

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2015年9月17日(17.09.2015)



(10) 国際公開番号
WO 2015/137471 A1

- (51) 国際特許分類:
C07D 403/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2015/057391
- (22) 国際出願日: 2015年3月12日(12.03.2015)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2014-049549 2014年3月12日(12.03.2014) JP
- (71) 出願人: 出光興産株式会社 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区丸の内三丁目1番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 川上 宏典 (KAWAKAMI, Hironori); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 池田 潔 (IKEDA, Kiyoshi); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 八巻 太郎 (YAMAKI, Taro); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP). 柏村 孝 (KASHIWAMURA, Takashi); 〒2990293 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地 Chiba (JP).
- (74) 代理人: 大谷 保 (OHTANI, Tamotsu); 〒1050001 東京都港区虎ノ門三丁目25番2号 虎ノ門E S

ビル7階 特許業務法人大谷特許事務所 Tokyo (JP).

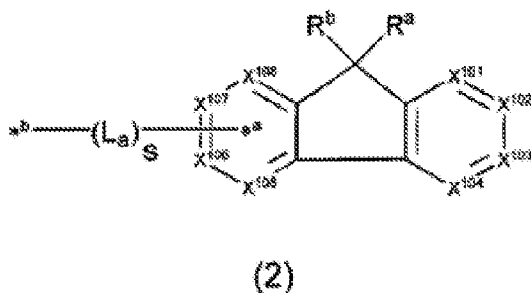
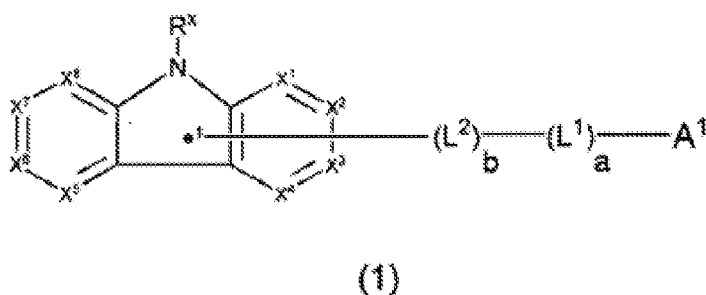
- (81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

- 国際調査報告 (条約第21条(3))

(54) Title: COMPOUND, MATERIAL FOR ORGANIC ELECTROLUMINESCENCE ELEMENT, INK COMPOSITION, ORGANIC ELECTROLUMINESCENCE ELEMENT, AND ELECTRONIC DEVICE

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



(57) Abstract: Provided are: a compound that is represented by general formulas (1) and (2) and comprises a nitrogen-containing heteroaromatic group substituted with a substituent which has a specific structure of having 11 or more benzene rings in a molecule; a material for an organic electroluminescence element comprising the compound; an ink composition including a solvent and the compound; an organic electroluminescence element using the compound; and an electronic device equipped with the organic electroluminescence element.

(57) 要約: 下記一般式(1)及び(2)で表され、かつ1分子内にベンゼン環を11以上有するという特定構造を有する置換基により置換された窒素含有ヘテロ芳香族基を有する化合物、当該化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、溶媒及び当該化合物を含むインク組成物、当該化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供する。



WO 2015/137471 A1

明 細 書

発明の名称：

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

技術分野

[0001] 本発明は、化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、インク組成物、有機エレクトロルミネッセンス素子、及び電子機器に関する。

背景技術

[0002] 陽極と陰極との間に発光層を含む有機薄膜層を備え、発光層に注入された正孔と電子との再結合によって生じる励起子（エキシトン）エネルギーから発光を得る有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「有機EL素子」と記載することもある）が知られている。（特許文献1参照）

[0003] 有機EL素子は、自発光型素子としての利点を活かし、高発光効率、高画質、低消費電力さらには薄型のデザイン性に優れた発光素子として期待されている。発光層を、ホストにドーパントとして発光材料をドーピングしたホスト／ドーパント発光層にすることが知られている。

ホスト／ドーパント発光層では、ホストに注入された電荷から効率よく励起子を生成することができる。そして、生成された励起子のエネルギーをドーパントに移動させ、ドーパントから高効率の発光を得ることができる。

[0004] 近年では有機EL素子の性能向上を果たすべく、ホスト／ドーパントシステムに関してもさらなる研究が行われており、好適なホスト材料及びその他の有機EL素子用材料の探索が続いている。

[0005] また、有機EL素子の各層を形成する方法は、真空蒸着法や分子線蒸着法等の蒸着法と、ディッピング法、スピンコーティング法、キャスト法、バーコート法及びロールコート法等の塗布法に大別される。塗布法で層形成する材料は、例えば温度耐性や溶媒への可溶性など、蒸着法で用いられる材料とは異なる特性が求められる。したがって、蒸着法で有用な材料が塗布

法においても有用であるとは限らない。更に、塗布法での層形成が可能な上で、有機EL素子として求められる多様な性能要求に応える必要がある。

特に、大型の有機ELディスプレイ、照明パネルなどの製造には塗布法による層形成が適用され得るため、塗布法に用いることができる有機EL素子用材料の開発が望まれている。

先行技術文献

特許文献

[0006] 特許文献1：国際公開第2012/086170号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0007] 本発明の目的は、塗布法により層形成する有機EL素子に適用して好適な化合物を提供することである。また、他の目的は、当該化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、当該化合物を含むインク組成物、及び当該化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することである。

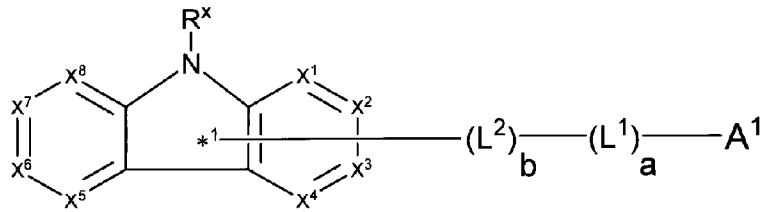
課題を解決するための手段

[0008] 本発明者らは、鋭意研究を重ねた結果、特定構造を有する置換基により置換された窒素含有ヘテロ芳香族基を有する化合物が上記課題を解決し得ることを見出した。

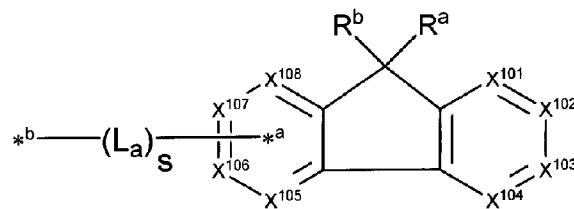
[0009] すなわち、本発明の一態様によれば、下記〔1〕～〔10〕が提供される。

〔1〕 下記一般式（1）及び（2）で表され、かつ1分子内にベンゼン環を1以上含有する化合物。

[化1]



(1)



(2)

(一般式(1)中、 A^1 は、置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の含窒素ヘテロ芳香族基を表す。

L^1 及び L^2 は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又はこれらの基が2～4個結合してなる基を表す。

a 及び b は、それぞれ独立に、0又は1を表す。ただし、 a が0のとき、 $(L^1)_a$ は、単結合を表す。また、 b が0のとき、 $(L^2)_b$ は、単結合を表す。

R^x は、水素原子又は置換基を表す。

$X^1 \sim X^8$ は、それぞれC(R^1)～C(R^8)、又は窒素原子を表す。

$R^1 \sim R^8$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^1 \sim R^4$ 及び R^x のうちのいずれか1つは、*1の位置で L^2 に結合する単結合を表す。

一般式(2)中、 L_a は、置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環

基を表す。

s は、0 又は 1 を表す。ただし、s が 0 のとき、 $(L_a)_0$ は単結合を表す。

$X^{101} \sim X^{108}$ は、それぞれ $C(R^{101}) \sim C(R^{108})$ 又は窒素原子を表す。 $R^{101} \sim R^{108}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。ただし、 $R^{105} \sim R^{108}$ のうちのいずれか 1 つは、 $*^a$ の位置で L_a に直接結合する単結合を表す。

R^a 及び R^b は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 14 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 14 のヘテロアリール基を表す。 R^a と R^b は、互いに結合して環を形成していてもよい。 R^a と R^{101} 、 R^b と R^{108} は、それぞれ独立に、互いに結合して環を形成していてもよい。

式 (2) は、 $*^b$ の位置で、 L^1 、 L^2 、 $R^1 \sim R^8$ 、及び R^x のうちの少なくとも 1 つに結合する。この場合、式 (2) が結合する $R^1 \sim R^8$ 、及び R^x は単結合を表す。

式 (2) が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。))

[0010] [2] 溶媒及び前記 [1] 記載の化合物を含む、インク組成物。

[3] 前記 [1] 記載の化合物からなる、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

[4] 陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

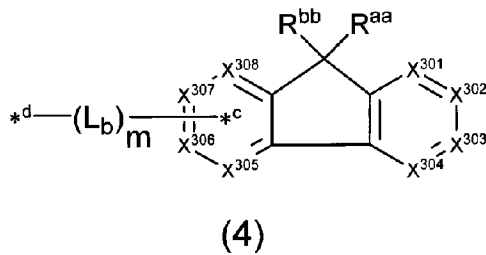
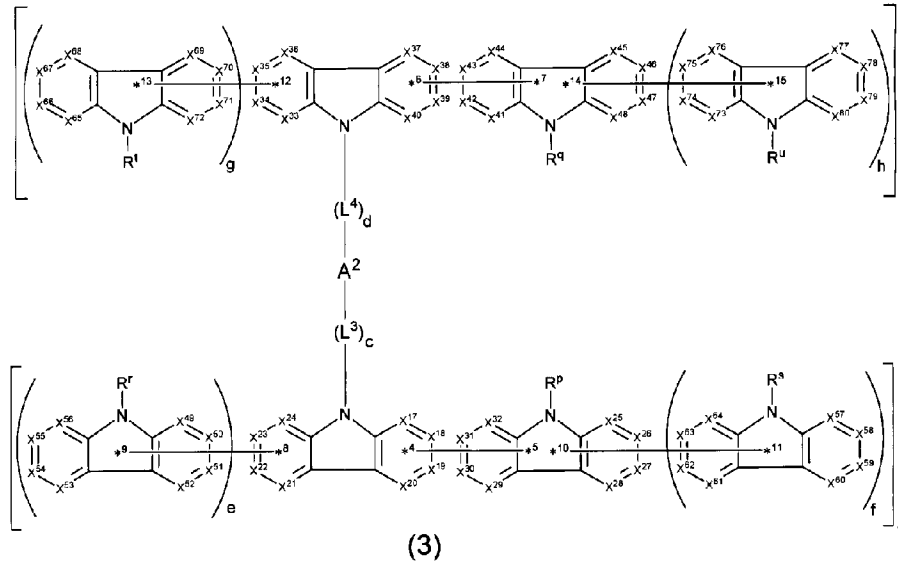
前記一層以上の有機薄膜層が発光層を含み、前記一層以上の有機薄膜層の少なくとも 1 層が前記 [1] 記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[5] 前記 [4] 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。

[0011] 本発明の他の態様によれば、下記 [6] ~ [10] が提供される。

[6] 下記一般式 (3) 及び (4) で表される化合物。

[化2]



(一般式 (3) 中、 A^2 は、置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の含窒素ヘテロ芳香族基を表す。

L^3 及び L^4 は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又はこれらの基が2～4個結合してなる基を表す。

c 及び d は、それぞれ独立に、0又は1を表す。ただし、 c が0のとき、 $(L^3)_0$ は、単結合を表す。また、 d が0のとき、 $(L^4)_0$ は、単結合を表す。

$R^p \sim R^u$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。

$X^{17} \sim X^{80}$ は、それぞれC (R^{17}) ～C (R^{80})、又は窒素原子を表す。

$R^{17} \sim R^{80}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^{17} \sim R^{20}$ のうちのいずれか1つは $*^4$ に結合する単結合を表し、 R^p 、 $R^{29} \sim R^{32}$ のうちのいずれか1つは $*^5$ に結合する単結合を表し、 $R^{37} \sim R^{40}$ のうちのいずれか1つは $*^6$ に結合する単結合を表し、 R^q 、 $R^{41} \sim R^{44}$ のうちのいずれか1つは $*^7$ に結合する単結合を表し、 $R^{21} \sim R^{24}$ のうちのいずれか1つは $*^8$ に結合する単結合を表し、 R^r 、 $R^{49} \sim R^{52}$ のうちのいずれか1つは $*^9$ に結合する単結合を表し、 R^p 、 $R^{25} \sim R^{28}$ のうちのいずれか1つは $*^{10}$ に結合する単結合を表し、 R^s 、 $R^{61} \sim R^{64}$ のうちのいずれか1つは $*^{11}$ に結合する単結合を表し、 $R^{33} \sim R^{36}$ のうちのいずれか1つは $*^{12}$ に結合する単結合を表し、 R^t 、 $R^{69} \sim R^{72}$ のうちのいずれか1つは $*^{13}$ に結合する単結合を表し、 R^q 、 $R^{45} \sim R^{48}$ のうちのいずれか1つは $*^{14}$ に結合する単結合を表し、 R^u 、 $R^{73} \sim R^{76}$ のうちのいずれか1つは $*^{15}$ に結合する単結合を表す。

$X^{17} \sim X^{80}$ 、 $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ のうち同一符号のものが複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。

$e \sim h$ は、それぞれ独立に、0又は1の整数を表す。ただし、 $e \sim h$ が0の場合、 $()_0$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。

t 及び u は、それぞれ独立に、0～2の整数を表し、 $t + u = 2$ である。ただし、 t が0の場合の $[]_0$ 、及び u が0の場合の $[]_0$ は、それぞれ、水素原子を表す。

一般式(4)中、 L_b は、置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基を表す。

m は、0又は1を表す。ただし、 m が0のとき、 $(L_b)_0$ は単結合を表す。

$X^{301} \sim X^{308}$ は、それぞれ $C(R^{301}) \sim C(R^{308})$ 又は窒素原子を表す。 $R^{301} \sim R^{308}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。ただし、 $R^{305} \sim R^{308}$ のうちのいずれか1つは、 $*^c$ の位置で L_b に直接結合する単結合を表す。

R^{aa} 及び R^{bb} は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数1～10のアルキル基、環形成炭素数6～14のアリール基、又は環形成原子数5～14のヘテロアリール基を表す。 R^{aa} と R^{bb} は、互いに結合して環を形成していてもよい。 R^{aa} と R^{301} 、 R^{bb} と R^{308} は、それぞれ独立に、互いに結合して環を形成してもよい。

式(4)は $*^d$ の位置で、 L^3 、 L^4 、 $X^{17} \sim X^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ の少なくとも1つに結合する。この場合、式(4)が結合する $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ は単結合を表す。

式(4)が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。))

[0012] [7] 溶媒及び前記[6]記載の化合物を含む、インク組成物。

[8] 前記[6]記載の化合物からなる、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

[9] 陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

前記一層以上の有機薄膜層が発光層を含み、前記一層以上の有機薄膜層の少なくとも1層が前記[6]記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[10] 前記[9]記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。

発明の効果

[0013] 本発明によれば、塗布法により層形成する有機EL素子に適用して好適な化合物を提供できる。

図面の簡単な説明

[0014] [図1]本発明の一態様に係る有機EL素子の概略構成を示す図である。

発明を実施するための形態

[0015] 本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の

炭素数を表すものであり、置換されている場合の置換基の炭素数は含めない。ここで、「YY」は「XX」よりも大きく、「XX」と「YY」はそれぞれ1以上の整数を意味する。

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

[0016] 本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が6であり、ナフタレン環は環形成炭素数が10であり、ピリジニル基は環形成炭素数5であり、フラニル基は環形成炭素数4である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

[0017] また、本明細書において、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造（例えば単環、縮合環、環集合）の化合物（例えば単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子（例えば環を構成する原子の結合手を終端する水素原子）や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。以下で記される「環形成原子数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ピリジン環の環形成原子数は6であり、キナゾリン環の環形成原子数は10であり、フラン環の環形

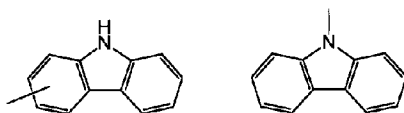
成原子数は5である。ピリジン環やキナゾリン環の炭素原子にそれぞれ結合している水素原子や置換基を構成する原子については、環形成原子数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の原子数は環形成原子数の数に含めない。

[0018] また、本明細書において、「水素原子」とは、中性子数が異なる同位体、すなわち、軽水素（protium）、重水素（deuterium）及び三重水素（tritium）を包含する。

本明細書中において、「ヘテロアリアル基」、「ヘテロアリーレン基」及び「複素環基」は、環形成原子として、少なくとも1つのヘテロ原子を含む基であり、該ヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子及びセレン原子から選ばれる1種以上であることが好ましい。

[0019] 本明細書中において、「置換もしくは無置換のカルバゾリル基」は、下記のカルバゾリル基、

[化3]

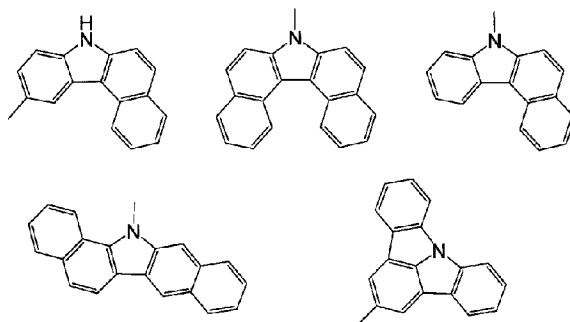


及び上記の基に対して、更に任意の置換基を有する置換カルバゾリル基を表す。

なお、当該置換カルバゾリル基は、任意の置換基同士が互いに結合して縮環してもよく、窒素原子、酸素原子、ケイ素原子及びセレン原子等のヘテロ原子を含んでもよく、また、結合位置は1位～9位のいずれであってもよい。このような置換カルバゾリル基の具体例として、例えば、下記に示す基が挙げられる。

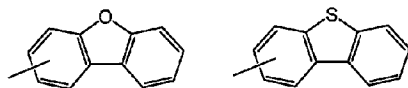
[0020]

[化4]



[0021] 本明細書において、「置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基」及び「置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基」は、下記のジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基、

[化5]



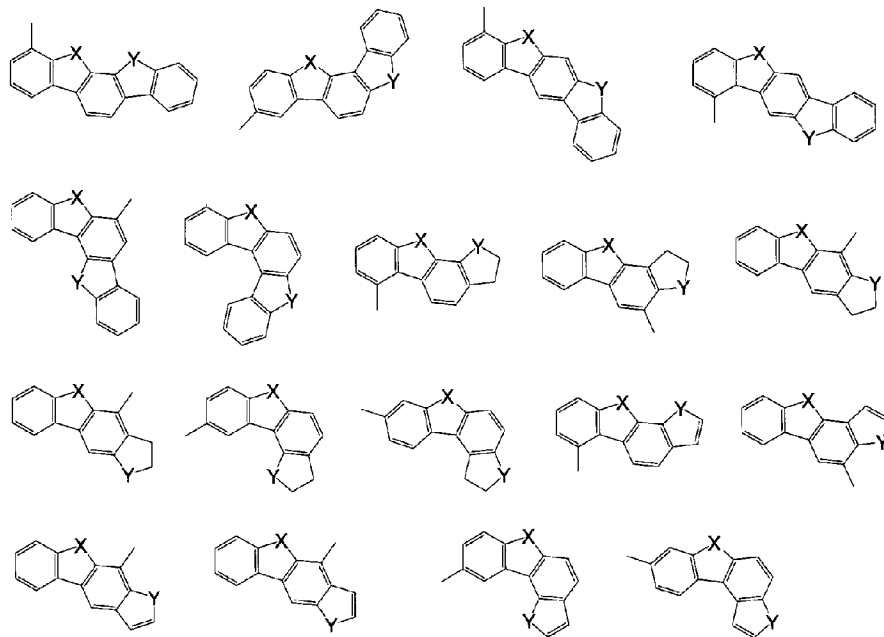
及び上記の基に対して、更に任意の置換基を有する置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基を表す。

なお、当該置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基は、任意の置換基同士が互いに結合して縮環してもよく、窒素原子、酸素原子、ケイ素原子及びセレン原子等のヘテロ原子を含んでもよく、また、結合位置は1位～8位のいずれであってもよい。

このような置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基の具体例として、例えば、下記に示す基が挙げられる。

[0022]

[化6]



[上記式中、Xは酸素原子又は硫黄原子を表し、Yは酸素原子、硫黄原子、NH、NR^{ab}（R^{ab}はアルキル基又はアリール基である。）、CH₂、又は、CR^{cd}₂（R^{cd}はアルキル基又はアリール基である。）を表す。]

[0023] また、「置換基」、又は「置換もしくは無置換」との記載における置換基としては、炭素数1～50（好ましくは1～18、より好ましくは1～8）のアルキル基；環形成炭素数3～50（好ましくは3～10、より好ましくは3～8、更に好ましくは5又は6）のシクロアルキル基；環形成炭素数6～50（好ましくは6～25、より好ましくは6～18）のアリール基；環形成炭素数6～50（好ましくは6～25、より好ましくは6～18）のアリール基を有する炭素数7～51（好ましくは7～30、より好ましくは7～20）のアラルキル基；アミノ基；炭素数1～50（好ましくは1～18、より好ましくは1～8）のアルキル基及び環形成炭素数6～50（好ましくは6～25、より好ましくは6～18）のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基；炭素数1～50（好ましくは1～18、より好ましくは1～8）のアルキル基を有するアルコキシ基；環形成炭素数6～50（好ましくは6～25、より好ましくは6～18）のアリール

基を有するアリーロキシ基；炭素数1～50（好ましくは1～18、より好ましくは1～8）のアルキル基及び環形成炭素数6～50（好ましくは6～25、より好ましくは6～18）のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基；環形成原子数5～50（好ましくは5～24、より好ましくは5～13）のヘテロアリール基；炭素数1～50（好ましくは1～18、より好ましくは1～8）のハロアルキル基；ハロゲン原子（フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子）；シアノ基；ニトロ基；炭素数1～50（好ましくは1～18、より好ましくは1～8）のアルキル基及び環形成炭素数6～50（好ましくは6～25、より好ましくは6～18）のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基；炭素数1～50（好ましくは1～18、より好ましくは1～8）のアルキル基及び環形成炭素数6～50（好ましくは6～25、より好ましくは6～18）のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォルル基；アルキルスルホニルオキシ基；アリールスルホニルオキシ基；アルキルカルボニルオキシ基；アリールカルボニルオキシ基；ホウ素含有基；亜鉛含有基；スズ含有基；ケイ素含有基；マグネシウム含有基；リチウム含有基；ヒドロキシ基；アルキル置換又はアリール置換カルボニル基；カルボキシル基；ビニル基；（メタ）アクリロイル基；エポキシ基；並びにオキセタニル基からなる群より選ばれる少なくとも1つが好ましい。

これらの置換基は、更に上述の任意の置換基により置換されていてもよい。また、これらの置換基は、複数の置換基が互いに結合して環を形成していてもよい。

また、「置換もしくは無置換」との記載における「無置換」とは、これらの置換基で置換されておらず、水素原子が結合していることを意味する。

[0024] 上記置換基の中でも、より好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数1～50（好ましくは1～18、より好ましくは1～8）のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50（好ましくは3～10、より好ましくは3～8、更に好ましくは5又は6）のシクロアルキル基、置換もしくは無

置換の環形成炭素数6～50（好ましくは6～25、より好ましくは6～18）のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1～50（好ましくは1～18、より好ましくは1～8）のアルキル基及び置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50（好ましくは6～25、より好ましくは6～18）のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50（好ましくは5～24、より好ましくは5～13）のヘテロアリール基、ハロゲン原子、シアノ基である。

[0025] 本明細書中、好ましいとする規定は任意に選択することができ、また、好ましいとする規定の組み合わせはより好ましいと言える。

[0026] [化合物（A）]

本発明の一態様において、下記一般式（1）及び（2）によって表され、かつ1分子内にベンゼン環を1以上含有する化合物〔以下、単に、化合物（A）と略称することがある。〕が提供される。

ベンゼン環数が1以上であることで、ベンゼン環数が10以下の化合物と比較するとガラス転移温度（ T_g ）が高くなる傾向がある。

有機EL素子では電流を印加し素子を駆動した際の発熱により素子性能が低下することから、化合物（A）のガラス転移温度を高めて、熱安定性を向上させるためにベンゼン環数を1以上とすることで素子駆動時の安定性の向上が期待できる。

一方で、化合物（A）を含有する層を塗布成膜した後に、塗布に用いた有機溶媒を乾燥除去する工程において、加熱乾燥を行う場合がある。加熱乾燥過程において安定な薄膜を維持するためには、化合物（A）の T_g が高いことが望ましい。

当該膜を形成する材料の T_g が低い場合、加熱により固相から液相への相転移を起こし、膜が流動することにより薄膜の形状を維持できない。このような観点から、ベンゼン環数は好ましくは12以上、より好ましくは13以上である。

本明細書において、化合物中のベンゼン環数とは、化合物一分子中に存在

する炭素と水素のみからなる芳香族6員環の数を表す。なお、縮合環化合物、複素環化合物等の構造中に含まれる同様の構造もベンゼン環数として数えることとする。例えば、ナフタレンではベンゼン環数は「2」、カルバゾールではベンゼン環数は「2」、キナゾリンではベンゼン環数は「1」と数えられる。

[0027] 当該化合物(A)は、下記一般式(2)で表される構造が、下記一般式(1)の構造に結合した構造を有するために、塗布法により層形成する有機EL素子に適用して好適な化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

下記一般式(1)の構造にフェニル基等の置換基より分子量が大きい下記一般式(2)で表される構造が結合することで、化合物(A)のT_gが高くなる。そのため、化合物(A)を含有する層を塗布成膜した後に、当該膜を加熱乾燥する場合も、安定に薄膜を形成することが可能となる。

下記一般式(2)で表される構造の特徴はR^a及びR^bがs p₃炭素に結合している点である。有機EL材料に代表される有機半導体材料は、電荷輸送機能を持たせるためにs p₂炭素を主体とした平面性の高い分子構造から形成されている。しかし、このような分子骨格を有する化合物群は、分子間相互作用が強く働くことで固体状態が安定となる傾向があり、塗布成膜を目的とする場合においては、材料の有機溶媒への溶解性が極めて低く、所望の有機溶媒へ溶解させることが困難である。

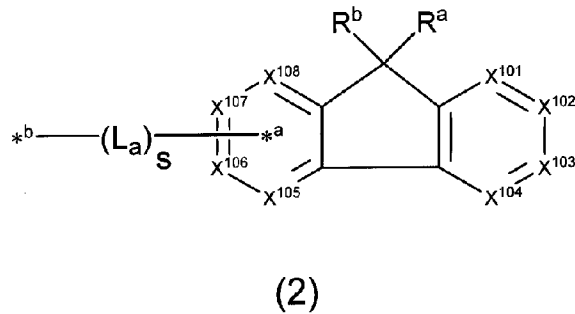
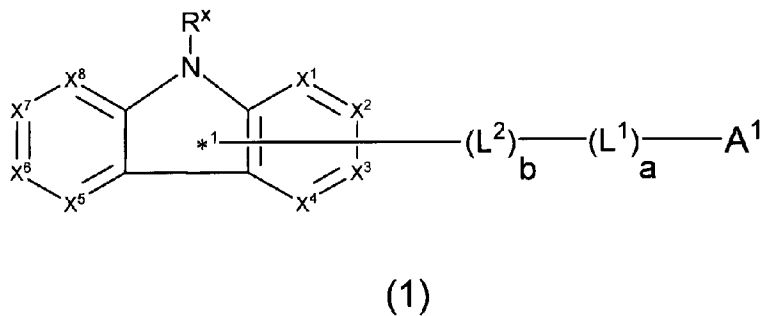
本発明の一態様においては、s p₃炭素を分子骨格中に導入し、適切な置換基R^a、R^bを選択することにより、分子の平面性を乱すことができることを見出した。平面性が乱れることにより、分子間相互作用が弱まり、有機溶剤への溶解性を高めることができる。

これにより、所望の有機溶媒へ溶解させ、適当な塗布方法により薄膜を形成することが可能になる。

ここで、一般式(2)で表される構造の最高被占軌道(HOMO)や最低空軌道(LUMO)が、結合対象である一般式(1)で表される構造のHO

MOとLUMOと近いエネルギーを有する場合、分子軌道が大きく広がってしまい、一般式(1)で表される構造のイオン化ポテンシャル(I_p)や電子親和力(E_a)が変化する可能性がある。HOMOとLUMOの重なりが生じないように一般式(2)で表される構造が一般式(1)で表される構造に結合することで、一般式(2)で表される構造の結合によって分子軌道が広がることを防ぎ、本来の一般式(1)で表される構造の物性を維持したまま分子間相互作用を低減させることが可能になる。

[0028] [化7]



[0029] (一般式(1)中、 A^1 は、置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の含窒素ヘテロ芳香族基を表す。

L^1 及び L^2 は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又はこれらの基が2～4個結合してなる基を表す。

a 及び b は、それぞれ独立に、0又は1を表す。ただし、 a が0のとき、 $(L^1)_a$ は、単結合を表す。また、 b が0のとき、 $(L^2)_b$ は、単結合を表す。

R^x は、水素原子又は置換基を表す。

$X^1 \sim X^8$ は、それぞれ $C(R^1) \sim C(R^8)$ 、又は窒素原子を表す。

$R^1 \sim R^8$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^1 \sim R^4$ 及び R^x のうちのいずれか1つは、 $*^1$ の位置で L^2 に結合する単結合を表す。

一般式(2)中、 L_a は、置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基を表す。

s は、0又は1を表す。ただし、 s が0のとき、 $(L_a)_0$ は単結合を表す。

$X^{101} \sim X^{108}$ は、それぞれ $C(R^{101}) \sim C(R^{108})$ 又は窒素原子を表す。 $R^{101} \sim R^{108}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。ただし、 $R^{105} \sim R^{108}$ のうちのいずれか1つは、 $*^a$ の位置で L_a に直接結合する単結合を表す。

R^a 及び R^b は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数1～10のアルキル基、環形成炭素数6～14のアリール基、又は環形成原子数5～14のヘテロアリール基を表す。 R^a と R^b は、互いに結合して環を形成していてもよい。 R^a と R^{101} 、 R^b と R^{108} は、それぞれ独立に、互いに結合して環を形成していてもよい。

式(2)は、 $*^b$ の位置で、 L^1 、 L^2 、 $R^1 \sim R^8$ 、及び R^x のうちの少なくとも1つに結合する。この場合、式(2)が結合する $R^1 \sim R^8$ 、及び R^x は単結合を表す。

式(2)が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。))

[0030] (一般式(1)中の各基についての説明)

一般式(1)中、 A^1 が表す窒素含有ヘテロ芳香族基の環形成原子数は5～30であり、好ましくは6～20、より好ましくは6～14である。窒素含

有ヘテロ芳香族基は、好ましくは、単環、2環から構成される縮合環、3環から構成される縮合環のいずれかである。

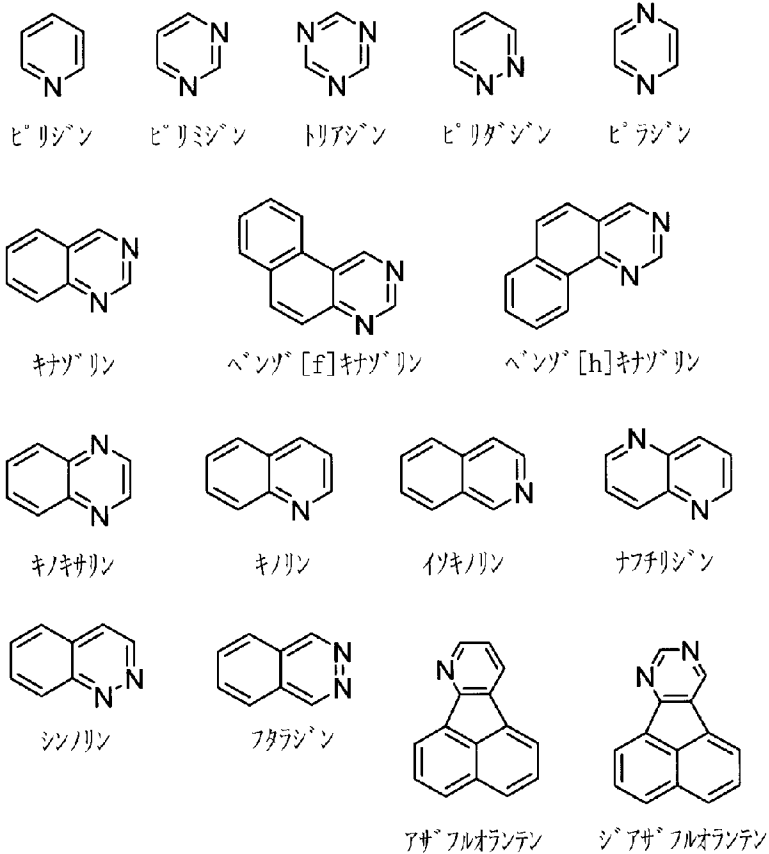
窒素含有ヘテロ芳香族基が含有する窒素原子の数は、好ましくは1～3個、より好ましくは2個又は3個である。特に、窒素含有ヘテロ芳香族基が単環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは2個又は3個、より好ましくは3個であり、窒素含有ヘテロ芳香族基が2環又は3環から構成される縮合環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは2個である。なお、窒素含有ヘテロ芳香族基は、窒素原子以外のヘテロ原子、例えば、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、セレン原子等を含有していてもよく、一方、ヘテロ原子として窒素原子のみを含有していることも好ましい。

A¹が表す窒素含有ヘテロ芳香族基の具体例としては、ピロール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、イミダゾール、ピラゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール、インドリジン、キノリジン、キノリン、イソキノリン、ナフチリジン、シンノリン、フタラジン、キナゾリン、ベンゾ[f]キナゾリン、ベンゾ[h]キナゾリン、アザフルオランテン、ジアザフルオランテン、キノキサリン、ベンゾイミダゾール、インダゾール、カルバゾール、ビスカルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、アザトリフェニレン、ジアザトリフェニレン、ヘキサアザトリフェニレン、アザカルバゾール、アザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェン及びジナフト[2',3':2,3;2',3':6,7]カルバゾールから選択される化合物の残基などが挙げられる。ここで、残基とは、化合物から水素原子が1つ以上脱離して得られる1価以上の基である。

前記窒素含有ヘテロ芳香族基としては、上記の中でも、下記の群から選択される化合物の残基が好ましい。

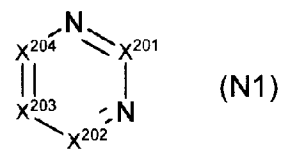
[0031]

[化8]



[0032] また、本発明の一態様においては、A¹が表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が、下記一般式 (N1) で表される窒素含有複素環の残基であることが好ましい。

[化9]

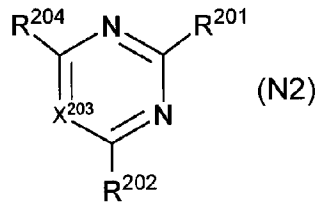


(一般式 (N1) 中、X²⁰¹~X²⁰⁴は、それぞれC (R²⁰¹) ~C (R²⁰⁴)) 又は窒素原子を示す。R²⁰¹~R²⁰⁴は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R²⁰²~R²⁰⁴から選ばれる2つは、互いに結合して、環を形成していてもよい。)

[0033] 本発明の一態様においては、A¹が表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が

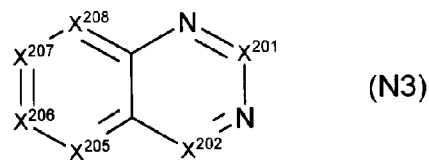
、下記一般式 (N2) ~ (N6) のいずれかで表される窒素含有複素環の残基であることがより好ましい。

[化10]



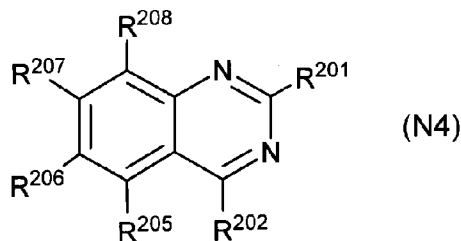
(一般式 (N2) 中、 X^{203} は、 $C (R^{203})$ 又は窒素原子を示す。 $R^{201} \sim R^{204}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。 $R^{202} \sim R^{204}$ から選ばれる2つは、互いに結合して、環を形成していてもよい。)

[0034] [化11]



(一般式 (N3) 中、 X^{201} 、 X^{202} 、 $X^{205} \sim X^{208}$ は、それぞれ $C (R^{201})$ 、 $C (R^{202})$ 、 $C (R^{205}) \sim C (R^{208})$ 又は窒素原子を示す。 R^{201} 、 R^{202} 及び $R^{205} \sim R^{208}$ 、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、 R^{202} 及び $R^{205} \sim R^{208}$ から選ばれる2つは、互いに結合して、環を形成していてもよい。)

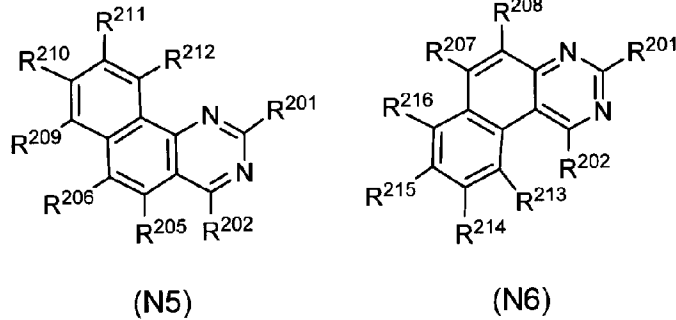
[0035] [化12]



(一般式 (N4) 中、 R^{201} 、 R^{202} 及び $R^{205} \sim R^{208}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、 R^{202} 及び $R^{205} \sim R^{208}$ から選ばれる2つは

、互いに結合して、環を形成していてもよい。)

[0036] [化13]

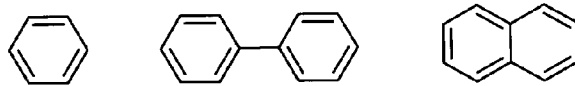


(一般式 (N5)、(N6) 中、 R^{201} 、 R^{202} 及び $R^{205} \sim R^{216}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。)

[0037] 一般式 (1) 中、 L^1 及び L^2 が表す芳香族炭化水素基の環形成炭素数は 6 ~ 30 であり、好ましくは 6 ~ 18、より好ましくは 6 ~ 13、更に好ましくは 6 ~ 12、特に好ましくは 6 ~ 10 である。

L^1 及び L^2 が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表されるいずれかの化合物の 2 ~ 4 個の残基であることが好ましく、本発明の一態様においては、 L^1 及び L^2 の少なくとも一つ (好ましくは全て) が下記式で表されるいずれかの化合物の 2 ~ 4 個の残基であることが好ましい。

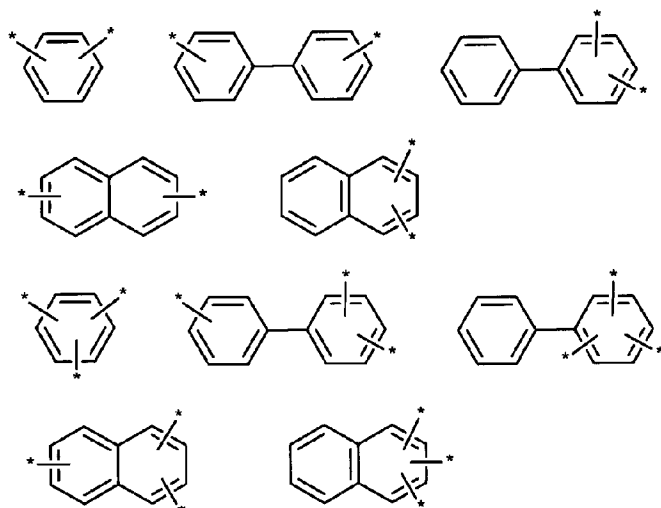
[化14]



(上記化合物中の炭素原子は置換基を有していてもよい。)

[0038] 更に、 L^1 及び L^2 が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましく、本発明の一態様においては、 L^1 及び L^2 の少なくとも一つ (好ましくは全て) が下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましい。

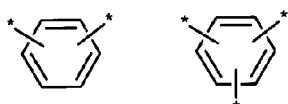
[化15]



(上記式中、*は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基を有していてもよい。)

[0039] 上記の中でも、 L^1 及び L^2 が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表される基のいずれかであることがより好ましく、 L^1 及び L^2 の少なくとも一つ（好ましくは全て）が下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましい。

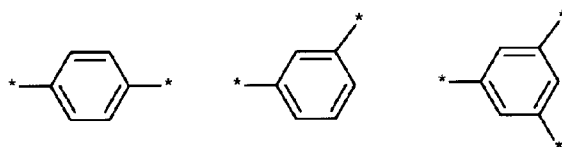
[化16]



(上記式中、*は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基を有していてもよい。)

[0040] 上記の中でも、 L^1 及び L^2 が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表される基のいずれかであることが更に好ましく、 L^1 及び L^2 の少なくとも一つ（好ましくは全て）が下記式で表されるいずれかの基であることが更に好ましい。

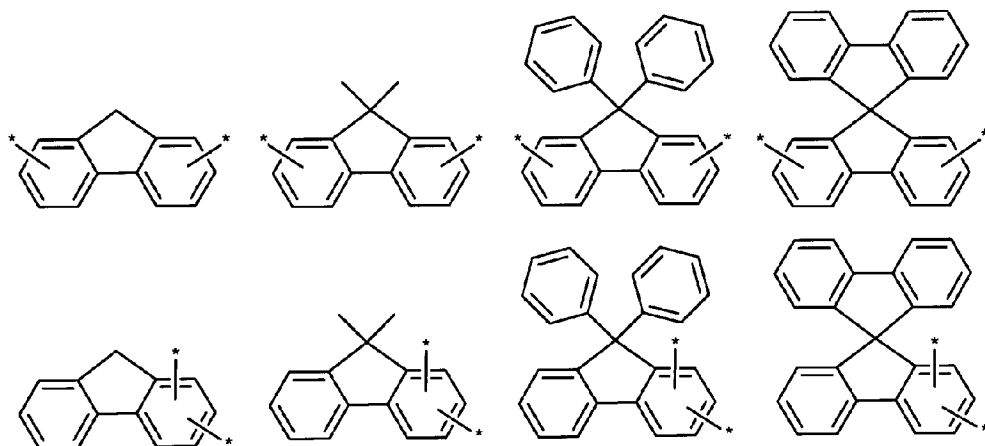
[化17]



(上記式中、*は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基を有していてもよい。)

[0041] L^1 及び L^2 が表す芳香族炭化水素基としては、上記以外にも、下記式で表される基が挙げられる。

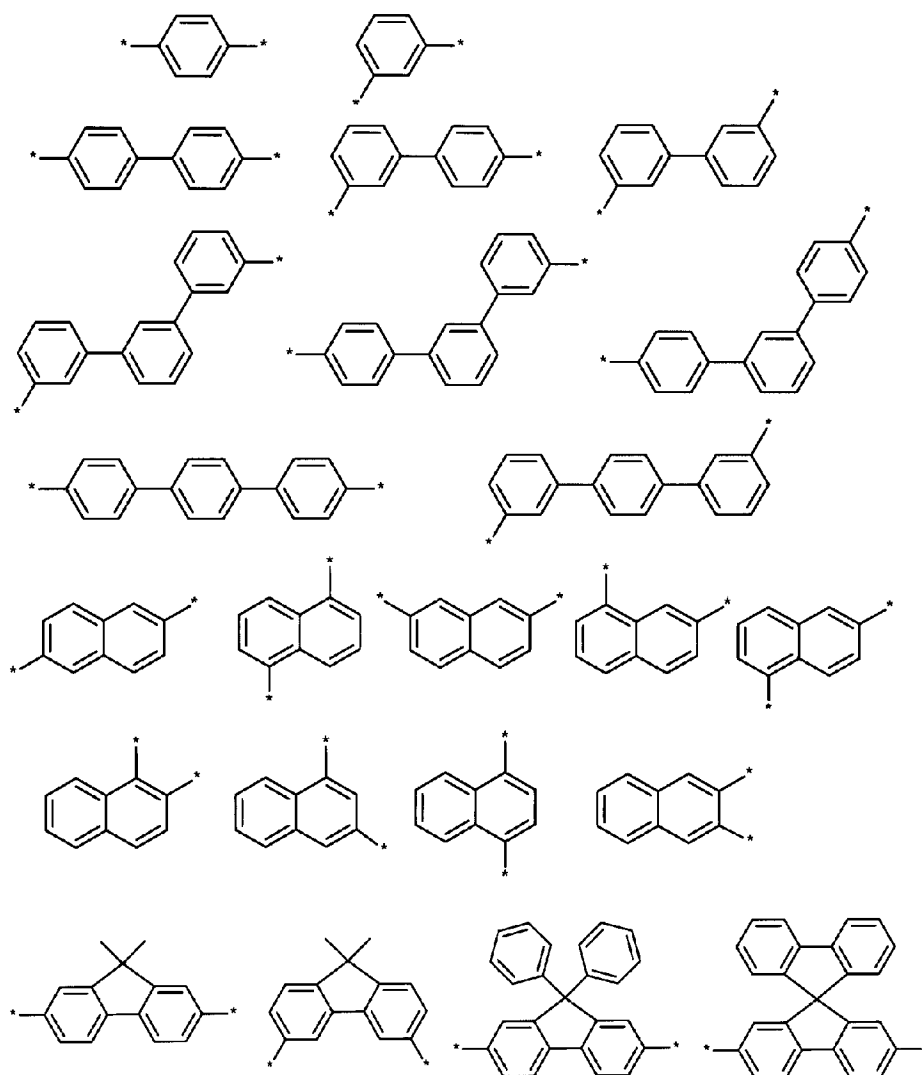
[化18]



(上記式中、*は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基を有していてもよい。)

[0042] L^1 及び L^2 が表す芳香族炭化水素基が二価の場合の具体例としては、下記式で表される基が挙げられる。

[化19]



(上記式中、*は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基を有していてもよい。)

[0043] また、 L^1 及び L^2 が表す複素環基の環形成原子数は5～30であり、好ましくは5～18、より好ましくは5～13、特に好ましくは5～10である。複素環基としては、例えば、ピロール、ピリジン、イミダゾピリジン、ピラゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール及びカルバゾール等の含窒素複素環化合物の残基；フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾナフトフラン及びジナフトフラン等の含酸素複素環化

化合物の残基；チオフェン、ベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、チアゾール、チアジアゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾナフトチオフェン及びジナフトチオフェン等の含硫黄複素環化合物の残基などが挙げられる。

L^1 及び L^2 が表す、「これらの基が2～4個結合してなる基」は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基と置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基とが2～4個結合してなる基である。この場合の結合順序に特に制限はない。

以上の中でも、 L^1 及び L^2 としては、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基が好ましい。該芳香族炭化水素基としてより好ましいものは、前述の通りである。

[0044] 一般式(1)中、 a 及び b は、それぞれ独立に、0又は1を表す。ただし、 a が0のとき、 $(L^1)_o$ は、単結合を表す。また、 b が0のとき、 $(L^2)_o$ は、単結合を表す。

[0045] 一般式(1)中、 R^x は、水素原子又は置換基を表す。

[0046] 一般式(1)中、 $X^1\sim X^8$ は、それぞれ $C(R^1)\sim C(R^8)$ 、又は窒素原子を表す。 $R^1\sim R^8$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^1\sim R^4$ 及び R^x のうちのいずれか1つは、 $*^1$ の位置で L^2 に結合する単結合を表す。

$X^1\sim X^8$ としては、好ましくはいずれも $C(R^1)\sim C(R^8)$ であり、後述する一般式(2)が結合しない該 $R^1\sim R^8$ は、いずれも水素原子であることがより好ましい。

また、該 R^x が $*^1$ の位置で L^2 に結合しない場合、又は後述する一般式(2)に結合しない場合は、置換基であることがより好ましく、 R^x は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であることが更に好ましい。

[0047] R^x がアリール基を表す場合、好ましくはアリール基の環形成炭素数は6～30であり、より好ましくは6～18、更に好ましくは6～13、より更に

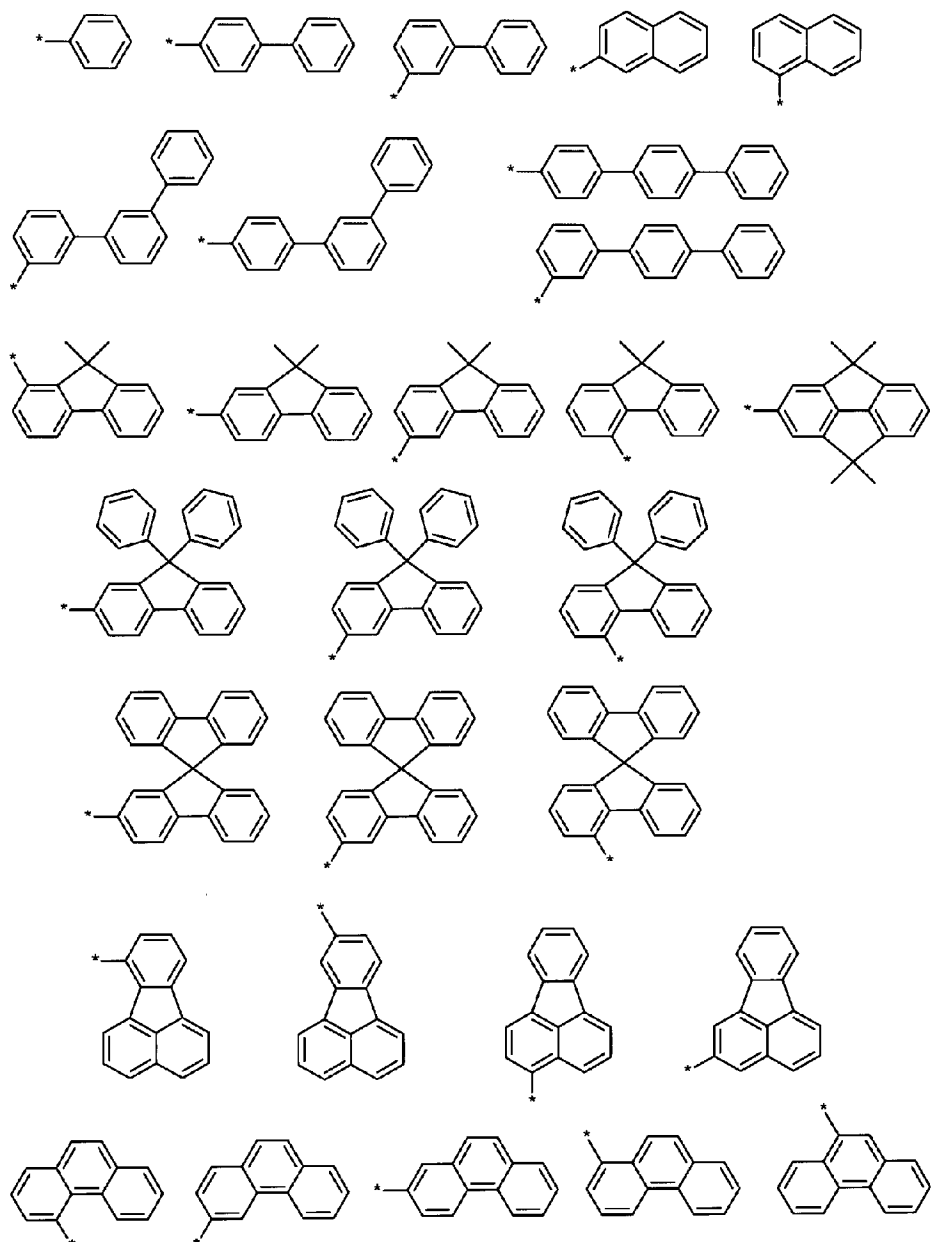
好ましくは6～12、特に好ましくは6～10である。

該アリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基（1-ナフチル基、2-ナフチル基）、ナフチルフェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、クアテルフェニル基、キルクフェニル基、アセナフチレニル基、アントリル基、ベンゾアントリル基、アセアントリル基、フェナントリル基、ベンゾフェナントリル基、フェナレニル基、フルオレニル基（9,9-ジメチルフルオレニル基、9,9-ジフェニルフルオレニル基、9,9'-スピロビフルオレニル基を含む。）、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、ピセニル基、ペンタフェニル基、ペンタセニル基、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾクリセニル基、s-インダニル基、a s-インダニル基、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基、テトラセニル基、トリフェニレニル基、ベンゾトリフェニレニル基、ペリレニル基、コロニル基、ジベンゾアントリル基等が挙げられる。前記各基は、異性体基が存在する場合には、異性体基を含む。

R^xとしては、本発明の一態様においては、前記アリール基の中でも、環形成炭素数10～30（好ましくは10～20、より好ましくは10～14）の縮合環基であることも好ましい。該縮合環基としては、ナフチル基（1-ナフチル基、2-ナフチル基）、アセナフチレニル基、アントリル基、ベンゾアントリル基、アセアントリル基、フェナントリル基、ベンゾフェナントリル基、フェナレニル基、フルオレニル基（9,9-ジメチルフルオレニル基、9,9-ジフェニルフルオレニル基、9,9'-スピロビフルオレニル基を含む。）、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、ピセニル基、ペンタセニル基、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾクリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基、テトラセニル基、ペリレニル基、コロニル基、ジベンゾアントリル基等が挙げられる。

また、アリール基としては、より具体的には、下記群から選択されるアリール基が好ましい。

[化20]



(上記式中、*は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基を有していてもよい。)

[0048] R*がヘテロアリール基を表す場合、好ましくはヘテロアリール基の環形成原子数は5～30であり、より好ましくは5～20、更に好ましくは5～14、より更に好ましくは5～10である。

該ヘテロアリール基は、少なくとも1個、好ましくは1～5個、より好ま

しくは1～3個、更に好ましくは1～2個の同一又は異なるヘテロ原子を含む。該ヘテロ原子としては、例えば、窒素原子、硫黄原子、酸素原子及びリン原子が挙げられ、好ましくはこれらから選択される。

該ヘテロアリアル基としては、例えば、ピロリル基、フリル基、チエニル基、ピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、イミダゾリル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、ピラゾリル基、イソオキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチオフェニル基、インドリジニル基、キノリジニル基、キノリル基、イソキノリル基、シンノリル基、フタラジニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、インダゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基、ビスカルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基、アザトリフェニレニル基、ジアザトリフェニレニル基、キサントニル基、アザカルバゾリル基、アザジベンゾフラニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ベンゾフラノベンゾチオフェニル基、ベンゾチエノベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラノナフチル基、ジベンゾチエノナフチル基、ジナフトチエノチオフェニル基、及びジナフト [2', 3' :2, 3; 2', 3' :6, 7] カルバゾリル基が挙げられる。

R^xとしては、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリアル基が好ましい。該アリアル基としてより好ましいものは、前述の通りである。

[0049] (一般式(2)中の各基についての説明)

一般式(2)中、L_aは、置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基を表す。L_aが表す芳香族炭化水素基、複素環基の説明は、前述のL¹及び

L^2 の場合と同じであり、好ましいものも同じである。その中でも、 L_a が表す芳香族炭化水素基としては、フェニレン基、ナフチレン基が好ましく、フェニレン基がより好ましい。

一般式(2)中、 s は、0又は1を表し、好ましくは0である。ただし、 s が0のとき、 $(L_a)_0$ は単結合を表す。

L_a が置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基を表す場合の好ましい例としては、上述のとおりであるが、一般式(2)としては、 $s=0$ で、 $(L_a)_0$ が単結合を表す場合が、更に好ましい。

$X^{101} \sim X^{108}$ は、それぞれC(R^{101})～C(R^{108})又は窒素原子を表す。 $R^{101} \sim R^{108}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。ただし、 $R^{105} \sim R^{108}$ のうちのいずれか1つは、 $*^a$ の位置で L_a に直接結合する単結合を表す。

R^a 及び R^b は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数1～10のアルキル基、環形成炭素数6～14のアリール基、又は環形成原子数5～14のヘテロアリール基を表す。 R^a と R^b は、互いに結合して環を形成していてもよい。 R^a と R^{101} 、 R^b と R^{108} は、それぞれ独立に、互いに結合して環を形成していてもよい。

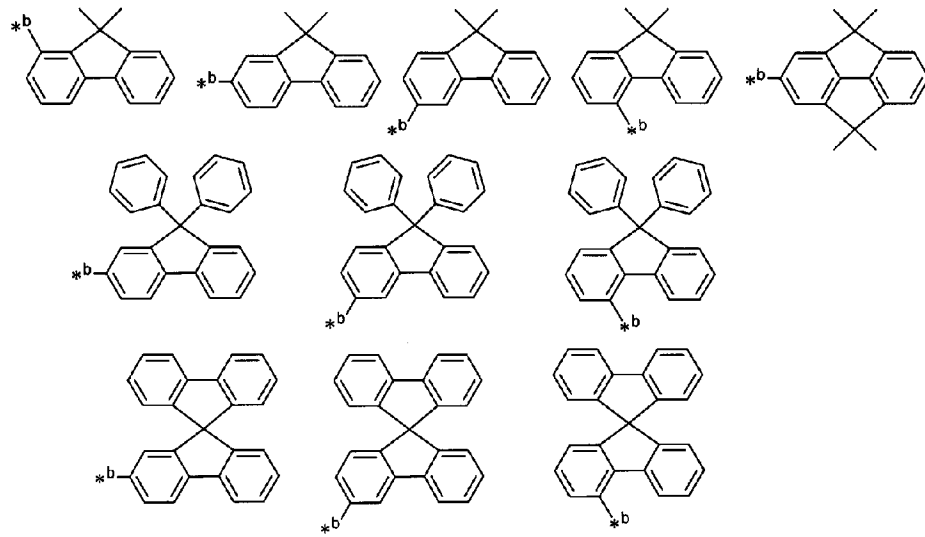
式(2)は、 $*^b$ の位置で、 L^1 、 L^2 、 $R^1 \sim R^8$ 、及び R^x のうちの少なくとも1つに結合する。この場合、式(2)が結合する $R^1 \sim R^8$ 、及び R^x は単結合を表す。

式(2)が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。

また、式(2)で表される構造としては、より具体的には、下記群から選択されるアリール基であることが好ましい。

[0050]

[化21]



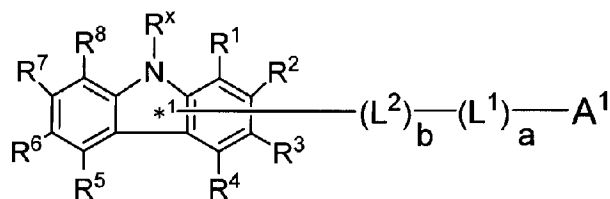
(上記式中、 $*^b$ は、上述した一般式(2)中の $*^b$ であり、結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基を有していてもよい。)

[0051] (化合物(A)の中でも好ましい化合物の一般式)

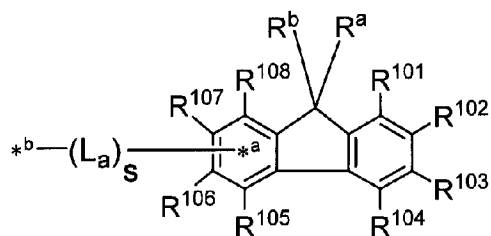
本発明の化合物(A)の中でも好ましい化合物の一般式を以下に列挙する。なお、各基の定義は、特に明記しない限り、一般式(1)及び(2)中のものと同じであり、好ましいものも同じである。

[0052] 本発明の化合物(A)の一態様においては、一般式(1)及び(2)が表す構造が、下記一般式(1a)及び(2a)で表される構造であることが好ましい。

[化22]



(1a)



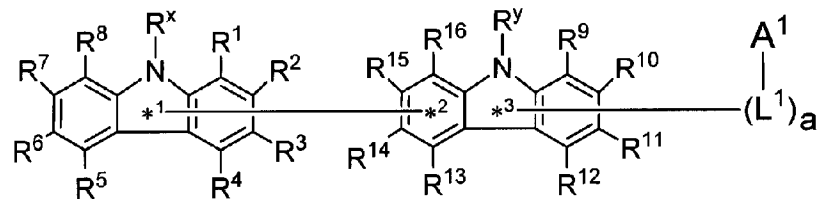
(2a)

(一般式 (1 a) 中、A¹、L¹、L²、a、b、R¹~R⁸、及びR^xは、前述の (1) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

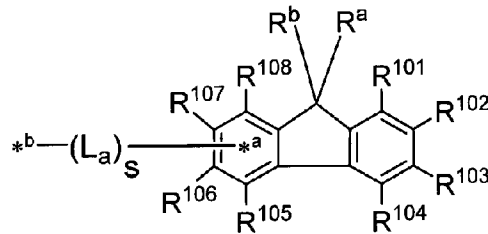
(一般式 (2 a) 中、L_a、s、R¹⁰¹~R¹⁰⁸、R^a及びR^bは、前述の (2) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0053] 本発明の化合物 (A) の一態様においては、一般式 (1) 及び (2) が表す構造が、下記一般式 (1 a-1) 及び (2 a) で表される構造であることが好ましい。

[化23]



(1a-1)



(2a)

(一般式(1a-1)中、 A^1 、 L^1 、 a は、前述の(1a)の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

R^x 及び R^y は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。

$R^1 \sim R^{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

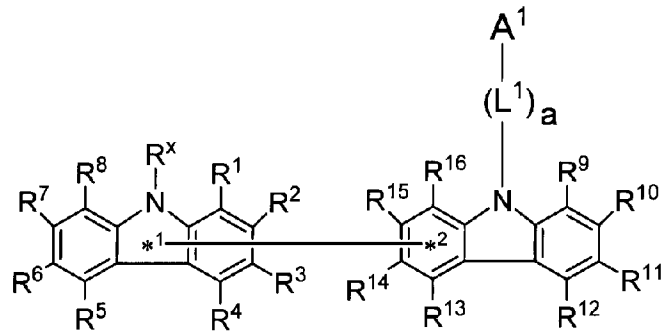
ただし、 $R^1 \sim R^4$ 、及び R^x のうちのいずれか1つは $*^1$ に結合する単結合を表し、 $R^{13} \sim R^{16}$ のうちのいずれか1つは $*^2$ に結合する単結合を表し、 $R^9 \sim R^{12}$ 、及び R^y のうちのいずれか1つは $*^3$ の位置で L^1 に結合する単結合を表す。

一般式(2a)中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。

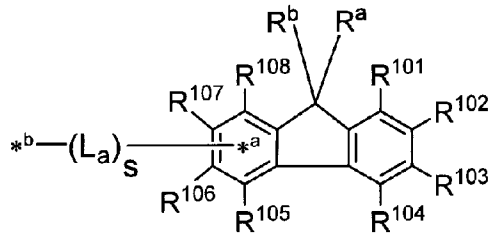
ただし、式(2a)は $*^b$ の位置で、 L^1 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^x 、及び R^y の少なくとも1つに結合する。))

[0054] 本発明の化合物(A)の一態様においては、一般式(1a-1)及び(2)が表す構造が、下記一般式(1a-2)及び(2a)で表される構造であることが好ましい。

[化24]



(1a-2)



(2a)

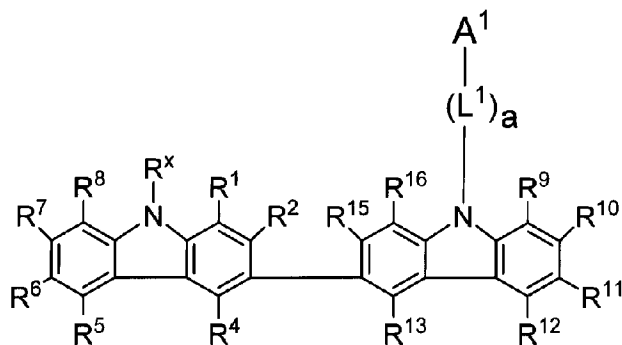
(一般式(1a-2)中、 A^1 、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、及び R^x は、前述の(1a-1)の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

一般式(2a)中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。

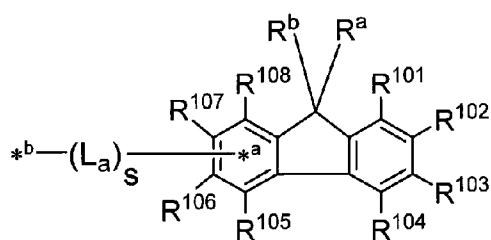
ただし、式(2a)は $*^b$ の位置で、 L^1 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、及び R^x の少なくとも1つに結合する。))

[0055] 本発明の化合物(A)の一態様においては、一般式(1a-1)及び(2)が表す構造が、下記一般式(1a-3)及び(2a)で表される構造であることがより好ましい。

[化25]



(1a-3)



(2a)

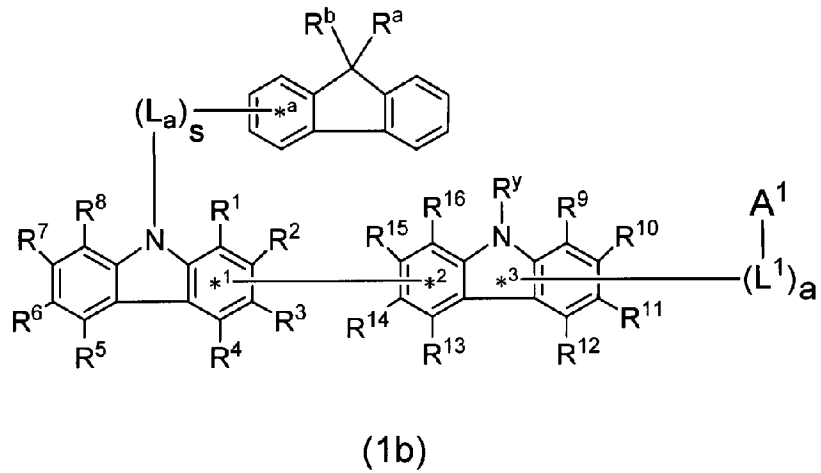
(一般式 (1 a - 3) 中、A¹、L¹、a、R¹~R¹⁶、及びR^xは、前述の (1 a - 1) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

一般式 (2 a) 中、L_a、s、R¹⁰¹~R¹⁰⁸、R^a及びR^bは、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。

ただし、式 (2 a) は*^bの位置で、L¹、R¹~R¹⁶、及びR^xの少なくとも1つに結合する。)

[0056] また、本発明の化合物 (A) の一態様においては、一般式 (1) に一般式 (2) が結合した構造が、下記一般式 (1 b) で表される構造であることが好ましい。

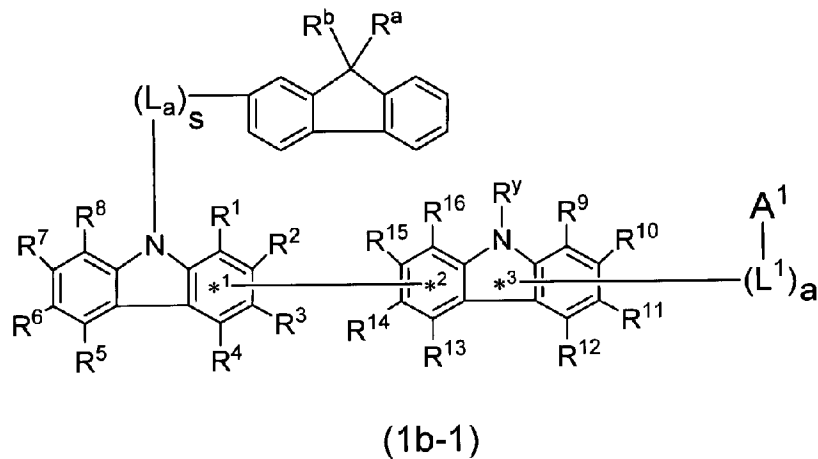
[化26]



(一般式 (1b) 中、 A^1 、 L_a 、 L^1 、 a 、 s 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^y 、 R^a 及び R^b は、前述の (1a-1) 及び (2a) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0057] 本発明の化合物 (A) の一態様においては、一般式 (1b) が表す構造が、下記一般式 (1b-1) で表される構造であることが好ましい。

[化27]

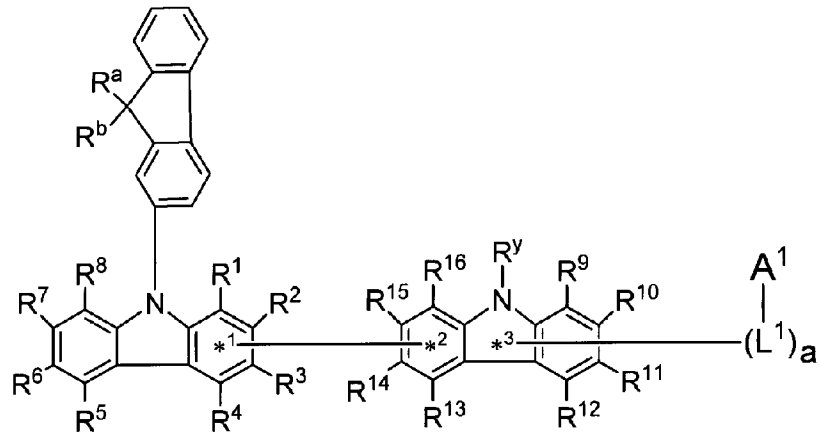


(一般式 (1b-1) 中、 A^1 、 L_a 、 L^1 、 a 、 s 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^y 、 R^a 及び R^b は、前述の (1a-1) 及び (2a) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0058] 本発明の化合物 (A) の一態様においては、一般式 (1b) が表す構造が

、下記一般式（1b-2）で表される構造であることが、より好ましい。

[化28]

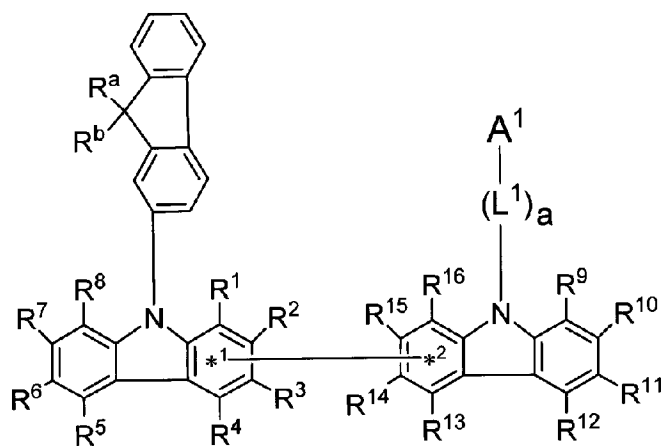


(1b-2)

（一般式（1b-2）中、 A^1 、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^y 、 R^a 及び R^b は、前述の（1a-1）及び（2a）の場合と同じであり、好ましいものも同じである。）

[0059] 本発明の化合物（A）の一態様においては、一般式（1b）が表す構造が、下記一般式（1b-3）で表される構造であることが、更に好ましい。

[化29]



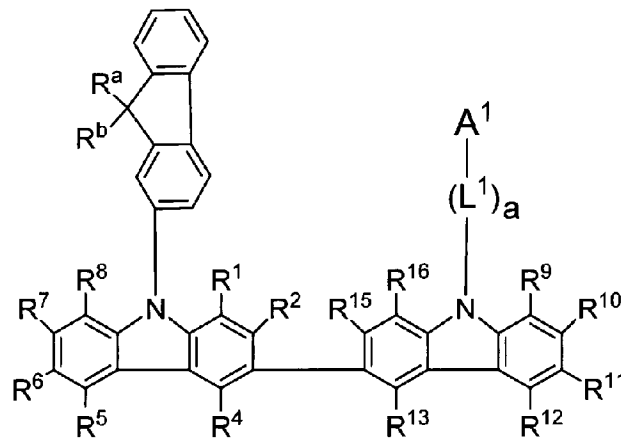
(1b-3)

（一般式（1b-3）中、 A^1 、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^a 及び R^b は、前述

の(1a-1)及び(2a)の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0060] 本発明の化合物(A)の一態様においては、一般式(1b)が表す構造が、下記一般式(1b-4)で表される構造であることが、より更に好ましい。

[化30]

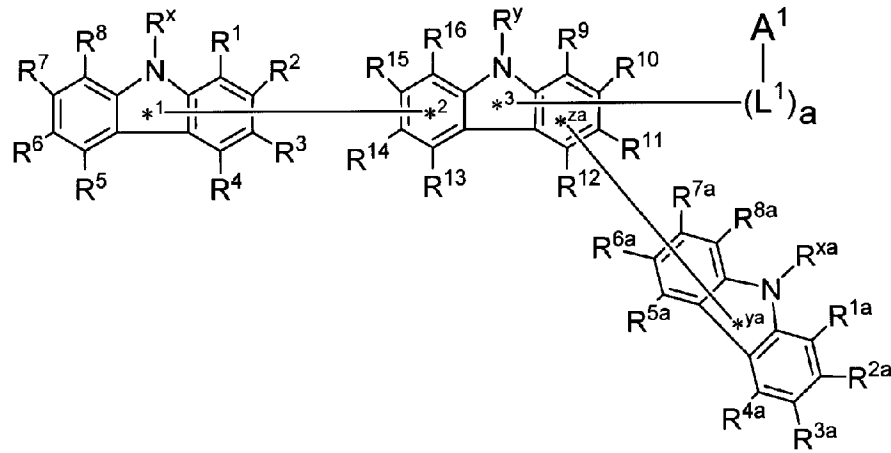


(1b-4)

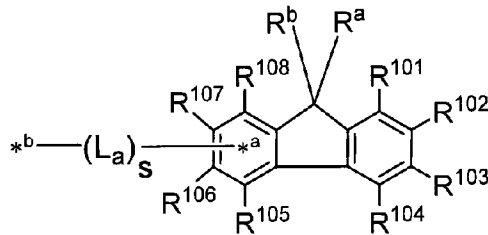
(一般式(1b-4)中、 A^1 、 L^1 、 a 、 R^1 、 R^2 、 $R^4 \sim R^{13}$ 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^a 及び R^b は、前述の(1a-1)及び(2a)の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0061] 本発明の化合物(A)の一態様においては、一般式(1)及び(2)が表す構造が、下記一般式(1a-a)及び(2a)で表される構造であることが好ましい。

[化31]



(1a-a)



(2a)

(一般式(1a-a)中、 A^1 、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^x 及び R^y は、前述の(1a-1)の記載と同じである。

R^{xa} は、水素原子又は置換基を表す。

$R^{1a} \sim R^{8a}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^{5a} \sim R^{8a}$ 及び R^{xa} のうちのいずれか1つは、 $*^{ya}$ に結合する単結合を表し、 $R^9 \sim R^{12}$ のうちのいずれか1つは $*^{za}$ に結合する単結合を表す。

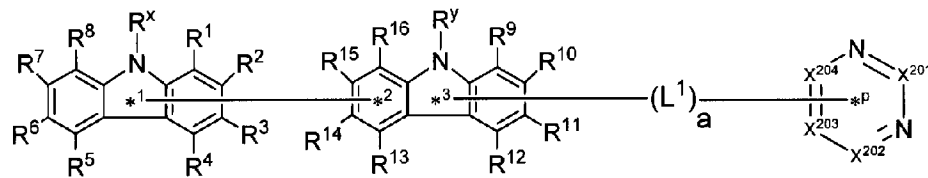
。

一般式(2a)中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。

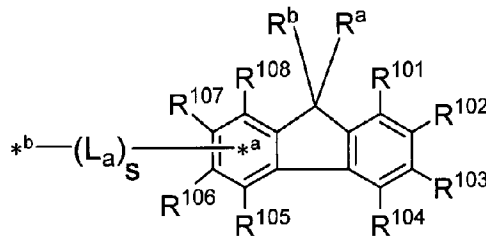
ただし、式(2a)は $*^b$ の位置で、 L^1 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 $R^{1a} \sim R^{8a}$ 、 R^x 、 R^y 、及び R^{xa} の少なくとも1つに結合する。))

[0062] また、本発明の化合物（A）の一態様においては、一般式（1）及び（2）が表す構造が、下記一般式（1-i）及び（2a）で表される構造であることが好ましい。

[化32]



(1-i)



(2a)

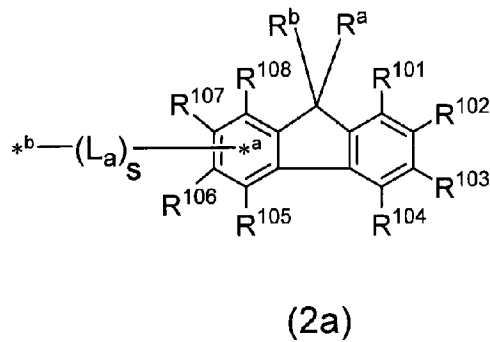
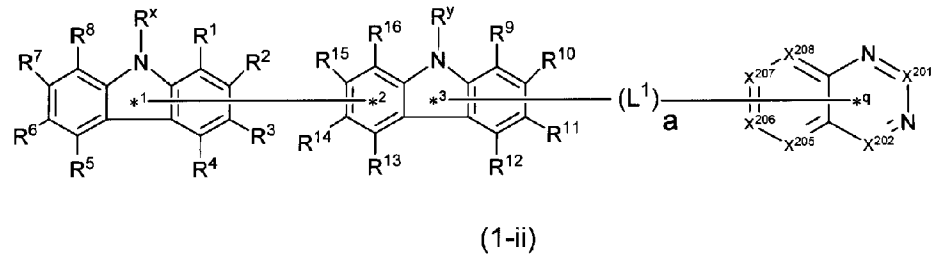
（一般式（1-i）中、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^x 及び R^y は、前述の（1a-1）の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

$X^{201} \sim X^{204}$ は、それぞれC（ R^{201} ）～C（ R^{204} ）又は窒素原子を表す。 $R^{201} \sim R^{204}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は互いに結合してもよい。ただし、 $R^{201} \sim R^{204}$ のうちのいずれか1つは、*Pの位置で L^1 に直接結合する単結合を表す。

一般式（2a）中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。）

[0063] 本発明の化合物（A）の一態様においては、一般式（1）及び（2）が表す構造が、下記一般式（1-ii）及び（2a）で表される構造であることが好ましい。

[化33]



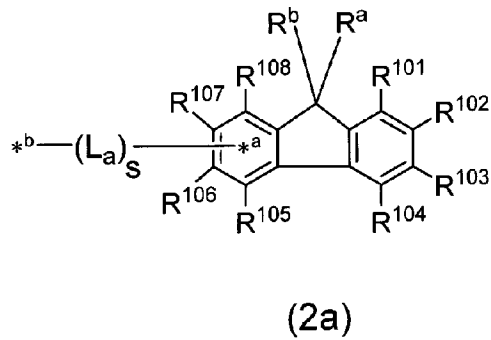
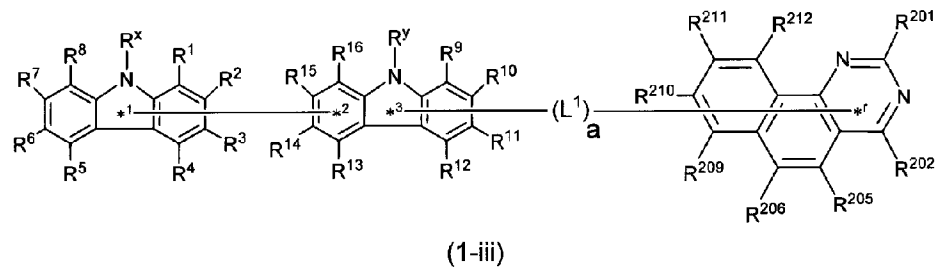
(一般式 (1-ii) 中、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^x 及び R^y は、前述の (1 a-1) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

X^{201} 、 X^{202} 、及び $X^{205} \sim X^{208}$ は、それぞれ $C(R^{201})$ 、 $C(R^{202})$ 、 $C(R^{205}) \sim C(R^{208})$ 、又は窒素原子を表す。 R^{201} 、 R^{202} 、及び $R^{205} \sim R^{208}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は互いに結合してもよい。ただし、 R^{201} 、 R^{202} 、及び $R^{205} \sim R^{208}$ のうちのいずれか1つは、 $*^q$ の位置で L^1 に直接結合する単結合を表す。

一般式 (2 a) 中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。)

[0064] 本発明の化合物 (A) の一態様においては、一般式 (1) 及び (2) が表す構造が、下記一般式 (1-iii) 及び (2 a) で表される構造であることが好ましい。

[化34]



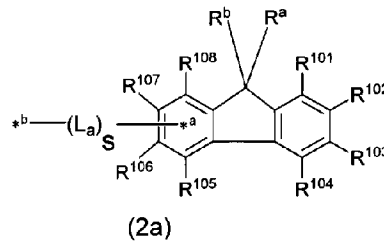
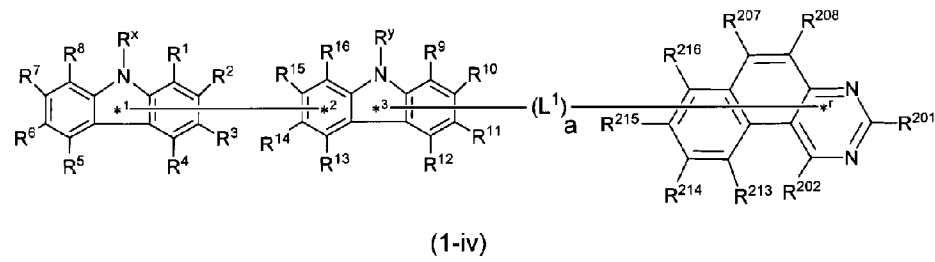
(一般式 (1-iii) 中、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^x 及び R^y は、前述の (1 a-1) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

R^{201} 、 R^{202} 、 R^{205} 、 R^{206} 、及び $R^{209} \sim R^{212}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は互いに結合してもよい。ただし、 R^{201} 、 R^{202} 、 R^{205} 、 R^{206} 、及び $R^{209} \sim R^{212}$ のうちのいずれか 1 つは、 $*r$ の位置で L^1 に直接結合する単結合を表す。

(一般式 (2a) 中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。)

[0065] 本発明の化合物 (A) の一態様においては、一般式 (1) 及び (2) が表す構造が、下記一般式 (1-iv) 及び (2a) で表される構造であることが好ましい。

[化35]



(一般式 (1-iv) 中、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^x 及び R^y は、前述の (1a-1) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

R^{201} 、 R^{202} 、 R^{207} 、 R^{208} 、及び $R^{213} \sim R^{216}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は互いに結合してもよい。ただし、 R^{201} 、 R^{202} 、 R^{207} 、 R^{208} 、及び $R^{213} \sim R^{216}$ のうちのいずれか 1 つは、*r の位置で L^1 に直接結合する単結合を表す。

(一般式 (2a) 中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。)

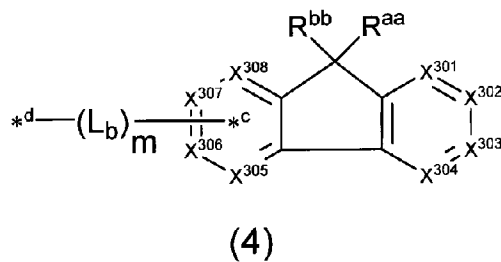
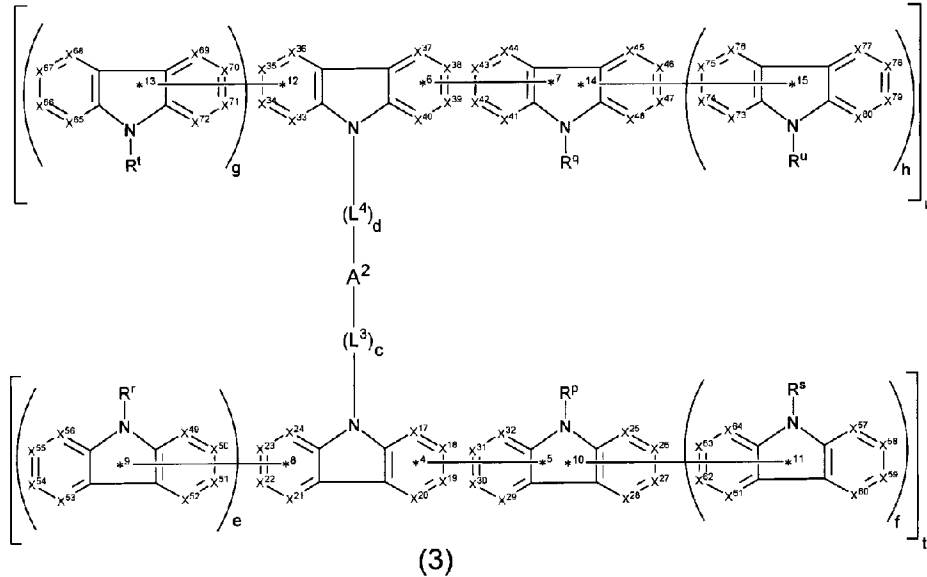
[0066] [化合物 (B)]

本発明の一態様において、下記一般式 (3) 及び (4) によって表される化合物 [以下、単に、化合物 (B) と略称することがある。] が提供される。当該化合物 (B) は、下記一般式 (4) で表される構造が、下記一般式 (3) の構造に結合した構造を有するために、塗布法による層形成が可能であり、有機 EL 素子の多様な特性 (電子輸送性、正孔輸送性、発光効率、寿命等) の向上要求に応え得る化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

なお、化合物 (B) には、前述の化合物 (A) と同様の構造を有するものも含むことができる。また、本発明の一態様において、下記一般式 (4) で

表される構造の特徴、及び下記一般式（４）で表される構造を下記一般式（３）に結合させる理由は、上述した一般式（２）で表される構造の特徴、及び上記一般式（２）で表される構造を上記一般式（１）で表される構造に結合させる理由と同様である。

[0067] [化36]



（一般式（３）中、 A^2 は、置換若しくは無置換の環形成原子数５～３０の含窒素ヘテロ芳香族基を表す。

L^3 及び L^4 は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換若しくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基を表す。

c 及び d は、それぞれ独立に、０又は１を表す。ただし、 c が０のとき、 $(L^3)_0$ は、単結合を表す。また、 d が０のとき、 $(L^4)_0$ は、単結合を表す。

$R^p \sim R^u$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。

$X^{17} \sim X^{80}$ は、それぞれ $C(R^{17}) \sim C(R^{80})$ 、又は窒素原子を表す。

$R^{17} \sim R^{80}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^{17} \sim R^{20}$ のうちのいずれか1つは*⁴に結合する単結合を表し、 R^p 、 $R^{29} \sim R^{32}$ のうちのいずれか1つは*⁵に結合する単結合を表し、 $R^{37} \sim R^{40}$ のうちのいずれか1つは*⁶に結合する単結合を表し、 R^q 、 $R^{41} \sim R^{44}$ のうちのいずれか1つは*⁷に結合する単結合を表し、 $R^{21} \sim R^{24}$ のうちのいずれか1つは*⁸に結合する単結合を表し、 R^r 、 $R^{49} \sim R^{52}$ のうちのいずれか1つは*⁹に結合する単結合を表し、 R^p 、 $R^{25} \sim R^{28}$ のうちのいずれか1つは*¹⁰に結合する単結合を表し、 R^s 、 $R^{61} \sim R^{64}$ のうちのいずれか1つは*¹¹に結合する単結合を表し、 $R^{33} \sim R^{36}$ のうちのいずれか1つは*¹²に結合する単結合を表し、 R^t 、 $R^{69} \sim R^{72}$ のうちのいずれか1つは*¹³に結合する単結合を表し、 R^q 、 $R^{45} \sim R^{48}$ のうちのいずれか1つは*¹⁴に結合する単結合を表し、 R^u 、 $R^{73} \sim R^{76}$ のうちのいずれか1つは*¹⁵に結合する単結合を表す。

$X^{17} \sim X^{80}$ 、 $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ のうち同一符号のものが複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。

$e \sim h$ は、それぞれ独立に、0又は1の整数を表す。ただし、 $e \sim h$ が0の場合、 $()_0$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。

t 及び u は、それぞれ独立に、0～2の整数を表し、 $t + u = 2$ である。ただし、 t が0の場合の $[]_0$ 、及び u が0の場合の $[]_0$ は、それぞれ、水素原子を表す。

一般式(4)中、 L_b は、置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基を表す。

m は、0又は1を表す。ただし、 m が0のとき、 $(L_b)_0$ は単結合を表す。

$X^{301} \sim X^{308}$ は、それぞれ $C(R^{301}) \sim C(R^{308})$ 又は窒素原子を表す。 $R^{301} \sim R^{308}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。ただし、 $R^{305} \sim R^{308}$ のうちいずれか1つは、 $*^c$ の位置で L_b に直接結合する単結合を表す。

R^{aa} 及び R^{bb} は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数1～10のアルキル基、環形成炭素数6～14のアリール基、又は環形成原子数5～14のヘテロアリール基を表す。 R^{aa} と R^{bb} は、互いに結合して環を形成していてもよい。 R^{aa} と R^{301} 、 R^{bb} と R^{308} は、それぞれ独立に、互いに結合して環を形成してもよい。

式(4)は $*^d$ の位置で、 L^3 、 L^4 、 $X^{17} \sim X^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ の少なくとも1つに結合する。この場合、式(4)が結合する $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ は単結合を表す。

式(4)が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。))

[0068] (一般式(3)中の各基についての説明)

一般式(3)中、 A^2 は、前述の一般式(1)における A^1 が表す基と同様であり、好ましいものも同じである。

[0069] なお、後述する化合物(B)の中でも好ましい化合物の一般式の例中、一般式 A^2 構造中の $X^{501} \sim X^{508}$ 、及び $R^{501} \sim R^{516}$ は、上述の $N1 \sim N6$ の構造の $X^{201} \sim X^{208}$ 、及び $R^{201} \sim R^{216}$ と同様であり、好ましいものも同じである

一般式(3)中、 L^3 及び L^4 は、前述の一般式(1)における L^1 及び L^2 が表す基と同様であり、好ましいものも同じである。

一般式(3)中、 c 及び d は、それぞれ独立に、0又は1を表す。ただし、 c が0のとき、 $(L^3)_0$ は、単結合を表す。また、 d が0のとき、 $(L^4)_0$ は、単結合を表す。

一般式(3)中、 $R^p \sim R^u$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、前述の一般式(1)における R^x が表す基と同様であり、好ましいものも

同じである。

[0070] 一般式 (3) 中、 $X^{17} \sim X^{80}$ は、それぞれ $C(R^{17}) \sim C(R^{80})$ 、又は窒素原子を表す。 $R^{17} \sim R^{80}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよく、前述の一般式 (1) における R^x が表す基と同様であり、好ましいものも同じである。

ただし、 $R^{17} \sim R^{20}$ のうちのいずれか1つは $*^4$ に結合する単結合を表し、 R^p 、 $R^{29} \sim R^{32}$ のうちのいずれか1つは $*^5$ に結合する単結合を表し、 $R^{37} \sim R^{40}$ のうちのいずれか1つは $*^6$ に結合する単結合を表し、 R^q 、 $R^{41} \sim R^{44}$ のうちのいずれか1つは $*^7$ に結合する単結合を表し、 $R^{21} \sim R^{24}$ のうちのいずれか1つは $*^8$ に結合する単結合を表し、 R^r 、 $R^{49} \sim R^{52}$ のうちのいずれか1つは $*^9$ に結合する単結合を表し、 R^p 、 $R^{25} \sim R^{28}$ のうちのいずれか1つは $*^{10}$ に結合する単結合を表し、 R^s 、 $R^{61} \sim R^{64}$ のうちのいずれか1つは $*^{11}$ に結合する単結合を表し、 $R^{33} \sim R^{36}$ のうちのいずれか1つは $*^{12}$ に結合する単結合を表し、 R^t 、 $R^{69} \sim R^{72}$ のうちのいずれか1つは $*^{13}$ に結合する単結合を表し、 R^q 、 $R^{45} \sim R^{48}$ のうちのいずれか1つは $*^{14}$ に結合する単結合を表し、 R^u 、 $R^{73} \sim R^{76}$ のうちのいずれか1つは $*^{15}$ に結合する単結合を表す。

一般式 (3) 中、 $X^{17} \sim X^{80}$ 、 $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ のうち同一符号のものが複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。

[0071] 一般式 (3) 中、 $e \sim h$ は、それぞれ独立に、0又は1の整数を表す。ただし、 $e \sim h$ が0の場合、 $()_0$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。

[0072] 一般式 (3) 中、 t 及び u は、それぞれ独立に、0～2の整数を表し、 $t + u = 2$ である。ただし、 t が0の場合の $[]_0$ 、及び u が0の場合の $[]_0$ は、それぞれ、水素原子を表す。

[0073] (一般式 (4) 中の各基についての説明)

一般式 (4) 中、 L_b は、前述の一般式 (2) における L_a が表す基と同様

であり、好ましいものも同じである。

一般式(4)中、 m は、0又は1を表し、好ましくは0である。ただし、 m が0のとき、 $(L_b)_0$ は単結合を表す。

L_b が置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基を表す場合の好ましい例としては、上述のとおりであるが、一般式(4)としては、 $m=0$ で、 $(L_b)_0$ が単結合を表す場合が、更に好ましい。

[0074] 一般式(4)中、 $X^{301} \sim X^{308}$ は、それぞれC(R^{301})～C(R^{308})又は窒素原子を表す。 $R^{301} \sim R^{308}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。ただし、 $R^{305} \sim R^{308}$ のうちのいずれか1つは、*^cの位置で L_b に直接結合する単結合を表す。

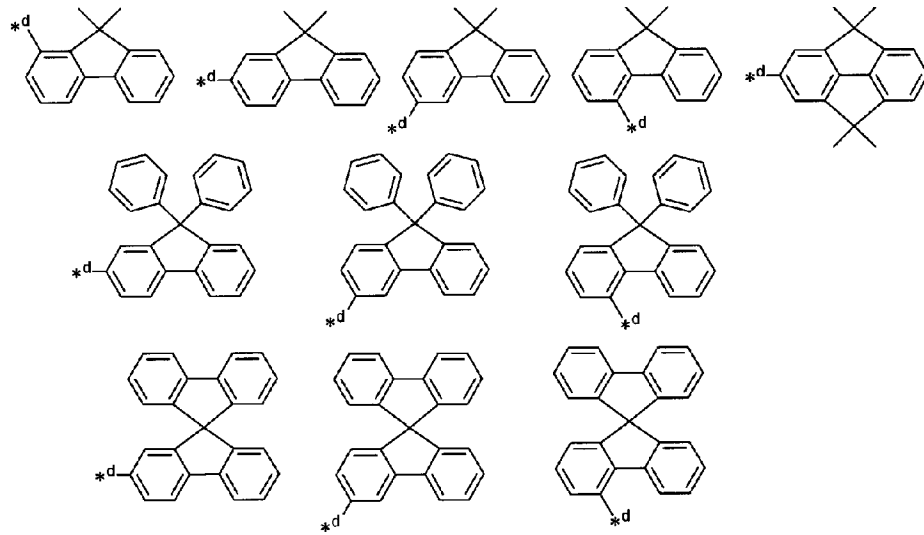
[0075] 一般式(4)中、 R^{aa} 及び R^{bb} は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数1～10のアルキル基、環形成炭素数6～14のアリール基、又は環形成原子数5～14のヘテロアリール基を表す。 R^{aa} と R^{bb} は、互いに結合して環を形成していてもよい。 R^{aa} と R^{301} 、 R^{bb} と R^{308} は、それぞれ独立に、互いに結合して環を形成してもよい。

式(4)は*^dの位置で、 L^3 、 L^4 、 $X^{17} \sim X^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ の少なくとも1つに結合する。この場合、式(4)が結合する $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ は単結合を表す。

式(4)が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。

[0076] また、一般式(4)で表される構造としては、より具体的には、下記群から選択されるアリール基であることが好ましい。

[化37]



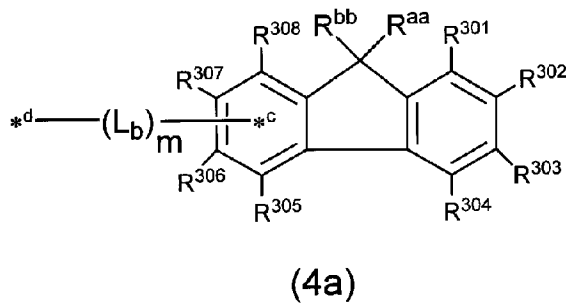
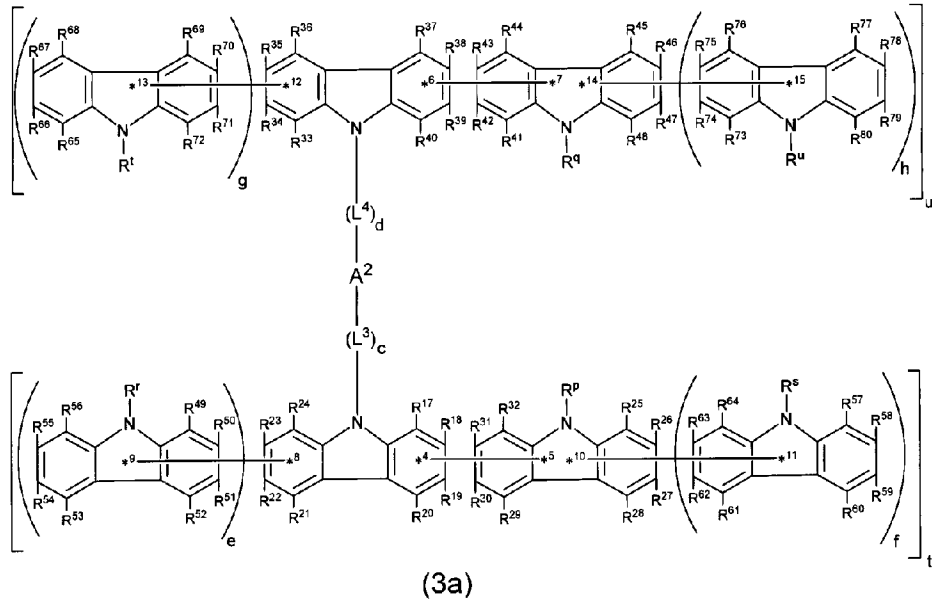
(上記式中、*^dは、上述した一般式(4)中の*^dであり、結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基を有していてもよい。)

[0077] (化合物(B)の中でも好ましい化合物の一般式)

本発明の化合物(B)の中でも好ましい化合物の一般式を以下に列挙する。なお、各基の定義は、特に明記しない限り、一般式(3)及び(4)中のものと同じであり、好ましいものも同じである。

[0078] 本発明の化合物(B)の一態様においては、一般式(3)及び(4)が表す構造が、下記一般式(3a)及び(4a)で表される構造であることが、より好ましい。

[化38]

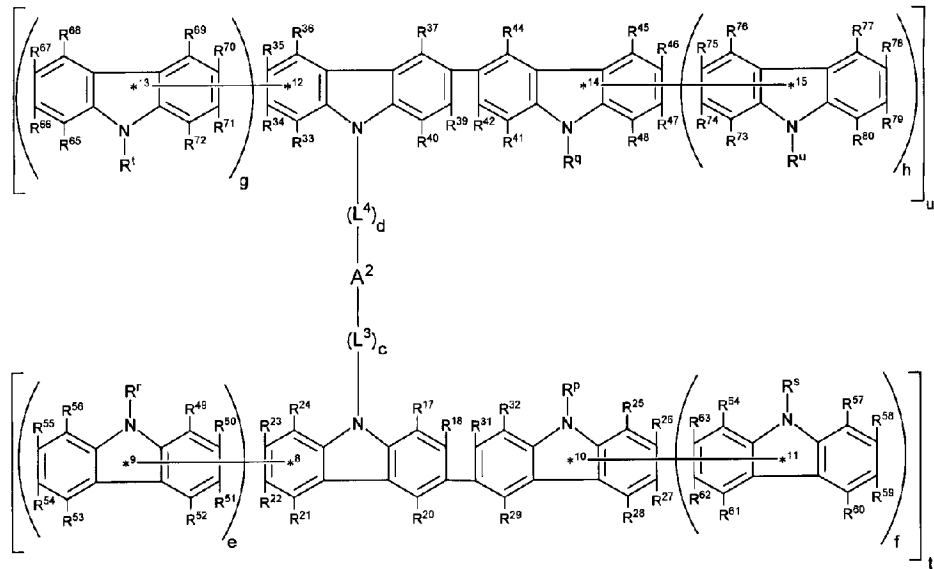


(一般式 (3 a) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 $c \sim h$ 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ は前述の (3) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

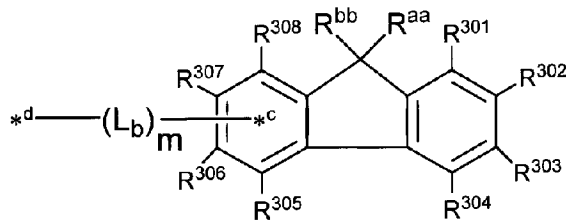
一般式 (4 a) 中、 L_b 、 m 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 R^{aa} 、及び R^{bb} は、前述の (4) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0079] 本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3) 及び (4) が表す構造が、下記一般式 (3 a - 1) 及び (4 a) で表される構造であることが好ましい。

[化39]



(3a-1)



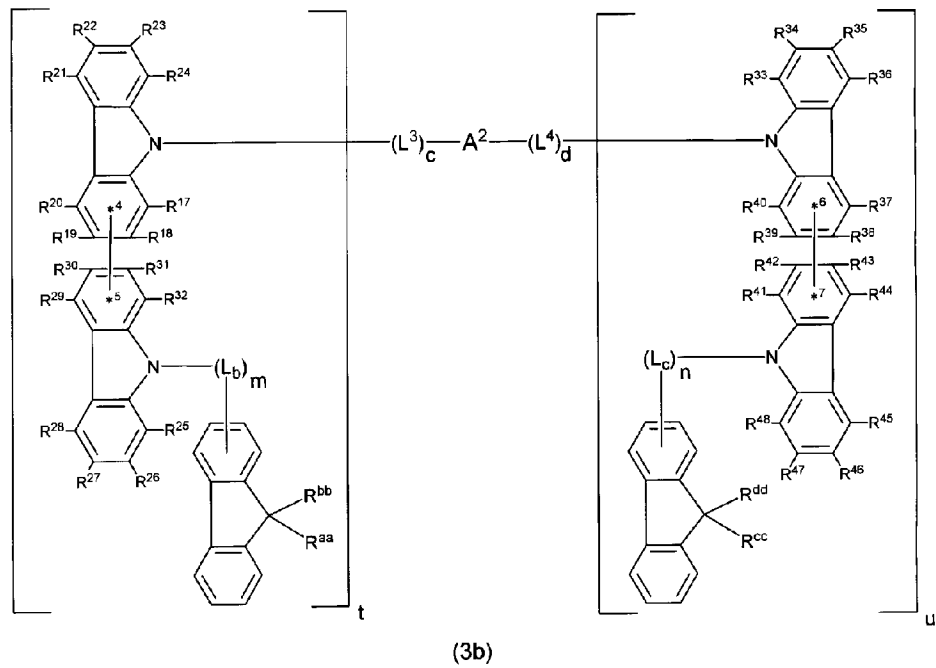
(4a)

