

(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
2022年12月29日(29.12.2022)



(10) 国際公開番号
WO 2022/270602 A1

(51) 国際特許分類:

H01L 51/50 (2006.01) *C07D 405/14* (2006.01)
C07D 209/86 (2006.01) *C07F 5/02* (2006.01)
C07D 405/04 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
C07D 405/10 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2022/025197

(22) 国際出願日: 2022年6月23日(23.06.2022)

(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:

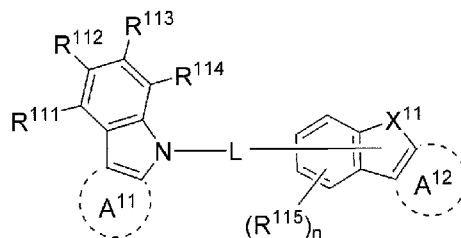
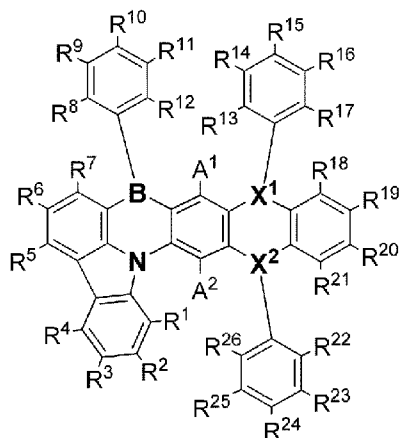
特願	2021-103702	2021年6月23日(23.06.2021)	JP
特願	2021-151805	2021年9月17日(17.09.2021)	JP
特願	2021-157765	2021年9月28日(28.09.2021)	JP
特願	2021-160212	2021年9月30日(30.09.2021)	JP
特願	2021-204983	2021年12月17日(17.12.2021)	JP
特願	2022-068629	2022年4月19日(19.04.2022)	JP
特願	2022-068881	2022年4月19日(19.04.2022)	JP
特願	2022-073952	2022年4月28日(28.04.2022)	JP
特願	2022-091795	2022年6月6日(06.06.2022)	JP

(71) 出願人: 株式会社 K y u l u x (KYULUX, INC.) [JP/JP]; 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 Fukuoka (JP).

(72) 発明者: 吉 ▲ 崎 ▼ 誠 (YOSHIZAKI Makoto); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). ファンソンヘ(HWANG Songhye); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 森本 京(MORIMOTO Kei); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 遠藤 礼隆(ENDO Ayataka); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 黒瀧 公之(KUROTAKI Masayuki); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 金原 幸誠(KANAHARA Kousei); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 垣添 勇人(KAKIZOE Hayato); 〒8190388

(54) Title: ORGANIC LIGHT-EMITTING ELEMENT AND FILM

(54) 発明の名称: 有機発光素子および膜



(57) Abstract: This organic light-emitting element containing compounds represented by the respective general formulae below has excellent light-emitting properties. One of X^1 and X^2 indicates N and the other indicates B; each of R^1 - R^{26} , A^1 , and A^2 indicates H, D, or a substituent; X^{11} indicates O, S, or the like; each of A^{11} and A^{12} indicates a benzene ring, a furan ring, or the like; each of R^{111} - R^{115} indicates H, D, an aryl group, or the like; n is 3 or 4; and L indicates a single bond, an arylene group, or the like.

(57) 要約: 下記の各一般式で表される化合物を含む有機発光素子は優れた発光特性を有する。 X^1 、 X^2 は一方がN、他方がB； R^1 ～ R^{26} 、 A^1 、 A^2 はH、Dまたは置換基； X^1 はO、S等； A^{11} 、 A^{12} はベンゼン環、フラン環等； R^{111} ～ R^{115} はH、D、アリール等；nは3または4；Lは単結合、アリーレン基等である。

[続葉有]

福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社Kyulux内Fukuoka (JP).

(74) 代理人: 小林 功 (KOBAYASHI Takumi);
〒1600023 東京都新宿区西新宿7-21-9 天翔西新宿ビル101号室 バード
国際特許事務所 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, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, 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, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, 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))

明 細 書

発明の名称：有機発光素子および膜

技術分野

[0001] 本発明は、良好な発光特性を有する有機発光素子および膜に関する。

背景技術

[0002] 有機発光ダイオード（OLED）などの有機発光素子の発光効率を高める研究が盛んに行われている。

例えば、非特許文献1には、5,9-Diphenyl-5H,9H-[1,4]benzazaborino[2,3,4-kl]phenazaborine（DABNA-1）のように多重共鳴効果を発現する化合物を用いることにより、逆系間交差過程による熱活性型遅延蛍光を発現し、半値幅が狭くて色純度が高い発光を実現したことが記載されている。このような発光は、高い発光効率を達成することができることから、ディスプレイを志向した用途において有用である。

また、非特許文献1および2には、DABNA-1を修飾することによって、最高被遷移分子軌道（HOMO）および最低空分子軌道（LUMO）などのエネルギー準位を調整し、また発光へと寄与する蛍光放射過程や逆系間交差過程を促進して、エレクトロルミネッセンス量子効率を改善したことが記載されている。

先行技術文献

非特許文献

[0003] 非特許文献1：Adv. Mater. 2016, 28, 2777-2781

非特許文献2：Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 11316-11320

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] このように多重共鳴効果を発現する化合物に関する研究が種々行われているが、その構造と発光特性の関係については未知な点も多い。実用性のある発光素子を製造するためには、少しでも発光特性が優れた材料を提供するこ

とが必要とされている。また、発光特性が優れた材料を提供するだけでなく、それと組み合わせて用いる材料も選択することにより、一段と発光特性が優れた有機発光素子を提供することも望まれる。

そこで、本発明者らは、多重共鳴効果を発現する化合物の誘導体を開発するとともに、それと組み合わせて用いる材料を選択することにより、一段と発光特性が優れた有機発光素子を提供することを目的として鋭意検討を進めた。

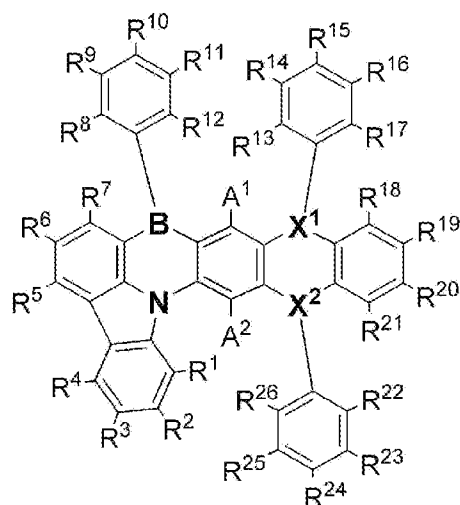
課題を解決するための手段

[0005] 鋭意検討を進めた結果、本発明者らは、多重共鳴効果を発現する化合物の中でも特定の構造を有するものが優れた発光特性を有することを見いだした。そして、その優れた発光特性は、特定の構造を有する材料と組み合わせて用いることにより、一段と良好になることを見いだした。本発明は、このような知見に基づいて提案されたものであり、以下の構成を有する。

[0006] [1] 下記一般式(1)で表される化合物および下記一般式(2)で表される化合物を含む有機発光素子。

一般式(1)

[化1]

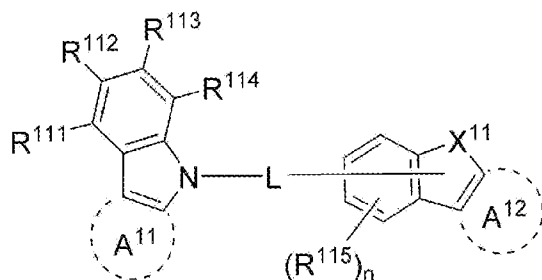


[一般式(1)において、 X^1 および X^2 は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。 $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と

R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ただし、 X^1 が窒素原子であるとき、 R^{17} と R^{18} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成し、 X^2 が窒素原子であるとき、 R^{21} と R^{22} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。ただし、 X^1 が窒素原子であって、 R^7 と R^8 および R^{21} と R^{22} が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して単結合を形成しているとき、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換もしくは無置換のアリール基であるか、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 のいずれかが互いに結合して芳香環または複素芳香環を形成している。]

一般式 (2)

[化2]



[一般式 (2) において、 X^{11} は、O、S、N (R^A) またはC (R^B) (R^C) を表す。 A^{11} および A^{12} は、各々独立にベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環またはシクロペンタジエン環であって、これらの環にはさらに他の環が縮合していてもよく、また置換されていてもよい。 $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^B 、 R^C は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはシアノ基を表す。 R^{115} は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、シアノ基、またはLとの結合を

表す。R^Aは、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはLとの結合を表す。R¹¹¹とR¹¹²、R¹¹²とR¹¹³、R¹¹³とR¹¹⁴、隣り合う2個のR¹¹⁵、R^BとR^Cは、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。nは3または4のいずれかの整数を表す。Lは単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基、またはこれらの2個以上が結合した連結基を表す。ただし、X¹¹がNで、LがそのNに結合しているとき、R¹¹⁵の少なくとも1個かA¹²が表す環に結合する基の少なくとも1個は置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基またはシアノ基である。]

[2] 一般式(1)のR³およびR⁶がともに置換基である、[1]に記載の有機発光素子。

[3] 一般式(1)のR⁸およびR¹²がともに置換基である、[1]または[2]に記載の有機発光素子。特に、R⁸およびR¹²が炭素数2以上のアルキル基、好ましくは3以上のアルキル基、より好ましくは炭素数3~8のアルキル基、さらに好ましくは3または4のアルキル基である。

[4] 一般式(1)のX¹が窒素原子であり、X²がホウ素原子である、[1]~[3]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[5] 一般式(1)のR⁷とR⁸、R¹⁷とR¹⁸が互いに結合して-B(R³²)-を形成しており、R³²は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す、[1]~[4]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[6] 一般式(1)のR⁷とR⁸、R¹⁷とR¹⁸が互いに結合して-CO-を形成している、[1]~[4]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[7] 一般式(1)のR⁷とR⁸、R¹⁷とR¹⁸が互いに結合して-CS-を形成している、[1]~[4]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

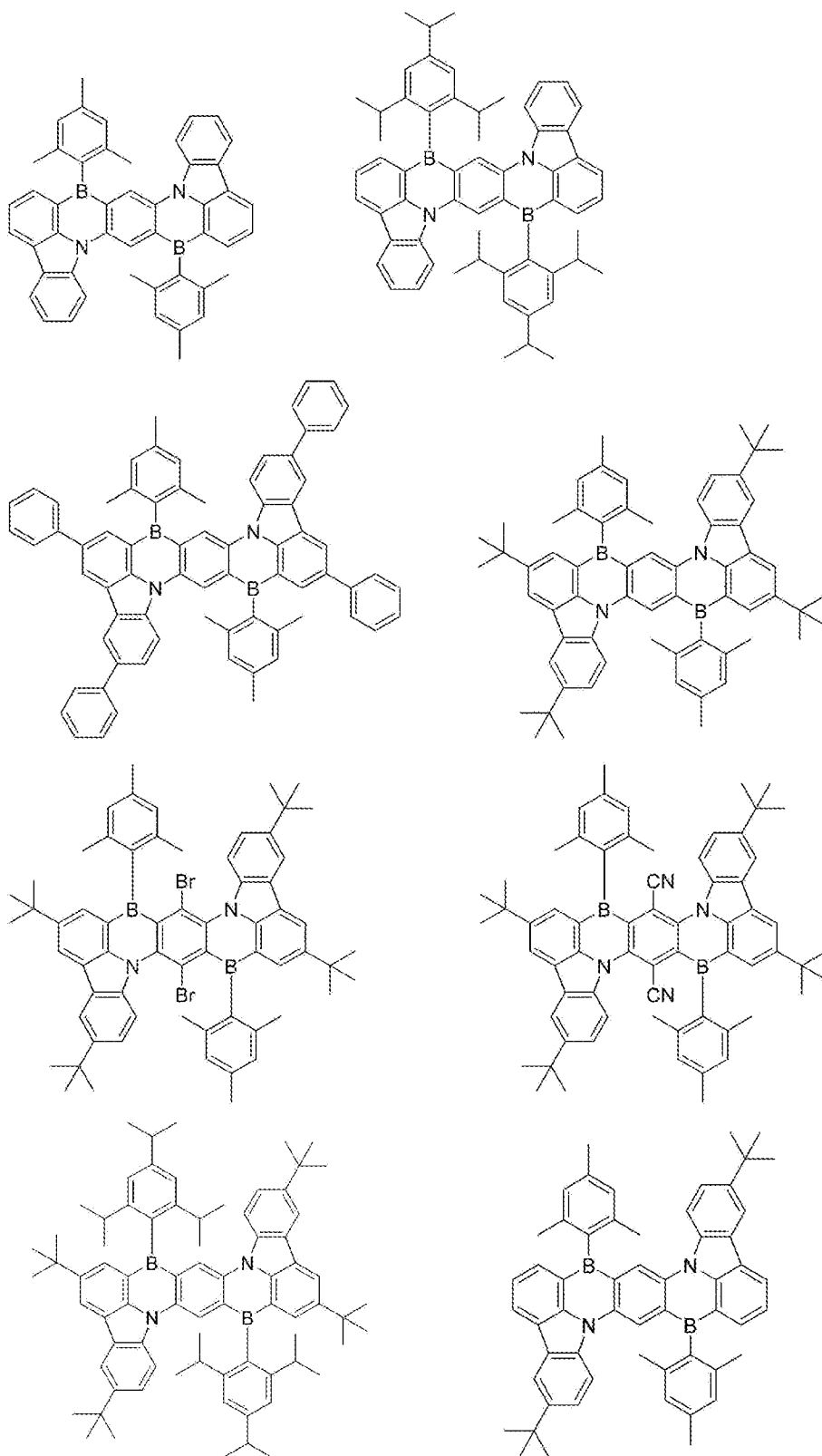
[8] 一般式(1)のR⁷とR⁸、R¹⁷とR¹⁸が互いに結合して-N(R²⁷)-を形成しており、R²⁷は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す、[1]~[4]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[9] 一般式(1)の R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} のうちの1～6組が、互いに結合してベンゾフラン環またはベンゾチオフェン環を形成している、[1]～[8]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

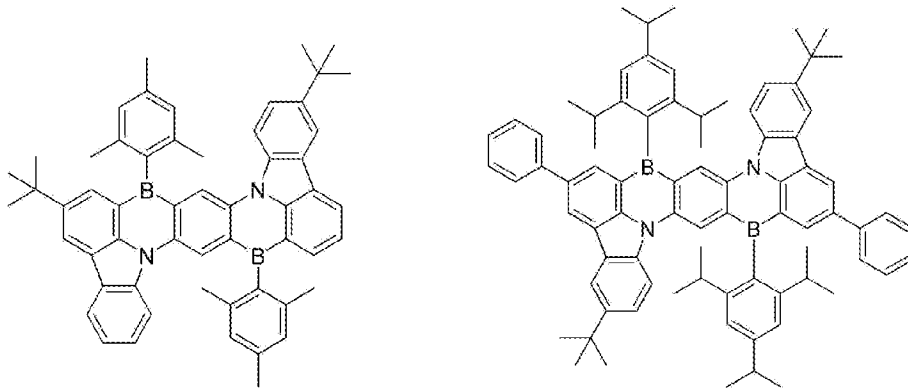
[10] 一般式(1)で表される化合物が回転対称構造を有する、[1]～[9]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[11] 一般式(1)で表される化合物が下記のいずれかの構造を有する、[1]に記載の有機発光素子。例えば、最上段左の化合物以外の9個の化合物からなる群から化合物を選択してもよい。

[化3-1]



[化3-2]



[12] 一般式(2)のLの右側に結合する基がジベンゾフラン構造を含む、[1]～[11]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

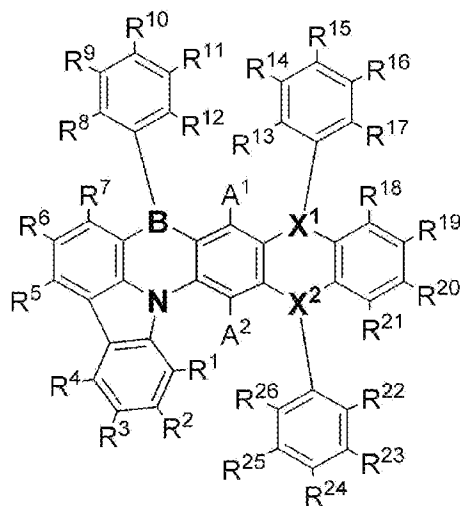
[13] 一般式(2)のLがメタフェニレン基である、[1]～[12]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[14] 一般式(2)で表される化合物の双極子モーメントが2.52未満である、[1]～[13]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[15] 下記一般式(1)で表される化合物および下記一般式(2)で表される化合物を含む膜。

一般式(1)

[化4]

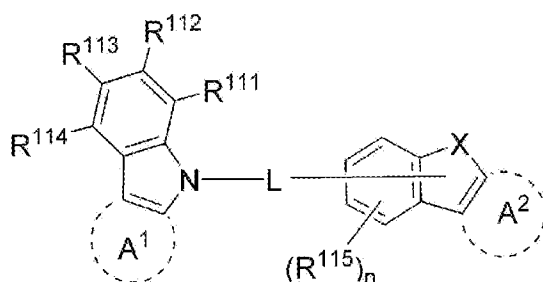


[一般式(1)において、 X^1 および X^2 は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。 $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原

子または置換基を表す。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ただし、 X^1 が窒素原子であるとき、 R^{17} と R^{18} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成し、 X^2 が窒素原子であるとき、 R^{21} と R^{22} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。ただし、 X^1 が窒素原子であって、 R^7 と R^8 および R^{21} と R^{22} が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して単結合を形成しているとき、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換もしくは無置換のアリール基であるか、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 のいずれかが互いに結合して芳香環または複素芳香環を形成している。]

一般式 (2)

[化5]



[一般式 (2) において、 X は、 O 、 S 、 $N(R^A)$ または $C(R^B)(R^C)$ を表す。 A^1 および A^2 は、各々独立にベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環またはシクロペンタジエン環であって、これらの環にはさらに他の環が縮合していてもよく、また置換されていてもよい。 $R^{111} \sim R^{115}$ 、 R^B 、 R^C は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはシアノ基を表す。 R^A は、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアル

キル基を表す。 R^{111} と R^{112} 、 R^{112} と R^{113} 、 R^{113} と R^{114} 、隣り合う2個の R^{115} 、 R^B と R^C は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。 n は3または4のいずれかの整数を表す。 L は単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基、またはこれらの2個以上が結合した連結基を表す。ただし、 X が N で、 L がその N に結合しているとき、 R^{115} の少なくとも1個か A^2 が表す環に結合する基の少なくとも1個は置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基またはシアノ基である。]

[16] 前記一般式(1)で表される化合物の含有量が前記一般式(2)で表される化合物よりも少ない、[15]に記載の膜。

発明の効果

[0007] 本発明の膜は、発光材料が優れた配向性を示しており、有機発光素子に好適に用いることができる。また、本発明の有機発光素子は優れた発光特性を示す。特に本発明の有機発光素子は、発光効率が高く、駆動電圧が低くて優れている。

発明を実施するための形態

[0008] 以下において、本発明の内容について詳細に説明する。以下に記載する構成要件の説明は、本発明の代表的な実施態様や具体例に基づいてなされることがあるが、本発明はそのような実施態様や具体例に限定されるものではない。なお、本明細書において「～」を用いて表される数値範囲は、「～」の前後に記載される数値を下限値および上限値として含む範囲を意味する。また、本発明に用いられる化合物の分子内に存在する水素原子の一部または全部は重水素原子(^2H 、デューテリウムD)に置換することができる。本明細書の化学構造式では、水素原子はHと表示しているか、その表示を省略している。例えばベンゼン環の環骨格構成炭素原子に結合する原子の表示が省略されているとき、表示が省略されている箇所ではHが環骨格構成炭素原子に結合しているものとする。本明細書にて「置換基」という用語は、水素原子および重水素原子以外の原子または原子団を意味する。一方、「置換もしくは

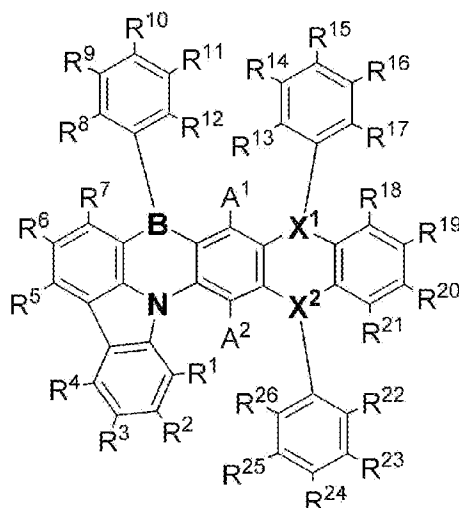
は無置換の」という用語は、水素原子が重水素原子または置換基で置換されていてもよいことを意味する。

[0009] [一般式(1)で表される化合物]

下記一般式(1)で表される化合物について説明する。

一般式(1)

[化6]



[0010] 一般式(1)において、 X^1 および X^2 は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。本発明の一態様では、 X^1 が窒素原子であり、 X^2 がホウ素原子である。このとき、 R^{17} と R^{18} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。本発明の別の態様では、 X^1 がホウ素原子であり、 X^2 が窒素原子である。このとき、 R^{21} と R^{22} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。

[0011] 一般式(1)において、 $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{12} と R^{13} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

R^7 と R^8 が結合して形成する環状構造は、環骨格構成原子としてホウ素原

子と4つの炭素原子を含む。 R^{17} と R^{18} が結合して形成する環状構造は、 X^1 がホウ素原子であるとき、環骨格構成原子としてホウ素原子と4つの炭素原子を含む。 X^1 が窒素原子であるとき、環状構造はピロール環に限定される。 R^{21} と R^{22} が結合して形成する環状構造は、 X^2 がホウ素原子であるとき、環骨格構成原子としてホウ素原子と4つの炭素原子を含む。 X^2 が窒素原子であるとき、環状構造はピロール環に限定される。 R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{21} と R^{22} が互いに結合してホウ素原子を含む環状構造を形成するとき、その環状構造は5～7員環であることが好ましく、5または6員環であることがより好ましく、6員環であることがさらに好ましい。 R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{21} と R^{22} が互いに結合するときは、互いに結合して単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{27})-$ 、 $-C(R^{28})(R^{29})-$ 、 $-Si(R^{30})(R^{31})-$ 、 $-B(R^{32})-$ 、 $-CO-$ 、 $-CS-$ 、を形成することが好ましく、 $-O-$ 、 $-S-$ または $-N(R^{27})-$ を形成することがより好ましく、 $-N(R^{27})-$ を形成することがさらに好ましい。ここで、 $R^{27} \sim R^{32}$ は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。置換基としては、後述の置換基群A～Eのいずれかから選択される基を採用してもよいが、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基であることが好ましく、特に R^{27} は置換もしくは無置換のアリール基であることが好ましい。 $R^{27} \sim R^{32}$ が置換基であるとき、 R^7 と R^8 が互いに結合して形成する環における $R^{27} \sim R^{32}$ は R^6 および R^9 の少なくとも一方と結合してさらに環状構造を形成してもよく、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して形成する環における $R^{27} \sim R^{32}$ は R^{16} および R^{19} の少なくとも一方と結合してさらに環状構造を形成してもよく、 R^{21} と R^{22} が互いに結合して形成する環における $R^{27} \sim R^{32}$ は R^{20} および R^{23} の少なくとも一方と結合してさらに環状構造を形成してもよい。本発明の一態様では、 R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{21} と R^{22} のうちの1組だけが互いに結合している。本発明の一態様では、 R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{21} と R^{22} のうちの2組だけが互いに結合している。本発明の一態様では、 R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{21} と R^{22} のす

べてが互いに結合している。

[0012] R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} が互いに結合して形成する環状構造は、芳香環であっても脂肪環であってもよく、またヘテロ原子を含むものであってもよく、さらに他の環が1環以上縮合していてもよい。ここでいうヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択されるものであることが好ましい。形成される環状構造の例として、ベンゼン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピロール環、イミダゾール環、ピラゾール環、トリアゾール環、イミダゾリン環、フラン環、チオフェン環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、シクロヘキサジエン環、シクロヘキセン環、シクロペンテン環、シクロヘプタトリエン環、シクロヘプタジエン環、シクロヘプテン環、およびこれらの環からなる群より選択される1つ以上の環がさらに縮合した環を挙げることができる。本発明の好ましい一態様では、環状構造は置換もしくは無置換のベンゼン環（さらに環が縮合していてもよい）であり、例えば、アルキル基またはアリール基で置換されていてもよいベンゼン環である。本発明の好ましい一態様では、環状構造は置換もしくは無置換の複素芳香環であり、好ましくはベンゾフランのフラン環、ベンゾチオフェンのチオフェン環である。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} のうち、互いに結合して環状構造を形成している組み合わせの数は0であってもよいし、例えば1～6のいずれかであってもよい。例えば1～4のいずれかであってもよく、1を選択したり、2を選択したり、3または4を選択したりすることができる。本発明の一態様では、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 が

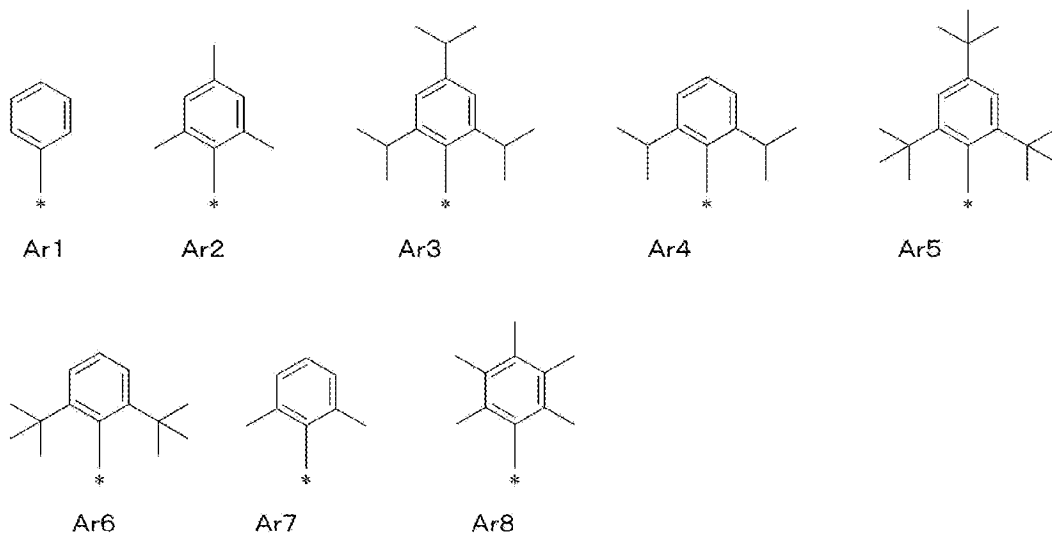
ら選択される1組が互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態様では、 R^5 と R^6 が互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態様では、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} から選択される1組が互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態様では、 R^1 と R^2 、 R^{13} と R^{14} がいずれも互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態様では、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 から選択される1組が互いに結合して環状構造を形成しており、なおかつ、 R^5 と R^6 が互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態様では、 R^5 と R^6 、 R^{19} と R^{20} がいずれも互いに結合して環状構造を形成している。

