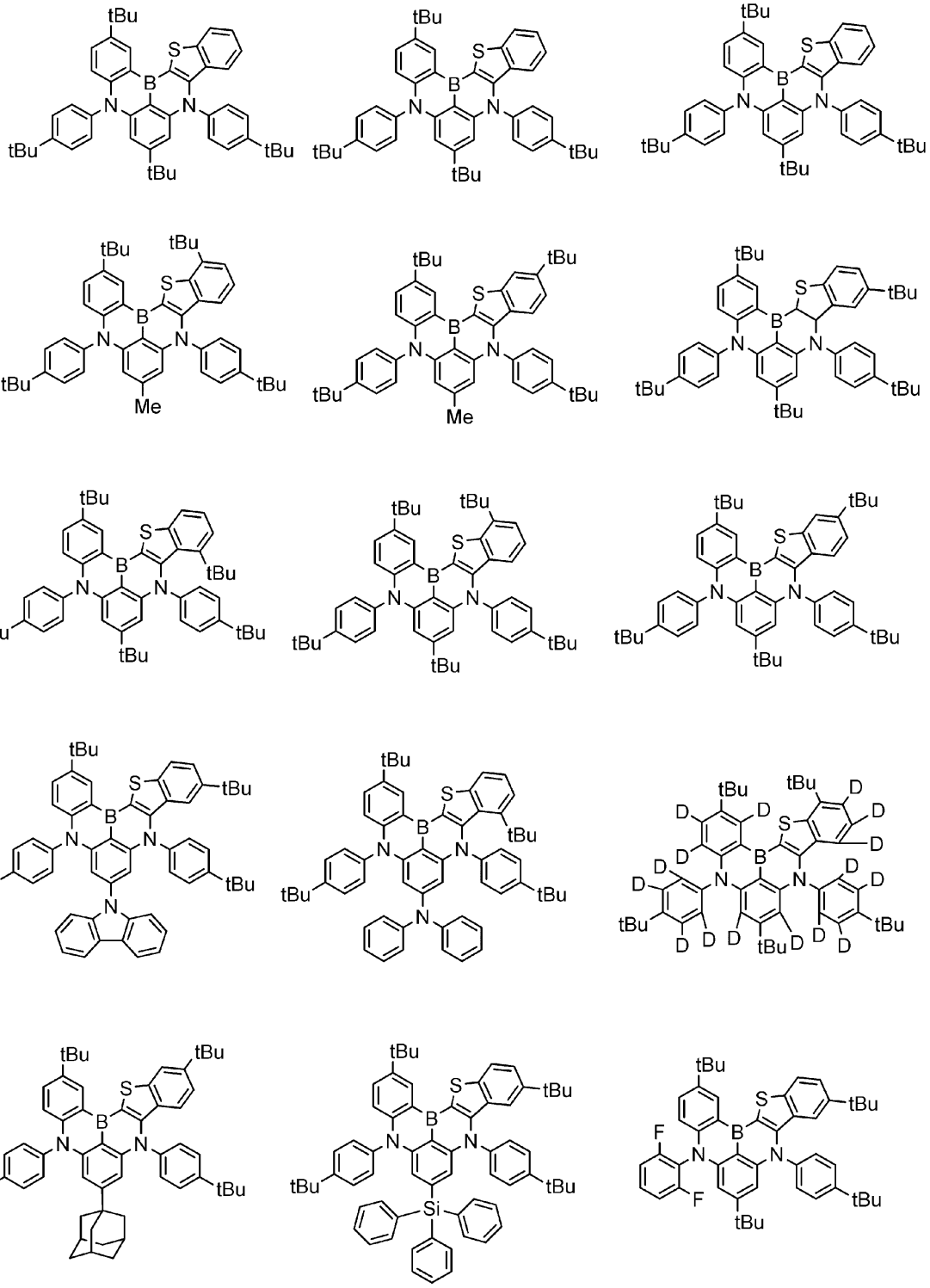
【０２６７】

【化１０８】

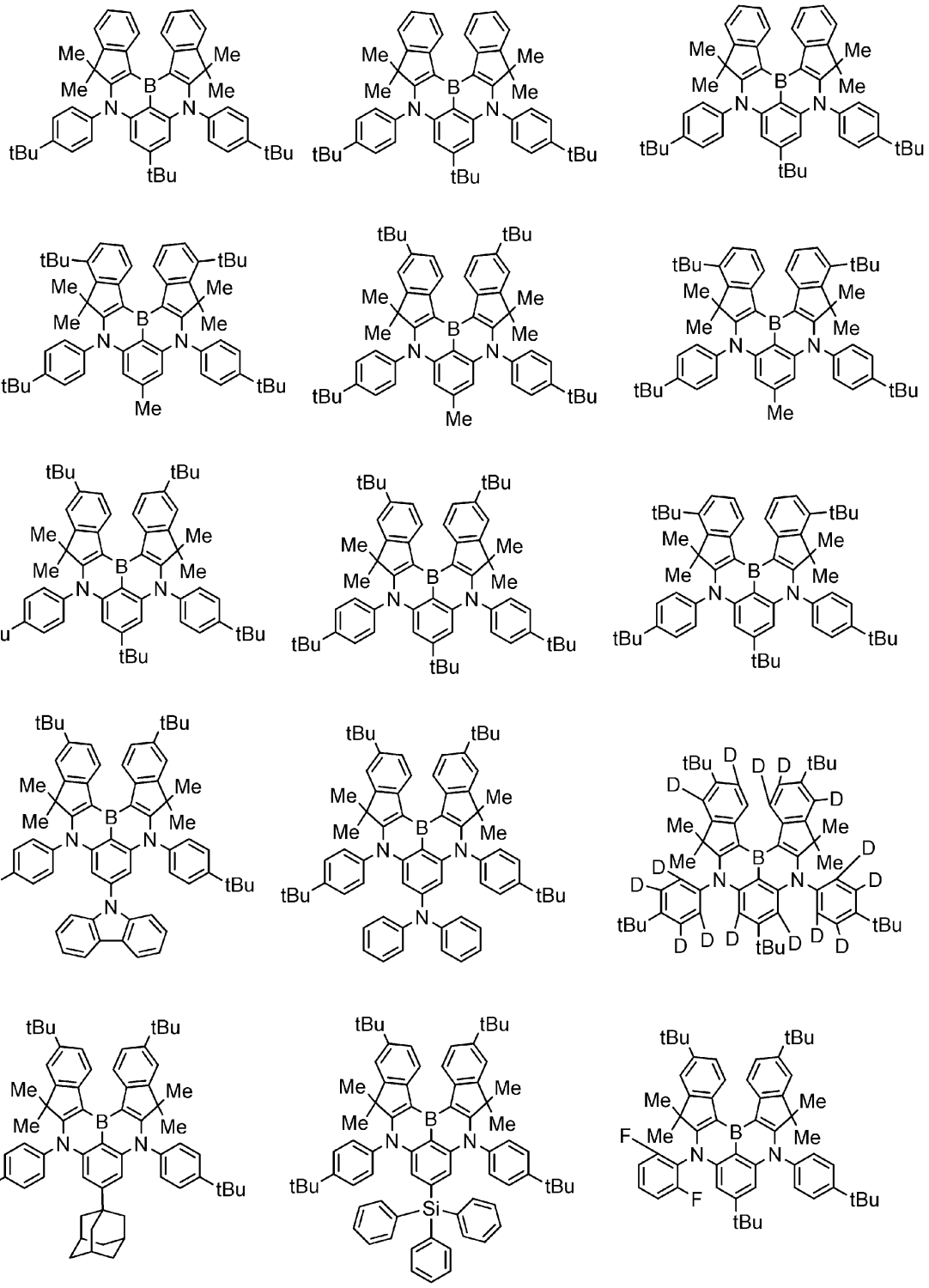

【０２６８】

【化１０９】



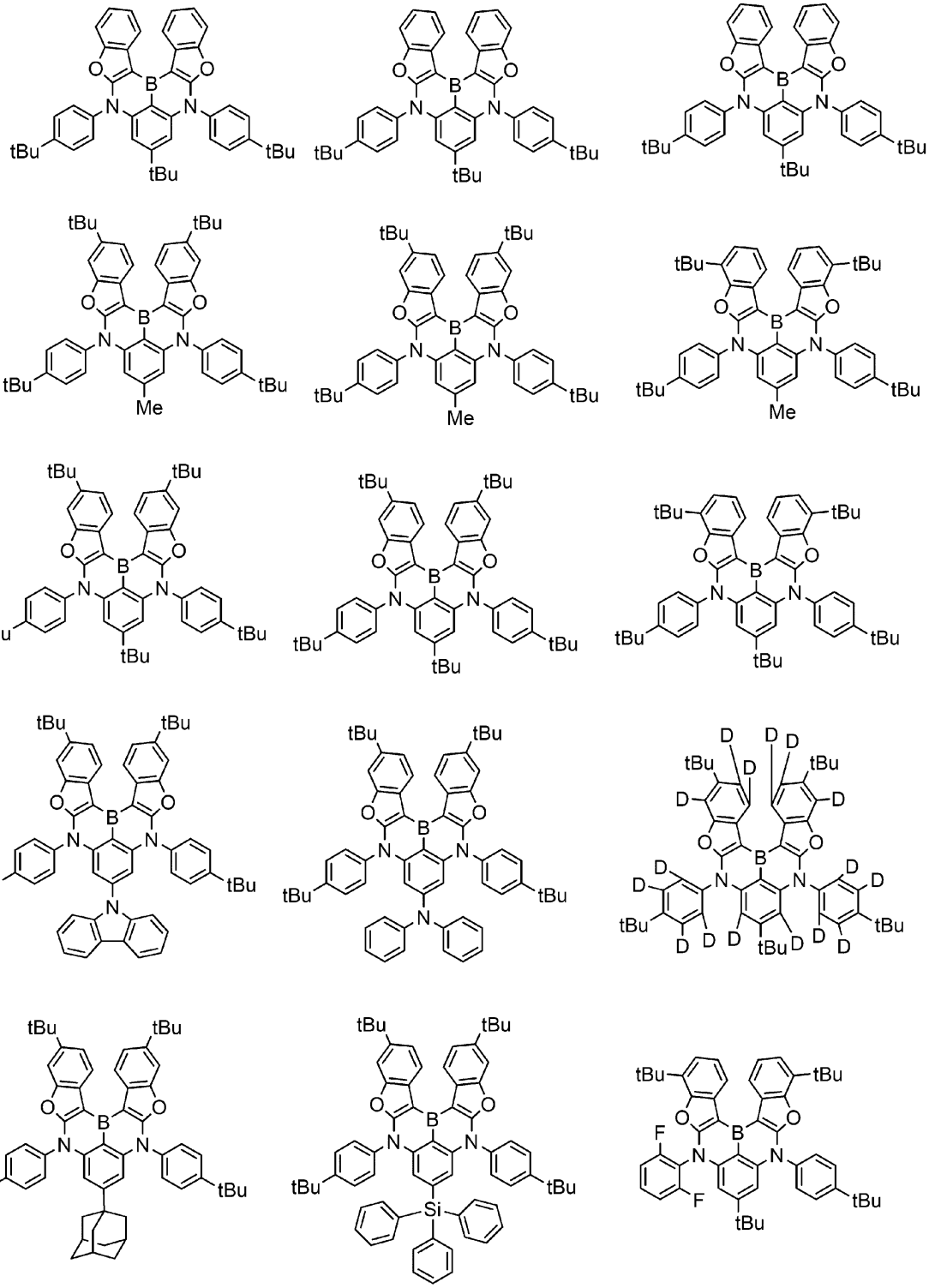
【０２６９】

【化１１０】



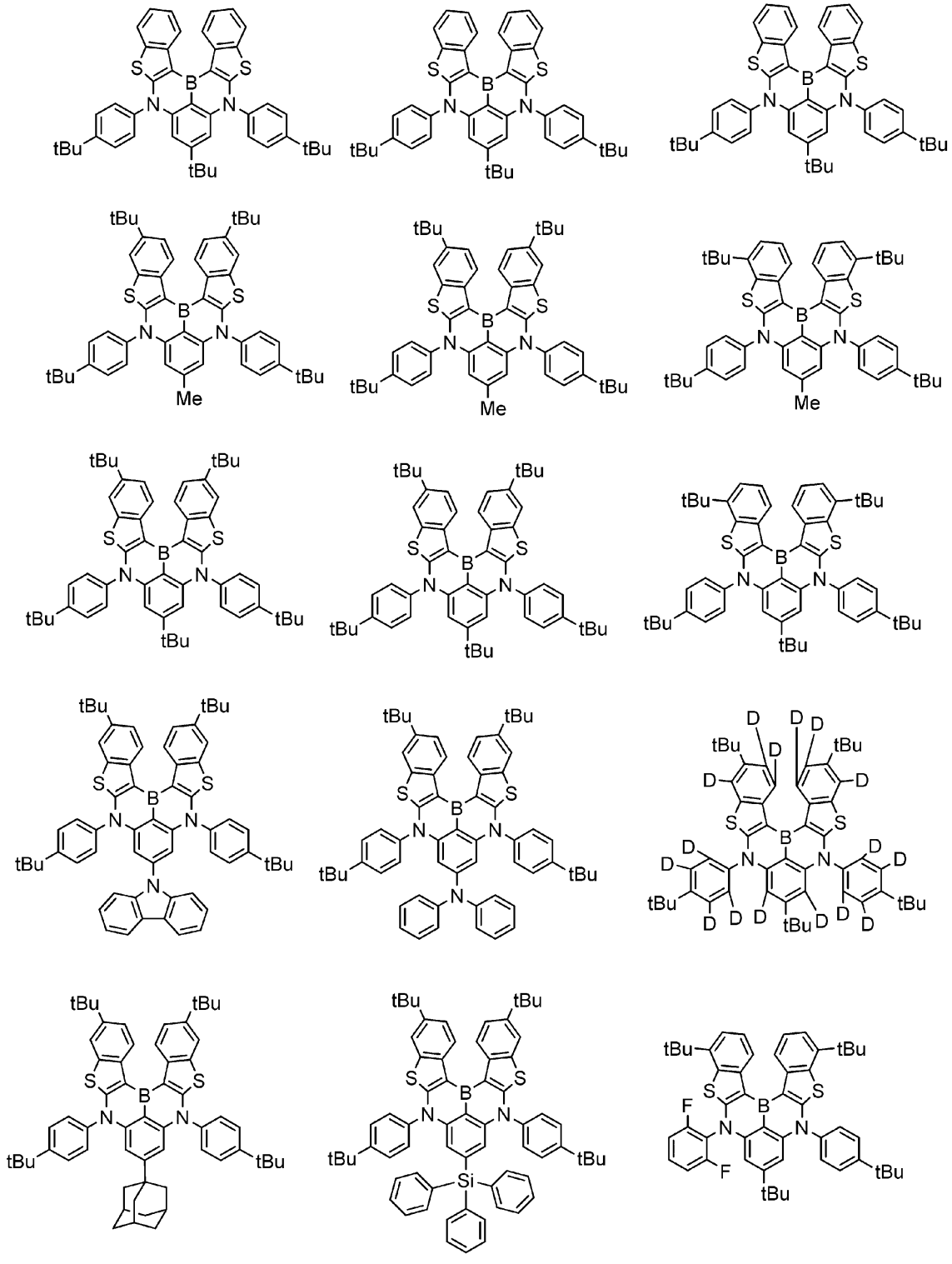
【０２７０】

【化１１１】



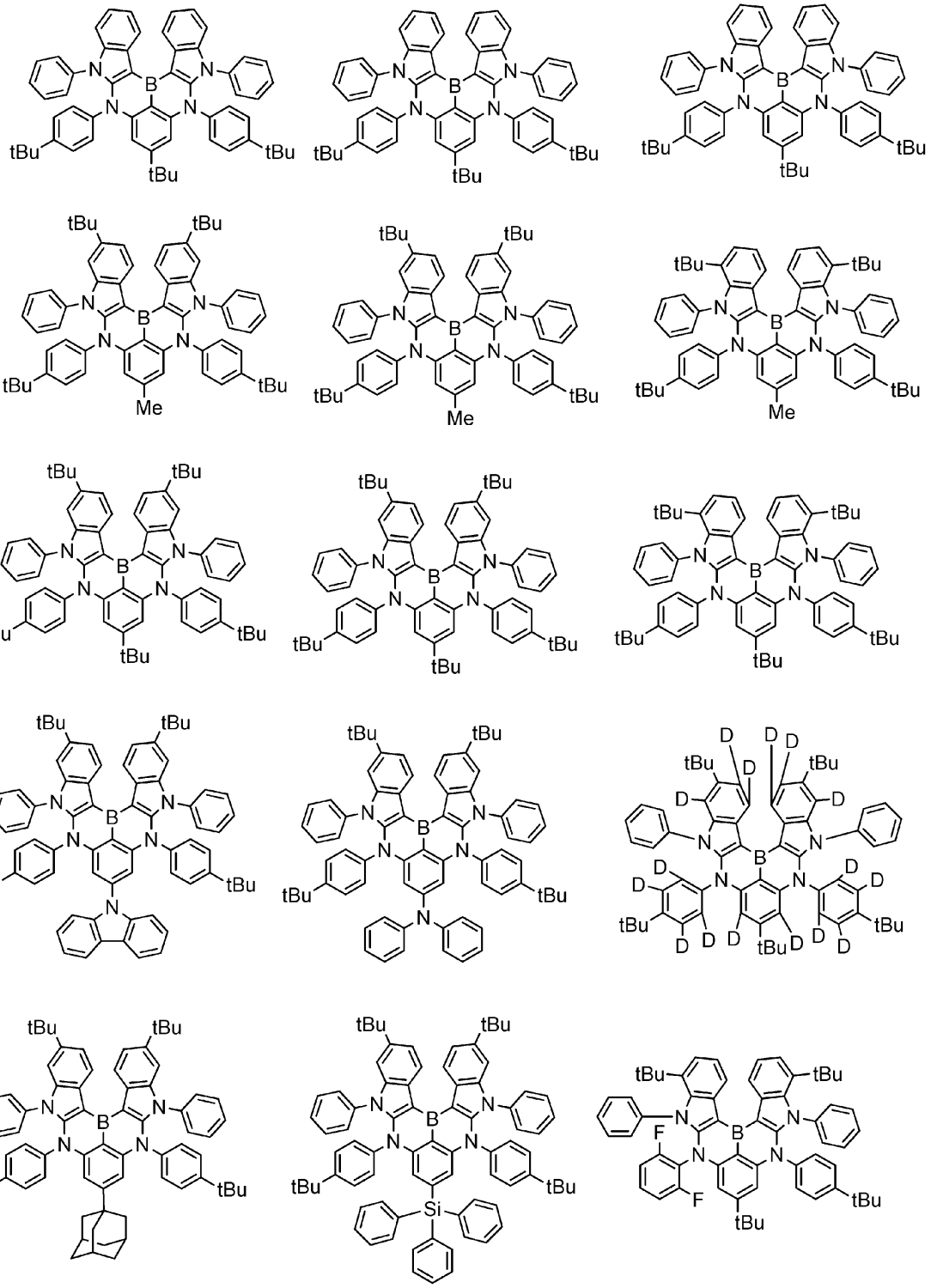
【０２７１】

【化１１２】



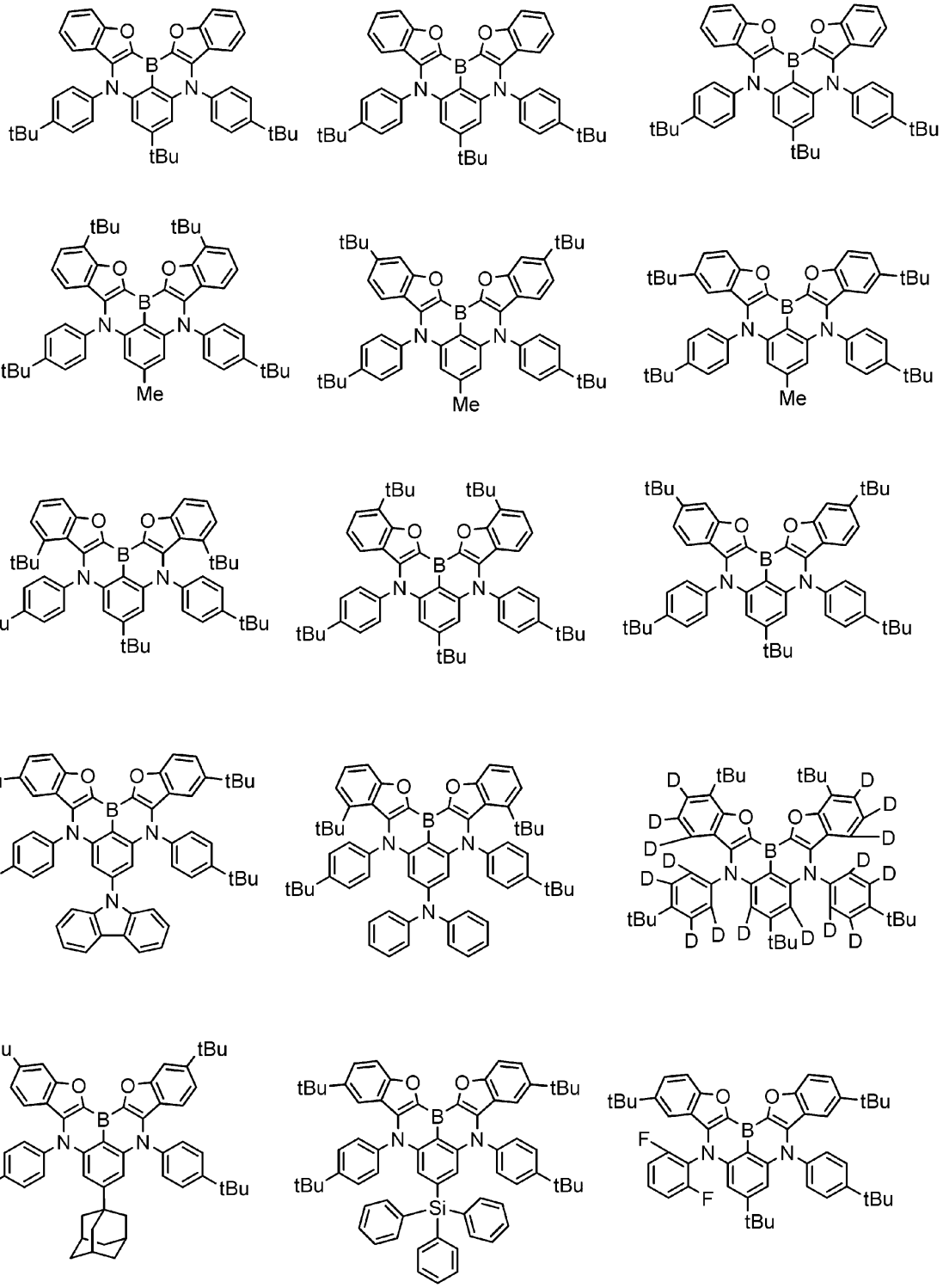
【０２７２】

【化１１３】



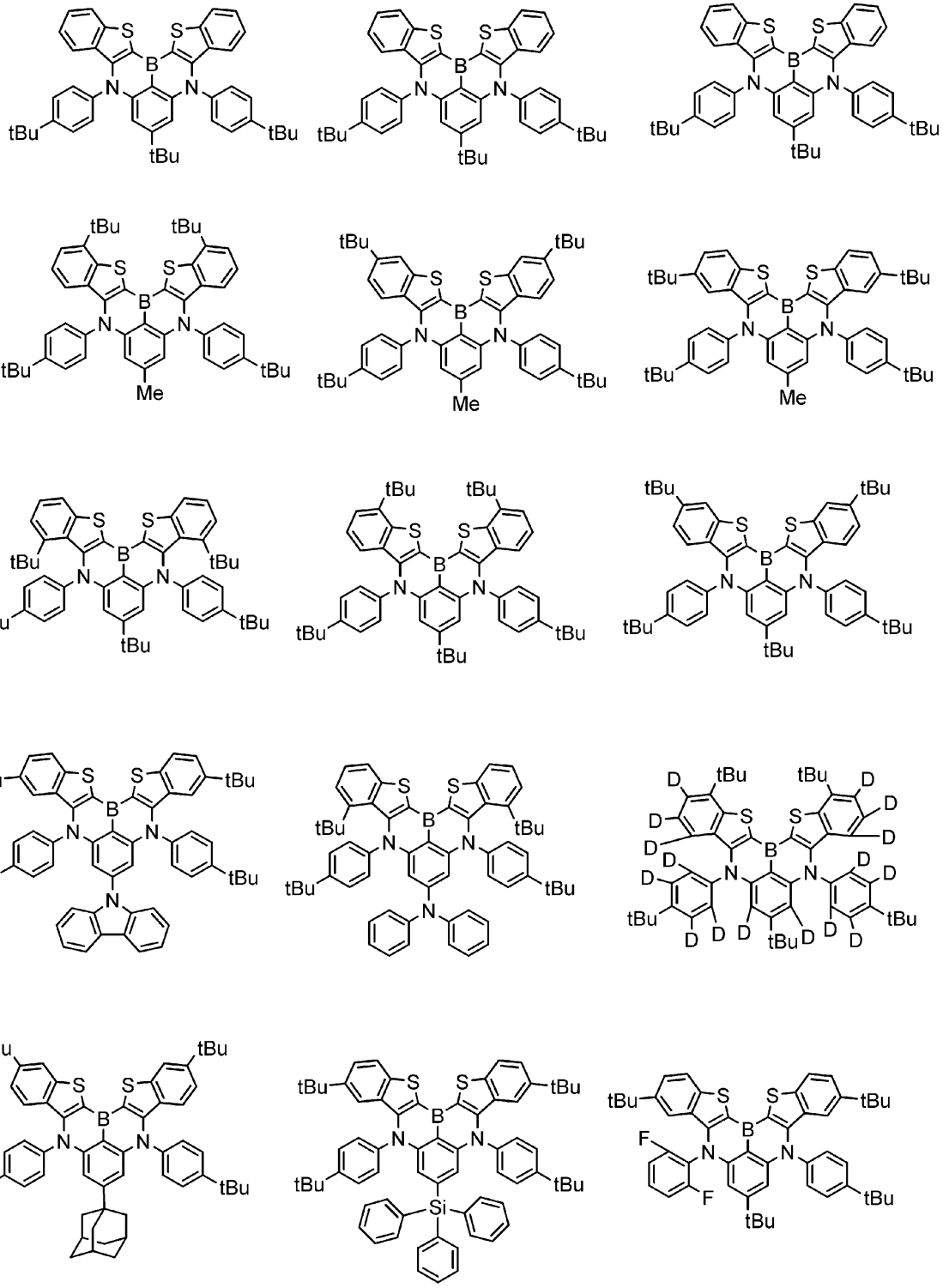
【０２７３】

【化１１４】



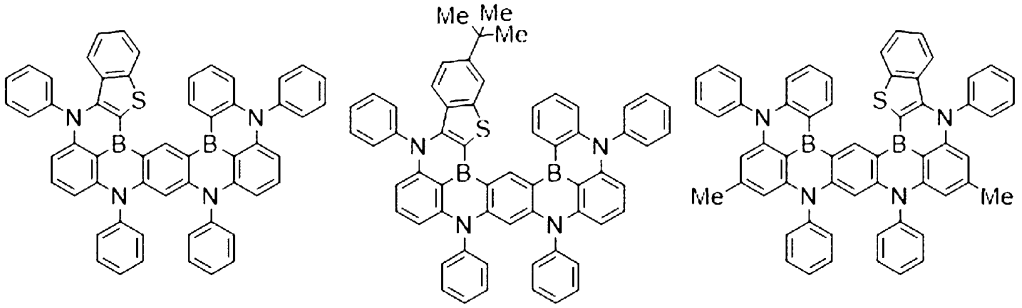
【０２７４】

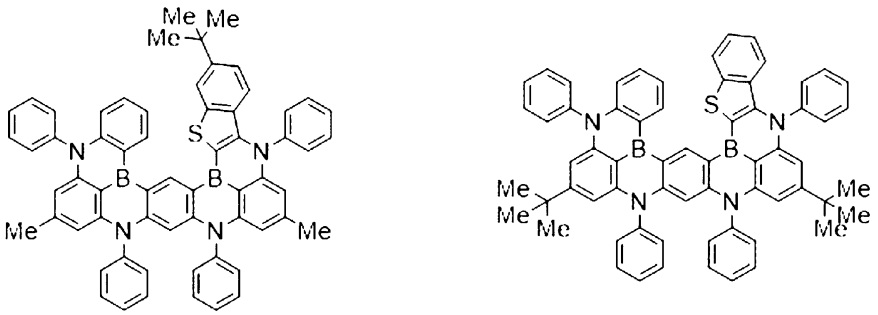
【化１１５】

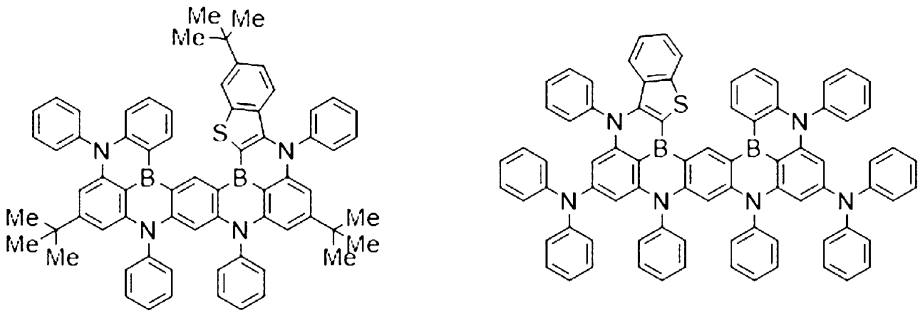


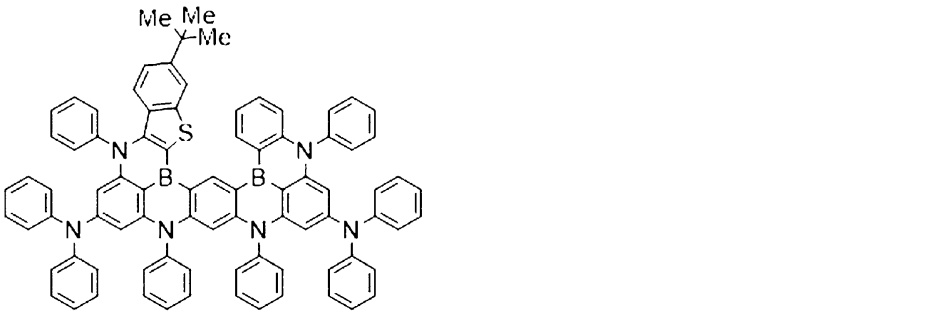
【０２７５】

【化１１６】



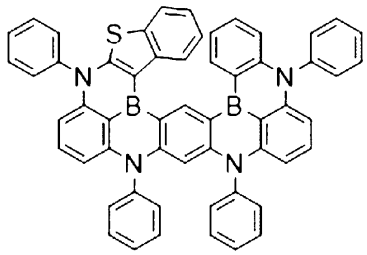
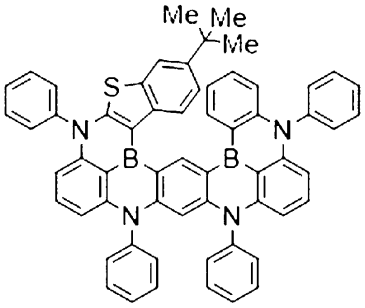
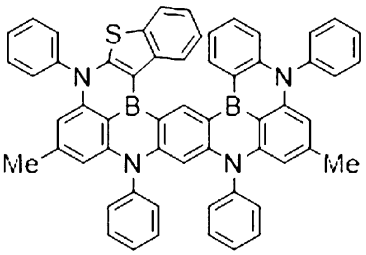
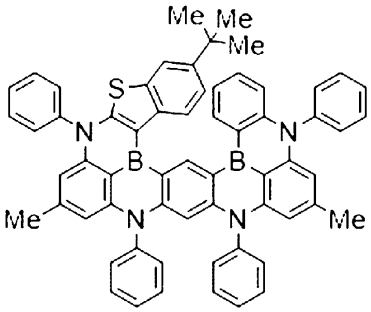
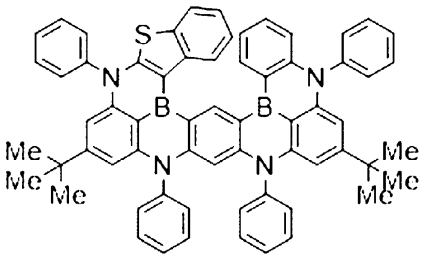
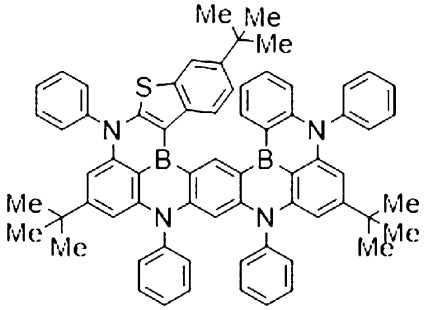
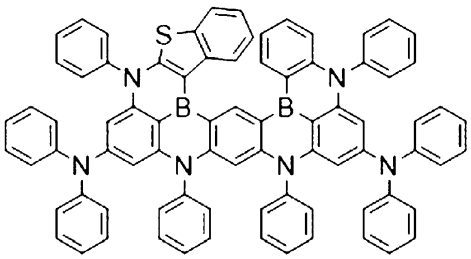
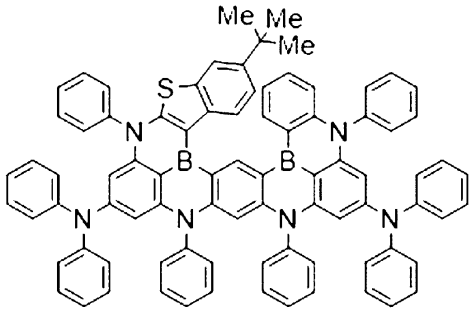






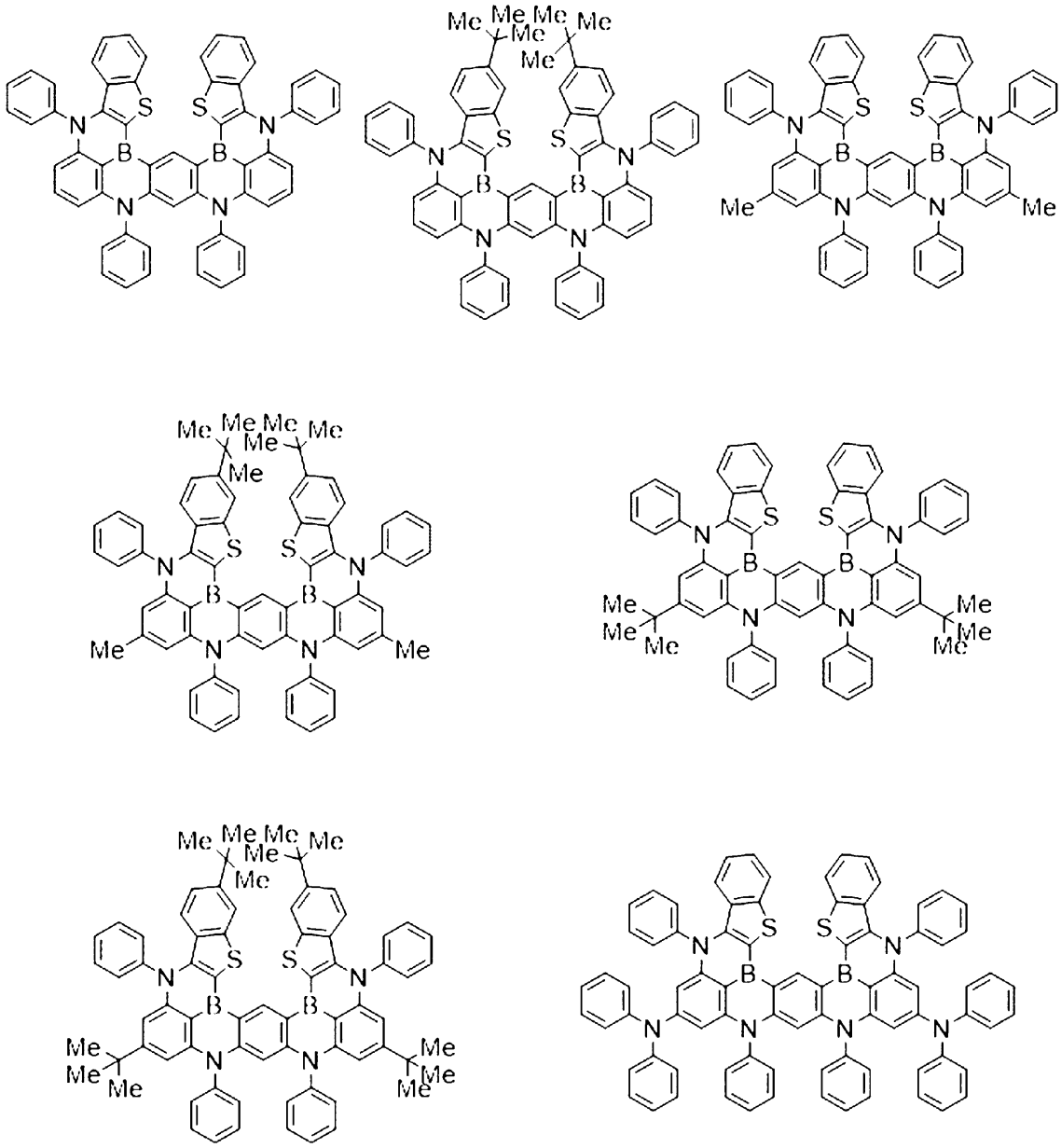
【０２７６】

【化１１７】

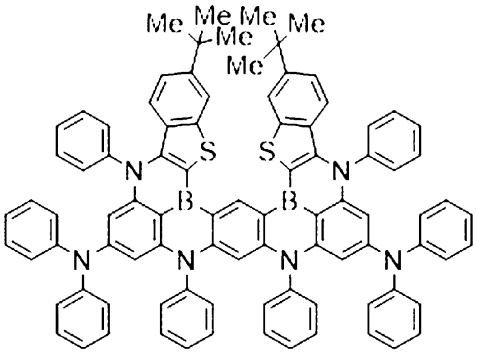
【０２７７】

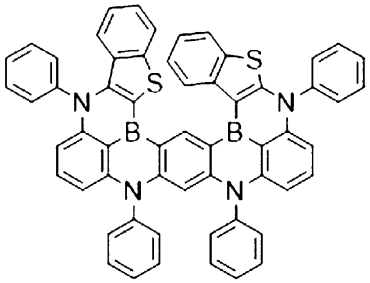
【化１１８】

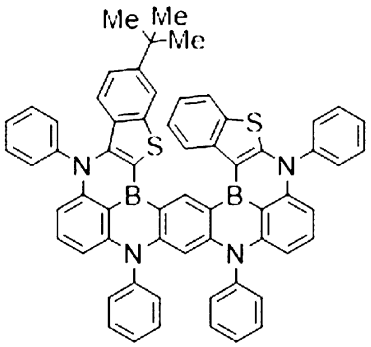


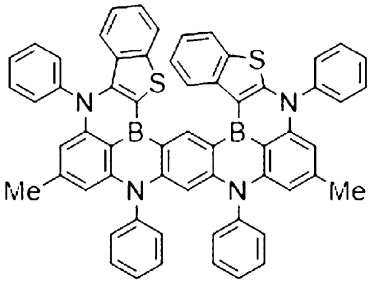
【０２７８】

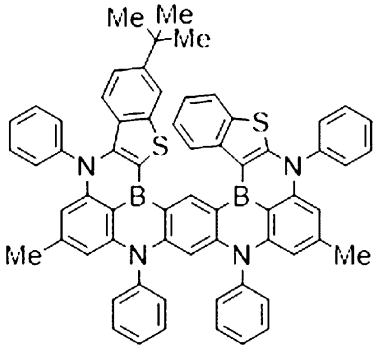
【化１１９】

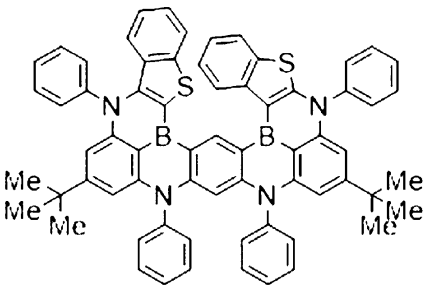






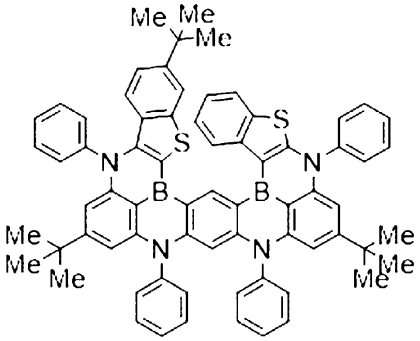


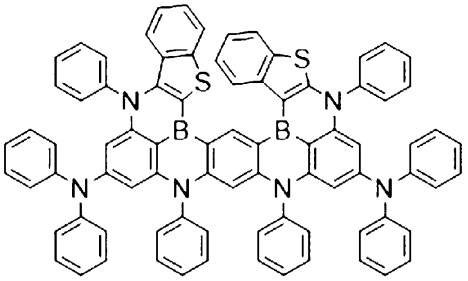


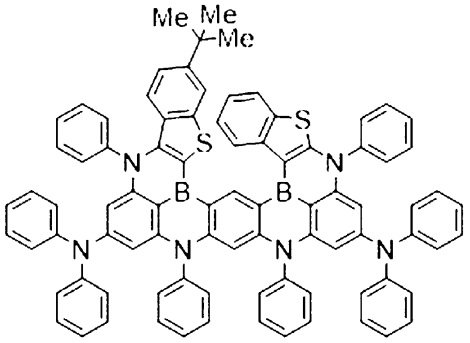


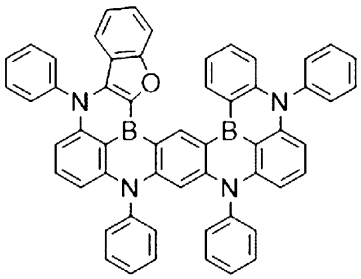
【０２７９】

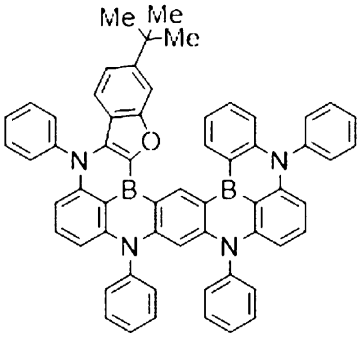
【化１２０】

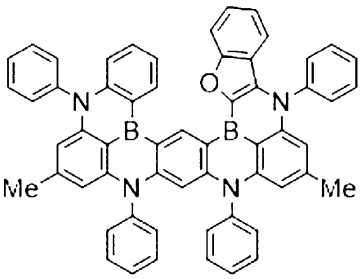






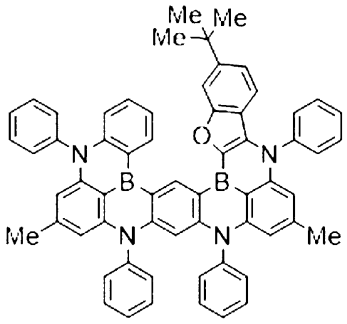


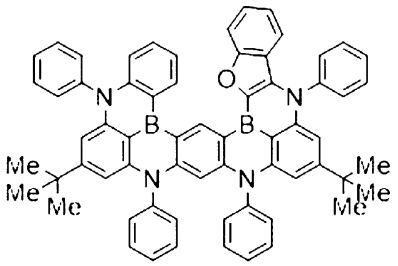


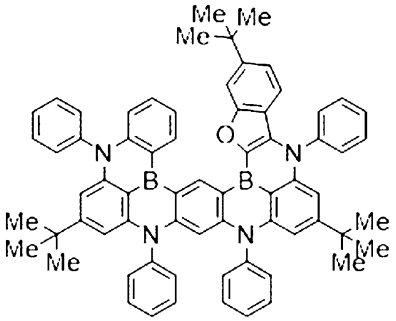


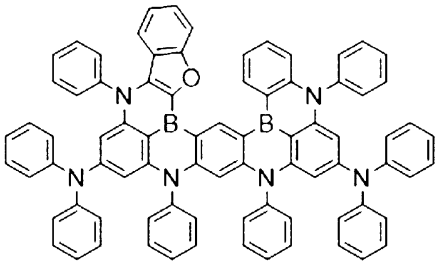
【０２８０】

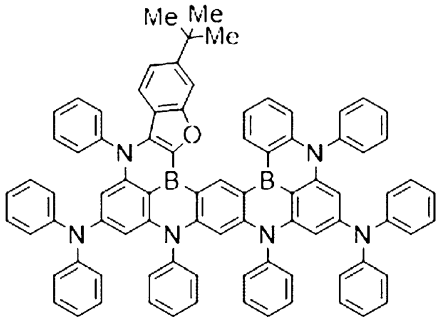
【化１２１】

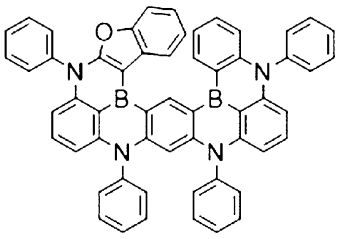


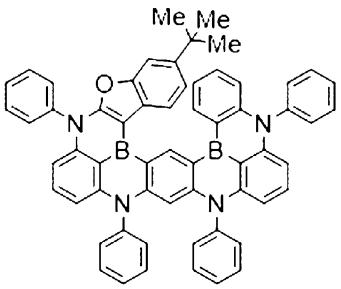


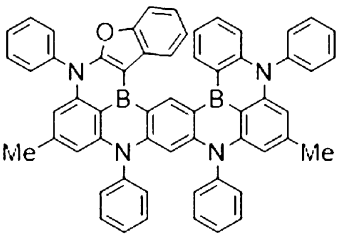






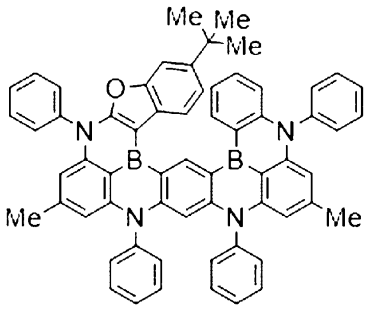


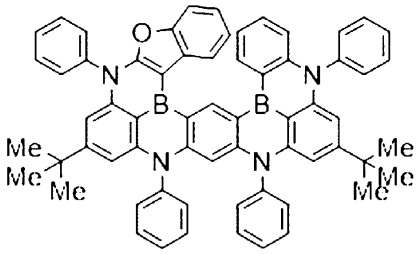


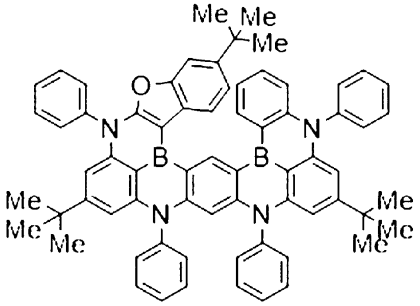


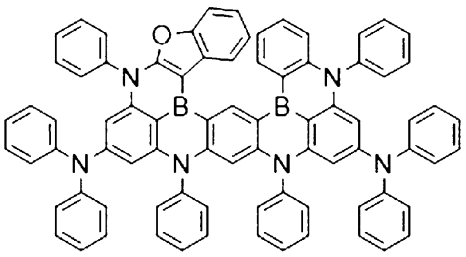
【０２８１】

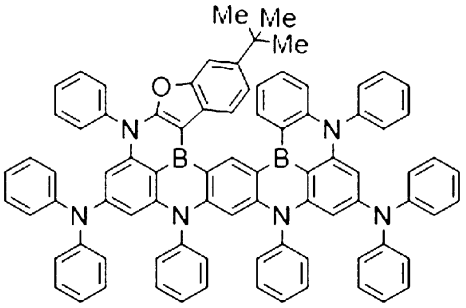
【化１２２】

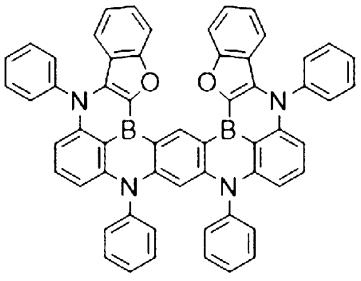


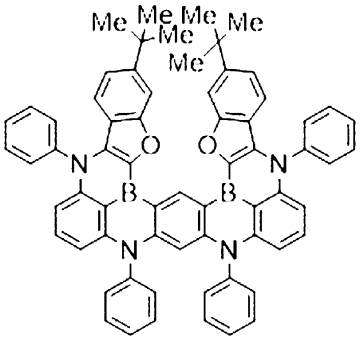


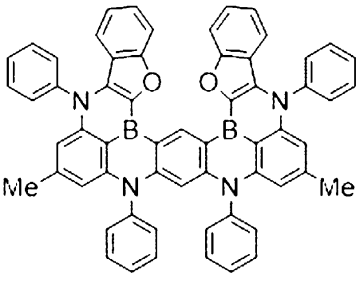






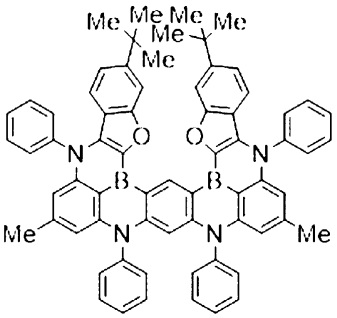


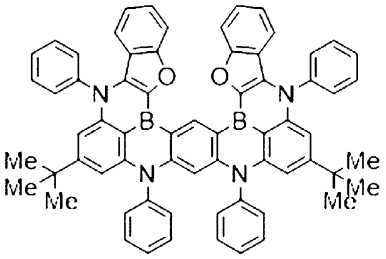


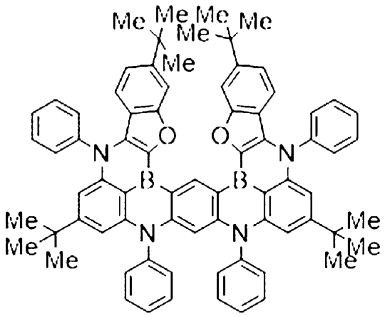


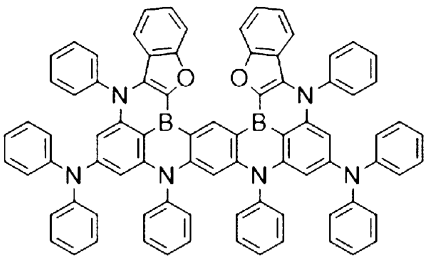
【０２８２】

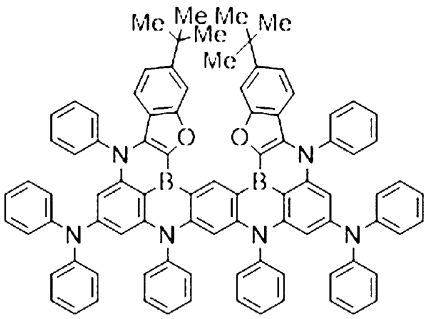
【化１２３】

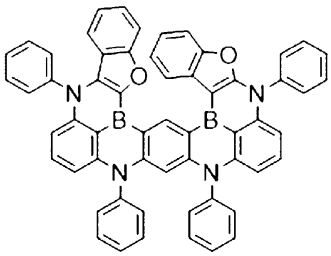


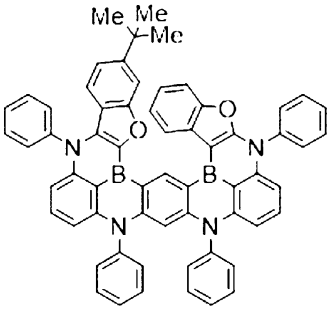


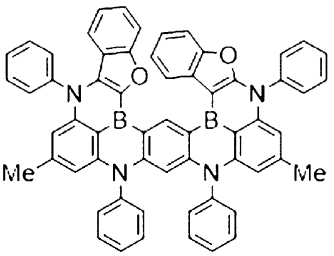






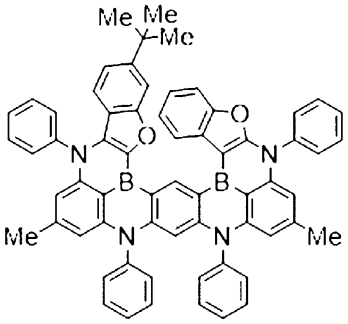


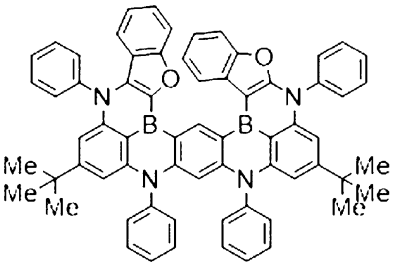


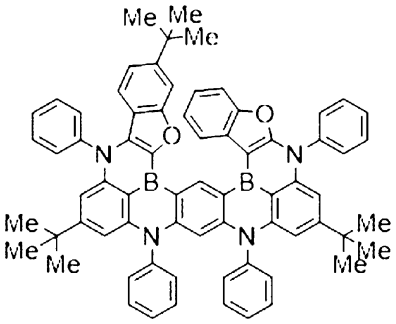


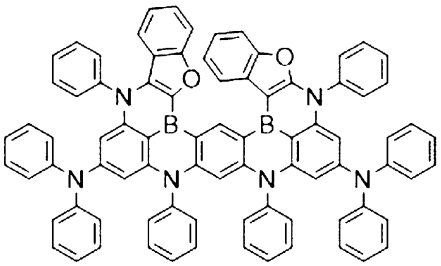
【０２８３】

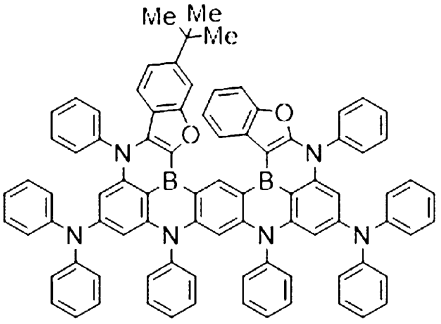
【化１２４】

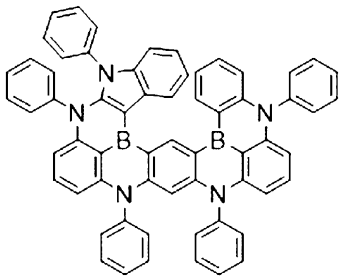


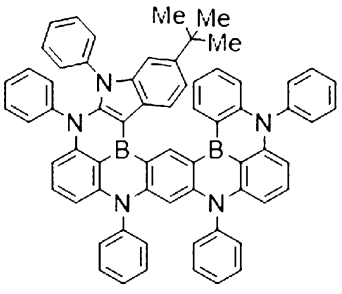


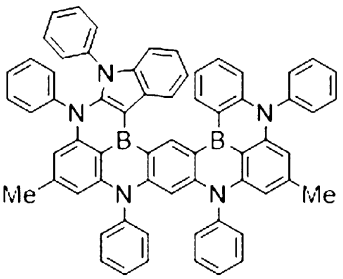






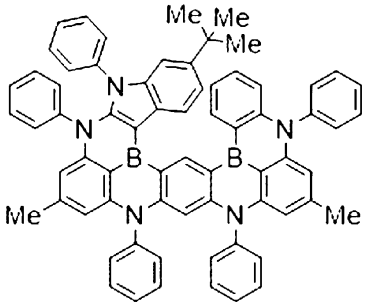


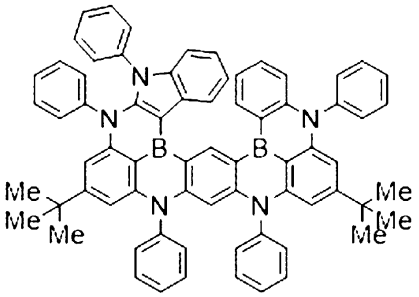


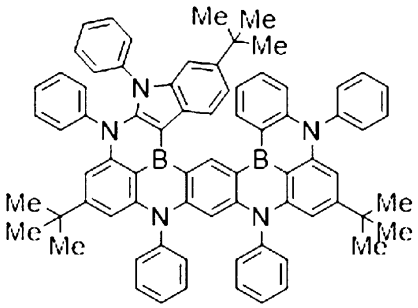


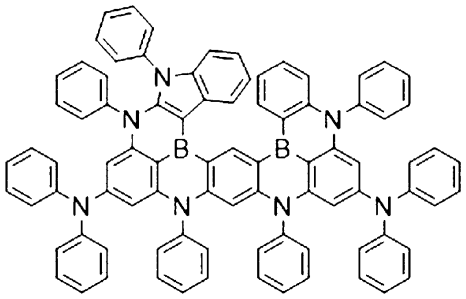
【０２８４】

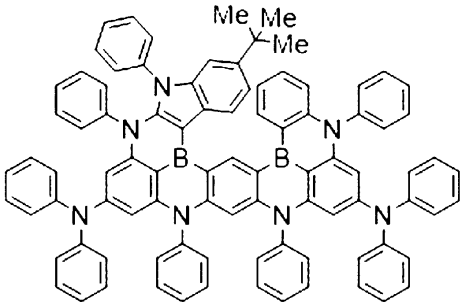
【化１２５】

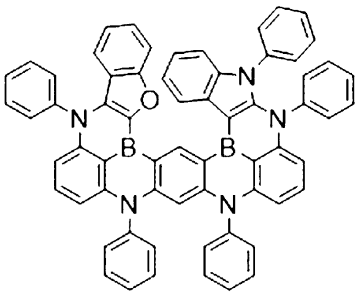


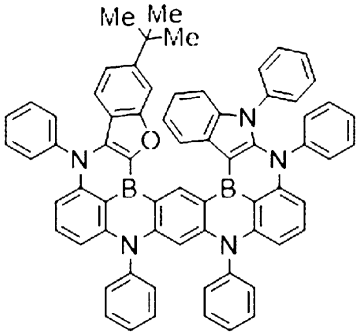


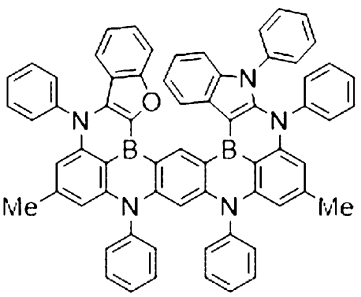






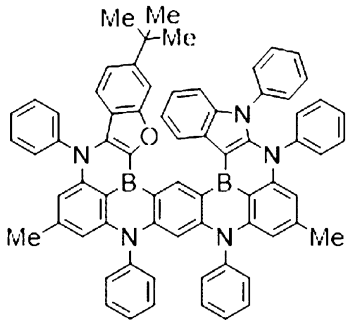


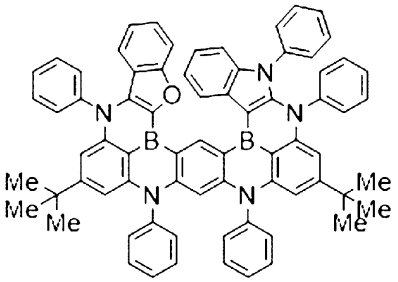


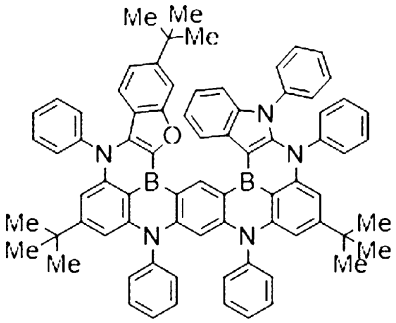


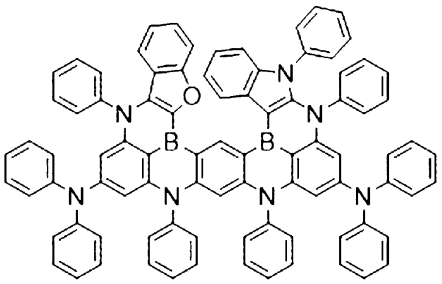
【０２８５】

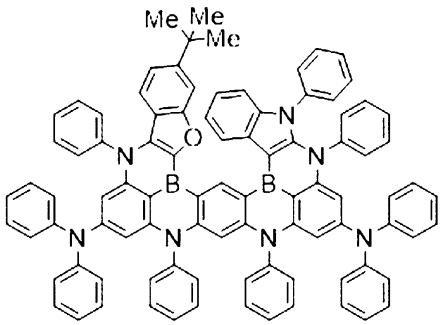
【化１２６】

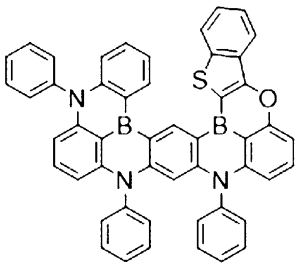


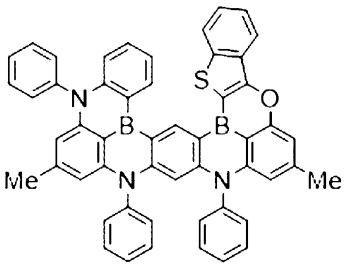






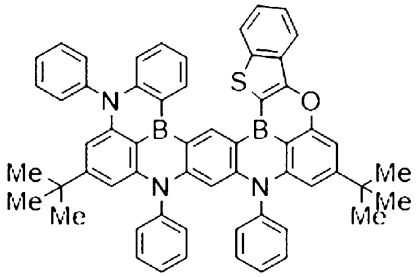
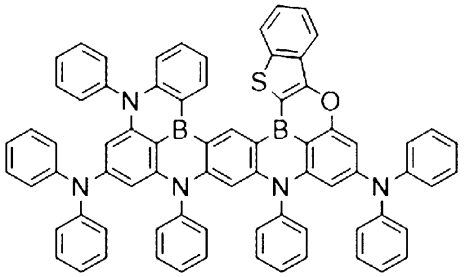
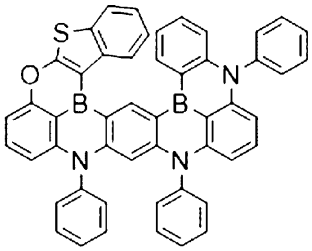
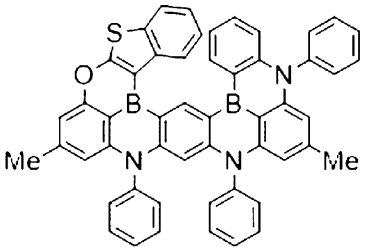
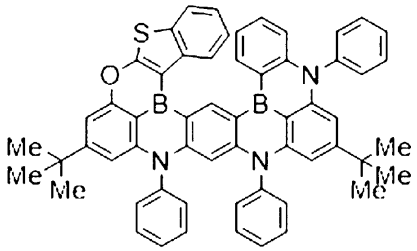
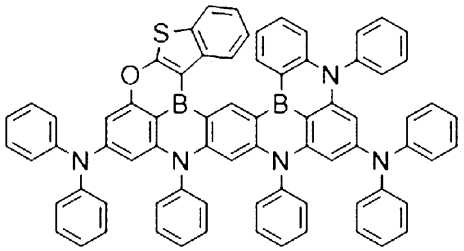
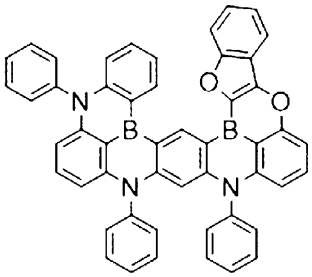
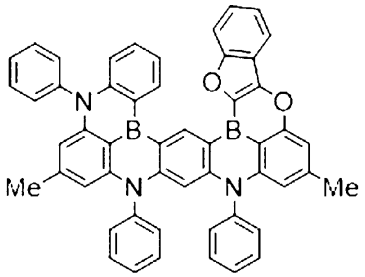






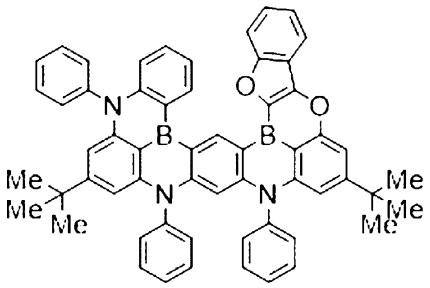
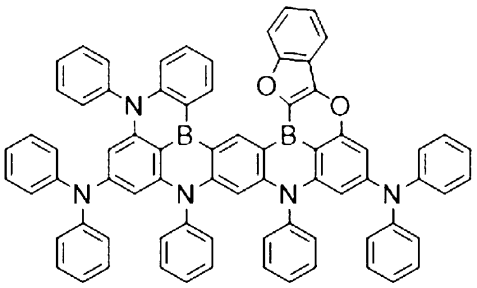
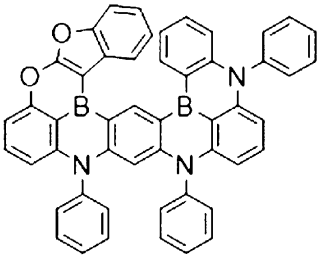
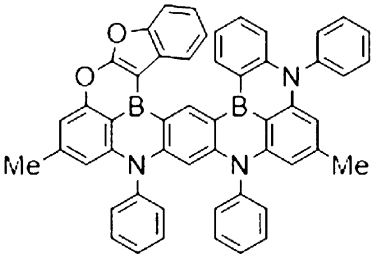
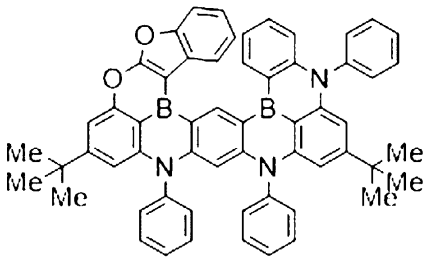
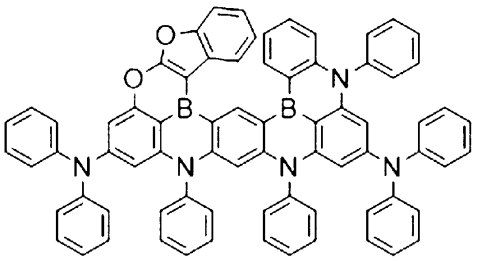
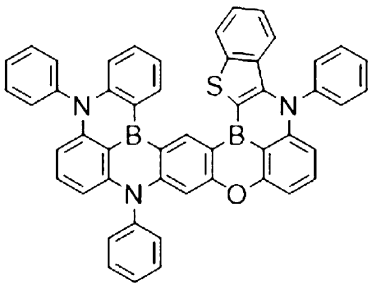
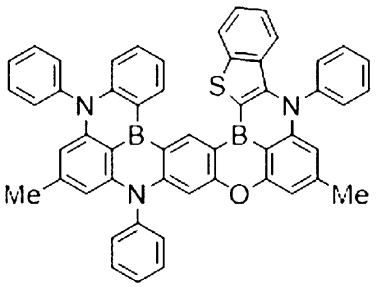
【０２８６】

【化１２７】

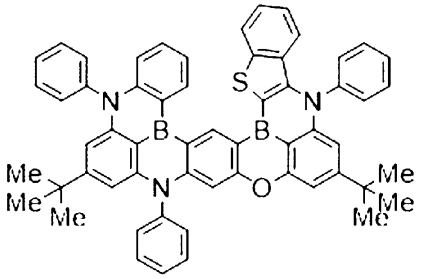
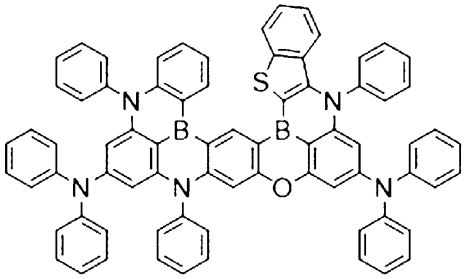
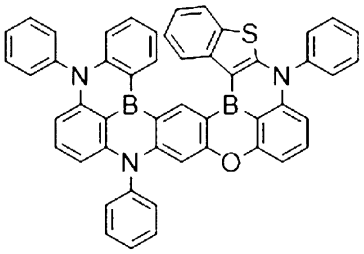
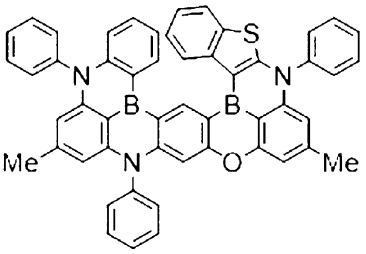
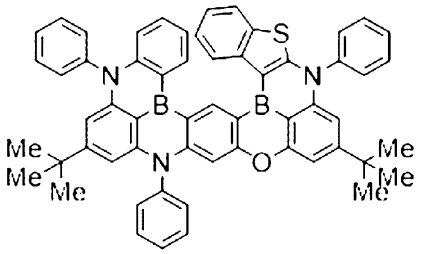
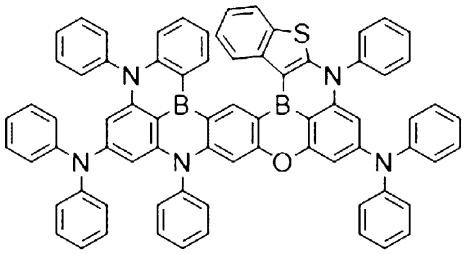
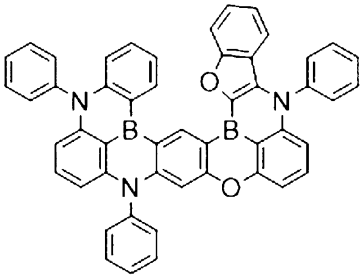
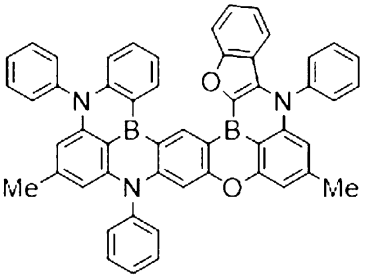
【０２８７】

【化１２８】

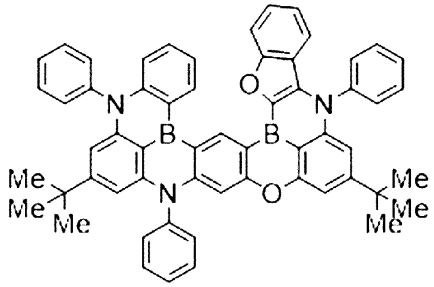
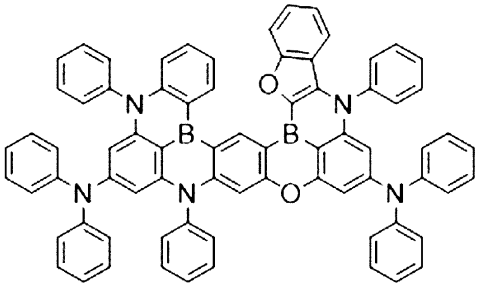
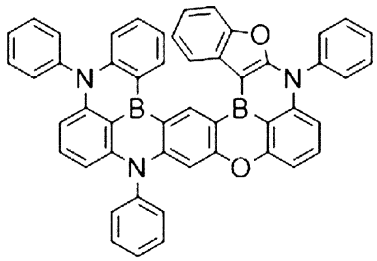
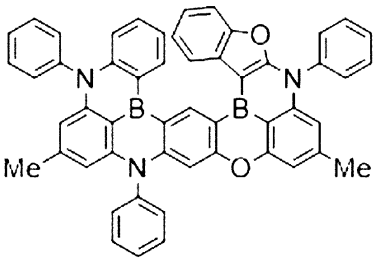
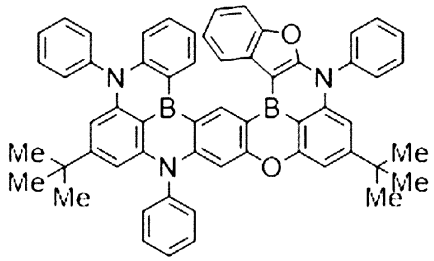
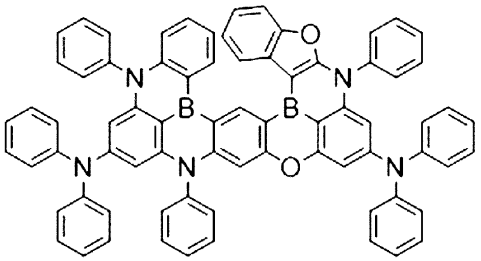
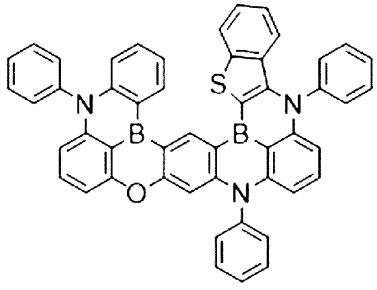
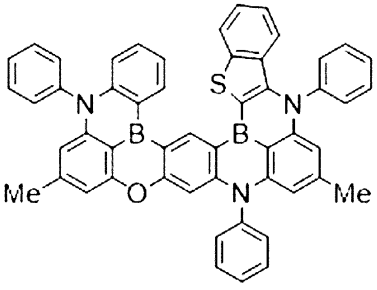
【０２８８】

【化１２９】

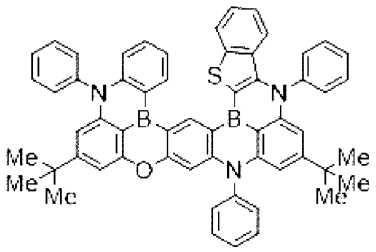
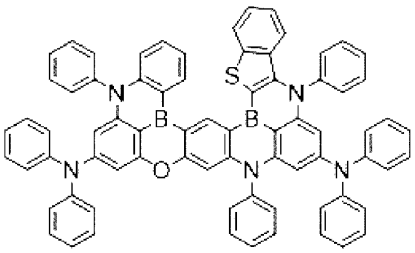
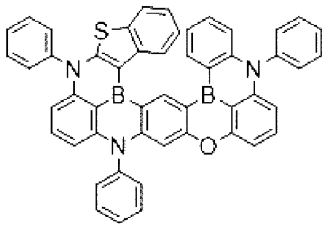
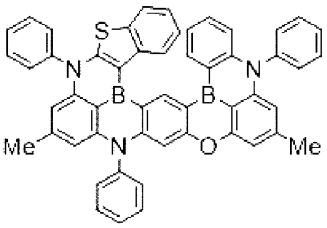
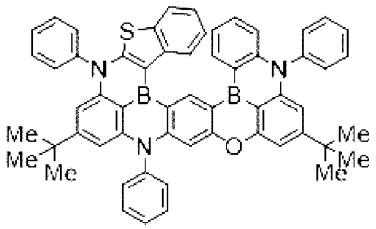
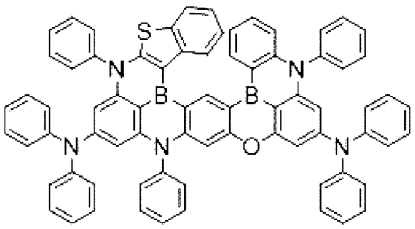
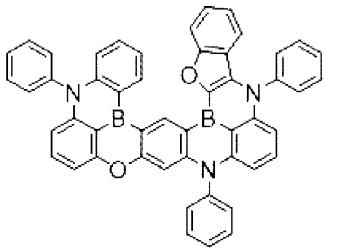
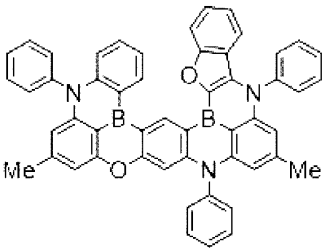
【０２８９】

【化１３０】

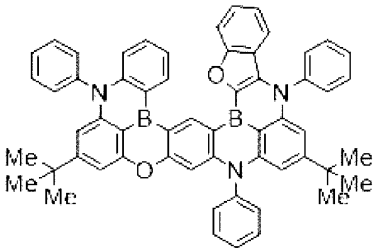
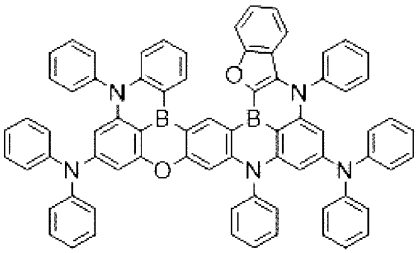
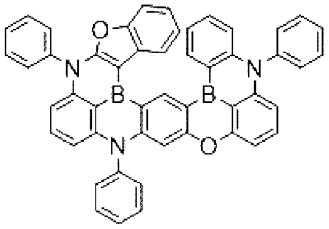
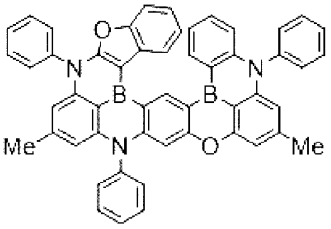
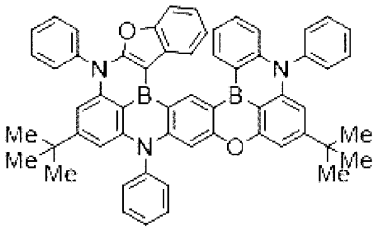
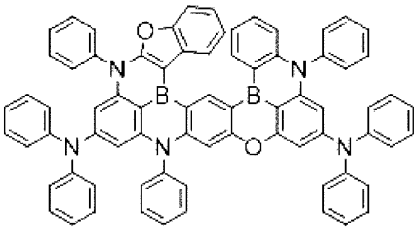
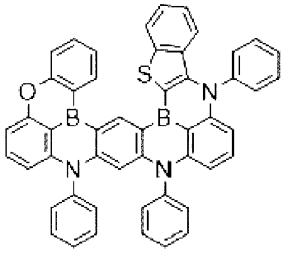
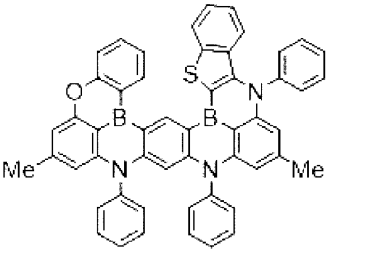
【０２９０】

【化１３１】

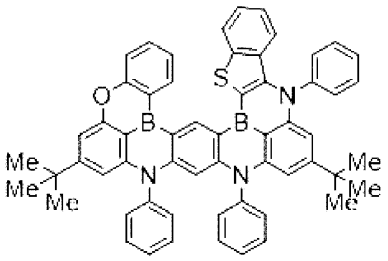
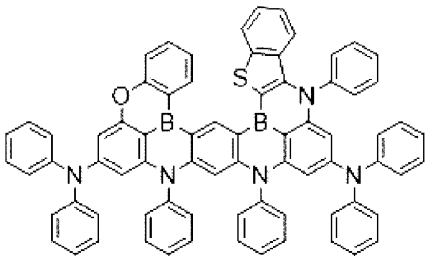
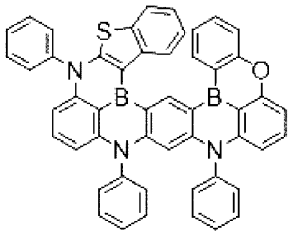
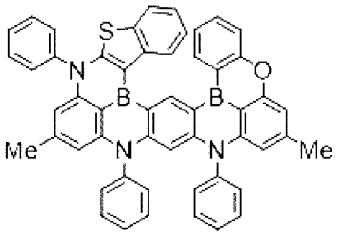
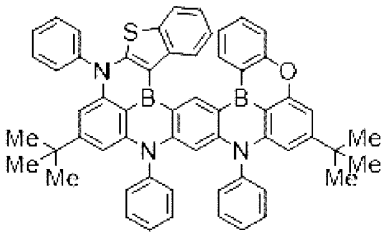
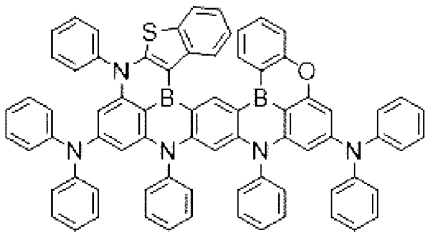
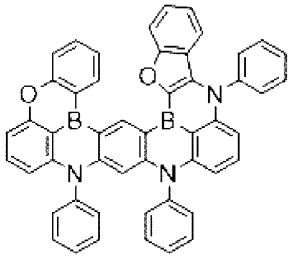
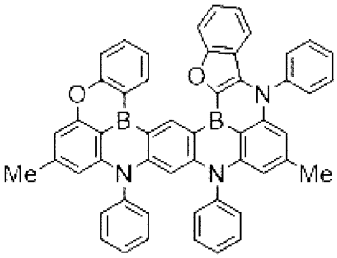
【０２９１】

【化１３２】

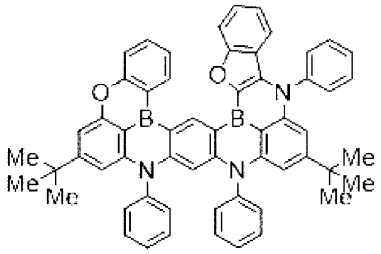
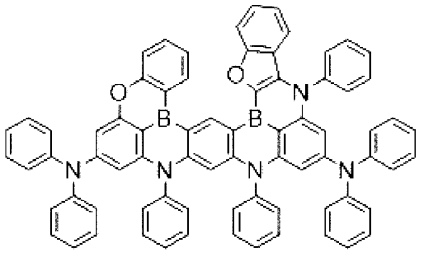
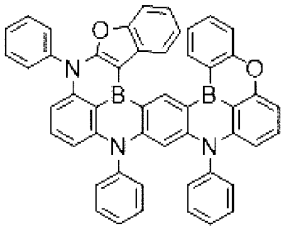
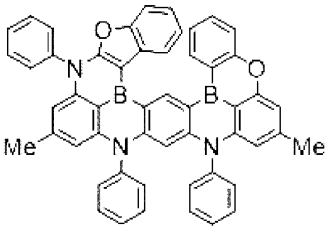
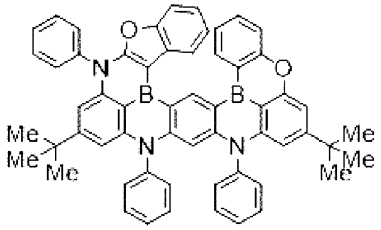
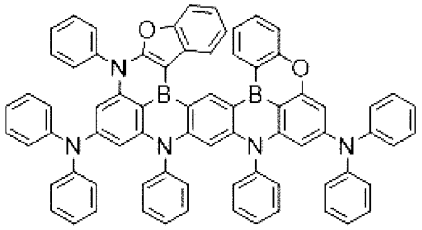
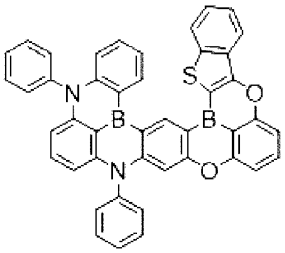
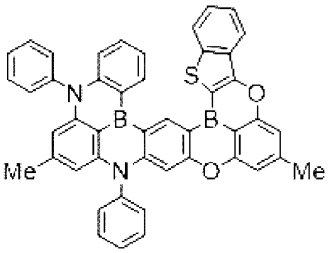
【０２９２】

【化１３３】

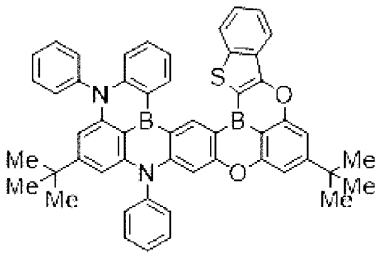
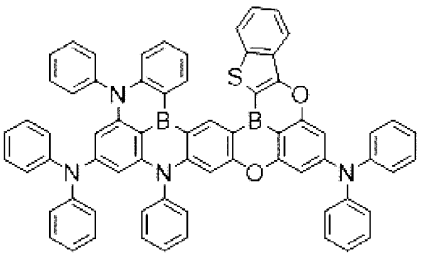
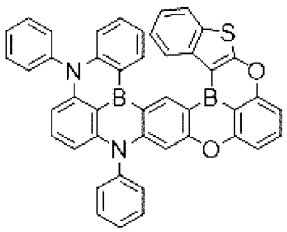
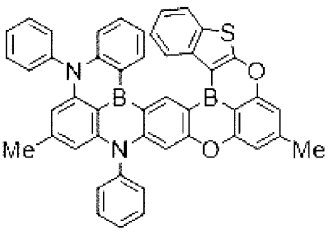
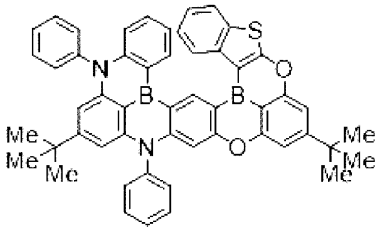
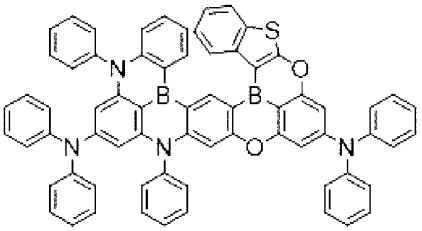
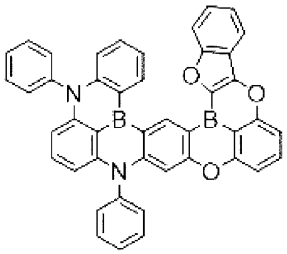
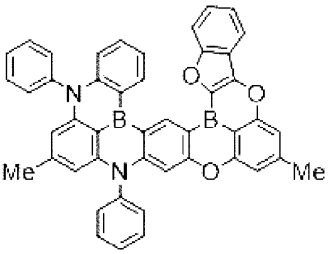
【０２９３】

【化１３４】

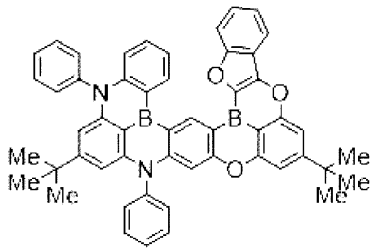
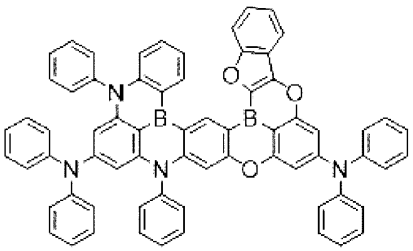
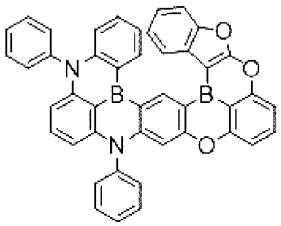
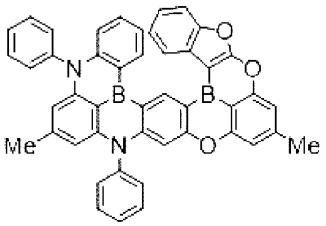
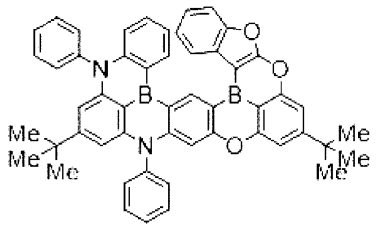
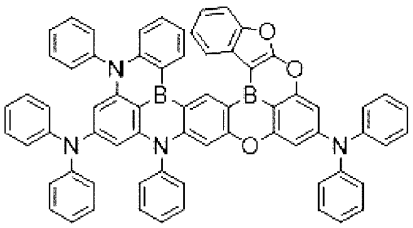
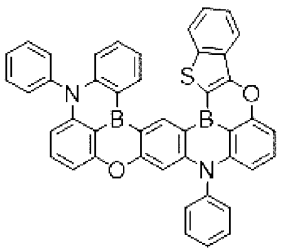
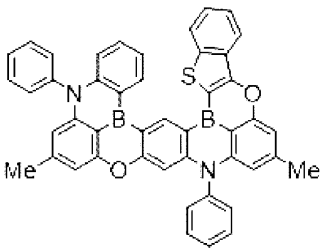
【０２９４】

【化１３５】

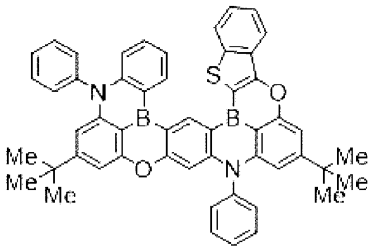
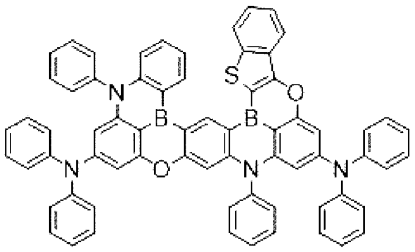
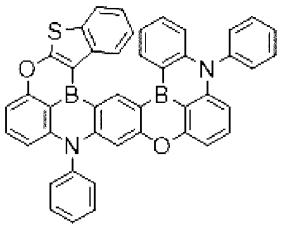
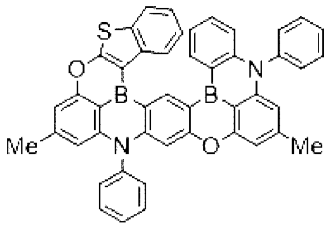
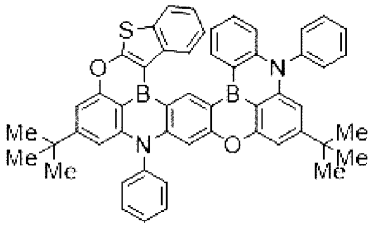
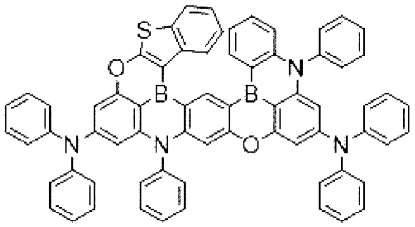
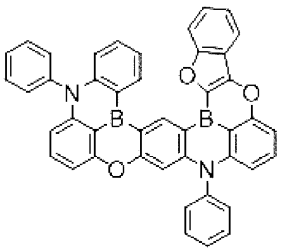
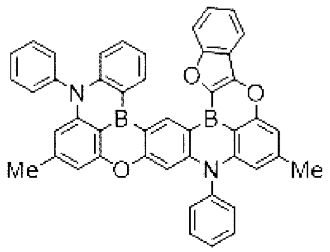
【０２９５】

【化１３６】

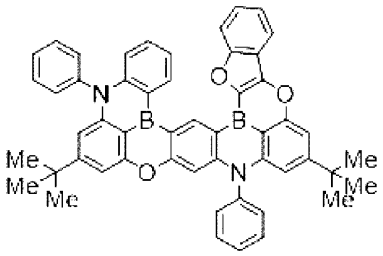
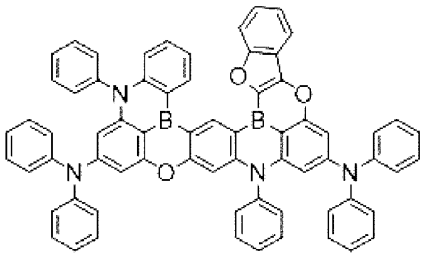
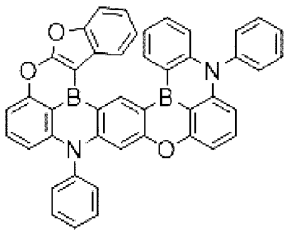
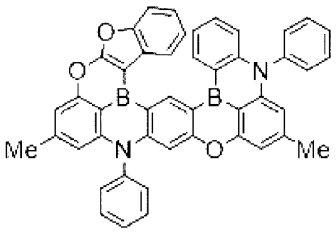
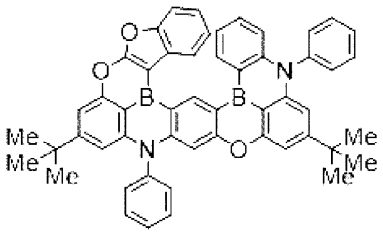
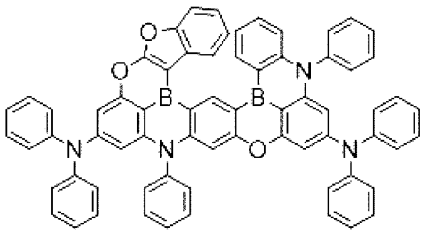
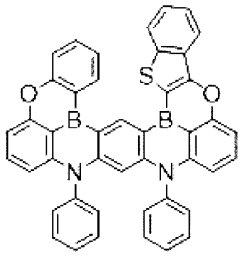
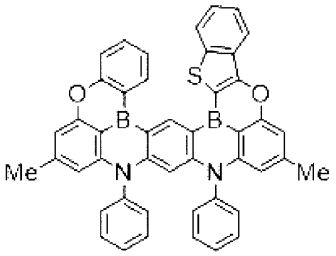
【０２９６】

【化１３７】

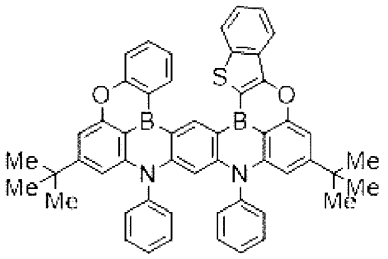
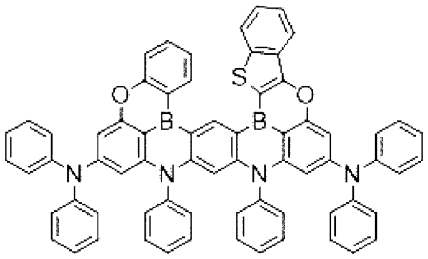
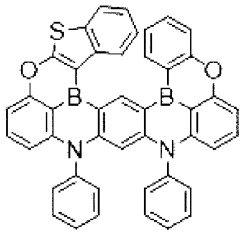
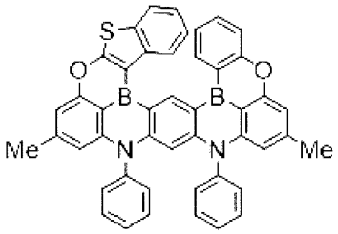
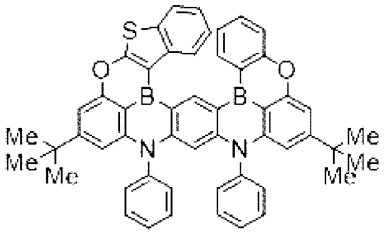
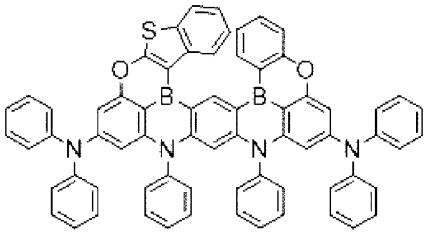
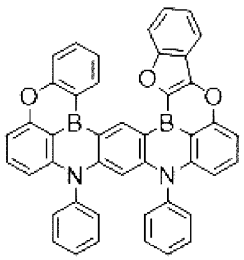
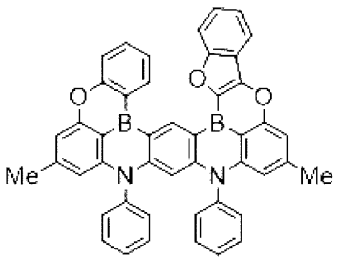
【０２９７】

【化１３８】

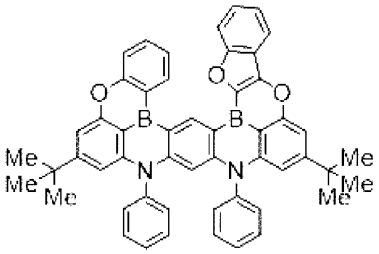
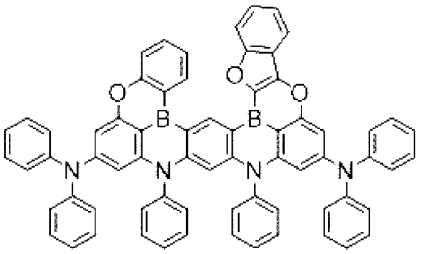
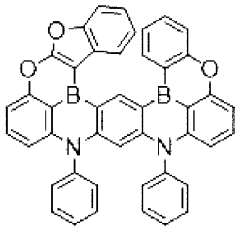
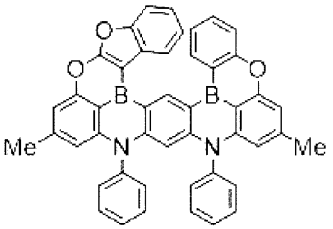
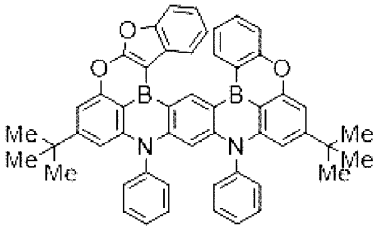
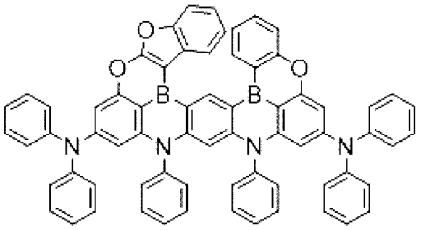
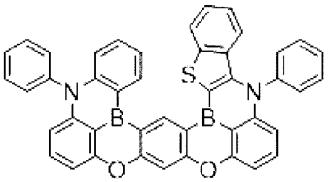
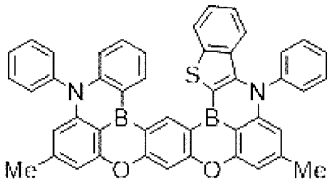
【０２９８】

【化１３９】

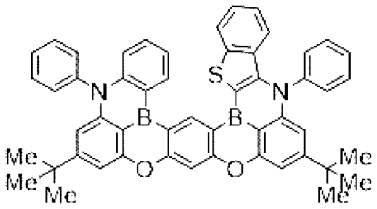
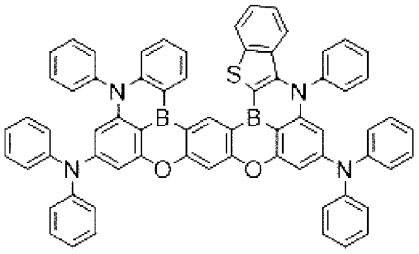
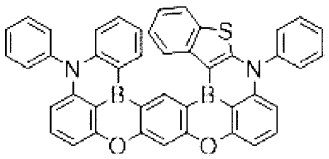
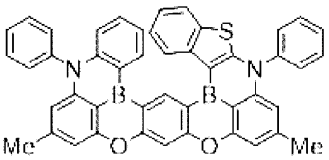
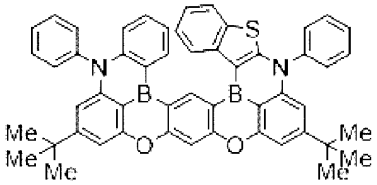
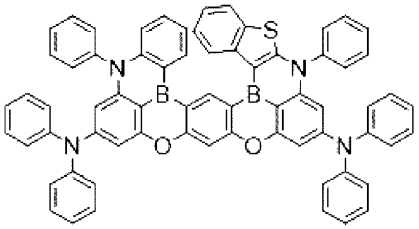
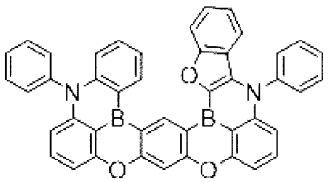
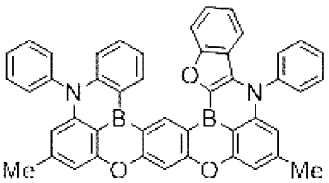
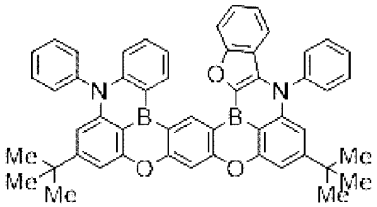
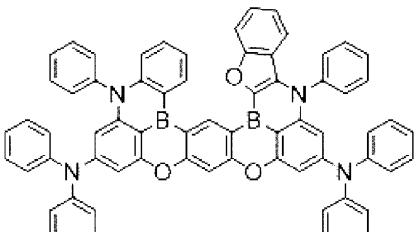
【０２９９】

【化１４０】

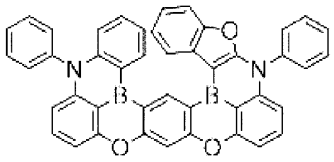
【０３００】

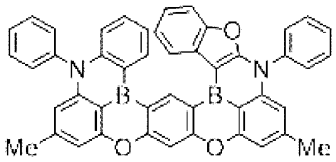
【化１４１】

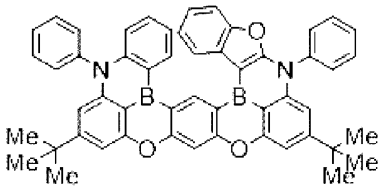











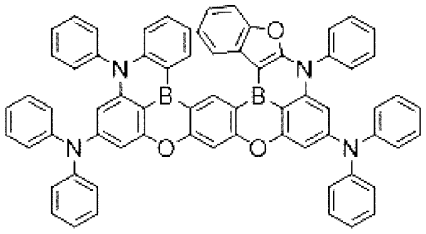

【０３０１】

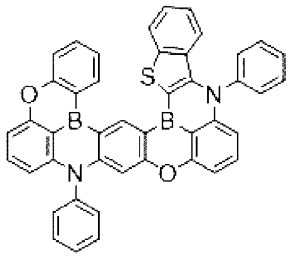
【化１４２】

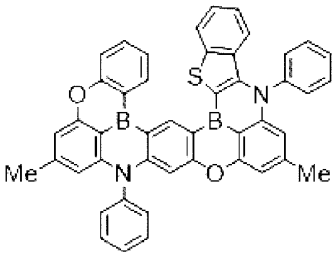


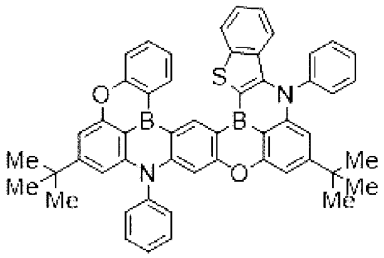


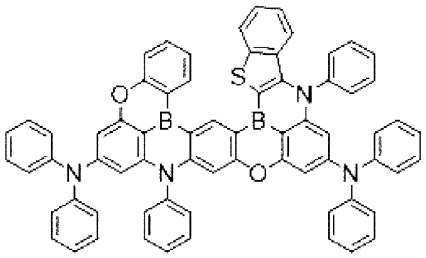






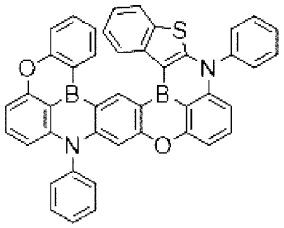
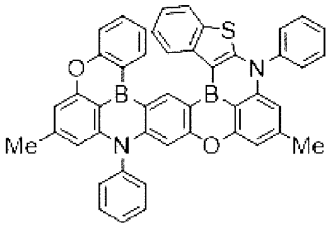
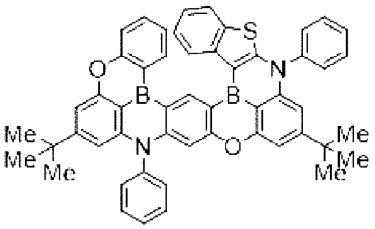
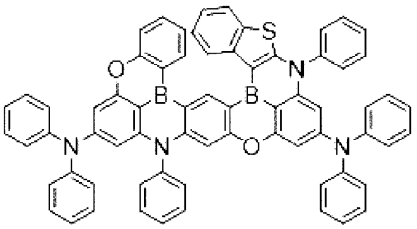
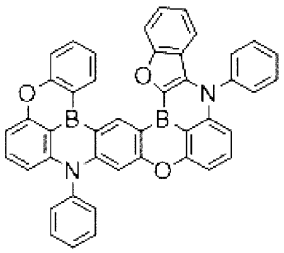
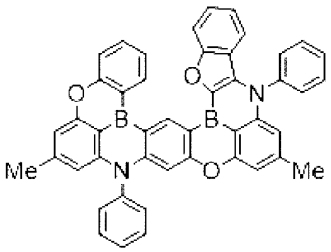
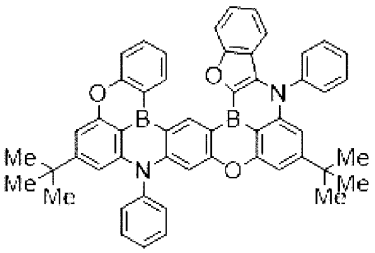
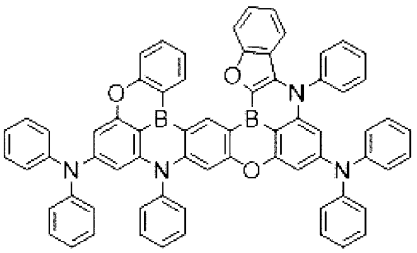






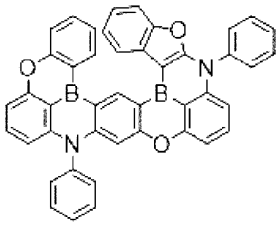
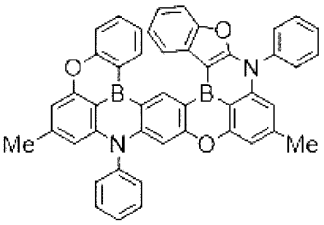
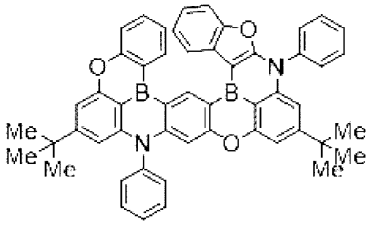
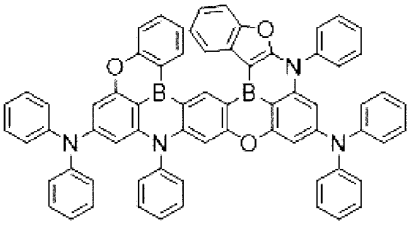
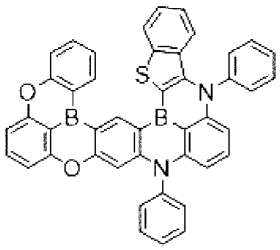
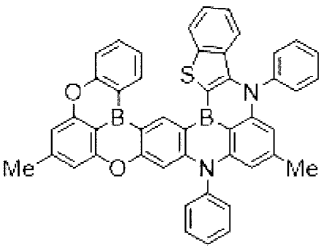
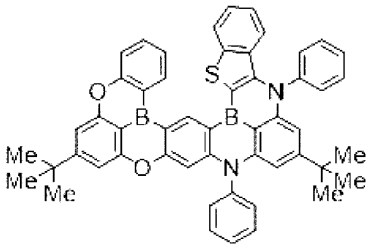
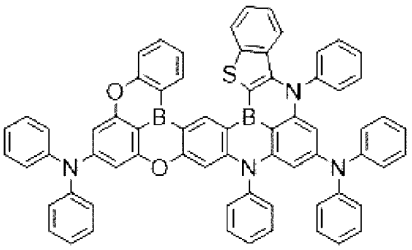
【０３０２】

【化１４３】

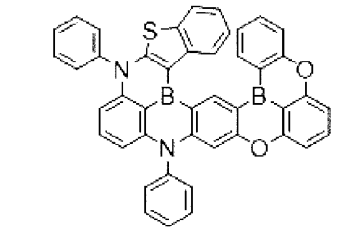
【０３０３】

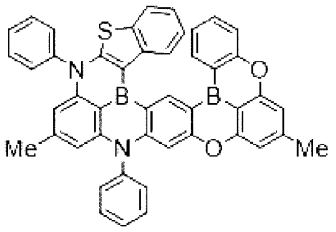
【化１４４】

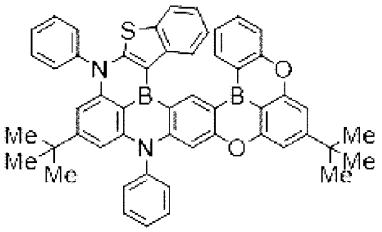









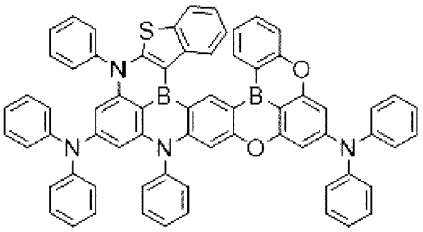
【０３０４】

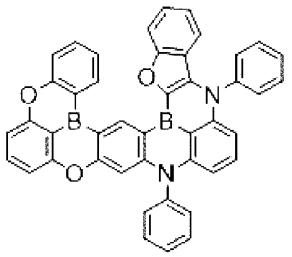
【化１４５】

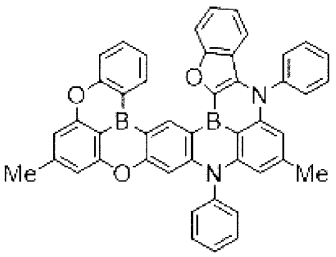


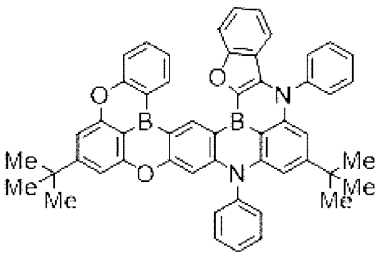


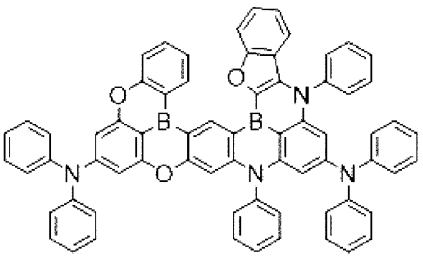






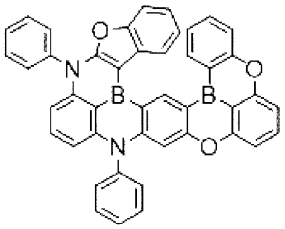
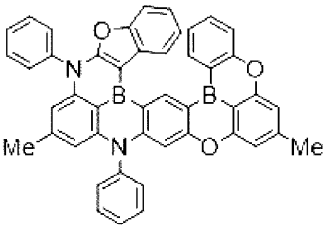
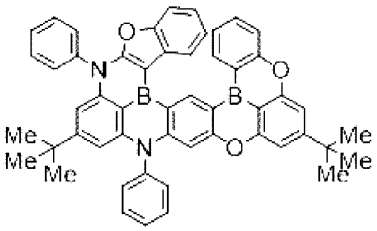
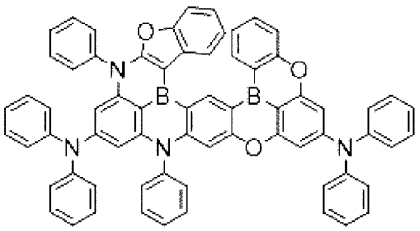
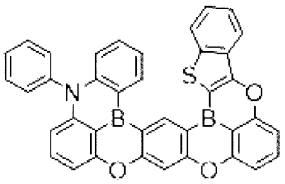
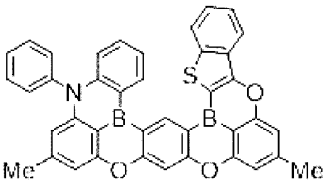
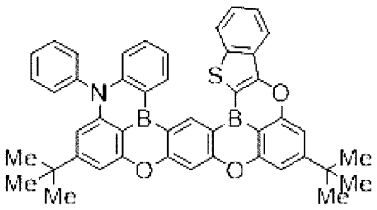
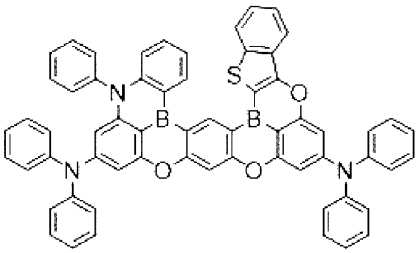
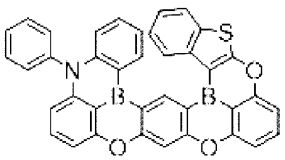
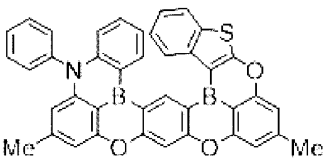






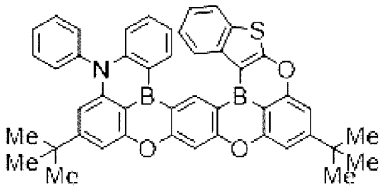
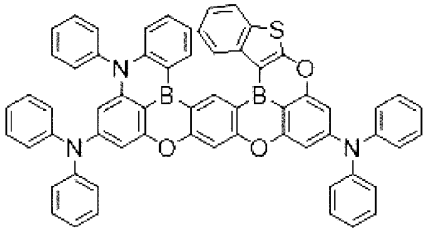
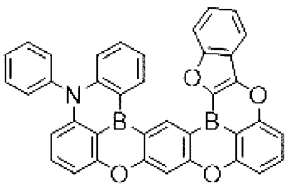
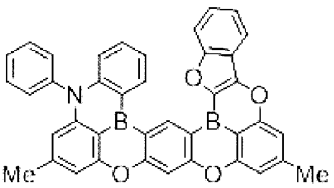
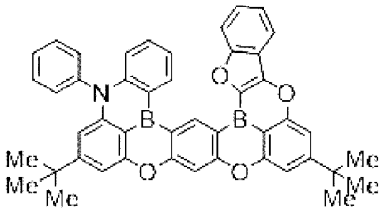
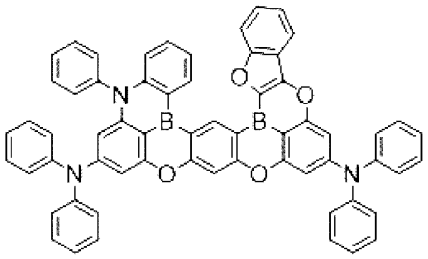
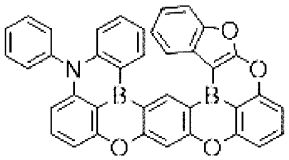
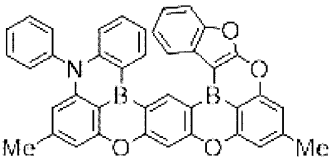
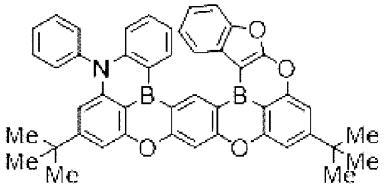
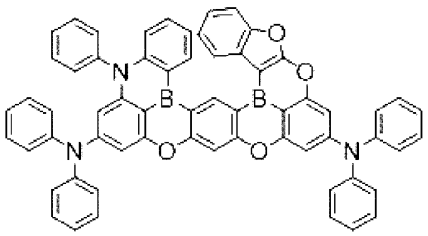
【０３０５】

【化１４６】

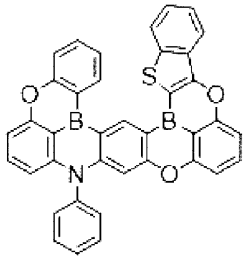
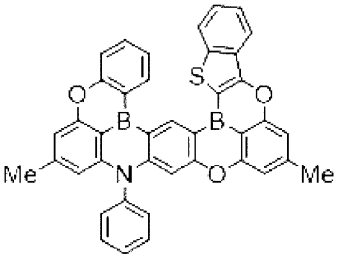
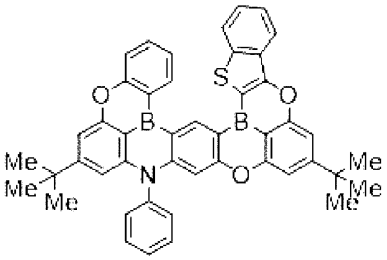
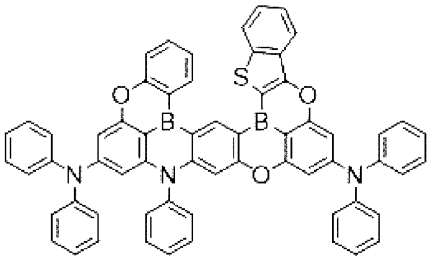
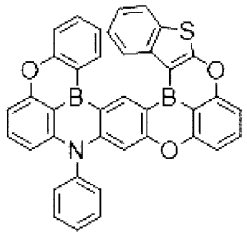
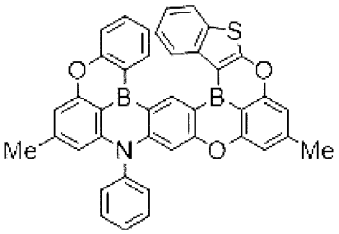
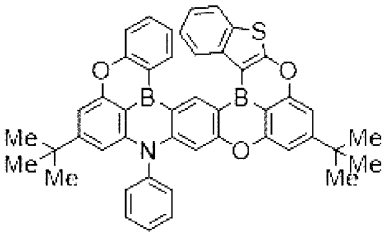
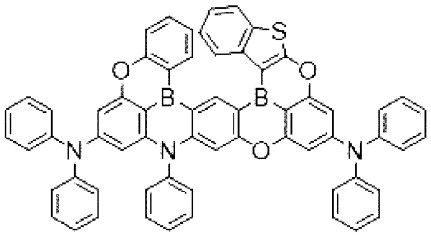
【０３０６】

【化１４７】

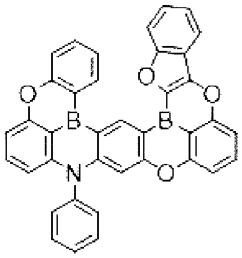
【０３０７】

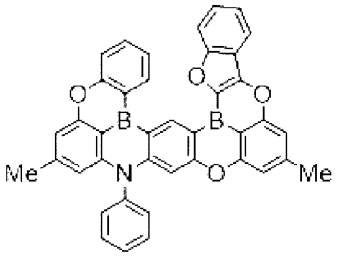
【化１４８】

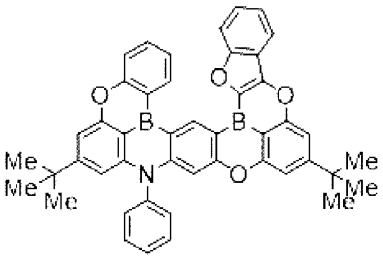









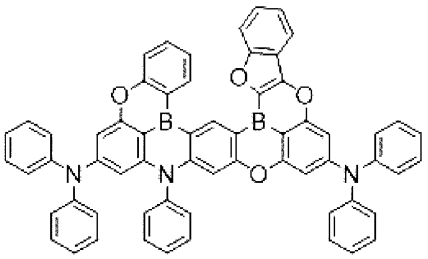
【０３０８】

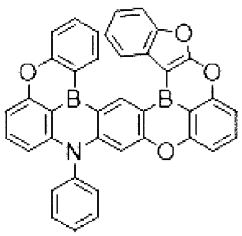
【化１４９】

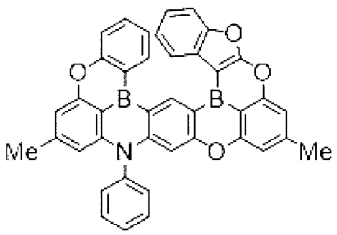


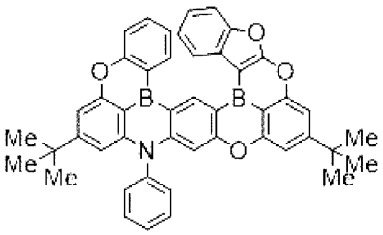


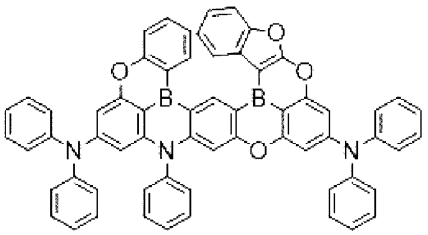






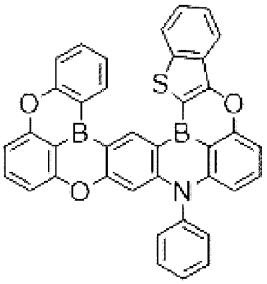


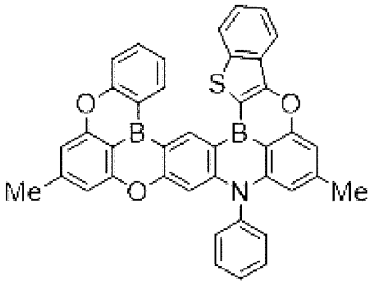


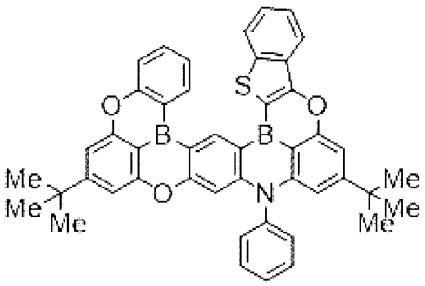


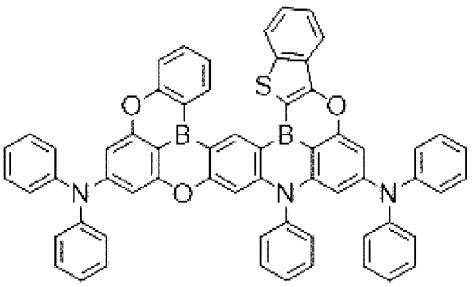
【０３０９】

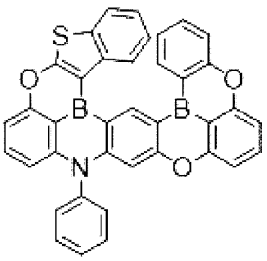
【化１５０】

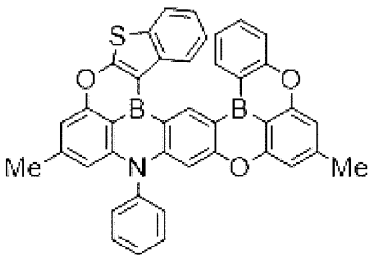


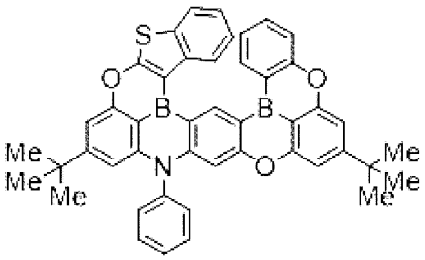


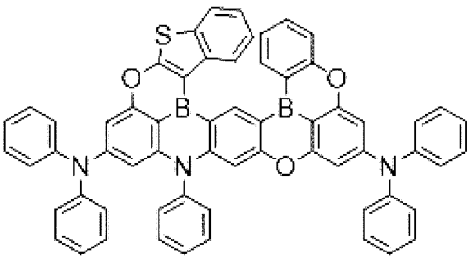






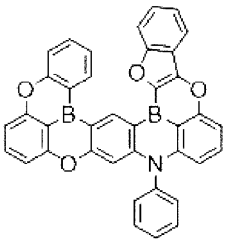
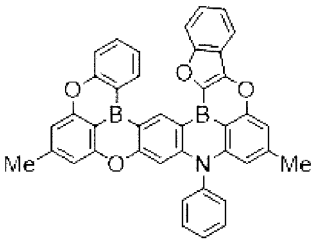
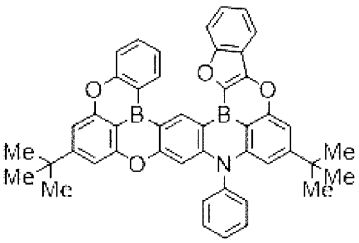
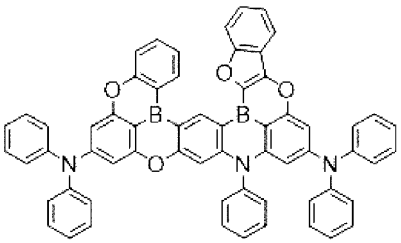
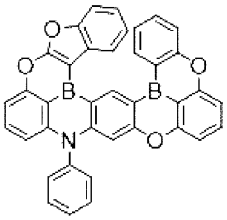
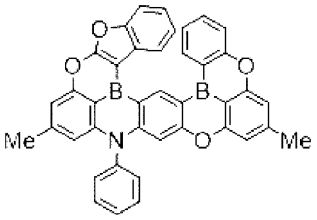
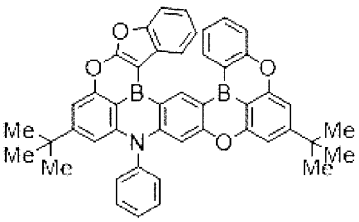
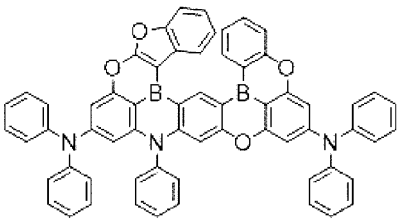






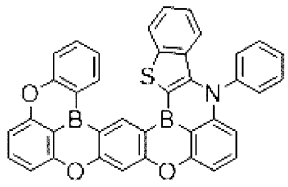
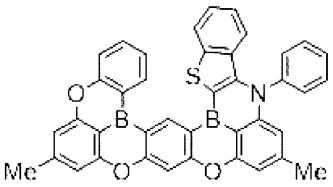
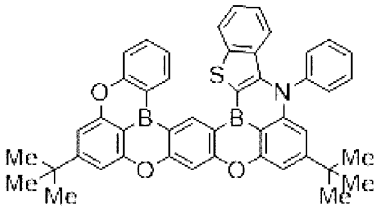
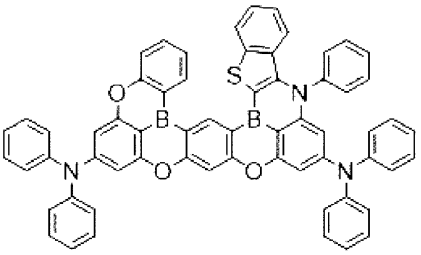
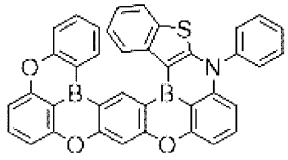
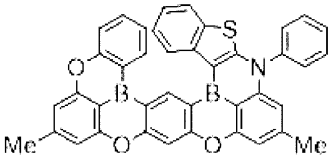
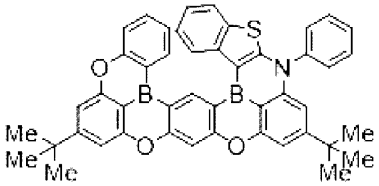
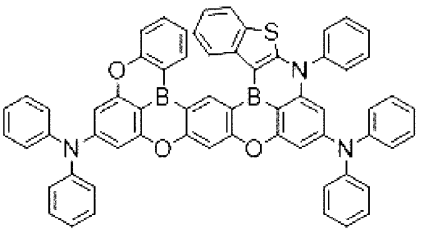
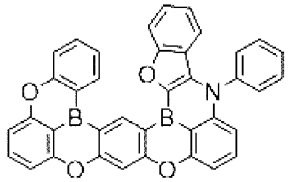
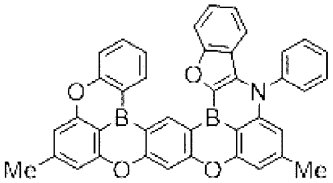
【０３１０】

【化１５１】

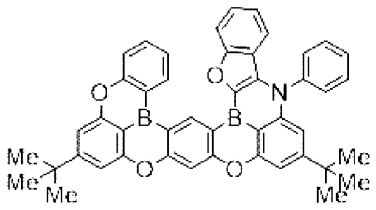
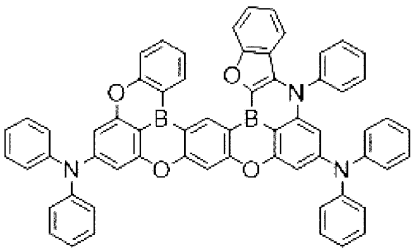
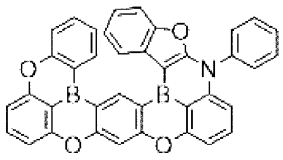
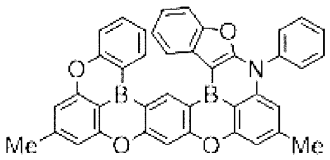
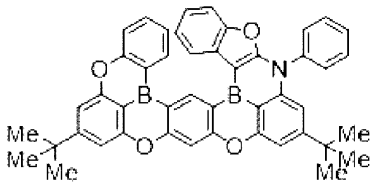
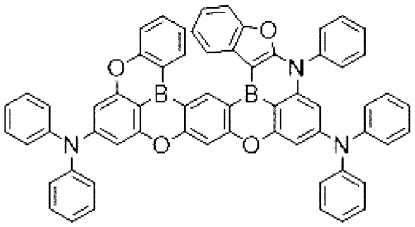
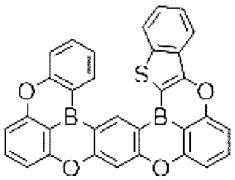
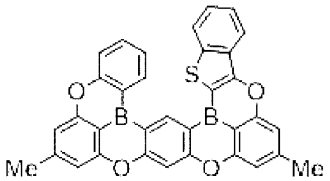
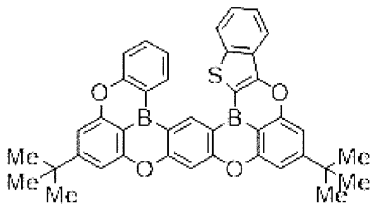
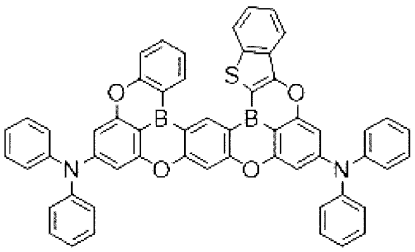
【０３１１】

【化１５２】

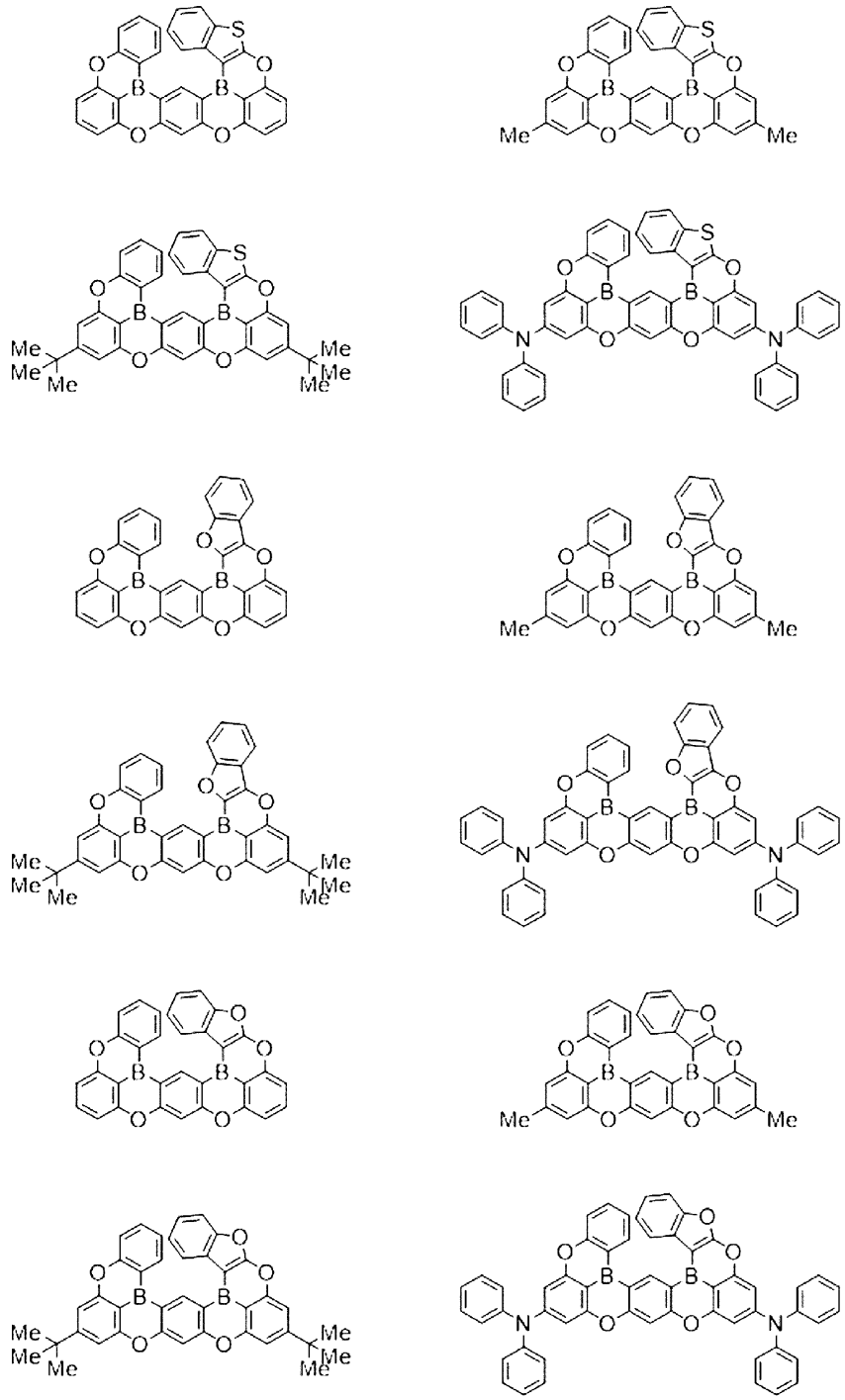
【０３１２】

【化１５３】

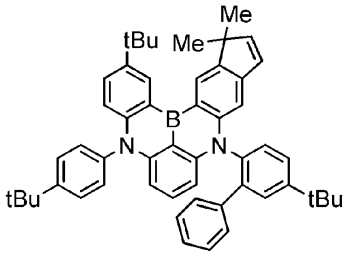
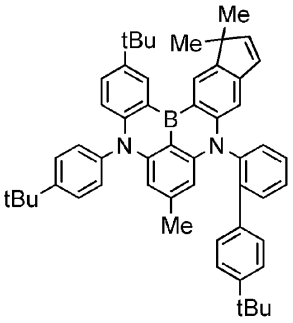
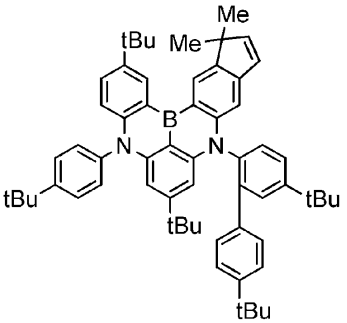
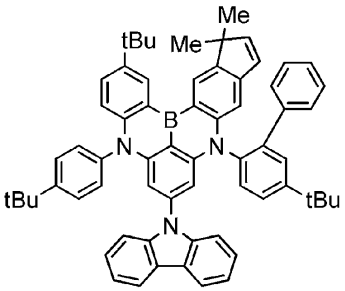
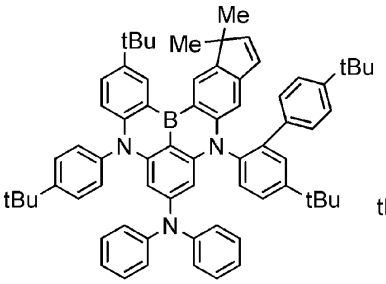
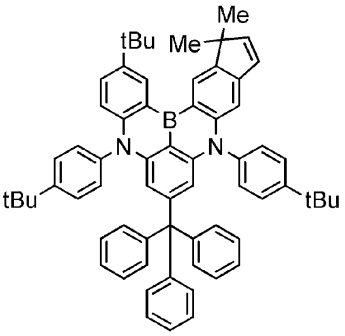
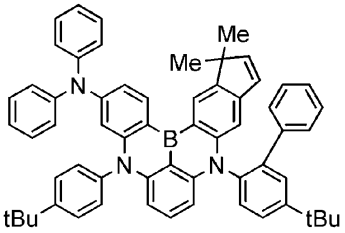
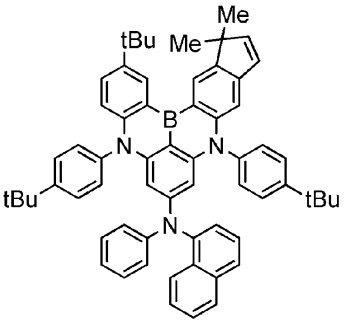
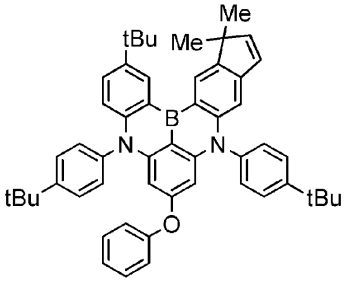
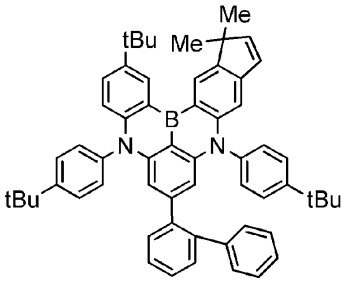
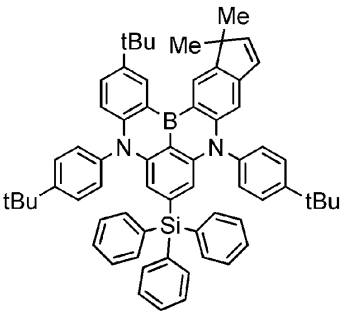
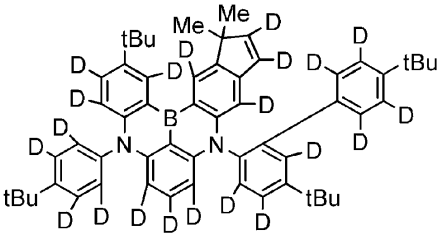
【０３１３】

【化１５４】



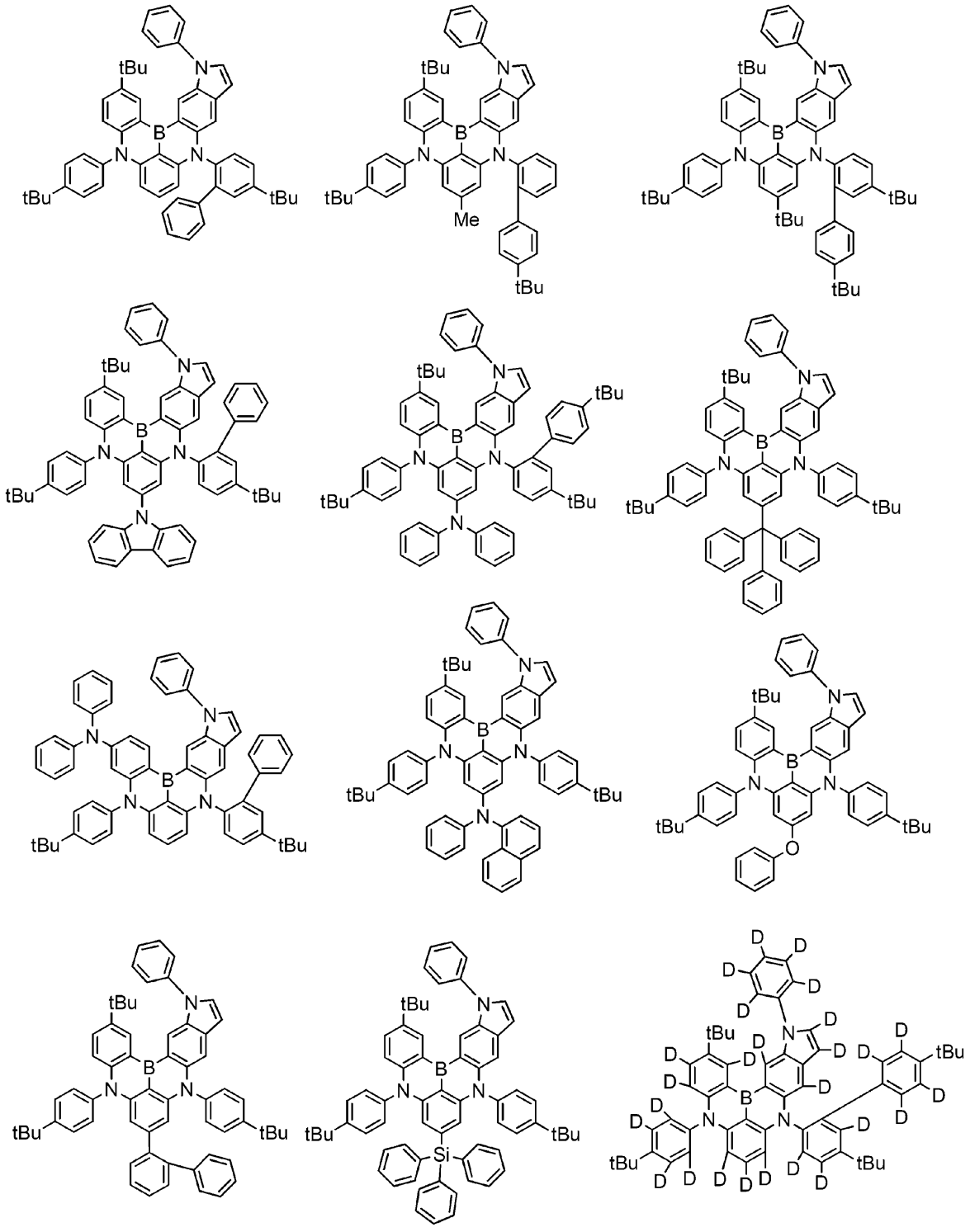
【０３１４】

【化１５５】

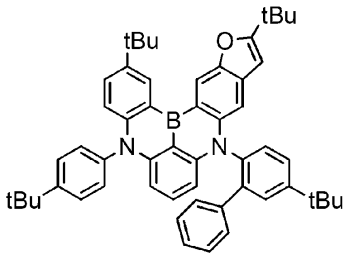
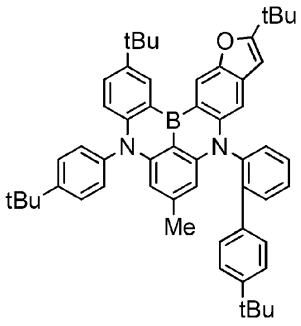
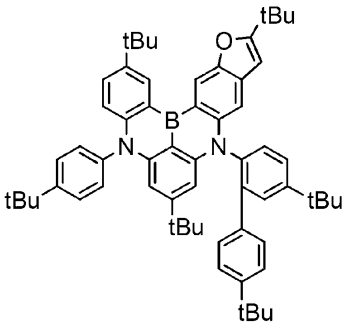
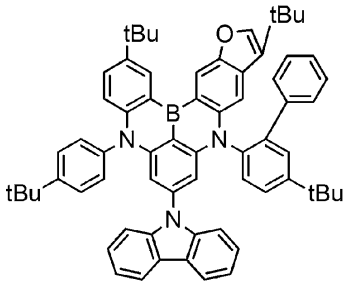
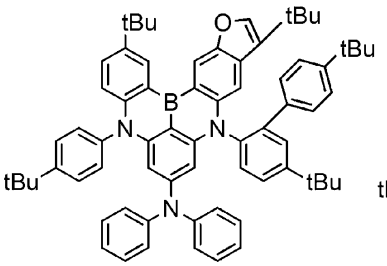
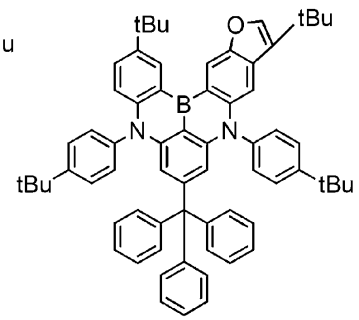
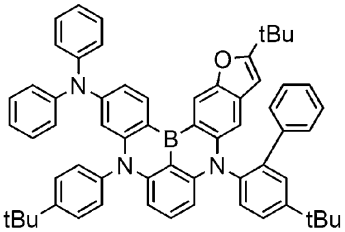
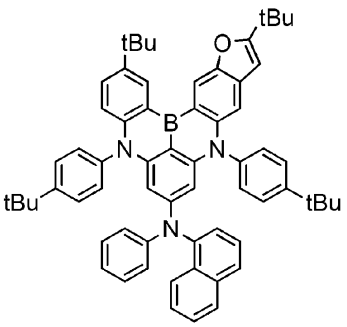
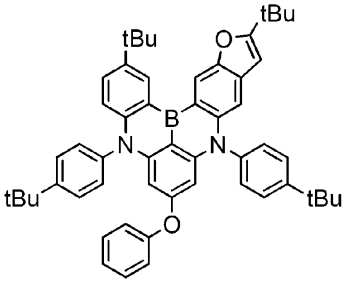
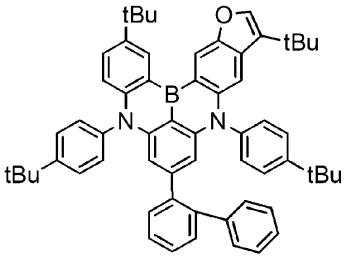
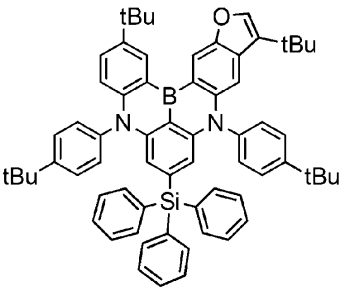
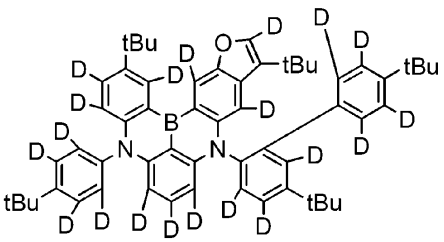
【０３１５】

【化１５６】



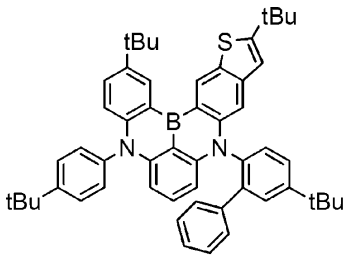
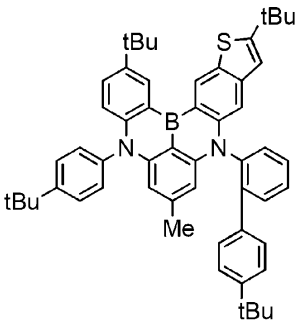
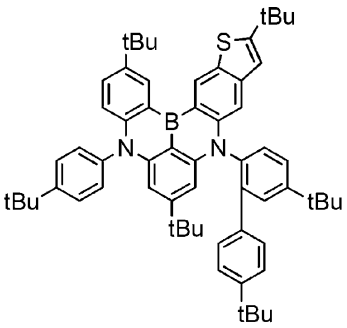
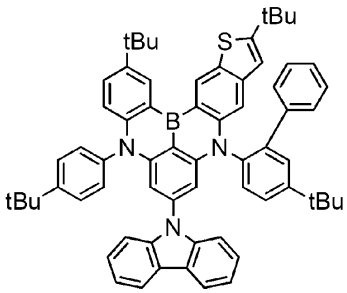
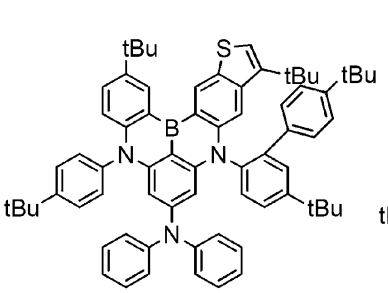
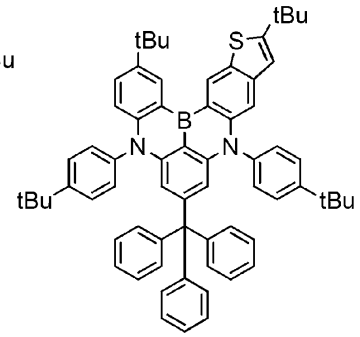
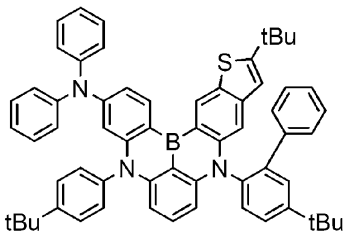
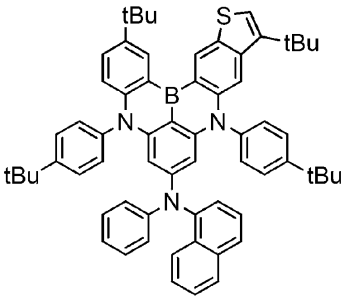
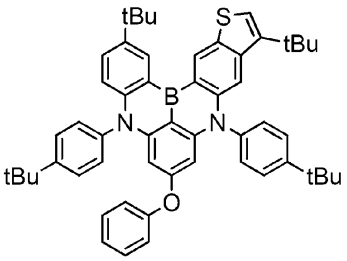
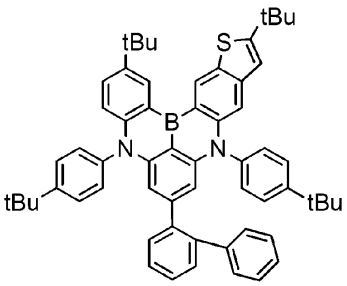
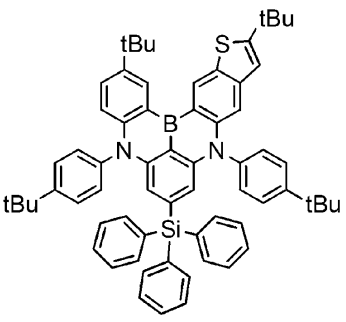
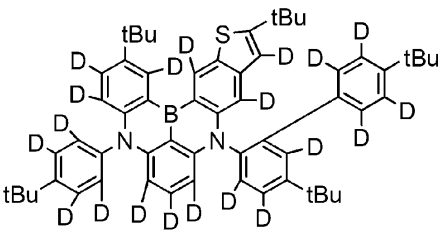
【０３１６】

【化１５７】

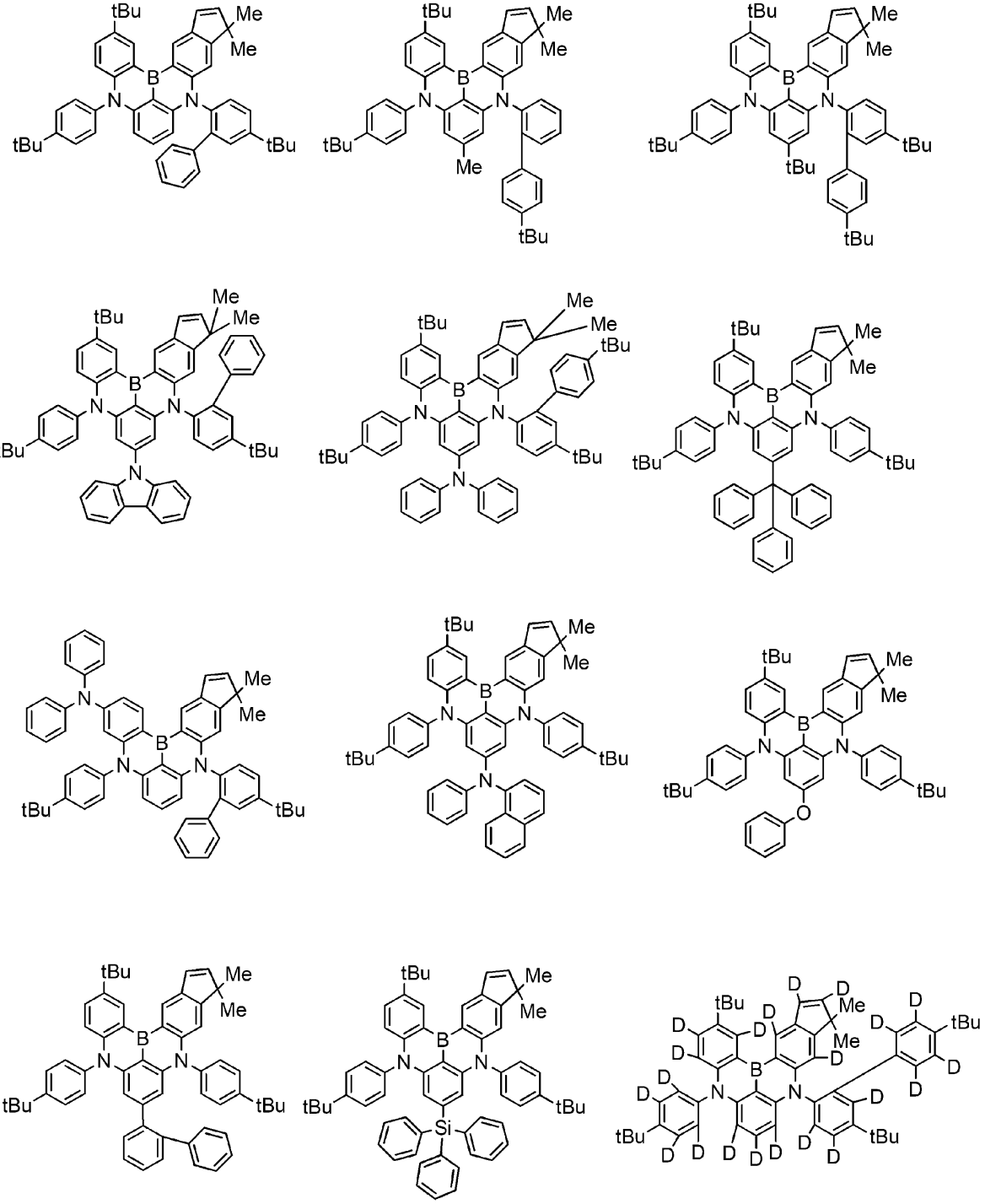
【０３１７】

【化１５８】

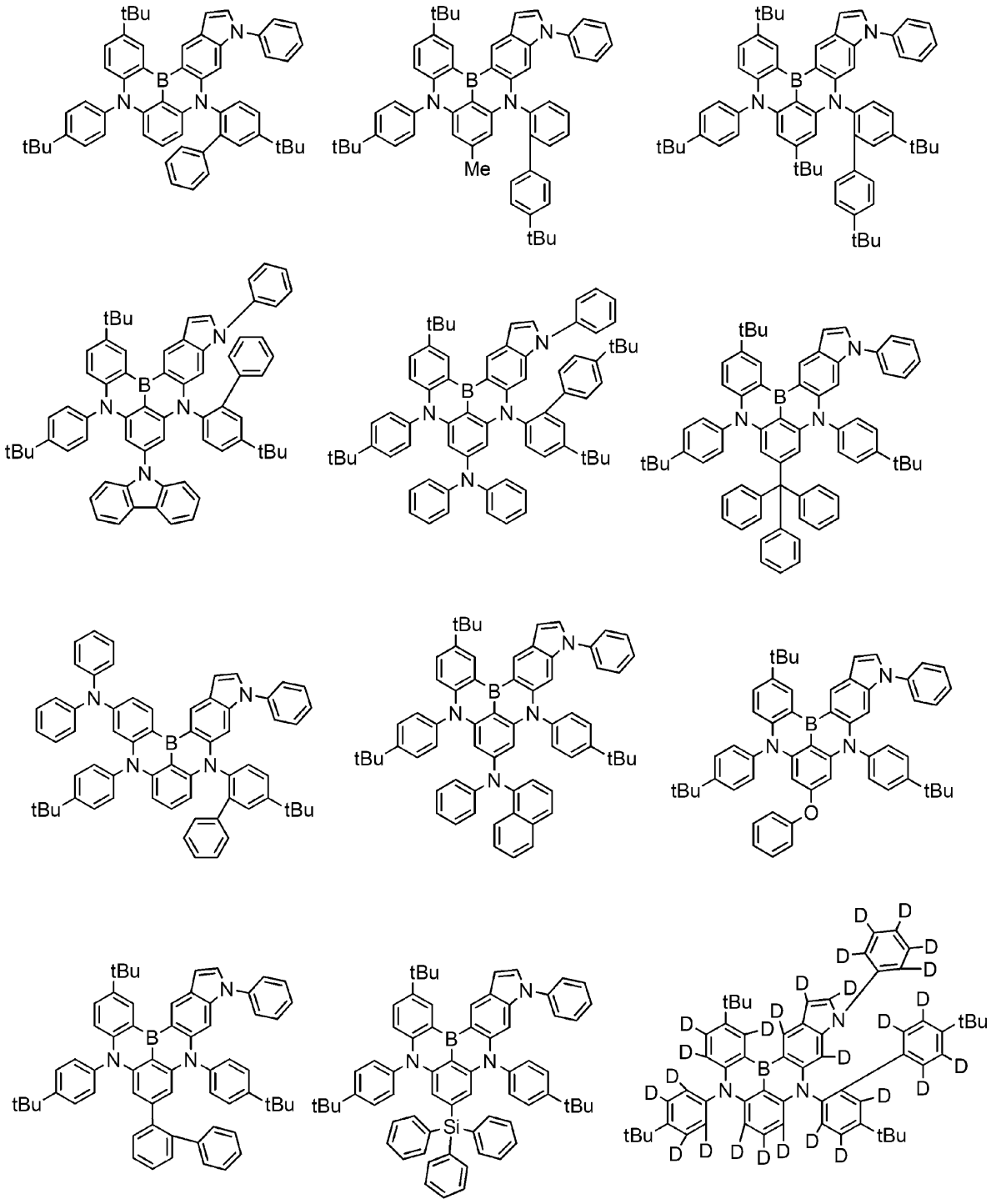
【０３１８】

【化１５９】



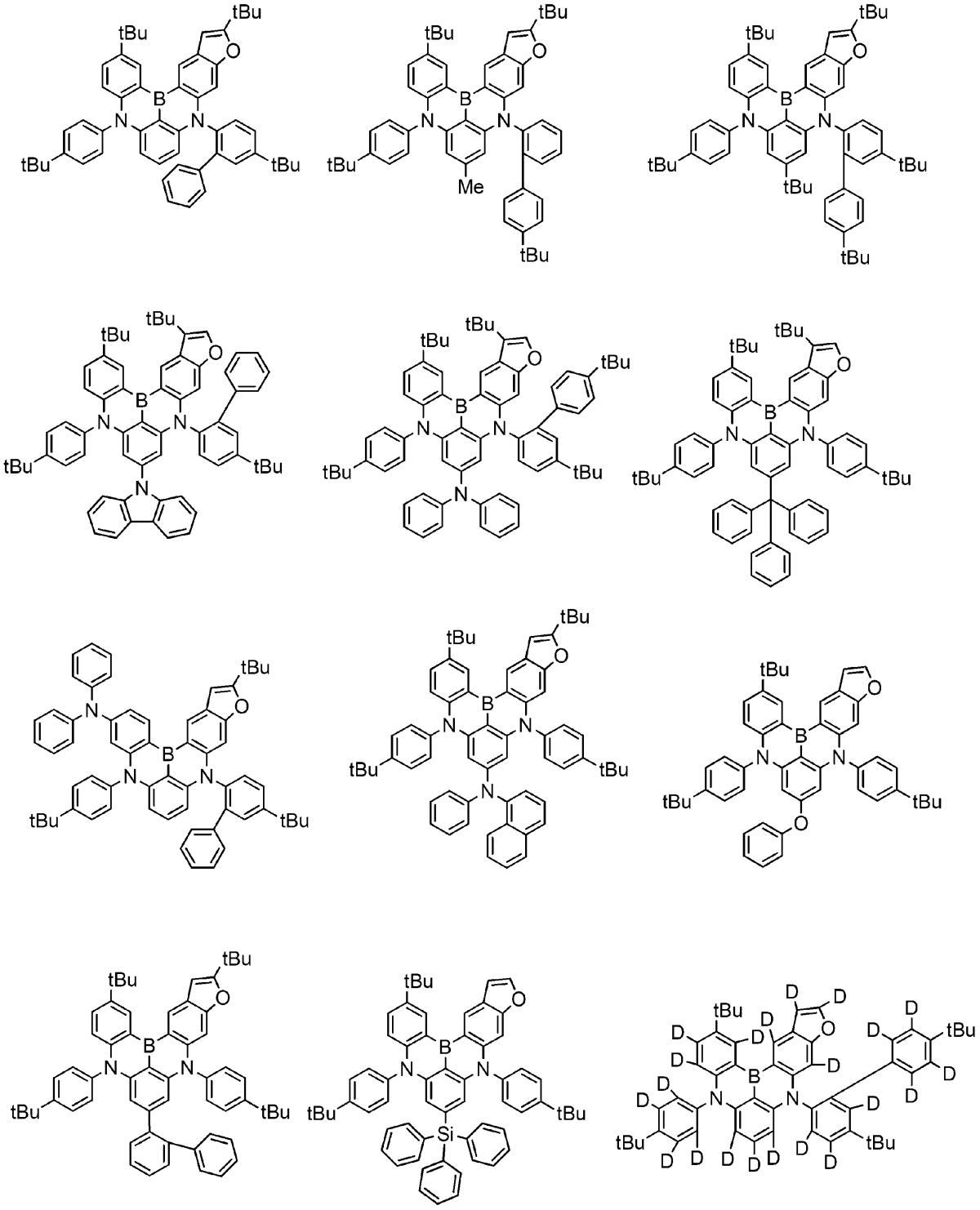
【０３１９】

【化１６０】



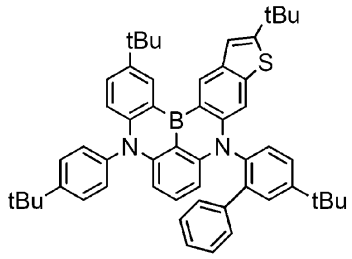
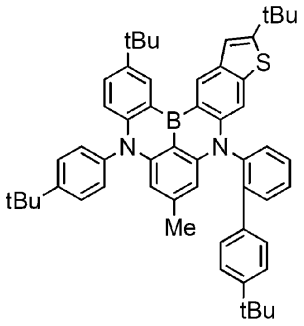
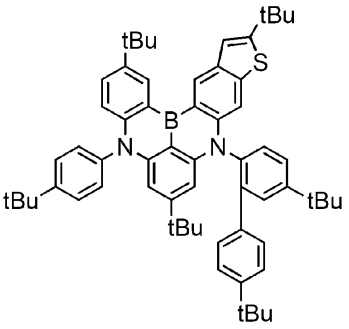
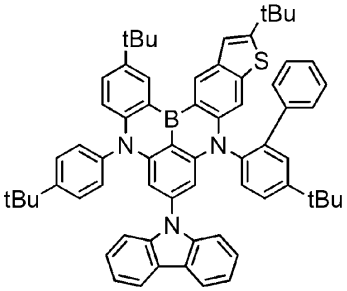
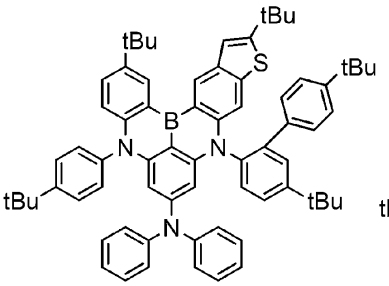
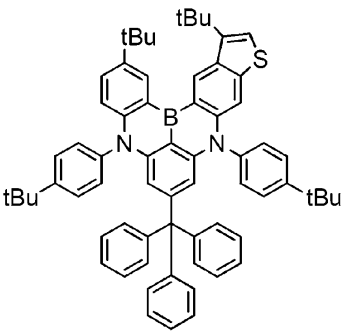
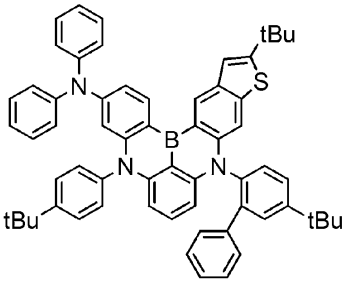
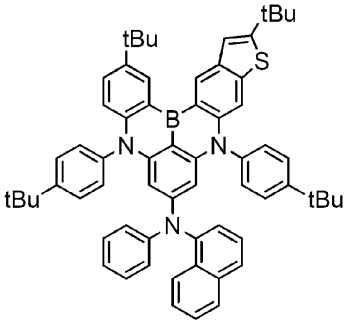
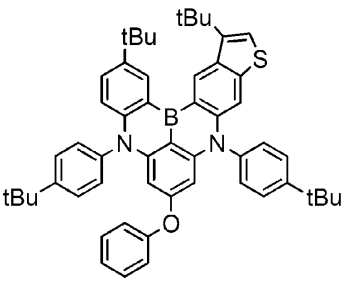
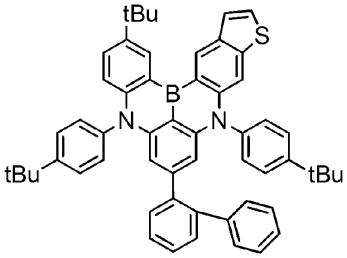
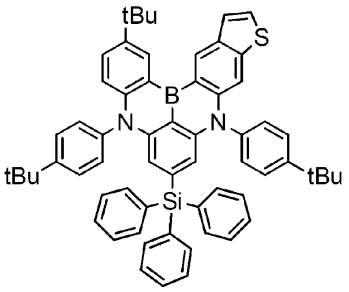
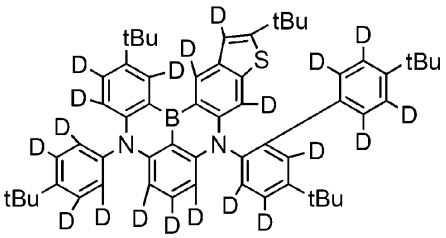
【０３２０】

【化１６１】



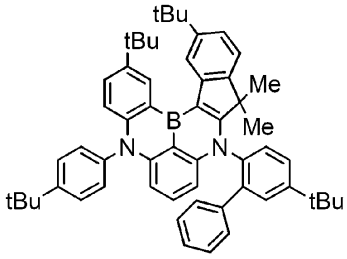
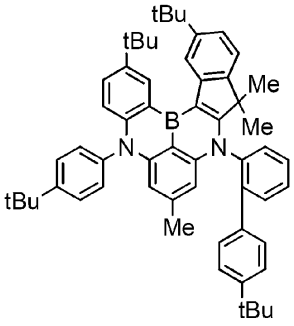
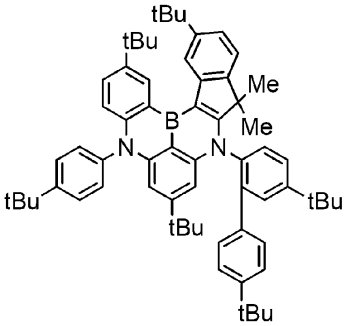
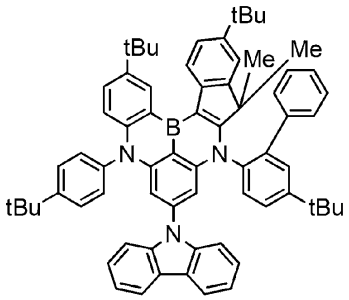
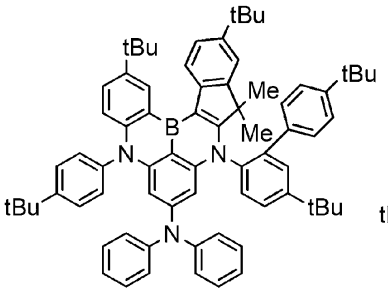
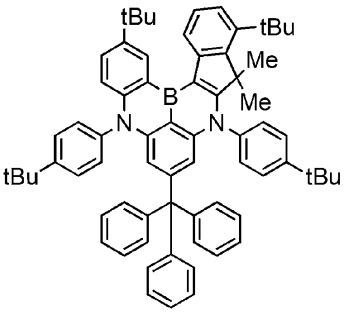
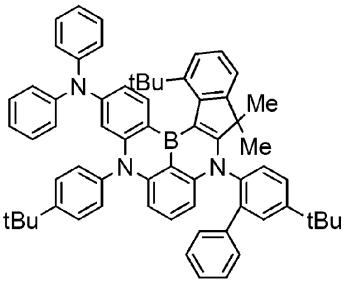
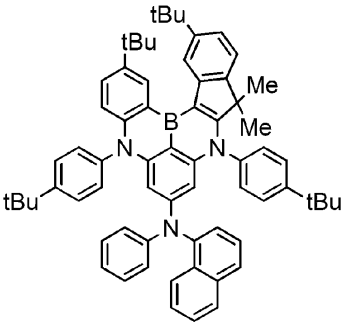
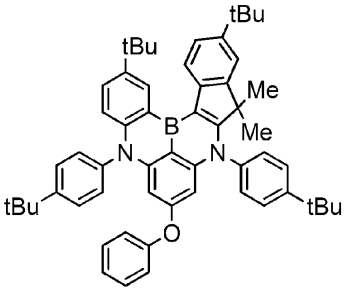
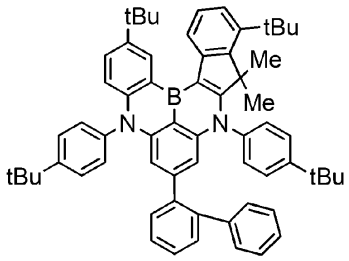
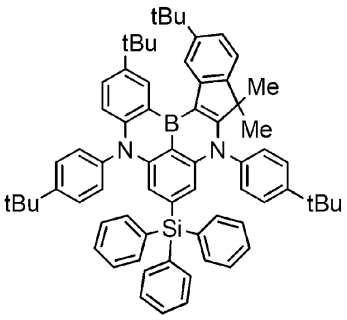
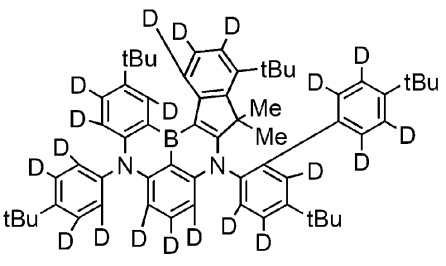
【０３２１】

【化１６２】

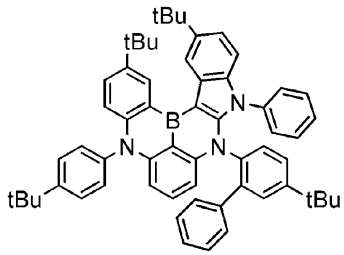
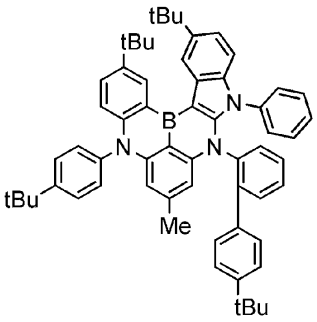
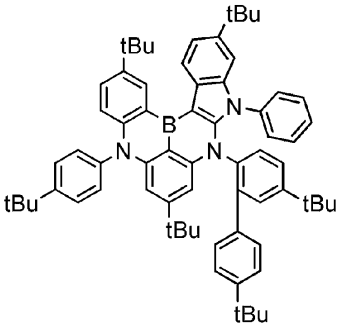
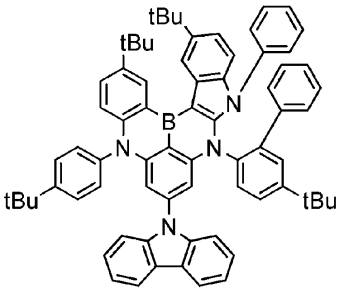
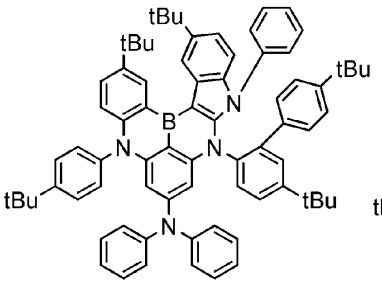
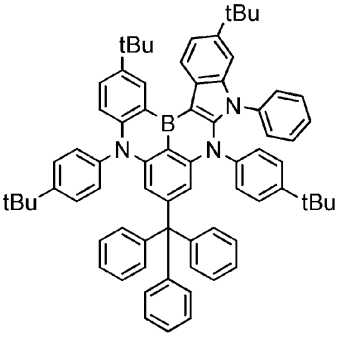
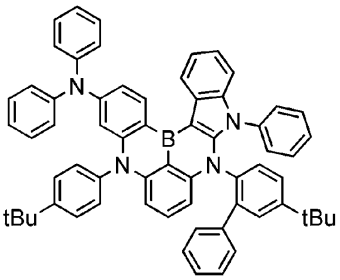
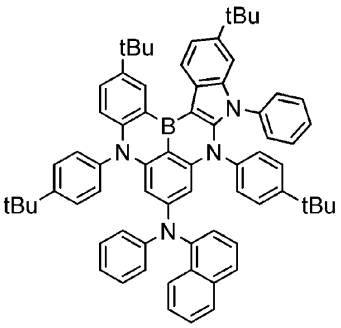
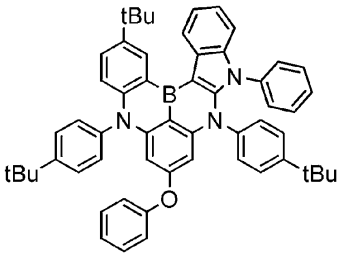
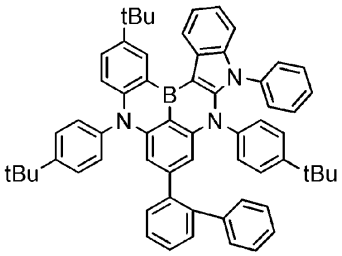
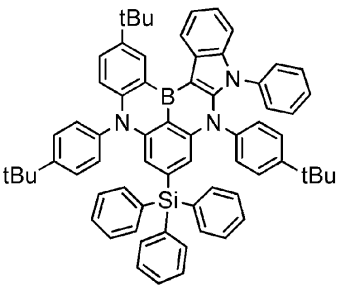
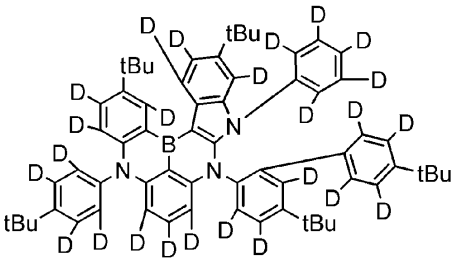
【０３２２】

【化１６３】

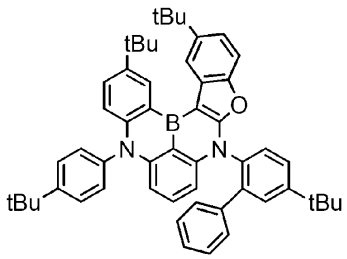
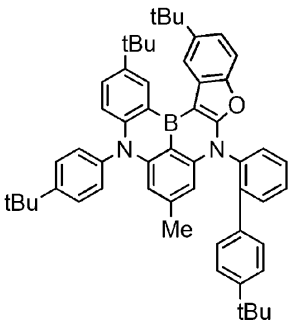
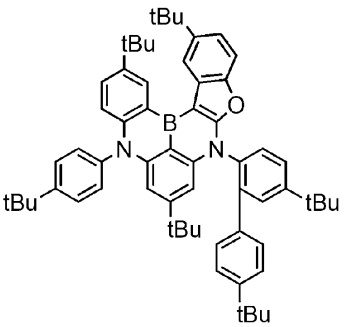
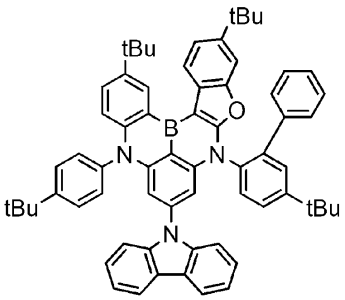
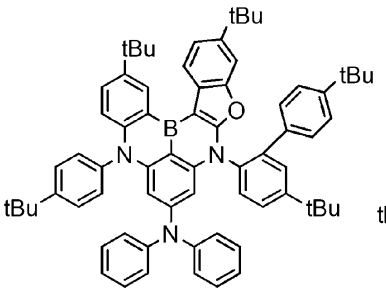
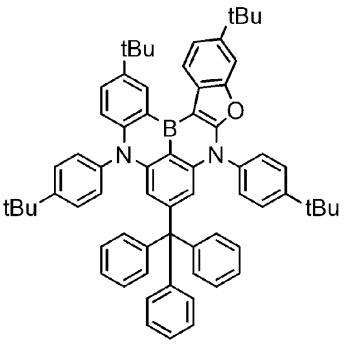
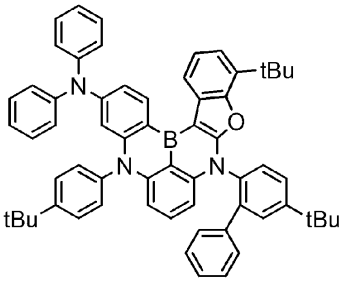
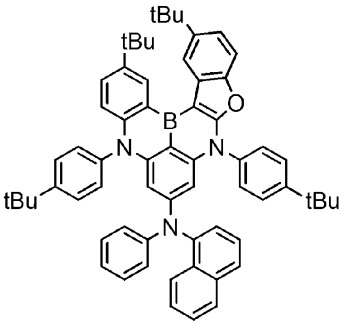
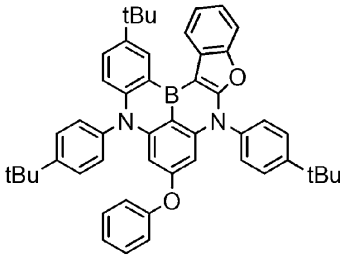
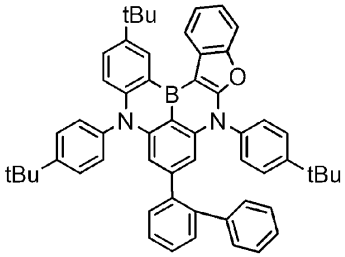
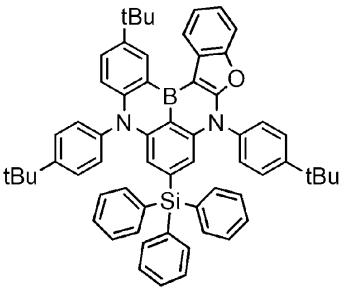
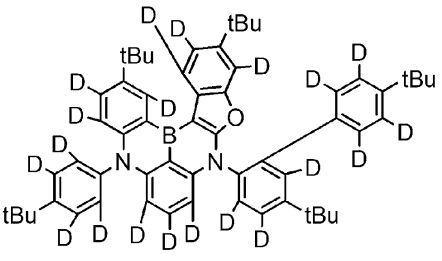
【０３２３】

【化１６４】

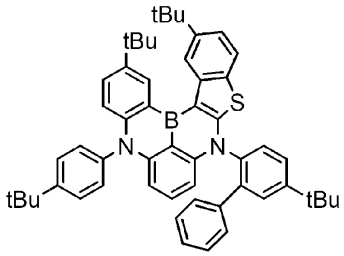
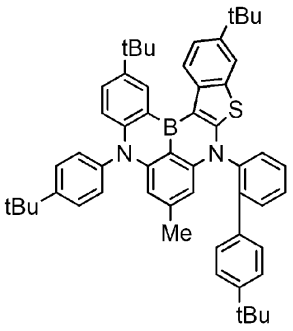
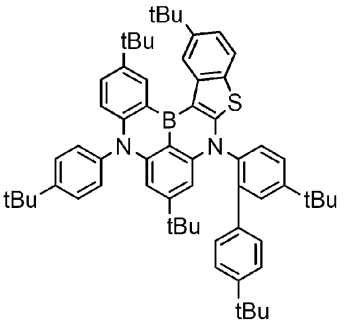
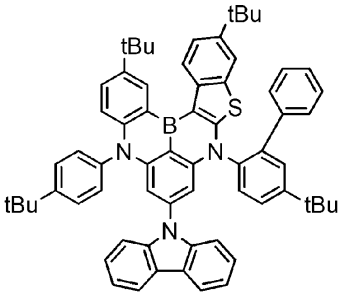
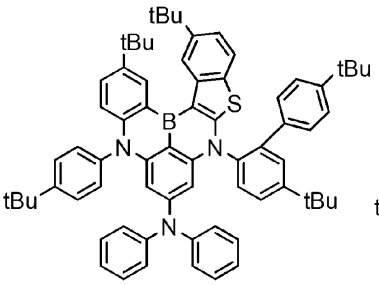
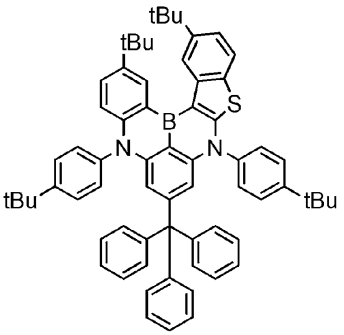
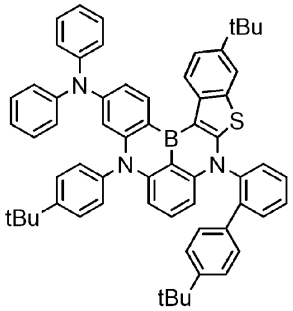
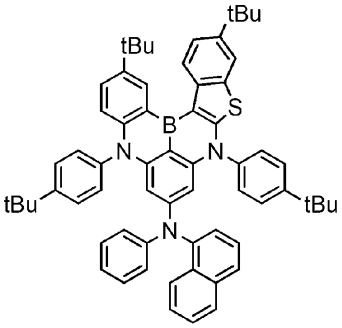
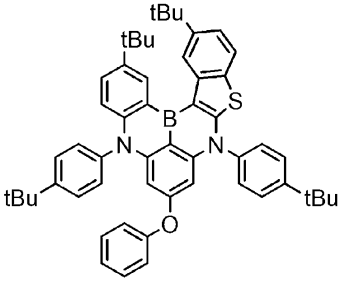
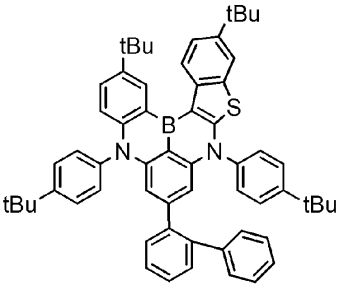
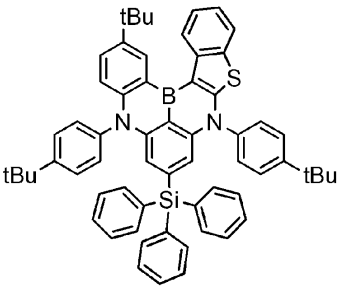
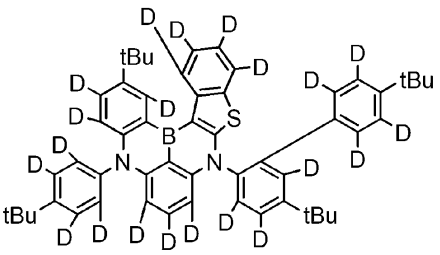
【０３２４】

【化１６５】

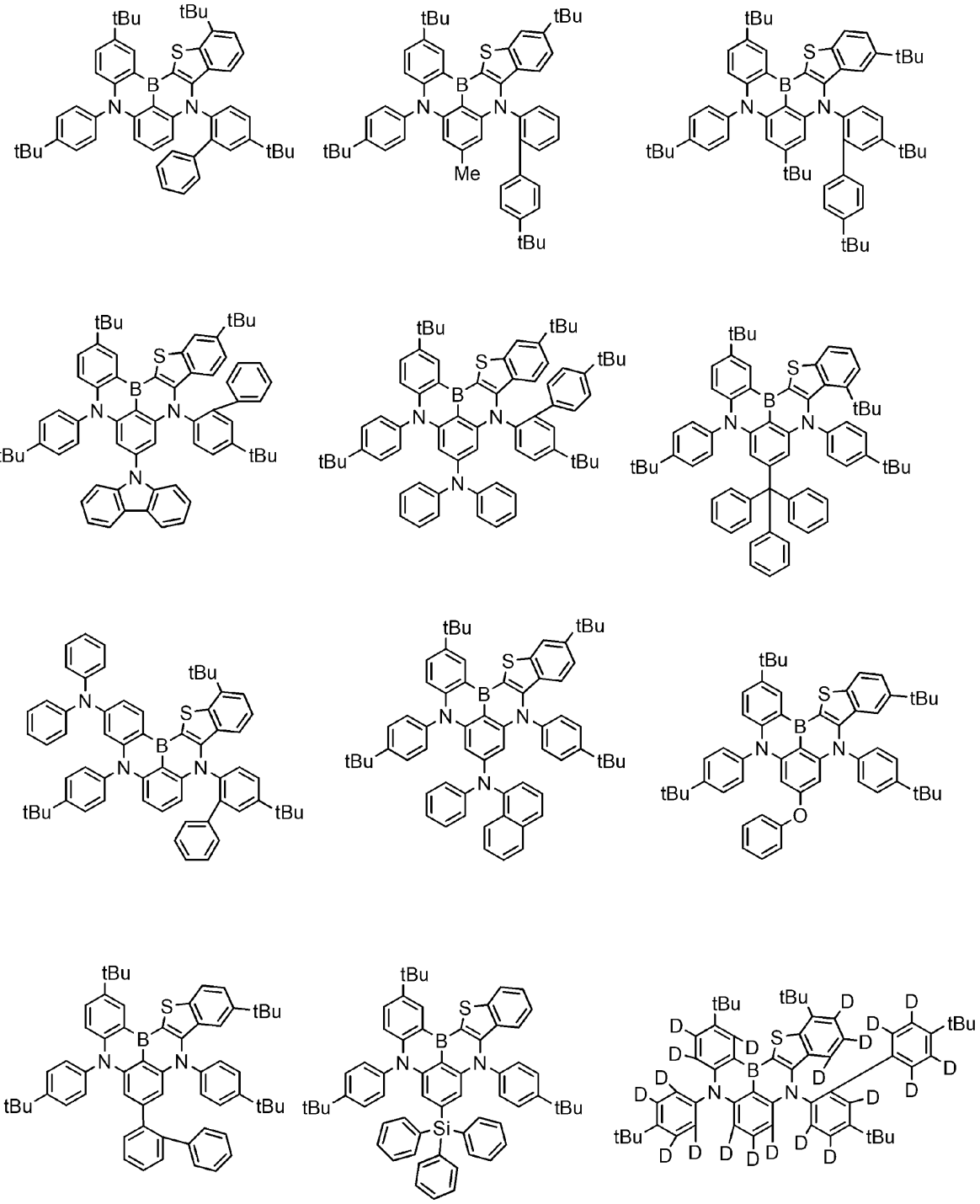
【０３２５】

【化１６６】

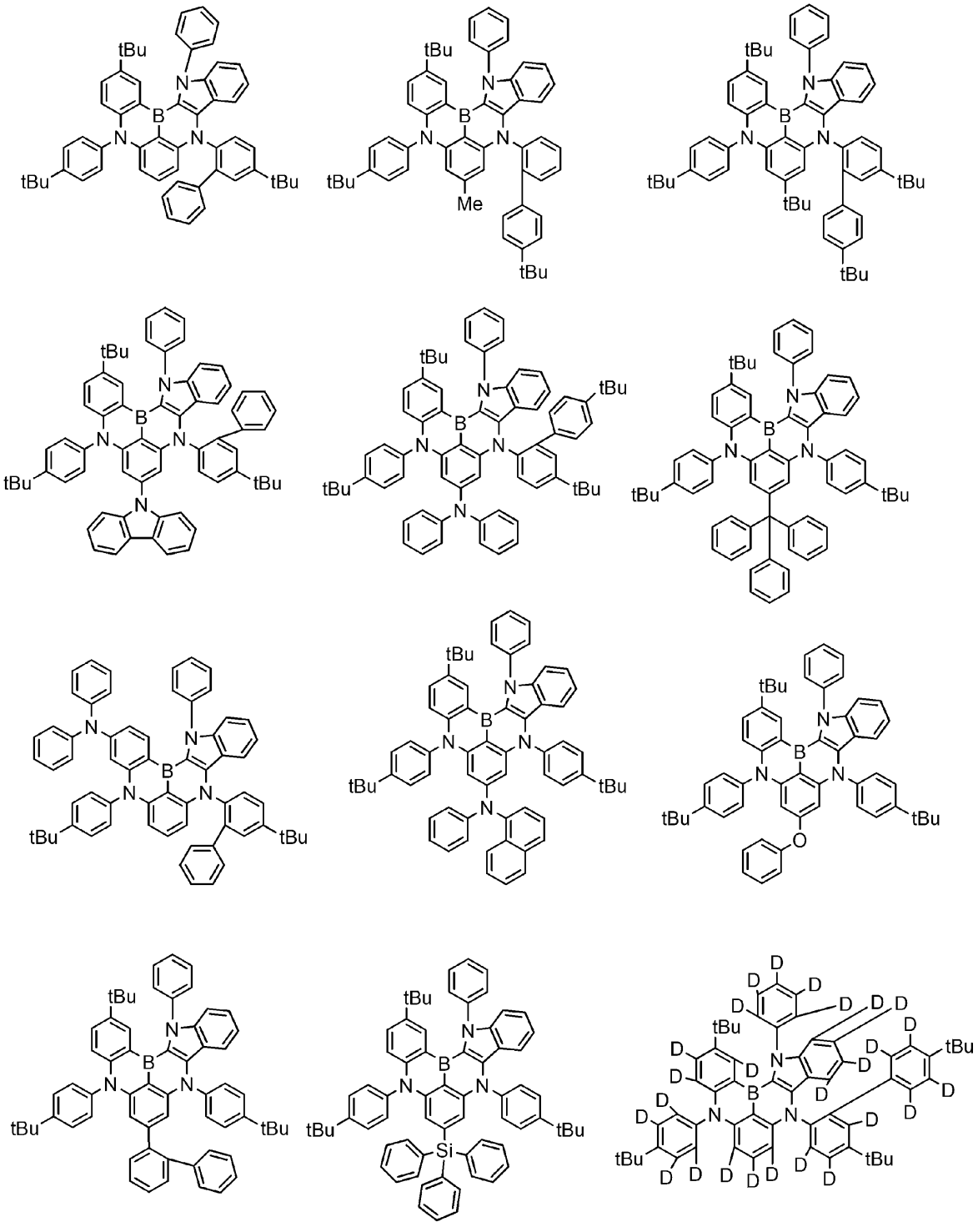
【０３２６】

【化１６７】



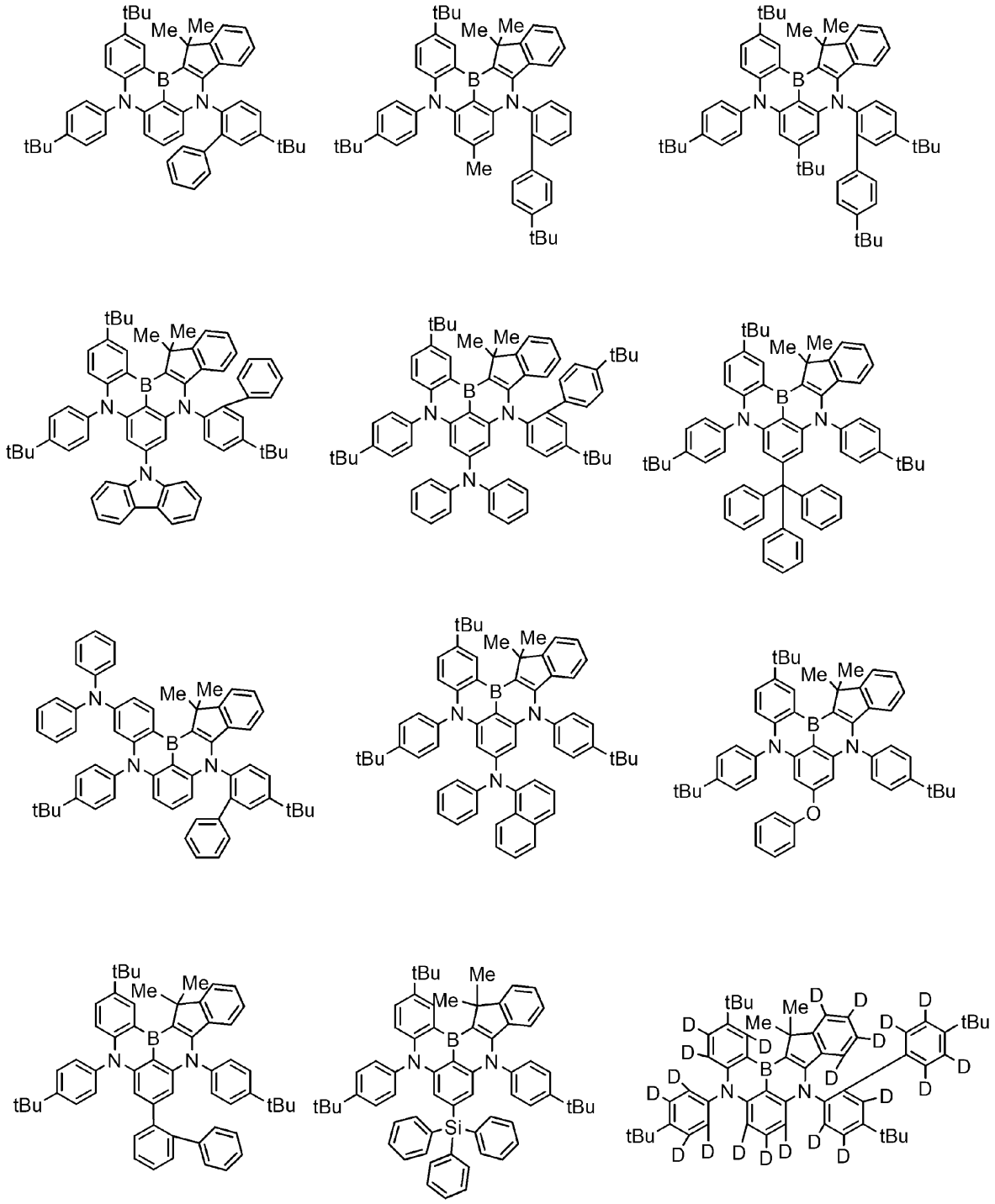
【０３２７】

【化１６８】



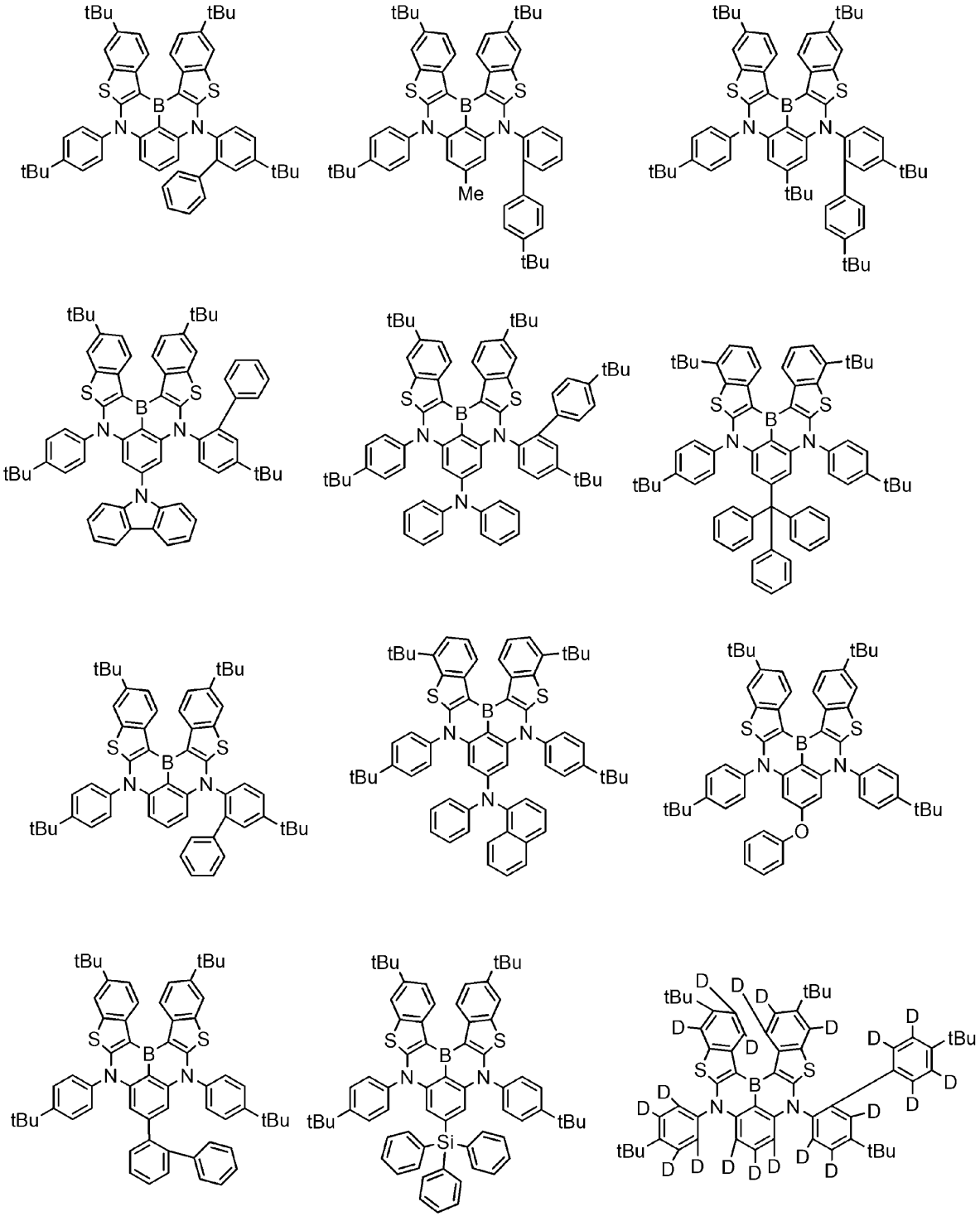
【０３２８】

【化１６９】



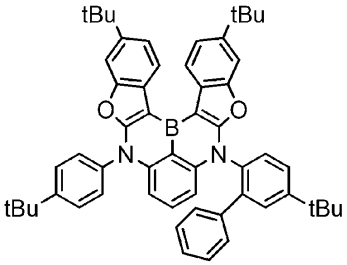
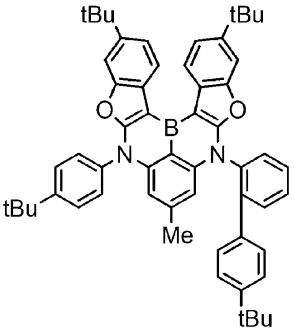
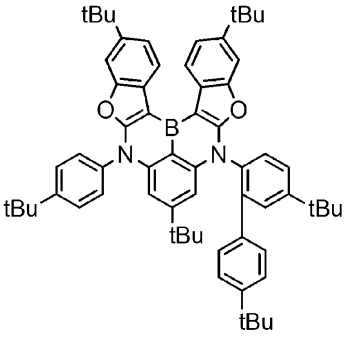
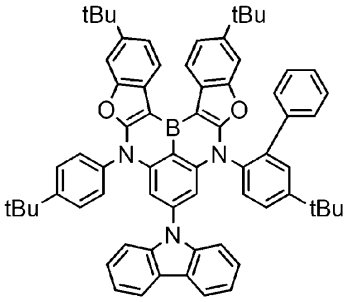
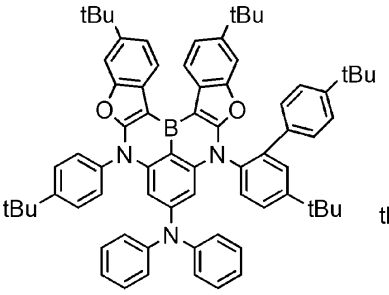
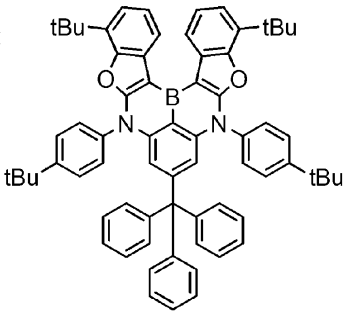
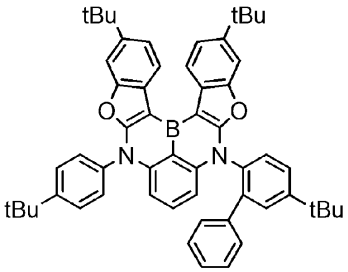
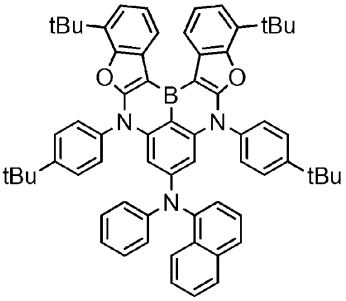
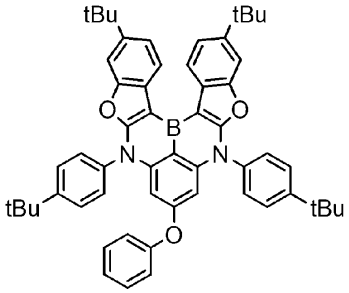
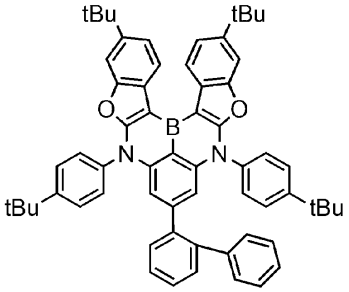
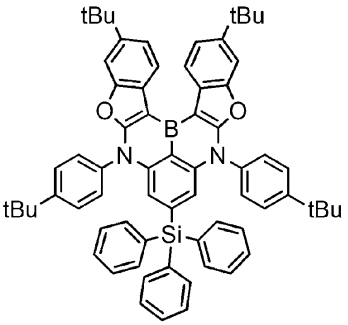
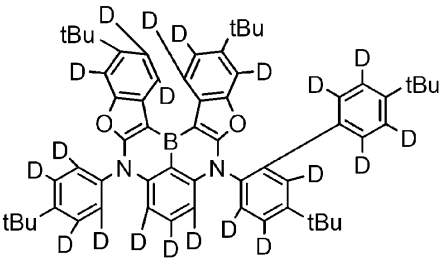
【０３２９】

【化１７０】



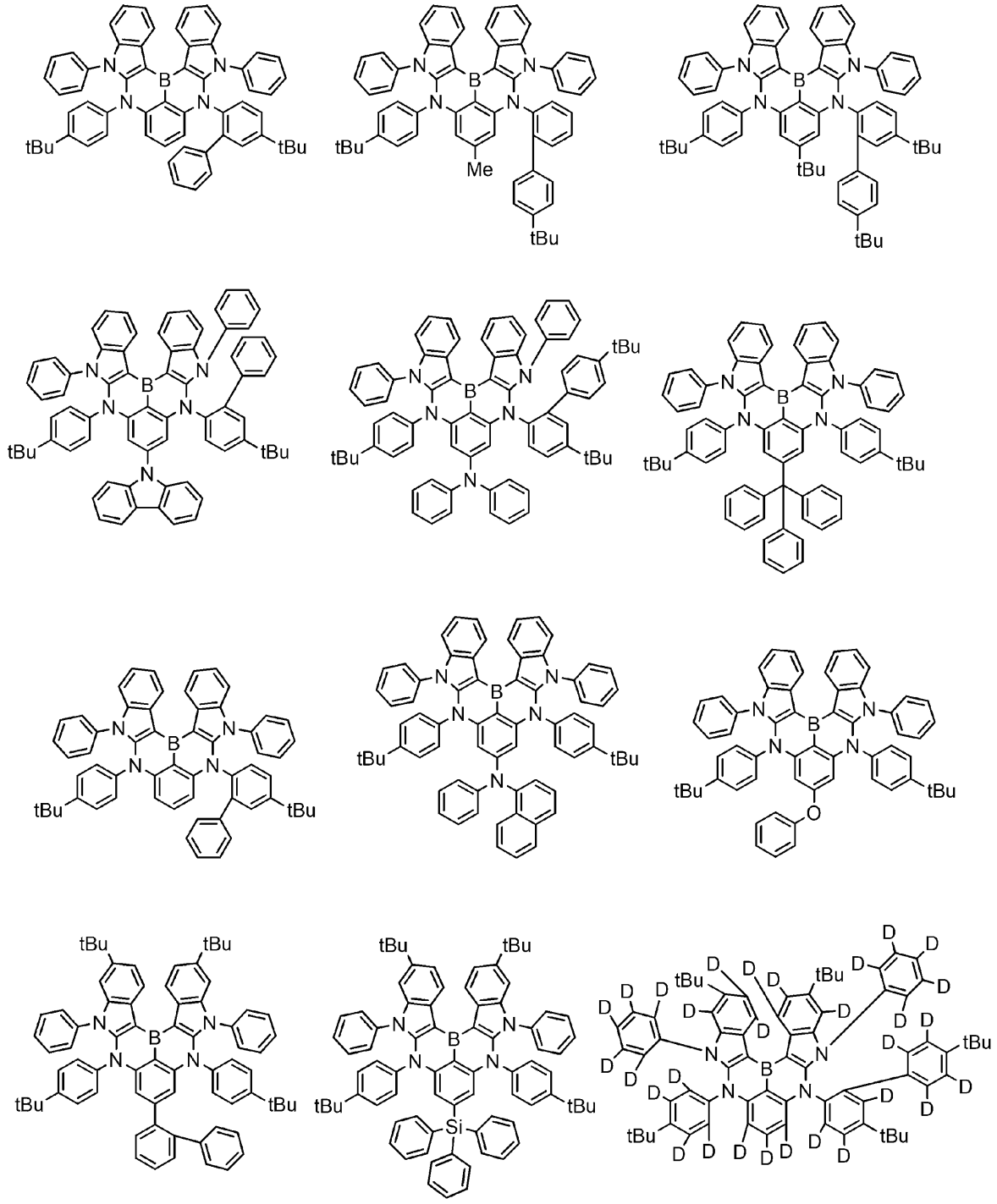
【０３３０】

【化１７１】

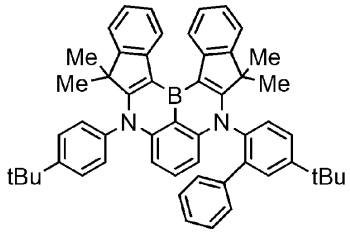
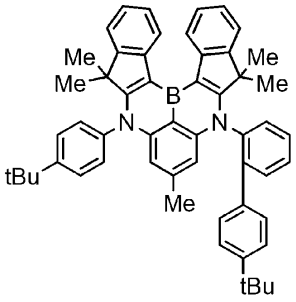
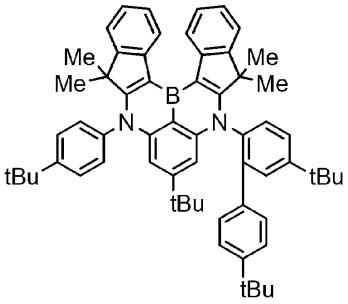
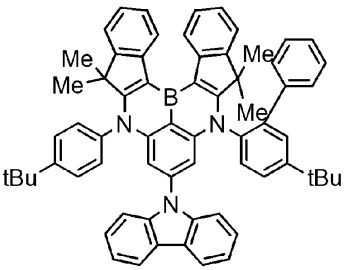
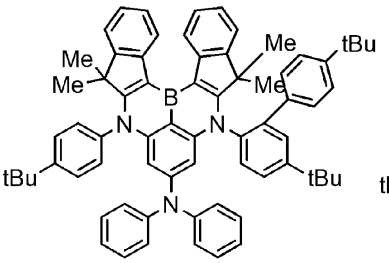
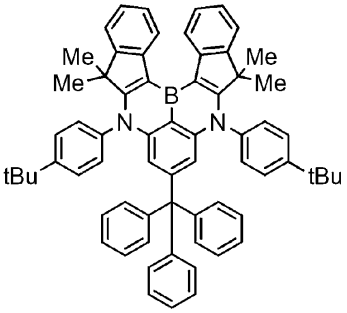
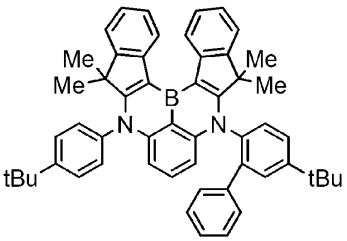
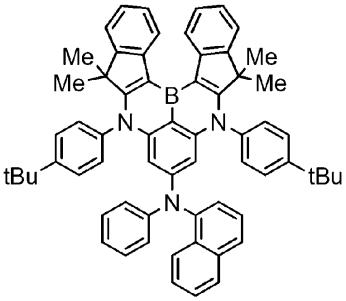
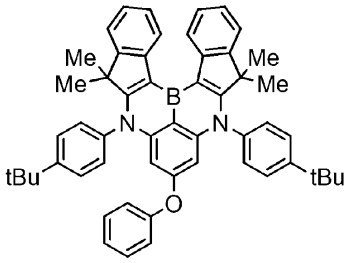
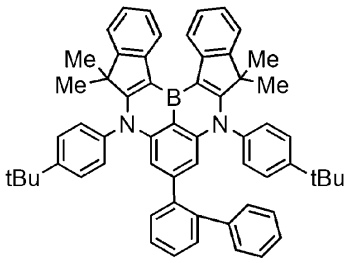
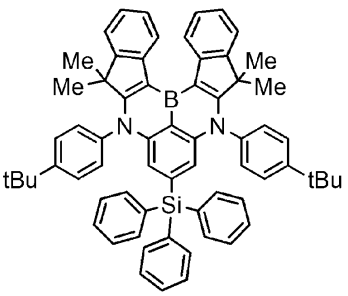
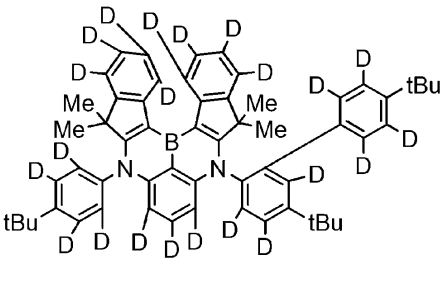
【０３３１】

【化１７２】



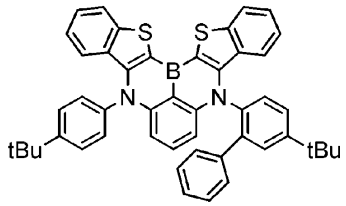
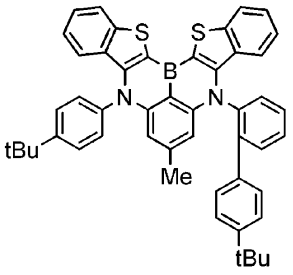
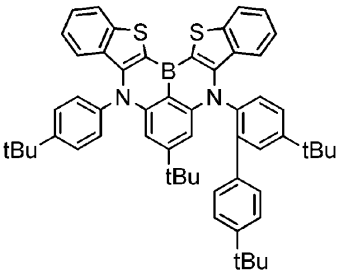
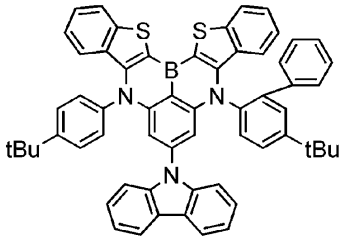
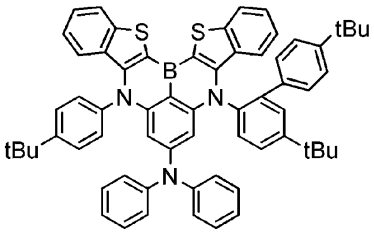
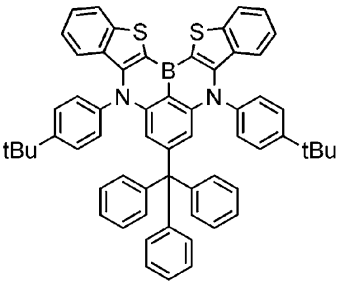
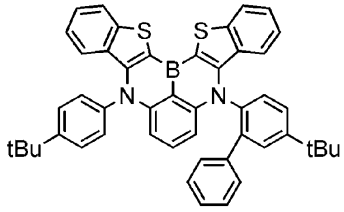
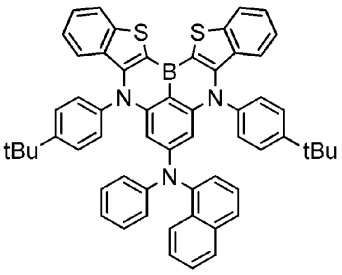
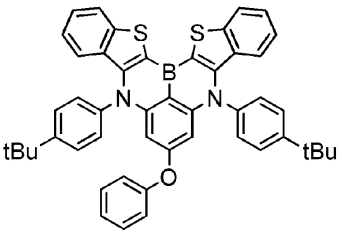
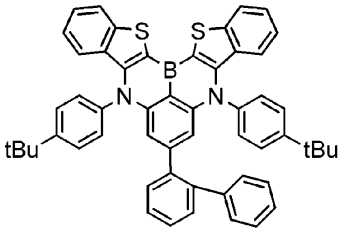
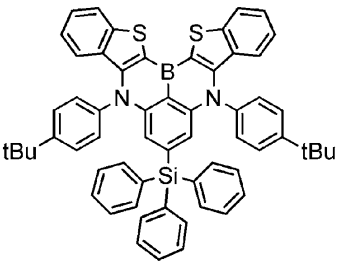
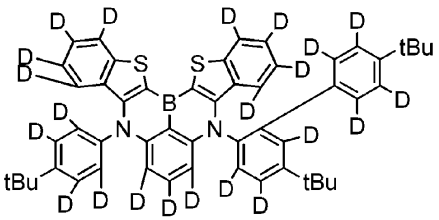
【０３３２】

【化１７３】

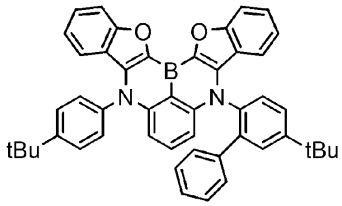
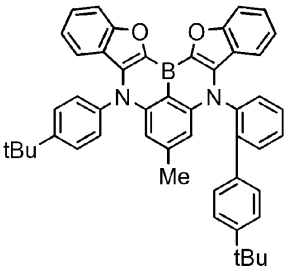
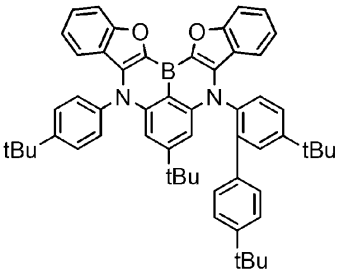
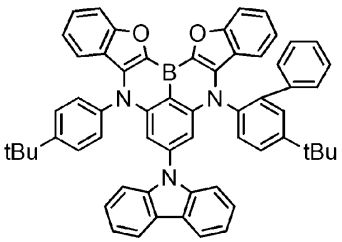
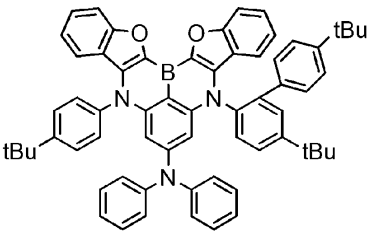
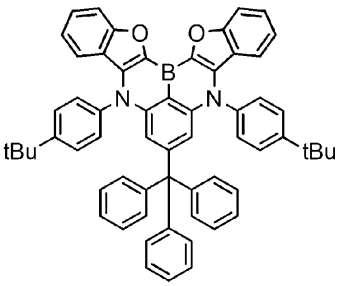
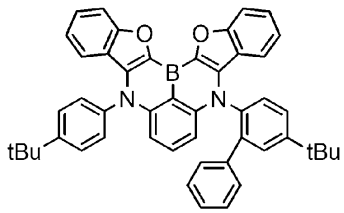
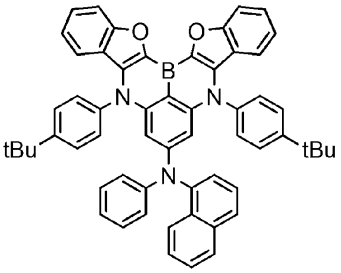
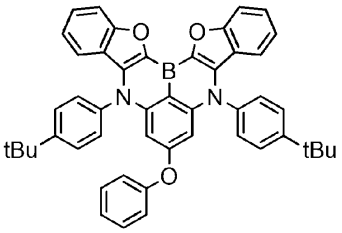
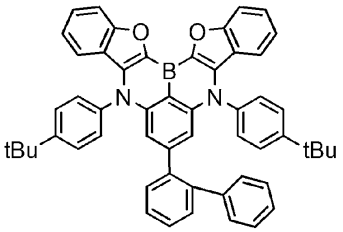
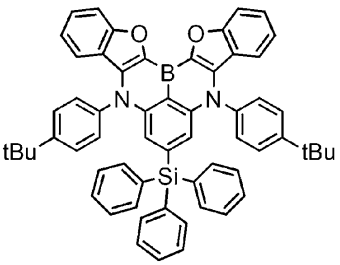
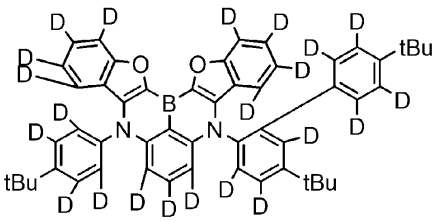
【０３３３】

【化１７４】

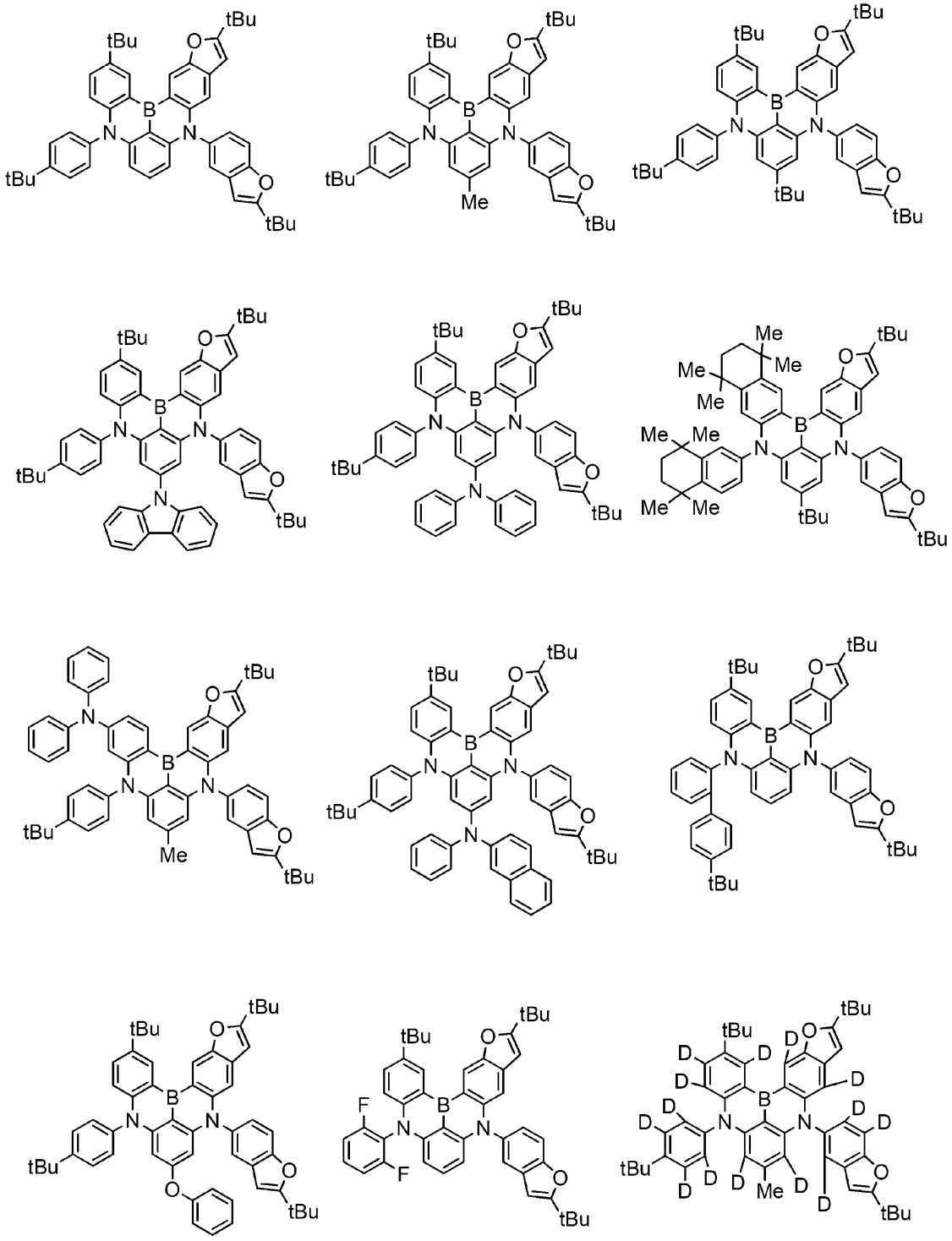
【０３３４】

【化１７５】

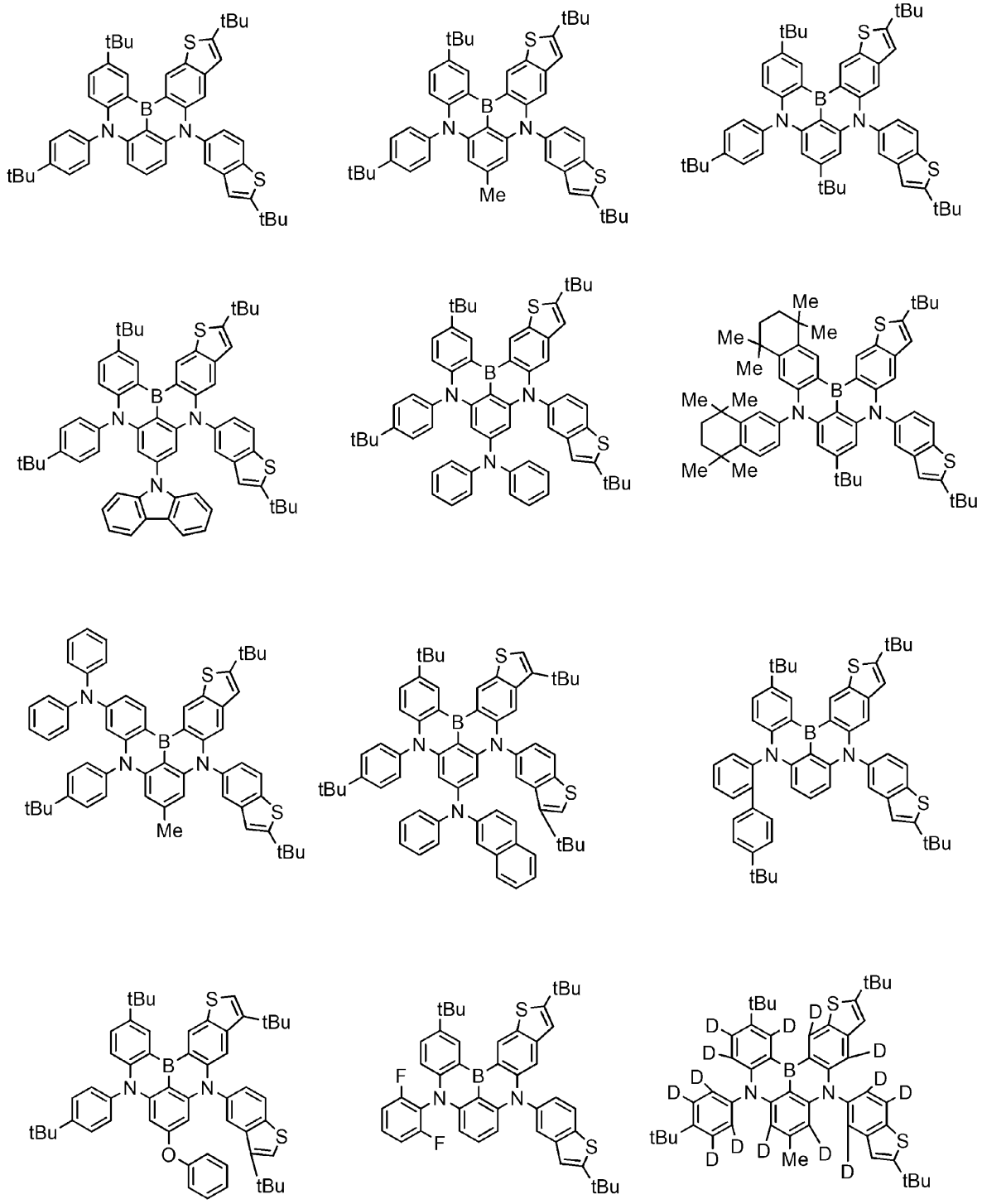
【０３３５】

【化１７６】



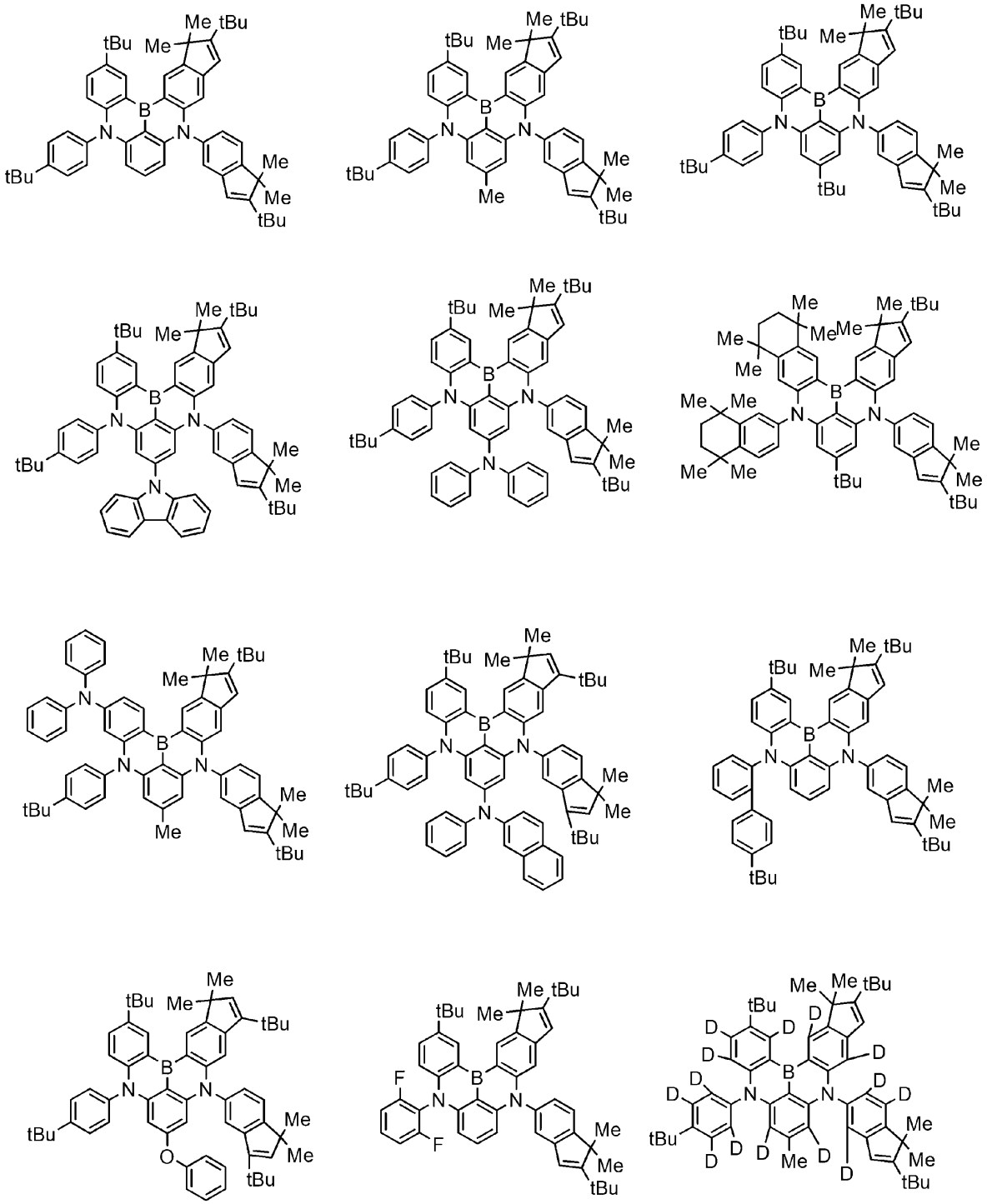
【０３３６】

【化１７７】



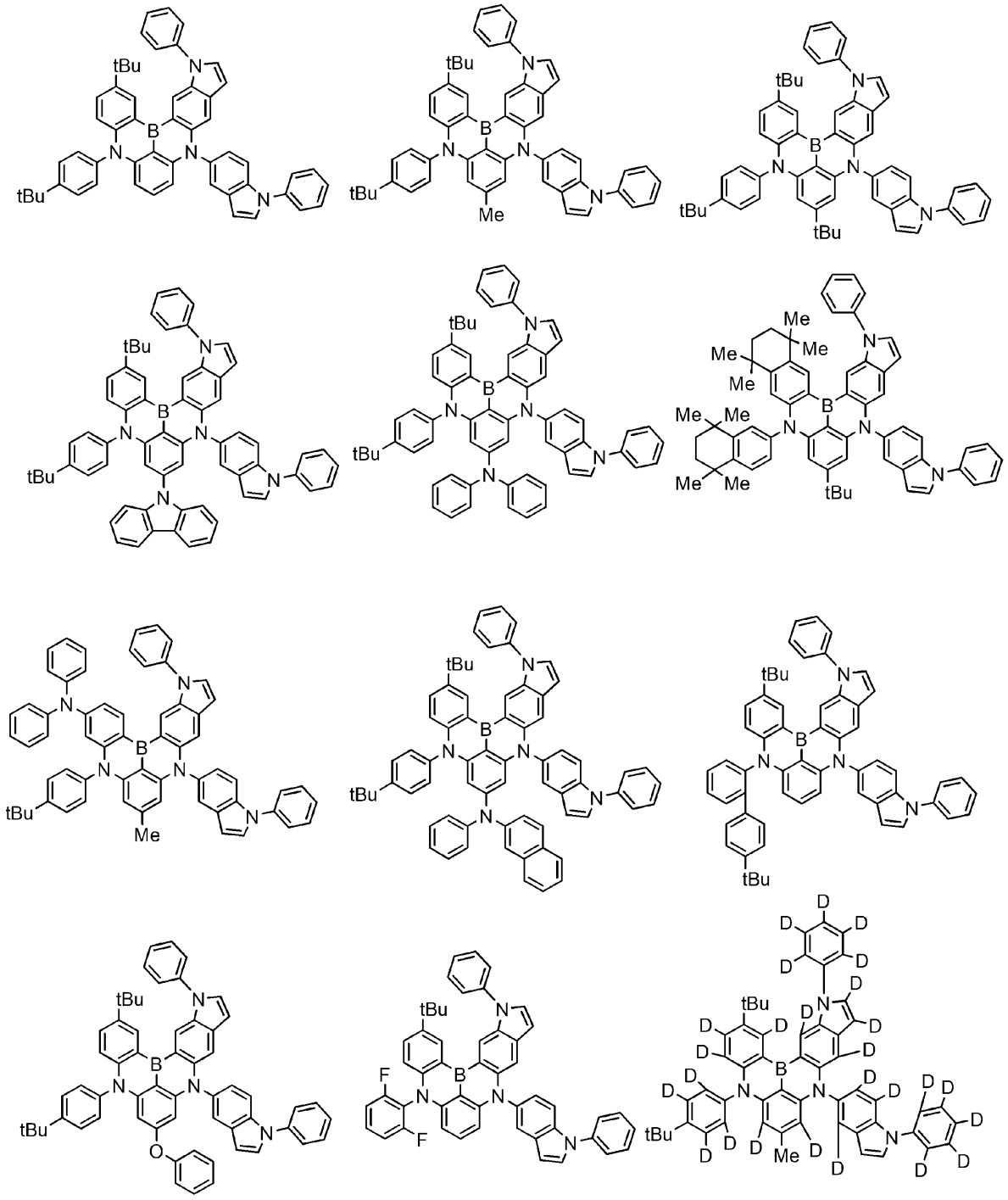
【０３３７】

【化１７８】



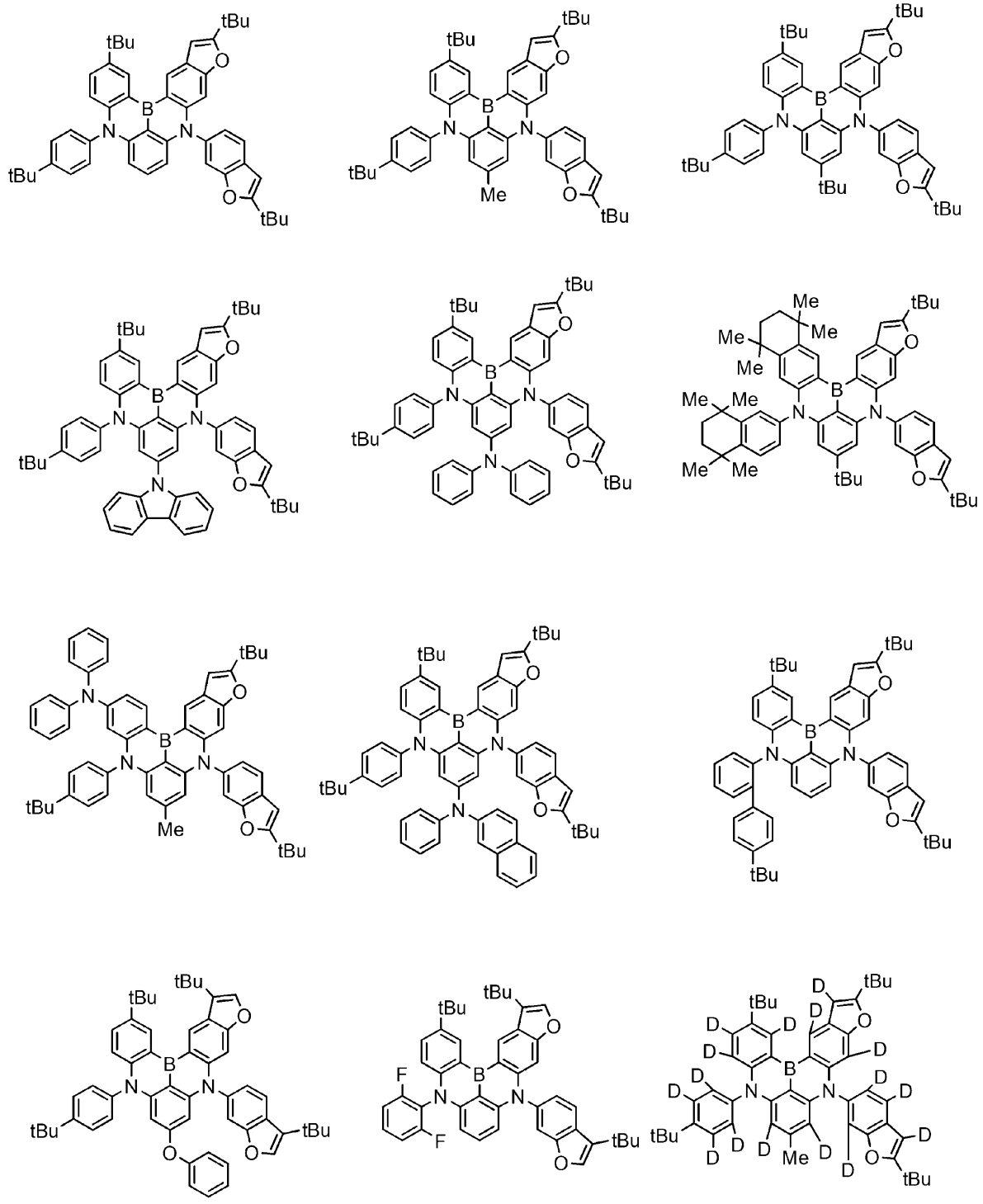
【０３３８】

【化１７９】



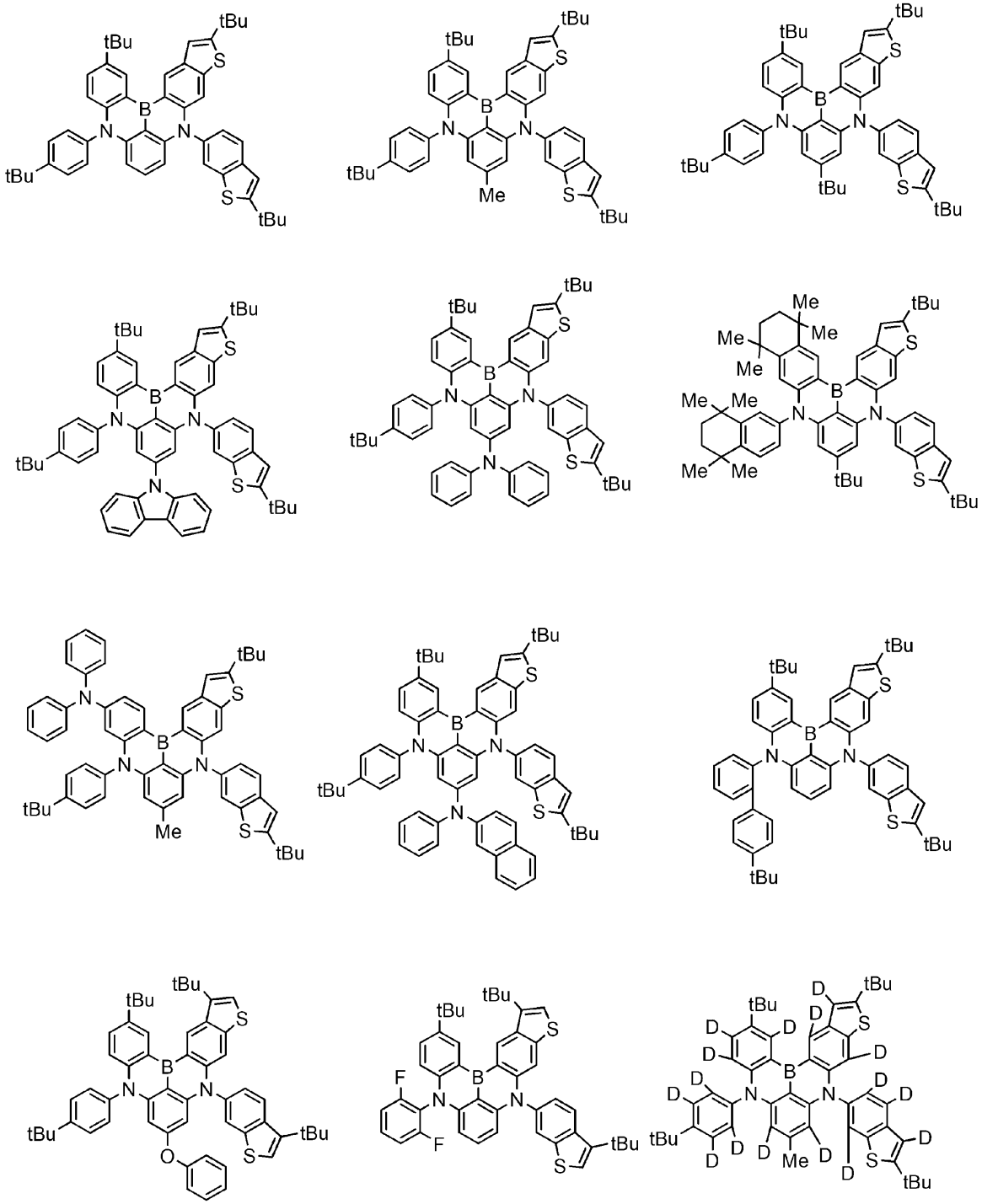
【０３３９】

【化１８０】



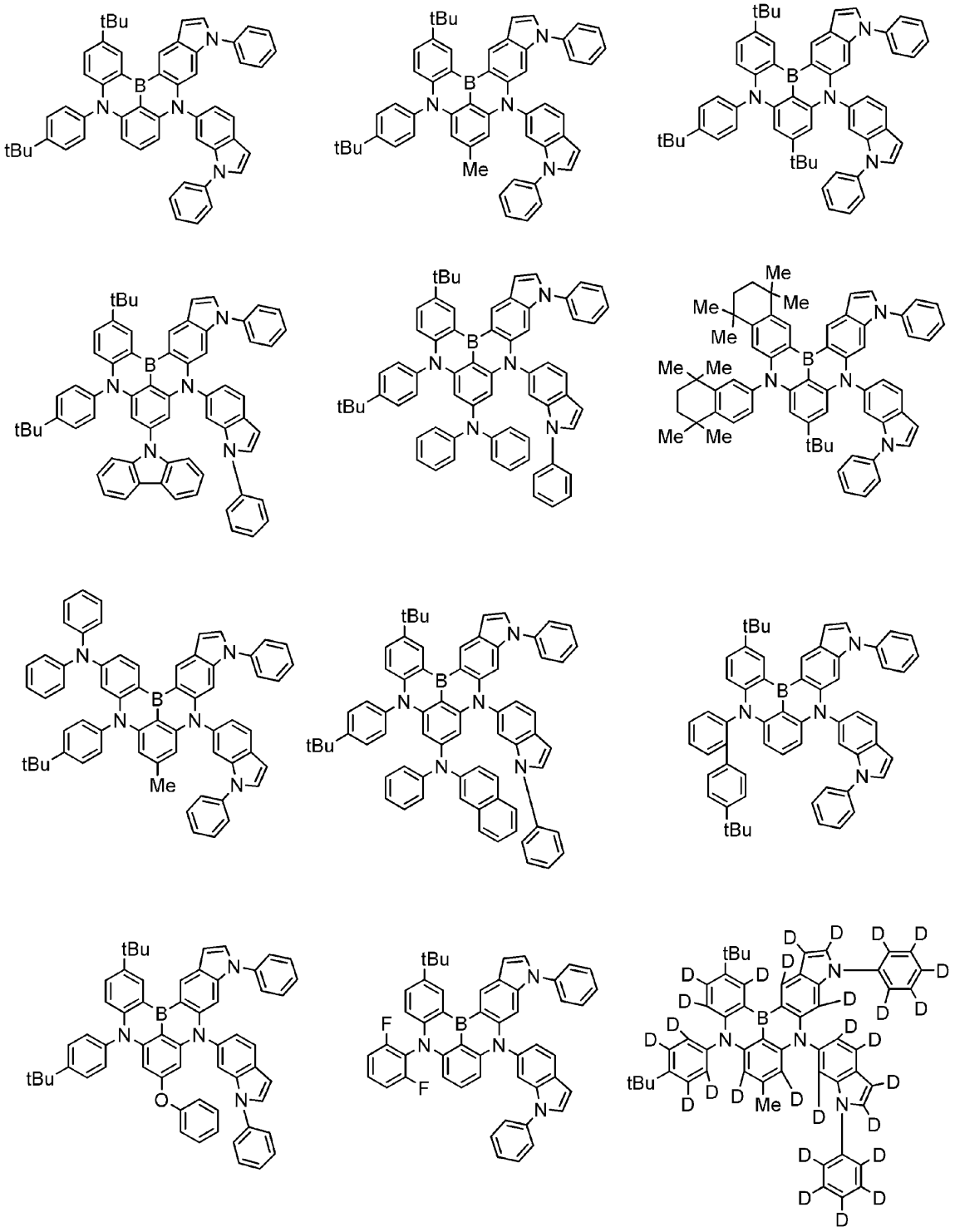
【０３４０】

【化１８１】



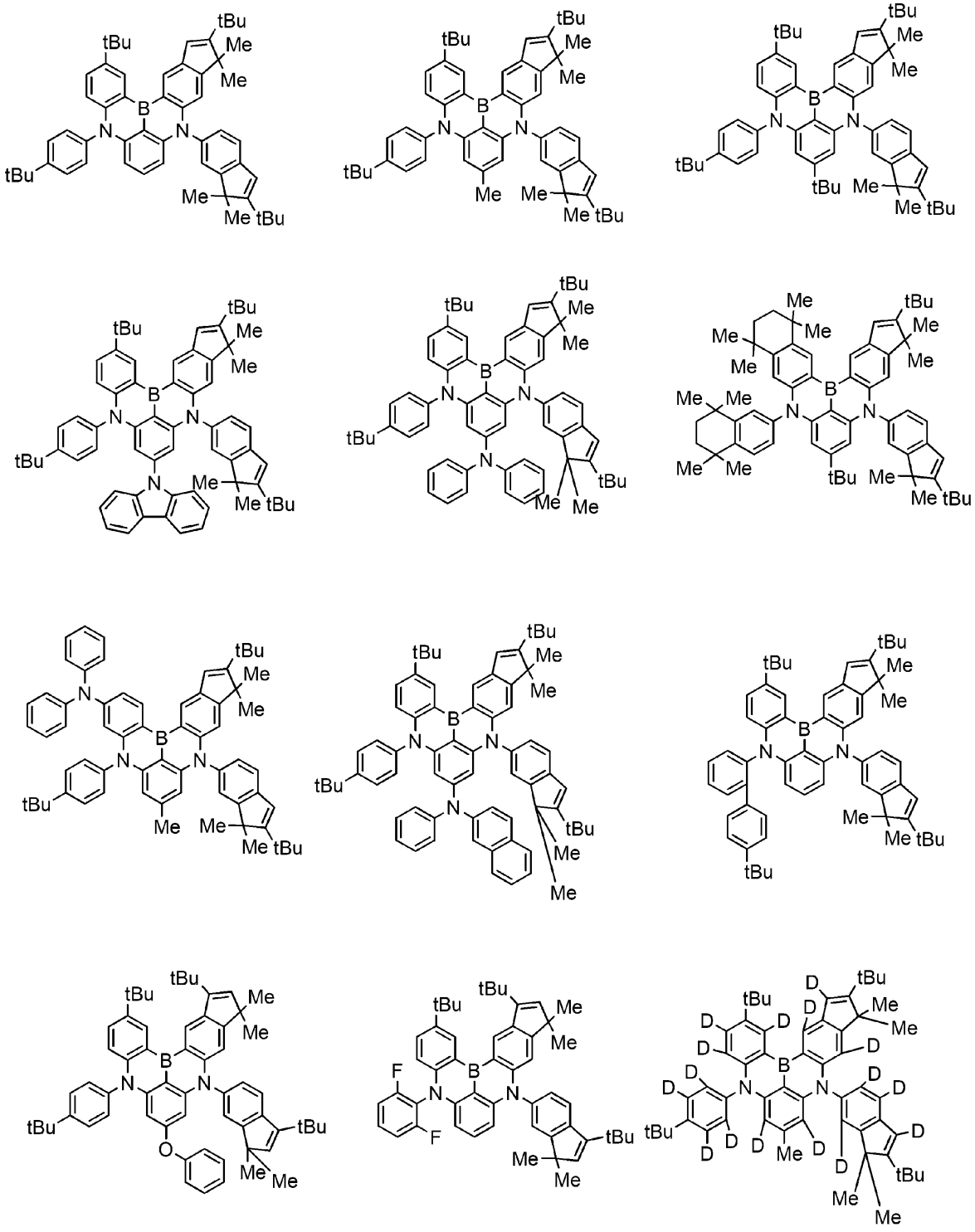
【０３４１】

【化１８２】



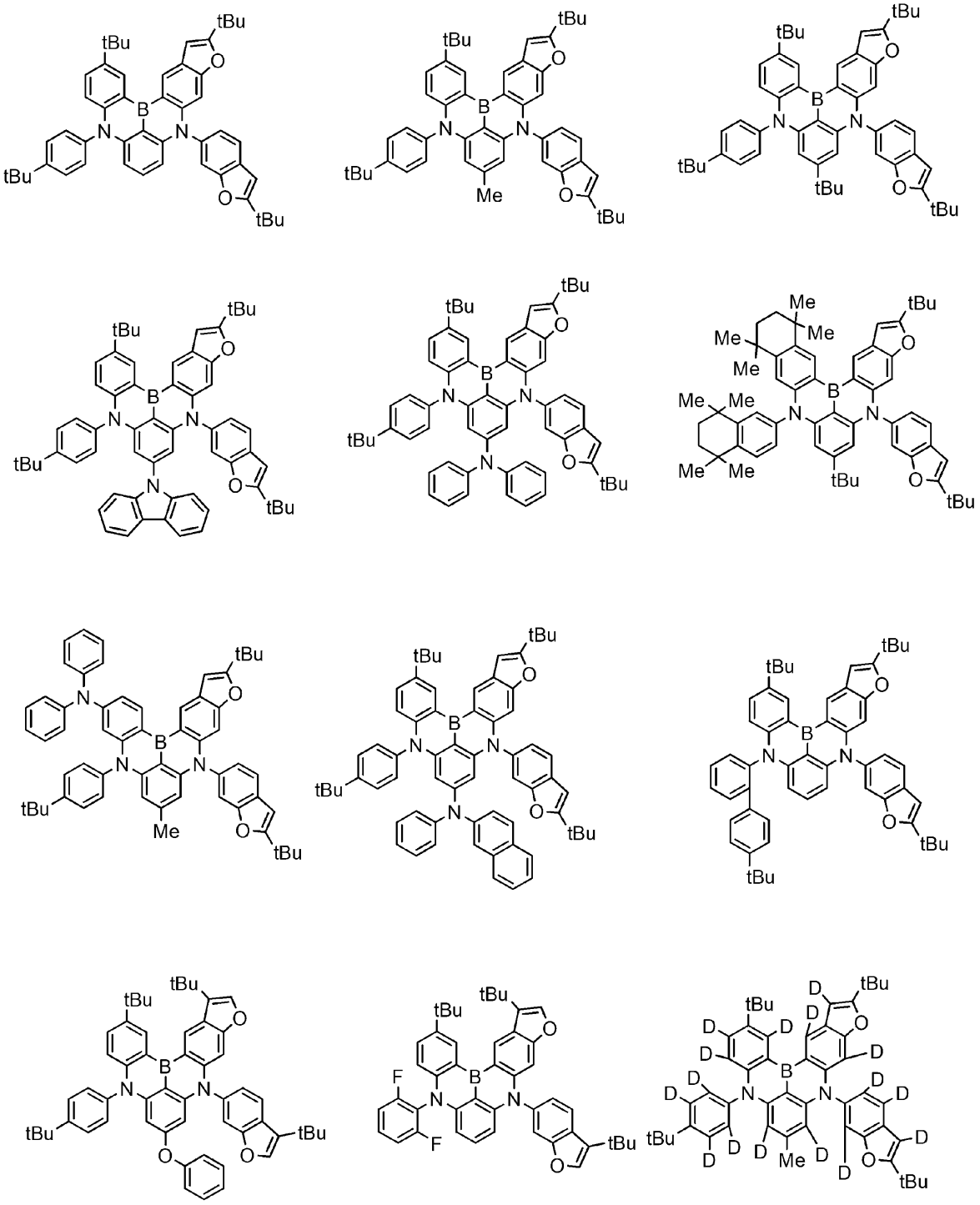
【０３４２】

【化１８３】



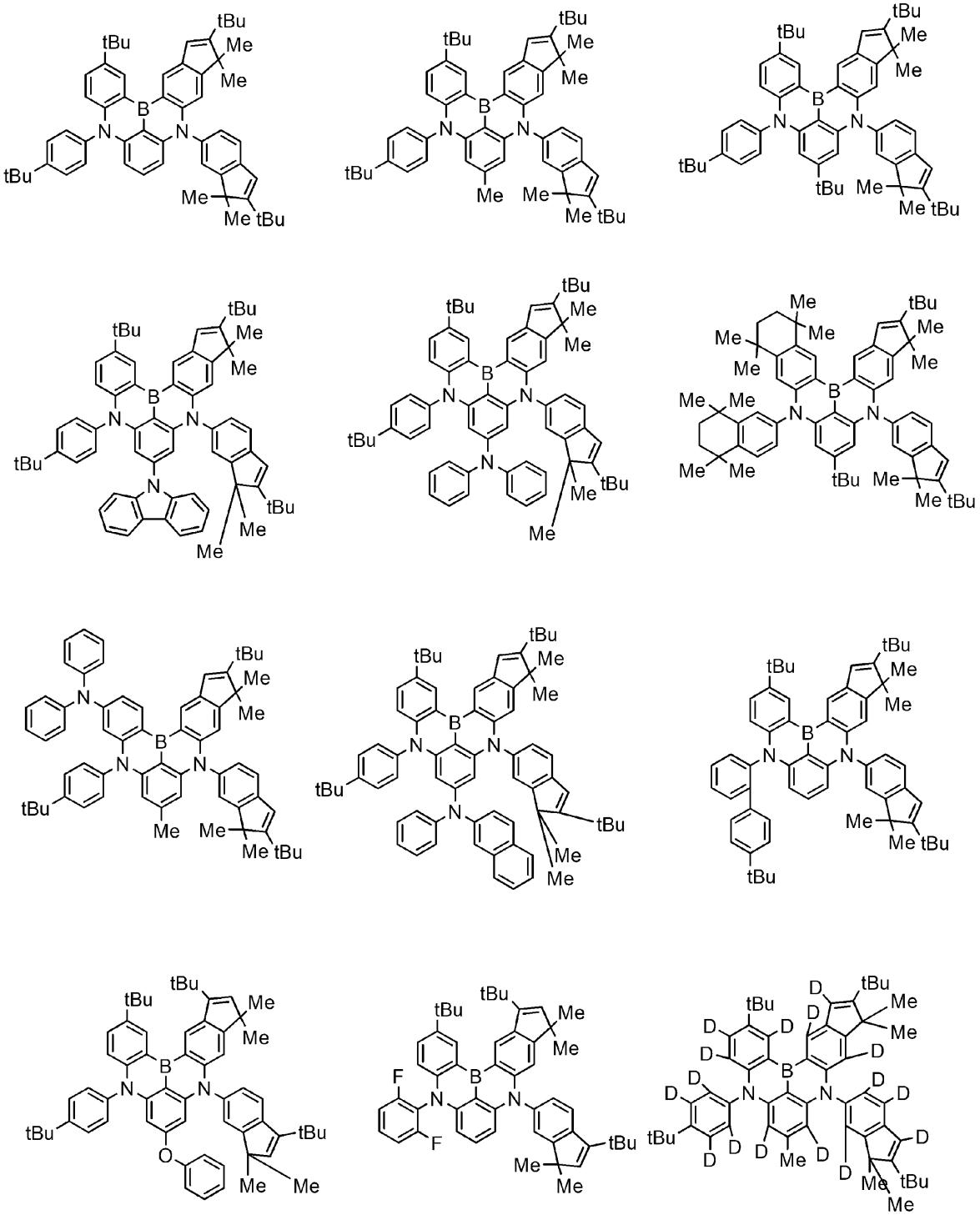
【０３４３】

【化１８４】



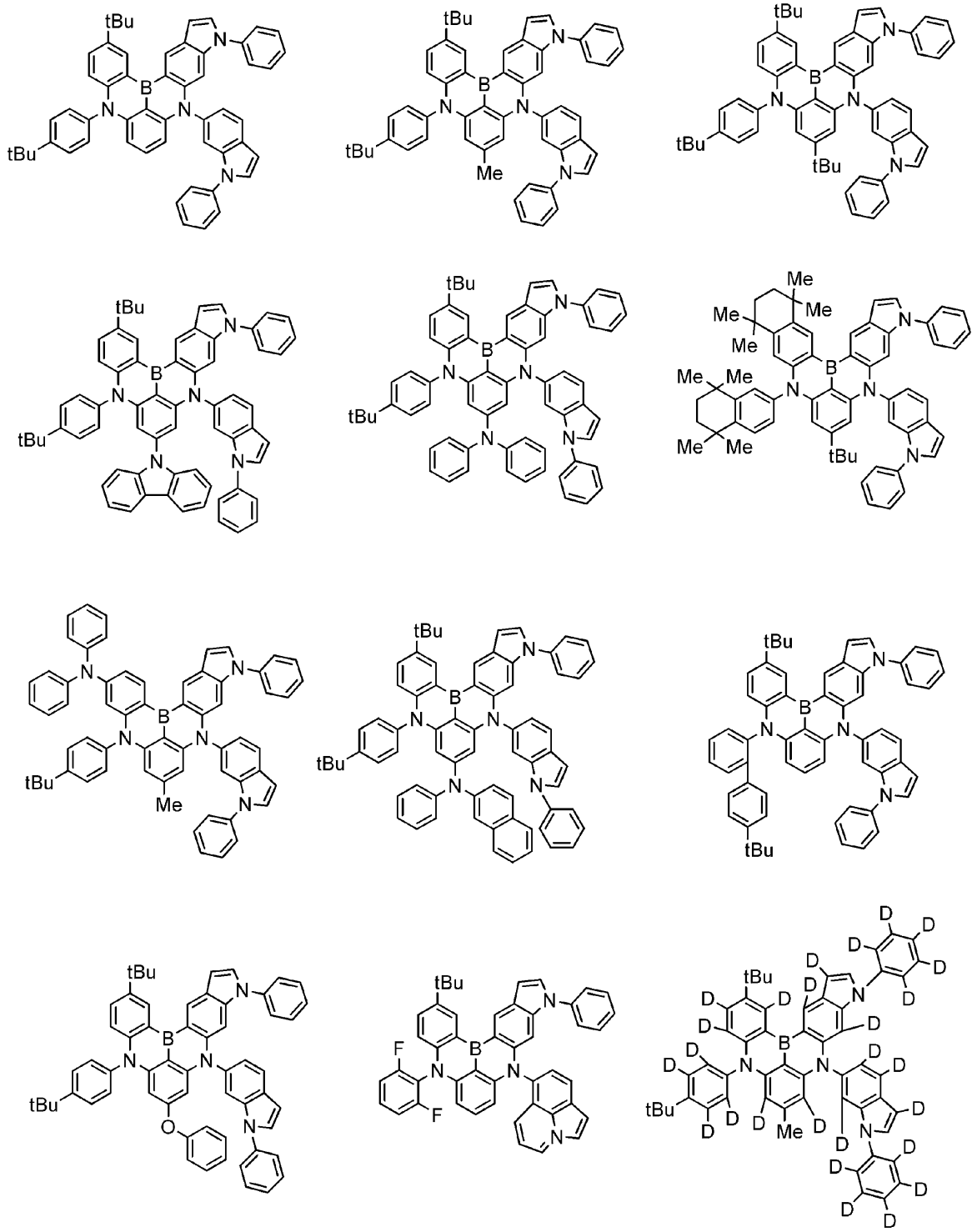
【０３４４】

【化１８５】



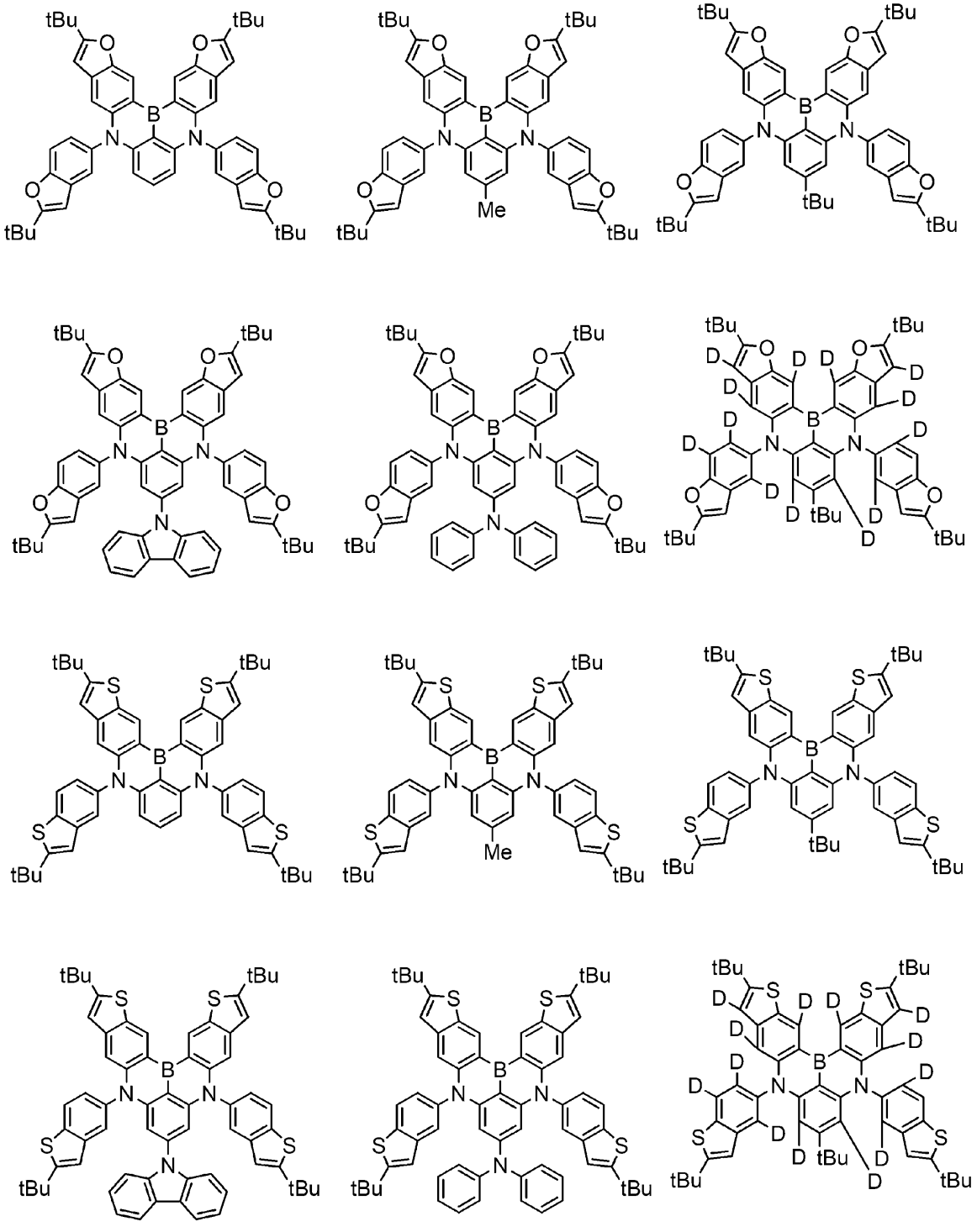
【０３４５】

【化１８６】



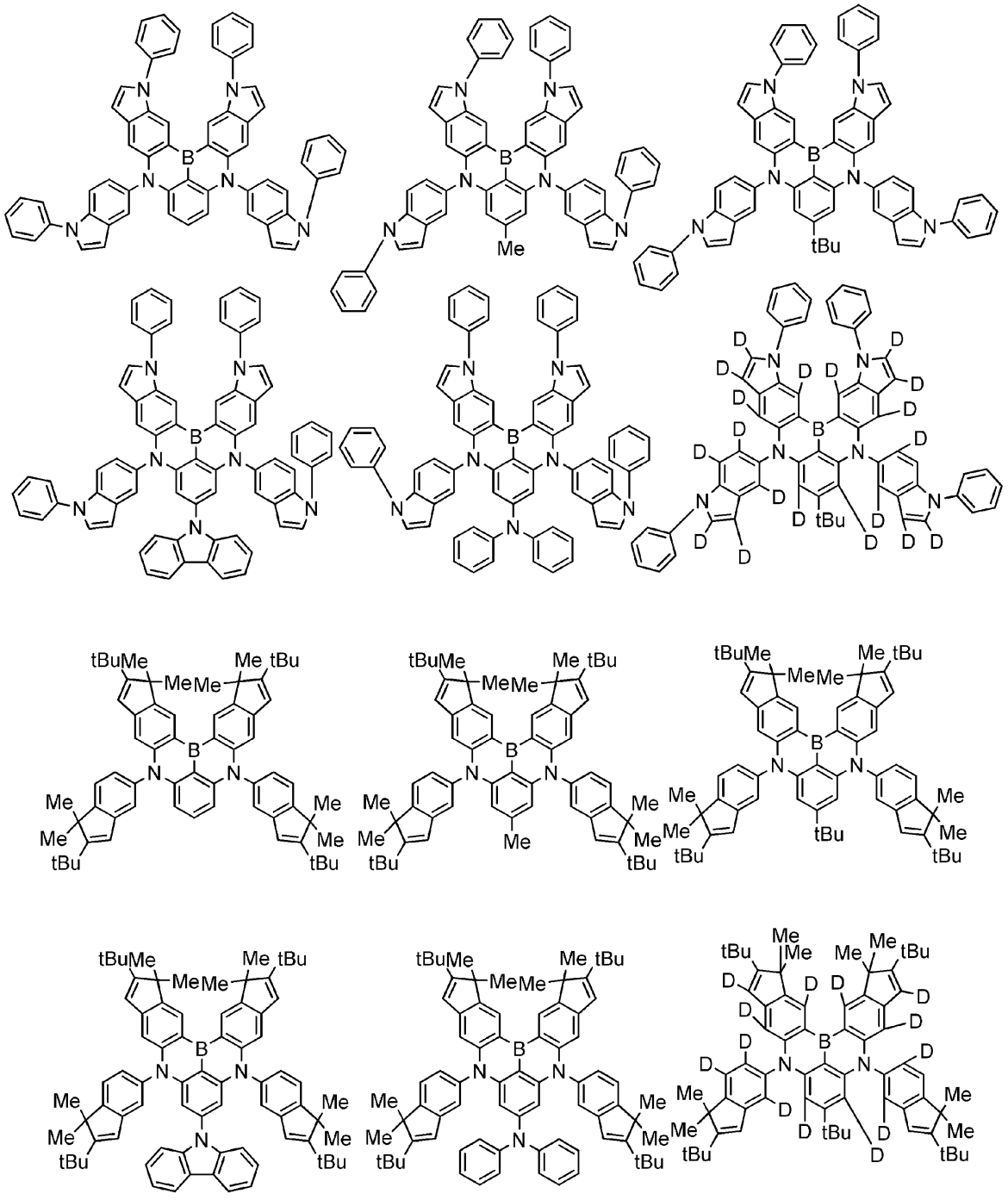
【０３４６】

【化１８７】



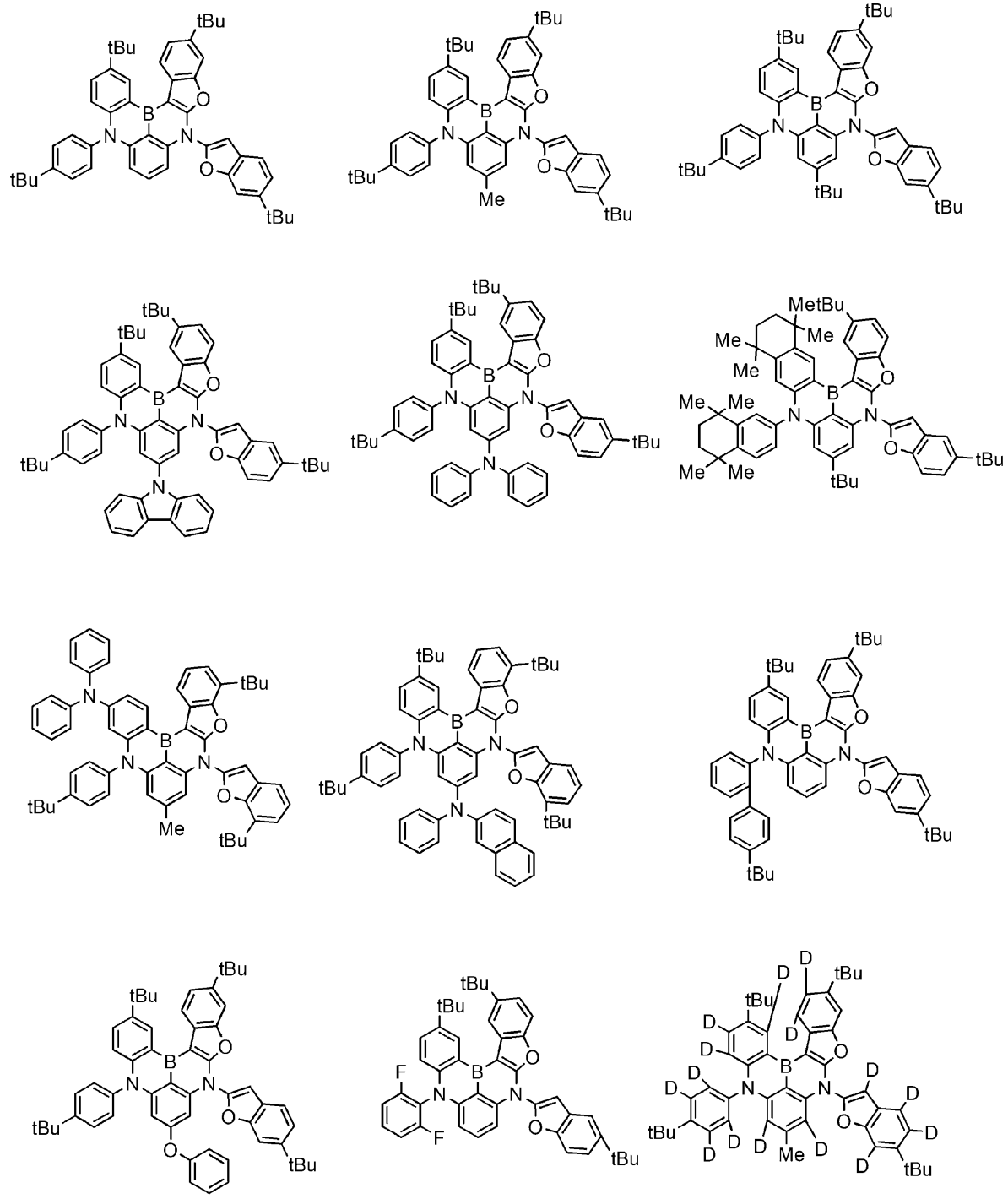
【０３４７】

【化１８８】



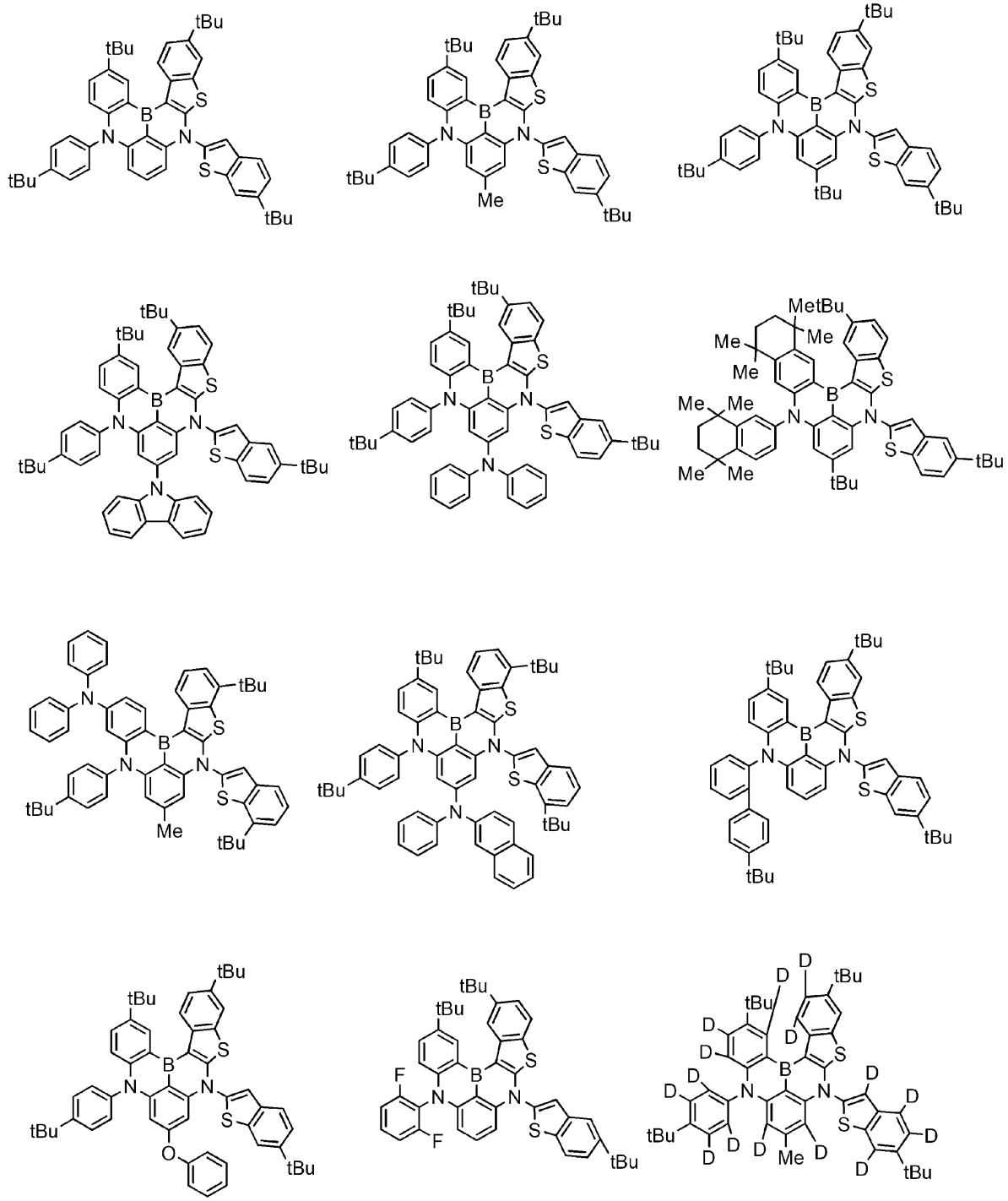
【０３４８】

【化１８９】



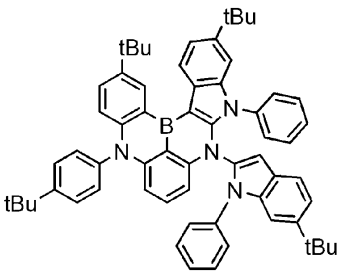
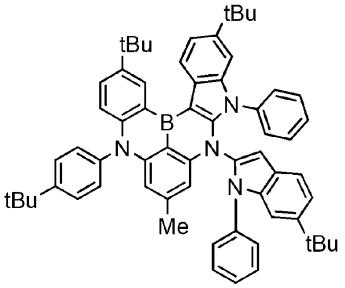
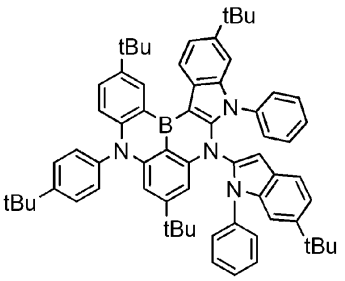
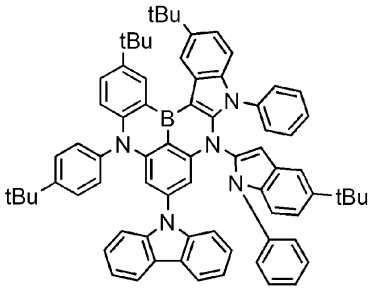
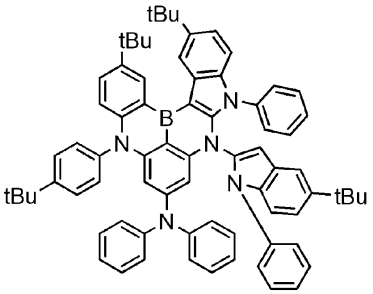
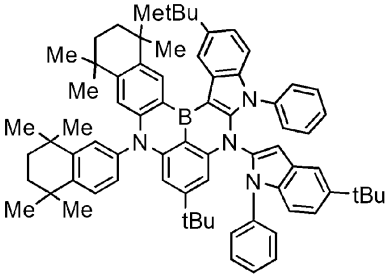
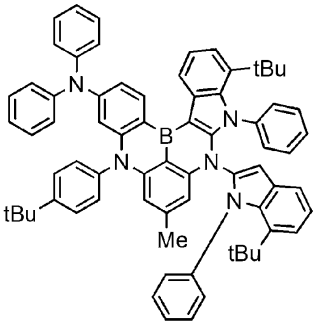
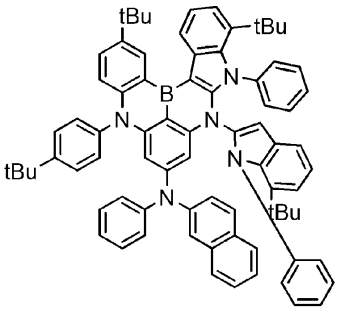
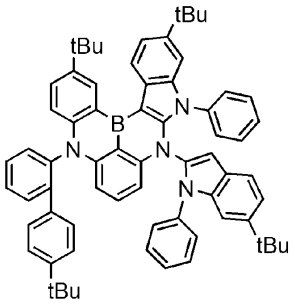
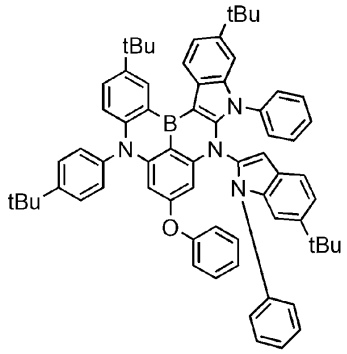
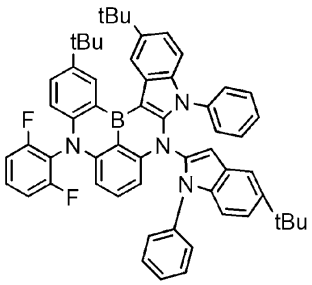
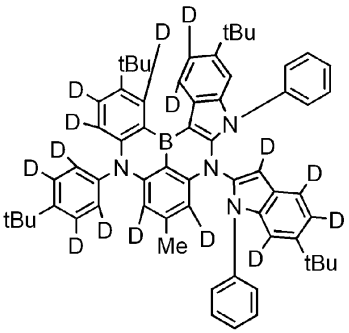
【０３４９】

【化１９０】



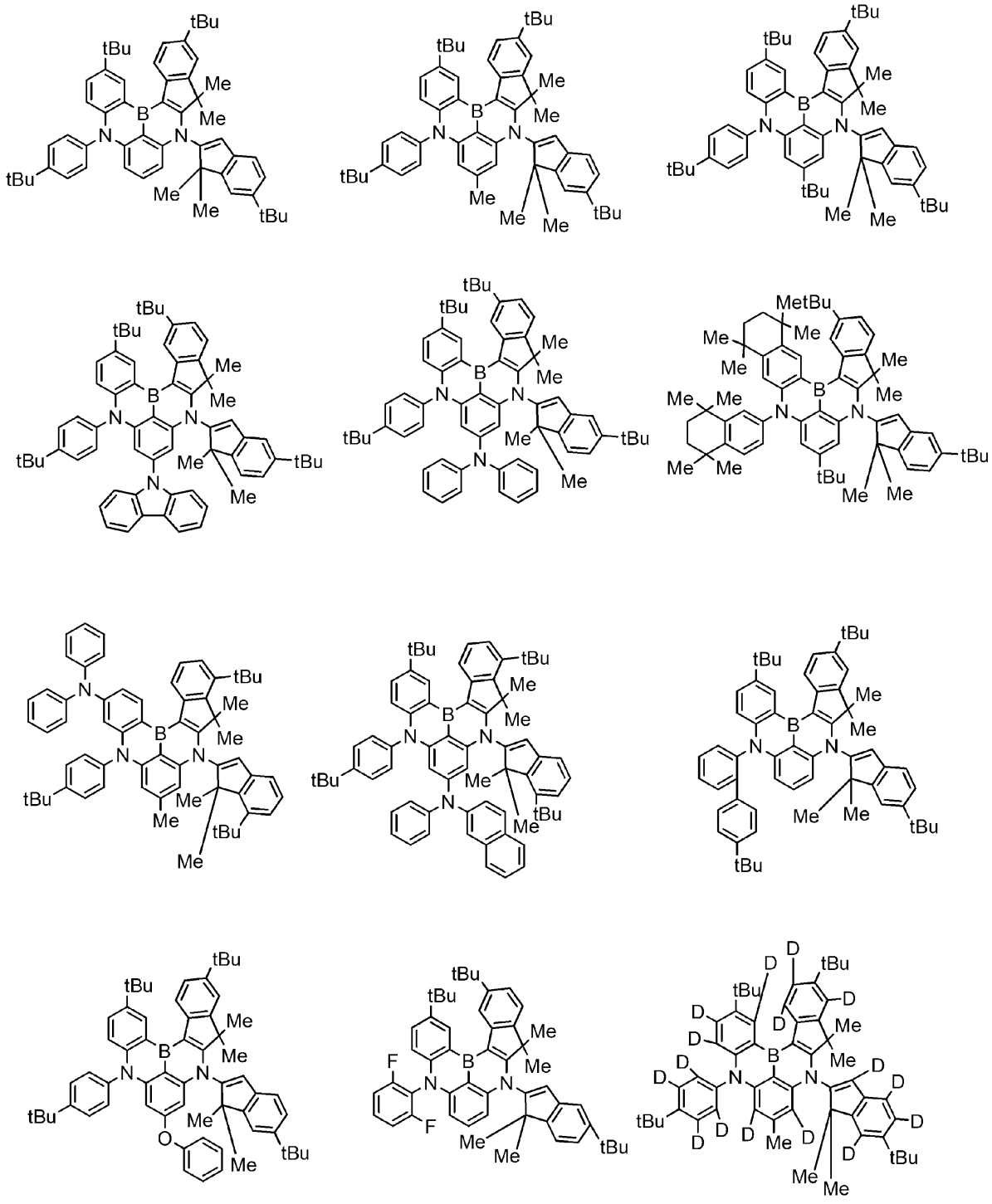
【０３５０】

【化１９１】

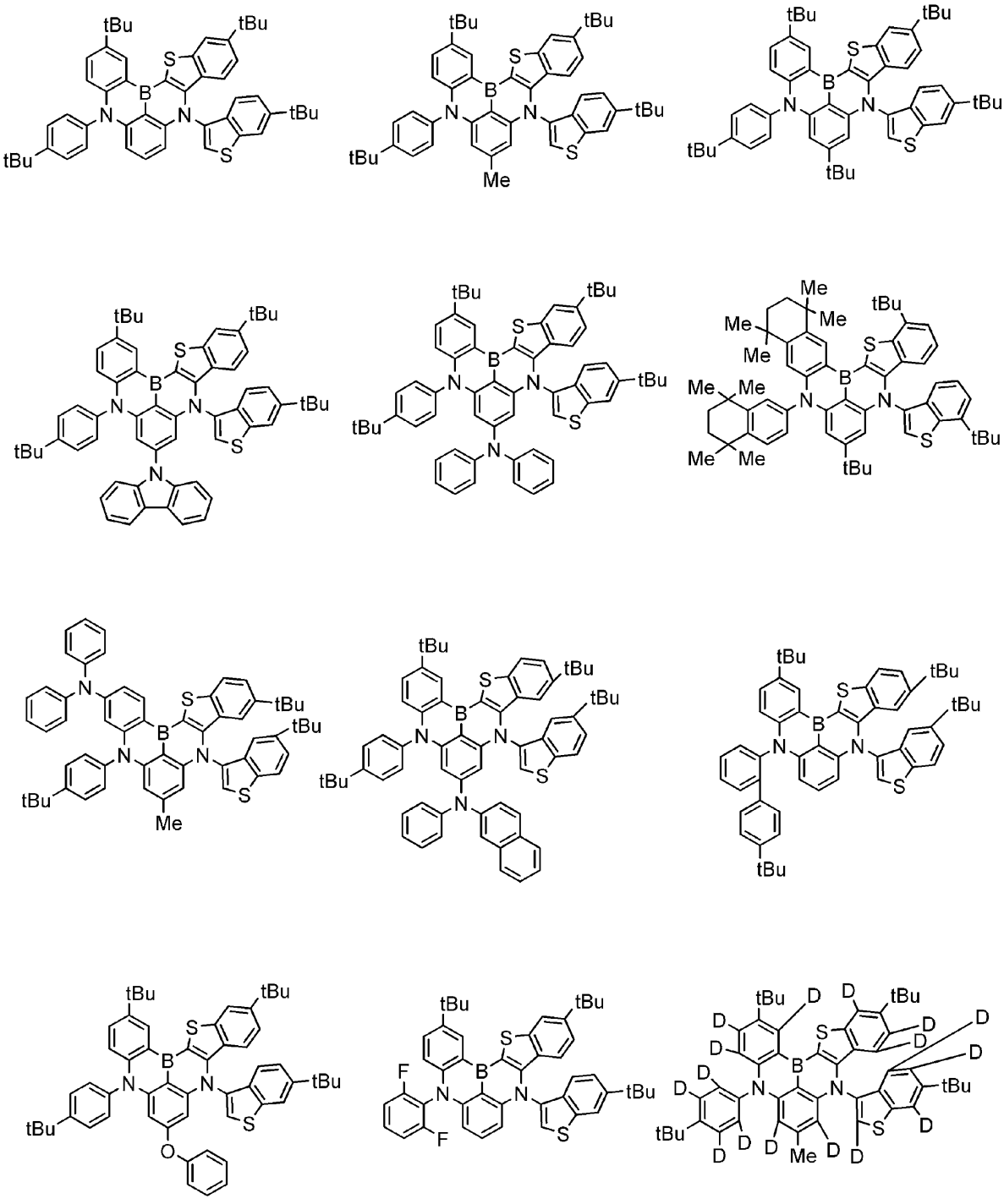
【０３５１】

【化１９２】



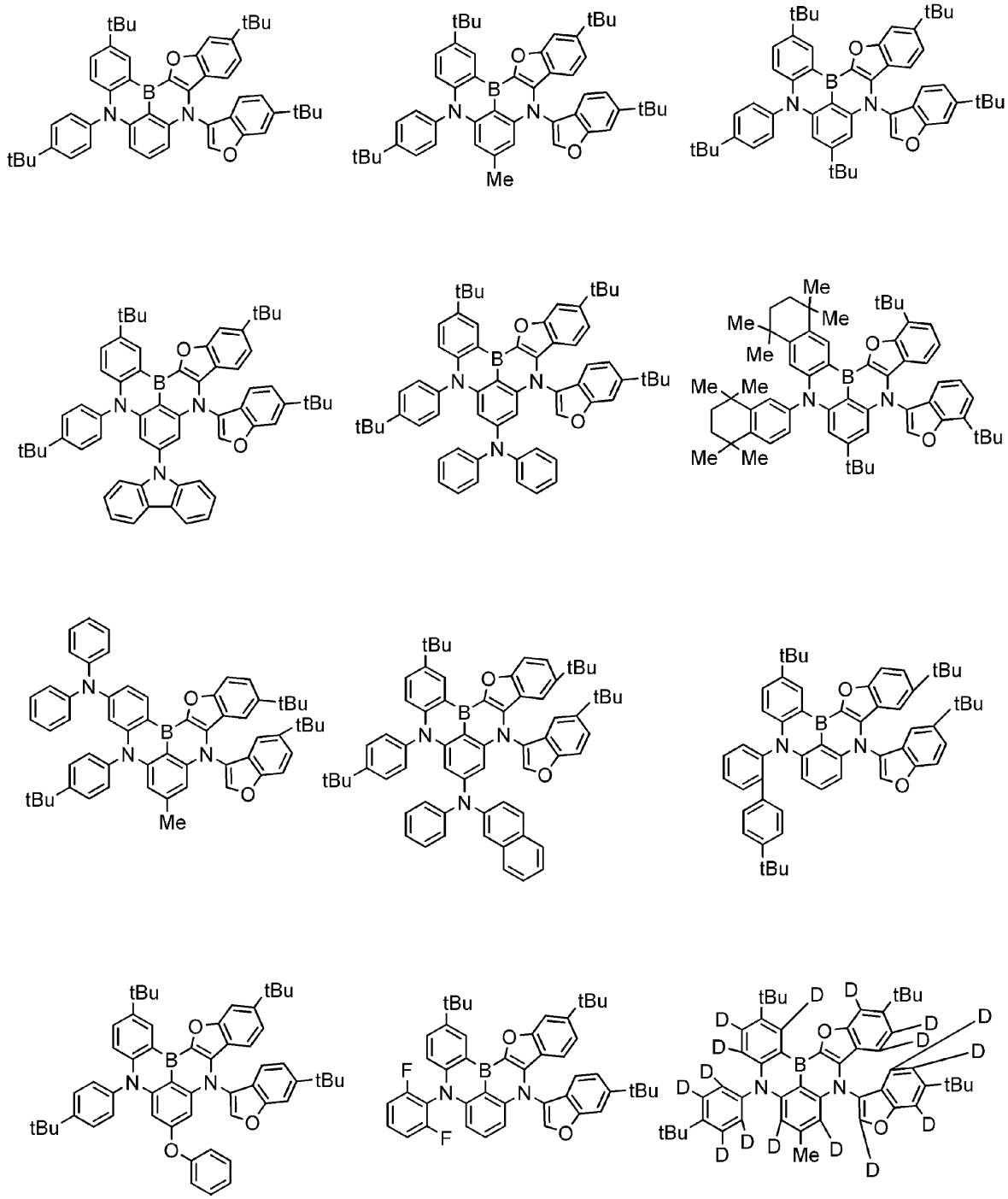
【０３５２】

【化１９３】



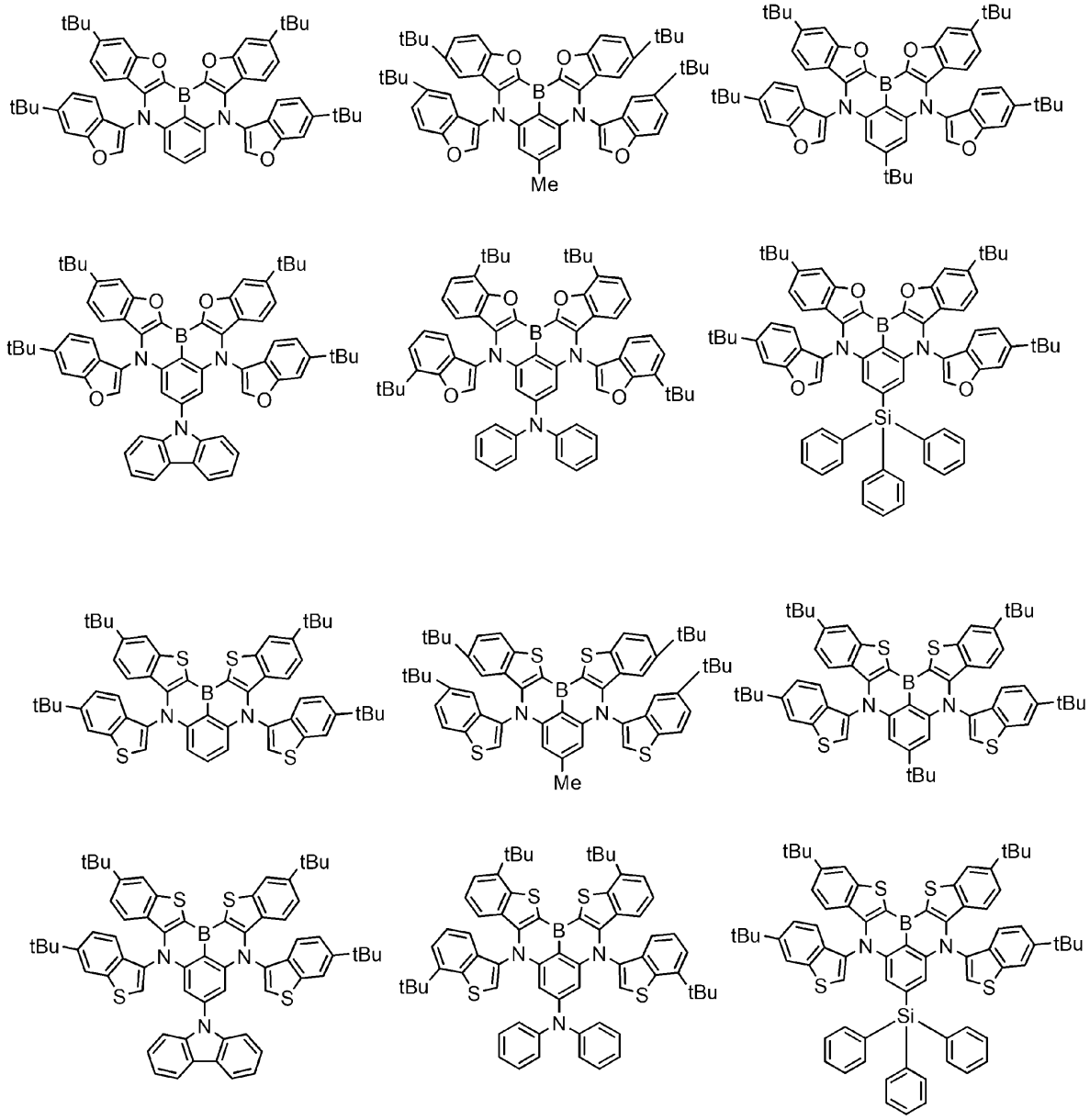
【０３５３】

【化１９４】



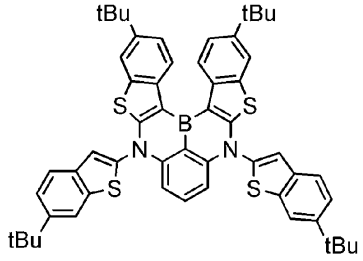
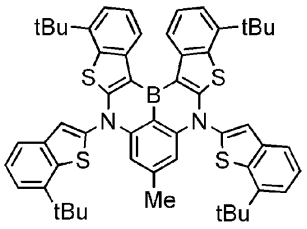
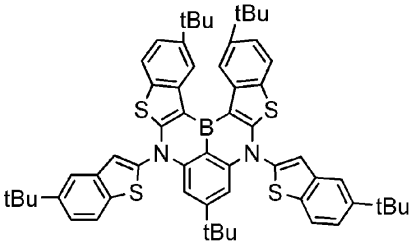
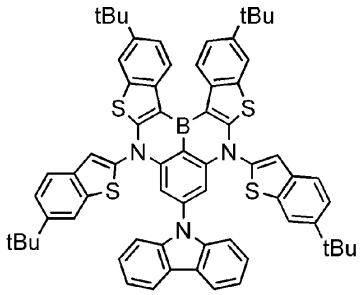
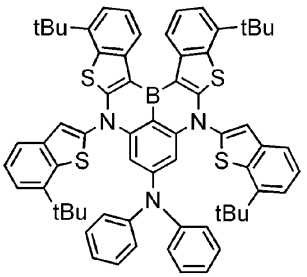
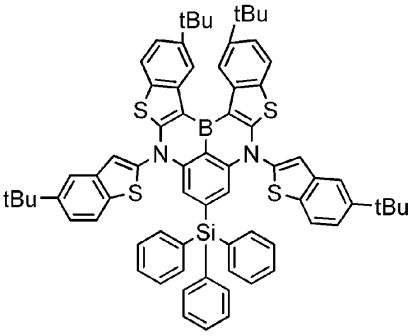
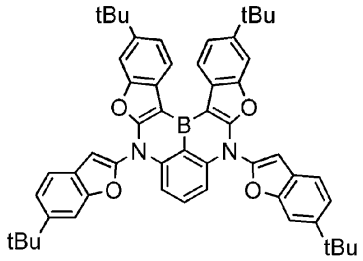
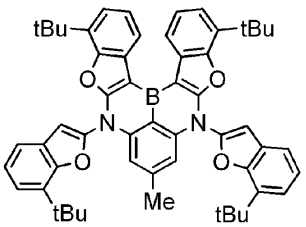
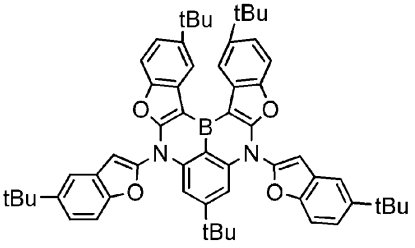
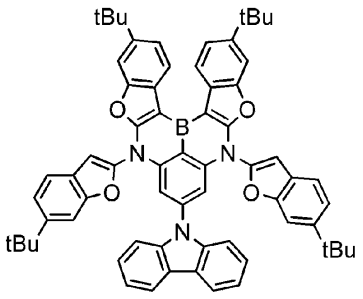
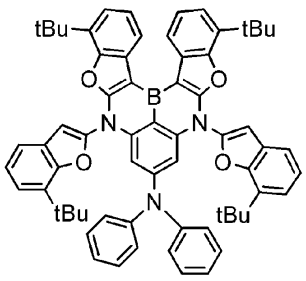
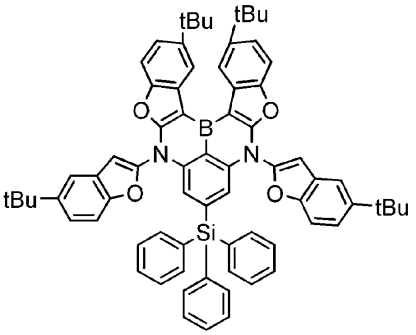
【０３５４】