(一般式 (3 a - 1) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 $c \sim h$ 、 t 、 u 、 R^{17} 、 R^{18} 、 $R^{20} \sim R^{29}$ 、 $R^{31} \sim R^{37}$ 、 $R^{39} \sim R^{42}$ 、 $R^{44} \sim R^{80}$ 、 $R^p \sim R^u$ は、前述の (3 a) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

(一般式 (4 a) 中、 L_b 、 m 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 R^{aa} 及び R^{bb} は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。)

[0080] また、本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3) に一般式 (4) が結合した構造が、下記一般式 (3 b) で表される構造であることが、好ましい。

[化40]



(一般式 (3 b) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 c 、 d 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim R^{48}$ 、 L_b 、 m 、 R^{aa} 及び R^{bb} は、前述の (3 a) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

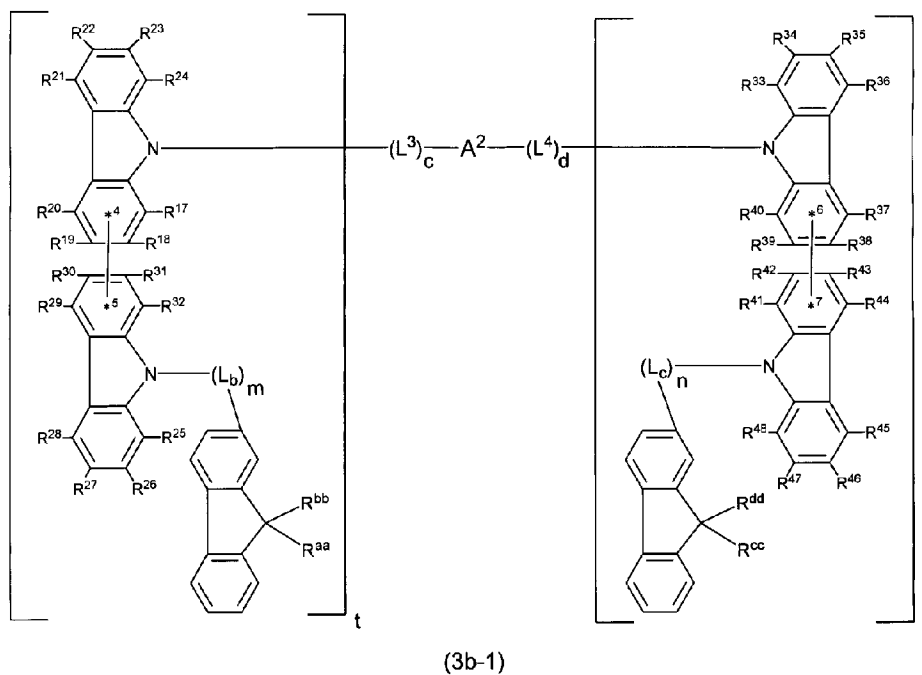
L_c は、置換若しくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基を表す。

n は、0 又は 1 を表す。ただし、 n が 0 のとき、 $(L_c)_0$ は単結合を表す。

R^{cc} 及び R^{dd} は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 14 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 14 のヘテロアリール基を表す。 R^{cc} と R^{dd} は、互いに結合して環を形成していてもよい。なお、 R^{cc} 及び R^{dd} は、前述の R^{aa} 及び R^{bb} の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0081] 本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3 b) で表される構造が、下記一般式 (3 b-1) で表される構造であることが、好ましい。

[化41]

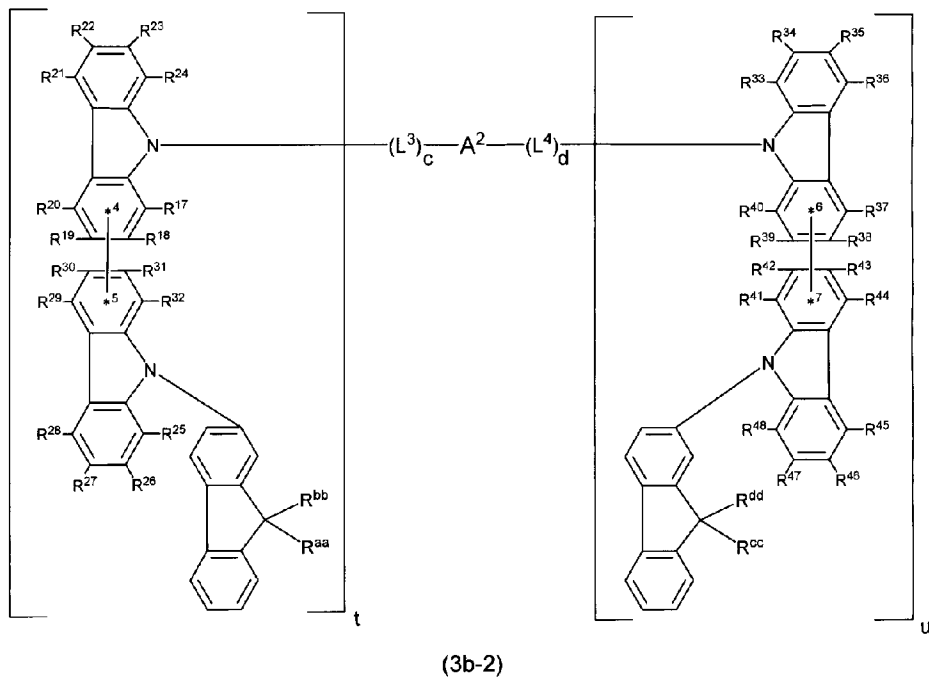


(一般式 (3b-1) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 c 、 d 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim R^{48}$ 、 L_b 、 L_c 、 m 、 n 、及び $R^{aa} \sim R^{dd}$ は、前述の (3b) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0082] 本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3b) で表される構造が、下記一般式 (3b-2) で表される構造であることが、より好ましい

。

[化42]

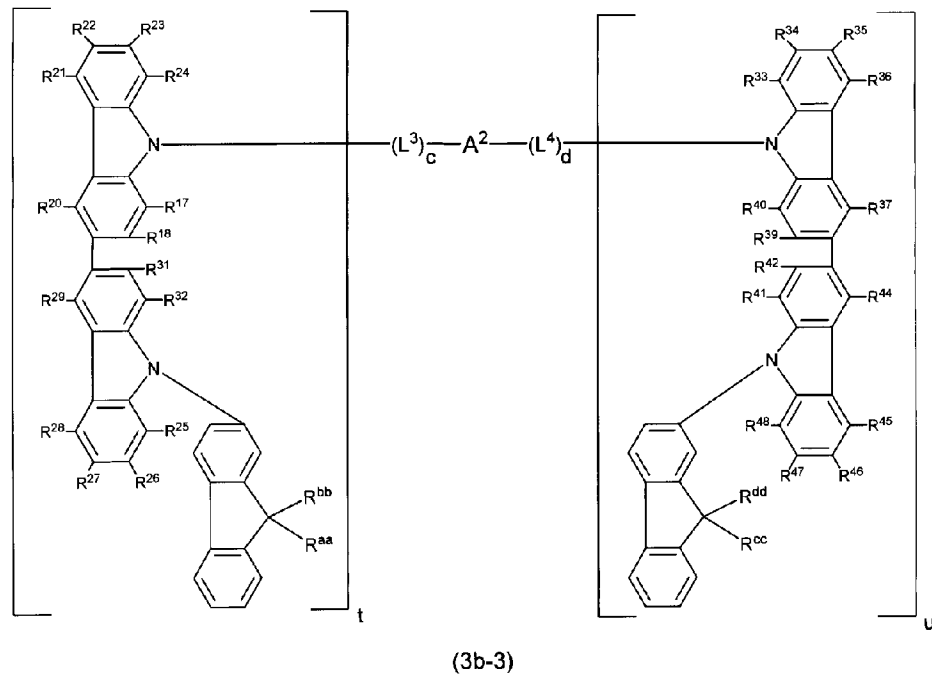


(一般式 (3b-2) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 c 、 d 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim R^{48}$ 、及び $R^{aa} \sim R^{dd}$ は、前述の (3b) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0083] 本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3b) で表される構造が、下記一般式 (3b-3) で表される構造であることが、更に好ましい

。

[化43]

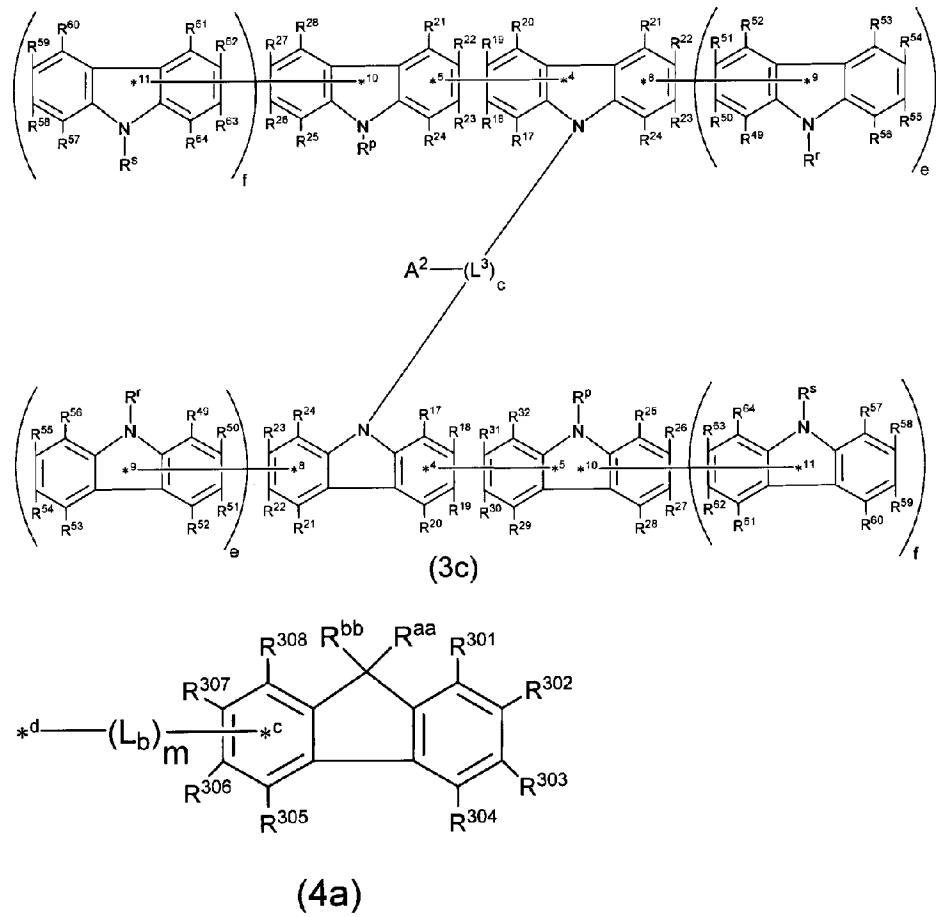


(一般式 (3b-3) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 c 、 d 、 t 、 u 、 R^{17} 、 R^{18} 、 $R^{20} \sim R^{29}$ 、 $R^{31} \sim R^{37}$ 、 $R^{39} \sim R^{42}$ 、 $R^{44} \sim R^{48}$ 、及び $R^{aa} \sim R^{dd}$ は、前述の (3b) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0084] 本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3) 及び (4) が表す構造が、下記一般式 (3c) 及び (4a) で表される構造であってもよい。

○

[化44]

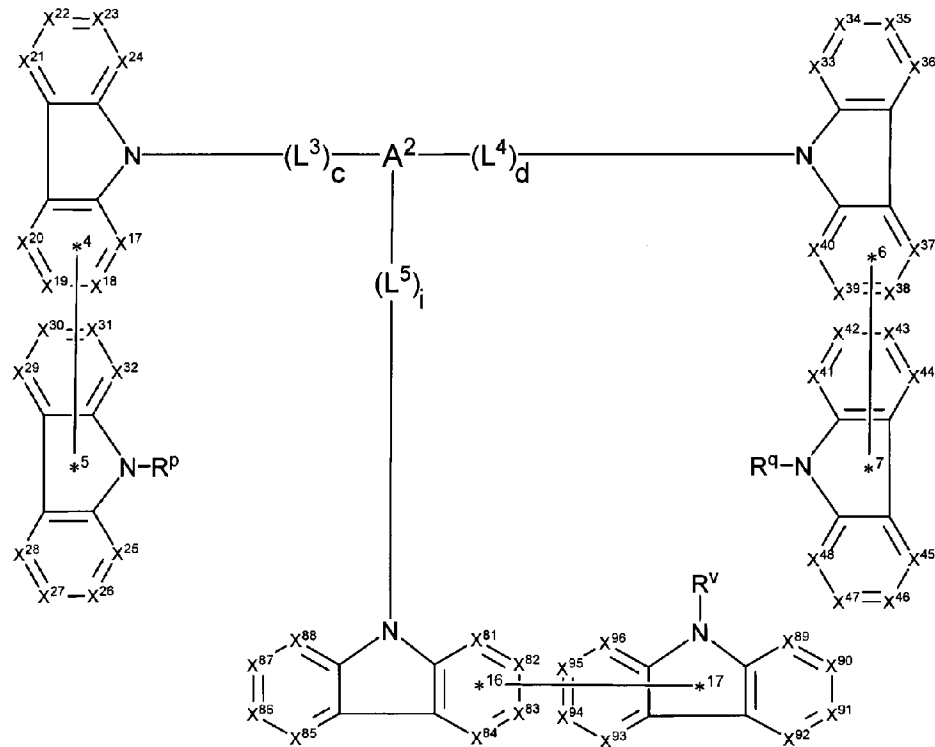


(一般式 (3c) 中、 A^2 、 L^3 、 c 、 e 、 f 、 $R^{17} \sim R^{32}$ 、 $R^{49} \sim R^{64}$ 、 R^p 、 R^r 、及び R^s は、前述の (3a) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

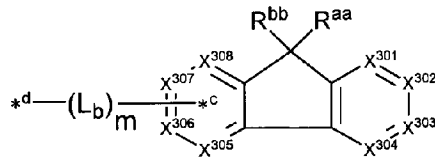
一般式 (4a) 中、 L_b 、 m 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 R^{aa} 及び R^{bb} は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。)

[0085] 本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3) 及び (4) が表す構造が、下記一般式 (3d) 及び (4) で表される構造であってもよい。

[化45]



(3 d)



(4)

(一般式 (3 d) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 c 、 d 、 $X^{17} \sim X^{48}$ 、 R^p 及び R^q は、前述の (3 a) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

L^5 は、置換若しくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、置換若しくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、又はこれらの基が 2 ~ 4 個結合してなる基を表す。

i は、0 又は 1 を表す。ただし、 i が 0 のとき、 $(L^5)_0$ は単結合を表す。

R^v は、水素原子又は置換基を表す。

$X^{81} \sim X^{96}$ は、それぞれ $C(R^{81}) \sim C(R^{96})$ 、又は窒素原子を表す。

$R^{81} \sim R^{96}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置

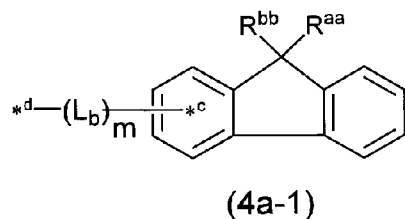
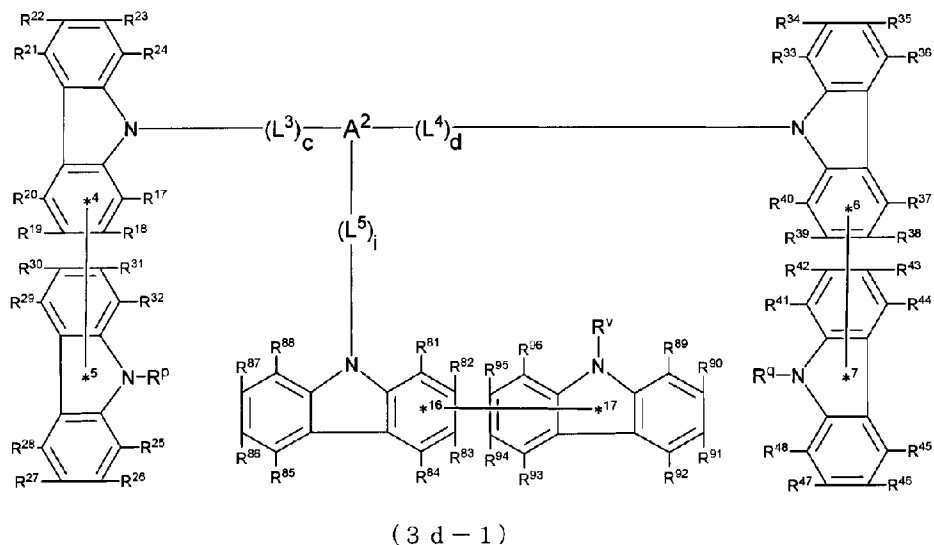
換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^{81} \sim R^{84}$ のうちのいずれか1つは*¹⁶に結合する単結合を表し、 R^v 、 $R^{93} \sim R^{96}$ のうちのいずれか1つは*¹⁷に結合する単結合を表す。

一般式(4)中、 L_b 、 m 、 $X^{301} \sim X^{308}$ 、 R^{aa} 及び R^{bb} は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。)

[0086] 本発明の化合物(B)の一態様においては、一般式(3d)及び(4)が表す構造が、下記一般式(3d-1)及び(4a-1)で表される構造であってもよい。

[化46]



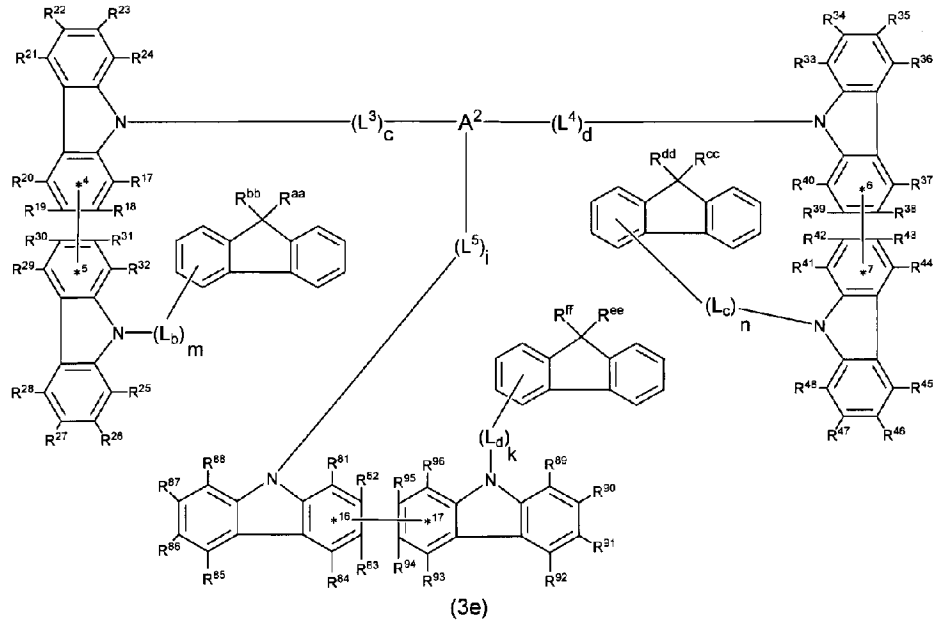
(一般式(3d-1)中、 A^2 、 $L^3 \sim L^5$ 、 c 、 d 、 i 、 $R^{17} \sim R^{48}$ 、 $R^{81} \sim R^{96}$ 、 R^p 、 R^q 及び R^v は、前述の(3d)の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

一般式(4a-1)中、 L_b 、 m 、 R^{aa} 及び R^{bb} は、前述の(4)の場合と同じであり、好ましいものも同じである。)

[0087] また、本発明の化合物(B)の一態様においては、一般式(3)に一般式

(4) が結合した構造が、下記一般式 (3e) で表される構造であってもよい。

[化47]



(一般式 (3e) 中、 A^2 、 $L^3 \sim L^5$ 、 c 、 d 、 i 、 $R^{17} \sim R^{48}$ 、 $R^{81} \sim R^{96}$ 、 L_b 、 m 、 R^{aa} 及び R^{bb} は、前述の (3d) 及び (4) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

L_c 、及び L_d は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基を表す。

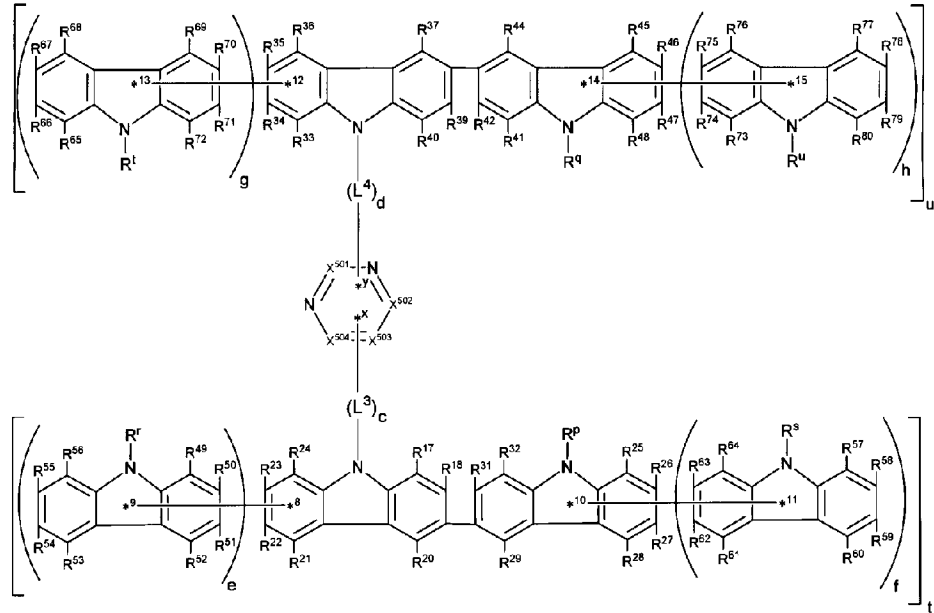
k 及び n は、それぞれ独立に、0 又は 1 を表す。ただし、 k が、0 のとき、 $(L_d)_0$ は単結合を表す。また、 n が、0 のとき、 $(L_c)_0$ は単結合を表す。

$R^{cc} \sim R^{ff}$ は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 14 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 14 のヘテロアリール基を表す。 R^{cc} と R^{dd} 、 R^{ee} と R^{ff} は、それぞれ独立に、互いに結合して環を形成してもよい。))

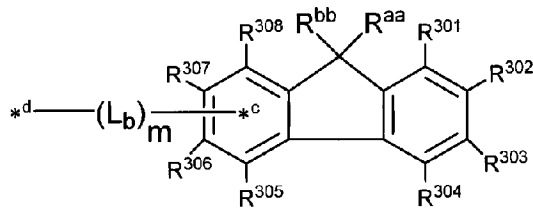
[0088] また、本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3) 及び (4)

) が表す構造が、下記一般式 (3-i) 及び (4a) で表される構造であってもよい。

[化48]



(3-i)



(4a)

(一般式 (3-i) 中、 L^3 、 L^4 、 $c \sim h$ 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ は、前述の (3) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

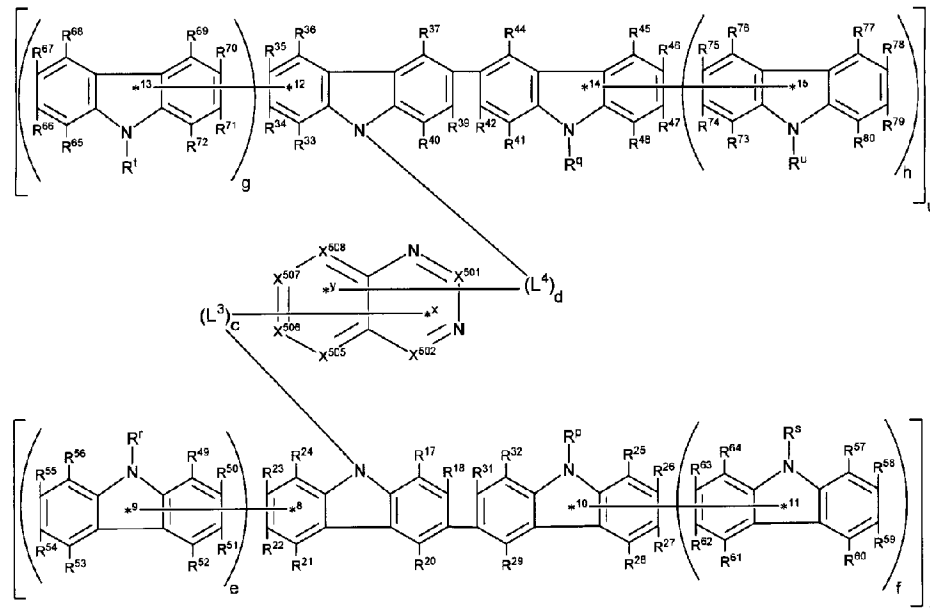
$X^{501} \sim X^{504}$ のうちの 1 つは $*x$ に結合する炭素原子であり、残りの 3 つのうち 1 つは $*y$ に結合する炭素原子であり、残りは、 $C(R_2)$ 、 $C(R_3)$) 又は窒素原子を表す。

R_2 、 R_3 は、水素原子又は置換基である。

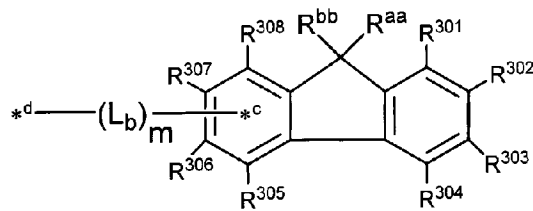
(一般式 (4a) 中、 L_b 、 m 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 R^{aa} 及び R^{bb} は、前述のとおりであり、好ましいものも同じである。)

[0089] また、本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3) 及び (4) が表す構造が、下記一般式 (3-ii) 及び (4a) で表される構造であってもよい。

[化49]



(3-ii)



(4a)

(一般式 (3-ii) 中、 L^3 、 L^4 、 $c \sim h$ 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ は、前述の (3) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

X^{501} 、 X^{502} 、 $X^{505} \sim X^{508}$ のうちの 1 つは $*x$ に結合する炭素原子であり、残りの 5 つのうちの 1 つは $*y$ に結合する炭素原子であり、残りは、 $C(R_2) \sim C(R_5)$ 又は窒素原子を表す。

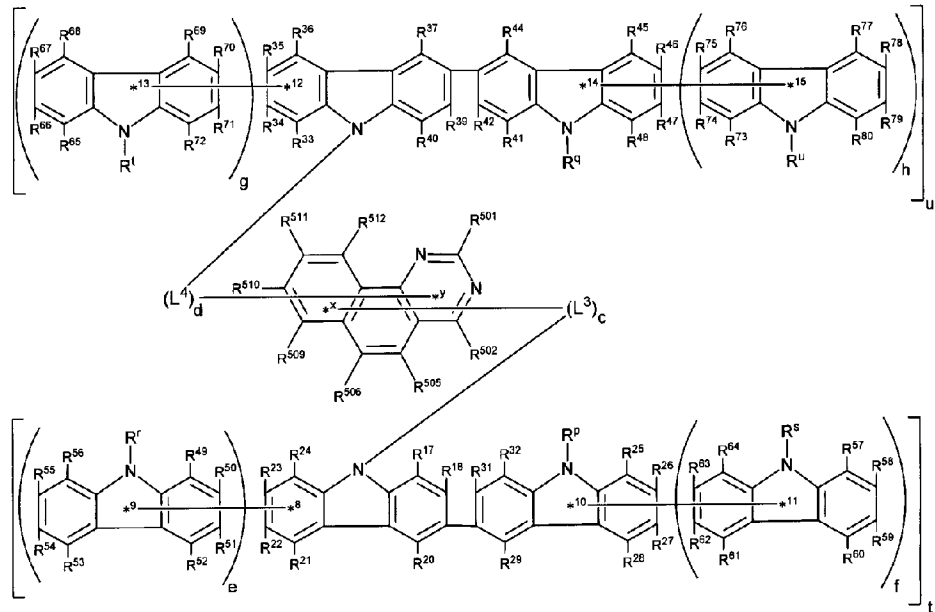
$R_2 \sim R_5$ は、水素原子又は置換基である。

一般式 (4a) 中、 L_b 、 m 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 R^{aa} 、及び R^{bb} は、前述の

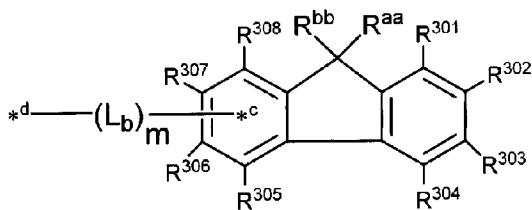
とおりであり、好ましいものも同じである。)

[0090] また、本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3) 及び (4) が表す構造が、下記一般式 (3-iii) 及び (4a) で表される構造であってもよい。

[化50]



(3-iii)



(4a)

(一般式 (3-iii) 中、 L^3 、 L^4 、 $c \sim h$ 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ は、前述の (3) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

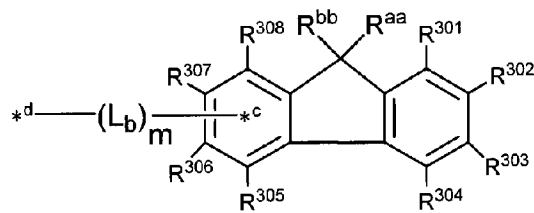
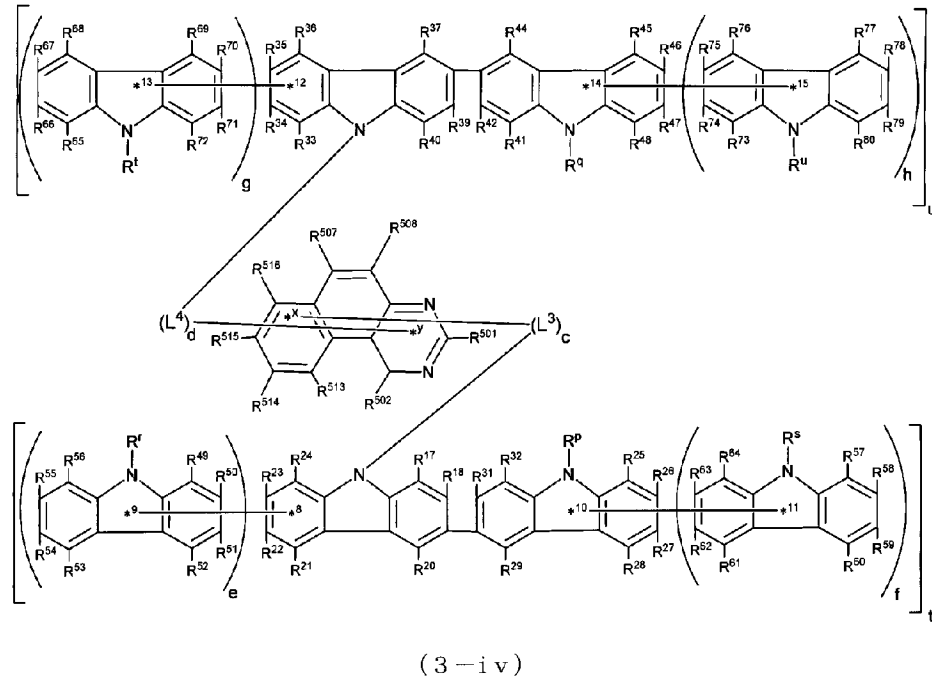
R^{501} 、 R^{502} 、 R^{505} 、 R^{506} 、 $R^{509} \sim R^{512}$ のうちの 1 つは $*x$ に結合する単結合であり、残りの 7 つのうちの 1 つは $*y$ に結合する単結合であり、残りは水素原子又は置換基である。

一般式 (4a) 中、 L_b 、 m 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 R^{aa} 、及び R^{bb} は、前述の

とおりであり、好ましいものも同じである。)

[0091] また、本発明の化合物 (B) の一態様においては、一般式 (3) 及び (4) が表す構造が、下記一般式 (3-iv) 及び (4a) で表される構造であってもよい。

[化51]



(一般式 (3-iv) 中、 L^3 、 L^4 、 $c \sim h$ 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ は、前述の (3) の場合と同じであり、好ましいものも同じである。

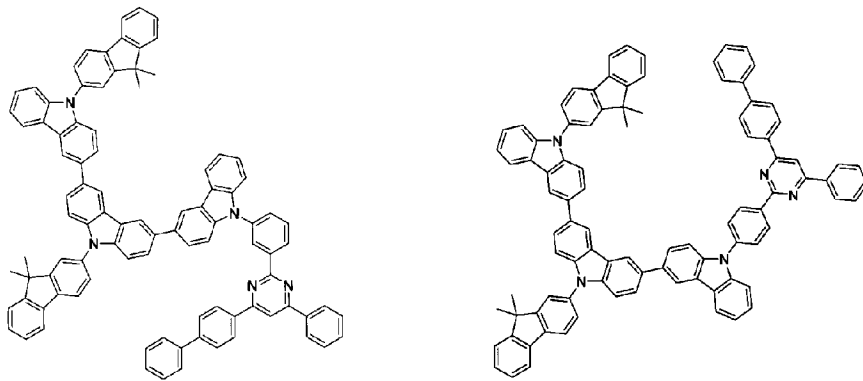
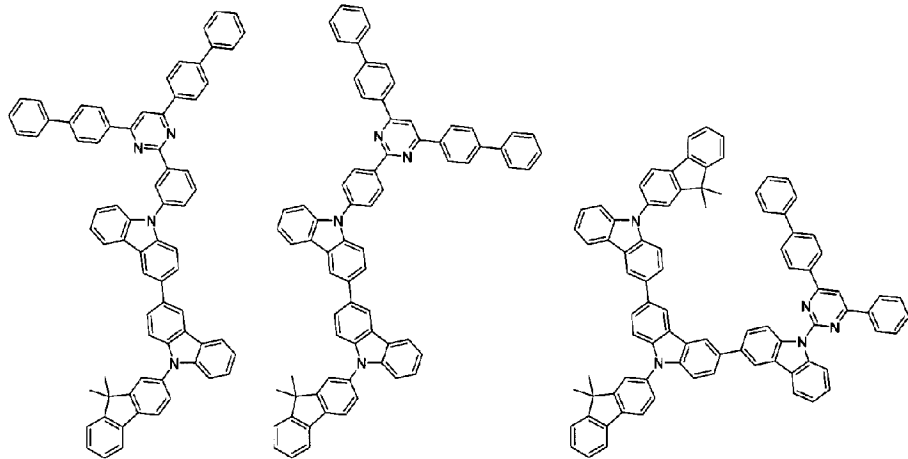
R^{501} 、 R^{502} 、 R^{507} 、 R^{508} 、 $R^{513} \sim R^{516}$ のうちの 1 つは $*x$ に結合する単結合であり、残りの 7 つのうちの 1 つは $*y$ に結合する単結合であり、残りは水素原子又は置換基である。

一般式 (4a) 中、 L_b 、 m 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 R^{aa} 、及び R^{bb} は、前述の

とおりであり、好ましいものも同じである。)

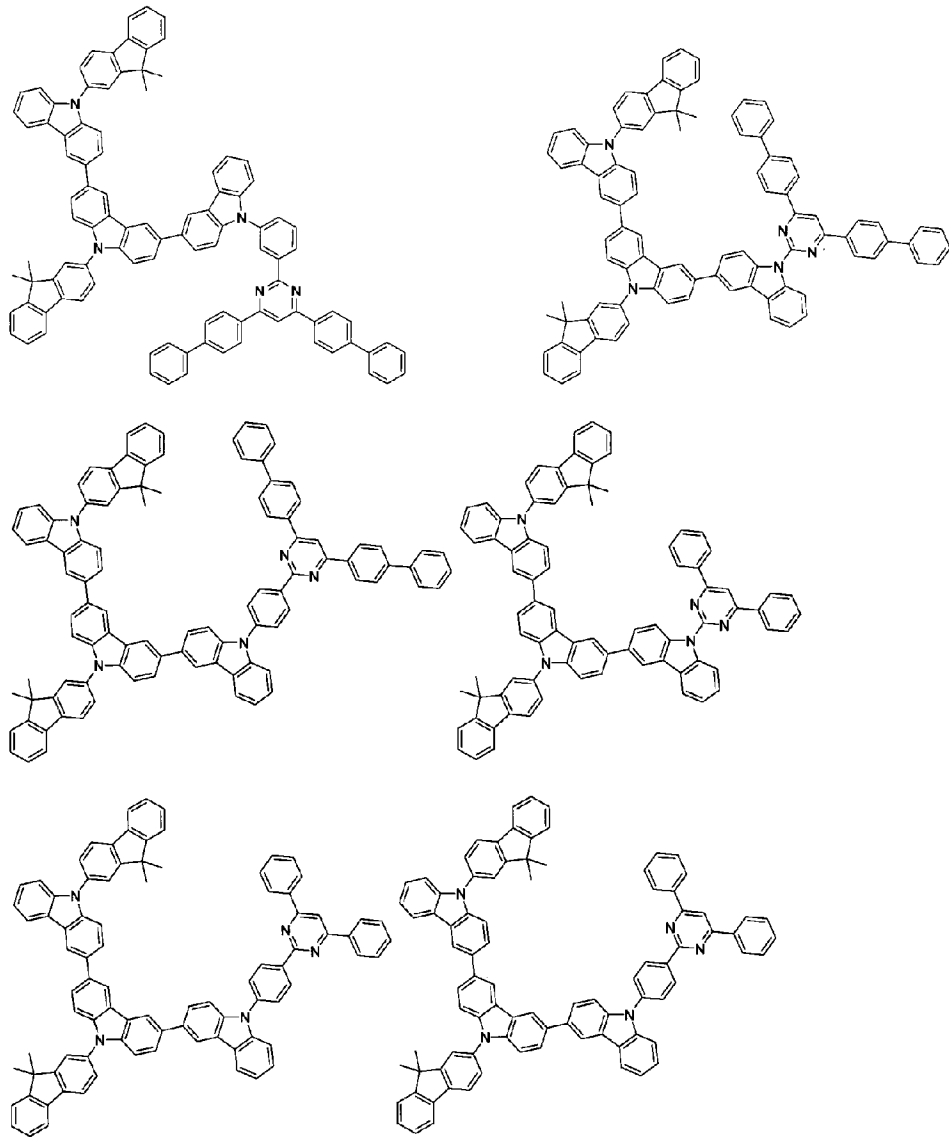
[0092] 以下に化合物 (A) 及び (B) の具体例を示すが、これらに限定されるものではない。

[化52]



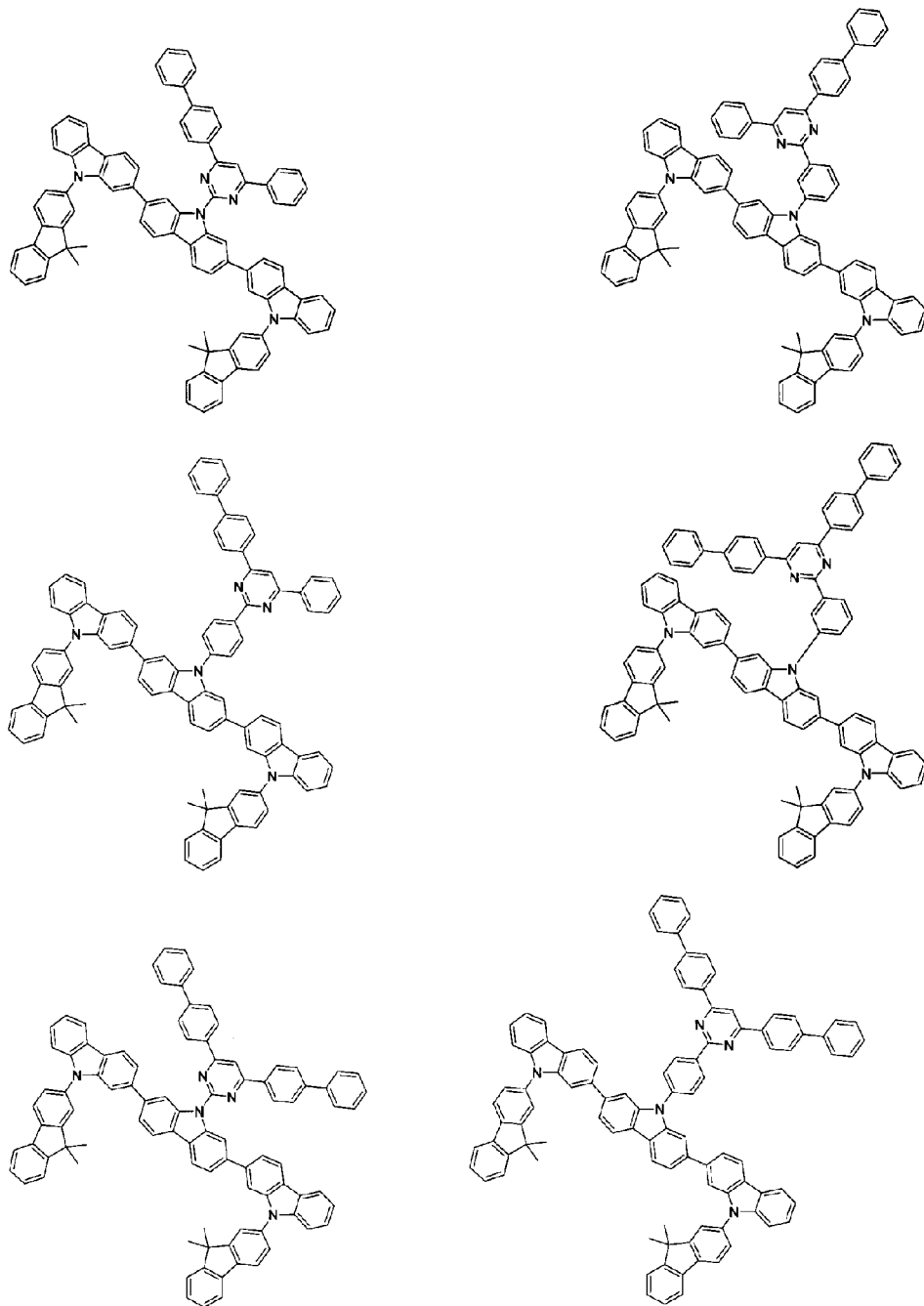
[0093]

[化53]



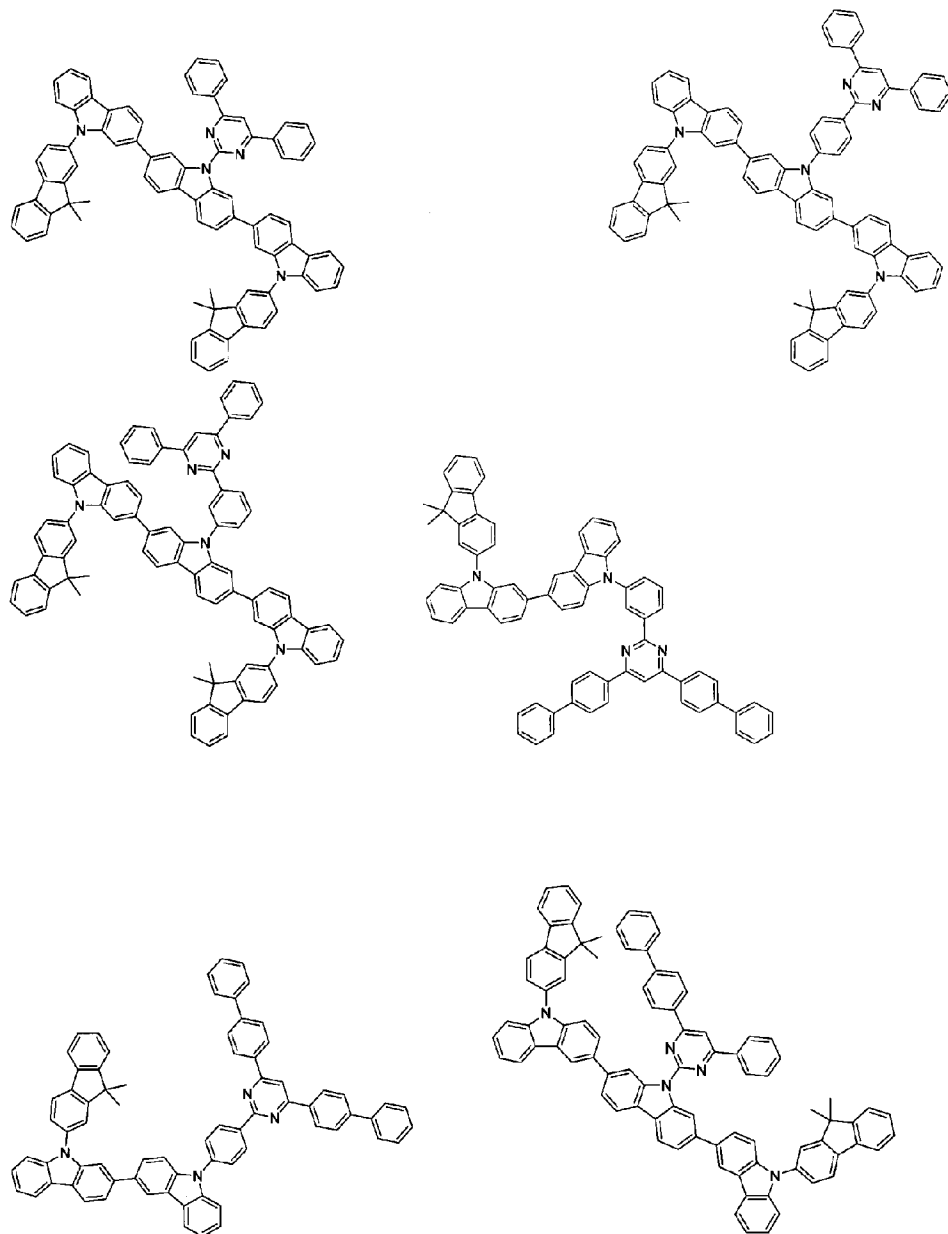
[0094]

[化54]



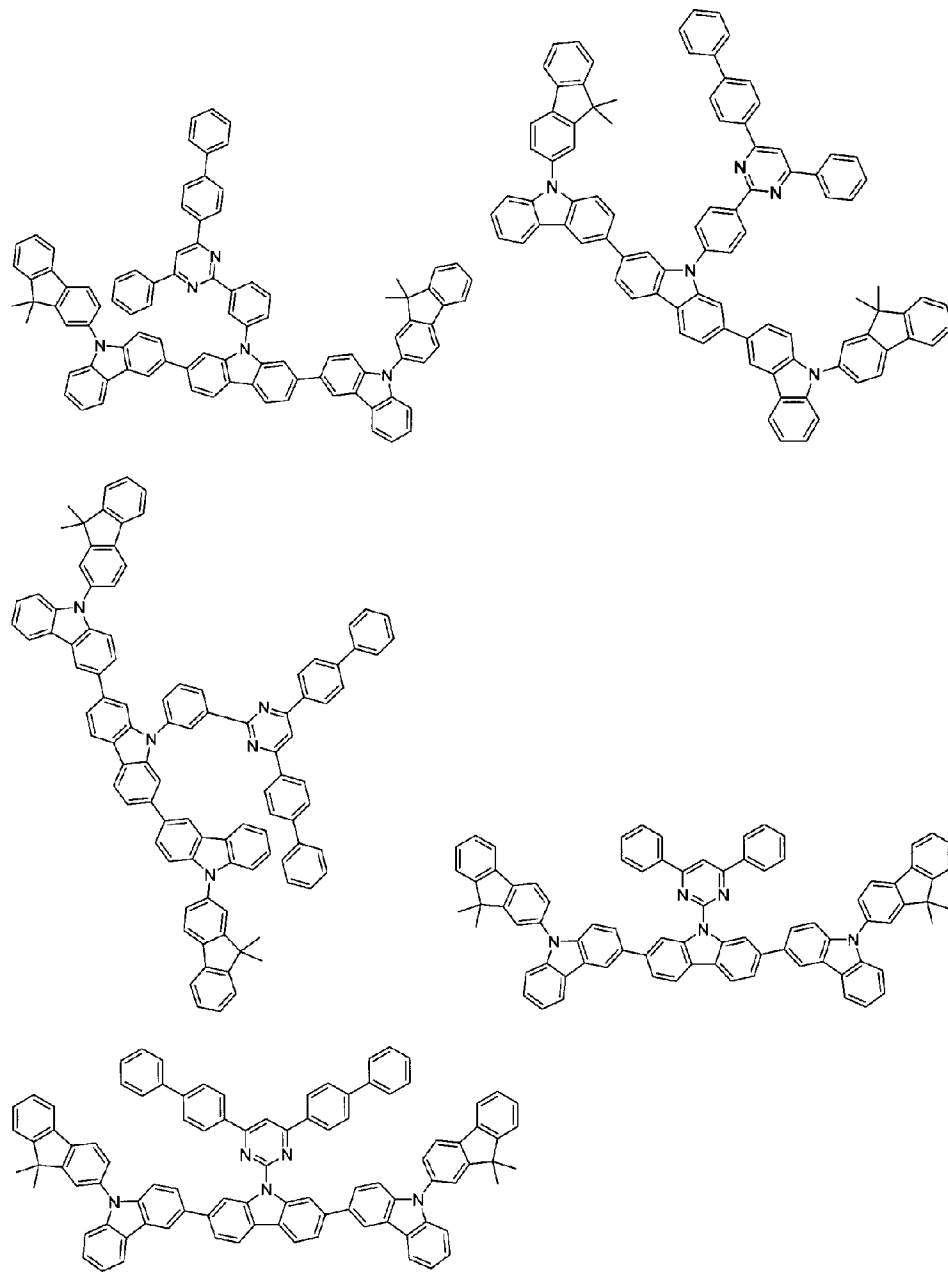
[0095]

[化55]



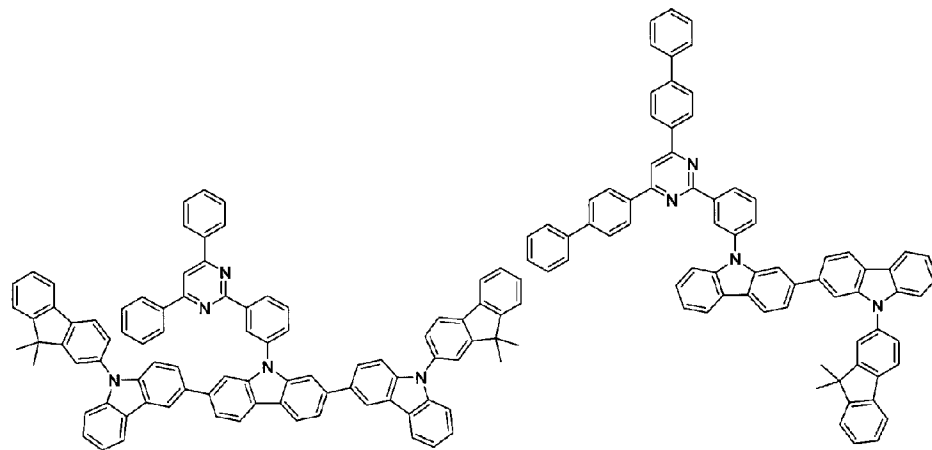
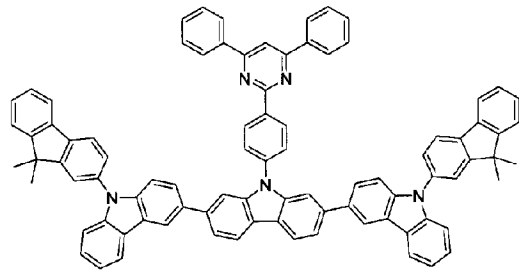
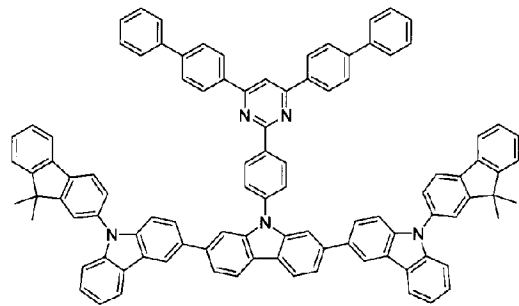
[0096]

[化56]



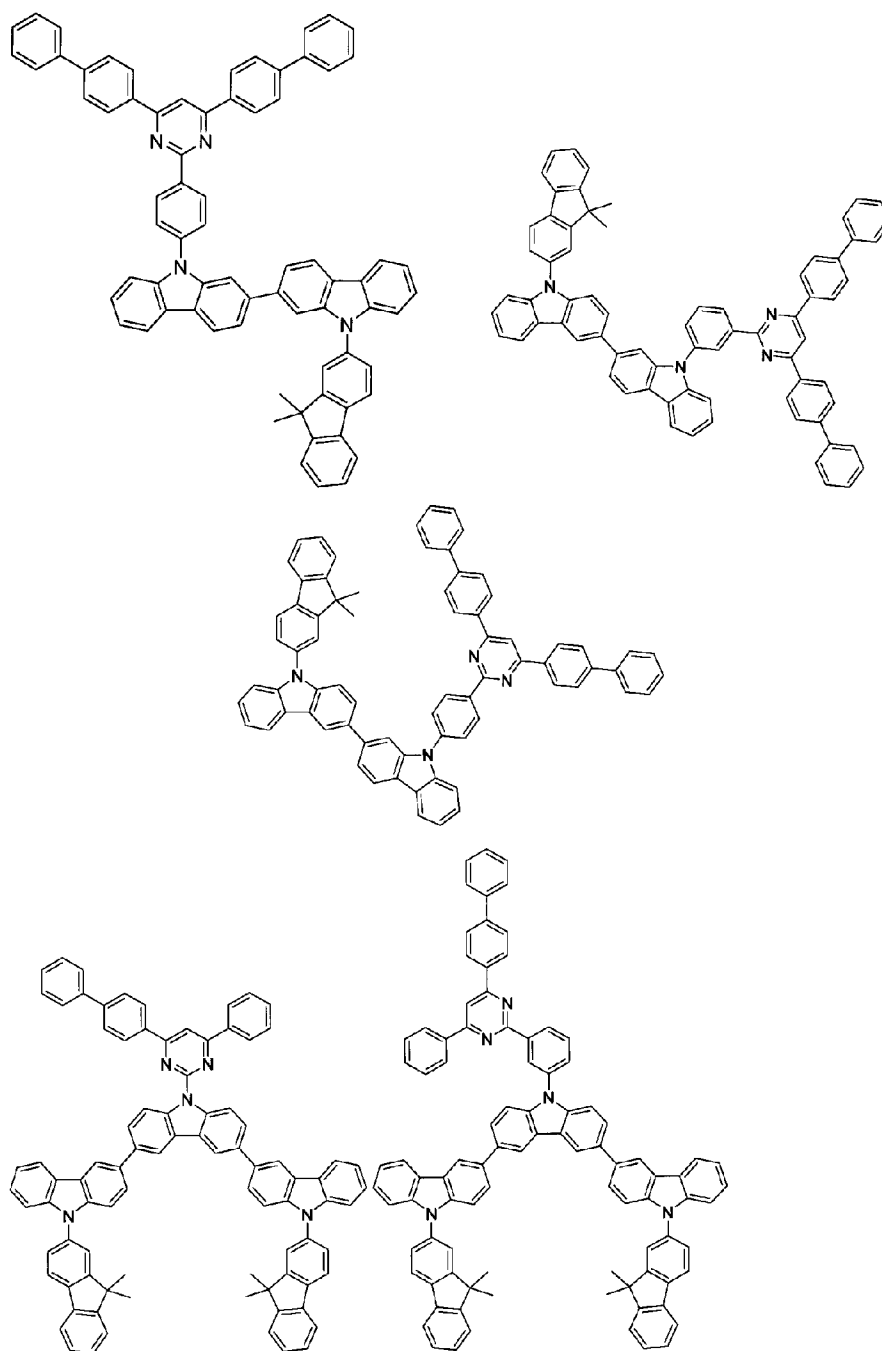
[0097]

[化57]



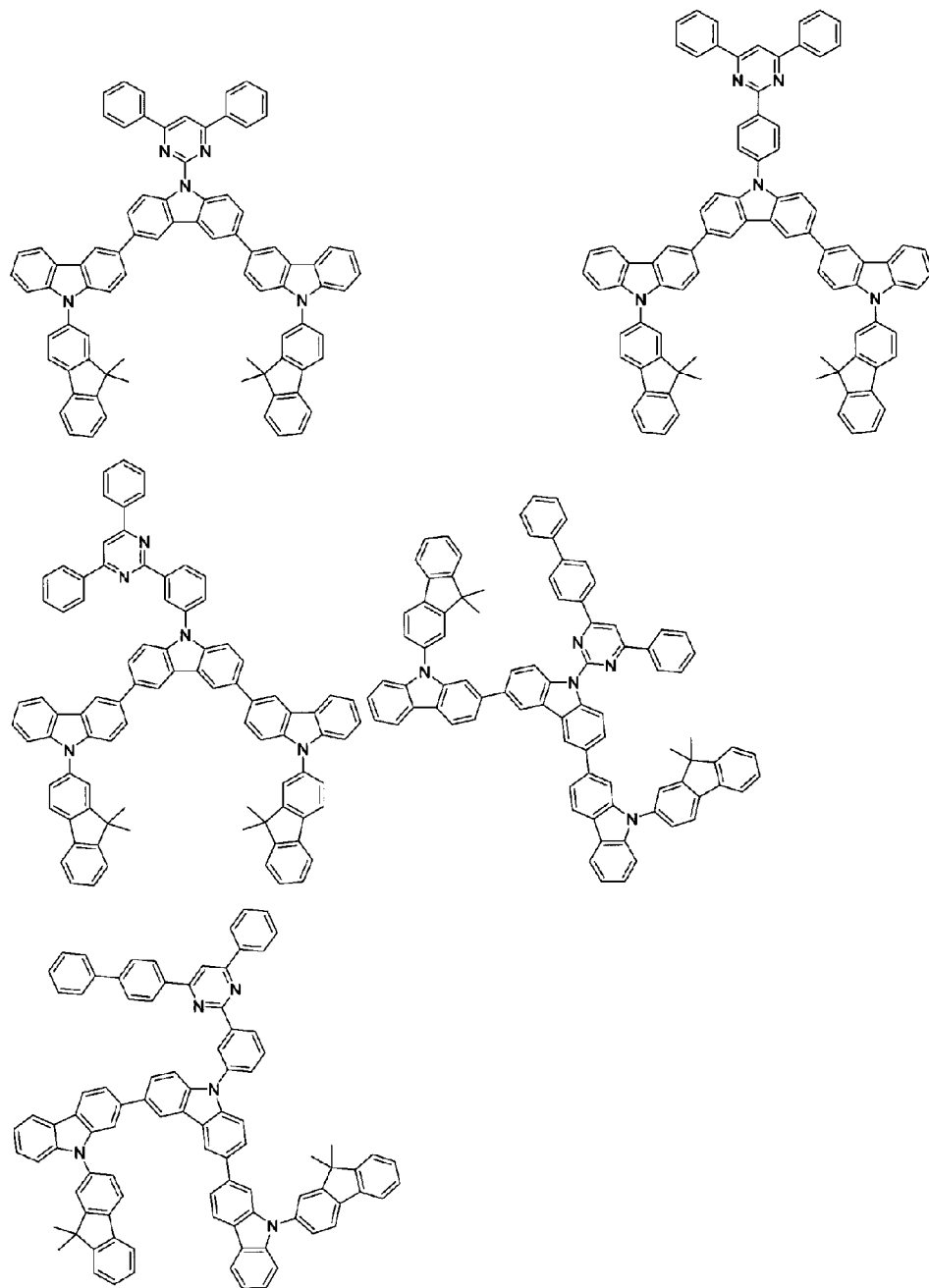
[0098]

[化58]



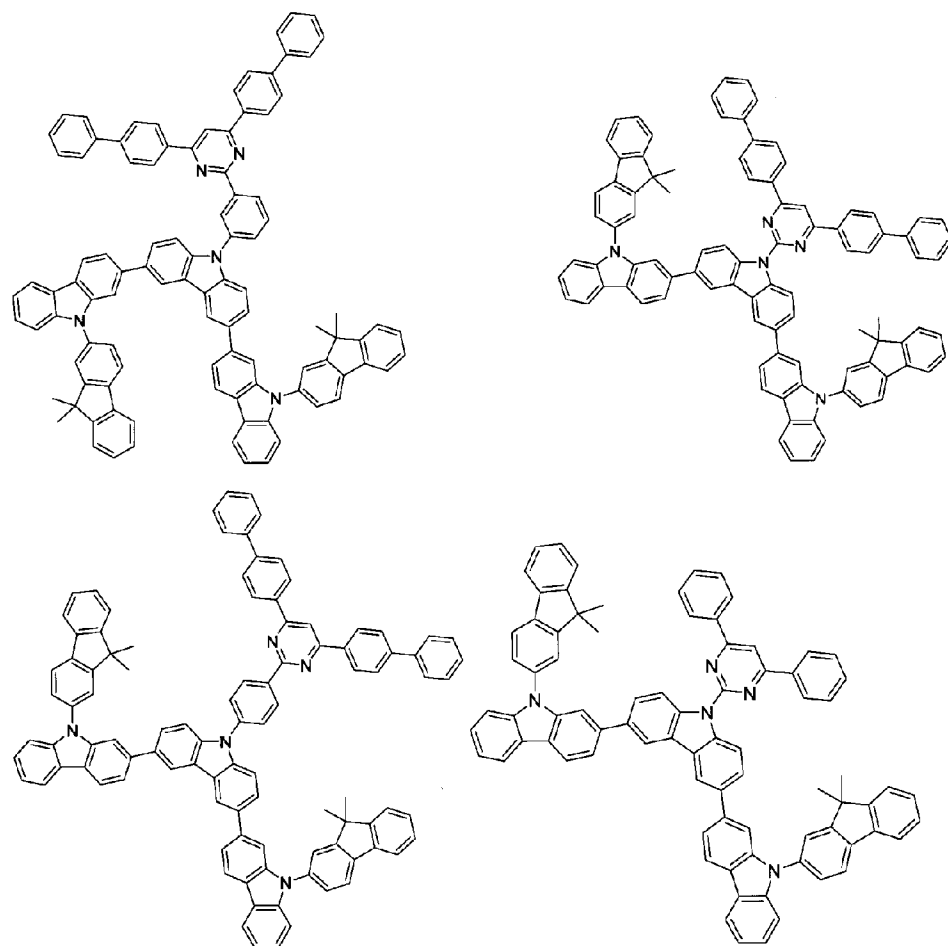
[0099]

[化60]



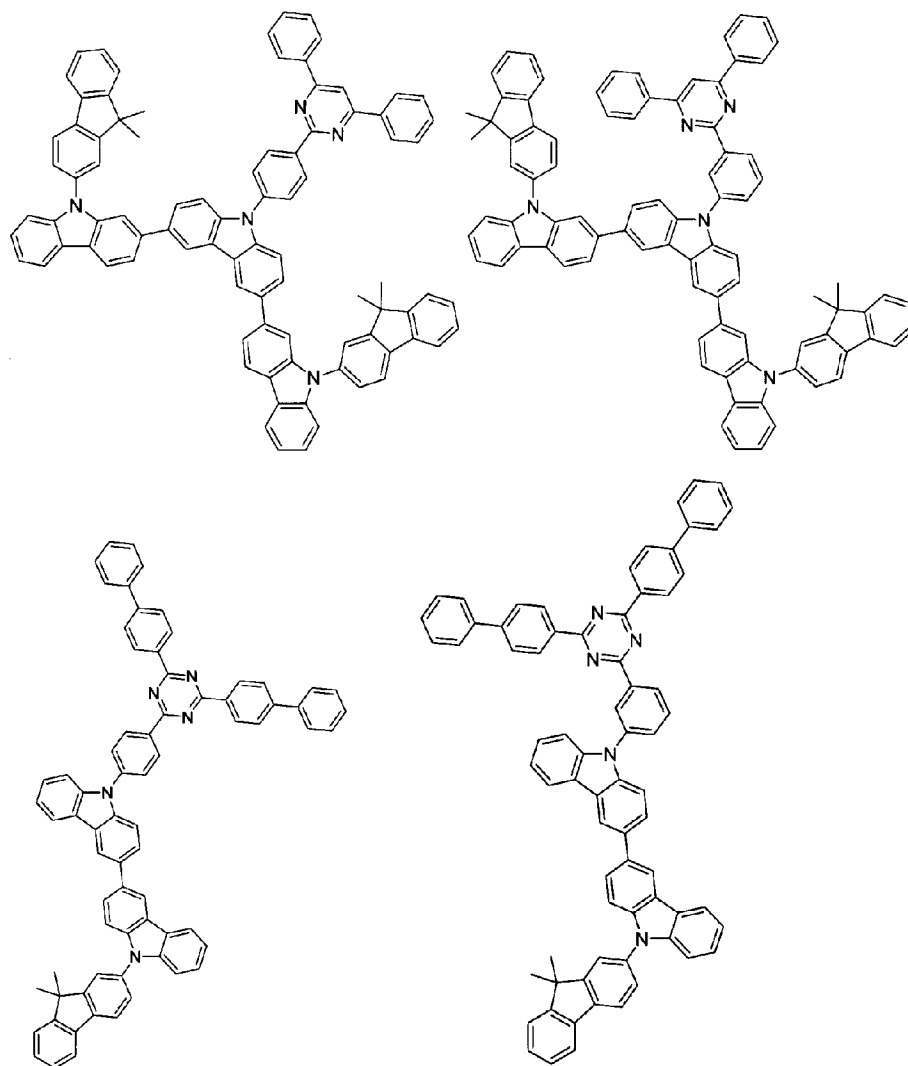
[0101]

[化61]



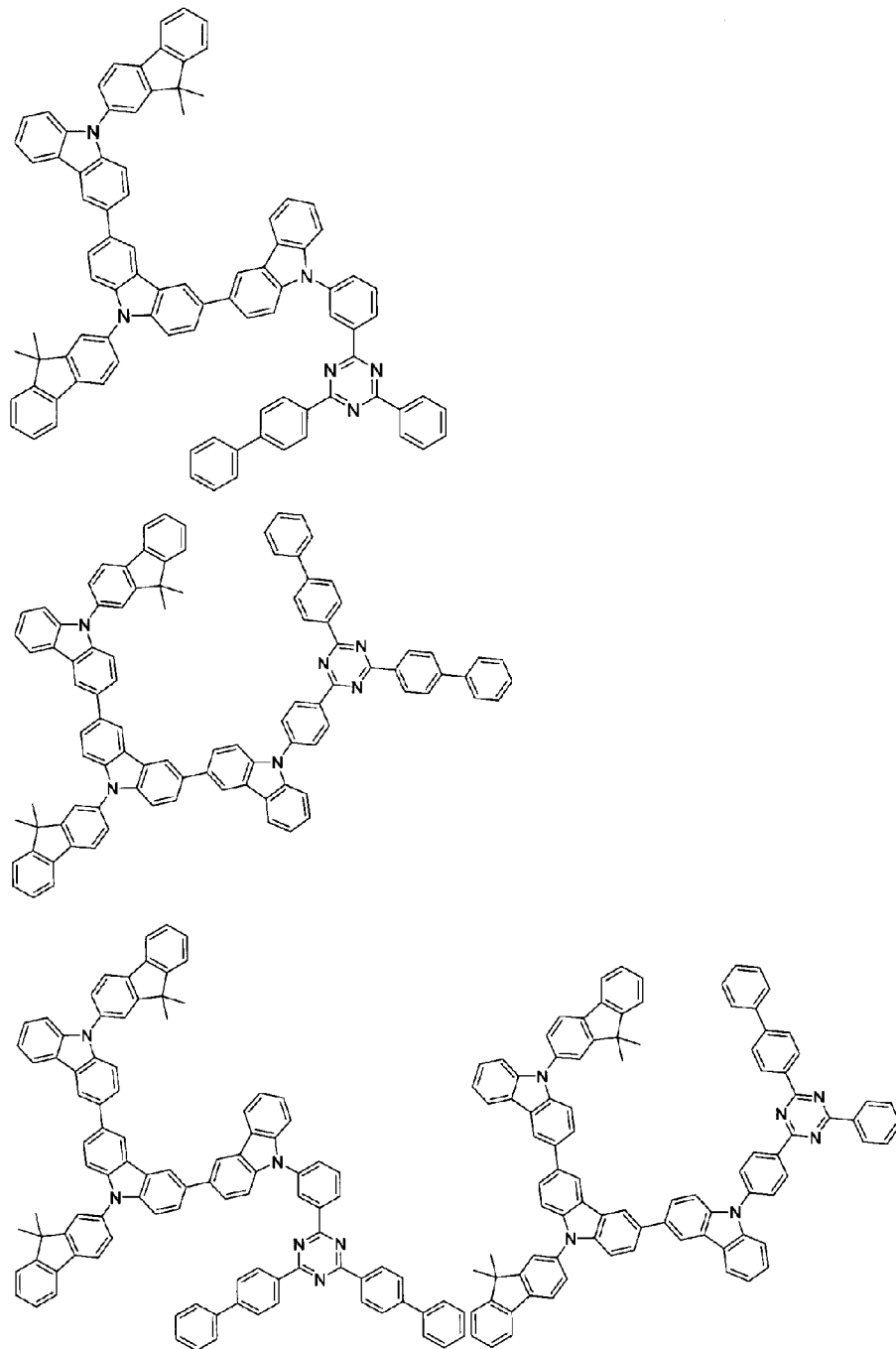
[0102]

[化62]



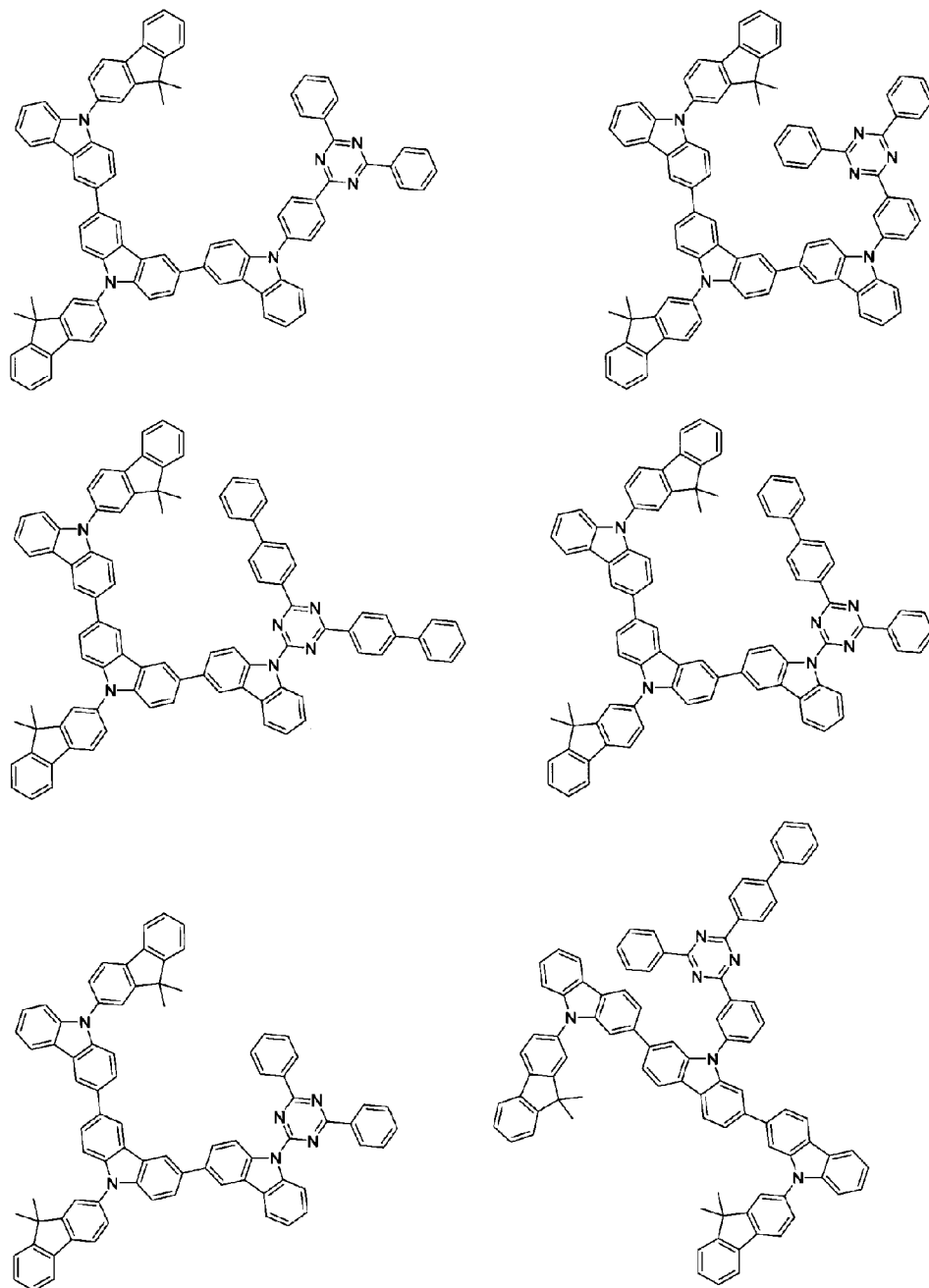
[0103]

[化63]



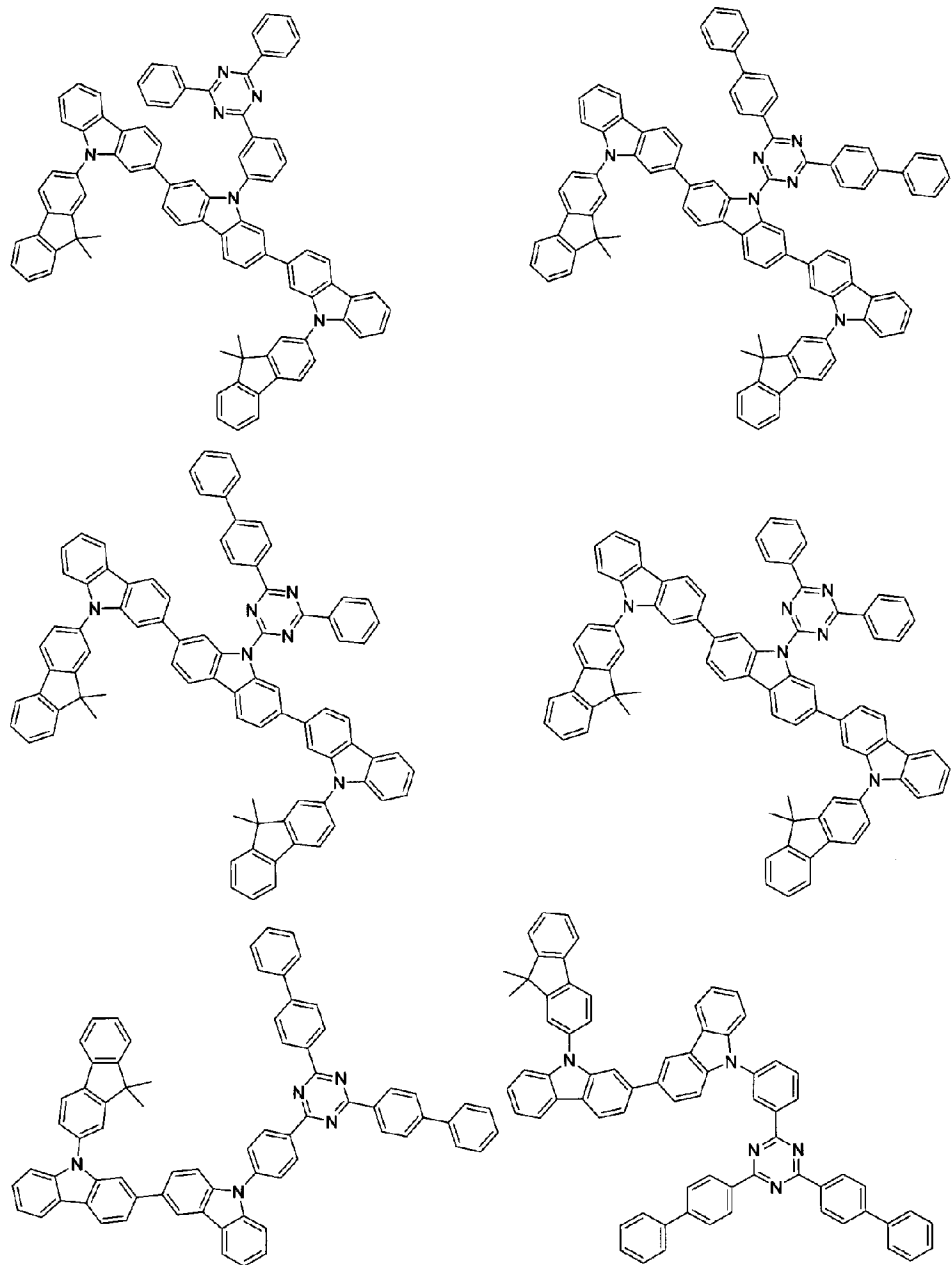
[0104]

[化64]



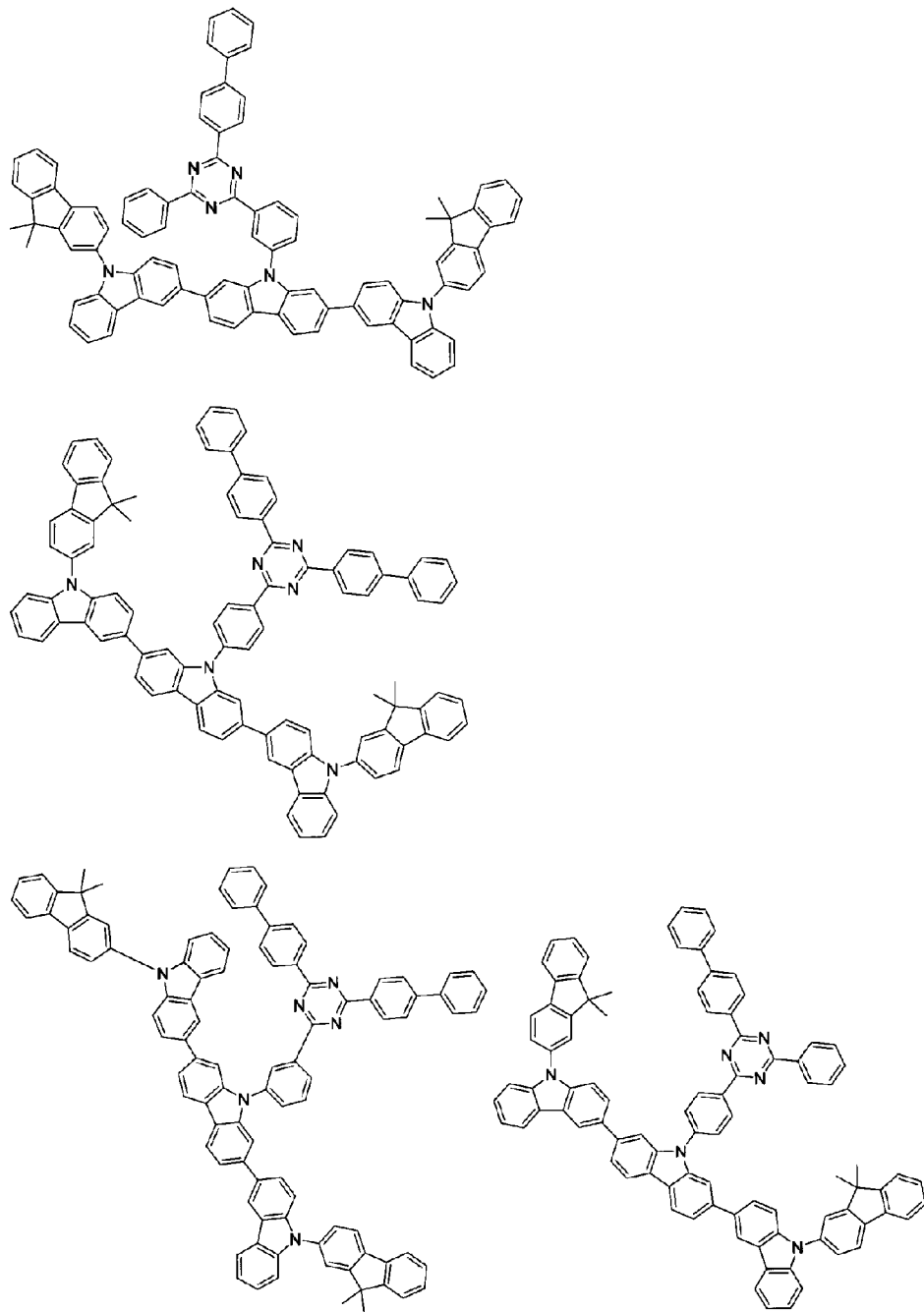
[0105]

[化66]



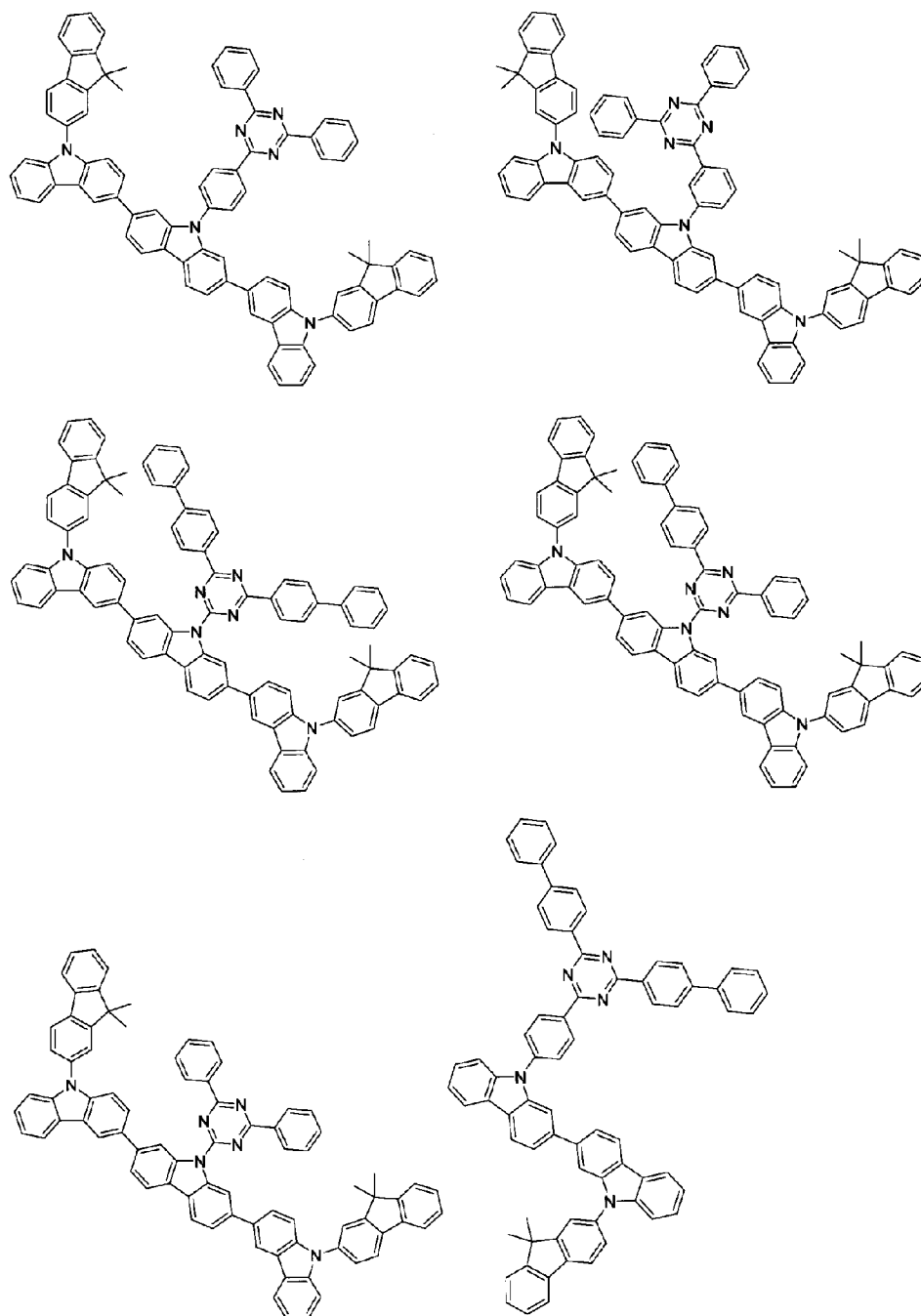
[0107]

[化67]



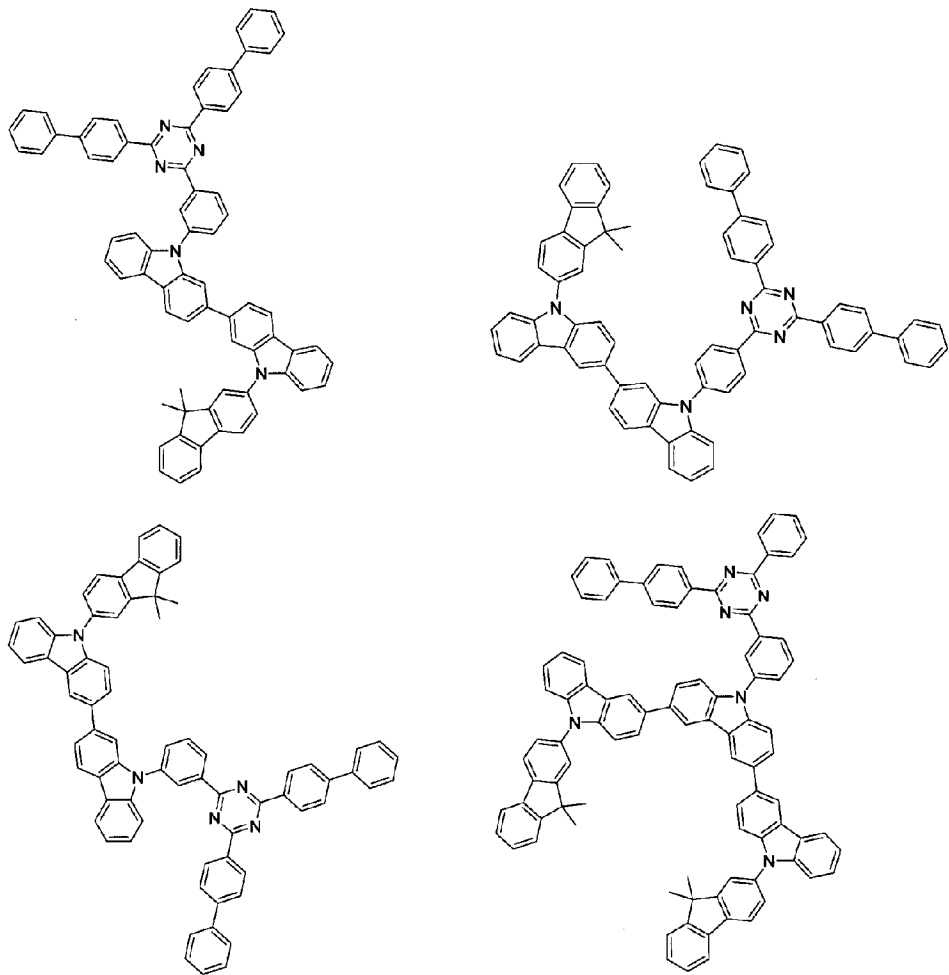
[0108]

[化68]



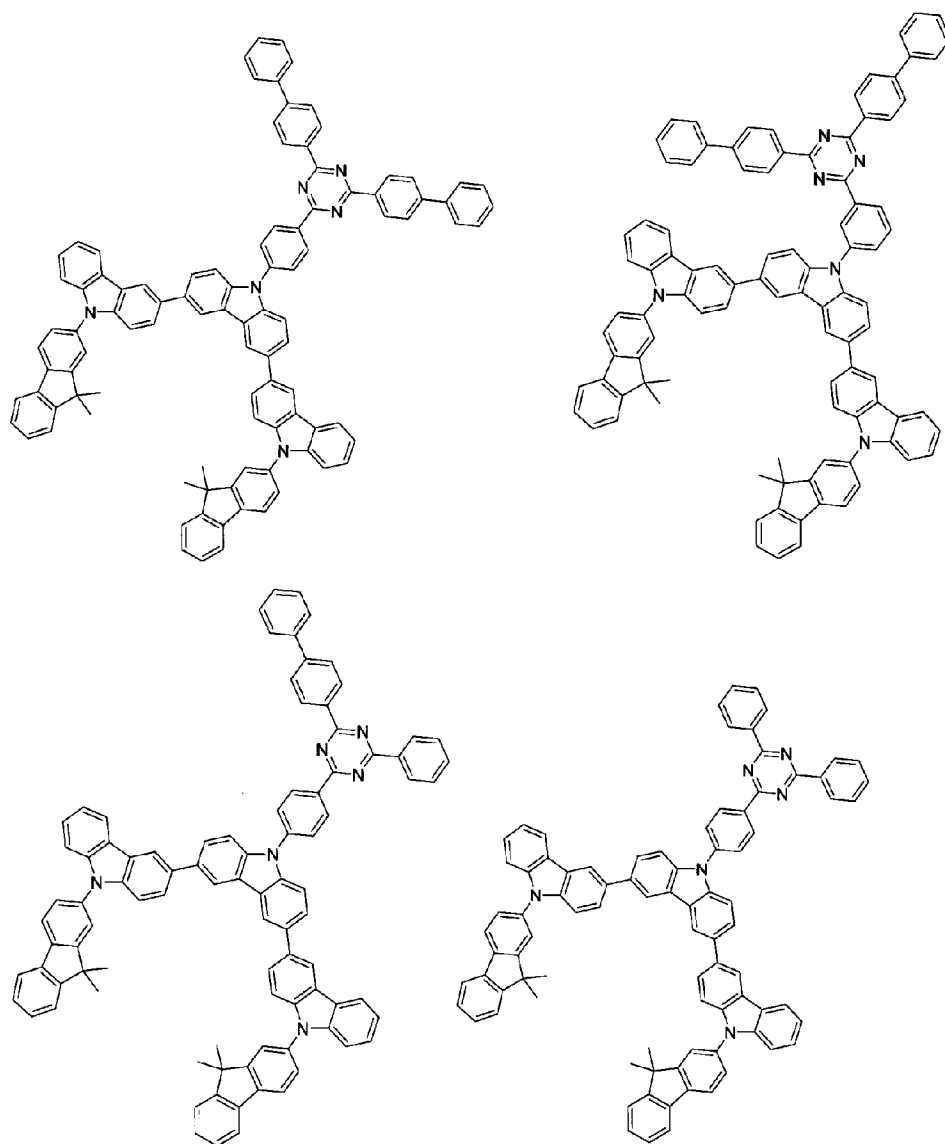
[0109]

[化69]



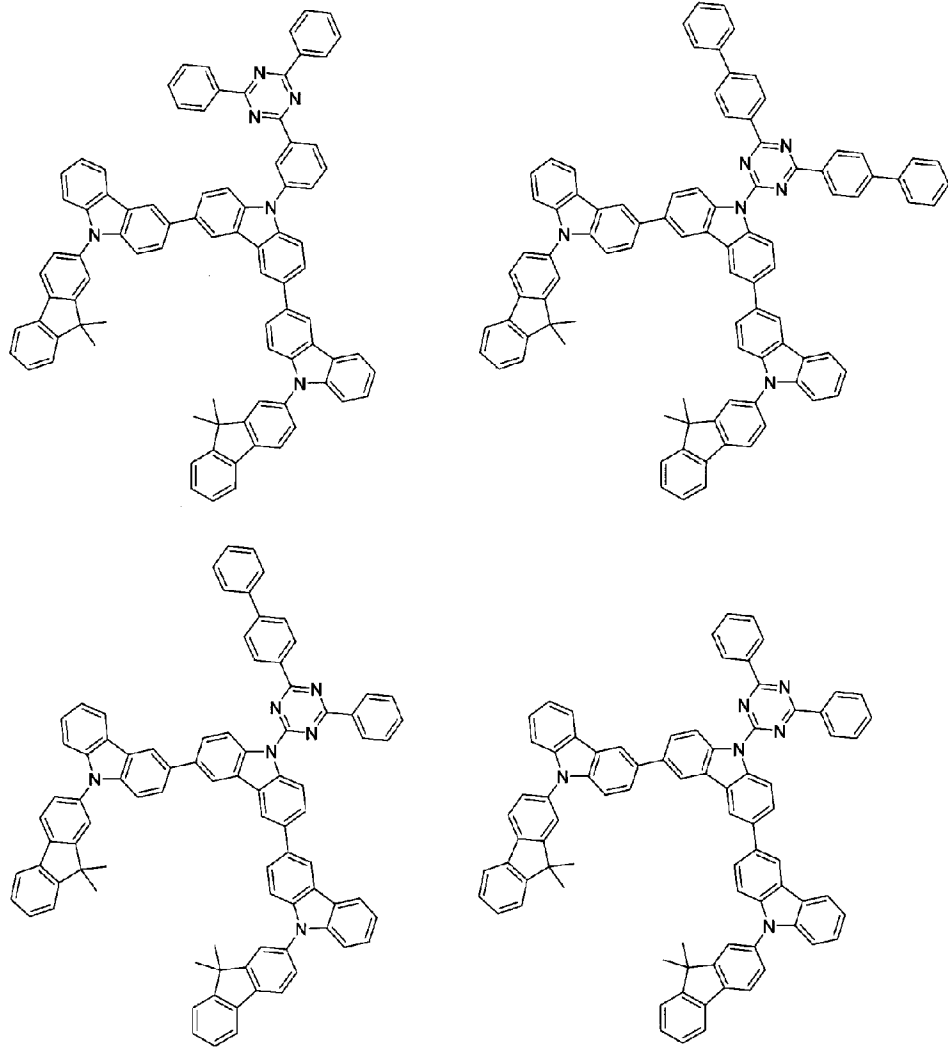
[0110]

[化70]



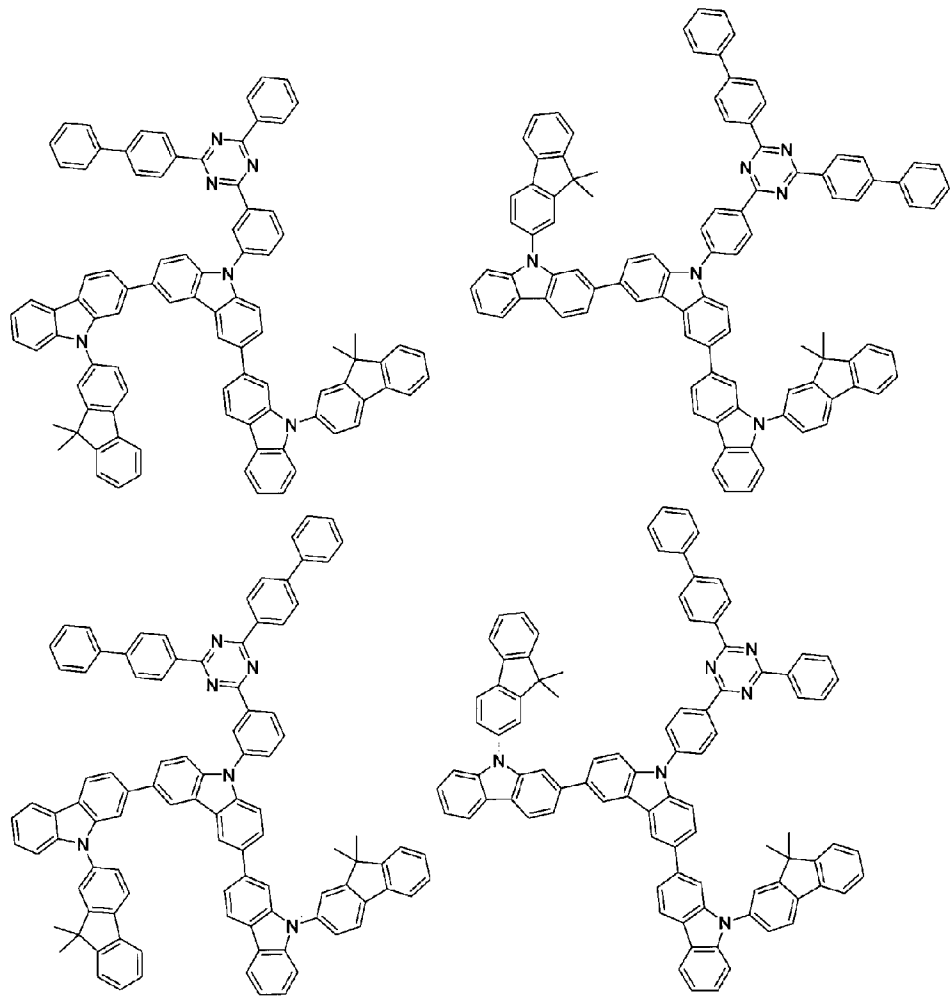
[0111]

[化71]



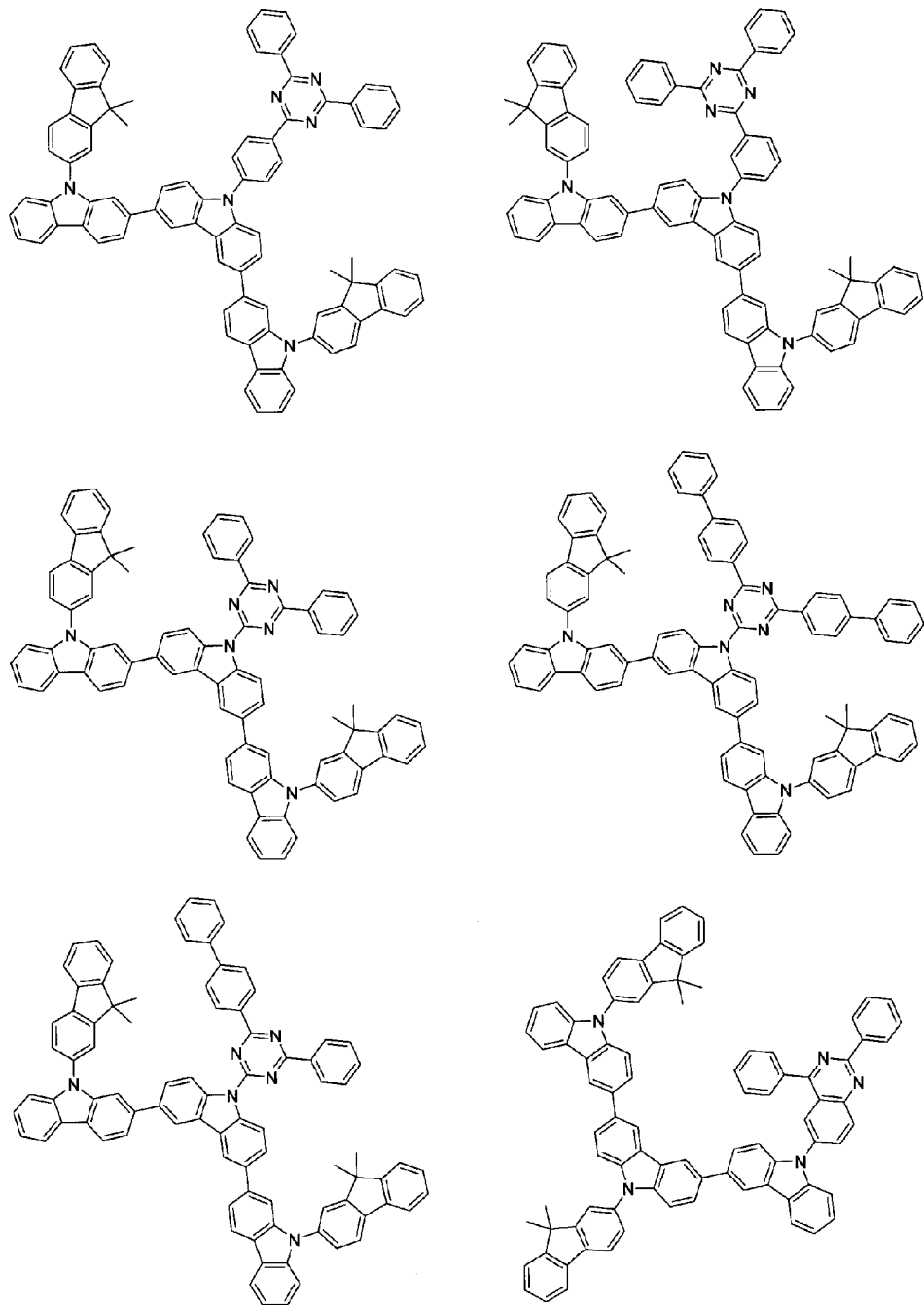
[0112]

[化72]



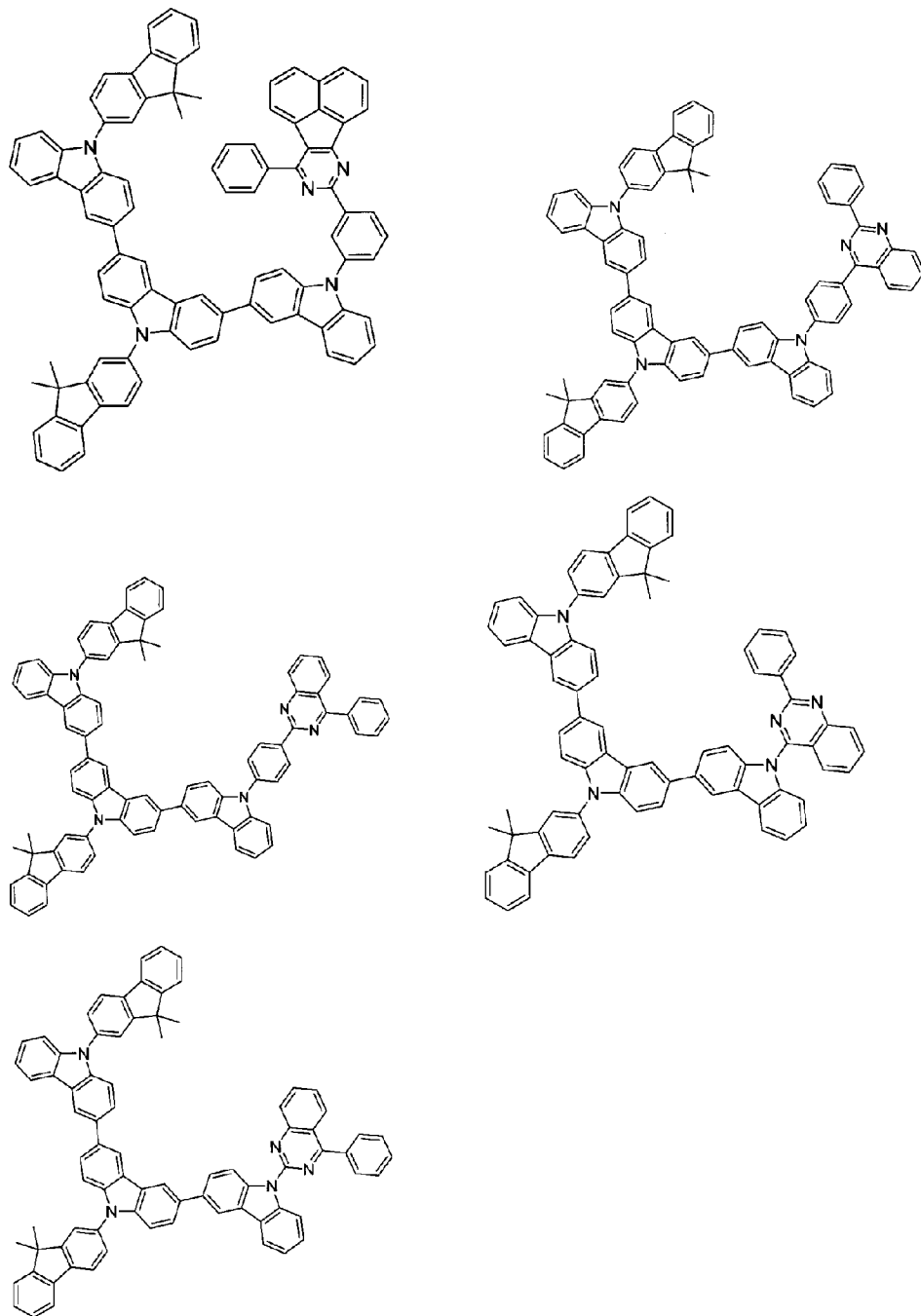
[0113]