[0013] 隣接する R^n ($n = 1 \sim 26$) と互いに結合していない $R^1 \sim R^{26}$ は、水素原子、重水素原子または置換基である。置換基としては、後述の置換基群A～Eのいずれかから選択される基を採用することができる。

$R^1 \sim R^{26}$ が採りうる好ましい置換基は、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基であり、例えば置換基は置換もしくは無置換のアリール基であってもよいし、例えば置換基は置換もしくは無置換のアルキル基であってもよい。ここでいうアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基の置換基も置換基群A～Eのいずれかから選択される基を採用することができるが、好ましくはアルキル基、アリール基およびヘテロアリール基からなる群より選択される1以上の基であり、より好ましくは置換基群Eの基であり、無置換であってもよい。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。例えば $R^2 \sim R^6$ の少なくとも1つが置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。例えば、 R^5 および R^6 の少なくとも1つが置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。本発明の好ましい一態様では、 R^3 および R^6 の少なくとも一方が置換基であり、より好ましくは両方が置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。本発明の好ましい一態様では、 X^1 が窒素原子であるとき、 R^{15} および R^{20} の少なくとも一方が置換基であり、より好ましくは両方が置換基であり、好ましく

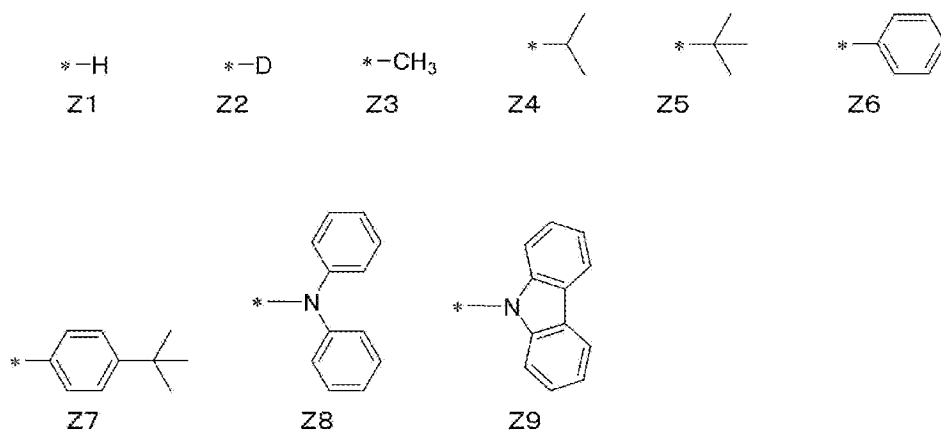
は置換基群Eの基である。このとき、 R^{17} と R^{18} は互いに結合して単結合を形成している。本発明の好ましい一態様では、 X^2 が窒素原子であるとき、 R^{19} および R^{24} の少なくとも一方が置換基であり、より好ましくは両方が置換基であり、好ましくは置換基群Eの基である。このとき、 R^{21} と R^{22} は互いに結合して単結合を形成している。本発明の一態様では、 R^8 および R^{12} の少なくとも一方が置換基であり、好ましくは両方が置換基である。本発明の一態様では、 R^8 、 R^{10} および R^{12} が置換基である。 $R^8 \sim R^{12}$ の置換基としては、無置換のアルキル基が好ましい。特に、 R^8 および R^{12} が炭素数2以上のアルキル基（好ましくは炭素数3以上のアルキル基、より好ましくは炭素数3～8のアルキル基、さらに好ましくは3または4のアルキル基）であるとき、膜にしたときに配向性が高くなり好ましい。中でも、 R^8 および R^{12} が置換基（好ましくはアルキル基、より好ましくは炭素数2以上のアルキル基、さらに好ましくは炭素数3以上のアルキル基、さらにより好ましくは炭素数3～8のアルキル基、特に好ましくは3または4のアルキル基）であって、なおかつ、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換基（好ましくは置換基群Eの基）である場合が特に好ましい。 X^1 がホウ素原子であるとき、 R^{13} および R^{17} の少なくとも一方が置換基であり、好ましくは両方が置換基である。本発明の一態様では、 X^1 がホウ素原子であるとき、 R^{13} 、 R^{15} および R^{17} が置換基である。 X^1 がホウ素原子であるとき、 $R^{13} \sim R^{17}$ の置換基としては、無置換のアルキル基が好ましい。 X^2 がホウ素原子であるとき、 R^{22} および R^{26} の少なくとも一方が置換基であり、好ましくは両方が置換基である。本発明の一態様では、 X^2 がホウ素原子であるとき、 R^{22} 、 R^{24} および R^{26} が置換基である。 X^2 がホウ素原子であるとき、 $R^{22} \sim R^{26}$ の置換基としては、無置換のアルキル基が好ましい。一般式(1)中にBと表示されるホウ素原子や、 X^1 または X^2 が表すホウ素原子に結合する基の具体例を以下に挙げる。ただし、本発明で採用することができるホウ素原子に結合する基は、以下の具体例により限定的に解釈されることはない。なお、本明細書中ではメチル基は CH_3 の表示を省略している。*は結合位置を表す。

[化7]



[0014] 以下において、一般式（１）の $R^1 \sim R^{26}$ の具体例を挙げる。 $R^1 \sim R^7$ 、 X^1 が窒素原子であるときの $R^{13} \sim R^{21}$ 、 X^2 が窒素原子であるときの $R^{18} \sim R^{26}$ として $Z^1 \sim Z^9$ が好ましく、 $R^8 \sim R^{12}$ 、 X^1 が窒素原子であるときの $R^{22} \sim R^{26}$ 、 X^2 が窒素原子であるときの $R^{13} \sim R^{17}$ として $Z^1 \sim Z^7$ が好ましい。ただし、本発明で採用することができるホウ素原子に結合する基は、以下の具体例により限定的に解釈されることはない。Dは重水素原子を表す。 $*$ は結合位置を表す。

[化8]



[0015] A^1 および A^2 は、水素原子、重水素原子または置換基である。置換基としては、後述の置換基群A～Eのいずれかから選択される基を採用することができる。

本発明の好ましい一態様では、 A^1 および A^2 は、各々独立に水素原子または重水素原子である。例えば、 A^1 および A^2 は水素原子である。例えば、 A^1 および A^2 は重水素原子である。

A^1 および A^2 の一方は置換基であってもよい。また、 A^1 および A^2 は各々独立に置換基であってもよい。

A^1 および A^2 が採りうる好ましい置換基は、アクセプター性基である。アクセプター性基は、ハメットの σ_p 値が正の基である。ここで、「ハメットの σ_p 値」は、L. P. ハメットにより提唱されたものであり、パラ置換ベンゼン誘導体の反応速度または平衡に及ぼす置換基の影響を定量化したものである。具体的には、パラ置換ベンゼン誘導体における置換基と反応速度定数または平衡定数の間に成立する下記式：

$$\log(k/k_0) = \rho \sigma_p$$

または

$$\log(K/K_0) = \rho \sigma_p$$

における置換基に特有な定数(σ_p)である。上式において、 k_0 は置換基を持たないベンゼン誘導体の速度定数、 k は置換基で置換されたベンゼン誘導体の速度定数、 K_0 は置換基を持たないベンゼン誘導体の平衡定数、 K は置換基で置換されたベンゼン誘導体の平衡定数、 ρ は反応の種類と条件によって決まる反応定数を表す。本発明における「ハメットの σ_p 値」に関する説明と各置換基の数値については、Hansch, C. et. al., Chem. Rev., 91, 165-195(1991)の σ_p 値に関する記載を参照することができる。

A^1 および A^2 が採りうるアクセプター性基は、ハメットの σ_p 値が0.2より大きい基であることがより好ましい。ハメットの σ_p 値が0.2より大きい基として、シアノ基、少なくともシアノ基で置換されているアリール基、フッ素原子を含む基、環骨格構成原子として窒素原子を含む置換もしくは無置換のヘテロアリール基を挙げることができる。ここでいう少なくともシアノ基で置換されているアリール基は、シアノ基以外の置換基（例えばアルキル基やアリール基）で置換されていてもよいが、シアノ基だけで置換され

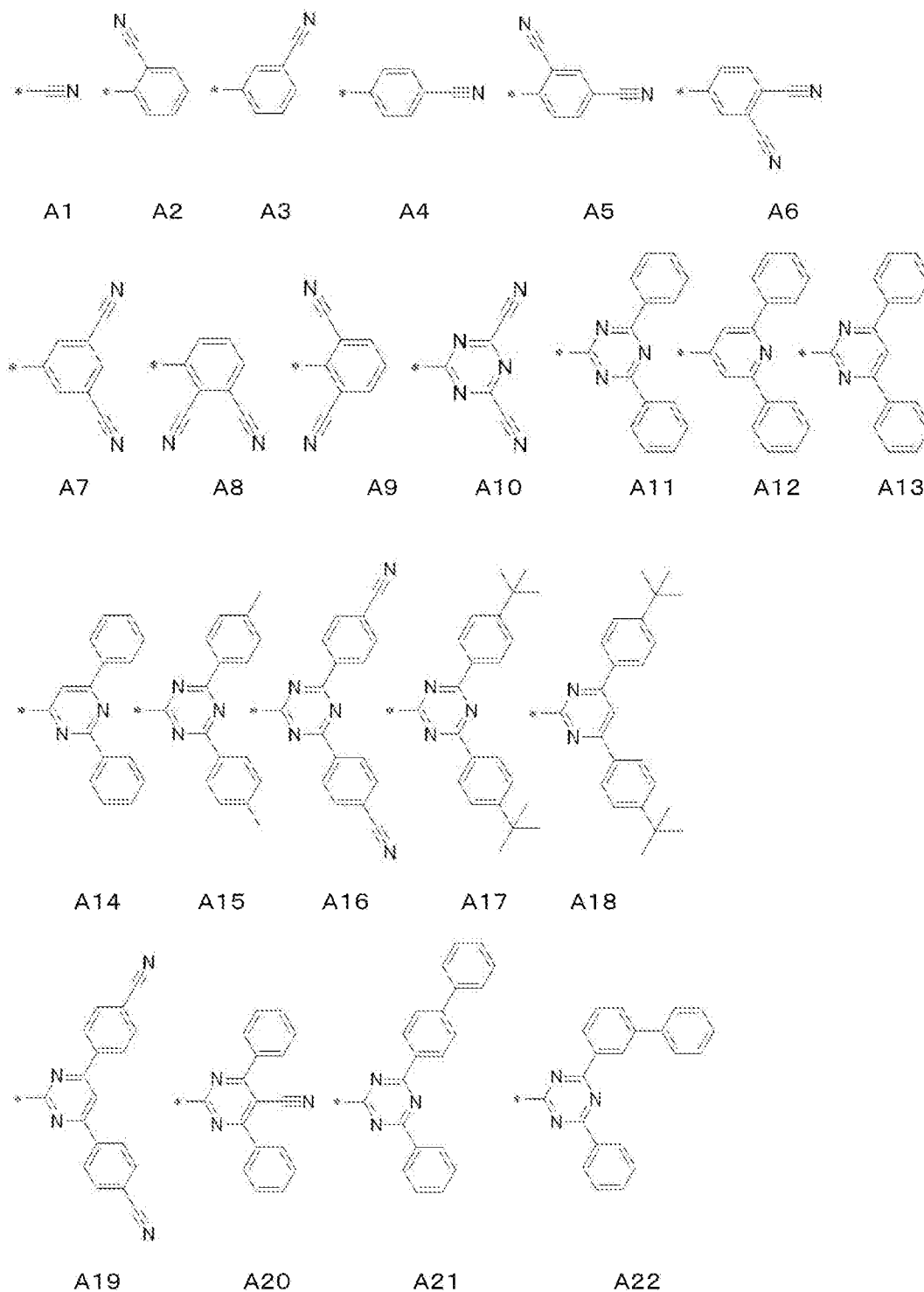
ているアリール基であってもよい。少なくともシアノ基で置換されているアリール基は、少なくともシアノ基で置換されているフェニル基であることが好ましい。シアノ基の置換数は1または2であることが好ましく、例えば1であってもよく、2であってもよい。フッ素原子を含む基は、フッ素原子、フッ化アルキル基、フッ素原子またはフッ化アルキル基で少なくとも置換されたアリール基を挙げることができる。フッ化アルキル基は、パーフルオロアルキル基であることが好ましく、炭素原子数は1～6であることが好ましく、1～3であることがより好ましい。また、環骨格構成原子として窒素原子を含むヘテロアリール基は、単環であってもよいし、2つ以上の環が縮合した縮合環であってもよい。縮合環である場合、縮合した後の環の数は2～6であることが好ましく、例えば2～4の中から選択したり、2としたりすることができる。ヘテロアリール基を構成する環の具体例として、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キナゾリン環、キノキサリン環、キナゾリン環やキノキサリン環以外のナフチリジン環を挙げることができる。ヘテロアリール基を構成する環は、重水素原子や置換基で置換されていてもよく、置換基としては例えば、アルキル基、アリール基およびヘテロアリール基からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせ形成される基を挙げることができる。A¹およびA²が採りうるアクセプター性基として特に好ましいのはシアノ基である。

本発明の一態様では、A¹およびA²の少なくとも一方はアクセプター性基である。本発明の一態様では、A¹およびA²の一方だけがアクセプター性基である。本発明の一態様では、A¹およびA²の両方が同じアクセプター性基である。本発明の一態様では、A¹およびA²が互いに異なるアクセプター性基である。本発明の一態様では、A¹およびA²がシアノ基である。本発明の一態様では、A¹およびA²がハロゲン原子であり、例えば臭素原子である。

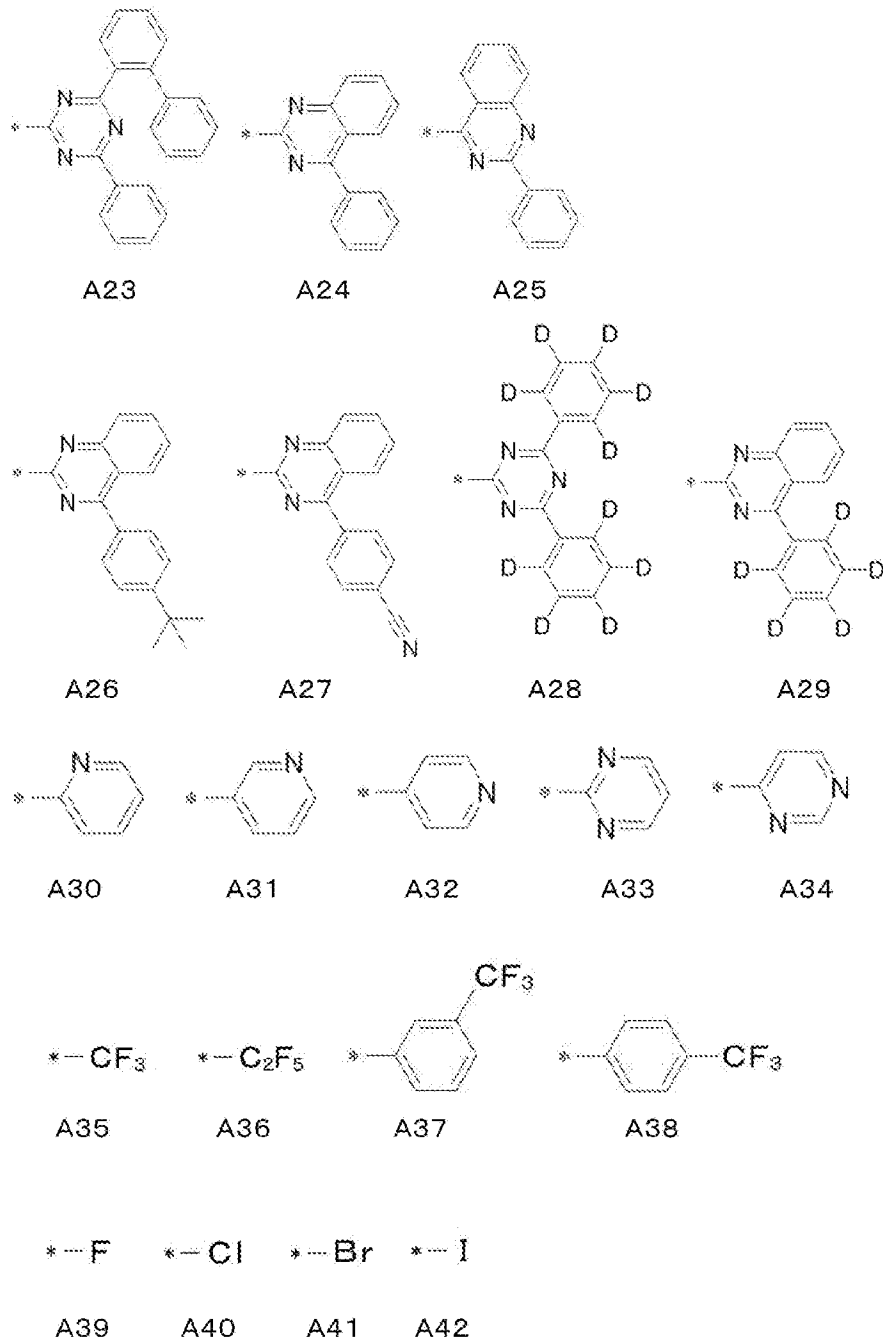
[0016] 以下において、本発明で採用することができるアクセプター性基の具体例を示す。ただし、本発明において用いることができるアクセプター性基は以

下の具体例によって限定的に解釈されることはない。本明細書中ではメチル基は CH_3 の表示を省略している。このため、例えばA15であれば、4-メチルフェニル基が2つ含まれる基を示している。また「D」は重水素原子を表す。＊は結合位置を表す。

[化9-1]



[化9-2]



[0017] なお、 X^1 が窒素原子であって、 R^7 と R^8 が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{21} と R^{22} が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して単結合を形成しているとき、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換もしくは無置換のアリール基であるか、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 のいずれかが互いに結合して芳香環（縮合していてもよい置換もしくは無置換のベンゼン環）または複素芳香環（好ましくは

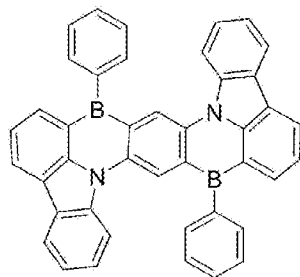
縮合していてもよい置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環、縮合していてもよい置換もしくは無置換のベンゾチオフェンのチオフェン環）を形成している。

また、 X^1 がホウ素原子で、 X^2 が窒素原子であり、 R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合してホウ素原子を含む環状構造を形成している場合、その環状構造は5～7員環であり、6員環である場合は R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して $-B(R^{32})-$ 、 $-CO-$ 、 $-CS-$ または $-N(R^{27})-$ を形成している。 R^{27} は水素原子、重水素原子または置換基を表すことが好ましい。

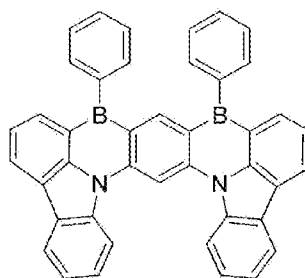
[0018] 一般式(1)の X^1 が窒素原子であるとき、本発明の化合物は下記の骨格(1a)を有する。一般式(1)の X^2 が窒素原子であるとき、本発明の化合物は下記の骨格(1b)を有する。

[化10]

骨格(1a)



骨格(1b)

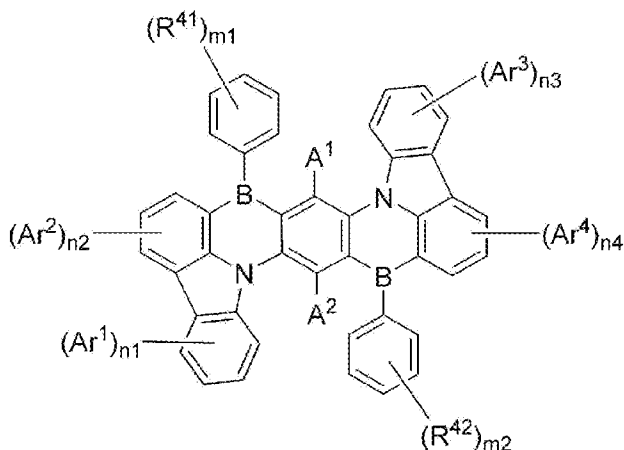


[0019] 骨格(1a)および(1b)における各水素原子は、重水素原子または置換基に置換されていてもよい。また、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していてもよい。詳細については、一般式(1)の対応する $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。骨格(1a)および(1b)においてホウ素原子に結合しているフェニル基がいずれもメシチル基、2,6-ジイソプロピルフェニル基または2,4,6-トリイソプロピルフェニル基に置換されている化合物などを例示することができる。本発明の一態様では、骨格(1a)および(1b)における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0020] 骨格(1a)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(1a)で表される化合物を例示することができる。

一般式(1a)

[化11]



[0021] 一般式(1a)において、 $Ar^1 \sim Ar^4$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 R^{41} および R^{42} は、各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 $m1$ および $m2$ は各々独立に0～5の整数を表し、 $n1$ および $n3$ は各々独立に0～4の整数を表し、 $n2$ および $n4$ は各々独立に0～3の整数を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $n1 \sim n4$ の少なくとも1つは1以上であり、 $m1$ および $m2$ は各々独立に1～5のいずれかの整数であることが好ましい。

本発明の一態様では、 $n1 \sim n4$ は各々独立に0～2の整数を表す。本発明の好ましい一態様では、 $n1 \sim n4$ の少なくとも1つは1以上であり、好ましくは $n1$ および $n2$ の少なくとも1つは1以上であり、 $n3$ および $n4$ の少なくとも1つは1以上である。本発明の一態様では、 $n1$ および $n3$ が各々独立に1または2であり、 $n2$ および $n4$ が0である。本発明の一態様では $n2$ および $n4$ が各々独立に1または2であり、 $n1$ および $n3$ が0である。本発明の一態様では、 $n1 \sim n4$ は各々独立に1または2である。本発明の一態様では、 $n1$ と $n3$ は等しく、 $n2$ と $n4$ は等しい。本発明の一

態様では、 n_1 と n_3 は1であり、 n_2 と n_4 は0である。本発明の一態様では、 n_1 と n_3 は0であり、 n_2 と n_4 は1である。本発明の一態様では、 $n_1 \sim n_4$ はいずれも1である。 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ の結合位置は、カルバゾール環の3, 6位の少なくとも一つであってもよいし、2, 7位の少なくとも一つであってもよいし、1, 8位の少なくとも一つであってもよいし、4, 5位の少なくとも一つであってもよい。本発明の一態様では、 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ の結合位置は、カルバゾール環の3, 6位の両方であってもよいし、2, 7位の両方であってもよいし、1, 8位の両方であってもよいし、4, 5位の両方であってもよい。例えば、3, 6位の少なくとも一つを好ましく選択することができ、あるいは、3, 6位の両方をさらに好ましく選択することができる。本発明の好ましい一態様では、 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ はすべて同一の基である。本発明の好ましい一態様では、 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基であり、より好ましくは置換もしくは無置換のフェニル基またはナフチル基であり、さらに好ましくは置換もしくは無置換のフェニル基である。置換基としては後述の置換基群A～Eのいずれかから選択される基を挙げることができるが、無置換のフェニル基も好ましい。 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ の好ましい具体例として、フェニル基、*o*-ビフェニル基、*m*-ビフェニル基、*p*-ビフェニル基、ターフェニル基を挙げることができる。

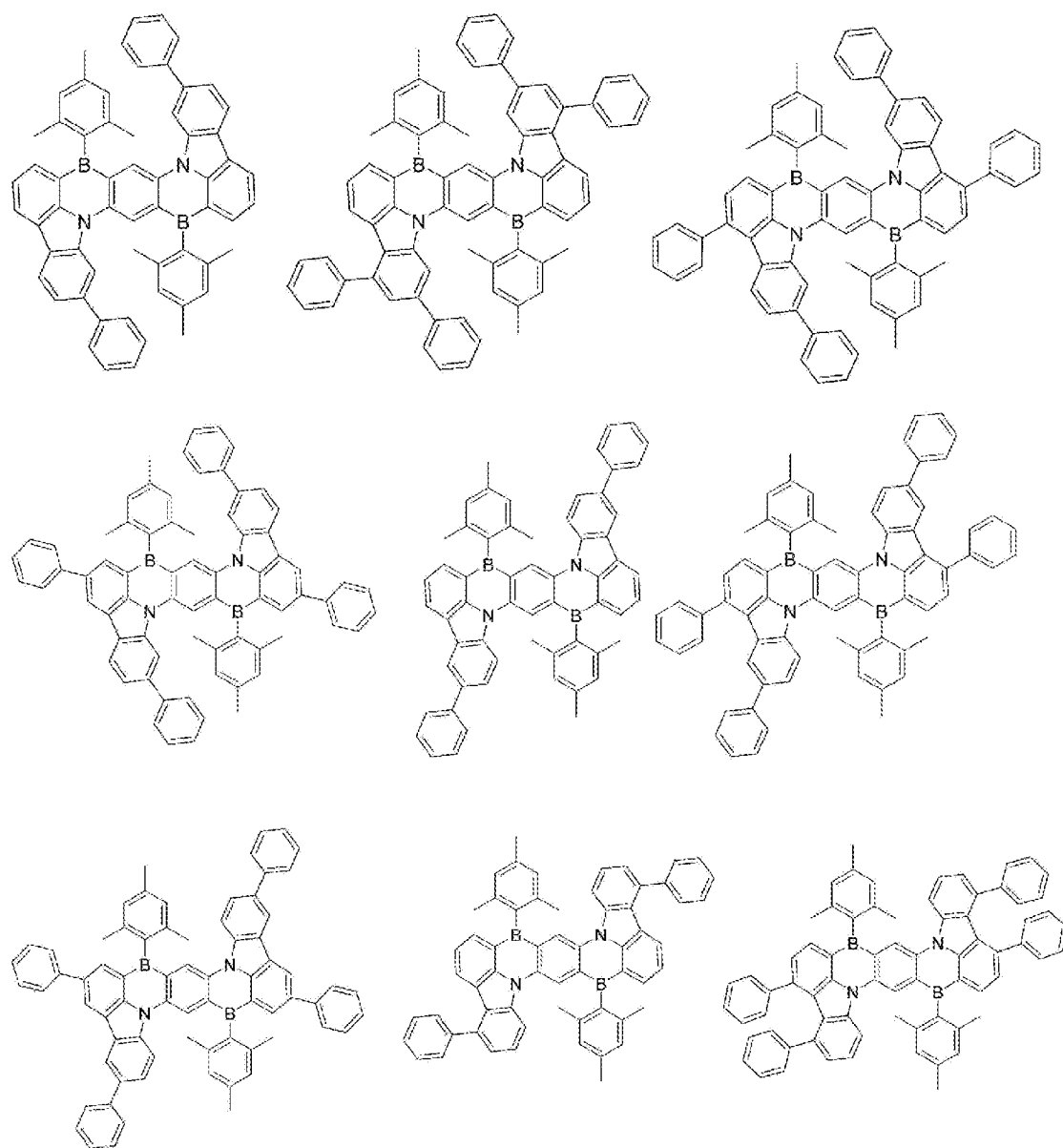
本発明の一態様では、 m_1 および m_2 は各々独立に0である。本発明の一態様では、 m_1 および m_2 は各々独立に1～5のいずれかの整数である。本発明の一態様では、 m_1 と m_2 は等しい。本発明の一態様では、 R^{4^1} および R^{4^2} は炭素数1～6のアルキル基であり、例えば炭素数1～3のアルキル基の中から選択したり、メチル基を選択したりすることができる。アルキル基の置換位置は、ホウ素原子に結合している炭素原子を1位として、2位のみ、3位のみ、4位のみ、3位と5位、2位と4位、2位と6位、2位と4位と6位などを例示することができ、少なくとも2位であることが好ましく、少なくとも2位と6位であることがより好ましい。