【化１９５】



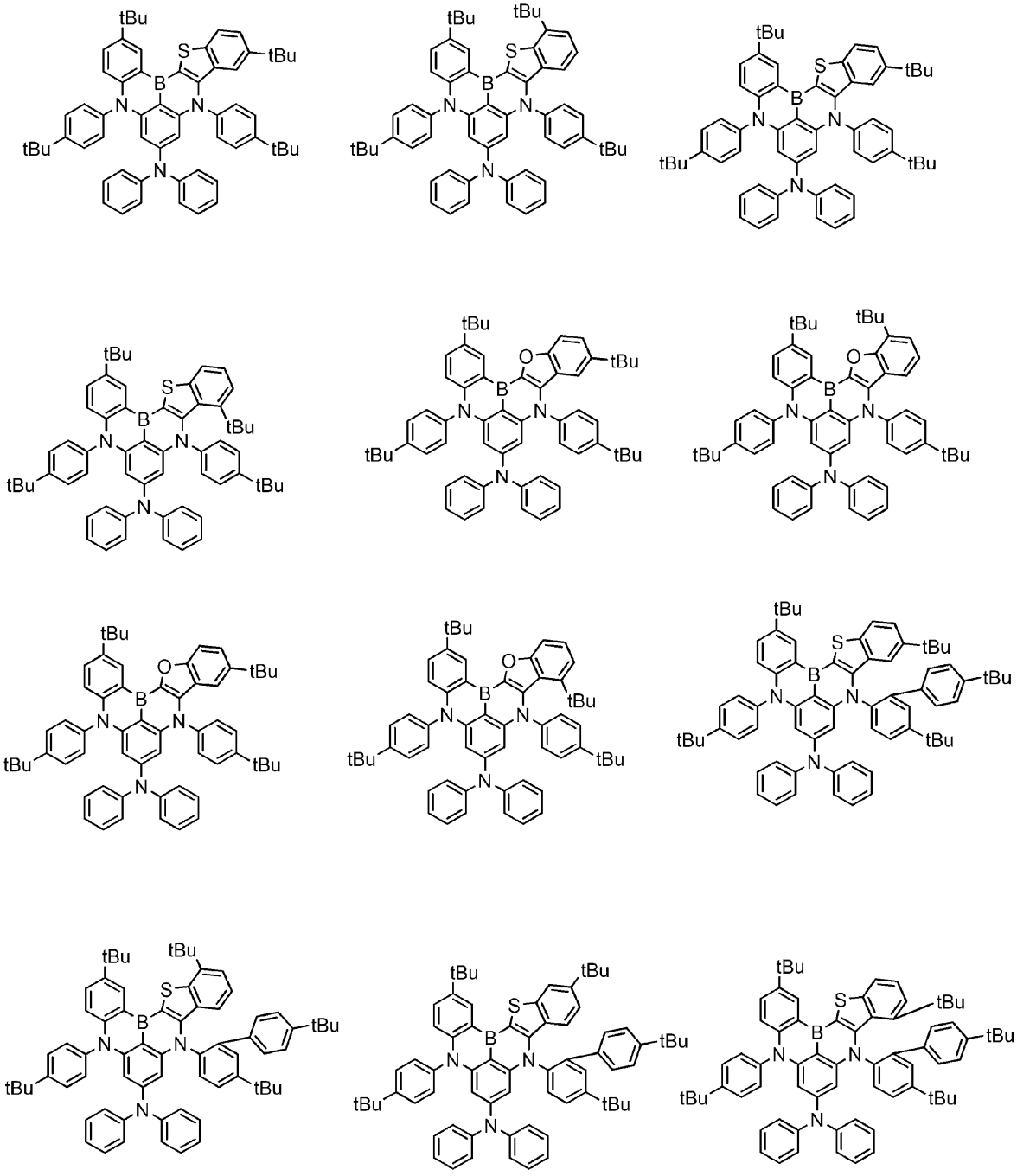
【０３５５】

【化１９６】

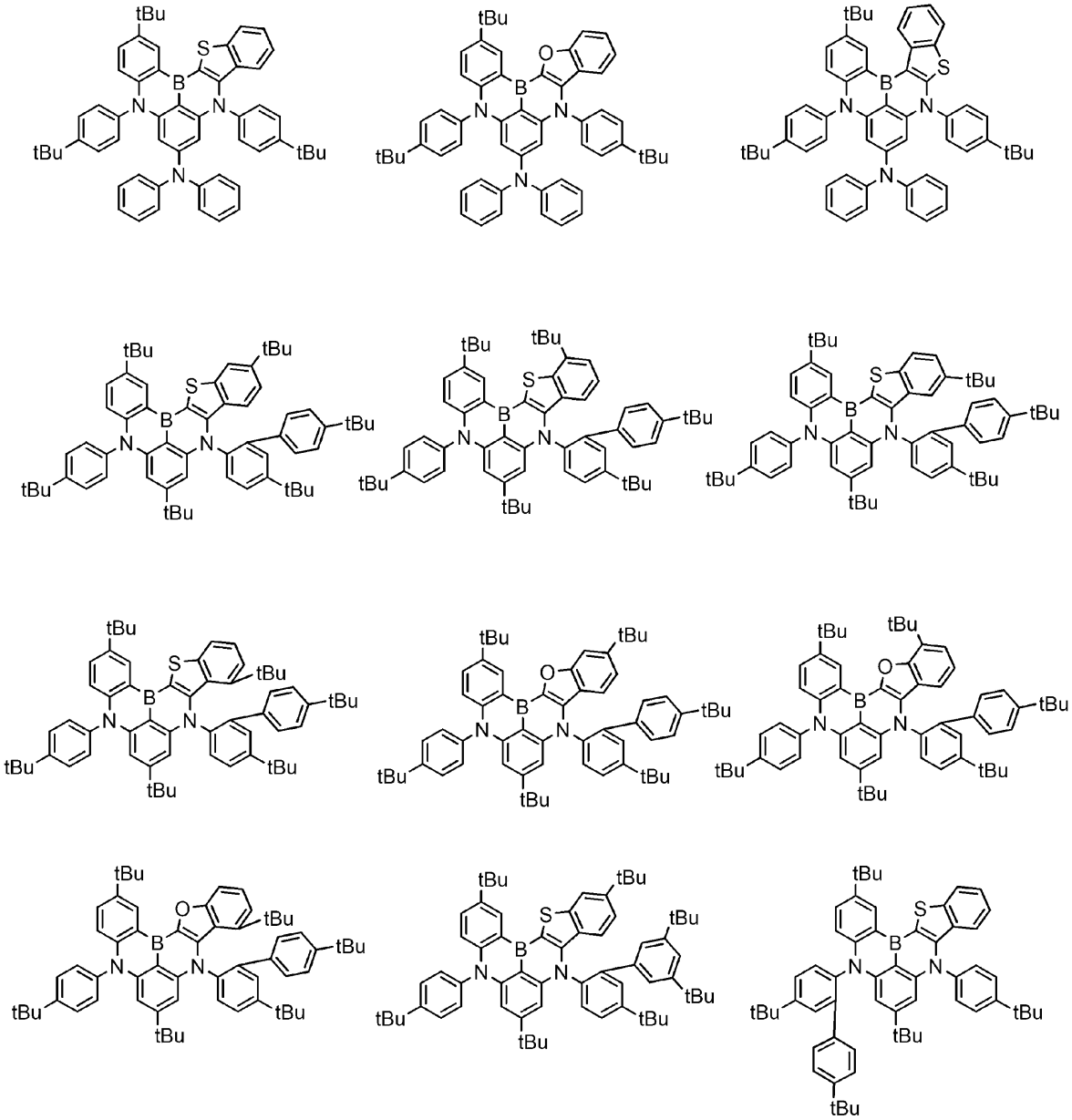
【０３５６】

【化１９７】



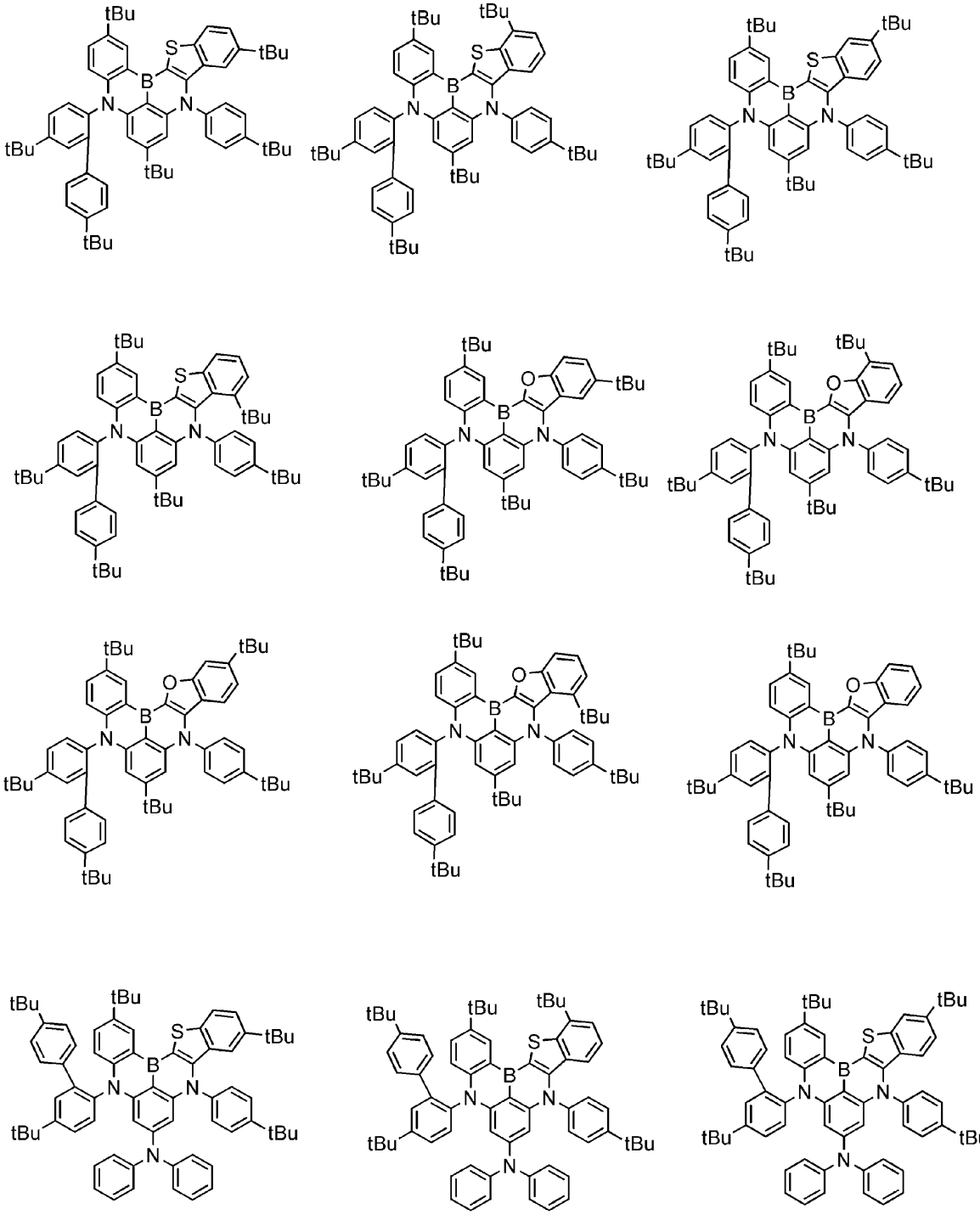
【０３５７】

【化１９８】



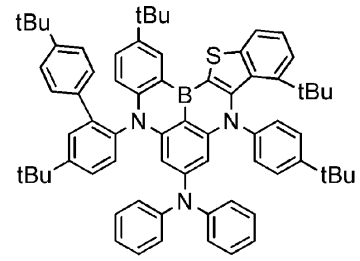
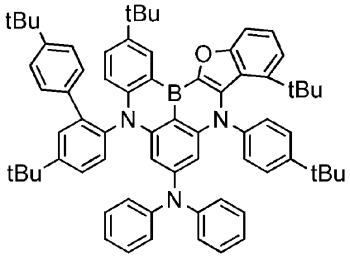
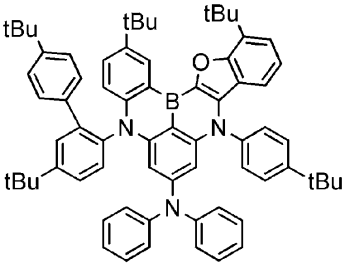
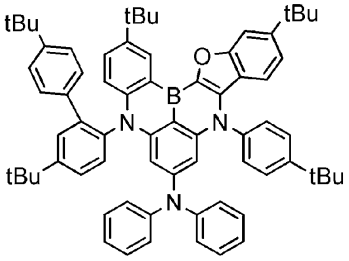
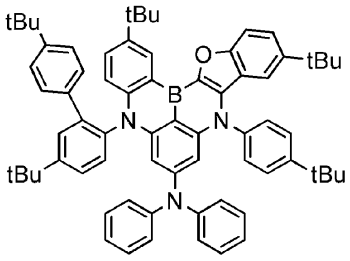
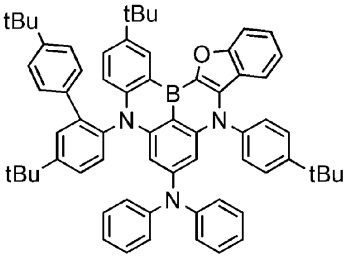
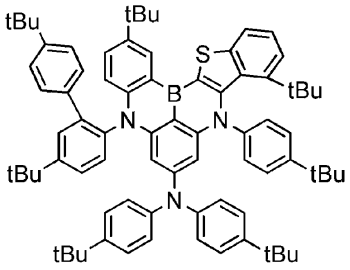
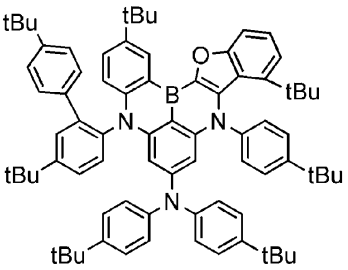
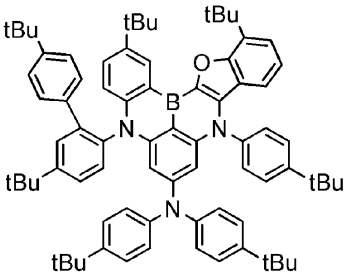
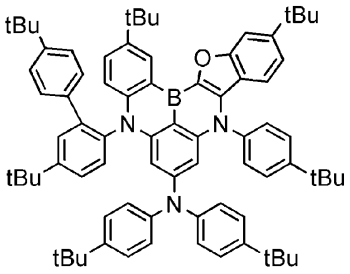
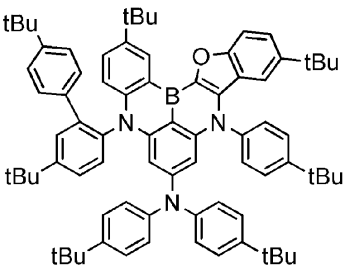
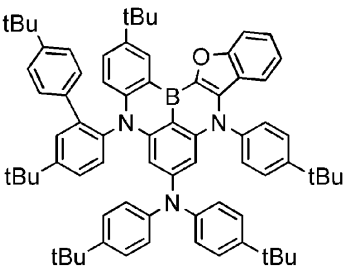
【０３５８】

【化１９９】



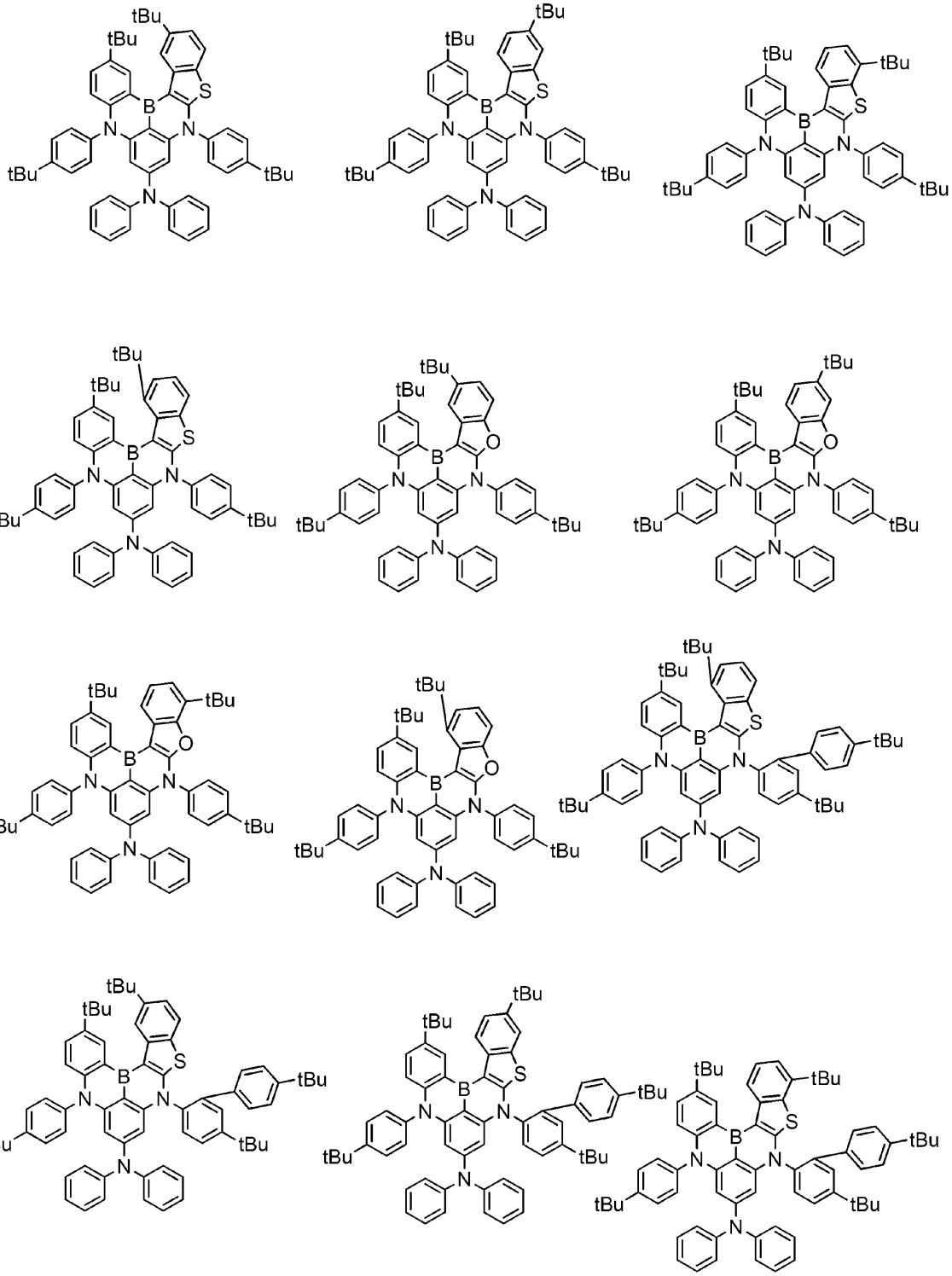
【０３５９】

【化２００】

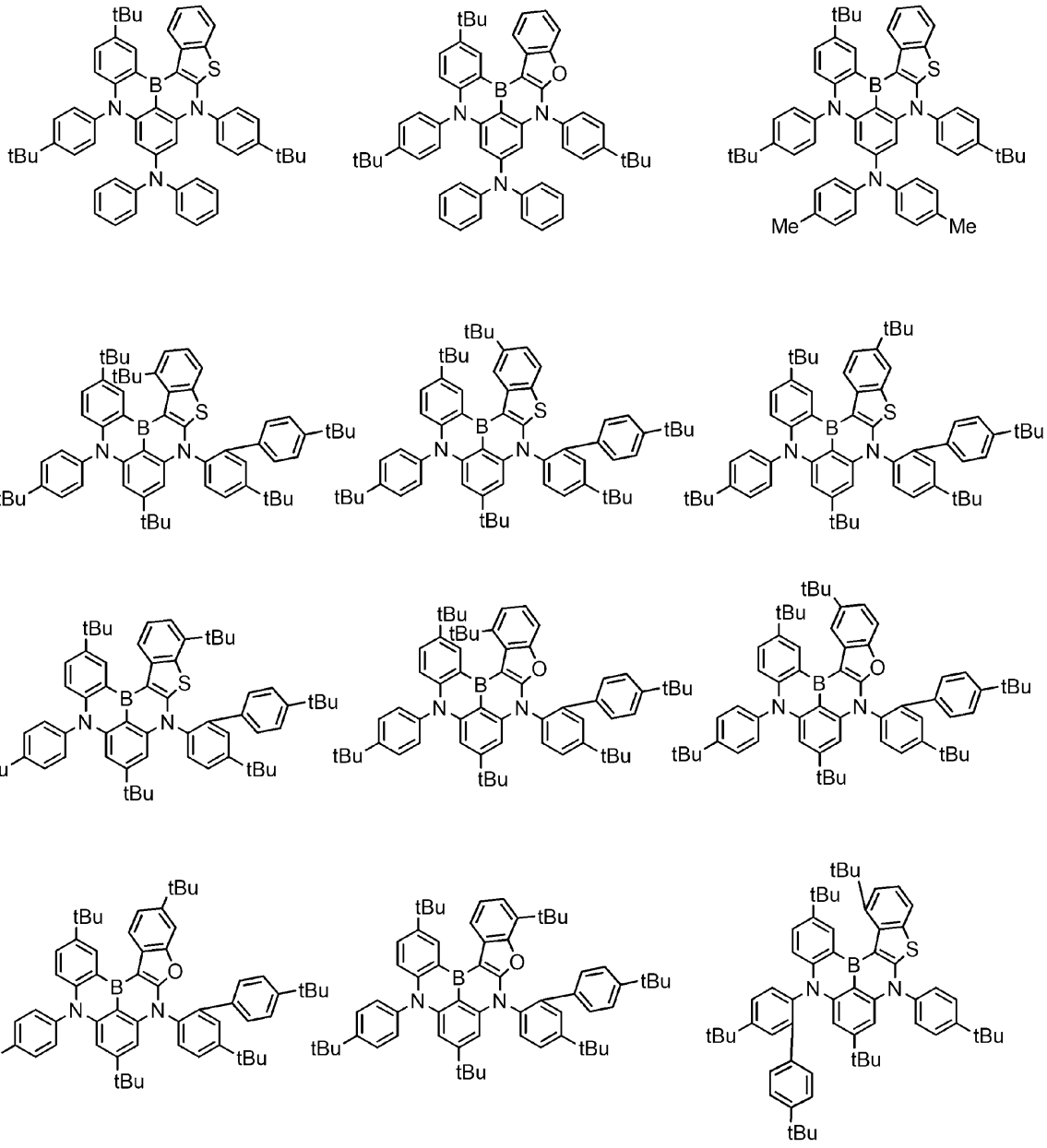
【０３６０】

【化２０１】



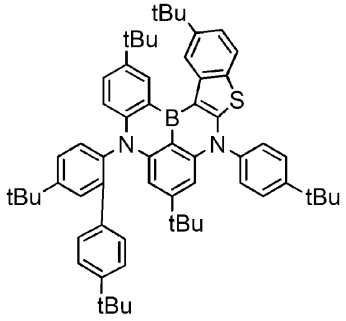
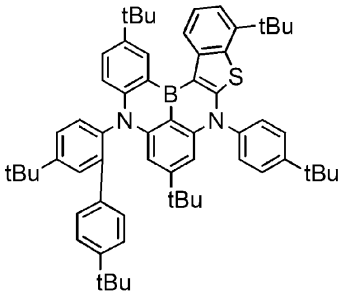
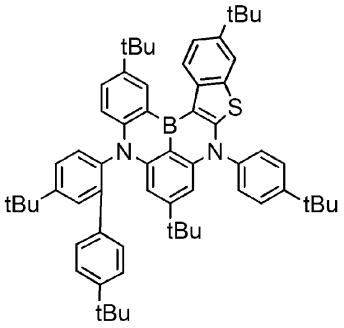
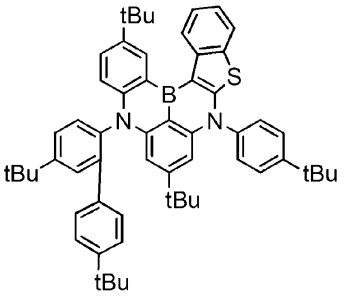
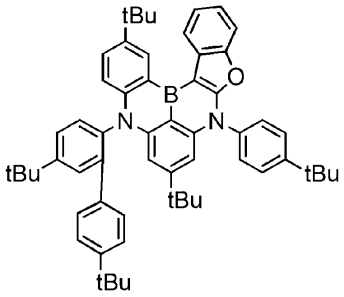
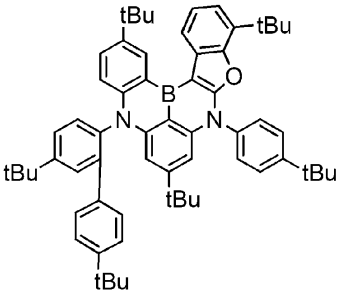
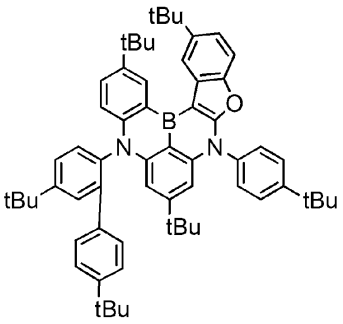
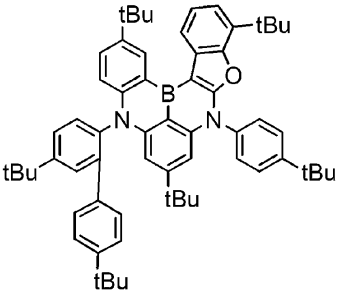
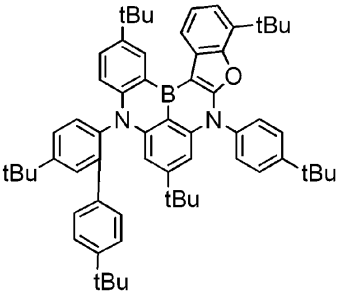
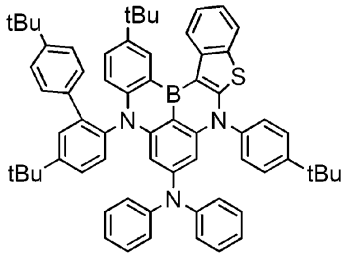
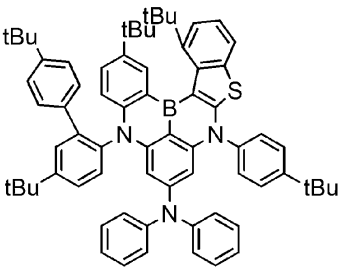
【０３６１】

【化２０２】



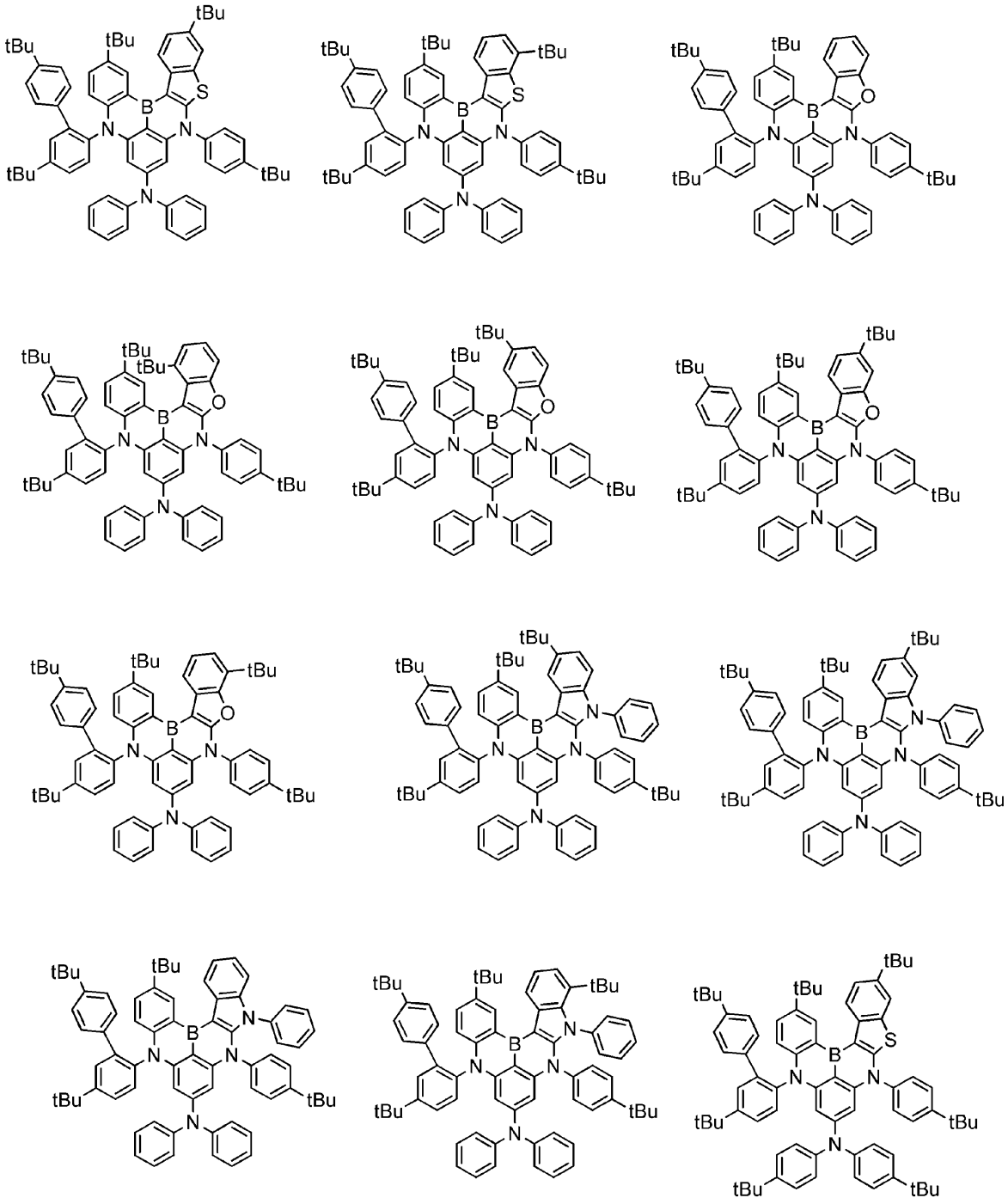
【０３６２】

【化２０３】

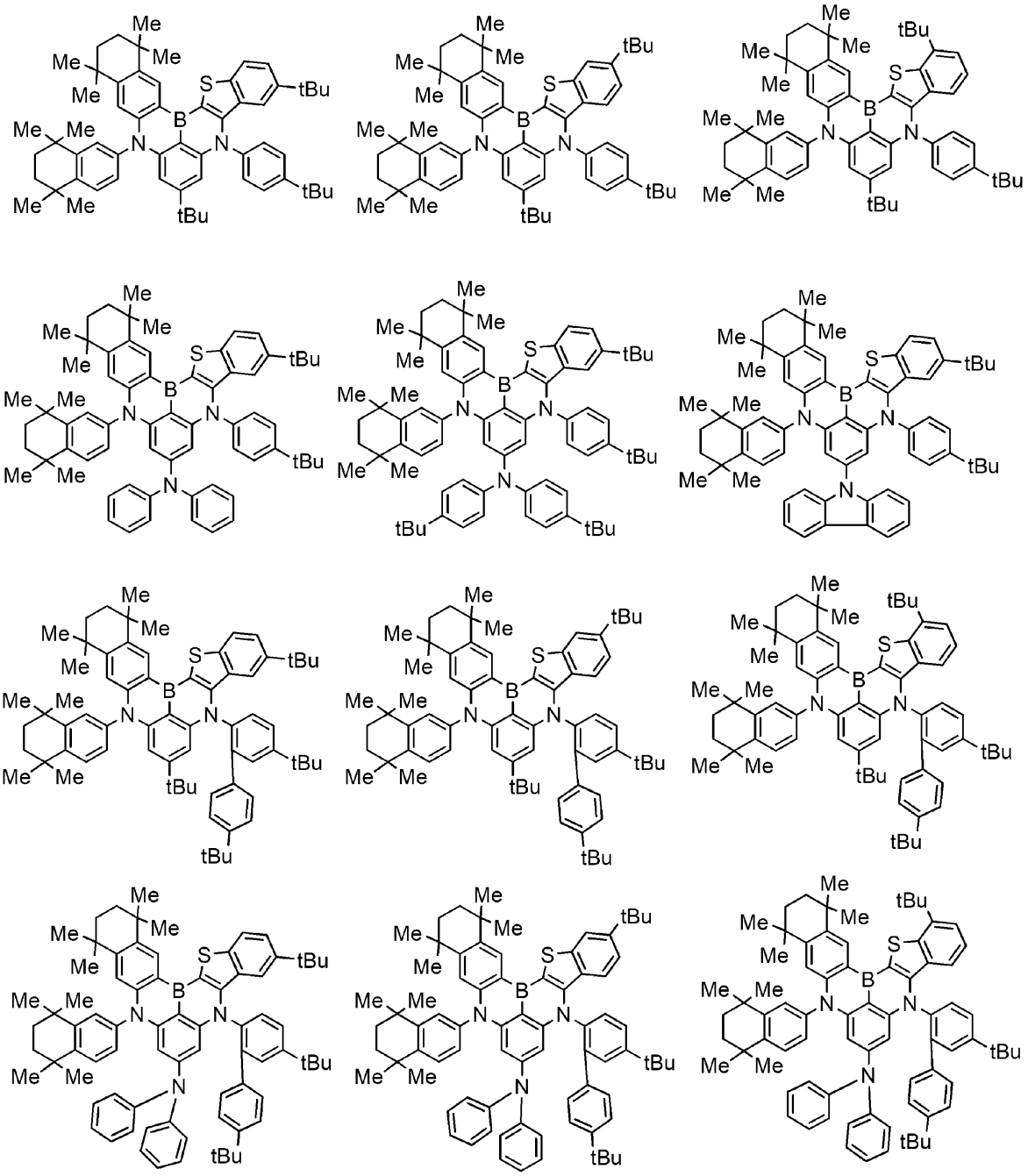
【０３６３】

【化２０４】



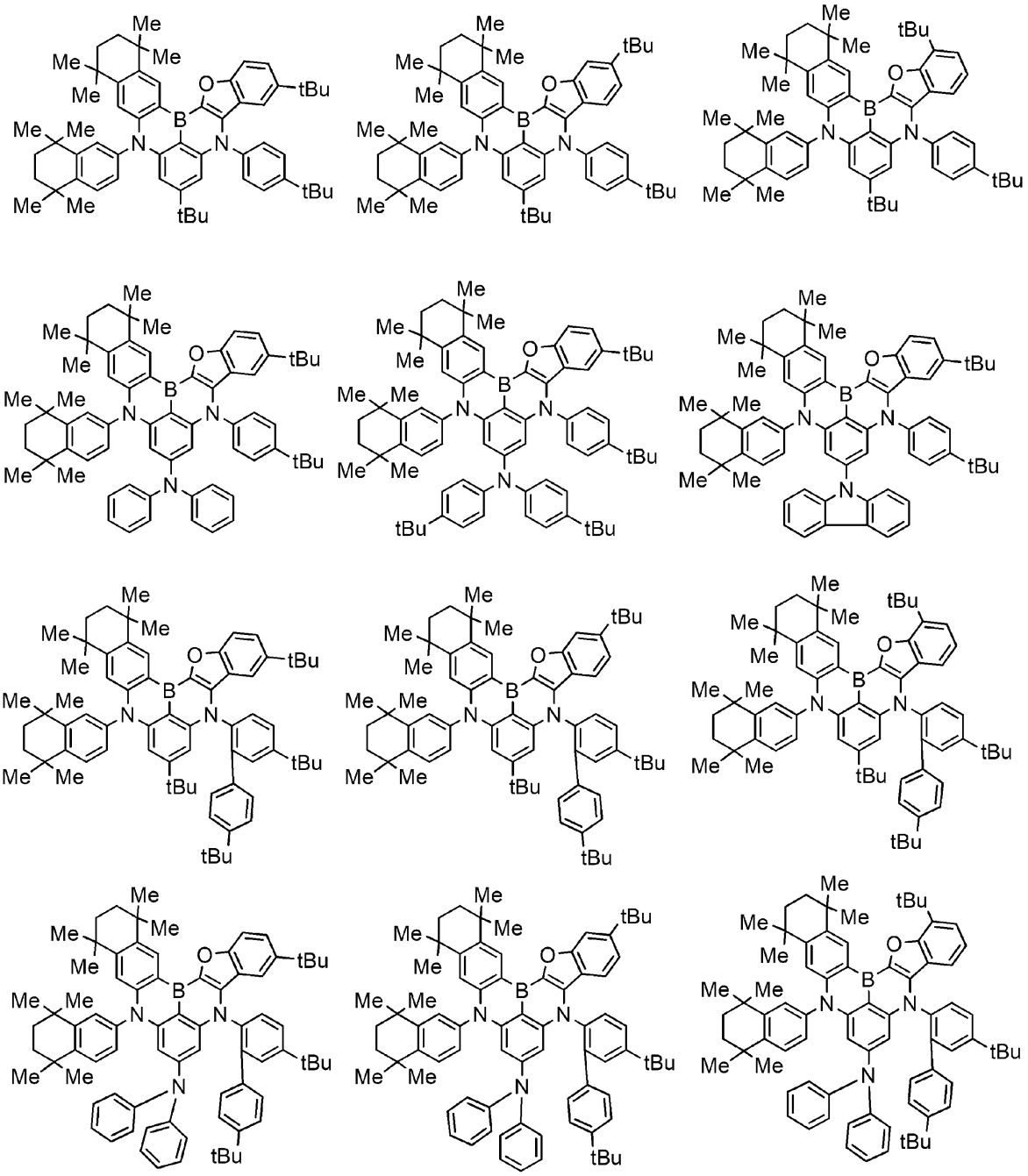
【０３６４】

【化２０５】



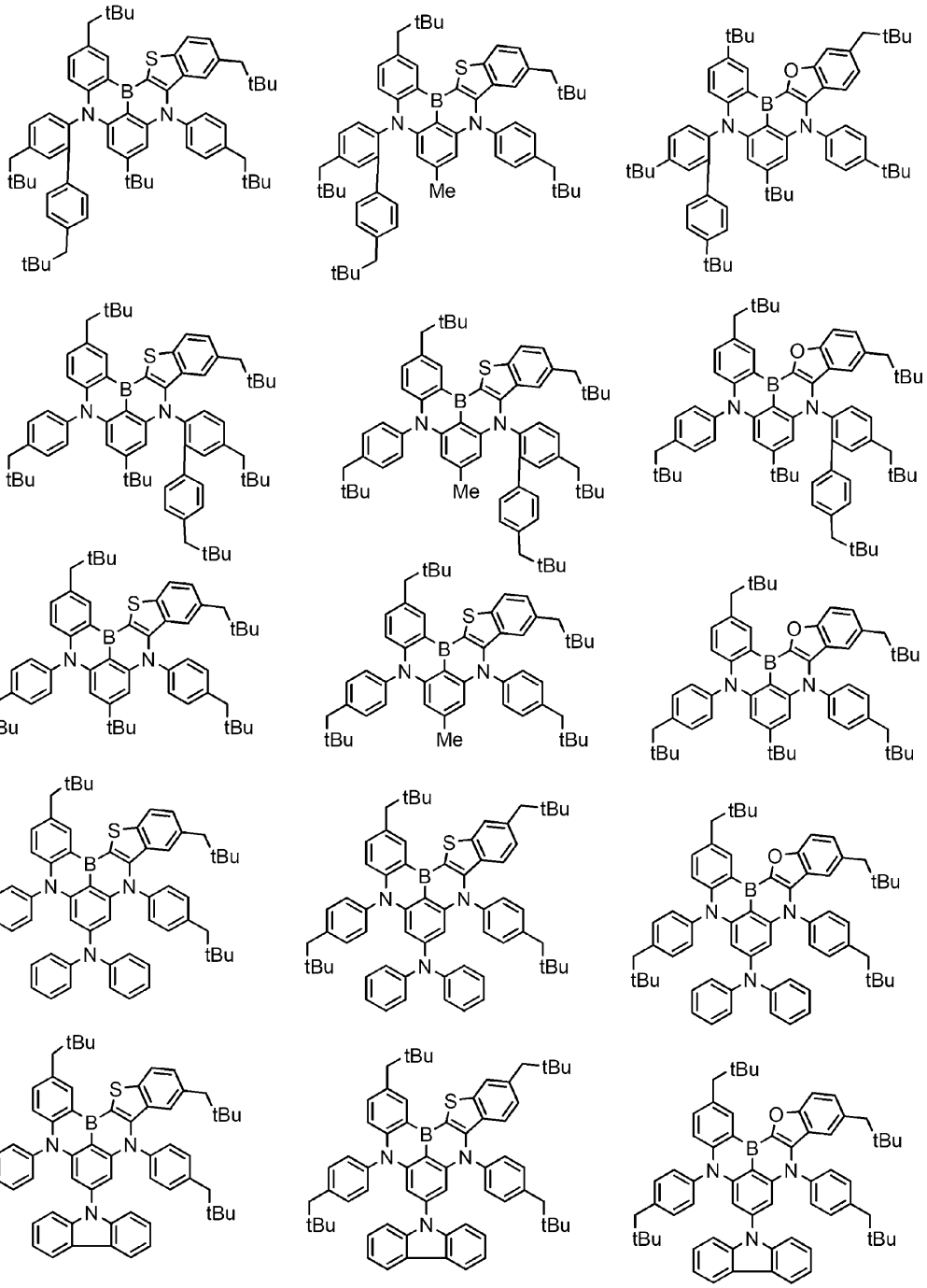
【０３６５】

【化２０６】



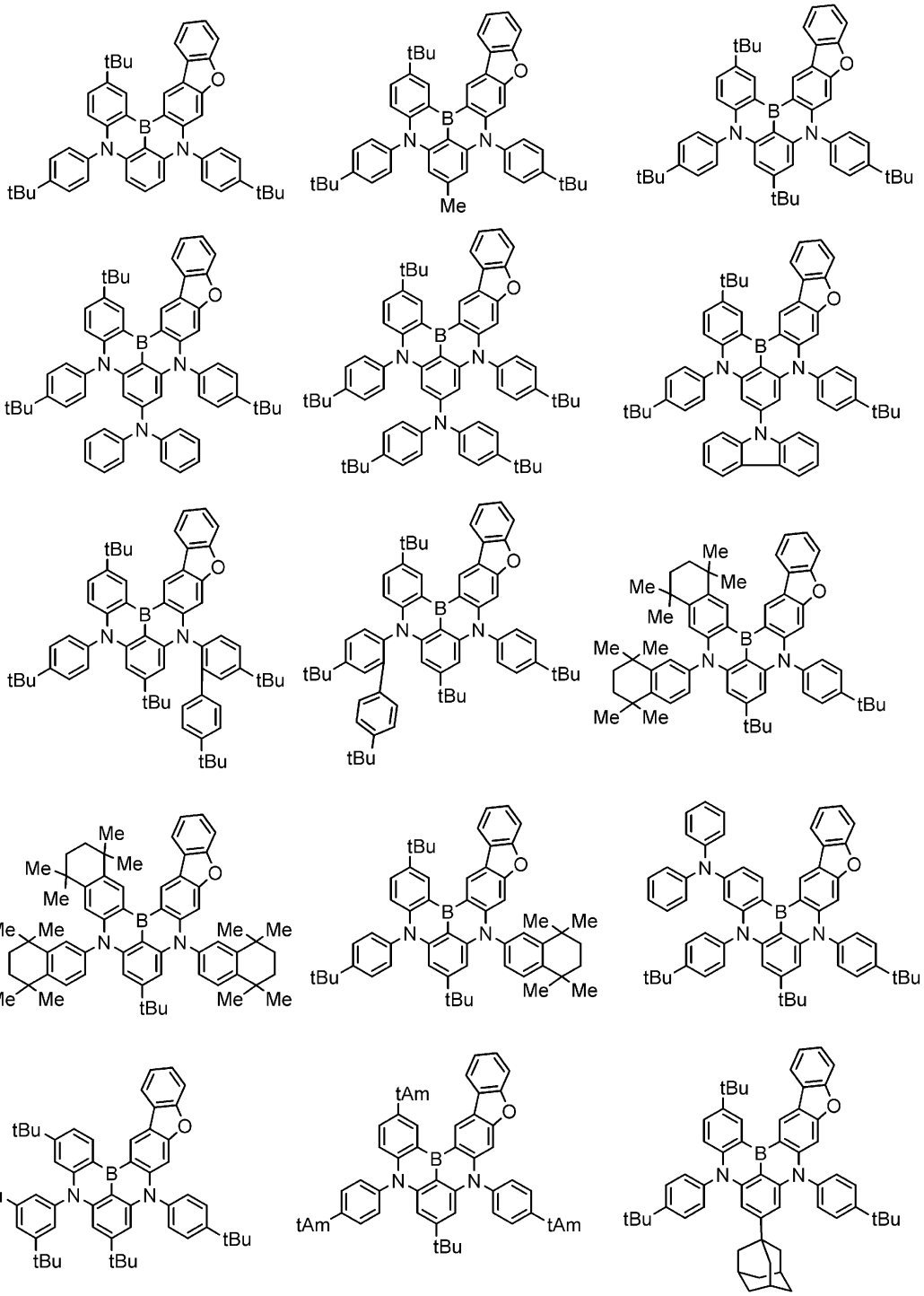
【０３６６】

【化２０７】



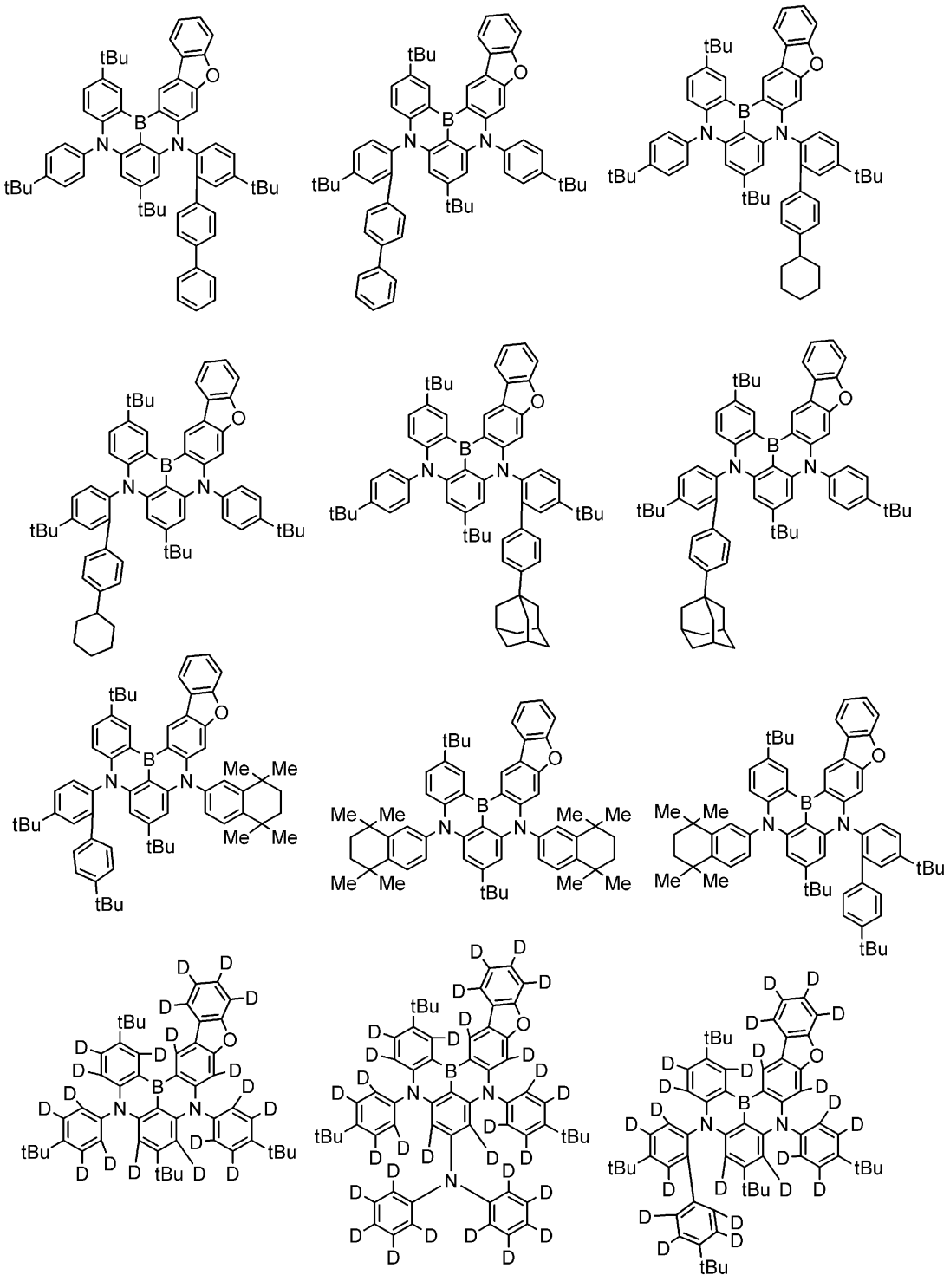
【０３６７】

【化２０８】



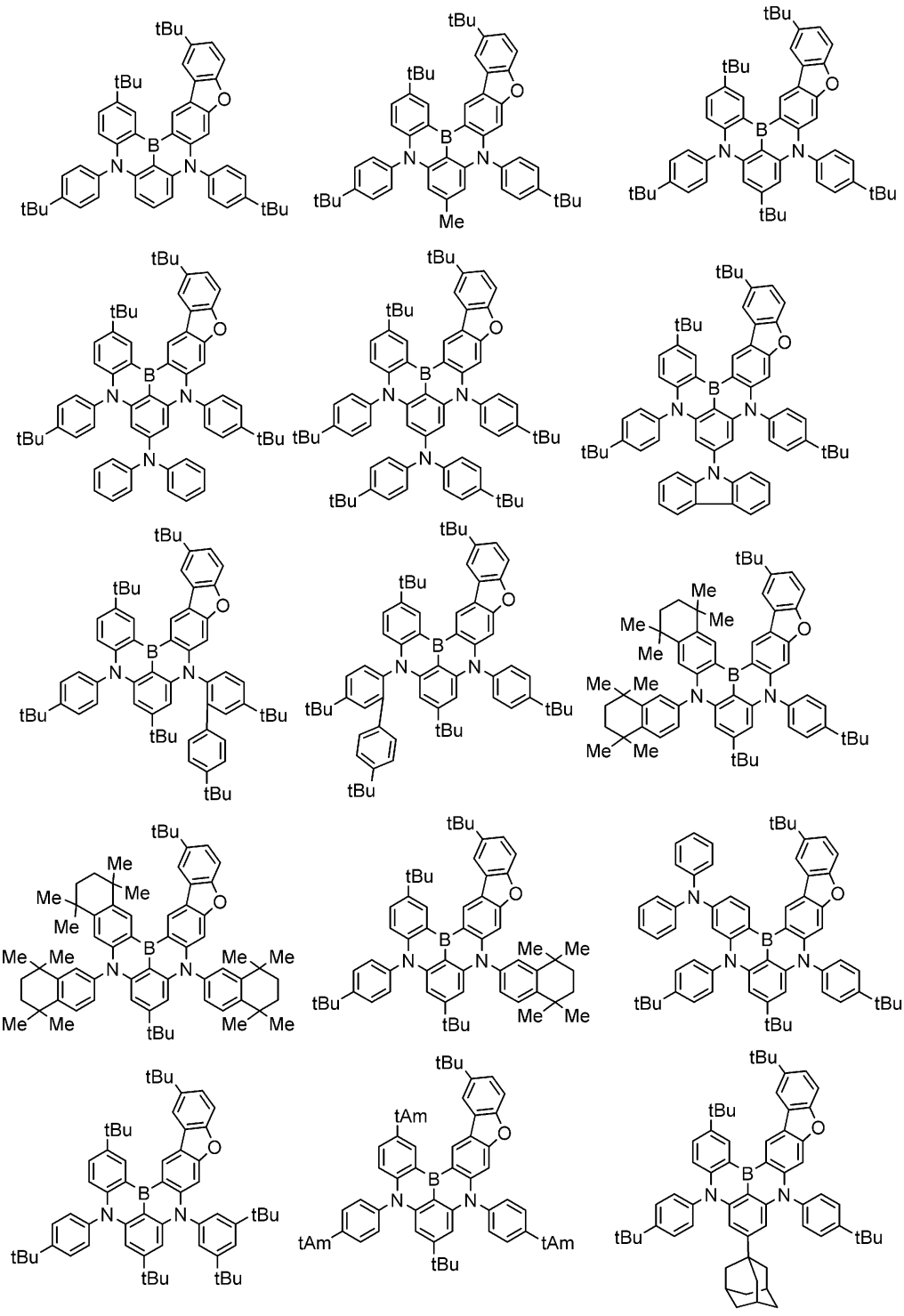
【０３６８】

【化２０９】



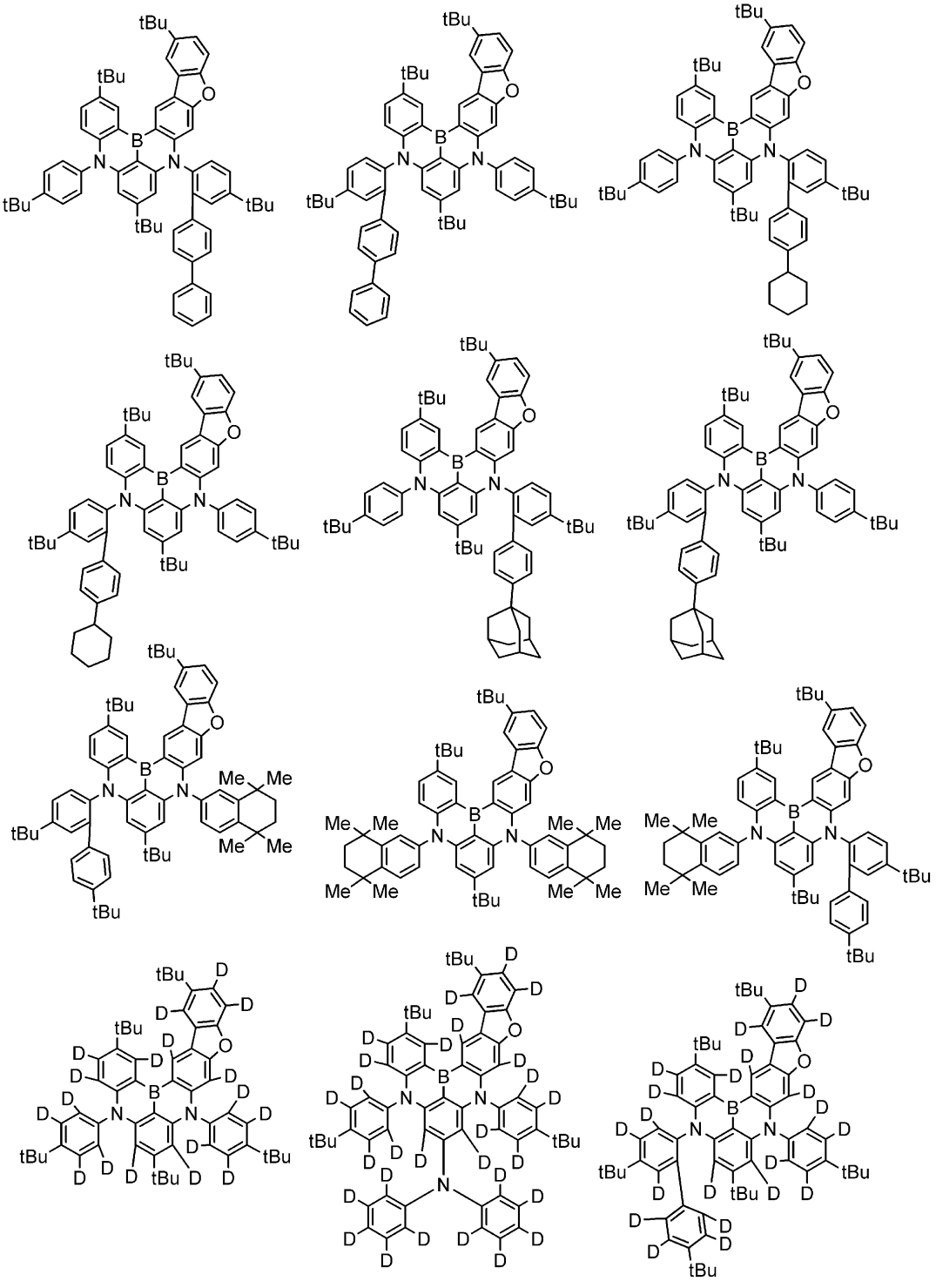
【０３６９】

【化２１０】



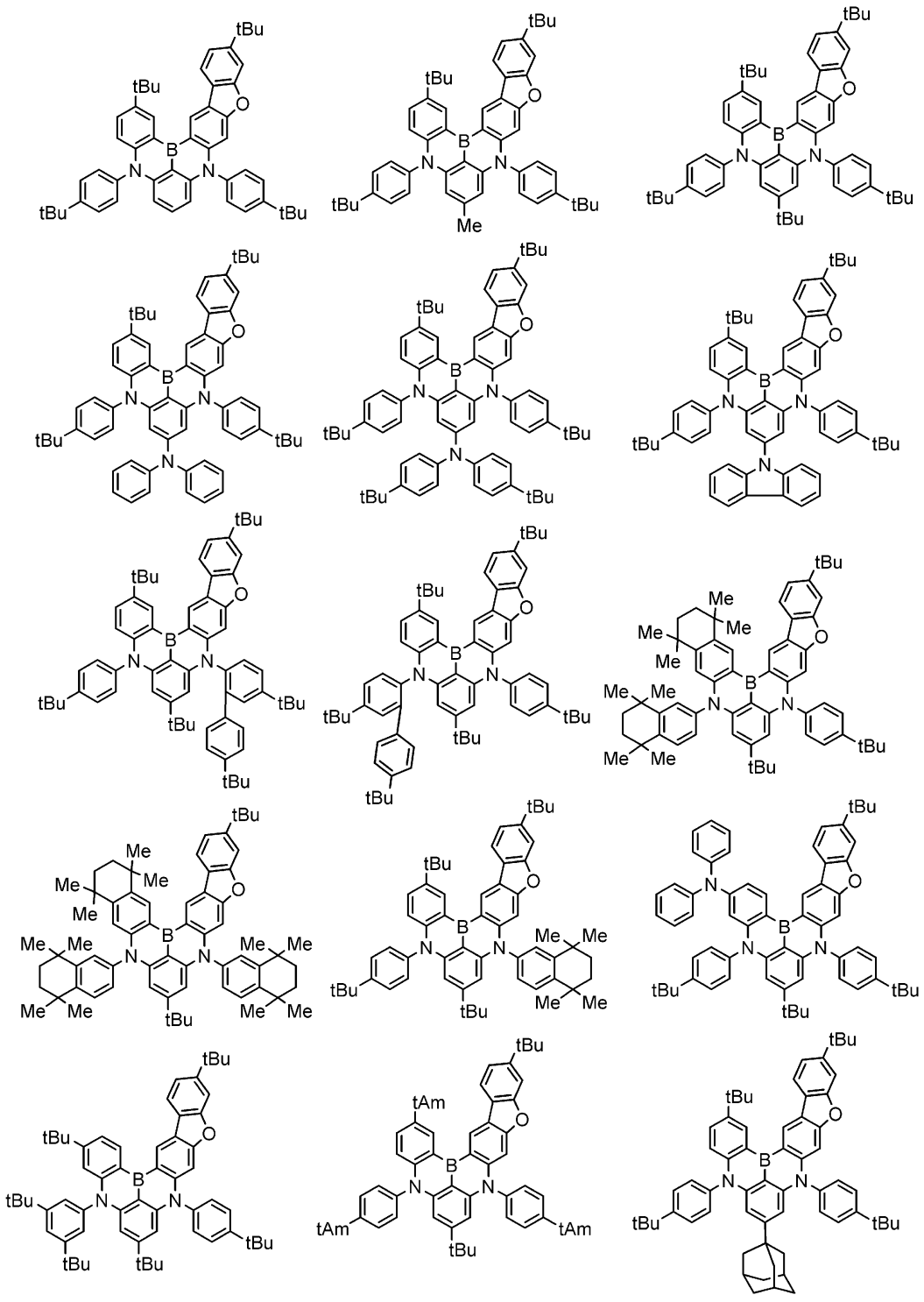
【０３７０】

【化２１１】



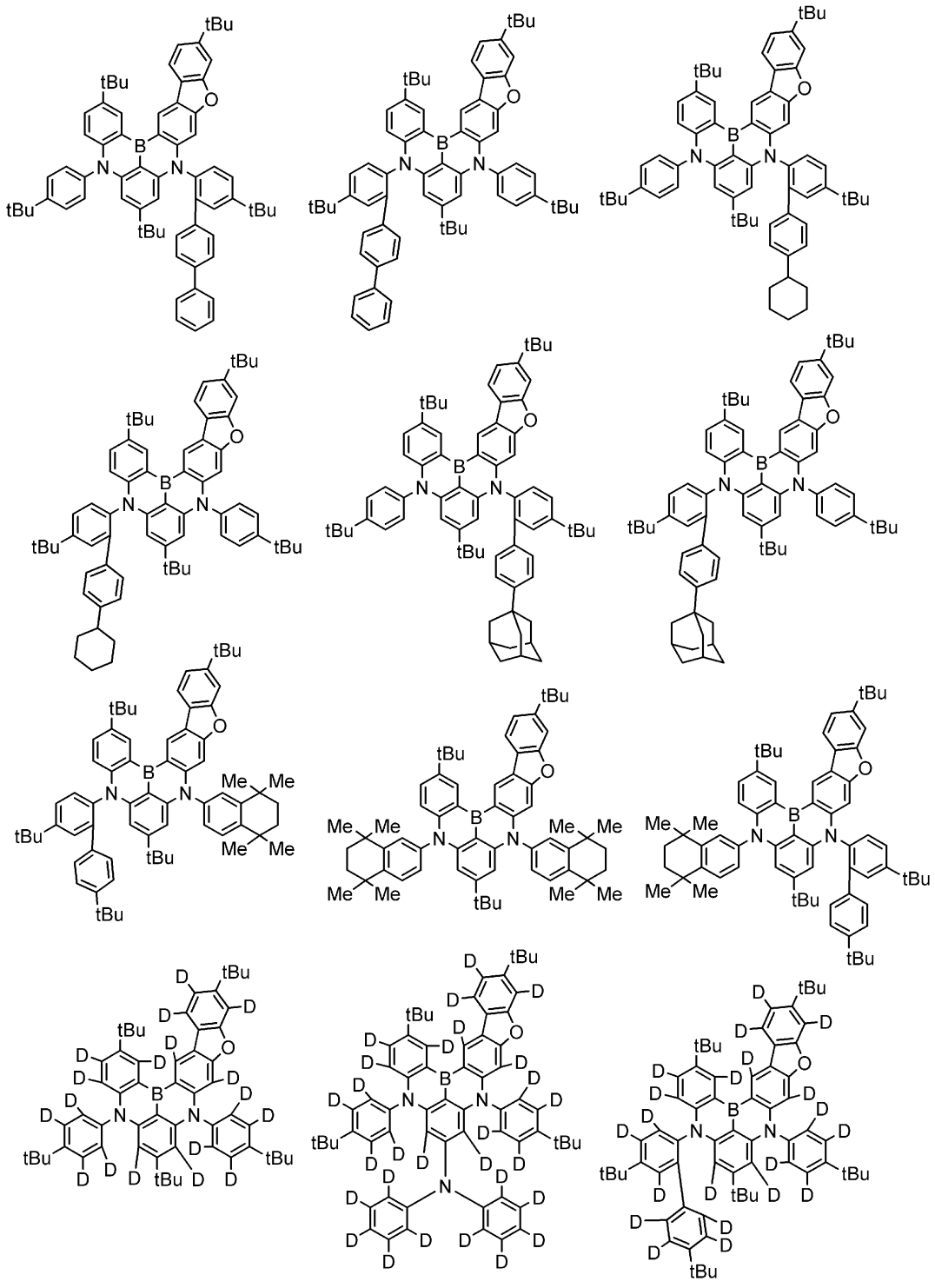
【０３７１】

【化２１２】



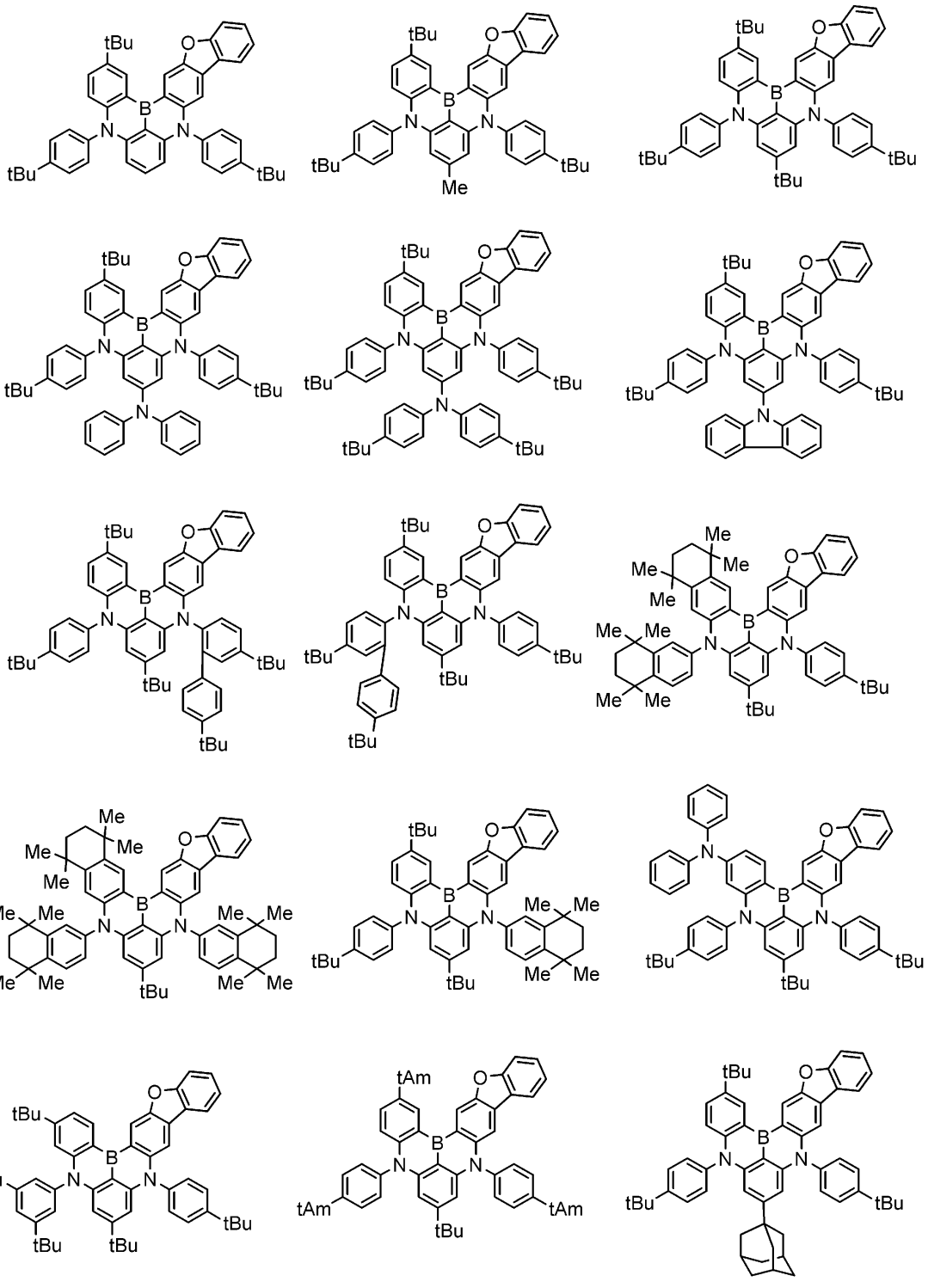
【０３７２】

【化２１３】



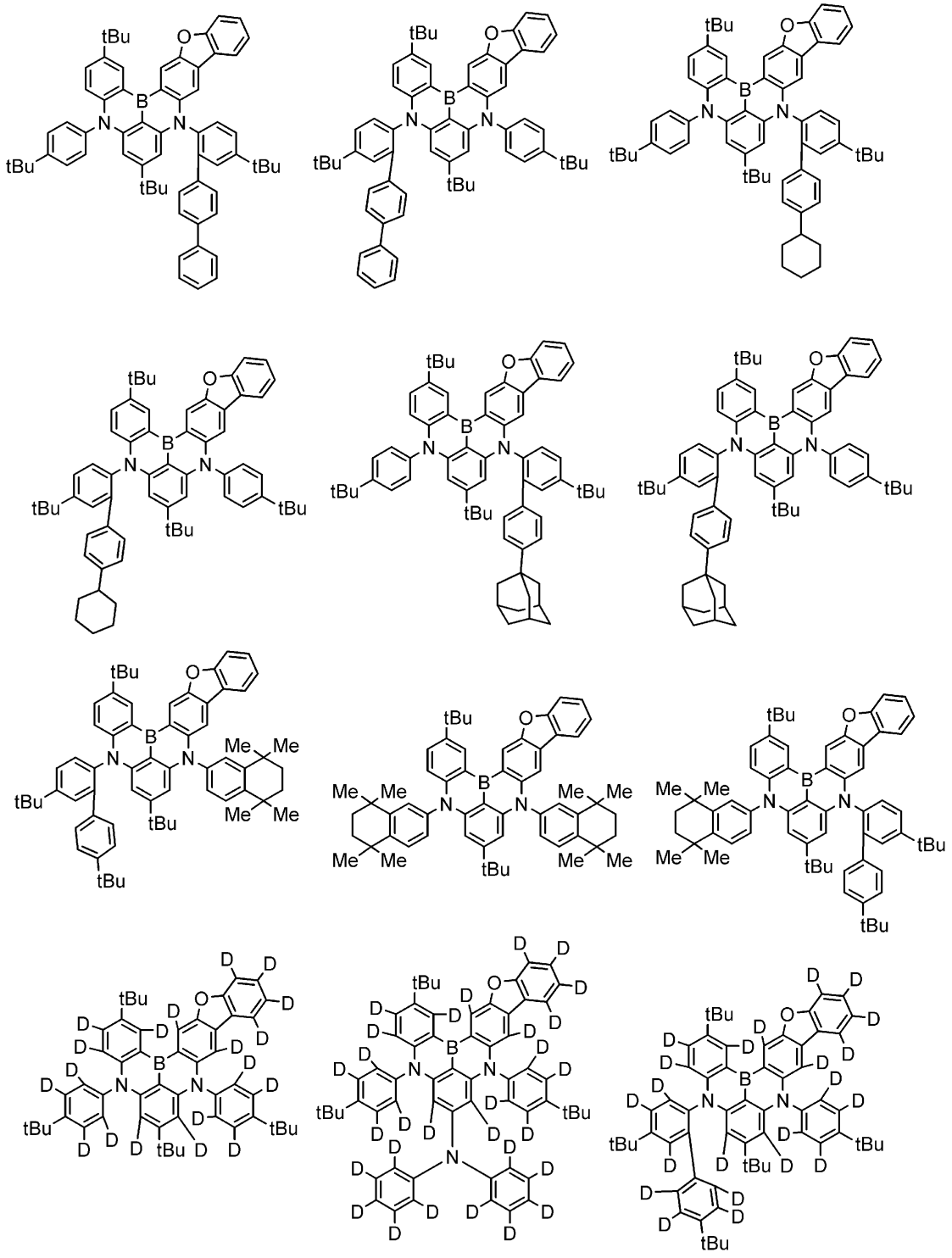
【０３７３】

【化２１４】



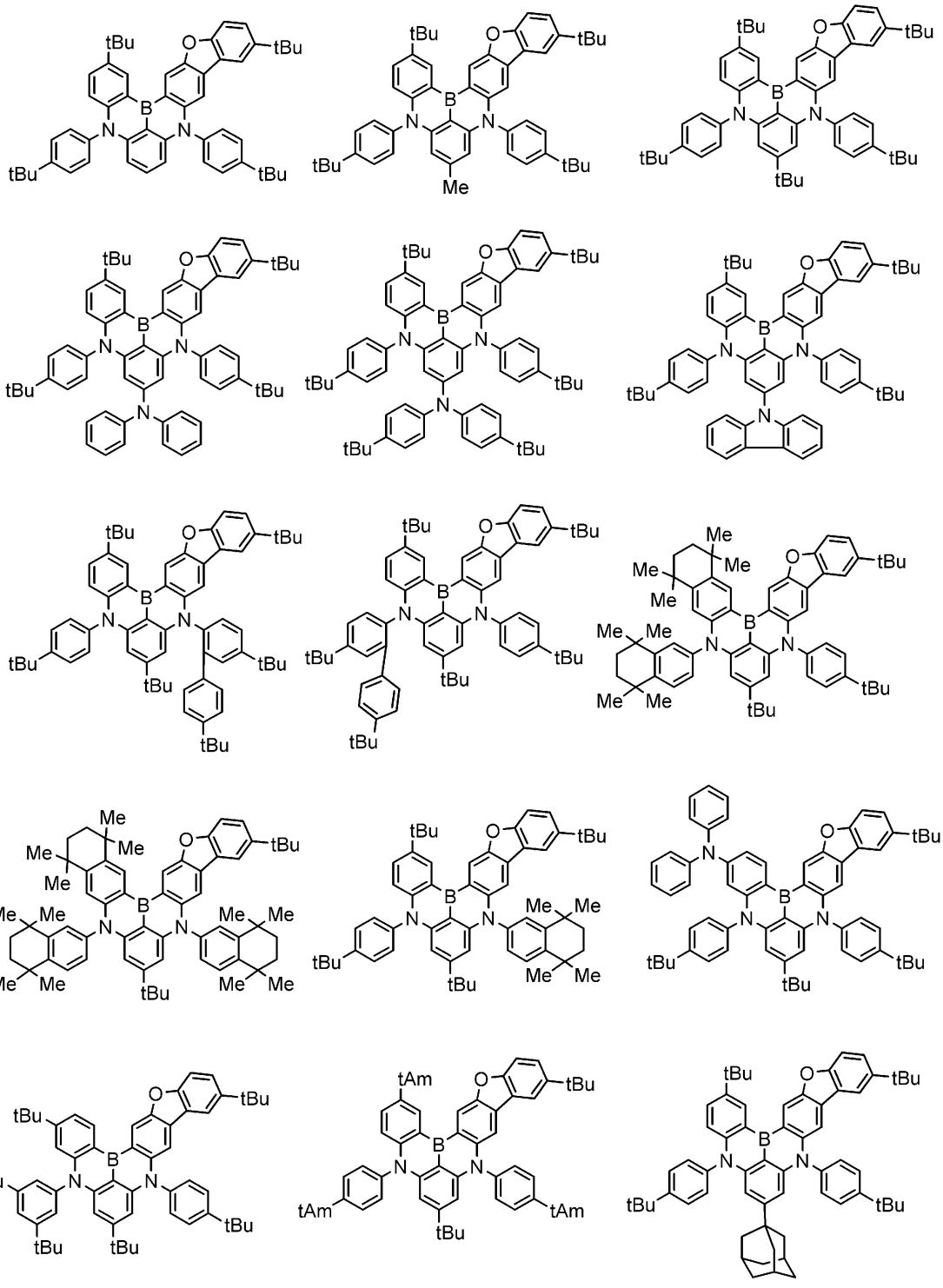
【０３７４】

【化２１５】



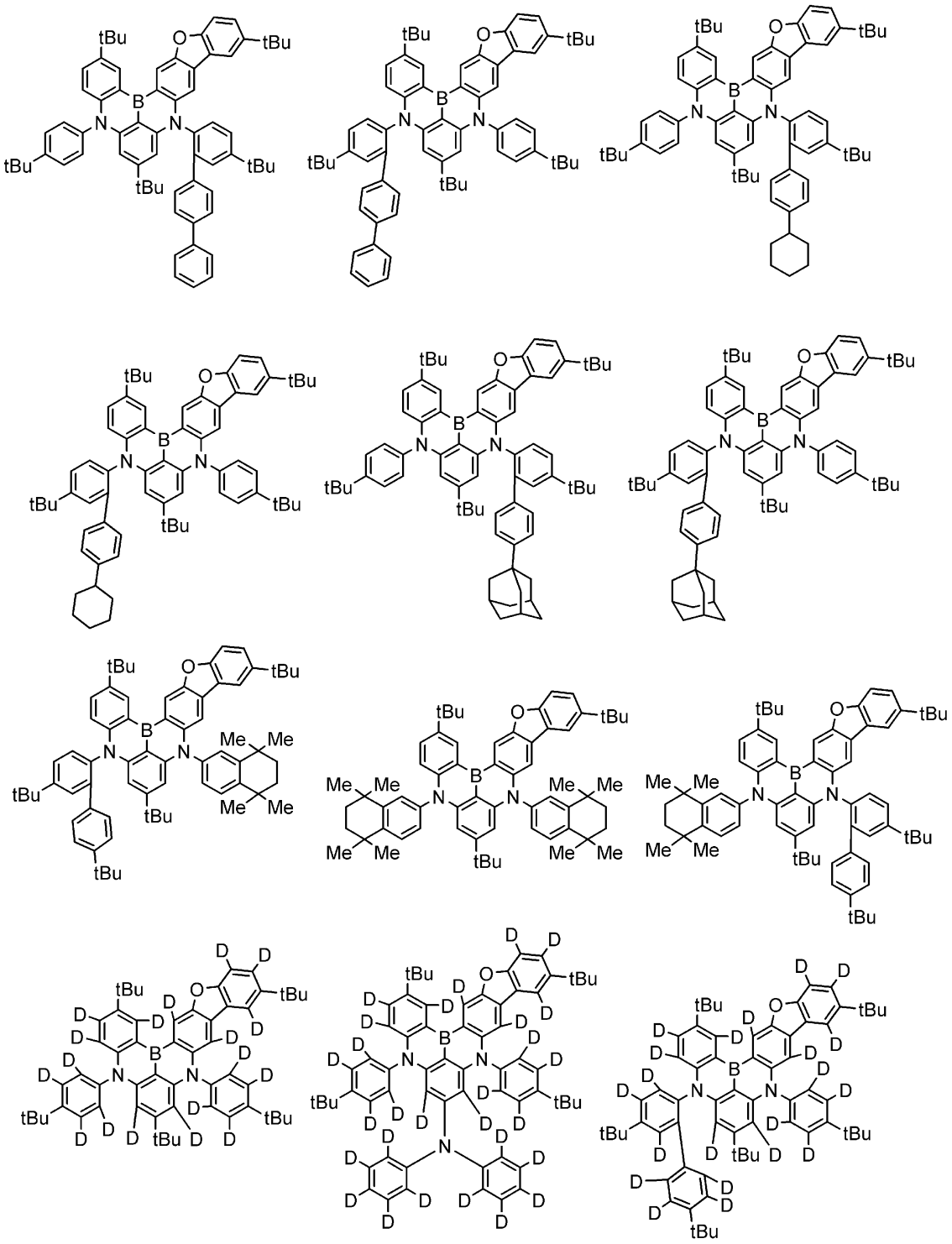
【０３７５】

【化２１６】



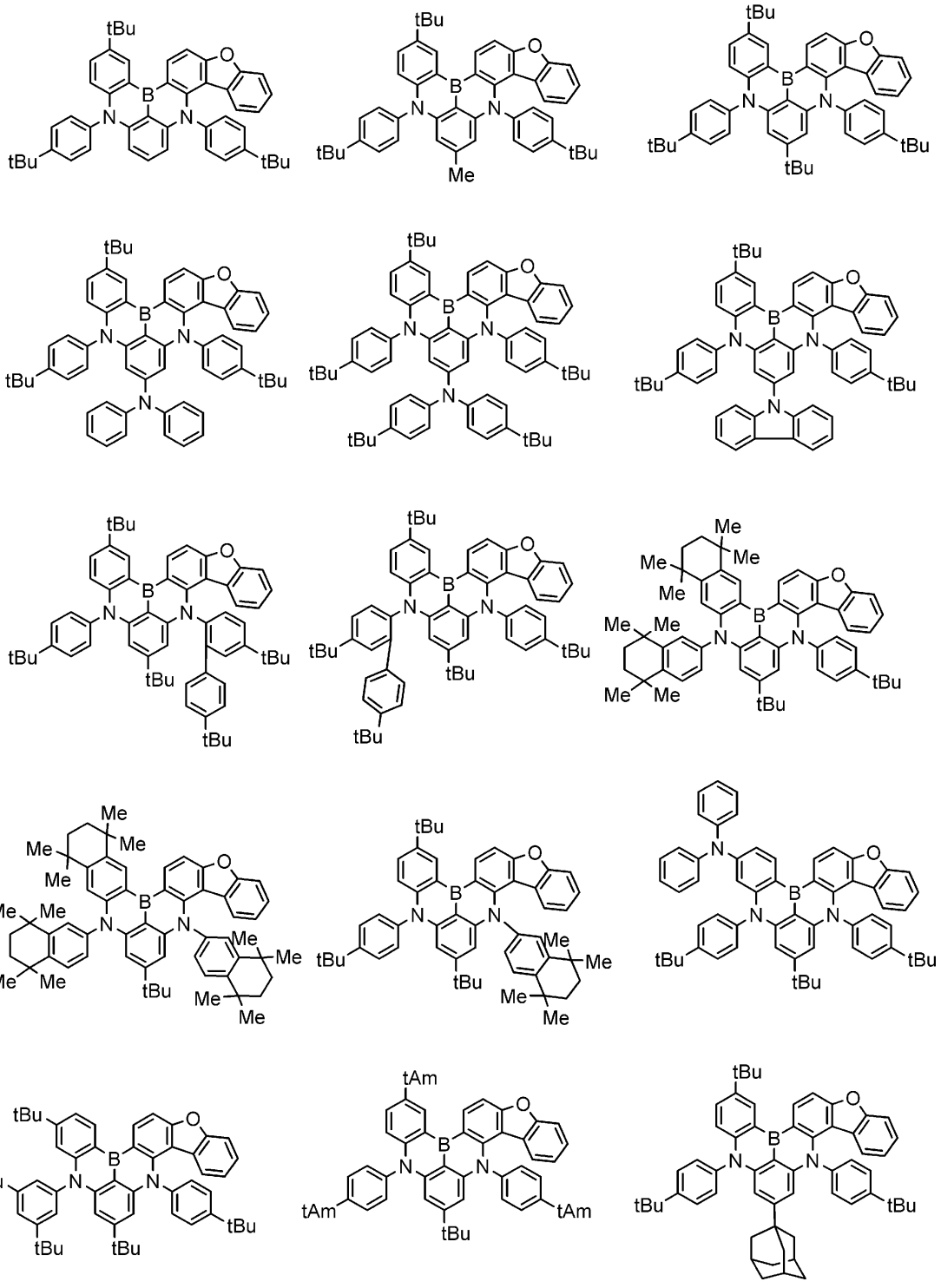
【０３７６】

【化２１７】



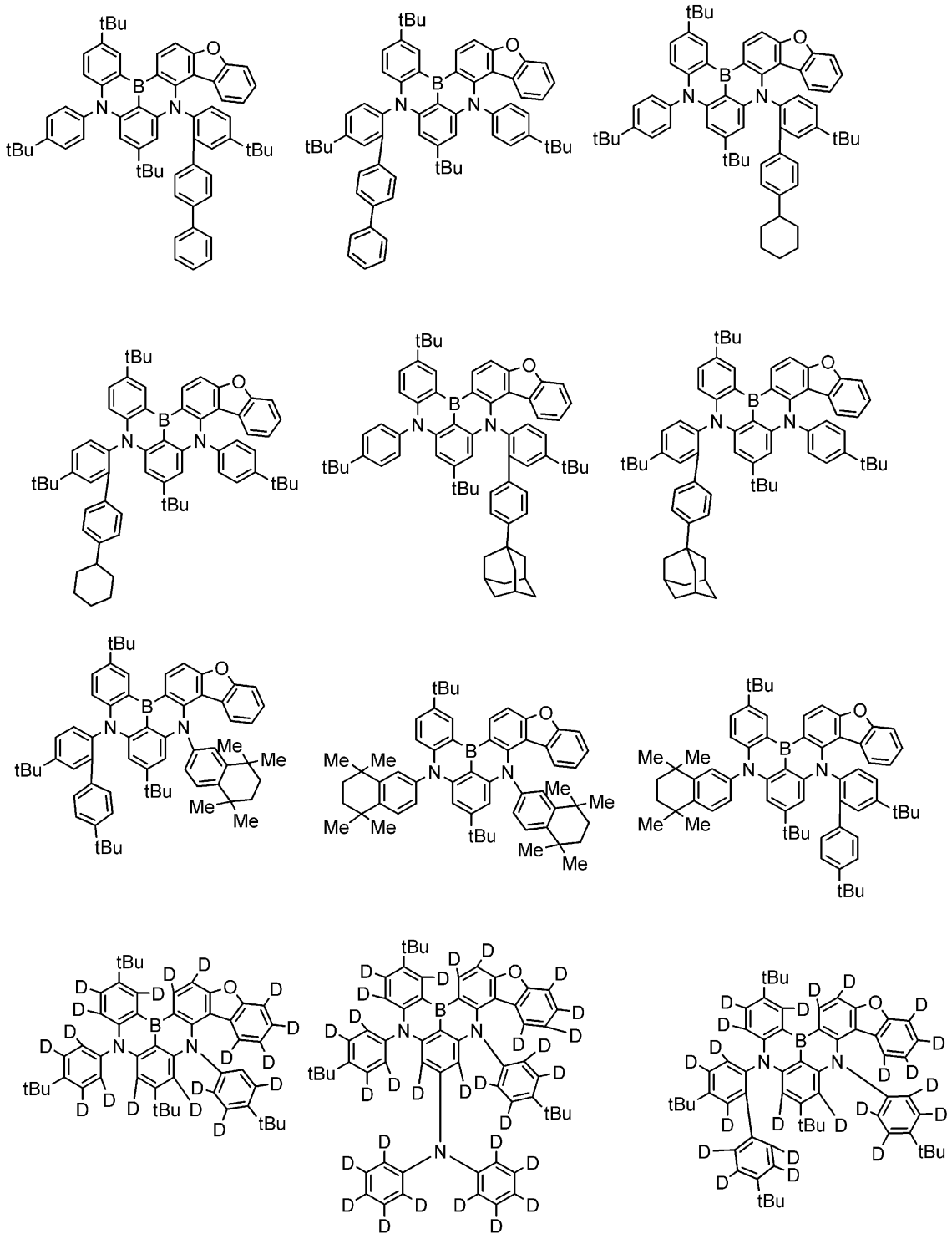
【０３７７】

【化２１８】



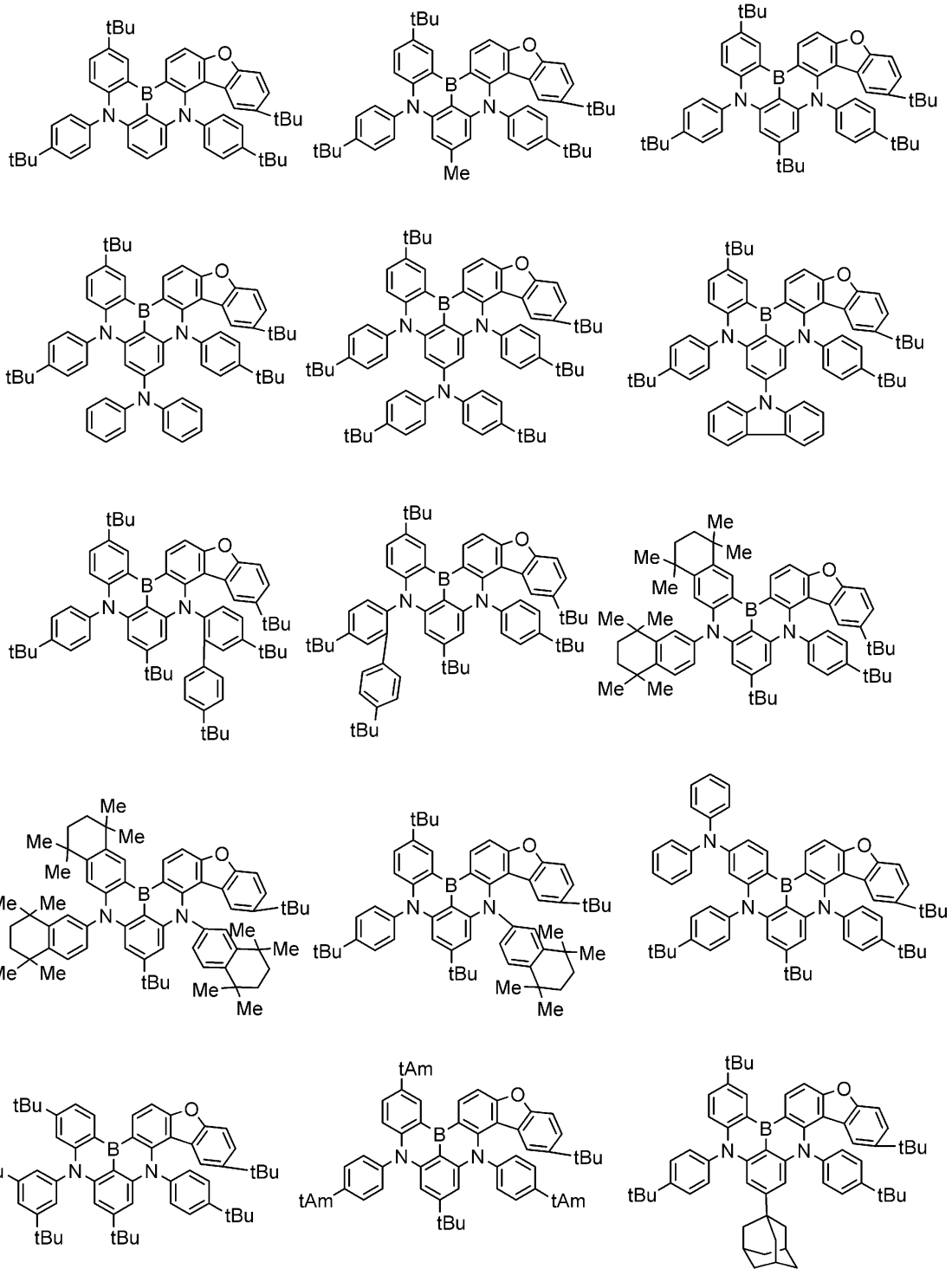
【０３７８】

【化２１９】



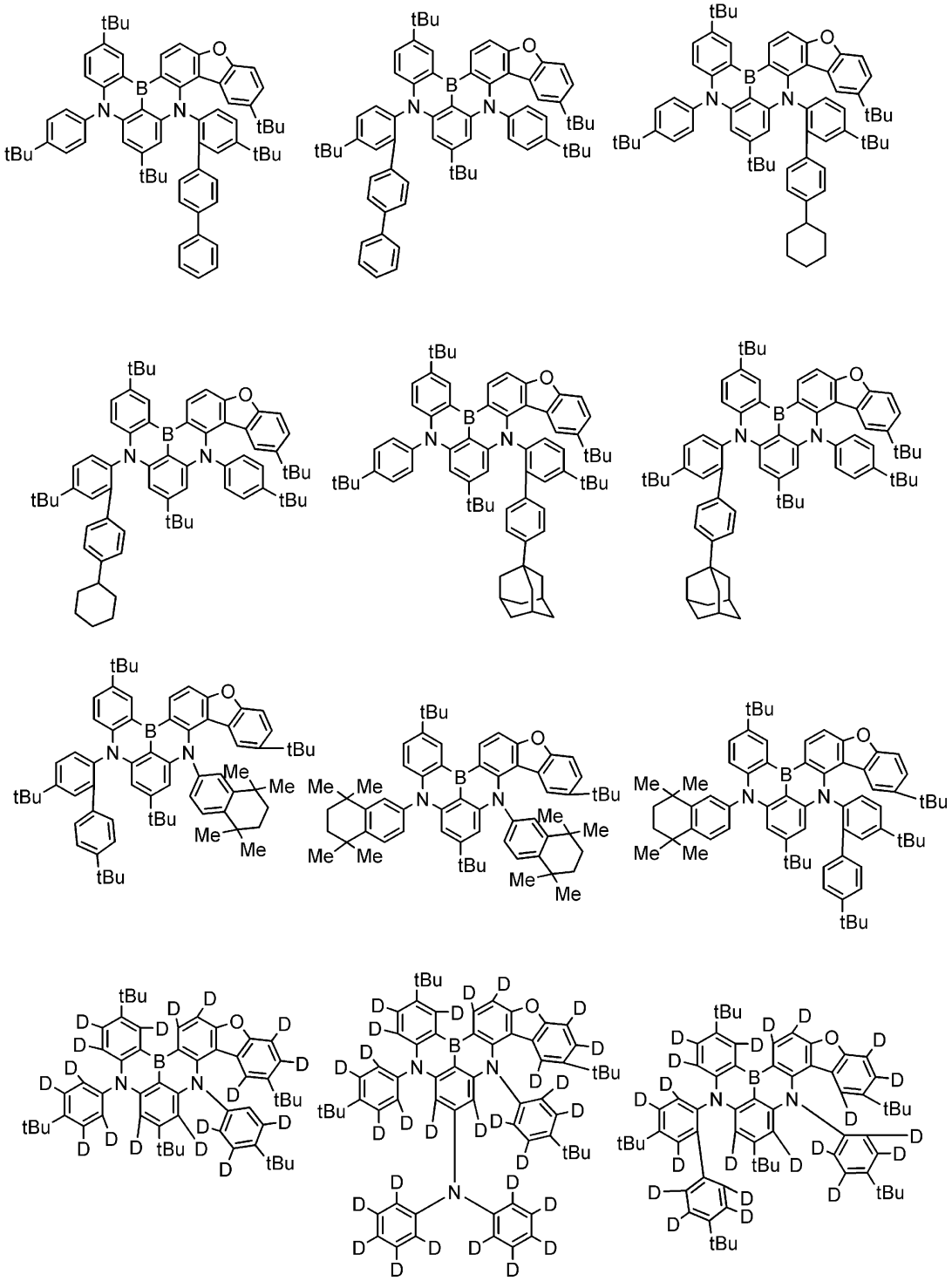
【０３７９】

【化２２０】



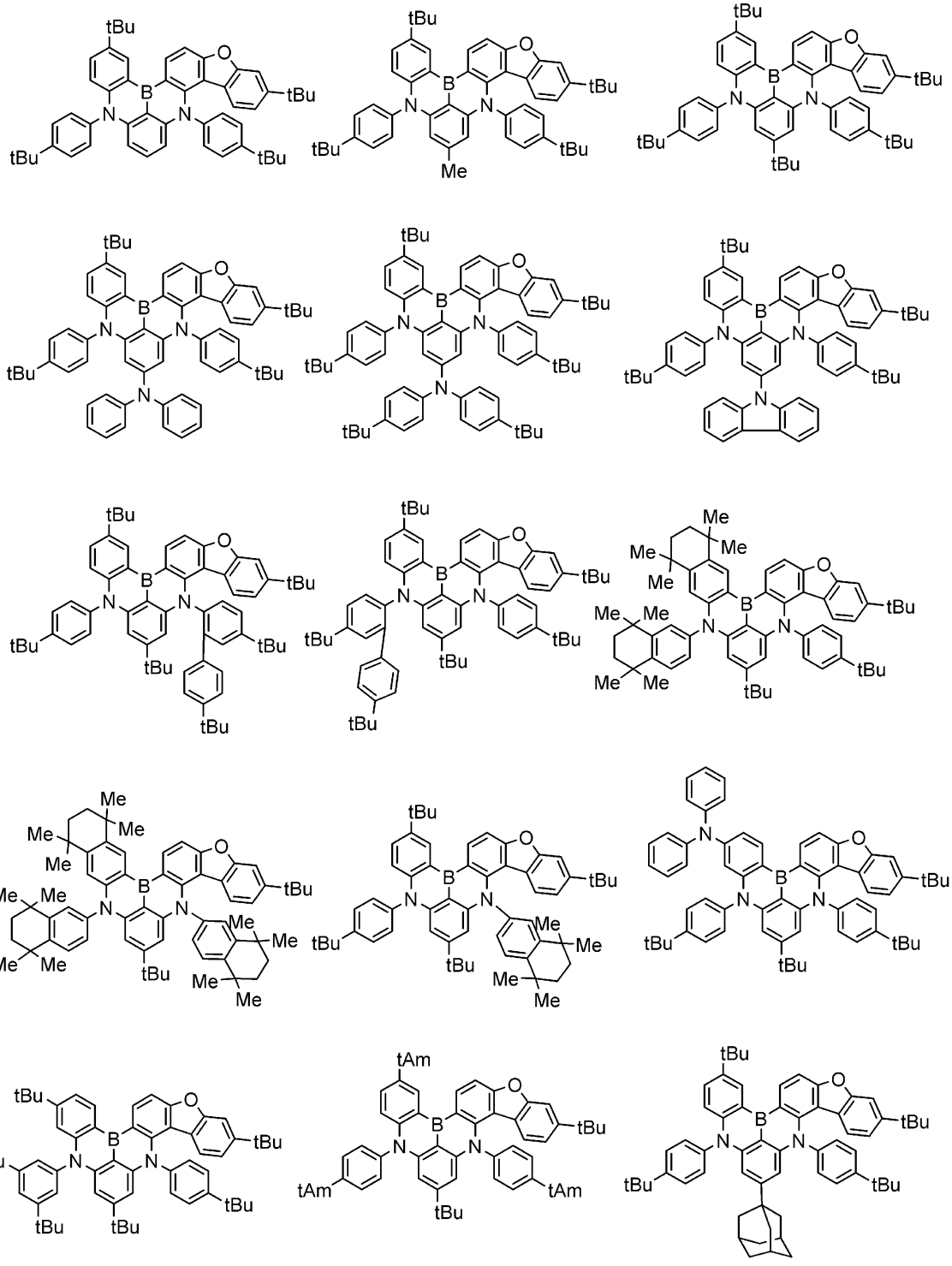
【０３８０】

【化２２１】



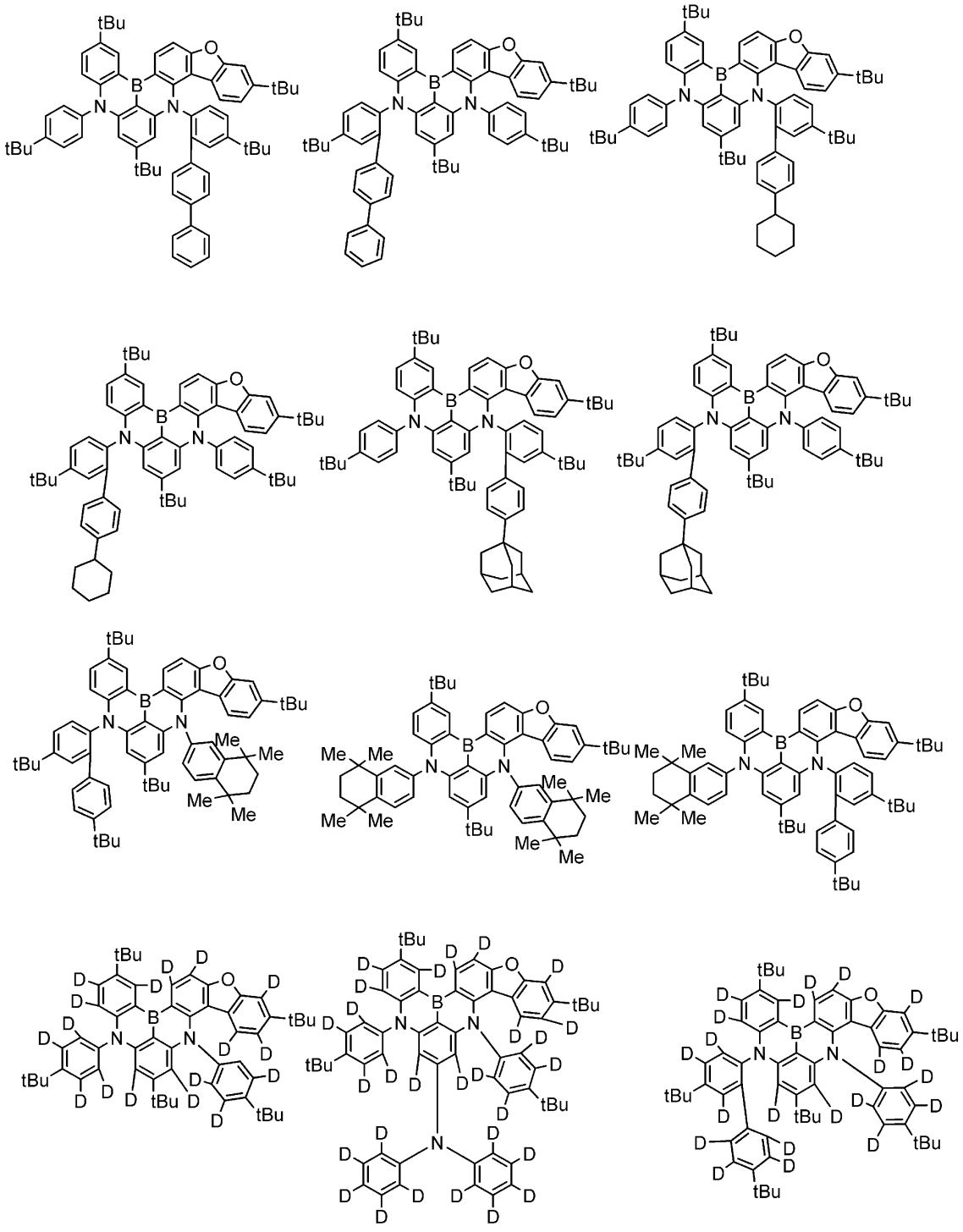
【０３８１】

【化２２２】



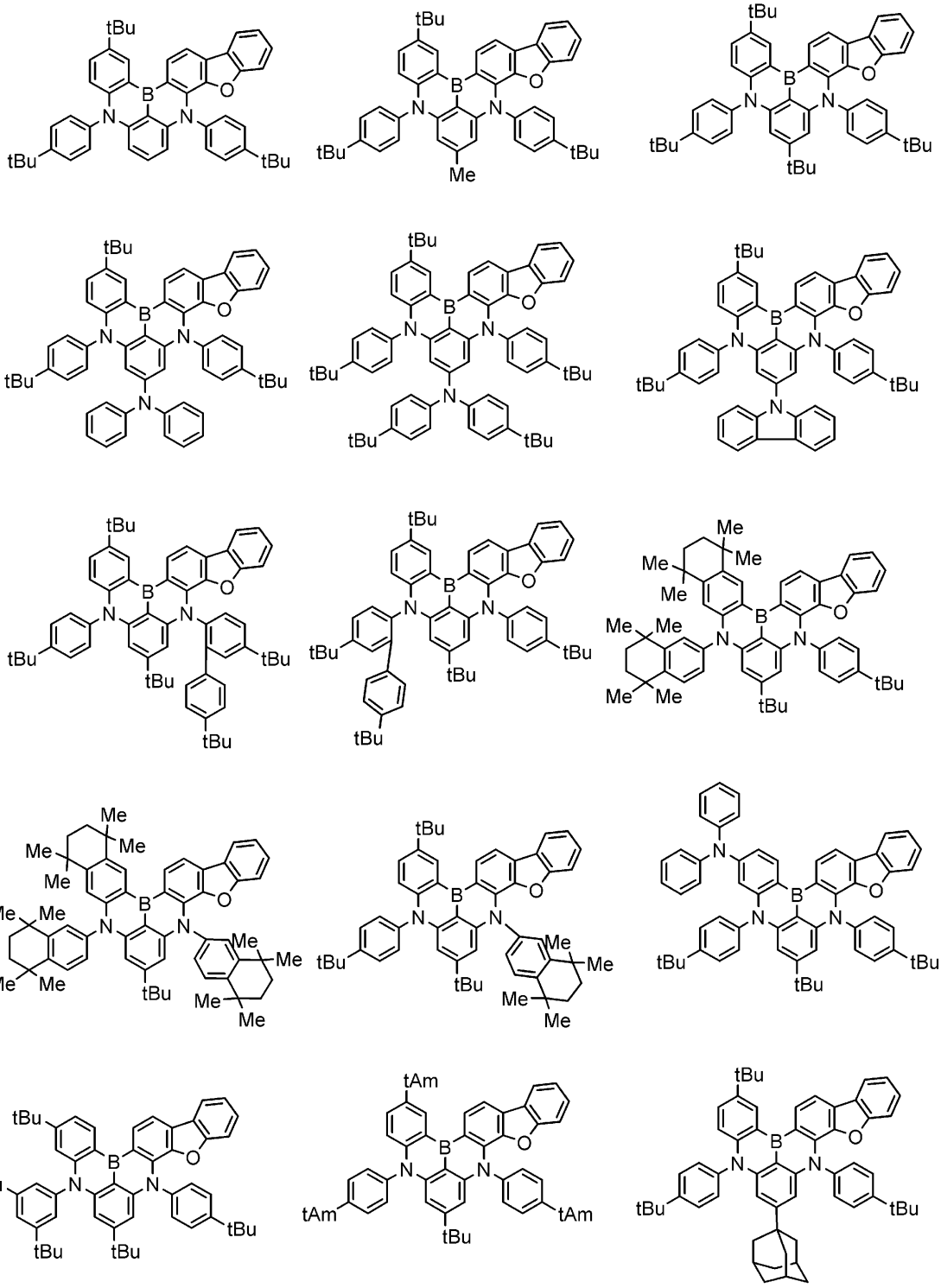
【０３８２】

【化２２３】



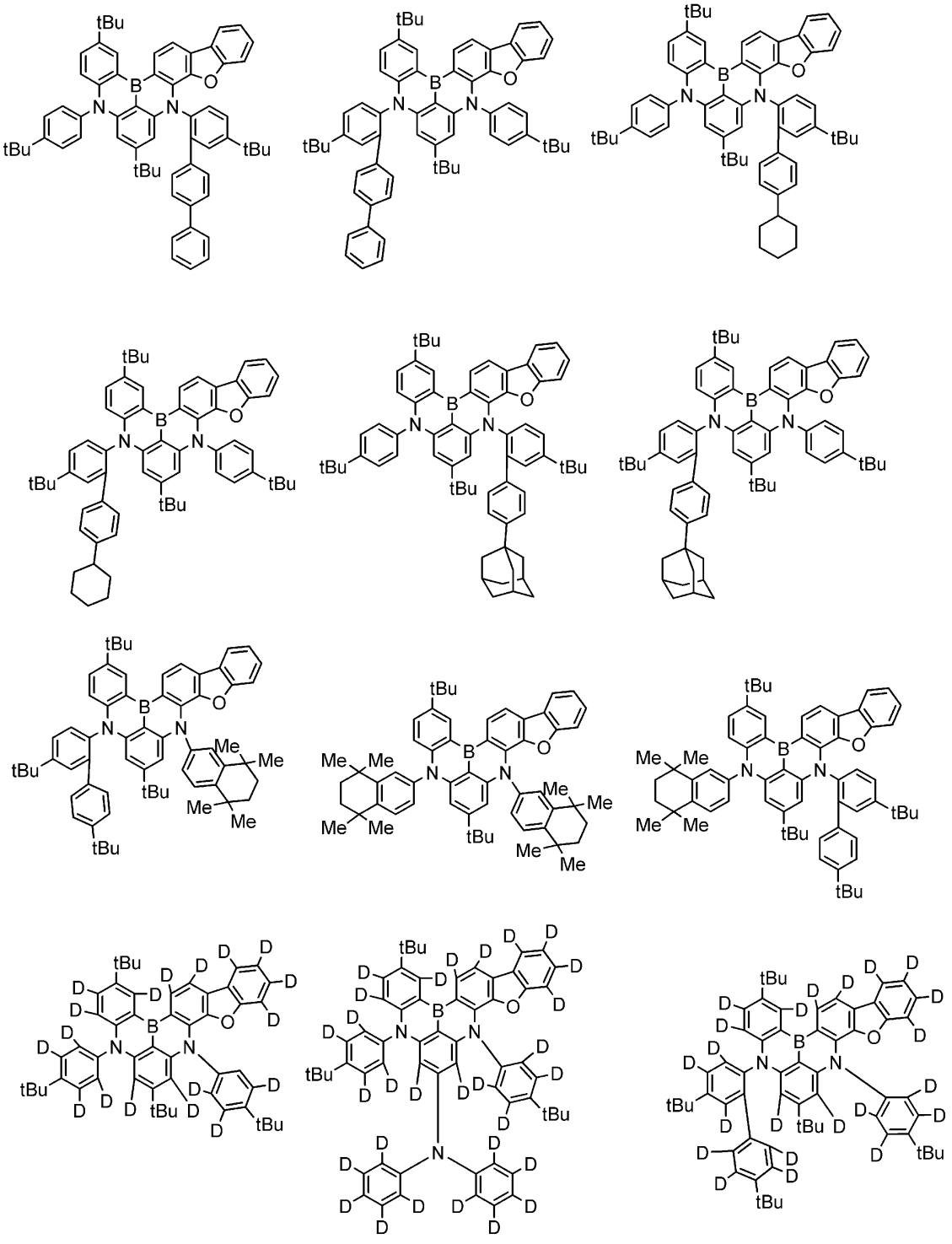
【０３８３】

【化２２４】



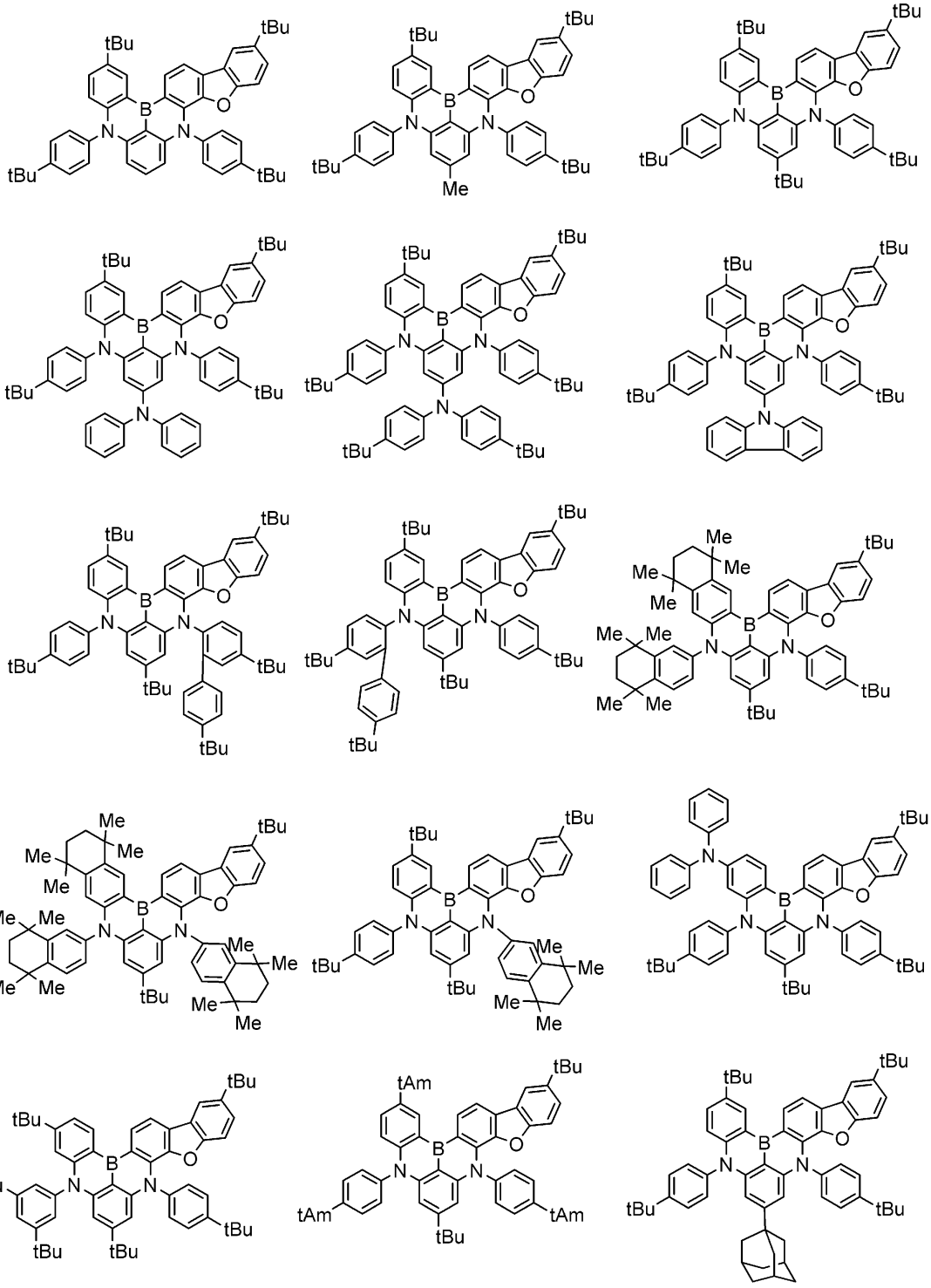
【０３８４】

【化２２５】



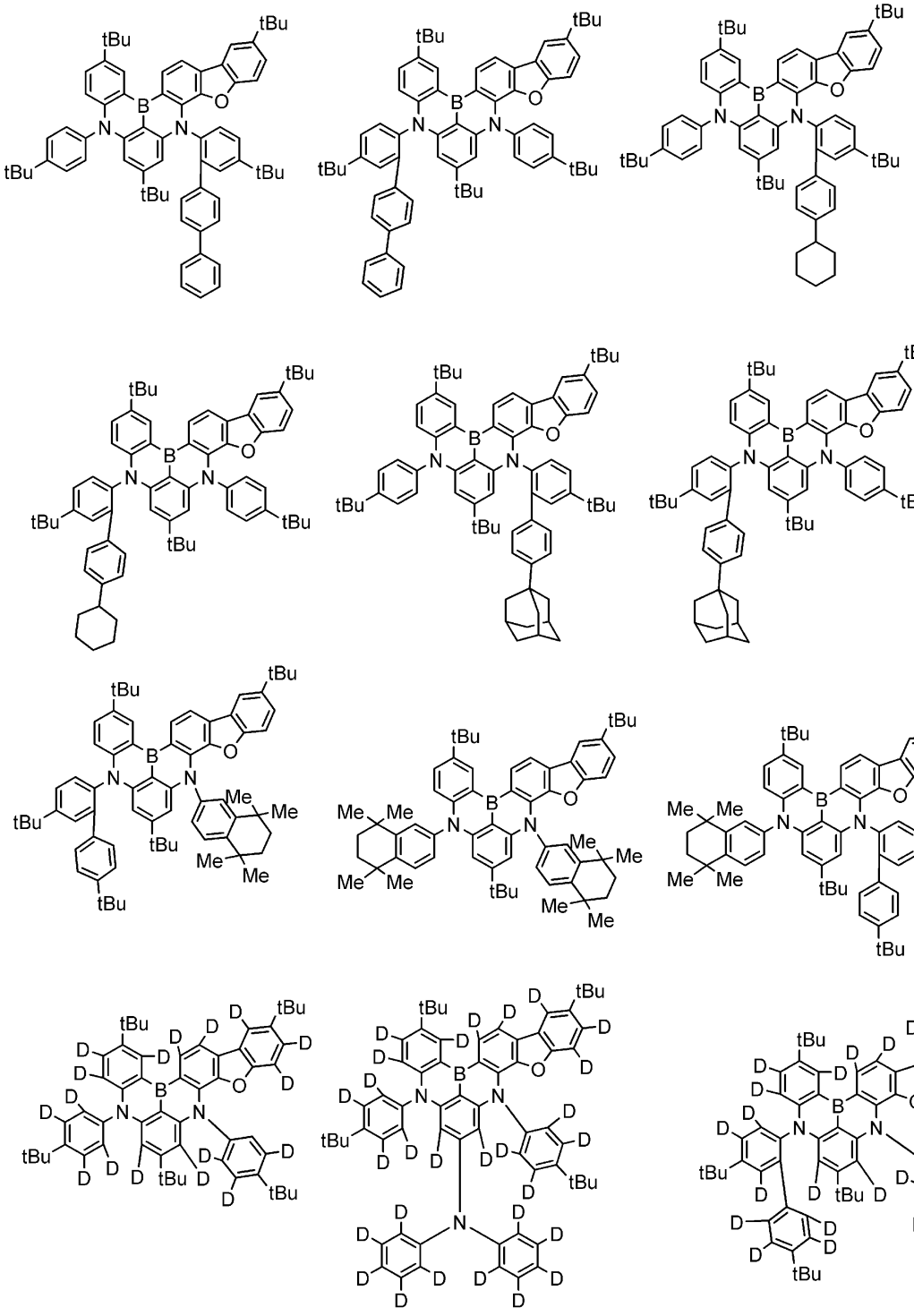
【０３８５】

【化２２６】



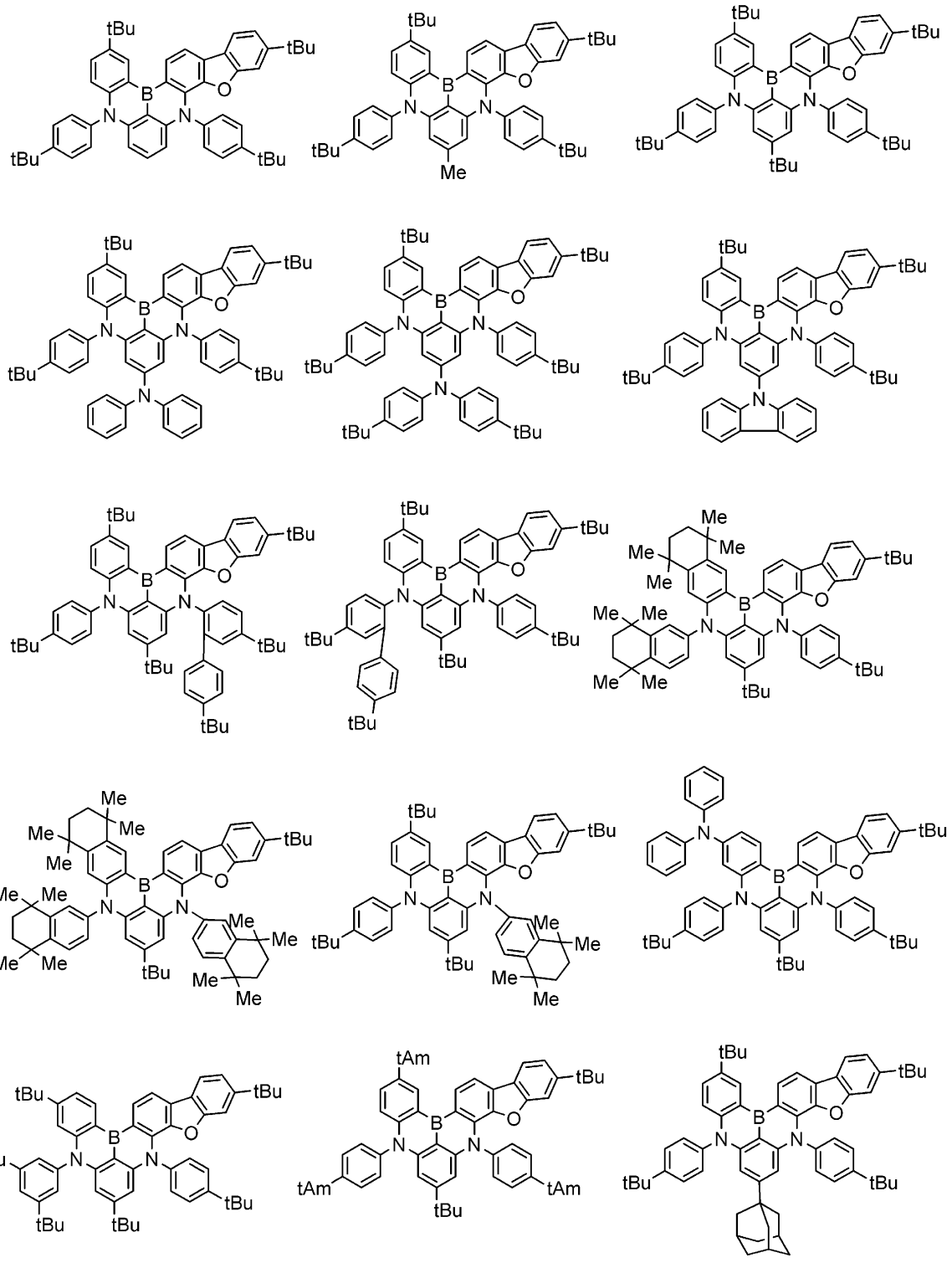
【０３８６】

【化２２７】



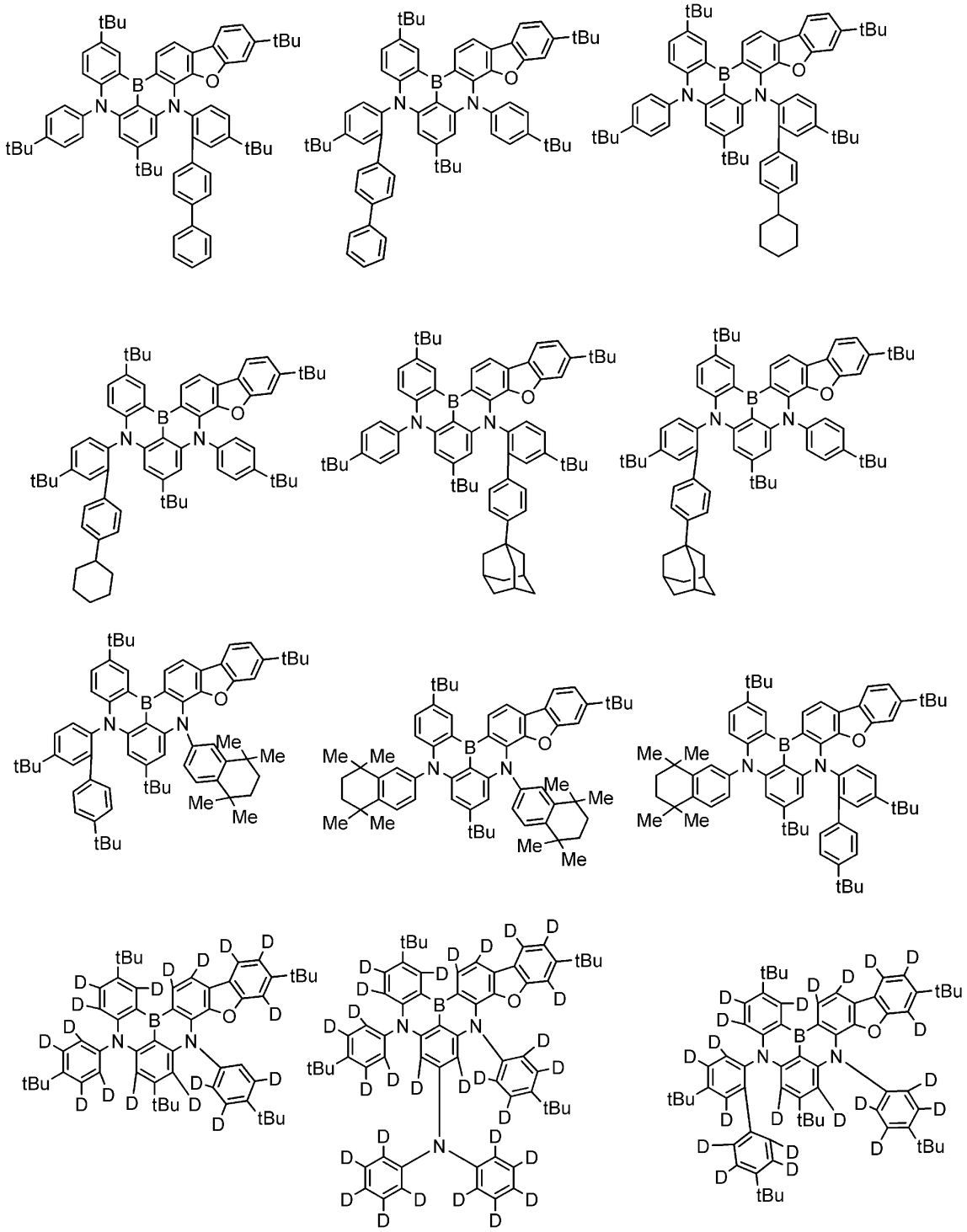
【０３８７】

【化２２８】



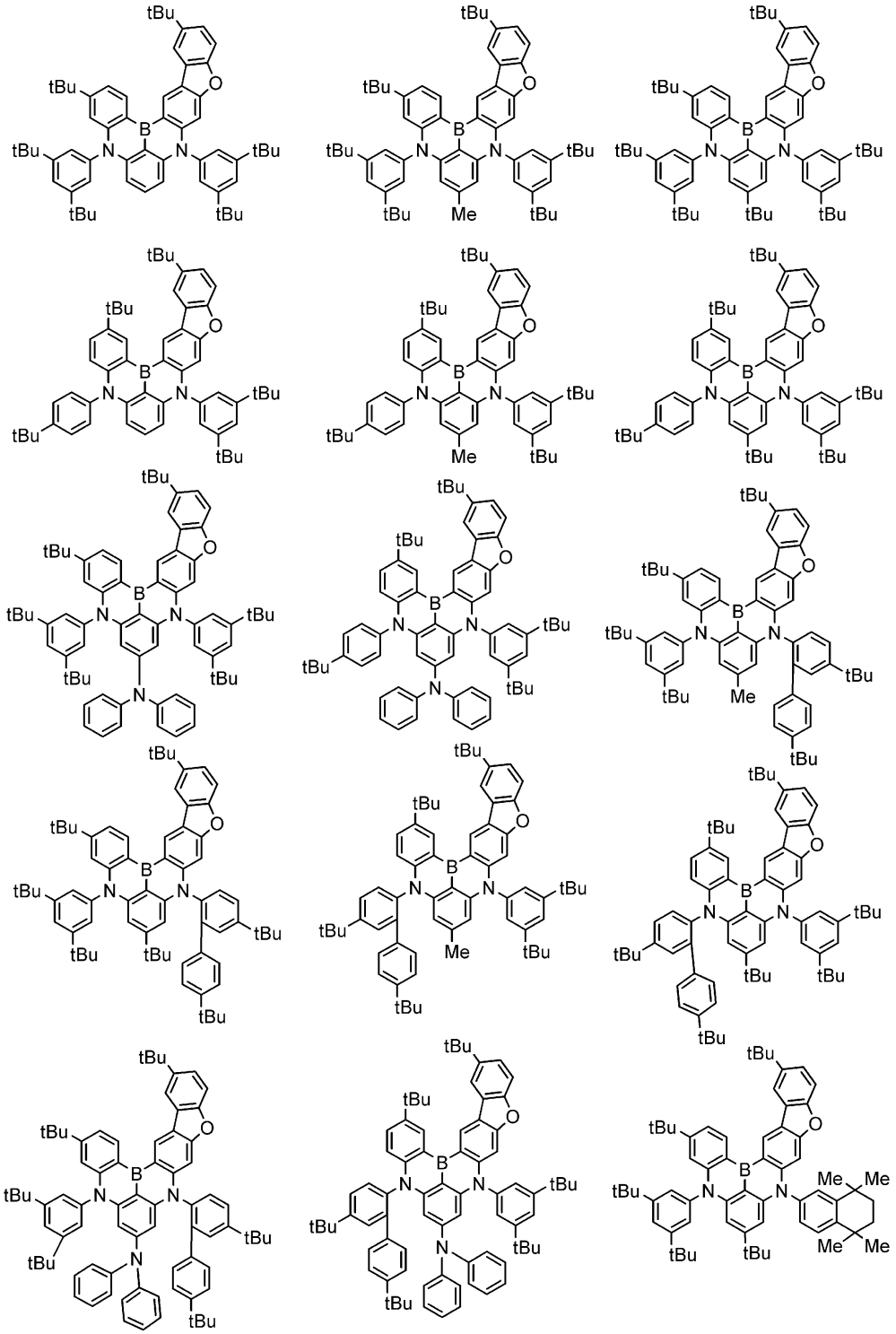
【０３８８】

【化２２９】



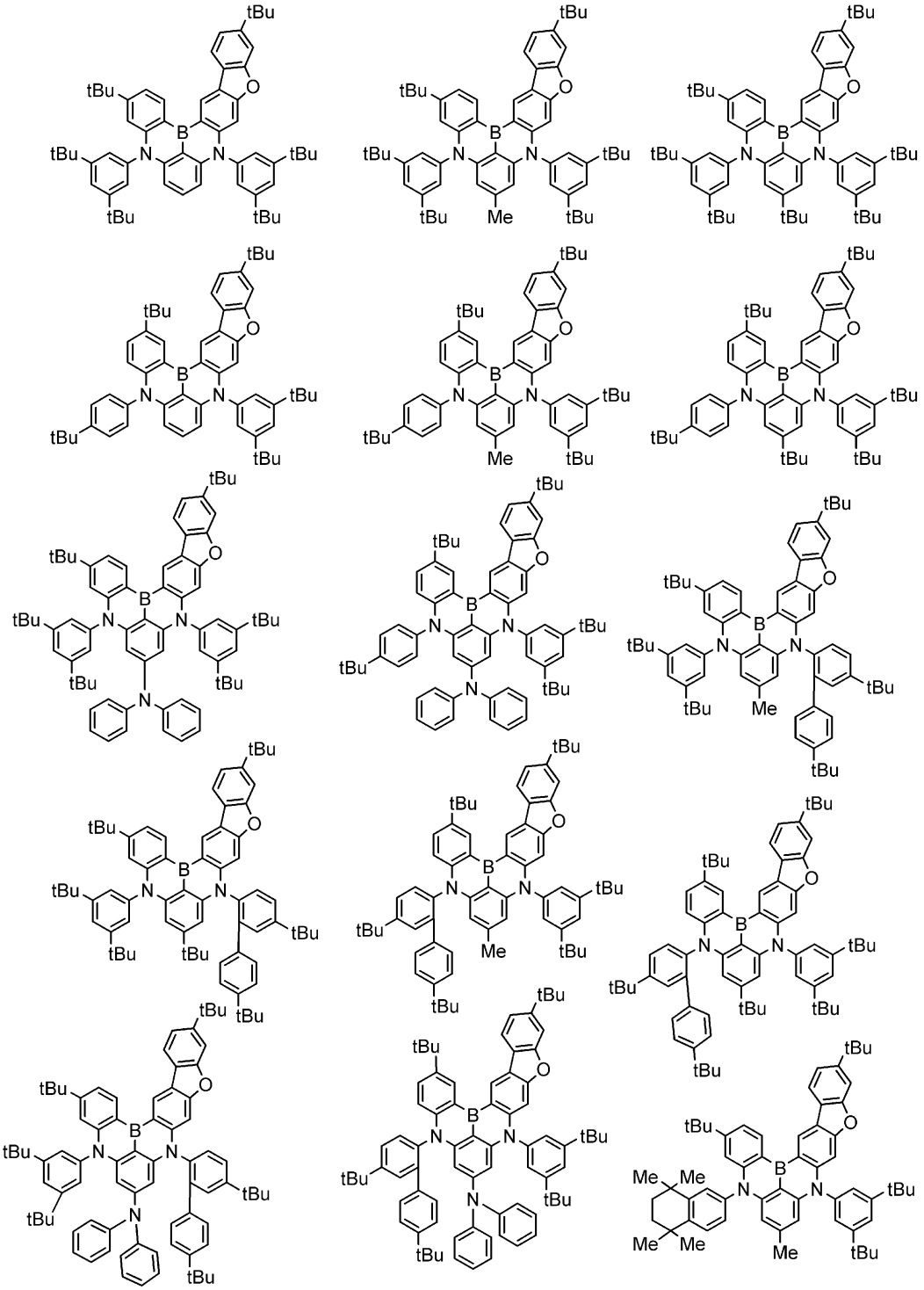
【０３８９】

【化２３０】



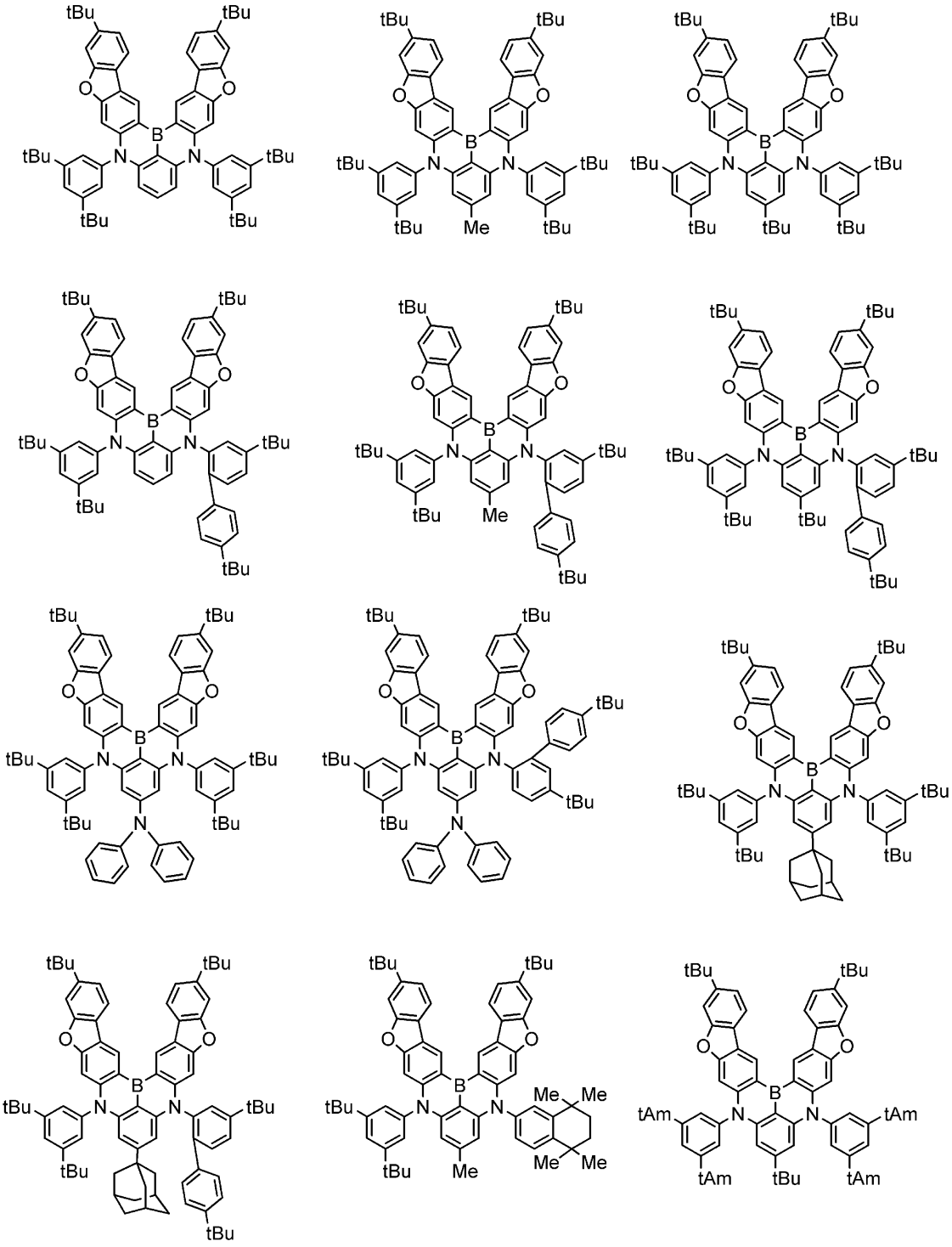
【０３９０】

【化２３１】



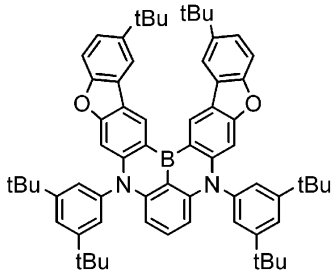
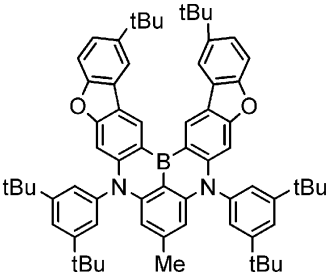
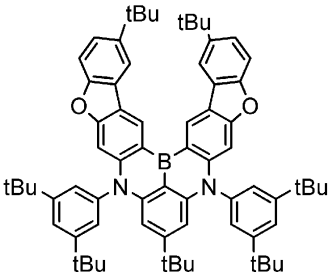
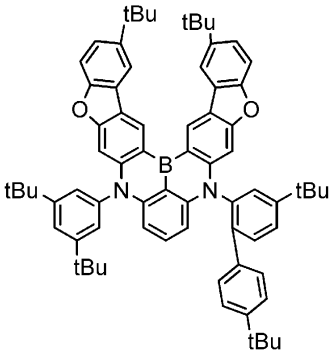
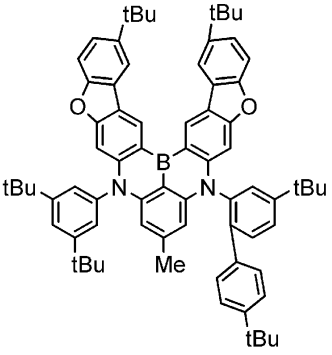
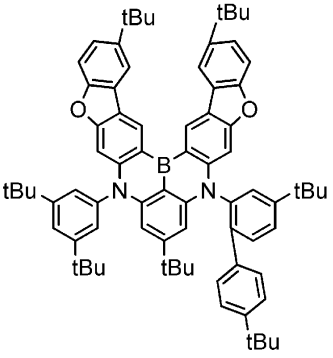
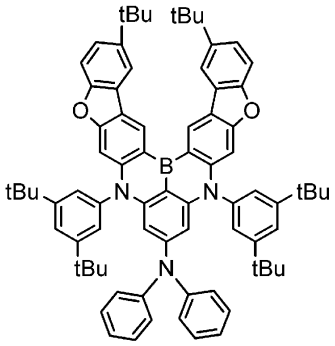
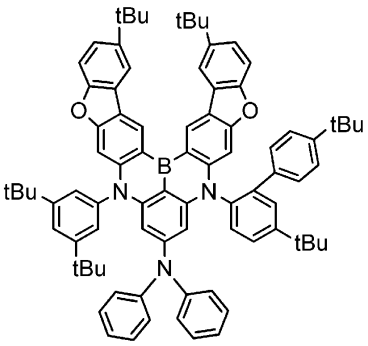
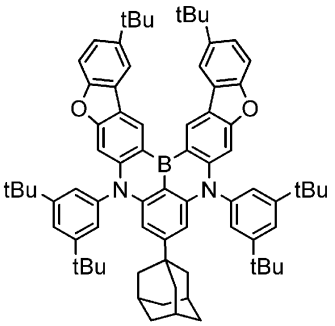
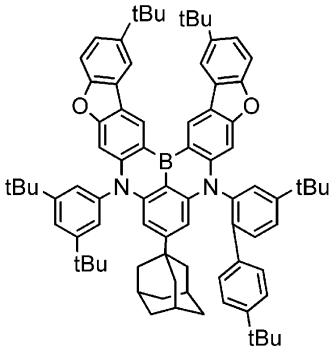
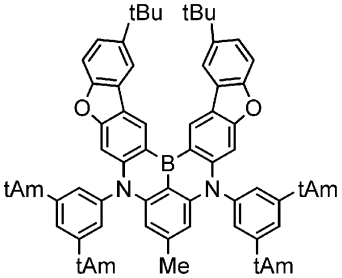
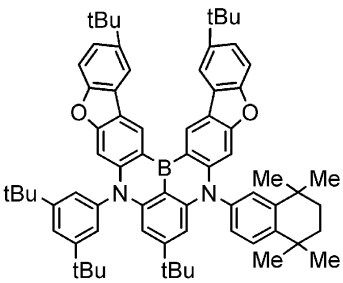
【０３９１】

【化２３２】



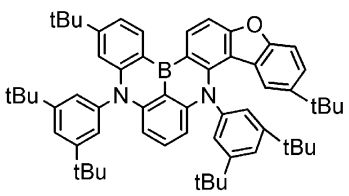
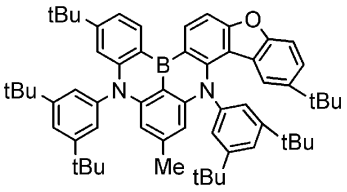
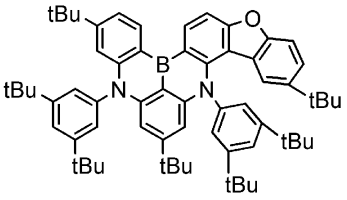
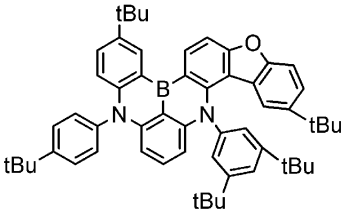
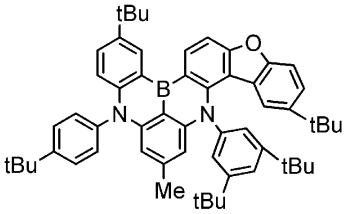
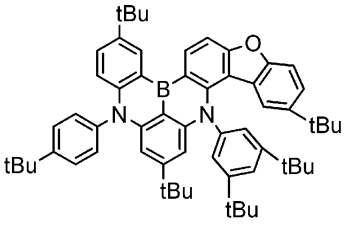
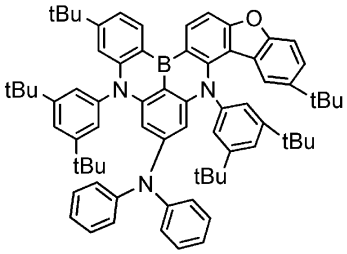
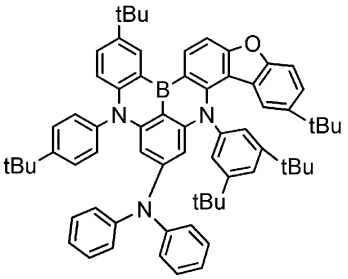
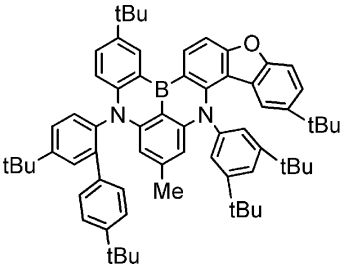
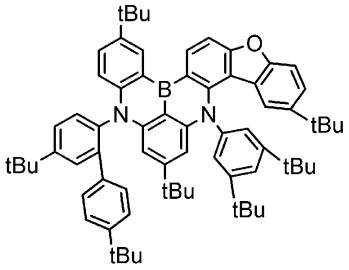
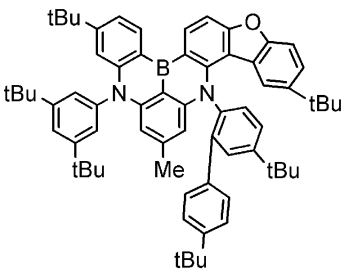
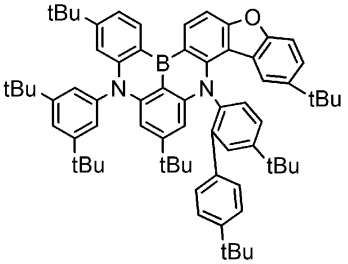
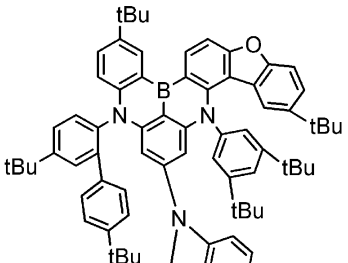
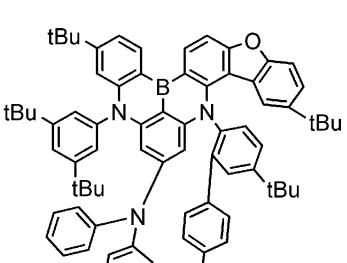
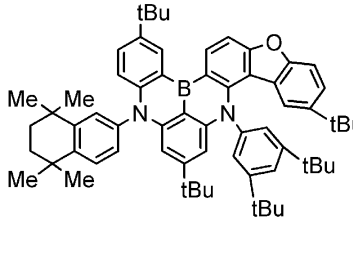
【０３９２】

【化２３３】

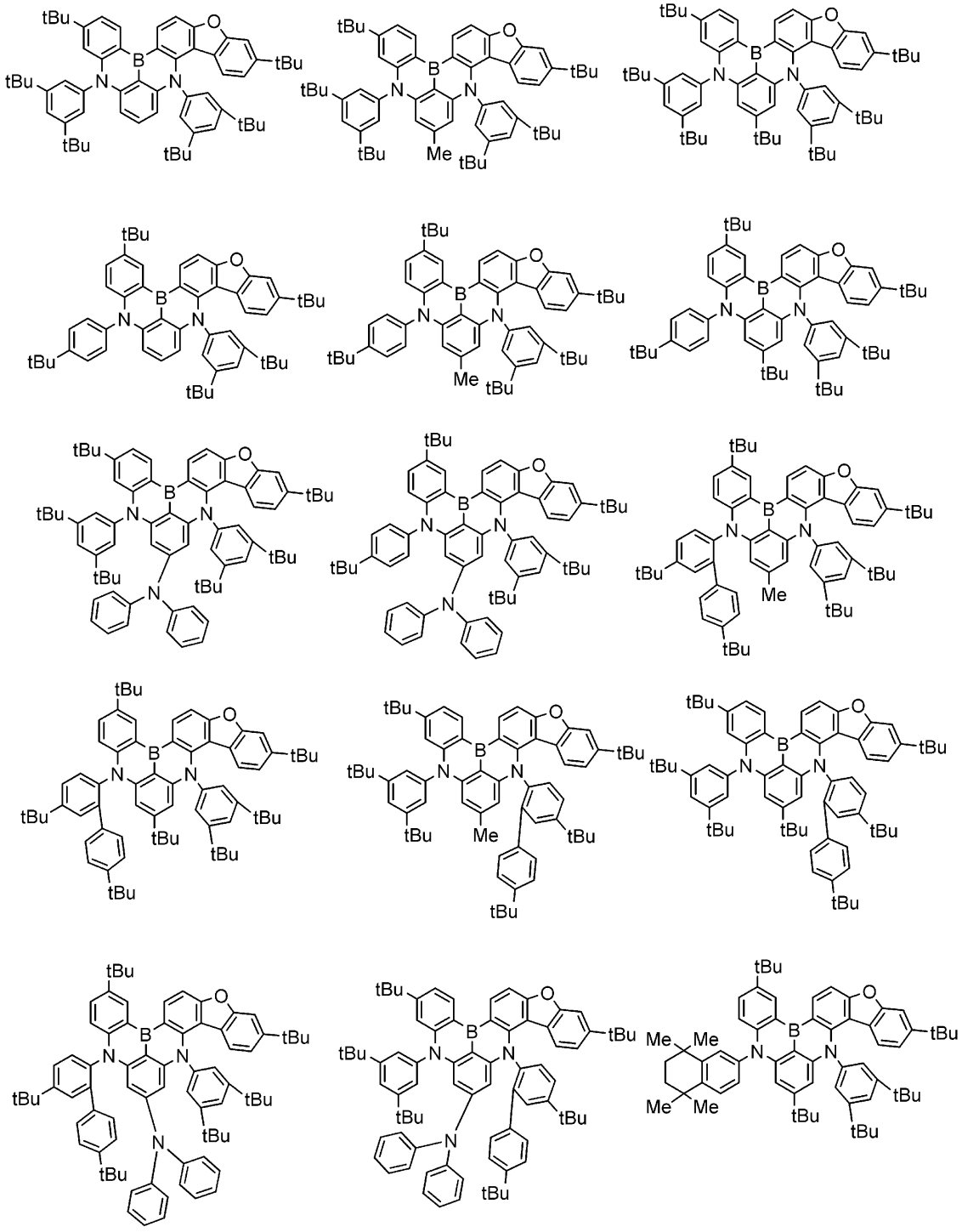
【０３９３】

【化２３４】

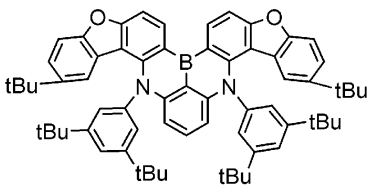
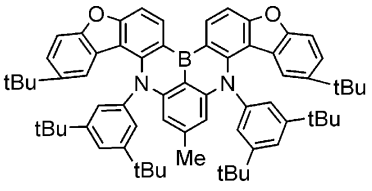
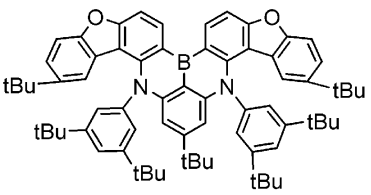
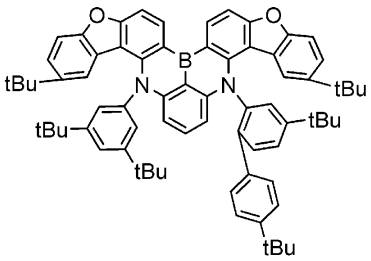
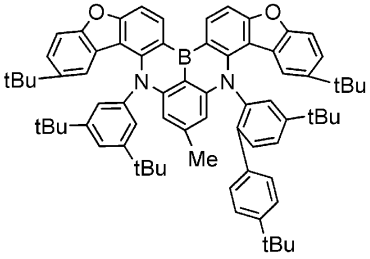
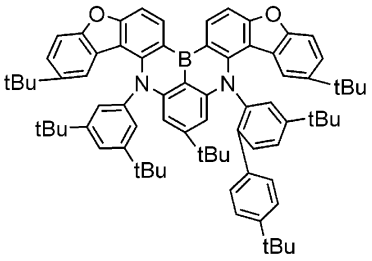
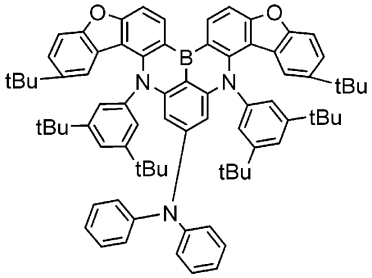
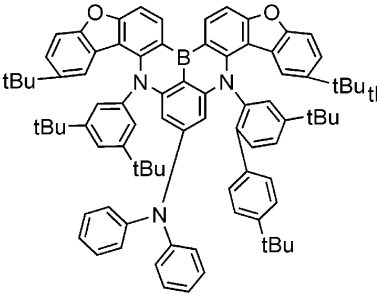
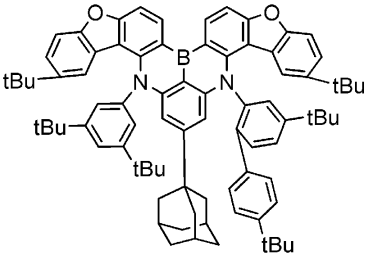
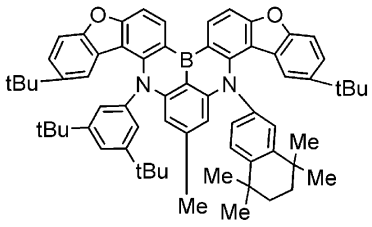
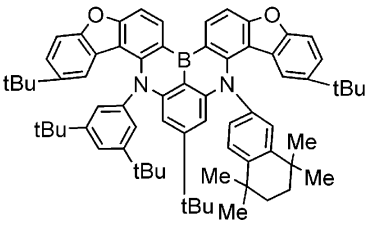
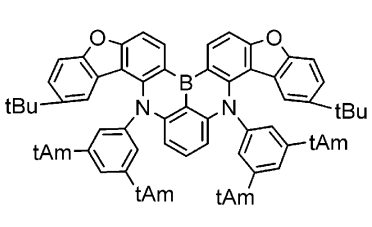
【０３９４】

【化２３５】



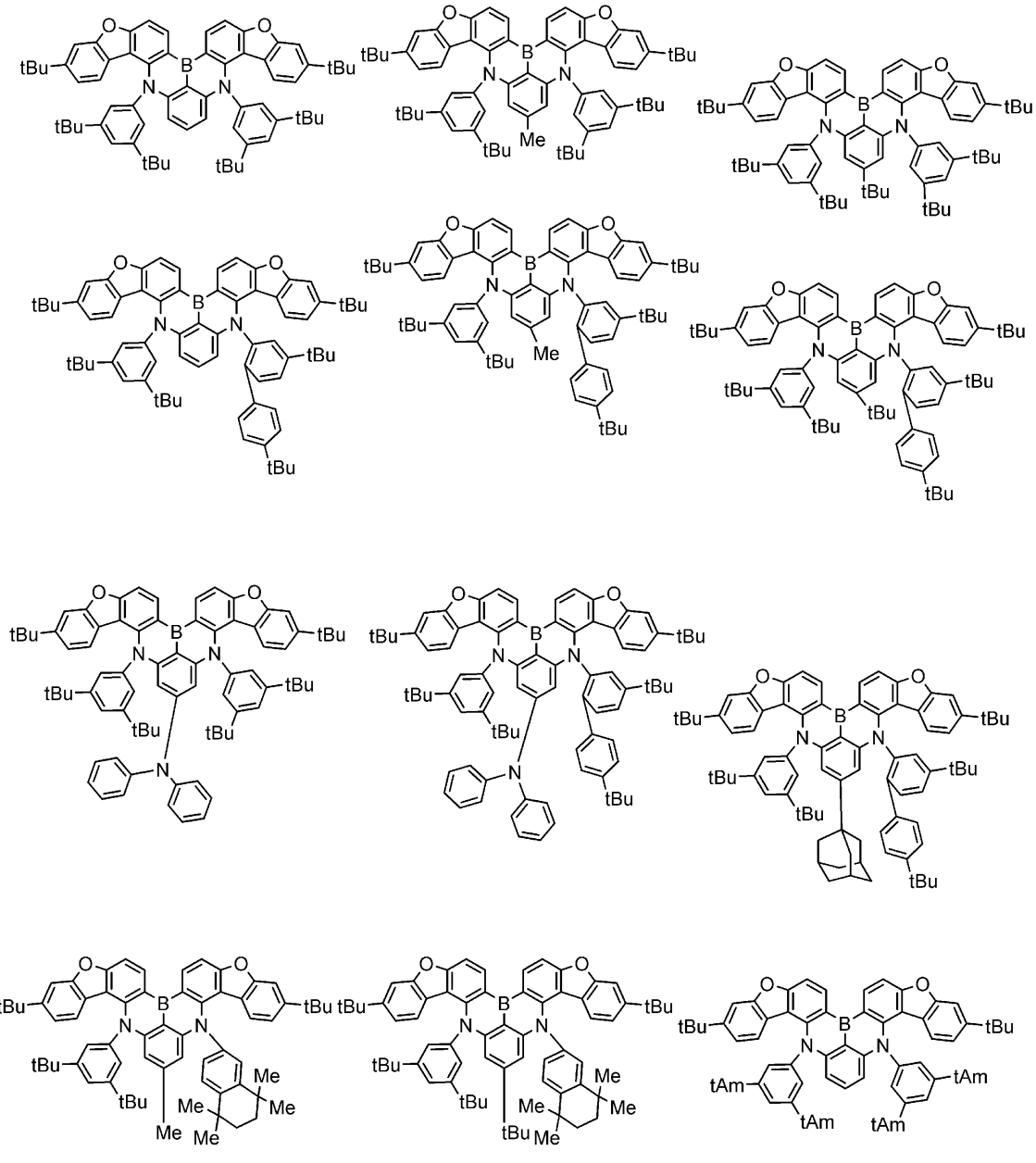
【０３９５】

【化２３６】

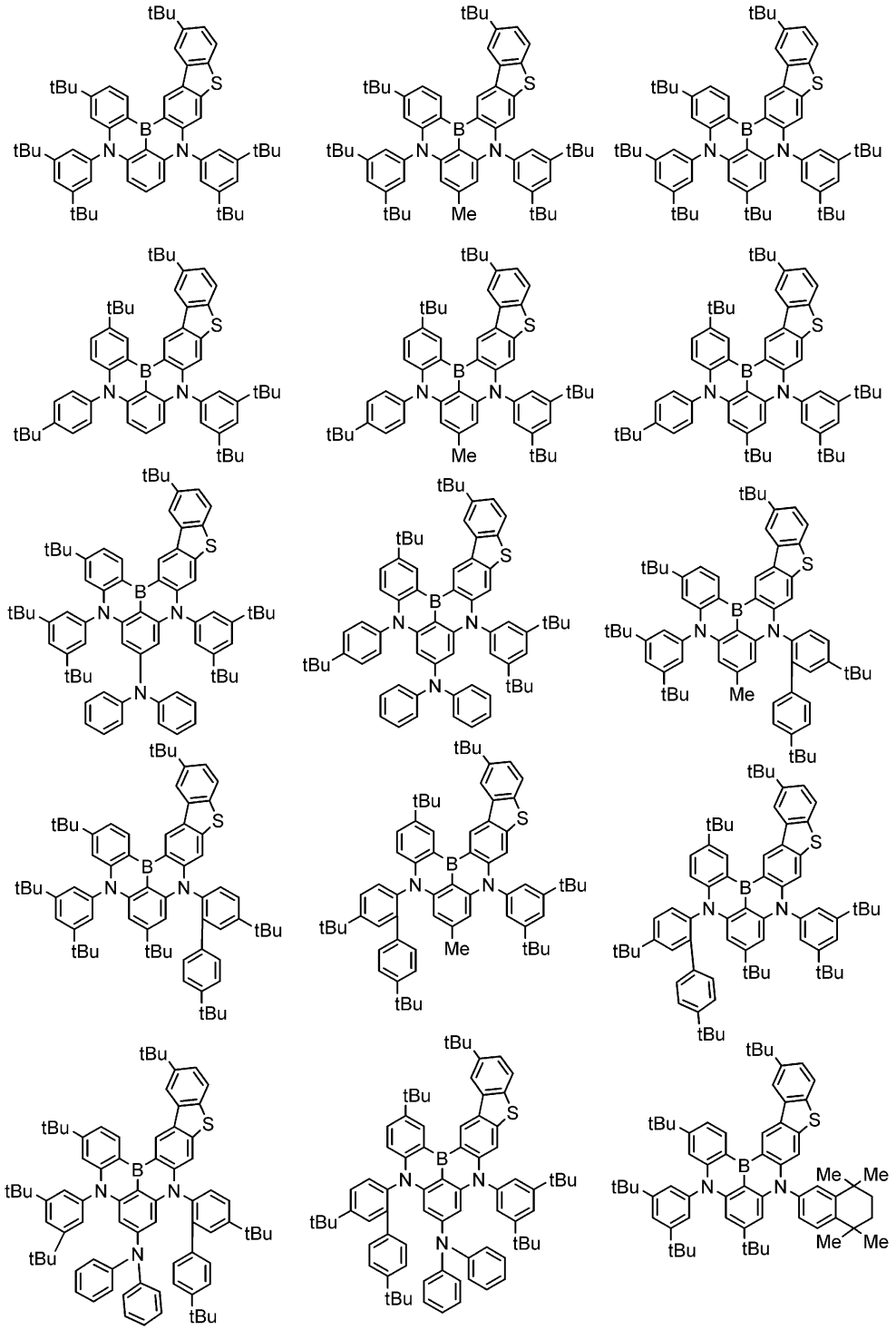
【０３９６】

【化２３７】



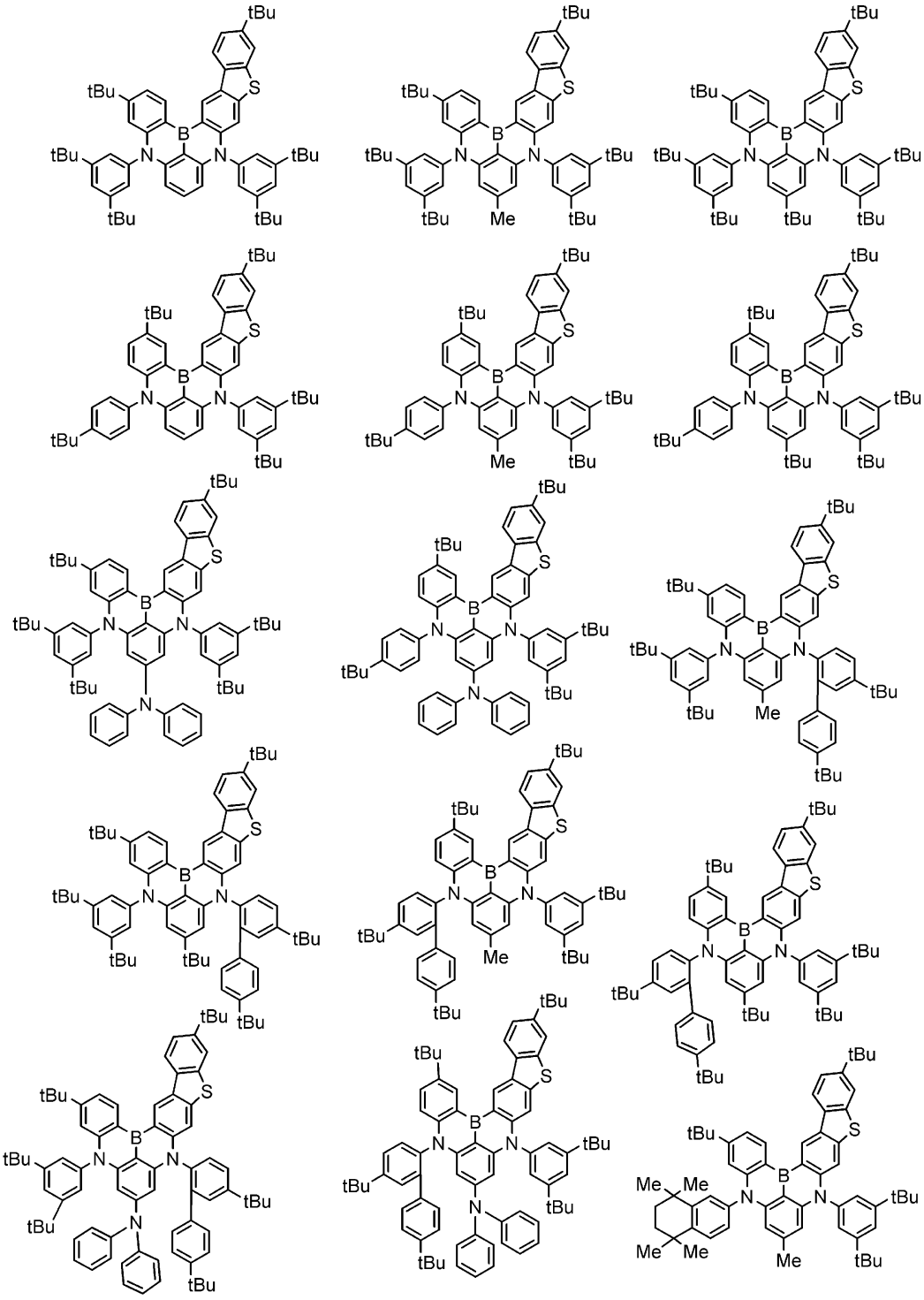
【０３９７】

【化２３８】



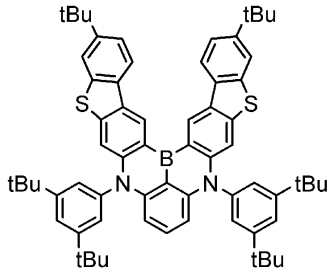
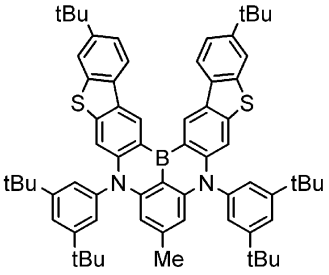
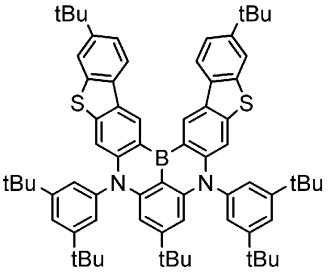
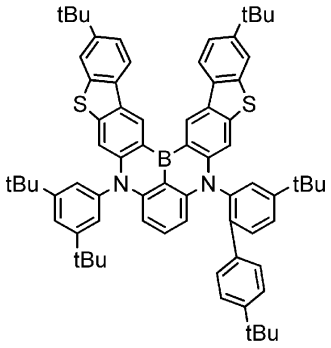
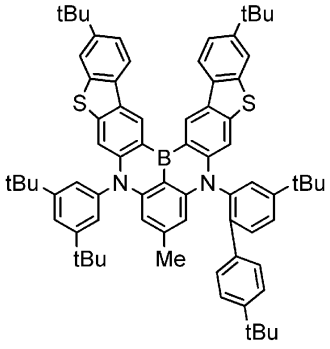
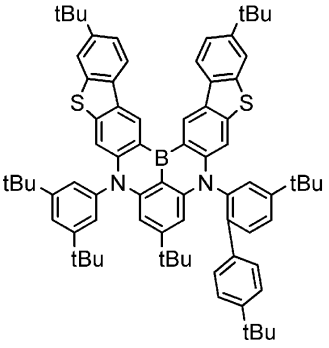
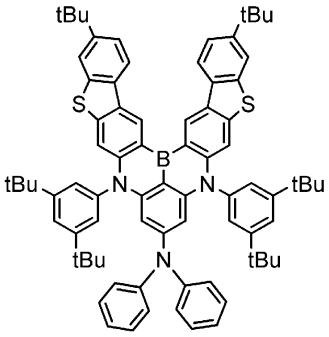
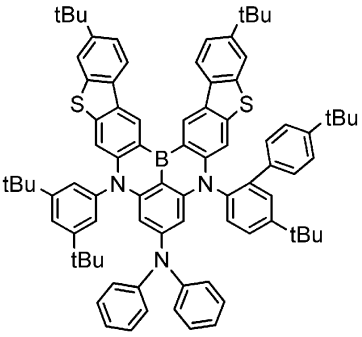
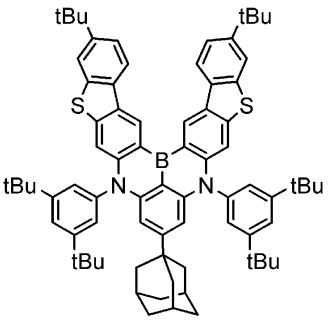
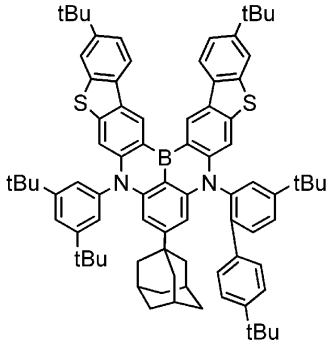
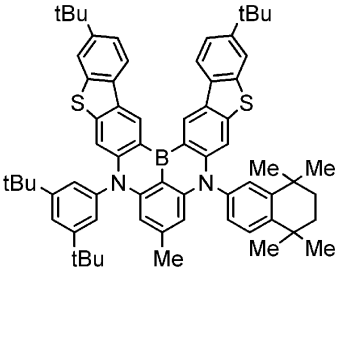
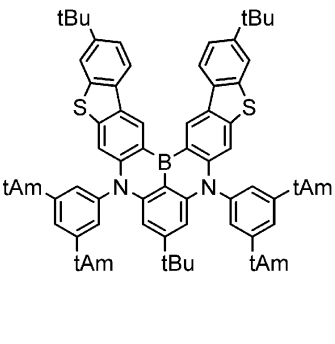
【０３９８】

【化２３９】



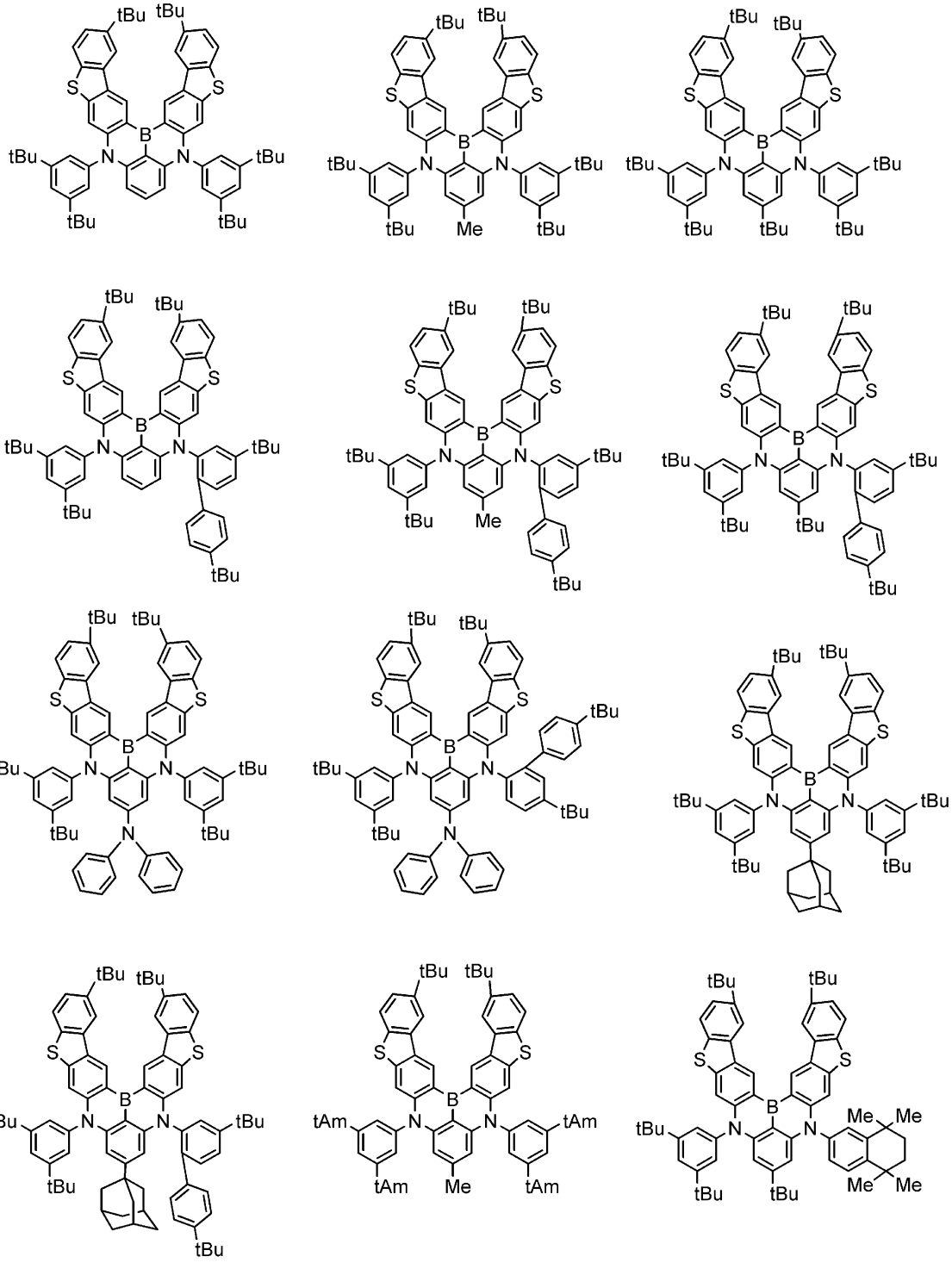
【０３９９】

【化２４０】

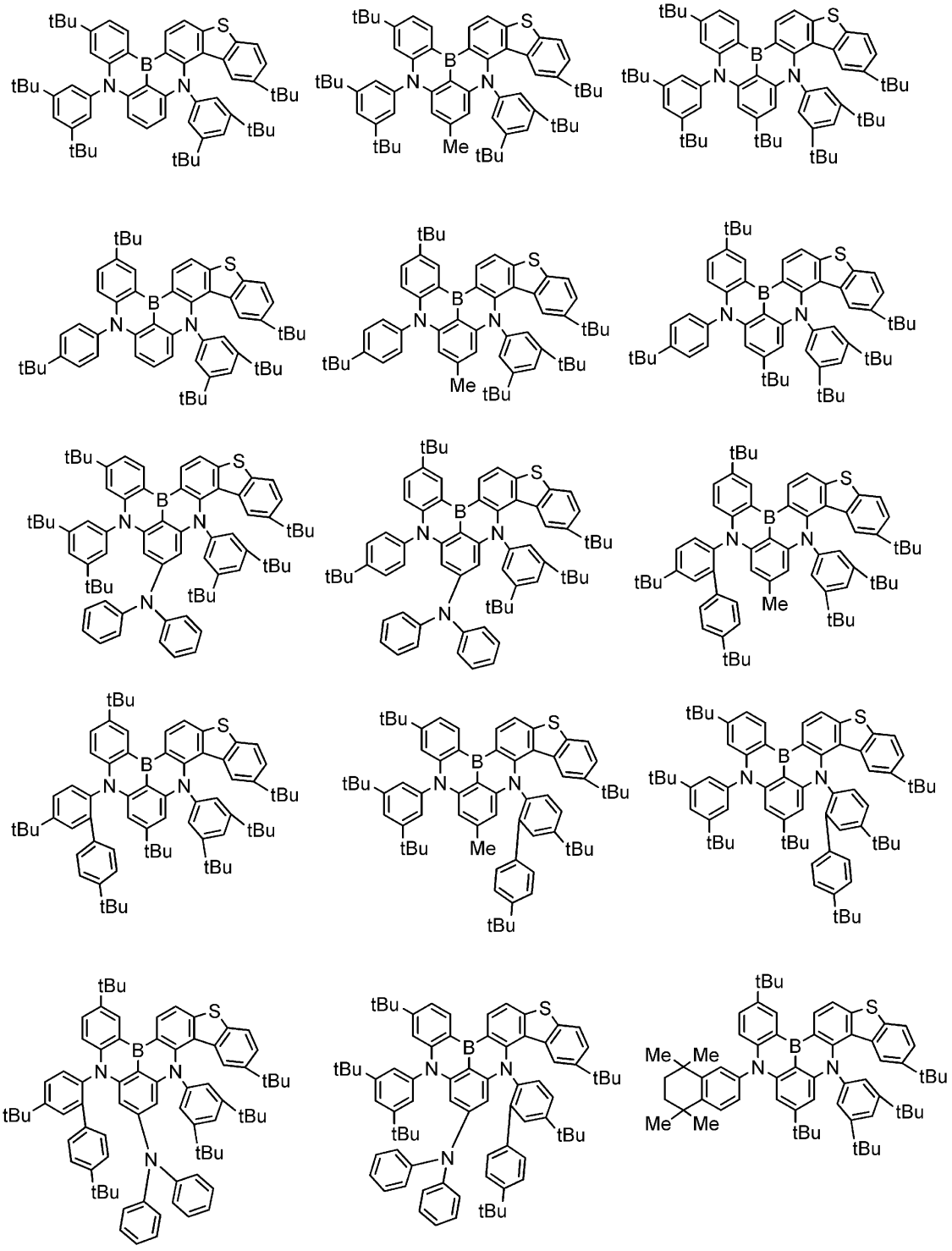
【０４００】

【化２４１】



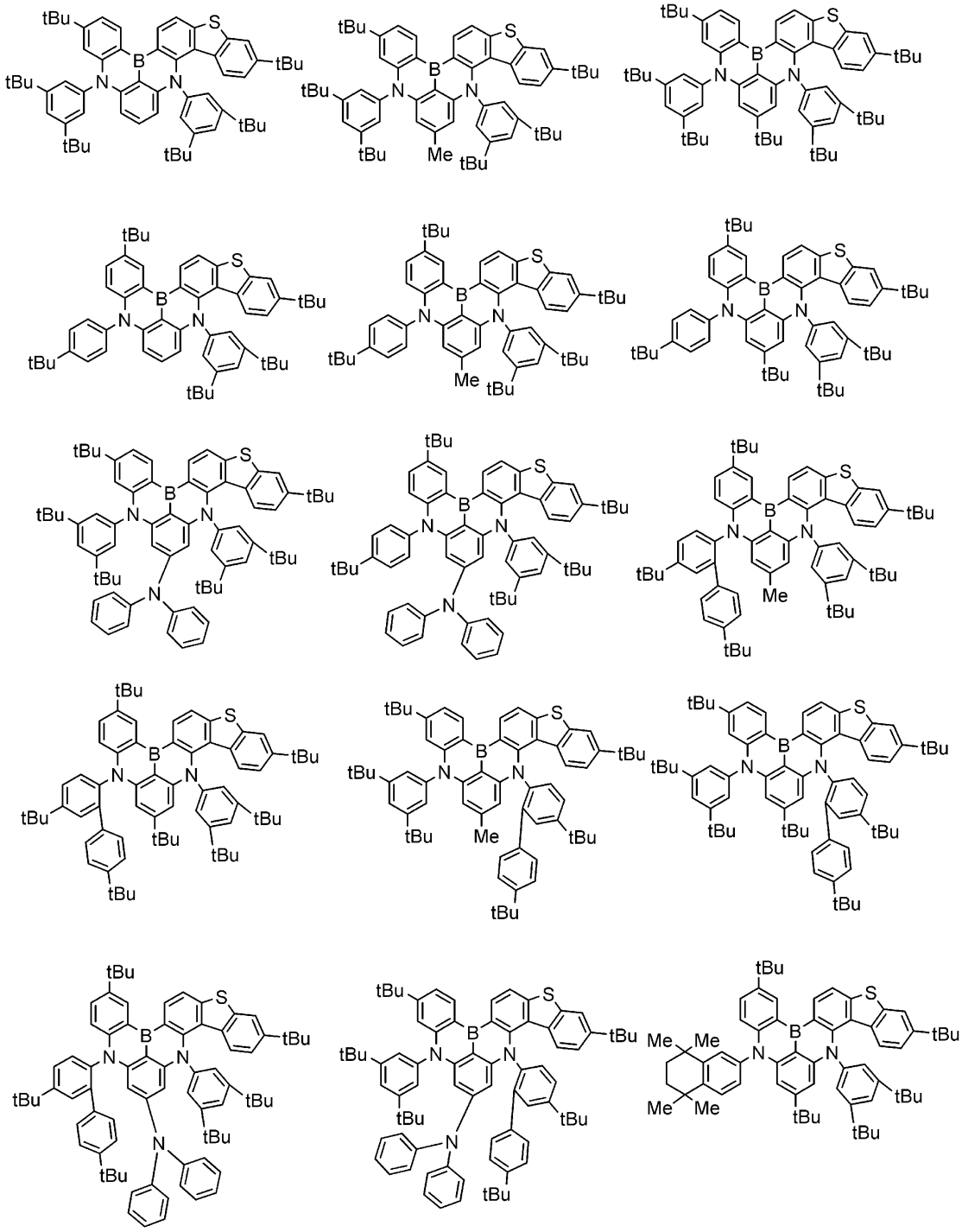
【０４０１】

【化２４２】



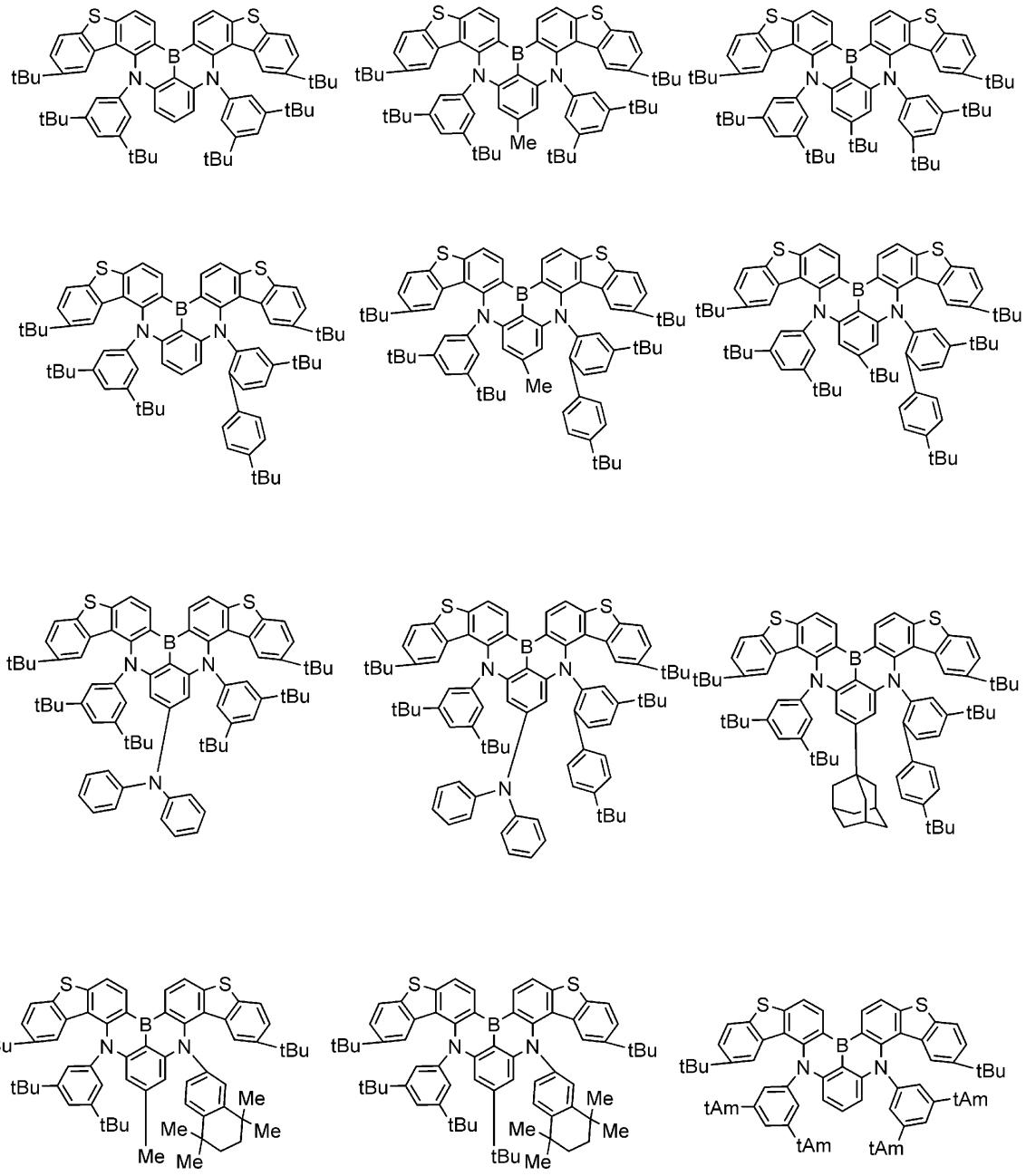
【０４０２】

【化２４３】



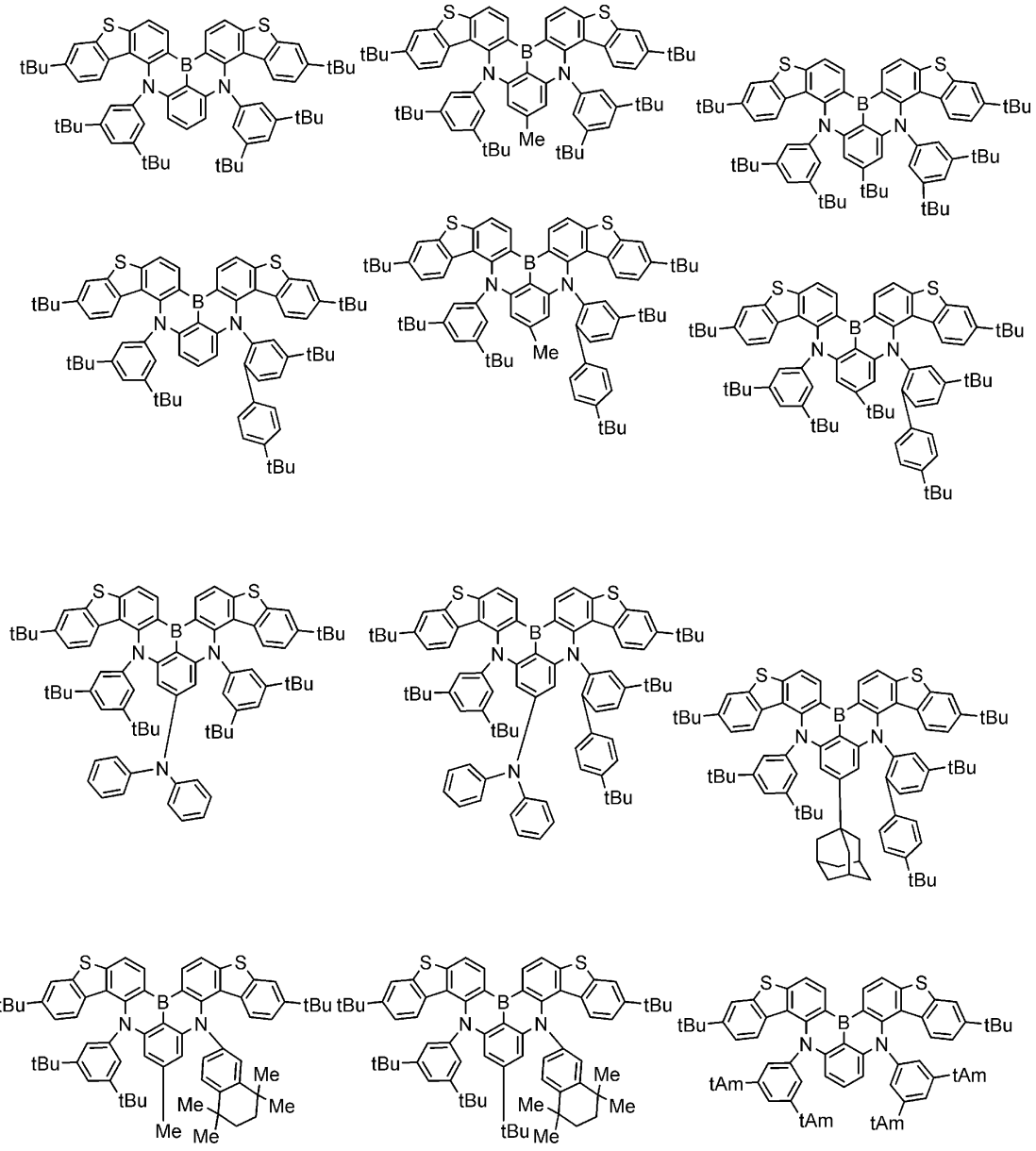
【０４０３】

【化２４４】



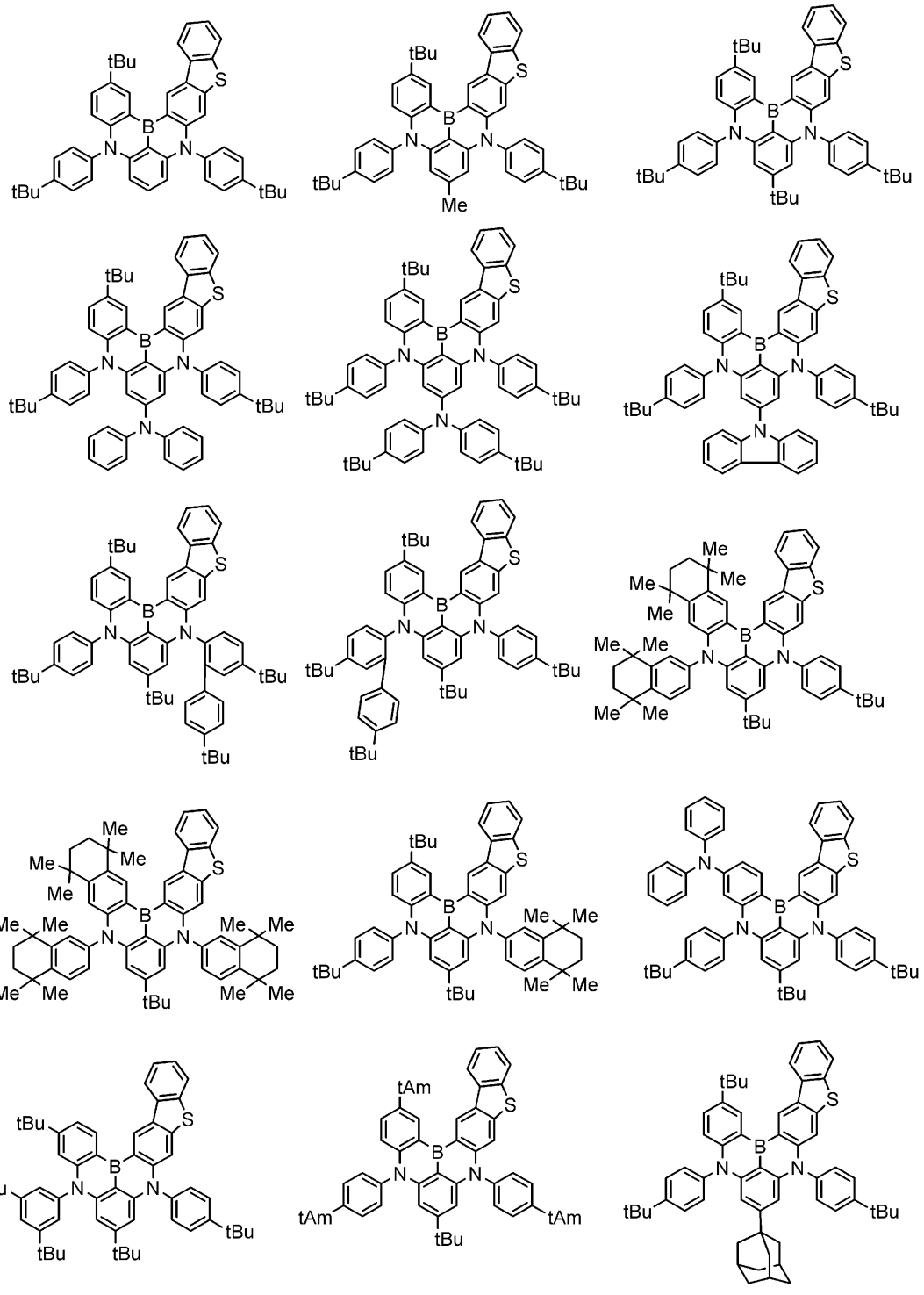
【０４０４】

【化２４５】



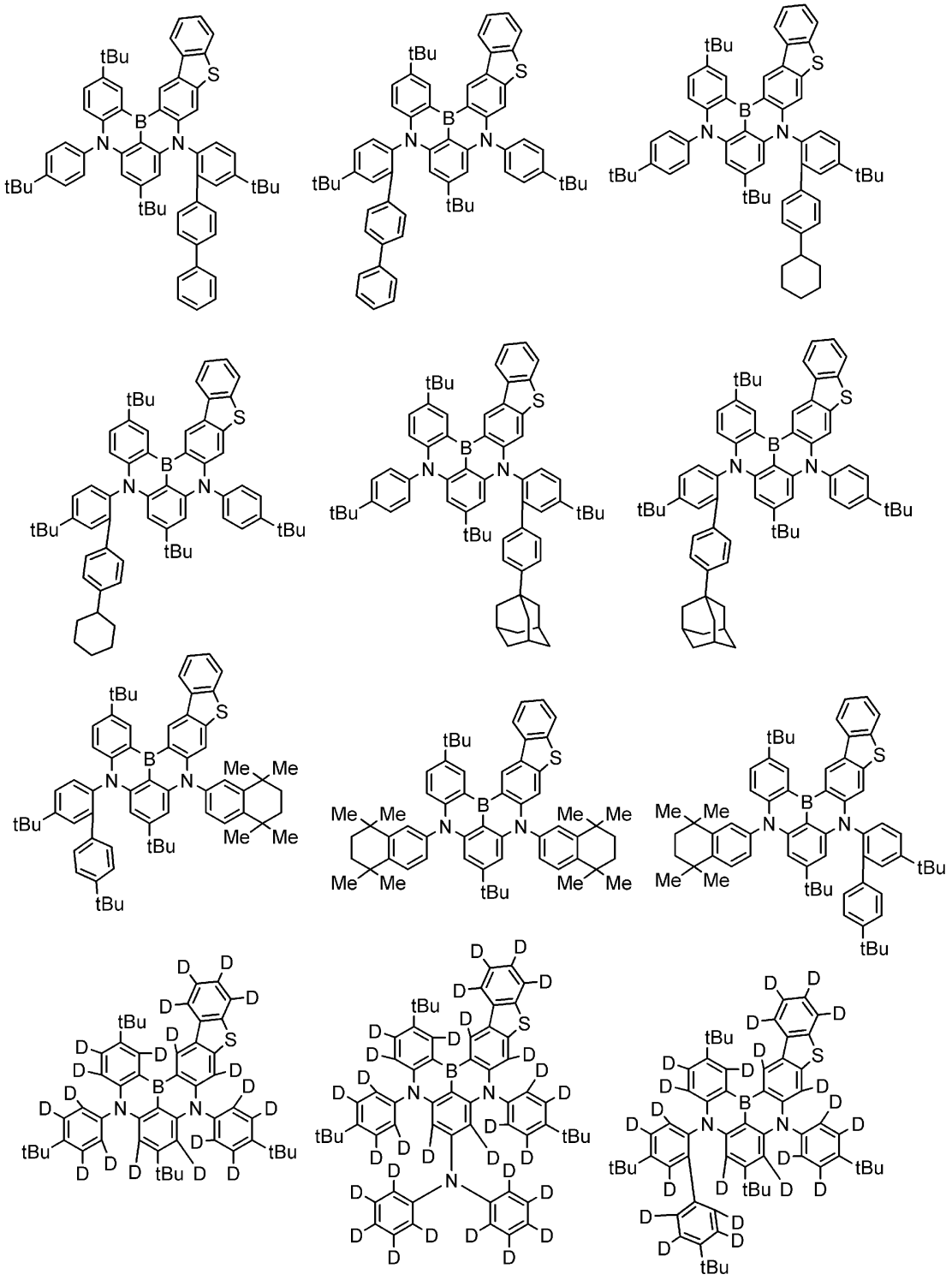
【０４０５】

【化２４６】



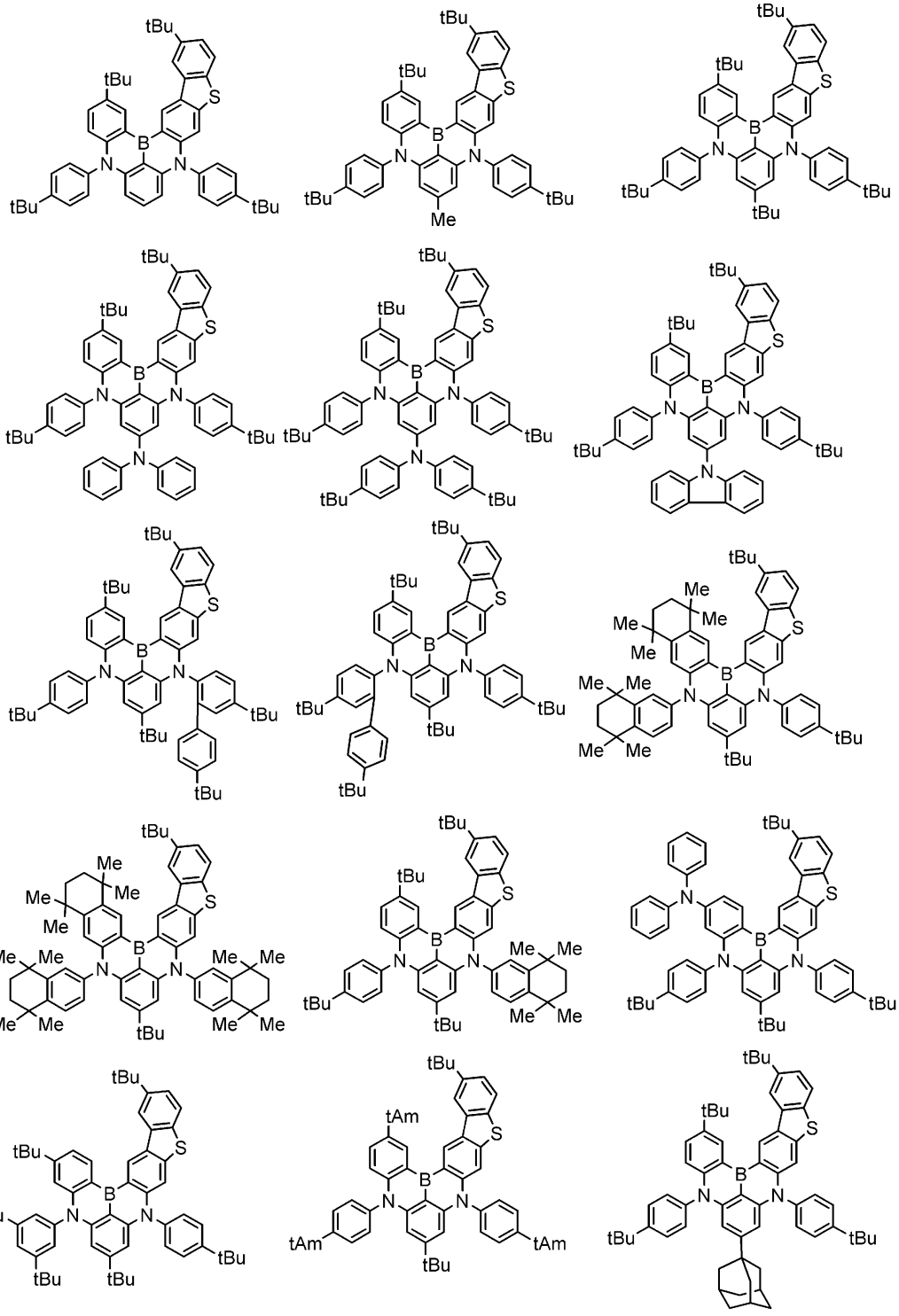
【０４０６】

【化２４７】



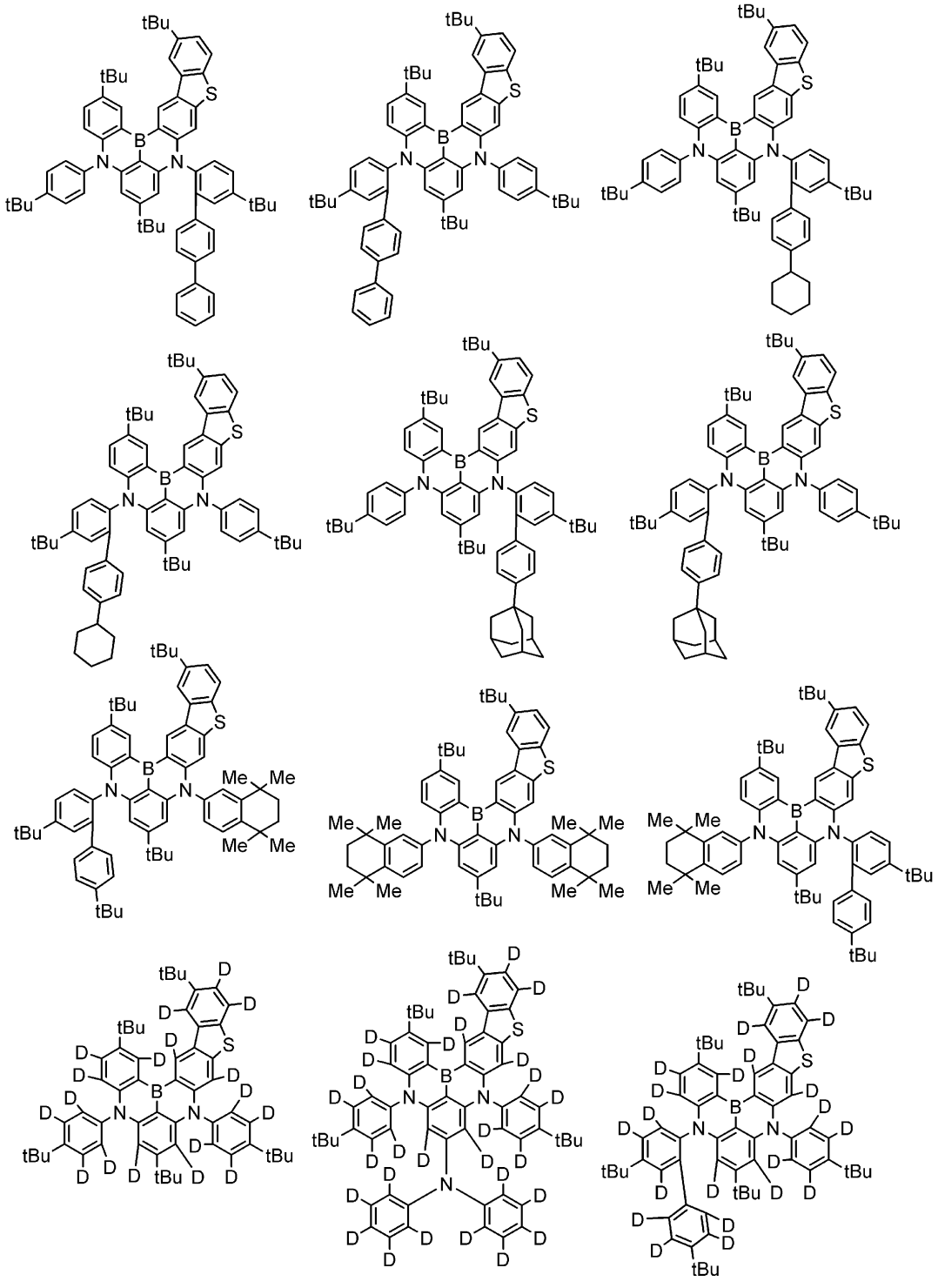
【０４０７】

【化２４８】



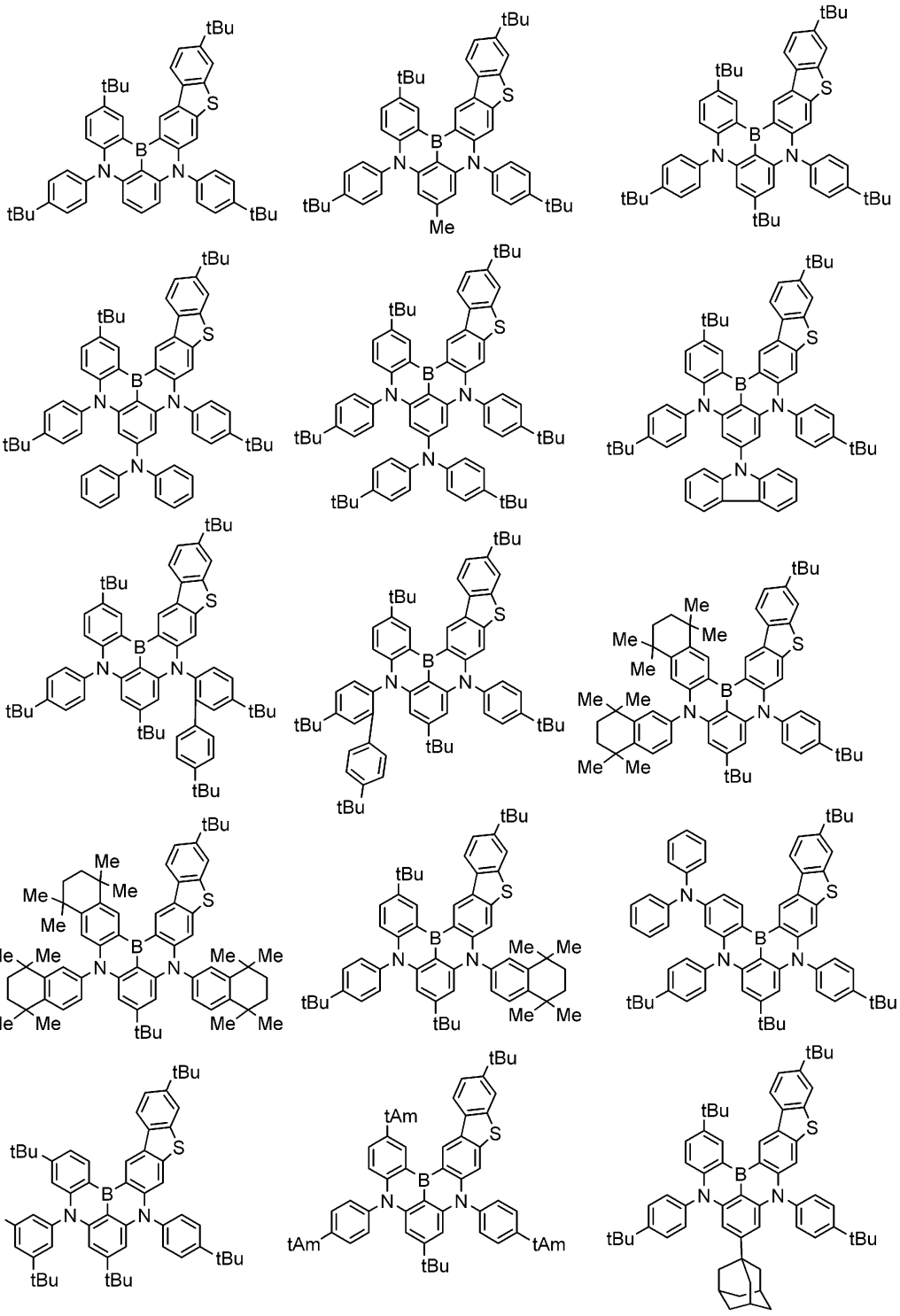
【０４０８】

【化２４９】



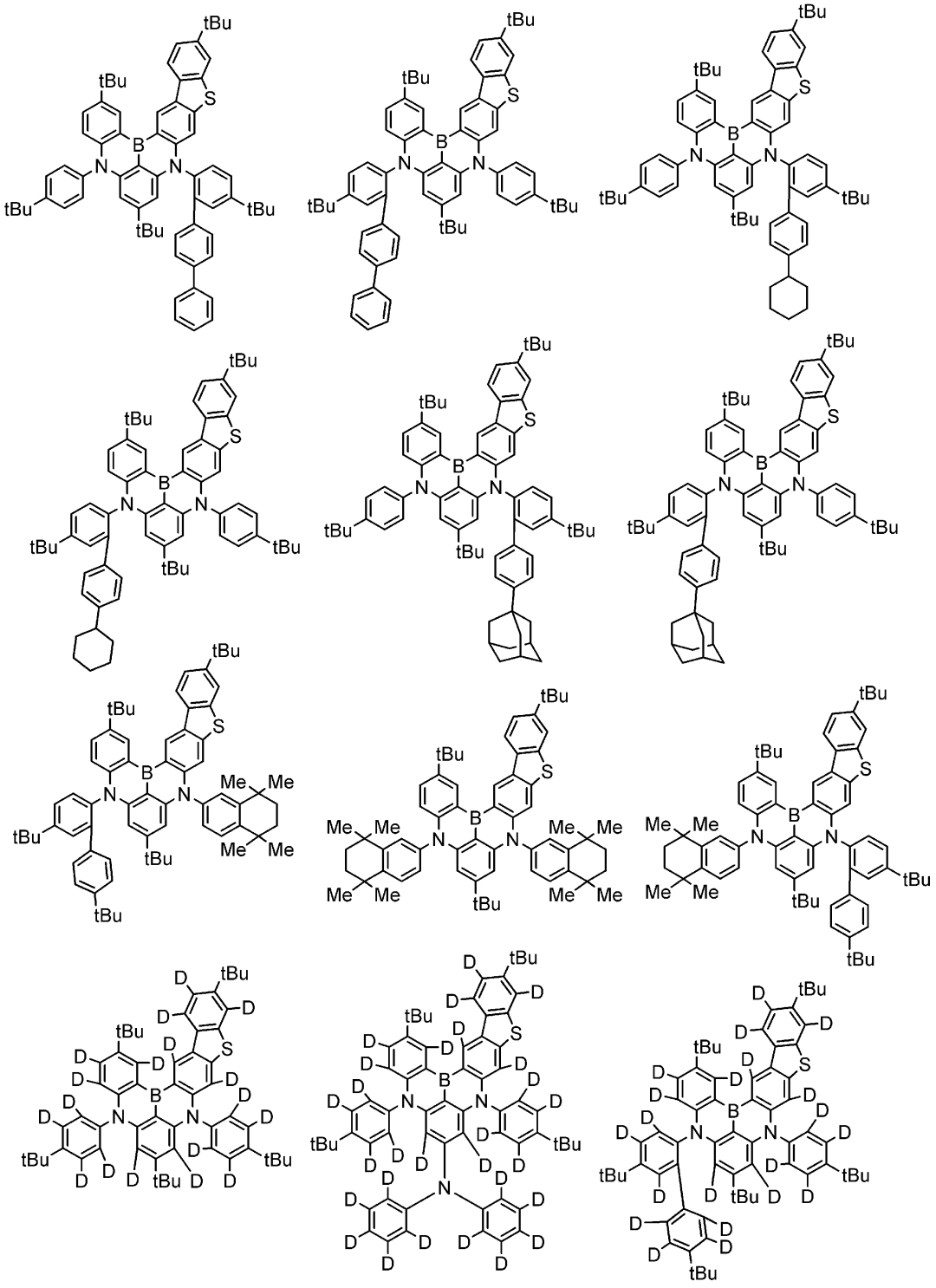
【０４０９】

【化２５０】



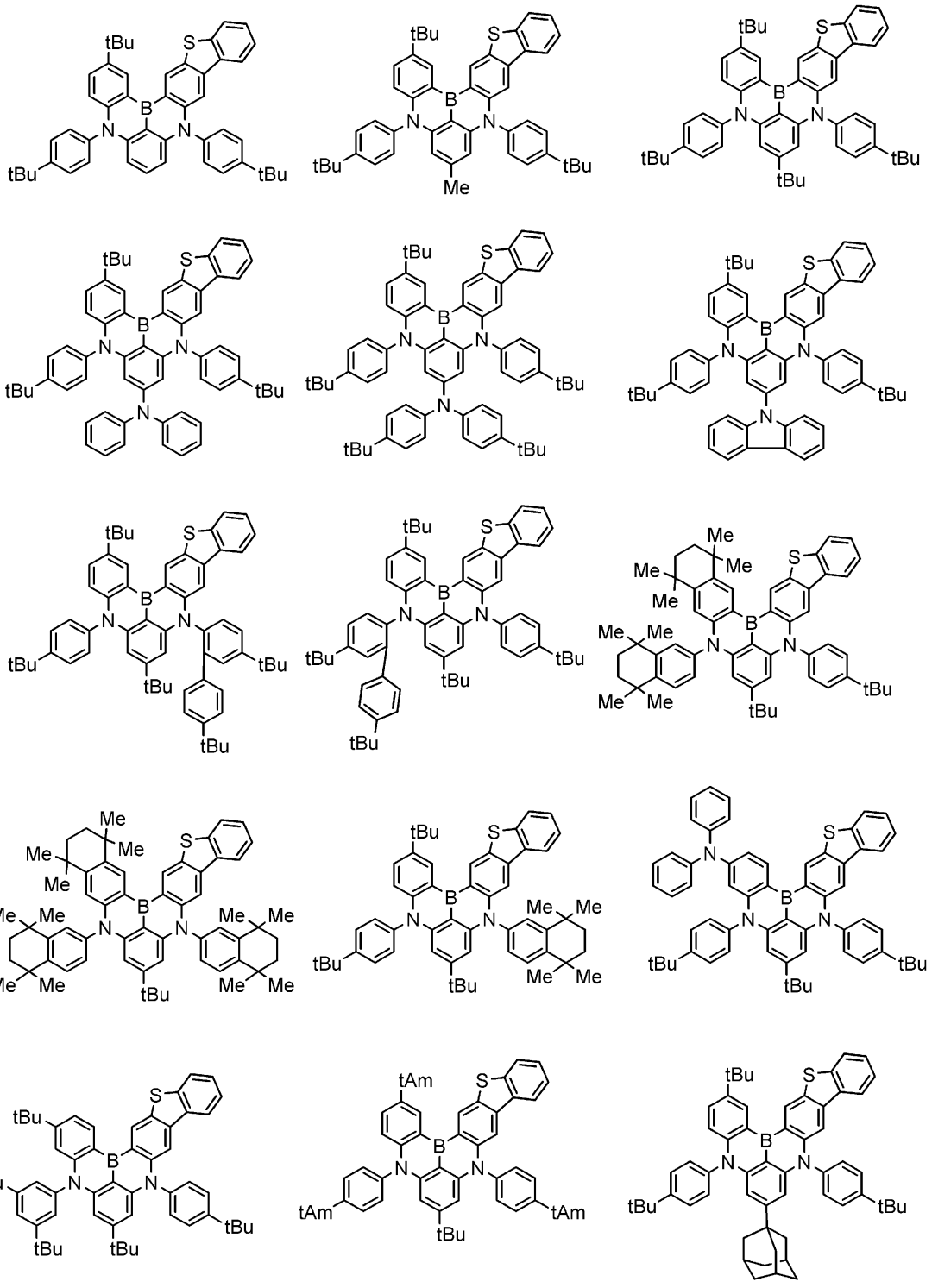
【０４１０】

【化２５１】



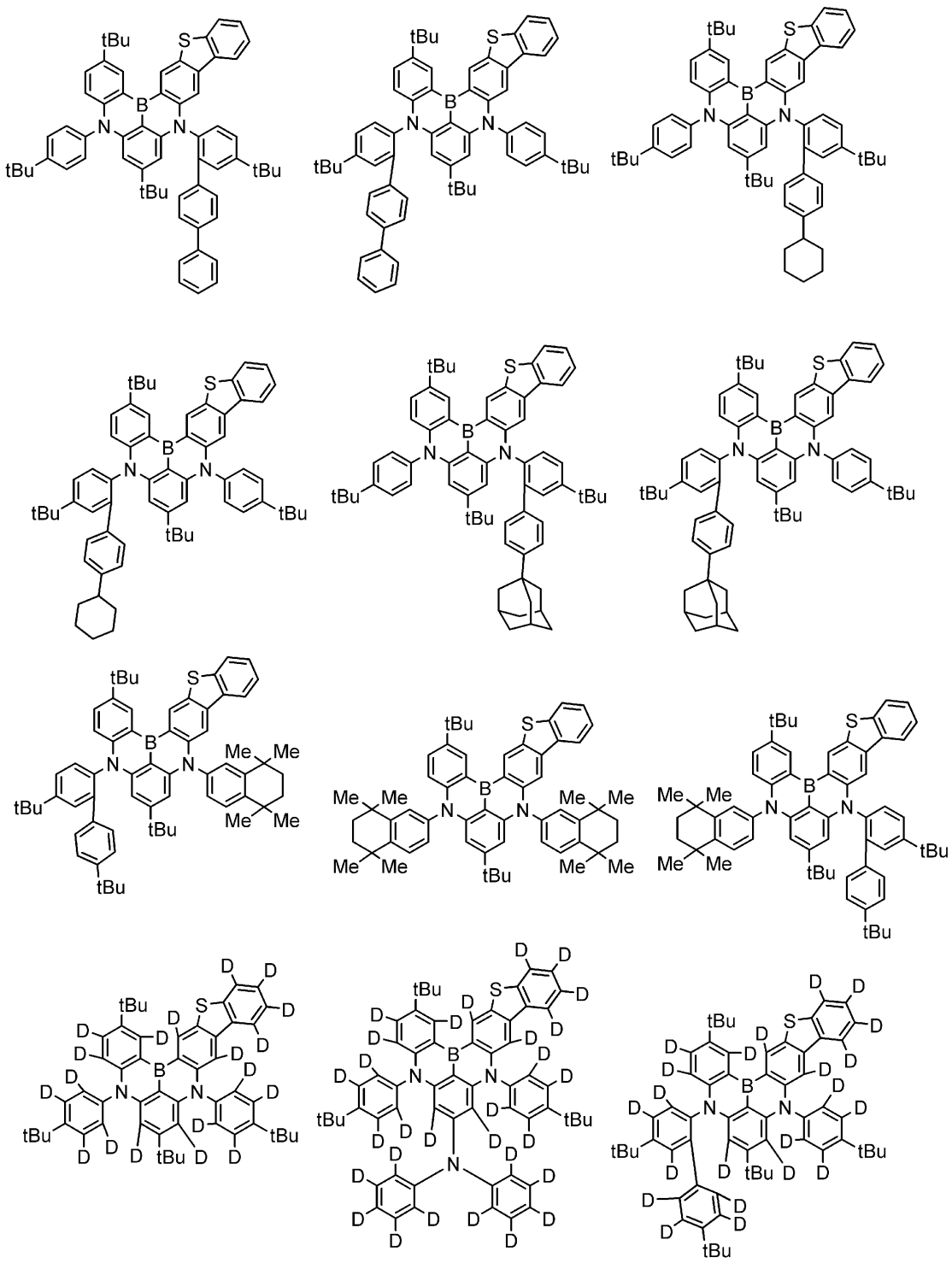
【０４１１】

【化２５２】



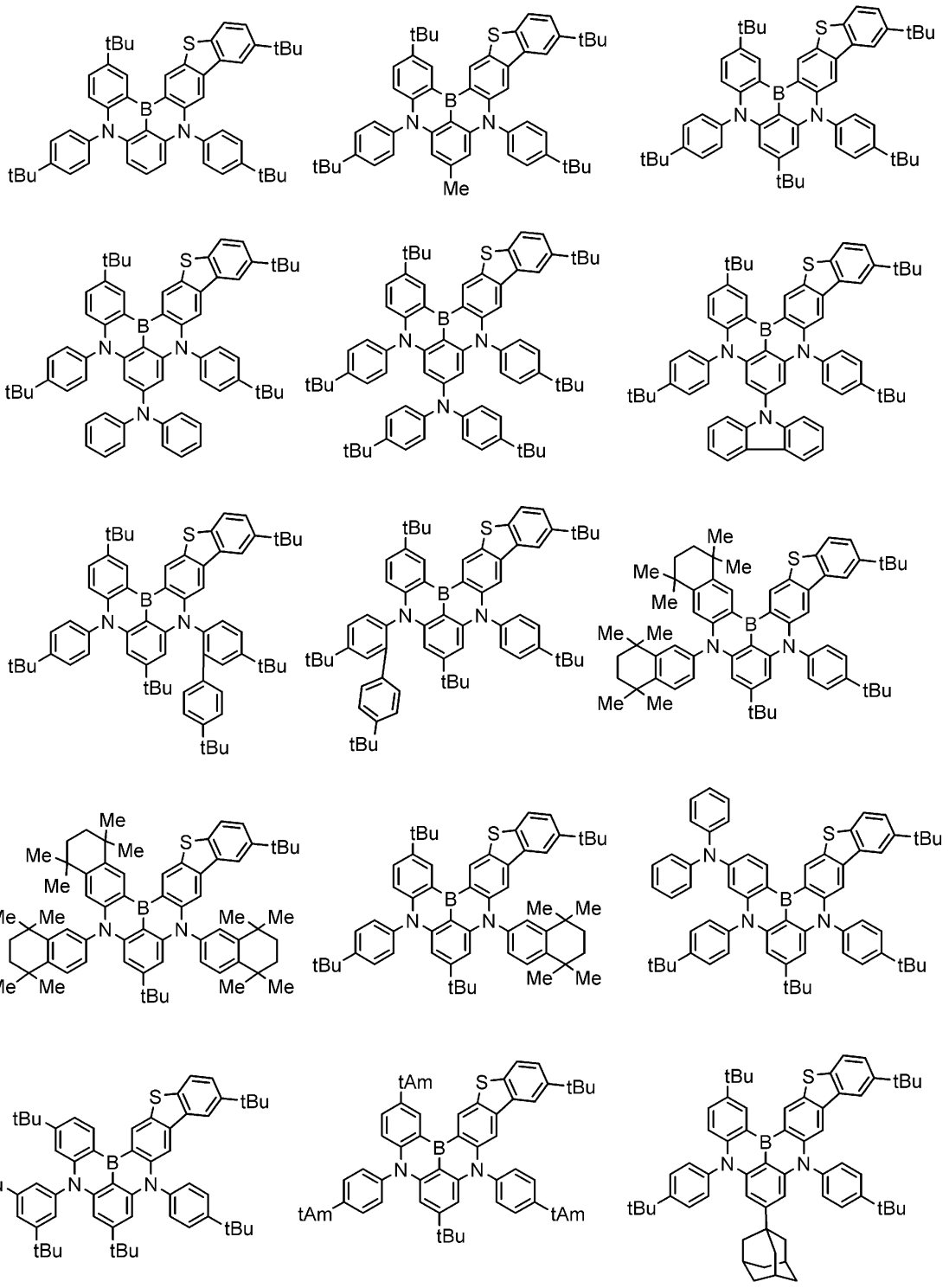
【０４１２】

【化２５３】



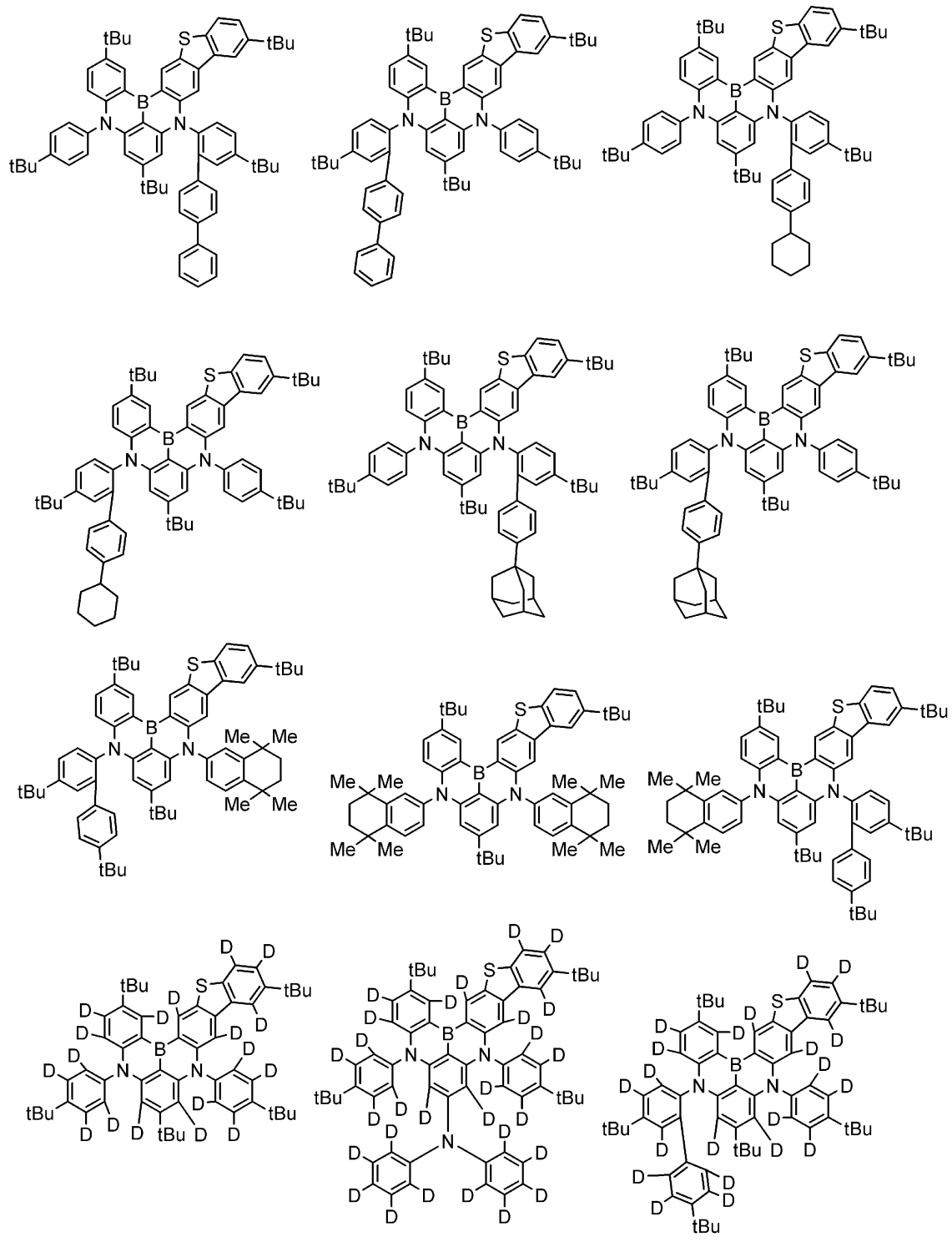
【０４１３】

【化２５４】



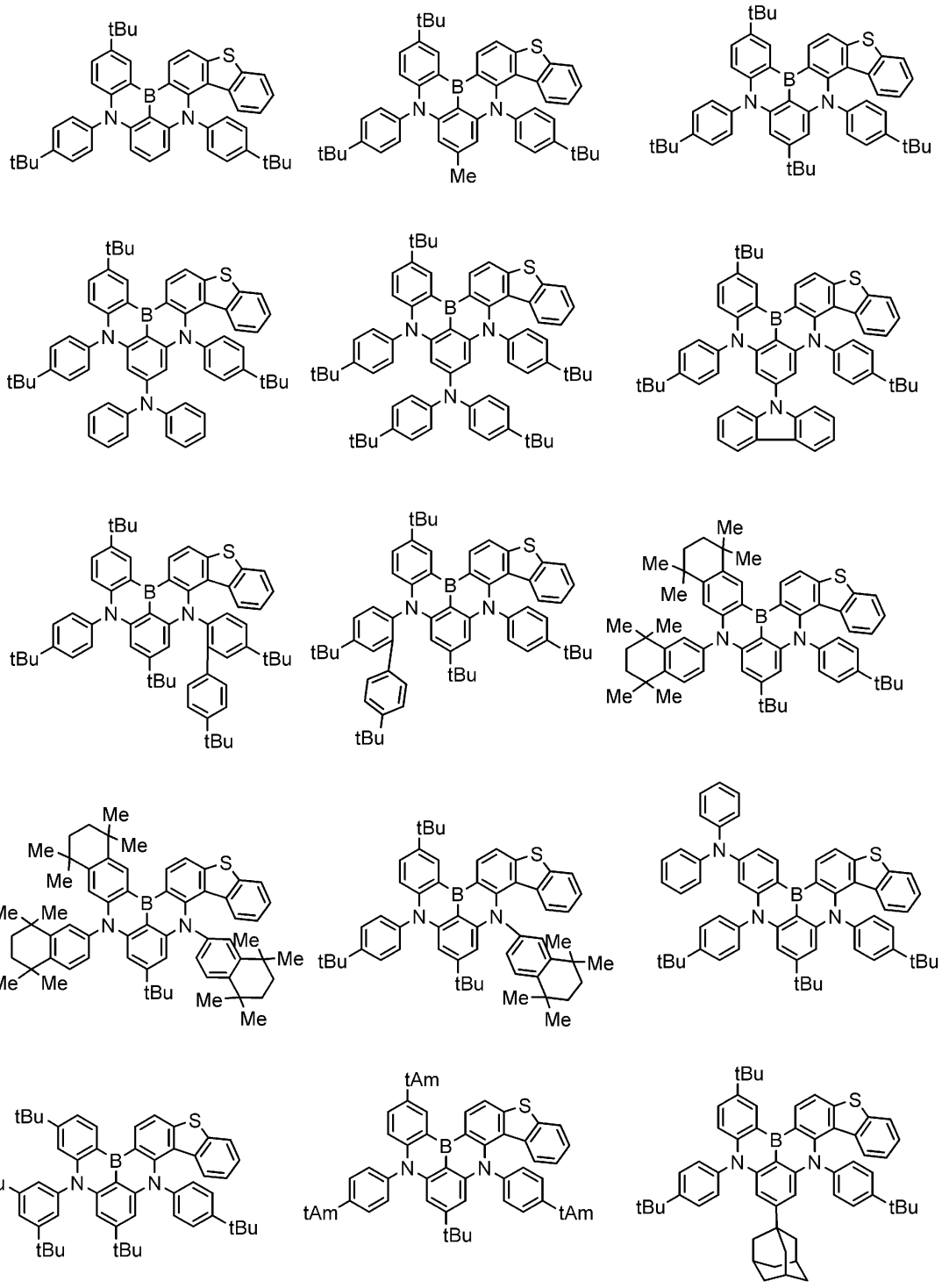
【０４１４】

【化２５５】



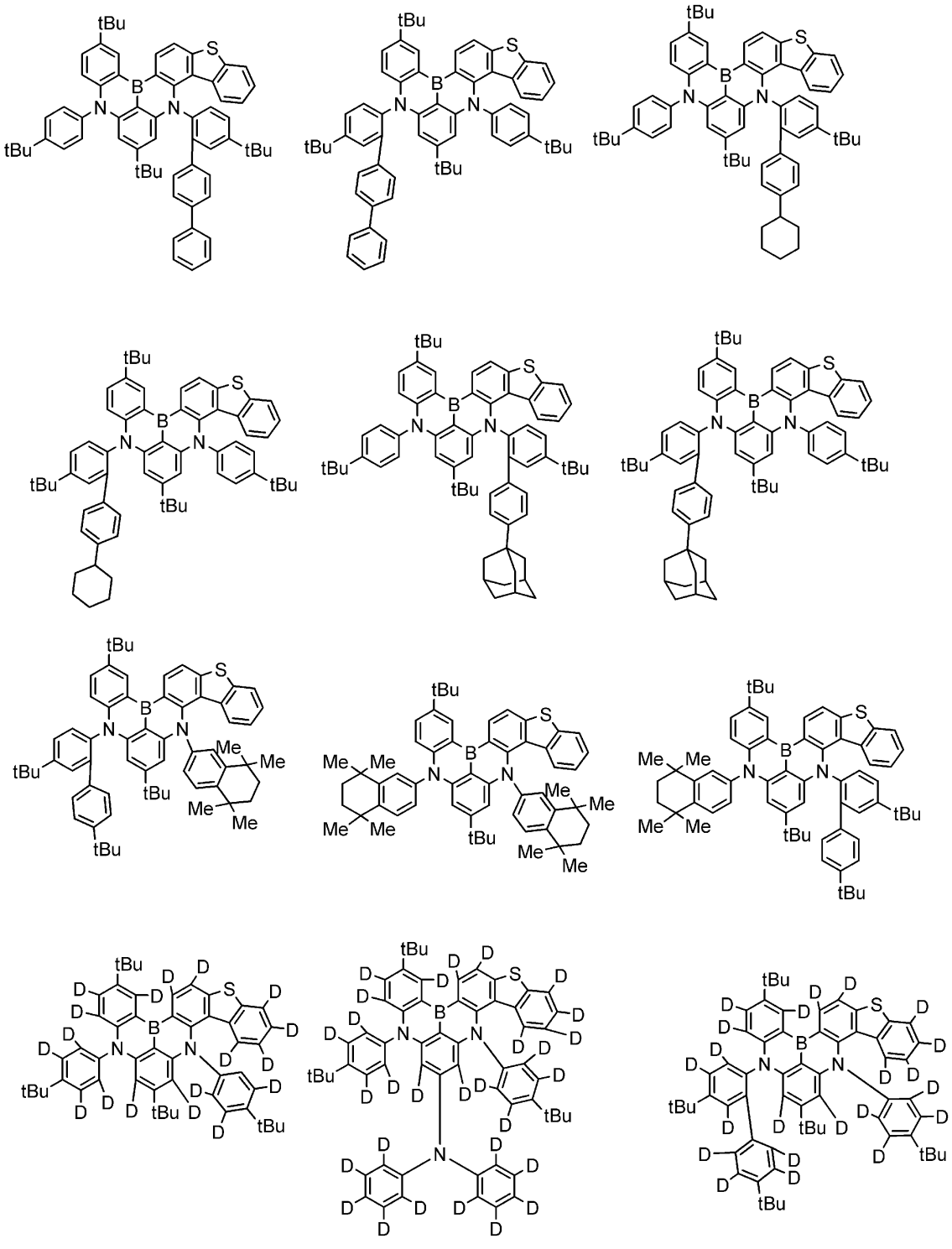
【０４１５】

【化２５６】



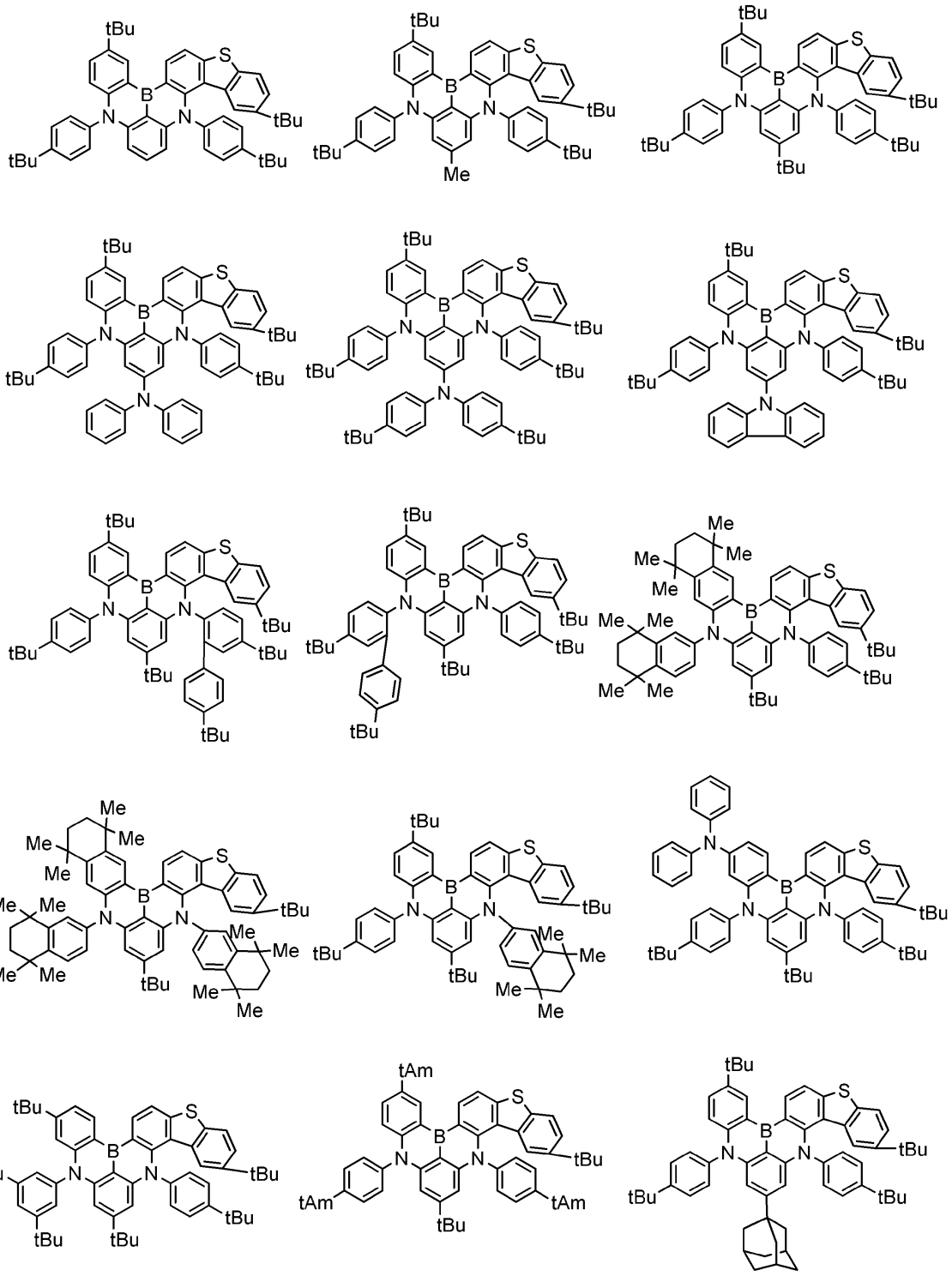
【０４１６】

【化２５７】



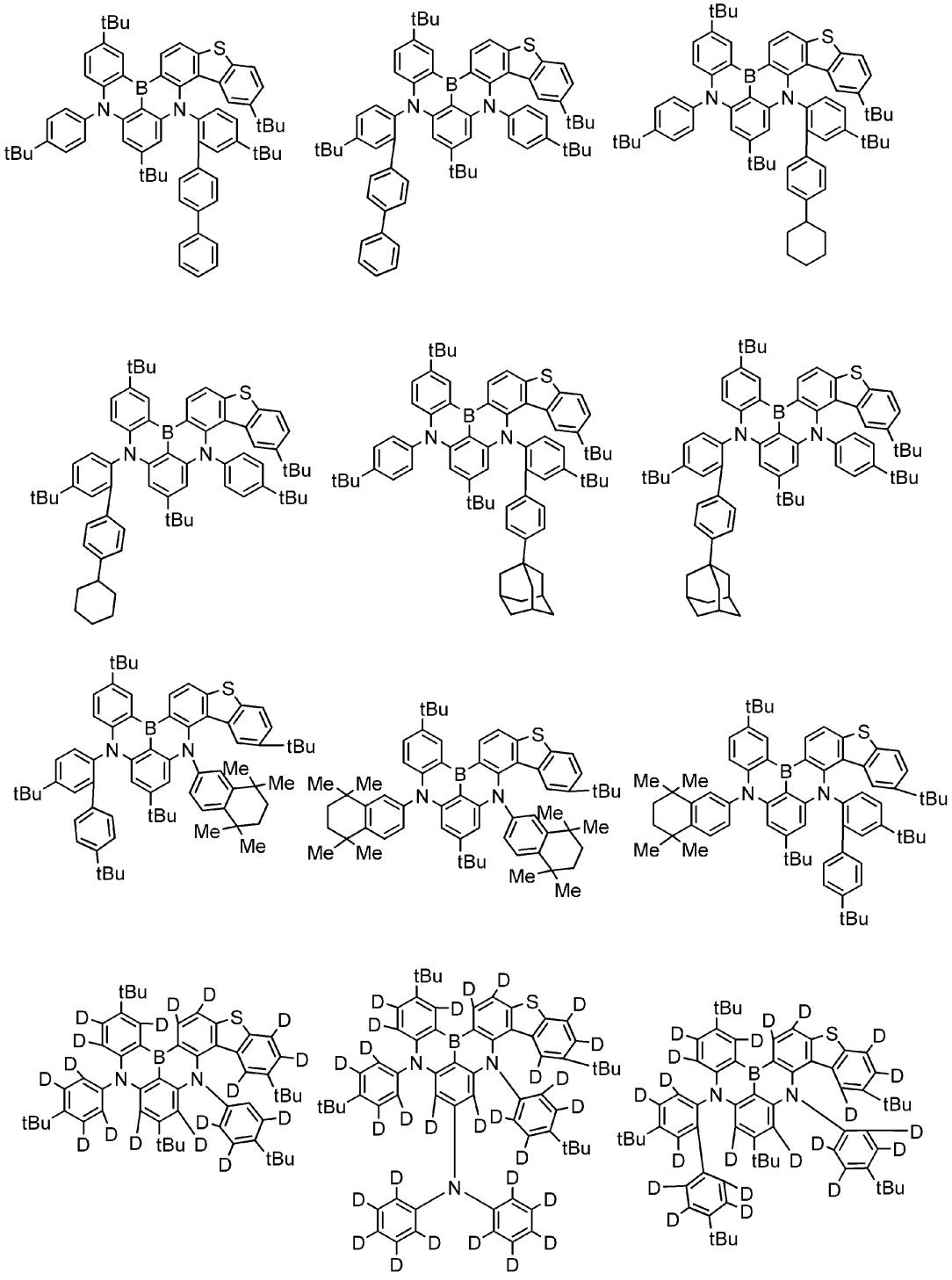
【０４１７】

【化２５８】



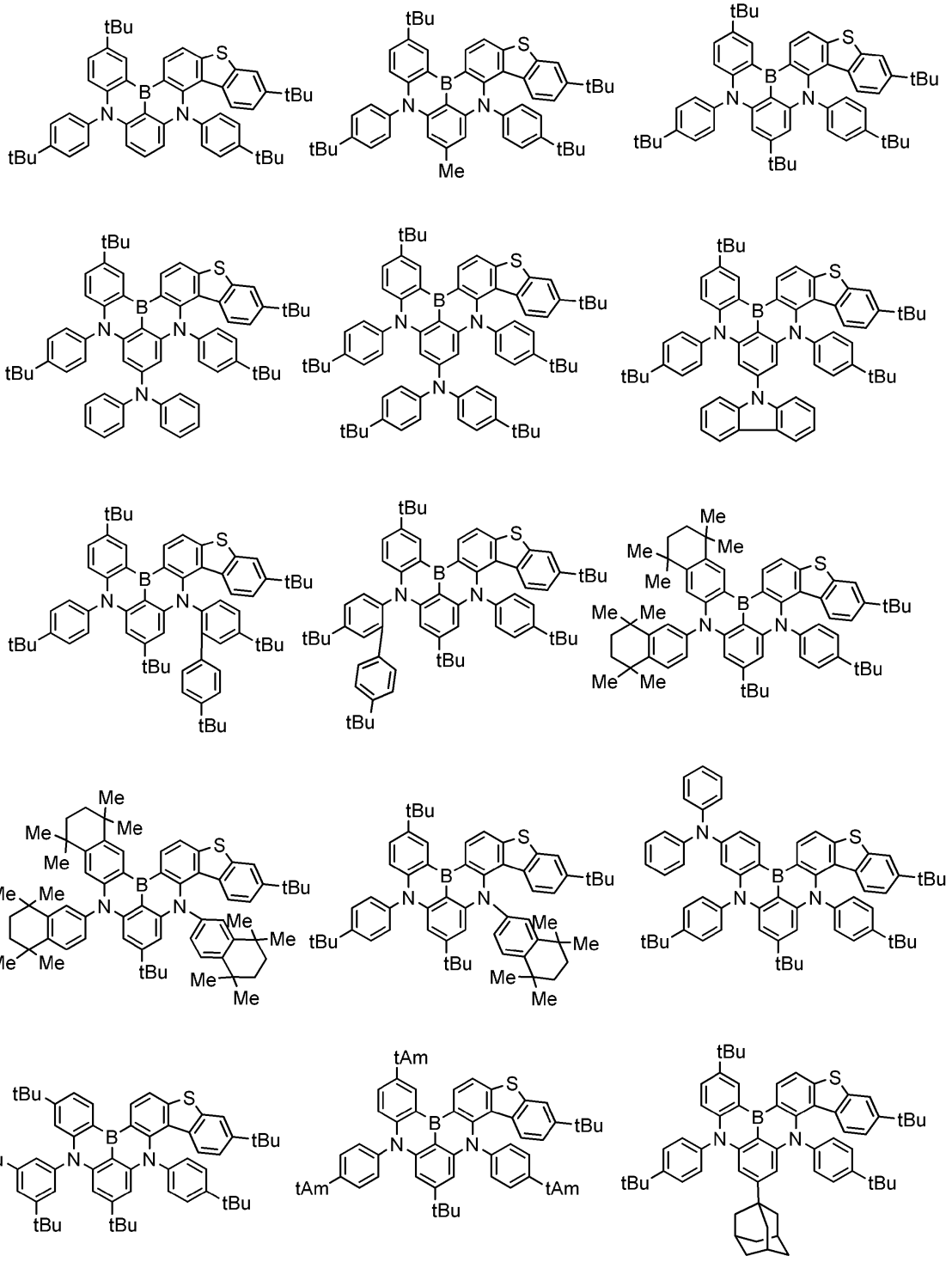
【０４１８】

【化２５９】



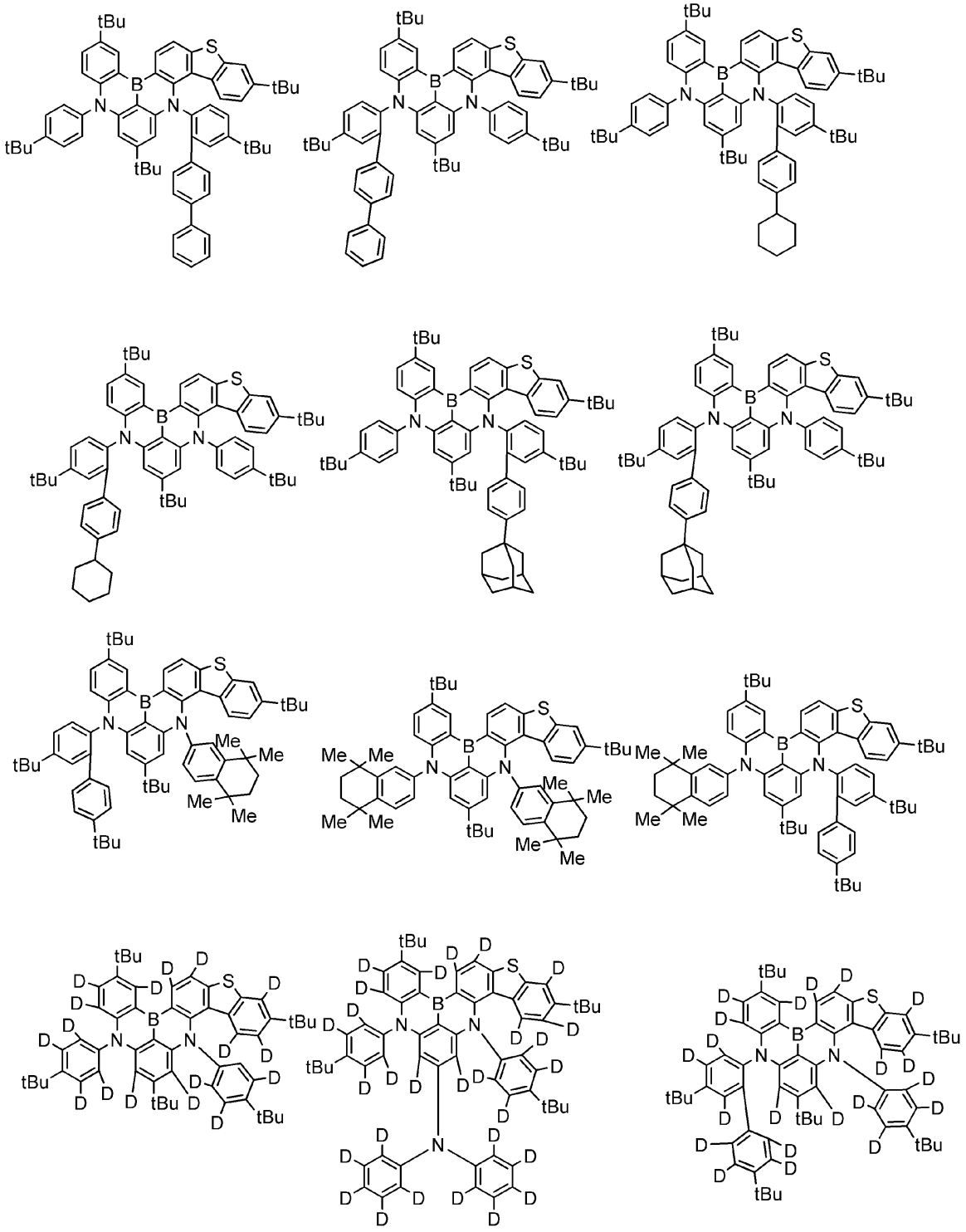
【０４１９】

【化２６０】



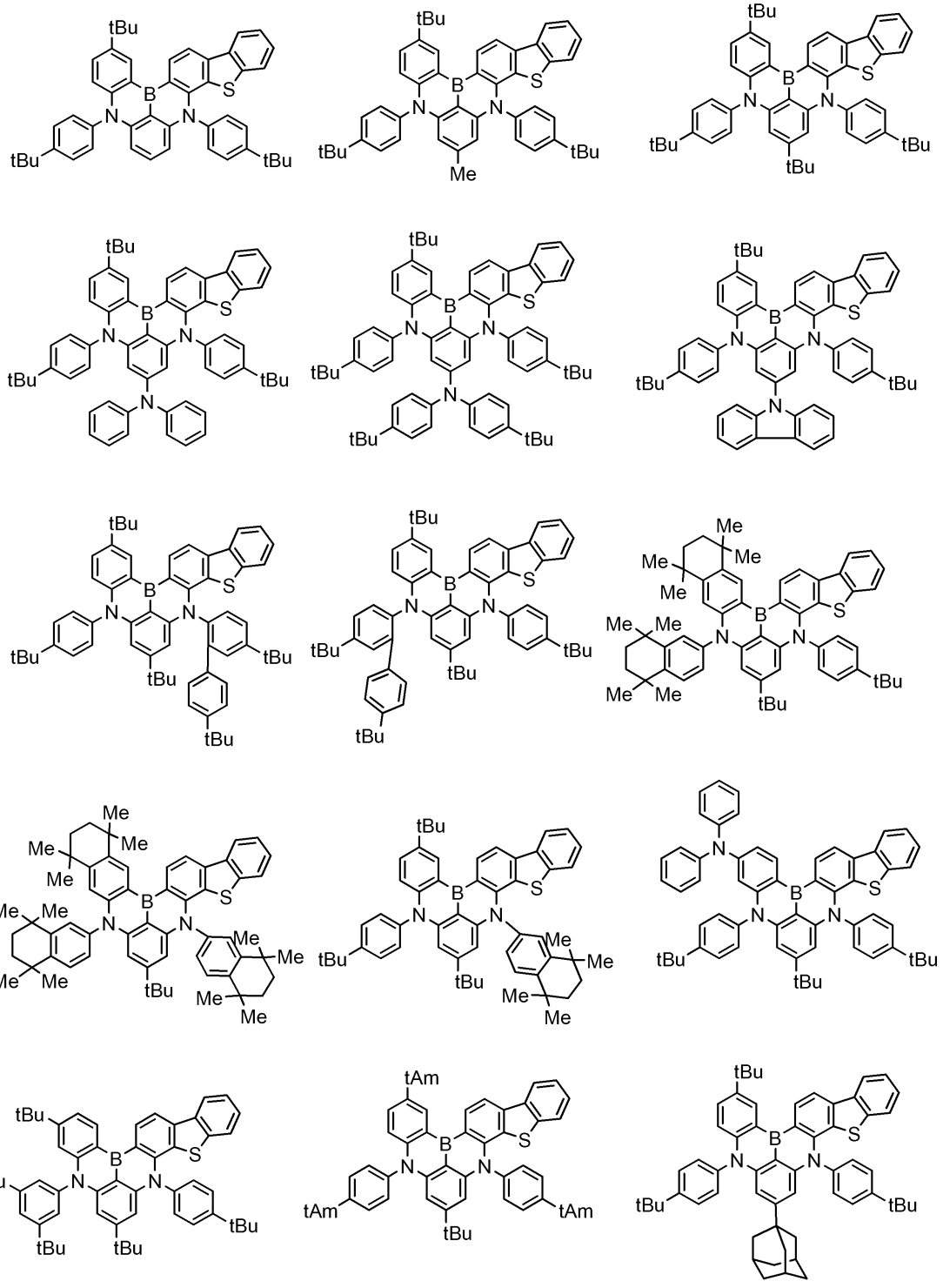
【０４２０】

【化２６１】



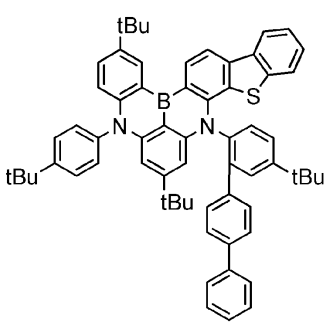
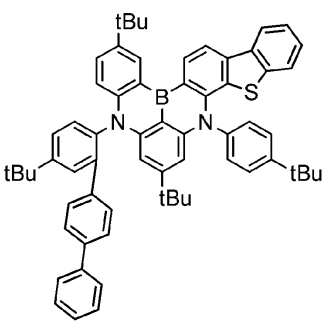
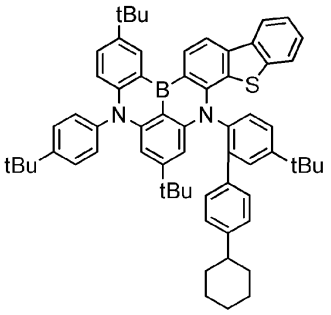
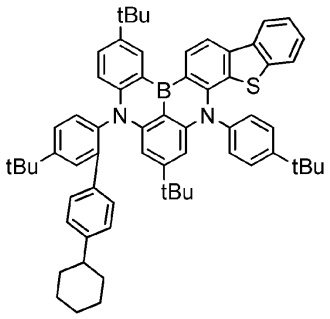
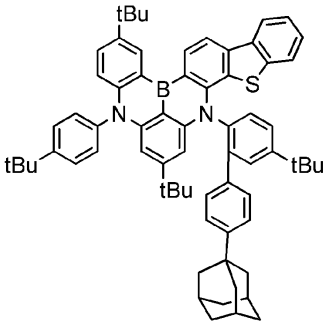
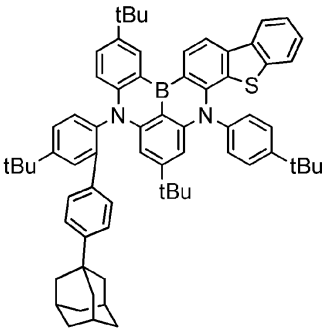
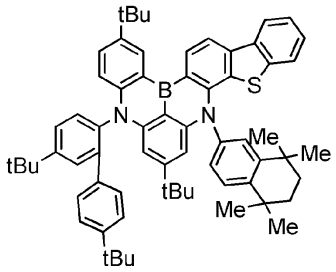
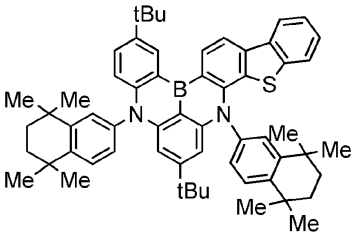
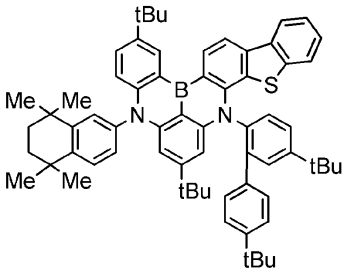
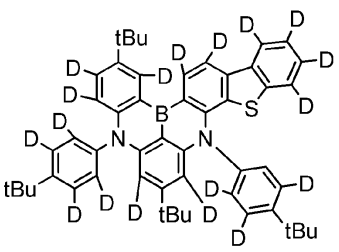
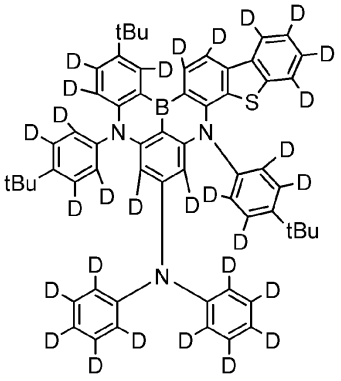
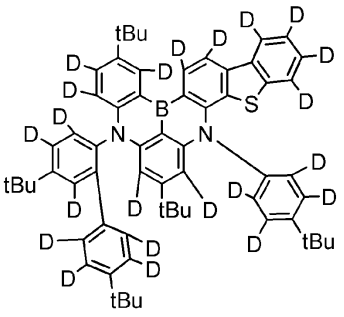
【０４２１】

【化２６２】



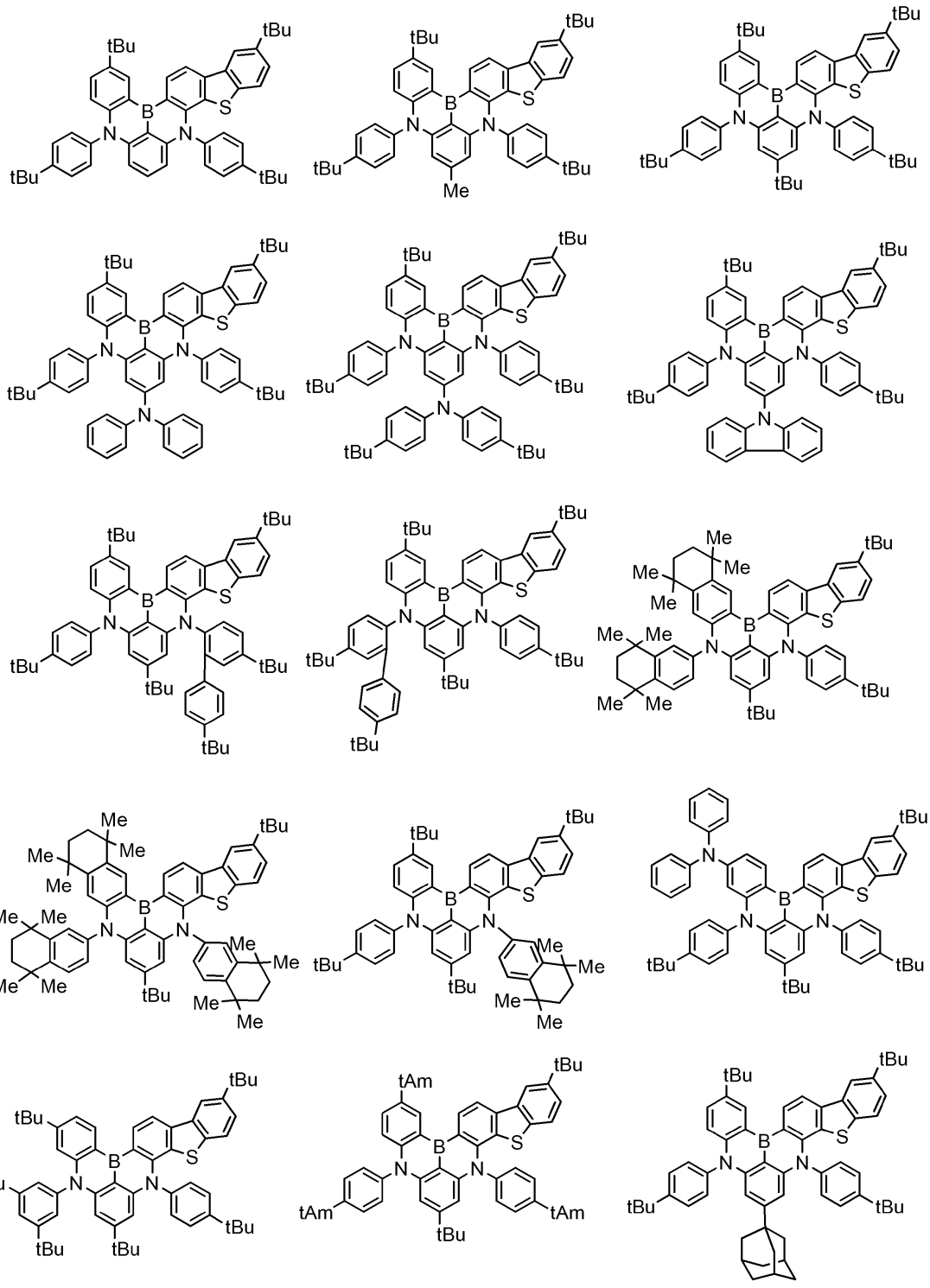
【０４２２】

【化２６３】

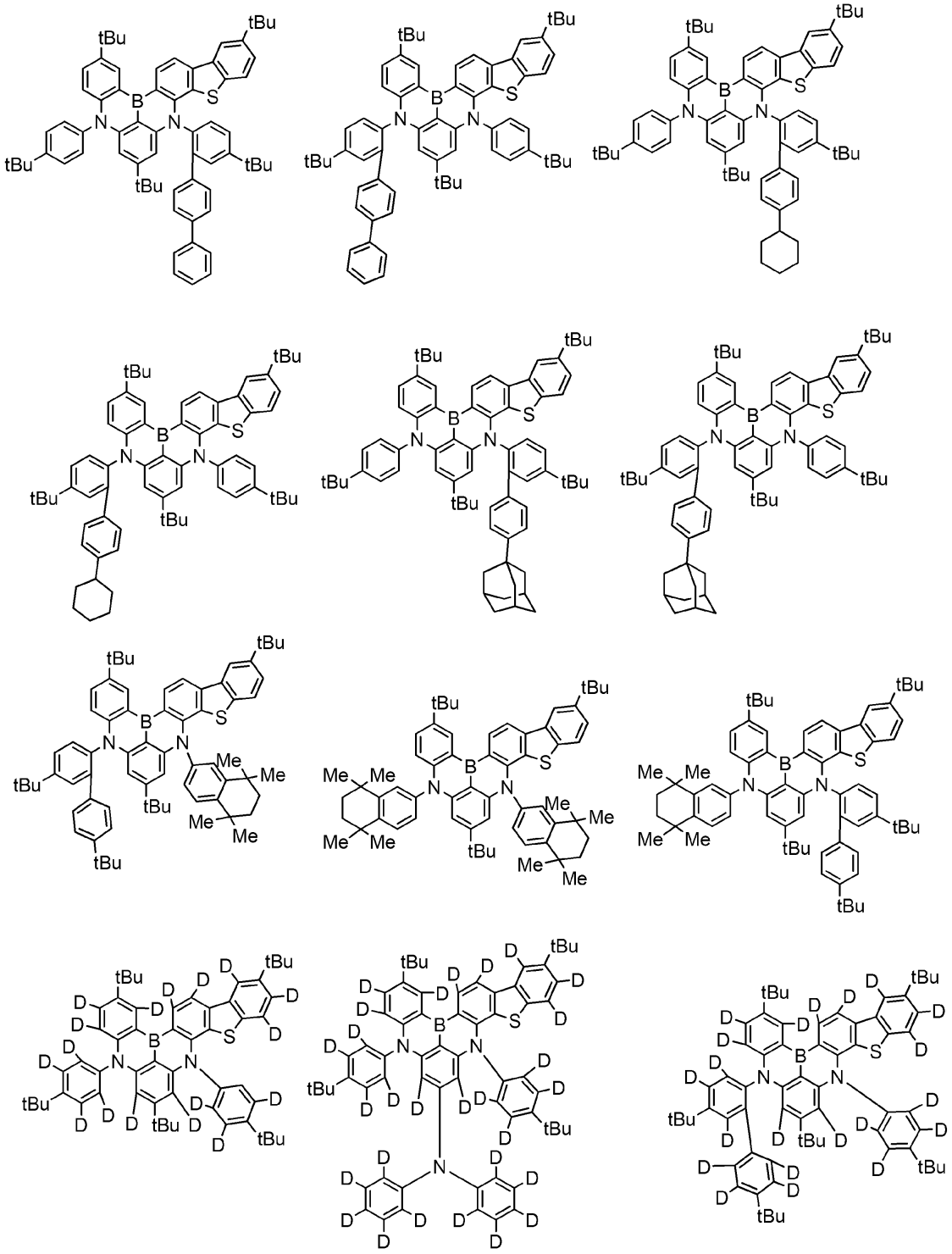
【０４２３】

【化２６４】



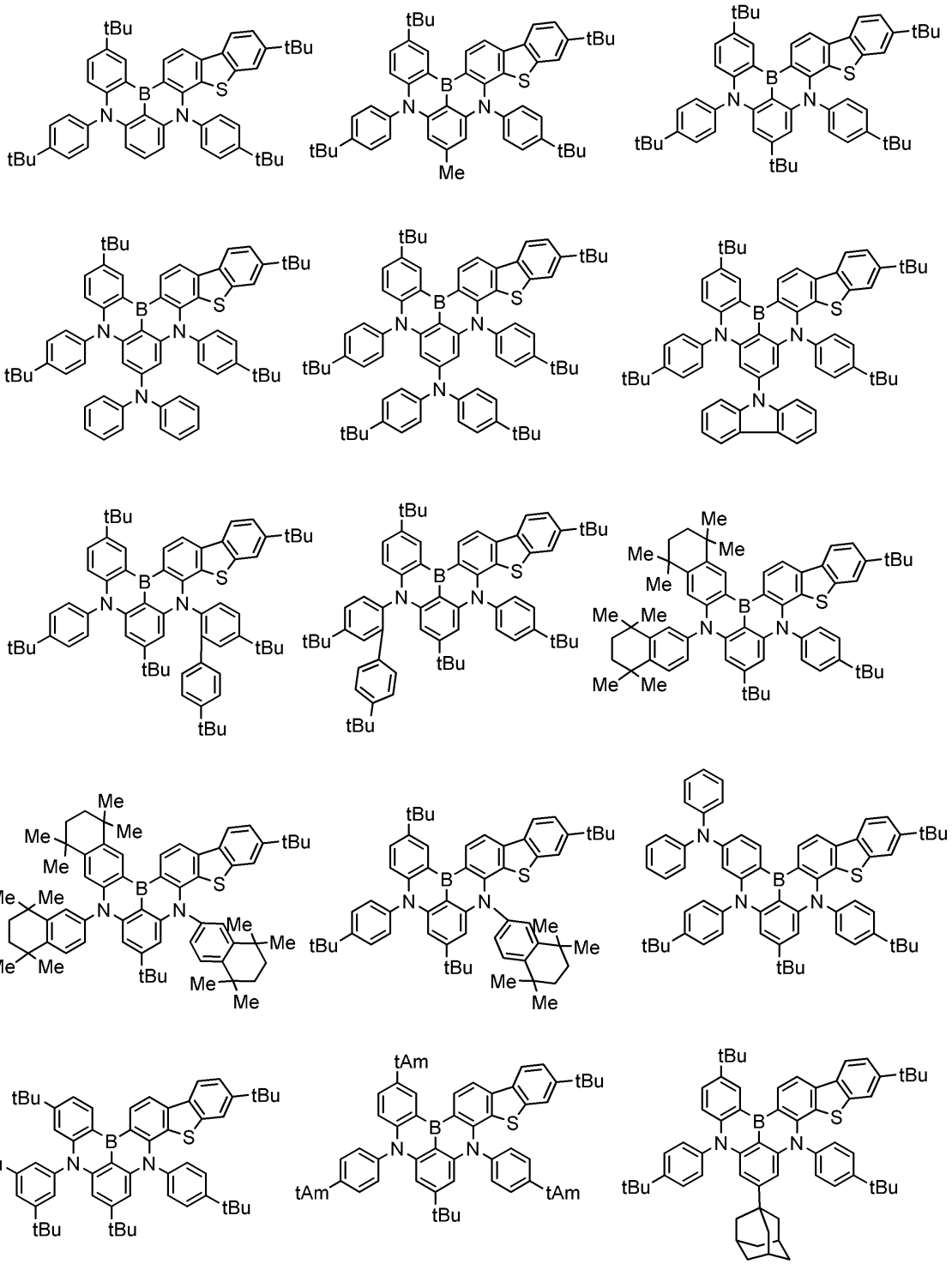
【０４２４】

【化２６５】



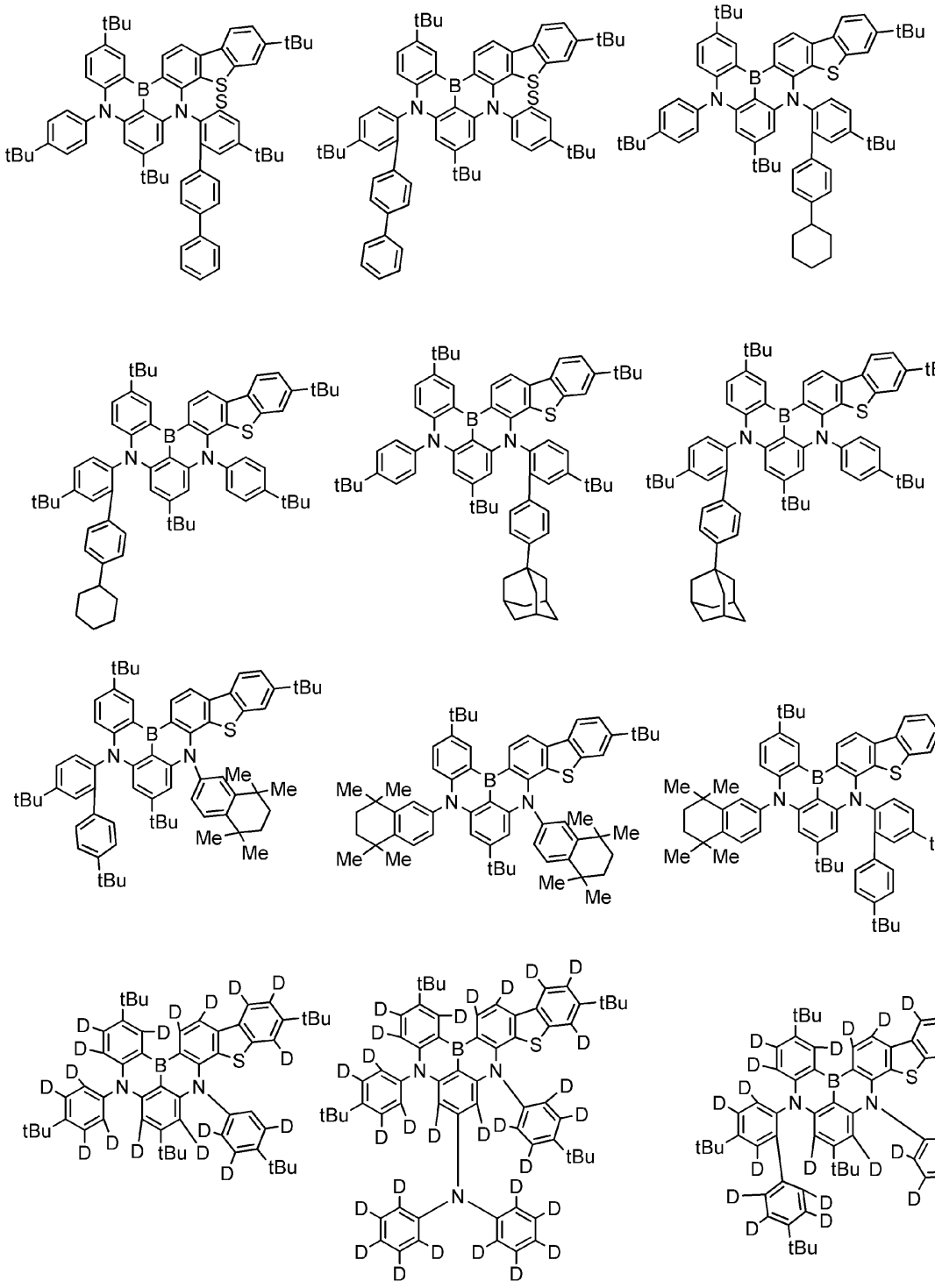
【０４２５】

【化２６６】



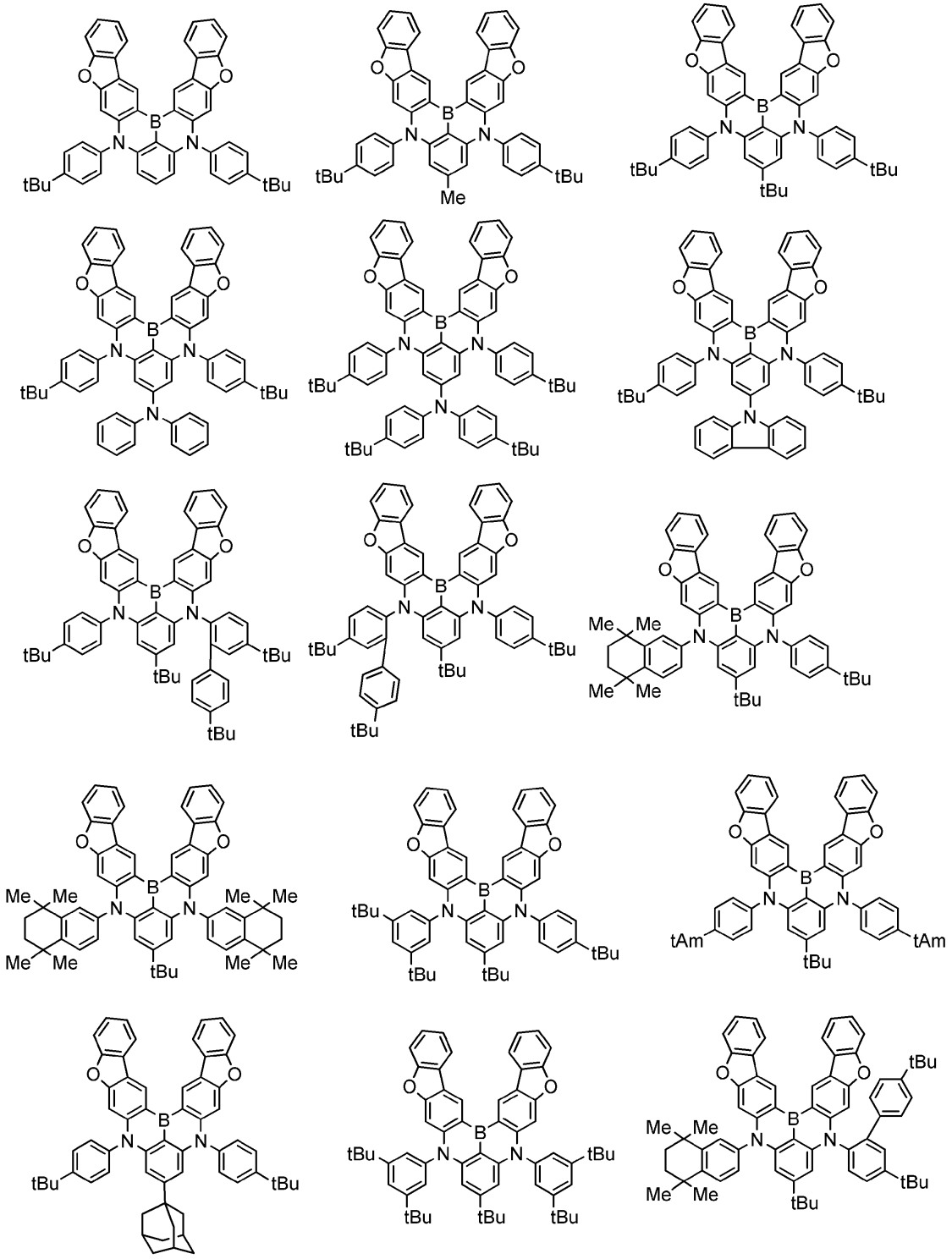
【０４２６】

【化２６７】



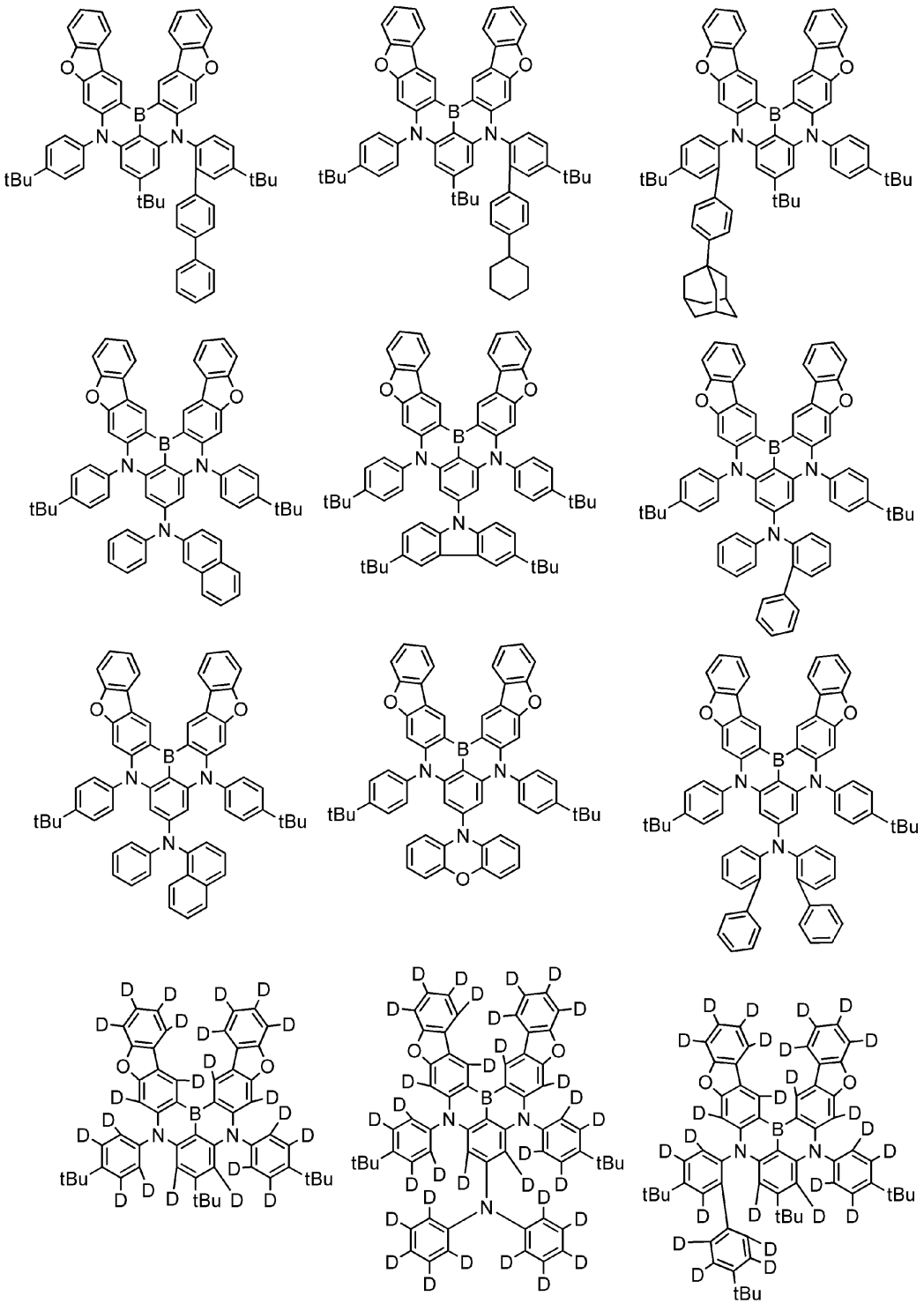
【０４２７】

【化２６８】



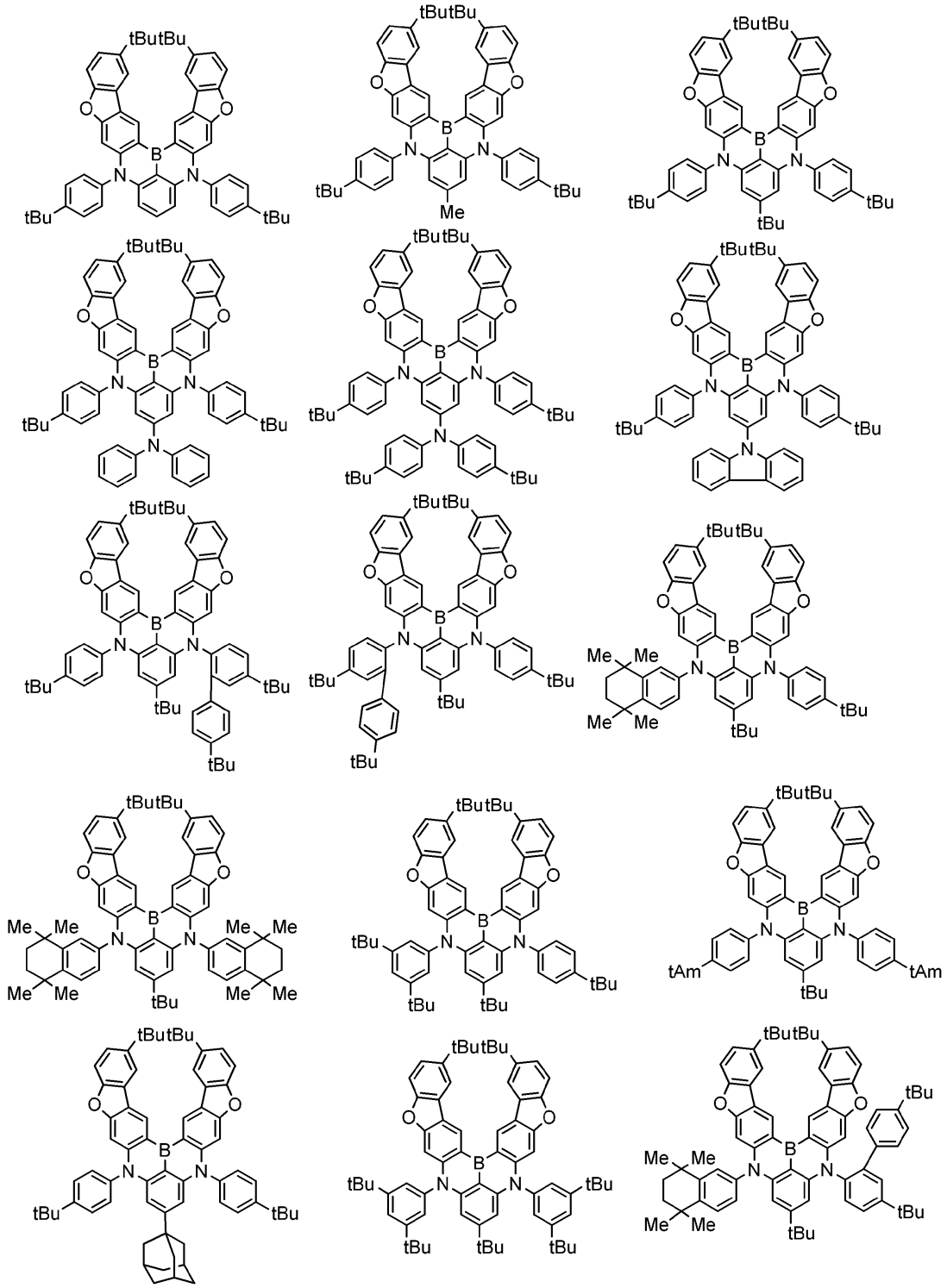
【０４２８】

【化２６９】



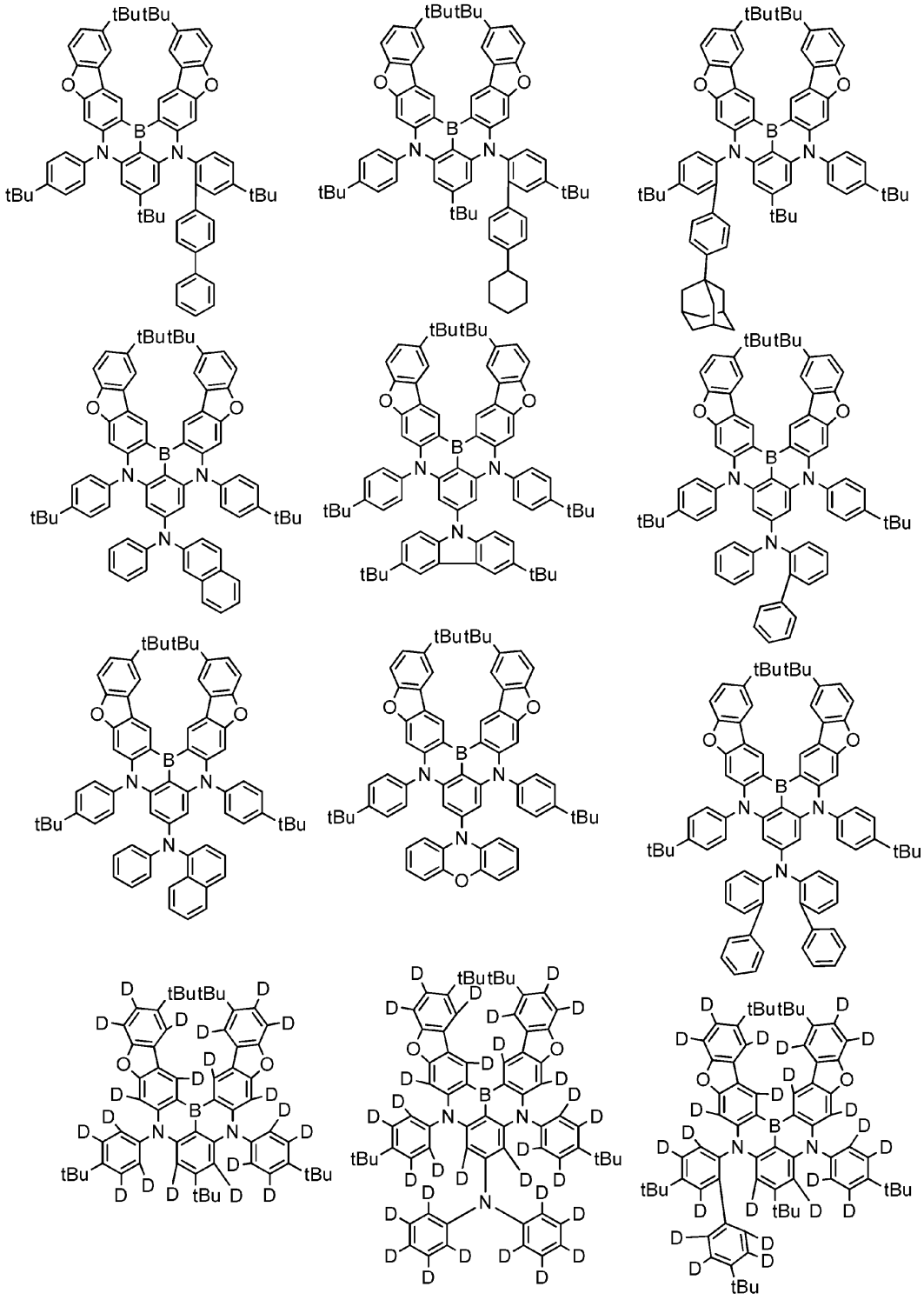
【０４２９】

【化２７０】



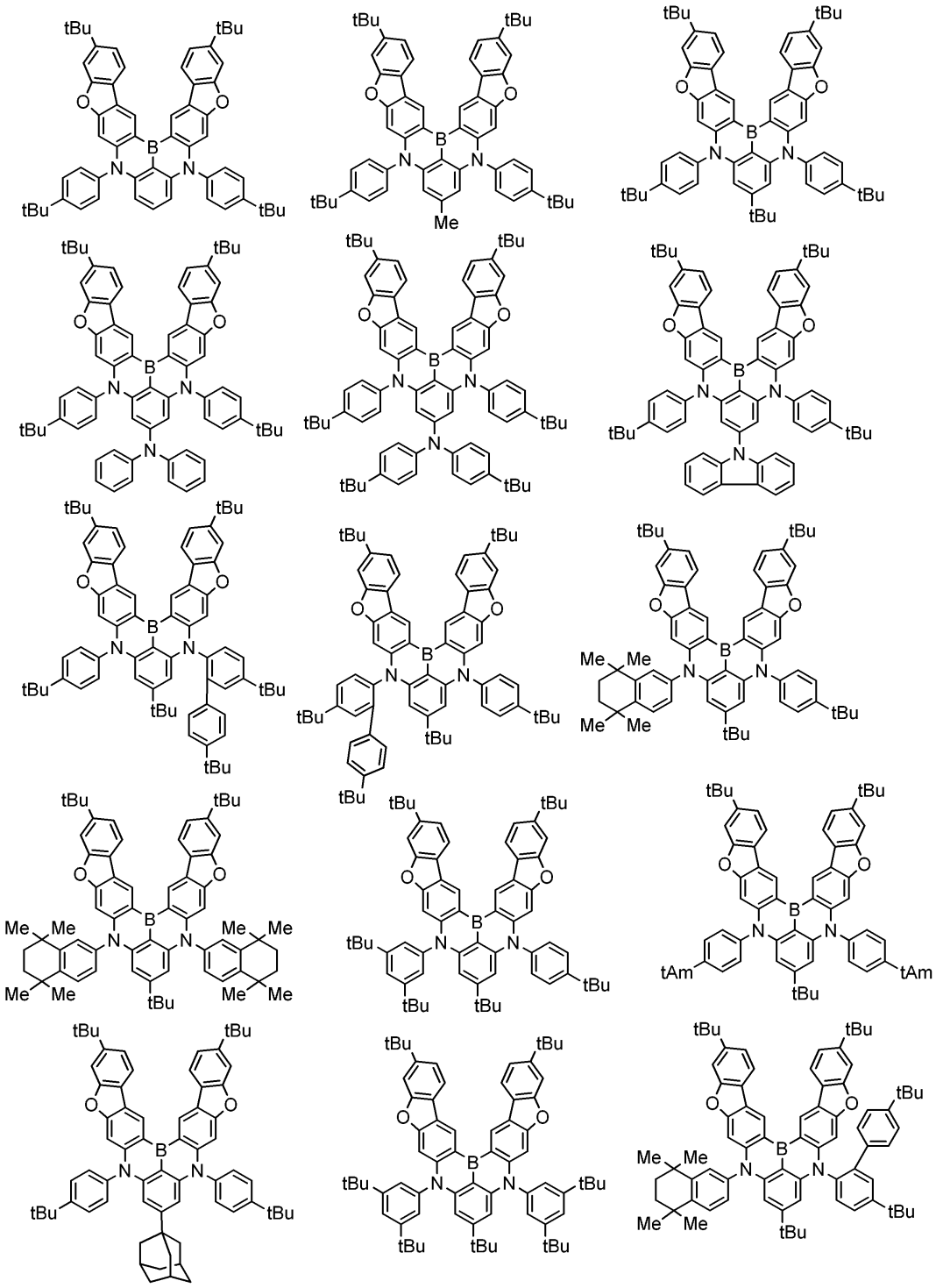
【０４３０】

【化２７１】



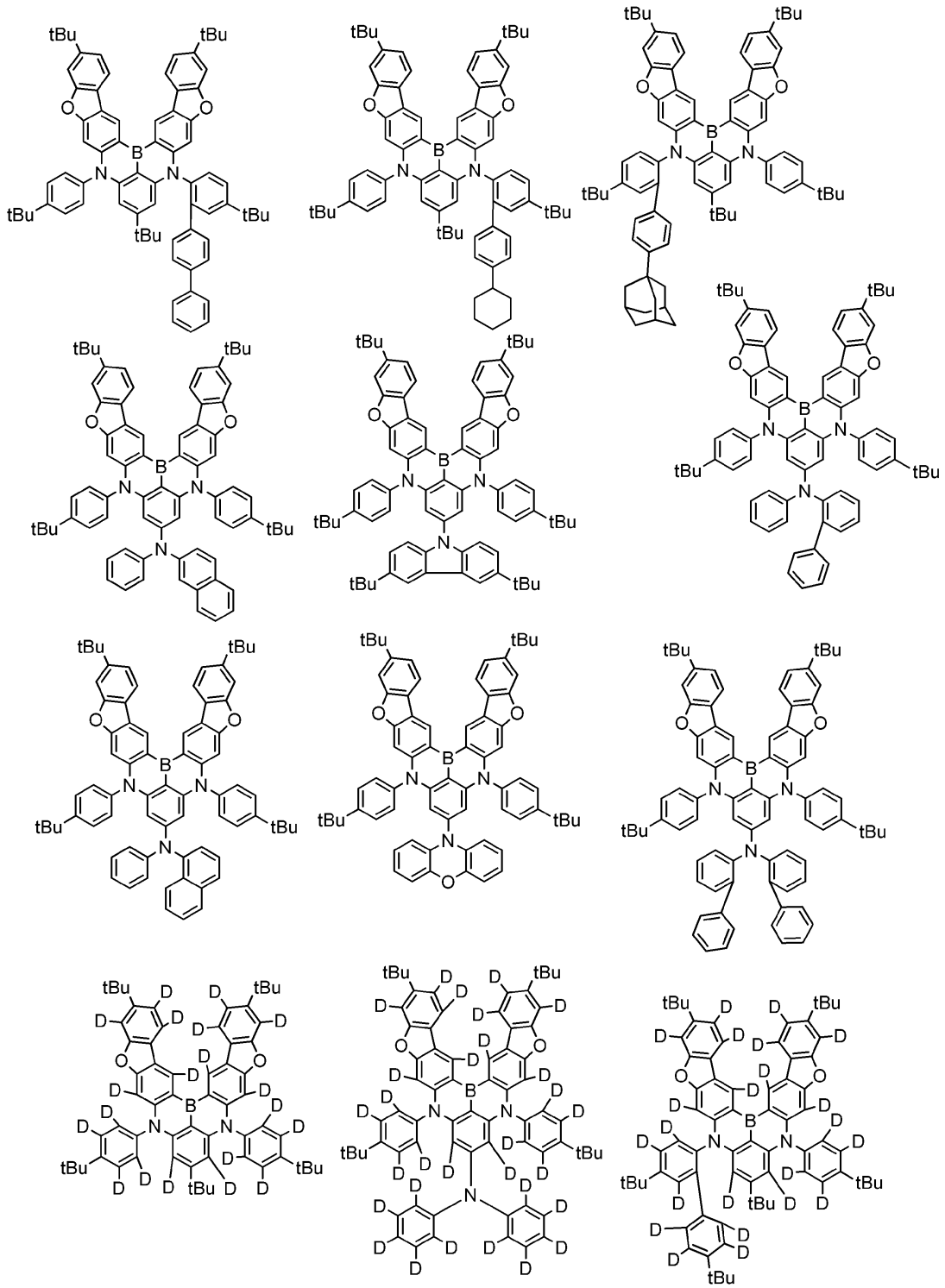
【０４３１】

【化２７２】



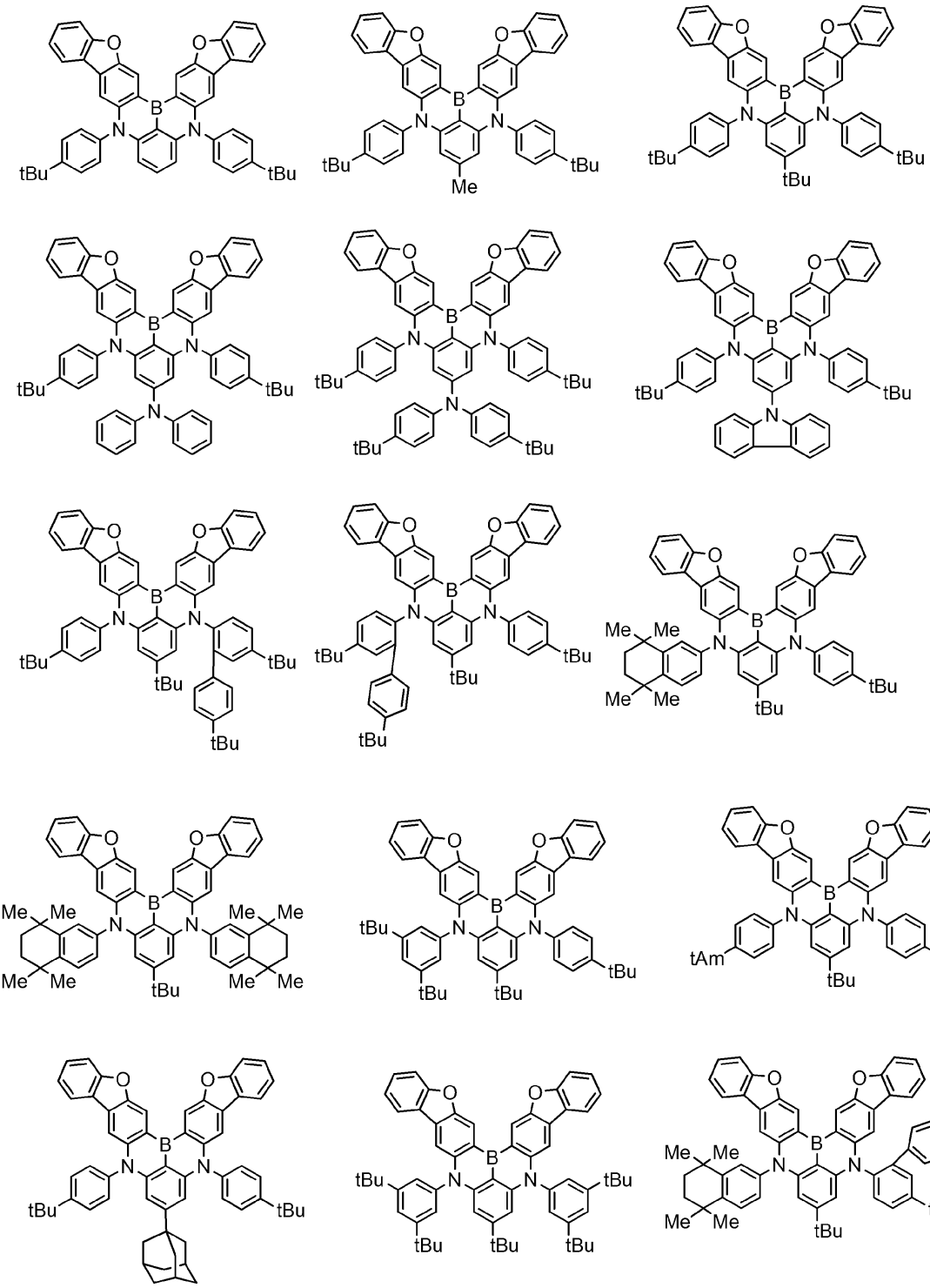
【０４３２】

【化２７３】



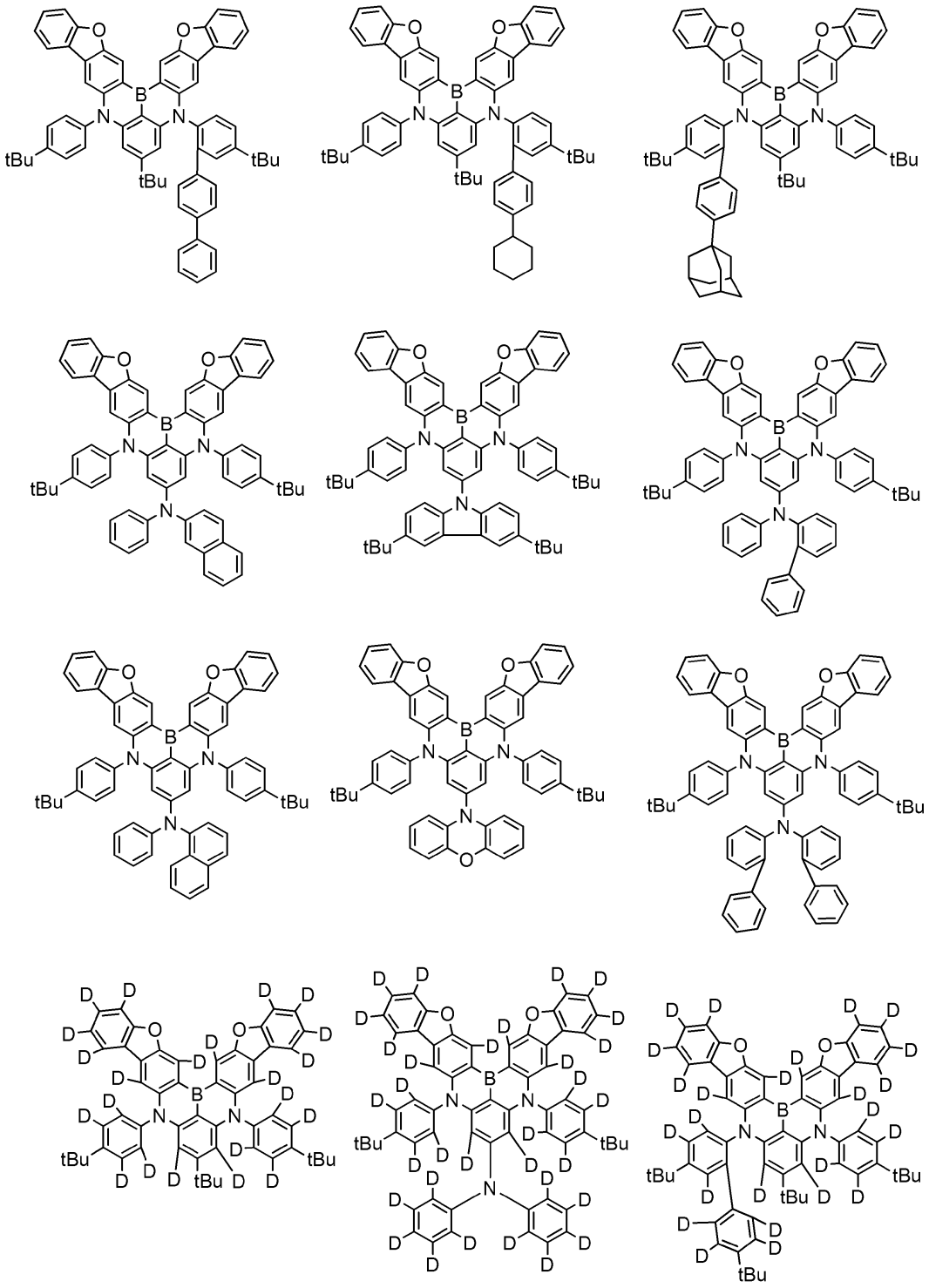
【０４３３】

【化２７４】



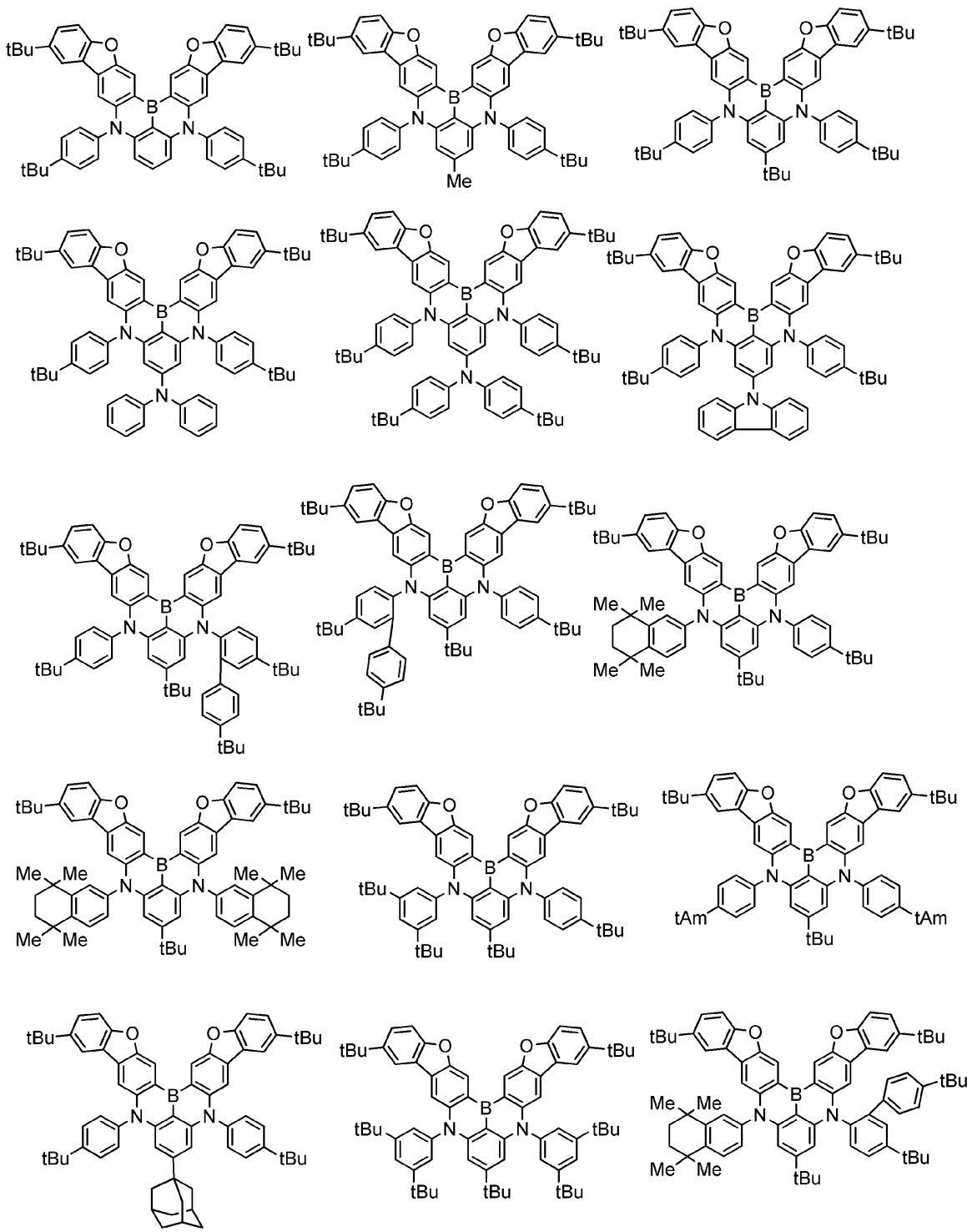
【０４３４】

【化２７５】



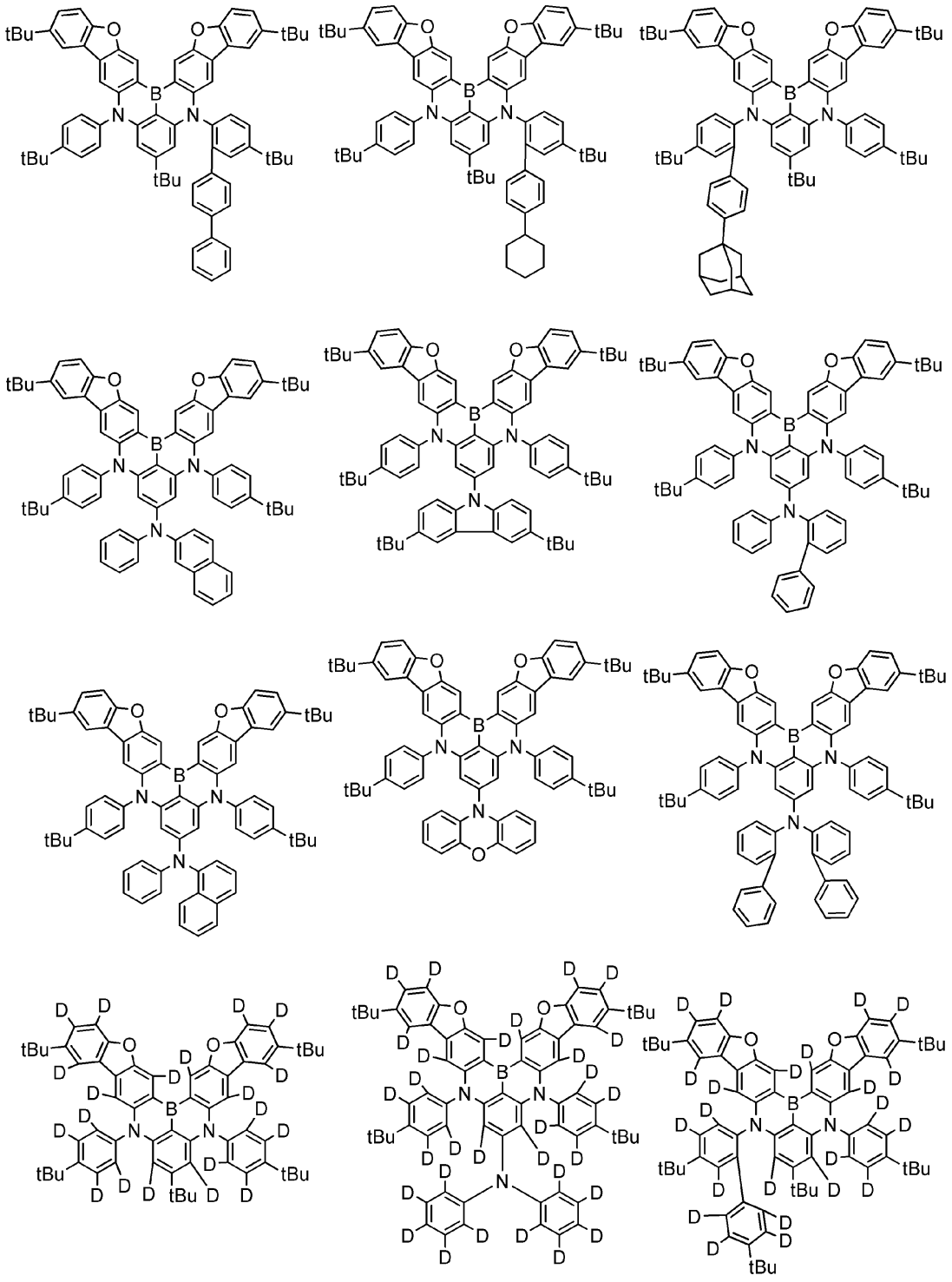
【０４３５】

【化２７６】



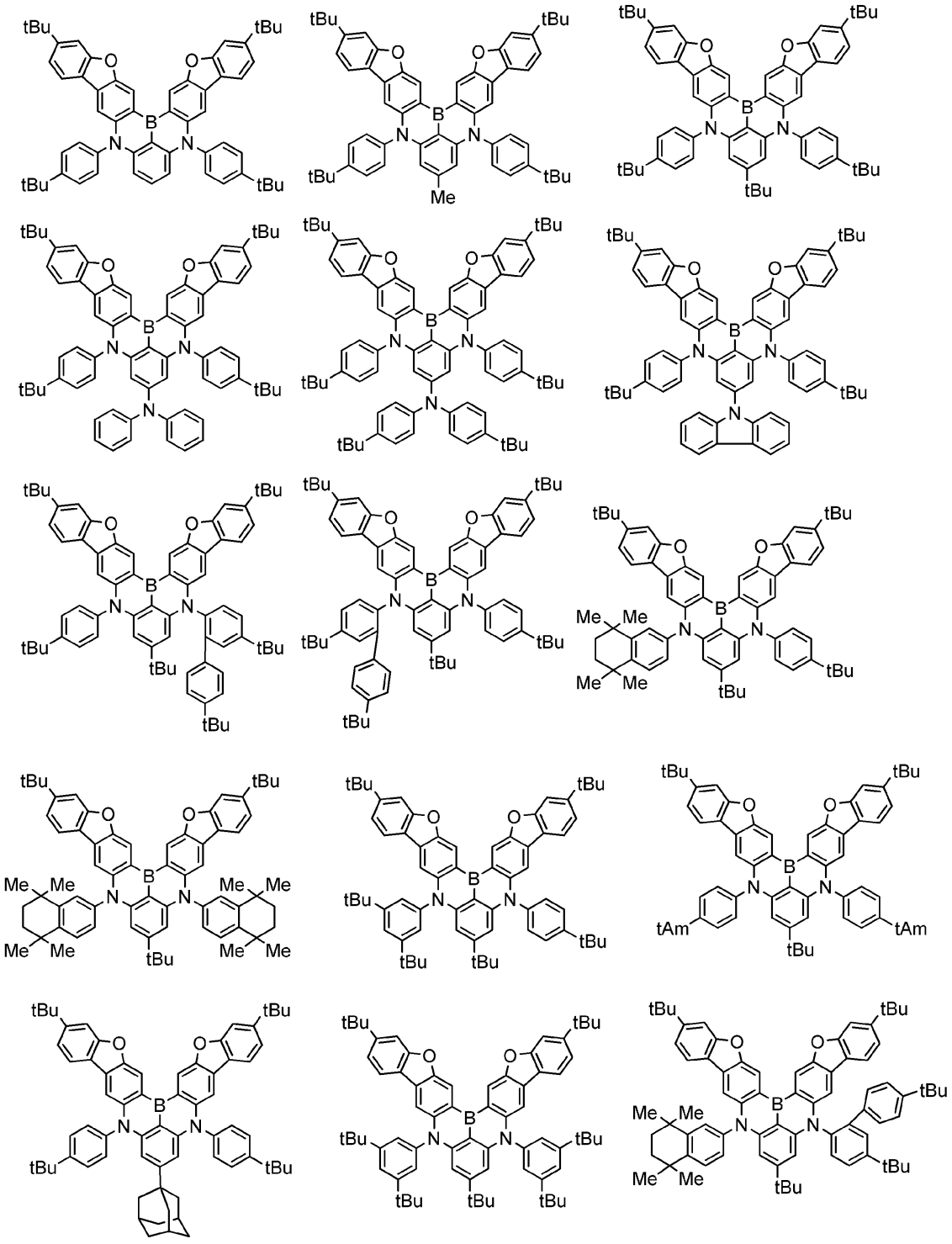
【０４３６】

【化２７７】



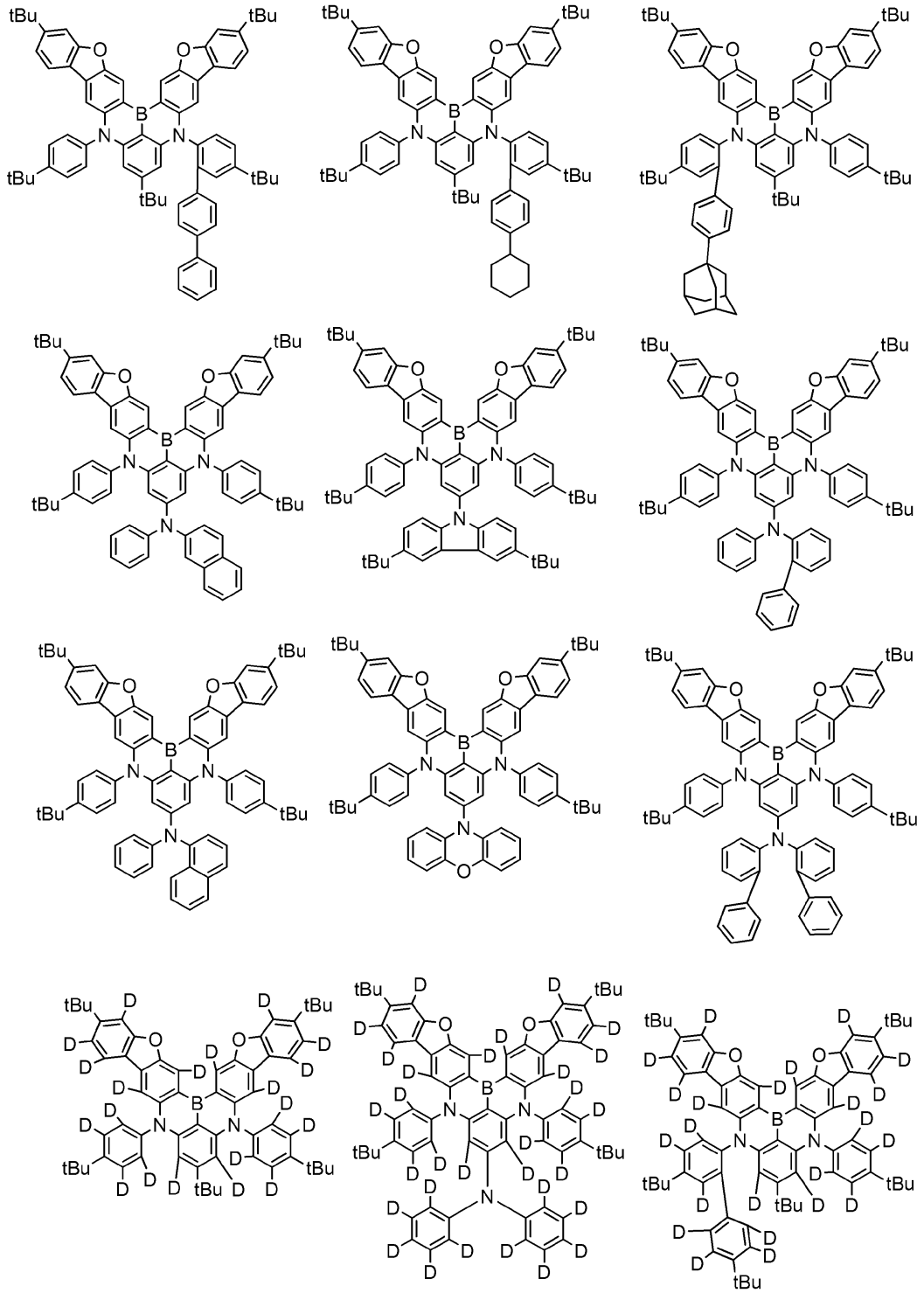
【０４３７】

【化２７８】



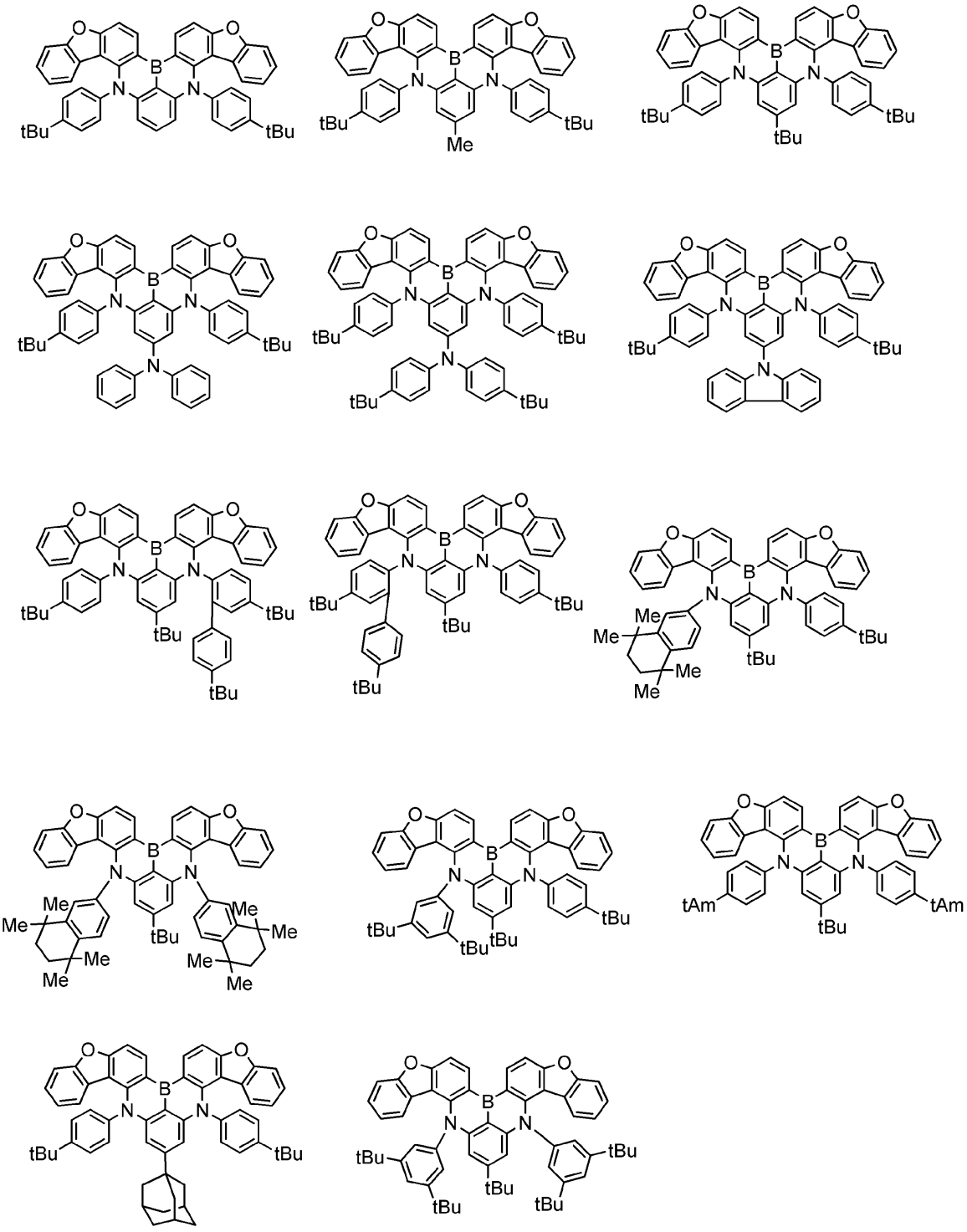
【０４３８】

【化２７９】



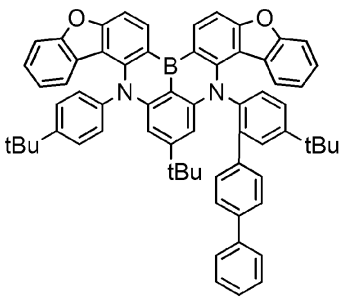
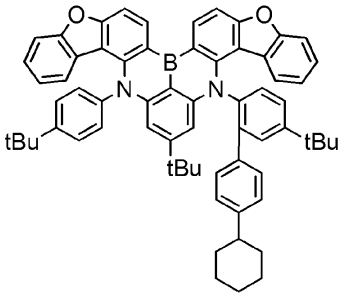
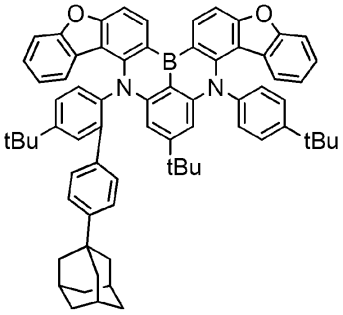
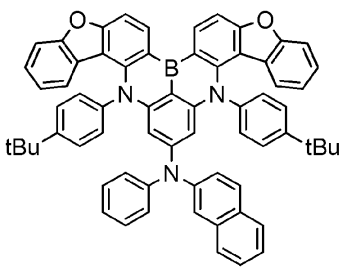
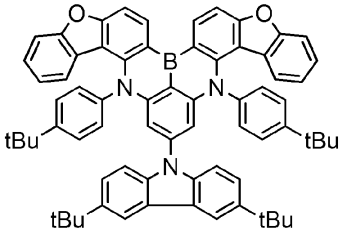
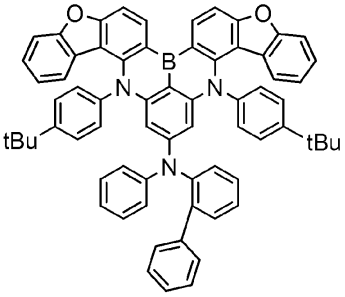
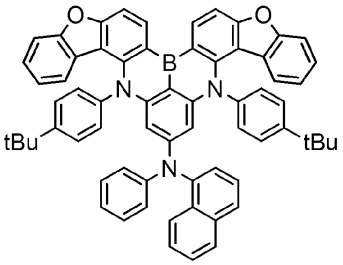
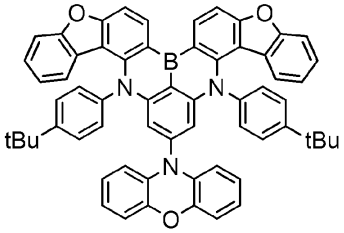
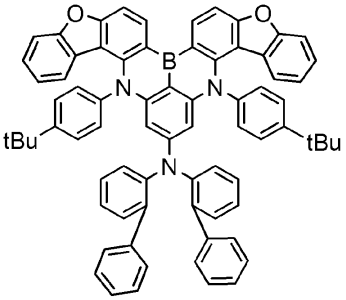
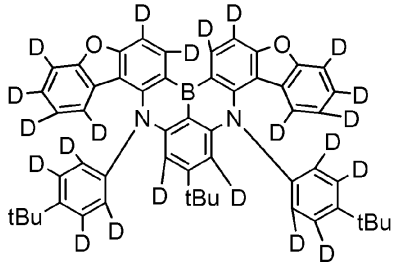
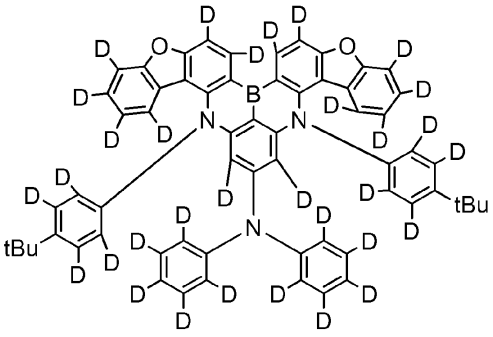
【０４３９】