[化73]



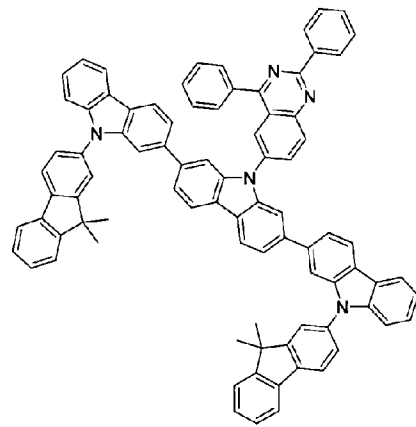
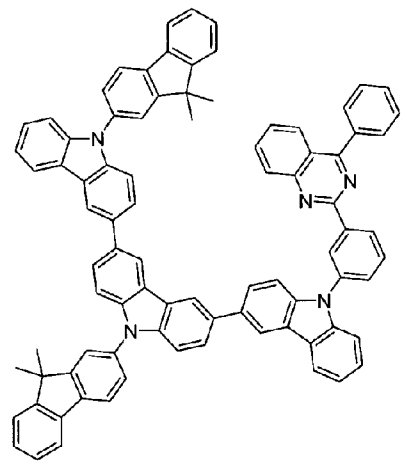
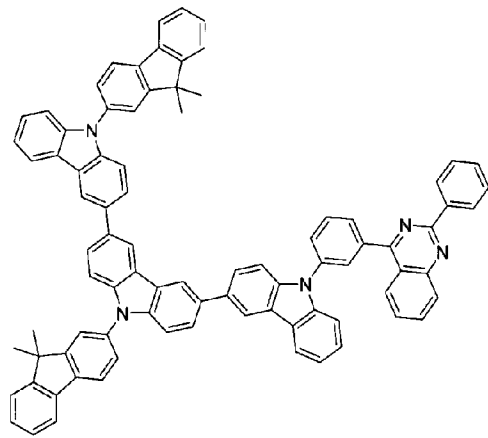
[0114]

[化74]



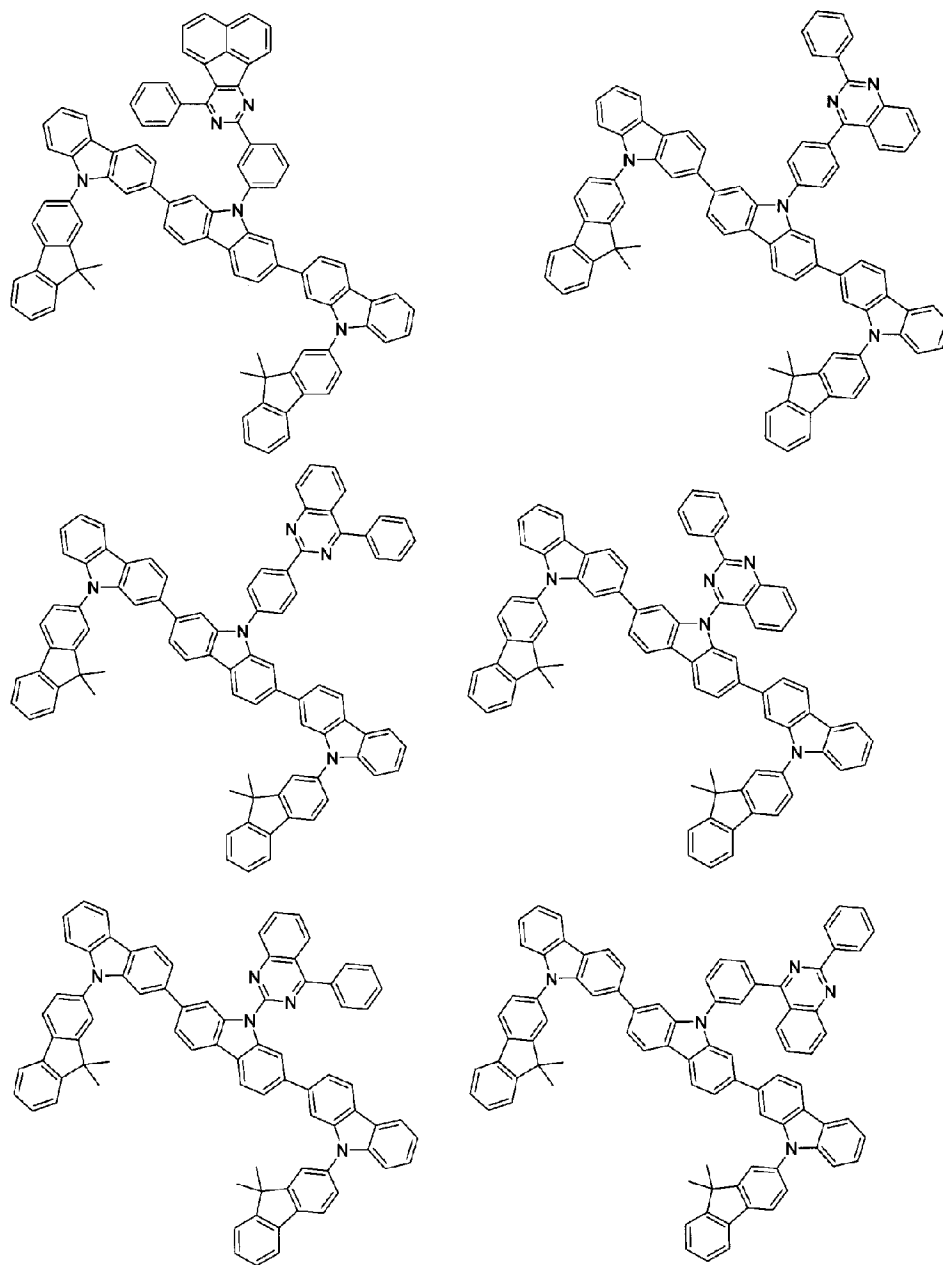
[0115]

[化75]



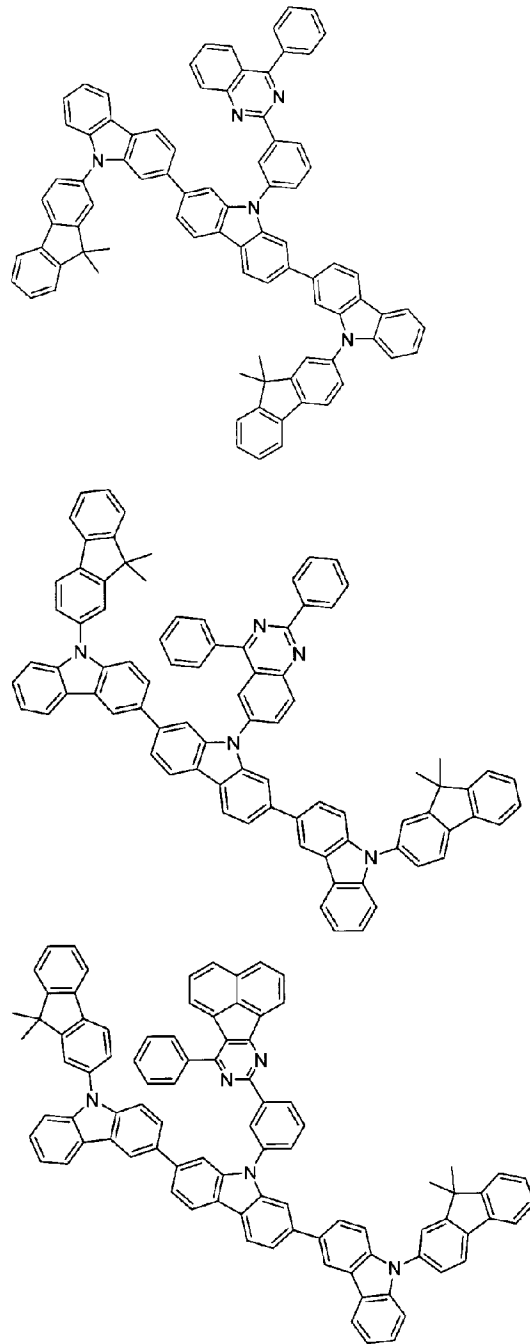
[0116]

[化76]



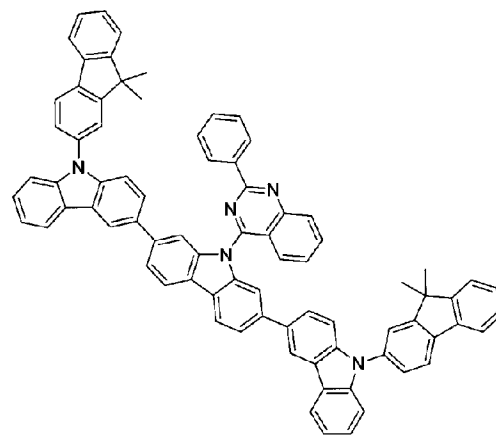
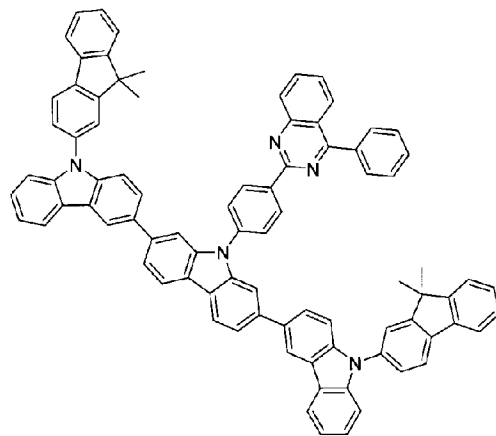
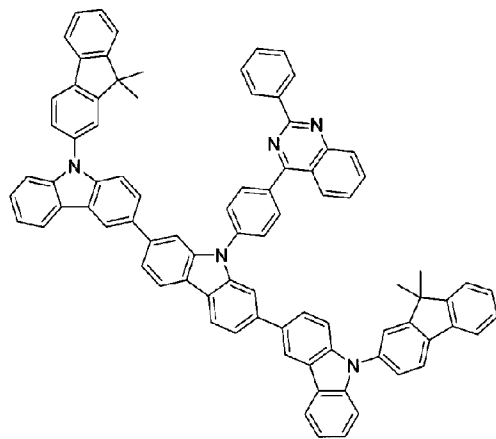
[0117]

[化77]



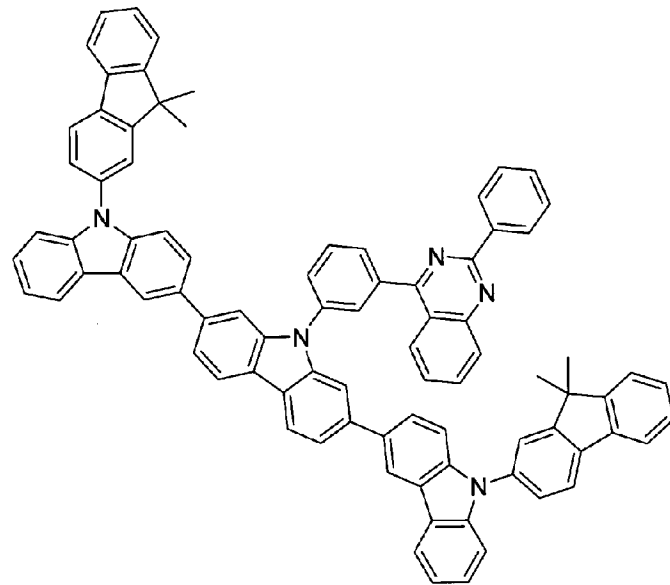
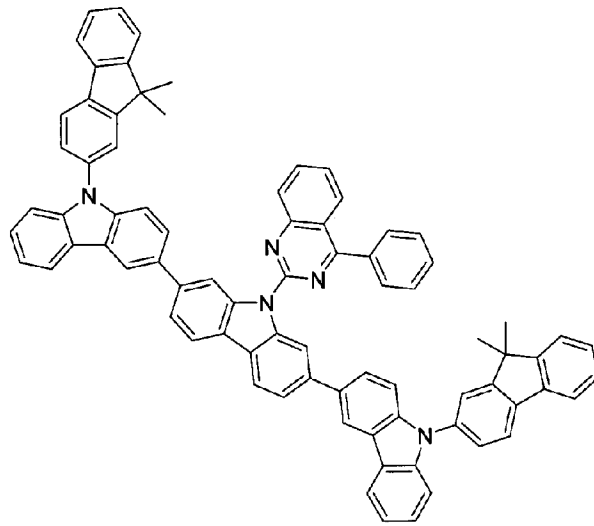
[0118]

[化78]



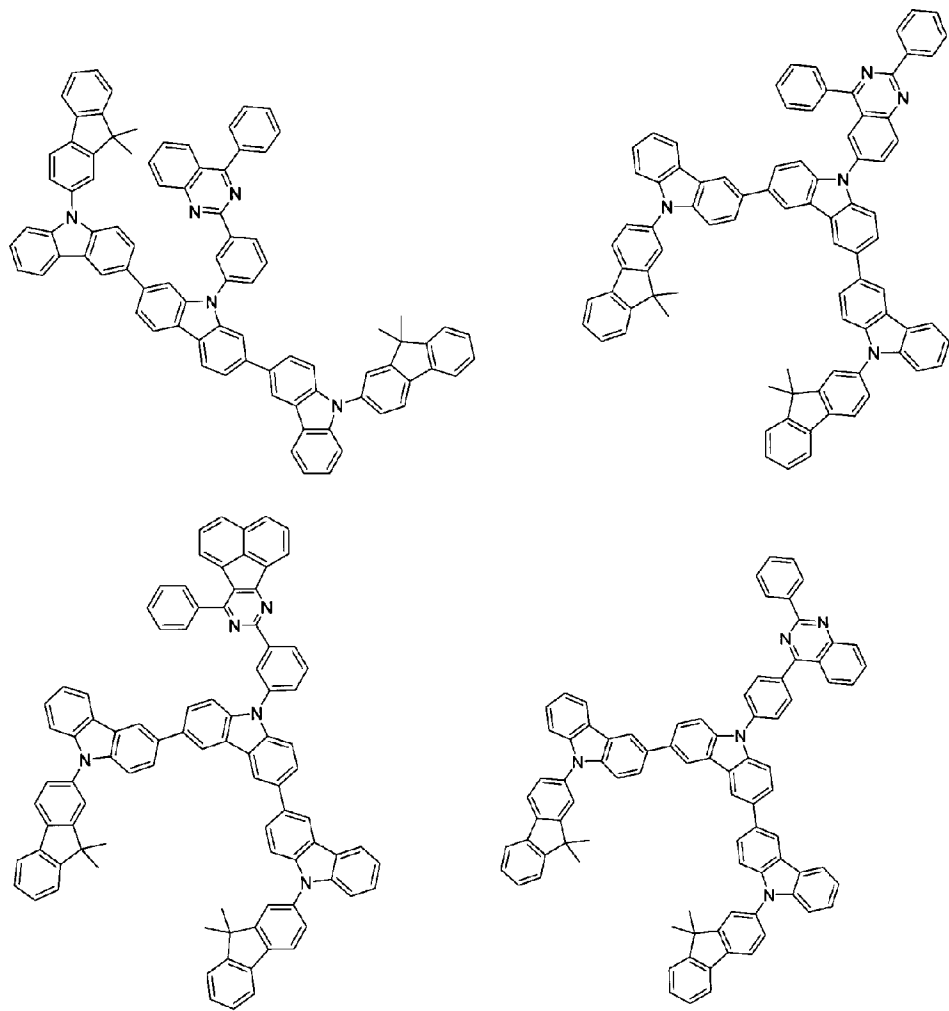
[0119]

[化79]



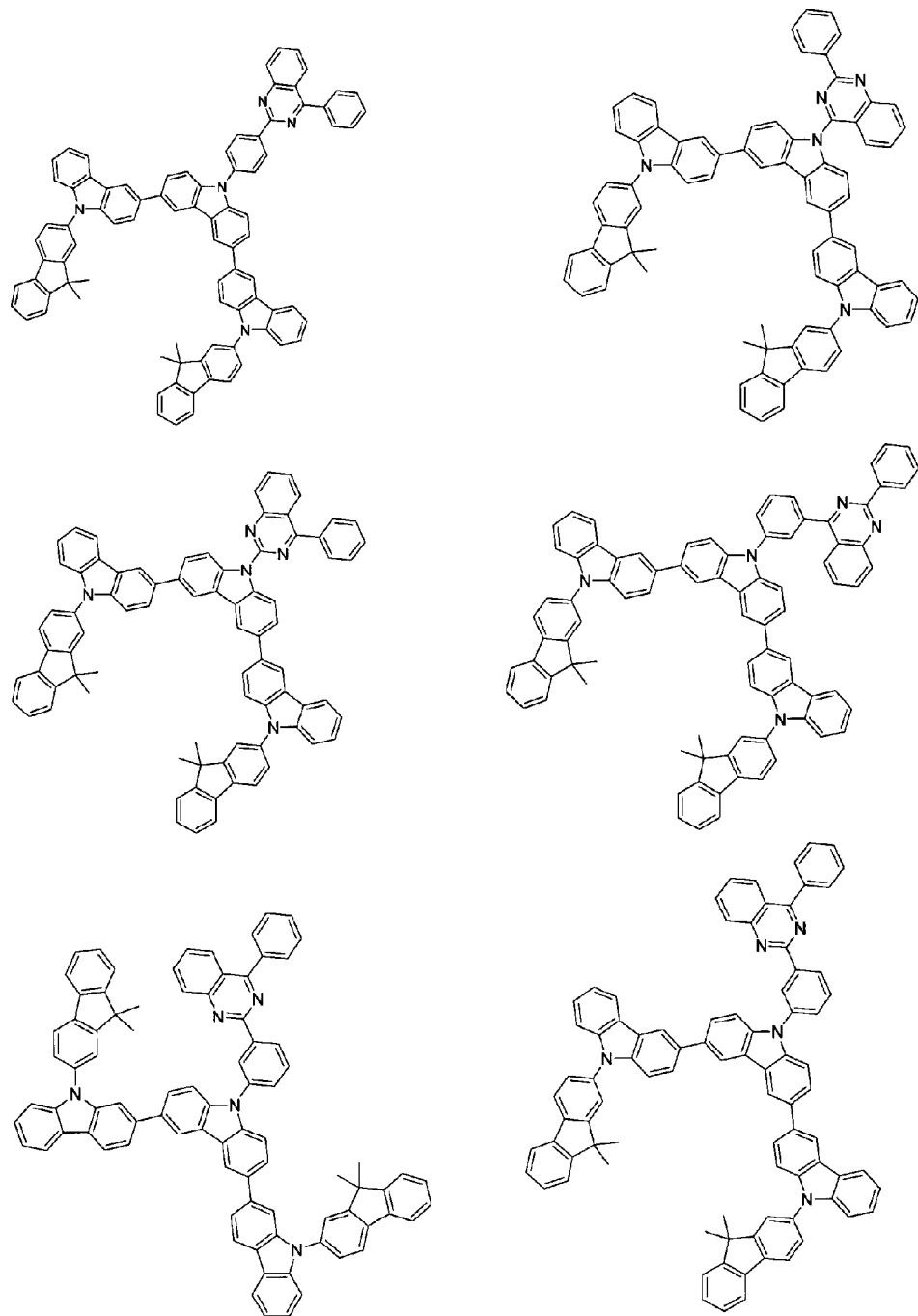
[0120]

[化80]



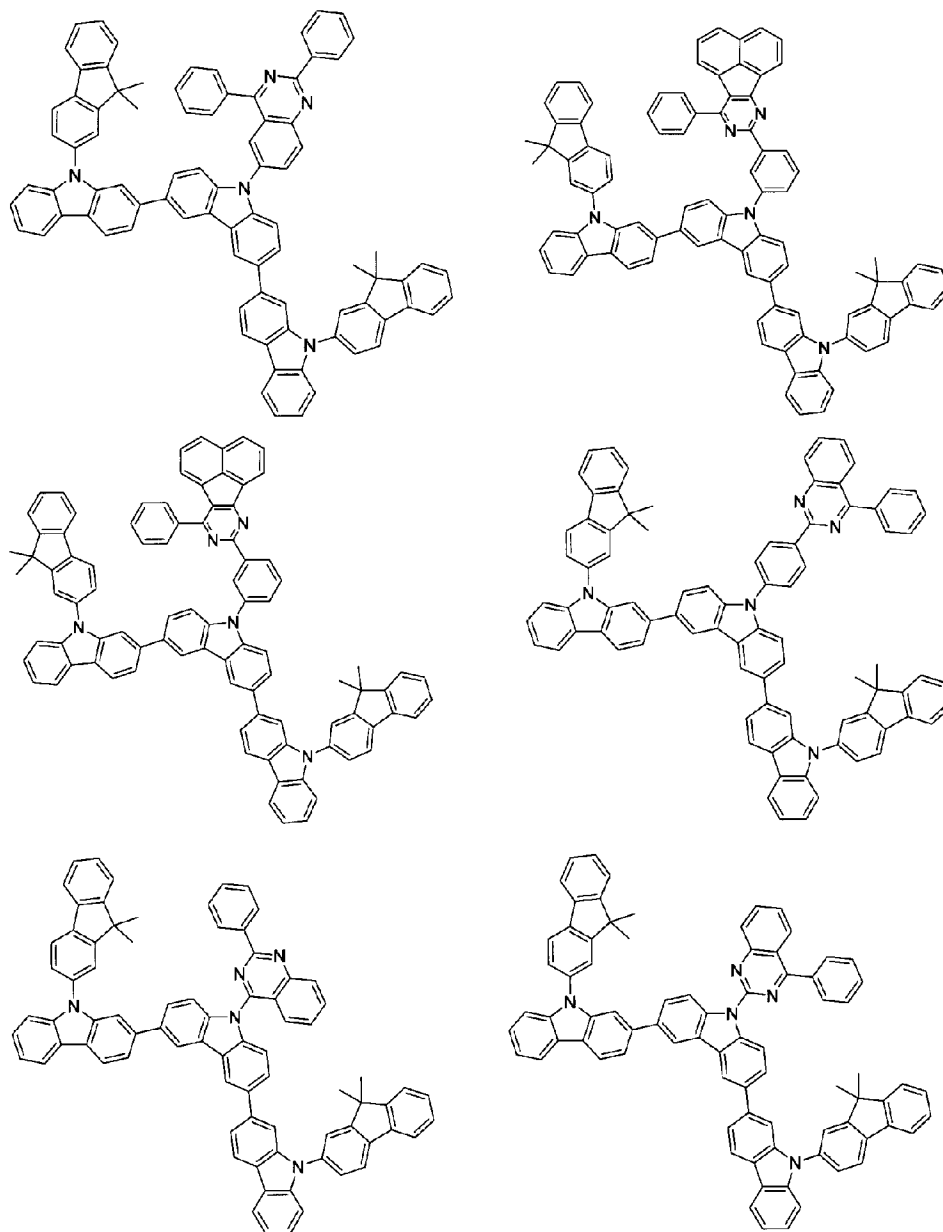
[0121]

[化81]



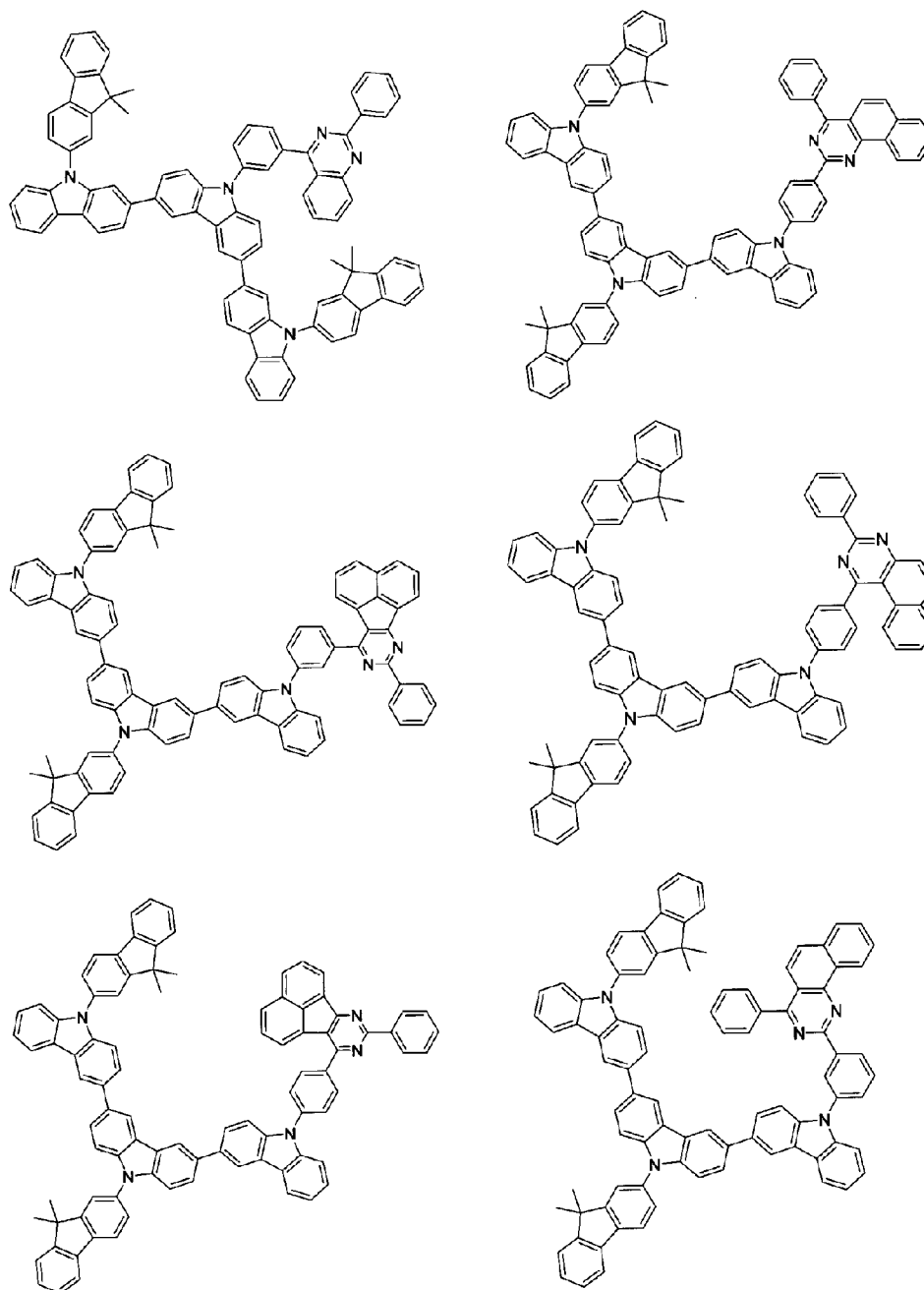
[0122]

[化82]



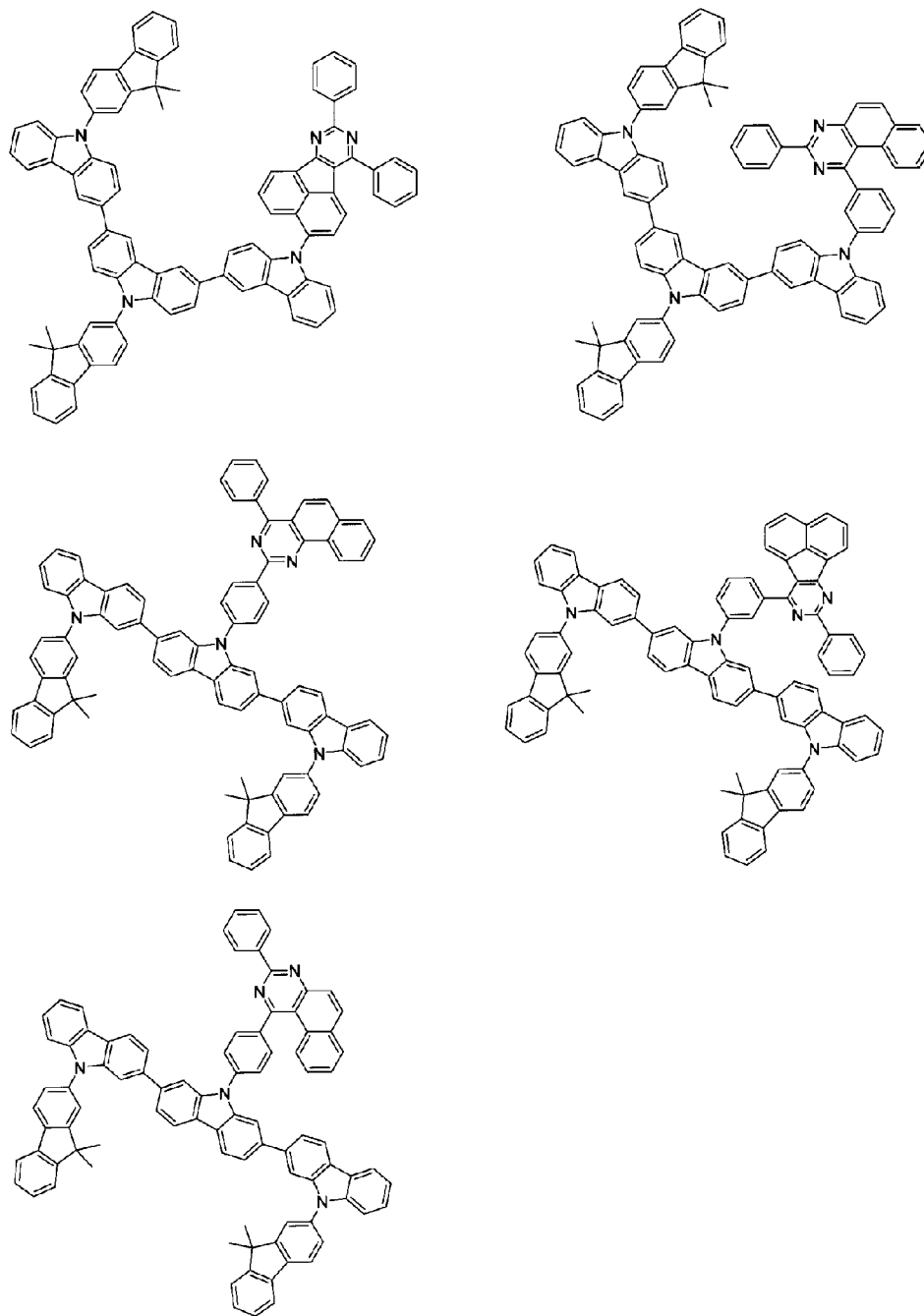
[0123]

[化83]



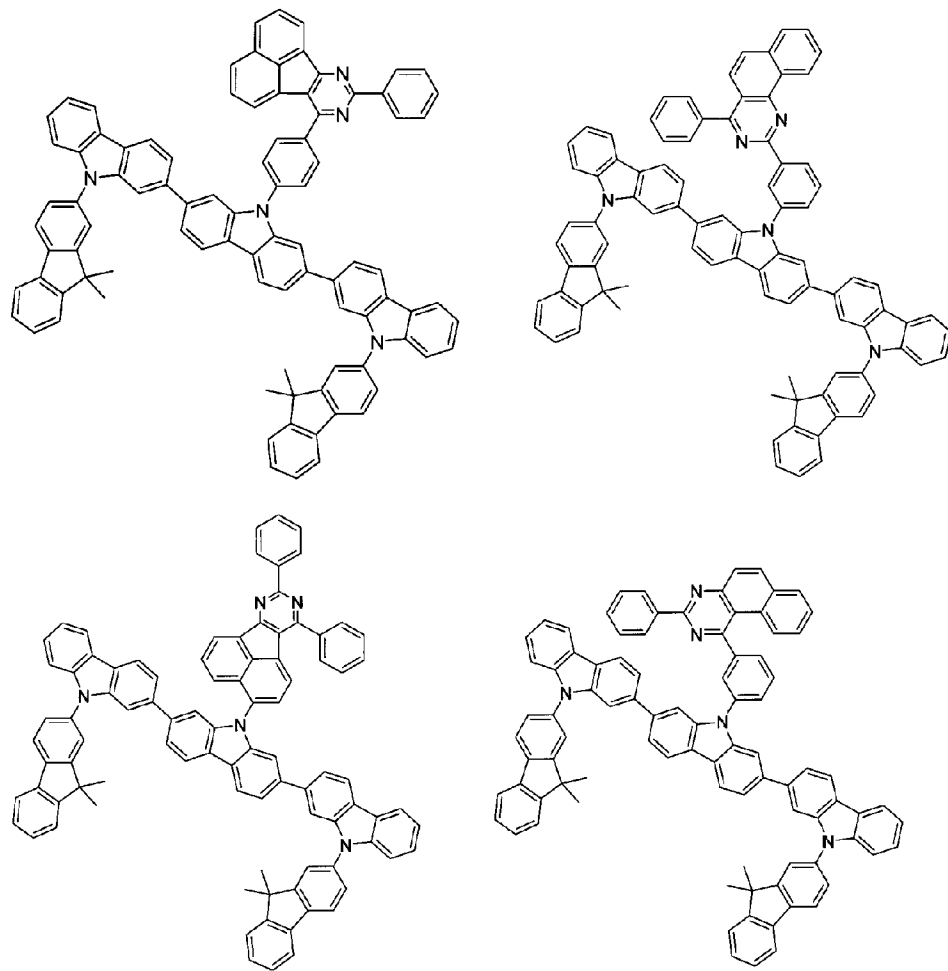
[0124]

[化84]



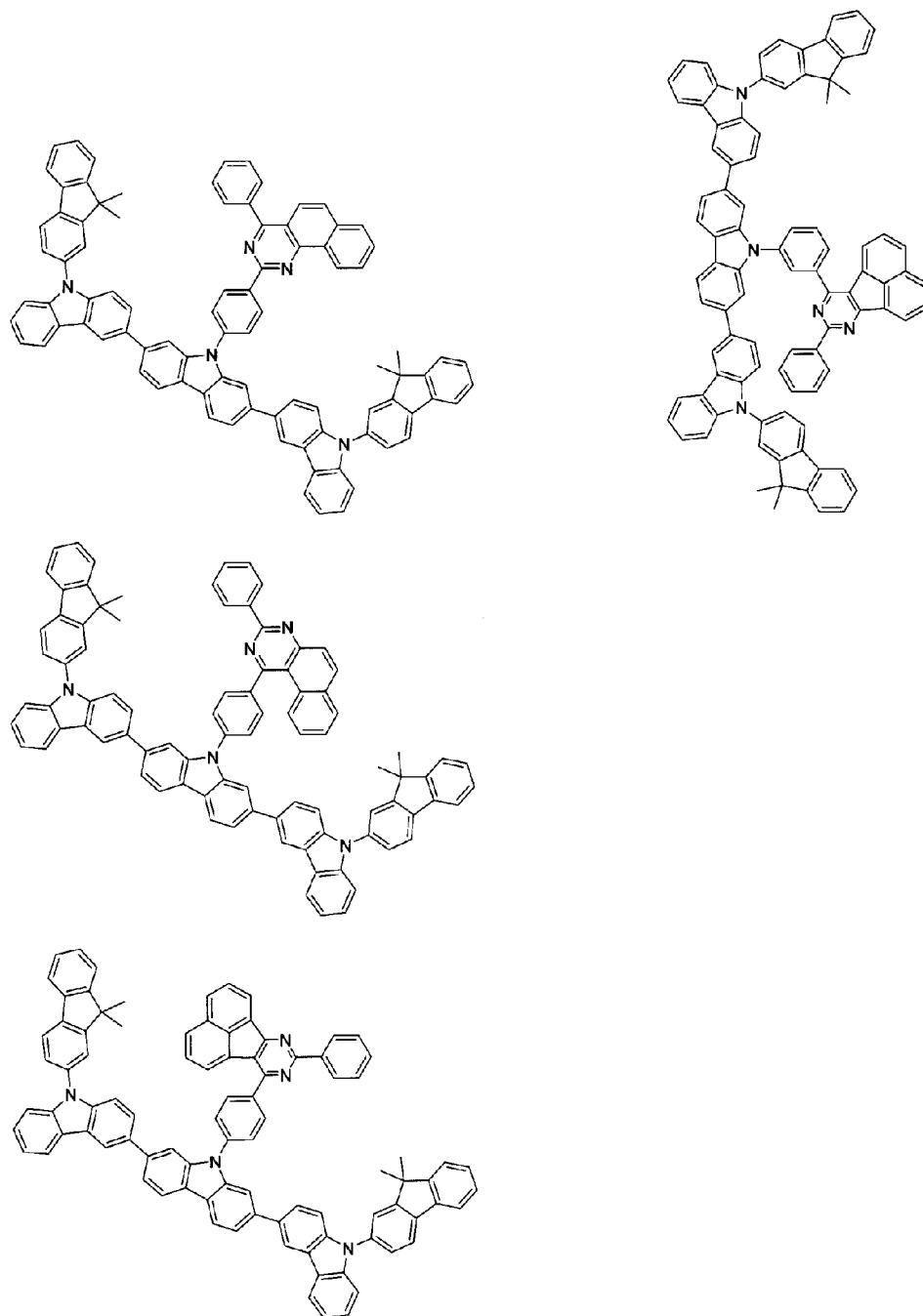
[0125]

[化85]



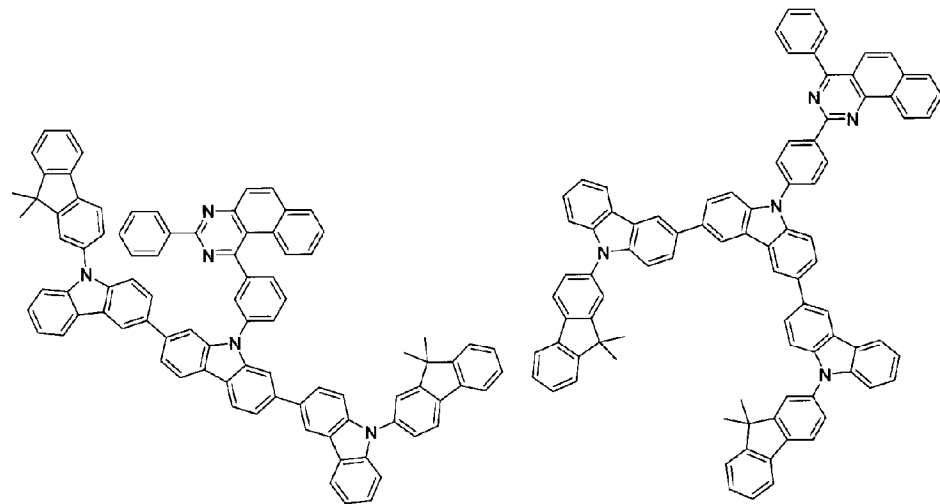
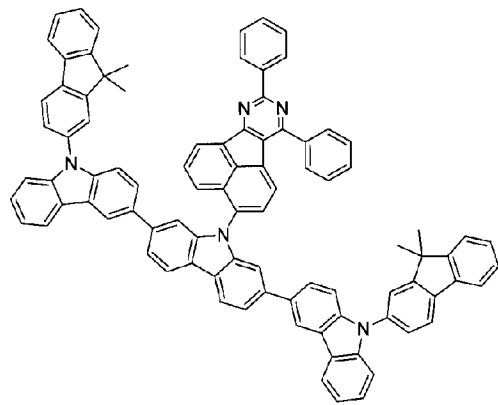
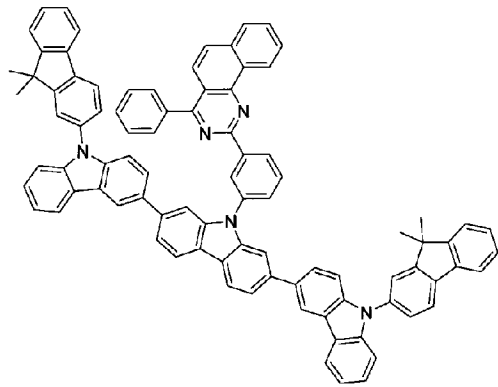
[0126]

[化86]



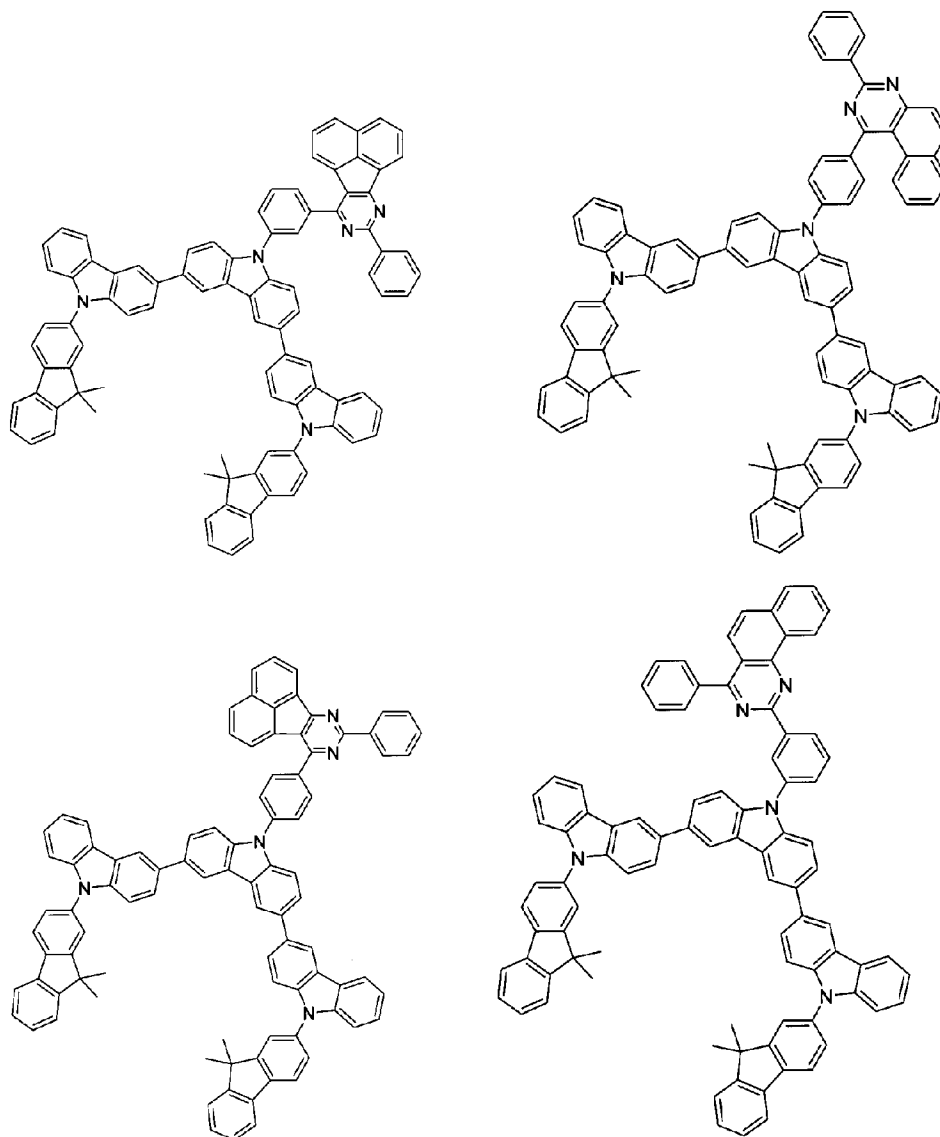
[0127]

[化87]



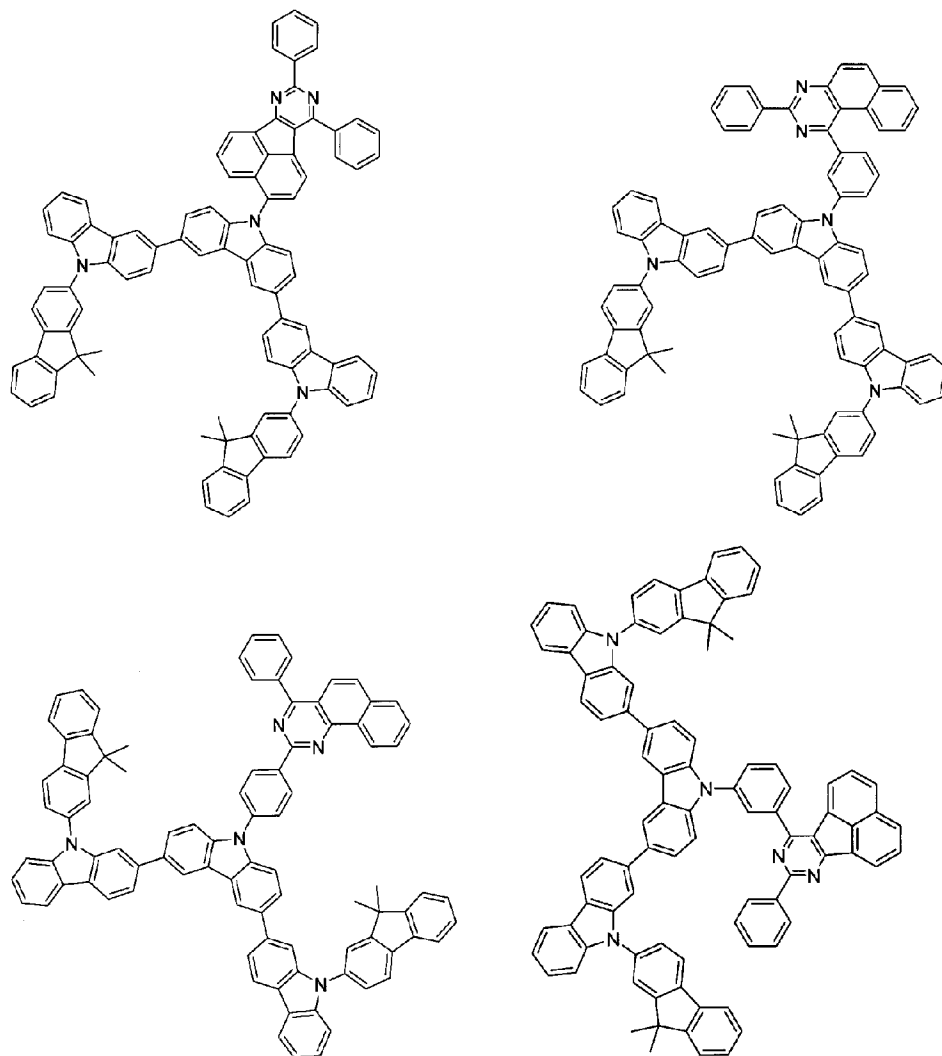
[0128]

[化88]



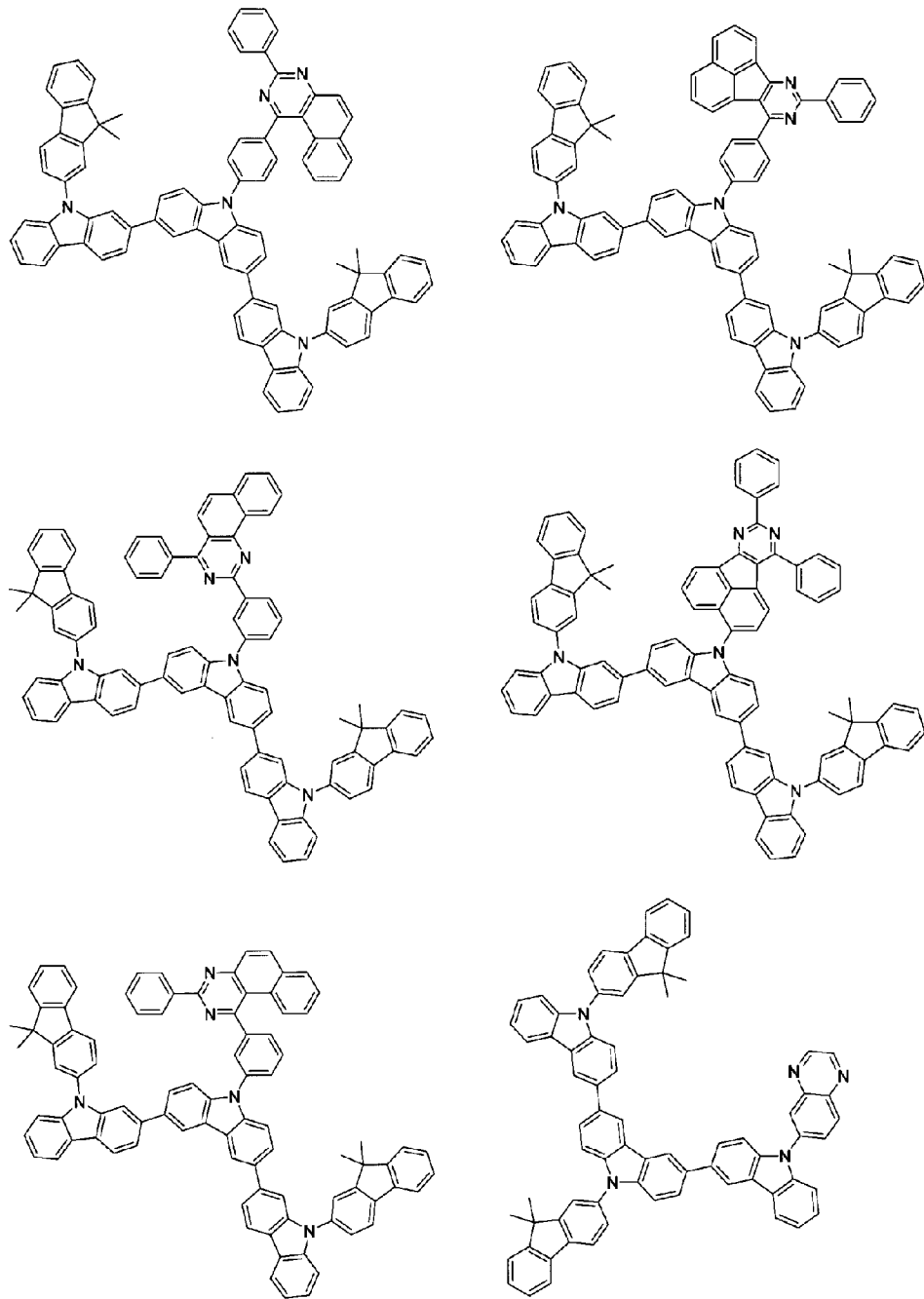
[0129]

[化89]



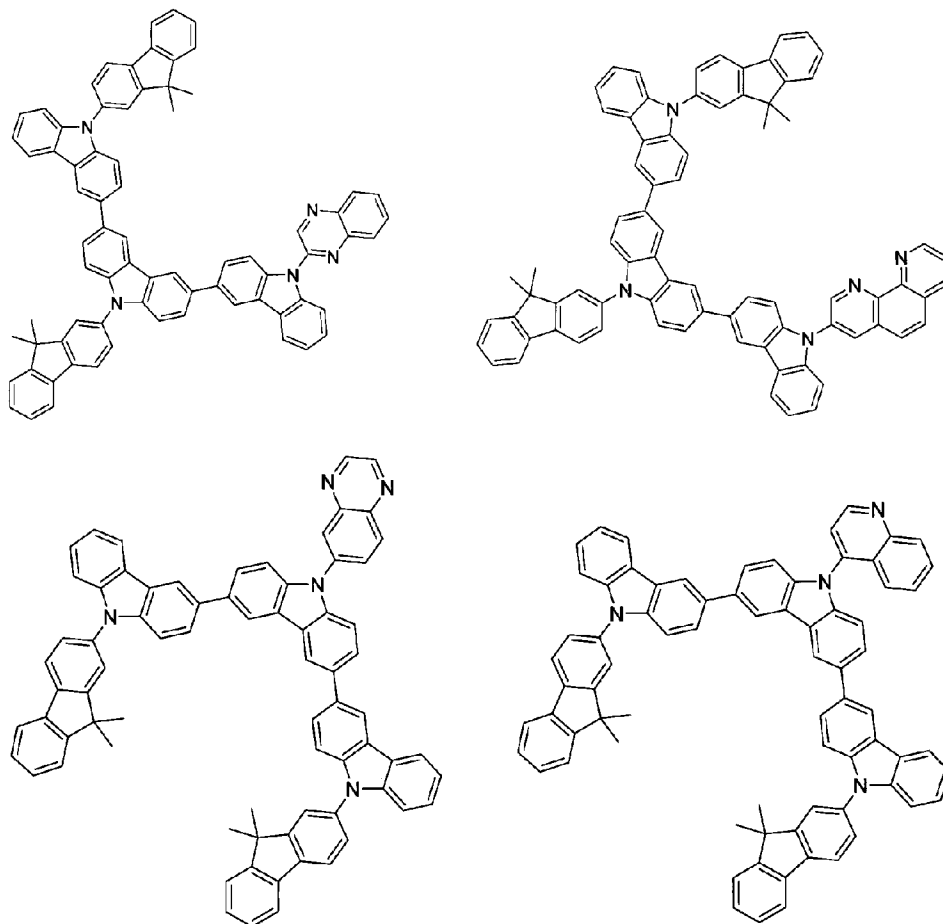
[0130]

[化90]



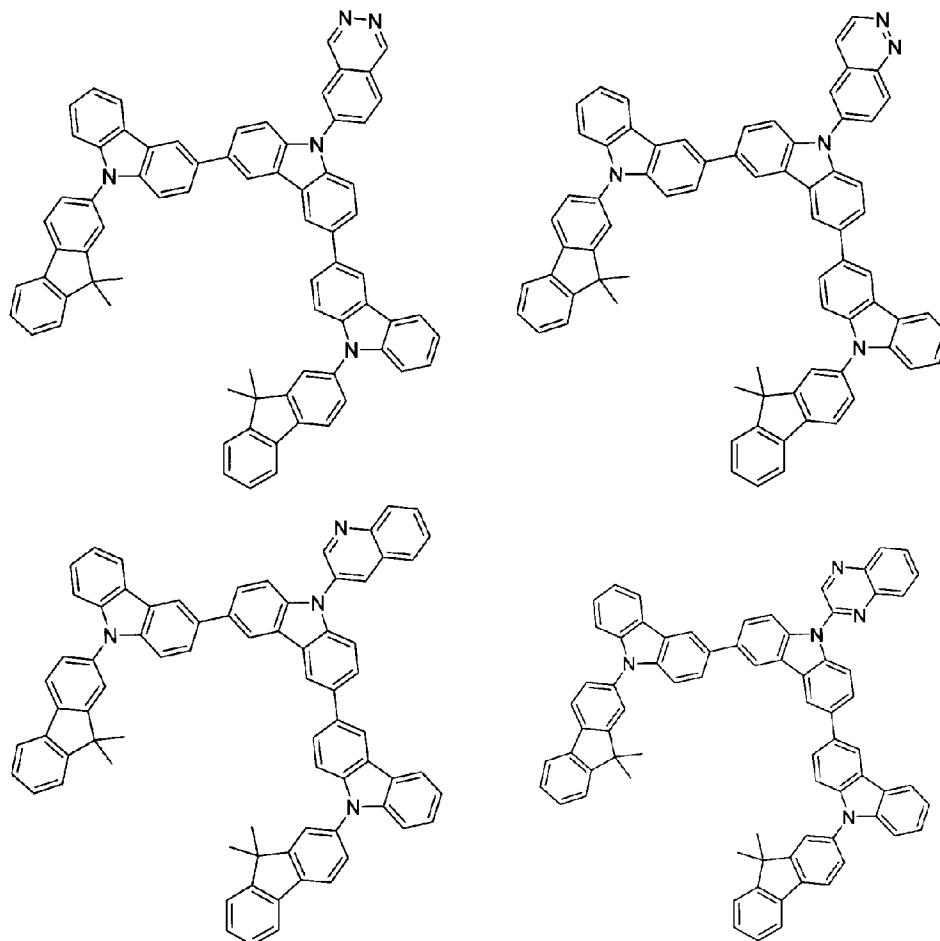
[0131]

[化92]



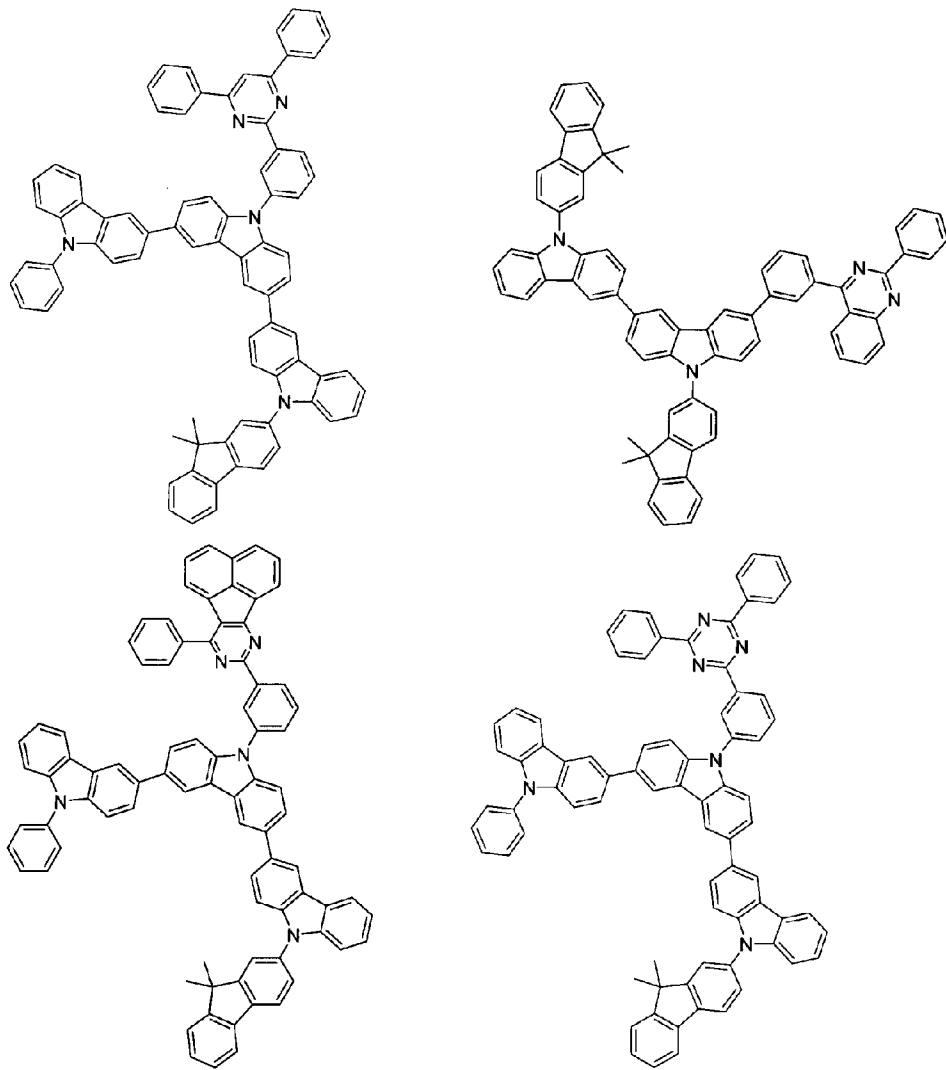
[0133]

[化93]



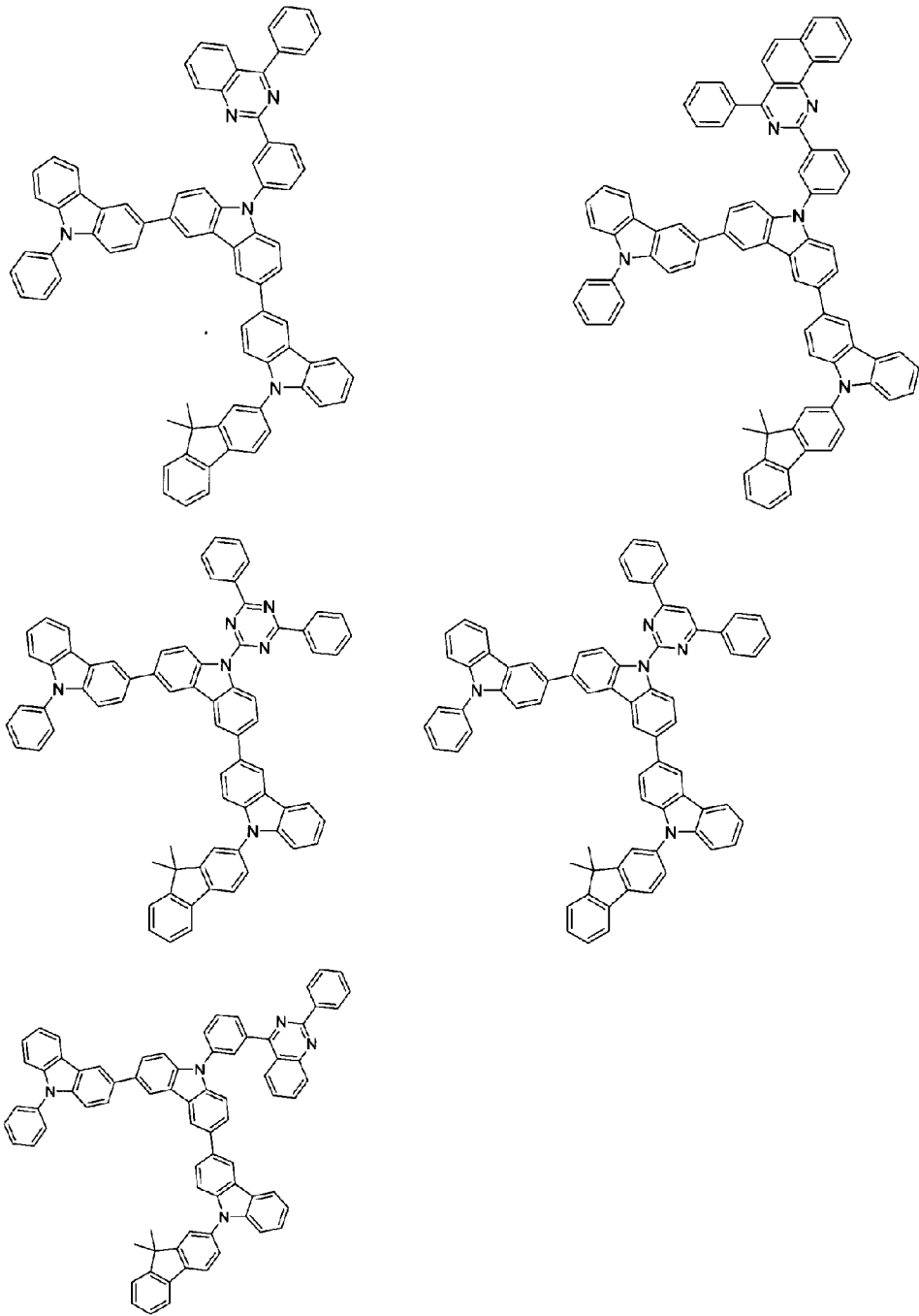
[0134]

[化95]



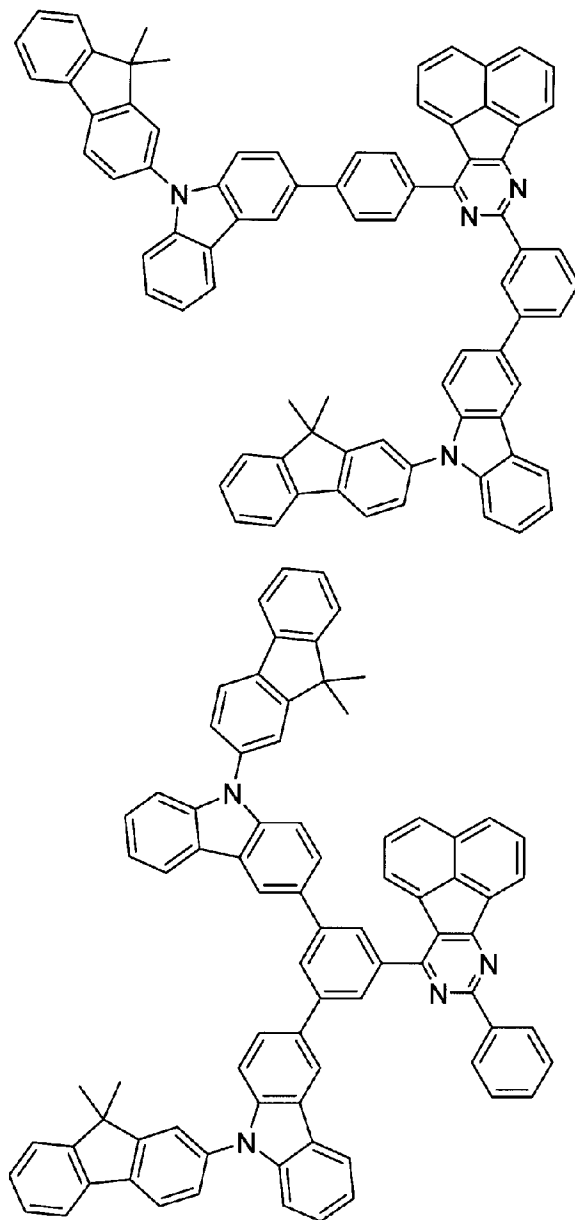
[0136]

[化96]



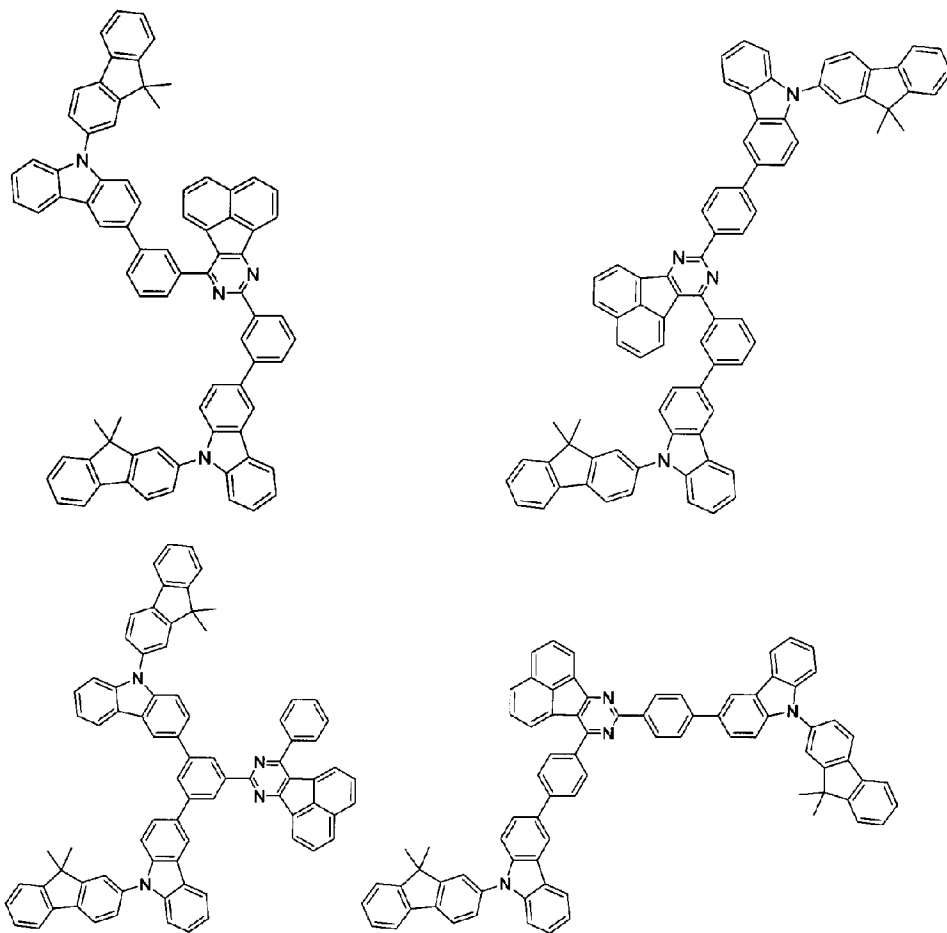
[0137]

[化97]



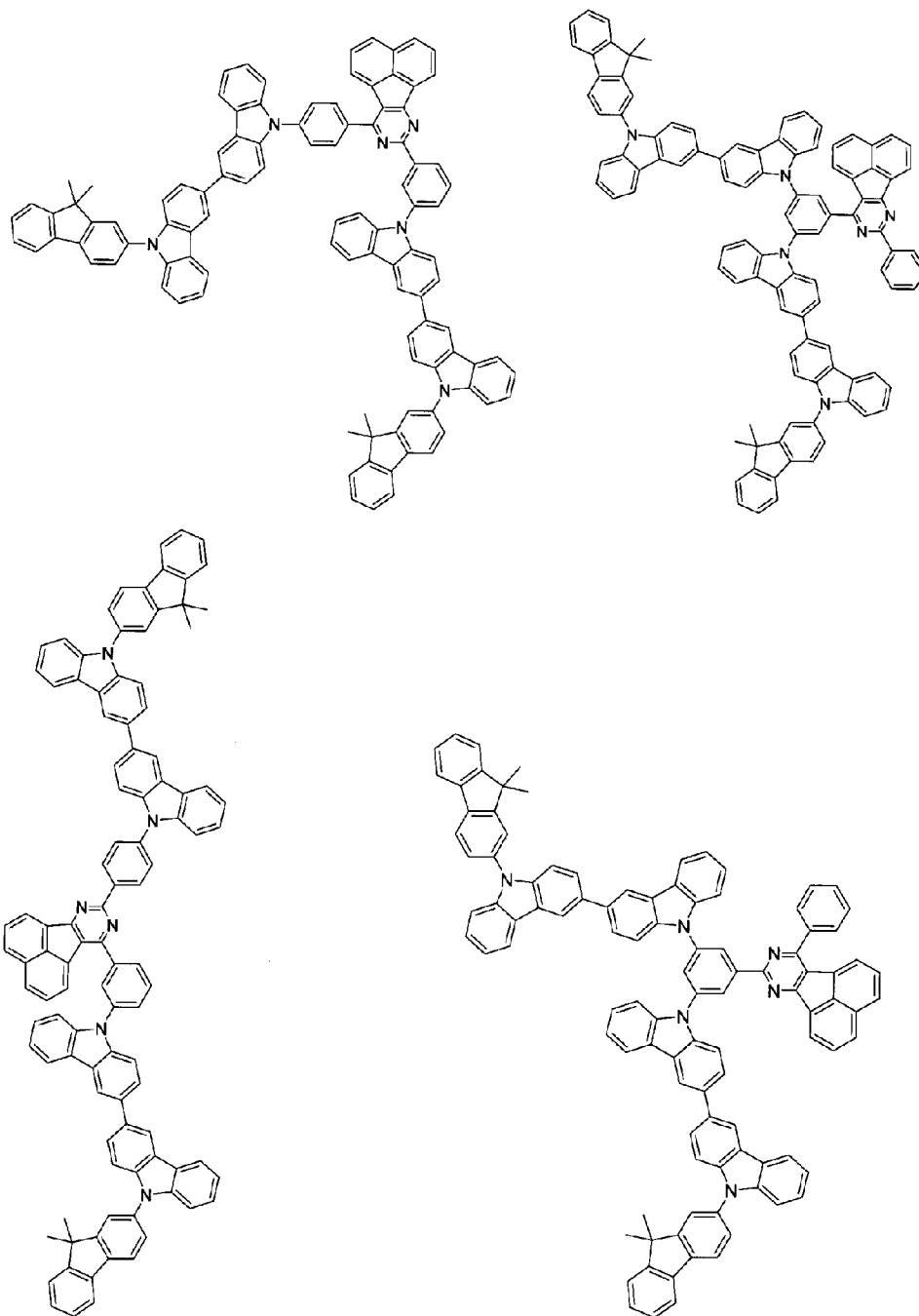
[0138]

[化98]



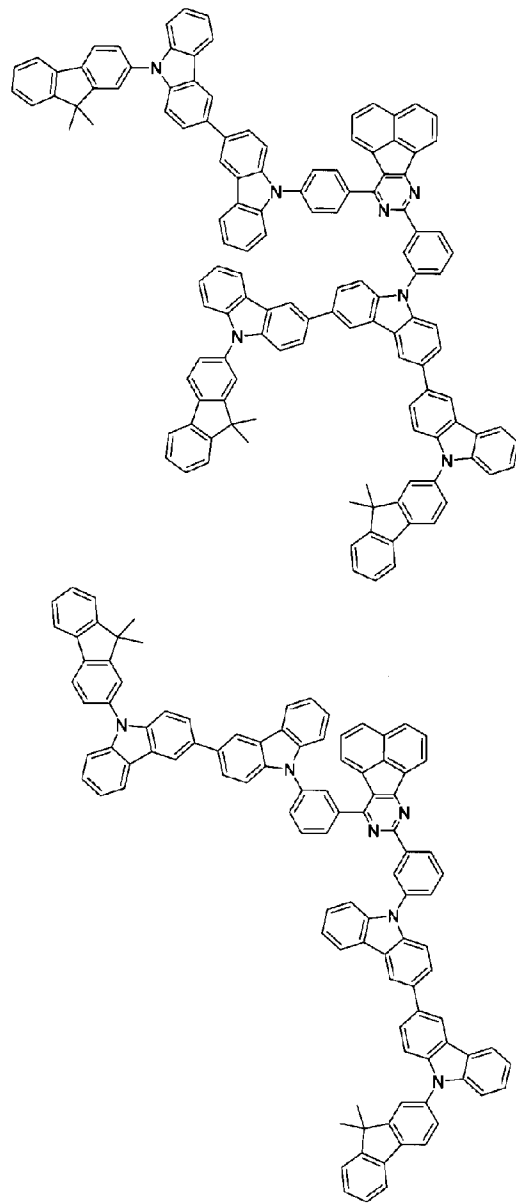
[0139]

[化99]



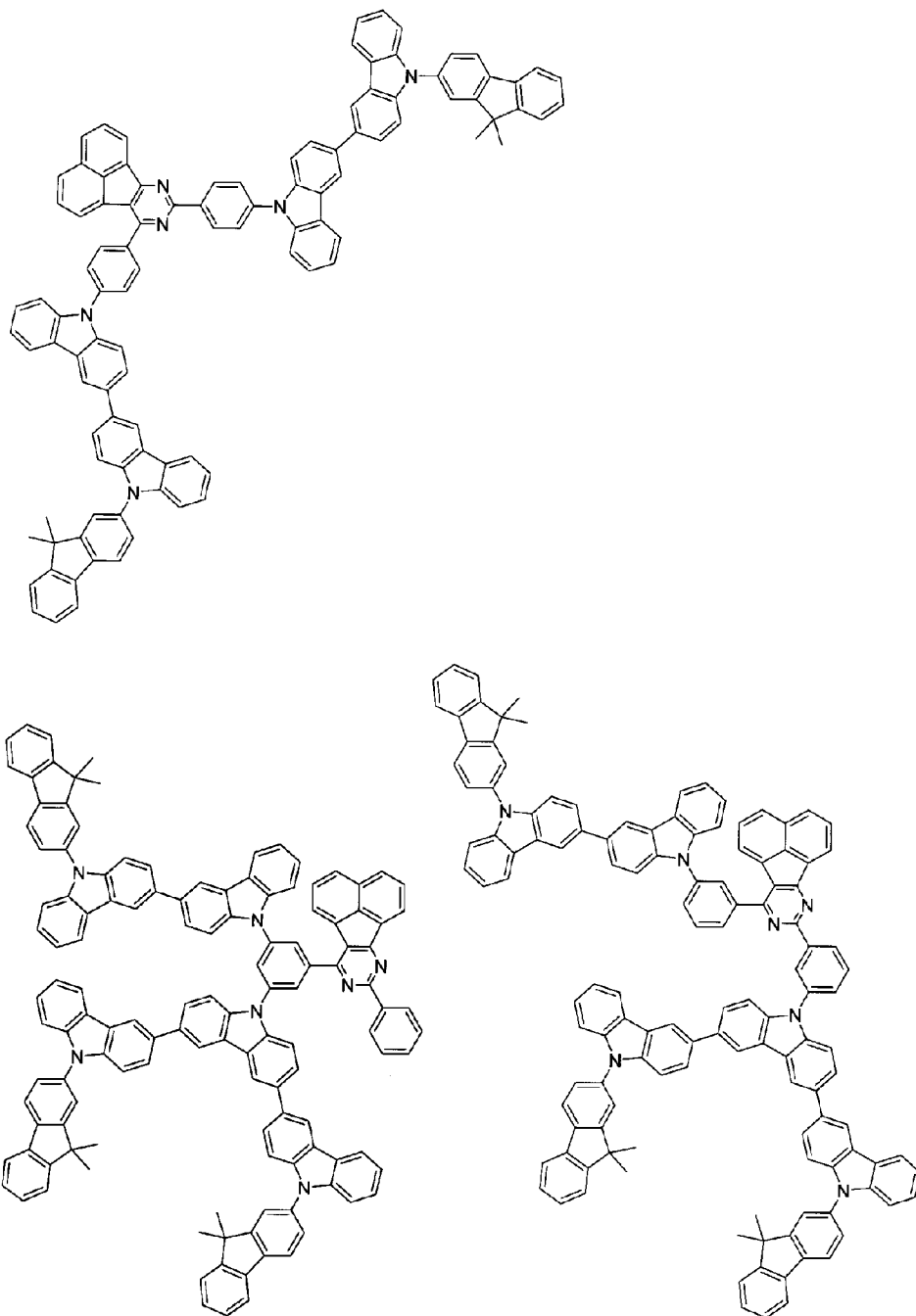
[0140]

[化100]



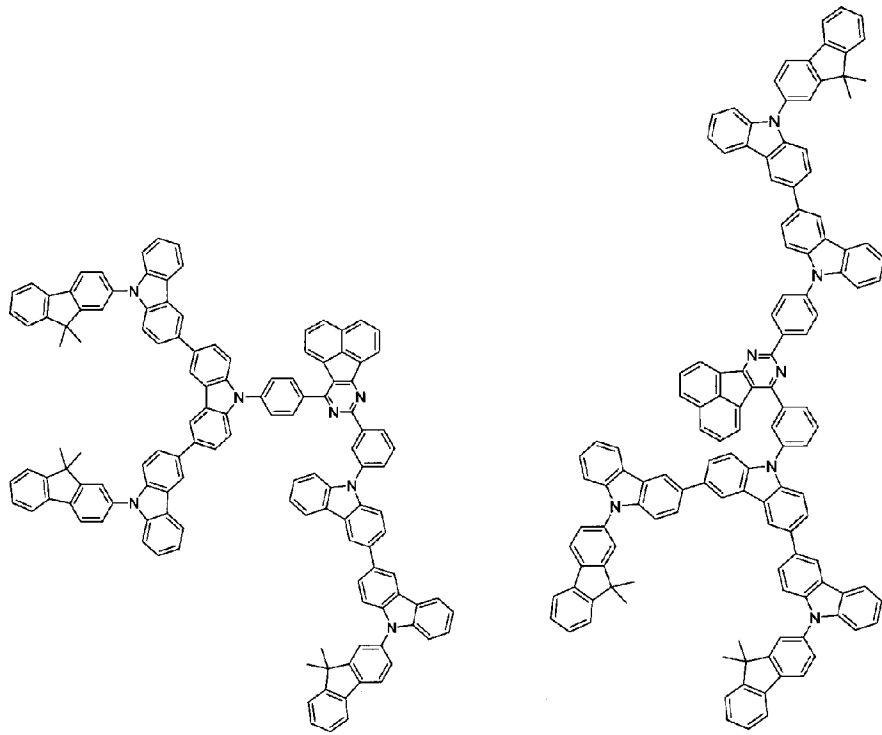
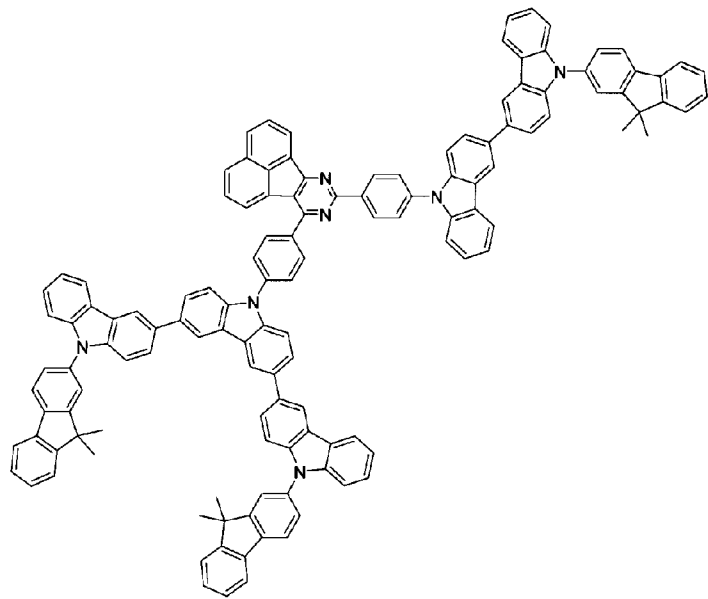
[0141]

[化101]



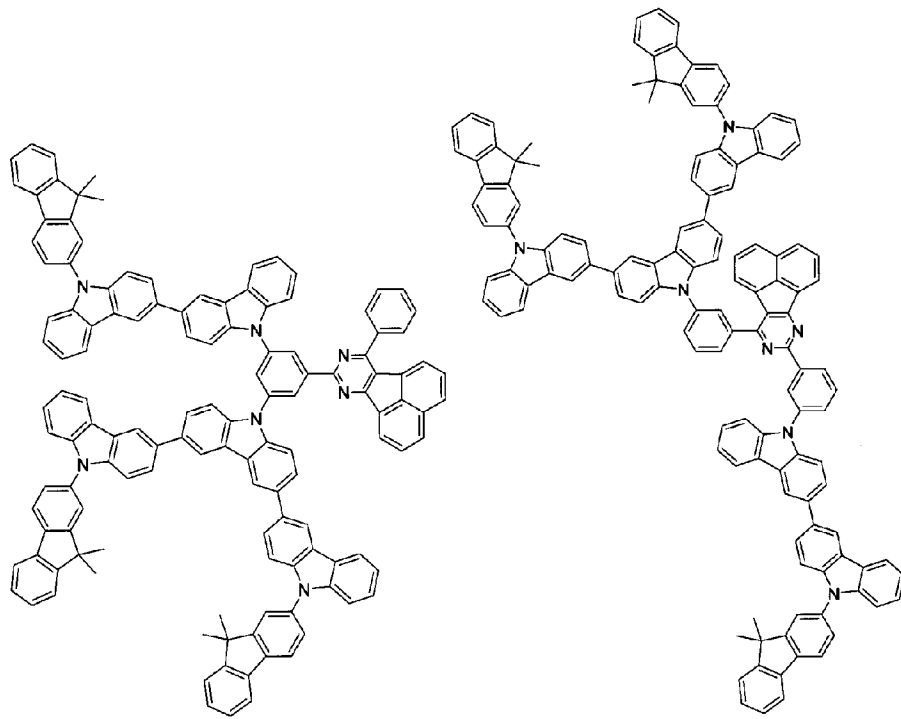
[0142]

[化102]



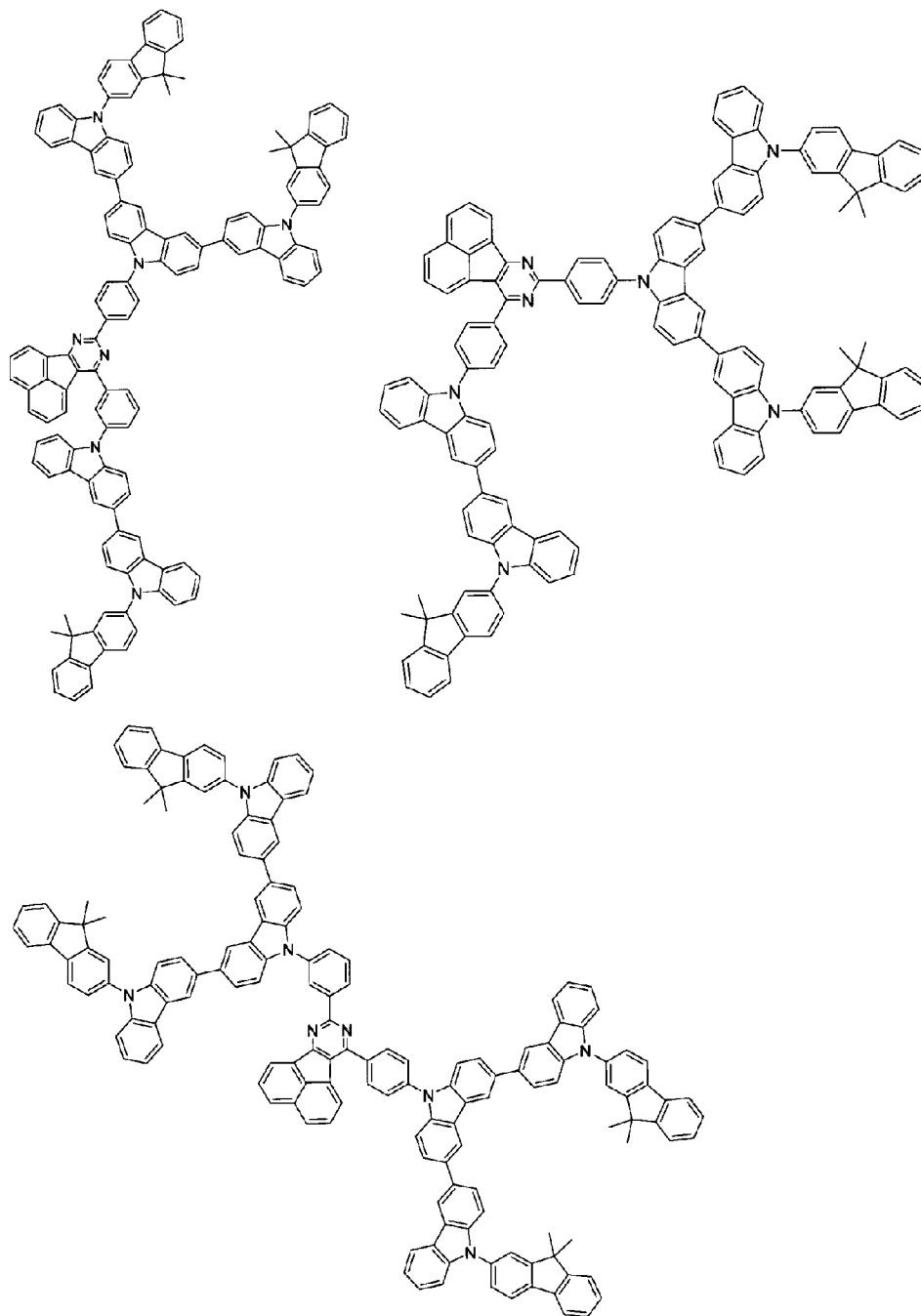
[0143]

[化103]



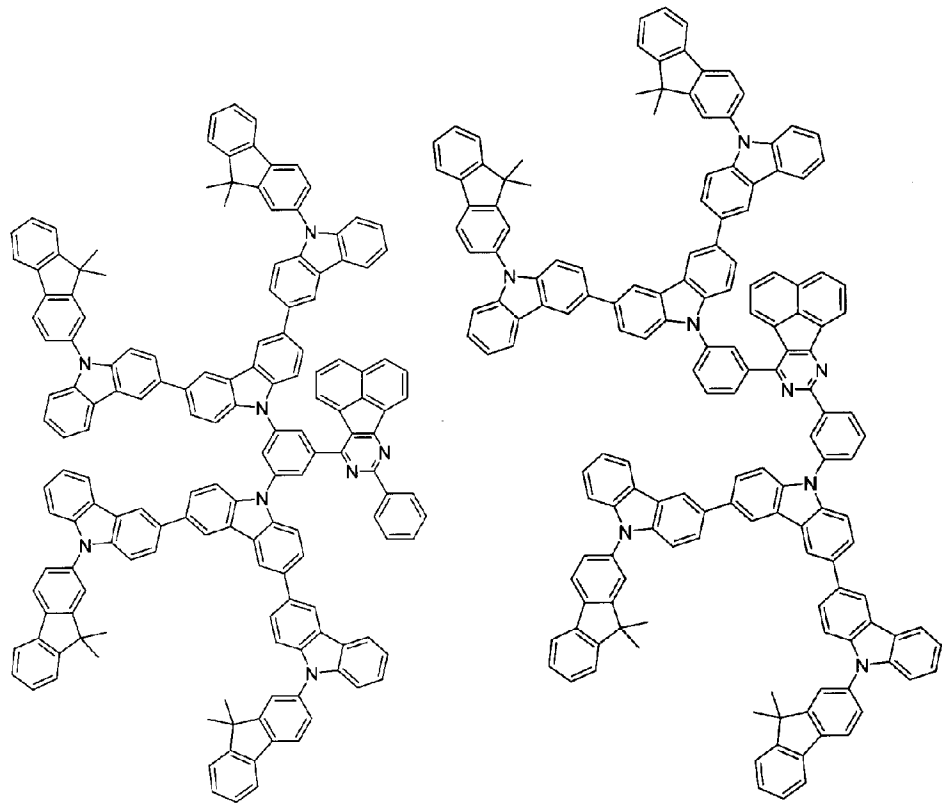
[0144]

[化104]



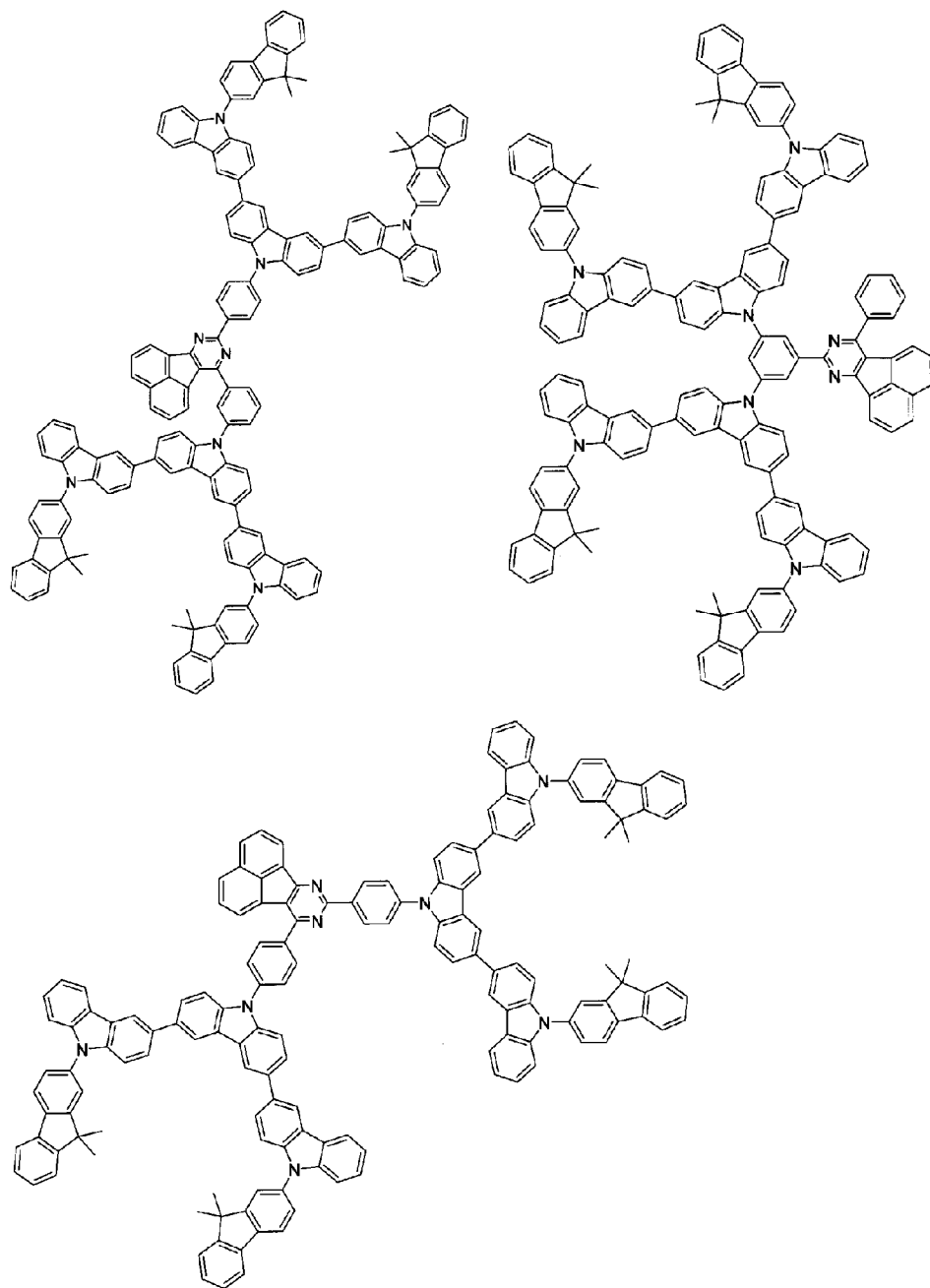
[0145]

[化105]



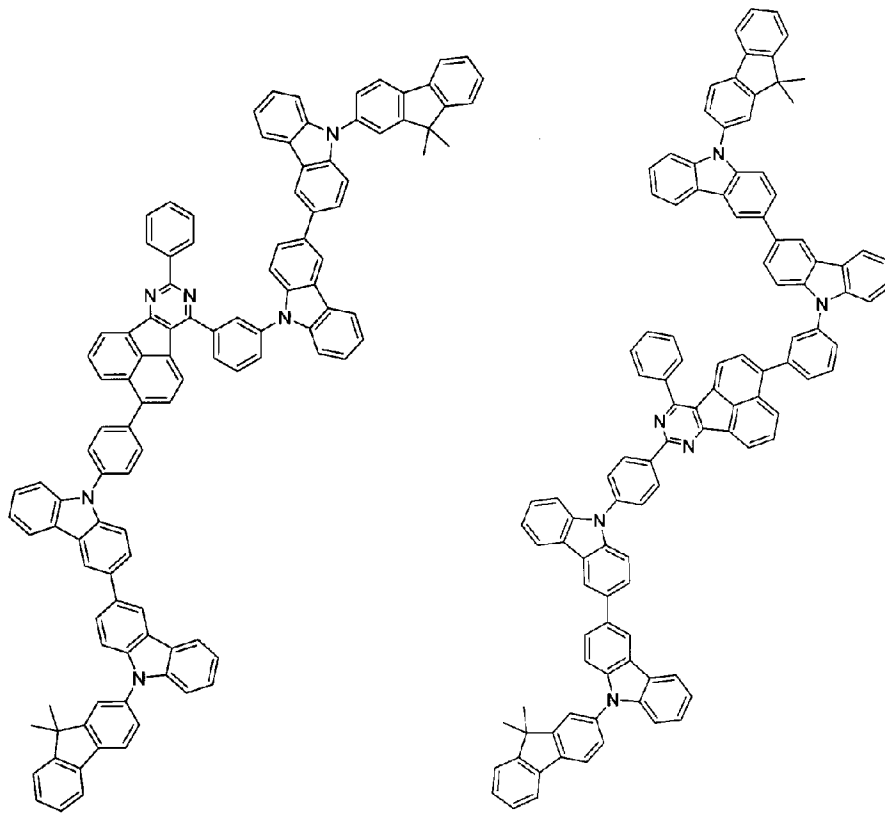
[0146]

[化106]



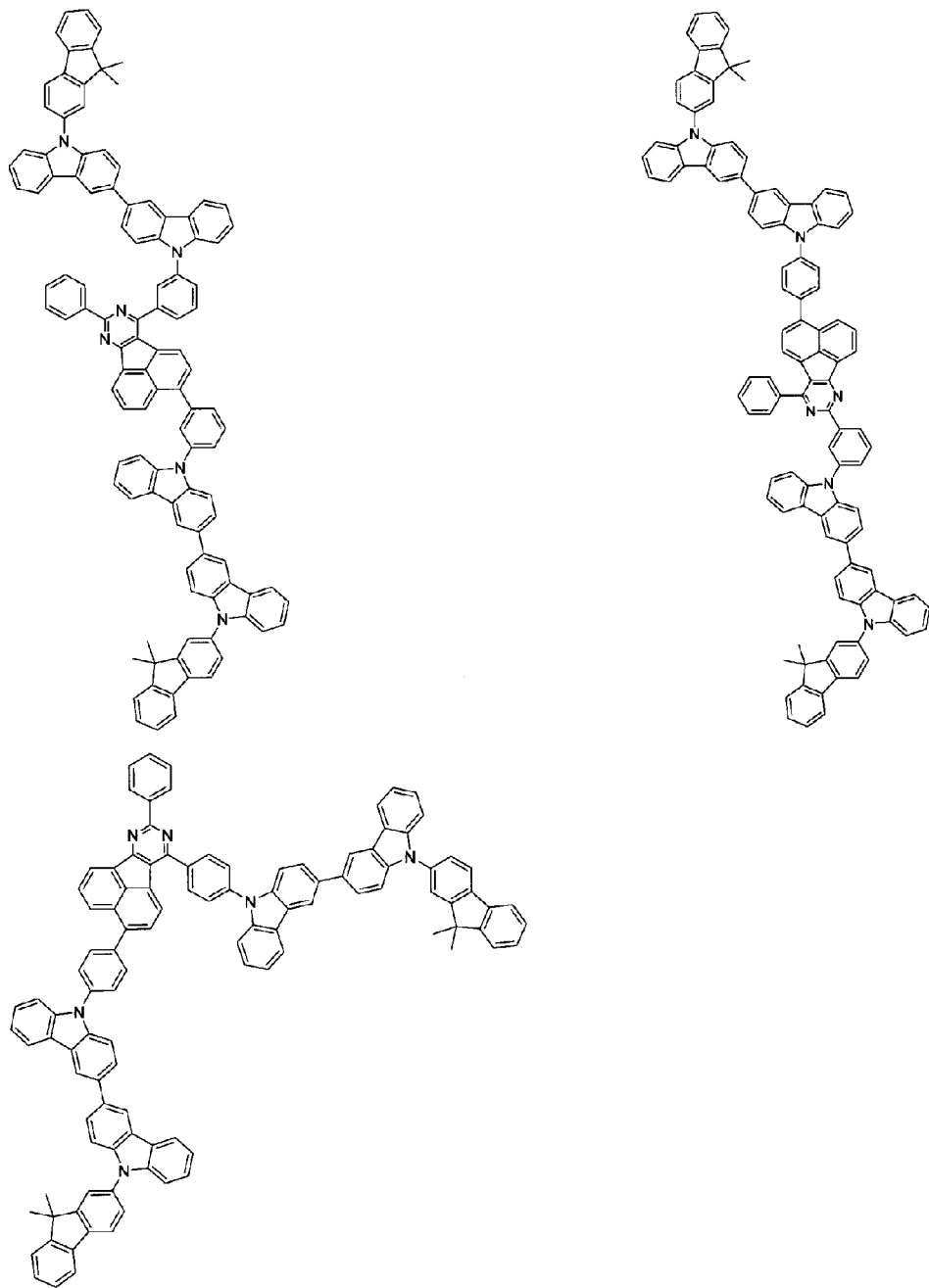
[0147]

[化107]



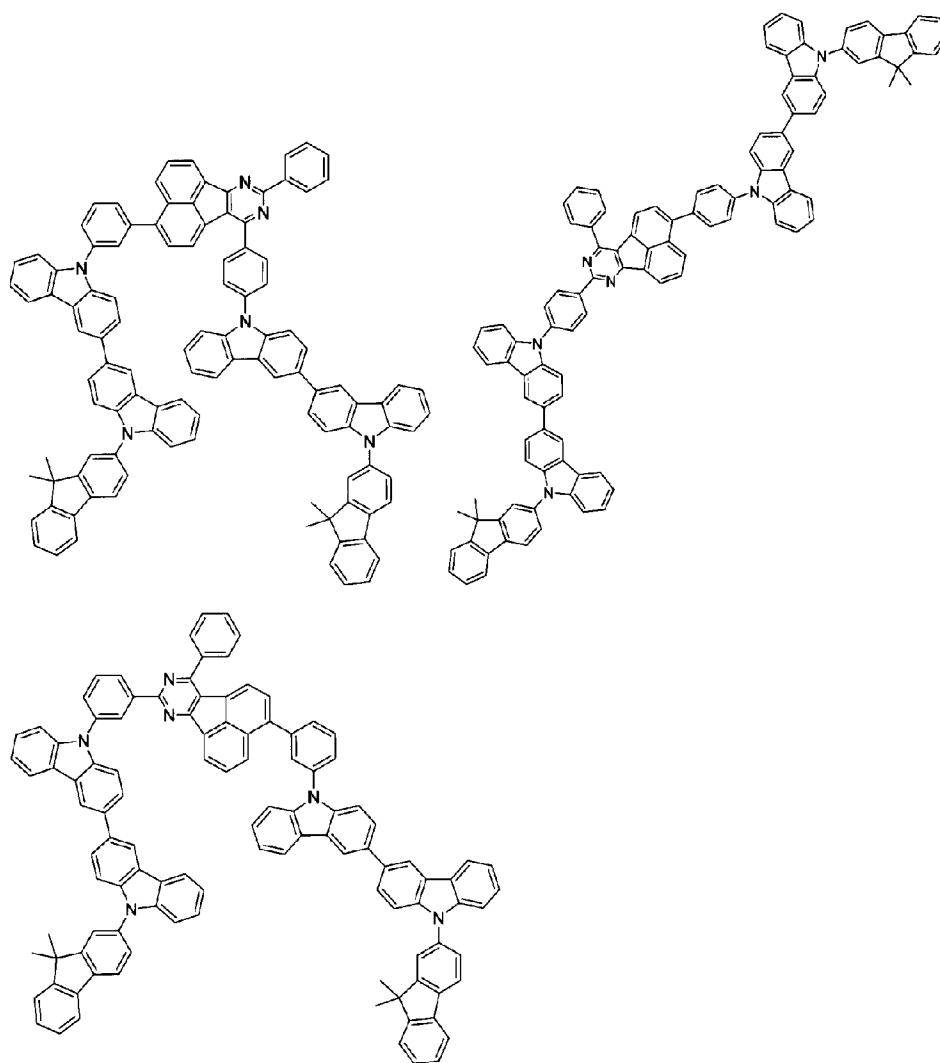
[0148]

[化108]