A^1 および A^2 の説明と好ましい範囲については、一般式(1)の対応する

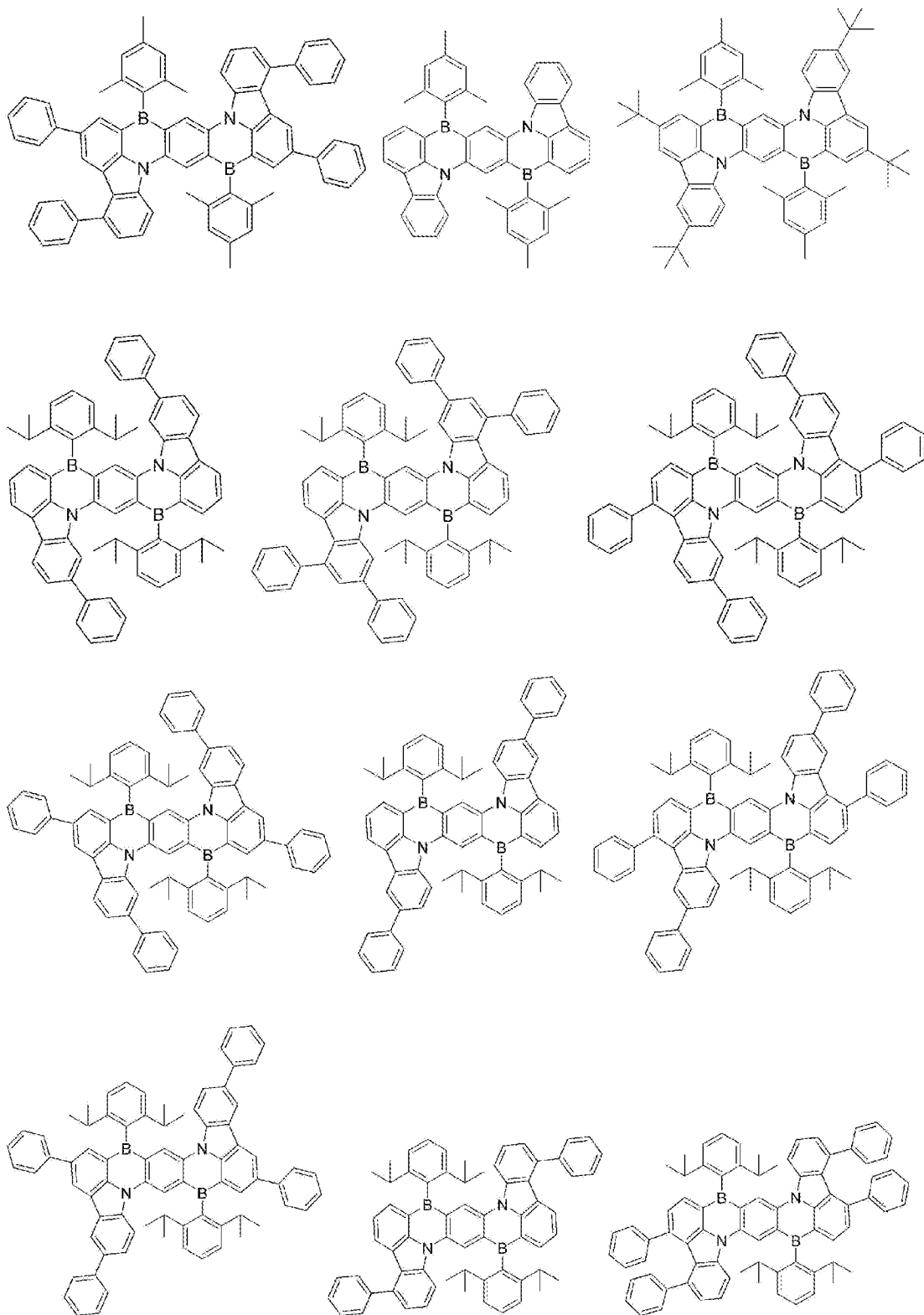
記載を参照することができる。

[0022] 以下において、一般式（1 a）で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式（1 a）の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。例えば好ましい一群として、下記の４段目中央の化合物と下記の８段目中央の化合物を除く、残りの化合物からなる群を挙げることができる。

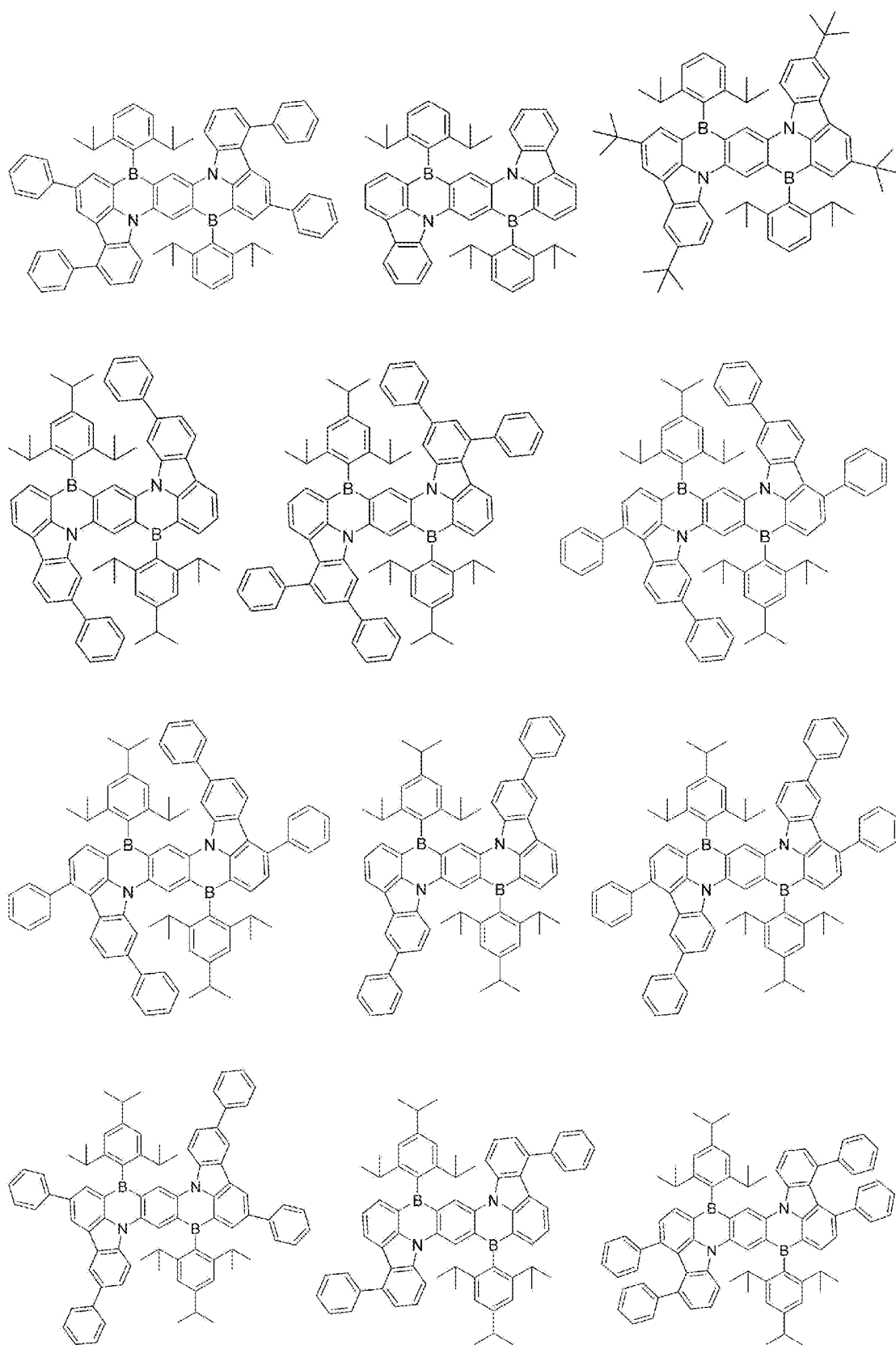
[化12-1]



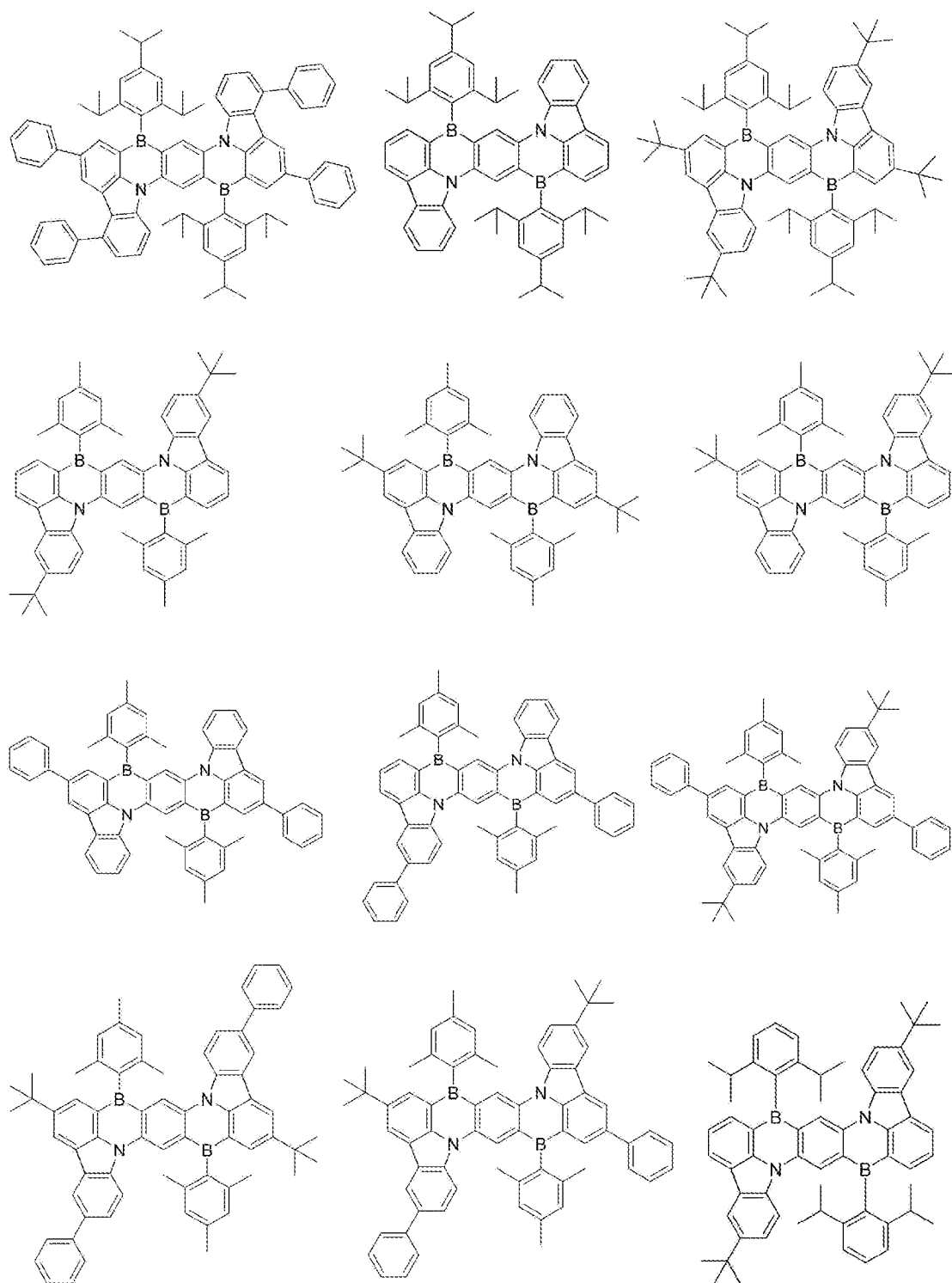
[化12-2]



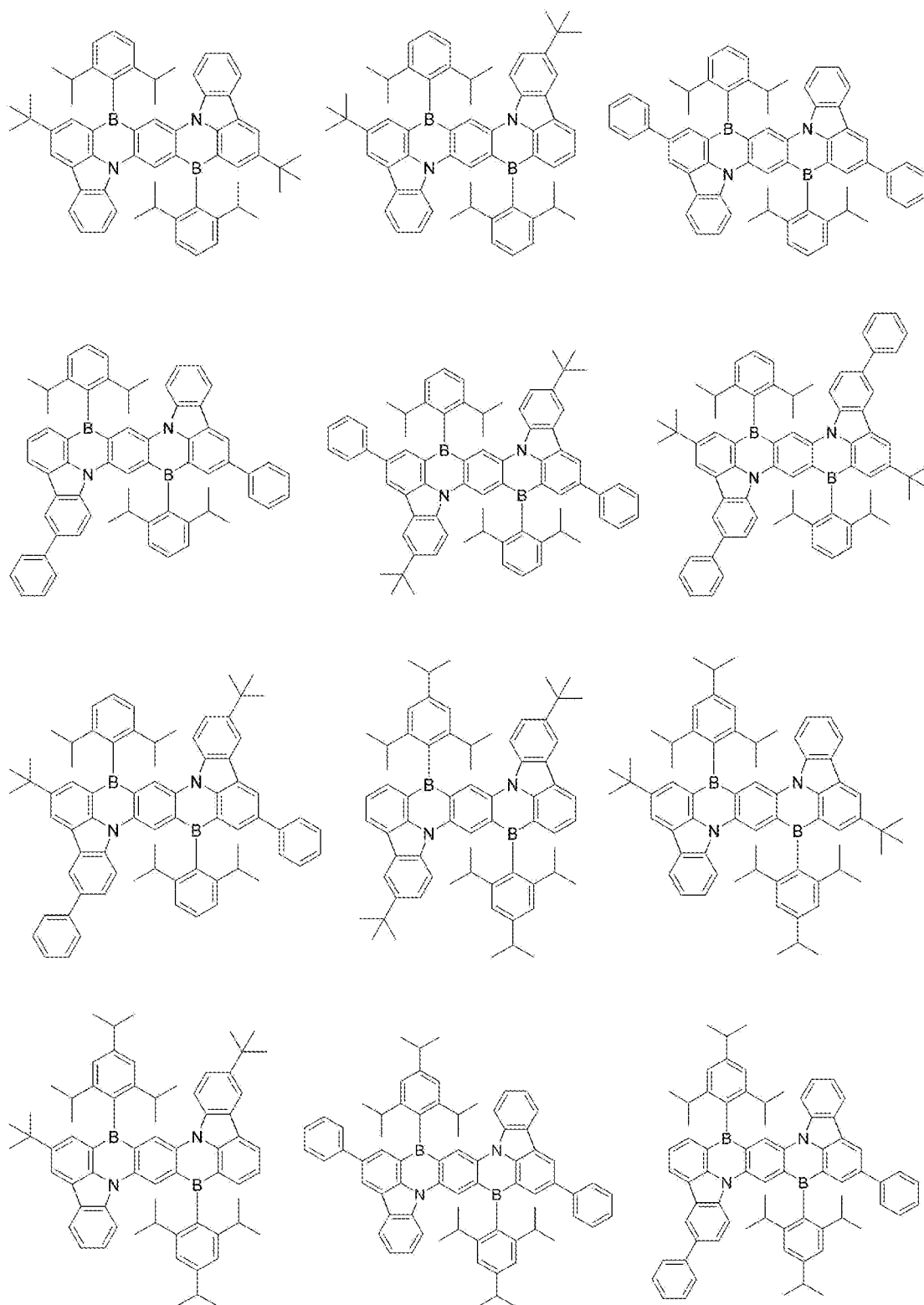
[化12-3]



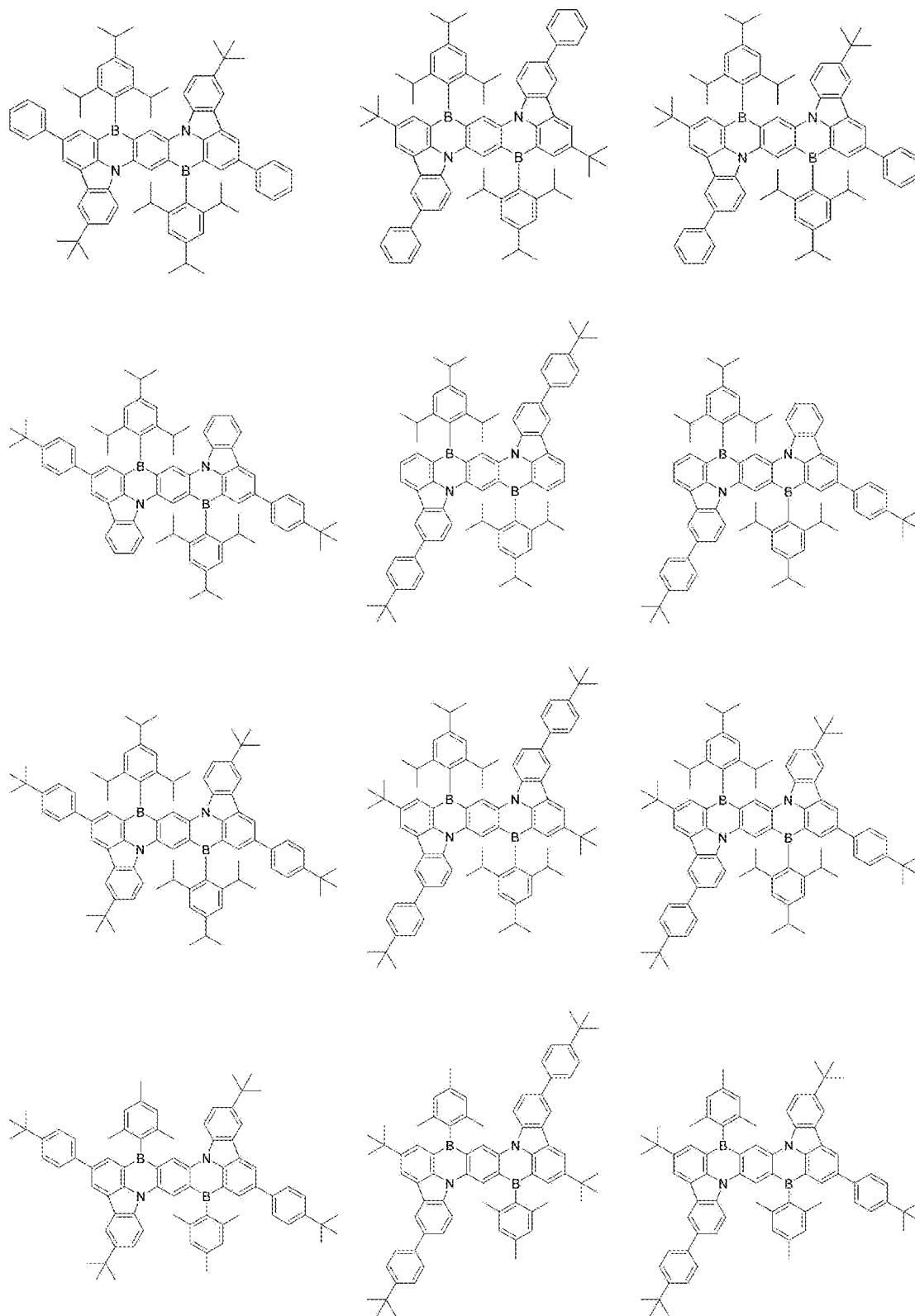
[化12-4]



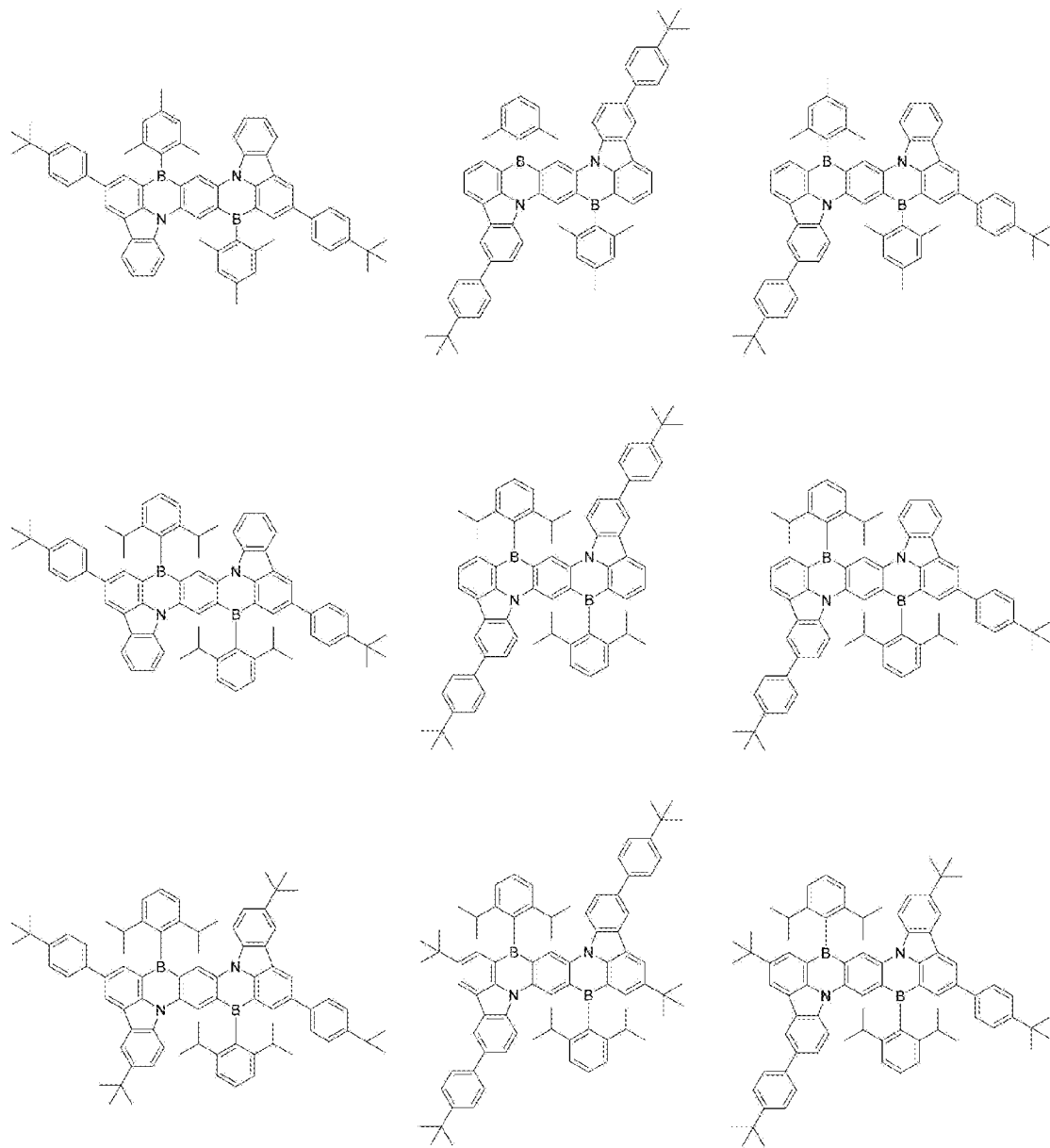
[化12-5]



[化12-6]

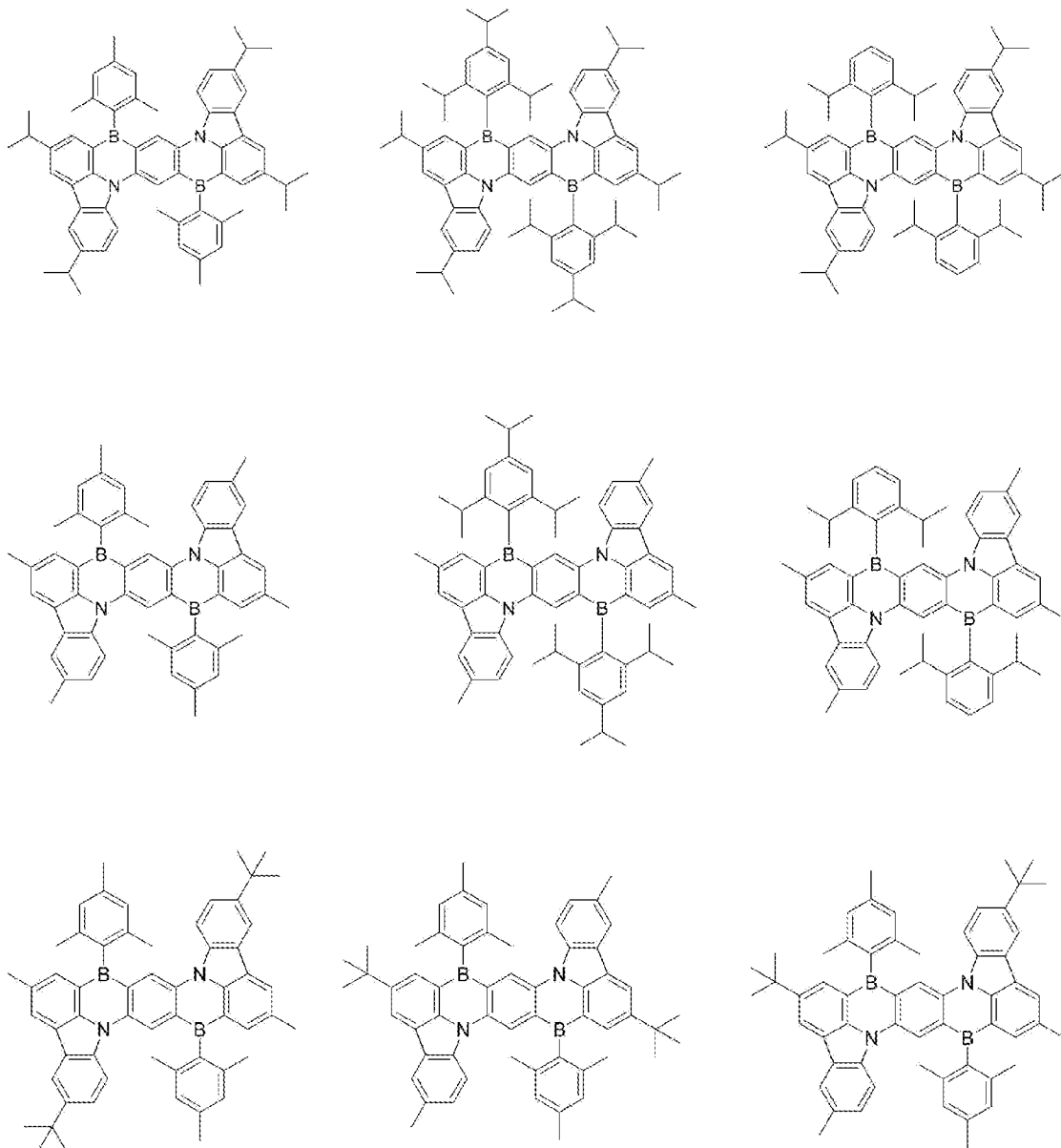


[化12-7]