【化２８０】

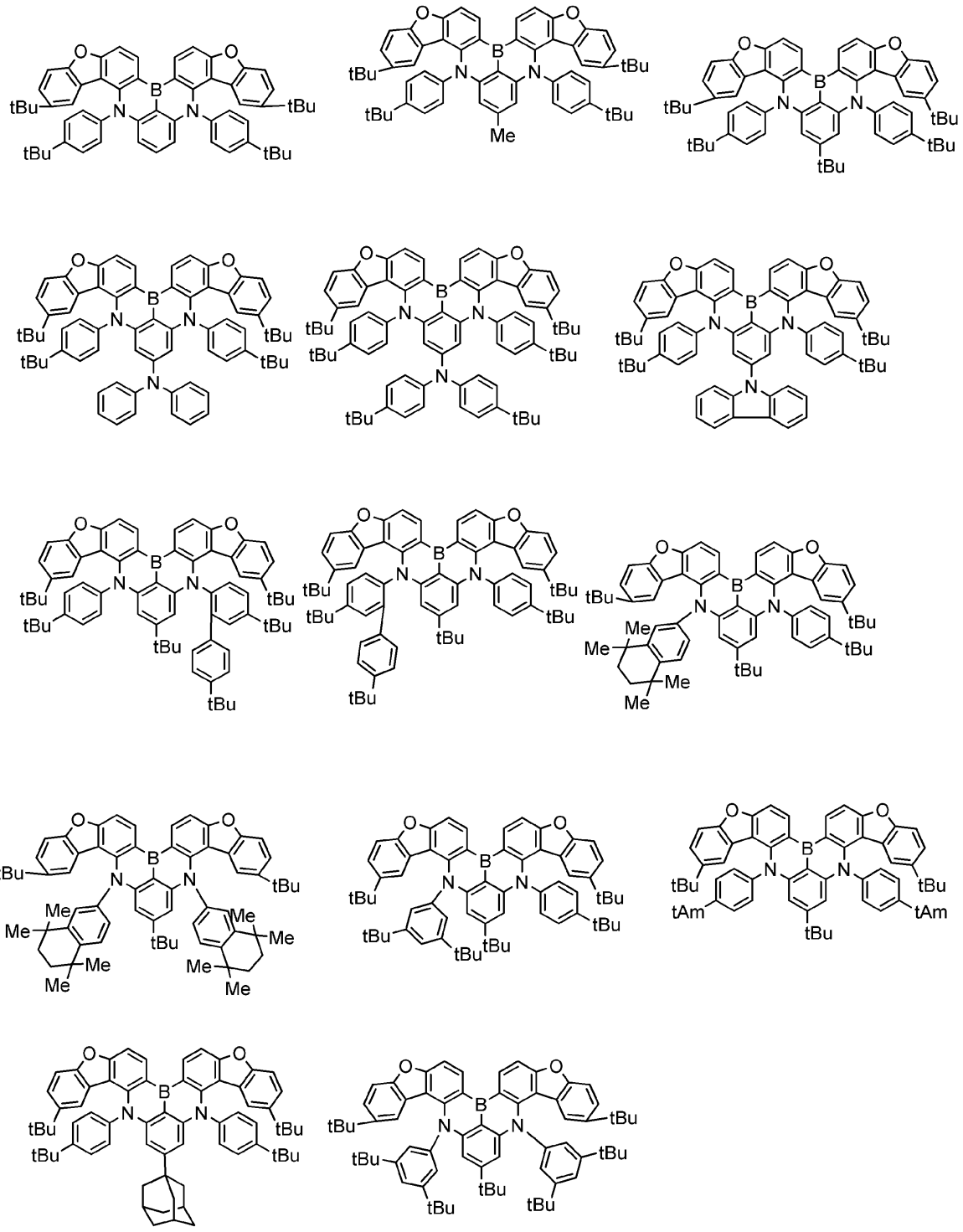


【０４４０】

【化２８１】

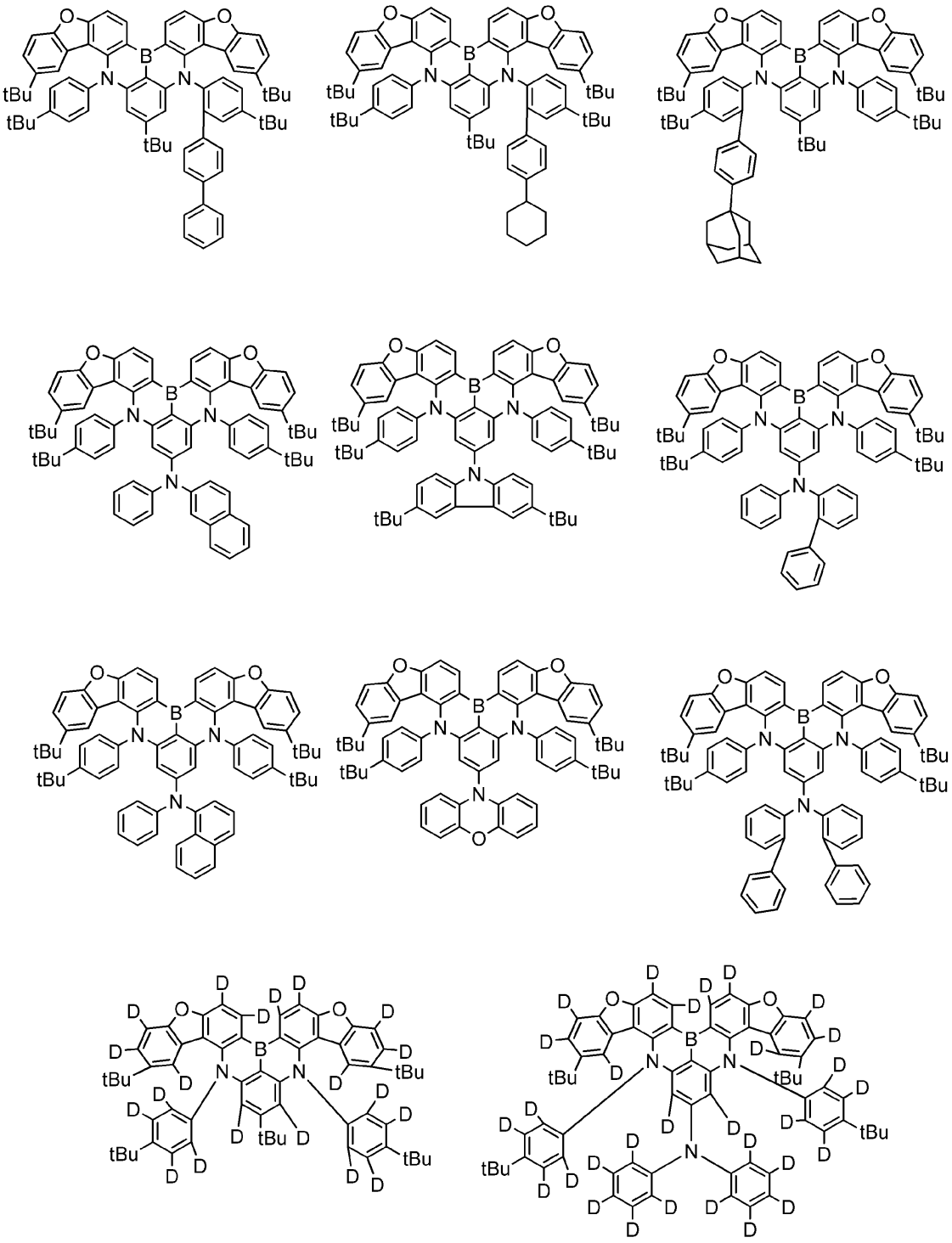












【化２８２】



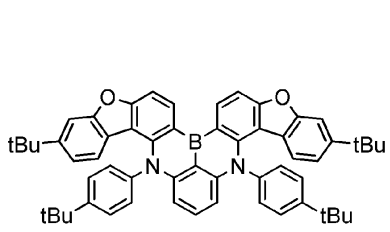
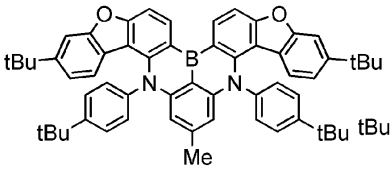
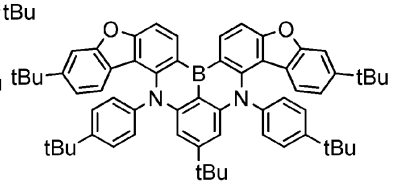
【０４４１】

【化２８３】

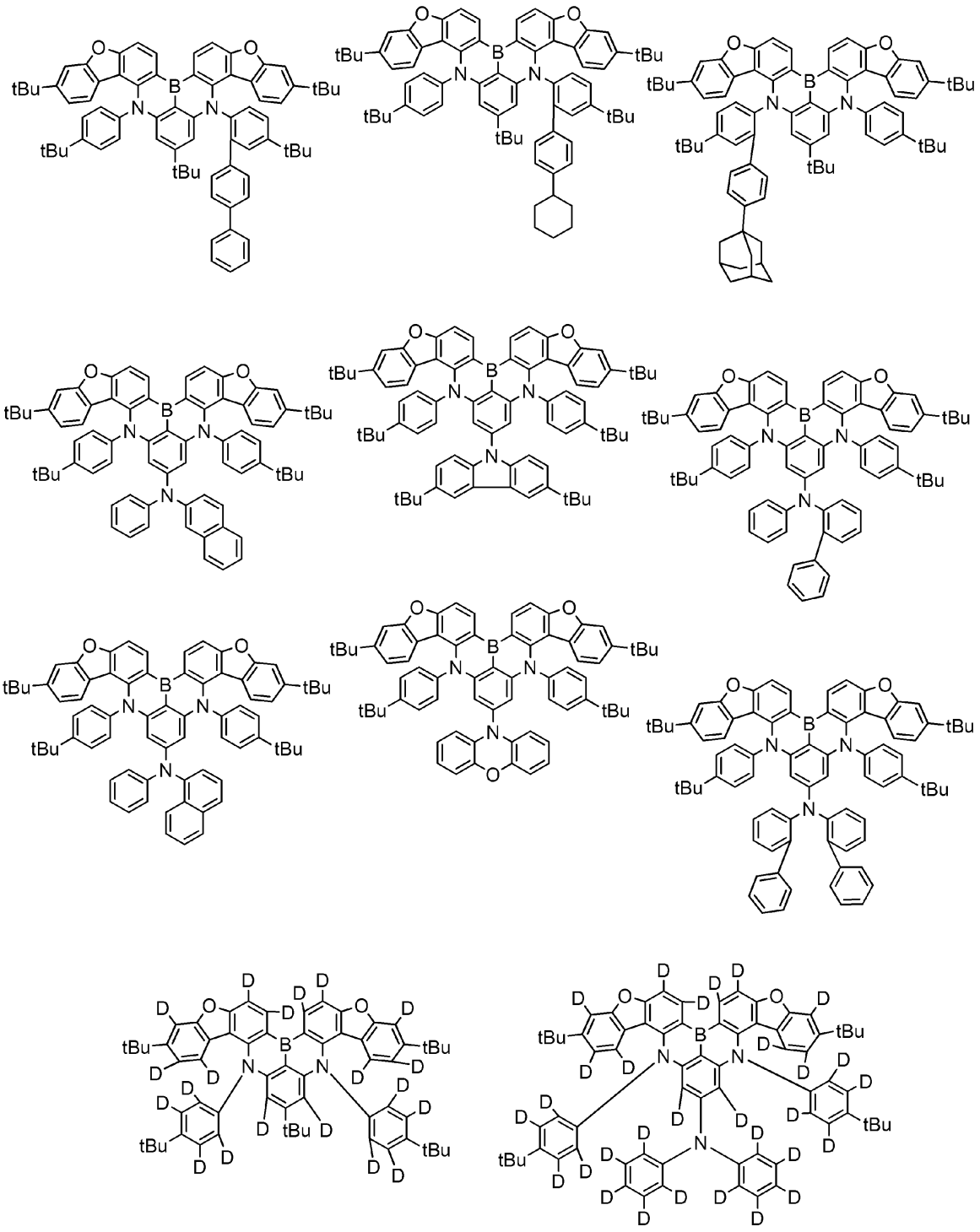


【０４４２】

【化２８４】

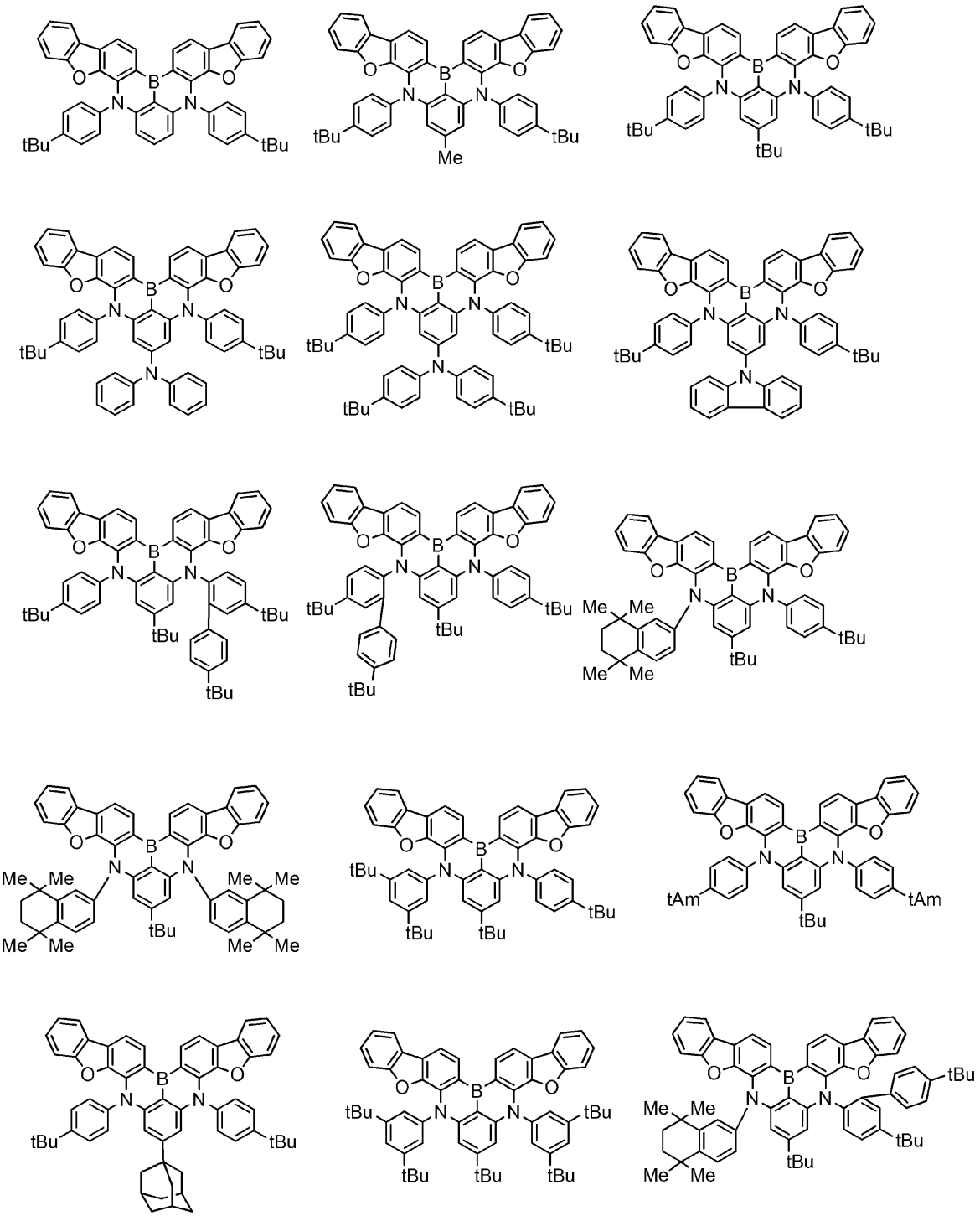




【化２８５】



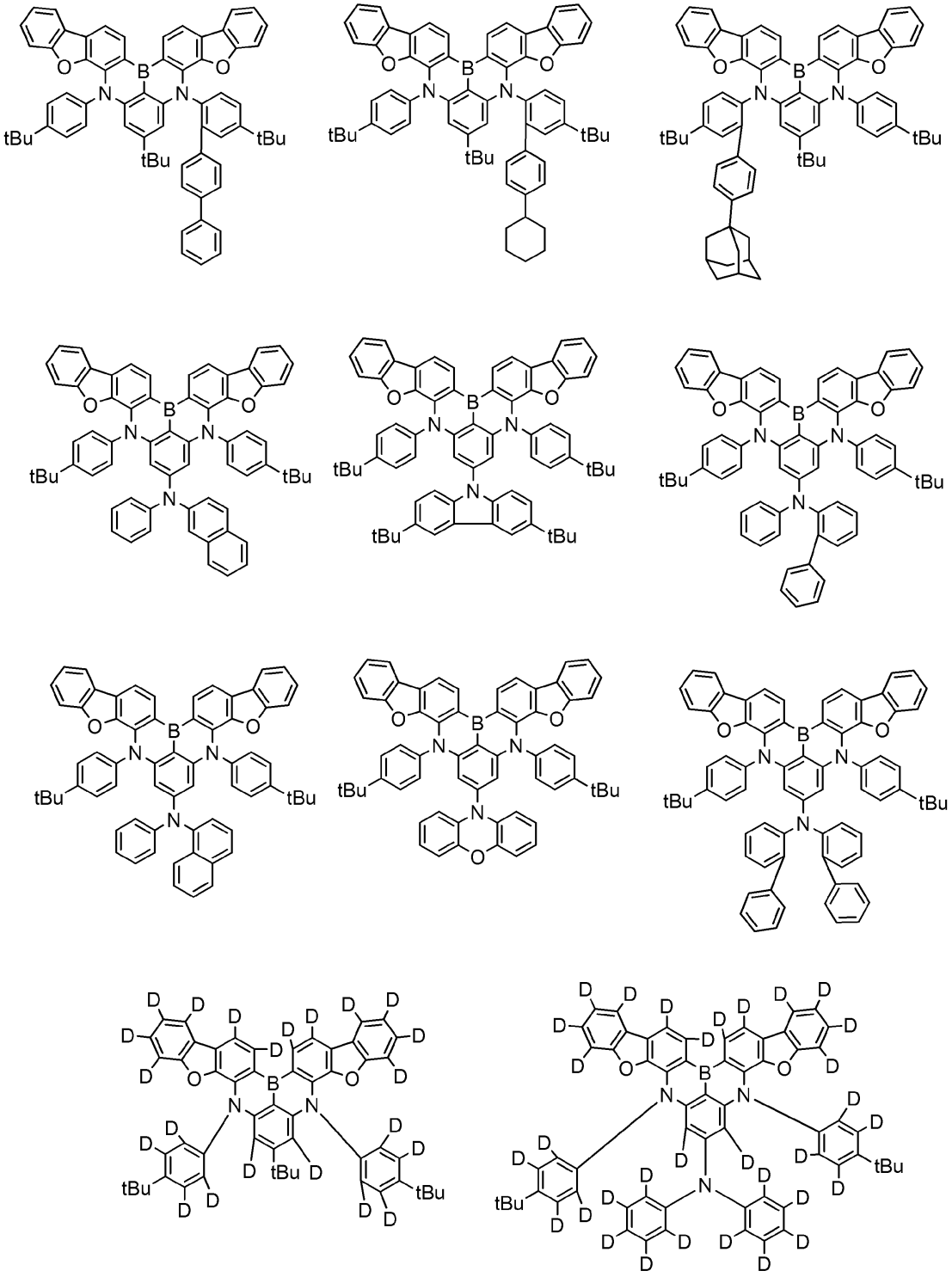
【０４４４】

【化２８６】



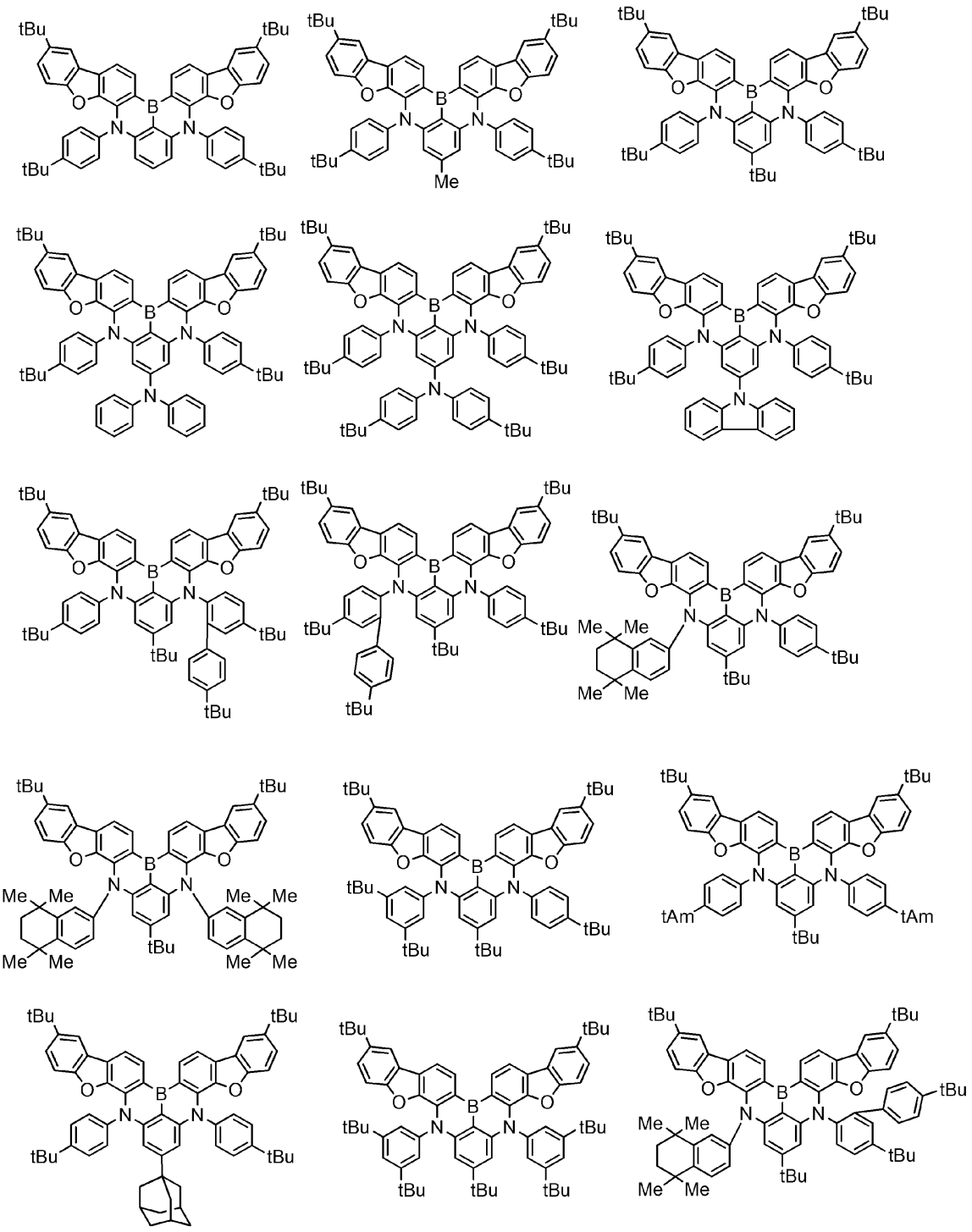
【０４４５】

【化２８７】



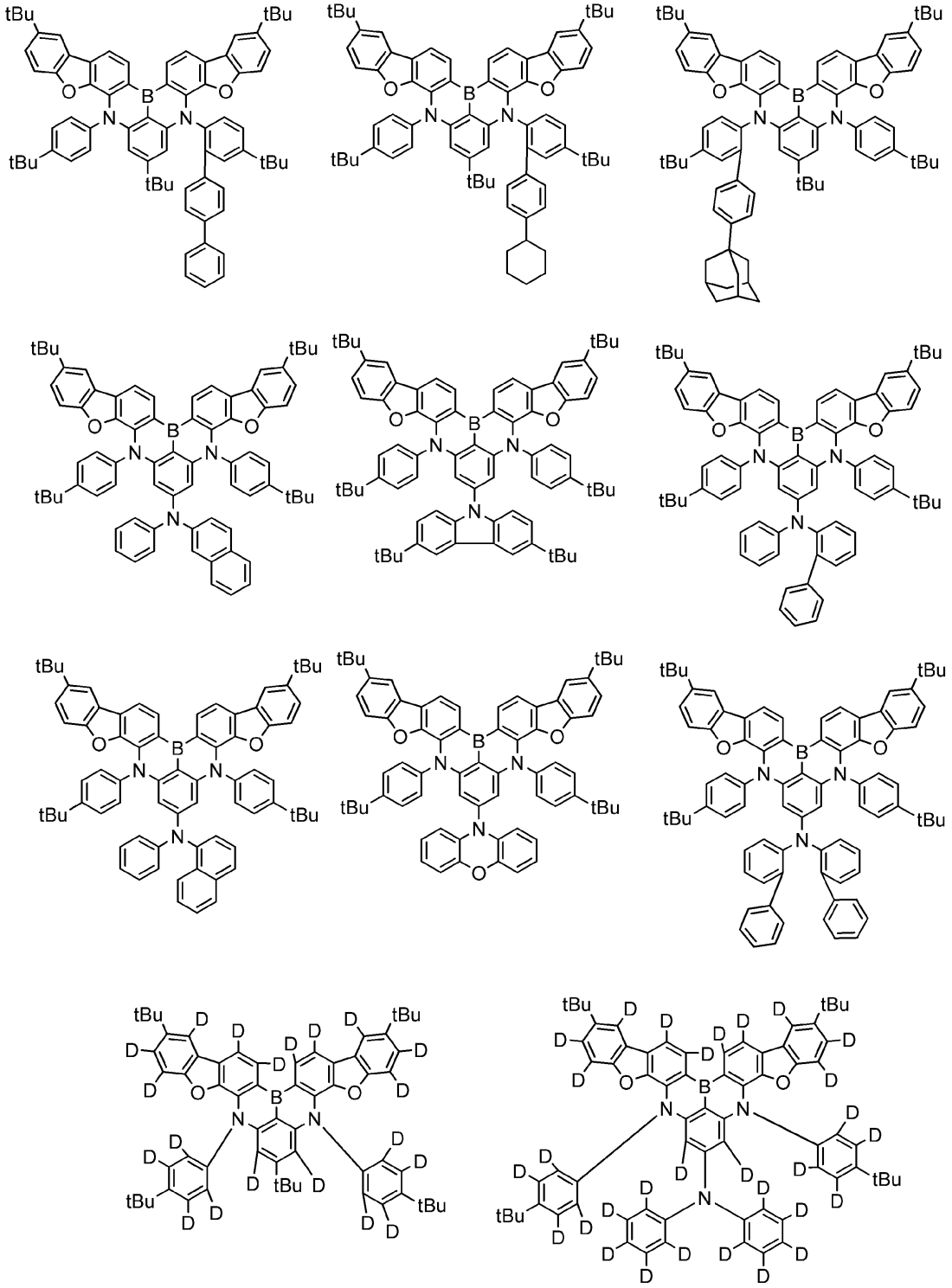
【０４４６】

【化２８８】



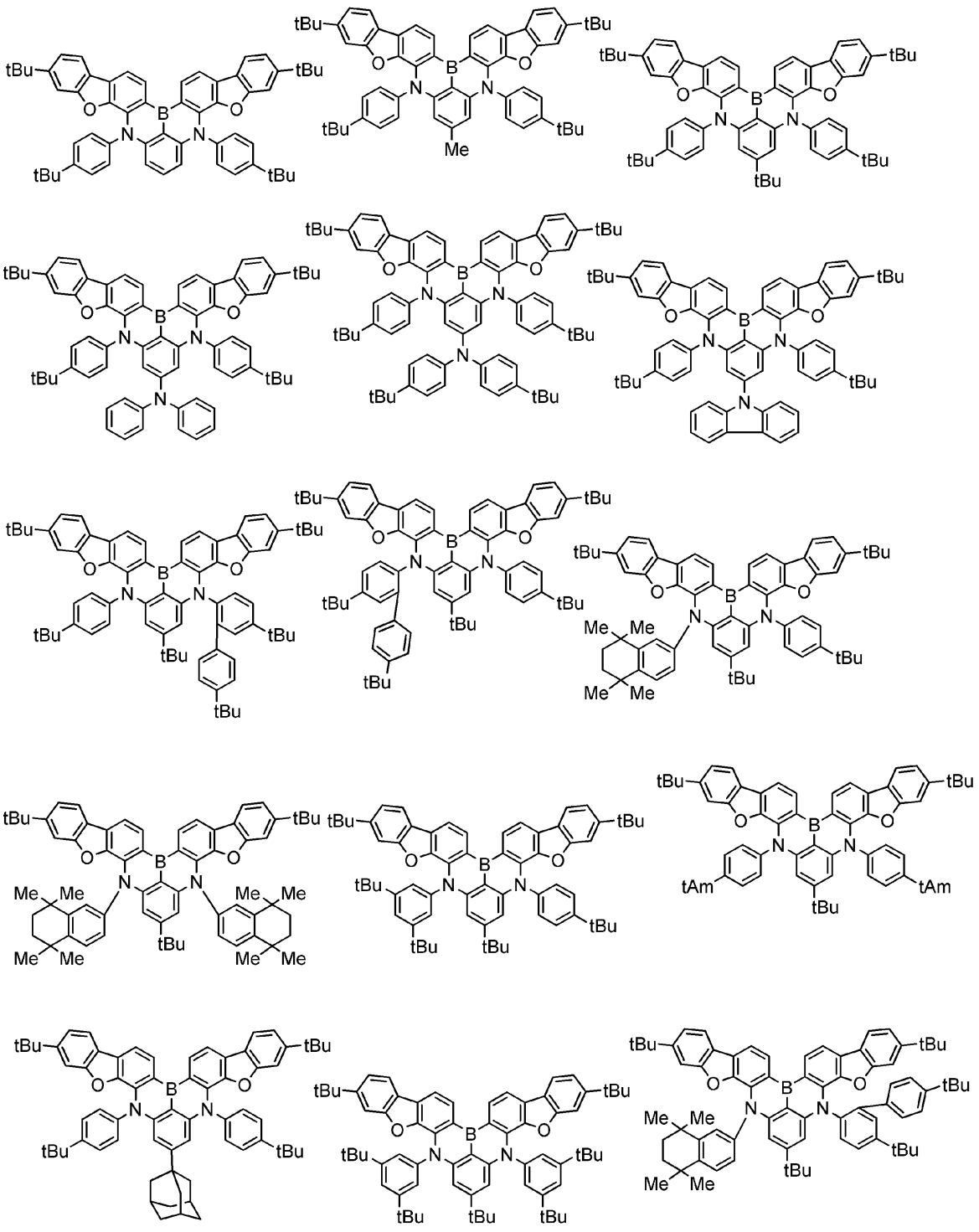
【０４４７】

【化２８９】



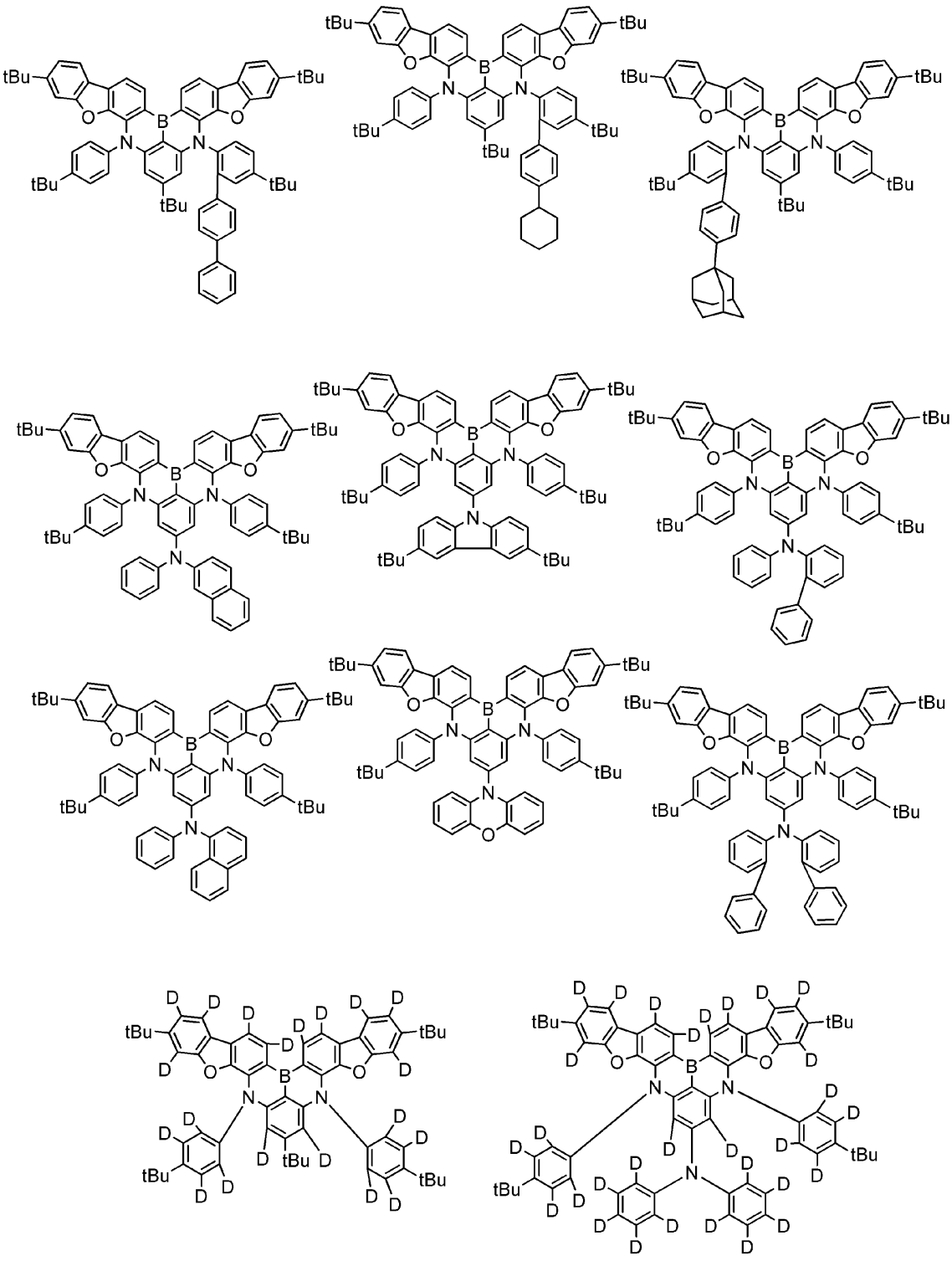
【０４４８】

【化２９０】



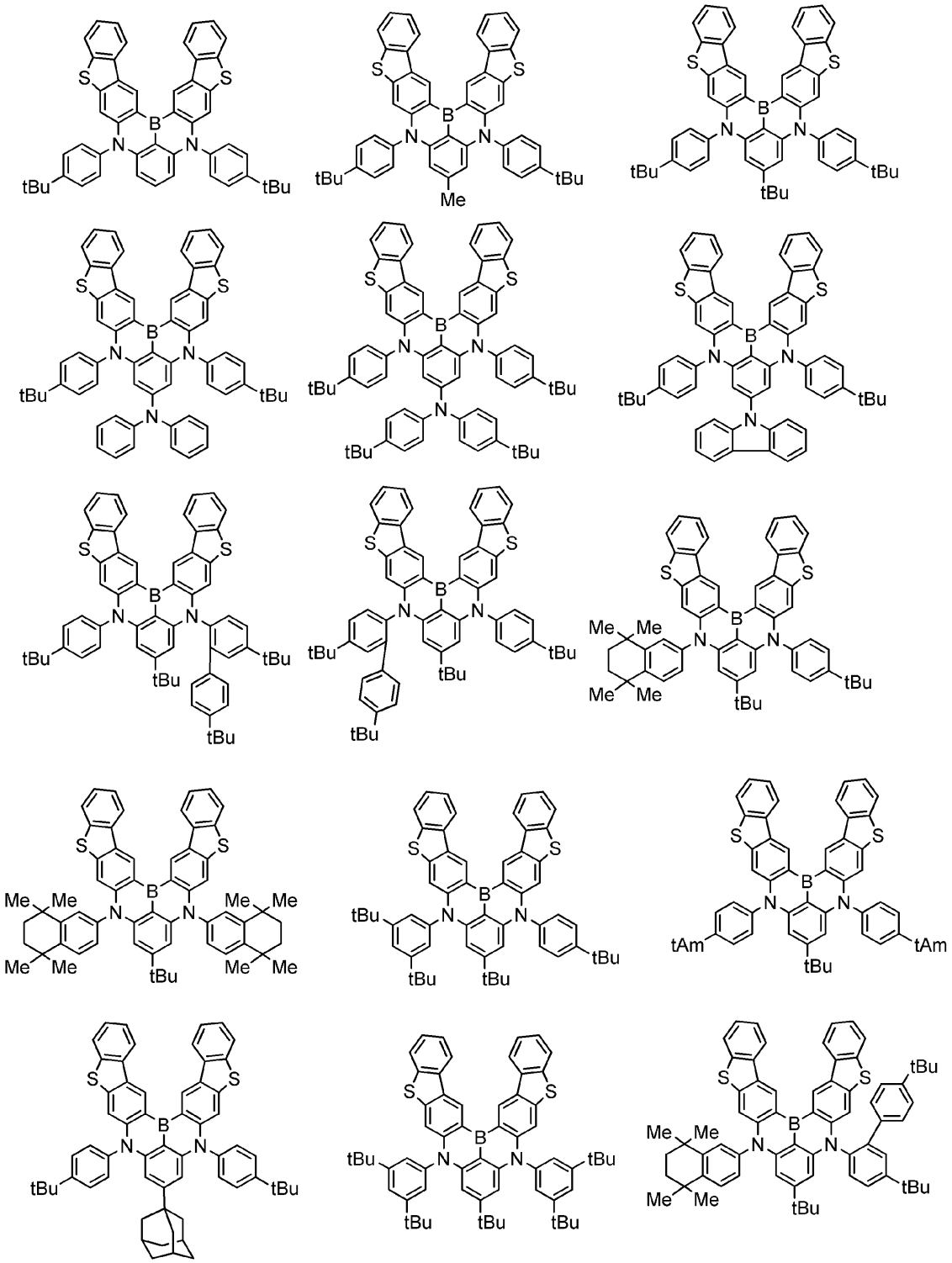
【０４４９】

【化２９１】



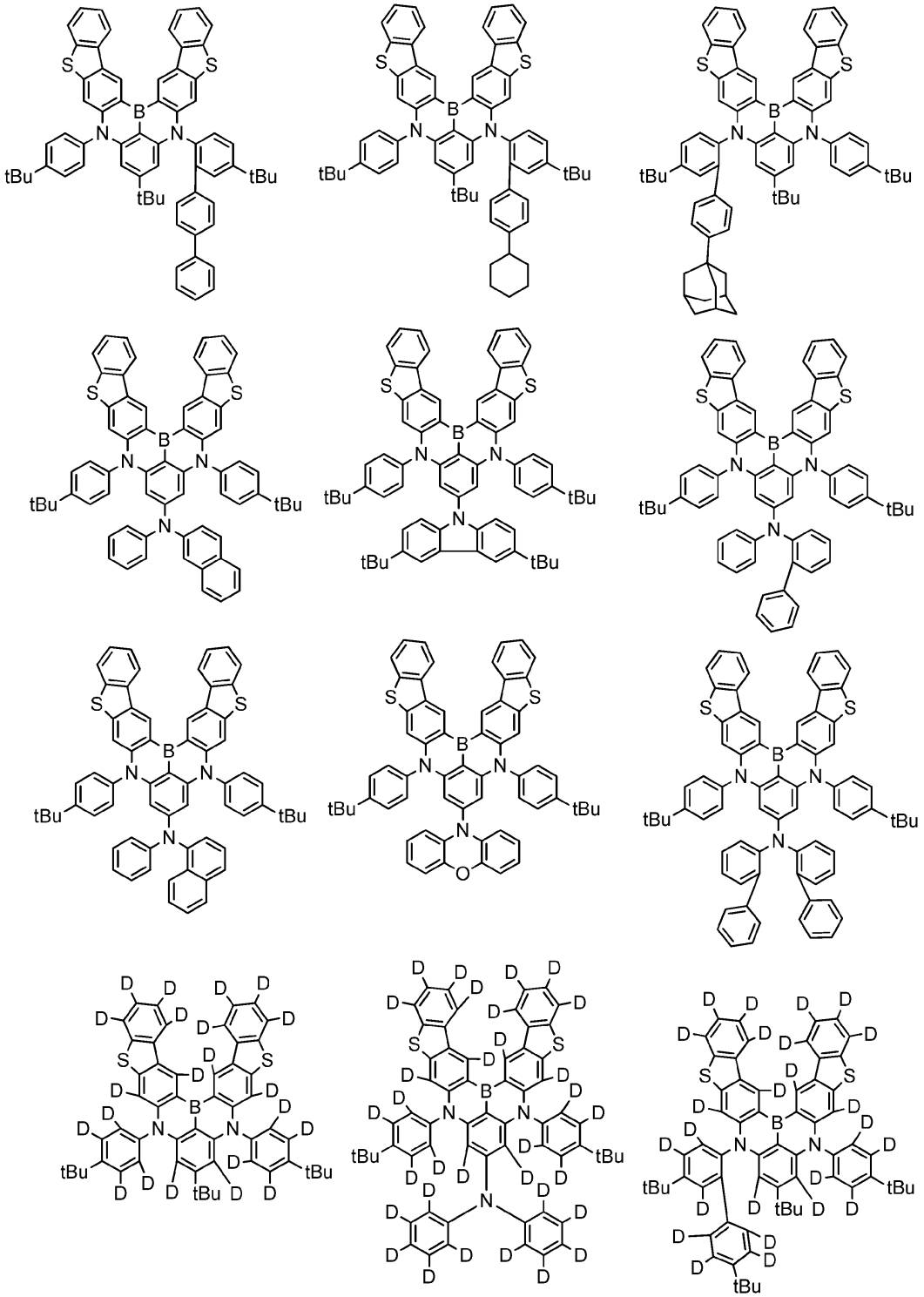
【０４５０】

【化２９２】



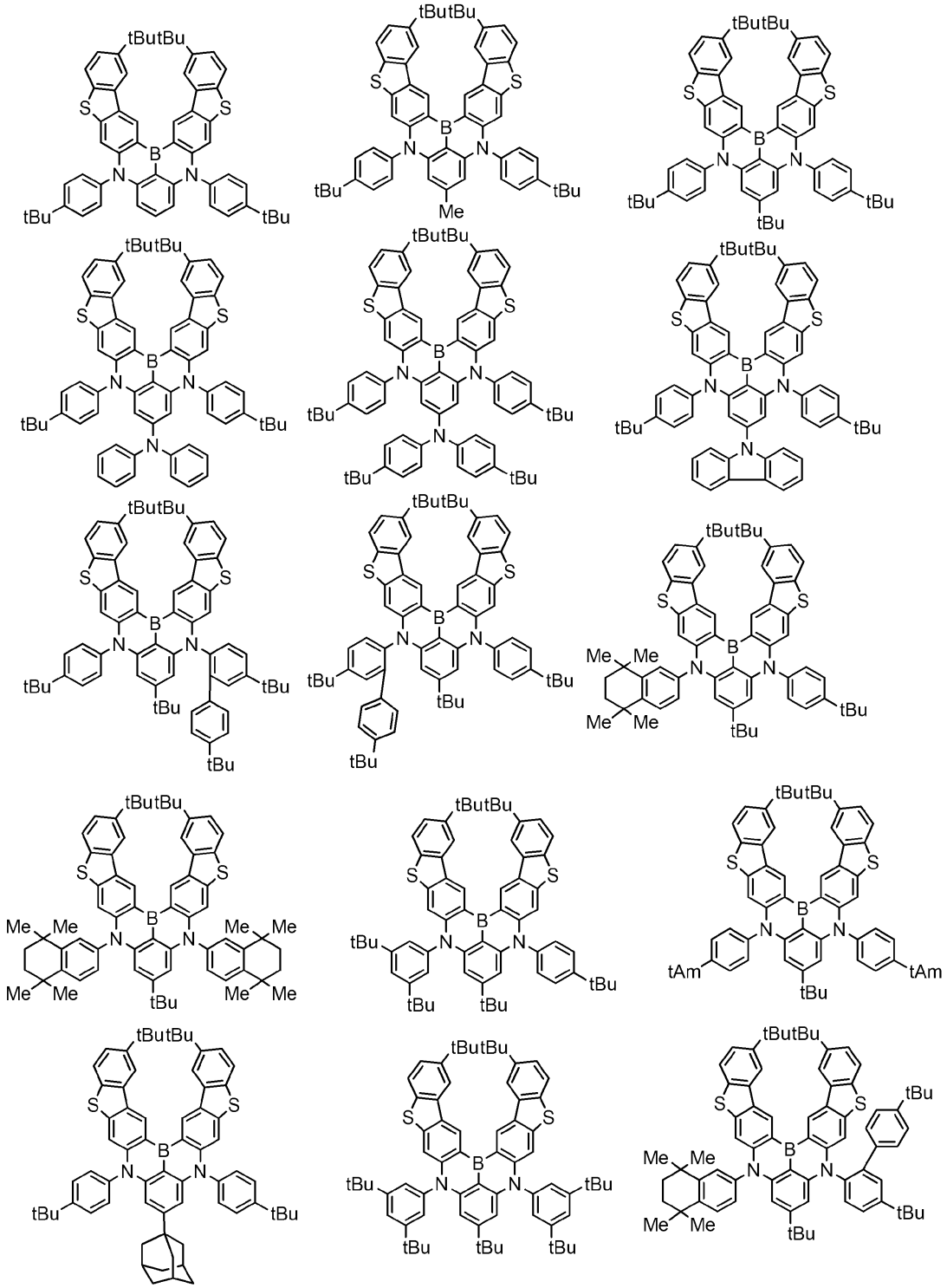
【０４５１】

【化２９３】



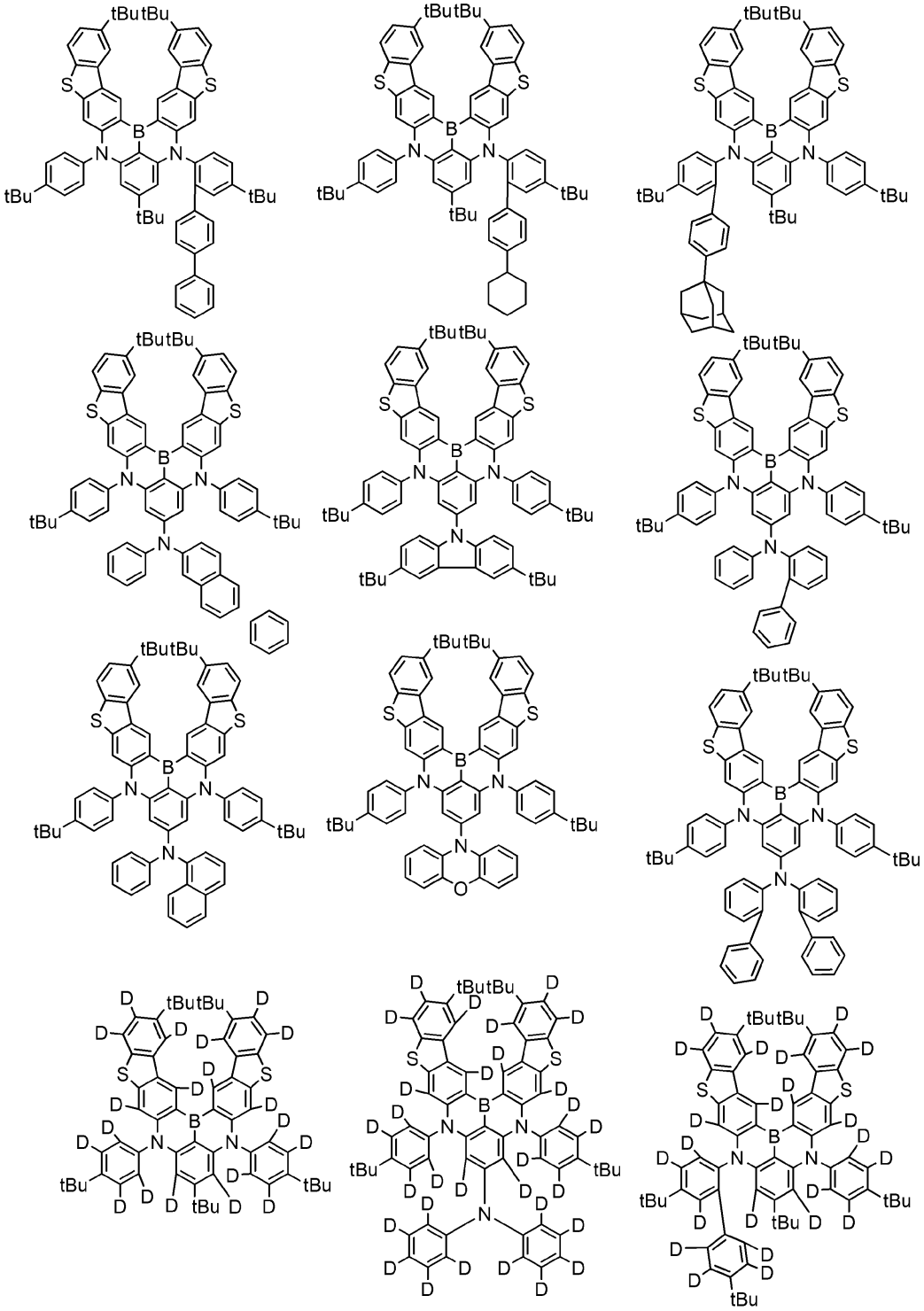
【０４５２】

【化２９４】



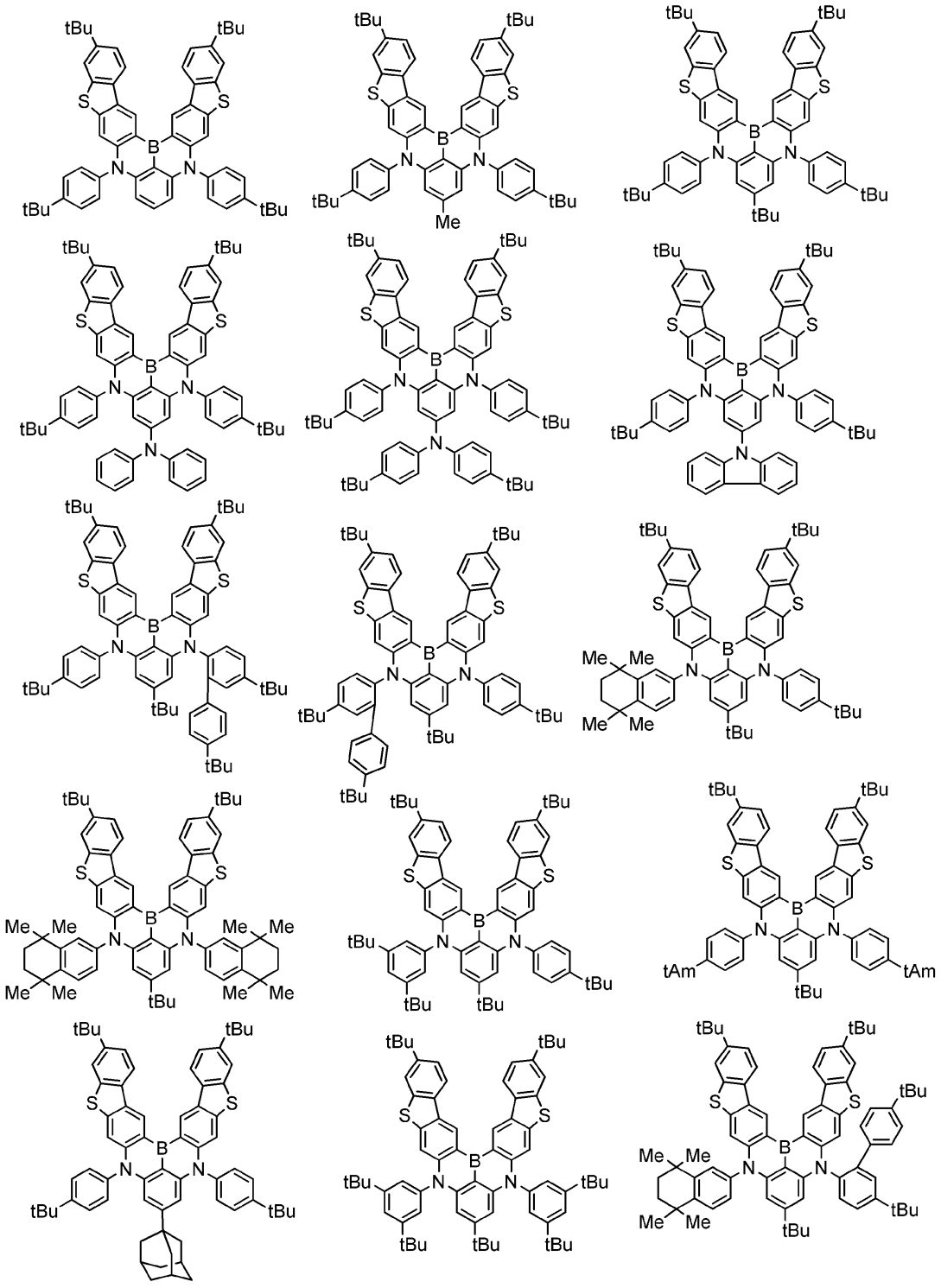
【０４５３】

【化２９５】



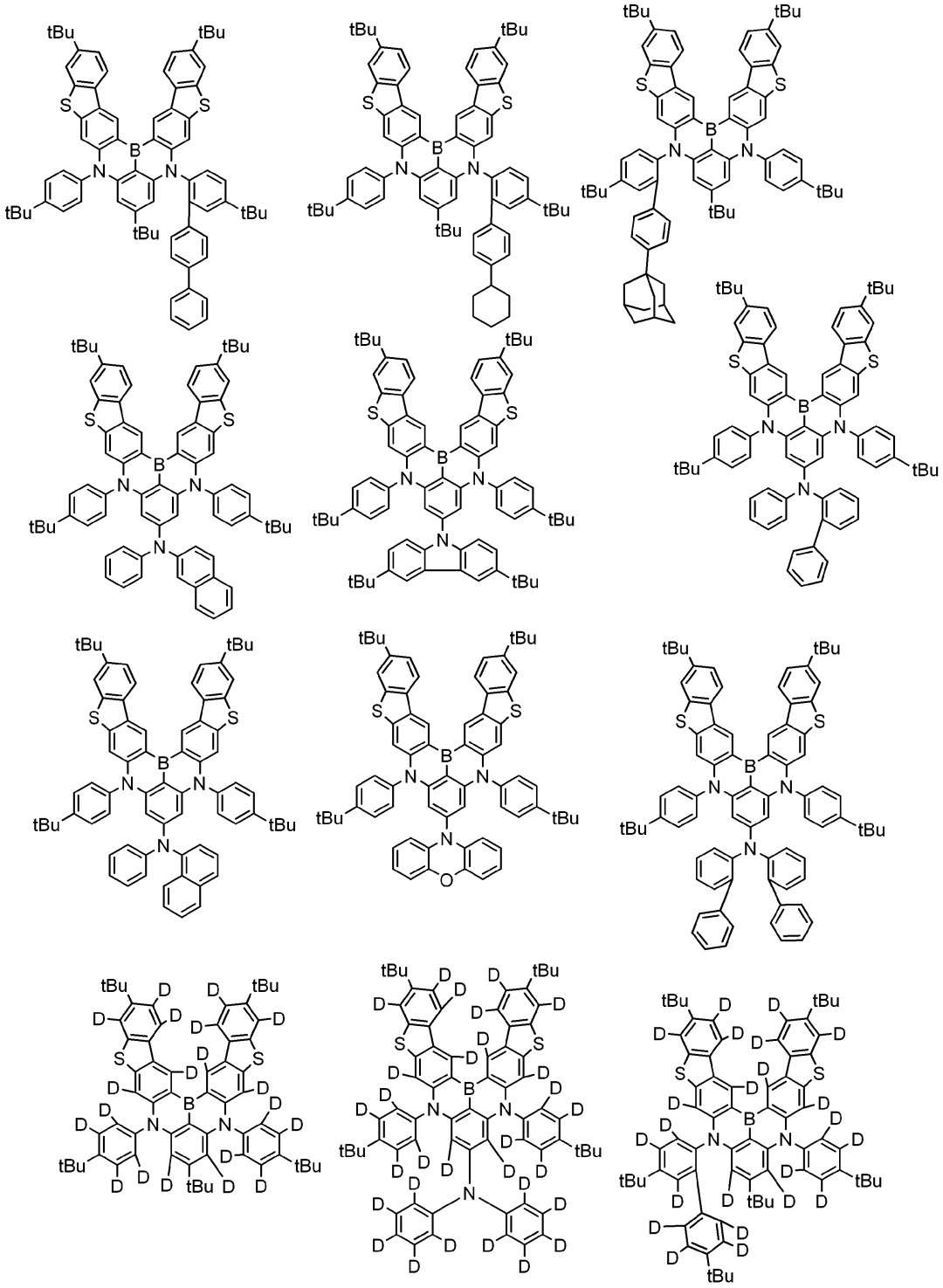
【０４５４】

【化２９６】



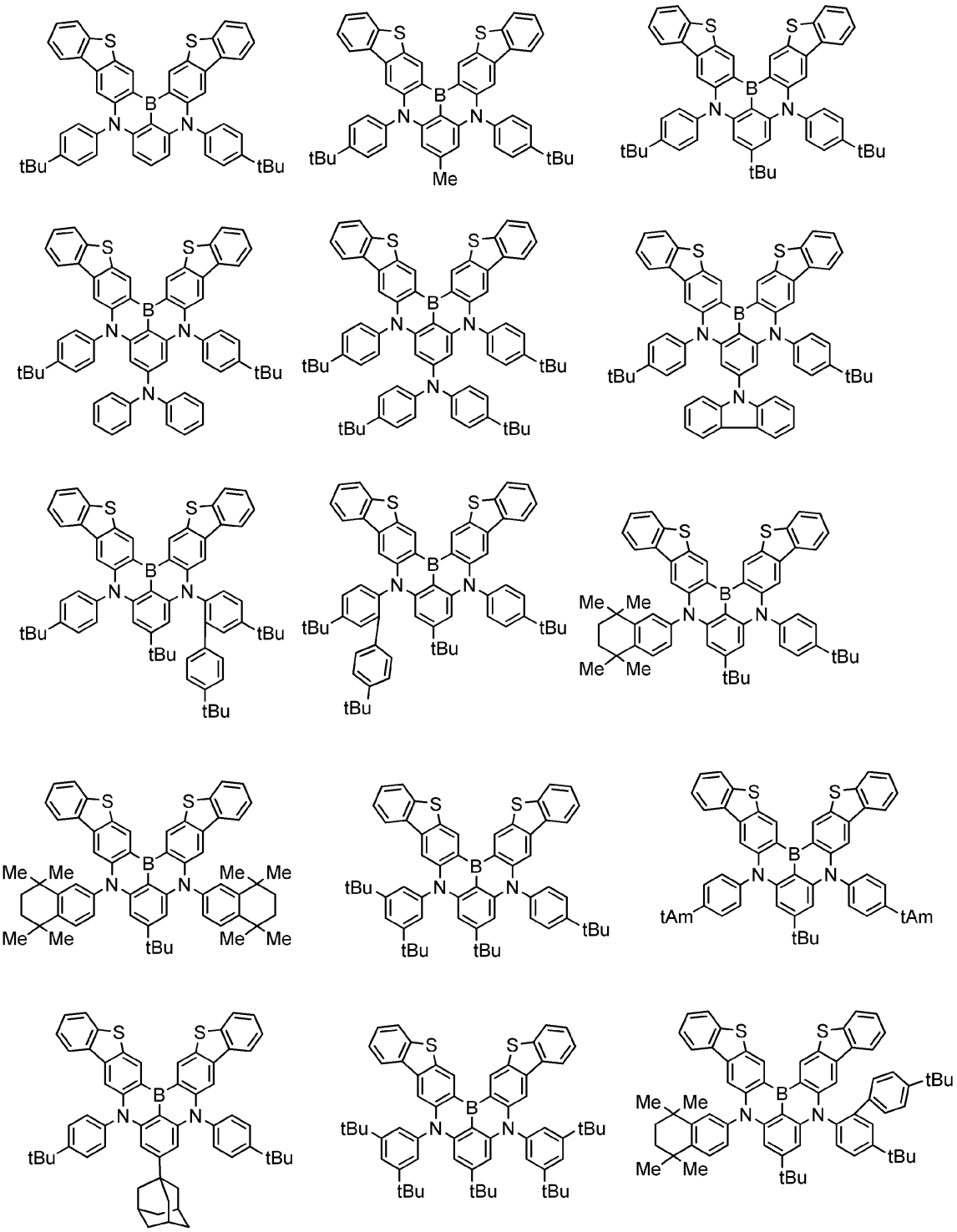
【０４５５】

【化２９７】



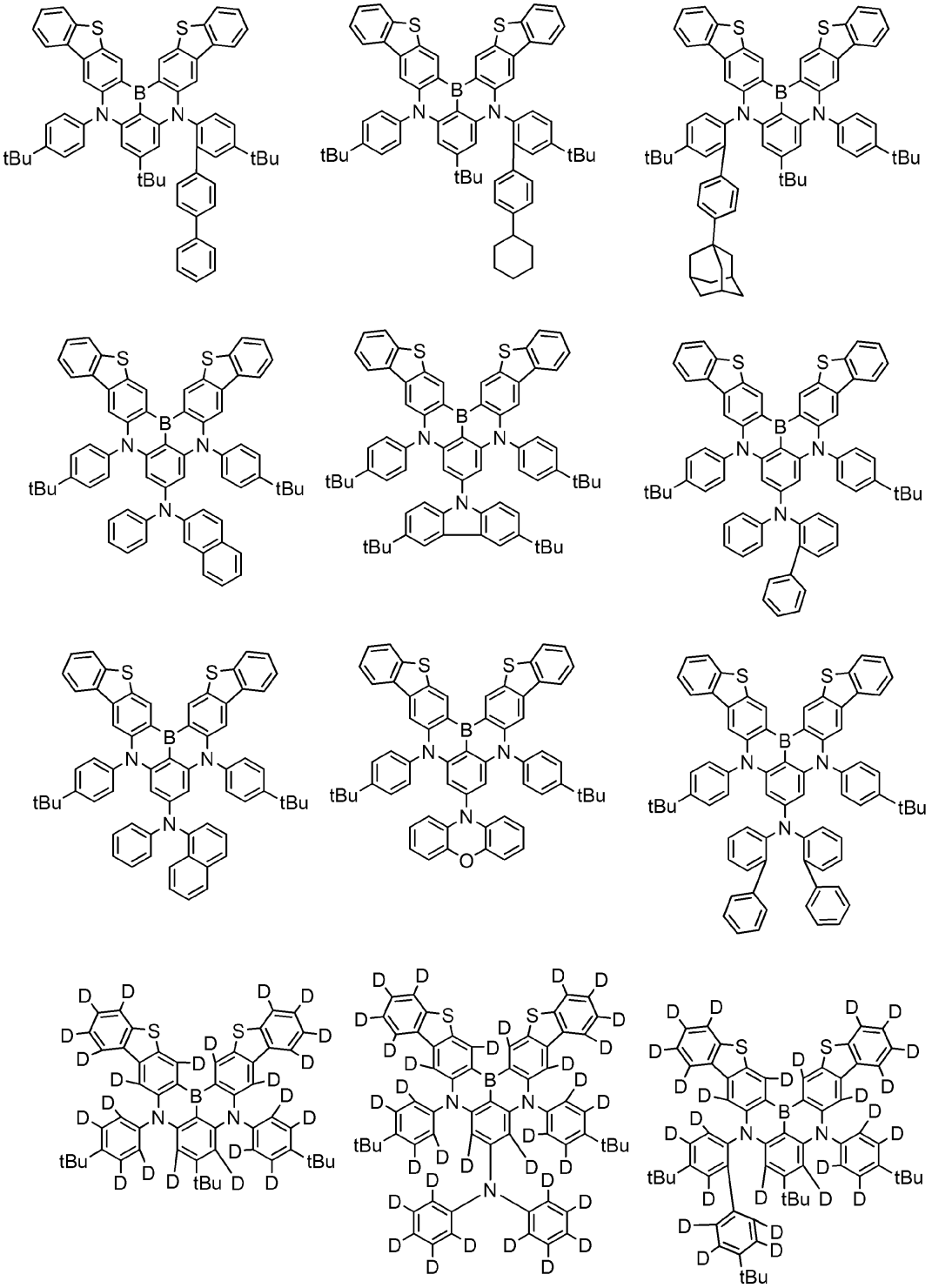
【０４５６】

【化２９８】



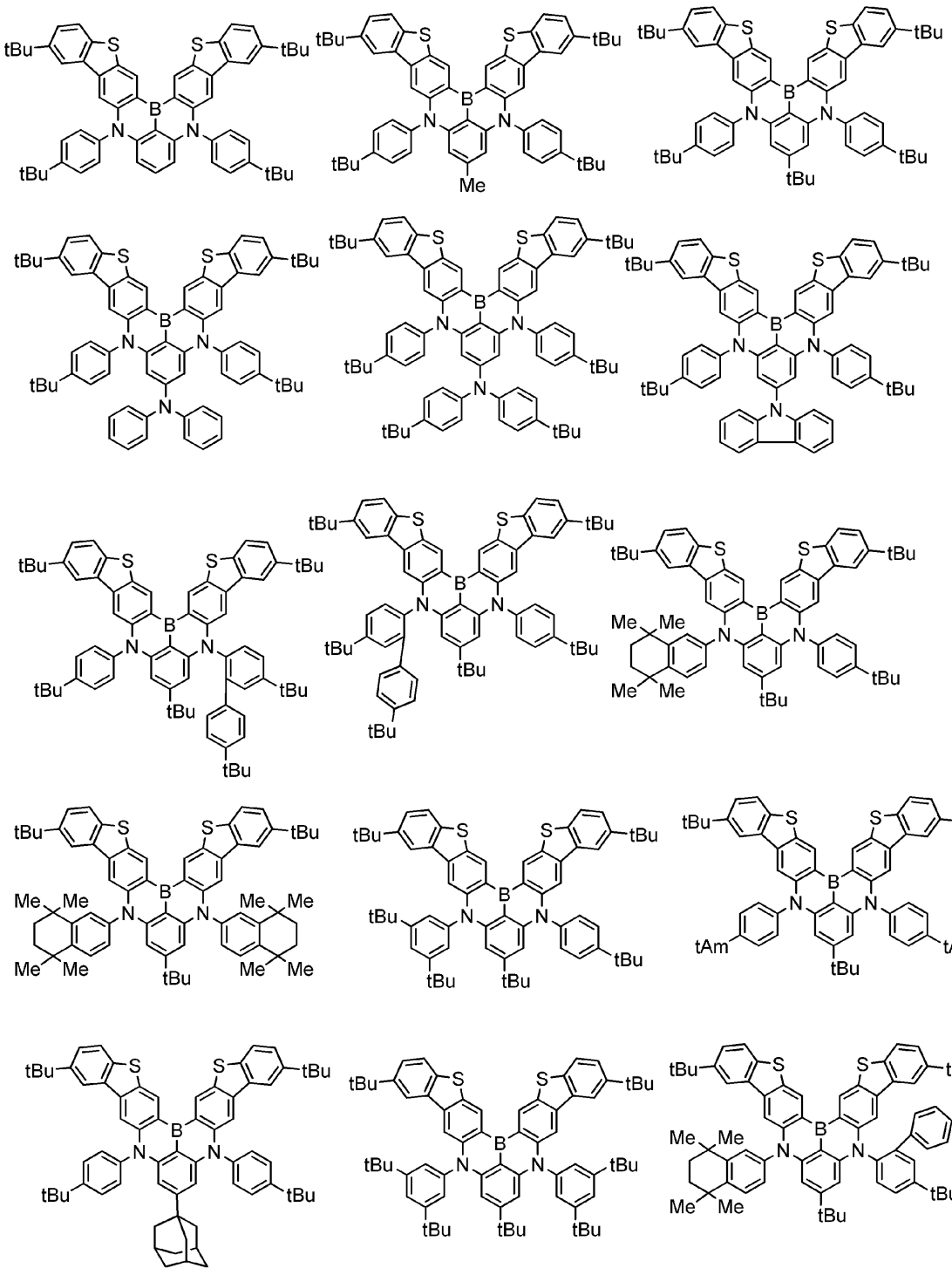
【０４５７】

【化２９９】



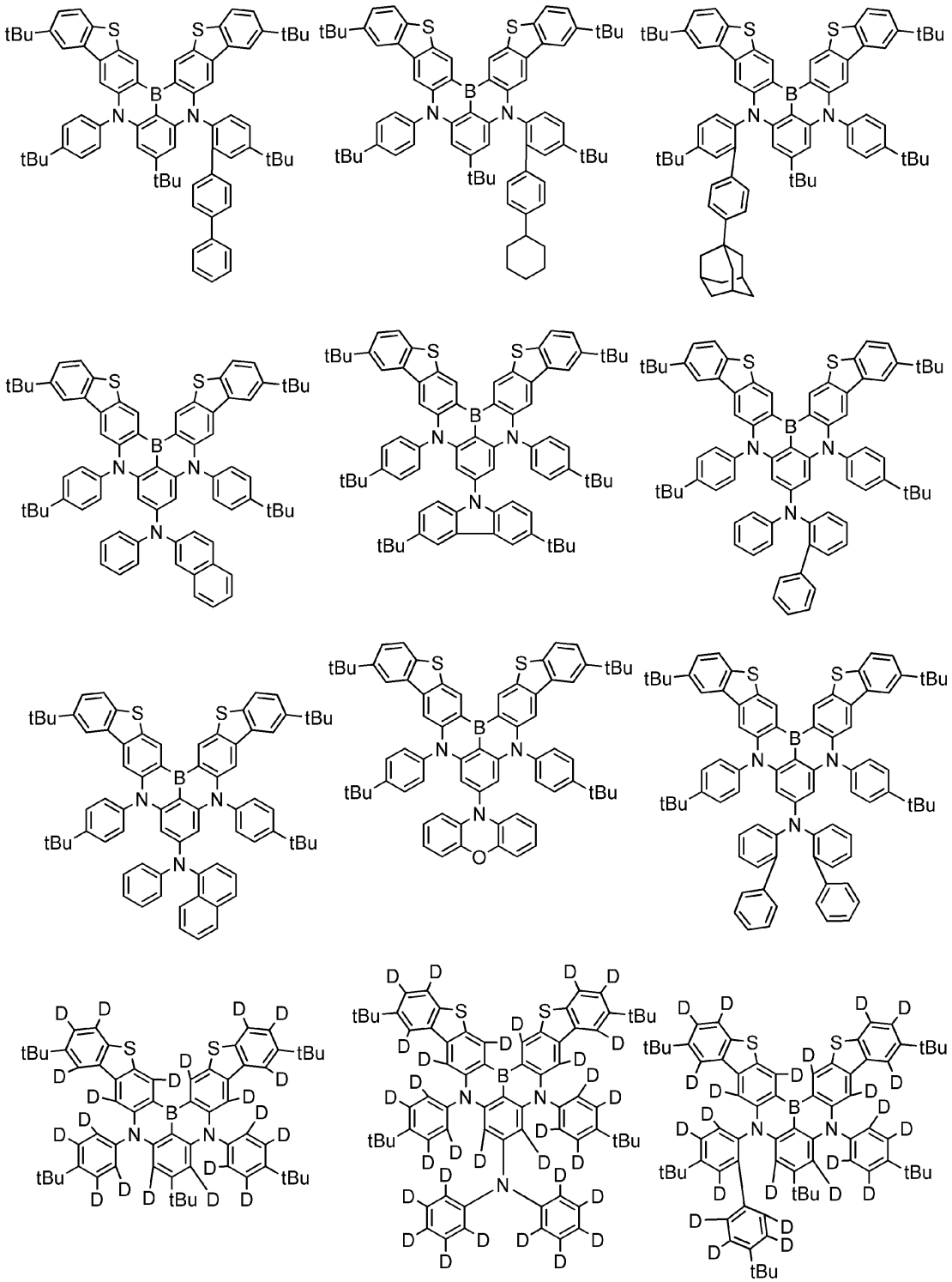
【０４５８】

【化３００】



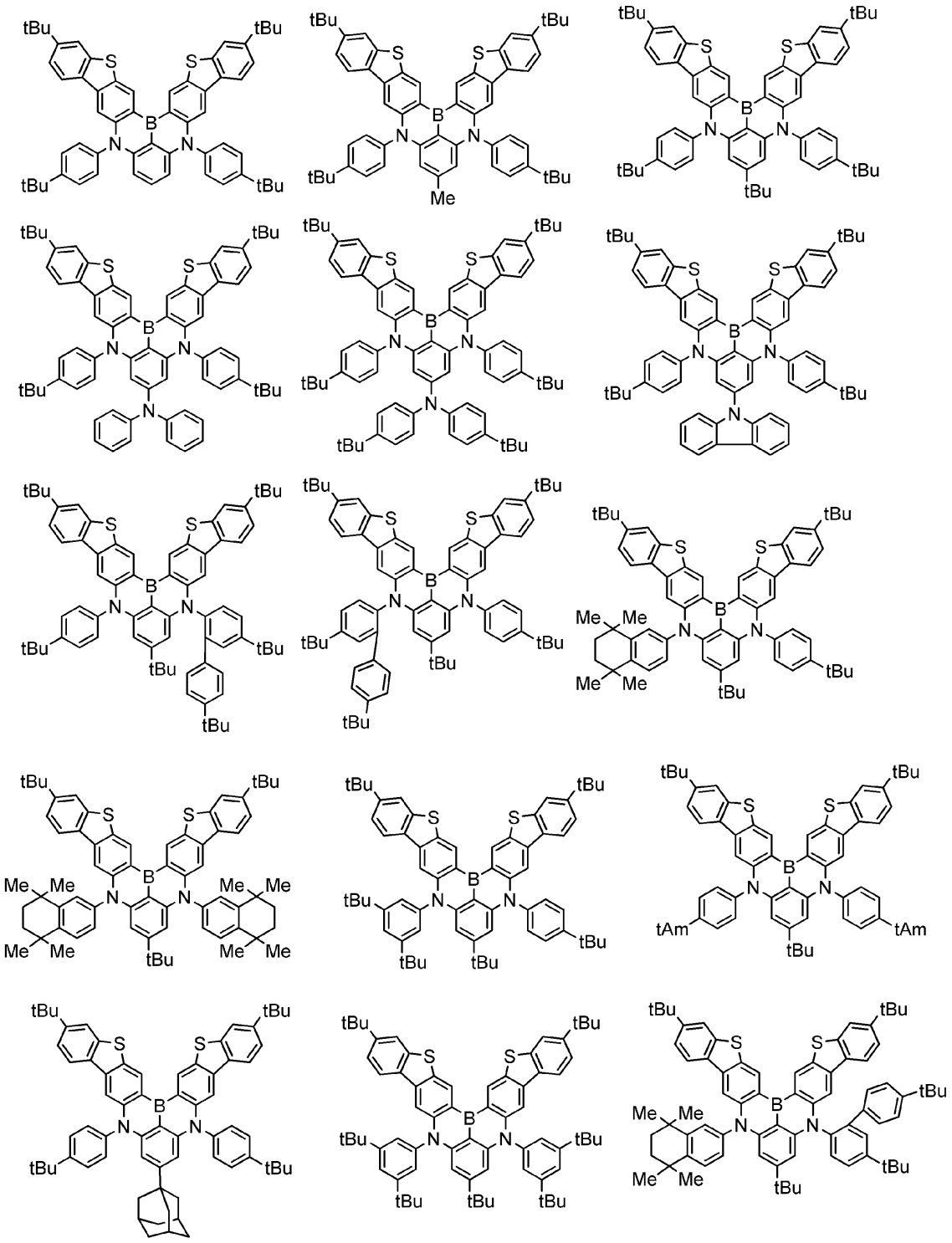
【０４５９】

【化３０１】



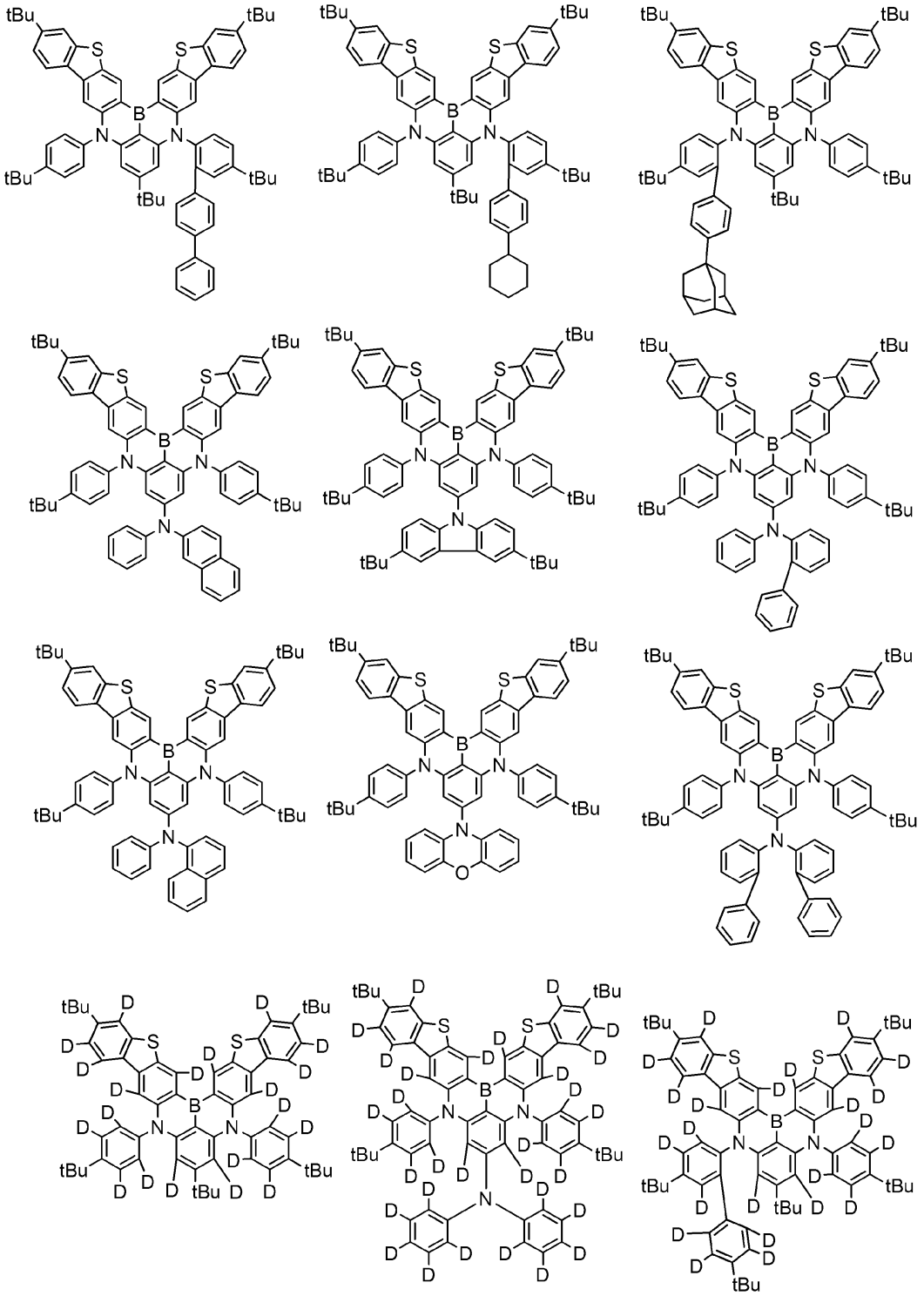
【０４６０】

【化３０２】



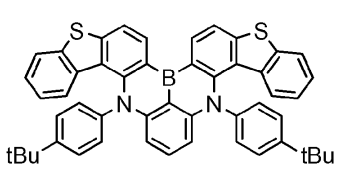
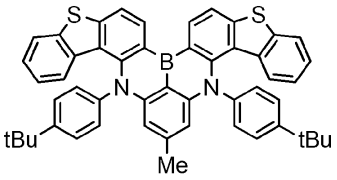
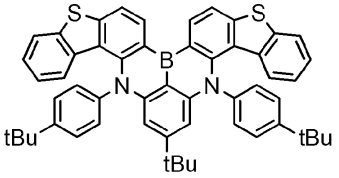
【０４６１】

【化３０３】

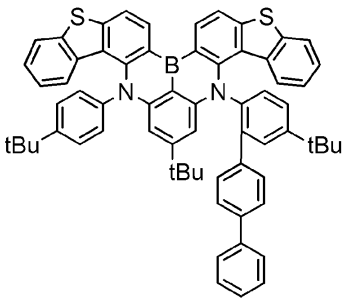
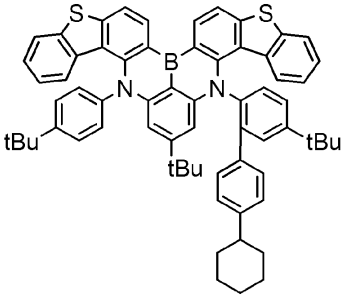
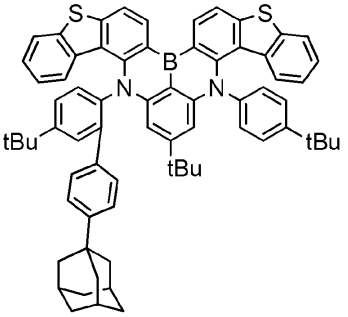
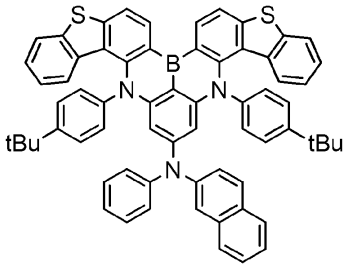
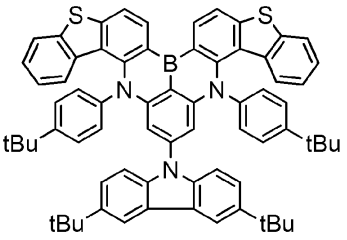
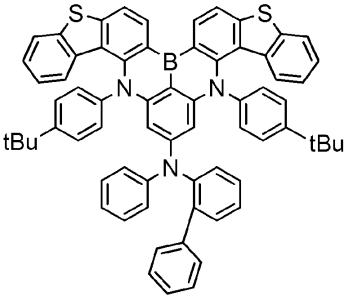
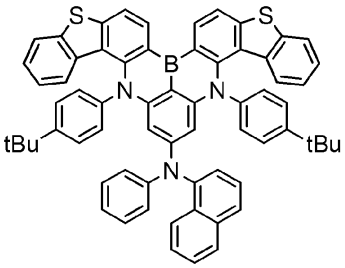
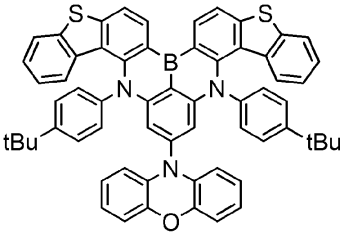
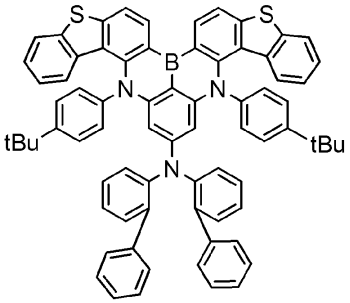
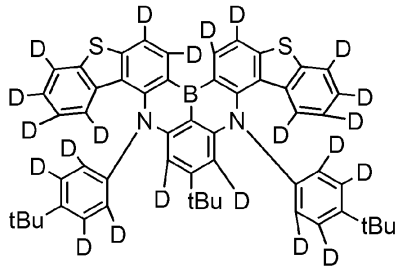
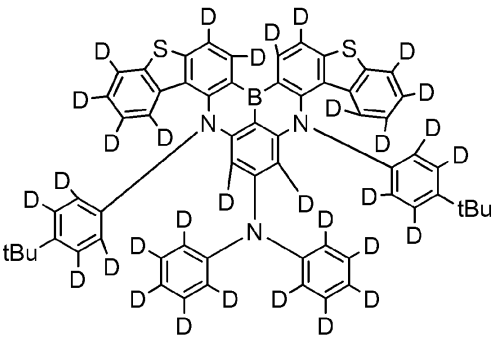


【０４６２】

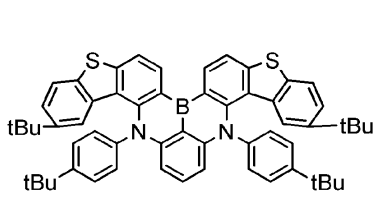
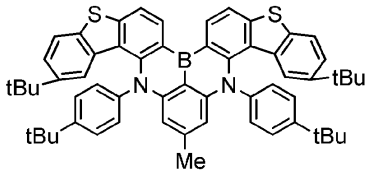
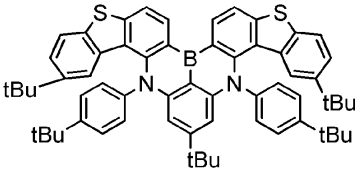
【化３０４】

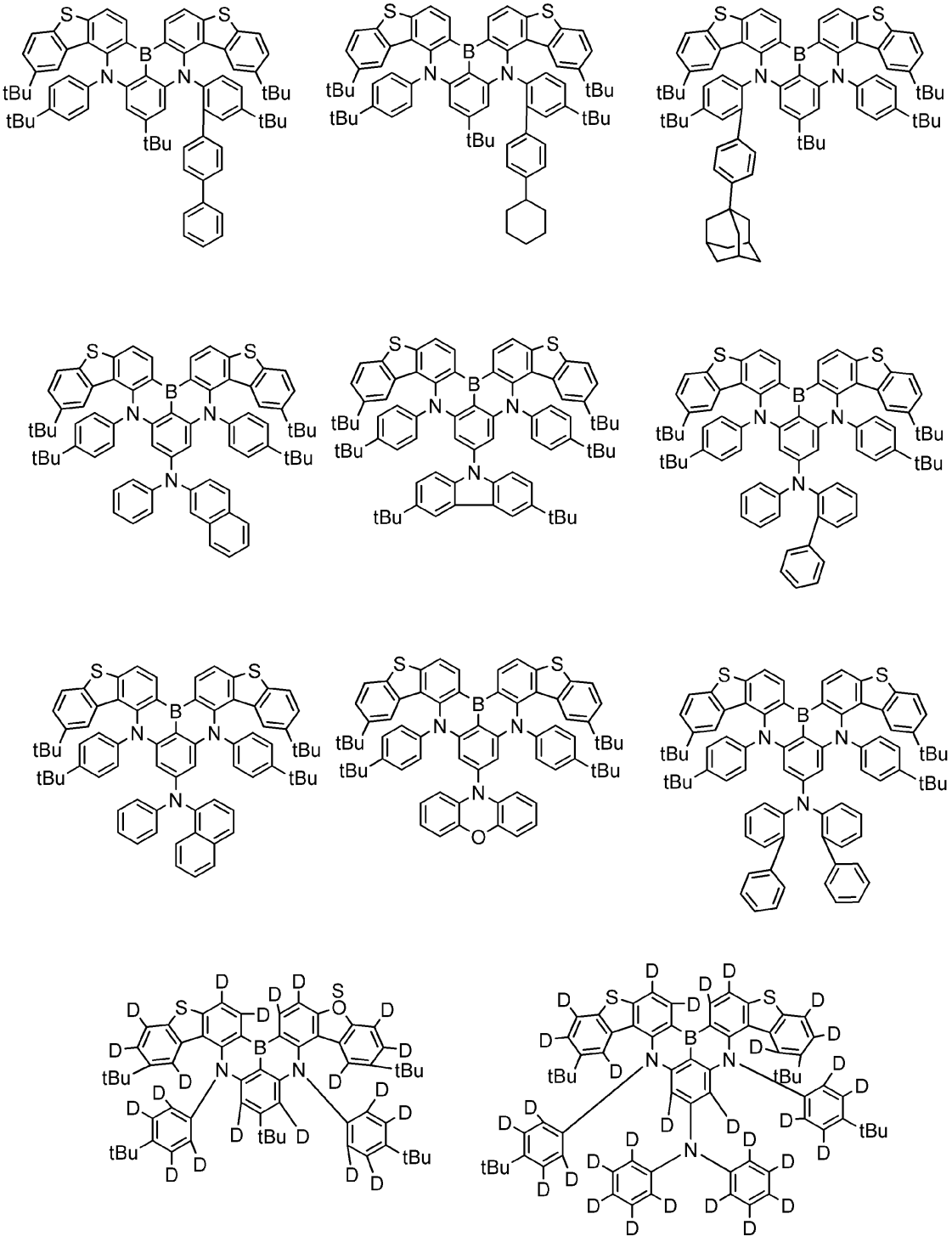
【化３０５】

【化３０６】

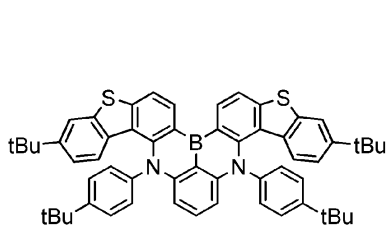
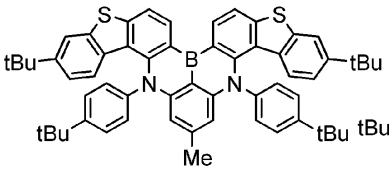
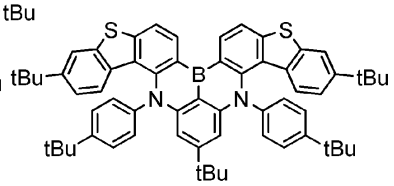
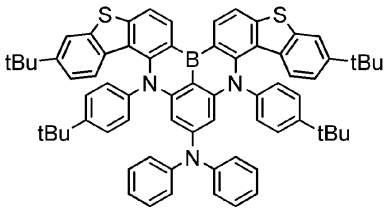
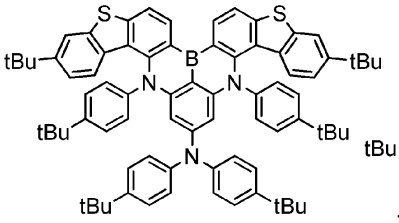
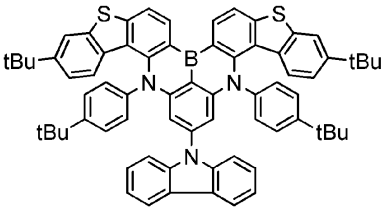
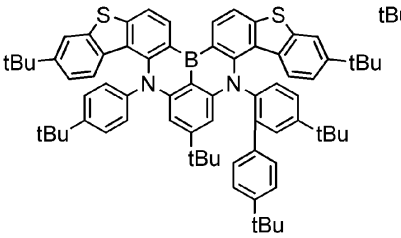
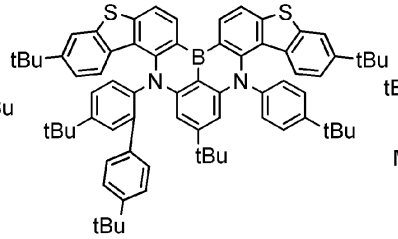
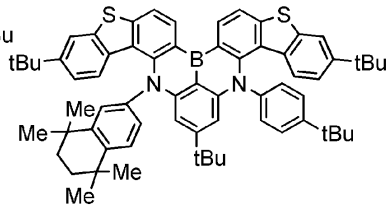
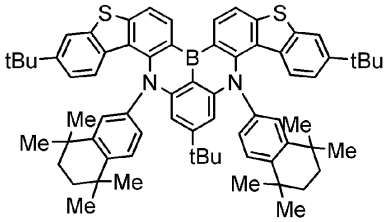
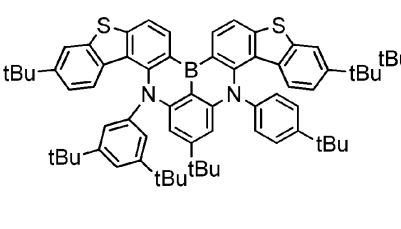
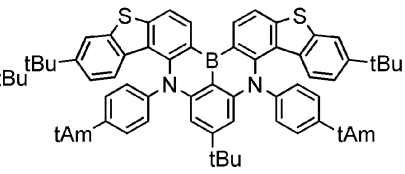




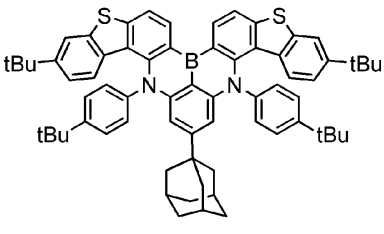
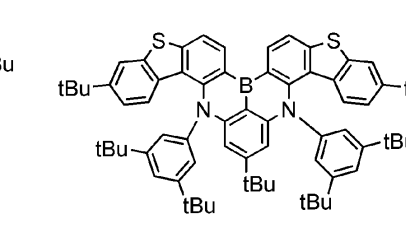
【化３０７】



【０４６５】

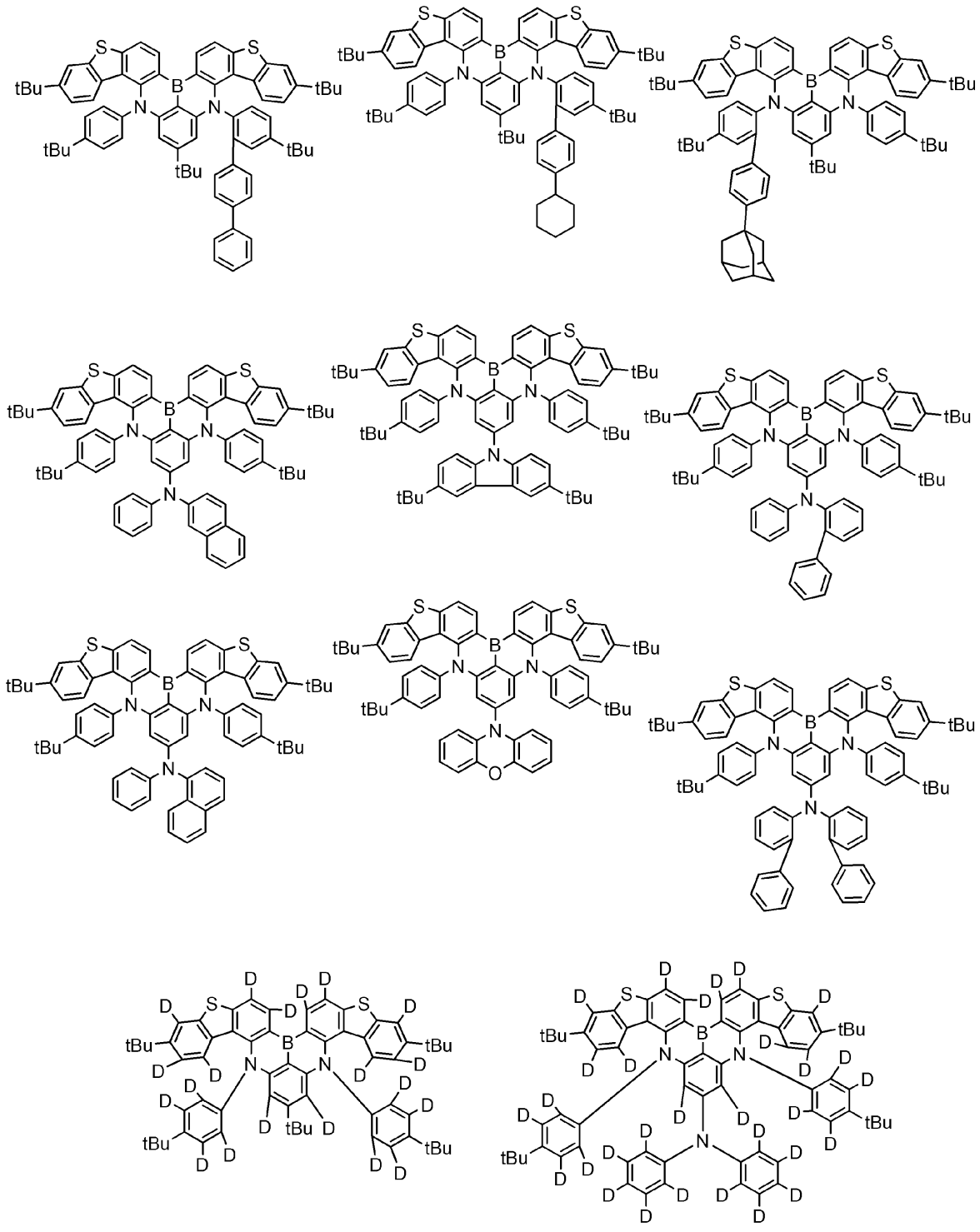
【化３０８】

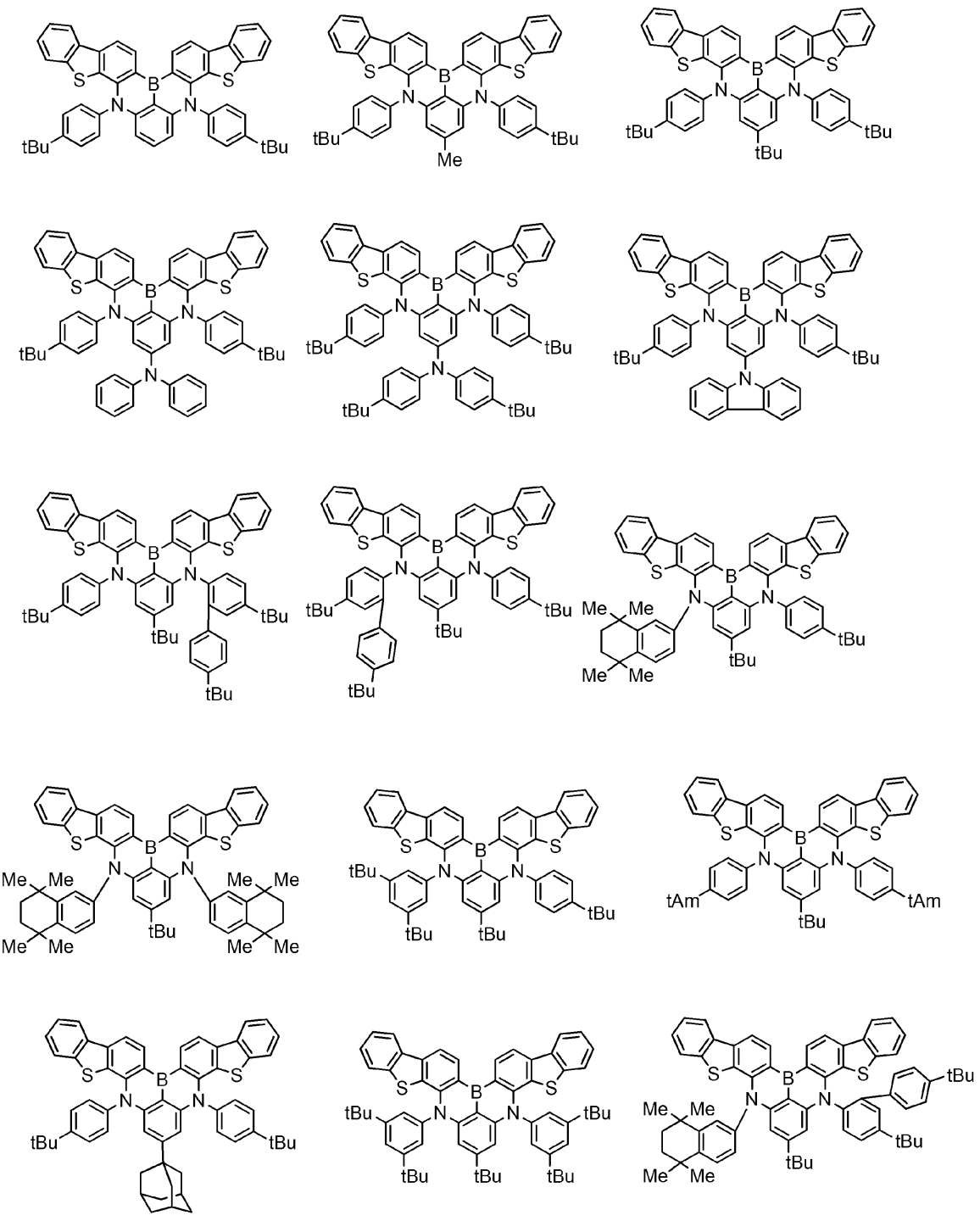

【０４６６】

【化３０９】



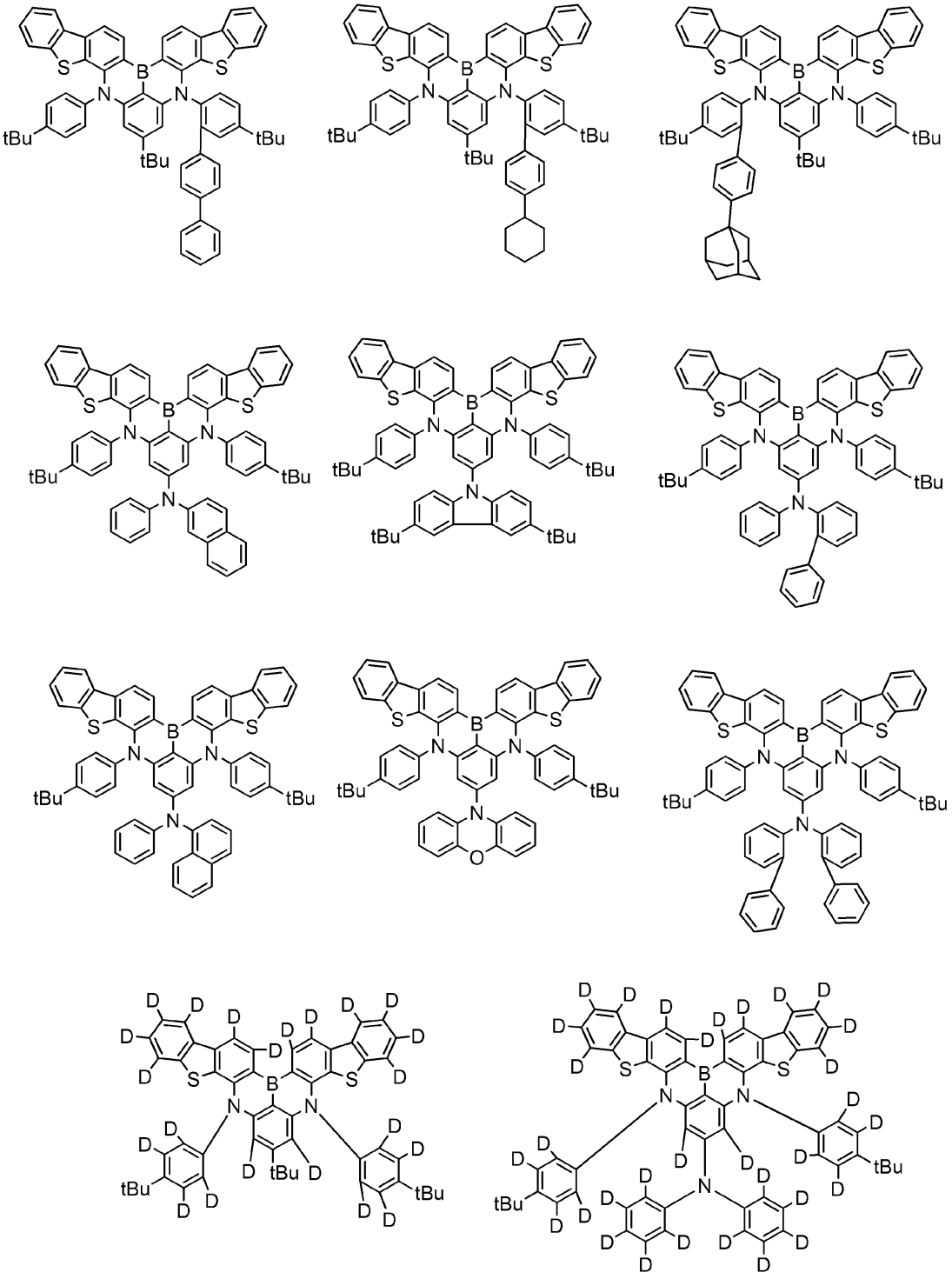
【０４６７】

【化３１０】



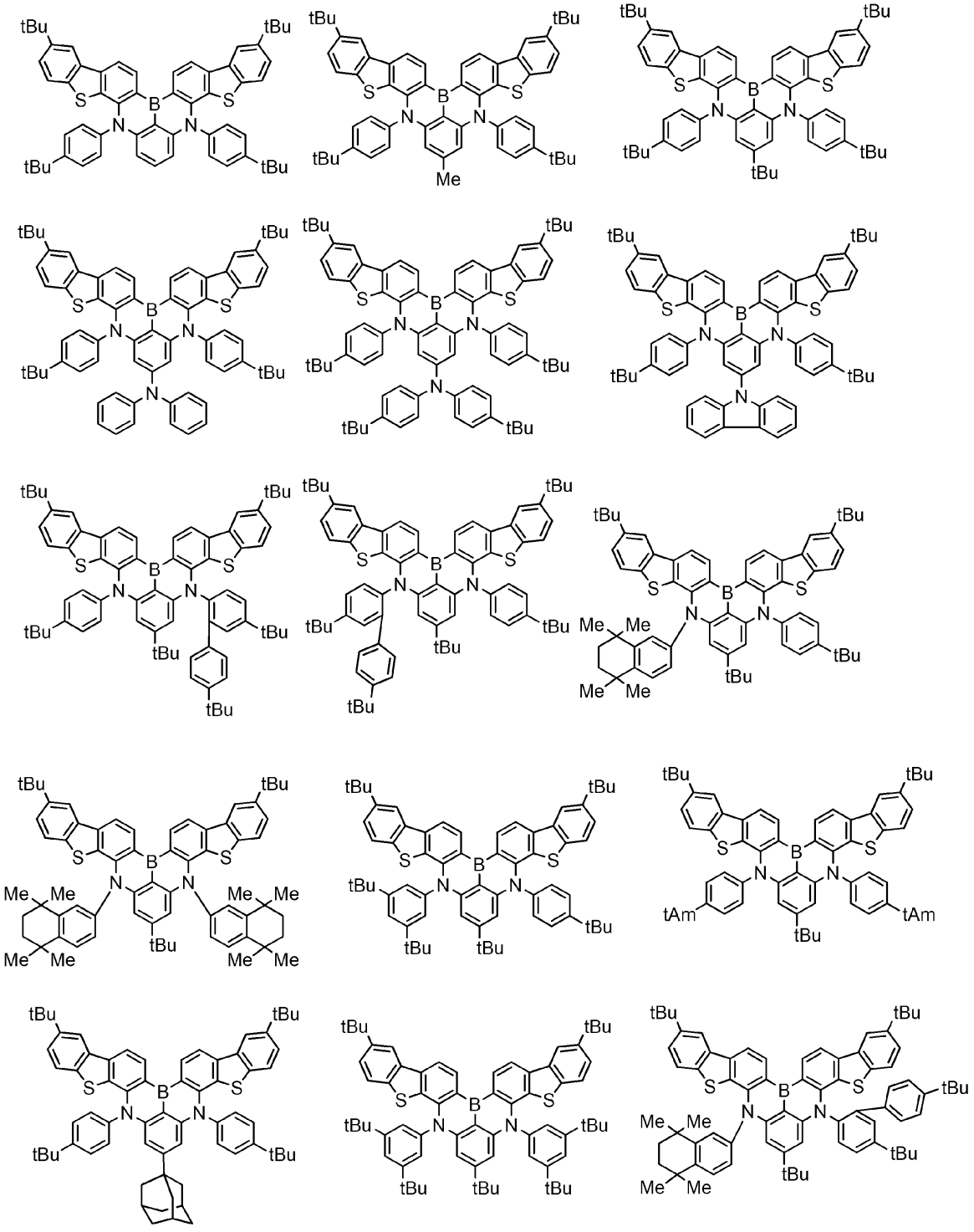
【０４６８】

【化３１１】



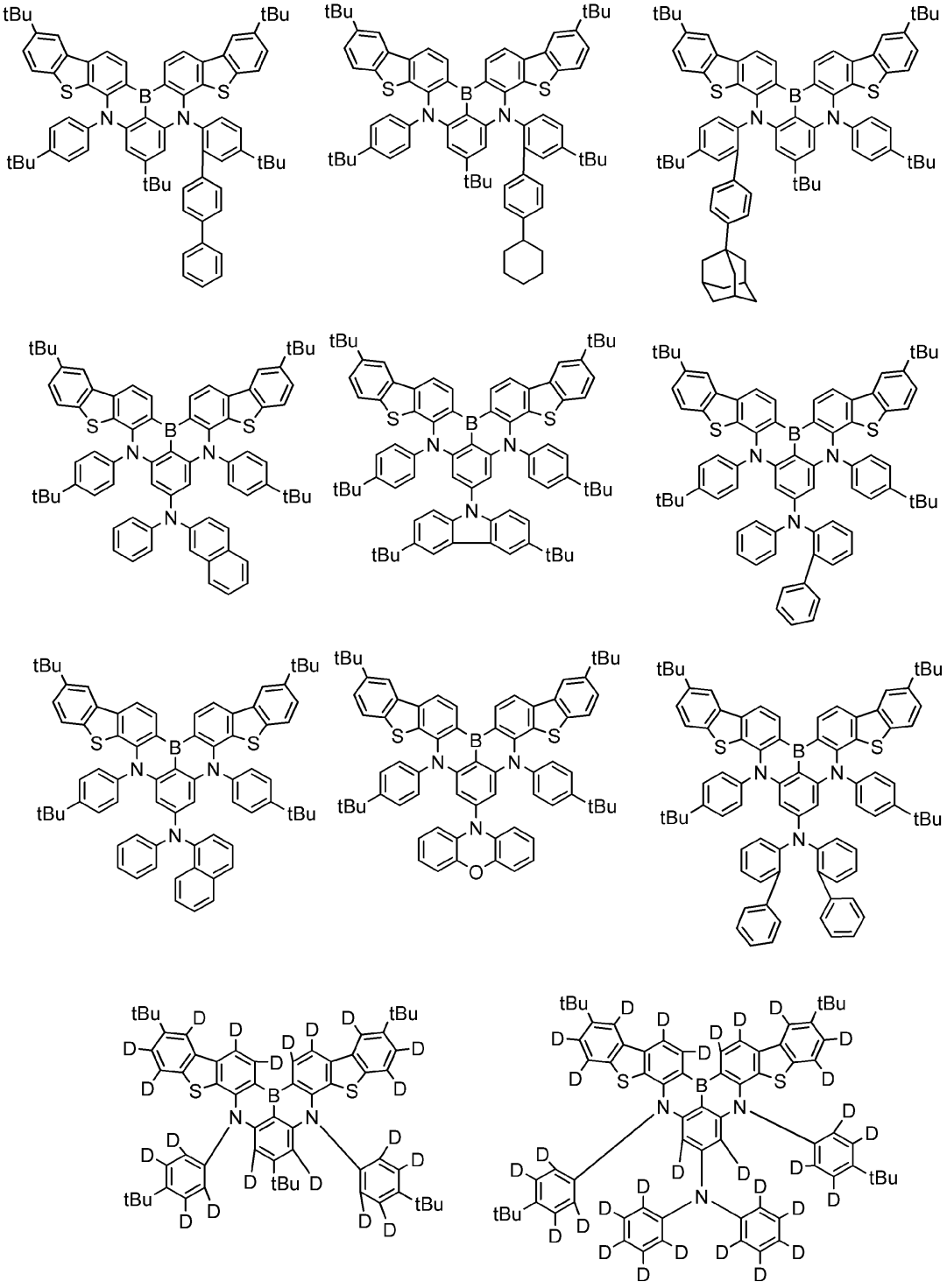
【０４６９】

【化３１２】



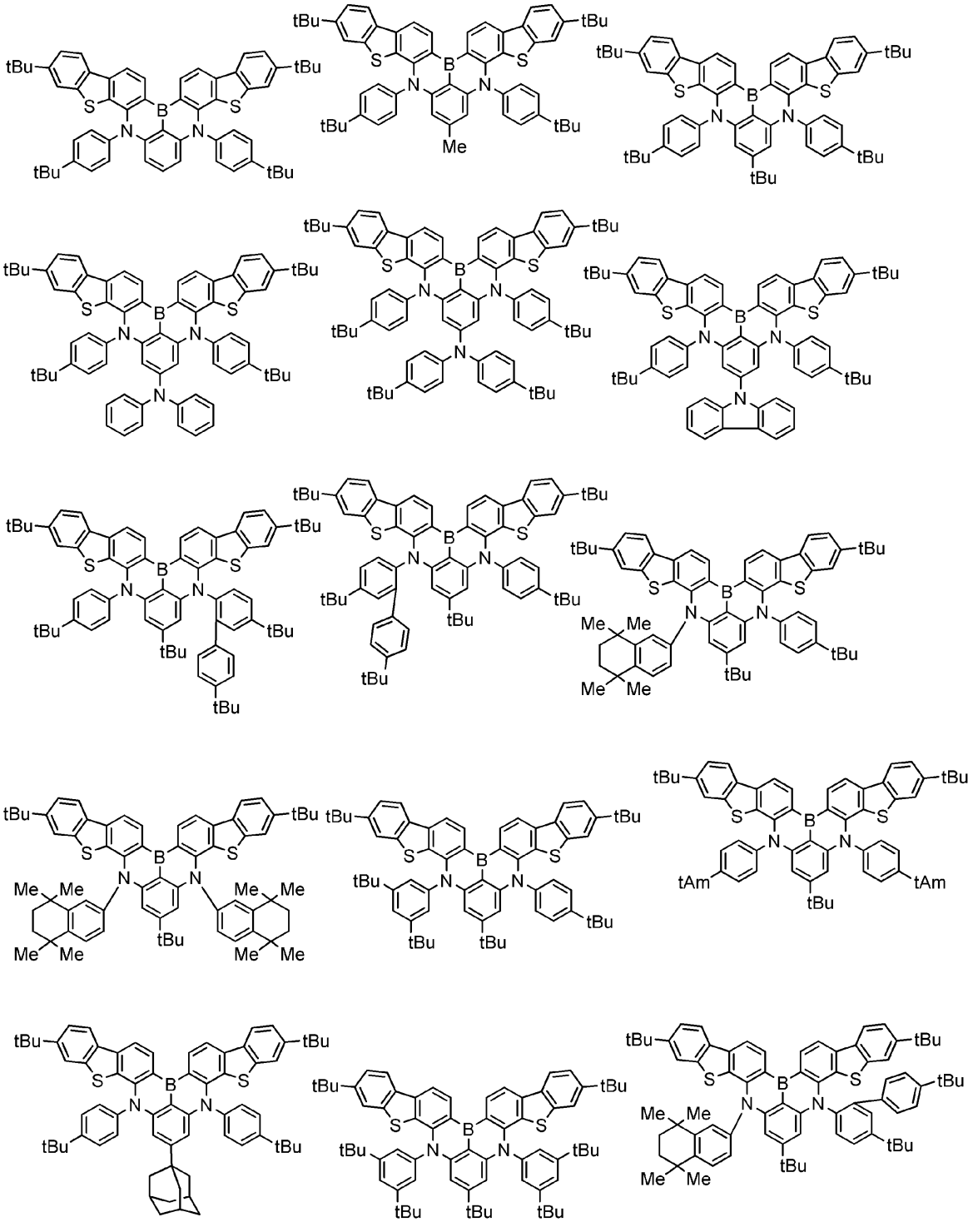
【０４７０】

【化３１３】



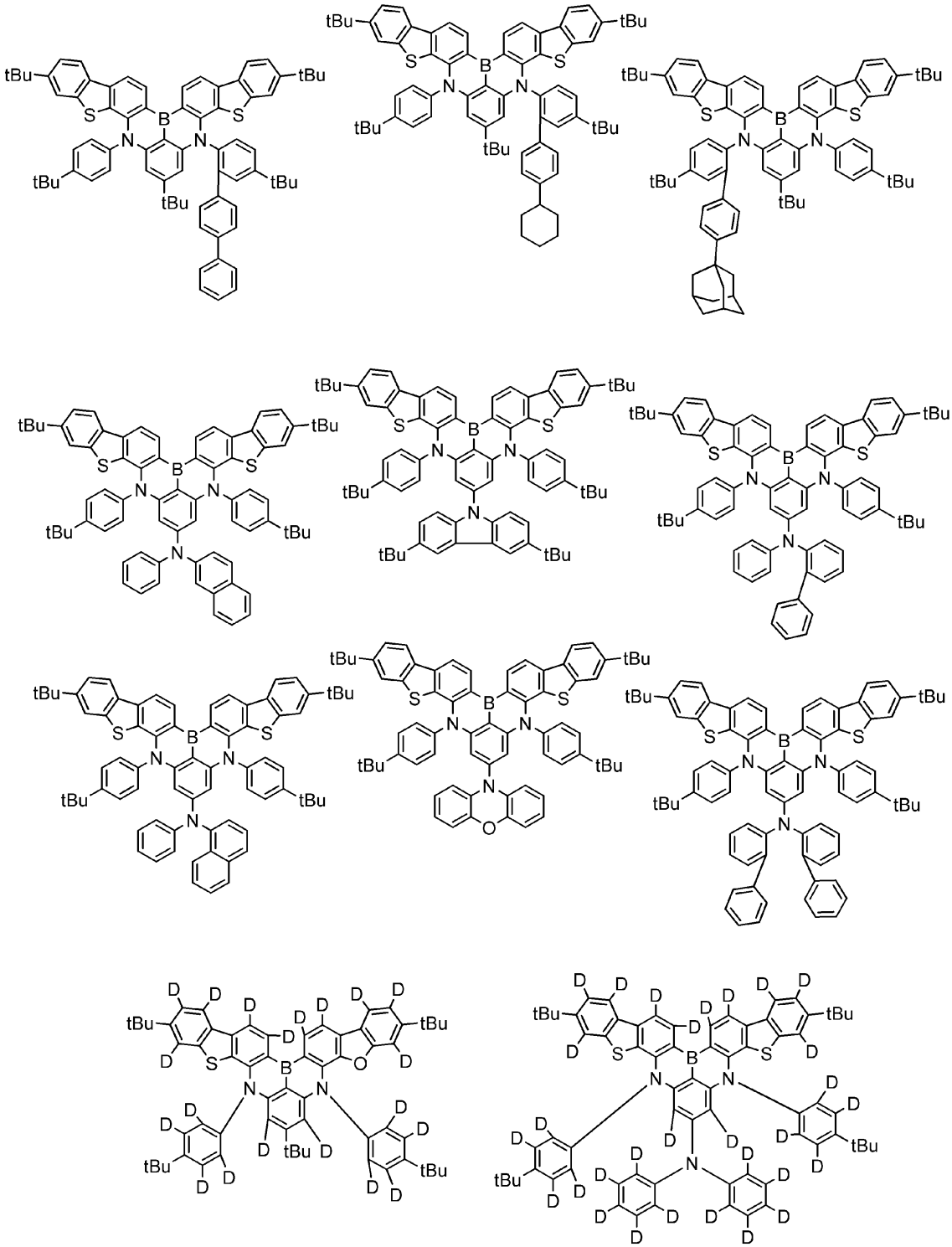
【０４７１】

【化３１４】



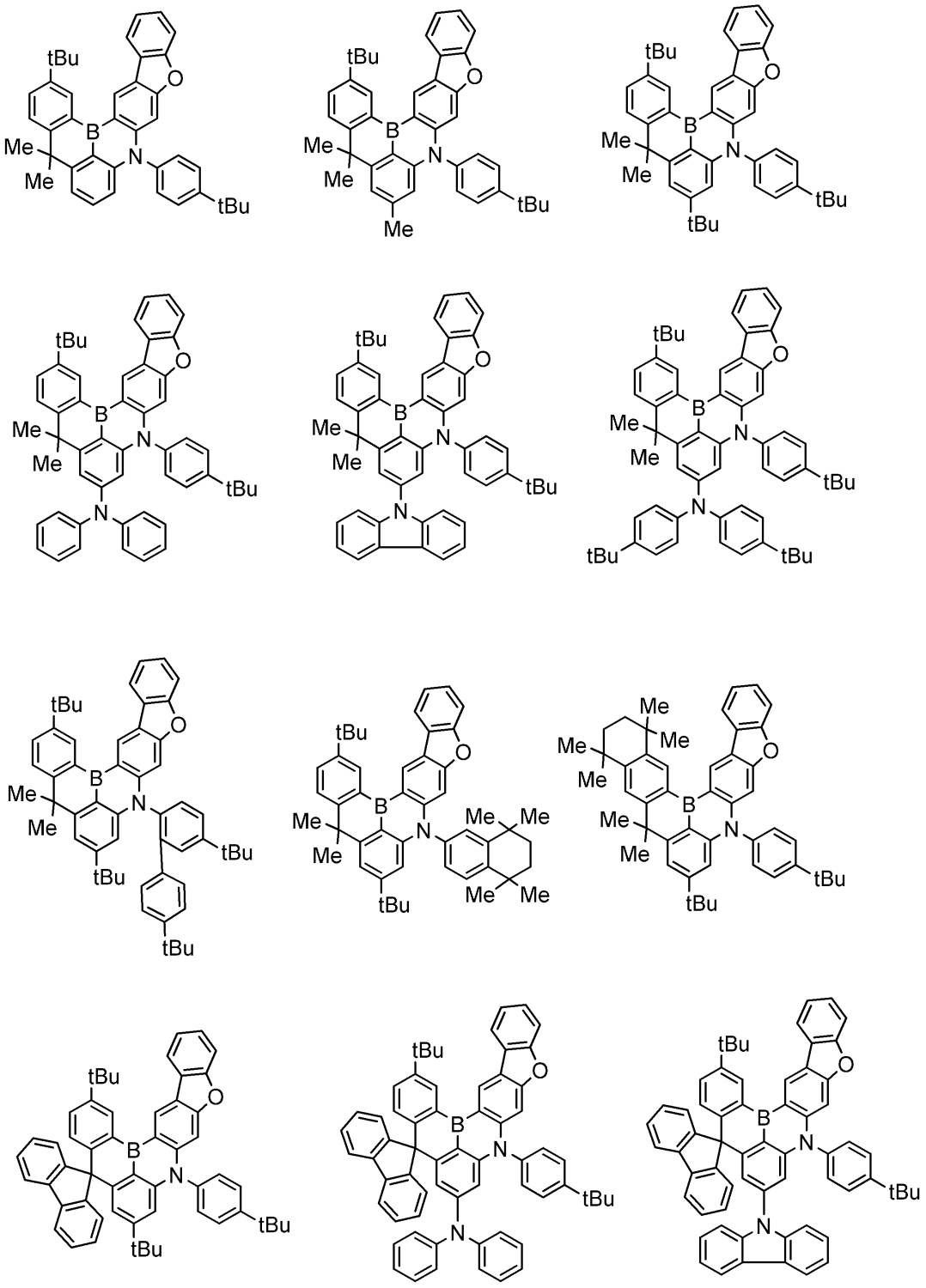
【０４７２】

【化３１５】



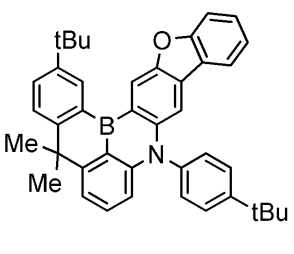
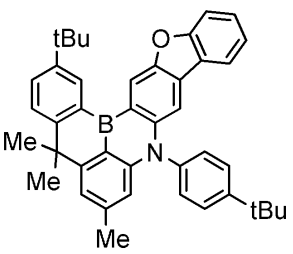
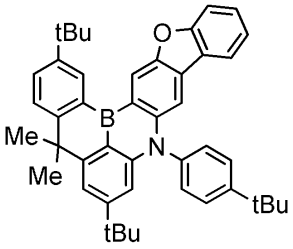
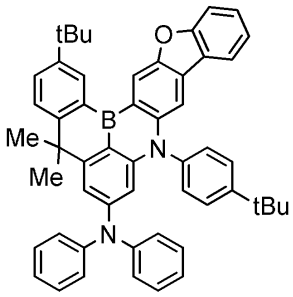
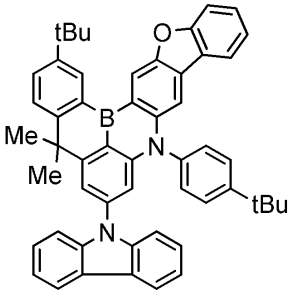
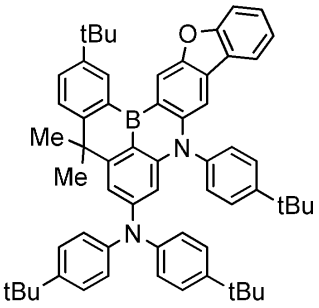
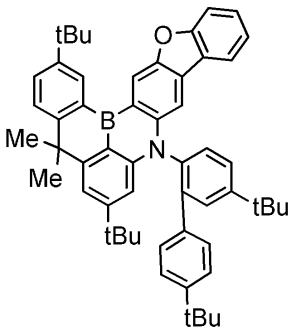
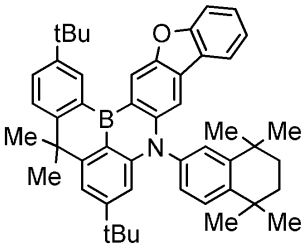
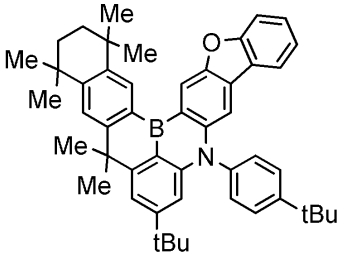
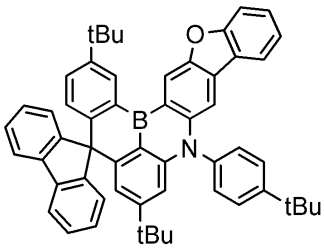
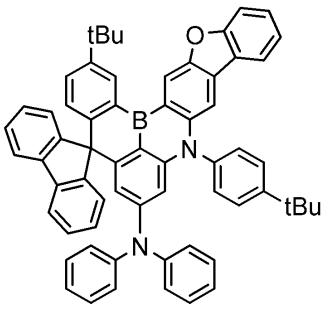
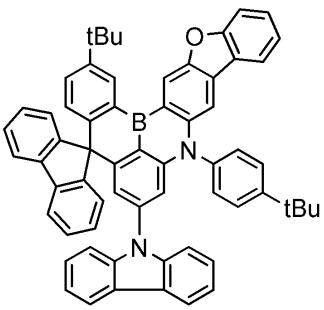
【０４７３】

【化３１６】



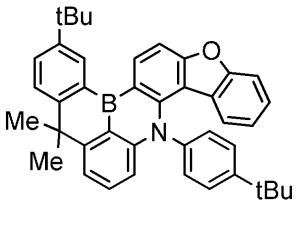
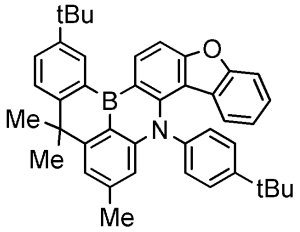
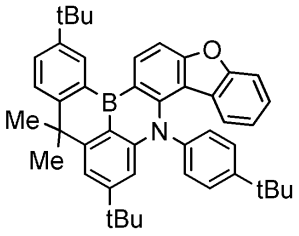
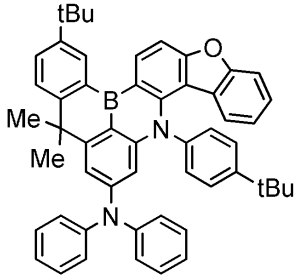
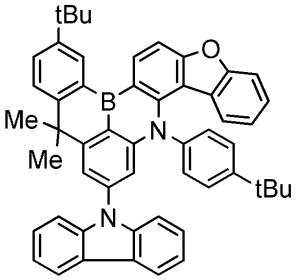
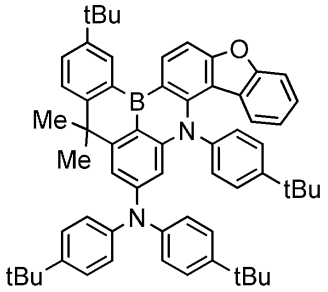
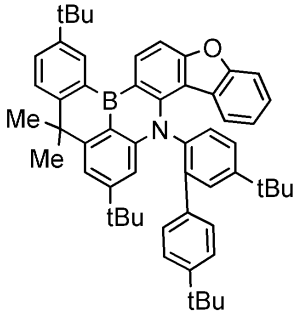
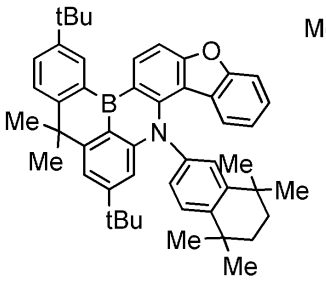
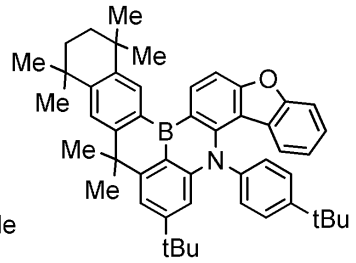
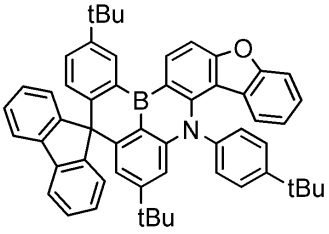
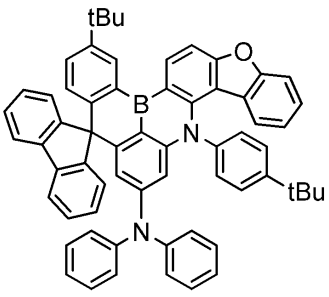
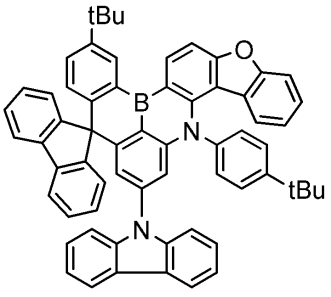
【０４７４】

【化３１７】

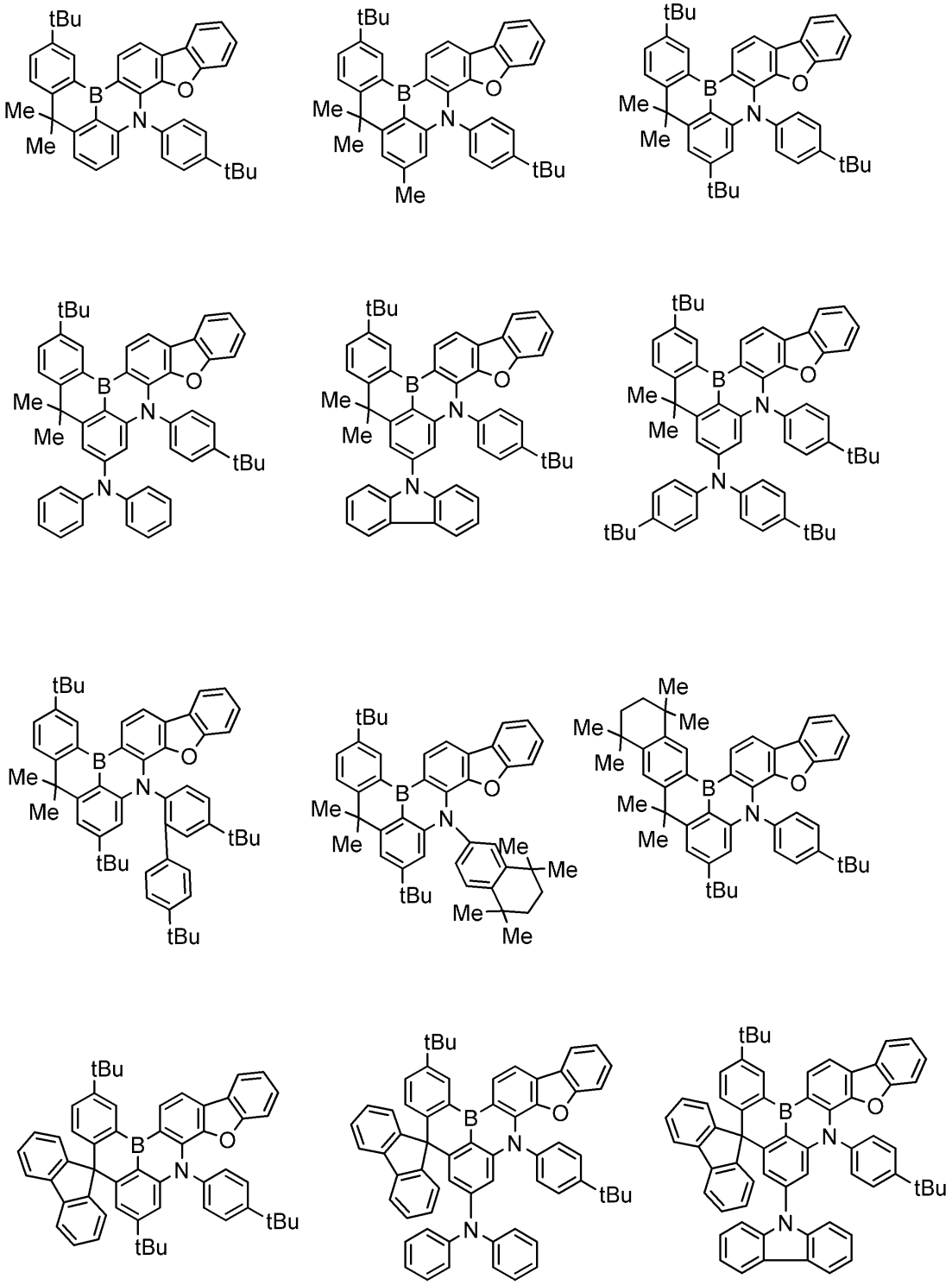
【０４７５】

【化３１８】

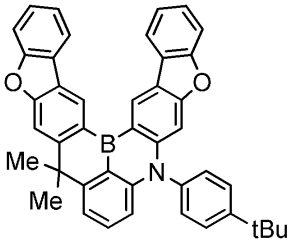
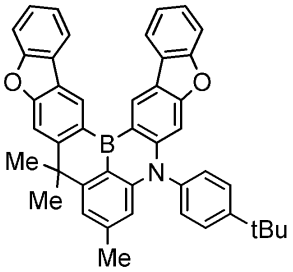
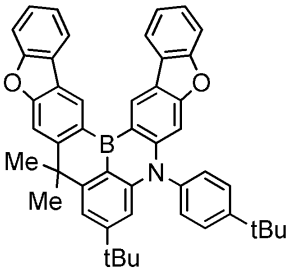
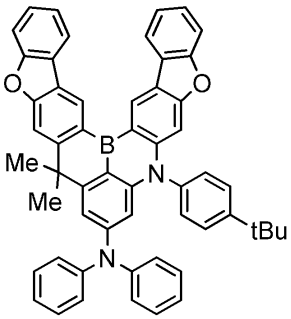
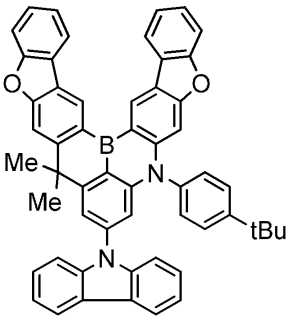
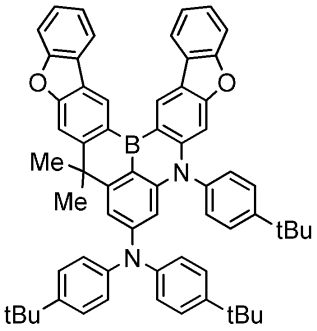
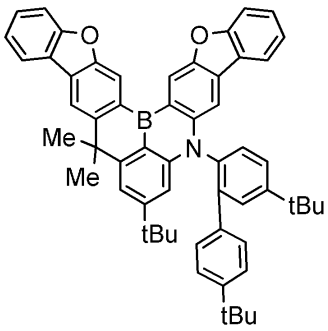
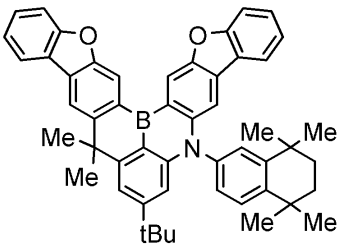
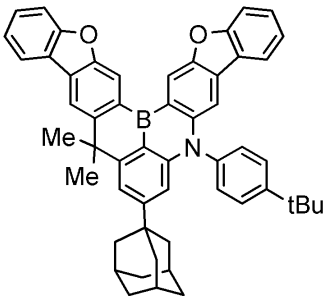
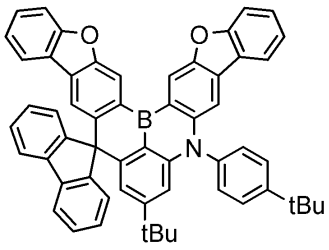
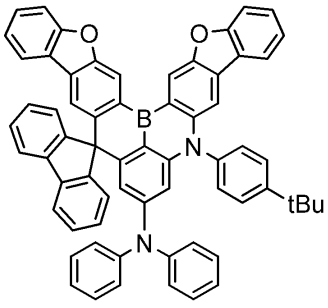
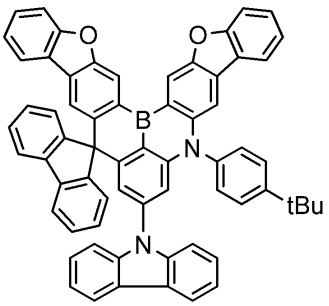
【０４７６】

【化３１９】



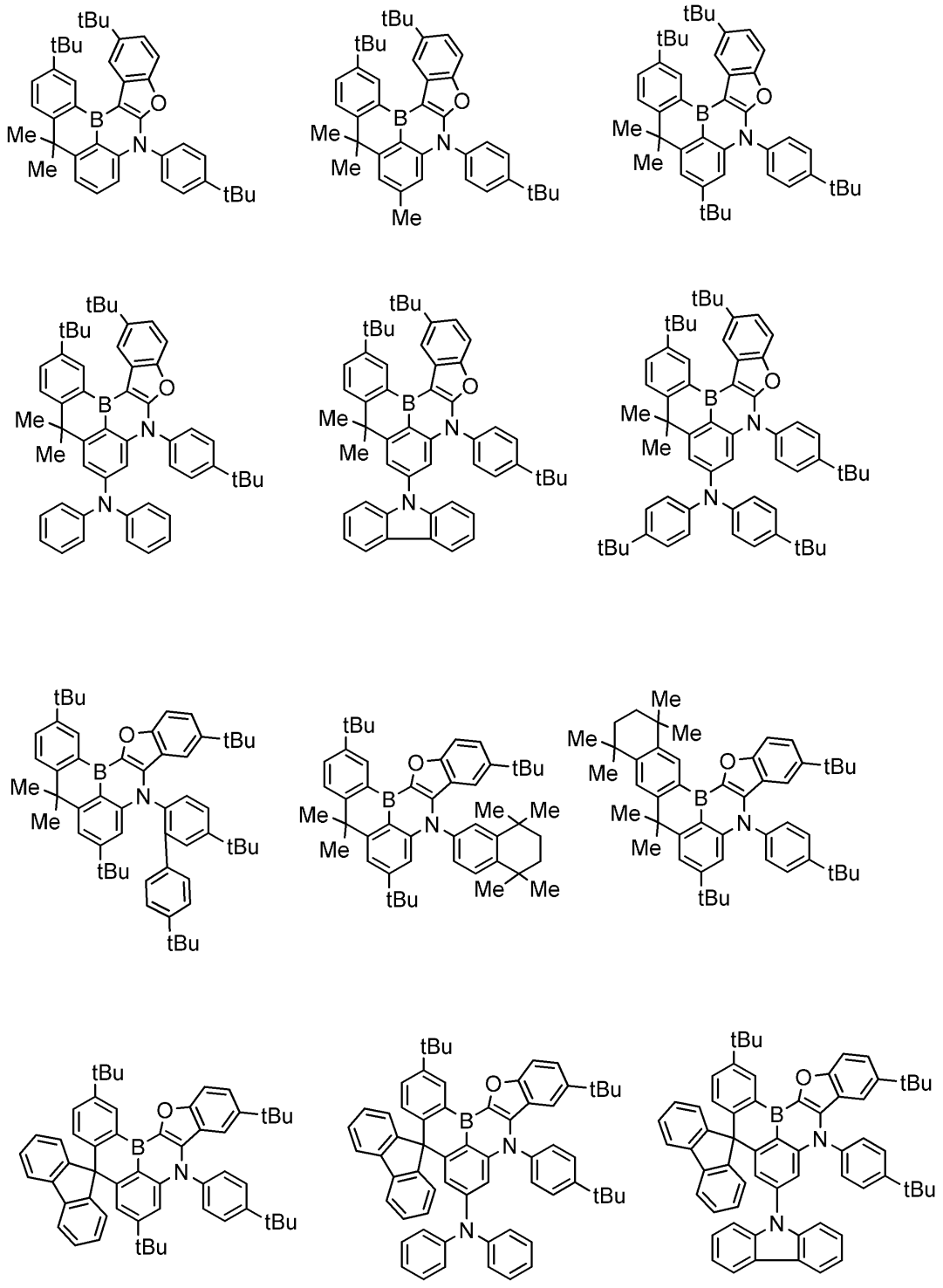
【０４７７】

【化３２０】

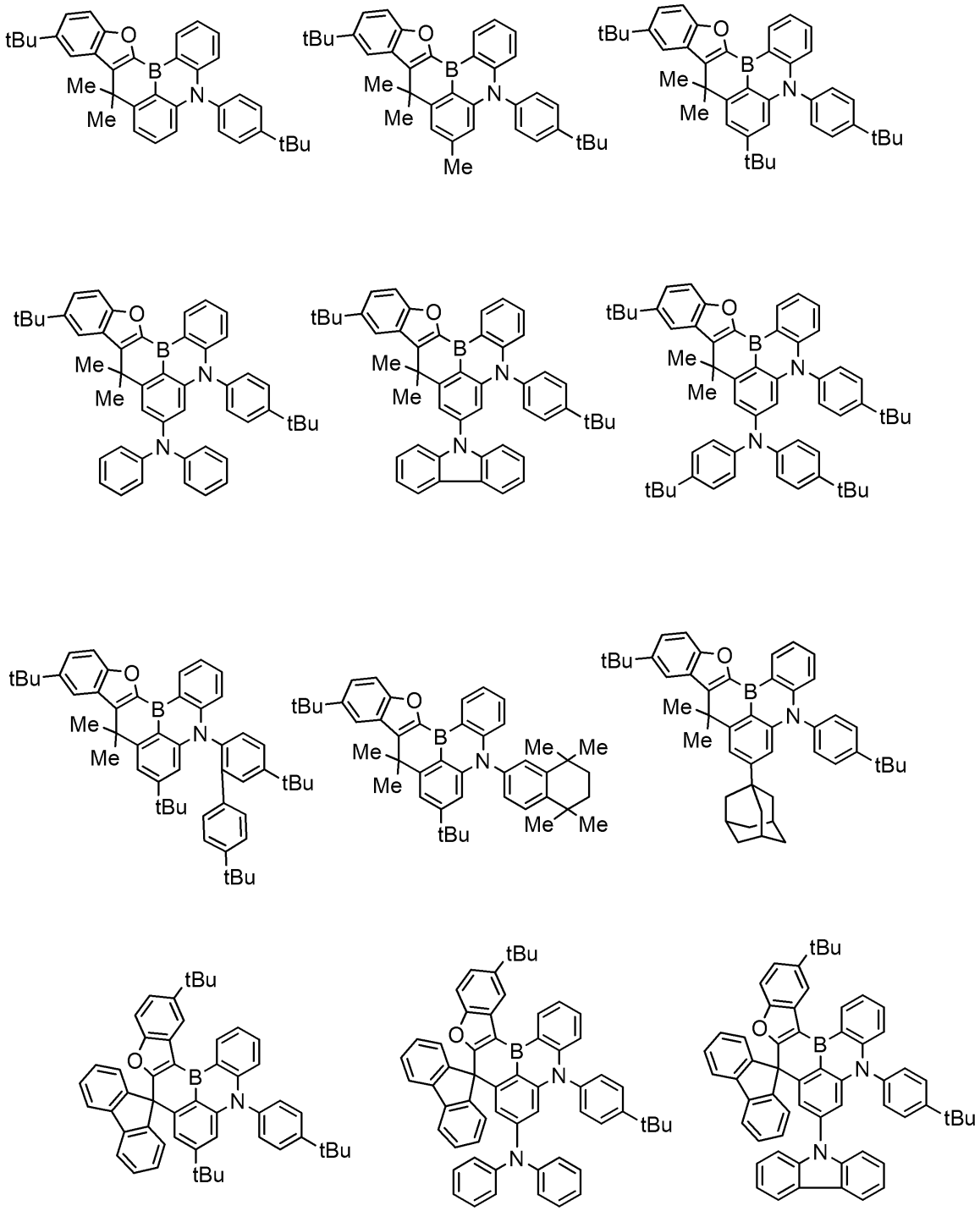
【０４７８】

【化３２１】



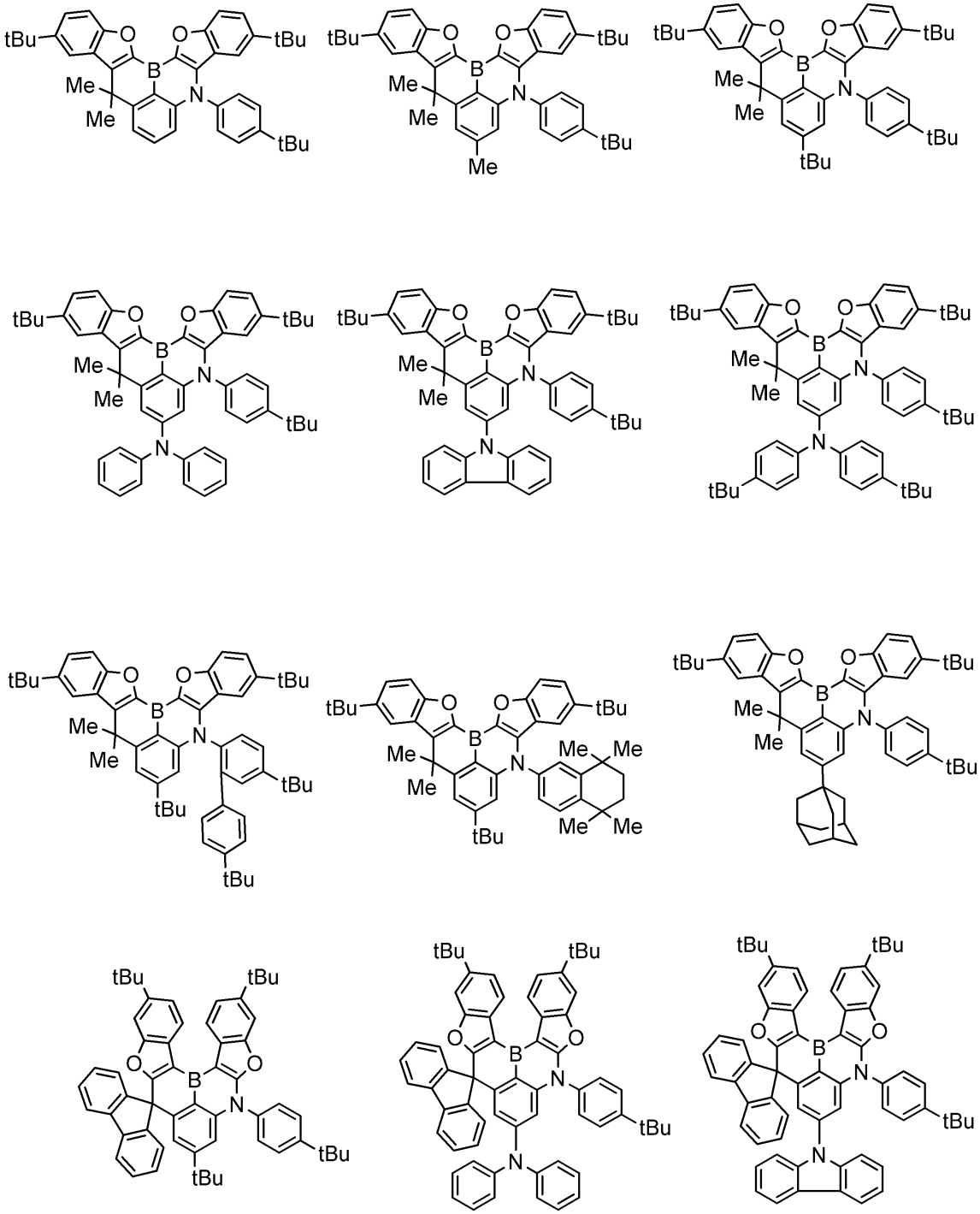
【０４７９】

【化３２２】



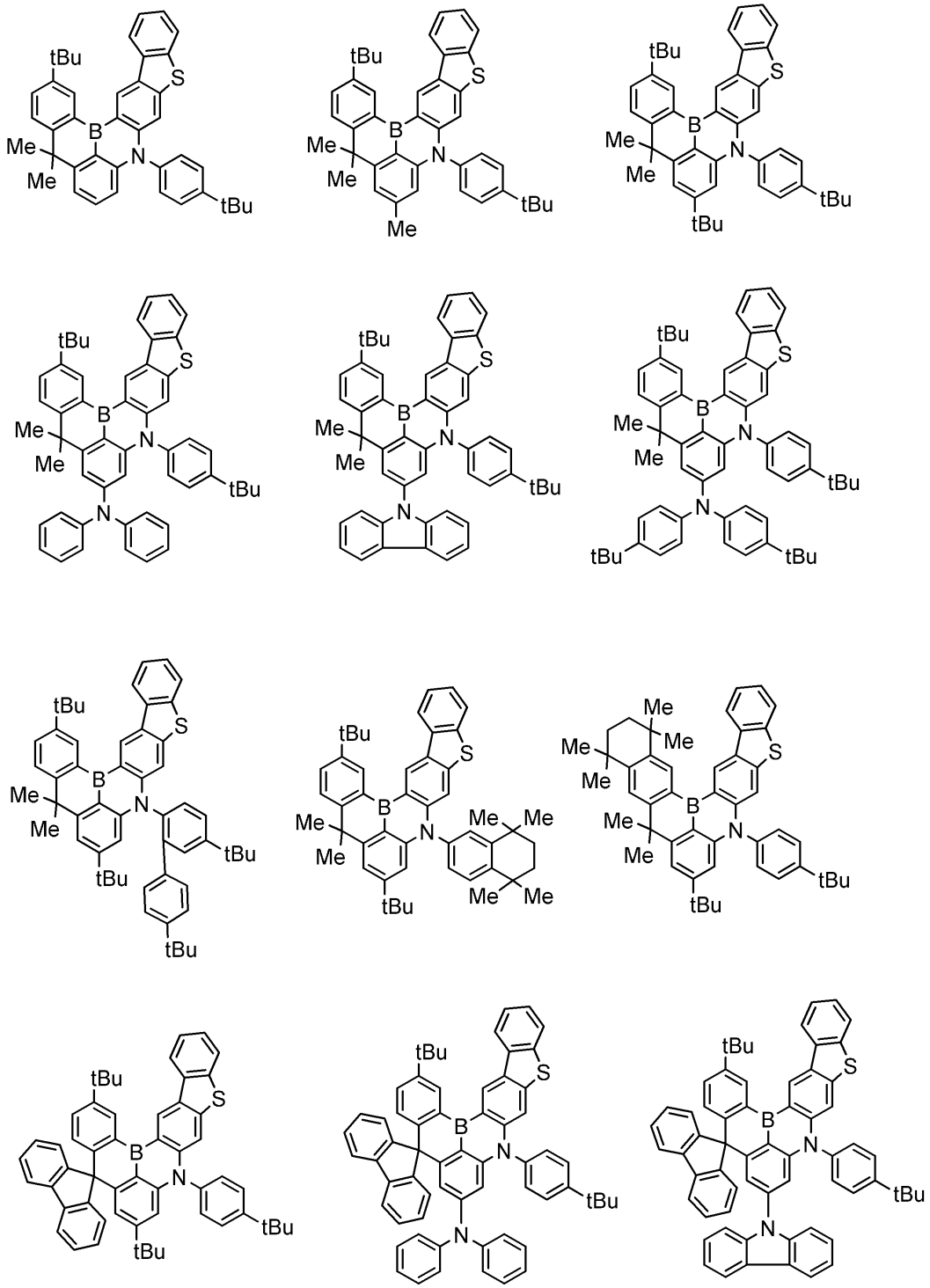
【０４８０】

【化３２３】



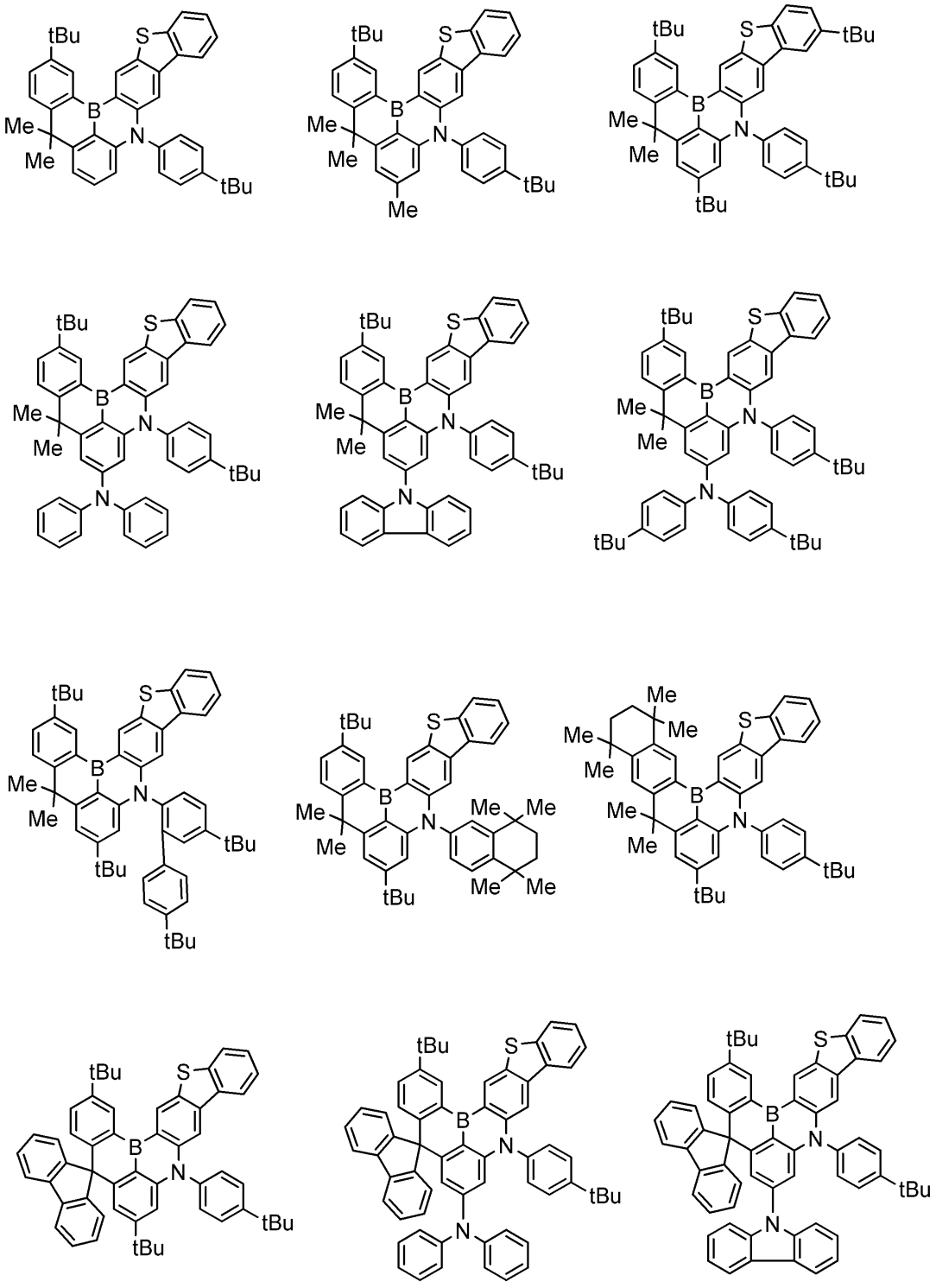
【０４８１】

【化３２４】



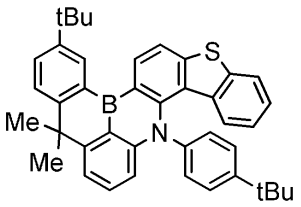
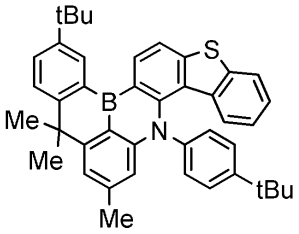
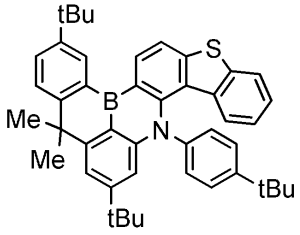
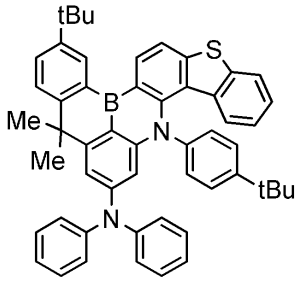
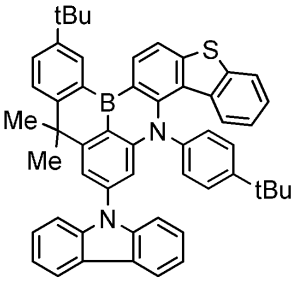
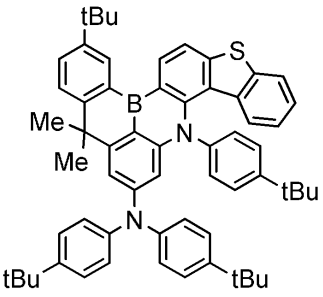
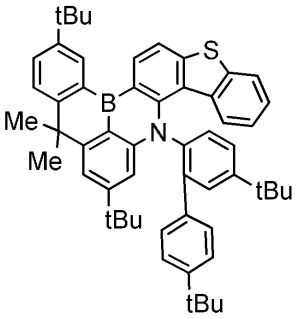
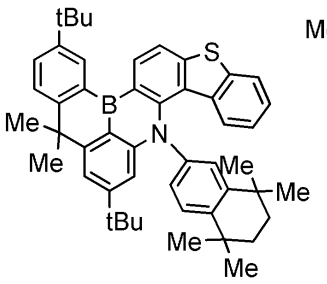
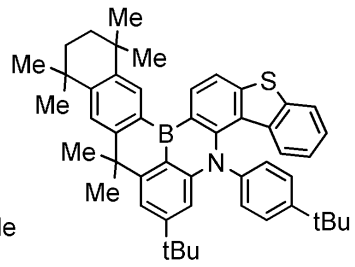
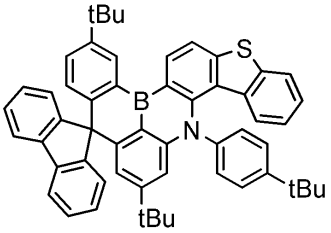
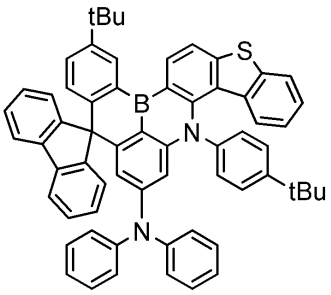
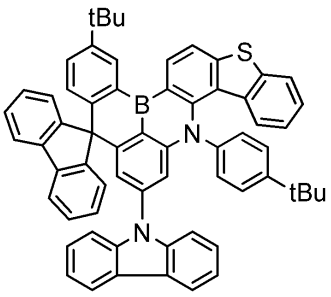
【０４８２】

【化３２５】



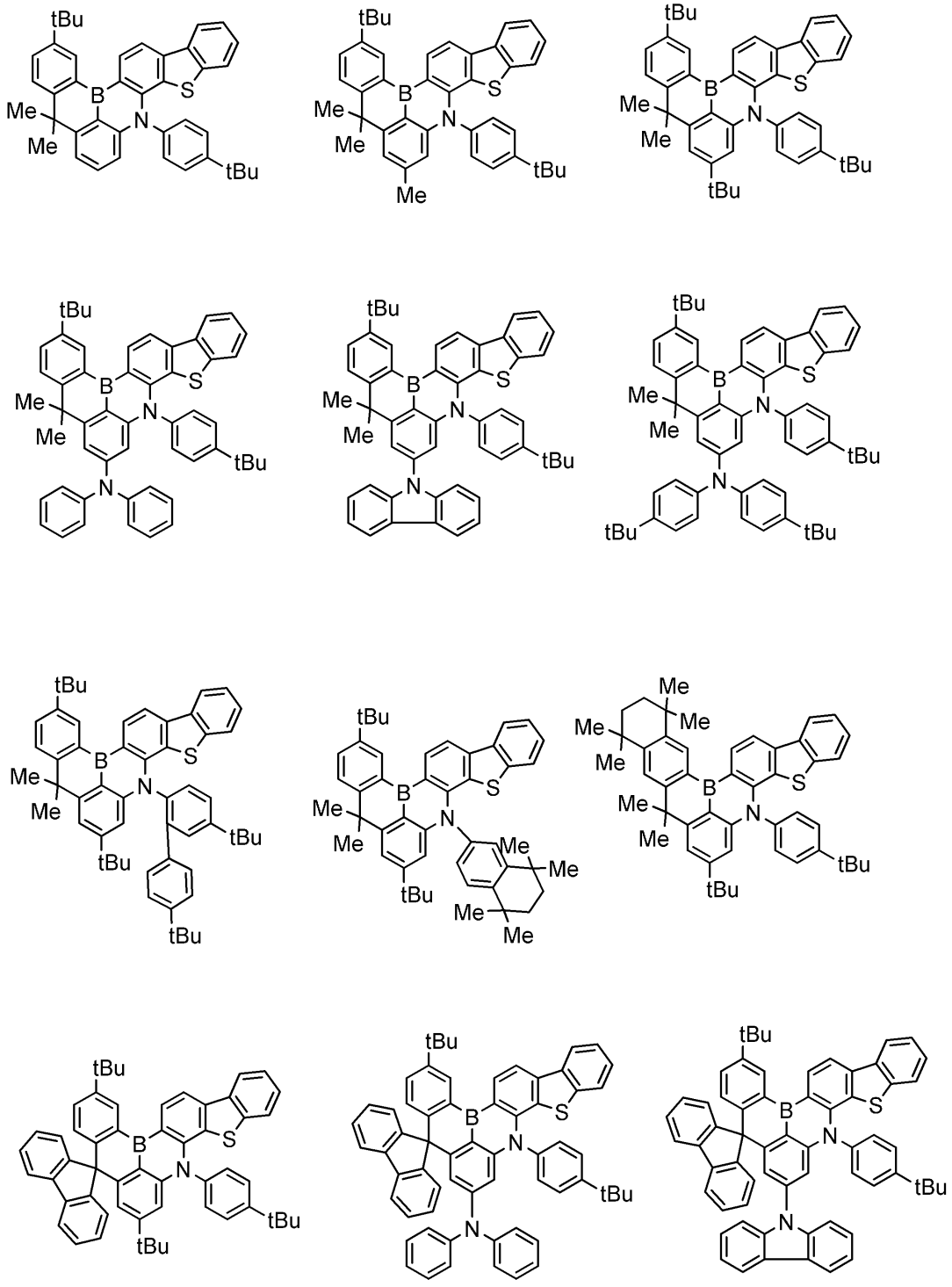
【０４８３】

【化３２６】

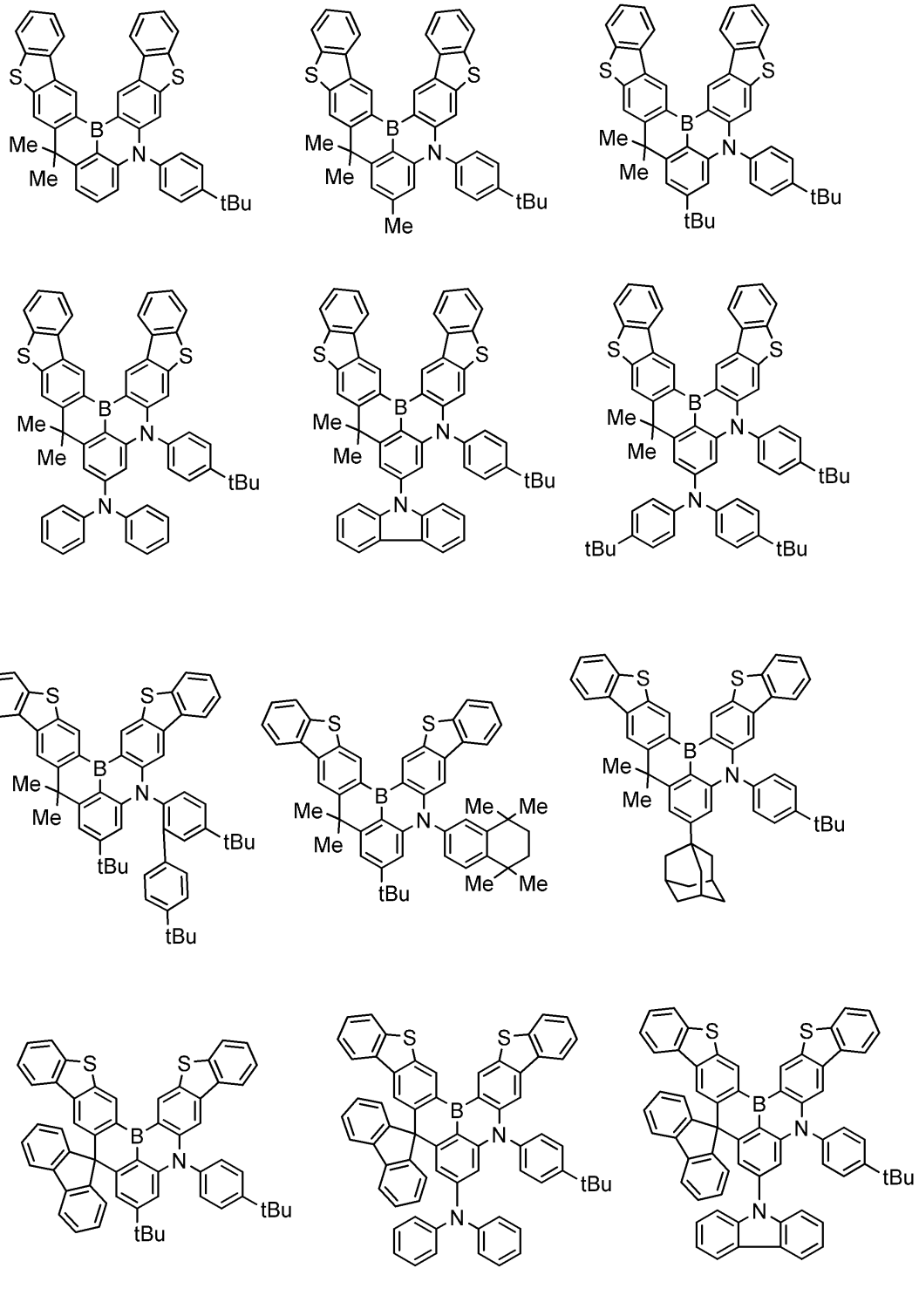
【０４８４】

【化３２７】



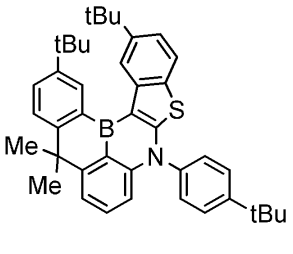
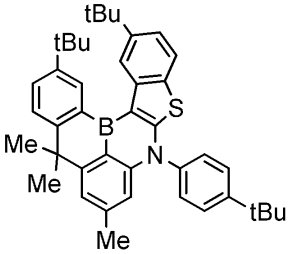
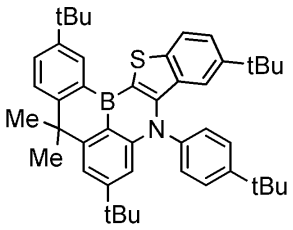
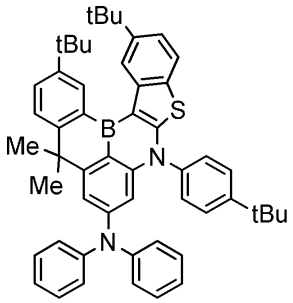
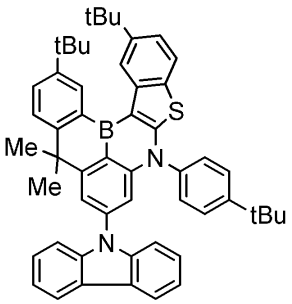
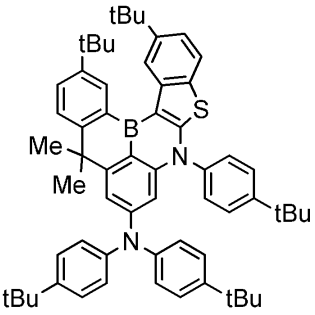
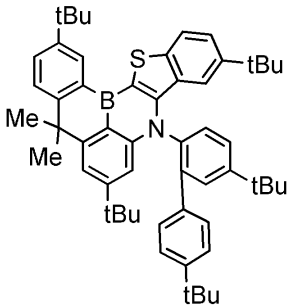
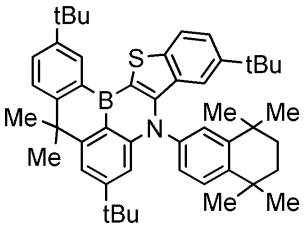
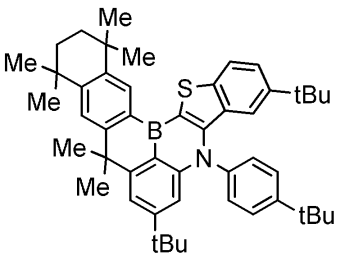
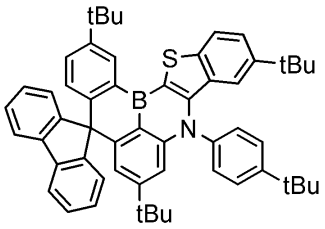
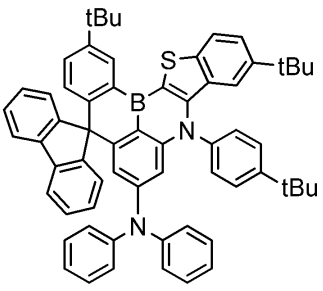
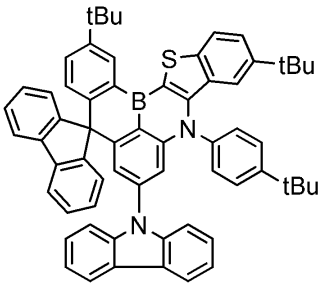
【０４８５】

【化３２８】



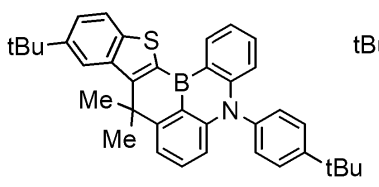
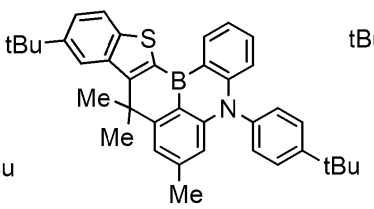
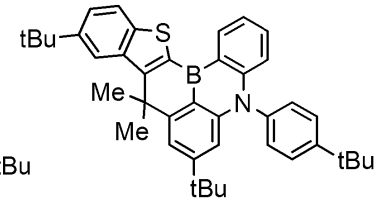
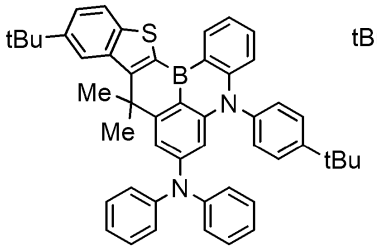
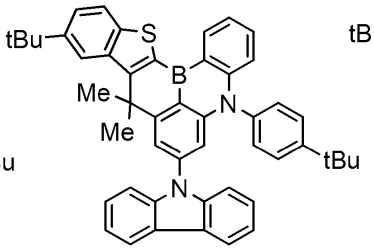
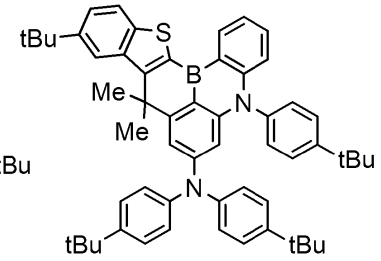
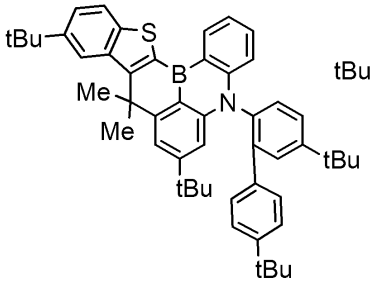
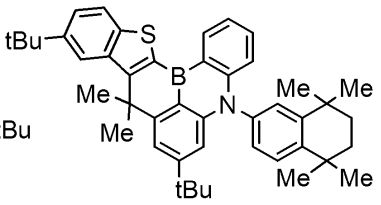
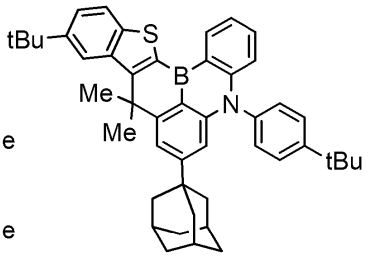
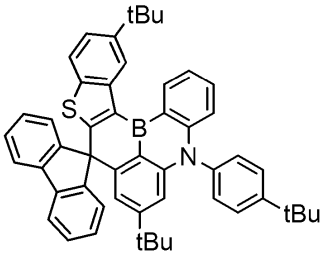
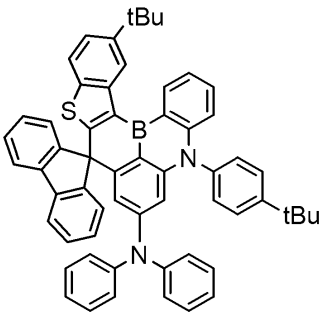
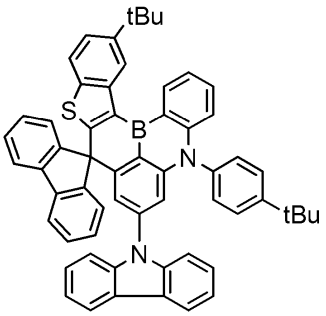
【０４８６】

【化３２９】

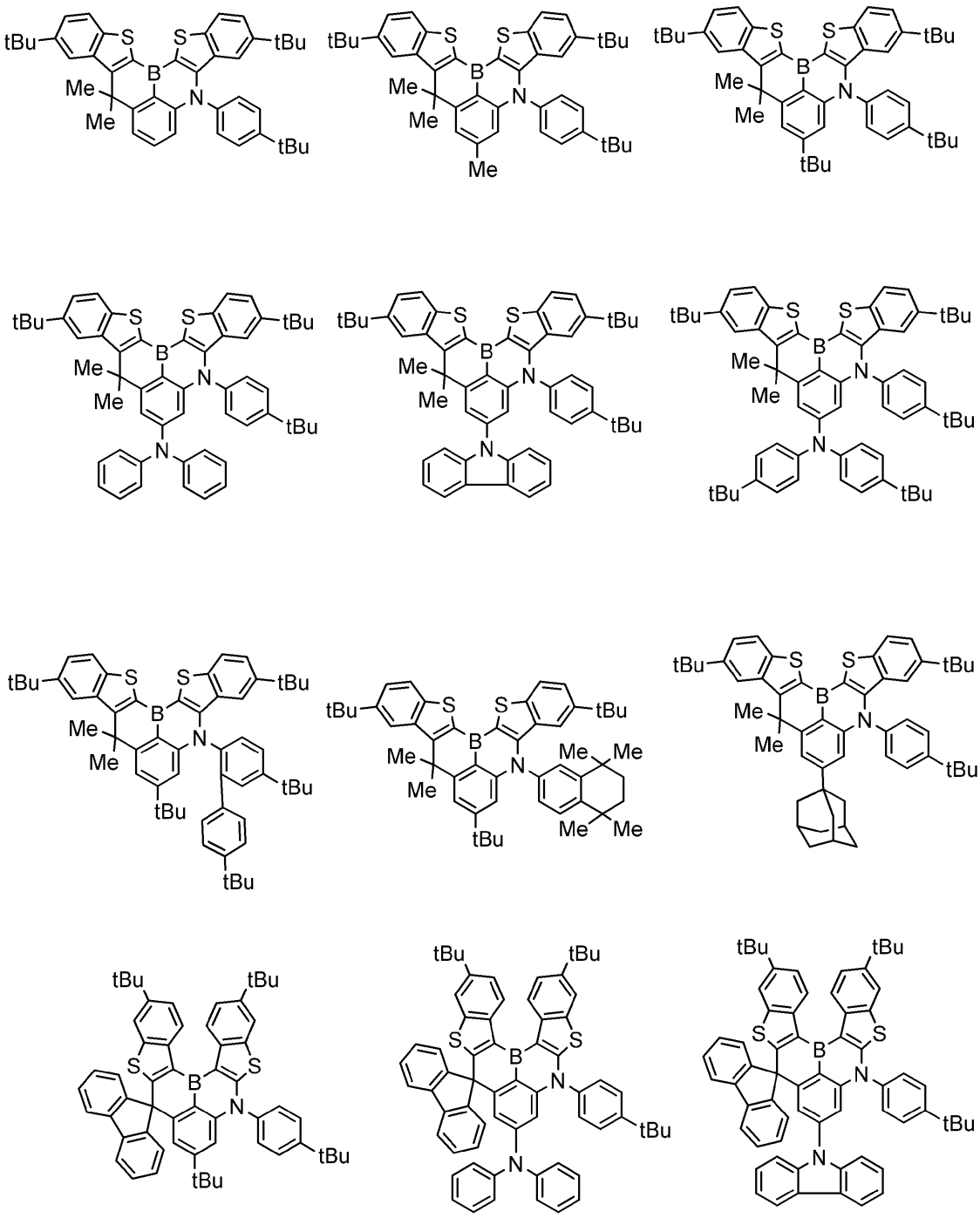
【０４８７】

【化３３０】

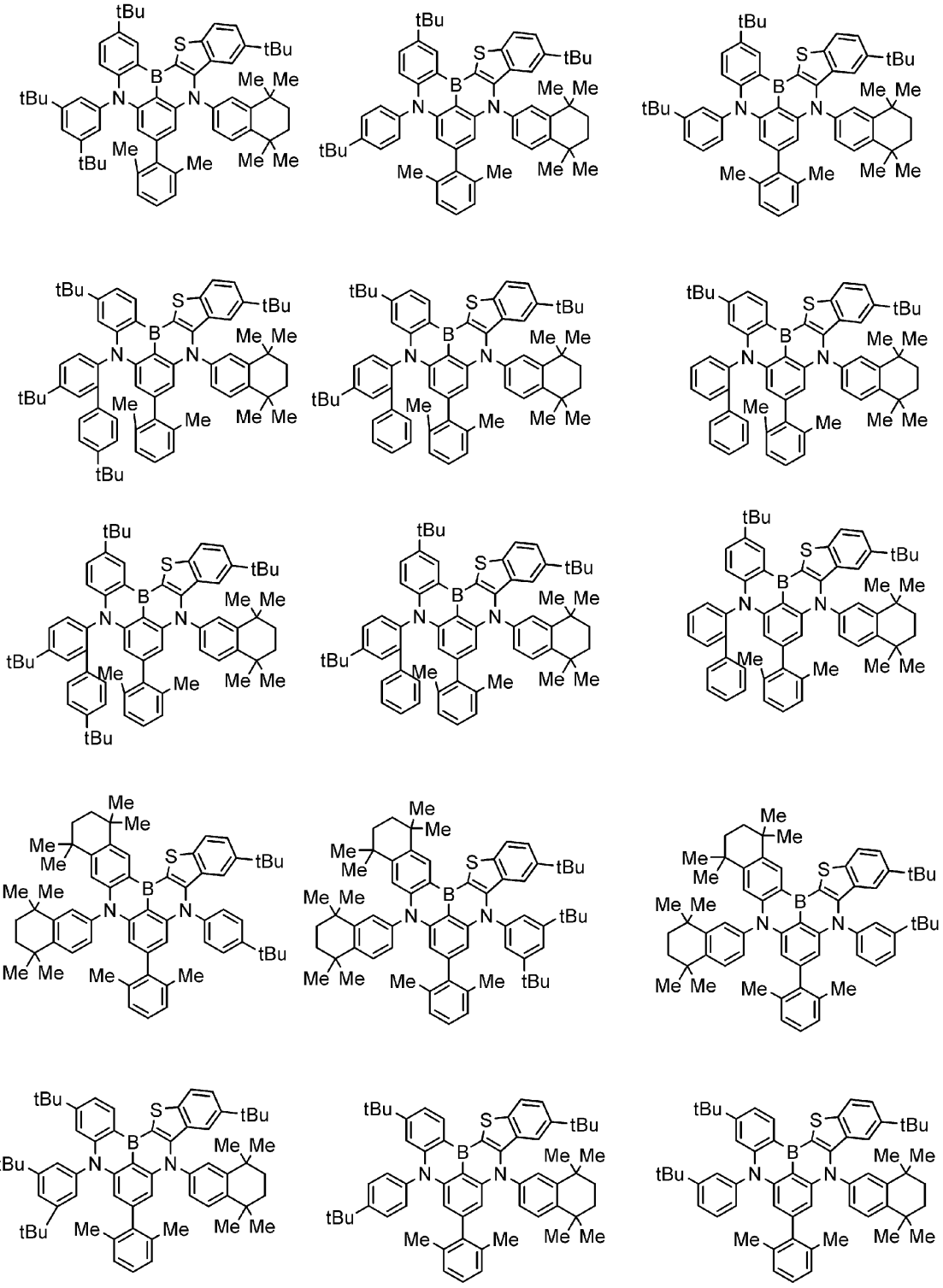
【０４８８】

【化３３１】



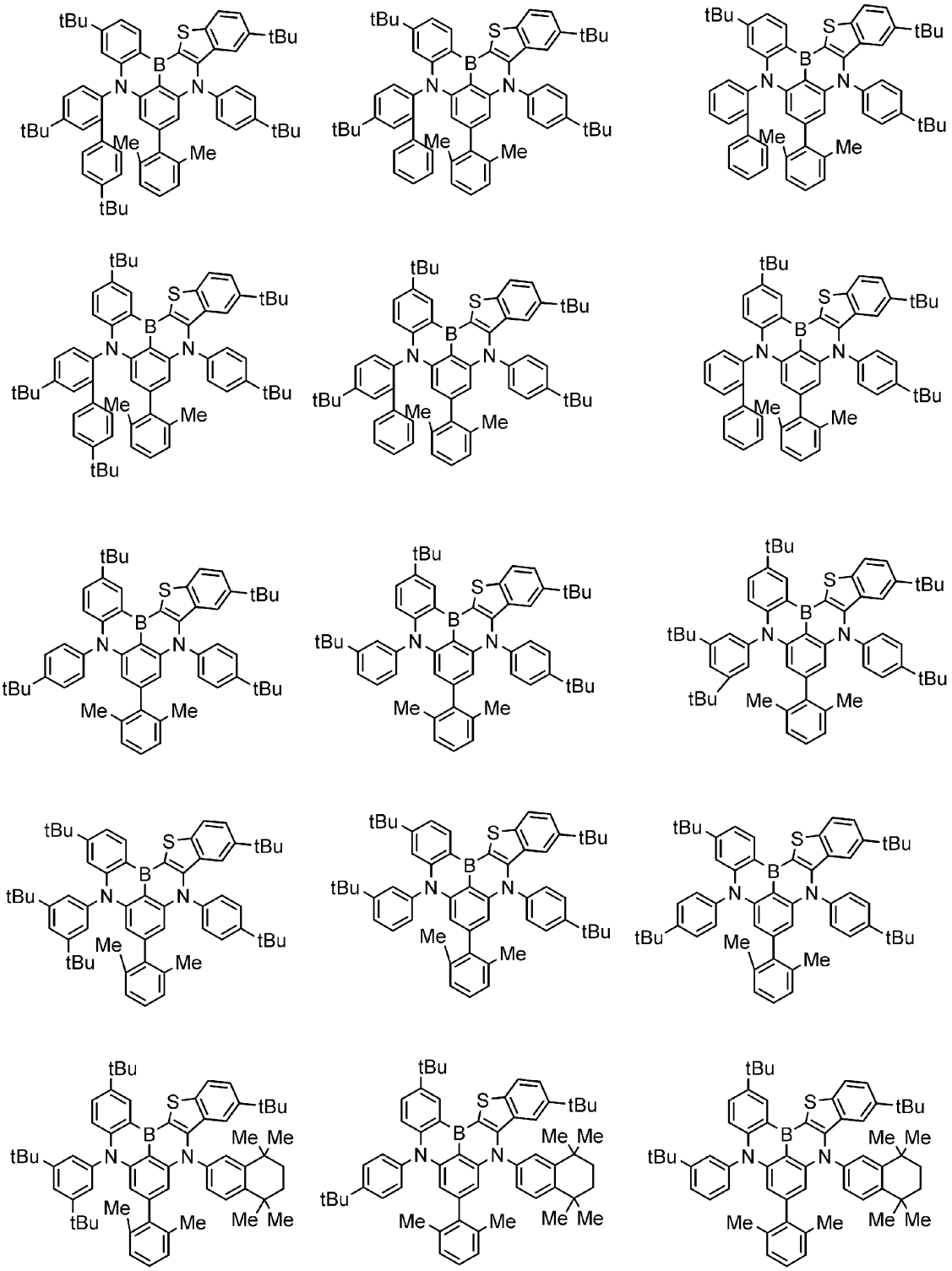
【０４８９】

【化３３２】



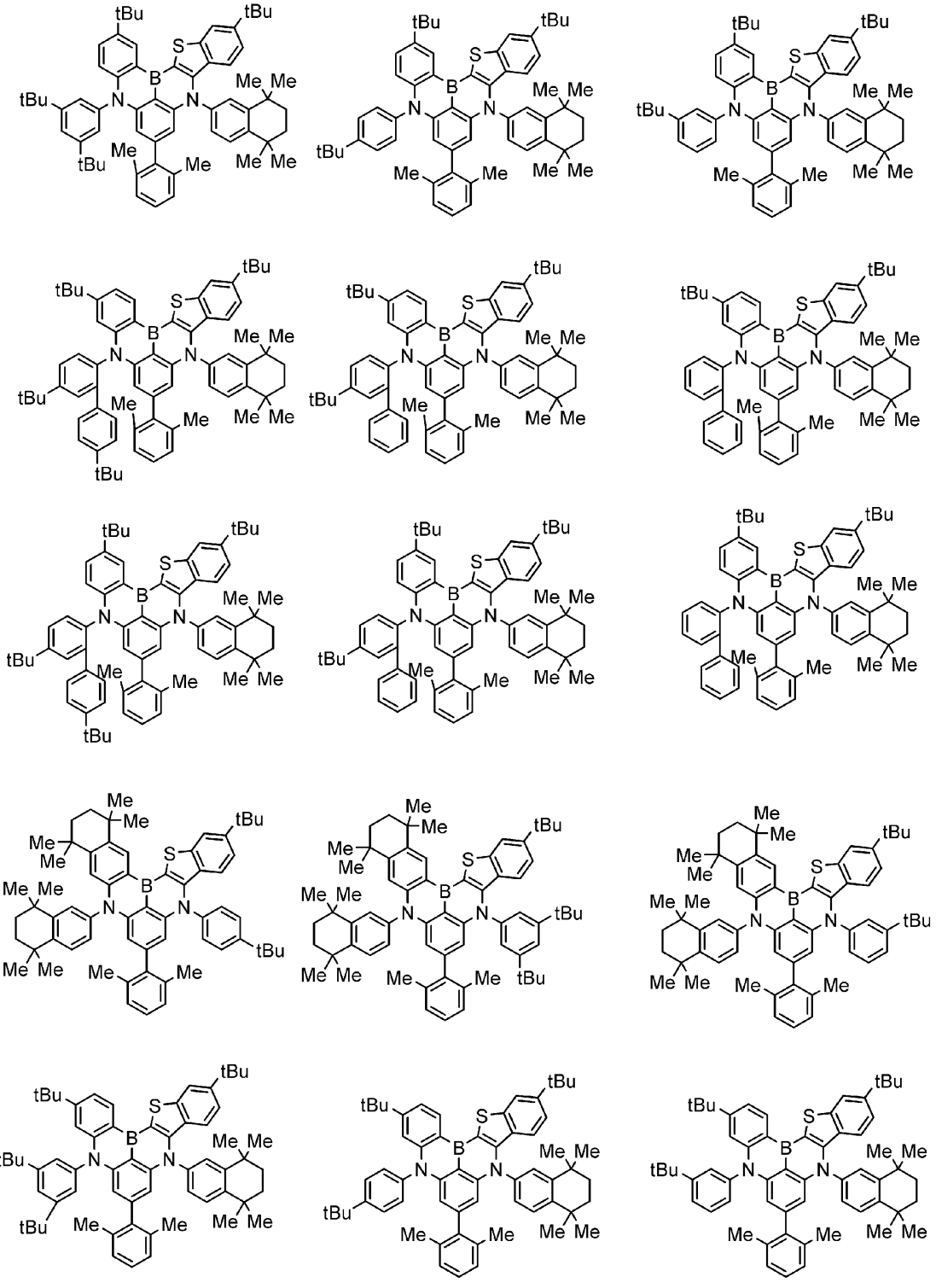
【０４９０】

【化３３３】



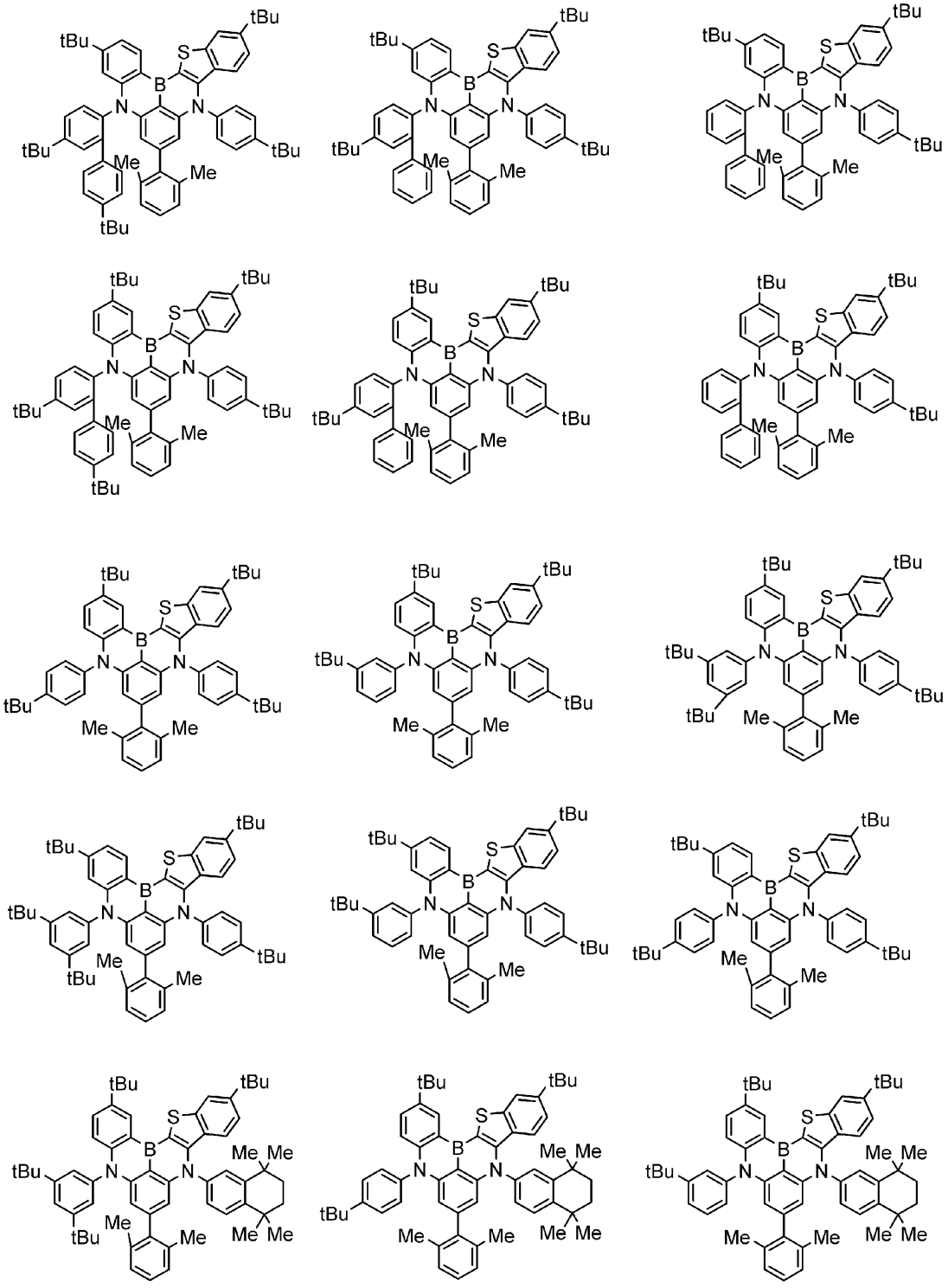
【０４９１】

【化３３４】



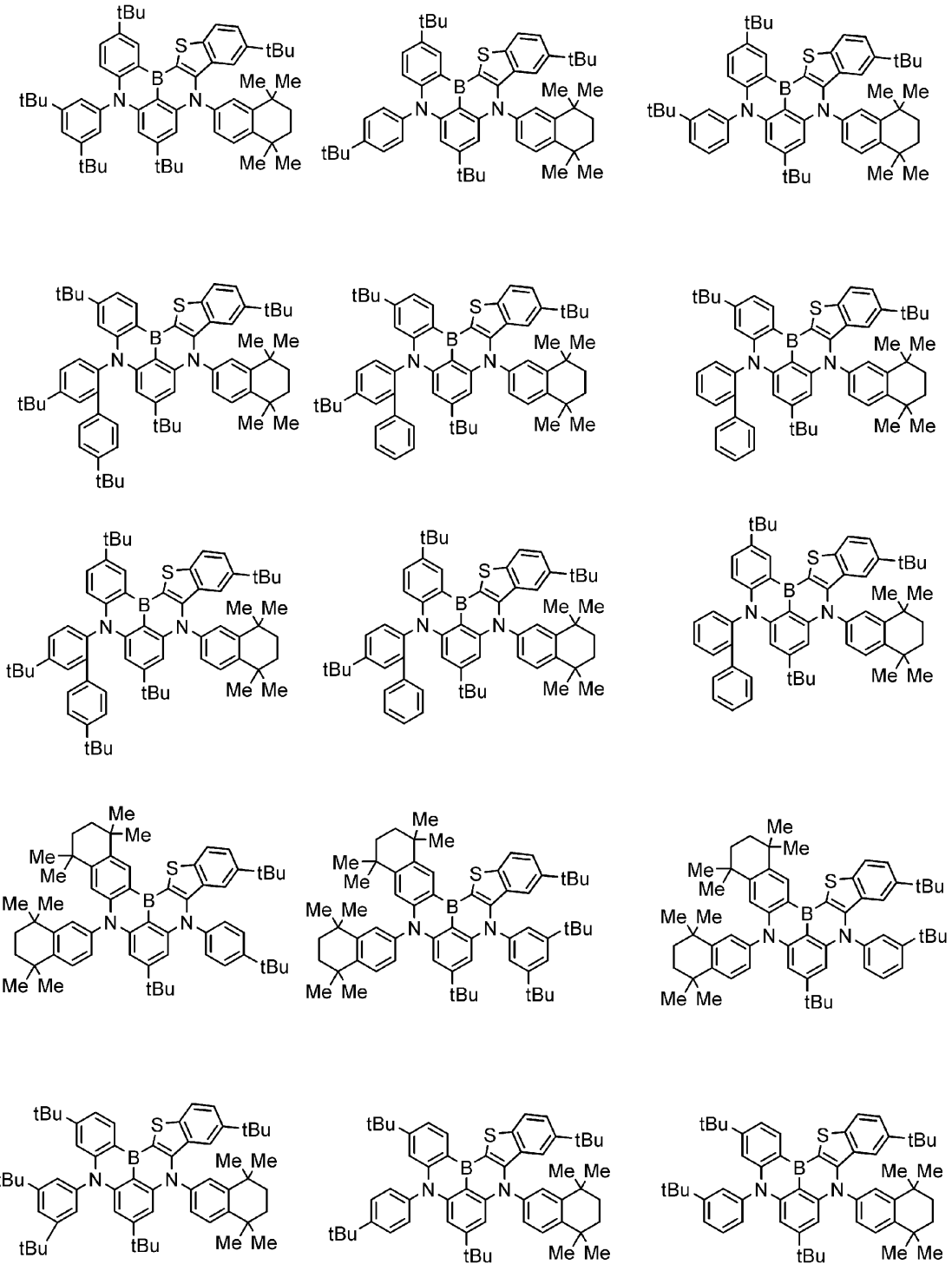
【０４９２】

【化３３５】



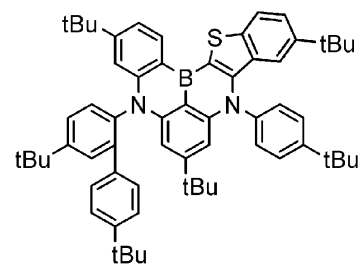
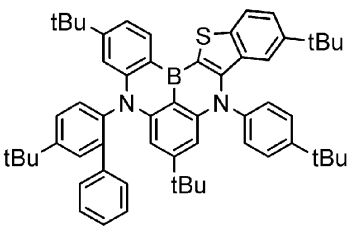
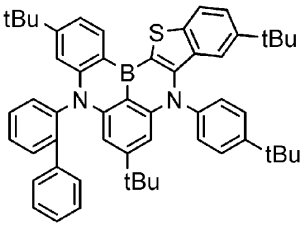
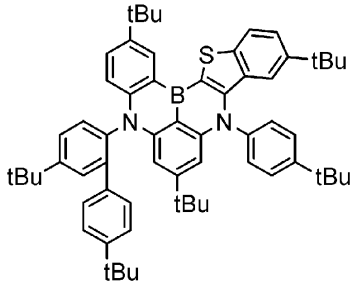
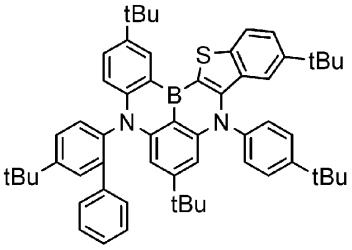
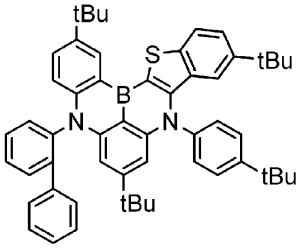
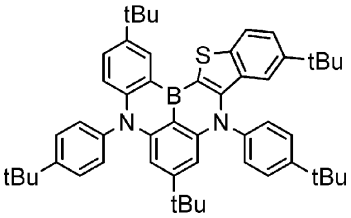
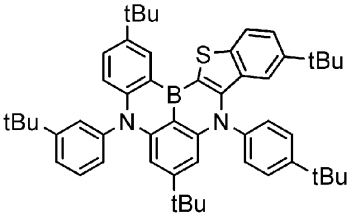
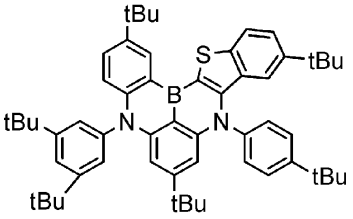
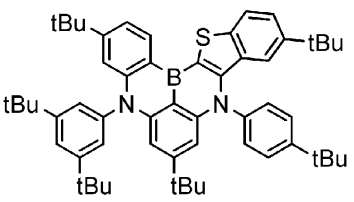
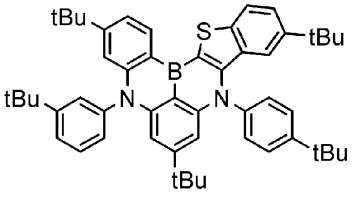
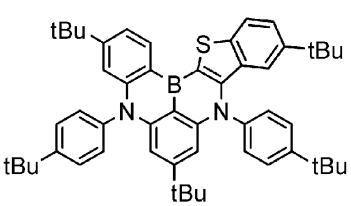
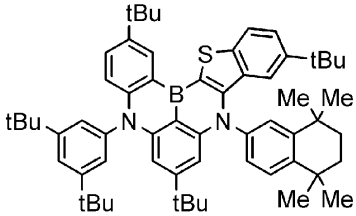
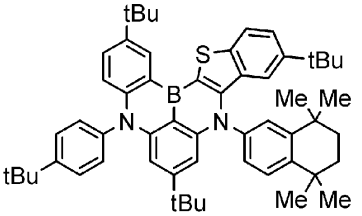
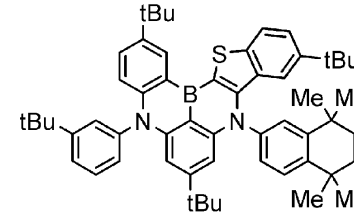
【０４９３】

【化３３６】



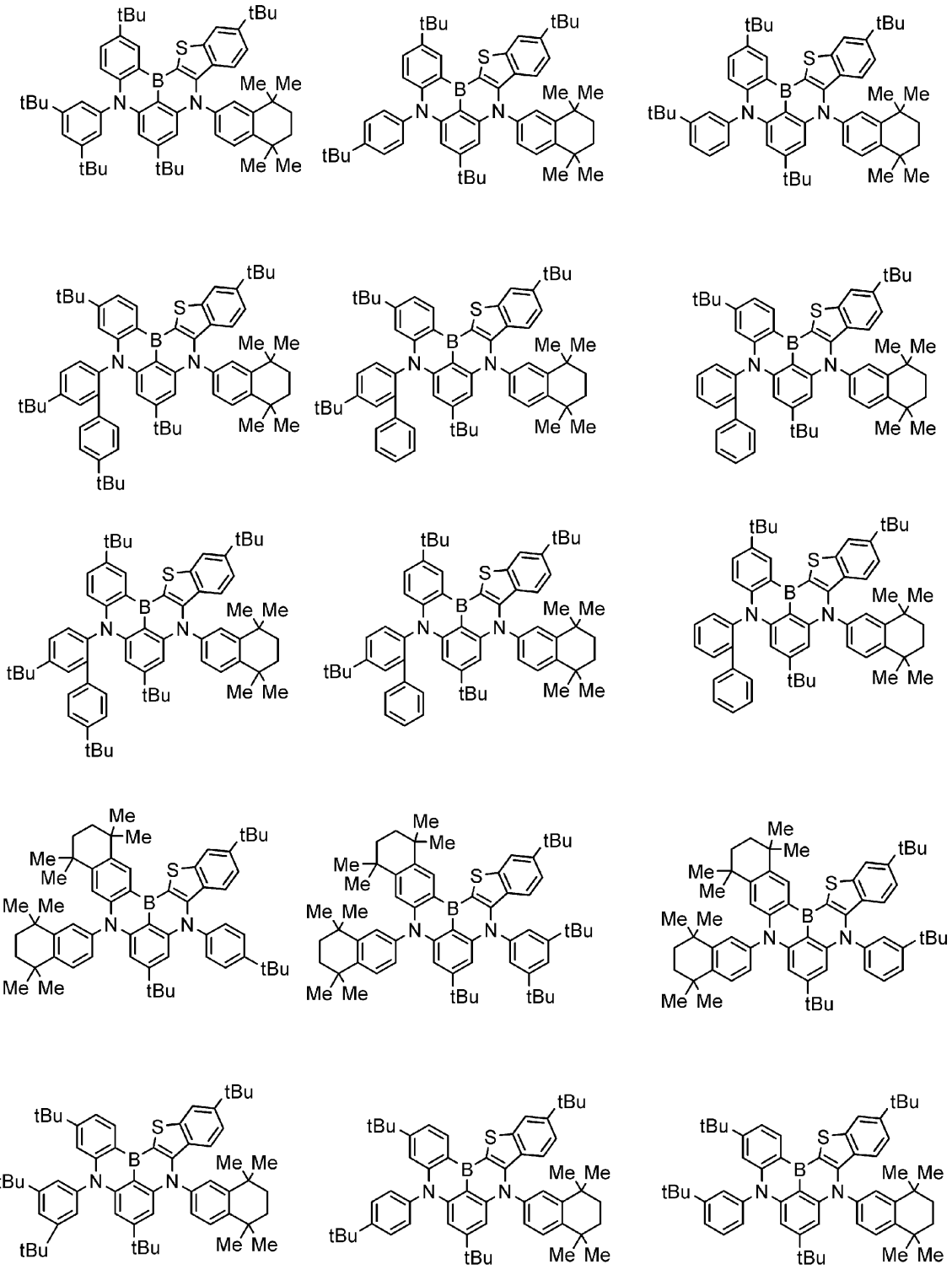
【０４９４】

【化３３７】

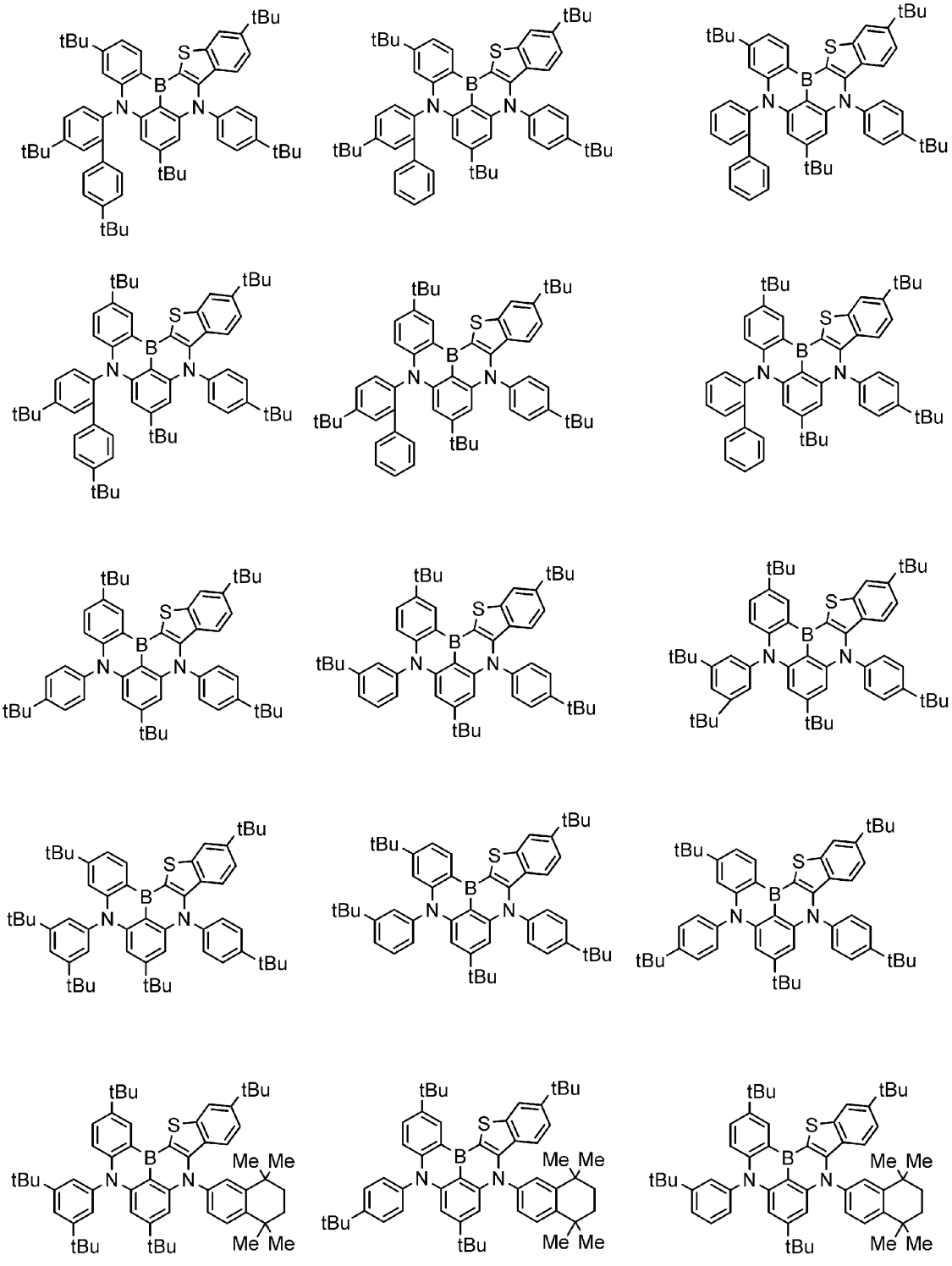
【０４９５】

【化３３８】



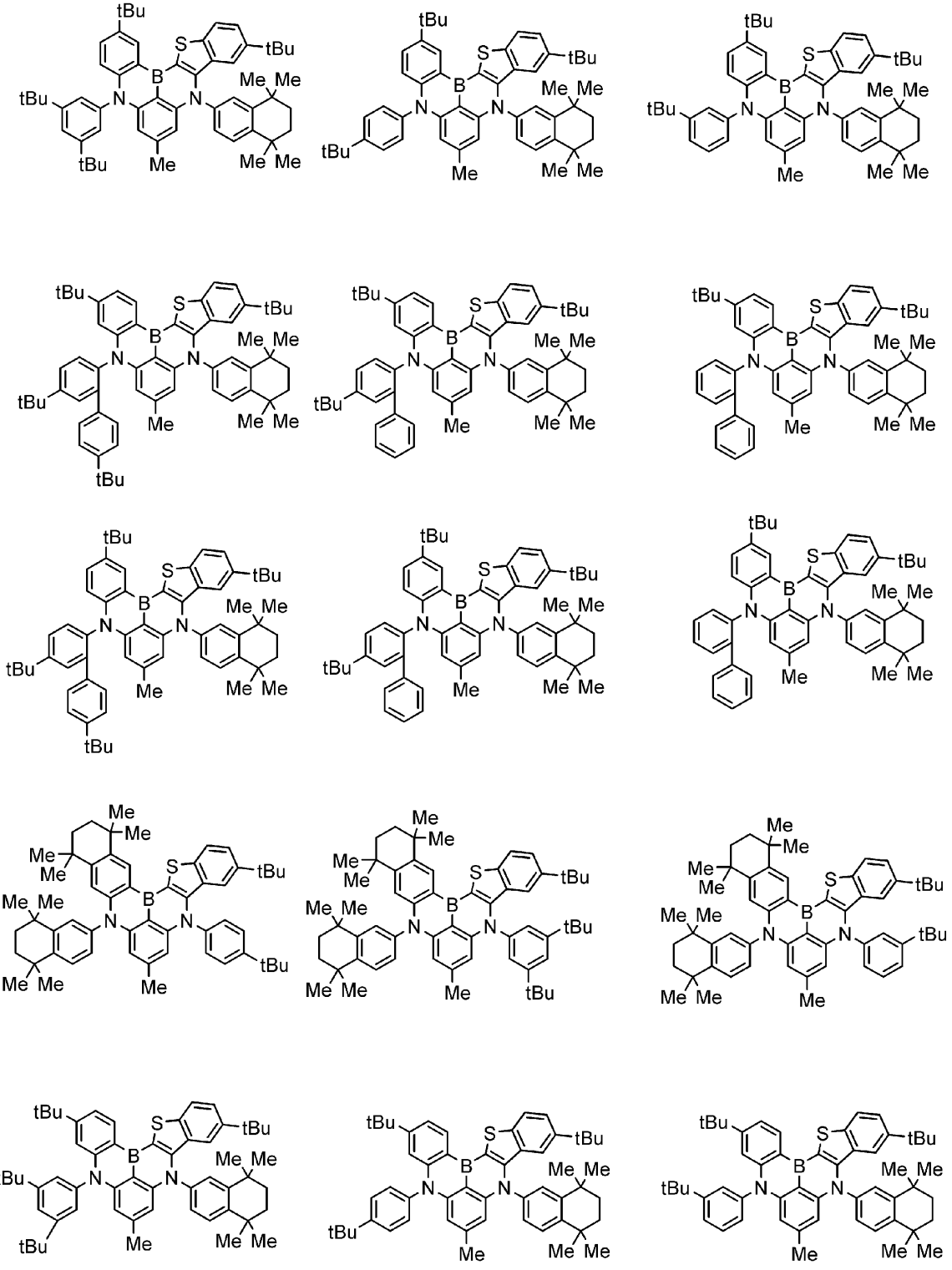
【０４９６】

【化３３９】



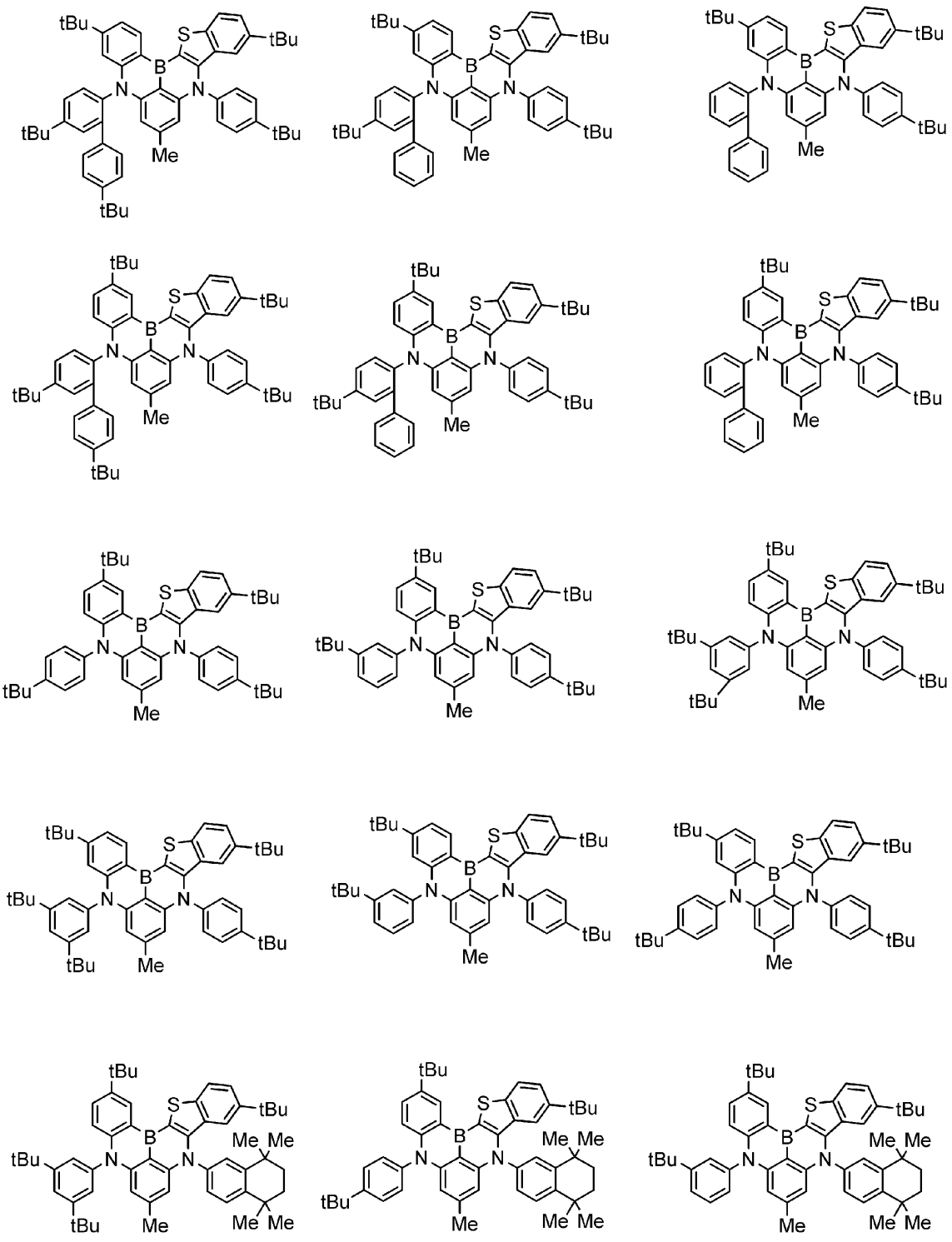
【０４９７】

【化３４０】



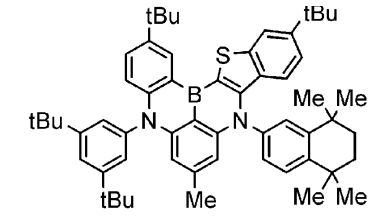
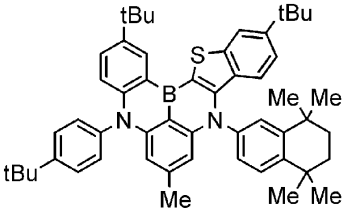
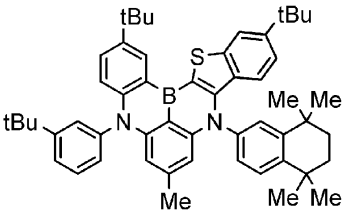
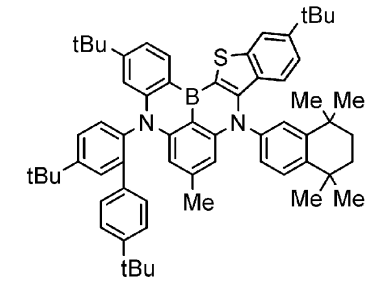
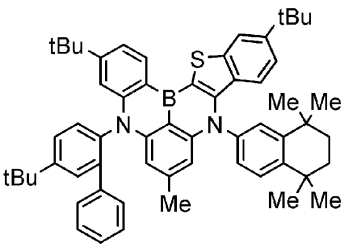
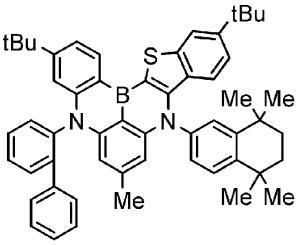
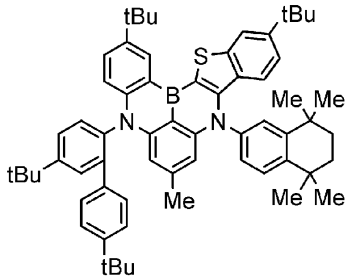
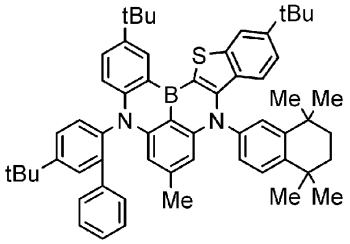
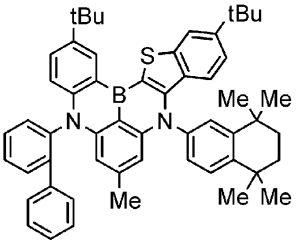
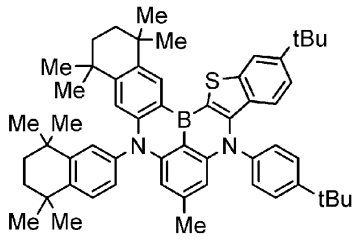
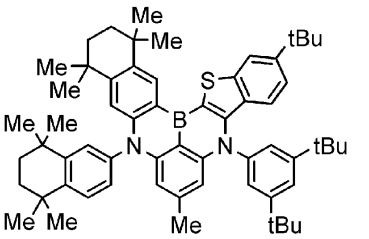
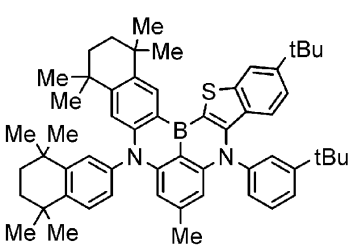
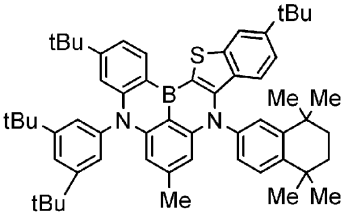
【０４９８】

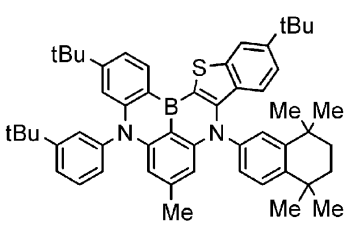
【化３４１】



【０４９９】

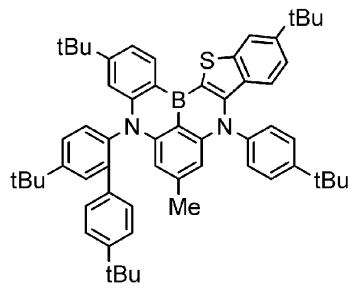
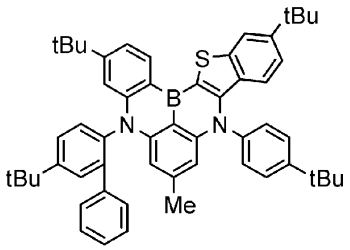
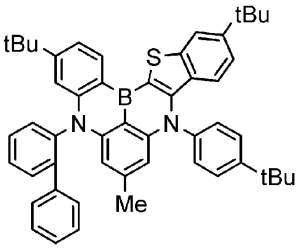
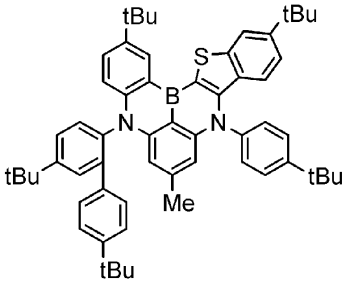
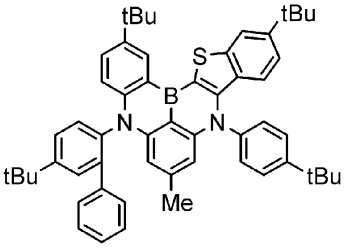
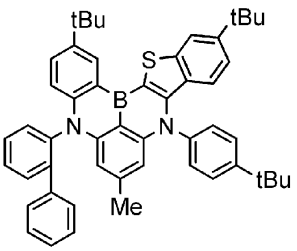
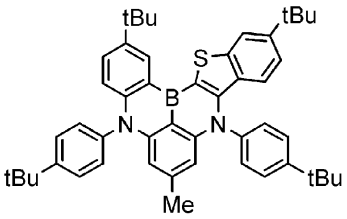
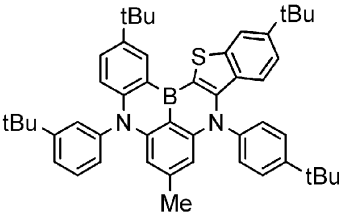
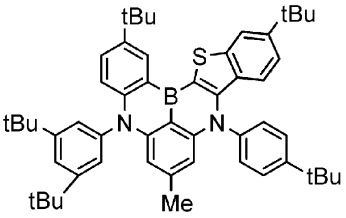
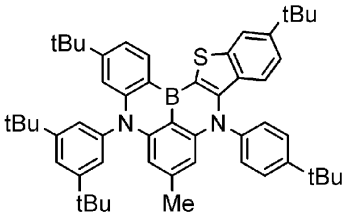
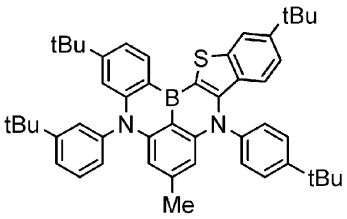
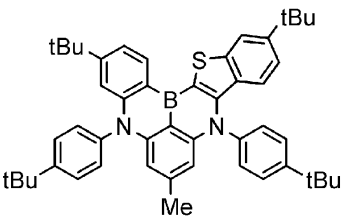
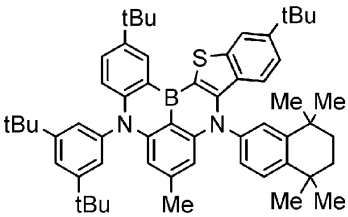
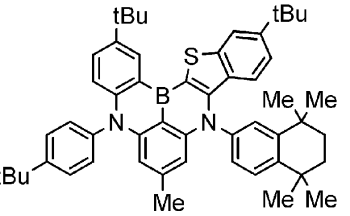
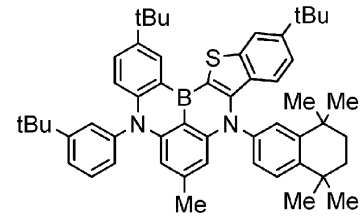
【化３４２】



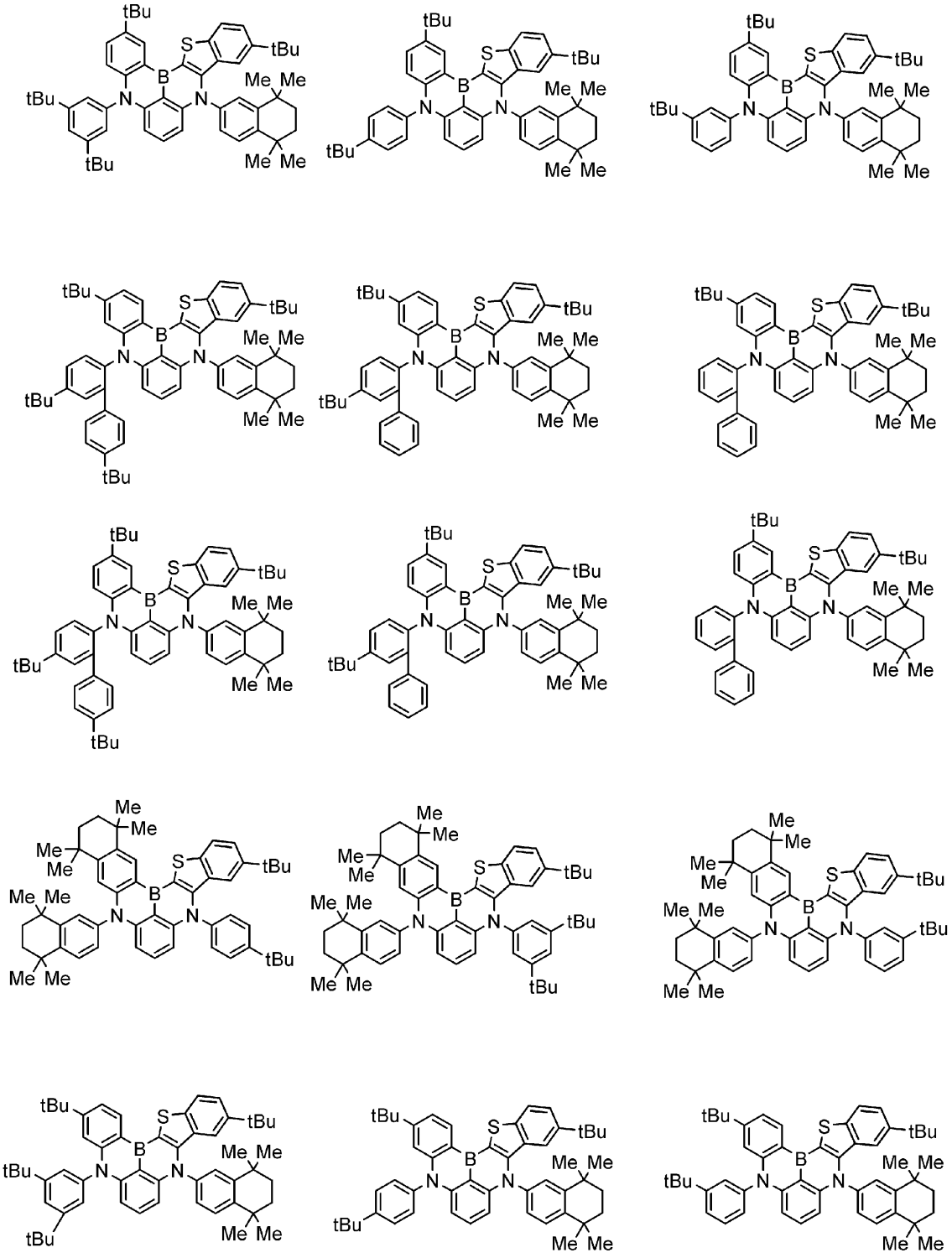
【０５００】

【化３４３】

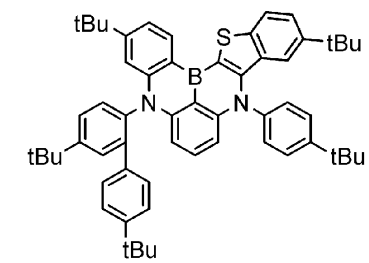
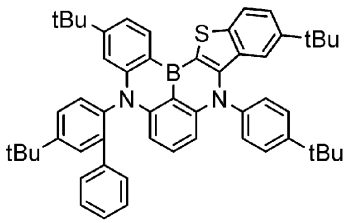
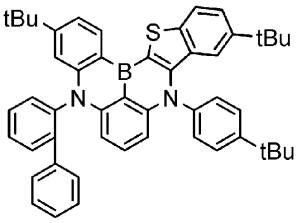
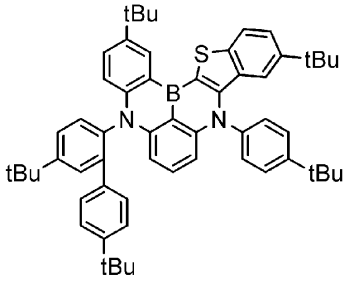
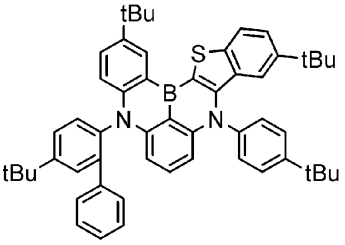
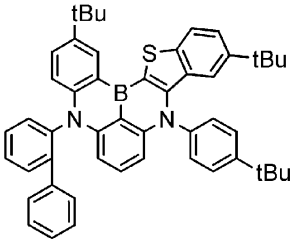
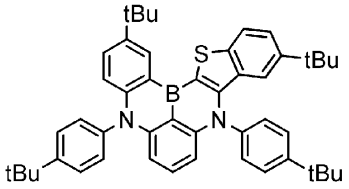
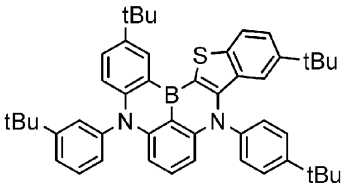
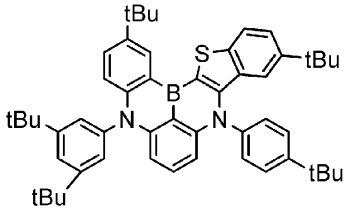
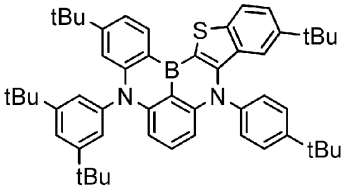
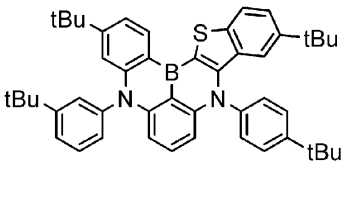
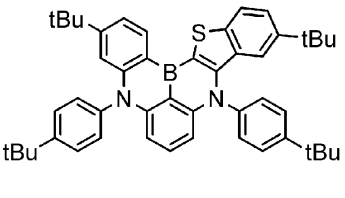
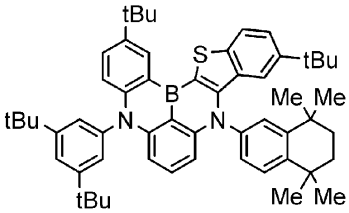
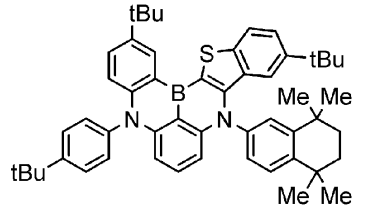
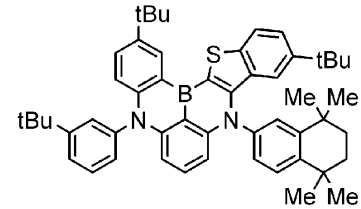
【０５０１】

【化３４４】



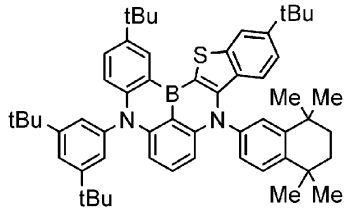
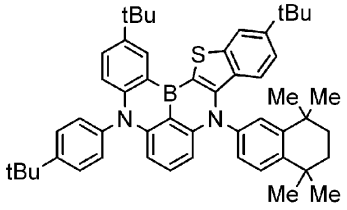
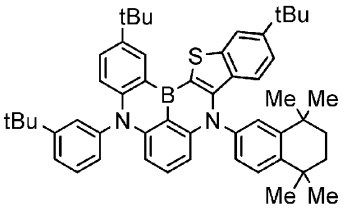
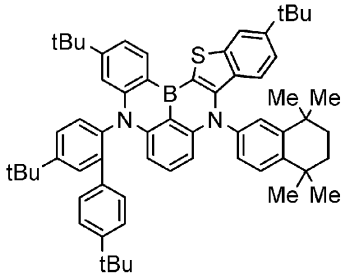
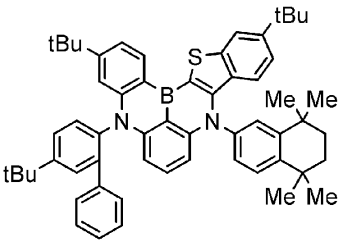
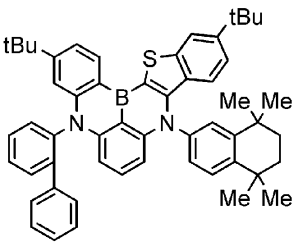
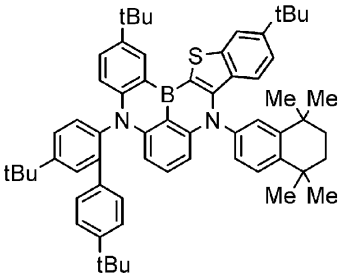
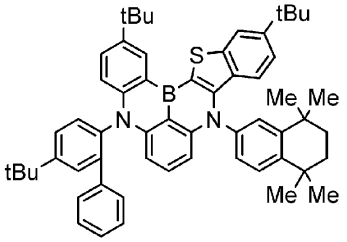
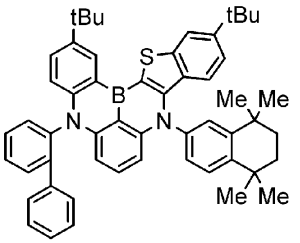
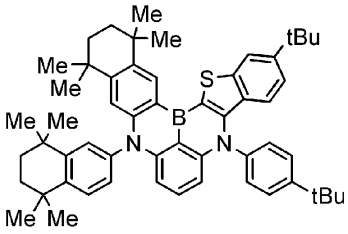
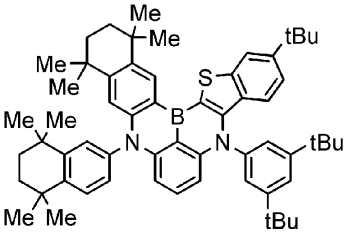
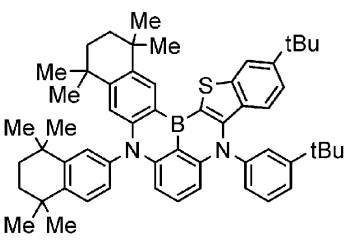
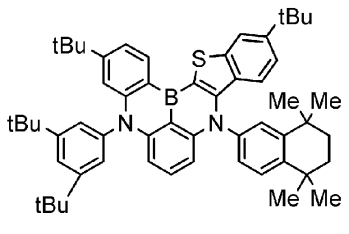
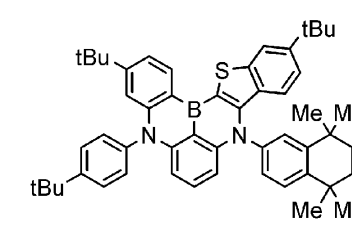
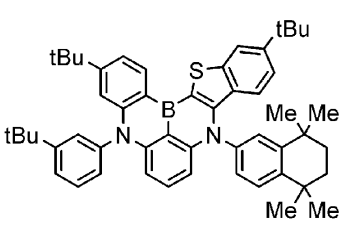
【０５０２】