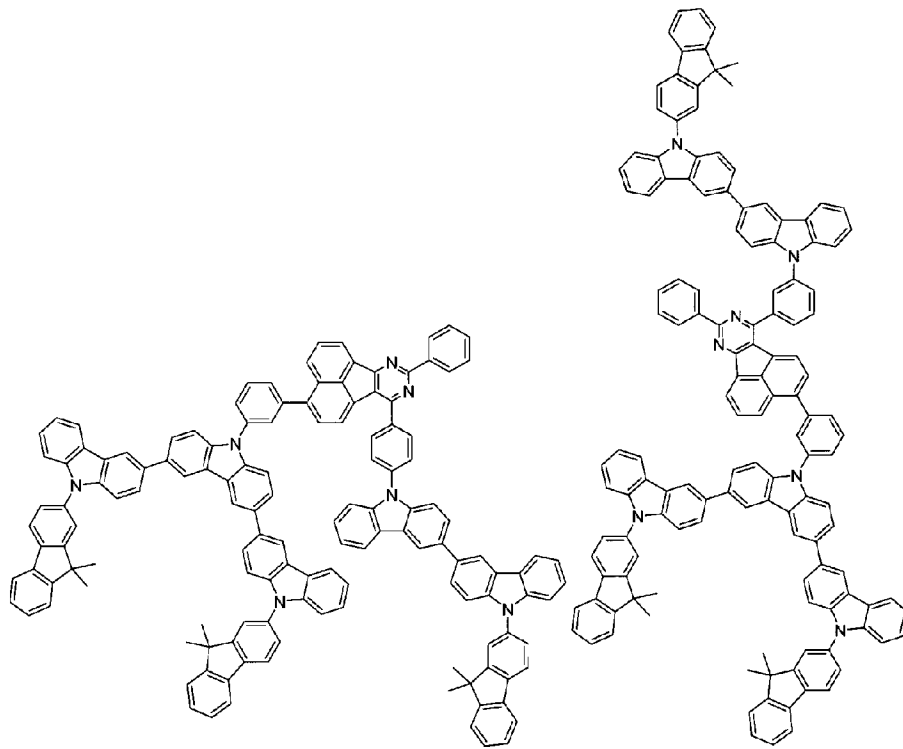
[0149]

[化109]

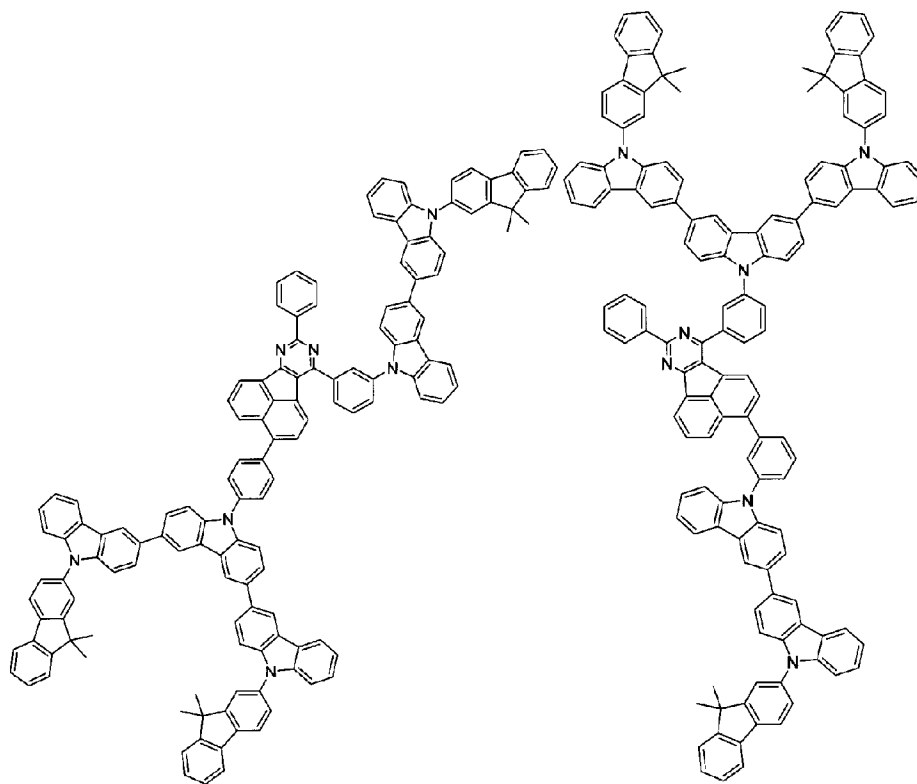


[0150]

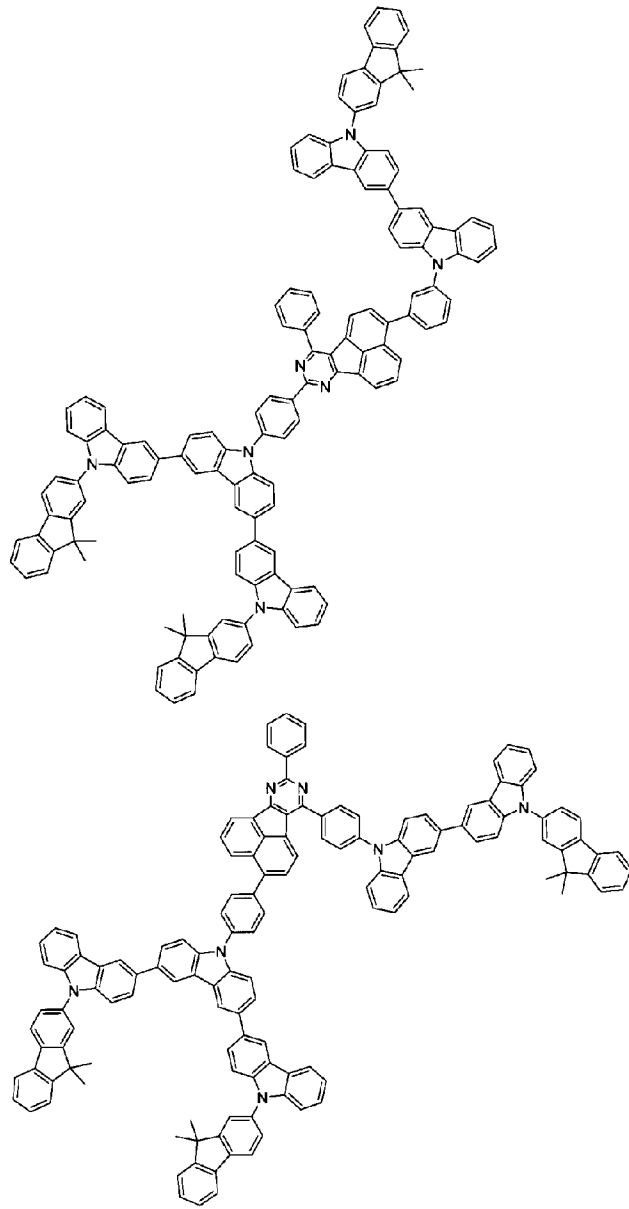
[化110]



[0151] [化111]

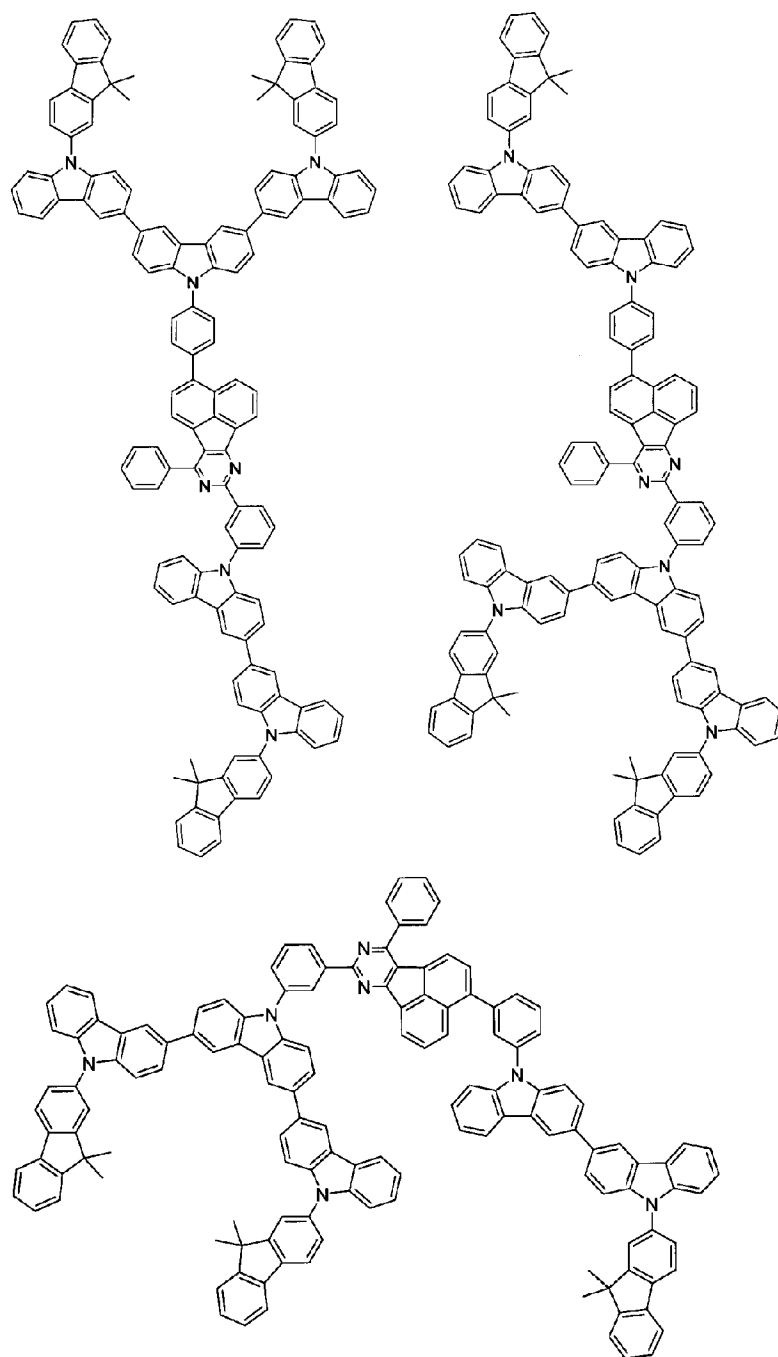


[0152] [化112]



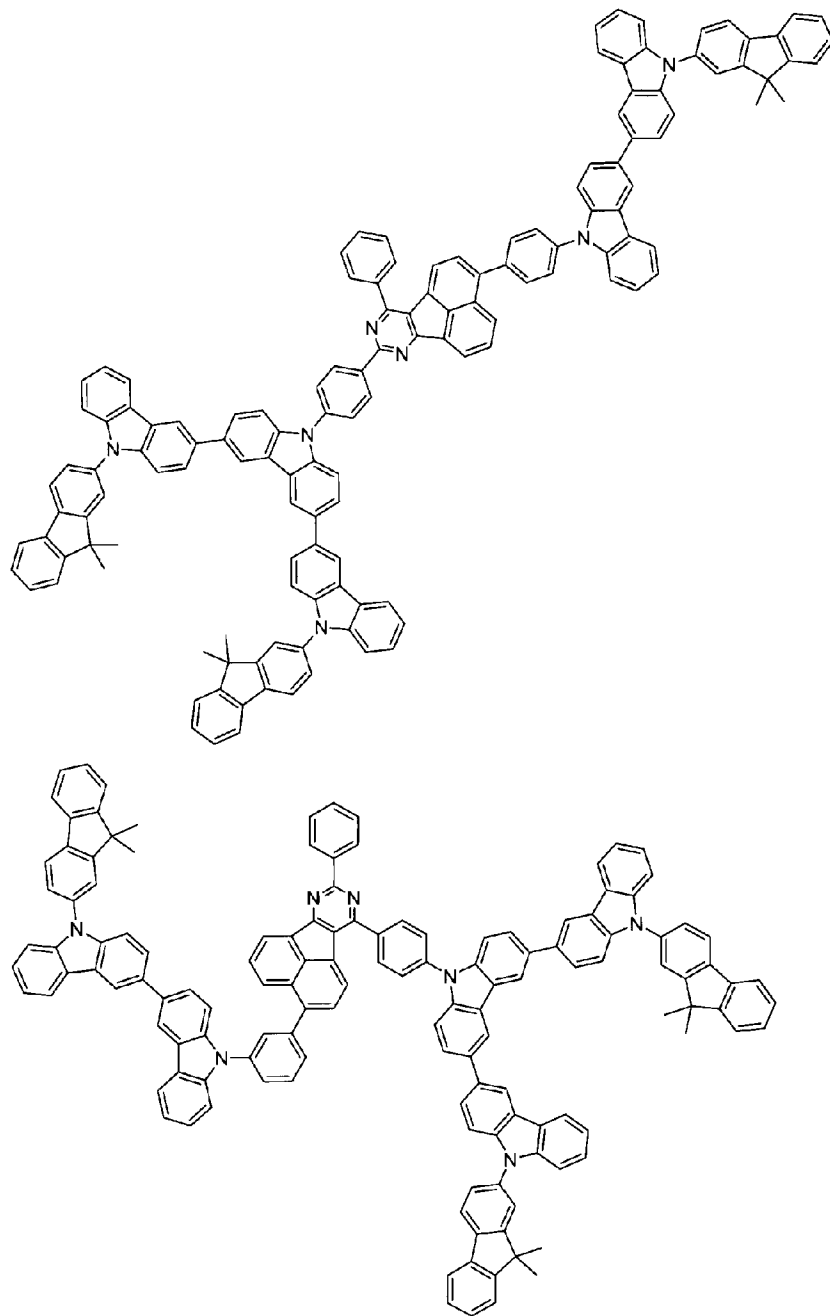
[0153]

[化113]



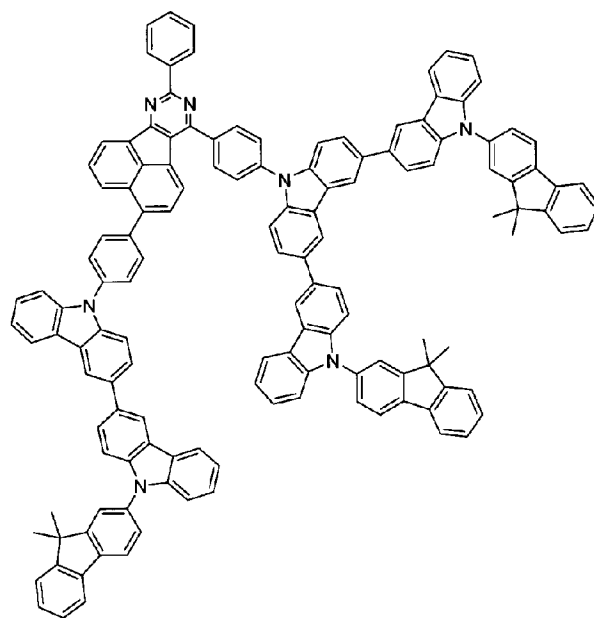
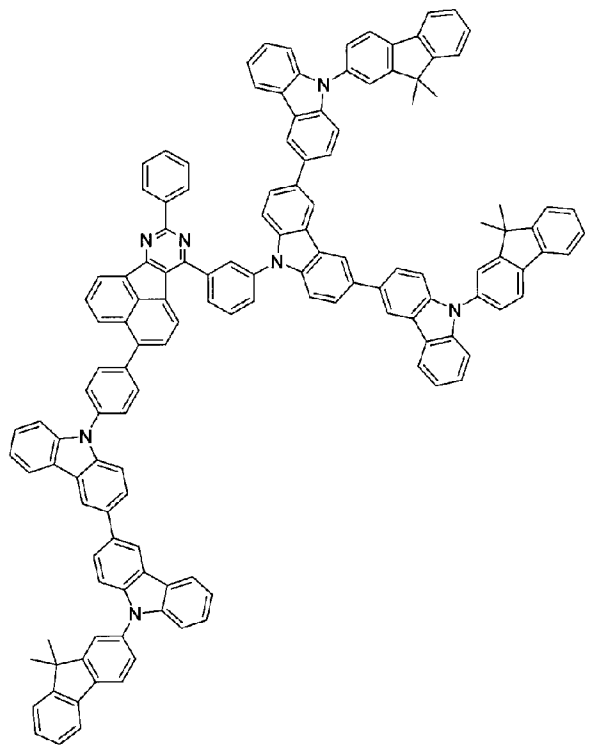
[0154]

[化114]



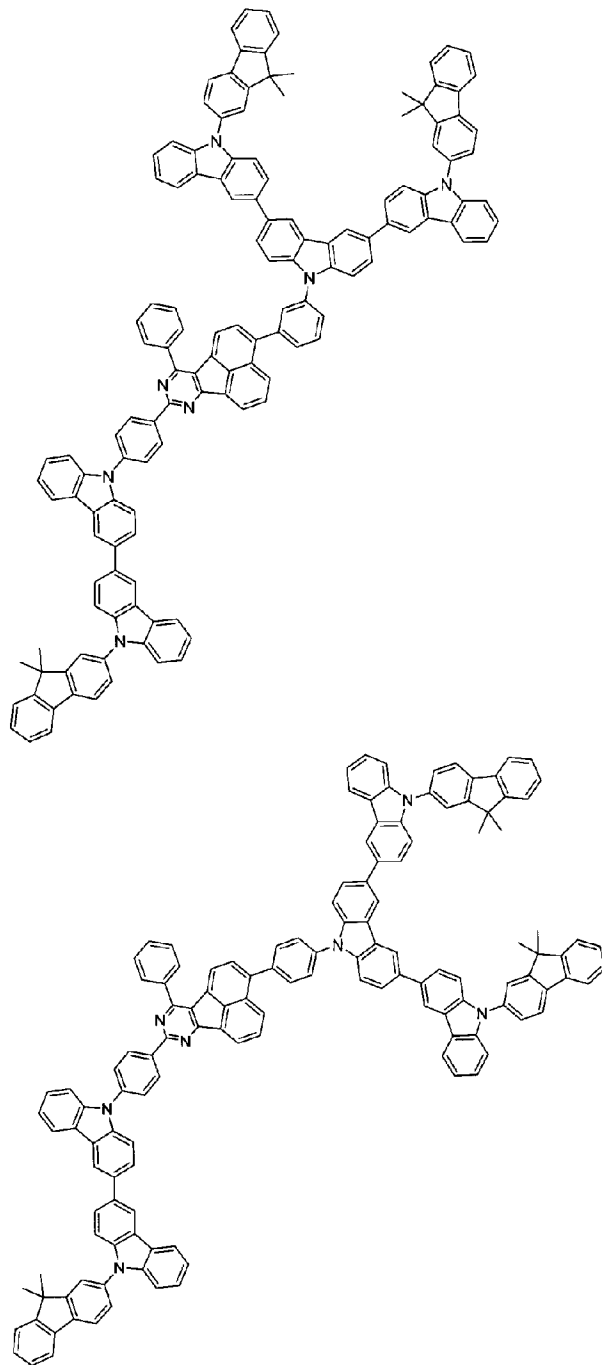
[0155]

[化115]



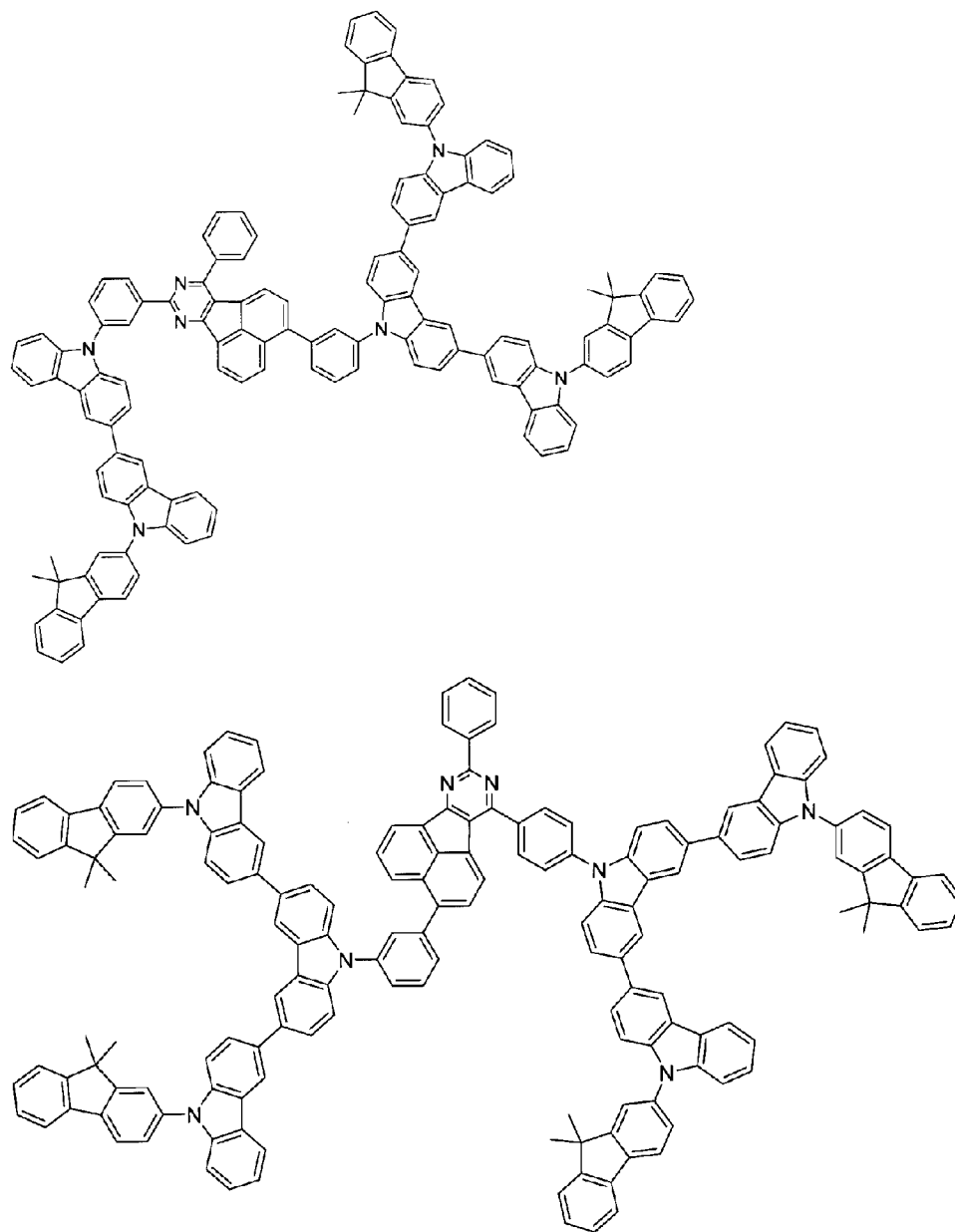
[0156]

[化116]



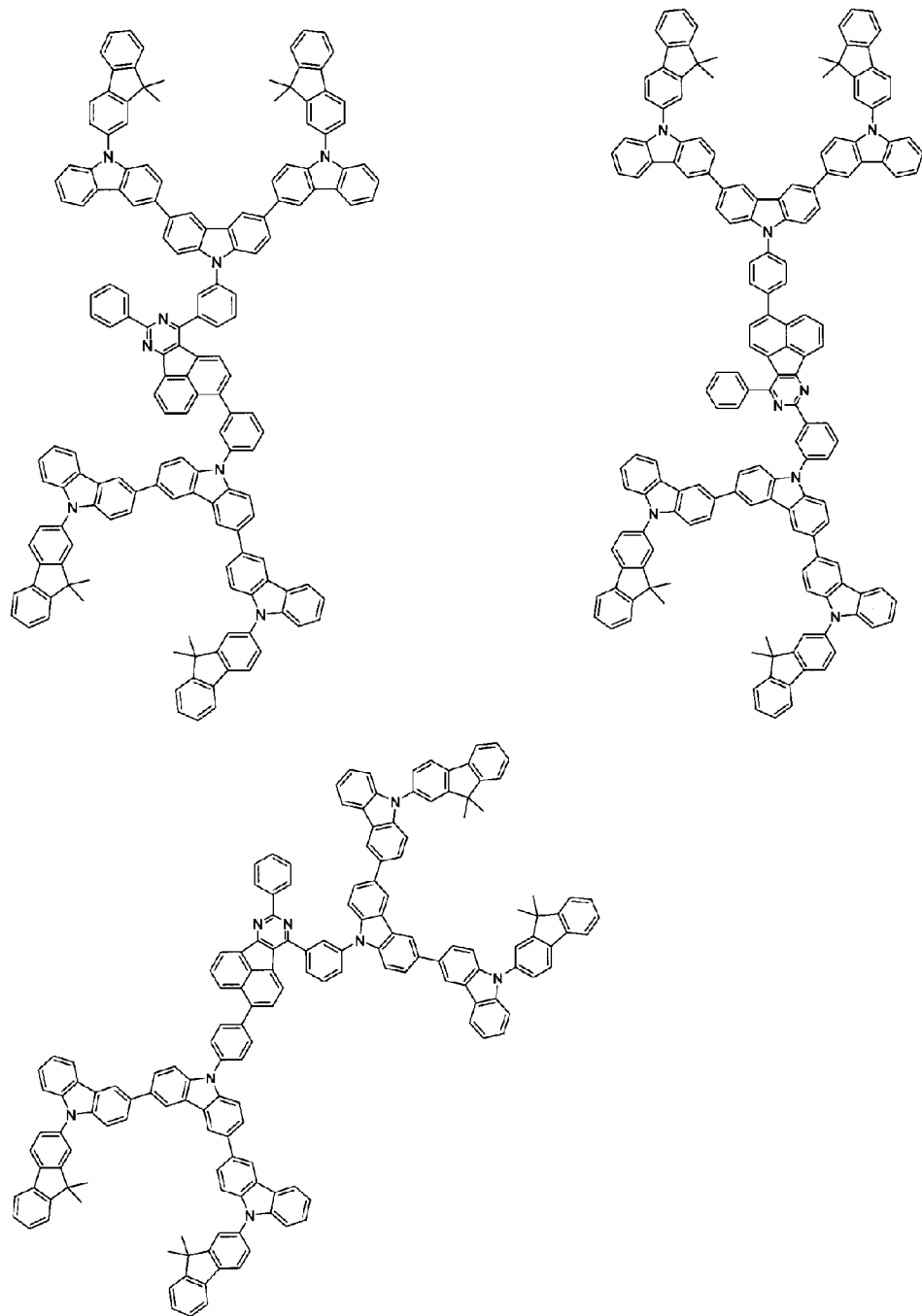
[0157]

[化117]



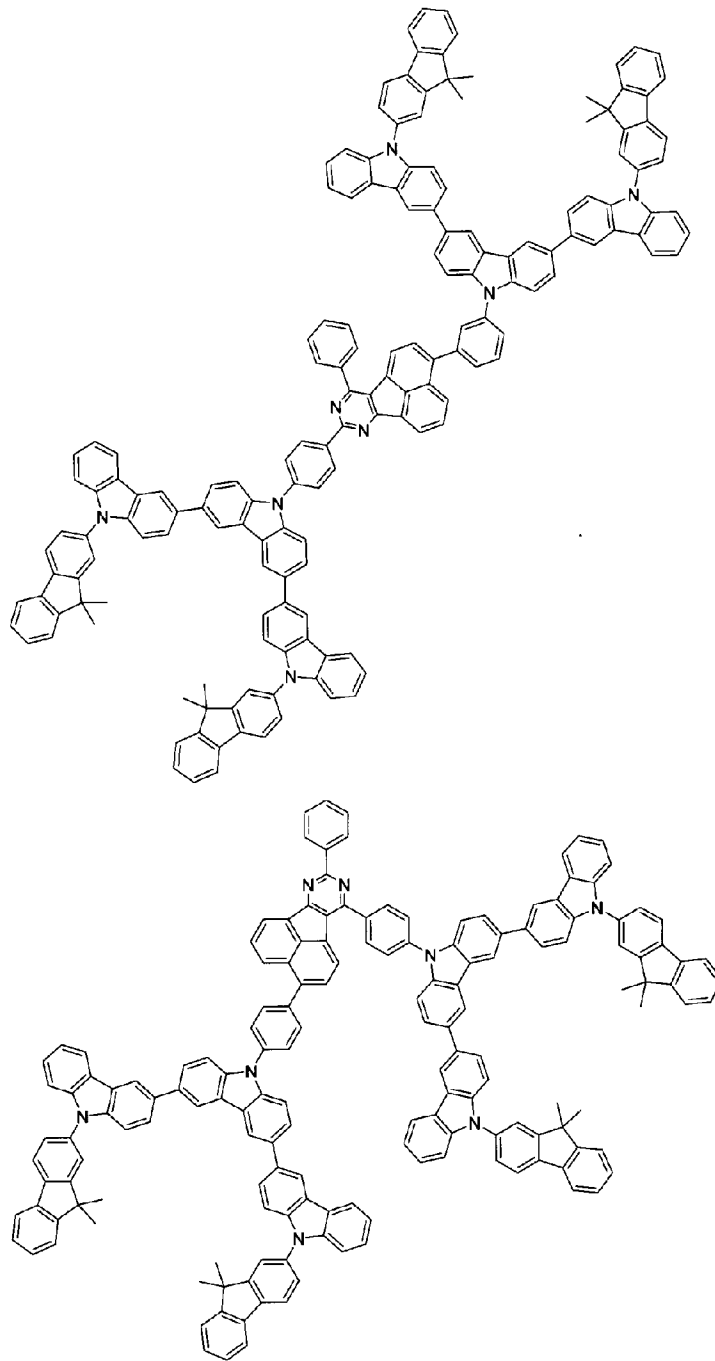
[0158]

[化118]



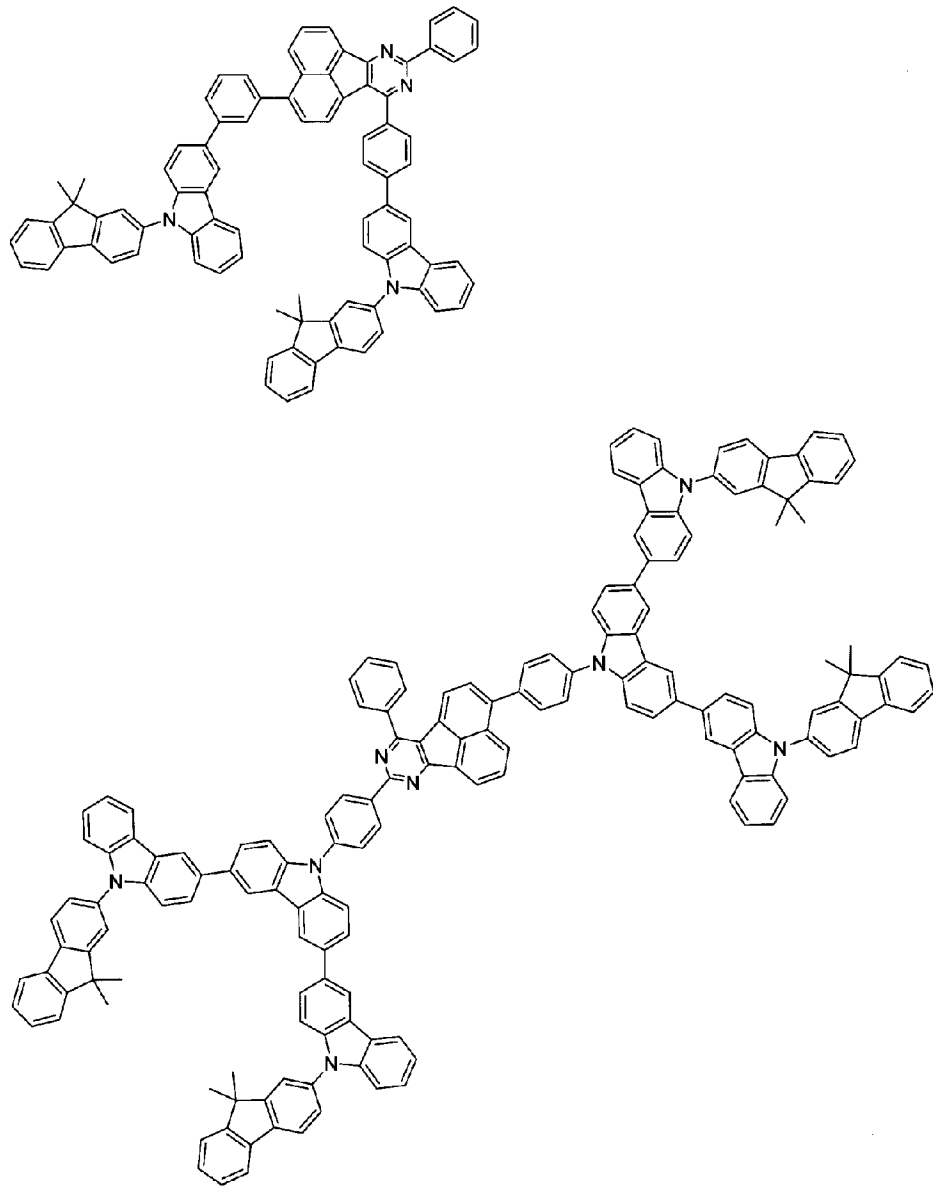
[0159]

[化119]



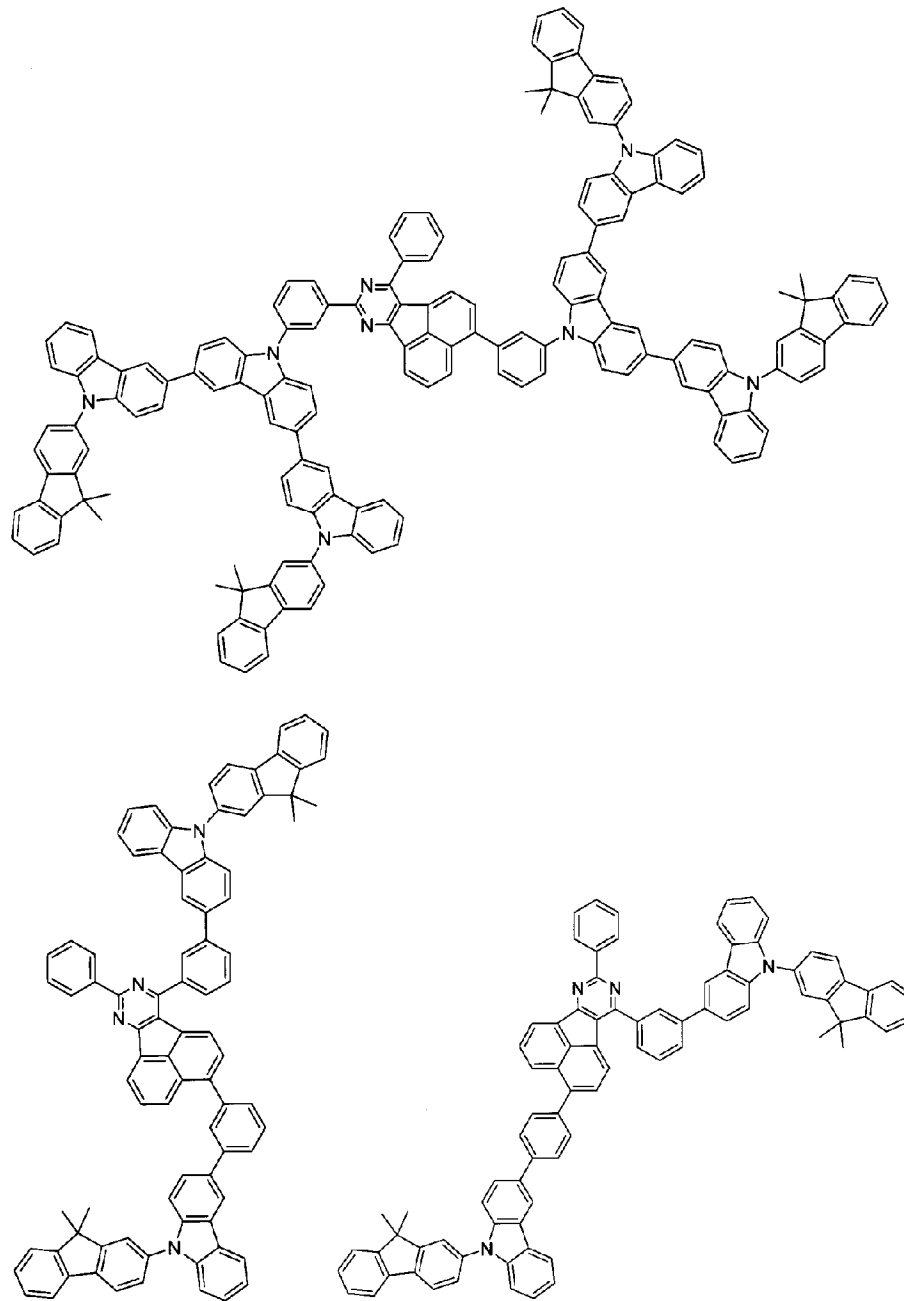
[0160]

[化120]



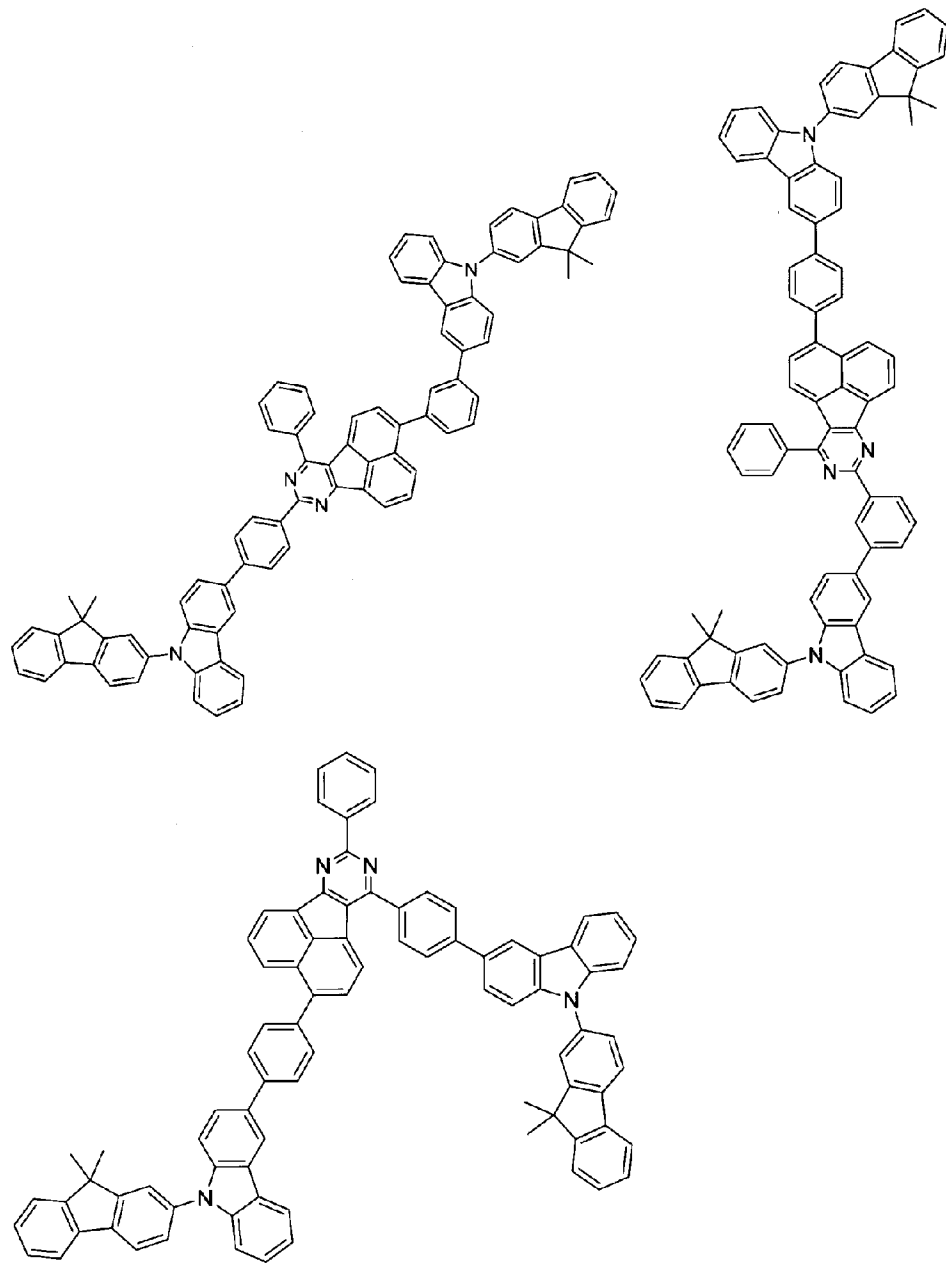
[0161]

[化121]



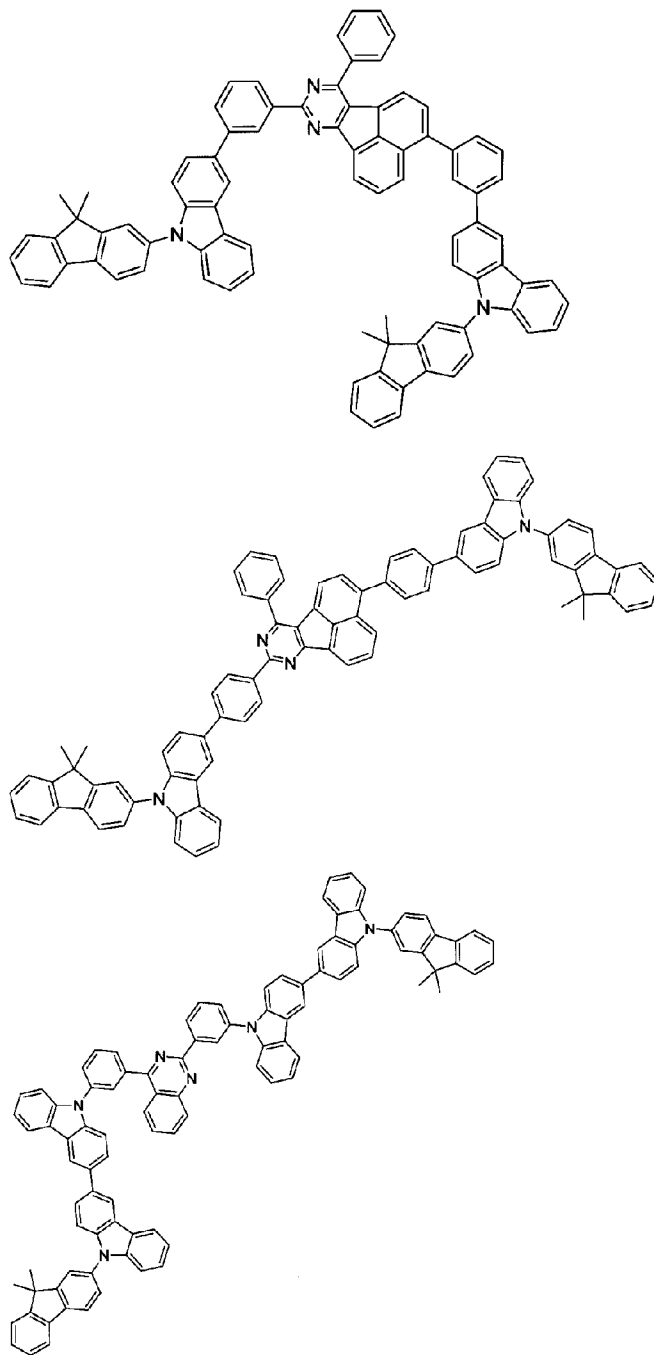
[0162]

[化122]



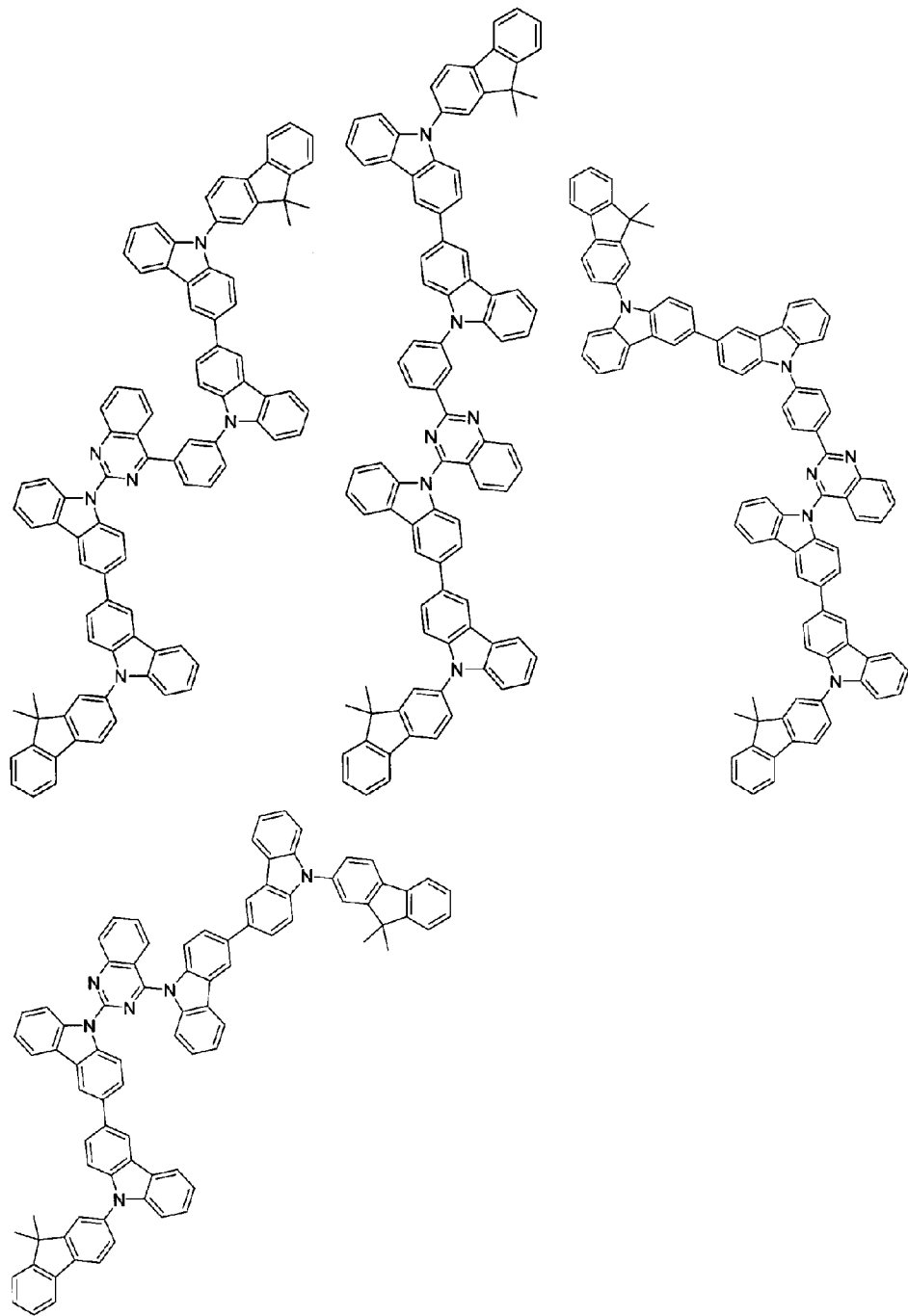
[0163]

[化123]



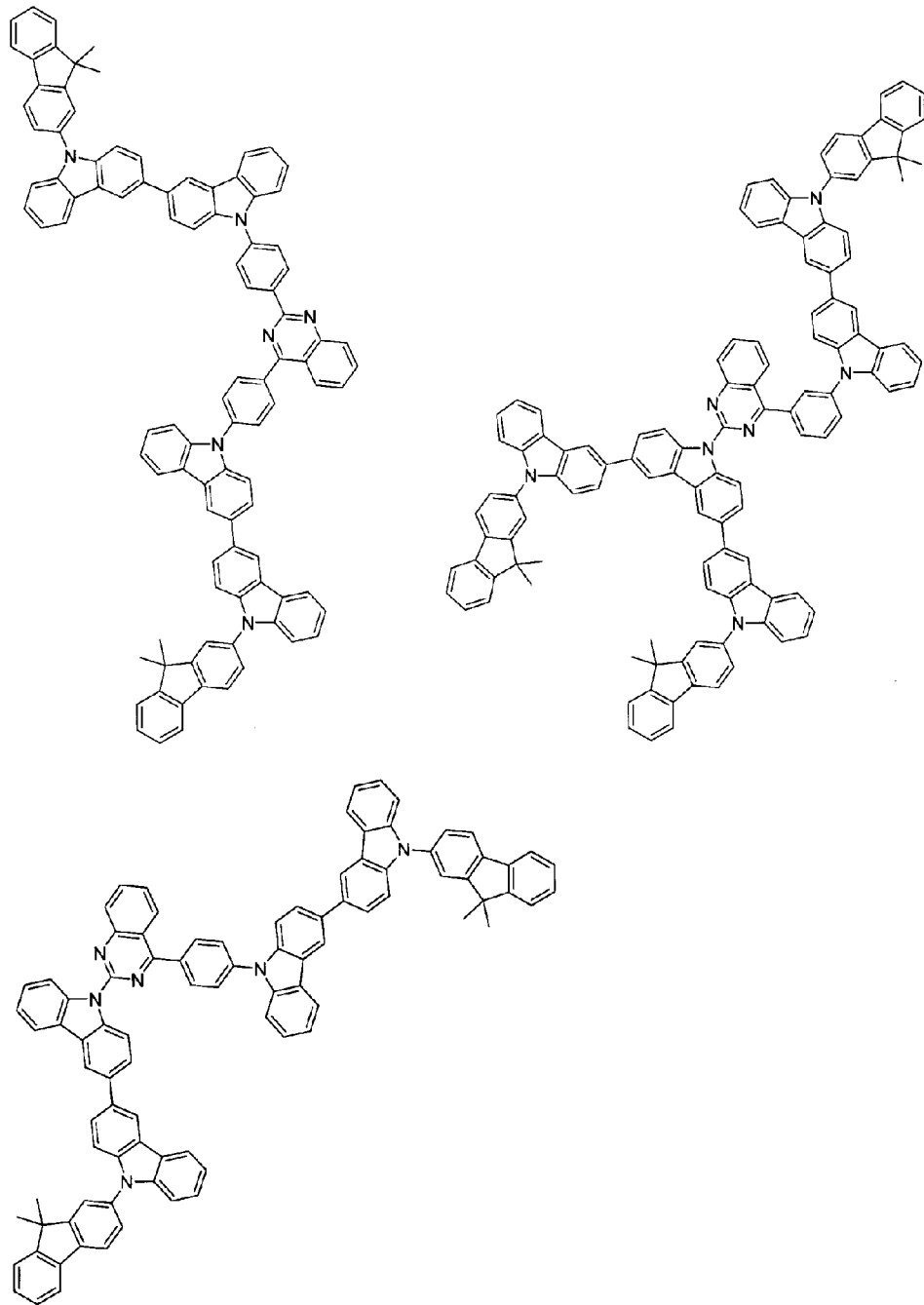
[0164]

[化124]



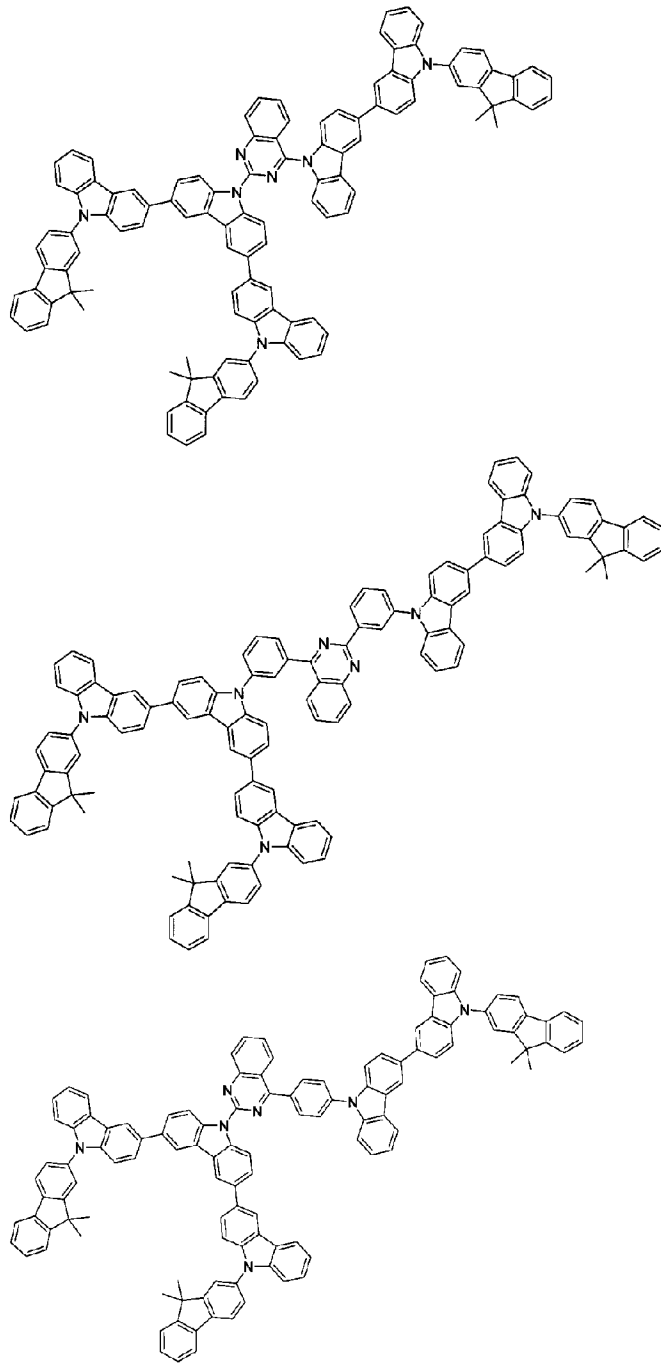
[0165]

[化125]



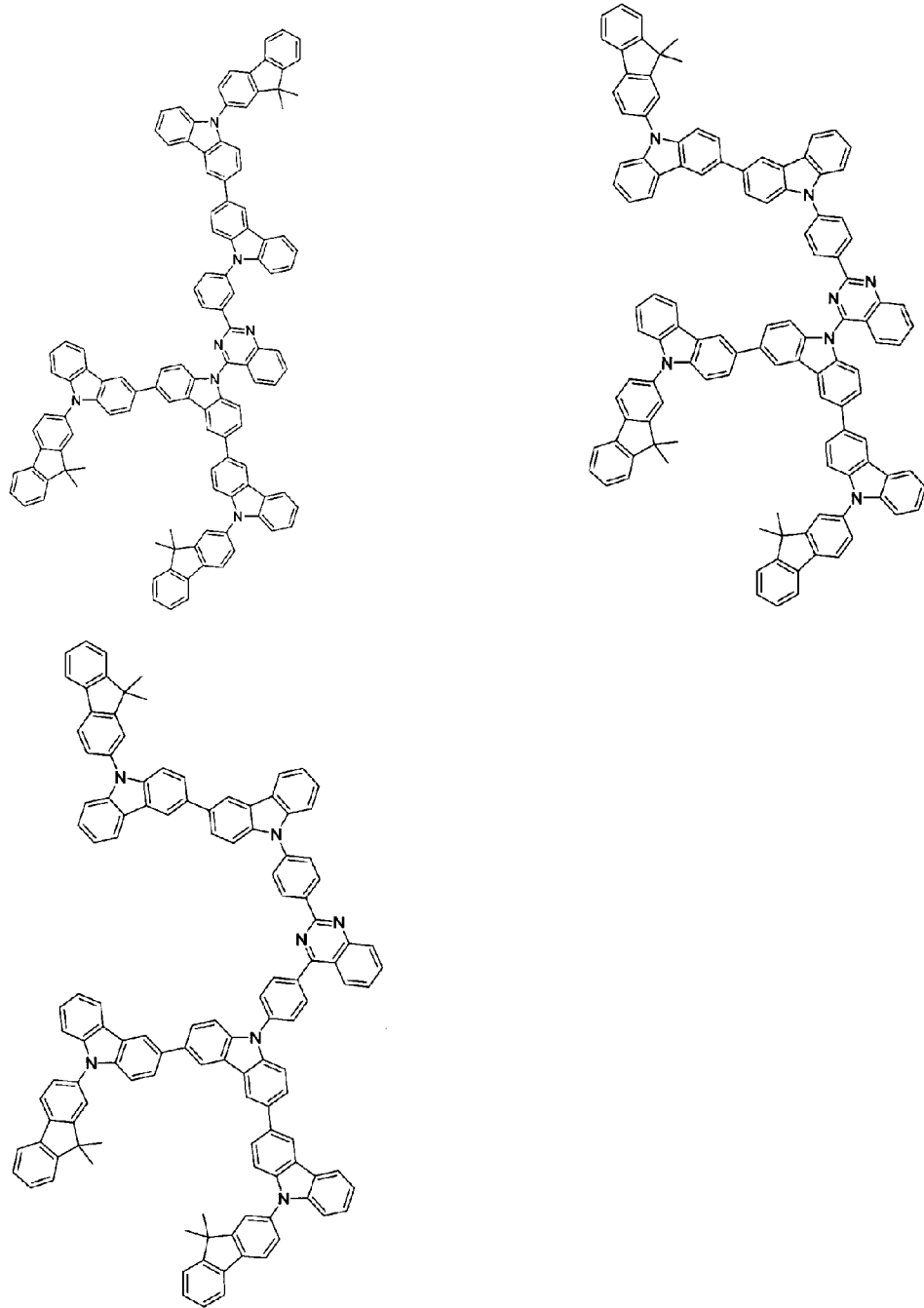
[0166]

[化126]



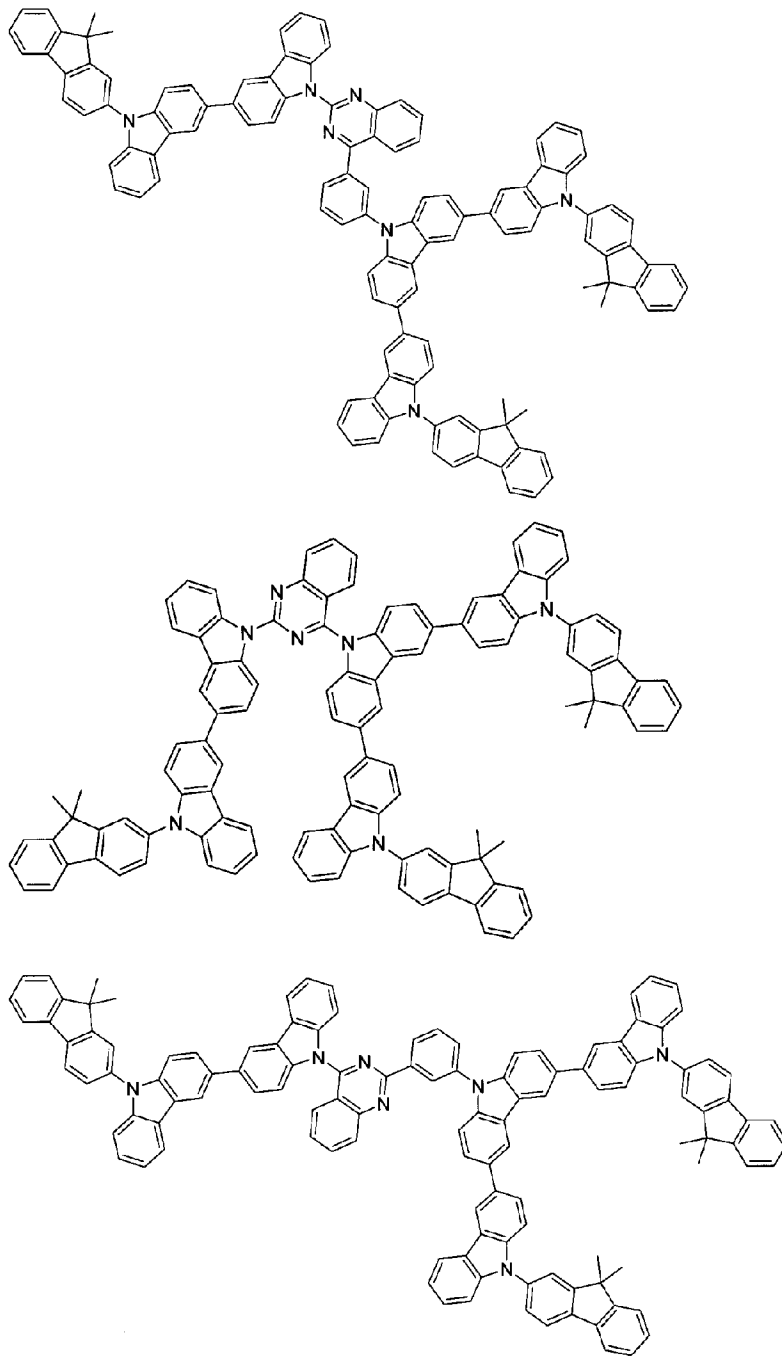
[0167]

[化127]



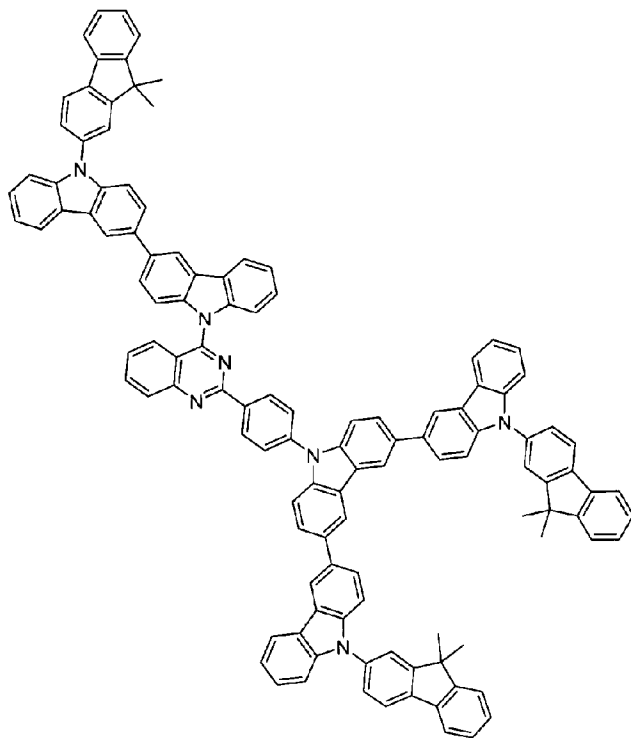
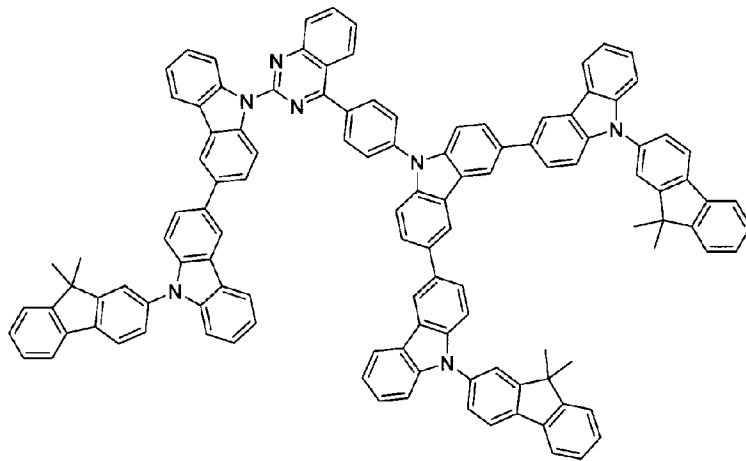
[0168]

[化128]



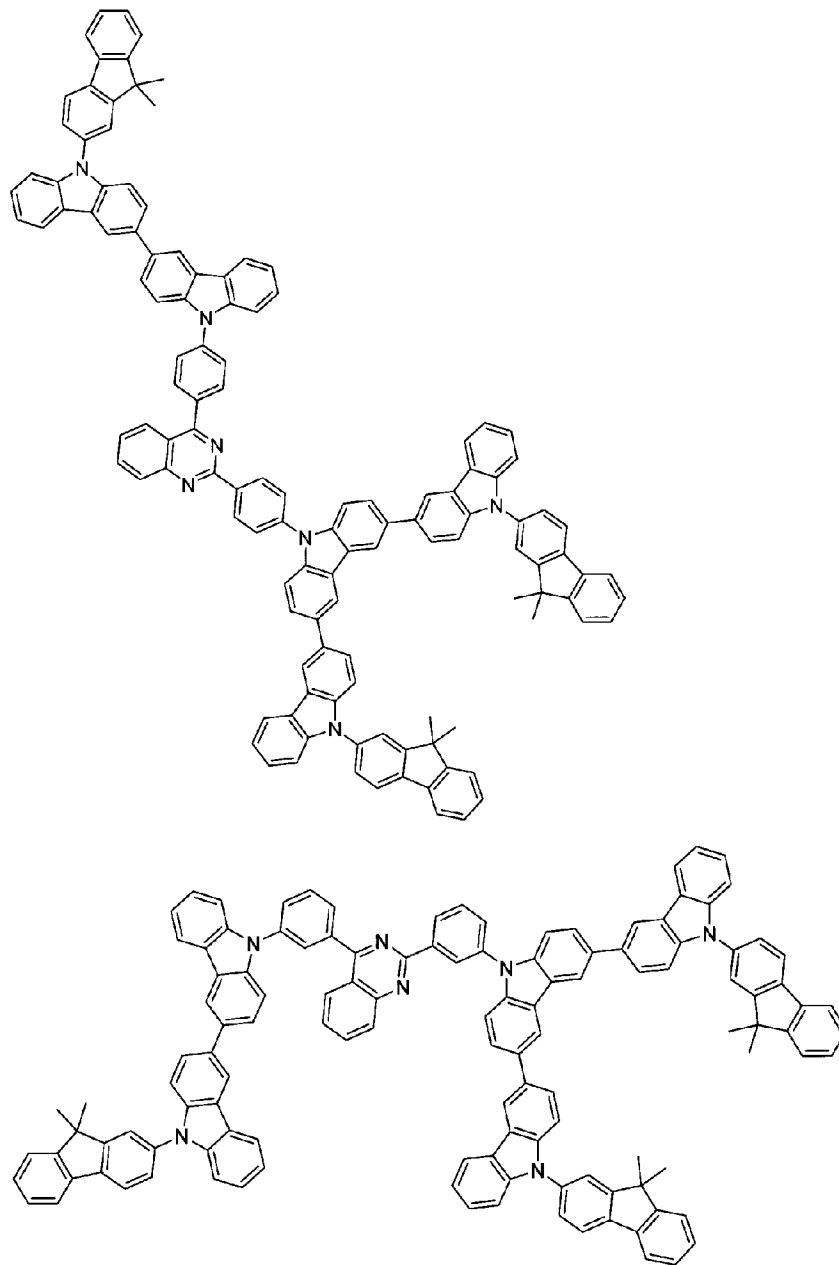
[0169]

[化129]



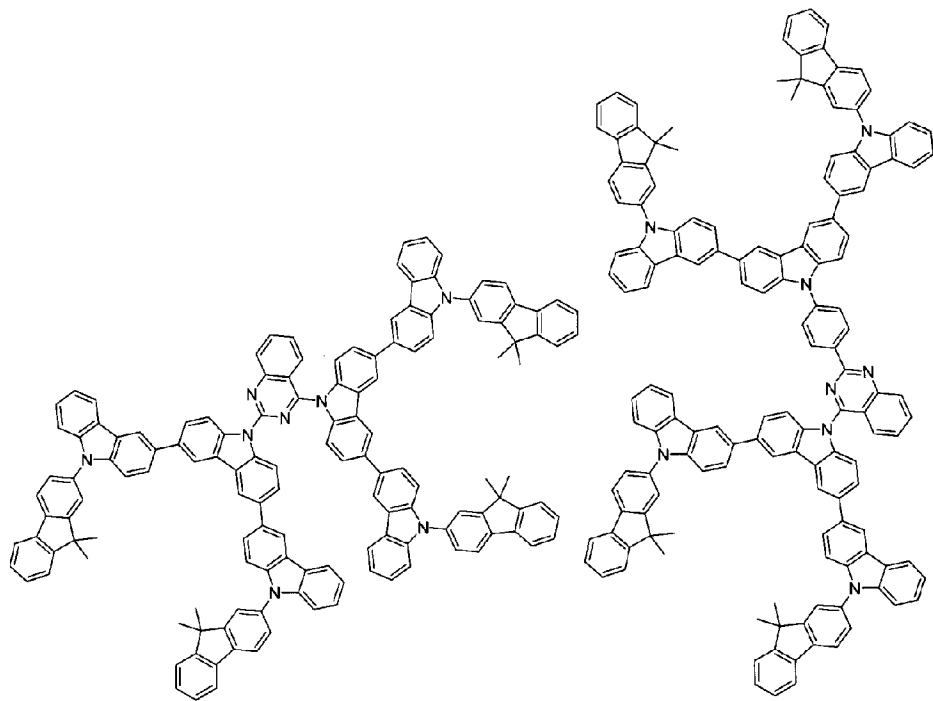
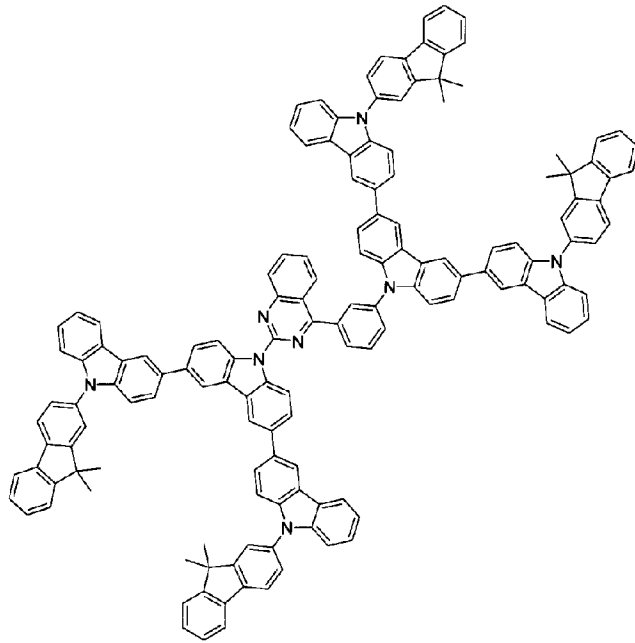
[0170]

[化130]



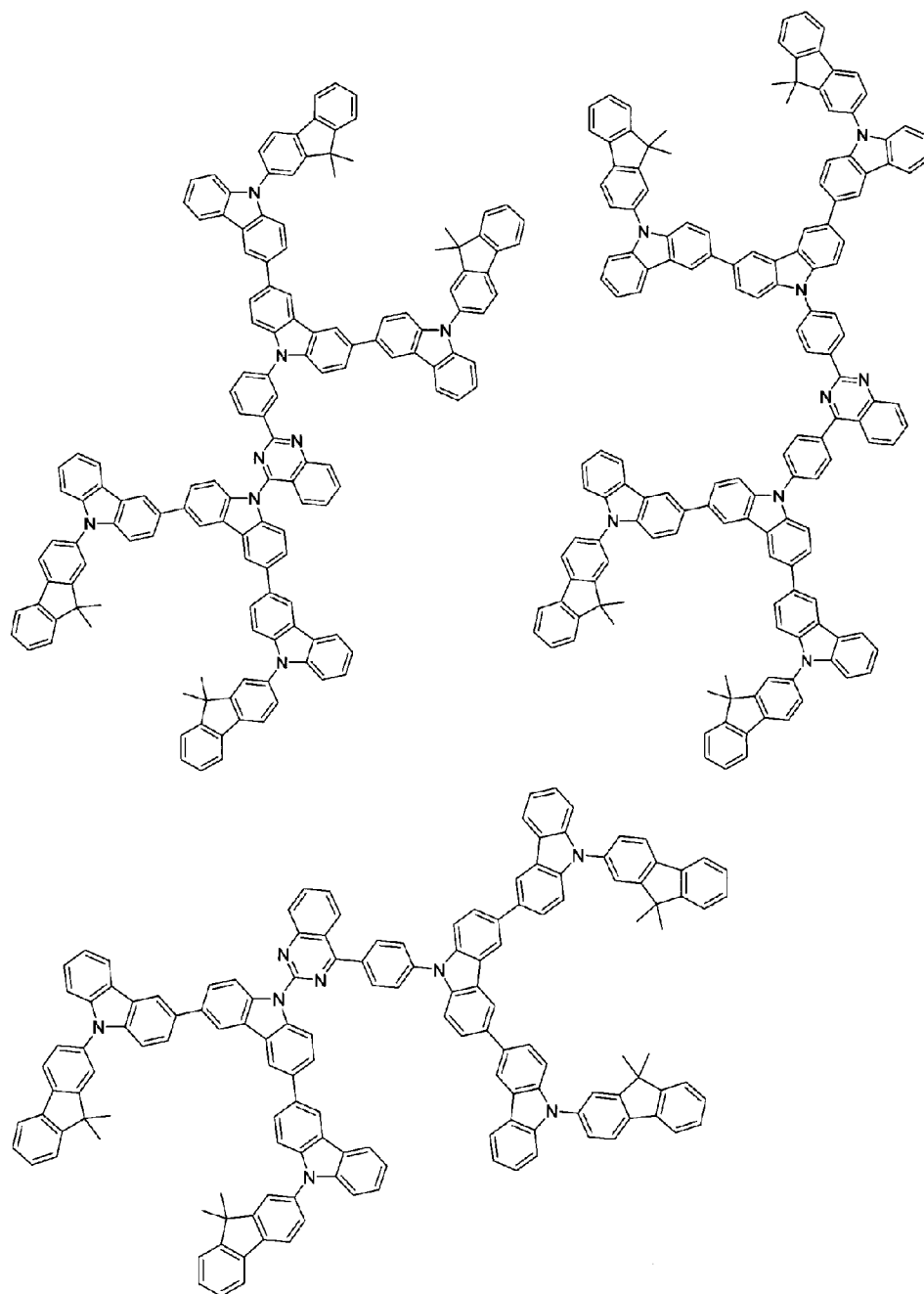
[0171]

[化131]



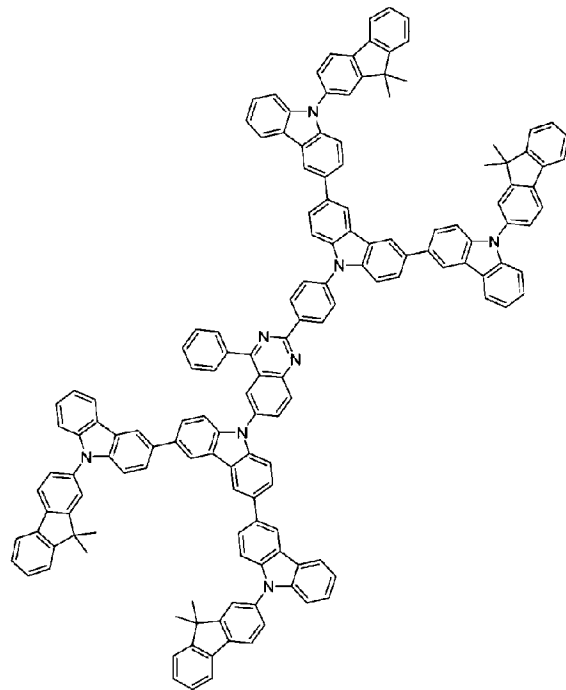
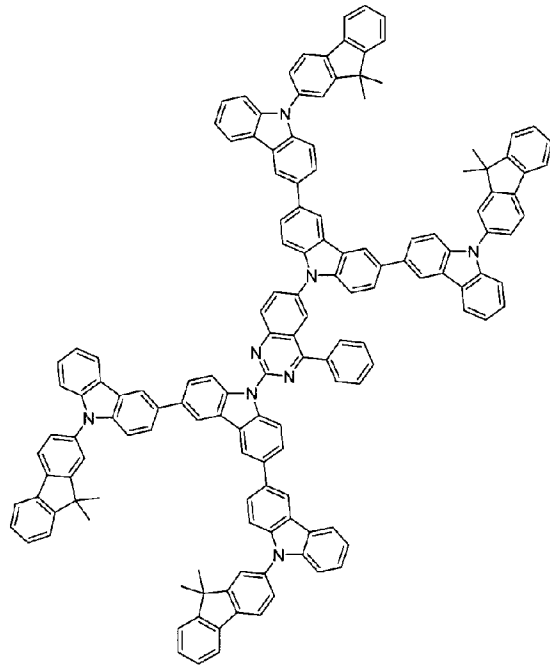
[0172]

[化132]



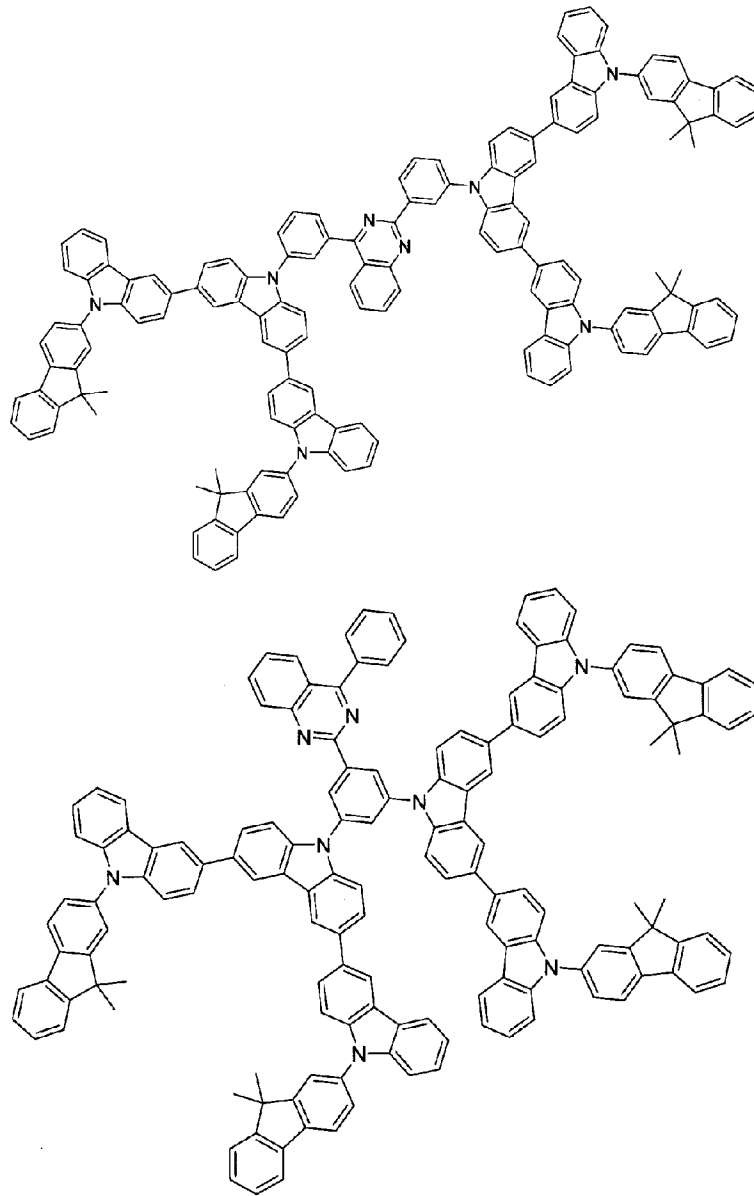
[0173]

[化133]



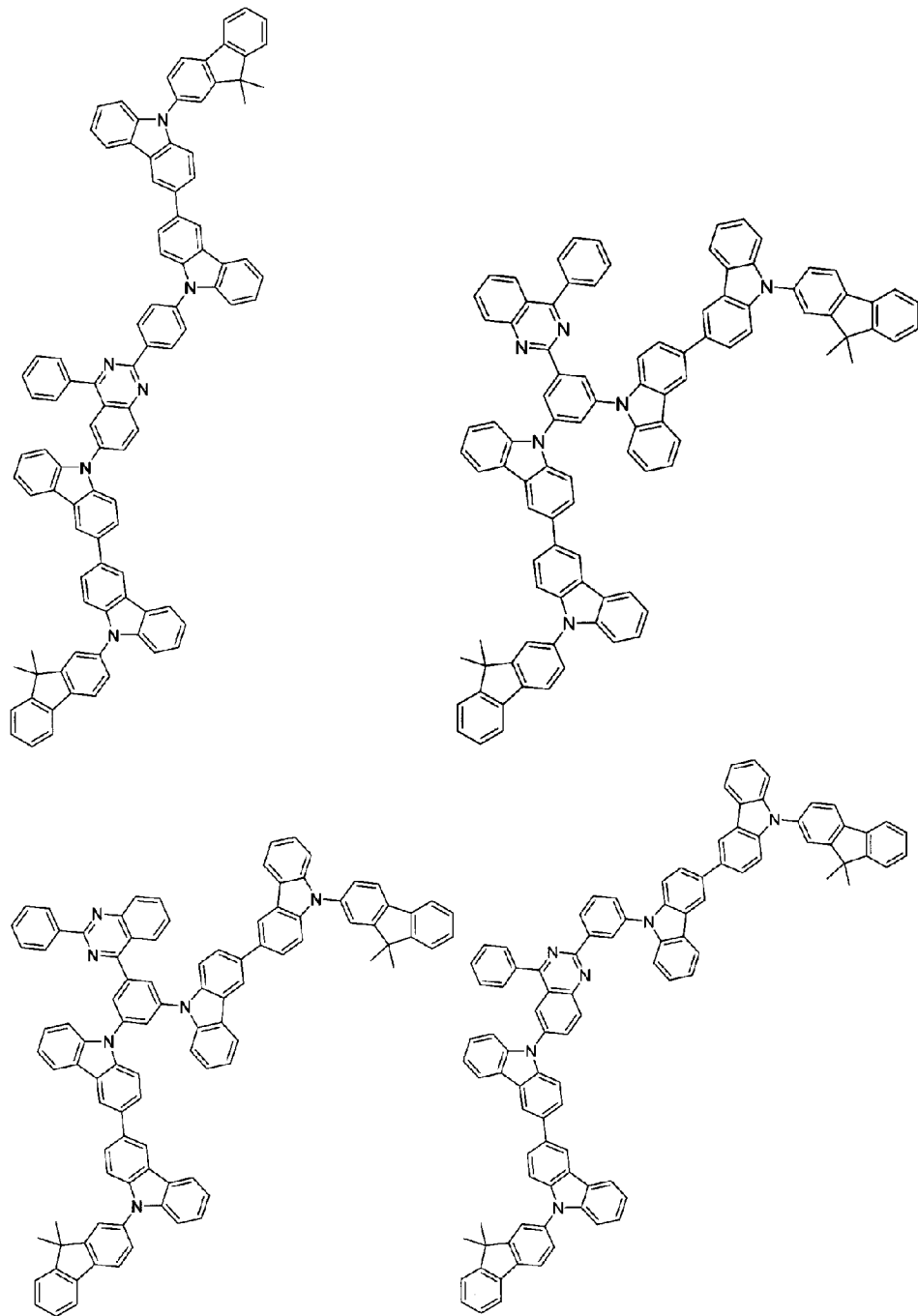
[0174]

[化134]



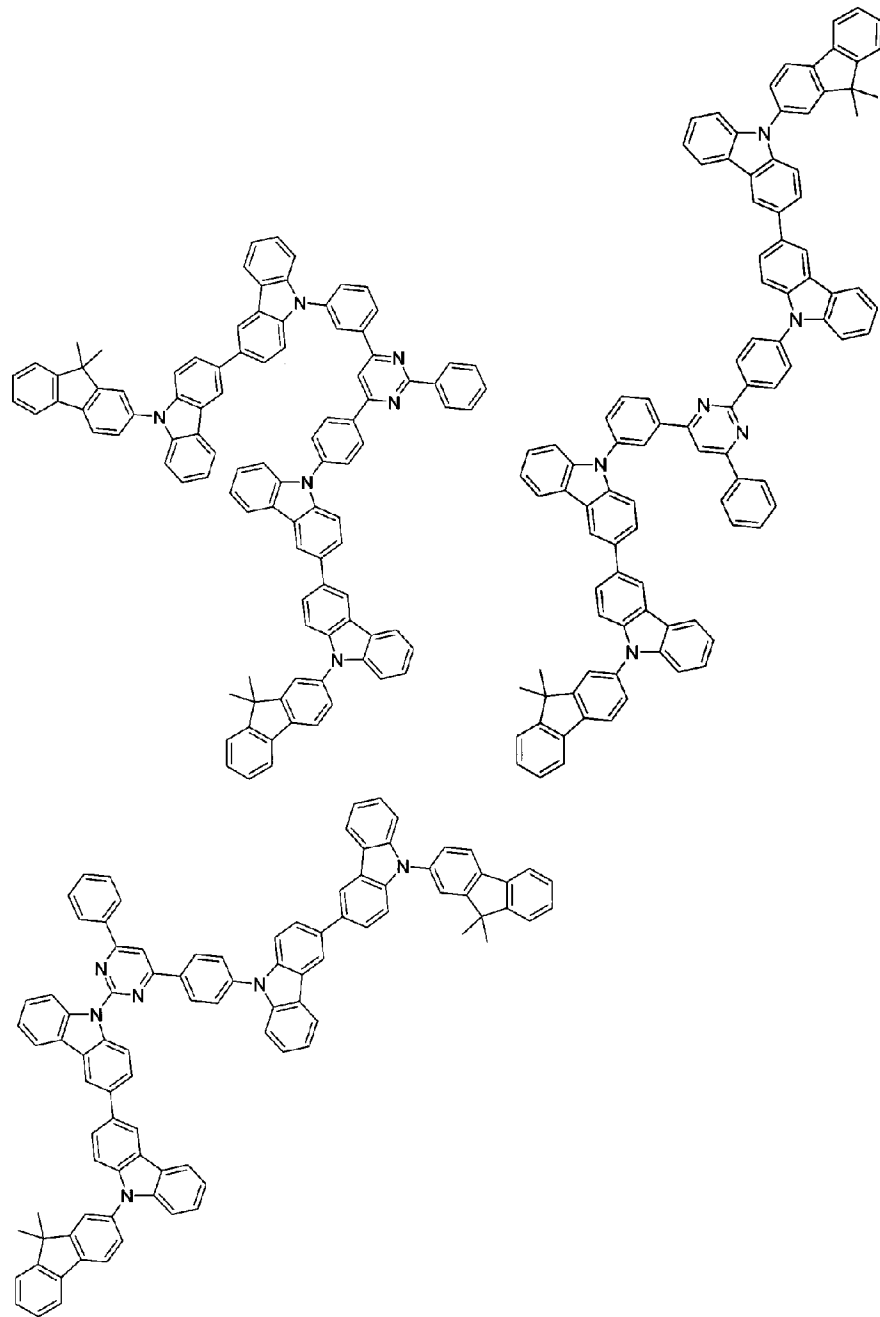
[0175]

[化136]



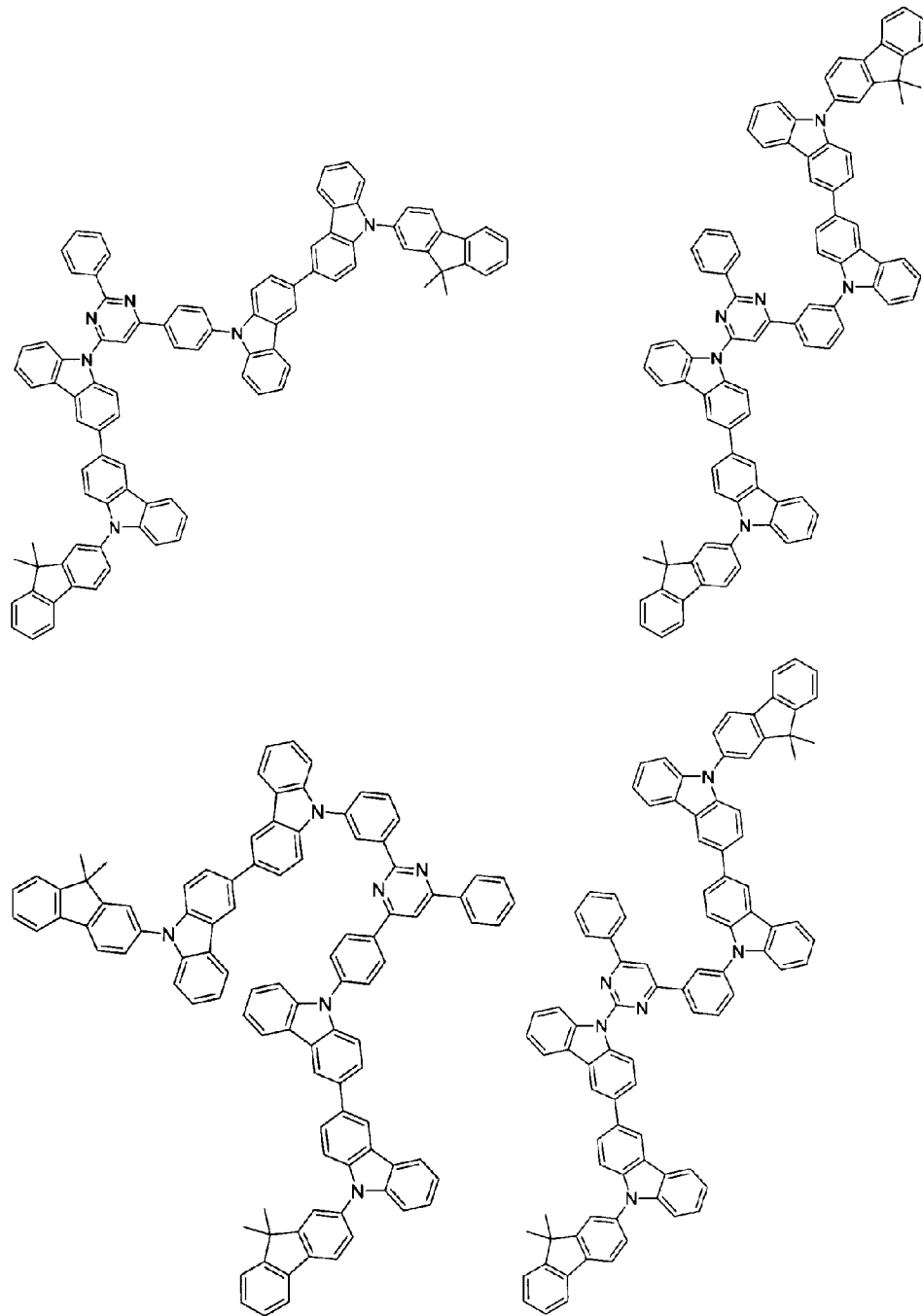
[0177]

[化137]



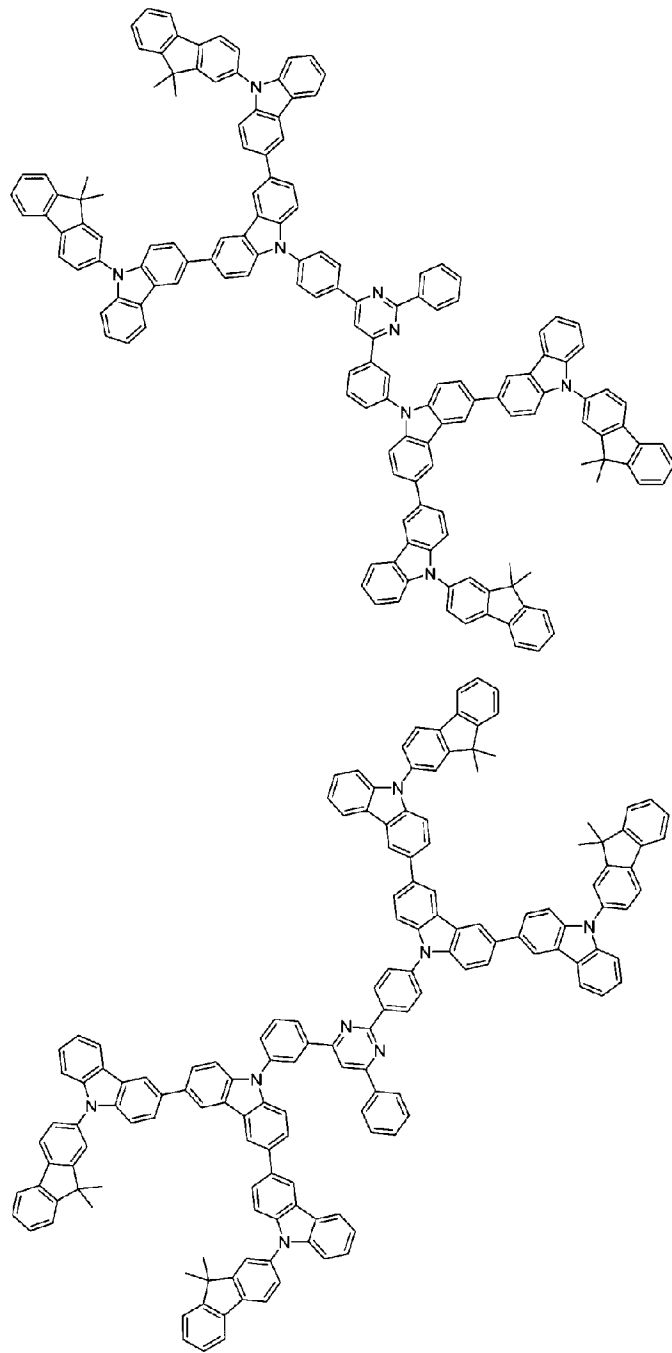
[0178]

[化138]



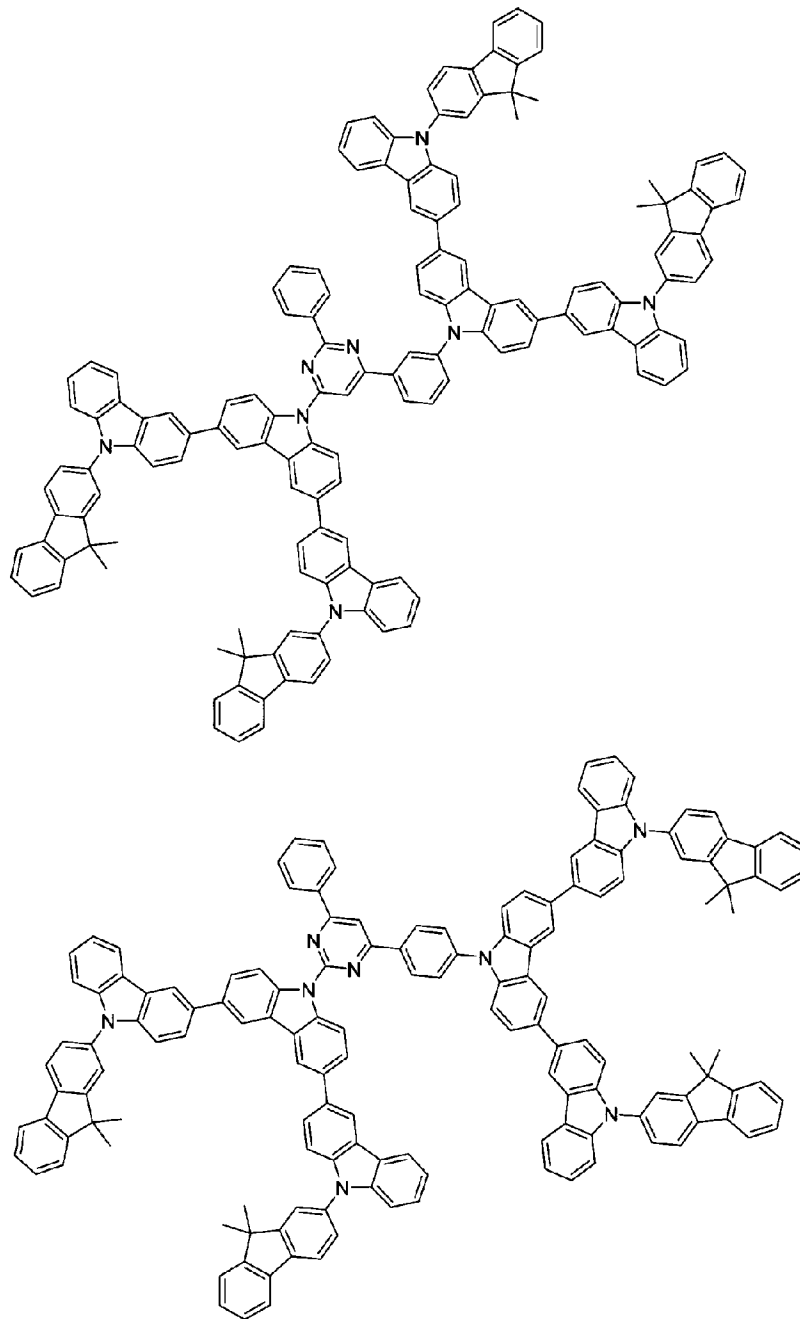
[0179]

[化139]



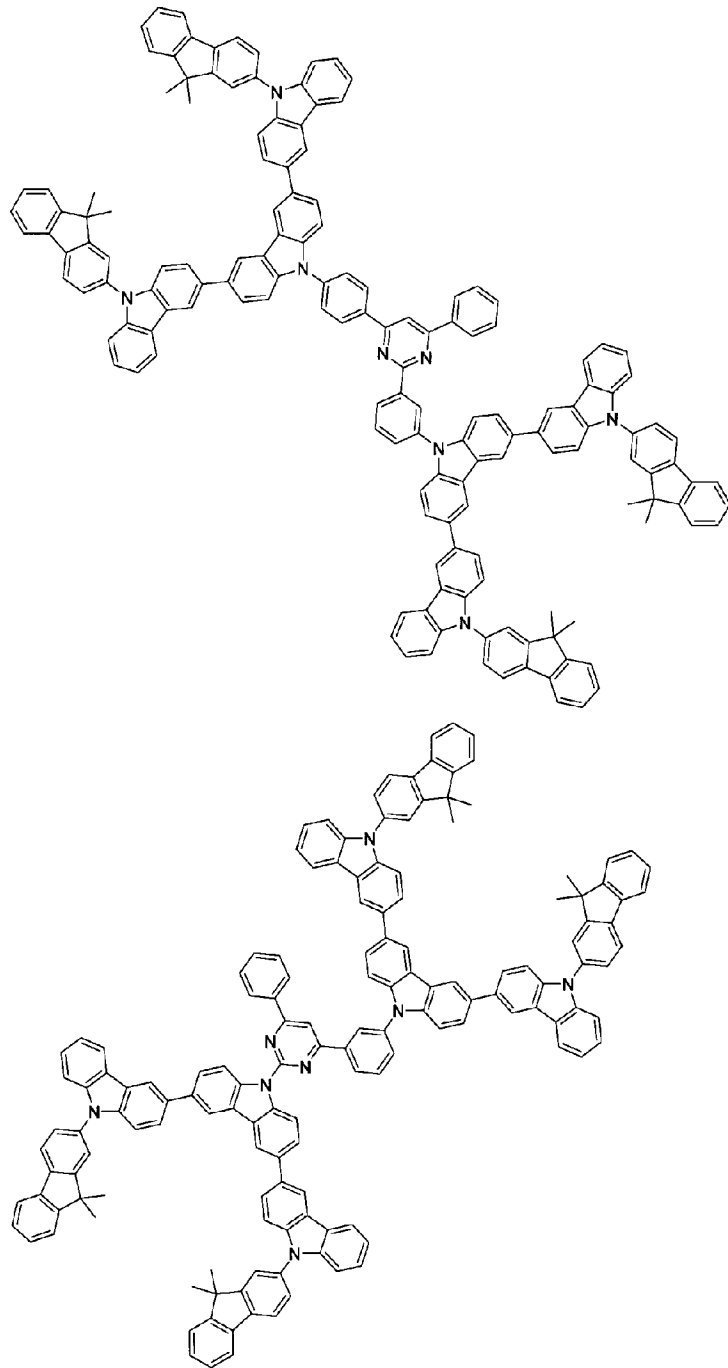
[0180]

[化140]



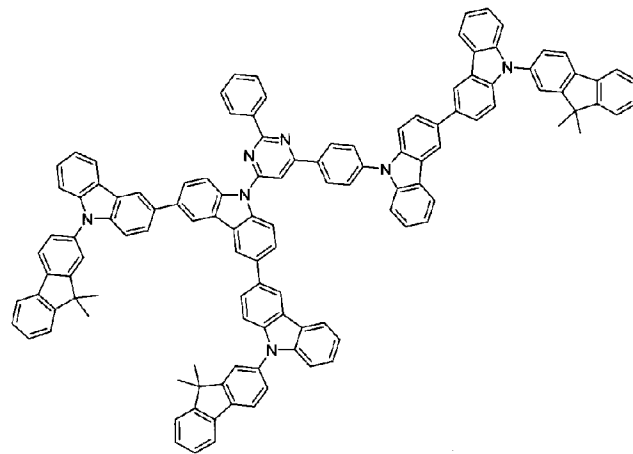
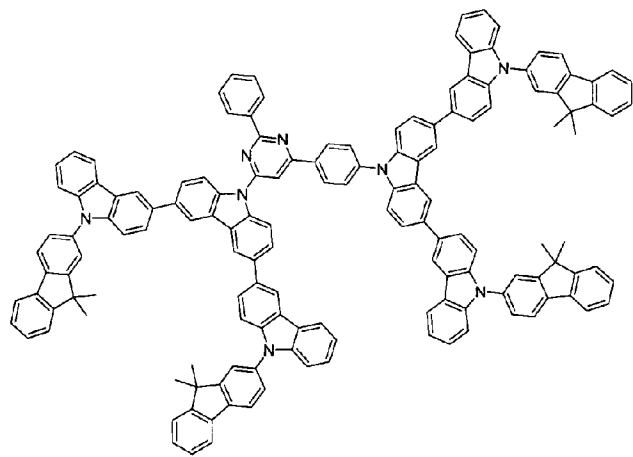
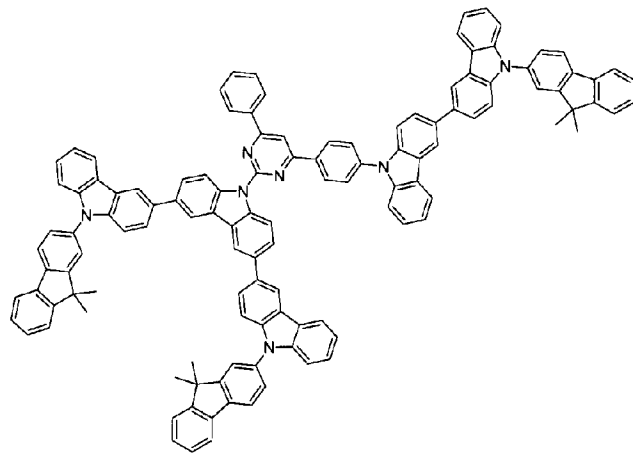
[0181]

[化141]