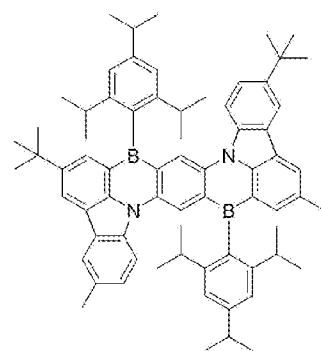
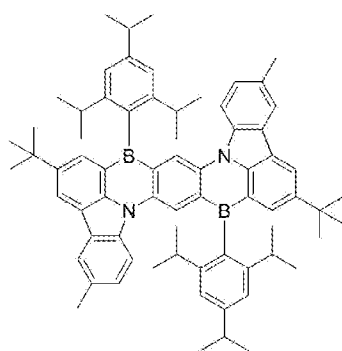
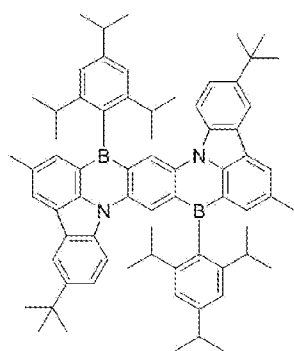
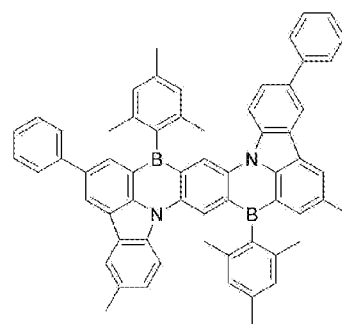
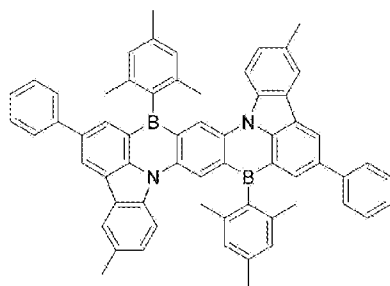
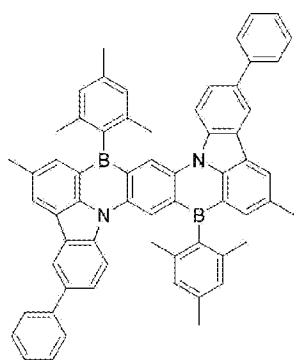
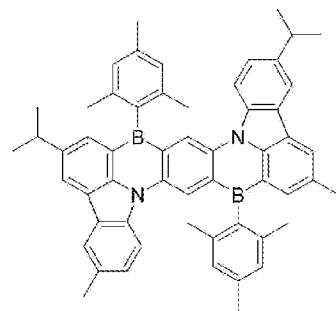
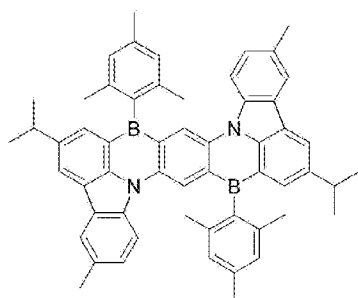
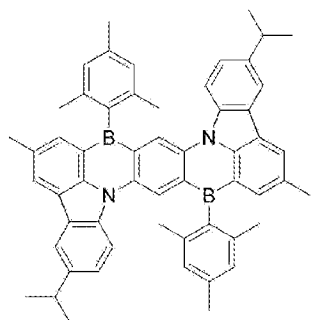


[0023] 以下において、一般式（1 a）で表される化合物の別の一群の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式（1 a）の化合物は、下記の一群の具体例により限定的に解釈されることはない。

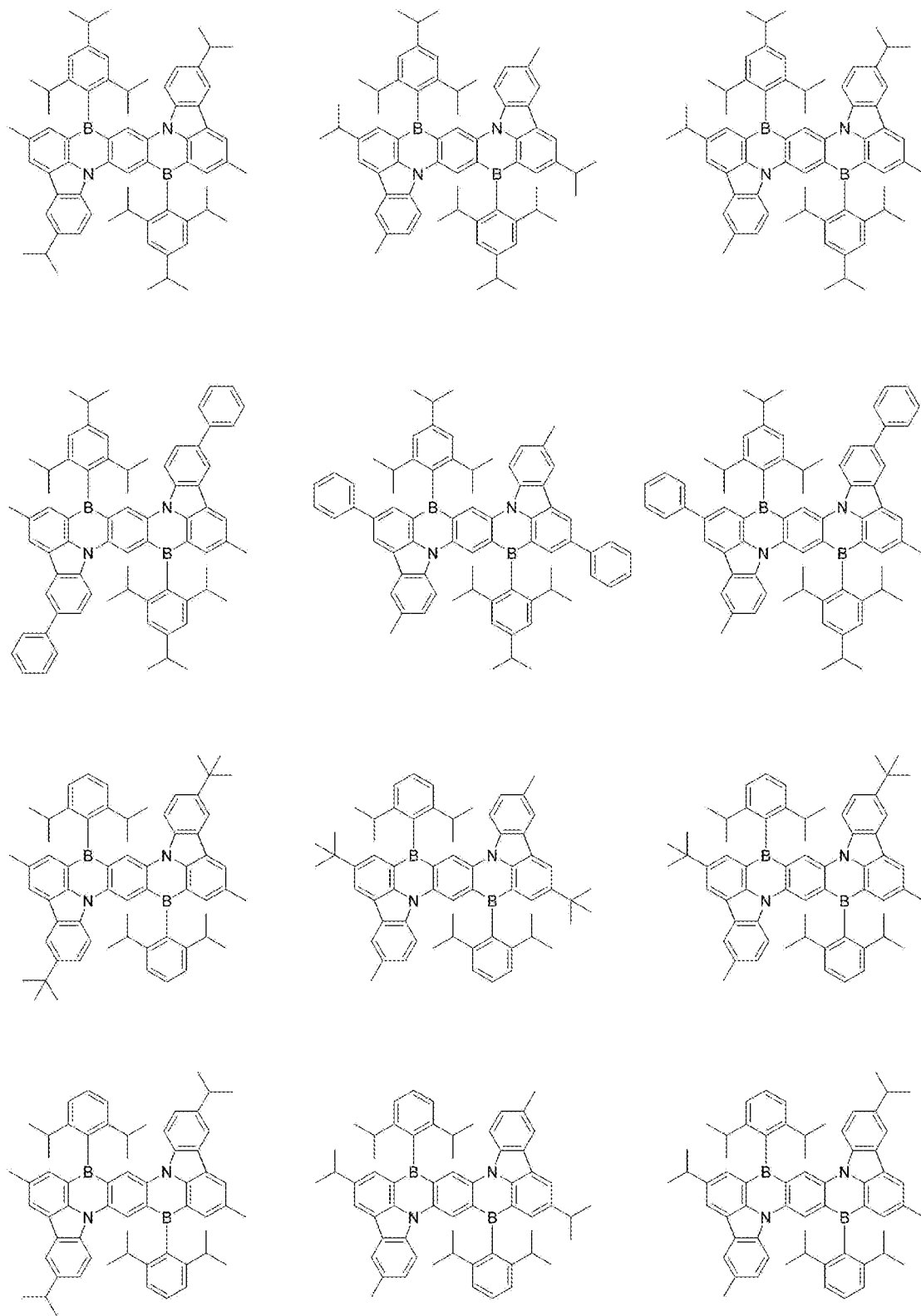
[化13-1]



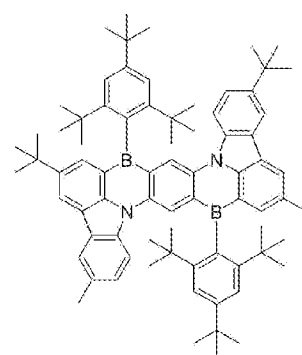
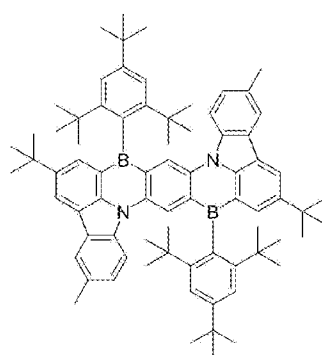
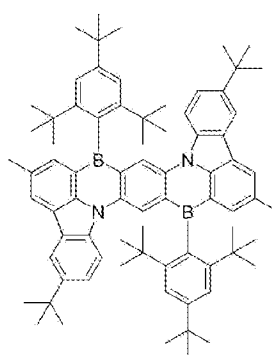
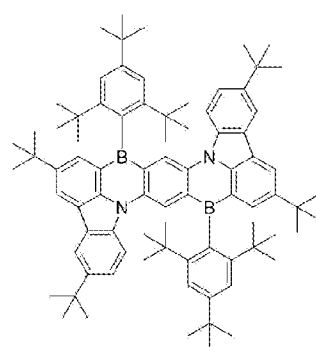
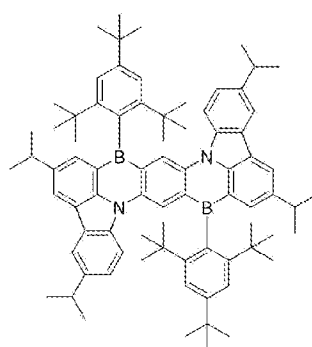
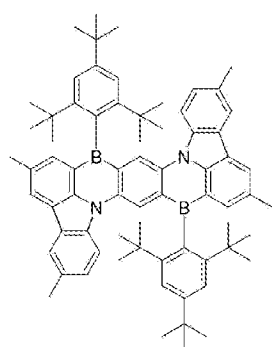
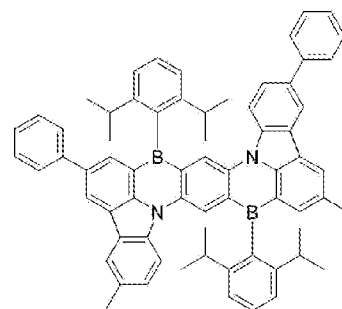
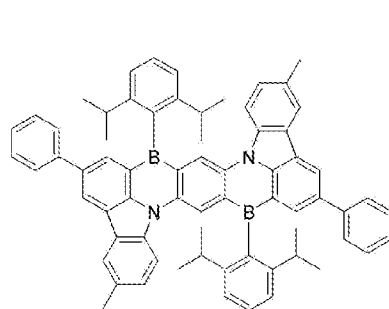
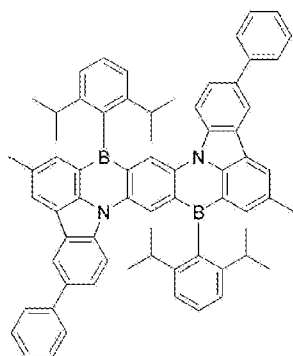
[化13-2]



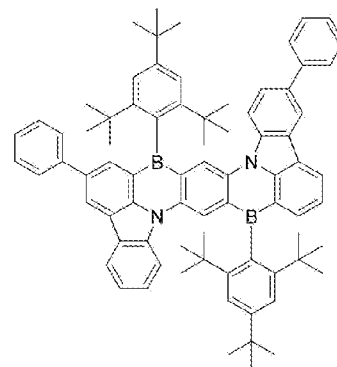
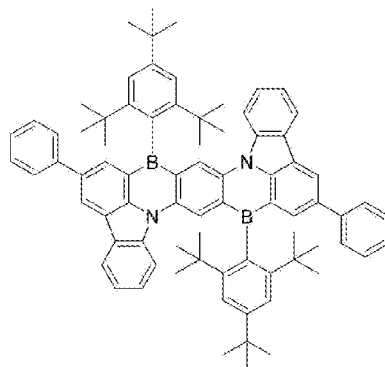
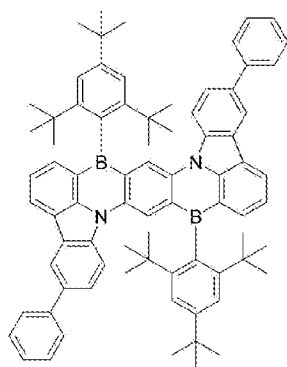
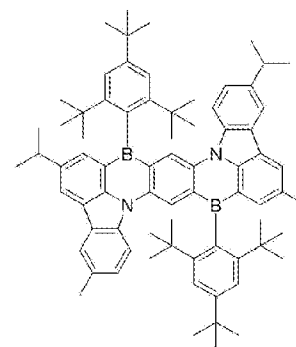
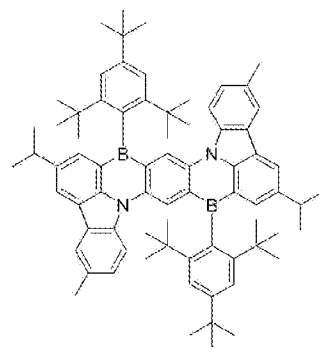
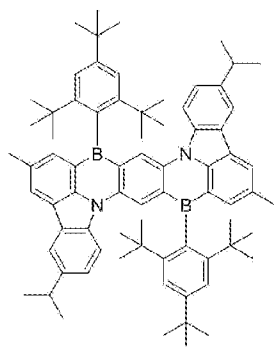
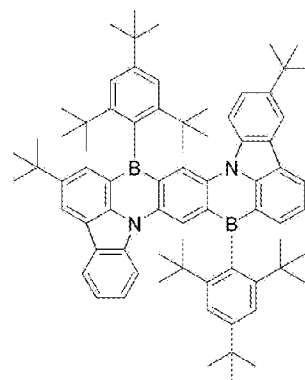
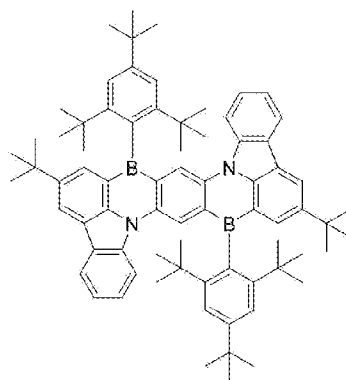
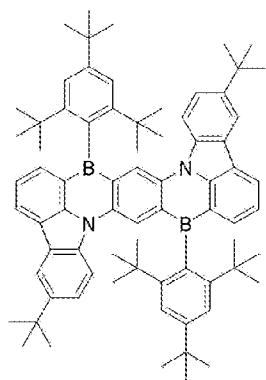
[化13-3]



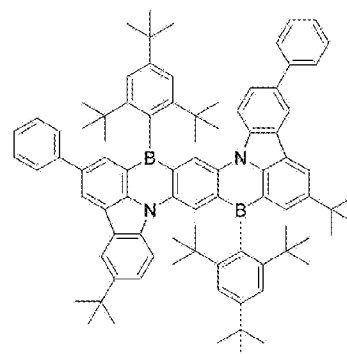
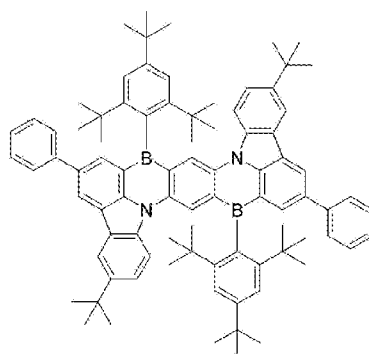
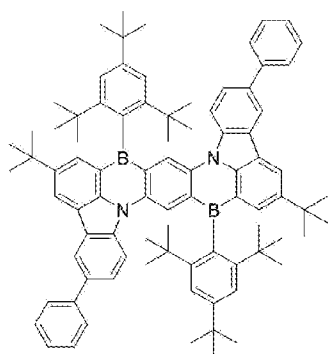
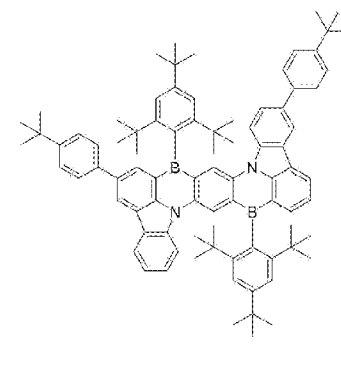
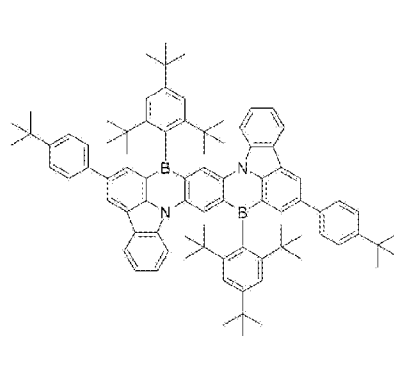
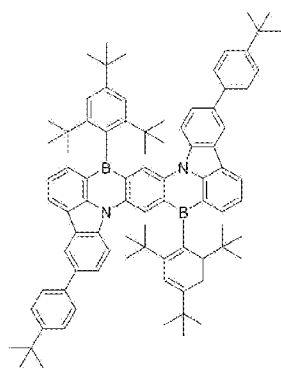
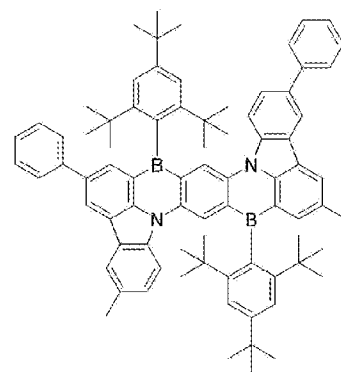
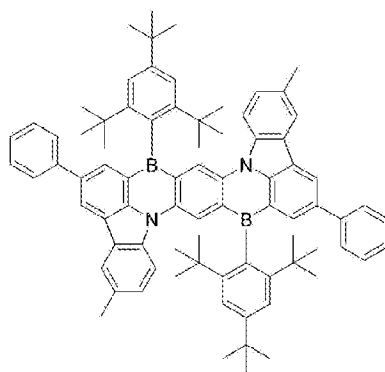
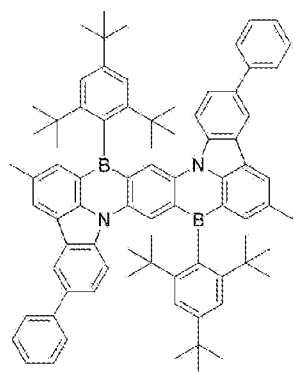
[化13-4]



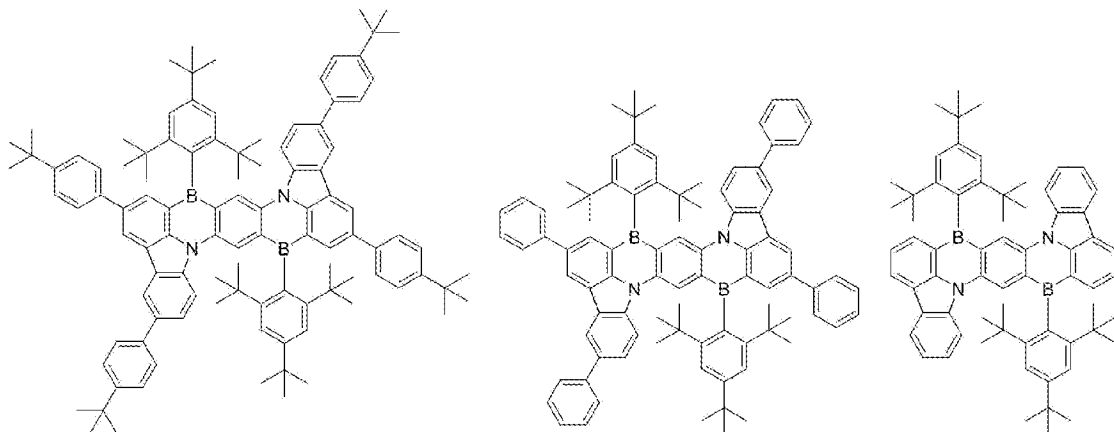
[化13-5]



[化13-6]



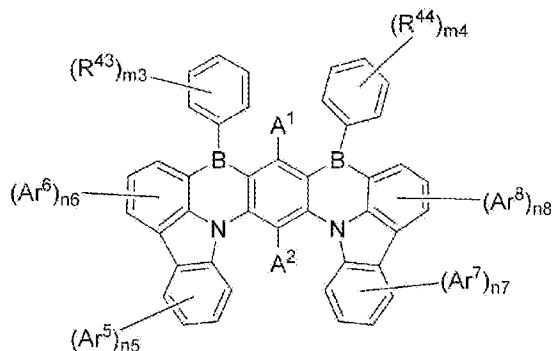
[化13-7]



[0024] 骨格(1b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(1b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(1b)

[化14]

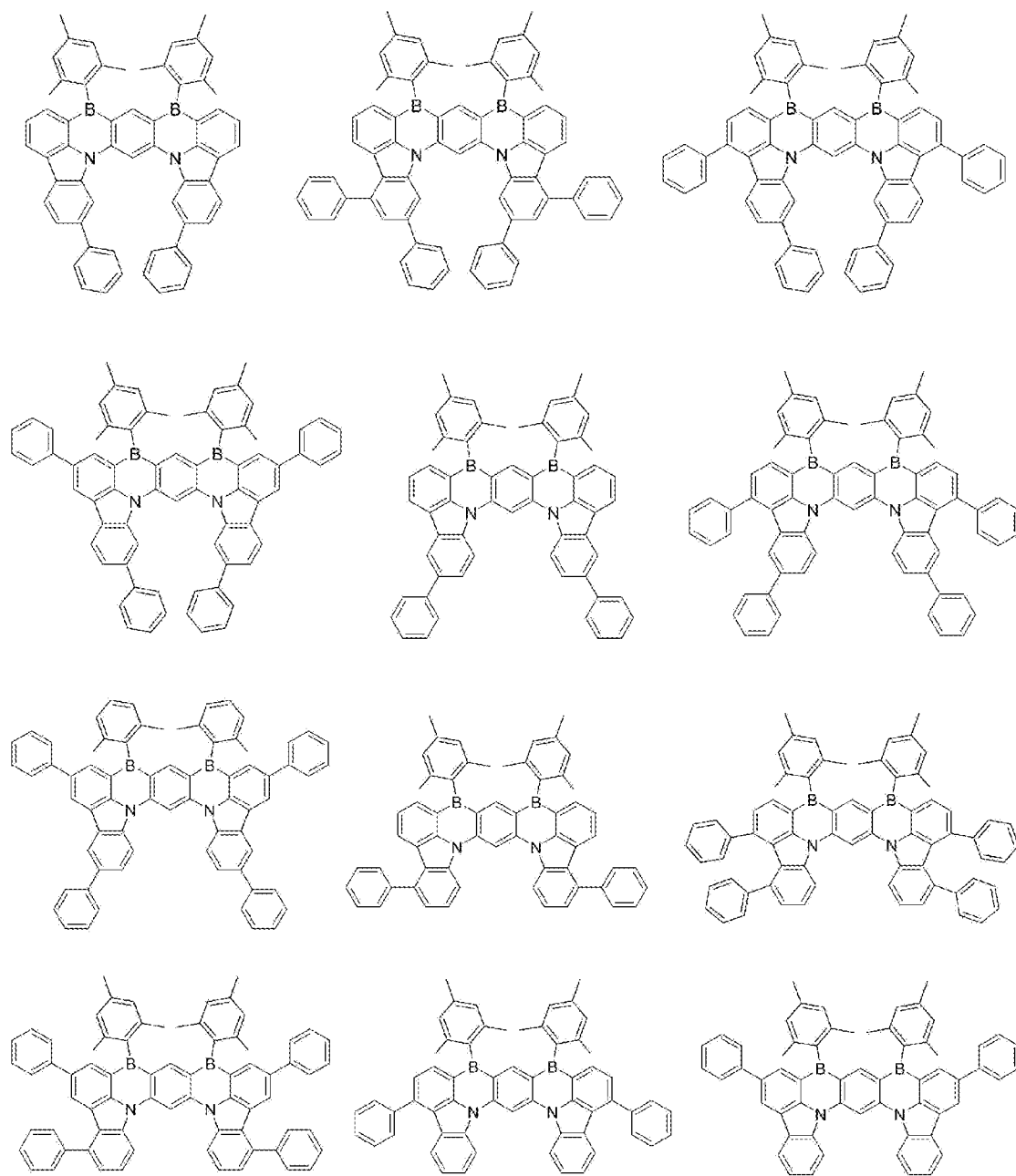


[0025] 一般式(1b)において、 $Ar^5 \sim Ar^8$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 R^{43} および R^{44} は、各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 $m3$ および $m4$ は各々独立に0～5の整数を表し、 $n6$ および $n8$ は各々独立に0～3の整数を表し、 $n5$ および $n7$ は各々独立に0～4の整数を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Ar^5 \sim Ar^8$ 、 R^{43} および R^{44} 、 $m3$ および $m4$ 、 $n5 \sim n8$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(1a)の $Ar^1 \sim Ar^4$ 、 R^{41} および R^{42} 、 $m1$ および $m2$ 、 $n1 \sim n4$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照する。

ことができる。 $n5 \sim n8$ の少なくとも1つは1以上であり、 $m3$ および $m4$ は各々独立に1～5のいずれかの整数であることが好ましい。

[0026] 以下において、一般式(1b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(1b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

[化15]



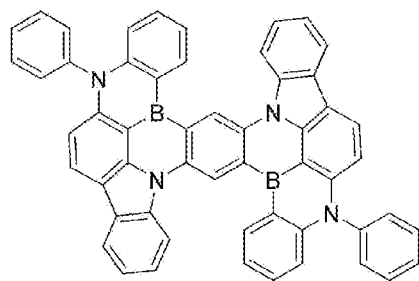
[0027] 一般式(1)の R^7 と R^8 が互いに結合してN-P hを形成するとき、本発

明の化合物は X^1 が窒素原子であるときに例えば下記の骨格（2 a）を有し、 X^2 が窒素原子であるときに例えば下記の骨格（2 b）を有する。Phはフェニル基である。

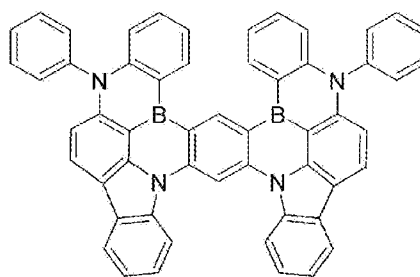
骨格（2 a）

[化16]