【化３４５】

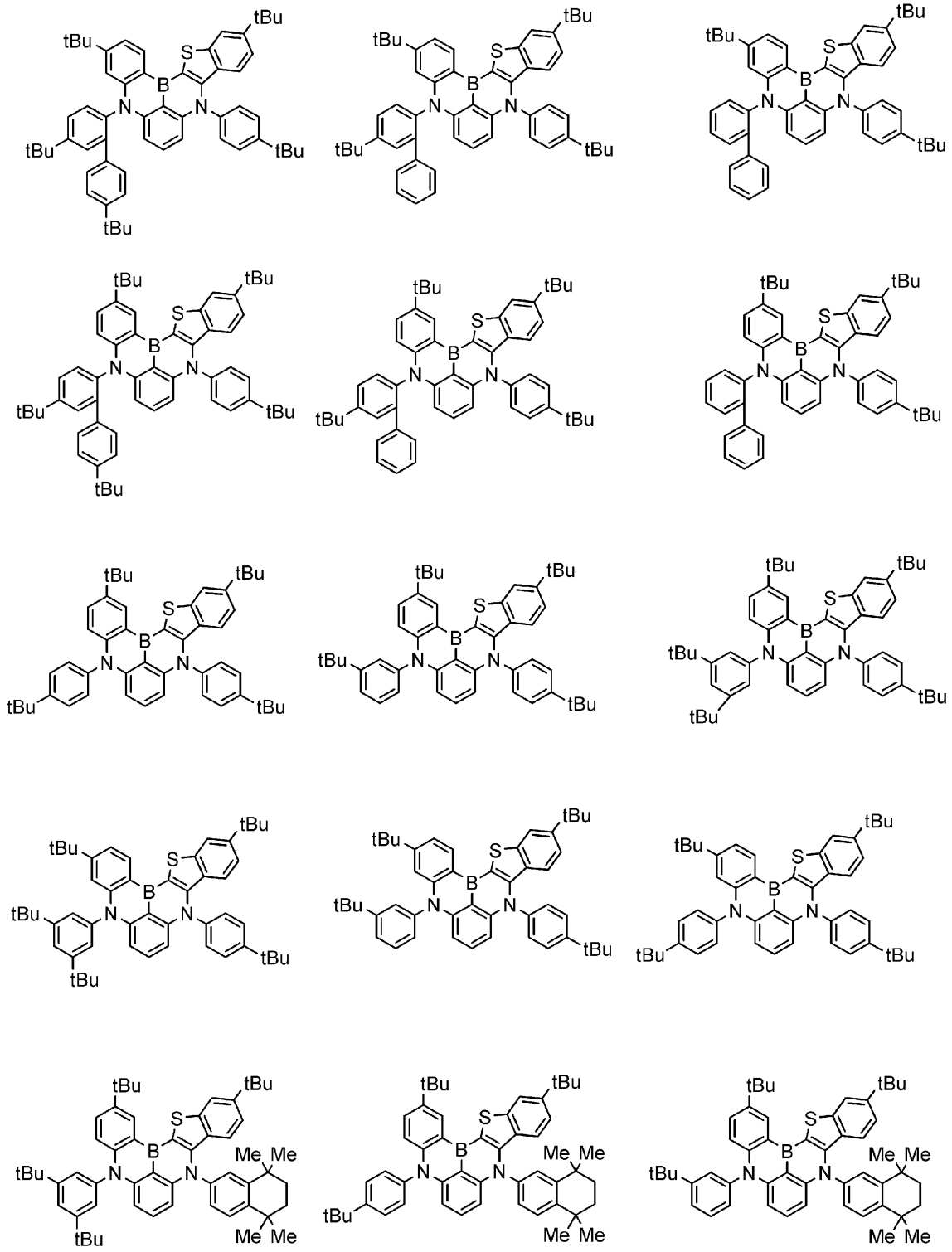
【０５０３】

【化３４６】

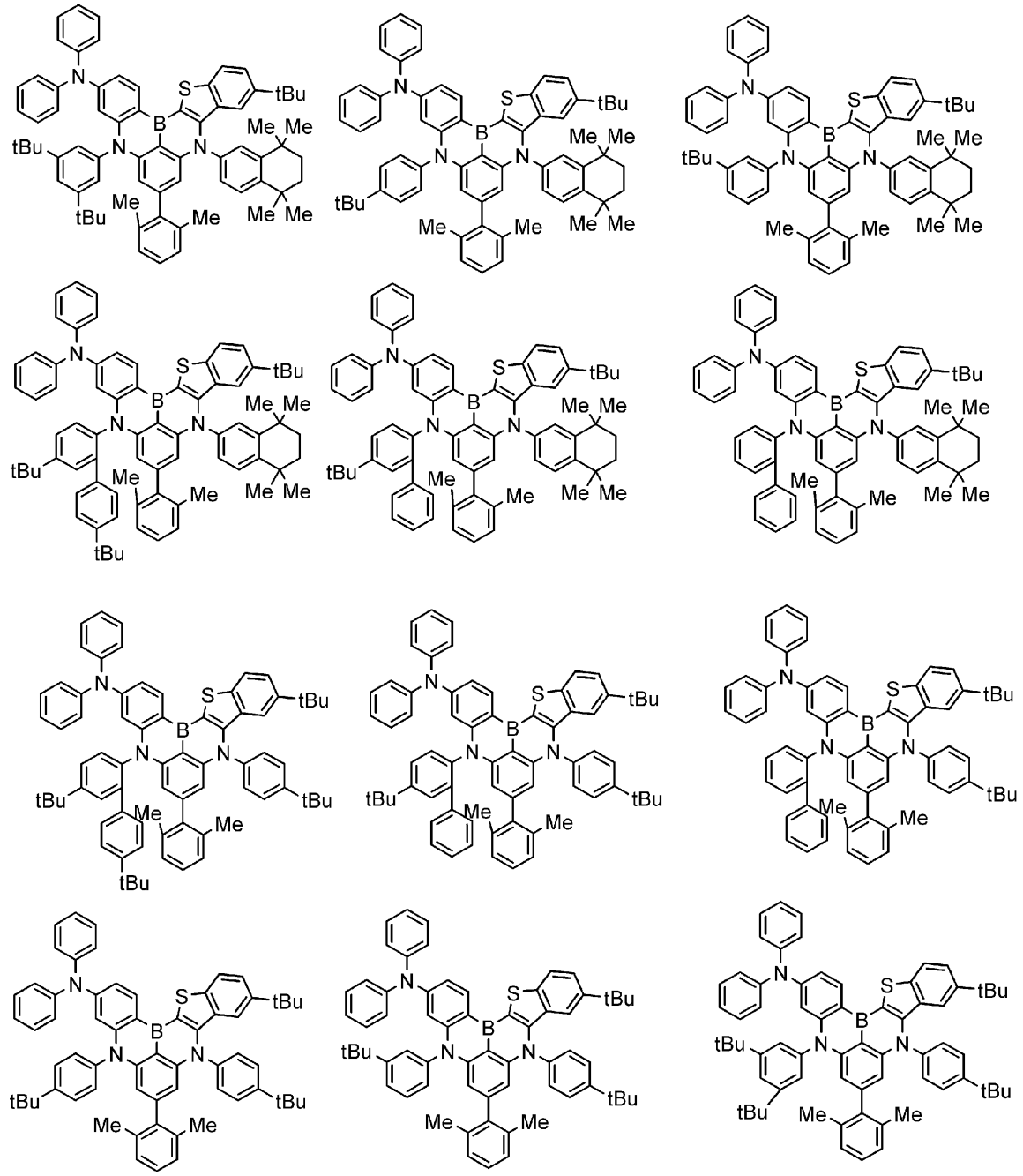
【０５０４】

【化３４７】



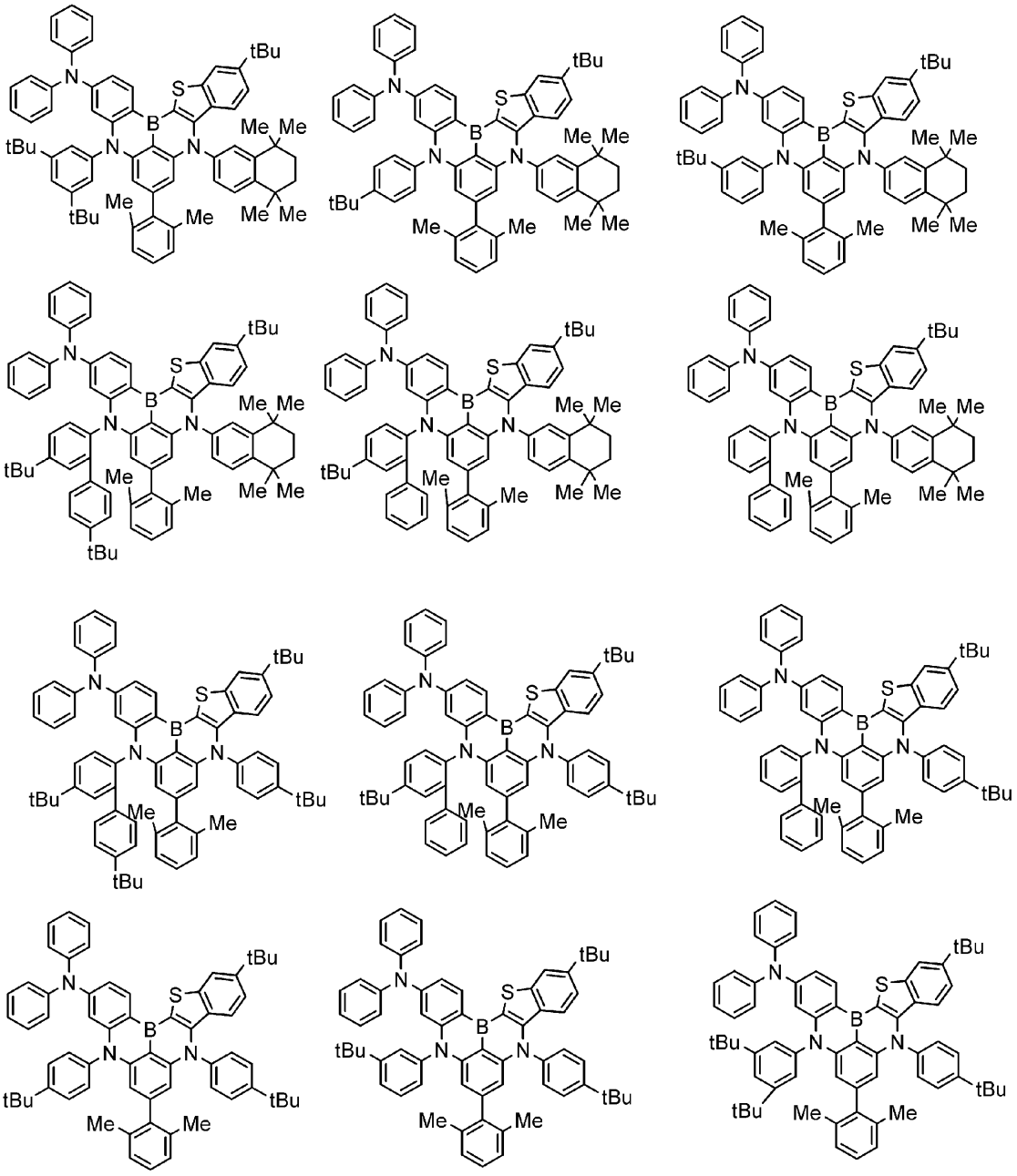
【０５０５】

【化３４８】



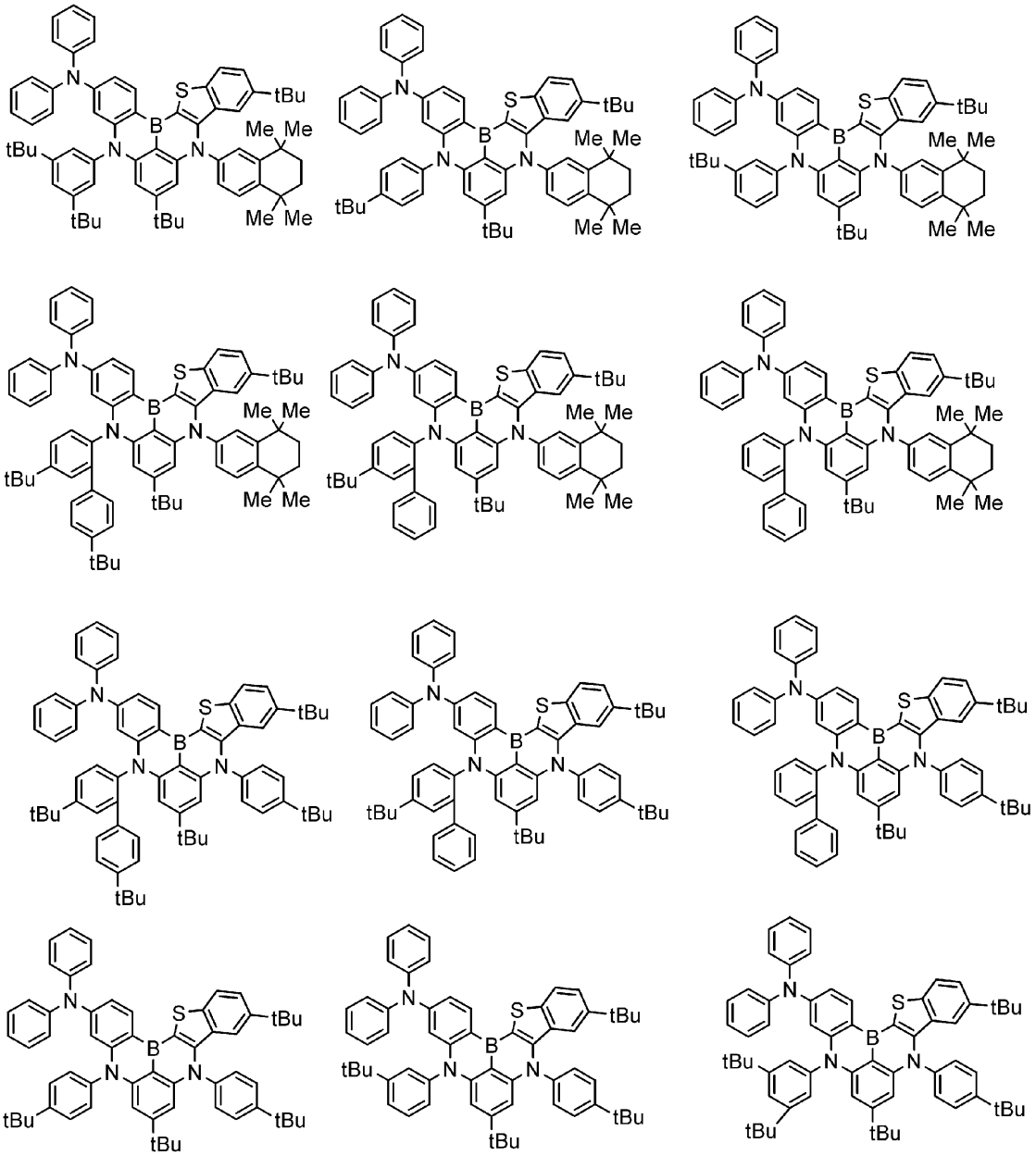
【０５０６】

【化３４９】



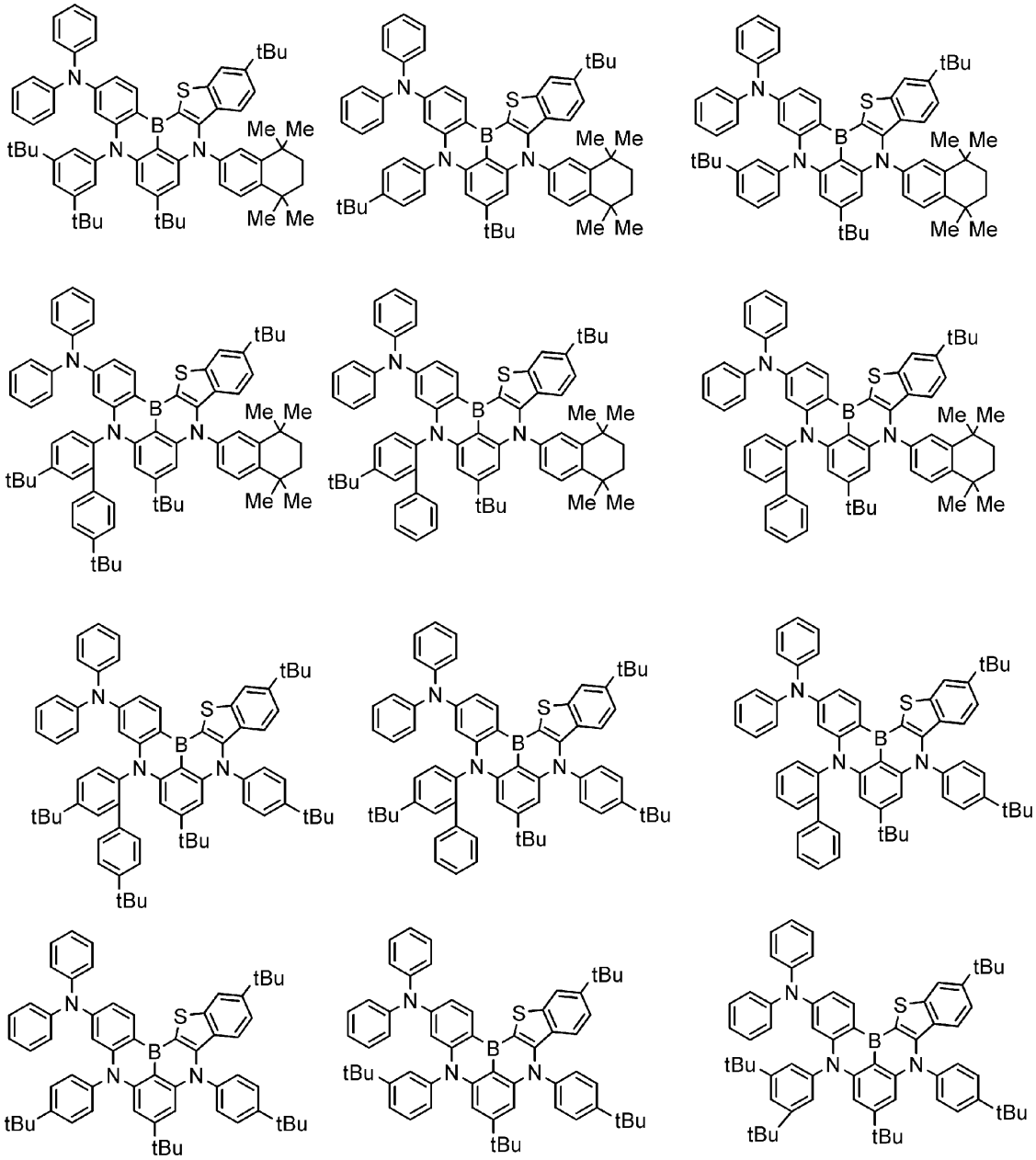
【０５０７】

【化３５０】



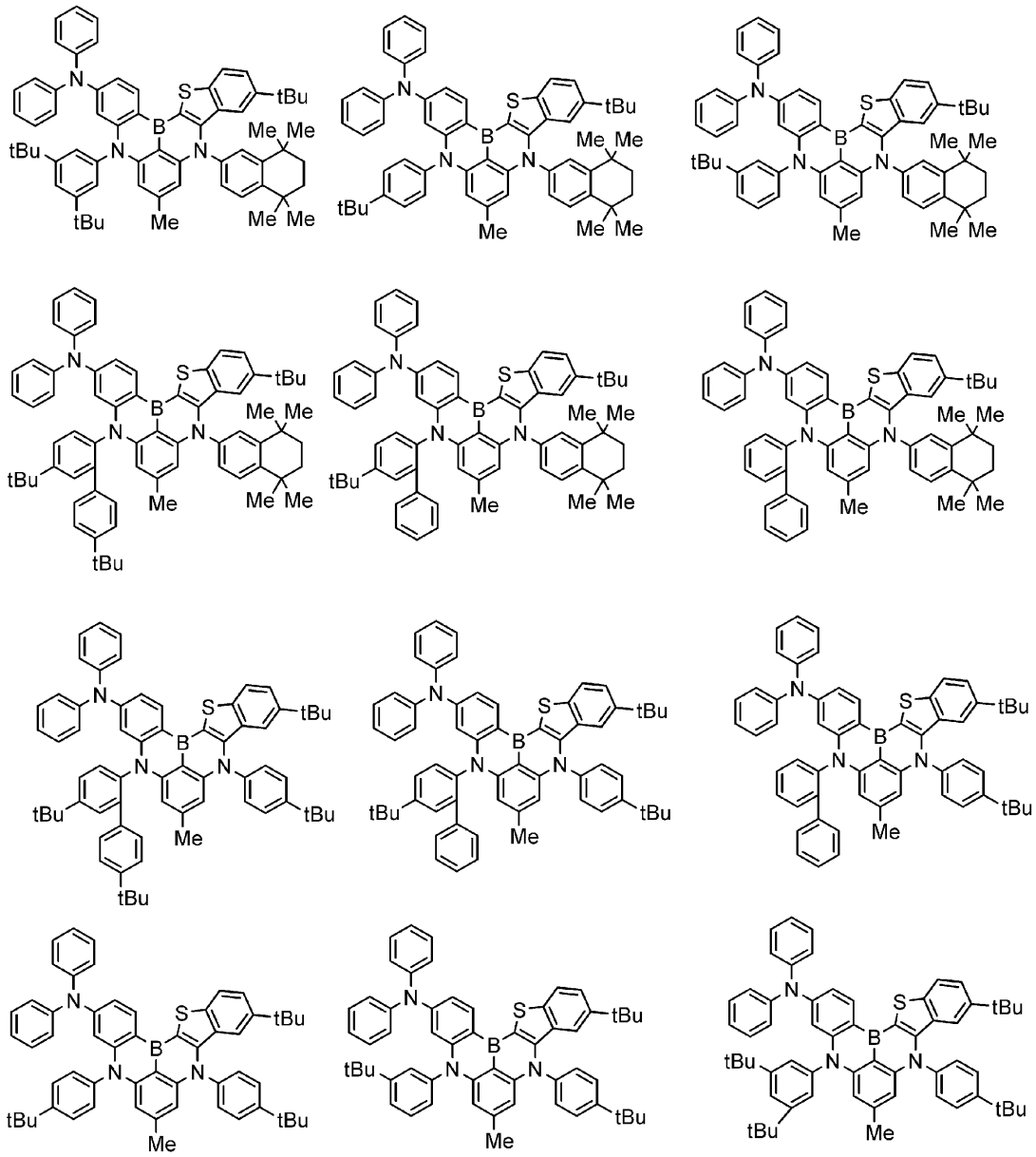
【０５０８】

【化３５１】



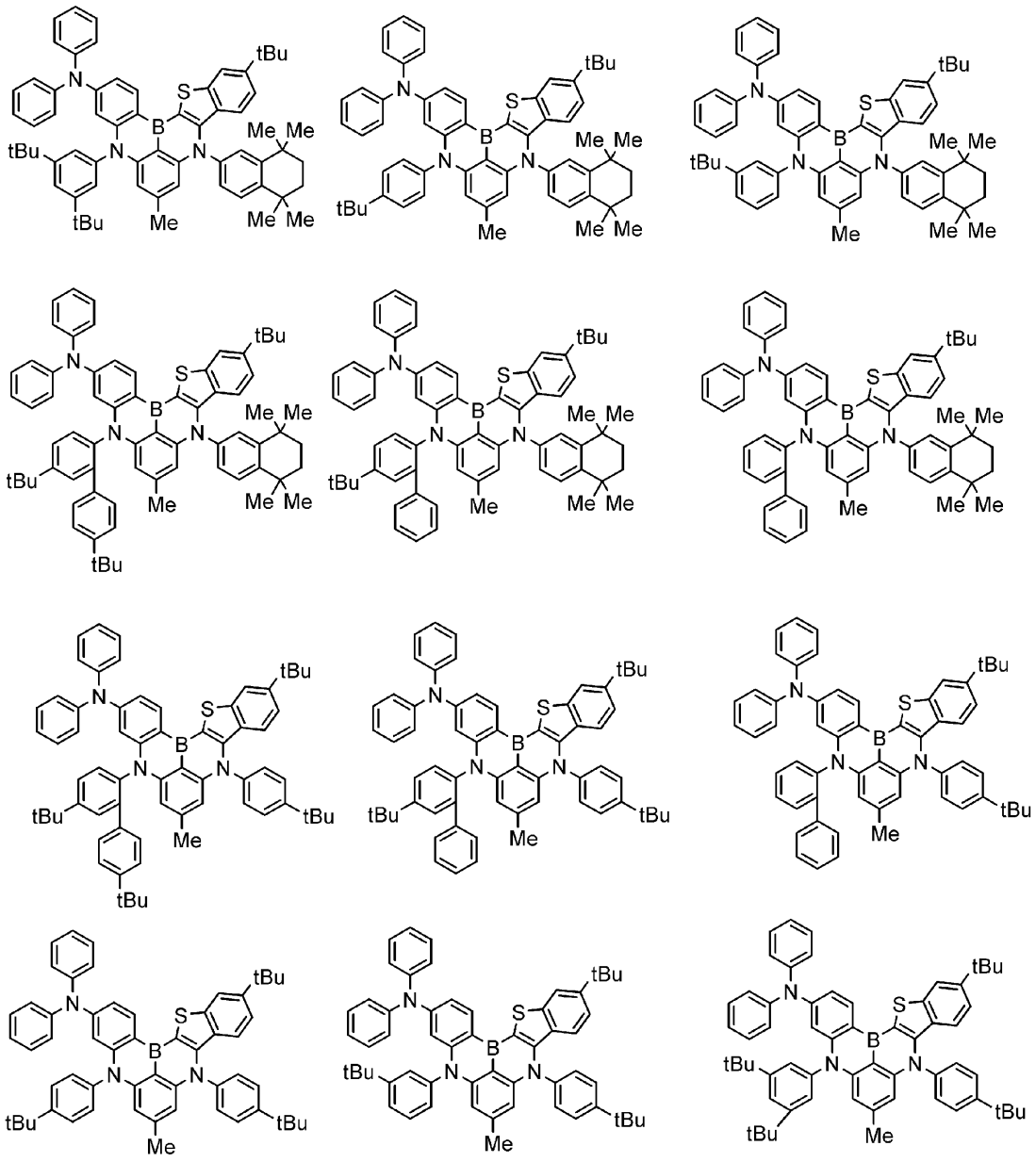
【０５０９】

【化３５２】



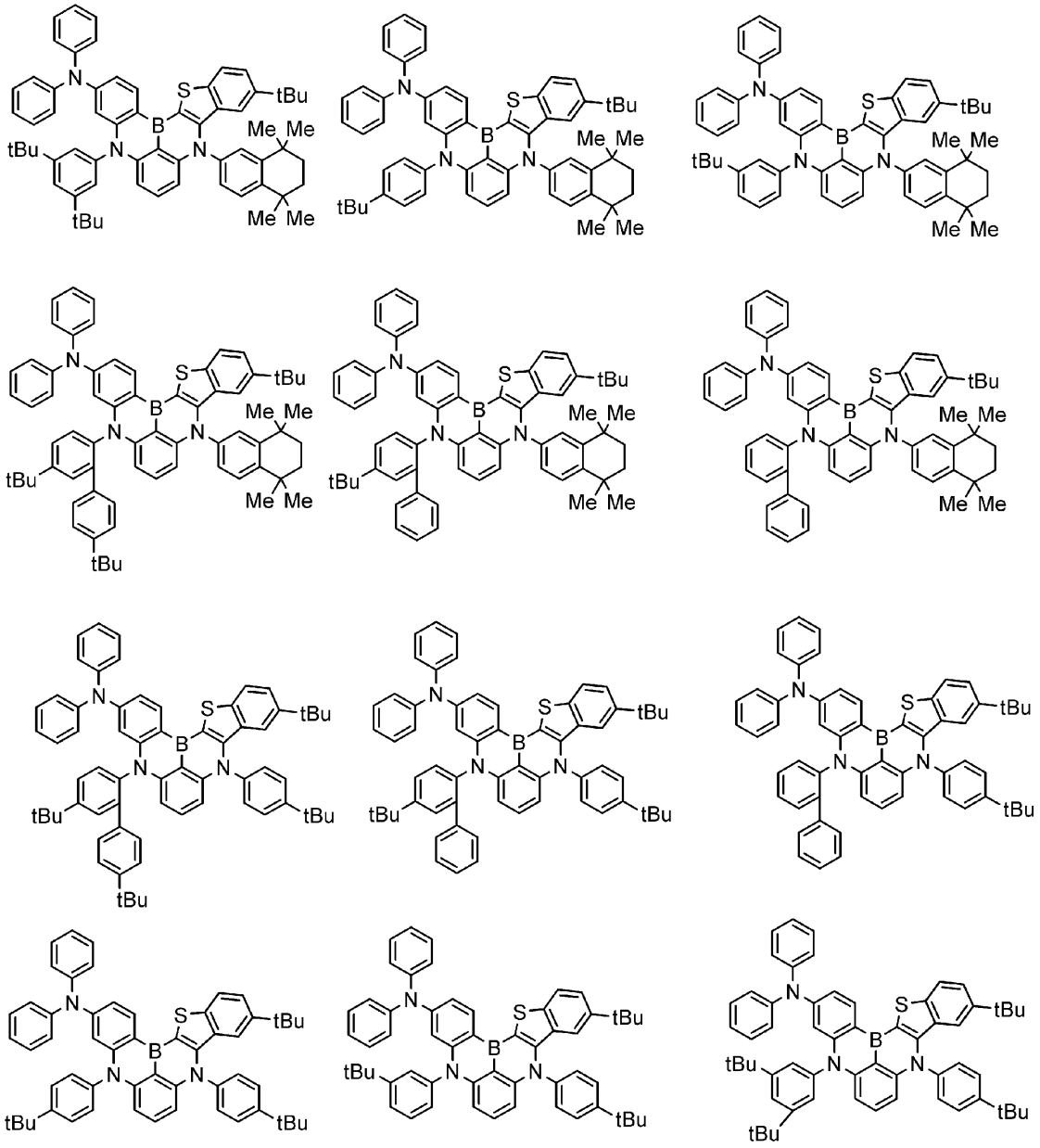
【０５１０】

【化３５３】



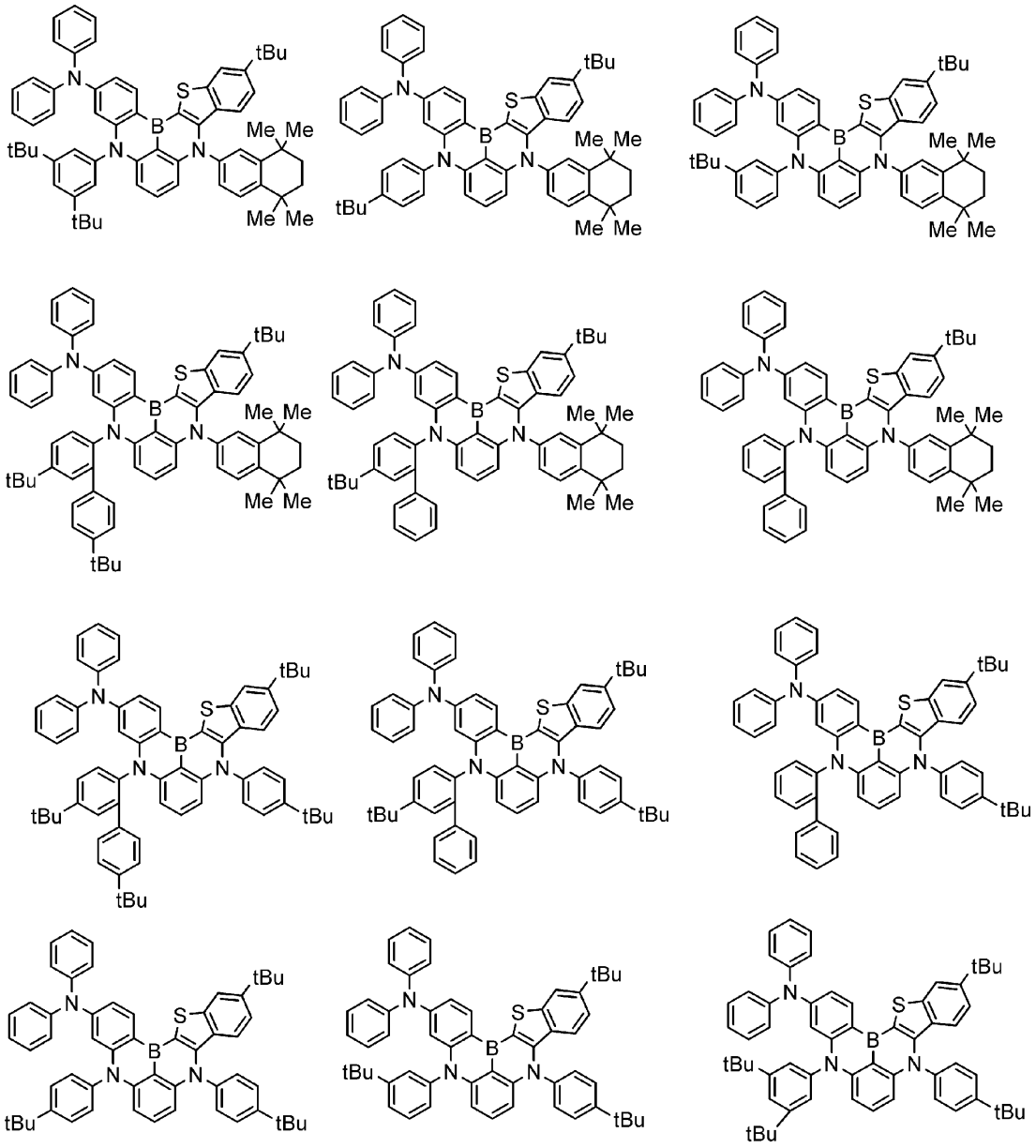
【０５１１】

【化３５４】



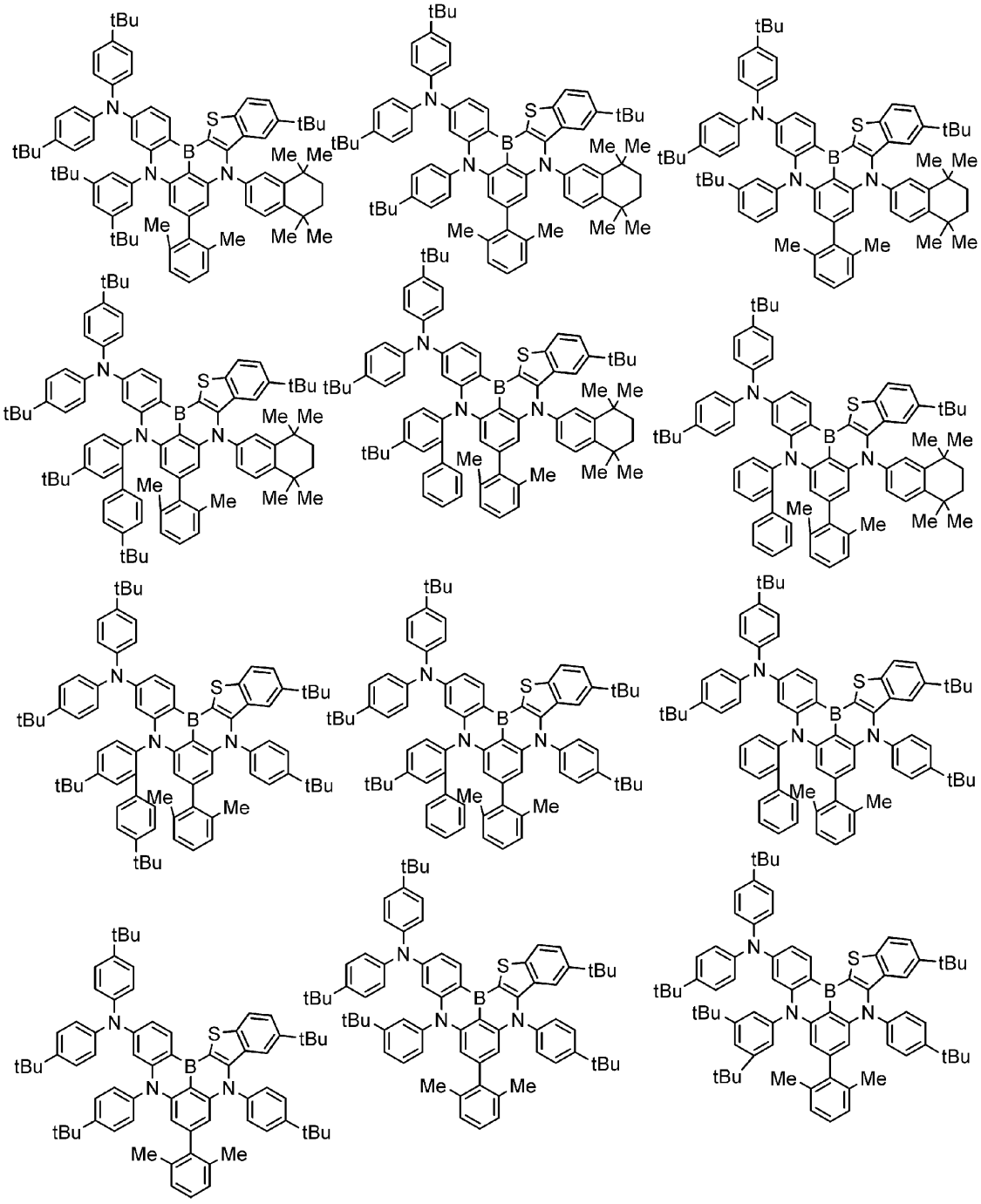
【０５１２】

【化３５５】



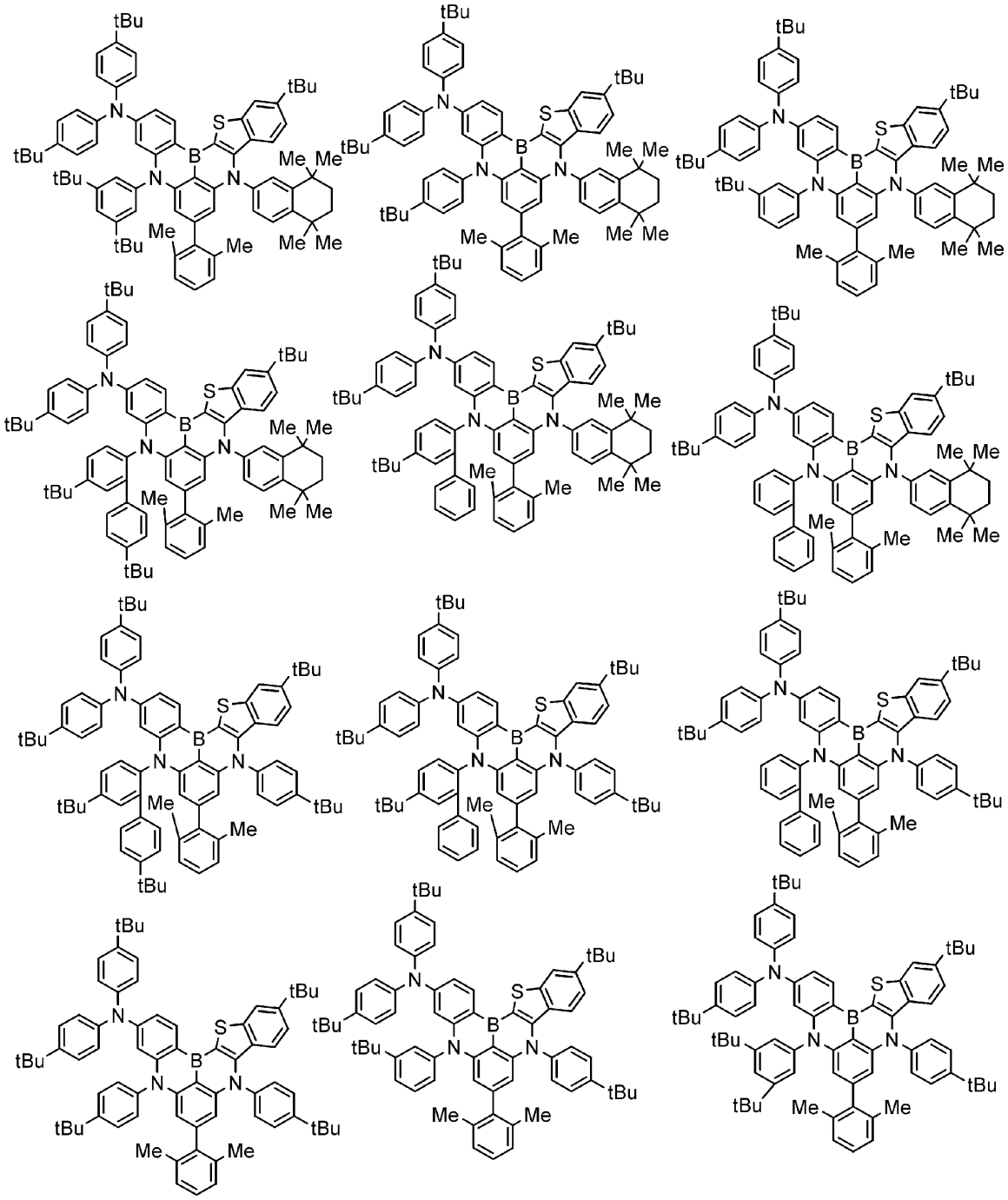
【０５１３】

【化３５６】



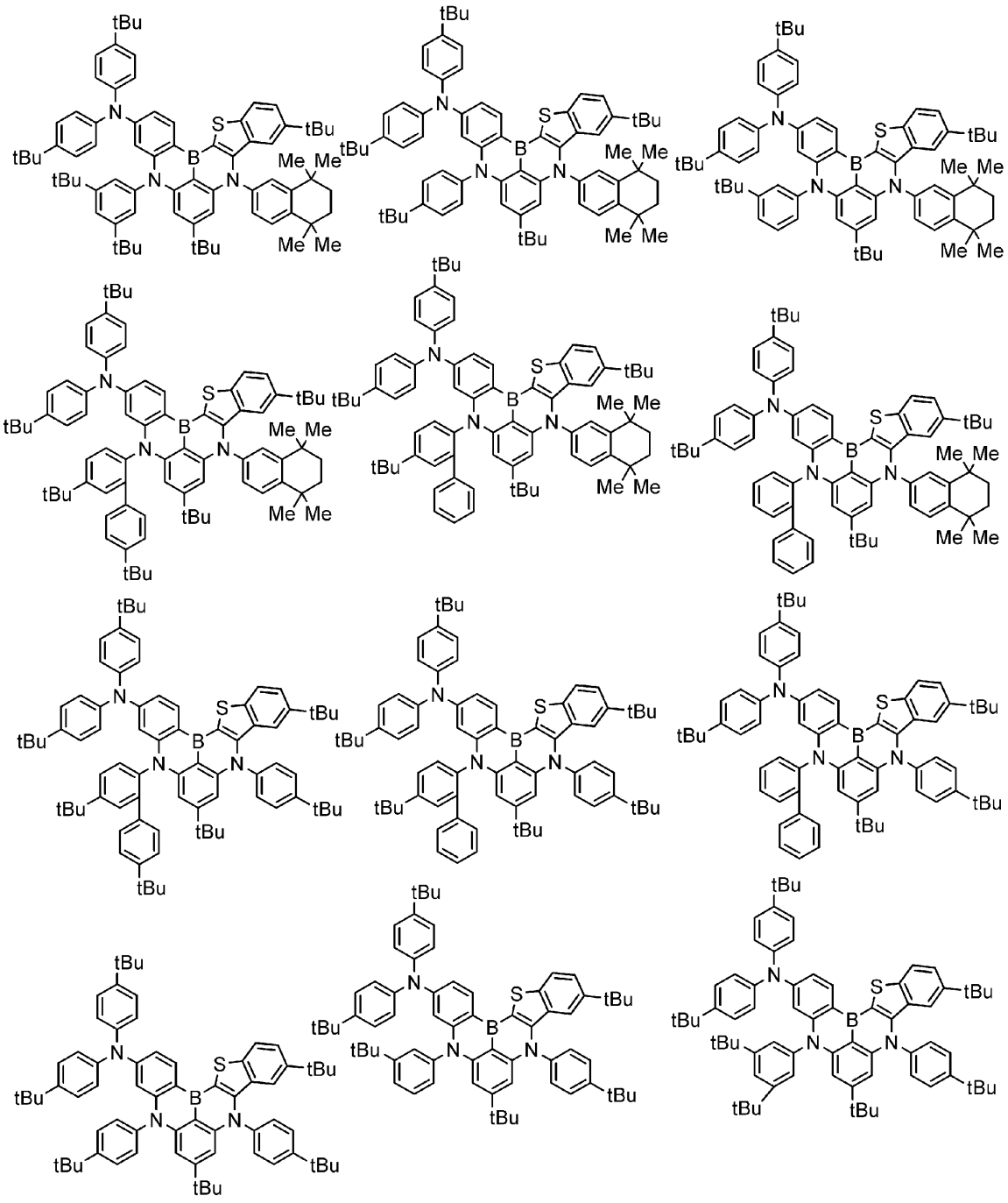
【０５１４】

【化３５７】



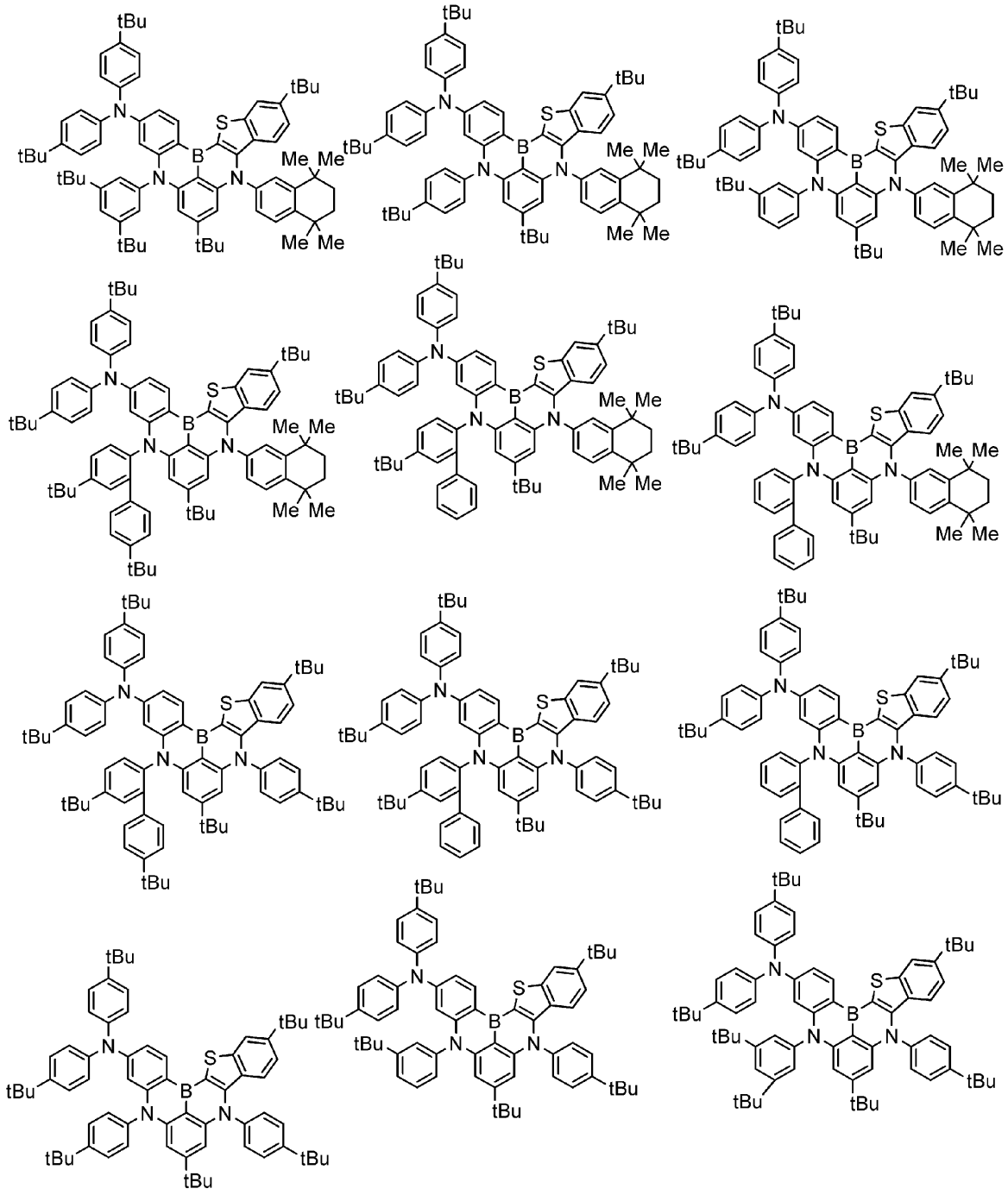
【０５１５】

【化３５８】



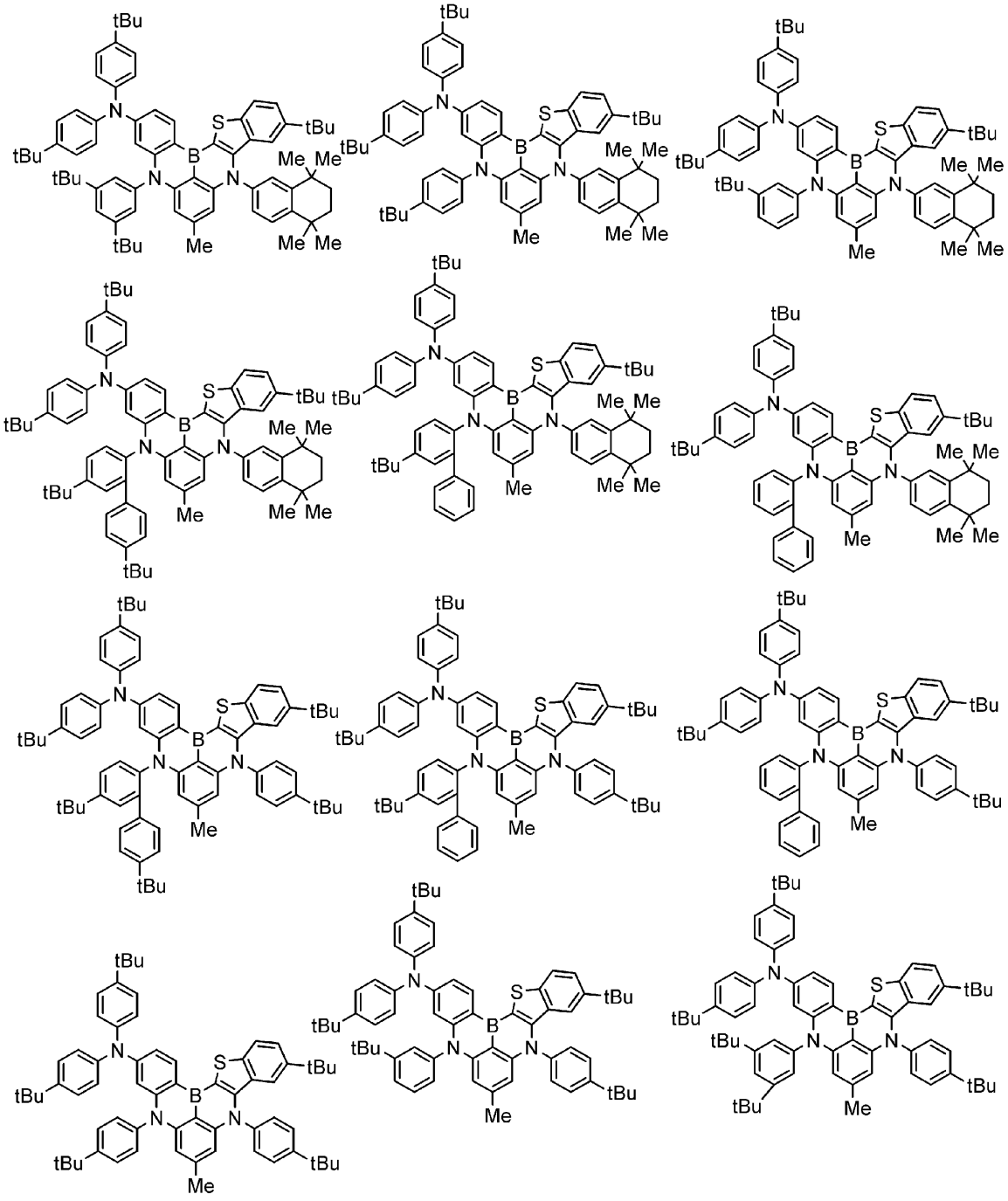
【０５１６】

【化３５９】



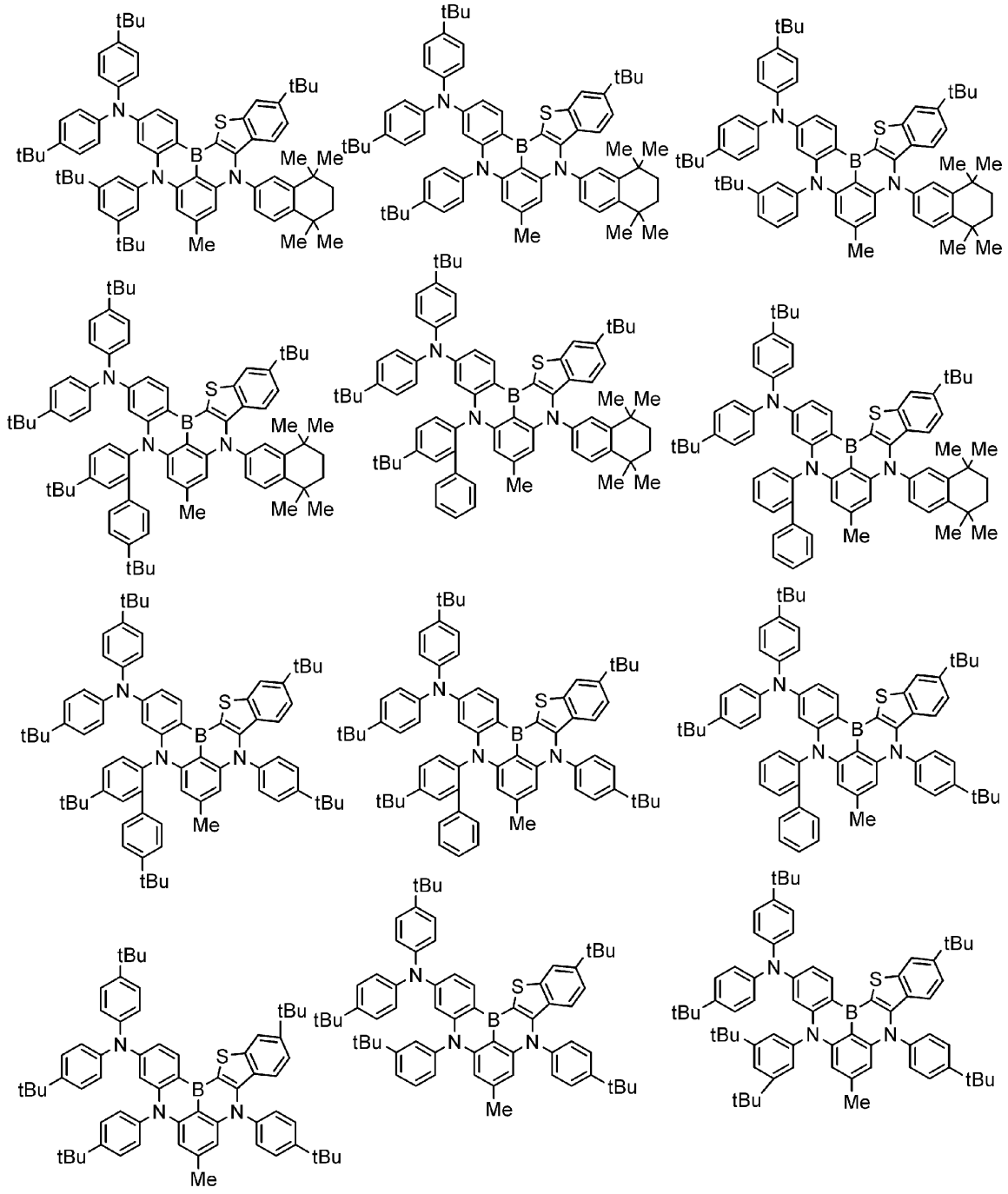
【０５１７】

【化３６０】



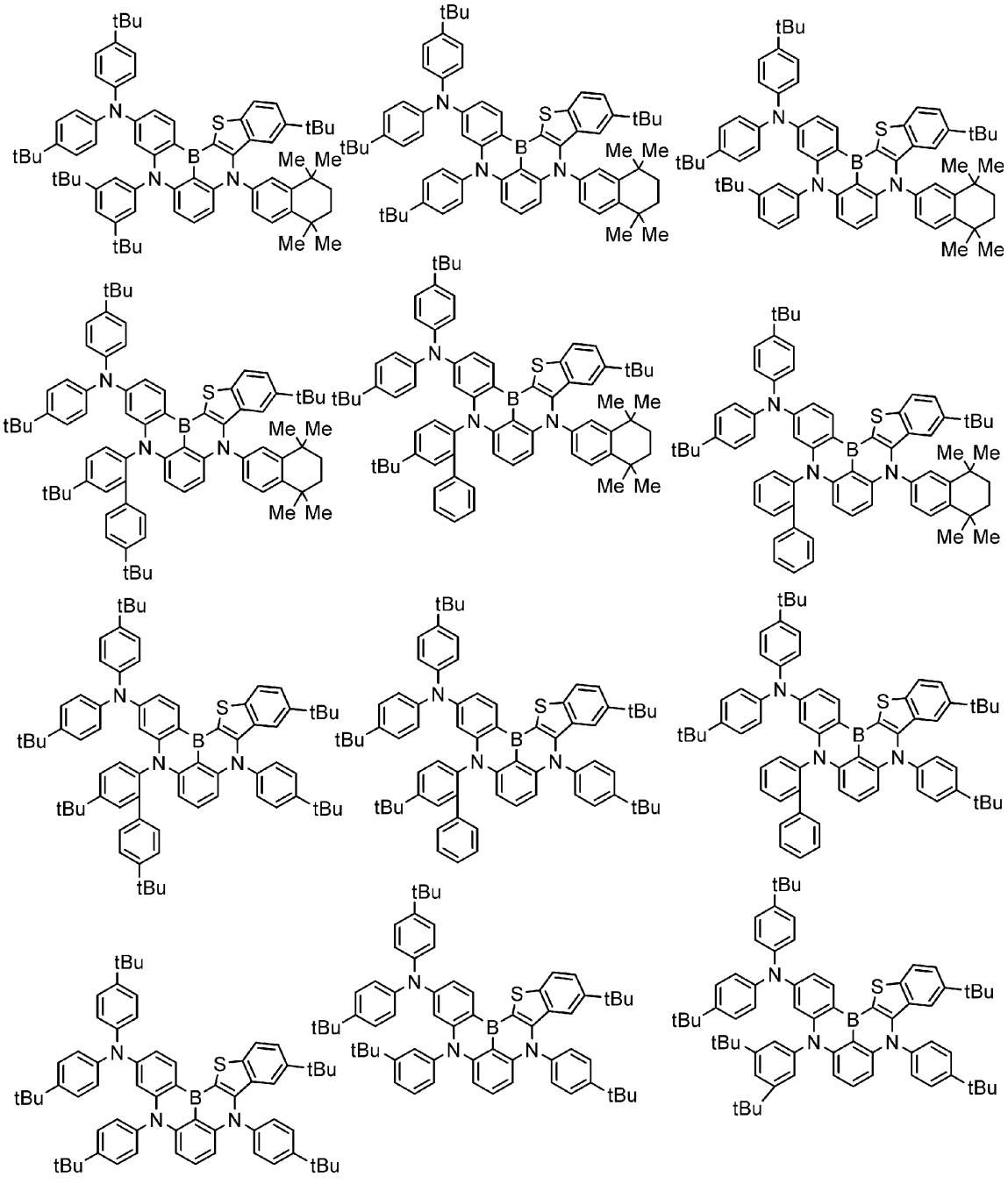
【０５１８】

【化３６１】



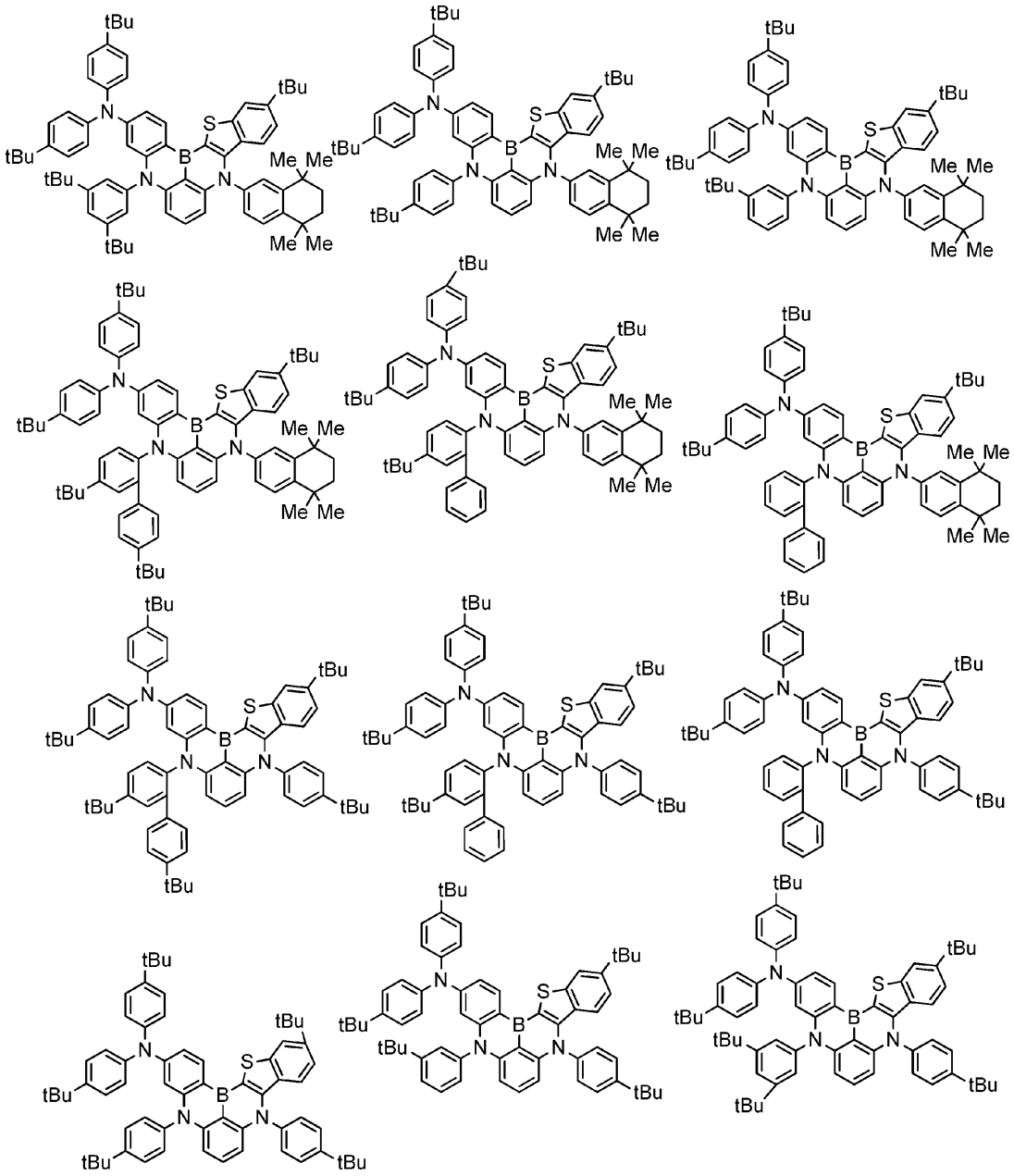
【０５１９】

【化３６２】



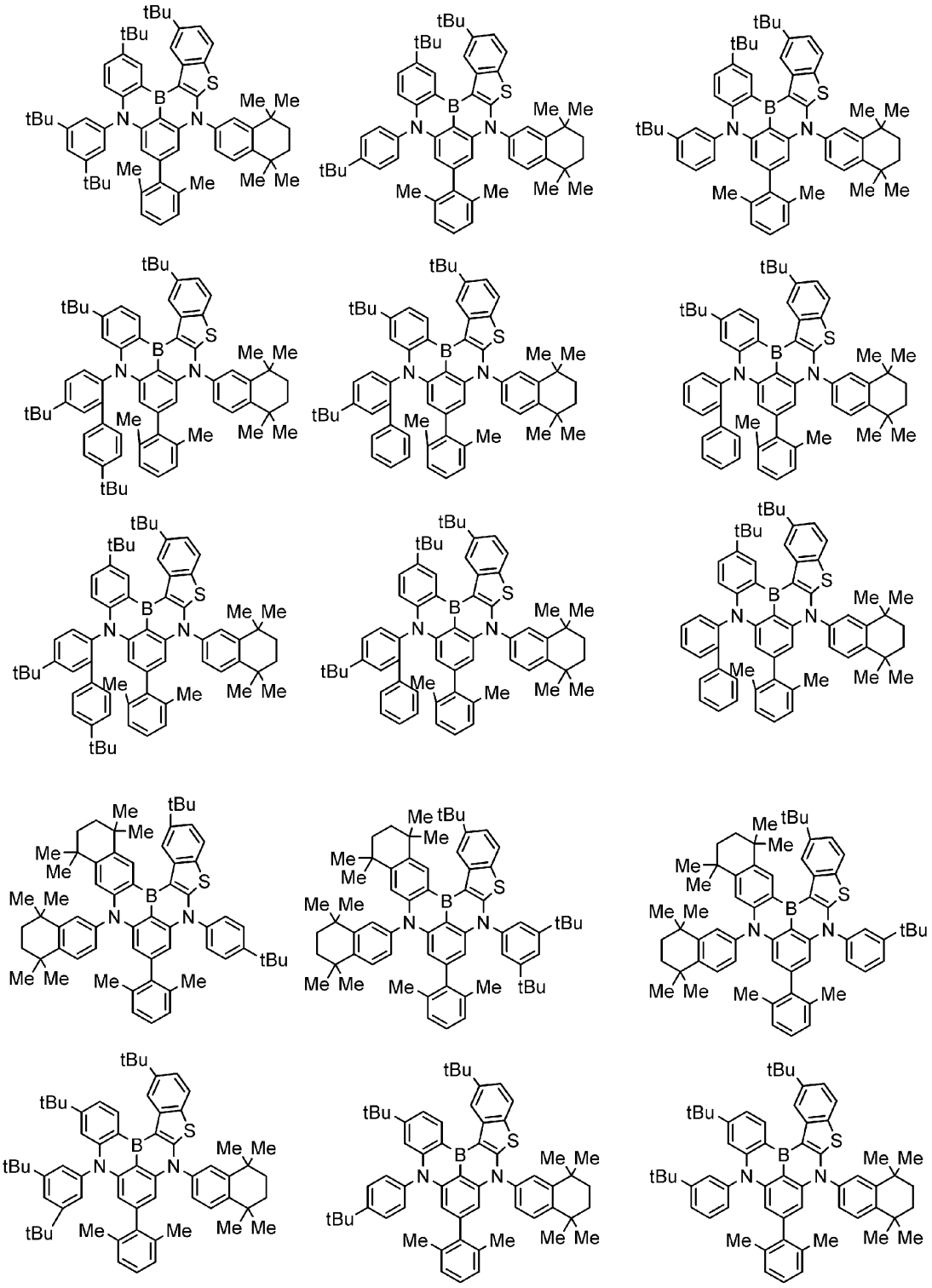
【０５２０】

【化３６３】



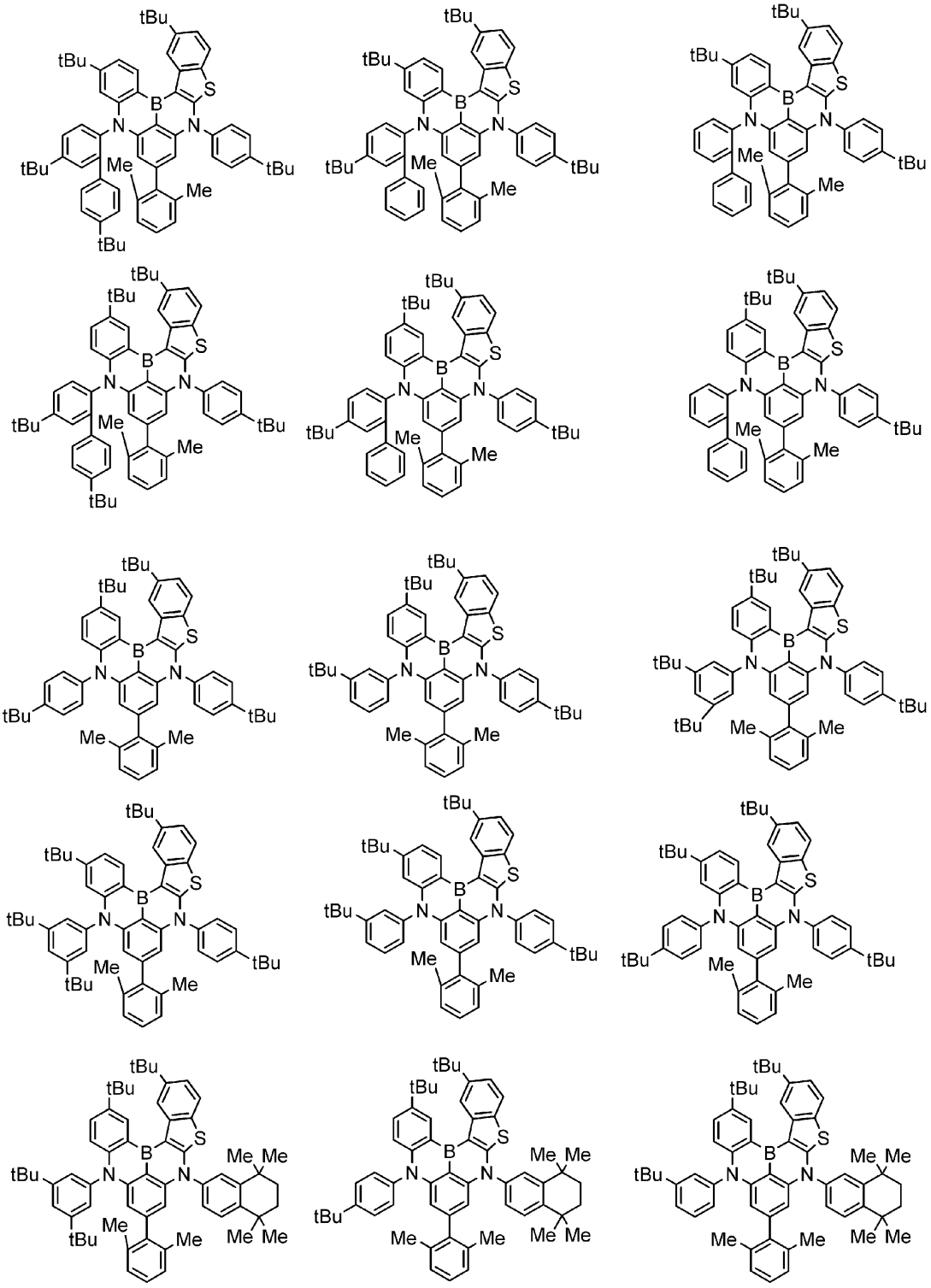
【０５２１】

【化３６４】



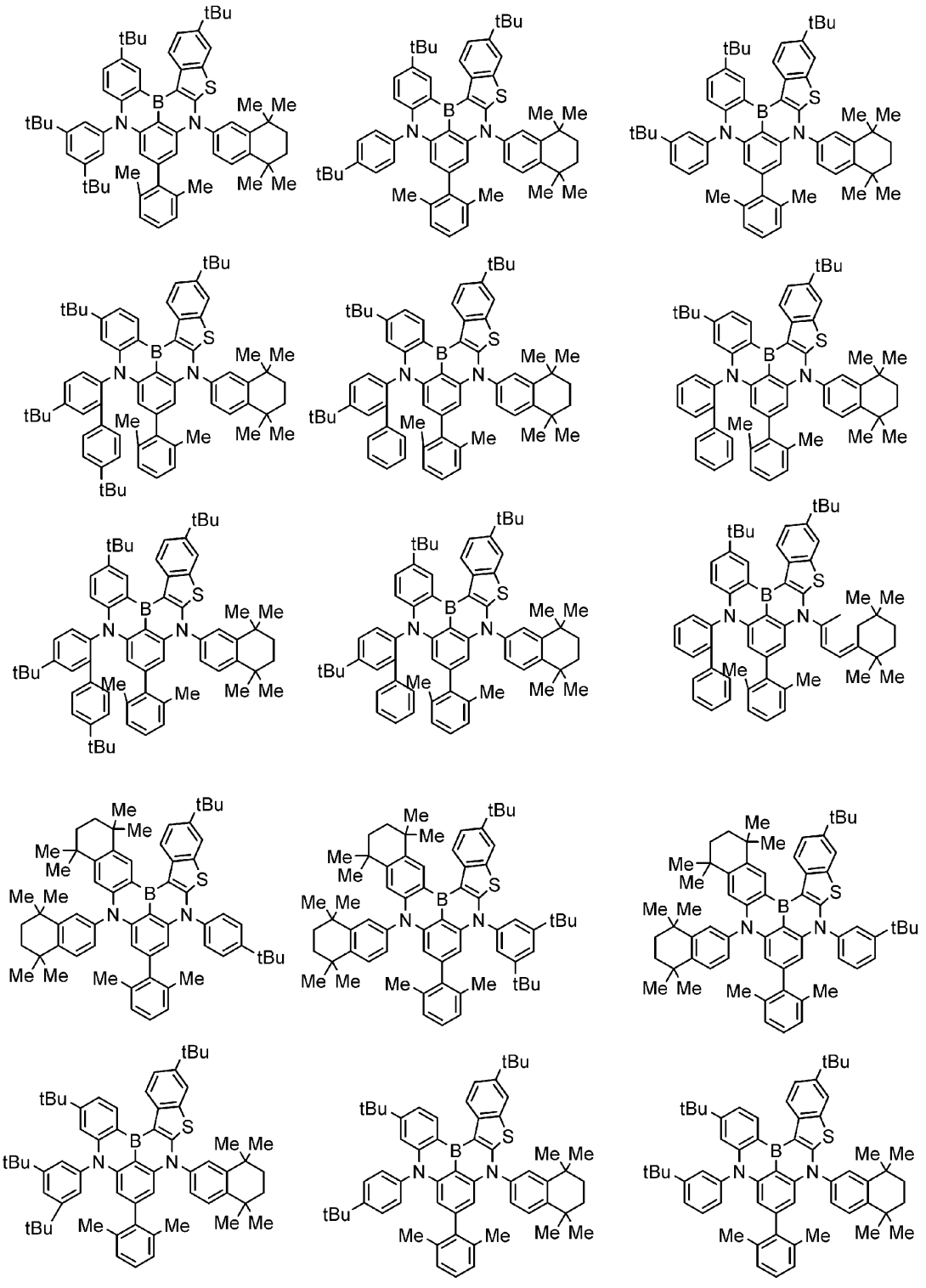
【０５２２】

【化３６５】



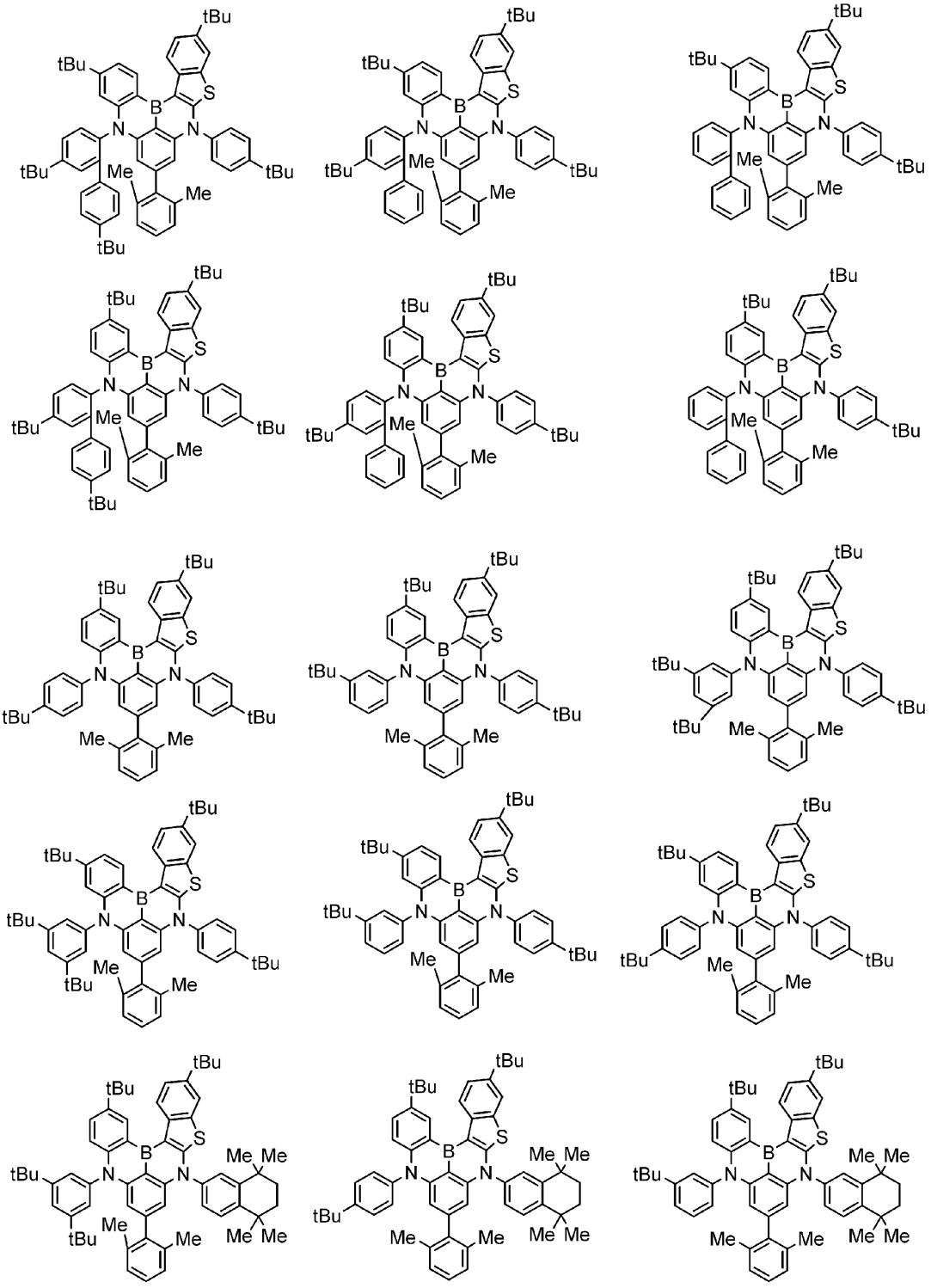
【０５２３】

【化３６６】



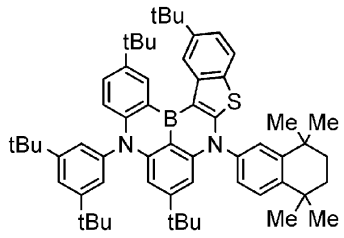
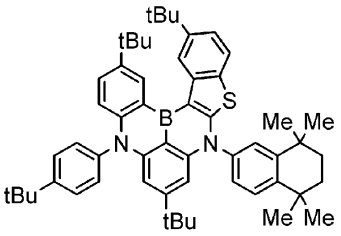
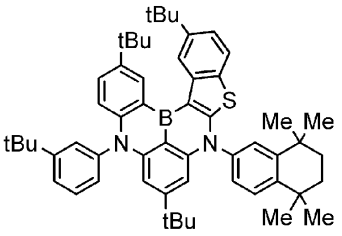
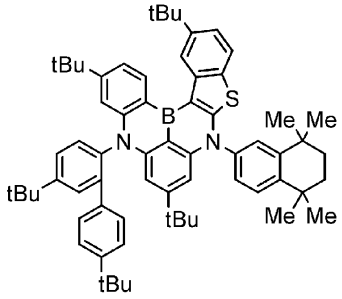
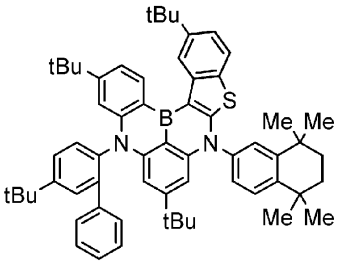
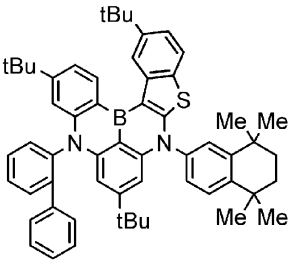
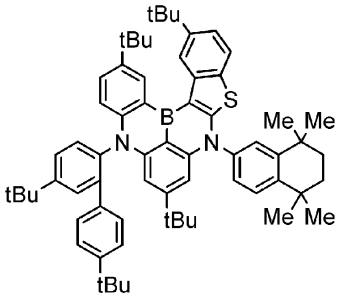
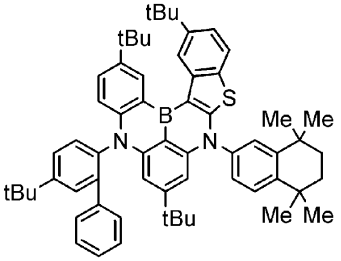
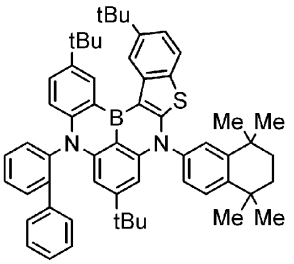
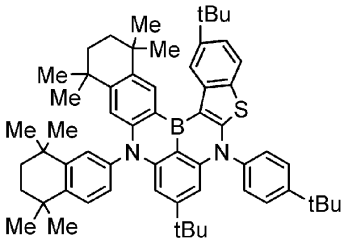
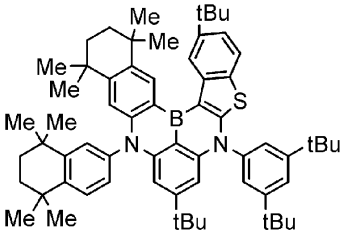
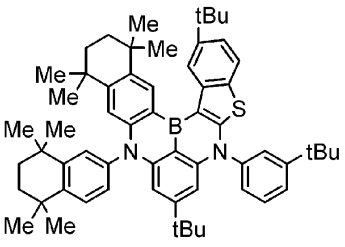
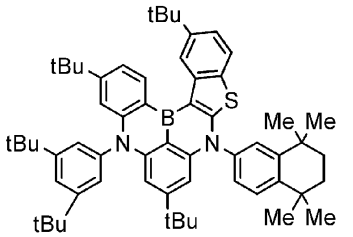
【０５２４】

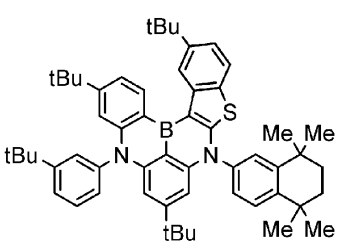
【化３６７】

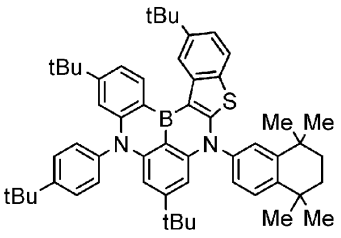


【０５２５】

【化３６８】

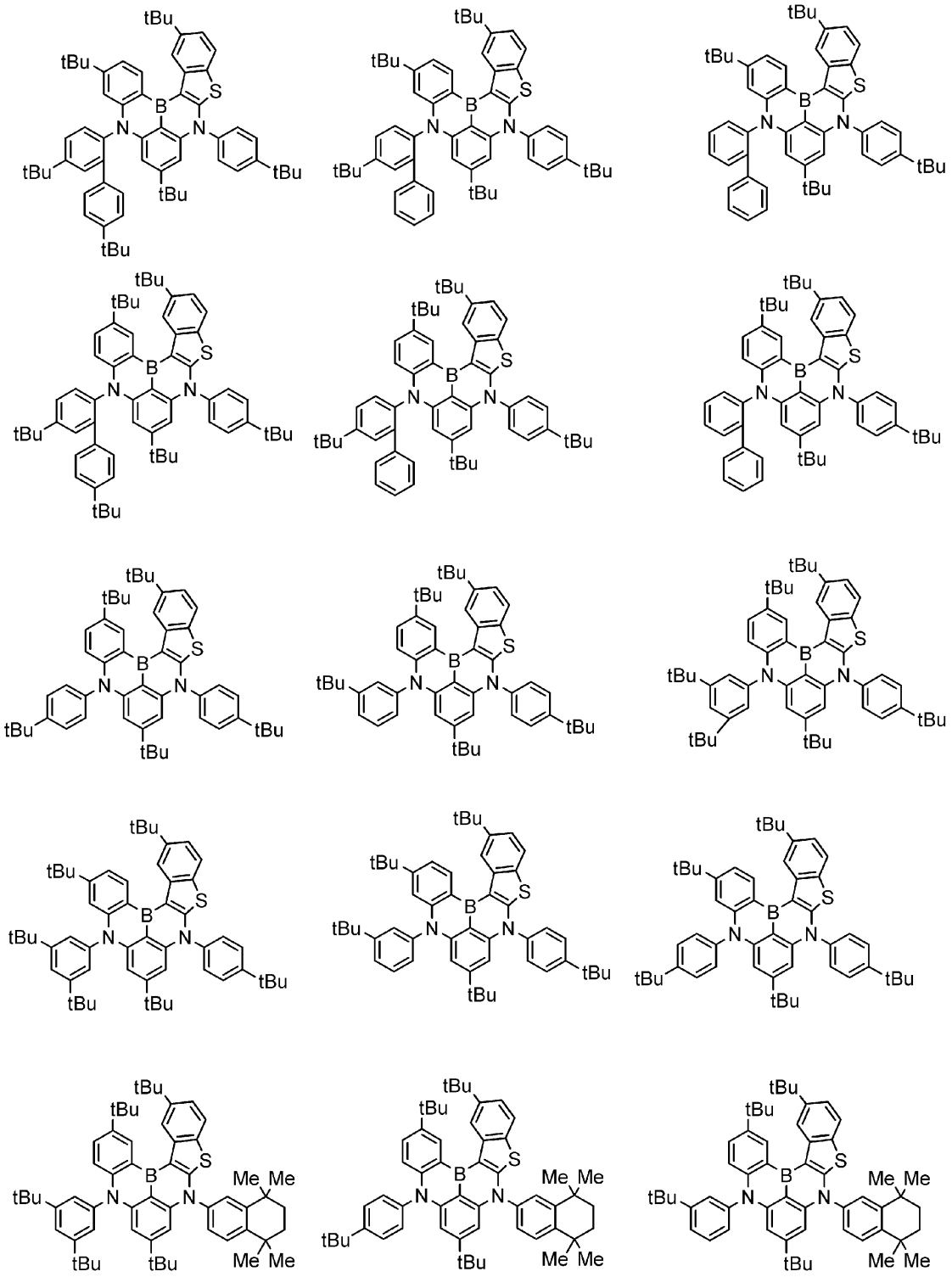


















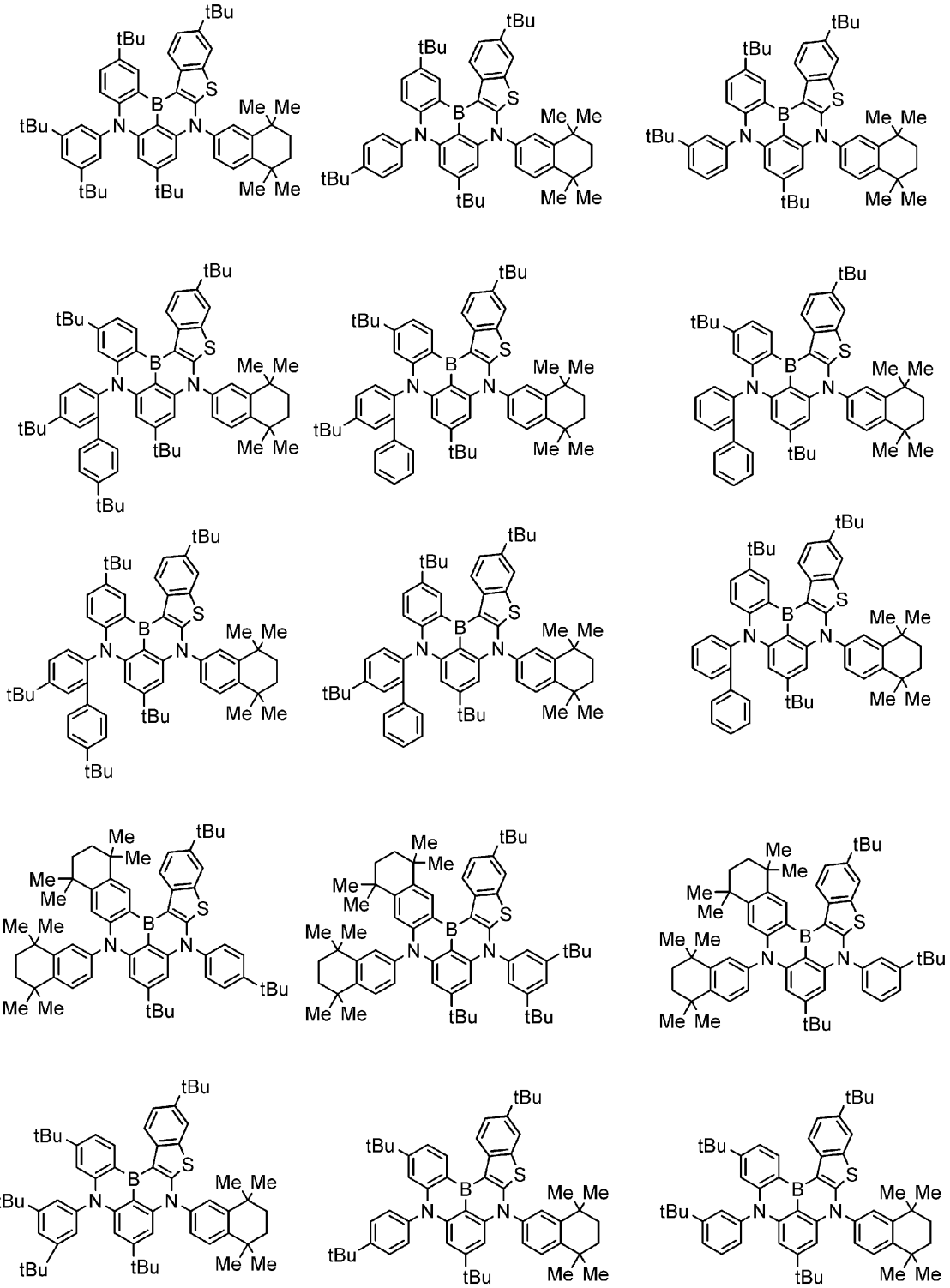
【０５２６】

【化３６９】



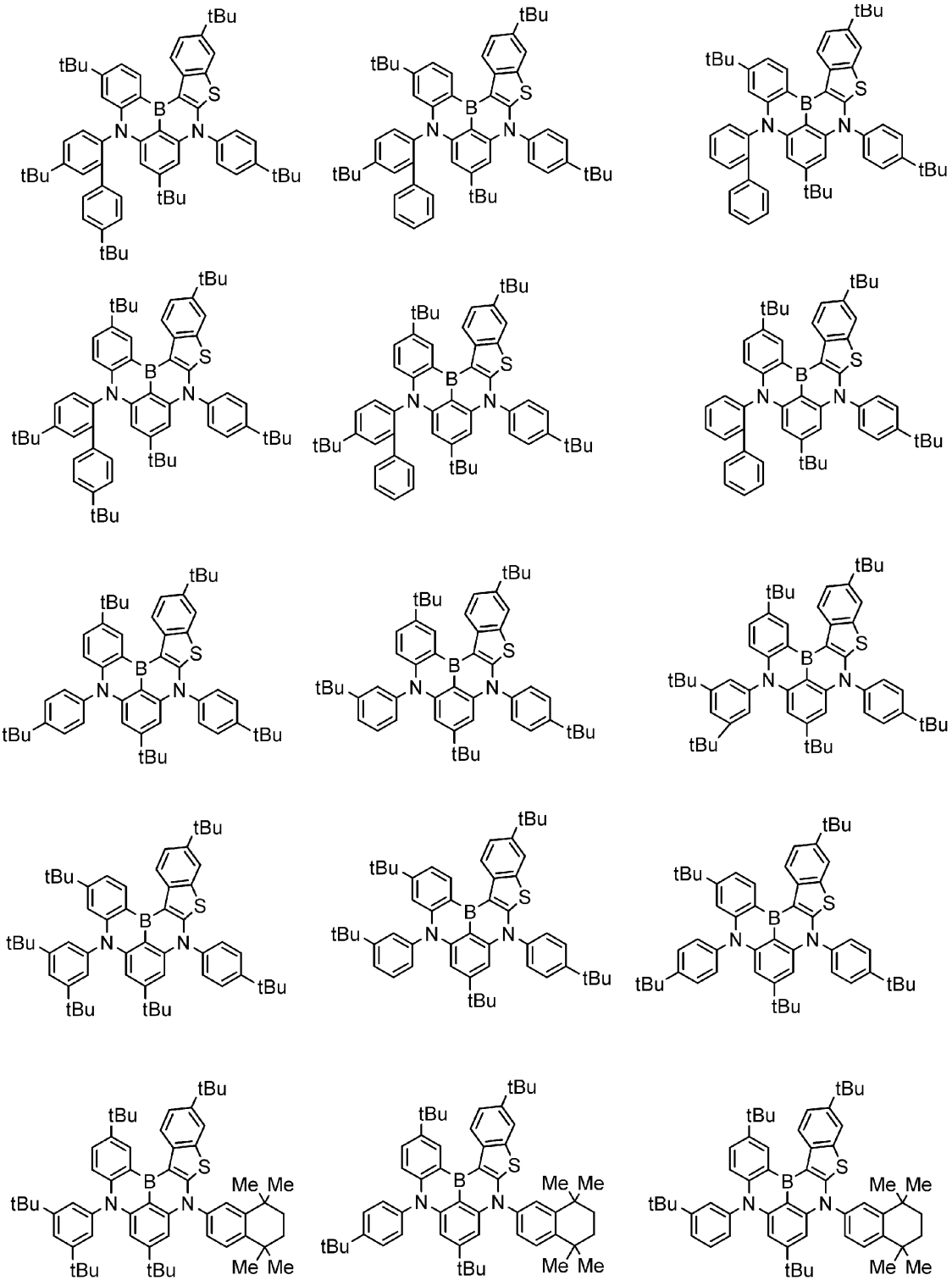
【０５２７】

【化３７０】



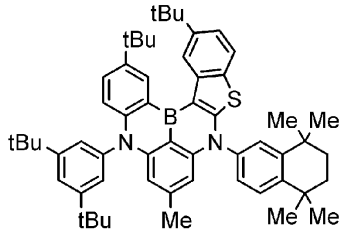
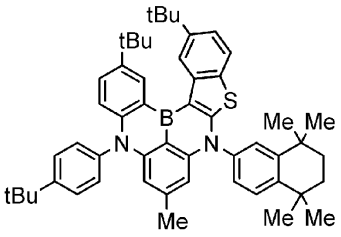
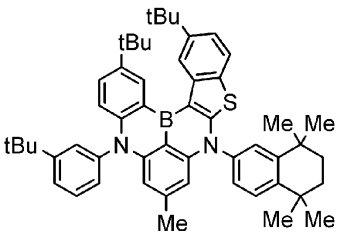
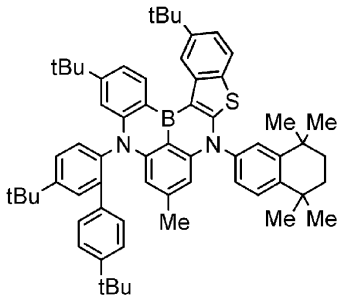
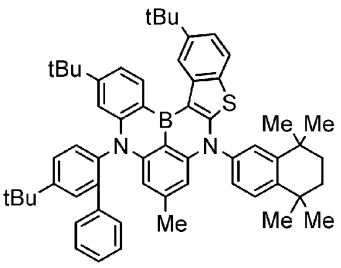
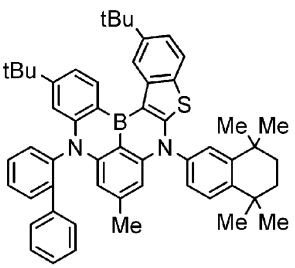
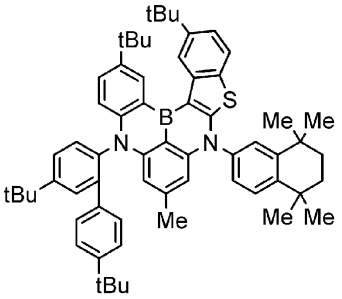
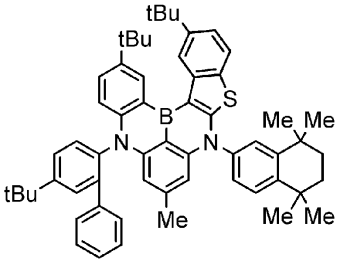
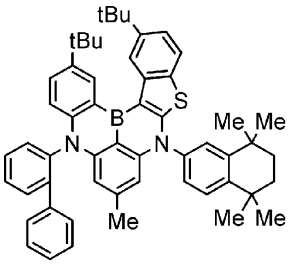
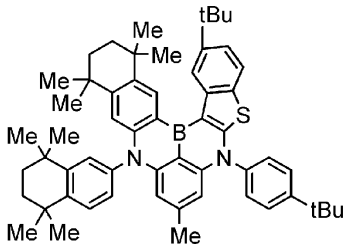
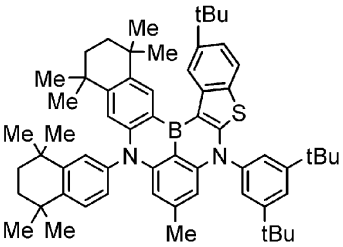
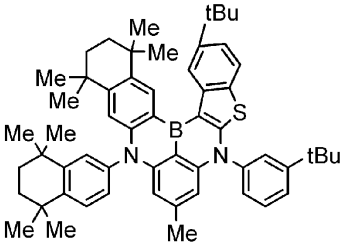
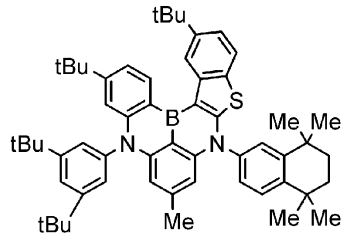
【０５２８】

【化３７１】



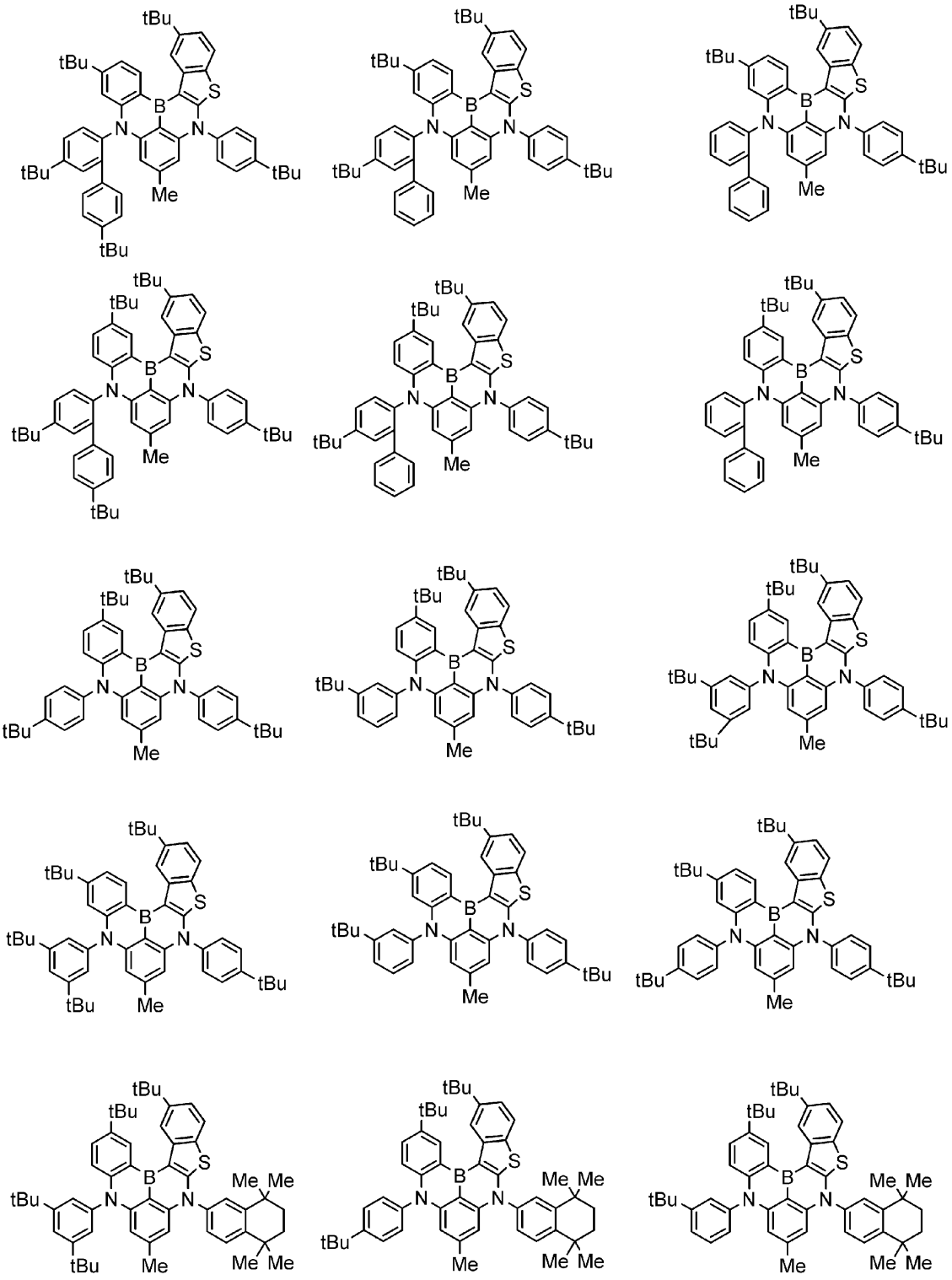
【０５２９】

【化３７２】

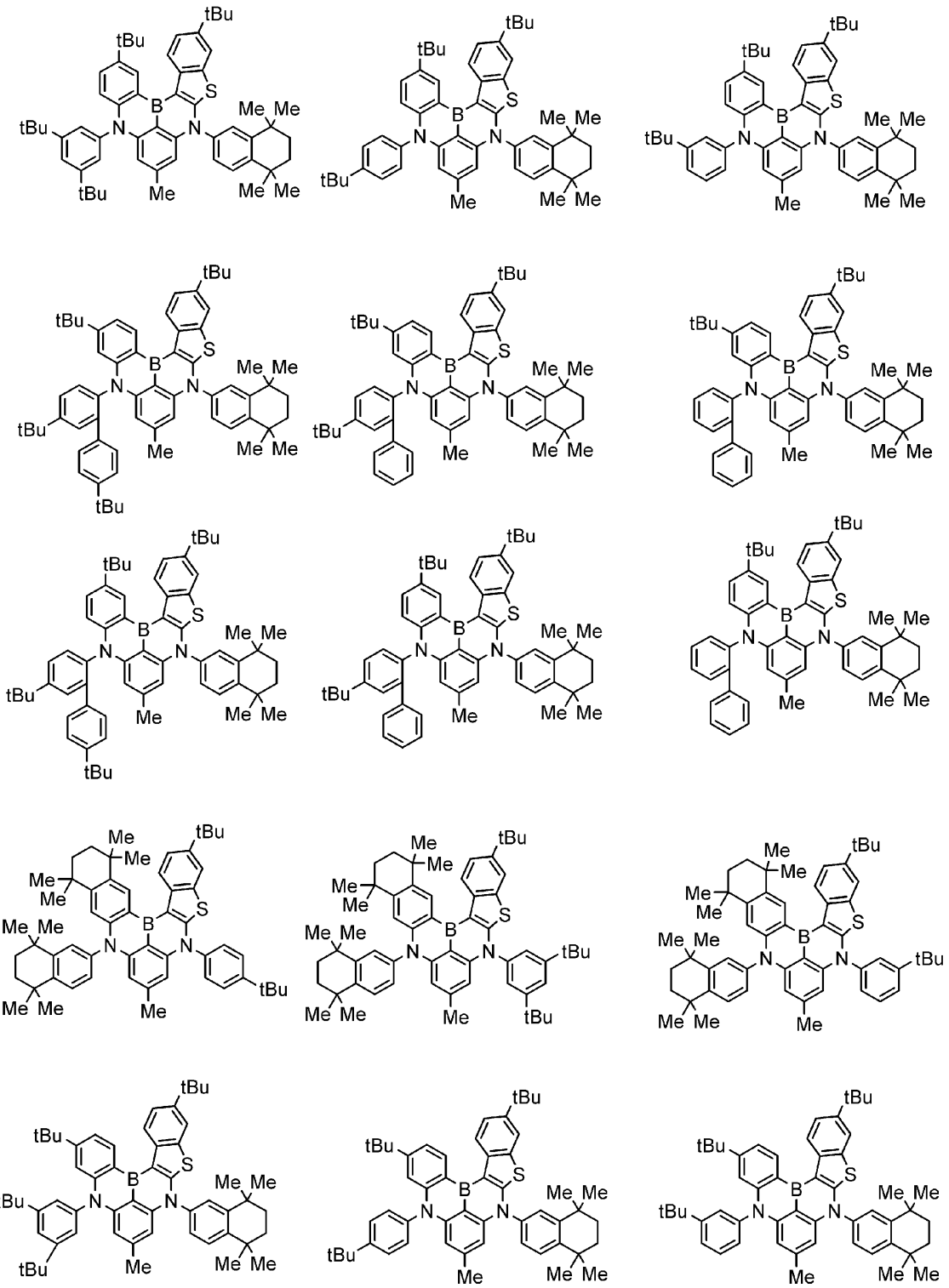
【０５３０】

【化３７３】



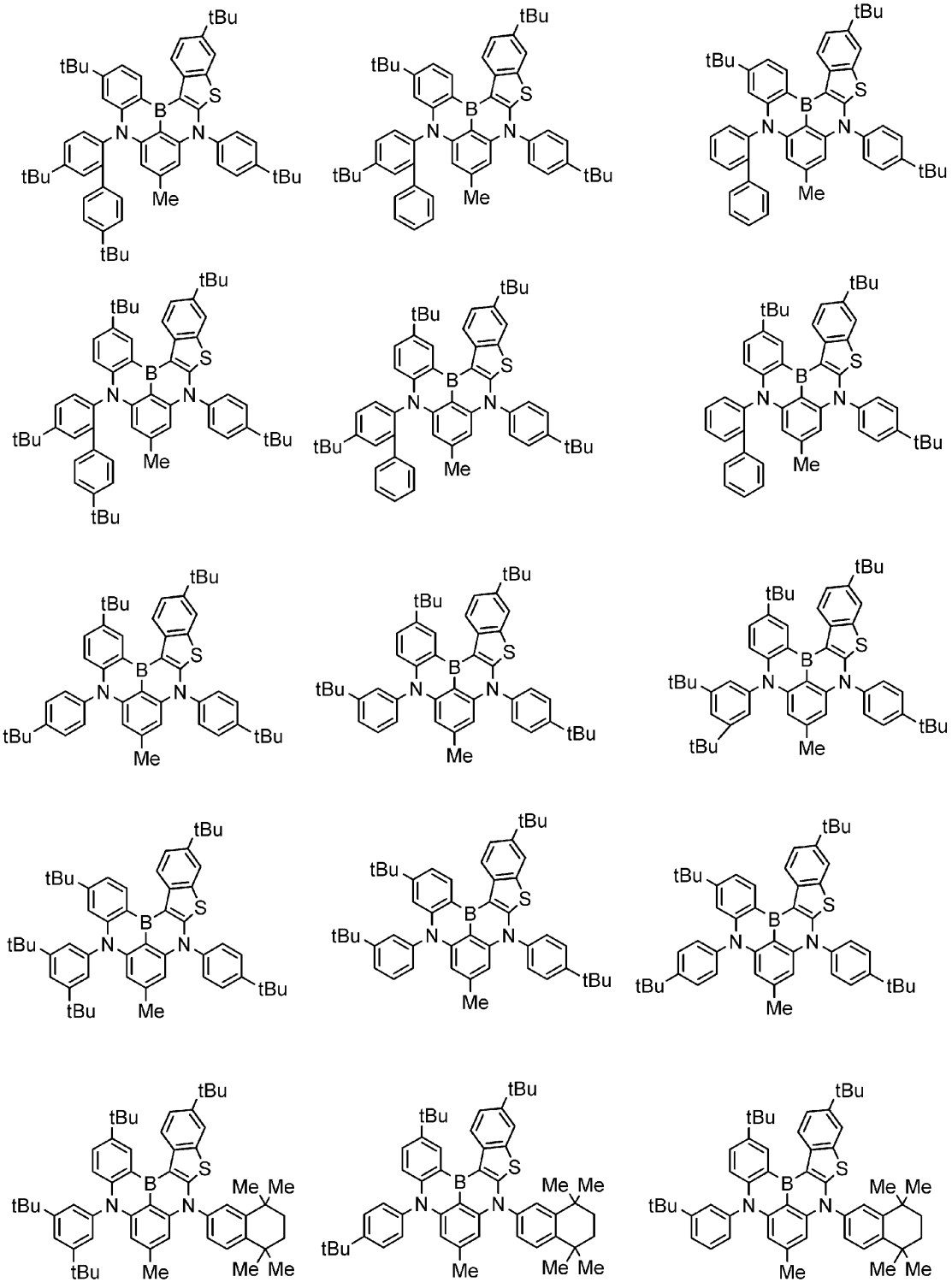
【０５３１】

【化３７４】



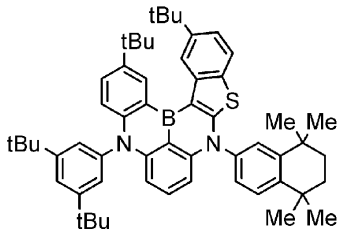
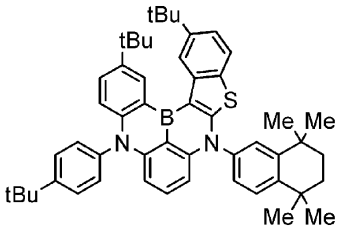
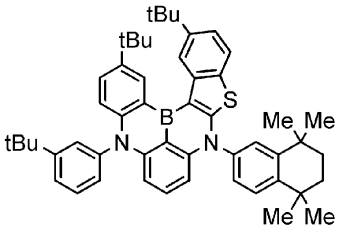
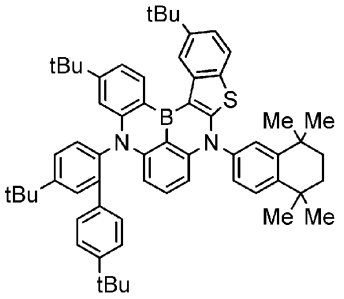
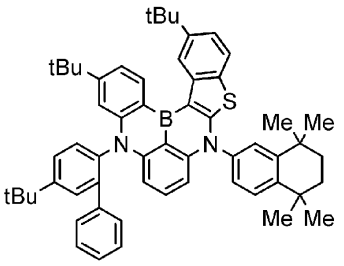
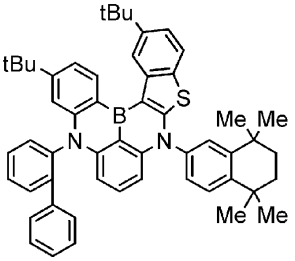
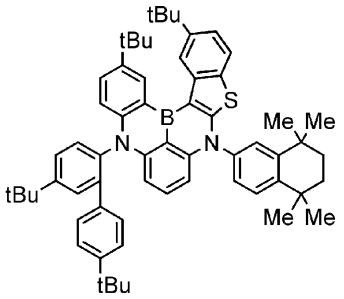
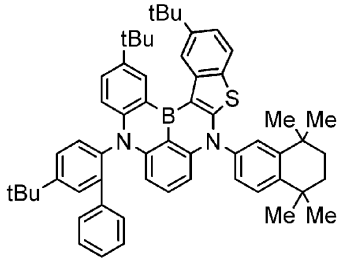
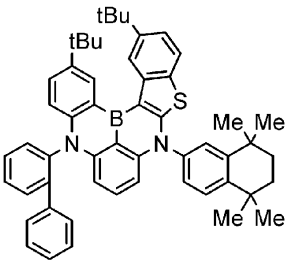
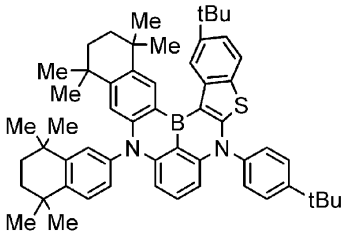
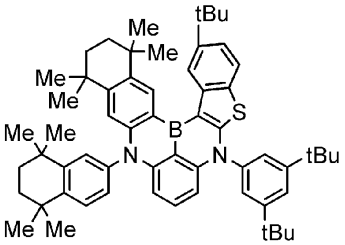
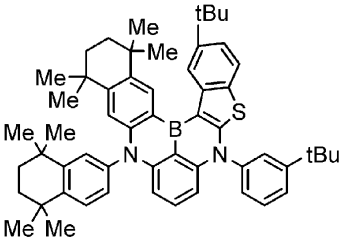
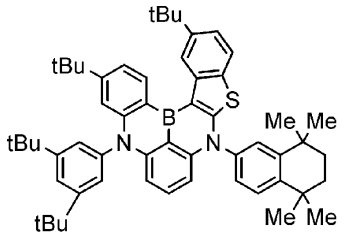
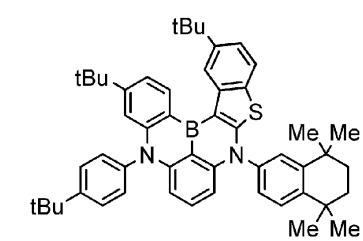
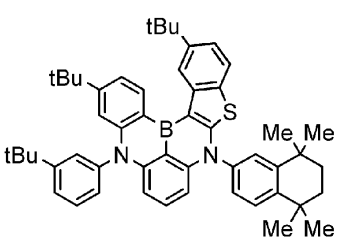
【０５３２】

【化３７５】



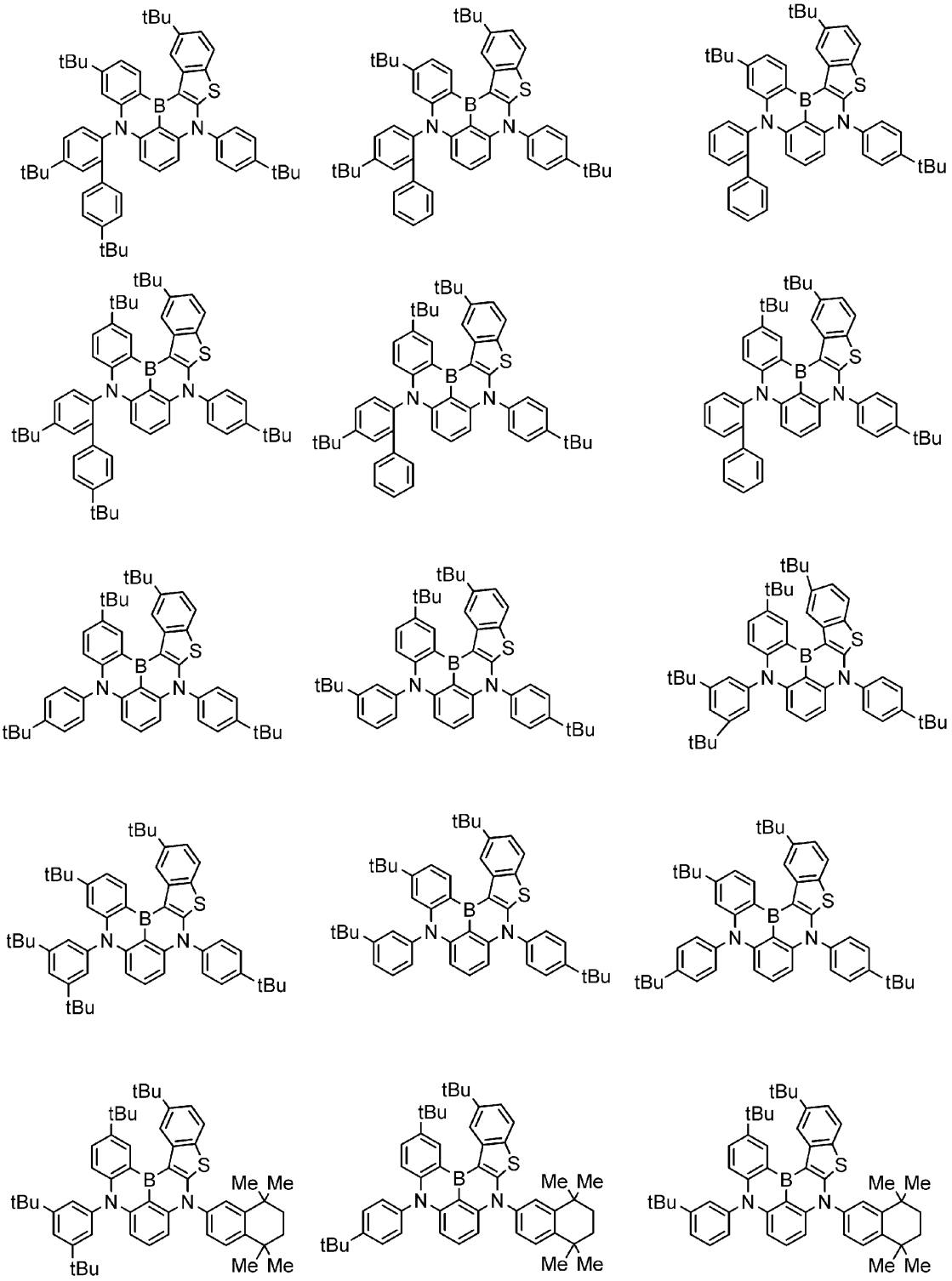
【０５３３】

【化３７６】

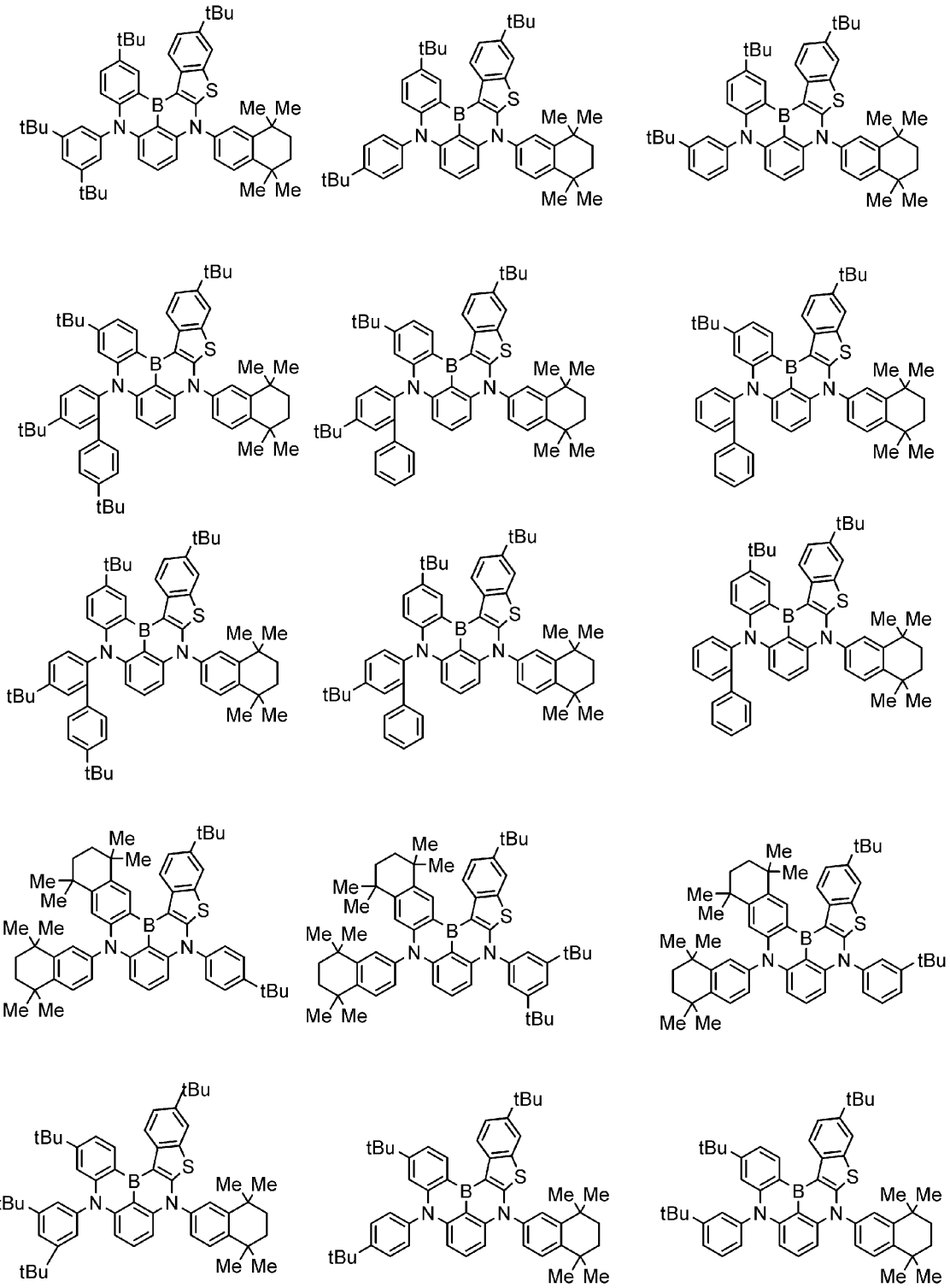
【０５３４】

【化３７７】



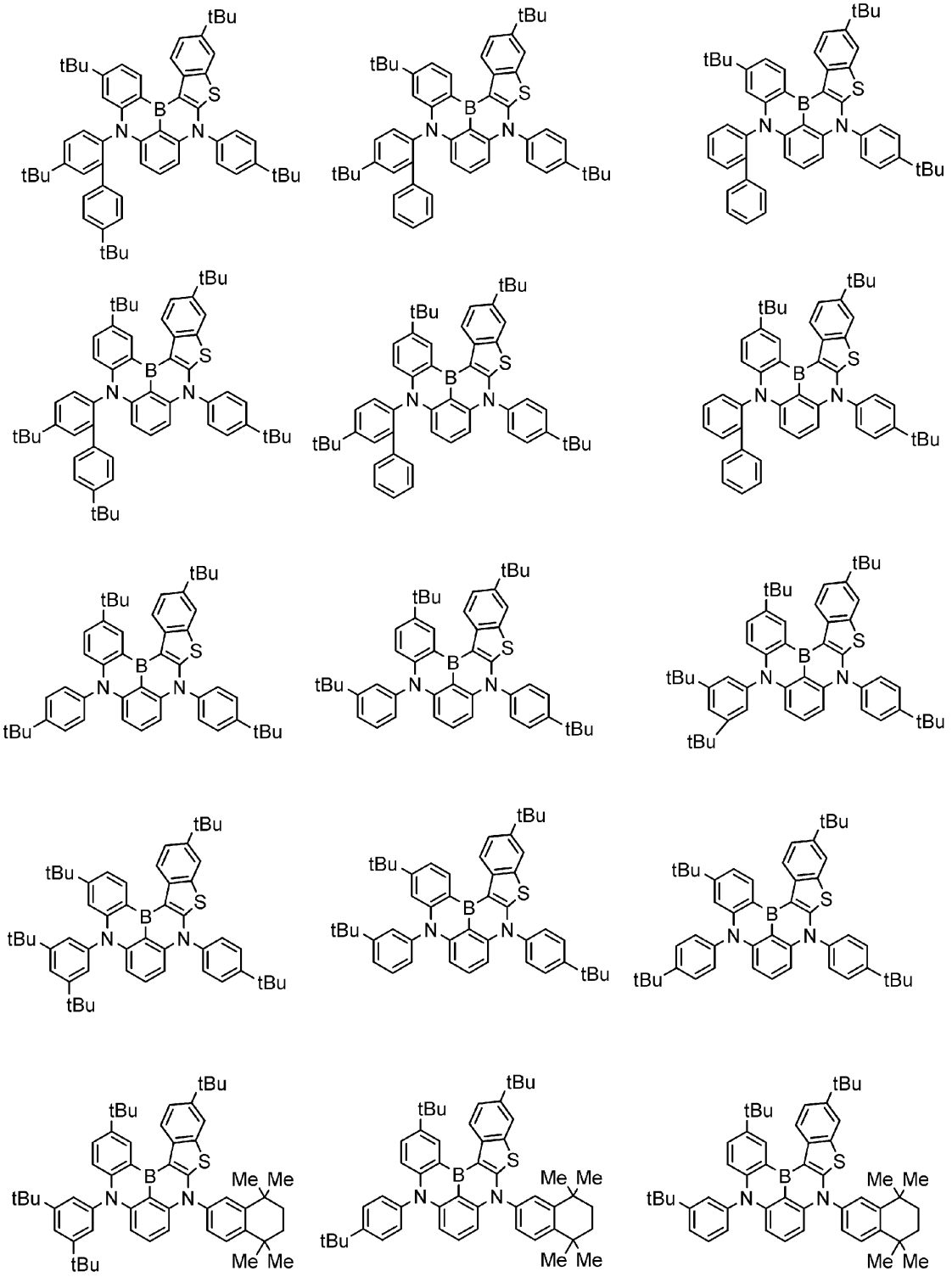
【０５３５】

【化３７８】



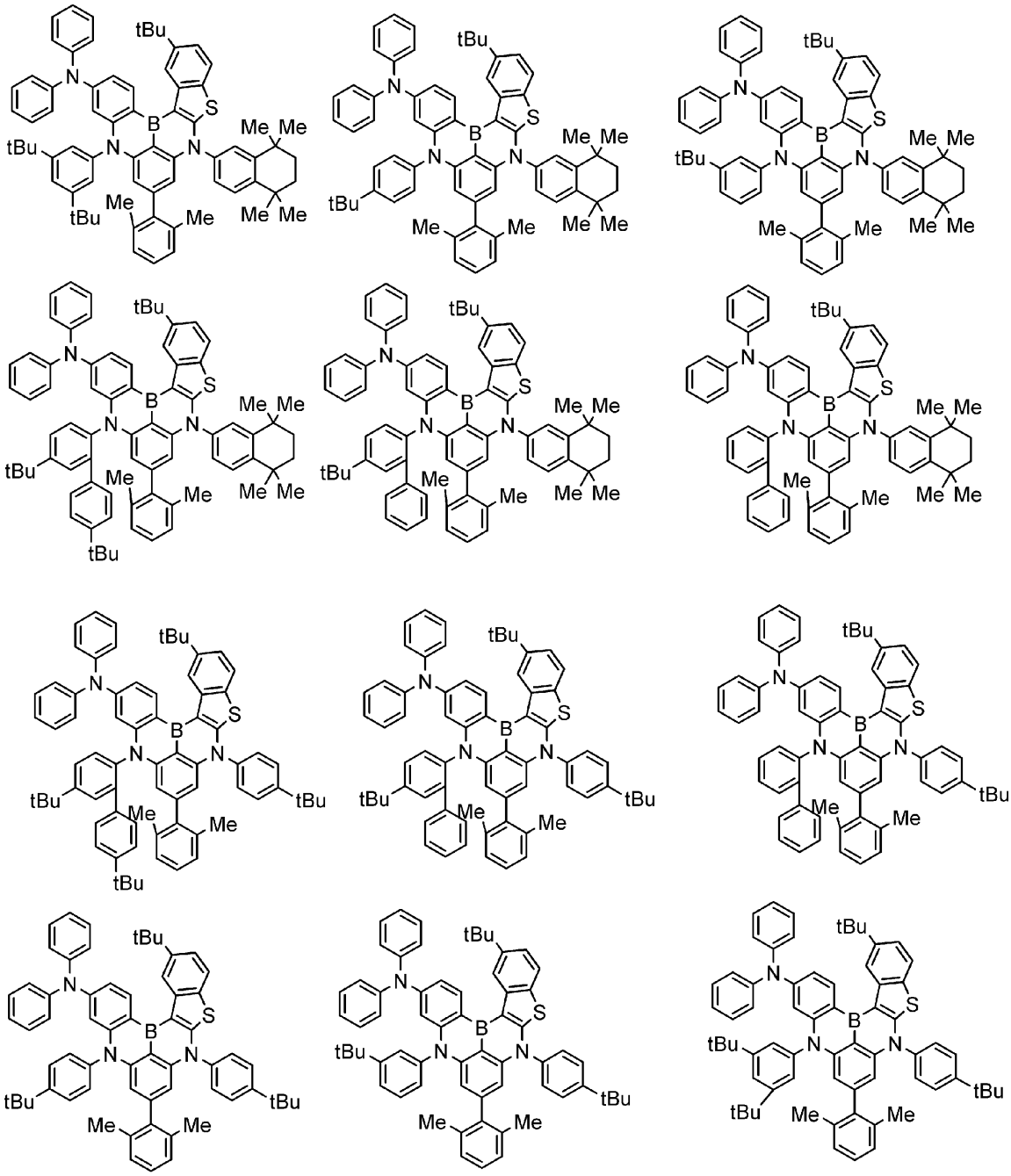
【０５３６】

【化３７９】



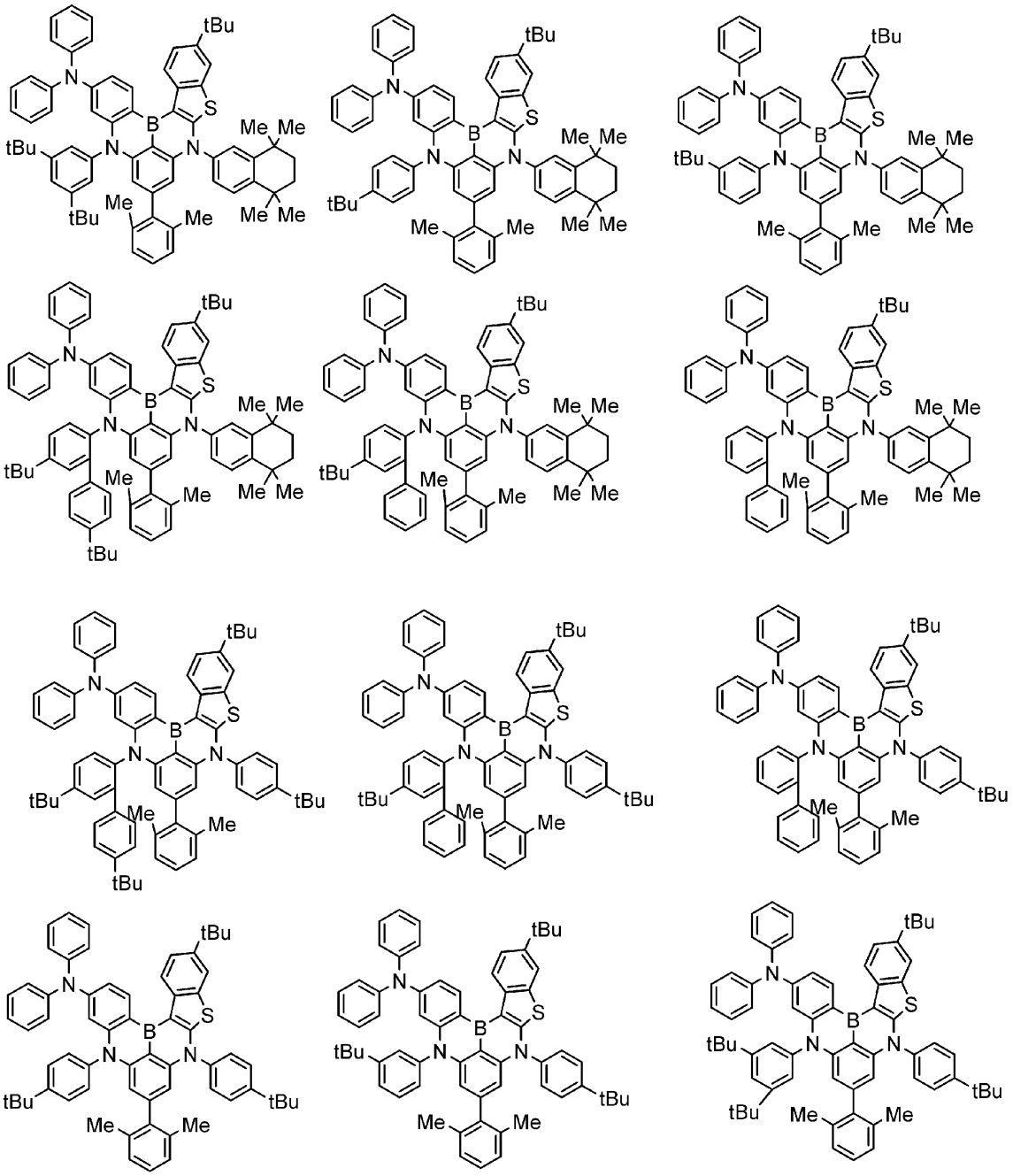
【０５３７】

【化３８０】



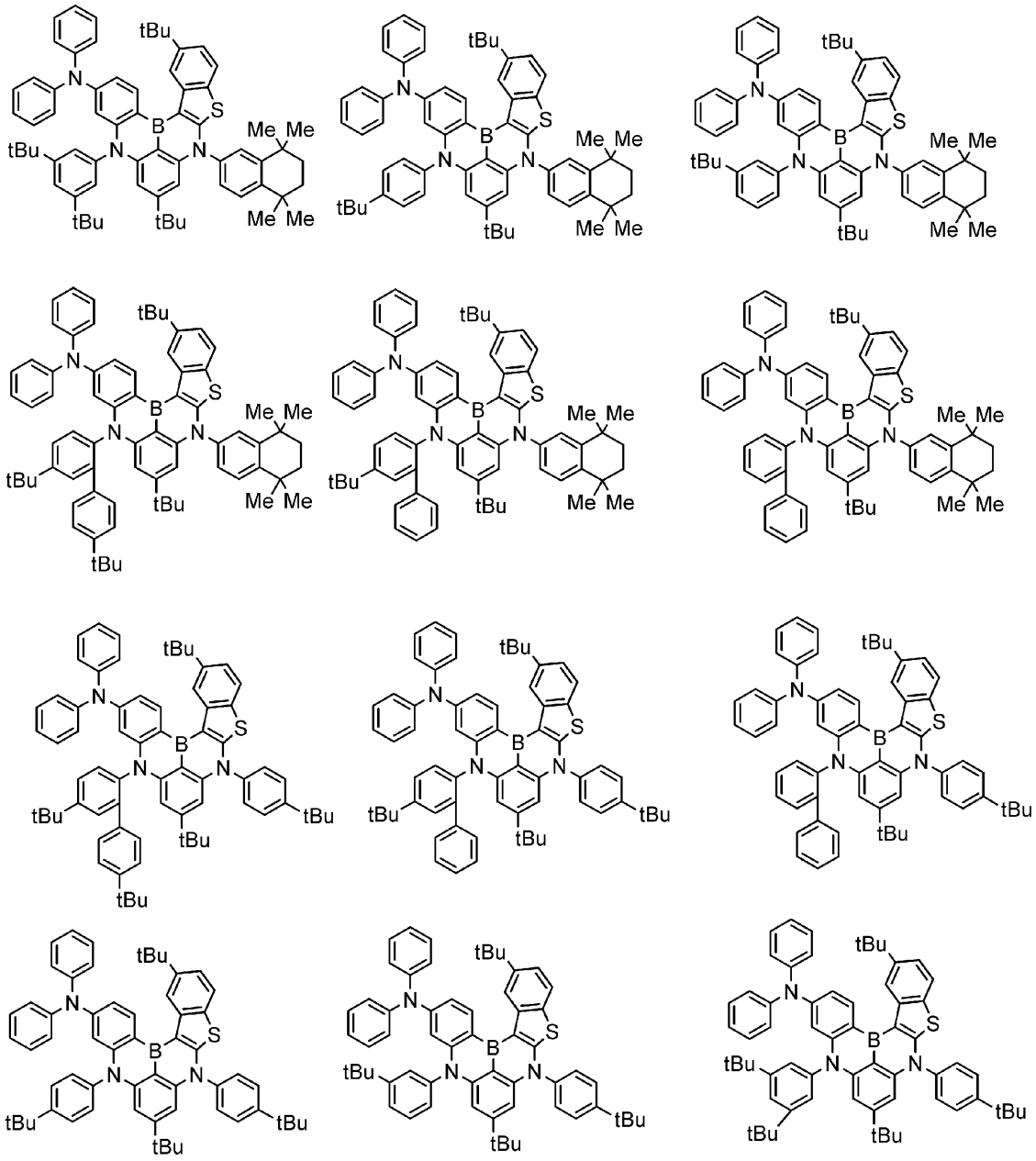
【０５３８】

【化３８１】



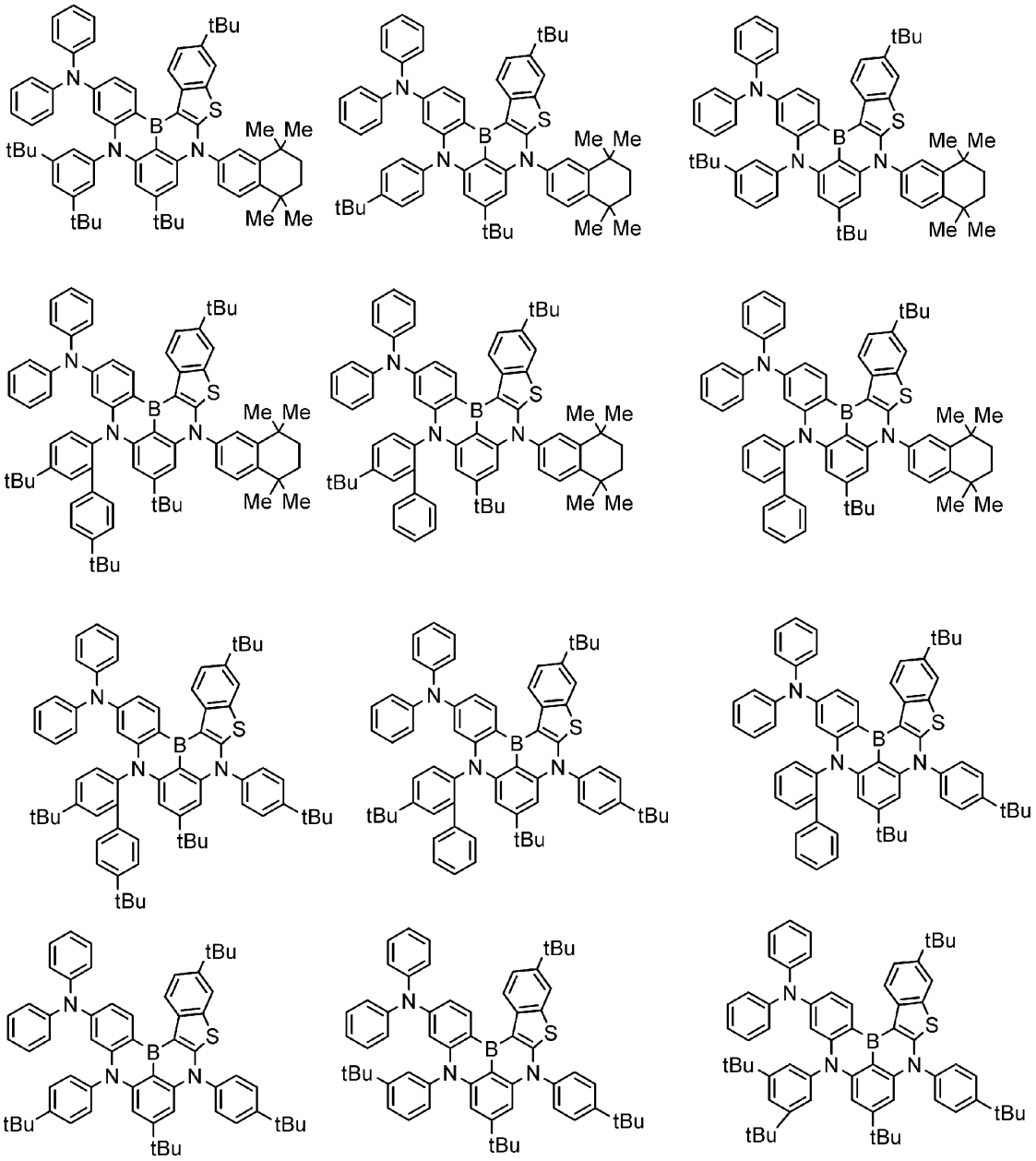
【０５３９】

【化３８２】



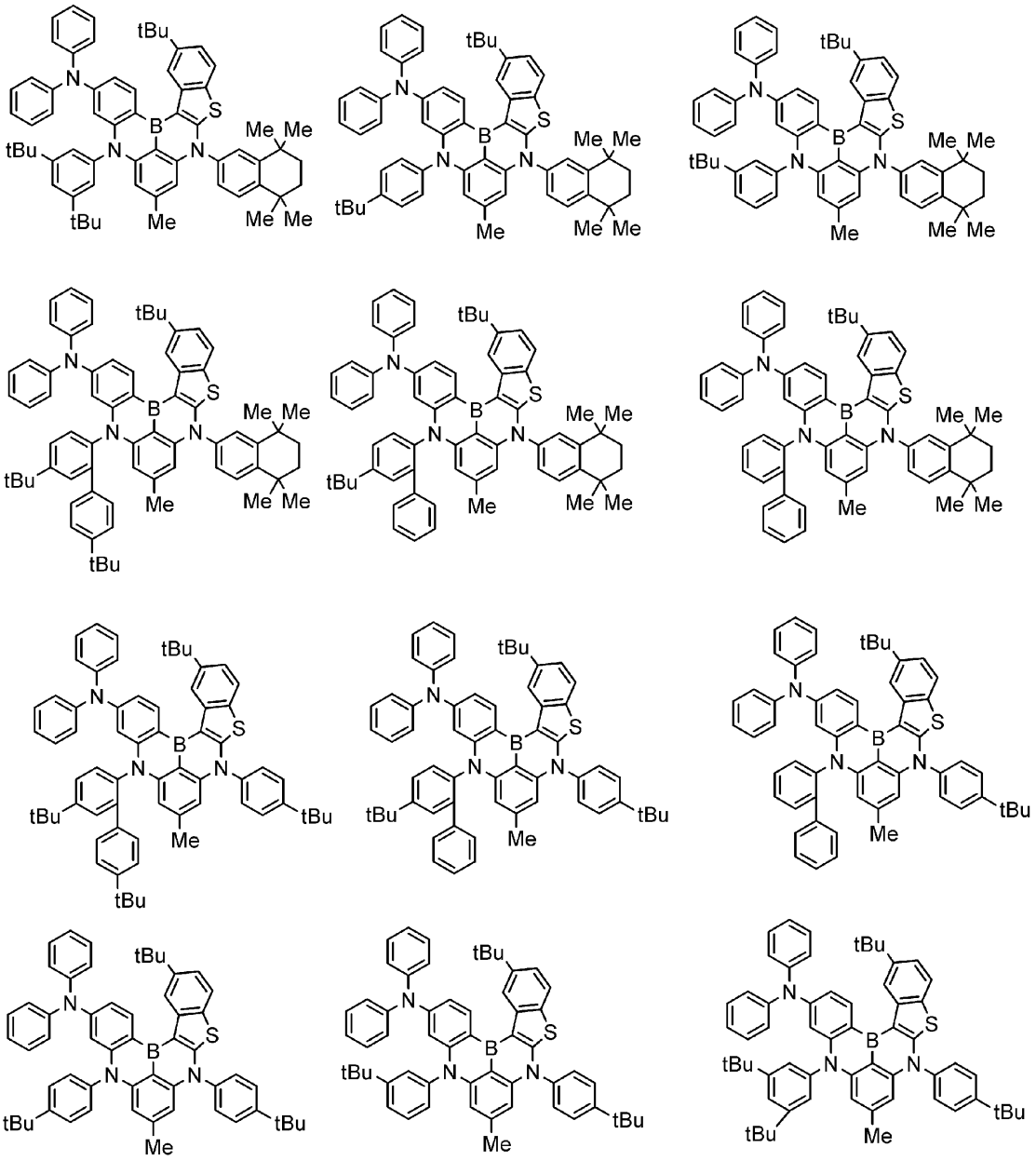
【０５４０】

【化３８３】



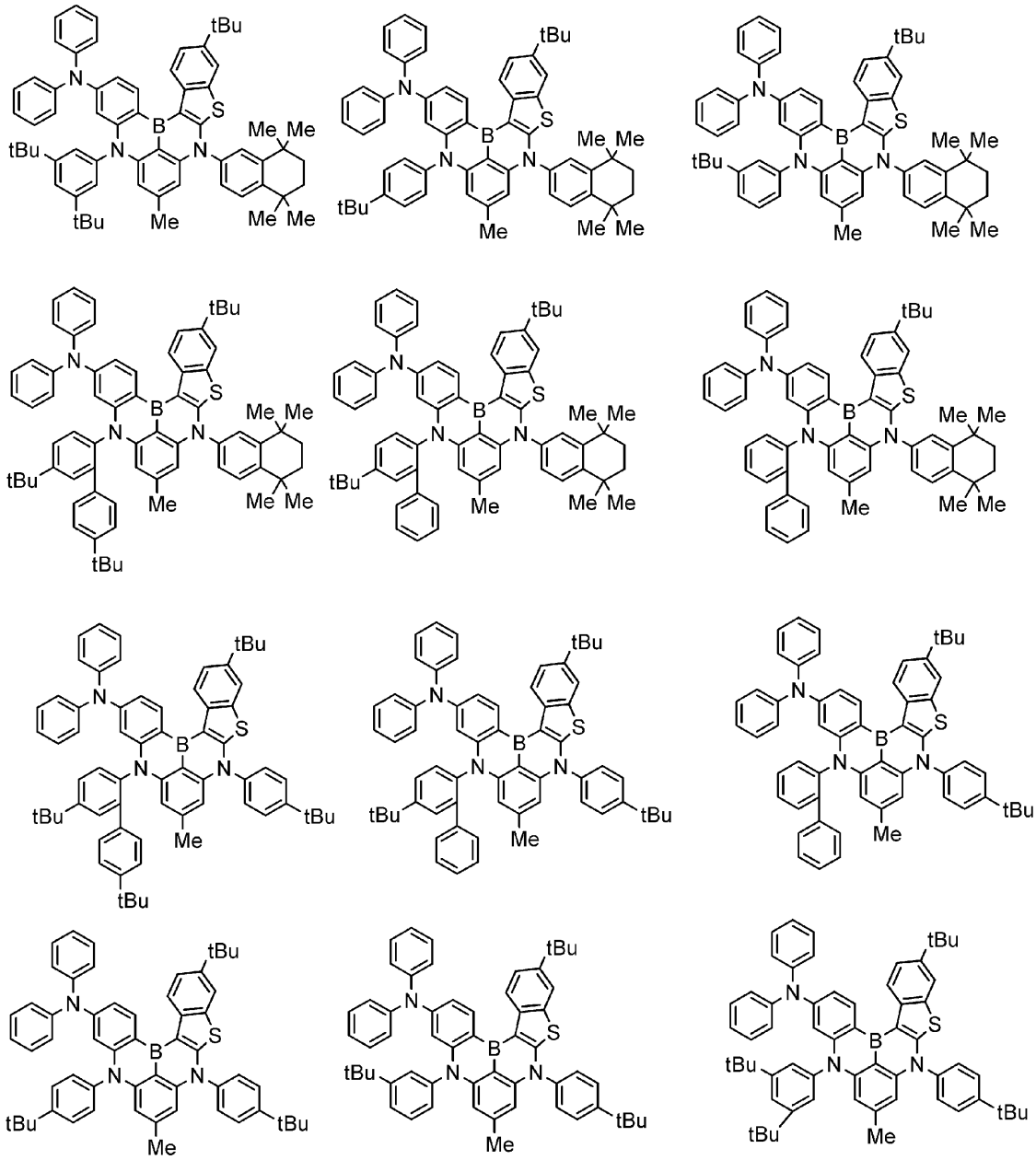
【０５４１】

【化３８４】



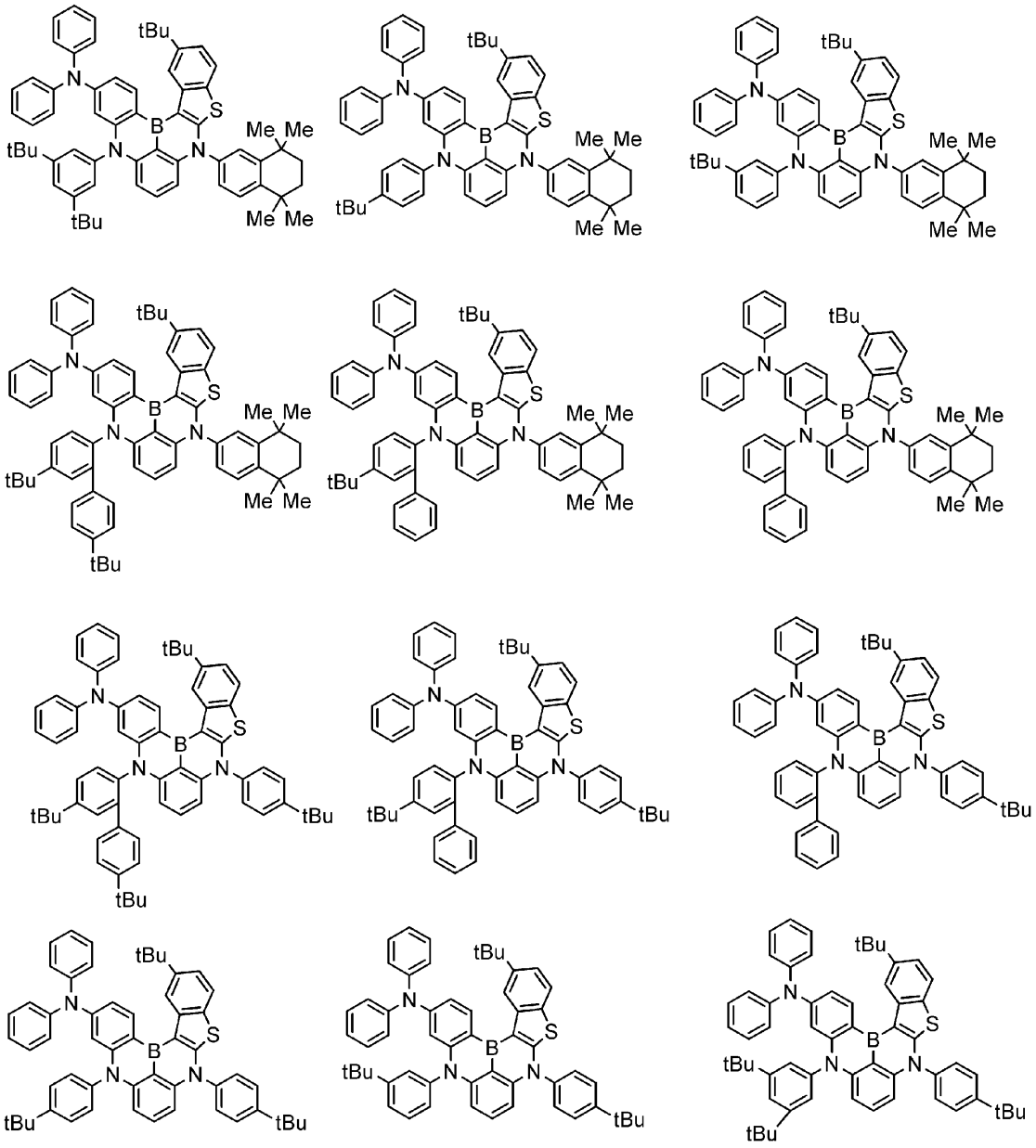
【０５４２】

【化３８５】



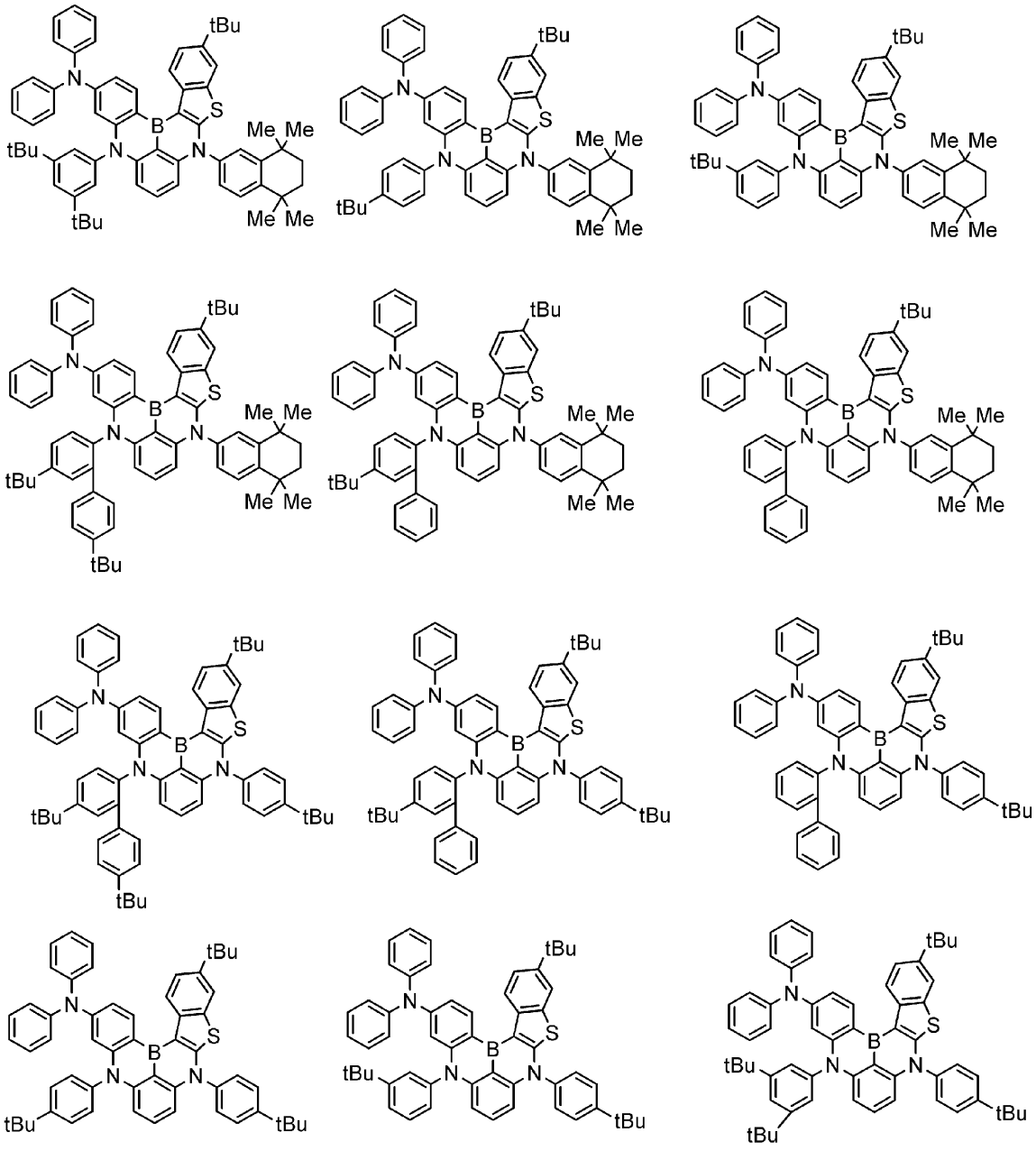
【０５４３】

【化３８６】



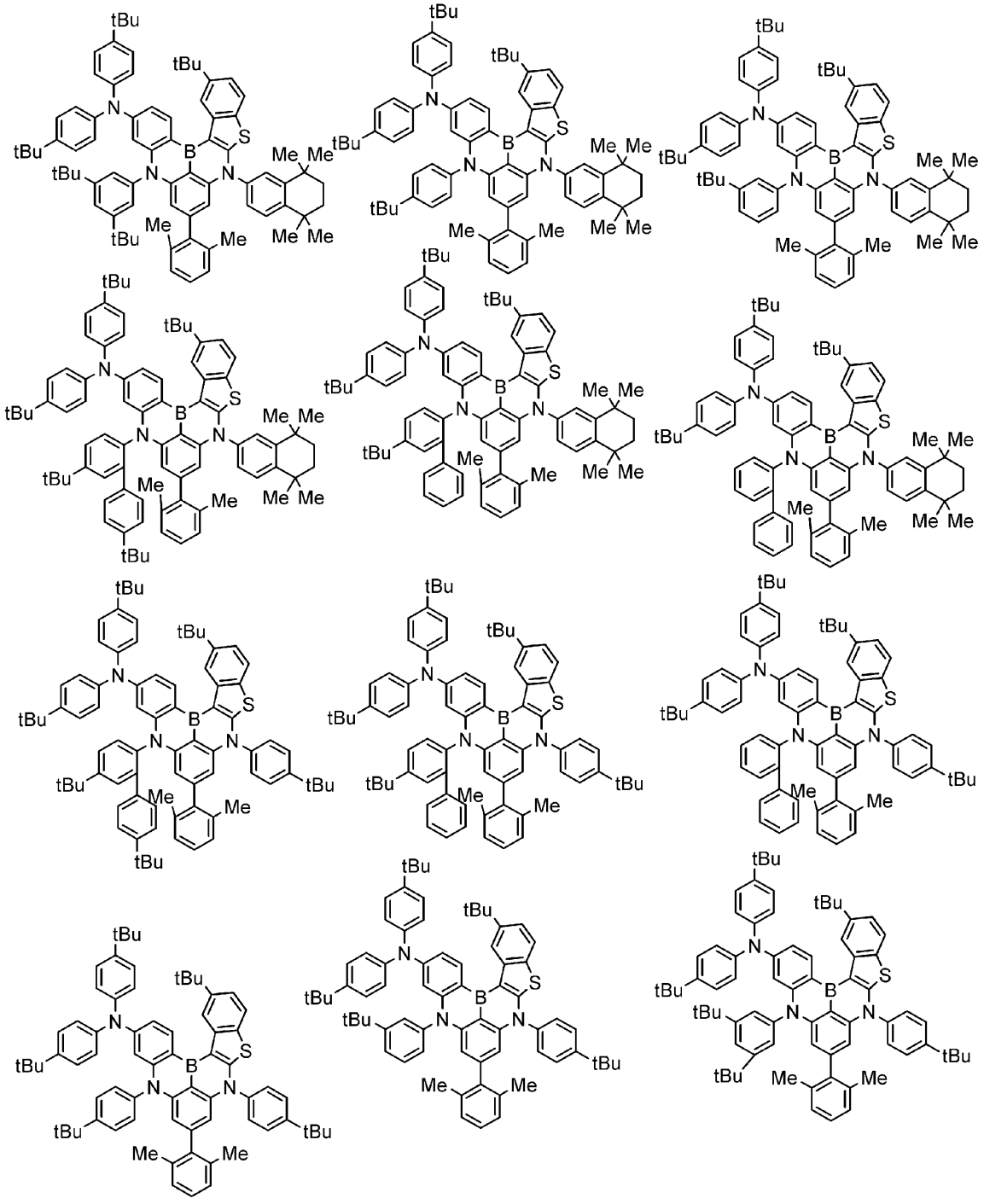
【０５４４】

【化３８７】



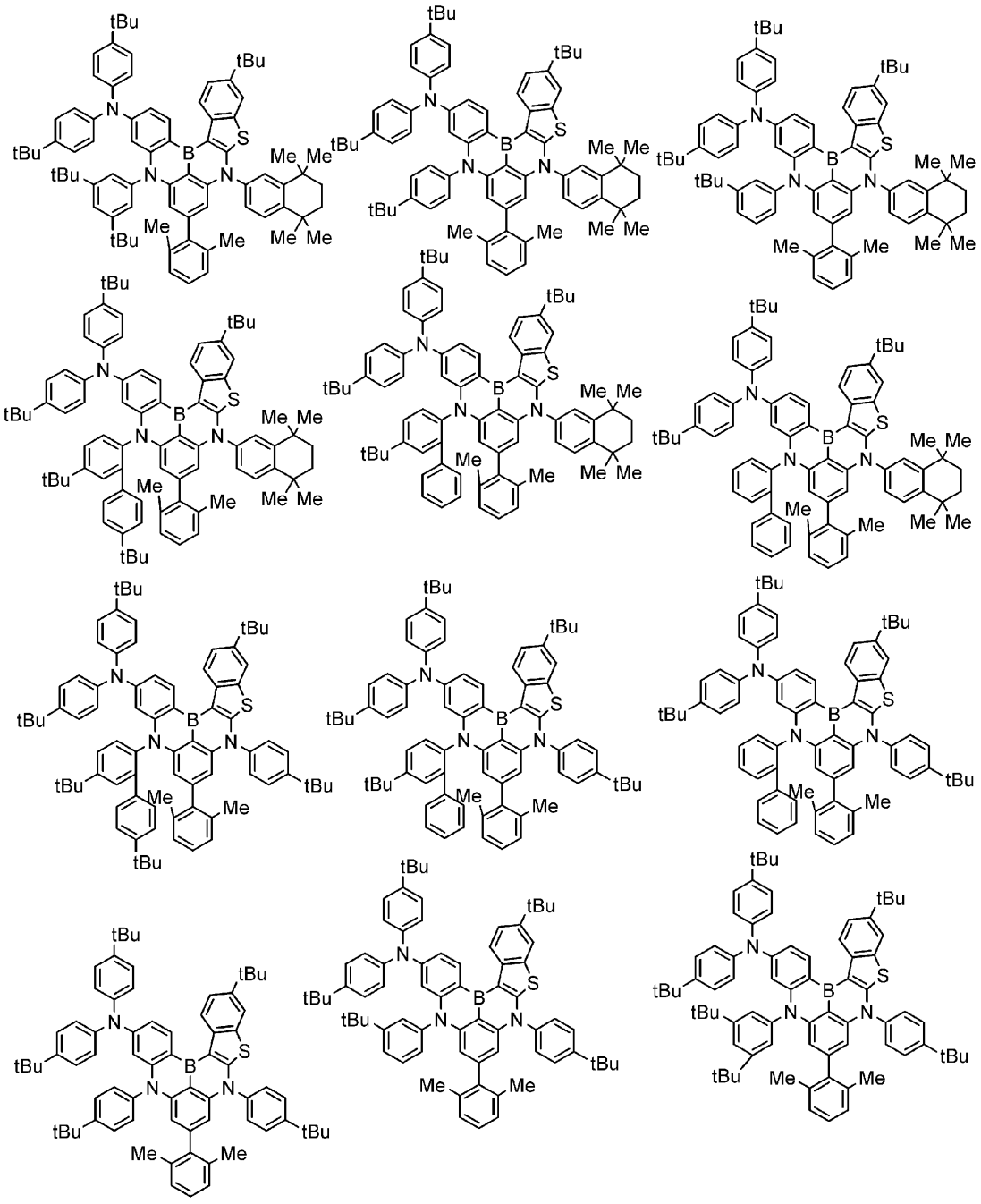
【０５４５】

【化３８８】



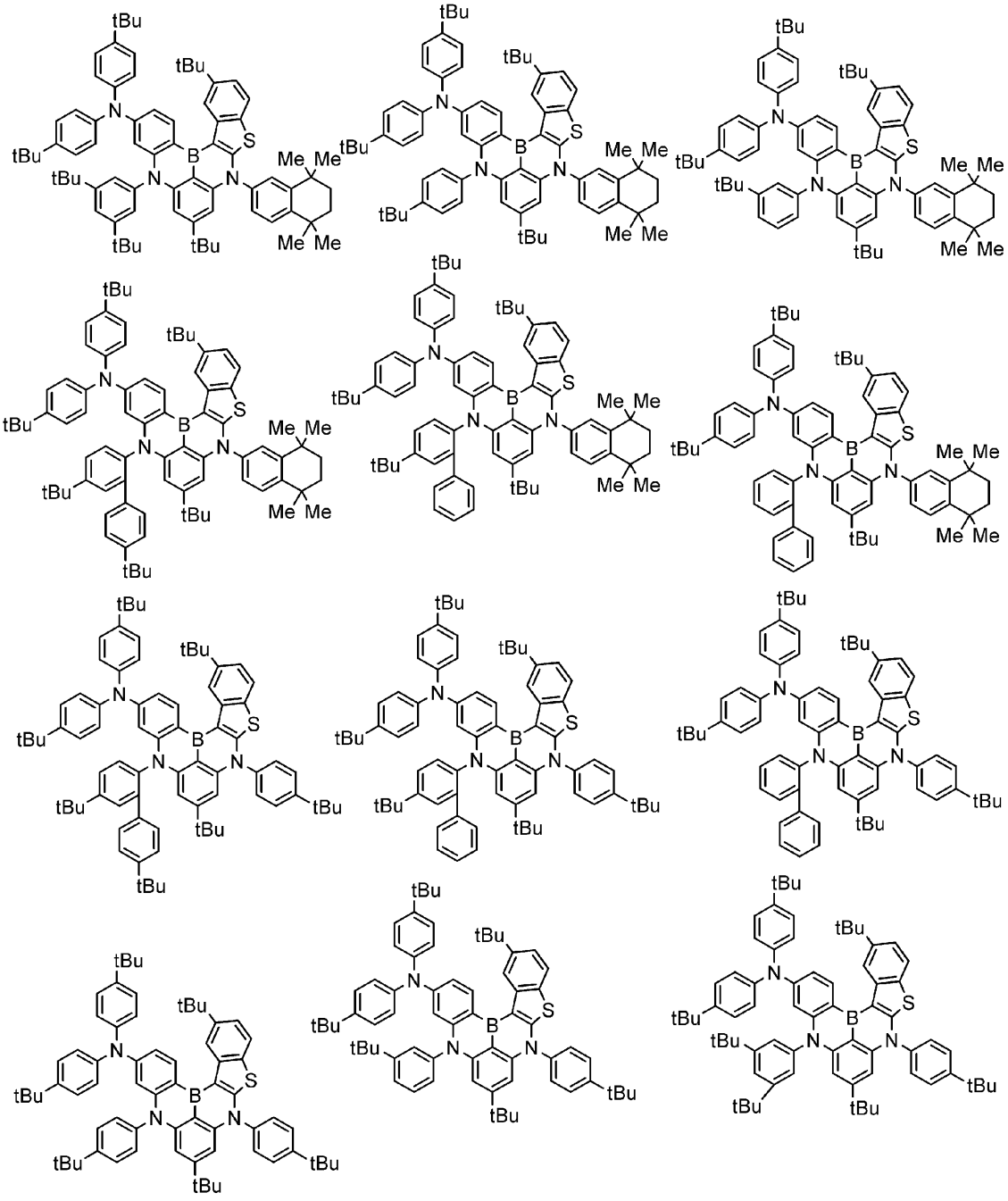
【０５４６】

【化３８９】



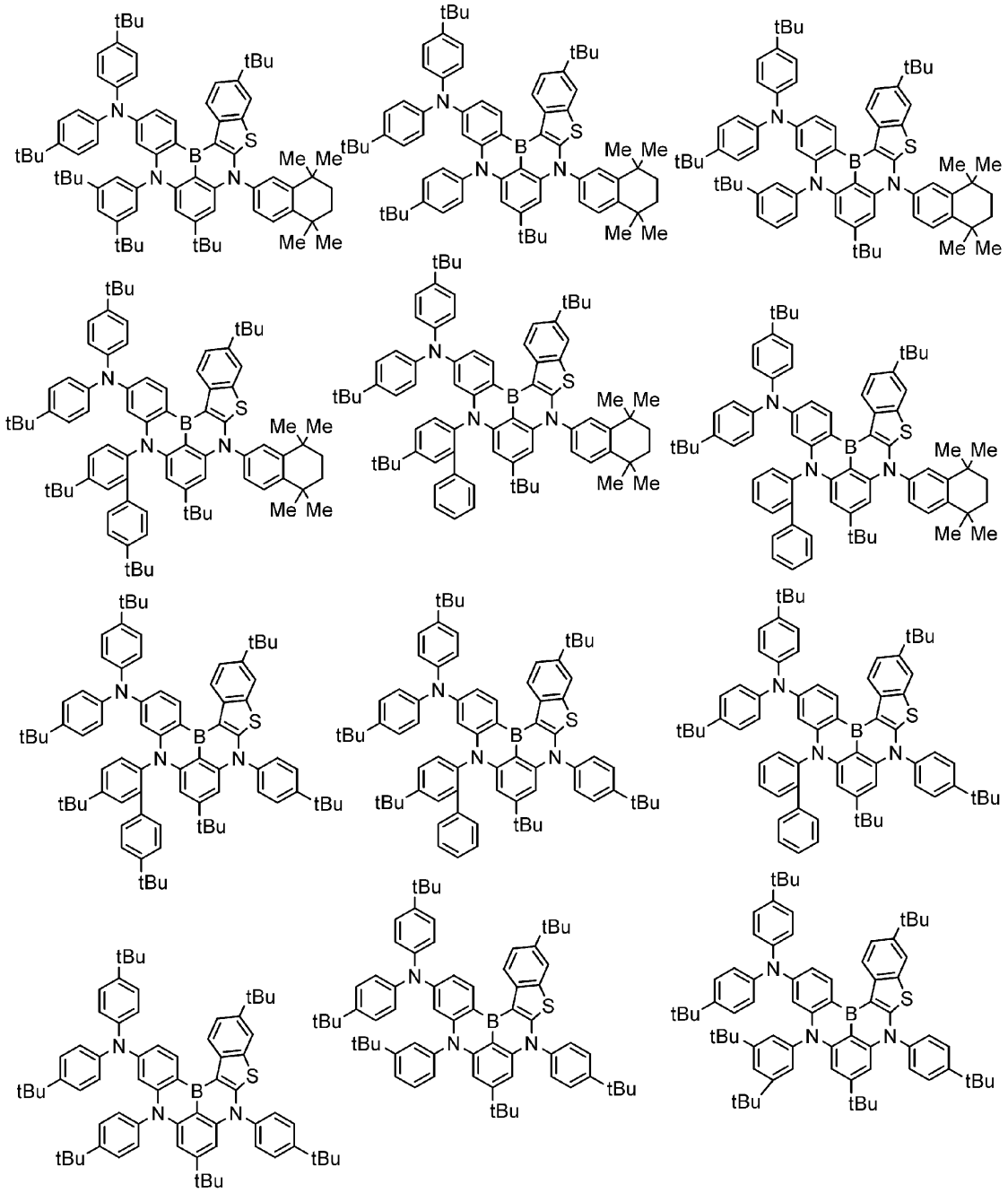
【０５４７】

【化３９０】



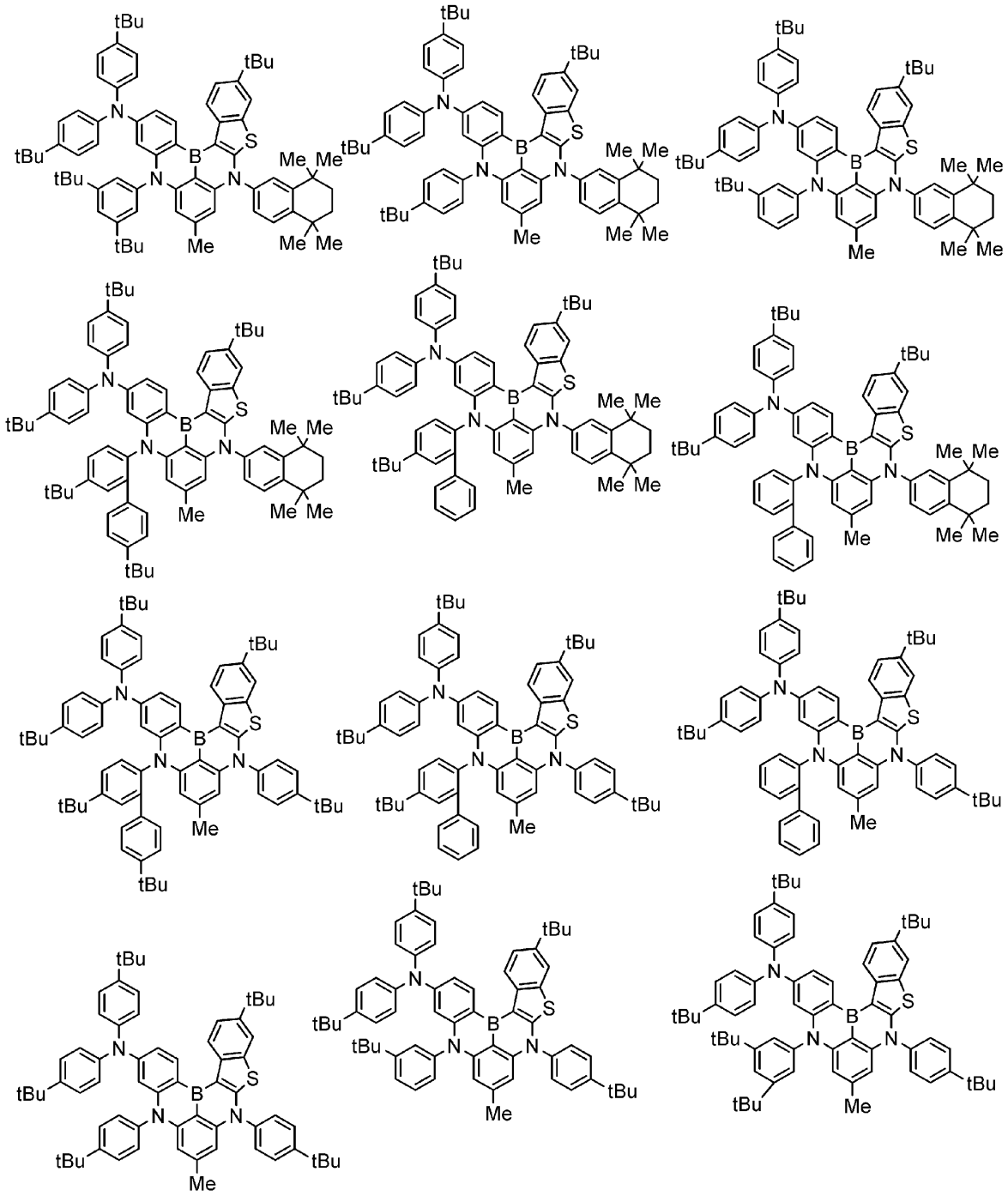
【０５４８】

【化３９１】



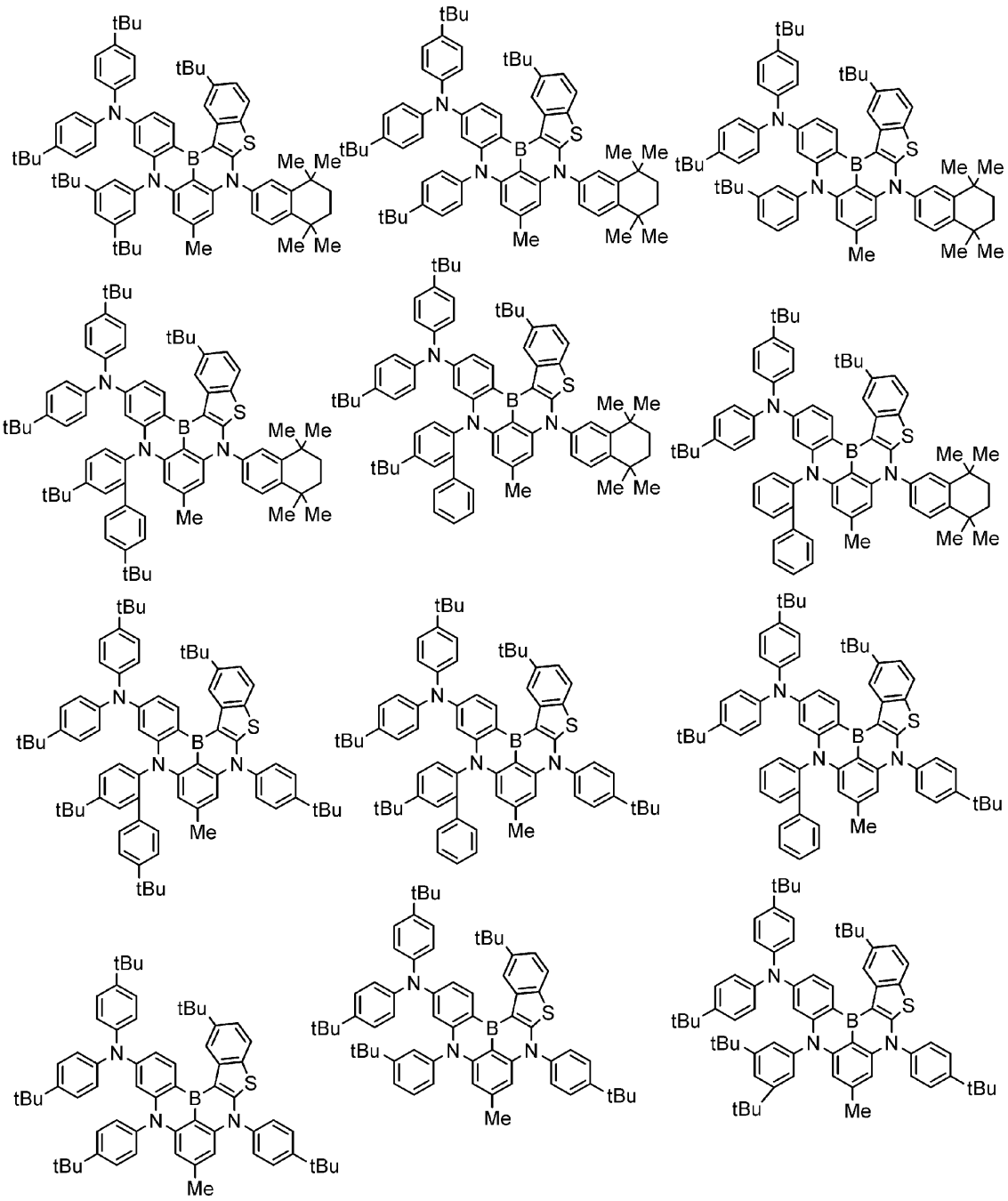
【０５４９】

【化３９２】



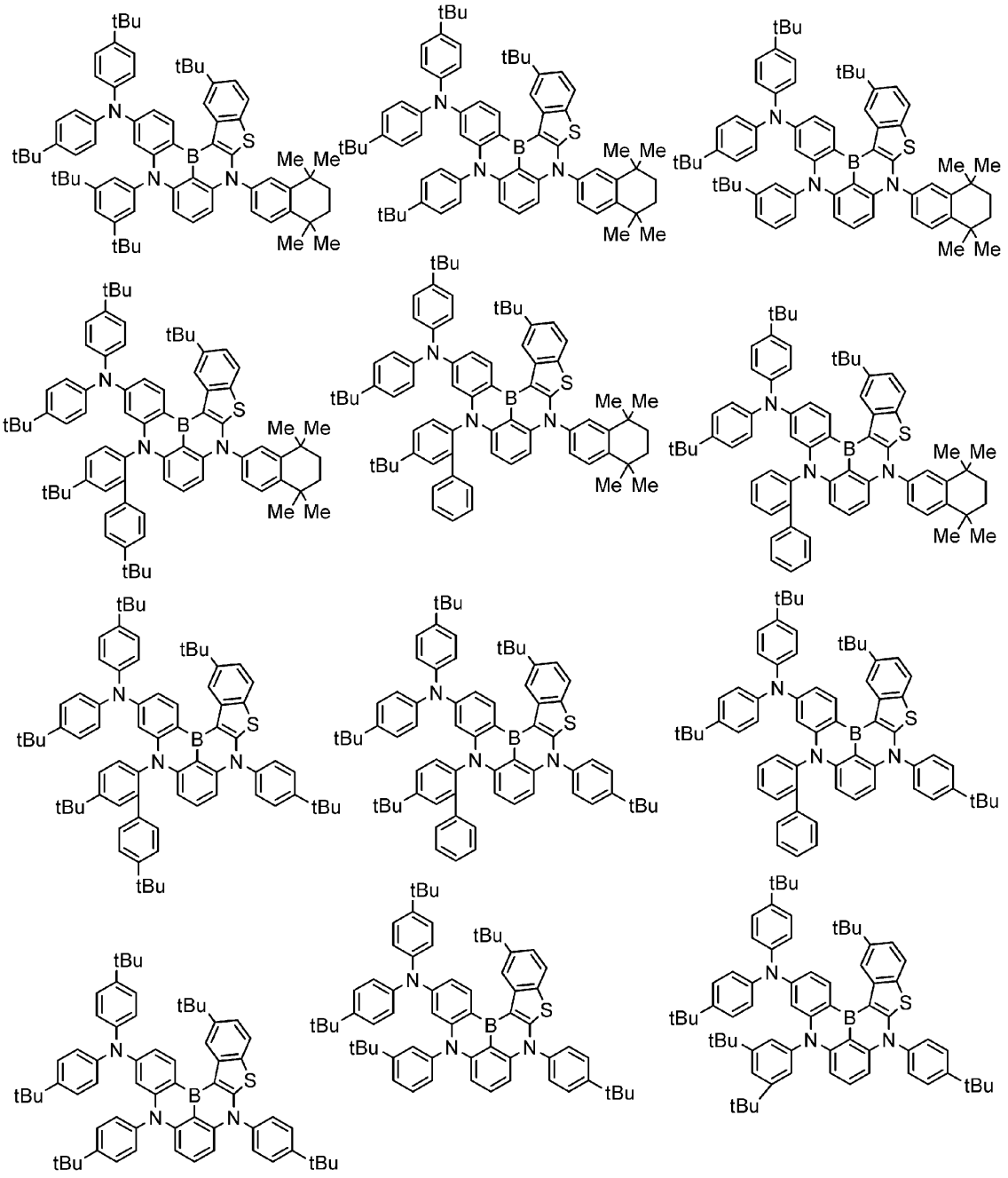
【０５５０】

【化３９３】



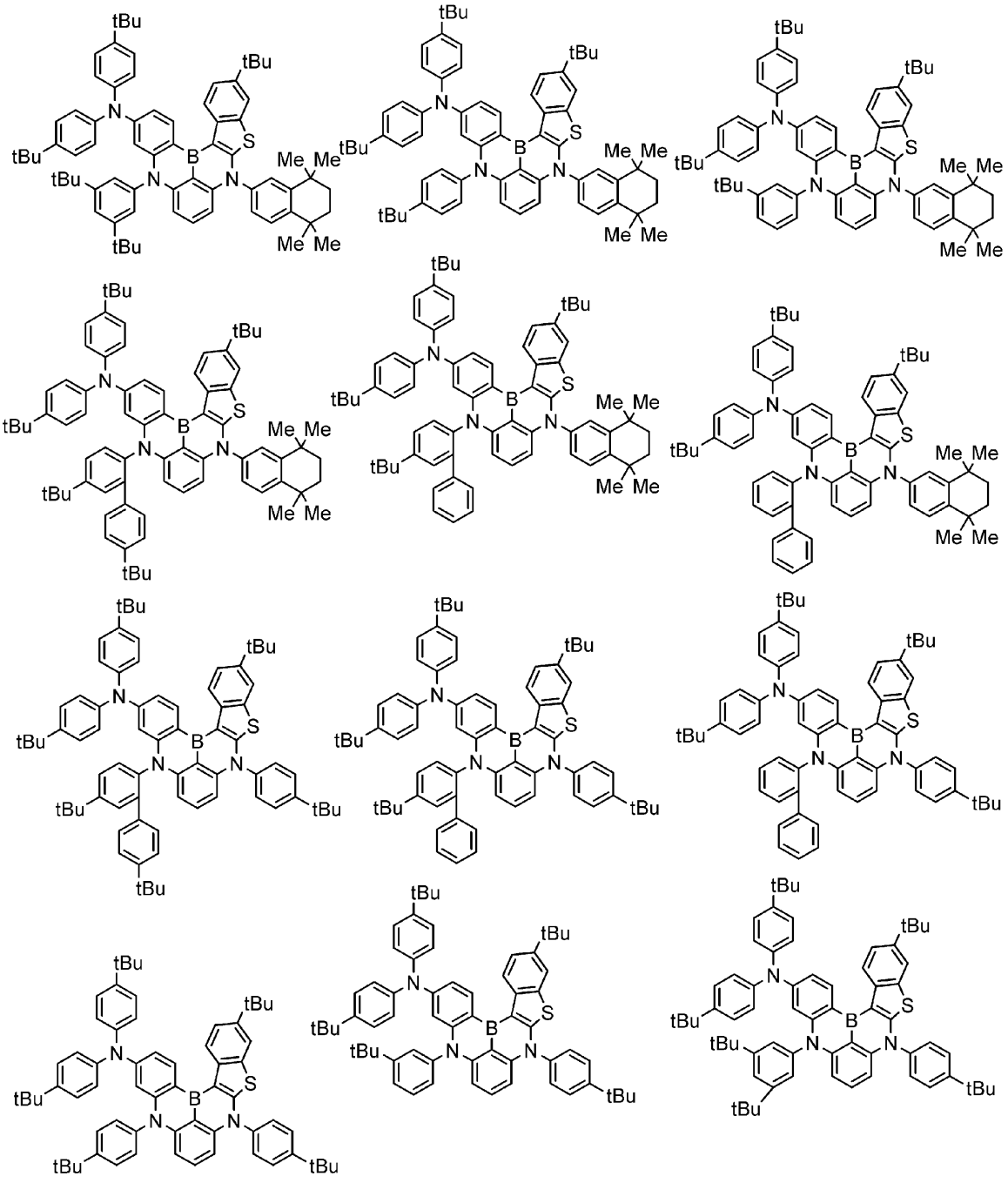
【０５５１】

【化３９４】



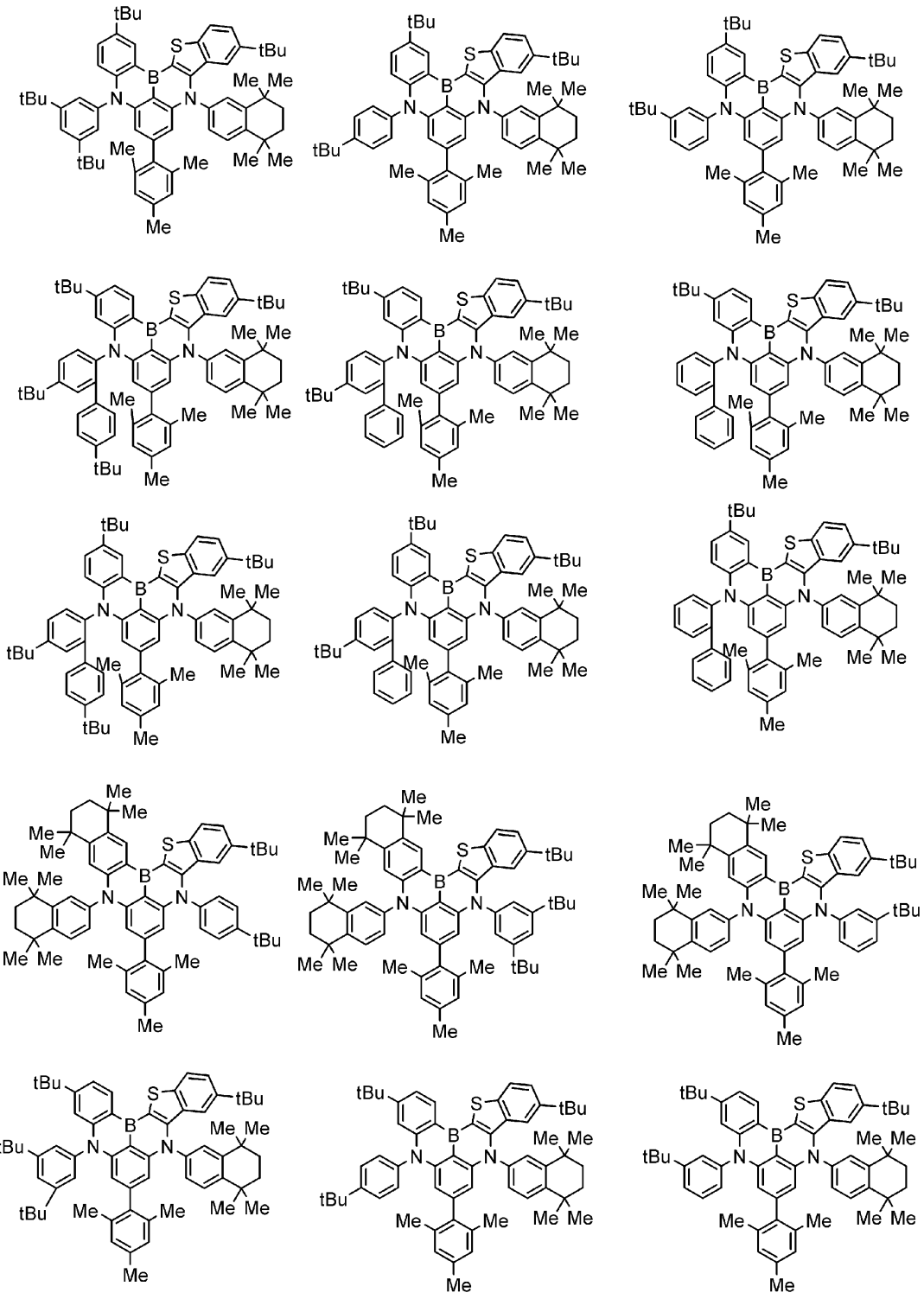
【０５５２】

【化３９５】



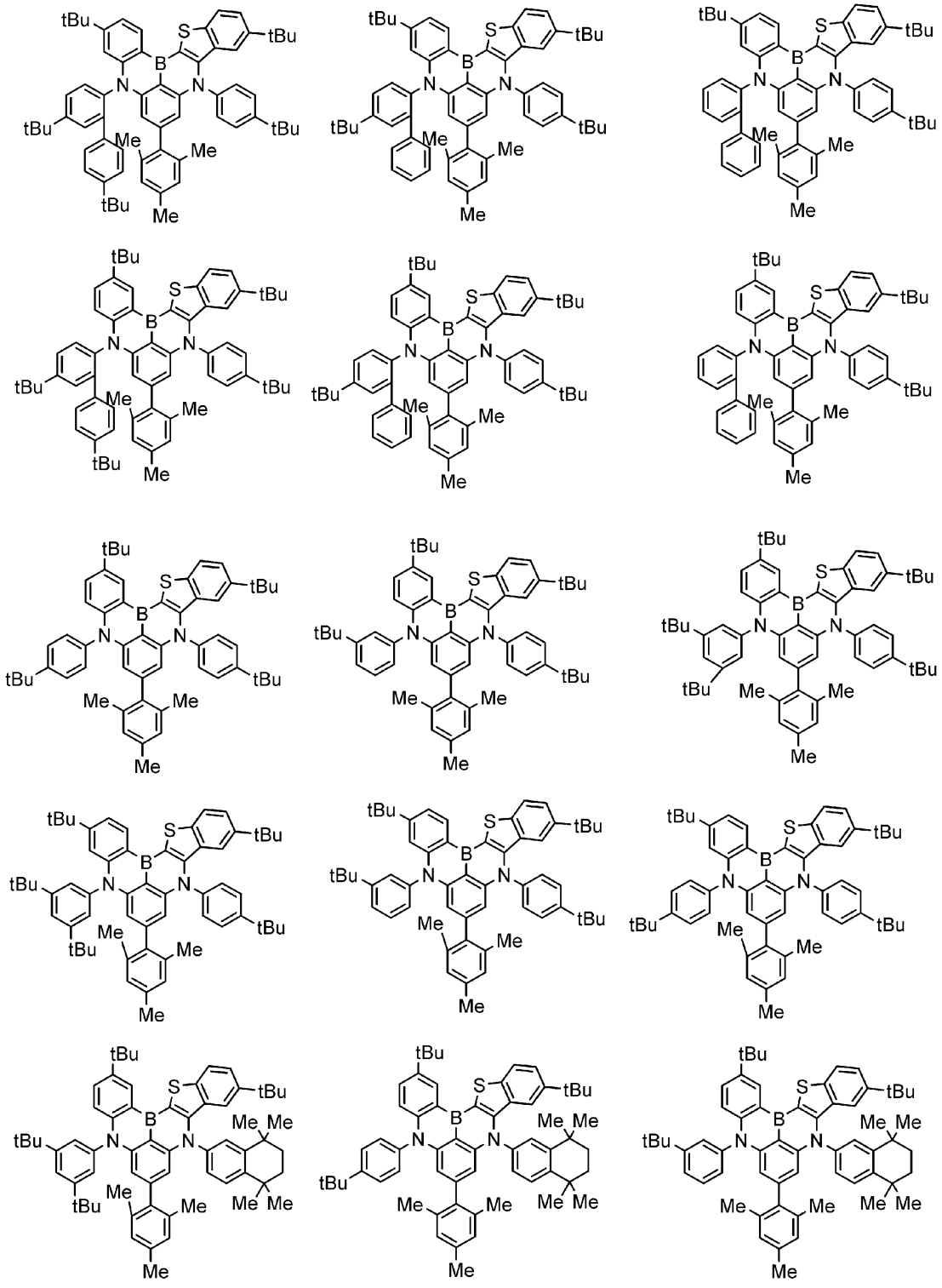
【０５５３】

【化３９６】



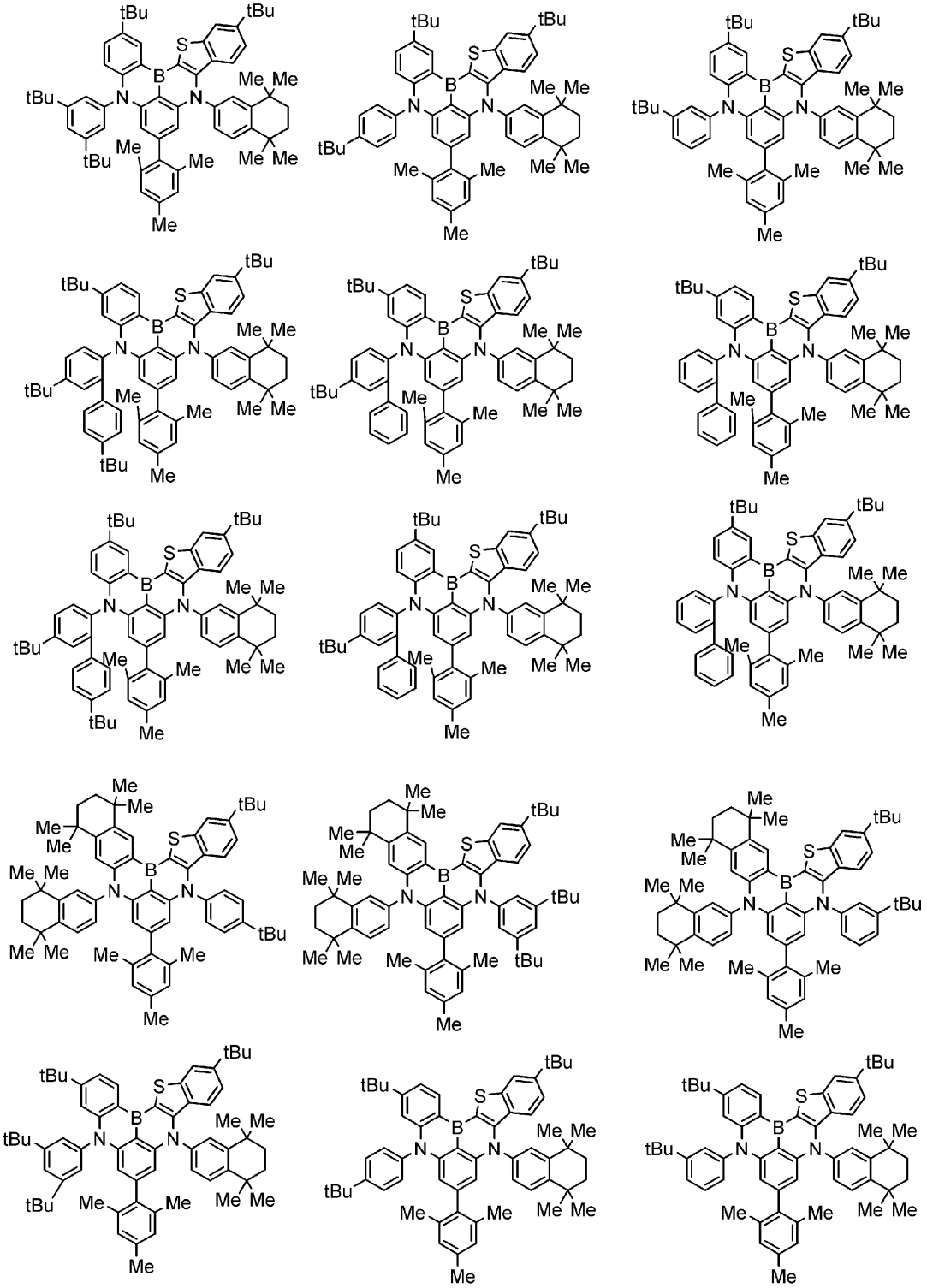
【０５５４】

【化３９７】



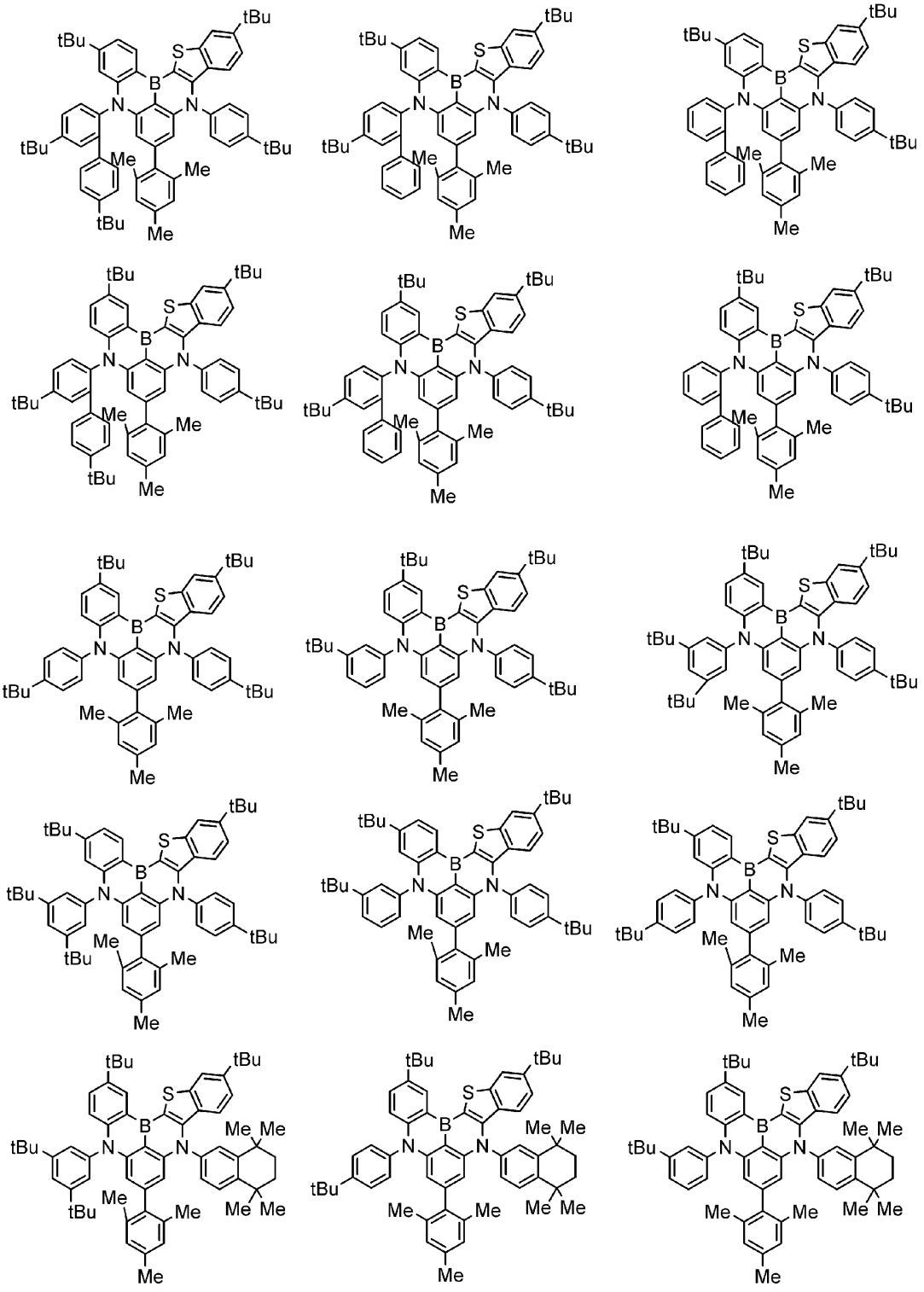
【０５５５】

【化３９８】



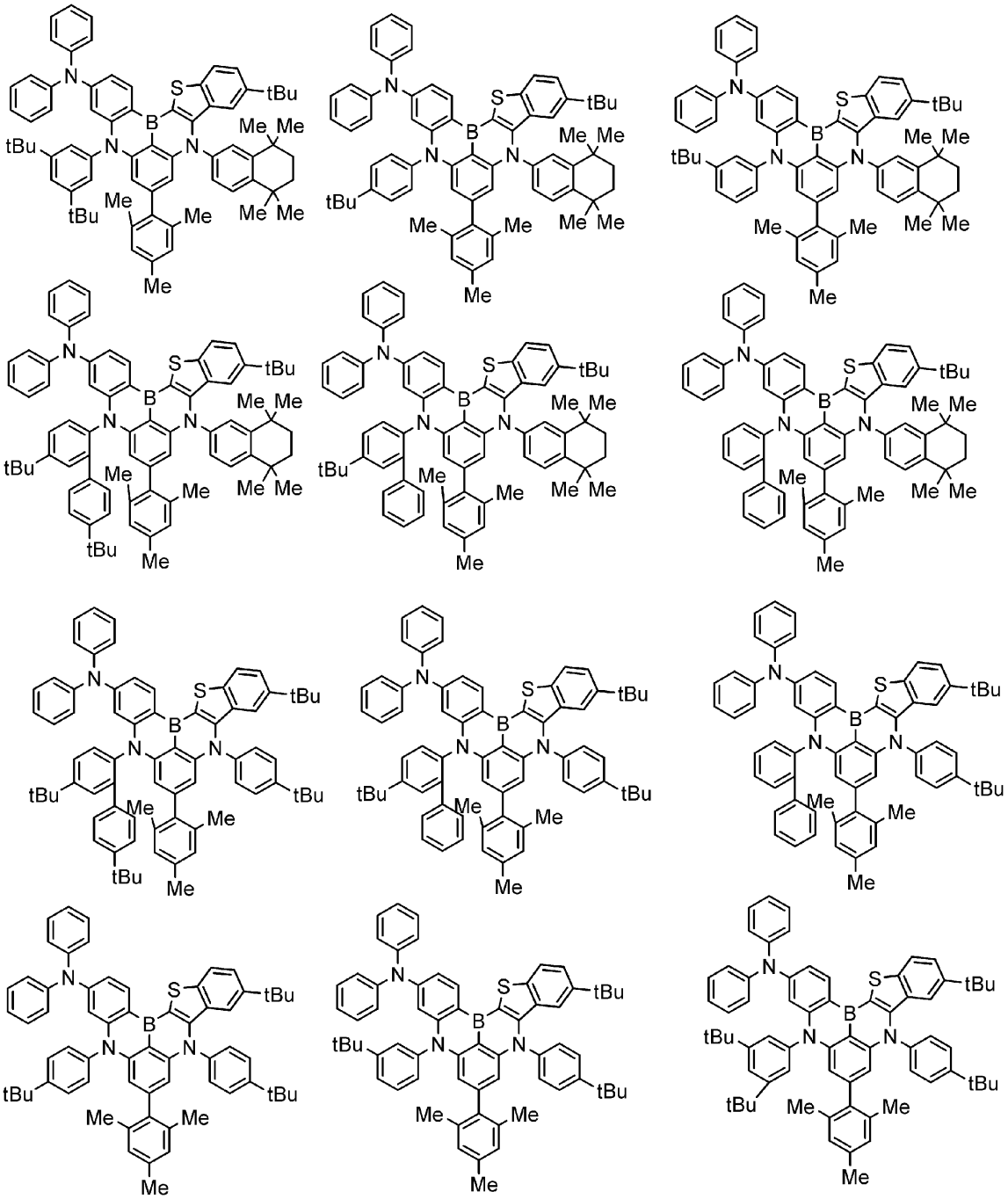
【０５５６】

【化３９９】



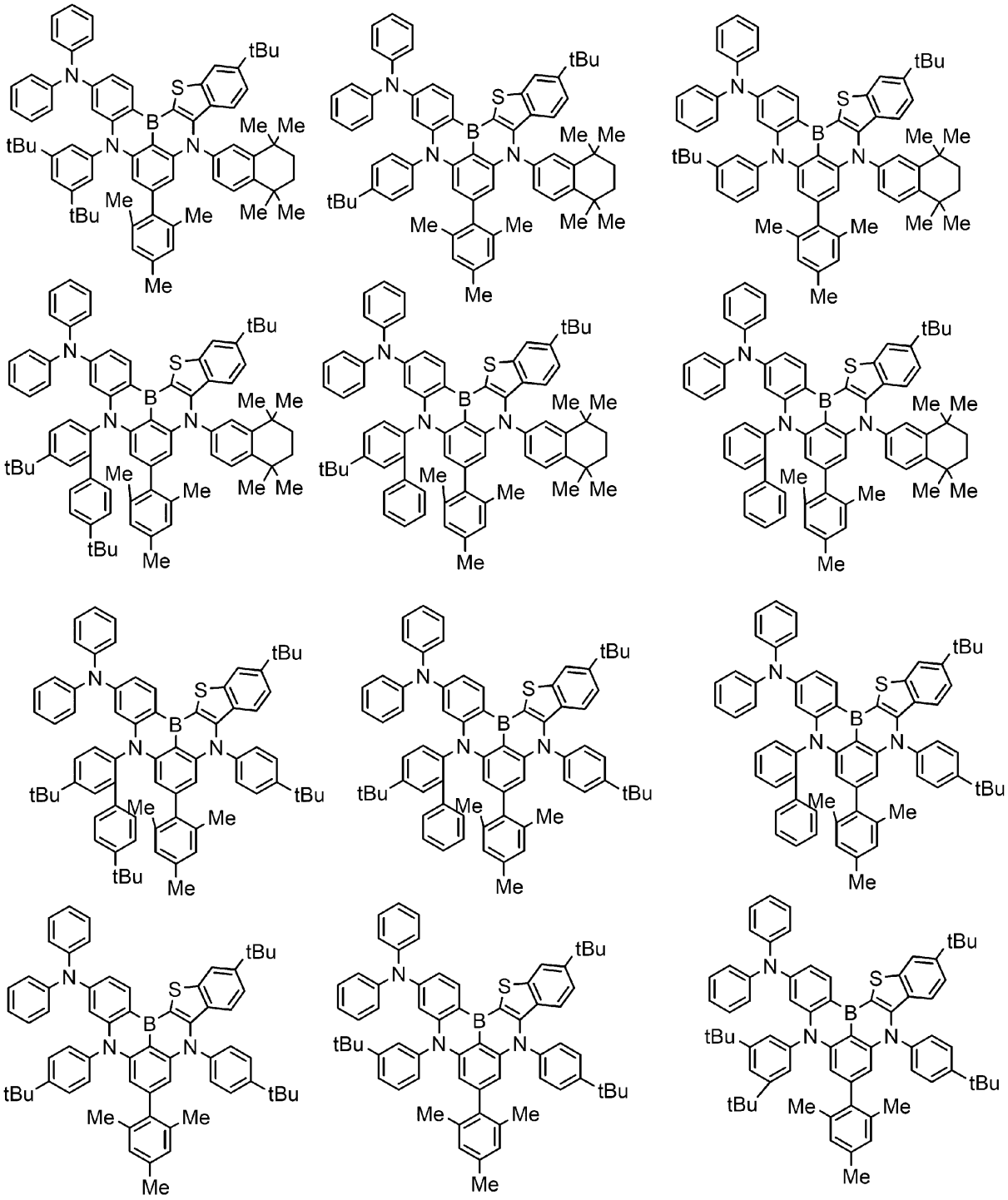
【０５５７】

【化４００】



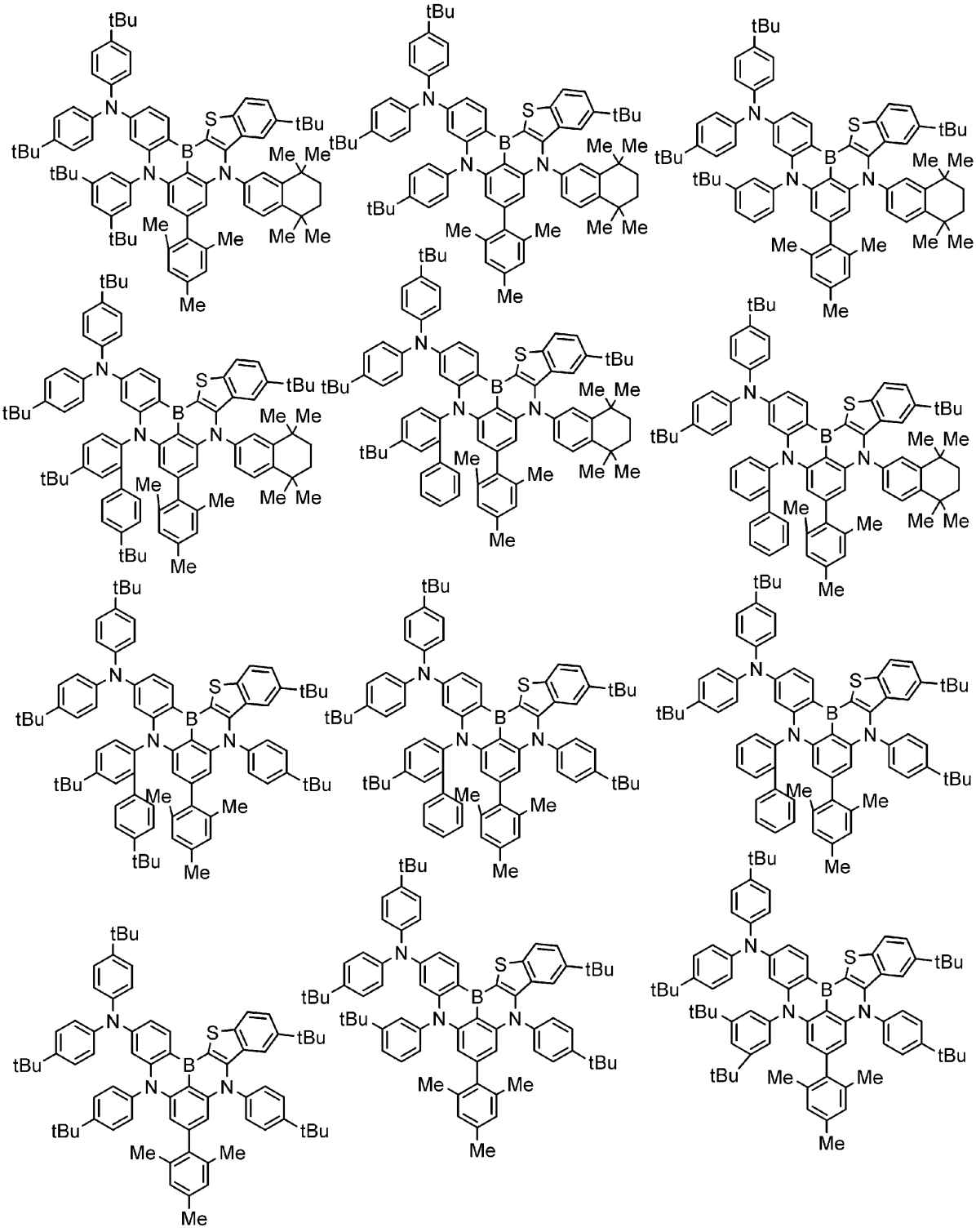
【０５５８】

【化４０１】



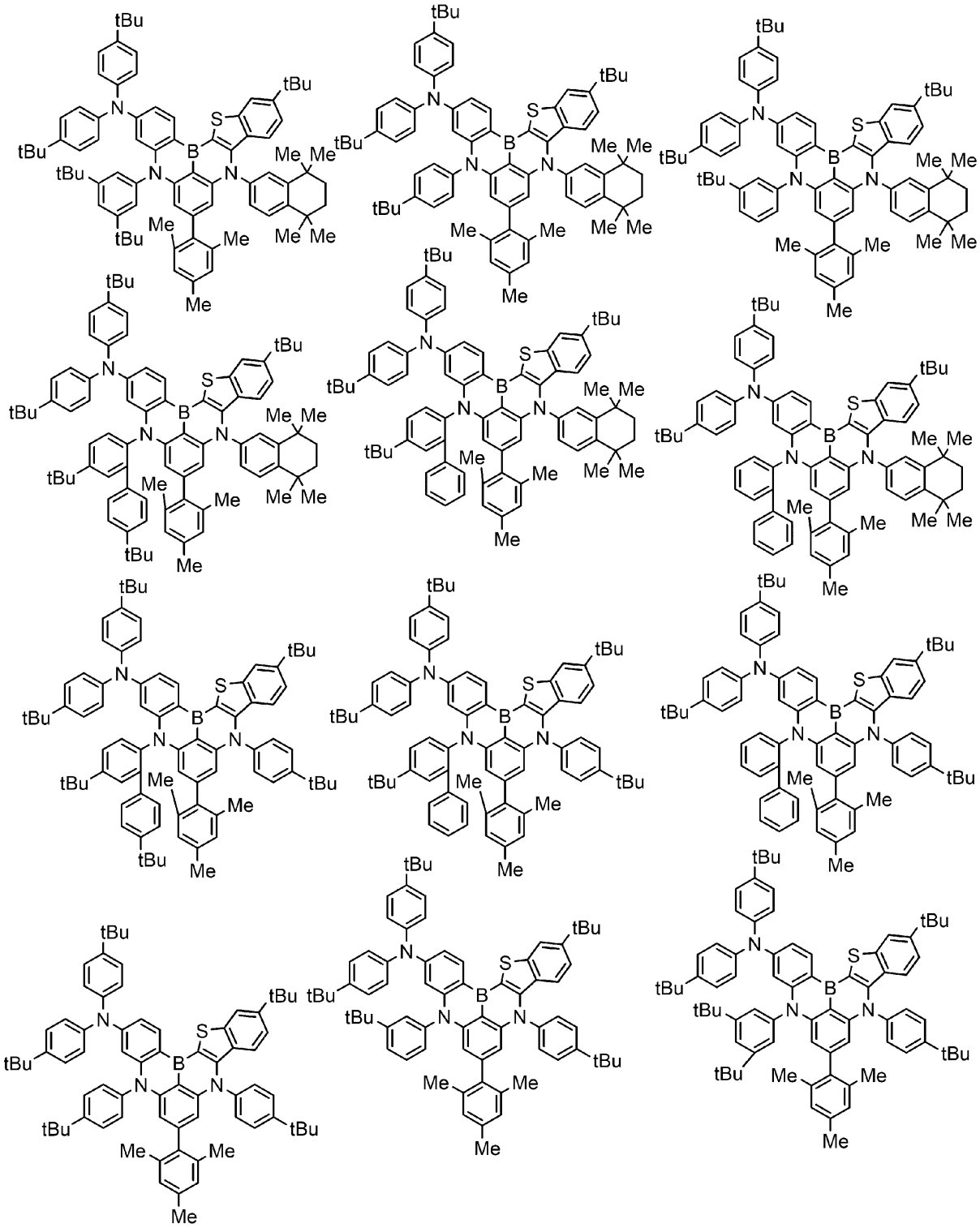
【０５５９】

【化４０２】



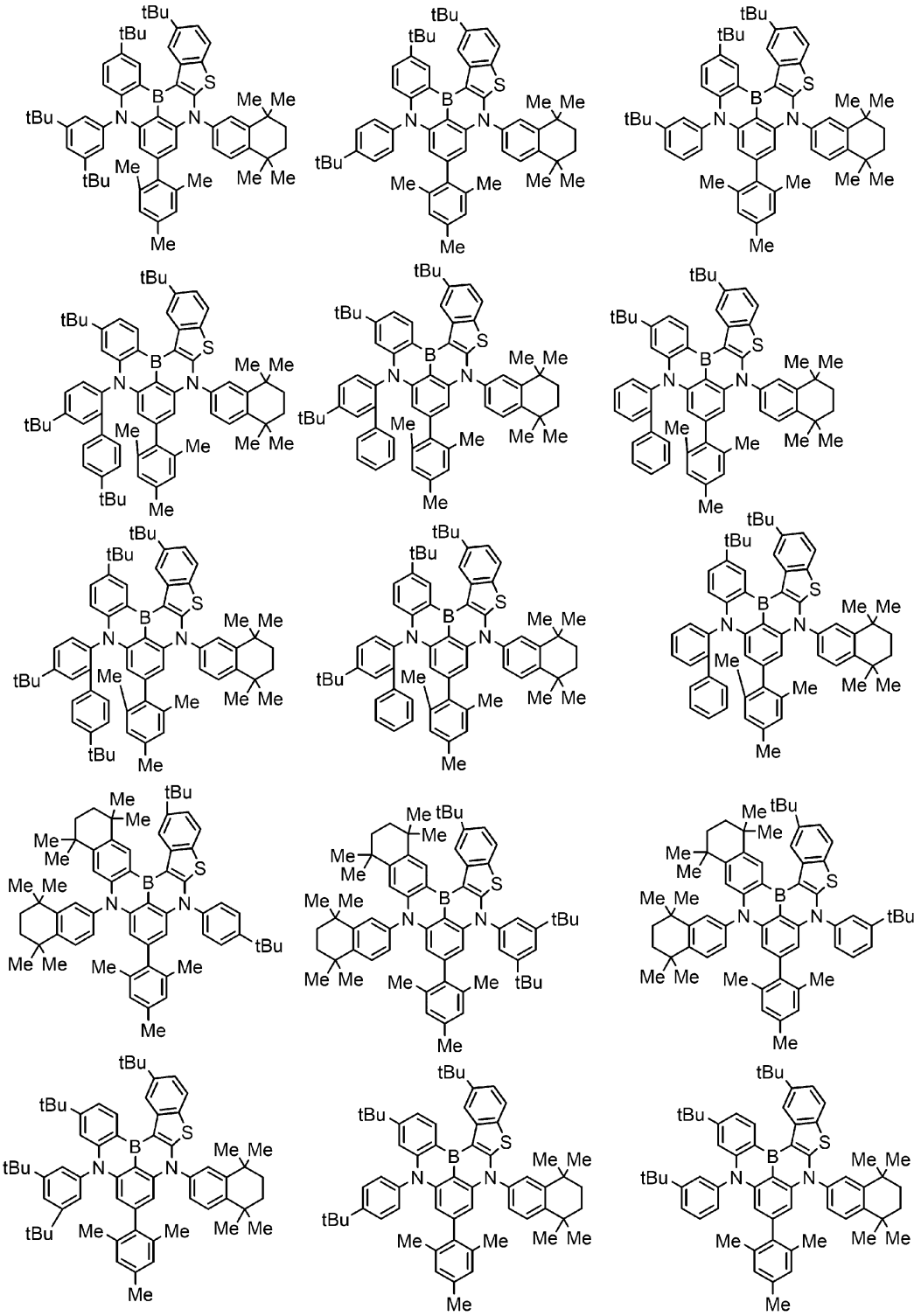
【０５６０】

【化４０３】



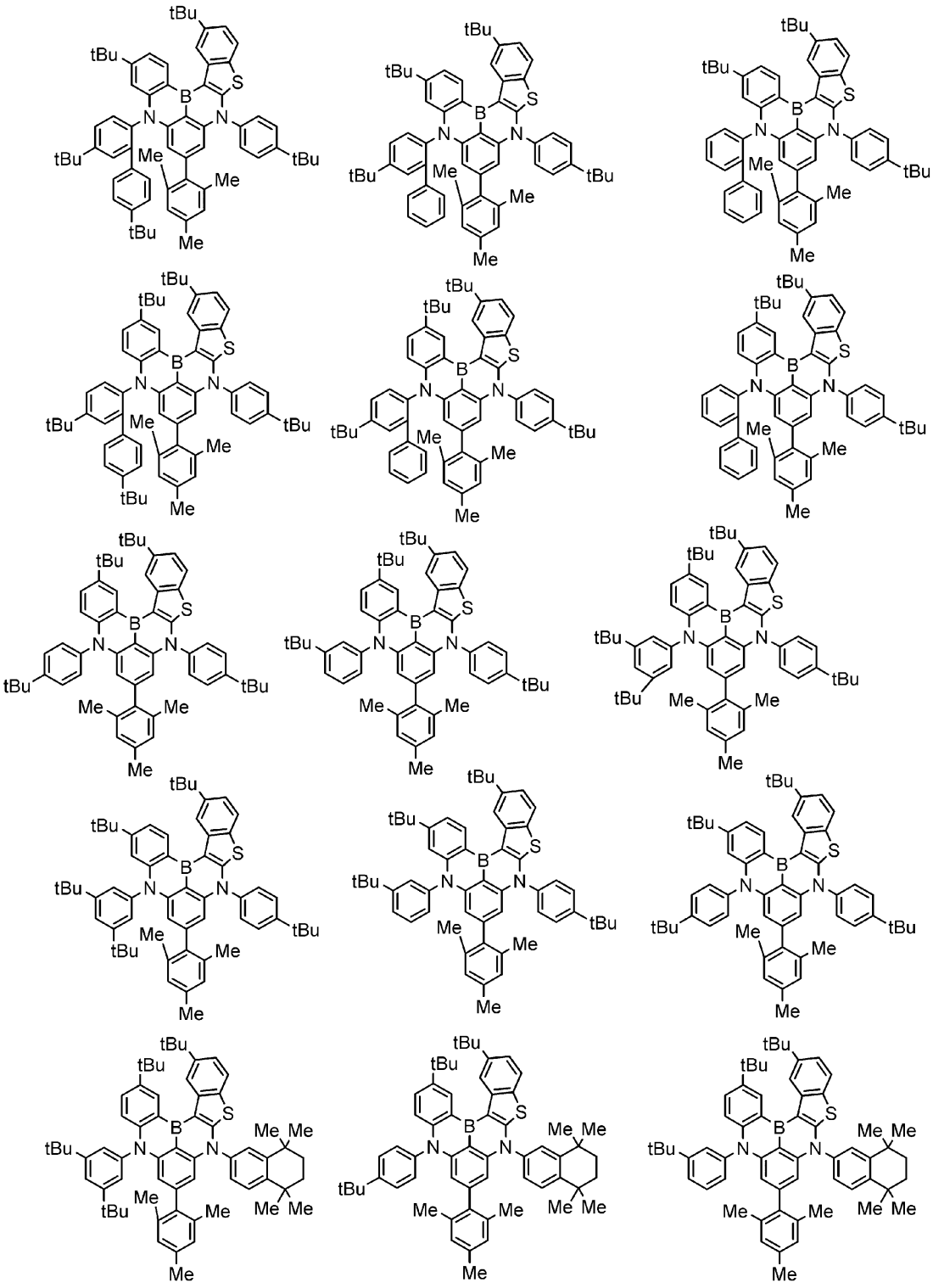
【０５６１】

【化４０４】



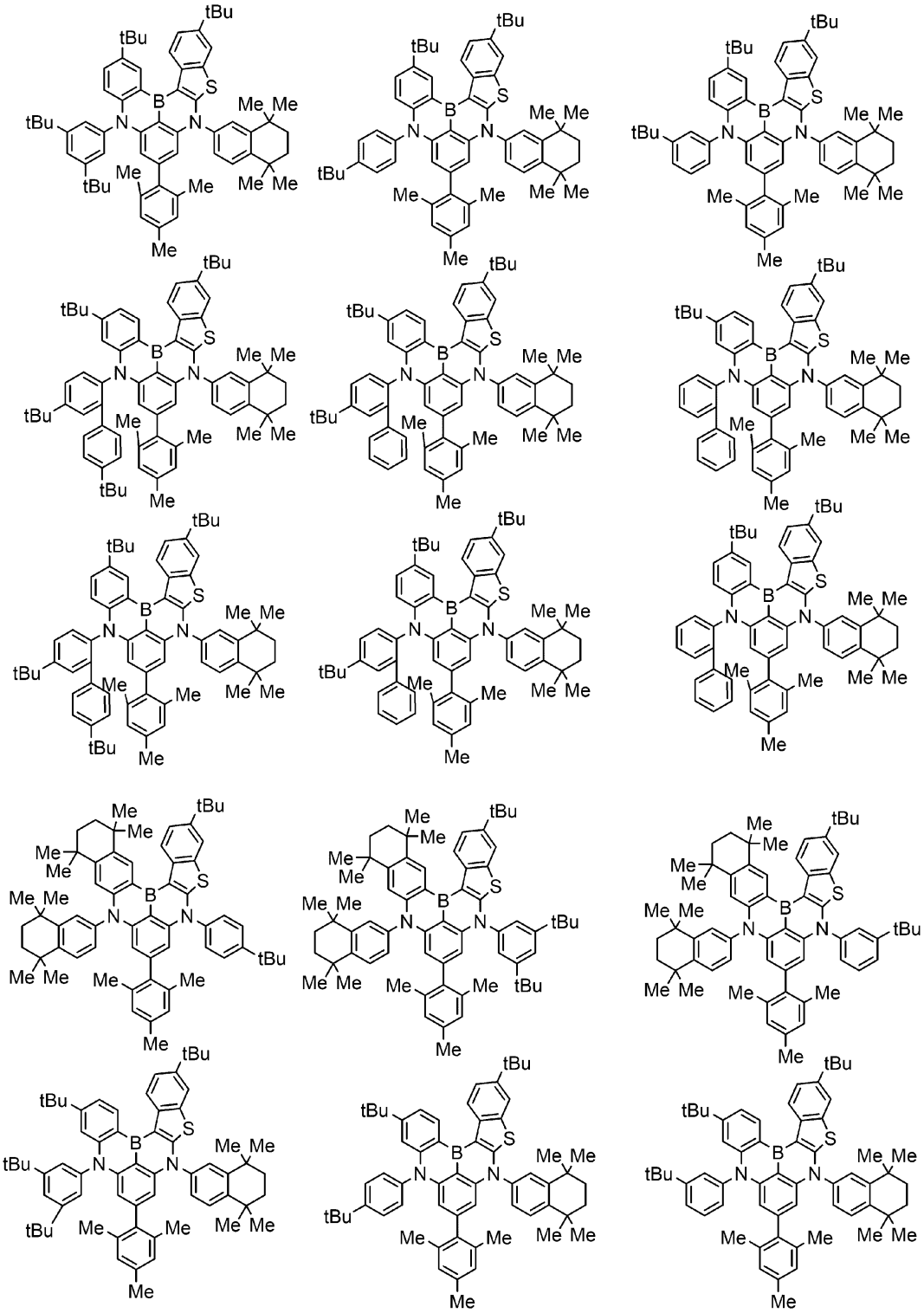
【０５６２】

【化４０５】



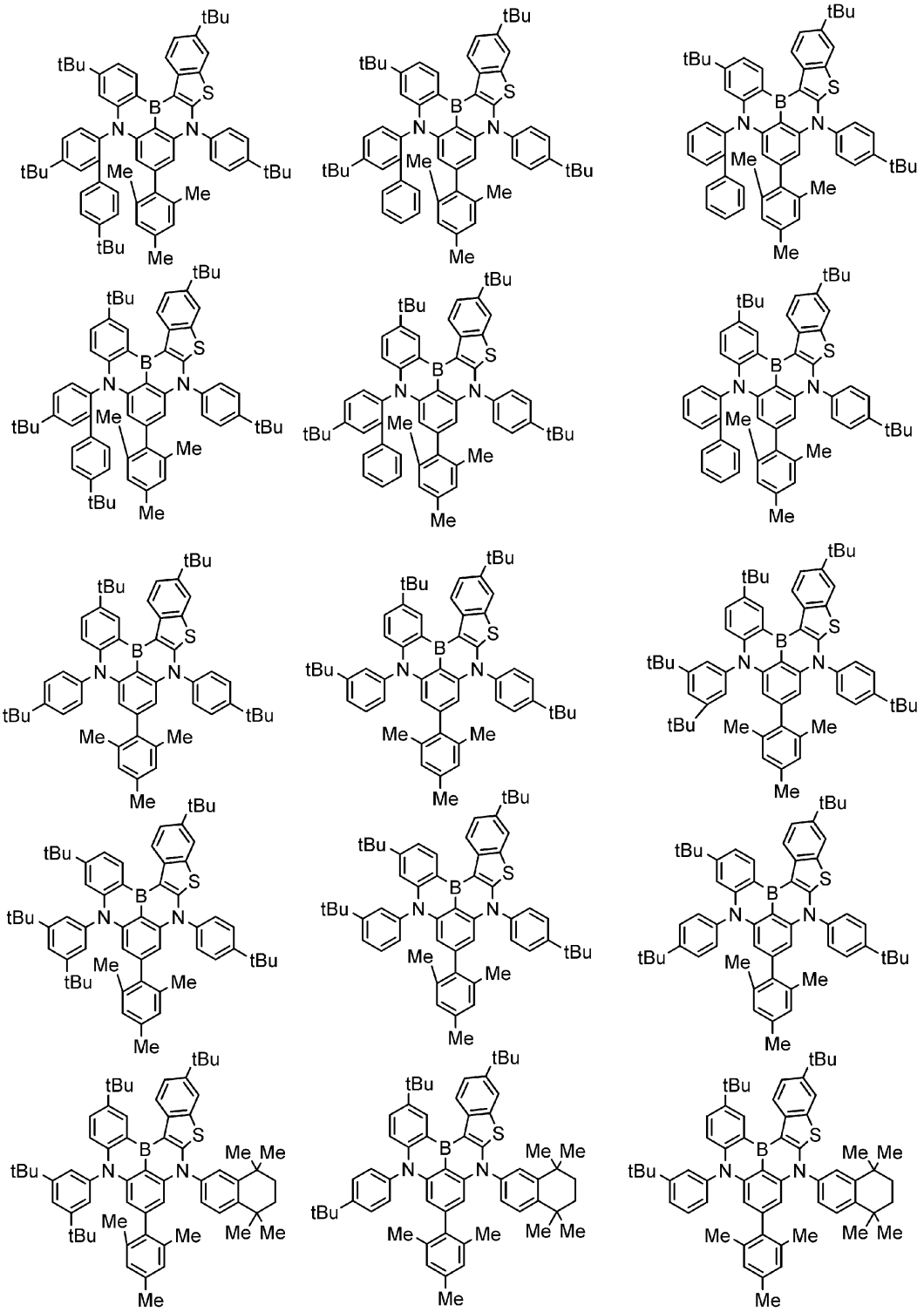
【０５６３】

【化４０６】



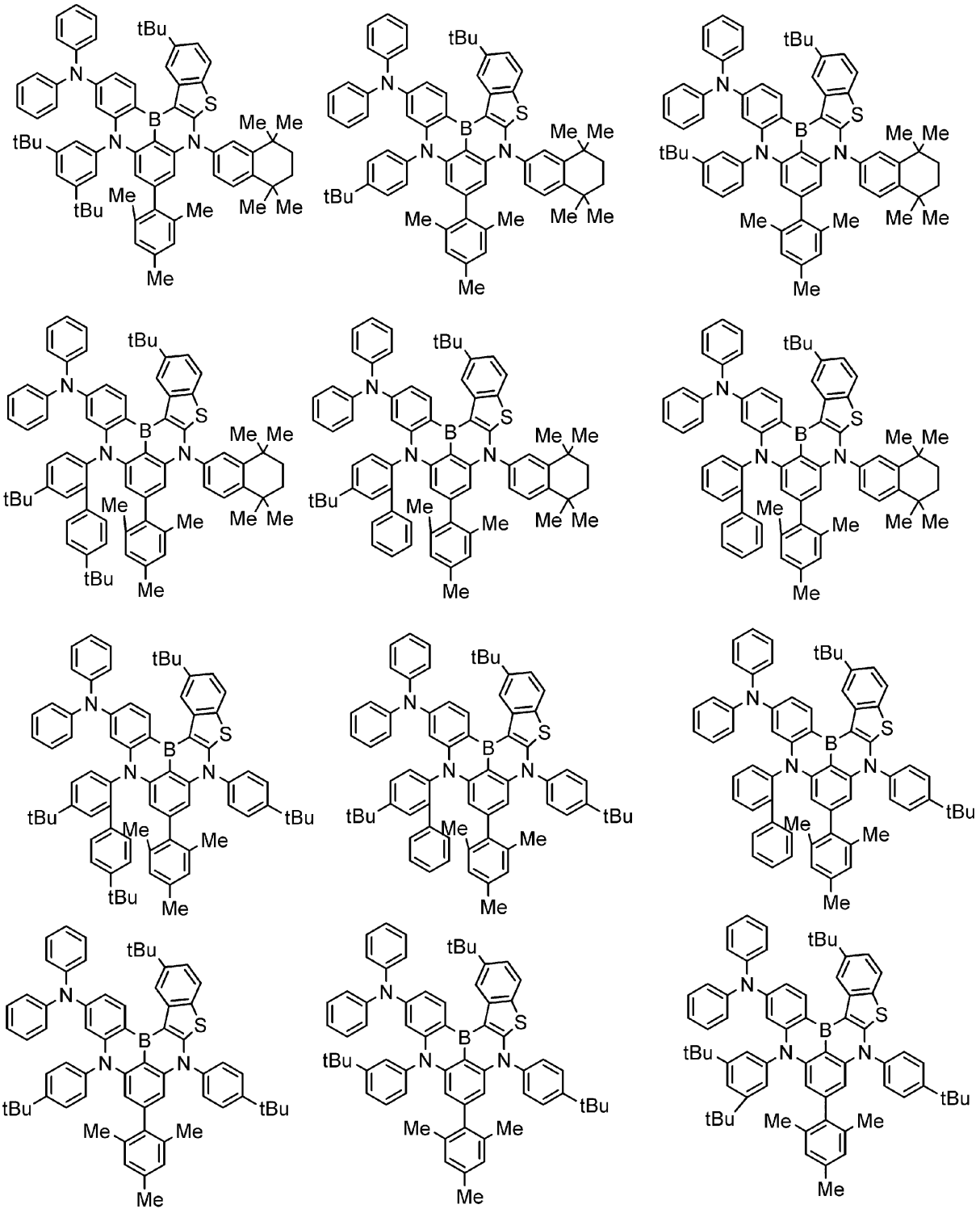
【０５６４】

【化４０７】



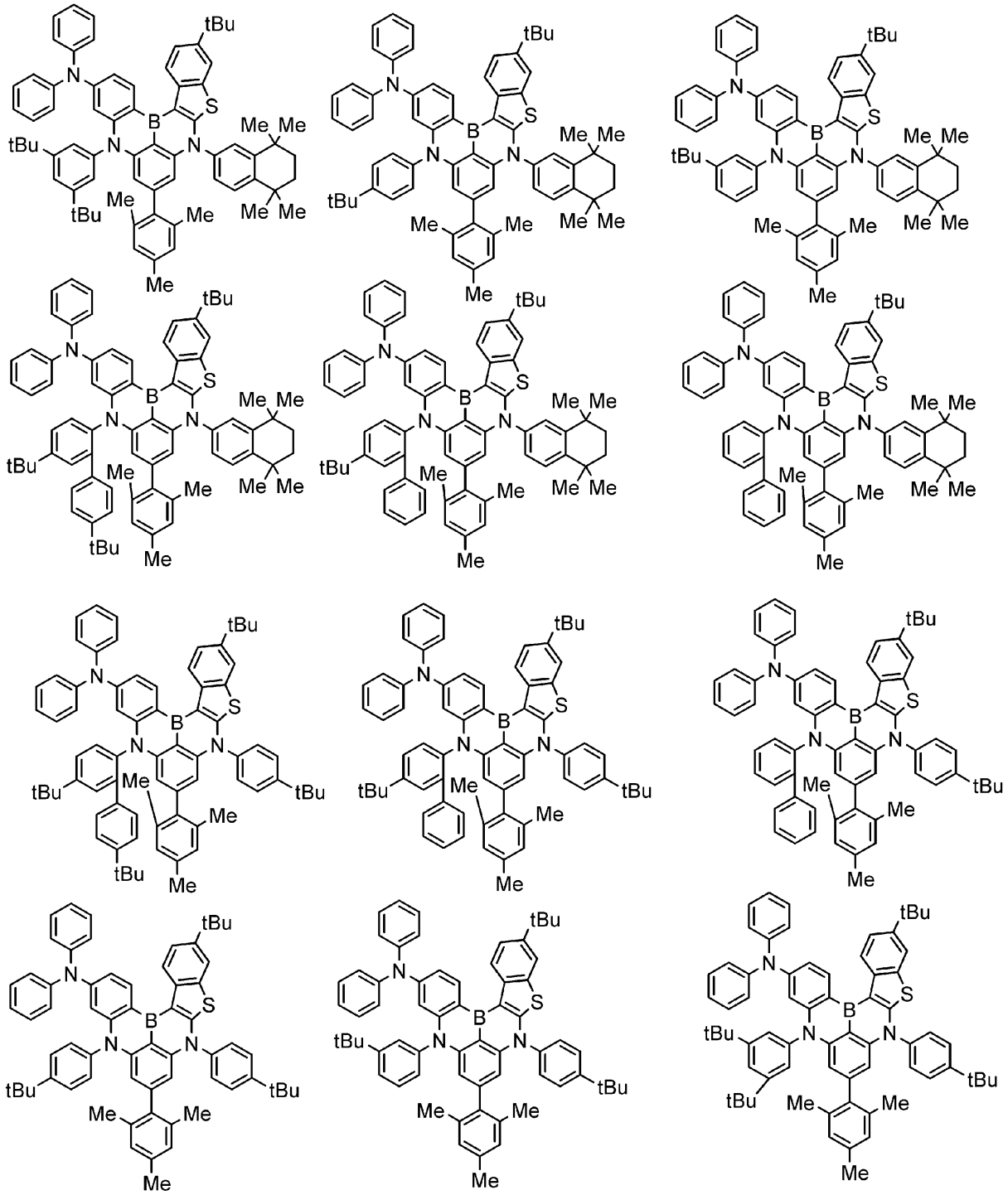
【０５６５】

【化４０８】



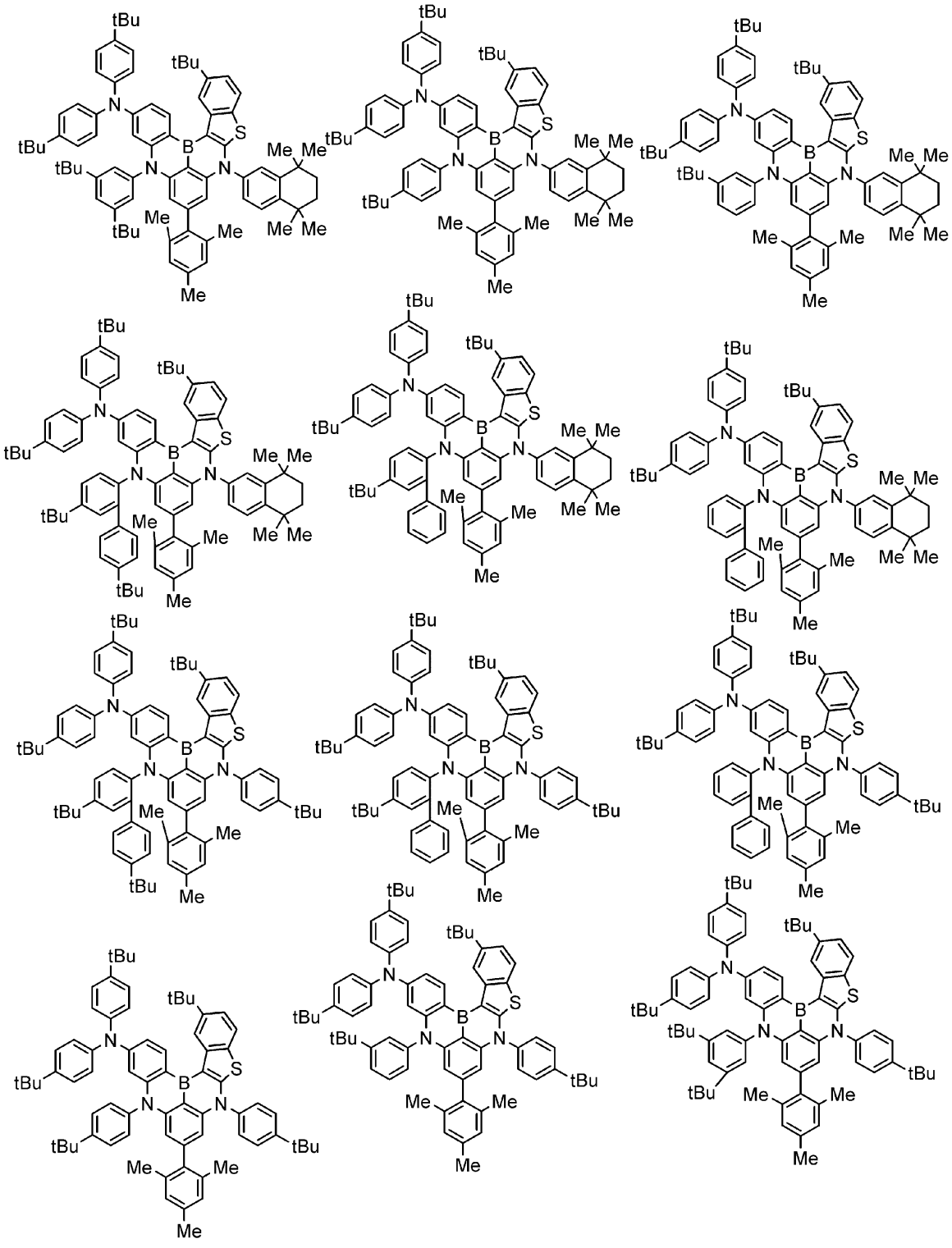
【０５６６】

【化４０９】



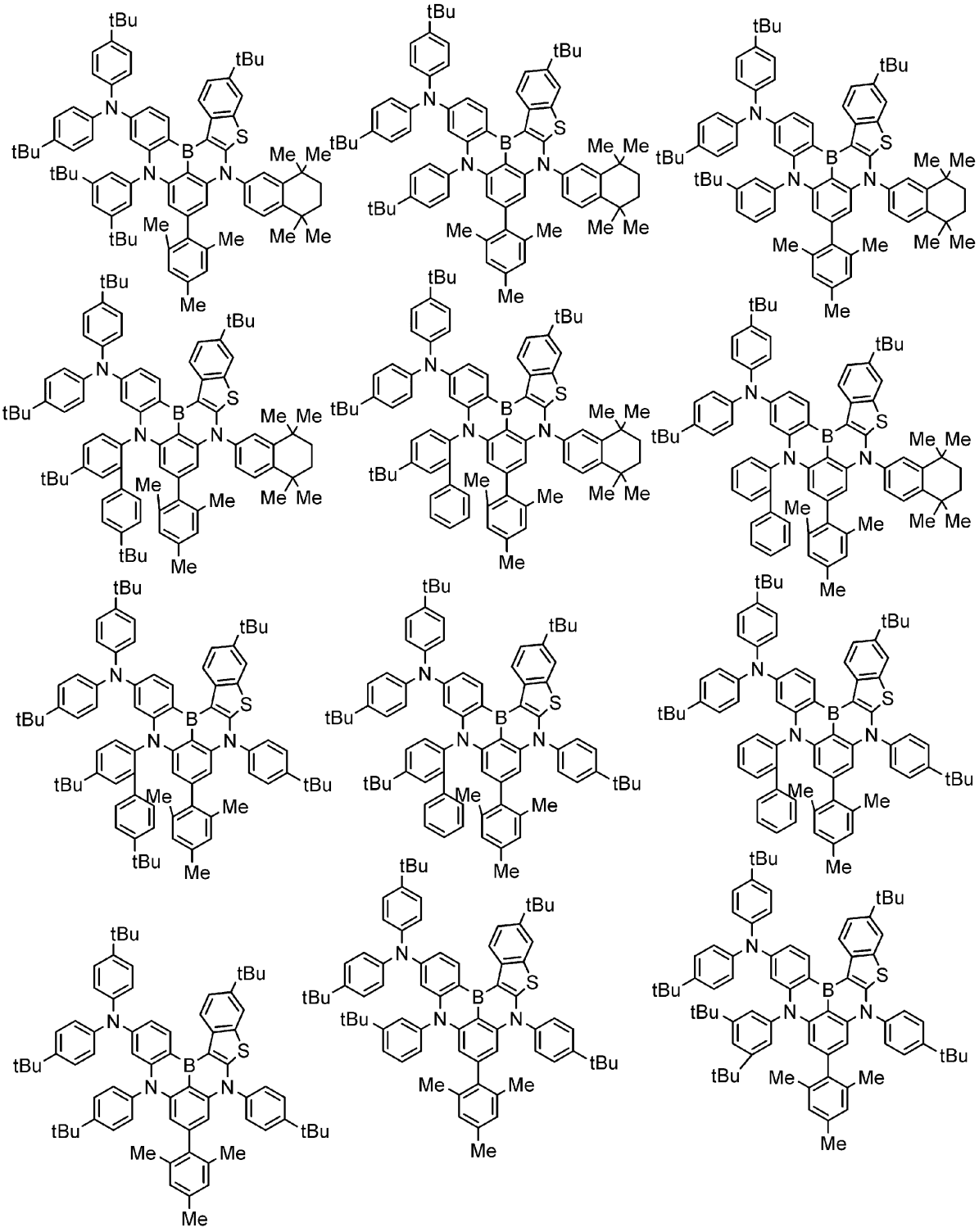
【０５６７】

【化４１０】



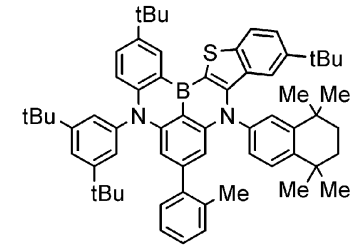
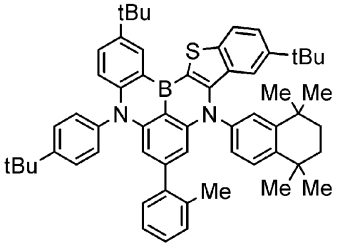
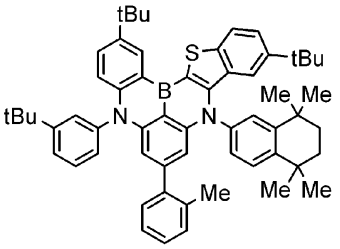
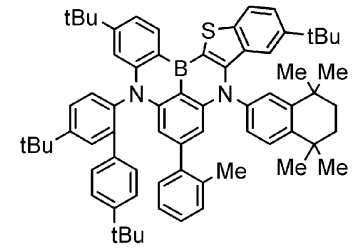
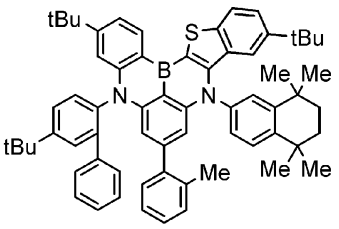
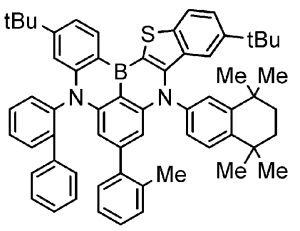
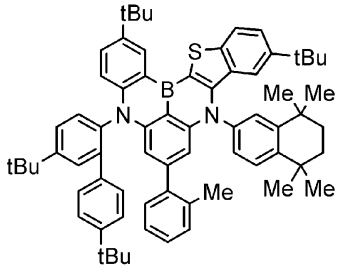
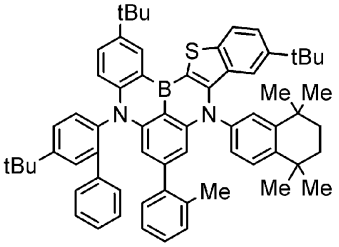
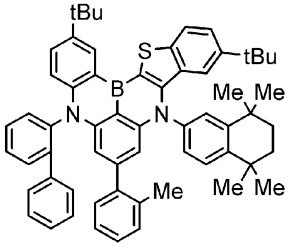
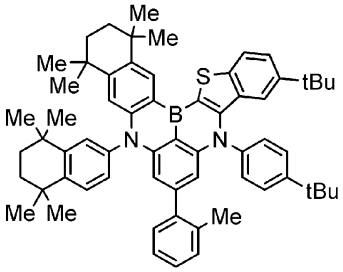
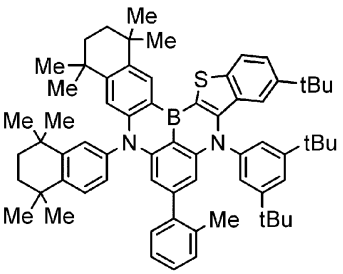
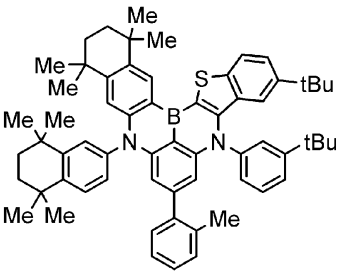
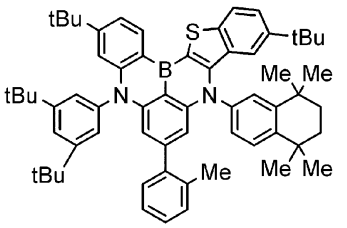
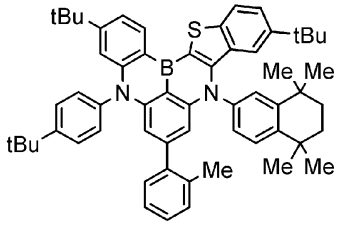
【０５６８】

【化４１１】



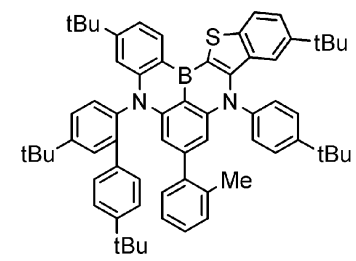
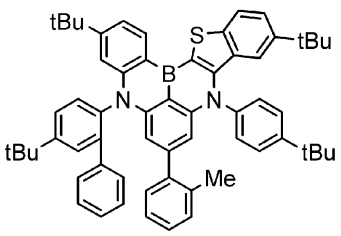
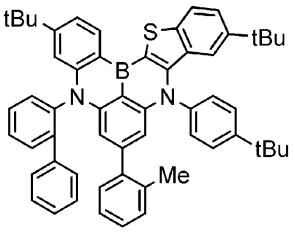
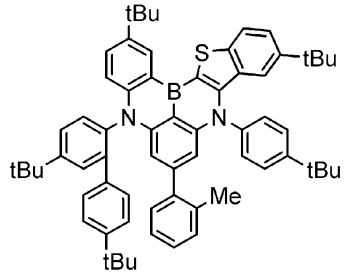
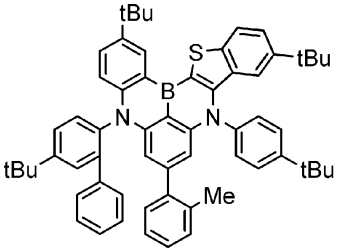
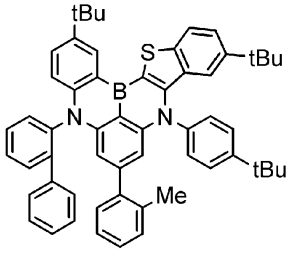
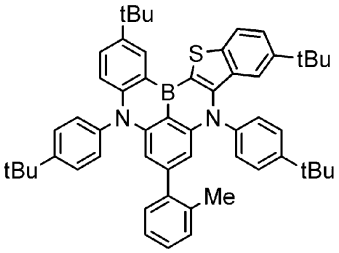
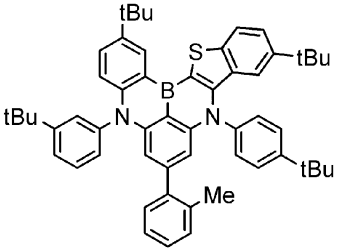
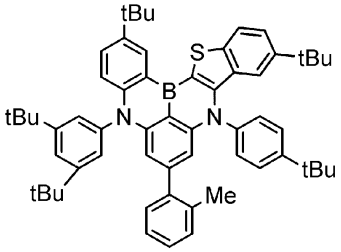
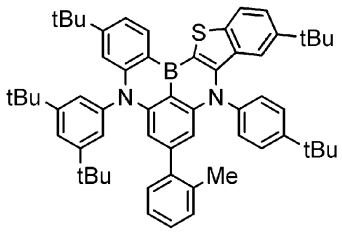
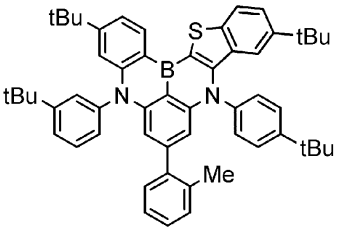
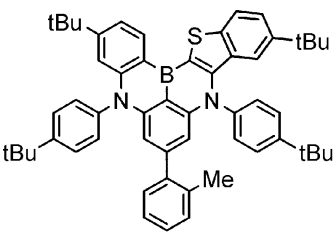
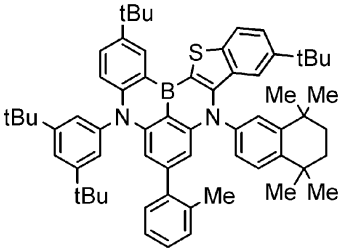
【０５６９】

【化４１２】

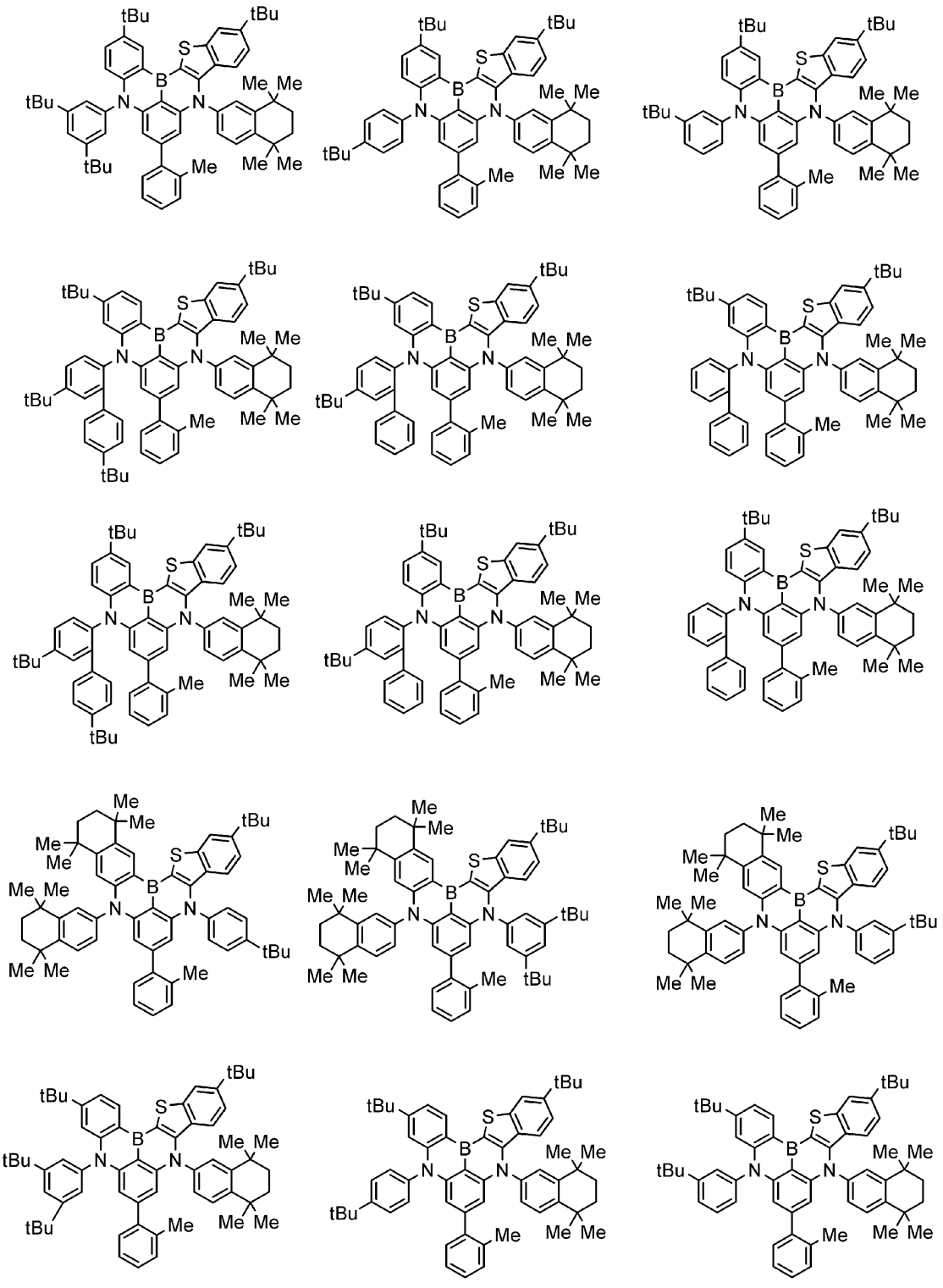
【０５７０】

【化４１３】

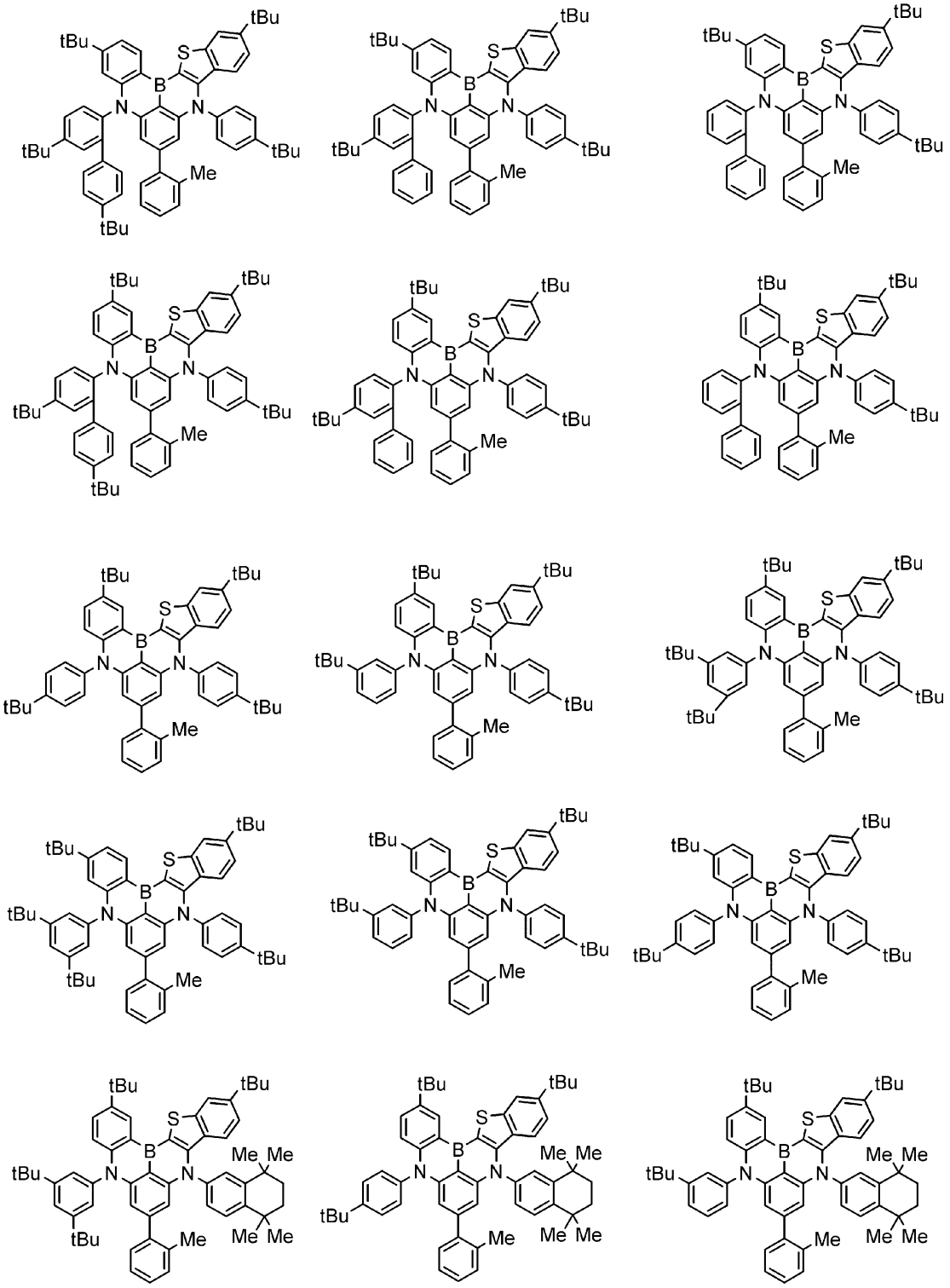
【０５７１】

【化４１４】



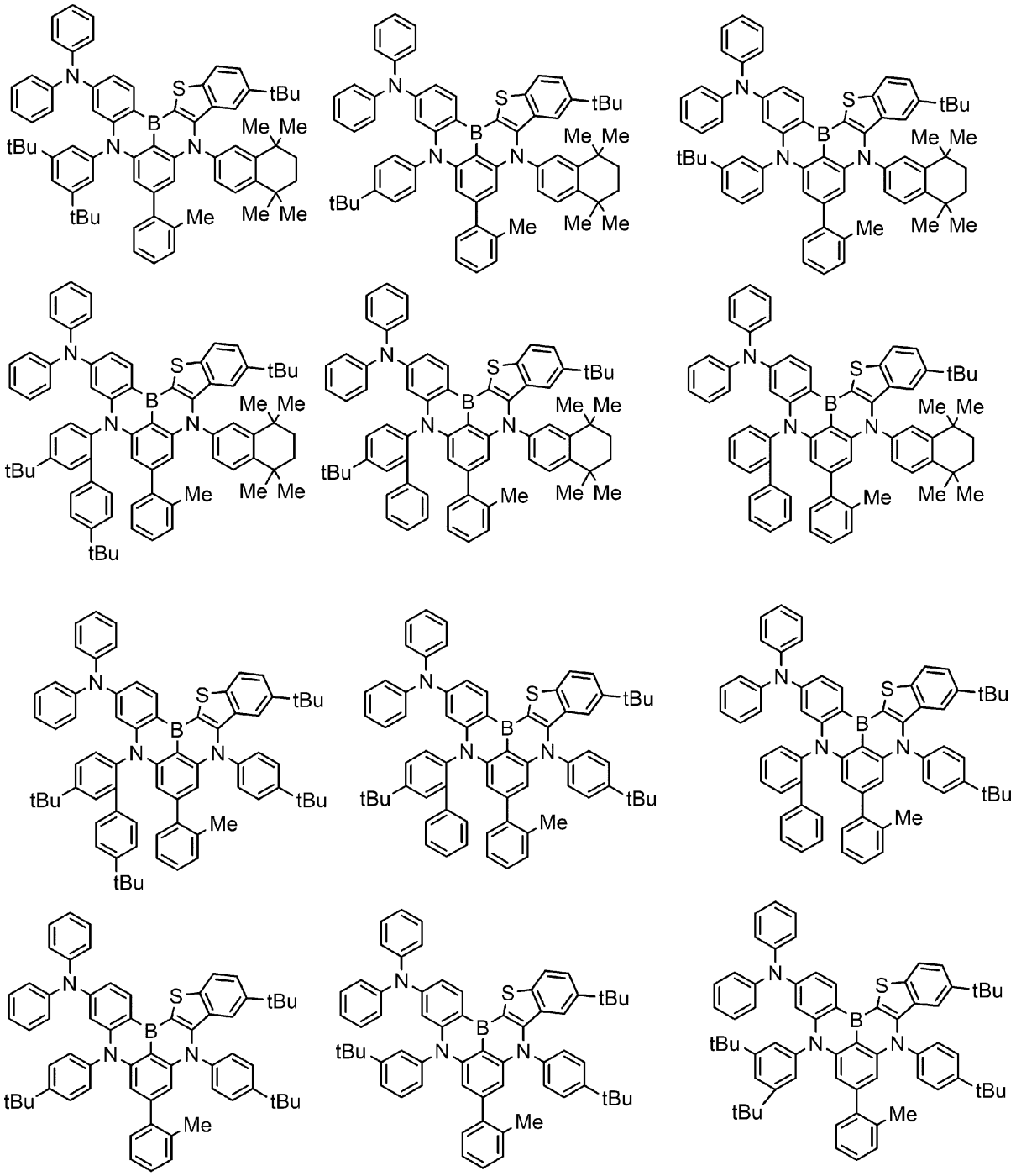
【０５７２】

【化４１５】



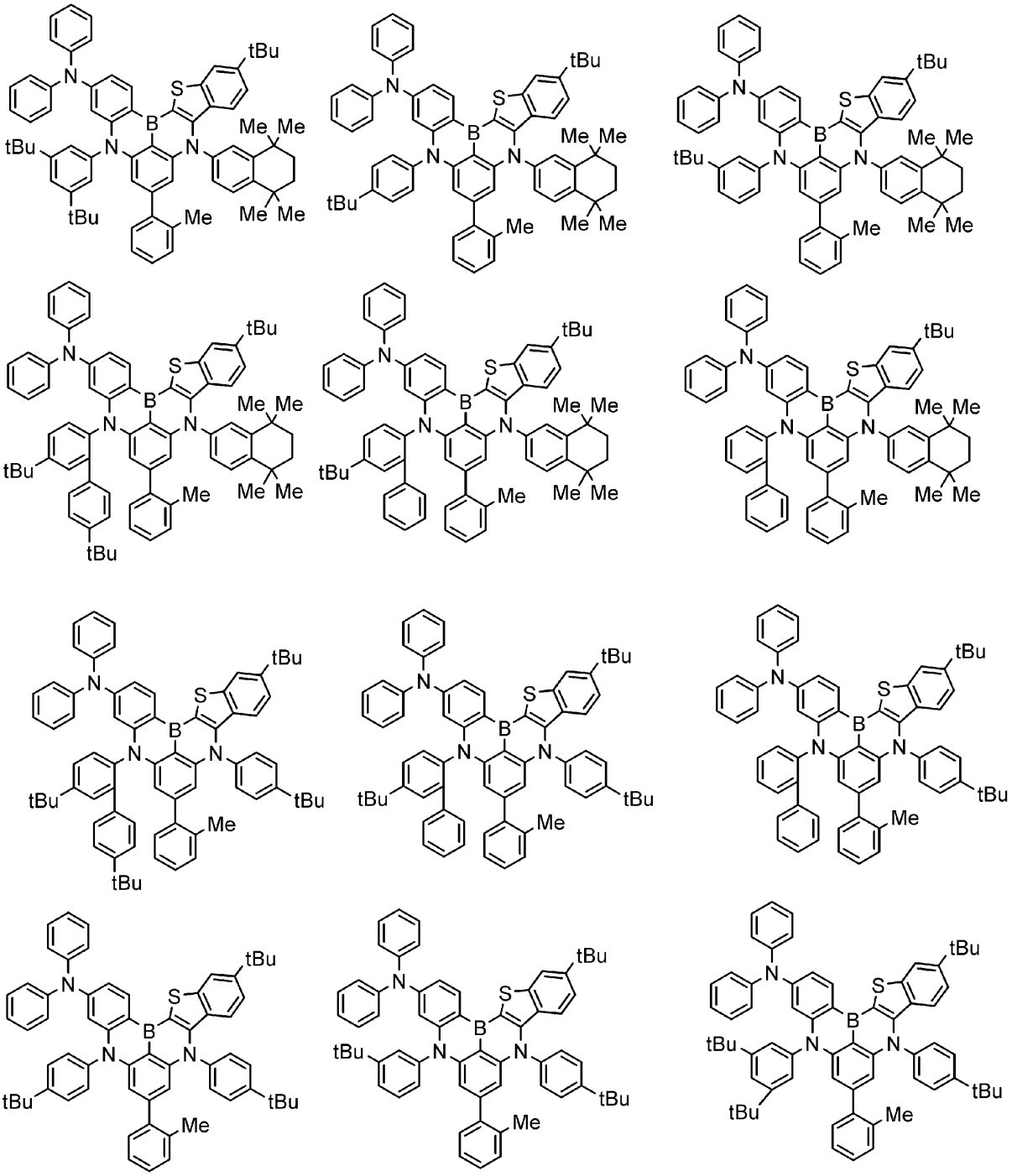
【０５７３】

【化４１６】



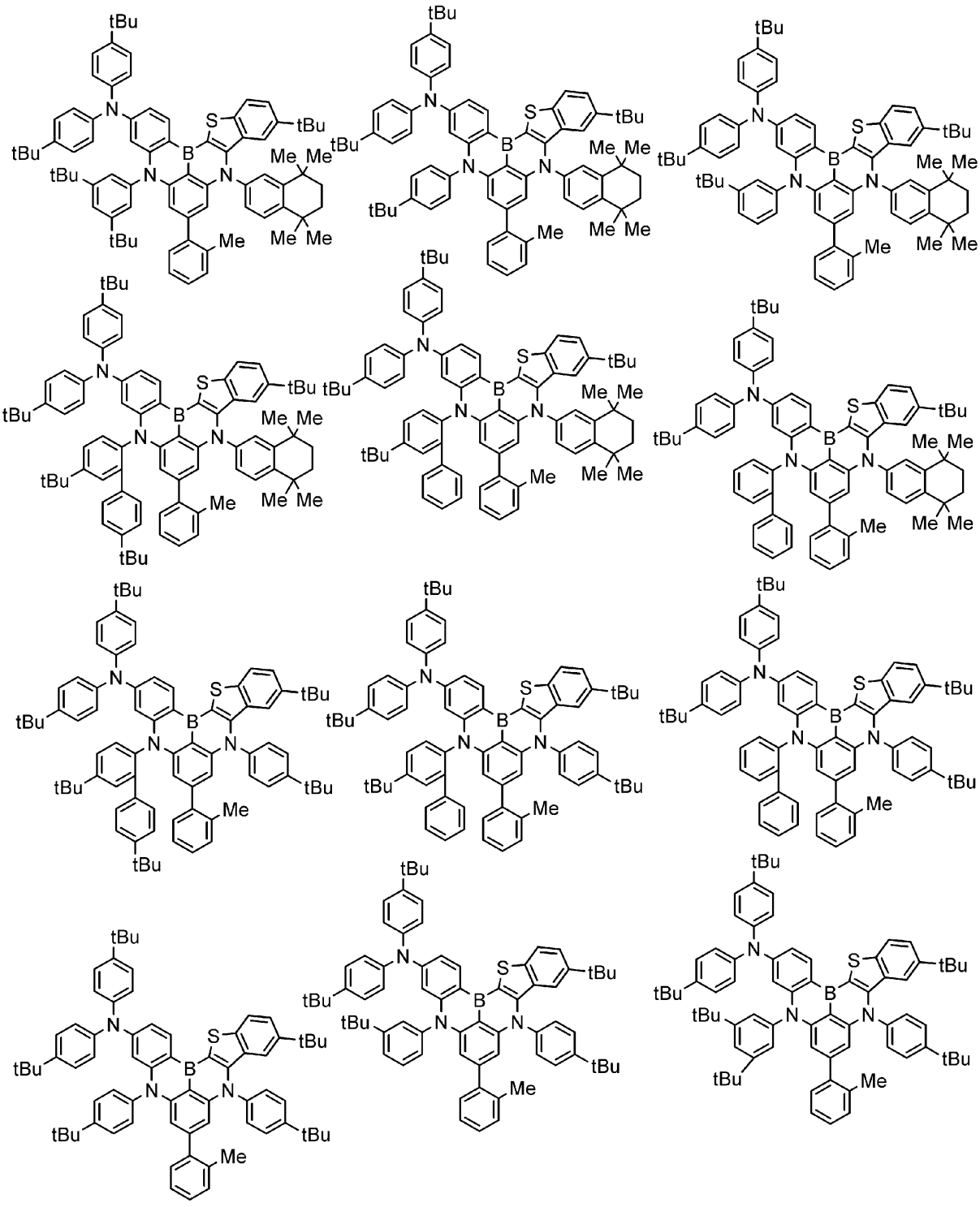
【０５７４】

【化４１７】



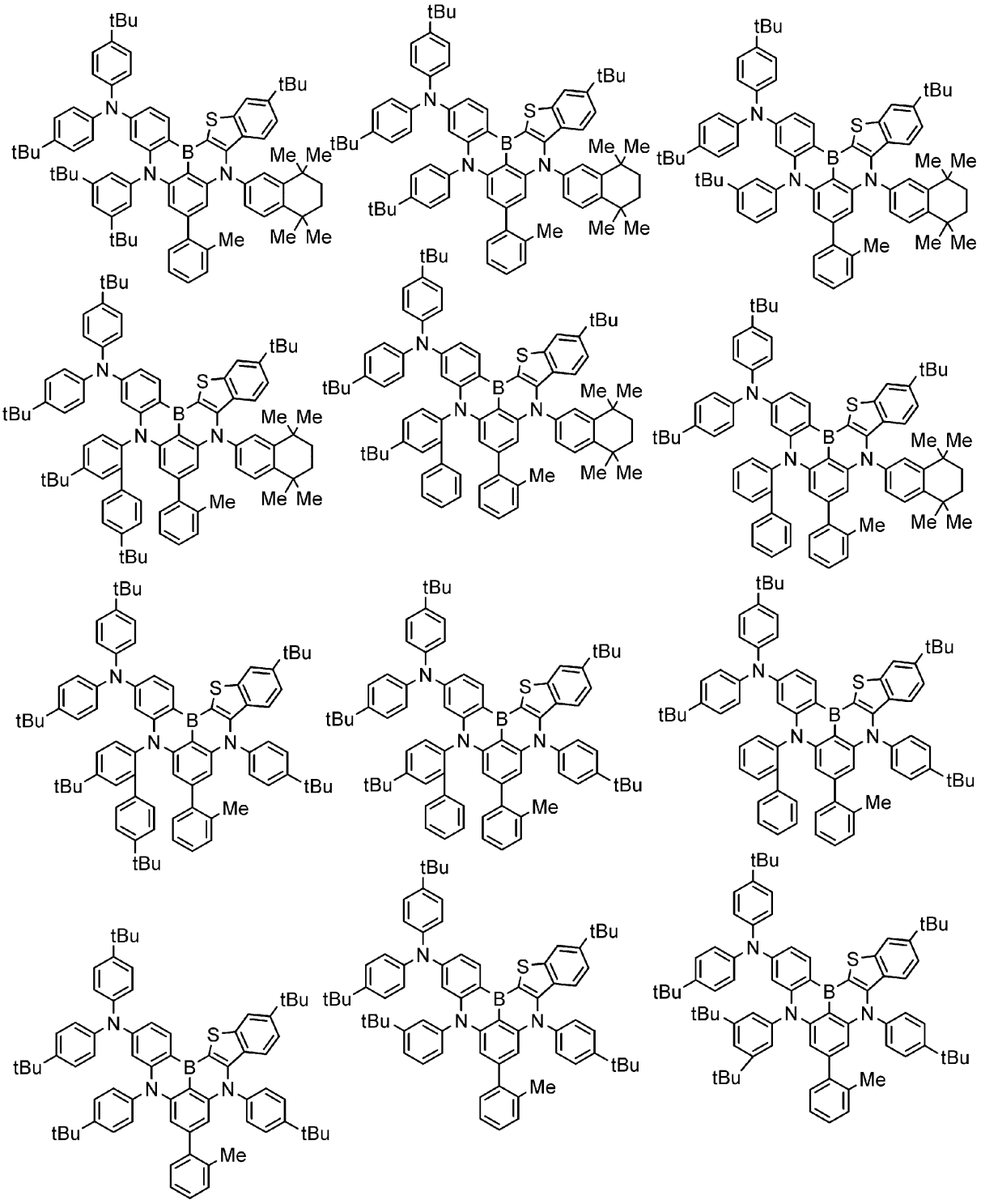
【０５７５】

【化４１８】



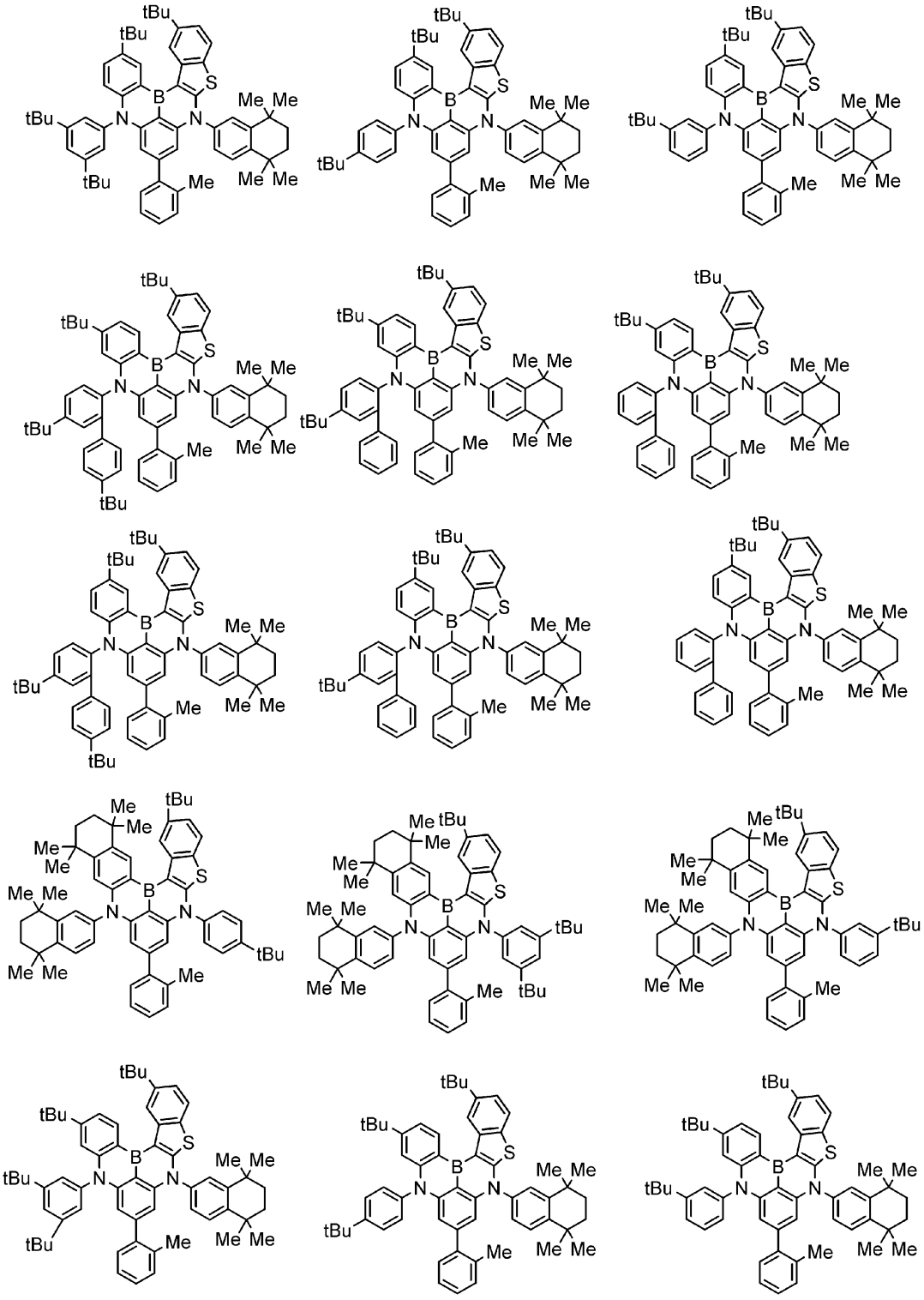
【０５７６】

【化４１９】



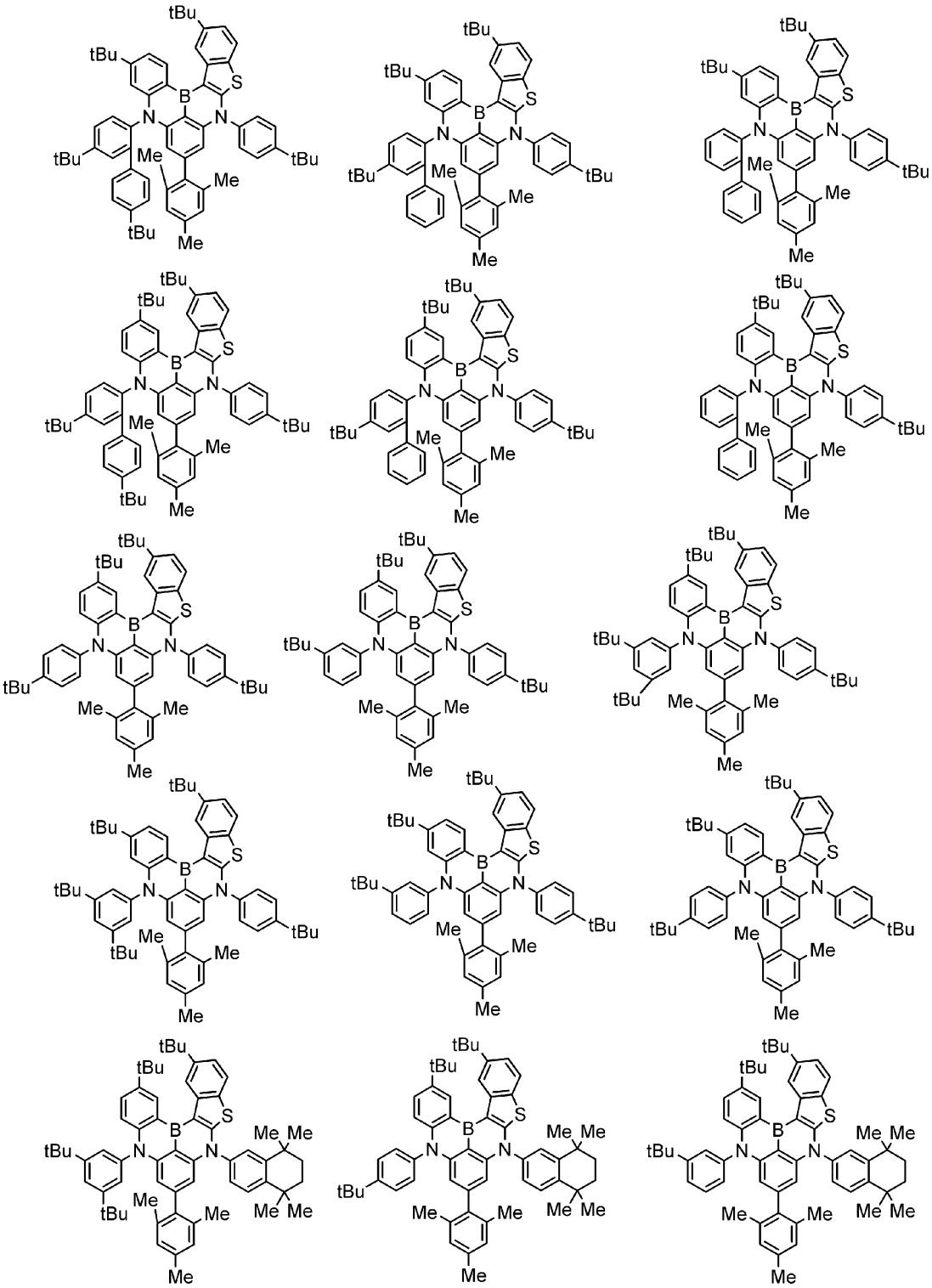
【０５７７】

【化４２０】



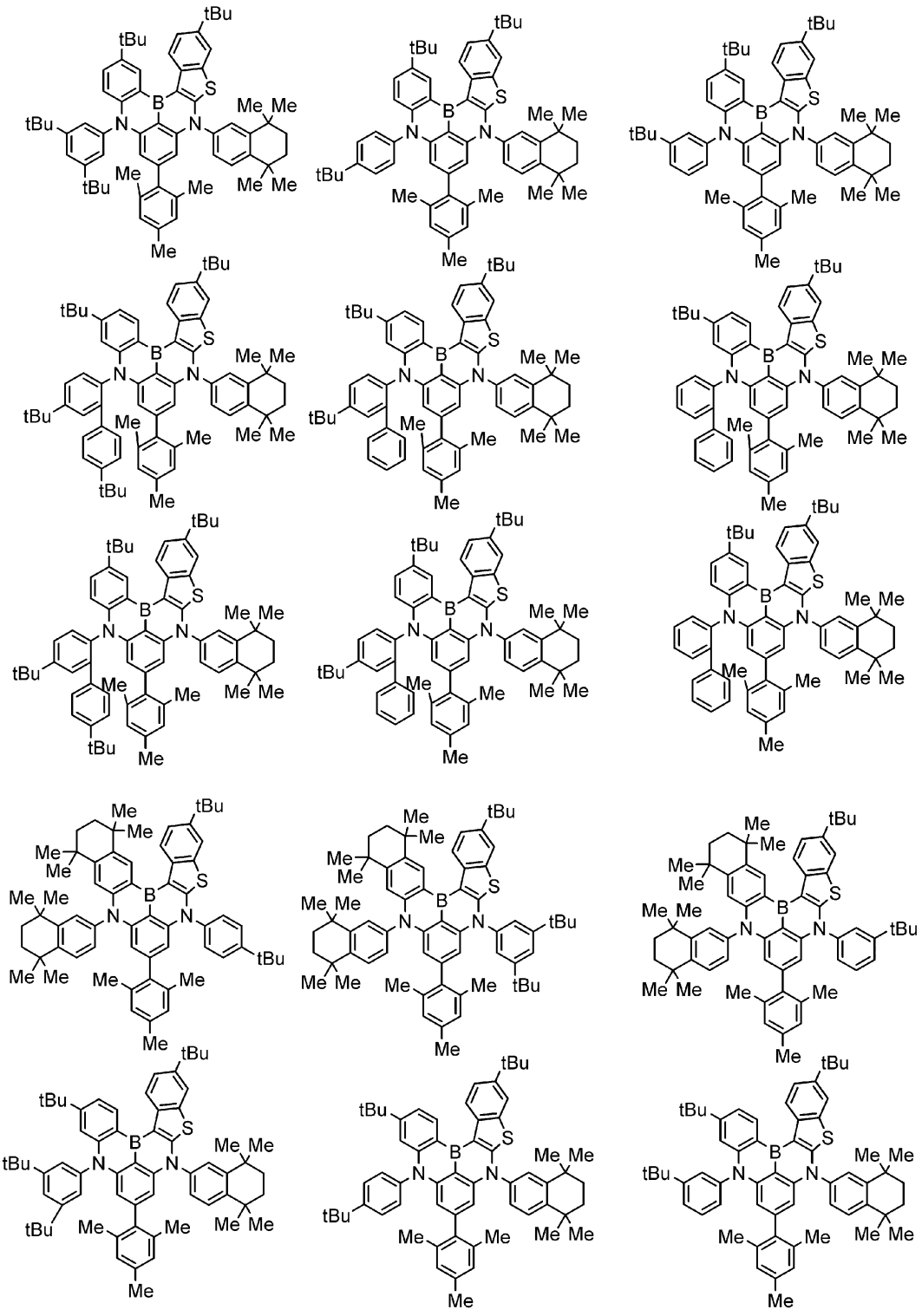
【０５７８】

【化４２１】



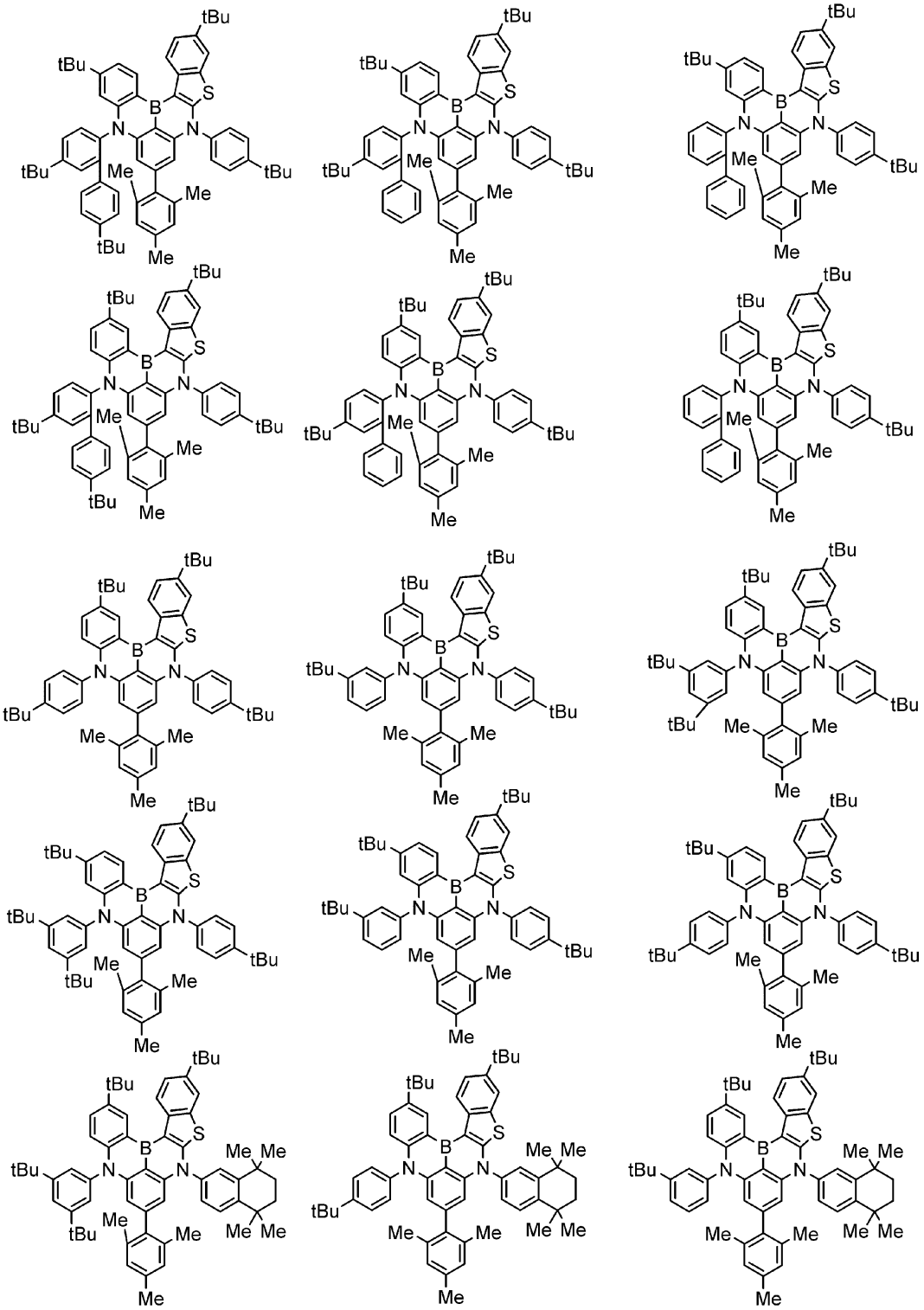
【０５７９】

【化４２２】



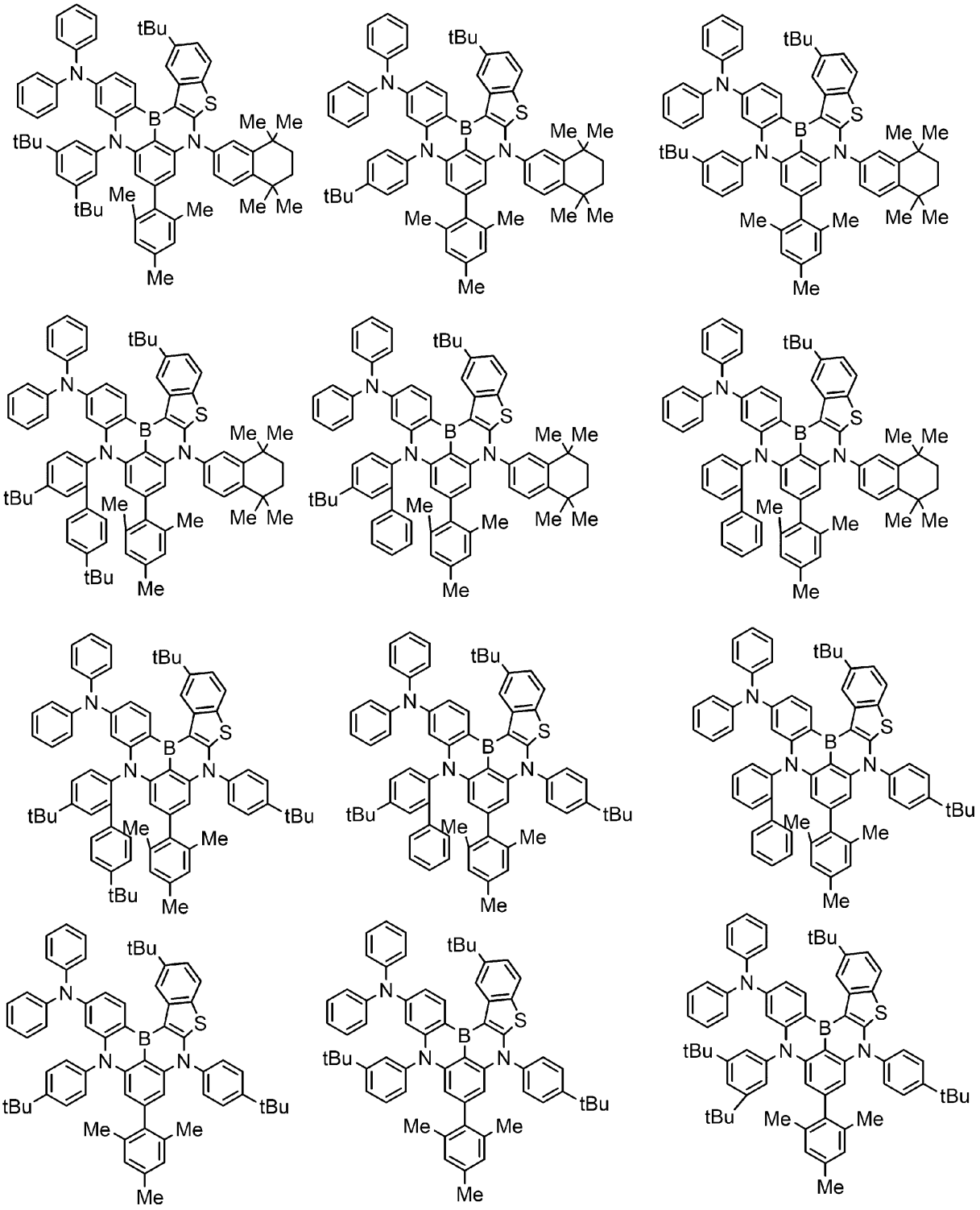
【０５８０】

【化４２３】



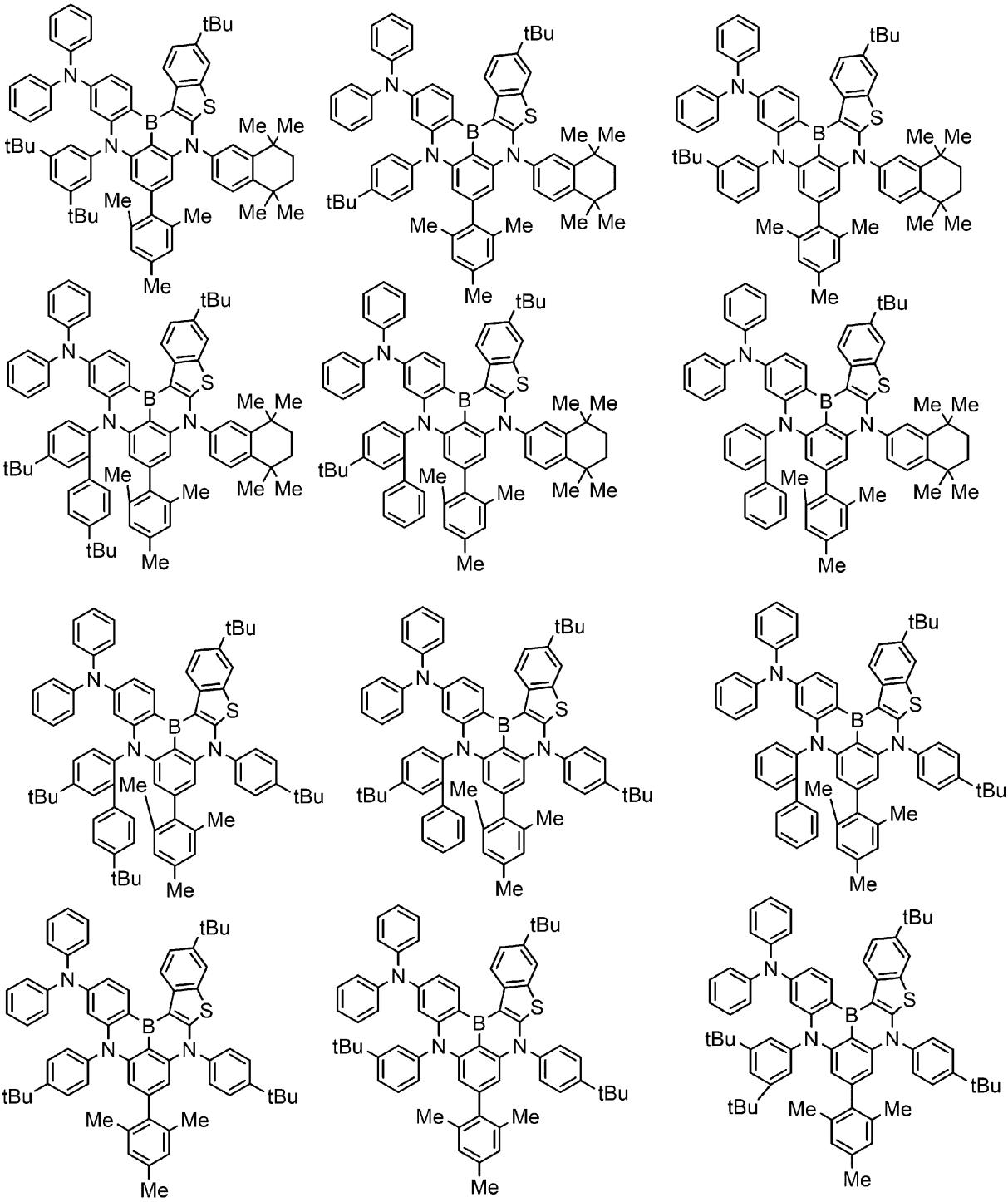
【０５８１】

【化４２４】



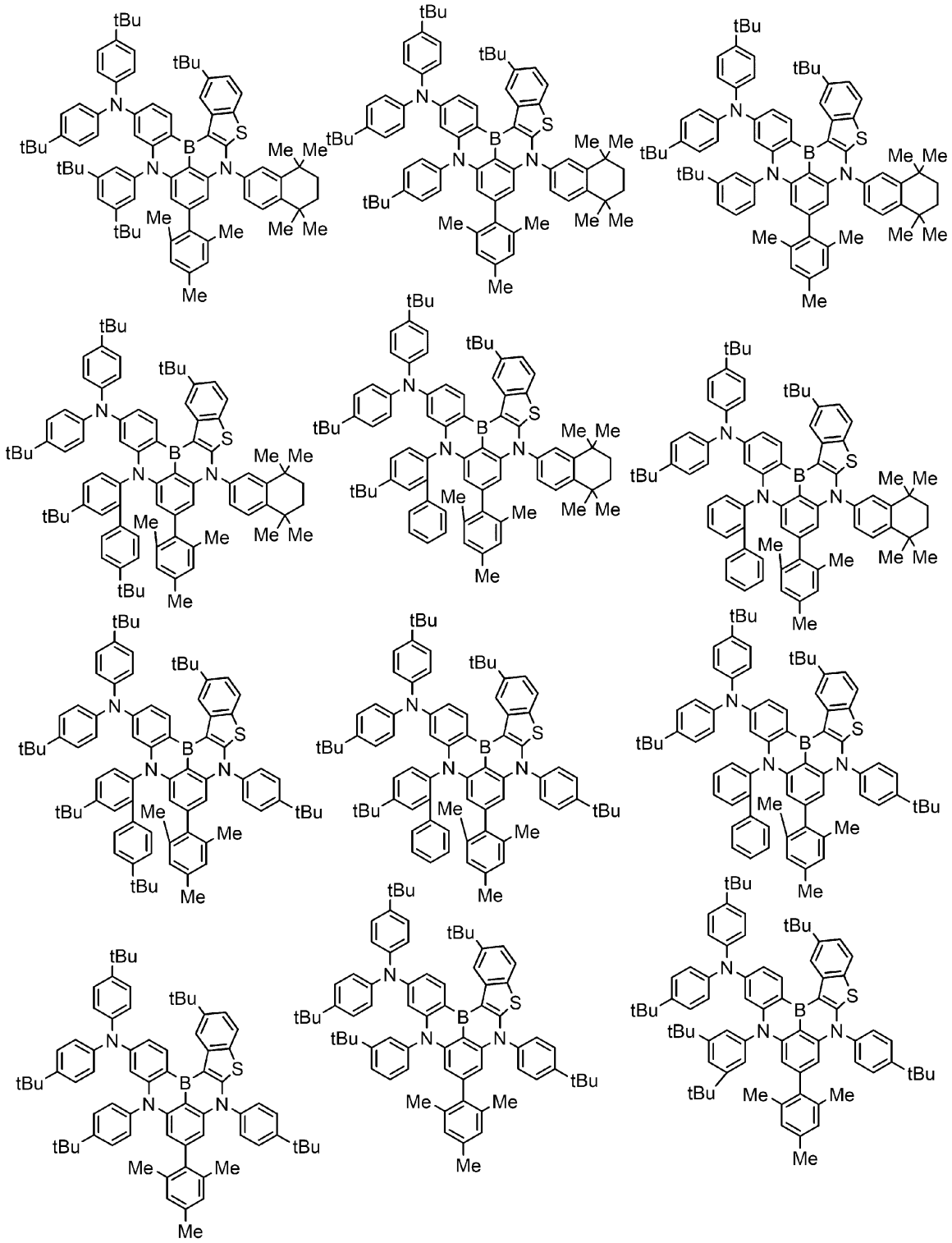
【０５８２】

【化４２５】



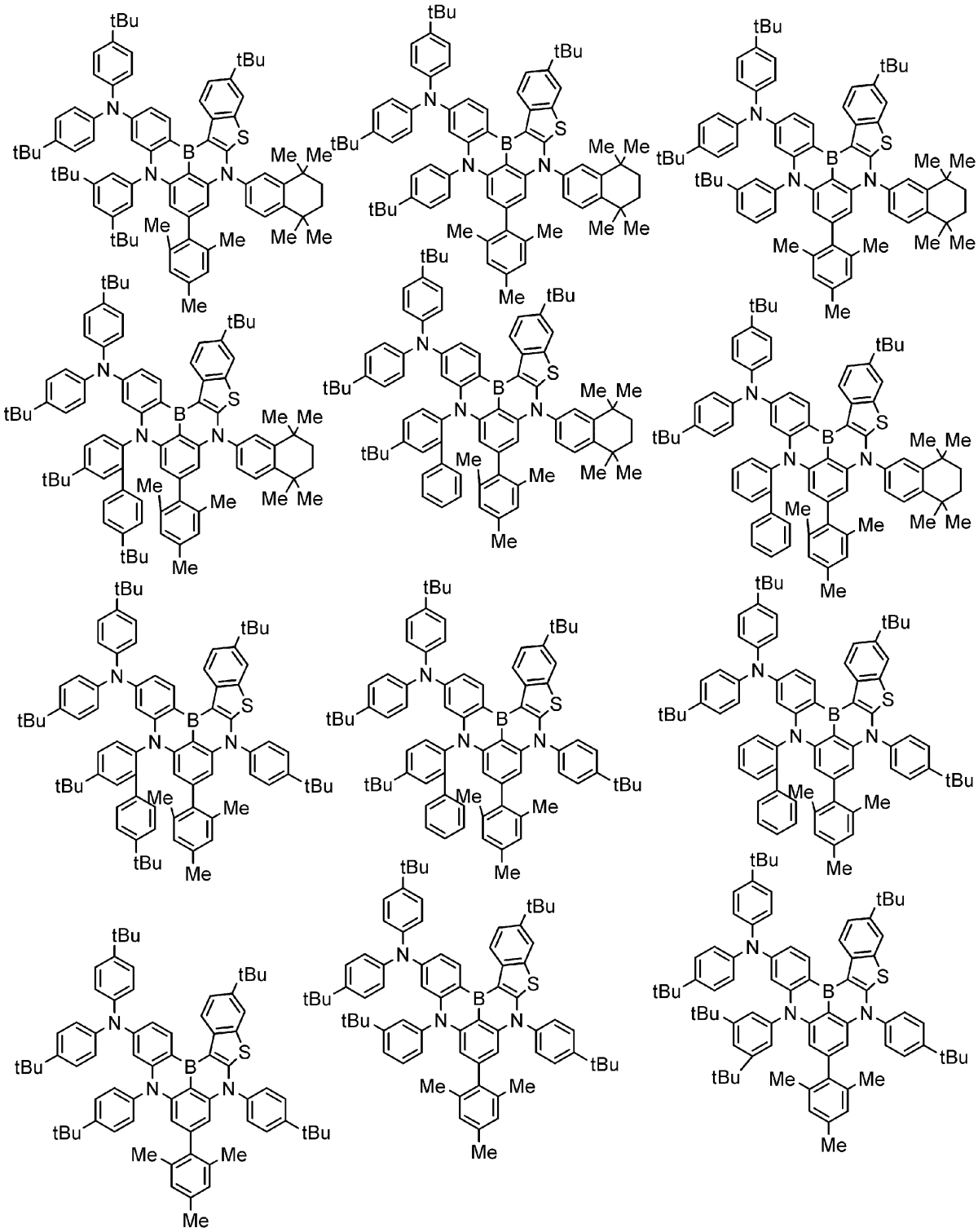
【０５８３】

【化４２６】



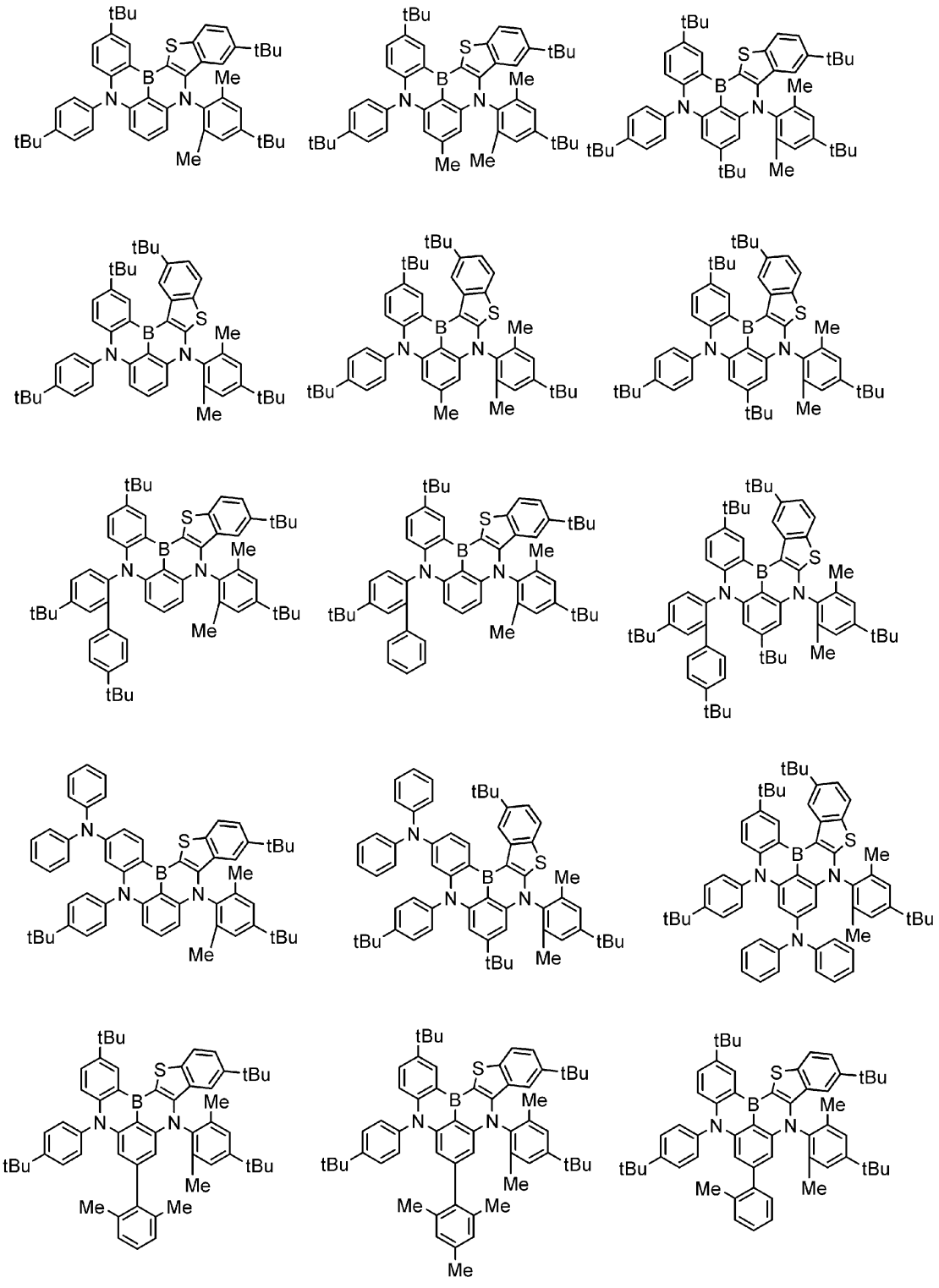
【０５８４】

【化４２７】



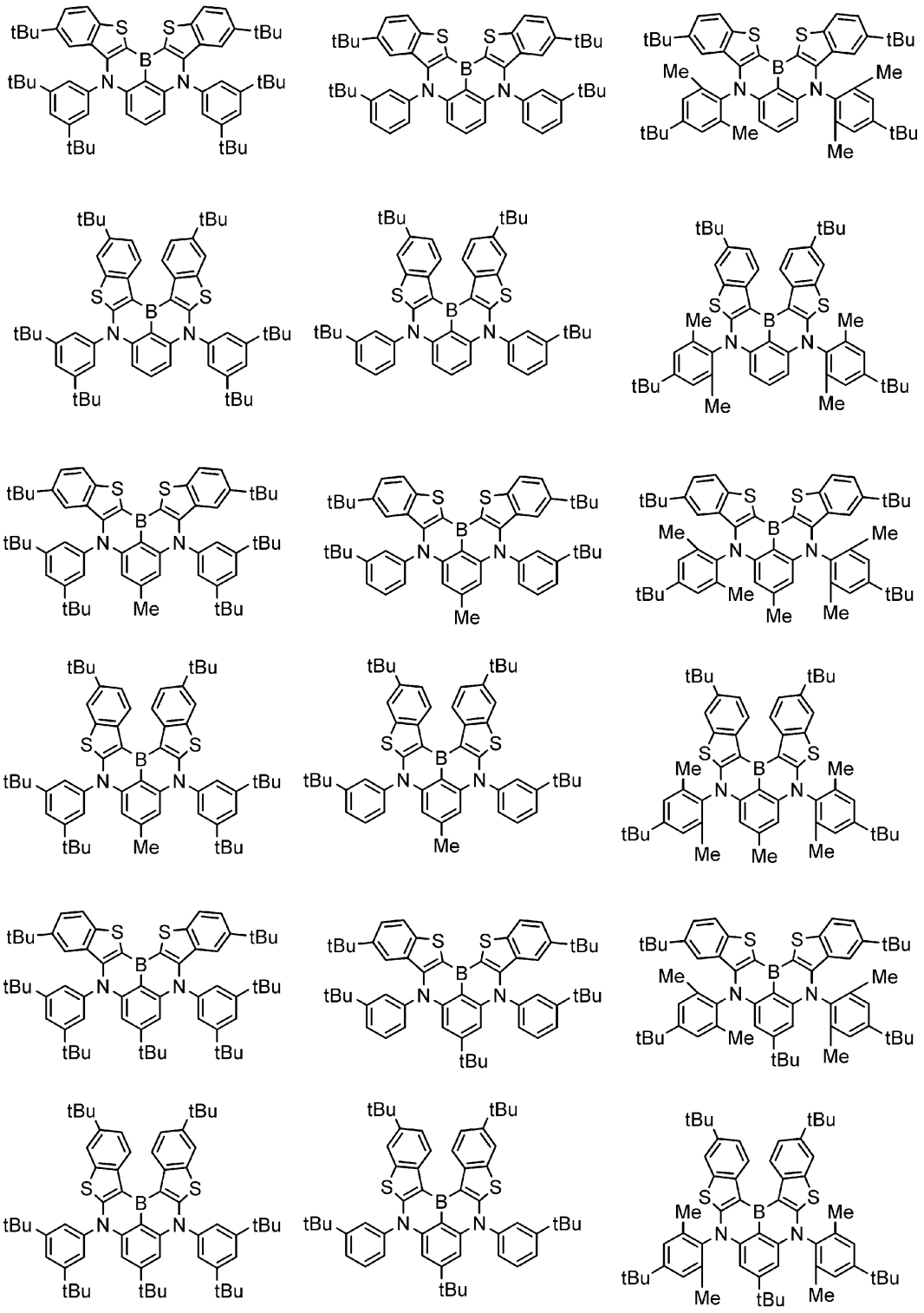
【０５８５】

【化４２８】



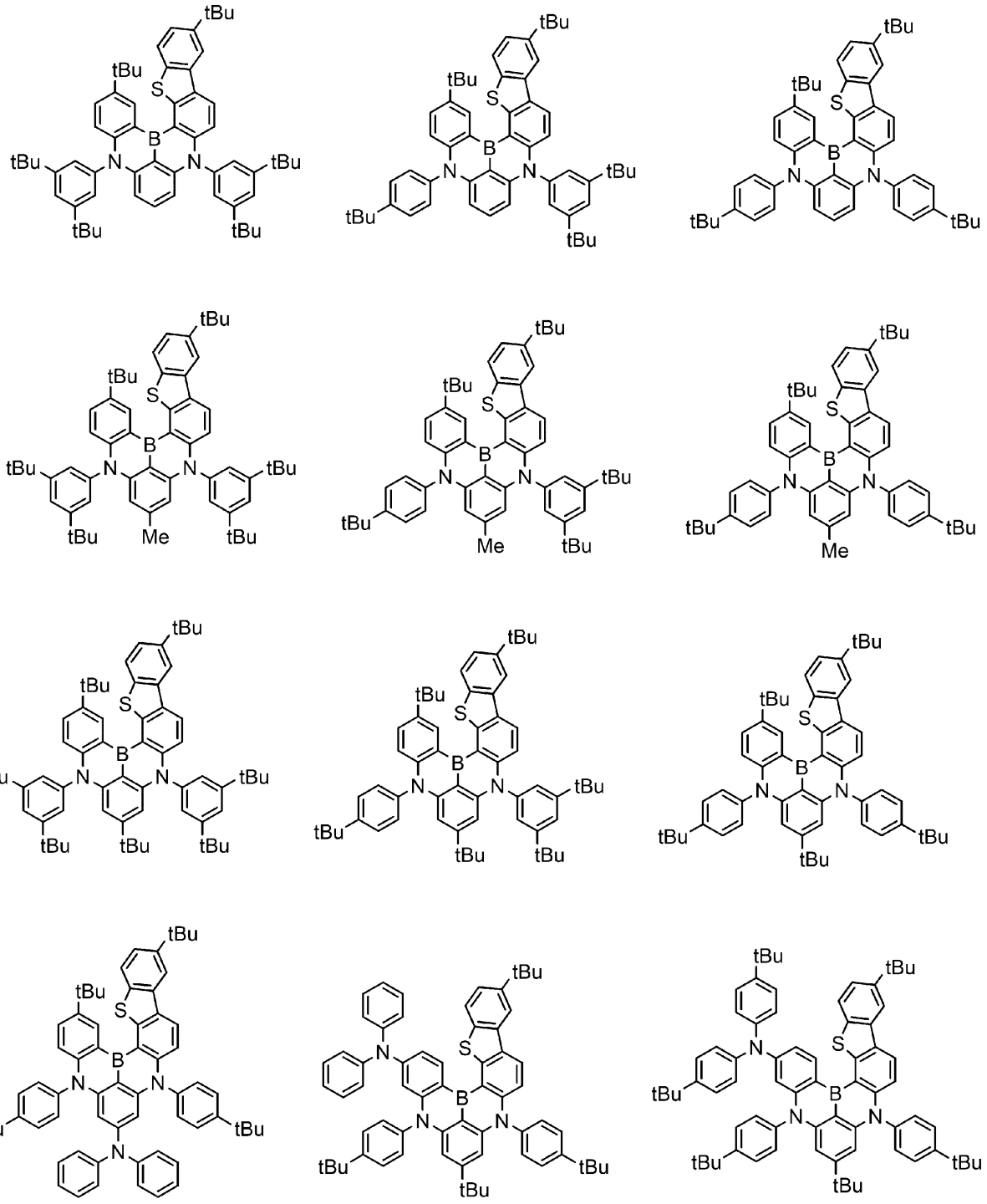
【０５８６】

【化４２９】



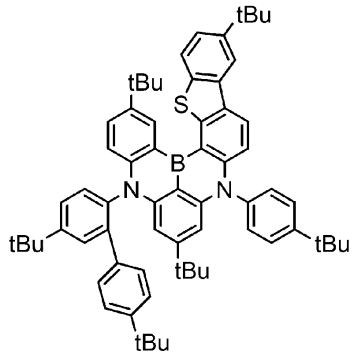
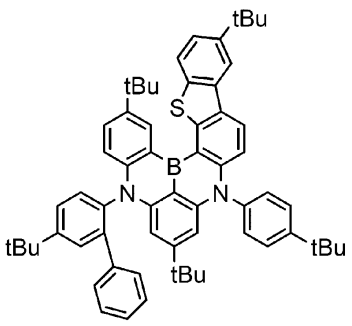
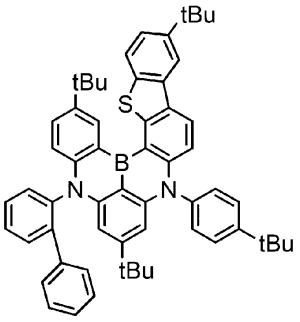
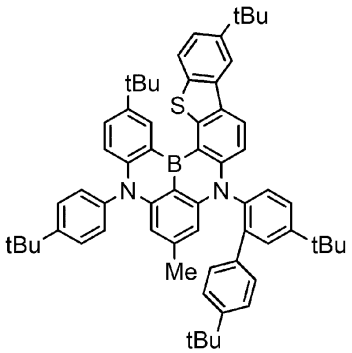
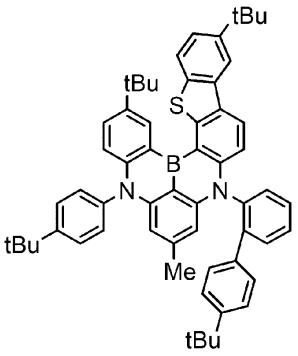
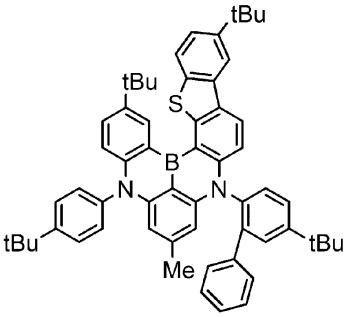
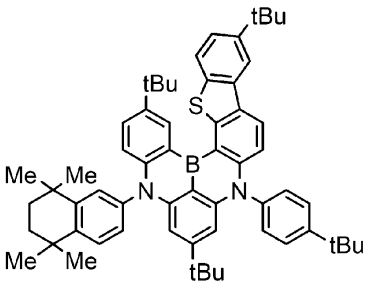
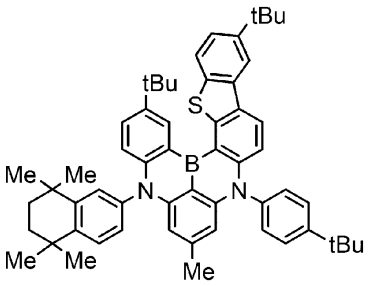
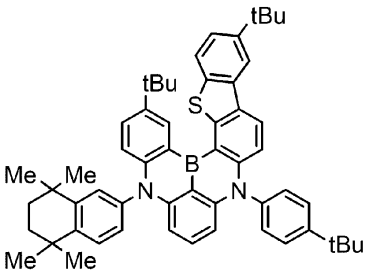
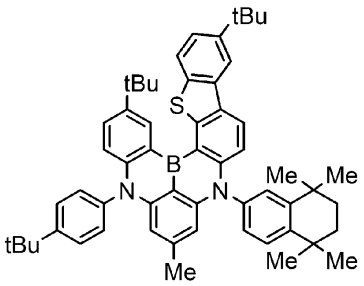
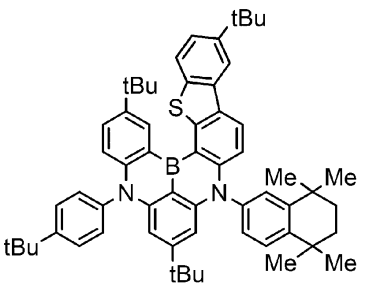
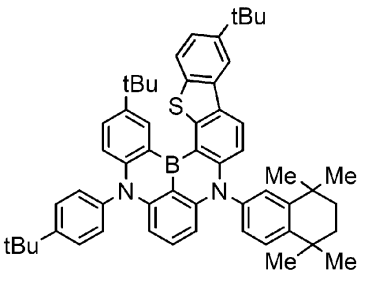
【０５８７】

【化４３０】



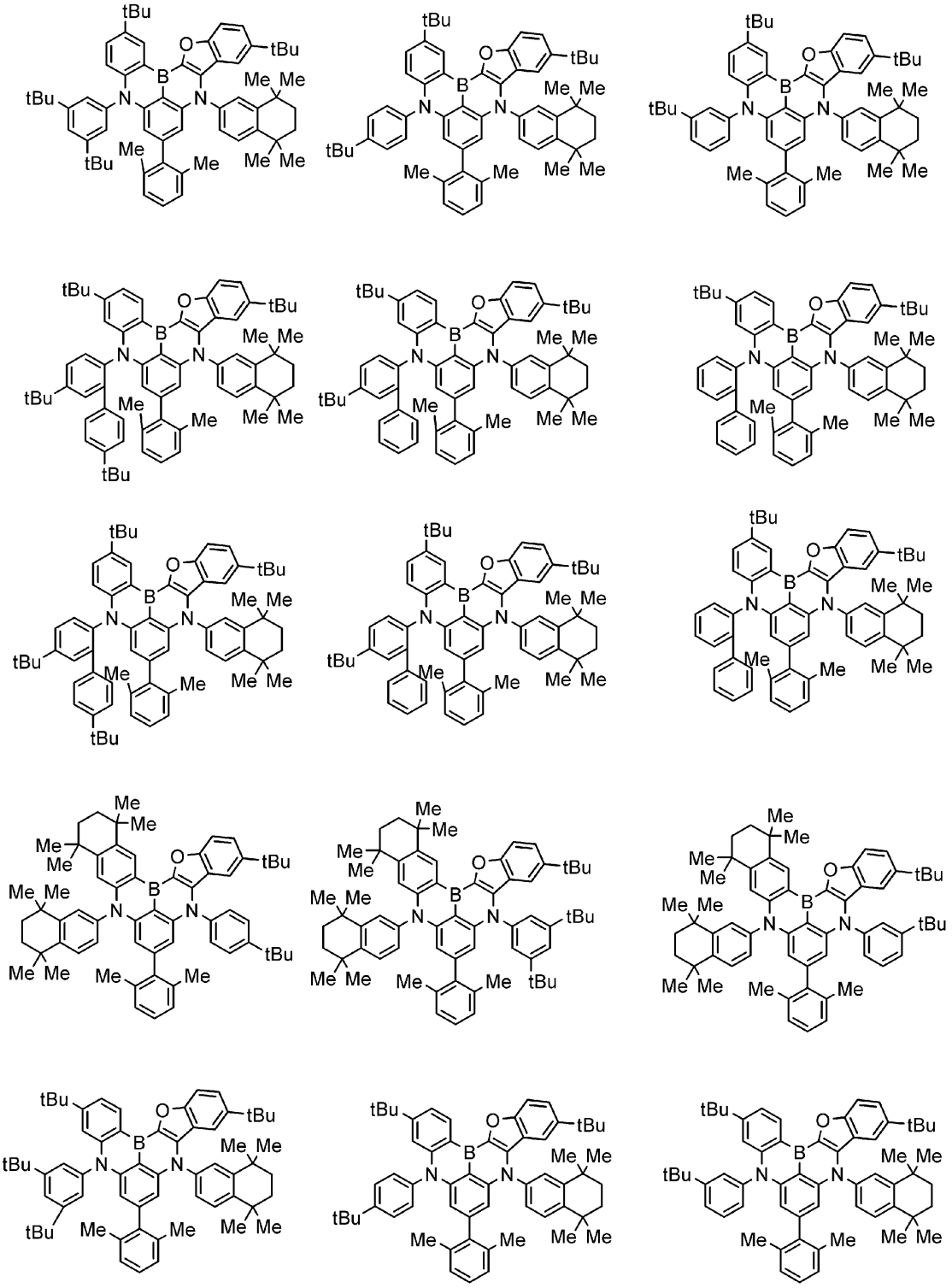
【０５８８】

【化４３１】

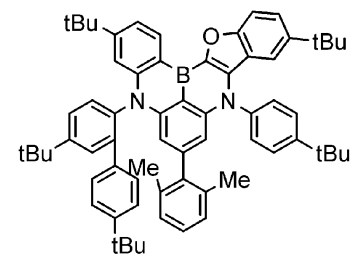
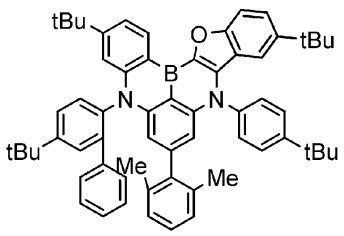
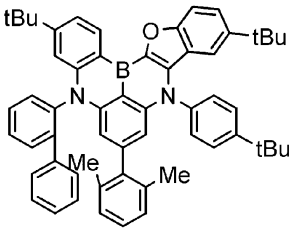
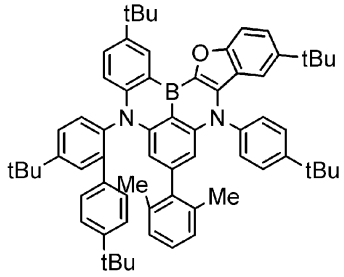
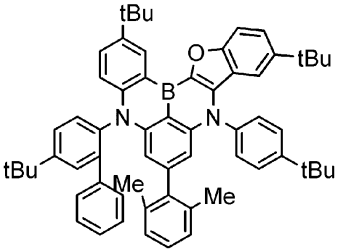
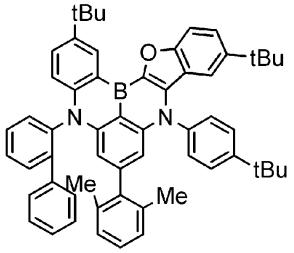
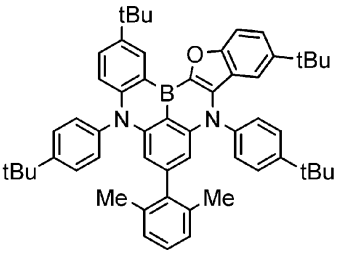
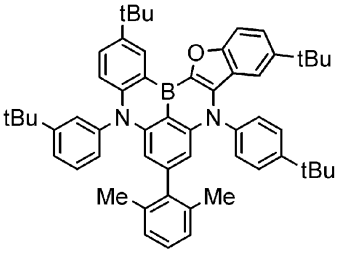
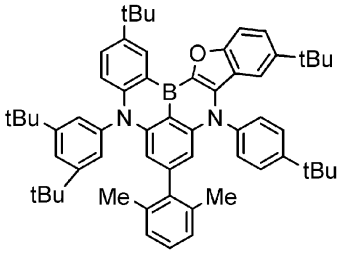
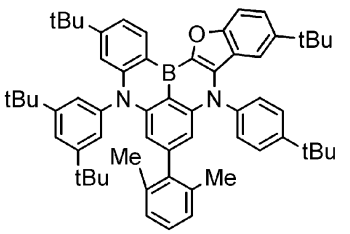
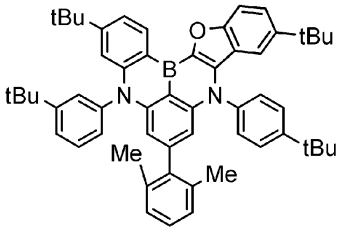
【０５８９】