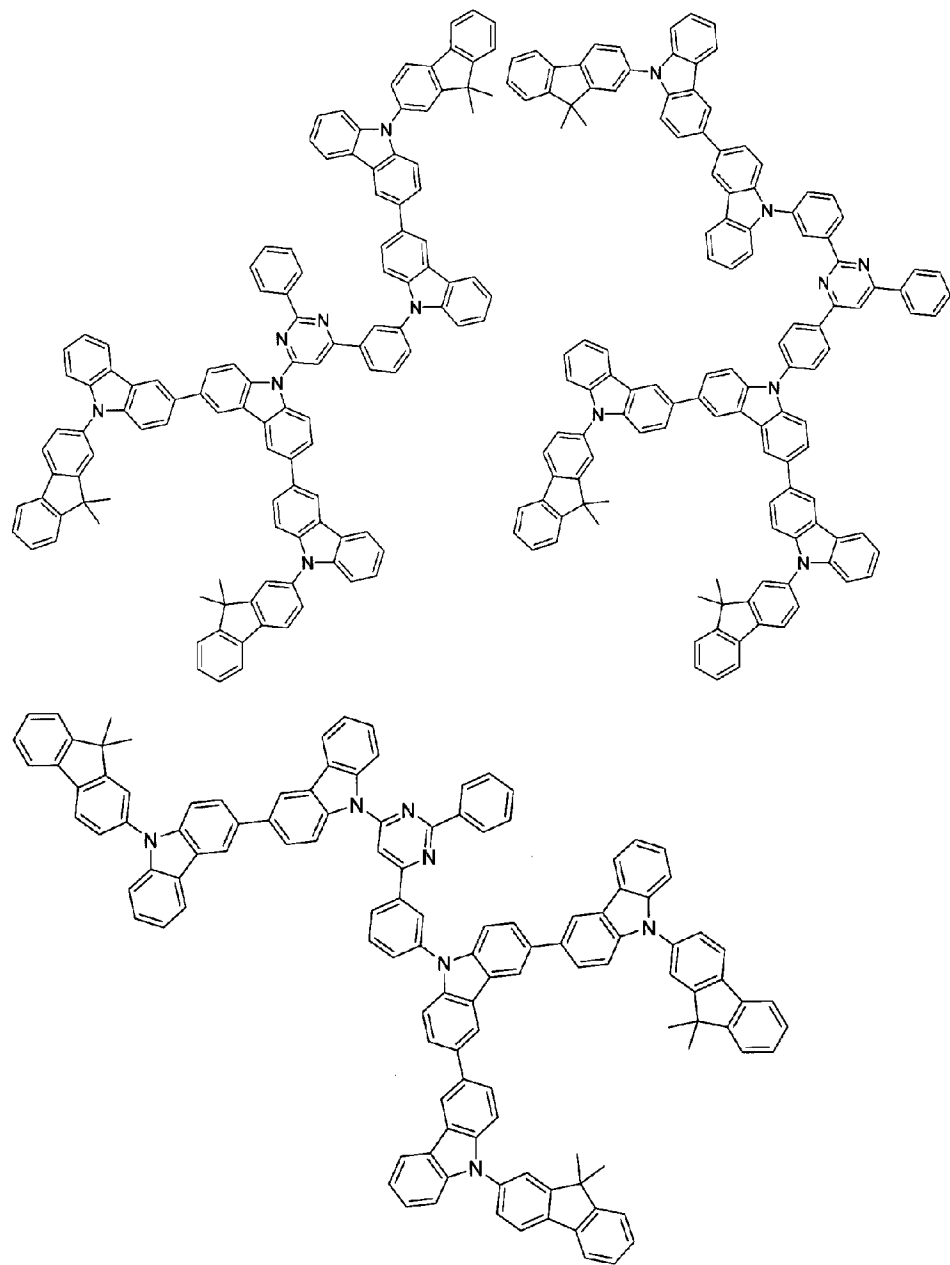
[0182]

[化142]



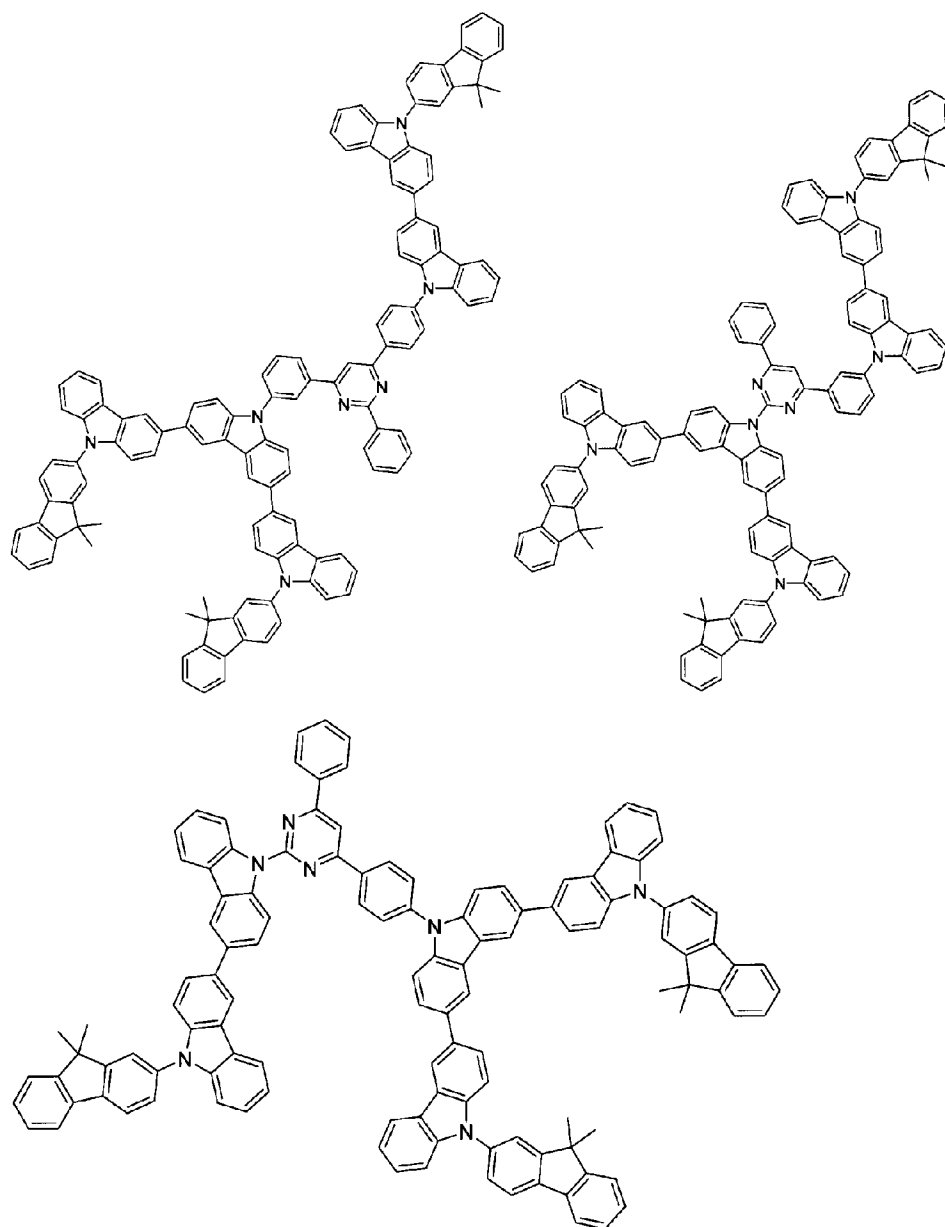
[0183]

[化143]



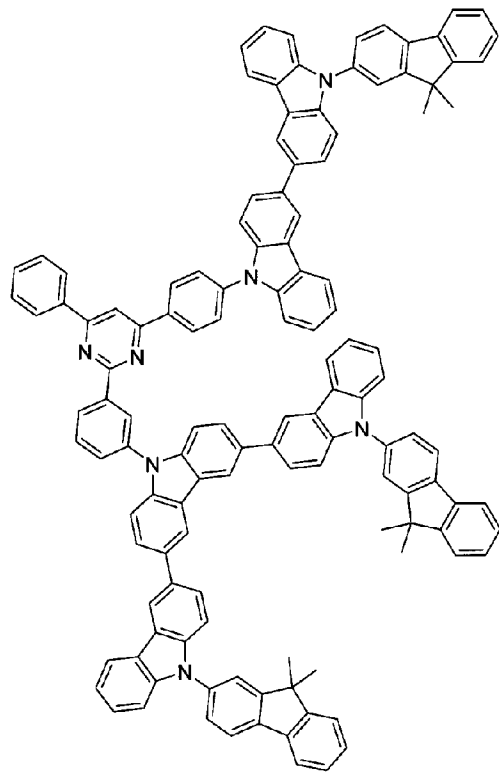
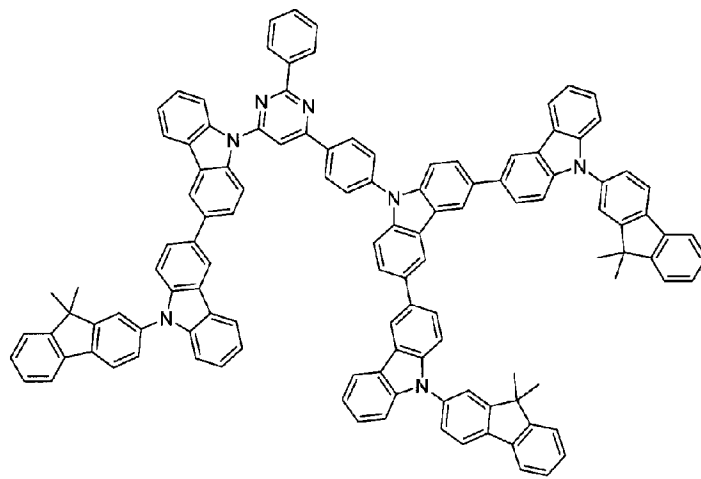
[0184]

[化144]



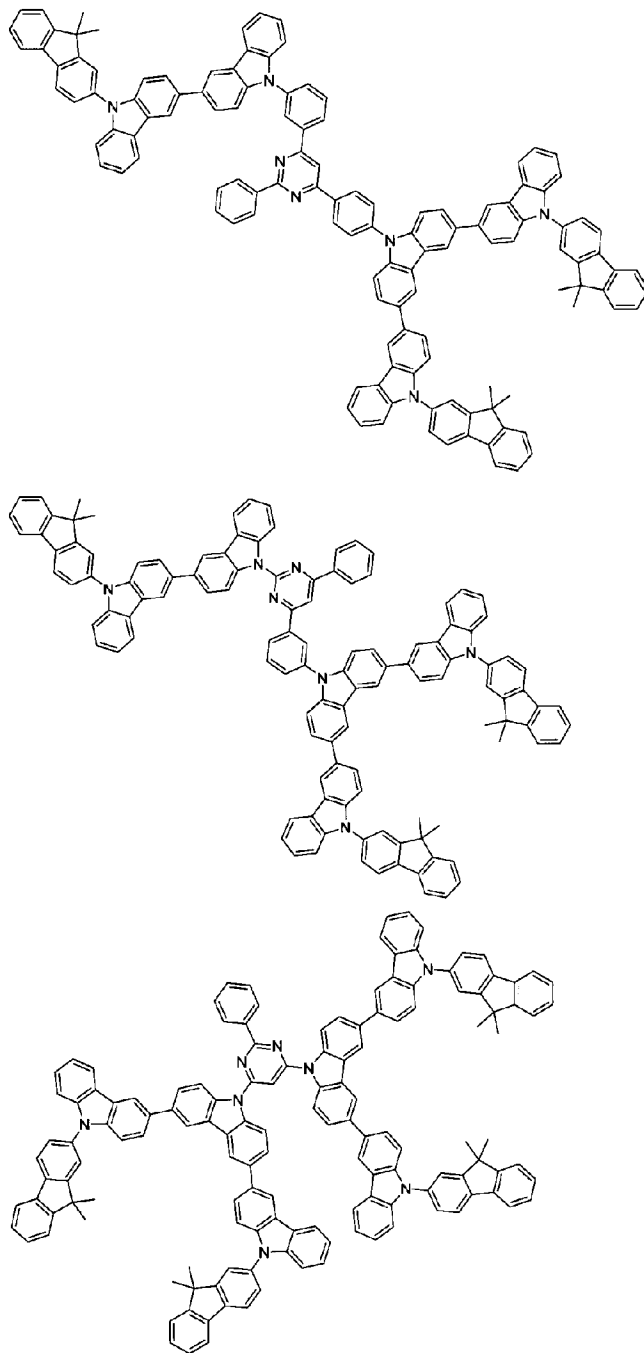
[0185]

[化145]



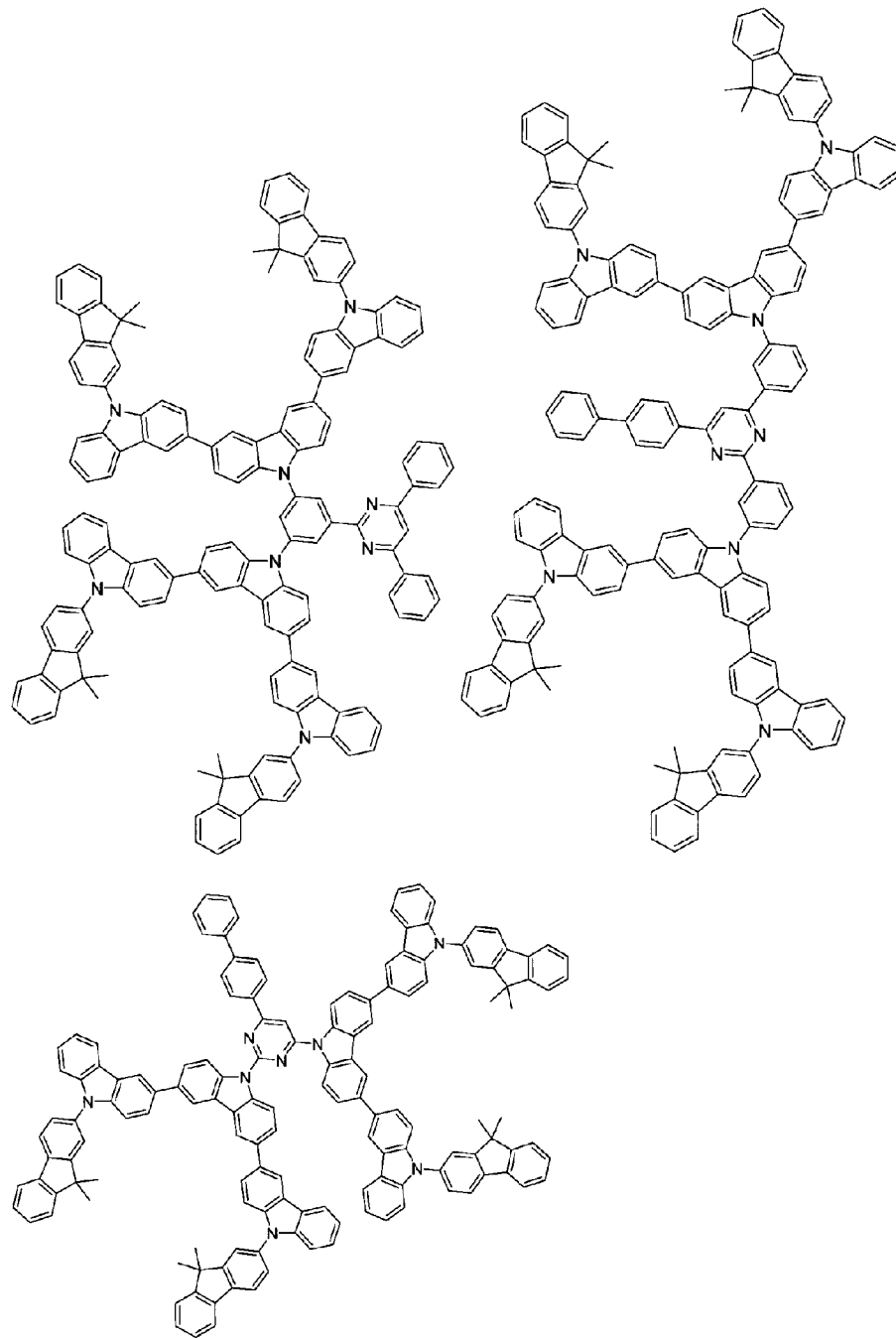
[0186]

[化146]



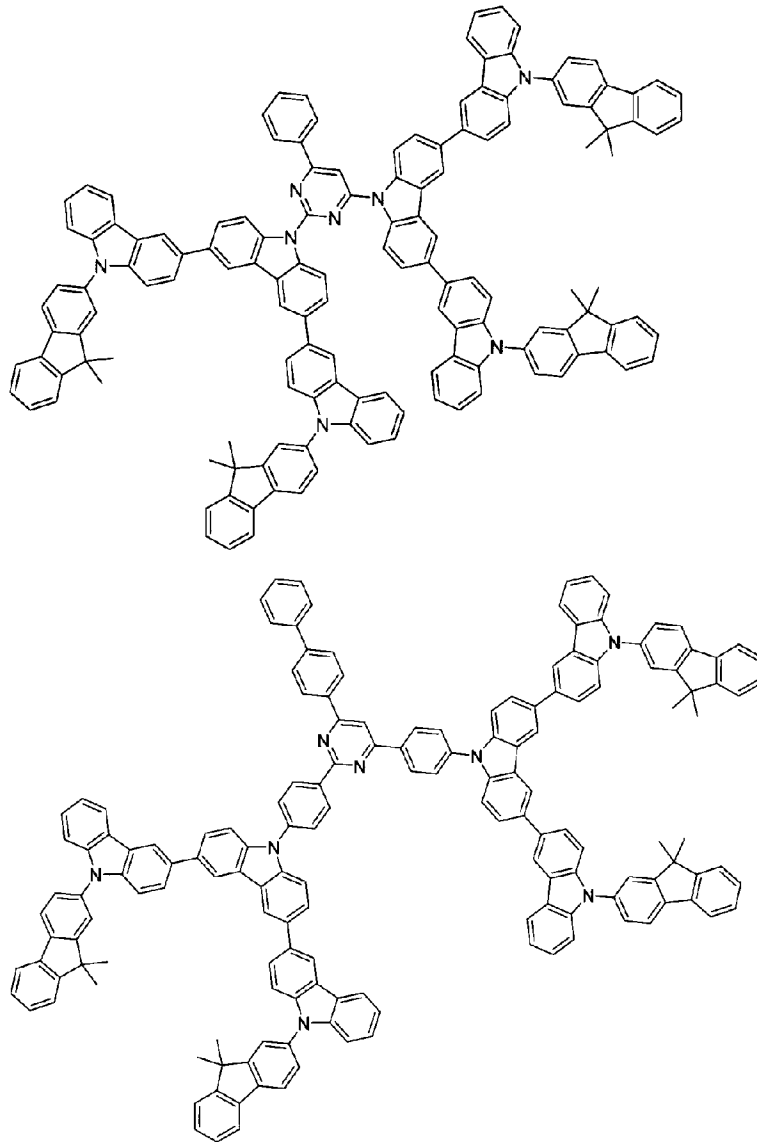
[0187]

[化147]



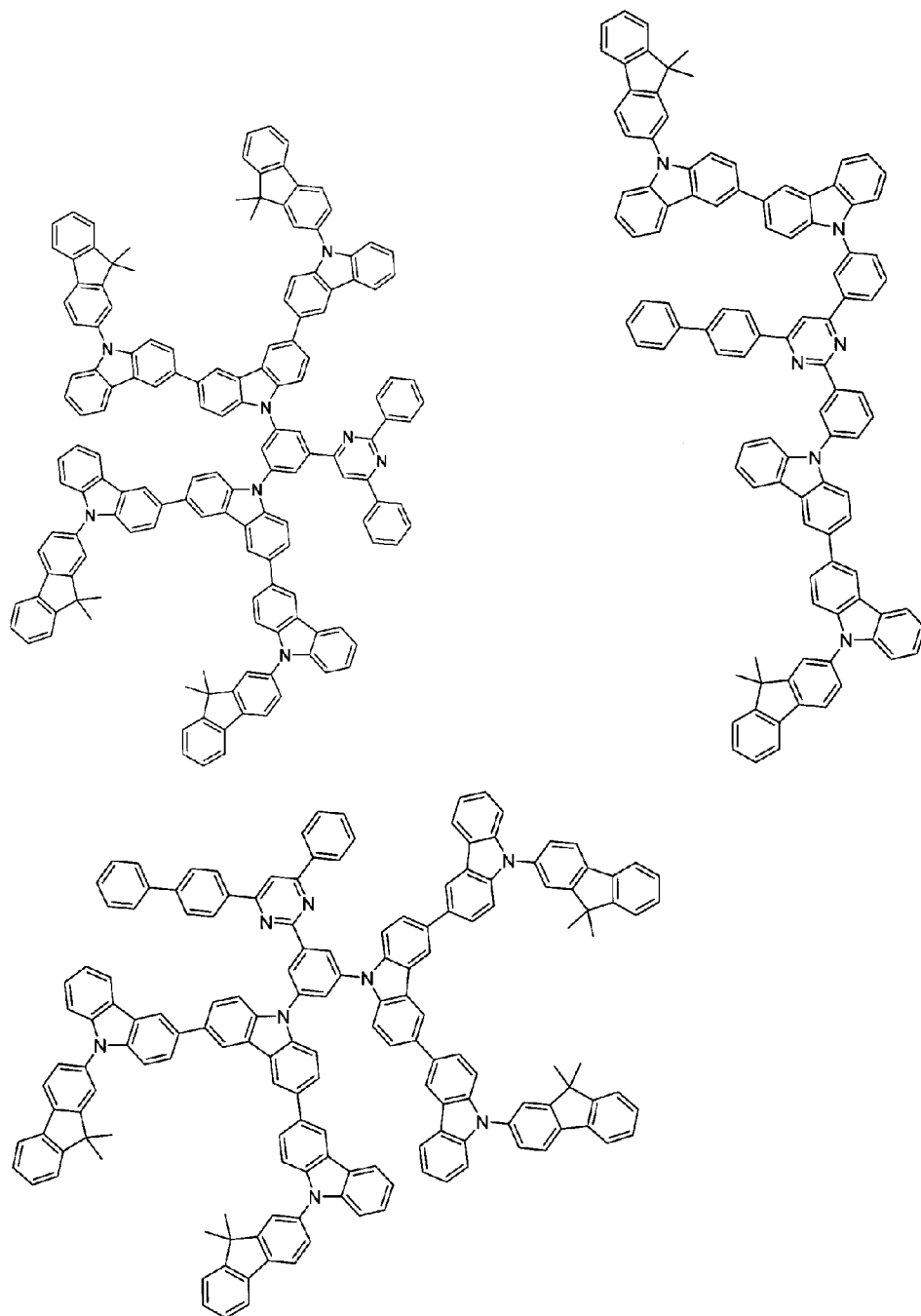
[0188]

[化148]



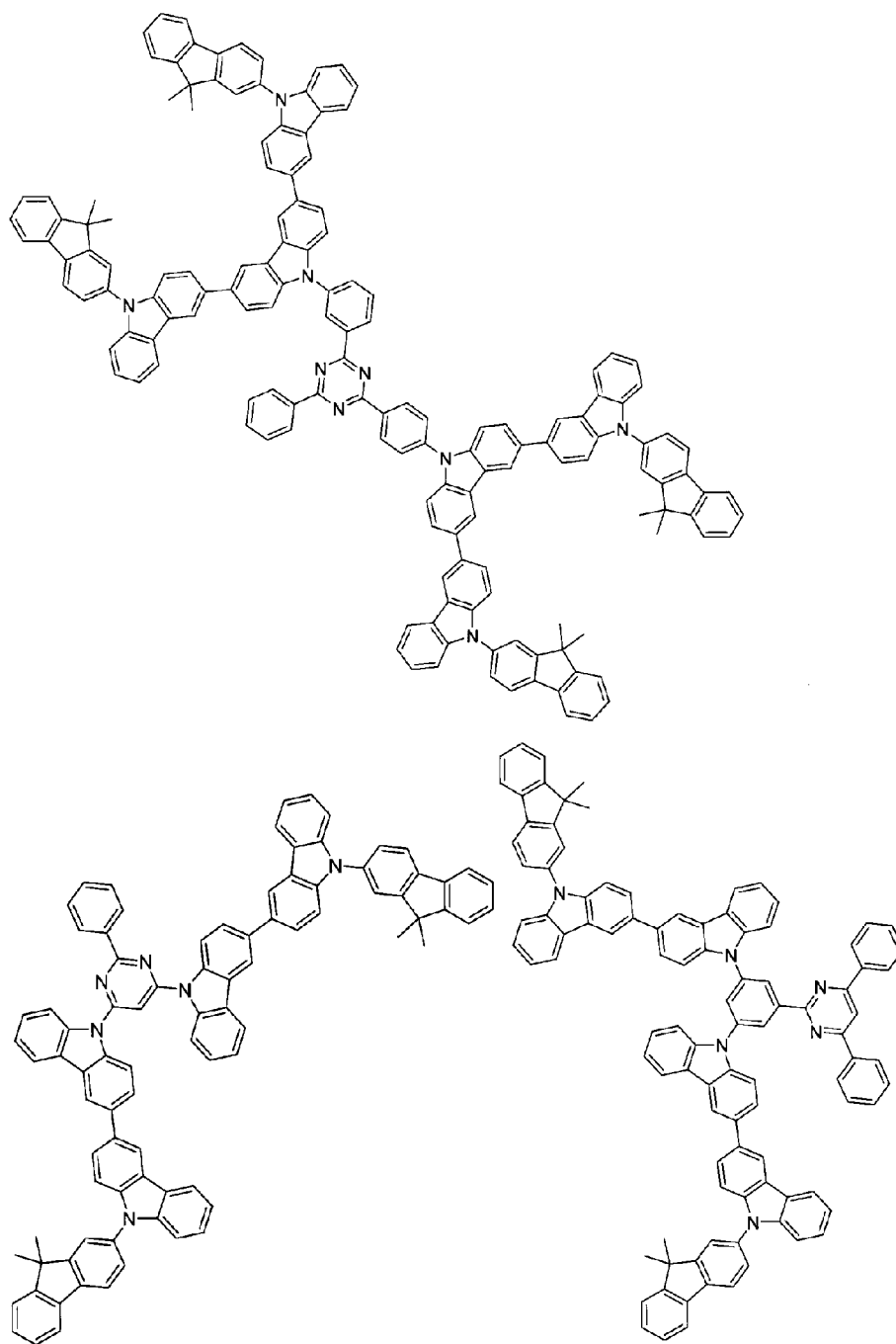
[0189]

[化149]



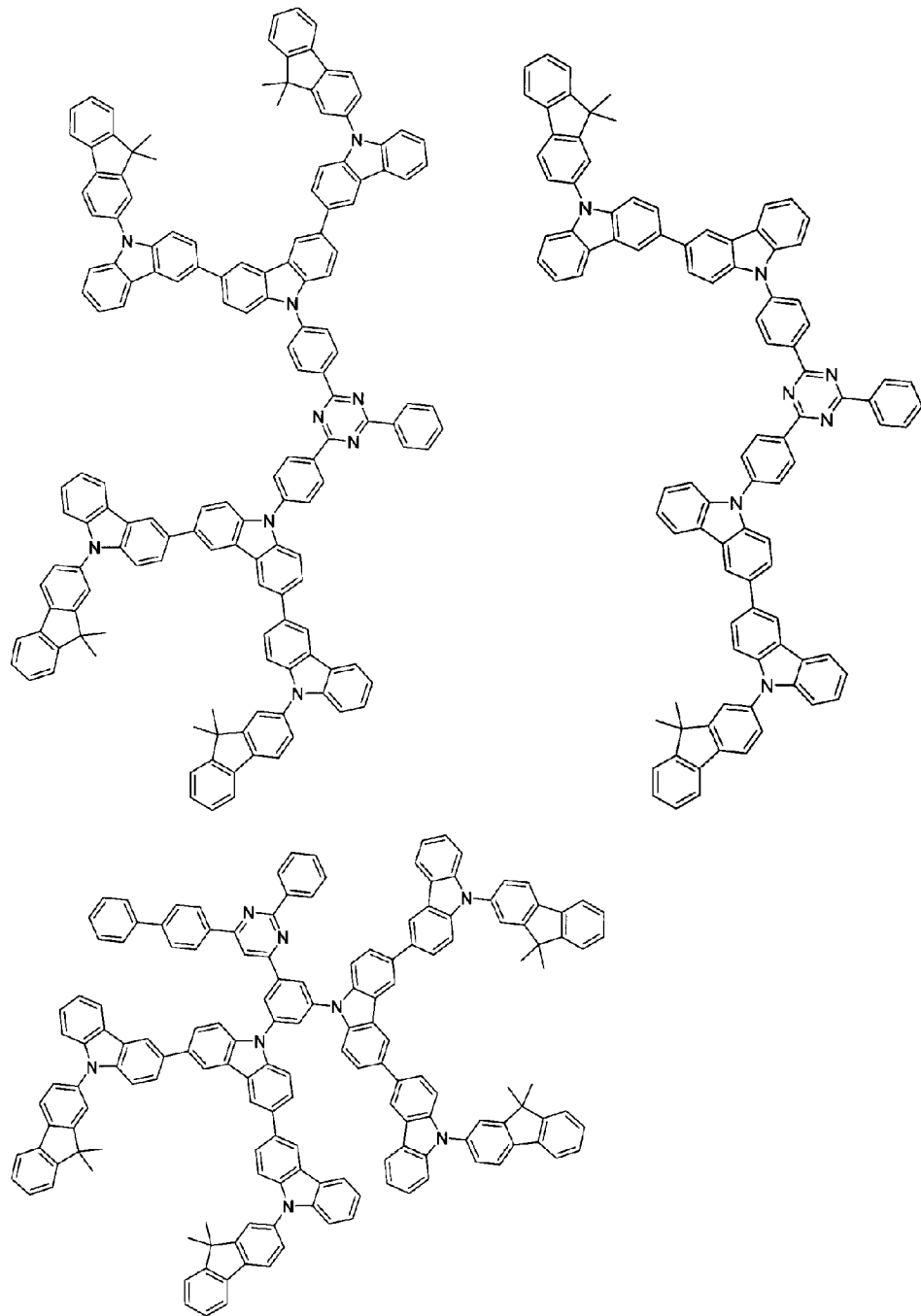
[0190]

[化150]



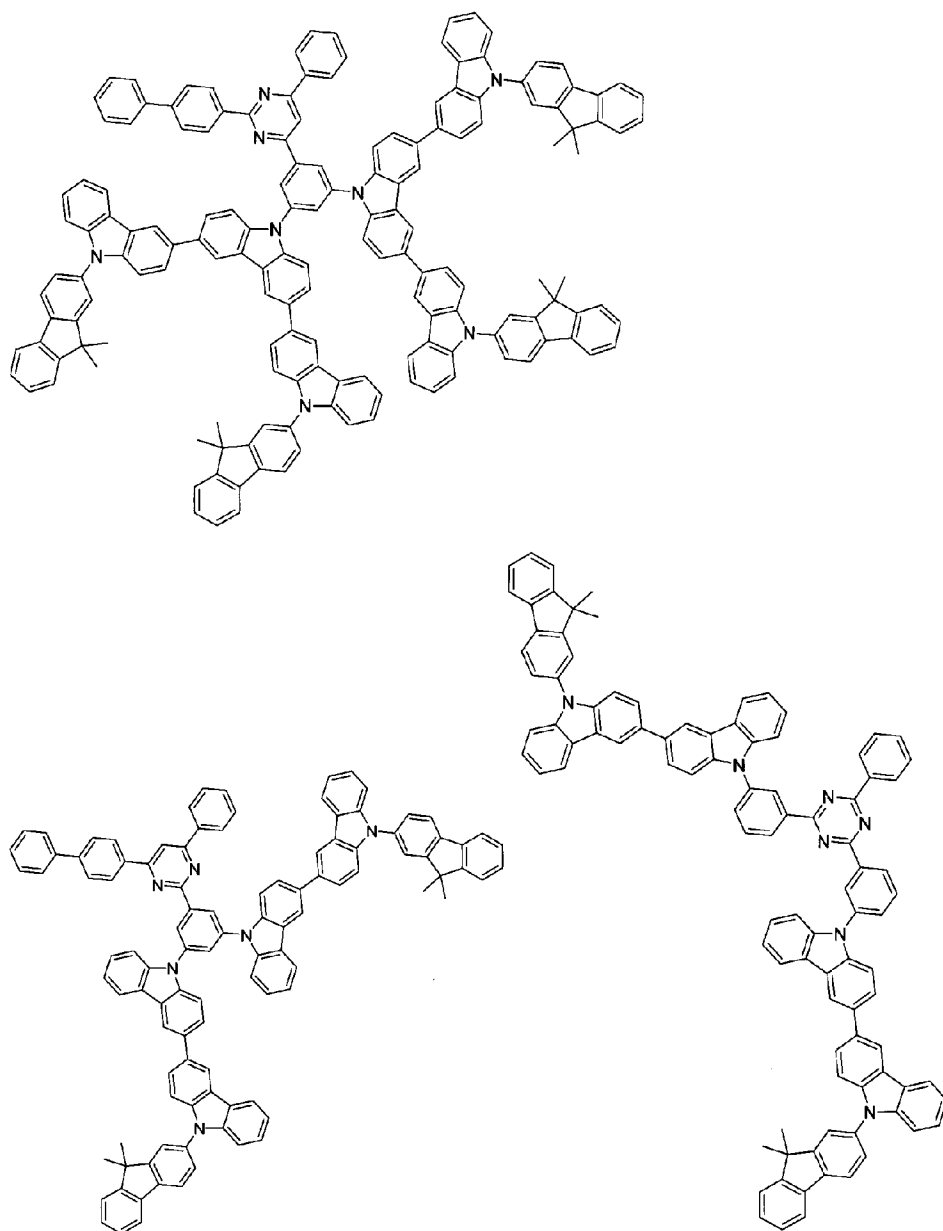
[0191]

[化152]



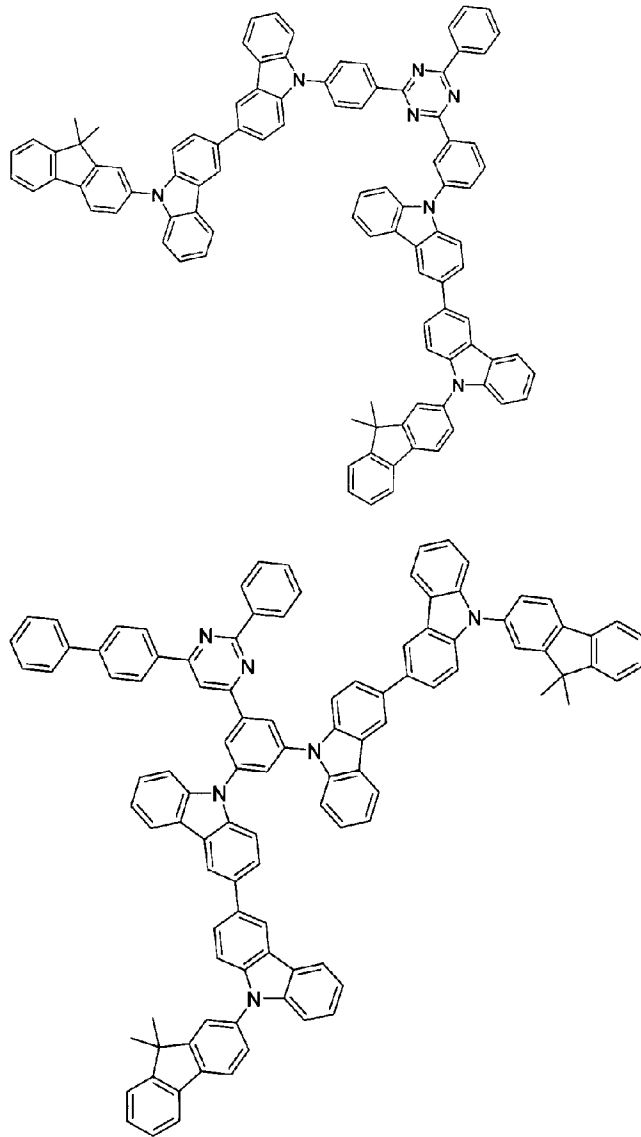
[0193]

[化153]



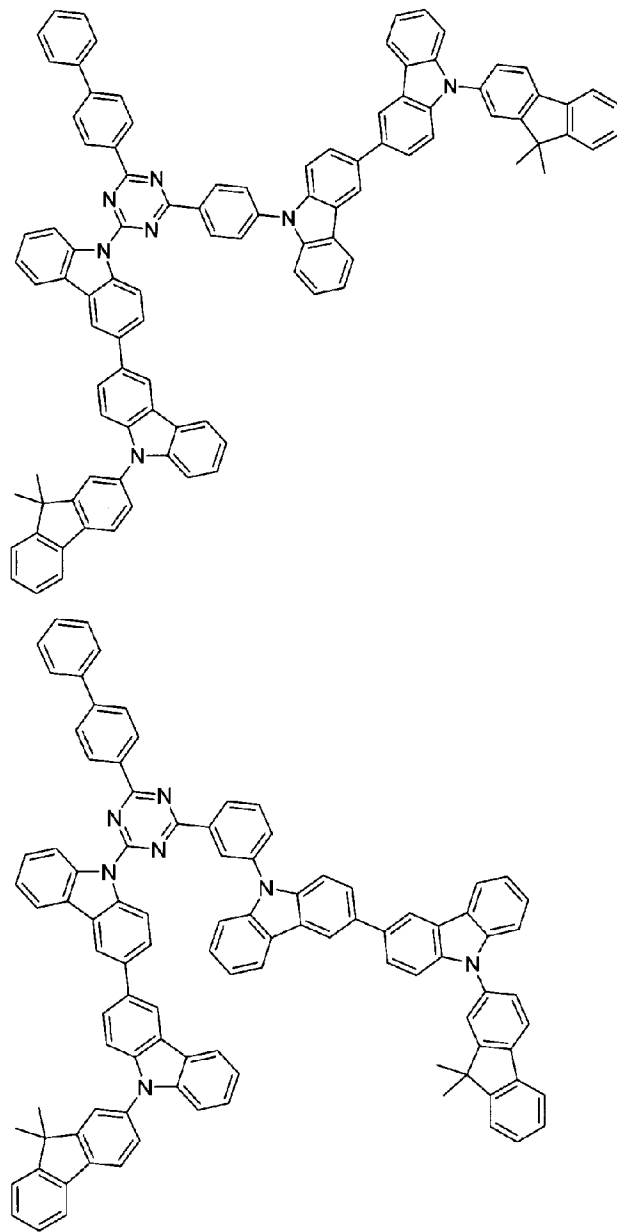
[0194]

[化154]



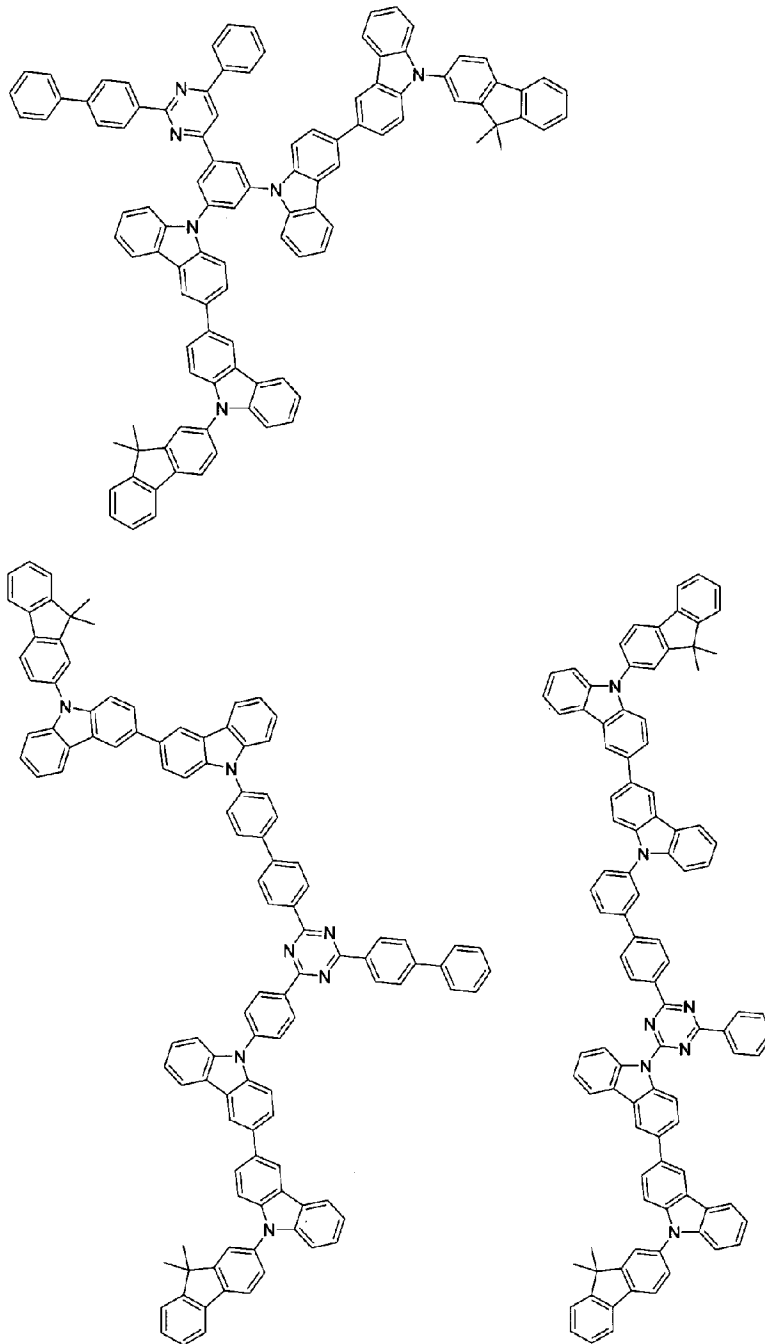
[0195]

[化155]



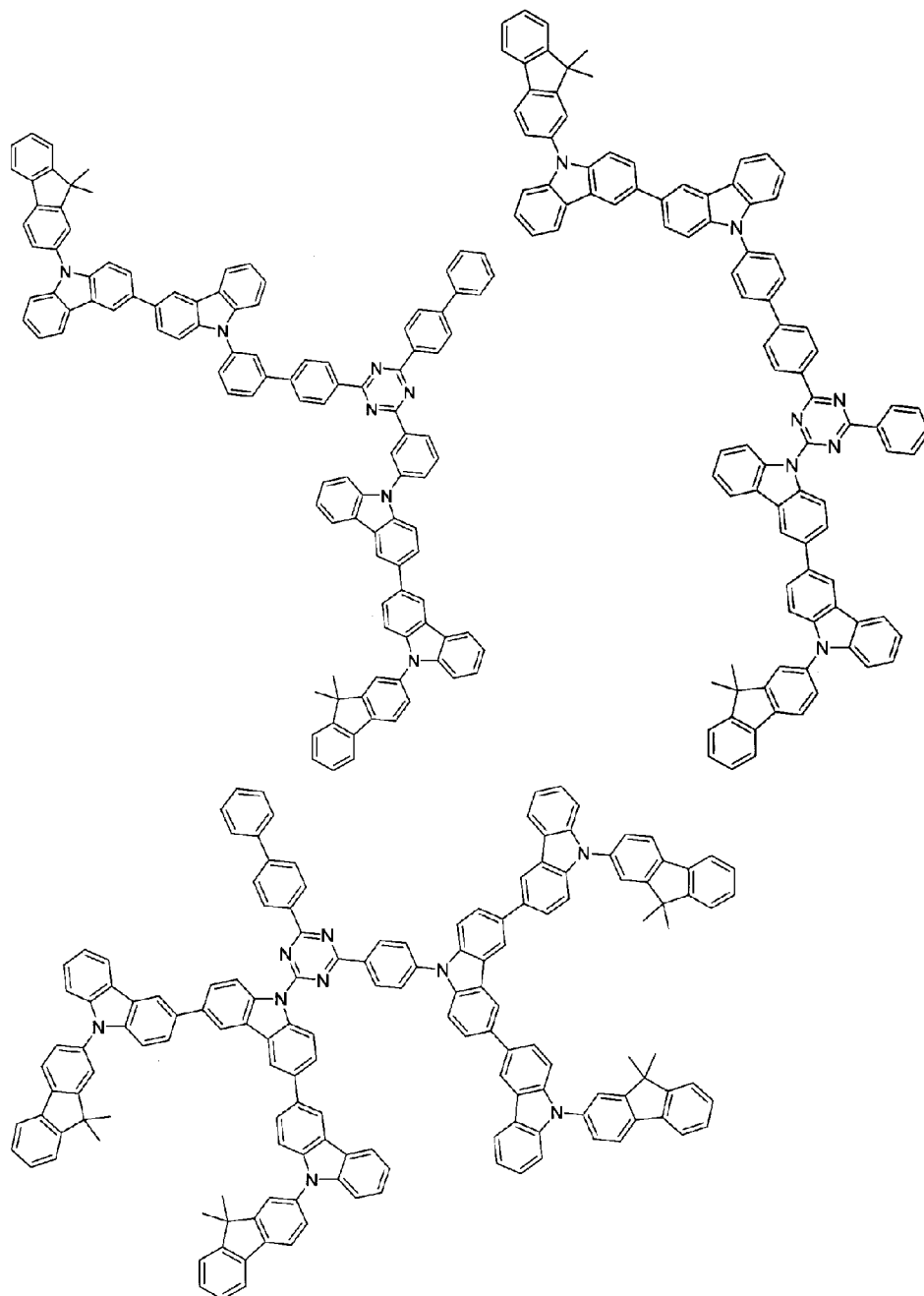
[0196]

[化156]



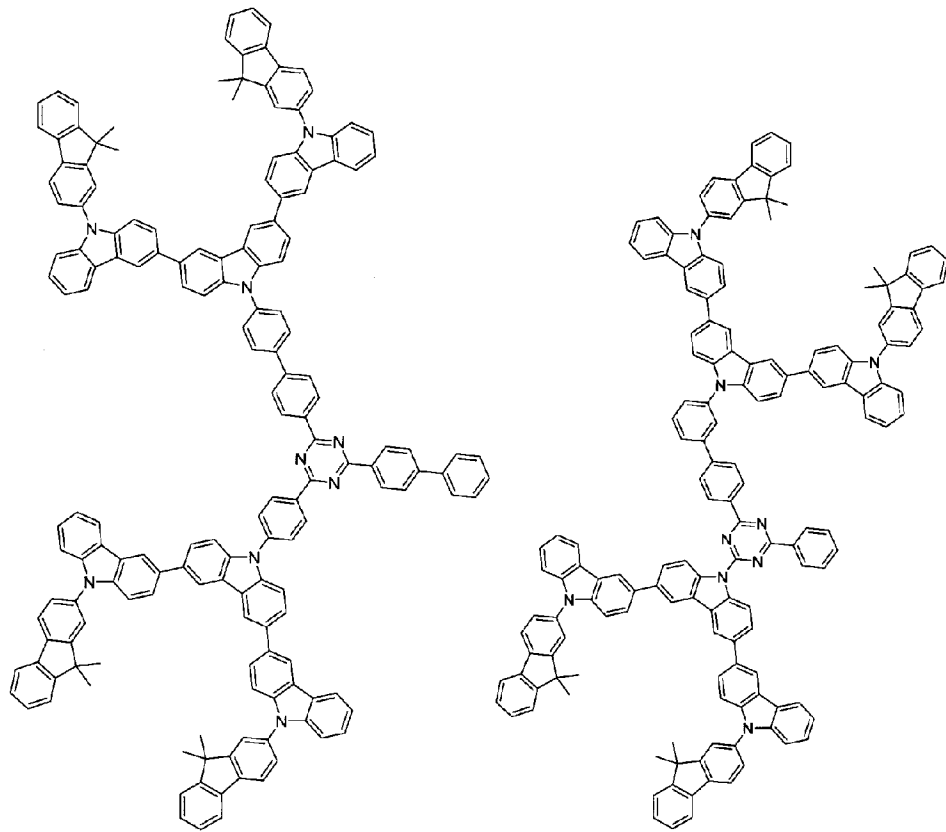
[0197]

[化157]



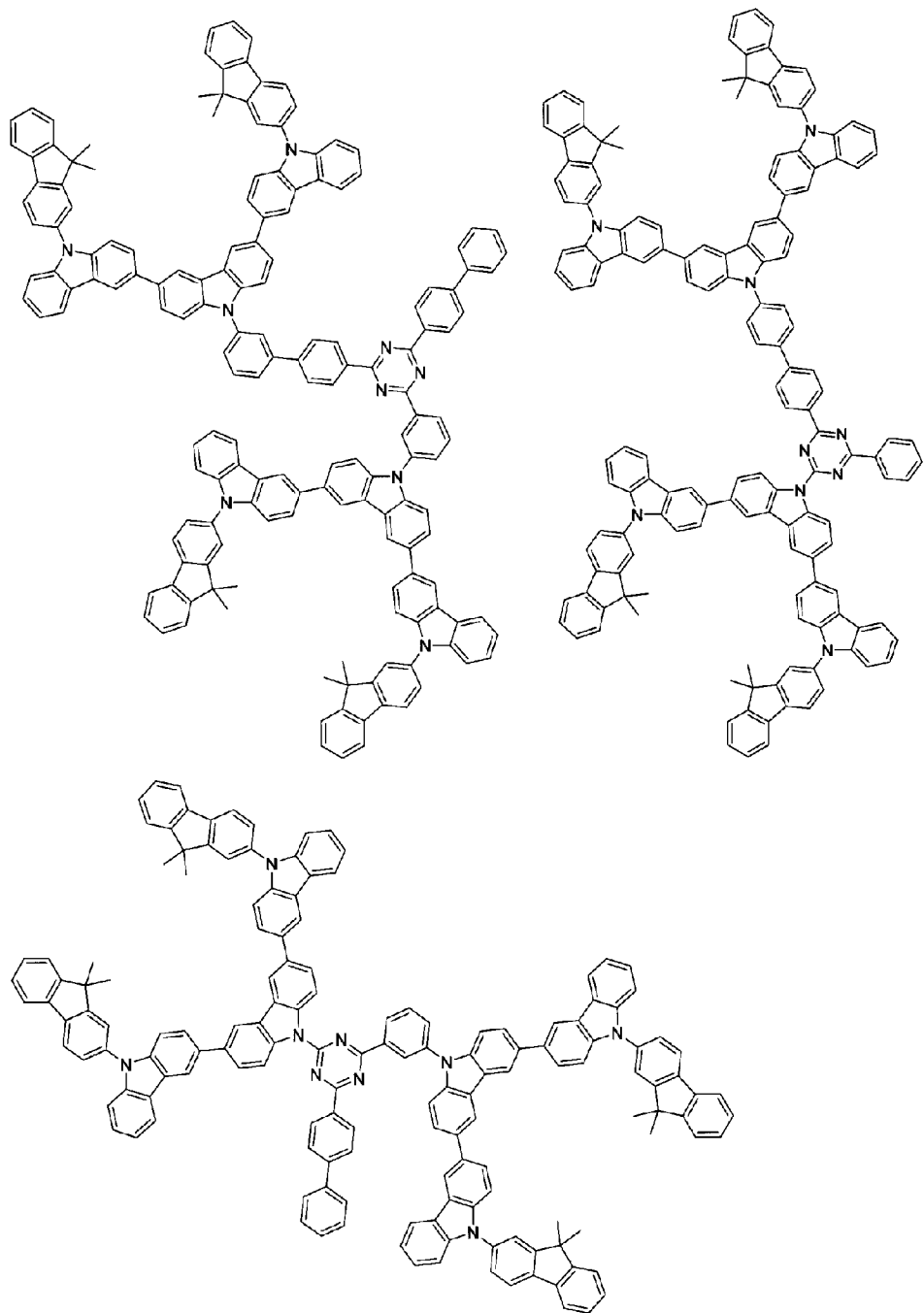
[0198]

[化158]



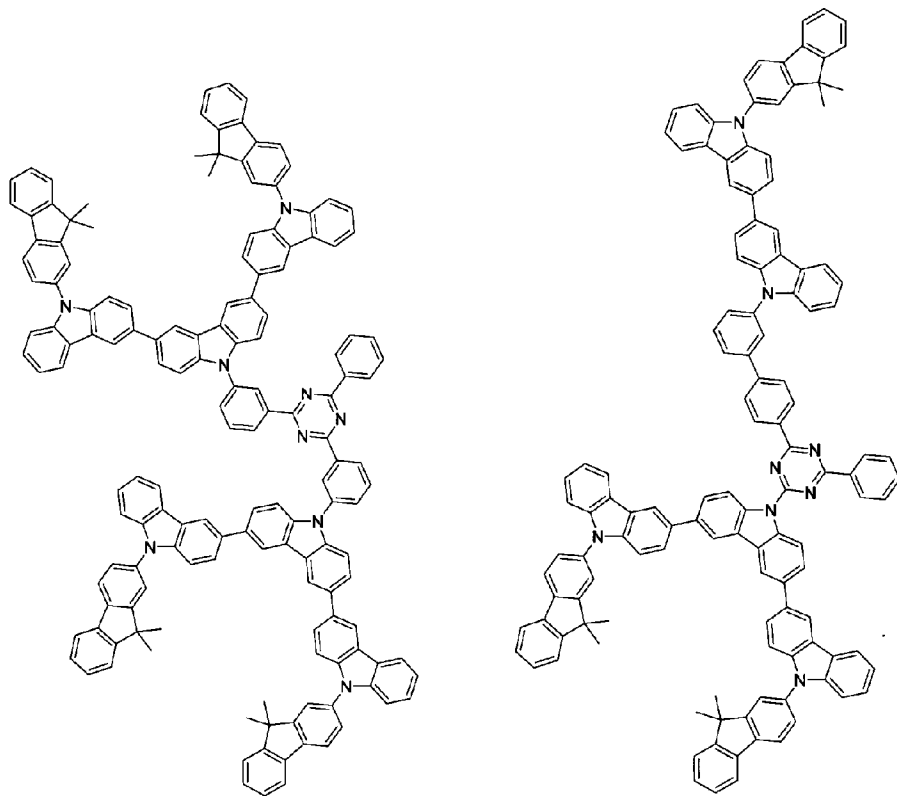
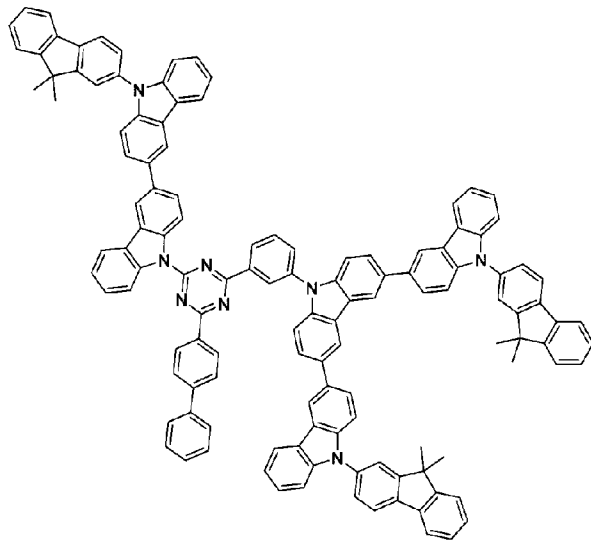
[0199]

[化159]



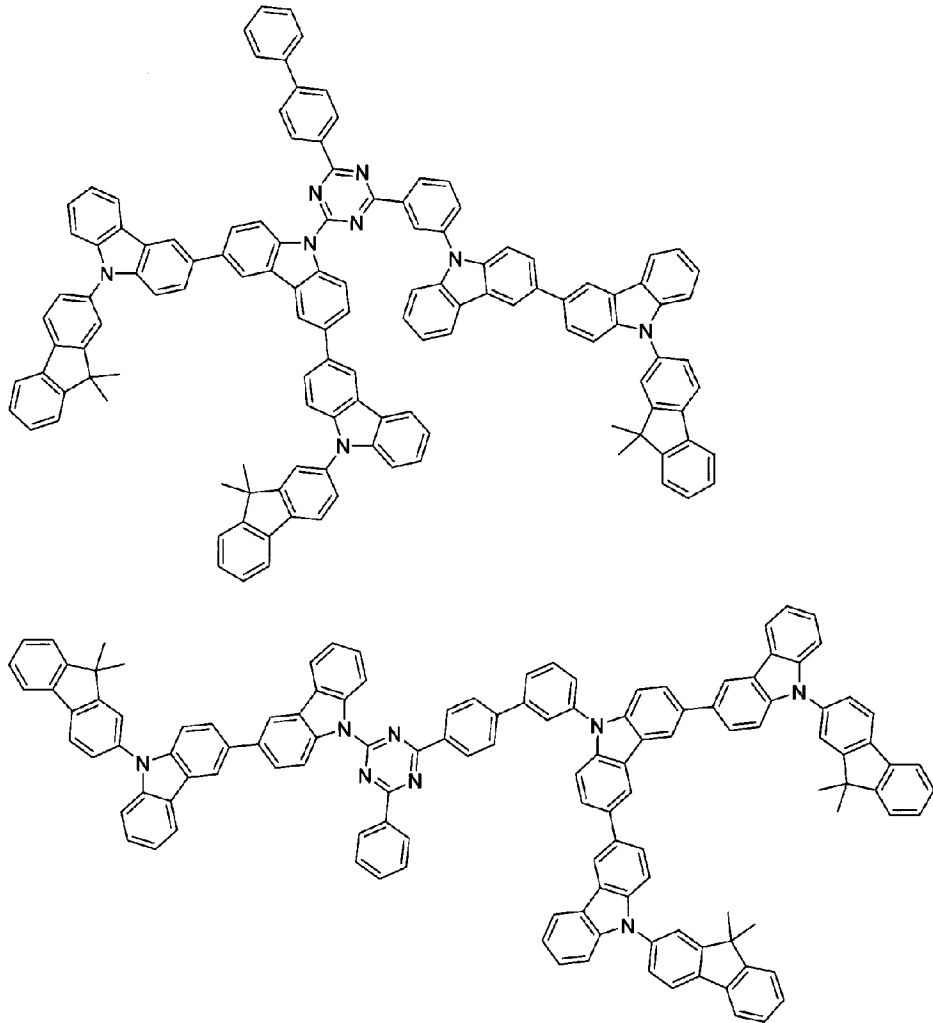
[0200]

[化160]



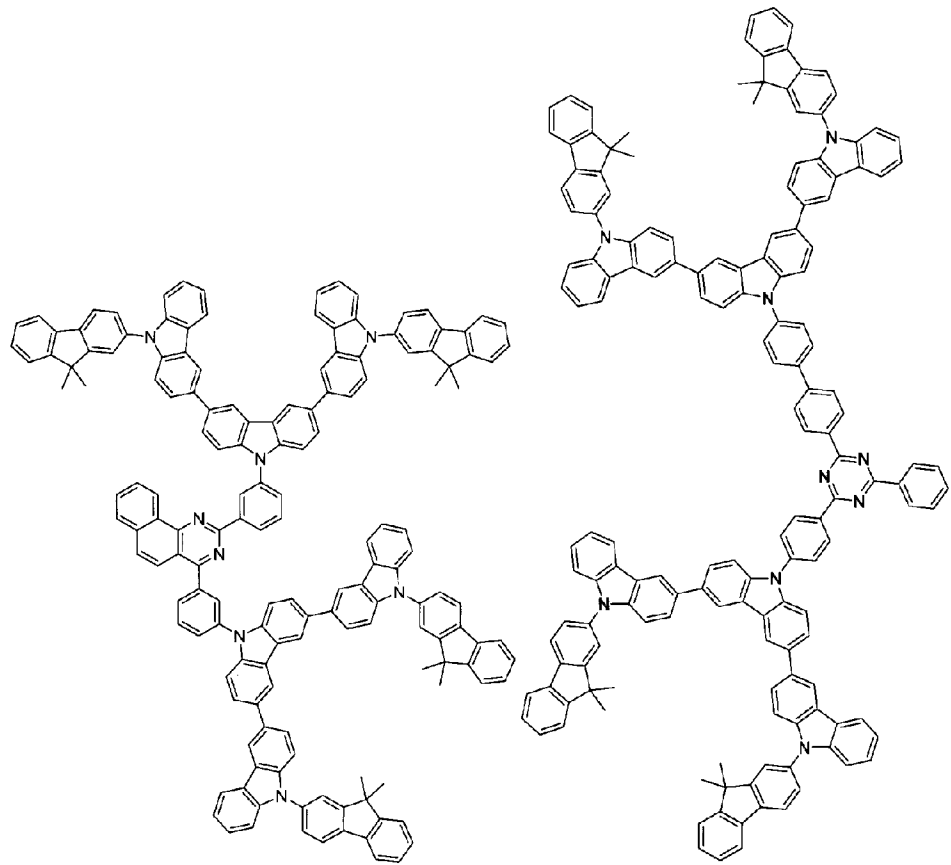
[0201]

[化161]



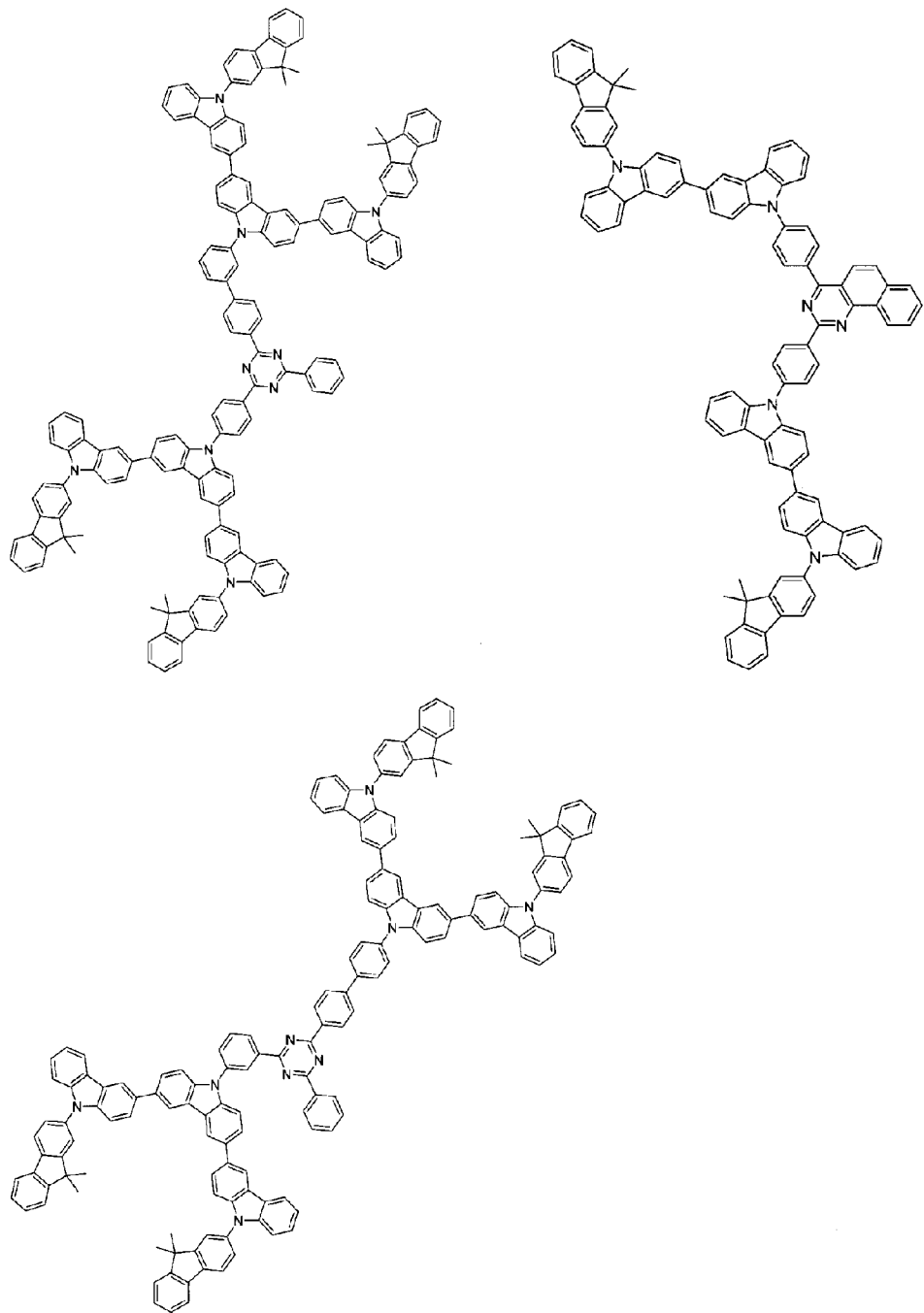
[0202]

[化162]



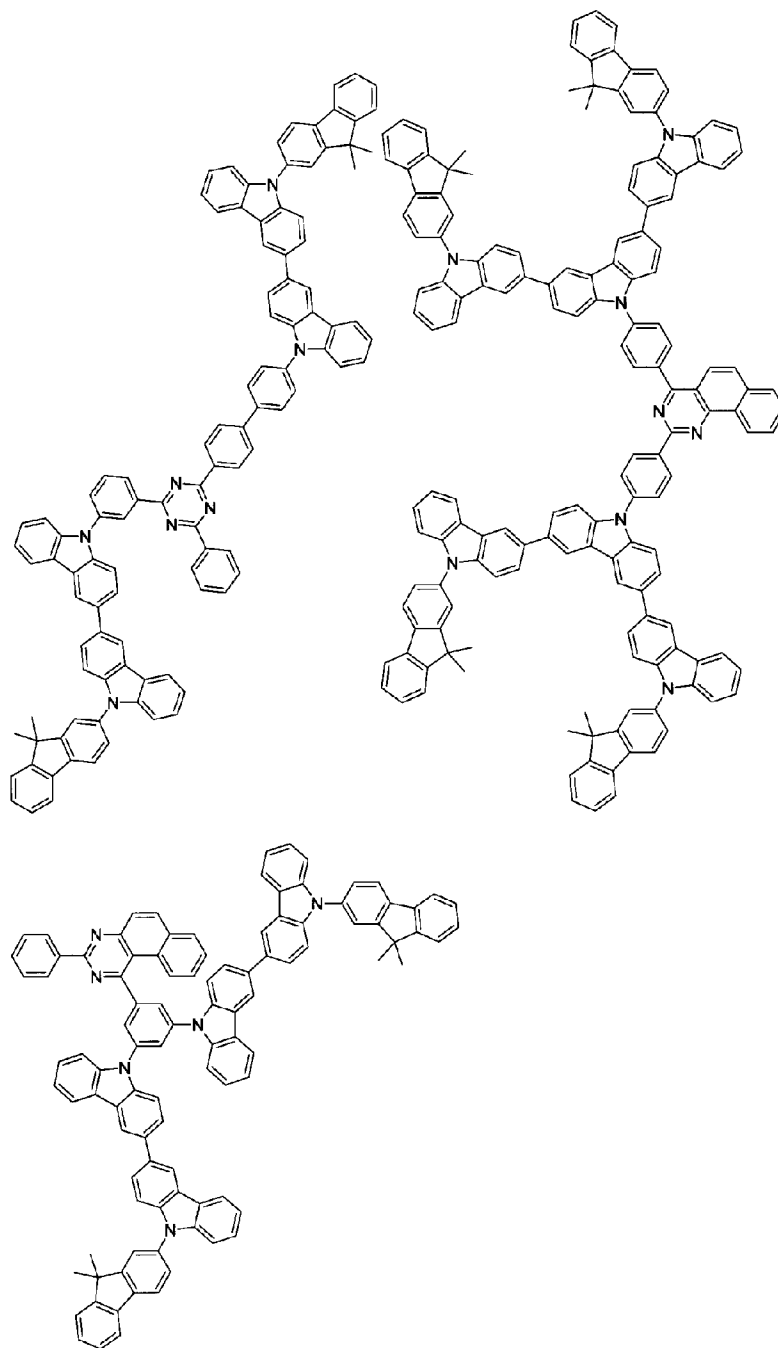
[0203]

[化163]



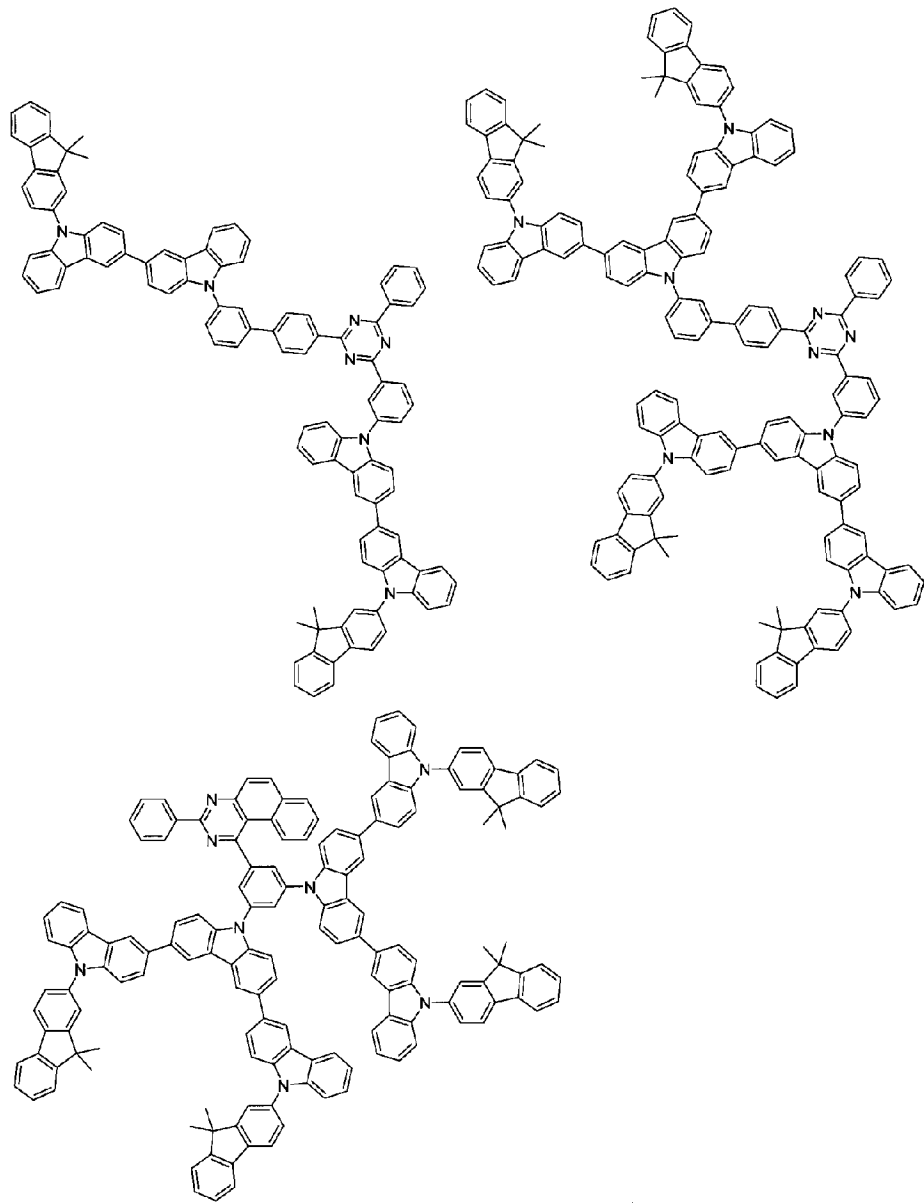
[0204]

[化164]



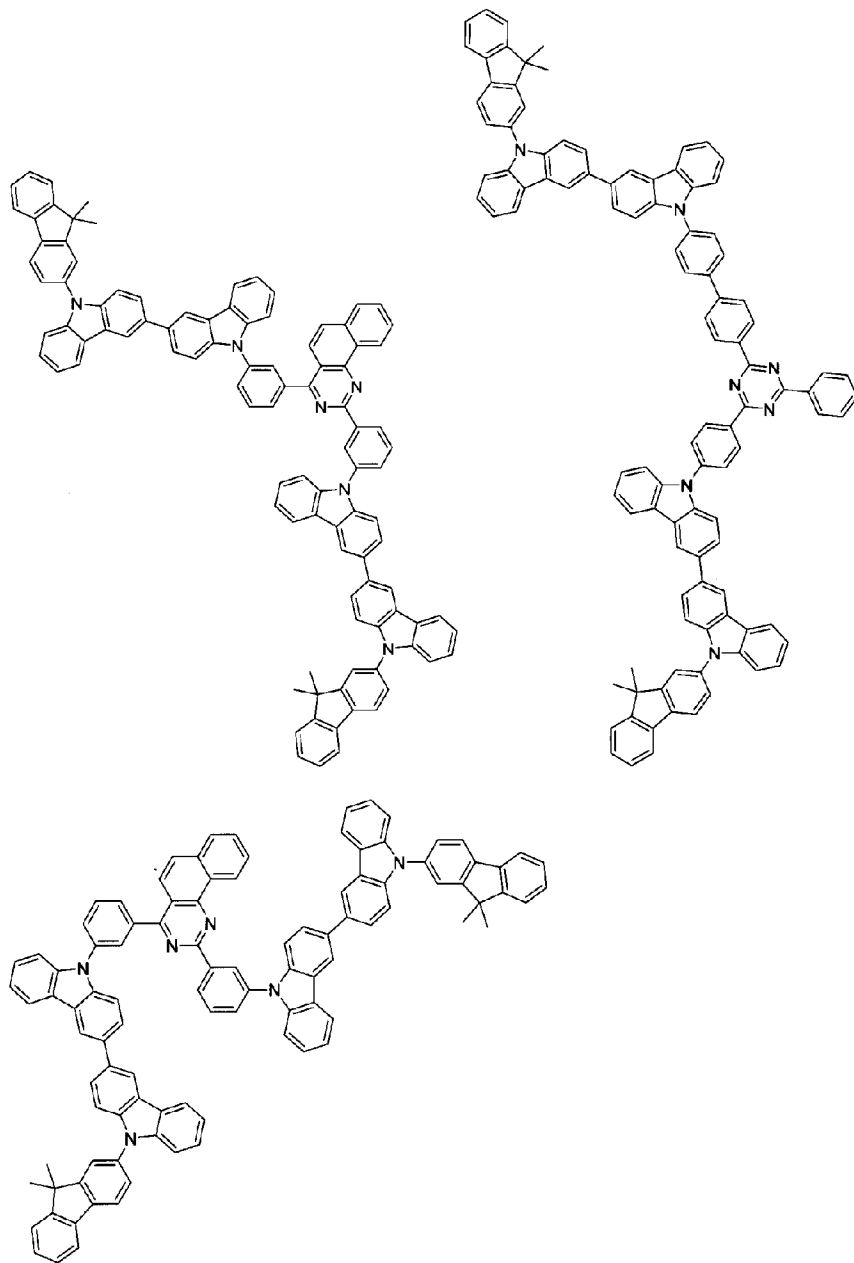
[0205]

[化165]



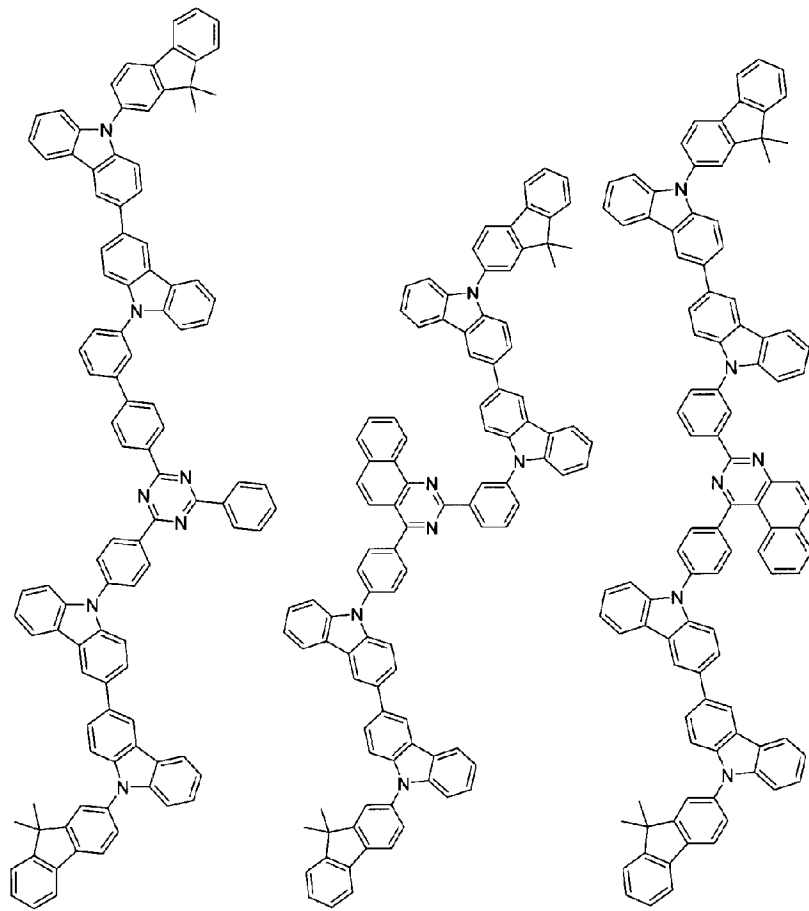
[0206]

[化166]



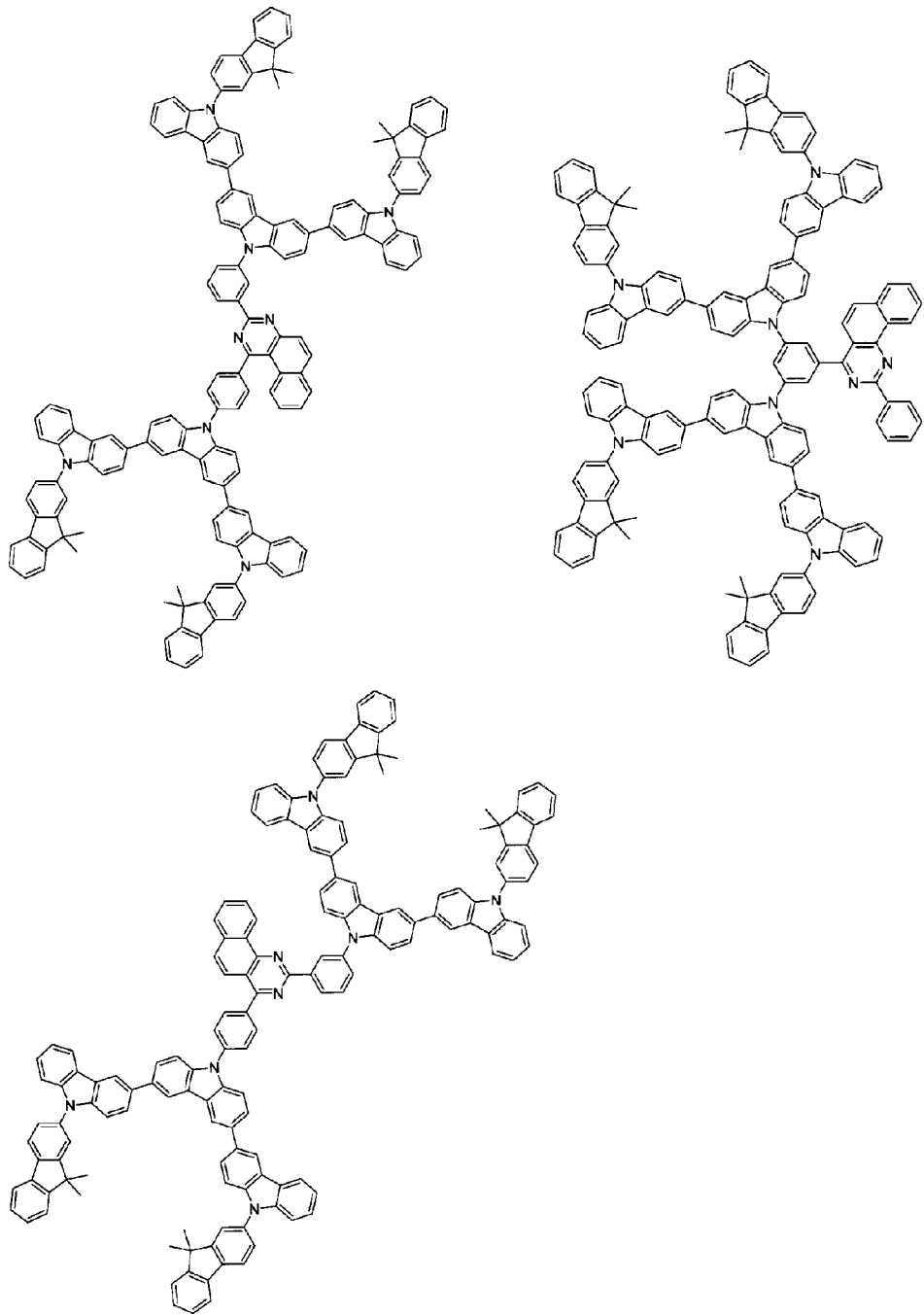
[0207]

[化167]



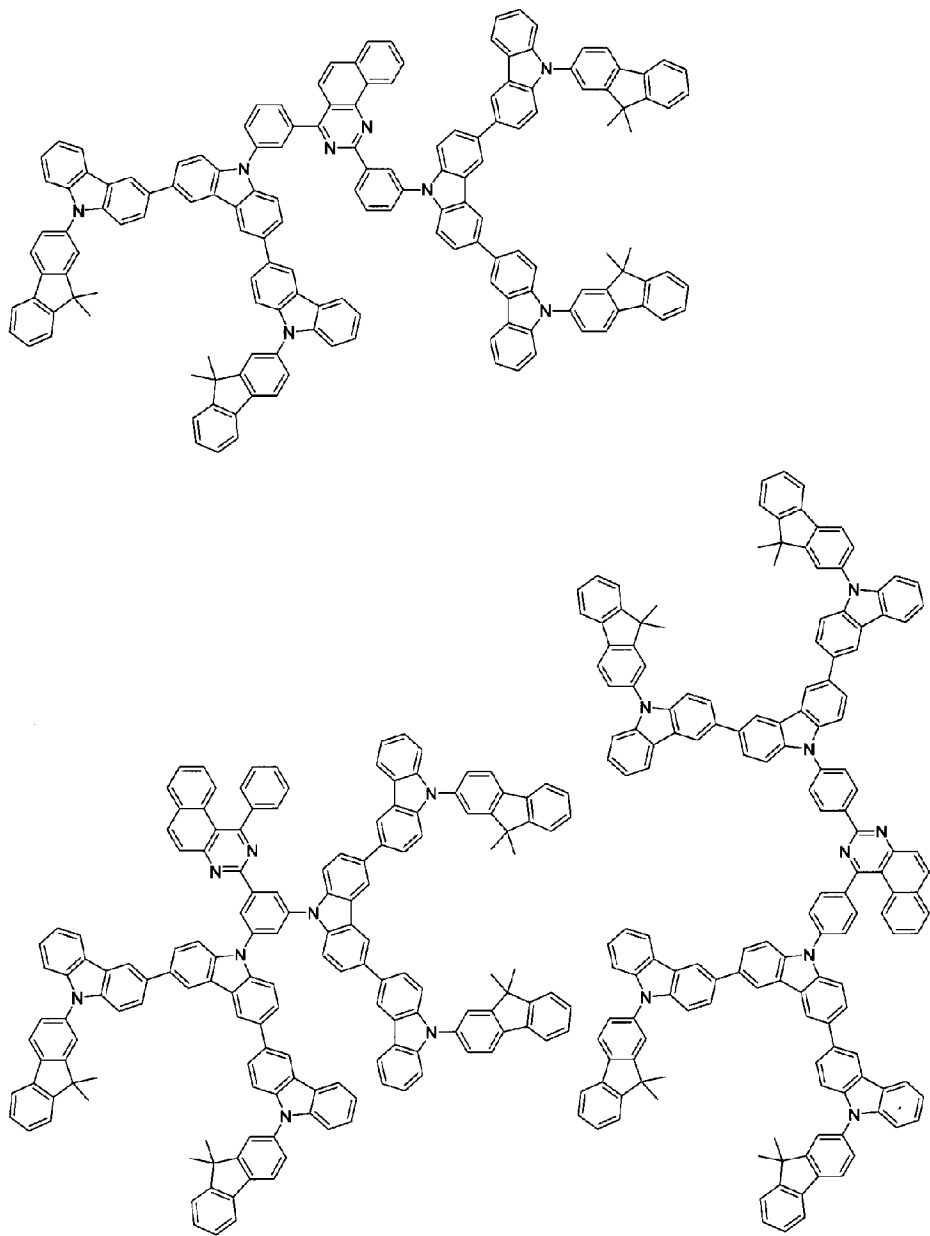
[0208]

[化169]



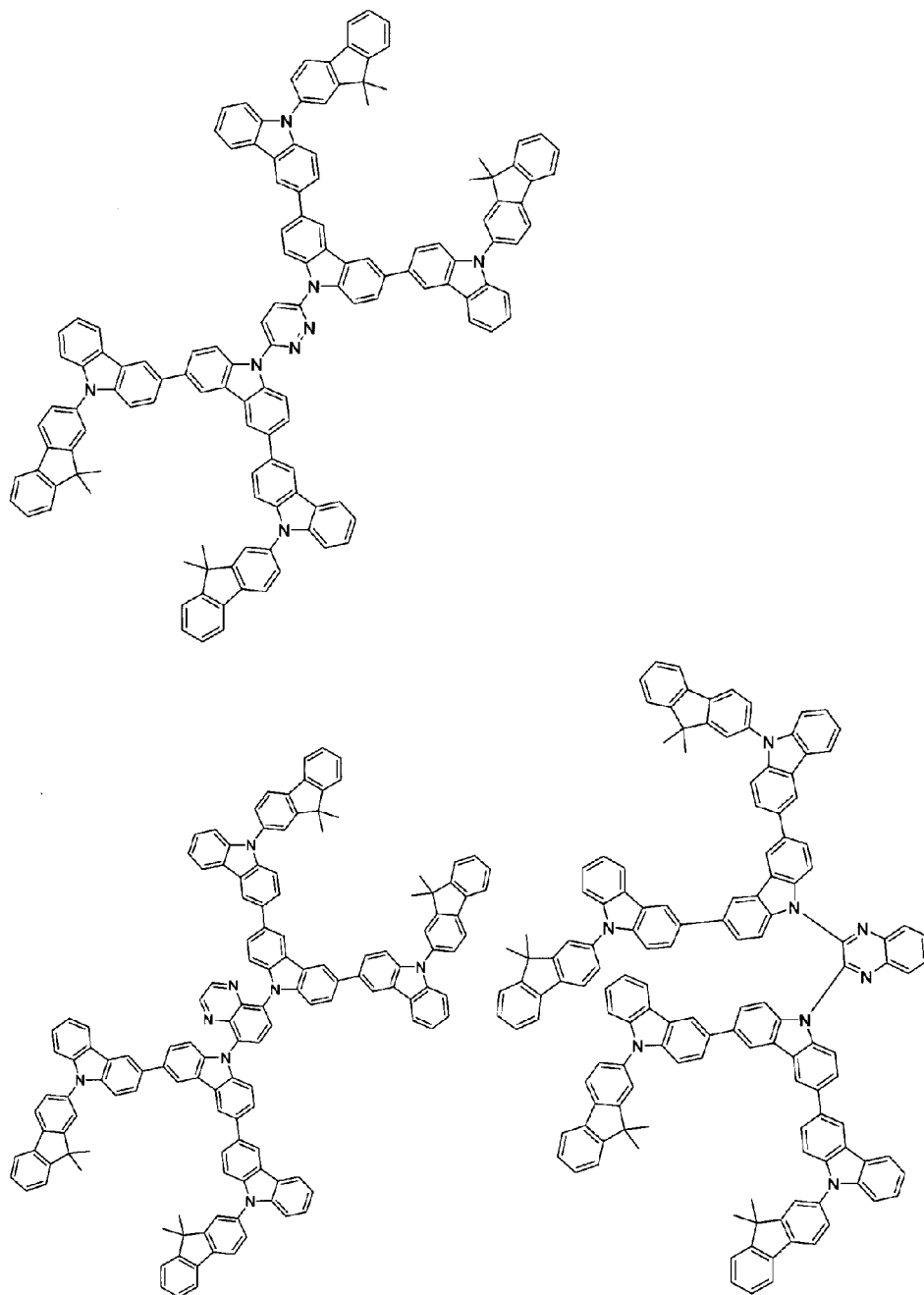
[0210]

[化170]



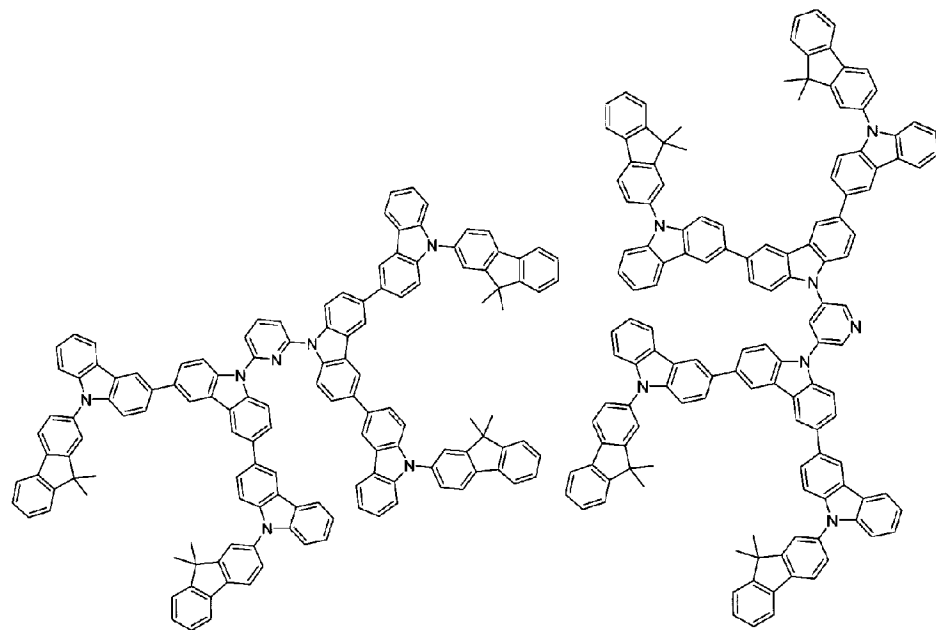
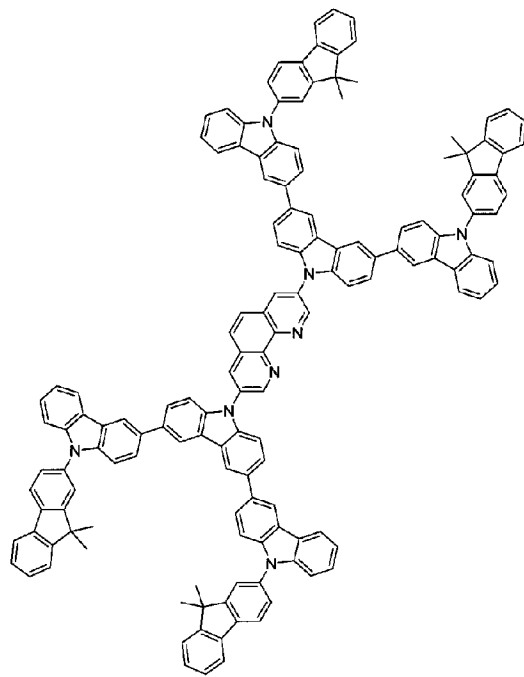
[0211]

[化171]



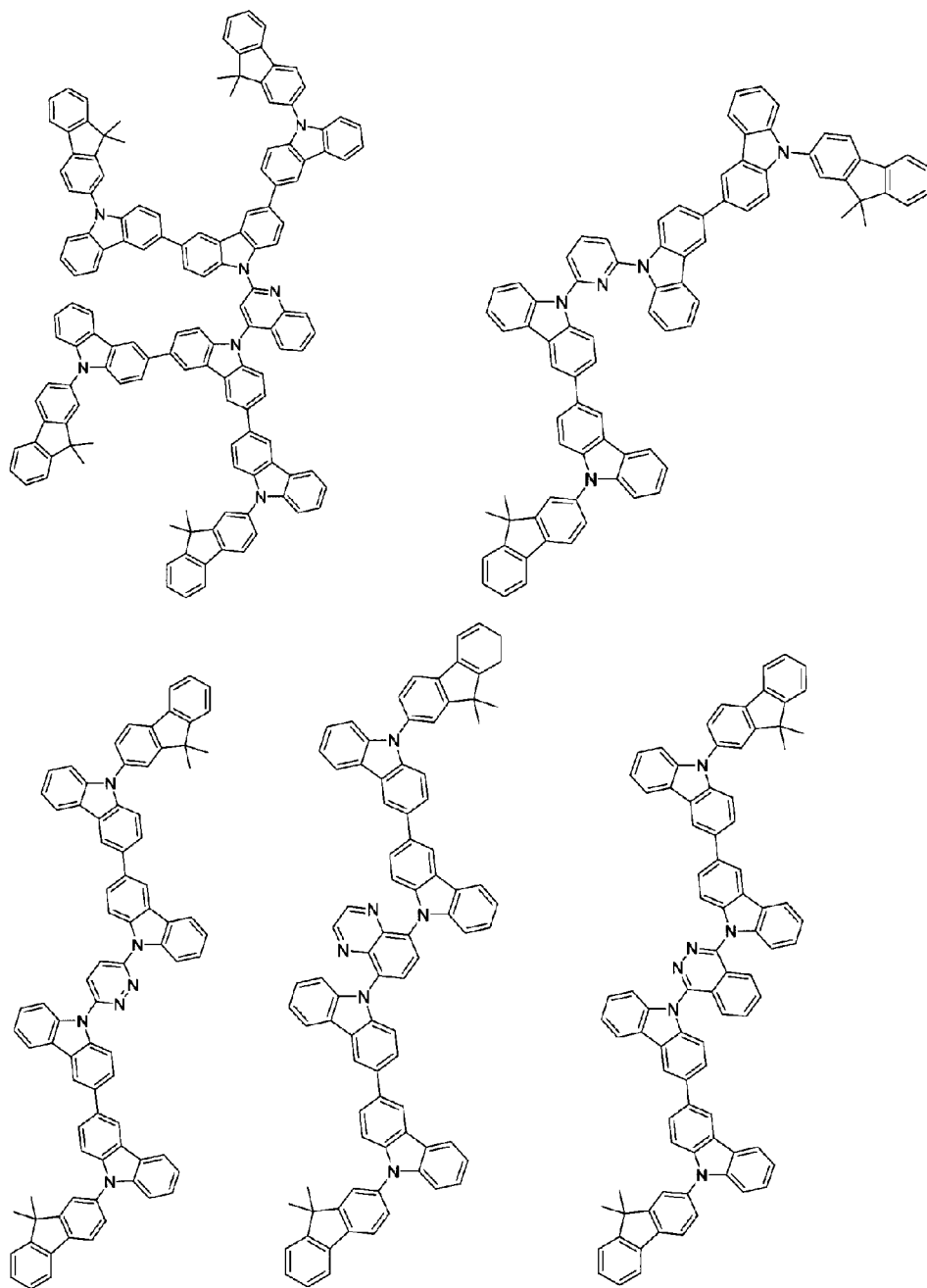
[0212]

[化172]



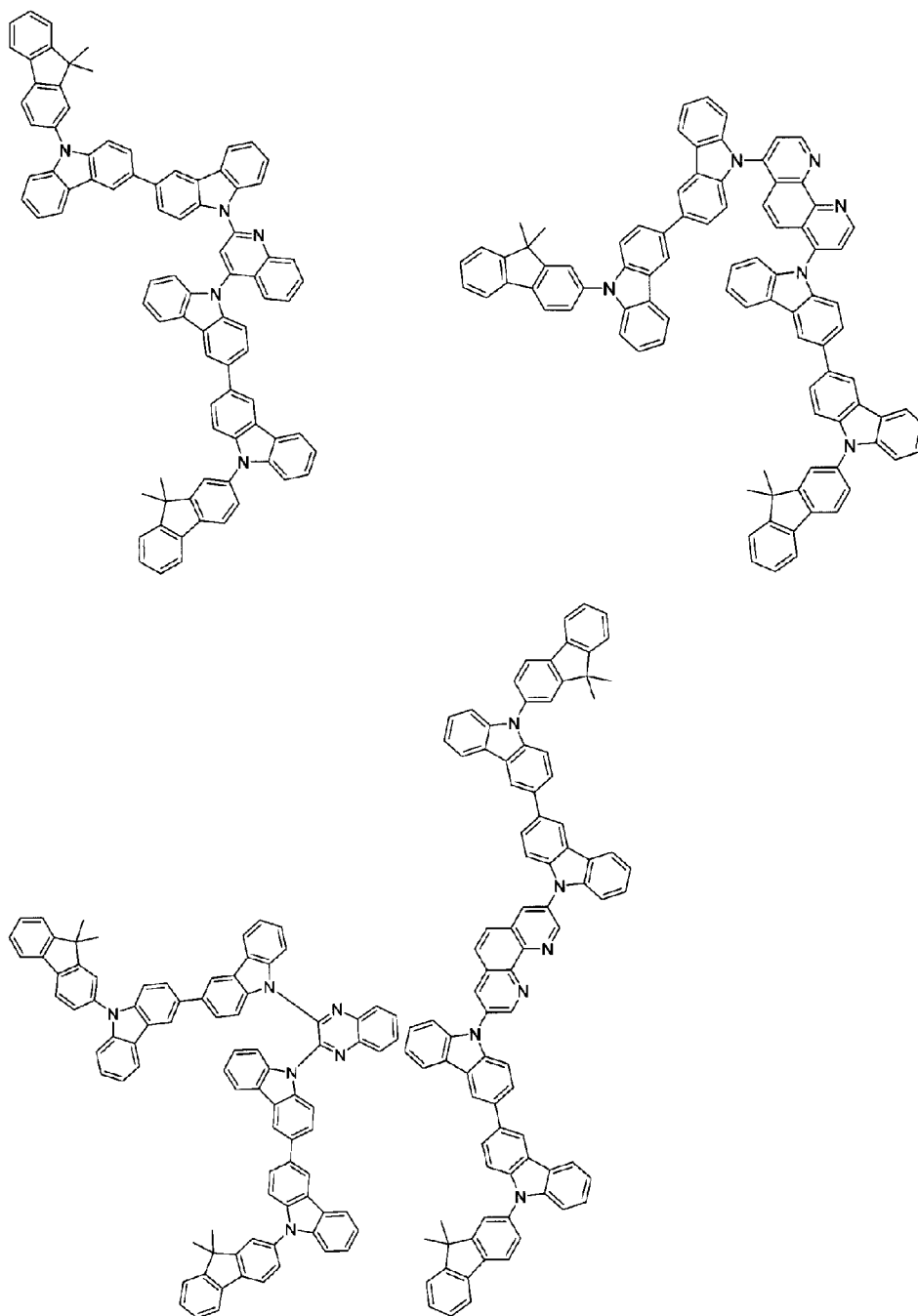
[0213]

[化173]



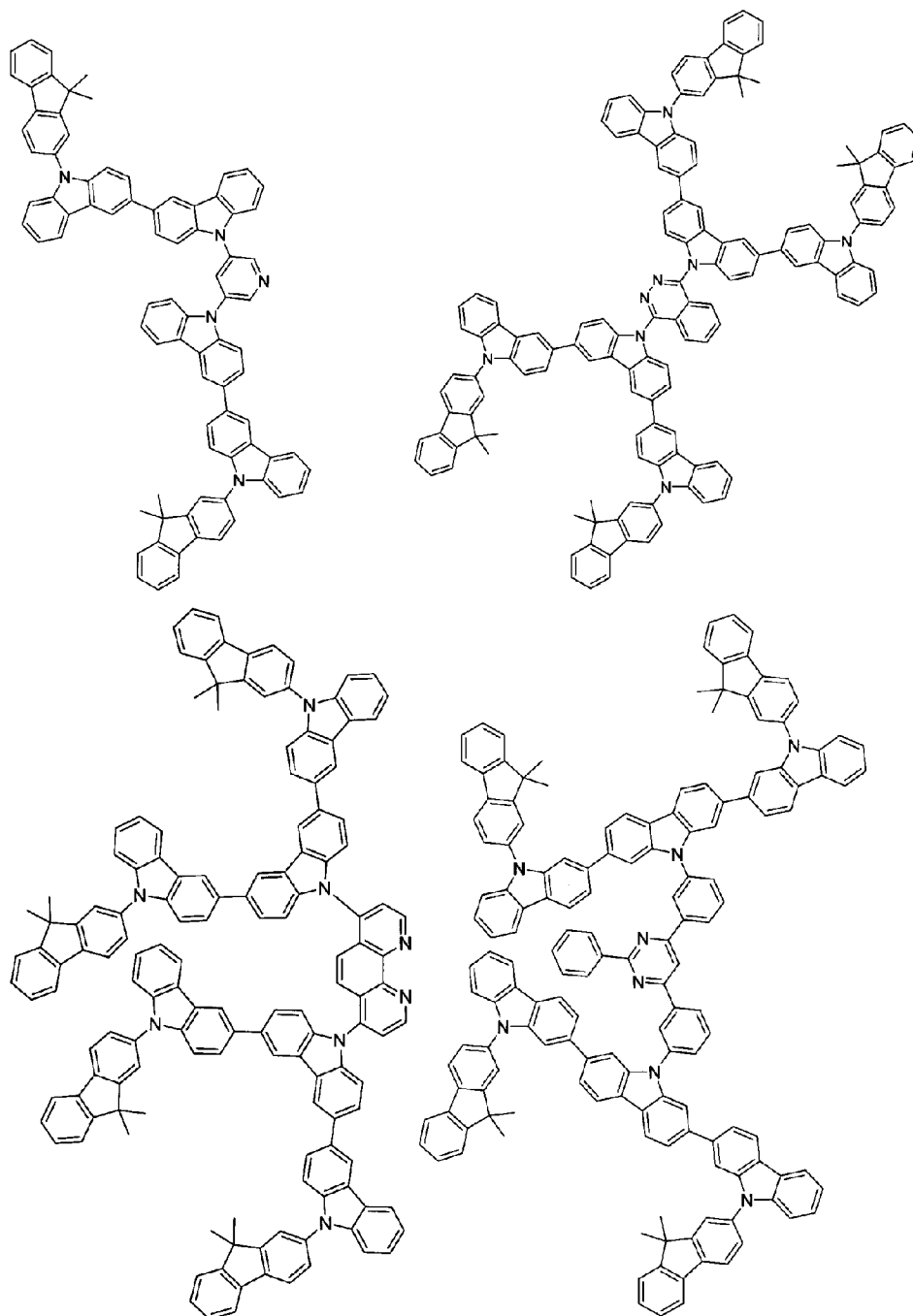
[0214]

[化174]