骨格（2 a）



骨格（2 b）

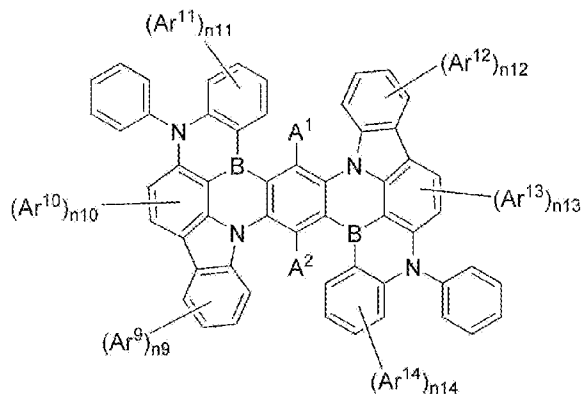


[0028] 骨格（2 a）および（2 b）における各水素原子は、重水素原子または置換基に置換されていてもよい。また、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していてもよい。詳細については、一般式（1）の対応する $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。骨格（2 a）に含まれているカルバゾール部分構造を構成するベンゼン環の少なくとも1つの水素原子は、置換もしくは無置換のアリール基で置換されている。本発明の一態様では、骨格（2 a）および（2 b）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0029] 骨格（2 a）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（2 a）で表される化合物を例示することができる。

一般式（2 a）

[化17]



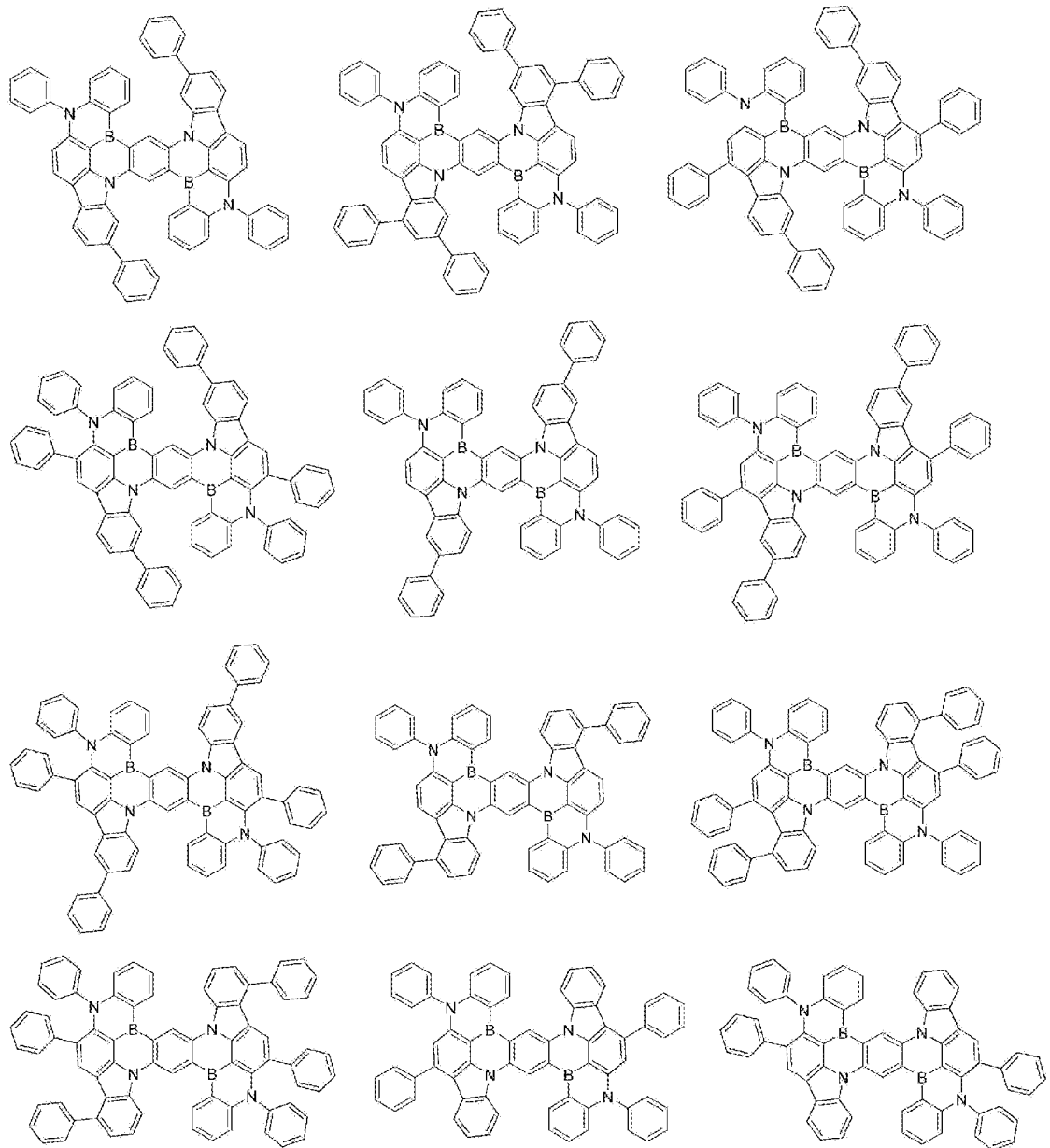
[0030] 一般式(2a)において、Ar⁹～Ar¹⁴は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。n₉、n₁₁、n₁₂、n₁₄は各々独立に0～4の整数を表し、n₁₀およびn₁₃は各々独立に0～2の整数を表す。ただし、n₉、n₁₀、n₁₂、n₁₃のうちの少なくとも1つは1以上である。A¹、A²は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

本発明の一態様では、n₉～n₁₄は各々独立に0～2の整数を表す。本発明の一態様では、n₉～n₁₄の少なくとも1つは1以上であり、例えば、n₉およびn₁₂を1以上としたり、n₁₀およびn₁₃を1以上としたりすることができる。本発明の好ましい一態様では、n₉、n₁₀、n₁₂、n₁₃の少なくとも1つは1以上である。本発明の一態様では、n₉およびn₁₂が各々独立に1または2であり、n₁₀、n₁₁、n₁₃、n₁₄が0である。本発明の一態様ではn₁₀およびn₁₃が各々独立に1または2であり、n₉、n₁₁、n₁₂、n₁₄が0である。本発明の一態様では、n₉およびn₁₂が各々独立に1または2であり、n₁₀およびn₁₃が各々独立に1または2であり、n₁₁およびn₁₄が0である。本発明の一態様では、n₉～n₁₄はいずれも1である。Ar⁹～Ar¹⁴の結合位置は、カルバゾール環の3，6位としたり、その他の位置としたりすることができ

る。本発明の好ましい一態様では、 $A r^9 \sim A r^{14}$ はすべて同一の基である。 $A r^9 \sim A r^{14}$ の好ましい基については、 $A r^1 \sim A r^4$ の対応する記載を参照することができる。 A^1 および A^2 の説明と好ましい範囲については、一般式(1)の対応する記載を参照することができる。

[0031] 以下において、一般式(2a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(2a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

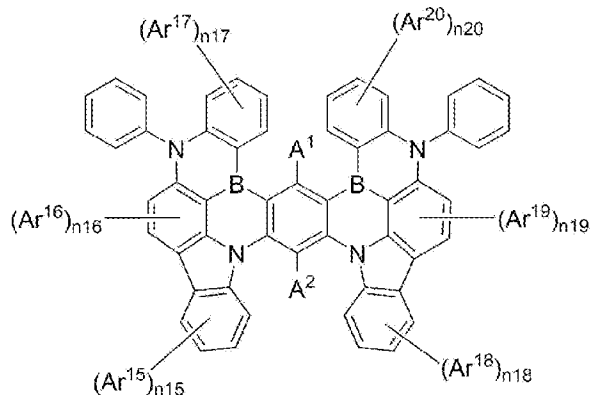
[化18]



[0032] 骨格(2b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(2b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(2b)

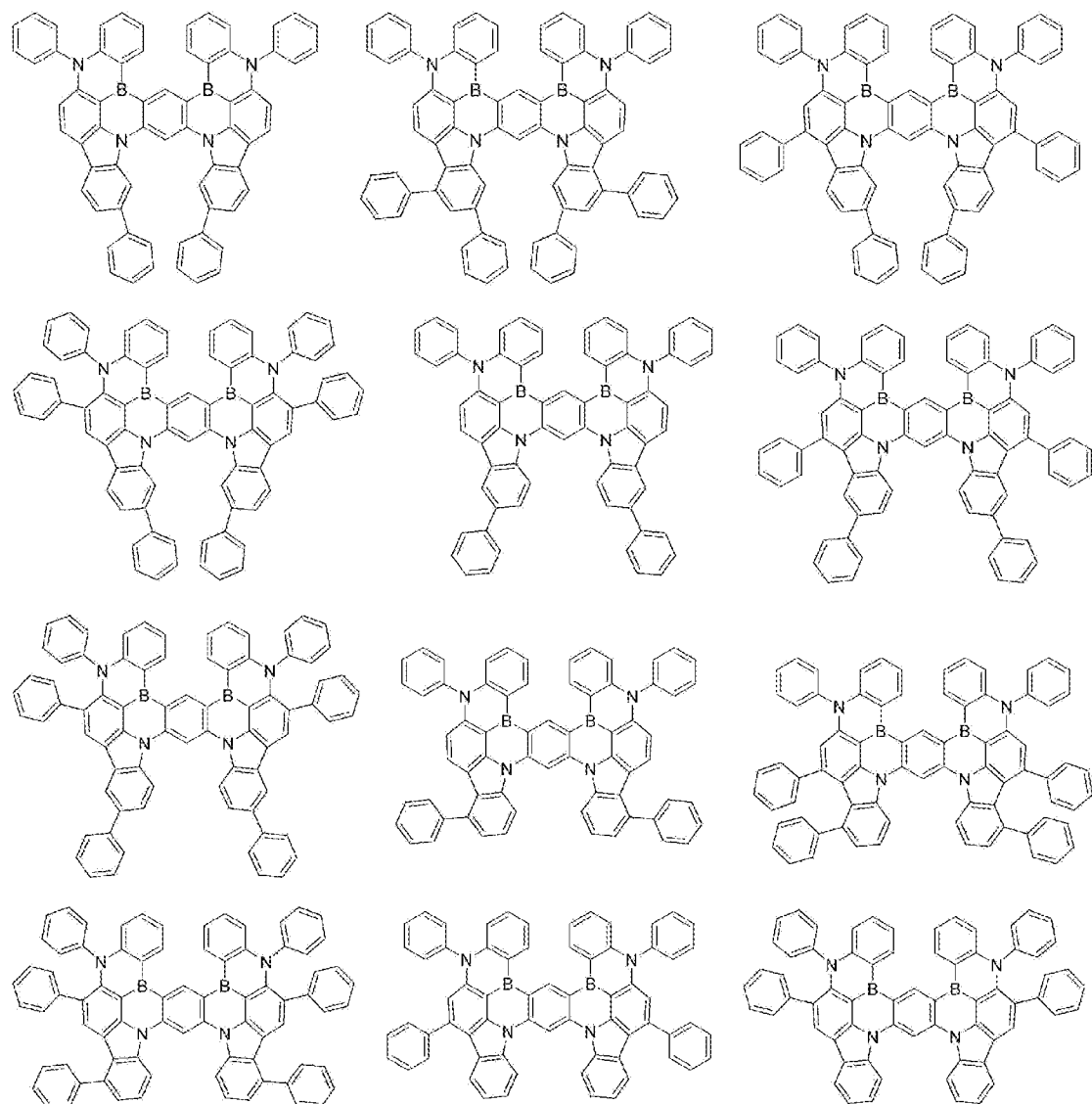
[化19]



[0033] 一般式(2b)において、Ar¹⁵～Ar²⁰は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。n¹⁵、n¹⁷、n¹⁸、n²⁰は各々独立に0～4の整数を表し、n¹⁶およびn¹⁹は各々独立に0～2の整数を表す。A¹、A²は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。Ar¹⁵～Ar²⁰、n¹⁵～n²⁰、A¹、A²の詳細については、一般式(2a)のAr⁹～Ar¹⁴、n⁹～n¹⁴、A¹、A²の記載を順に参照することができる。

[0034] 以下において、一般式(2b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(2b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

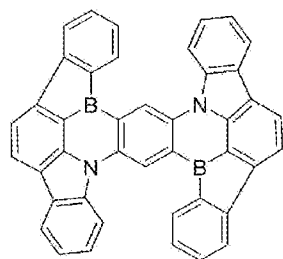
[化20]



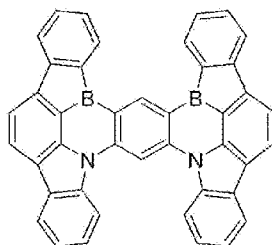
[0035] 一般式(1)の R^7 と R^8 が互いに結合して単結合を形成するとき、本発明の化合物は X^1 が窒素原子であるときに例えば下記の骨格(3a)を有し、 X^2 が窒素原子であるときに例えば下記の骨格(3b)を有する。

[化21]

骨格(3a)



骨格(3b)

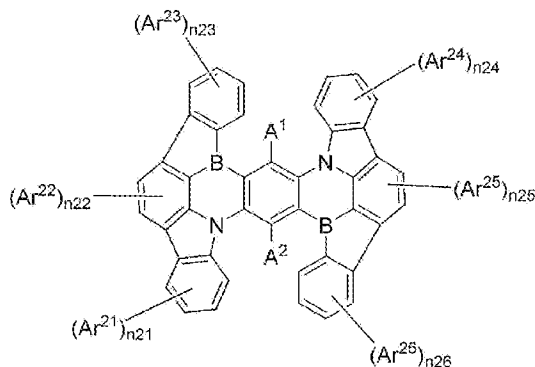


[0036] 骨格 (3 a) および (3 b) における各水素原子は、重水素原子または置換基に置換されていてもよい。また、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していてもよい。詳細については、一般式 (1) の対応する $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格 (3 a) および (3 b) における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0037] 骨格 (3 a) を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式 (3 a) で表される化合物を例示することができる。

一般式 (3 a)

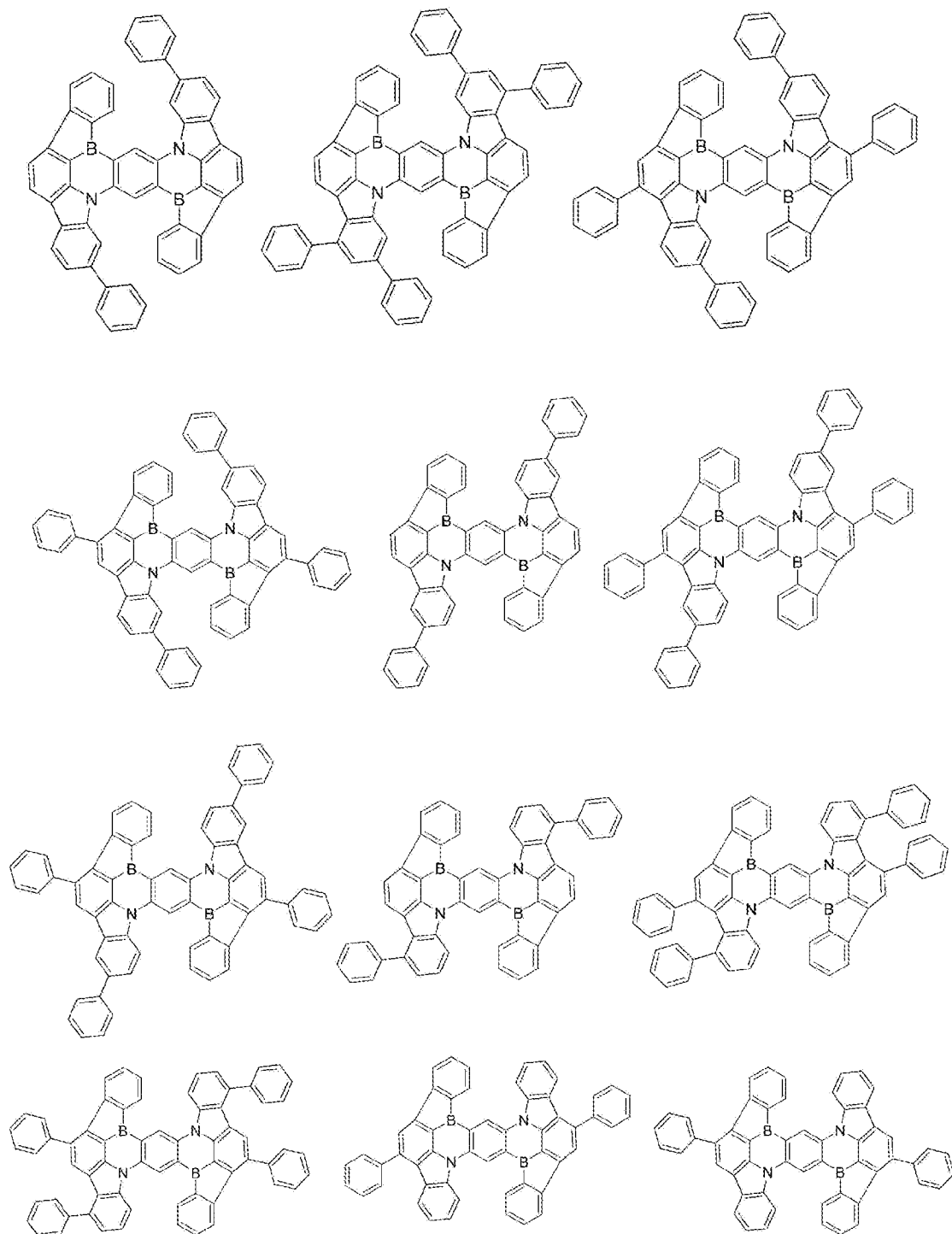
[化22]



[0038] 一般式 (3 a) において、 $Ar^{21} \sim Ar^{26}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 n_{21} 、 n_{23} 、 n_{24} 、 n_{26} は各々独立に 0～4 の整数を表し、 n_{22} および n_{25} は各々独立に 0～2 の整数を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Ar^{21} \sim Ar^{25}$ 、 $n_{21} \sim n_{25}$ の詳細については、一般式 (2 a) の $Ar^9 \sim Ar^{14}$ 、 $n_9 \sim n_{14}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

[0039] 以下において、一般式 (3 a) で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式 (3 a) の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

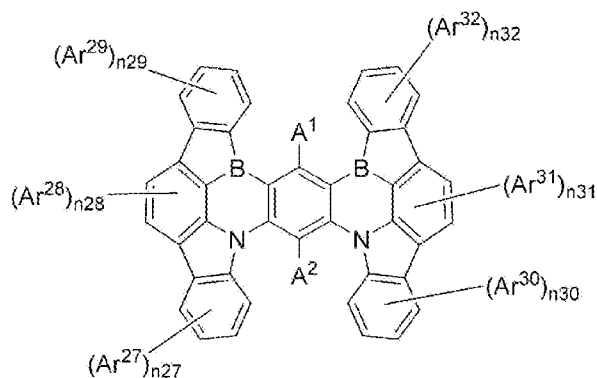
[化23]



[0040] 骨格(3b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(3b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(3b)

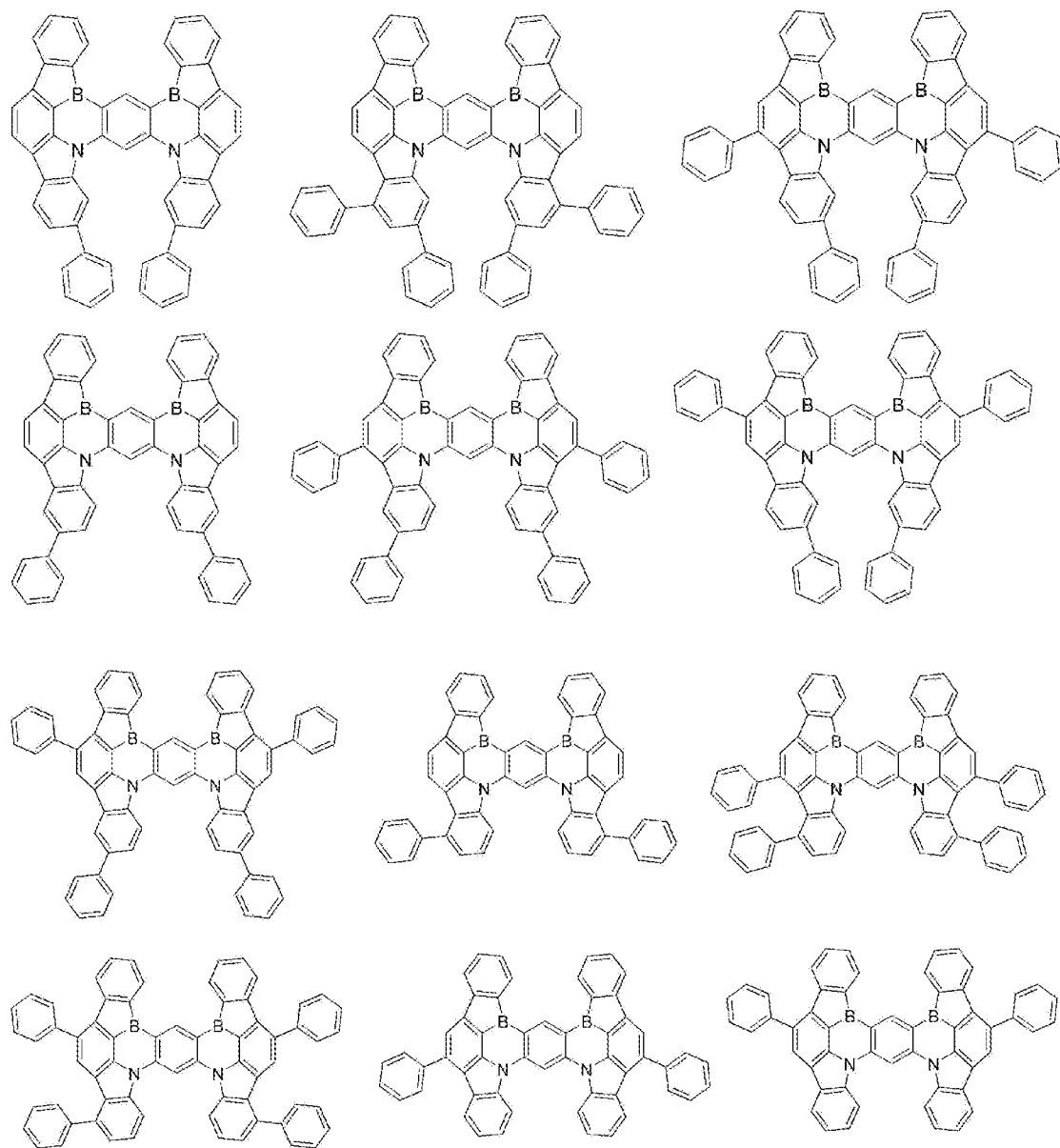
[化24]



[0041] 一般式(3b)において、 $Ar^{27} \sim Ar^{32}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 n_{27} 、 n_{29} 、 n_{30} 、 n_{32} は各々独立に0～4の整数を表し、 n_{28} および n_{31} は各々独立に0～2の整数を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Ar^{27} \sim Ar^{32}$ 、 $n_{27} \sim n_{32}$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(2b)の $Ar^{15} \sim Ar^{20}$ 、 $n_{15} \sim n_{20}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を順に参照することができる。

[0042] 以下において、一般式(3b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(3b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

[化25]



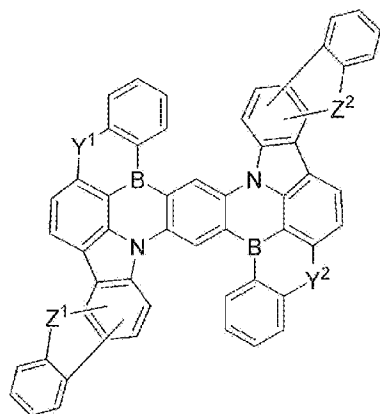
[0043] 本発明の好ましい一態様では、一般式（１）に存在するカルバゾール部分構造を構成する２つのベンゼン環に他の環が縮合している化合物を選択する。中でも、ベンフラン環が縮合した化合物、ベンゾチオフエン環が縮合した化合物、ベンゼン環が縮合した化合物を特に好ましく選択することができる。以下において、これらの環が縮合した化合物について具体例を挙げながら説明する。

[0044] 一般式（１）に存在するカルバゾール部分構造を構成する２つのベンゼン環のうちホウ素原子が直接結合していないベンゼン環に、ベンゾフラン環ま

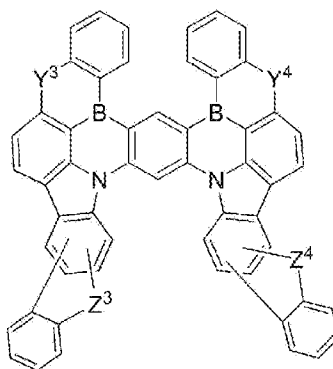
たはベンゾチオフェン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。
 そのような化合物の例として、下記の骨格（4 a）を有する化合物と、下記の骨格（4 b）を有する化合物を例示することができる。

[化26]

骨格（4 a）



骨格（4 b）



[0045] 骨格（4 a）および（4 b）において、 $Y^1 \sim Y^4$ は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。ここでいう水素原子2個は、ホウ素原子に結合している2つのベンゼン環が互いに連結していない状態を示している。 Y^1 と Y^2 は同じであり、 Y^3 と Y^4 は同じであることが好ましいが、それぞれ異なってもよい。本発明の一態様では、 $Y^1 \sim Y^4$ は単結合である。本発明の一態様では、 $Y^1 \sim Y^4$ は $N(R^{27})$ である。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。

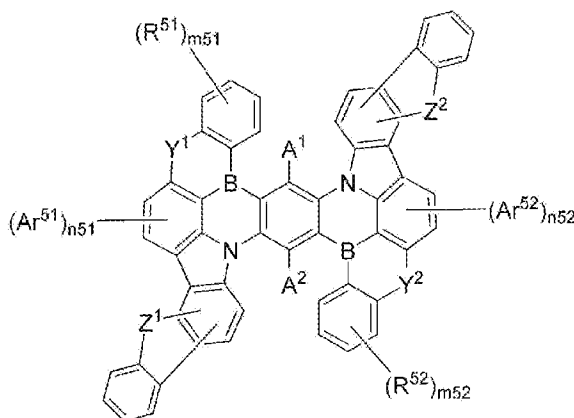
$Z^1 \sim Z^4$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 Z^1 と Z^2 は同じであり、 Z^3 と Z^4 は同じであることが好ましいが、それぞれ異なってもよい。本発明の一態様では $Z^1 \sim Z^4$ は酸素原子である。このとき、ベンゾフランのフラン環が、（4 a）および（4 b）におけるカルバゾール部分構造を構成するベンゼン環に縮合している。縮合しているフラン環の向きは制限されない。本発明の一態様では $Z^1 \sim Z^4$ は硫黄原子である。このとき、ベンゾチオフェンのチオフェン環が、（4 a）および（4 b）におけるカルバゾール部分構造を構成するベンゼン環に縮合している。縮合しているチオフェン環の向きは制限されない。