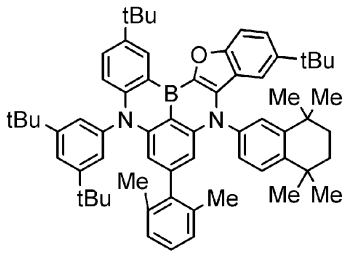
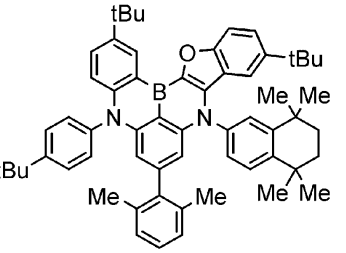
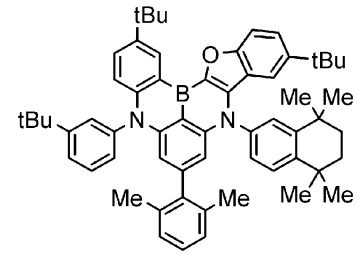
【化４３２】



【０５９０】

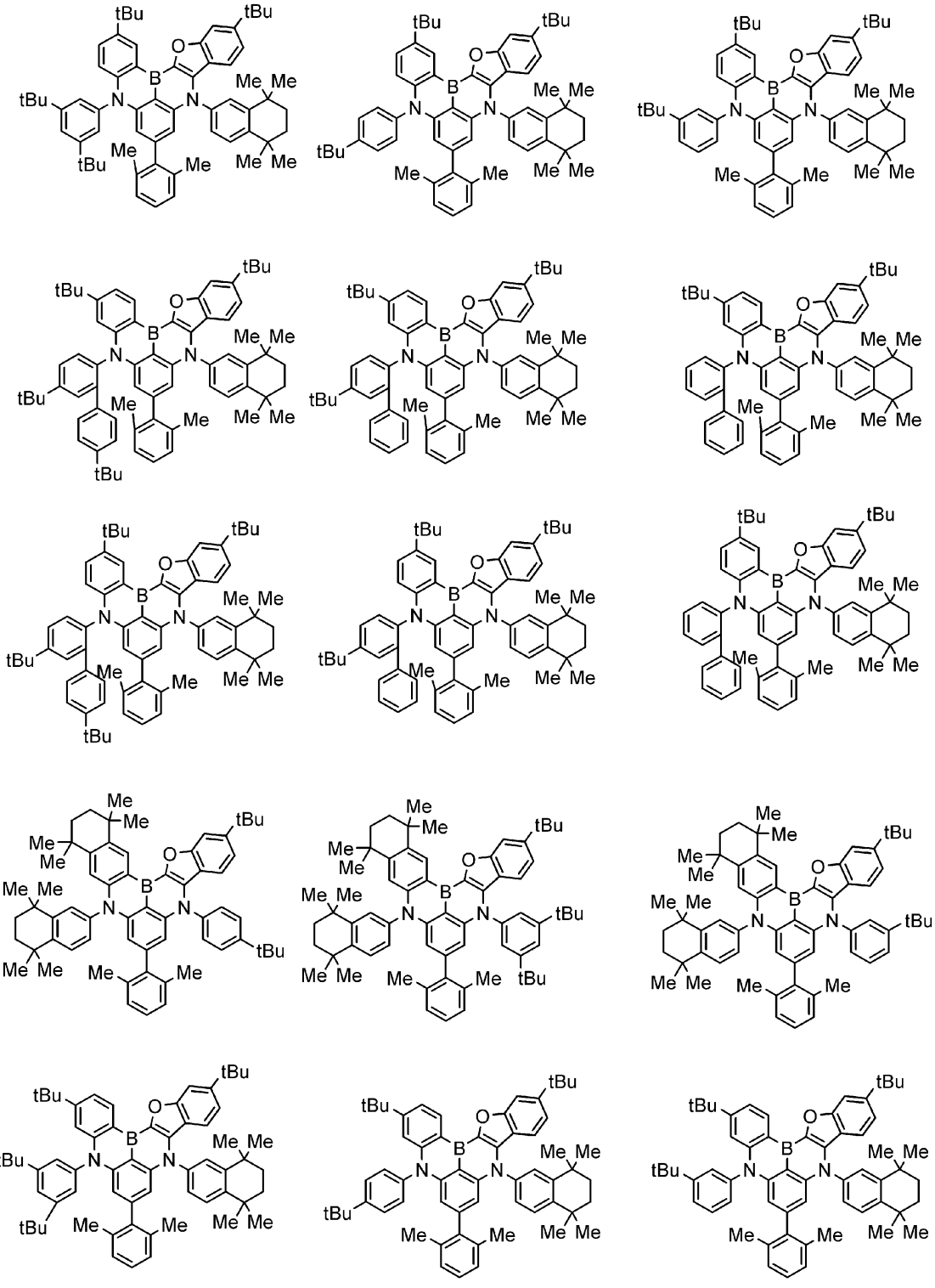
【化４３３】

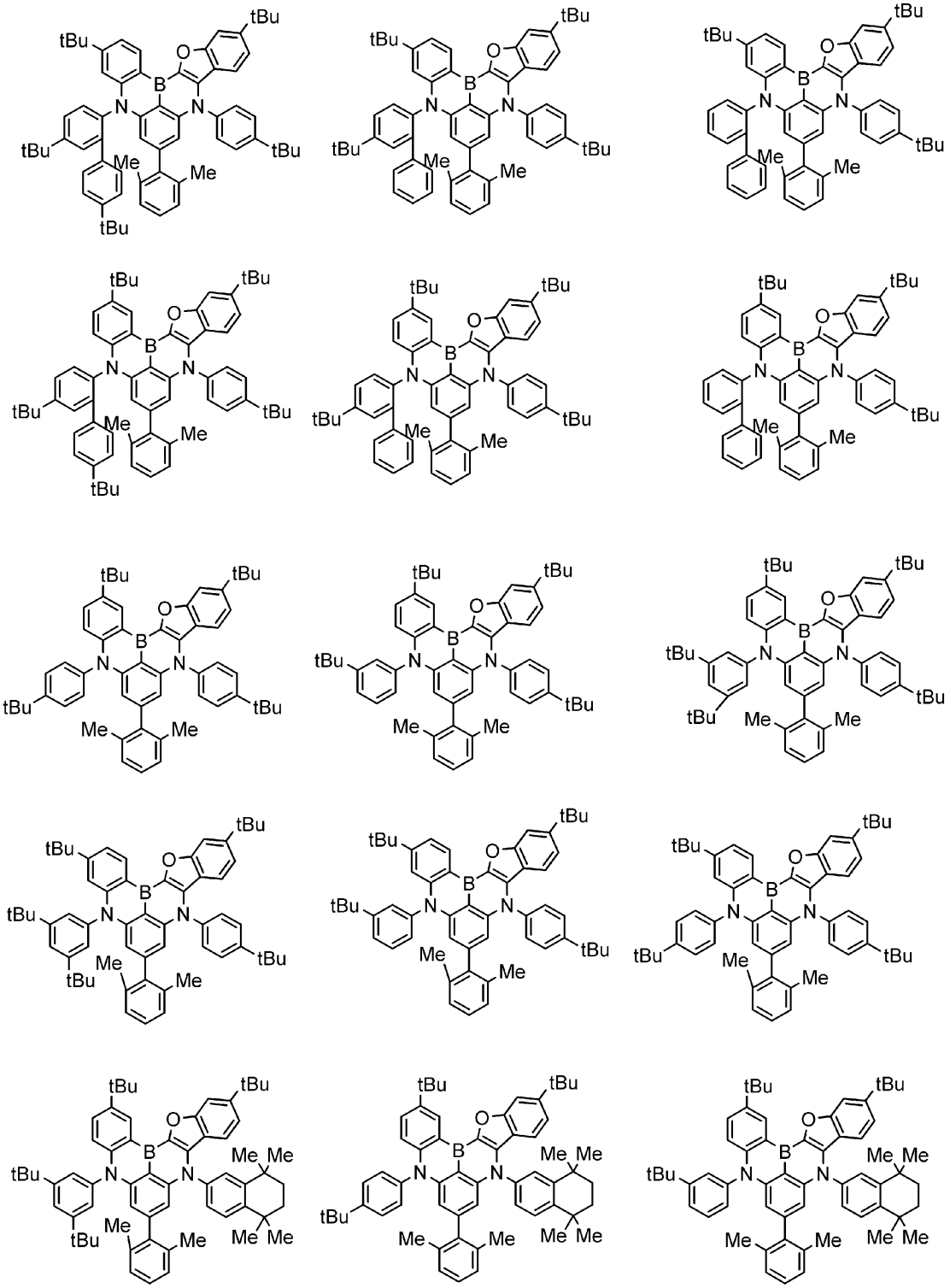
【０５９１】

【化４３４】



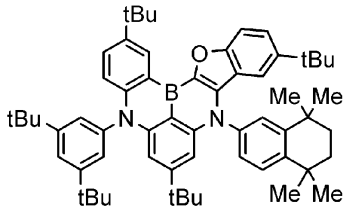
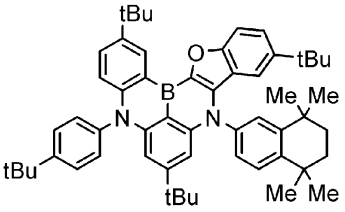
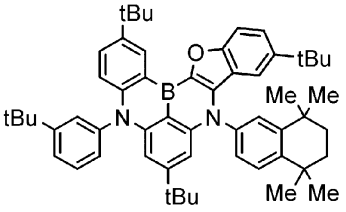
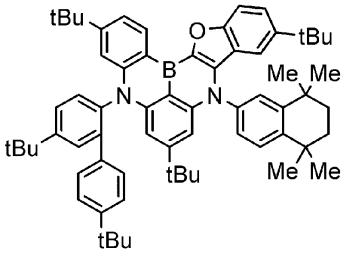
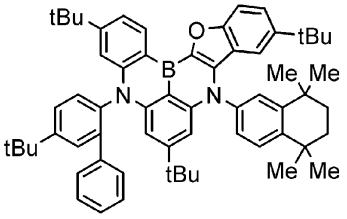
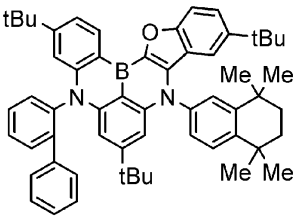
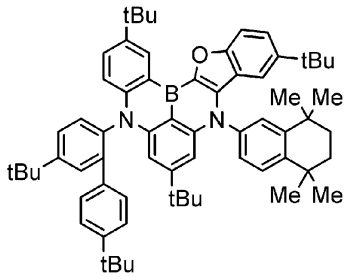
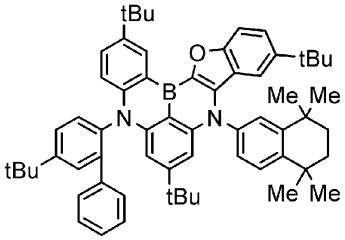
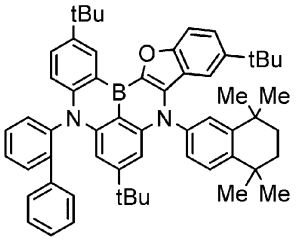
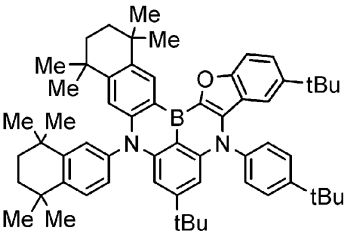
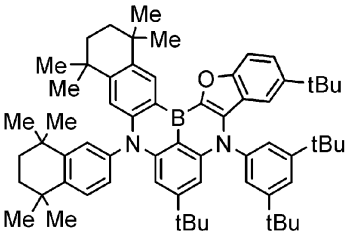
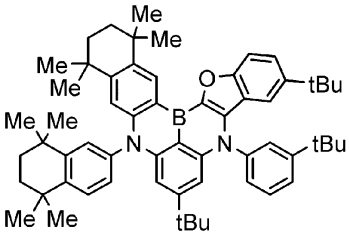
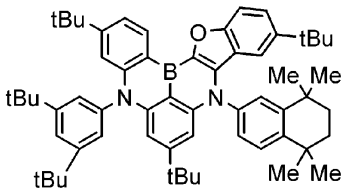
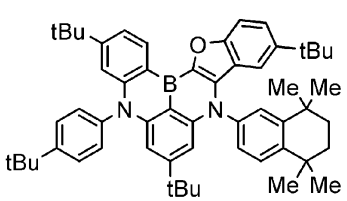
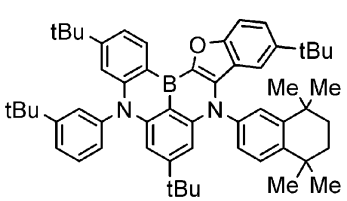
【０５９２】

【化４３５】



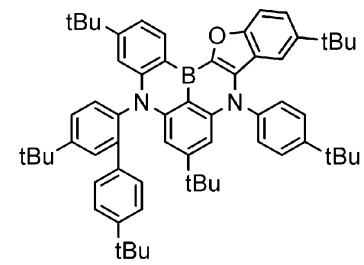
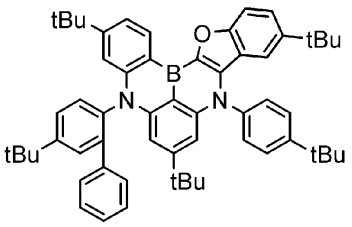
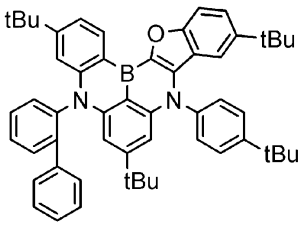
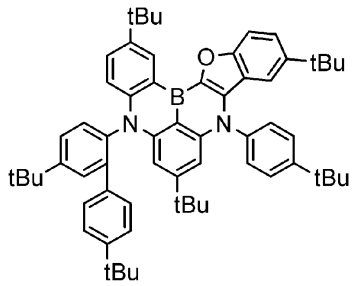
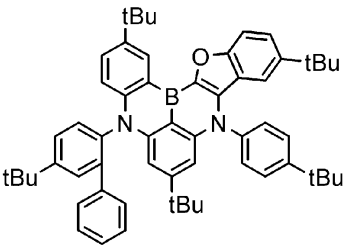
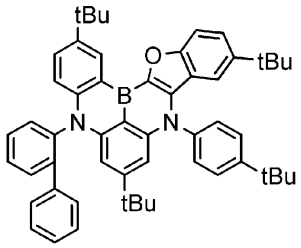
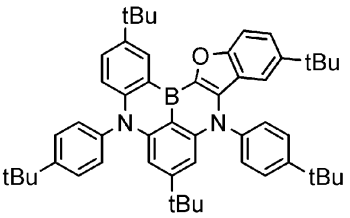
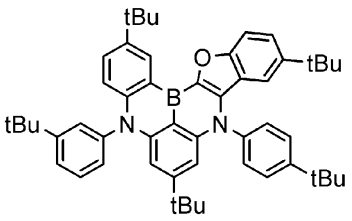
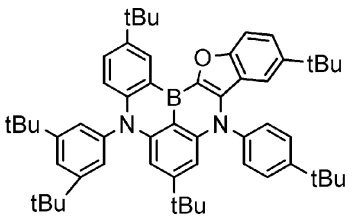
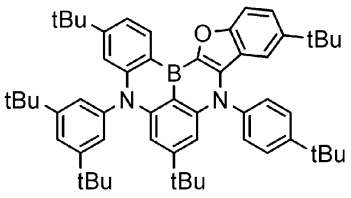
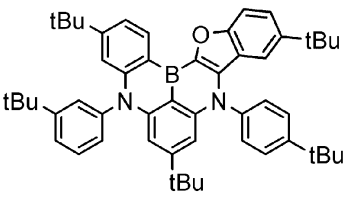
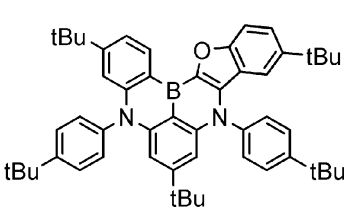
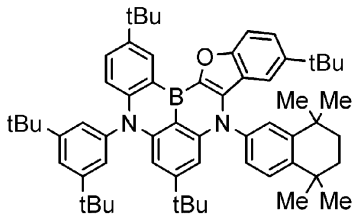
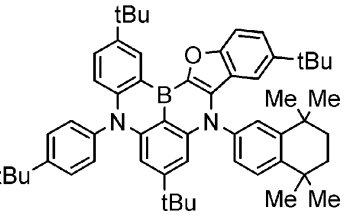
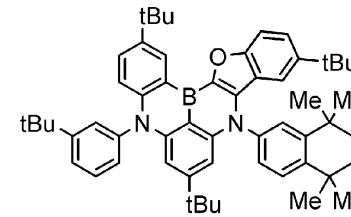
【０５９３】

【化４３６】

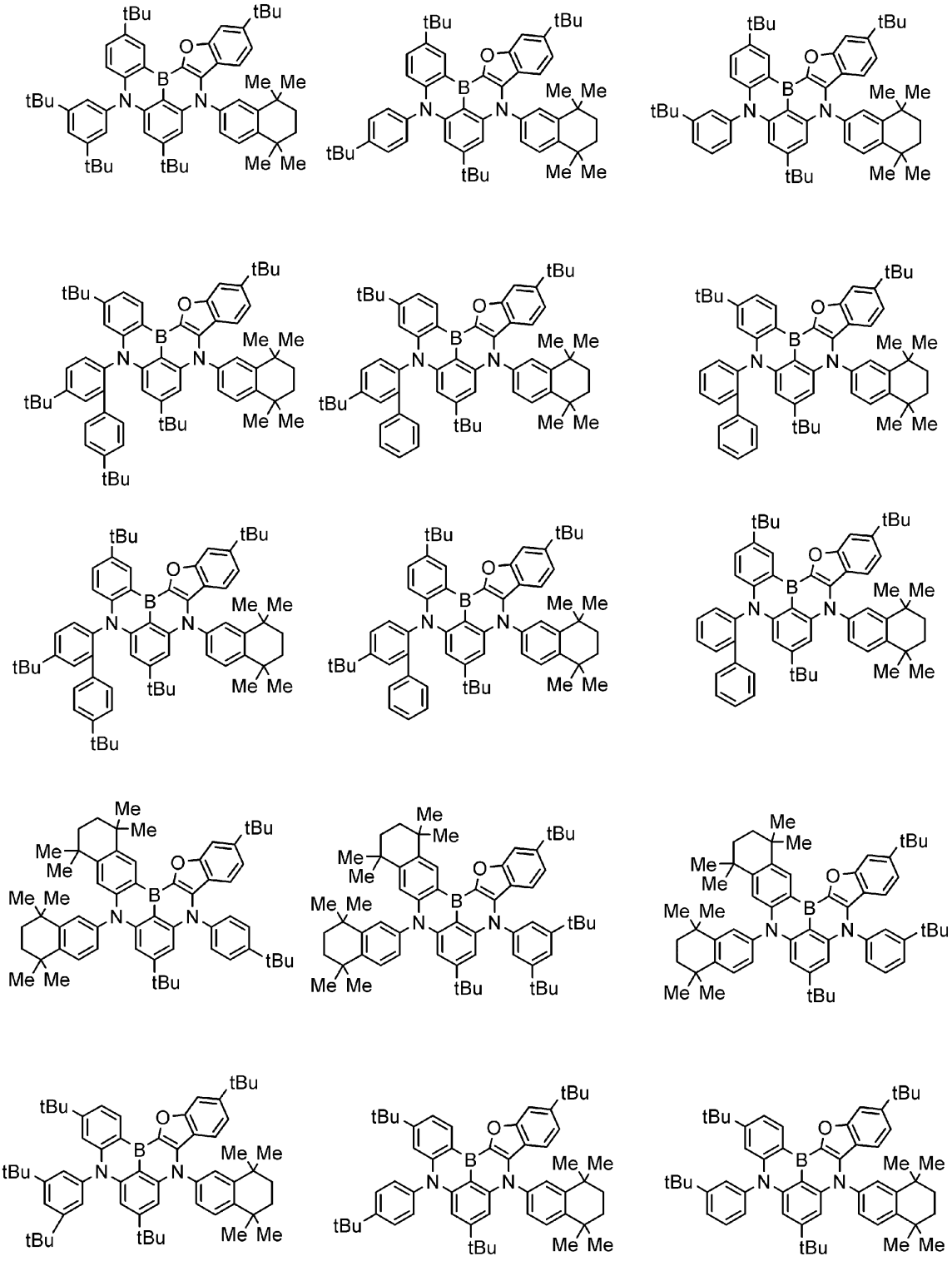
【０５９４】

【化４３７】

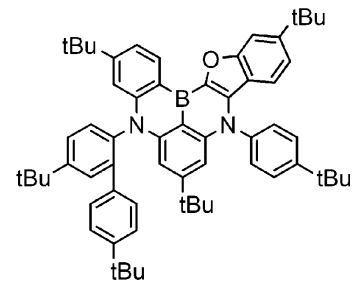
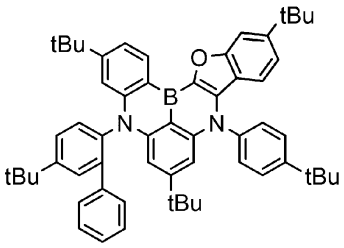
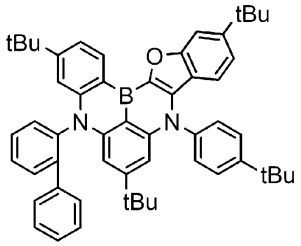
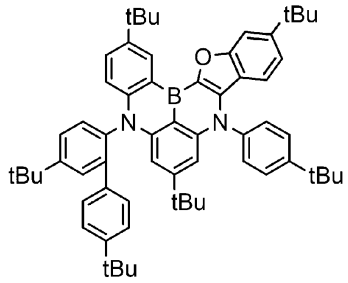
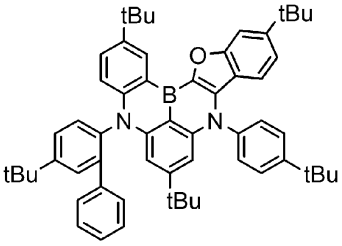
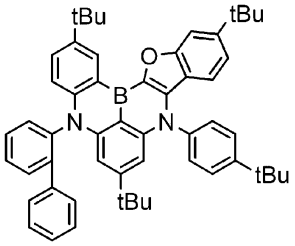
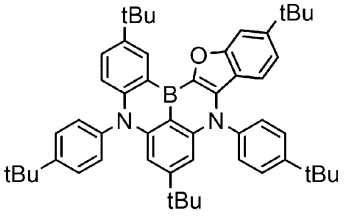
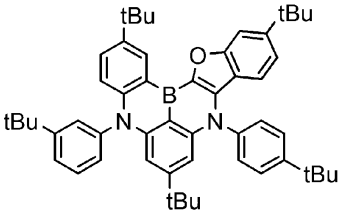
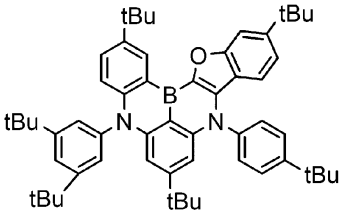
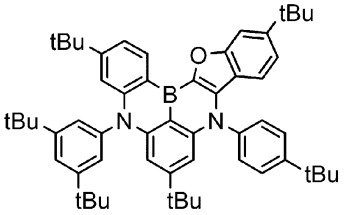
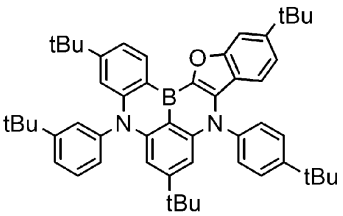
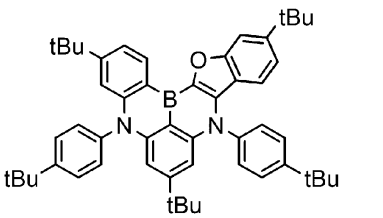
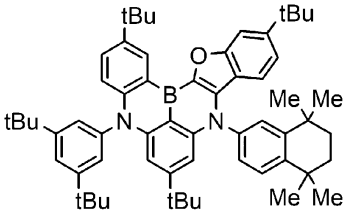
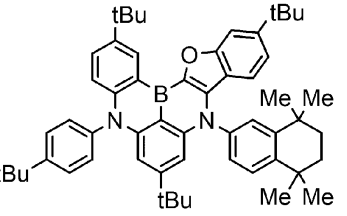
【０５９５】

【化４３８】



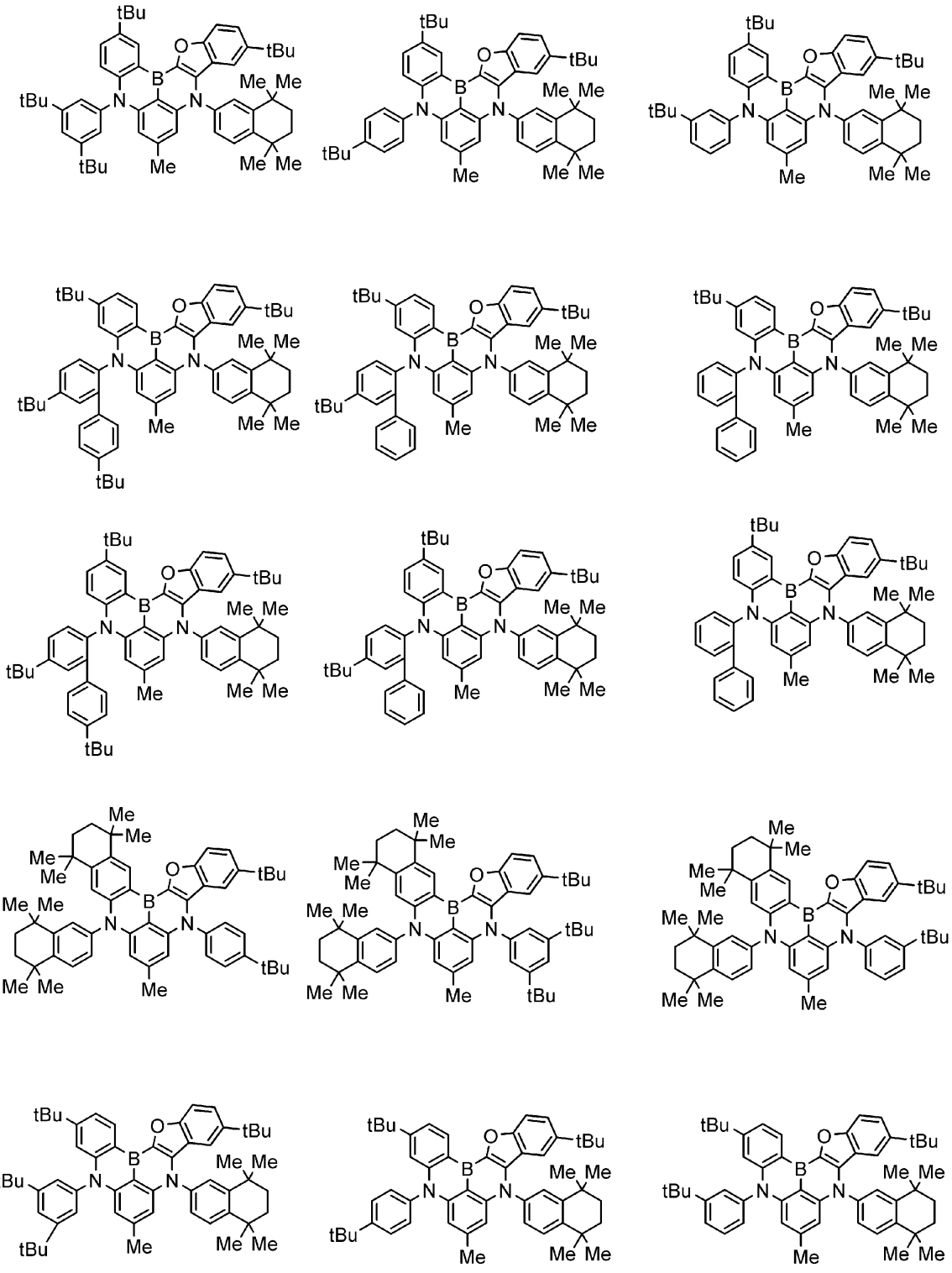
【０５９６】

【化４３９】

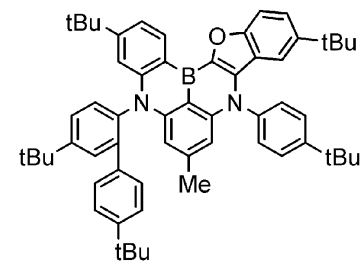
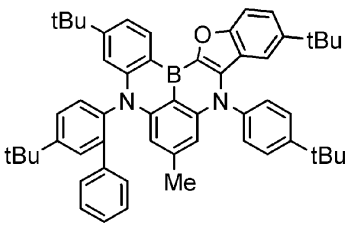
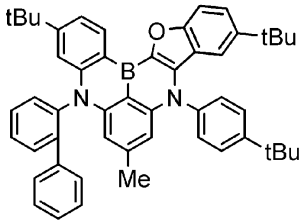
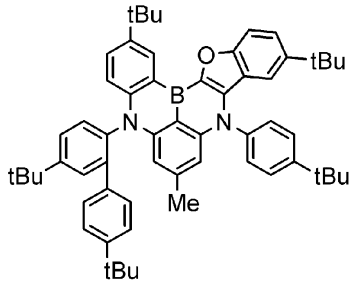
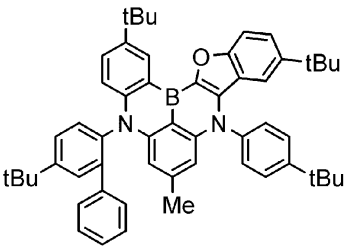
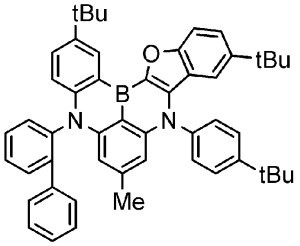
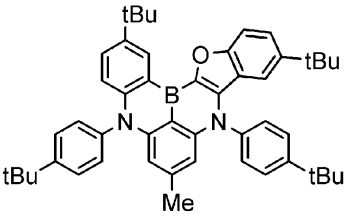
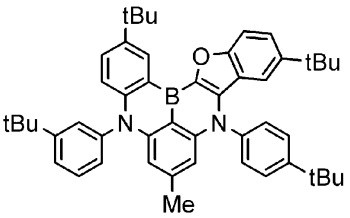
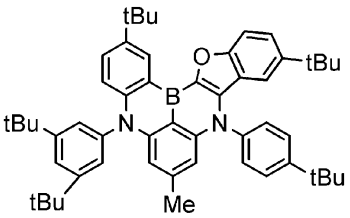
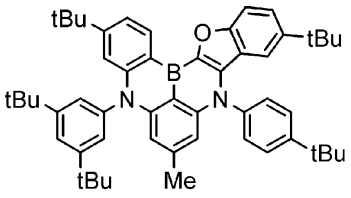
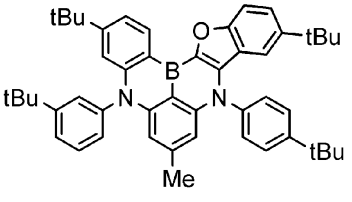
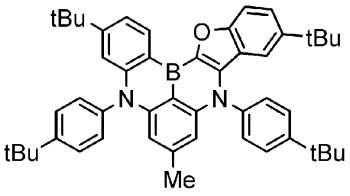
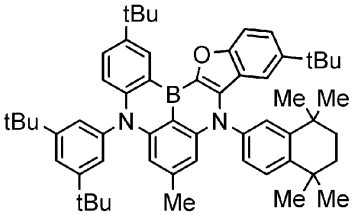
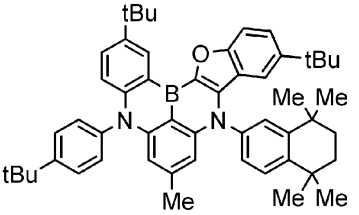
【０５９７】

【化４４０】



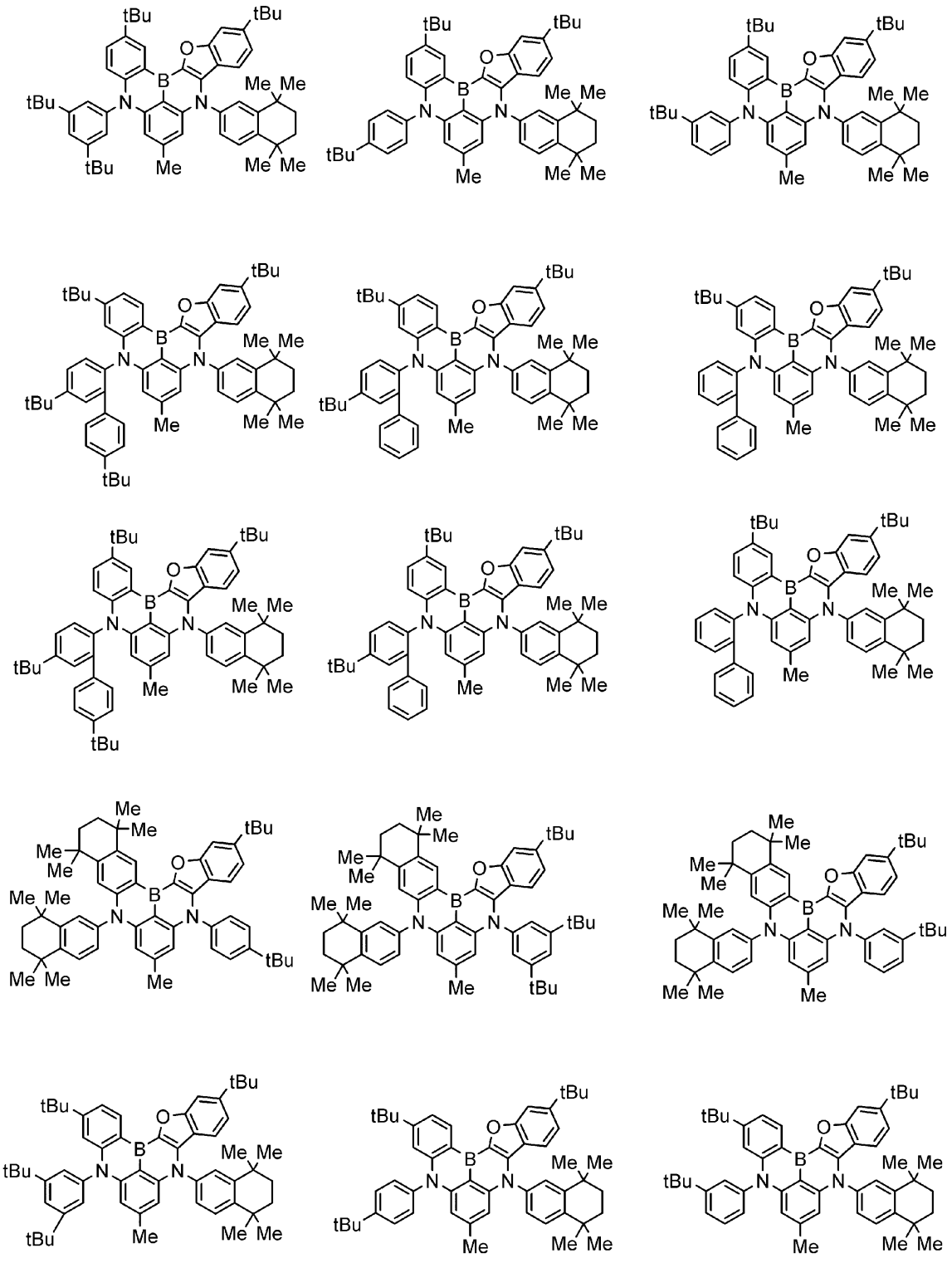
【０５９８】

【化４４１】

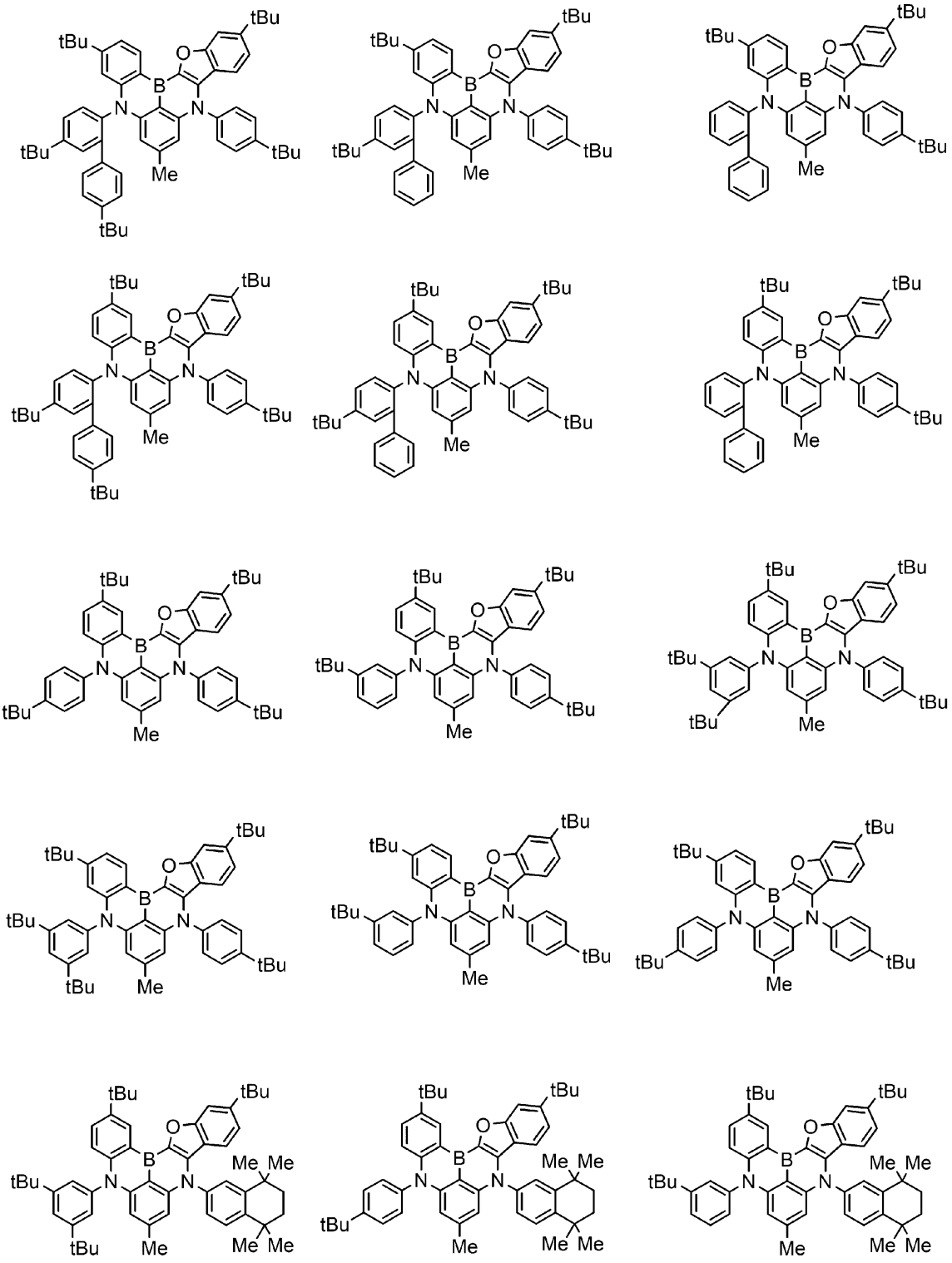
【０５９９】

【化４４２】



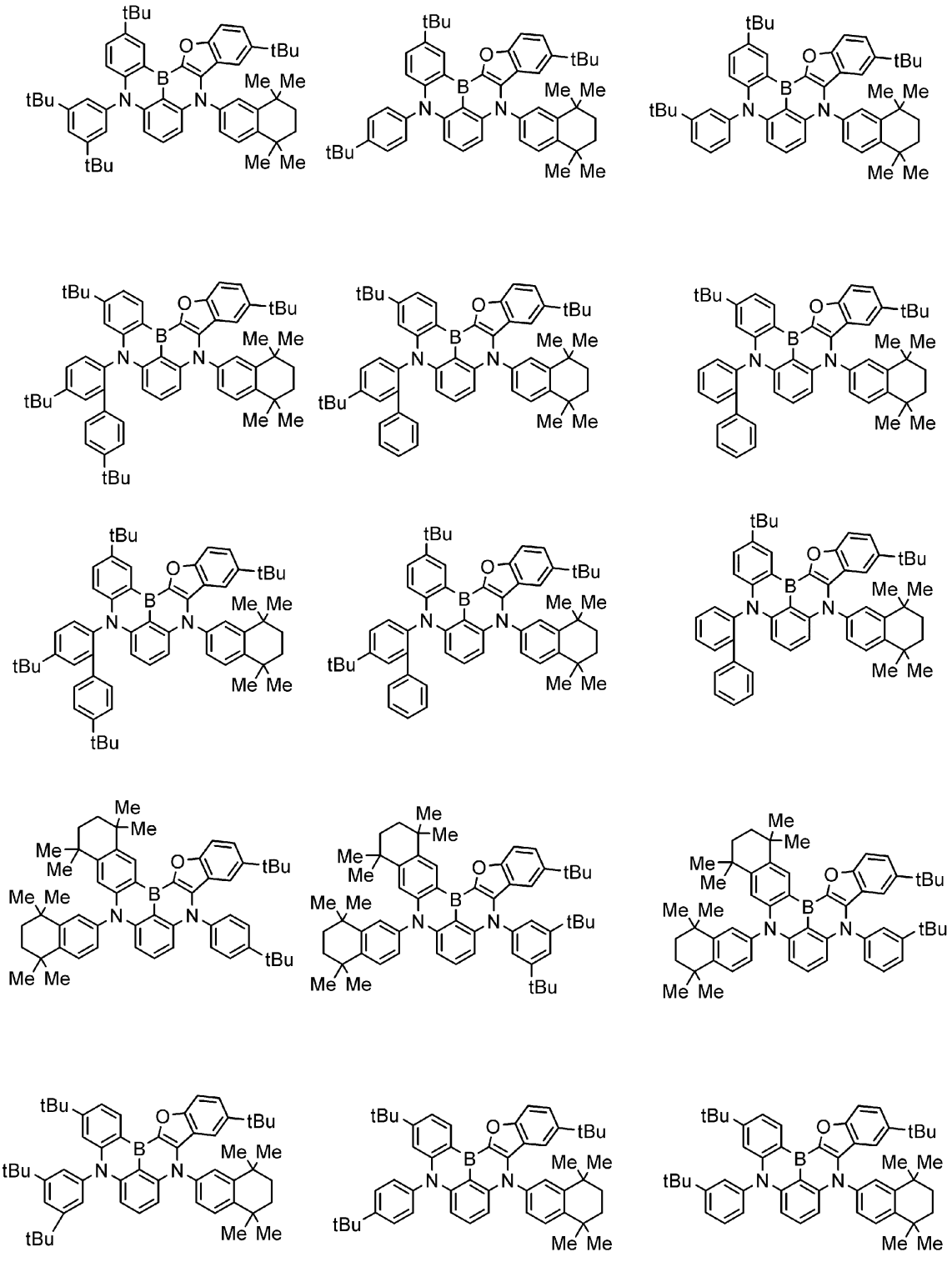
【０６００】

【化４４３】



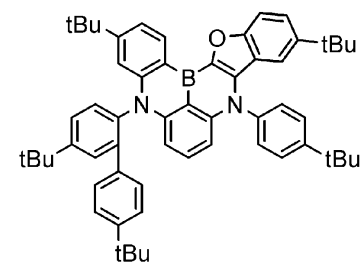
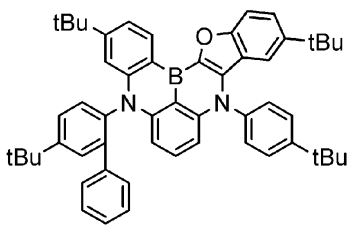
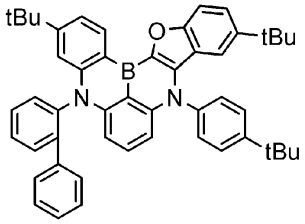
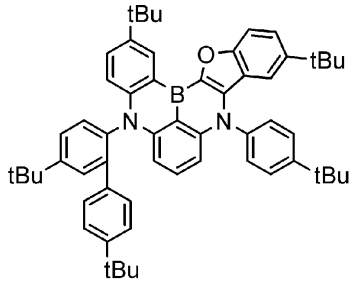
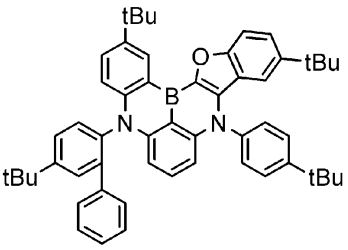
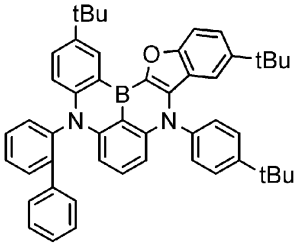
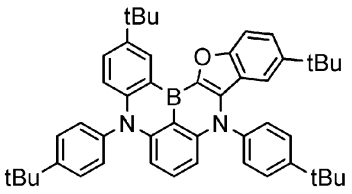
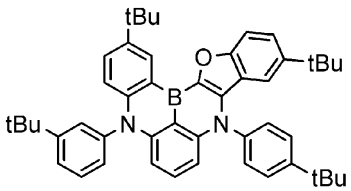
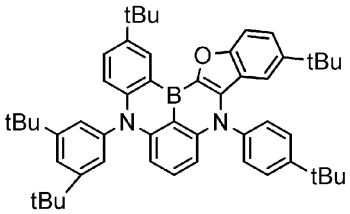
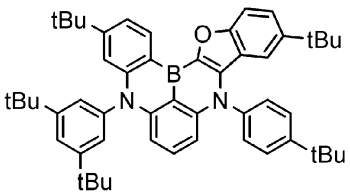
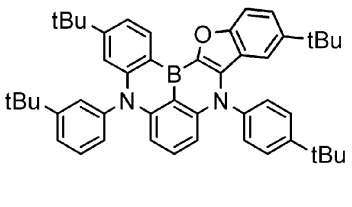
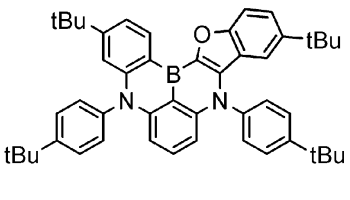
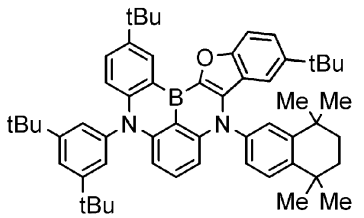
【０６０１】

【化４４４】



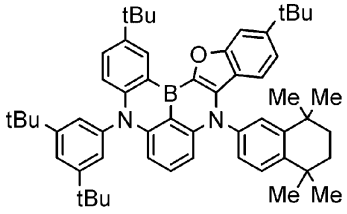
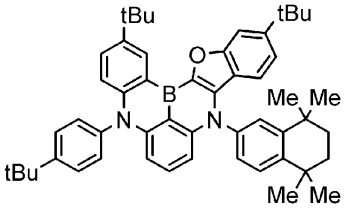
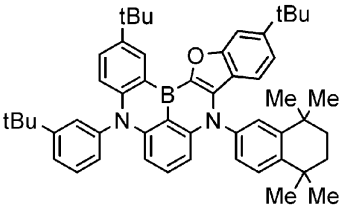
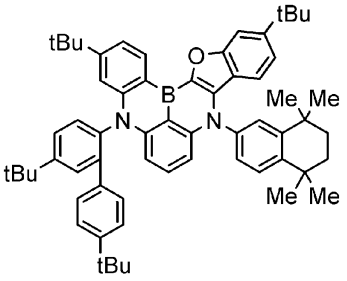
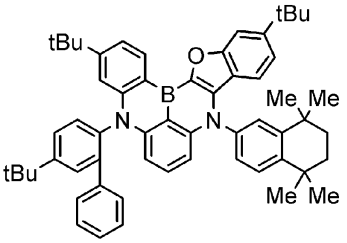
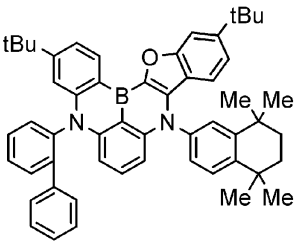
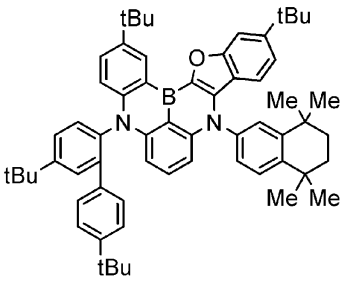
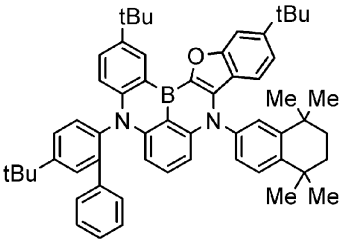
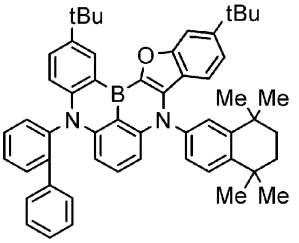
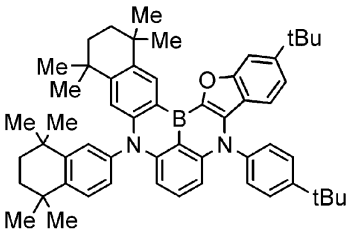
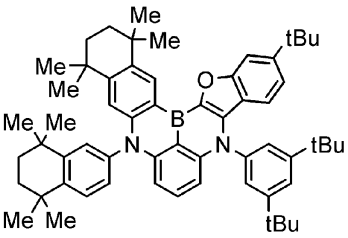
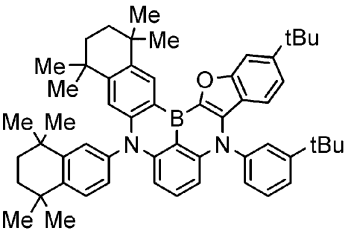
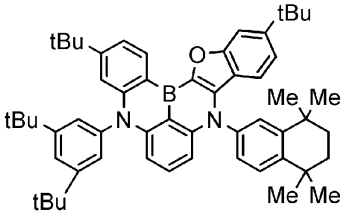
【０６０２】

【化４４５】

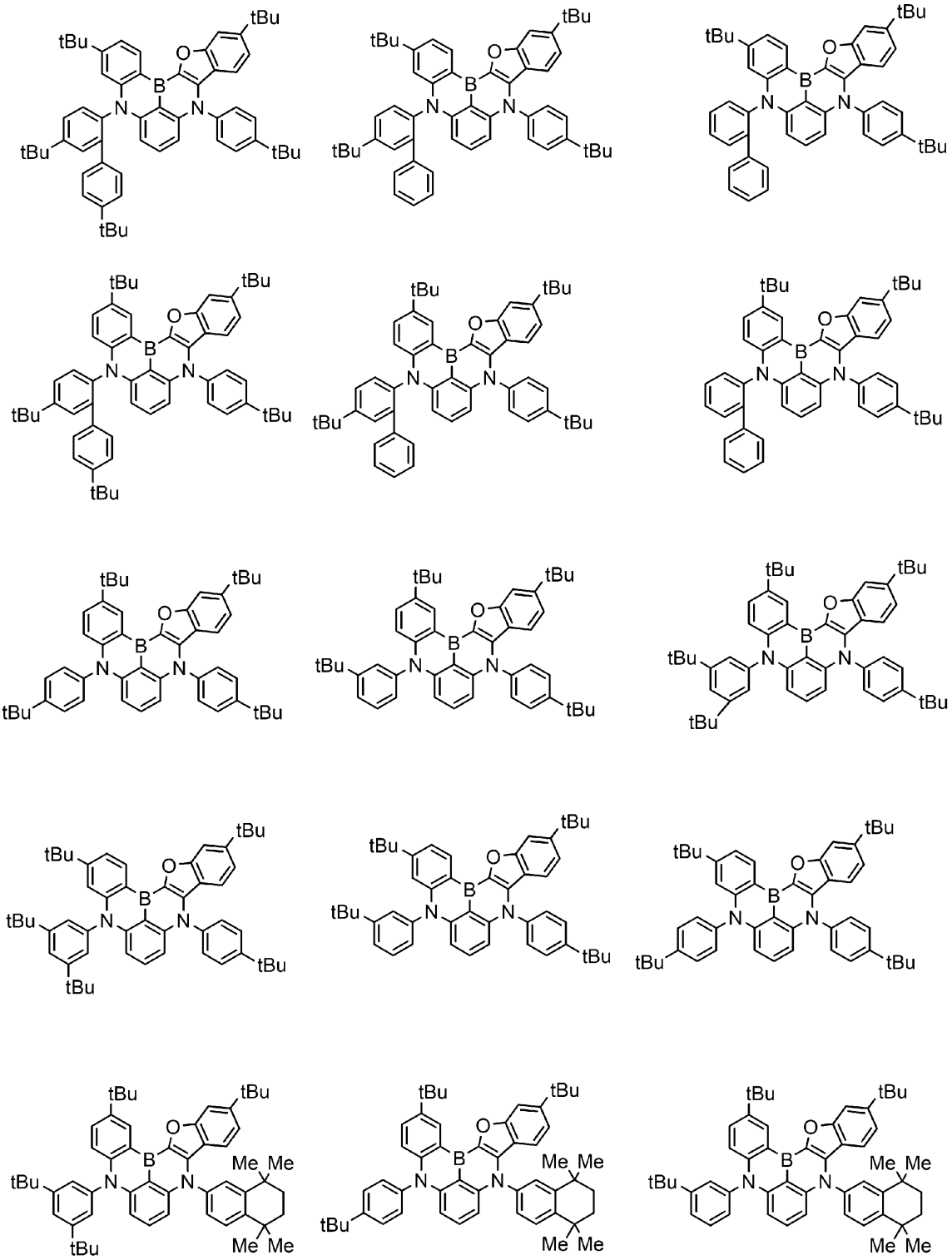
【０６０３】

【化４４６】

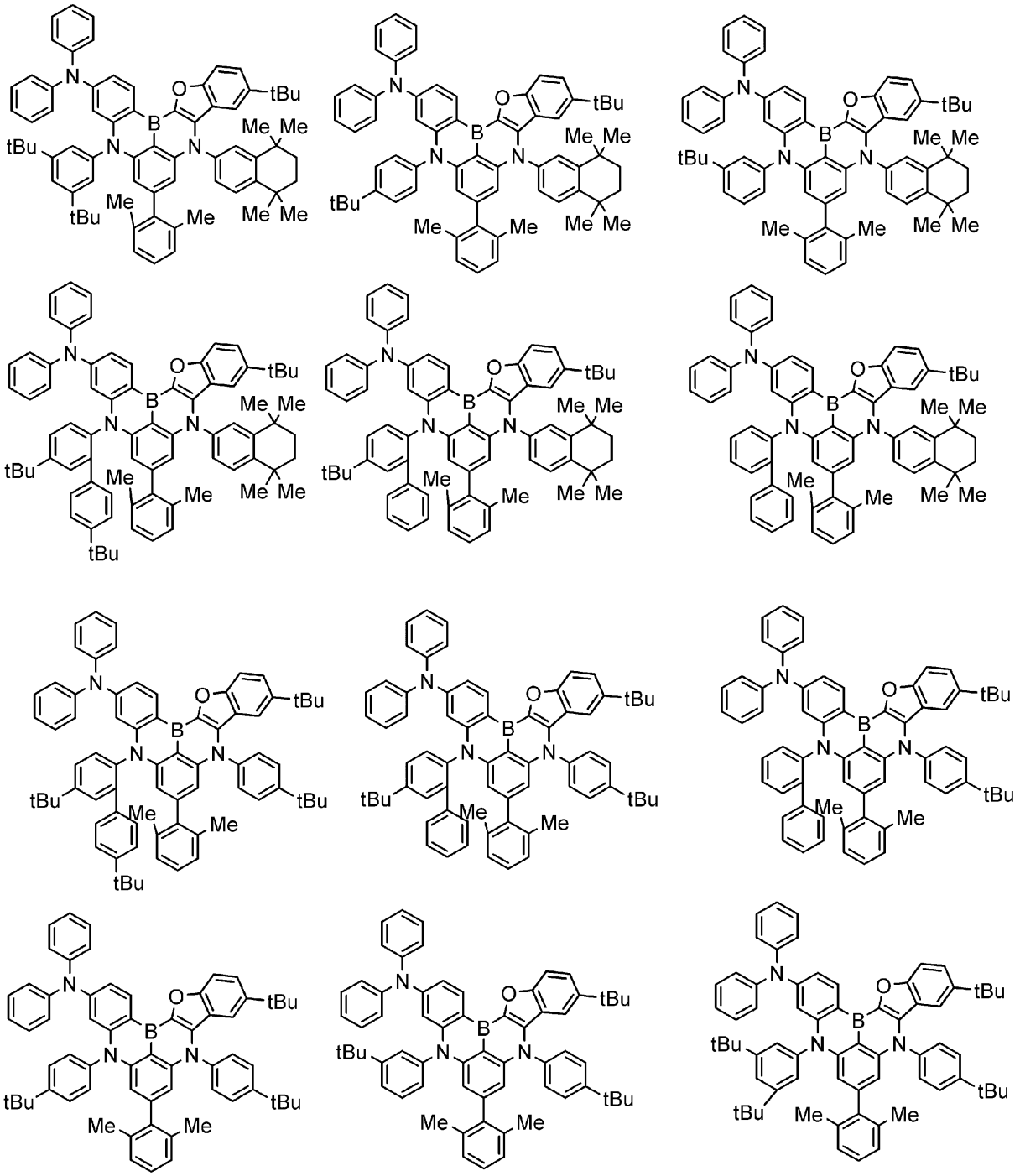
【０６０４】

【化４４７】



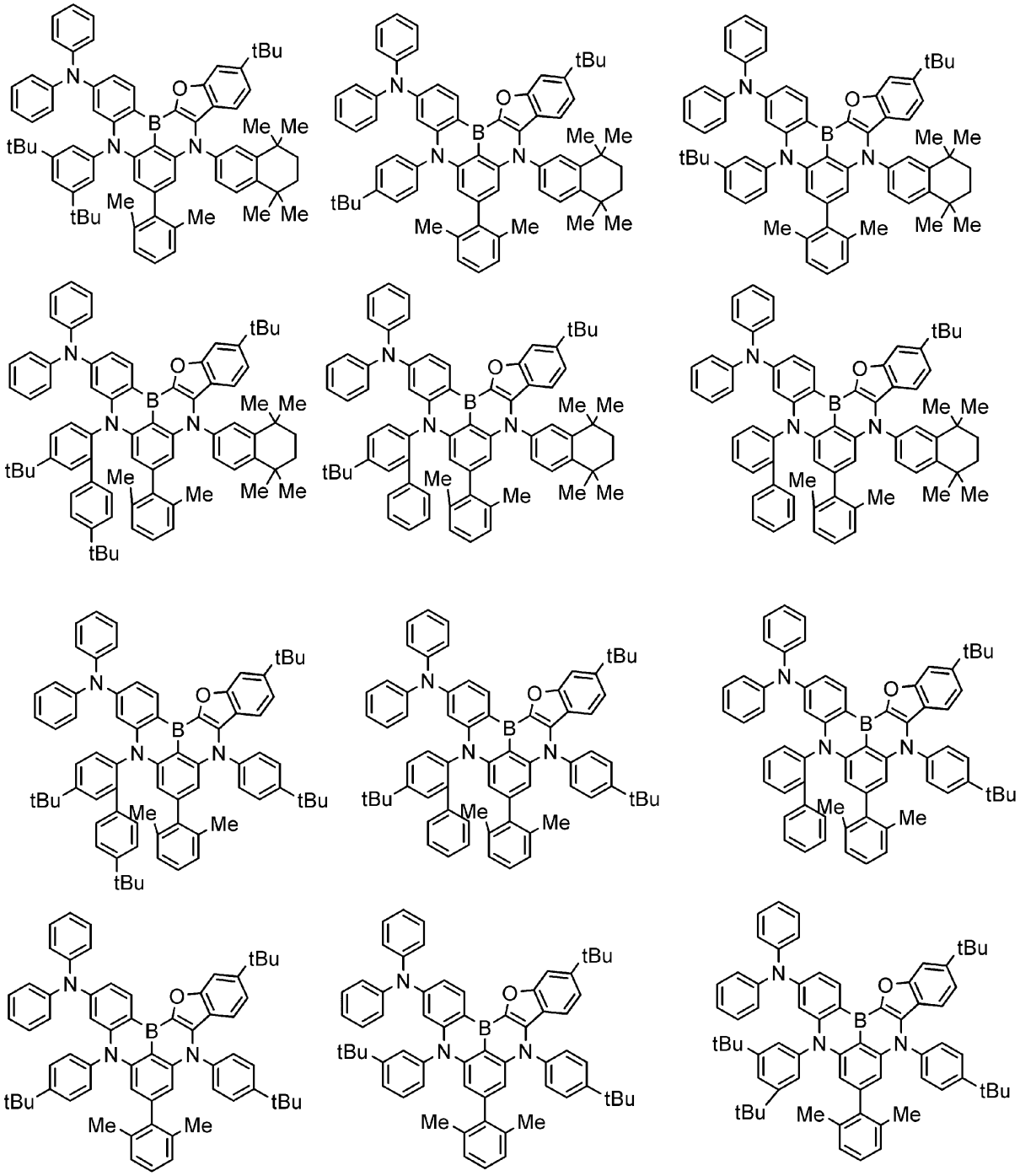
【０６０５】

【化４４８】



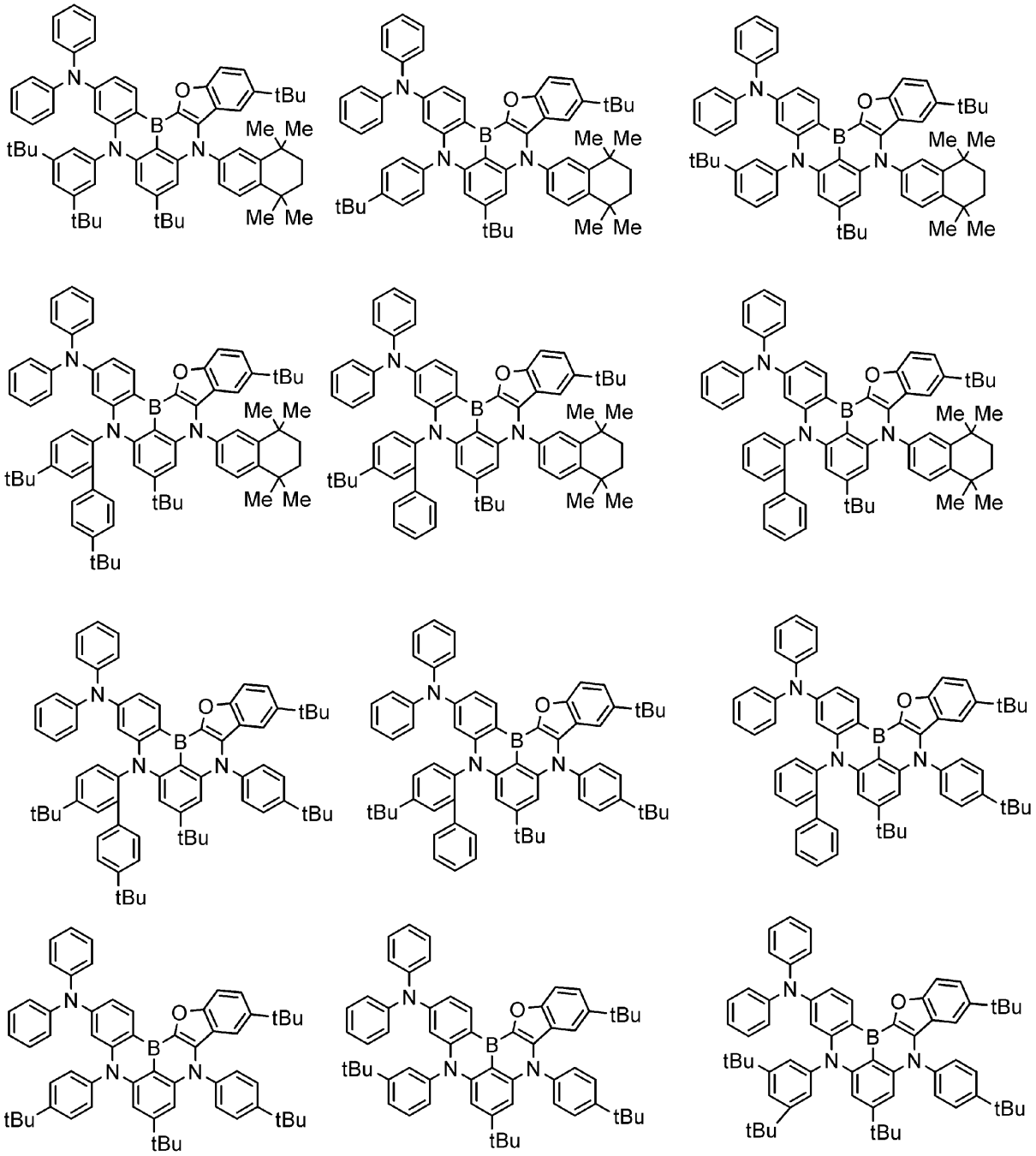
【０６０６】

【化４４９】



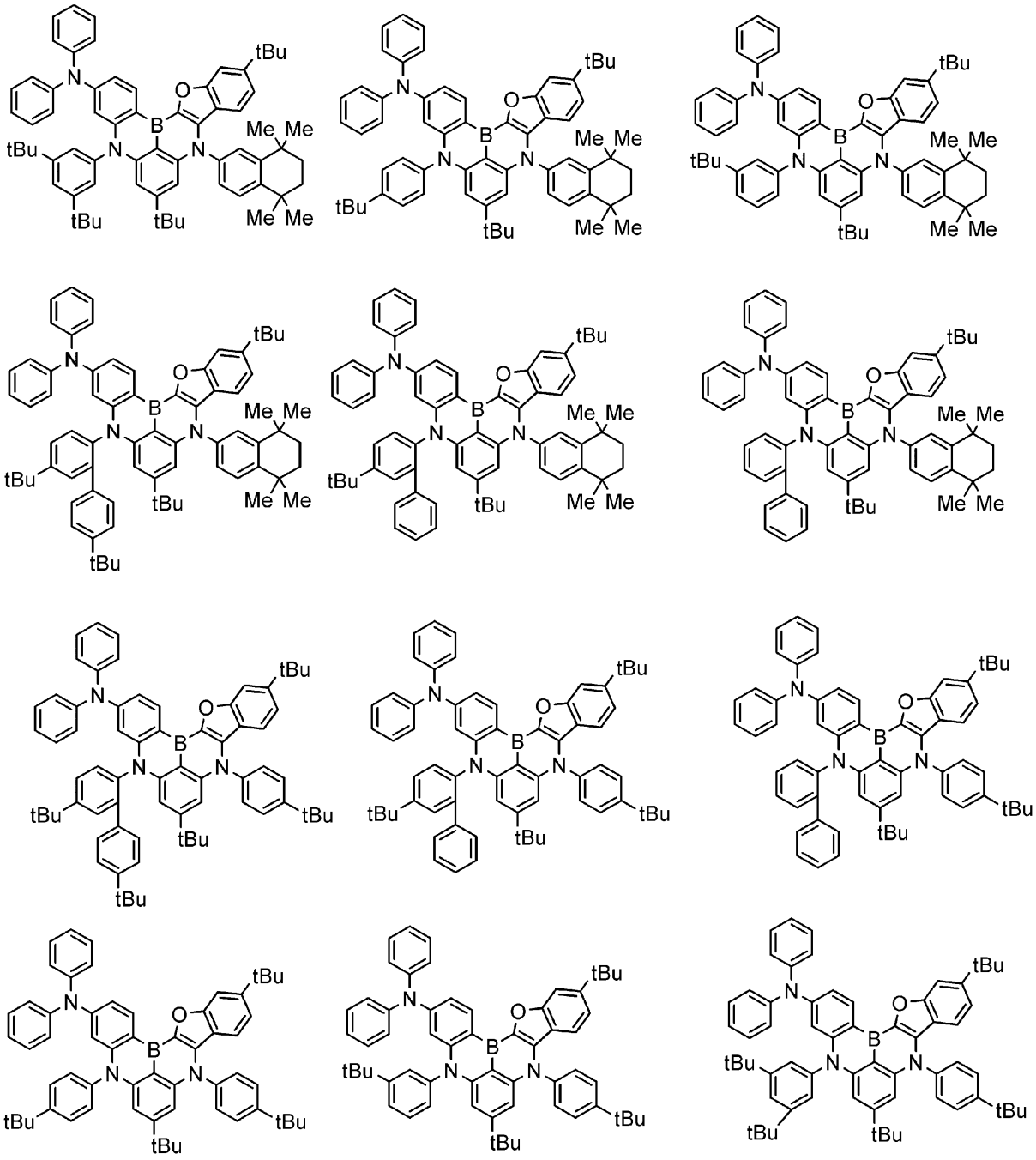
【０６０７】

【化４５０】



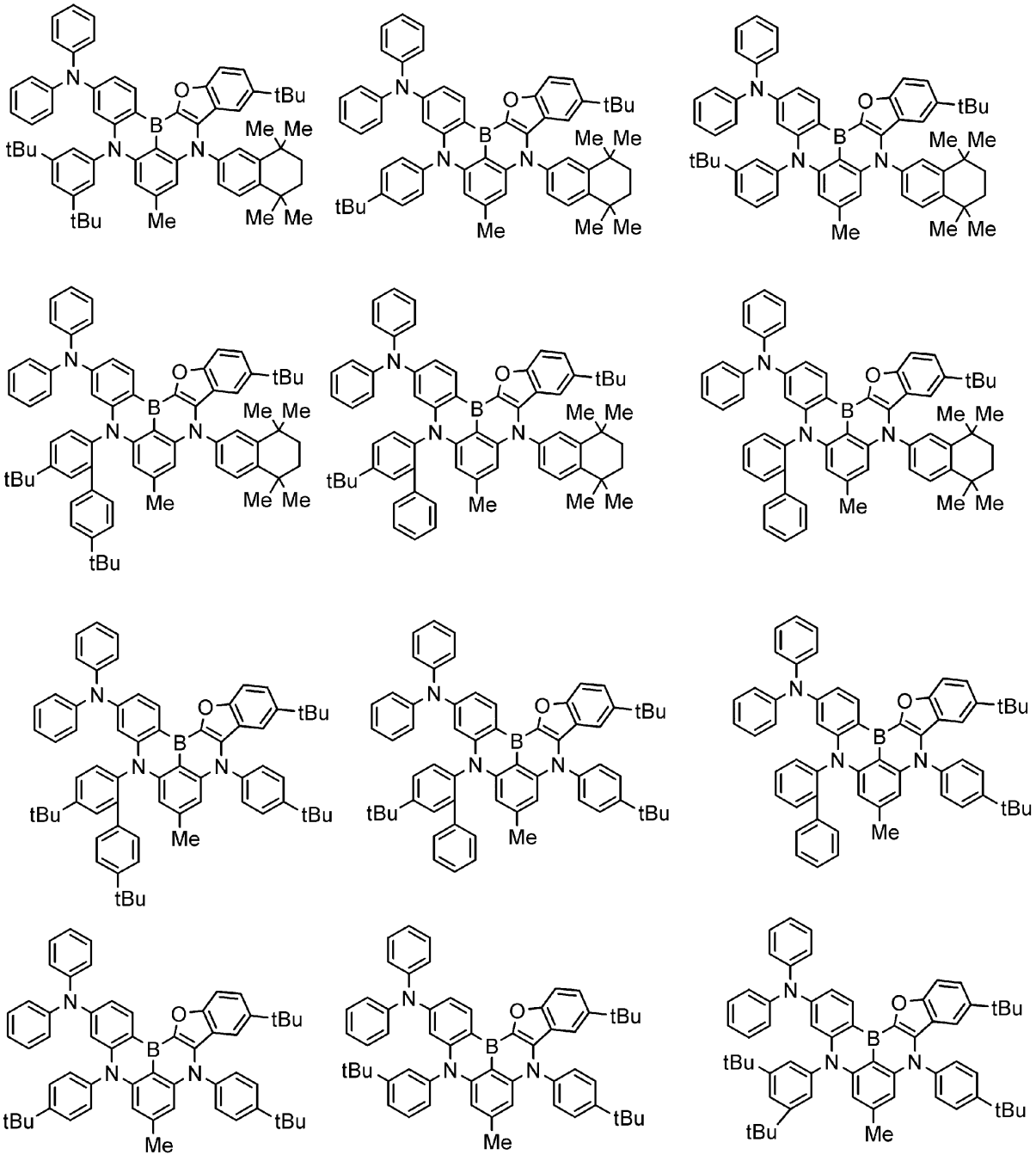
【０６０８】

【化４５１】



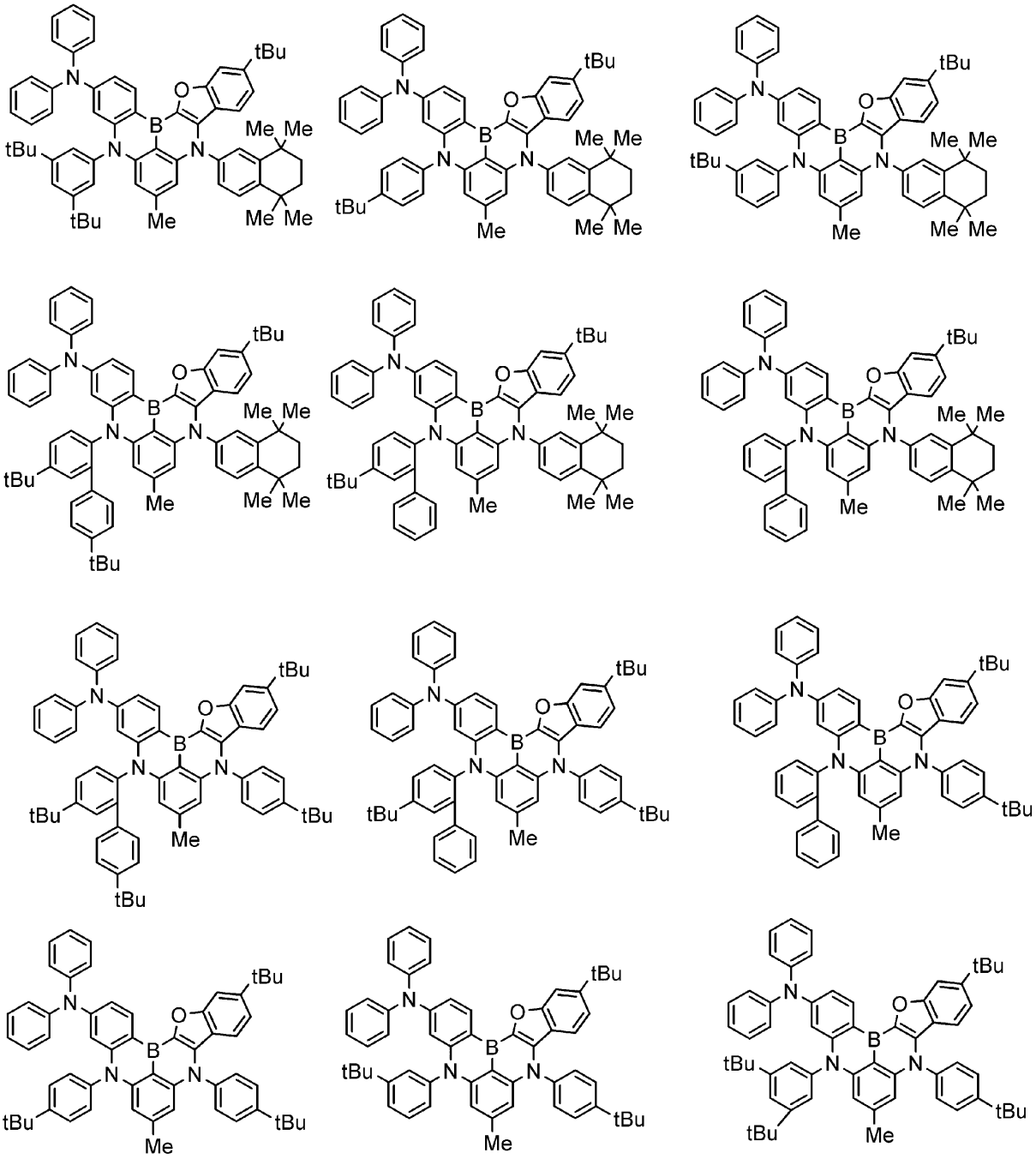
【０６０９】

【化４５２】



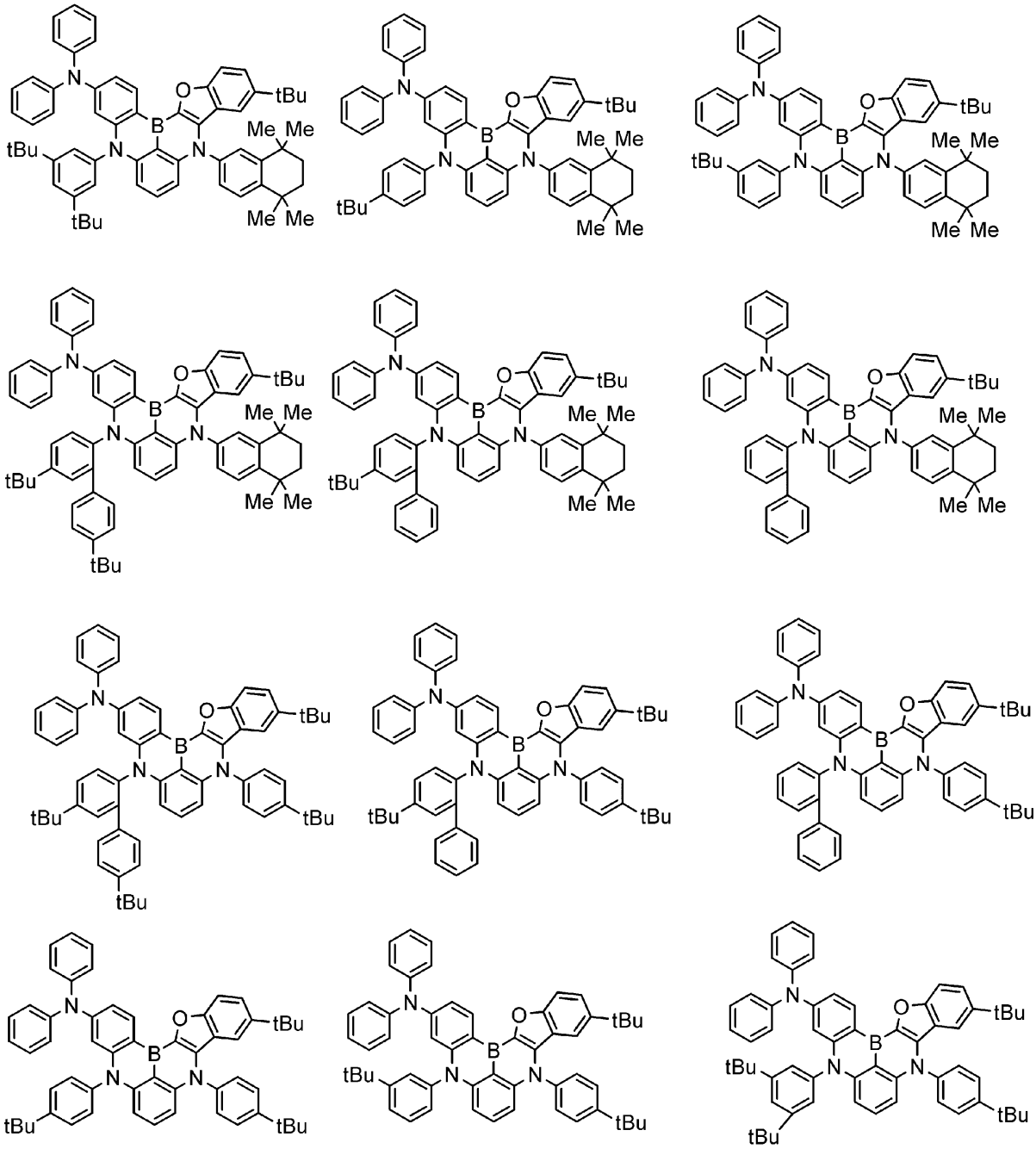
【０６１０】

【化４５３】



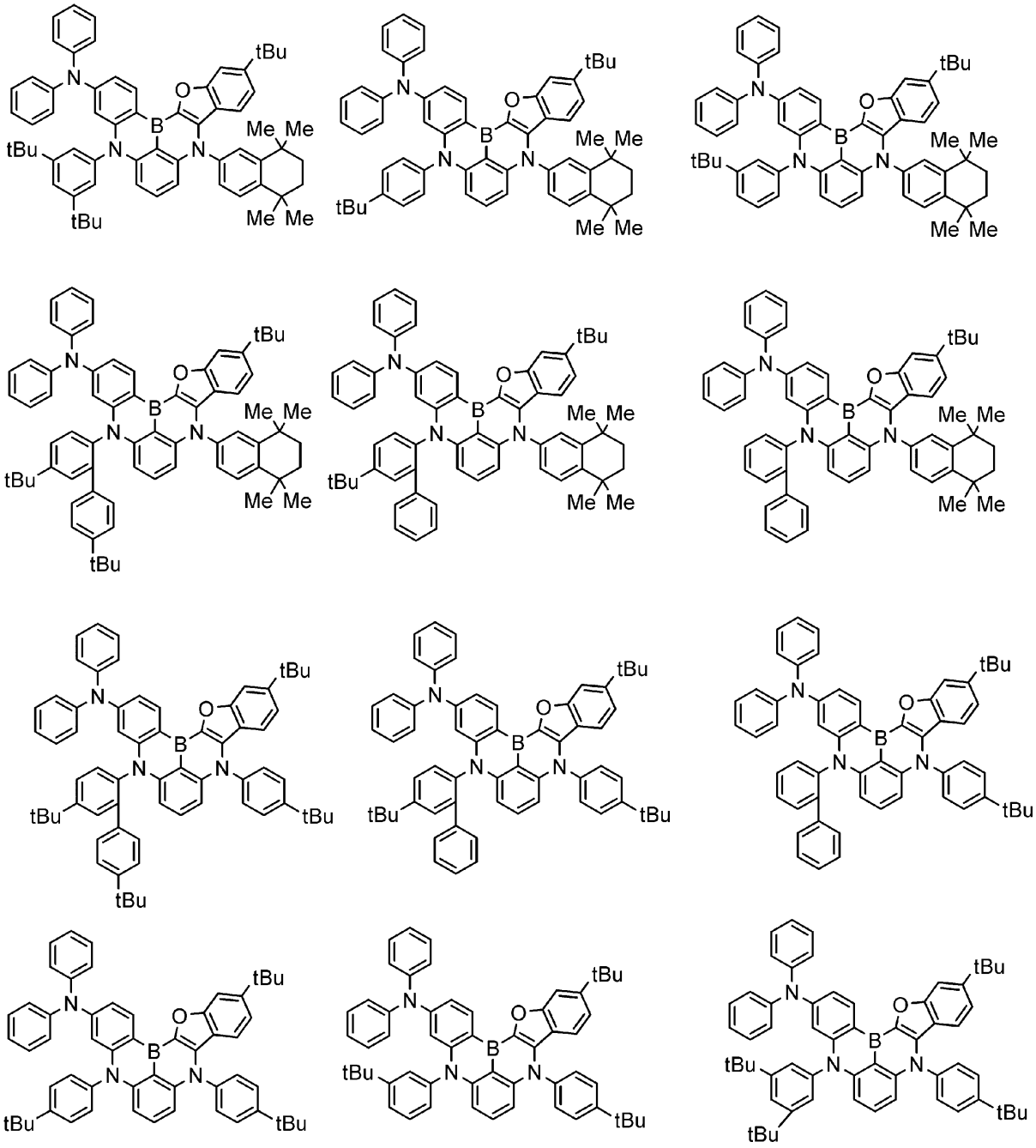
【０６１１】

【化４５４】



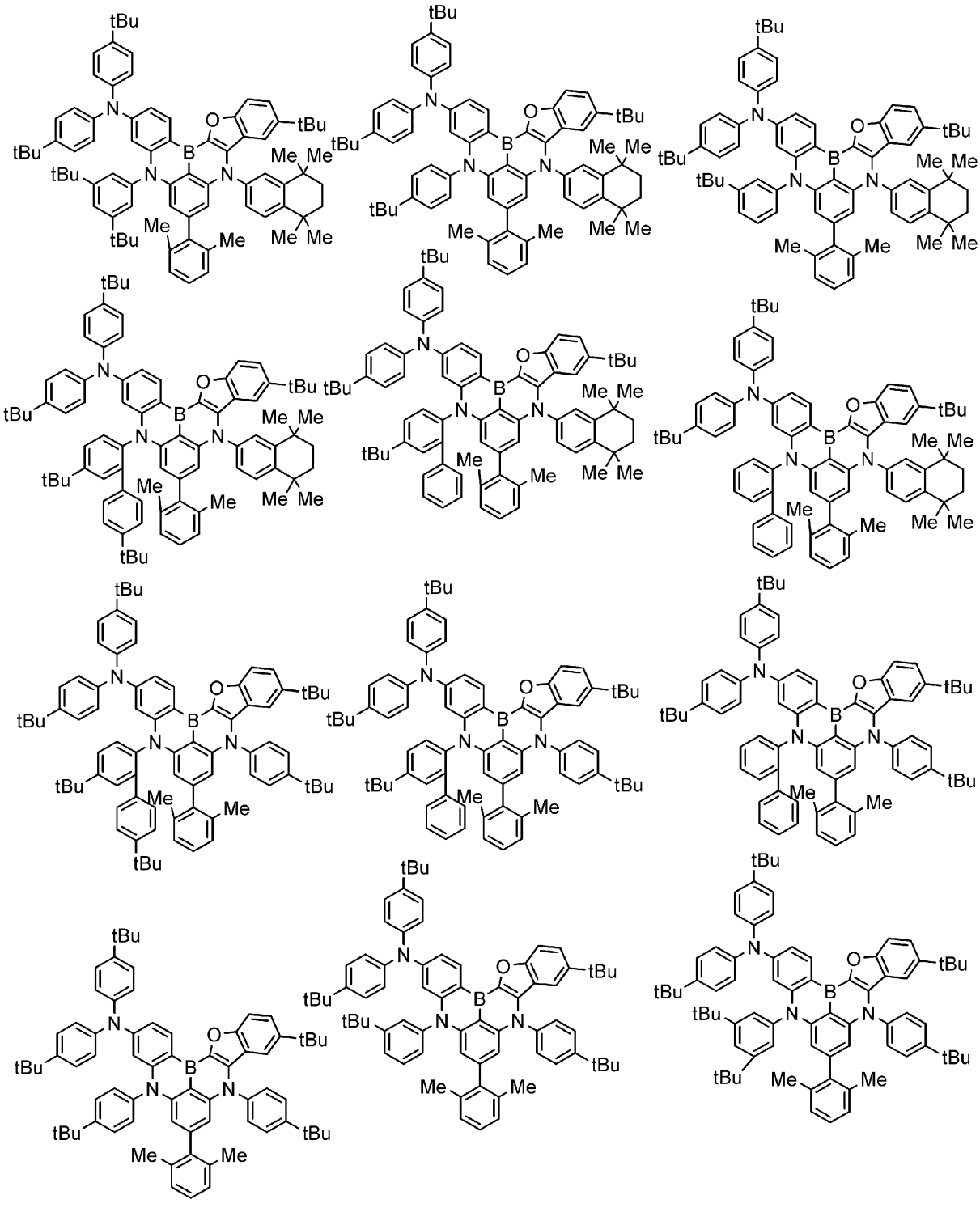
【０６１２】

【化４５５】



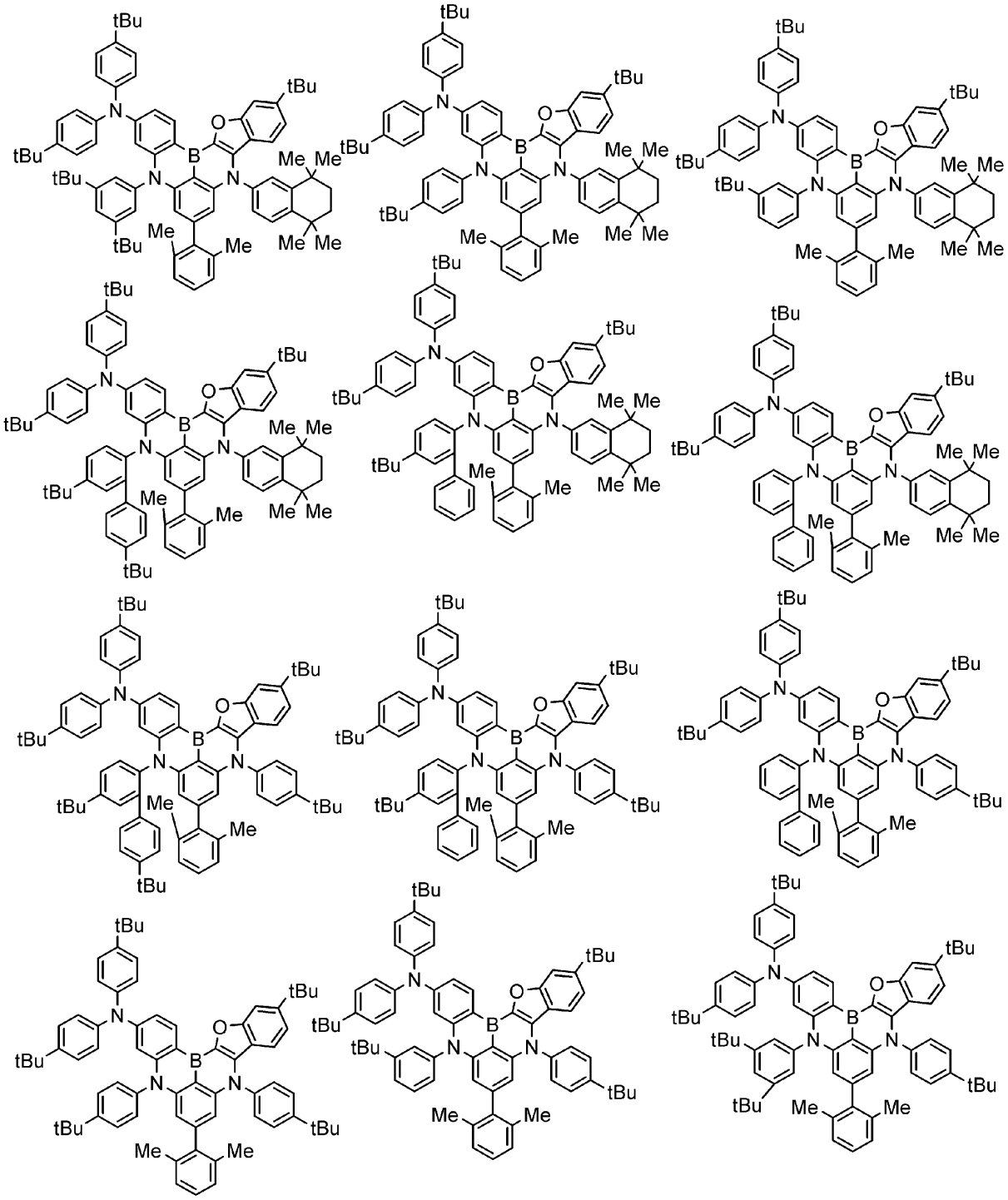
【０６１３】

【化４５６】



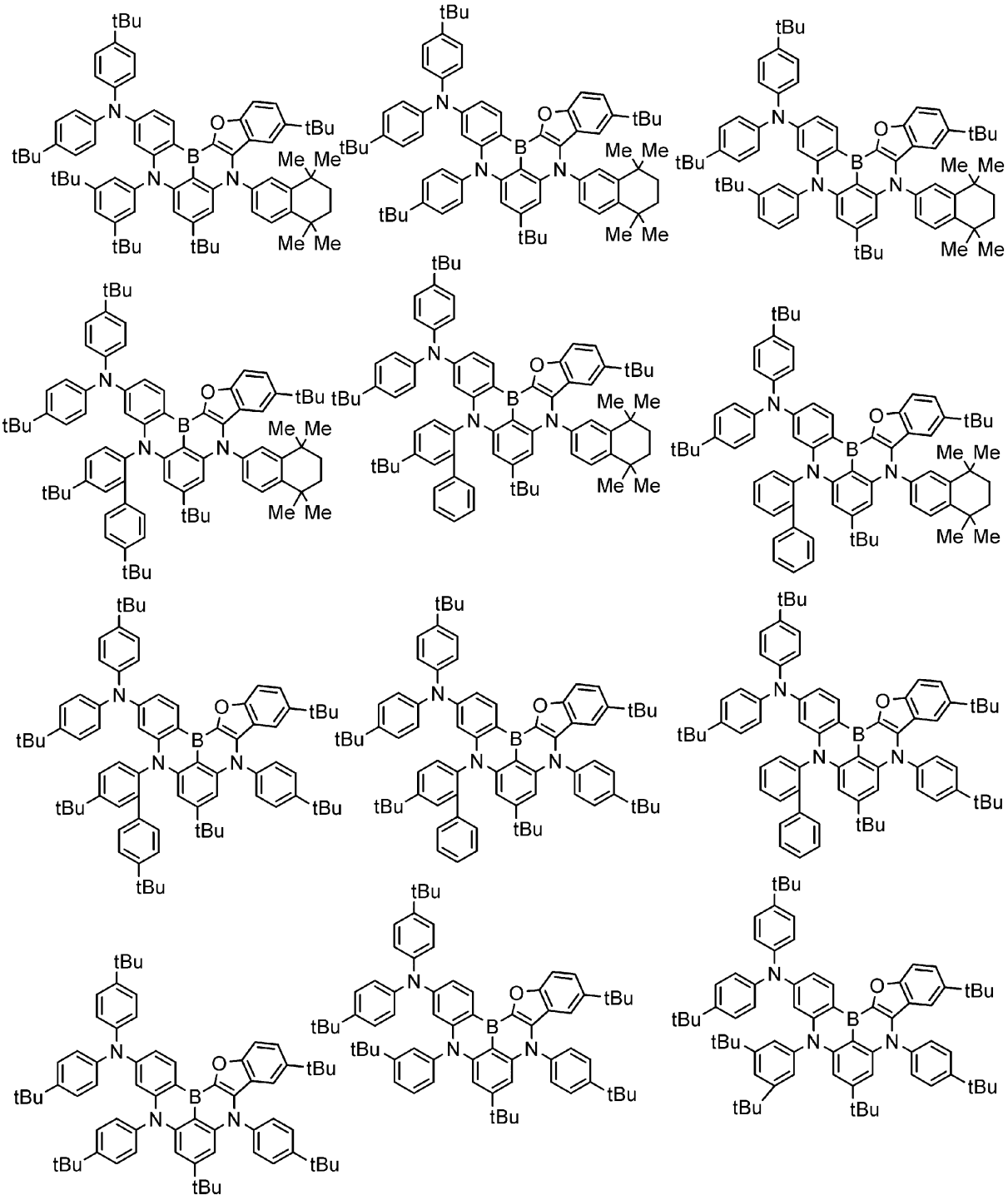
【０６１４】

【化４５７】



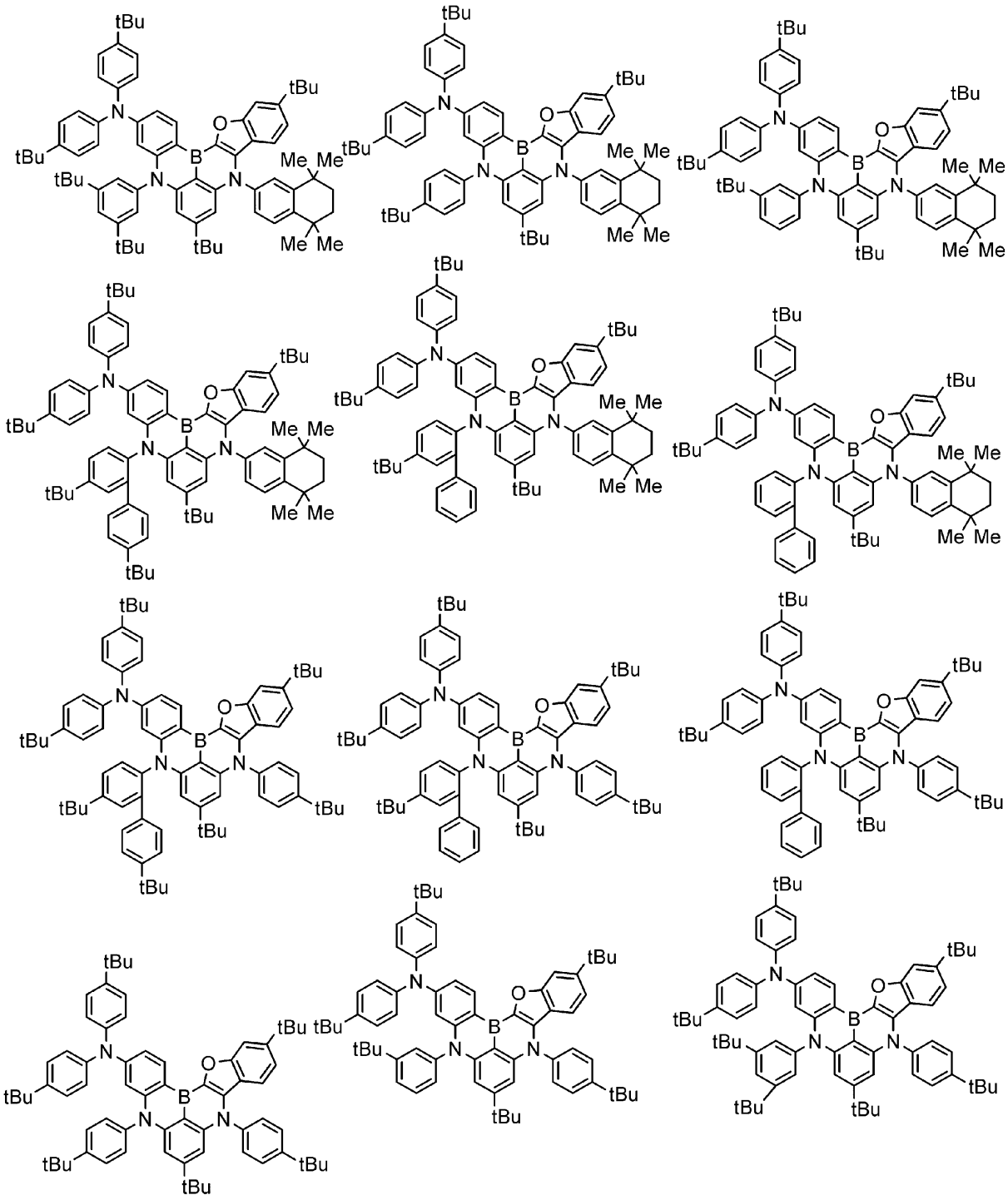
【０６１５】

【化４５８】



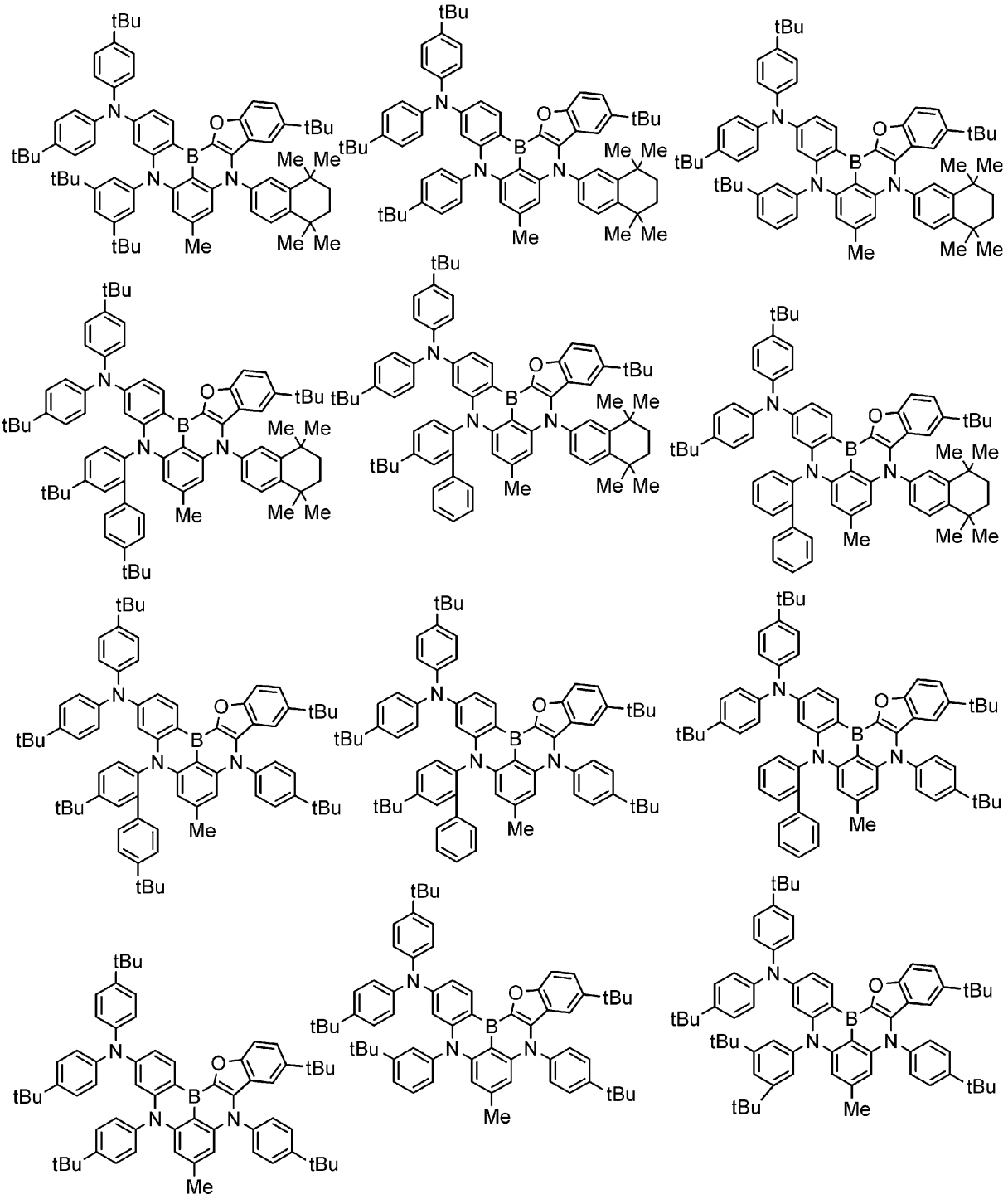
【０６１６】

【化４５９】



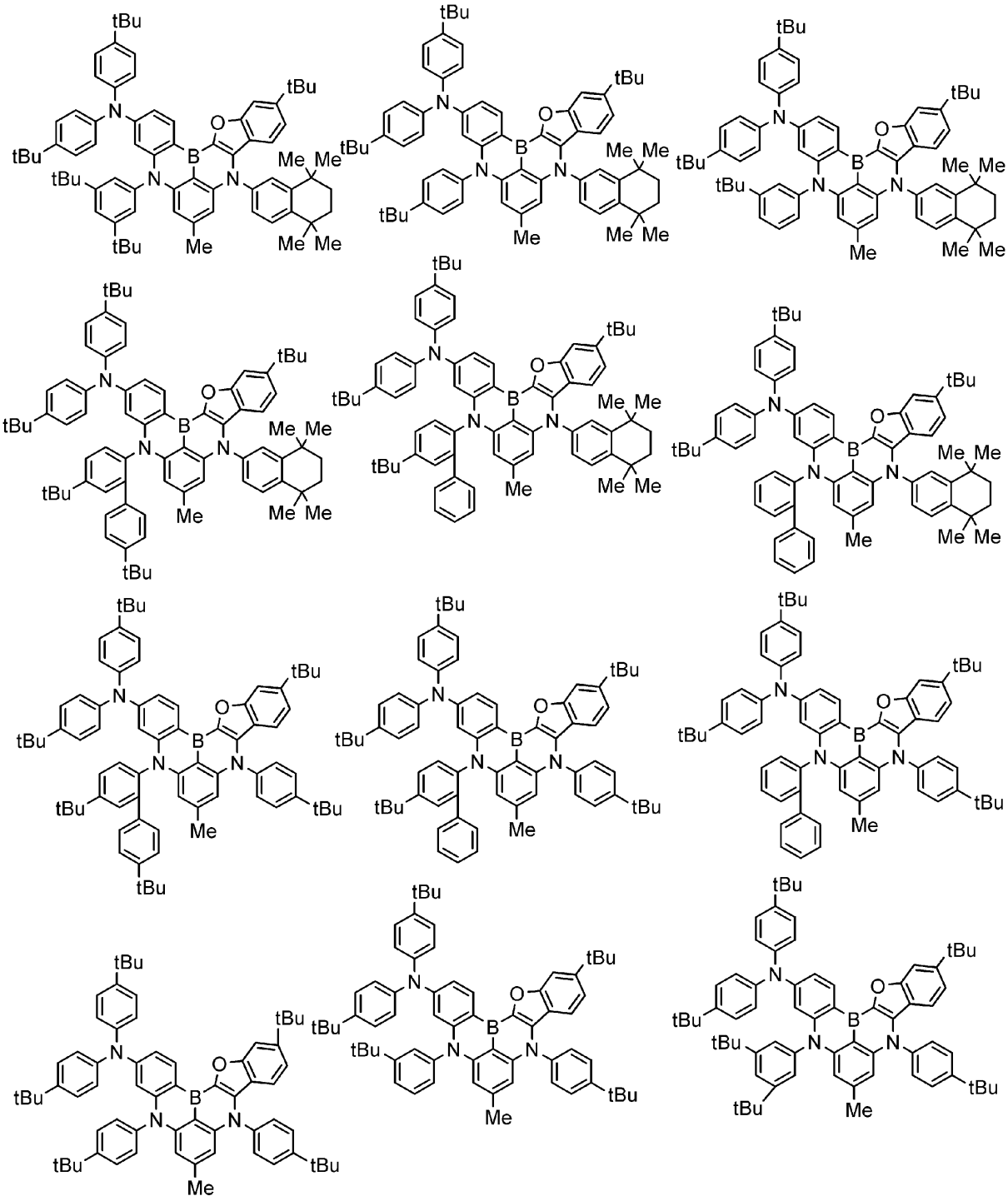
【０６１７】

【化４６０】



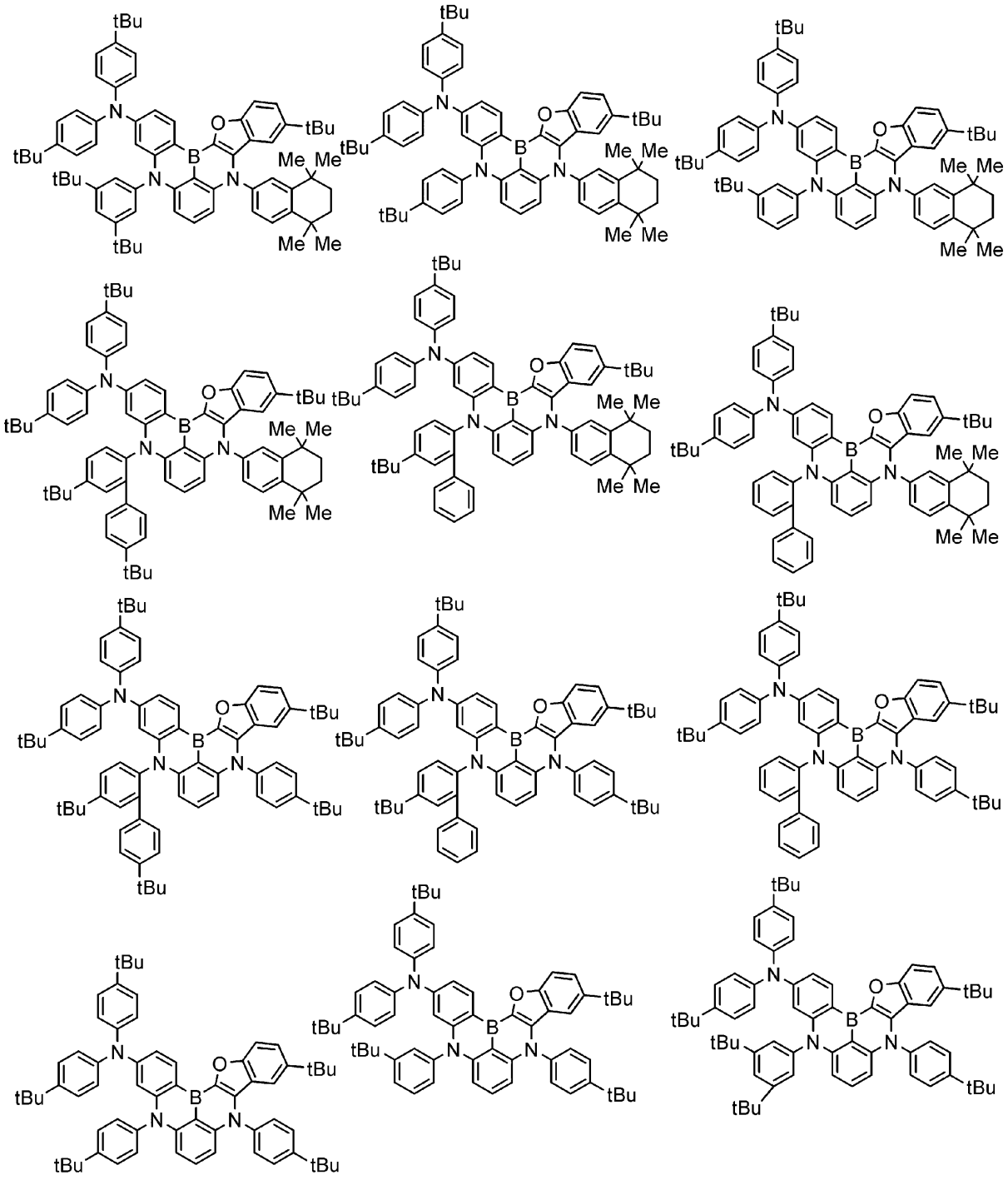
【０６１８】

【化４６１】



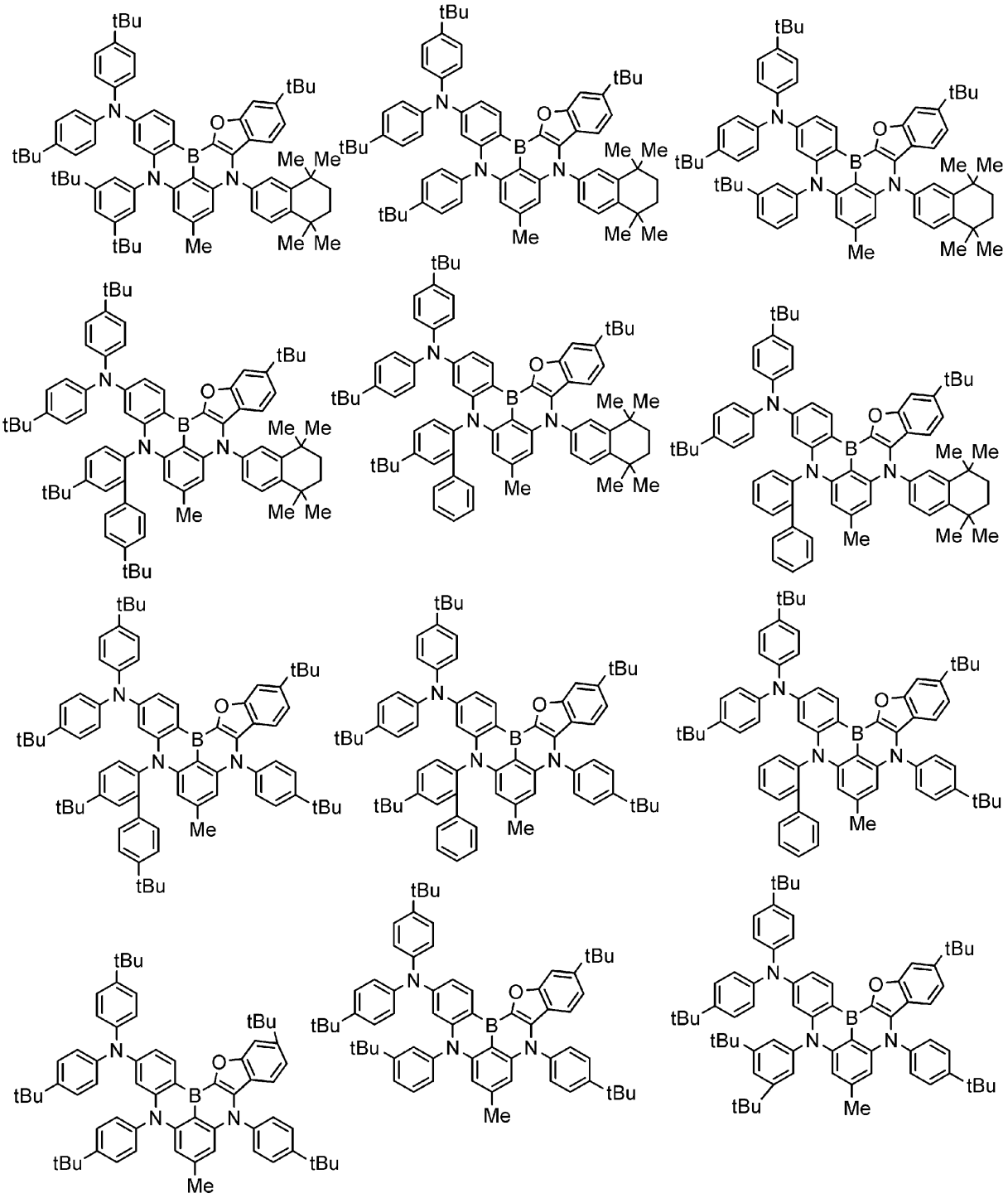
【０６１９】

【化４６２】



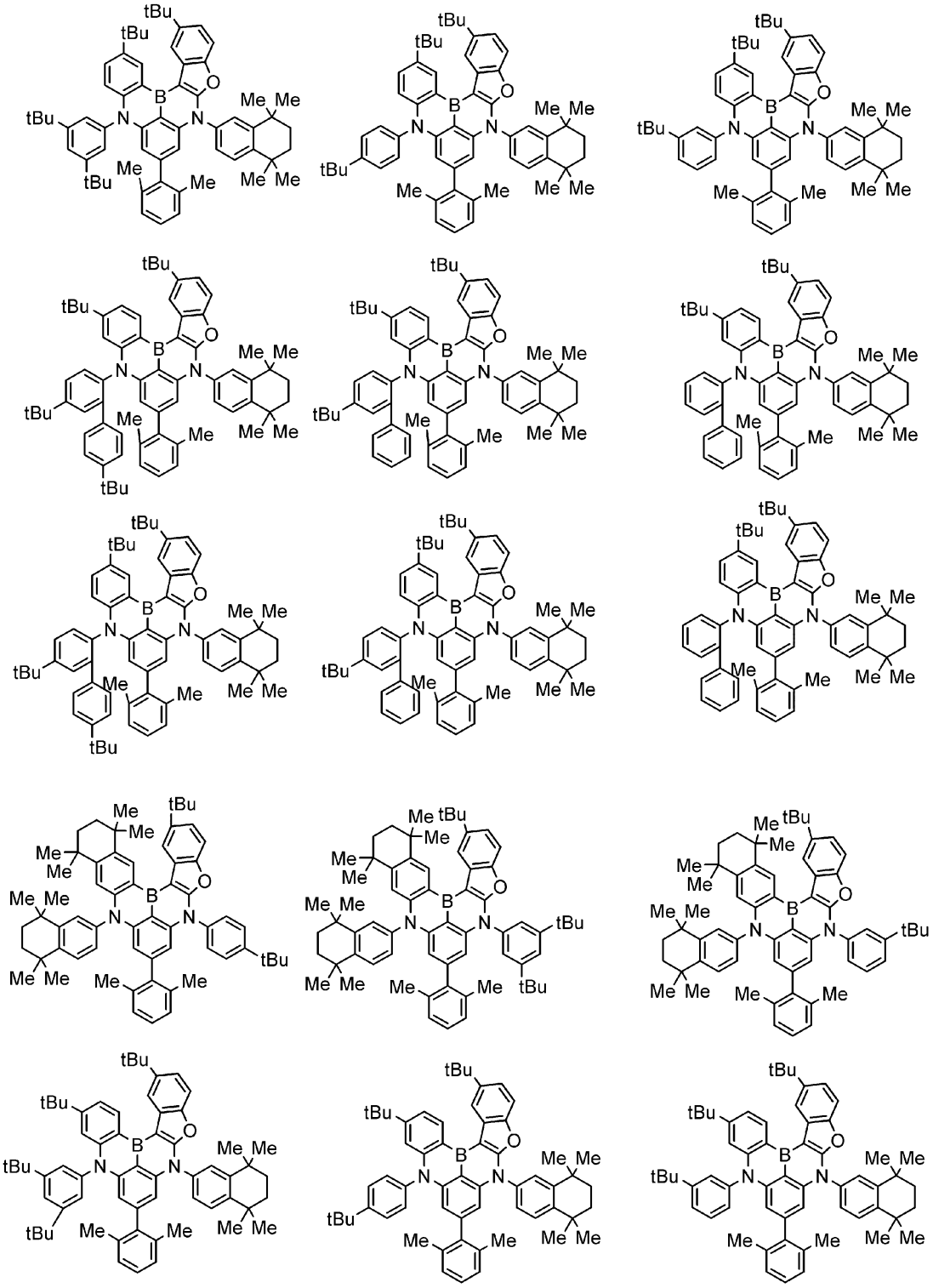
【０６２０】

【化４６３】



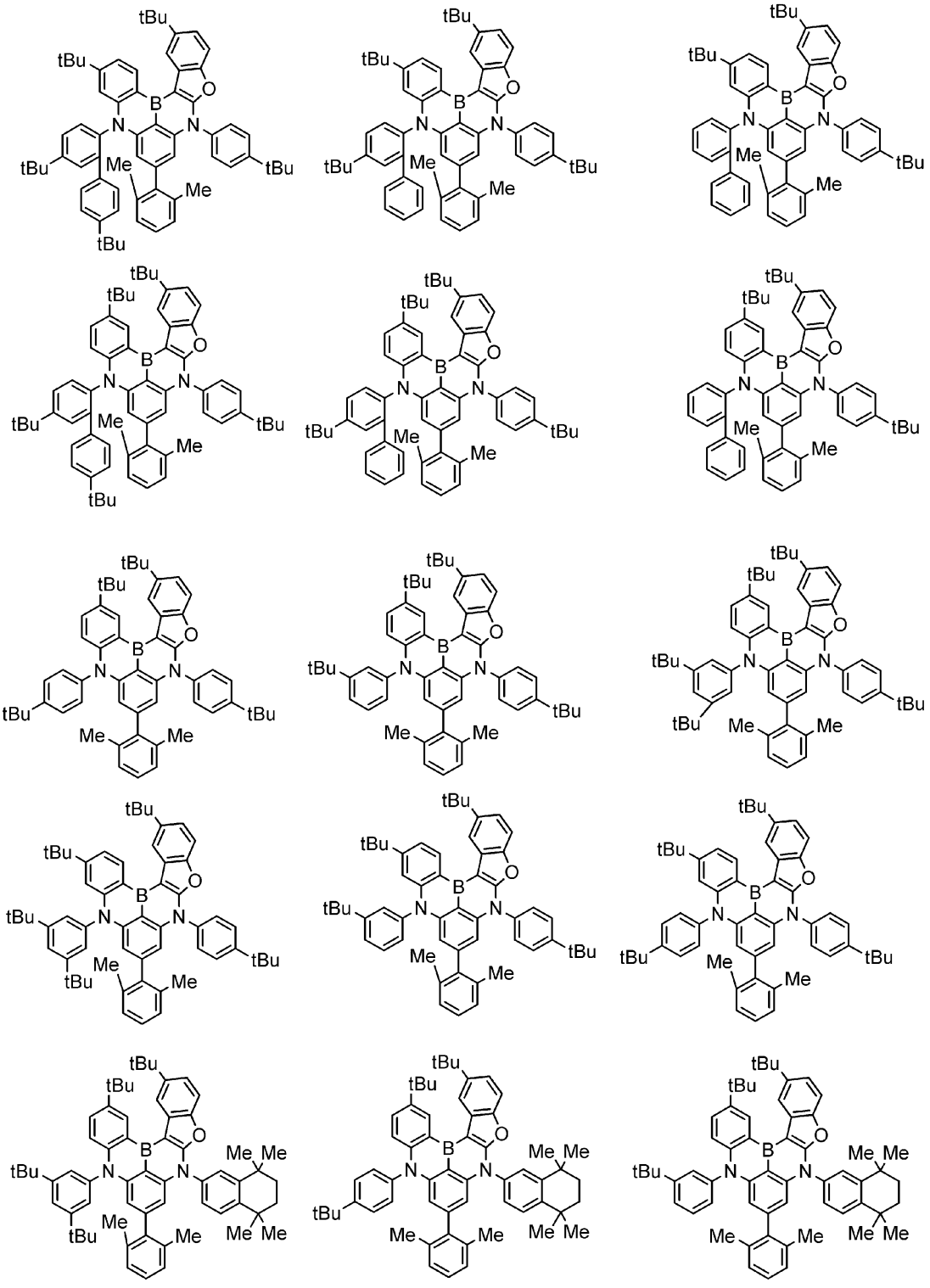
【０６２１】

【化４６４】



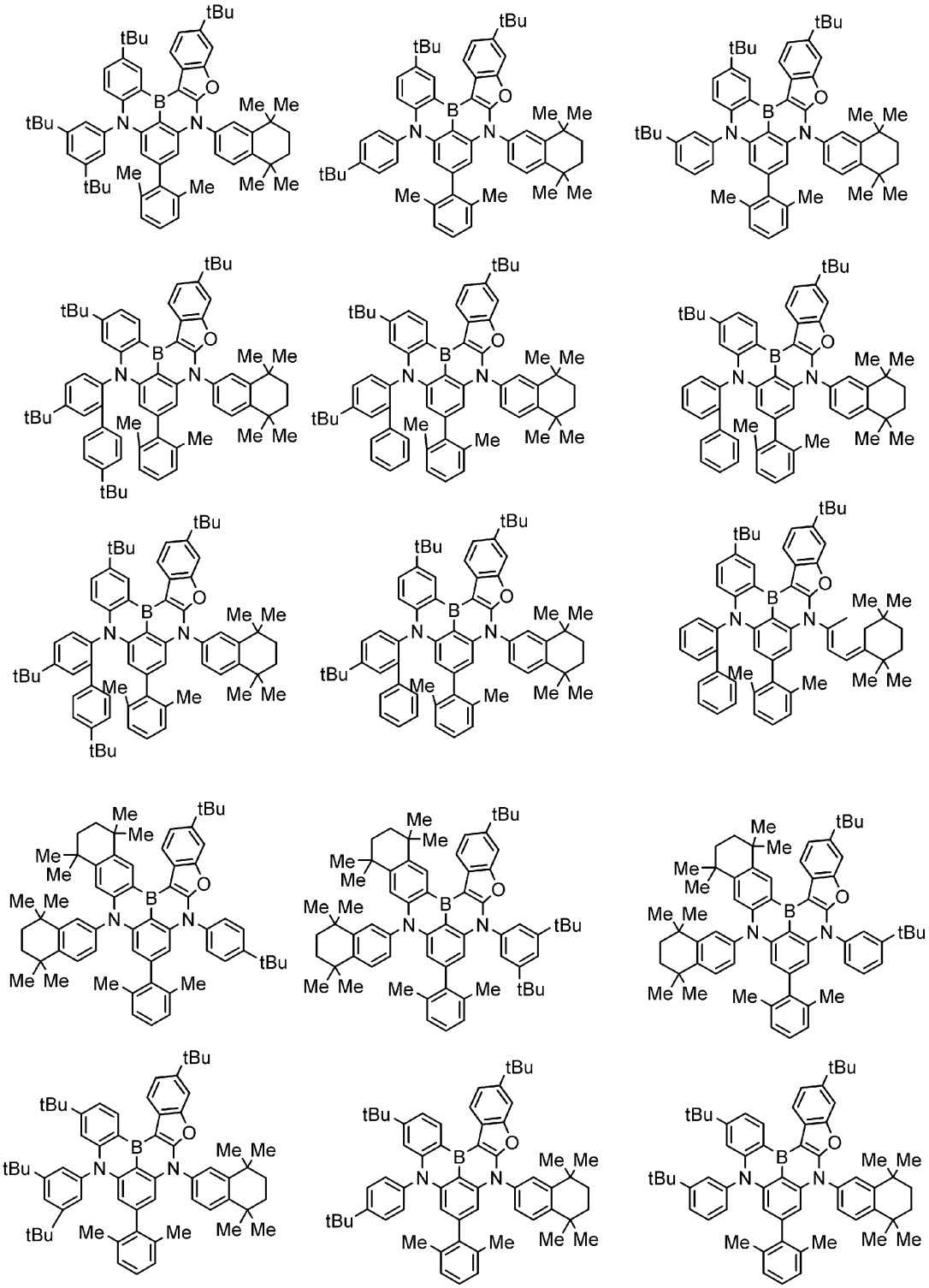
【０６２２】

【化４６５】



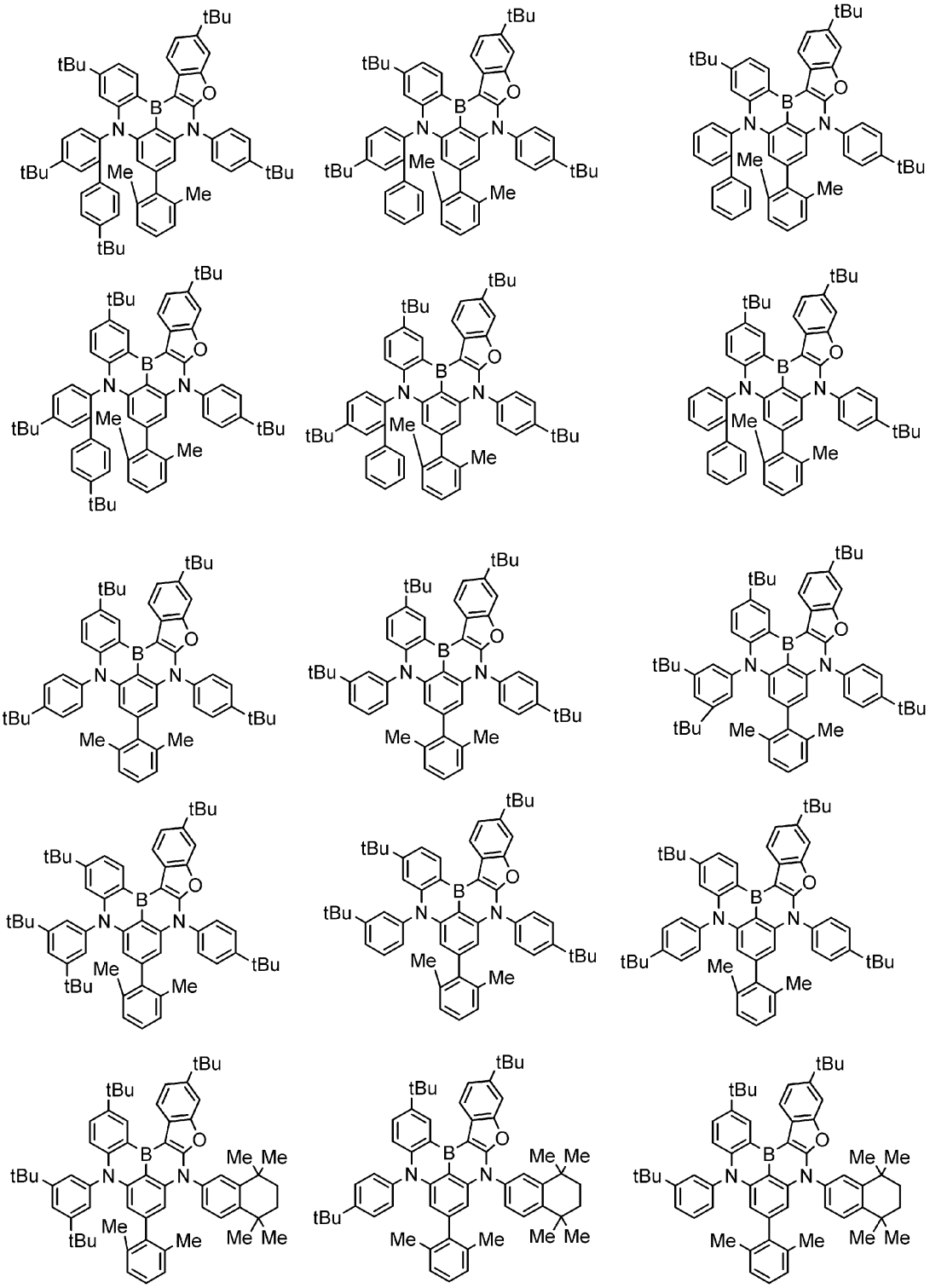
【０６２３】

【化４６６】



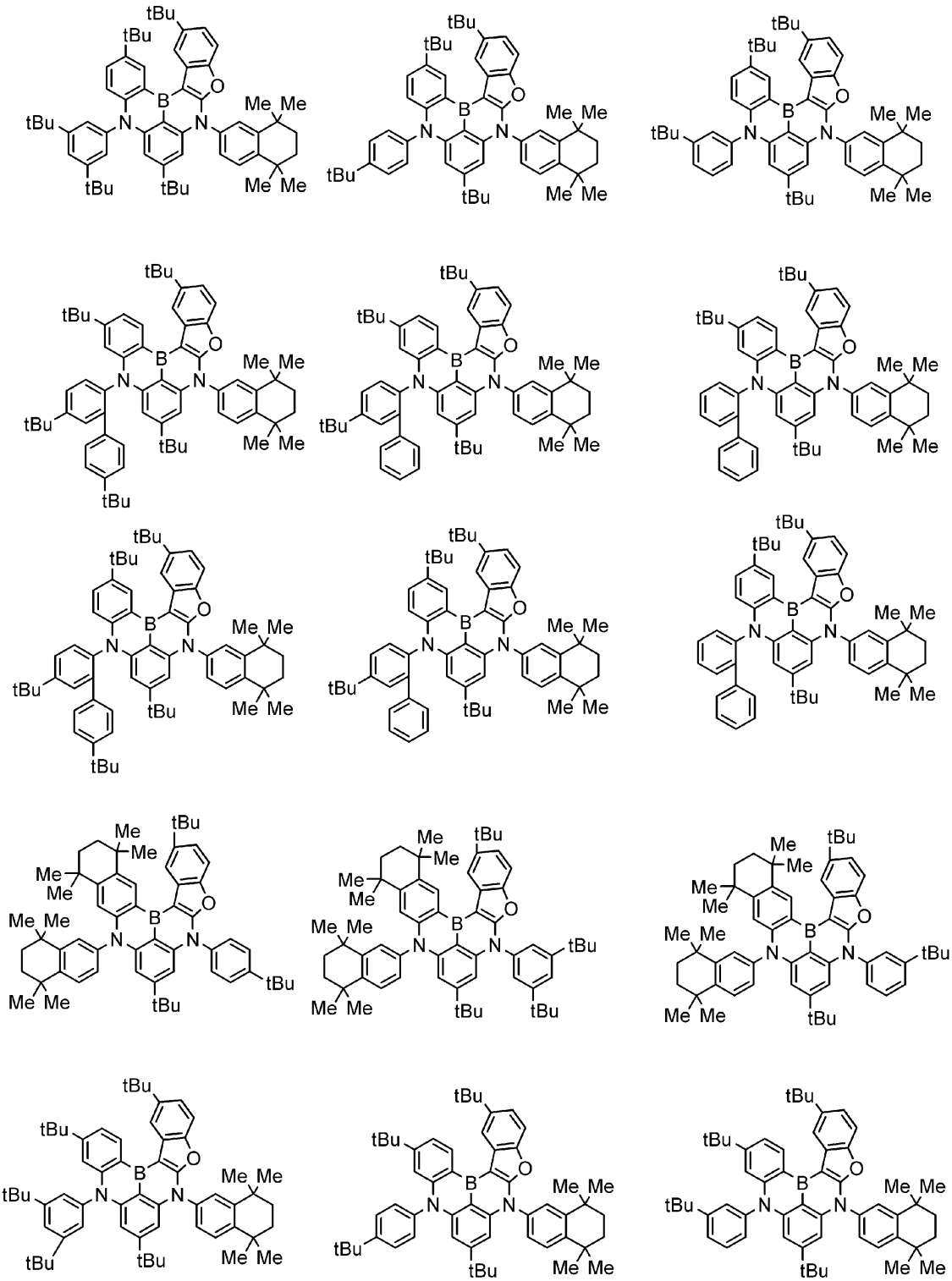
【０６２４】

【化４６７】



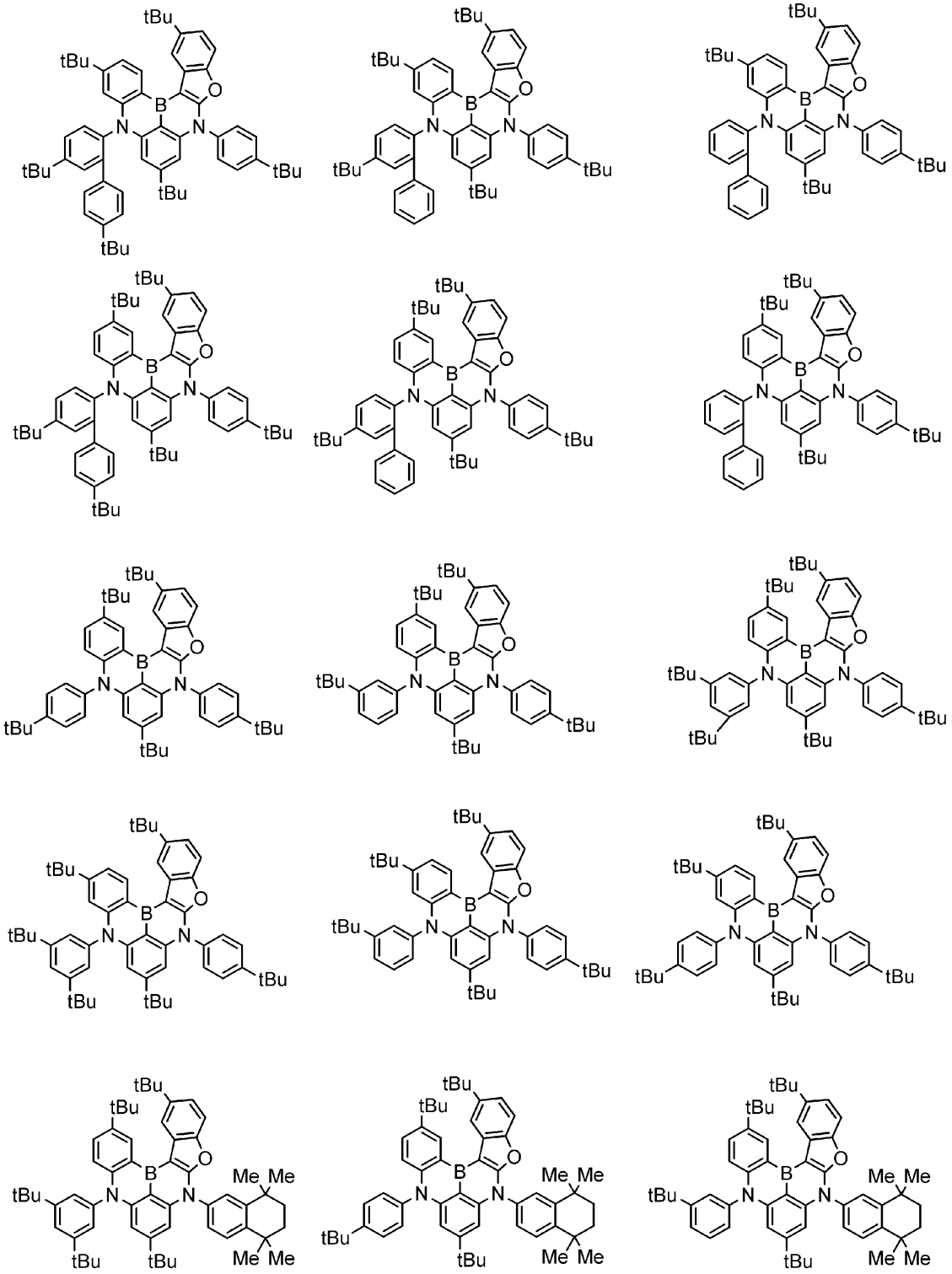
【０６２５】

【化４６８】



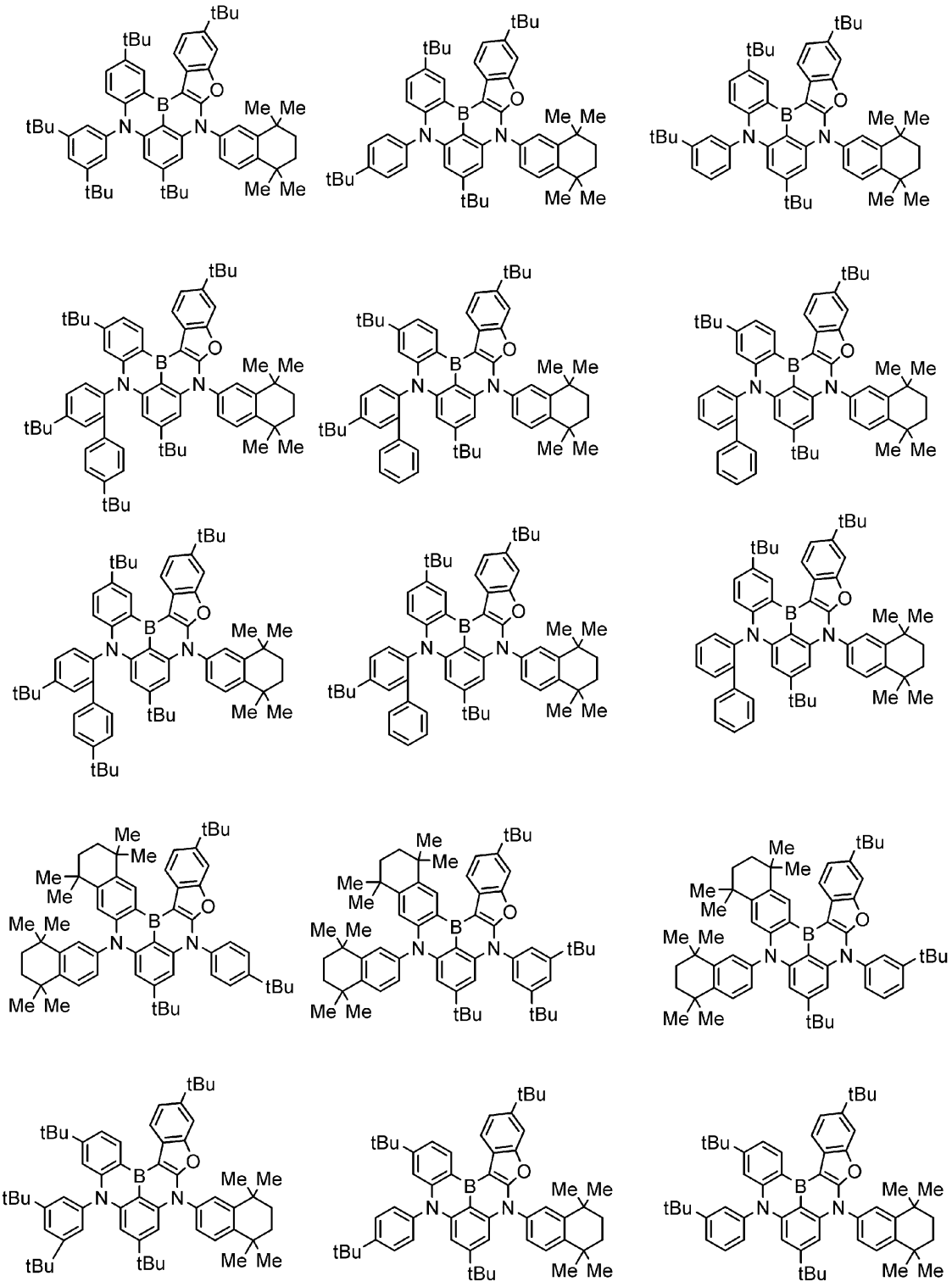
【０６２６】

【化４６９】



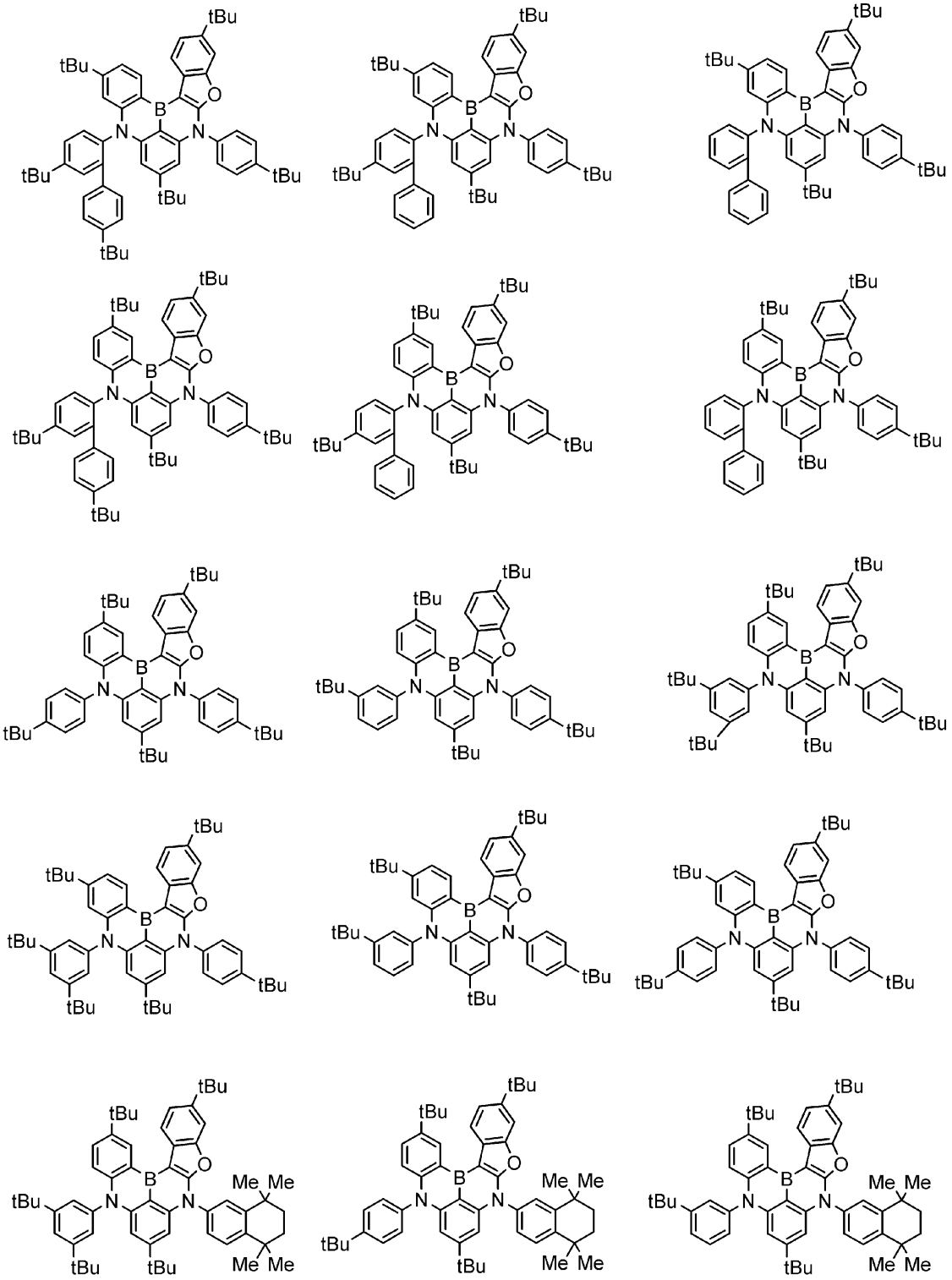
【０６２７】

【化４７０】



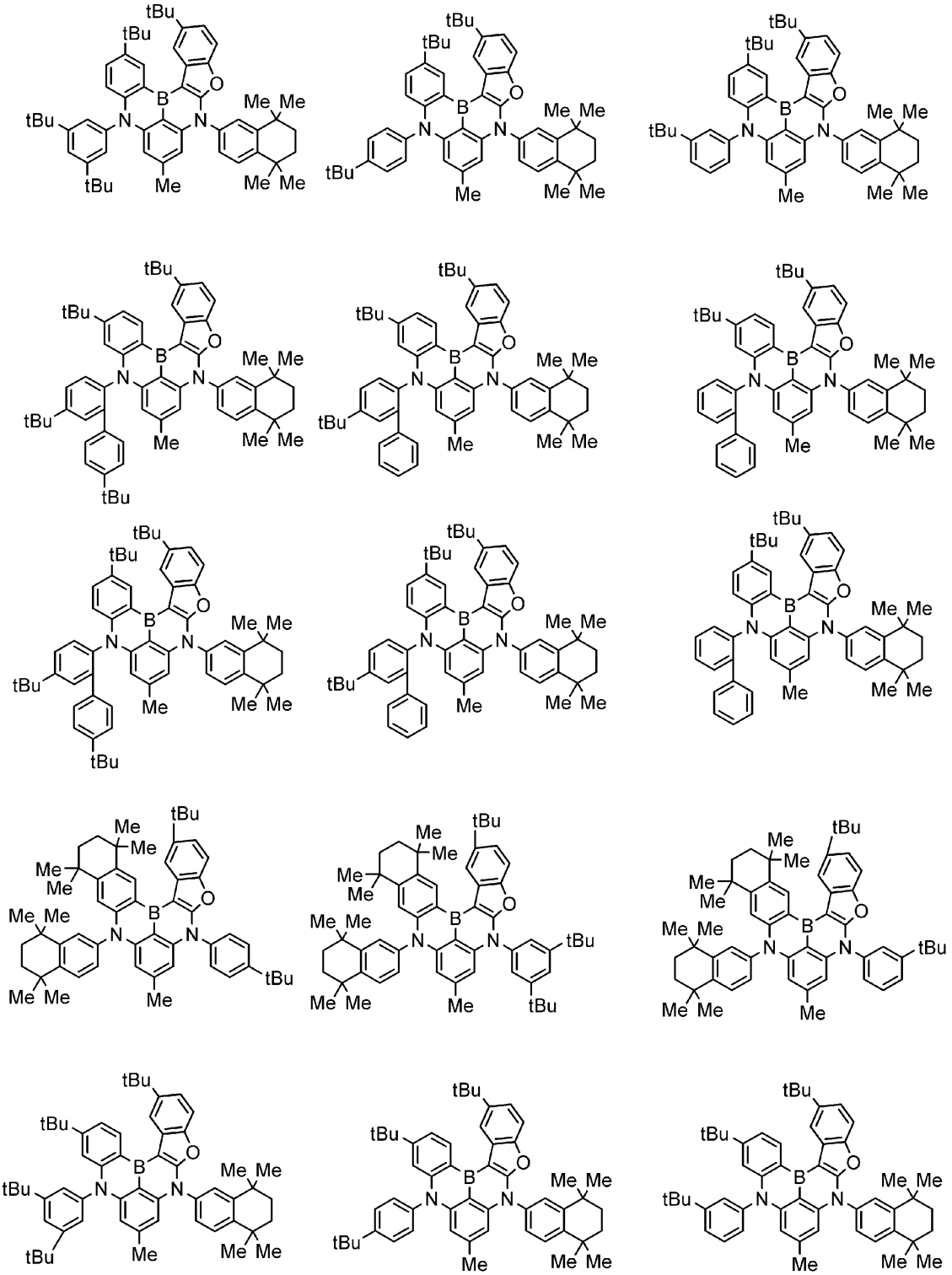
【０６２８】

【化４７１】



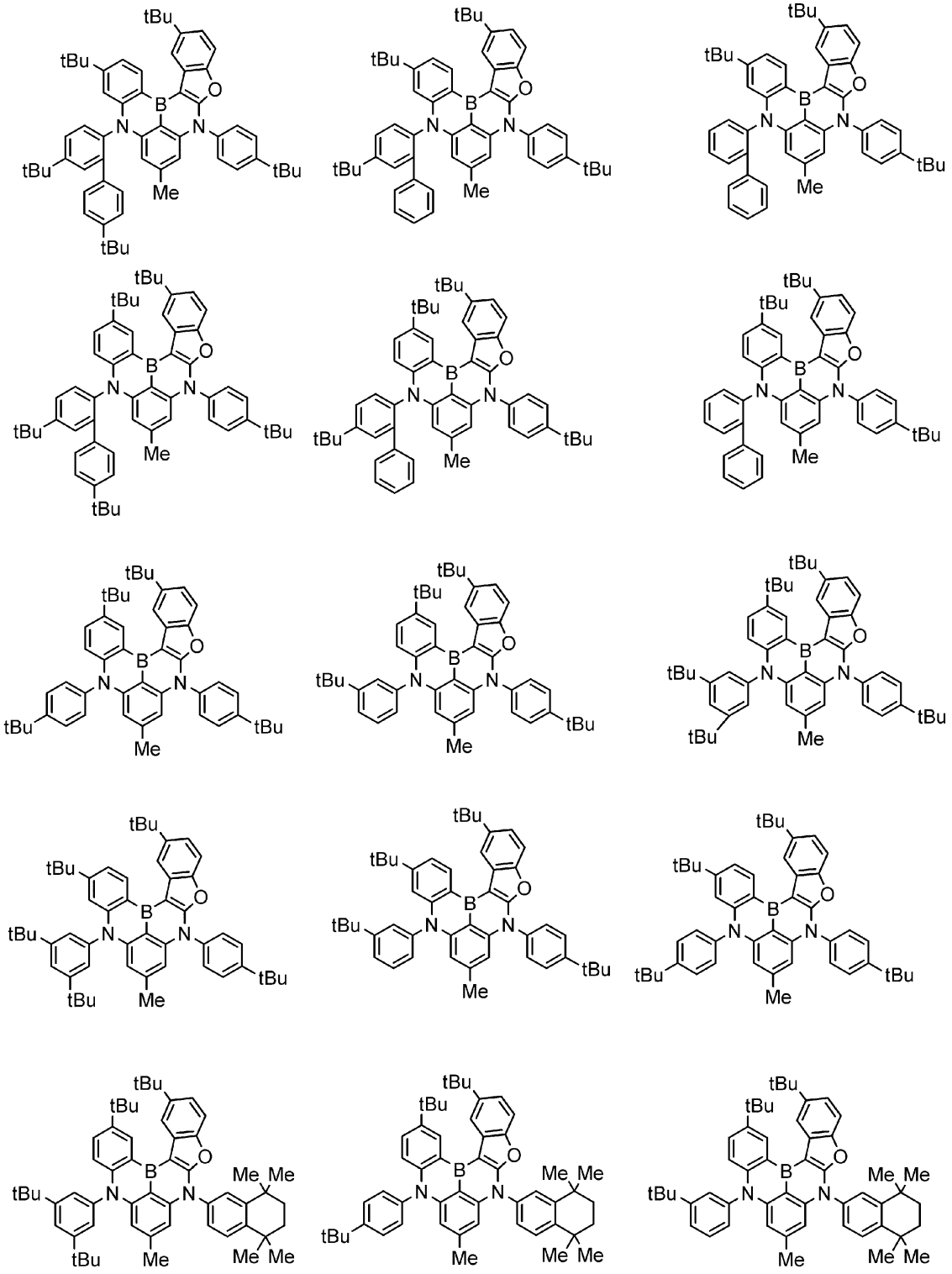
【０６２９】

【化４７２】



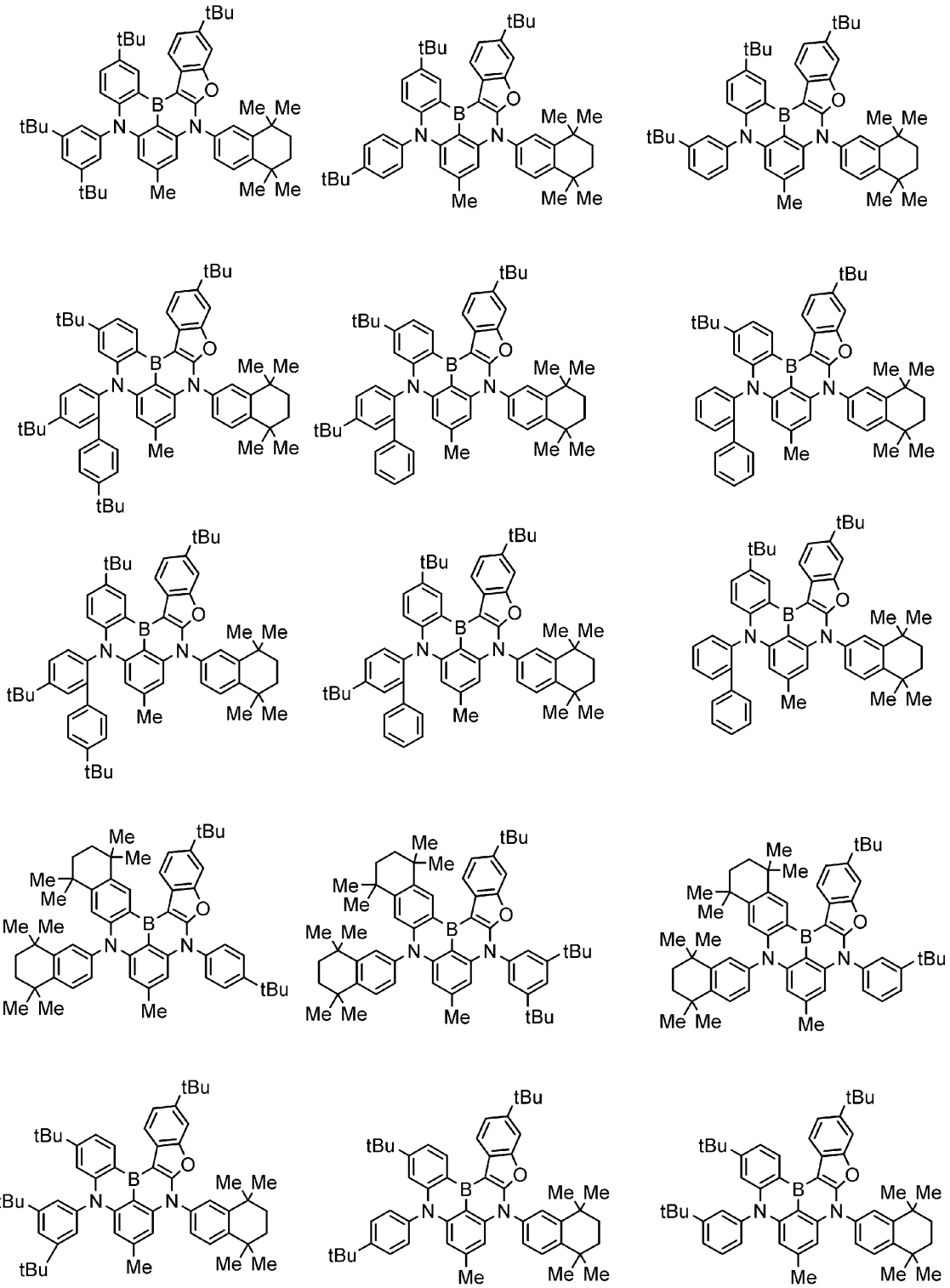
【０６３０】

【化４７３】



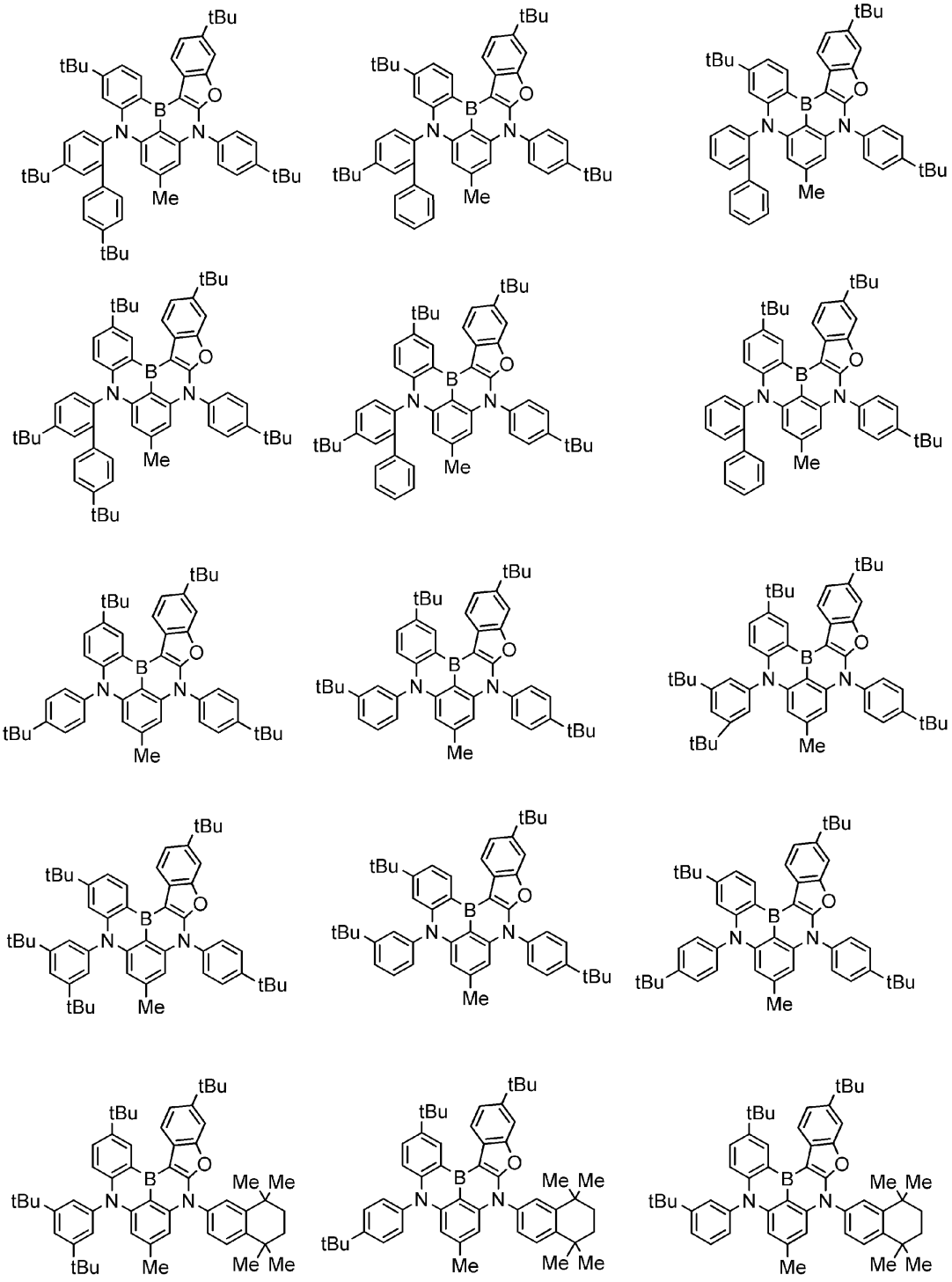
【０６３１】

【化４７４】



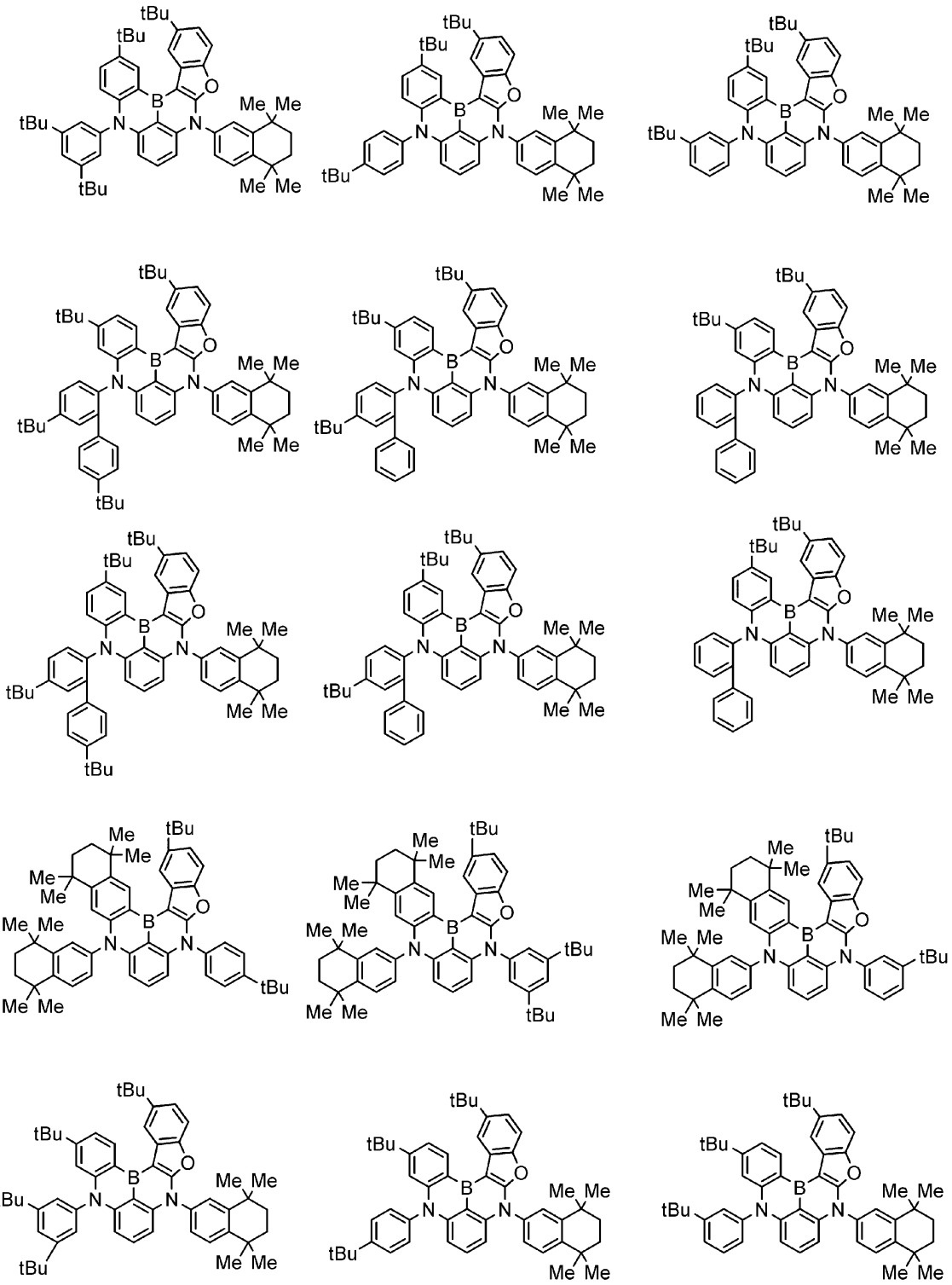
【０６３２】

【化４７５】



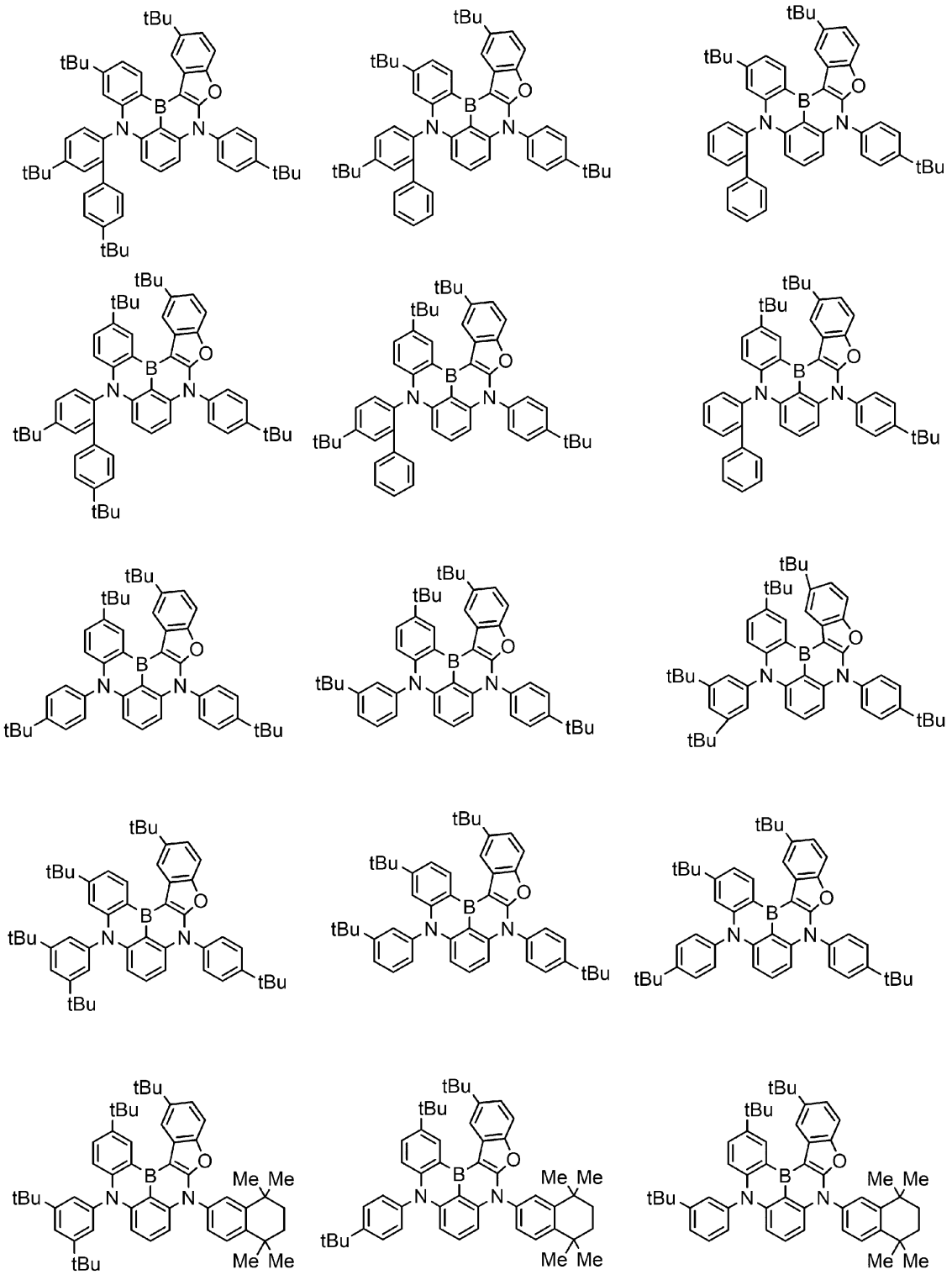
【０６３３】

【化４７６】



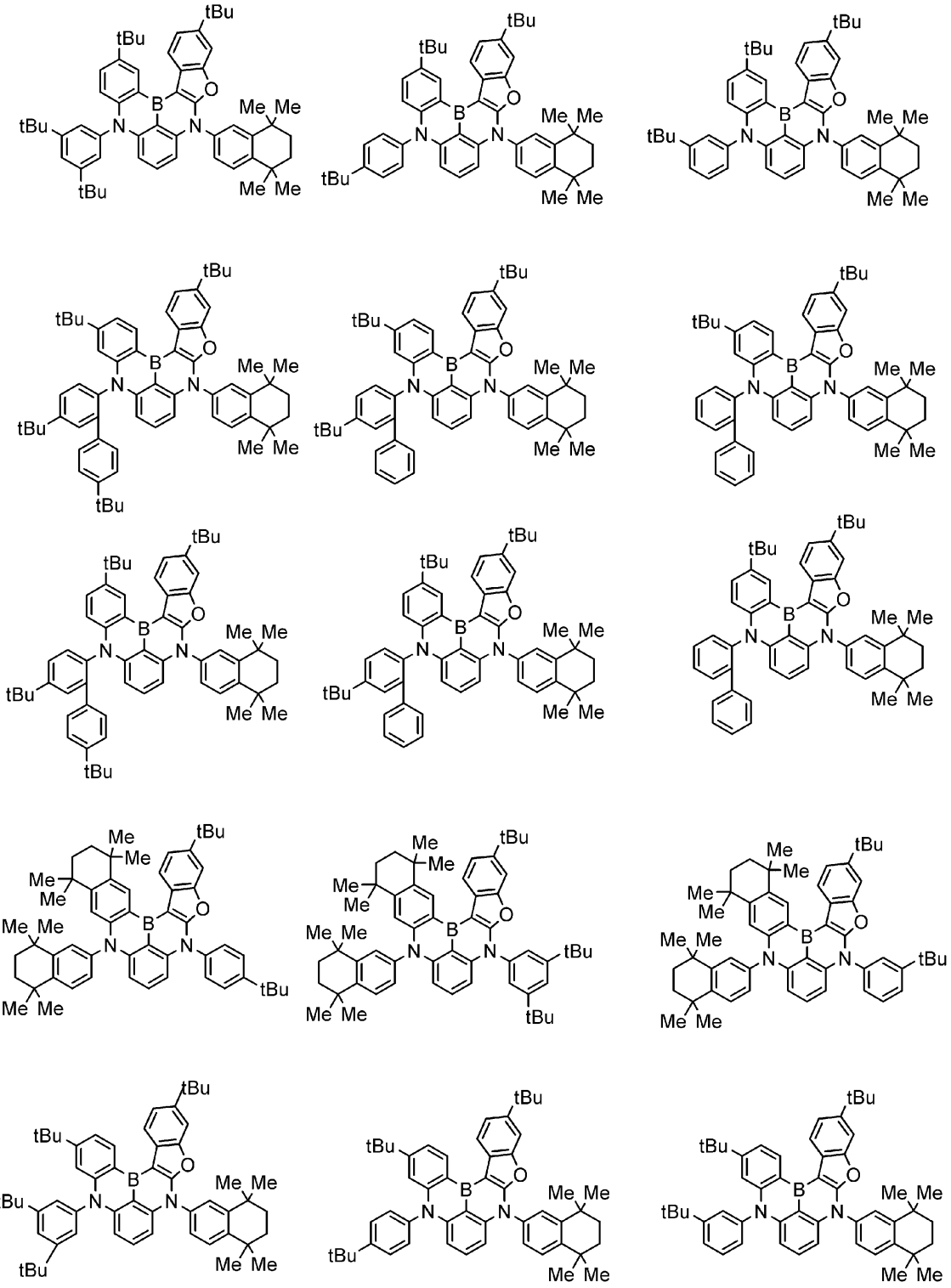
【０６３４】

【化４７７】



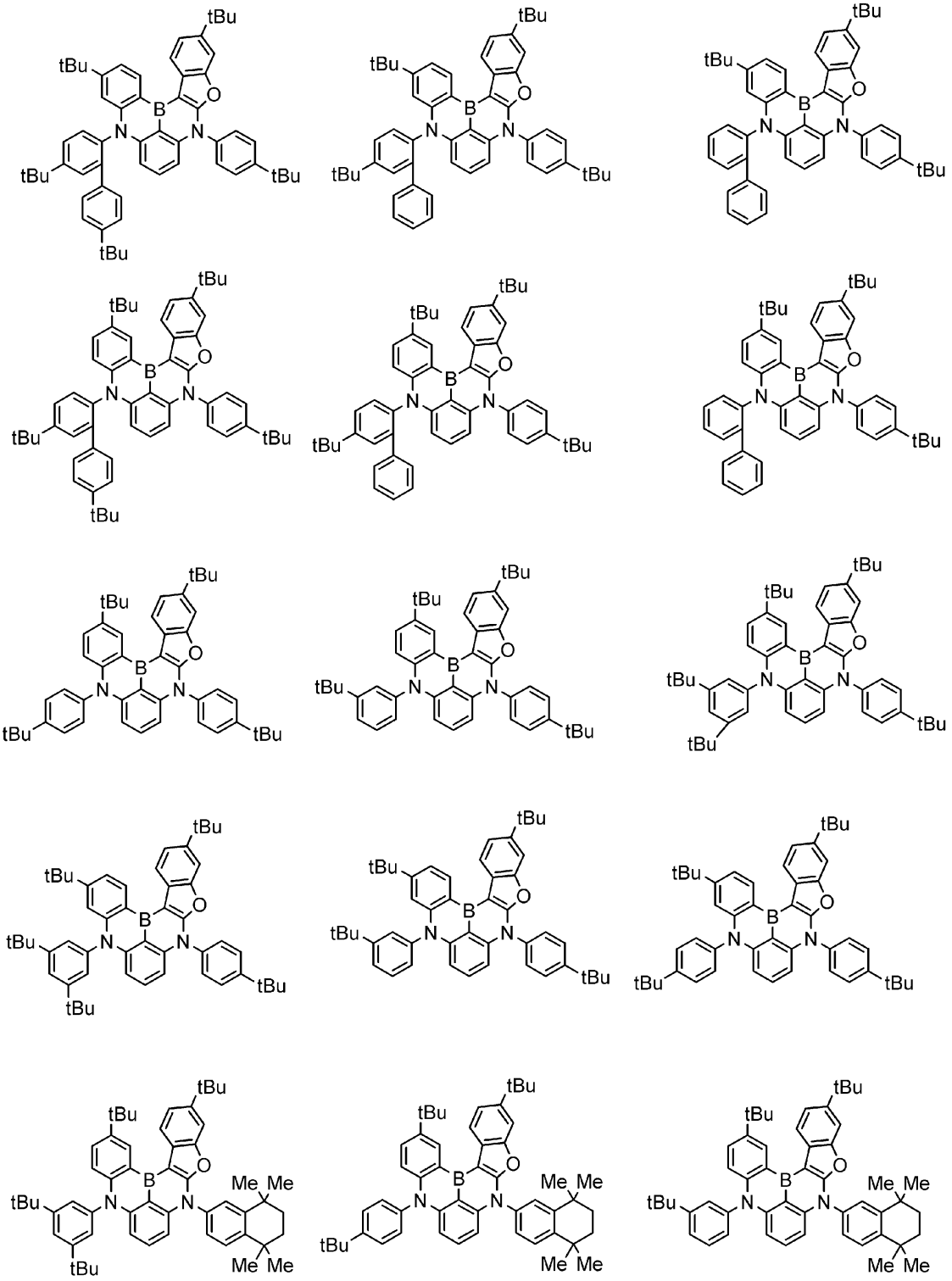
【０６３５】

【化４７８】



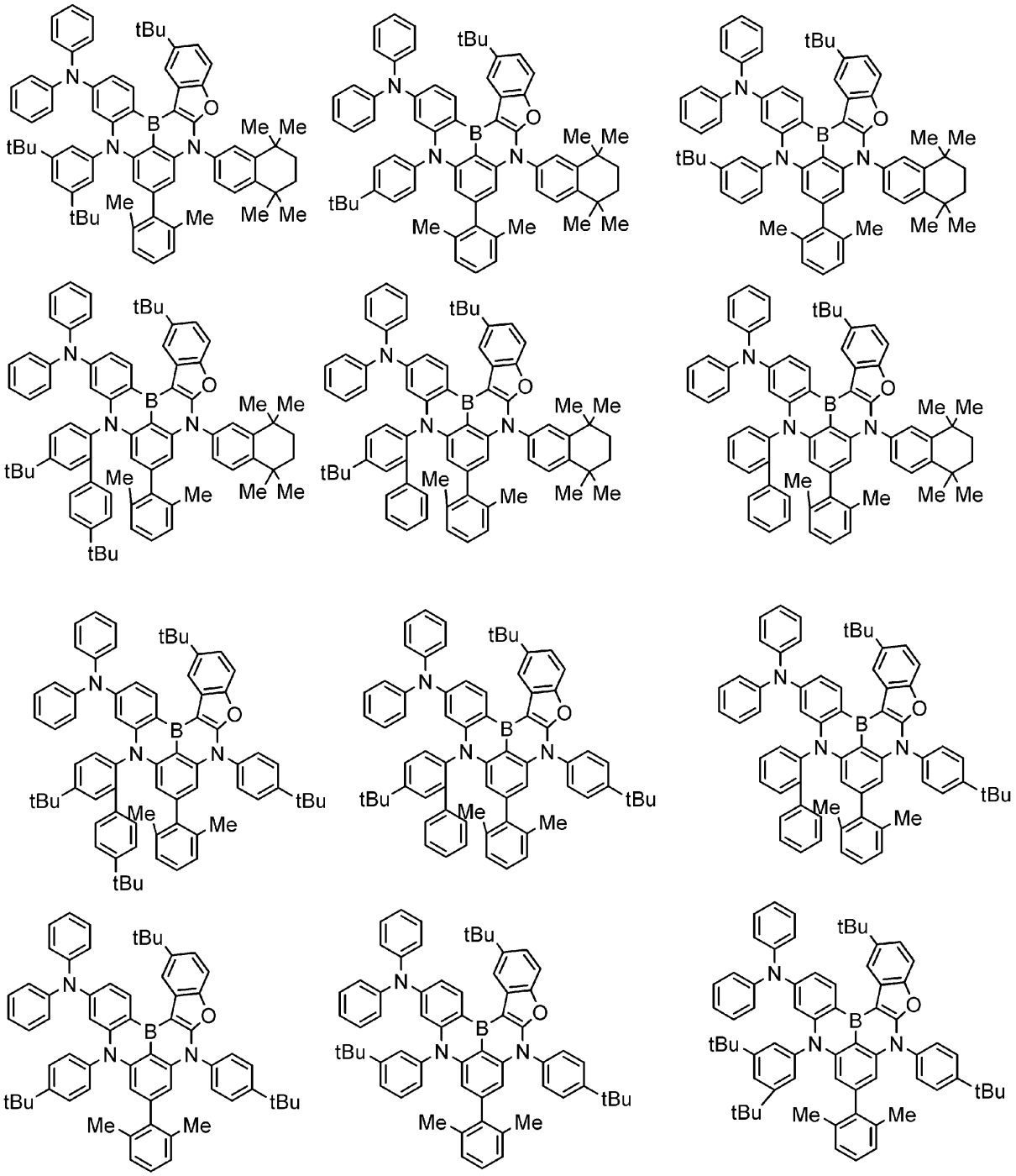
【０６３６】

【化４７９】



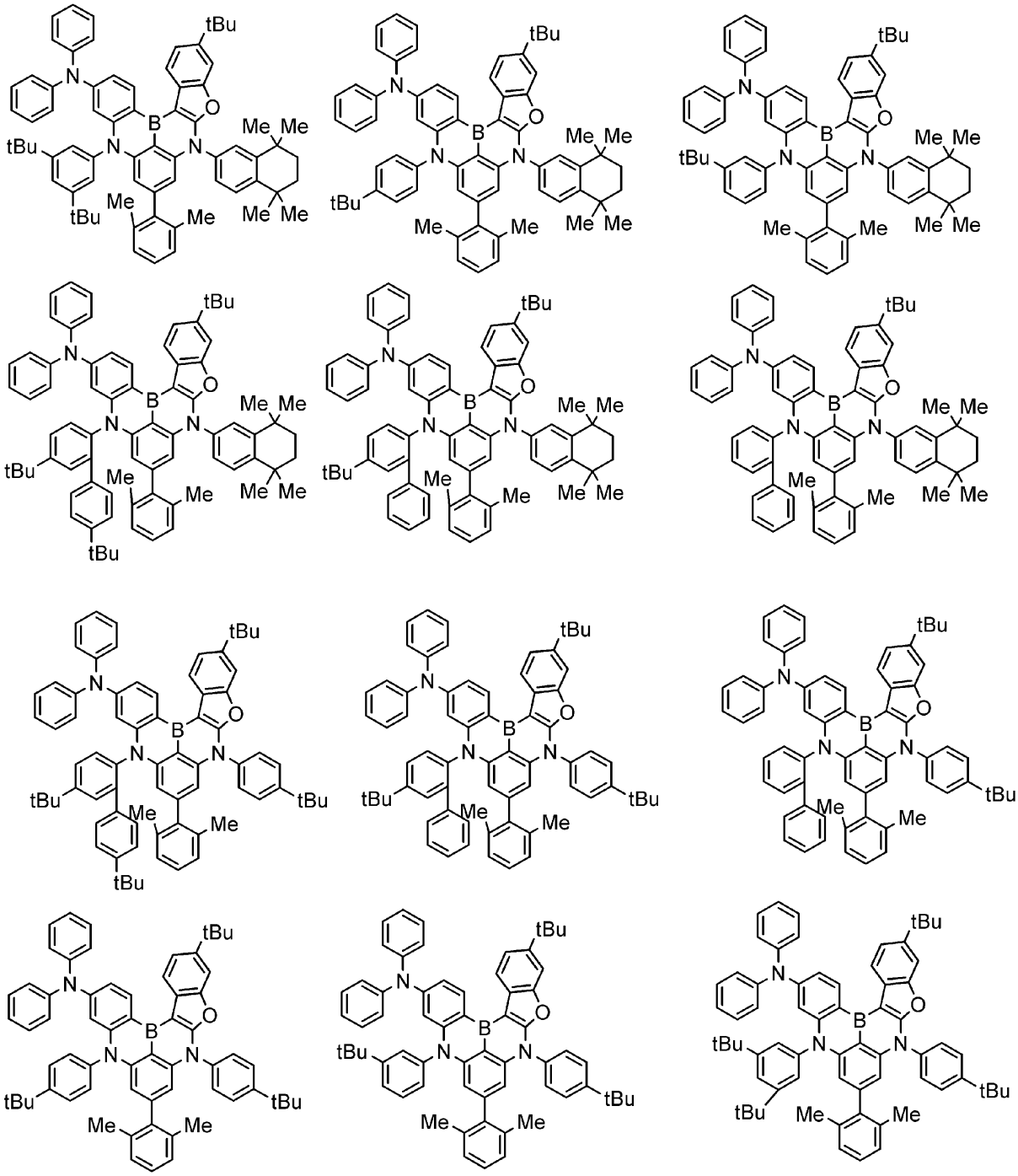
【０６３７】

【化４８０】



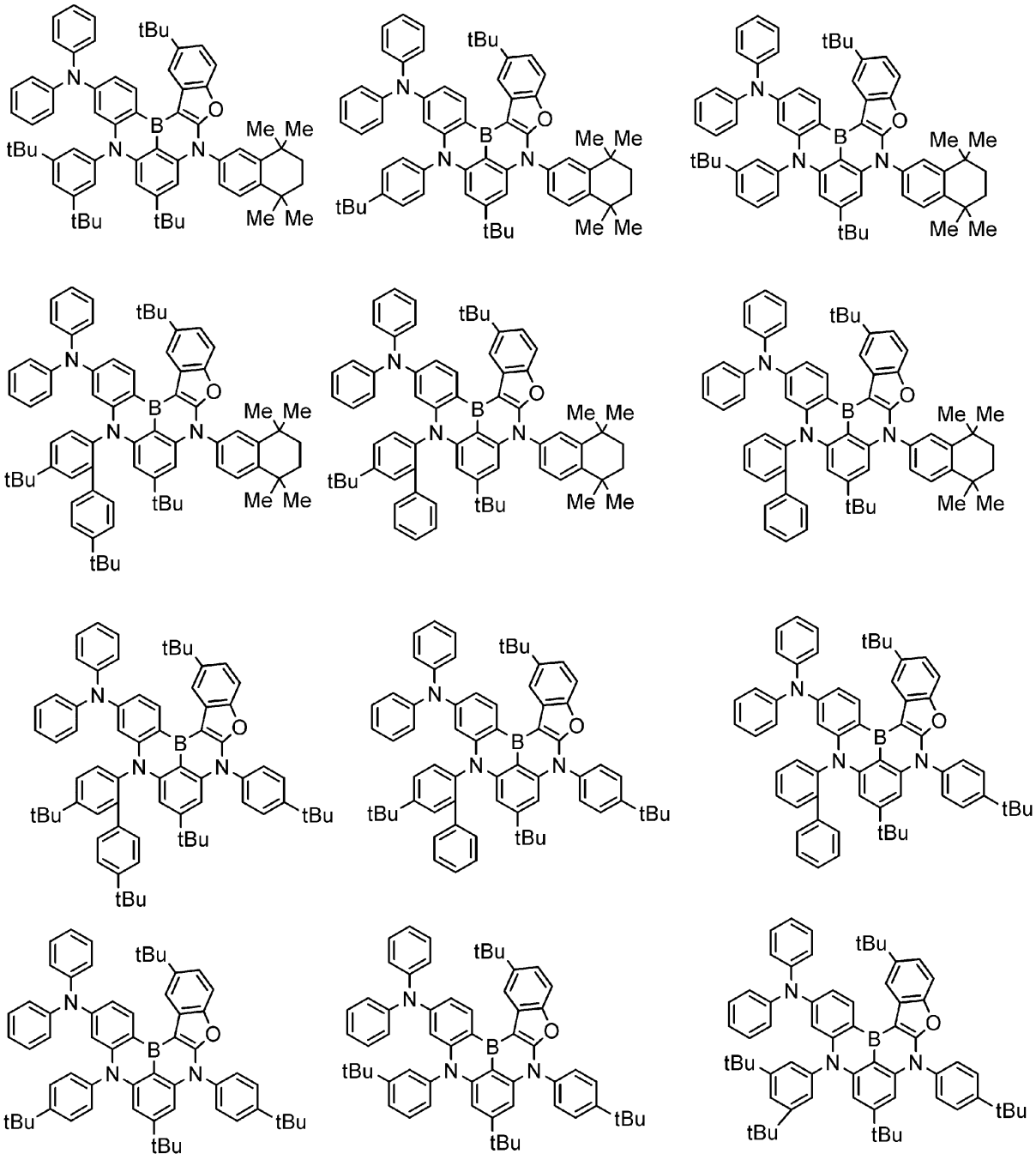
【０６３８】

【化４８１】



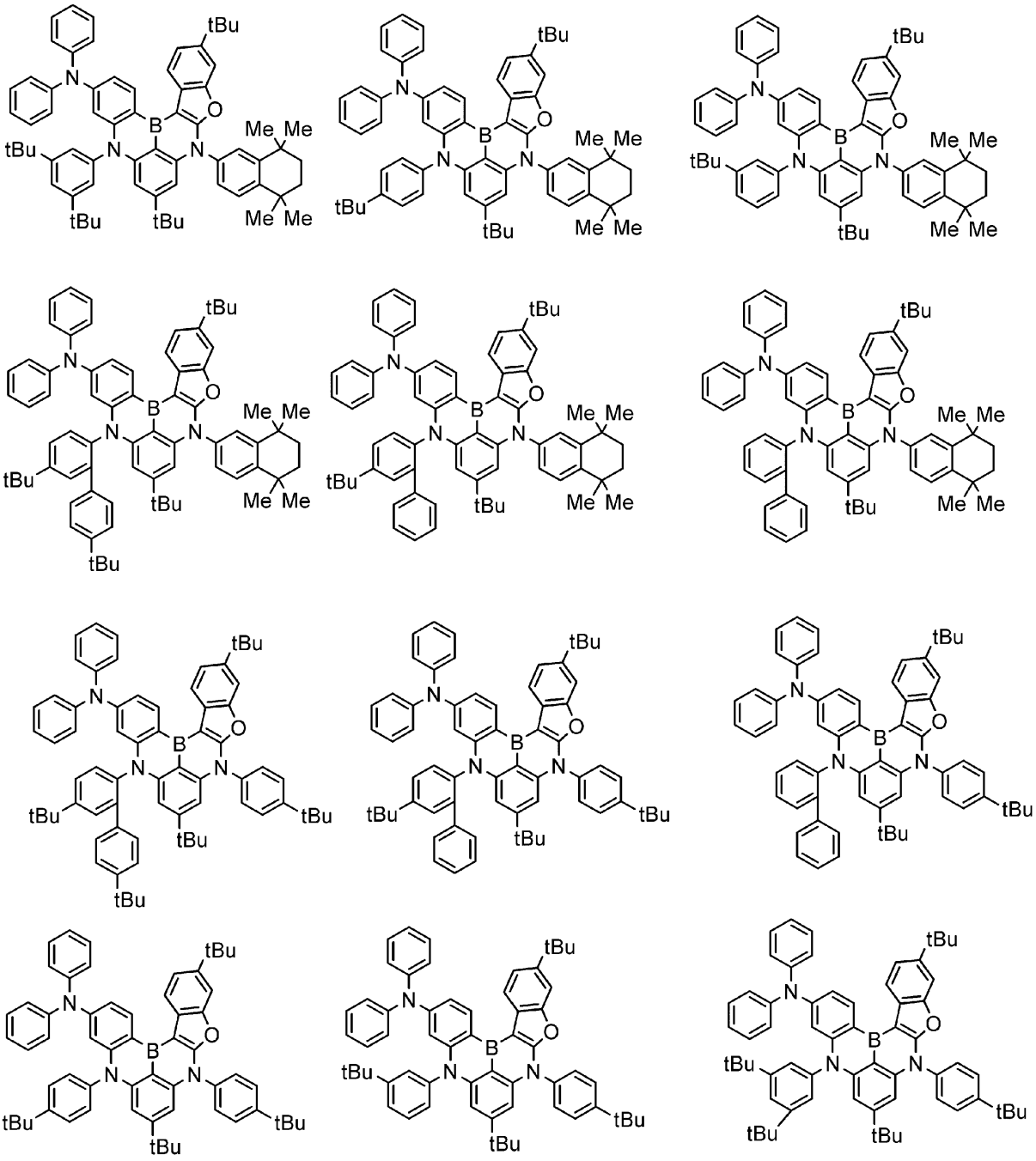
【０６３９】

【化４８２】



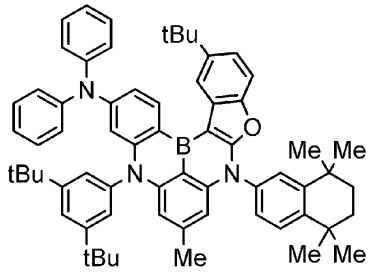
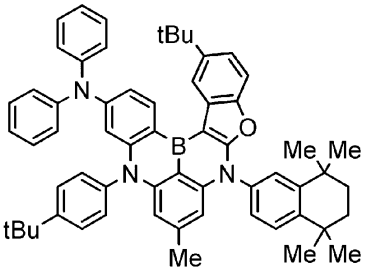
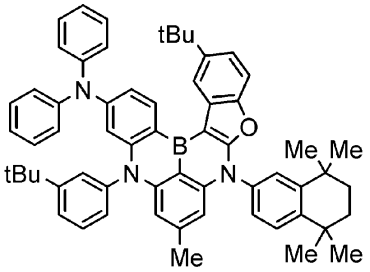
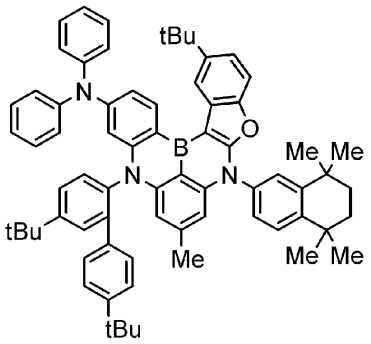
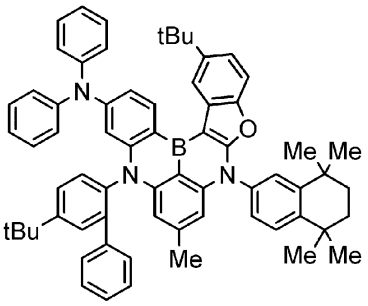
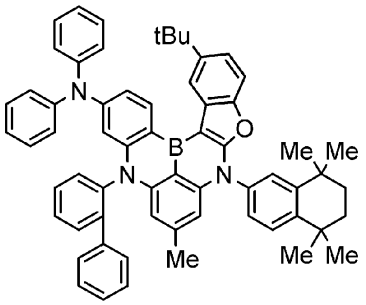
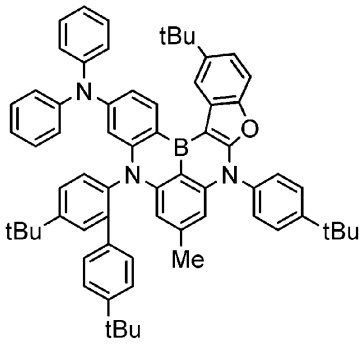
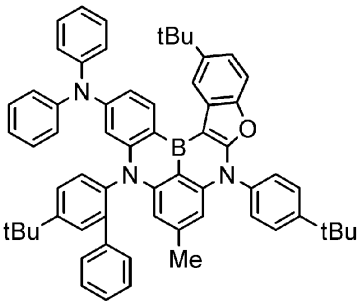
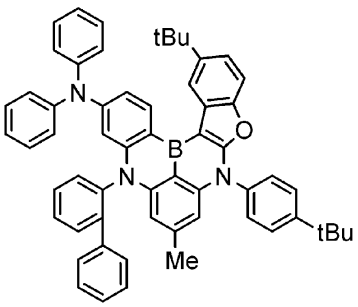
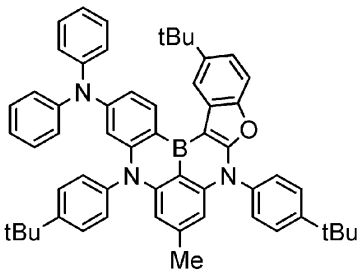
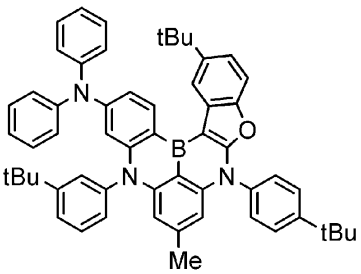
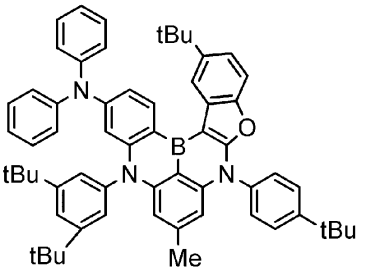
【０６４０】