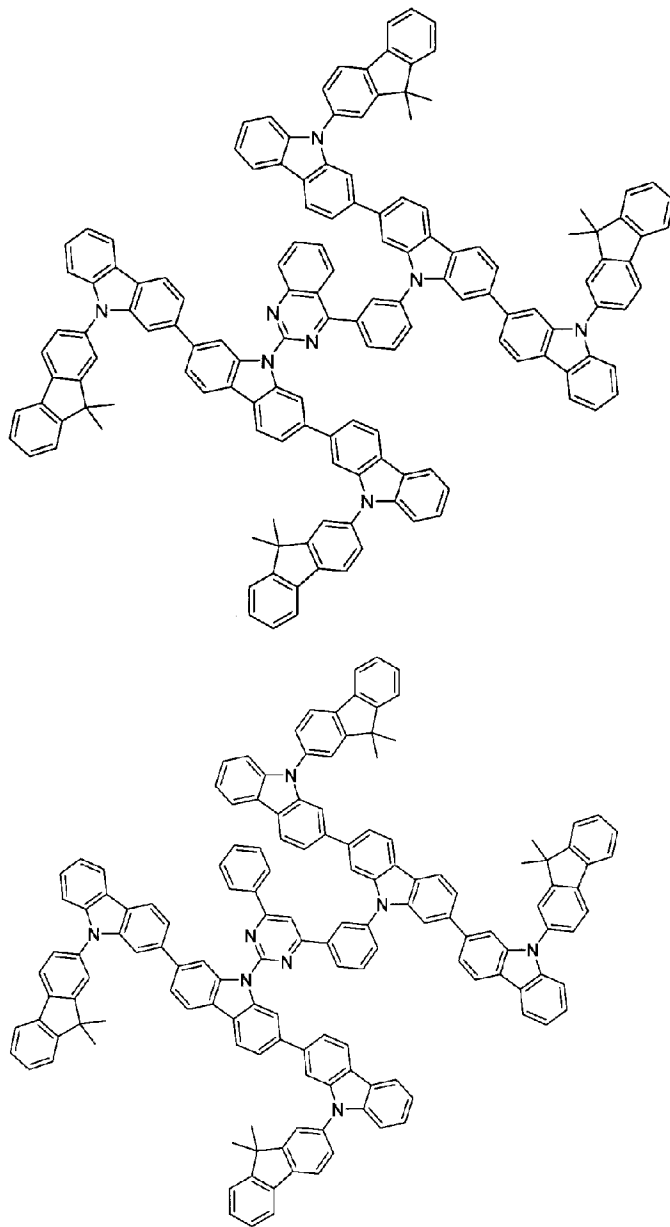
[0215]

[化175]



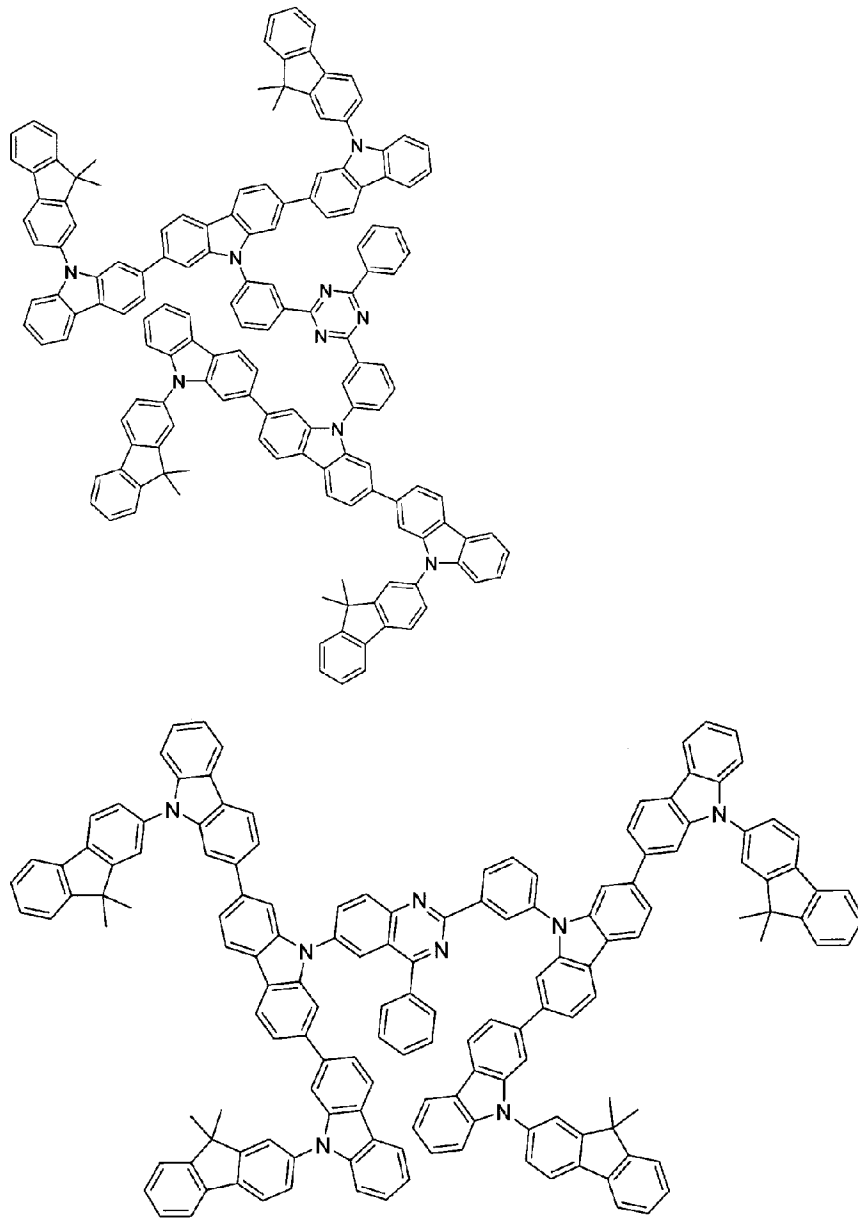
[0216]

[化176]



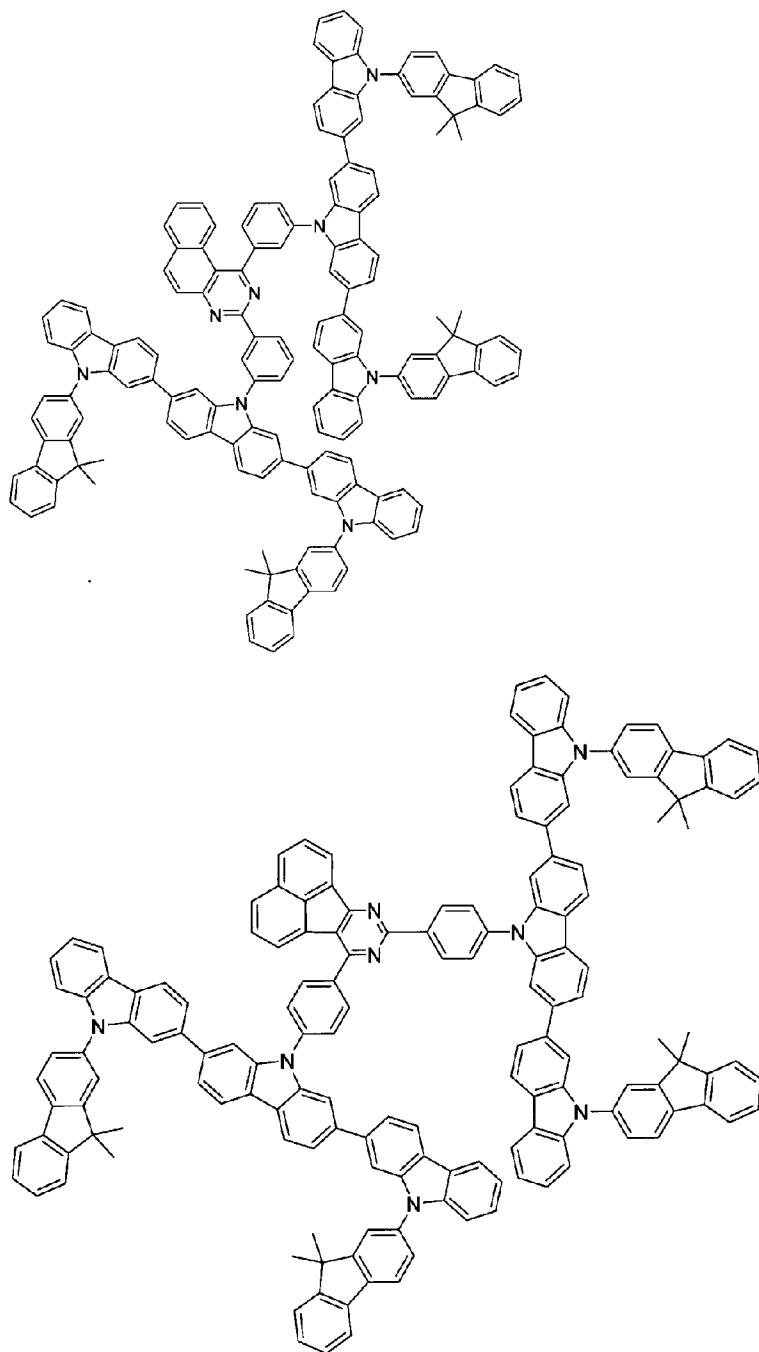
[0217]

[化177]



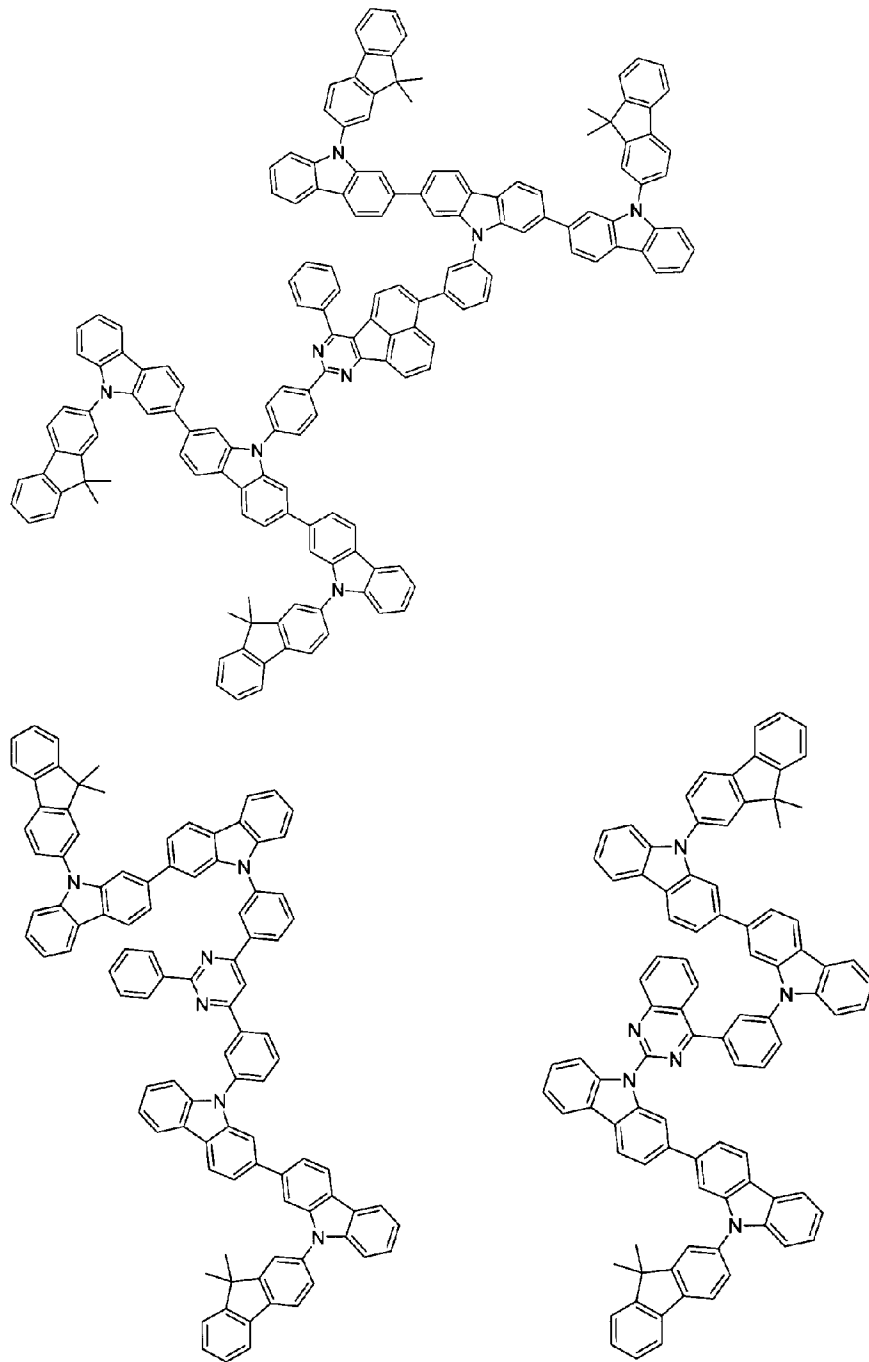
[0218]

[化178]



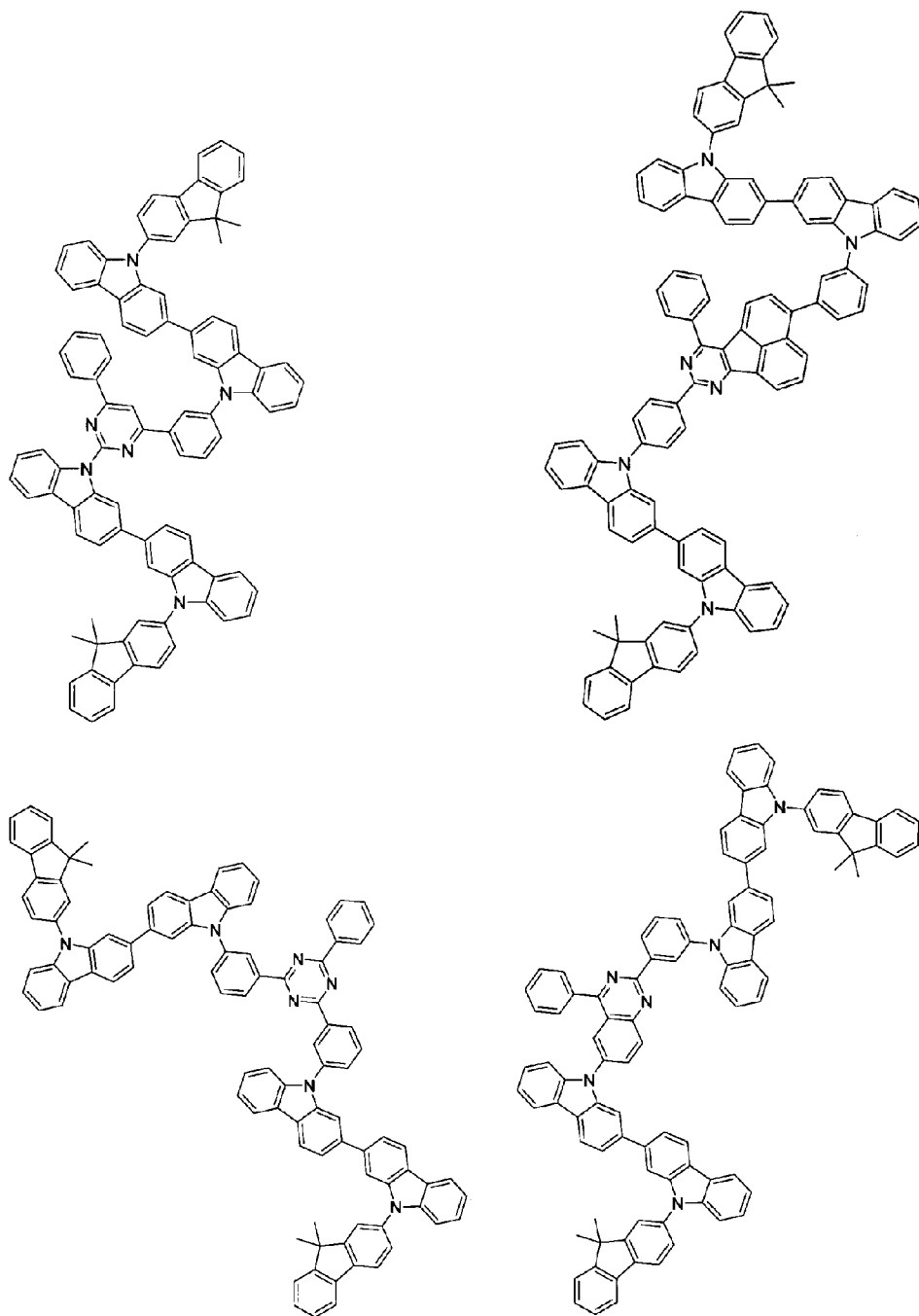
[0219]

[化179]



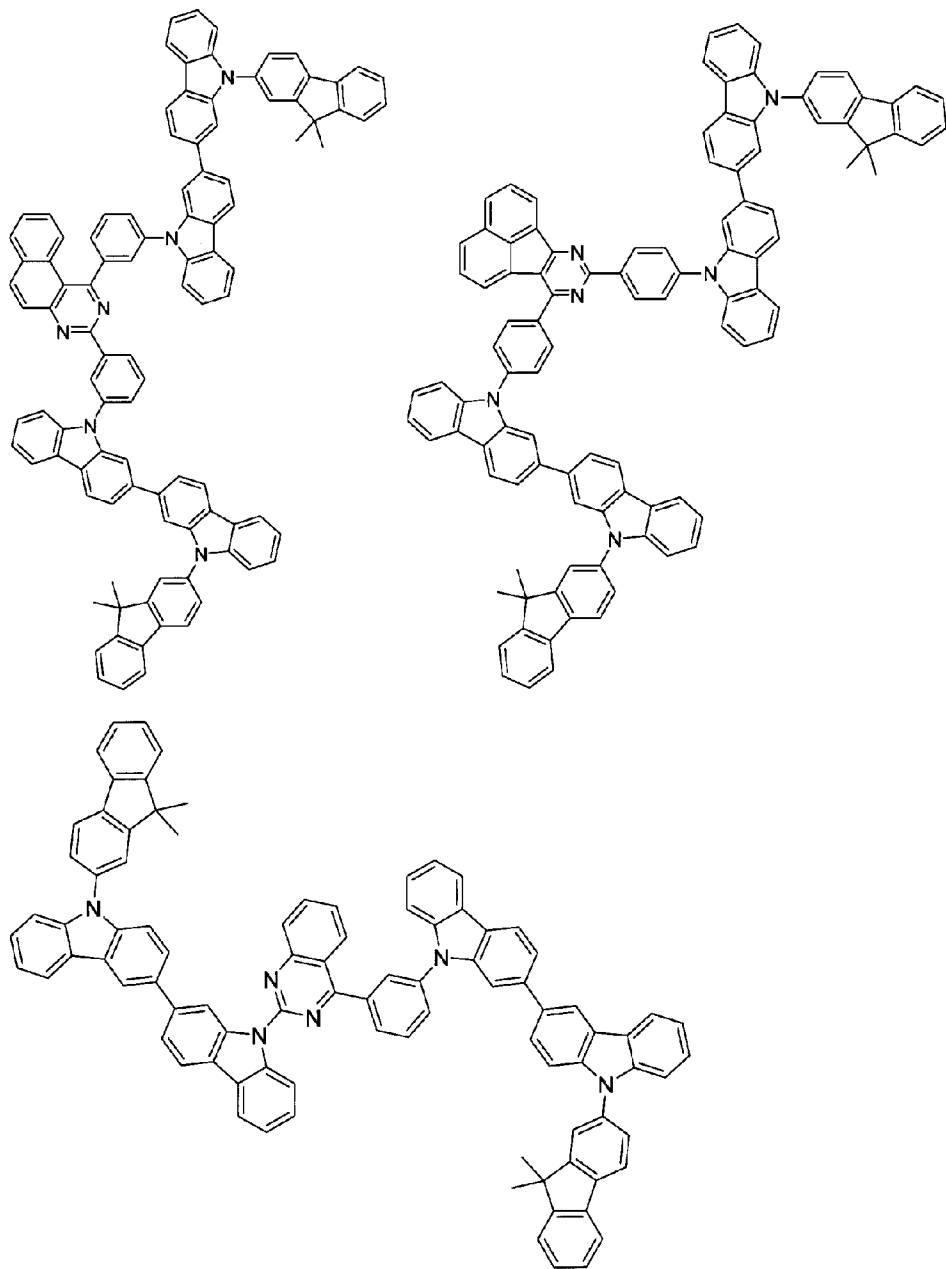
[0220]

[化180]



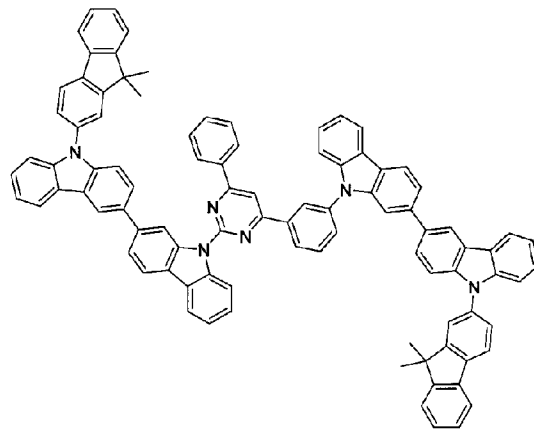
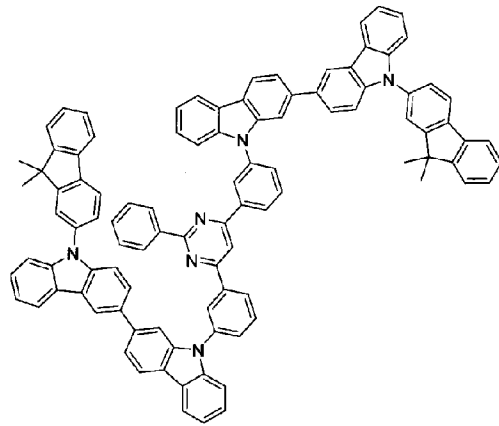
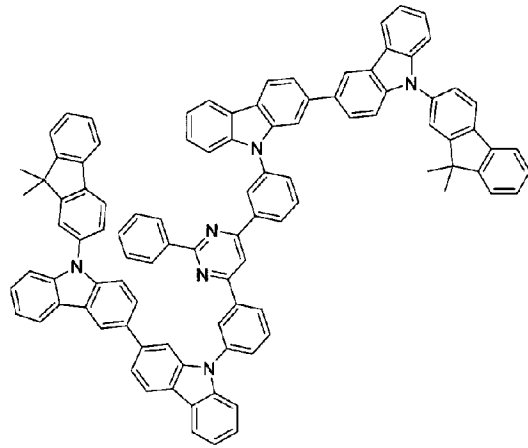
[0221]

[化181]



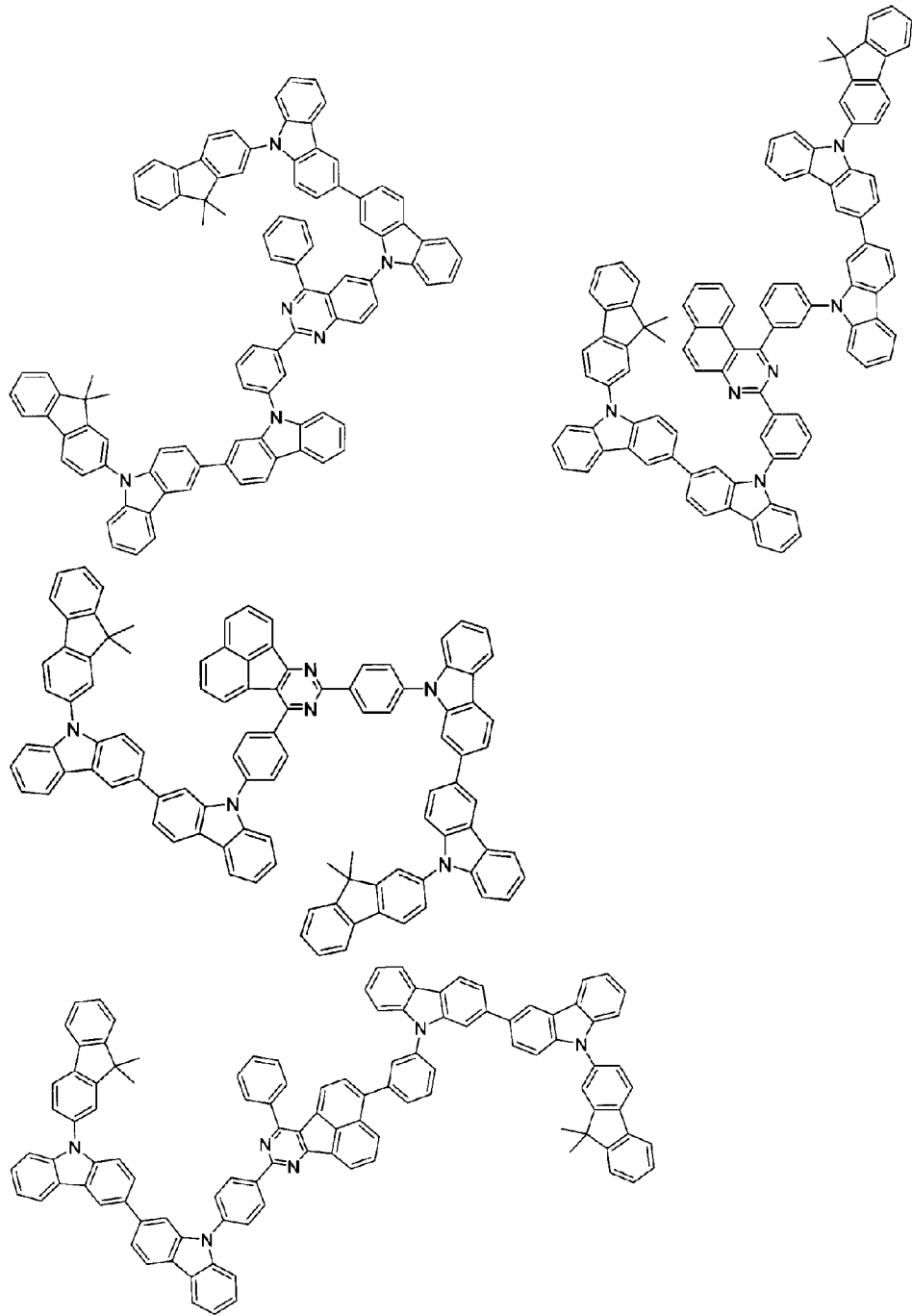
[0222]

[化182]



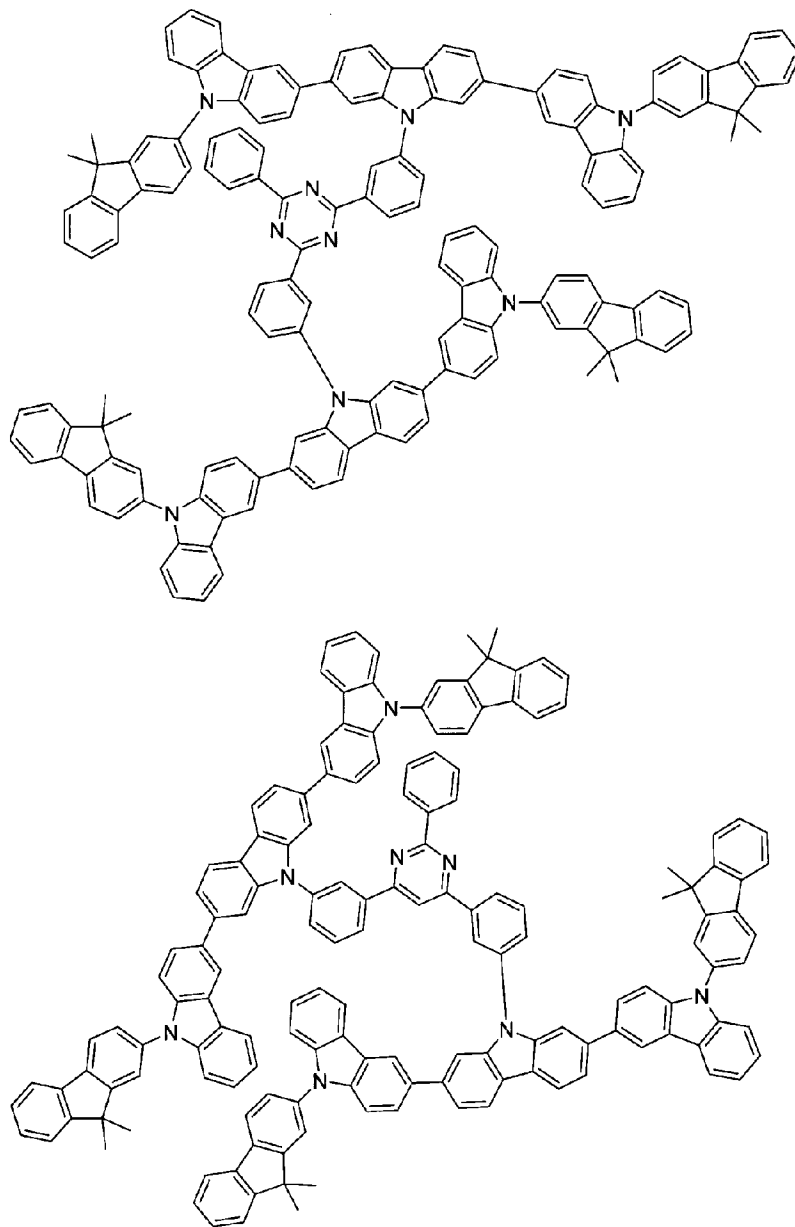
[0223]

[化183]



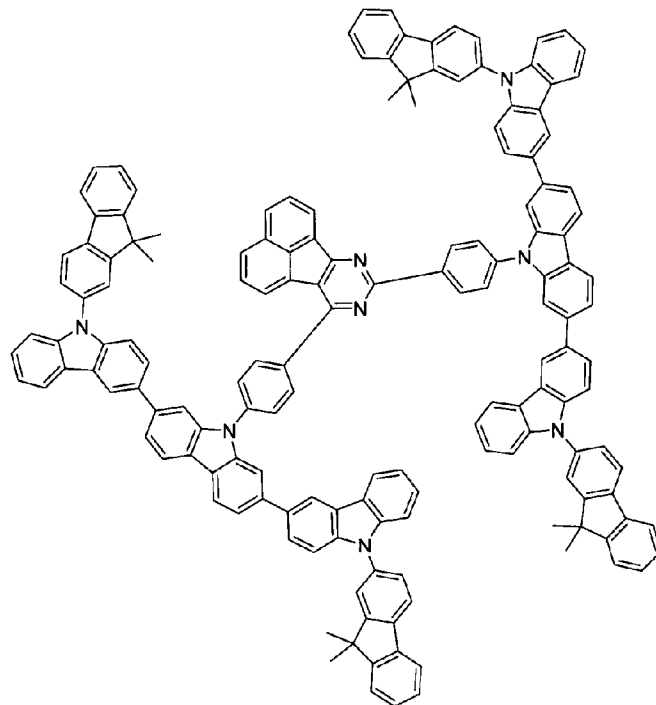
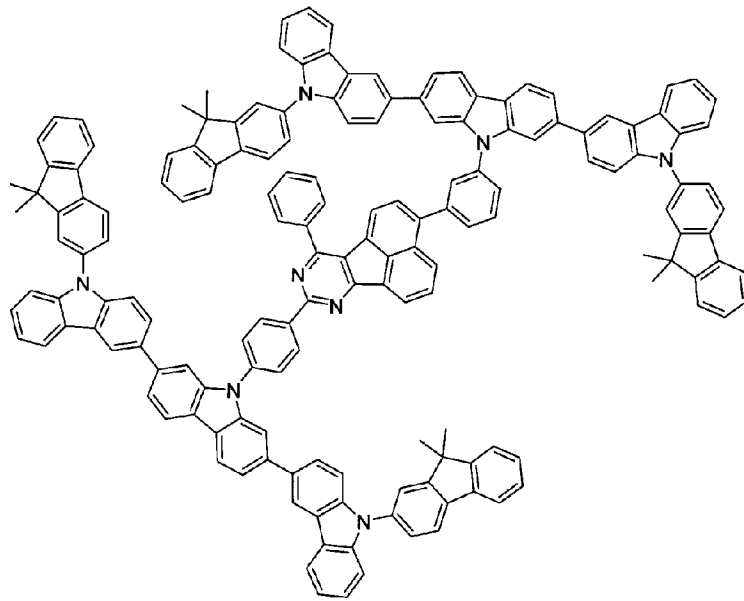
[0224]

[化184]



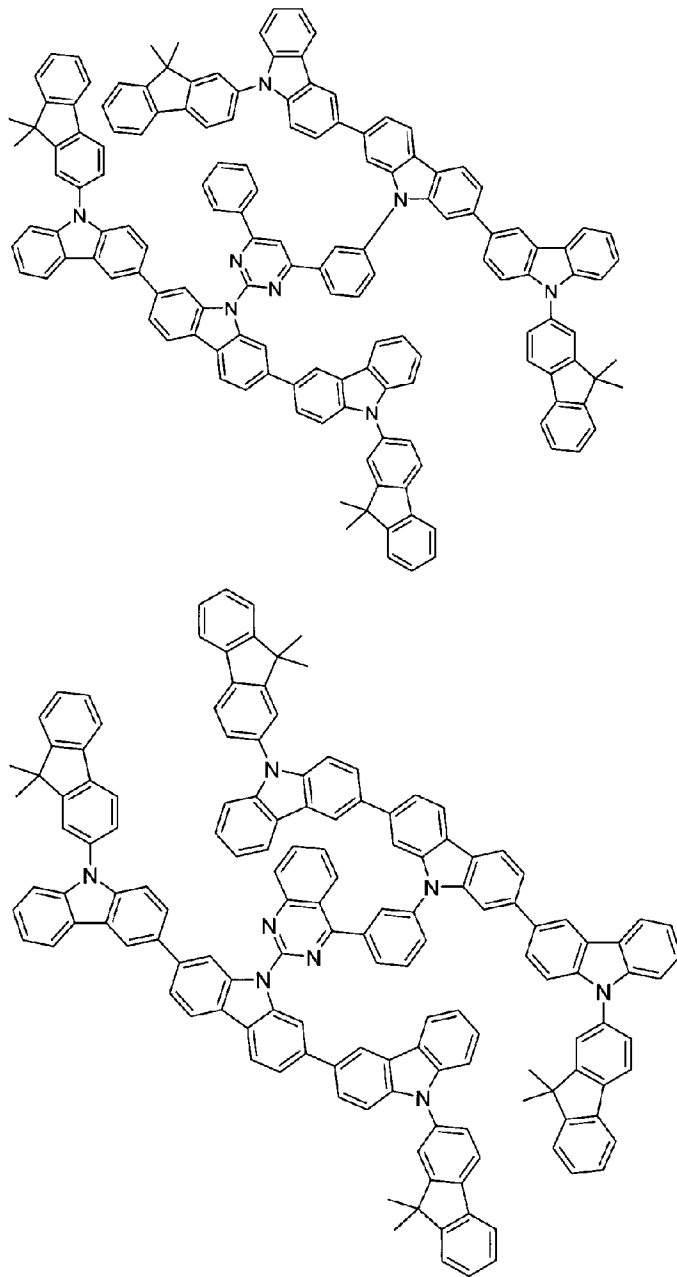
[0225]

[化185]



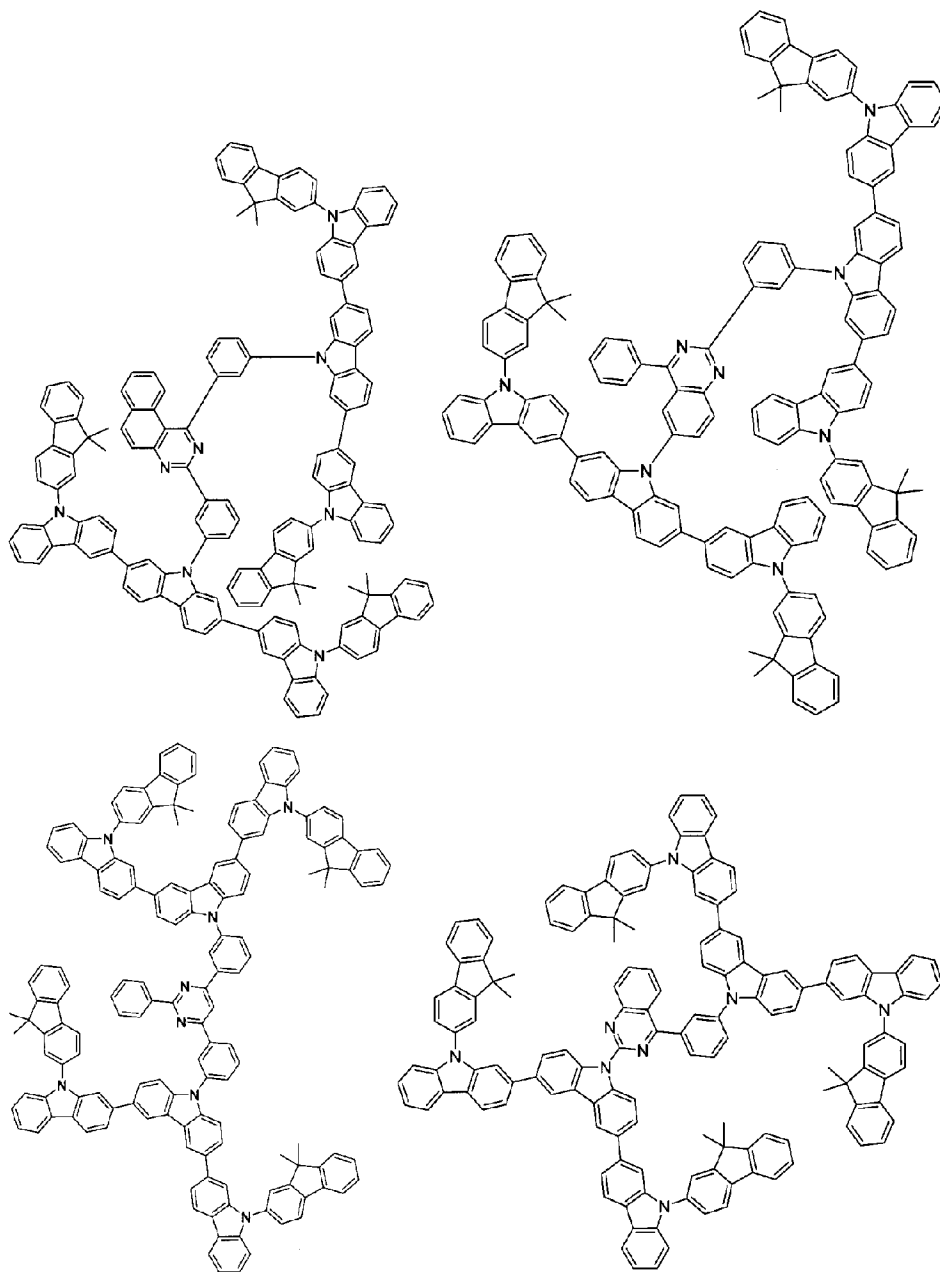
[0226]

[化186]



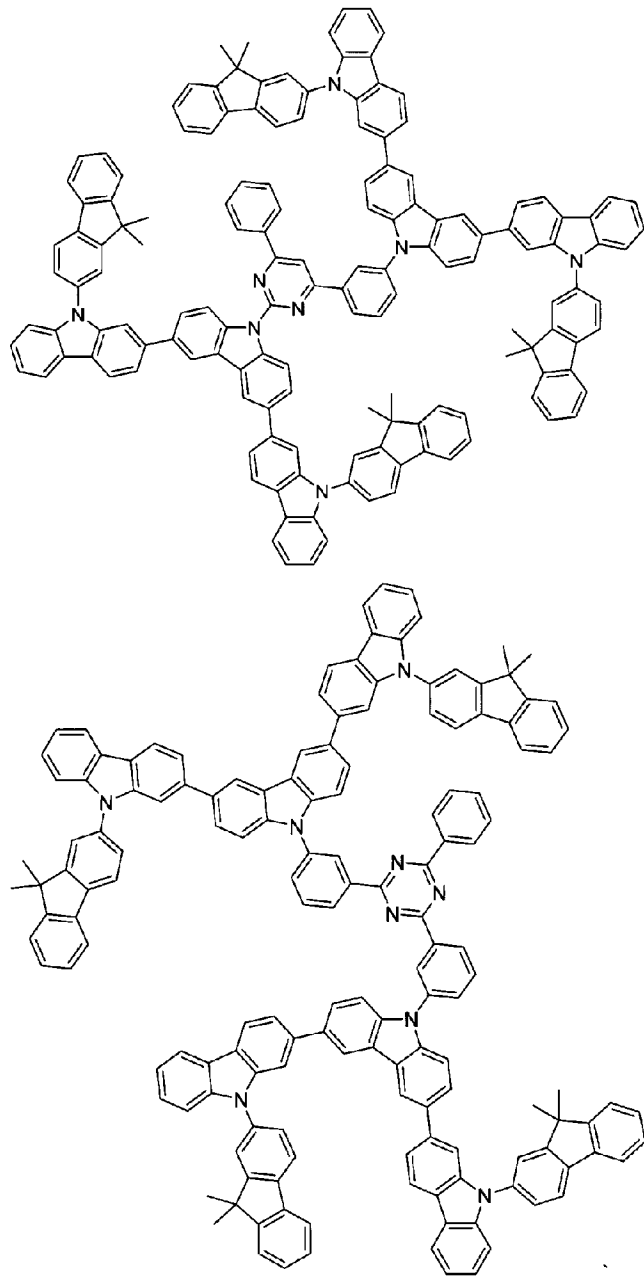
[0227]

[化187]



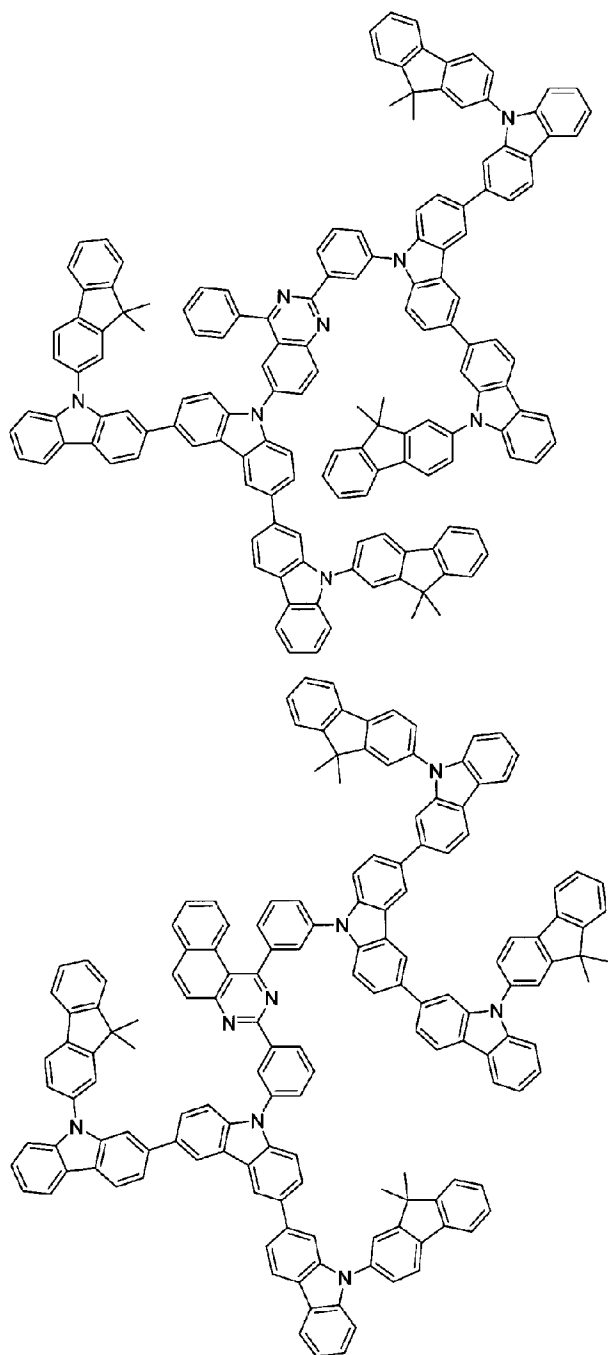
[0228]

[化188]



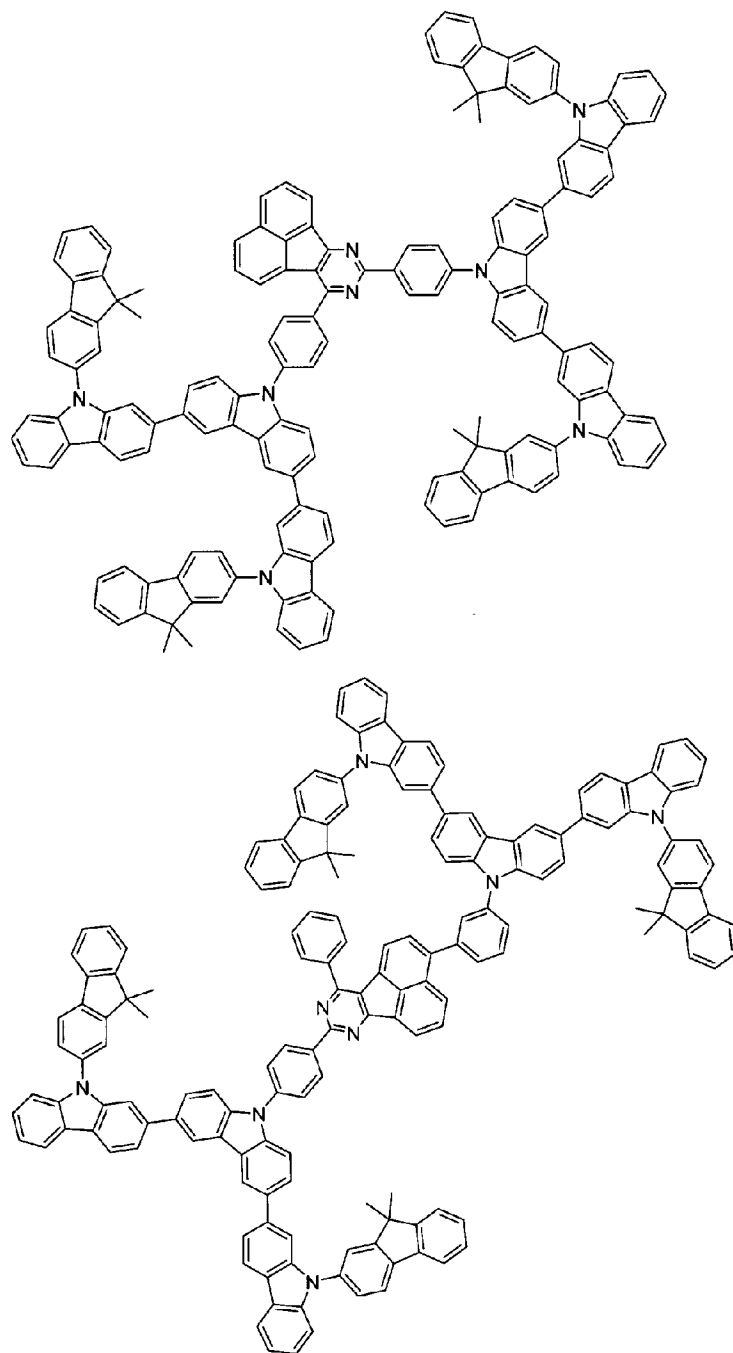
[0229]

[化189]



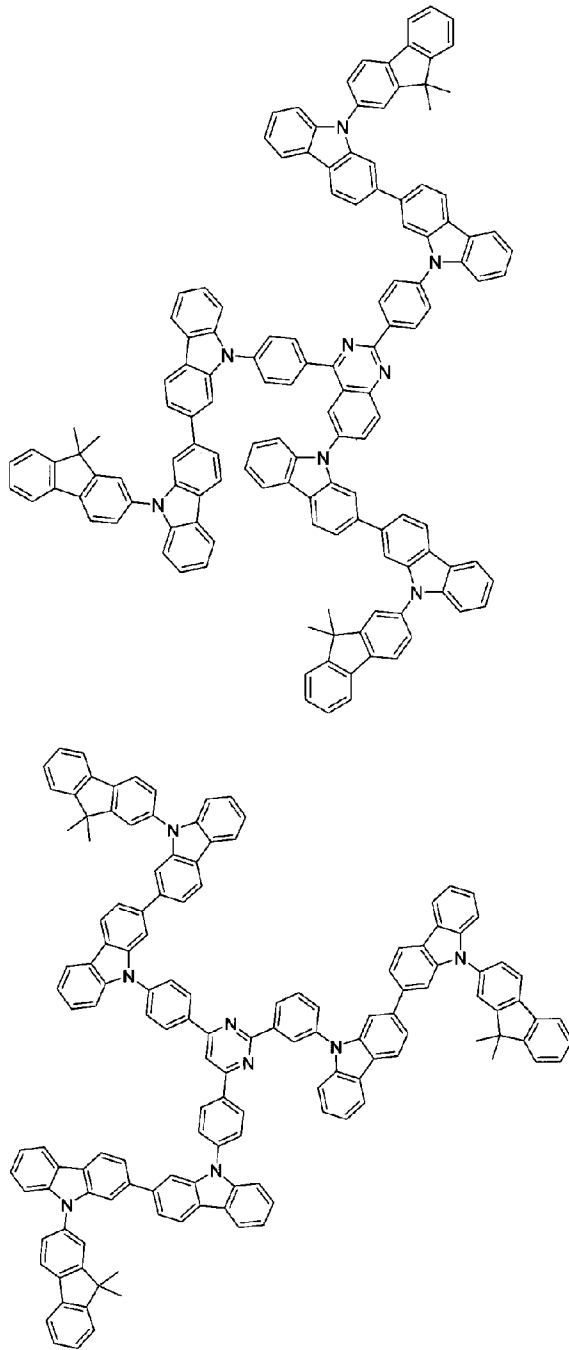
[0230]

[化190]



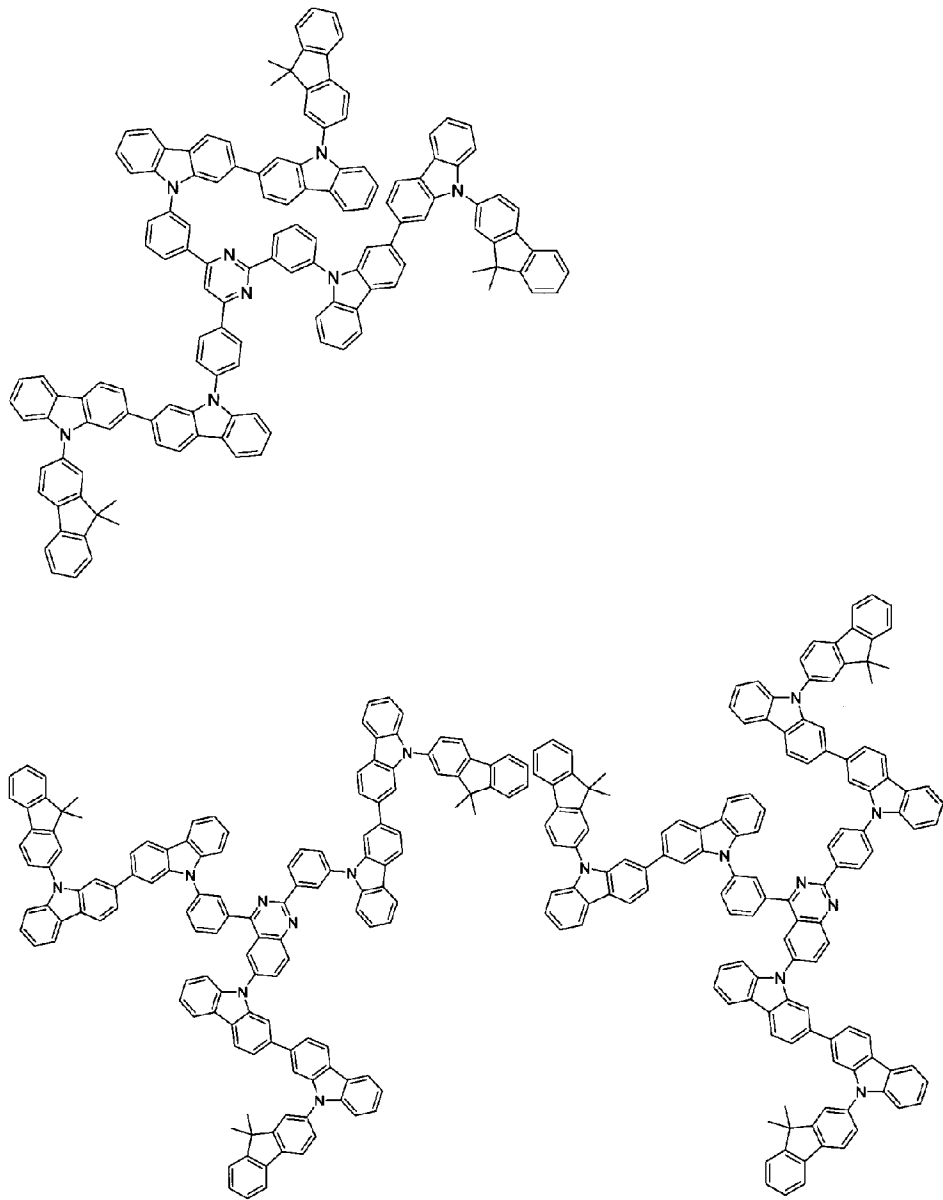
[0231]

[化191]



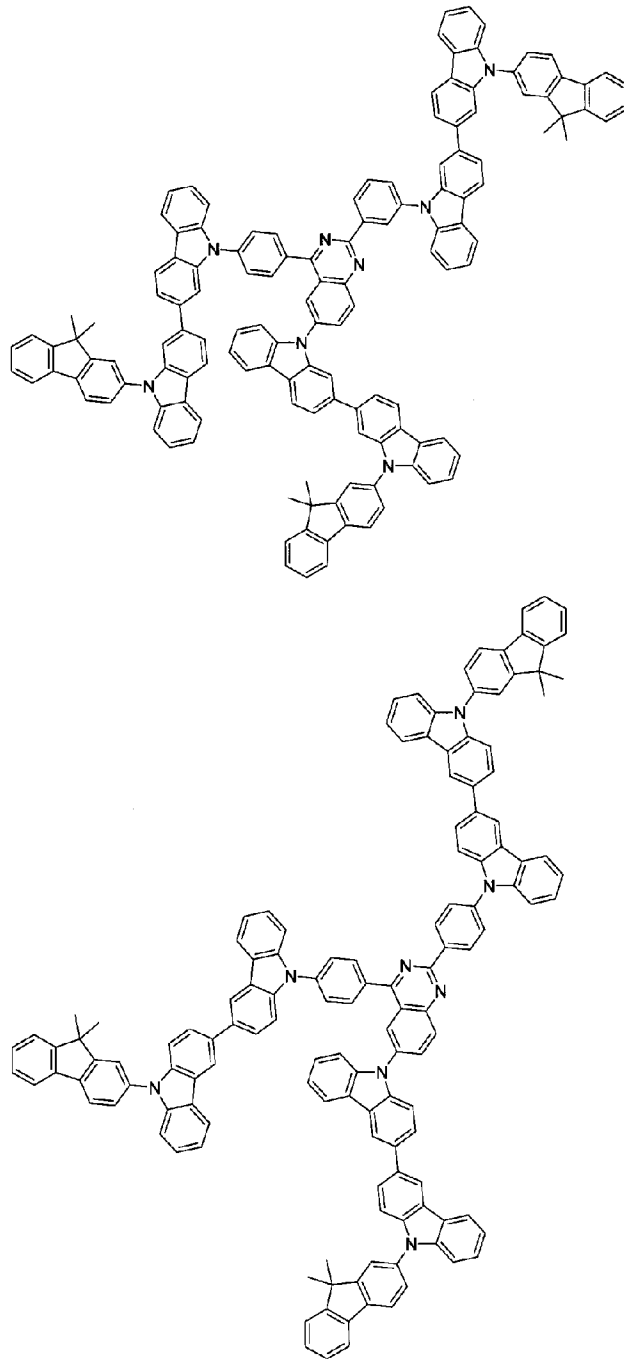
[0232]

[化192]



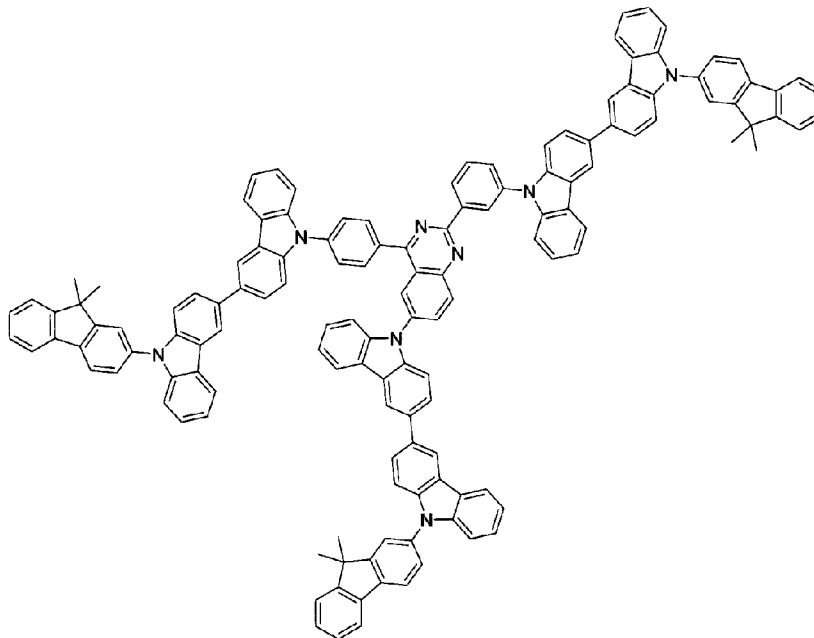
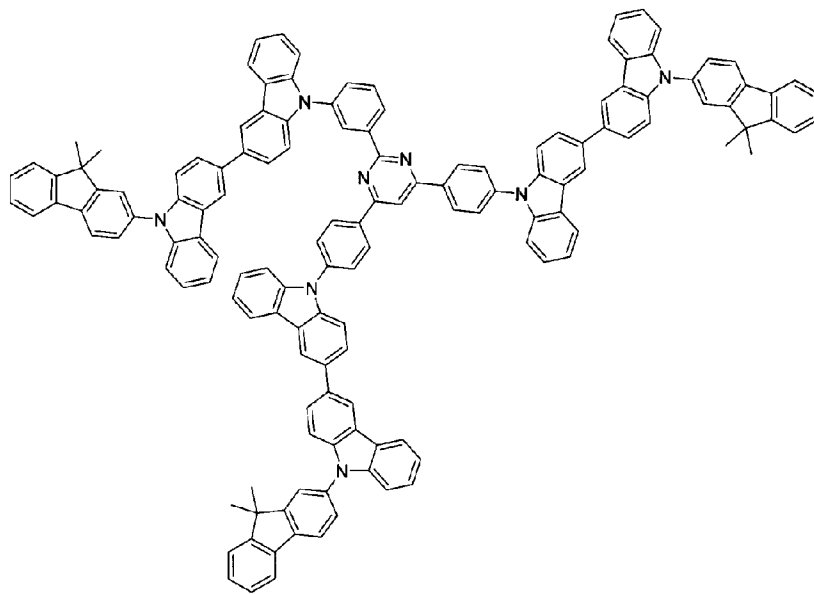
[0233]

[化193]



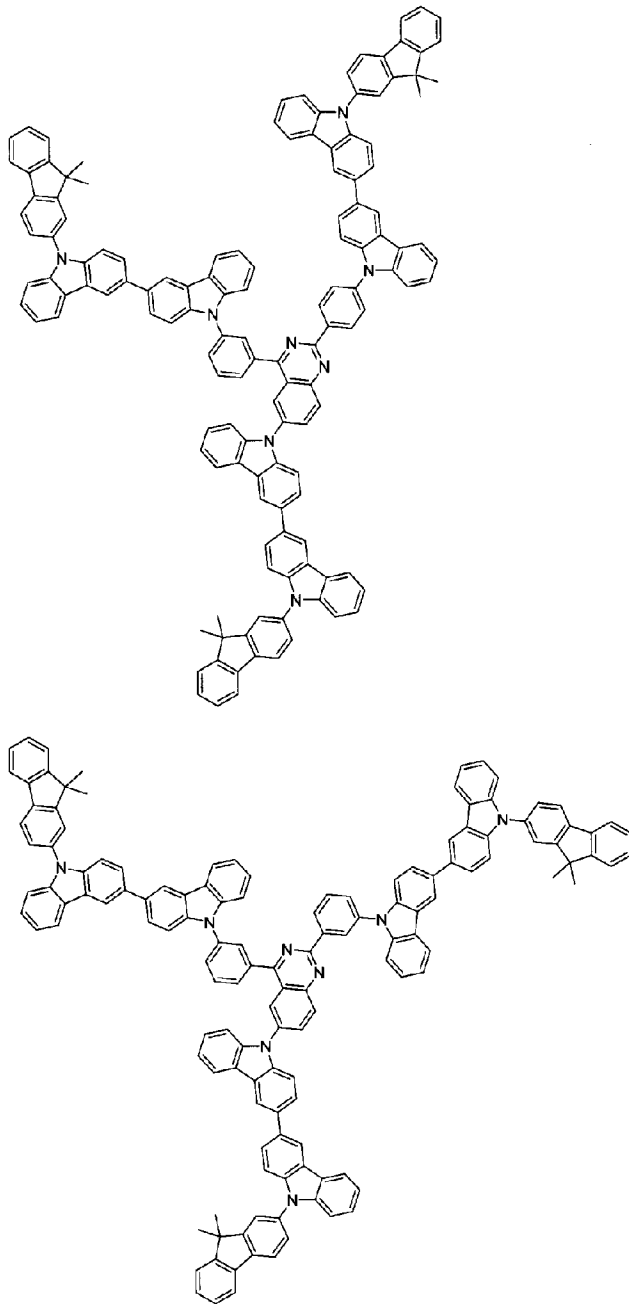
[0234]

[化194]



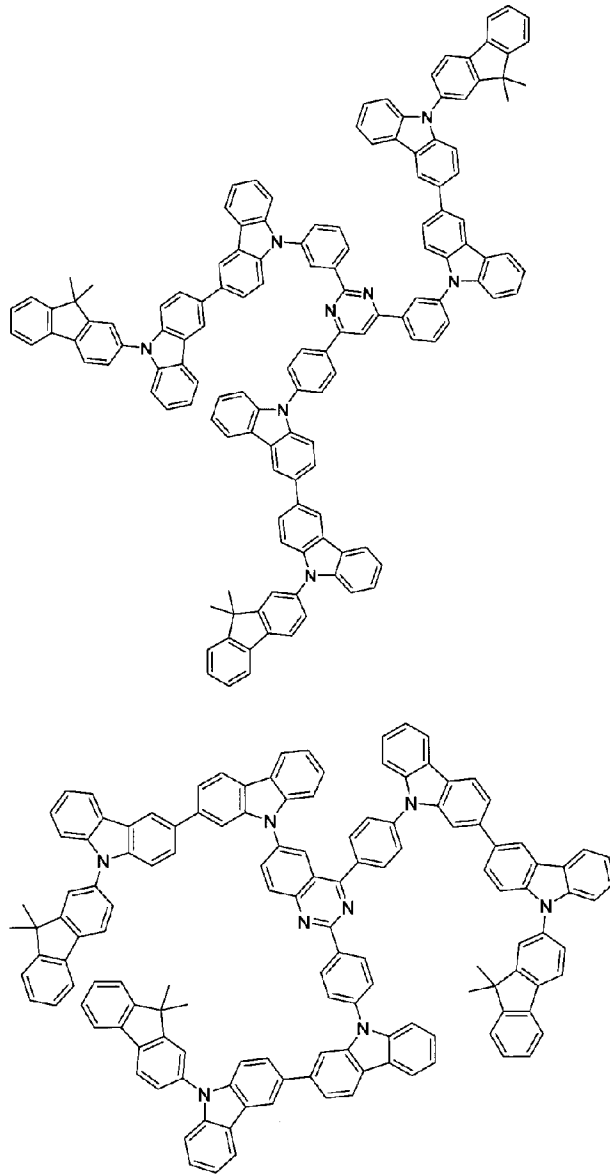
[0235]

[化195]



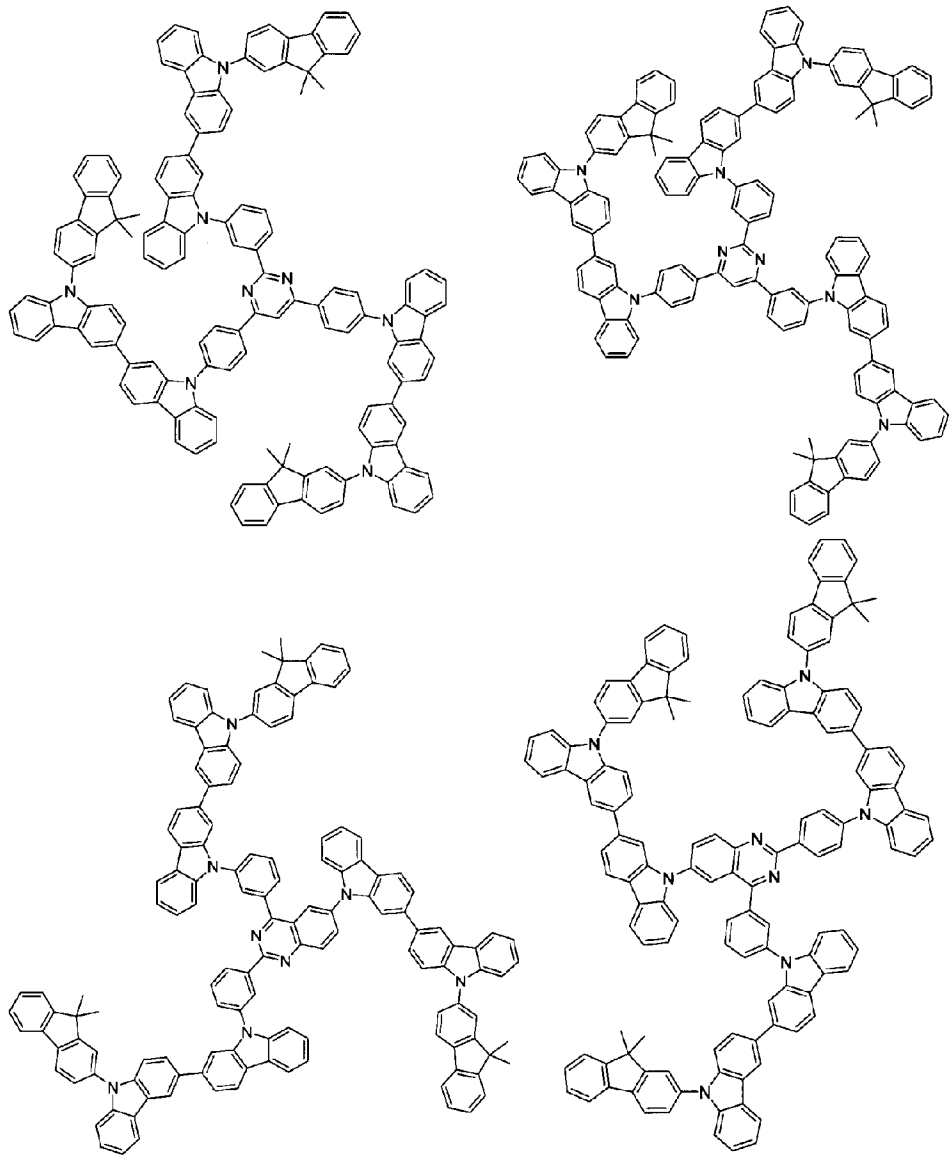
[0236]

[化196]



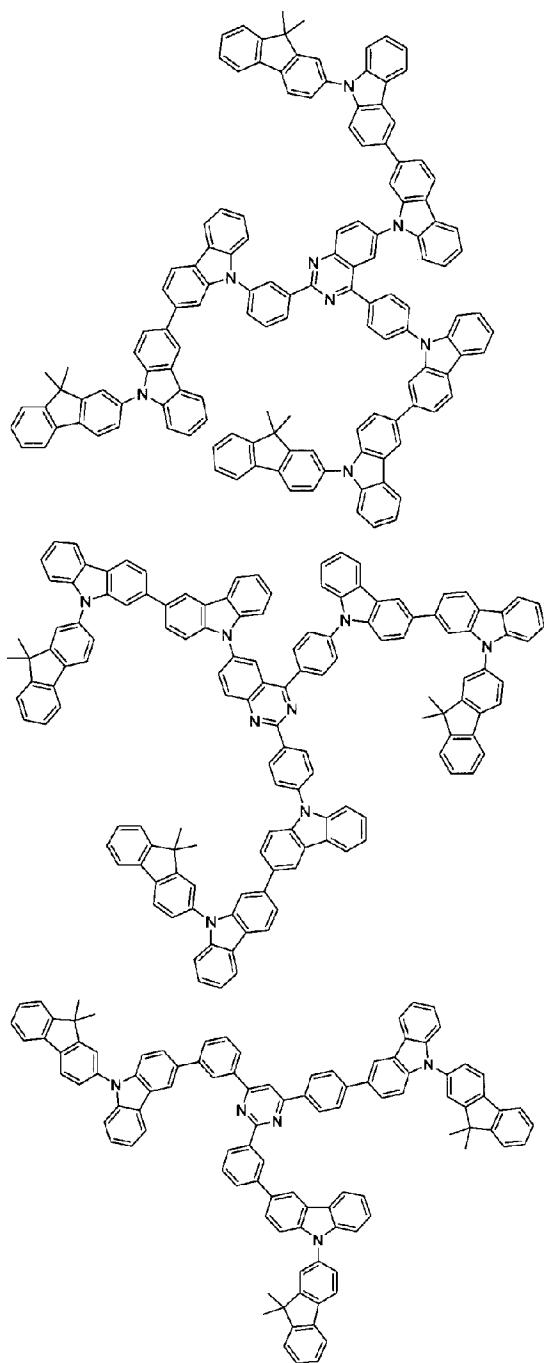
[0237]

[化197]



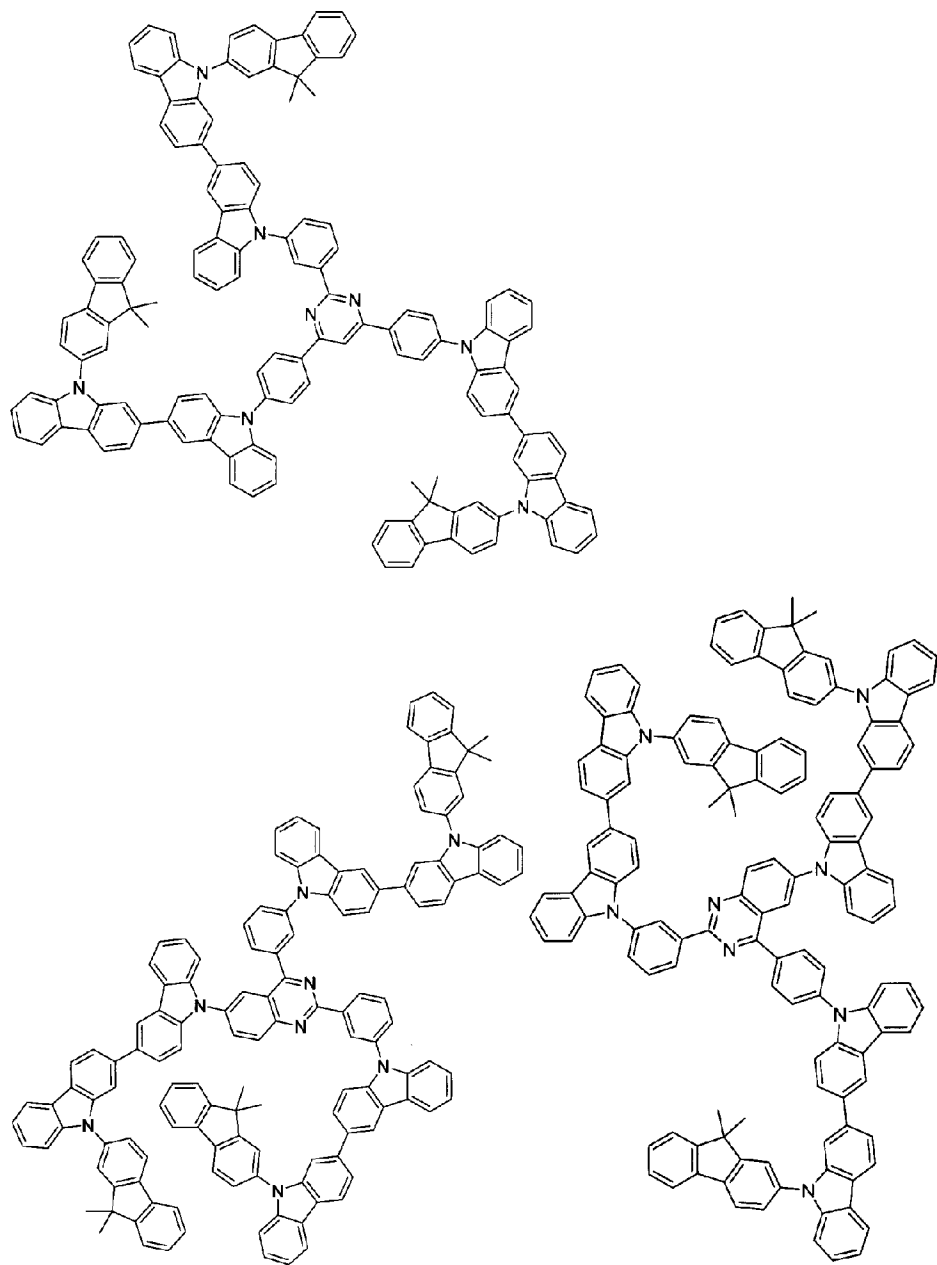
[0238]

[化198]



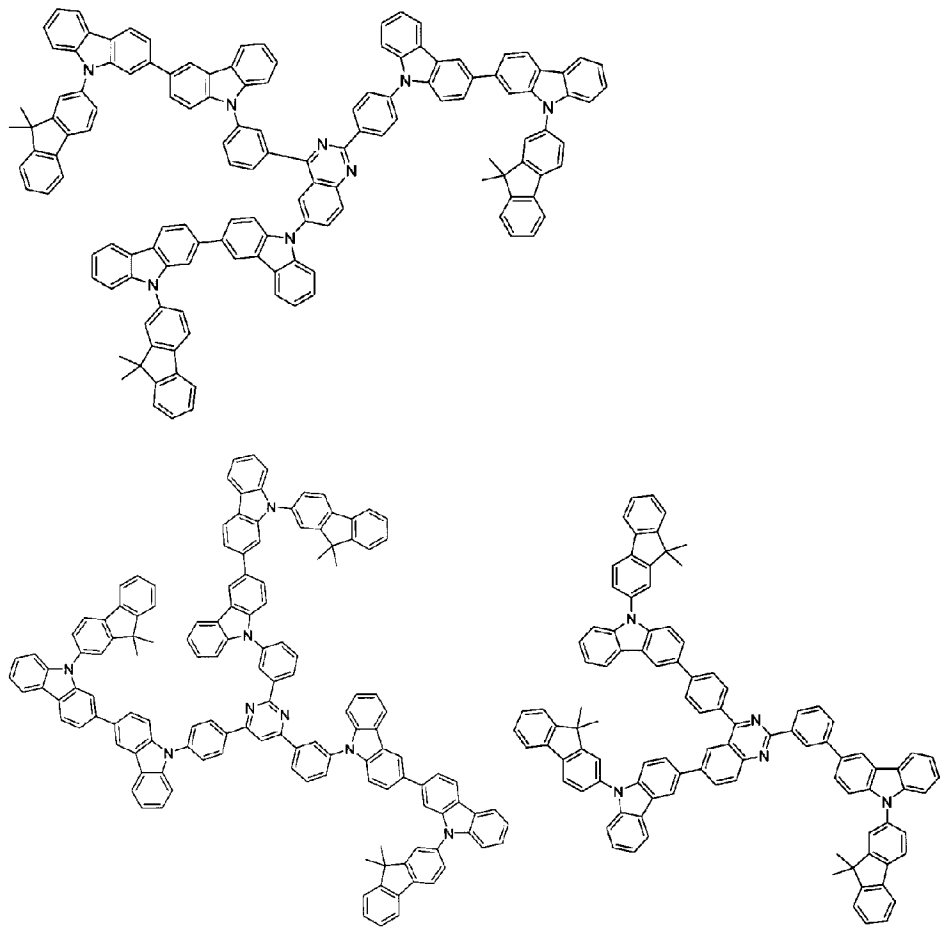
[0239]

[化199]



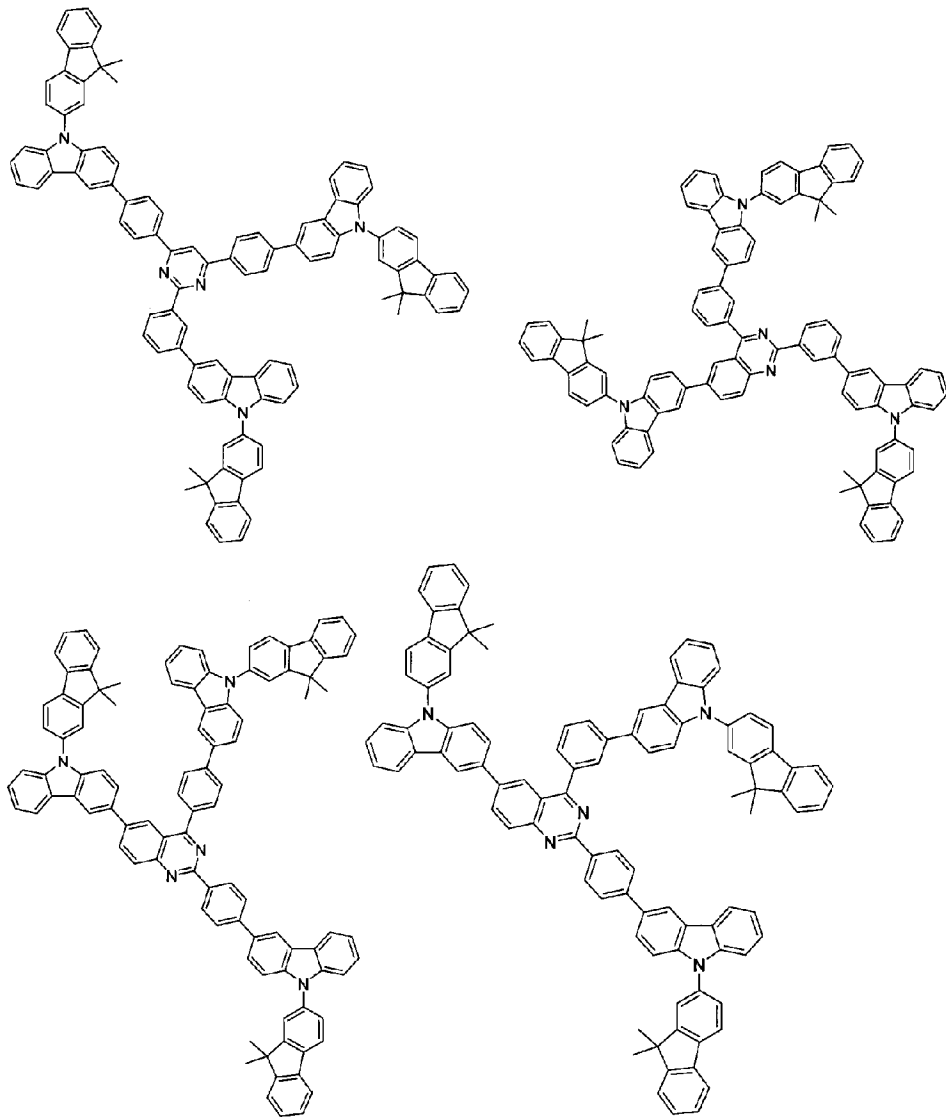
[0240]

[化200]



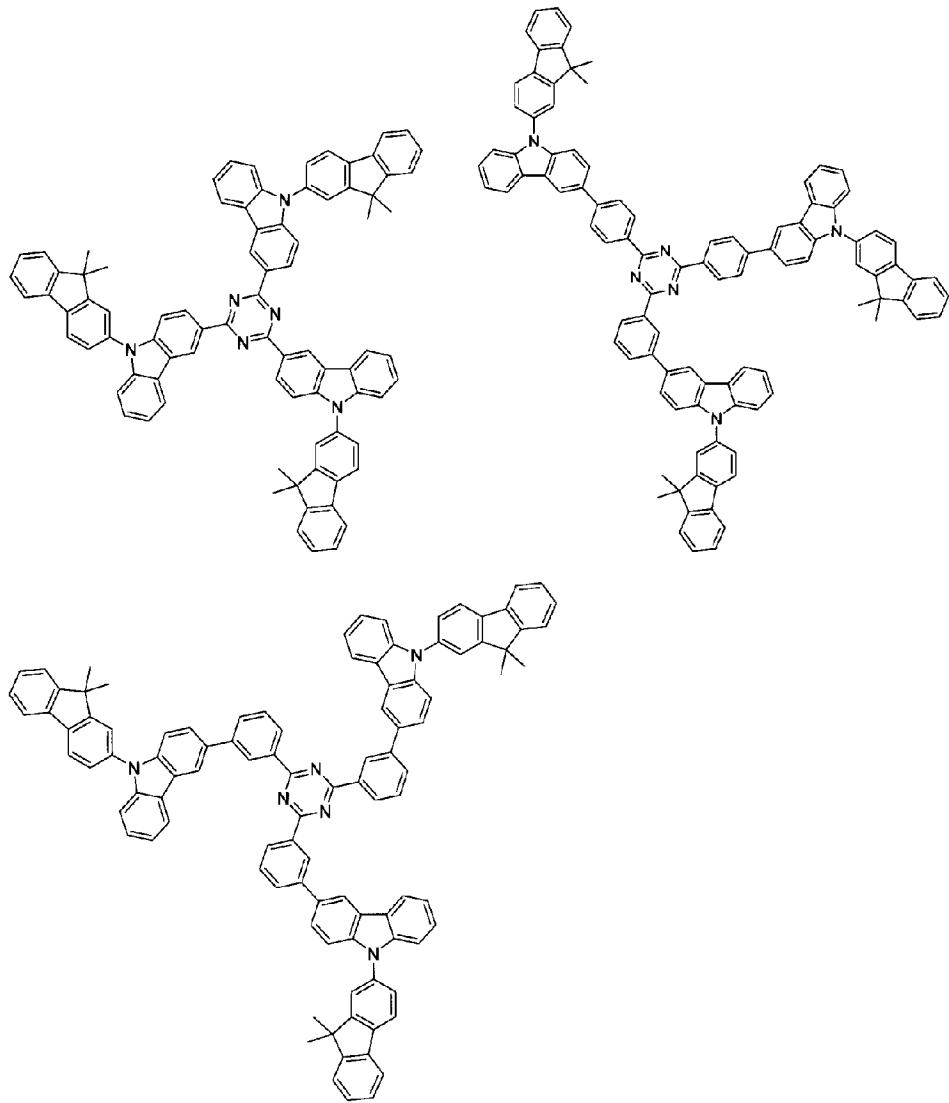
[0241]

[化201]



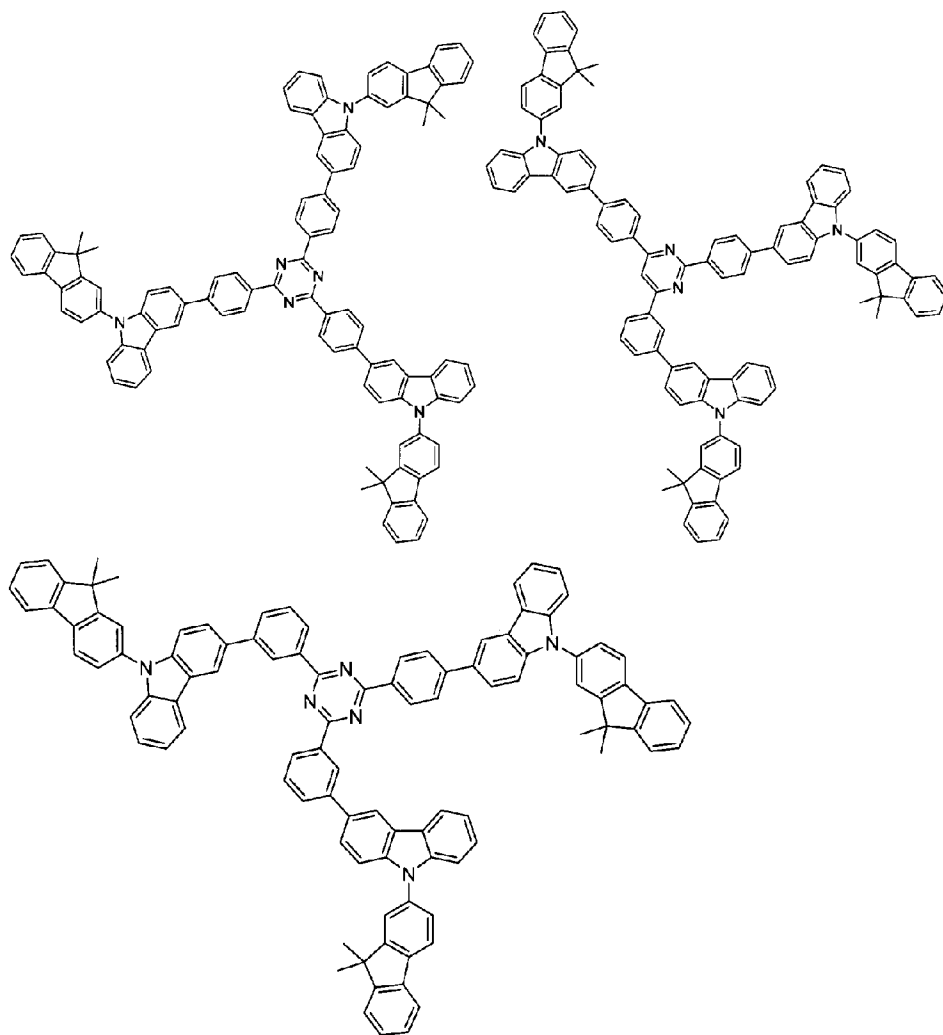
[0242]

[化202]



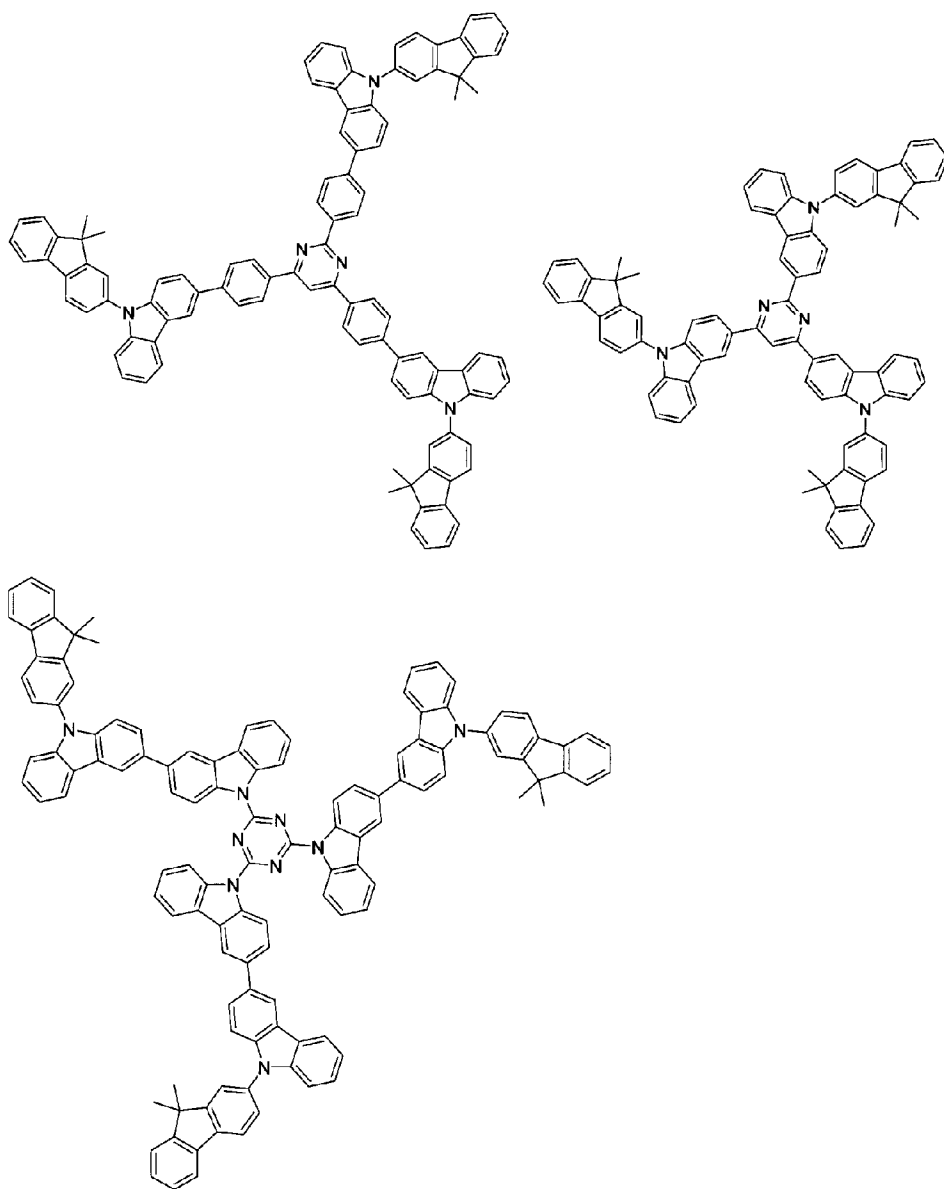
[0243]

[化203]



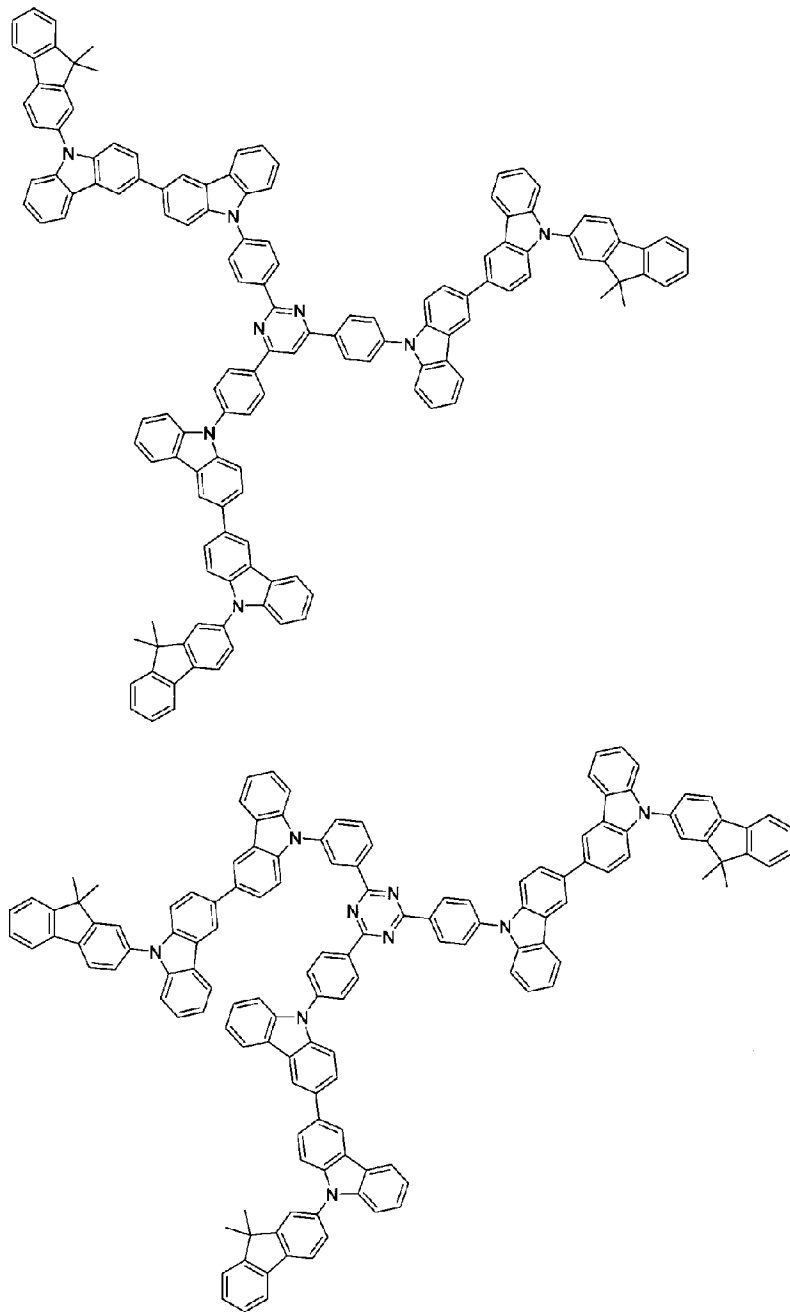
[0244]

[化204]



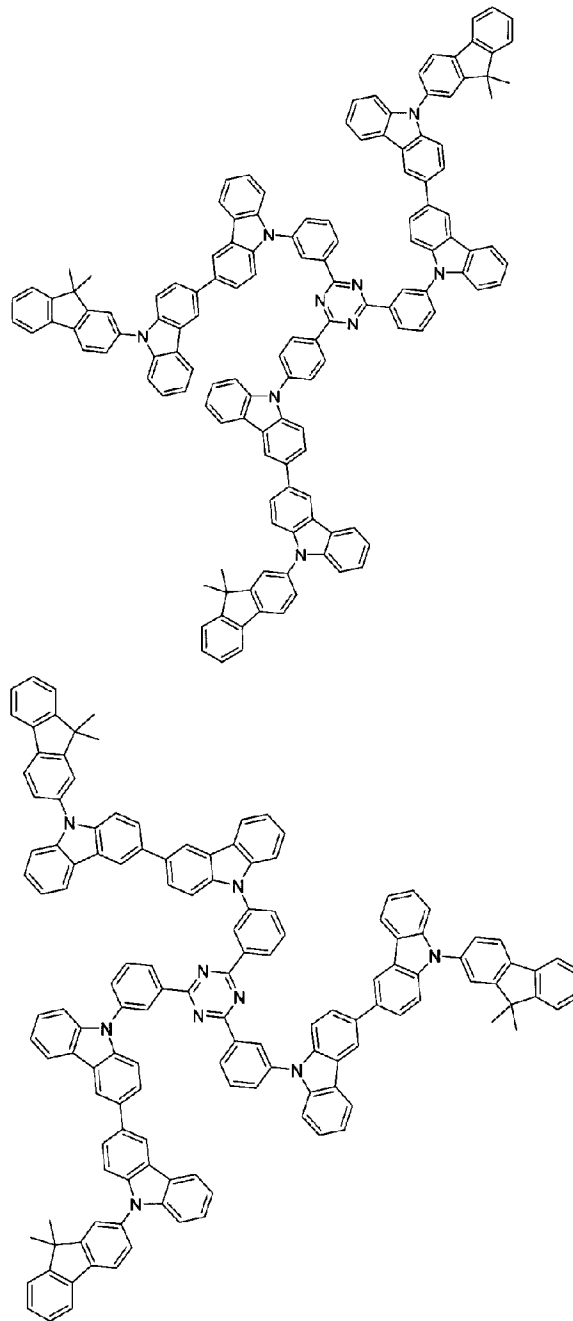
[0245]

[化205]



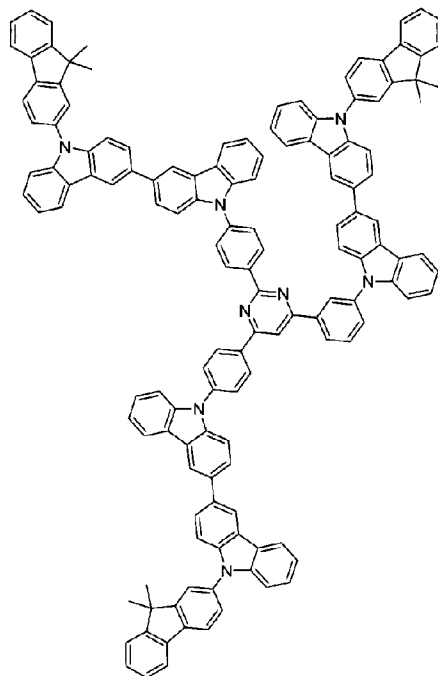
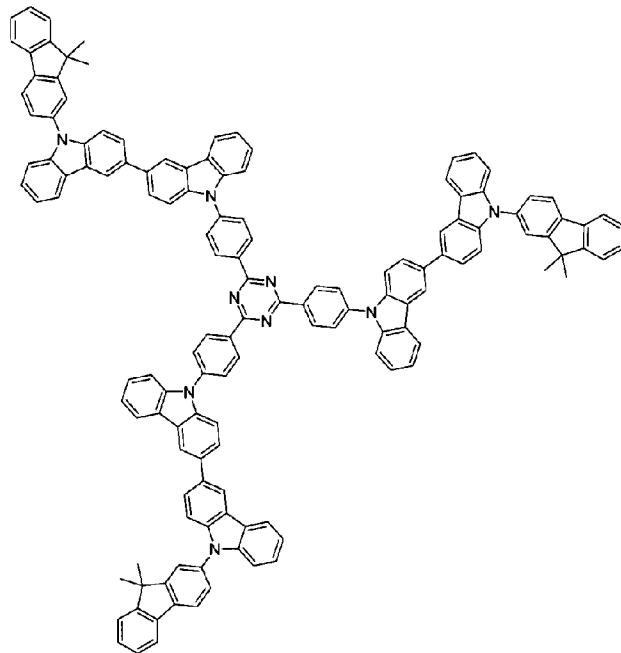
[0246]

[化206]



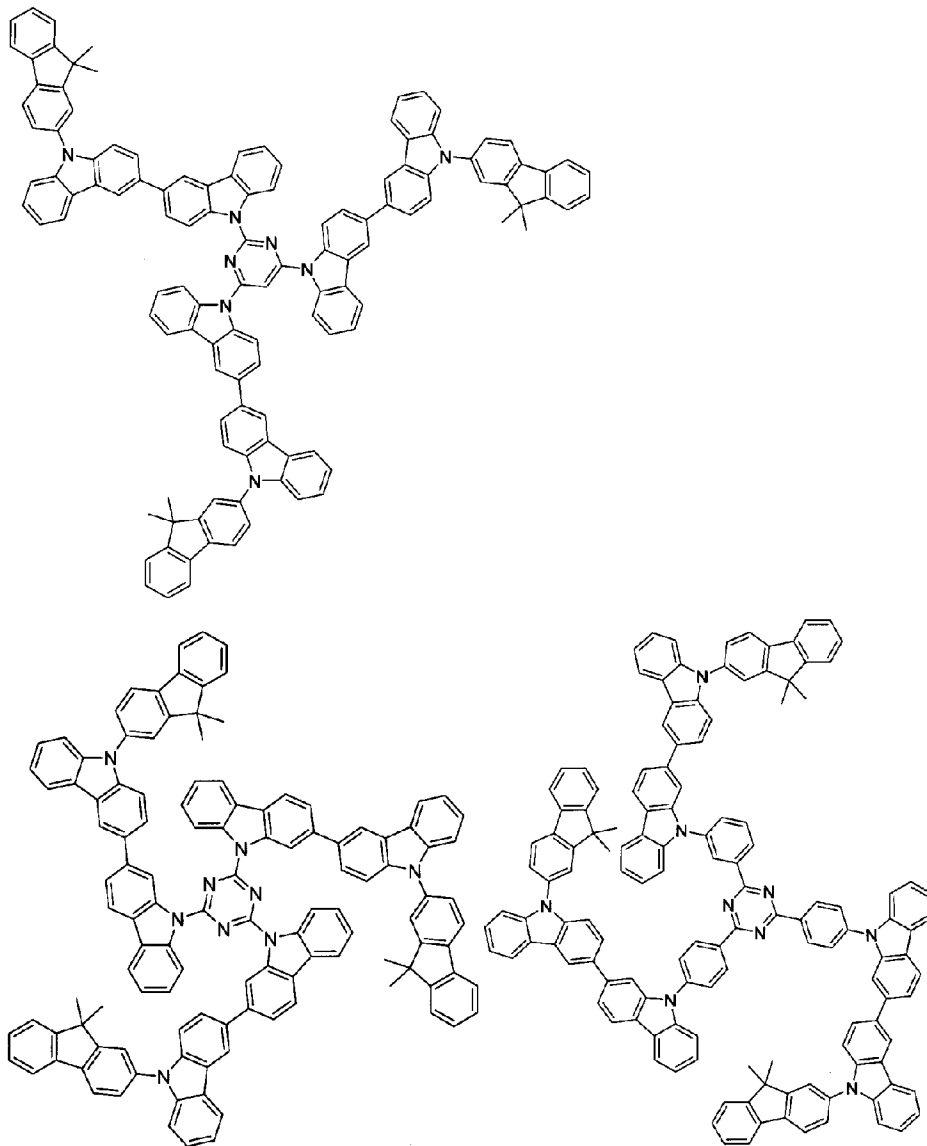
[0247]

[化207]



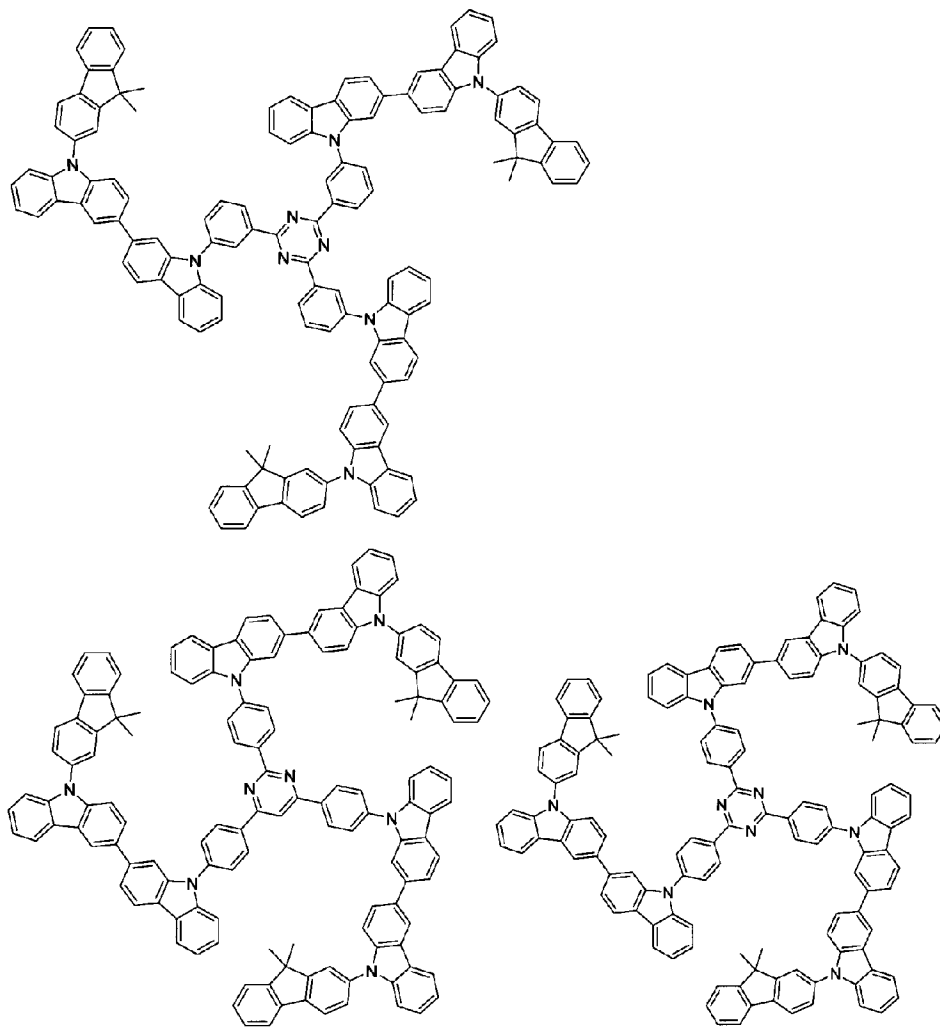
[0248]