骨格（４ a）および（４ b）における各水素原子は、重水素原子または置換基に置換されていてもよい。また、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していてもよい。詳細については、一般式（１）の対応する $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格（４ a）および（４ b）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0046] 骨格（４ a）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（４ a）で表される化合物を例示することができる。具体例中の X は酸素原子または硫黄原子であり、 X が酸素原子である化合物と X が硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。以降の他の一般式で表される化合物の具体例中の X も同じ意味を表す。

一般式（４ a）

[化27]



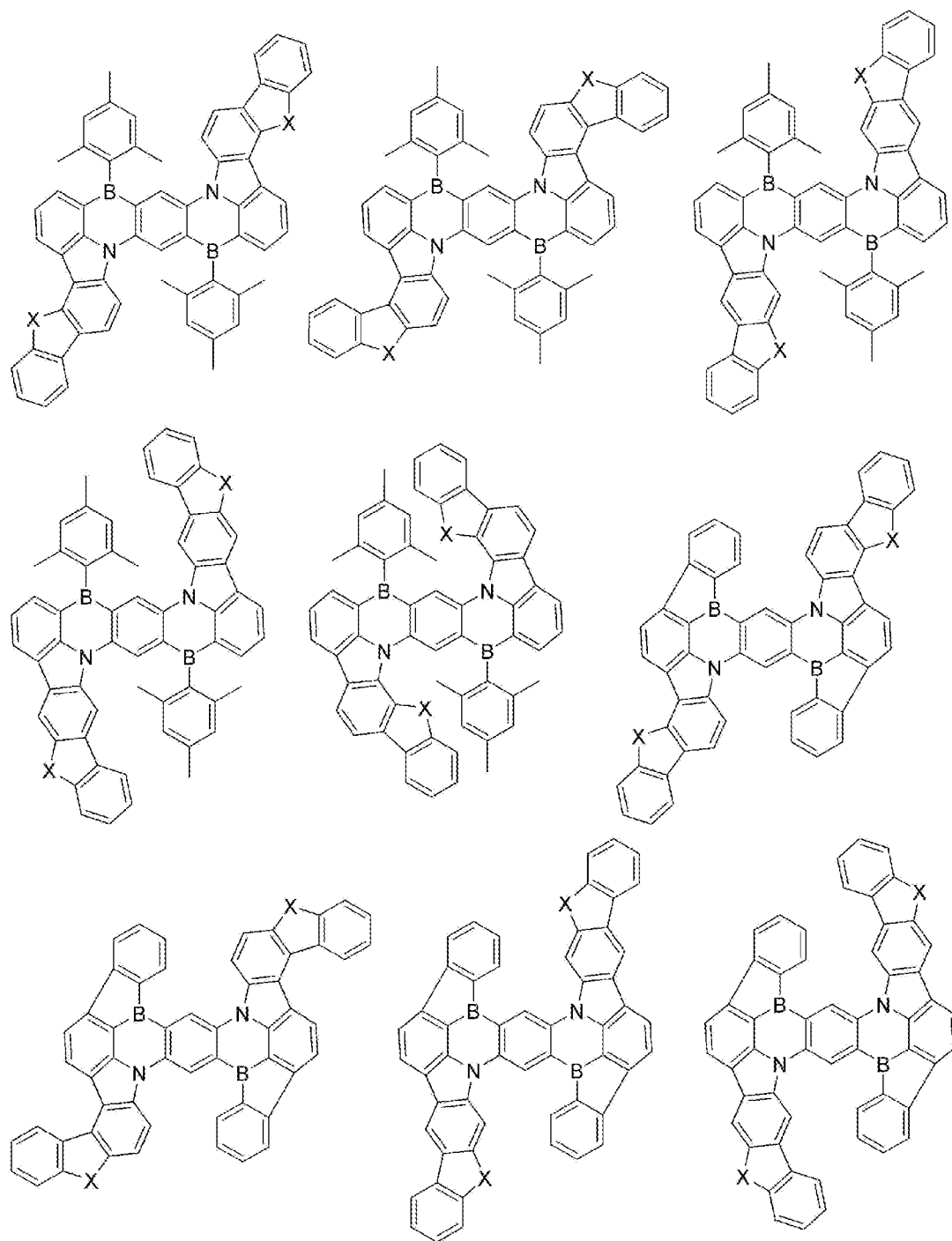
[0047] 一般式（４ a）において、 Ar^{51} および Ar^{52} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 R^{51} および R^{52} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{51} および m_{52} は各々独立に $0 \sim 4$ の整数を表す。 n_{51} および n_{52} は各々独立に $0 \sim 2$ の整数を表す。 $Y^1 \sim Y^4$ は、各々独立に水素原子 2 個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Z^1 \sim Z^4$ は、各々独立に酸素原子

または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

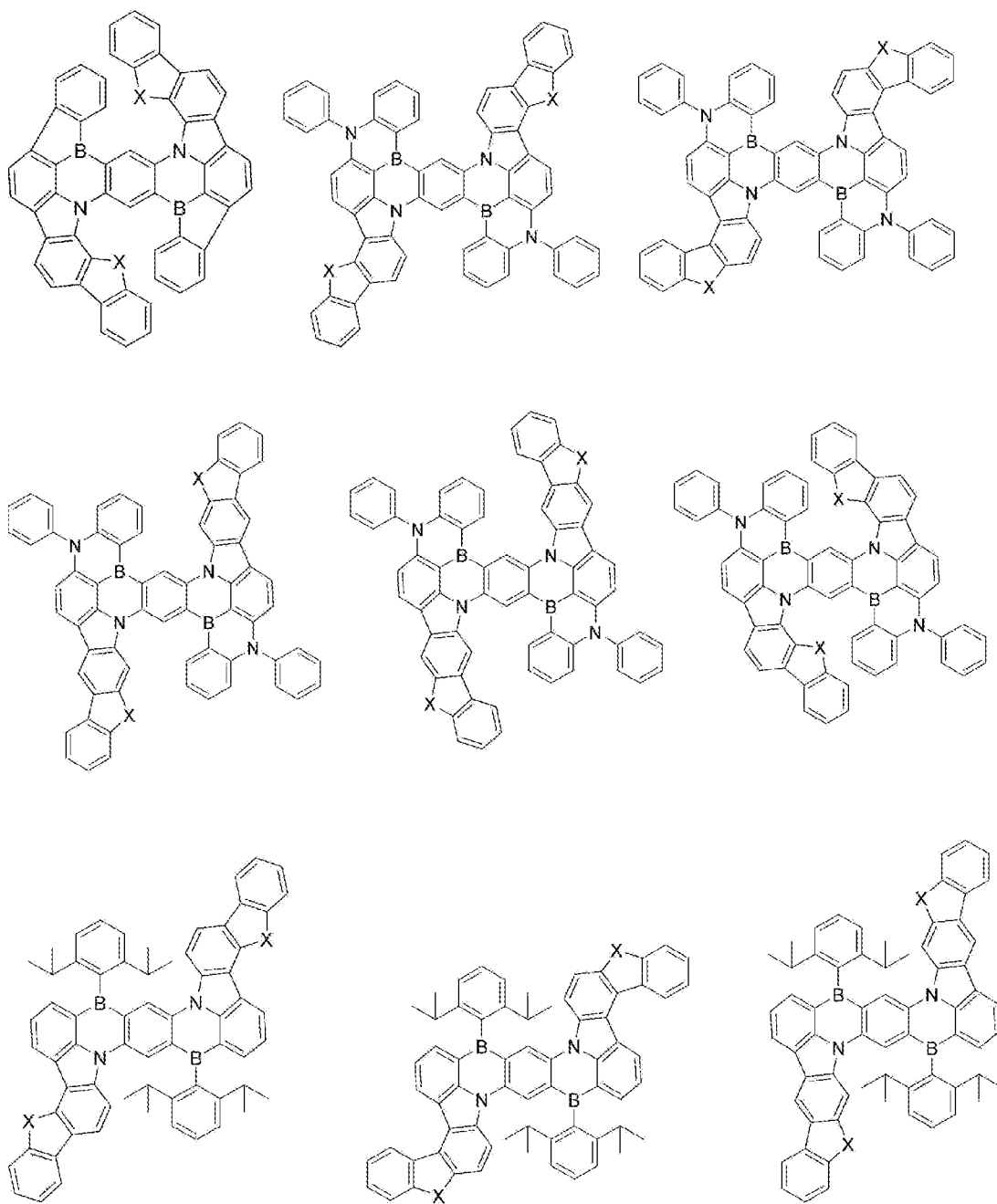
本発明の一態様では、 n_{51} と n_{52} は同じ数である。例えば、 n_{51} と n_{52} は0であってもよく、 n_{51} と n_{52} は1であってもよい。本発明の一態様では、 m_{51} と m_{52} は同じ数である。本発明の一態様では、 m_{51} と m_{52} は0～3の整数である。例えば、 m_{51} と m_{52} は0であってもよく、 m_{51} と m_{52} は1であってもよく、 m_{51} と m_{52} は2であってもよく、 m_{51} と m_{52} は3であってもよい。 Ar^{51} 、 Ar^{52} 、 R^{51} 、 R^{52} 、 A^1 、 A^2 の好ましい基については、一般式(1a)の $Ar^1 \sim Ar^4$ 、 $R^{41} \sim R^{42}$ 、 A^1 、 A^2 の対応する記載を参照することができる。

[0048] 以下において、一般式(4a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(4a)の化合物は、下記の一群の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

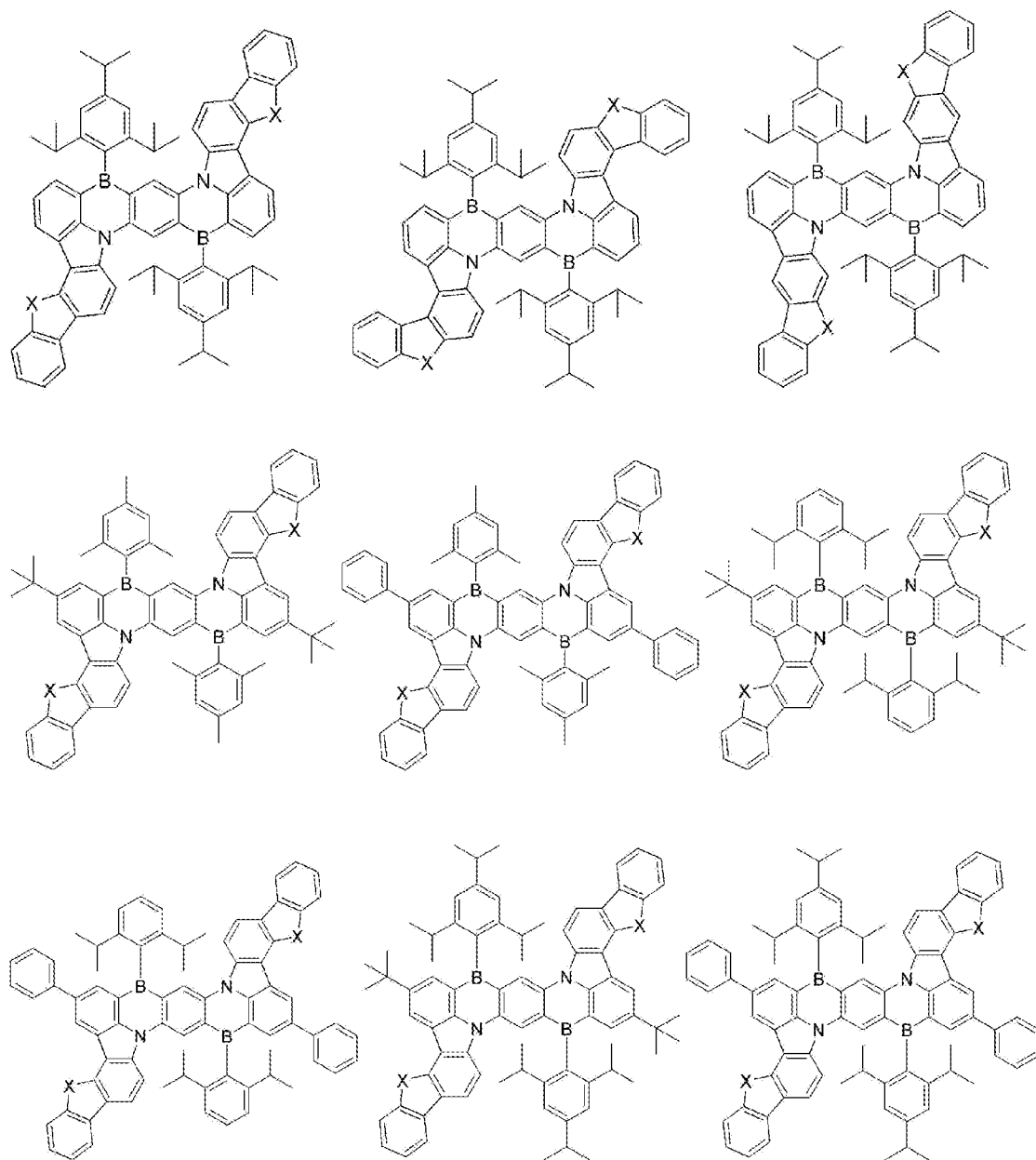
[化28-1]



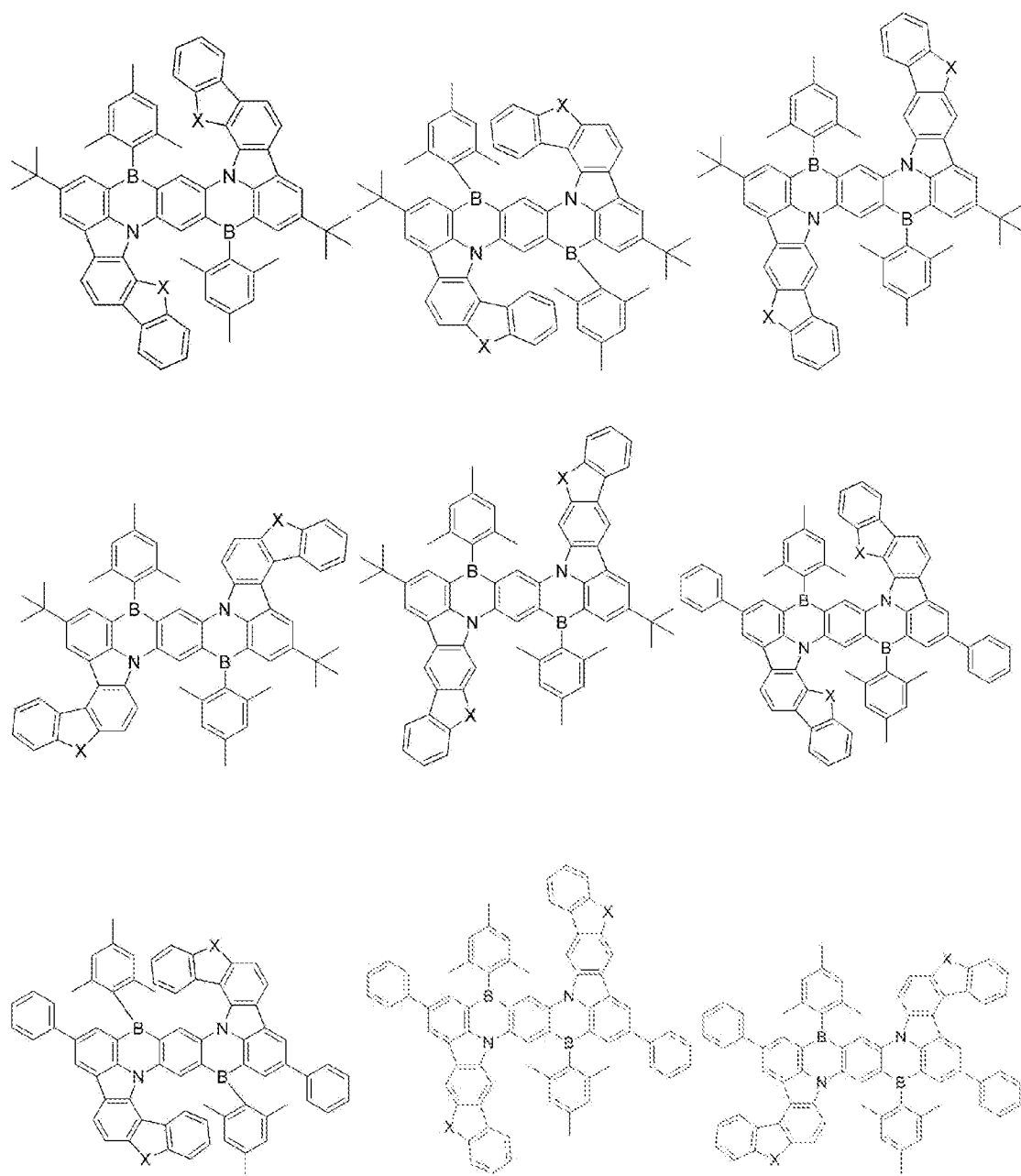
[化28-2]



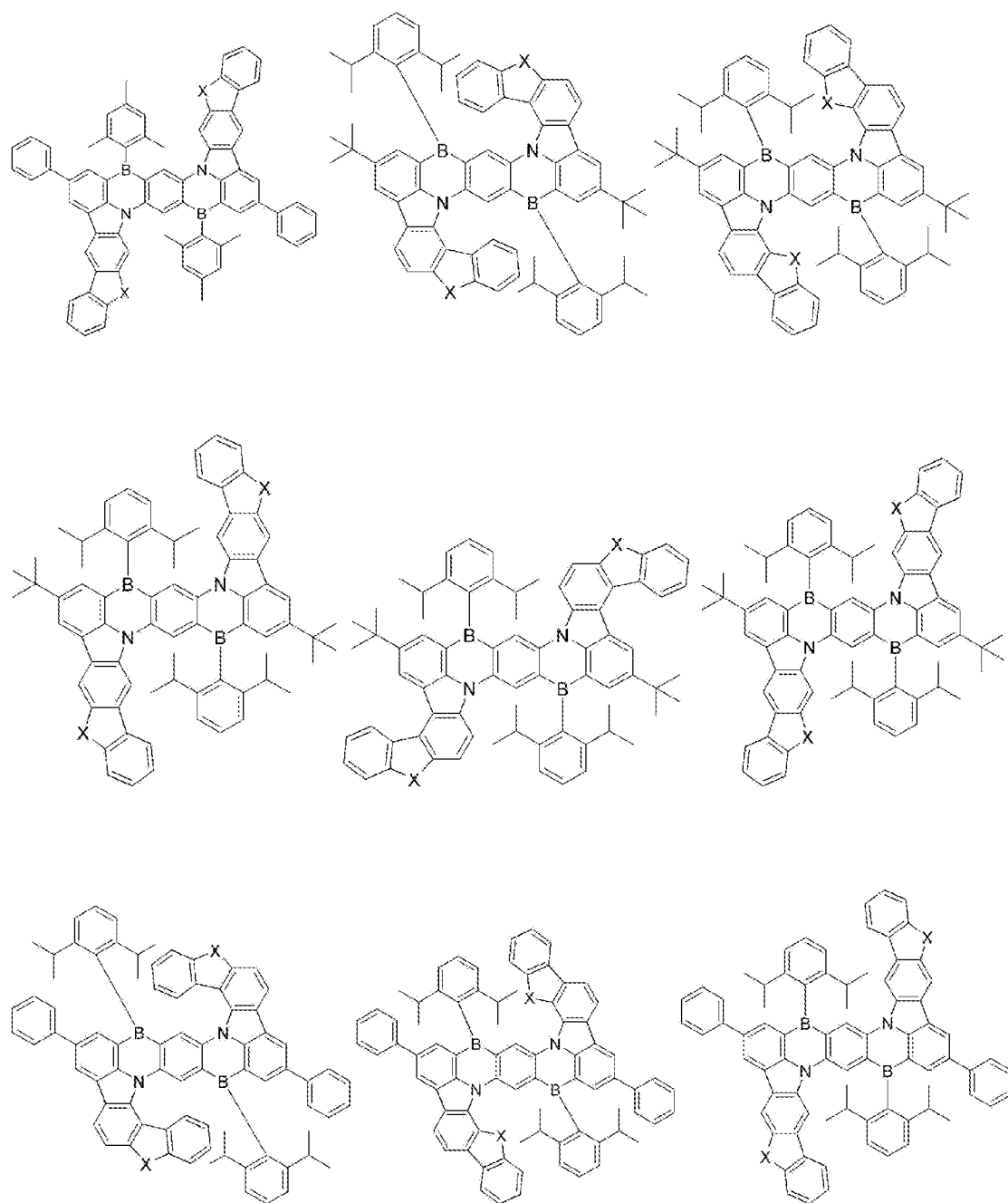
[化28-3]



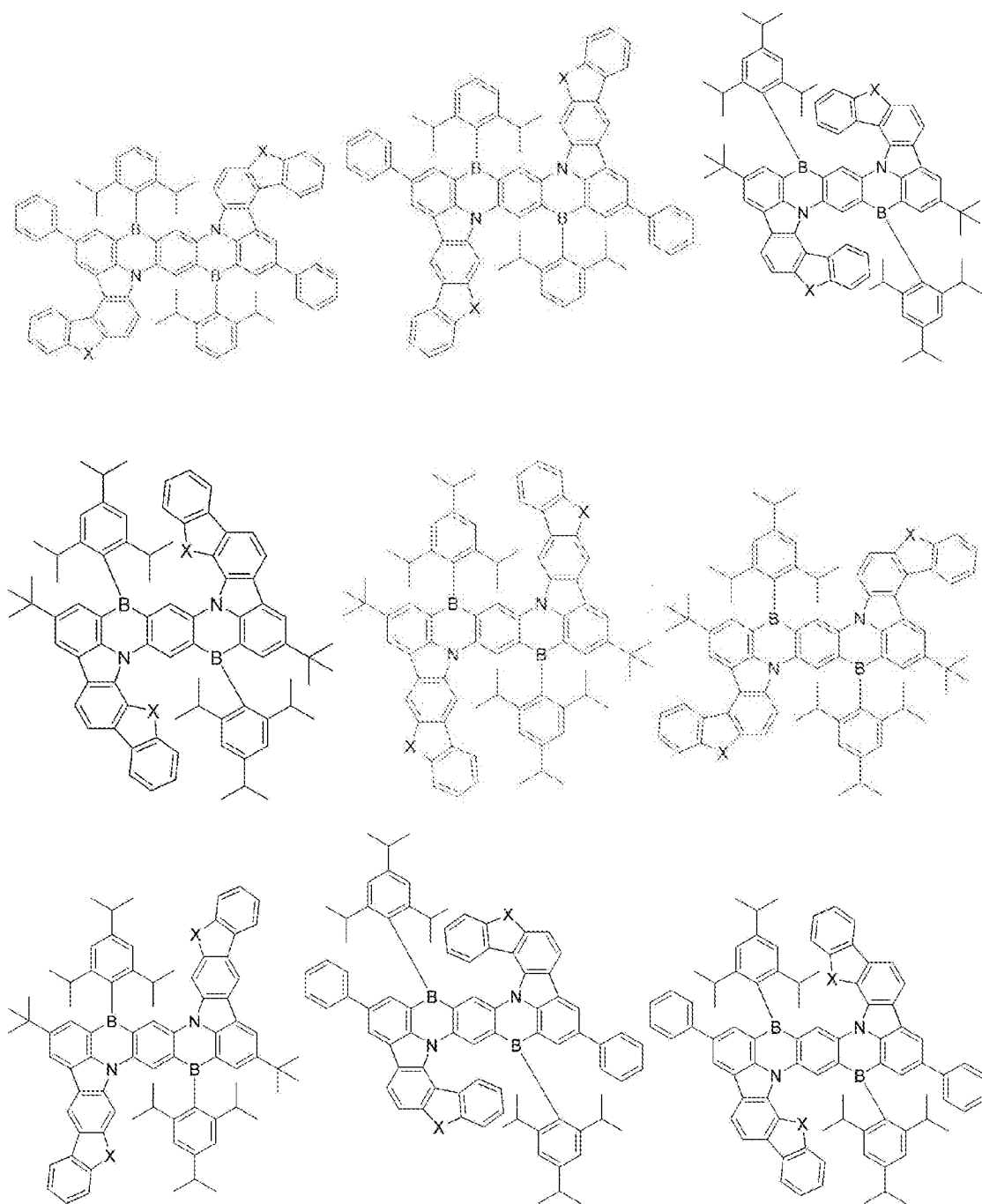
[化28-4]



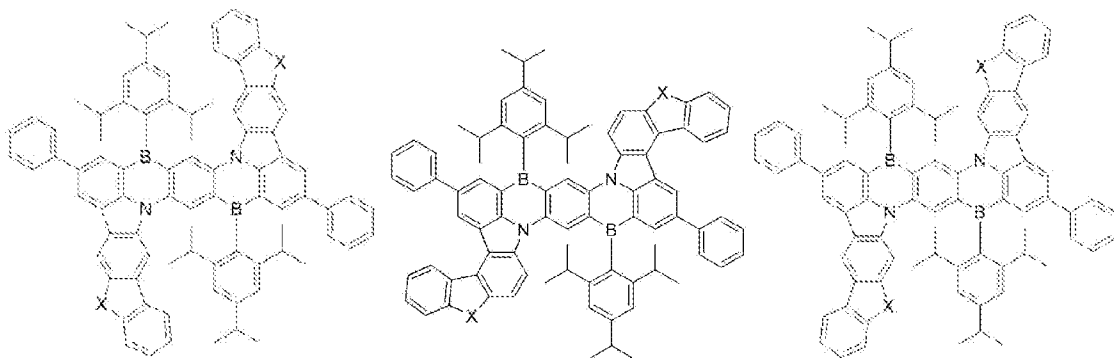
[化28-5]



[化28-6]