【化４８３】



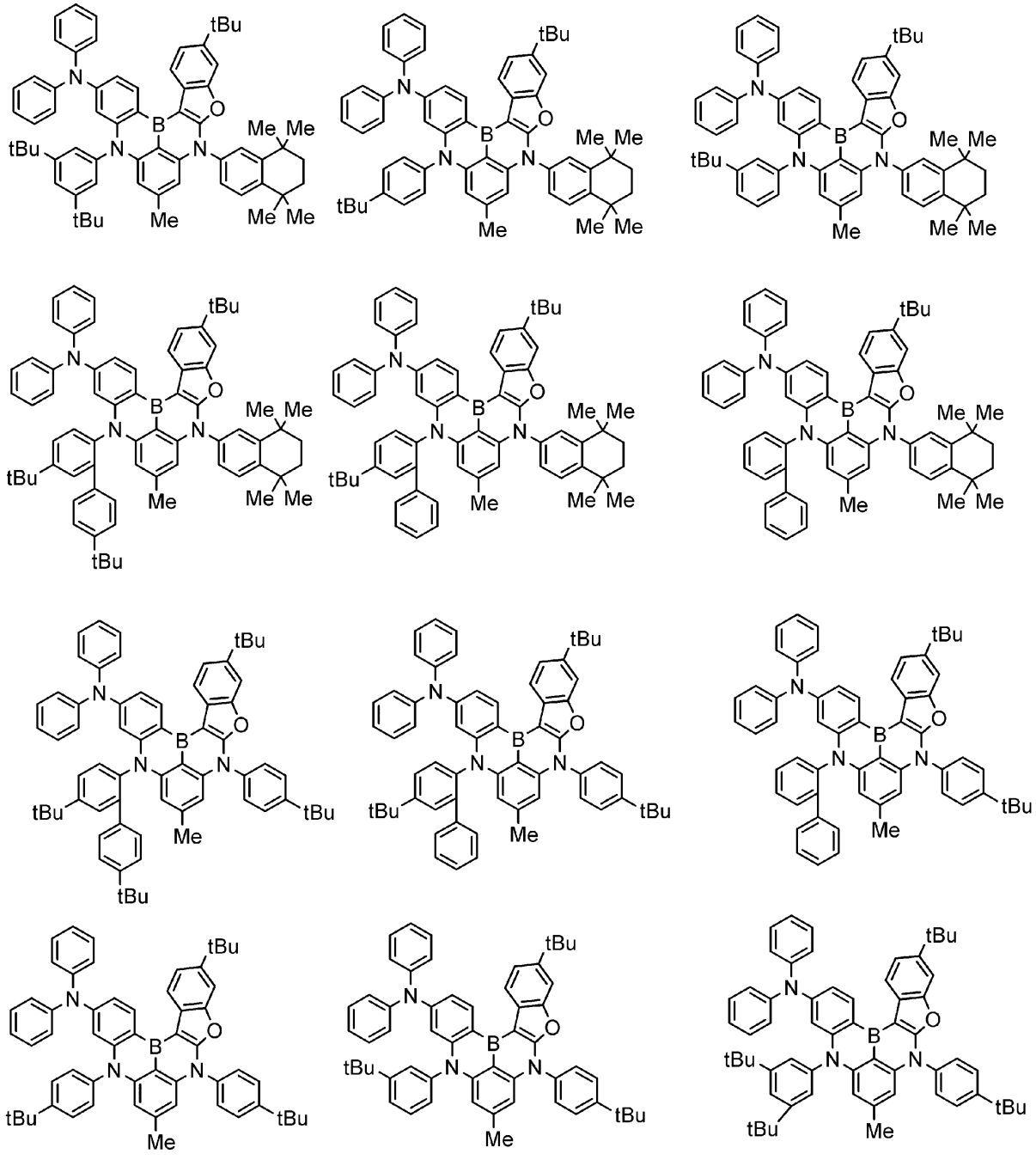
【０６４１】

【化４８４】

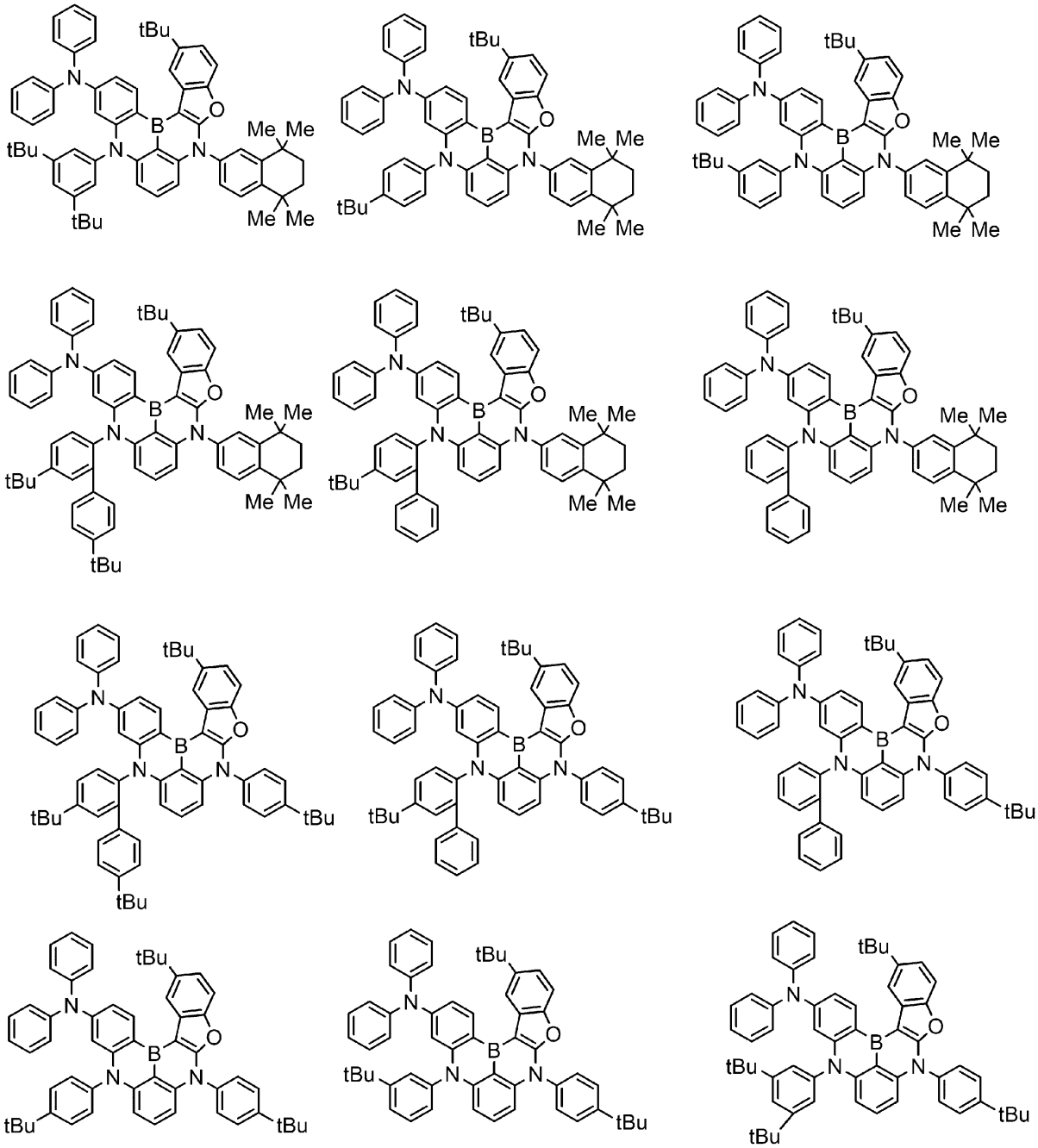
【０６４２】

【化４８５】



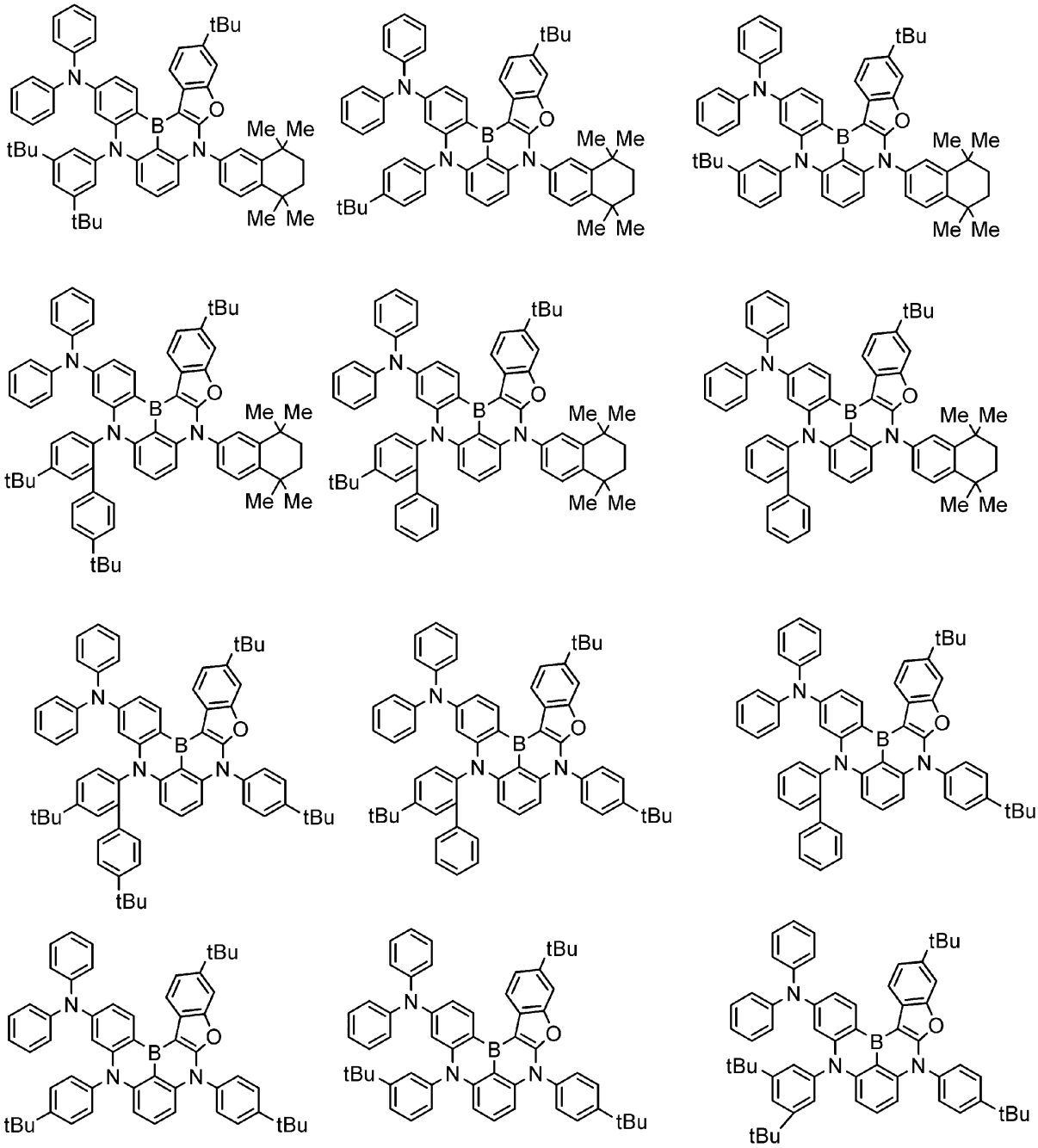
【０６４３】

【化４８６】



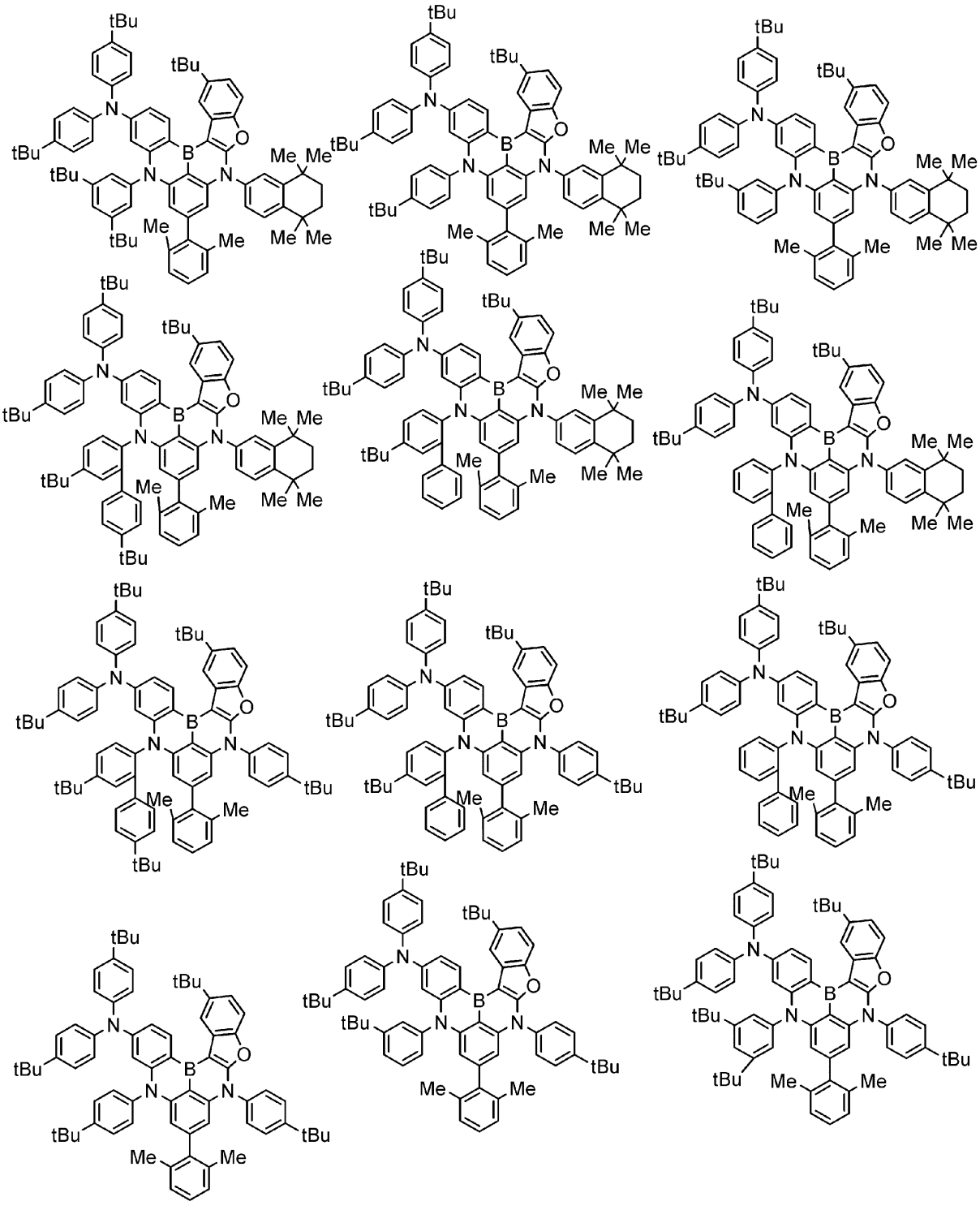
【０６４４】

【化４８７】



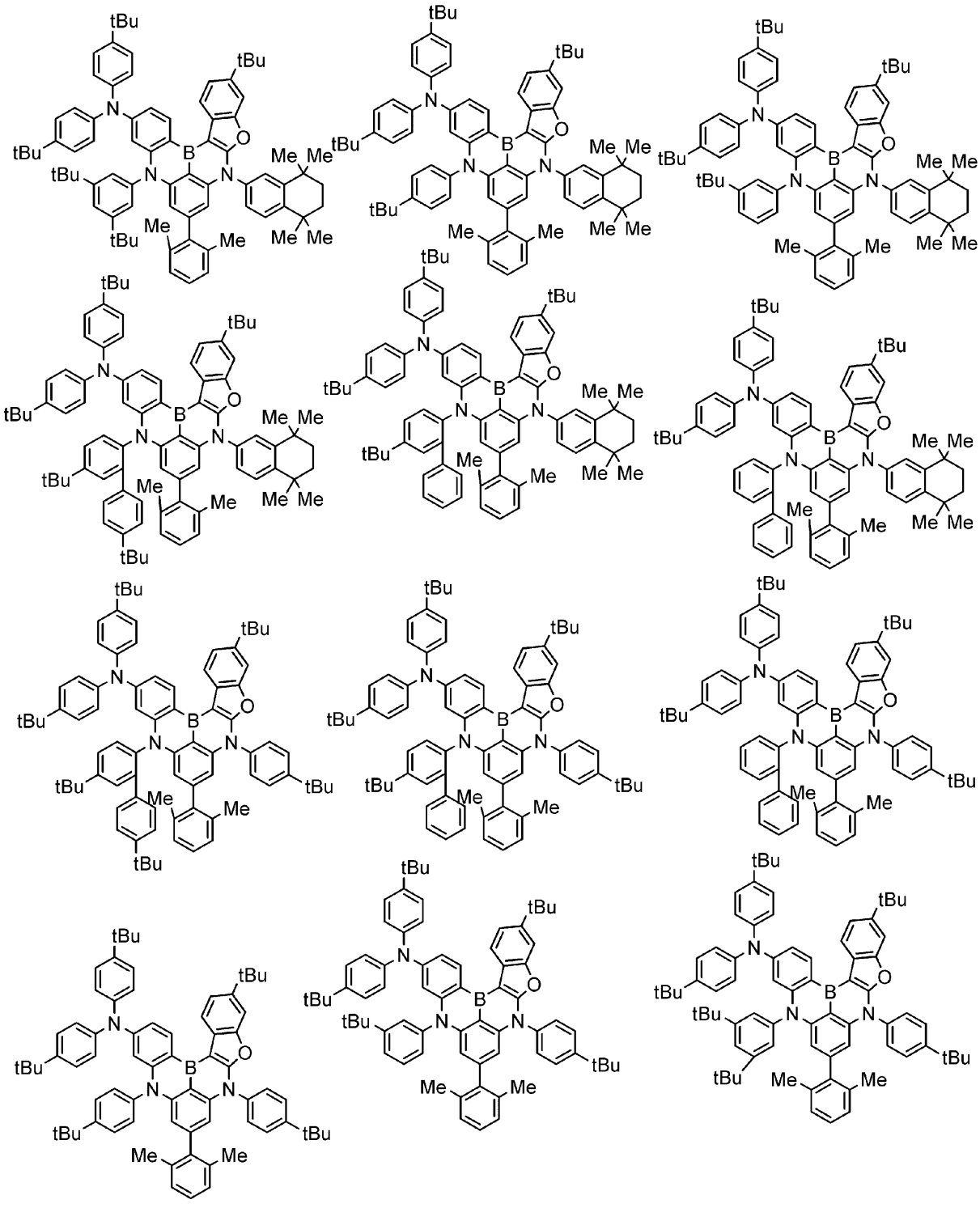
【０６４５】

【化４８８】



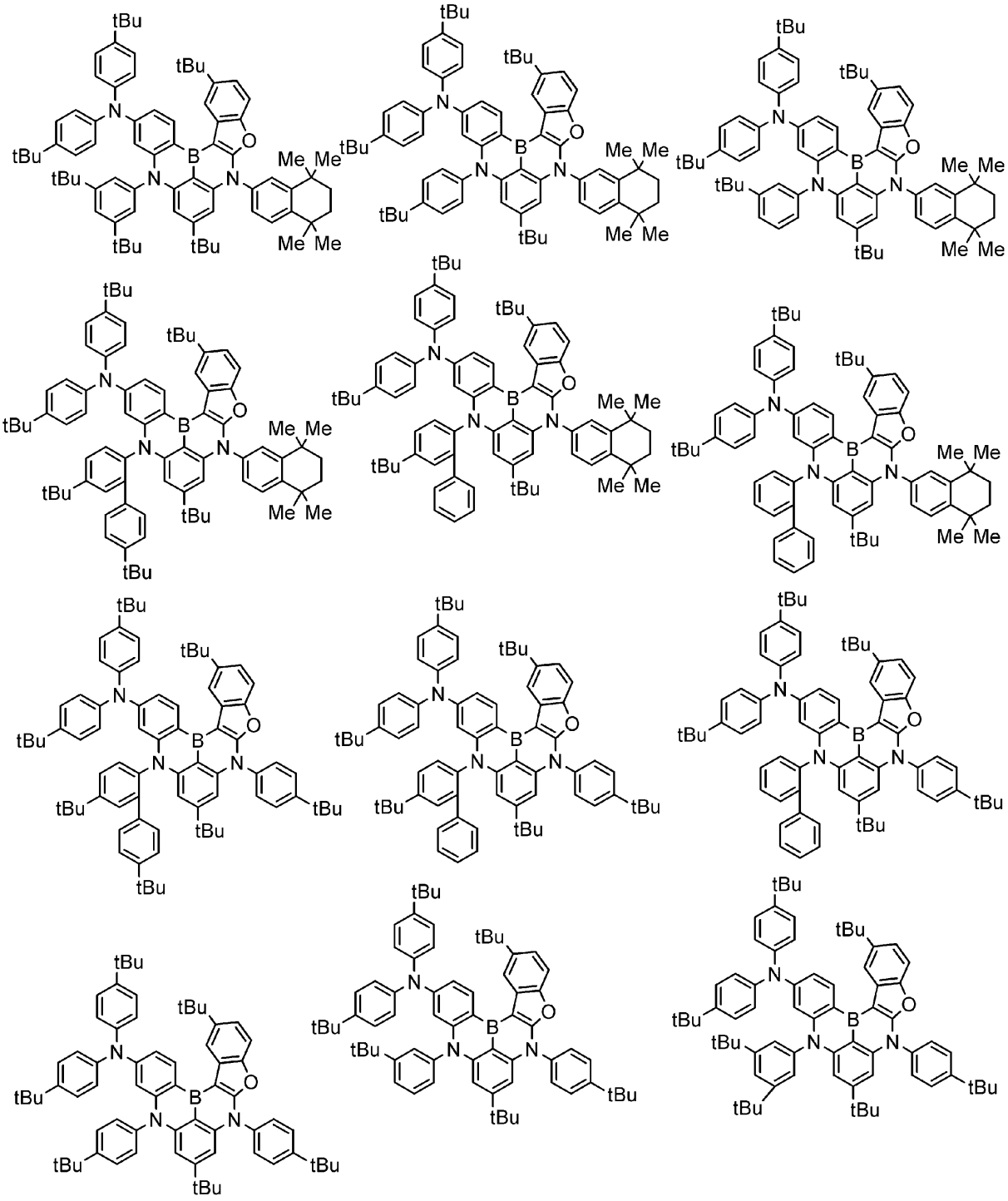
【０６４６】

【化４８９】



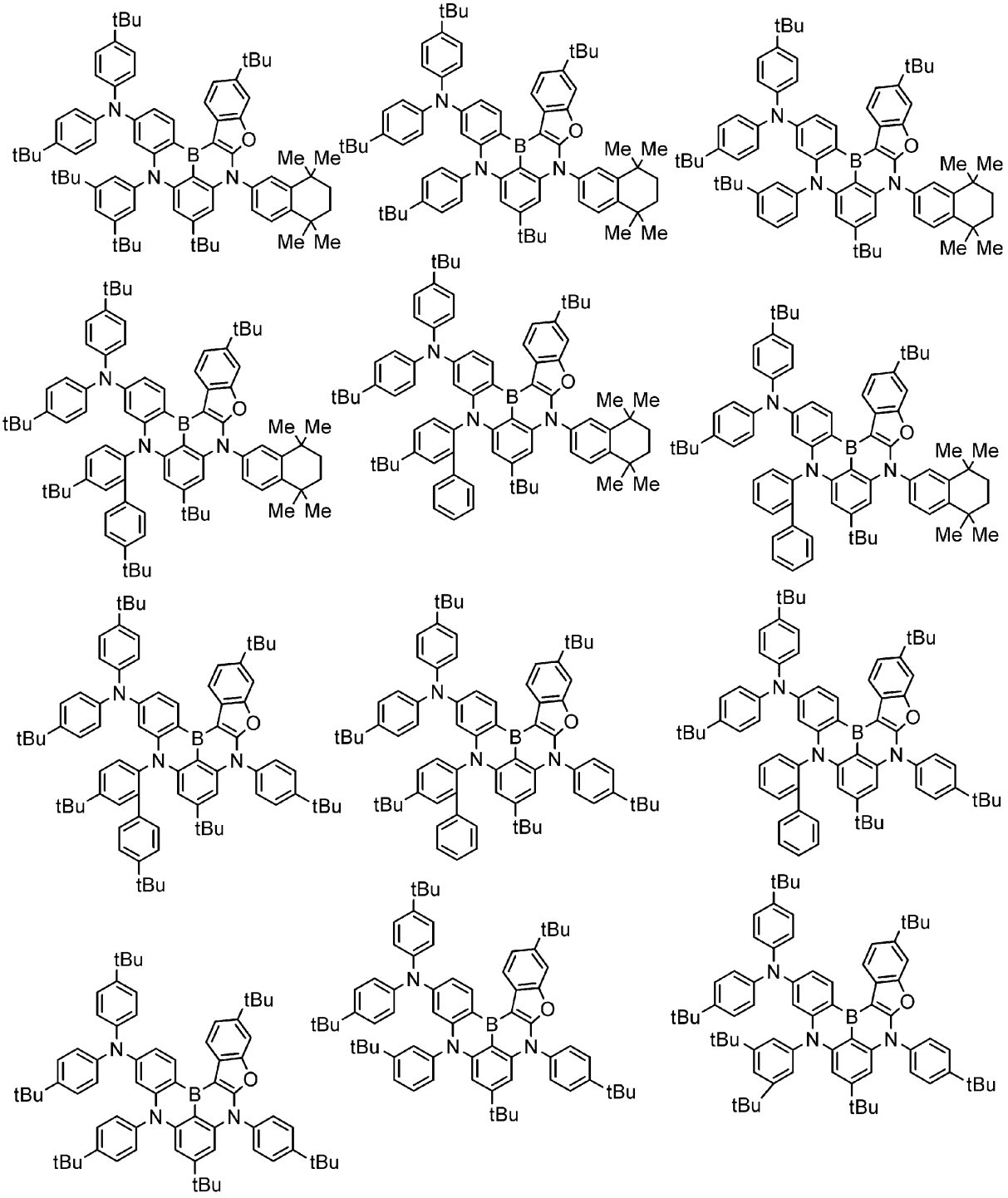
【０６４７】

【化４９０】



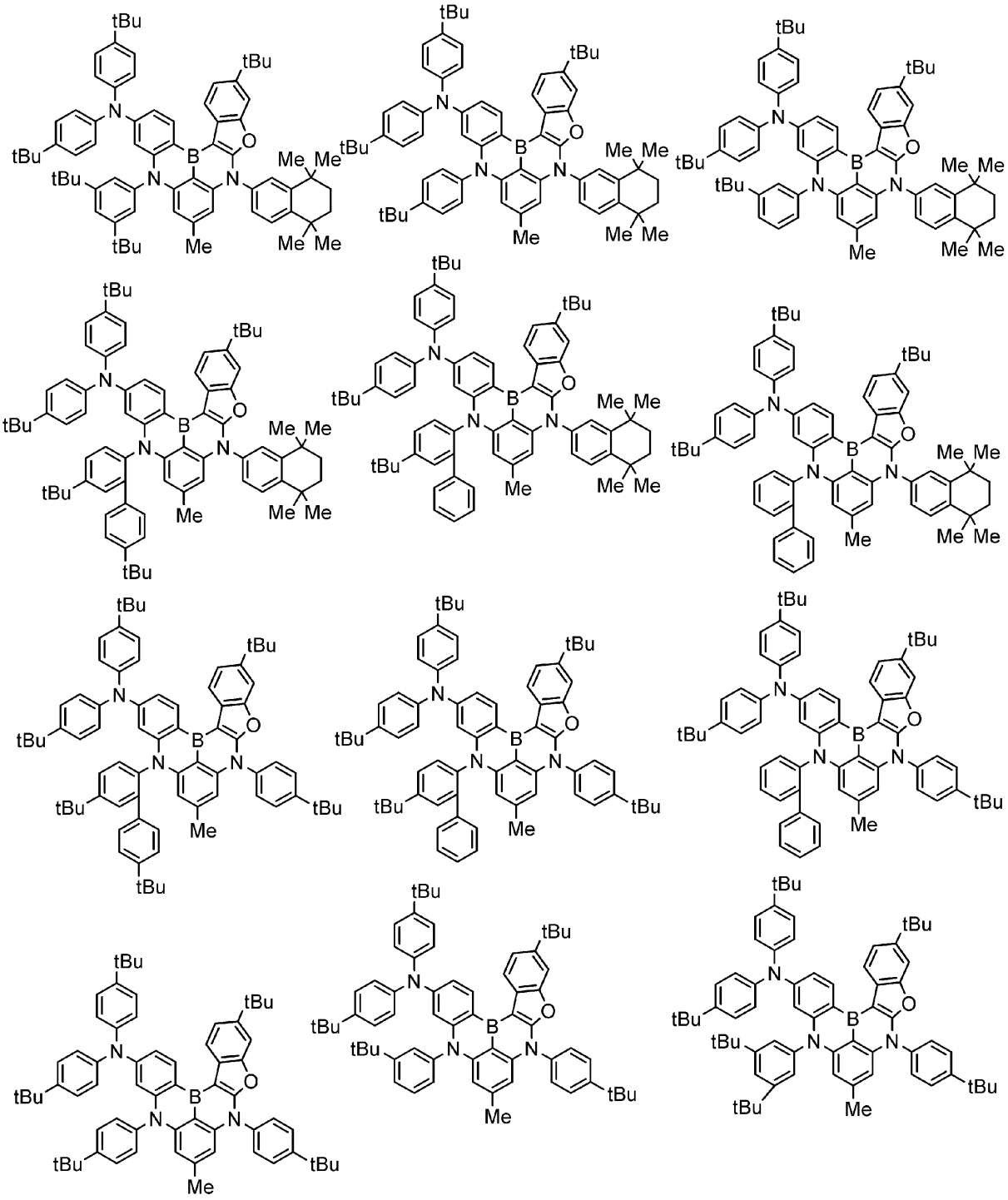
【０６４８】

【化４９１】



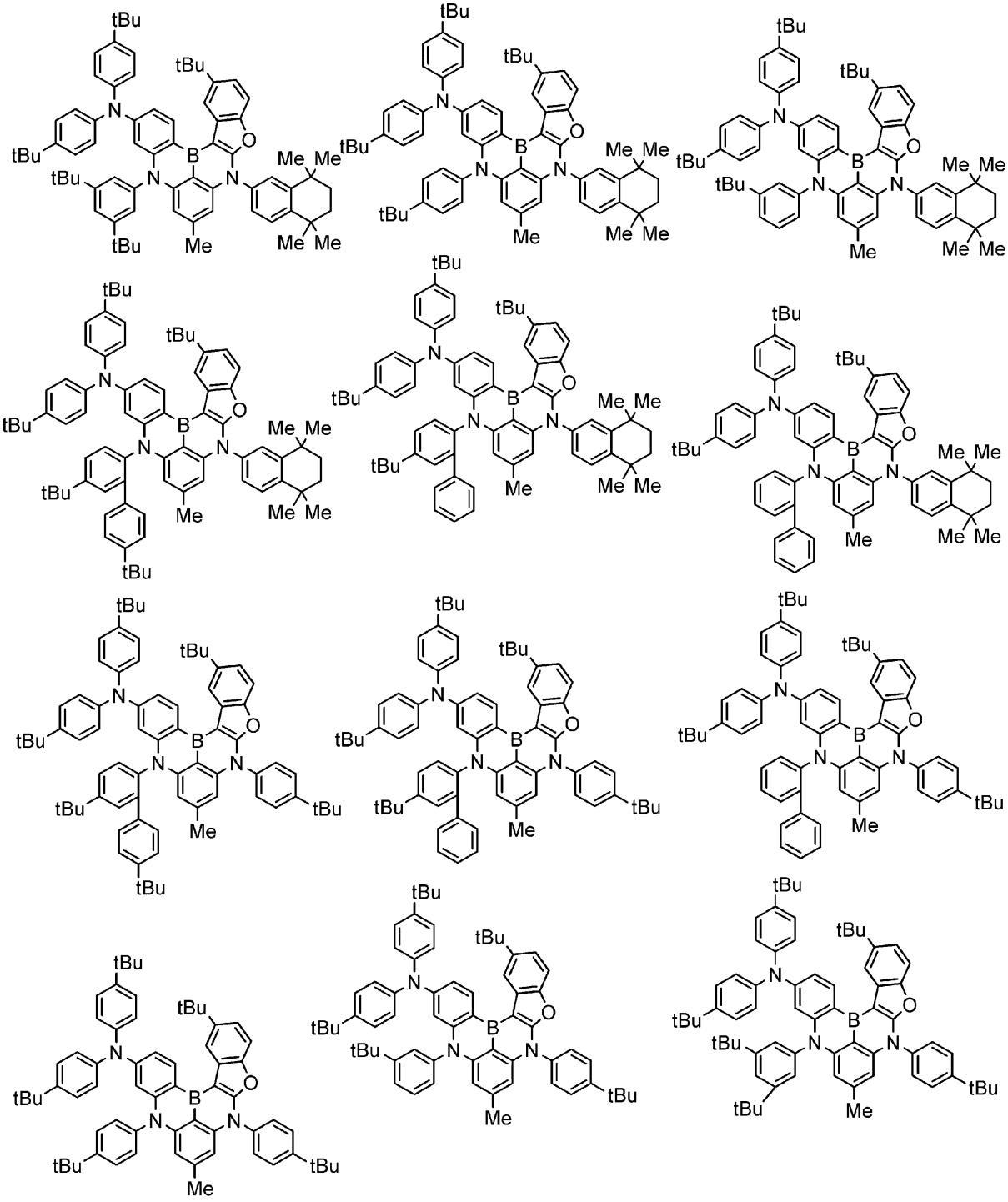
【０６４９】

【化４９２】



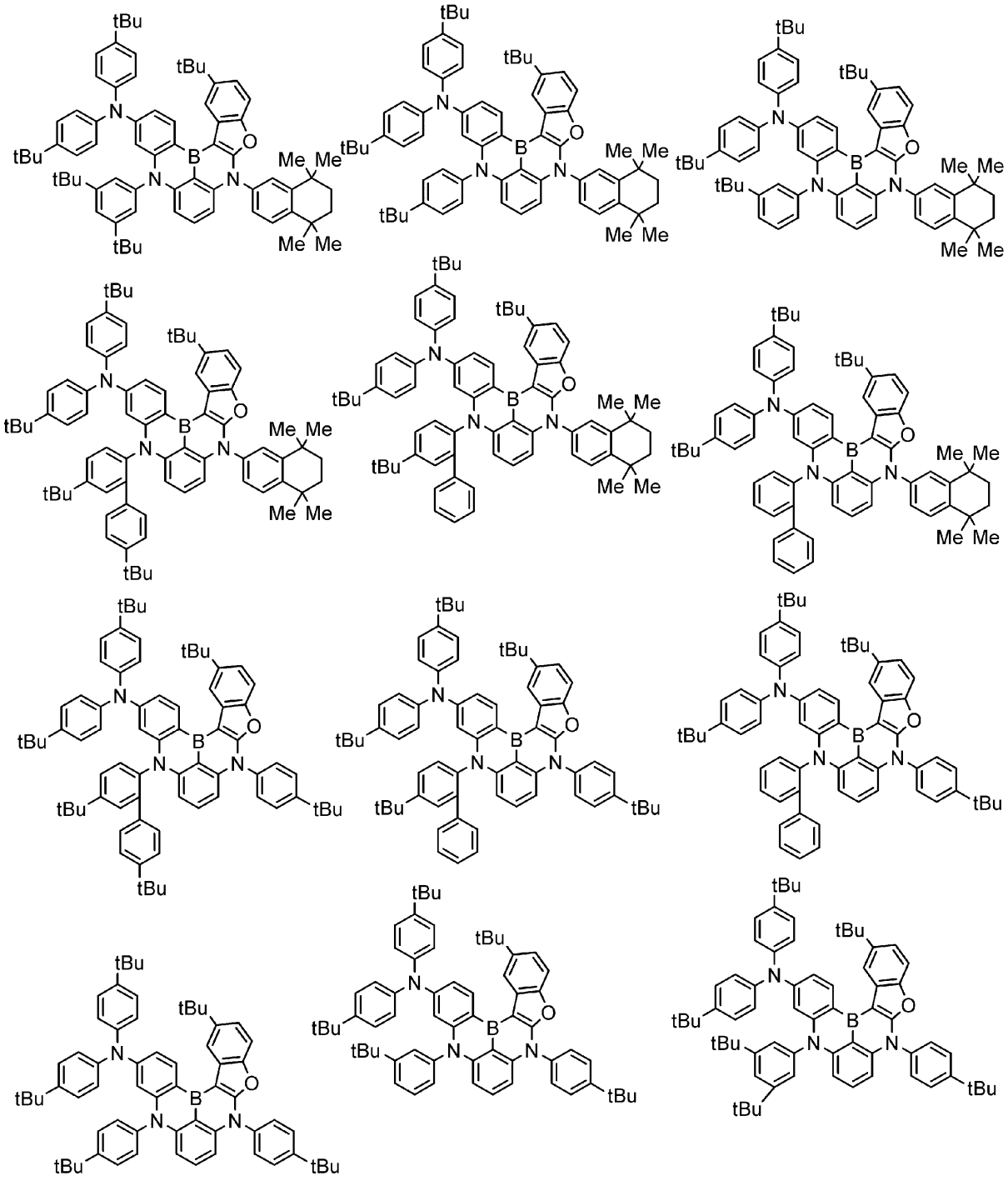
【０６５０】

【化４９３】



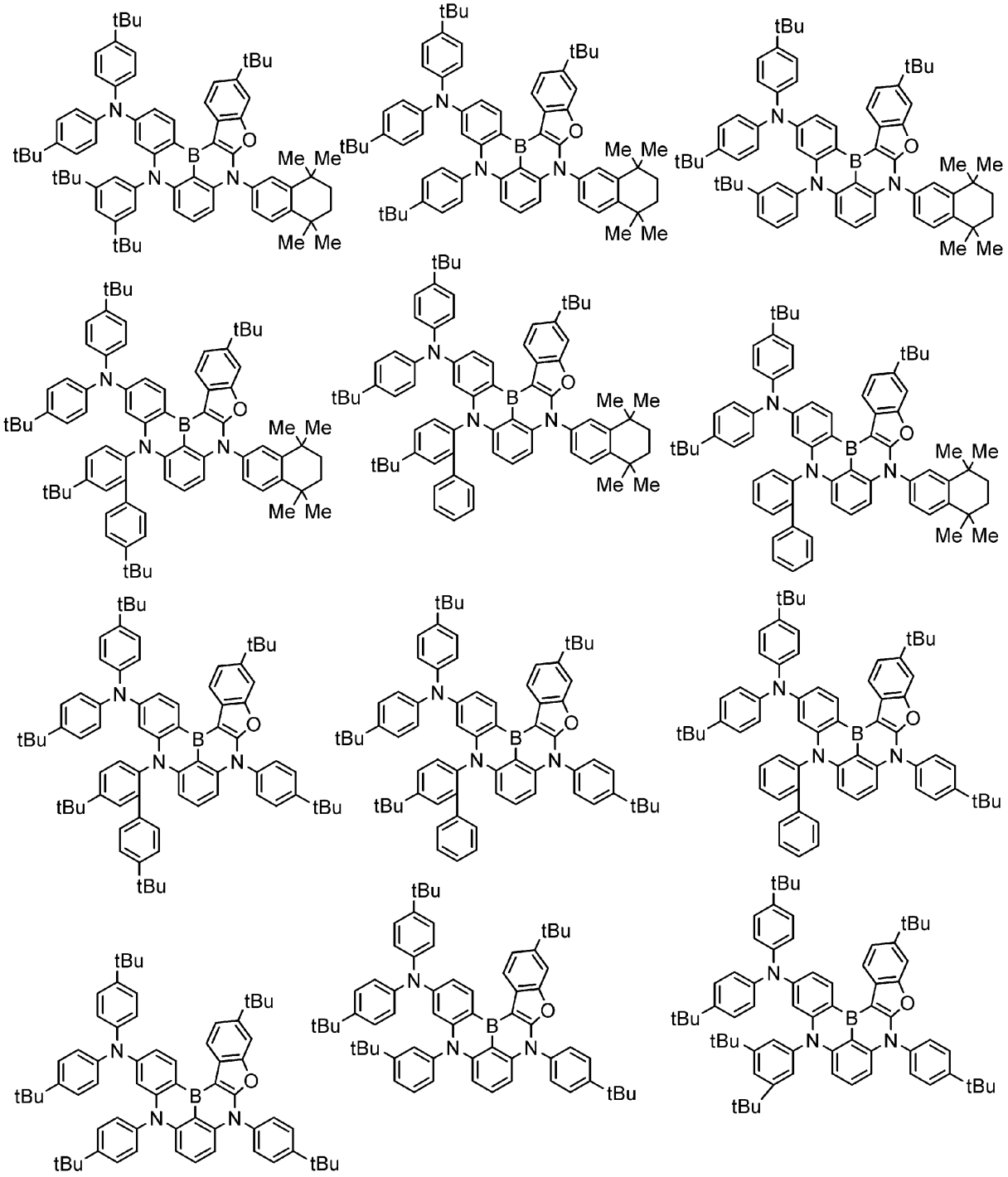
【０６５１】

【化４９４】



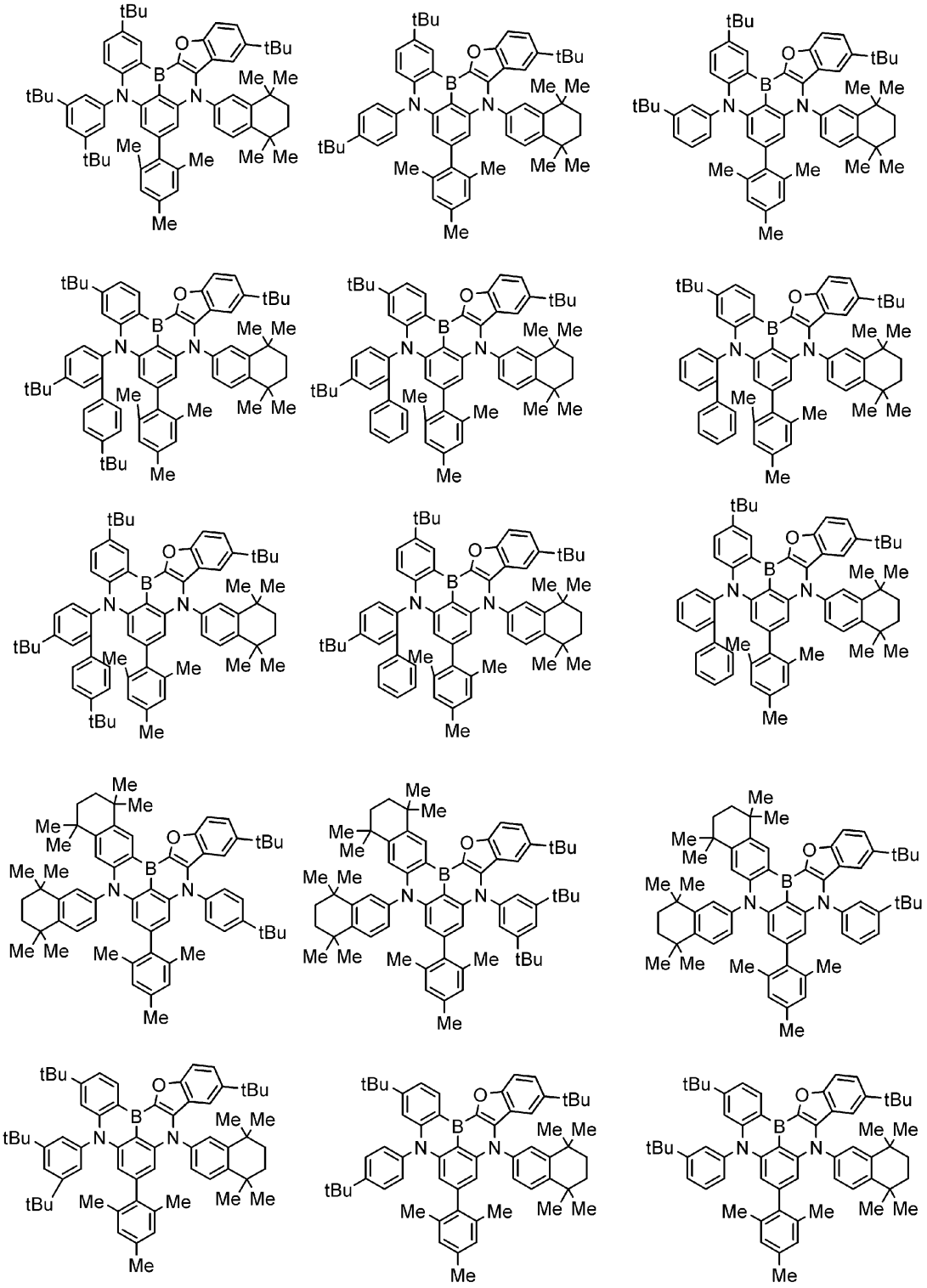
【０６５２】

【化４９５】



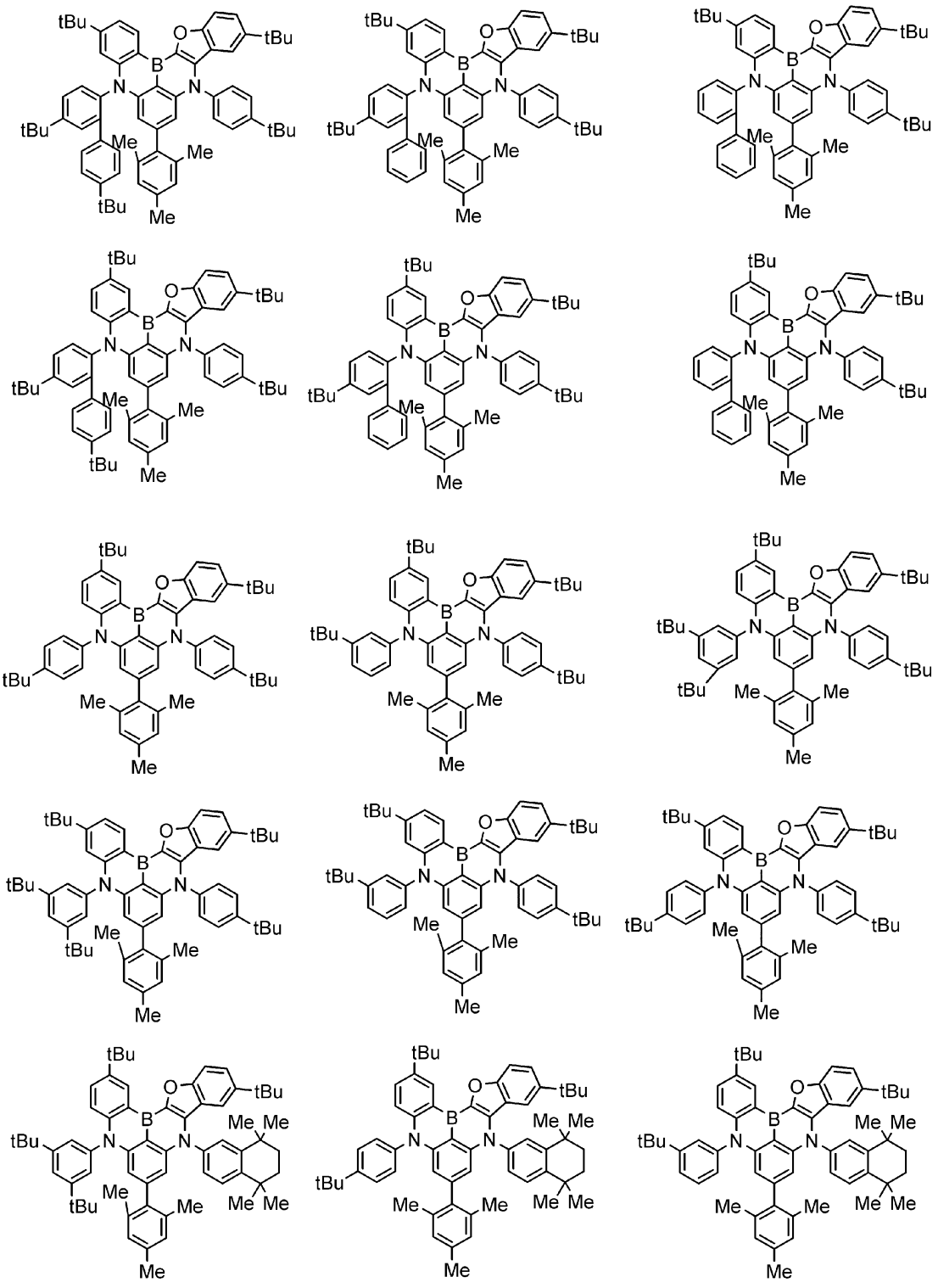
【０６５３】

【化４９６】



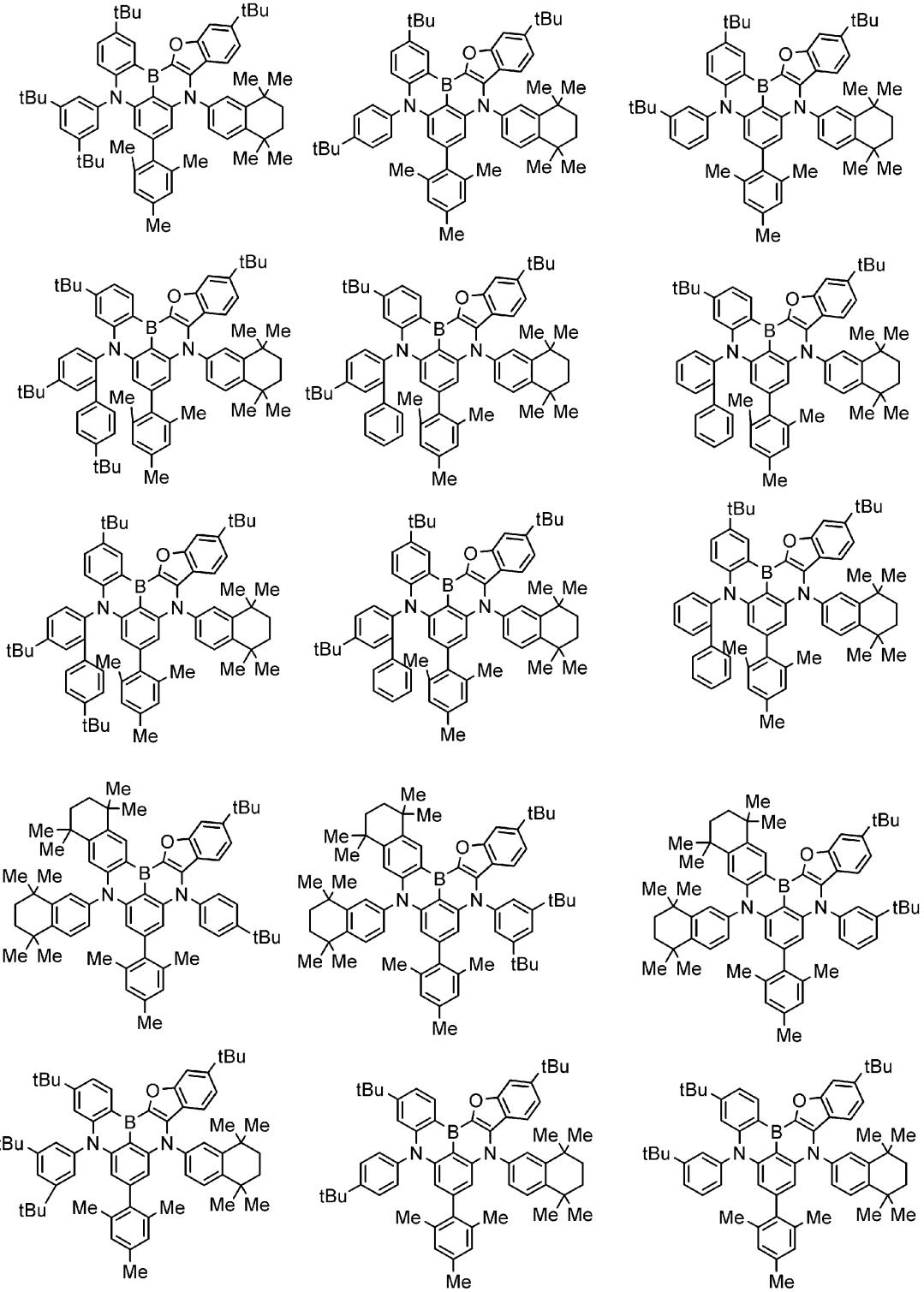
【０６５４】

【化４９７】



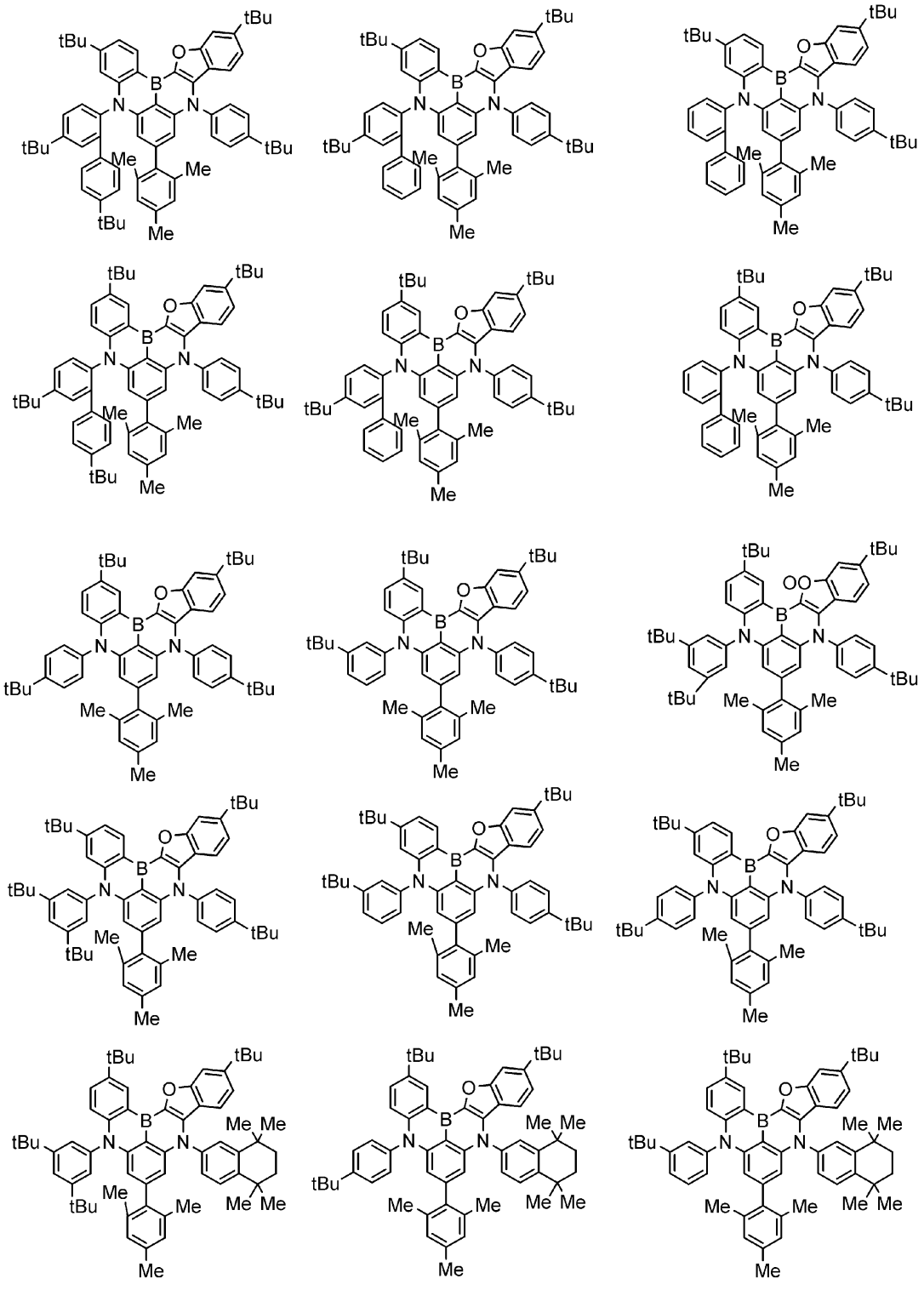
【０６５５】

【化４９８】



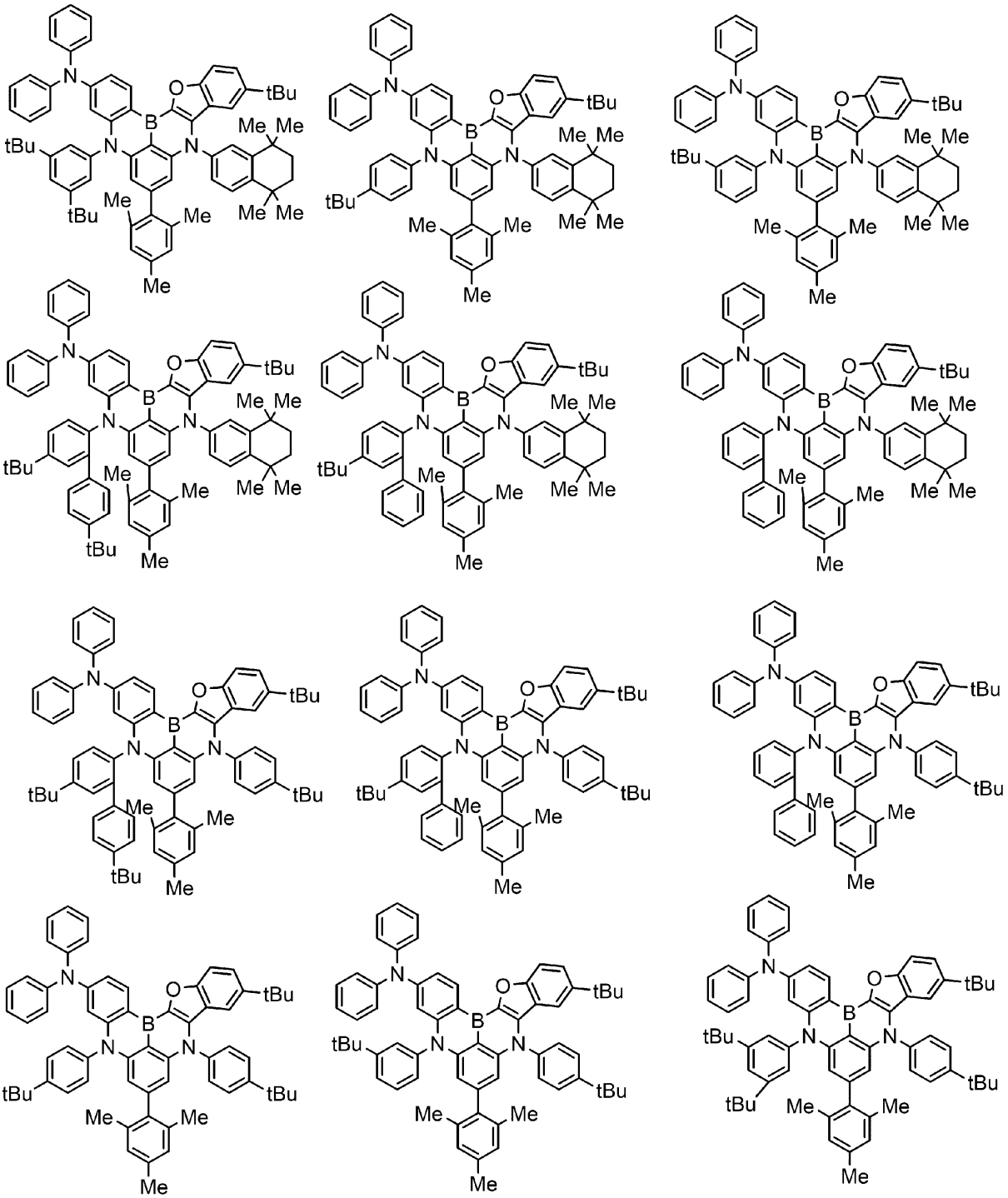
【０６５６】

【化４９９】



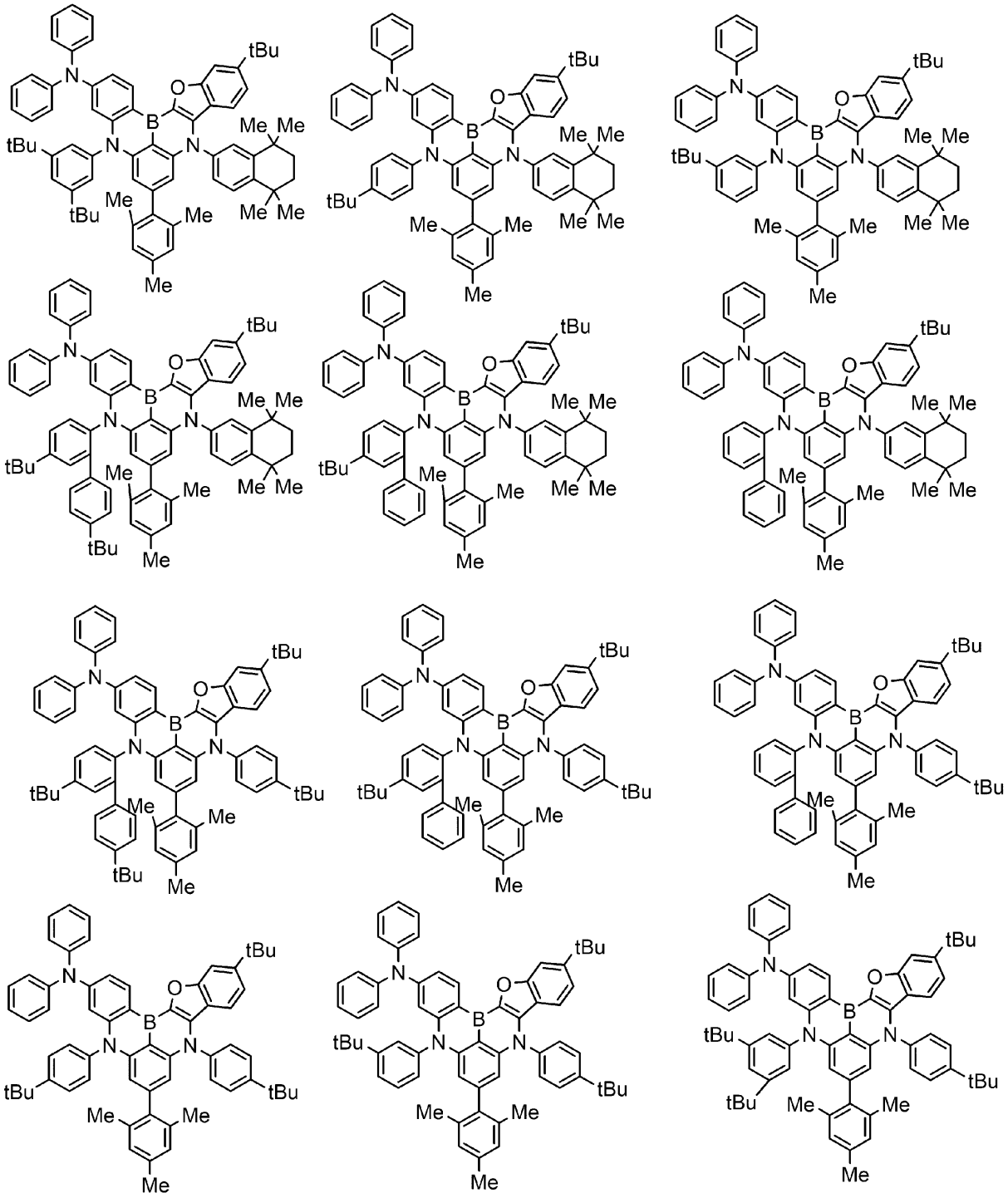
【０６５７】

【化５００】



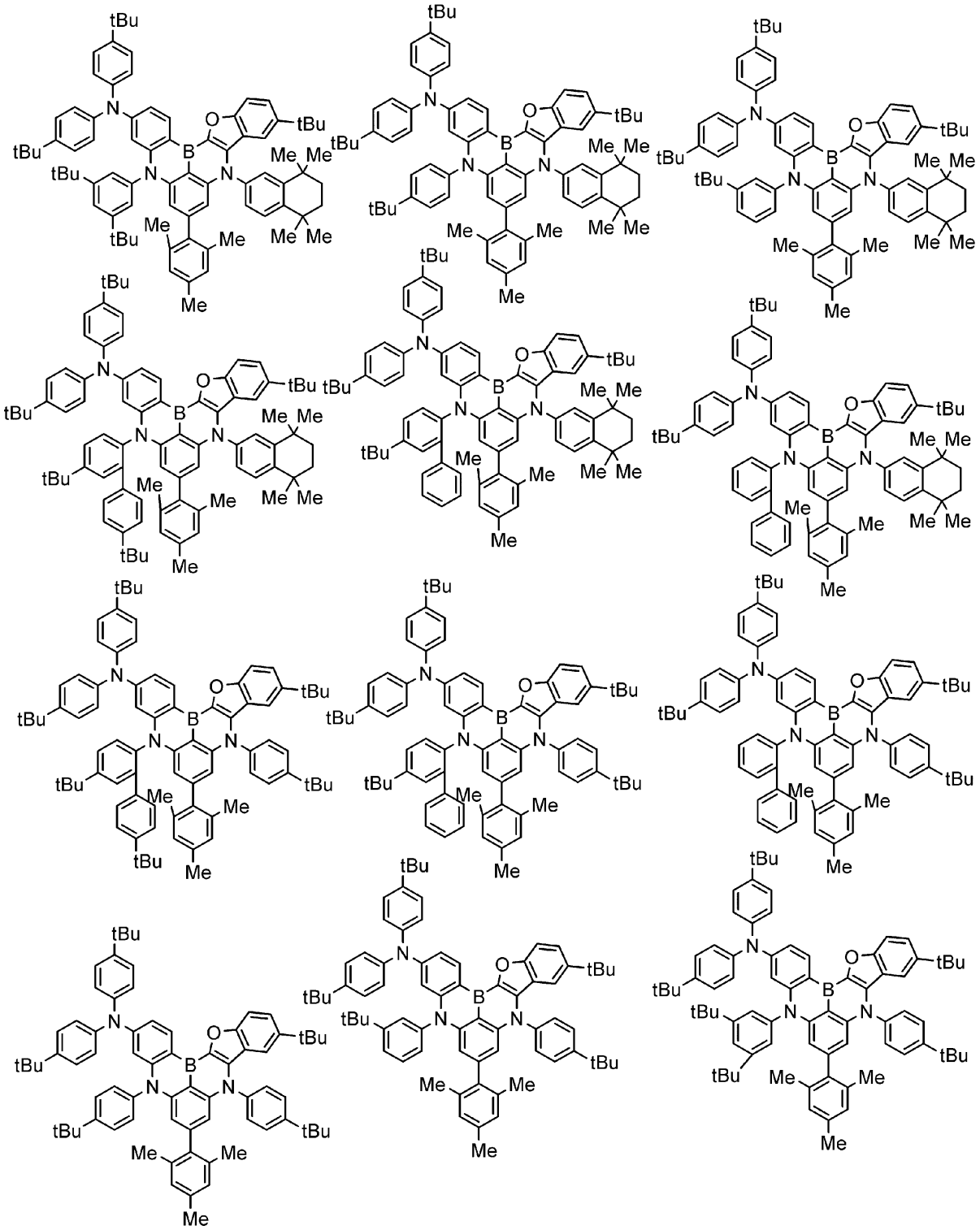
【０６５８】

【化５０１】



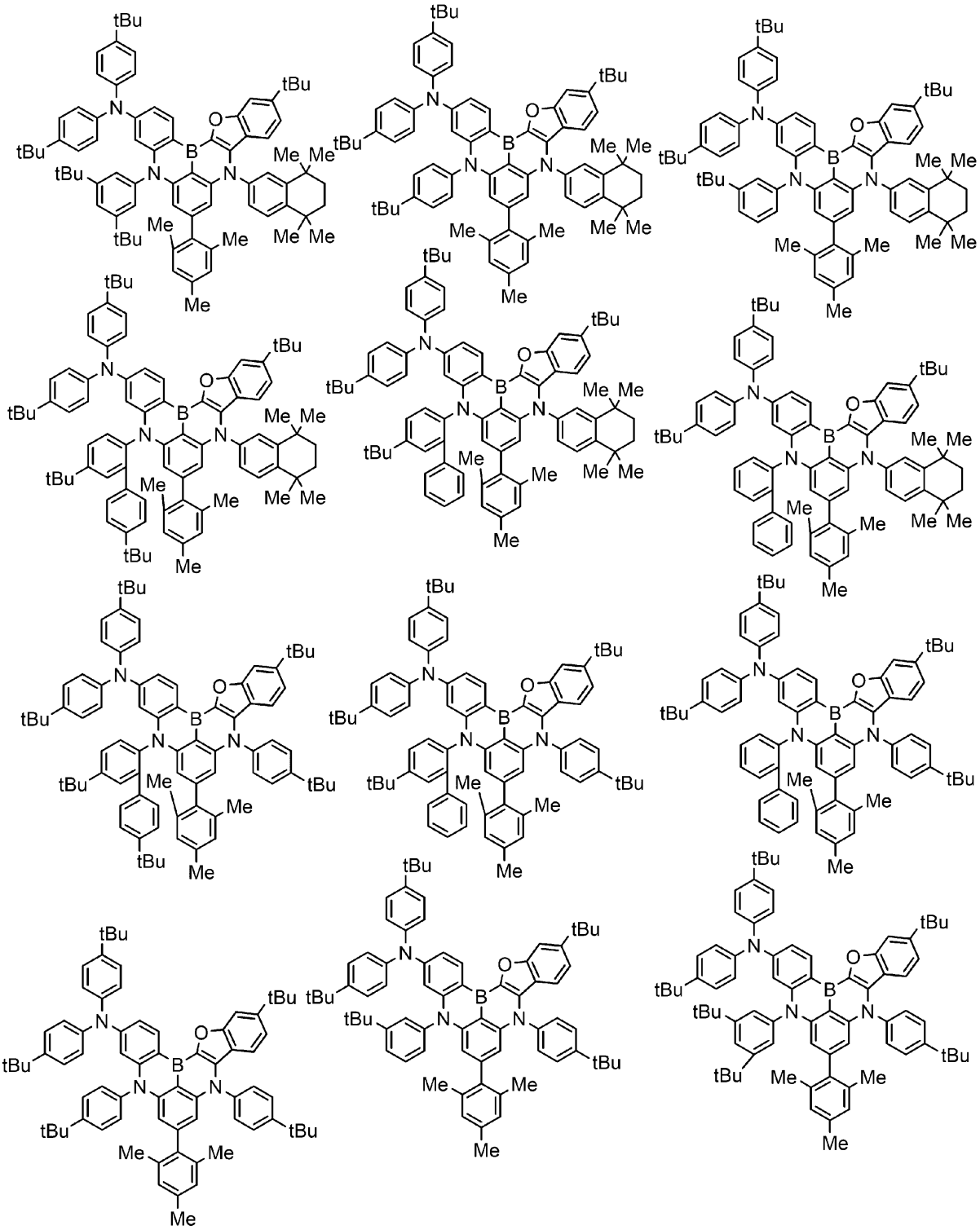
【０６５９】

【化５０２】



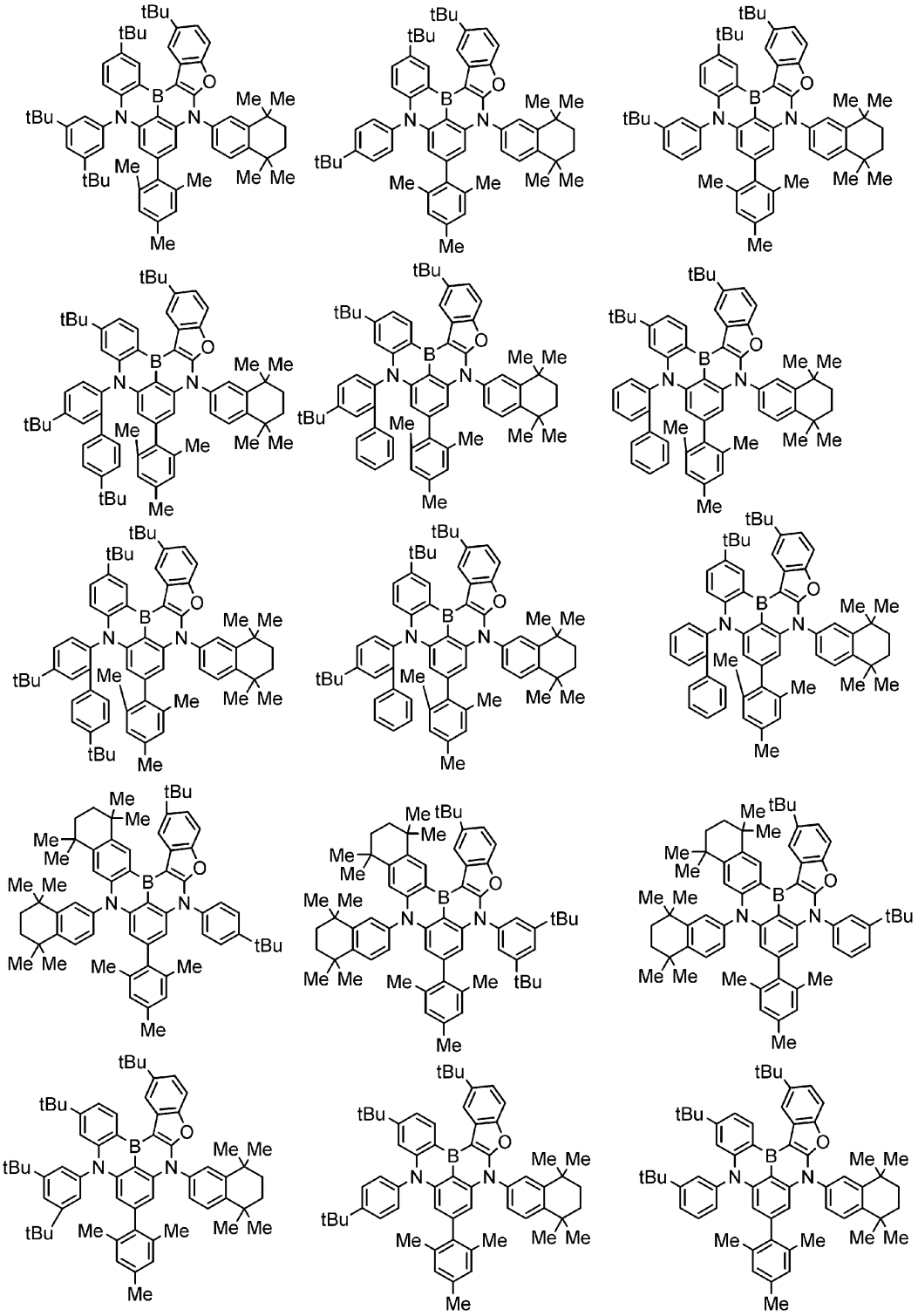
【０６６０】

【化５０３】



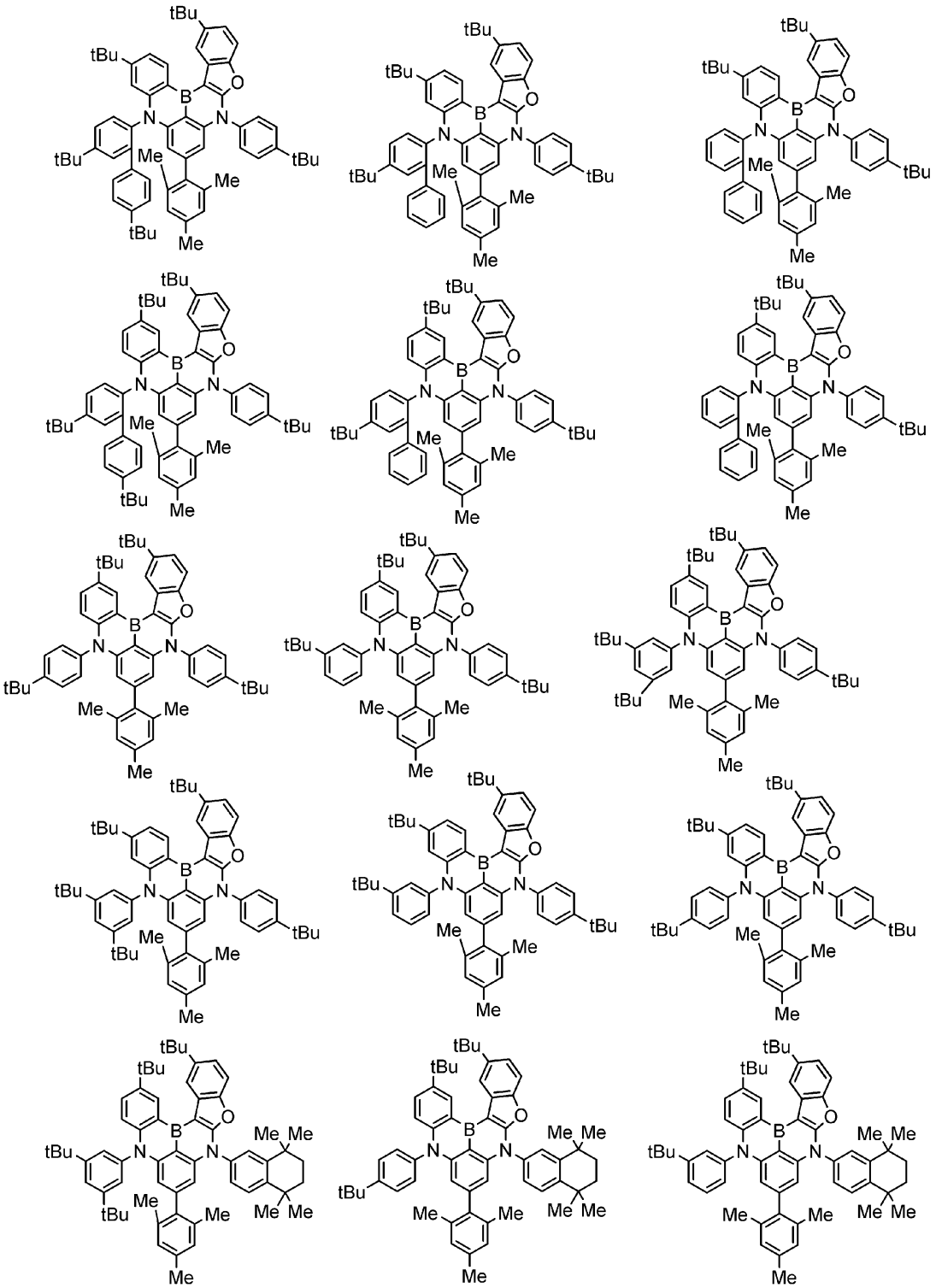
【０６６１】

【化５０４】



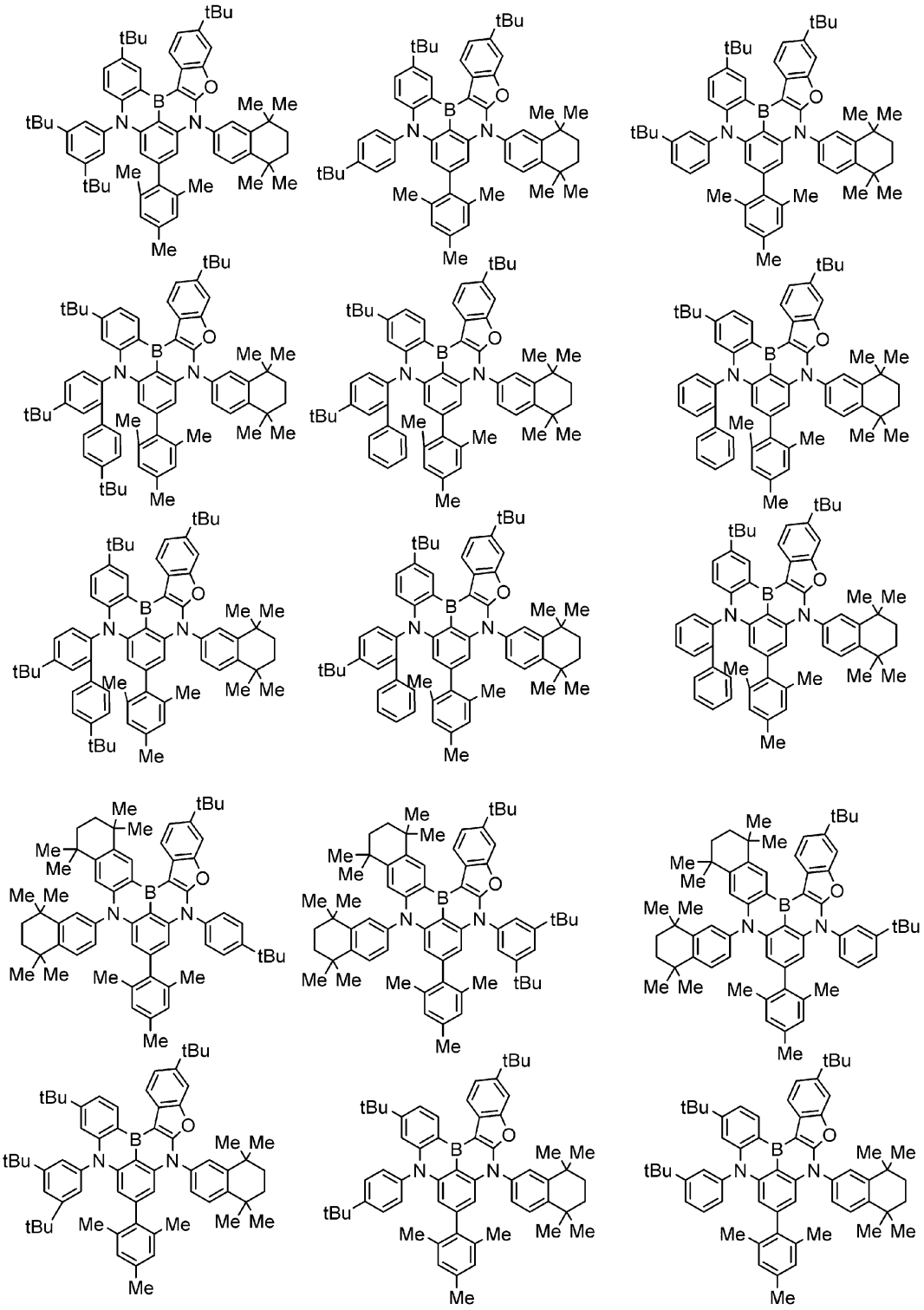
【０６６２】

【化５０５】



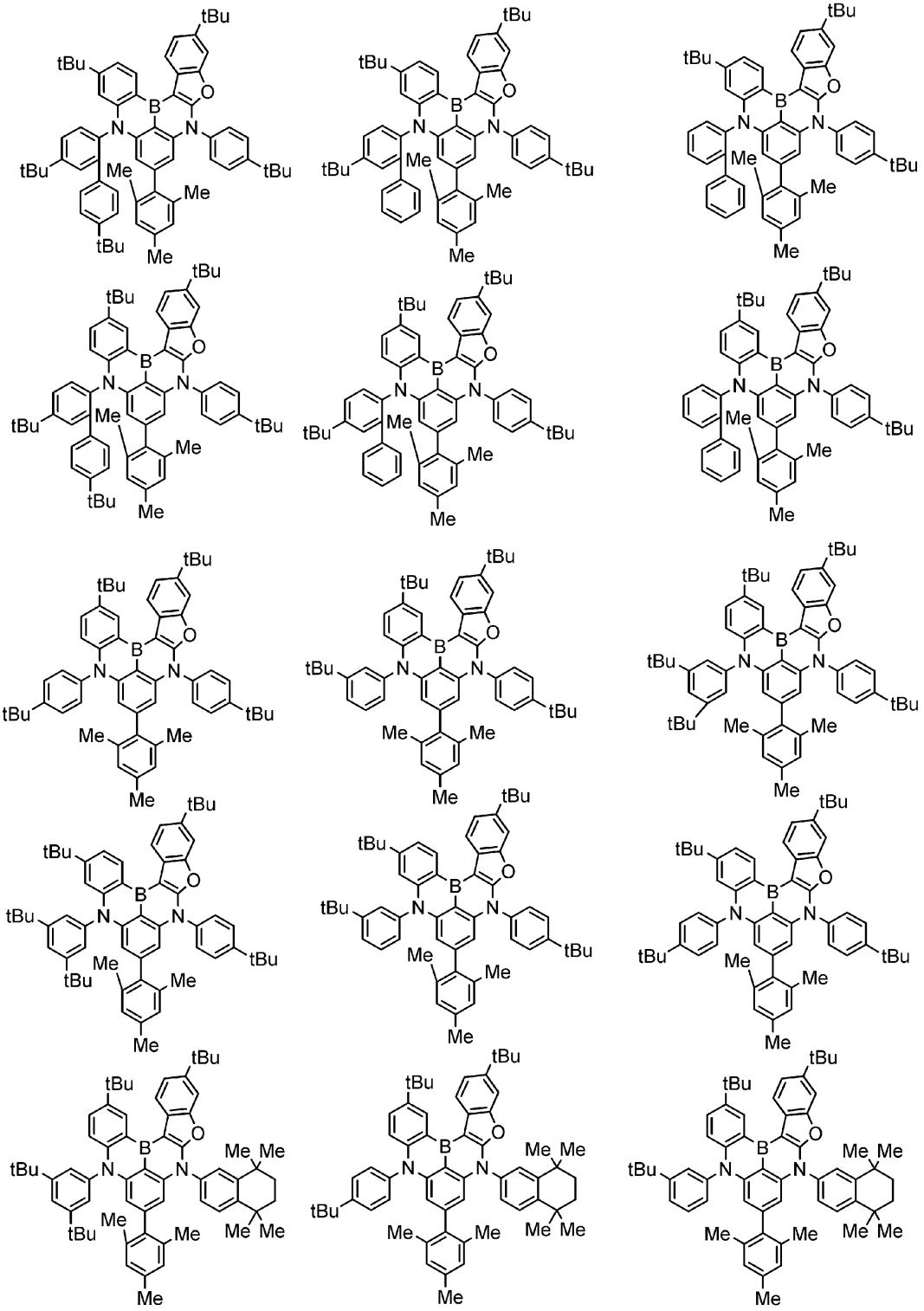
【０６６３】

【化５０６】



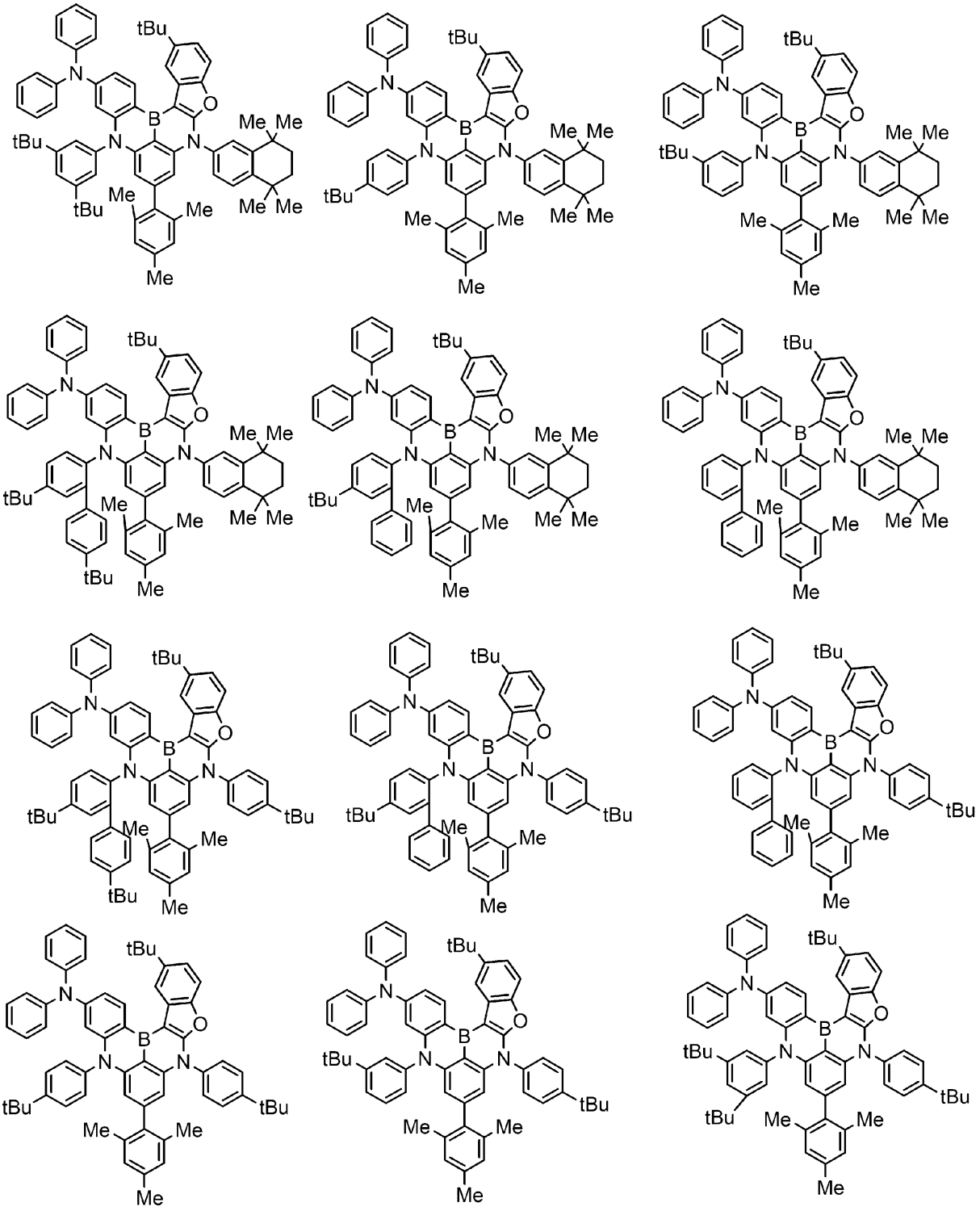
【０６６４】

【化５０７】



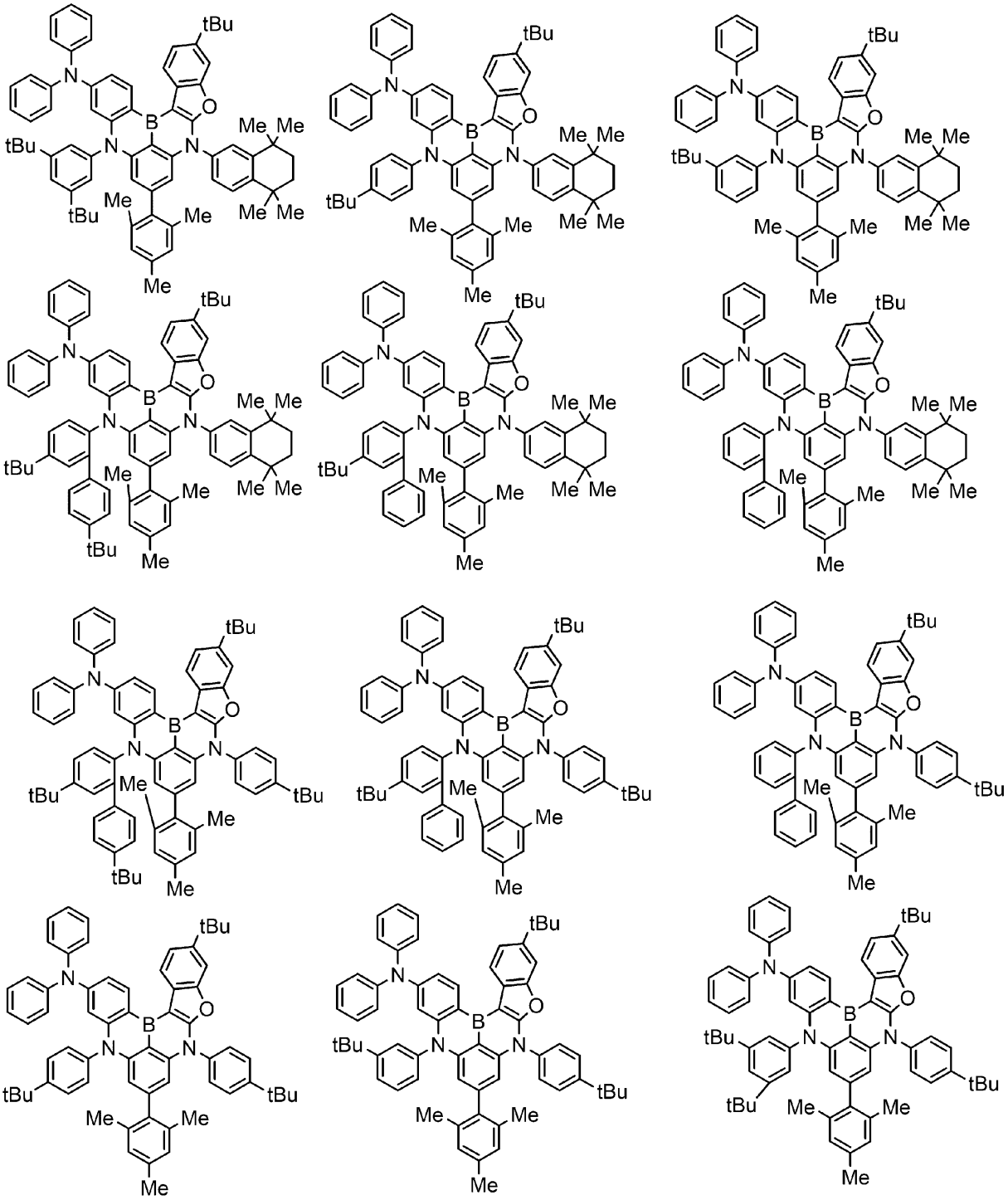
【０６６５】

【化５０８】



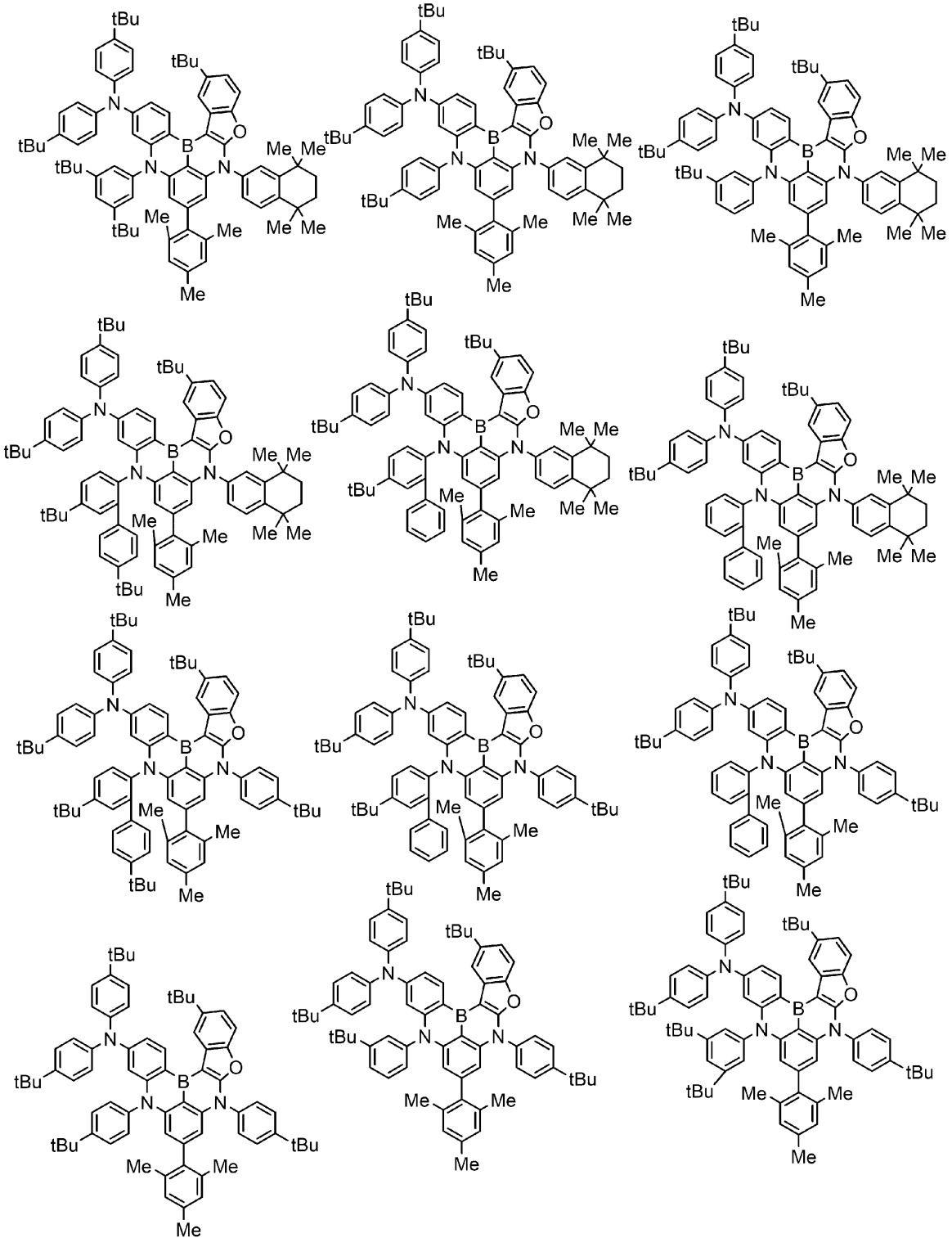
【０６６６】

【化５０９】



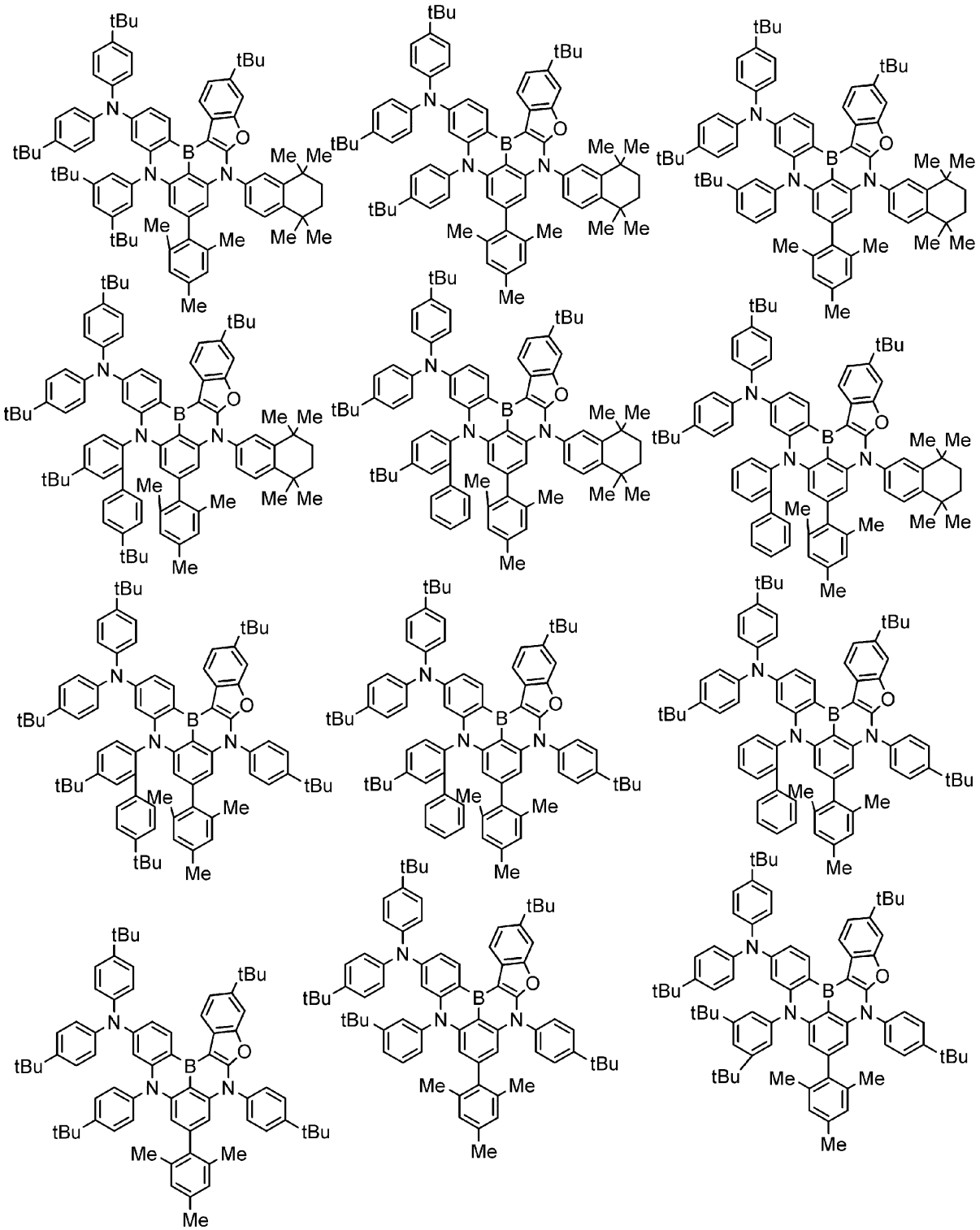
【０６６７】

【化５１０】



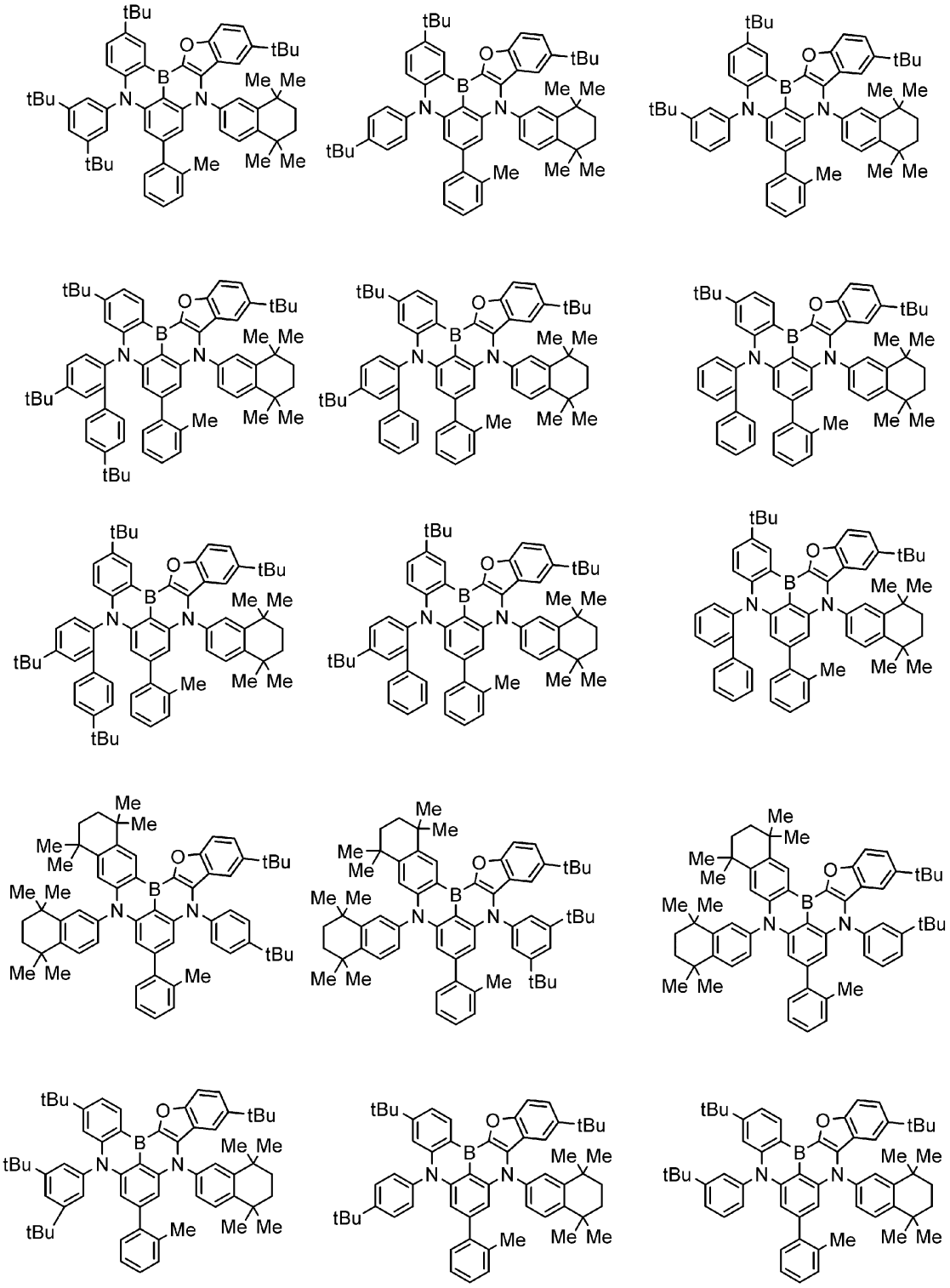
【０６６８】

【化５１１】



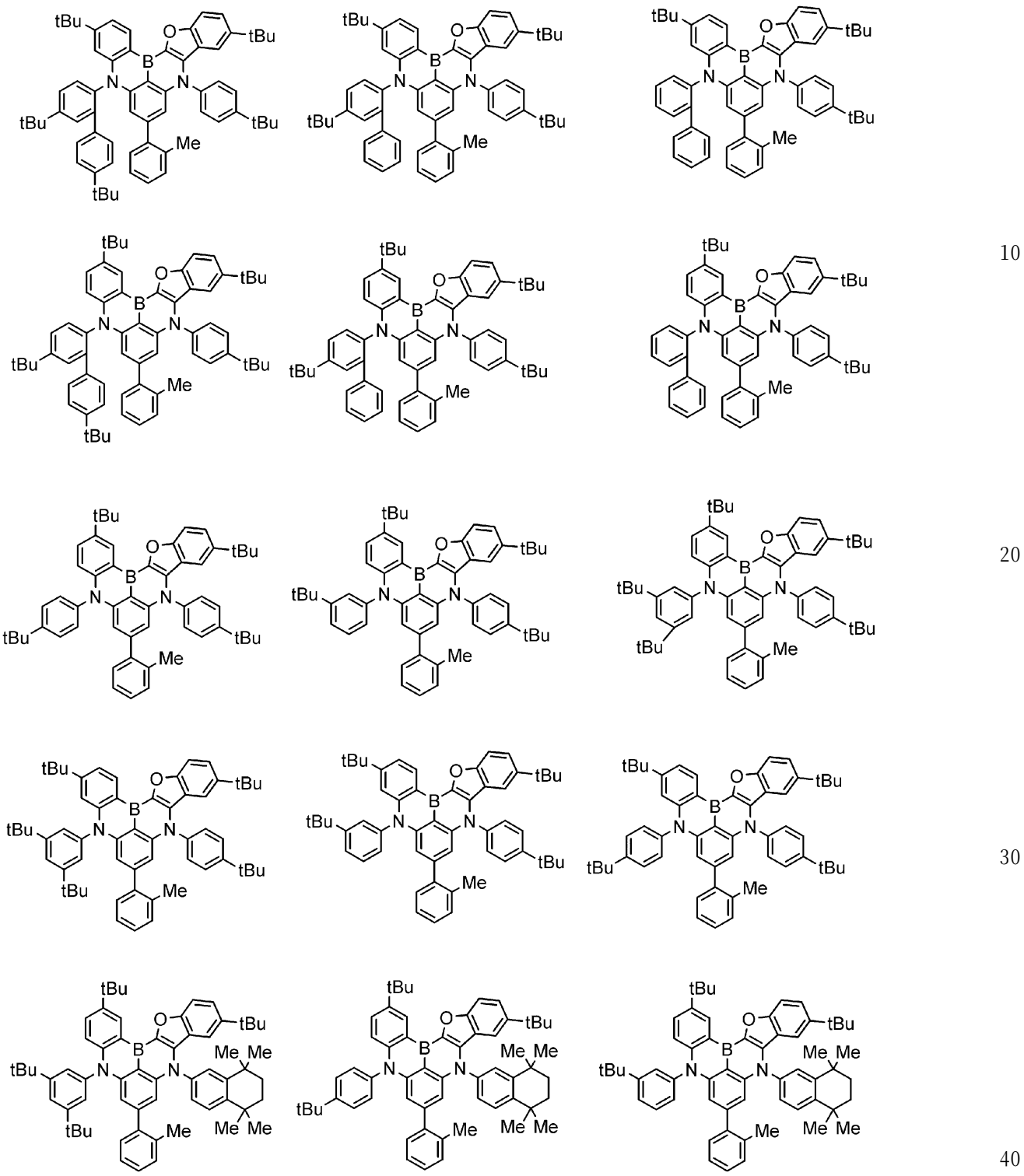
【０６６９】

【化５１２】



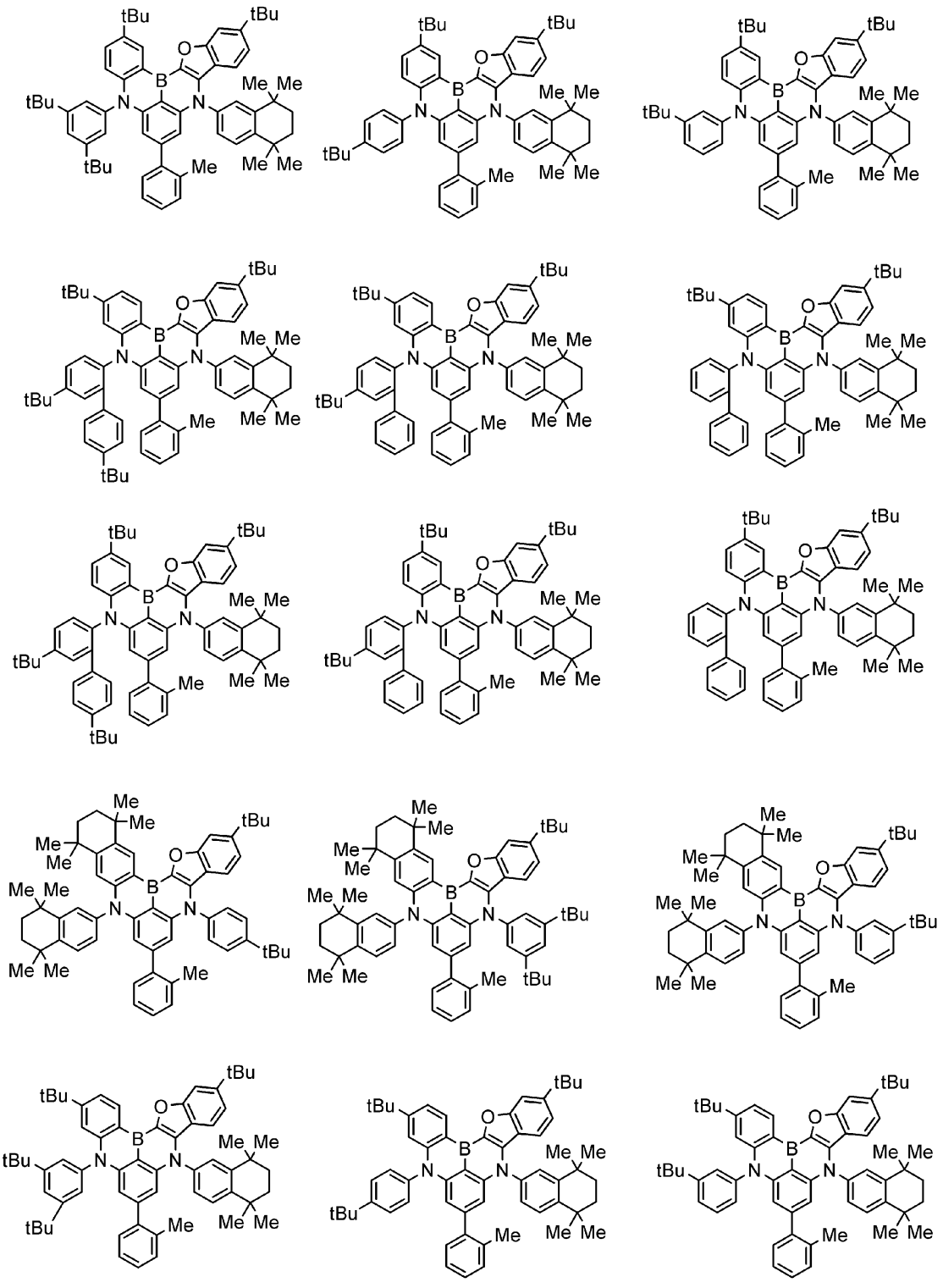
【０６７０】

【化５１３】



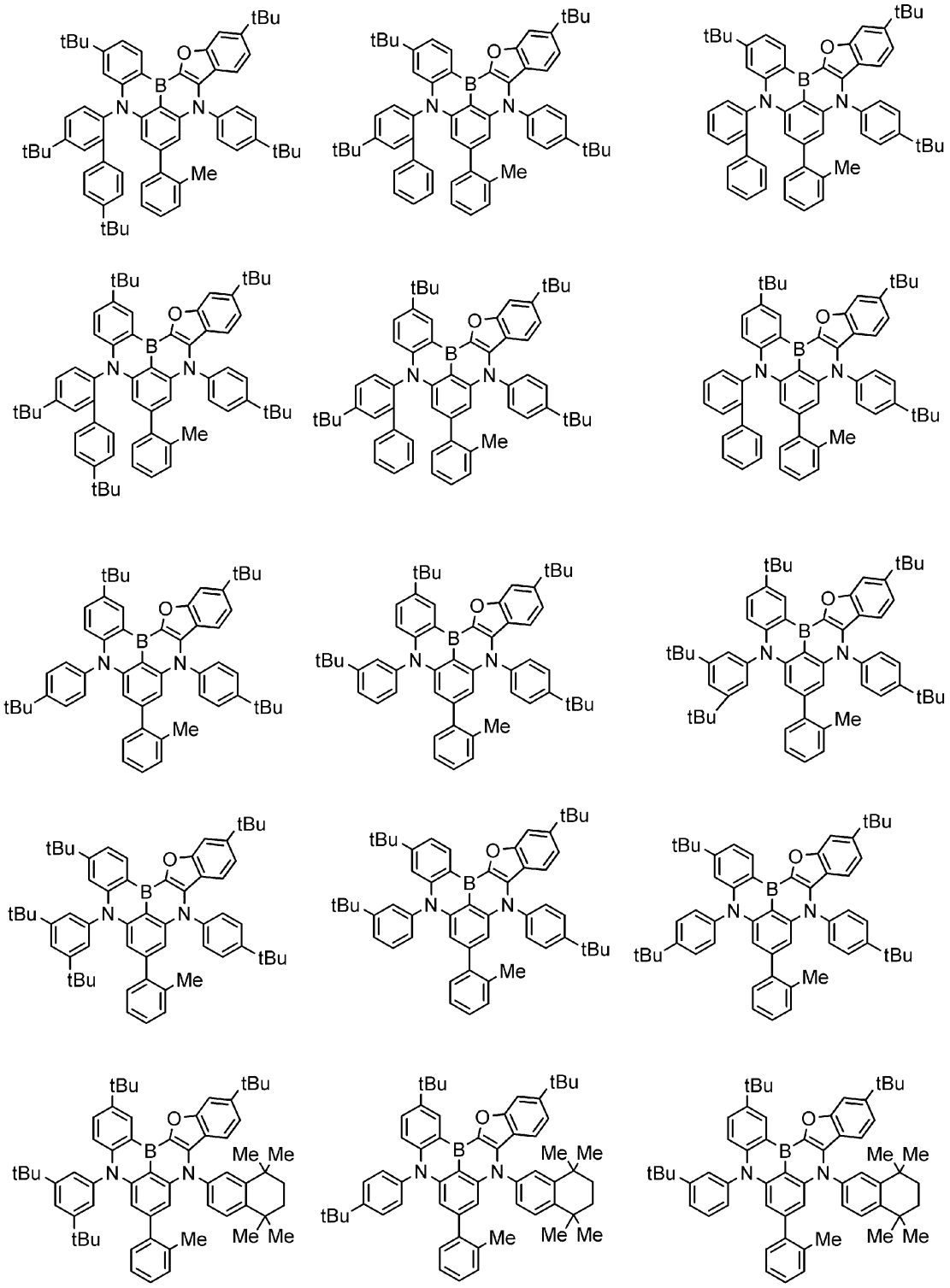
【０６７１】

【化５１４】



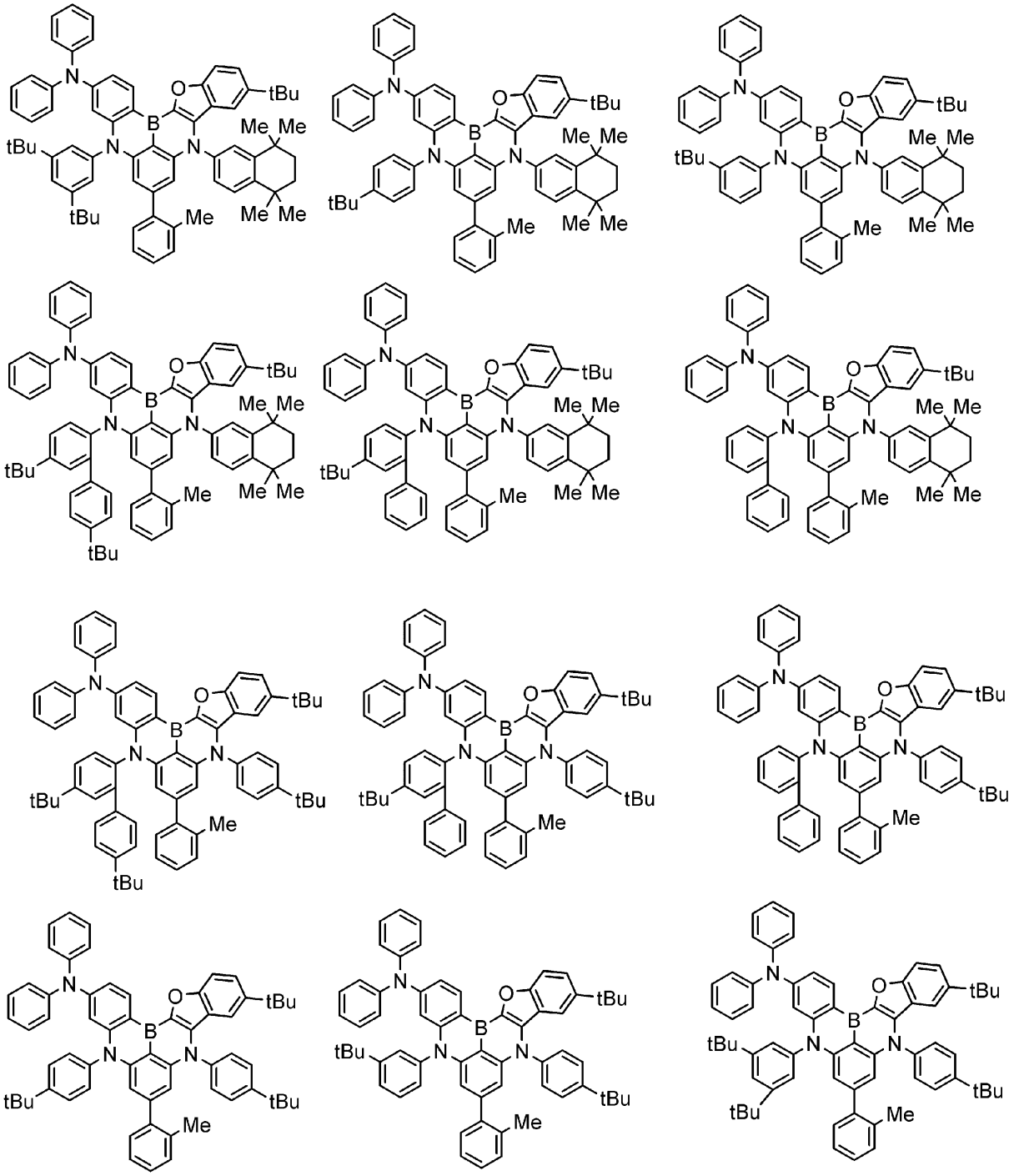
【０６７２】

【化５１５】



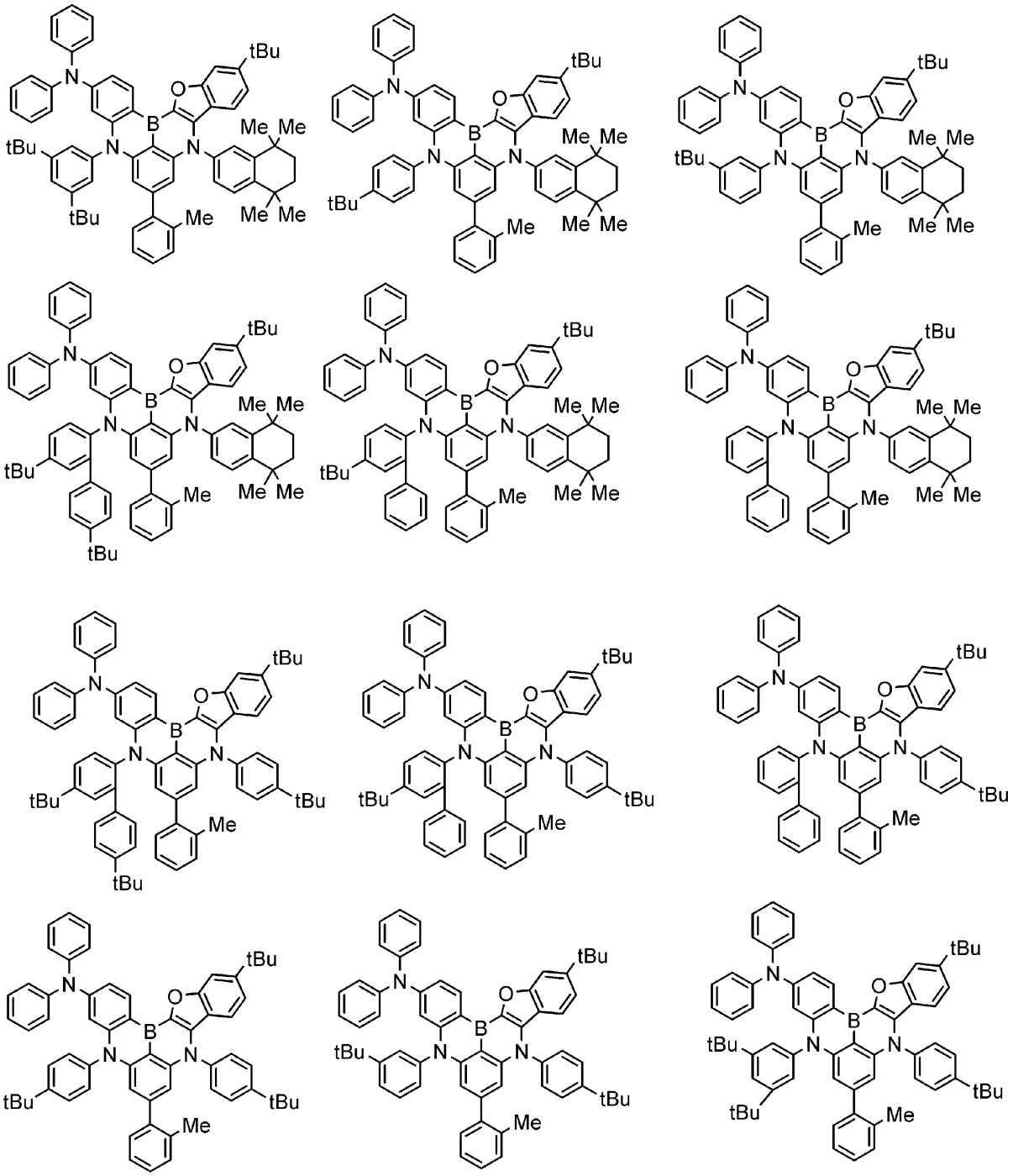
【０６７３】

【化５１６】



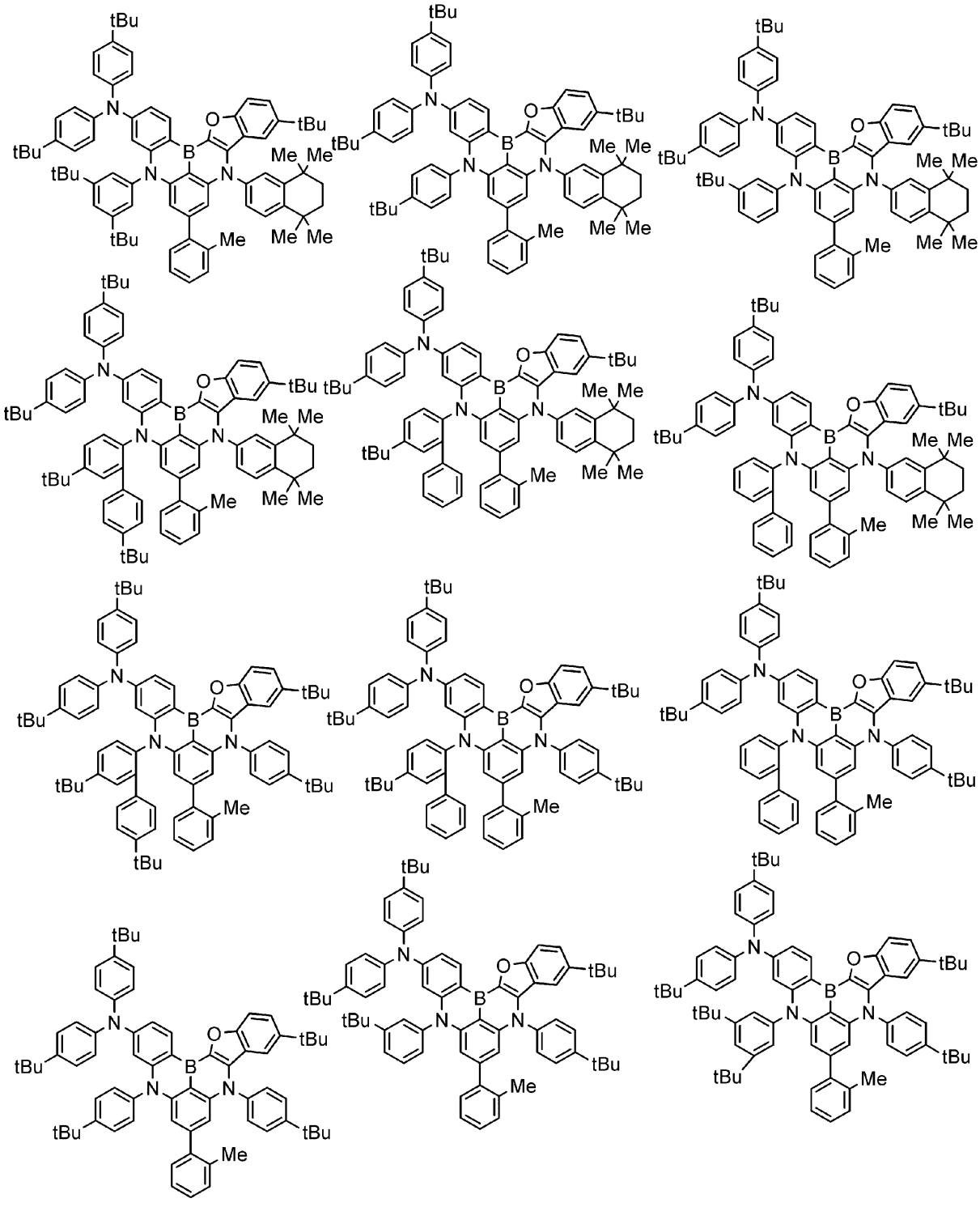
【０６７４】

【化５１７】



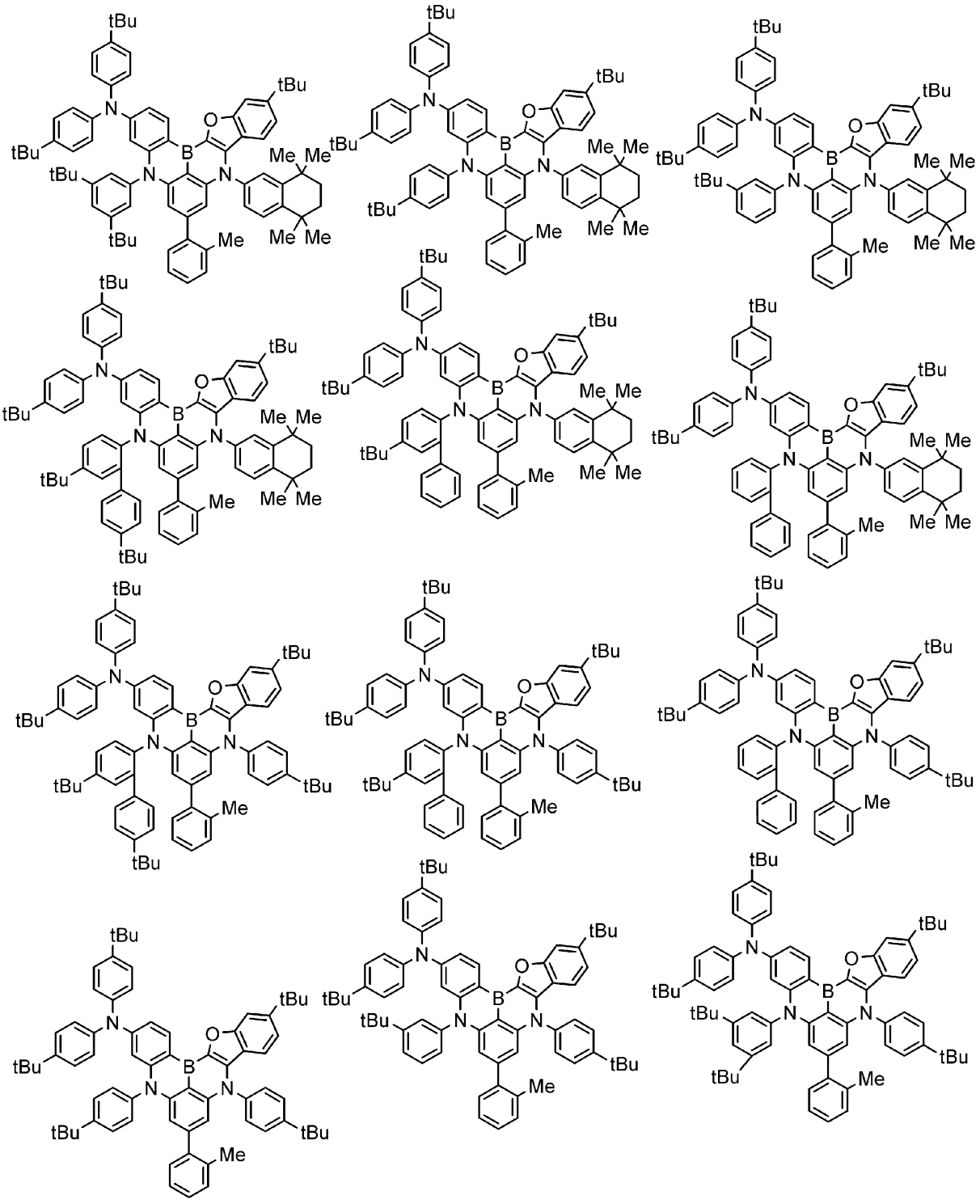
【０６７５】

【化５１８】



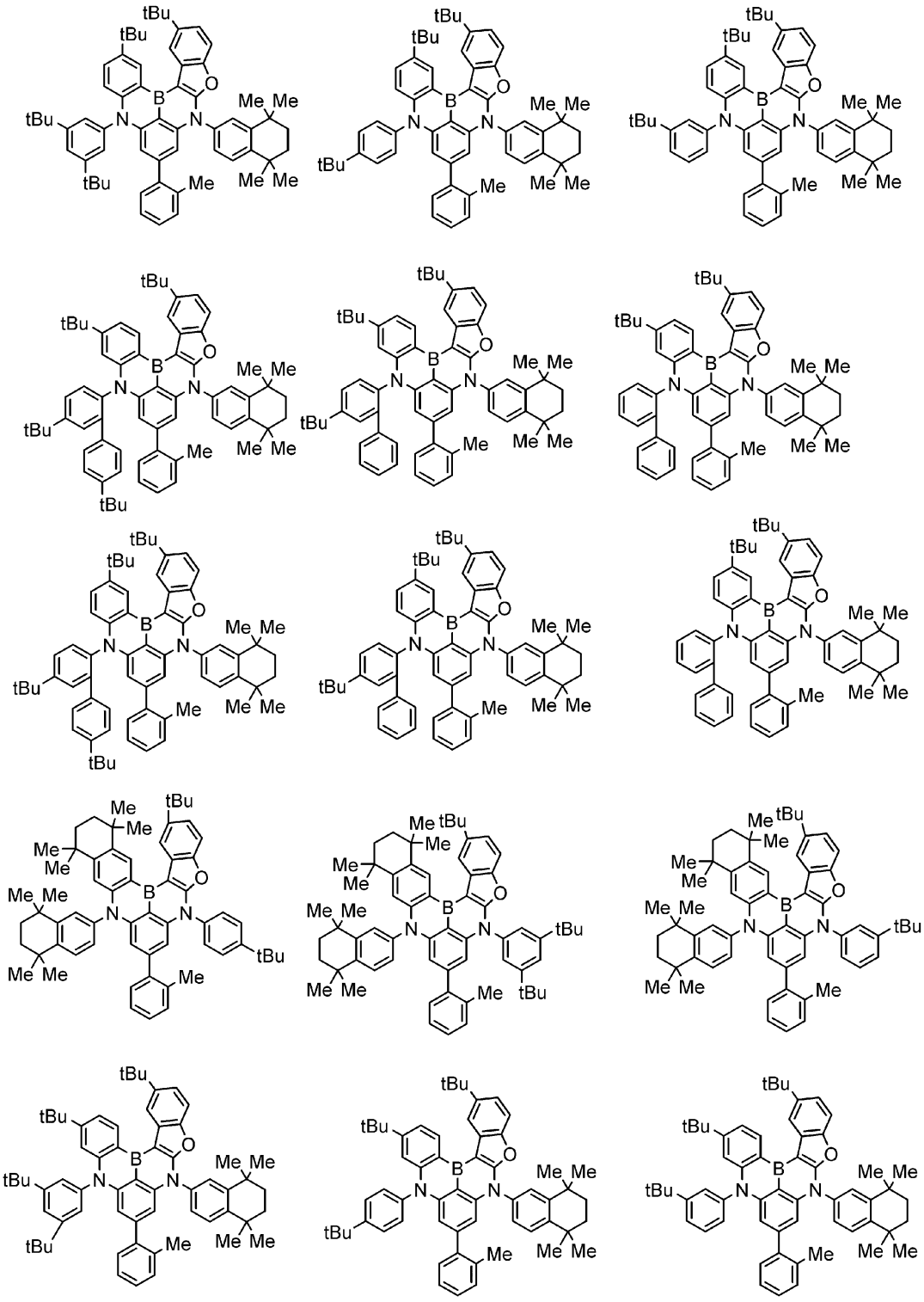
【０６７６】

【化５１９】



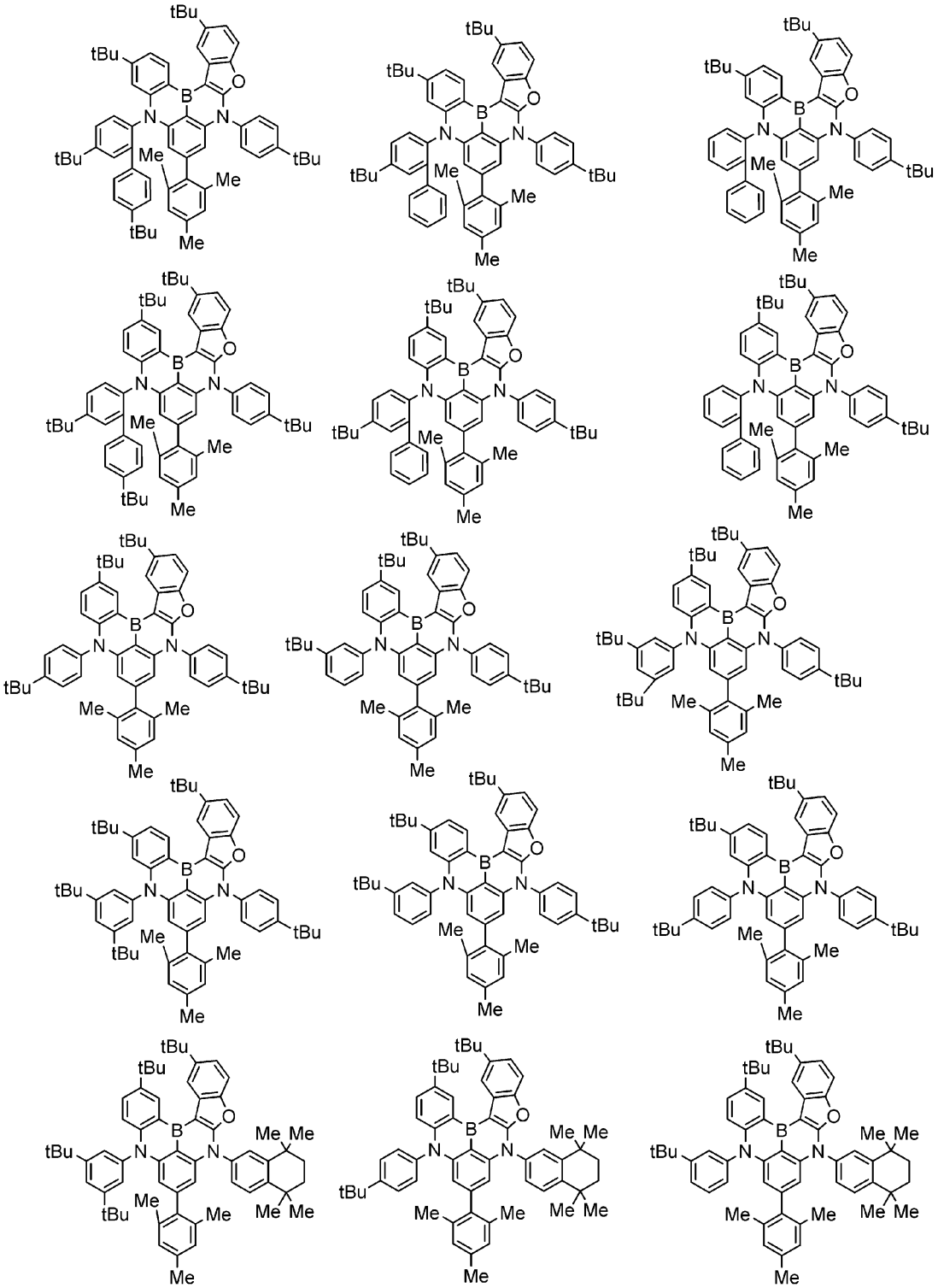
【０６７７】

【化５２０】



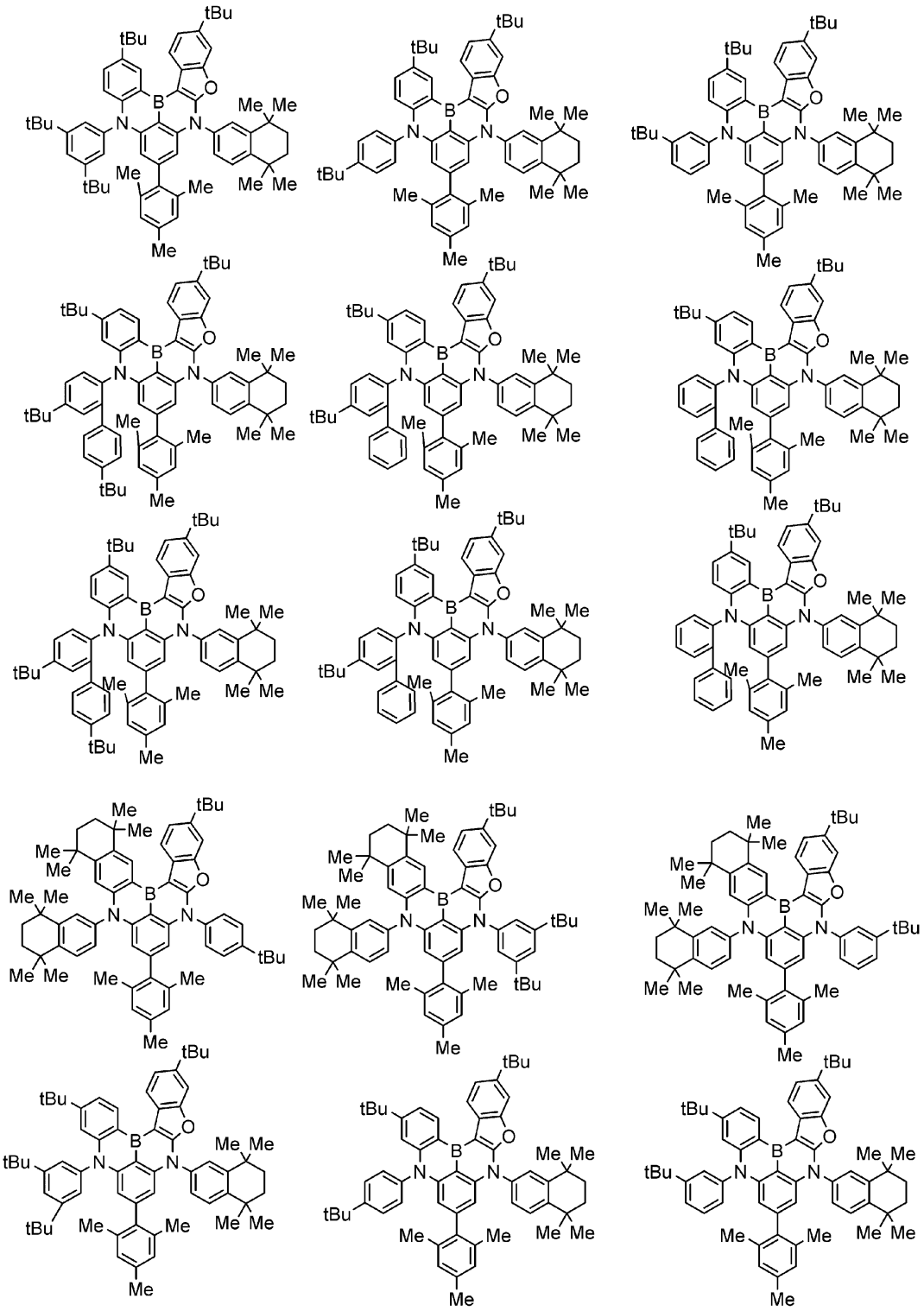
【０６７８】

【化５２１】



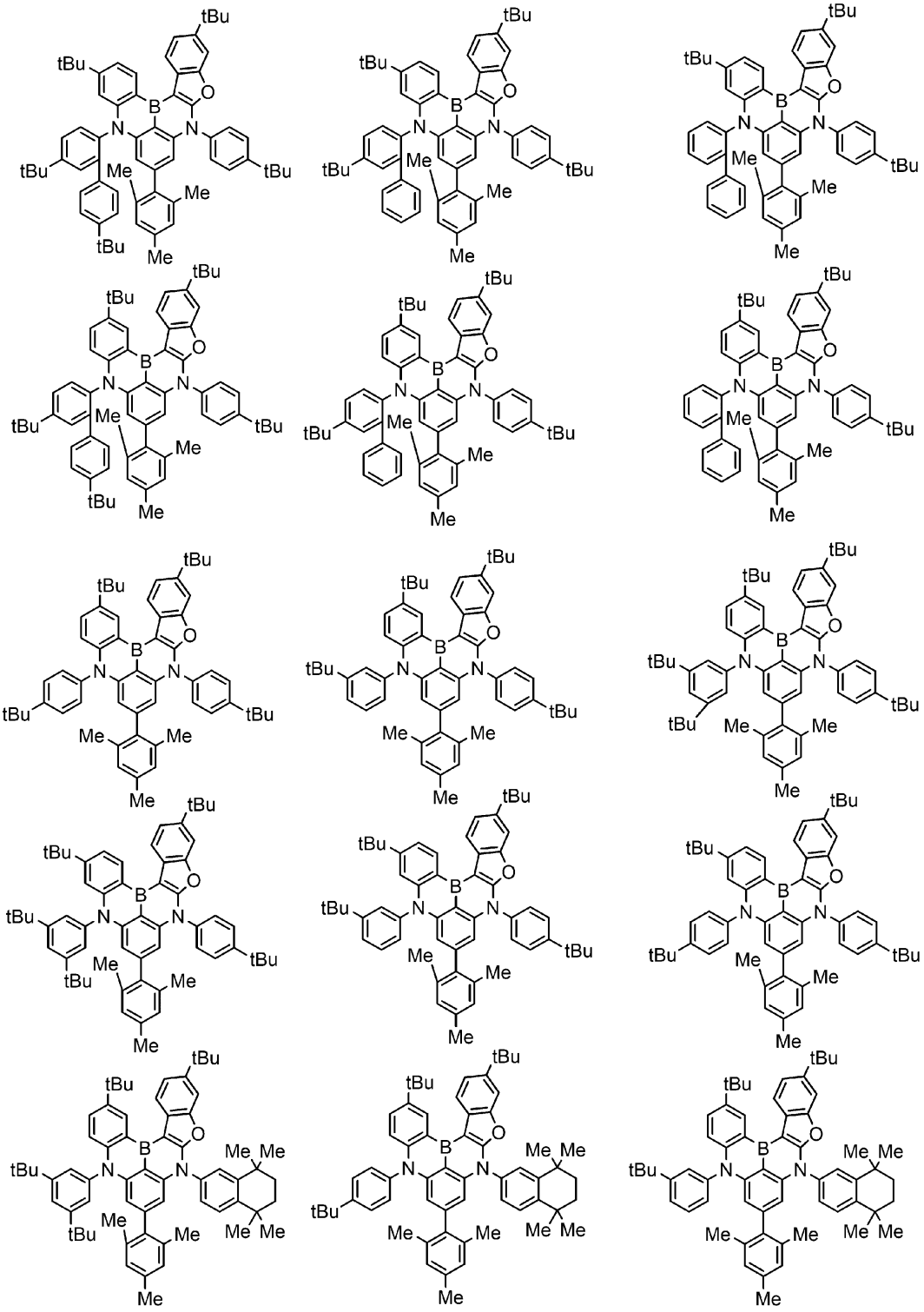
【０６７９】

【化５２２】



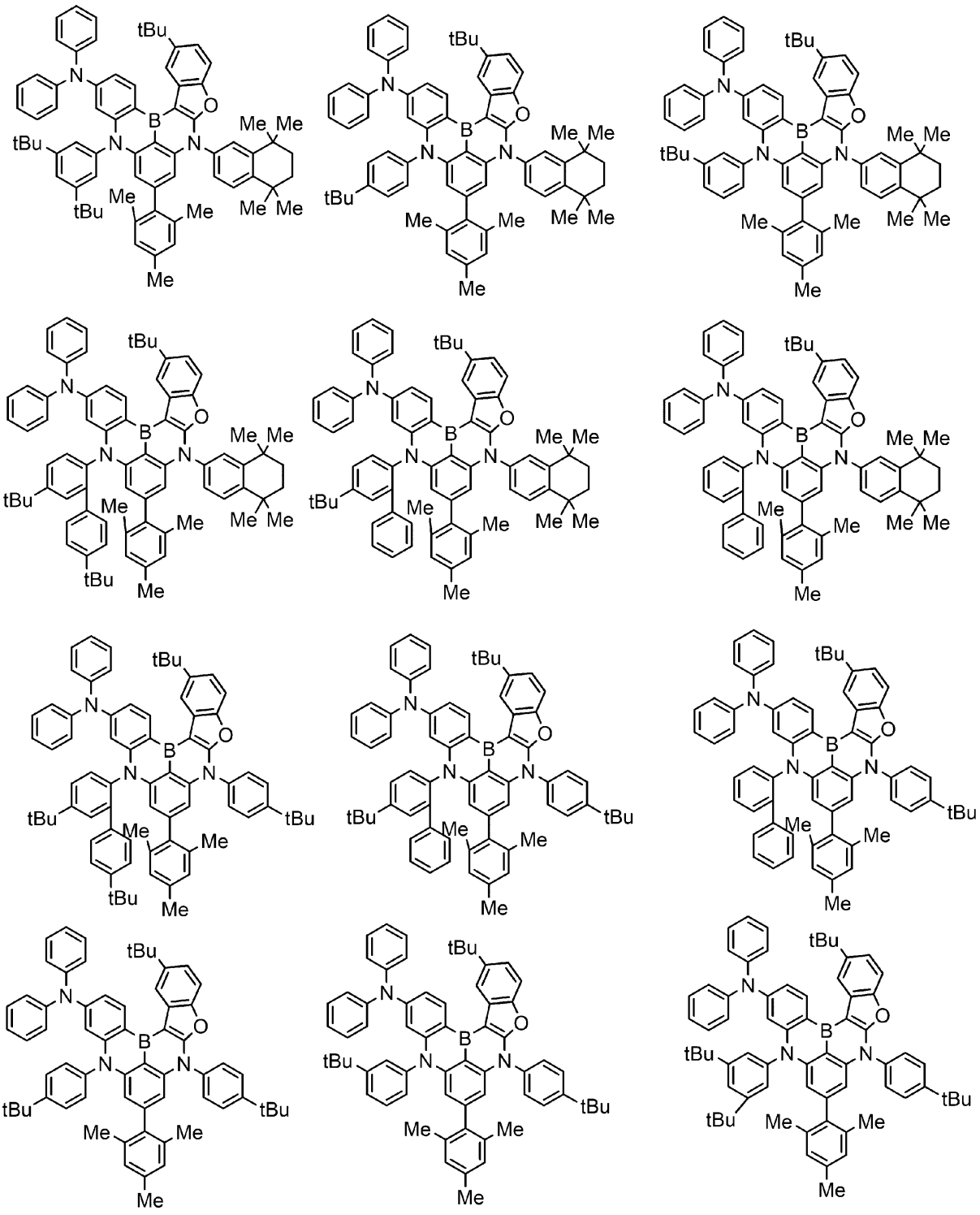
【０６８０】

【化５２３】



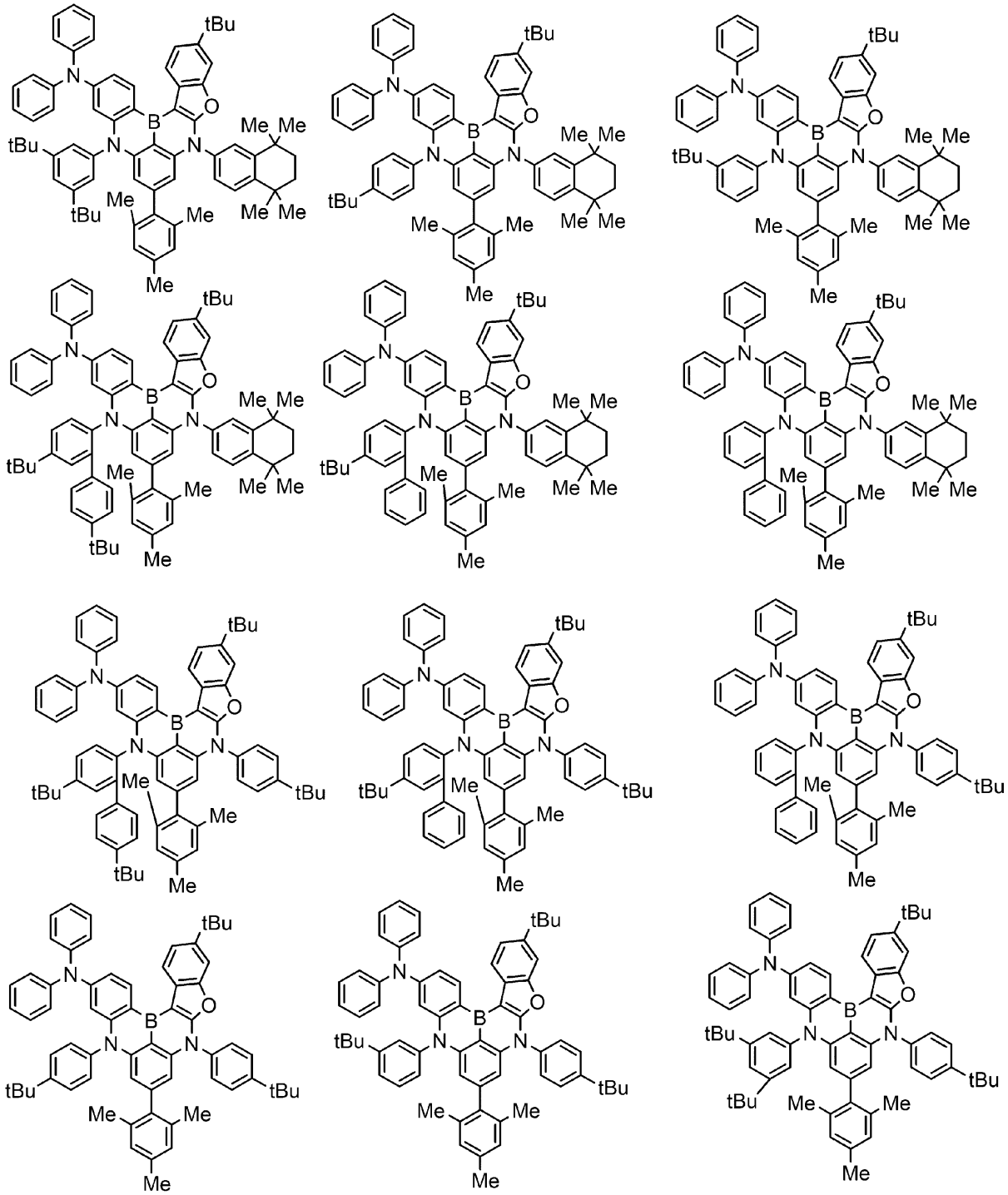
【０６８１】

【化５２４】



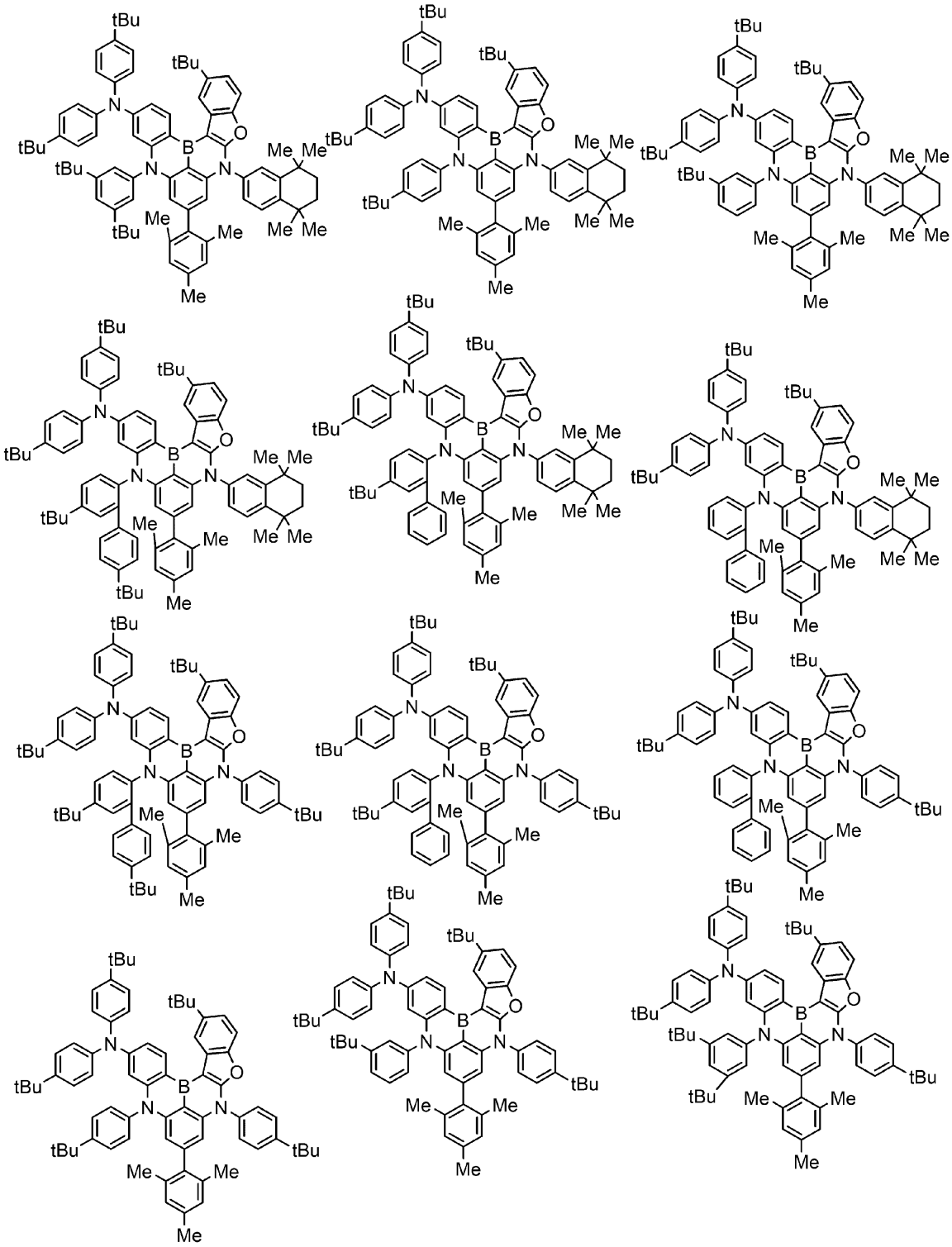
【０６８２】

【化５２５】



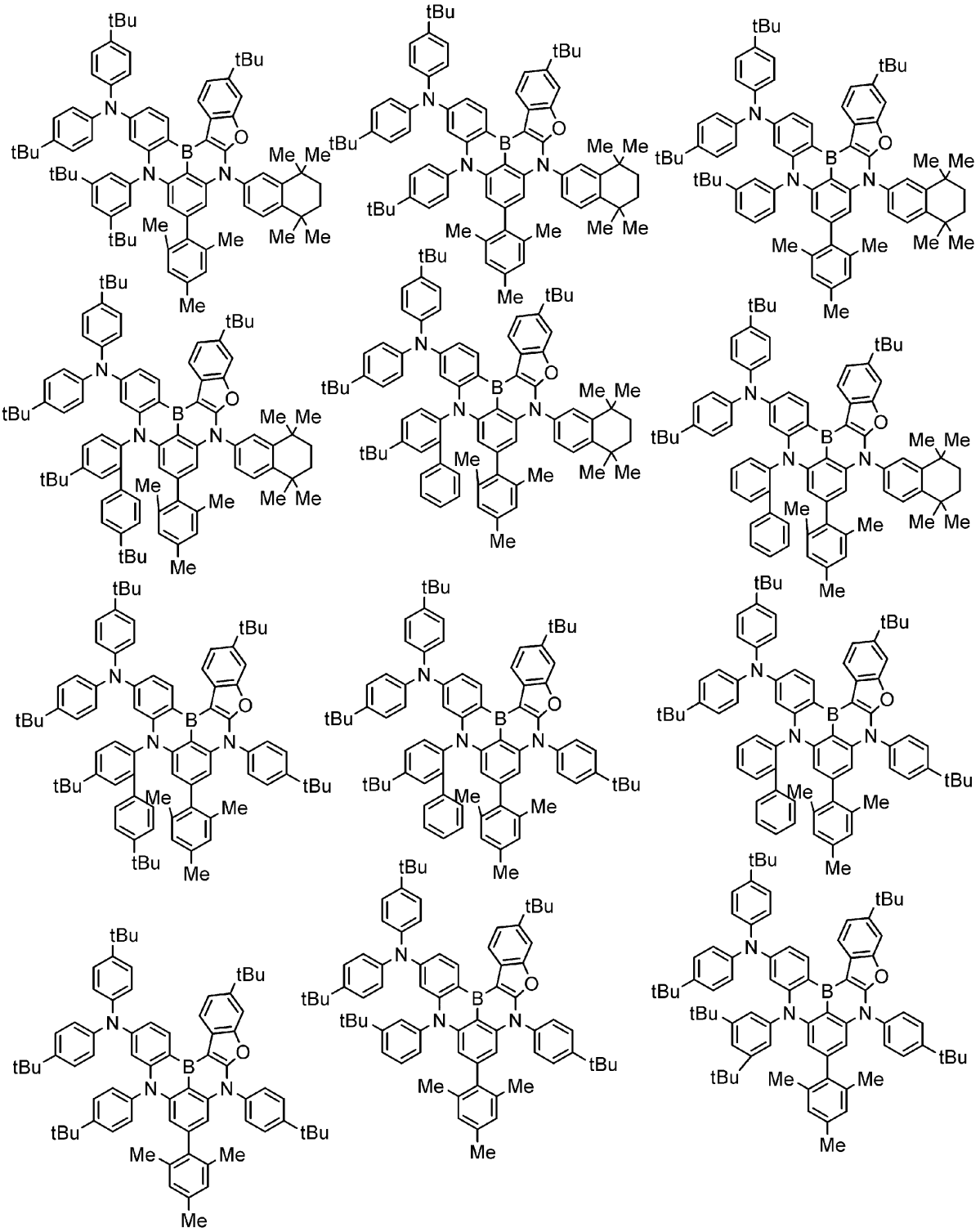
【０６８３】

【化５２６】



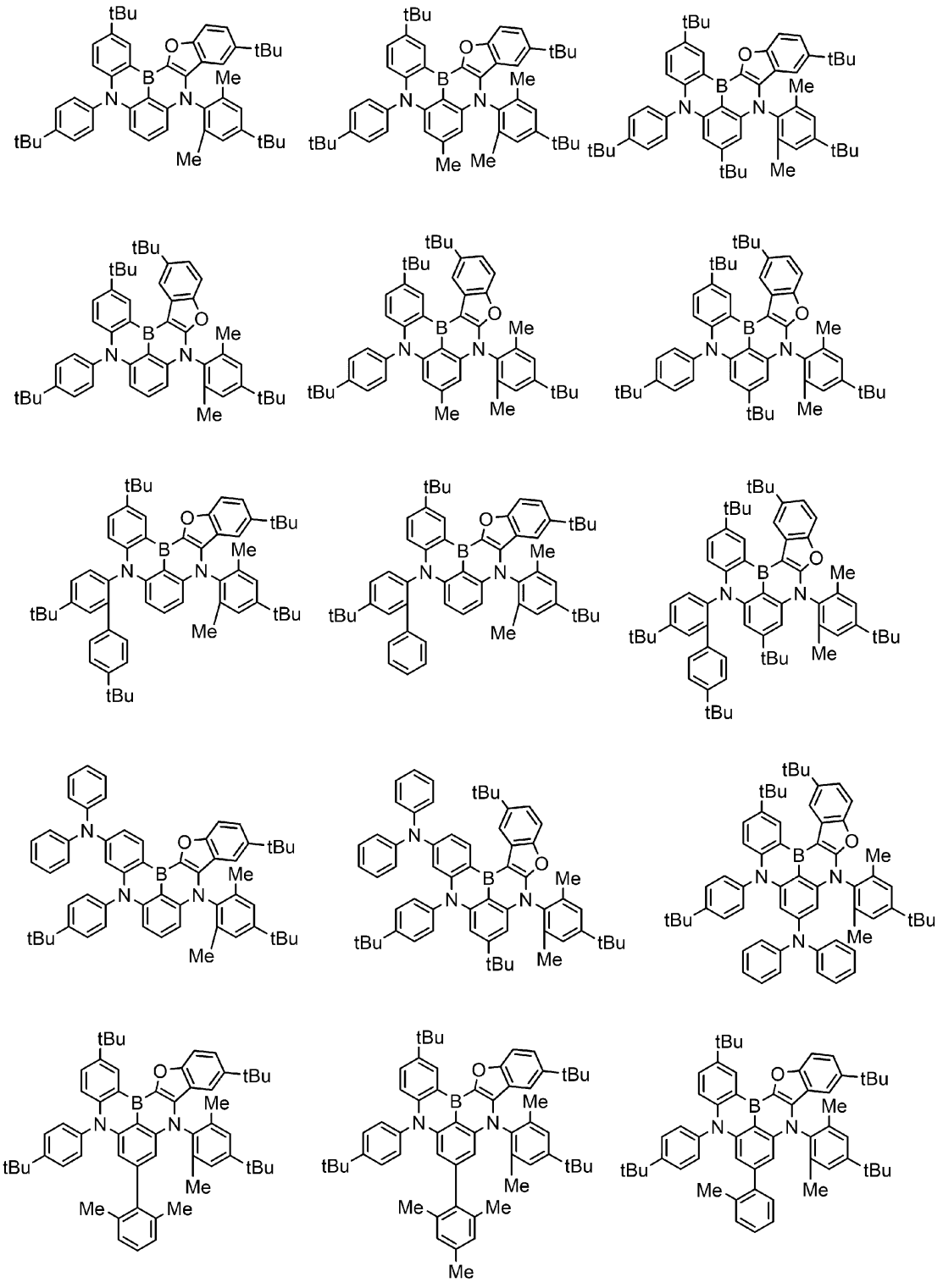
【０６８４】

【化５２７】



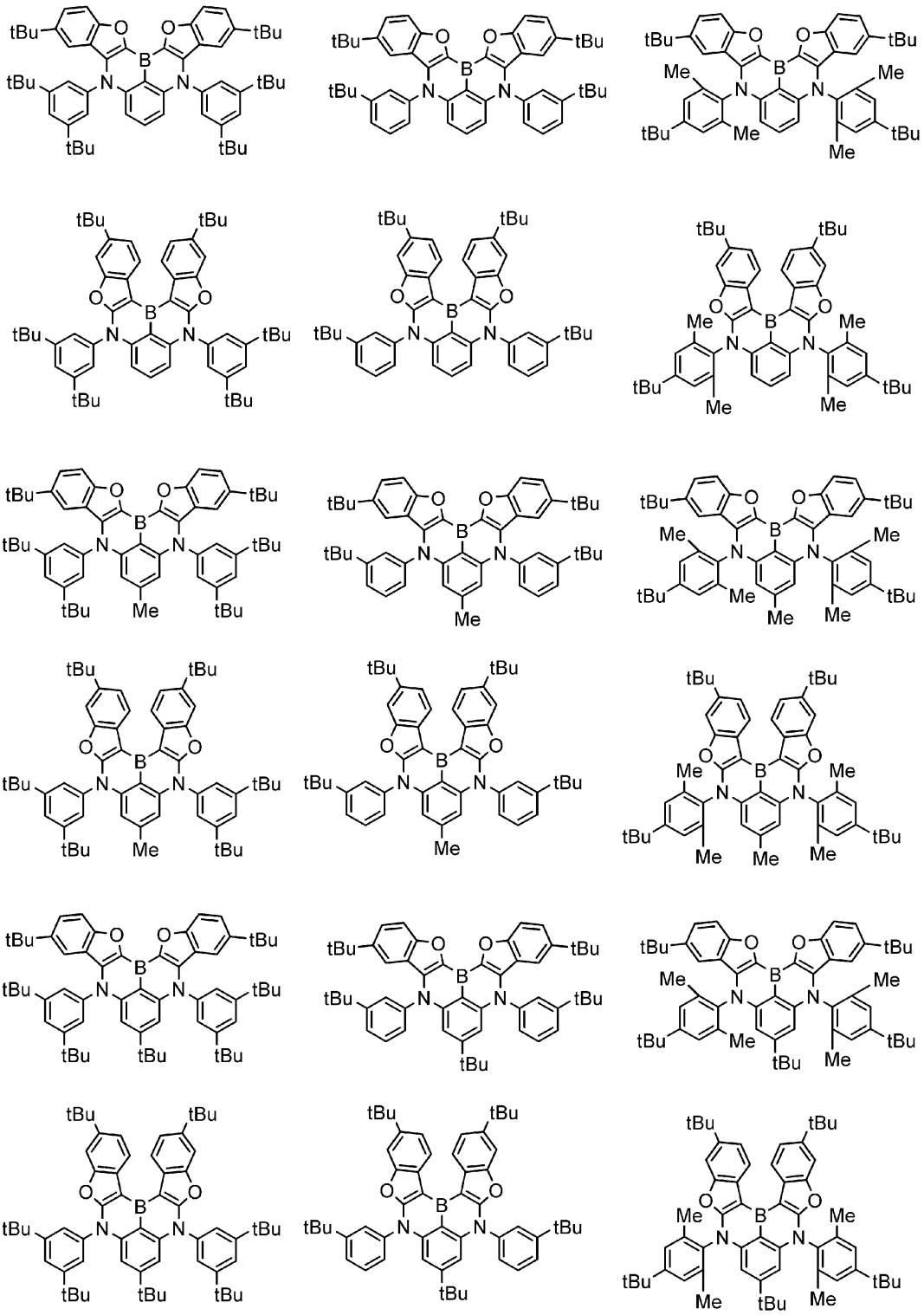
【０６８５】

【化５２８】



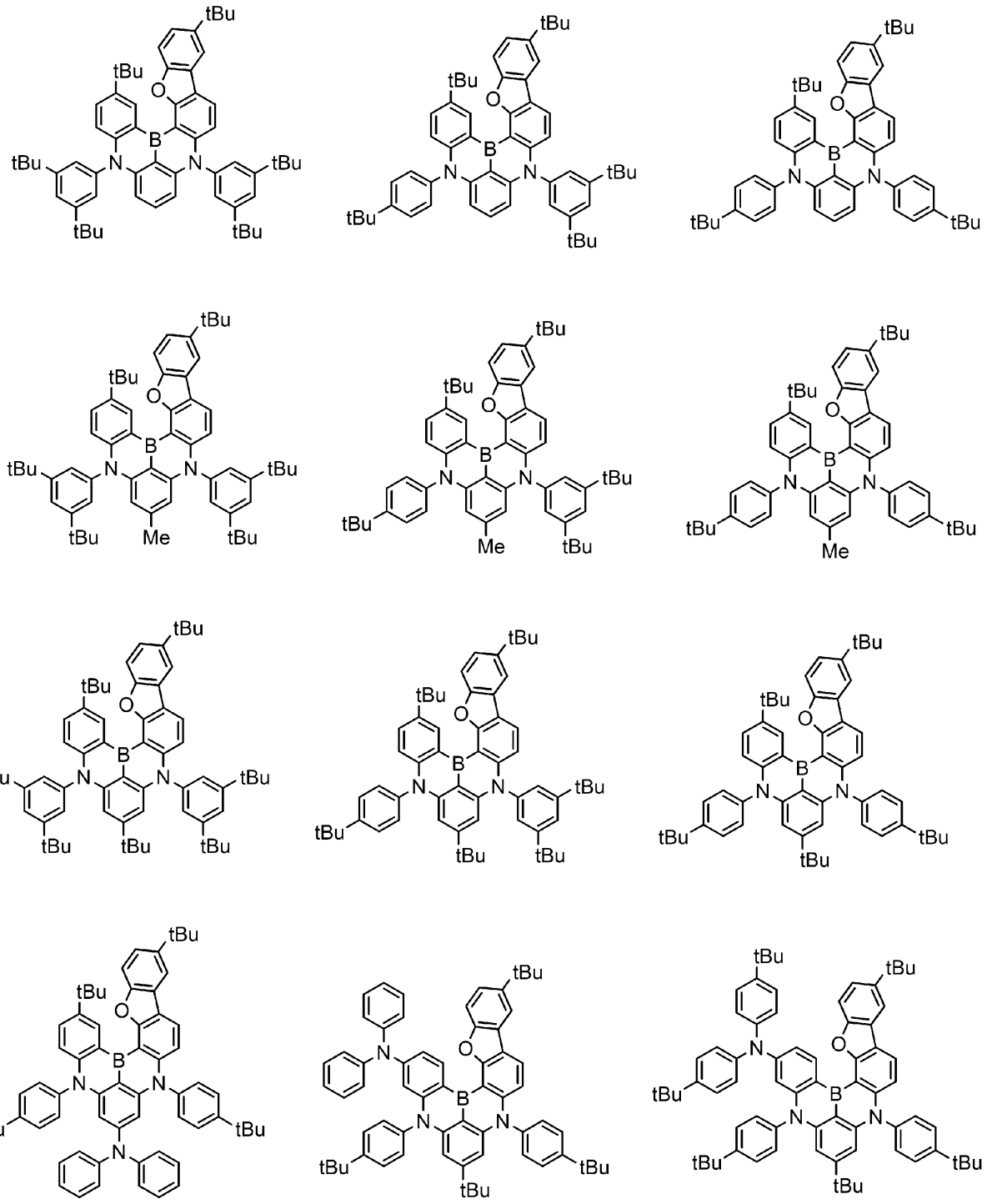
【０６８６】

【化５２９】



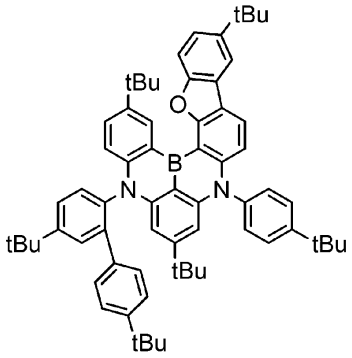
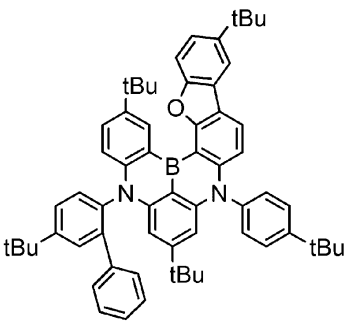
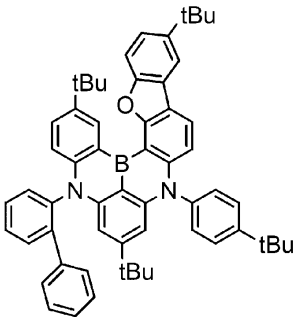
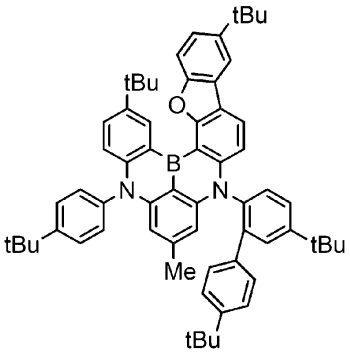
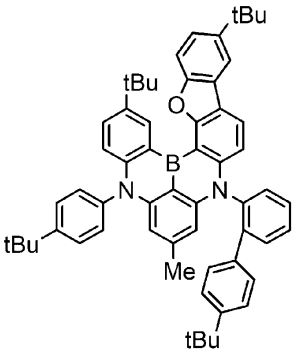
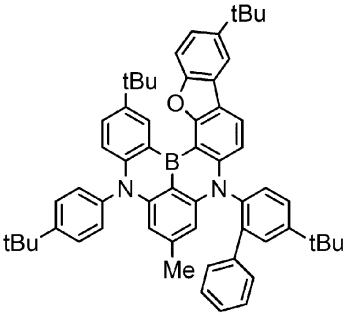
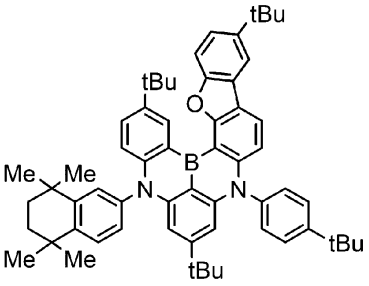
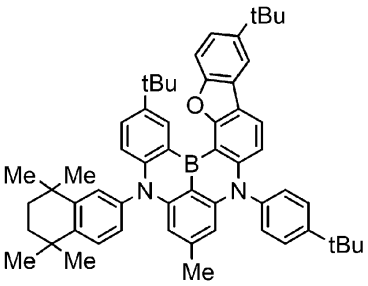
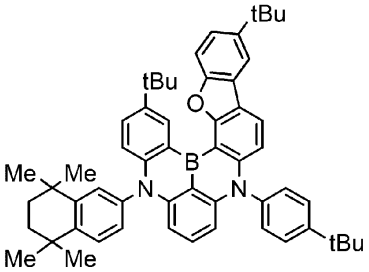
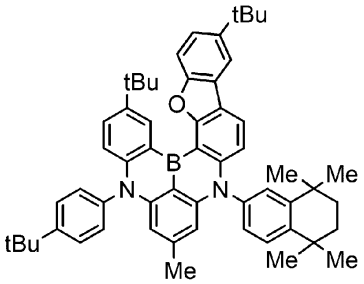
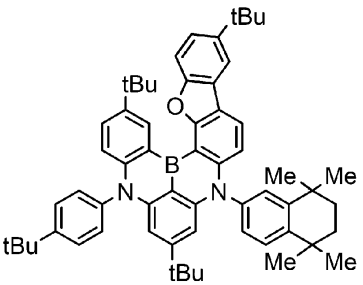
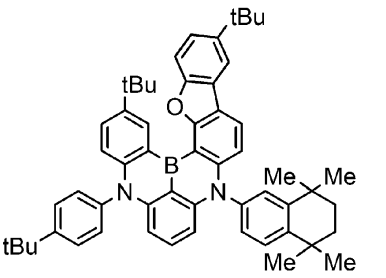
【０６８７】

【化５３０】



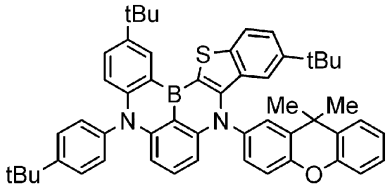
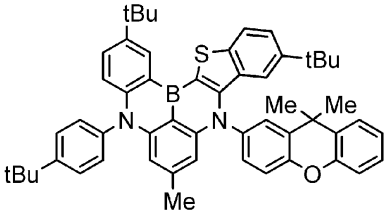
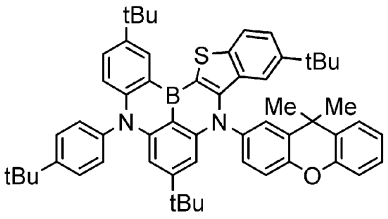
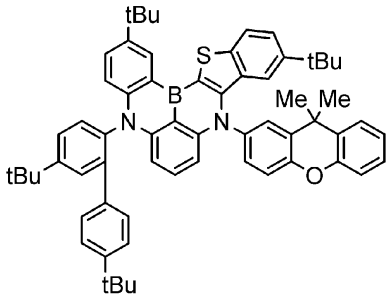
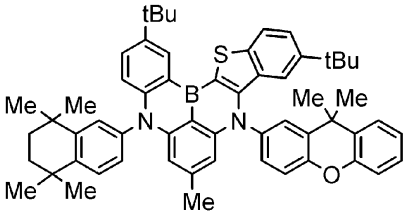
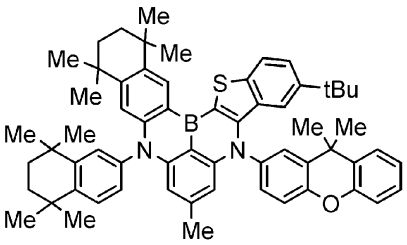
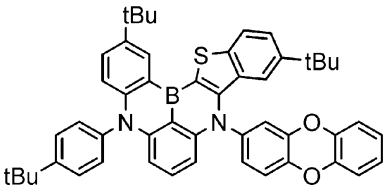
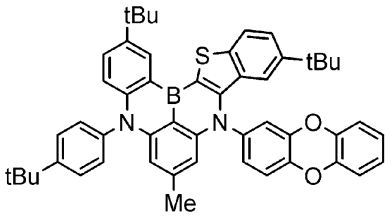
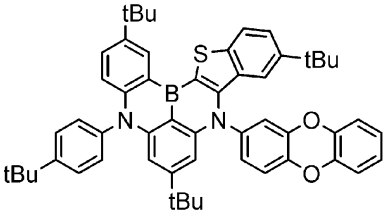
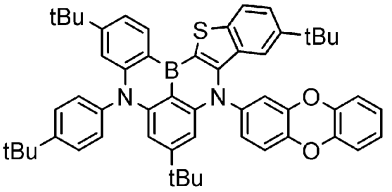
【０６８８】

【化５３１】

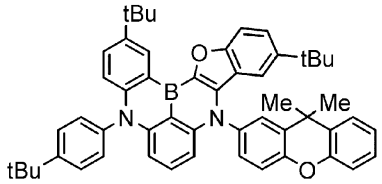
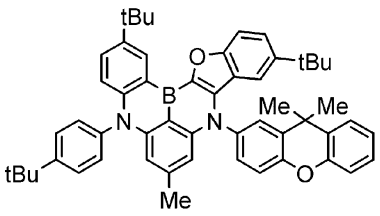
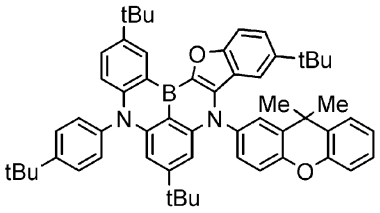
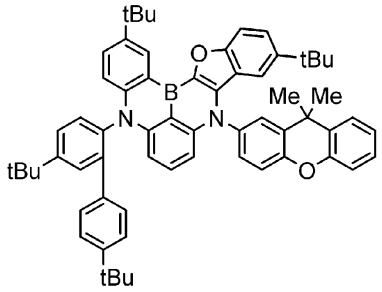
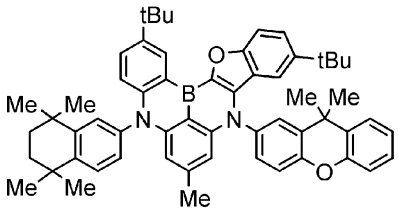
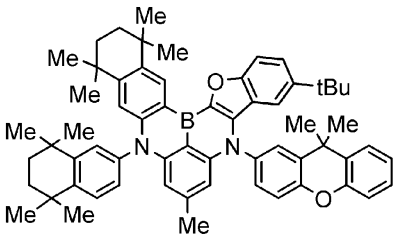
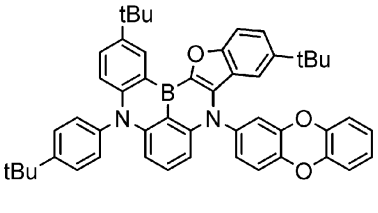
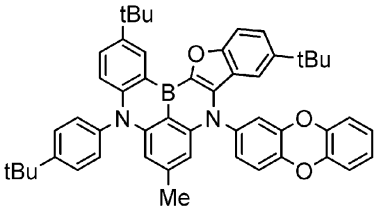
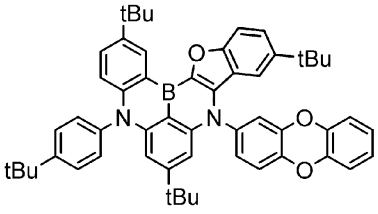
【０６８９】

【化５３２】

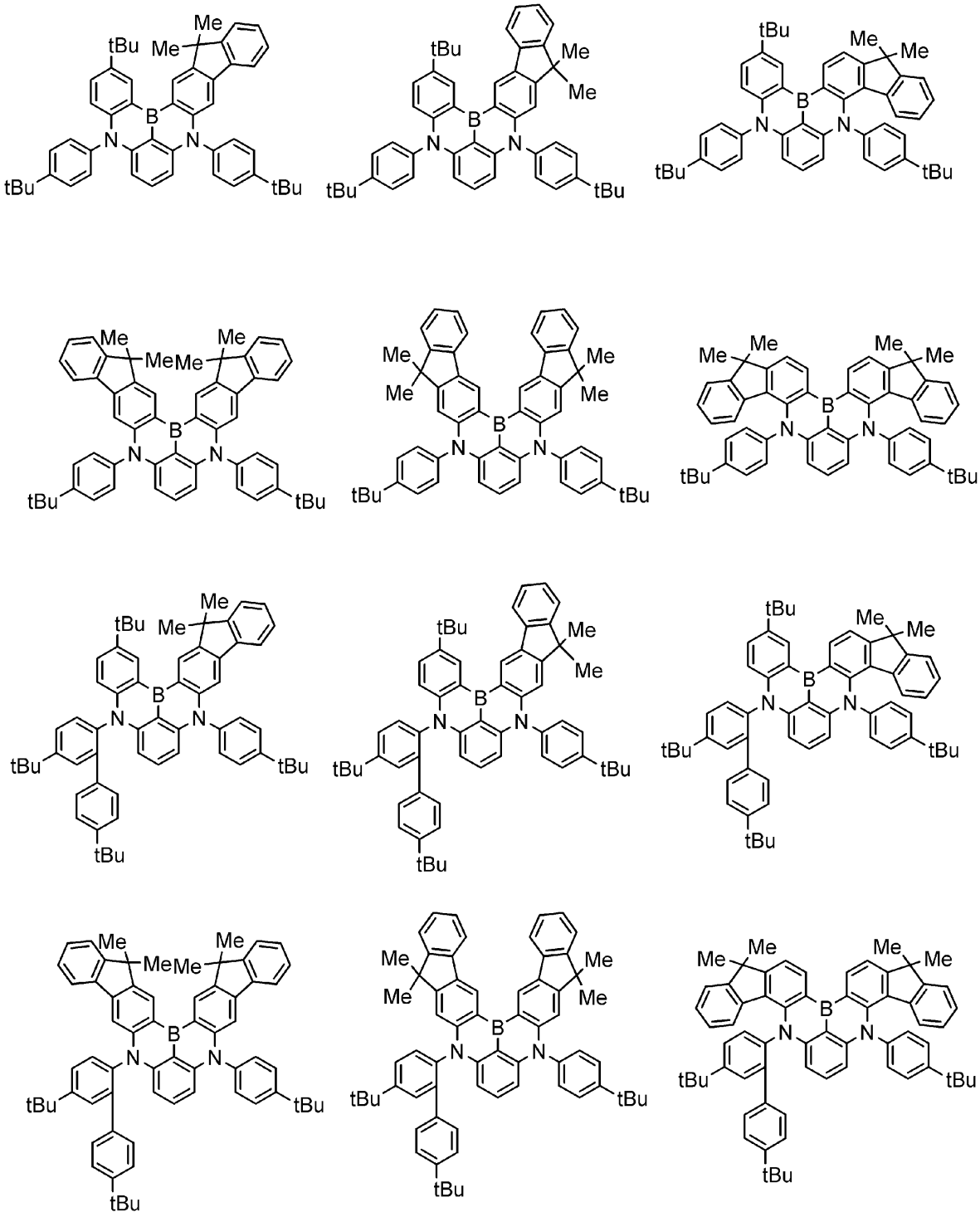
【０６９０】

【化５３３】

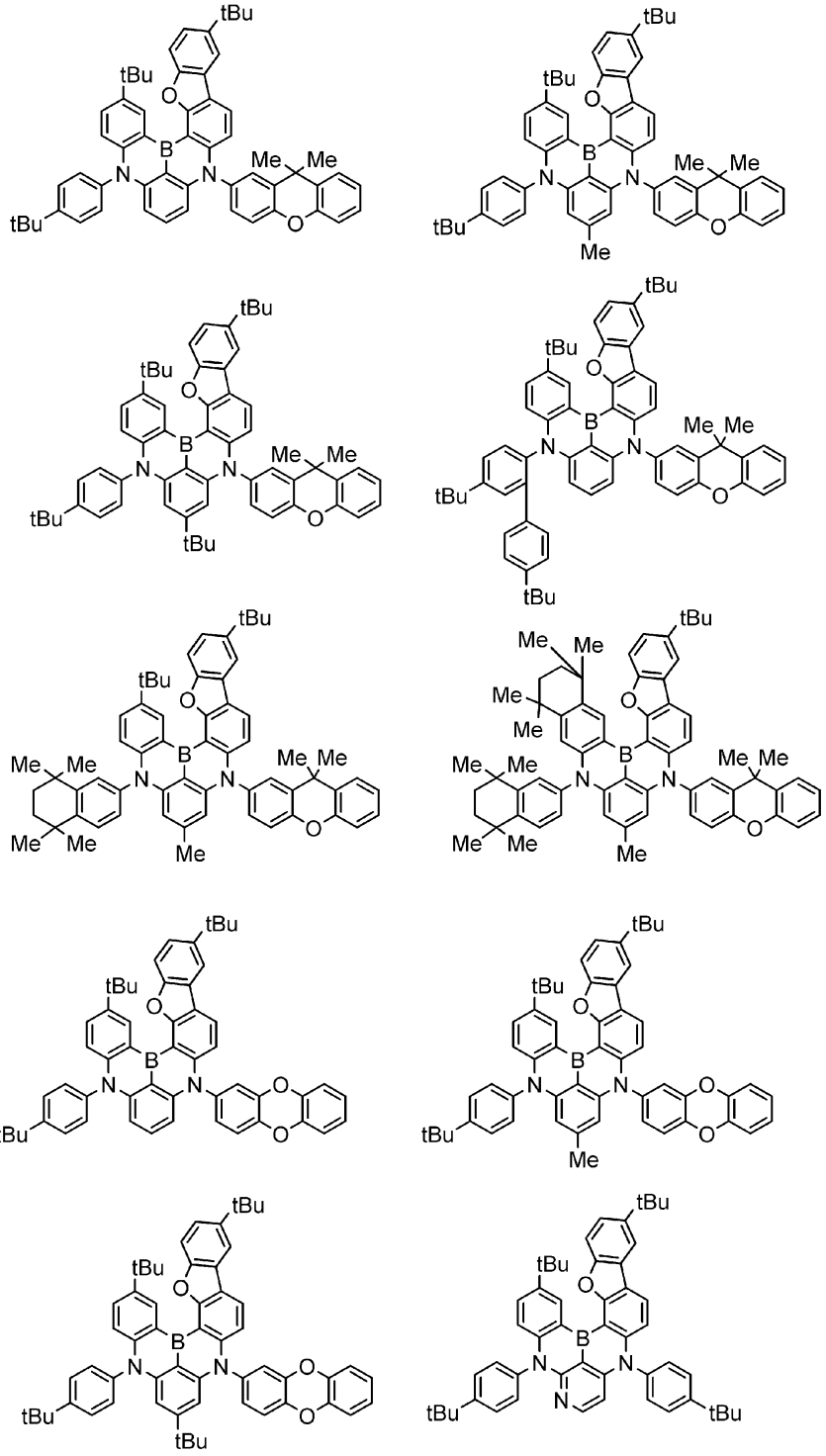
【０６９１】

【化５３４】



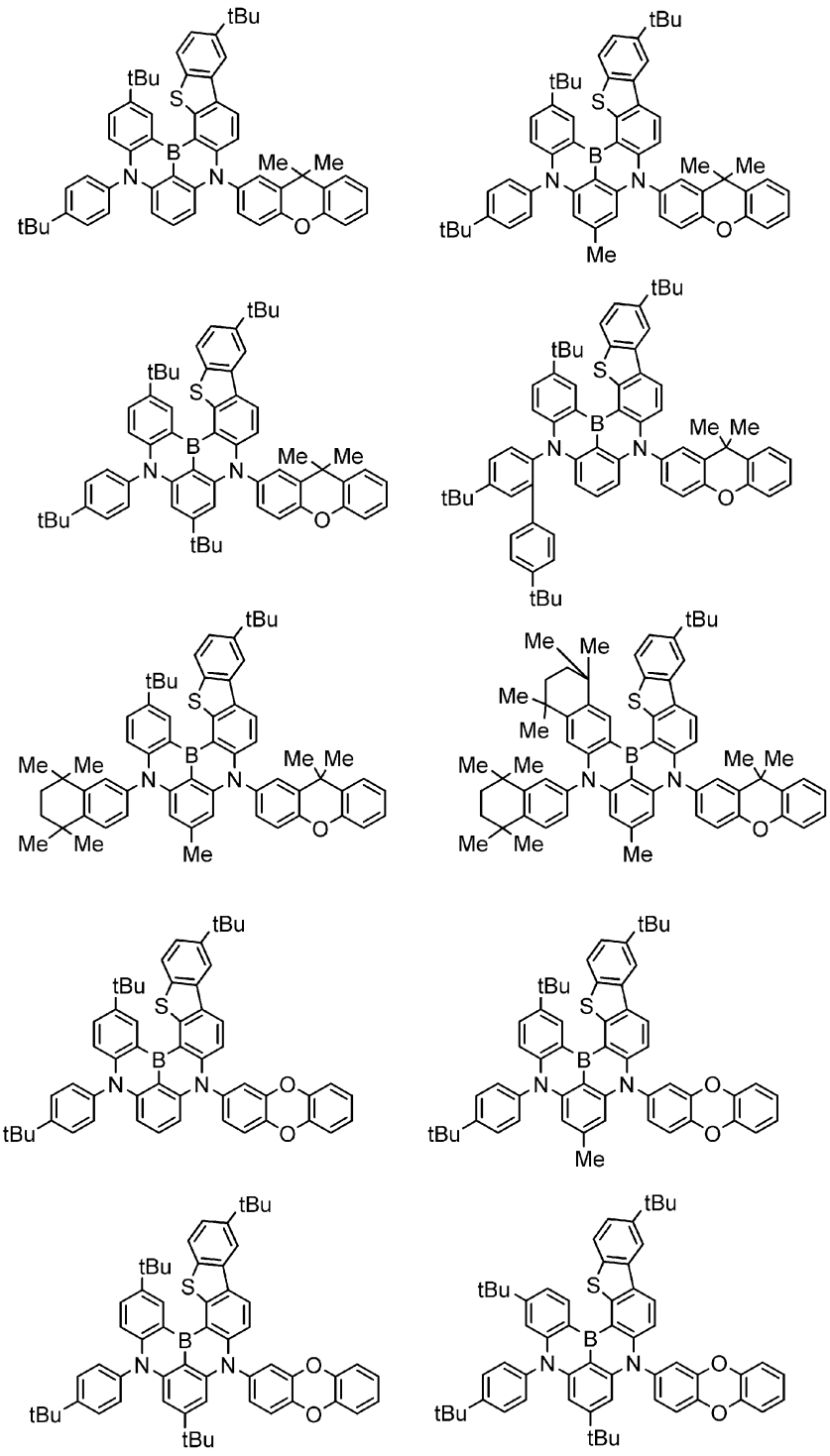
【０６９２】

【化５３５】



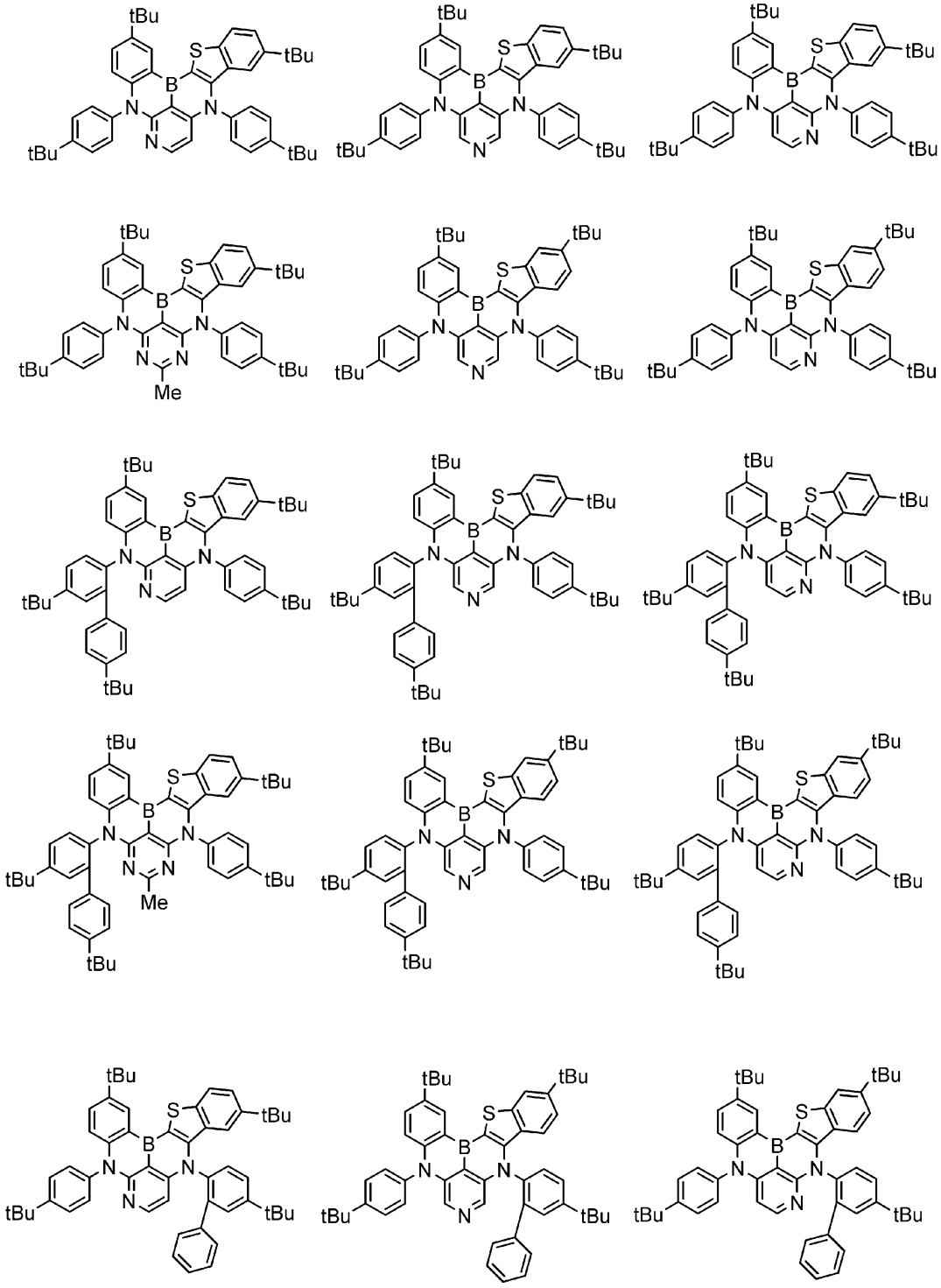
【０６９３】

【化５３６】



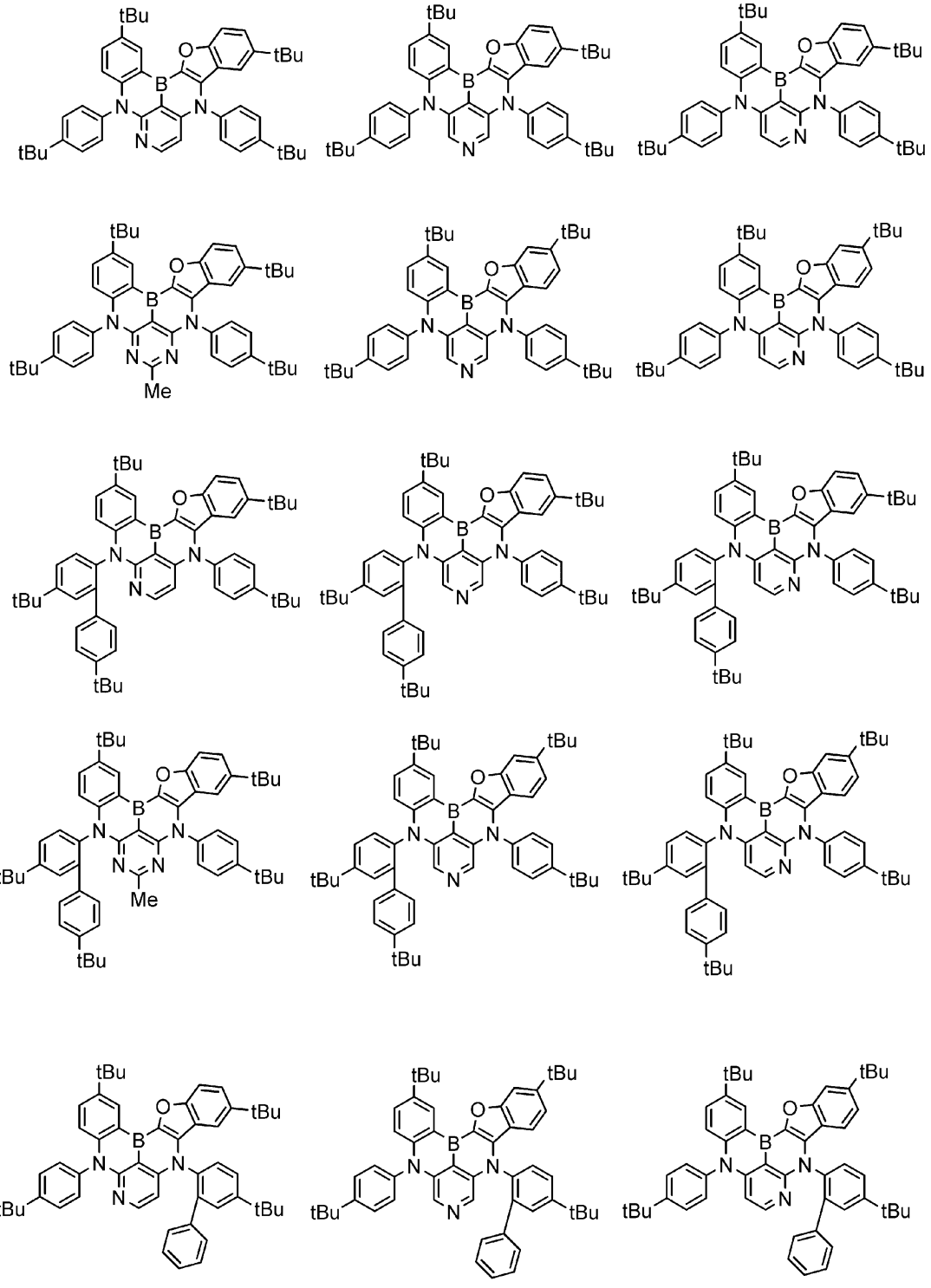
【０６９４】

【化５３７】



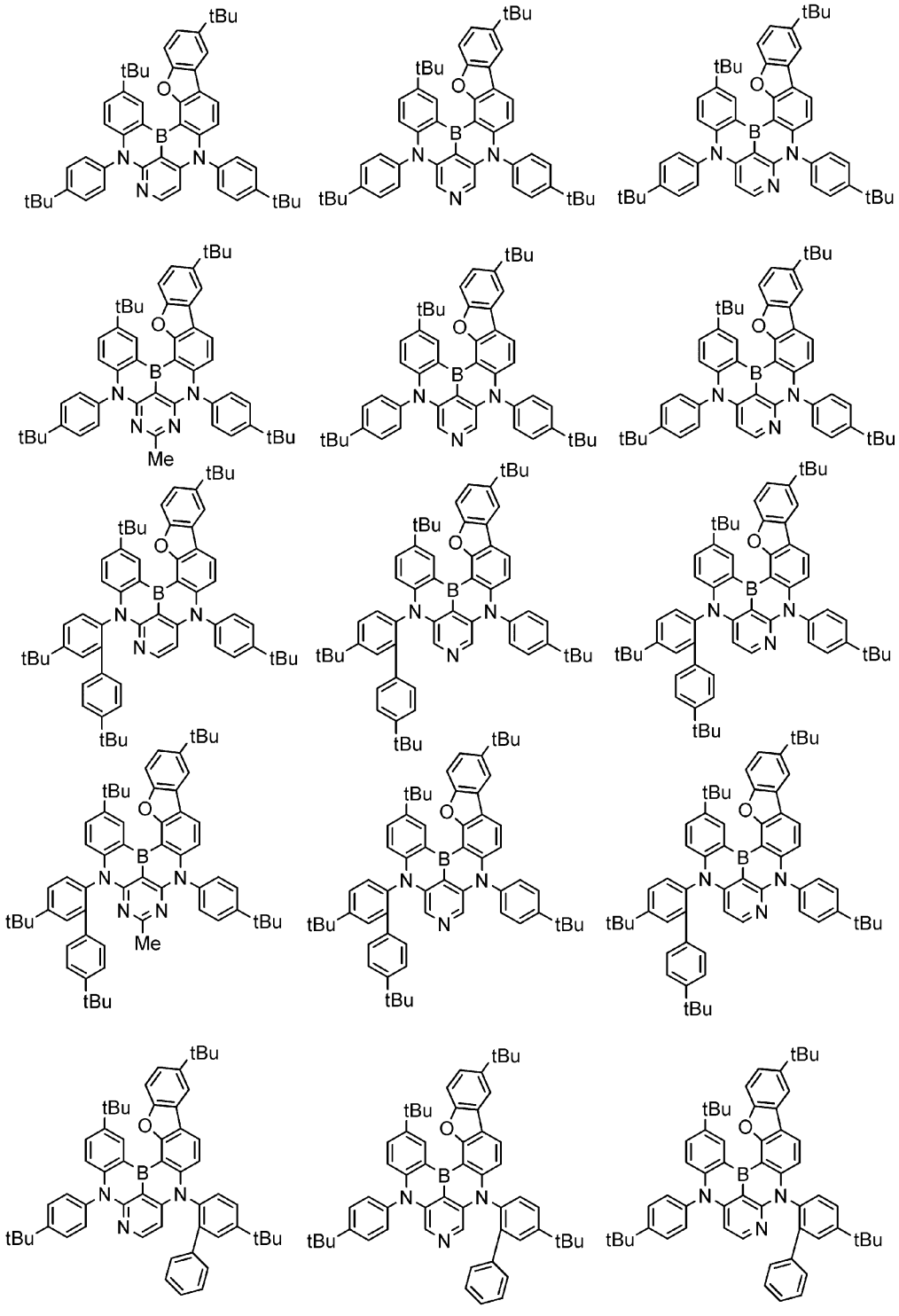
【０６９５】

【化５３８】



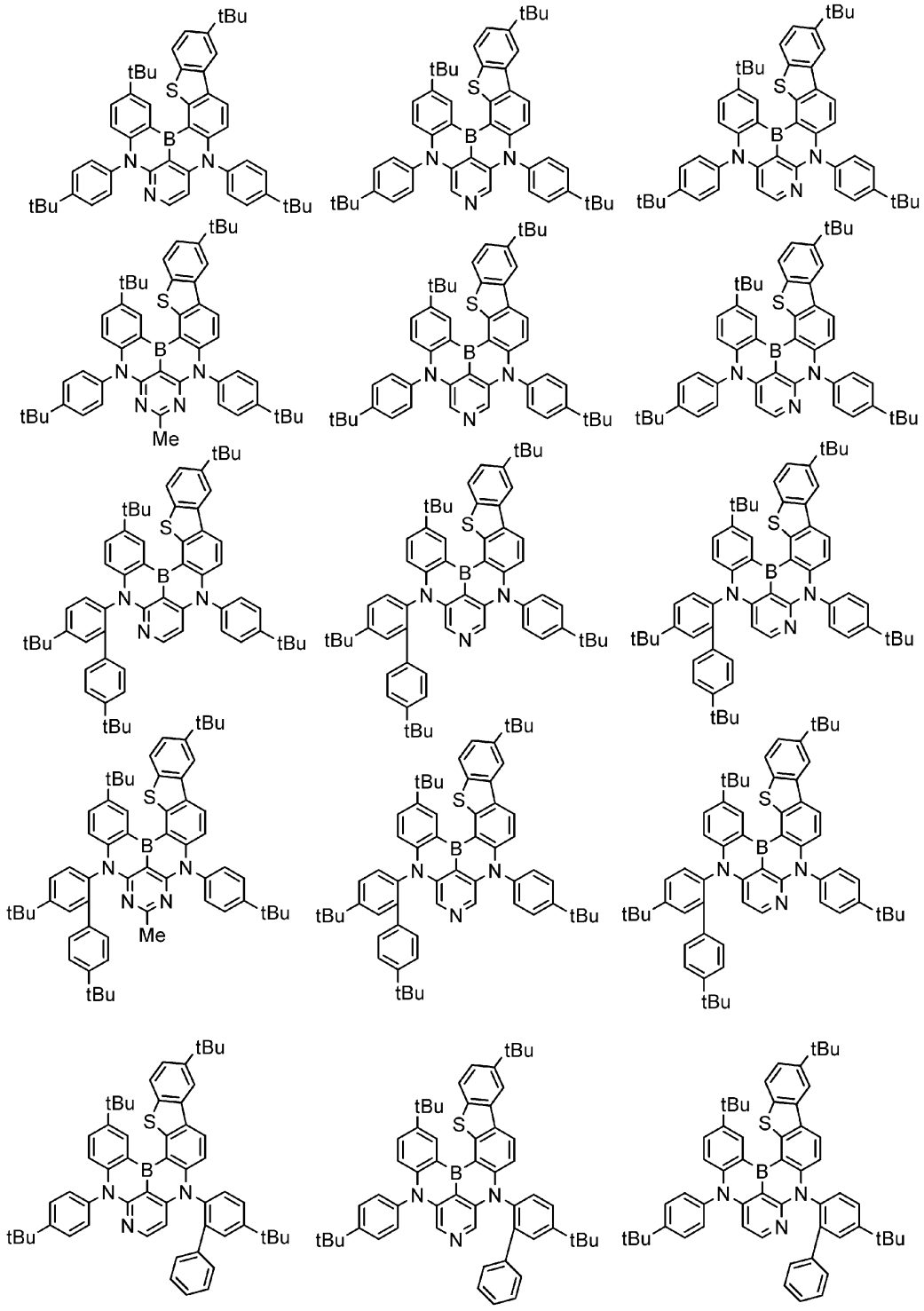
【０６９６】

【化５３９】



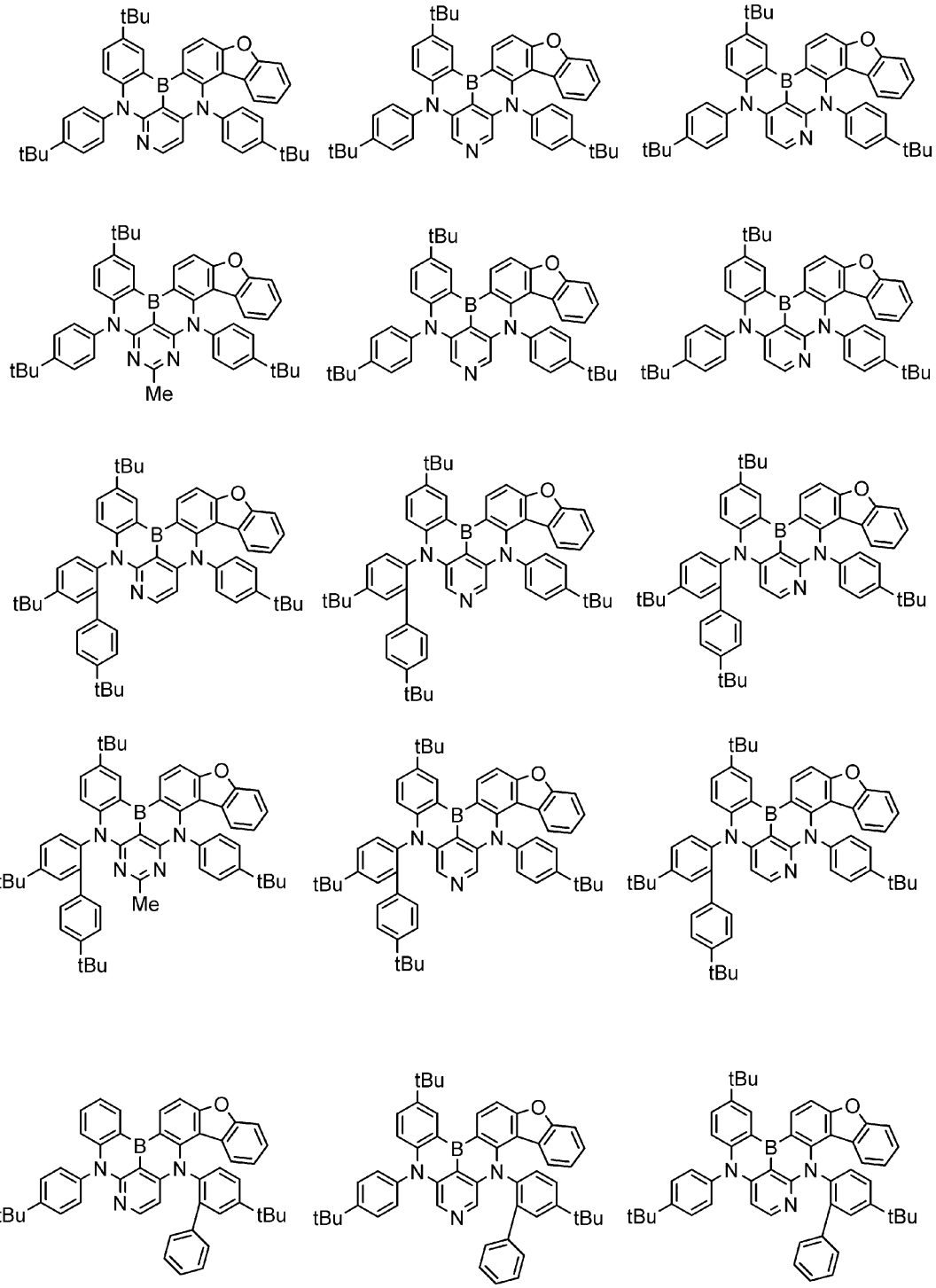
【０６９７】

【化５４０】



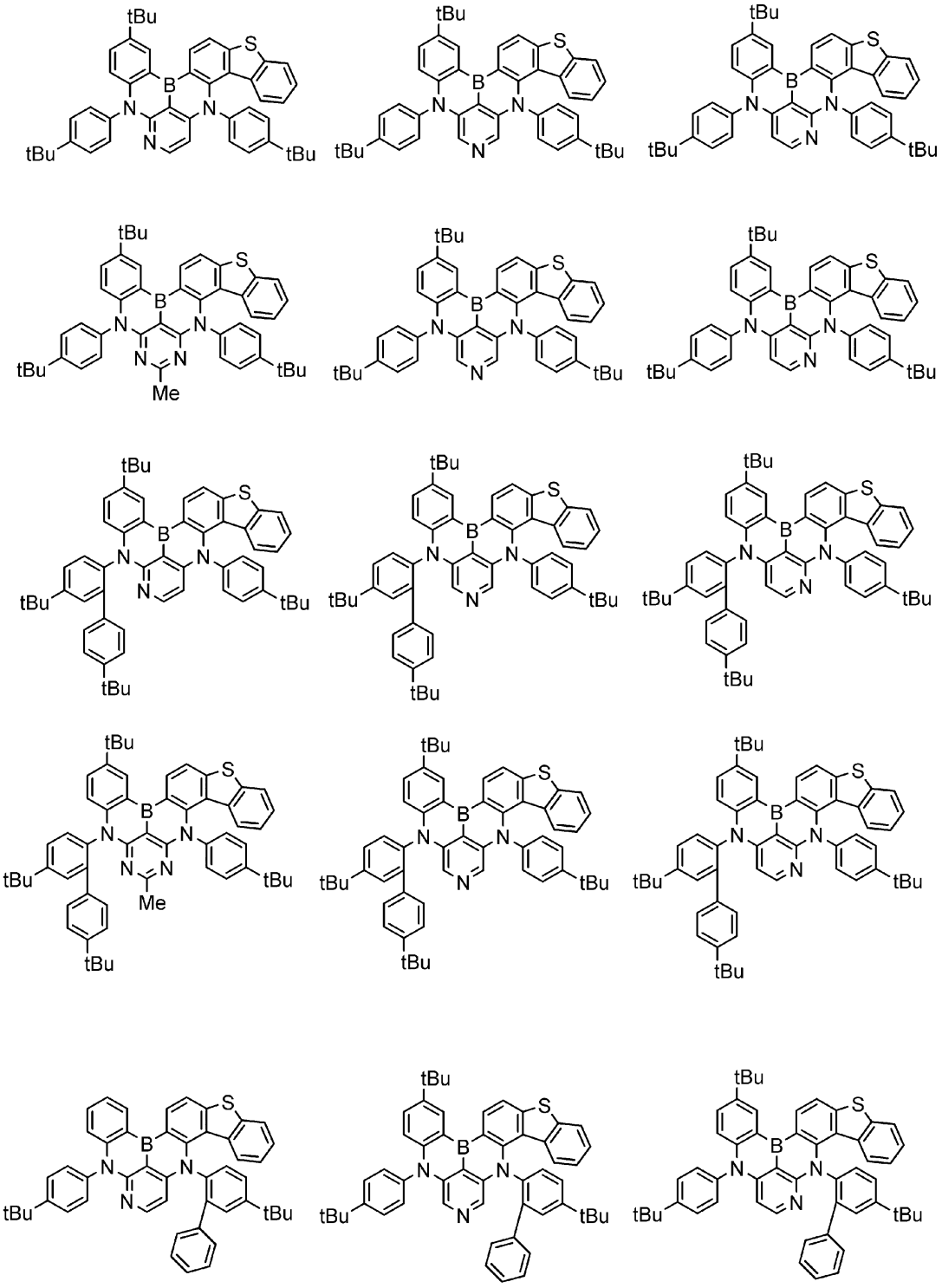
【０６９８】

【化５４１】



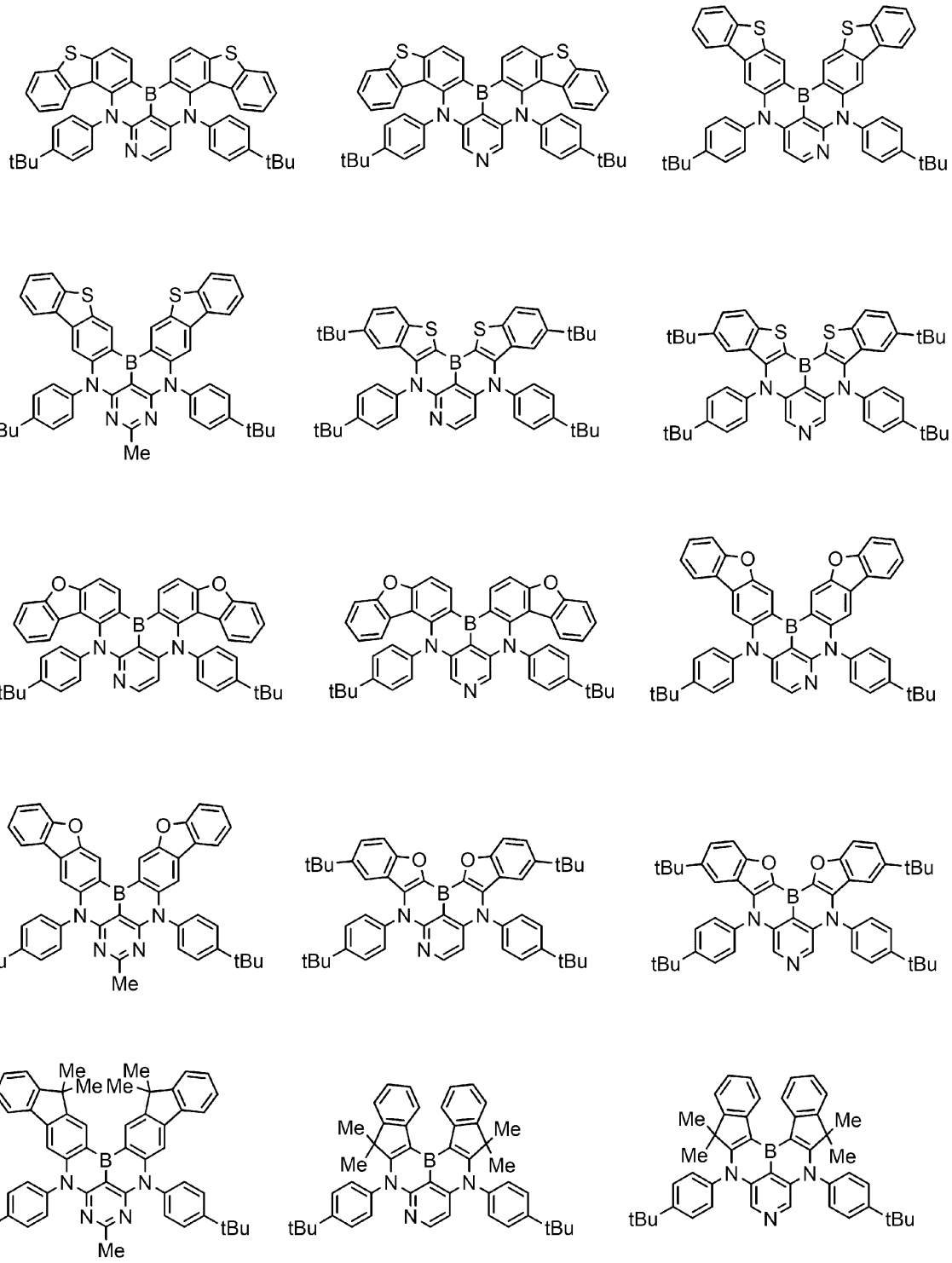
【０６９９】

【化５４２】



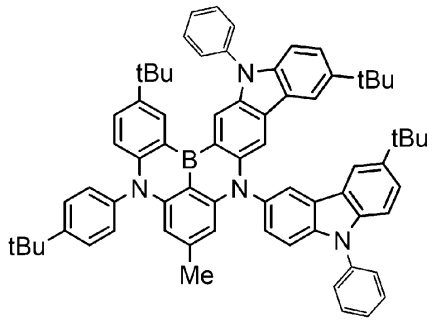
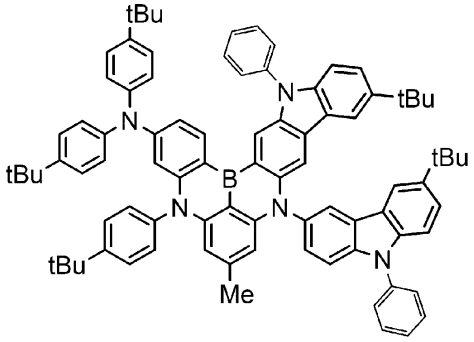
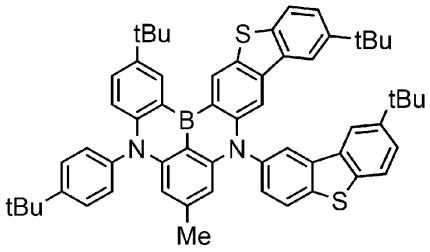
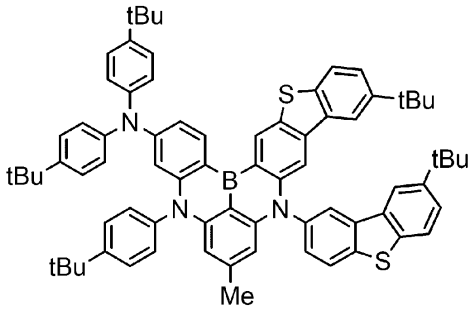
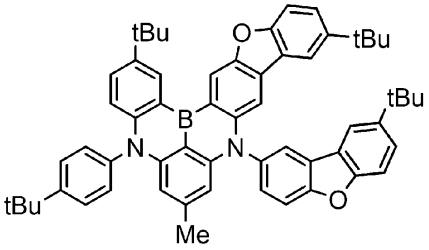
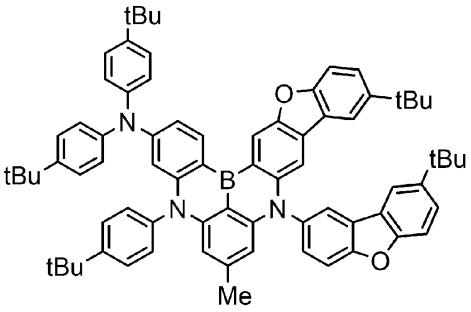
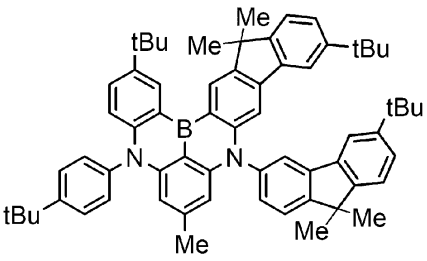
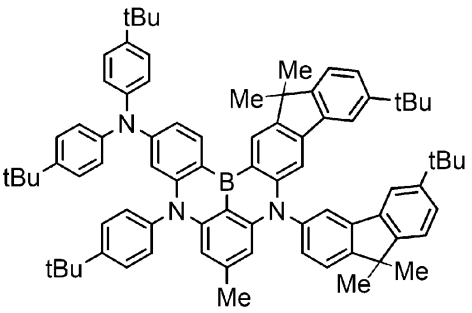
【０７００】

【化５４３】



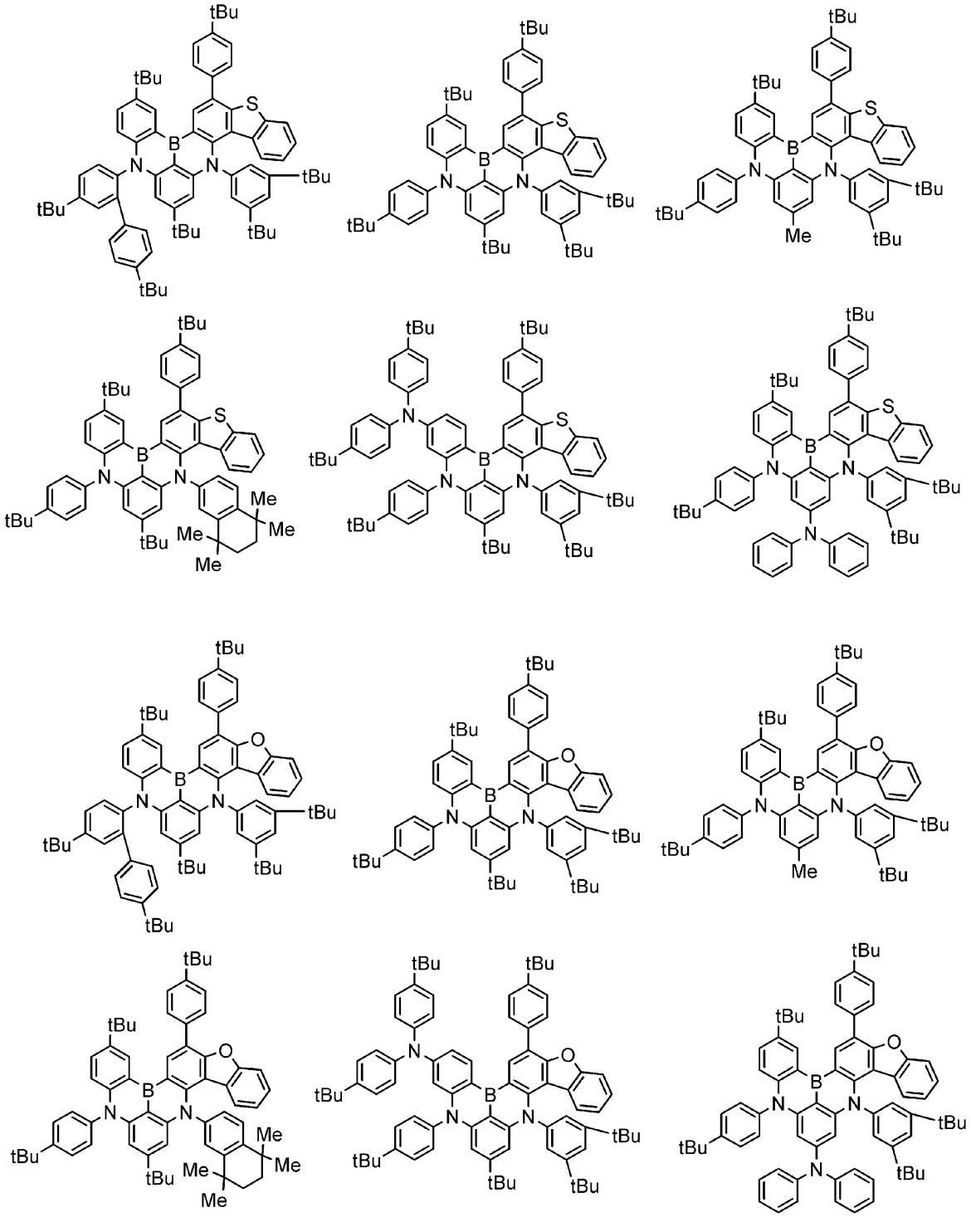
【０７０１】

【化５４４】

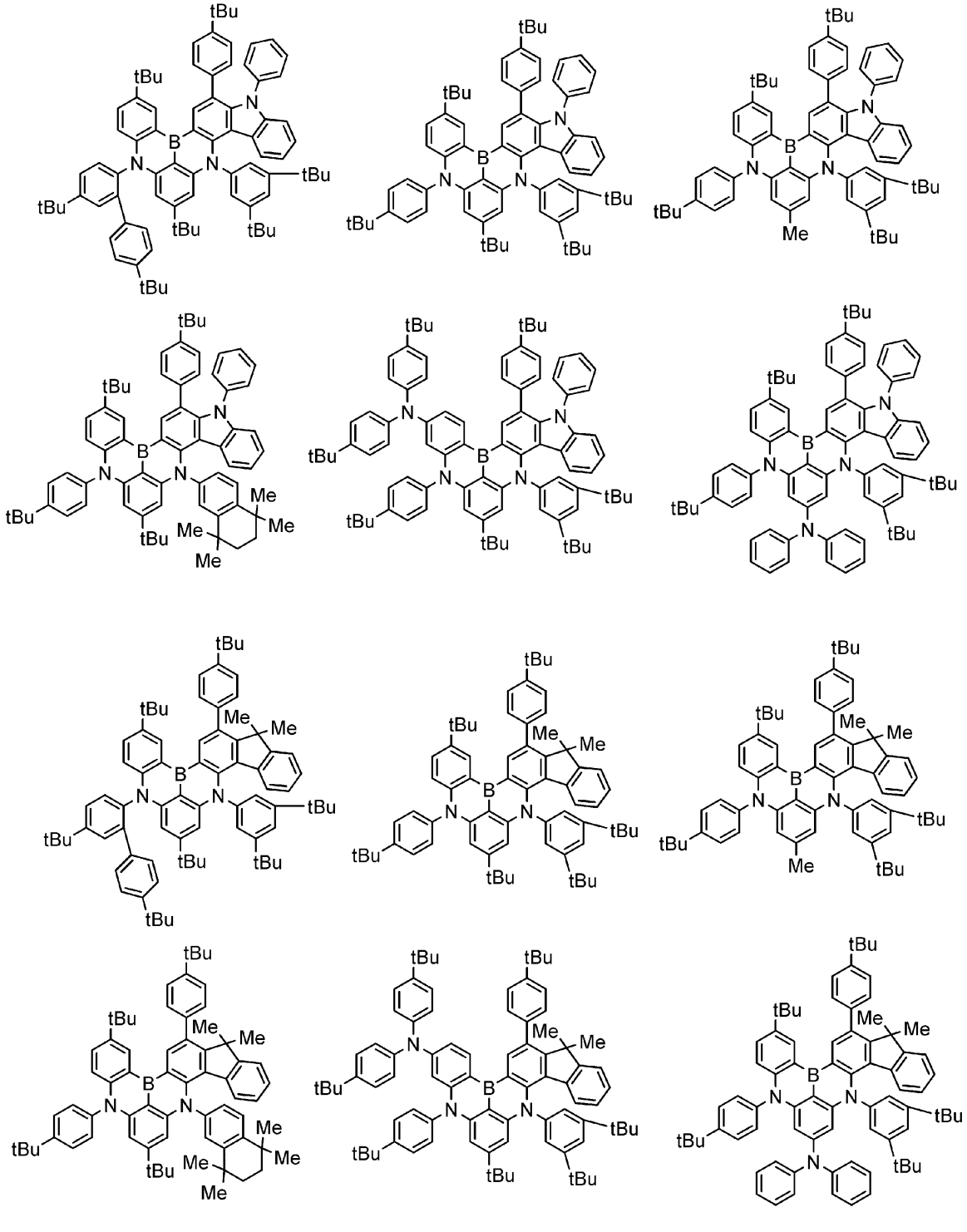
【０７０２】

【化５４５】



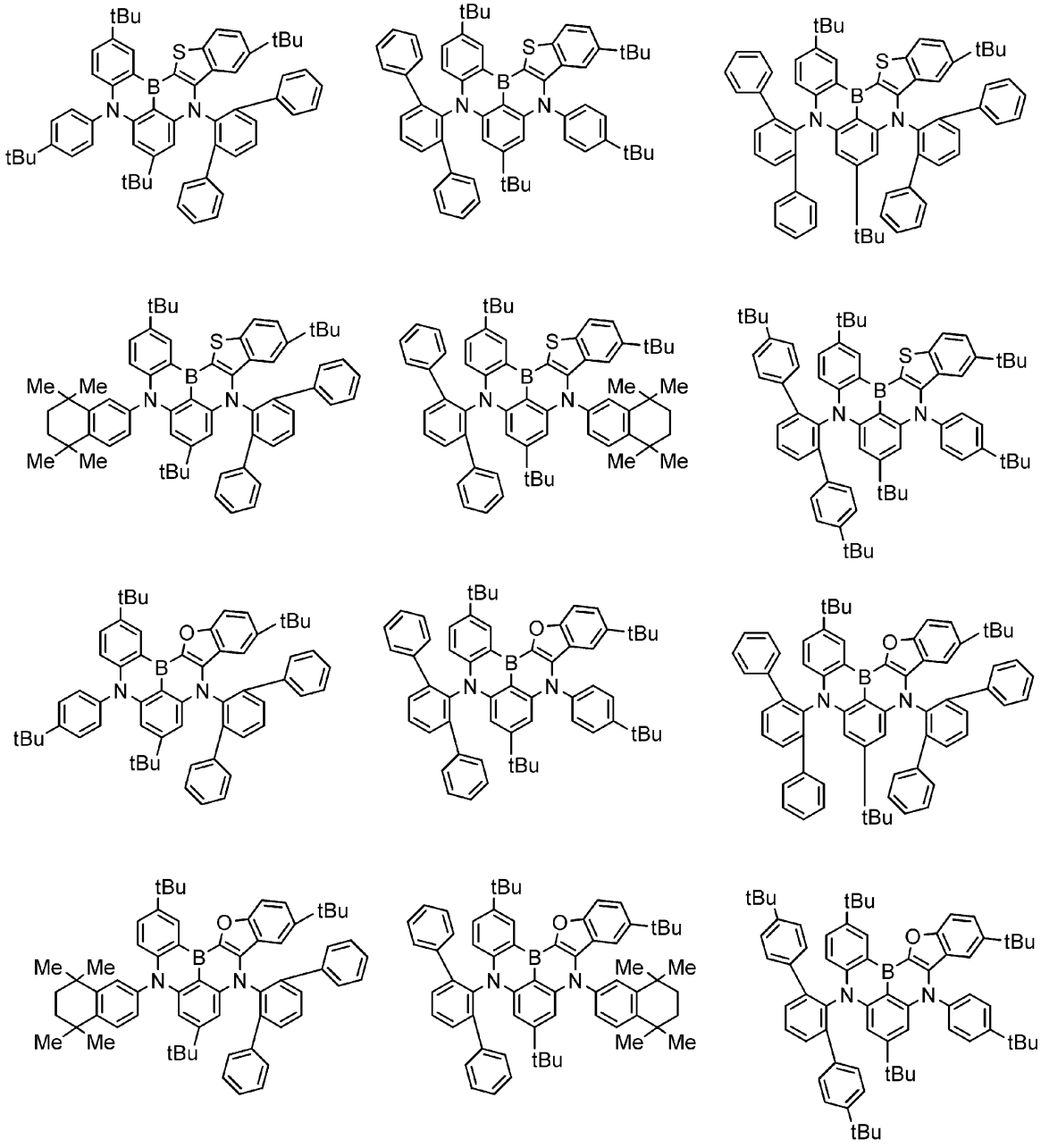
【０７０３】

【化５４６】



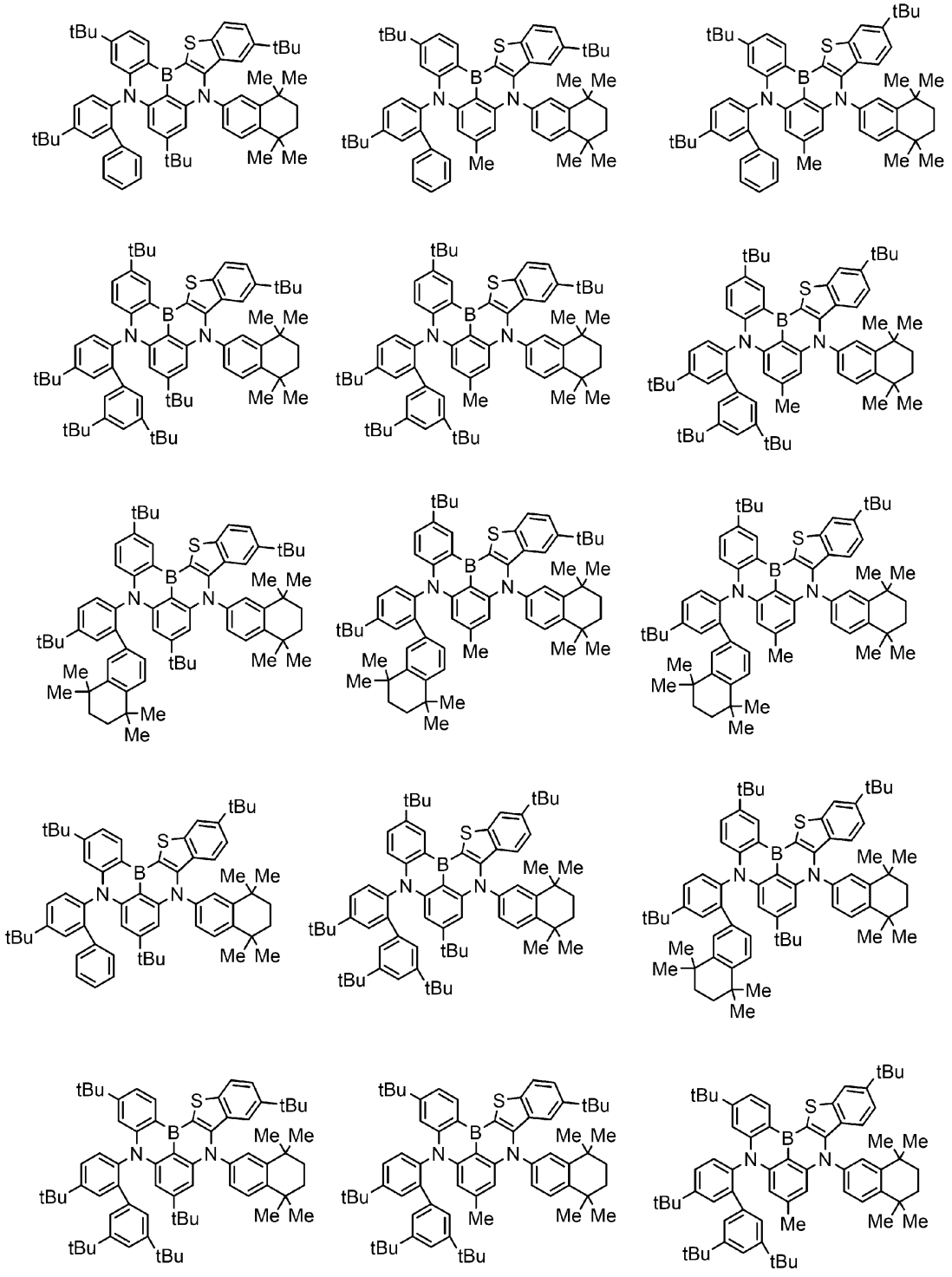
【０７０４】

【化５４７】



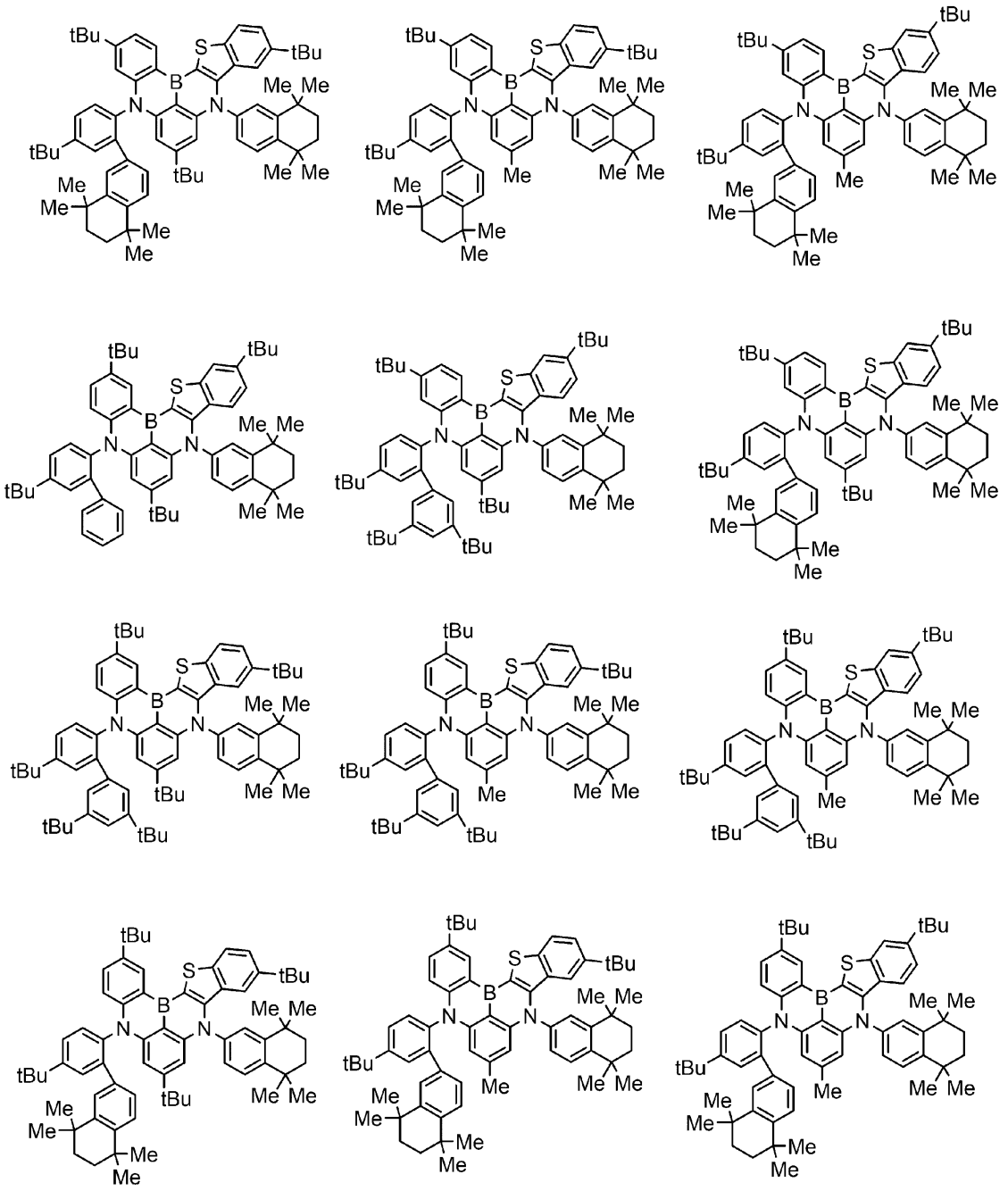
【０７０５】

【化５４８】



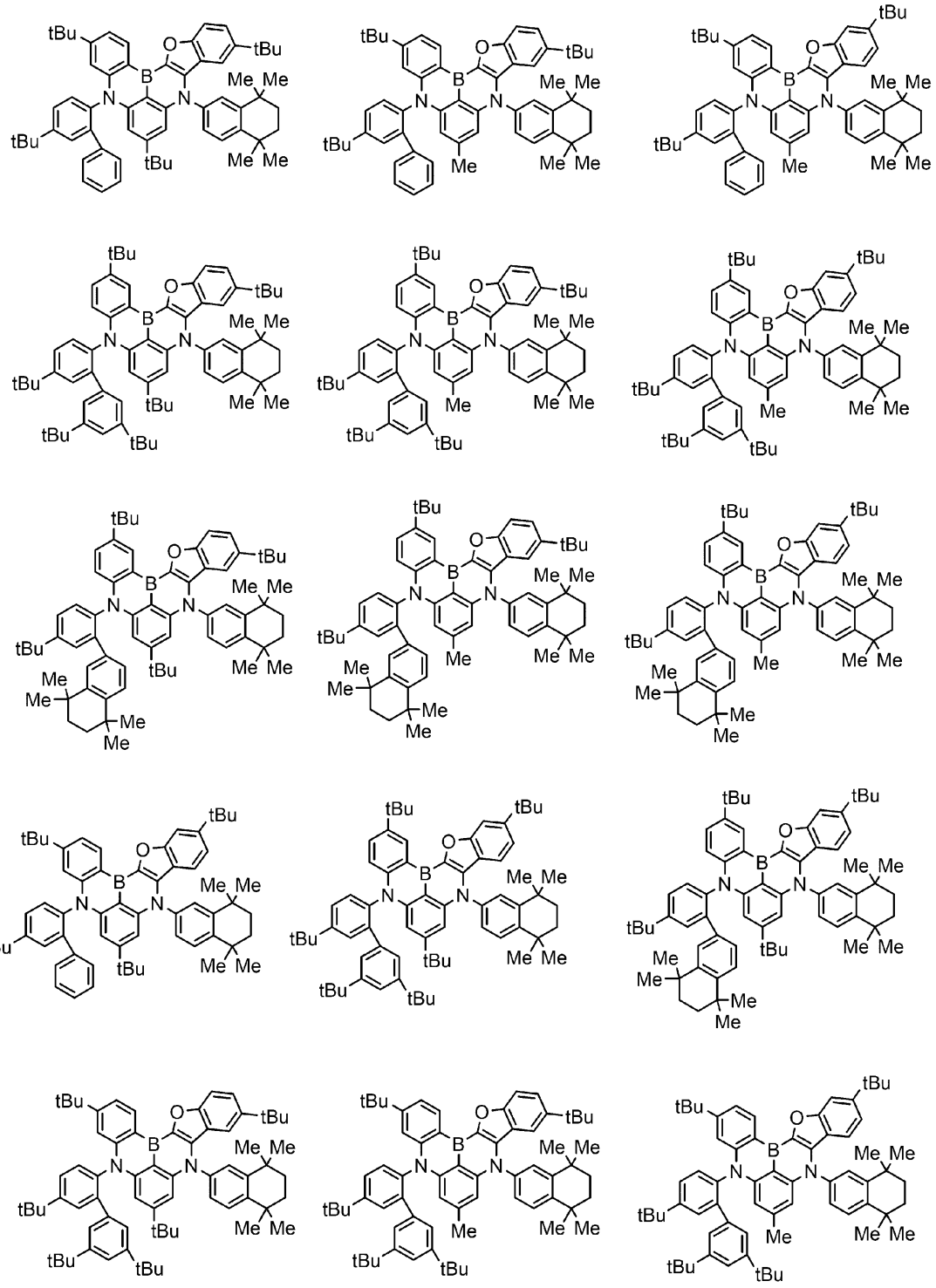
【０７０６】

【化５４９】



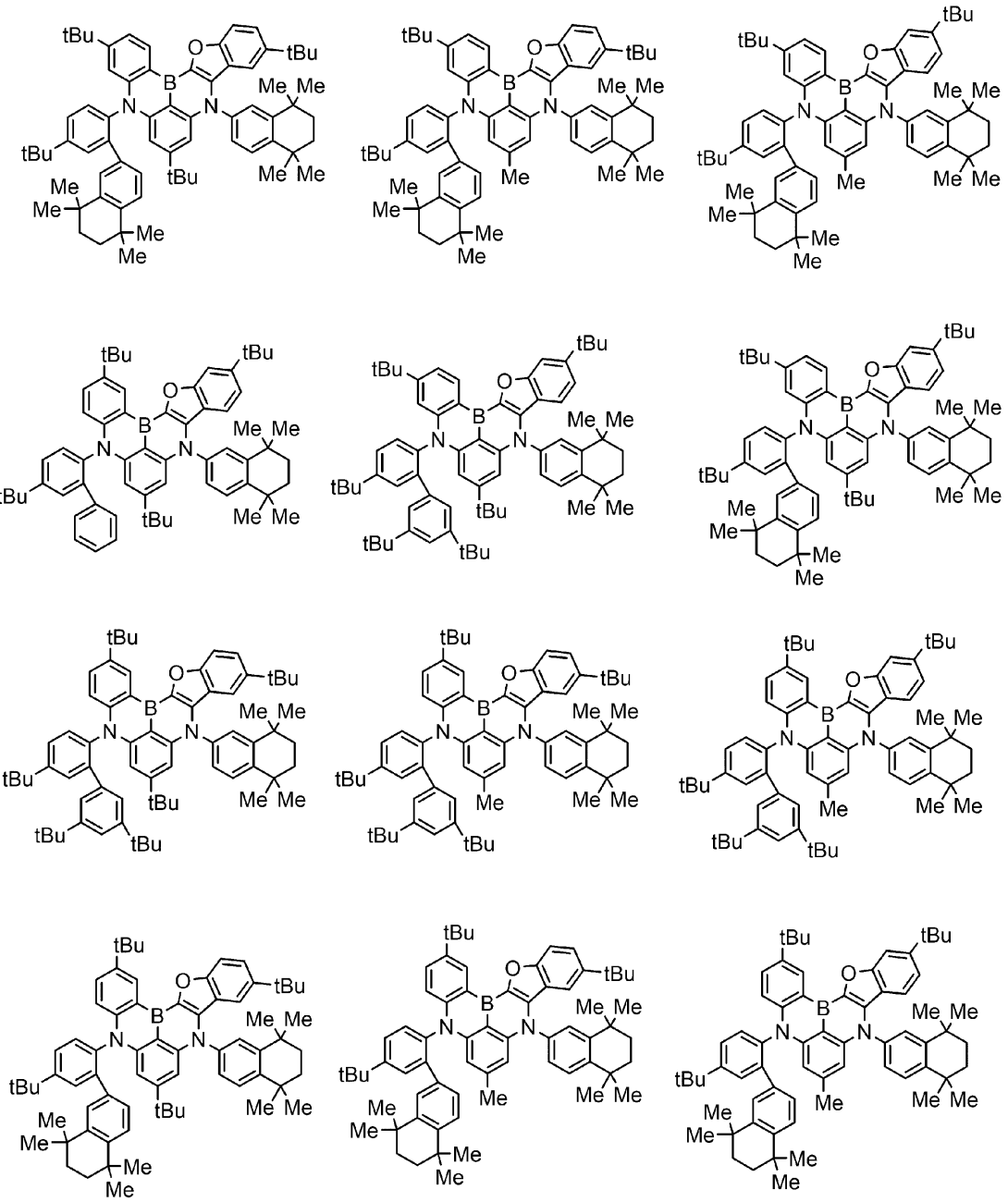
【０７０７】

【化５５０】



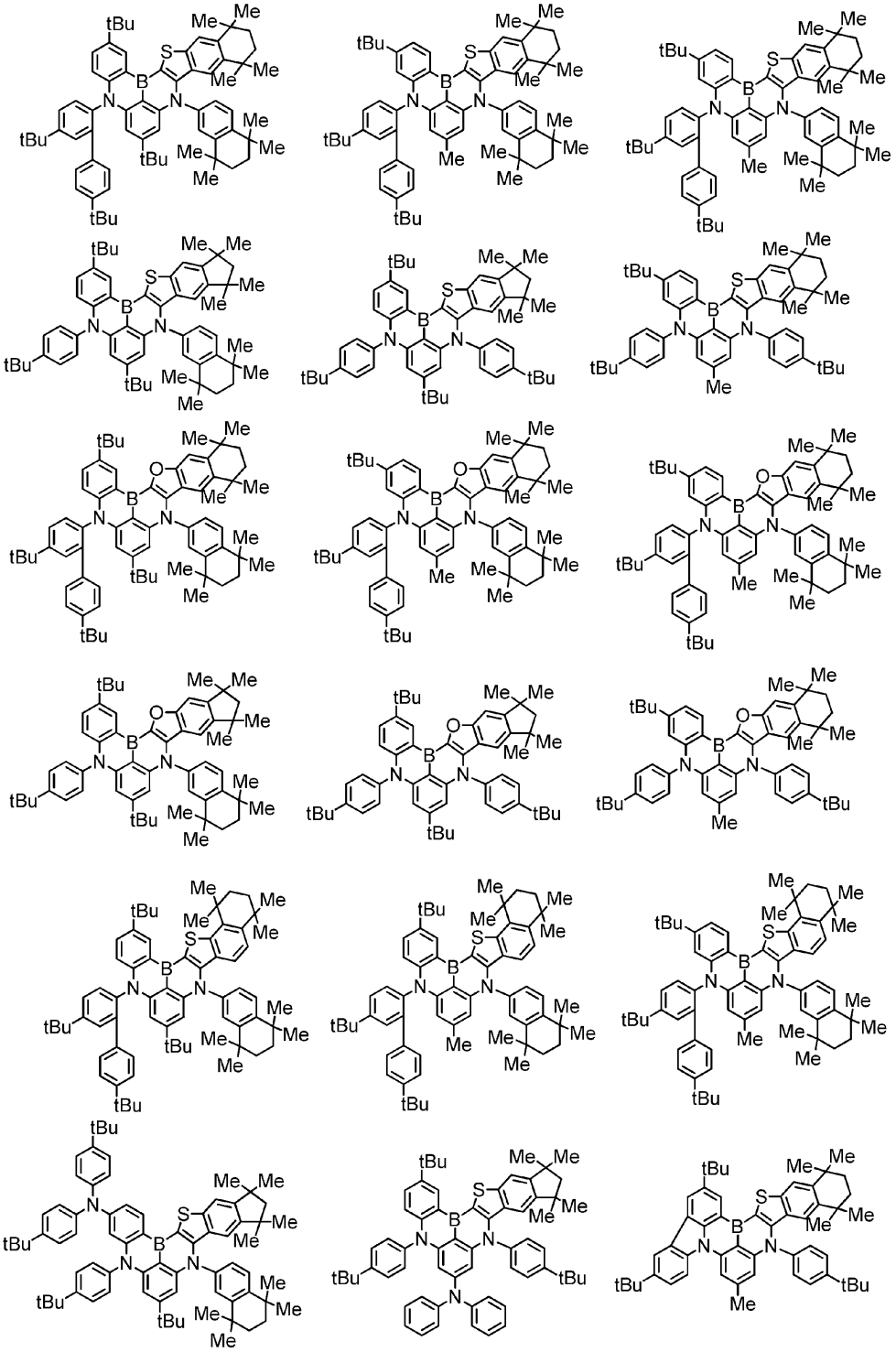
【０７０８】

【化５５１】



【０７０９】

【化５５２】



【０７１０】

本発明に係る式（１）で表される多環芳香族化合物およびその多量体は、これらに反応性置換基が置換した反応性化合物をモノマーとして高分子化させた高分子化合物（この高分子化合物を得るための前記モノマーは重合性置換基を有する）、もしくは当該高分子化合物をさらに架橋させた高分子架橋体（この高分子架橋体を得るための前記高分子化合物は架橋性置換基を有する）、または、主鎖型高分子と前記反応性化合物とを反応させたペンダント型高分子化合物（このペンダント型高分子化合物を得るための前記反応性化合物は反応性置換基を有する）、もしくは当該ペンダント型高分子化合物をさらに架橋させたペンダント型高分子架橋体（このペンダント型高分子架橋体を得るための前記ペンダント

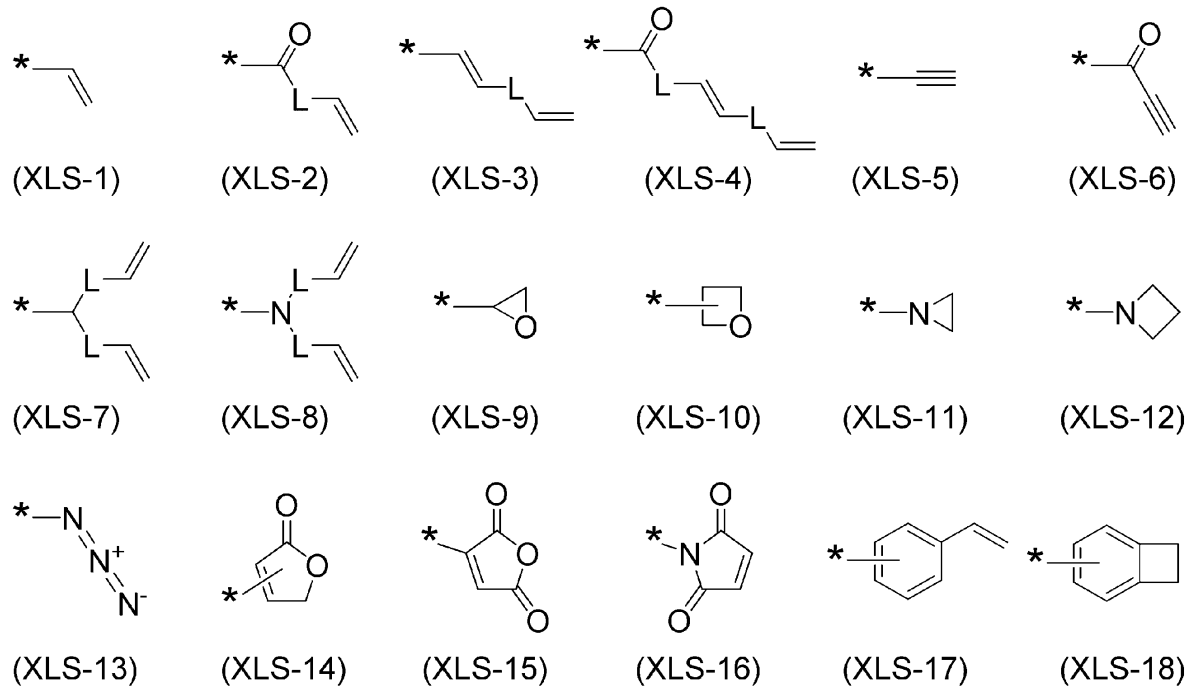
型高分子化合物は架橋性置換基を有する）としても、有機デバイス用材料、例えば、有機電界発光素子用材料、有機電界効果トランジスタ用材料または有機薄膜太陽電池用材料に用いることができる。

【０７１１】

上述した反応性置換基（前記重合性置換基、前記架橋性置換基、および、ペンダント型高分子を得るための反応性置換基を含み、以下、単に「反応性置換基」とも言う）としては、上記多環芳香族化合物またはその多量体を高分子量化できる置換基、そのようにして得られた高分子化合物をさらに架橋化できる置換基、また、主鎖型高分子にペンダント反応し得る置換基であれば特に限定されないが、アルケニル、アルキニル、シクロアルキルの不飽和体（例えばシクロブテニル）、シクロアルキルにおける少なくとも１つの－ＣＨ$_2$－が－Ｏ－で置換された基（例えばエポキシ）、縮合したシクロアルカンの不飽和体（例えば縮合したシクロブテン）などがあげられ、以下の構造の置換基が好ましい。各構造式中の＊は結合位置を示す。

【０７１２】

【化５５３】



【０７１３】

Ｌは、それぞれ独立して、単結合、－Ｏ－、－Ｓ－、＞Ｃ＝Ｏ、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－、炭素数１～１２のアルキレン、炭素数１～１２のオキシアルキレンおよび炭素数１～１２のポリオキシアルキレンである。上記置換基の中でも、式（ＸＬＳ－１）、式（ＸＬＳ－２）、式（ＸＬＳ－３）、式（ＸＬＳ－９）、式（ＸＬＳ－１０）または式（ＸＬＳ－１７）で表される基が好ましく、式（ＸＬＳ－１）、式（ＸＬＳ－３）または式（ＸＬＳ－１７）で表される基がより好ましい。

【０７１４】

このような高分子化合物、高分子架橋体、ペンダント型高分子化合物およびペンダント型高分子架橋体（以下、単に「高分子化合物および高分子架橋体」とも言う）の用途の詳細については後述する。

【０７１５】

<u>２．多環芳香族化合物およびその多量体の製造方法</u>

式（１）または式（２）、（３）、（４）、（５）、（６）、（７）、（８）、（９）、（１２）、（１３）、（１４）、（１５）、（１６）、（１７）、（１８）、もしくは（１９）で表される多環芳香族化合物およびその多量体は、基本的には、まずＡ環（ａ環

）とＢ環（ｂ環）およびＣ環（ｃ環）とを結合基（X^1やX^2を含む基）で結合させることで中間体を製造し（第１反応）、その後に、Ａ環（ａ環）、Ｂ環（ｂ環）およびＣ環（ｃ環）を結合基（Y^1を含む基）で結合させることで最終生成物を製造することができる（第２反応）。第１反応では、例えばエーテル化反応であれば、求核置換反応、ウルマン反応といった一般的反応が利用でき、アミノ化反応で有ればブッフバルト－ハートウィッグ反応といった一般的反応が利用できる。また、第２反応では、タンデムヘテロフリーデルクラフツ反応（連続的な芳香族求電子置換反応、以下同様）が利用できる。反応工程のどこかで、所望の縮合環を有する原料を用いたり、環を縮合する工程を追加したりすることで、Ａ環、Ｂ環およびＣ環からなる群より選択される少なくとも一つの環が単環のアリール環、単環のヘテロアリール環、およびシクロペンタジエン環、からなる群より選択される２つ以上の環で構成される縮合環で化合物を製造することができる。

【０７１６】

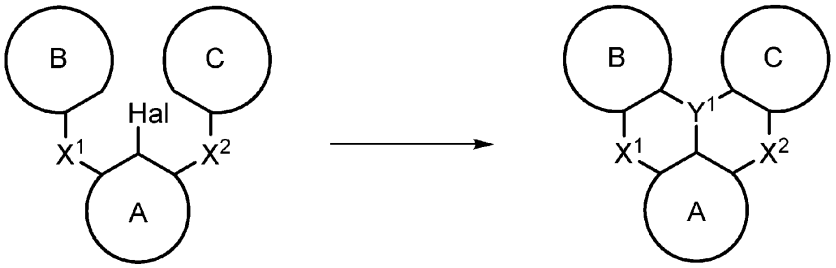
中間体－１を経由する製造方法

本発明の多環芳香族化合物は以下の工程を含む製造方法で製造することができる。以下各工程については、国際公開第２０１５／１０２１１８号の記載を参照することができる。

有機アルカリ化合物を用いて下記中間体－１におけるX^1とX^2の間のハロゲン原子（Ｈａｌ）をメタル化する反応工程と、Y^1のハロゲン化物、Y^1のアミノ化ハロゲン化物、Y^1のアルコキシ化物およびY^1のアリールオキシ化物からなる群から選択される試薬を用いて前記メタルとY^1とを交換する反応工程と、ブレンステッド塩基を用いて連続的な芳香族求電子置換反応により前記Y^1でＢ環とＣ環とを結合する反応工程とを含む方法。

【０７１７】

【化５５４】



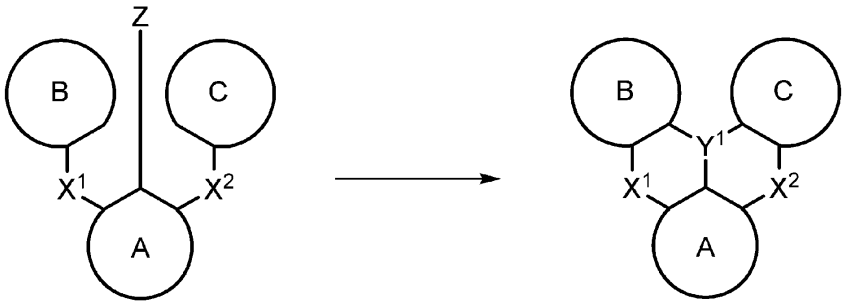
（中間体-1） （1）

【０７１８】

中間体－２を経由する製造方法

本発明の多環芳香族化合物は下記中間体－２に酸を作用させる反応工程を含む、製造方法で製造されることも好ましい。

【化５５５】



（中間体-2） （1）

（中間体－２において、Ｚは、エステル化されていてもよい－Ｂ（ＯＨ）$_2$である。）

【０７１９】

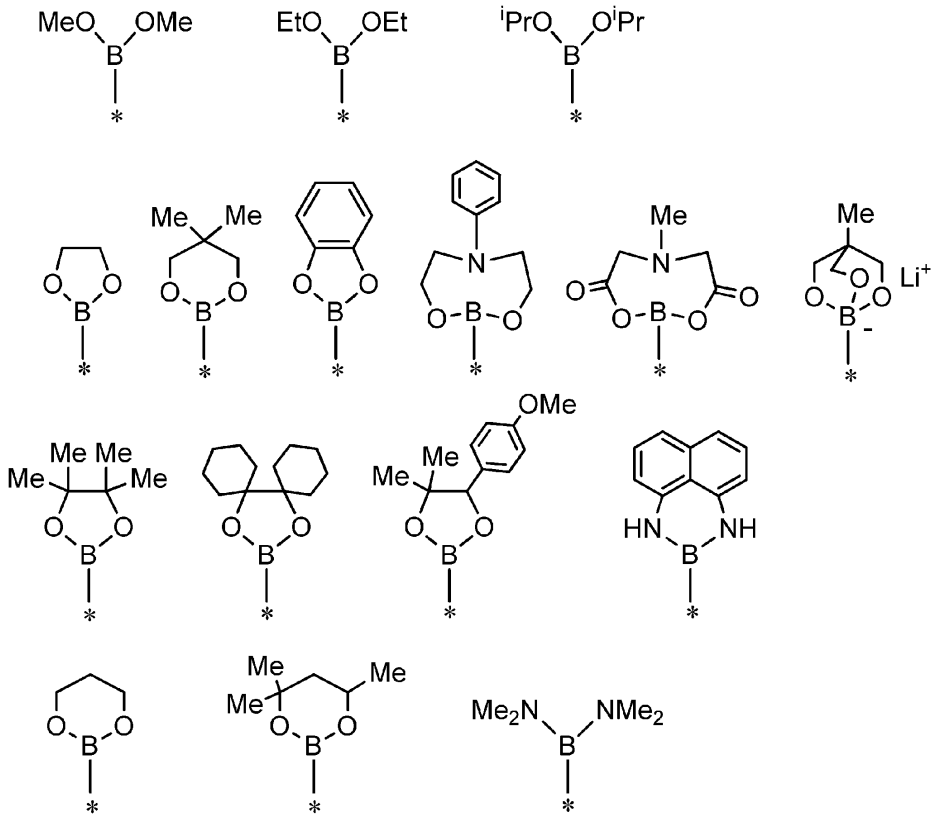
中間体－２におけるＺは、エステル化されていてもよい－Ｂ（ＯＨ）$_2$である。好ましいＹ^{1}は－Ｂ（ＯＨ）$_2$がエステル化された基である。

【０７２０】

－Ｂ（ＯＨ）$_2$がエステル化された基（－Ｂ（ＯＲ）$_2$）としては特に限定されず、例えば、ジオールを含むアルコールやカルボン酸とボロン酸との反応で得られるような基があげられる。－Ｂ（ＯＲ）$_2$のＲとしては置換されていてもよい炭素数１～４のアルキル（炭素数３～４の分岐鎖アルキル）があげられ、Ｒ同士が結合して環を形成していてもよく、また形成された環にベンゼンなどの芳香族環が含まれていてもよい。具体的には以下の構造の基があげられる。以下構造において、「Ｍｅ」はメチル、「Ｅｔ」はエチル、「ｉＰｒ」はイソプロピル、＊は結合位置を表す。

【０７２１】

【化５５６】



【０７２２】

中間体－２等のボロン酸またはボロン酸エステルの製造方法

中間体－２で表される化合物（ボロン酸またはボロン酸エステル）は、基本的には、Ａ環（ａ環）とＢ環（ｂ環）およびＣ環（ｃ環）とを結合基（Ｘ^{1}およびＸ^2）で結合させることで中間体を製造し（第１反応）、その後にＹ^{1}基を導入することで、まずボロン酸エステルを製造することができ、これを加水分解することでそのボロン酸を製造することができる。第１反応では、例えばエーテル化反応であれば、求核置換反応、ウルマン反応といった一般的反応が利用でき、アミノ化反応で有ればブッフバルト－ハートウィッグ反応といった一般的反応が利用できる。なお、以下に示す各スキーム中の構造式における符号は上記した定義と同じである。

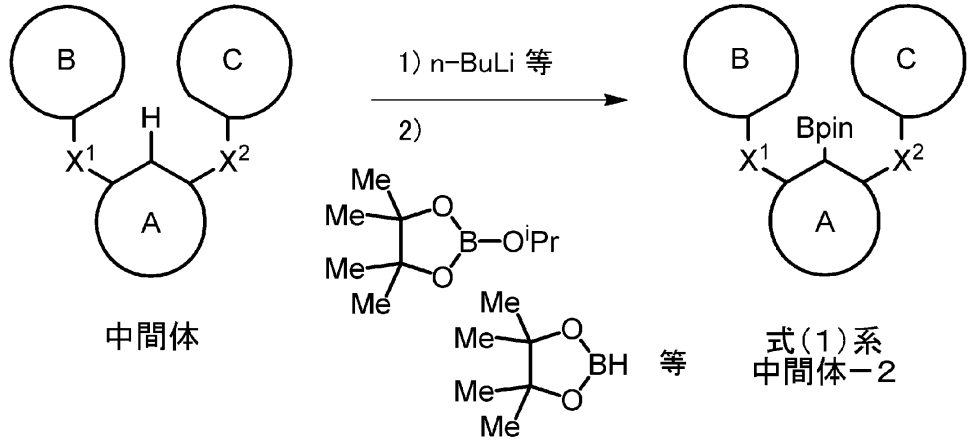
【０７２３】

第２反応は、下記スキーム（１）または（２）に示すように、上記第１反応で得られた中間体にＹ^{1}であるＢｐｉｎ（ピナコラートボリル）のようなボロン酸エステルを導入する反応である。

【０７２４】

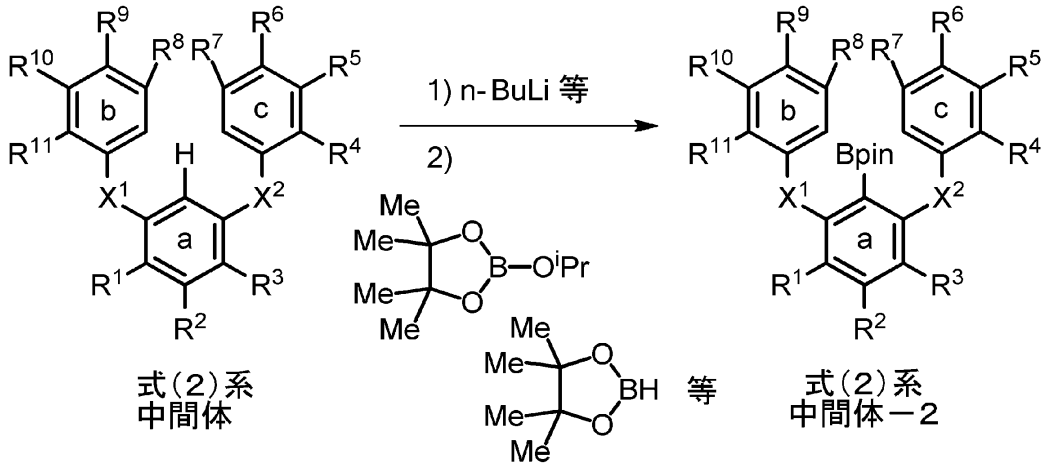
【化５５７】

スキーム(1)



中間体　等　式(1)系 中間体－2

スキーム(2)



式(2)系 中間体　等　式(2)系 中間体－2

【０７２５】

上記スキーム（１）および（２）では、まず水素原子をｎ－ブチルリチウム、ｓｅｃ－ブチルリチウムまたはｔ－ブチルリチウム等でオルトメタル化することでリチオ化する。ここではｎ－ブチルリチウム、ｓｅｃ－ブチルリチウムまたはｔ－ブチルリチウム等を単独で用いる方法を示したが、反応性を向上させるためにＮ，Ｎ，Ｎ’，Ｎ’－テトラメチルエチレンジアミンなどを添加してもよい。そして得られたリチオ化体に２－イソプロポキシ－４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロランのようなボロン酸エステル化反応剤を加えることで、ボロン酸のピナコールエステルを製造することができる。ここでは２－イソプロポキシ－４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロランを用いる方法を示したが、その他、トリメトキシボランやトリイソプロコキシボラン等も用いることができる。また、国際公開第２０１３／０１６１８５号に記載されている方法を応用して、４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロランなども同様に用いることができる。

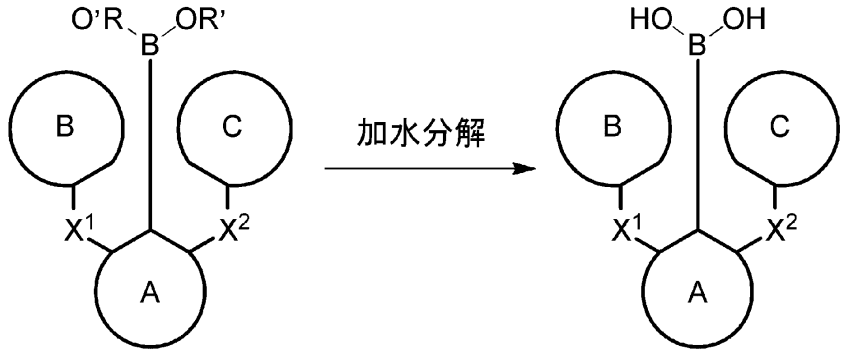
【０７２６】

また、下記スキーム（３）または（４）で示すように、上記スキーム（１）または（２）の方法で製造したボロン酸エステルを加水分解することで、ボロン酸を製造することができる。

【０７２７】

【化５５８】

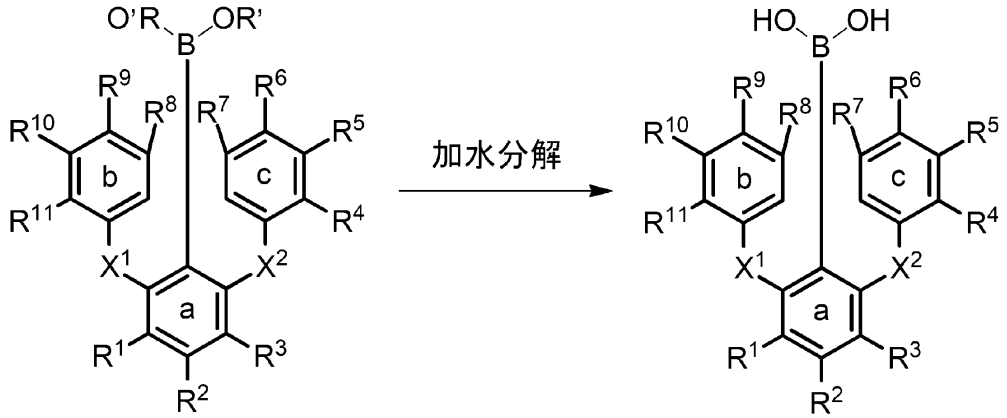
スキーム(3)



R' = メチル、エチル、イソプロピル、
R'同士が結合したピナコール等

式(1)系
中間体－2

スキーム(4)



R' = メチル、エチル、イソプロピル、
R'同士が結合したピナコール等

式(2)系
中間体－2

【０７２８】

さらに、上記スキーム（１）～（４）で得られたボロン酸エステルまたはボロン酸に適当なアルコールを作用させることで、エステル交換または再エステル化を経て、異なるボロン酸エステルを製造することができる。

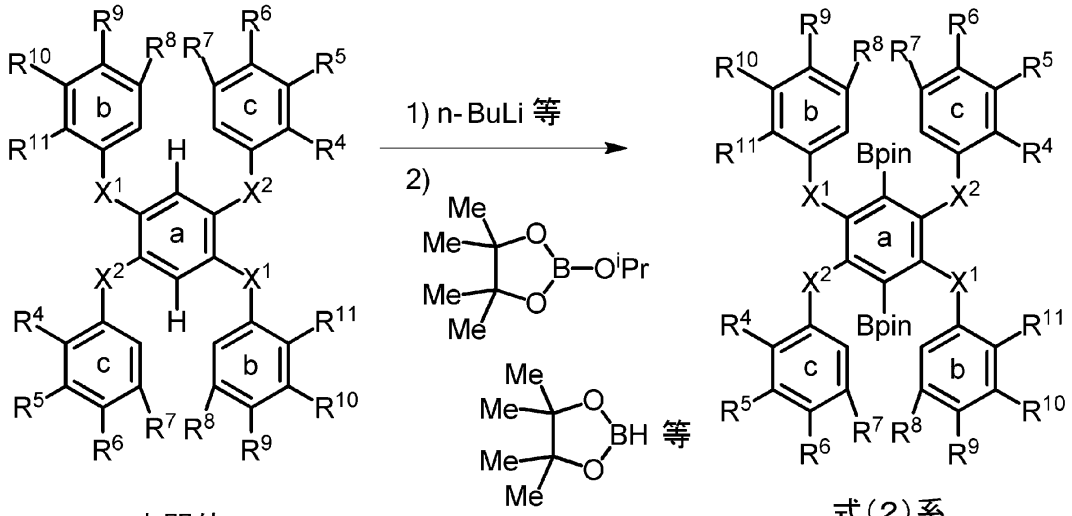
【０７２９】

なお、上記スキーム（１）および（２）は、式（１）または（２）で表されるボロン酸エステルの製造方法を示しているが、式（１）または（２）で表される構造を複数有する多量体化合物については、複数のＡ環（ａ環）、Ｂ環（ｂ環）およびＣ環（ｃ環）を有する中間体を用いることで製造することができる。詳細には下記スキーム（５）～（７）で説明する。この場合、使用するブチルリチウム等の試薬の量を２倍量、３倍量等とすることで２量体化合物、３量体化合物等の目的物を得ることができる。

【０７３０】

【化５５９】

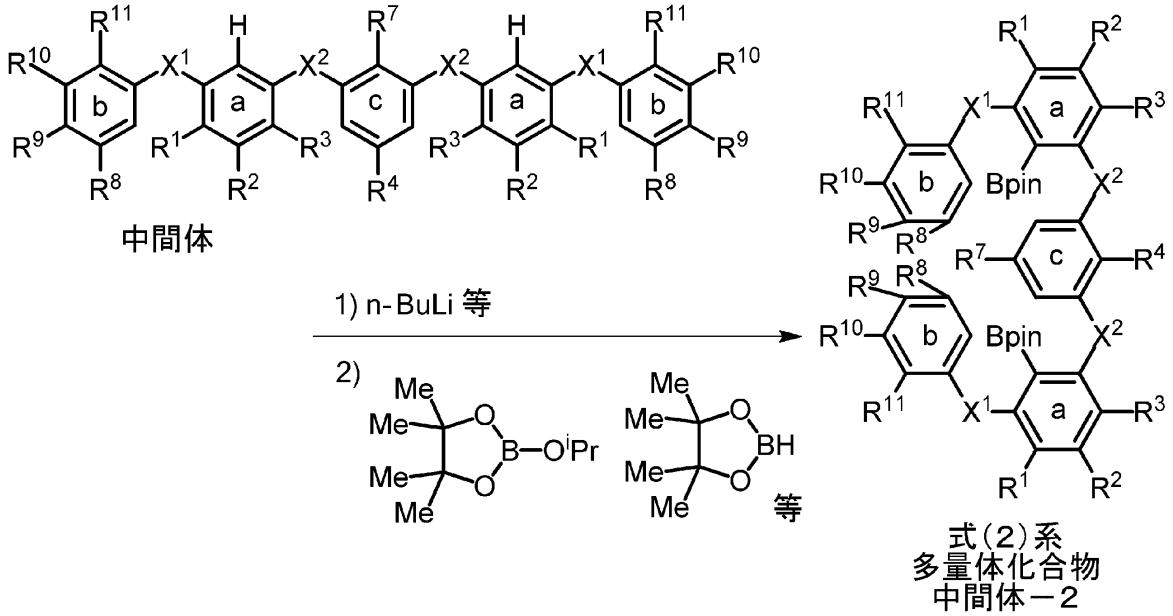
スキーム(5)



【０７３１】

【化５６０】

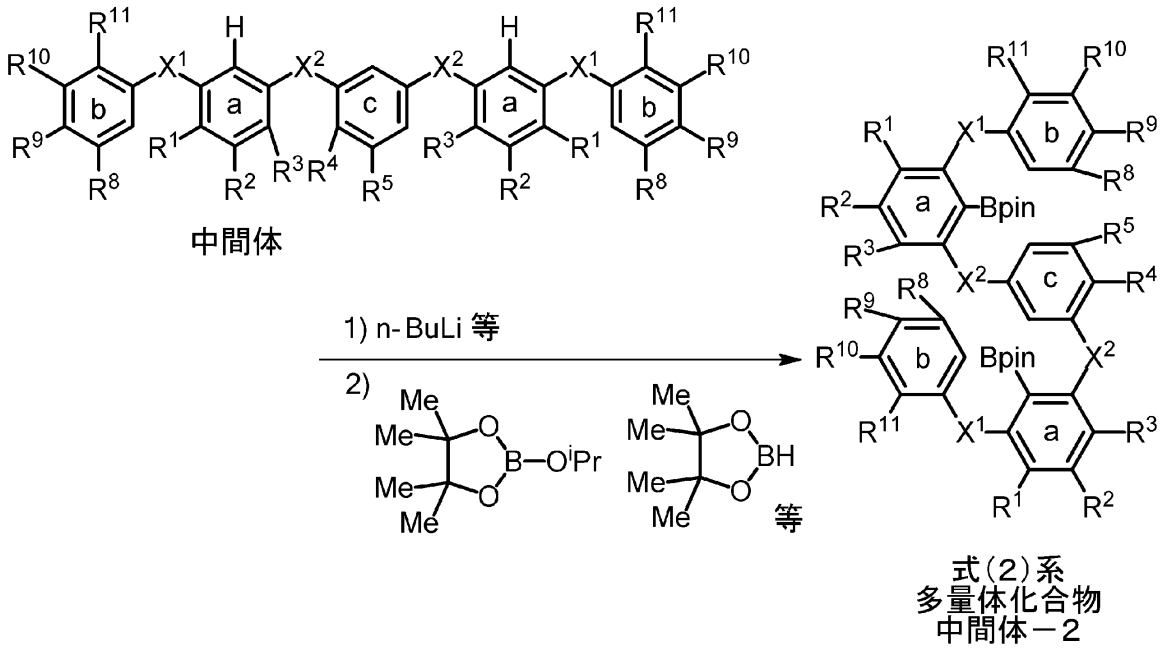
スキーム(6)



【０７３２】

【化５６１】

スキーム(7)



【０７３３】

上記スキーム（５）～（７）ではボロン酸エステルの多量体化合物の製造方法を示したが、そのボロン酸体は上記スキーム（４）に従って加水分解で製造することができ、また異なるエステル体もアルコールを使用したエステル交換や再エステル化を経て製造することができる。

【０７３４】

上述の合成法を適宜選択し、使用する原料も適宜選択することで、所望の位置に置換基を有するボロン酸またはボロン酸エステルを合成することができる。

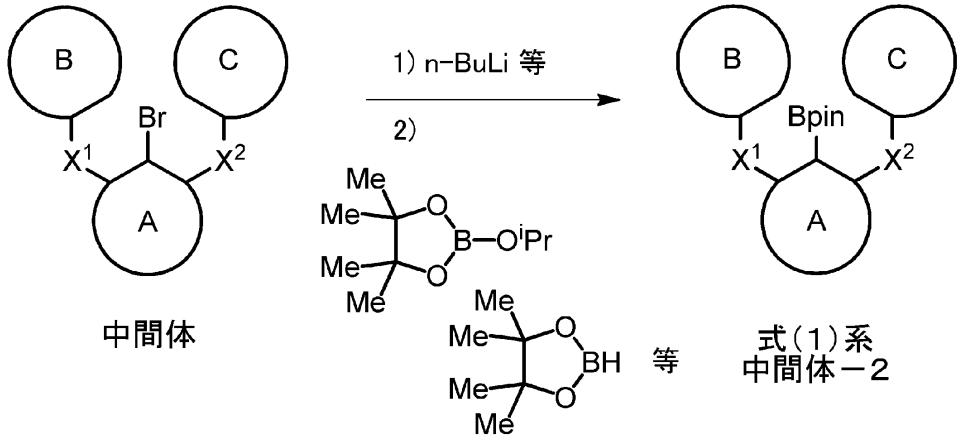
【０７３５】

上記スキーム（１）～（７）においては、オルトメタル化により所望の位置へリチウムを導入したが、下記スキーム（８）または（９）のようにリチウムを導入したい位置に臭素原子等のハロゲンを導入し、ハロゲン－メタル交換によっても所望の位置へリチウムを導入することができる。そして得られたリチオ化体からボロン酸エステルを製造することができる。

【０７３６】

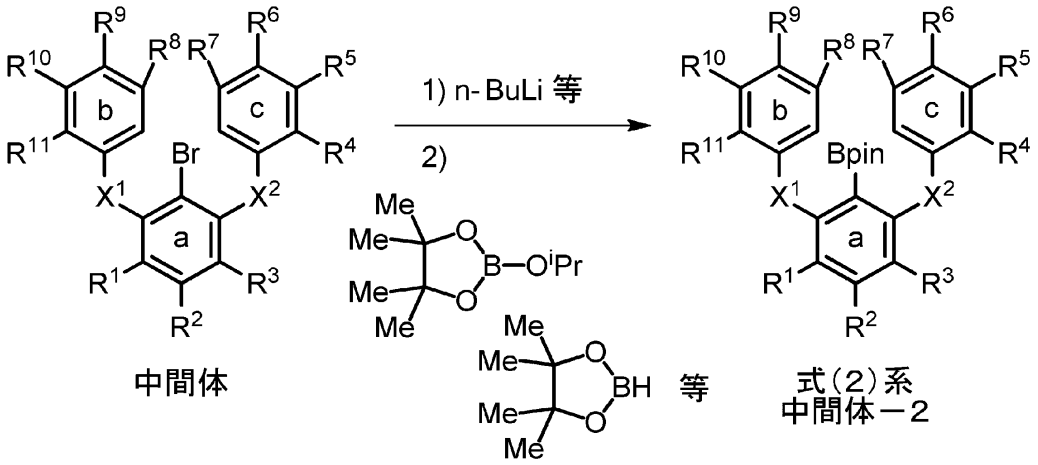
【化５６２】

スキーム（８）



中間体　　式（１）系中間体－２

スキーム（９）



中間体　　式（２）系中間体－２

【０７３７】

上記スキーム（８）および（９）では、まずハロゲン原子をｎ－ブチルリチウム、ｓｅｃ－ブチルリチウムまたはｔ－ブチルリチウム等でハロゲン－リチウム交換反応をすることでリチオ化する。ここではｎ－ブチルリチウム、ｓｅｃ－ブチルリチウムまたはｔ－ブチルリチウム等を単独で用いる方法を示したが、反応性を向上させるためにＮ，Ｎ，Ｎ’，Ｎ’－テトラメチルエチレンジアミンなどを添加してもよい。そして得られたリチオ化体に２－イソプロポキシ－４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロランのようなボロン酸エステル化反応剤を加えることで、ボロン酸のピナコールエステルを製造することができる。ここでは２－イソプロポキシ－４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロランを用いる方法を示したが、その他、トリメトキシボランやトリイソプロコキシボラン等も用いることができる。また国際公開第２０１３／０１６１８５号に記載されている方法を応用して、４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロランなども同様に用いることができる。

【０７３８】

なお、上記スキーム（８）および（９）は、式（１）または（２）で表されるボロン酸エステルの製造方法を示しているが、そのようにして得られたボロン酸エステルを加水分解することで、ボロン酸を製造することができる（上記スキーム（３）または（４）を参照）。また、これらのボロン酸エステルやボロン酸に適当なアルコールを作用させることで、エステル交換または再エステル化を経て、異なるボロン酸エステルを製造することができる。さらに、式（１）または（２）で表される構造を複数有する多量体化合物につい

ても、複数のＡ環（ａ環）、Ｂ環（ｂ環）およびＣ環（ｃ環）を有する中間体を用いることで製造することができる（上記スキーム（５）～（７）を参照）。

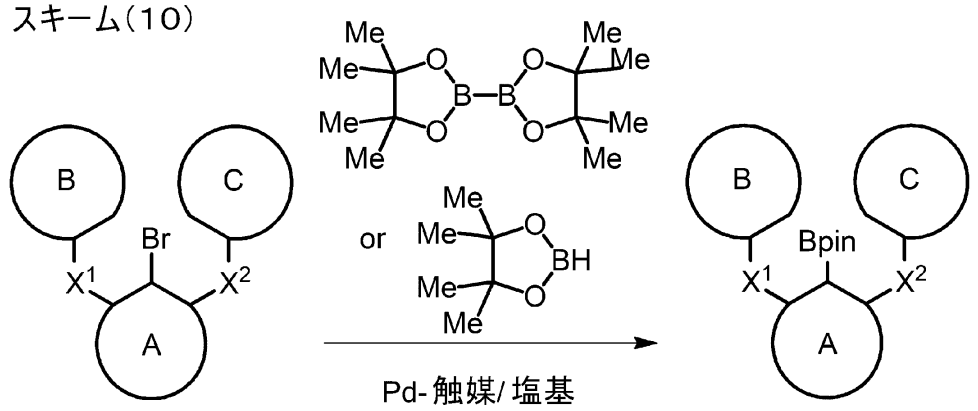
【０７３９】

また、下記スキーム（１０）または（１１）に示すように、ブロモ化体とビス（ピナコラート）ジボロンまたは４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン等とを、パラジウム触媒および塩基を用いてカップリング反応させることによっても、同様にボロン酸エステルを合成することができる。

【０７４０】

【化５６３】

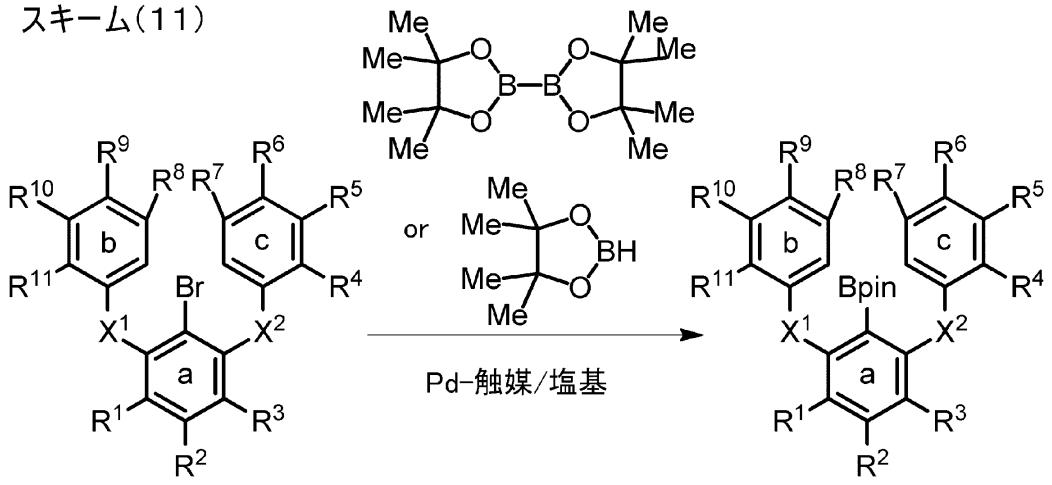
スキーム(10)



中間体

式(1)系
中間体－２

スキーム(11)



中間体

式(2)系
中間体－２

【０７４１】

なお、上記スキーム（１０）および（１１）は、式（１）または（２）で表されるボロン酸エステルの製造方法を示しているが、そのようにして得られたボロン酸エステルを加水分解することで、ボロン酸を製造することができる（上記スキーム（３）または（４）を参照）。また、これらのボロン酸エステルやボロン酸に適当なアルコールを作用させることで、エステル交換または再エステル化を経て、異なるボロン酸エステルを製造することができる。さらに、式（１）または（２）で表される構造を複数有する多量体化合物についても、複数のＡ環（ａ環）、Ｂ環（ｂ環）およびＣ環（ｃ環）を有する中間体を用いることで製造することができる（上記スキーム（５）～（７）を参照）。

【０７４２】

これまで説明してきたスキームにおけるハロゲン－メタル交換反応で使用されるメタル化試薬としては、メチルリチウム、ｎ－ブチルリチウム、ｓｅｃ－ブチルリチウム、ｔ－ブチルリチウム等のアルキルリチウム、塩化イソプロピルマグネシウム、臭化イソプロピルマグネシウム、塩化フェニルマグネシウム、臭化フェニルマグネシウムおよびターボグリニャール試薬として知られている、塩化イソプロピルマグネシウムの塩化リチウム錯体などがあげられる。

【０７４３】

また、これまで説明してきたスキームにおけるオルトメタル交換反応で使用されるメタル化試薬としては、上記の試薬に加えて、リチウムジイソプロピルアミド、リチウムテトラメチルピペリジド、リチウムヘキサメチルジシラジド、カリウムヘキサメチルジシラジド、塩化リチウムテトラメチルピペリジニルマグネシウム・塩化リチウム錯体、トリ－ｎ－ブチルマグネシウム酸リチウムなどの有機アルカリ化合物があげられる。

【０７４４】

さらに、メタル化試薬としてアルキルリチウムを使用する場合に反応を促進させる添加剤としては、Ｎ，Ｎ，Ｎ’，Ｎ’－テトラメチルエチレンジアミン、１，４－ジアザビシクロ［２．２．２］オクタン、Ｎ，Ｎ－ジメチルプロピレン尿素などがあげられる。

【０７４５】

また、本発明のボロン酸またはボロン酸エステルには、少なくとも一部の水素原子が重水素で置換されているものやフッ素や塩素などのハロゲンで置換されているものも含まれるが、このような化合物などは所望の箇所が重水素化、フッ素化または塩素化された原料を用いることで、上記と同様に合成することができる。

【０７４６】

中間体－２化合物のボロン酸等からの多環芳香族化合物の製造方法

次に、中間体－２化合物等で表されるボロン酸またはボロン酸エステルを用いて、多環芳香族化合物および多環芳香族多量体化合物を製造する方法について説明する。なお、以下に示す各スキーム中の構造式における符号は上記した定義と同じである。

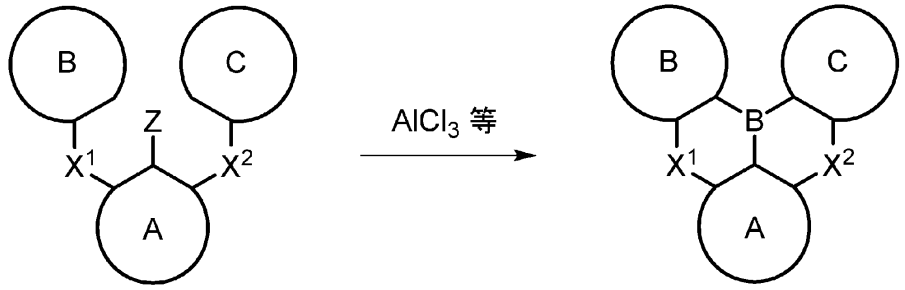
【０７４７】

下記スキーム（１２）または（１３）において、中間体－２化合物等で表されるボロン酸またはボロン酸エステルに塩化アルミニウムのようなルイス酸を反応させることで、多環芳香族化合物を製造することができる。

【０７４８】

【化５６４】

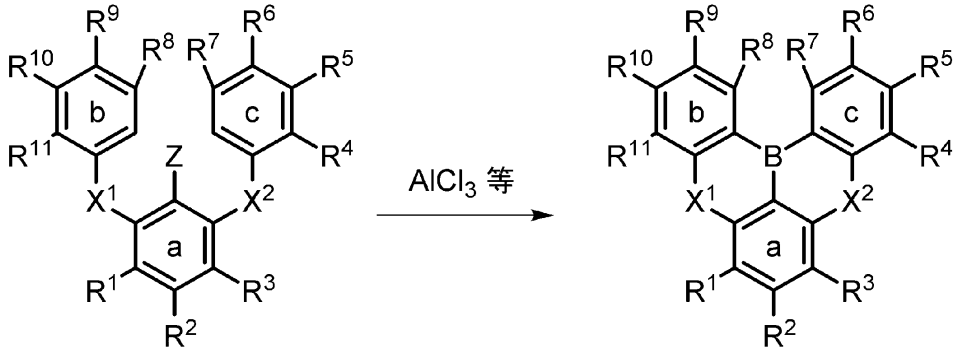
スキーム（１２）



中間体-2
化合物

多環芳香族
化合物

スキーム（１３）



中間体-2系
化合物

多環芳香族
化合物

【０７４９】

また、ｐ－トルエンスルホン酸のようなブレンステッド酸も用いることができる。特にルイス酸を用いて反応を行う場合には、選択率や収率を向上させるためにジイソプロピルエチルアミンなどの塩基を加えてもよい。

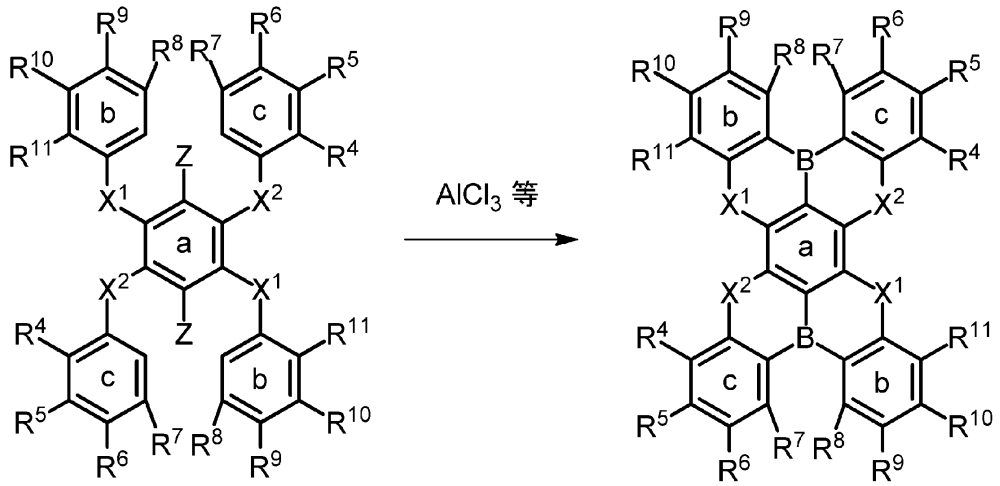
【０７５０】

また、下記スキーム（１４）～（１６）に示された方法により、中間体－２で表される構造を複数有する多量体化合物を用いて、多環芳香族多量体化合物を製造することもできる。この場合、多量体化合物の構造に応じて使用する塩化アルミニウム等の試薬の量を２倍量、３倍量等とすることで２量体化合物、３量体化合物等の目的物を得ることができる。

【０７５１】

【化５６５】

スキーム（１４）



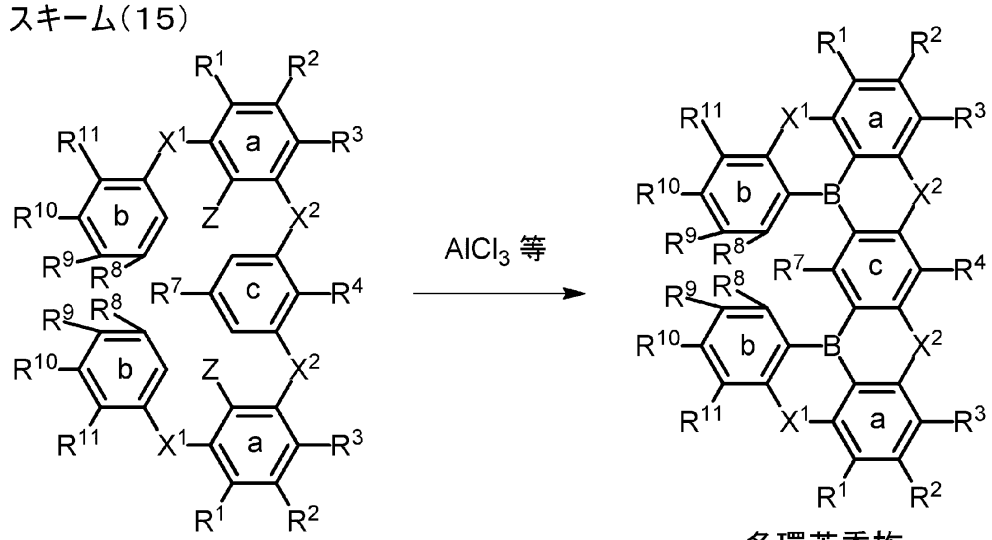
式（２）系
多量体化合物
中間体－２

多環芳香族
多量体化合物

【０７５２】

【化５６６】

スキーム（１５）



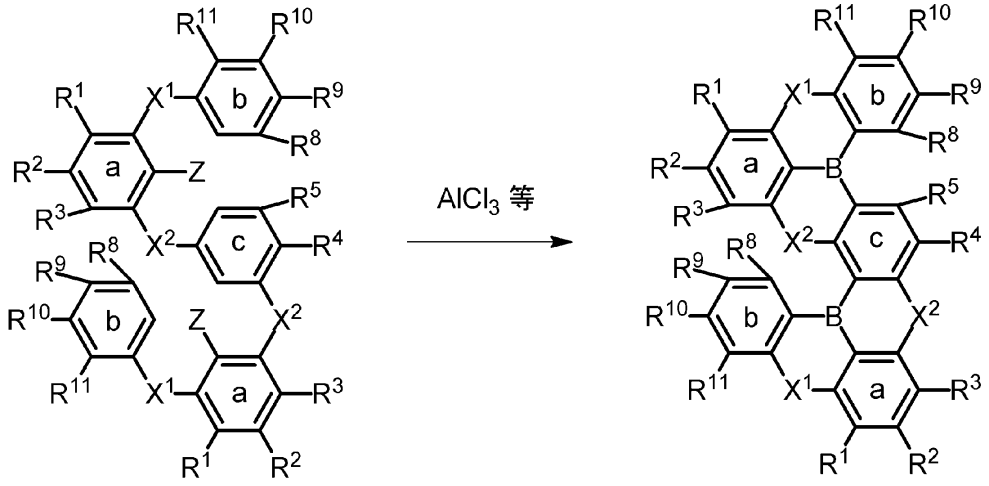
式（２）系
多量体化合物
中間体－２

多環芳香族
多量体化合物

【０７５３】

【化５６７】

スキーム(16)



式(2)系
多量体化合物
中間体－2

多環芳香族
多量体化合物

【０７５４】

上記スキーム（１２）～（１６）で使用するルイス酸としては、ＡｌＣｌ$_3$、ＡｌＢｒ$_3$、ＡｌＦ$_3$、ＢＦ$_3$・ＯＥｔ$_2$、ＢＣｌ$_3$、ＢＢｒ$_3$、ＧａＣｌ$_3$、ＧａＢｒ$_3$、ＩｎＣｌ$_3$、ＩｎＢｒ$_3$、Ｉｎ（ＯＴｆ）$_3$、ＳｎＣｌ$_4$、ＳｎＢｒ$_4$、ＡｇＯＴｆ、ＳｃＣｌ$_3$、Ｓｃ（ＯＴｆ）$_3$、ＺｎＣｌ$_2$、ＺｎＢｒ$_2$、Ｚｎ（ＯＴｆ）$_2$、ＭｇＣｌ$_2$、ＭｇＢｒ$_2$、Ｍｇ（ＯＴｆ）$_2$、ＬｉＯＴｆ、ＮａＯＴｆ、ＫＯＴｆ、Ｍｅ$_3$ＳｉＯＴｆ、Ｃｕ（ＯＴｆ）$_2$、ＣｕＣｌ$_2$、ＹＣｌ$_3$、Ｙ（ＯＴｆ）$_3$、ＴｉＣｌ$_4$、ＴｉＢｒ$_4$、ＺｒＣｌ$_4$、ＺｒＢｒ$_4$、ＦｅＣｌ$_3$、ＦｅＢｒ$_3$、ＣｏＣｌ$_3$、ＣｏＢｒ$_3$などがあげられる。また、これらのルイス酸を固体に担持したものも同様に使用することができる。

【０７５５】

上記スキーム（１２）～（１６）で使用するブレンステッド酸としては、ｐ－トルエンスルホン酸、メタンスルホン酸、トリフルオロメタンスルホン酸、フルオロスルホン酸、カルボラン酸、トリフルオロ酢酸、（トリフルオロメタンスルホニル）イミド、トリス（トリフルオロメタンスルホニル）メタン、塩化水素、臭化水素、フッ化水素などがあげられる。また固体ブレンステッド酸としてアンバーリスト（商品名：ダウ・ケミカル）、ナフィオン（商品名：デュポン）、ゼオライト、テイカキュア（商品名：テイカ株式会社）などがあげられる。

【０７５６】

上記スキーム（１２）～（１６）で加えても良いアミンとしては、ジイソプロピルエチルアミン、トリエチルアミン、トリブチルアミン、１，４－ジアザビシクロ［２．２．２］オクタン、Ｎ，Ｎ－ジメチル－ｐ－トルイジン、Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリン、ピリジン、２，６－ルチジン、２，６－ジ－ｔ－ブチルアミンなどがあげられる。

【０７５７】

また上記スキーム（１２）～（１６）で使用する溶媒としては、ｏ－ジクロロベンゼン、クロロベンゼン、トルエン、ベンゼン、塩化メチレン、クロロホルム、ジクロロエチレン、ベンゾトリフルオリド、デカリン、シクロヘキサン、ヘキサン、ヘプタン、１，２，４－トリメチルベンゼン、キシレン、ジフェニルエーテル、アニソール、シクロペンチルメチルエーテル、テトラヒドロフラン、ジオキサン、メチル－ｔ－ブチルエーテルなどがあげられる。

【０７５８】

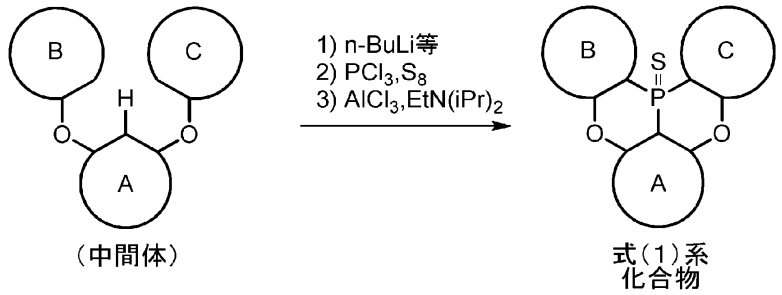
次に、例としてＹ^{1}がリンスルフィド、リンオキサイドまたはリン原子であり、Ｘ^{1}お

およびX^{2}が酸素原子である場合を下記スキーム（１７－１）、（１７－２）、（１８）～（１９）に示す。これまでと同様に、まずX^{1}とX^{2}の間の水素原子をｎ－ブチルリチウム等でオルトメタル化する。次いで、三塩化リン、硫黄の順に添加し、最後に三塩化アルミニウム等のルイス酸およびＮ，Ｎ－ジイソプロピルエチルアミン等のブレンステッド塩基を加えることで、タンデムホスファフリーデルクラフツ反応させ、Y^{1}がリンスルフィドである化合物を得ることができる。また、得られたリンスルフィド化合物をｍ－クロロ過安息香酸（ｍ－ＣＰＢＡ）で処理することでY^{1}がリンオキサイドである化合物を得ることができ、トリエチルホスフィンで処理することでY^{1}がリン原子である化合物を得ることができる。

【０７５９】

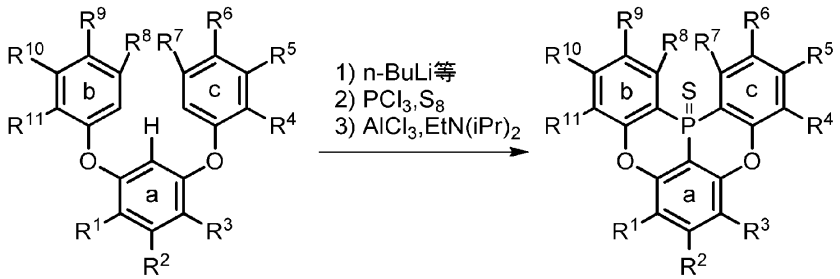
【化５６８】

スキーム（17－1）



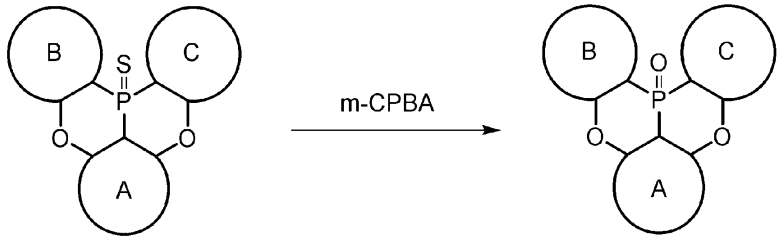
（中間体） 式（1）系化合物

スキーム（17－2）

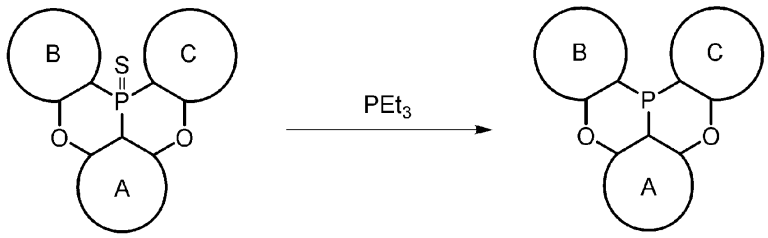


（中間体） 式（2）系化合物

スキーム（18）



スキーム（19）



【０７６０】

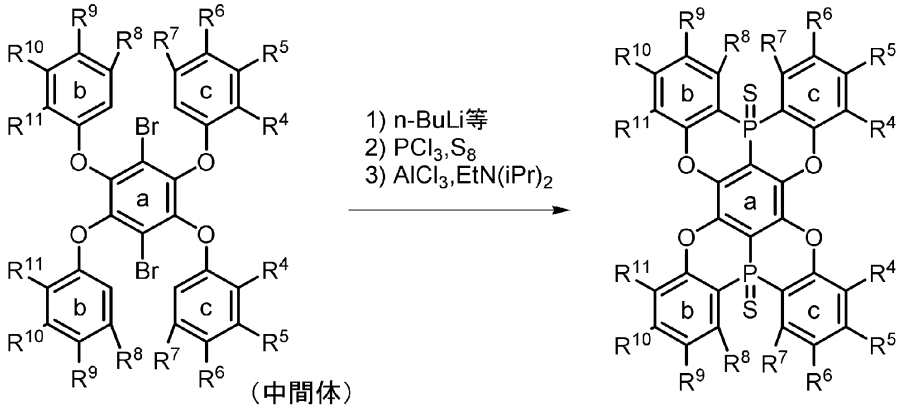
また、Y^{1}がリンスルフィド、X^{1}およびX^{2}が酸素原子の場合の多量体についても、上

記スキーム（６）および（７）のようにリチウムを導入したい位置に臭素原子や塩素原子等のハロゲンを導入し、ハロゲン－メタル交換によっても所望の位置へリチウムを導入することができる（下記スキーム（２０）、（２１）および（２２））。また、このようにしてできたＹ^{1}がリンスルフィド、Ｘ^{1}およびＸ^{2}が酸素原子の場合の多量体も、上記スキーム（１８）および（１９）のようにして、ｍ－クロロ過安息香酸（ｍ－ＣＰＢＡ）で処理することでＹ^{1}がリンオキサイドである化合物を得ることができ、トリエチルホスフィンで処理することでＹ^{1}がリン原子である化合物を得ることができる。

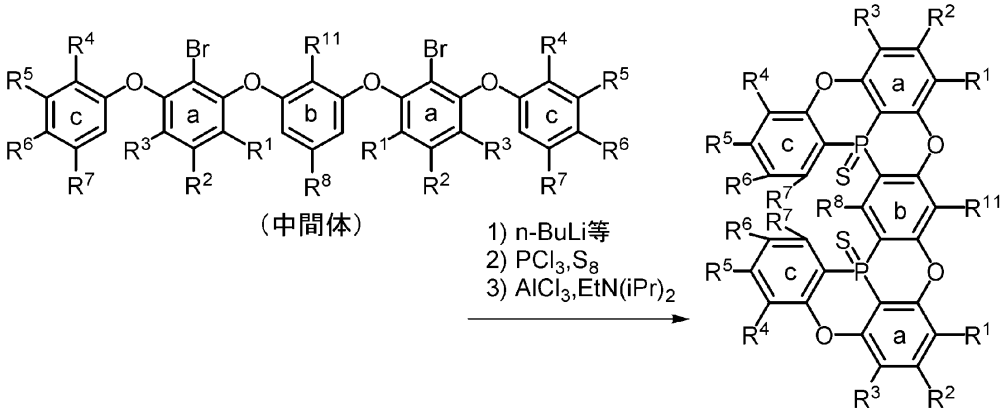
【０７６１】

【化５６９】

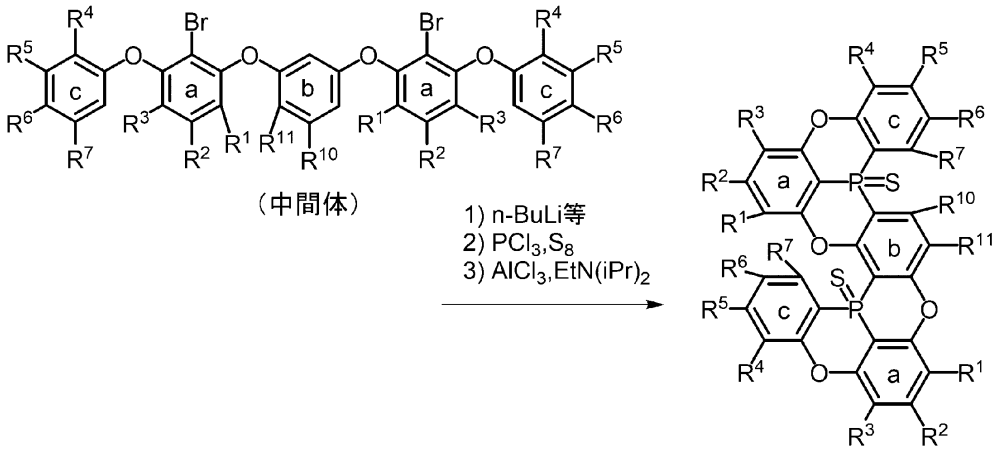
スキーム(20)



スキーム(21)



スキーム(22)



【０７６２】

ここでは、Y^1が、B、P、P＝OまたはP＝Sであり、X^1およびX^2がOまたはNRである例を記載したが、原料を適宜変更することで、Y^1が、Al、Ga、As、Si－RまたはGe－Rである化合物や、X^1およびX^2がSである化合物も合成することができる。

【０７６３】

以上の反応で用いられる溶媒の具体例は、ｔ－ブチルベンゼンやキシレンなどである。

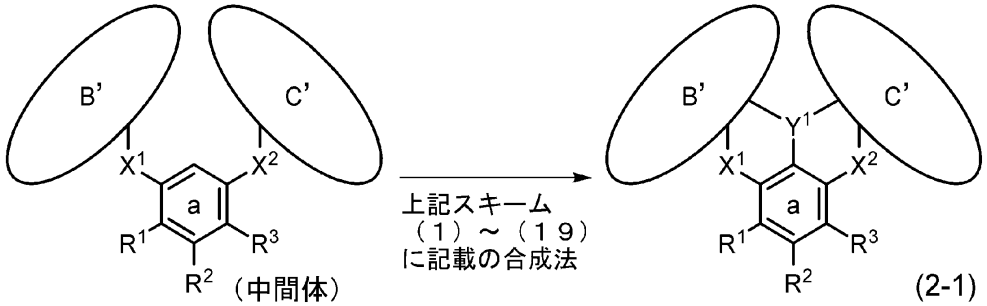
【０７６４】

また、式（２）では、ａ環、ｂ環およびｃ環の置換基R^1～R^{11}のうちの隣接する基同士が結合してａ環、ｂ環またはｃ環と共にアリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素はアリールまたはヘテロアリールで置換されていてもよい。したがって、式（２）で表される多環芳香族化合物は、ａ環、ｂ環およびｃ環における置換基の相互の結合形態によって、下記スキーム（２３）および（２４）の式（２－１）および式（２－２）に示すように、化合物を構成する環構造が変化する。これらの化合物は下記スキーム（２３）および（２４）に示す中間体に上記スキーム（１）～（１９）で示した合成法を適用することで合成することができる。

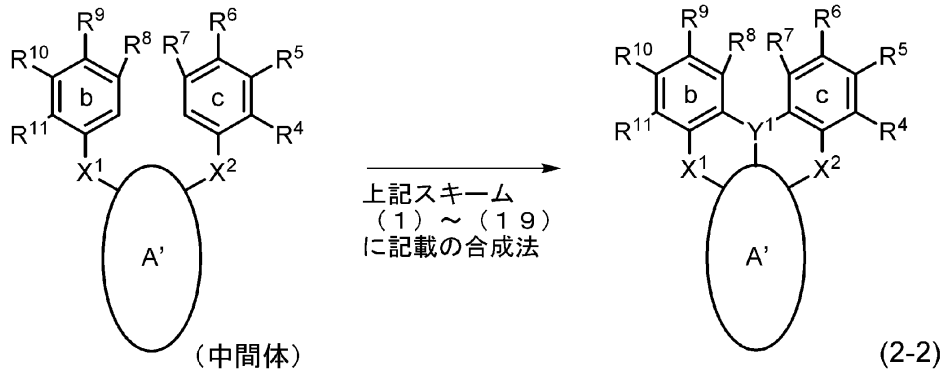
【０７６５】

【化５７０】

スキーム(23)



スキーム(24)



【０７６６】

式（２－１）および式（２－２）中のＡ’環、Ｂ’環およびＣ’環は、置換基R^1～R^{11}のうちの隣接する基同士が結合して、それぞれａ環、ｂ環およびｃ環と共に形成したアリール環またはヘテロアリール環を示す（ａ環、ｂ環またはｃ環に他の環構造が縮合してできた縮合環ともいえる）。なお、式では示してはいないが、ａ環、ｂ環およびｃ環の全てがＡ’環、Ｂ’環およびＣ’環に変化した化合物もある。

【０７６７】

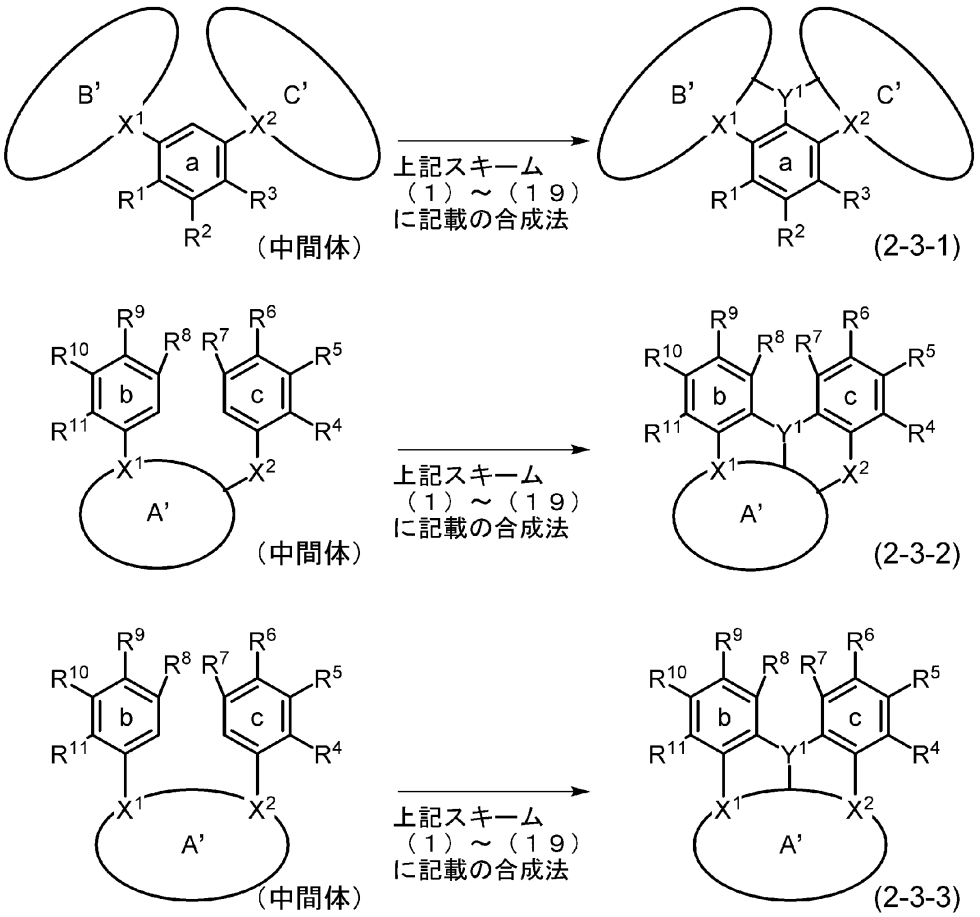
また、式（２）における「前記＞Ｎ－Ｒ、＞Ｓｉ（－Ｒ）$_2$および＞Ｃ（－Ｒ）$_2$の少なくとも１つにおけるＲは、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｃ（－Ｒ）$_2$－または単結合により、前記ａ環、ｂ環およびｃ環の少なくとも１つの環と結合している」との規定は、下記スキー

ム（２５）の式（２－３－１）で表される、Ｘ^{1}やＸ^{2}が縮合環Ｂ’および縮合環Ｃ’に取り込まれた環構造を有する化合物や、式（２－３－２）や式（２－３－３）で表される、Ｘ^{1}やＸ^{2}が縮合環Ａ’に取り込まれた環構造を有する化合物で表現することができる。これらの化合物は下記スキーム（２５）に示す中間体に上記スキーム（１）～（１９）で示した合成法を適用することで合成することができる。

【０７６８】

【化５７１】

スキーム(25)



【０７６９】

また、上記スキーム（１７－１）（１７－２）および（２０）～（２５）の合成法では、三塩化ホウ素や三臭化ホウ素等を加える前に、Ｘ^{1}とＸ^{2}の間の水素原子（またはハロゲン原子）をブチルリチウム等でオルトメタル化することで、タンデムヘテロフリーデルクラフツ反応させた例を示したが、ブチルリチウム等を用いたオルトメタル化を行わずに、三塩化ホウ素や三臭化ホウ素等の添加により反応を進行させることもできる。

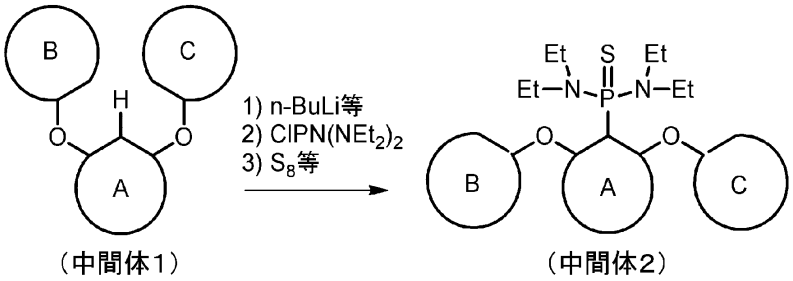
【０７７０】

また、Ｙ^{1}がリン系の場合には、下記スキーム（２６）や（２７）に示すように、Ｘ^{1}とＸ^{2}（下記式ではＯ）の間の水素原子をｎ－ブチルリチウム、ｓｅｃ－ブチルリチウムまたはｔ－ブチルリチウム等でオルトメタル化し、次いで、ビスジエチルアミノクロロホスフィンを加え、リチウム－リンの金属交換を行った後、三塩化アルミニウム等のルイス酸を加えることで、タンデムホスファフリーデルクラフツ反応させ、目的物を得ることができる。この反応方法は国際公開第２０１０／１０４０４７号（例えば２７頁）にも記載されている。

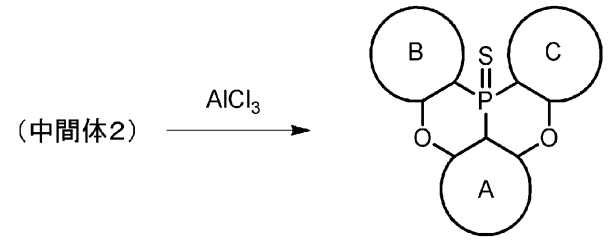
【０７７１】

【化５７２】

スキーム(26)

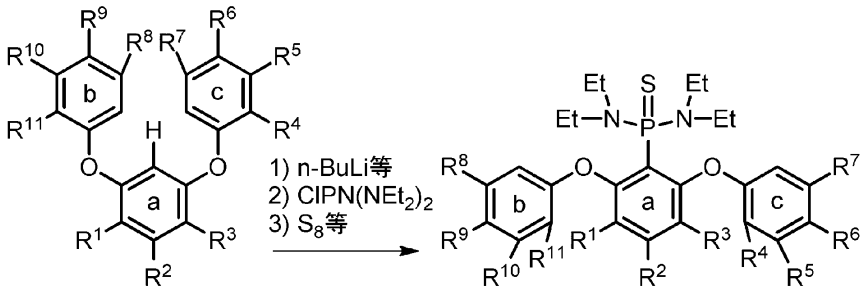


（中間体1）　（中間体2）

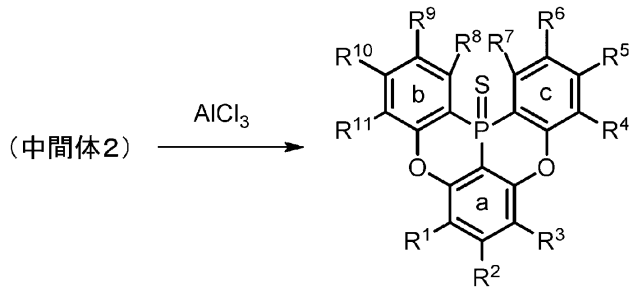


式(1)系
化合物

スキーム(27)



（中間体1）　（中間体2）



式(2)系
化合物

【０７７２】

なお、上記スキーム（２６）や（２７）においても、ブチルリチウム等のオルトメタル化試薬を中間体１のモル量に対して２倍、３倍のモル量を使用することで多量体化合物を合成することができる。また、リチウム等のメタルを導入したい位置にあらかじめ臭素原子や塩素原子等のハロゲンを導入しておき、ハロゲン－メタル交換することで所望の位置へメタルを導入することができる。

【０７７３】

また、シクロアルカンで縮合された化合物については、各スキーム中の反応工程のどこかで、シクロアルカン縮合された原料を用いたり、シクロアルカンを縮合する工程を追加

したりすることで、所望の位置がシクロアルカン縮合された化合物を製造することができる。

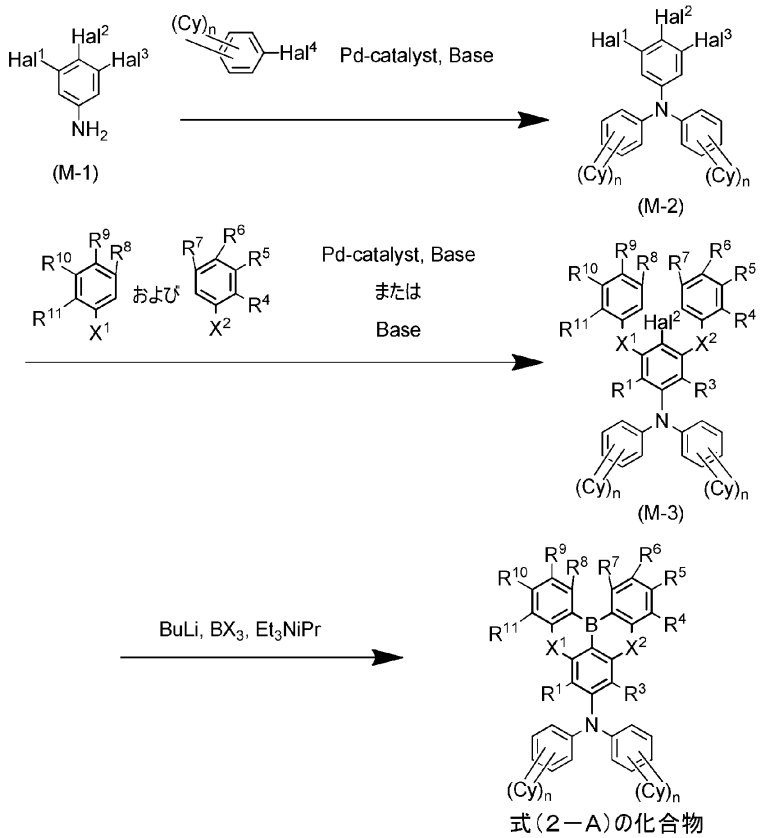
【０７７４】

その他、式（２－Ａ）で表される多環芳香族化合物については、下記スキーム（２８）のように、シクロアルカン縮合された中間体を合成し、それを環化させることで所望の位置がシクロアルカンで縮合された多環芳香族化合物を合成できる。スキーム（２８）中、Ｘはハロゲンまたは水素を表し、その他の符号の定義は式（２）中の符号の定義と同じである。

【０７７５】

【化５７３】

スキーム(28)



式(2－A)の化合物

【０７７６】

スキーム（２８）中の環化前の中間体も、Ｂｕｃｈｗａｌｄ－Ｈａｒｔｗｉｇ反応や鈴木カップリング反応、または求核置換反応やＵｌｌｍａｎｎ反応などによるエーテル化反応などを適宜組み合わせることで、所望の置換基を有する中間体を合成することができる。これらの反応において、シクロアルカン縮合された前駆体となる原料は市販品を利用することもできる。

【０７７７】

シクロアルカン縮合されたジフェニルアミノを有する式（２－Ａ）の化合物は、例えば次のような方法でも合成できる。すなわち、シクロアルカン縮合ブロモベンゼンとトリハロゲン化アニリンとをＢｕｃｈｗａｌｄ－Ｈａｒｔｗｉｇ反応のようなアミノ化反応によってシクロアルカン縮合されたジフェニルアミノを導入した後、X^1、X^2がＮ－Ｒである場合にはＢｕｃｈｗａｌｄ－Ｈａｒｔｗｉｇ反応のようなアミノ化反応にて、X^1、X^2がＯである場合にはフェノールを用いたエーテル化によって中間体（Ｍ－３）へと誘導し、その後、例えばブチルリチウムのようなメタル化試薬を作用させトランスメタル化した後、三臭化ホウ素のようなハロゲン化ホウ素を作用させた後、ジエチルイソプロピルアミ

ンのようなブレンステッド塩基を作用させることによるタンデムボラフリーデルクラフツ反応によって、式（２－Ａ）の化合物を合成することができる。これらの反応は、その他のシクロアルカン縮合された化合物にも応用することができる。

【０７７８】

なお、上記スキームで使用するオルトメタル化試薬としては、メチルリチウム、ｎ－ブチルリチウム、ｓｅｃ－ブチルリチウム、ｔ－ブチルリチウム等のアルキルリチウム、リチウムジイソプロピルアミド、リチウムテトラメチルピペリジド、リチウムヘキサメチルジシラジド、カリウムヘキサメチルジシラジドなどの有機アルカリ化合物、有機溶媒分散Ｎａ等の分散アルカリ金属があげられる。

【０７７９】

なお、上記スキームで使用するメタル－Y^1の金属交換試薬としては、Y^1の三フッ化物、Y^1の三塩化物、Y^1の三臭化物、Y^1の三ヨウ化物などのY^1のハロゲン化物、ＣＩＰＮ（NEt_2）$_2$などのY^1のアミノ化ハロゲン化物、Y^1のアルコキシ化物、Y^1のアリールオキシ化物などがあげられる。

【０７８０】

なお、上記スキームで使用するブレンステッド塩基としては、Ｎ，Ｎ－ジイソプロピルエチルアミン、トリエチルアミン、２，２，６，６－テトラメチルピペリジン、１，２，２，６，６－ペンタメチルピペリジン、Ｎ，Ｎ－ジメチルアニリン、Ｎ，Ｎ－ジメチルトルイジン、２，６－ルチジン、テトラフェニルホウ酸ナトリウム、テトラフェニルホウ酸カリウム、トリフェニルボラン、テトラフェニルシラン、Ar_4BNa、Ar_4BK、Ar_3B、Ar_4Si（なお、Ａｒはフェニルなどのアリール）などがあげられる。

【０７８１】

上記スキームで使用するルイス酸としては、$AlCl_3$、$AlBr_3$、AlF_3、BF_3・OEt_2、BCl_3、BBr_3、$GaCl_3$、$GaBr_3$、$InCl_3$、$InBr_3$、In（OTf）$_3$、$SnCl_4$、$SnBr_4$、AgOTf、$ScCl_3$、Sc（OTf）$_3$、$ZnCl_2$、$ZnBr_2$、Zn（OTf）$_2$、$MgCl_2$、$MgBr_2$、Mg（OTf）$_2$、LiOTf、NaOTf、KOTf、Me_3SiOTf、Cu（OTf）$_2$、$CuCl_2$、YCl_3、Y（OTf）$_3$、$TiCl_4$、$TiBr_4$、$ZrCl_4$、$ZrBr_4$、$FeCl_3$、$FeBr_3$、$CoCl_3$、$CoBr_3$などがあげられる。

【０７８２】

上記スキームでは、タンデムヘテロフリーデルクラフツ反応の促進のためにブレンステッド塩基またはルイス酸を使用してもよい。ただし、Y^1の三フッ化物、Y^1の三塩化物、Y^1の三臭化物、Y^1の三ヨウ化物などのY^1のハロゲン化物を用いた場合は、芳香族求電子置換反応の進行とともに、フッ化水素、塩化水素、臭化水素、ヨウ化水素といった酸が生成するため、酸を捕捉するブレンステッド塩基の使用が効果的である。一方、Y^1のアミノ化ハロゲン化物、Y^1のアルコキシ化物を用いた場合は、芳香族求電子置換反応の進行とともに、アミン、アルコールが生成するために、多くの場合、ブレンステッド塩基を使用する必要はないが、アミノやアルコキシの脱離能が低いために、その脱離を促進するルイス酸の使用が効果的である。

【０７８３】

また、本発明の多環芳香族化合物やその多量体には、少なくとも一部の水素原子が重水素やシアノで置換されている化合物やフッ素や塩素などのハロゲンで置換されている化合物も含まれるが、このような化合物などは所望の位置が重水素化、シアノ化、フッ素化または塩素化された原料を用いることで、上記と同様に合成することができる。

【０７８４】

３．有機デバイス

本発明に係るアミノ置換多環芳香族化合物は、有機デバイス用材料として用いることができる。有機デバイスとしては、例えば、有機電界発光素子、有機電界効果トランジスタまたは有機薄膜太陽電池などがあげられる。

【０７８５】

３－１．有機電界発光素子

以下に、本実施形態に係る有機ＥＬ素子について図面に基づいて詳細に説明する。図１は、本実施形態に係る有機ＥＬ素子を示す概略断面図である。

【０７８６】

＜有機電界発光素子の構造＞

図１に示された有機ＥＬ素子１００は、基板１０１と、基板１０１上に設けられた陽極１０２と、陽極１０２の上に設けられた正孔注入層１０３と、正孔注入層１０３の上に設けられた正孔輸送層１０４と、正孔輸送層１０４の上に設けられた発光層１０５と、発光層１０５の上に設けられた電子輸送層１０６と、電子輸送層１０６の上に設けられた電子注入層１０７と、電子注入層１０７の上に設けられた陰極１０８とを有する。

【０７８７】

なお、有機ＥＬ素子１００は、作製順序を逆にして、例えば、基板１０１と、基板１０１上に設けられた陰極１０８と、陰極１０８の上に設けられた電子注入層１０７と、電子注入層１０７の上に設けられた電子輸送層１０６と、電子輸送層１０６の上に設けられた発光層１０５と、発光層１０５の上に設けられた正孔輸送層１０４と、正孔輸送層１０４の上に設けられた正孔注入層１０３と、正孔注入層１０３の上に設けられた陽極１０２とを有する構成としてもよい。

【０７８８】

上記各層すべてがなくてはならないわけではなく、最小構成単位を陽極１０２と発光層１０５と陰極１０８とからなる構成として、正孔注入層１０３、正孔輸送層１０４、電子輸送層１０６、電子注入層１０７は任意に設けられる層である。また、上記各層は、それぞれ単一層からなってもよいし、複数層からなってもよい。

【０７８９】

有機ＥＬ素子を構成する層の態様としては、上述する「基板／陽極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極」の構成態様の他に、「基板／陽極／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極」、「基板／陽極／正孔注入層／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極」、「基板／陽極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／陰極」、「基板／陽極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／陰極」、「基板／陽極／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極」、「基板／陽極／正孔輸送層／発光層／電子注入層／陰極」、「基板／陽極／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／陰極」、「基板／陽極／正孔注入層／発光層／電子注入層／陰極」、「基板／陽極／正孔注入層／発光層／電子輸送層／陰極」、「基板／陽極／発光層／電子輸送層／陰極」、「基板／陽極／発光層／電子注入層／陰極」の構成態様であってもよい。

【０７９０】

＜有機電界発光素子における基板＞

基板１０１は、有機ＥＬ素子１００の支持体であり、通常、石英、ガラス、金属、プラスチックなどが用いられる。基板１０１は、目的に応じて板状、フィルム状、またはシート状に形成され、例えば、ガラス板、金属板、金属箔、プラスチックフィルム、プラスチックシートなどが用いられる。なかでも、ガラス板、および、ポリエステル、ポリメタクリレート、ポリカーボネート、ポリスルホンなどの透明な合成樹脂製の板が好ましい。ガラス基板であれば、ソーダライムガラスや無アルカリガラスなどが用いられ、また、厚みも機械的強度を保つのに十分な厚みがあればよいので、例えば、０．２ｍｍ以上あればよい。厚さの上限値としては、例えば、２ｍｍ以下、好ましくは１ｍｍ以下である。ガラスの材質については、ガラスからの溶出イオンが少ない方がよいので無アルカリガラスの方が好ましいが、SiO_2などのバリアコートを施したソーダライムガラスも市販されているのでこれを使用することができる。また、基板１０１には、ガスバリア性を高めるために、少なくとも片面に緻密なシリコン酸化膜などのガスバリア膜を設けてもよく、特にガスバリア性が低い合成樹脂製の板、フィルムまたはシートを基板１０１として用いる場合にはガスバリア膜を設けるのが好ましい。

【０７９１】

＜有機電界発光素子における陽極＞
陽極１０２は、発光層１０５へ正孔を注入する役割を果たす。なお、陽極１０２と発光層１０５との間に正孔注入層１０３および／または正孔輸送層１０４が設けられている場合には、これらを介して発光層１０５へ正孔を注入することになる。
【０７９２】
陽極１０２を形成する材料としては、無機化合物および有機化合物があげられる。無機化合物としては、例えば、金属（アルミニウム、金、銀、ニッケル、パラジウム、クロムなど）、金属酸化物（インジウムの酸化物、スズの酸化物、インジウム－スズ酸化物（ＩＴＯ）、インジウム－亜鉛酸化物（ＩＺＯ）など）、ハロゲン化金属（ヨウ化銅など）、硫化銅、カーボンブラック、ＩＴＯガラスやネサガラスなどがあげられる。有機化合物としては、例えば、ポリ（３－メチルチオフェン）などのポリチオフェン、ポリピロール、ポリアニリンなどの導電性ポリマーなどがあげられる。その他、有機ＥＬ素子の陽極として用いられている物質の中から適宜選択して用いることができる。
【０７９３】
透明電極の抵抗は、発光素子の発光に十分な電流が供給できればよいので限定されないが、発光素子の消費電力の観点からは低抵抗であることが望ましい。例えば、３００Ω／□以下のＩＴＯ基板であれば素子電極として機能するが、現在では１０Ω／□程度の基板の供給も可能になっていることから、例えば１００～５Ω／□、好ましくは５０～５Ω／□の低抵抗品を使用することが特に望ましい。ＩＴＯの厚みは抵抗値に合わせて任意に選ぶ事ができるが、通常５０～３００ｎｍの間で用いられることが多い。
【０７９４】
＜有機電界発光素子における正孔注入層、正孔輸送層＞
正孔注入層１０３は、陽極１０２から移動してくる正孔を、効率よく発光層１０５内または正孔輸送層１０４内に注入する役割を果たす。正孔輸送層１０４は、陽極１０２から注入された正孔または陽極１０２から正孔注入層１０３を介して注入された正孔を、効率よく発光層１０５に輸送する役割を果たす。正孔注入層１０３および正孔輸送層１０４は、それぞれ、正孔注入・輸送材料の一種または二種以上を積層、混合するか、正孔注入・輸送材料と高分子結着剤の混合物により形成される。また、正孔注入・輸送材料に塩化鉄（III）のような無機塩を添加して層を形成してもよい。
【０７９５】
正孔注入・輸送材料としては電界を与えられた電極間において正極からの正孔を効率よく注入・輸送することが必要で、正孔注入効率が高く、注入された正孔を効率よく輸送することが望ましい。そのためにはイオン化ポテンシャルが小さく、しかも正孔移動度が大きく、さらに安定性に優れ、トラップとなる不純物が製造時および使用時に発生しにくい物質であることが好ましい。
【０７９６】
正孔注入層１０３および正孔輸送層１０４を形成する材料としては、光導電材料において、正孔の電荷輸送材料として従来から慣用されている化合物、ｐ型半導体、有機ＥＬ素子の正孔注入層および正孔輸送層に使用されている公知の化合物の中から任意の化合物を選択して用いることができる。それらの具体例は、カルバゾール誘導体（Ｎ－フェニルカルバゾール、ポリビニルカルバゾールなど）、ビス（Ｎ－アリールカルバゾール）またはビス（Ｎ－アルキルカルバゾール）などのビスカルバゾール誘導体、トリアリールアミン誘導体（芳香族第３級アミノを主鎖または側鎖に持つポリマー、１，１－ビス（４－ジ－ｐ－トリルアミノフェニル）シクロヘキサン、Ｎ，Ｎ’－ジフェニル－Ｎ，Ｎ’－ジ（３－メチルフェニル）－４，４’－ジアミノビフェニル、Ｎ，Ｎ’－ジフェニル－Ｎ，Ｎ’－ジナフチル－４，４’－ジアミノビフェニル、Ｎ，Ｎ’－ジフェニル－Ｎ，Ｎ’－ジ（３－メチルフェニル）－４，４’－ジフェニル－１，１’－ジアミン、Ｎ，Ｎ’－ジナフチル－Ｎ，Ｎ’－ジフェニル－４，４’－ジフェニル－１，１’－ジアミン、N^4，$N^{4'}$－ジフェニル－N^4，$N^{4'}$－ビス（９－フェニル－９Ｈ－カルバゾール－３－イル）－［１，１’－ビフェニル］－４，４’－ジアミン、N^4，N^4，$N^{4'}$，$N^{4'}$－テトラ［１，１’－ビフェニル］－４－

イル）－［１，１’－ビフェニル］－４，４’－ジアミン、４，４’，４”－トリス（３－メチルフェニル（フェニル）アミノ）トリフェニルアミン、Ｎ－（［１，１’－ビフェニル］－４－イル）－９，９－ジメチル－Ｎ－（４－（９－フェニル－９Ｈ－カルバゾール－３－イル）フェニル）－９Ｈ－フルオレン－２－アミン、Ｎ，Ｎ－ビス（４－（ジベンゾ［ｂ，ｄ］フラン－４－イル）フェニル）－［１，１’：４’，１”－テルフェニル］－４－アミンなどのトリフェニルアミン誘導体、スターバーストアミン誘導体など）、スチルベン誘導体、フタロシアニン誘導体（無金属、銅フタロシアニンなど）、ピラゾリン誘導体、ヒドラゾン系化合物、ベンゾフラン誘導体やチオフェン誘導体、オキサジアゾール誘導体、キノキサリン誘導体（例えば、１，４，５，８，９，１２－ヘキサアザトリフェニレン－２，３，６，７，１０，１１－ヘキサカルボニトリルなど）、ポルフィリン誘導体などの複素環化合物、ポリシランなどである。ポリマー系では前記単量体を側鎖に有するポリカーボネートやスチレン誘導体、ポリビニルカルバゾールおよびポリシランなどが好ましいが、発光素子の作製に必要な薄膜を形成し、陽極から正孔が注入できて、さらに正孔を輸送できる化合物であれば特に限定されない。

【０７９７】

また、有機半導体の導電性は、ドーピングにより、強い影響を受けることも知られている。有機半導体マトリックス物質は、電子供与性の良好な化合物、または、電子受容性の良好な化合物から構成されている。電子供与物質のドーピングのために、テトラシアノキノンジメタン（ＴＣＮＱ）または２，３，５，６－テトラフルオロテトラシアノ－１，４－ベンゾキノンジメタン（Ｆ４ＴＣＮＱ）などの強い電子受容体が知られている（例えば、文献「M.Pfeiffer,A.Beyer,T.Fritz,K.Leo,Appl.Phys.Lett.,73(22),3202-3204(1998)」および文献「J.Blochwitz,M.Pfeiffer,T.Fritz,K.Leo,Appl.Phys.Lett.,73（6）,729-731（1998）」を参照）。これらは、電子供与型ベース物質（正孔輸送物質）における電子移動プロセスによって、いわゆる正孔を生成する。正孔の数および移動度によって、ベース物質の伝導性が、かなり大きく変化する。正孔輸送特性を有するマトリックス物質としては、例えばベンジジン誘導体（ＴＰＤなど）またはスターバーストアミン誘導体（ＴＤＡＴＡなど）、または、特定の金属フタロシアニン（特に、亜鉛フタロシアニン（ＺｎＰｃ）など）が知られている（特開２００５－１６７１７５号公報）。

【０７９８】

上述した正孔注入層用材料および正孔輸送層用材料は、これらに反応性置換基が置換した反応性化合物をモノマーとして高分子化させた高分子化合物、もしくはその高分子架橋体、または、主鎖型高分子と前記反応性化合物とを反応させたペンダント型高分子化合物、もしくはそのペンダント型高分子架橋体としても、正孔層用材料に用いることができる。この場合の反応性置換基としては、式（１）で表される多環芳香族化合物での説明を引用できる。

このような高分子化合物および高分子架橋体の用途の詳細については後述する。

【０７９９】

＜有機電界発光素子における発光層＞

発光層１０５は、電界を与えられた電極間において、陽極１０２から注入された正孔と、陰極１０８から注入された電子とを再結合させることにより発光する層である。発光層１０５を形成する材料としては、正孔と電子との再結合によって励起されて発光する化合物（発光性化合物）であればよく、安定な薄膜形状を形成することができ、かつ、固体状態で強い発光（蛍光）効率を示す化合物であるのが好ましい。本発明では、発光層用の材料として、ホスト材料と、例えばドーパント材料としての式（１）で表される多環芳香族化合物とを用いることができる。

【０８００】

発光層は単一層でも複数層からなってもどちらでもよく、それぞれ発光層用材料（ホスト材料、ドーパント材料）により形成される。ホスト材料とドーパント材料は、それぞれ一種類であっても、複数の組み合わせであっても、いずれでもよい。ドーパント材料はホスト材料の全体に含まれていても、部分的に含まれていても、いずれであってもよい。ド

ーピング方法としては、ホスト材料との共蒸着法によって形成することができるが、ホスト材料と予め混合してから同時に蒸着してもよい。

【０８０１】

ホスト材料の使用量はホスト材料の種類によって異なり、そのホスト材料の特性に合わせて決めればよい。ホスト材料の使用量の目安は、好ましくは発光層用材料全体の５０～９９．９９９質量％であり、より好ましくは８０～９９．９５質量％であり、さらに好ましくは９０～９９．９質量％である。

【０８０２】

ドーパント材料の使用量はドーパント材料の種類によって異なり、そのドーパント材料の特性に合わせて決めればよい。ドーパントの使用量の目安は、好ましくは発光層用材料全体の０．００１～５０質量％であり、より好ましくは０．０５～２０質量％であり、さらに好ましくは０．１～１０質量％である。上記の範囲であれば、例えば、濃度消光現象を防止できるという点で好ましい。また耐久性の観点からドーパント材料の水素原子は一部、あるいは全部が重水素化されていることも好ましい。

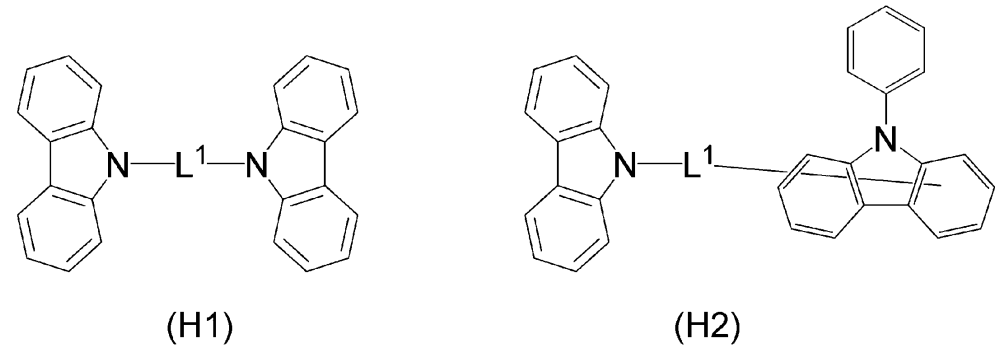
【０８０３】

ホスト材料としては、以前から発光体として知られていたアントラセン、ピレン、ジベンゾクリセンまたはフルオレンなどの縮合環誘導体、ビススチリルアントラセン誘導体やジスチリルベンゼン誘導体などのビススチリル誘導体、テトラフェニルブタジエン誘導体、シクロペンタジエン誘導体、下記式（Ｈ１）、（Ｈ２）および（Ｈ３）のいずれかで表される化合物などがあげられる。アントラセン系化合物、フルオレン系化合物またはジベンゾクリセン系化合物、下記式（Ｈ１）、（Ｈ２）および（Ｈ３）のいずれかで表される化合物が好ましく、アントラセン系化合物または下記式（Ｈ１）、（Ｈ２）および（Ｈ３）のいずれかで表される化合物がより好ましい。また、耐久性の観点からホスト材料は一部、あるいは全部の水素原子は一部、あるいは全部が重水素化されていることも好ましい。さらに、重水素化された一部あるいは全部の水素原子が重水素化されたホスト化合物と、重水素化された一部あるいは全部の水素原子が重水素化されたドーパント化合物を組み合わせて発光層とすることも好ましい。

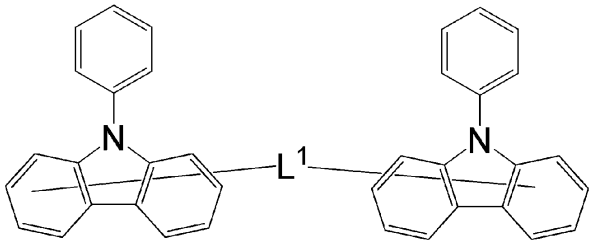
【０８０４】

＜式（Ｈ１）、（Ｈ２）および（Ｈ３）のいずれかで表される化合物＞

【化５７４】



(H1)　　(H2)



(H3)

【０８０５】

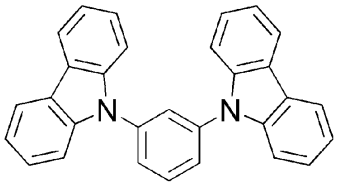
上記式（Ｈ１）、（Ｈ２）および（Ｈ３）中、Ｌ^{1}は炭素数６～２４のアリーレン、炭素数２～２４のヘテロアリーレン、炭素数６～２４のヘテロアリーレンアリーレンおよび炭素数６～２４のアリーレンヘテロアリーレンアリーレンであり、炭素数６～１６のアリーレンが好ましく、炭素数６～１２のアリーレンがより好ましく、炭素数６～１０のアリーレンが特に好ましく、具体的には、ベンゼン環、ビフェニル環、テルフェニル環およびフルオレン環などの二価の基があげられる。ヘテロアリーレンとしては、炭素数２～２４のヘテロアリーレンが好ましく、炭素数２～２０のヘテロアリーレンがより好ましく、炭素数２～１５のヘテロアリーレンがさらに好ましく、炭素数２～１０のヘテロアリーレンが特に好ましく、具体的には、ピロール環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、イミダゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、トリアゾール環、テトラゾール環、ピラゾール環、ピリジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、ピラジン環、トリアジン環、インドール環、イソインドール環、１Ｈ－インダゾール環、ベンゾイミダゾール環、ベンゾオキサゾール環、ベンゾチアゾール環、１Ｈ－ベンゾトリアゾール環、キノリン環、イソキノリン環、シンノリン環、キナゾリン環、キノキサリン環、フタラジン環、ナフチリジン環、プリン環、プテリジン環、カルバゾール環、アクリジン環、フェノキサチイン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、フェナジン環、インドリジン環、フラン環、ベンゾフラン環、イソベンゾフラン環、ジベンゾフラン環、チオフェン環、ベンゾチオフェン環、ジベンゾチオフェン環、フラザン環、オキサジアゾール環およびチアントレン環などの二価の基があげられる。

上記各式で表される化合物における少なくとも１つの水素は、炭素数１～６のアルキル、シアノ、ハロゲンまたは重水素で置換されていてもよい。

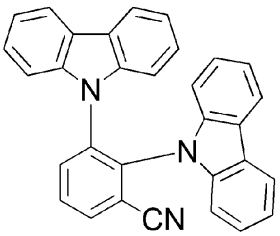
【０８０６】

好ましい具体例としては、以下に列挙したいずれかの構造式で表される化合物があげられる。なお、以下の構造式において、Ｍｅはメチルである。以下に列挙した構造式においては、少なくとも１つの水素が、ハロゲン、シアノ、炭素数１～４のアルキル（例えばメチルやｔ－ブチル）、フェニルまたはナフチルなどで置換されていてもよい。

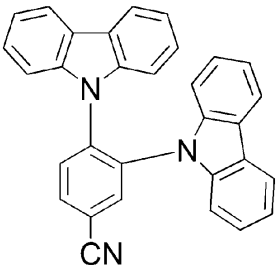
【０８０７】
【化５７５】



(H1-1201)

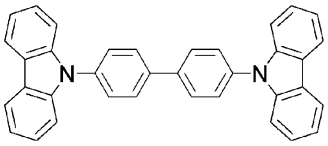


(H1-1202)

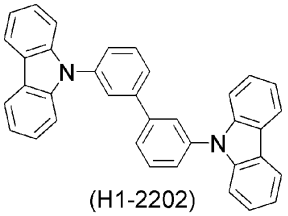


(H1-1203)

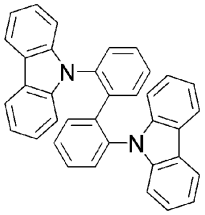
【０８０８】
【化５７６】



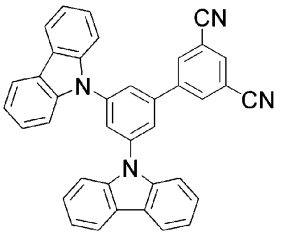
(H1-2201)



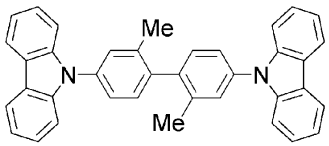
(H1-2202)
(mCBP)



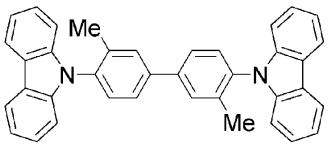
(H1-2203)



(H1-2203)



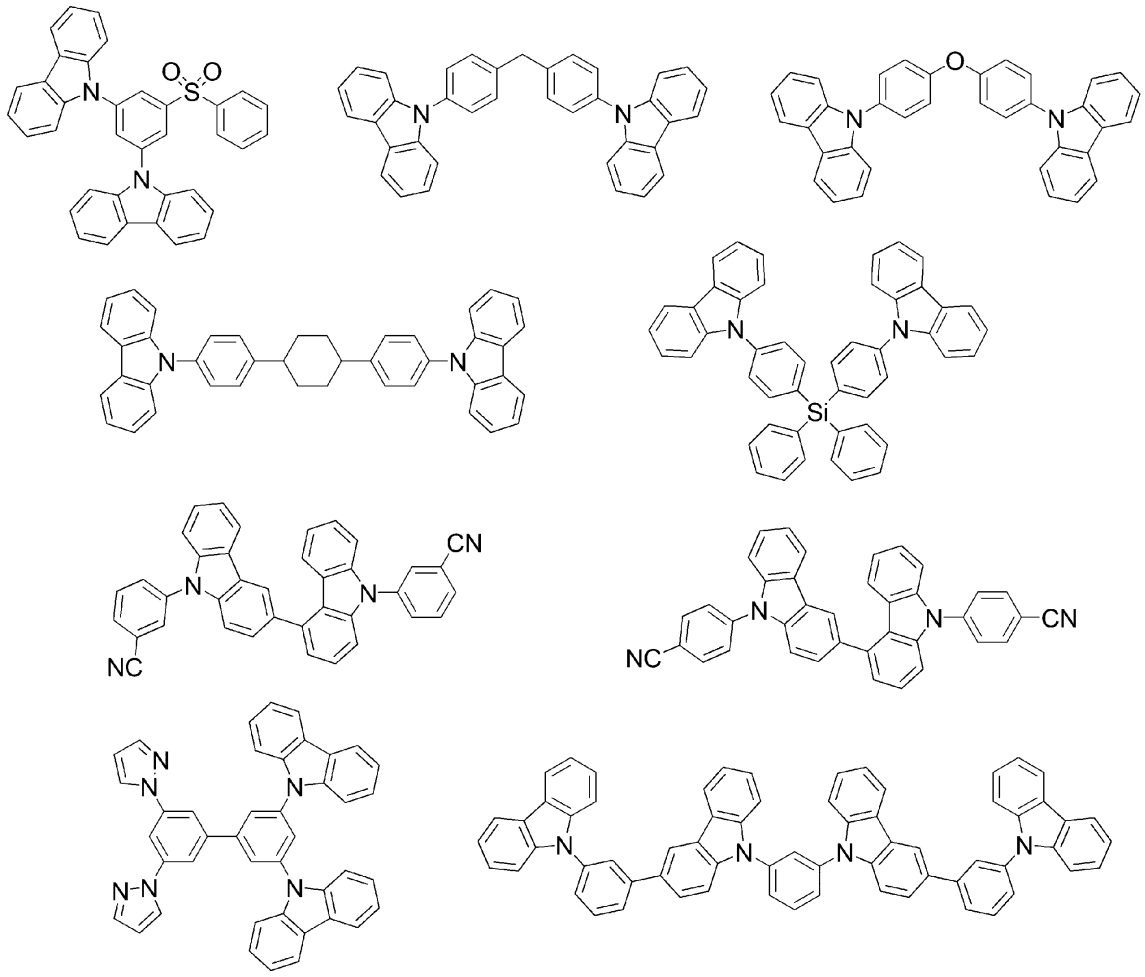
(H1-2204)



(H1-2205)

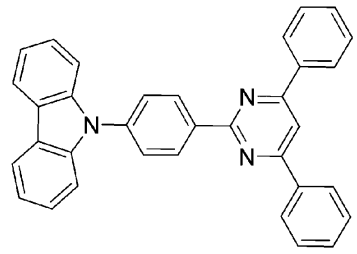
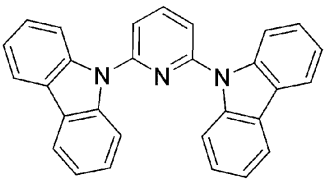
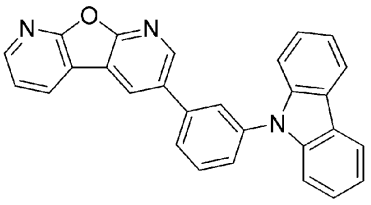
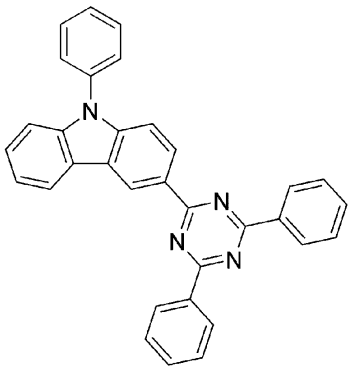
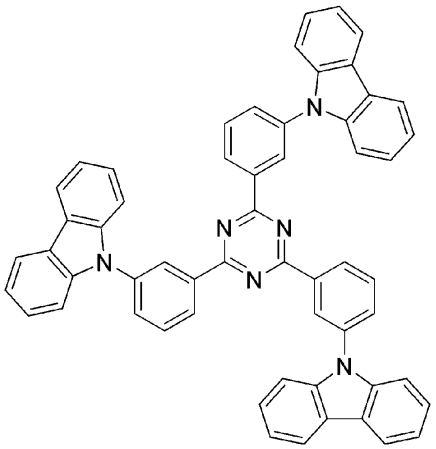
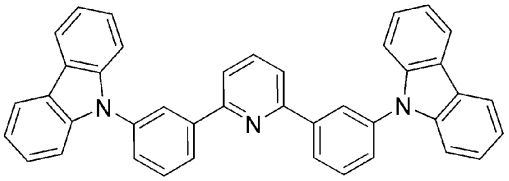
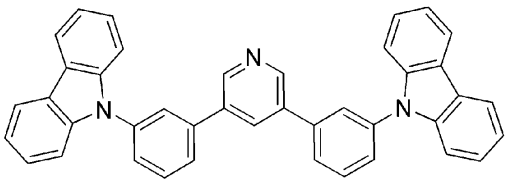
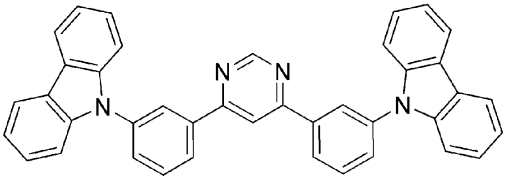
【０８０９】

【化５７７】



【０８１０】

【化５７８】

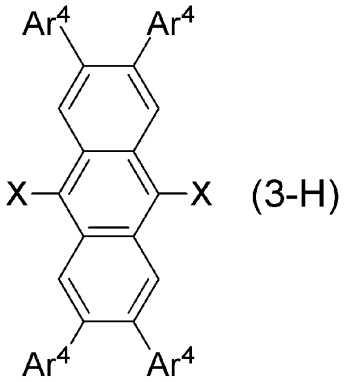









【０８１１】

＜アントラセン系化合物＞

ホストとしてのアントラセン系化合物は、例えば下記式（３－Ｈ）または下記式（３－２－Ｈ）で表される化合物である。

【化５７９】



【０８１２】

式（３－Ｈ）中、

ＸおよびＡｒ^{4}は、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいジアリールアミノ、置換されていてもよいジヘテロアリールアミノ、置換されていてもよいアリールヘテロアリールアミノ、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよいアルケニル、置換されていてもよいアルコキシ、置換されていてもよいアリールオキシ、置換されていてもよいアリールチオまたは置換されていてもよいシリルであり、全てのＸおよびＡｒ^{4}は同時に水素になることはなく、

式（３－Ｈ）で表される化合物における少なくとも１つの水素はハロゲン、シアノ、重水素または置換されていてもよいヘテロアリールで置換されていてもよい。

【０８１３】

また、式（３－Ｈ）で表される構造を単位構造として多量体（好ましくは二量体）を形成してもよい。この場合、例えば式（３－Ｈ）で表される単位構造同士がＸを介して結合する形態があげられ、このＸとしては単結合、アリーレン（フェニレン、ビフェニレンおよびナフチレン等）およびヘテロアリーレン（ピリジン環、ジベンゾフラン環、ジベンゾチオフェン環、カルバゾール環、ベンゾカルバゾール環およびフェニル置換カルバゾール環などが二価の結合価を有する基）等があげられる。

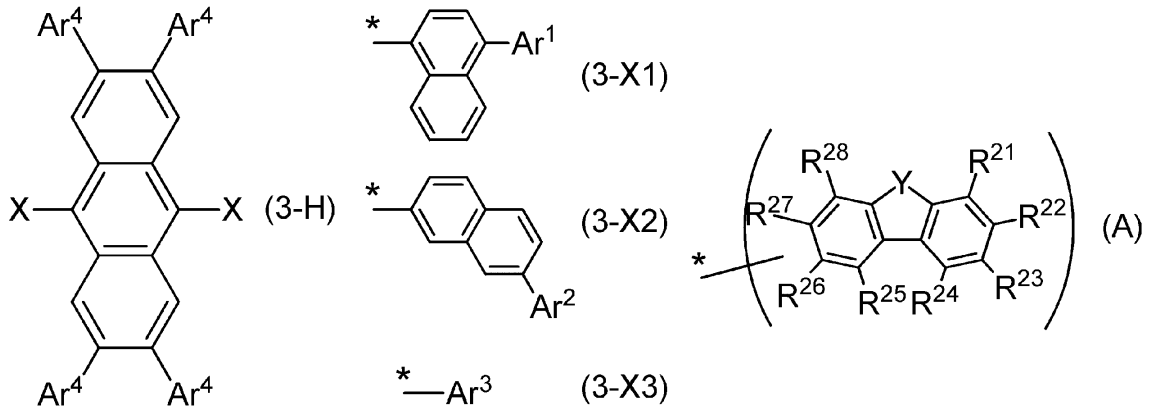
【０８１４】

上記アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルコキシ、アリールオキシ、アリールチオまたはシリルの詳細は、以下の好ましい態様の欄で説明する。また、これらへの置換基としては、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルコキシ、アリールオキシ、アリールチオまたはシリルなどがあげられ、これらの詳細も以下の好ましい態様の欄で説明する。

【０８１５】

上記アントラセン系化合物の好ましい態様を以下に説明する。下記構造における符号の定義は上述する定義と同じである。

【化５８０】



【０８１６】

式（３－Ｈ）では、Ｘはそれぞれ独立して式（３－Ｘ１）、式（３－Ｘ２）または式（３－Ｘ３）で表される基であり、式（３－Ｘ１）、式（３－Ｘ２）または式（３－Ｘ３）で表される基は＊において式（３－Ｈ）のアントラセン環と結合する。好ましくは、２つのＸが同時に式（３－Ｘ３）で表される基になることはない。より好ましくは２つのＸが同時に式（３－Ｘ２）で表される基になることもない。

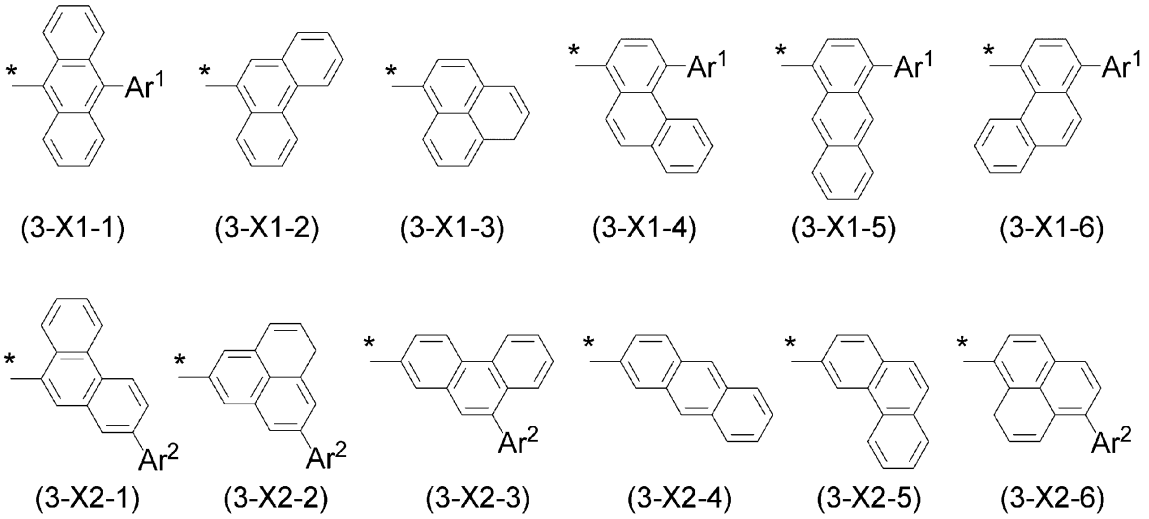
【０８１７】

また、式（３－Ｈ）で表される構造を単位構造として多量体（好ましくは二量体）を形成してもよい。この場合、例えば式（３－Ｈ）で表される単位構造同士がＸを介して結合する形態があげられ、このＸとしては単結合、アリーレン（フェニレン、ビフェニレンおよびナフチレン等）およびヘテロアリーレン（ピリジン環、ジベンゾフラン環、ジベンゾチオフェン環、カルバゾール環、ベンゾカルバゾール環およびフェニル置換カルバゾール環などが二価の結合価を有する基）等があげられる。

【０８１８】

式（３－Ｘ１）および式（３－Ｘ２）におけるナフチレン部位は１つのベンゼン環で縮合されていてもよい。このようにして縮合した構造は以下のとおりである。

【化５８１】



【０８１９】

Ａｒ^{1}およびＡｒ^{2}は、それぞれ独立して、水素、フェニル、ビフェニリル、テルフェニリル、クアテルフェニリル、ナフチル、フェナントリル、フルオレニル、ベンゾフルオレニル、クリセニル、トリフェニレニル、ピレニリル、または、式（Ａ）で表される基（カルバゾリル、ベンゾカルバゾリルおよびフェニル置換カルバゾリルも含む）である。な

お、Ａｒ^{1}またはＡｒ^{2}が後述の式（Ａ）で表される基である場合は、式（Ａ）で表される基はその＊において式（３－Ｘ１）または式（３－Ｘ２）中のナフタレン環と結合する。

【０８２０】

Ａｒ^{3}は、フェニル、ビフェニリル、テルフェニリル、クアテルフェニリル、ナフチル、フェナントリル、フルオレニル、ベンゾフルオレニル、クリセニル、トリフェニレニル、ピレニリル、または、式（Ａ）で表される基（カルバゾリル、ベンゾカルバゾリルおよびフェニル置換カルバゾリルも含む）である。なお、Ａｒ^{3}が式（Ａ）で表される基である場合は、式（Ａ）で表される基はその＊において式（３－Ｘ３）中の直線で表される単結合と結合する。すなわち、式（３－Ｈ）のアントラセン環と式（Ａ）で表される基が直接結合する。

【０８２１】

また、Ａｒ^{3}は置換基を有していてもよく、Ａｒ^{3}における少なくとも１つの水素はさらに炭素数１～４のアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキル、フェニル、ビフェニリル、テルフェニリル、ナフチル、フェナントリル、フルオレニル、クリセニル、トリフェニレニル、ピレニリル、または、式（Ａ）で表される基（カルバゾリルおよびフェニル置換カルバゾリルも含む）で置換されていてもよい。なお、Ａｒ^{3}が有する置換基が式（Ａ）で表される基である場合は、式（Ａ）で表される基はその＊において式（３－Ｘ３）中のＡｒ^{3}と結合する。

【０８２２】

Ａｒ^{4}は、それぞれ独立して、水素、フェニル、ビフェニリル、ターフェニリル、ナフチル、または炭素数１～４のアルキル（メチル、エチル、ｔ－ブチルなど）および／もしくは炭素数５～１０のシクロアルキルで置換されているシリルである。

【０８２３】

シリルに置換する炭素数１～４のアルキルは、メチル、エチル、プロピル、ｉ－プロピル、ブチル、ｓｅｃ－ブチル、ｔ－ブチル、シクロブチルなどがあげられ、シリルにおける３つの水素が、それぞれ独立して、これらのアルキルで置換されている。

【０８２４】

具体的な「炭素数１～４のアルキルで置換されているシリル」としては、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリｉ－プロピルシリル、トリブチルシリル、トリｓｅｃ－ブチルシリル、トリｔ－ブチルシリル、エチルジメチルシリル、プロピルジメチルシリル、ｉ－プロピルジメチルシリル、ブチルジメチルシリル、ｓｅｃ－ブチルジメチルシリル、ｔ－ブチルジメチルシリル、メチルジエチルシリル、プロピルジエチルシリル、ｉ－プロピルジエチルシリル、ブチルジエチルシリル、ｓｅｃ－ブチルジエチルシリル、ｔ－ブチルジエチルシリル、メチルジプロピルシリル、エチルジプロピルシリル、ブチルジプロピルシリル、ｓｅｃ－ブチルジプロピルシリル、ｔ－ブチルジプロピルシリル、メチルジｉ－プロピルシリル、エチルジｉ－プロピルシリル、ブチルジｉ－プロピルシリル、ｓｅｃ－ブチルジｉ－プロピルシリル、ｔ－ブチルジｉ－プロピルシリルなどがあげられる。

【０８２５】

シリルに置換する炭素数５～１０のシクロアルキルは、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、ノルボルネニル、ビシクロ［１．１．１］ペンチル、ビシクロ［２．０．１］ペンチル、ビシクロ［１．２．１］ヘキシル、ビシクロ［３．０．１］ヘキシル、ビシクロ［２．１．２］ヘプチル、ビシクロ［２．２．２］オクチル、アダマンチル、デカヒドロナフタレニル、デカヒドロアズレニルなどがあげられ、シリルにおける３つの水素が、それぞれ独立して、これらのシクロアルキルで置換されている。

【０８２６】

具体的な「炭素数５～１０のシクロアルキルで置換されているシリル」としては、トリシクロペンチルシリル、トリシクロヘキシルシリルなどがあげられる。

【０８２７】

置換されているシリルとしては、２つのアルキルと１つのシクロアルキルが置換したジアルキルシクロアルキルシリルと、１つのアルキルと２つのシクロアルキルが置換したアルキルジシクロアルキルシリルもあり、置換するアルキルおよびシクロアルキルの具体例としては上述した基があげられる。

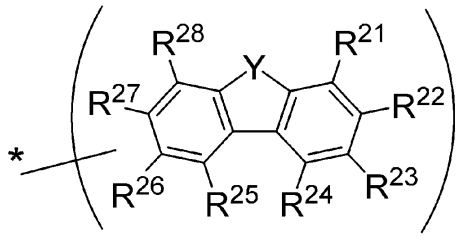
【０８２８】

また、式（３－Ｈ）で表されるアントラセン系化合物の化学構造中の水素は式（Ａ）で表される基で置換されていてもよい。式（Ａ）で表される基で置換される場合は、式（Ａ）で表される基はその＊において式（３－Ｈ）で表される化合物における少なくとも１つの水素と置換する。

【０８２９】

式（Ａ）で表される基は、式（３－Ｈ）で表されるアントラセン系化合物が有しうる置換基の１つである。

【化５８２】



(A)

【０８３０】

式（Ａ）中、Ｙは－Ｏ－、－Ｓ－または＞Ｎ－Ｒ２９であり、Ｒ２１～Ｒ２８はそれぞれ独立して水素、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルコキシ、置換されていてもよいアリールオキシ、置換されていてもよいアリールチオ、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、アルキルジシクロアルキルシリル、置換されていてもよいアミノ、ハロゲン、ヒドロキシまたはシアノであり、Ｒ２１～Ｒ２８のうち隣接する基は互いに結合して炭化水素環、アリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、Ｒ２９は水素または置換されていてもよいアリールである。

【０８３１】

Ｒ２１～Ｒ２８における「置換されていてもよいアルキル」の「アルキル」としては、直鎖および分岐鎖のいずれでもよく、例えば、炭素数１～２４の直鎖アルキルまたは炭素数３～２４の分岐鎖アルキルがあげられる。炭素数１～１８のアルキル（炭素数３～１８の分岐鎖アルキル）が好ましく、炭素数１～１２のアルキル（炭素数３～１２の分岐鎖アルキル）がより好ましく、炭素数１～６のアルキル（炭素数３～６の分岐鎖アルキル）がさらに好ましく、炭素数１～４のアルキル（炭素数３～４の分岐鎖アルキル）が特に好ましい。

【０８３２】

具体的な「アルキル」としては、メチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｎ－ブチル、イソブチル、ｓ－ブチル、ｔ－ブチル、ｎ－ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ｔ－ペンチル、ｎ－ヘキシル、１－メチルペンチル、４－メチル－２－ペンチル、３，３－ジメチルブチル、２－エチルブチル、ｎ－ヘプチル、１－メチルヘキシル、ｎ－オクチル、ｔ－オクチル、１－メチルヘプチル、２－エチルヘキシル、２－プロピルペンチル、ｎ－ノニル、２，２－ジメチルヘプチル、２，６－ジメチル－４－ヘプチル、３，５，５－トリメチルヘキシル、ｎ－デシル、ｎ－ウンデシル、１－メチルデシル、ｎ－ドデシル、ｎ－トリデシル、１－ヘキシルヘプチル、ｎ－テトラデシル、ｎ－ペンタデシル

、ｎ－ヘキサデシル、ｎ－ヘプタデシル、ｎ－オクタデシル、ｎ－エイコシルなどがあげられる。

【０８３３】

Ｒ^{21}～Ｒ^{28}における「置換されていてもよいシクロアルキル」の「シクロアルキル」としては、炭素数３～２４のシクロアルキル、炭素数３～２０のシクロアルキル、炭素数３～１６のシクロアルキル、炭素数３～１４のシクロアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキル、炭素数５～８のシクロアルキル、炭素数５～６のシクロアルキル、炭素数５のシクロアルキルなどがあげられる。

【０８３４】

具体的な「シクロアルキル」としては、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、およびこれらの炭素数１～４のアルキル（特にメチル）置換体や、ノルボルネニル、ビシクロ［１．０．１］ブチル、ビシクロ［１．１．１］ペンチル、ビシクロ［２．０．１］ペンチル、ビシクロ［１．２．１］ヘキシル、ビシクロ［３．０．１］ヘキシル、ビシクロ［２．１．２］ヘプチル、ビシクロ［２．２．２］オクチル、アダマンチル、ジアマンチル、デカヒドロナフタレニル、デカヒドロアズレニルなどがあげられる。

【０８３５】

Ｒ^{21}～Ｒ^{28}における「置換されていてもよいアリール」の「アリール」としては、例えば、炭素数６～３０のアリールがあげられ、炭素数６～１６のアリールが好ましく、炭素数６～１２のアリールがより好ましく、炭素数６～１０のアリールが特に好ましい。

【０８３６】

具体的な「アリール」としては、単環系であるフェニル、二環系であるビフェニリル、縮合二環系であるナフチル、三環系であるテルフェニリル（ｍ－テルフェニリル、ｏ－テルフェニリル、ｐ－テルフェニリル）、縮合三環系である、アセナフチレニル、フルオレニル、フェナレニル、フェナントレニル、縮合四環系であるトリフェニレニル、ピレニル、ナフタセニル、縮合五環系であるペリレニル、ペンタセニルなどがあげられる。

【０８３７】

Ｒ^{21}～Ｒ^{28}における「置換されていてもよいヘテロアリール」の「ヘテロアリール」としては、例えば、炭素数２～３０のヘテロアリールがあげられ、炭素数２～２５のヘテロアリールが好ましく、炭素数２～２０のヘテロアリールがより好ましく、炭素数２～１５のヘテロアリールがさらに好ましく、炭素数２～１０のヘテロアリールが特に好ましい。また、ヘテロアリールとしては、例えば環構成原子として炭素以外に酸素、硫黄および窒素から選ばれるヘテロ原子を１～５個含有する複素環などがあげられる。

【０８３８】

具体的な「ヘテロアリール」としては、例えば、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、オキサジアゾリル、チアジアゾリル、トリアゾリル、テトラゾリル、ピラゾリル、ピリジル、ピリミジニル、ピリダジニル、ピラジニル、トリアジニル、インドリル、イソインドリル、１Ｈ－インダゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、１Ｈ－ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリル、キナゾリル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、プリニル、プテリジニル、カルバゾリル、アクリジニル、フェノキサチイニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、インドリジニル、フリル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ジベンゾフラニル、チエニル、ベンゾ［ｂ］チエニル、ジベンゾチエニル、フラザニル、オキサジアゾリル、チアントレニル、ナフトベンゾフラニル、ナフトベンゾチエニルなどがあげられる。

【０８３９】

Ｒ^{21}～Ｒ^{28}における「置換されていてもよいアルコキシ」の「アルコキシ」としては、例えば、炭素数１～２４の直鎖または炭素数３～２４の分岐鎖のアルコキシがあげられる。炭素数１～１８のアルコキシ（炭素数３～１８の分岐鎖のアルコキシ）が好ましく、炭素数１～１２のアルコキシ（炭素数３～１２の分岐鎖のアルコキシ）がより好ましく、

炭素数１～６のアルコキシ（炭素数３～６の分岐鎖のアルコキシ）がさらに好ましく、炭素数１～４のアルコキシ（炭素数３～４の分岐鎖のアルコキシ）が特に好ましい。

【０８４０】

具体的な「アルコキシ」としては、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソプロポキシ、ブトキシ、イソブトキシ、ｓ－ブトキシ、ｔ－ブトキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、ヘプチルオキシ、オクチルオキシなどがあげられる。

【０８４１】

R^{21}～R^{28}における「置換されていてもよいアリールオキシ」の「アリールオキシ」としては、－ＯＨ基の水素がアリールで置換された基であり、このアリールは上述したR^{21}～R^{28}における「アリール」として説明した基を引用することができる。

【０８４２】

R^{21}～R^{28}における「置換されていてもよいアリールチオ」の「アリールチオ」としては、－ＳＨ基の水素がアリールで置換された基であり、このアリールは上述したR^{21}～R^{28}における「アリール」として説明した基を引用することができる。

【０８４３】

R^{21}～R^{28}における「トリアルキルシリル」としては、シリル基における３つの水素がそれぞれ独立してアルキルで置換された基があげられ、このアルキルは上述したR^{21}～R^{28}における「アルキル」として説明した基を引用することができる。置換するのに好ましいアルキルは、炭素数１～４のアルキルであり、具体的にはメチル、エチル、プロピル、ｉ－プロピル、ブチル、ｓｅｃ－ブチル、ｔ－ブチル、シクロブチルなどがあげられる。

【０８４４】

具体的な「トリアルキルシリル」としては、トリメチルシリル、トリエチルシリル、トリプロピルシリル、トリｉ－プロピルシリル、トリブチルシリル、トリｓｅｃ－ブチルシリル、トリｔ－ブチルシリル、エチルジメチルシリル、プロピルジメチルシリル、ｉ－プロピルジメチルシリル、ブチルジメチルシリル、ｓｅｃ－ブチルジメチルシリル、ｔ－ブチルジメチルシリル、メチルジエチルシリル、プロピルジエチルシリル、ｉ－プロピルジエチルシリル、ブチルジエチルシリル、ｓｅｃ－ブチルジエチルシリル、ｔ－ブチルジエチルシリル、メチルジプロピルシリル、エチルジプロピルシリル、ブチルジプロピルシリル、ｓｅｃ－ブチルジプロピルシリル、ｔ－ブチルジプロピルシリル、メチルジｉ－プロピルシリル、エチルジｉ－プロピルシリル、ブチルジｉ－プロピルシリル、ｓｅｃ－ブチルジｉ－プロピルシリル、ｔ－ブチルジｉ－プロピルシリルなどがあげられる。

【０８４５】

R^{21}～R^{28}における「トリシクロアルキルシリル」としては、シリル基における３つの水素がそれぞれ独立してシクロアルキルで置換された基があげられ、このシクロアルキルは上述したR^{21}～R^{28}における「シクロアルキル」として説明した基を引用することができる。置換するのに好ましいシクロアルキルは、炭素数５～１０のシクロアルキルであり、具体的にはシクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、ビシクロ［１．１．１］ペンチル、ビシクロ［２．０．１］ペンチル、ビシクロ［１．２．１］ヘキシル、ビシクロ［３．０．１］ヘキシル、ビシクロ［２．１．２］ヘプチル、ビシクロ［２．２．２］オクチル、アダマンチル、デカヒドロナフタレニル、デカヒドロアズレニルなどがあげられる。

【０８４６】

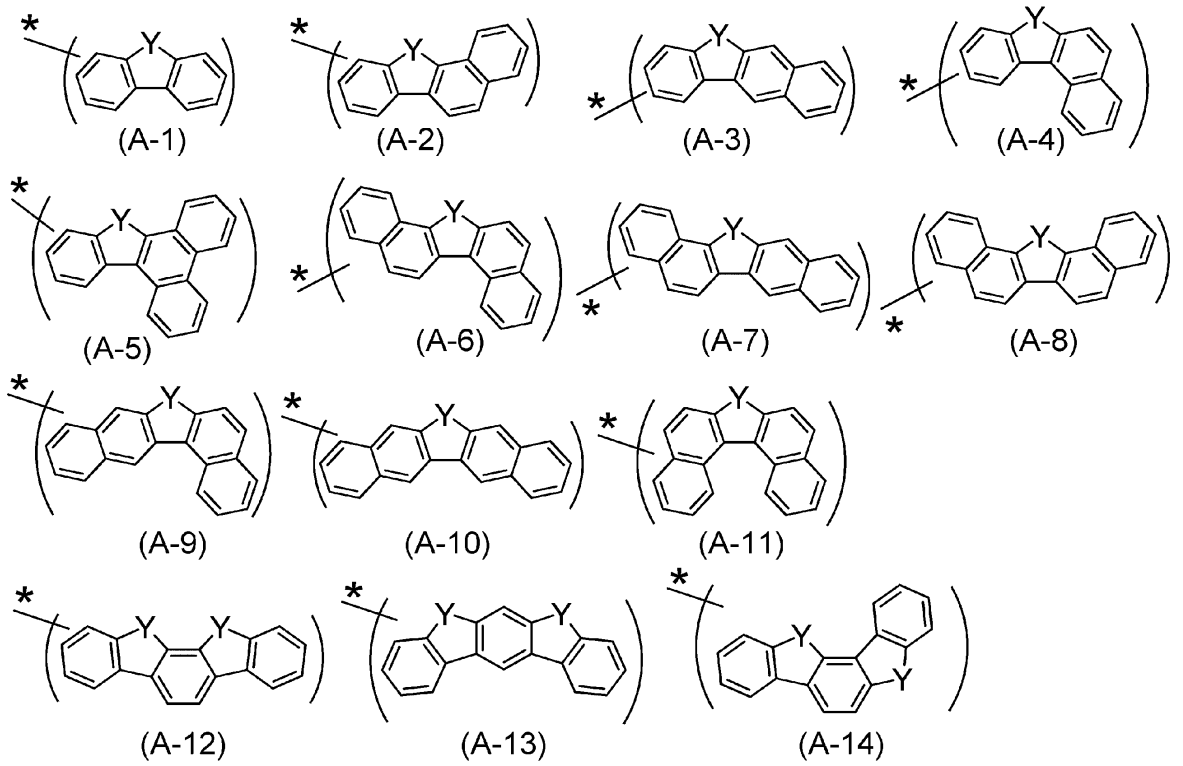
具体的な「トリシクロアルキルシリル」としては、トリシクロペンチルシリル、トリシクロヘキシルシリルなどがあげられる。

【０８４７】

２つのアルキルと１つのシクロアルキルが置換したジアルキルシクロアルキルシリルと、１つのアルキルと２つのシクロアルキルが置換したアルキルジシクロアルキルシリルの具体例としては、上述した具体的なアルキルおよびシクロアルキルから選択される基が置換したシリルがあげられる。

【０８４８】
Ｒ^{21}～Ｒ^{28}における「置換されていてもよいアミノ」の「置換されたアミノ」としては、例えば２つの水素がアリールやヘテロアリールで置換されたアミノがあげられる。２つの水素がアリールで置換されたアミノがジアリール置換アミノであり、２つの水素がヘテロアリールで置換されたアミノがジヘテロアリール置換アミノであり、２つの水素がアリールとヘテロアリールで置換されたアミノがアリールヘテロアリール置換アミノである。このアリールやヘテロアリールは上述したＲ^{21}～Ｒ^{28}における「アリール」や「ヘテロアリール」として説明した基を引用することができる。
【０８４９】
具体的な「置換されたアミノ」としては、ジフェニルアミノ、ジナフチルアミノ、フェニルナフチルアミノ、ジピリジルアミノ、フェニルピリジルアミノ、ナフチルピリジルアミノなどがあげられる。
【０８５０】
Ｒ^{21}～Ｒ^{28}における「ハロゲン」としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素があげられる。
【０８５１】
Ｒ^{21}～Ｒ^{28}として説明した基のうち、いくつかは上述するように置換されてもよく、この場合の置換基としてはアルキル、シクロアルキル、アリールまたはヘテロアリールがあげられる。このアルキル、シクロアルキル、アリールまたはヘテロアリールは上述したＲ^{21}～Ｒ^{28}における「アルキル」、「シクロアルキル」、「アリール」または「ヘテロアリール」として説明した基を引用することができる。
【０８５２】
Ｙとしての「＞Ｎ－Ｒ^{29}」におけるＲ^{29}は水素または置換されていてもよいアリールであり、このアリールとしては上述したＲ^{21}～Ｒ^{28}における「アリール」として説明した基を引用することができ、またその置換基としてはＲ^{21}～Ｒ^{28}に対する置換基として説明した基を引用することができる。
【０８５３】
Ｒ^{21}～Ｒ^{28}のうち隣接する基は互いに結合して炭化水素環、アリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよい。環を形成しない場合が下記式（Ａ－１）で表される基であり、環を形成した場合としては例えば下記式（Ａ－２）～式（Ａ－１４）で表される基があげられる。なお、式（Ａ－１）～式（Ａ－１４）のいずれかで表される基における少なくとも１つの水素はアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アルコキシ、アリールオキシ、アリールチオ、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリル、アルキルジシクロアルキルシリル、ジアリール置換アミノ、ジヘテロアリール置換アミノ、アリールヘテロアリール置換アミノ、ハロゲン、ヒドロキシまたはシアノで置換されていてもよい。

【化５８３】



【０８５４】

隣接する基が互いに結合してできた環としては、炭化水素環であれば例えばシクロヘキサン環があげられ、アリール環やヘテロアリール環としては上述したR^{21}～R^{28}における「アリール」や「ヘテロアリール」で説明した環構造があげられ、これらの環は式（Ａ－１）における１つまたは２つのベンゼン環と縮合するように形成される。

【０８５５】

式（Ａ）で表される基としては、例えば式（Ａ－１）～式（Ａ－１４）のいずれかで表される基があげられ、式（Ａ－１）～式（Ａ－５）および式（Ａ－１２）～式（Ａ－１４）のいずれかで表される基が好ましく、式（Ａ－１）～式（Ａ－４）のいずれかで表される基がより好ましく、式（Ａ－１）、式（Ａ－３）および式（Ａ－４）のいずれかで表される基がさらに好ましく、式（Ａ－１）で表される基が特に好ましい。

【０８５６】

式（Ａ）で表される基は、式（Ａ）中の＊において、式（３－Ｘ１）または式（３－Ｘ２）中のナフタレン環、式（３－Ｘ３）中の単結合、式（３－Ｘ３）中のAr^3と結合し、また式（３－Ｈ）で表される化合物における少なくとも１つの水素と置換することは上述したとおりだが、これらの結合形態の中でも式（３－Ｘ１）または式（３－Ｘ２）中のナフタレン環、式（３－Ｘ３）中の単結合および／または式（３－Ｘ３）中のAr^3と結合した形態が好ましい。

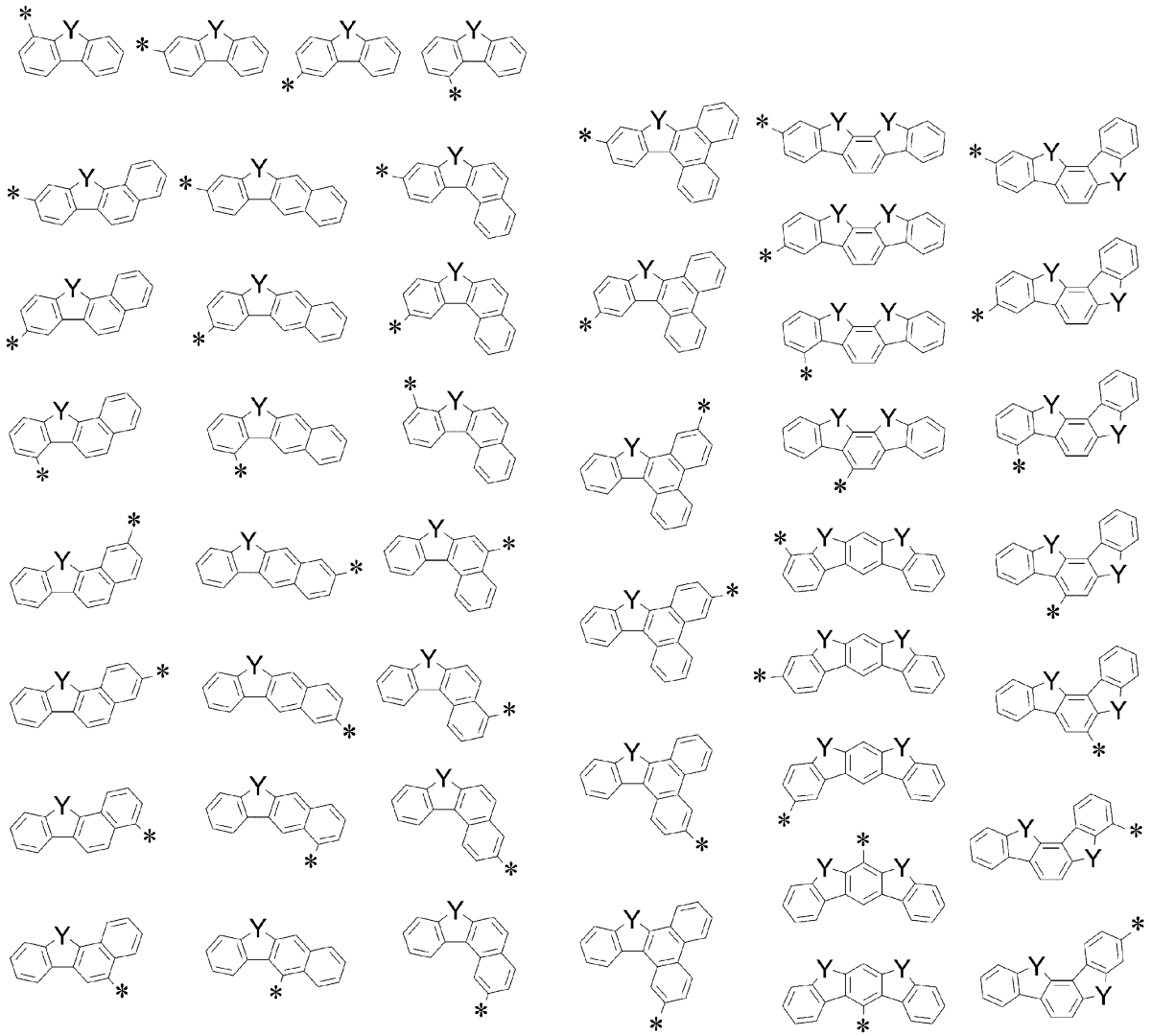
【０８５７】

また、式（Ａ）で表される基の構造中で、式（３－Ｘ１）または式（３－Ｘ２）中のナフタレン環、式（３－Ｘ３）中の単結合、式（３－Ｘ３）中のAr^3が結合する位置、また、式（Ａ）で表される基の構造中で、式（３－Ｈ）で表される化合物における少なくとも１つの水素と置換する位置は、式（Ａ）の構造中のいずれの位置であってもよく、例えば、式（Ａ）の構造中の２つのベンゼン環のいずれか、式（Ａ）の構造中のR^{21}～R^{28}のうち隣接する基が互いに結合して形成されたいずれかの環、または式（Ａ）の構造中のＹとしての「＞Ｎ－R^{29}」におけるR^{29}中のいずれかの位置で結合することができる。