[化208]



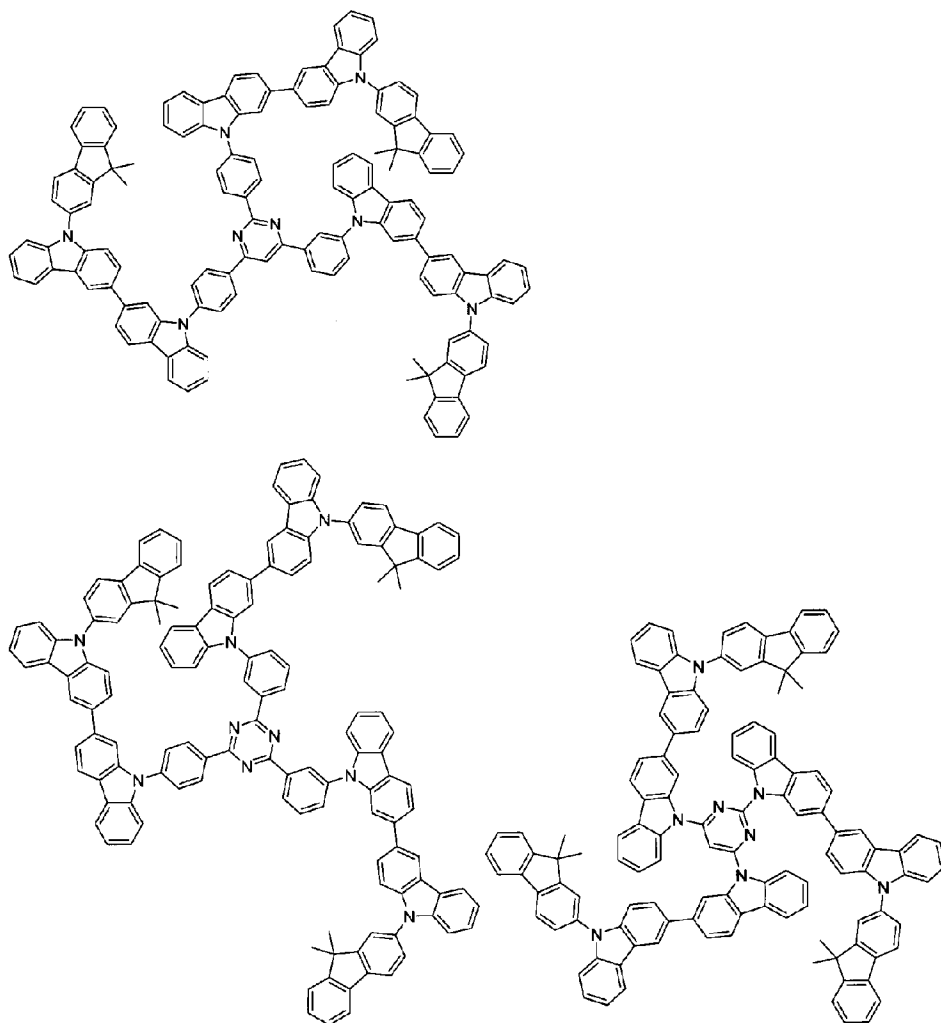
[0249]

[化209]



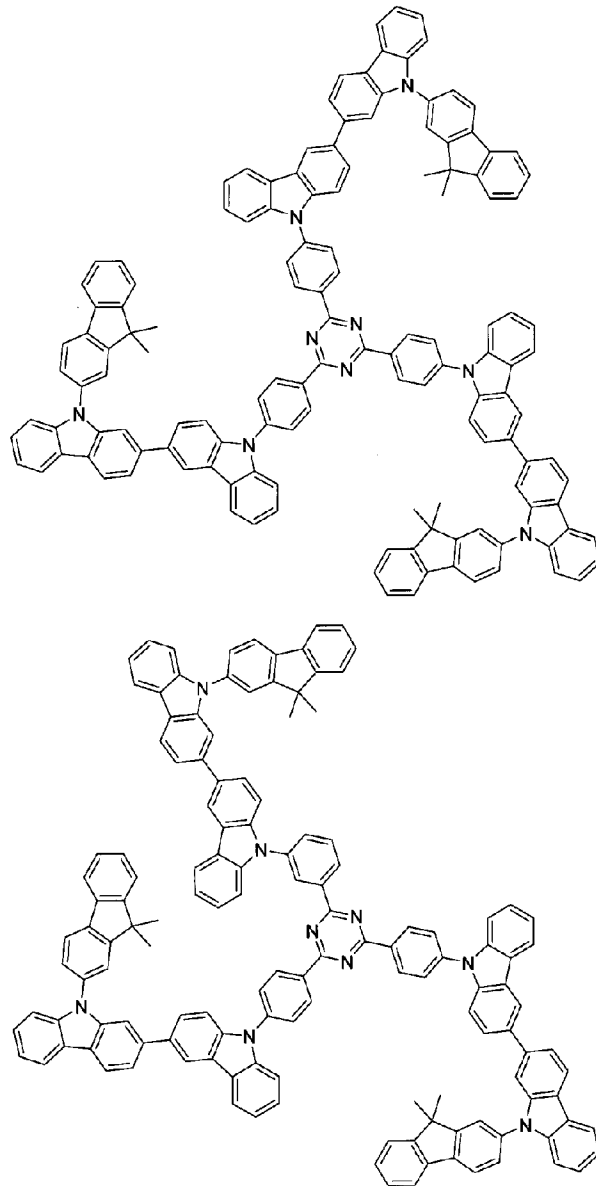
[0250]

[化210]



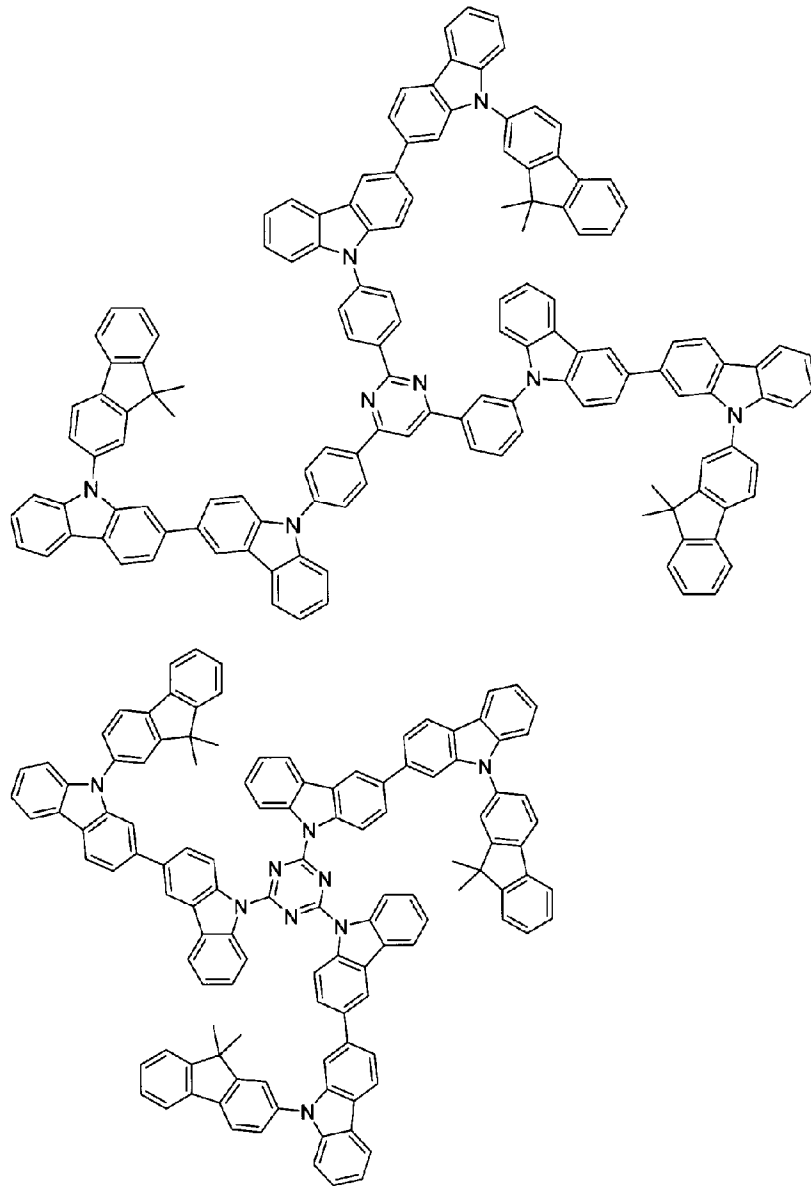
[0251]

[化211]



[0252]

[化212]



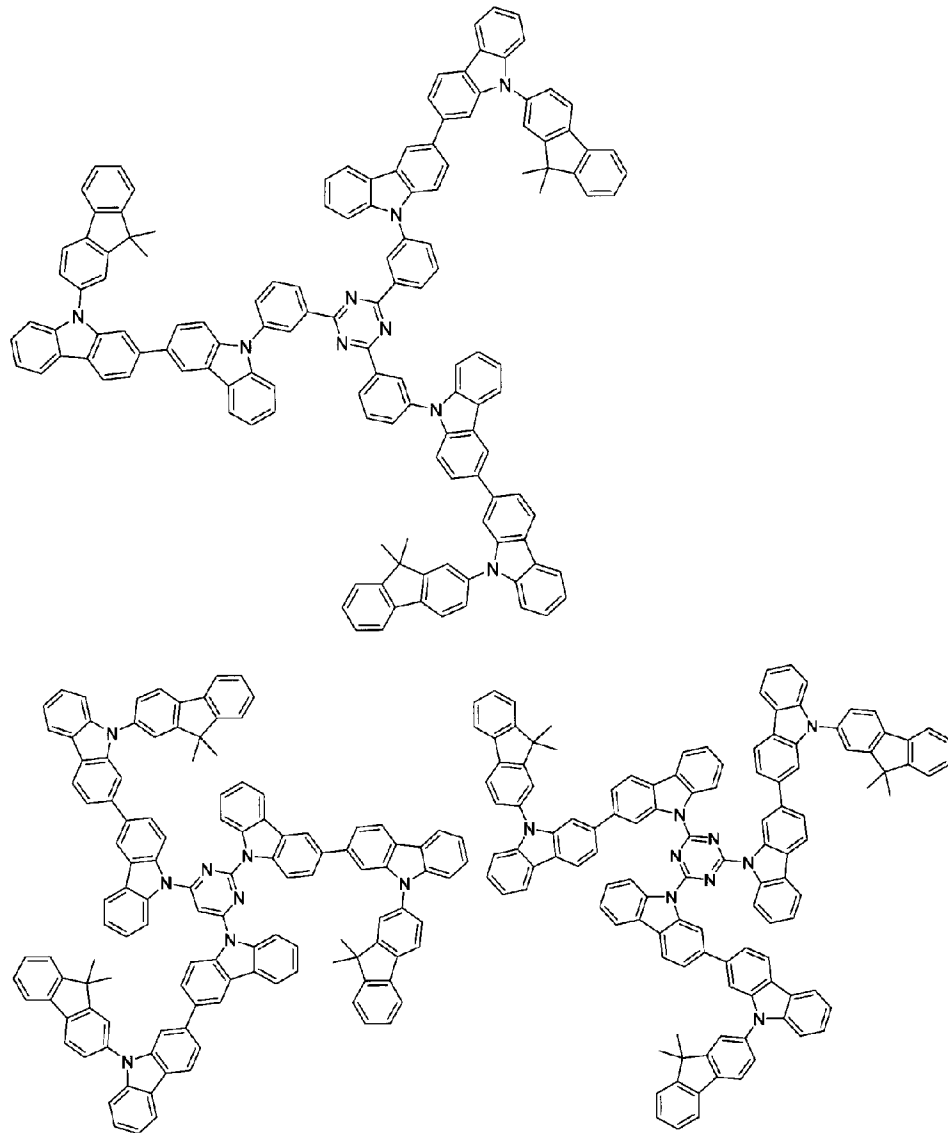
[0253]

[化213]



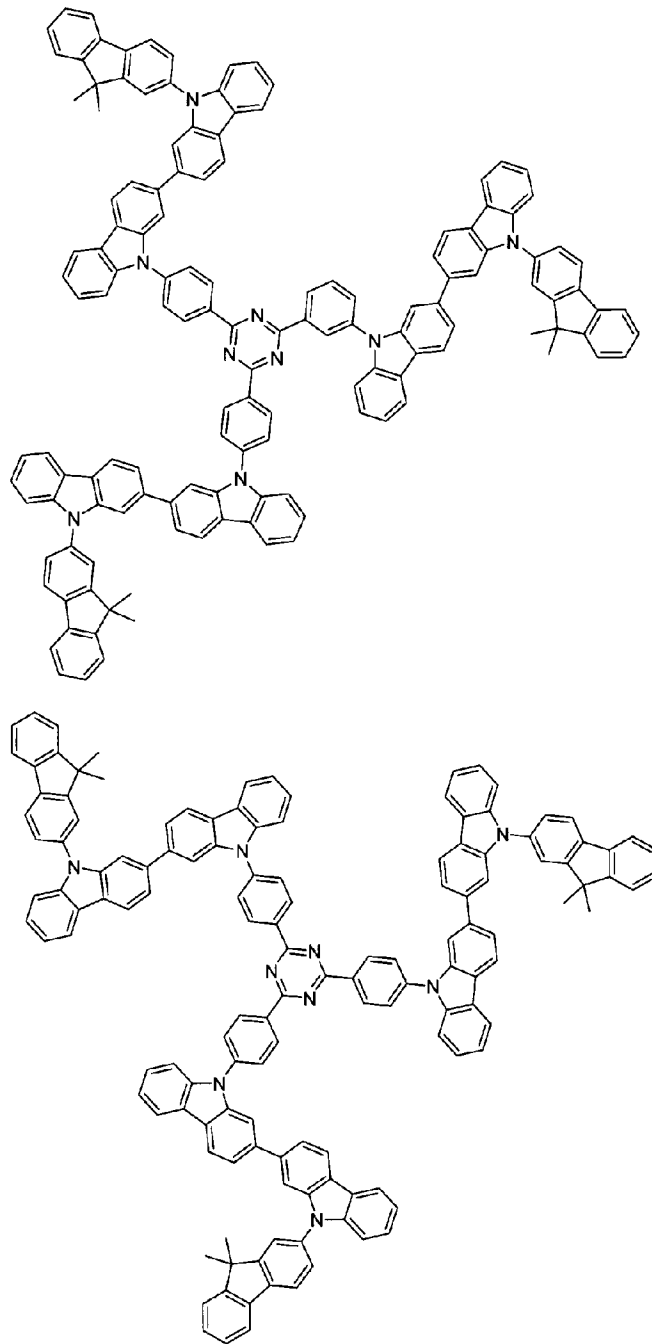
[0254]

[化214]



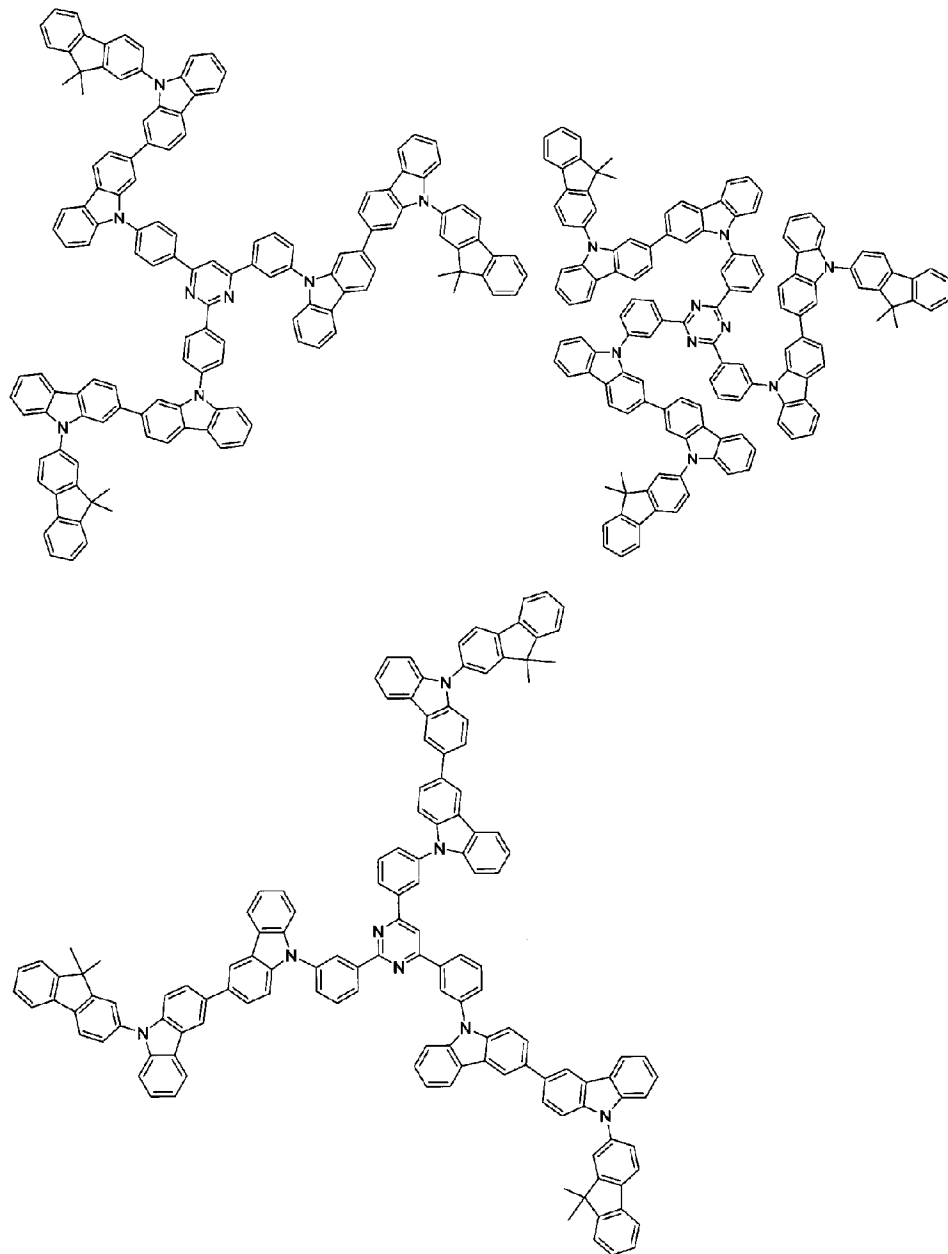
[0255]

[化215]



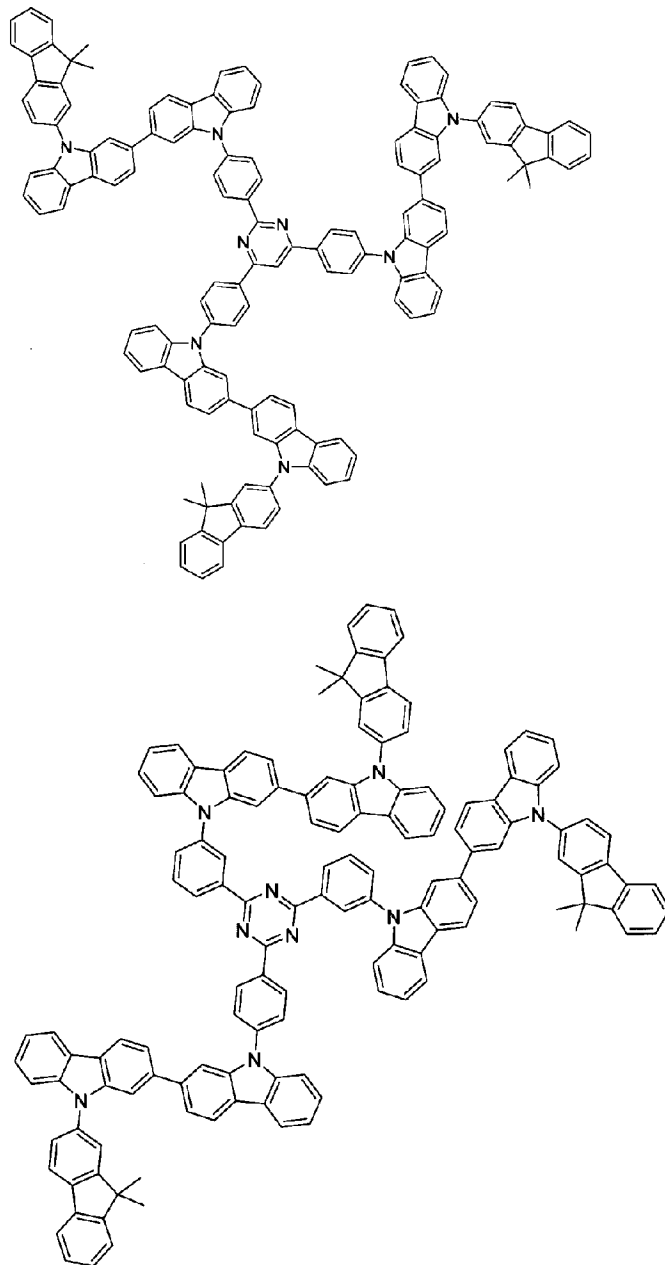
[0256]

[化216]



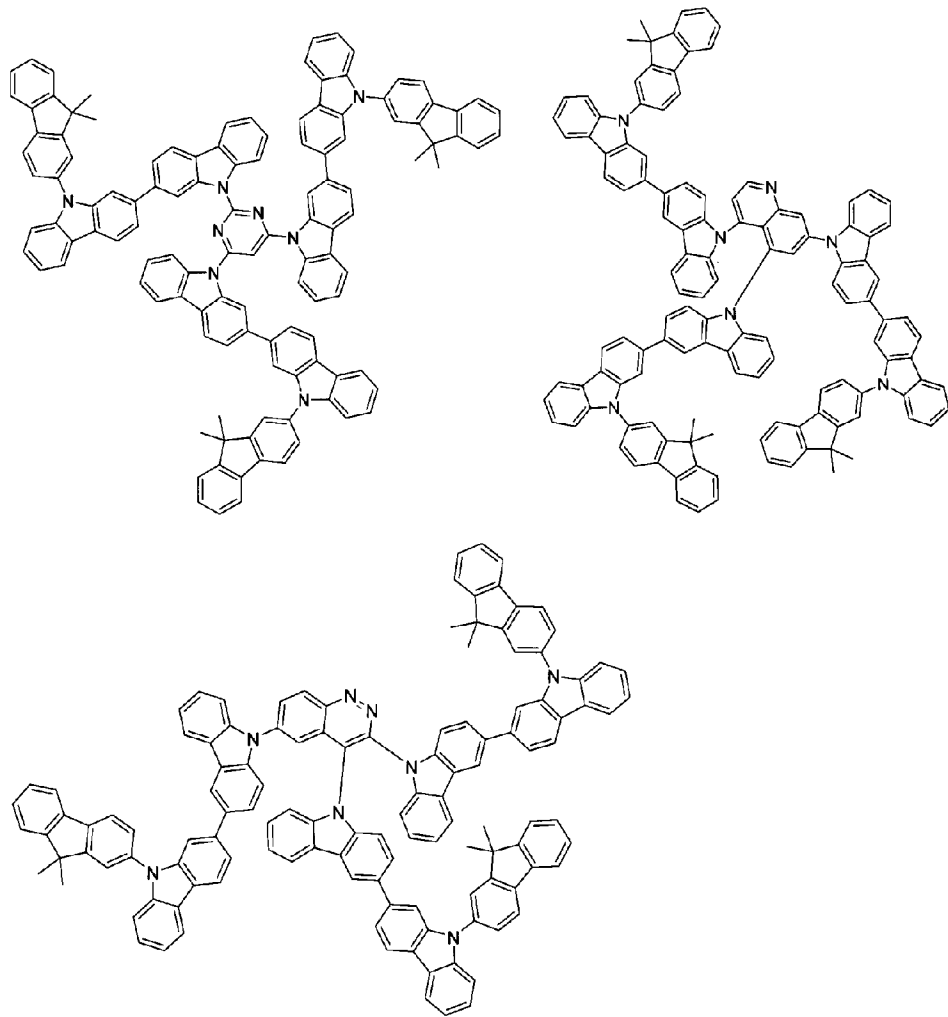
[0257]

[化217]



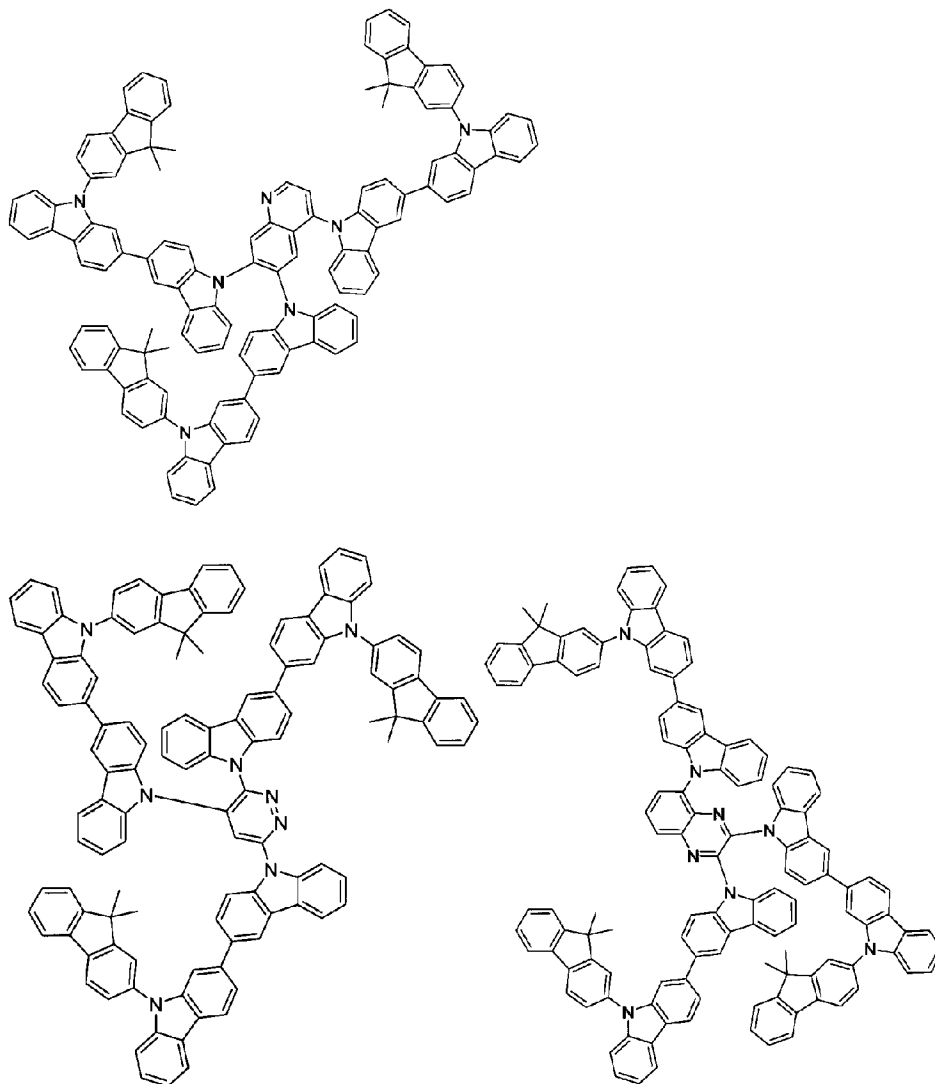
[0258]

[化218]



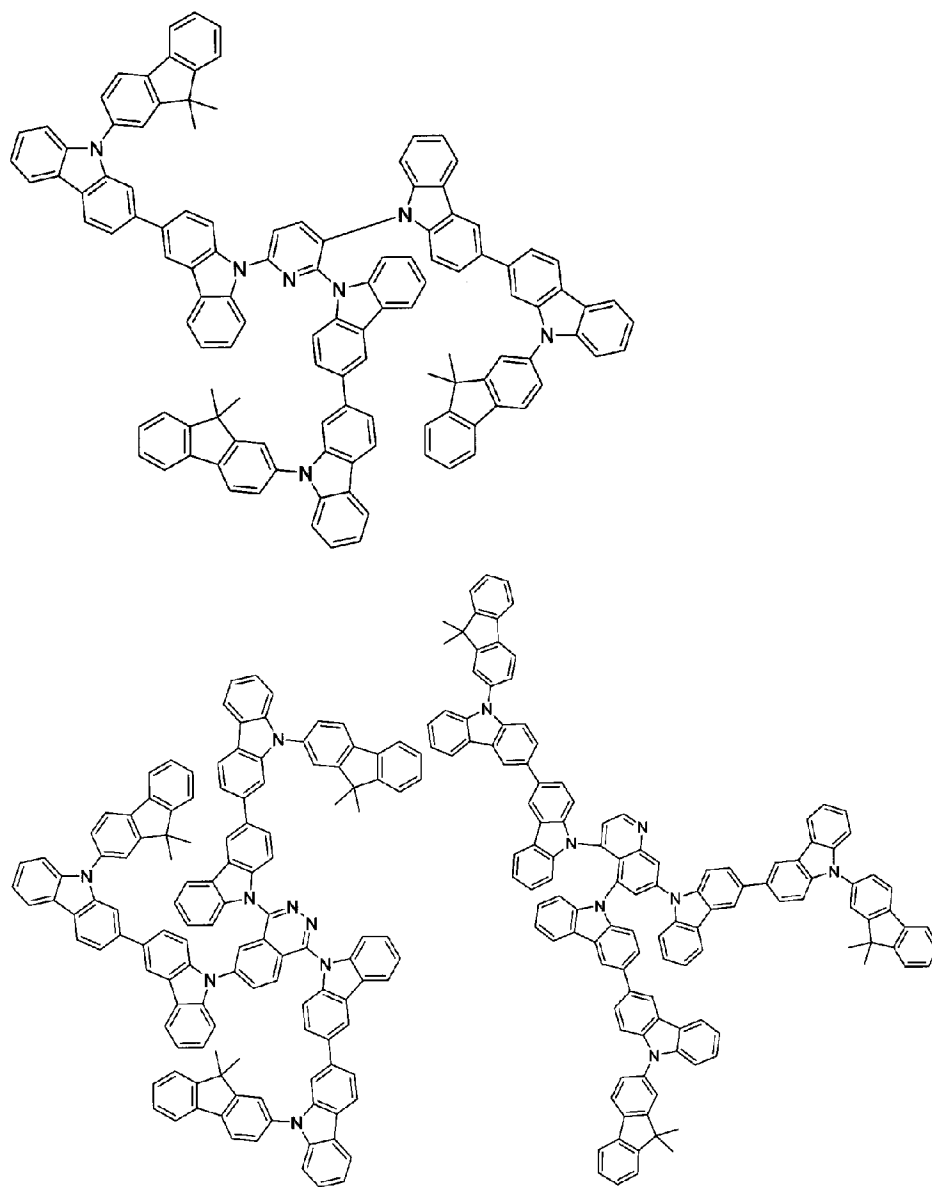
[0259]

[化219]



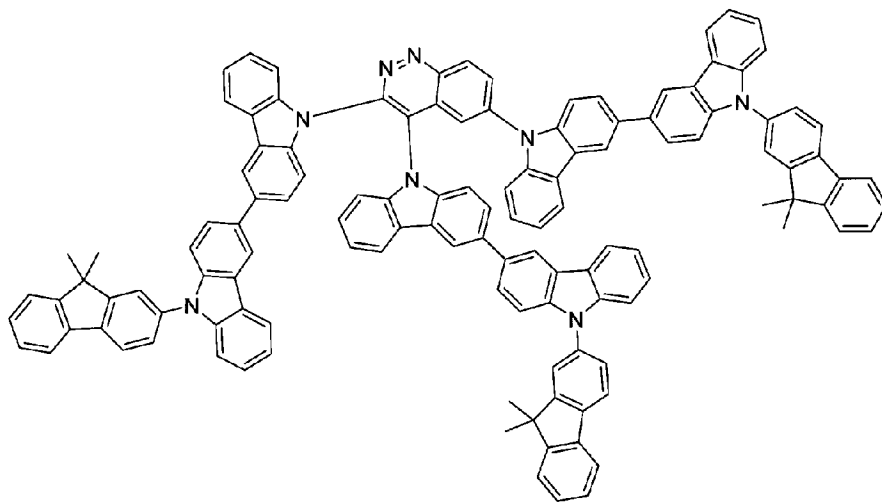
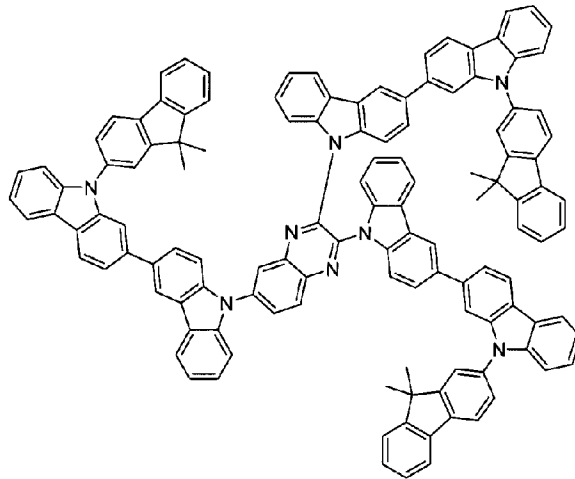
[0260]

[化220]



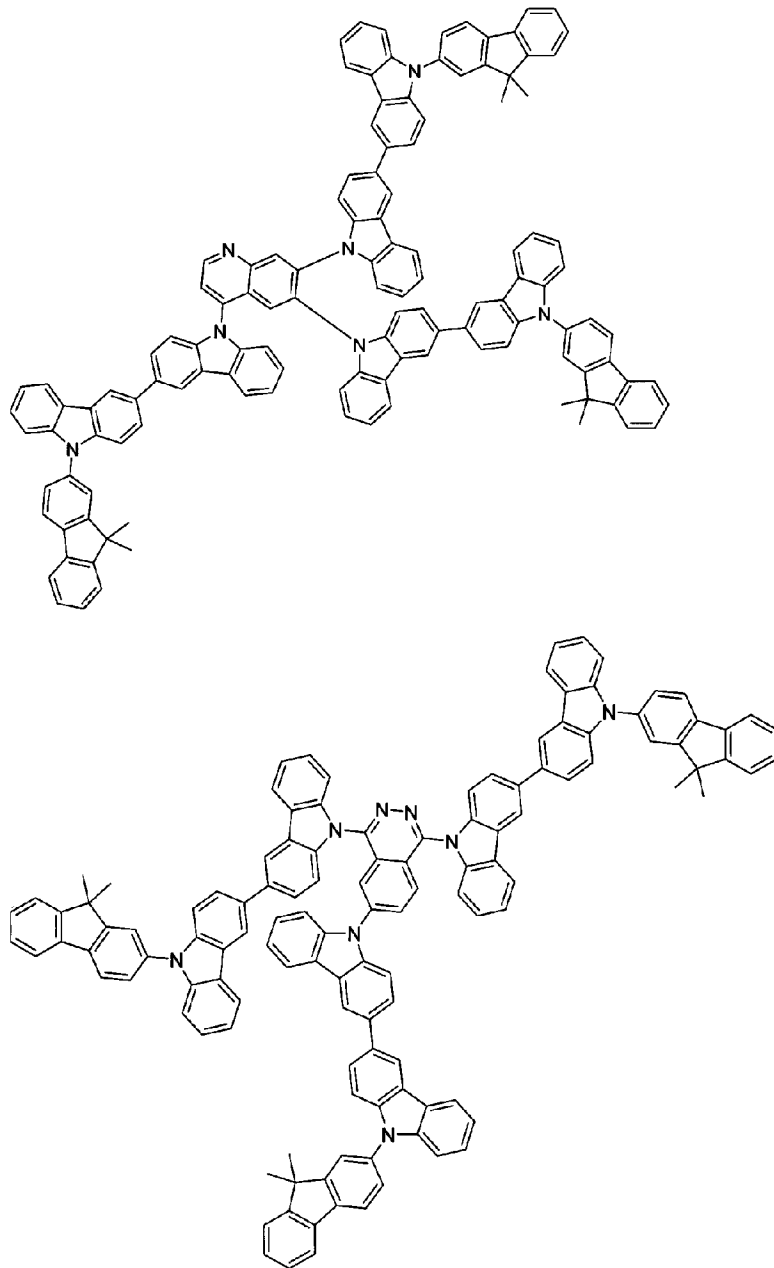
[0261]

[化221]



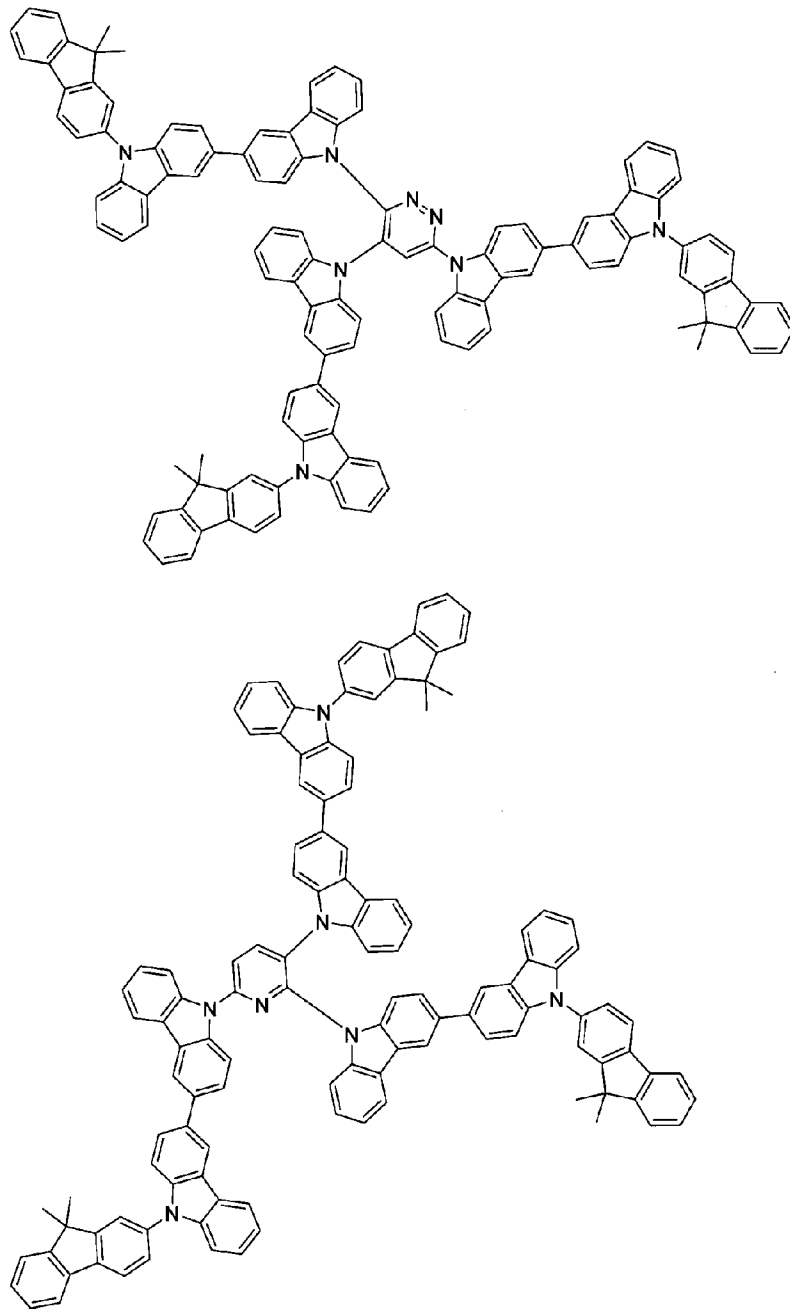
[0262]

[化222]



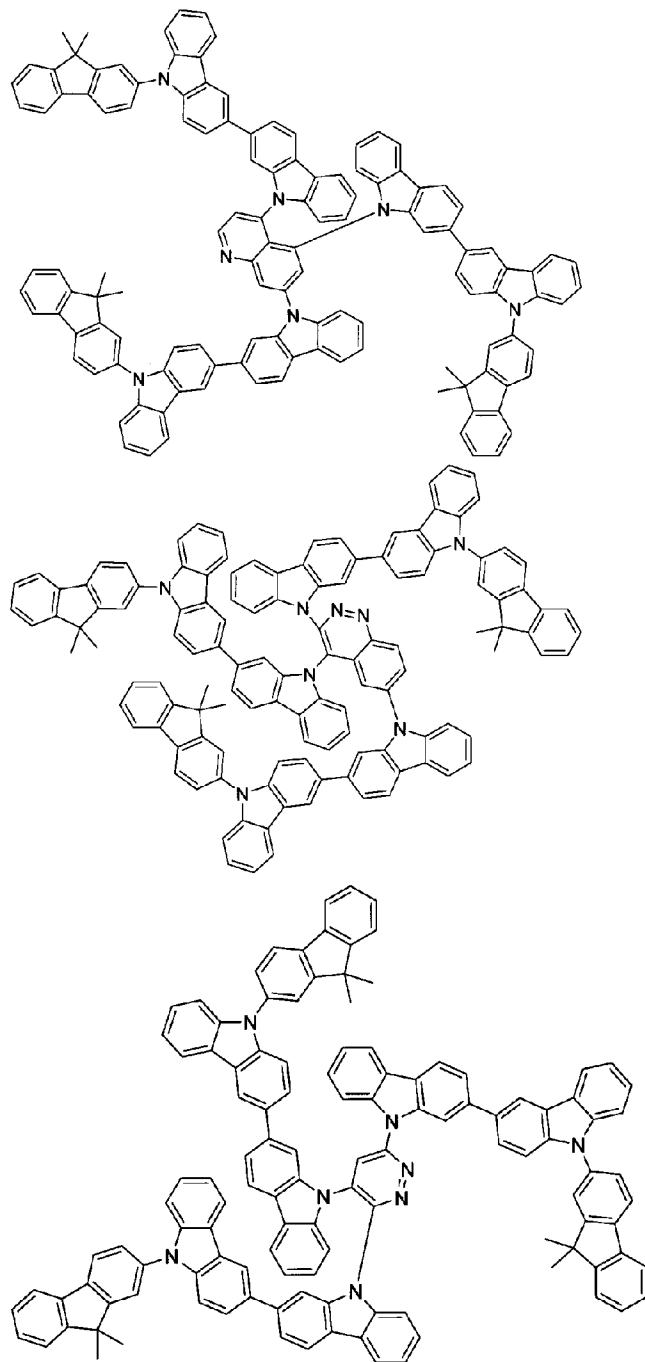
[0263]

[化224]



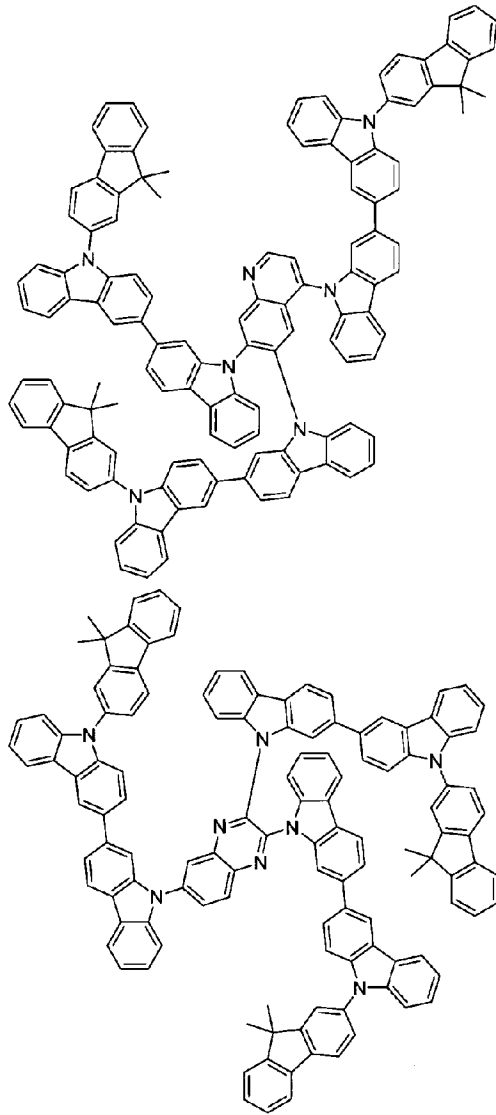
[0265]

[化225]



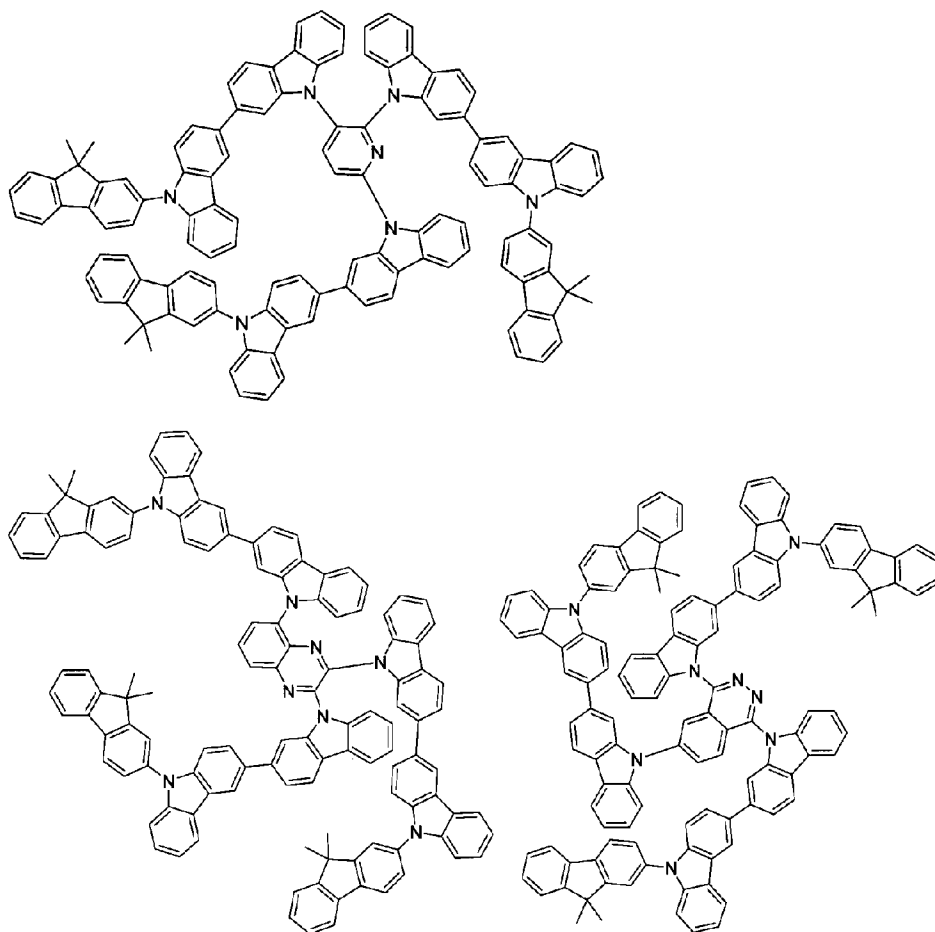
[0266]

[化226]



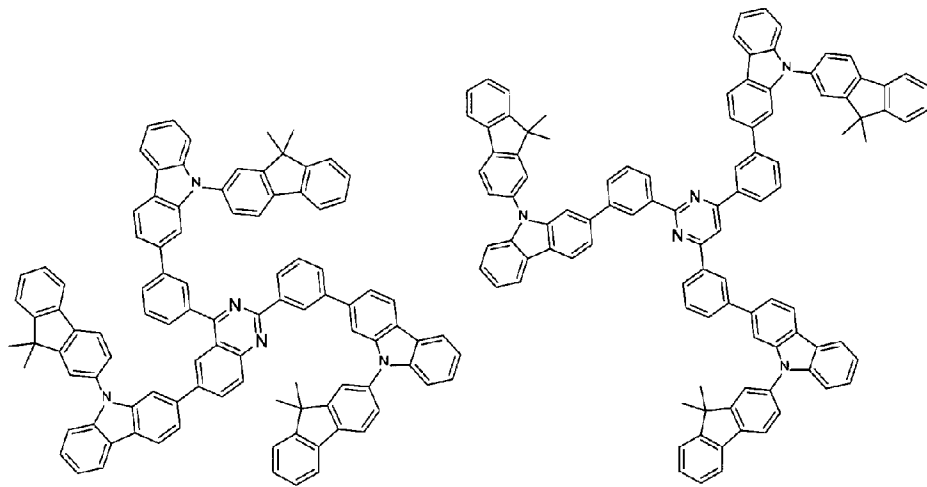
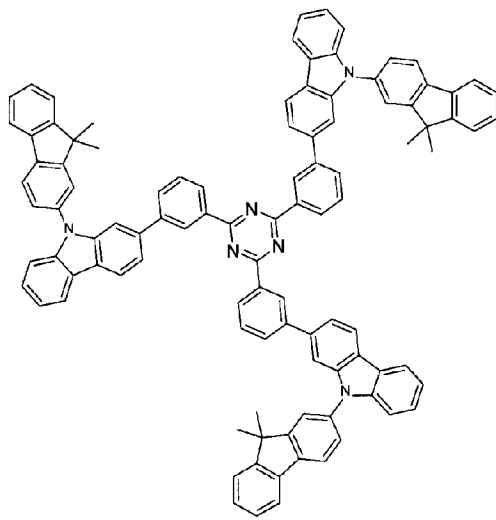
[0267]

[化227]



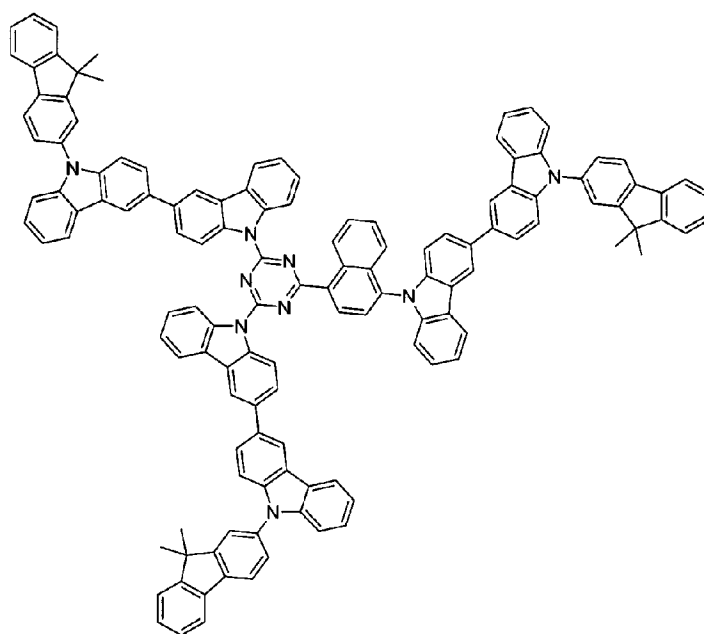
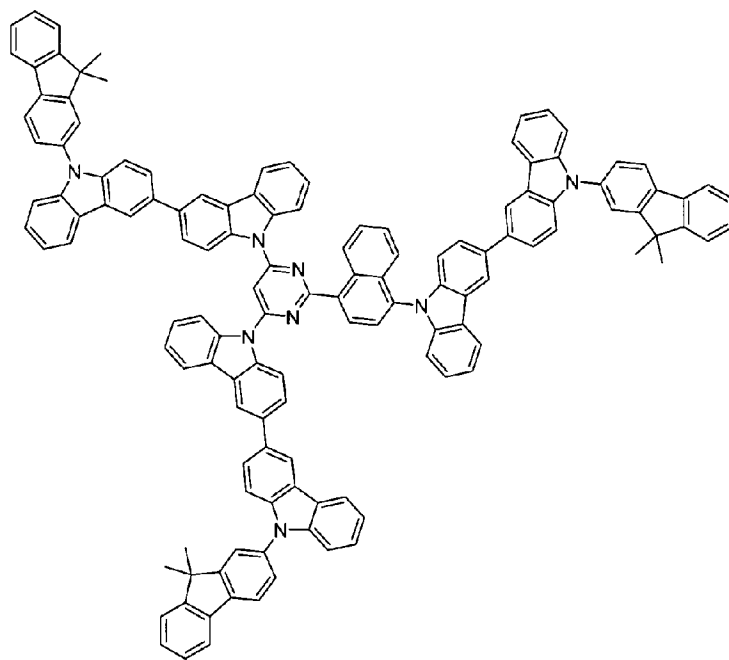
[0268]

[化228]



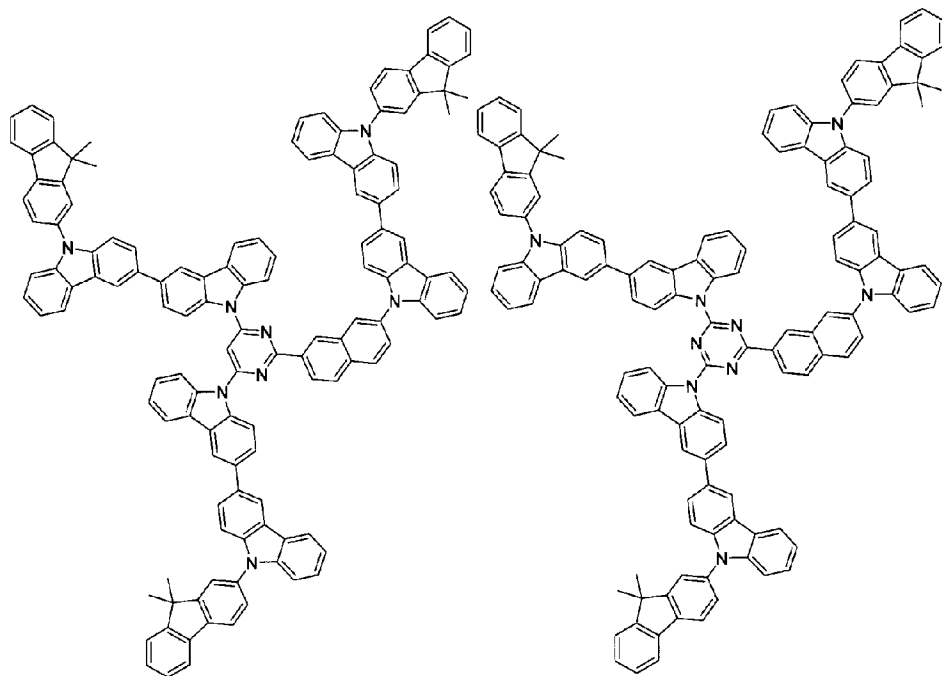
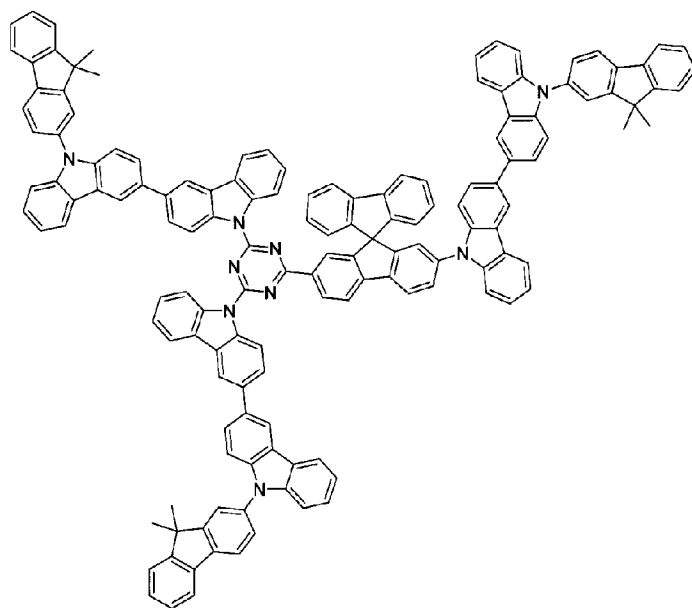
[0269]

[化229]



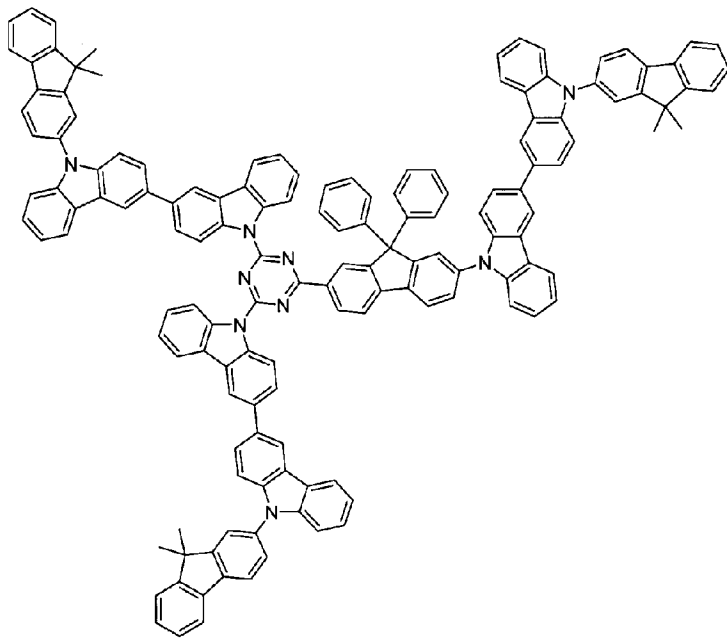
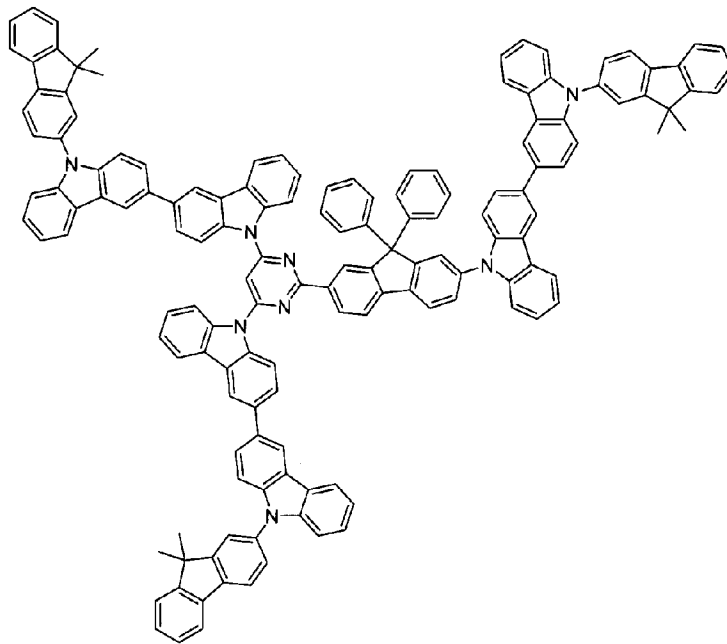
[0270]

[化230]



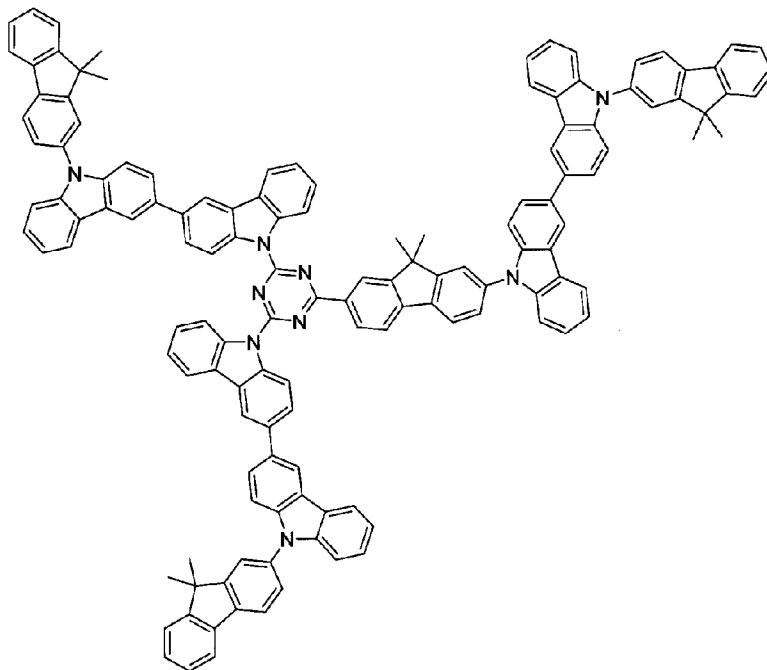
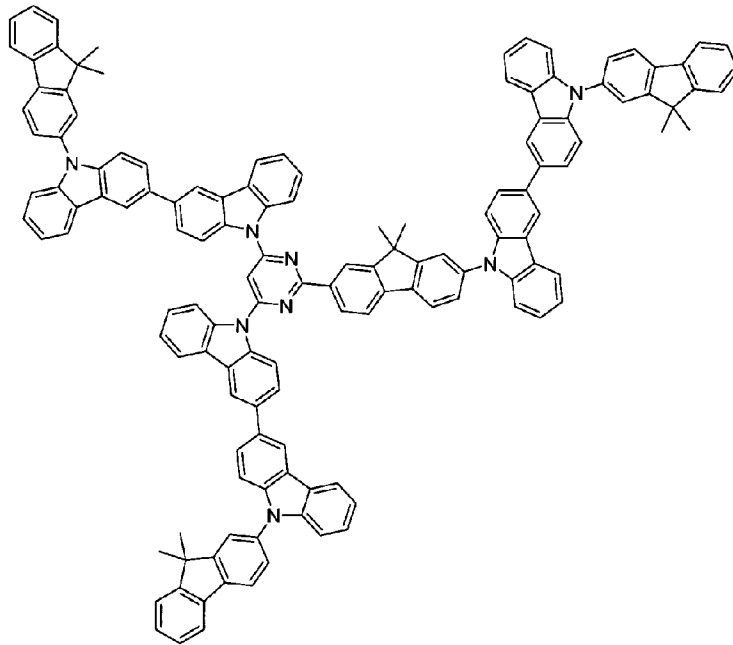
[0271]

[化231]



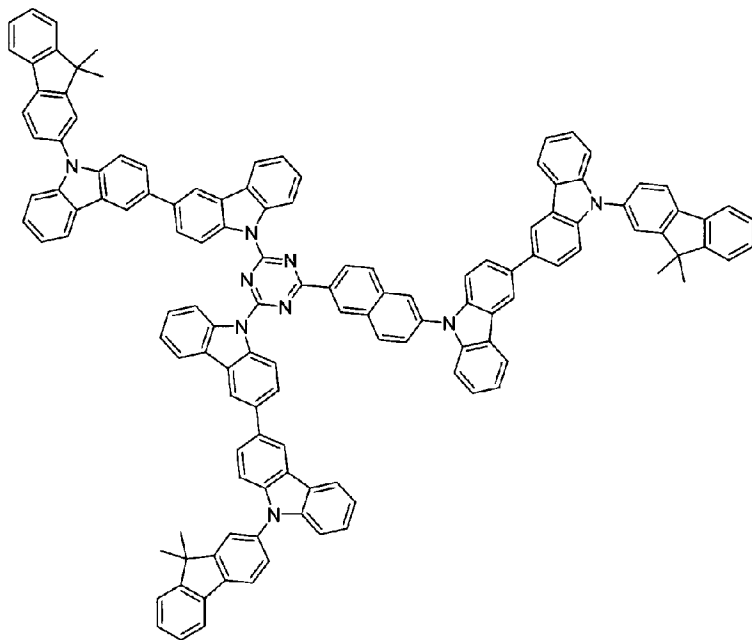
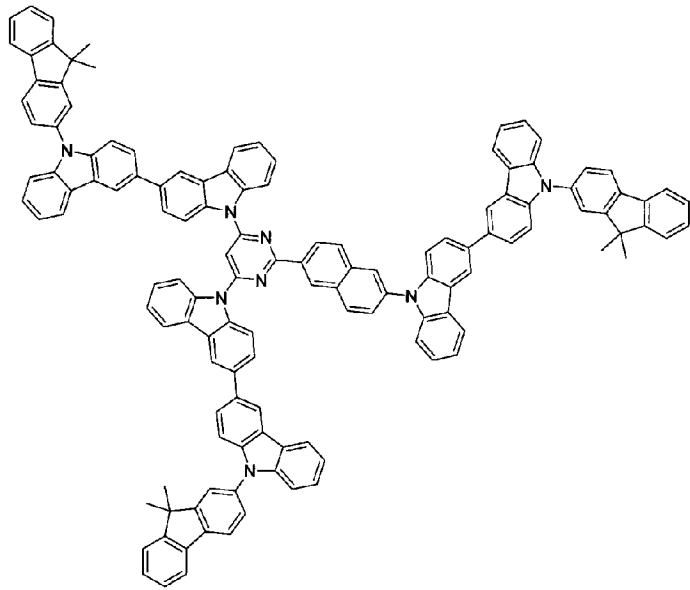
[0272]

[化232]



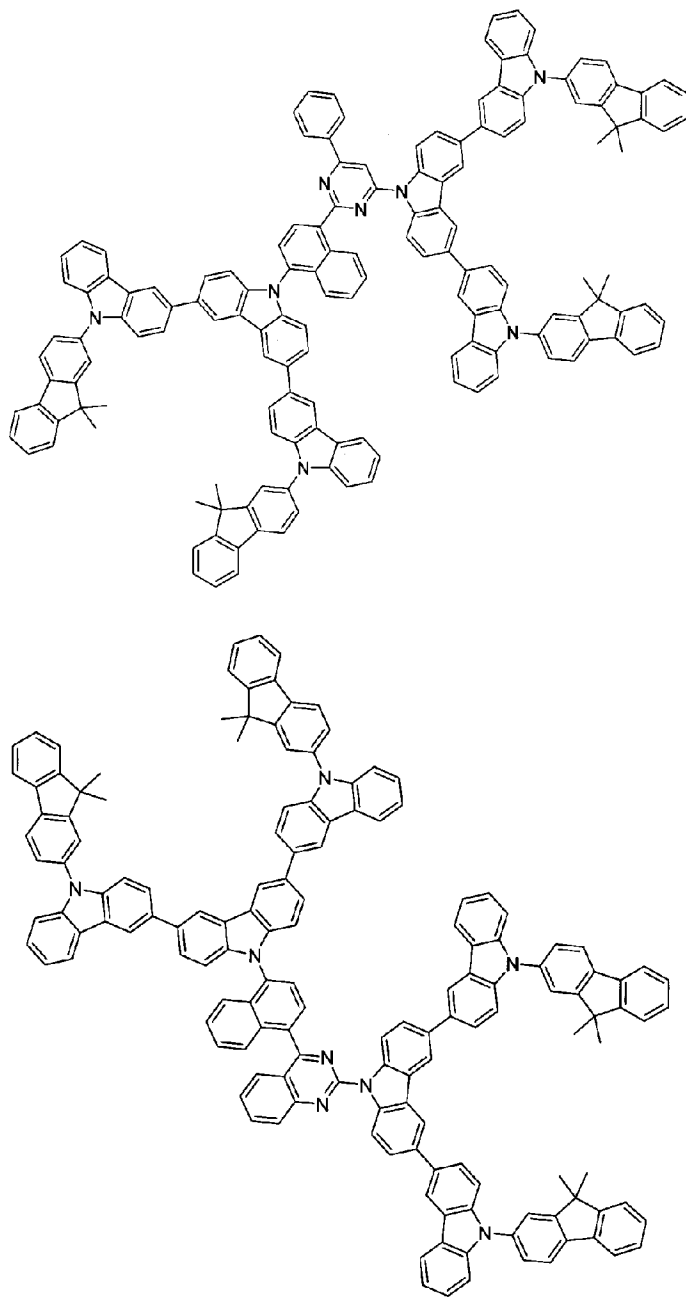
[0273]

[化233]



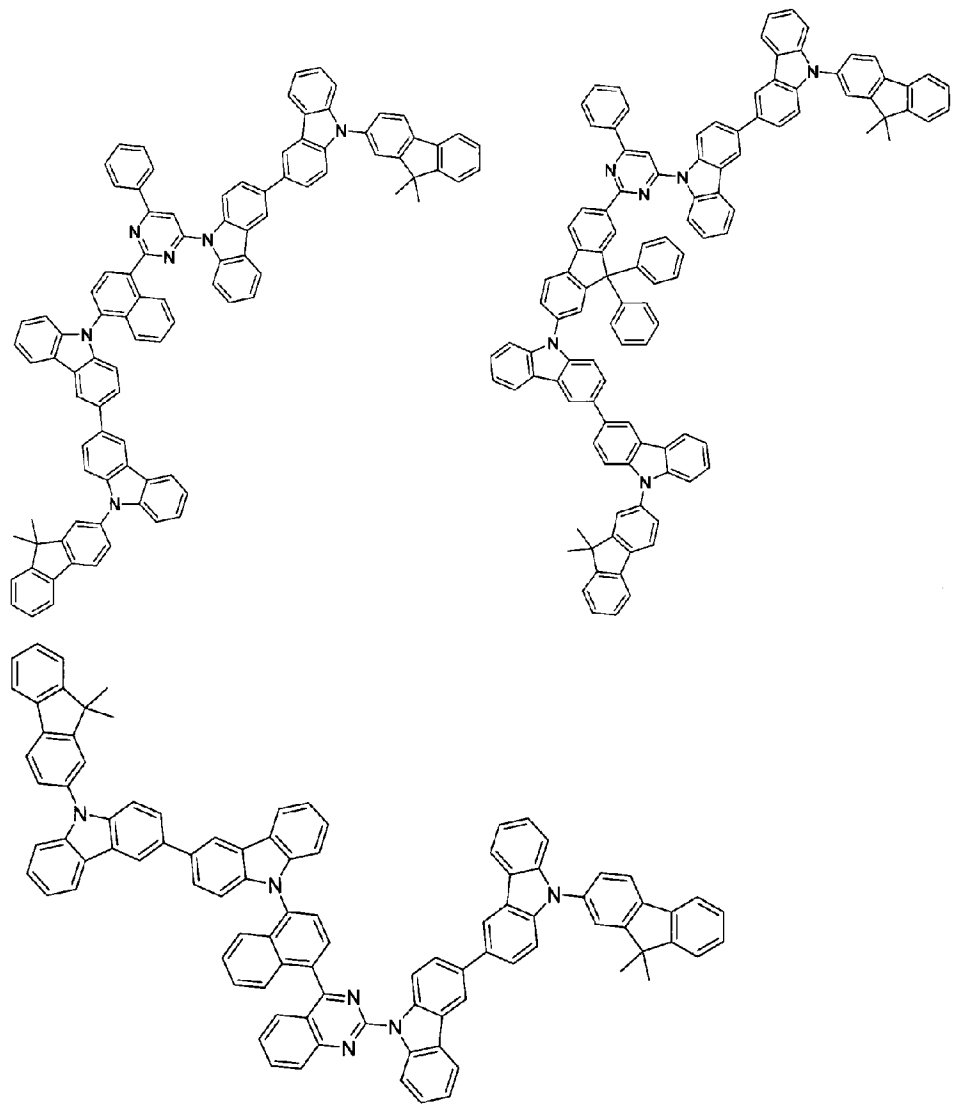
[0274]

[化234]



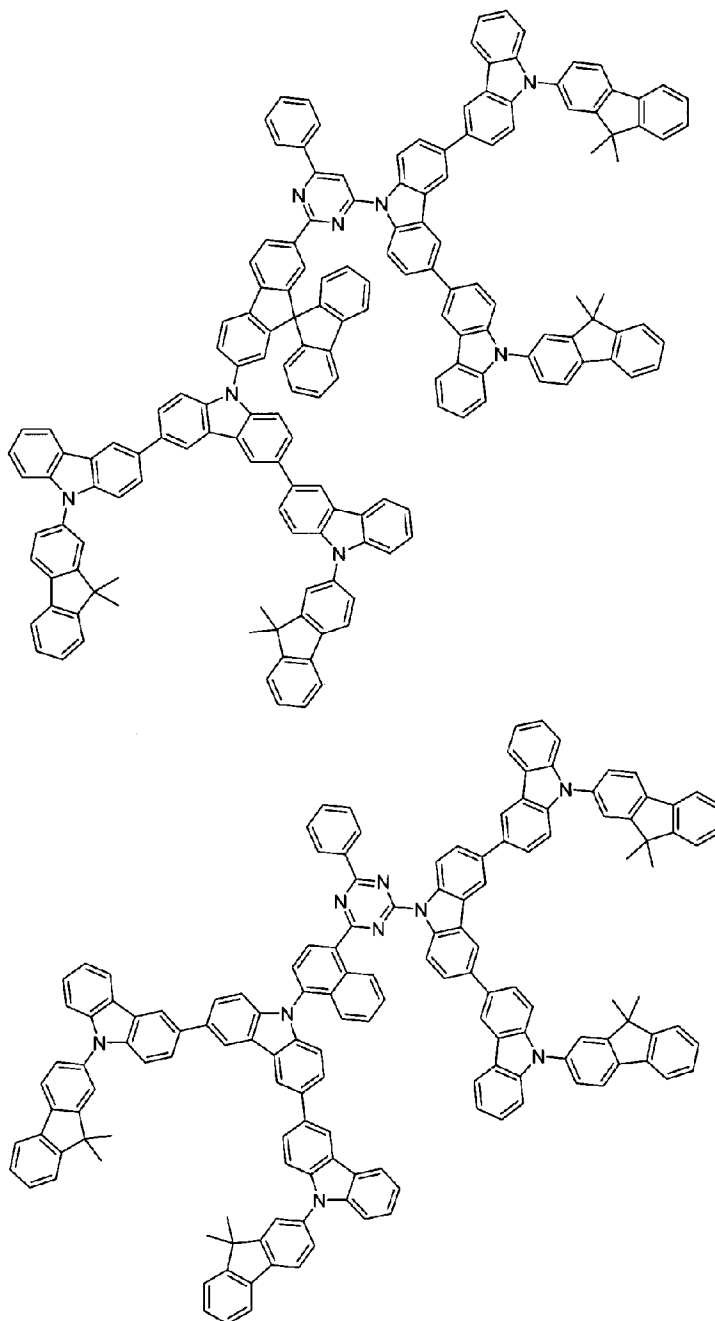
[0275]

[化235]



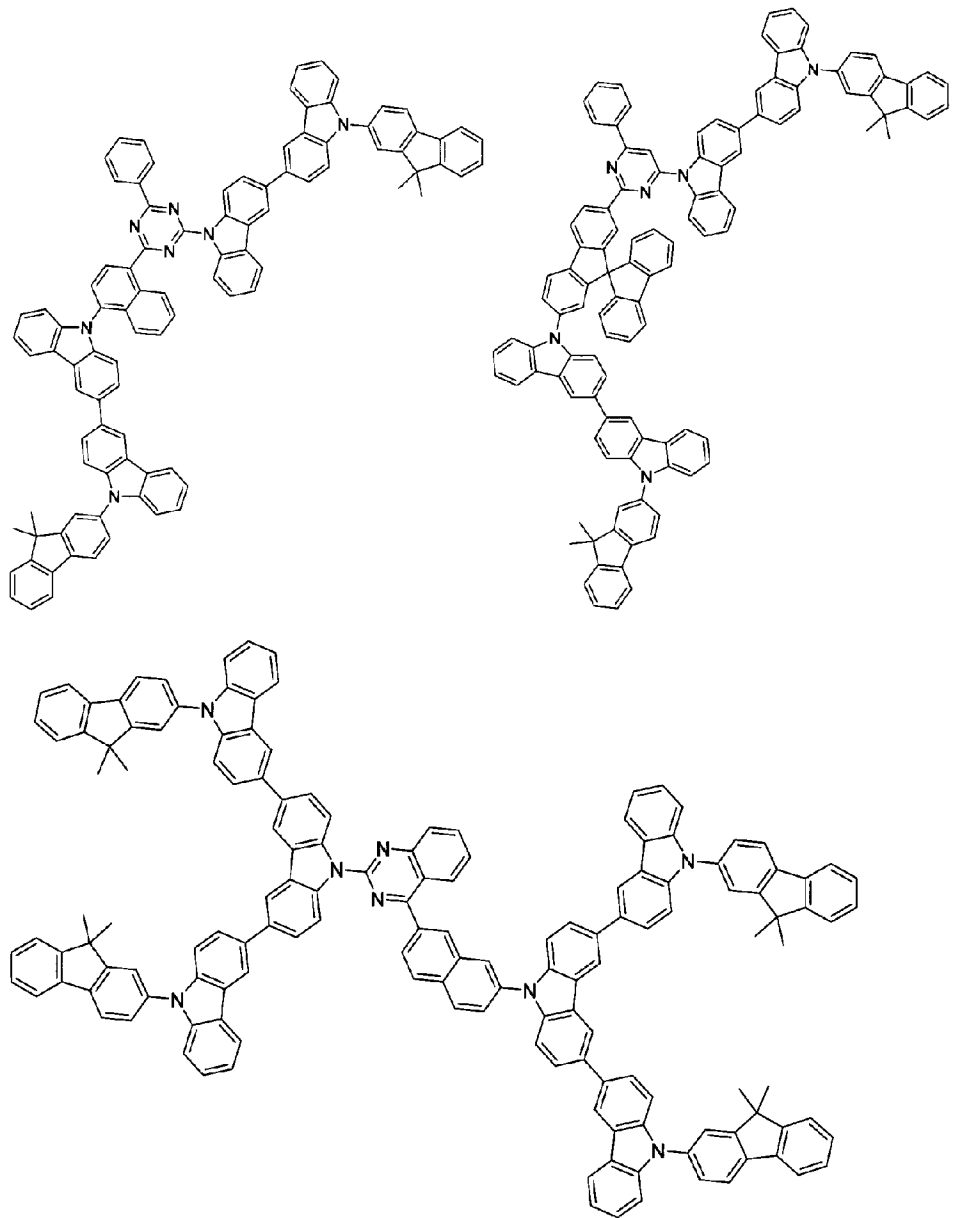
[0276]

[化236]



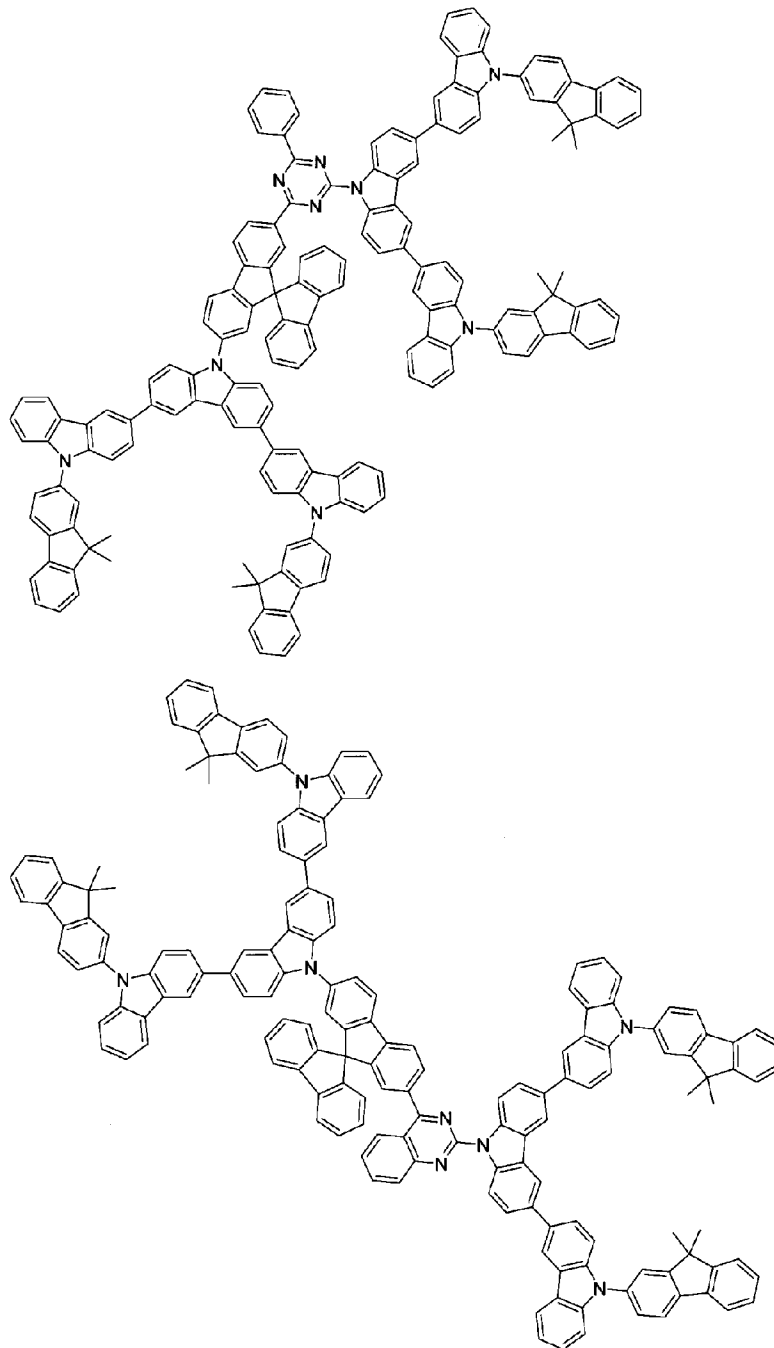
[0277]

[化237]



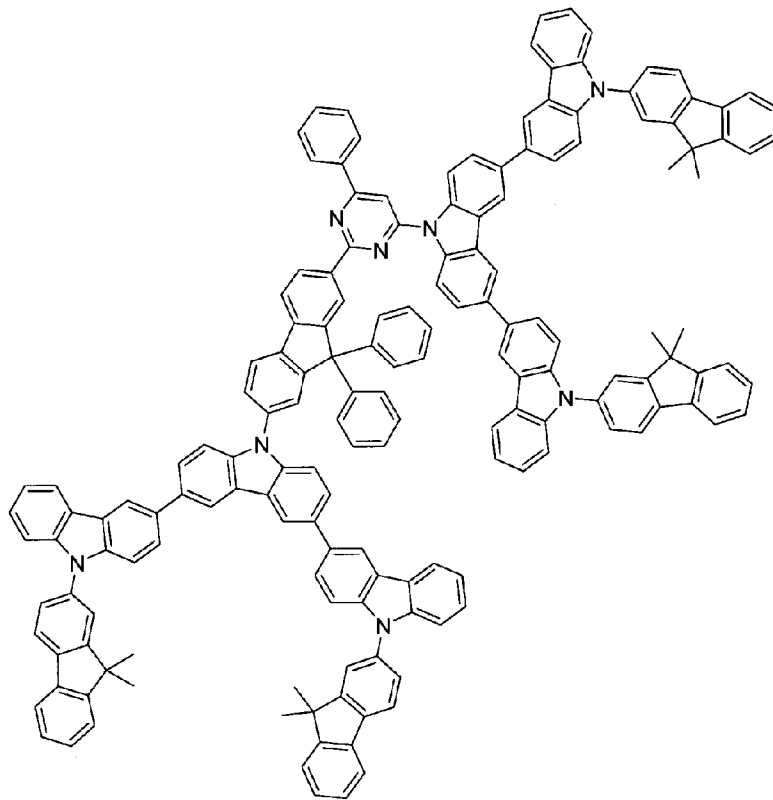
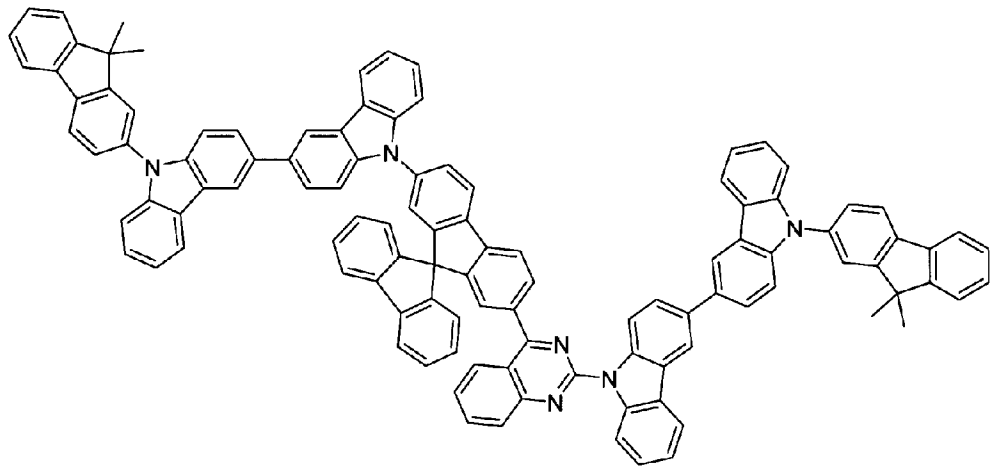
[0278]

[化238]



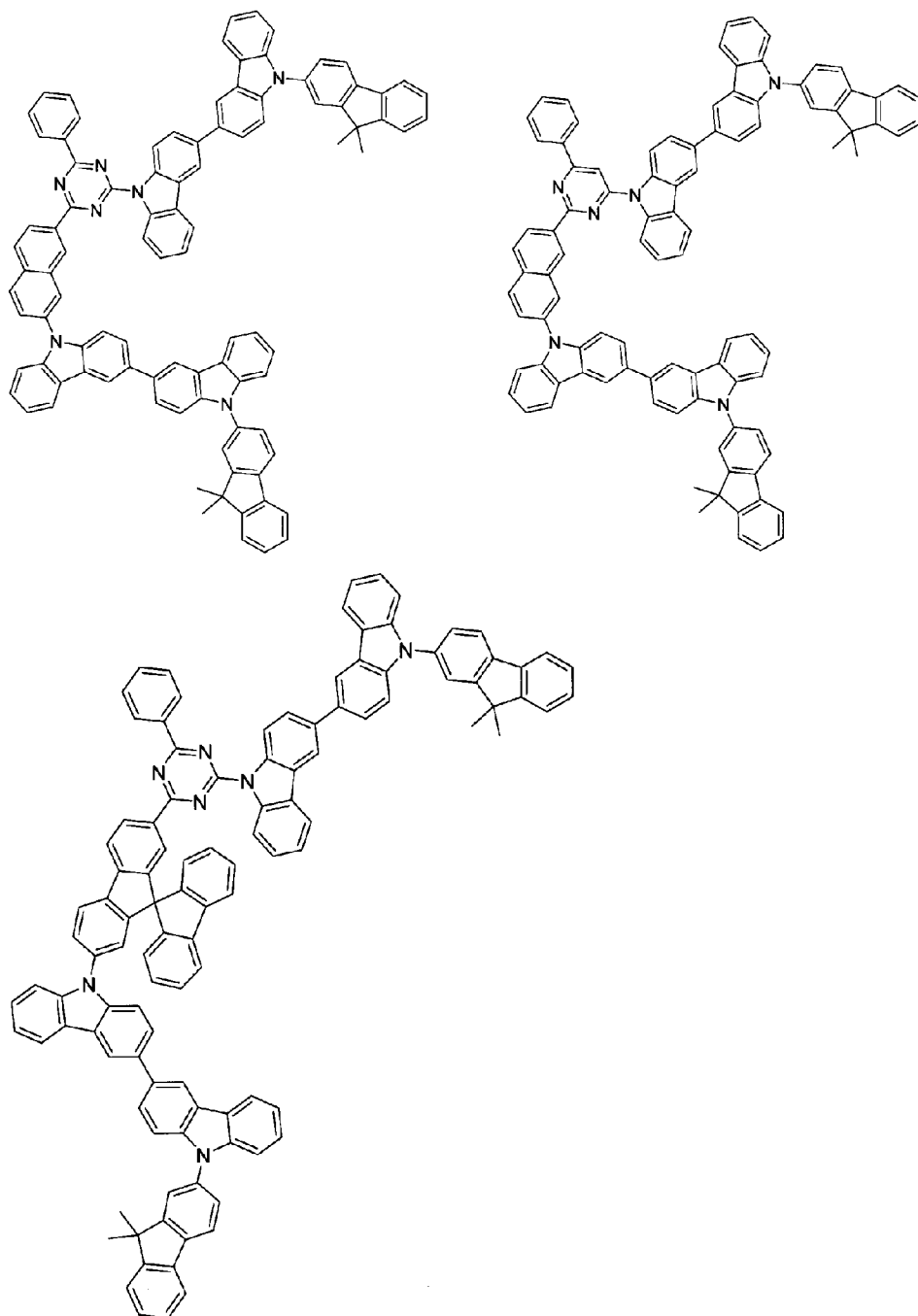
[0279]

[化239]



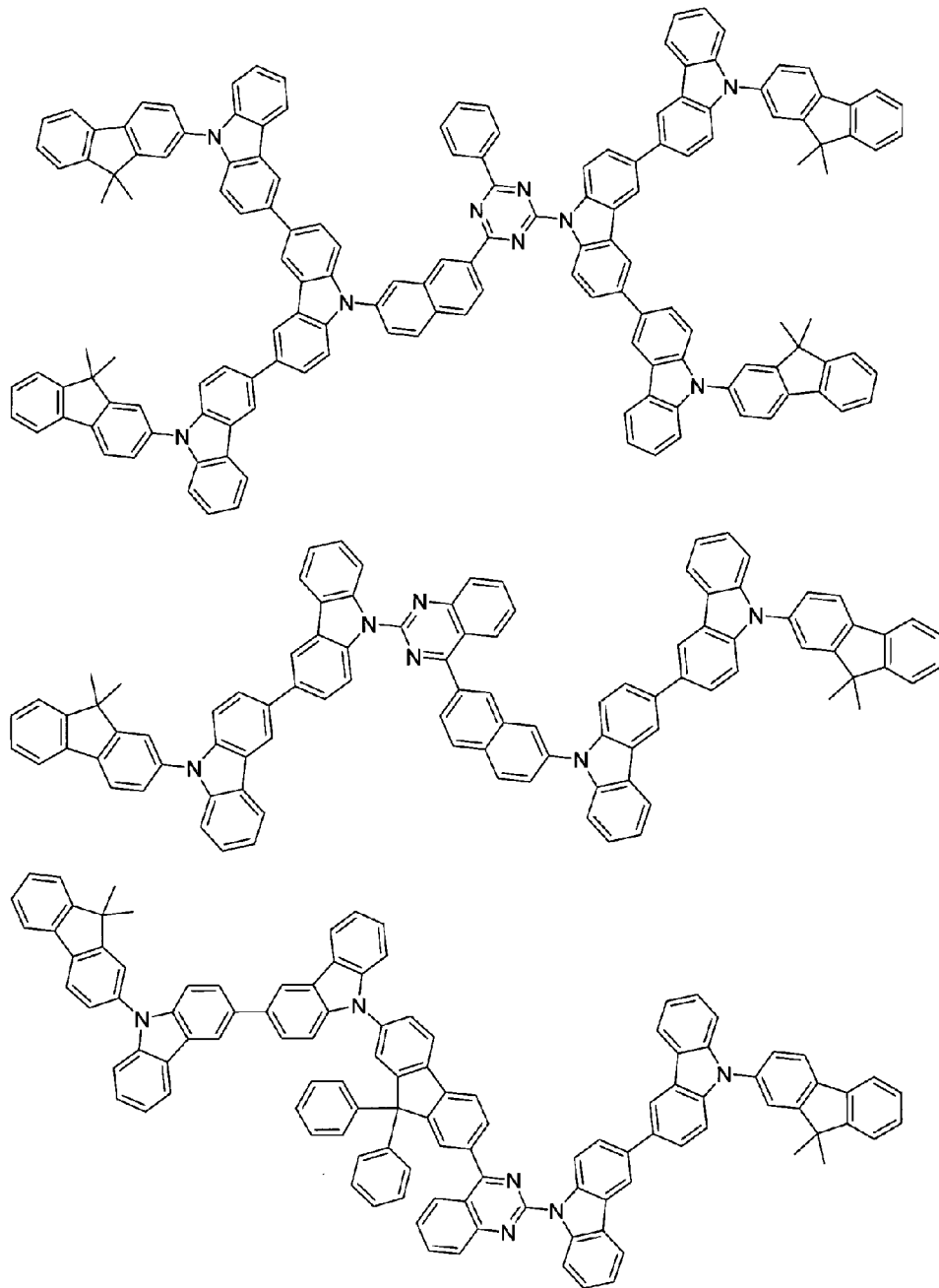
[0280]

[化240]



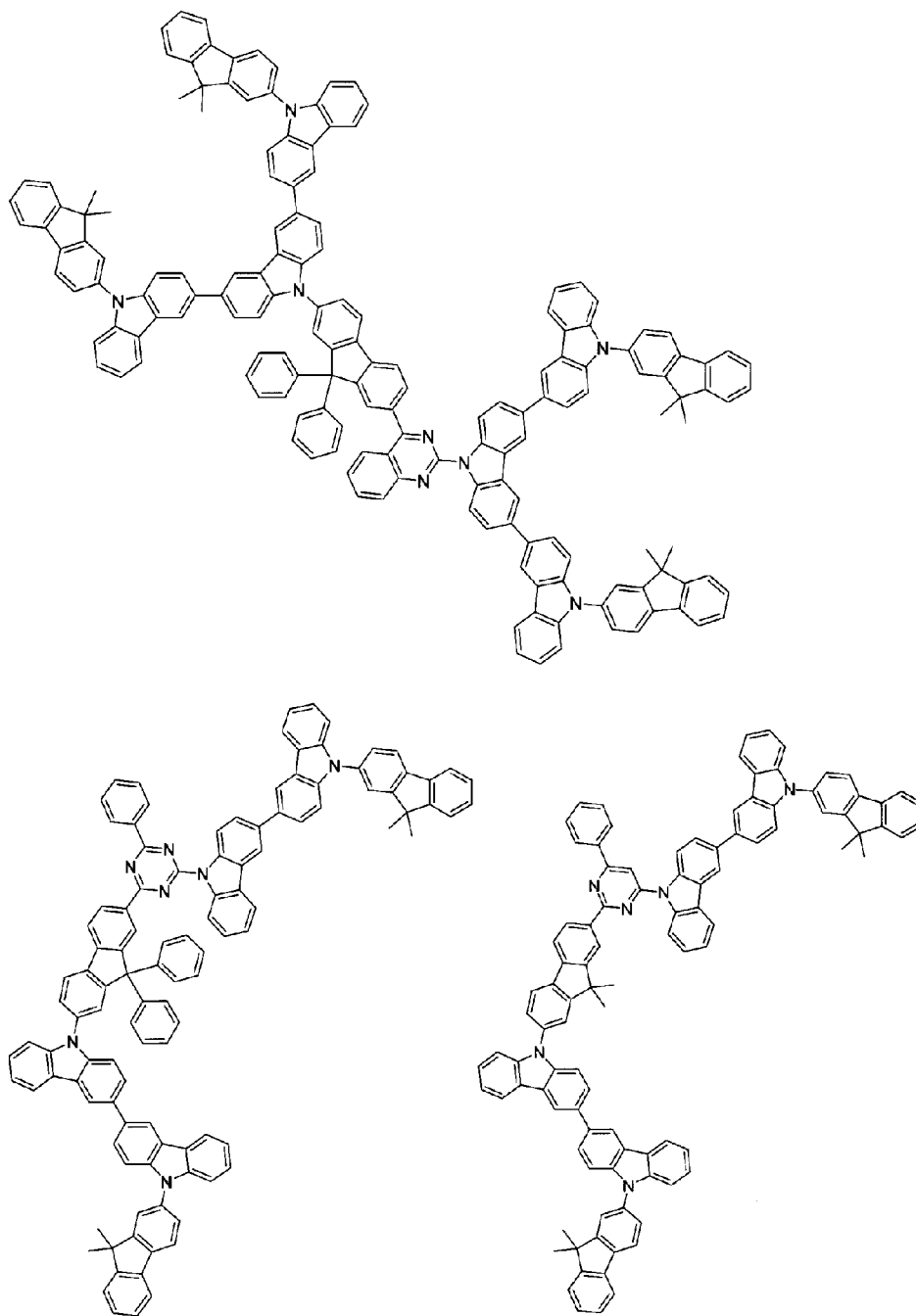
[0281]

[化241]



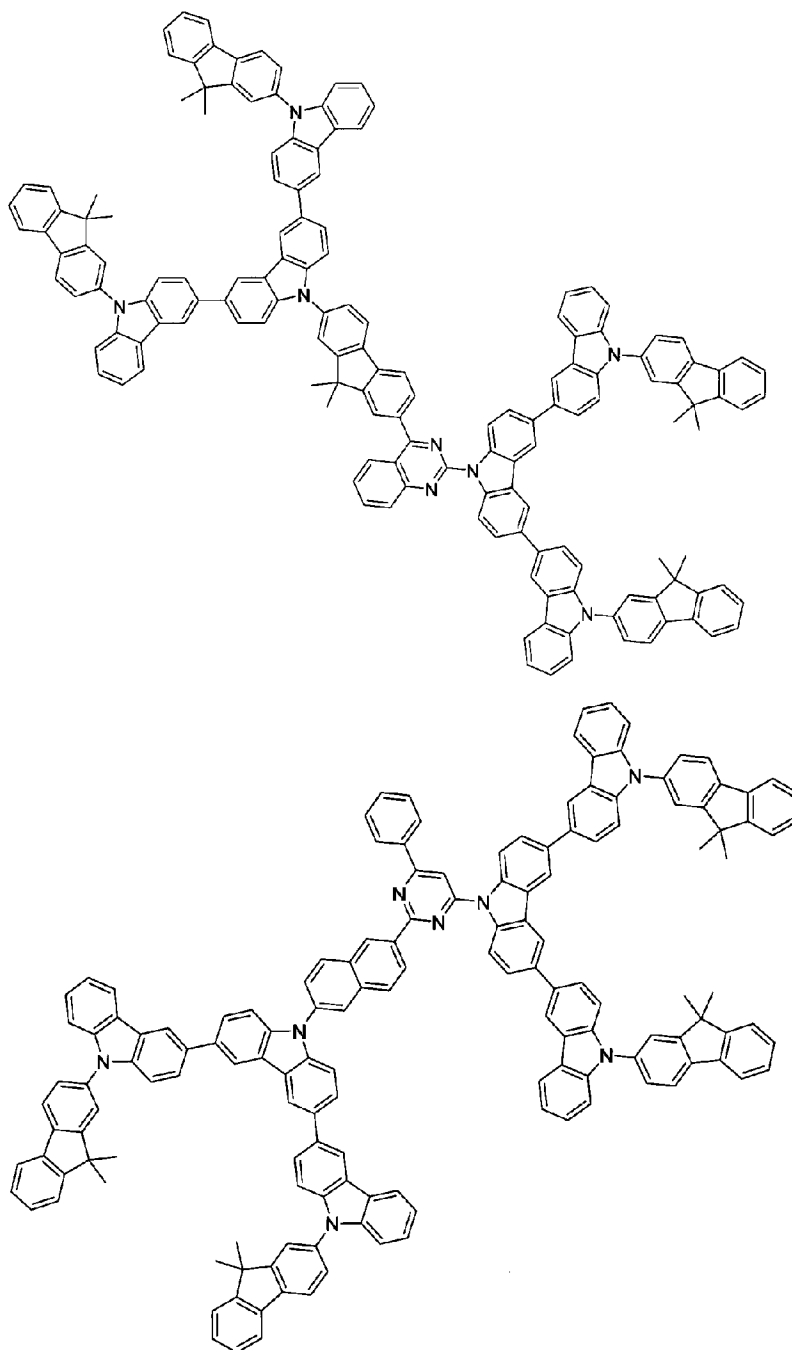
[0282]

[化242]



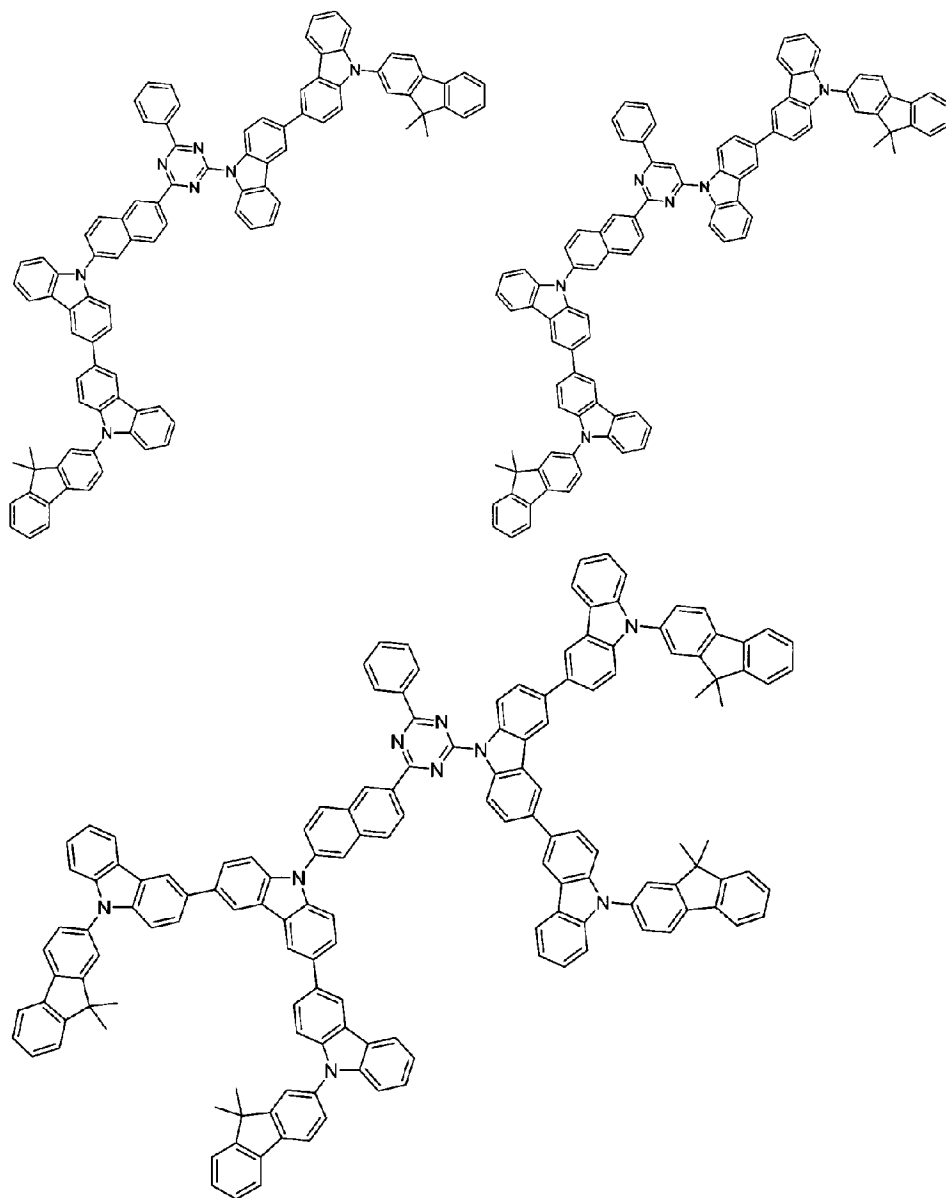
[0283]