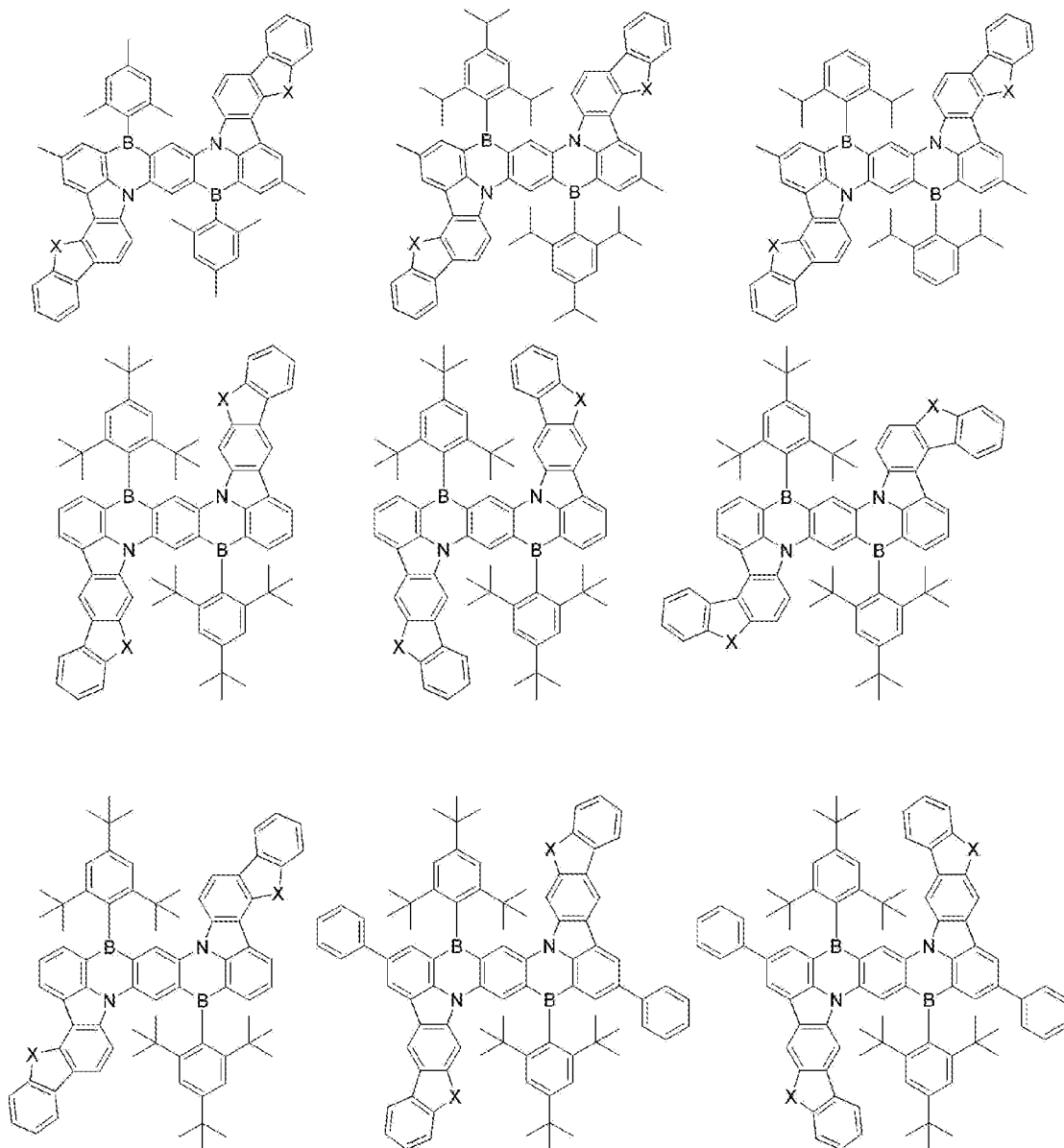


[化28-7]

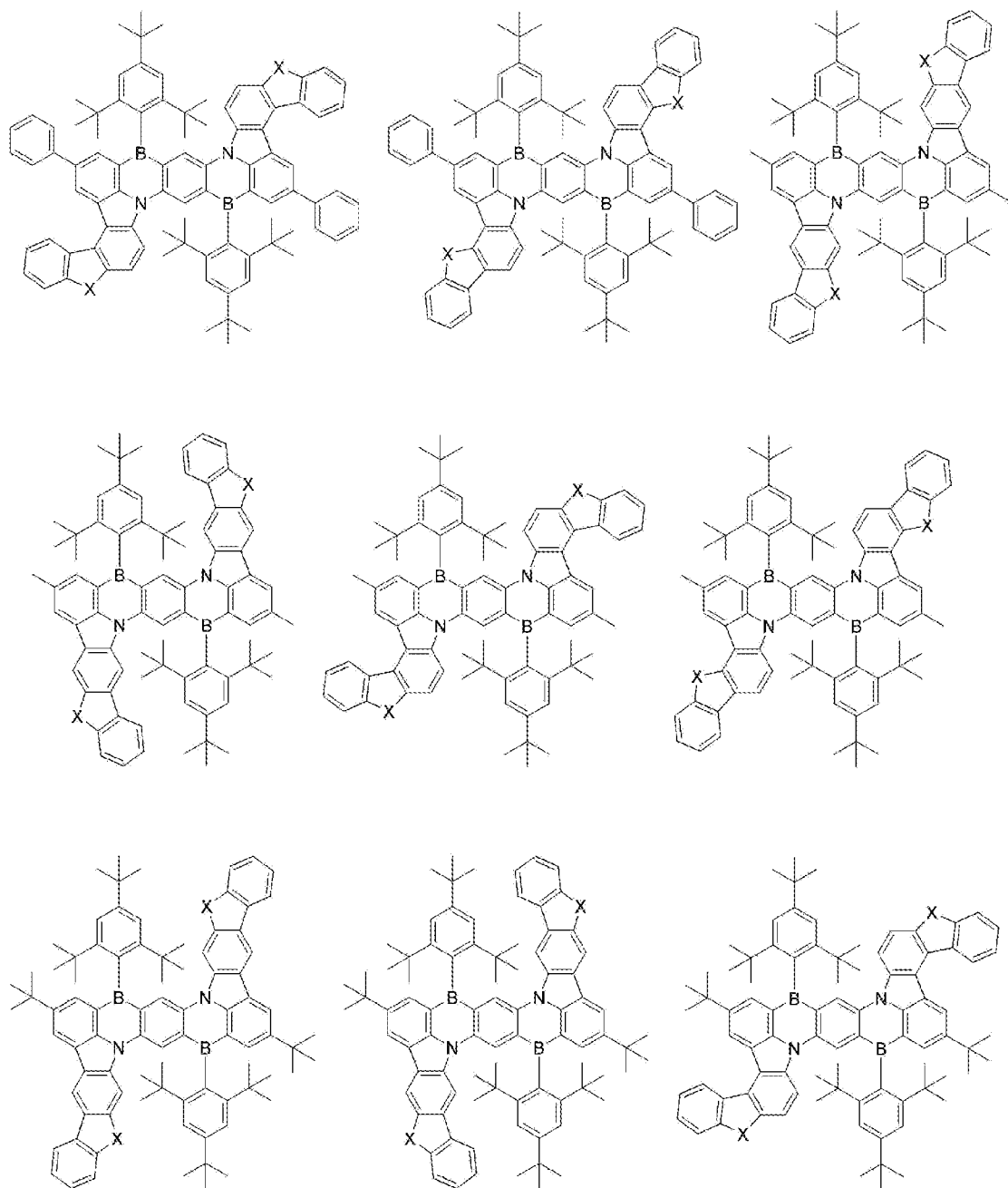


[0049] 以下において、一般式（4 a）で表される化合物の別の一群の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式（4 a）の化合物は、下記の一群の具体例により限定的に解釈されることはない。

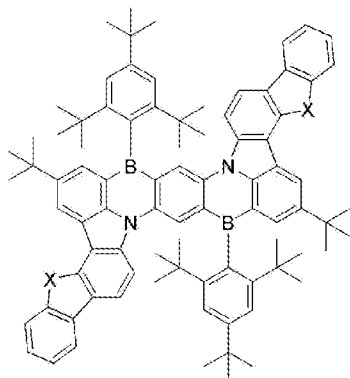
[化29-1]



[化29-2]



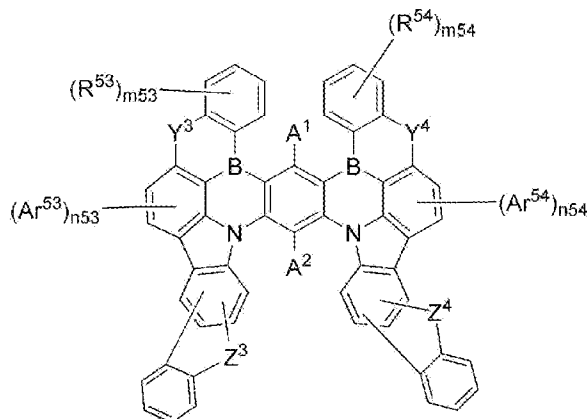
[化29-3]



[0050] 骨格(4b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(4b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(4b)

[化30]

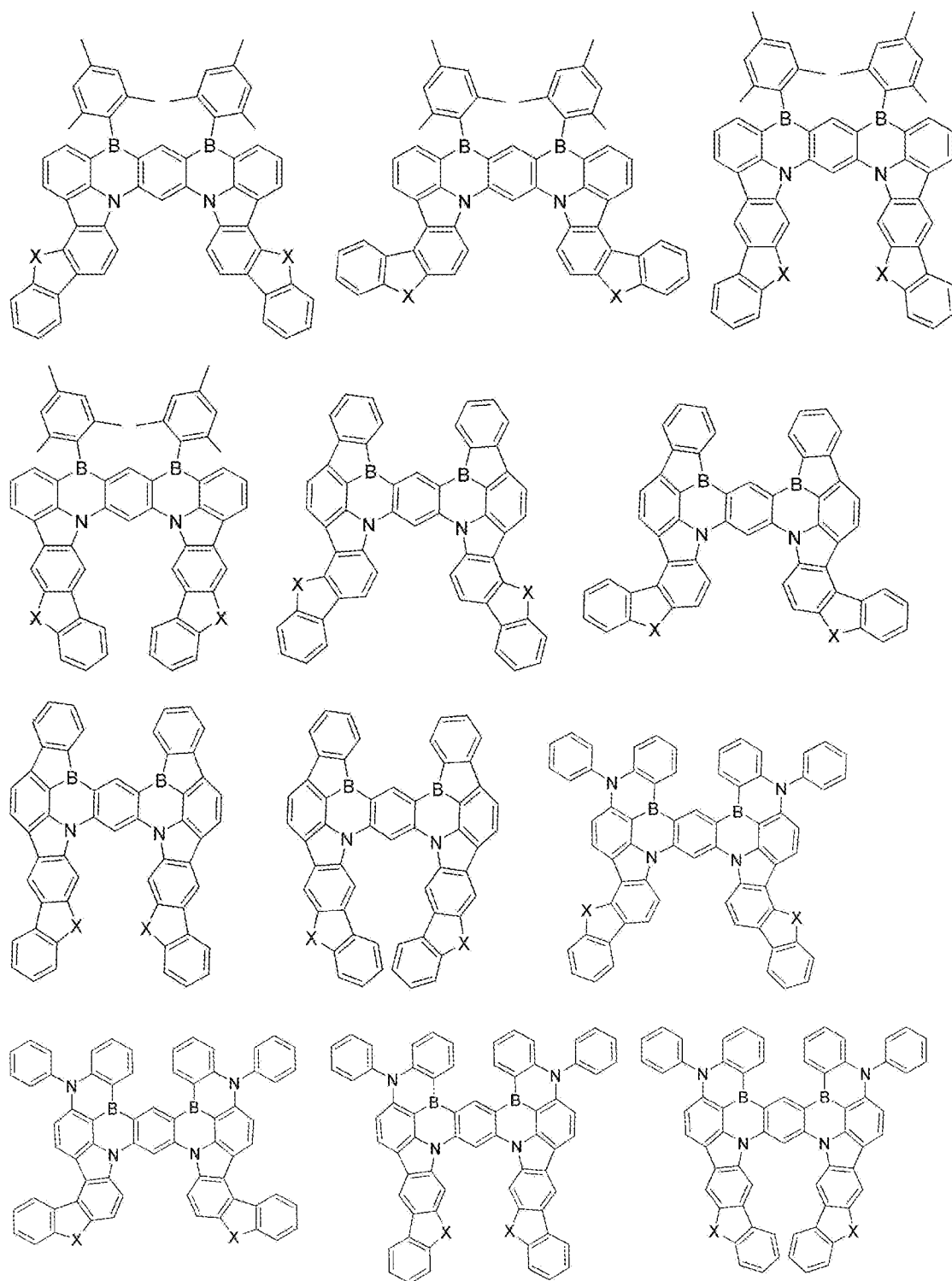


[0051] 一般式(4b)において、 Ar^{53} および Ar^{54} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 R^{53} および R^{54} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{53} および m_{54} は各々独立に0~4の整数を表す。 n_{53} および n_{54} は各々独立に0~2の整数を表す。 Y^3 および Y^4 は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Z^3 および Z^4 は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Ar^{53} 、 Ar^{54} 、 R^{53} 、 R^{54} 、 m_{53} 、 m_{54} 、

n^{53} 、 n^{54} 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(4a)の Ar^{51} 、 Ar^{52} 、 R^{51} 、 R^{52} 、 m^{51} 、 m^{52} 、 n^{51} 、 n^{52} 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

[0052] 以下において、一般式(4b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(4b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

[化31]

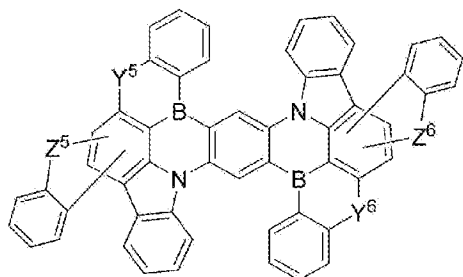


[0053] 一般式(1)に存在するカルバゾール部分構造を構成する2つのベンゼン環のうちホウ素原子が直接結合しているベンゼン環に、ベンゾフラン環またはベンゾチオフェン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。そ

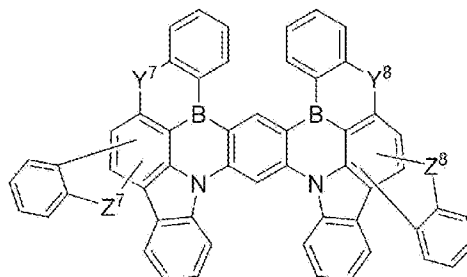
のような化合物の例として、下記の骨格（５a）を有する化合物と、下記の骨格（５b）を有する化合物を例示することができる。

[化32]

骨格（５a）



骨格（５b）

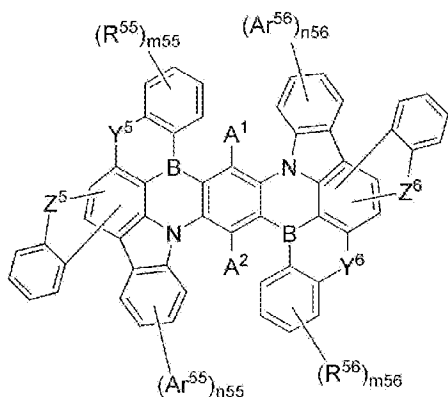


[0054] 骨格（５a）および（５b）において、 $Y^5 \sim Y^8$ は、各々独立に水素原子２個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 $Z^5 \sim Z^8$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 $Y^5 \sim Y^8$ 、 $Z^5 \sim Z^8$ の詳細については、骨格（４a）および（４b）の対応する記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格（５a）および（５b）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0055] 骨格（５a）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（５a）で表される化合物を例示することができる。

一般式（５a）

[化33]



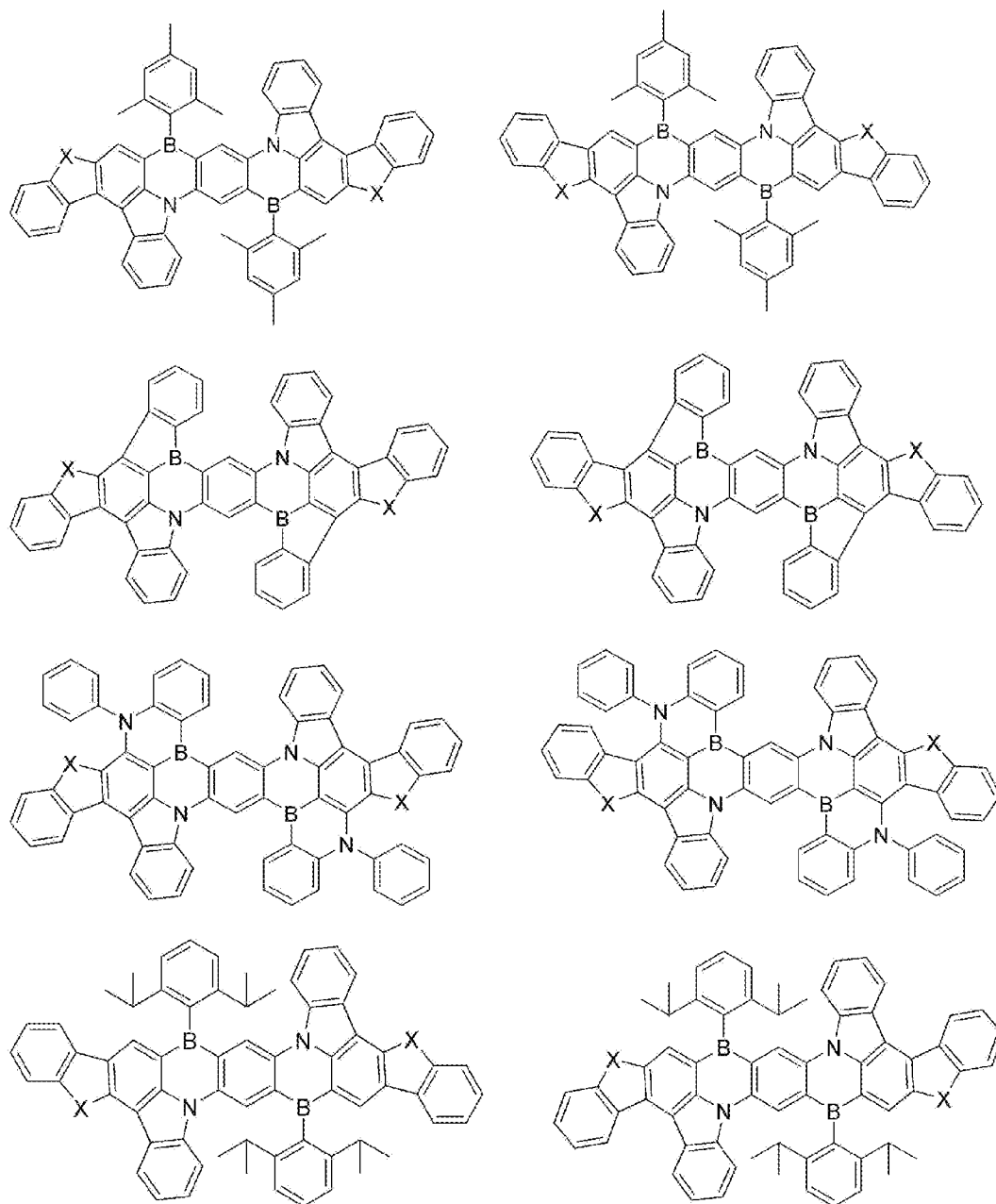
[0056] 一般式（５a）において、 Ar^{55} および Ar^{56} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール

基を好ましく選択することができる。 R^{55} および R^{56} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m^{55} および m^{56} は各々独立に0～4の整数を表す。 n^{55} および n^{56} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^5 および Y^6 は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Z^5 および Z^6 は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

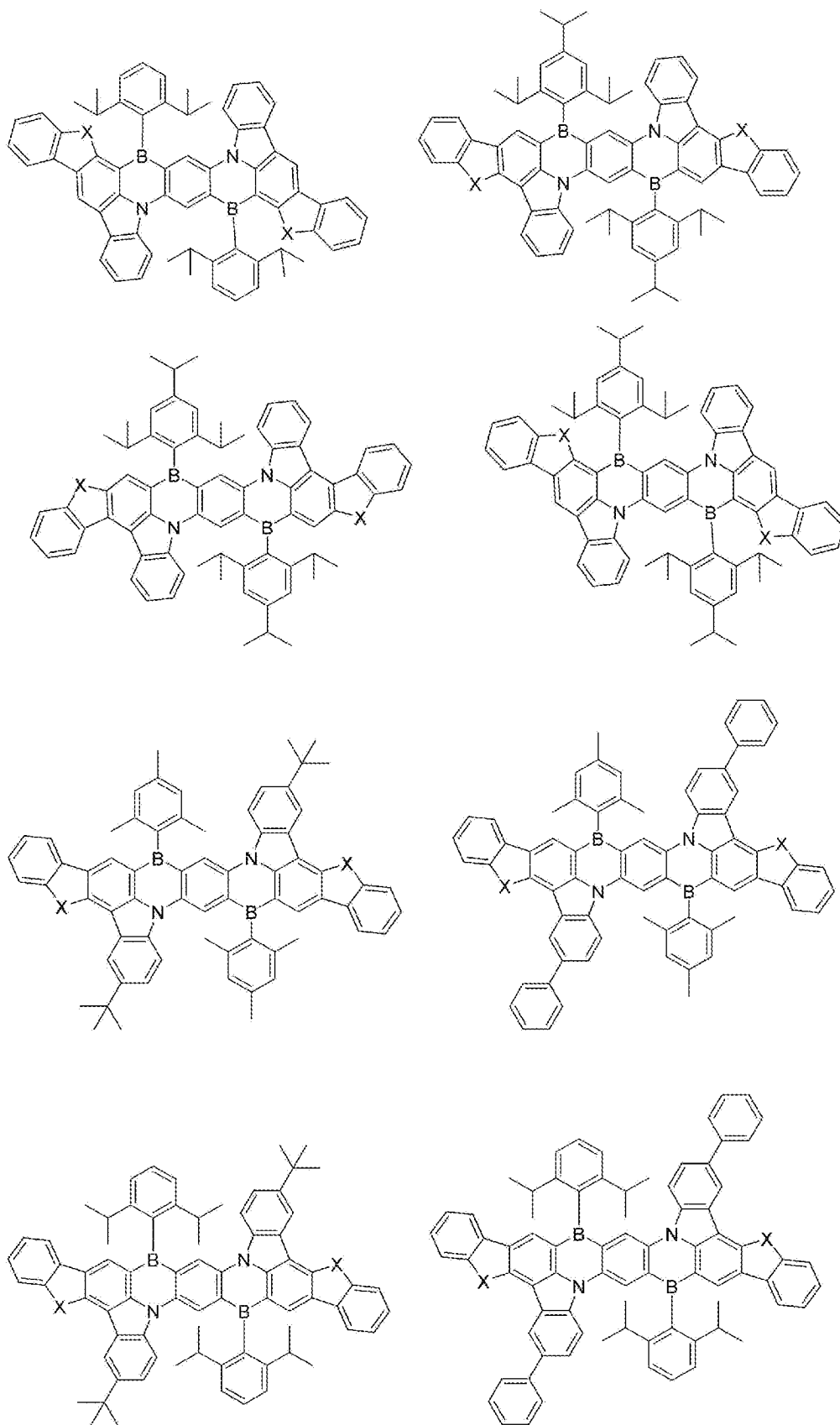
本発明の一態様では、 n^{55} と n^{56} は0～2の整数である。例えば、 n^{55} と n^{56} は0であってもよく、 n^{55} と n^{56} は1であってもよい。本発明の一態様では、 m^{51} と m^{52} は同じ数である。 m^{55} と m^{56} の詳細については、一般式(4a)の m^{51} と m^{52} の記載を参照することができる。 Ar^{55} 、 Ar^{56} 、 R^{55} 、 R^{56} 、 A^1 、 A^2 の好ましい基については、一般式(1a)の Ar^1 、 Ar^3 、 R^{41} 、 R^{42} 、 A^1 、 A^2 の対応する記載を参照することができる。

[0057] 以下において、一般式(5a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(5a)の化合物は、下記の一群の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

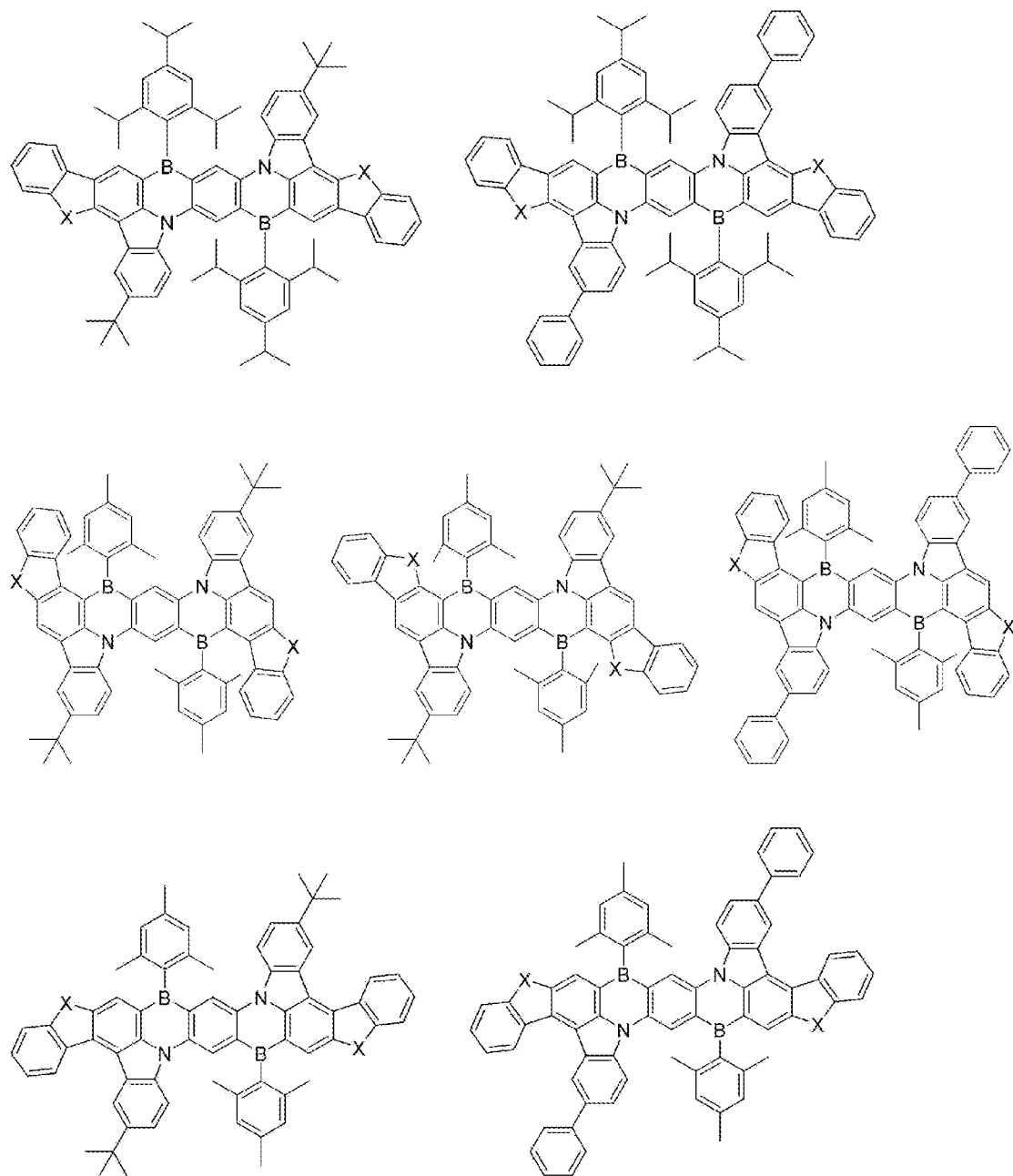
[化34-1]