【０８５８】

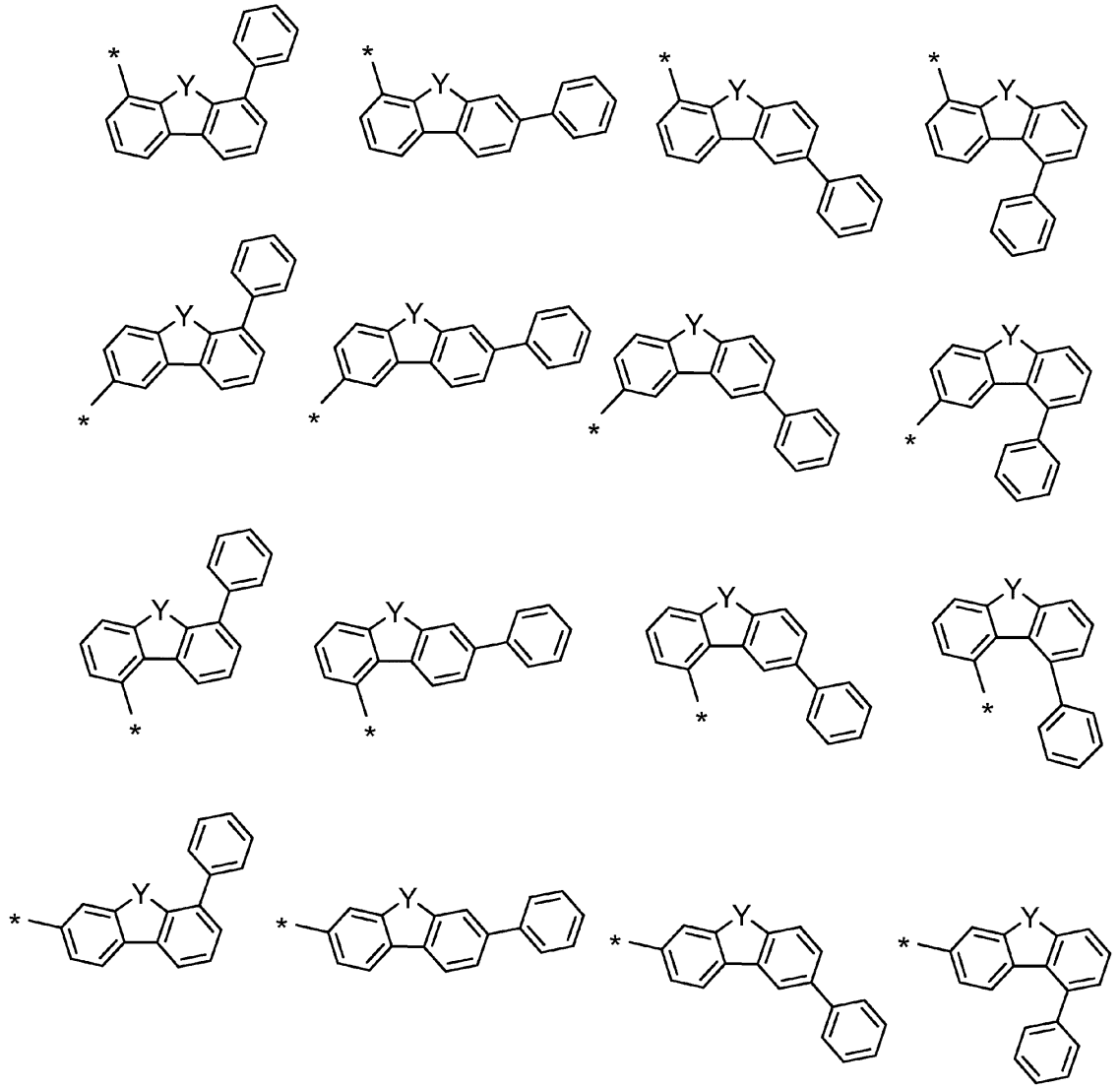
式（Ａ）で表される基としては、例えば以下の基があげられる。式中のＹおよび＊は上記と同じ定義である。

【化５８４】



【０８５９】

【化５８５】



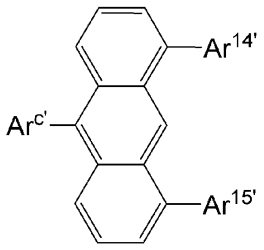
【０８６０】

また、式（３－Ｈ）で表されるアントラセン系化合物の化学構造中の水素は、その全てまたは一部が重水素であってもよい。

【０８６１】

またアントラセン系化合物として、下記式（３－２－Ｈ）で表されるアントラセン系化合物をあげることができる。

【化５８６】



(3-2-H)

【０８６２】

式（３－２－Ｈ）中、Ａｒ^{c}’、Ａｒ^{14}’、およびＡｒ^{15}’はそれぞれ独立して、フェニル、ビフェニリル、テルフェニリル、ナフチル、フェナントリル、フルオレニル、ベンゾフルオレニル、クリセニル、トリフェニレニル、ピレニル、または上記式（Ａ－１）～式（Ａ－１４）のいずれかで表される基であり、これらの基における少なくとも１つの水素は、フェニル、ビフェニリル、テルフェニリル、ナフチル、フェナントリル、フルオレニル、ベンゾフルオレニル、クリセニル、トリフェニレニル、ピレニル、または式（Ａ－１）～式（Ａ－１４）のいずれかで表される基で置換されていてもよい。ここで、フルオレニルおよびベンゾフルオレニルにおけるメチレンの水素がいずれもフェニルで置換されているときは、これらのフェニルは互いに単結合で結合していてもよい。また、Ａｒ^{c}’、Ａｒ^{14}’、およびＡｒ^{15}’が結合していないアントラセン環上の炭素原子には水素の代わりにメチルまたはｔ－ブチルが置換していてもよい。式（３－２－Ｈ）で表される化合物における少なくとも１つの水素はハロゲンまたはシアノで置換されていてもよく、かつ式（３－２－Ｈ）で表される化合物における少なくとも１つの水素は重水素で置換されている。

【０８６３】

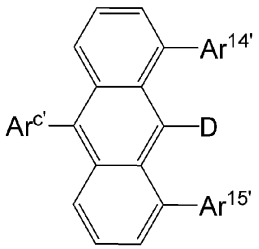
式（３－２－Ｈ）中、Ａｒ^{c}’、Ａｒ^{14}’、およびＡｒ^{15}’はそれぞれ独立してフェニル、ビフェニリル、テルフェニリル、ナフチル、フェナントリル、フルオレニル、または上記式（Ａ－１）～式（Ａ－４）のいずれかで表される基であることが好ましく、これらの基における少なくとも１つの水素は、フェニル、ナフチル、フェナントリル、フルオレニル、または式（Ａ－１）～式（Ａ－４）のいずれかで表される基で置換されていてもよい。

【０８６４】

式（３－２－Ｈ）で表される化合物においては、少なくとも、アントラセン環の１０位の炭素（Ａｒ^{c}’が結合する炭素を９位とする）に結合する水素が重水素に置換されていることが好ましい。すなわち、式（３－２－Ｈ）で表される化合物は、下記式（３－２－Ｈ－ｂ）で表される化合物であることが好ましい。なお、式（１Ａｂ）中、Ｄは重水素であり、Ａｒ^{c}’、Ａｒ^{14}’、およびＡｒ^{15}’は式（３－２－Ｈ）中の定義と同一である。式（（３－２－Ｈ－ｂ）におけるＤは少なくともこの位置が重水素であることを示し、式（３－２－Ｈ－ｂ）におけるその他のいずれか１つ以上の水素が同時に重水素であってもよく、式（３－２－Ｈ－ｂ）における水素がいずれも重水素であることも好ましい。

【０８６５】

【化５８７】



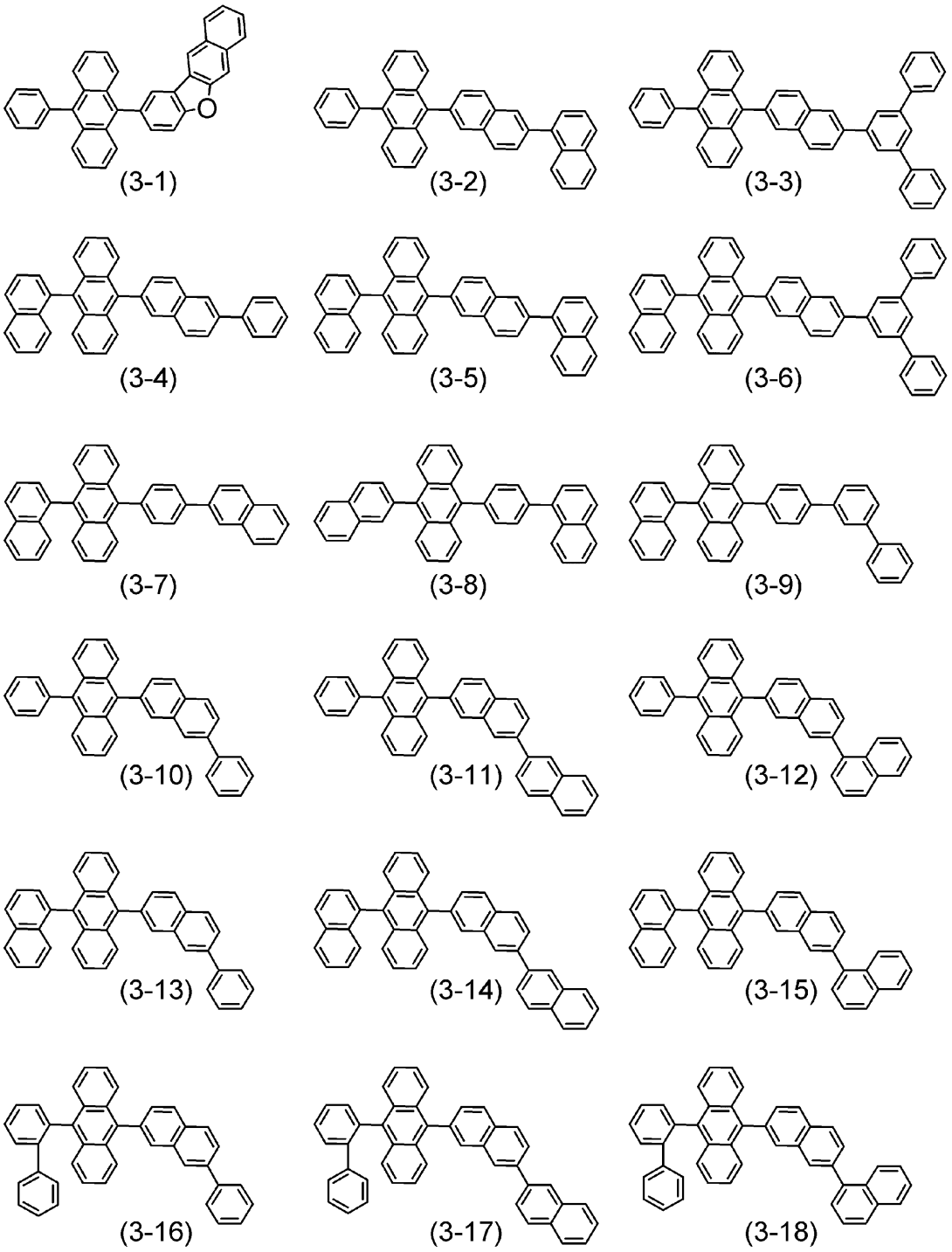
(3-2-H-b)

【０８６６】

アントラセン系化合物の具体的な例としては、例えば、下記式（３－１）～式（３－７２）で表される化合物があげられる。なお、下記構造式中の「Ｍｅ」はメチル、「Ｄ」は重水素、「ｔＢｕ」はｔ－ブチルを示す。

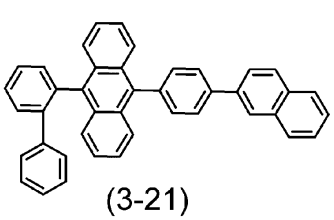
【０８６７】

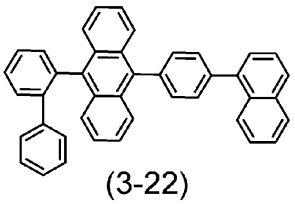
【化５８８】

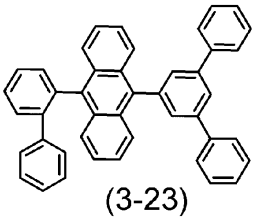


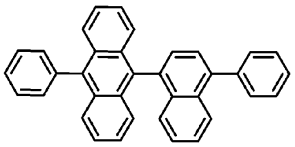
【０８６８】

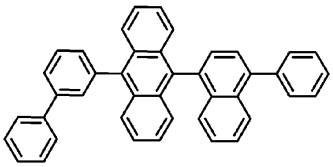
【化５８９】

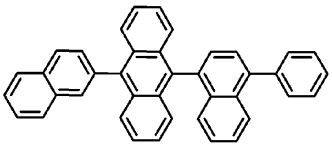

(3-21)

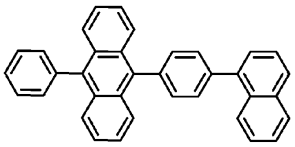

(3-22)

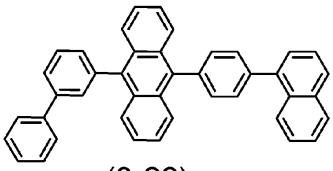

(3-23)

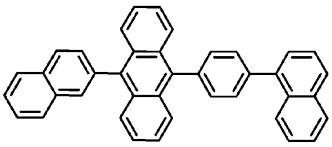

(3-24)

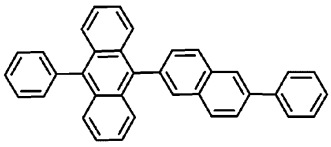

(3-25)

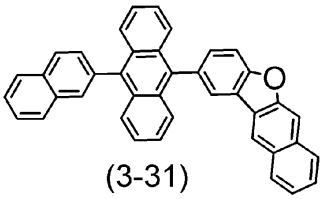

(3-26)

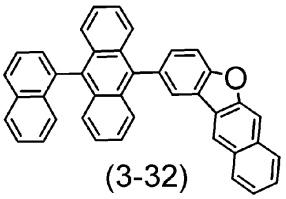

(3-27)

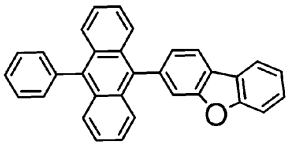

(3-28)

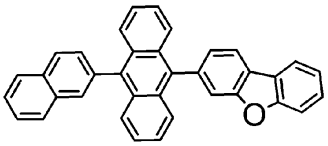

(3-29)

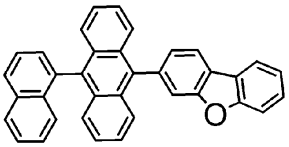

(3-30)

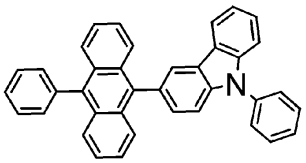

(3-31)

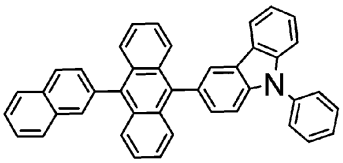

(3-32)

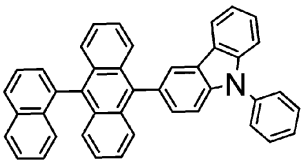

(3-33)


(3-34)


(3-35)

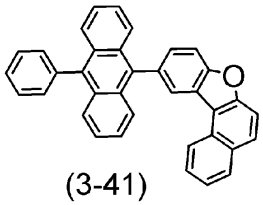

(3-36)

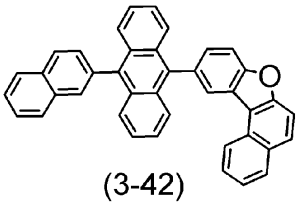

(3-37)

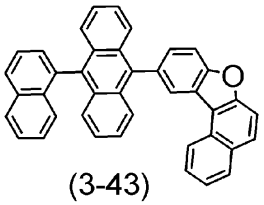

(3-38)

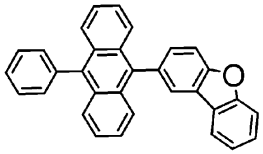
【０８６９】

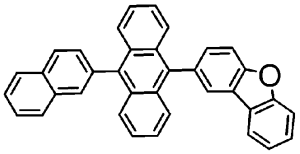
【化５９０】

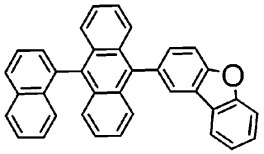

(3-41)

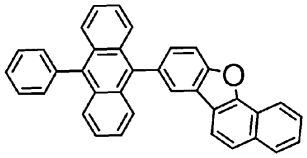

(3-42)

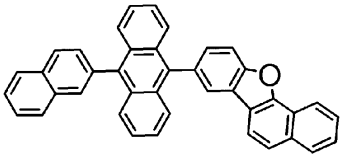

(3-43)

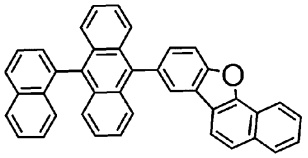

(3-44)

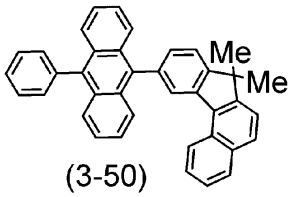

(3-45)

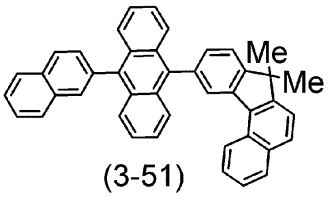

(3-46)

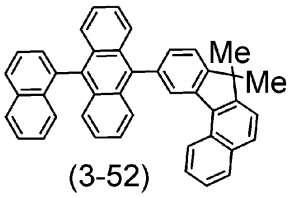

(3-47)

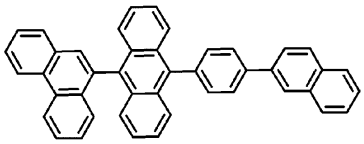

(3-48)

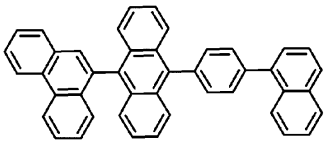

(3-49)

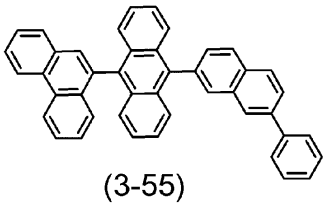

(3-50)

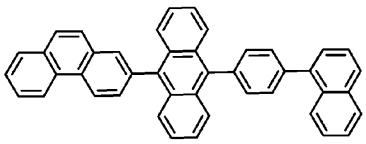

(3-51)

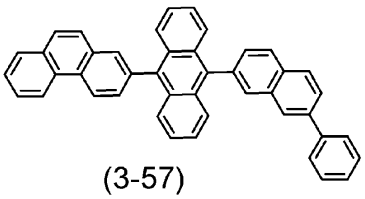

(3-52)

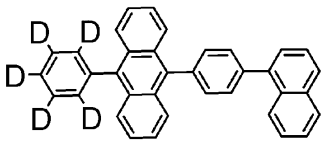

(3-53)


(3-54)


(3-55)

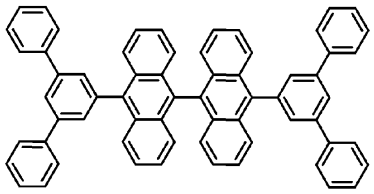

(3-56)


(3-57)

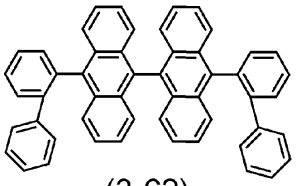

(3-58)

【０８７０】

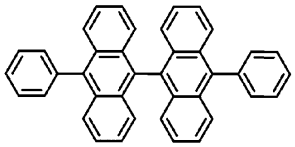
【化５９１】



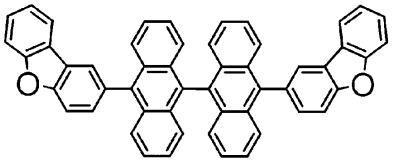
(3-61)



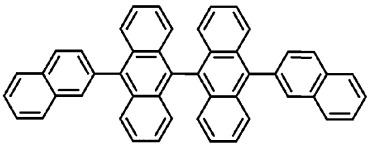
(3-62)



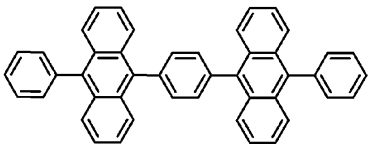
(3-63)



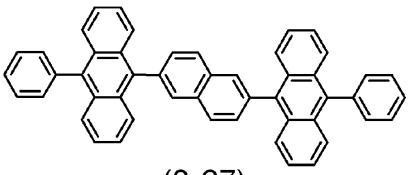
(3-64)



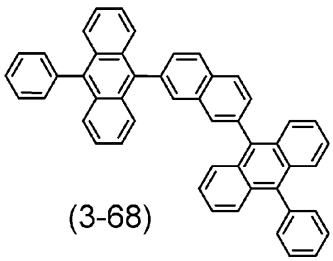
(3-65)



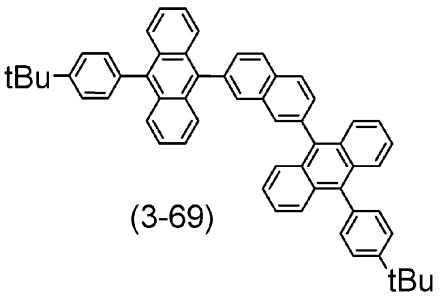
(3-66)



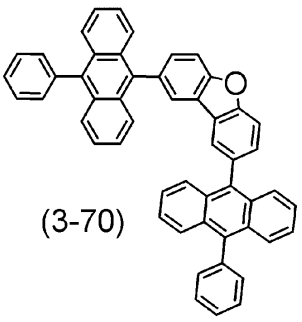
(3-67)



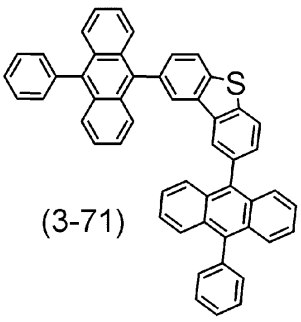
(3-68)



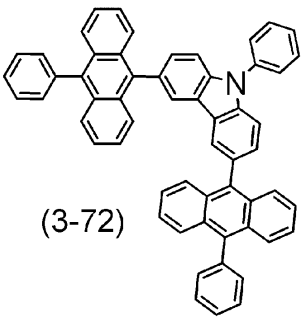
(3-69)



(3-70)



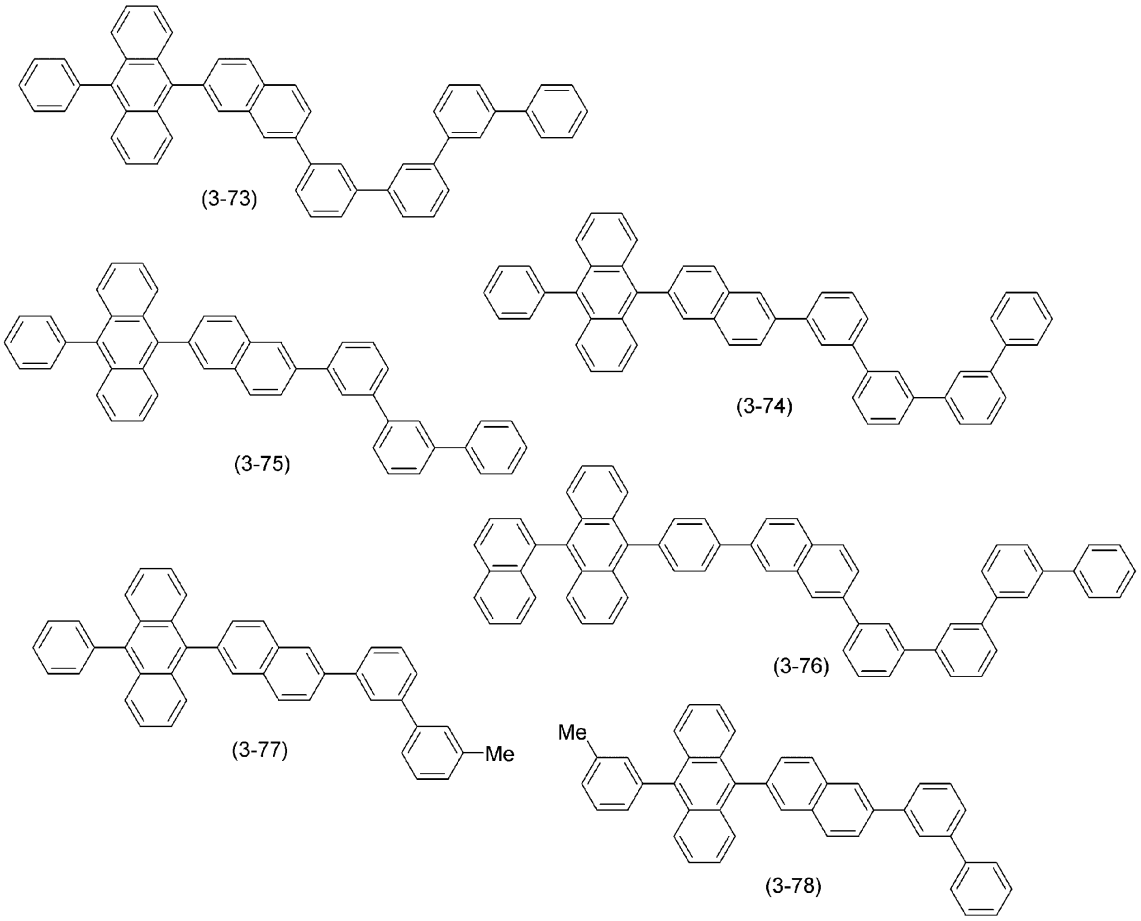
(3-71)



(3-72)

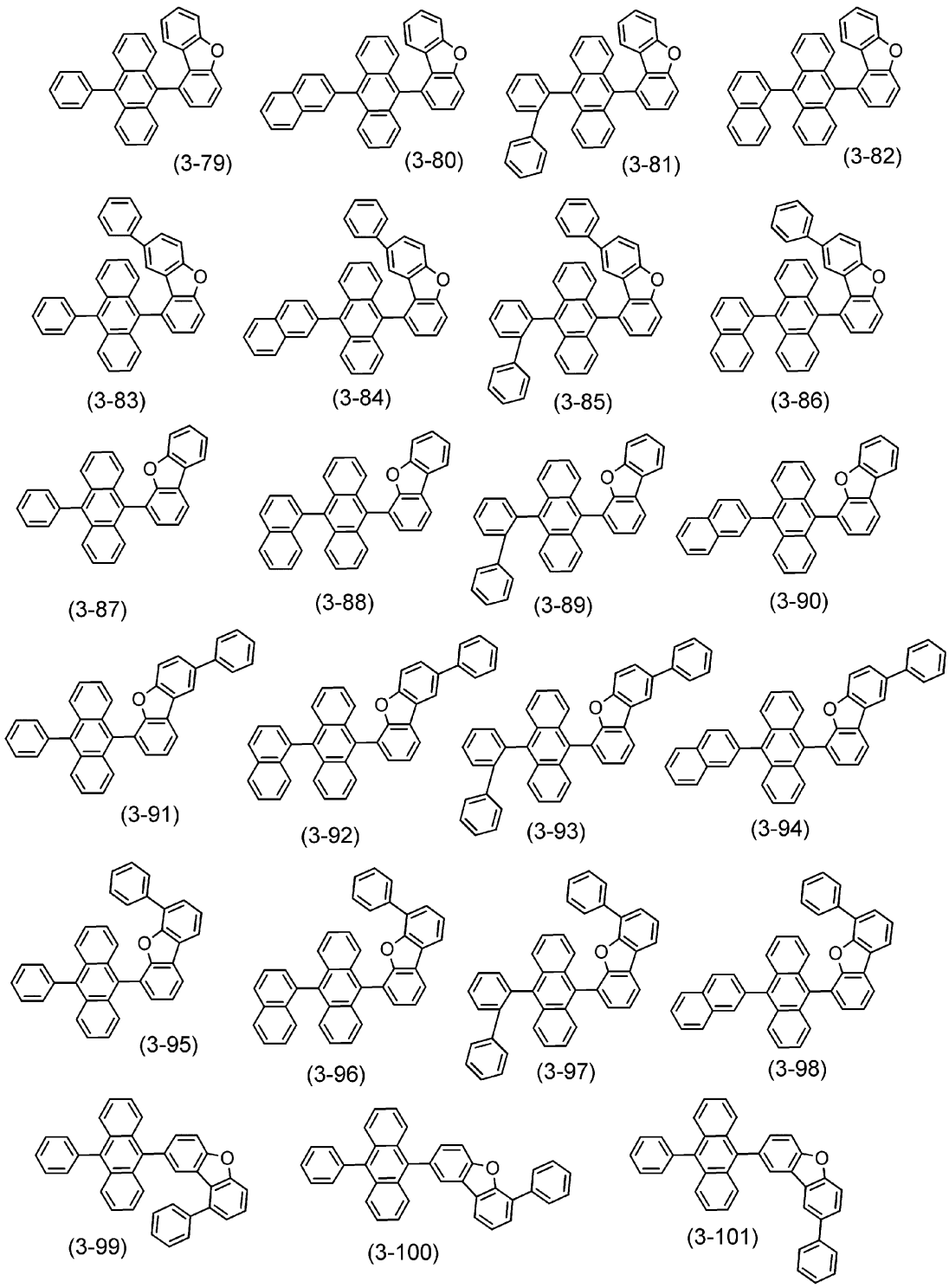
【０８７１】

【化５９２】



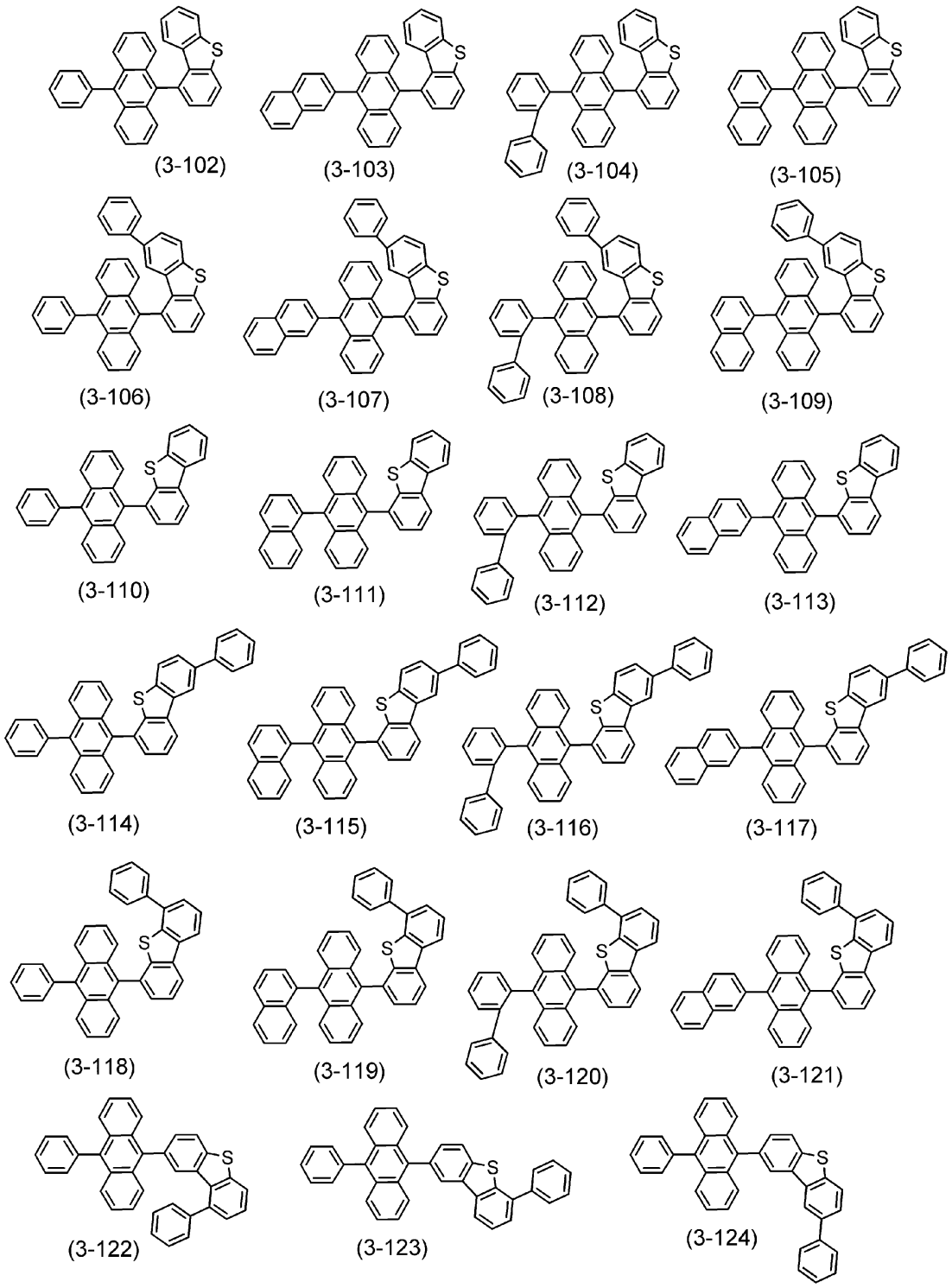
【０８７２】

【化５９３】


(3-79)
(3-80)
(3-81)
(3-82)
(3-83)
(3-84)
(3-85)
(3-86)
(3-87)
(3-88)
(3-89)
(3-90)
(3-91)
(3-92)
(3-93)
(3-94)
(3-95)
(3-96)
(3-97)
(3-98)
(3-99)
(3-100)
(3-101)

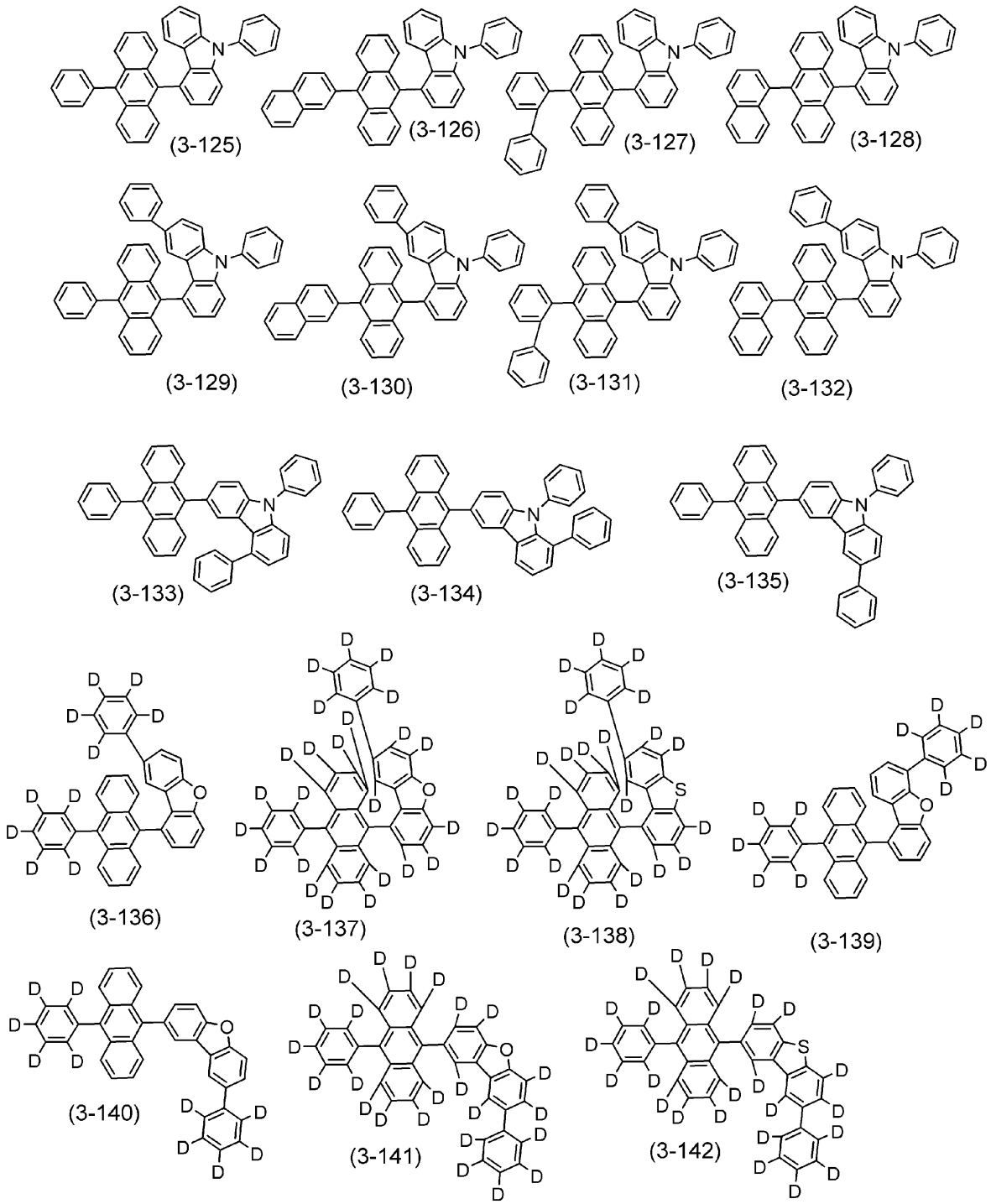
【０８７３】

【化５９４】


(3-102)
(3-103)
(3-104)
(3-105)
(3-106)
(3-107)
(3-108)
(3-109)
(3-110)
(3-111)
(3-112)
(3-113)
(3-114)
(3-115)
(3-116)
(3-117)
(3-118)
(3-119)
(3-120)
(3-121)
(3-122)
(3-123)
(3-124)

【０８７４】

【化５９５】



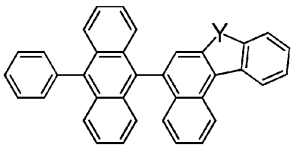
【０８７５】

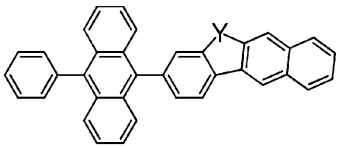
また、アントラセン系化合物の他の具体的な例としては、例えば、下記式（３－１３１－Ｙ）～式（３－１７９－Ｙ）で表される化合物、下記式（３－１８０－Ｙ）～式（３－１８２－Ｙ）で表される化合物、下記式（３－１８３－Ｎ）、下記式（３－１８４－Ｙ）～式（３－２５４－Ｙ）、式（３－２５４－Ｙ）～式（３－２６９－Ｙ）、および下記式（３－５００）～式（３－５５７）で表される化合物があげられる。下記式（３－１３１－Ｙ）～式（３－１７９－Ｙ）で表される化合物、下記式（３－１８０－Ｙ）～式（３－１８２－Ｙ）で表される化合物、下記式（３－１８３－Ｎ）、下記式（３－１８４－Ｙ）～式（３－２５４－Ｙ）、式（３－２５４－Ｙ）～式（３－２６９－Ｙ）、および下記式（３－５００）～式（３－５５７）中、水素原子は部分的に、またはすべて重水素で置換

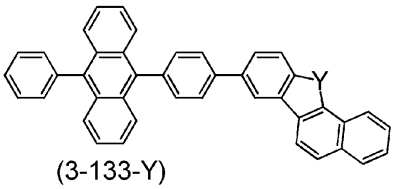
されていてもよい。式中のＹは－Ｏ－、－Ｓ－、＞Ｎ－Ｒ^{29}（Ｒ^{29}は上記と同じ定義）または＞Ｃ（－Ｒ^{30}）$_2$（Ｒ^{30}は連結していてもよいアリール、またはアルキル）のいずれでもよく、Ｒ^{29}は例えばフェニル、Ｒ^{30}は例えばメチルである。式番号は、例えばＹがＯの場合は、式（３－１３１－Ｙ）は式（３－１３１－Ｏ）とし、Ｙが－Ｓ－または＞Ｎ－Ｒ^{29}の場合はそれぞれ式（３－１３１－Ｓ）または式（３－１３１－Ｎ）とする。

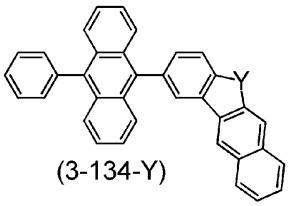
【０８７６】

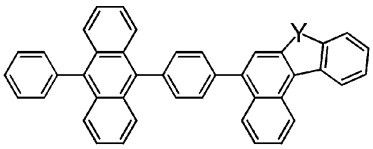
【化５９６】

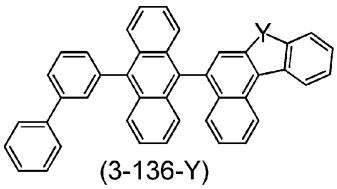

(3-131-Y)

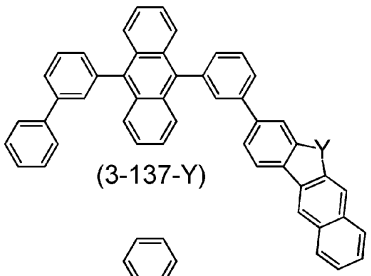

(3-132-Y)

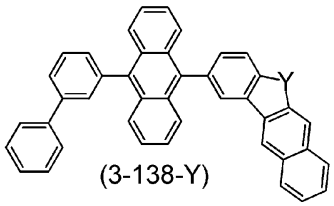

(3-133-Y)

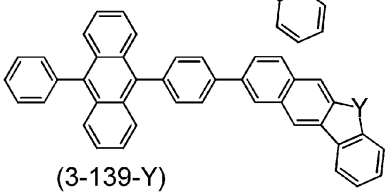

(3-134-Y)

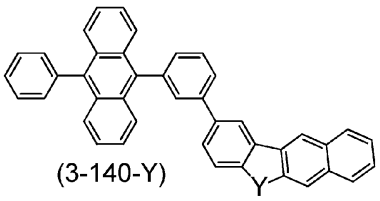

(3-135-Y)

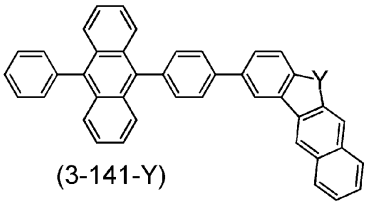

(3-136-Y)

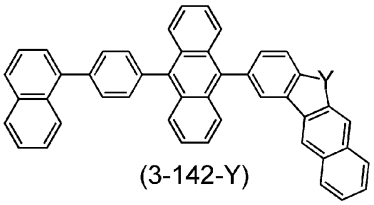

(3-137-Y)

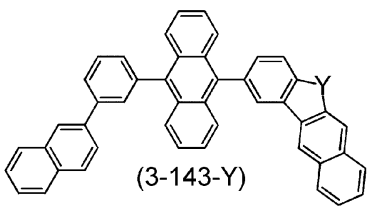

(3-138-Y)

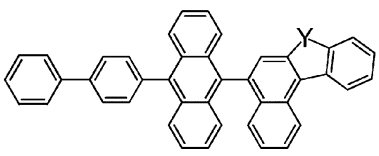

(3-139-Y)


(3-140-Y)


(3-141-Y)

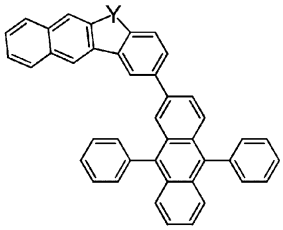

(3-142-Y)


(3-143-Y)

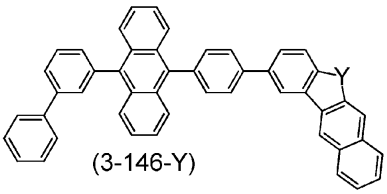

(3-144-Y)

【０８７７】

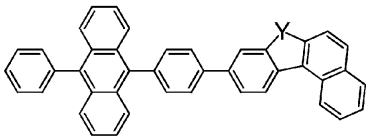
【化５９７】



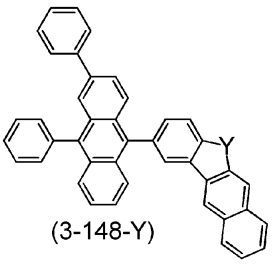
(3-145-Y)



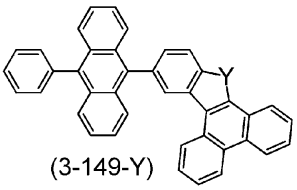
(3-146-Y)



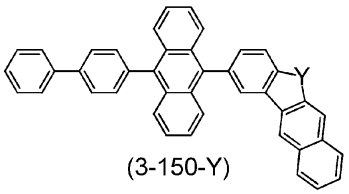
(3-147-Y)



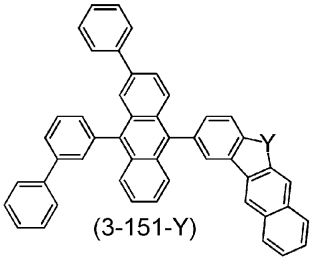
(3-148-Y)



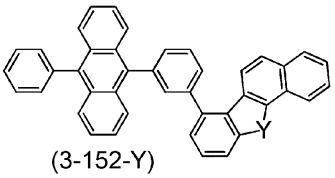
(3-149-Y)



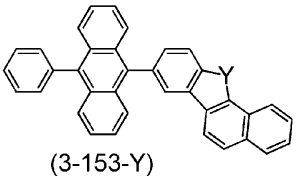
(3-150-Y)



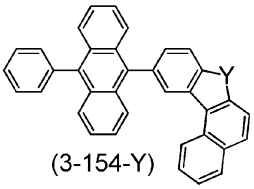
(3-151-Y)



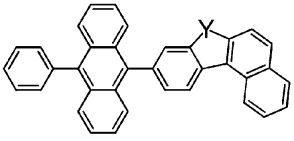
(3-152-Y)



(3-153-Y)



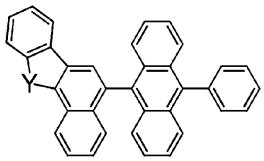
(3-154-Y)

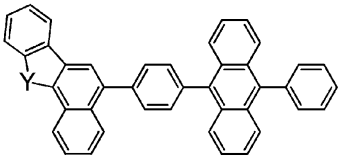


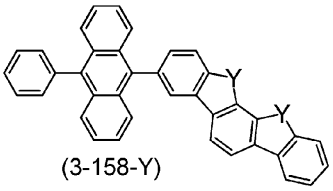
(3-155-Y)

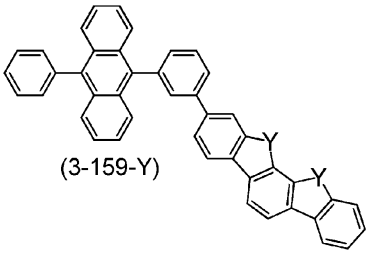
【０８７８】

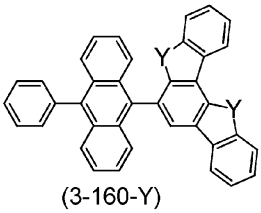
【化５９８】

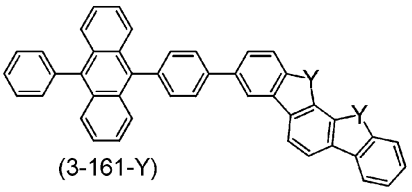

(3-156-Y)

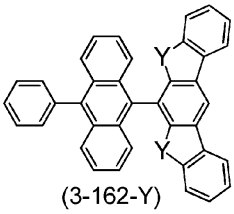

(3-157-Y)

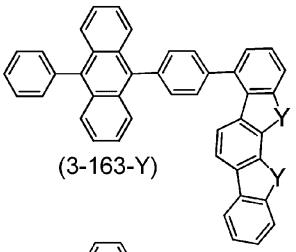

(3-158-Y)

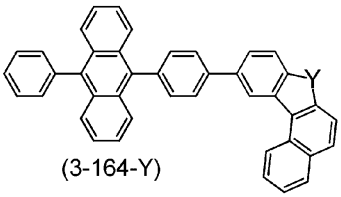

(3-159-Y)

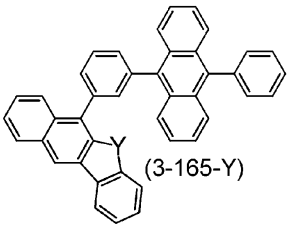

(3-160-Y)

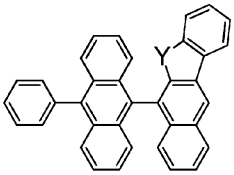

(3-161-Y)

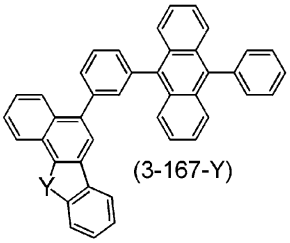

(3-162-Y)


(3-163-Y)


(3-164-Y)

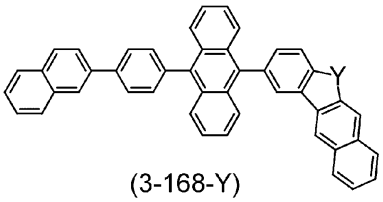

(3-165-Y)


(3-166-Y)

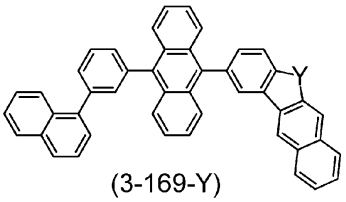

(3-167-Y)

【０８７９】

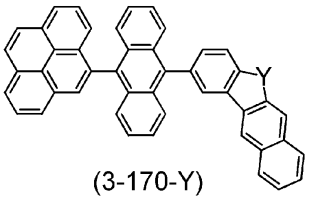
【化５９９】



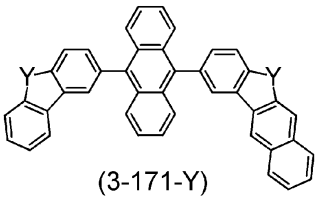
(3-168-Y)



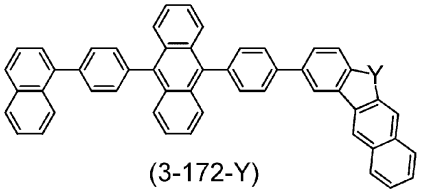
(3-169-Y)



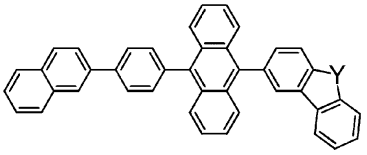
(3-170-Y)



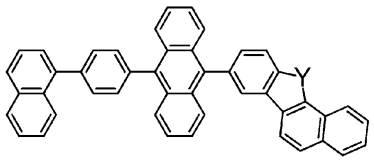
(3-171-Y)



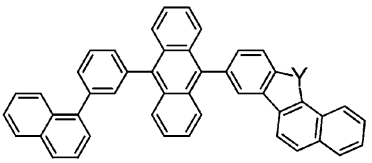
(3-172-Y)



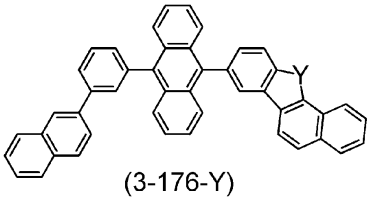
(3-173-Y)



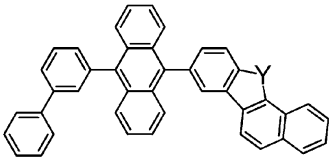
(3-174-Y)



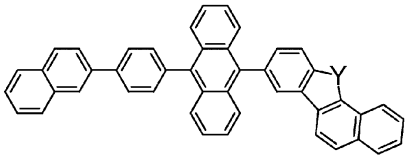
(3-175-Y)



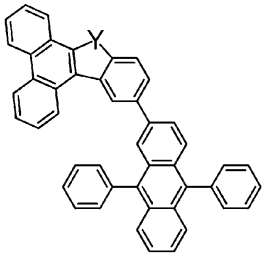
(3-176-Y)



(3-177-Y)



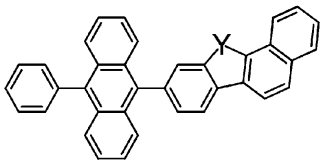
(3-178-Y)



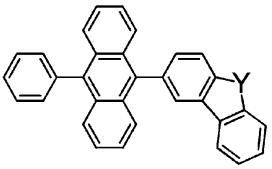
(3-179-Y)

【０８８０】

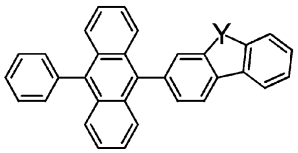
【化６００】



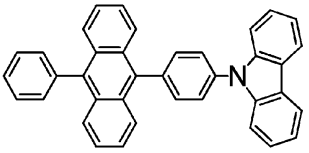
(3-180-Y)



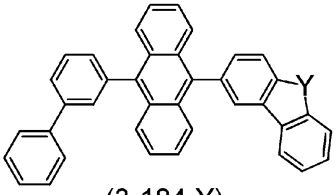
(3-181-Y)



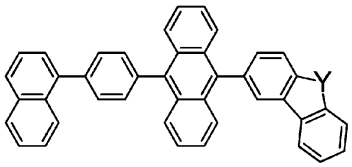
(3-182-Y)



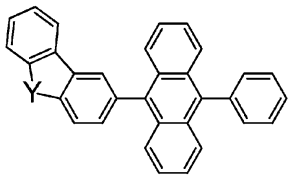
(3-183-N)



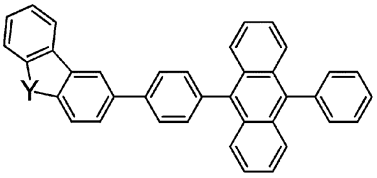
(3-184-Y)



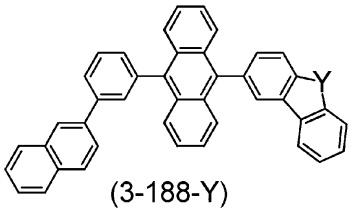
(3-185-Y)



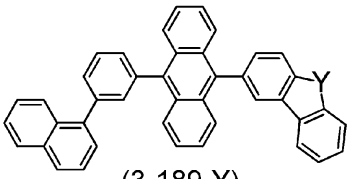
(3-186-Y)



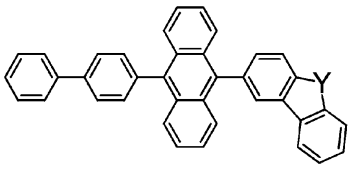
(3-187-Y)



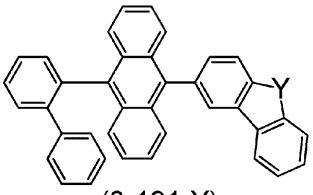
(3-188-Y)



(3-189-Y)



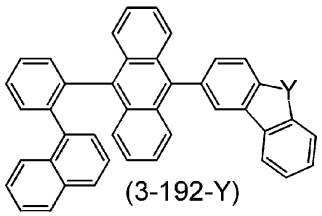
(3-190-Y)

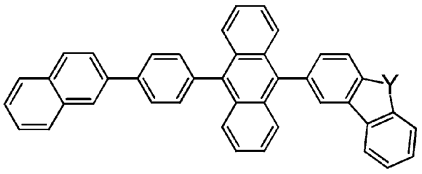


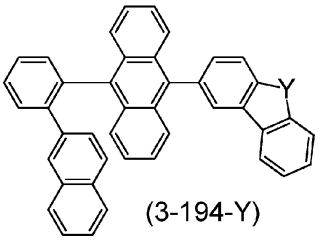
(3-191-Y)

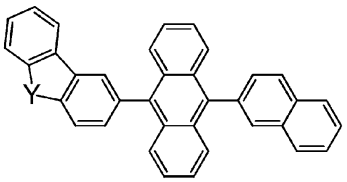
【０８８１】

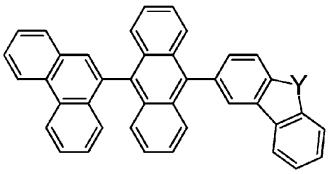
【化６０１】

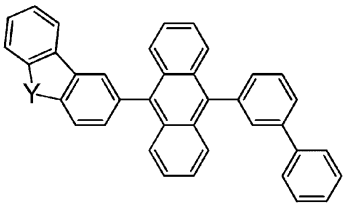

(3-192-Y)

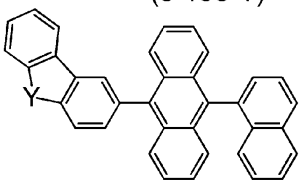

(3-193-Y)

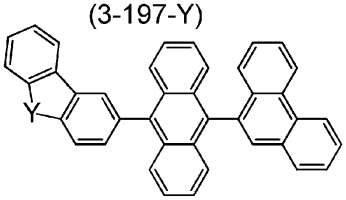

(3-194-Y)

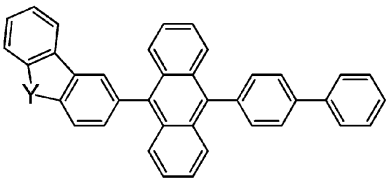

(3-195-Y)

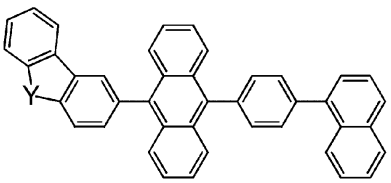

(3-196-Y)

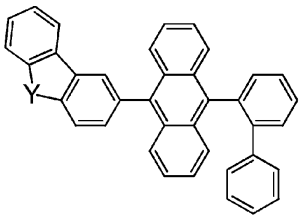

(3-197-Y)

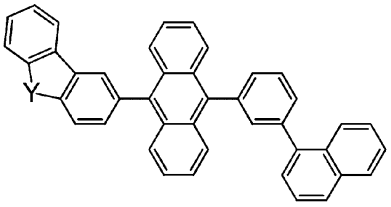

(3-198-Y)


(3-199-Y)


(3-200-Y)

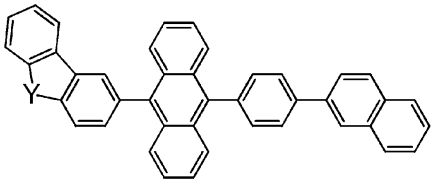

(3-201-Y)


(3-202-Y)

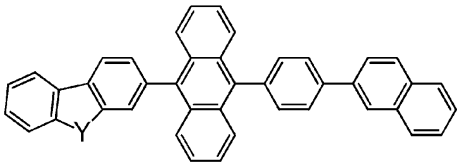

(3-203-Y)

【０８８２】

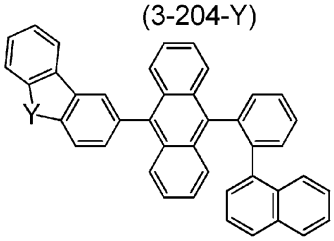
【化６０２】



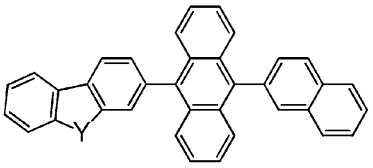
(3-204-Y)



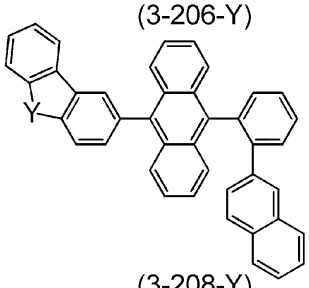
(3-205-Y)



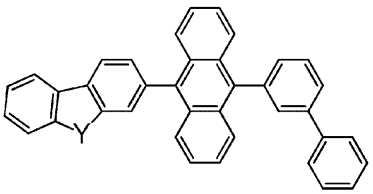
(3-206-Y)



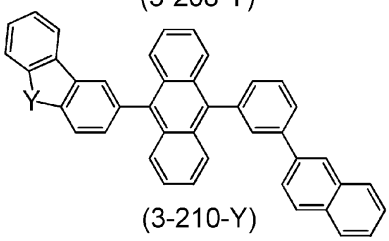
(3-207-Y)



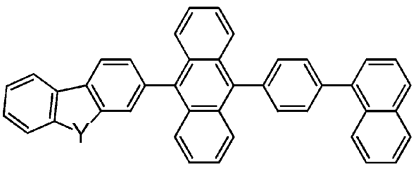
(3-208-Y)



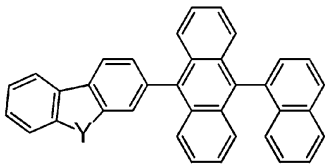
(3-209-Y)



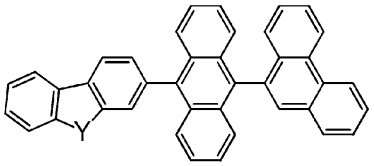
(3-210-Y)



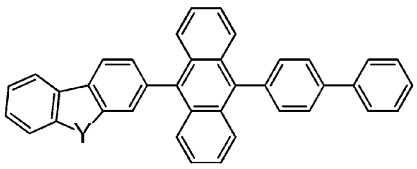
(3-211-Y)



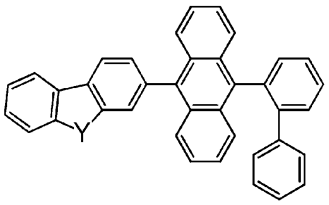
(3-212-Y)



(3-213-Y)



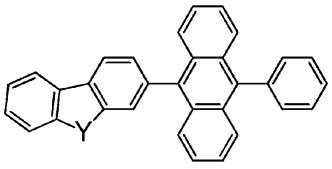
(3-214-Y)



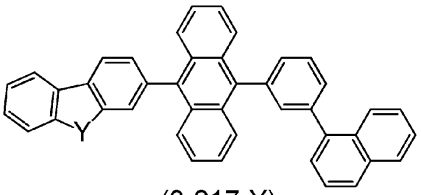
(3-215-Y)

【０８８３】

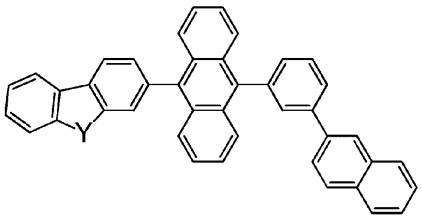
【化６０３】



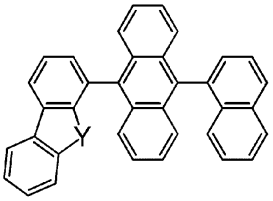
(3-216-Y)



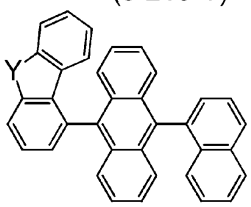
(3-217-Y)



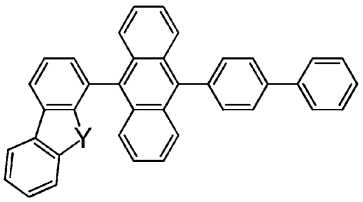
(3-218-Y)



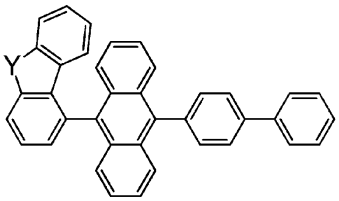
(3-219-Y)



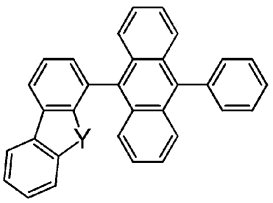
(3-220-Y)



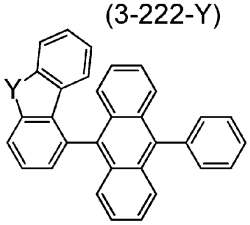
(3-221-Y)



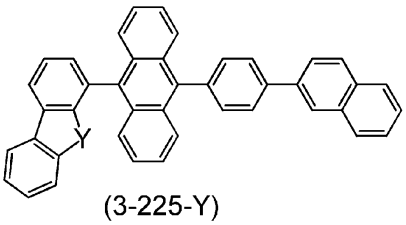
(3-222-Y)



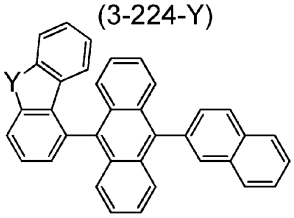
(3-223-Y)



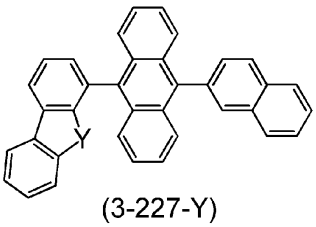
(3-224-Y)



(3-225-Y)



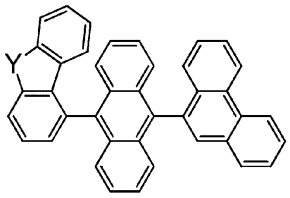
(3-226-Y)



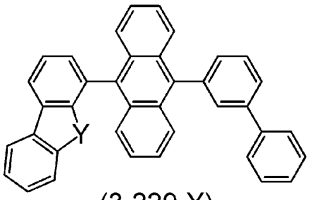
(3-227-Y)

【０８８４】

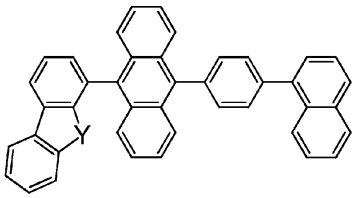
【化６０４】



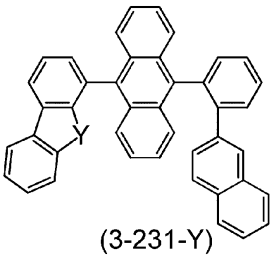
(3-228-Y)



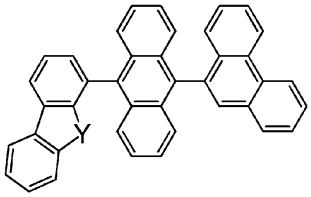
(3-229-Y)



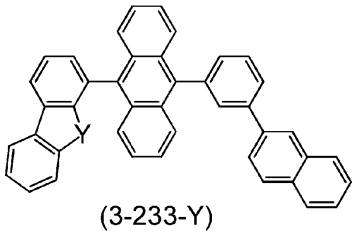
(3-230-Y)



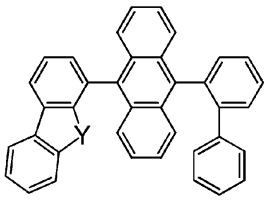
(3-231-Y)



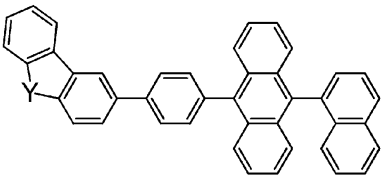
(3-232-Y)



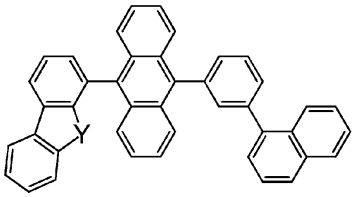
(3-233-Y)



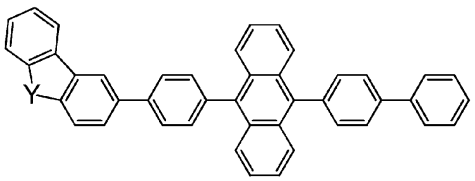
(3-234-Y)



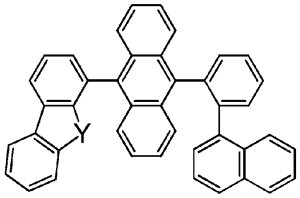
(3-235-Y)



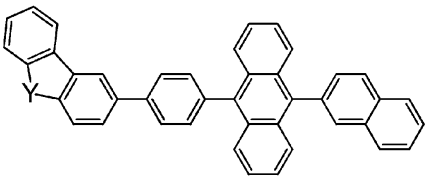
(3-236-Y)



(3-237-Y)



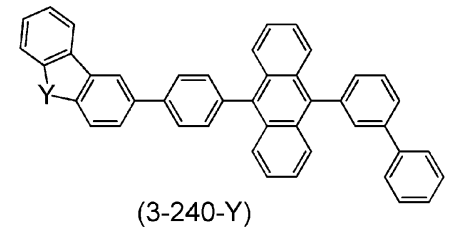
(3-238-Y)



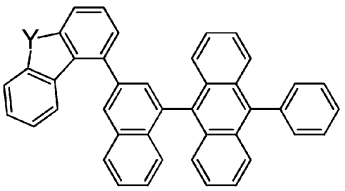
(3-239-Y)

【０８８５】

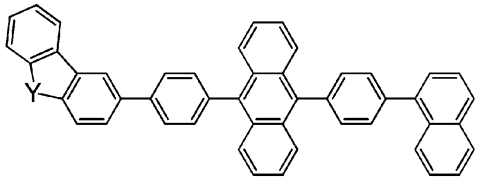
【化６０５】



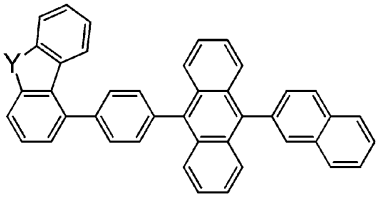
(3-240-Y)



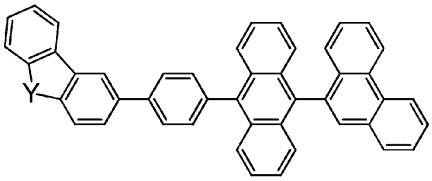
(3-241-Y)



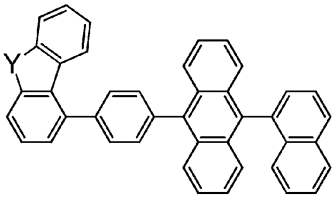
(3-242-Y)



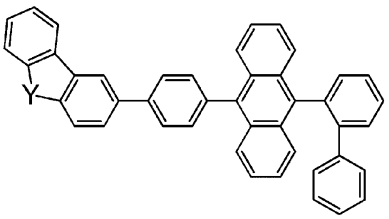
(3-243-Y)



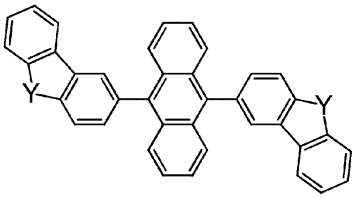
(3-244-Y)



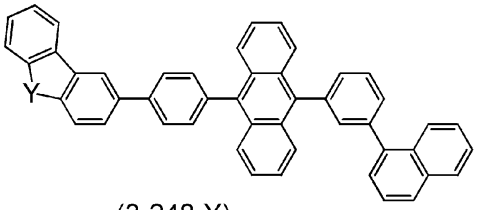
(3-245-Y)



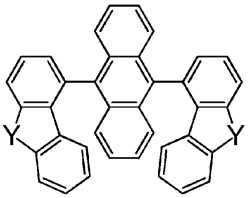
(3-246-Y)



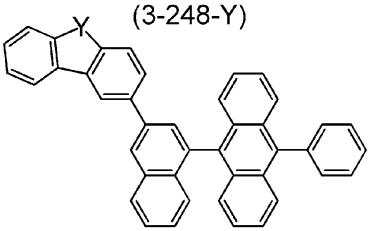
(3-247-Y)



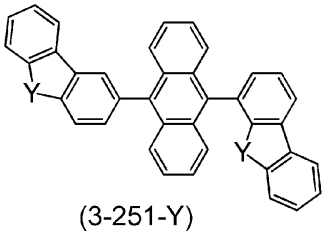
(3-248-Y)



(3-249-Y)



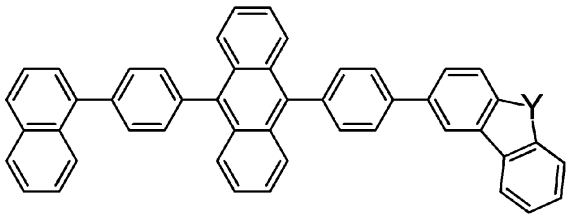
(3-250-Y)



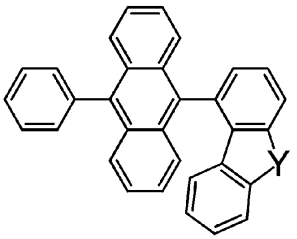
(3-251-Y)

【０８８６】

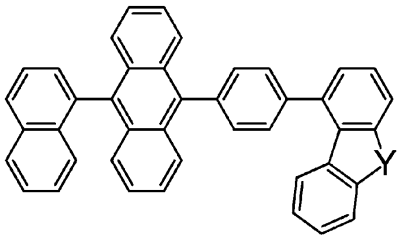
【化６０６】



(3-252-Y)



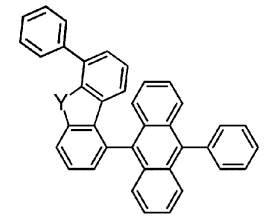
(3-253-Y)

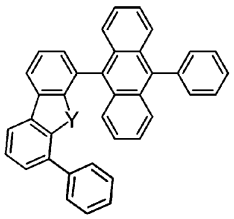


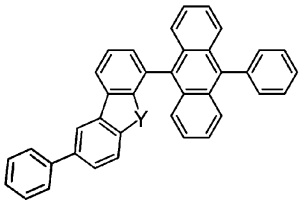
(3-254-Y)

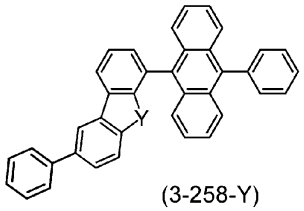
【０８８７】

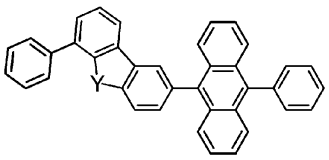
【化６０７】

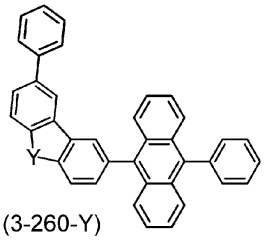

(3-255-Y)

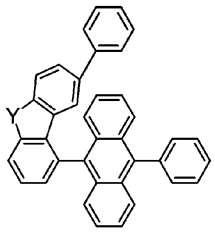

(3-256-Y)

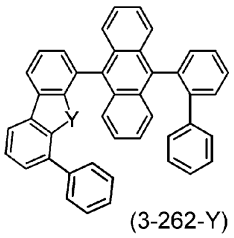

(3-257-Y)

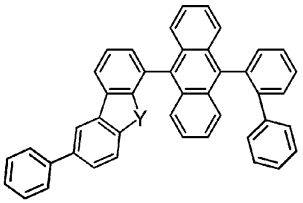

(3-258-Y)

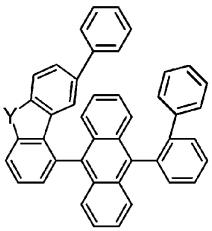

(3-259-Y)

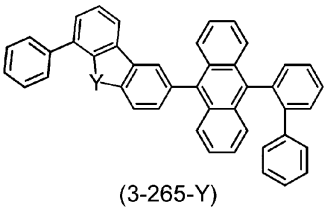

(3-260-Y)

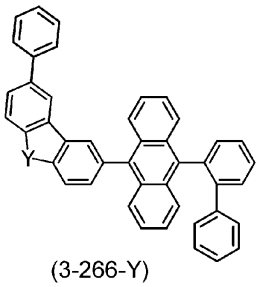

(3-261-Y)

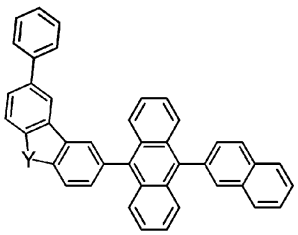

(3-262-Y)

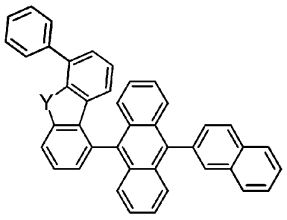

(3-263-Y)

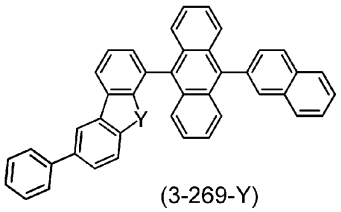

(3-264-Y)


(3-265-Y)


(3-266-Y)

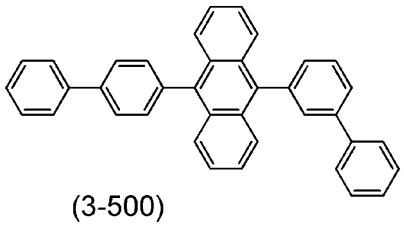

(3-267-Y)


(3-268-Y)

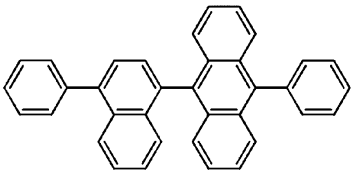

(3-269-Y)

【０８８８】

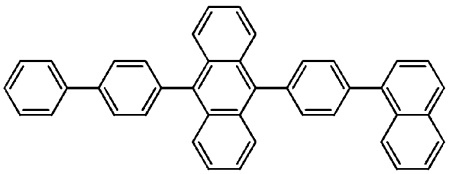
【化６０８】



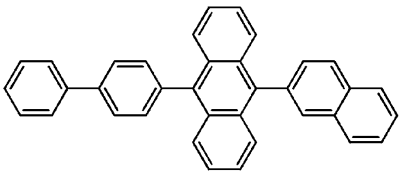
(3-500)



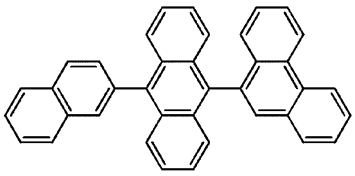
(3-501)



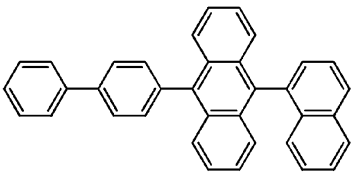
(3-502)



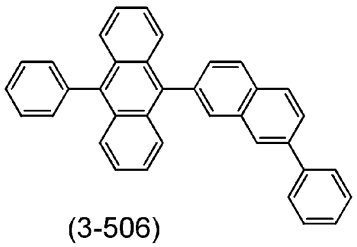
(3-503)



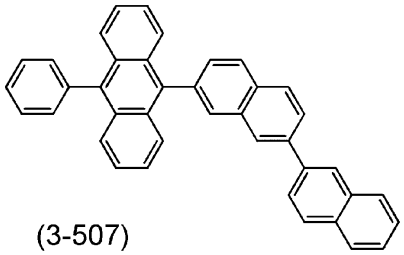
(3-504)



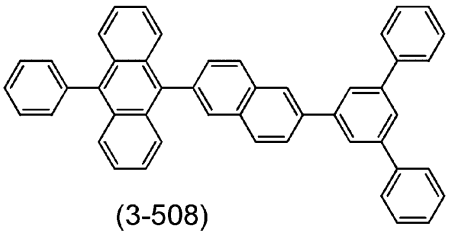
(3-505)



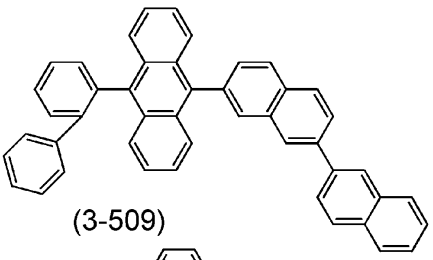
(3-506)



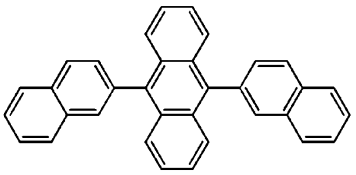
(3-507)



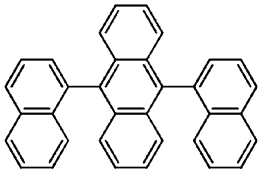
(3-508)



(3-509)



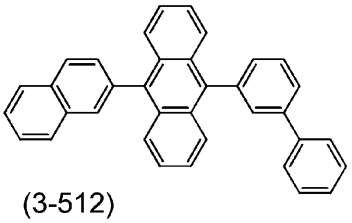
(3-510)



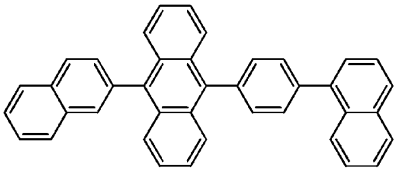
(3-511)

【０８８９】

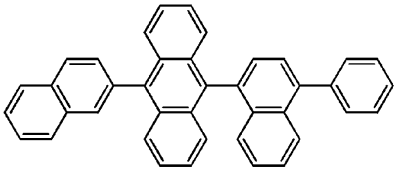
【化６０９】



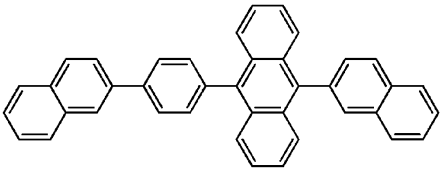
(3-512)



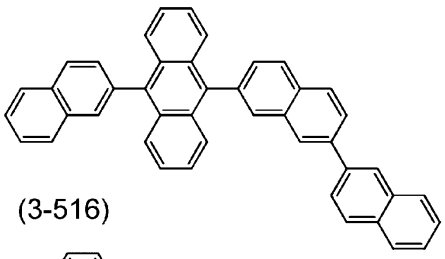
(3-513)



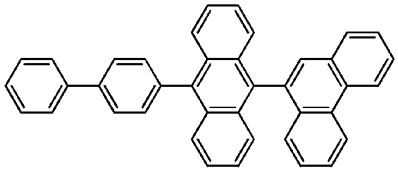
(3-514)



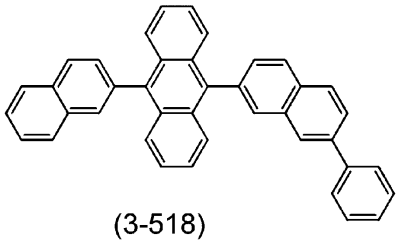
(3-515)



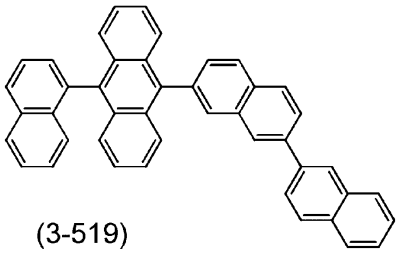
(3-516)



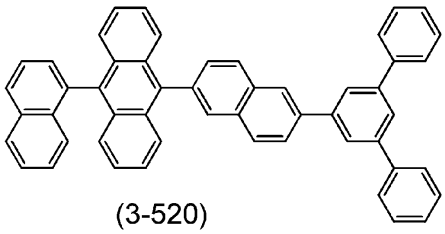
(3-517)



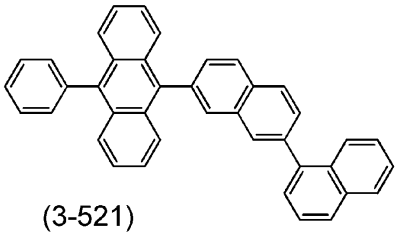
(3-518)



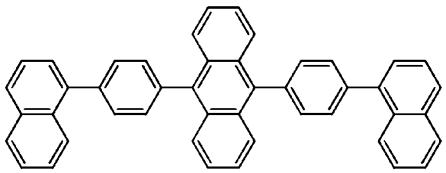
(3-519)



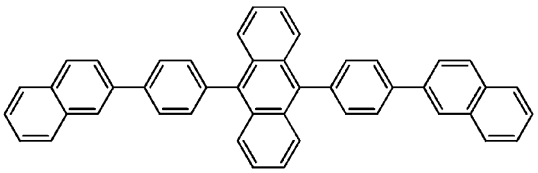
(3-520)



(3-521)



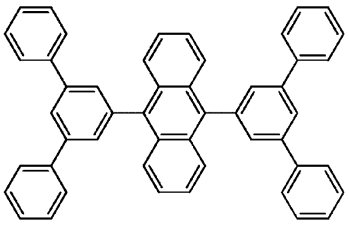
(3-522)



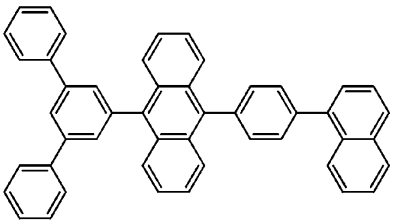
(3-523)

【０８９０】

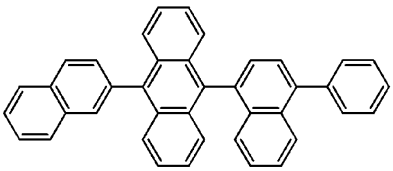
【化６１０】



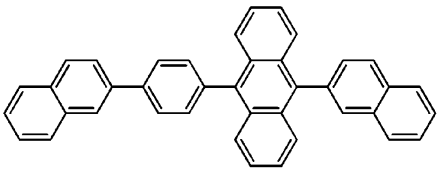
(3-524)



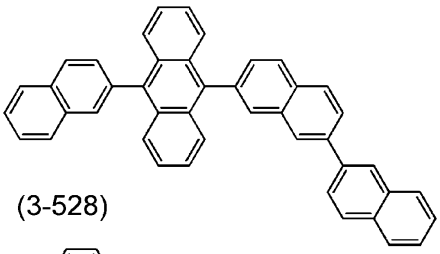
(3-525)



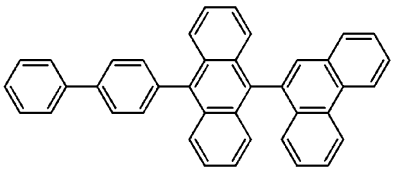
(3-526)



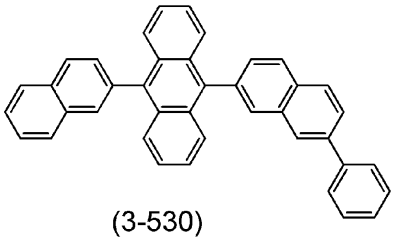
(3-527)



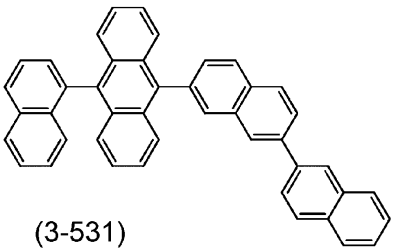
(3-528)



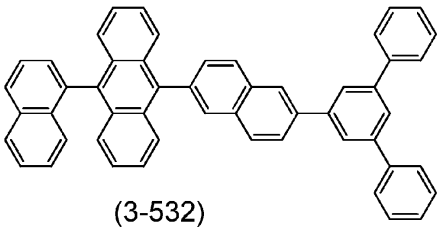
(3-529)



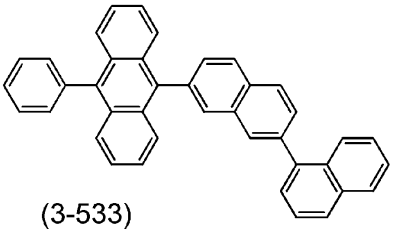
(3-530)



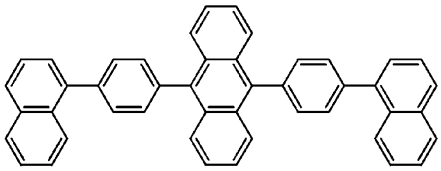
(3-531)



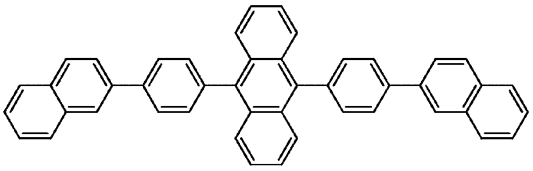
(3-532)



(3-533)



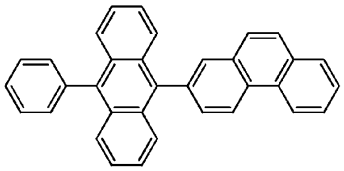
(3-534)



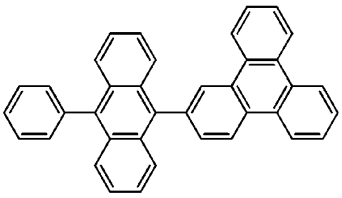
(3-535)

【０８９１】

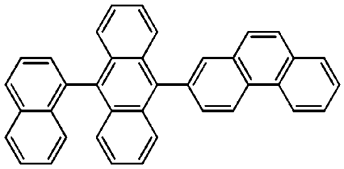
【化６１１】



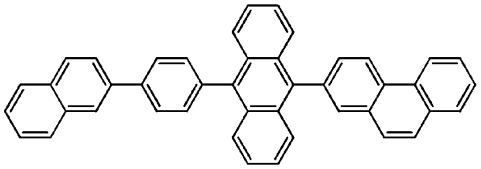
(3-536)



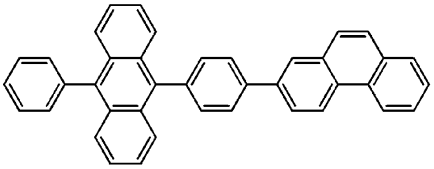
(3-537)



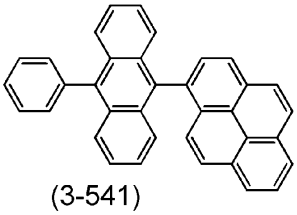
(3-538)



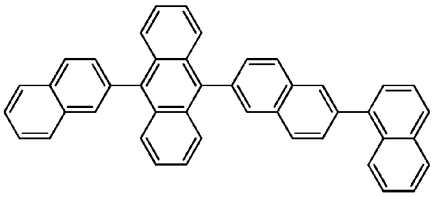
(3-539)



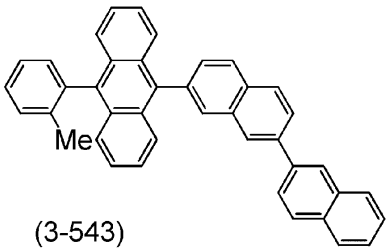
(3-540)



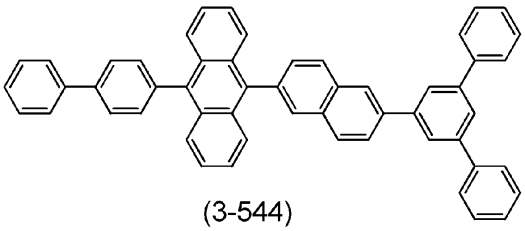
(3-541)



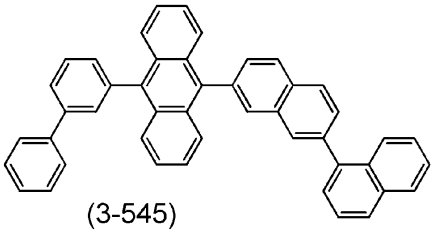
(3-542)



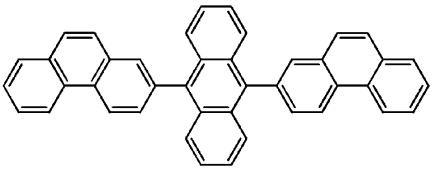
(3-543)



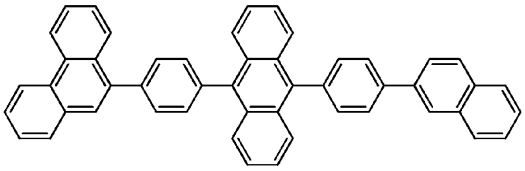
(3-544)



(3-545)



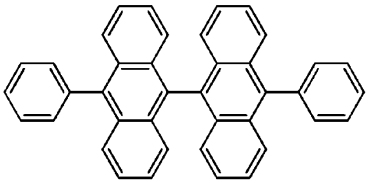
(3-546)



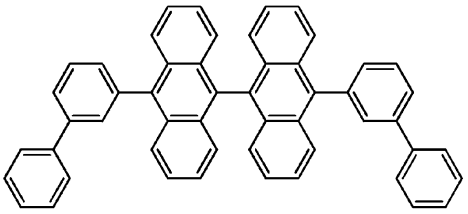
(3-547)

【０８９２】

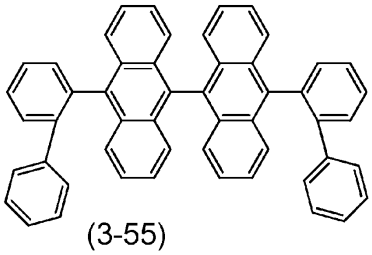
【化６１２】



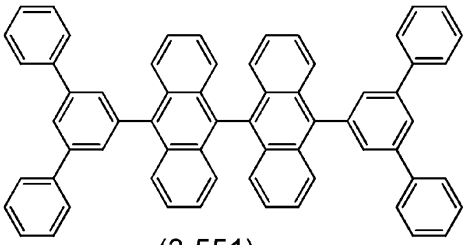
(3-548)



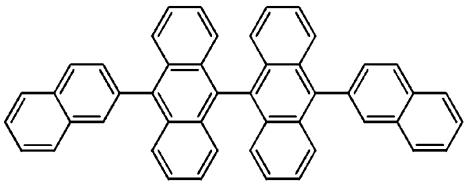
(3-549)



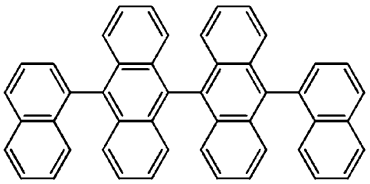
(3-55)



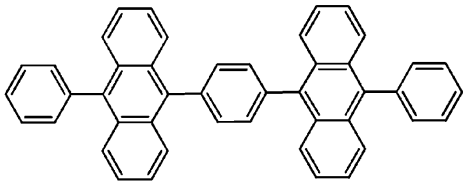
(3-551)



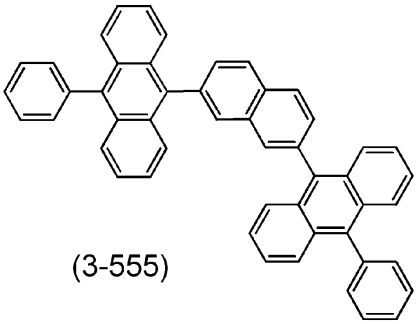
(3-552)



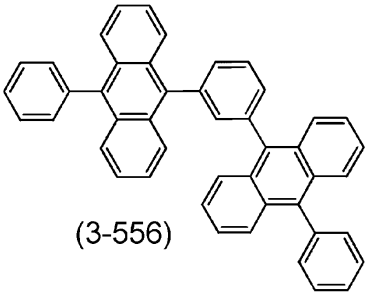
(3-553)



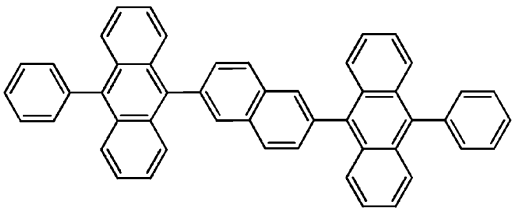
(3-554)



(3-555)



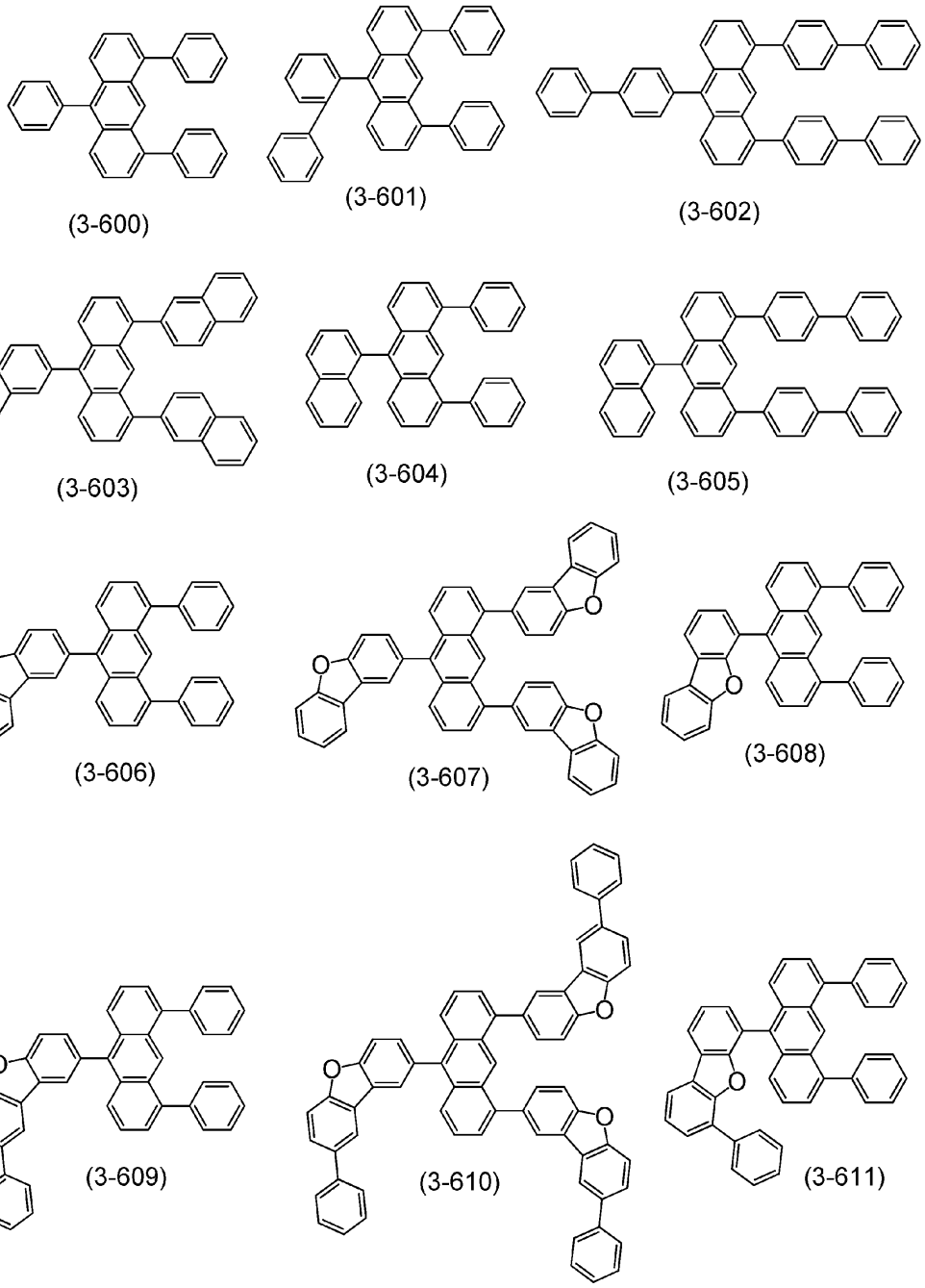
(3-556)



(3-557)

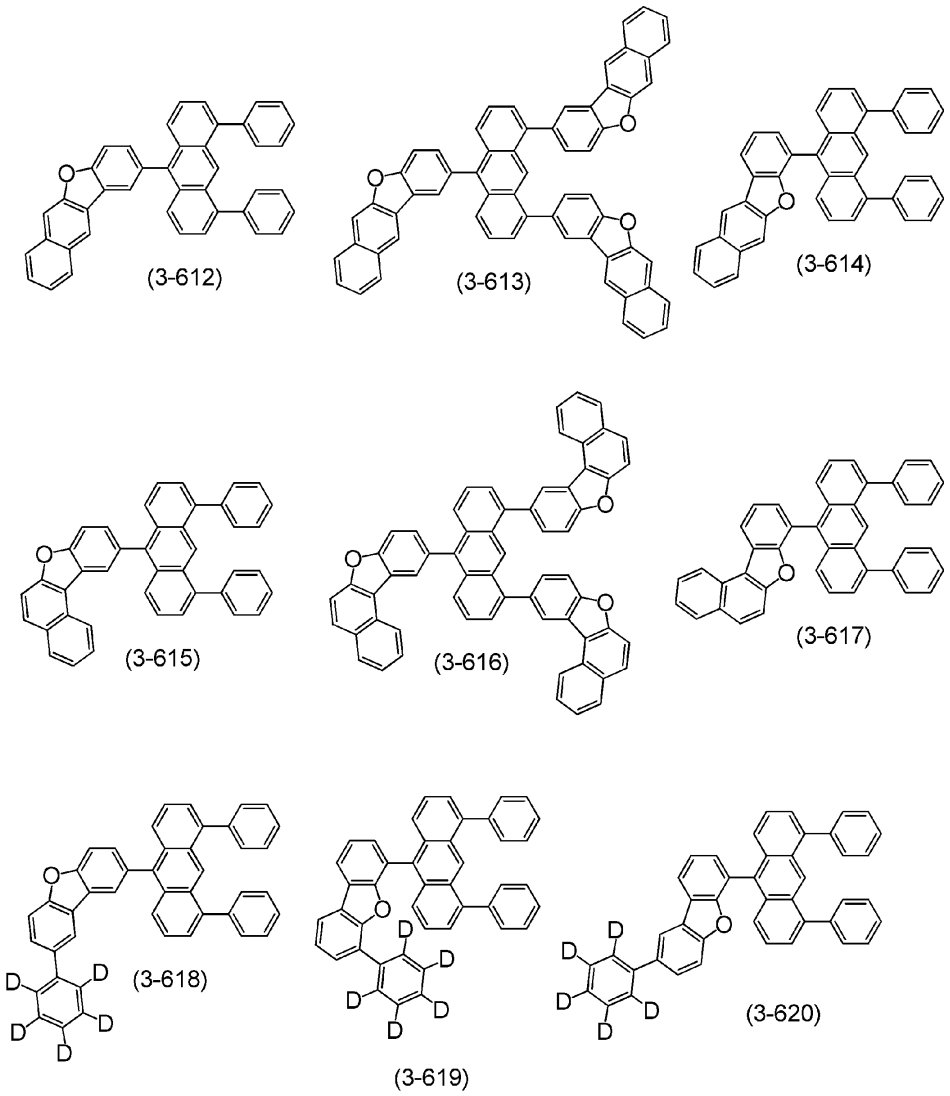
【０８９３】

【化６１３】



【０８９４】

【化６１４】



【０８９５】

これらの化合物の中でも、式（３－１３１－Ｙ）～式（３－１３４－Ｙ）、式（３－１３８－Ｙ）、式（３－１４０－Ｙ）～式（３－１４３－Ｙ）、式（３－１５０－Ｙ）、式（３－１５３－Ｙ）～式（３－１５６－Ｙ）、式（３－１６６－Ｙ）、式（３－１６８－Ｙ）、式（３－１７３－Ｙ）、式（３－１７７－Ｙ）、式（３－１８０－Ｙ）～式（３－１８３－Ｎ）、式（３－１８５－Ｙ）、式（３－１９０－Ｙ）、式（３－２２３－Ｙ）、式（３－２４１－Ｙ）、式（３－２５０－Ｙ）、式（３－２５２－Ｙ）～式（３－２５４－Ｙ）、式（３－５０１）、式（３－５０７）、式（３－５０８）、式（３－５０９）、式（３－５１３）、式（３－５１４）、式（３－５１９）、式（３－５２１）、式（３－５３８）～式（３－５４７）または式（３－６００）～（３－６２０）で表される化合物が好ましい。また、Ｙは－Ｏ－であることが好ましい。

【０８９６】

式（３－Ｈ）で表されるアントラセン系化合物は、アントラセン骨格の所望の位置に反応性基を有する化合物と、Ｘ、Ar^4および式（Ａ）の構造などの部分構造に反応性基を有する化合物を出発原料として、鈴木カップリング、根岸カップリング、その他の公知のカップリング反応を応用して製造することができる。これらの反応性化合物の反応性基としては、ハロゲンやボロン酸などがあげられる。具体的な製造方法としては、例えば国際公開第２０１４／１４１７２５号の段落［００８９］～［０１７５］における合成法を参考にすることができる。

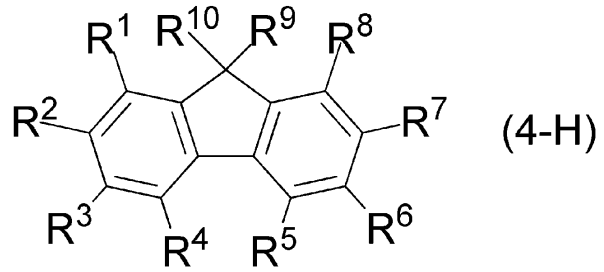
式（３－２－Ｈ）で表されるアントラセン系化合物は、国際公開第２００６／００３８４２号、韓国公開特許第２０１７－１１６８８５号公報、国際公開第２００９／１４２２３０号等に記載されている製造方法に準ずる方法で製造することができる。

【０８９７】

＜フルオレン系化合物＞

式（４－Ｈ）で表される化合物は基本的にはホストとして機能する。

【化６１５】



(4-H)

【０８９８】

式（４－Ｈ）中、

Ｒ^{1}からＲ^{10}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール（当該ヘテロアリールは連結基を介して式（４－Ｈ）におけるフルオレン骨格と結合していてもよい）、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルコキシまたはアリールオキシであり、これらにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、

また、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^{7}とＲ^{8}またはＲ^{9}とＲ^{10}がそれぞれ独立して結合して縮合環またはスピロ環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール（当該ヘテロアリールは連結基を介して当該形成された環と結合していてもよい）、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルコキシまたはアリールオキシで置換されていてもよく、これらにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、

式（４－Ｈ）で表される化合物における少なくとも１つの水素がハロゲン、シアノまたは重水素で置換されていてもよい。

【０８９９】

式（４－Ｈ）の定義における各基の詳細は、上述した、式（１）の多環芳香族化合物における説明を引用することができる。

【０９００】

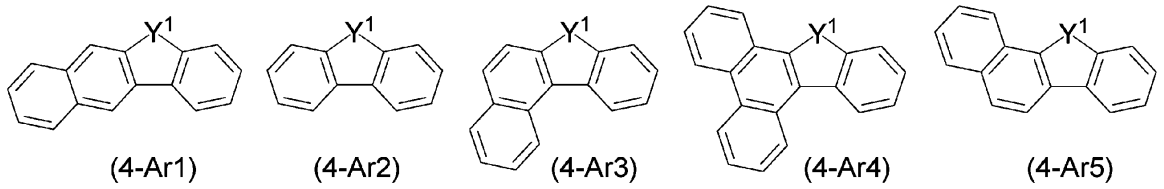
Ｒ^{1}からＲ^{10}におけるアルケニルとしては、例えば、炭素数２～３０のアルケニルがあげられ、炭素数２～２０のアルケニルが好ましく、炭素数２～１０のアルケニルがより好ましく、炭素数２～６のアルケニルがさらに好ましく、炭素数２～４のアルケニルが特に好ましい。好ましいアルケニルは、ビニル、１－プロペニル、２－プロペニル、１－ブテニル、２－ブテニル、３－ブテニル、１－ペンテニル、２－ペンテニル、３－ペンテニル、４－ペンテニル、１－ヘキセニル、２－ヘキセニル、３－ヘキセニル、４－ヘキセニル、または５－ヘキセニルである。

【０９０１】

なお、ヘテロアリールの具体例として、下記式（４－Ａｒ１）、式（４－Ａｒ２）、式（４－Ａｒ３）、式（４－Ａｒ４）または式（４－Ａｒ５）の化合物から任意の１つの水素原子を除いて表される１価の基もあげられる。

【０９０２】

【化６１６】



(4-Ar1) (4-Ar2) (4-Ar3) (4-Ar4) (4-Ar5)

【０９０３】

式（４－Ａｒ１）から式（４－Ａｒ５）中、Ｙ^{1}は、それぞれ独立して、Ｏ、ＳまたはＮ－Ｒであり、Ｒはフェニル、ビフェニリル、ナフチル、アントラセニルまたは水素であり、

式（４－Ａｒ１）から式（４－Ａｒ５）の構造における少なくとも１つの水素はフェニル、ビフェニリル、ナフチル、アントラセニル、フェナントレニル、メチル、エチル、プロピル、または、ブチルで置換されていてもよい。

【０９０４】

これらのヘテロアリールは、連結基を介して、式（４－Ｈ）におけるフルオレン骨格と結合していてもよい。すなわち、式（４－Ｈ）におけるフルオレン骨格と上記ヘテロアリールとが直接結合するだけでなく、それらの間に連結基を介して結合してもよい。この連結基としては、フェニレン、ビフェニレン、ナフチレン、アントラセニレン、メチレン、エチレン、－ＯＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$－、－ＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$Ｏ－、または、－ＯＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$Ｏ－などがあげられる。

【０９０５】

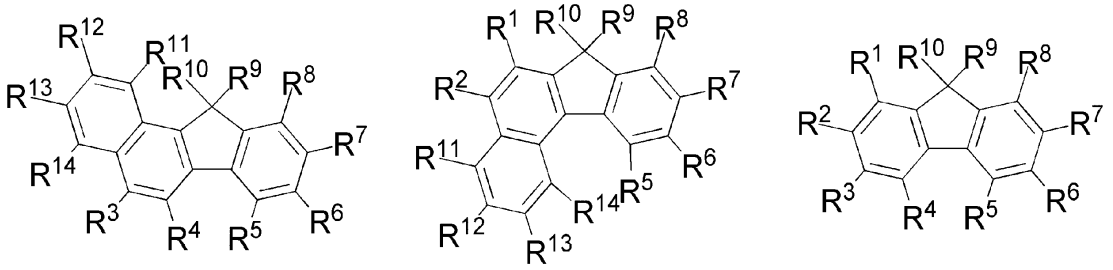
また、式（４－Ｈ）中のＲ^{1}とＲ^{2}、Ｒ^{2}とＲ^{3}、Ｒ^{3}とＲ^{4}、Ｒ^{5}とＲ^{6}、Ｒ^{6}とＲ^{7}またはＲ^{7}とＲ^{8}がそれぞれ独立して結合して縮合環を、Ｒ^{9}とＲ^{10}が結合してスピロ環を形成していてもよい。Ｒ^{1}からＲ^{8}により形成された縮合環は、式（４－Ｈ）におけるベンゼン環に縮合する環であり、脂肪族環または芳香族環である。好ましくは芳香族環であり、式（４－Ｈ）におけるベンゼン環を含めた構造としてはナフタレン環やフェナントレン環などがあげられる。Ｒ^{9}とＲ^{10}により形成されたスピロ環は、式（４－Ｈ）における５員環にスピロ結合する環であり、脂肪族環または芳香族環である。好ましくは芳香族環であり、フルオレン環などがあげられる。

【０９０６】

式（４－Ｈ）で表される化合物は、好ましくは、下記式（４－Ｈ－１）、式（４－Ｈ－２）または式（４－Ｈ－３）で表される化合物であり、それぞれ、式（４－Ｈ）においてＲ^{1}とＲ^{2}が結合して形成されたベンゼン環が縮合した化合物、式（４－Ｈ）においてＲ^{3}とＲ^{4}が結合して形成されたベンゼン環が縮合した化合物、式（４－Ｈ）においてＲ^{1}からＲ^{8}のいずれもが結合していない化合物である。

【０９０７】

【化６１７】



(4-H-1) (4-H-2) (4-H-3)

【０９０８】

式（４－Ｈ－１）、式（４－Ｈ－２）および式（４－Ｈ－３）におけるＲ^{1}からＲ^{10}の

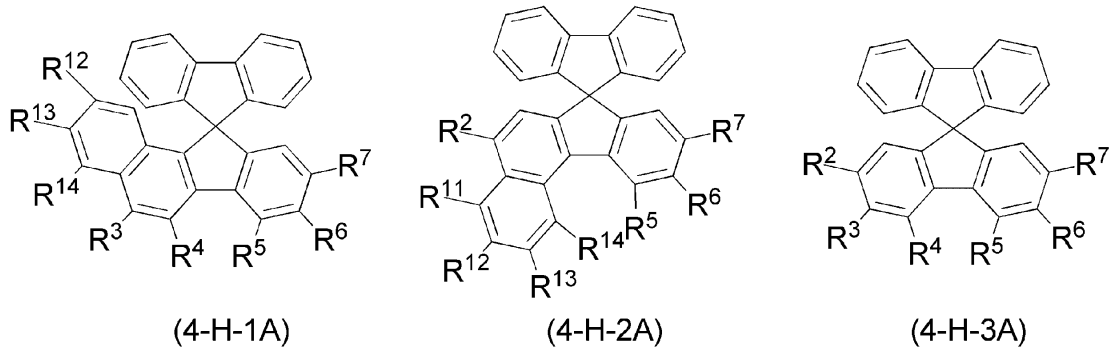
定義は式（４－Ｈ）において対応するＲ１からＲ１０と同じであり、式（４－Ｈ－１）および式（４－Ｈ－２）におけるＲ１１からＲ１４の定義も式（４－Ｈ）におけるＲ１からＲ１０と同じである。

【０９０９】

式（４－Ｈ）で表される化合物は、さらに好ましくは、下記式（４－Ｈ－１Ａ）、式（４－Ｈ－２Ａ）または式（４－Ｈ－３Ａ）で表される化合物であり、それぞれ、式（４－Ｈ－１）、式（４－Ｈ－１）または式（４－Ｈ－３）においてＲ９とＲ１０が結合してスピロ－フルオレン環が形成された化合物である。

【０９１０】

【化６１８】



【０９１１】

式（４－１Ａ）、式（４－２Ａ）および式（４－３Ａ）におけるＲ２からＲ７の定義は式（４－１）、式（４－２）および式（４－３）において対応するＲ２からＲ７と同じであり、式（４－１Ａ）および式（４－２Ａ）におけるＲ１１からＲ１４の定義も式（４－１）および式（４－２）におけるＲ１１からＲ１４と同じである。

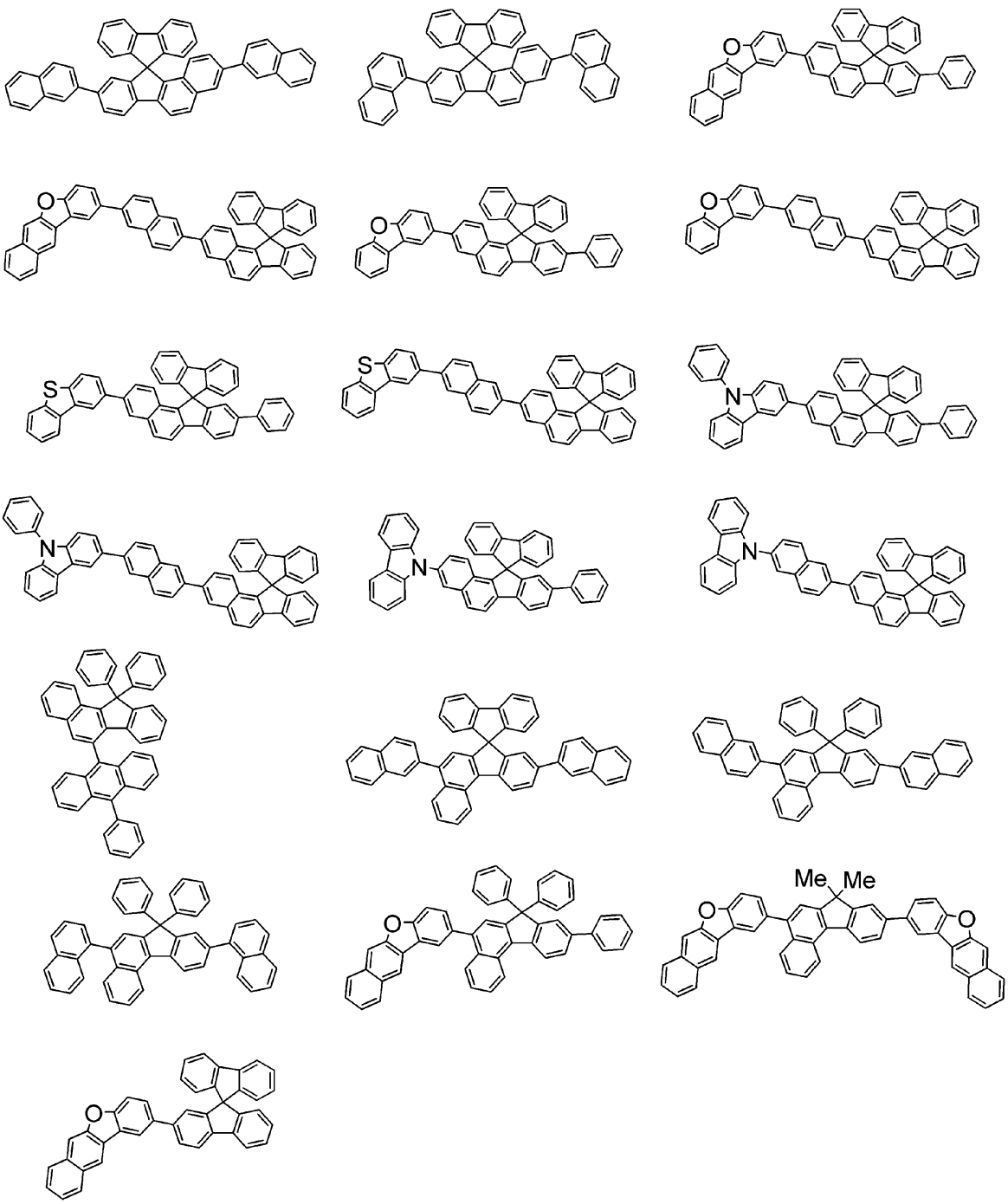
【０９１２】

また、式（４－Ｈ）で表される化合物における水素は、その全てまたは一部がハロゲン、シアノまたは重水素で置換されていてもよい。

【０９１３】

本発明のホストとしてのフルオレン系化合物のさらに具体的な例としては、以下の構造式で表される化合物があげられる。なお、「Ｍｅ」はメチルを示す。

【化６１９】

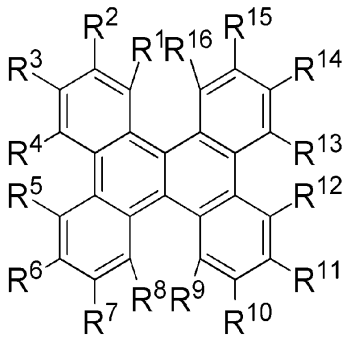


【０９１４】

＜ジベンゾクリセン系化合物＞

ホストとしてのジベンゾクリセン系化合物は、例えば下記式（５－Ｈ）で表される化合物である。

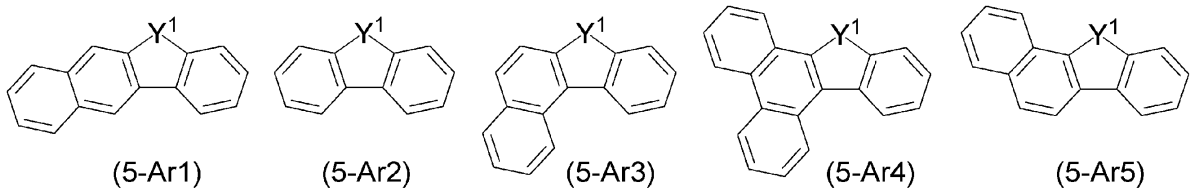
【化６２０】



(5-H)

【０９１５】
式（５－Ｈ）中、
Ｒ１からＲ１６は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール（当該ヘテロアリールは連結基を介して式（５－Ｈ）におけるジベンゾクリセン骨格と結合していてもよい）、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルコキシまたはアリールオキシであり、これらにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、
また、Ｒ１からＲ１６のうち隣接する基同士が結合して縮合環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール（当該ヘテロアリールは連結基を介して当該形成された環と結合していてもよい）、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルコキシまたはアリールオキシで置換されていてもよく、これらにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、
式（５－Ｈ）で表される化合物における少なくとも１つの水素がハロゲン、シアノまたは重水素で置換されていてもよい。
【０９１６】
式（５－Ｈ）の定義における各基の詳細は、上述した、式（１）の多環芳香族化合物における説明を引用することができる。
【０９１７】
式（５－Ｈ）の定義におけるアルケニルとしては、例えば、炭素数２～３０のアルケニルがあげられ、炭素数２～２０のアルケニルが好ましく、炭素数２～１０のアルケニルがより好ましく、炭素数２～６のアルケニルがさらに好ましく、炭素数２～４のアルケニルが特に好ましい。好ましいアルケニルは、ビニル、１－プロペニル、２－プロペニル、１－ブテニル、２－ブテニル、３－ブテニル、１－ペンテニル、２－ペンテニル、３－ペンテニル、４－ペンテニル、１－ヘキセニル、２－ヘキセニル、３－ヘキセニル、４－ヘキセニル、または５－ヘキセニルである。
【０９１８】
なお、ヘテロアリールの具体例として、下記式（５－Ａｒ１）、式（５－Ａｒ２）、式（５－Ａｒ３）、式（５－Ａｒ４）または式（５－Ａｒ５）の化合物から任意の１つの水素原子を除いて表される１価の基もあげられる。
【０９１９】

【化６２１】



(5-Ar1) (5-Ar2) (5-Ar3) (5-Ar4) (5-Ar5)

【０９２０】

式（５－Ａｒ１）から式（５－Ａｒ５）中、Ｙ^{1}は、それぞれ独立して、Ｏ、ＳまたはＮ－Ｒであり、Ｒはフェニル、ビフェニリル、ナフチル、アントラセニルまたは水素であり、

式（５－Ａｒ１）から式（５－Ａｒ５）の構造における少なくとも１つの水素はフェニル、ビフェニリル、ナフチル、アントラセニル、フェナントレニル、メチル、エチル、プロピル、または、ブチルで置換されていてもよい。

【０９２１】

これらのヘテロアリールは、連結基を介して、式（５－Ｈ）におけるジベンゾクリセン骨格と結合していてもよい。すなわち、式（５－Ｈ）におけるジベンゾクリセン骨格と上記ヘテロアリールとが直接結合するだけでなく、それらの間に連結基を介して結合してもよい。この連結基としては、フェニレン、ビフェニレン、ナフチレン、アントラセニレン、メチレン、エチレン、－ＯＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$－、－ＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$Ｏ－、または、－ＯＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$Ｏ－などがあげられる。

【０９２２】

式（５－Ｈ）で表される化合物は、好ましくは、Ｒ^{1}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}およびＲ^{16}は水素である。この場合、式（５－Ｈ）中のＲ^{2}、Ｒ^{3}、Ｒ^{6}、Ｒ^{7}、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{14}およびＲ^{15}は、それぞれ独立して、水素、フェニル、ビフェニリル、ナフチル、アントラセニル、フェナントレニル、式（５－Ａｒ１）、式（５－Ａｒ２）、式（５－Ａｒ３）、式（５－Ａｒ４）もしくは式（５－Ａｒ５）の構造を有する１価の基（当該構造を有する１価の基は、フェニレン、ビフェニレン、ナフチレン、アントラセニレン、メチレン、エチレン、－ＯＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$－、－ＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$Ｏ－、または、－ＯＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$Ｏ－を介して、式（５－Ｈ）におけるジベンゾクリセン骨格と結合していてもよい）、メチル、エチル、プロピル、または、ブチルであることが好ましい。

【０９２３】

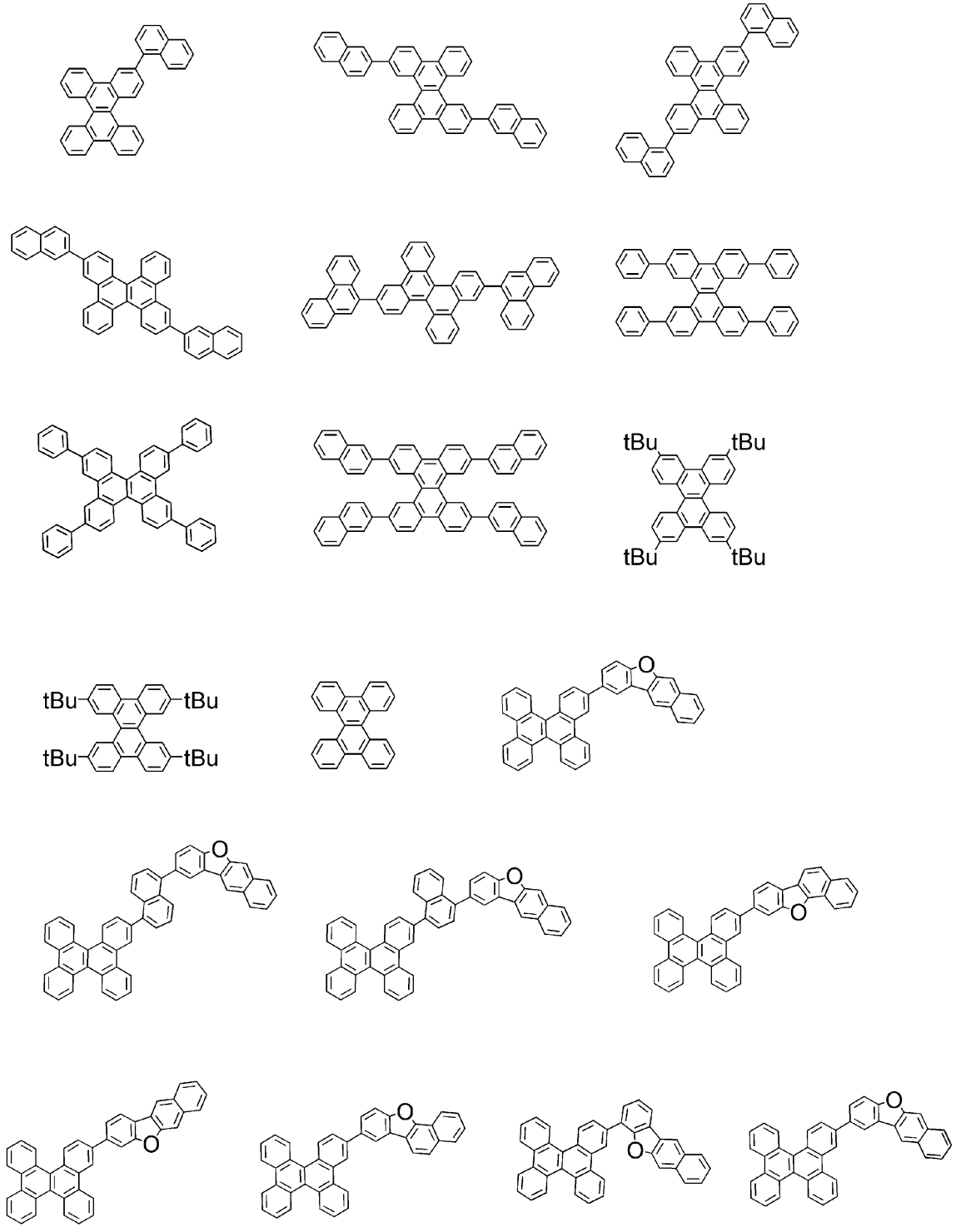
式（５－Ｈ）で表される化合物は、より好ましくは、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{4}、Ｒ^{5}、Ｒ^{7}、Ｒ^{8}、Ｒ^{9}、Ｒ^{10}、Ｒ^{12}、Ｒ^{13}、Ｒ^{15}およびＲ^{16}は水素である。この場合、式（５－Ｈ）中のＲ^{3}、Ｒ^{6}、Ｒ^{11}およびＲ^{14}の少なくとも１つ（好ましくは１つまたは２つ、より好ましくは１つ）は、単結合、フェニレン、ビフェニレン、ナフチレン、アントラセニレン、メチレン、エチレン、－ＯＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$－、－ＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$Ｏ－、または、－ＯＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{2}$Ｏ－を介した、式（５－Ａｒ１）、式（５－Ａｒ２）、式（５－Ａｒ３）、式（５－Ａｒ４）または式（５－Ａｒ５）の構造を有する１価の基であり、

前記少なくとも１つ以外（すなわち、前記構造を有する１価の基が置換した位置以外）は水素、フェニル、ビフェニリル、ナフチル、アントラセニル、メチル、エチル、プロピル、または、ブチルであり、これらにおける少なくとも１つの水素は、フェニル、ビフェニリル、ナフチル、アントラセニル、メチル、エチル、プロピル、または、ブチルで置換されていてもよい。

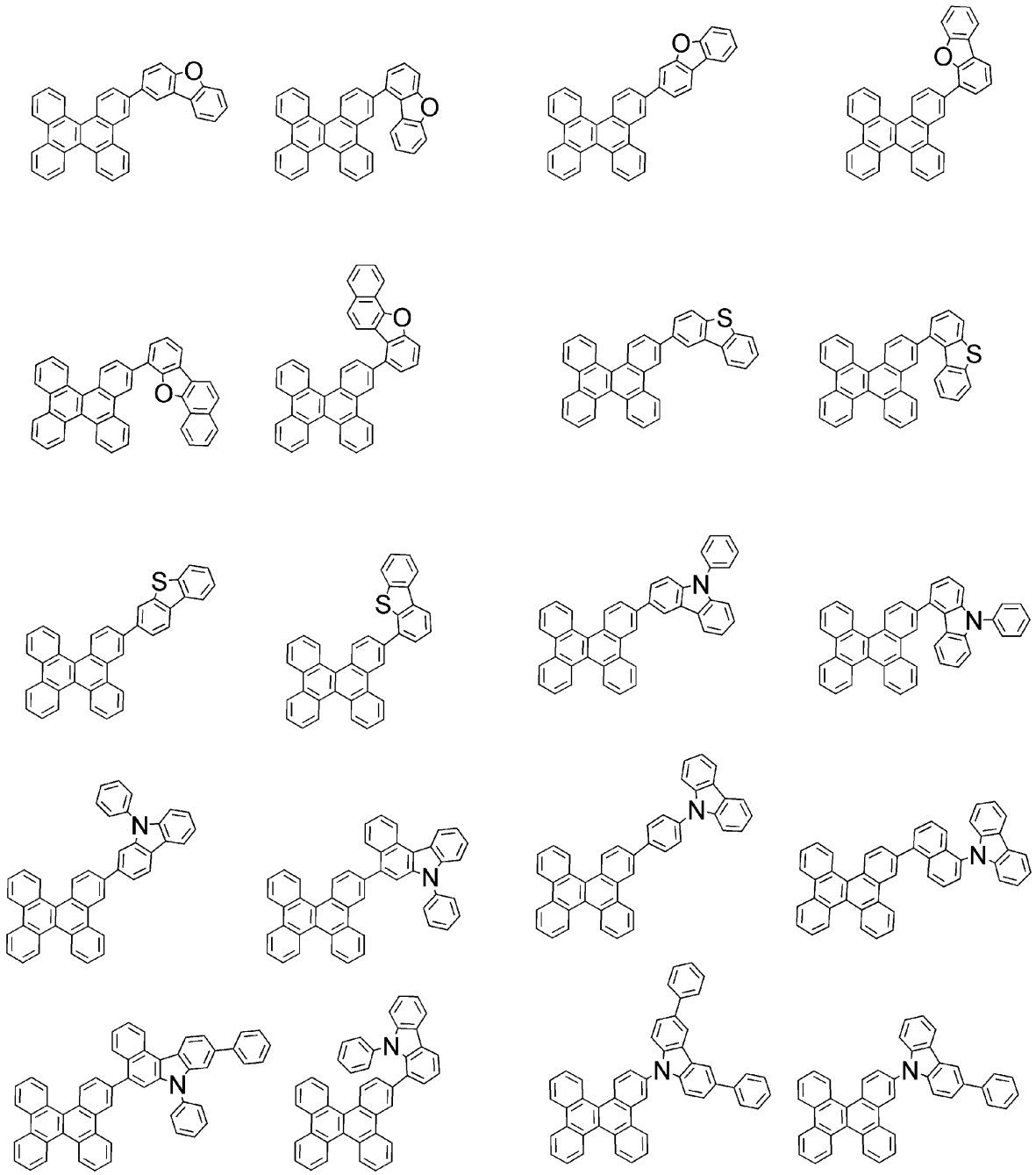
【０９２４】

また、式（５－Ｈ）中のＲ^{2}、Ｒ^{3}、Ｒ^{6}、Ｒ^{7}、Ｒ^{10}、Ｒ^{11}、Ｒ^{14}およびＲ^{15}として、式（５－Ａｒ１）から式（５－Ａｒ５）で表される構造を有する１価の基が選択された場合には、当該構造における少なくとも１つの水素は式（５－Ｈ）中のＲ^{1}からＲ^{16}のいずれかと結合して単結合を形成していてもよい。

【０９２５】
本発明のホストとしてのジベンゾクリセン系化合物のさらに具体的な例としては、以下の構造式で表される化合物があげられる。なお、「ｔＢｕ」はｔ－ブチルを示す。
【０９２６】
【化６２２】



【化６２３】



【０９２７】

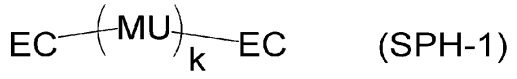
上述した発光層用材料（ホスト材料およびドーパント材料）は、これらに反応性置換基が置換した反応性化合物をモノマーとして高分子化させた高分子化合物、もしくはその高分子架橋体、または、主鎖型高分子と前記反応性化合物とを反応させたペンダント型高分子化合物、もしくはそのペンダント型高分子架橋体としても、発光層用材料に用いることができる。この場合の反応性置換基としては、式（１）で表される多環芳香族化合物での説明を引用できる。

このような高分子化合物および高分子架橋体の用途の詳細については後述する。

【０９２８】

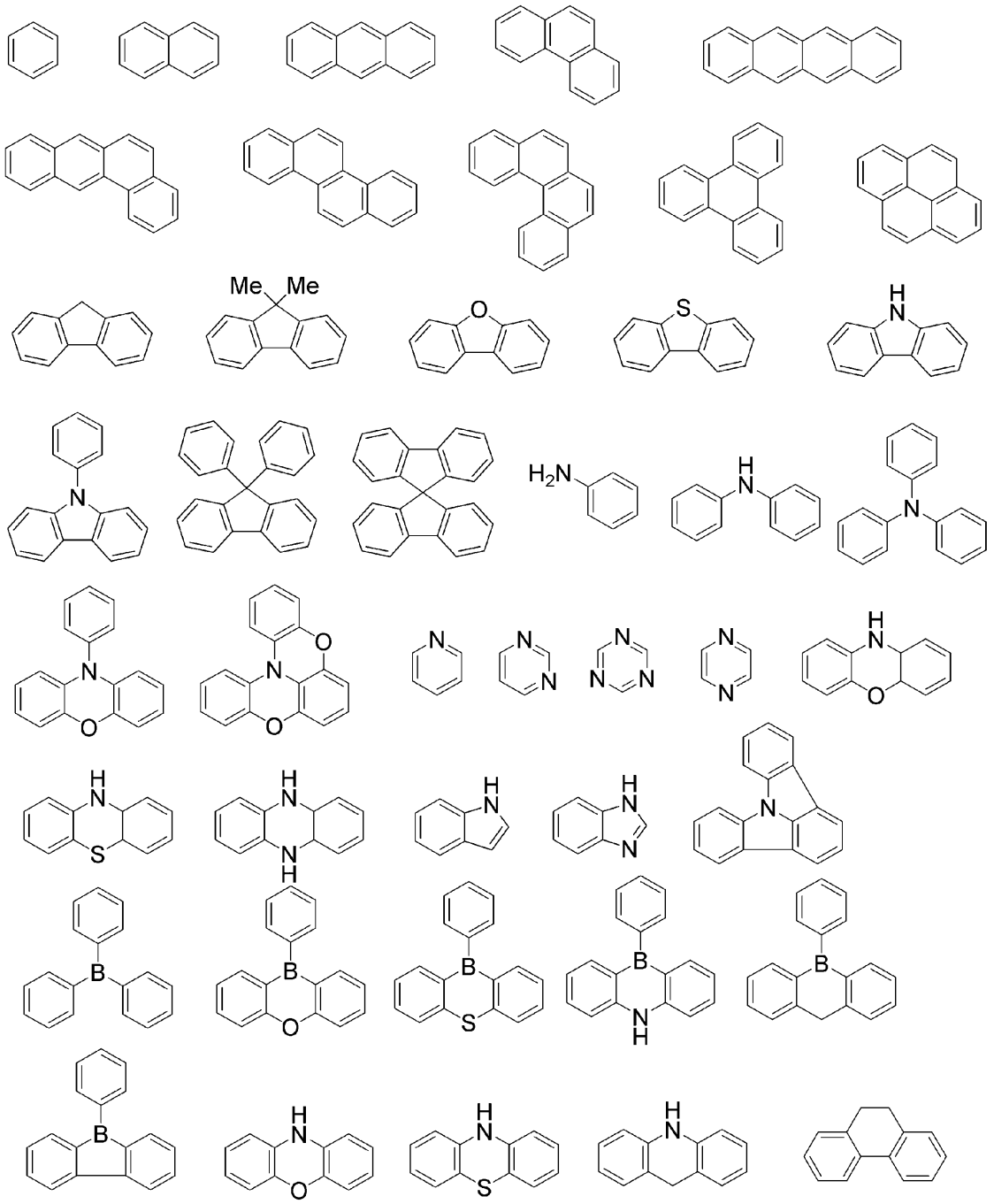
＜高分子ホスト材料の一例＞

【化６２４】



【０９２９】
式（ＳＰＨ－１）において、
ＭＵはそれぞれ独立して２価の芳香族基、ＥＣはそれぞれ独立して１価の芳香族基であり、ＭＵ中の２つの水素がＥＣまたはＭＵと置換され、ｋは２～５００００の整数である。
【０９３０】
より具体的には、
ＭＵは、それぞれ独立して、アリーレン、ヘテロアリーレン、ジアリーレンアリールアミノ、ジアリーレンアリールボリル、オキサボリン－ジイル、アザボリン－ジイルであり、
ＥＣは、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノまたはアリールオキシであり、
ＭＵおよびＥＣにおける少なくとも１つの水素はさらに、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、アルキルおよびシクロアルキルで置換されていてもよく、
ｋは２～５００００の整数である。
ｋは２０～５００００の整数であることが好ましく、１００～５００００の整数であることがより好ましい。
【０９３１】
式（ＳＰＨ－１）中のＭＵおよびＥＣにおける少なくとも１つの水素は、炭素数１～２４のアルキル、炭素数３～２４のシクロアルキル、ハロゲンまたは重水素で置換されていてもよく、さらに、前記アルキルにおける任意の－ＣＨ$_2$－は－Ｏ－または－Ｓｉ（ＣＨ$_3$）$_2$－で置換されていてもよく、前記アルキルにおける式（ＳＰＨ－１）中のＥＣに直結している－ＣＨ$_2$－を除く任意の－ＣＨ$_2$－は炭素数６～２４のアリーレンで置換されていてもよく、前記アルキルにおける任意の水素はフッ素で置換されていてもよい。
【０９３２】
ＭＵとしては、例えば、以下のいずれかの化合物から任意の２つの水素原子を除いて表される２価の基があげられる。

【化６２５】

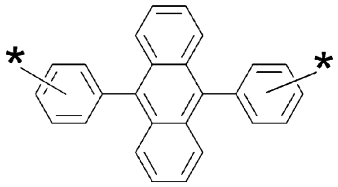


【０９３３】

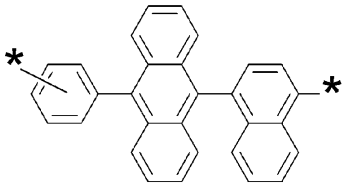
より具体的には、以下のいずれかの構造で表される２価の基があげられる。これらにおいて、ＭＵは＊において他のＭＵまたはＥＣと結合する。

【０９３４】

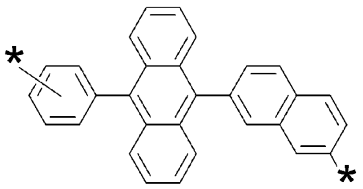
【化６２６】



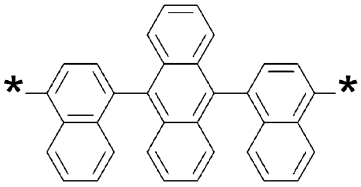
(MU-1-1)



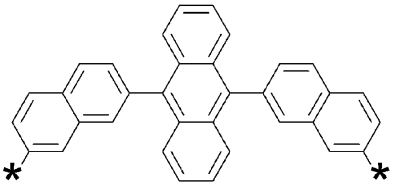
(MU-1-2)



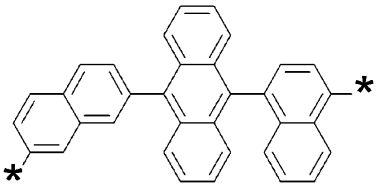
(MU-1-3)



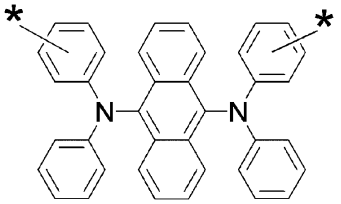
(MU-1-4)



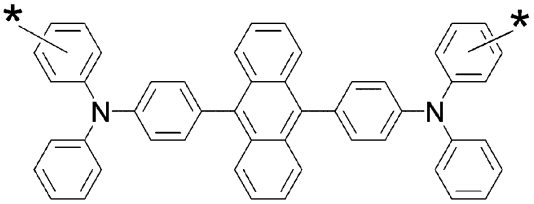
(MU-1-5)



(MU-1-6)

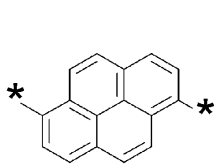


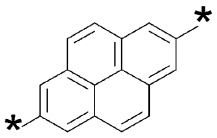
(MU-1-11)

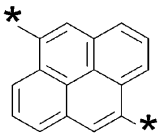


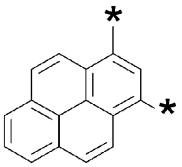
(MU-1-12)

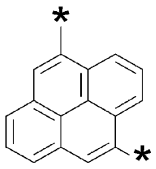
【化６２７】

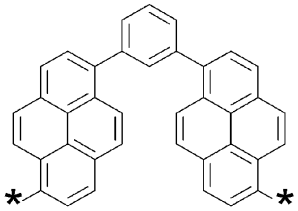

(MU-2-1)

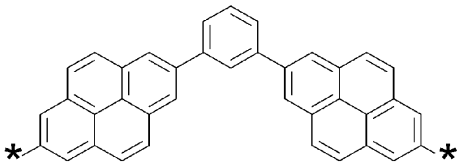

(MU-2-2)

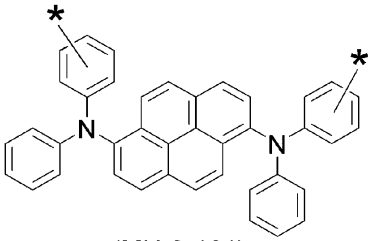

(MU-2-3)

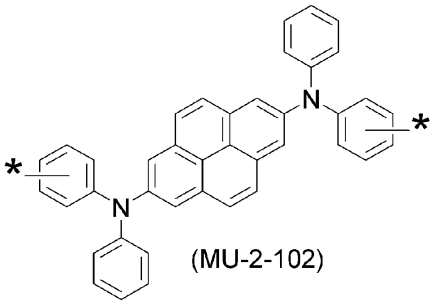

(MU-2-4)

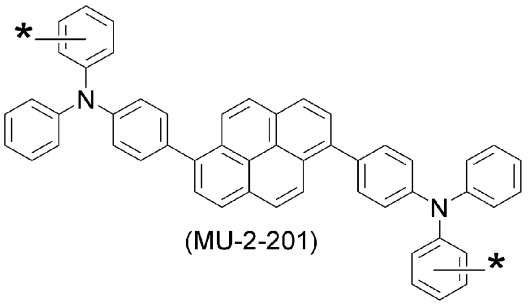

(MU-2-5)

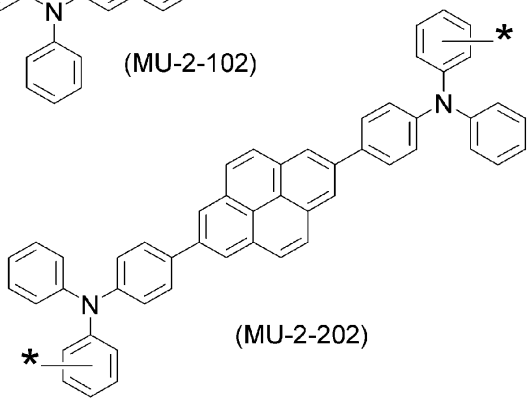

(MU-2-11)


(MU-2-12)

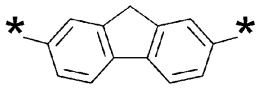

(MU-2-101)


(MU-2-102)

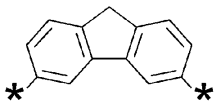

(MU-2-201)


(MU-2-202)

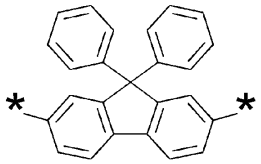
【化６２８】



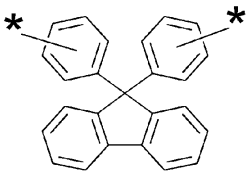
(MU-3-1)



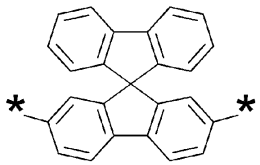
(MU-3-2)



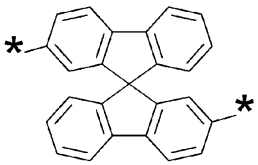
(MU-3-11)



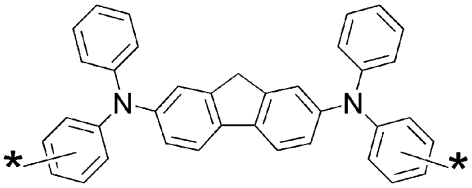
(MU-3-12)



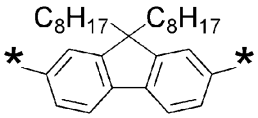
(MU-3-21)



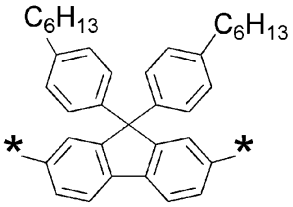
(MU-3-22)



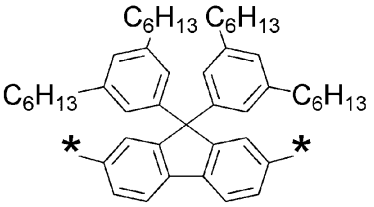
(MU-3-101)



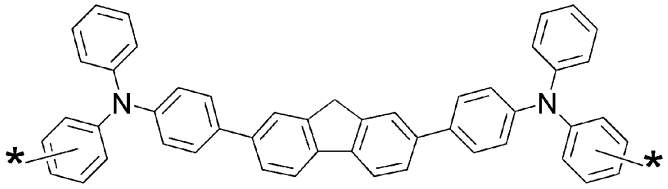
(MU-3-102)



(MU-3-111)

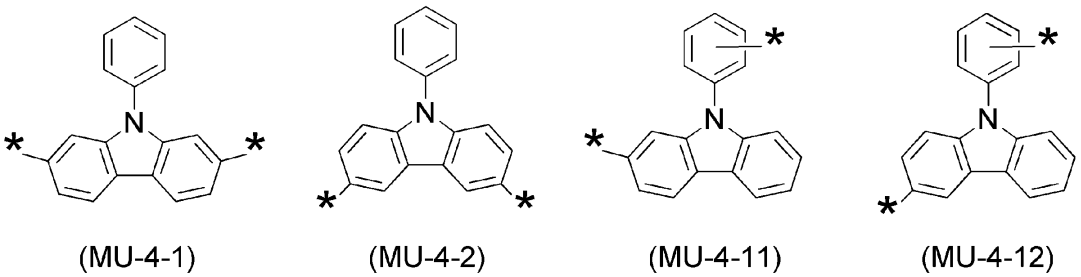


(MU-3-112)

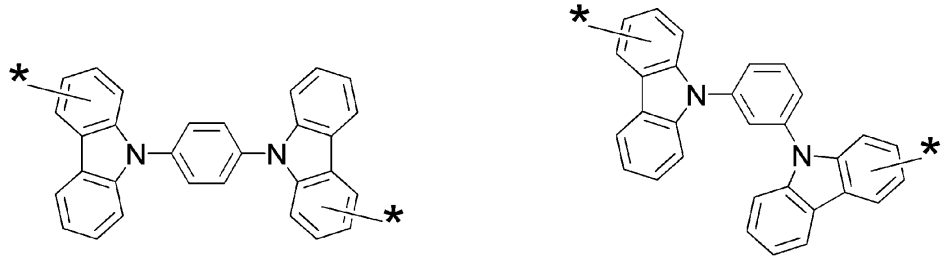


(MU-3-201)

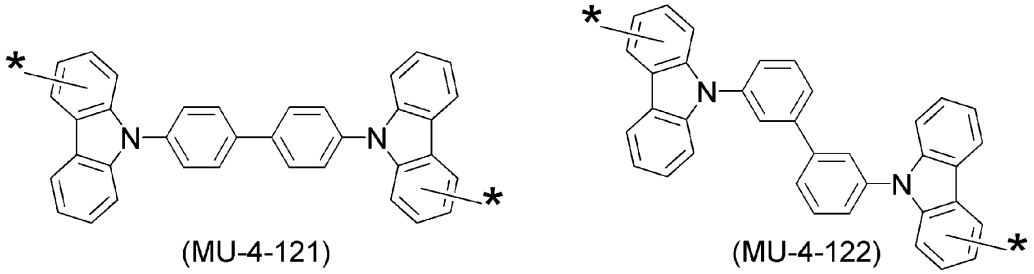
【化６２９】



(MU-4-1) (MU-4-2) (MU-4-11) (MU-4-12)

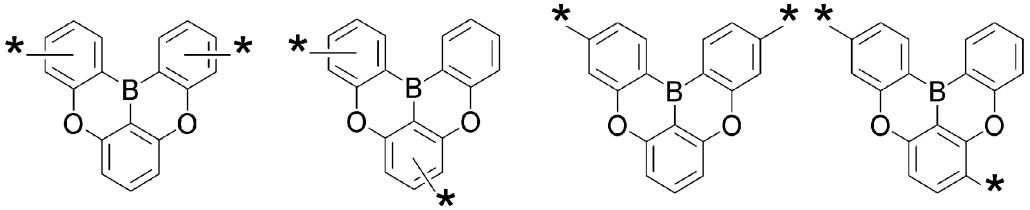


(MU-4-101) (MU-4-102)



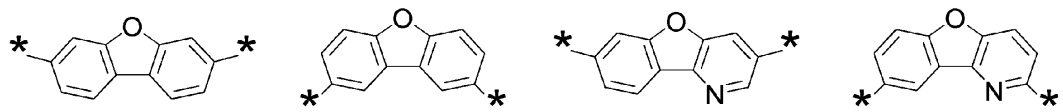
(MU-4-121) (MU-4-122)

【化６３０】



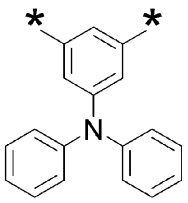
(MU-5-1) (MU-5-2) (MU-5-11) (MU-5-12)

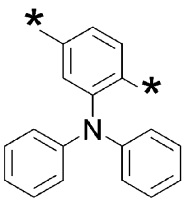
【化６３１】

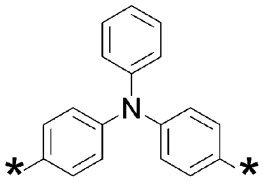


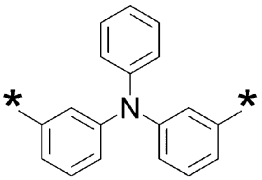
(MU-6-1) (MU-6-2) (MU-6-3) (MU-6-4)

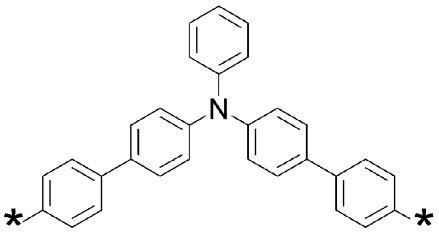
【化６３２】

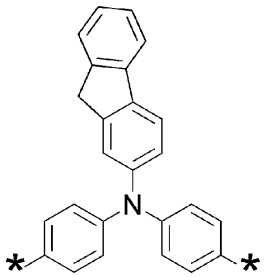

(MU-7-1)

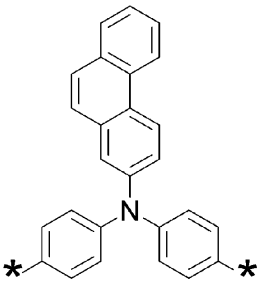

(MU-7-2)

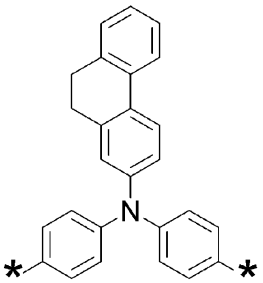

(MU-7-3)

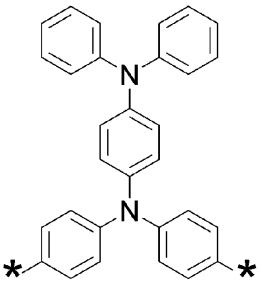

(MU-7-4)

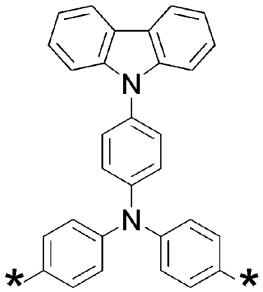

(MU-7-31)

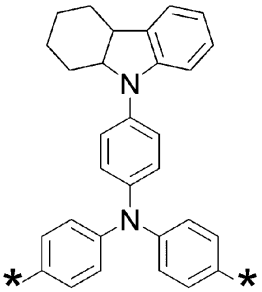

(MU-7-32)

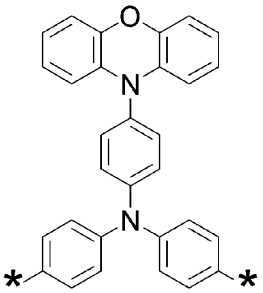

(MU-7-33)


(MU-7-34)

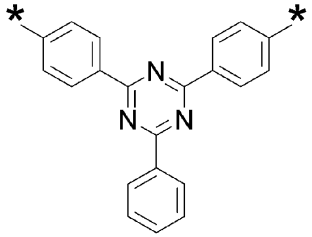

(MU-7-35)

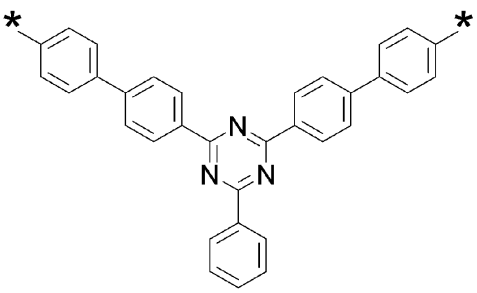

(MU-7-36)

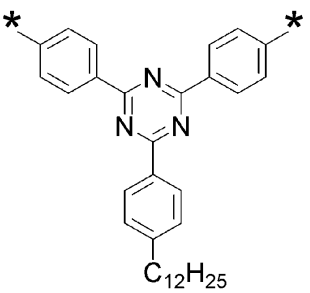

(MU-7-37)


(MU-7-38)

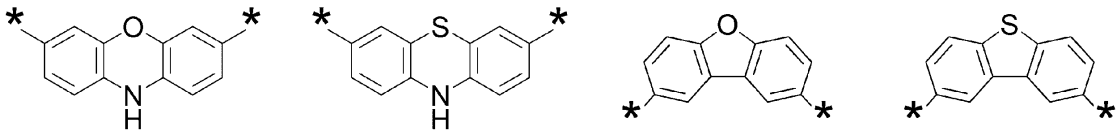
【化６３３】


(MU-8-1)


(MU-8-2)


(MU-8-3)

【化６３４】



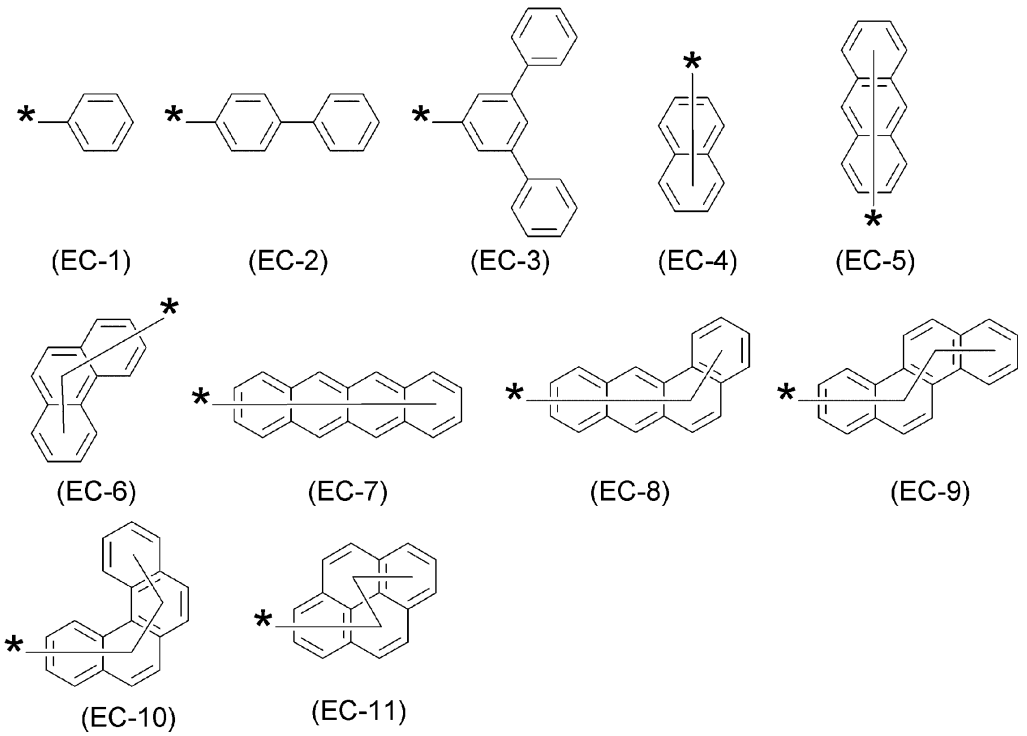
(MU-9-1) (MU-9-2) (MU-9-3) (MU-9-4)

【０９３５】

また、ＥＣとしては、例えば以下のいずれかの構造で表される１価の基があげられる。これらにおいて、ＥＣは＊においてＭＵと結合する。

【０９３６】

【化６３５】

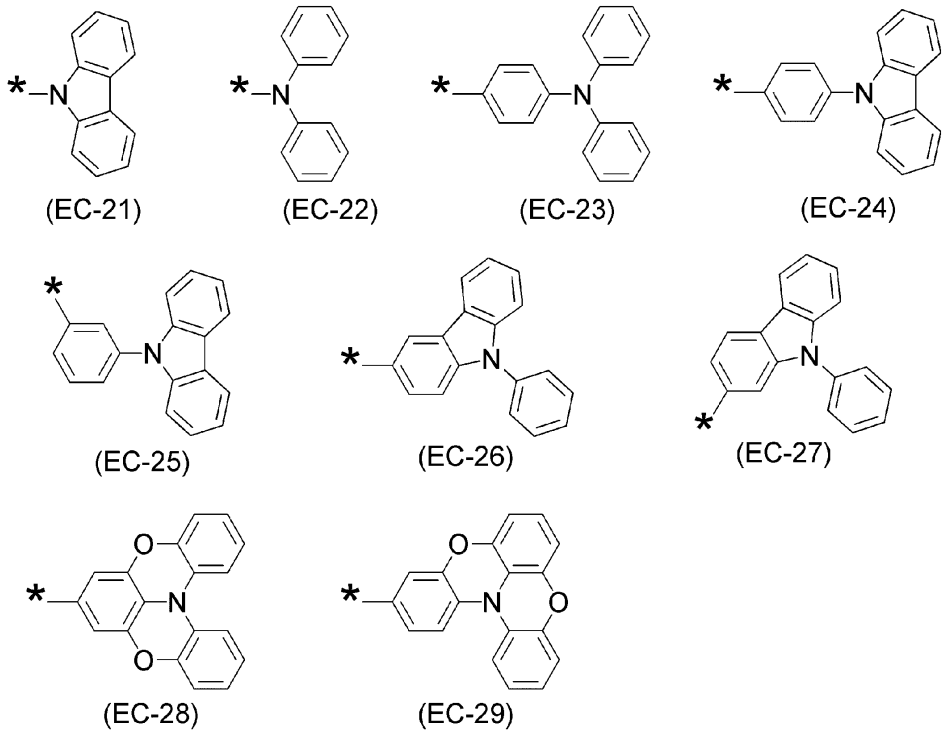


(EC-1) (EC-2) (EC-3) (EC-4) (EC-5)

(EC-6) (EC-7) (EC-8) (EC-9)

(EC-10) (EC-11)

【化６３６】



【０９３７】

式（ＳＰＨ－１）で表される化合物は、溶解性および塗布成膜性の観点から、分子中のＭＵ総数（ｋ）の１０～１００％のＭＵが炭素数１～２４のアルキルを有することが好ましく、分子中のＭＵ総数（ｋ）の３０～１００％のＭＵが炭素数１～１８のアルキル（炭素数３～１８の分岐鎖アルキル）を有することがより好ましく、分子内のＭＵ総数（ｋ）の５０～１００％のＭＵが炭素数１～１２のアルキル（炭素数３～１２の分岐鎖アルキル）を有することがさらに好ましい。一方、面内配向性および電荷輸送の観点からは、分子中のＭＵ総数（ｋ）の１０～１００％のＭＵが炭素数７～２４のアルキルを有することが好ましく、分子中のＭＵ総数（ｋ）の３０～１００％のＭＵが炭素数７～２４のアルキル（炭素数７～２４の分岐鎖アルキル）を有することがより好ましい。

【０９３８】

このような高分子化合物および高分子架橋体の用途の詳細については後述する。

【０９３９】

＜有機電界発光素子における電子注入層、電子輸送層＞

電子注入層１０７は、陰極１０８から移動してくる電子を、効率よく発光層１０５内または電子輸送層１０６内に注入する役割を果たす。電子輸送層１０６は、陰極１０８から注入された電子または陰極１０８から電子注入層１０７を介して注入された電子を、効率よく発光層１０５に輸送する役割を果たす。電子輸送層１０６および電子注入層１０７は、それぞれ、電子輸送・注入材料の一種または二種以上を積層、混合するか、電子輸送・注入材料と高分子結着剤の混合物により形成される。

【０９４０】

電子注入・輸送層とは、陰極から電子が注入され、さらに電子を輸送することをつかさどる層であり、電子注入効率が高く、注入された電子を効率よく輸送することが望ましい。そのためには電子親和力が大きく、しかも電子移動度が大きく、さらに安定性に優れ、トラップとなる不純物が製造時および使用時に発生しにくい物質であることが好ましい。しかしながら、正孔と電子の輸送バランスを考えた場合に、陽極からの正孔が再結合せずに陰極側へ流れるのを効率よく阻止できる役割を主に果たす場合には、電子輸送能力がそれ程高くなくても、発光効率を向上させる効果は電子輸送能力が高い材料と同等に有する

。したがって、本実施形態における電子注入・輸送層は、正孔の移動を効率よく阻止できる層の機能も含まれてもよい。

【０９４１】

電子輸送層１０６または電子注入層１０７を形成する材料（電子輸送材料）としては、光導電材料において電子伝達化合物として従来から慣用されている化合物、有機ＥＬ素子の電子注入層および電子輸送層に使用されている公知の化合物の中から任意に選択して用いることができる。

【０９４２】

電子輸送層または電子注入層に用いられる材料としては、炭素、水素、酸素、硫黄、ケイ素およびリンの中から選ばれる一種以上の原子で構成される芳香族環または複素芳香族環からなる化合物、ピロール誘導体およびその縮合環誘導体および電子受容性窒素を有する金属錯体の中から選ばれる少なくとも一種を含有することが好ましい。具体的には、ナフタレン、アントラセンなどの縮合環系芳香族環誘導体、４，４’－ビス（ジフェニルエテニル）ビフェニルに代表されるスチリル系芳香族環誘導体、ペリノン誘導体、クマリン誘導体、ナフタルイミド誘導体、アントラキノンやジフェノキノンなどのキノン誘導体、リンオキサイド誘導体、アリールニトリル誘導体およびインドール誘導体などがあげられる。電子受容性窒素を有する金属錯体としては、例えば、ヒドロキシフェニルオキサゾール錯体などのヒドロキシアゾール錯体、アゾメチン錯体、トロポロン金属錯体、フラボノール金属錯体およびベンゾキノリン金属錯体などがあげられる。これらの材料は単独でも用いられるが、異なる材料と混合して使用しても構わない。

【０９４３】

また、他の電子伝達化合物の具体例として、ピリジン誘導体、ナフタレン誘導体、アントラセン誘導体、ベンゾフルオレン誘導体、フェナントロリン誘導体、ペリノン誘導体、クマリン誘導体、ナフタルイミド誘導体、アントラキノン誘導体、ジフェノキノン誘導体、ジフェニルキノン誘導体、ペリレン誘導体、オキサジアゾール誘導体（１，３－ビス［（４－ｔ－ブチルフェニル）１，３，４－オキサジアゾリル］フェニレンなど）、チオフェン誘導体、トリアゾール誘導体（Ｎ－ナフチル－２，５－ジフェニル－１，３，４－トリアゾールなど）、チアジアゾール誘導体、オキシン誘導体の金属錯体、キノリノール系金属錯体、キノキサリン誘導体、キノキサリン誘導体のポリマー、ベンザゾール類化合物、ガリウム錯体、ピラゾール誘導体、パーフルオロ化フェニレン誘導体、トリアジン誘導体、ピラジン誘導体、ベンゾキノリン誘導体（２，２’－ビス（ベンゾ［ｈ］キノリン－２－イル）－９，９’－スピロビフルオレンなど）、イミダゾピリジン誘導体、ボラン誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体（トリス（Ｎ－フェニルベンゾイミダゾール－２－イル）ベンゼンなど）、ベンゾオキサゾール誘導体、ベンゾチアゾール誘導体、キノリン誘導体、テルピリジンなどのオリゴピリジン誘導体、ビピリジン誘導体、テルピリジン誘導体（１，３－ビス（４’－（２，２’：６’２”－テルピリジニル））ベンゼンなど）、ナフチリジン誘導体（ビス（１－ナフチル）－４－（１，８－ナフチリジン－２－イル）フェニルホスフィンオキサイドなど）、アルダジン誘導体、アリールニトリル誘導体、インドール誘導体、ホスフィンオキサイド誘導体、ビススチリル誘導体などがあげられる。

【０９４４】

また、電子受容性窒素を有する金属錯体を用いることもでき、例えば、キノリノール系金属錯体やヒドロキシフェニルオキサゾール錯体などのヒドロキシアゾール錯体、アゾメチン錯体、トロポロン金属錯体、フラボノール金属錯体およびベンゾキノリン金属錯体などがあげられる。

【０９４５】

上述した材料は単独でも用いられるが、異なる材料と混合して使用しても構わない。

【０９４６】

上述した材料の中でも、ボラン誘導体、ピリジン誘導体、フルオランテン誘導体、ＢＯ系誘導体、アントラセン誘導体、ベンゾフルオレン誘導体、ホスフィンオキサイド誘導体、ピリミジン誘導体、アリールニトリル誘導体、トリアジン誘導体、ベンゾイミダゾール

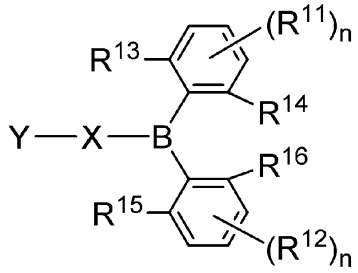
誘導体、フェナントロリン誘導体、およびキノリノール系金属錯体が好ましい。

【０９４７】

＜ボラン誘導体＞

ボラン誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－１）で表される化合物であり、詳細には特開２００７－２７５８７号公報に開示されている。

【化６３７】



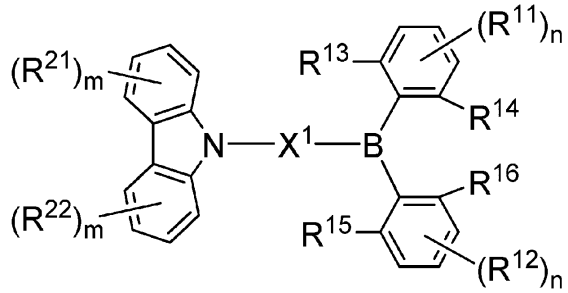
(ETM-1)

式（ＥＴＭ－１）中、R^{11}およびR^{12}は、それぞれ独立して、水素、アルキル、シクロアルキル、置換されていてもよいアリール、置換されているシリル、置換されていてもよい窒素含有複素環、またはシアノの少なくとも一つであり、R^{13}～R^{16}は、それぞれ独立して、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル、または置換されていてもよいアリールであり、Ｘは、置換されていてもよいアリーレンであり、Ｙは、置換されていてもよい炭素数１６以下のアリール、置換されているボリル、または置換されていてもよいカルバゾリルであり、そして、ｎはそれぞれ独立して０～３の整数である。また、「置換されていてもよい」または「置換されている」場合の置換基としては、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルなどがあげられる。

【０９４８】

式（ＥＴＭ－１）で表される化合物の中でも、下記式（ＥＴＭ－１－１）で表される化合物や下記式（ＥＴＭ－１－２）で表される化合物が好ましい。

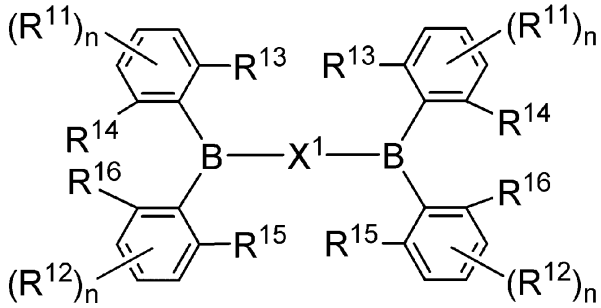
【化６３８】



(ETM-1-1)

式（ＥＴＭ－１－１）中、R^{11}およびR^{12}は、それぞれ独立して、水素、アルキル、シクロアルキル、置換されていてもよいアリール、置換されているシリル、置換されていてもよい窒素含有複素環、またはシアノの少なくとも一つであり、R^{13}～R^{16}は、それぞれ独立して、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル、または置換されていてもよいアリールであり、R^{21}およびR^{22}は、それぞれ独立して、水素、アルキル、シクロアルキル、置換されていてもよいアリール、置換されているシリル、置換されていてもよい窒素含有複素環、またはシアノの少なくとも一つであり、X^{1}は、置換されていてもよい炭素数２０以下のアリーレンであり、ｎはそれぞれ独立して０～３の整数であり、そして、ｍはそれぞれ独立して０～４の整数である。また、「置換されていてもよい」または「置換されている」場合の置換基としては、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルなどがあげられる。

【化６３９】



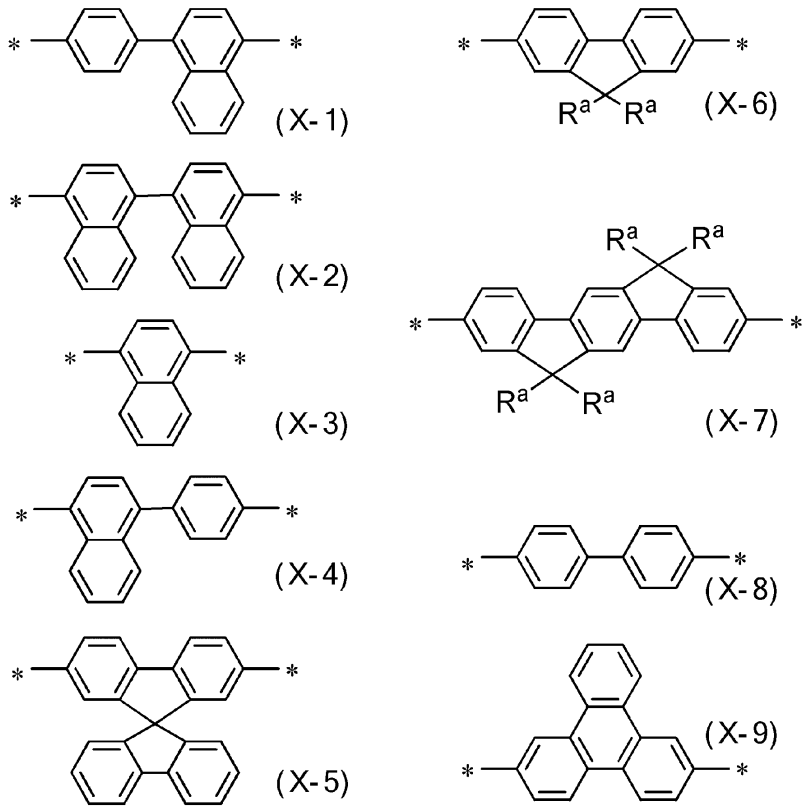
(ETM-1-2)

式（ＥＴＭ－１－２）中、Ｒ^{11}およびＲ^{12}は、それぞれ独立して、水素、アルキル、シクロアルキル、置換されていてもよいアリール、置換されているシリル、置換されていてもよい窒素含有複素環、またはシアノの少なくとも一つであり、Ｒ^{13}～Ｒ^{16}は、それぞれ独立して、置換されていてもよいアルキル、置換されていてもよいシクロアルキル、または置換されていてもよいアリールであり、Ｘ^{1}は、置換されていてもよい炭素数２０以下のアリーレンであり、そして、ｎはそれぞれ独立して０～３の整数である。また、「置換されていてもよい」または「置換されている」場合の置換基としては、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルなどがあげられる。

【０９４９】

Ｘ^{1}の具体的な例としては、下記式（Ｘ－１）～式（Ｘ－９）のいずれかで表される２価の基があげられる。

【化６４０】

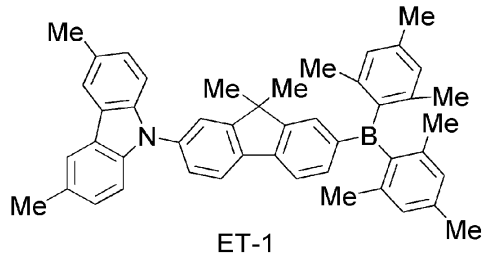


（各式中、Ｒ^{a}は、それぞれ独立してアルキル、シクロアルキルまたは置換されていてもよいフェニルであり、＊は結合位置を表す。）

【０９５０】

このボラン誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。

【化６４１】



ET-1

【０９５１】

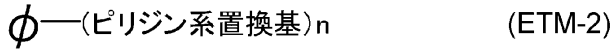
このボラン誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【０９５２】

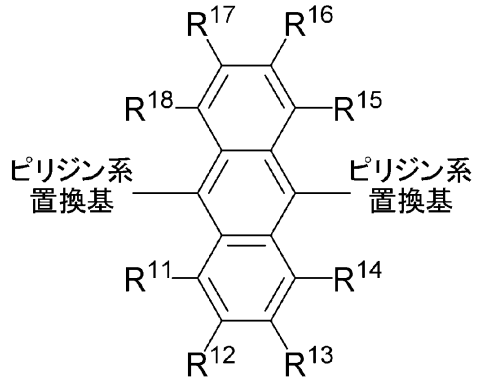
＜ピリジン誘導体＞

ピリジン誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－２）で表される化合物であり、好ましくは式（ＥＴＭ－２－１）または式（ＥＴＭ－２－２）で表される化合物である。

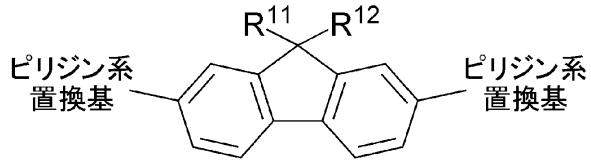
【化６４２】



(ETM-2)



(ETM-2-1)



(ETM-2-2)

【０９５３】

φは、ｎ価のアリール環（好ましくはｎ価のベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フルオレン環、ベンゾフルオレン環、フェナレン環、フェナントレン環またはトリフェニレン環）であり、ｎは１～４の整数である。

【０９５４】

式（ＥＴＭ－２－１）において、Ｒ１１～Ｒ１８は、それぞれ独立して、水素、アルキル（好ましくは炭素数１～２４のアルキル）、シクロアルキル（好ましくは炭素数３～１２のシクロアルキル）またはアリール（好ましくは炭素数６～３０のアリール）である。

【０９５５】

式（ＥＴＭ－２－２）において、Ｒ１１およびＲ１２は、それぞれ独立して、水素、アルキル（好ましくは炭素数１～２４のアルキル）、シクロアルキル（好ましくは炭素数３～１２のシクロアルキル）またはアリール（好ましくは炭素数６～３０のアリール）であり

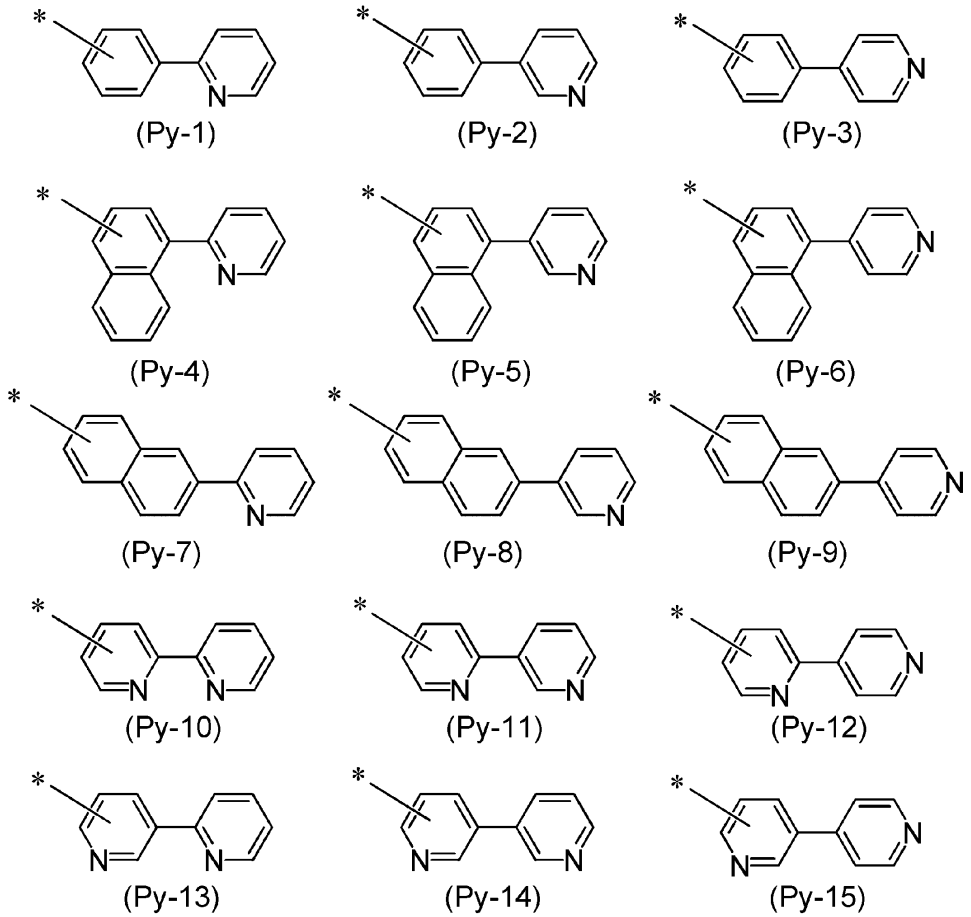
、Ｒ１１およびＲ１２は結合して環を形成していてもよい。

【０９５６】

各式において、「ピリジン系置換基」は、下記式（Ｐｙ－１）～式（Ｐｙ－１５）のいずれか（式中の＊は、結合位置を表す。）であり、ピリジン系置換基はそれぞれ独立して炭素数１～４のアルキルまたは炭素数５～１０のシクロアルキルで置換されていてもよい。具体例としては、メチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｎ－ブチル、イソブチル、ｓ－ブチル、またはｔ－ブチルなどがあげられ、メチルが好ましい。また、ピリジン系置換基はフェニレン基やナフチレン基を介して各式におけるφ、アントラセン環またはフルオレン環に結合していてもよい。

【０９５７】

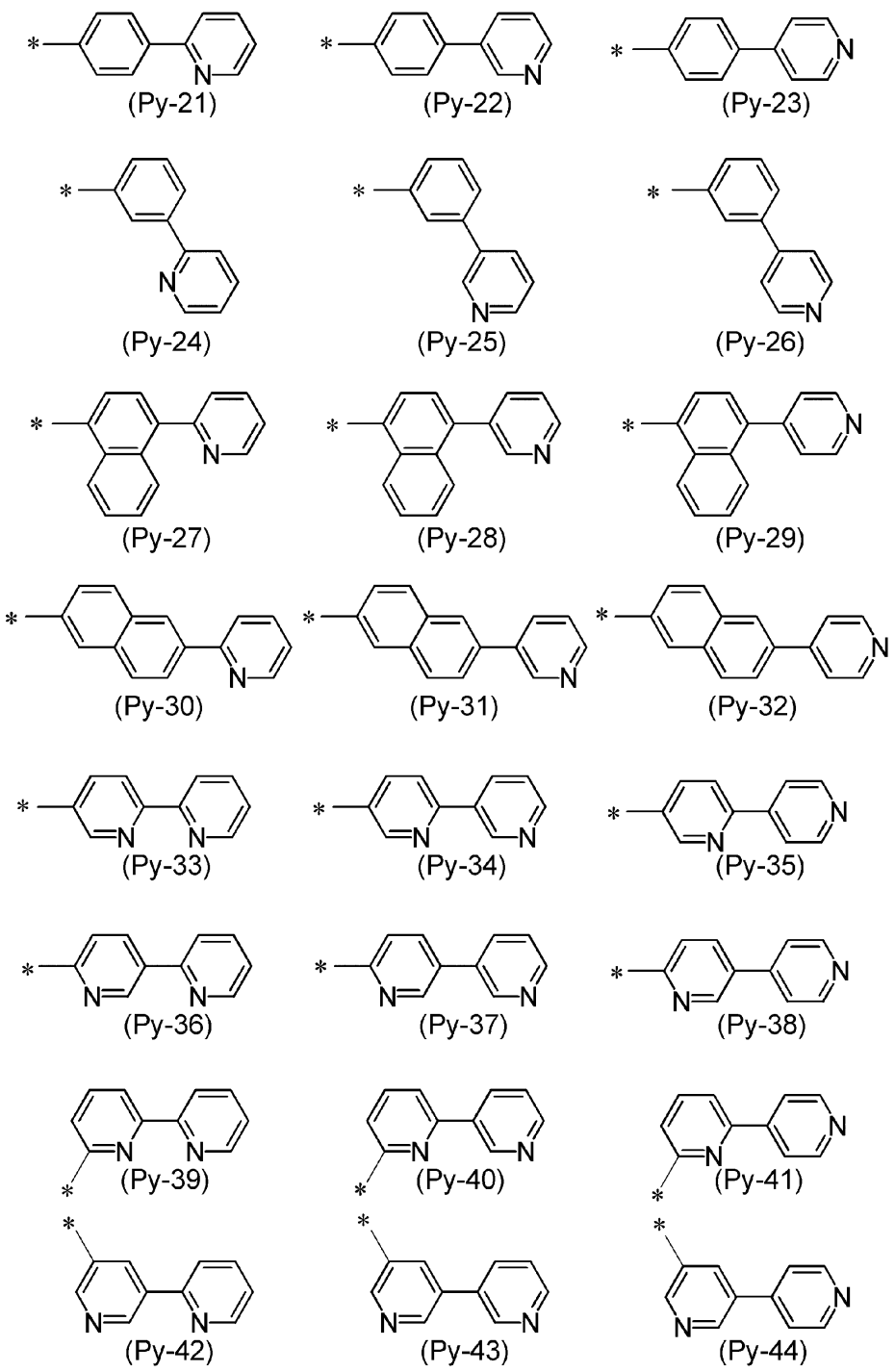
【化６４３】



【０９５８】

ピリジン系置換基は、式（Ｐｙ－１）～式（Ｐｙ－１５）のいずれか（式中の＊は、結合位置を表す。）であるが、これらの中でも、下記式（Ｐｙ－２１）～式（Ｐｙ－４４）のいずれかであることが好ましい。

【化６４４】



【０９５９】

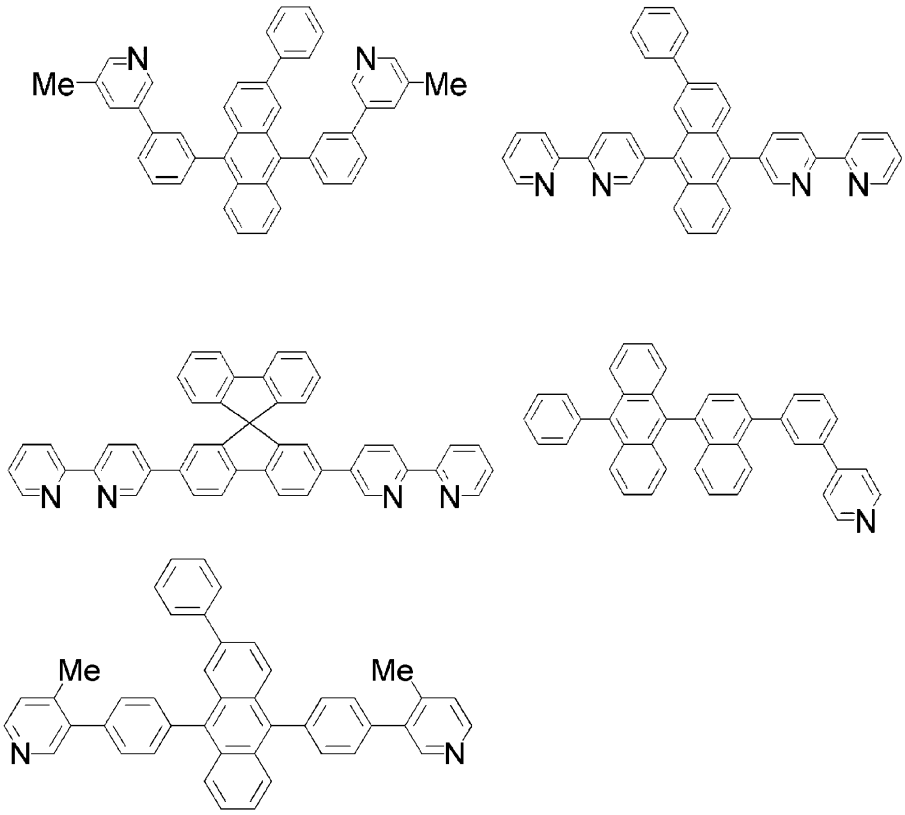
各ピリジン誘導体における少なくとも１つの水素が重水素で置換されていてもよく、また、式（ＥＴＭ－２－１）および式（ＥＴＭ－２－２）における２つの「ピリジン系置換基」のうちの一方はアリールで置き換えられていてもよい。

【０９６０】

Ｒ^{11}～Ｒ^{18}における「アルキル」としては、直鎖および分岐鎖のいずれでもよく、例えば、炭素数１～２４の直鎖アルキルまたは炭素数３～２４の分岐鎖アルキルがあげられる。好ましい「アルキル」は、炭素数１～１８のアルキル（炭素数３～１８の分岐鎖アルキル）である。より好ましい「アルキル」は、炭素数１～１２のアルキル（炭素数３～１２の分岐鎖アルキル）である。さらに好ましい「アルキル」は、炭素数１～６のアルキル（炭素数３～６の分岐鎖アルキル）である。特に好ましい「アルキル」は、炭素数１～４

のアルキル（炭素数３～４の分岐鎖アルキル）である。
【０９６１】
具体的な「アルキル」としては、メチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｎ－ブチル、イソブチル、ｓ－ブチル、ｔ－ブチル、ｎ－ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ｔ－ペンチル、ｎ－ヘキシル、１－メチルペンチル、４－メチル－２－ペンチル、３，３－ジメチルブチル、２－エチルブチル、ｎ－ヘプチル、１－メチルヘキシル、ｎ－オクチル、ｔ－オクチル、１－メチルヘプチル、２－エチルヘキシル、２－プロピルペンチル、ｎ－ノニル、２，２－ジメチルヘプチル、２，６－ジメチル－４－ヘプチル、３，５，５－トリメチルヘキシル、ｎ－デシル、ｎ－ウンデシル、１－メチルデシル、ｎ－ドデシル、ｎ－トリデシル、１－ヘキシルヘプチル、ｎ－テトラデシル、ｎ－ペンタデシル、ｎ－ヘキサデシル、ｎ－ヘプタデシル、ｎ－オクタデシル、ｎ－エイコシルなどがあげられる。
【０９６２】
ピリジン系置換基に置換する炭素数１～４のアルキルとしては、上記アルキルの説明を引用することができる。
【０９６３】
R^{11}～R^{18}における「シクロアルキル」としては、例えば、炭素数３～１２のシクロアルキルがあげられる。好ましい「シクロアルキル」は、炭素数３～１０のシクロアルキルである。より好ましい「シクロアルキル」は、炭素数３～８のシクロアルキルである。さらに好ましい「シクロアルキル」は、炭素数３～６のシクロアルキルである。
具体的な「シクロアルキル」としては、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、メチルシクロペンチル、シクロヘプチル、メチルシクロヘキシル、シクロオクチルまたはジメチルシクロヘキシルなどがあげられる。
【０９６４】
R^{11}～R^{18}における「アリール」としては、好ましいアリールは炭素数６～３０のアリールであり、より好ましいアリールは炭素数６～１８のアリールであり、さらに好ましくは炭素数６～１４のアリールであり、特に好ましくは炭素数６～１２のアリールである。
【０９６５】
具体的な「炭素数６～３０のアリール」としては、単環系アリールであるフェニル、縮合二環系アリールである（１－，２－）ナフチル、縮合三環系アリールである、アセナフチレン－（１－，３－，４－，５－）イル、フルオレン－（１－，２－，３－，４－，９－）イル、フェナレン－（１－，２－）イル、（１－，２－，３－，４－，９－）フェナントリル、縮合四環系アリールであるトリフェニレン－（１－，２－）イル、ピレン－（１－，２－，４－）イル、ナフタセン－（１－，２－，５－）イル、縮合五環系アリールであるペリレン－（１－，２－，３－）イル、ペンタセン－（１－，２－，５－，６－）イルなどがあげられる。
【０９６６】
好ましい「炭素数６～３０のアリール」は、フェニル、ナフチル、フェナントリル、クリセニルまたはトリフェニレニルなどがあげられ、さらに好ましくはフェニル、１－ナフチル、２－ナフチルまたはフェナントリルがあげられ、特に好ましくはフェニル、１－ナフチルまたは２－ナフチルがあげられる。
【０９６７】
式（ＥＴＭ－２－２）におけるR^{11}およびR^{12}は結合して環を形成していてもよく、この結果、フルオレン骨格の５員環には、シクロブタン、シクロペンタン、シクロペンテン、シクロペンタジエン、シクロヘキサン、フルオレンまたはインデンなどがスピロ結合していてもよい。
【０９６８】
このピリジン誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。

【化６４５】



【０９６９】

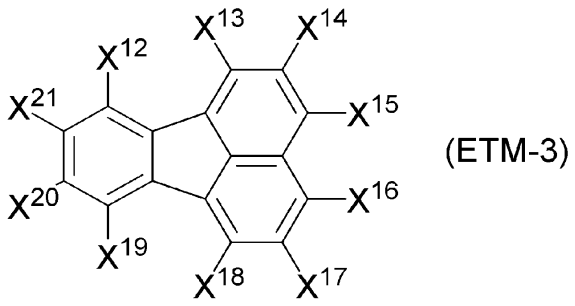
このピリジン誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【０９７０】

＜フルオランテン誘導体＞

フルオランテン誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－３）で表される化合物であり、詳細には国際公開第2010/134352号に開示されている。

【化６４６】



(ETM-3)

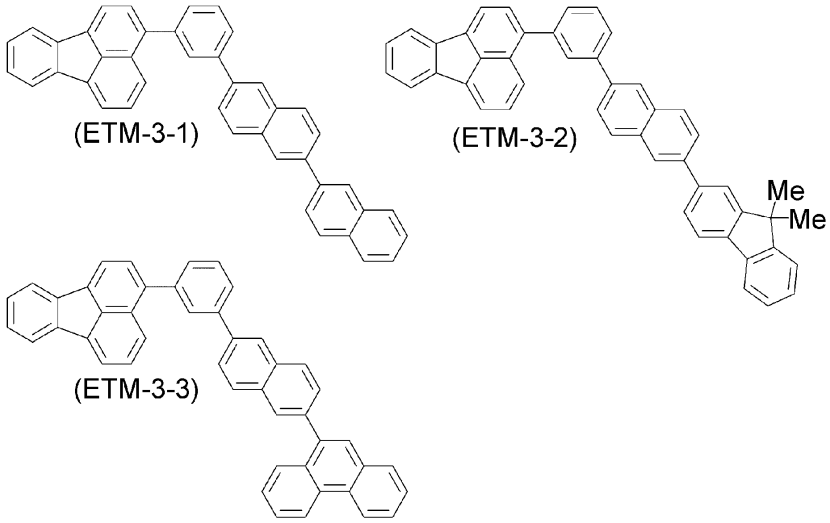
【０９７１】

式（ＥＴＭ－３）中、Ｘ１２～Ｘ２１は水素、ハロゲン、直鎖、分岐もしくは環状のアルキル、直鎖、分岐もしくは環状のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリール、または置換もしくは無置換のヘテロアリールを表す。ここで、置換されている場合の置換基としては、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルなどがあげられる。

【０９７２】

このフルオランテン誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。

【化６４７】

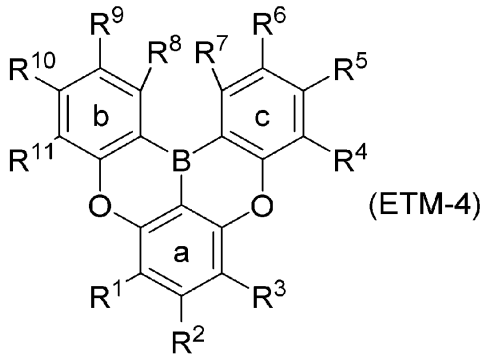


【０９７３】

＜ＢＯ系誘導体＞

ＢＯ系誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－４）で表される多環芳香族化合物、または下記式（ＥＴＭ－４）で表される構造を複数有する多環芳香族化合物の多量体である。

【化６４８】



【０９７４】

R^{1}～R^{11}は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、アルキル、シクロアルキル、アルコキシまたはアリールオキシであり、これらにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよい。

【０９７５】

また、R^{1}～R^{11}のうちの隣接する基同士が結合してａ環、ｂ環またはｃ環と共にアリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、アルキル、シクロアルキル、アルコキシまたはアリールオキシで置換されていてもよく、これらにおける少なくとも１つの水素はアリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよい。

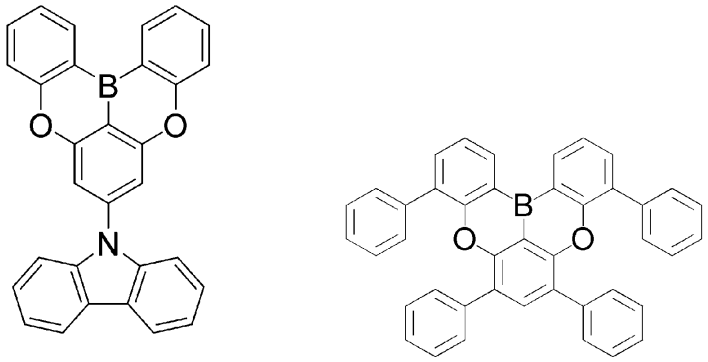
【０９７６】

また、式（ＥＴＭ－４）で表される化合物または構造における少なくとも１つの水素がハロゲンまたは重水素で置換されていてもよい。

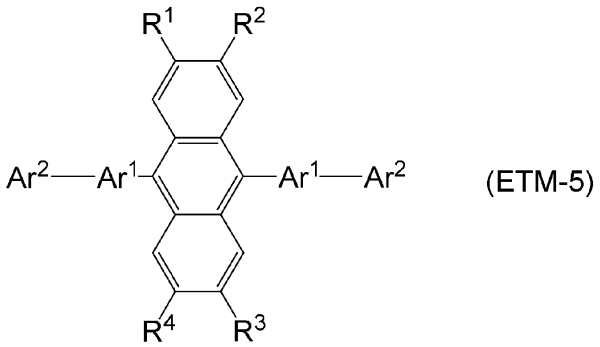
【０９７７】

式（ＥＴＭ－４）における置換基や環形成の形態の説明については、式（１）等で表される多環芳香族化合物の説明を引用することができる。

【０９７８】
このＢＯ系誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。
【化６４９】



【０９７９】
このＢＯ系誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。
【０９８０】
＜アントラセン誘導体＞
アントラセン誘導体の一つは、例えば下記式（ＥＴＭ－５）で表される化合物である。
【化６５０】



(ETM-5)

【０９８１】
Ａｒ^{1}は、それぞれ独立して、単結合、２価のベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フルオレン、またはフェナレンである。
【０９８２】
Ａｒ^{2}は、それぞれ独立して、炭素数６～２０のアリールであり、炭素数６～１６のアリールが好ましく、炭素数６～１２のアリールがより好ましく、炭素数６～１０のアリールが特に好ましい。「炭素数６～２０のアリール」の具体例としては、単環系アリールであるフェニル、（ｏ－，ｍ－，ｐ－）トリル、（２，３－，２，４－，２，５－，２，６－，３，４－，３，５－）キシリル、メシチル（２，４，６－トリメチルフェニル）、（ｏ－，ｍ－，ｐ－）クメニル、二環系アリールである（２－，３－，４－）ビフェニリル、縮合二環系アリールである（１－，２－）ナフチル、三環系アリールであるテルフェニリル（ｍ－テルフェニル－２’－イル、ｍ－テルフェニル－４’－イル、ｍ－テルフェニル－５’－イル、ｏ－テルフェニル－３’－イル、ｏ－テルフェニル－４’－イル、ｐ－テルフェニル－２’－イル、ｍ－テルフェニル－２－イル、ｍ－テルフェニル－３－イル、ｍ－テルフェニル－４－イル、ｏ－テルフェニル－２－イル、ｏ－テルフェニル－３－イル、ｏ－テルフェニル－４－イル、ｐ－テルフェニル－２－イル、ｐ－テルフェニル－３－イル、ｐ－テルフェニル－４－イル）、縮合三環系アリールである、アントラセン－（１－，２－，９－）イル、アセナフチレン－（１－，３－，４－，５－）イル、フルオレン－（１－，２－，３－，４－，９－）イル、フェナレン－（１－，２－）イル、（１－，２－

，３－，４－，９－）フェナントリル、縮合四環系アリールであるトリフェニレン－（１－，２－）イル、ピレン－（１－，２－，４－）イル、テトラセン－（１－，２－，５－）イル、縮合五環系アリールであるペリレン－（１－，２－，３－）イルなどがあげられる。「炭素数６～１０のアリール」の具体例としては、フェニル、ビフェニリル、ナフチル、テルフェニリル、アントラセニル、アセナフチレニル、フルオレニル、フェナレニル、フェナントリル、トリフェニレニル、ピレニル、テトラセニル、ペリレニルなどがあげられる。

【０９８３】

R^1～R^4は、それぞれ独立して、水素、炭素数１～６のアルキル、炭素数３から６のシクロアルキルまたは炭素数６～２０のアリールである。

R^1～R^4における炭素数１～６のアルキルについては直鎖および分岐鎖のいずれでもよい。すなわち、炭素数１～６の直鎖アルキルまたは炭素数３～６の分岐鎖アルキルである。より好ましくは、炭素数１～４のアルキル（炭素数３～４の分岐鎖アルキル）である。具体例としては、メチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｎ－ブチル、イソブチル、ｓ－ブチル、ｔ－ブチル、ｎ－ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ｔ－ペンチル、ｎ－ヘキシル、１－メチルペンチル、４－メチル－２－ペンチル、３，３－ジメチルブチル、または２－エチルブチルなどがあげられ、メチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｎ－ブチル、イソブチル、ｓ－ブチル、またはｔ－ブチルが好ましく、メチル、エチル、またはｔ－ブチルがより好ましい。

【０９８４】

R^1～R^4における炭素数３～６のシクロアルキルの具体例としては、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、メチルシクロペンチル、シクロヘプチル、メチルシクロヘキシル、シクロオクチルまたはジメチルシクロヘキシルなどがあげられる。

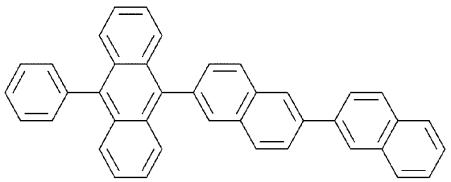
【０９８５】

R^1～R^4における炭素数６～２０のアリールについては、炭素数６～１６のアリールが好ましく、炭素数６～１２のアリールがより好ましく、炭素数６～１０のアリールが特に好ましい。「炭素数６～２０のアリール」の具体例としては、Ar^2における「炭素数６～２０のアリール」の具体例を引用することができる。好ましい「炭素数６～２０のアリール」は、フェニル、ビフェニリル、テルフェニリルまたはナフチルであり、より好ましくは、フェニル、ビフェニリル、１－ナフチル、２－ナフチルまたはｍ－テルフェニル－５’－イルであり、さらに好ましくは、フェニル、ビフェニリル、１－ナフチルまたは２－ナフチルであり、最も好ましくはフェニルである。

【０９８６】

これらのアントラセン誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。

【化６５１】



【０９８７】

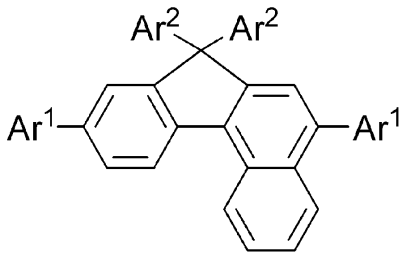
これらのアントラセン誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【０９８８】

＜ベンゾフルオレン誘導体＞

ベンゾフルオレン誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－６）で表される化合物である。

【化６５２】



(ETM-6)

【０９８９】

Ａｒ^{1}は、それぞれ独立して、炭素数６～２０のアリールであり、式（ＥＴＭ－５）のＡｒ^{2}における「炭素数６～２０のアリール」と同じ説明を引用することができる。炭素数６～１６のアリールが好ましく、炭素数６～１２のアリールがより好ましく、炭素数６～１０のアリールが特に好ましい。具体例としては、フェニル、ビフェニリル、ナフチル、テルフェニリル、アントラセニル、アセナフチレニル、フルオレニル、フェナレニル、フェナントリル、トリフェニレニル、ピレニル、テトラセニル、ペリレニルなどがあげられる。

【０９９０】

Ａｒ^{2}は、それぞれ独立して、水素、アルキル（好ましくは炭素数１～２４のアルキル）、シクロアルキル（好ましくは炭素数３～１２のシクロアルキル）またはアリール（好ましくは炭素数６～３０のアリール）であり、２つのＡｒ^{2}は結合して環を形成していてもよい。

【０９９１】

Ａｒ^{2}における「アルキル」としては、直鎖および分岐鎖のいずれでもよく、例えば、炭素数１～２４の直鎖アルキルまたは炭素数３～２４の分岐鎖アルキルがあげられる。好ましい「アルキル」は、炭素数１～１８のアルキル（炭素数３～１８の分岐鎖アルキル）である。より好ましい「アルキル」は、炭素数１～１２のアルキル（炭素数３～１２の分岐鎖アルキル）である。さらに好ましい「アルキル」は、炭素数１～６のアルキル（炭素数３～６の分岐鎖アルキル）である。特に好ましい「アルキル」は、炭素数１～４のアルキル（炭素数３～４の分岐鎖アルキル）である。具体的な「アルキル」としては、メチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｎ－ブチル、イソブチル、ｓ－ブチル、ｔ－ブチル、ｎ－ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、ｔ－ペンチル、ｎ－ヘキシル、１－メチルペンチル、４－メチル－２－ペンチル、３，３－ジメチルブチル、２－エチルブチル、ｎ－ヘプチル、１－メチルヘキシルなどがあげられる。

【０９９２】

Ａｒ^{2}における「シクロアルキル」としては、例えば、炭素数３～１２のシクロアルキルがあげられる。好ましい「シクロアルキル」は、炭素数３～１０のシクロアルキルである。より好ましい「シクロアルキル」は、炭素数３～８のシクロアルキルである。さらに好ましい「シクロアルキル」は、炭素数３～６のシクロアルキルである。具体的な「シクロアルキル」としては、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、メチルシクロペンチル、シクロヘプチル、メチルシクロヘキシル、シクロオクチルまたはジメチルシクロヘキシルなどがあげられる。

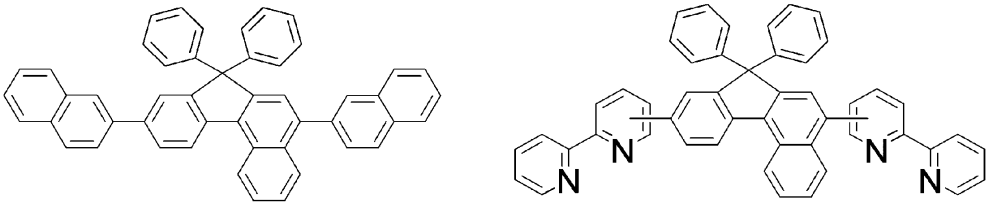
【０９９３】

Ａｒ^{2}における「アリール」としては、好ましいアリールは炭素数６～３０のアリールであり、より好ましいアリールは炭素数６～１８のアリールであり、さらに好ましくは炭素数６～１４のアリールであり、特に好ましくは炭素数６～１２のアリールである。

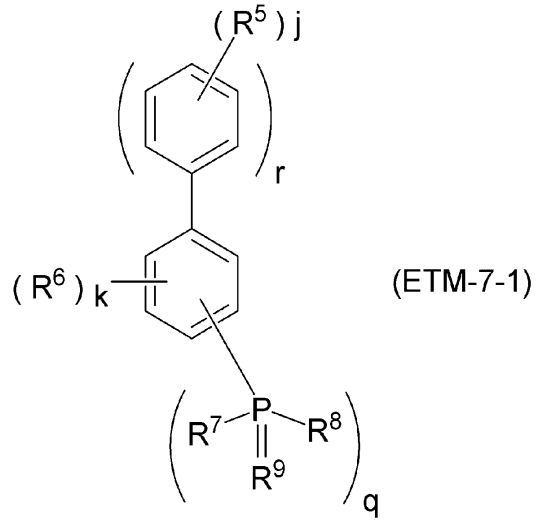
【０９９４】

具体的な「炭素数６～３０のアリール」としては、フェニル、ナフチル、アセナフチレニル、フルオレニル、フェナレニル、フェナントリル、トリフェニレニル、ピレニル、ナフタセニル、ペリレニル、ペンタセニルなどがあげられる。

【０９９５】
２つのＡｒ^{2}は結合して環を形成していてもよく、この結果、フルオレン骨格の５員環には、シクロブタン、シクロペンタン、シクロペンテン、シクロペンタジエン、シクロヘキサン、フルオレンまたはインデンなどがスピロ結合していてもよい。
【０９９６】
このベンゾフルオレン誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。
【化６５３】



【０９９７】
このベンゾフルオレン誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。
【０９９８】
＜ホスフィンオキサイド誘導体＞
ホスフィンオキサイド誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－７－１）で表される化合物である。詳細は国際公開第２０１３／０７９２１７号および国際公開第２０１３／０７９６７８号にも記載されている。
【化６５４】



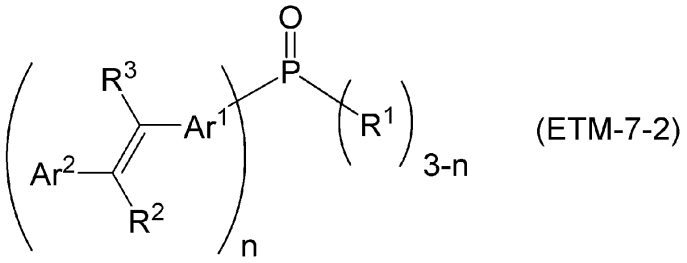
【０９９９】
Ｒ^{5}は、置換または無置換の、炭素数１～２０のアルキル、炭素数３～１６のシクロアルキル、炭素数６～２０のアリールまたは炭素数５～２０のヘテロアリールであり、
Ｒ^{6}は、ＣＮ、置換または無置換の、炭素数１～２０のアルキル、炭素数３～１６のシクロアルキル、炭素数１～２０のヘテロアルキル、炭素数６～２０のアリール、炭素数５～２０のヘテロアリール、炭素数１～２０のアルコキシまたは炭素数６～２０のアリールオキシであり、
Ｒ^{7}およびＲ^{8}は、それぞれ独立して、置換または無置換の、炭素数６～２０のアリールまたは炭素数５～２０のヘテロアリールであり、
Ｒ^{9}は酸素または硫黄であり、
ｊは０または１であり、ｋは０または１であり、ｒは０～４の整数であり、ｑは１～３の整数である。

ここで、置換されている場合の置換基としては、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルなどがあげられる。

【１０００】

ホスフィンオキサイド誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－７－２）で表される化合物でもよい。

【化６５５】



(ETM-7-2)

【１００１】

Ｒ１～Ｒ３は、同じでも異なっていてもよく、水素、アルキル、シクロアルキル、アラルキル、アルケニル、シクロアルケニル、アルキニル、アルコキシ、アルキルチオ、シクロアルキルチオ、アリールエーテル（アリールエーテル基）、アリールチオエーテル（アリールチオエーテル基）、アリール、複素環基、ハロゲン、シアノ、アルデヒド、カルボニル、カルボキシル、アミノ、ニトロ、シリル、および隣接置換基との間に形成される縮合環の中から選ばれる。

【１００２】

Ａｒ１は、同じでも異なっていてもよく、アリーレンまたはヘテロアリーレンである。Ａｒ２は、同じでも異なっていてもよく、アリールまたはヘテロアリールである。ただし、Ａｒ１およびＡｒ２のうち少なくとも一方は置換基を有しているか、または隣接置換基との間に縮合環を形成している。ｎは０～３の整数であり、ｎが０のとき不飽和構造部分は存在せず、ｎが３のときＲ１は存在しない。

【１００３】

これらの置換基の内、アルキルとは、例えば、メチル、エチル、プロピル、ブチルなどの飽和脂肪族炭化水素基を示し、これは無置換でも置換されていてもかまわない。置換されている場合の置換基には特に制限は無く、例えば、アルキル、アリール、複素環基等をあげることができ、この点は、以下の記載にも共通する。また、アルキルの炭素数は特に限定されないが、入手の容易性やコストの点から、通常、１～２０の範囲である。

【１００４】

また、シクロアルキルとは、例えば、シクロプロピル、シクロヘキシル、ノルボルニル、アダマンチルなどの飽和脂環式炭化水素基を示し、これは無置換でも置換されていてもかまわない。アルキル部分の炭素数は特に限定されないが、通常、３～２０の範囲である。

【１００５】

また、アラルキルとは、例えば、ベンジル、フェニルエチルなどの脂肪族炭化水素を介した芳香族炭化水素基を示し、脂肪族炭化水素と芳香族炭化水素はいずれも無置換でも置換されていてもかまわない。脂肪族部分の炭素数は特に限定されないが、通常、１～２０の範囲である。

【１００６】

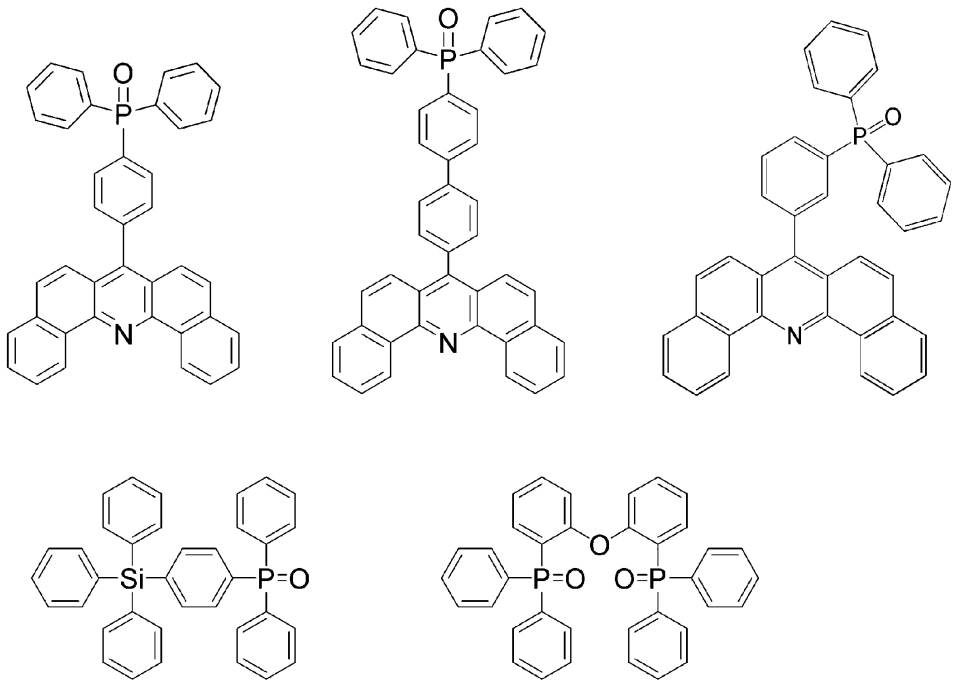
また、アルケニルとは、例えば、ビニル、アリル、ブタジエニルなどの二重結合を含む不飽和脂肪族炭化水素基を示し、これは無置換でも置換されていてもかまわない。アルケニルの炭素数は特に限定されないが、通常、２～２０の範囲である。

【１００７】

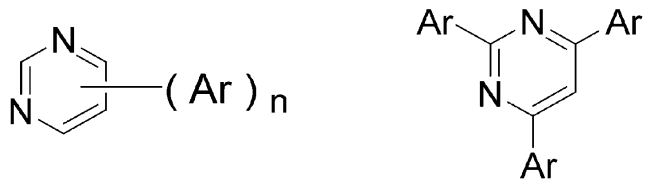
また、シクロアルケニルとは、例えば、シクロペンテニル、シクロペンタジエニル、シクロヘキセニルなどの二重結合を含む不飽和脂環式炭化水素基を示し、これは無置換でも

置換されていてもかまわない。
【１００８】
　また、アルキニルとは、例えば、アセチレニルなどの三重結合を含む不飽和脂肪族炭化水素基を示し、これは無置換でも置換されていてもかまわない。アルキニルの炭素数は特に限定されないが、通常、２～２０の範囲である。
【１００９】
　また、アルコキシとは、例えば、メトキシなどのエーテル結合を介した脂肪族炭化水素基を示し、脂肪族炭化水素基は無置換でも置換されていてもかまわない。アルコキシの炭素数は特に限定されないが、通常、１～２０の範囲である。
【１０１０】
　また、アルキルチオとは、アルコキシのエーテル結合の酸素原子が硫黄原子に置換された基である。
【１０１１】
　また、シクロアルキルチオとは、シクロアルコキシのエーテル結合の酸素原子が硫黄原子に置換された基である。
【１０１２】
　また、アリールエーテルとは、例えば、フェノキシなどのエーテル結合を介した芳香族炭化水素基を示し、芳香族炭化水素基は無置換でも置換されていてもかまわない。アリールエーテルの炭素数は特に限定されないが、通常、６～４０の範囲である。
【１０１３】
　また、アリールチオエーテルとは、アリールエーテルのエーテル結合の酸素原子が硫黄原子に置換された基である。
【１０１４】
　また、アリールとは、例えば、フェニル、ナフチル、ビフェニリル、フェナントリル、ターフェニリル、ピレニルなどの芳香族炭化水素基を示す。アリールは無置換でも置換されていてもかまわない。アリールの炭素数は特に限定されないが、通常、６～４０の範囲である。
【１０１５】
　また、複素環基とは、例えば、フラニル、チエニル、オキサゾリル、ピリジル、キノリニル、カルバゾリルなどの炭素以外の原子を有する環状構造基を示し、これは無置換でも置換されていてもかまわない。複素環基の炭素数は特に限定されないが、通常、２～３０の範囲である。
【１０１６】
　ハロゲンとは、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素を示す。
【１０１７】
　アルデヒド、カルボニル、アミノには、脂肪族炭化水素、脂環式炭化水素、芳香族炭化水素、複素環などで置換された基も含むことができる。
【１０１８】
　また、脂肪族炭化水素、脂環式炭化水素、芳香族炭化水素、複素環は無置換でも置換されていてもかまわない。
【１０１９】
　シリルとは、例えば、トリメチルシリルなどのケイ素化合物基を示し、これは無置換でも置換されていてもかまわない。シリルの炭素数は特に限定されないが、通常、３～２０の範囲である。また、ケイ素数は、通常、１～６である。
【１０２０】
　隣接置換基との間に形成される縮合環とは、例えば、Ar^1とR^2、Ar^1とR^3、Ar^2とR^2、Ar^2とR^3、R^2とR^3、Ar^1とAr^2等の間で形成された共役または非共役の縮合環である。ここで、ｎが１の場合、２つのR^1同士で共役または非共役の縮合環を形成してもよい。これら縮合環は、環内構造に窒素、酸素、硫黄原子を含んでいてもよいし、さらに別の環と縮合してもよい。

【１０２１】
このホスフィンオキサイド誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。
【化６５６】



【１０２２】
このホスフィンオキサイド誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。
【１０２３】
＜ピリミジン誘導体＞
ピリミジン誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－８）で表される化合物であり、好ましくは下記式（ＥＴＭ－８－１）で表される化合物である。詳細は国際公開第２０１１／０２１６８９号にも記載されている。
【化６５７】



(ETM-8)　　(ETM-8-1)

【１０２４】
Ａｒは、それぞれ独立して、置換されていてもよいアリール、または置換されていてもよいヘテロアリールである。ｎは１～４の整数であり、好ましくは１～３の整数であり、より好ましくは２または３である。
【１０２５】
「置換されていてもよいアリール」の「アリール」としては、例えば、炭素数６～３０のアリールがあげられ、好ましくは炭素数６～２４のアリール、より好ましくは炭素数６～２０のアリール、さらに好ましくは炭素数６～１２のアリールである。
【１０２６】
具体的な「アリール」としては、単環系アリールであるフェニル、二環系アリールである（２－，３－，４－）ビフェニリル、縮合二環系アリールである（１－，２－）ナフチ

ル、三環系アリールであるテルフェニリル（ｍ－テルフェニル－２’－イル、ｍ－テルフェニル－４’－イル、ｍ－テルフェニル－５’－イル、ｏ－テルフェニル－３’－イル、ｏ－テルフェニル－４’－イル、ｐ－テルフェニル－２’－イル、ｍ－テルフェニル－２－イル、ｍ－テルフェニル－３－イル、ｍ－テルフェニル－４－イル、ｏ－テルフェニル－２－イル、ｏ－テルフェニル－３－イル、ｏ－テルフェニル－４－イル、ｐ－テルフェニル－２－イル、ｐ－テルフェニル－３－イル、ｐ－テルフェニル－４－イル）、縮合三環系アリールである、アセナフチレン－（１－，３－，４－，５－）イル、フルオレン－（１－，２－，３－，４－，９－）イル、フェナレン－（１－，２－）イル、（１－，２－，３－，４－，９－）フェナントリル、四環系アリールであるクアテルフェニリル（５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－２－イル、５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－３－イル、５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－４－イル、ｍ－クアテルフェニリル）、縮合四環系アリールであるトリフェニレン－（１－，２－）イル、ピレン－（１－，２－，４－）イル、ナフタセン－（１－，２－，５－）イル、縮合五環系アリールであるペリレン－（１－，２－，３－）イル、ペンタセン－（１－，２－，５－，６－）イルなどがあげられる。

【１０２７】

「置換されていてもよいヘテロアリール」の「ヘテロアリール」としては、例えば、炭素数２～３０のヘテロアリールがあげられ、炭素数２～２５のヘテロアリールが好ましく、炭素数２～２０のヘテロアリールがより好ましく、炭素数２～１５のヘテロアリールがさらに好ましく、炭素数２～１０のヘテロアリールが特に好ましい。また、ヘテロアリールとしては、例えば環構成原子として炭素以外に酸素、硫黄および窒素から選ばれるヘテロ原子を１ないし５個含有する複素環などがあげられる。

【１０２８】

具体的なヘテロアリールとしては、例えば、フリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、オキサジアゾリル、フラザニル、チアジアゾリル、トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリミジニル、ピリダジニル、ピラジニル、トリアジニル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾ［ｂ］チエニル、インドリル、イソインドリル、１Ｈ－インダゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、１Ｈ－ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリル、キナゾリル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、プリニル、プテリジニル、カルバゾリル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、インドリジニルなどがあげられる。

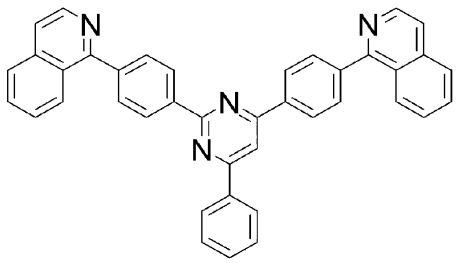
【１０２９】

また、上記アリールおよびヘテロアリールは置換されていてもよく、それぞれ例えば上記アリールやヘテロアリールで置換されていてもよい。

【１０３０】

このピリミジン誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。

【化６５８】



【１０３１】

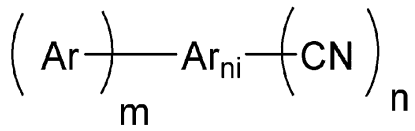
このピリミジン誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【１０３２】

＜アリールニトリル誘導体＞

アリールニトリル誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－９）で表される化合物、またはそれが単結合などで複数結合した多量体である。詳細は米国出願公開第２０１４／０１９７３８６号明細書に記載されている。

【化６５９】



(ETM-9)

【１０３３】

Ａｒｎｉは、速い電子輸送性の観点からは炭素数が多いことが好ましく、高いＴ１の観点からは炭素数が少ないことが好ましい。Ａｒｎｉは、具体的には、発光層に隣接する層に用いるには高いＴ１であることが好ましく、炭素数６～２０のアリールであり、好ましくは炭素数６～１４のアリール、より好ましくは炭素数６～１０のアリールである。また、ニトリル基の置換個数ｎは、高いＴ１の観点からは多いことが好ましく、高いＳ１の観点からは少ないことが好ましい。ニトリル基の置換個数ｎは、具体的には、１～４の整数であり、好ましくは１～３の整数であり、より好ましくは１～２の整数であり、さらに好ましくは１である。

【１０３４】

Ａｒは、それぞれ独立して、置換されていてもよいアリール、または置換されていてもよいヘテロアリールである。高いＳ１および高いＴ１の観点からドナー性のヘテロアリールであることが好ましく、電子輸送層として用いるためドナー性のヘテロアリールは少ないことが好ましい。電荷輸送性の観点からは炭素数の多いアリールまたはヘテロアリールが好ましく、置換基を多く有することが好ましい。Ａｒの置換個数ｍは、具体的には、１～４の整数であり、好ましくは１～３の整数であり、より好ましくは１～２である。

【１０３５】

「置換されていてもよいアリール」の「アリール」としては、例えば、炭素数６～３０のアリールがあげられ、好ましくは炭素数６～２４のアリール、より好ましくは炭素数６～２０のアリール、さらに好ましくは炭素数６～１２のアリールである。

【１０３６】

具体的な「アリール」としては、単環系アリールであるフェニル、二環系アリールである（２－，３－，４－）ビフェニリル、縮合二環系アリールである（１－，２－）ナフチル、三環系アリールであるテルフェニリル（ｍ－テルフェニル－２’－イル、ｍ－テルフェニル－４’－イル、ｍ－テルフェニル－５’－イル、ｏ－テルフェニル－３’－イル、ｏ－テルフェニル－４’－イル、ｐ－テルフェニル－２’－イル、ｍ－テルフェニル－２－イル、ｍ－テルフェニル－３－イル、ｍ－テルフェニル－４－イル、ｏ－テルフェニル－２－イル、ｏ－テルフェニル－３－イル、ｏ－テルフェニル－４－イル、ｐ－テルフェニル－２－イル、ｐ－テルフェニル－３－イル、ｐ－テルフェニル－４－イル）、縮合三環系アリールである、アセナフチレン－（１－，３－，４－，５－）イル、フルオレン－（１－，２－，３－，４－，９－）イル、フェナレン－（１－，２－）イル、（１－，２－，３－，４－，９－）フェナントリル、四環系アリールであるクアテルフェニリル（５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－２－イル、５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－３－イル、５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－４－イル、ｍ－クアテルフェニリル）、縮合四環系アリールであるトリフェニレン－（１－，２－）イル、ピレン－（１－，２－，４－）イル、ナフタセン－（１－，２－，５－）イル、縮合五環系アリールであるペリレン－（１－，２－，３－）イル、ペンタセン－（１－，２－，５－，６－）イルなどがあげられる。

【１０３７】

「置換されていてもよいヘテロアリール」の「ヘテロアリール」としては、例えば、炭素数２～３０のヘテロアリールがあげられ、炭素数２～２５のヘテロアリールが好ましく、炭素数２～２０のヘテロアリールがより好ましく、炭素数２～１５のヘテロアリールがさらに好ましく、炭素数２～１０のヘテロアリールが特に好ましい。また、ヘテロアリールとしては、例えば環構成原子として炭素以外に酸素、硫黄および窒素から選ばれるヘテロ原子を１ないし５個含有する複素環などがあげられる。

【１０３８】

具体的なヘテロアリールとしては、例えば、フリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、オキサジアゾリル、フラザニル、チアジアゾリル、トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリミジニル、ピリダジニル、ピラジニル、トリアジニル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾ［ｂ］チエニル、インドリル、イソインドリル、１Ｈ－インダゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、１Ｈ－ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリル、キナゾリル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、プリニル、プテリジニル、カルバゾリル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、インドリジニルなどがあげられる。

【１０３９】

また、上記アリールおよびヘテロアリールは置換されていてもよく、それぞれ例えば上記アリールやヘテロアリールで置換されていてもよい。

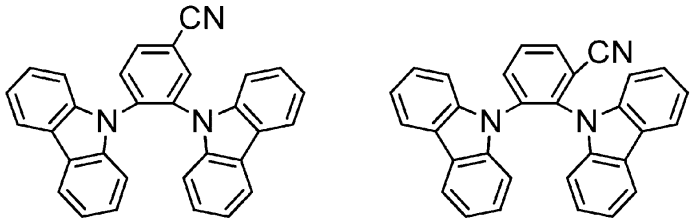
【１０４０】

アリールニトリル誘導体は、式（ＥＴＭ－９）で表される化合物が単結合などで複数結合した多量体であってもよい。この場合、単結合以外に、アリール環（好ましくは多価のベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フルオレン環、ベンゾフルオレン環、フェナレン環、フェナントレン環またはトリフェニレン環）で結合されていてもよい。

【１０４１】

このアリールニトリル誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。

【化６６０】



【１０４２】

このアリールニトリル誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【１０４３】

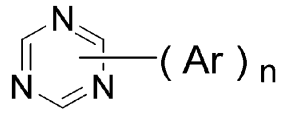
このカルバゾール誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【１０４４】

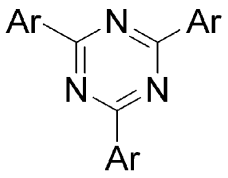
＜トリアジン誘導体＞

トリアジン誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－１０）で表される化合物であり、好ましくは下記式（ＥＴＭ－１０－１）で表される化合物である。詳細は米国特許出願公開第2011/0156013号明細書に記載されている。

【化６６１】



(ETM-10)



(ETM-10-1)

【１０４５】

Ａｒは、それぞれ独立して、置換されていてもよいアリール、または置換されていてもよいヘテロアリールである。ｎは１～３の整数であり、好ましくは２または３である。

【１０４６】

「置換されていてもよいアリール」の「アリール」としては、例えば、炭素数６～３０のアリールがあげられ、好ましくは炭素数６～２４のアリール、より好ましくは炭素数６～２０のアリール、さらに好ましくは炭素数６～１２のアリールである。

【１０４７】

具体的な「アリール」としては、単環系アリールであるフェニル、二環系アリールである（２－，３－，４－）ビフェニリル、縮合二環系アリールである（１－，２－）ナフチル、三環系アリールであるテルフェニリル（ｍ－テルフェニル－２’－イル、ｍ－テルフェニル－４’－イル、ｍ－テルフェニル－５’－イル、ｏ－テルフェニル－３’－イル、ｏ－テルフェニル－４’－イル、ｐ－テルフェニル－２’－イル、ｍ－テルフェニル－２－イル、ｍ－テルフェニル－３－イル、ｍ－テルフェニル－４－イル、ｏ－テルフェニル－２－イル、ｏ－テルフェニル－３－イル、ｏ－テルフェニル－４－イル、ｐ－テルフェニル－２－イル、ｐ－テルフェニル－３－イル、ｐ－テルフェニル－４－イル）、縮合三環系アリールである、アセナフチレン－（１－，３－，４－，５－）イル、フルオレン－（１－，２－，３－，４－，９－）イル、フェナレン－（１－，２－）イル、（１－，２－，３－，４－，９－）フェナントリル、四環系アリールであるクアテルフェニリル（５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－２－イル、５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－３－イル、５’－フェニル－ｍ－テルフェニル－４－イル、ｍ－クアテルフェニリル）、縮合四環系アリールであるトリフェニレン－（１－，２－）イル、ピレン－（１－，２－，４－）イル、ナフタセン－（１－，２－，５－）イル、縮合五環系アリールであるペリレン－（１－，２－，３－）イル、ペンタセン－（１－，２－，５－，６－）イルなどがあげられる。

【１０４８】

「置換されていてもよいヘテロアリール」の「ヘテロアリール」としては、例えば、炭素数２～３０のヘテロアリールがあげられ、炭素数２～２５のヘテロアリールが好ましく、炭素数２～２０のヘテロアリールがより好ましく、炭素数２～１５のヘテロアリールがさらに好ましく、炭素数２～１０のヘテロアリールが特に好ましい。また、ヘテロアリールとしては、例えば環構成原子として炭素以外に酸素、硫黄および窒素から選ばれるヘテロ原子を１ないし５個含有する複素環などがあげられる。

【１０４９】

具体的なヘテロアリールとしては、例えば、フリル、チエニル、ピロリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、オキサジアゾリル、フラザニル、チアジアゾリル、トリアゾリル、テトラゾリル、ピリジル、ピリミジニル、ピリダジニル、ピラジニル、トリアジニル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾ［ｂ］チエニル、インドリル、イソインドリル、１Ｈ－インダゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、１Ｈ－ベンゾトリアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリル、キナゾリル、キノキサリニル、フタラジニル、ナフチリジニル、プリニル、プテリジニル、カルバゾリル、アクリジニル、フェノキサジニル、フェノチアジニル、フェナジニル、フェノキサチイニル、チアントレニル、イン

ドリジニルなどがあげられる。

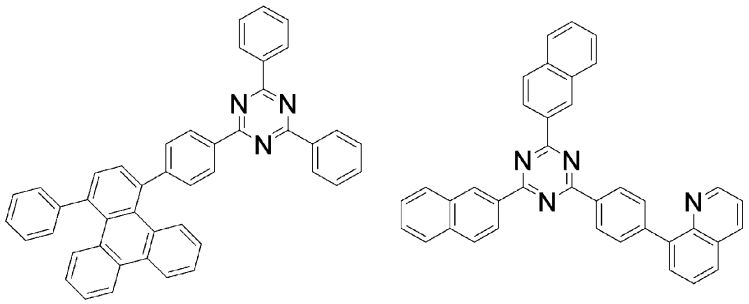
【１０５０】

また、上記アリールおよびヘテロアリールは置換されていてもよく、それぞれ例えば上記アリールやヘテロアリールで置換されていてもよい。

【１０５１】

このトリアジン誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。

【化６６２】



【１０５２】

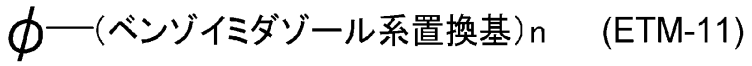
このトリアジン誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【１０５３】

＜ベンゾイミダゾール誘導体＞

ベンゾイミダゾール誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－１１）で表される化合物である。

【化６６３】

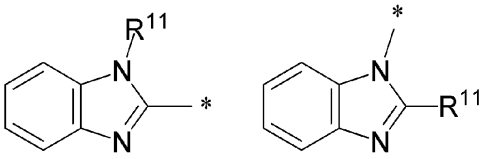


【１０５４】

φは、ｎ価のアリール環（好ましくはｎ価のベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フルオレン環、ベンゾフルオレン環、フェナレン環、フェナントレン環またはトリフェニレン環）であり、ｎは１～４の整数であり、「ベンゾイミダゾール系置換基」は、式（ＥＴＭ－２）、式（ＥＴＭ－２－１）および式（ＥＴＭ－２－２）における「ピリジン系置換基」の中のピリジル基がベンゾイミダゾリルに置き換わった置換基であり、ベンゾイミダゾール誘導体における少なくとも１つの水素は重水素で置換されていてもよい。

【１０５５】

【化６６４】



ベンゾイミダゾリル　　＊は結合位置を示す。

【１０５６】

上記ベンゾイミダゾリルにおけるＲ^{11}は、水素、炭素数１～２４のアルキル、炭素数３～１２のシクロアルキルまたは炭素数６～３０のアリールであり、式（ＥＴＭ－２－１）および式（ＥＴＭ－２－２）におけるＲ^{11}の説明を引用することができる。

【１０５７】

φは、さらに、アントラセン環またはフルオレン環であることが好ましく、この場合の構造は式（ＥＴＭ－２－１）または式（ＥＴＭ－２－２）での説明を引用することができ、各式中のＲ^{11}～Ｒ^{18}は式（ＥＴＭ－２－１）または式（ＥＴＭ－２－２）での説明を引用することができる。また、式（ＥＴＭ－２－１）または式（ＥＴＭ－２－２）では２

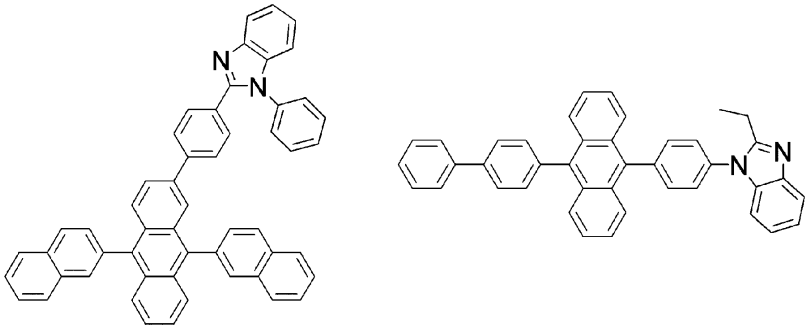
つのピリジン系置換基が結合した形態で説明されているが、これらをベンゾイミダゾール系置換基に置き換えるときには、両方のピリジン系置換基をベンゾイミダゾール系置換基で置き換えてもよいし（すなわちｎ＝２）、いずれか１つのピリジン系置換基をベンゾイミダゾール系置換基で置き換えて他方のピリジン系置換基をR^{11}～R^{18}で置き換えてもよい（すなわちｎ＝１）。さらに、例えば式（ＥＴＭ－２－１）におけるR^{11}～R^{18}の少なくとも１つをベンゾイミダゾール系置換基で置き換えて「ピリジン系置換基」をR^{11}～R^{18}で置き換えてもよい。

【１０５８】

このベンゾイミダゾール誘導体の具体例としては、例えば１－フェニル－２－（４－（１０－フェニルアントラセン－９－イル）フェニル）－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール、２－（４－（１０－（ナフタレン－２－イル）アントラセン－９－イル）フェニル）－１－フェニル－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール、２－（３－（１０－（ナフタレン－２－イル）アントラセン－９－イル）フェニル）－１－フェニル－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール、５－（１０－（ナフタレン－２－イル）アントラセン－９－イル）－１，２－ジフェニル－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール、１－（４－（１０－（ナフタレン－２－イル）アントラセン－９－イル）フェニル）－２－フェニル－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール、２－（４－（９，１０－ジ（ナフタレン－２－イル）アントラセン－２－イル）フェニル）－１－フェニル－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール、１－（４－（９，１０－ジ（ナフタレン－２－イル）アントラセン－２－イル）フェニル）－２－フェニル－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾール、５－（９，１０－ジ（ナフタレン－２－イル）アントラセン－２－イル）－１，２－ジフェニル－１Ｈ－ベンゾ［ｄ］イミダゾールなどがあげられる。

【１０５９】

【化６６５】



【１０６０】

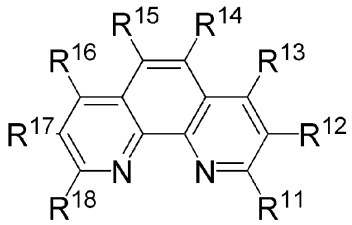
このベンゾイミダゾール誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【１０６１】

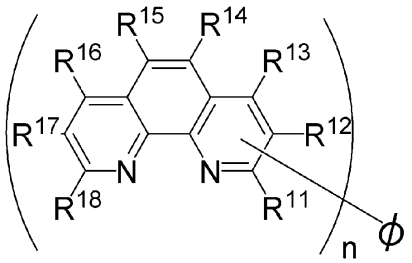
＜フェナントロリン誘導体＞

フェナントロリン誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－１２）または式（ＥＴＭ－１２－１）で表される化合物である。詳細は国際公開第２００６／０２１９８２号に記載されている。

【化６６６】



(ETM-12)



(ETM-12-1)

【１０６２】

φは、ｎ価のアリール環（好ましくはｎ価のベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フルオレン環、ベンゾフルオレン環、フェナレン環、フェナントレン環またはトリフェニレン環）であり、ｎは１～４の整数である。

【１０６３】

各式のＲ１１～Ｒ１８は、それぞれ独立して、水素、アルキル（好ましくは炭素数１～２４のアルキル）、シクロアルキル（好ましくは炭素数３～１２のシクロアルキル）またはアリール（好ましくは炭素数６～３０のアリール）である。また、式（ＥＴＭ－１２－１）においてはＲ１１～Ｒ１８のいずれかがアリール環であるφと結合する。

【１０６４】

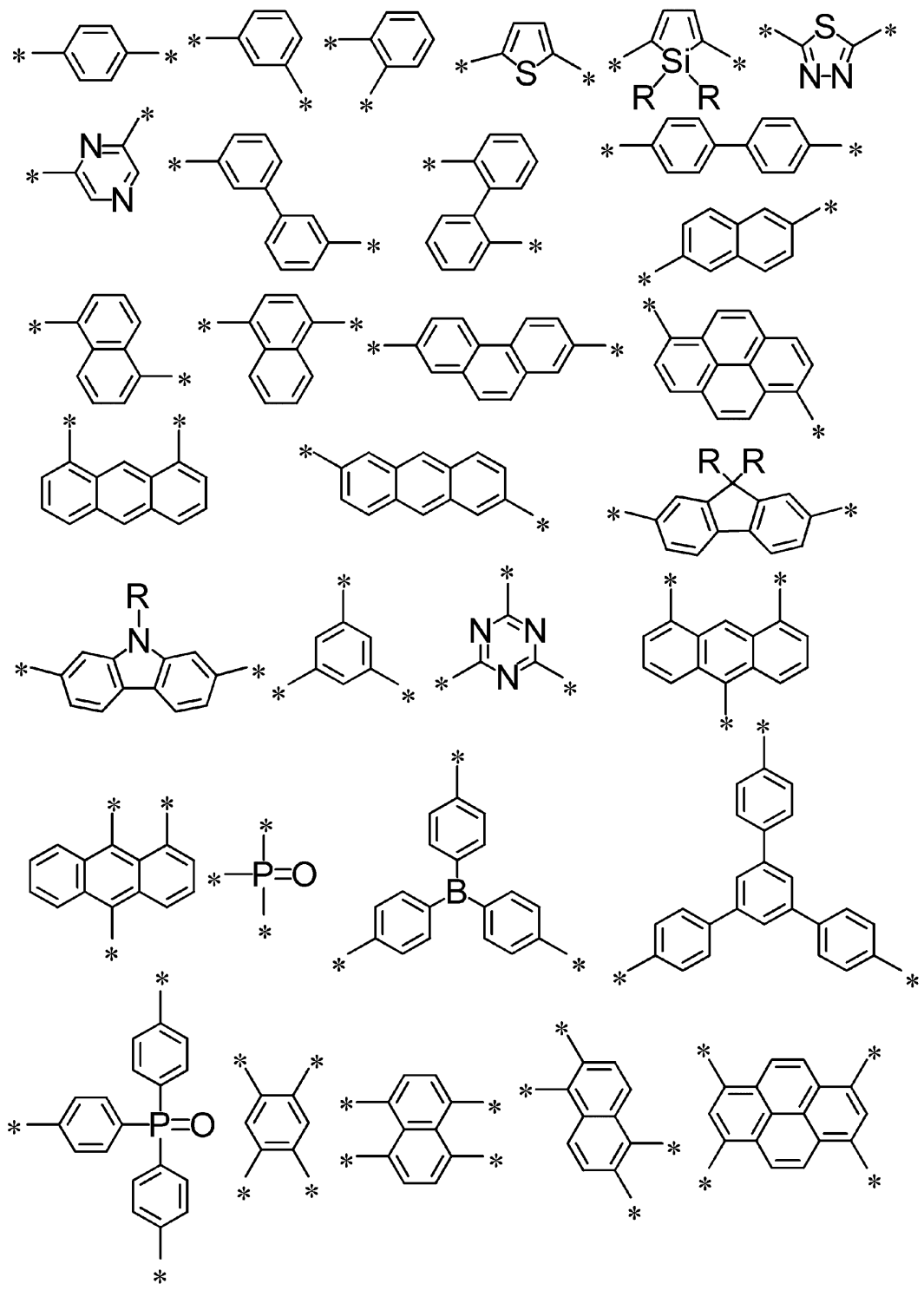
各フェナントロリン誘導体における少なくとも１つの水素が重水素で置換されていてもよい。

【１０６５】

Ｒ１１～Ｒ１８におけるアルキル、シクロアルキルおよびアリールとしては、式（ＥＴＭ－２）におけるＲ１１～Ｒ１８の説明を引用することができる。また、φは上記した例のほかに、例えば、以下の構造式があげられる。なお、下記構造式中のＲは、それぞれ独立して、水素、メチル、エチル、イソプロピル、シクロヘキシル、フェニル、１－ナフチル、２－ナフチル、ビフェニリルまたはテルフェニリルであり、＊は、結合位置を表す。

【１０６６】

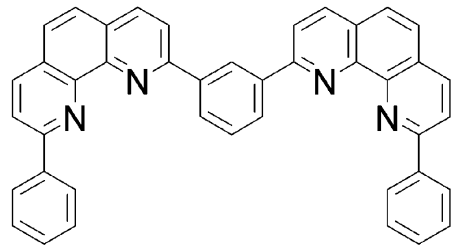
【化６６７】



【１０６７】

このフェナントロリン誘導体の具体例としては、例えば４，７－ジフェニル－１，１０－フェナントロリン、２，９－ジメチル－４，７－ジフェニル－１，１０－フェナントロリン、９，１０－ジ（１，１０－フェナントロリン－２－イル）アントラセン、２，６－ジ（１，１０－フェナントロリン－５－イル）ピリジン、１，３，５－トリ（１，１０－フェナントロリン－５－イル）ベンゼン、９，９’－ジフルオロ－ビ（１，１０－フェナントロリン－５－イル）、バソクプロイン、１，３－ビス（２－フェニル－１，１０－フェナントロリン－９－イル）ベンゼンや下記構造式で表される化合物などがあげられる。

【化６６８】



【１０６８】

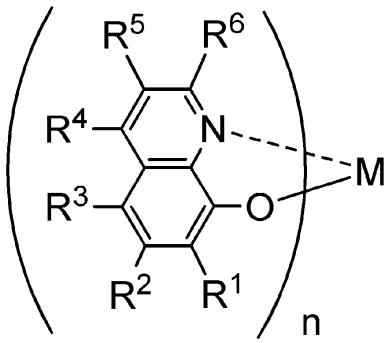
このフェナントロリン誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【１０６９】

＜キノリノール系金属錯体＞

キノリノール系金属錯体は、例えば下記式（ＥＴＭ－１３）で表される化合物である。

【化６６９】



(ETM-13)

式中、Ｒ^{1}～Ｒ^{6}は、それぞれ独立して、水素、フッ素、アルキル、シクロアルキル、アラルキル、アルケニル、シアノ、アルコキシ、またはアリールであり、ＭはＬｉ、Ａｌ、Ｇａ、Ｂｅ、またはＺｎであり、ｎは１～３の整数である。

【１０７０】

キノリノール系金属錯体の具体例としては、８－キノリノールリチウム、トリス（８－キノリノラート）アルミニウム、トリス（４－メチル－８－キノリノラート）アルミニウム、トリス（５－メチル－８－キノリノラート）アルミニウム、トリス（３，４－ジメチル－８－キノリノラート）アルミニウム、トリス（４，５－ジメチル－８－キノリノラート）アルミニウム、トリス（４，６－ジメチル－８－キノリノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（フェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（２－メチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（３－メチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（４－メチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（２－フェニルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（３－フェニルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（４－フェニルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（２，３－ジメチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（２，６－ジメチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（３，４－ジメチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（３，５－ジメチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（３，５－ジ－ｔ－ブチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（２，６－ジフェニルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（２，４，６－トリフェニルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（２，４，６－トリ

メチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（２，４，５，６－テトラメチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（１－ナフトラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）（２－ナフトラート）アルミニウム、ビス（２，４－ジメチル－８－キノリノラート）（２－フェニルフェノラート）アルミニウム、ビス（２，４－ジメチル－８－キノリノラート）（３－フェニルフェノラート）アルミニウム、ビス（２，４－ジメチル－８－キノリノラート）（４－フェニルフェノラート）アルミニウム、ビス（２，４－ジメチル－８－キノリノラート）（３，５－ジメチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２，４－ジメチル－８－キノリノラート）（３，５－ジ－ｔ－ブチルフェノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－８－キノリノラート）アルミニウム－μ－オキソ－ビス（２－メチル－８－キノリノラート）アルミニウム、ビス（２，４－ジメチル－８－キノリノラート）アルミニウム－μ－オキソ－ビス（２，４－ジメチル－８－キノリノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－４－エチル－８－キノリノラート）アルミニウム－μ－オキソ－ビス（２－メチル－４－エチル－８－キノリノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－４－メトキシ－８－キノリノラート）アルミニウム－μ－オキソ－ビス（２－メチル－４－メトキシ－８－キノリノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－５－シアノ－８－キノリノラート）アルミニウム－μ－オキソ－ビス（２－メチル－５－シアノ－８－キノリノラート）アルミニウム、ビス（２－メチル－５－トリフルオロメチル－８－キノリノラート）アルミニウム－μ－オキソ－ビス（２－メチル－５－トリフルオロメチル－８－キノリノラート）アルミニウム、ビス（１０－ヒドロキシベンゾ［ｈ］キノリン）ベリリウムなどがあげられる。

【１０７１】

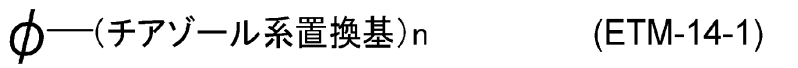
このキノリノール系金属錯体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【１０７２】

＜チアゾール誘導体およびベンゾチアゾール誘導体＞

チアゾール誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－１４－１）で表される化合物である。

【化６７０】



ベンゾチアゾール誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－１４－２）で表される化合物である。

【化６７１】

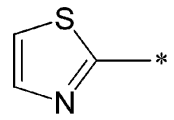


【１０７３】

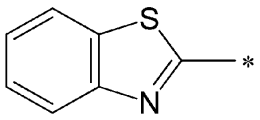
各式のφは、ｎ価のアリール環（好ましくはｎ価のベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フルオレン環、ベンゾフルオレン環、フェナレン環、フェナントレン環またはトリフェニレン環）であり、ｎは１～４の整数であり、「チアゾール系置換基」や「ベンゾチアゾール系置換基」は、式（ＥＴＭ－２）、式（ＥＴＭ－２－１）および式（ＥＴＭ－２－２）における「ピリジン系置換基」の中のピリジルが下記のチアゾリルやベンゾチアゾリルに置き換わった置換基であり、チアゾール誘導体およびベンゾチアゾール誘導体における少なくとも１つの水素が重水素で置換されていてもよい。

【１０７４】

【化６７２】



チアゾリル



ベンゾチアゾリル

＊は結合位置を示す。

【１０７５】

φは、さらに、アントラセン環またはフルオレン環であることが好ましく、この場合の構造は式（ＥＴＭ－２－１）または式（ＥＴＭ－２－２）での説明を引用することができ、各式中のＲ^{11}～Ｒ^{18}は式（ＥＴＭ－２－１）または式（ＥＴＭ－２－２）での説明を引用することができる。また、式（ＥＴＭ－２－１）または式（ＥＴＭ－２－２）では２つのピリジン系置換基が結合した形態で説明されているが、これらをチアゾール系置換基（またはベンゾチアゾール系置換基）に置き換えるときには、両方のピリジン系置換基をチアゾール系置換基（またはベンゾチアゾール系置換基）で置き換えてもよいし（すなわちｎ＝２）、いずれか１つのピリジン系置換基をチアゾール系置換基（またはベンゾチアゾール系置換基）で置き換えて他方のピリジン系置換基をＲ^{11}～Ｒ^{18}で置き換えてもよい（すなわちｎ＝１）。さらに、例えば式（ＥＴＭ－２－１）におけるＲ^{11}～Ｒ^{18}の少なくとも１つをチアゾール系置換基（またはベンゾチアゾール系置換基）で置き換えて「ピリジン系置換基」をＲ^{11}～Ｒ^{18}で置き換えてもよい。

【１０７６】

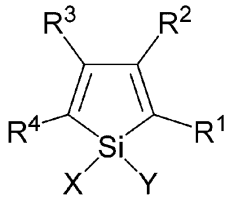
これらのチアゾール誘導体またはベンゾチアゾール誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【１０７７】

＜シロール誘導体＞

シロール誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－１５）で表される化合物である。詳細は特開平9-194487号公報に記載されている。

【化６７３】



(ETM-15)

【１０７８】

ＸおよびＹは、それぞれ独立して、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、アルケニルオキシ、アルキニルオキシ、アリール、ヘテロアリールであり、これらは置換されていてもよい。これらの基の詳細については、式（１）および式（２）における説明、さらに式（ＥＴＭ－７－２）における説明を引用できる。また、アルケニルオキシおよびアルキニルオキシは、それぞれアルコキシにおけるアルキル部分がアルケニルまたはアルキニルに置き換わった基であり、これらのアルケニルおよびアルキニルの詳細については式（ＥＴＭ－７－２）における説明を引用できる。

また、いずれもアルキルであるＸとＹとが結合して環を形成していてもよい。

【１０７９】

Ｒ^{1}～Ｒ^{4}は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、アルキルカルボニル、アリールカルボニル、アルコキシカルボニル、アリールオキシカルボニル、アゾ基、アルキルカルボニルオキシ、アリールカルボニルオキシ、アルコキシカルボニルオキシ、アリールオキシカルボニルオキシ、スルフィニル、スルフォニル、スルファニル、シリル、カルバモイル、アリール、ヘテロ

アリール、アルケニル、アルキニル、ニトロ、ホルミル、ニトロソ、ホルミルオキシ、イソシアノ、シアネート基、イソシアネート基、チオシアネート基、イソチオシアネート基、または、シアノであり、これらはアルキル、シクロアルキル、アリールまたはハロゲンで置換されていてもよく、隣接置換基との間に縮合環を形成していてもよい。

【１０８０】

Ｒ^{1}～Ｒ^{4}における、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、アリール、ヘテロアリール、アルケニルおよびアルキニルの詳細については、式（１）および式（２）における説明を引用できる。

【１０８１】

Ｒ^{1}～Ｒ^{4}における、アルキルカルボニル、アリールカルボニル、アルコキシカルボニル、アリールオキシカルボニル、アルキルカルボニルオキシ、アリールカルボニルオキシ、アルコキシカルボニルオキシおよびアリールオキシカルボニルオキシ中の、アルキル、アリールおよびアルコキシの詳細についても、式（１）および式（２）における説明を引用できる。

【１０８２】

シリルとしては、シリル基、および、シリル基の３つの水素の少なくとも１つが、それぞれ独立して、アリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換された基があげられ、トリ置換シリルが好ましく、トリアリールシリル、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルおよびアルキルジシクロアルキルシリル等があげられる。これらにおける、アリール、アルキルおよびシクロアルキルの詳細については、式（１）および式（２）における説明を引用できる。

【１０８３】

隣接置換基との間に形成される縮合環とは、例えば、Ｒ^{1}とＲ^{2}、Ｒ^{2}とＲ^{3}、Ｒ^{3}とＲ^{4}等の間で形成された共役または非共役の縮合環である。これら縮合環は、環内構造に窒素、酸素、硫黄原子を含んでいてもよいし、さらに別の環と縮合してもよい。

【１０８４】

ただし、好ましくは、Ｒ^{1}およびＲ^{4}がフェニルの場合、ＸおよびＹは、アルキルまたはフェニルではない。また、好ましくは、Ｒ^{1}およびＲ^{4}がチエニル基の場合、ＸおよびＹは、アルキルを、Ｒ^{2}およびＲ^{3}は、アルキル、アリール、アルケニルまたはＲ^{2}とＲ^{3}が結合して環を形成するシクロアルキルを同時に満たさない構造である。また、好ましくは、Ｒ^{1}およびＲ^{4}がシリル基の場合、Ｒ^{2}、Ｒ^{3}、ＸおよびＹは、それぞれ独立して、水素または炭素数１から６のアルキルではない。また、好ましくは、Ｒ^{1}およびＲ^{2}でベンゼン環が縮合した構造の場合、ＸおよびＹは、アルキルおよびフェニルではない。

【１０８５】

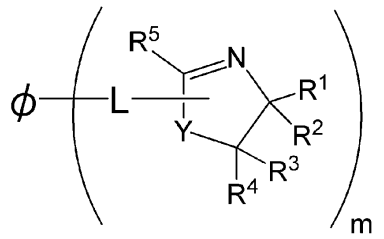
これらのシロール誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【１０８６】

＜アゾリン誘導体＞

アゾリン誘導体は、例えば下記式（ＥＴＭ－１６）で表される化合物である。詳細は国際公開第２０１７／０１４２２６号に記載されている。

【化６７４】



(ETM-16)

【１０８７】

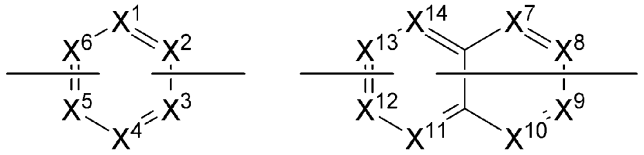
式（ＥＴＭ－１６）中、

φは炭素数６～４０の芳香族炭化水素に由来するｍ価の基または炭素数２～４０の芳香族複素環に由来するｍ価の基であり、φの少なくとも１つの水素は炭素数１～６のアルキル、炭素数３～１４のシクロアルキル、炭素数６～１８のアリールまたは炭素数２～１８のヘテロアリールで置換されていてもよく、

Ｙは、それぞれ独立して、－Ｏ－、－Ｓ－または＞Ｎ－Ａｒであり、Ａｒは炭素数６～１２のアリールまたは炭素数２～１２のヘテロアリールであり、Ａｒの少なくとも１つの水素は炭素数１～４のアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキル、炭素数６～１２のアリールまたは炭素数２～１２のヘテロアリールで置換されていてもよく、R^1～R^5はそれぞれ独立して水素、炭素数１～４のアルキルまたは炭素数５～１０のシクロアルキルであり、ただし、前記＞Ｎ－Ａｒにおけるおよび前記R^1～R^5のうちのいずれか１つはＬと結合する部位であり、

Ｌは、それぞれ独立して、下記式（Ｌ－１）で表される２価の基、および下記式（Ｌ－２）で表される２価の基からなる群から選ばれ、

【化６７５】



(L-1) (L-2)

【１０８８】

式（Ｌ－１）中、X^1～X^6はそれぞれ独立して＝CR^6－または＝Ｎ－であり、X^1～X^6のうちの少なくとも２つは＝CR^6－であり、X^1～X^6のうちの２つの＝CR^6－におけるR^6はφまたはアゾリン環と結合する部位であり、それ以外の＝CR^6－におけるR^6は水素であり、

式（Ｌ－２）中、X^7～X^{14}はそれぞれ独立して＝CR^6－または＝Ｎ－であり、X^7～X^{14}のうちの少なくとも２つは＝CR^6－であり、X^7～X^{14}のうちの２つの＝CR^6－におけるR^6はφまたはアゾリン環と結合する部位であり、それ以外の＝CR^6－におけるR^6は水素であり、

Ｌの少なくとも１つの水素は炭素数１～４のアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキル、炭素数６～１０のアリールまたは炭素数２～１０のヘテロアリールで置換されていてもよく、

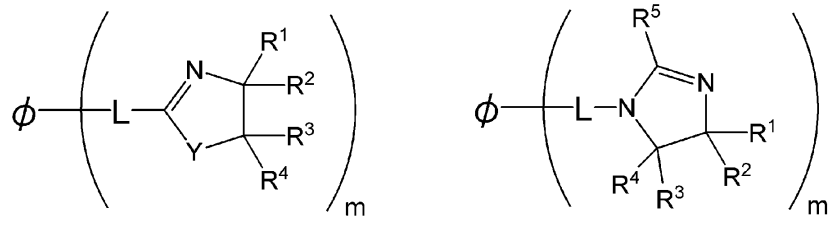
ｍは１～４の整数であり、ｍが２～４であるとき、アゾリン環とＬとで形成される基は同一であっても異なっていてもよく、そして、

式（ＥＴＭ－１６）で表される化合物中の少なくとも１つの水素は重水素で置換されていてもよい。

【１０８９】

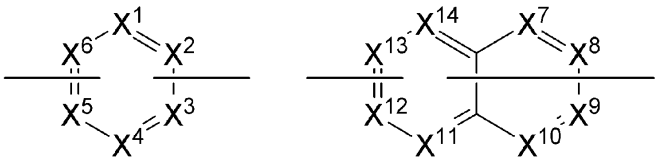
具体的なアゾリン誘導体は、下記式（ＥＴＭ－１６－１）または式（ＥＴＭ－１６－２）で表される化合物である。

【化６７６】



(ETM-16-1) (ETM-16-2)

【１０９０】
式（ＥＴＭ－１６－１）および式（ＥＴＭ－１６－２）中、
φは炭素数６～４０の芳香族炭化水素に由来するｍ価の基または炭素数２～４０の芳香族複素環に由来するｍ価の基であり、φの少なくとも１つの水素は炭素数１～６のアルキル、炭素数３～１４のシクロアルキル、炭素数６～１８のアリールまたは炭素数２～１８のヘテロアリールで置換されていてもよく、
式（ＥＴＭ－１６－１）中、Ｙは、それぞれ独立して、－Ｏ－、－Ｓ－または＞Ｎ－Ａｒであり、Ａｒは炭素数６～１２のアリールまたは炭素数２～１２のヘテロアリールであり、Ａｒの少なくとも１つの水素は炭素数１～４のアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキル、炭素数６～１２のアリールまたは炭素数２～１２のヘテロアリールで置換されていてもよく、
式（ＥＴＭ－１６－１）中、R^1～R^4はそれぞれ独立して水素、炭素数１～４のアルキルまたは炭素数５～１０のシクロアルキルであり、ただし、R^1とR^2は同一であり、またR^3とR^4は同一であり、
式（ＥＴＭ－１６－２）中、R^1～R^5はそれぞれ独立して水素、炭素数１～４のアルキルまたは炭素数５～１０のシクロアルキルであり、ただし、R^1とR^2は同一であり、またR^3とR^4は同一であり、
式（ＥＴＭ－１６－１）および式（ＥＴＭ－１６－２）中、
Ｌは、それぞれ独立して、下記式（Ｌ－１）で表される２価の基、および下記式（Ｌ－２）で表される２価の基からなる群から選ばれ、
【１０９１】
【化６７７】



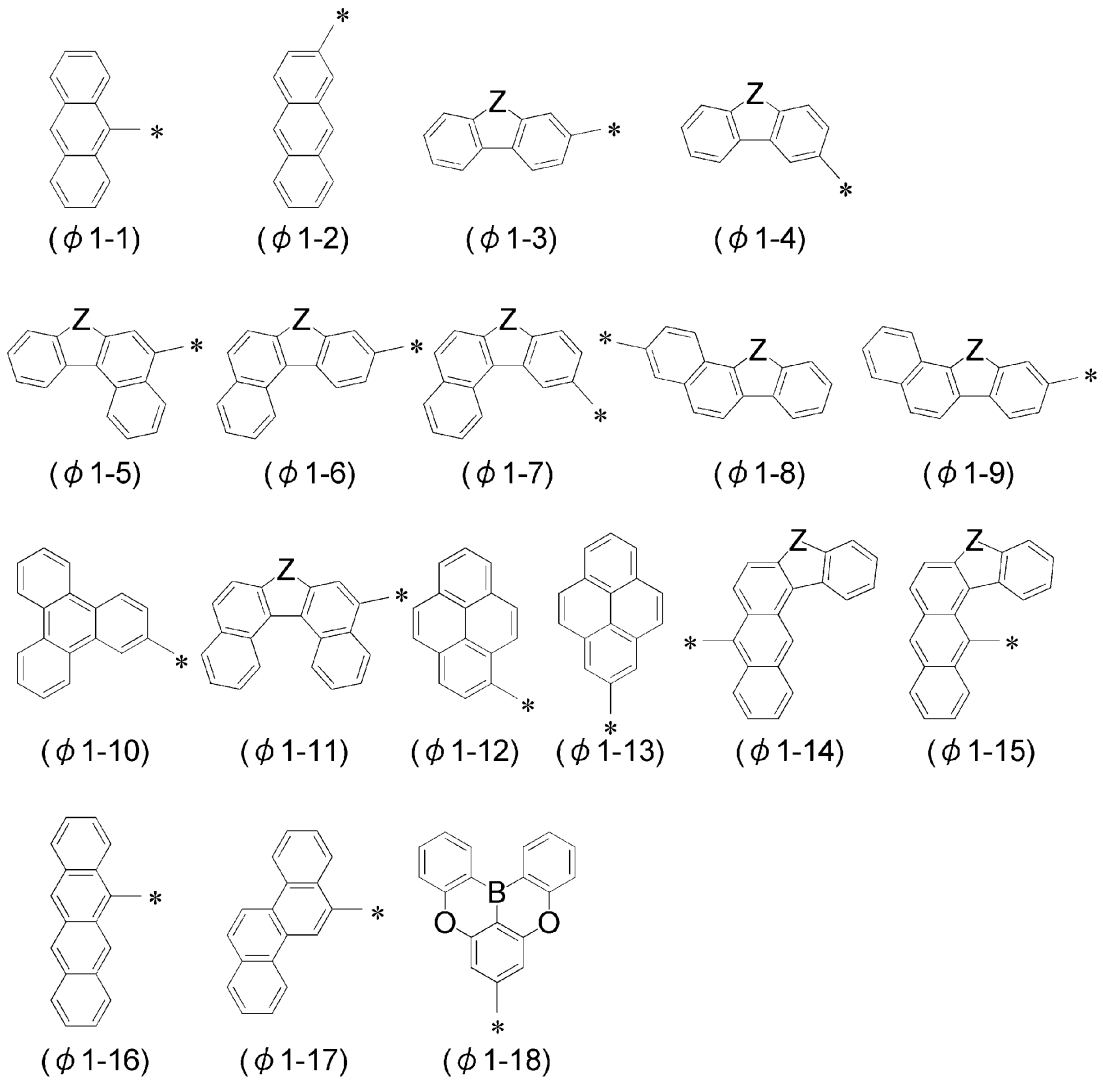
(L-1)　　(L-2)

式（Ｌ－１）中、X^1～X^6はそれぞれ独立して＝CR^6－または＝Ｎ－であり、X^1～X^6のうちの少なくとも２つは＝CR^6－であり、X^1～X^6のうちの２つの＝CR^6－におけるR^6はφまたはアゾリン環と結合する部位であり、それ以外の＝CR^6－におけるR^6は水素であり、
式（Ｌ－２）中、X^7～X^{14}はそれぞれ独立して＝CR^6－または＝Ｎ－であり、X^7～X^{14}のうちの少なくとも２つは＝CR^6－であり、X^7～X^{14}のうちの２つの＝CR^6－におけるR^6はφまたはアゾリン環と結合する部位であり、それ以外の＝CR^6－におけるR^6は水素であり、
Ｌの少なくとも１つの水素は炭素数１～４のアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキル、炭素数６～１０のアリールまたは炭素数２～１０のヘテロアリールで置換されていてもよく、
ｍは１～４の整数であり、ｍが２～４であるとき、アゾリン環とＬとで形成される基は同一であっても異なっていてもよく、そして、
式（ＥＴＭ－１６－１）または式（ＥＴＭ－１６－２）で表される化合物中の少なくとも１つの水素は重水素で置換されていてもよい。
【１０９２】
好ましくは、φは、下記式（φ１－１）～式（φ１－１８）で表される１価の基、下記式（φ２－１）～式（φ２－３４）で表される２価の基、下記式（φ３－１）～式（φ３－３）で表される３価の基、および下記式（φ４－１）～式（φ４－２）で表される４価の基からなる群から選択され、φの少なくとも１つの水素は炭素数１～６のアルキル、炭

素数３～１４のシクロアルキル、炭素数６～１８のアリールまたは炭素数２～１８のヘテロアリールで置換されていてもよい。

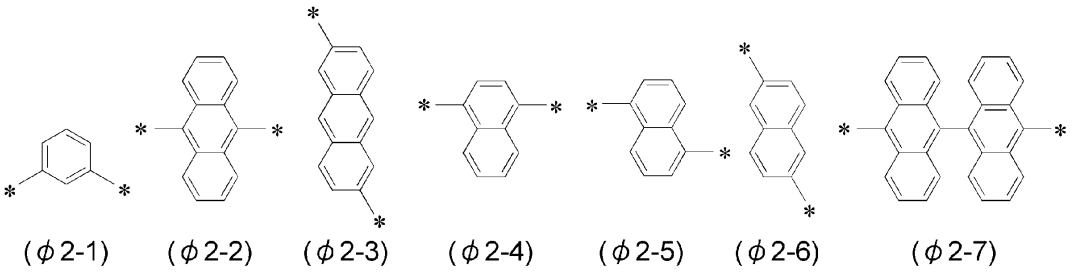
【１０９３】

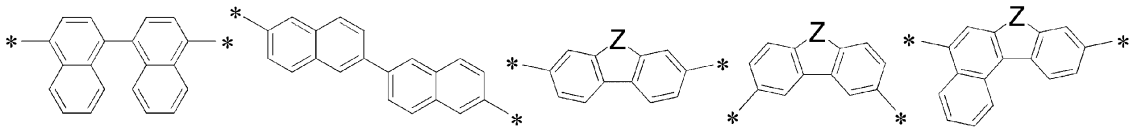
【化６７８】

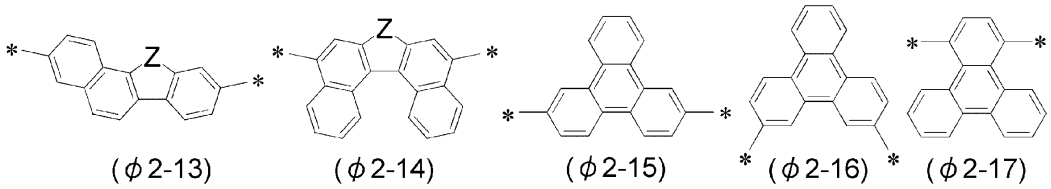


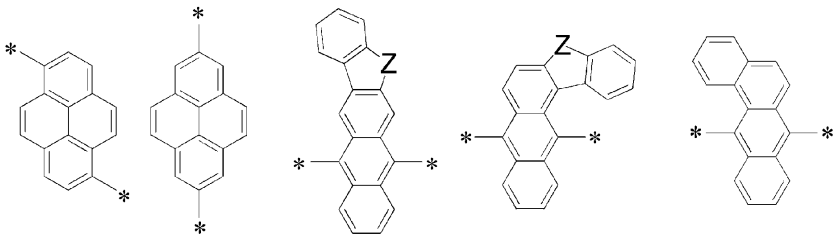
【１０９４】

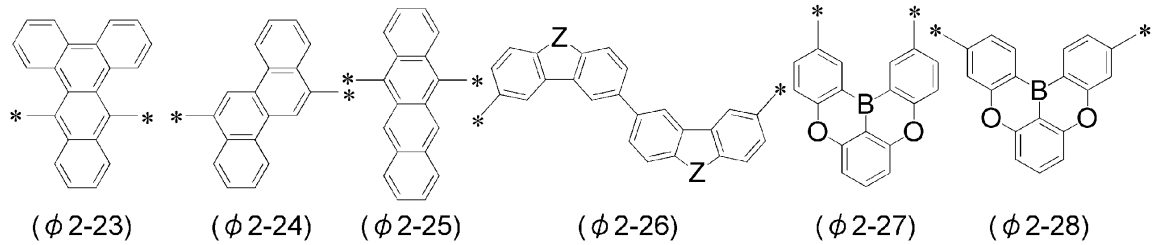
【化６７９】

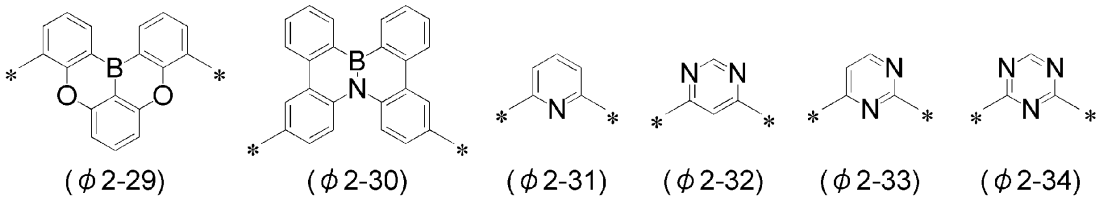

(φ2-1) (φ2-2) (φ2-3) (φ2-4) (φ2-5) (φ2-6) (φ2-7)


(φ2-8) (φ2-9) (φ2-10) (φ2-11) (φ2-12)

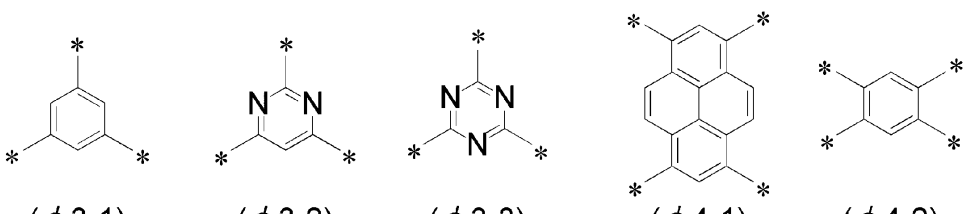

(φ2-13) (φ2-14) (φ2-15) (φ2-16) (φ2-17)


(φ2-18) (φ2-19) (φ2-20) (φ2-21) (φ2-22)


(φ2-23) (φ2-24) (φ2-25) (φ2-26) (φ2-27) (φ2-28)

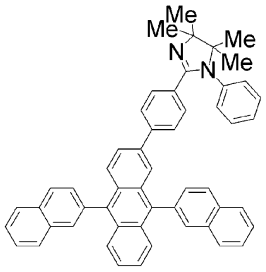

(φ2-29) (φ2-30) (φ2-31) (φ2-32) (φ2-33) (φ2-34)

【化６８０】

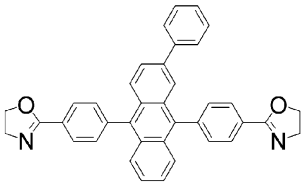

(φ3-1) (φ3-2) (φ3-3) (φ4-1) (φ4-2)

【１０９５】
式中のＺは、＞ＣＲ$_2$、＞Ｎ－Ａｒ、＞Ｎ－Ｌ、－Ｏ－または－Ｓ－であり、＞ＣＲ$_2$におけるＲは、それぞれ独立して、炭素数１～４のアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキル、炭素数６～１２のアリールまたは炭素数２～１２のヘテロアリールであり、Ｒは互いに結合して環を形成していてもよく、＞Ｎ－ＡｒにおけるＡｒは炭素数６～１２のアリールまたは炭素数２～１２のヘテロアリールであり、＞Ｎ－Ｌにおけるは式（ＥＴＭ－１６）、式（ＥＴＭ－１６－１）または式（ＥＴＭ－１６－２）におけるＬである。式中の＊は、結合位置を表す。
【１０９６】
好ましくは、Ｌは、ベンゼン、ナフタレン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、キノリン、イソキノリン、ナフチリジン、フタラジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、およびプテリジンからなる群から選択される環の２価の基であり、Ｌの少なくとも１つの水素は炭素数１～４のアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキル、炭素数６～１０のアリールまたは炭素数２～１０のヘテロアリールで置換されていてもよい。
【１０９７】
好ましくは、ＹまたはＺとしての＞Ｎ－ＡｒにおけるＡｒは、フェニル、ナフチル、ピリジニル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニル、トリアジニル、キノリニル、イソキノリニル、ナフチリジニル、フタラジニル、キノキサリニル、キナゾリニル、シンノリニル、およびプテリジニルからなる群から選択され、Ｙとしての＞Ｎ－ＡｒにおけるＡｒの少なくとも１つの水素は炭素数１～４のアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキルまたは炭素数６～１０のアリールで置換されていてもよい。
【１０９８】
好ましくは、Ｒ^1～Ｒ^{4}はそれぞれ独立して水素、炭素数１～４のアルキルまたは炭素数５～１０のシクロアルキルであり、ただし、Ｒ^{1}とＲ^{2}は同一であり、Ｒ^{3}とＲ^{4}は同一であり、またＲ^1～Ｒ^{4}の全てが同時に水素になることはなく、そして、ｍは１または２であり、ｍが２であるとき、アゾリン環とＬとで形成される基は同一である。
【１０９９】
アゾリン誘導体の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。なお、構造式中の「Ｍｅ」はメチルを表す。

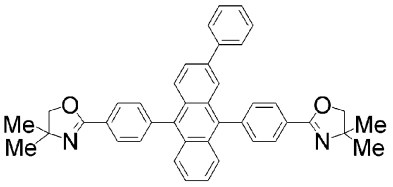
【化６８１】



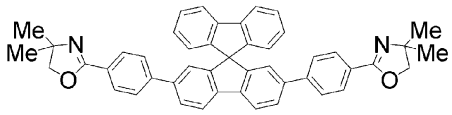
ETM-16-(1)



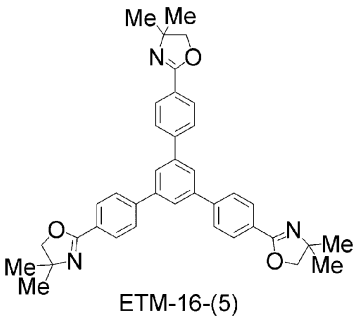
ETM-16-(2)



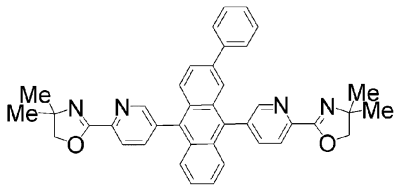
ETM-16-(3)



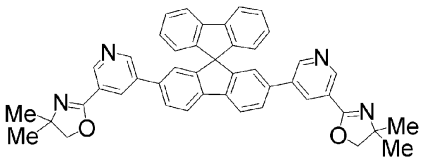
ETM-16-(4)



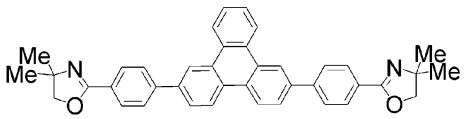
ETM-16-(5)



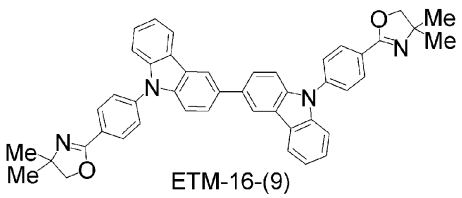
ETM-16-(6)



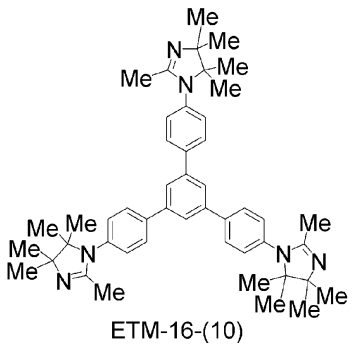
ETM-16-(7)



ETM-16-(8)



ETM-16-(9)



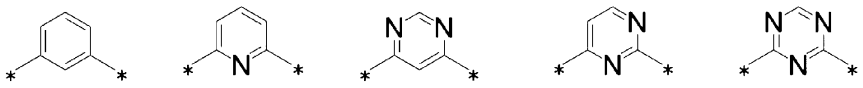
ETM-16-(10)

【１１００】

より好ましくは、φは、下記式（φ２－１）、式（φ２－３１）、式（φ２－３２）、式（φ２－３３）および式（φ２－３４）で表される２価の基からなる群から選択され、φの少なくとも１つの水素は炭素数６～１８のアリールで置換されていてもよい。

【１１０１】

【化６８２】



(φ2-1) (φ2-31) (φ2-32) (φ2-33) (φ2-34)

（＊は結合位置を示す。）

【１１０２】

Ｌは、ベンゼン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、およびトリアジンからなる群から選択される環の２価の基であり、Ｌの少なくとも１つの水素は炭素数１～４のアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキル、炭素数６～１０のアリールまたは炭素数２～１４のヘテロアリールで置換されていてもよく、

Ｙとしての＞Ｎ－ＡｒにおけるＡｒは、フェニル、ピリジニル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニル、およびトリアジニルからなる群から選択され、当該Ａｒの少なくとも１つの水素は炭素数１～４のアルキル、炭素数５～１０のシクロアルキルまたは炭素数６～１０のアリールで置換されていてもよく、

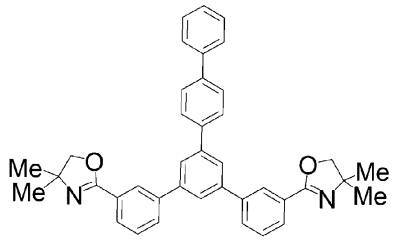
R^1～R^4はそれぞれ独立して水素、炭素数１～４のアルキルまたは炭素数５～１０のシクロアルキルであり、ただし、R^1とR^2は同一であり、R^3とR^4は同一であり、またR^1～R^4の全てが同時に水素になることはなく、そして、

ｍは２であり、アゾリン環とＬとで形成される基は同一である。

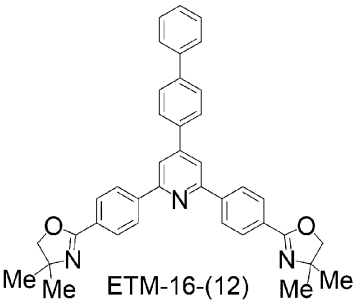
【１１０３】

アゾリン誘導体の他の具体例としては、例えば以下の化合物があげられる。なお、構造式中の「Ｍｅ」はメチルを表す。

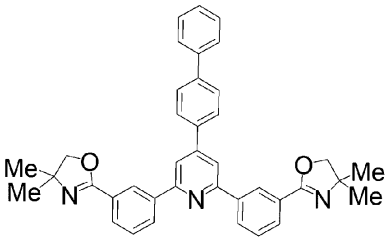
【化６８３】



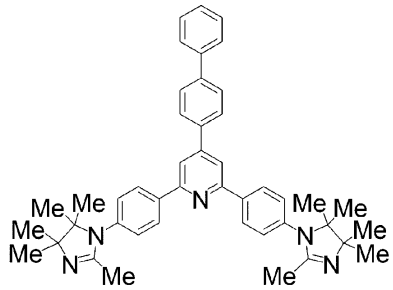
ETM-16-(11)



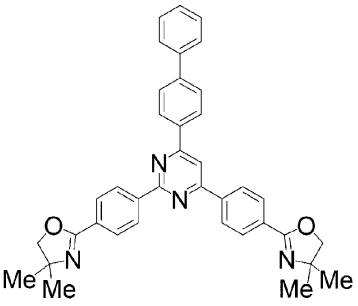
ETM-16-(12)



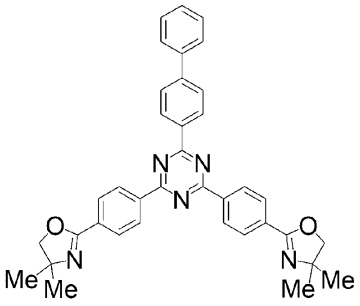
ETM-16-(13)



ETM-16-(14)



ETM-16-(15)



ETM-16-(16)

【１１０４】

このアゾリン誘導体を規定する上記各式中の、アルキル、シクロアルキル、アリールまたはヘテロアリールの詳細については、式（１）および式（２）における説明を引用できる。

【１１０５】

このアゾリン誘導体は公知の原料と公知の合成方法を用いて製造することができる。

【１１０６】
電子輸送層または電子注入層には、さらに、電子輸送層または電子注入層を形成する材料を還元できる物質を含んでいてもよい。この還元性物質は、一定の還元性を有する物質であれば、様々な物質が用いられ、例えば、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属の有機錯体、アルカリ土類金属の有機錯体および希土類金属の有機錯体からなる群から選択される少なくとも１つを好適に使用することができる。
【１１０７】
好ましい還元性物質としては、Ｎａ（仕事関数２．３６ｅＶ）、Ｋ（同２．２８ｅＶ）、Ｒｂ（同２．１６ｅＶ）またはＣｓ（同１．９５ｅＶ）などのアルカリ金属や、Ｃａ（同２．９ｅＶ）、Ｓｒ（同２．０～２．５ｅＶ）またはＢａ（同２．５２ｅＶ）などのアルカリ土類金属があげられ、仕事関数が２．９ｅＶ以下の物質が特に好ましい。これらのうち、より好ましい還元性物質は、Ｋ、ＲｂまたはＣｓのアルカリ金属であり、さらに好ましくはＲｂまたはＣｓであり、最も好ましいのはＣｓである。これらのアルカリ金属は、特に還元能力が高く、電子輸送層または電子注入層を形成する材料への比較的少量の添加により、有機ＥＬ素子における発光輝度の向上や長寿命化が図られる。また、仕事関数が２．９ｅＶ以下の還元性物質として、これら２種以上のアルカリ金属の組み合わせも好ましく、特に、Ｃｓを含んだ組み合わせ、例えば、ＣｓとＮａ、ＣｓとＫ、ＣｓとＲｂ、またはＣｓとＮａとＫとの組み合わせが好ましい。Ｃｓを含むことにより、還元能力を効率的に発揮することができ、電子輸送層または電子注入層を形成する材料への添加により、有機ＥＬ素子における発光輝度の向上や長寿命化が図られる。
【１１０８】
上述した電子注入層用材料および電子輸送層用材料は、これらに反応性置換基が置換した反応性化合物をモノマーとして高分子化させた高分子化合物、もしくはその高分子架橋体、または、主鎖型高分子と前記反応性化合物とを反応させたペンダント型高分子化合物、もしくはそのペンダント型高分子架橋体としても、電子層用材料に用いることができる。この場合の反応性置換基としては、式（１）で表される多環芳香族化合物での説明を引用できる。
このような高分子化合物および高分子架橋体の用途の詳細については後述する。
【１１０９】
＜有機電界発光素子における陰極＞
陰極１０８は、電子注入層１０７および電子輸送層１０６を介して、発光層１０５に電子を注入する役割を果たす。
【１１１０】
陰極１０８を形成する材料としては、電子を有機層に効率よく注入できる物質であれば特に限定されないが、陽極１０２を形成する材料と同様の材料を用いることができる。なかでも、スズ、インジウム、カルシウム、アルミニウム、銀、銅、ニッケル、クロム、金、白金、鉄、亜鉛、リチウム、ナトリウム、カリウム、セシウムおよびマグネシウムなどの金属またはそれらの合金（マグネシウム－銀合金、マグネシウム－インジウム合金、フッ化リチウム／アルミニウムなどのアルミニウム－リチウム合金など）などが好ましい。電子注入効率をあげて素子特性を向上させるためには、リチウム、ナトリウム、カリウム、セシウム、カルシウム、マグネシウムまたはこれら低仕事関数金属を含む合金が有効である。しかしながら、これらの低仕事関数金属は一般に大気中で不安定であることが多い。この点を改善するために、例えば、有機層に微量のリチウム、セシウムやマグネシウムをドーピングして、安定性の高い電極を使用する方法が知られている。その他のドーパントとしては、フッ化リチウム、フッ化セシウム、酸化リチウムおよび酸化セシウムのような無機塩も使用することができる。ただし、これらに限定されない。
【１１１１】
さらに、電極保護のために白金、金、銀、銅、鉄、スズ、アルミニウムおよびインジウ

ムなどの金属、またはこれら金属を用いた合金、そしてシリカ、チタニアおよび窒化ケイ素などの無機物、ポリビニルアルコール、塩化ビニル、炭化水素系高分子化合物などを積層することが、好ましい例としてあげられる。これらの電極の作製法も、抵抗加熱、電子ビーム蒸着、スパッタリング、イオンプレーティングおよびコーティングなど、導通を取ることができれば特に制限されない。

【１１１２】

＜各層で用いてもよい結着剤＞

以上の正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層および電子注入層に用いられる材料は単独で各層を形成することができるが、高分子結着剤としてポリ塩化ビニル、ポリカーボネート、ポリスチレン、ポリ（Ｎ－ビニルカルバゾール）、ポリメチルメタクリレート、ポリブチルメタクリレート、ポリエステル、ポリスルホン、ポリフェニレンオキサイド、ポリブタジエン、炭化水素樹脂、ケトン樹脂、フェノキシ樹脂、ポリアミド、エチルセルロース、酢酸ビニル樹脂、ＡＢＳ樹脂、ポリウレタン樹脂などの溶剤可溶性樹脂や、フェノール樹脂、キシレン樹脂、石油樹脂、ユリア樹脂、メラミン樹脂、不飽和ポリエステル樹脂、アルキド樹脂、エポキシ樹脂、シリコーン樹脂などの硬化性樹脂などに分散させて用いることも可能である。

【１１１３】

＜有機電界発光素子の作製方法＞

有機ＥＬ素子を構成する各層は、各層を構成すべき材料を蒸着法、抵抗加熱蒸着、電子ビーム蒸着、スパッタリング、分子積層法、印刷法、スピンコート法またはキャスト法、コーティング法などの方法で薄膜とすることにより、形成することができる。このようにして形成された各層の膜厚については特に限定はなく、材料の性質に応じて適宜設定することができるが、通常２ｎｍ～５０００ｎｍの範囲である。膜厚は通常、水晶発振式膜厚測定装置などで測定できる。蒸着法を用いて薄膜化する場合、その蒸着条件は、材料の種類、膜の目的とする結晶構造および会合構造などにより異なる。蒸着条件は一般的に、ボート加熱温度＋５０～＋４００℃、真空度10^{-6}～10^{-3}Ｐａ、蒸着速度０．０１～５０ｎｍ／秒、基板温度－１５０～＋３００℃、膜厚２ｎｍ～５μｍの範囲で適宜設定することが好ましい。

【１１１４】

このようにして得られた有機ＥＬ素子に直流電圧を印加する場合には、陽極を＋、陰極を－の極性として印加すればよく、電圧２～４０Ｖ程度を印加すると、透明または半透明の電極側（陽極または陰極、および両方）より発光が観測できる。また、この有機ＥＬ素子は、パルス電流や交流電流を印加した場合にも発光する。なお、印加する交流の波形は任意でよい。

【１１１５】

次に、有機ＥＬ素子を作製する方法の一例として、陽極／正孔注入層／正孔輸送層／ホスト材料とドーパント材料からなる発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極からなる有機ＥＬ素子の作製法について説明する。

【１１１６】

＜蒸着法＞

適当な基板上に、陽極材料の薄膜を蒸着法などにより形成させて陽極を作製した後、この陽極上に正孔注入層および正孔輸送層の薄膜を形成させる。この上にホスト材料とドーパント材料を共蒸着し薄膜を形成させて発光層とし、この発光層の上に電子輸送層、電子注入層を形成させ、さらに陰極用物質からなる薄膜を蒸着法などにより形成させて陰極とすることにより、目的の有機ＥＬ素子が得られる。なお、上述の有機ＥＬ素子の作製においては、作製順序を逆にして、陰極、電子注入層、電子輸送層、発光層、正孔輸送層、正孔注入層、陽極の順に作製することも可能である。

【１１１７】

＜湿式成膜法＞

湿式成膜法は、有機ＥＬ素子の各有機層を形成し得る低分子化合物を液状の有機層形成

用組成物として準備し、これを用いることによって実施される。この低分子化合物を溶解する適当な有機溶媒がない場合には、当該低分子化合物に反応性置換基を置換させた反応性化合物として溶解性機能を有する他のモノマーや主鎖型高分子と共に高分子化させた高分子化合物などから有機層形成用組成物を準備してもよい。

【１１１８】

湿式成膜法は、一般的には、基板に有機層形成用組成物を塗布する塗布工程および塗布された有機層形成用組成物から溶媒を取り除く乾燥工程を経ることで塗膜を形成する。上記高分子化合物が架橋性置換基を有する場合（これを架橋性高分子化合物ともいう）には、この乾燥工程によりさらに架橋して高分子架橋体が形成される。塗布工程の違いにより、スピンコーターを用いる方法をスピンコート法、スリットコーターを用いる方法をスリットコート法、版を用いる方法をグラビア、オフセット、リバースオフセット、フレキソ印刷法、インクジェットプリンタを用いる方法をインクジェット法、霧状に吹付ける方法をスプレー法と呼ぶ。

【１１１９】

一例として、図２を参考にして、バンクを有する基板にインクジェット法を用いて塗膜を形成する方法を説明する。まず、バンク（２００）は基板（１１０）上の電極（１２０）の上に設けられている。この場合、インクジェットヘッド（３００）より、バンク（２００）間にインクの液滴（３１０）を滴下し、乾燥させることで塗膜（１３０）を作製することができる。これを繰り返し、次の塗膜（１４０）、さらに発光層（１５０）まで作製し、真空蒸着法を用い電子輸送層、電子注入層および電極を成膜すれば、バンク材で発光部位が区切られた有機ＥＬ素子を作製することができる。

【１１２０】

乾燥工程には、風乾、加熱、減圧乾燥などの方法がある。乾燥工程は１回のみ行なってもよく、異なる方法や条件を用いて複数回行なってもよい。また、例えば、減圧下での焼成のように、異なる方法を併用してもよい。

【１１２１】

湿式成膜法とは溶液を用いた成膜法であり、例えば、一部の印刷法（インクジェット法）、スピンコート法またはキャスト法、コーティング法などである。湿式成膜法は真空蒸着法と異なり高価な真空蒸着装置を用いる必要が無く、大気圧下で成膜することができる。加えて、湿式成膜法は大面積化や連続生産が可能であり、製造コストの低減につながる。

【１１２２】

一方で、真空蒸着法と比較した場合には、湿式成膜法は積層化が難しい場合がある。湿式成膜法を用いて積層膜を作製する場合、上層の組成物による下層の溶解を防ぐ必要があり、溶解性を制御した組成物、下層の架橋および直交溶媒（Orthogonal solvent、互いに溶解し合わない溶媒）などが駆使される。しかしながら、それらの技術を用いても、全ての膜の塗布に湿式成膜法を用いるのは難しい場合がある。

【１１２３】

そこで、一般的には、幾つかの層だけを湿式成膜法を用い、残りを真空蒸着法で有機ＥＬ素子を作製するという方法が採用される。

【１１２４】

例えば、湿式成膜法を一部適用し有機ＥＬ素子を作製する手順を以下に示す。

（手順１）陽極の真空蒸着法による成膜
（手順２）正孔注入層用材料を含む正孔注入層形成用組成物の湿式成膜法による成膜
（手順３）正孔輸送層用材料を含む正孔輸送層形成用組成物の湿式成膜法による成膜
（手順４）ホスト材料とドーパント材料を含む発光層形成用組成物の湿式成膜法による成膜
（手順５）電子輸送層の真空蒸着法による成膜
（手順６）電子注入層の真空蒸着法による成膜
（手順７）陰極の真空蒸着法による成膜

この手順を経ることで、陽極／正孔注入層／正孔輸送層／ホスト材料とドーパント材料からなる発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極からなる有機ＥＬ素子が得られる。

もちろん、下層の発光層の溶解を防ぐ手段があったり、また上記手順とは逆に陰極側から成膜する手段などを用いることで、電子輸送層用材料や電子注入層用材料を含む層形成用組成物として準備して、それらを湿式成膜法により成膜できる。

【１１２５】

＜その他の成膜法＞

有機層形成用組成物の成膜化には、レーザー加熱描画法（ＬＩＴＩ）を用いることができる。ＬＩＴＩとは基材に付着させた化合物をレーザーで加熱蒸着する方法で、基材へ塗布される材料に有機層形成用組成物を用いることができる。

【１１２６】

＜任意の工程＞

成膜の各工程の前後に、適切な処理工程、洗浄工程および乾燥工程を適宜入れてもよい。処理工程としては、例えば、露光処理、プラズマ表面処理、超音波処理、オゾン処理、適切な溶媒を用いた洗浄処理および加熱処理等があげられる。さらには、バンクを作製する一連の工程もあげられる。