[化244]



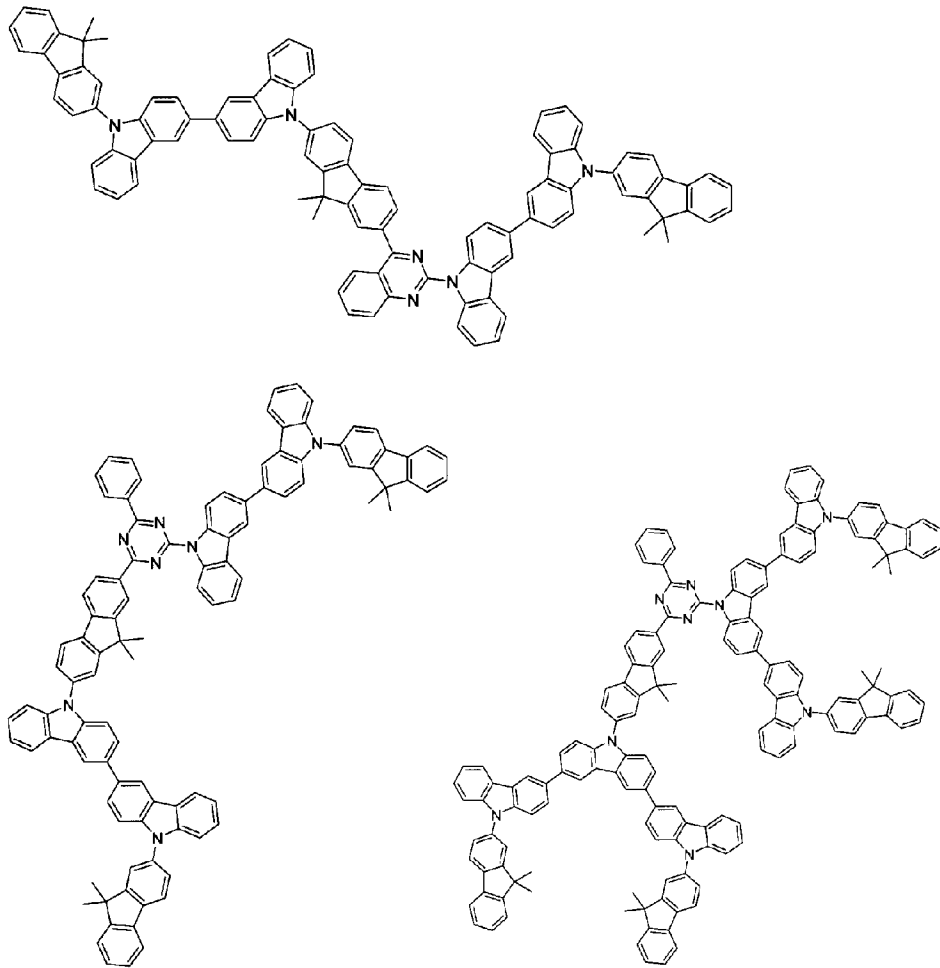
[0285]

[化245]



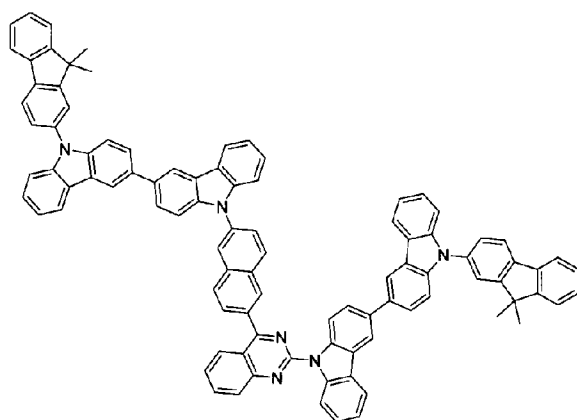
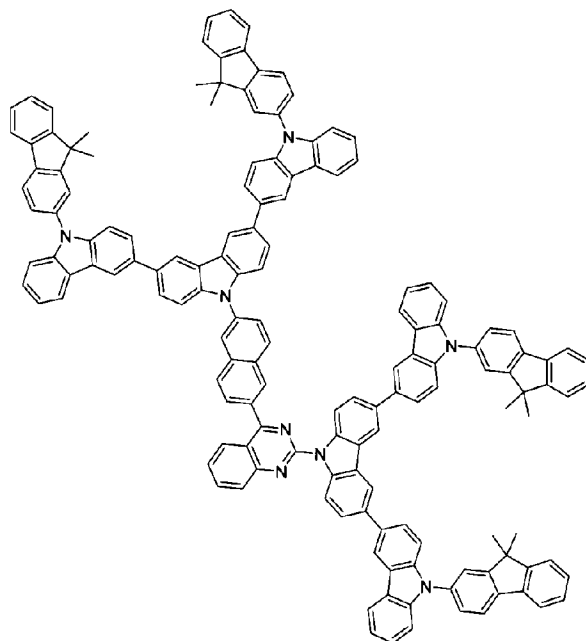
[0286]

[化246]



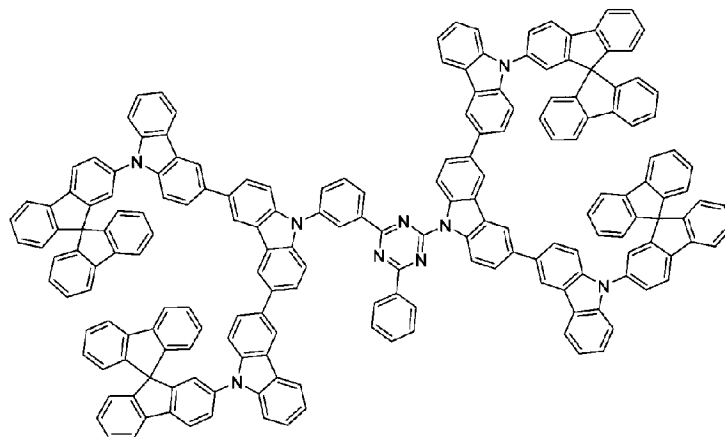
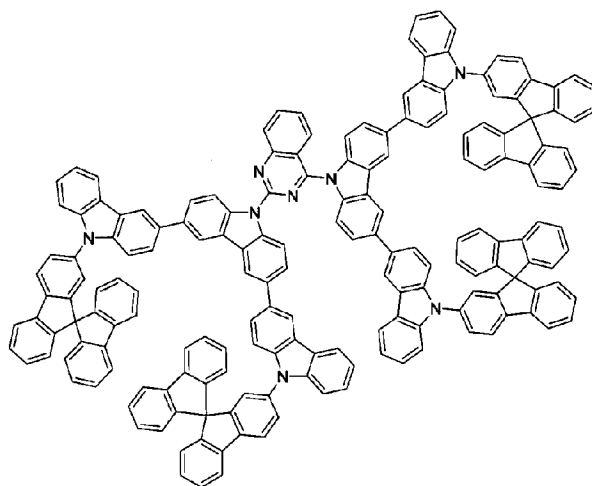
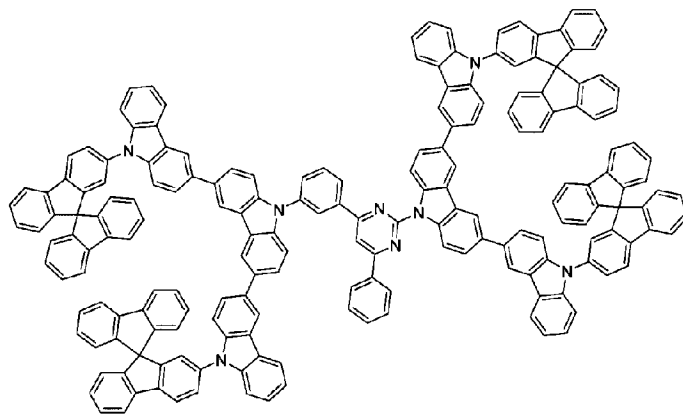
[0287]

[化247]



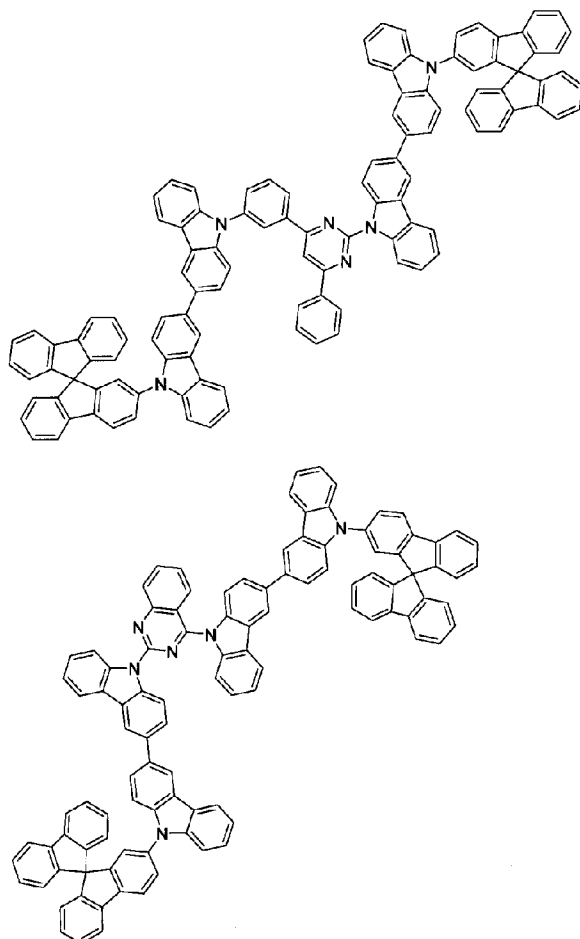
[0288]

[化248]



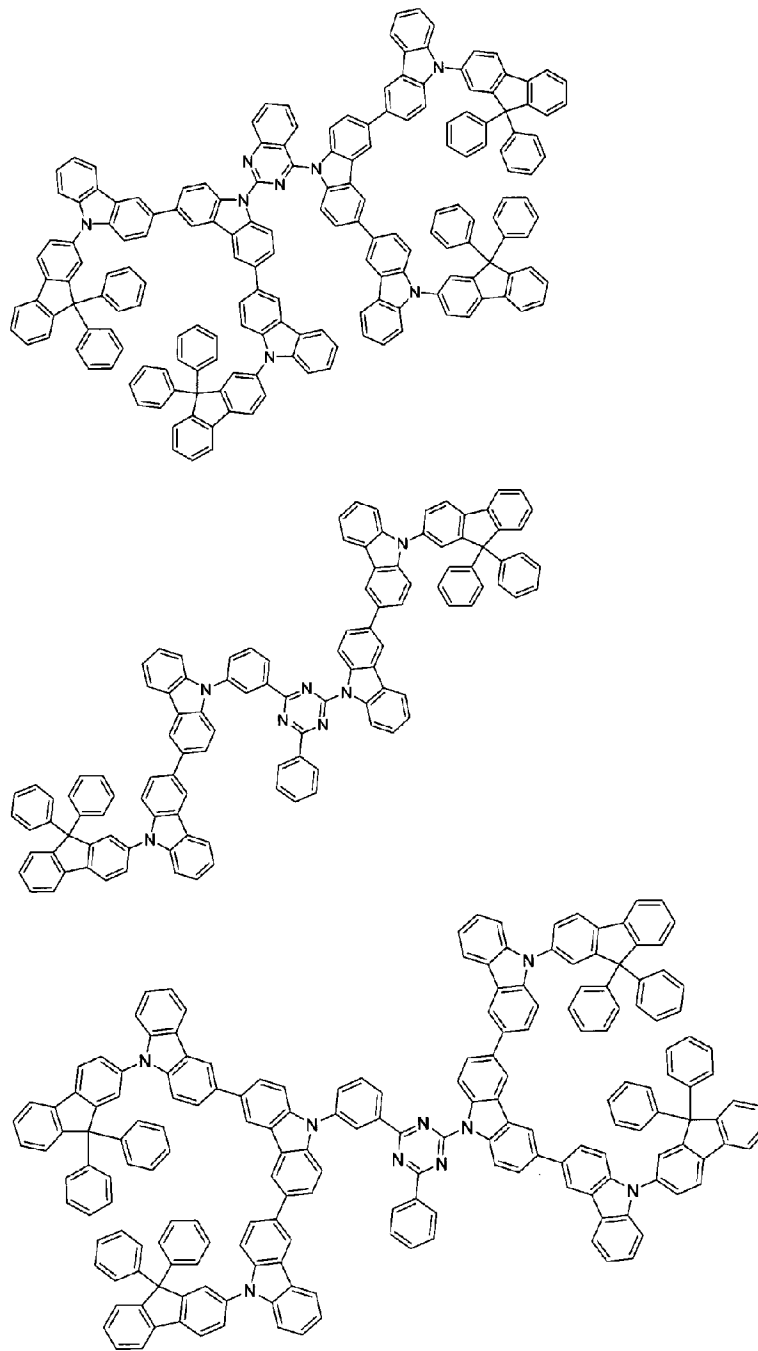
[0289]

[化249]



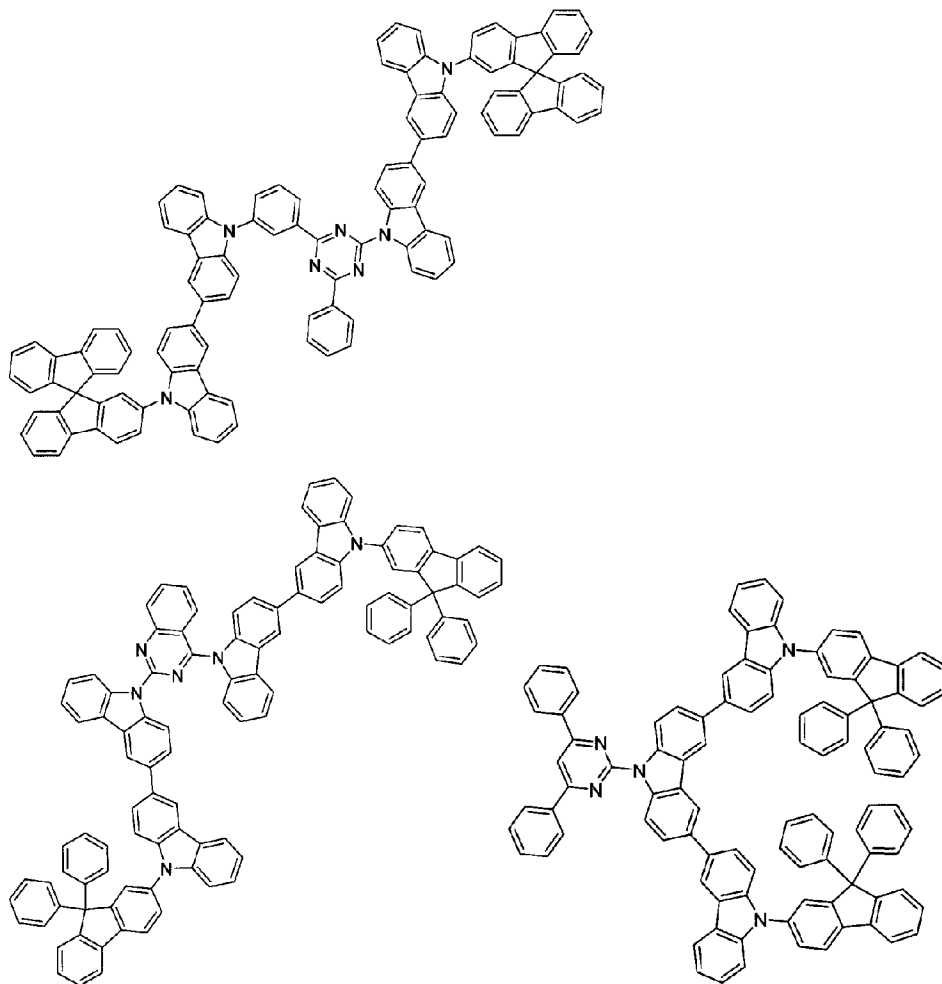
[0290]

[化250]



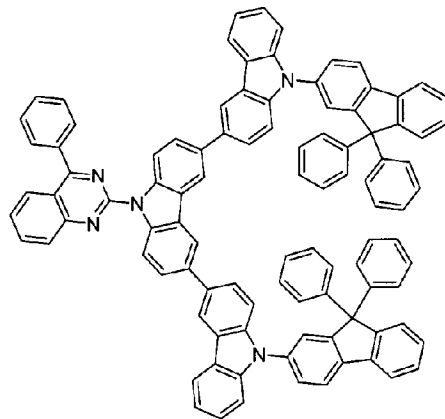
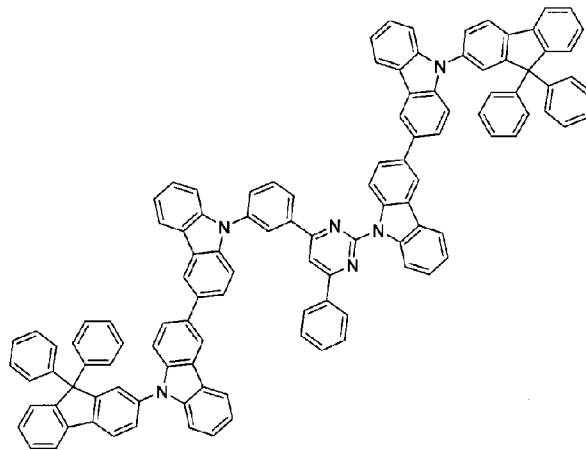
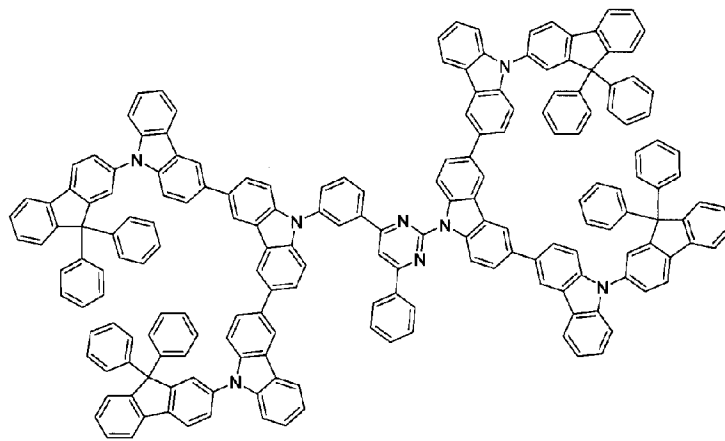
[0291]

[化251]



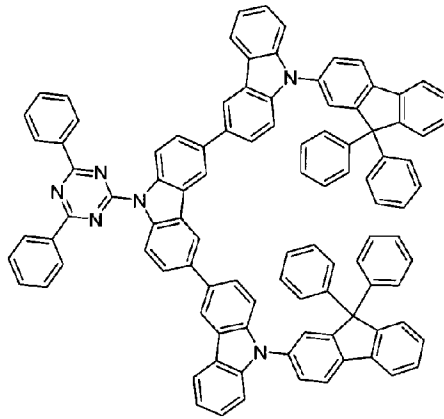
[0292]

[化252]



[0293]

[化253]



[0294] [有機エレクトロルミネッセンス素子]

次に、本発明の一態様の有機EL素子について説明する。

有機EL素子は、陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する。この一層以上の有機薄膜層は発光層を含み、有機薄膜層の少なくとも1層が本発明の前記化合物（前記化合物（A）及び（B）や、それに包含される下位概念の前記各化合物。以降の説明において、これらの化合物を単に「前記化合物」と略称することがある）を含む。

本発明の前記化合物が含まれる有機薄膜層の例としては、陽極と発光層との間に設けられる陽極側有機薄膜層（正孔輸送層、正孔注入層等）、発光層、陰極と発光層との間に設けられる陰極側有機薄膜層（電子輸送層、電子注入層等）、スペース層、障壁層等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。前記化合物は、上記いずれの層に含まれていてもよく、例えば、蛍光発光ユニットの発光層におけるホスト材料やドーパント材料、燐光発光ユニットの発光層におけるホスト材料、発光ユニットの正孔輸送層材料、電子輸送層材料等として用いることができる。特に、発光層が本発明の前記化合物を含むことが好ましく、その場合、本発明の前記化合物はホスト材料として機能し得る。

[0295] 本発明の一態様において、有機EL素子は、蛍光又は燐光発光型の単色発光素子であっても、蛍光／燐光ハイブリッド型の白色発光素子であってもよ

いし、単独の発光ユニットを有するシンプル型であっても、複数の発光ユニットを有するタンデム型であってもよく、中でも、燐光発光型であることが好ましい。ここで、「発光ユニット」とは、一層以上の有機層を含み、そのうちの一層が発光層であり、注入された正孔と電子が再結合することにより発光することができる最小単位をいう。

[0296] 従って、シンプル型有機EL素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を挙げることができる。

(1) 陽極／発光ユニット／陰極

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

(a) 正孔輸送層／発光層（／電子輸送層）

(b) 正孔輸送層／第一燐光発光層／第二燐光発光層（／電子輸送層）

(c) 正孔輸送層／燐光発光層／スペース層／蛍光発光層（／電子輸送層）

(d) 正孔輸送層／第一燐光発光層／第二燐光発光層／スペース層／蛍光発光層（／電子輸送層）

(e) 正孔輸送層／第一燐光発光層／スペース層／第二燐光発光層／スペース層／蛍光発光層（／電子輸送層）

(f) 正孔輸送層／燐光発光層／スペース層／第一蛍光発光層／第二蛍光発光層（／電子輸送層）

(g) 正孔輸送層／電子障壁層／発光層（／電子輸送層）

(h) 正孔輸送層／発光層／正孔障壁層（／電子輸送層）

(i) 正孔輸送層／蛍光発光層／トリプレット障壁層（／電子輸送層）

[0297] 上記各燐光又は蛍光発光層は、それぞれ互いに異なる発光色を示すものとする。具体的には、上記積層発光ユニット（d）において、正孔輸送層／第一燐光発光層（赤色発光）／第二燐光発光層（緑色発光）／スペース層／蛍光発光層（青色発光）／電子輸送層といった層構成等が挙げら

れる。

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

[0298] タンデム型有機EL素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を挙げることができる。

(2) 陽極／第一発光ユニット／中間層／第二発光ユニット／陰極

ここで、上記第一発光ユニット及び第二発光ユニットとしては、例えば、それぞれ独立に上述の発光ユニットと同様のものを選択することができる。

上記中間層は、一般的に、中間電極、中間導電層、電荷発生層、電子引抜層、接続層、中間絶縁層とも呼ばれ、第一発光ユニットに電子を、第二発光ユニットに正孔を供給する、公知の材料構成を用いることができる。

[0299] 図1に、前記有機EL素子の一例の概略構成を示す。有機EL素子1は、基板2、陽極3、陰極4、及び該陽極3と陰極4との間に配置された発光ユニット10とを有する。発光ユニット10は、燐光ホスト材料と燐光ドーパント（燐光発光材料）を含む少なくとも1つの燐光発光層を含む発光層5を有する。発光層5と陽極3との間に正孔注入・輸送層（陽極側有機薄膜層）6等、発光層5と陰極4との間に電子注入・輸送層（陰極側有機薄膜層）7等を形成してもよい。また、発光層5の陽極3側に電子障壁層（図示せず）を、発光層5の陰極4側に正孔障壁層（図示せず）を、それぞれ設けてもよい。これにより、電子や正孔を発光層5に閉じ込めて、発光層5における励起子の生成確率を更に高めることができる。

[0300] なお、本発明において、蛍光ドーパント（蛍光発光材料）と組み合わせられたホストを蛍光ホストと称し、燐光ドーパントと組み合わせられたホストを燐光ホストと称する。蛍光ホストと燐光ホストは分子構造のみにより区分されるものではない。すなわち、燐光ホストとは、燐光ドーパントを含有する燐

光発光層を形成する材料を意味し、蛍光発光層を形成する材料として利用できないことを意味しているわけではない。蛍光ホストについても同様である。

[0301] (基板)

基板は、発光素子の支持体として用いられる。基板としては、例えば、ガラス、石英、プラスチックなどを用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブル）基板のことであり、例えば、ポリカーボネート、ポリ塩化ビニルからなるプラスチック基板等が挙げられる。

[0302] (陽極)

基板上に形成される陽極には、仕事関数の大きい（具体的には4.0 eV以上）金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物などを用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム-酸化スズ（ITO：Indium Tin Oxide）、珪素若しくは酸化珪素を含有した酸化インジウム-酸化スズ、酸化インジウム-酸化亜鉛、酸化タングステン、及び酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。この他、金（Au）、白金（Pt）、又は金属材料の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

[0303] (陰極)

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

[0304] (発光層のゲスト材料)

発光層は、発光性の高い物質を含む層であり、種々の材料を用いることが

できる。例えば、発光性の高い物質としては、蛍光を発光する蛍光性化合物や燐光を発光する燐光性化合物を用いることができる。蛍光性化合物は一重項励起状態から発光可能な化合物であり、燐光性化合物は三重項励起状態から発光可能な化合物である。

[0305] 発光層に用いることができる青色系の蛍光発光材料として、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、トリアリールアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N, N'-ビス [4 - (9H-カルバゾール-9-イル) フェニル] -N, N'-ジフェニルスチルベン-4, 4'-ジアミン (略称: YGA2S)、4 - (9H-カルバゾール-9-イル) -4' - (10-フェニル-9-アントリル) トリフェニルアミン (略称: YGAPA)、4 - (10-フェニル-9-アントリル) -4' - (9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル) トリフェニルアミン (略称: PCBAPA) などが挙げられる。

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

発光層に用いることができる赤色系の蛍光発光材料として、テトラセン誘

導体、ジアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N, N, N', N'-テトラキス(4-メチルフェニル)テトラセン-5, 11-ジアミン(略称: p-mPhTD)、7, 14-ジフェニル-N, N, N', N'-テトラキス(4-メチルフェニル)アセナフト[1, 2-a]フルオランテン-3, 10-ジアミン(略称: p-mPhAFD)などが挙げられる。

[0306] 発光層に用いることができる青色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体、好ましくはイリジウム、オスミウム又は白金金属のオルトメタル化錯体を使用される。具体的には、ビス[2-(4', 6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N, C2']イリジウム(III)テトラキス(1-ピラゾリル)ボラート(略称: Flr6)、ビス[2-(4', 6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N, C2']イリジウム(III)ピコリナート(略称: Flrpic)、ビス[2-(3', 5'-ビストリフルオロメチルフェニル)ピリジナト-N, C2']イリジウム(III)ピコリナート(略称: Ir(CF₃ppy)₂(pic))、ビス[2-(4', 6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N, C2']イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: Flracac)などが挙げられる。

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

発光層に用いることができる赤色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、白金錯体、テルビウム錯体、ユーロピウム錯体等の金属錯体を使用される。具体的には、ビス[2-(2'-ベンゾ[4, 5-α]チエニル)ピリジナト-N, C3']イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: Ir(

b t p)₂ (a c a c))、ビス (1 - フェニルイソキノリナト - N, C 2') イリジウム (III) アセチルアセトナート (略称 : I r (p i q)₂ (a c a c))、(アセチルアセトナート) ビス [2, 3 - ビス (4 - フルオロフェニル) キノキサリナト] イリジウム (III) (略称 : I r (F d p q)₂ (a c a c))、2, 3, 7, 8, 12, 13, 17, 18 - オクタエチル - 2 1 H, 2 3 H - ポルフィリン白金 (II) (略称 : P t O E P) 等の有機金属錯体が挙げられる。

また、トリス (アセチルアセトナート) (モノフェナントロリン) テルビウム (III) (略称 : T b (a c a c)₃ (P h e n))、トリス (1, 3 - ジフェニル - 1, 3 - プロパンジオナート) (モノフェナントロリン) ユーロピウム (III) (略称 : E u (D B M)₃ (P h e n))、トリス [1 - (2 - テノイル) - 3, 3, 3 - トリフルオロアセトナート] (モノフェナントロリン) ユーロピウム (III) (略称 : E u (T T A)₃ (P h e n)) 等の希土類金属錯体は、希土類金属イオンからの発光 (異なる多重度間の電子遷移) であるため、燐光性化合物として用いることができる。

[0307] (発光層のホスト材料)

発光層としては、上述した発光性の高い物質 (ゲスト材料) を他の物質 (ホスト材料) に分散させた構成としてもよい。発光性の高い物質を分散させるための物質としては、各種のものを用いることができ、発光性の高い物質よりも最低空軌道準位 (L U M O 準位) が高く、最高被占有軌道準位 (H O M O 準位) が低い物質を用いることが好ましい。

発光性の高い物質を分散させるための物質 (ホスト材料) としては、本発明の前記化合物が好ましい。本発明の前記化合物以外にも、例えば、1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、若しくは亜鉛錯体等の金属錯体、2) オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、若しくはフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、3) カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、若しくはクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、4) トリアリールアミン誘導体、若しくは縮合多環芳香族

アミン誘導体等の芳香族アミン化合物を使用できる。より具体的には、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム(III)(略称:A I q)、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)(略称:A I m q 3)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(II)(略称:Be B q 2)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(4-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)(略称:BA I q)、ビス(8-キノリノラト)亜鉛(II)(略称:Z n q)、ビス[2-(2-ベンゾオキサゾリル)フェノラト]亜鉛(II)(略称:Z n P B O)、ビス[2-(2-ベンゾチアゾリル)フェノラト]亜鉛(II)(略称:Z n B T Z)などの金属錯体、2-(4-ビフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称:P B D)、1,3-ビス[5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称:O X D-7)、3-(4-ビフェニル)-4-フェニル-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称:T A Z)、2,2',2''-(1,3,5-ベンゼントリイル)トリス(1-フェニル-1H-ベンゾイミダゾール)(略称:T P B I)、バソフェナントロリン(略称:B P h e n)、バソキュプロイン(略称:B C P)などの複素環化合物や、9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称:C z P A)、3,6-ジフェニル-9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称:D P C z P A)、9,10-ビス(3,5-ジフェニルフェニル)アントラセン(略称:D P P A)、9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(略称:D N A)、2-tert-ブチル-9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(略称:t-B u D N A)、9,9'-ビアントリル(略称:B A N T)、9,9'-(スチルベン-3,3'-ジイル)ジフェナントレン(略称:D P N S)、9,9'-(スチルベン-4,4'-ジイル)ジフェナントレン(略称:D P N S 2)、3,3',3''-(ベンゼン-1,3,5-トリイル)トリピレン(略称:T P B 3)、9,10-ジフェニルア

ントラセン（略称：DPAnt h）、6，12-ジメトキシ-5，11-ジフェニルクリセンなどの縮合芳香族化合物、N，N-ジフェニル-9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：CzA1PA）、4-(10-フェニル-9-アントリル)トリフェニルアミン（略称：DPhPA）、N，9-ジフェニル-N-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：PCAPA）、N，9-ジフェニル-N-{4-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]フェニル}-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：PCAPBA）、N-(9，10-ジフェニル-2-アントリル)-N，9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン（略称：2PCAPA）、NPB（又は α -NPD）、TPD、DFLDPBi、BSPBなどの芳香族アミン化合物などを用いることができる。また、発光性の高い物質（ゲスト材料）を分散させるための物質（ホスト材料）は複数種用いることができる。

[0308]（電子輸送層）

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層には、1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、2) イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、3) 高分子化合物を使用することができる。

[0309]（電子注入層）

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層には、リチウム（Li）、フッ化リチウム（LiF）、フッ化セシウム（CsF）、フッ化カルシウム（CaF₂）、リチウム酸化物（LiO_x）等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、又はそれらの化合物を用いることができる。

[0310]（正孔注入層）

正孔注入層は、正孔注入性の高い物質を含む層である。正孔注入性の高い

物質としては、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、マンガニウム酸化物、芳香族アミン化合物、又は高分子化合物（オリゴマー、デンドリマー、ポリマー等）等も使用できる。

[0311] （正孔輸送層）

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層には、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用することができる。ポリ（N-ビニルカルバゾール）（略称：PVK）やポリ（4-ビニルトリフェニルアミン）（略称：PVTPA）等の高分子化合物を用いることもできる。但し、電子よりも正孔の輸送性の高い物質であれば、これら以外のものを用いてもよい。なお、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。

[0312] 本発明の一態様において、有機EL素子の各層は従来公知の真空蒸着法、スピニング法等により形成することができる。例えば、真空蒸着法、分子線蒸着法（MBE法）、あるいは、層を形成する化合物の溶液を用いた、ディッピング法、スピニング法、キャスト法、バーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

[0313] 各有機層の膜厚は特に制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い駆動電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常は数nmから1 μ mの範囲が好ましい。

[0314] 本発明の前記化合物を含有する層（発光層、正孔輸送層、電子輸送層）は、溶媒及び前記化合物を含む溶液（インク組成物）を用いて上記塗布法により成膜することが好ましい。該インク組成物には、必要に応じて、ドーパント等の他の材料を含有させてもよい。

[0315] 塗布法としては、湿式成膜法が好適に用いられ、凸版印刷法、凹版印刷法

、平版印刷法、孔版印刷法、及び、それらとオフセット印刷法を組み合わせた印刷法、インクジェット印刷法、ディスペンサー塗布スピコート法、バーコート法、ディップコート法、スプレーコート法、スリットコート法、ロールコート法、キャップコート法、グラビアロールコート法、メニスカスコート法等が適用できる。特に微細なパターンングを要する場合、凸版印刷法、凹版印刷法、平版印刷法、孔版印刷法、及び、それらとオフセット印刷法を組み合わせた印刷法、インクジェット印刷法、ディスペンサー塗布等が好ましい。また、転写前駆基板へ本重合体を前記の湿式成膜法により成膜した後、レーザー光や熱プレスなどで対象とする電極を有する配線基板上へ転写する方法を用いることもできる。

これらの方法による成膜は当業者に周知の条件により行うことができ、その詳細は省略する。

なお、塗布成膜後の有機溶媒を乾燥除去する工程において、加熱乾燥を行う場合がある。加熱乾燥温度については、塗布に用いた有機溶媒を十分に除去することができる温度以上であり、かつ、前記化合物が熱分解する温度以下であることが望ましい。

このような観点から、塗布成膜後の乾燥時の適切な加熱乾燥温度範囲は、好ましくは50℃以上、より好ましくは80℃以上、更に好ましくは100℃以上、より更に好ましくは140℃以上であり、そして、好ましくは300℃以下、より好ましくは250℃以下、更に好ましくは240℃以下の範囲である。

[0316] 塗布法に使用する塗布液（インク組成物）は、少なくとも1種類の前記化合物（1）を含有していればよく、溶媒に溶解していても、分散していてもよい。

上記塗布液（インク組成物）中の前記化合物（1）の含有量は、成膜用溶液全体に対して0.1～15質量%が好ましく、0.5～10質量%がより好ましい。

溶媒は好ましくは有機溶媒であり、当該有機溶媒としては、例えばクロロ

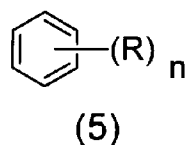
ホルム、クロロベンゼン、クロロトルエン、クロロキシレン、クロロアニソール、ジクロロメタン、ジクロロベンゼン、ジクロロトルエン、ジクロロエタン、トリクロロエタン、トリクロロベンゼン、トリクロロメチルベンゼン、ブromoベンゼン、ジブromoベンゼン、ブromoアニソール等の塩素系溶媒、テトラヒドロフラン、ジオキサン、ジオキソラン、オキサゾール、メチルベンゾオキサゾール、ベンゾイソオキサゾール、フラン、フラザン、ベンゾフラン、ジヒドロベンゾフラン等のエーテル系溶媒、エチルベンゼン、ジエチルベンゼン、トリエチルベンゼン、トリメチルベンゼン、トリメトキシベンゼン、プロピルベンゼン、イソプロピルベンゼン、ジイソプロピルベンゼン、ジブチルベンゼン、アミルベンゼン、ジヘキシルベンゼン、シクロヘキシルベンゼン、テトラメチルベンゼン、ドデシルベンゼン、ベンゾニトリル、アセトフェノン、メチルアセトフェノン、メトキシアセトフェノン、トルイール酸エチルエステル、トルエン、エチルトルエン、メトキシトルエン、ジメトキシトルエン、トリメトキシトルエン、イソプロピルトルエン、キシレン、ブチルキシレン、イソプロピルキシレン、アニソール、エチルアニソール、ジメチルアニソール、トリメチルアニソール、プロピルアニソール、イソプロピルアニソール、ブチルアニソール、メチルエチルアニソール、アネトールアニシールアルコール、安息香酸メチル、安息香酸エチル、安息香酸プロピル、安息香酸ブチル、ジフェニルエーテル、ブチルフェニルエーテル、ベンジルメチルエーテル、ベンジルのエチルエーテル、メチレンジオキシベンゼン、メチルナフタレン、テトラヒドロナフタレン、アニリン、メチルアニリン、エチルアニリン、ブチルアニリン、ビフェニル、メチルビフェニル、イソプロピルビフェニル等の芳香族炭化水素系溶媒、シクロヘキサン、メチルシクロヘキサン、n-ペンタン、n-ヘキサン、n-ヘプタン、n-オクタン、n-ノナン、n-デカン、テトラデカン、デカリン、イソプロピルシクロヘキサン等の脂肪族炭化水素系溶媒、アセトン、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン、アセトフェノン等のケトン系溶媒、酢酸エチル、酢酸ブチル、エチルセロソルブアセテート、安息香酸メチル、酢酸フェニル等のエス

テル系溶媒、エチレングリコール、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エチルエーテル、エチレングリコールモノメチルエーテル、ジメトキシエタン、プロピレングリコール、ジエトキシメタン、トリエチレングリコールモノエチルエーテル、グリセリン、1, 2-ヘキサジオール等の多価アルコール及びその誘導体、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、シクロヘキサノール等のアルコール系溶媒、ジメチルスルホキシド等のスルホキシド系溶媒、N-メチル-2-ピロリドン、N, N-ジメチルホルムアミド等のアミド系溶媒が例示される。また、これらの有機溶媒は、単独で、又は複数組み合わせ用いることができる。

[0317] 上記の溶媒のうち、溶解性、成膜の均一性、粘度特性等の観点から、少なくともトルエン、キシレン、エチルベンゼン、アミルベンゼン、アニソール、4-メトキシトルエン、2-メトキシトルエン、1, 2-ジメトキシベンゼン、メシチレン、テトラヒドロナフタレン、シクロヘキシルベンゼン、2, 3-ジヒドロベンゾフラン、シクロヘキサノン、メチルシクロヘキサノンのいずれか1種以上を含むことが好ましい。

[0318] 上記の溶媒の中でも、前記化合物と、沸点が110℃以上、且つ20℃での水への溶解度が1質量%以下である下記一般式(5)に記載の溶媒を用いることが、より好ましい。

[化254]



(一般式(5)中、それぞれ独立に、Rは炭素数1~20の置換基であり、nは0~6の整数を表す。)

[0319] 前記化合物と、沸点が110℃以上、且つ20℃での水への溶解度が1質量%以下である上記一般式(5)に記載の溶媒を含む成膜用の塗布液(インク組成物)であることが好ましい。

また、成膜用の塗布液（インク組成物）には、必要に応じて粘度の調整剤、表面張力の調整材、架橋反応の開始剤、架橋反応の触媒を添加することもできる。尚、粘度の調整剤、表面張力の調整剤、架橋反応の開始剤、架橋反応の触媒は、膜中に残留しても素子特性に影響を与えないものを選択するか、成膜工程で膜中から除去できるものが望ましい。

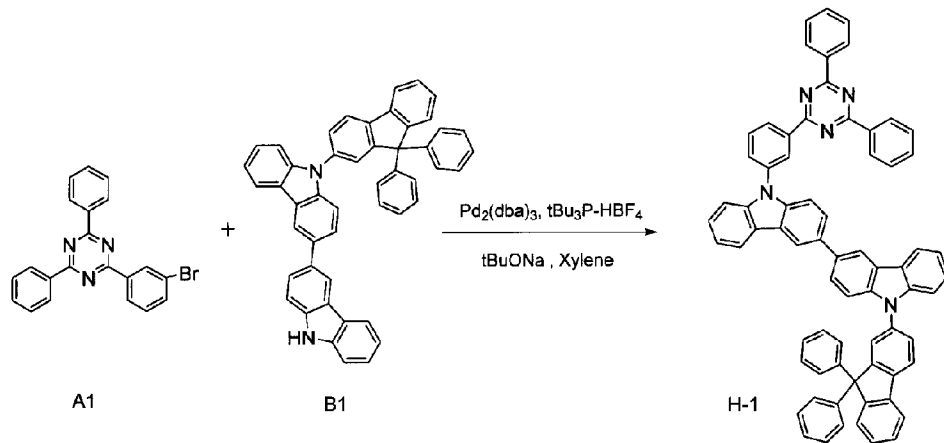
[0320] 本発明の一態様において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、有機ELパネルモジュール等の表示部品、テレビ、携帯電話、パーソナルコンピュータ等の表示装置、及び、照明、車両用灯具の発光装置等の電子機器に使用できる。従って、本発明は、前記有機EL素子を搭載した電子機器をも提供する。

実施例

[0321] 次に、実施例及び比較例を挙げて本発明を更に詳しく説明するが、本発明はこれらの実施例の記載内容になんら制限されるものではない。

[0322] 合成例 1（化合物 H-1 の合成）

[化255]



[0323] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル中間体 B 1（2.60 g、4.00 mmol）、トリアジン中間体 A 1（1.55 g、4.00 mmol）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（0.147 g、0.160 mmol）、トリー-*t*-ブチルホスホニウムテトラフルオロボロ酸塩（0.186 g、0.640 mmol）、*t*-ブトキシナトリウム（1.15 g、12

、0 mmol)、無水キシレン(80 mL)を順次加えて8時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物H-1(3.21 g, 収率84%)を得た。

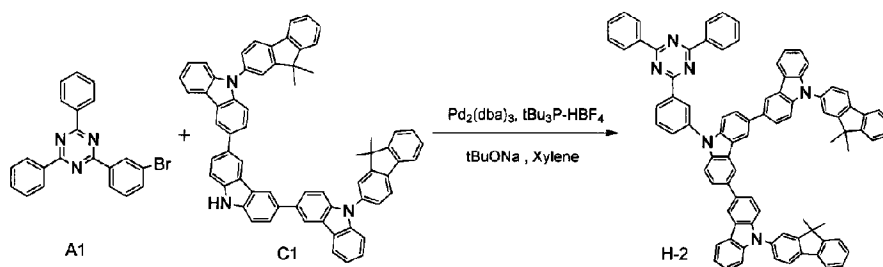
[0324] 化合物H-1について、HPLC(High Performance Liquid Chromatography)及びLC-MS(Liquid Chromatography-Mass Spectrometry)の分析結果を以下に示す。

HPLC: 純度99.7%

LC-MS: calcd for C₇₀H₄₅N₅=955、
found m/z=955 (M+, 100)

[0325] 合成例2(化合物H-2の合成)

[化256]



[0326] アルゴン雰囲気下、トリカルバゾリル中間体C1(2.64 g, 2.99 mmol)、トリアジン中間体A1(1.16 g, 2.99 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0.110 g, 0.120 mmol)、トリーt-ブチルホスホニウムテトラフルオロホウ酸塩(0.139 g, 0.478 mmol)、t-ブトキシナトリウム(0.862 g, 0.897 mmol)、無水キシレン(60 mL)を順次加えて7.5時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し

、化合物H-2 (2.32g, 収率65%) を得た。

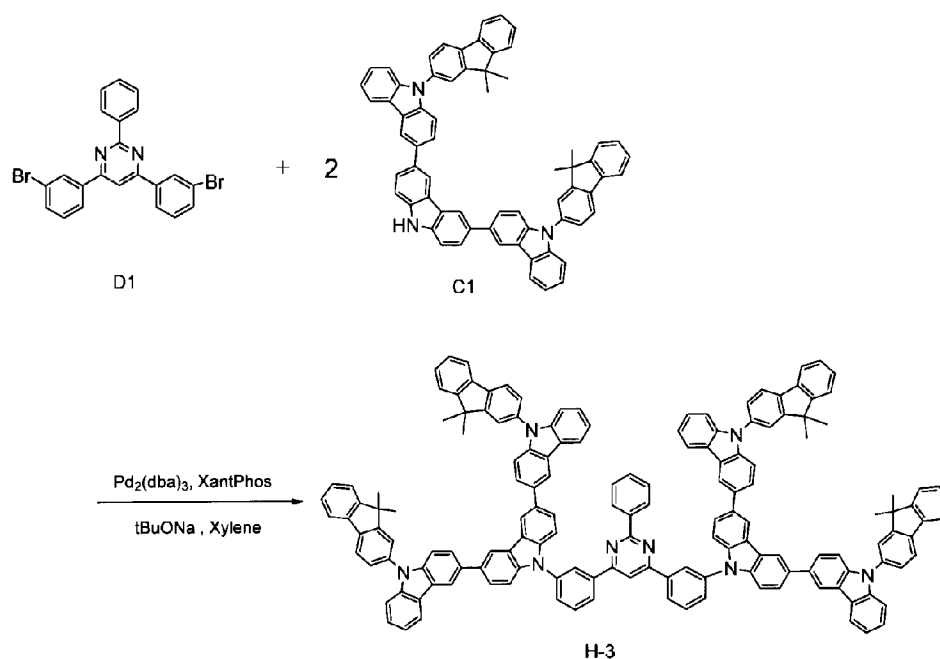
[0327] 化合物H-2について、HPLC (High Performance Liquid Chromatography) 及びLC-MS (Liquid Chromatography-Mass Spectrometry) の分析結果を以下に示す。

HPLC: 純度99.8%

LC-MS: calcd for C₈₇H₆₀N₆=1188,
found m/z=1188 (M+, 100)

[0328] 合成例3 (化合物H-3の合成)

[化257]



[0329] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル中間体C1 (1.50g, 1.70mmol)、ピリミジン中間体D1 (0.396g, 0.850mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0.0623g, 0.0680mmol)、キサントホス(0.0787g, 0.136mmol)、*t*-ブトキシナトリウム(0.245g, 2.55mmol)、無水キシレン(34mL)を順次加えて8時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下

留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物H-3 (1.45g, 収率82%)を得た。

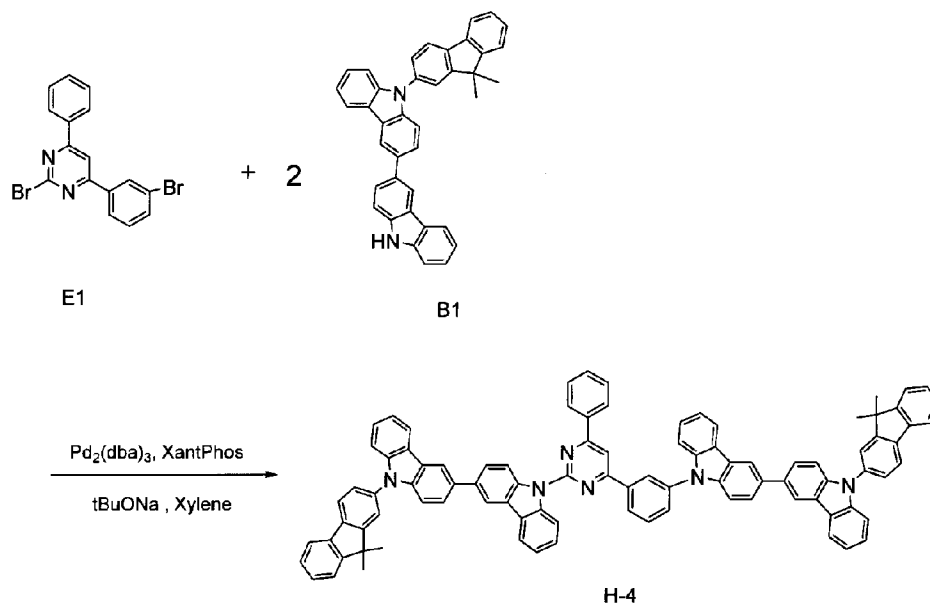
[0330] 化合物H-3について、HPLC (High Performance Liquid Chromatography) 及びLC-MS (Liquid Chromatography-Mass Spectrometry) の分析結果を以下に示す。

HPLC: 純度98.5%

LC-MS: calcd for C₁₅₄H₁₀₆N₈=2066,
found m/z=2066 (M+, 100)

[0331] 合成例4 (化合物H-4の合成)

[化258]



[0332] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル中間体B1 (2.69g, 5.13mmol)、ピリミジン中間体E1 (1.00g, 2.56mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム (0.0938g, 0.102mmol)、キサントホス (0.119g, 0.205mmol)、*t*-ブトキシナトリウム (0.738g, 7.68mmol)、無水キシレン (100mL) を順次加えて8時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下

留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物H-4 (2.62g, 収率80%)を得た。

[0333] 化合物H-4について、HPLC (High Performance Liquid Chromatography) 及びLC-MS (Liquid Chromatography-Mass Spectrometry) の分析結果を以下に示す。

HPLC : 純度99.0%

LC-MS : calcd for C₉₄H₆₄N₆ = 1276、

found m/z = 1276 (M+, 100)

[0334] なお、以上の合成反応を参照し、目的物に合わせた公知の代替反応や原料を用いることによって、特許請求の範囲で規定の化合物を合成することが可能である。

[0335] 実施例1

(基板の洗浄)

25mm×25mm×厚さ1.1mmのITO透明電極付ガラス基板 (ジオマテック株式会社製) をイソプロピルアルコール中で、超音波洗浄を5分間行った後、UVオゾン洗浄を5分間行った。

(下地層の形成)

正孔輸送材料としてHERAEUS社製CLEVIOUS A14083 (商品名) を30nmの厚さで前記のITO基板上にスピンコート法により成膜した。成膜後、アセトンにより不要な部分を除去し、次いで大気中で200℃のホットプレートで10分間焼成し、下地基板を作製した。

(発光層の形成)

ホスト材料として合成例で得た化合物H-1、ドーパント材料として下記の化合物D-1を用い、化合物H-1 : 化合物D-1が重量比で90 : 10となるような混合比で1.6重量%のトルエン溶液を調製した。このトルエン溶液を用い、前記下地基板上にスピンコート法により、50nmの膜厚になるように塗布積層した。塗布成膜後、不要部分をトルエンにて除去し、1

50℃のホットプレート上で加熱乾燥し、発光層を成膜した塗布積層基板を作製した。なお、発光層の成膜にかかる全ての操作は窒素雰囲気グローブボックス中で実施した。

(蒸着、封止)

塗布積層基板を蒸着チャンバー中に搬送し、電子輸送層として下記化合物ET-1を50nm蒸着した。更にフッ化リチウムを1nm、アルミニウムを80nm蒸着積層した。全ての蒸着工程を完了させた後、窒素雰囲気下のグローブボックス中でザグリガラスによる封止を行い、有機EL素子を作製した。

(素子評価)

得られた有機EL素子を、直流電流駆動により発光させ、電流密度10mA/cm²における外部量子収率(EQE)を測定した。測定結果を表1に示す。

[0336] 実施例2

ホスト材料として合成例で得た化合物H-2を用いたこと以外は、実施例1と同様の方法で有機EL素子を作製した。測定結果を表1に示す。

[0337] 実施例3

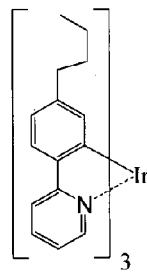
ホスト材料として合成例で得た化合物H-3を用いたこと以外は、実施例1と同様の方法で有機EL素子を作製した。測定結果を表1に示す。

[0338] 実施例4

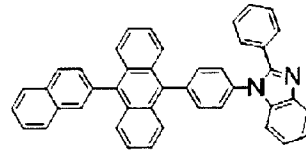
ホスト材料として合成例で得た化合物H-4を用いたこと以外は、実施例1と同様の方法で有機EL素子を作製した。測定結果を表1に示す。

[0339]

[化259]



D-1

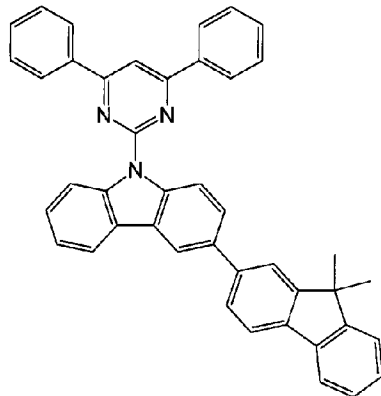


ET-1

[0340] 比較例 1

ホスト材料として下記化合物CEH-1を用いたこと以外は、実施例1と同様の方法で有機EL素子の作製を試みた。しかし、塗布成膜後の加熱乾燥時、当該膜が流動してしまい、均一な膜を得ることができなかった。

[0341] [化260]



CEH-1

[0342] [表1]

表1 EQE評価結果

	化合物	EQE (%)
実施例1	H-1	8.2%
実施例2	H-2	9.1%
実施例3	H-3	8.9%
実施例4	H-4	8.7%

[0343] 以上の実施例より、本願の分子構造を有する化合物は有機EL材料としての特性を有する事が確認できた。

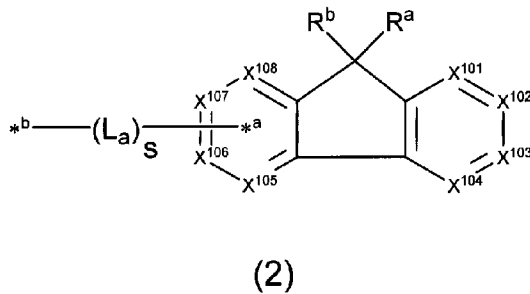
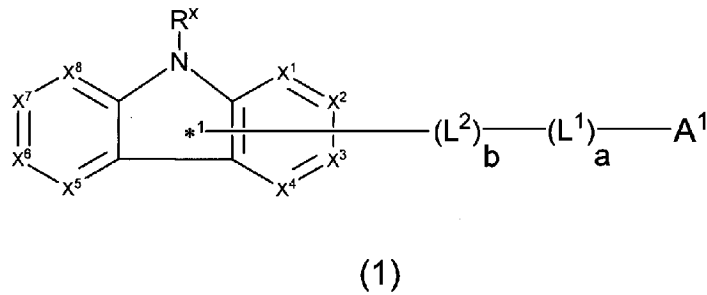
符号の説明

- [0344]
- 1 有機EL素子
 - 2 基板
 - 3 陽極
 - 4 陰極
 - 5 発光層
 - 6 陽極側有機薄膜層
 - 7 陰極側有機薄膜層
 - 10 発光ユニット

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（１）及び（２）で表され、かつ１分子内にベンゼン環を１以上含有する化合物。

[化1]



（一般式（１）中、 A^1 は、置換若しくは無置換の環形成原子数５～３０の含窒素ヘテロ芳香族基を表す。

L^1 及び L^2 は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換若しくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基を表す。

a 及び b は、それぞれ独立に、０又は１を表す。ただし、 a が０のとき、 $(L^1)_0$ は、単結合を表す。また、 b が０のとき、 $(L^2)_0$ は、単結合を表す。

R^x は、水素原子又は置換基を表す。

$X^1 \sim X^8$ は、それぞれ $C(R^1) \sim C(R^8)$ 、又は窒素原子を表す。

$R^1 \sim R^8$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り

合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^1 \sim R^4$ 及び R^x のうちのいずれか1つは、 $*^1$ の位置で L^2 に結合する単結合を表す。

一般式(2)中、 L_a は、置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基を表す。

s は、0又は1を表す。ただし、 s が0のとき、 $(L_a)_0$ は単結合を表す。

$X^{101} \sim X^{108}$ は、それぞれ $C(R^{101}) \sim C(R^{108})$ 又は窒素原子を表す。 $R^{101} \sim R^{108}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。ただし、 $R^{105} \sim R^{108}$ のうちのいずれか1つは、 $*^a$ の位置で L_a に直接結合する単結合を表す。

R^a 及び R^b は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数1～10のアルキル基、環形成炭素数6～14のアリール基、又は環形成原子数5～14のヘテロアリール基を表す。 R^a と R^b は、互いに結合して環を形成していてもよい。 R^a と R^{101} 、 R^b と R^{108} は、それぞれ独立に、互いに結合して環を形成していてもよい。

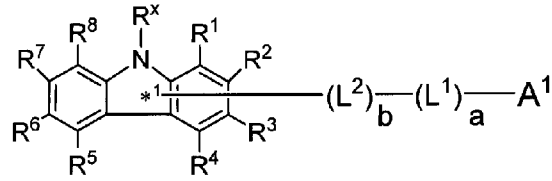
式(2)は、 $*^b$ の位置で、 L^1 、 L^2 、 $R^1 \sim R^8$ 、及び R^x のうちの少なくとも1つに結合する。この場合、式(2)が結合する $R^1 \sim R^8$ 、及び R^x は単結合を表す。

式(2)が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。))

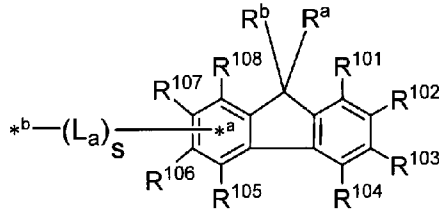
[請求項2]

下記一般式(1a)及び(2a)で表される、請求項1に記載の化合物。

[化2]



(1a)



(2a)

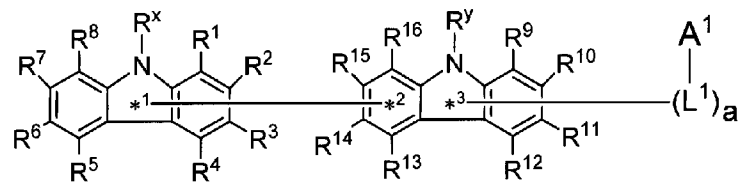
(一般式 (1 a) 中、 A^1 、 L^1 、 L^2 、 a 、 b 、 $R^1 \sim R^8$ 、及び R^x は、請求項 1 の記載と同じである。

一般式 (2 a) 中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、請求項 1 の記載と同じである。)

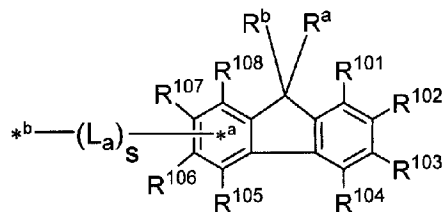
[請求項3]

下記一般式 (1 a - 1) 及び (2 a) で表される、請求項 2 に記載の化合物。

[化3]



(1a-1)



(2a)

(一般式 (1 a - 1) 中、 A^1 、 L^1 、 a は、請求項2の記載と同じである。

R^x 及び R^y は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。

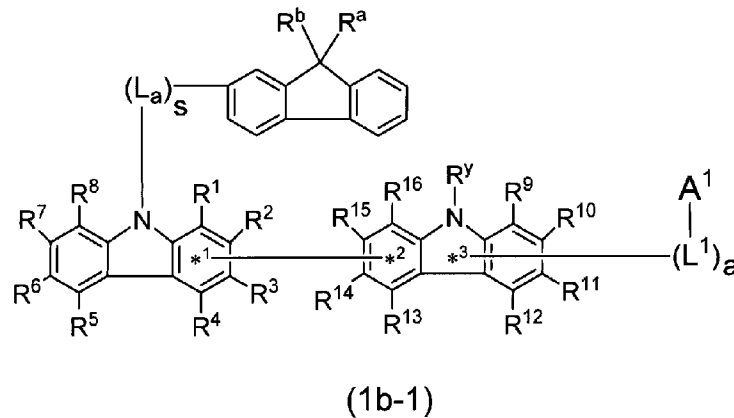
$R^1 \sim R^{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^1 \sim R^4$ 、及び R^x のうちのいずれか1つは*¹に結合する単結合を表し、 $R^{13} \sim R^{16}$ のうちのいずれか1つは*²に結合する単結合を表し、 $R^9 \sim R^{12}$ 、及び R^y のうちのいずれか1つは*³の位置で L^1 に結合する単結合を表す。

一般式 (2 a) 中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、請求項2の記載と同じである。

ただし、式 (2 a) は*^bの位置で、 L^1 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^x 、及び R^y の少なくとも1つに結合する。))

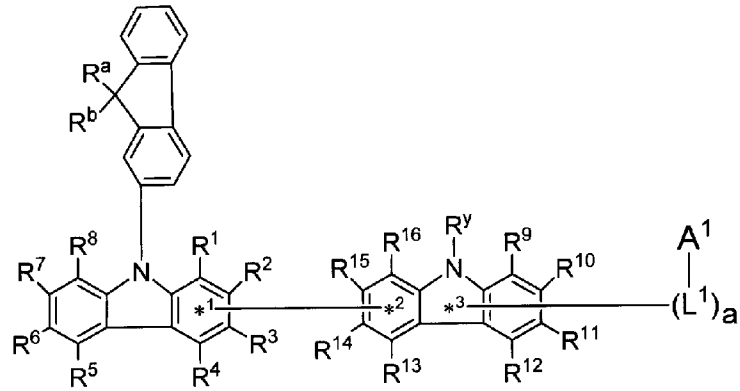
[請求項4] 下記一般式 (1 b - 1) で表される、請求項3に記載の化合物。
[化4]



(一般式 (1 b - 1) 中、 A^1 、 L_a 、 L^1 、 a 、 s 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^y 、 R^a 及び R^b は、請求項3の記載と同じである。)

[請求項5] 下記一般式 (1 b - 2) で表される、請求項3に記載の化合物。

[化5]

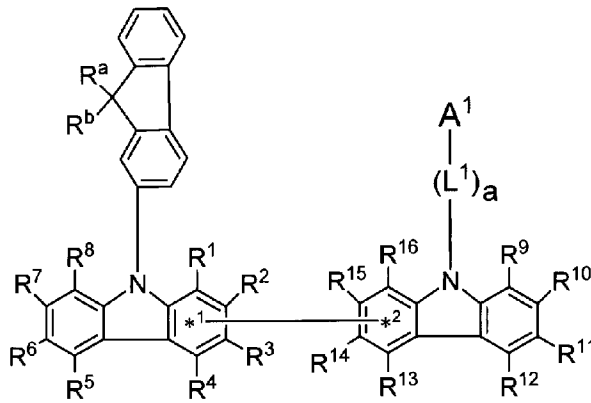


(1b-2)

(一般式 (1 b - 2) 中、 A^1 、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^y 、 R^a 及び R^b は、請求項3の記載と同じである。)

[請求項6] 下記一般式 (1 b - 3) で表される、請求項3に記載の化合物。

[化6]

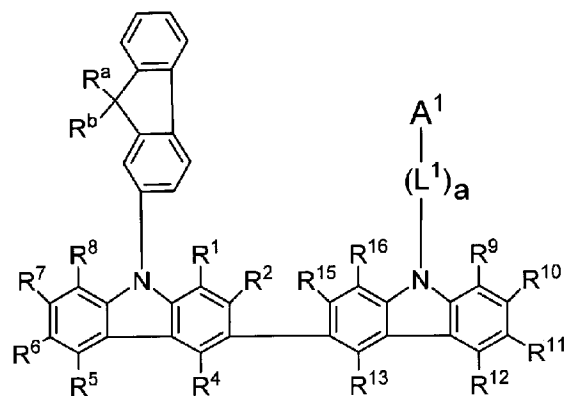


(1b-3)

(一般式 (1 b - 3) 中、 A^1 、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^a 及び R^b は、請求項3の記載と同じである。)

[請求項7] 下記一般式 (1 b - 4) で表される、請求項3に記載の化合物。

[化7]

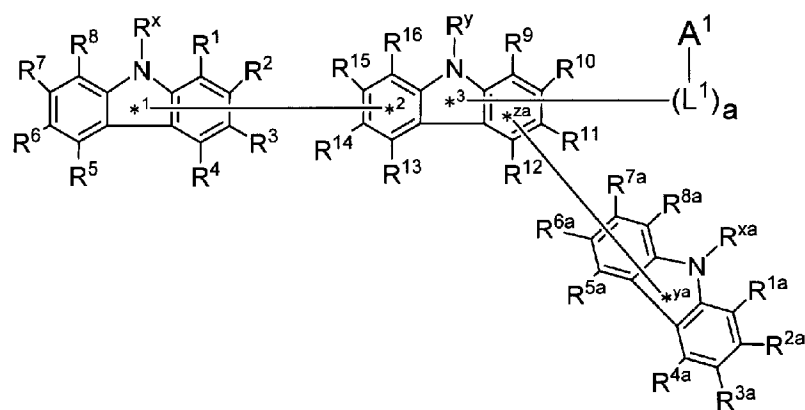


(1b-4)

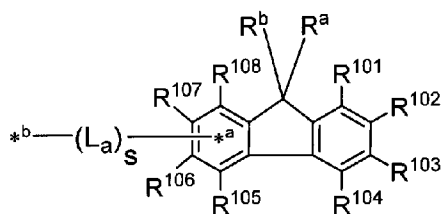
(一般式 (1 b - 4) 中、A¹、L¹、a、R¹、R²、R⁴~R¹³、R¹⁵、R¹⁶、R^a及びR^bは、請求項3の記載と同じである。)

[請求項8] 下記一般式 (1 a - a) 及び (2 a) で表される、請求項3に記載の化合物。

[化8]



(1a-a)



(2a)

(一般式 (1 a - a) 中、 A^1 、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^x 及び R^y は、請求項3の記載と同じである。

R^{xa} は、水素原子又は置換基を表す。

$R^{1a} \sim R^{8a}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^{5a} \sim R^{8a}$ 及び R^{xa} のうちのいずれか1つは、 $*^{ya}$ に結合する単結合を表し、 $R^9 \sim R^{12}$ のうちのいずれか1つは $*^{za}$ に結合する単結合を表す。

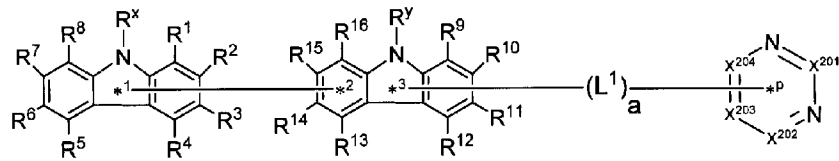
一般式 (2 a) 中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、請求項3の記載と同じである。

ただし、式 (2 a) は $*^b$ の位置で、 L^1 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 $R^{1a} \sim R^{8a}$ 、 R^x 、 R^y 、及び R^{xa} の少なくとも1つに結合する。))

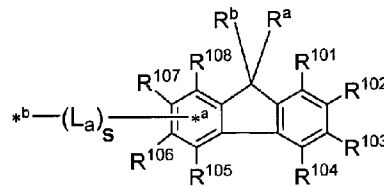
[請求項9]

下記一般式 (1 - i) 及び (2 a) で表される、請求項3に記載の化合物。

[化9]



(1-i)



(2a)

(一般式 (1 - i) 中、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^x 及び R^y は、請求項3の記載と同じである。

$X^{201} \sim X^{204}$ は、それぞれC (R^{201}) \sim C (R^{204}) 又は窒素原

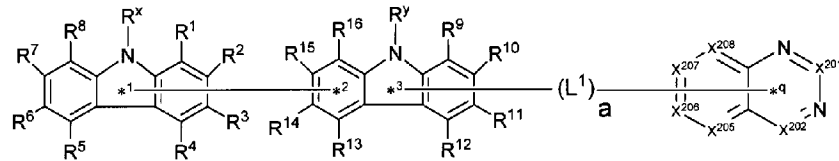
子を表す。R²⁰¹～R²⁰⁴は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は互いに結合してもよい。ただし、R²⁰¹～R²⁰⁴のうちのいずれか1つは、*^pの位置でL¹に直接結合する単結合を表す。

一般式(2a)中、L_a、s、R¹⁰¹～R¹⁰⁸、R^a及びR^bは、請求項3の記載と同じである。)

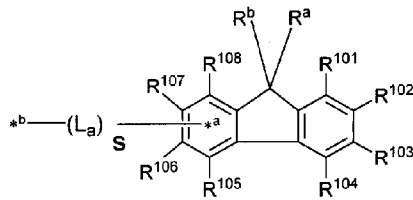
[請求項10]

下記一般式(1-ii)及び(2a)で表される、請求項3に記載の化合物。

[化10]



(1-ii)



(2a)

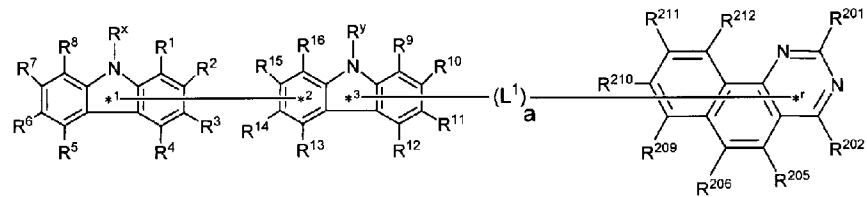
(一般式(1-ii)中、L¹、a、R¹～R¹⁶、R^x及びR^yは、請求項3の記載と同じである。

X²⁰¹、X²⁰²、及びX²⁰⁵～X²⁰⁸は、それぞれC(R²⁰¹)、C(R²⁰²)、C(R²⁰⁵)～C(R²⁰⁸)、又は窒素原子を表す。R²⁰¹、R²⁰²、及びR²⁰⁵～R²⁰⁸は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は互いに結合してもよい。ただし、R²⁰¹、R²⁰²、及びR²⁰⁵～R²⁰⁸のうちのいずれか1つは、*^qの位置でL¹に直接結合する単結合を表す。

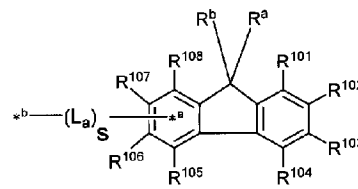
一般式(2a)中、L_a、s、R¹⁰¹～R¹⁰⁸、R^a及びR^bは、請求項3の記載と同じである。)

[請求項11] 下記一般式 (1 - iii) 及び (2 a) で表される、請求項3に記載の化合物。

[化11]



(1-iii)



(2a)

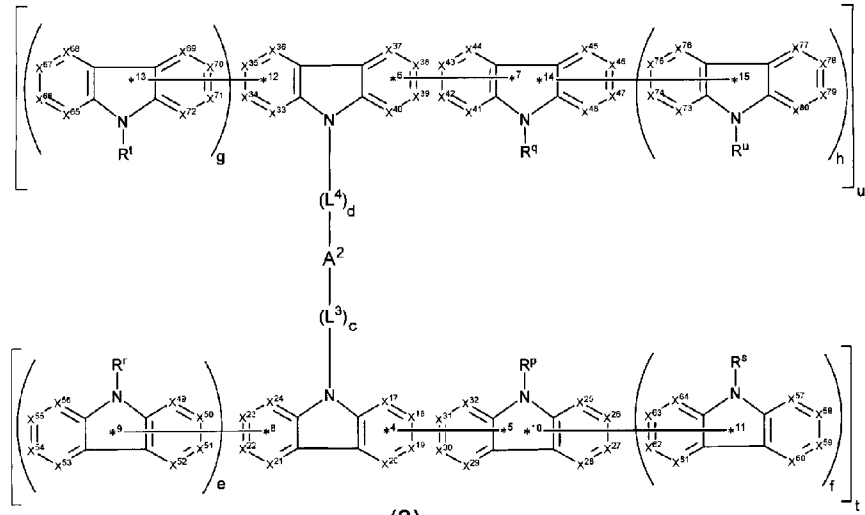
(一般式 (1 - iii) 中、 L^1 、 a 、 $R^1 \sim R^{16}$ 、 R^x 及び R^y は、請求項3の記載と同じである。

R^{201} 、 R^{202} 、 R^{205} 、 R^{206} 、及び $R^{209} \sim R^{212}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、隣り合う置換基は互いに結合してもよい。ただし、 R^{201} 、 R^{202} 、 R^{205} 、 R^{206} 、及び $R^{209} \sim R^{212}$ のうちのいずれか1つは、*rの位置で L^1 に直接結合する単結合を表す。

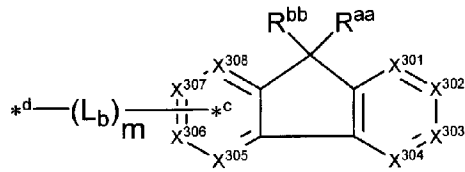
(一般式 (2 a) 中、 L_a 、 s 、 $R^{101} \sim R^{108}$ 、 R^a 及び R^b は、請求項3の記載と同じである。)

[請求項12] 下記一般式 (3) 及び (4) で表される化合物。

[化12]



(3)



(4)

(一般式 (3) 中、 A^2 は、置換若しくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の含窒素ヘテロ芳香族基を表す。

L^3 及び L^4 は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の芳香族炭化水素基、置換若しくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、又はこれらの基が 2 ~ 4 個結合してなる基を表す。

c 及び d は、それぞれ独立に、0 又は 1 を表す。ただし、 c が 0 のとき、 $(L^3)_c$ は、単結合を表す。また、 d が 0 のとき、 $(L^4)_d$ は、単結合を表す。

$R^p \sim R^u$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。

$X^{17} \sim X^{80}$ は、それぞれ $C(R^{17}) \sim C(R^{80})$ 、又は窒素原子を表す。

$R^{17} \sim R^{80}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣

り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^{17} \sim R^{20}$ のうちのいずれか1つは $*^4$ に結合する単結合を表し、 R^p 、 $R^{29} \sim R^{32}$ のうちのいずれか1つは $*^5$ に結合する単結合を表し、 $R^{37} \sim R^{40}$ のうちのいずれか1つは $*^6$ に結合する単結合を表し、 R^q 、 $R^{41} \sim R^{44}$ のうちのいずれか1つは $*^7$ に結合する単結合を表し、 $R^{21} \sim R^{24}$ のうちのいずれか1つは $*^8$ に結合する単結合を表し、 R^r 、 $R^{49} \sim R^{52}$ のうちのいずれか1つは $*^9$ に結合する単結合を表し、 R^p 、 $R^{25} \sim R^{28}$ のうちのいずれか1つは $*^{10}$ に結合する単結合を表し、 R^s 、 $R^{61} \sim R^{64}$ のうちのいずれか1つは $*^{11}$ に結合する単結合を表し、 $R^{33} \sim R^{36}$ のうちのいずれか1つは $*^{12}$ に結合する単結合を表し、 R^t 、 $R^{69} \sim R^{72}$ のうちのいずれか1つは $*^{13}$ に結合する単結合を表し、 R^q 、 $R^{45} \sim R^{48}$ のうちのいずれか1つは $*^{14}$ に結合する単結合を表し、 R^u 、 $R^{73} \sim R^{76}$ のうちのいずれか1つは $*^{15}$ に結合する単結合を表す。

$X^{17} \sim X^{80}$ 、 $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ のうち同一符号のものが複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。

$e \sim h$ は、それぞれ独立に、0又は1の整数を表す。ただし、 $e \sim h$ が0の場合、 $()_o$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。

t 及び u は、それぞれ独立に、0～2の整数を表し、 $t + u = 2$ である。ただし、 t が0の場合の $[]_o$ 、及び u が0の場合の $[]_o$ は、それぞれ、水素原子を表す。

一般式(4)中、 L_b は、置換若しくは無置換の環形成炭素数6～30の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基を表す。

$X^{301} \sim X^{308}$ は、それぞれ $C(R^{301}) \sim C(R^{308})$ 又は窒素原子を表す。 $R^{301} \sim R^{308}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基

であり、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。ただし、 $R^{305} \sim R^{308}$ のうちのいずれか1つは、*^cの位置で L_b に直接結合する単結合を表す。

R^{aa} 及び R^{bb} は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数1～10のアルキル基、環形成炭素数6～14のアリール基、又は環形成原子数5～14のヘテロアリール基を表す。 R^{aa} と R^{bb} は、互いに結合して環を形成していてもよい。 R^{aa} と R^{301} 、 R^{bb} と R^{308} は、それぞれ独立に、互いに結合して環を形成してもよい。

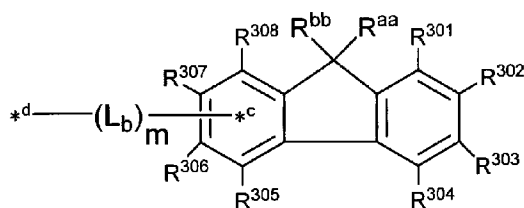
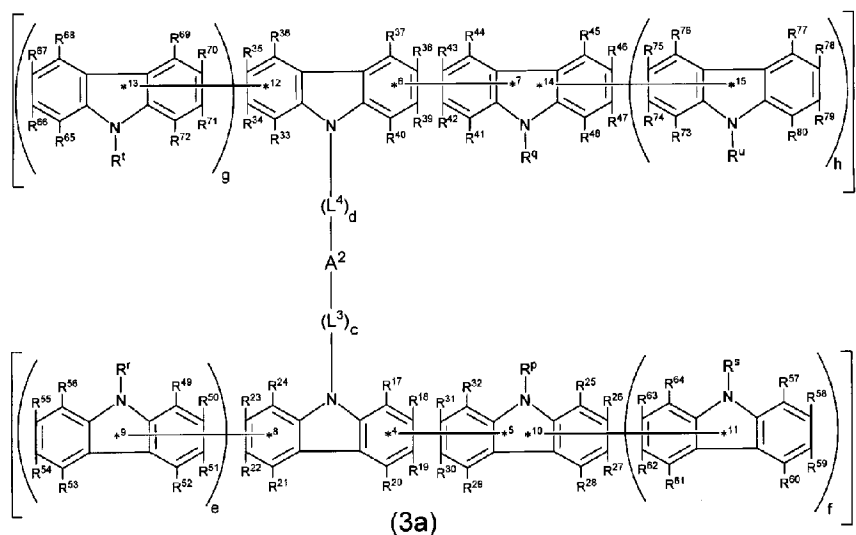
m は、0又は1を表す。ただし、 m が0のとき、 $(L_b)_0$ は単結合を表す。

式(4)は*^dの位置で、 L^3 、 L^4 、 $X^{17} \sim X^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ の少なくとも1つに結合する。この場合、式(4)が結合する $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ は単結合を表す。

式(4)が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよいし、異なってもよい。))

[請求項13] 下記式(3a)及び(4a)で表される、請求項12に記載の化合物。

[化13]



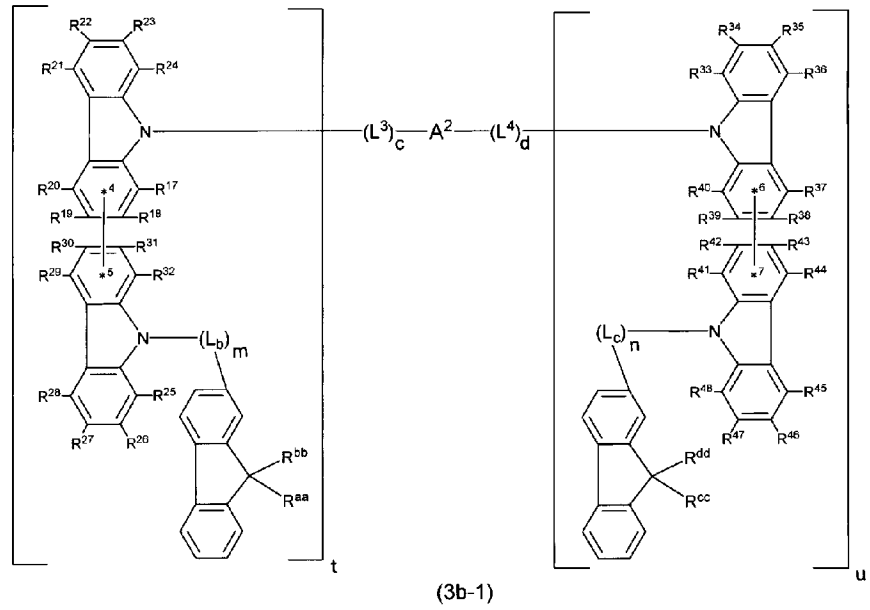
(一般式 (3 a) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 $c \sim h$ 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim R^{80}$ 、及び $R^p \sim R^u$ は請求項 1 2 の記載と同じである。

一般式 (4 a) 中、 L_b 、 m 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 R^{aa} 及び R^{bb} は、請求項 1 2 の記載と同じである。)

[請求項14]

下記一般式 (3 b) で表される、請求項 1 2 に記載の化合物。

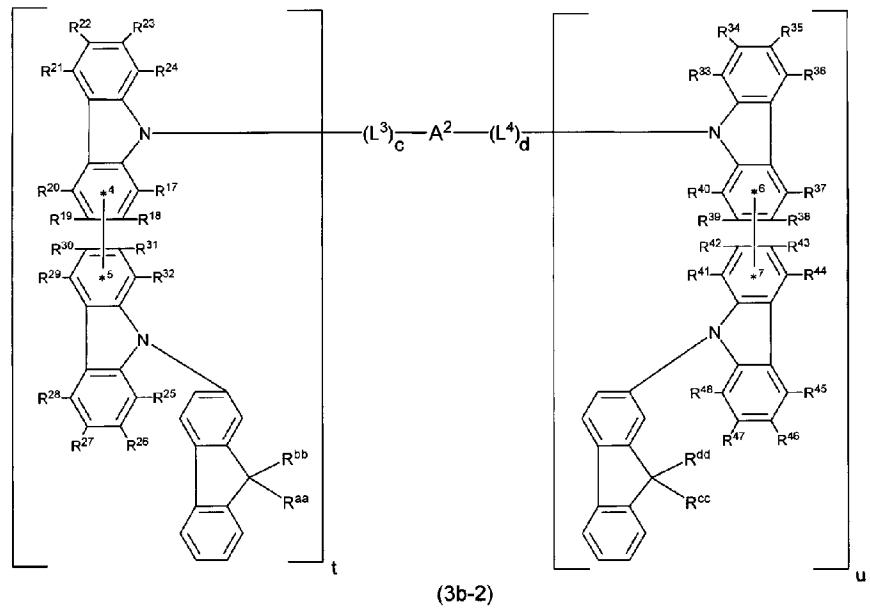
[化15]



(一般式 (3b-1) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 c 、 d 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim R^{48}$ 、 L_b 、 L_c 、 m 、 n 、及び $R^{aa} \sim R^{dd}$ は、請求項 14 の記載と同じである。)

[請求項 16] 下記一般式 (3b-2) で表される、請求項 14 に記載の化合物。

[化16]

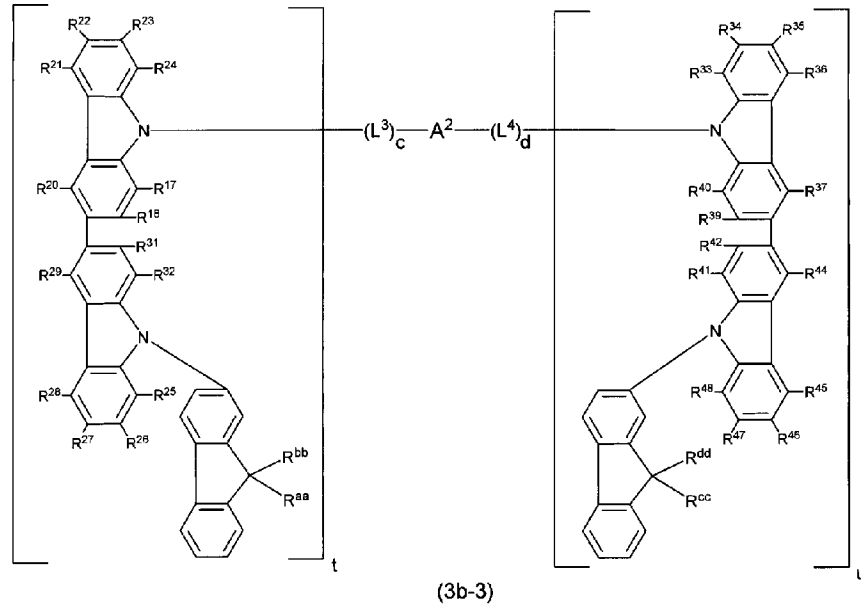


(一般式 (3b-2) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 c 、 d 、 t 、 u 、 $R^{17} \sim$

R⁴⁸、及びR^{aa}～R^{dd}は、請求項14の記載と同じである。）

[請求項17] 下記一般式(3b-3)で表される、請求項14に記載の化合物。

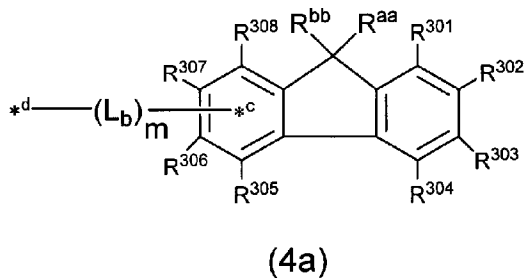
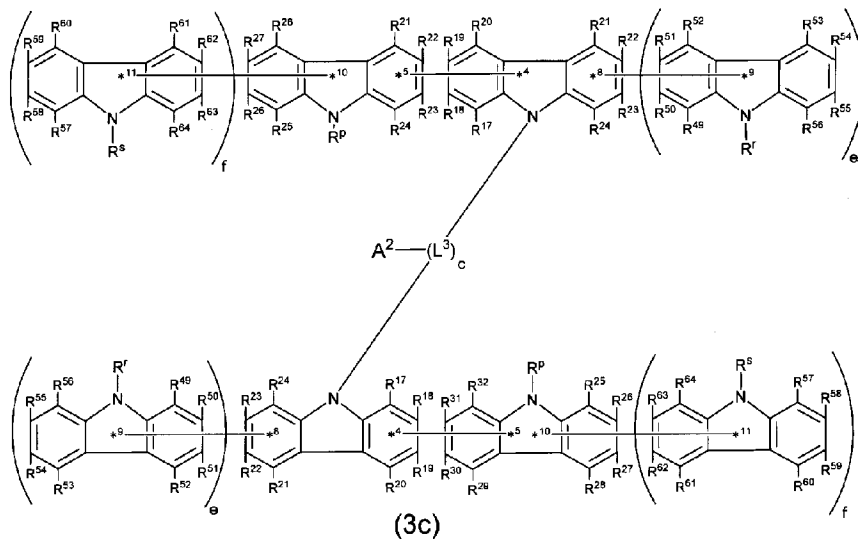
[化17]



(一般式(3b-3)中、A²、L³、L⁴、c、d、t、u、R¹⁷、R¹⁸、R²⁰～R²⁹、R³¹～R³⁷、R³⁹～R⁴²、R⁴⁴～R⁴⁸、及びR^{aa}～R^{dd}は、請求項14の記載と同じである。)

[請求項18] 下記一般式(3c)及び(4a)で表される、請求項12に記載の化合物。

[化18]

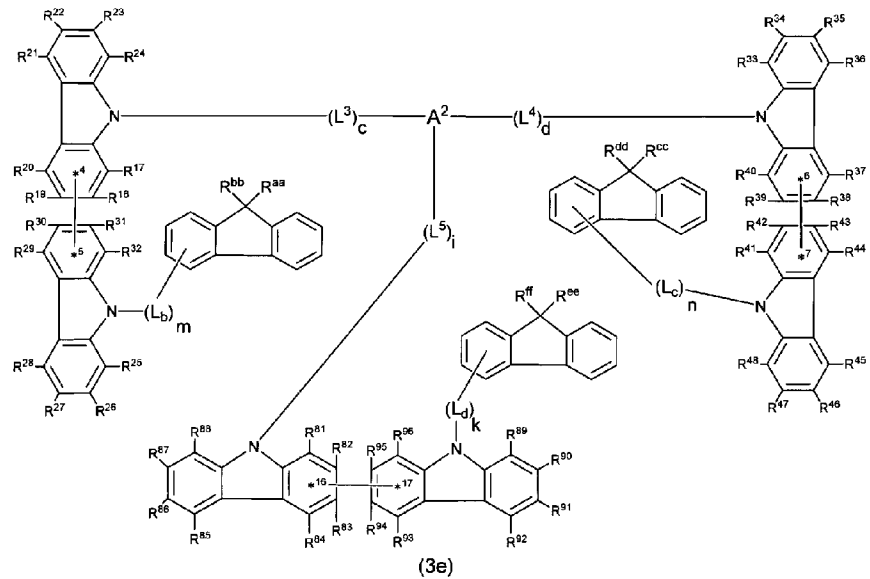


(一般式 (3c) 中、 A^2 、 L^3 、 c 、 e 、 f 、 $R^{17} \sim R^{32}$ 、 $R^{49} \sim R^{64}$ 、 R^p 、 R^r 、及び R^s は、請求項12の記載と同じである。

一般式 (4a) 中、 L_b 、 m 、 $R^{301} \sim R^{308}$ 、 R^{aa} 及び R^{bb} は、請求項12の記載と同じである。)

[請求項19] 下記一般式 (3e) で表される、請求項12に記載の化合物。

[化19]



(一般式 (3e) 中、 A^2 、 L^3 、 L^4 、 c 、 d 、 $R^{17} \sim R^{48}$ 、 L_b 、 m 、 R^{aa} 及び R^{bb} は、請求項 12 の記載と同じである。

L^5 は、置換若しくは無置換の環形成炭素数 6～30 の芳香族炭化水素基、置換若しくは無置換の環形成原子数 5～30 の複素環基、又はこれらの基が 2～4 個結合してなる基を表す。

i は、0 又は 1 を表す。ただし、 i が 0 のとき、 $(L^5)_0$ は単結合を表す。

$R^{81} \sim R^{96}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、隣り合う置換基は、互いに結合して環を形成してもよい。

ただし、 $R^{81} \sim R^{84}$ のうちのいずれか 1 つは $*^{16}$ に結合する単結合を表し、 $R^{93} \sim R^{96}$ のうちのいずれか 1 つは $*^{17}$ に結合する単結合を表す。

L_c 、及び L_d は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数 6～30 の芳香族炭化水素基、又は置換若しくは無置換の環形成原子数 5～30 の複素環基を表す。

k 及び n は、それぞれ独立に、0 又は 1 を表す。ただし、 k が、0 のとき、 $(L_d)_0$ は単結合を表す。また、 n が、0 のとき、 (L_c)

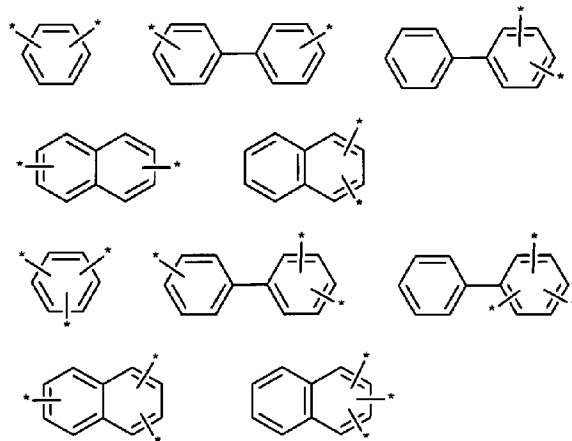
。は単結合を表す。

$R^{cc} \sim R^{ff}$ は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数1～10のアルキル基、環形成炭素数6～14のアリール基、又は環形成原子数5～14のヘテロアリール基を表す。 R^{cc} と R^{dd} 、 R^{ee} と R^{ff} は、それぞれ独立に、互いに結合して環を形成してもよい。）

[請求項20]

一般式(3)における L^3 及び L^4 の少なくとも一つが、下記式で表される基のいずれかである、請求項12～19のいずれかに記載の化合物。

[化20]



(上記式中、*は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基を有していてもよい。)

[請求項21]

前記 $R^{aa} \sim R^{ff}$ が、それぞれ独立に、メチル基又はフェニル基である、請求項12～20のいずれかに記載の化合物。

[請求項22]

前記 A^2 、 L^3 、 L^4 、 L^5 、 L_b 、 L_c 、 L_d 、 $X^{17} \sim X^{80}$ 、 $X^{301} \sim X^{308}$ 及び $R^p \sim R^u$ における、置換基、又は「置換もしくは無置換」という記載における置換基が、いずれも、炭素数1～50のアルキル基、環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、環形成炭素数6～50のアリール基、環形成炭素数6～50のアリール基を有する炭素数7～51のアラルキル基、アミノ基、炭素数1～50のアルキル基及び環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる置換基を有するモ

ノ置換又はジ置換アミノ基、炭素数1～50のアルキル基を有するアルコキシ基、環形成炭素数6～50のアリール基を有するアリールオキシ基、炭素数1～50のアルキル基及び環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基、環形成原子数5～50のヘテロアリール基、炭素数1～50のハロアルキル基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、炭素数1～50のアルキル基及び環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基、炭素数1～50のアルキル基及び環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォルル基、アルキルスルホニルオキシ基、アリールスルホニルオキシ基、アルキルカルボニルオキシ基、アリールカルボニルオキシ基、ホウ素含有基、亜鉛含有基、スズ含有基、ケイ素含有基、マグネシウム含有基、リチウム含有基、ヒドロキシ基、アルキル置換又はアリール置換カルボニル基、カルボキシル基、ビニル基、(メタ)アクリロイル基、エポキシ基、並びにオキセタニル基からなる群より選ばれる、請求項12～21のいずれかに記載の化合物。

[請求項23] 溶媒及び請求項1～22のいずれかに記載の化合物を含む、インク組成物。

[請求項24] 更に金属錯体を含む、請求項23に記載のインク組成物。

[請求項25] 請求項1～22のいずれかに記載の化合物からなる、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

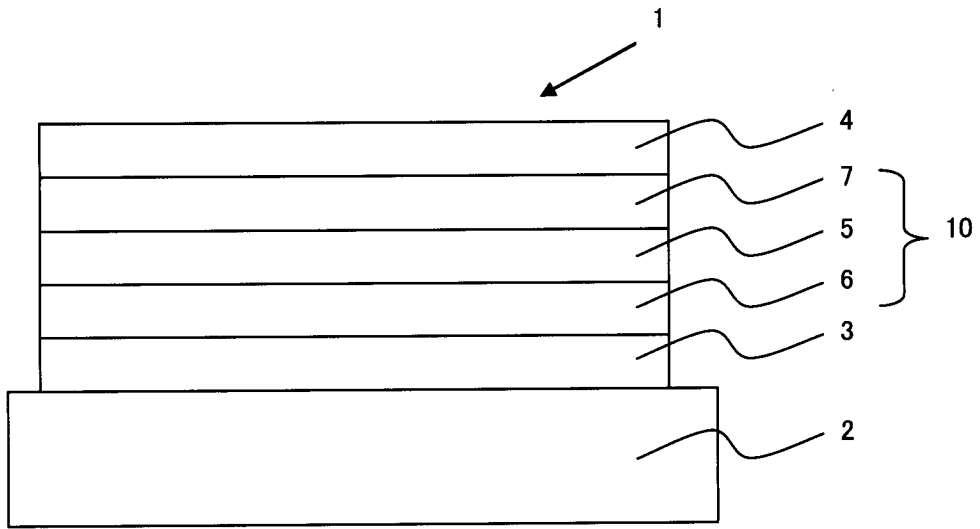
[請求項26] 陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

前記一層以上の有機薄膜層が発光層を含む層であり、前記一層以上の有機薄膜層の少なくとも1層が請求項1～22のいずれかに記載の化合物を含む層である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項27] 前記発光層が、請求項1～22のいずれかに記載の化合物を含む、請求項26に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項28] 請求項26又は27に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を
搭載した、電子機器。

[図1]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2015/057391

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C07D403/14(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C07D403/14, C09K11/06, H01L51/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2015
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2015	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2015

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
CAplus/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2013-87217 A (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 13 May 2013 (13.05.2013), entire text; particularly, paragraph [0038]; compounds P-1, P-3 to P-7 & US 2014/0231771 A & WO 2013/057908 A & EP 2770006 A1 & CN 103717636 A & KR 10-2014-0092289 A	1-8, 23-28
X	WO 2013/057922 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 25 April 2013 (25.04.2013), entire text; particularly, paragraphs [0060] to [0061]; compounds P-1, P-3 to P-7 & US 2014/0299855 A1	1-8, 23-28

Further documents are listed in the continuation of Box C. See patent family annex.

* Special categories of cited documents:	"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date	"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)	"&" document member of the same patent family
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	

Date of the actual completion of the international search 08 April 2015 (08.04.15)	Date of mailing of the international search report 21 April 2015 (21.04.15)
---	--

Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan	Authorized officer Telephone No.
--	---

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2015/057391

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2012/108881 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORP.), 16 August 2012 (16.08.2012), entire text; particularly, claims; illustrative compounds & JP 2014-511564 A & US 2013/0306963 A1 & KR 10-2014-0043043 A	1-7, 9, 23-28
X	WO 2013/162284 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.), 31 October 2013 (31.10.2013), entire text; particularly, claims; illustrative compounds & EP 2828254 A1 & KR 10-2013-0121479 A & CN 104254529 A	1-7, 9, 23-28
X	WO 2013/165192 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.), 07 November 2013 (07.11.2013), entire text; particularly, claims; illustrative compounds & KR 10-2014-0096182 A & CN 104271702 A	1-7, 9, 23-28
X/A	WO 2012/141499 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.), 18 October 2012 (18.10.2012), entire text; particularly, claims; illustrative compounds & JP 2014-513083 A & EP 2697216 A1 & KR 10-2012-0116269 A & CN 103619833 A	1-7, 10, 23-28/11
X/A	WO 2012/121561 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.), 13 September 2012 (13.09.2012), entire text; particularly, claims; illustrative compounds & JP 2014-513064 A & US 2014/0107338 A1 & EP 2683712 A1 & KR 10-2012-0102374 A & CN 103502243 A	1-7, 10, 23-28/11
X/A	WO 2012/134124 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.), 04 October 2012 (04.10.2012), entire text; particularly, claims; illustrative compounds & JP 2014-515738 A1 & US 2014/0114069 A1 & EP 2678335 A & KR 10-2012-0109744 A & CN 103534251 A	1-7, 10, 23-28/11
X	WO 2011/049325 A2 (CHEIL INDUSTRIES INC.), 28 April 2011 (28.04.2011), entire text; particularly, claims; chemical formulae 61, 62, 68, 74 & US 2012/0205636 A1 & KR 10-2011-0043342 A	1-8, 23-28

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2015/057391

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X/A	HWANG, I. et al, Photophysics of Delocalized Excitons in Carbazole Dendrimers, Journal of Physical Chemistry A, 2013, Vol.117, No.29, pp.6270-6278	1, 2, 12, 13, 23-28/14-22
X	CN 103183664 A (KUNSHAN VISIONOX DISPLAY CO., LTD.), 03 July 2013 (03.07.2013), entire text; particularly, claims; compounds I-12 to I-14 (Family: none)	1, 2, 23-28
X	JP 2010-13444 A (Gracel Display Inc.), 21 January 2010 (21.01.2010), entire text; particularly, claims; illustrative compounds (particularly, compound 82) & US 2010/0066241 A1 & EP 2138551 A2 & KR 10-2010-0000772 A & CN 101671291 A	1, 2, 23-28
X	JP 2009-194042 A (Toyo Ink Manufacturing Co., Ltd.), 27 August 2009 (27.08.2009), entire text; particularly, claims; illustrative compounds (1) to (65) (Family: none)	1, 2, 23-28

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） Int.Cl. C07D403/14(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i		
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） Int.Cl. C07D403/14, C09K11/06, H01L51/50		
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2015年 日本国実用新案登録公報 1996-2015年 日本国登録実用新案公報 1994-2015年		
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語） CAplus/REGISTRY(STN)		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	JP 2013-87217 A（出光興産株式会社）2013.05.13, 全文、特に[0038]、化合物 P-1, P-3~P-7 & US 2014/0231771 A & WO 2013/057908 A & EP 2770006 A1 & CN 103717636 A & KR 10-2014-0092289 A	1-8, 23-28
X	WO 2013/057922 A1（出光興産株式会社）2013.04.25, 全文、特に[0060]-[0061]、化合物 P-1, P-3~P-7 & US 2014/0299855 A1	1-8, 23-28
<input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー 「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの 「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの 「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） 「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願		
の日の後に公表された文献 「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの 「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの 「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの 「&」同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日	
08.04.2015	21.04.2015	
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁（ISA/J P） 郵便番号100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	特許庁審査官（権限のある職員） 三上 晶子 電話番号 03-3581-1101 内線 3492	4 P 4042

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	WO 2012/108881 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 2012.08.16, 全文、特に claims、例示化合物 & JP 2014-511564 A & US 2013/0306963 A1 & KR 10-2014-0043043 A	1-7, 9, 23-28
X	WO 2013/162284 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD) 2013.10.31, 全文、特に claims、例示化合物 & EP 2828254 A1 & KR 10-2013-0121479 A & CN 104254529 A	1-7, 9, 23-28
X	WO 2013/165192 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 2013.11.07, 全文、特に claims、例示化合物 & KR 10-2014-0096182 A & CN 104271702 A	1-7, 9, 23-28
X / A	WO 2012/141499 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 2012.10.18, 全文、特に claims、例示化合物 & JP 2014-513083 A & EP 2697216 A1 & KR 10-2012-0116269 A & CN 103619833 A	1-7, 10, 23-28/ 11
X / A	WO 2012/121561 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 2012.09.13, 全文、特に claims、例示化合物 & JP 2014-513064 A & US 2014/0107338 A1 & EP 2683712 A1 & KR 10-2012-0102374 A & CN 103502243 A	1-7, 10, 23-28/ 11
X / A	WO 2012/134124 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 2012.10.04, 全文、特に claims、例示化合物 & JP 2014-515738 A1 & US 2014/0114069 A1 & EP 2678335 A & KR 10-2012-0109744 A & CN 103534251 A	1-7, 10, 23-28/ 11
X	WO 2011/049325 A2 (CHEIL INDUSTRIES INC.) 2011.04.28, 全文、 特に claims、Chemical Formula 61, 62, 68, 74 & US 2012/0205636 A1 & KR 10-2011-0043342 A	1-8, 23-28
X / A	HWANG, I. et al, Photophysics of Delocalized Excitons in Carbazole Dendrimers, Journal of Physical Chemistry A, 2013, Vol.117, No.29, pp.6270-6278	1, 2, 12, 13, 23-28/ 14-22

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	CN 103183664 A (KUNSHAN VISIONOX DISPLAY CO., LTD.) 2013. 07. 03, 全文、特に特許請求の範囲、化合物 I-12~I-14 (ファミリーなし)	1, 2, 23-28
X	JP 2010-13444 A (グラセル・ディスプレイ・インコーポレーテッド) 2010. 01. 21, 全文、特に特許請求の範囲、例示化合物 (特に、化合物 82) & US 2010/0066241 A1 & EP 2138551 A2 & KR 10-2010-0000772 A & CN 101671291 A	1, 2, 23-28
X	JP 2009-194042 A (東洋インキ製造株式会社) 2009. 08. 27, 全文、特に特許請求の範囲、例示化合物(1)~(65) (ファミリーなし)	1, 2, 23-28