【１１２７】

バンクの作製にはフォトリソグラフィ技術を用いることができる。フォトリソグラフィの利用可能なバンク材としては、ポジ型レジスト材料およびネガ型レジスト材料を用いることができる。また、インクジェット法、グラビアオフセット印刷、リバースオフセット印刷、スクリーン印刷などのパターン可能な印刷法も用いることができる。その際には永久レジスト材料を用いることもできる。

【１１２８】

バンクに用いられる材料としては、多糖類およびその誘導体、ヒドロキシルを有するエチレン性モノマーの単独重合体および共重合体、生体高分子化合物、ポリアクリロイル化合物、ポリエステル、ポリスチレン、ポリイミド、ポリアミドイミド、ポリエーテルイミド、ポリスルフィド、ポリスルホン、ポリフェニレン、ポリフェニルエーテル、ポリウレタン、エポキシ（メタ）アクリレート、メラミン（メタ）アクリレート、ポリオレフィン、環状ポリオレフィン、アクリロニトリル－ブタジエン－スチレン共重合ポリマー（ＡＢＳ）、シリコーン樹脂、ポリ塩化ビニル、塩素化ポリエチレン、塩素化ポリプロピレン、ポリアセテート、ポリノルボルネン、合成ゴム、ポリフルオロビニリデン、ポリテトラフルオロエチレン、ポリヘキサフルオロプロピレン等のフッ化ポリマー、フルオロオレフィン－ヒドロカーボンオレフィンの共重合ポリマー、フルオロカーボンポリマーがあげられるが、それだけに限定されない。

【１１２９】

＜湿式成膜法に使用される有機層形成用組成物＞

有機層形成用組成物は、有機ＥＬ素子の各有機層を形成し得る低分子化合物、または当該低分子化合物を高分子化させた高分子化合物を有機溶媒に溶解させて得られる。例えば、発光層形成用組成物は、第１成分として少なくとも１種のドーパント材料である多環芳香族化合物（またはその高分子化合物）と、第２成分として少なくとも１種のホスト材料と、第３成分として少なくとも１種の有機溶媒とを含有する。第１成分は、該組成物から得られる発光層のドーパント成分として機能し、第２成分は発光層のホスト成分として機能する。第３成分は、組成物中の第１成分と第２成分を溶解する溶媒として機能し、塗布時には第３成分自身の制御された蒸発速度により平滑で均一な表面形状を与える。

【１１３０】

＜有機溶媒＞

有機層形成用組成物は少なくとも一種の有機溶媒を含む。成膜時に有機溶媒の蒸発速度を制御することで、成膜性および塗膜の欠陥の有無、表面粗さ、平滑性を制御および改善することができる。また、インクジェット法を用いた成膜時は、インクジェットヘッドのピンホールでのメニスカス安定性を制御し、吐出性を制御・改善することができる。加えて、膜の乾燥速度および誘導体分子の配向を制御することで、該有機層形成用組成物より得られる有機層を有する有機ＥＬ素子の電気特性、発光特性、効率、および寿命を改善す

ることができる。
【１１３１】
（１）有機溶媒の物性
少なくとも１種の有機溶媒の沸点は、１３０℃～３００℃であり、１４０℃～２７０℃がより好ましく、１５０℃～２５０℃がさらに好ましい。沸点が１３０℃より高い場合、インクジェットの吐出性の観点から好ましい。また、沸点が３００℃より低い場合、塗膜の欠陥、表面粗さ、残留溶媒および平滑性の観点から好ましい。有機溶媒は、良好なインクジェットの吐出性、成膜性、平滑性および低い残留溶媒の観点から、２種以上の有機溶媒を含む構成がより好ましい。一方で、場合によっては、運搬性などを考慮し、有機層形成用組成物中から溶媒を除去することで固形状態とした組成物であってもよい。
【１１３２】
さらに、有機溶媒が溶質の少なくとも１種に対する良溶媒（ＧＳ）と貧溶媒（ＰＳ）とを含み、良溶媒（ＧＳ）の沸点（BP_{GS}）が貧溶媒（ＰＳ）の沸点（BP_{PS}）よりも低い、構成が特に好ましい。
高沸点の貧溶媒を加えることで成膜時に低沸点の良溶媒が先に揮発し、組成物中の含有物の濃度と貧溶媒の濃度が増加し速やかな成膜が促される。これにより、欠陥が少なく、表面粗さが小さい、平滑性の高い塗膜が得られる。
【１１３３】
溶解度の差（$S_{GS}-S_{PS}$）は、１％以上であることが好ましく、３％以上であることがより好ましく、５％以上であることがさらに好ましい。沸点の差（$BP_{PS}-BP_{GS}$）は、１０℃以上であることが好ましく、３０℃以上であることがより好ましく、５０℃以上であることがさらに好ましい。
【１１３４】
有機溶媒は、成膜後に、真空、減圧、加熱などの乾燥工程により塗膜より取り除かれる。加熱を行う場合、塗布成膜性改善の観点からは、溶質の少なくとも１種のガラス転移温度（Ｔｇ）＋３０℃以下で行うことが好ましい。また、残留溶媒の削減の観点からは、溶質の少なくとも１種のガラス転移点（Ｔｇ）－３０℃以上で加熱することが好ましい。加熱温度が有機溶媒の沸点より低くても膜が薄いために、有機溶媒は十分に取り除かれる。また、異なる温度で複数回乾燥を行ってもよく、複数の乾燥方法を併用してもよい。
【１１３５】
（２）有機溶媒の具体例
有機層形成用組成物に用いられる有機溶媒としては、アルキルベンゼン系溶媒、フェニルエーテル系溶媒、アルキルエーテル系溶媒、環状ケトン系溶媒、脂肪族ケトン系溶媒、単環性ケトン系溶媒、ジエステル骨格を有する溶媒および含フッ素系溶媒などがあげられ、具体例として、ペンタノール、ヘキサノール、ヘプタノール、オクタノール、ノナノール、デカノール、ウンデカノール、ドデカノール、テトラデカノール、ヘキサン－２－オール、ヘプタン－２－オール、オクタン－２－オール、デカン－２－オール、ドデカン－２－オール、シクロヘキサノール、α－テルピネオール、β－テルピネオール、γ－テルピネオール、δ－テルピネオール、テルピネオール（混合物）、エチレングリコールモノメチルエーテルアセテート、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセテート、ジエチレングリコールジメチルエーテル、ジプロピレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールエチルメチルエーテル、ジエチレングリコールイソプロピルメチルエーテル、ジプロピレングリコールモノメチルエーテル、ジエチレングリコールジエチルエーテル、ジエチレングリコールモノメチルエーテル、ジエチレングリコールブチルメチルエーテル、トリプロピレングリコールジメチルエーテル、トリエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールモノブチルエーテル、エチレングリコールモノフェニルエーテル、トリエチレングリコールモノメチルエーテル、ジエチレングリコールジブチルエーテル、トリエチレングリコールブチルメチルエーテル、ポリエチレングリコールジメチルエーテル、テトラエチレングリコールジメチルエーテル、ｐ－キシレン、ｍ－キシレン、ｏ－キシレン、２，６－ルチジン、２－フルオロ－ｍ－キシレン、３－フルオロ－ｏ－

キシレン、２－クロロベンゾ三フッ化物、クメン、トルエン、２－クロロ－６－フルオロトルエン、２－フルオロアニソール、アニソール、２，３－ジメチルピラジン、ブロモベンゼン、４－フルオロアニソール、３－フルオロアニソール、３－トリフルオロメチルアニソール、メシチレン、１，２，４－トリメチルベンゼン、ｔ－ブチルベンゼン、２－メチルアニソール、フェネトール、ベンゾジオキソール、４－メチルアニソール、ｓ－ブチルベンゼン、３－メチルアニソール、４－フルオロ－３－メチルアニソール、シメン、１，２，３－トリメチルベンゼン、１，２－ジクロロベンゼン、２－フルオロベンゾニトリル、４－フルオロベラトロール、２，６－ジメチルアニソール、ｎ－ブチルベンゼン、３－フルオロベンゾニトリル、デカリン（デカヒドロナフタレン）、ネオペンチルベンゼン、２，５－ジメチルアニソール、２，４－ジメチルアニソール、ベンゾニトリル、３，５－ジメチルアニソール、ジフェニルエーテル、１－フルオロ－３，５－ジメトキシベンゼン、安息香酸メチル、イソペンチルベンゼン、３，４－ジメチルアニソール、ｏ－トルニトリル、ｎ－アミルベンゼン、ベラトロール、１，２，３，４－テトラヒドロナフタレン、安息香酸エチル、ｎ－ヘキシルベンゼン、安息香酸プロピル、シクロヘキシルベンゼン、１－メチルナフタレン、安息香酸ブチル、２－メチルビフェニル、３－フェノキシトルエン、２，２’－ビトリル、ドデシルベンゼン、ジペンチルベンゼン、テトラメチルベンゼン、トリメトキシベンゼン、トリメトキシトルエン、２，３－ジヒドロベンゾフラン、１－メチル－４－（プロポキシメチル）ベンゼン、１-メチル－４－（ブチルオキシメチル）ベンゼン、１－メチル－４－（ペンチルオキシメチル）ベンゼン、１－メチル－４－（ヘキシルオキシメチル）ベンゼン、１－メチル－４－（ヘプチルオキシメチル）ベンゼンベンジルブチルエーテル、ベンジルペンチルエーテル、ベンジルヘキシルエーテル、ベンジルヘプチルエーテル、ベンジルオクチルエーテルなどがあげられるが、それだけに限定されない。また、溶媒は単一で用いてもよく、混合してもよい。

【１１３６】

＜任意成分＞

有機層形成用組成物は、その性質を損なわない範囲で、任意成分を含んでいてもよい。任意成分としては、バインダーおよび界面活性剤等があげられる。

【１１３７】

（１）バインダー

有機層形成用組成物は、バインダーを含有していてもよい。バインダーは、成膜時には膜を形成するとともに、得られた膜を基板と接合する。また、該有機層形成用組成物中で他の成分を溶解および分散および結着させる役割を果たす。

【１１３８】

有機層形成用組成物に用いられるバインダーとしては、例えば、アクリル樹脂、ポリエチレンテレフタレート、エチレン－酢酸ビニル共重合体、エチレン－ビニルアルコール共重合体、アクリロニトリル－エチレン－スチレン共重合体（ＡＥＳ）樹脂、アイオノマー、塩素化ポリエーテル、ジアリルフタレート樹脂、不飽和ポリエステル樹脂、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリ塩化ビニル、ポリ塩化ビニリデン、ポリスチレン、ポリ酢酸ビニル、テフロン、アクリロニトリル－ブタジエン－スチレン共重合体（ＡＢＳ）樹脂、アクリロニトリル－スチレン共重合体（ＡＳ）樹脂、フェノール樹脂、エポキシ樹脂、メラミン樹脂、尿素樹脂、アルキド樹脂、ポリウレタン、および、上記樹脂およびポリマーの共重合体、があげられるが、それだけに限定されない。

【１１３９】

有機層形成用組成物に用いられるバインダーは、１種のみであってもよく複数種を混合して用いてもよい。

【１１４０】

（２）界面活性剤

有機層形成用組成物は、例えば、有機層形成用組成物の膜面均一性、膜表面の親溶媒性および撥液性の制御のために界面活性剤を含有してもよい。界面活性剤は、親水性基の構造からイオン性および非イオン性に分類され、さらに、疎水性基の構造からアルキル系お

よびシリコン系およびフッ素系に分類される。また、分子の構造から、分子量が比較的小さく単純な構造を有する単分子系および分子量が大きく側鎖や枝分かれを有する高分子系に分類される。また、組成から、単一系、二種以上の界面活性剤および基材を混合した混合系に分類される。該有機層形成用組成物に用いることのできる界面活性剤としては、全ての種類の界面活性剤を用いることができる。

【１１４１】

界面活性剤としては、例えば、ポリフローＮｏ．４５、ポリフローＫＬ－２４５、ポリフローＮｏ．７５、ポリフローＮｏ．９０、ポリフローＮｏ．９５（商品名、共栄社化学工業（株）製）、ディスパーベイク（Ｄｉｓｐｅｒｂｙｋ）１６１、ディスパーベイク１６２、ディスパーベイク１６３、ディスパーベイク１６４、ディスパーベイク１６６、ディスパーベイク１７０、ディスパーベイク１８０、ディスパーベイク１８１、ディスパーベイク１８２、ＢＹＫ３００、ＢＹＫ３０６、ＢＹＫ３１０、ＢＹＫ３２０、ＢＹＫ３３０、ＢＹＫ３４２、ＢＹＫ３４４、ＢＹＫ３４６（商品名、ビックケミー・ジャパン（株）製）、ＫＰ－３４１、ＫＰ－３５８、ＫＰ－３６８、ＫＦ－９６－５０ＣＳ、ＫＦ－５０－１００ＣＳ（商品名、信越化学工業（株）製）、サーフロンＳＣ－１０１、サーフロンＫＨ－４０（商品名、セイミケミカル（株）製）、フタージェント２２２Ｆ、フタージェント２５１、ＦＴＸ－２１８（商品名、（株）ネオス製）、ＥＦＴＯＰ　ＥＦ－３５１、ＥＦＴＯＰ　ＥＦ－３５２、ＥＦＴＯＰ　ＥＦ－６０１、ＥＦＴＯＰ　ＥＦ－８０１、ＥＦＴＯＰ　ＥＦ－８０２（商品名、三菱マテリアル（株）製）、メガファックＦ－４７０、メガファックＦ－４７１、メガファックＦ－４７５、メガファックＲ－０８、メガファックＦ－４７７、メガファックＦ－４７９、メガファックＦ－５５３、メガファックＦ－５５４（商品名、ＤＩＣ（株）製）、フルオロアルキルベンゼンスルホン酸塩、フルオルアルキルカルボン酸塩、フルオロアルキルポリオキシエチレンエーテル、フルオロアルキルアンモニウムヨージド、フルオロアルキルベタイン、フルオロアルキルスルホン酸塩、ジグリセリンテトラキス（フルオロアルキルポリオキシエチレンエーテル）、フルオロアルキルトリメチルアンモニウム塩、フルオロアルキルアミノスルホン酸塩、ポリオキシエチレンノニルフェニルエーテル、ポリオキシエチレンオクチルフェニルエーテル、ポリオキシエチレンアルキルエーテル、ポリオキシエチレンラウレート、ポリオキシエチレンオレエート、ポリオキシエチレンステアレート、ポリオキシエチレンラウリルアミン、ソルビタンラウレート、ソルビタンパルミテート、ソルビタンステアレート、ソルビタンオレエート、ソルビタン脂肪酸エステル、ポリオキシエチレンソルビタンラウレート、ポリオキシエチレンソルビタンパルミテート、ポリオキシエチレンソルビタンステアレート、ポリオキシエチレンソルビタンオレエート、ポリオキシエチレンナフチルエーテル、アルキルベンゼンスルホン酸塩およびアルキルジフェニルエーテルジスルホン酸塩をあげることができる。

【１１４２】

また、界面活性剤は１種で用いてもよく、２種以上を併用してもよい。

【１１４３】

＜有機層形成用組成物の組成および物性＞

有機層形成用組成物における各成分の含有量は、有機層形成用組成物中の各成分の良好な溶解性、保存安定性および成膜性、ならびに、該有機層形成用組成物から得られる塗膜の良質な膜質、また、インクジェット法を用いた場合の良好な吐出性、該組成物を用いて作製された有機層を有する有機ＥＬ素子の、良好な電気特性、発光特性、効率、寿命の観点を考慮して決定される。例えば、発光層形成用組成物の場合には、第１成分が発光層形成用組成物の全質量に対して、０．０００１質量％～２．０質量％、第２成分が発光層形成用組成物の全質量に対して、０．０９９９質量％～８．０質量％、第３成分が発光層形成用組成物の全質量に対して、９０．０質量％～９９．９質量％が好ましい。

【１１４４】

より好ましくは、第１成分が発光層形成用組成物の全質量に対して、０．００５質量％～１．０質量％、第２成分が発光層形成用組成物の全質量に対して、０．０９５質量％～

４．０質量％、第３成分が発光層形成用組成物の全質量に対して、９５．０質量％～９９．９質量％である。さらに好ましくは、第１成分が発光層形成用組成物の全質量に対して、０．０５質量％～０．５質量％、第２成分が発光層形成用組成物の全質量に対して、０．２５質量％～２．５質量％、第３成分が発光層形成用組成物の全質量に対して、９７．０質量％～９９．７質量％である。

【１１４５】

有機層形成用組成物は、上述した成分を、公知の方法で撹拌、混合、加熱、冷却、溶解、分散等を適宜選択して行うことによって製造できる。また、調製後に、ろ過、脱ガス（デガスとも言う）、イオン交換処理および不活性ガス置換・封入処理等を適宜選択して行ってもよい。

【１１４６】

有機層形成用組成物の粘度としては、高粘度である方が、良好な成膜性とインクジェット法を用いた場合の良好な吐出性が得られる。一方、低粘度である方が薄い膜を作りやすい。このことから、該有機層形成用組成物の粘度は、２５℃における粘度が０．３～３ｍＰａ・ｓであることが好ましく、１～３ｍＰａ・ｓであることがより好ましい。本発明において、粘度は円錐平板型回転粘度計（コーンプレートタイプ）を用いて測定した値である。

【１１４７】

有機層形成用組成物の表面張力としては、低い方が良好な成膜性および欠陥のない塗膜が得られる。一方、高い方が良好なインクジェット吐出性を得られる。このことから、該有機層形成用組成物の粘度は、２５℃における表面張力が２０～４０ｍＮ／ｍであることが好ましく、２０～３０ｍＮ／ｍであることがより好ましい。本発明において、表面張力は懸滴法を用いて測定した値である。

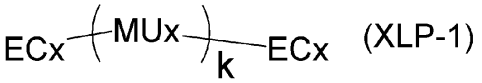
【１１４８】

＜架橋性高分子化合物：式（ＸＬＰ－１）で表される化合物＞

次に、上述した高分子化合物が架橋性置換基を有する場合について説明する。このような架橋性高分子化合物は例えば下記式（ＸＬＰ－１）で表される化合物である。

【１１４９】

【化６８４】



【１１５０】

式（ＸＬＰ－１）において、

ＭＵｘ、ＥＣｘおよびｋは式（ＳＰＨ－１）におけるＭＵ、ＥＣおよびｋと同定義であり、ただし、式（ＸＬＰ－１）で表される化合物は少なくとも１つの架橋性置換基（ＸＬＳ）を有し、好ましくは架橋性置換基を有する１価または２価の芳香族基の含有量は、分子中０．１～８０質量％である。

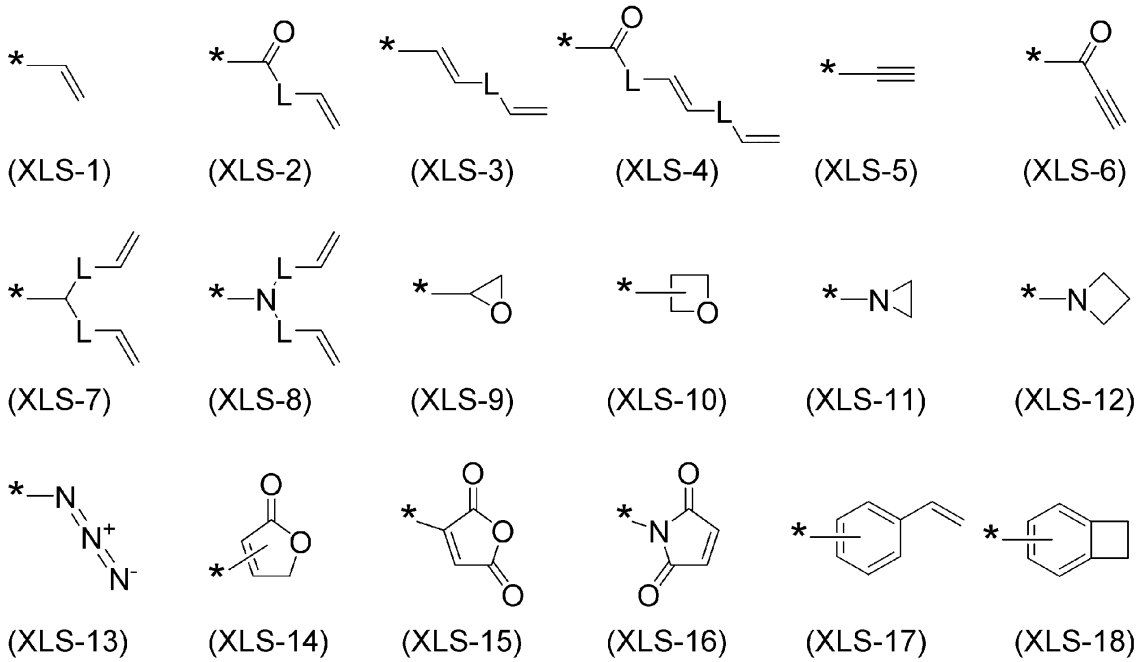
【１１５１】

架橋性置換基を有する１価または２価の芳香族化合物の含有量は、０．５～５０質量％が好ましく、１～２０質量％がより好ましい。

【１１５２】

架橋性置換基（ＸＬＳ）としては、上述した高分子化合物をさらに架橋化できる基であれば特に限定されないが、以下の構造の置換基が好ましい。各構造式中の＊は結合位置を示す。

【化６８５】



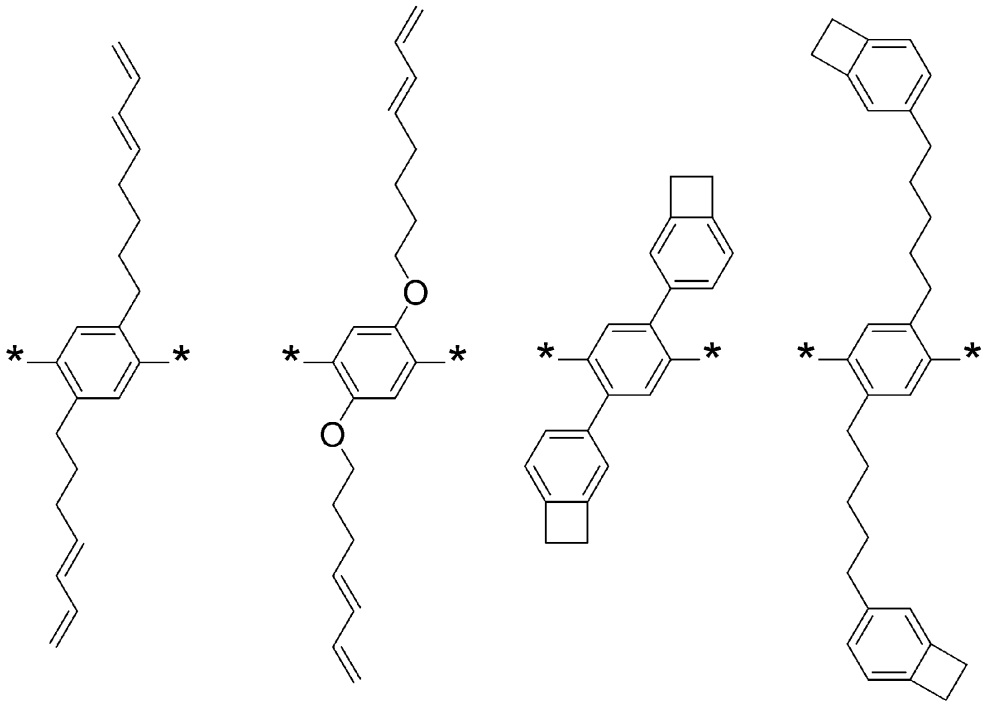
【１１５３】

Ｌは、それぞれ独立して、単結合、－Ｏ－、－Ｓ－、＞Ｃ＝Ｏ、－Ｏ－Ｃ（＝Ｏ）－、炭素数１～１２のアルキレン、炭素数１～１２のオキシアルキレンおよび炭素数１～１２のポリオキシアルキレンである。上記置換基の中でも、式（ＸＬＳ－１）、式（ＸＬＳ－２）、式（ＸＬＳ－３）、式（ＸＬＳ－９）、式（ＸＬＳ－１０）または式（ＸＬＳ－１７）で表される基が好ましく、式（ＸＬＳ－１）、式（ＸＬＳ－３）または式（ＸＬＳ－１７）で表される基がより好ましい。

【１１５４】

架橋性置換基を有する２価の芳香族化合物としては、例えば下記部分構造を有する化合物があげられる。

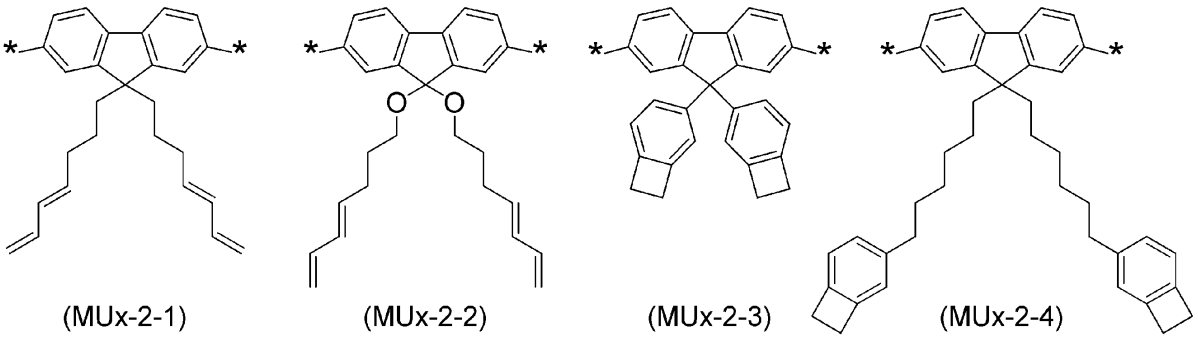
【化６８６】



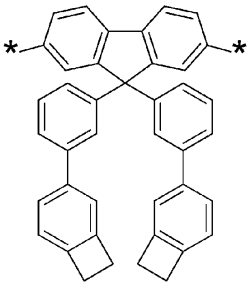
(MUx-1-1) (MUx-1-2) (MUx-1-3) (MUx-1-4)

【１１５５】

【化６８７】



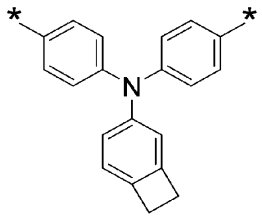
(MUx-2-1) (MUx-2-2) (MUx-2-3) (MUx-2-4)



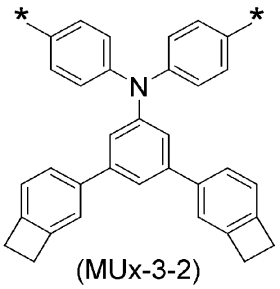
(MUx-2-5)

【１１５６】

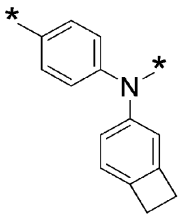
【化６８８】



(MUx-3-1)



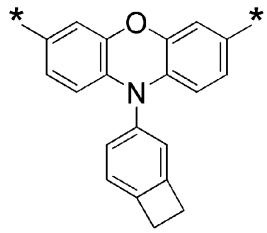
(MUx-3-2)



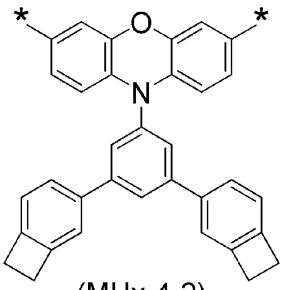
(MUx-3-3)

【１１５７】

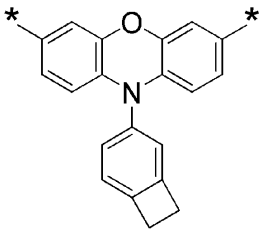
【化６８９】



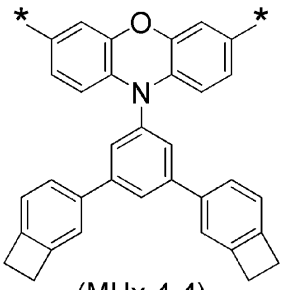
(MUx-4-1)



(MUx-4-2)



(MUx-4-3)



(MUx-4-4)

【１１５８】

＜高分子化合物および架橋性高分子化合物の製造方法＞

高分子化合物および架橋性高分子化合物の製造方法について、上述した式（ＳＰＨ－１）で表される化合物および（ＸＬＰ－１）で表される化合物を例にして説明する。これらの化合物は、公知の製造方法を適宜組み合わせて合成することができる。

【１１５９】

反応で用いられる溶媒としては、芳香族溶媒、飽和／不飽和炭化水素溶媒、アルコール溶媒、エーテル系溶媒などがあげられ、例えば、ジメトキシエタン、２－（２－メトキシエトキシ）エタン、２－（２－エトキシエトキシ）エタン等があげられる。

【１１６０】

また、反応は２相系で行ってもよい。２相系で反応させる場合は、必要に応じて、第４級アンモニウム塩等の相間移動触媒を加えてもよい。

【１１６１】

式（ＳＰＨ－１）の化合物および（ＸＬＰ－１）の化合物を製造する際、一段階で製造してもよいし、多段階を経て製造してもよい。また、原料を反応容器に全て入れてから反応を開始する一括重合法により行ってもよいし、原料を反応容器に滴下し加える滴下重合法により行ってもよいし、生成物が反応の進行に伴い沈殿する沈殿重合法により行ってもよく、これらを適宜組み合わせて合成することができる。例えば、式（ＳＰＨ－１）で表される化合物を一段階で合成する際、モノマーユニット（ＭＵ）に重合性基が結合したモノマーおよびエンドキャップユニット（ＥＣ）に重合性基が結合したモノマーを反応容器に加えた状態で反応を行うことで目的物を得る。また、式（ＳＰＨ－１）で表される化合物を多段階で合成する際、モノマーユニット（ＭＵ）に重合性基が結合したモノマーを目的の分子量まで重合した後、エンドキャップユニット（ＥＣ）に重合性基が結合したモノマーを加えて反応させることで目的物を得る。多段階で異なる種類のモノマーユニット（ＭＵ）に重合性基が結合したモノマーを加え反応を行えば、モノマーユニットの構造について濃度勾配を有するポリマーを作ることができる。また、前駆体ポリマーを調製した後、あと反応により目的物ポリマーを得ることができる。

【１１６２】

また、モノマーの重合性基を選べばポリマーの一次構造を制御することができる。例えば、合成スキームの１～３に示すように、ランダムな一次構造を有するポリマー（合成スキームの１）、規則的な一次構造を有するポリマー（合成スキームの２および３）などを合成することが可能であり、目的物に応じて適宜組み合わせて用いることができる。さらには、重合性基を３つ以上有するモノマーユニットを用いれば、ハイパーブランチポリマーやデンドリマーを合成することができる。

【１１６３】

【化６９０】

a，b＝MUまたはMUx
重合性基＝x，y（それぞれxとyが結合する）

１） 2種のモノマー（x-a-y）および（x-b-y）を用いて合成されるポリマー



２） 2種のモノマー（x-a-x）および（y-b-y）を用いて合成されるポリマー



３） 2種のモノマー（x-a-y）および（y-b-y）を用いて合成されるポリマー



【１１６４】

本発明で用いることのできるモノマーとしては、特開２０１０－１８９６３０号公報、国際公開第２０１２／０８６６７１号、国際公開第２０１３／１９１０８８号、国際公開第２００２／０４５１８４号、国際公開第２０１１／０４９２４１号、国際公開第２０１３／１４６８０６号、国際公開第２００５／０４９５４６号、国際公開第２０１５／１４５８７１号、特開２０１０－２１５８８６号、特開２００８－１０６２４１号公報、特開２０１０－２１５８８６号公報、国際公開第２０１６／０３１６３９号、特開２０１１－１７４０６２号公報、国際公開第２０１６／０３１６３９号、国際公開第２０１６／０３１６３９号、国際公開第２００２／０４５１８４号に記載の方法に準じて合成することができる。

【１１６５】

また、具体的なポリマー合成手順については、特開２０１２－０３６３８８号公報、国際公開第２０１５／００８８５１号、特開２０１２－３６３８１号公報、特開２０１２－１４４７２２号公報、国際公開第２０１５／１９４４４８号、国際公開第２０１３／１４６８０６号、国際公開第２０１５／１４５８７１号、国際公開第２０１６／０３１６３９号、国際公開第２０１６／１２５５６０号、国際公開第２０１６／０３１６３９号、国際公開第２０１６／０３１６３９号、国際公開第２０１６／１２５５６０号、国際公開第２０１５／１４５８７１号、国際公開第２０１１／０４９２４１号、特開２０１２－１４４７２２号公報に記載の方法に準じて合成することができる。

【１１６６】

＜有機電界発光素子の応用例＞

また、本発明は、有機ＥＬ素子を備えた表示装置または有機ＥＬ素子を備えた照明装置

などにも応用することができる。
有機ＥＬ素子を備えた表示装置または照明装置は、本実施形態にかかる有機ＥＬ素子と公知の駆動装置とを接続するなど公知の方法によって製造することができ、直流駆動、パルス駆動、交流駆動など公知の駆動方法を適宜用いて駆動することができる。
【１１６７】
表示装置としては、例えば、カラーフラットパネルディスプレイなどのパネルディスプレイ、フレキシブルカラー有機電界発光（ＥＬ）ディスプレイなどのフレキシブルディスプレイなどがあげられる（例えば、特開平10-335066号公報、特開2003-321546号公報、特開2004-281086号公報など参照）。また、ディスプレイの表示方式としては、例えば、マトリクスおよび／またはセグメント方式などがあげられる。なお、マトリクス表示とセグメント表示は同じパネルの中に共存していてもよい。
【１１６８】
マトリクスでは、表示のための画素が格子状やモザイク状など二次元的に配置されており、画素の集合で文字や画像を表示する。画素の形状やサイズは用途によって決まる。例えば、パソコン、モニター、テレビの画像および文字表示には、通常一辺が３００μｍ以下の四角形の画素が用いられ、また、表示パネルのような大型ディスプレイの場合は、一辺がｍｍオーダーの画素を用いることになる。モノクロ表示の場合は、同じ色の画素を配列すればよいが、カラー表示の場合には、赤、緑、青の画素を並べて表示させる。この場合、典型的にはデルタタイプとストライプタイプがある。そして、このマトリクスの駆動方法としては、線順次駆動方法やアクティブマトリックスのどちらでもよい。線順次駆動の方が構造が簡単であるという利点があるが、動作特性を考慮した場合、アクティブマトリックスの方が優れる場合があるので、これも用途によって使い分けることが必要である。
【１１６９】
セグメント方式（タイプ）では、予め決められた情報を表示するようにパターンを形成し、決められた領域を発光させることになる。例えば、デジタル時計や温度計における時刻や温度表示、オーディオ機器や電磁調理器などの動作状態表示および自動車のパネル表示などがあげられる。
【１１７０】
照明装置としては、例えば、室内照明などの照明装置、液晶表示装置のバックライトなどがあげられる（例えば、特開２００３－２５７６２１号公報、特開２００３－２７７７４１号公報、特開２００４－１１９２１１号公報など参照）。バックライトは、主に自発光しない表示装置の視認性を向上させる目的に使用され、液晶表示装置、時計、オーディオ装置、自動車パネル、表示板および標識などに使用される。特に、液晶表示装置、中でも薄型化が課題となっているパソコン用途のバックライトとしては、従来方式が蛍光灯や導光板からなっているため薄型化が困難であることを考えると、本実施形態に係る発光素子を用いたバックライトは薄型で軽量が特徴になる。
【１１７１】
<u>３－２．その他の有機デバイス</u>
本発明に係る多環芳香族化合物は、上述した有機電界発光素子の他に、有機電界効果トランジスタまたは有機薄膜太陽電池などの作製に用いることができる。
【１１７２】
有機電界効果トランジスタは、電圧入力によって発生させた電界により電流を制御するトランジスタのことであり、ソース電極とドレイン電極の他にゲート電極が設けられている。ゲート電極に電圧を印加すると電界が生じ、ソース電極とドレイン電極間を流れる電子（またはホール）の流れを任意にせき止めて電流を制御することができるトランジスタである。電界効果トランジスタは、単なるトランジスタ（バイポーラトランジスタ）に比べて小型化が容易であり、集積回路などを構成する素子としてよく用いられている。
【１１７３】
有機電界効果トランジスタの構造は、通常、本発明に係る多環芳香族化合物を用いて形成される有機半導体活性層に接してソース電極およびドレイン電極が設けられており、さ

らに有機半導体活性層に接した絶縁層（誘電体層）を挟んでゲート電極が設けられていればよい。その素子構造としては、例えば以下の構造があげられる。
（１）基板／ゲート電極／絶縁体層／ソース電極・ドレイン電極／有機半導体活性層
（２）基板／ゲート電極／絶縁体層／有機半導体活性層／ソース電極・ドレイン電極
（３）基板／有機半導体活性層／ソース電極・ドレイン電極／絶縁体層／ゲート電極
（４）基板／ソース電極・ドレイン電極／有機半導体活性層／絶縁体層／ゲート電極
　このように構成された有機電界効果トランジスタは、アクティブマトリックス駆動方式の液晶ディスプレイや有機エレクトロルミネッセンスディスプレイの画素駆動スイッチング素子などとして適用できる。

【１１７４】

　有機薄膜太陽電池は、ガラスなどの透明基板上にＩＴＯなどの陽極、ホール輸送層、光電変換層、電子輸送層、陰極が積層された構造を有する。光電変換層は陽極側にｐ型半導体層を有し、陰極側にｎ型半導体層を有している。本発明に係る多環芳香族化合物は、その物性に応じて、ホール輸送層、ｐ型半導体層、ｎ型半導体層、電子輸送層の材料として用いることが可能である。本発明に係る多環芳香族化合物は、有機薄膜太陽電池においてホール輸送材料や電子輸送材料として機能しうる。有機薄膜太陽電池は、上記の他にホールブロック層、電子ブロック層、電子注入層、ホール注入層、平滑化層などを適宜備えていてもよい。有機薄膜太陽電池には、有機薄膜太陽電池に用いられる既知の材料を適宜選択して組み合わせて用いることができる。

【実施例】

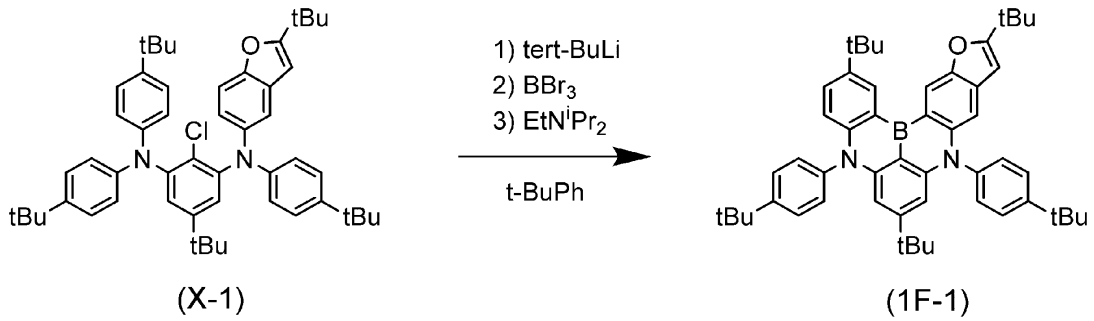
【１１７５】

　以下、実施例により本発明をさらに具体的に説明していくが、本発明はこれらに限定されるものではない。まず、多環芳香族化合物の合成例について、以下に説明する。

【１１７６】

　合成例（１）
　化合物（１Ｆ－１）の合成
　化合物（Ｘ－１）（７．７ｇ）およびｔｅｒｔ－ブチルベンゼン（５０ｍｌ）の入ったフラスコに、窒素雰囲気下、－３０℃で、１．６Ｍのｔｅｒｔ－ブチルリチウムペンタン溶液（１２．３ｍｌ）を加えた。滴下終了後、６０℃まで昇温して２時間撹拌した後、ｔｅｒｔ－ブチルベンゼンより低沸点の成分を減圧留去した。－３０℃まで冷却して三臭化ホウ素（５ｇ）を加え、室温まで昇温して０．５時間撹拌した。その後、再び０℃まで冷却してＮ，Ｎ－ジイソプロピルエチルアミン（３．５ｍｌ）を加え、発熱が収まるまで室温で撹拌した後、１２０℃まで昇温して３時間加熱撹拌した。反応液を室温まで冷却し、氷浴で冷やした酢酸ナトリウム水溶液、次いでヘプタンを加えて分液した。次いで、シリカゲルショートパスカラム（添加液：トルエン）で精製した後、溶媒を減圧留去し得られた固体をトルエンに溶かし、ヘプタンを加えて再沈殿させ、式（１Ｆ－１）で表される化合物を得られる。
　ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝７４０

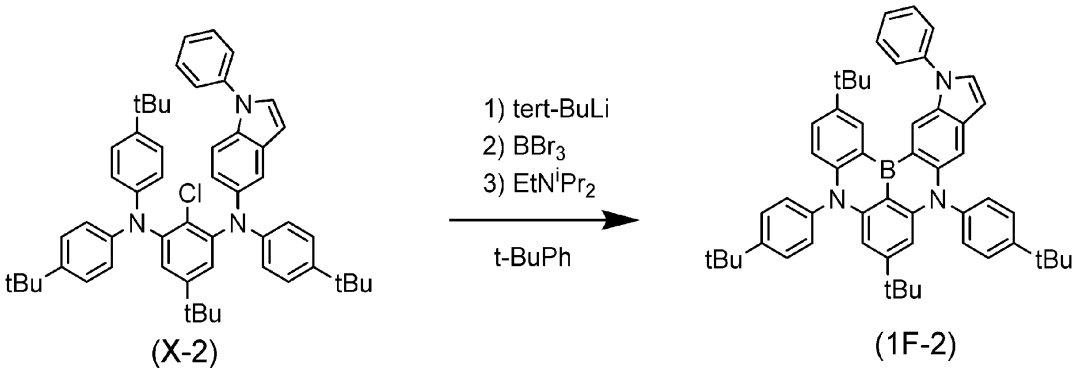
【化６９１】



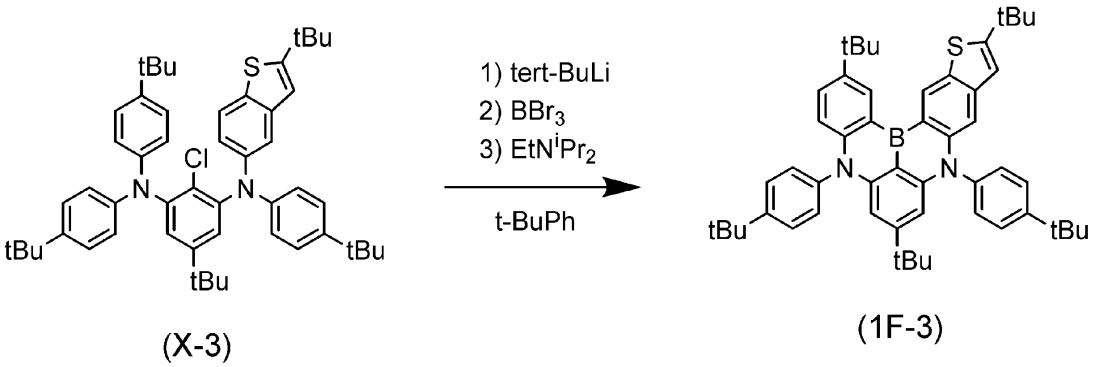
(X-1)　　(1F-1)

【１１７７】

合成例（２）
化合物（１Ｆ－２）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２）を用いて式（１Ｆ－２）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７５９
【化６９２】

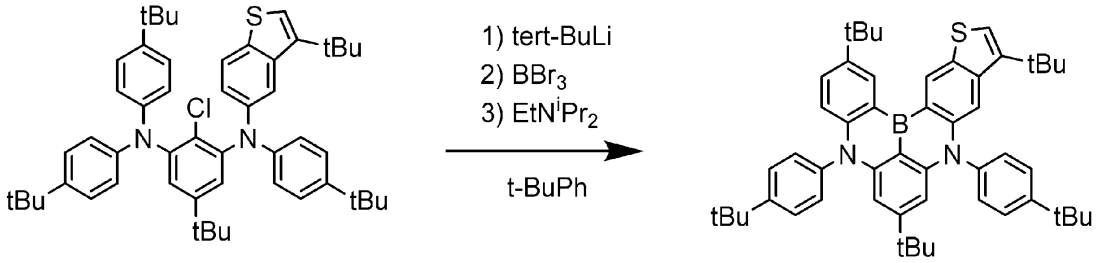


【１１７８】
合成例（３）
化合物（１Ｆ－３）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３）を用いて式（１Ｆ－３）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７５６
【化６９３】



【１１７９】
合成例（４）
化合物（１Ｆ－４）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４）を用いて式（１Ｆ－４）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７５６

【化６９４】



(X-4) (1F-4)

【１１８０】

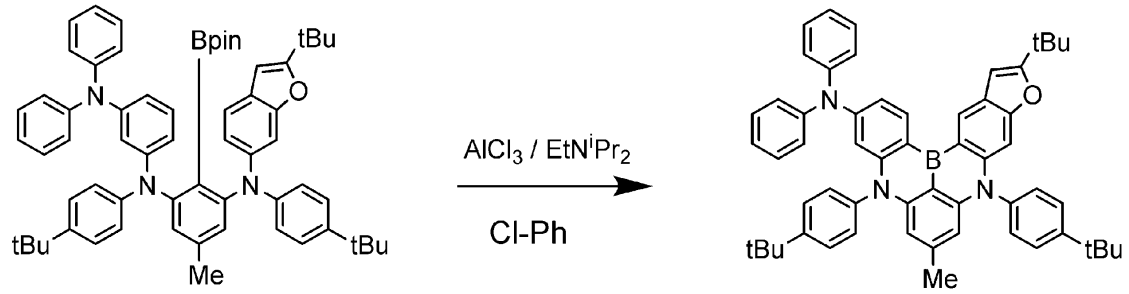
合成例（５）

化合物（１Ｆ－５）の合成

化合物（Ｘ－５）（５．５ｇ）、塩化アルミニウム（５．０ｇ）、Ｎ，Ｎ－ジイソプロピルエチルアミン（ＥｔＮ^{i}Ｐｒ$_{2}$）（６．５ｍＬ）およびクロロベンゼン（２０ｍｌ）の入ったフラスコを、窒素雰囲気下、１２０℃で１時間撹拌した。室温まで冷却した反応混合液を氷水（２００ｍｌ）に注ぎ、トルエンを加え有機層を抽出した。有機層の溶媒を減圧留去し得られた固体をクロロホルムに溶解させ、シリカゲルショートパスカラム（溶離液：トルエン）に通した。溶媒を減圧留去して得られた粗精製物をシクロペンチルメチルエーテルおよびメタノールを用いて再沈殿させることで、式（１Ｆ－５）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝８０９

【化６９５】



(X-5) (1F-5)

【１１８１】

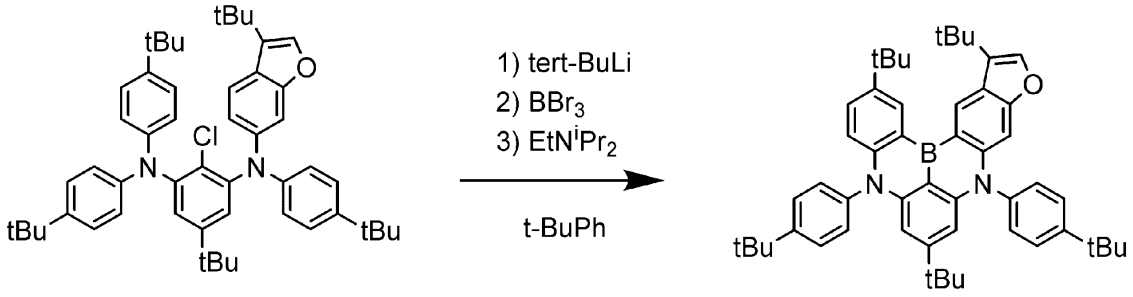
合成例（６）

化合物（１Ｆ－６）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６）を用いて式（１Ｆ－６）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝７４０

【化６９６】



(X-6) (1F-6)

【１１８２】

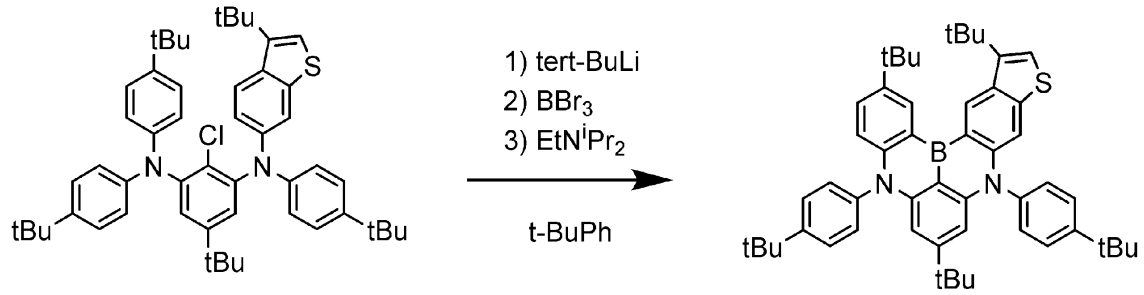
合成例（７）

化合物（１Ｆ－７）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７）を用いて式（１Ｆ－７）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７５６

【化６９７】



(X-7) (1F-7)

【１１８３】

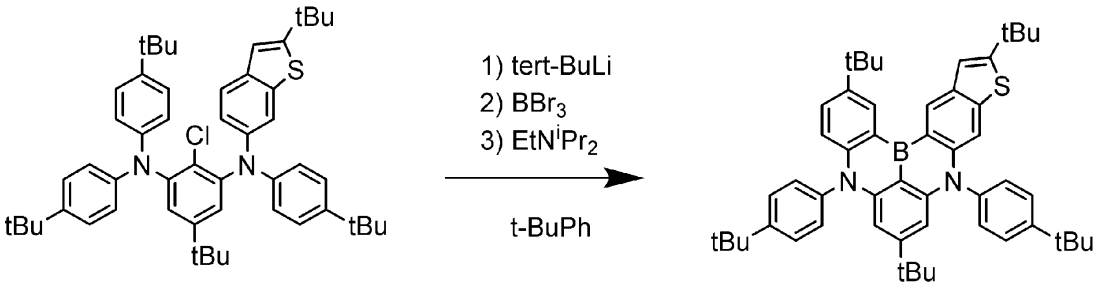
合成例（８）

化合物（１Ｆ－８）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－８）を用いて式（１Ｆ－８）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７５６

【化６９８】



(X-8) (1F-8)

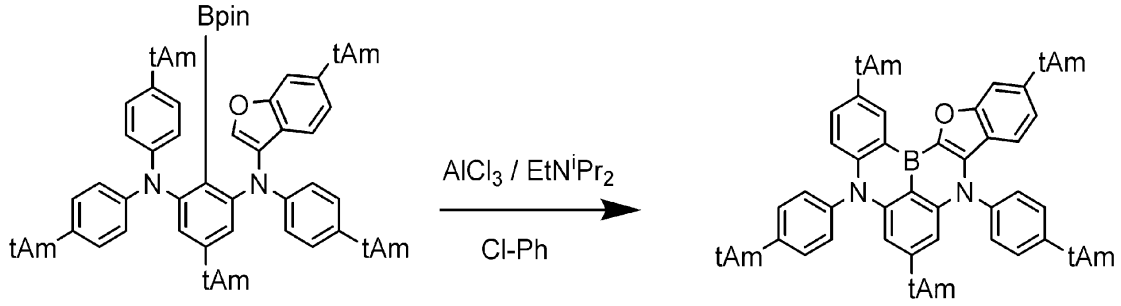
【１１８４】

合成例（９）

化合物（１Ｆ－９）の合成

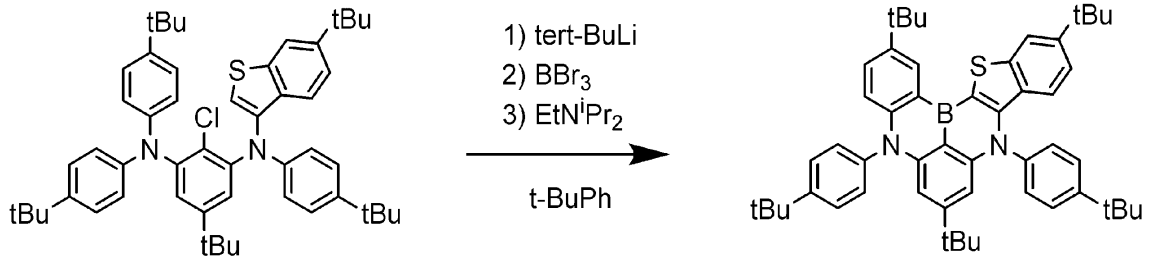
合成例（５）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９）を用いて式（１Ｆ－９）で表さ

れる化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝８１１
【化６９９】



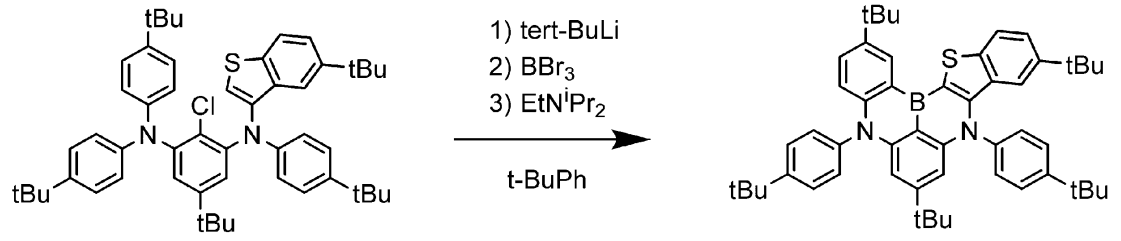
(X-9) (1F-9)

【１１８５】
合成例（１０）
化合物（１Ｆ－１０）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１０）を用いて式（１Ｆ－１０）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝７５６
【化７００】



(X-10) (1F-10)

【１１８６】
合成例（１１）
化合物（１Ｆ－１１）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１）を用いて式（１Ｆ－１１）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝７５６
【化７０１】



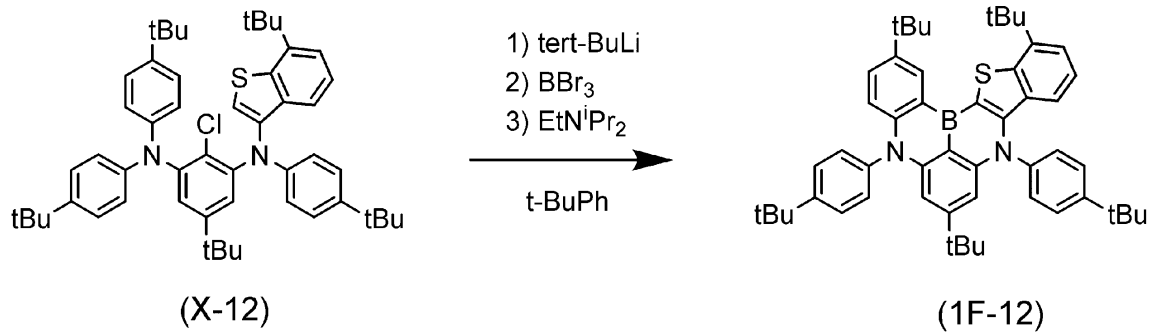
(X-11) (1F-11)

【１１８７】
合成例（１２）
化合物（１Ｆ－１２）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１２）を用いて式（１Ｆ－１２）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７５６

【化７０２】



(X-12) (1F-12)

【１１８８】

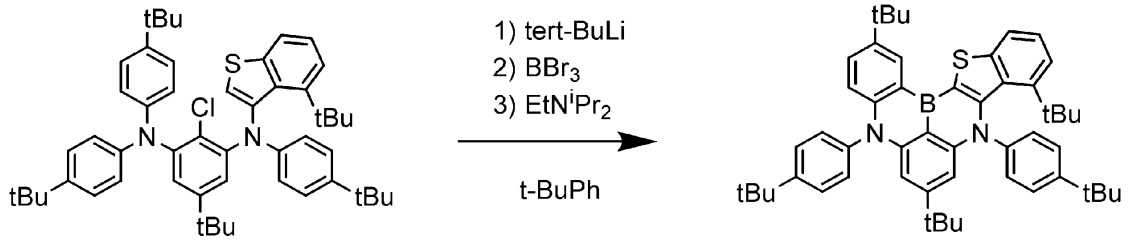
合成例（１３）

化合物（１Ｆ－１３）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１３）を用いて式（１Ｆ－１３）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７５６

【化７０３】



(X-13) (1F-13)

【１１８９】

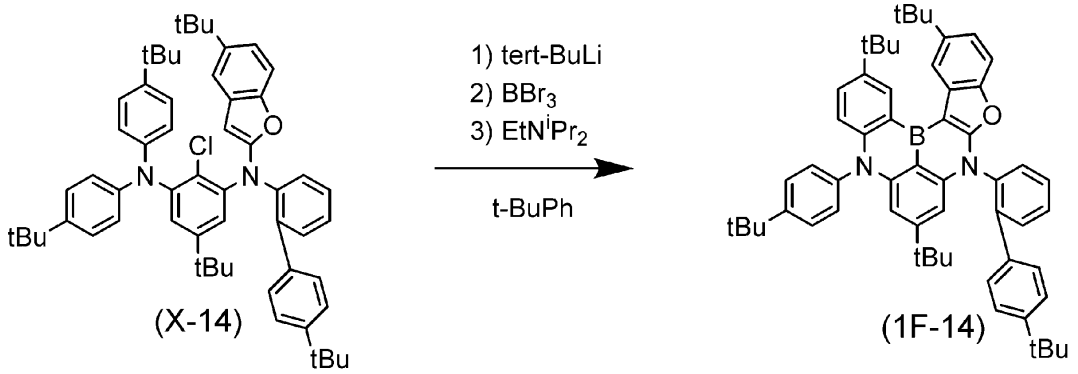
合成例（１４）

化合物（１Ｆ－１４）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１４）を用いて式（１Ｆ－１４）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝８１７

【化７０４】

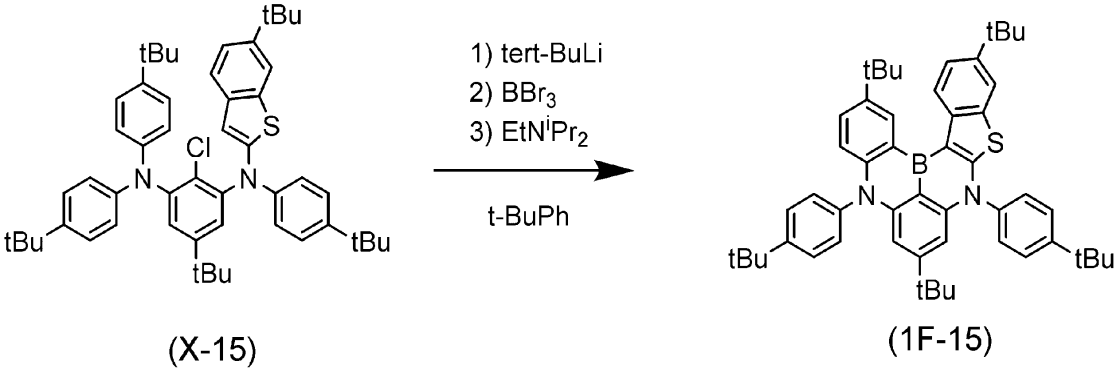


(X-14) (1F-14)

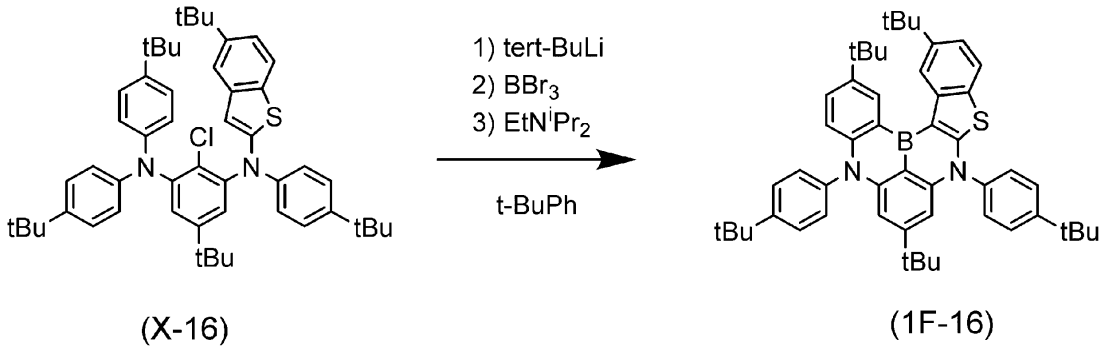
【１１９０】

合成例（１５）

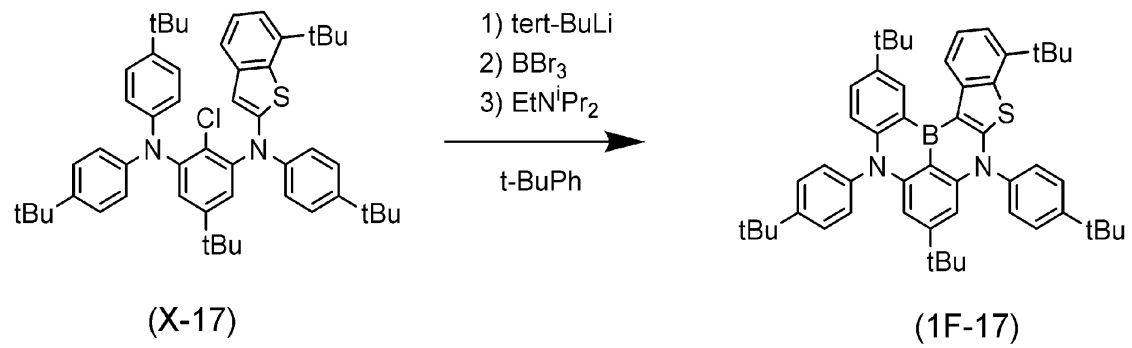
化合物（１Ｆ－１５）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１５）を用いて式（１Ｆ－１５）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７５６
【化７０５】



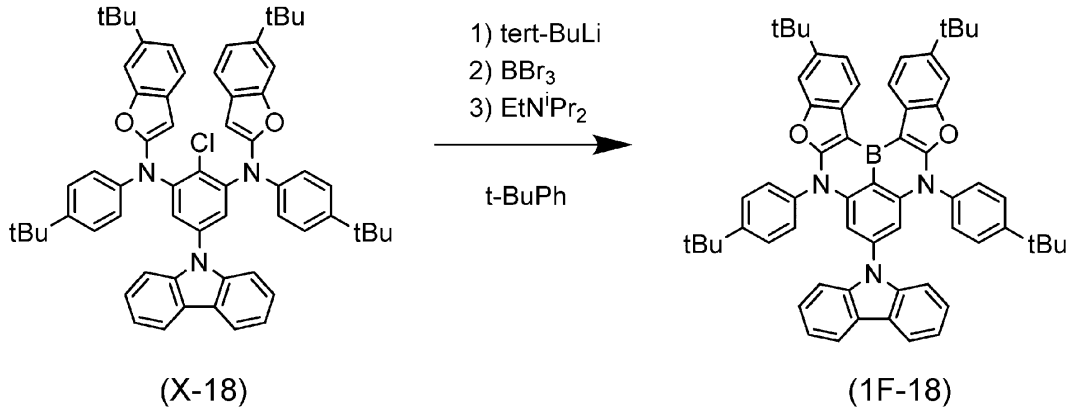
【１１９１】
合成例（１６）
化合物（１Ｆ－１６）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１６）を用いて式（１Ｆ－１６）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７５６
【化７０６】



【１１９２】
合成例（１７）
化合物（１Ｆ－１７）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１７）を用いて式（１Ｆ－１７）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７５６
【化７０７】

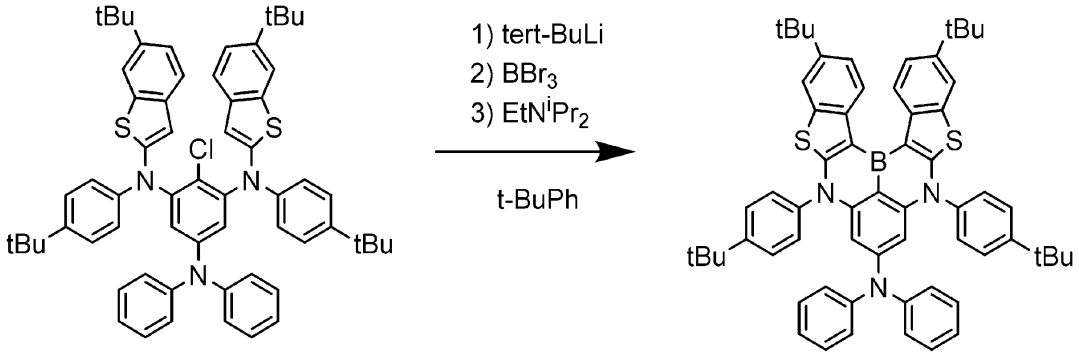


【１１９３】
合成例（１８）
化合物（１Ｆ－１８）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１８）を用いて式（１Ｆ－１８）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝８８９
【化７０８】



(X-18) (1F-18)

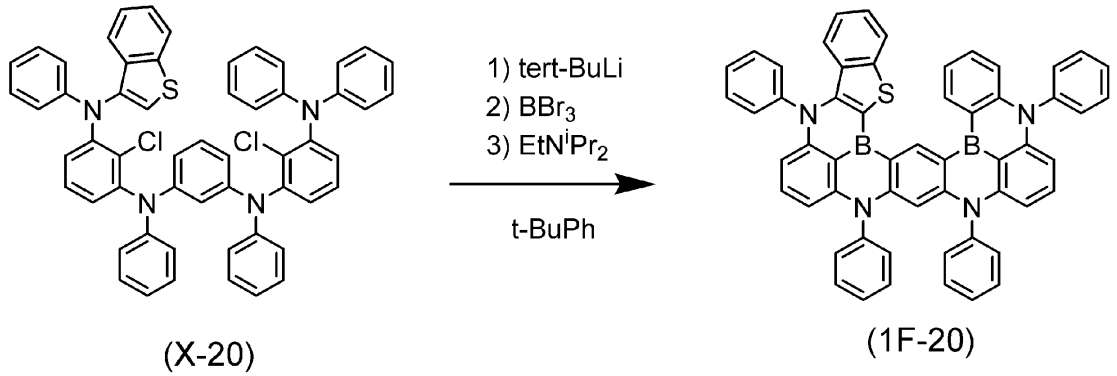
【１１９４】
合成例（１９）
化合物（１Ｆ－１９）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１９）を用いて式（１Ｆ－１９）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝９２３
【化７０９】



(X-19) (1F-19)

【１１９５】
合成例（２０）
化合物（１Ｆ－２０）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２０）を用いて式（１Ｆ－２０）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝８１８

【化７１０】



(X-20) (1F-20)

【１１９６】

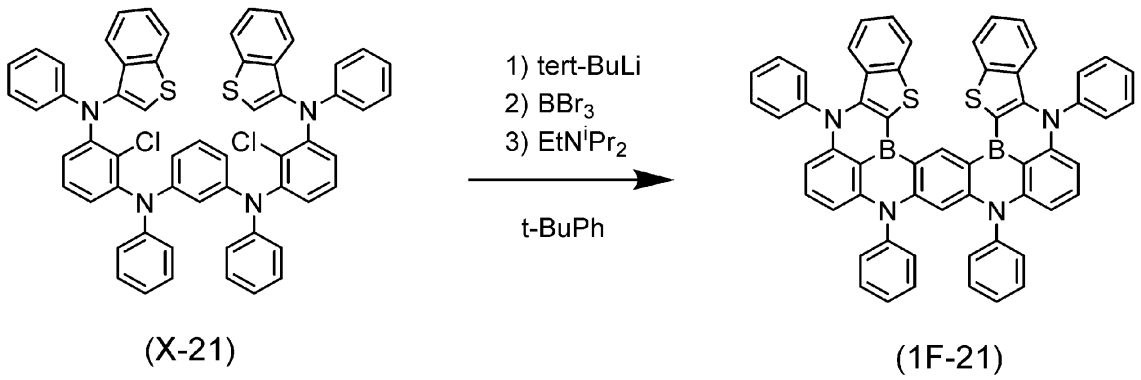
合成例（２１）

化合物（１Ｆ－２１）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２１）を用いて式（１Ｆ－２１）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝８７４

【化７１１】



(X-21) (1F-21)

【１１９７】

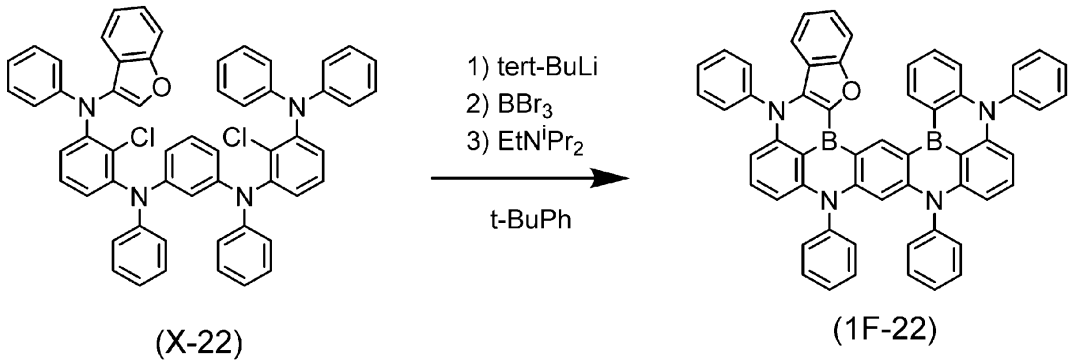
合成例（２２）

化合物（１Ｆ－２２）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２２）を用いて式（１Ｆ－２２）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝８０２

【化７１２】



(X-22) (1F-22)

【１１９８】

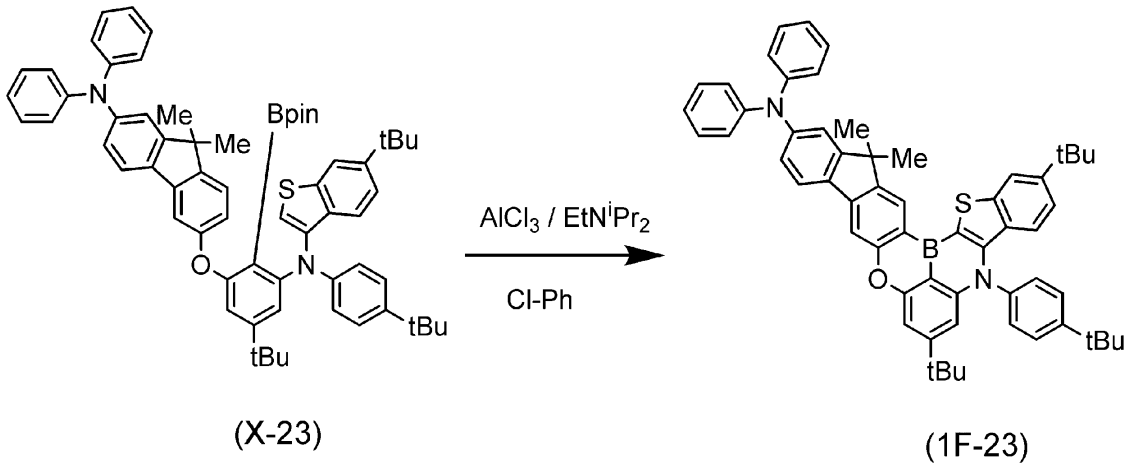
合成例（２３）

化合物（１Ｆ－２３）の合成

合成例（５）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２３）を用いて式（１Ｆ－２３）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝８５２

【化７１３】



(X-23) (1F-23)

【１１９９】

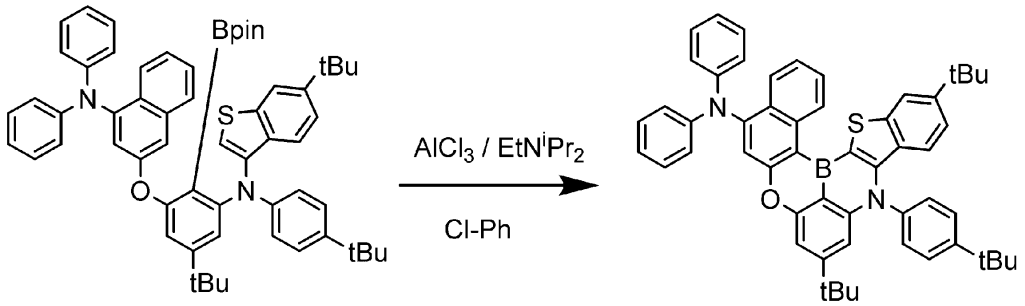
合成例（２４）

化合物（１Ｆ－２４）の合成

合成例（５）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２４）を用いて式（１Ｆ－２４）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７８６

【化７１４】



(X-24) (1F-24)

【１２００】

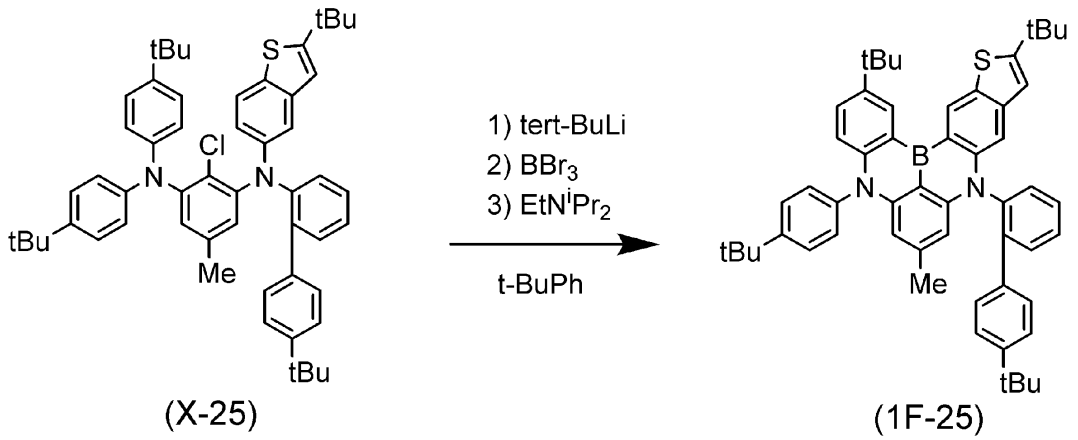
合成例（２５）

化合物（１Ｆ－２５）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２５）を用いて式（１Ｆ－２５）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７９０

【化７１５】



(X-25) (1F-25)

【１２０１】

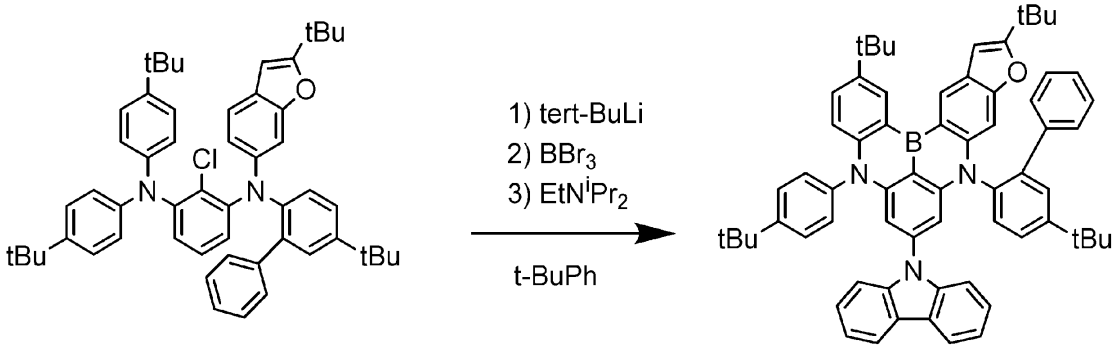
合成例（２６）

化合物（１Ｆ－２６）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２６）を用いて式（１Ｆ－２６）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝９５３

【化７１６】



(X-26) (1F-26)

【１２０２】

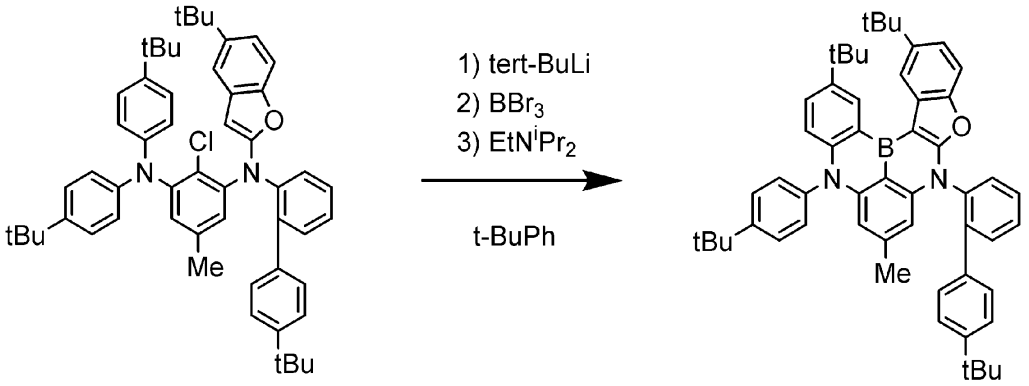
合成例（２７）

化合物（１Ｆ－２７）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２７）を用いて式（１Ｆ－２７）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７７４

【化７１７】



(X-27) (1F-27)

【１２０３】

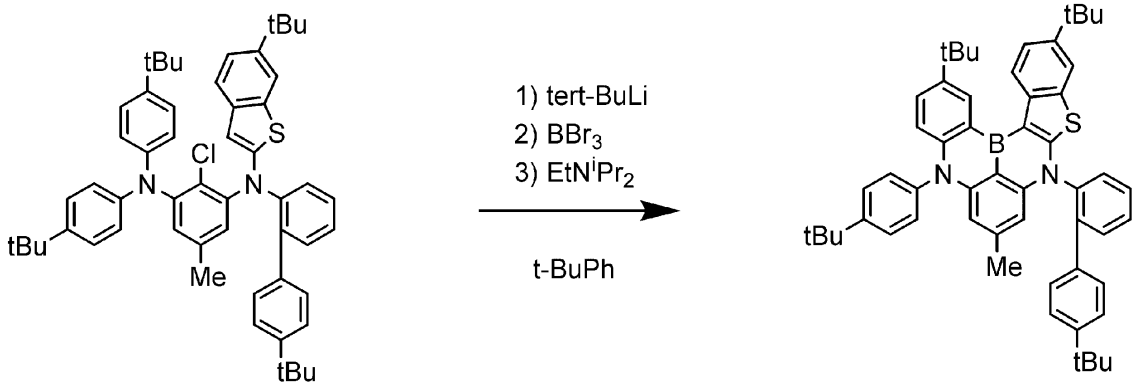
合成例（２８）

化合物（１Ｆ－２８）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２８）を用いて式（１Ｆ－２８）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７９０

【化７１８】



(X-28) (1F-28)

【１２０４】

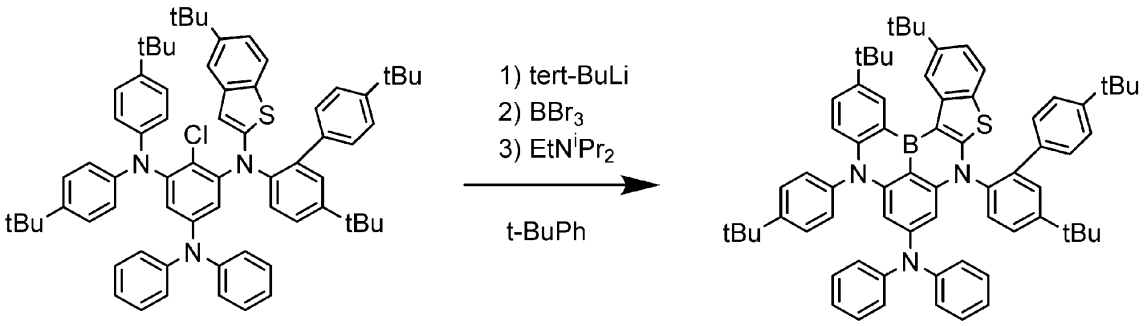
合成例（２９）

化合物（１Ｆ－２９）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－２９）を用いて式（１Ｆ－２９）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝１０００

【化７１９】



(X-29) (1F-29)

【１２０５】

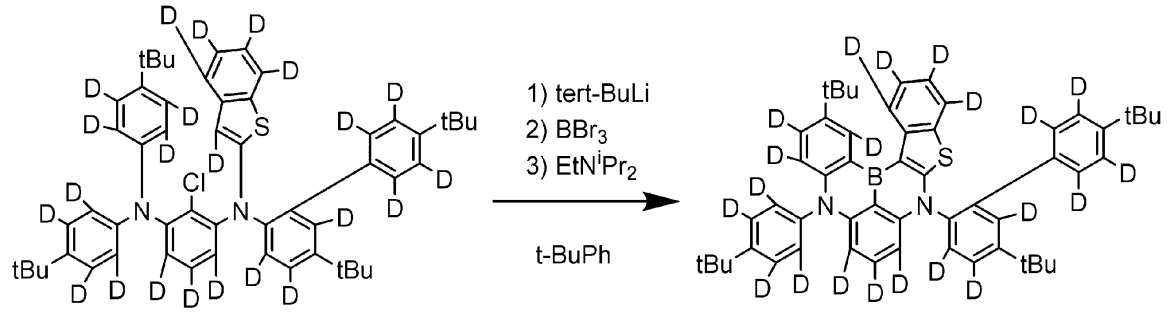
合成例（３０）

化合物（１Ｆ－３０）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３０）を用いて式（１Ｆ－３０）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７９８

【化７２０】



(X-30) (1F-30)

【１２０６】

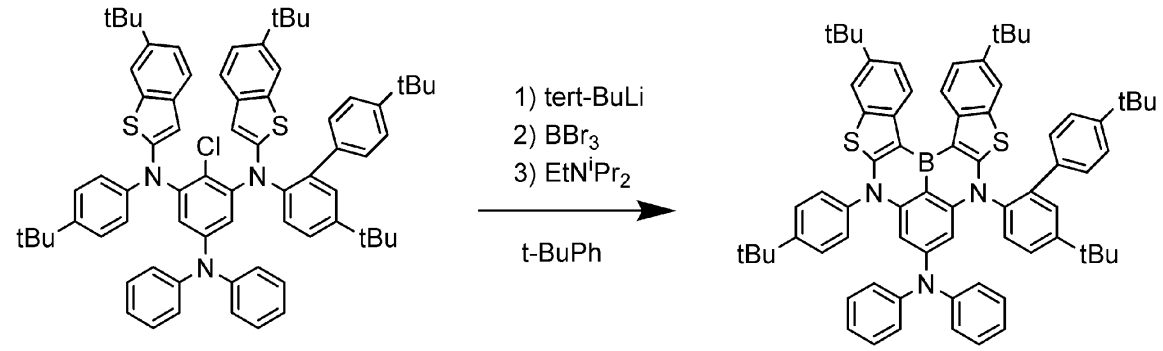
合成例（３１）

化合物（１Ｆ－３１）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３１）を用いて式（１Ｆ－３１）で表される化合物が得られる。

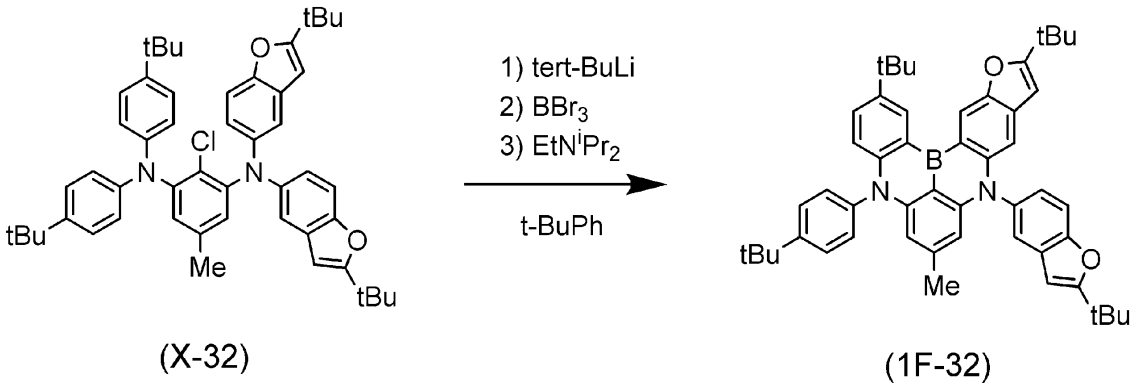
ＥＩ－ＭＳ：m/z＝１０５６

【化７２１】



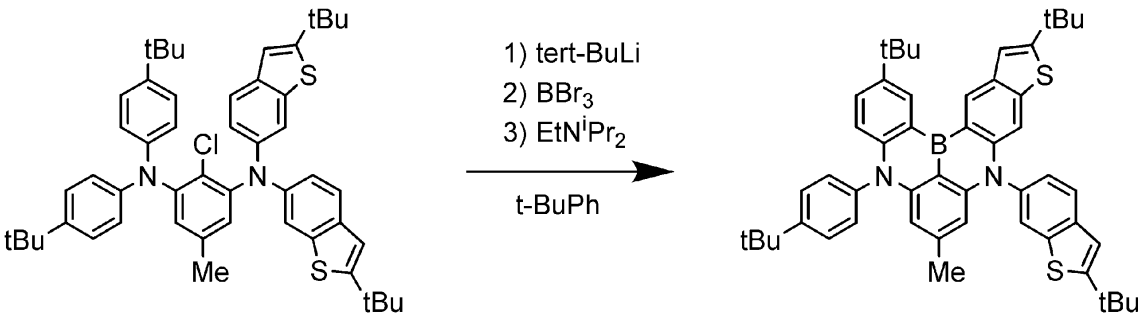
(X-31) (1F-31)

【１２０７】
合成例（３２）
化合物（１Ｆ－３２）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３２）を用いて式（１Ｆ－３２）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝７３８
【化７２２】



(X-32) (1F-32)

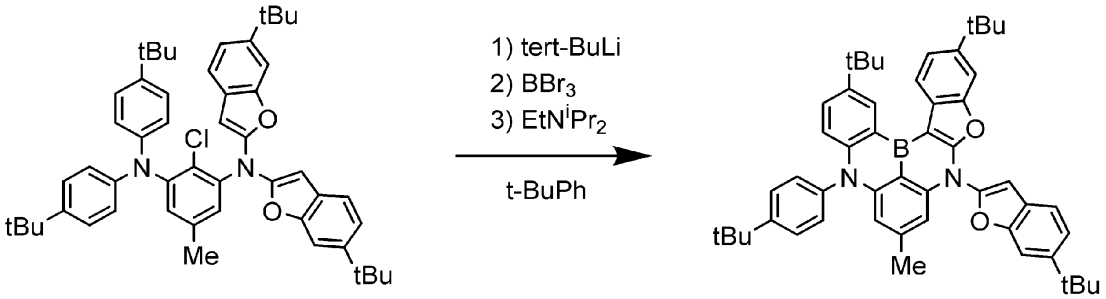
【１２０８】
合成例（３３）
化合物（１Ｆ－３３）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３３）を用いて式（１Ｆ－３３）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝７７０
【化７２３】



(X-33) (1F-33)

【１２０９】
合成例（３４）
化合物（１Ｆ－３４）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３４）を用いて式（１Ｆ－３４）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝７３８

【化７２４】



(X-34) (1F-34)

【１２１０】

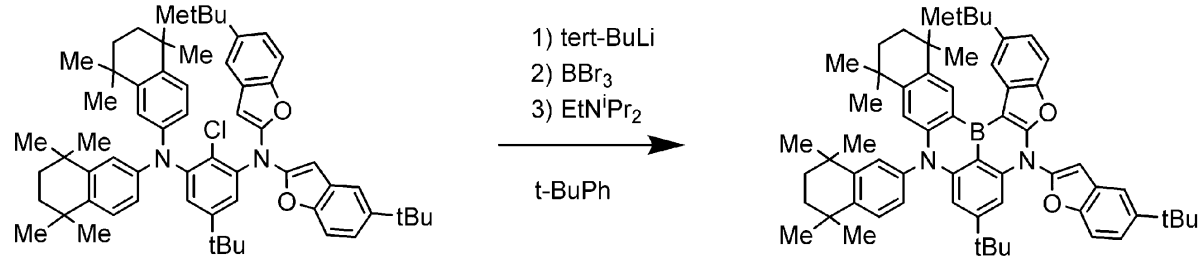
合成例（３５）

化合物（１Ｆ－３５）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３５）を用いて式（１Ｆ－３５）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝８８９

【化７２５】



(X-35) (1F-35)

【１２１１】

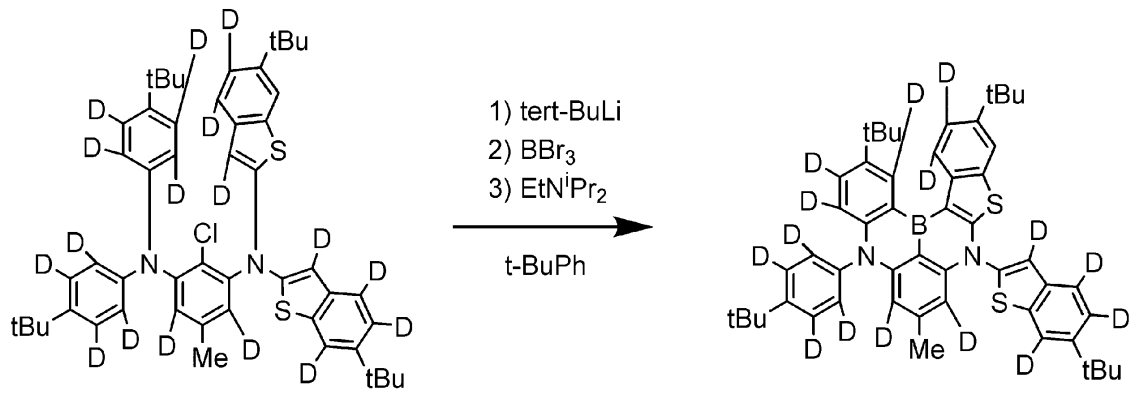
合成例（３６）

化合物（１Ｆ－３６）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３６）を用いて式（１Ｆ－３６）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７８５

【化７２６】

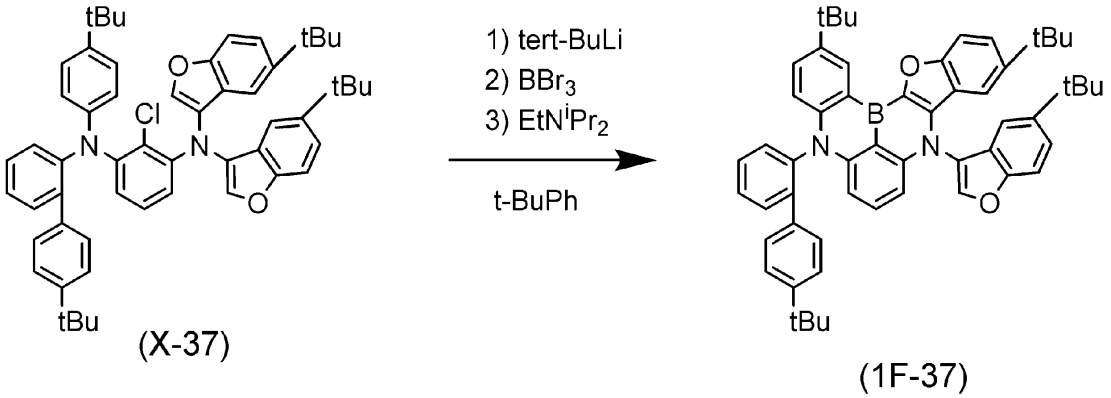


(X-36) (1F-36)

【１２１２】

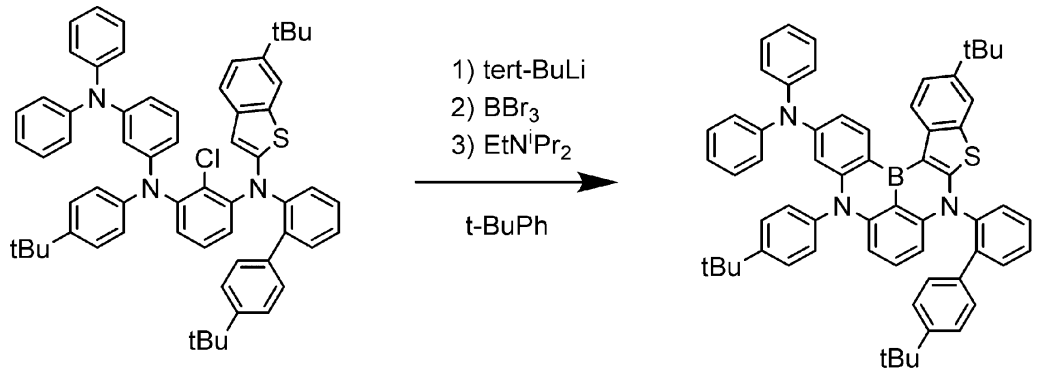
合成例（３７）

化合物（１Ｆ－３７）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３７）を用いて式（１Ｆ－３７）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝８００
【化７２７】



(X-37)　　(1F-37)

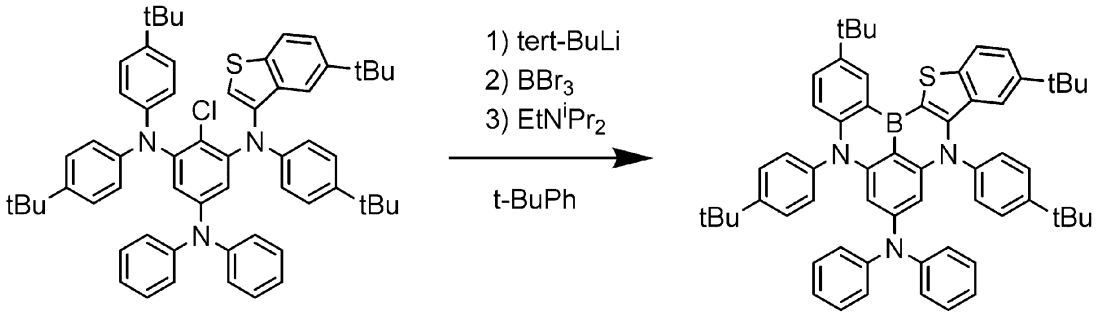
【１２１３】
合成例（３８）
化合物（１Ｆ－３８）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３８）を用いて式（１Ｆ－３８）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝８８７
【化７２８】



(X-38)　　(1F-38)

【１２１４】
合成例（３９）
化合物（１Ｆ－３９）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－３９）を用いて式（１Ｆ－３９）で表される化合物が得られる。
ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝８６７
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ＝１．１（ｓ，９Ｈ），１．３（ｓ，９Ｈ），１．４（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），５．６（ｓ，１Ｈ），５．７（ｓ，１Ｈ），６．５（ｄ，１Ｈ），６．６（ｄ，１Ｈ），６．９（ｔ，２Ｈ），７．０（ｄ，４Ｈ），７．１（ｔ，４Ｈ），７．１（ｄ，２Ｈ），７．３（ｄ，２Ｈ），７．４（ｄｄ，１Ｈ），７．４（ｄｄ，１Ｈ），７．５（ｄ，２Ｈ），７．５（ｄ，２Ｈ），７．９（ｄ，１Ｈ），８．７（ｄ，１Ｈ）．
【１２１５】

【化７２９】



(X-39) (1F-39)

【１２１６】

合成例（４０）

化合物（１Ｆ－４０）の合成

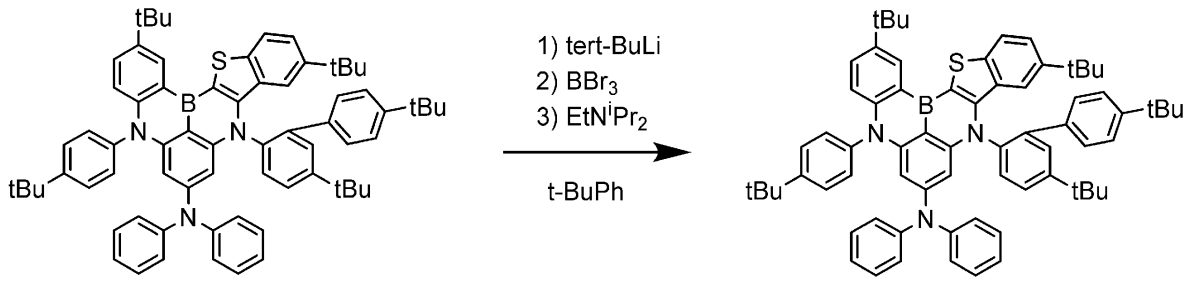
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４０）を用いて式（１Ｆ－４０）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝１０００

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．０（ｓ，９Ｈ），１．２（ｓ，９Ｈ），１．３（ｓ，９Ｈ），１．４（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），５．７（ｓ，１Ｈ），５．７（ｓ，１Ｈ），６．５（ｓ，１Ｈ），６．７（ｄ，１Ｈ），６．９（ｍ，６Ｈ），７．１（ｍ，９Ｈ），７．３（ｍ，２Ｈ），７．４（ｄｄ，１Ｈ），７．４（ｍ，２Ｈ），７．５（ｍ，３Ｈ），７．９（ｄ，１Ｈ），８．７（ｄ，１Ｈ）．

【１２１７】

【化７３０】



(X-40) (1F-40)

【１２１８】

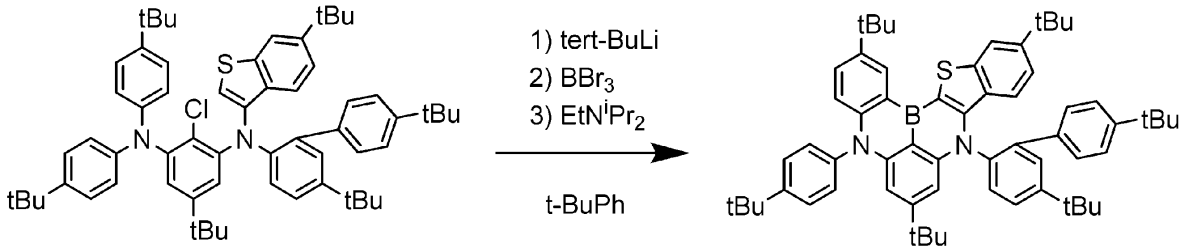
合成例（４１）

化合物（１Ｆ－４１）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４１）を用いて式（１Ｆ－４１）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝８８９

【化７３１】



(X-41) (1F-41)

【１２１９】

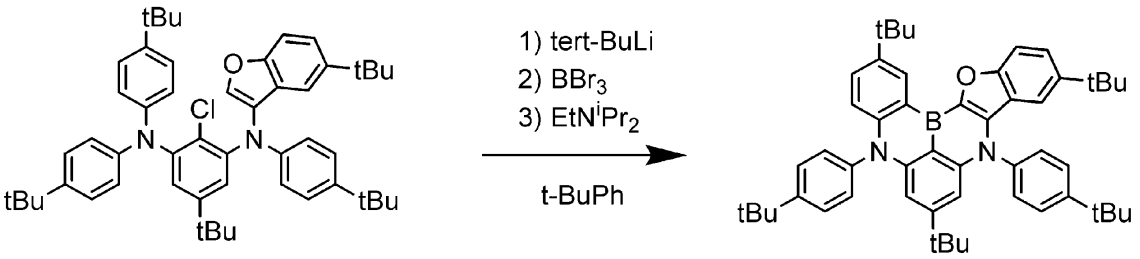
合成例（４２）

化合物（１Ｆ－４２）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４２）を用いて式（１Ｆ－４２）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝７４０

【化７３２】



(X-42) (1F-42)

【１２２０】

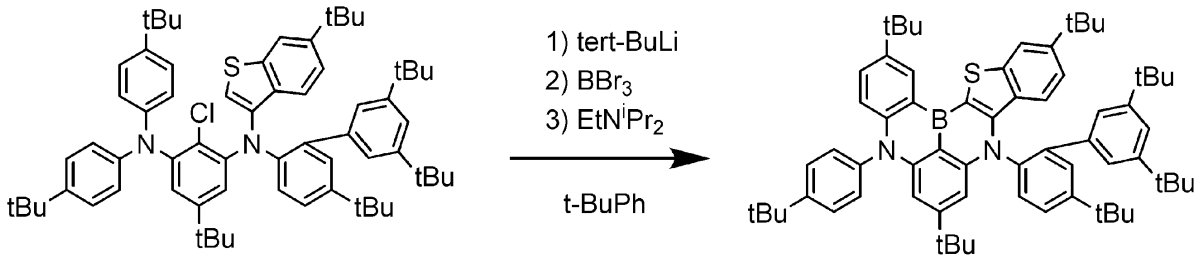
合成例（４３）

化合物（１Ｆ－４３）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４３）を用いて式（１Ｆ－４３）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝９４５

【化７３３】



(X-43) (1F-43)

【１２２１】

合成例（４４）

化合物（１Ｆ－４４）の合成

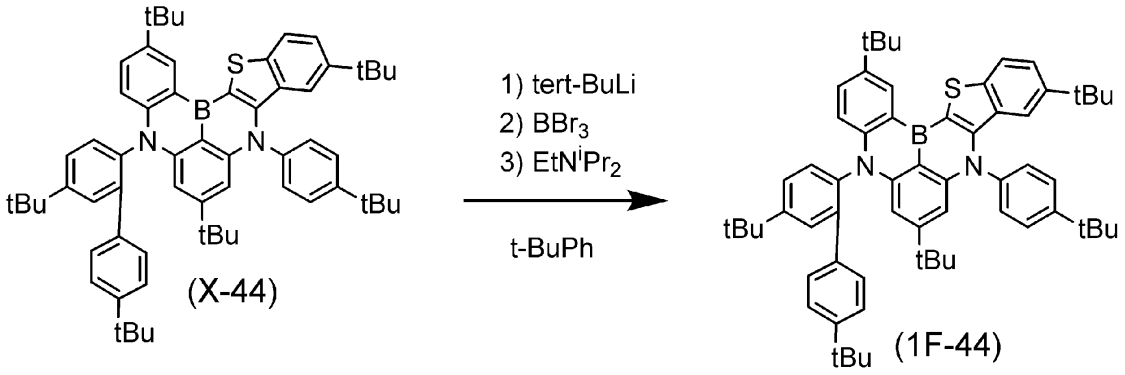
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４４）を用いて式（１Ｆ－４４）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝８８９

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：　δ＝１．０（ｓ，９Ｈ），１．１（ｓ，９Ｈ），１．３（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５　（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），６．２（ｄ，２Ｈ），６．６（ｓ，１Ｈ），６．７（ｓ，１Ｈ），７．０（ｄ，２Ｈ），７．２（ｍ，３Ｈ），７．４（ｄｄ，１Ｈ），７．４～７．５（ｍ，３Ｈ），７．６（ｄｄ，１Ｈ），７．７（ｄ，１Ｈ），７．７（ｄ，２Ｈ），７．９（ｄ，１Ｈ），８．７（ｄ，１Ｈ）．

【１２２２】

【化７３４】



【１２２３】

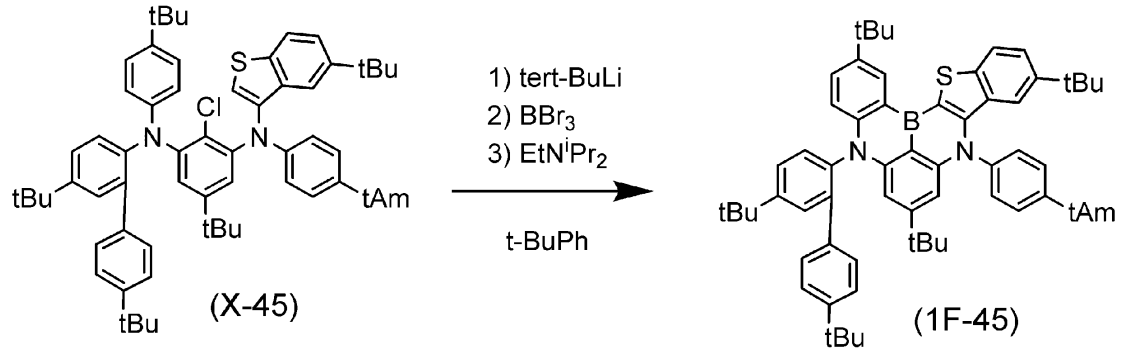
合成例（４５）

化合物（１Ｆ－４５）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４５）を用いて式（１Ｆ－４５）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝９０３

【化７３５】



【１２２４】

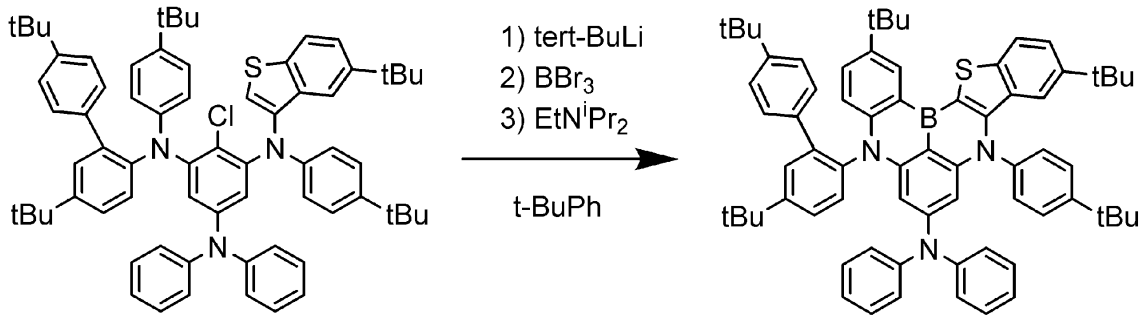
合成例（４６）

化合物（１Ｆ－４６）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４６）を用いて式（１Ｆ－４６）で表される化合物が得られる。

ＥＩ－ＭＳ：ｍ/ｚ＝１０００

【化７３６】



(X-46) (1F-46)

【１２２５】

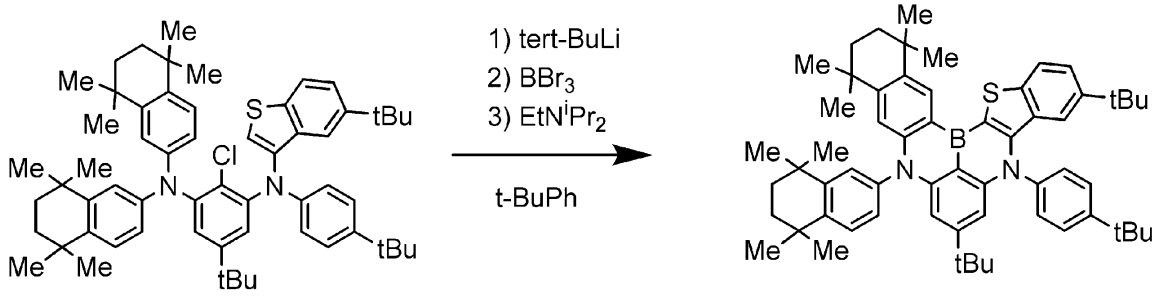
合成例（４７）

化合物（１Ｆ－４７）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４７）を用いて式（１Ｆ－４７）で表される化合物が得られる

ＥＩ－ＭＳ：m/z＝８６５

【化７３７】



(X-47) (1F-47)

【１２２６】

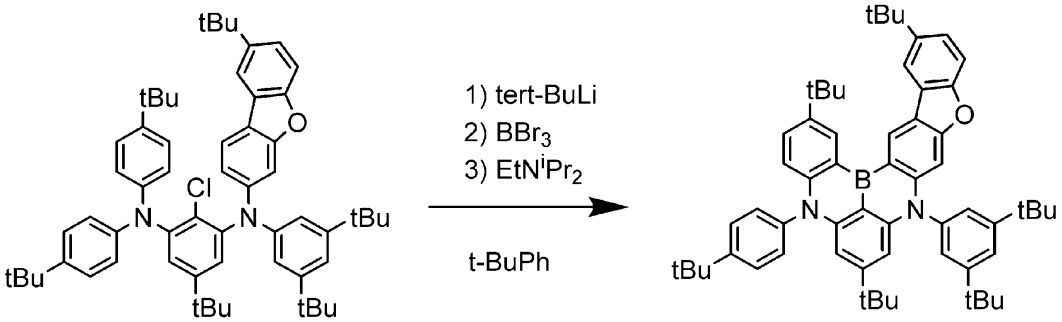
合成例（４８）

化合物（１Ｆ－４８）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４８）を用いて式（１Ｆ－４８）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ ｍ／ｚ ８４６．５６７１（ｃａｌｃｄ $C_{60}H_{71}BN_2O$，８４６．５６５９）．

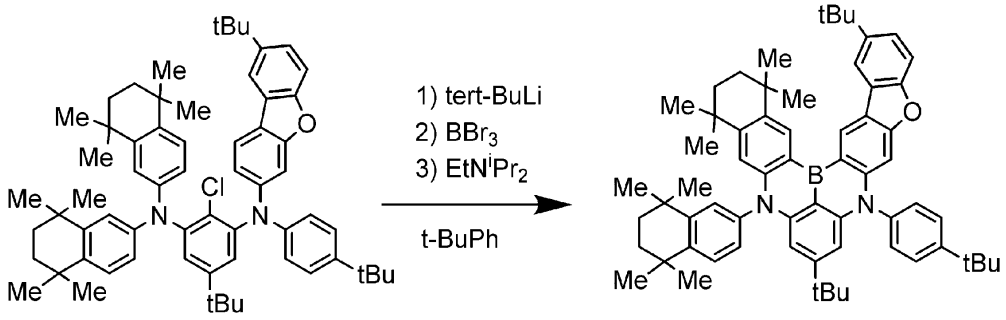
【化７３８】



(X-48) (1F-48)

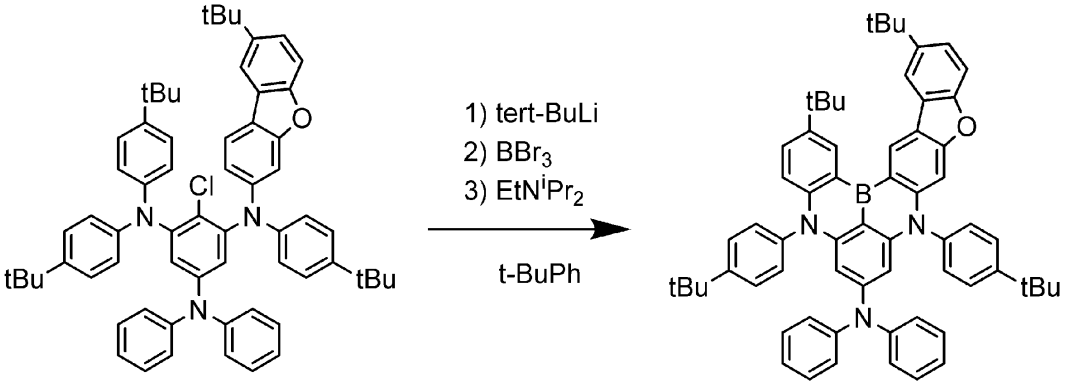
【１２２７】

合成例（４９）
化合物（１Ｆ－４９）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－４９）を用いて式（１Ｆ－４９）で表される化合物が得られる。
ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　８９８．５９５５（ｃａｌｃｄ　$C_{64}H_{75}BN_2O$，８９８．５９７２）．
【化７３９】



(X-49)　　(1F-49)

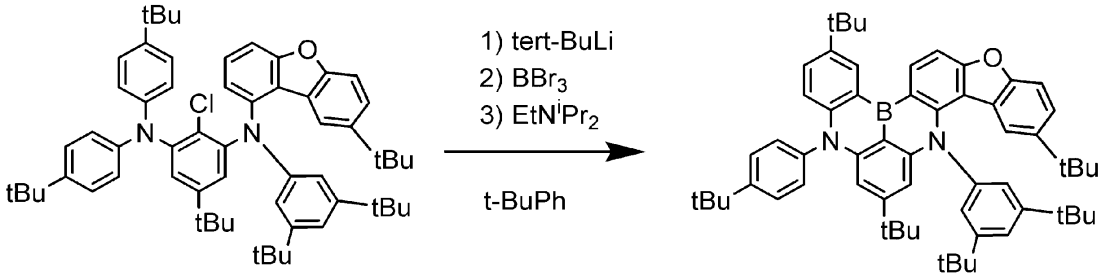
【１２２８】
合成例（５０）
化合物（１Ｆ－５０）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－５０）を用いて式（１Ｆ－５０）で表される化合物が得られる。
ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９０１．５１６３（ｃａｌｃｄ　$C_{64}H_{64}BN_3O$，９０１．５１４２）．
【化７４０】



(X-50)　　(1F-50)

【１２２９】
合成例（５１）
化合物（１Ｆ－５１）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－５１）を用いて式（１Ｆ－５１）で表される化合物が得られる。
ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　８４６．５６６８（ｃａｌｃｄ　$C_{60}H_{71}BN_2O$，８４６．５６５９）．

【化７４１】



(X-51) (1F-51)

【１２３０】

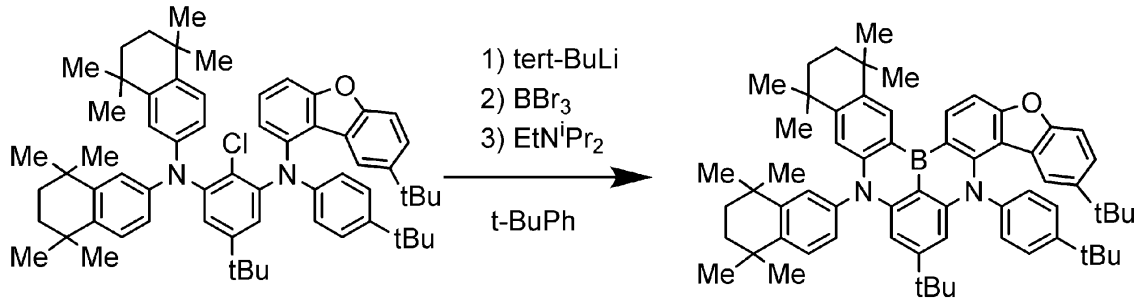
合成例（５２）

化合物（１Ｆ－５２）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－５２）を用いて式（１Ｆ－５２）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　８９８．５９８８（ｃａｌｃｄ　$C_{64}H_{75}BN_2O$，８９８．５９７２）．

【化７４２】



(X-52) (1F-52)

【１２３１】

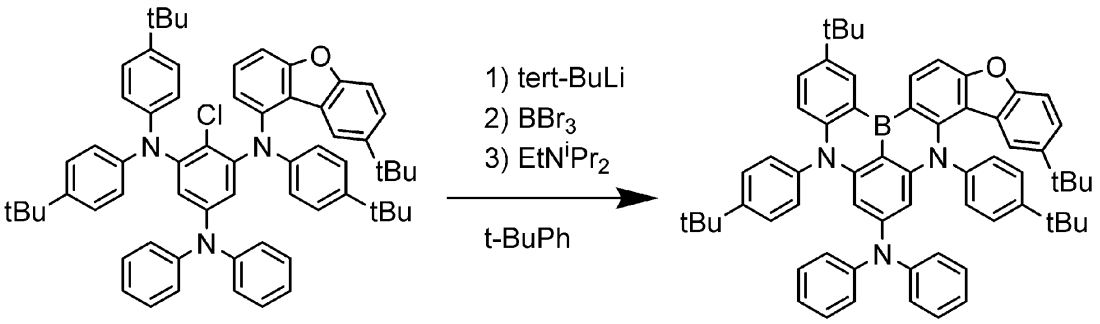
合成例（５３）

化合物（１Ｆ－５３）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－５３）を用いて式（１Ｆ－５３）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９０１．５１６１（ｃａｌｃｄ　$C_{64}H_{64}BN_3O$，９０１．５１４２）．

【化７４３】



(X-53) (1F-53)

【１２３２】

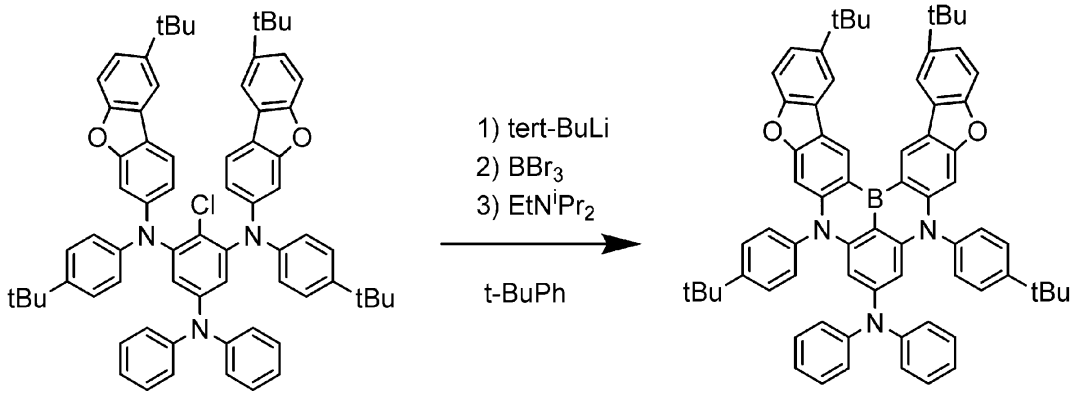
合成例（５４）

化合物（１Ｆ－５４）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－５４）を用いて式（１Ｆ－５４）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９９１．５２３８（ｃａｌｃｄ　$C_{70}H_{66}BN_3O_2$，９９１．５２４８）．

【化７４４】



(X-54) (1F-54)

【１２３３】

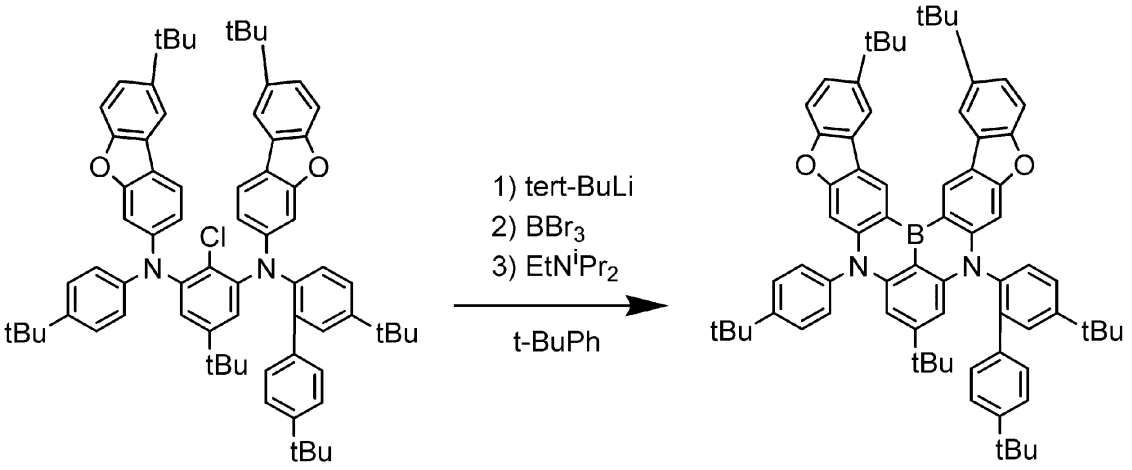
合成例（５５）

化合物（１Ｆ－５５）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－５５）を用いて式（１Ｆ－５５）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　１０１２．６０９５（ｃａｌｃｄ　$C_{72}H_{77}BN_2O_2$，１０１２．６０７８）．

【化７４５】



(X-55) (1F-55)

【１２３４】

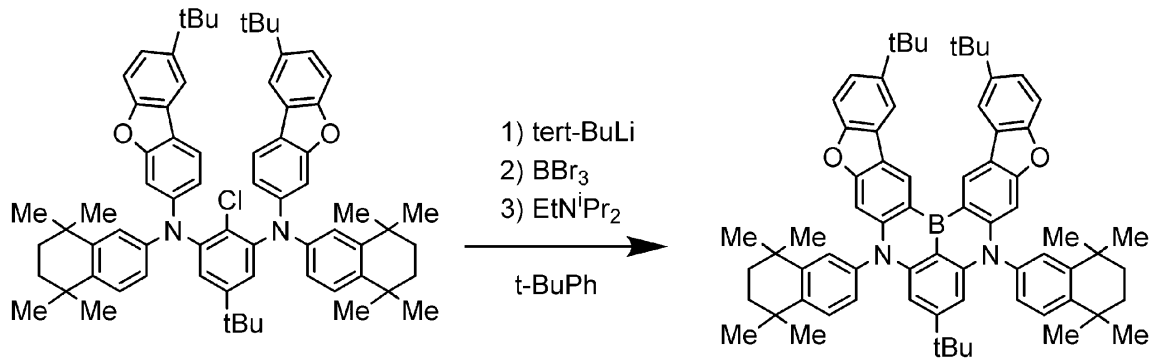
合成例（５６）

化合物（１Ｆ－５６）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－５６）を用いて式（１Ｆ－５６）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９８８．６０５０（ｃａｌｃｄ　$C_{70}H_{77}BN_2O_2$，９８８．６０７８）．

【化７４６】



(X-56) (1F-56)

【１２３５】

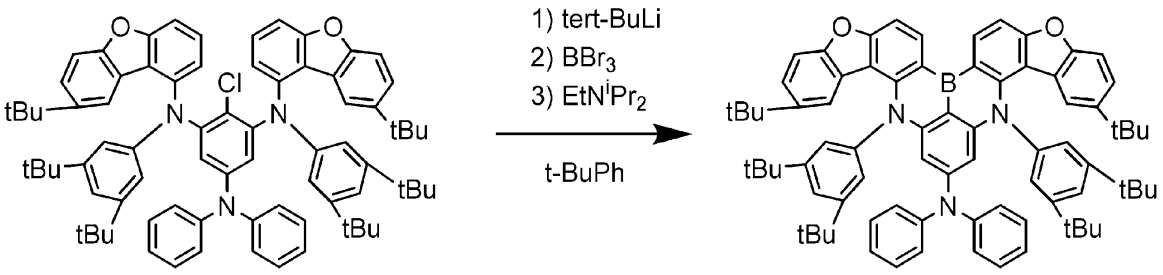
合成例（５７）

化合物（１Ｆ－５７）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－５７）を用いて式（１Ｆ－５７）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　１１０３．６５２２（ｃａｌｃｄ　$C_{78}H_{82}BN_3O_2$，１１０３．６５００）．

【化７４７】



(X-57) (1F-57)

【１２３６】

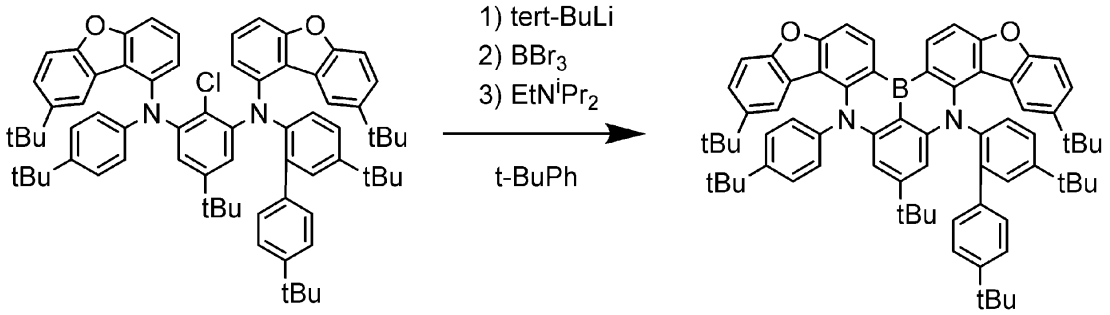
合成例（５８）

化合物（１Ｆ－５８）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－５８）を用いて式（１Ｆ－５８）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ ｍ／ｚ １０１２．６０５９（ｃａｌｃｄ $C_{72}H_{77}BN_2O_2$，１０１２．６０７８）．

【化７４８】



(X-58) (1F-58)

【１２３７】

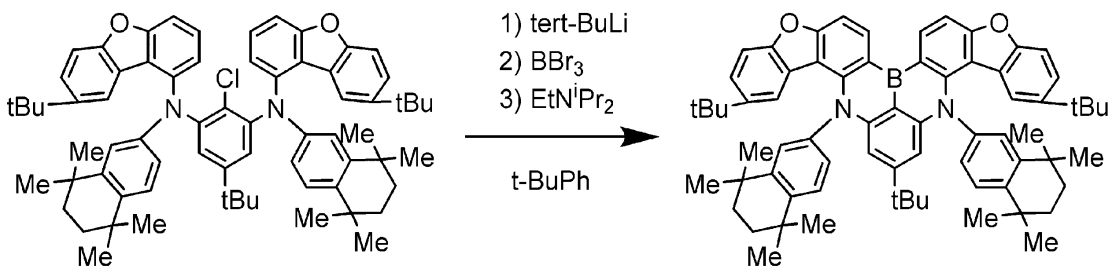
合成例（５９）

化合物（１Ｆ－５９）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－５９）を用いて式（１Ｆ－５９）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ ｍ／ｚ ９８８．６０８８（ｃａｌｃｄ $C_{70}H_{77}BN_2O_2$，９８８．６０７８）．

【化７４９】



(X-59) (1F-59)

【１２３８】

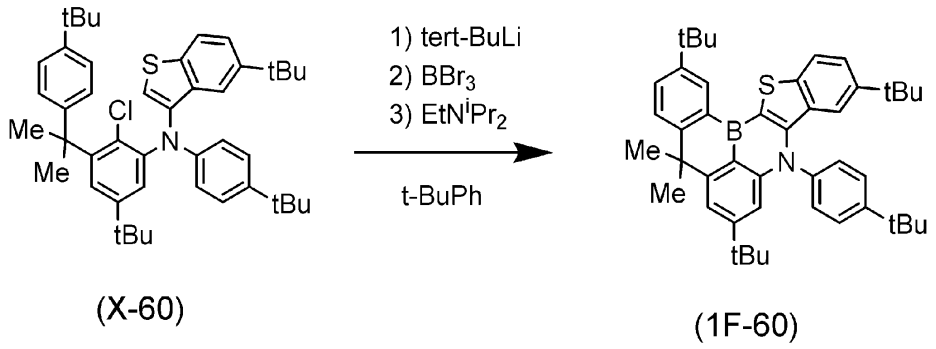
合成例（６０）

化合物（１Ｆ－６０）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６０）を用いて式（１Ｆ－６０）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　６５１．４０８５（ｃａｌｃｄ　$C_{45}H_{54}BNS$，６５１．４０７０）．

【化７５０】



(X-60)　　(1F-60)

【１２３９】

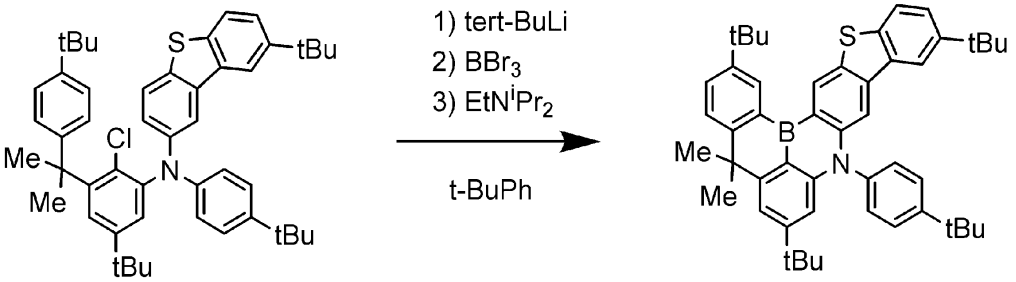
合成例（６１）

化合物（１Ｆ－６１）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６１）を用いて式（１Ｆ－６１）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　７０１．４２４１（ｃａｌｃｄ　$C_{49}H_{56}BNS$，７０１．４２２７）．

【化７５１】



(X-61)　　(1F-61)

【１２４０】

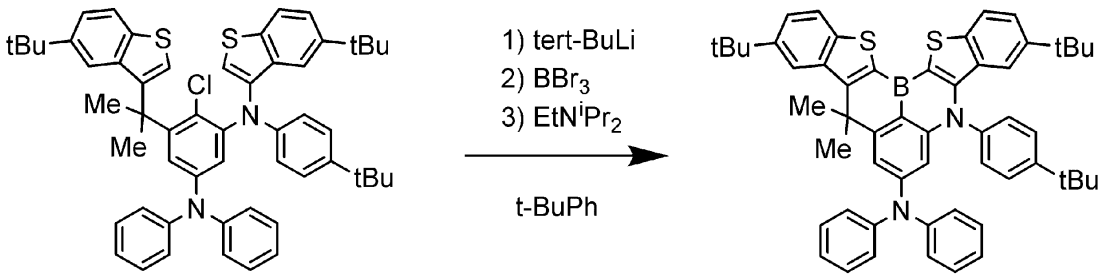
合成例（６２）

化合物（１Ｆ－６２）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６２）を用いて式（１Ｆ－６２）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　８１８．３９１１（ｃａｌｃｄ　$C_{55}H_{55}BN_2S_2$，８１８．３９００）．

【化７５２】



(X-62) (1F-62)

【１２４１】

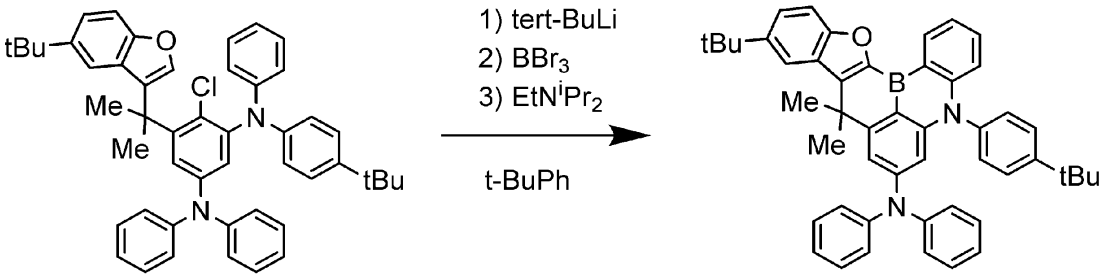
合成例（６３）

化合物（１Ｆ－６３）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６３）を用いて式（１Ｆ－６３）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　６９０．３７９６（ｃａｌｃｄ　$C_{49}H_{47}BN_2O$，６９０．３７８１）．

【化７５３】



(X-63) (1F-63)

【１２４２】

合成例（６４）

化合物（１Ｆ－６４）の合成

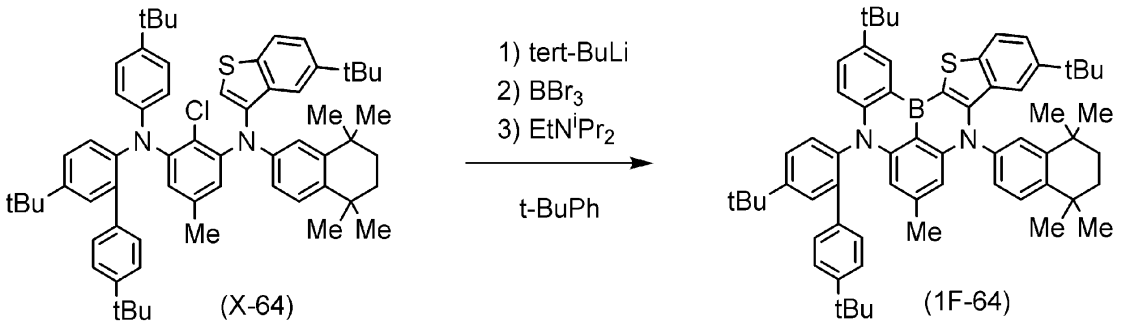
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６４）を用いて式（１Ｆ－６４）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９００．５５７３（ｃａｌｃｄ　$C_{63}H_{73}BN_2S$、９００．５５８８）．

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：　δ＝１．０９－１．１６（ｍ，１８Ｈ）、１．２５－１．３４（ｍ，６Ｈ）、１．４２－１．５０（ｍ，２４Ｈ）、１．７６－１．８６（ｍ，４Ｈ）、２．１９（ｓ，３Ｈ）、６．０３－６．１２（ｍ，２Ｈ）、６．５７－６．６６（ｍ，２Ｈ）、７．０１－７．０８（ｍ，２Ｈ）、７．１２－７．２５（ｍ，４Ｈ）、７．３７－７．４４（ｍ，２Ｈ）、７．４８－７．５４（ｍ，１Ｈ）、７．５８（ｄｄ，１Ｈ）、７．６０－７．６７（ｍ，１Ｈ）、７．６７－７．７１（ｍ，１Ｈ）、７．８８（ｄ，１Ｈ）、８．６８－８．７２（ｍ，１Ｈ）．

【１２４３】

【化７５４】



【１２４４】

合成例（６５）

化合物（１Ｆ－６５）の合成

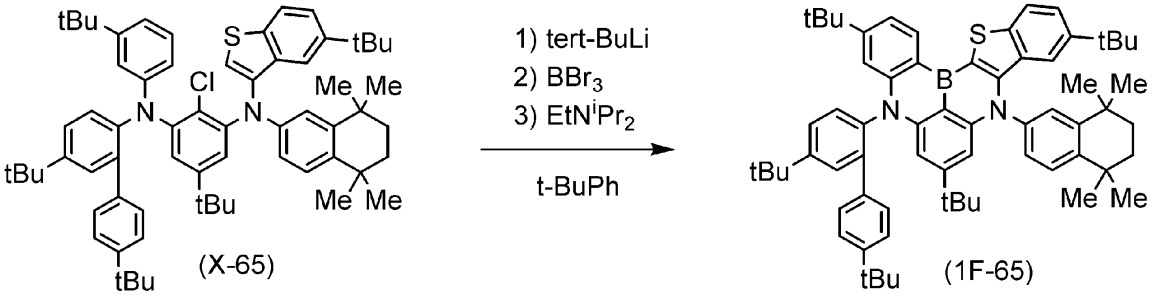
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６５）を用いて式（１Ｆ－６５）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９４２．６０６６（ｃａｌｃｄ　$C_{66}H_{79}BN_2S$、９４２．６０５７）．

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：　δ＝０．９８－１．０２（ｍ，９Ｈ）、１．０９－１．１４（ｍ，１８Ｈ）、１．２０（ｓ，９Ｈ）、１．２６－１．３４（ｍ，６Ｈ）、１．３９－１．５０（ｍ，１５Ｈ）、１．７５－１．８８（ｍ，４Ｈ）、６．１３－６．３５（ｍ，２Ｈ）、６．６６－６．７３（ｍ，２Ｈ）、７．００－７．０７（ｍ，２Ｈ）、７．１２－７．２６（ｍ，５Ｈ）、７．３９（ｄｄ，１Ｈ）、７．４８－７．７９（ｍ，３Ｈ）、７．７１（ｓ，１Ｈ）、７．８６（ｄ，１Ｈ）、８．５８（ｄ，１Ｈ）．

【１２４５】

【化７５５】



【１２４６】

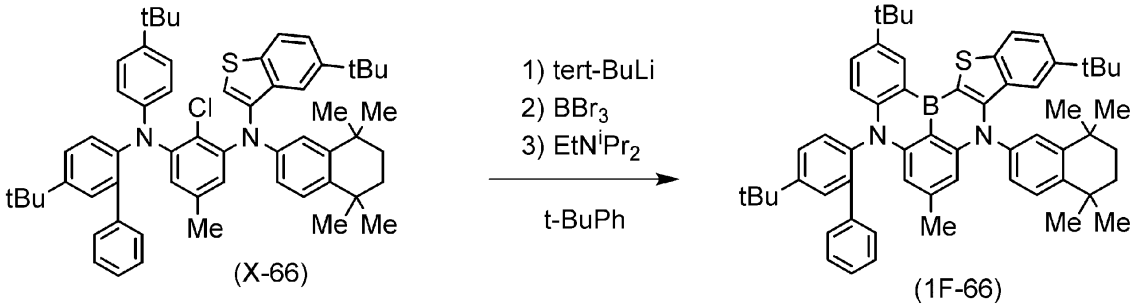
合成例（６６）

化合物（１Ｆ－６６）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６６）を用いて式（１Ｆ－６６）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　８４４．４９４１（ｃａｌｃｄ　$C_{59}H_{65}BN_2S$、８４４．４９６２）．

【化７５６】



【１２４７】

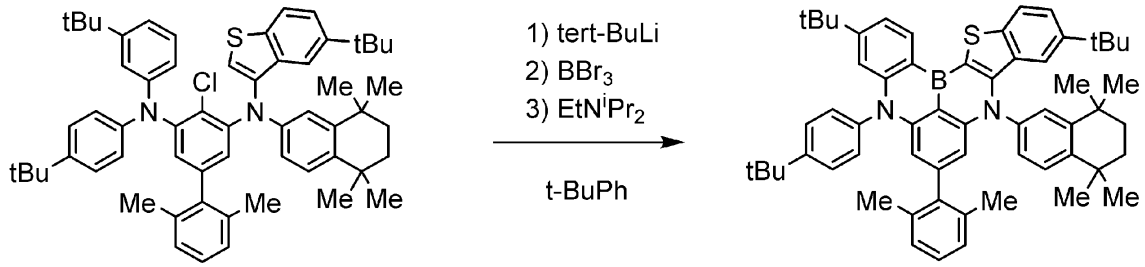
合成例（６７）

化合物（１Ｆ－６７）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６７）を用いて式（１Ｆ－６７）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　８５８．５１３１（ｃａｌｃｄ　$C_{60}H_{67}BN_2S$、８５８．５１１８）．

【化７５７】



【１２４８】

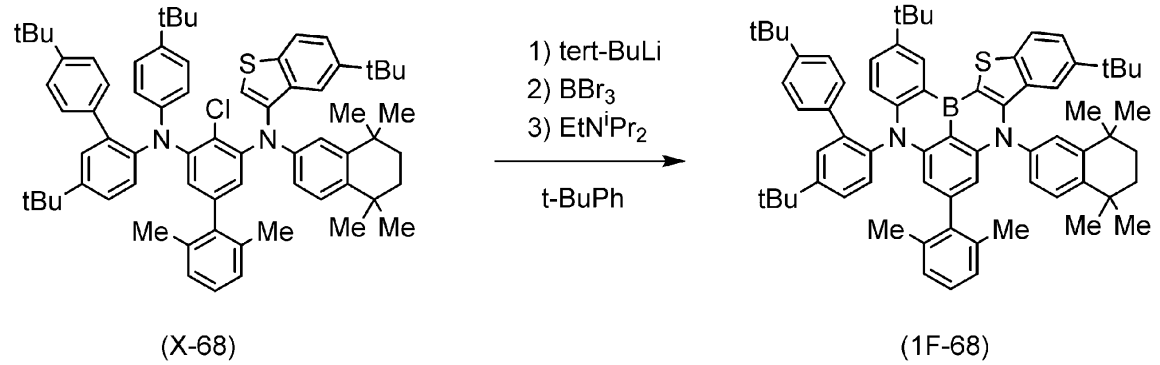
合成例（６８）

化合物（１Ｆ－６８）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６８）を用いて式（１Ｆ－６８）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９９０．６０７７（ｃａｌｃｄ　$C_{70}H_{79}BN_2S$、９９０．６０５７）．

【化７５８】



【１２４９】

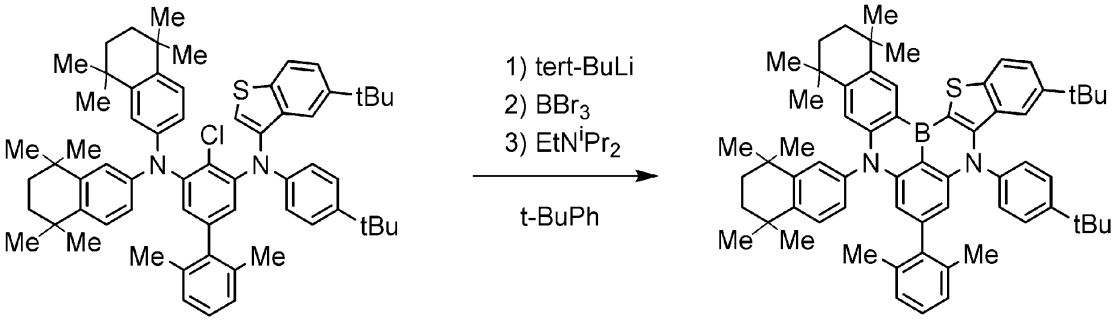
合成例（６９）

化合物（１Ｆ－６９）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－６９）を用いて式（１Ｆ－６９）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９１２．５５６２（ｃａｌｃｄ　$C_{64}H_{73}BN_2S$、９１２．５５８８）．

【化７５９】



(X-69)　　(1F-69)

【１２５０】

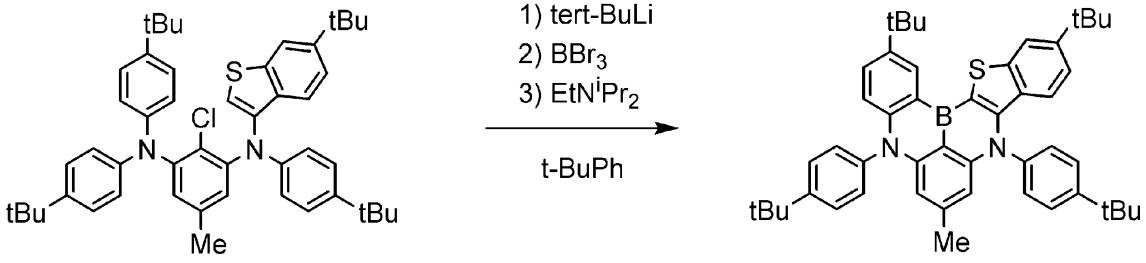
合成例（７０）

化合物（１Ｆ－７０）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７０）を用いて式（１Ｆ－７０）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　７１４．４１６６（ｃａｌｃｄ　$C_{49}H_{55}BN_2S$、７１４．４１７９）．

【化７６０】



(X-70)　　(1F-70)

【１２５１】

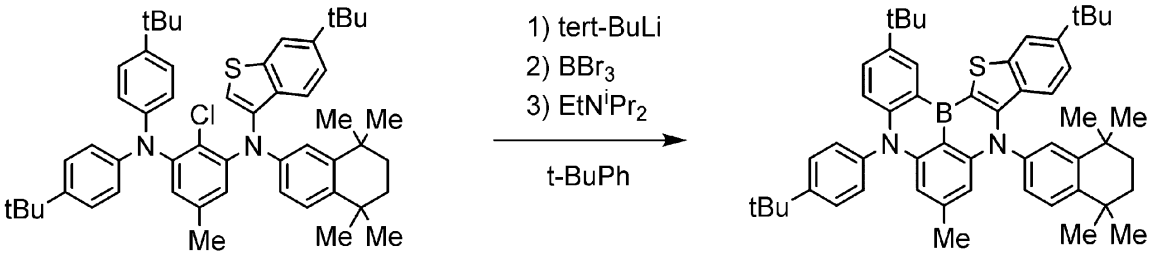
合成例（７１）

化合物（１Ｆ－７１）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７１）を用いて式（１Ｆ－７１）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　７６８．４６５９（ｃａｌｃｄ　$C_{53}H_{61}BN_2S$、７６８．４６４９）．

【化７６１】



(X-71) (1F-71)

【１２５２】

合成例（７２）

化合物（１Ｆ－７２）の合成

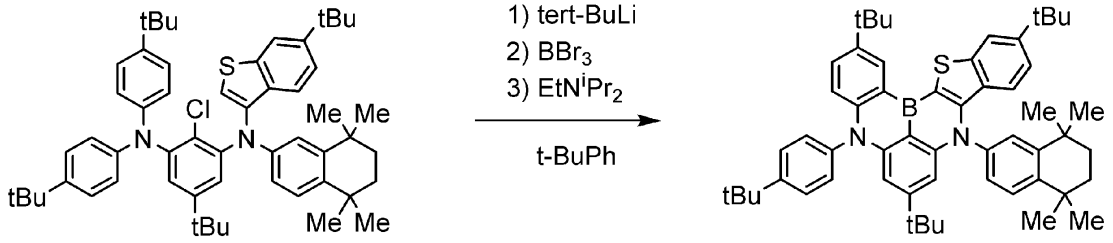
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７２）を用いて式（１Ｆ－７２）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ ｍ／ｚ ８１０．５１３０（ｃａｌｃｄ $C_{56}H_{67}BN_2S$、８１０．５１１８）．

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）： δ＝１．０１（ｓ，９Ｈ）、１．２７（ｓ，３Ｈ）、１．２９（ｓ，３Ｈ）、１．３６（ｓ，９Ｈ）、１．４５（ｓ，３Ｈ）、１．４６（ｓ，９Ｈ）、１．４９（ｓ，３Ｈ）、１．５１（ｓ，９Ｈ）、１．８１－１．８９（ｍ，４Ｈ）、６．０５（ｄ，１Ｈ）、６．１４（ｂｒ，１Ｈ）、６．３６（ｂｒ，１Ｈ）、６．６４（ｂｒ，１Ｈ）、６．９６（ｄｄ，１Ｈ）、７．１９（ｄｄ，１Ｈ）、７．２８（ｄ，２Ｈ）、７．４６（ｄｄ，１Ｈ）、７．４９（ｄ，１Ｈ）、７．６３（ｄ，１Ｈ）、７．６８（ｄ，２Ｈ）、７．９７（ｄ，１Ｈ）、８．７６（ｓ，１Ｈ）．

【１２５３】

【化７６２】



(X-72) (1F-72)

【１２５４】

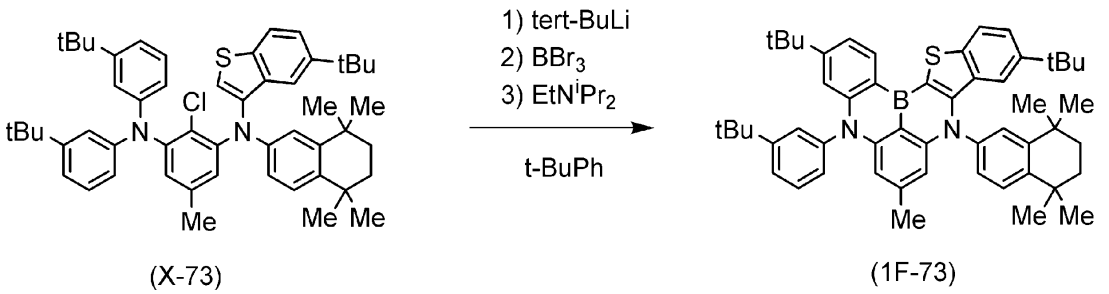
合成例（７３）

化合物（１Ｆ－７３）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７３）を用いて式（１Ｆ－７３）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ ｍ／ｚ ７６８．４６６１（ｃａｌｃｄ $C_{53}H_{61}BN_2S$、７６８．４６４９）．

【化７６３】



(X-73) (1F-73)

【１２５５】

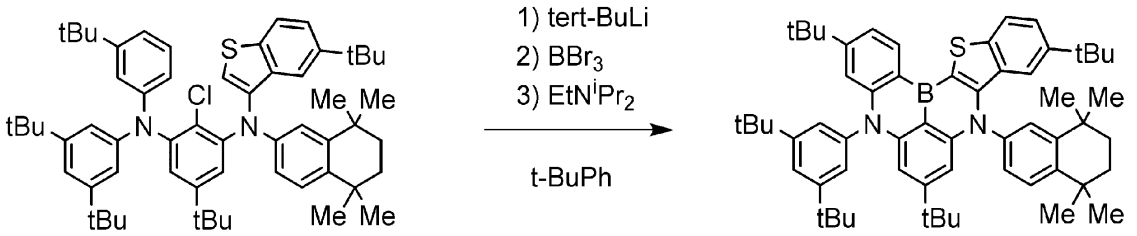
合成例（７４）

化合物（１Ｆ－７４）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７４）を用いて式（１Ｆ－７４）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　８６６．５７５７（ｃａｌｃｄ　$C_{60}H_{75}BN_2S$、８６６．５７４４）．

【化７６４】



(X-74) (1F-74)

【１２５６】

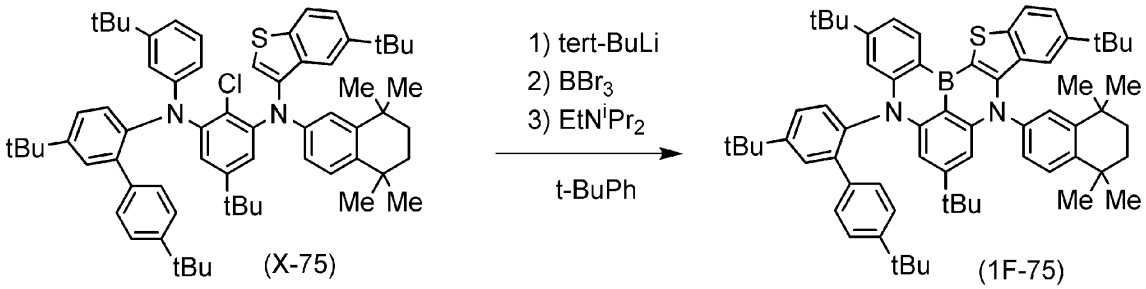
合成例（７５）

化合物（１Ｆ－７５）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７５）を用いて式（１Ｆ－７５）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９４２．６０８０（ｃａｌｃｄ　$C_{66}H_{79}BN_2S$、９４２．６０５７）．

【化７６５】



(X-75) (1F-75)

【１２５７】

合成例（７６）

化合物（１Ｆ－７６）の合成

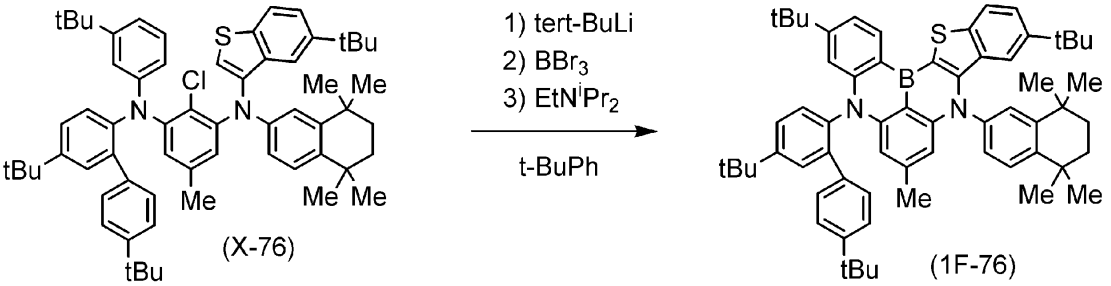
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７６）を用いて式（１Ｆ－７６）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９００．５５９９（ｃａｌｃｄ　$C_{63}H_{73}BN_2S$、９００．５５

８８）．
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：　δ＝１．１０（ｓ，９Ｈ）、１．１１－１．１３（ｍ，９Ｈ）、１．１６－１．１８（ｍ，９Ｈ）、１．２５－１．３６（ｍ，６Ｈ）、１．４３－１．４７（ｍ，６Ｈ）、１．４８（ｓ，９Ｈ）、１．７７－１．８７（ｍ，４Ｈ）、２．２２（ｓ，３Ｈ）、６．０７－６．１１（ｍ，１Ｈ）、６．２０（ｓ，１Ｈ）、６．５４－６．６２（ｍ，２Ｈ）、６．９９－７．０８（ｍ，２Ｈ）、７．１５－７．３０（ｍ，５Ｈ）、７．３７（ｄｄ，１Ｈ）、７．４６－７．５６（ｍ，１Ｈ）、７．５８－７．６８（ｍ，２Ｈ）、７．６９－７．７３（ｍ，１Ｈ）、７．８５（ｄ，１Ｈ）、８．５９－８．５５（ｍ，１Ｈ）．

【１２５８】

【化７６６】



【１２５９】

合成例（７７）

化合物（１Ｆ－７７）の合成

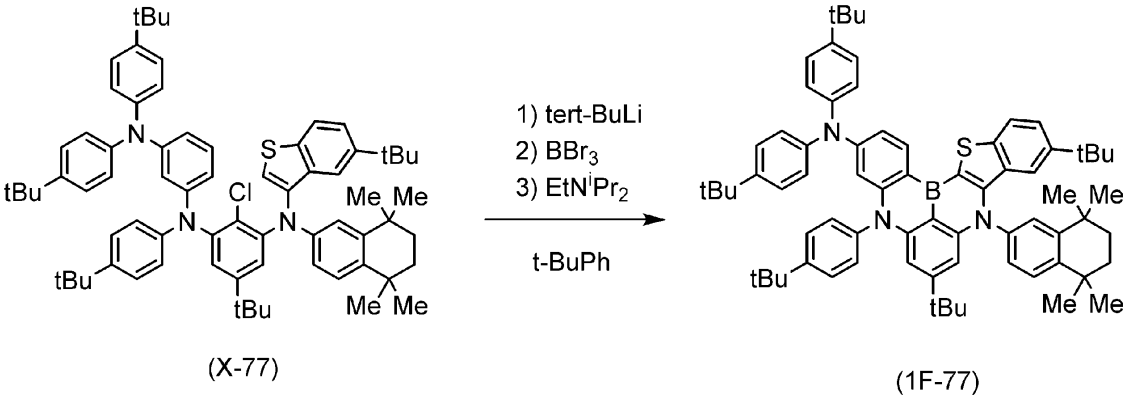
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７７）を用いて式（１Ｆ－７７）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　１０３３．６４５９（ｃａｌｃｄ　Ｃ$_{72}$Ｈ$_{84}$ＢＮ$_3$Ｓ、１０３３．６４７９）．

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：　δ＝０．９７（ｓ，９Ｈ）、１．１０（ｓ，９Ｈ）、１．２７－１．３４（ｍ，３３Ｈ）、１．４０－１．４７（ｍ，６Ｈ）、１．７５－１．９０（ｍ，４Ｈ）、６．００－６．２８（ｍ，２Ｈ）、６．３６（ｓ，１Ｈ）、６．６５－６．８０（ｍ，１Ｈ）、６．８０－６．９６（ｍ，１Ｈ）、７．００（ｄ，４Ｈ）、７．１４（ｄ，２Ｈ）、７．１８－７．２６（ｍ，５Ｈ）、７．３８（ｄ，１Ｈ）、７．４３－７．５８（ｍ，３Ｈ）、７．６５（ｄ，１Ｈ）、７．８５（ｄ，１Ｈ）、８．５３（ｓ，１Ｈ）．

【１２６０】

【化７６７】



【１２６１】

合成例（７８）

化合物（１Ｆ－７８）の合成

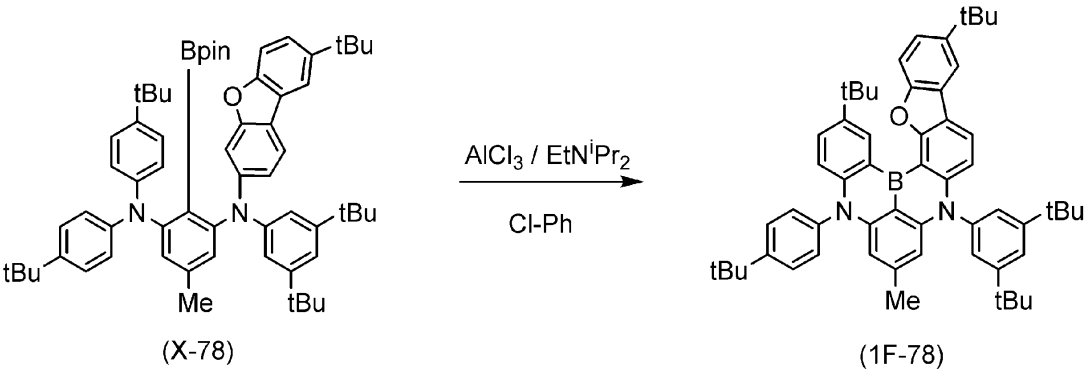
合成例（５）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７８）を用いて式（１Ｆ－７８）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　８０４．５１７７（ｃａｌｃｄ　$C_{57}H_{65}BN_2O$、８０４．５１９０）．

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（$CDCl_3$）：　δ＝１．４（ｓ，１８Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），２．２（ｓ，３Ｈ），６．０（ｓ，１Ｈ），６．１（ｓ，１Ｈ），６．７（ｄ，１Ｈ），６．８（ｄ，　１Ｈ），７．２（ｄ，２Ｈ），７．３（ｄ，２Ｈ），７．４（ｄｄ，１Ｈ），７．５～７．６（ｍ，２Ｈ），７．６（ｔ，１Ｈ），７．７（ｄ，２Ｈ），７．９（ｄ，１Ｈ），７．９（ｄ，１Ｈ），９．３（ｄ，１Ｈ）．

【１２６２】

【化７６８】



(X-78)　　(1F-78)

【１２６３】

合成例（７９）

化合物（１Ｆ－７９）の合成

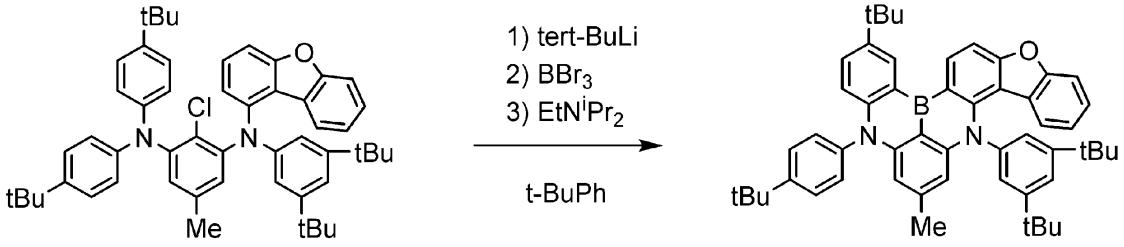
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－７９）を用いて式（１Ｆ－７９）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　７４８．４５５７（ｃａｌｃｄ　$C_{53}H_{57}BN_2O$、７４８．４５６４）．

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（$CDCl_3$）：　δ＝１．２（ｓ，１８Ｈ），１．４（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），２．２（ｓ，３Ｈ），５．８（ｄ，１Ｈ），６．１（ｓ，１Ｈ），６．３（ｓ，１Ｈ），６．６（ｔ，１Ｈ），６．７（ｄ，１Ｈ），７．１（ｔ，１Ｈ），７．３（ｄ，２Ｈ），７．４（ｄ，２Ｈ），７．４（ｄ，１Ｈ），７．５（ｍ，２Ｈ），７．６（ｄ，１Ｈ），７．７（ｄ，２Ｈ），８．７（ｄ，１Ｈ），８．８（ｄ，１Ｈ）．

【１２６４】

【化７６９】



(X-79)　　(1F-79)

【１２６５】

合成例（８０）

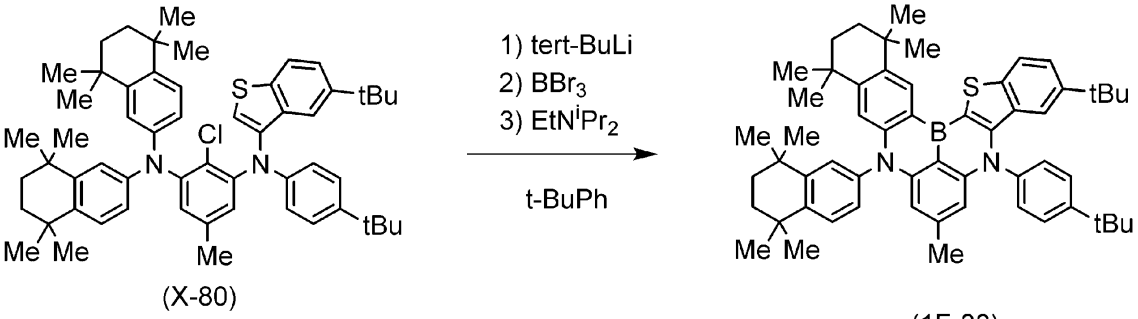
化合物（１Ｆ－８０）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－８０）を用いて式（１Ｆ－８０）で

表される化合物が得られる。
HRMS m／z 822.5133（calcd $C_{57}H_{67}BN_2S$、822.5118）.
^{1}H－NMR（$CDCl_3$）：δ＝1.04－1.10（m，15H）、1.25（s，6H）、1.38－1.45（m，6H）、1.49（s，9H）、1.53（s，6H）、1.66－1.83（m，8H）、2.20（s，3H）、6.06（d，2H）、6.41（s，1H）、6.50（d，1H）、7.07（dd，1H）、7.26（d，1H）、7.38（dd，1H）、7.46（d，2H）、7.59（d，1H）、7.74（d，2H）、7.88（d，1H）、8.70（d，1H）.

【1266】

【化770】



(X-80)　　(1F-80)

【1267】

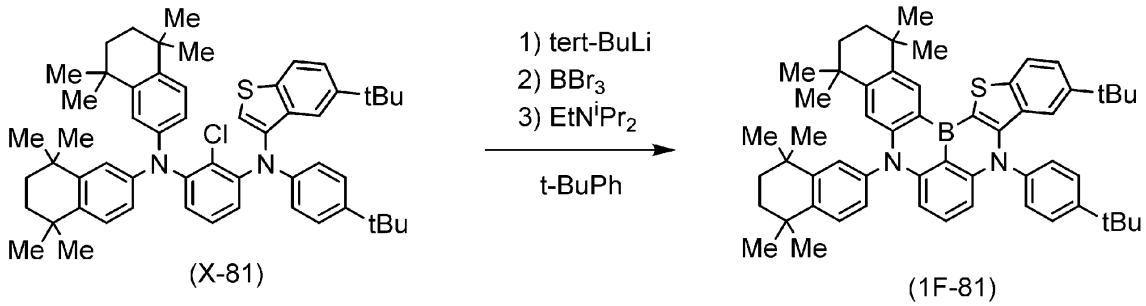
合成例（81）

化合物（1F－81）の合成

合成例（1）と同様の方法を用いて、化合物（X－81）を用いて式（1F－81）で表される化合物が得られる。

HRMS m／z 808.4977（calcd $C_{56}H_{65}BN_2S$、808.4962）.

【化771】



(X-81)　　(1F-81)

【1268】

合成例（82）

化合物（1F－82）の合成

合成例（1）と同様の方法を用いて、化合物（X－82）を用いて式（1F－82）で表される化合物が得られる。

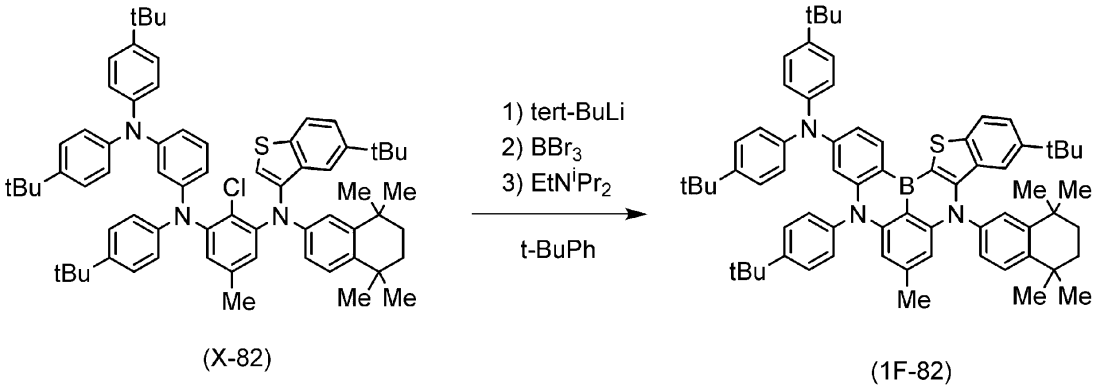
HRMS m／z 991.6022（calcd $C_{69}H_{78}BN_3S$、991.6010）.

^{1}H－NMR（$CDCl_3$）：δ＝1.10（s，9H）、1.17－1.20（m，9H）、1.25－1.38（m，33H）、1.42－1.48（m，6H）、1.76－1.88（m，4H）、2.19（s，3H）、6.02－6.16（m，3H）、6.57－6.62（m，2H）、6.86－6.96（m，7H）、7.01－7.14（m，3H）、7.20（d，4H）、7.36（dd，1H）、7.39－7.50（

ｍ，３Ｈ）、７．６０－７．６７（ｍ，１Ｈ）、７．８３（ｄ，１Ｈ）、８．４７（ｄ，１Ｈ）．

【１２６９】

【化７７２】



【１２７０】

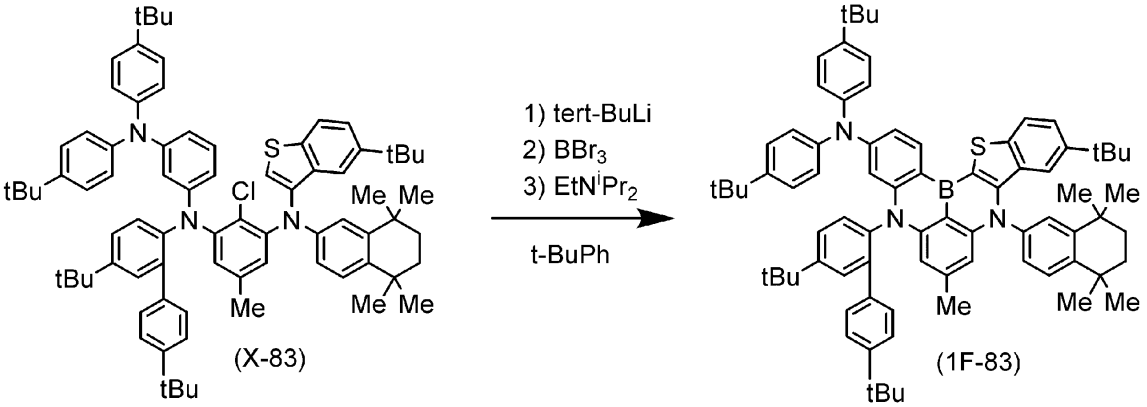
合成例（８３）

化合物（１Ｆ－８３）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－８３）を用いて式（１Ｆ－８３）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　１１２３．６９６１（ｃａｌｃｄ　$C_{79}H_{90}BN_3S$、１１２３．６９４９）．

【化７７３】



【１２７１】

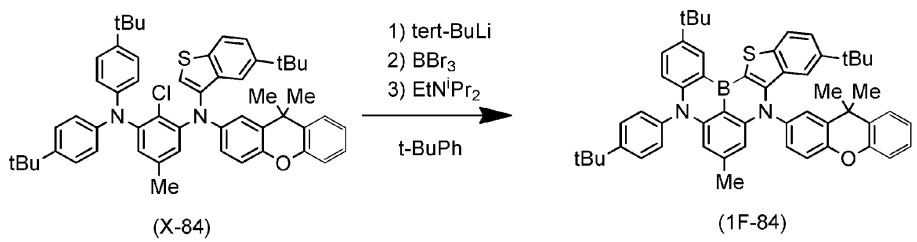
合成例（８４）

化合物（１Ｆ－８４）の合成

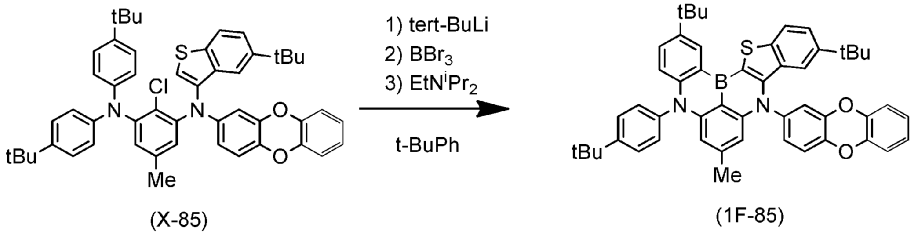
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－８４）を用いて式（１Ｆ－８４）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　７９０．４１２２（ｃａｌｃｄ　$C_{54}H_{55}BN_2OS$、７９０．４１２８）．

【化７７４】

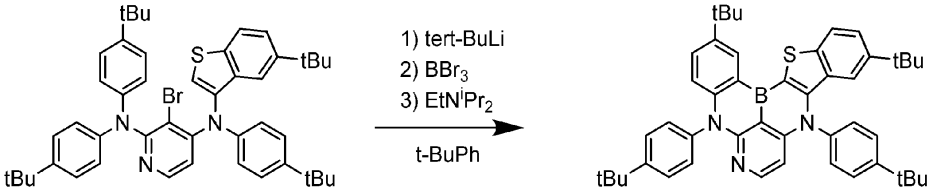


【１２７２】
合成例（８５）
化合物（１Ｆ－８５）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－８５）を用いて式（１Ｆ－８５）で表される化合物が得られる。
ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　７６４．３６２２（ｃａｌｃｄ　$C_{51}H_{49}BN_2O_2S$、７６４．３６０８）．
【化７７５】



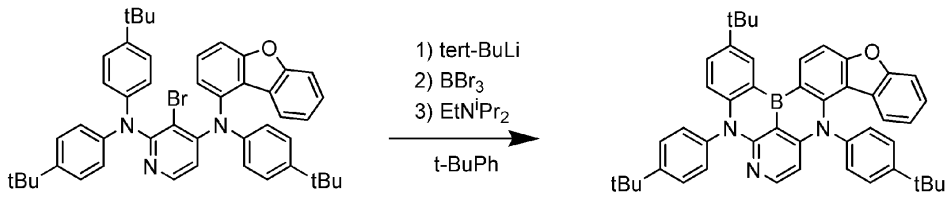
(X-85)　(1F-85)

【１２７３】
合成例（８６）
化合物（１Ｆ－８６）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－８６）を用いて式（１Ｆ－８６）で表される化合物が得られる。
ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　７０１．３９８８（ｃａｌｃｄ　$C_{47}H_{52}BN_3S$、７０１．３９７５）．
【化７７６】



(X-86)　(1F-86)

【１２７４】
合成例（８７）
化合物（１Ｆ－８７）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－８７）を用いて式（１Ｆ－８７）で表される化合物が得られる。
ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　６７９．３７２２（ｃａｌｃｄ　$C_{47}H_{46}BN_3O$、６７９．３７３４）．
【化７７７】



(X-87)　(1F-87)

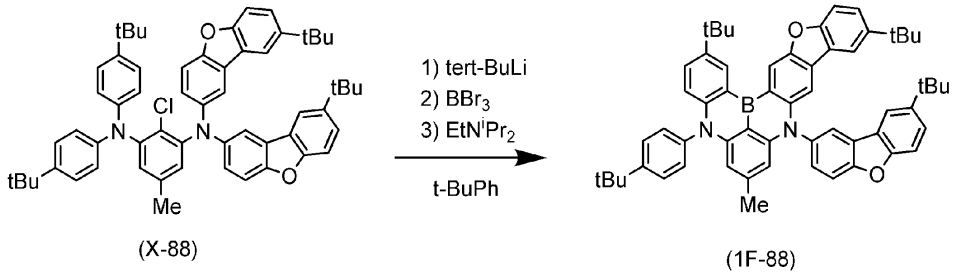
【１２７５】
合成例（８８）

化合物（１Ｆ－８８）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－８８）を用いて式（１Ｆ－８８）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　８３８．４６７７（ｃａｌｃｄ　$C_{59}H_{59}BN_2O_2$、８３８．４６７０）．

【化７７８】



(X-88)　　(1F-88)

【１２７６】

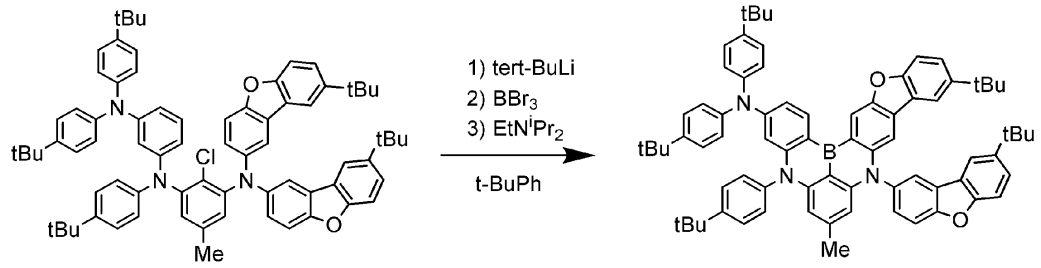
合成例（８９）

化合物（１Ｆ－８９）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－８９）を用いて式（１Ｆ－８９）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　１０６１．６０２２（ｃａｌｃｄ　$C_{75}H_{76}BN_3O_2$、１０６１．６０３１）

【化７７９】



(X-89)　　(1F-89)

【１２７７】

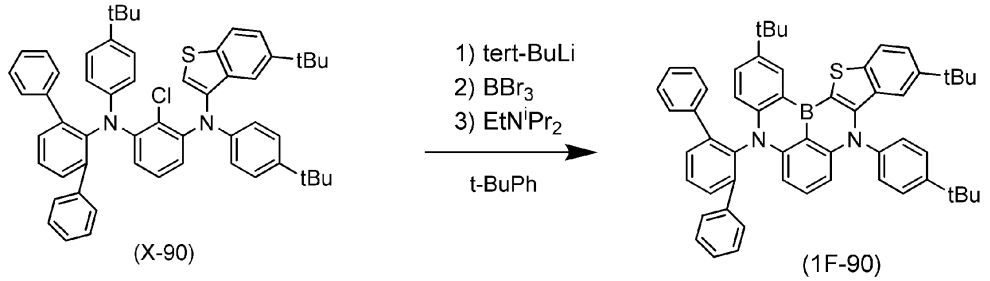
合成例（９０）

化合物（１Ｆ－９０）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９０）を用いて式（１Ｆ－９０）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　７９６．４０２２（ｃａｌｃｄ　$C_{56}H_{53}BN_2S$、７９６．４０２３）．

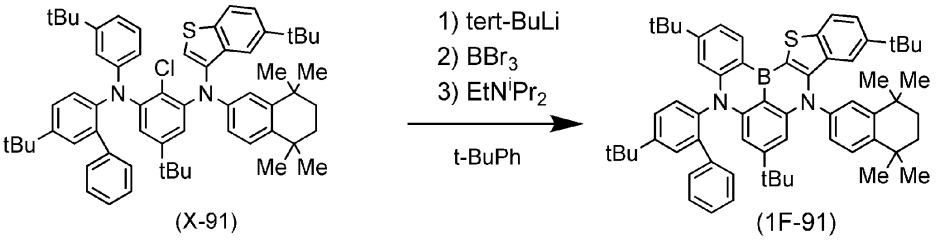
【化７８０】



(X-90)　　(1F-90)

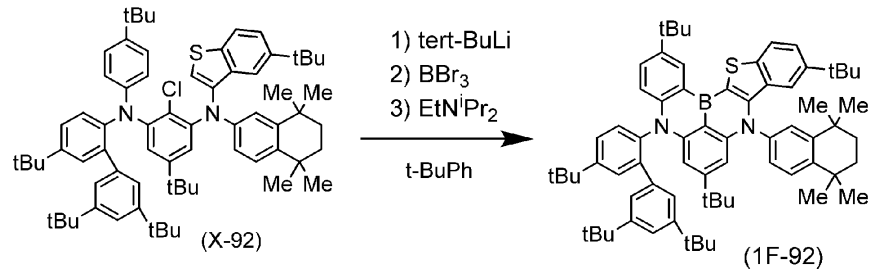
【１２７８】
合成例（９１）
化合物（１Ｆ－９１）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９１）を用いて式（１Ｆ－９１）で表される化合物が得られる。
ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　８８６．５４２２（ｃａｌｃｄ　$C_{62}H_{71}BN_2S$、８８６．５４３１）．
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（$CDCl_3$）：　δ＝０．９９－１．０２（ｍ，９Ｈ）、１．１０（ｓ，９Ｈ）、１．２１（ｓ，９Ｈ）、１．２５－１．３４（ｍ，６Ｈ）、１．３８－１．４７（ｍ，６Ｈ）、１．４９（ｓ，９Ｈ）、１．７５－１．８８（ｍ，４Ｈ）、６．０２－６．４５（ｍ，２Ｈ）、６．６２－６．７８（ｍ，２Ｈ）、６．９６－７．５０（ｍ，３Ｈ）、７．１４－７．２９（ｍ，５Ｈ）、７．３８（ｄｄ，１Ｈ）、７．４７－７．７３（ｍ，４Ｈ）、７．８５（ｄ，１Ｈ）、８．５８（ｄ，１Ｈ）．

【１２７９】
【化７８１】



【１２８０】
合成例（９２）
化合物（１Ｆ－９２）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９２）を用いて式（１Ｆ－９２）で表される化合物が得られる。
ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　９９８．６６８８（ｃａｌｃｄ　$C_{70}H_{87}BN_2S$、９９８．６６８３）．
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（$CDCl_3$）：　δ＝０．８６－０．９０（ｍ，１８Ｈ）、１．０２（ｓ，９Ｈ）、１．１０（ｓ，９Ｈ）、１．２７－１．３０（ｍ，６Ｈ）、１．４０－１．５０（ｍ，２４Ｈ）、１．７６－１．８６（ｍ，４Ｈ）、６．０２－６．３８（ｍ，２Ｈ）、６．５５－６．８０（ｍ，２Ｈ）、６．８４－９０（ｍ，２Ｈ）、６．９３－６．９６（ｍ，２Ｈ）、７．０８－７．２４（ｍ，１Ｈ）、７．３０－７．５４（ｍ，４Ｈ）、７．５８－７．７３（ｍ，２Ｈ）、７．８６（ｄ，１Ｈ）、８．６１（ｓ，１Ｈ）．

【１２８１】
【化７８２】

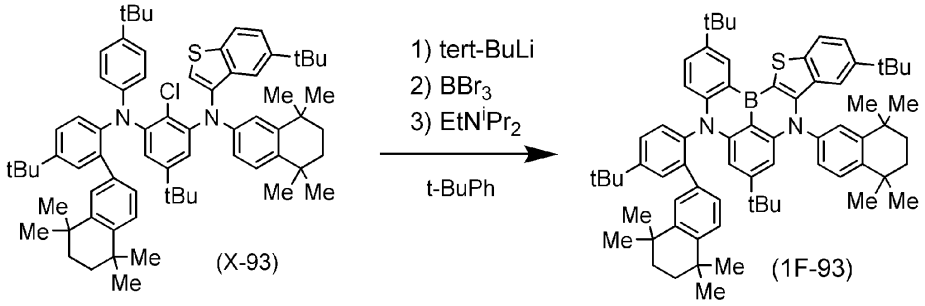


【１２８２】
合成例（９３）
化合物（１Ｆ－９３）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９３）を用いて式（１Ｆ－９３）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ ｍ／ｚ ９９６．６５２２（ｃａｌｃｄ $C_{70}H_{85}BN_2S$、９９６．６５２７）．
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（$CDCl_3$）： δ＝０．５３－０．６０（ｍ，６Ｈ）、０．９９（ｓ，９Ｈ）、１．０４－１．０９（ｍ，６Ｈ）、１．１０（ｓ，９Ｈ）、１．２９（ｓ，６Ｈ）、１．４０－１．５８（ｍ，２８Ｈ）、１．８６－１．７６（ｍ，４Ｈ）、６．０５－６．３８（ｍ，２Ｈ）、６．７２（ｄ，２Ｈ）、６．９６－７．０４（ｍ，２Ｈ）、７．０６（ｄ，１Ｈ）、７．１４－７．３１（ｍ，２Ｈ）、７．３６－７．５５（ｍ，３Ｈ）、７．５６－７．７４（ｍ，３Ｈ）、７．８８（ｄ，１Ｈ）、８．６６（ｓ，１Ｈ）．

【１２８３】

【化７８３】



【１２８４】

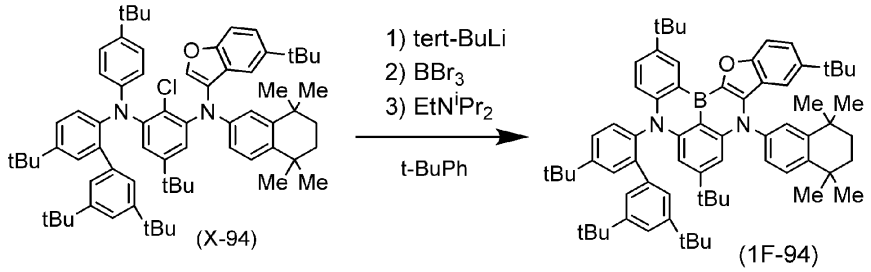
合成例（９４）

化合物（１Ｆ－９４）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９４）を用いて式（１Ｆ－９４）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ ｍ／ｚ ９８２．６９２２（ｃａｌｃｄ $C_{70}H_{87}BN_2O$、９８２．６９１１）．

【化７８４】



【１２８５】

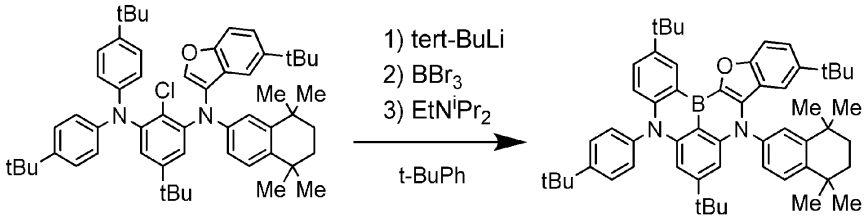
合成例（９５）

化合物（１Ｆ－９５）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９５）を用いて式（１Ｆ－９５）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ ｍ／ｚ ７９４．５３５２（ｃａｌｃｄ $C_{56}H_{67}BN_2O$、７９４．５３４６）．

【化７８５】



(X-95) (1F-95)

【１２８６】

合成例（９６）

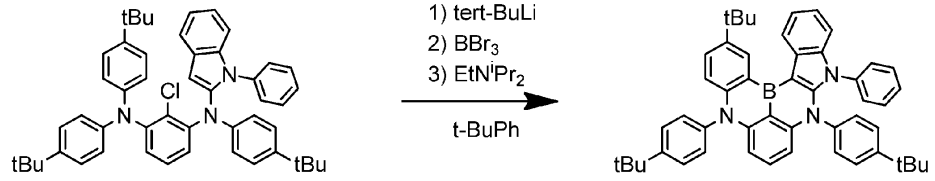
化合物（１Ｆ－９６）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９６）を用いて式（１Ｆ－９６）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝０．９（ｓ、９Ｈ）、１．３（ｓ、９Ｈ）、１．５（ｓ、９Ｈ）、６．３（ｄ、１Ｈ）、６．５（ｄ、１Ｈ）、６．６（ｄ、１Ｈ）、６．９（ｍ、３Ｈ）、７．１（ｍ、１Ｈ）、７．１～７．２（ｍ、８Ｈ）、７．３（ｍ、２Ｈ）、７．３（ｔ、１Ｈ）、７．６（ｔ、１Ｈ）、７．７（ｄ２Ｈ）、８．０（ｄ、１Ｈ）、８．３（ｄ、１Ｈ）．

【１２８７】

【化７８６】



(X-96) (1F-96)

【１２８８】

合成例（９７）

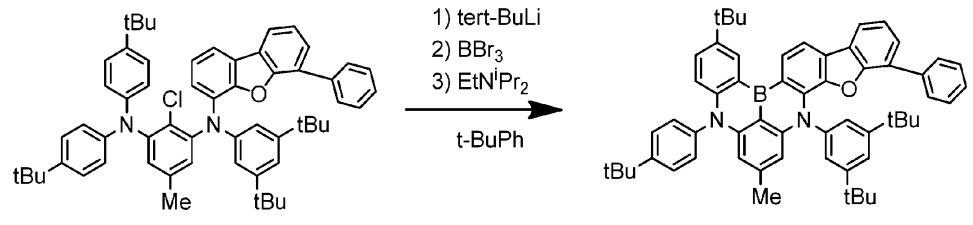
化合物（１Ｆ－９７）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９７）を用いて式（１Ｆ－９７）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．２（ｓ，１８Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），２．１（ｓ，３Ｈ），５．６（ｓ，１Ｈ），６．０（ｓ，１Ｈ），６．７（ｓ，１Ｈ），７．２～７．３（ｍ，４Ｈ），７．４（ｍ，６Ｈ），７．５（ｍ，３Ｈ），７．７（ｄ，２Ｈ），８．０（ｄ，１Ｈ），８．０（ｄｄ，１Ｈ），８．９（ｍ，２Ｈ）．

【１２８９】

【化７８７】



(X-97) (1F-97)

【１２９０】

合成例（９８）

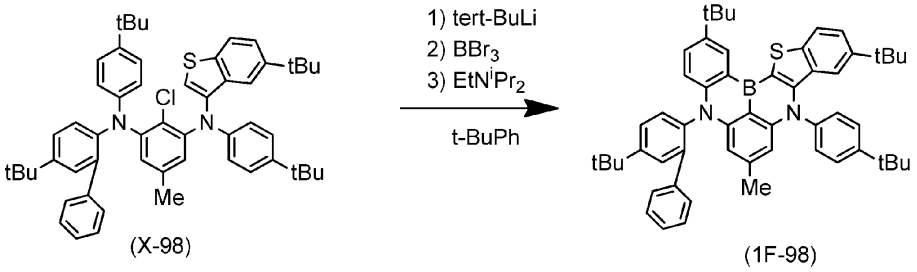
化合物（１Ｆ－９８）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９８）を用いて式（１Ｆ－９８）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．１（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），２．２（ｓ，３Ｈ），６．０（ｓ，１Ｈ），６．１（ｓ，１Ｈ），６．５（ｄ，１Ｈ），６．６（ｄ，１Ｈ），７．０（ｍ，３Ｈ），７．２～７．３（ｍ，３Ｈ），７．４～７．５（ｍ，４Ｈ），７．６（ｄｄ，１Ｈ），７．７（ｄ，１Ｈ），７．７（ｄ，２Ｈ），７．９（ｄ，１Ｈ），８．７（ｄ，１Ｈ）．

【１２９１】

【化７８８】



【１２９２】

合成例（９９）

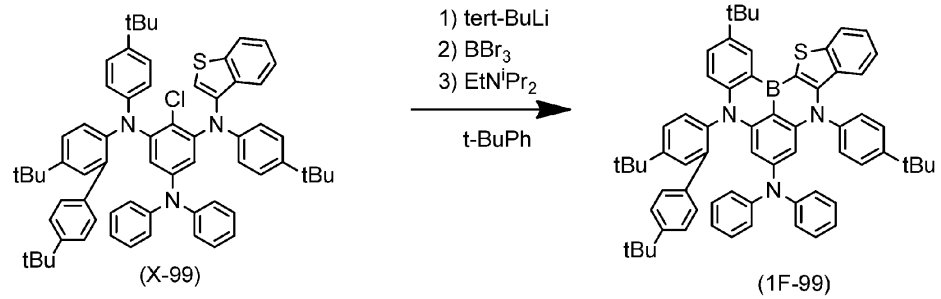
化合物（１Ｆ－９９）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－９９）を用いて式（１Ｆ－９９）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．２（ｓ，９Ｈ），１．４（ｓ，９Ｈ），１．４（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），５．７（ｄ，１Ｈ），５．８（ｄ，１Ｈ），６．１（ｄ，１Ｈ），６．７（ｄ，１Ｈ），６．９（ｍ，７Ｈ），７．１（ｍ，９Ｈ），７．２～７．３（ｍ，３Ｈ），７．４（ｍ，２Ｈ），７．５（ｍ，３Ｈ），７．９（ｄ，１Ｈ），８．７
（ｄ，１Ｈ）．

【１２９３】

【化７８９】



【１２９４】

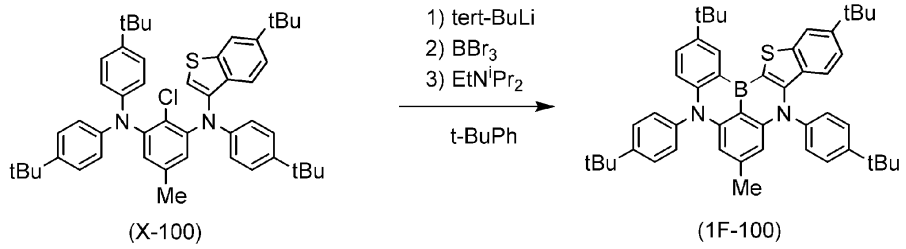
合成例（１００）

化合物（１Ｆ－１００）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１００）を用いて式（１Ｆ－１００）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．４（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），２．２（ｓ，３Ｈ），５．８（ｄ，１Ｈ），６．０（ｓ，１Ｈ），６．２（ｓ，１Ｈ），６．６（ｄ，１Ｈ），６．９（ｄｄ，１Ｈ），７．３（ｄ，２Ｈ），７．４～７．５（ｍ，３Ｈ），７．７（ｄ，２Ｈ），７．７（ｄ，２Ｈ），８．０（ｄ，１Ｈ），８．８（ｄ，１Ｈ）．

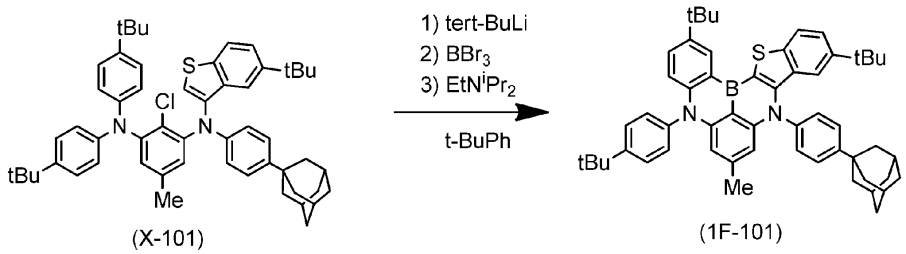
【１２９５】
【化７９０】



(X-100) (1F-100)

【１２９６】
合成例（１０１）
化合物（１Ｆ－１０１）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１０１）を用いて式（１Ｆ－01）で表される化合物が得られる。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．１（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．９（ｔ，６Ｈ），２．１（ｄ，６Ｈ），２．２（ｓ，３Ｈ），２．２（ｍ，３Ｈ），６．０（ｓ，１Ｈ），６．１（ｓ，１Ｈ），６．５（ｄ，１Ｈ），６．６（ｄ，１Ｈ），７．３（ｄｄ，２Ｈ），７．４～７．５（ｍ，４Ｈ），７．７（ｄｄ，２Ｈ），７．７（ｄｄ，２Ｈ），７．９（ｄ，１Ｈ），８．８（ｄ，１Ｈ）．

【１２９７】
【化７９１】

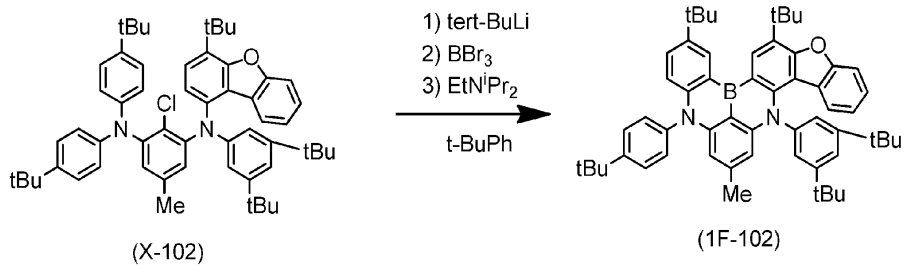


(X-101) (1F-101)

【１２９８】
合成例（１０２）
化合物（１Ｆ－１０２）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１０２）を用いて式（１Ｆ－１０２）で表される化合物が得られる。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．１（ｓ，１８Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．７（ｓ，９Ｈ），２，２（ｓ，３Ｈ），５．９（ｄ，１Ｈ），６．１（ｓ，１Ｈ），６．３（ｓ，１Ｈ），６．６（ｔ，１Ｈ），６．７（ｄ，１Ｈ），７．１（ｔ，１Ｈ），７．３（ｄ，２Ｈ），７．４（ｄ，２Ｈ），７．４～７．５（ｍ，３Ｈ），７．７（ｄ，２Ｈ），８．７（ｄ，１Ｈ），８．８（ｓ，１Ｈ）．

【１２９９】

【化７９２】



(X-102) (1F-102)

【１３００】

合成例（１０３）

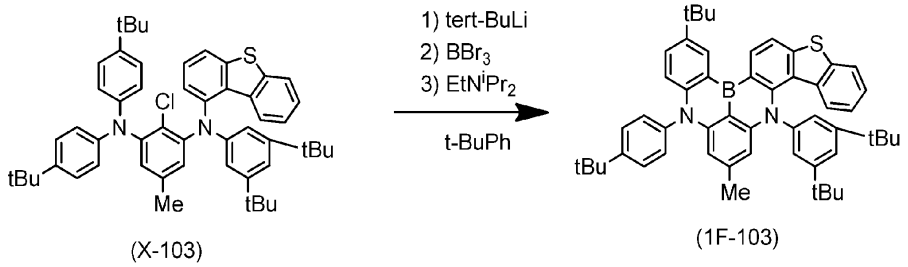
化合物（１Ｆ－１０３）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１０３）を用いて式（１Ｆ－１０３）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．１（ｓ，１８Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），２．３（ｓ，３Ｈ），６．２（ｓ，１Ｈ），６．７（ｄ，１Ｈ），６．９（ｔ，１Ｈ），７．０～７．３（ｍ，７Ｈ），７．５（ｄｄ，１Ｈ），７．７（ｍ，３Ｈ），７．８（ｄ，１Ｈ），８．１（ｄ，１Ｈ），８．７（ｄ，１Ｈ），８．８（ｄ，１Ｈ）．

【１３０１】

【化７９３】



(X-103) (1F-103)

【１３０２】

合成例（１０４）

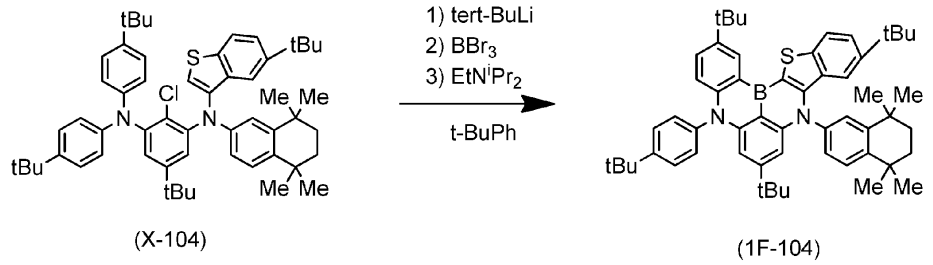
化合物（１Ｆ－１０４）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１０４）を用いて式（１Ｆ－１０４）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝０．９９（ｓ，９Ｈ）、１．１１（ｓ，９Ｈ）、１．３０（ｓ，６Ｈ）、１．４３（ｓ，３Ｈ）、１．４６（ｍ，１２Ｈ）、１．５１（ｓ，９Ｈ）、１．７８－１．８６（ｍ，４Ｈ）、６．１５（ｓ，１Ｈ）、６．６５（ｓ，１Ｈ）、６．７４（ｓ，１Ｈ）、７．２３－７．２９（ｄ，４Ｈ）、７．４１（ｄ，１Ｈ）、７．４６（ｄ，１Ｈ）、７．５３（ｓ，１Ｈ）、７．６６－７．６８（ｍ，３Ｈ）、７．９０（ｄ，１Ｈ）、８．７８（ｓ，１Ｈ）．

【１３０３】

【化７９４】



(X-104) (1F-104)

【１３０４】

合成例（１０５）

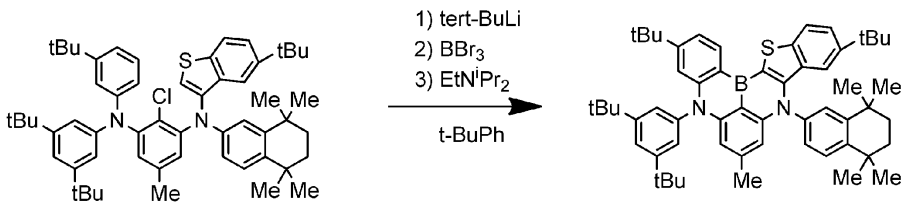
化合物（１Ｆ－１０５）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１０５）を用いて式（１Ｆ－１０５）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．１１（ｓ，９Ｈ）、１．１９（ｓ，９Ｈ）、１．２６（ｓ，３Ｈ）、１．２８（ｓ，３Ｈ）、１．３７（ｓ，１８Ｈ）、１．４４－１．４７（ｍ，６Ｈ）、１．７７－１．８６（ｍ，４Ｈ）、２．２１（ｓ，３Ｈ）、６．０８（ｓ，１Ｈ）、６．１０（ｓ，１Ｈ）、６．５３（ｄ，１Ｈ）、６．６１（ｄ，１Ｈ）、７．２０（ｄ，２Ｈ）、７．２６（ｄｄ，１Ｈ）、７．３１（ｄｄ，１Ｈ）、７．４０（ｄｄ，１Ｈ）、７．４８（ｄ，１Ｈ）、７．６１（ｔ，１Ｈ）、７．６６（ｄ，１Ｈ）、７．８８（ｄ，１Ｈ）、８．６９（ｄ，１Ｈ）．

【１３０５】

【化７９５】



(X-105) (1F-105)

【１３０６】

合成例（１０６）

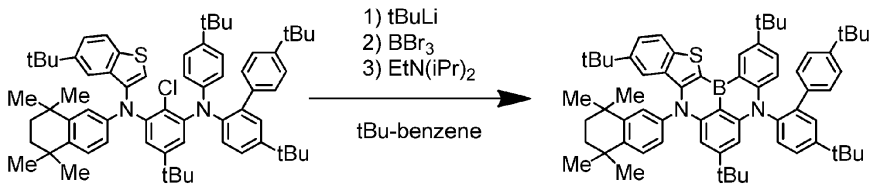
化合物（１Ｆ－１０６）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１０６）を用いて式（１Ｆ－１０６）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝０．９６－０．９９（ｍ，９Ｈ）、１．１０（ｓ，９Ｈ）、１．１２（ｓ，９Ｈ）、１．２５－１．３２（ｍ，６Ｈ）、１．３９－１．５１（ｍ，２４Ｈ）、１．７６－１．８６（ｍ，４Ｈ）、６．０５－６．２８（ｍ，２Ｈ）、６．６６－６．８０（ｍ，２Ｈ）、７．０１－７．０８（ｍ，２Ｈ）、７．１２－７．２４（ｍ，４Ｈ）、７．３７－７．４７（ｍ，２Ｈ）、７．４８－７．６９（ｍ，３Ｈ）、７．７０（ｓ，１Ｈ）、７．８８（ｄ，１Ｈ）、８．７０（ｓ，１Ｈ）．

【１３０７】

【化７９６】



(X-106) (1F-106)

【１３０８】

合成例（１０７）

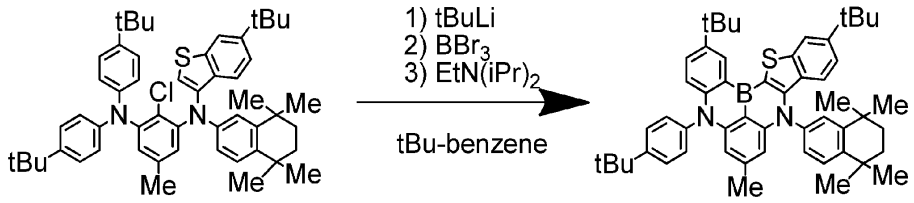
化合物（１Ｆ－１０７）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１０７）を用いて式（１Ｆ－１０７）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．２３（ｓ，３Ｈ）、１．２９（ｓ，３Ｈ）、１．３６（ｓ，９Ｈ）、１．４６（ｓ，９Ｈ）、１．４９（ｓ，６Ｈ）、１．５１（ｓ，９Ｈ）、１．８２－１．８９（ｍ，４Ｈ）、２．２２（ｓ，３Ｈ）、５．８０（ｄ，１Ｈ）、５．９９（ｓ，１Ｈ）、６．２４（ｓ，１Ｈ）、６．５６（ｄ，１Ｈ）、６．９２（ｄ，１Ｈ）、７．２０（ｄｄ，１Ｈ）、７．２２－７．２８（ｍ，２Ｈ）、７．４４－７．４７（ｍ，２Ｈ）、７．６３（ｄ，１Ｈ）、７．６８（ｄ，２Ｈ）、７．９６（ｓ，１Ｈ）、８．７８（ｄ，１Ｈ）．

【１３０９】

【化７９７】



(X-107) (1F-107)

【１３１０】

合成例（１０８）

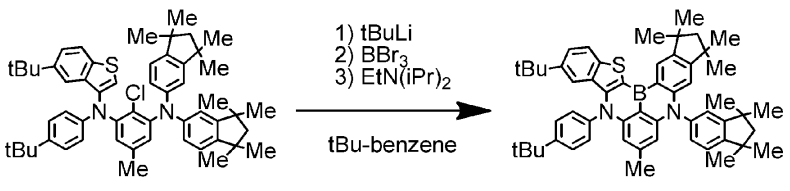
化合物（１Ｆ－１０８）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１０８）を用いて式（１Ｆ－１０８）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．０９（ｓ，９Ｈ）、１．１８（ｄ，６Ｈ）、１．３２（ｄ，６Ｈ）、１．４６（ｄ，６Ｈ）、１．５０（ｓ，９Ｈ）、１．５２（ｓ，６Ｈ）、１．９６（ｓ，２Ｈ）、２．０６（ｓ，２Ｈ）、２．２１（ｓ，３Ｈ）、６．０７（ｓ，２Ｈ）、６．２５（ｓ，１Ｈ）、６．５１（ｓ，１Ｈ）、７．０８（ｄ，１Ｈ）、７．１７（ｄｄ，１Ｈ）、７．３８－７．４１（ｍ，２Ｈ）、７．４７（ｄ，２Ｈ）、７．６５（ｄ，２Ｈ）、７．８８（ｄ，１Ｈ）、８．５１（ｓ，１Ｈ）．

【１３１１】

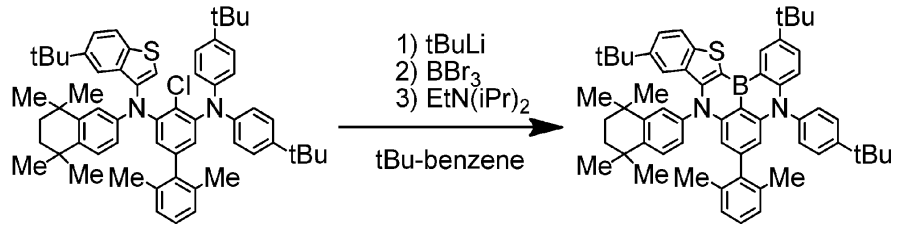
【化７９８】



(X-108) (1F-108)

【１３１２】
合成例（１０９）
化合物（１Ｆ－１０９）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１０９）を用いて式（１Ｆ－１０９）で表される化合物が得られる。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．１１（ｓ，９Ｈ）、１．１８－１．２４（ｍ，６Ｈ）、１．３７－１．４５（ｍ，１５Ｈ）、１．５１（ｓ，９Ｈ）、１．７１－１．８０（ｍ，４Ｈ）、１．９４（ｓ，６Ｈ）、６．０７（ｓ，１Ｈ）、６．１１（ｓ，１Ｈ）、６．４８－６．５５（ｍ，２Ｈ）、６．９７－７．０９（ｍ，３Ｈ）、７．２３（ｄ，２Ｈ）、７．３０（ｄｄ，１Ｈ）、７．３９－７．４３（ｍ，２Ｈ）、７．４６（ｄｄ，１Ｈ）、７．５７－７．６４（ｍ，３Ｈ）、７．９１（ｄ，１Ｈ）、８．８２（ｄ，１Ｈ）．

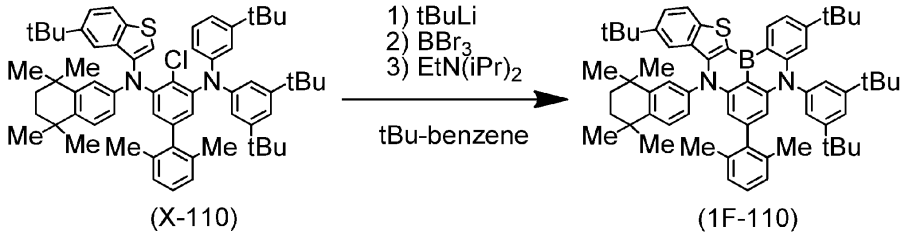
【１３１３】
【化７９９】



(X-109) (1F-109)

【１３１４】
合成例（１１０）
化合物（１Ｆ－１１０）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１０）を用いて式（１Ｆ－１１０）で表される化合物が得られる。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．１１（ｓ，９Ｈ）、１．１７－１．２４（ｍ，１５Ｈ）、１．３２（ｓ，１８Ｈ）、１．３７－１．４５（ｍ，６Ｈ）、１．７１－１．８０（ｍ，４Ｈ）、１．９７（ｓ，６Ｈ）、６．１１（ｓ，１Ｈ）、６．１４（ｓ，１Ｈ）、６．５２（ｄｄ，２Ｈ）、６．９７－７．０９（ｍ，３Ｈ）、７．１８（ｄ，２Ｈ）、７．２８－７．３４（ｍ，２Ｈ）、７．３８－７．４３（ｍ，２Ｈ）、７．５２（ｔ，１Ｈ）、７．６０（ｄ，１Ｈ）、７．８９（ｄ，１Ｈ）、８．７２（ｄ，１Ｈ）．

【１３１５】
【化８００】



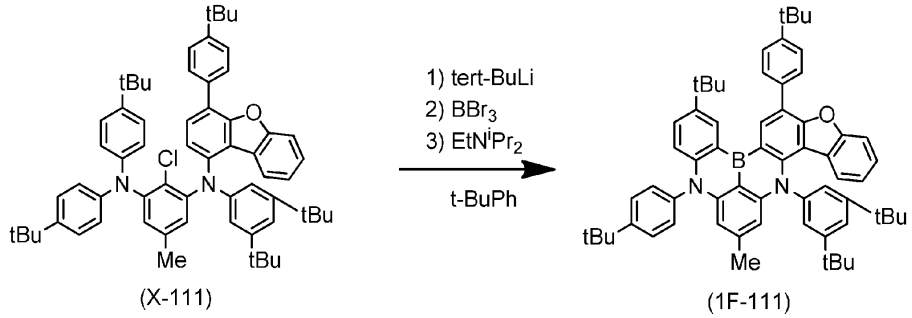
(X-110) (1F-110)

【１３１６】
合成例（１１１）
化合物（１Ｆ－１１１）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１１）を用いて式（１Ｆ－１１１）で表される化合物が得られる。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．２（ｓ，１８Ｈ），１．４（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），１．５（ｓ，９Ｈ），２．２（ｓ，３Ｈ），５．９（ｄ，１Ｈ），６．１（ｓ，１Ｈ），６．３（ｓ，１Ｈ），６．６（ｔ，１Ｈ），６．７（ｄ，１Ｈ），７．１

（ｔ，１Ｈ），７．３（ｄ，２Ｈ），７．４～７．５（ｍ，３Ｈ），７．５（ｍ，２Ｈ），７．６（ｄ，２Ｈ），７．７（ｄ，２Ｈ），８．１（ｄ，２Ｈ），８．９（ｄ，１Ｈ），９．１（ｓ，１Ｈ）．

【１３１７】

【化８０１】



【１３１８】

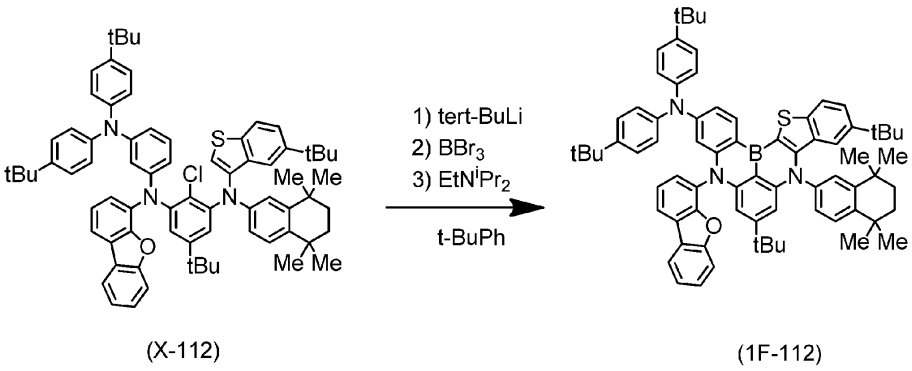
合成例（１１２）

化合物（１Ｆ－１１２）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１２）を用いて式（１Ｆ－１１２）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　１０６７．５９７７（ｃａｌｃｄ　Ｃ$_{74}$Ｈ$_{78}$ＢＮ$_{3}$ＯＳ、１０６７．５９５９）．

【化８０２】



【１３１９】

合成例（１１３）

化合物（１Ｆ－１１３）の合成

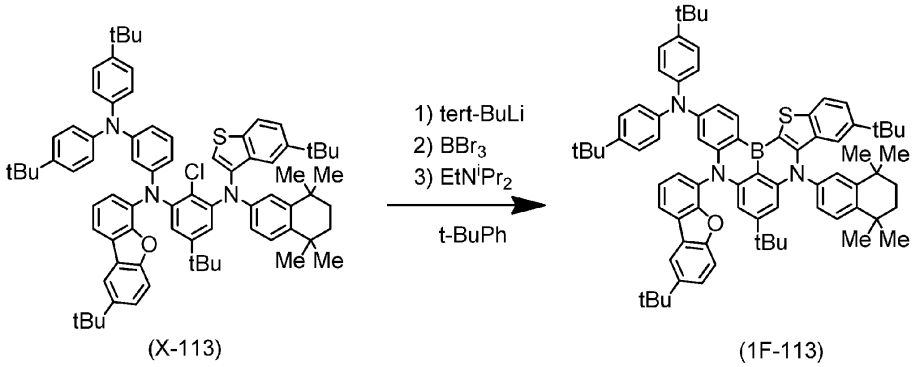
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１３）を用いて式（１Ｆ－１１３）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　１１２３．６５８８（ｃａｌｃｄ　Ｃ$_{78}$Ｈ$_{86}$ＢＮ$_{3}$ＯＳ、１１２３．６５８５）．

Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ＝０．９（ｓ、９Ｈ）、１．１（ｓ、９Ｈ）、１．２（ｓ、１８Ｈ）、１．３（ｍ、６Ｈ）、１．４～１．５（ｍ、１５Ｈ）、１．７～１．８（ｍ、４Ｈ）、６．２（ｄ、１Ｈ）、６．３（ｄ、２Ｈ）、６．７（ｓ、１Ｈ）、６．８（ｄ、１Ｈ）、６．９（ｑ、８Ｈ）、７．２（ｄｄ、１Ｈ）、７．４（ｍ、４Ｈ）、７．５（ｄ、２Ｈ）、７．６（ｄｄ、１Ｈ）、７．９（ｄ、１Ｈ）、７．９（ｔ、１Ｈ）、８．０（ｄ、１Ｈ）、８．５（ｄ、１Ｈ）．

【１３２０】

【化８０３】



(X-113) (1F-113)

【１３２１】

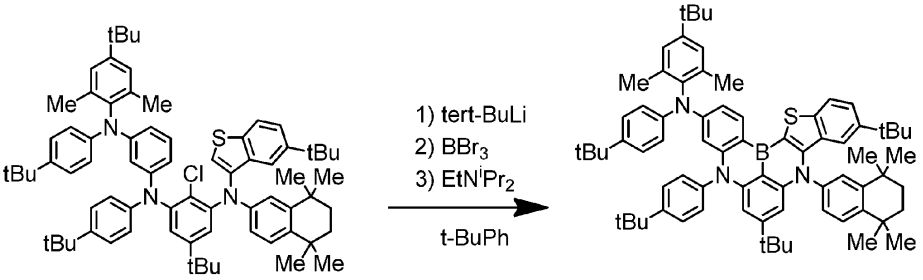
合成例（１１４）

化合物（１Ｆ－１１４）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１４）を用いて式（１Ｆ－１１４）で表される化合物が得られる。

ＨＲＭＳ ｍ／ｚ １０６１，６７８８（ｃａｌｃｄ $C_{74}H_{88}BN_3S$、１０６１．６７９２）

【化８０４】



(X-114) (1F-114)

【１３２２】

合成例（１１５）

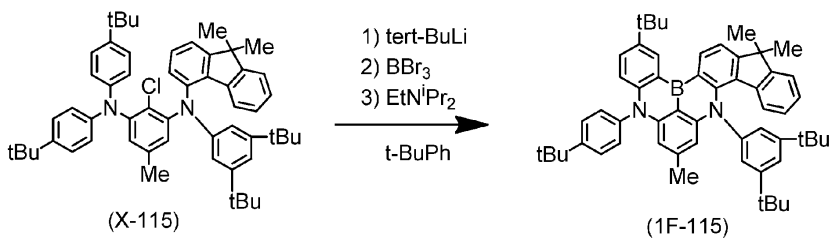
化合物（１Ｆ－１１５）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１５）を用いて式（１Ｆ－１１５）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．１（ｓ、１８Ｈ）、１，４（ｓ、９Ｈ）、１．５（ｓ、９Ｈ）、１．５（ｓ、６Ｈ）、２．２（ｓ、３Ｈ），６．２（ｓ、１Ｈ）、６．７（ｄ、１Ｈ）、７．０（ｔ、１Ｈ）、７．１（ｍ、２Ｈ）、７．２（ｓ、１Ｈ）、７．３（ｄ、２Ｈ）、７．３（ｄ、２Ｈ）、７．４（ｄ、１Ｈ）、７．６（ｄｄ、１Ｈ）、７．６（ｄｄ、２Ｈ）、７．８（ｄ、２Ｈ）、８．７（ｄ、１Ｈ）、８．８（ｓ、１Ｈ）．

【１３２３】

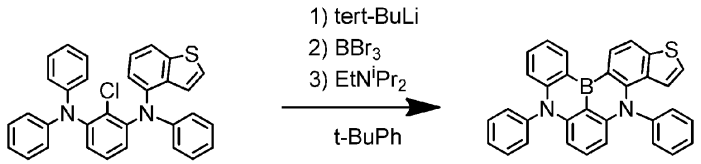
【化８０５】



(X-115) (1F-115)

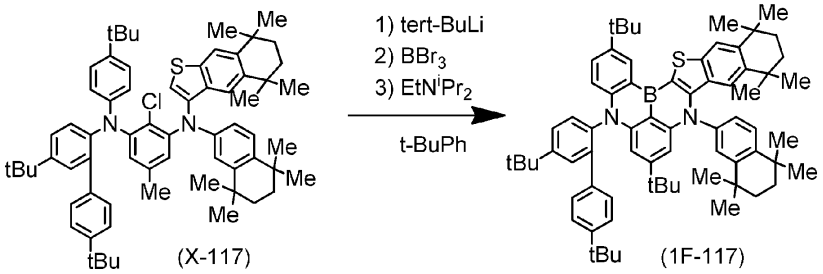
【１３２４】

合成例（１１６）
化合物（１Ｆ－１１６）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１６）を用いて式（１Ｆ－１１６）で表される化合物が得られる。
ＨＲＭＳ　ｍ／ｚ　４７６．１５２２（ｃａｌｃｄ　$C_{32}H_{21}BN_2S$、４７６．１５１８）．
【化８０６】



(X-116)　(1F-116)

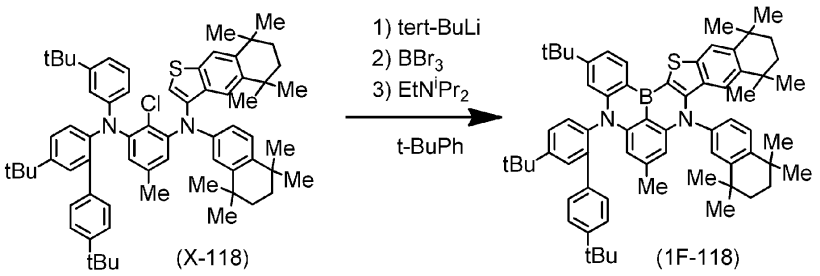
【１３２５】
合成例（１１７）
化合物（１Ｆ－１１７）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１７）を用いて式（１Ｆ－１１７）で表される化合物が得られる。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝０．９（ｍ、６Ｈ）、１．１（ｄ、９Ｈ）、１．３～１．４（ｍ、１２Ｈ）、１．５（ｍ、２４Ｈ）、１．６～１．７（ｍ、４Ｈ）、１．７～１．８（ｍ、４Ｈ）、２．２（ｄ、３Ｈ）、６．６（ｄ、２Ｈ）、６．５（ｄ、１Ｈ）、６．６（ｔ、１Ｈ）、７．０（ｄ、１Ｈ）、７．１（ｄ、１Ｈ）、７．１～７．２（ｍ、４Ｈ）、７．４（ｍ、１Ｈ）、７．５（ｍ、１Ｈ）、７．６（ｍ、１Ｈ）、７．７（ｍ、１Ｈ）、７．９（ｓ、１Ｈ）、８．７（ｔ、１Ｈ）．
【１３２６】
【化８０７】



(X-117)　(1F-117)

【１３２７】
合成例（１１８）
化合物（１Ｆ－１１８）の合成
合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１８）を用いて式（１Ｆ－１１８）で表される化合物が得られる。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）：δ＝１．１（ｍ、１５Ｈ）、１．１（ｄ、９Ｈ）、１．２（ｓ、９Ｈ）、１．３～１．４（ｍ、１２Ｈ）、１．４（ｓ、３Ｈ）、１．５（ｓ、１２Ｈ）、１．６～１．７（ｍ、４Ｈ）、１．７～１．９（ｍ、４Ｈ）、６．２（ｂｒｄ、２Ｈ）、６．６（ｓ、１Ｈ）、６．７（ｓ、１Ｈ）、７．０（ｔ、２Ｈ）、７．１～７．２（ｍ、５Ｈ）、７．５（ｄ、１Ｈ）、７．６（ｄ、１Ｈ）、７．７（ｔ、１Ｈ）、７．７（ｓ、１Ｈ）、７．９（ｓ、１Ｈ）、８．６（ｄ、１Ｈ）．
【１３２８】

【化８０８】



【１３２９】

合成例（１１９）

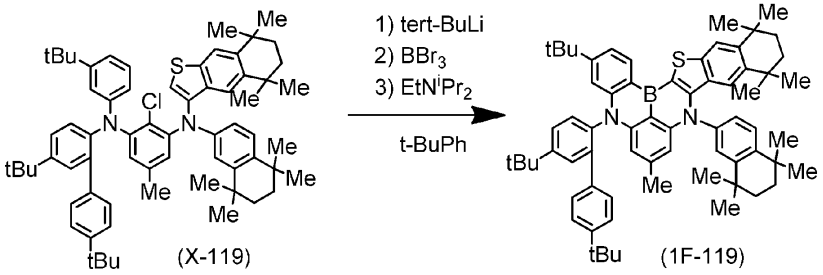
化合物（１Ｆ－１１９）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１９）を用いて式（１Ｆ－１１９）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ＝　１．０（ｄ、６Ｈ）、１．１（ｄ、９Ｈ）、１．２（ｓ、９Ｈ）、１．３～１．４（ｍ、１２Ｈ）、１．５（ｍ、１５Ｈ）、１．６～１．７（ｍ、４Ｈ）、１．８～１．９（ｍ、４Ｈ）、２．２（ｄ、３Ｈ）、６．０（ｄ、１Ｈ）、６．２（ｓ、１Ｈ）、６．５（ｄ、１Ｈ）、６．６（ｄｄ、１Ｈ）、７．０（ｄ、１Ｈ）、７．０（ｄ、１Ｈ）、７．１～７．２（ｍ、５Ｈ）、７．５（ｄｄ、１Ｈ）、７．６（ｄｔ、１Ｈ）、７．７（ｔ、１Ｈ）、７．７（ｄｄ、１Ｈ）、７．８（ｄ、１Ｈ）、８．６（ｄｄ、１Ｈ）．

【１３３０】

【化８０９】



【１３３１】

合成例（１１９）

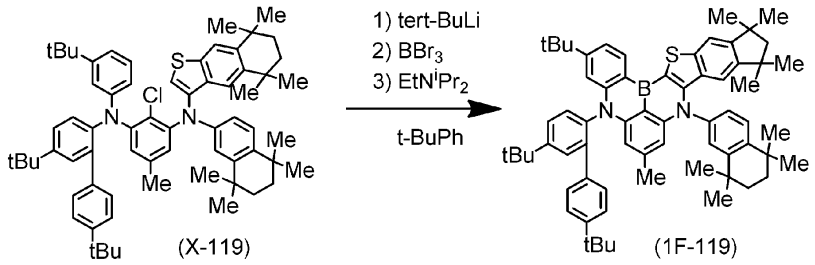
化合物（１Ｆ－１１９）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１１９）を用いて式（１Ｆ－１１９）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ＝　１．０～１．２（ｍ、２４Ｈ）、１．３（ｍ、１２Ｈ）、１，５（ｍ、１５Ｈ）、１．８～１．９（ｍ、４Ｈ）、１．９（ｓ、２Ｈ）、２．２（ｓ、３Ｈ）、５．９（ｄ、１Ｈ），６．２（ｓ、１Ｈ），６．２（ｓ、１Ｈ），６．６（ｄ、１Ｈ），７．０（ｄ、１Ｈ）、７．０（ｄ、１Ｈ）、７．１～７．３（ｍ、５Ｈ）、７．５（ｄｄ、１Ｈ）、７．６（ｍ、３Ｈ）、７．７（ｄｄ、１Ｈ）、８．６（ｄｄ、１Ｈ）．

【１３３２】

【化８１０】



【１３３３】

合成例（１２０）

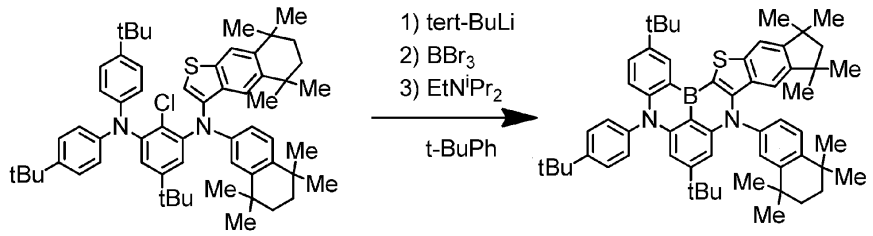
化合物（１Ｆ－１２０）の合成

合成例（１）と同様の方法を用いて、化合物（Ｘ－１２０）を用いて式（１Ｆ－１２０）で表される化合物が得られる。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ＝１．０（ｓ、９Ｈ）、１．１（ｓ、３Ｈ）、１．１（ｓ、３Ｈ）、１．３（ｓ、６Ｈ）、１．４（ｓ、６Ｈ）、１．５（ｍ、２４Ｈ）、１．７～１．９（ｍ、４Ｈ）、１．９（ｓ、２Ｈ）、６．０（ｓ、１Ｈ）、６．１（ｂｒｓ、１Ｈ）、６．３（ｂｒｓ、１Ｈ）、６．６（ｓ、１Ｈ）、７．２（ｄｄ、１Ｈ）、７．３（ｄ、２Ｈ）、７．５（ｄｄ、１Ｈ）、７．５（ｄ、１Ｈ）、７．６～７．７（ｍ、４Ｈ）、８．８（ｓ、１Ｈ）．

【１３３４】

【化８１１】



【１３３５】

原料の化合物を適宜変更することにより、上述した合成例に準じた方法で、本発明の他の多環芳香族化合物を合成することができる。

【１３３６】

次に、本発明をさらに詳細に説明するために、本発明の化合物を用いた有機ＥＬ素子の実施例を示すが、本発明はこれらに限定されない。

【１３３７】

＜蒸着型有機ＥＬ素子の評価＞

実施例１に係る有機ＥＬ素子を作製し、１０００ｃｄ／ｍ^{2}発光時の特性である電圧（Ｖ）、発光波長（ｎｍ）、外部量子効率（％）を測定し、次に１０ｍＡ／ｃｍ^{2}の電流密度で定電流駆動した際の初期輝度の９０％以上の輝度を保持する時間を測定する。

【１３３８】

発光素子の量子効率には、内部量子効率と外部量子効率とがあるが、内部量子効率は、発光素子の発光層に電子（または正孔）として注入される外部エネルギーが純粋に光子に変換される割合を示している。一方、外部量子効率は、この光子が発光素子の外部にまで放出された量に基づいて算出され、発光層において発生した光子は、その一部が発光素子の内部で吸収されたりまたは反射され続けたりして、発光素子の外部に放出されないため、外部量子効率は内部量子効率よりも低くなる。

【１３３９】

外部量子効率の測定方法は次の通りである。アドバンテスト社製電圧／電流発生器Ｒ６１４４を用いて、素子の輝度が１０００ｃｄ／ｍ^{2}になる電圧を印加して素子を発光させた。ＴＯＰＣＯＮ社製分光放射輝度計ＳＲ－３ＡＲを用いて、発光面に対して垂直方向から可視光領域の分光放射輝度を測定した。発光面が完全拡散面であると仮定して、測定した各波長成分の分光放射輝度の値を波長エネルギーで割ってπを掛けた数値が各波長におけるフォトン数である。次いで、観測した全波長領域でフォトン数を積算し、素子から放出された全フォトン数とした。印加電流値を素電荷で割った数値を素子へ注入したキャリア数として、素子から放出された全フォトン数を素子へ注入したキャリア数で割った数値が外部量子効率である。

【１３４０】

実施例１～８８および比較例１～４に係る有機ＥＬ素子における各層の材料構成を下記表１に示す。

【表１】

		正孔注入層1（40nm）	正孔注入層2（5nm）	正孔輸送層1（45nm）	正孔輸送層2（10nm）	発光層（25nm）		電子輸送層1（5nm）	電子輸送層2（25nm）	陰極1nm/100nm
						ホスト	ドーパント			
実施例1		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−1	化合物（1F−1）	ET−1	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例2		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−1）	ET−1	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例3		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−2）	ET−2	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例4		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−3）	ET−1	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例5		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−3	化合物（1F−3）	ET−2	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例6		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−1	化合物（1F−4）	ET−2	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例7		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−4）	ET−1	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例8		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−5）	ET−1	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例9		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−6）	ET−1	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例10		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−3	化合物（1F−6）	ET−2	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例11		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−1	化合物（1F−7）	ET−2	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例12		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−7）	ET−2	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例13		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−8）	ET−1	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例14		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−9）	ET−2	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例15		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−3	化合物（1F−9）	ET−1	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例16		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−10）	ET−2	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例17		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−3	化合物（1F−10）	ET−2	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例18		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−2	化合物（1F−11）	ET−1	ET−3+Liq	LiF/Al
実施例19		HI	HAT−CN	HT−1	HT−2	BH−3	化合物（1F−11）	ET−2	ET−3+Liq	LiF/Al

実施例20		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-1	化合物(1F-12)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例21		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-12)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例22		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-12)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例23		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-13)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例24		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-13)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例25		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-14)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例26		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-3	化合物(1F-14)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例27		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-15)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例28		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-3	化合物(1F-15)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例29		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-1	化合物(1F-16)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例30		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-16)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例31		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-17)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例32		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-3	化合物(1F-17)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例33		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-18)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例34		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-3	化合物(1F-18)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例35		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-1	化合物(1F-19)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例36		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-19)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例37		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-1	化合物(1F-20)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例38		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-20)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例39		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-21)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例40		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-3	化合物(1F-21)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al

実施例41		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-22)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例42		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-3	化合物(1F-22)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例43		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-23)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例44		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-3	化合物(1F-23)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例45		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-24)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例46		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-3	化合物(1F-24)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例47		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-1	化合物(1F-25)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例48		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-26)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例49		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-27)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例50		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-28)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例51		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-3	化合物(1F-29)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例52		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-1	化合物(1F-30)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例53		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-31)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例54		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-32)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例55		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-33)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例56		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-3	化合物(1F-34)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例57		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-1	化合物(1F-35)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例58		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	化合物(1F-36)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例59		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-1	化合物(1F-37)	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例60		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-38)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例61		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-39)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al

実施例62		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-40)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例63		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-41)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例64		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-42)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例65		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-43)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例66		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-44)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例67		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-45)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例68		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-46)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例69		HI	HAT-CN	HT-1	HT-1	BH-2	化合物(1F-47)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例70		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-48)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例71		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-49)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例72		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-50)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例73		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-51)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例74		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-52)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例75		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-53)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例76		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-54)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例77		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-55)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例78		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-56)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例79		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-57)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例80		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-58)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例81		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-59)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例82		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物(1F-60)	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al

実施例83		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-61）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例84		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-62）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例85		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-63）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例86		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-4	化合物（1F-24）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例87		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-5	化合物（1F-24）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例88		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-6	化合物（1F-24）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例89		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-24）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例90		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-64）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例91		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-65）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例92		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-66）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例93		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-67）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例94		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-68）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例95		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-69）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例96		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-71）	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例97		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-71）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例98		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-72）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例99		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-73）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例100		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-74）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例101		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-75）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例102		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-76）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例103		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-2	化合物（1F-77）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al

実施例104		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-78）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例105		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-79）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例106		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-80）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例107		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-81）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例108		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-82）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例109		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-83）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例110		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-84）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例111		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-85）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例112		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-86）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例113		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-87）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例114		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-88）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例115		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-2	化合物（1F-89）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例116		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-7	化合物（1F-90）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例117		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-7	化合物（1F-11）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例118		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-7	化合物（1F-74）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例119		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-7	化合物（1F-91）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例120		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-7	化合物（1F-92）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例121		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-7	化合物（1F-93）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例122		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-7	化合物（1F-94）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例123		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-7	化合物（1F-95）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例124		HI	HAT−CN	HT−1	HT−1	BH-8	化合物（1F-96）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al

実施例125		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-9	化合物（1F-97）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例126		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-9	化合物（1F-98）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例127		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-10	化合物（1F-99）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例128		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-10	化合物（1F-100）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例129		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-11	化合物（1F-101）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例130		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-10	化合物（1F-102）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例131		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-11	化合物（1F-103）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例132		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-10	化合物（1F-104）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例133		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-11	化合物（1F-105）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例134		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-11	化合物（1F-106）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例135		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-10	化合物（1F-107）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例136		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-10	化合物（1F-108）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例137		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-11	化合物（1F-109）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例138		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-11	化合物（1F-110）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例139		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-10	化合物（1F-111）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例140		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-11	化合物（1F-112）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例141		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-10	化合物（1F-113）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例142		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-11	化合物（1F-114）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例143		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-11	化合物（1F-115）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例144		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-8	化合物（1F-116）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例145		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-10	化合物（1F-116）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al

実施例146		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-8	化合物（1F-117）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例147		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-8	化合物（1F-118）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例148		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-8	化合物（1F-119）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
実施例149		HI	HAT－CN	HT－1	HT－1	BH-8	化合物（1F-120）	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
比較例1		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-1	比較化合物-1	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
比較例2		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	比較化合物-1	ET-1	ET-3+Liq	LiF/Al
比較例3		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-2	比較化合物-1	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
比較例4		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-3	比較化合物-1	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
比較例5		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-8	比較化合物-1	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al
比較例6		HI	HAT-CN	HT-1	HT-2	BH-11	比較化合物-1	ET-2	ET-3+Liq	LiF/Al

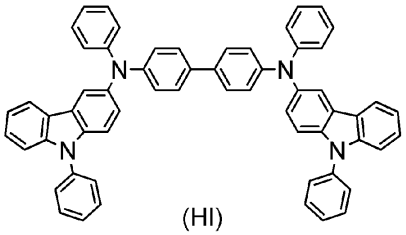
【１３４１】

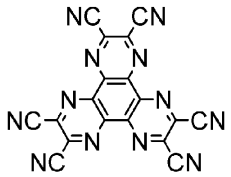
表１において、「ＨＩ」はＮ^{4}，Ｎ$^{4'}$－ジフェニル－Ｎ^{4}，Ｎ$^{4'}$－ビス（９－フェニル－９Ｈ－カルバゾール－３－イル）－［１，１’－ビフェニル］－４，４’－ジアミンであり、「ＨＡＴ－ＣＮ」は１，４，５，８，９，１２－ヘキサアザトリフェニレンヘキサカルボニトリルであり、「ＨＴ－１」はＮ－（［１，１’－ビフェニル］－４－イル－９，９－ジメチル－Ｎ－［４－（９－フェニル－９Ｈ－カルバゾール－３－イル）フェニル）－９Ｈ－フルオレン－２－アミン［１，１’－ビフェニル］－４－アミンであり、「ＨＴ－２」はＮ，Ｎ－ビス（４－（ジベンゾ［ｂ，ｄ］フラン－４－イル）フェニル）－［１，１’：４’，１”－テルフェニル］－４－アミンであり、「ＢＨ－１」は２－（１０－フェニルアントラセン－９－イル）ナフト［２，３－ｂ］ベンゾフランであり、「ＢＨ－２」は、２－（１０－フェニルアントラセン－９－イル）ジベンゾ［ｂ、ｄ］フランであり、「ＢＨ－３」は９－（［２，２’－ビナフタレン］－７－イル）－１０－フェニルアントラセンであり、「ＢＨ－４」は２，７，１０，１５－テトラフェニルジベンゾ［ｇ、ｐ］クリセンであり、「ＢＨ－５」は２－（ジベンゾ［ｇ、ｐ］クリセン－２－イル）ナフト［２，３－ｂ］ジベンゾフランであり、「ＢＨ－６」は５，９－ジ（ナフタレン－２－イル）スピロ［ベンゾ［ｃ］フルオレン－７，９’－フルオレンであり、「ＢＨ－７」は８－（フェニル－ｄ５）－１－（１０－（フェニル－ｄ５）アントラセン－９－イル）ジベンゾ［ｂ、ｄ］フランであり、「ＢＨ－８」は２－フェニル－８－（１０－フェニルアントラセン－９－イル）ジベンゾ［ｂ、ｄ］フランであり、「ＢＨ－９」は４－フェニル－６－（１０－フェニルアントラセン－９－イル）ジベンゾ［ｂ、ｄ］フランであり、「ＢＨ－１０」は１０－（［１，１’－ビフェニル］－２－イル）－１，８－ジフェニルアントラセンであり、「ＢＨ－１１」は２－（４，５－ジフェニルアントラセン－９－イル）－８－フェニルジベンゾ［ｂ、ｄ］フランであり、「ＥＴ－１」は４，６，８，１０－テトラフェニル［１，４］ベンゾキサボリニノ［２，３，４－ｋｌ］フェノキサボリニンであり、「ＥＴ－２」は、９，９’－（５－（６－（１，１’－ビフェニル）－４－イル）－２－フェニ

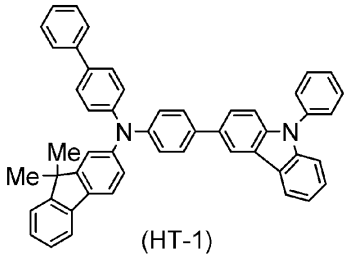
ルピリミジン－４－イル）－１，３－フェニレン］ビス（９Ｈ－カルバゾール）であり、「ＥＴ－３」は２，２’－［（２－フェニルアントラセン－９，１０－ジイル）ジベンゼン－４，１－ジイル］ジピリジンである。「Ｌｉｑ」および「比較化合物－１」と共に以下に化学構造を示す。

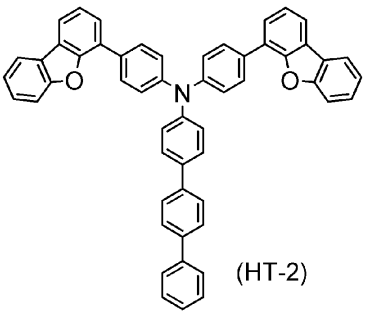
【１３４２】

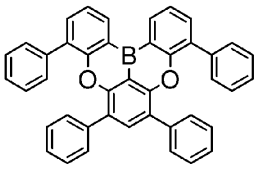
【化８１２】

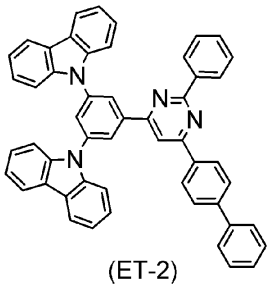

(HI)


(HAT-CN)


(HT-1)

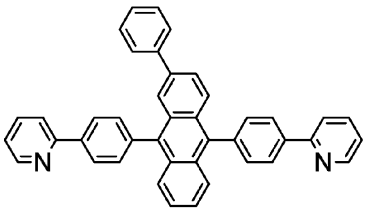

(HT-2)


(ET-1)

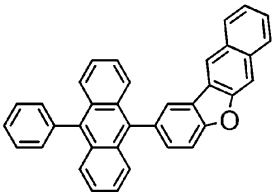

(ET-2)

【１３４３】

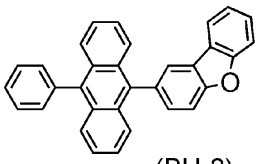
【化８１３】



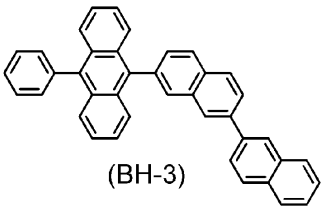
(ET-3)



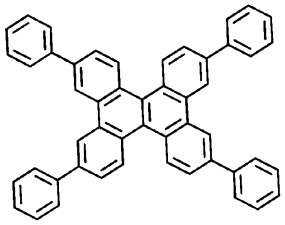
(BH-1)



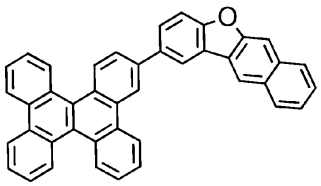
(BH-2)



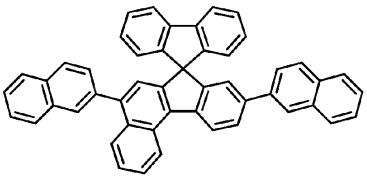
(BH-3)



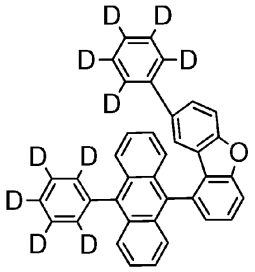
(BH-4)



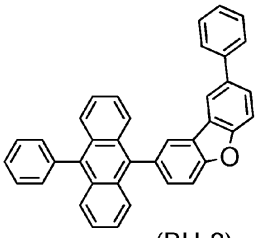
(BH-5)



(BH-6)



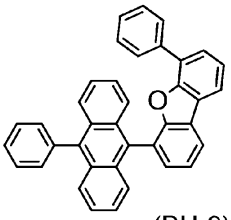
(BH-7)

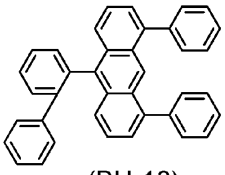


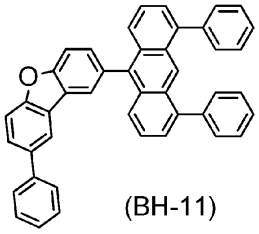
(BH-8)

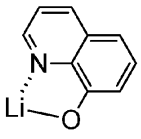
【１３４４】

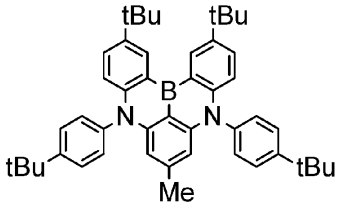
【化８１４】


(BH-9)


(BH-10)


(BH-11)


(Liq)



（比較化合物ー1）

【１３４５】

スパッタリングにより１８０ｎｍの厚さに成膜したＩＴＯを１５０ｎｍまで研磨した、２６ｍｍ×２８ｍｍ×０．７ｍｍのガラス基板（（株）オプトサイエンス製）を透明支持基板とする。この透明支持基板を市販の蒸着装置（昭和真空（株）製）の基板ホルダーに固定し、ＨＩ、ＨＡＴ－ＣＮ、ＨＴ－１、ＨＴ－２、ＢＨ－１、化合物（１Ｆ－１）、ＥＴ－１およびＥＴ－２をそれぞれ入れたモリブデン製蒸着用ボート、Ｌｉｑ、ＬｉＦおよびアルミニウムをそれぞれ入れた窒化アルミニウム製蒸着用ボートを装着する。

【１３４６】

透明支持基板のＩＴＯ膜の上に順次、下記各層を形成する。真空槽を５×１０$^{-4}$Ｐａまで減圧し、まず、ＨＩを加熱して膜厚４０ｎｍになるように蒸着し、次に、ＨＡＴ－ＣＮを加熱して膜厚５ｎｍになるように蒸着し、次に、ＨＴ－１を加熱して膜厚４５ｎｍになるように蒸着し、次に、ＨＴ－２を加熱して膜厚１０ｎｍになるように蒸着して、４層からなる正孔層を形成する。次に、ＢＨ－１と化合物（１Ｆ－１）を同時に加熱して膜厚２５ｎｍになるように蒸着して発光層を形成する。ＢＨ－１と化合物（１Ｆ－１）の質量比がおよそ９８対２になるように蒸着速度を調節する。さらに、ＥＴ－１を加熱して膜厚５ｎｍになるように蒸着し、次に、ＥＴ－３とＬｉｑを同時に加熱して膜厚２５ｎｍになるように蒸着して、２層からなる電子層を形成する。ＥＴ－３とＬｉｑの質量比がおよそ５０対５０になるように蒸着速度を調節する。各層の蒸着速度は０．０１～１ｎｍ／秒である。その後、ＬｉＦを加熱して膜厚１ｎｍになるように０．０１～０．１ｎｍ／秒の蒸着速度で蒸着し、次いで、アルミニウムを加熱して膜厚１００ｎｍになるように蒸着して陰極を形成し、実施例１の有機ＥＬ素子を得る。実施例２～６９、比較例１～４についても同様にする。

【１３４７】

ＩＴＯ電極を陽極、ＬｉＦ／アルミニウム電極を陰極として直流電圧を印加し、１０００ｃｄ／ｍ^{2}発光時の特性を測定し、また、初期輝度の９０％以上の輝度を保持する時間を測定する。

結果を表２に示す。

【１３４８】

【表２】

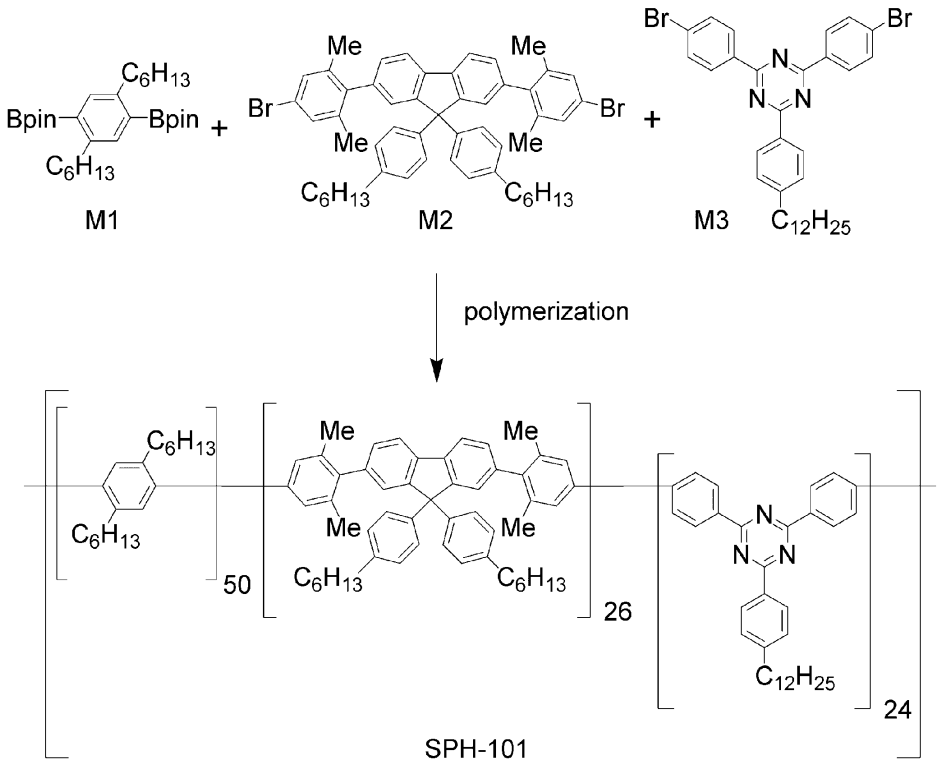
	初期輝度の 90%以上の輝度を保持した時間（hr）	電圧（V）	外部量子効率（%）
実施例1	158	3.82	7.80
実施例2	178	3.91	7.52
実施例3	162	3.77	7.32
実施例4	155	3.75	7.58
実施例5	180	4.01	7.47
実施例6	150	3.83	7.62
実施例7	158	3.78	7.94
実施例8	172	3.98	7.91
実施例9	158	4..18	7.77
実施例10	166	3.65	7.84
実施例11	155	3.73	7.31
実施例12	170	3.88	7.74
実施例13	162	4.18	7.54
実施例14	158	3.98	7.47
実施例15	183	3.65	7.58
実施例16	179	3.72	7.78
実施例17	160	3.70	7.94
実施例18	146	4.11	7.45
実施例19	178	3.63	7.69
実施例20	145	3.71	7.97
実施例21	190	3.78	7.88
実施例22	145	3.88	7.49
実施例23	171	3.63	7.44
実施例24	183	3.65	7.58
実施例25	182	3.55	7.78
実施例26	172	3.90	7.74
実施例27	156	4.01	7.25
実施例28	198	3.68	7.79
実施例29	155	3.91	7.87
実施例30	190	3.68	7.81
実施例31	152	3.48	7.52
実施例32	171	3.83	7.41
実施例33	193	3.65	7.48
実施例34	176	3.52	7.78
実施例35	170	3.75	7.90
実施例36	156	4.14	7.40
実施例37	168	3.73	7.61
実施例38	172	3.71	7.84
実施例39	188	3.68	7.42
実施例40	155	3.88	7.69
実施例41	170	3.93	7.54
実施例42	183	3.65	7.38
実施例43	186	3.69	7.22
実施例44	180	3.88	7.43
実施例45	156	3.78	7.71
実施例46	149	3.87	7.66

実施例47	210	3.69	7.62
実施例48	215	3.72	7.83
実施例49	232	3.69	7.47
実施例50	241	3.74	7.49
実施例51	203	3.99	7.83
実施例52	201	3.73	7.71
実施例53	244	3.82	7.68
実施例54	226	4.01	7.59
実施例55	231	3.85	7.73
実施例56	218	3.76	7.77
実施例57	230	3.81	7.42
実施例58	241	3.99	7.51
実施例59	225	3.79	7.61
実施例60	211	3.98	7.76
実施例61	215	3.85	7.96
実施例62	236	3.79	7.86
実施例63	199	3.92	7.75
実施例64	222	4.05	7.91
実施例65	243	4.01	7.69
実施例66	234	3.78	7.89
実施例67	251	3.69	7.78
実施例68	249	3.72	7.76
実施例69	259	3.61	7.85
実施例70	199	4.01	7.16
実施例71	185	3.67	7.15
実施例72	192	3.95	7.11
実施例73	203	4.12	7.09
実施例74	205	4.55	7.01
実施例75	187	4.32	7.20
実施例76	179	4.18	7.16
実施例77	185	4.15	7.12
実施例78	203	3.98	7.05
実施例79	206	3.78	6.98
実施例80	211	3.99	6.95
実施例81	209	4.05	6.93
実施例82	291	4.15	8.03
実施例83	285	4.02	8.10
実施例84	278	3.97	8.22
実施例85	293	4.11	8.16
実施例86	153	4.23	7.01
実施例87	162	4.21	7.12
実施例88	171	4.00	7.19
実施例89	246	4.22	7.01
実施例90	245	4.17	7.22
実施例91	255	3.96	6.98
実施例92	262	4.02	7.25
実施例93	249	4.12	6.88
実施例94	270	4.01	7..01
実施例95	271	4.32	7.13

実施例96	269	4.02	7.15
実施例97	292	4.22	7.03
実施例98	280	4.19	6.87
実施例99	279	4.15	7.12
実施例100	285	4.36	6.98
実施例101	278	3.85	6.95
実施例102	292	3.92	6.88
実施例103	277	4.13	7.22
実施例104	162	4.21	6.95
実施例105	171	4.00	6.85
実施例106	322	3.95	7.11
実施例107	310	4.12	7.09
実施例108	298	4.22	7.00
実施例109	278	4.18	6.95
実施例110	269	4.07	6.89
実施例111	287	3.98	7.12
実施例112	356	4.01	7.21
実施例113	368	3.89	7.33
実施例114	195	4.02	6.85
実施例115	188	3.97	6.77
実施例116	362	4.08	7.89
実施例117	282	4.01	7.65
実施例118	299	4.26	7.18
実施例119	272	4.05	7.35
実施例120	288	4.00	7.28
実施例 121	282	3.98	7.22
実施例 122	365	3.78	7.68
実施例 123	377	3.77	7.88
実施例 124	262	3.93	7.72
実施例 125	253	3.72	7.68
実施例 126	245	3.85	7.51
実施例 127	360	4.01	7.78
実施例 128	371	3.99	7.91
実施例 129	375	4.12	7.77
実施例 130	359	4.05	7.72
実施例 131	361	4.12	7.69
実施例 132	321	3.85	7.83
実施例 133	346	3.79	7.52
実施例 134	377	4.05	7.69
実施例 135	331	4.11	7.83
実施例 136	348	3.92	7.80
実施例 137	345	3.85	7.91
実施例 138	351	4.11	7.65
実施例 139	321	4.22	7.83
実施例 140	320	3.88	7.45
実施例 141	344	3.79	7.72
実施例 142	361	3.95	7.93
実施例 143	377	4.13	7.61
実施例 144	99	4.23	6.83

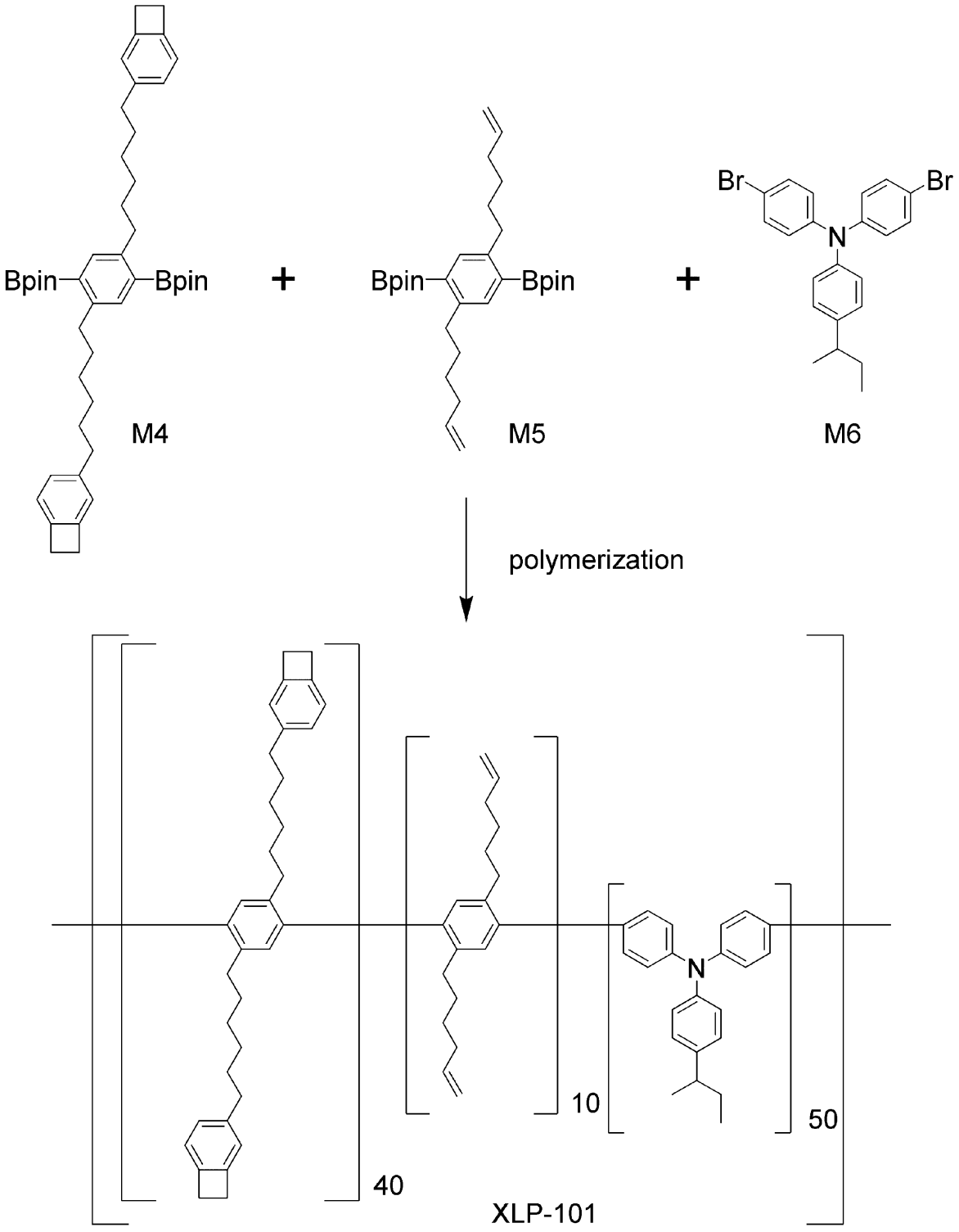
実施例 145	101	4.15	6.87
実施例 146	255	3,95	7.32
実施例 147	269	3.81	7.87
実施例 148	298	3.92	7.77
実施例 149	272	4.00	7.62
比較例1	68	4.01	6.10
比較例2	53	4.22	6.31
比較例3	71	3.99	6.67
比較例4	62	4.05	6.42
比較例 5	55	4.29	6.31
比較例 6	62	4.13	6.29

【１３４９】
＜塗布型有機ＥＬ素子の評価＞
次に、有機層を塗布形成して得られる有機ＥＬ素子について説明する。
【１３５０】
＜高分子ホスト化合物：ＳＰＨ－１０１の合成＞
国際公開第２０１５／００８８５１号に記載の方法に従い、ＳＰＨ－１０１を合成した。Ｍ１の隣にはＭ２またはＭ３が結合した共重合体が得られ、仕込み比より各ユニットは５０：２６：２４（モル比）であると推測される。
【１３５１】
【化８１５】



【１３５２】
＜高分子正孔輸送化合物：ＸＬＰ－１０１の合成＞
特開２０１８－６１０２８号公報に記載の方法に従い、下記のようにＸＬＰ－１０１を合成した。Ｍ７の隣にはＭ２またはＭ３が結合した共重合体が得られ、仕込み比より各ユニットは４０：１０：５０（モル比）であると推測される。なお、下記式において、Ｂｐｉｎはピナコラートボリルを表す。

【１３５３】
【化８１６】



【１３５４】
＜実施例１０２～１１０＞
各層を形成する材料の塗布用溶液を調製して塗布型有機ＥＬ素子を作製する。
【１３５５】
＜実施例１０２～１０４の有機ＥＬ素子の作製＞
有機ＥＬ素子における、各層の材料構成を表３に示す。
【１３５６】

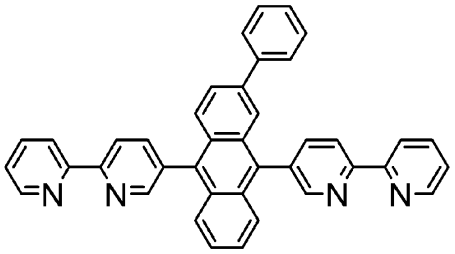
【表３】

	正孔注入層（40nm）	正孔輸送層（30nm）	発光層（20nm）		電子輸送層（30nm）	陰極（1nm/100nm）
			ホスト	ドーパント		
実施例 102	PEDOT:PSS	OTPD	SPH-101	（1F-1）	ET4	LiF/Al
実施例 103	PEDOT:PSS	XLP-101	SPH-101	（1F-1）	ET4	LiF/Al
実施例 104	PEDOT:PSS	PCz	SPH-101	（1F-1）	ET4	LiF/Al

【１３５７】

表３における、「ＥＴ４」の構造を以下に示す。

【化８１７】



ET4

【１３５８】

＜発光層形成用組成物（１）の調製＞

下記成分を均一な溶液になるまで撹拌することで発光層形成用組成物（１）を調製する。調製した発光層形成用組成物をガラス基板にスピンコートし、減圧下で加熱乾燥することによって、膜欠陥がなく平滑性に優れた塗布膜が得られる。

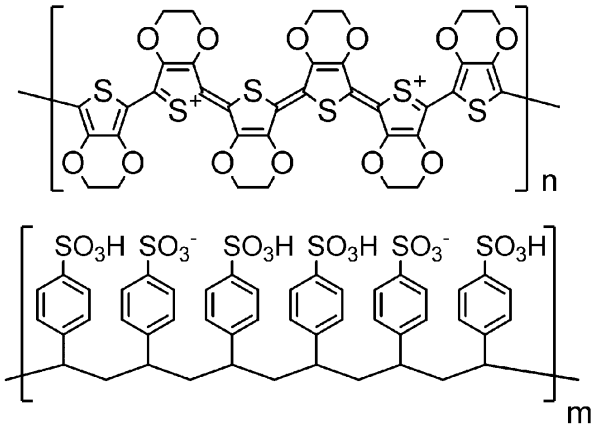
化合物（１Ｆ－１）	０．０４ 質量％
ＳＰＨ－１０１	１．９６ 質量％
キシレン	６９．００ 質量％
デカリン	２９．００ 質量％

【１３５９】

＜ＰＥＤＯＴ：ＰＳＳ溶液＞

市販のＰＥＤＯＴ：ＰＳＳ溶液（Clevios(TM) P VP AI4083、ＰＥＤＯＴ：ＰＳＳの水分散液、Heraeus Holdings社製）を用いる。

【化８１８】



PEDOT:PSS

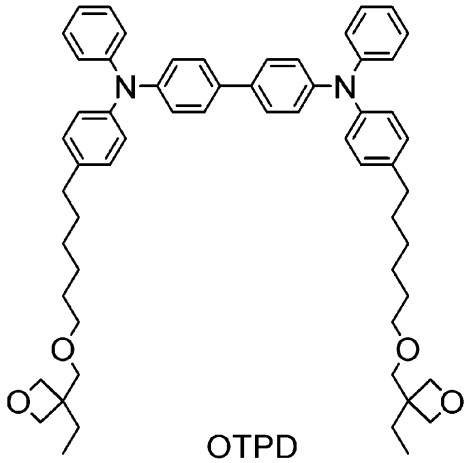
【１３６０】

＜ＯＴＰＤ溶液の調製＞

ＯＴＰＤ（LT-N159、Luminescence Technology Corp社製）およびＩＫ－２（光カチオン重合開始剤、サンアプロ社製）をトルエンに溶解させ、ＯＴＰＤ濃度０．７質量％、ＩＫ－２濃度０．００７質量％のＯＴＰＤ溶液を調製する。

【１３６１】

【化８１９】



OTPD

【１３６２】

＜ＸＬＰ－１０１溶液の調製＞

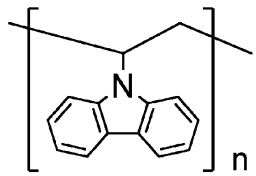
キシレンにＸＬＰ－１０１を０．６質量％の濃度で溶解させ、０．７質量％ＸＬＰ－１０１溶液を調製する。

【１３６３】

＜ＰＣｚ溶液の調製＞

ＰＣｚ（ポリビニルカルバゾール）をジクロロベンゼンに溶解させ、０．７質量％ＰＣｚ溶液を調製する。

【化８２０】



PCz

【１３６４】

＜実施例１０２＞

ＩＴＯが１５０ｎｍの厚さに蒸着されたガラス基板上に、ＰＥＤＯＴ：ＰＳＳ溶液をスピンコートし、２００℃のホットプレート上で１時間焼成することで、膜厚４０ｎｍのＰＥＤＯＴ：ＰＳＳ膜を成膜する（正孔注入層）。次いで、ＯＴＰＤ溶液をスピンコートし、８０℃のホットプレート上で１０分間乾燥した後、露光機で露光強度１００ｍＪ／ｃｍ^{2}で露光し、１００℃のホットプレート上で１時間焼成することで、溶液に不溶な膜厚３０ｎｍのＯＴＰＤ膜を成膜する（正孔輸送層）。次いで、発光層形成用組成物（１）をスピンコートし、１２０℃のホットプレート上で１時間焼成することで、膜厚２０ｎｍの発光層を成膜する。

【１３６５】

作製した多層膜を市販の蒸着装置（昭和真空（株）製）の基板ホルダーに固定し、ＥＴ１を入れたモリブデン製蒸着用ボート、ＬｉＦを入れたモリブデン製蒸着用ボート、アルミニウムを入れたタングステン製蒸着用ボートを装着する。真空槽を５×１０$^{-4}$Ｐａまで減圧した後、ＥＴ１を加熱して膜厚３０ｎｍになるように蒸着して電子輸送層を形成す

る。電子輸送層を形成する際の蒸着速度は１ｎｍ／秒とする。その後、ＬｉＦを加熱して膜厚１ｎｍになるように０．０１～０．１ｎｍ／秒の蒸着速度で蒸着する。次いで、アルミニウムを加熱して膜厚１００ｎｍになるように蒸着して陰極を形成する。このようにして有機ＥＬ素子を得る。

【１３６６】

＜実施例１０３＞

実施例１０２と同様の方法で有機ＥＬ素子を得る。なお、正孔輸送層は、ＸＬＰ－１０１溶液をスピンコートし、２００℃のホットプレート上で１時間焼成することで、膜厚３０ｎｍの膜を成膜する。

【１３６７】

＜実施例１０４＞

実施例１０２と同様の方法で有機ＥＬ素子を得る。なお、正孔輸送層は、ＰＣｚ溶液をスピンコートし、１２０℃のホットプレート上で１時間焼成することで、膜厚３０ｎｍの膜を成膜する。

【１３６８】

＜実施例１０５～１０７の有機ＥＬ素子の作製＞

有機ＥＬ素子における、各層の材料構成を表４に示す。

【１３６９】

【表４】

	正孔注入層（50nm）	正孔輸送層（20nm）	発光層（20nm）		電子輸送層（30nm）	陰極（1nm/100nm）
			ホスト	ドーパント		
実施例 105	ND-3202	XLP-101	mCBP	（1F-1）	TSPO1	LiF/Al
実施例 106	ND-3202	XLP-101	SPH-101	（1F-1）	TSPO1	LiF/Al
実施例 107	ND-3202	XLP-101	DOBNA	（1F-1）	TSPO1	LiF/Al

【１３７０】

＜発光層形成用組成物（２）～（４）の調製＞

下記成分を均一な溶液になるまで撹拌することで発光層形成用組成物（２）を調製する。

化合物（１Ｆ－１）	０．０２　質量％
ｍＣＢＰ	１．９８　質量％
トルエン	９８．００　質量％

【１３７１】

下記成分を均一な溶液になるまで撹拌することで発光層形成用組成物（３）を調製する。

化合物（１Ｆ－１）	０．０２　質量％
ＳＰＨ－１０１	１．９８　質量％
キシレン	９８．００　質量％

【１３７２】

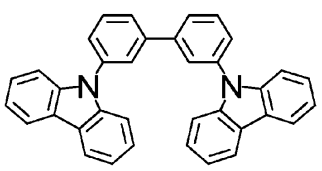
下記成分を均一な溶液になるまで撹拌することで発光層形成用組成物（４）を調製する。

化合物（１Ｆ－１）	０．０２　質量％
ＤＯＢＮＡ	１．９８　質量％
トルエン	９８．００　質量％

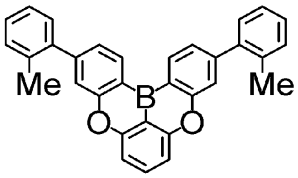
【１３７３】

表４において、「ｍＣＢＰ」は３，３’－ビス（Ｎ－カルバゾリル）－１，１’－ビフェニルであり、「ＤＯＢＮＡ」は３，１１－ジ－ｏ－トリル－５，９－ジオキサ－１３ｂ－ボラナフト［３，２，１－ｄｅ］アントラセンであり、「ＴＳＰＯ１」はジフェニル［４－（トリフェニルシリル）フェニル］ホスフィンオキシドである。以下に化学構造を示す。

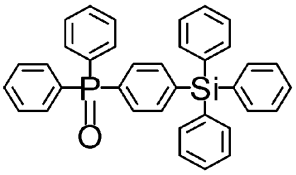
【化８２１】



mCBP



DOBNA



TSPO1

【１３７４】

＜実施例１０５＞

ＩＴＯが４５ｎｍの厚さに成膜されたガラス基板上に、ＮＤ－３２０２（日産化学工業製）溶液をスピンコートした後、大気雰囲気下において、５０℃、３分間加熱し、更に２３０℃、１５分間加熱することで、膜厚５０ｎｍのＮＤ－３２０２膜を成膜する（正孔注入層）。次いで、ＸＬＰ－１０１溶液をスピンコートし、窒素ガス雰囲気下において、ホットプレート上で２００℃、３０分間加熱させることで、膜厚２０ｎｍのＸＬＰ－１０１膜を成膜する（正孔輸送層）。次いで、発光層形成用組成物（２）をスピンコートし、窒素ガス雰囲気下において、１３０℃、１０分間加熱させることで、２０ｎｍの発光層を成膜する。

【１３７５】

作製した多層膜を市販の蒸着装置（昭和真空（株）製）の基板ホルダーに固定し、ＴＳＰＯ１を入れたモリブデン製蒸着用ボート、ＬｉＦを入れたモリブデン製蒸着用ボート、アルミニウムを入れたタングステン製蒸着用ボートを装着する。真空槽を５×１０$^{-4}$Ｐａまで減圧した後、ＴＳＰＯ１を加熱して膜厚３０ｎｍになるように蒸着して電子輸送層を形成する。電子輸送層を形成する際の蒸着速度は１ｎｍ／秒とする。その後、ＬｉＦを加熱して膜厚１ｎｍになるように０．０１～０．１ｎｍ／秒の蒸着速度で蒸着する。次いで、アルミニウムを加熱して膜厚１００ｎｍになるように蒸着して陰極を形成する。このようにして有機ＥＬ素子を得る。

【１３７６】

＜実施例１０６および１０７＞

発光層形成用組成物（３）または（４）を用いて、実施例５と同様の方法で有機ＥＬ素子を得る。

【１３７７】

＜実施例１０８～１１０の有機ＥＬ素子の作製＞

有機ＥＬ素子における、各層の材料構成を表５に示す。

【１３７８】

【表５】

	正孔注入層 50nm	正孔輸送層 20nm	発光層 20nm			電子輸送層 30nm	陰極 1nm/100nm
			ホスト	アシスティングドーパント	ドーパント		
実施例108	ND-3202	XLP-101	mCBP	2PXZ-TAZ	(1F-1)	TSPO1	LiF/Al
実施例109	ND-3202	XLP-101	SPH-101	2PXZ-TAZ	(1F-1)	TSPO1	LiF/Al
実施例110	ND-3202	XLP-101	DOBNA	2PXZ-TAZ	(1F-1)	TSPO1	LiF/Al

【１３７９】

＜発光層形成用組成物（５）～（７）の調製＞

下記成分を均一な溶液になるまで撹拌することで発光層形成用組成物（５）を調製する。

化合物（１Ｆ－１）　　０．０２　質量％

２ＰＸＺ－ＴＡＺ　　０．１８　質量％
ｍＣＢＰ　　１．８０　質量％
トルエン　　９８．００　質量％

【１３８０】

下記成分を均一な溶液になるまで撹拌することで発光層形成用組成物（６）を調製する。

化合物（１Ｆ－１）　　０．０２　質量％
２ＰＸＺ－ＴＡＺ　　０．１８　質量％
ＳＰＨ－１０１　　１．８０　質量％
キシレン　　９８．００　質量％

【１３８１】

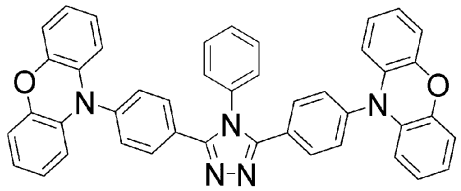
下記成分を均一な溶液になるまで撹拌することで発光層形成用組成物（７）を調製する。

化合物（１Ｆ－１）　　０．０２　質量％
２ＰＸＺ－ＴＡＺ　　０．１８　質量％
ＤＯＢＮＡ　　１．８０　質量％
トルエン　　９８．００　重量％

【１３８２】

表５において、「２ＰＸＺ－ＴＡＺ」は１０，１０’－（（４－フェニル－４Ｈ－１，２，４－トリアゾール－３，５－ジイル）ビス（４，１－フェニル））ビス（１０Ｈ－フェノキサジン）である。以下に化学構造を示す。

【化８２２】



(2PXZ-TAZ)

【１３８３】

＜実施例１０８＞

ＩＴＯが４５ｎｍの厚さに成膜されたガラス基板上に、ＮＤ－３２０２（日産化学工業製）溶液をスピンコートした後、大気雰囲気下において、５０℃、３分間加熱し、更に２３０℃、１５分間加熱することで、膜厚５０ｎｍのＮＤ－３２０２膜を成膜する（正孔注入層）。次いで、ＸＬＰ－１０１溶液をスピンコートし、窒素ガス雰囲気下において、ホットプレート上で２００℃、３０分間加熱させることで、膜厚２０ｎｍのＸＬＰ－１０１膜を成膜する（正孔輸送層）。次いで、発光層形成用組成物（５）をスピンコートし、窒素ガス雰囲気下において、１３０℃、１０分間加熱させることで、２０ｎｍの発光層を成膜する。

【１３８４】

作製した多層膜を市販の蒸着装置（昭和真空（株）製）の基板ホルダーに固定し、ＴＳＰＯ１を入れたモリブデン製蒸着用ボート、ＬｉＦを入れたモリブデン製蒸着用ボート、アルミニウムを入れたタングステン製蒸着用ボートを装着する。真空槽を５×１０$^{-4}$Ｐａまで減圧した後、ＴＳＰＯ１を加熱して膜厚３０ｎｍになるように蒸着して電子輸送層を形成する。電子輸送層を形成する際の蒸着速度は１ｎｍ／秒とする。その後、ＬｉＦを加熱して膜厚１ｎｍになるように０．０１～０．１ｎｍ／秒の蒸着速度で蒸着する。次いで、アルミニウムを加熱して膜厚１００ｎｍになるように蒸着して陰極を形成する。このようにして有機ＥＬ素子を得る。

【１３８５】

＜実施例１０９および１１０＞

発光層形成用組成物（５）におけるホストをｍＣＢＰからそれぞれＳＰＨ－１０１およびＤＯＢＮＡに変更する以外は、実施例１０８と同様の方法で有機ＥＬ素子を得る。

【１３８６】
＜実施例＞
＜発光層形成用組成物の調製＞
実施例２０１～実施例２４６および比較例２０１に係る発光層形成用組成物を調製した。組成物の調製に用いた化合物を以下に示す。
【１３８７】
＜実施例２０１＞
下記成分を混合および撹拌することで発光層形成用組成物を調製した。

化合物（１－Ｆ１）	０．０１　質量％
化合物（３－７３）	０．９９　質量％
シクロヘキシルベンゼン	７０　質量％
３－フェノキシトルエン	３０　質量％

【１３８８】
＜実施例２０２～実施例２４６、比較例２０１＞
それぞれ、表６に記載の組成を用いて実施例２０１に準じた方法で発光層形成用組成物を調製した。
【１３８９】
＜評価＞
得られた実施例２０１～実施例２４６および比較例２０１にかかる発光層形成用組成物について溶解性および塗布性を評価した。
【１３９０】
（溶解性の評価）
化合物がすべて溶解し、均一な溶液が得られた例を「溶解」、不溶物が残った例を「不溶」とした。
【１３９１】
（塗布性の評価）
調製したインク組成物の溶解性の評価において「溶解」であったものに関して、スピンコート成膜後またはインクジェット印刷後に得られた膜の製膜性を評価した。製膜後に、膜に、ピンホールまたは析出またはムラのあるものを「不良」、ピンホール、化合物の析出およびムラのないものを「良好」、で示した。
【１３９２】
＜スピンコートでの塗布方法＞
厚み０．５mm、サイズ２８×２６mmの清浄なガラス基板に、照射エネルギー１０００mJ／cm^2（低圧水銀灯（２５４ナノメートル））を照射することでＵＶ－Ｏ３処理を行った。次いで、０．３～０．６mＬのインク組成物をガラス上に滴下し、スピンコート（スロープ、５秒間→５００～５０００ｒｐｍ、１０秒間→スロープ、５秒間）を行った。さらに、１２０℃のホットプレート上で１０分間乾燥させた。
【１３９３】
＜インクジェットでの塗布方法＞
塗布性につき、インクジェットを用いて、１００ｐｐｉのピクセル内に吐出し、１００℃で乾燥させた塗膜の成膜性を評価した。結果は表６にまとめた。
【１３９４】
＜粘度の測定方法＞
粘度は円錐平板型回転粘度計（コーンプレートタイプ）を用いて測定した。
【１３９５】
＜表面張力の測定方法＞
表面張力は、懸滴法を用いて測定した。
【１３９６】

【表６－１】

	濃度				第1成分	第2成分	第3成分	結果	
	固形分濃度	第１成分	第２成分	第３成分				溶解	塗布性
比較例201	1	0.01	0.99	99.0	比較化合物（1）	化合物（3－73）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例201	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-1）	化合物（3－73）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例202	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-2）	化合物（3－73）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例203	2	0.02	1.98	98.0	化合物（1F-3）	化合物（3－73）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例204	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-4）	化合物（3－73）	o-キシレン+シクロヘキシルベンゼン 7:3	溶解	良好
実施例205	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-5）	化合物（3－73）	トルエン+デカリン 7:3	溶解	良好
実施例206	1	0.01	0.79	99.0	化合物（1F-6）	化合物（3－75）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例207	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-7）	化合物（3－75）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例208	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-8）	化合物（3－75）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例209	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-9）	化合物（3－75）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例210	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-10）	化合物（3－78）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例211	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-11）	化合物（3－78）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例212	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-12）	化合物（3－78）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好

【１３９７】

【表６－２】

	濃度				第1成分	第2成分	第3成分	結果	
	固形分濃度	第１成分	第２成分	第３成分				溶解	塗布性
実施例213	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-13)	化合物(3－78)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例214	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-14)	化合物(3－78)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例215	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-15)	化合物(3－78)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例216	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-16)	化合物(3－76)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例217	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-17)	化合物(3－76)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例218	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-18)	化合物(3－76)	トルエン+デカヒドロナフタレン 9:1	溶解	良好
実施例219	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-19)	化合物(3－74)	3-フェノキシトルエン+シクロヘキシルベンゼン 9:1	溶解	良好
実施例220	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-20)	化合物(3－74)	アニソール+デカヒドロナフタレン 7:3	溶解	良好
実施例221	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-21)	化合物(3－74)	キシレン+1-メチルナフタレン 7:3	溶解	良好
実施例222	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-22)	化合物(3－74)	3-フェノキシトルエン+シクロヘキシルベンゼン 7:3	溶解	良好
実施例223	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-23)	化合物(3－74)	n-オクチルベンゼン+ジフェニルエーテル 7:3	溶解	良好
実施例224	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-24)	化合物(3－74)	シクロヘキシルベンゼン+ジフェニルエーテル 7:3	溶解	良好
実施例225	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-25)	化合物(3－77)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン+4-フルオロアニソール 6:3:1	溶解	良好

【１３９８】

【表６－３】

	濃度				第1成分	第2成分	第3成分	結果	
	固形分濃度	第1成分	第2成分	第3成分				溶解	塗布性
実施例226	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-26)	化合物(3－77)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例227	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-27)	化合物(3－77)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例228	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-28)	化合物(3－77)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例229	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-29)	化合物(3－77)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例230	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-30)	化合物(3－77)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例231	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-31)	化合物(3－77)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例232	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-32)	化合物(3－77)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例233	1	0.01	0.99	99.0	化合物(1F-33)	化合物(3－77)	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好

【１３９９】

【表６－４】

	濃度				第1成分	第2成分	第3成分	結果	
	固形分濃度	第１成分	第２成分	第３成分				溶解	塗布性
実施例234	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-34）	化合物（3－75）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例235	2	0.02	1.98	98.0	化合物（1F-35）	化合物（3－75）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例236	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-36）	化合物（3－75）	トルエン+デカヒドロナフタレン 9:1	溶解	良好
実施例237	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-37）	化合物（3－75）	3-フェノキシトルエン+シクロヘキシルベンゼン 9:1	溶解	良好
実施例238	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-38）	化合物（3－75）	アニソール+デカヒドロナフタレン 7:3	溶解	良好
実施例239	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-39）	化合物（3－75）	キシレン+1-メチルナフタレン 7:3	溶解	良好
実施例240	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-40）	化合物（3－75）	3-フェノキシトルエン+シクロヘキシルベンゼン 7:3	溶解	良好
実施例241	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-41）	化合物（3－75）	n-オクチルベンゼン+ジフェニルエーテル 7:3	溶解	良好
実施例242	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-42）	化合物（3－73）	シクロヘキシルベンゼン+ジフェニルエーテル 7:3	溶解	良好
実施例243	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-43）	化合物（3－73）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン+4-フルオロアニソール 6:3:1	溶解	良好
実施例244	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-44）	化合物（3－73）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例245	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-45）	化合物（3－73）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好
実施例246	1	0.01	0.99	99.0	化合物（1F-46）	化合物（3－73）	シクロヘキシルベンゼン+3-フェノキシトルエン 7:3	溶解	良好

【１４００】

＜塗布型有機ＥＬ素子の評価＞

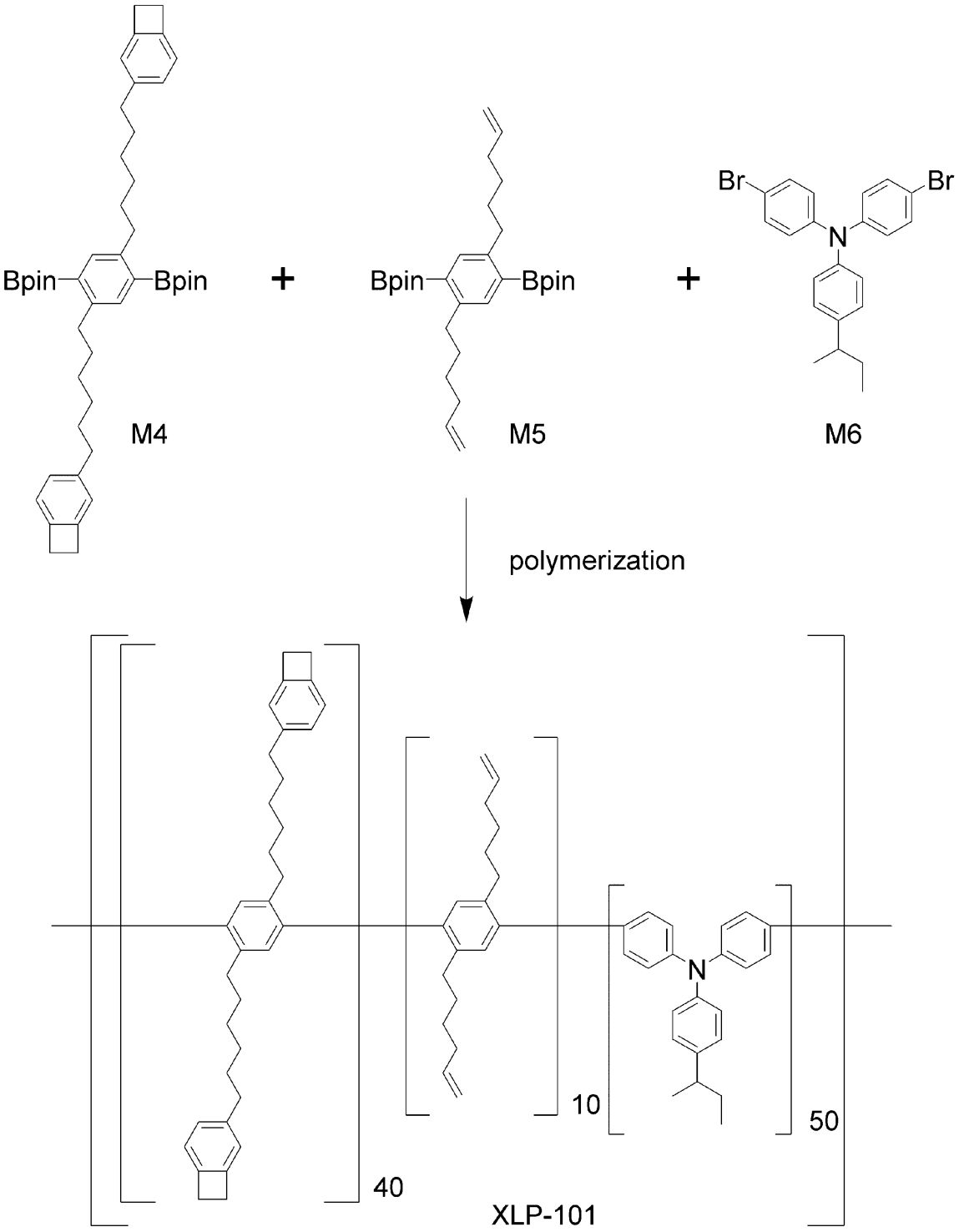
次に、有機層を塗布形成して得られる有機ＥＬ素子について説明する。

【１４０１】

＜高分子正孔輸送化合物：ＸＬＰ－１０１の合成＞

特開２０１８－６１０２８号公報に記載の方法に従い、下記のようにＸＬＰ－１０１を合成した。Ｍ４の隣にはＭ５またはＭ６が結合した共重合体が得られ、仕込み比より各ユニットは４０：１０：５０（モル比）であると推測される。なお、下記式において、Ｂｐｉｎはピナコラートボリルである。

【１４０２】
【化８２３】



【１４０３】
＜実施例３０１～実施例３４６、比較例３０１の有機ＥＬ素子の作製＞
有機ＥＬ素子における、各層の材料構成を表７に示す。
【１４０４】

【表７】

	正孔注入層（40nm）	正孔輸送層（30nm）	発光層（20nm）組成物	電子輸送層（30nm）	陰極（1nm/100nm）	効率[%]
比較例301	PEDOT:PSS	OTPD	比較例201	ET5	LiF/Al	3.6
実施例301	PEDOT:PSS	OTPD	実施例201	ET5	LiF/Al	5.7
実施例302	PEDOT:PSS	OTPD	実施例202	ET5	LiF/Al	5.2
実施例303	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例203	ET5	LiF/Al	5.7
実施例304	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例204	ET5	LiF/Al	5.5
実施例305	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例205	ET5	LiF/Al	4.9
実施例306	PEDOT:PSS	PCz	実施例206	ET5	LiF/Al	5.1
実施例307	PEDOT:PSS	PCz	実施例207	ET5	LiF/Al	5.1
実施例308	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例208	ET5	LiF/Al	5.2
実施例309	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例209	ET5	LiF/Al	5.8
実施例310	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例210	ET5	LiF/Al	5.8
実施例311	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例211	ET5	LiF/Al	5.4
実施例312	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例212	ET5	LiF/Al	5.6
実施例313	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例213	ET5	LiF/Al	5.4
実施例314	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例214	ET5	LiF/Al	5.8
実施例315	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例215	ET1	LiF/Al	5.9
実施例316	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例216	ET5	LiF/Al	5.8

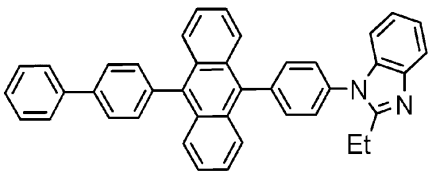
実施例317	PEDOT:PSS	OTPD	実施例217	ET5	LiF/Al	5.6
実施例318	PEDOT:PSS	OTPD	実施例218	ET5	LiF/Al	5.1
実施例319	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例219	ET5	LiF/Al	5.9
実施例320	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例220	ET5	LiF/Al	5.3
実施例321	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例221	ET5	LiF/Al	5.1
実施例322	PEDOT:PSS	PCz	実施例222	ET5	LiF/Al	5.2
実施例323	PEDOT:PSS	PCz	実施例223	ET5	LiF/Al	5.1
実施例324	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例224	ET5	LiF/Al	5.6
実施例325	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例225	ET5	LiF/Al	5.7
実施例326	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例226	ET5	LiF/Al	5.8
実施例327	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例227	ET5	LiF/Al	5.5
実施例328	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例228	ET5	LiF/Al	5.7
実施例329	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例229	ET5	LiF/Al	5.4
実施例330	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例230	ET5	LiF/Al	5.8
実施例331	PEDOT:PSS	OTPD	実施例231	ET5	LiF/Al	5.4
実施例332	PEDOT:PSS	OTPD	実施例232	ET5	LiF/Al	5.5
実施例333	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例233	ET5	LiF/Al	5.6

実施例334	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例234	ET5	LiF/Al	5.5
実施例335	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例235	ET5	LiF/Al	5.3
実施例336	PEDOT:PSS	PCz	実施例236	ET5	LiF/Al	5.1
実施例337	PEDOT:PSS	PCz	実施例237	ET5	LiF/Al	5.4
実施例338	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例238	ET5	LiF/Al	5.6
実施例339	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例239	ET5	LiF/Al	5.8
実施例340	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例240	ET5	LiF/Al	5.7
実施例341	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例241	ET5	LiF/Al	5.3
実施例342	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例242	ET5	LiF/Al	5.6
実施例343	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例243	ET5	LiF/Al	5.4
実施例344	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例244	ET5	LiF/Al	5.5
実施例345	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例245	ET5	LiF/Al	5.8
実施例346	PEDOT:PSS	XLP-101	実施例246	ET5	LiF/Al	5.1

【１４０５】

表７における、「ＥＴ５」の構造を以下に示す。

【化８２４】



ET5

Ｅｔはエチルである。

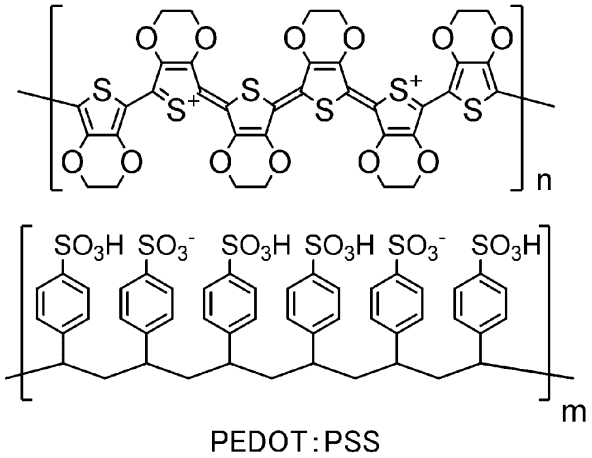
【１４０６】

＜ＰＥＤＯＴ：ＰＳＳ溶液＞

市販のＰＥＤＯＴ：ＰＳＳ溶液（Clevios(TM) P VP AI4083、ＰＥＤＯＴ：ＰＳＳの水分散液、Heraeus Holdings社製）を用いた。

【１４０７】

【化８２５】



PEDOT:PSS

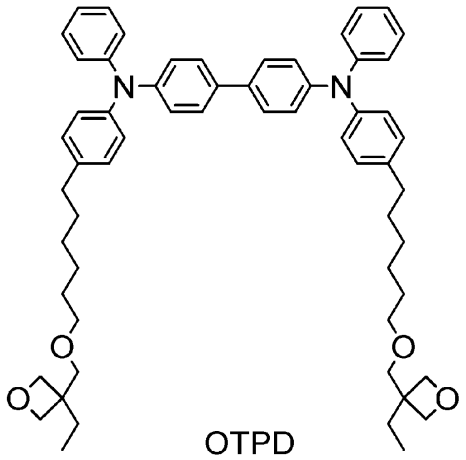
【１４０８】

＜ＯＴＰＤ溶液の調製＞

ＯＴＰＤ（LT-N159、Luminescence Technology Corp社製）およびＩＫ－２（光カチオン重合開始剤、サンアプロ社製）をトルエンに溶解させ、ＯＴＰＤ濃度０．７質量％、ＩＫ－２濃度０．００７質量％のＯＴＰＤ溶液を調製した。

【１４０９】

【化８２６】



OTPD

【１４１０】

＜ＸＬＰ－１０１溶液の調製＞

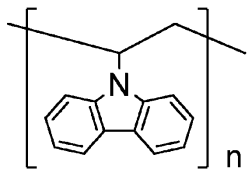
キシレンにＸＬＰ－１０１を０．６質量％の濃度で溶解させ、０．６質量％ＸＬＰ－１０１溶液を調製した。

【１４１１】

＜ＰＣｚ溶液の調製＞

ＰＣｚ（ポリビニルカルバゾール、平均分子量1,100,000 g/mol）をジクロロベンゼンに溶解させ、０．７質量％ＰＣｚ溶液を調製した。

【化８２７】



PCz

【１４１２】

＜実施例３０１＞

ＩＴＯが１５０ｎｍの厚さに蒸着されたガラス基板上に、ＰＥＤＯＴ：ＰＳＳ溶液をスピンコートし、２００℃のホットプレート上で１時間焼成することで、膜厚４０ｎｍのＰＥＤＯＴ：ＰＳＳ膜を成膜した（正孔注入層）。次いで、ＯＴＰＤ溶液をスピンコートし、８０℃のホットプレート上で１０分間乾燥した後、露光機で露光強度１００ｍＪ／ｃｍ^{2}で露光し、１００℃のホットプレート上で１時間焼成することで、溶液に不溶な膜厚３０ｎｍのＯＴＰＤ膜を成膜した（正孔輸送層）。次いで、実施例２０１で調製した発光層形成用組成物をスピンコートし、１２０℃のホットプレート上で１時間焼成することで、膜厚２０ｎｍの発光層を成膜した。

【１４１３】

作製した多層膜を市販の蒸着装置（昭和真空（株）製）の基板ホルダーに固定し、ＥＴ１を入れたモリブデン製蒸着用ボート、ＬｉＦを入れたモリブデン製蒸着用ボート、アルミニウムを入れたタングステン製蒸着用ボートを装着した。真空槽を５×１０$^{-4}$Ｐａまで減圧した後、ＥＴ１を加熱して膜厚３０ｎｍになるように蒸着して電子輸送層を形成した。電子輸送層を形成する際の蒸着速度は１ｎｍ／秒とした。その後、ＬｉＦを加熱して膜厚１ｎｍになるように０．０１～０．１ｎｍ／秒の蒸着速度で蒸着した。次いで、アルミニウムを加熱して膜厚１００ｎｍになるように蒸着して陰極を形成した。このようにして有機ＥＬ素子を得た。

【１４１４】

＜実施例３０２＞～＜実施例３４６＞および＜比較例３０１＞

実施例３０１で調製した発光層形成用組成物の替わりに表７に記載の各実施例で調製した発光層形成用組成物を用いた以外、実施例３０１と同様の手順で有機ＥＬ素子を作製した。

【産業上の利用可能性】

【１４１５】

本発明の多環芳香族化合物は有機デバイス用材料、特に有機電界発光素子の発光層形成のための発光層用材料として有用である。本発明の化合物を発光層に用いることで、高効率、長寿命な有機ＥＬ素子を提供することができる。

【符号の説明】

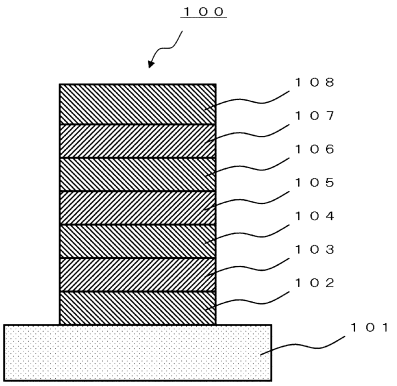
【１４１６】

１００　有機電界発光素子
１０１　基板
１０２　陽極
１０３　正孔注入層
１０４　正孔輸送層
１０５　発光層
１０６　電子輸送層
１０７　電子注入層
１０８　陰極
１１０　基板

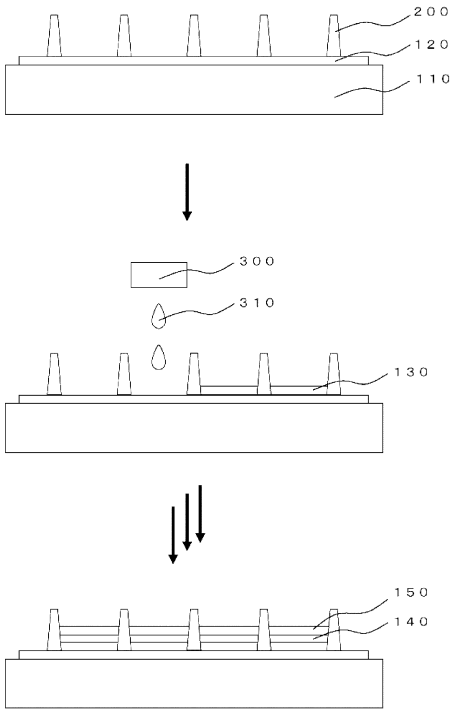
１２０　電極
１３０　塗膜
１４０　塗膜
１５０　発光層
２００　バンク
３００　インクジェットヘッド
３１０　インクの液滴

【図面】

【図１】



【図２】



フロントページの続き

(51)国際特許分類			FI		
H10K	*50/10*	*(2023.01)*	H05B	33/14	B
H05B	*33/22*	*(2006.01)*	H05B	33/22	A
H10K	*50/16*	*(2023.01)*	H05B	33/22	B
H10K	*50/15*	*(2023.01)*	H05B	33/22	D

(32)優先日　令和1年10月16日(2019.10.16)
(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)
(31)優先権主張番号　特願2019-219152(P2019-219152)
(32)優先日　令和1年12月3日(2019.12.3)
(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)
(31)優先権主張番号　特願2020-43590(P2020-43590)
(32)優先日　令和2年3月13日(2020.3.13)
(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)

Ｃ石油化学株式会社 市原研究所内
(72)発明者　川角 亮介
千葉県市原市五井海岸５番地の１　ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内
(72)発明者　笹田 康幸
千葉県市原市五井海岸５番地の１　ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内
(72)発明者　町田 詠希
千葉県市原市五井海岸５番地の１　ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内
(72)発明者　田中 裕之
千葉県市原市五井海岸５番地の１　ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内
(72)発明者　奥村 一雄
千葉県市原市五井海岸５番地の１　ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内
(72)発明者　近藤 靖宏
千葉県市原市五井海岸５番地の１　ＪＮＣ石油化学株式会社 市原研究所内

審査官　前田 憲彦

(56)参考文献
特開２０１８－０４３９８４（ＪＰ，Ａ）
特表２０２２－５１０３１８（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２０１９／０８８７９９（WO，Ａ１）
国際公開第２０１８／２０３６６６（WO，Ａ１）
国際公開第２０１７／１８８１１１（WO，Ａ１）
国際公開第２０１６／１５２５４４（WO，Ａ１）
国際公開第２０１５／１０２１１８（WO，Ａ１）
国際公開第２０２０／１１１８３０（WO，Ａ１）
韓国公開特許第２０１８－０１２０６１９（ＫＲ，Ａ）
国際公開第２０１６／１５２４１８（WO，Ａ１）

(58)調査した分野　(Int.Cl.，ＤＢ名)
Ｃ０７Ｆ　５／
Ｃ０９Ｋ　１１／
Ｈ１０Ｋ　５０／
Ｈ０５Ｂ　３３／
Ｈ１０Ｋ　３０／
Ｈ１０Ｋ　８５／
Ｈ０１Ｌ　２９／
Ｇ０９Ｆ　９／

CAplus／REGISTRY（STN）