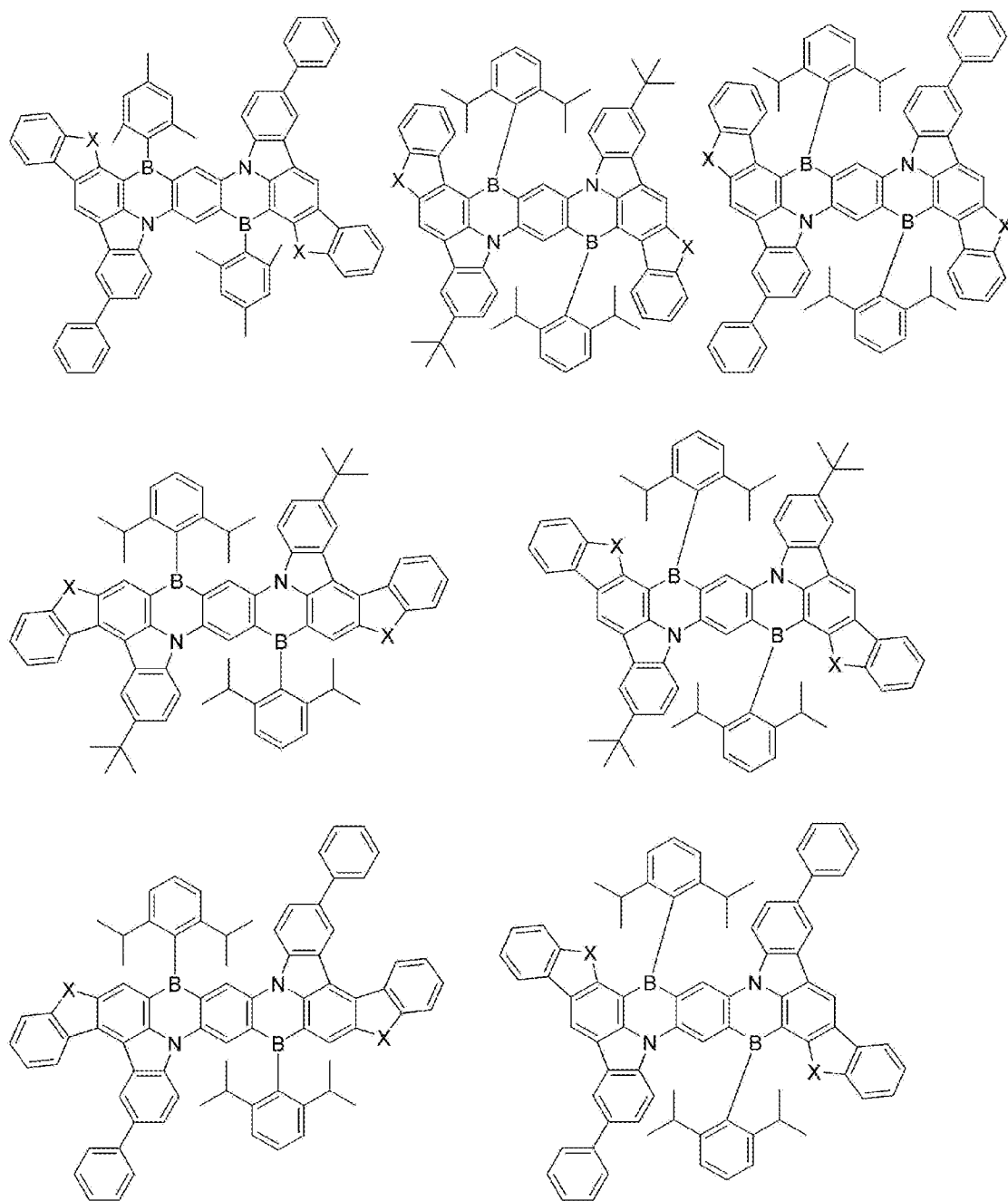
[化34-2]



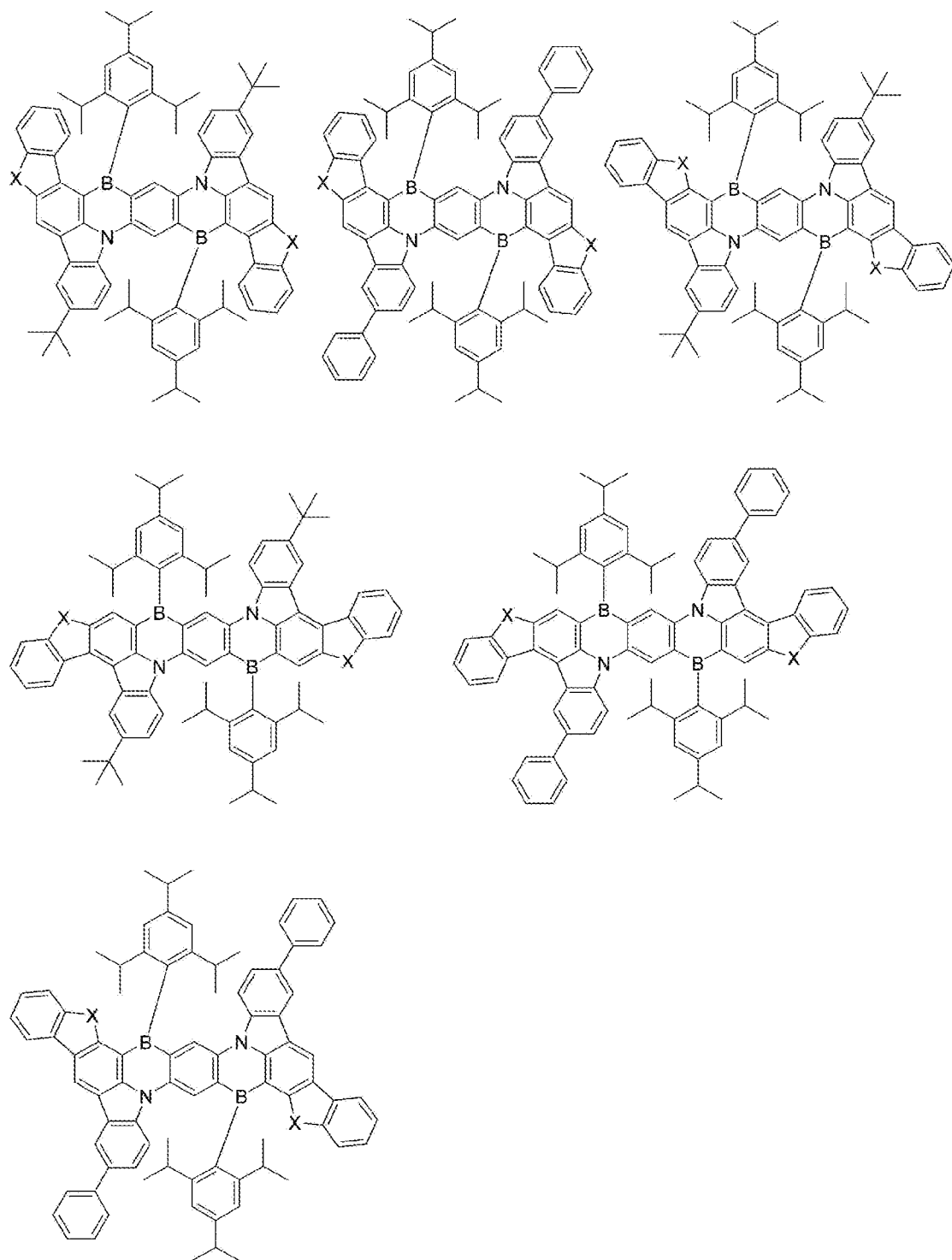
[化34-3]



[化34-4]

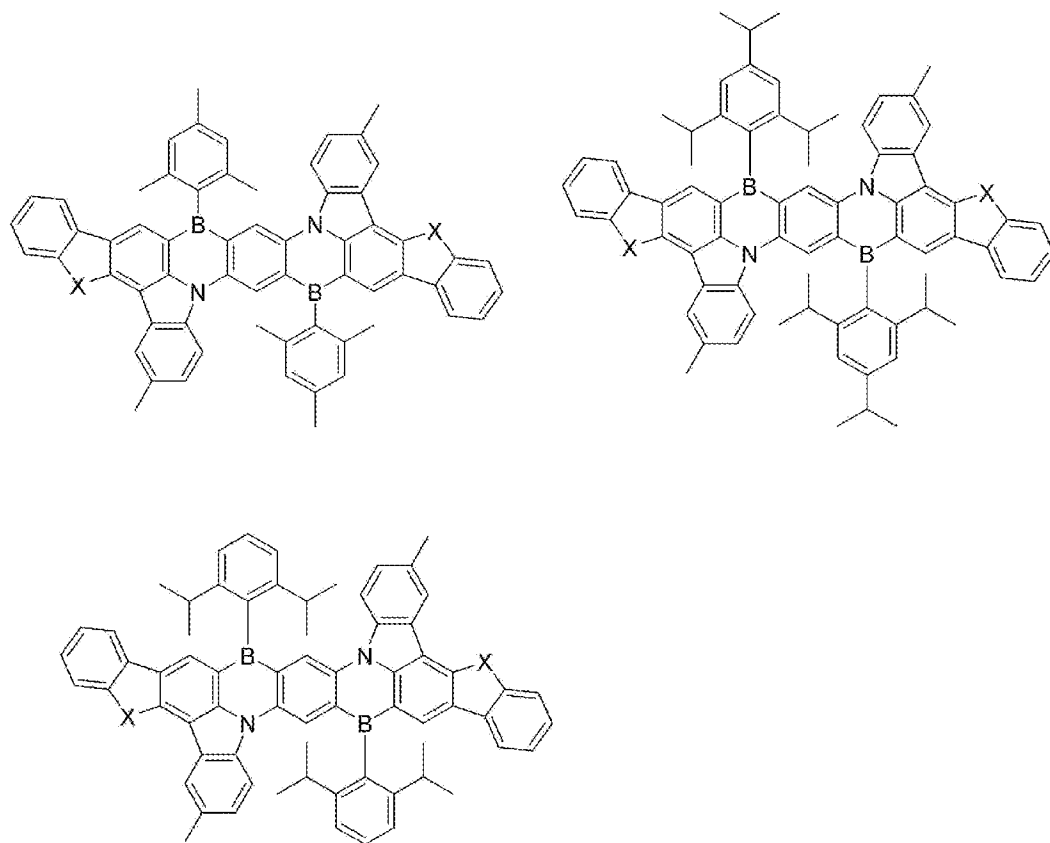


[化34-5]



[0058] 以下において、一般式（5 a）で表される化合物の別の一群の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式（5 a）の化合物は、下記の一群の具体例により限定的に解釈されることはない。

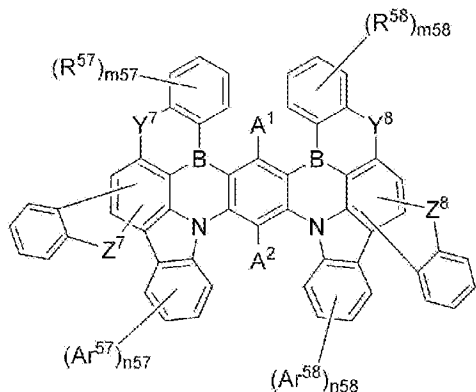
[化35]



[0059] 骨格 (5 b) を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式 (5 b) で表される化合物を例示することができる。

一般式 (5 b)

[化36]

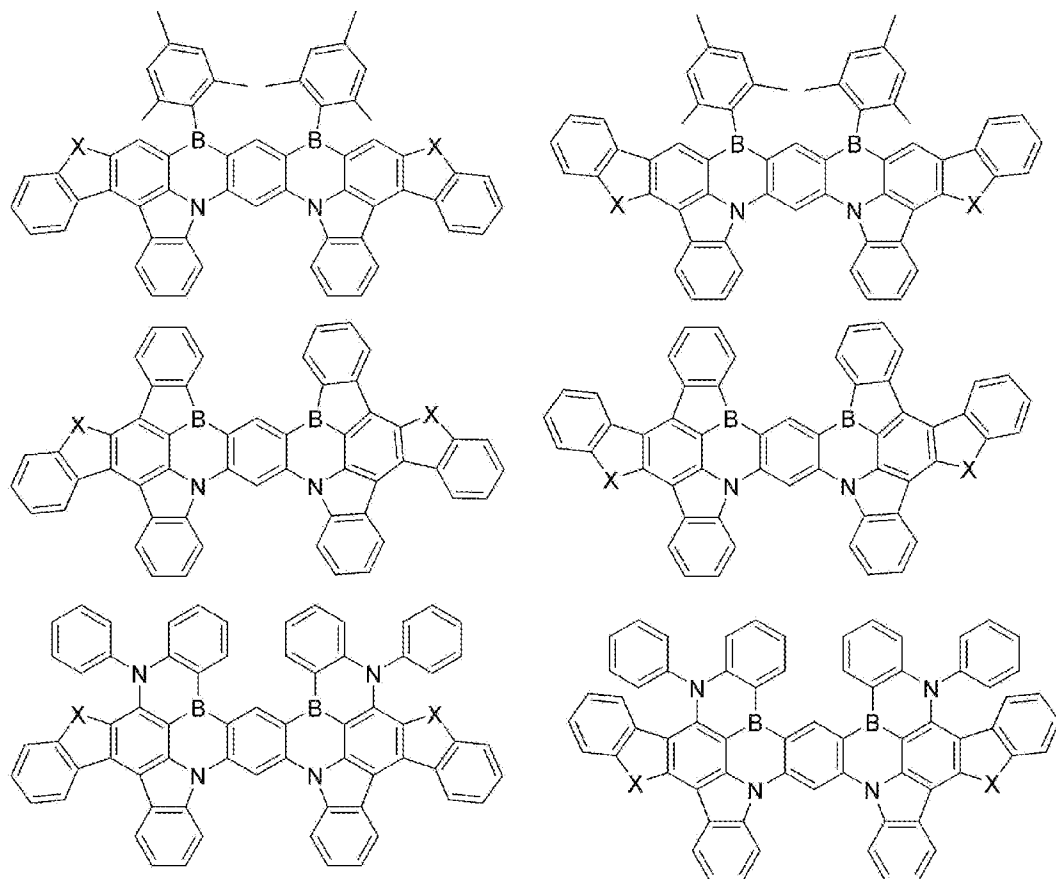


[0060] 一般式 (5 b) において、 Ar^{57} および Ar^{58} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール

基を好ましく選択することができる。 R^{57} および R^{58} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m^{57} および m^{58} は各々独立に0～4の整数を表す。 n^{57} および n^{58} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^7 および Y^8 は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Z^7 および Z^8 は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Ar^{57} 、 Ar^{58} 、 R^{57} 、 R^{58} 、 m^{57} 、 m^{58} 、 n^{57} 、 n^{58} 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(5a)の Ar^{55} 、 Ar^{56} 、 R^{55} 、 R^{56} 、 m^{55} 、 m^{56} 、 n^{55} 、 n^{56} 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

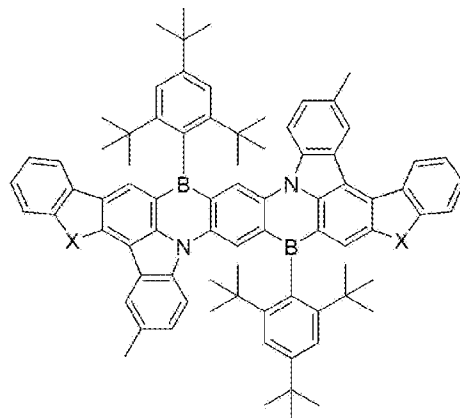
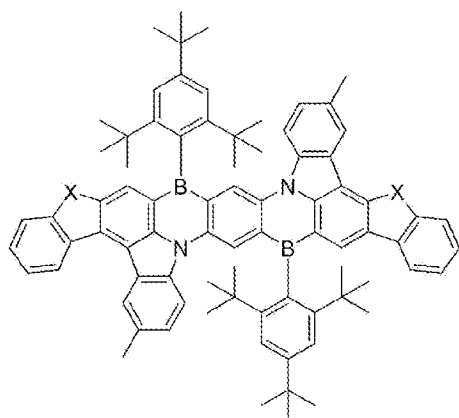
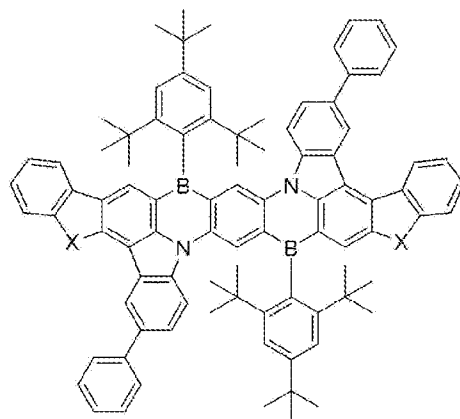
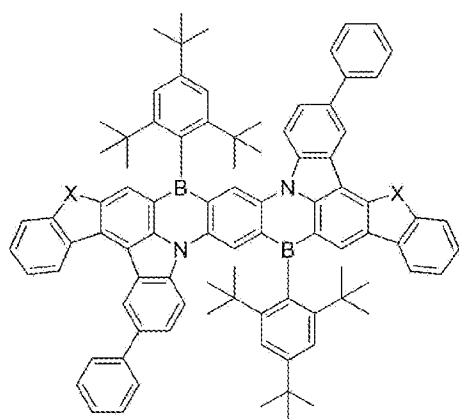
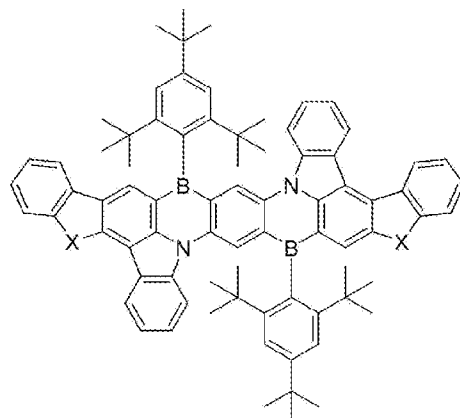
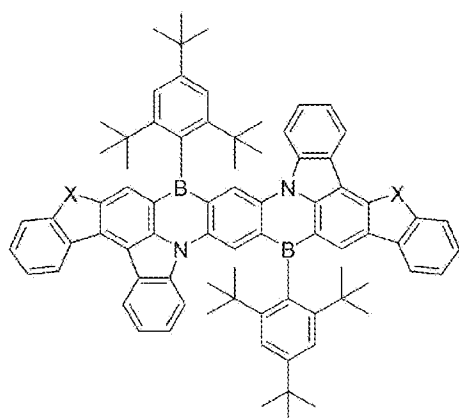
[0061] 以下において、一般式(5b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(5b)の化合物は、下記の一群の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

[化37]

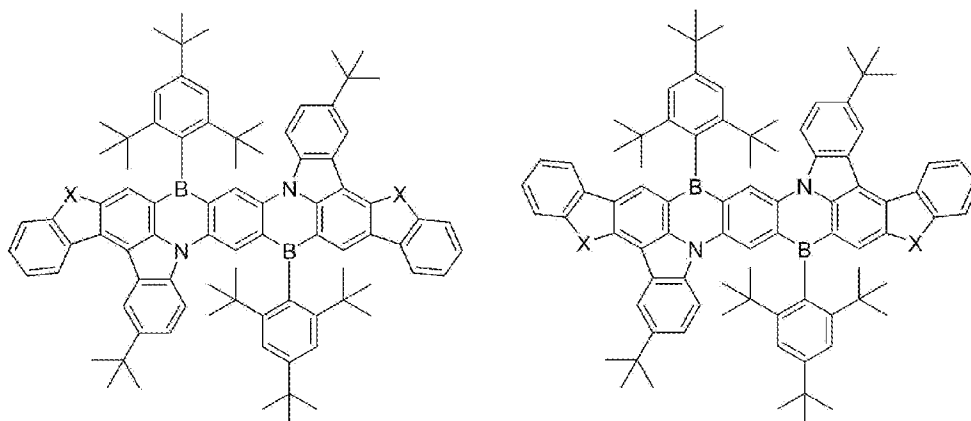


[0062] 以下において、一般式（5 b）で表される化合物の別の一群の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式（5 b）の化合物は、下記の一群の具体例により限定的に解釈されることはない。

[化38-1]



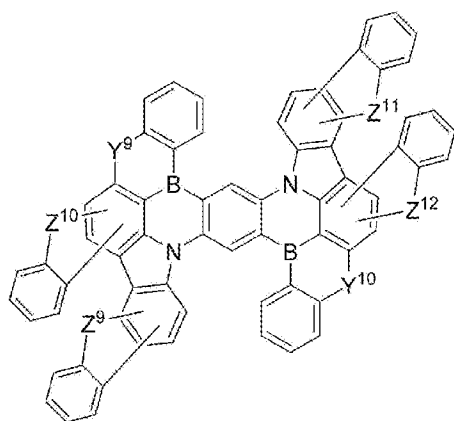
[化38-2]



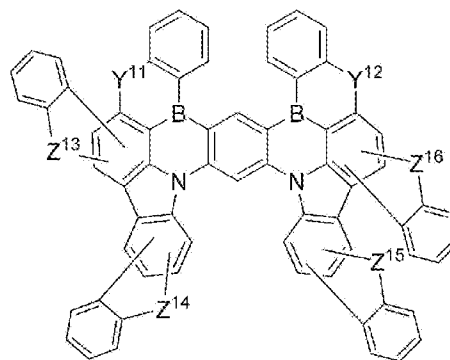
[0063] 一般式(1)に存在するカルバゾール部分構造を構成する2つのベンゼン環の両方に、ベンゾフラン環またはベンゾチオフェン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。そのような化合物の例として、下記の骨格(6a)を有する化合物と、下記の骨格(6b)を有する化合物を例示することができる。

[化39]

骨格(6a)



骨格(6b)



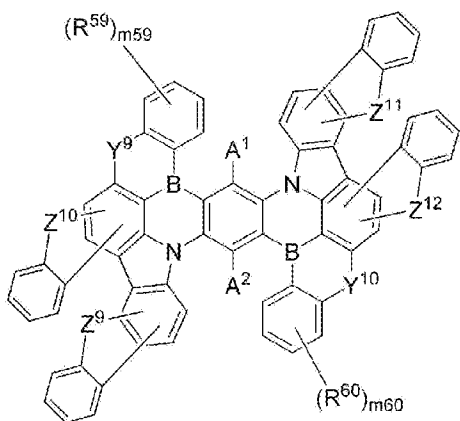
[0064] 骨格(6a)および(6b)において、 $Y^9 \sim Y^{12}$ は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 $Z^9 \sim Z^{16}$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 $Z^9 \sim Z^{16}$ は同一であることが好ましいが、異なっても構わない。本発明の一態様では、 $Z^9 \sim Z^{16}$ は酸素原子である。本発明の一態様では、 $Z^9 \sim Z^{16}$ は硫黄原子である。 $Y^9 \sim Y^{12}$ の詳細については、骨格(4a)および(4b)の対応する記載を参照することができる。本発明

の一態様では、骨格（6 a）および（6 b）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0065] 骨格（6 a）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（6 a）で表される化合物を例示することができる。

一般式（6 a）

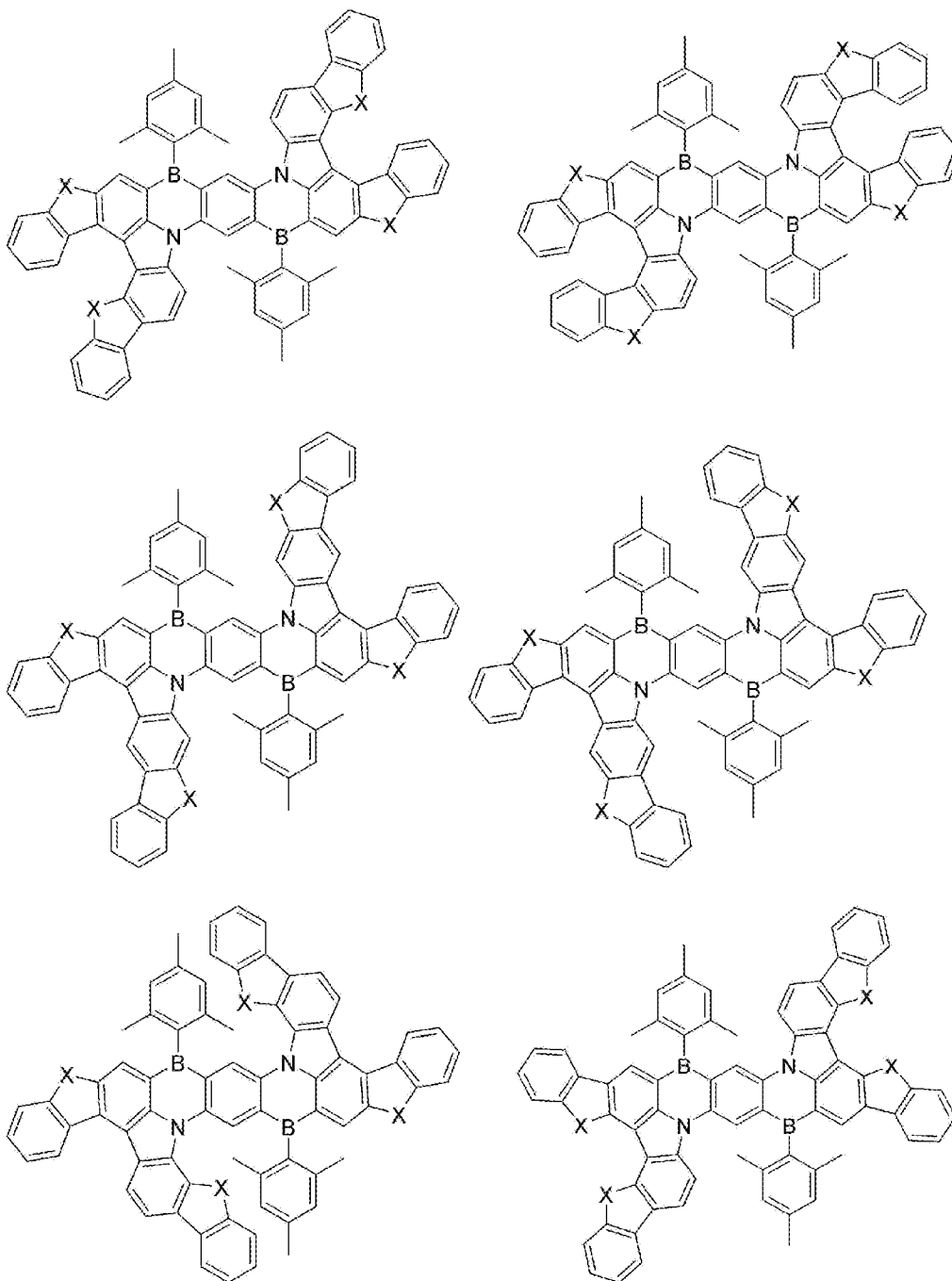
[化40]



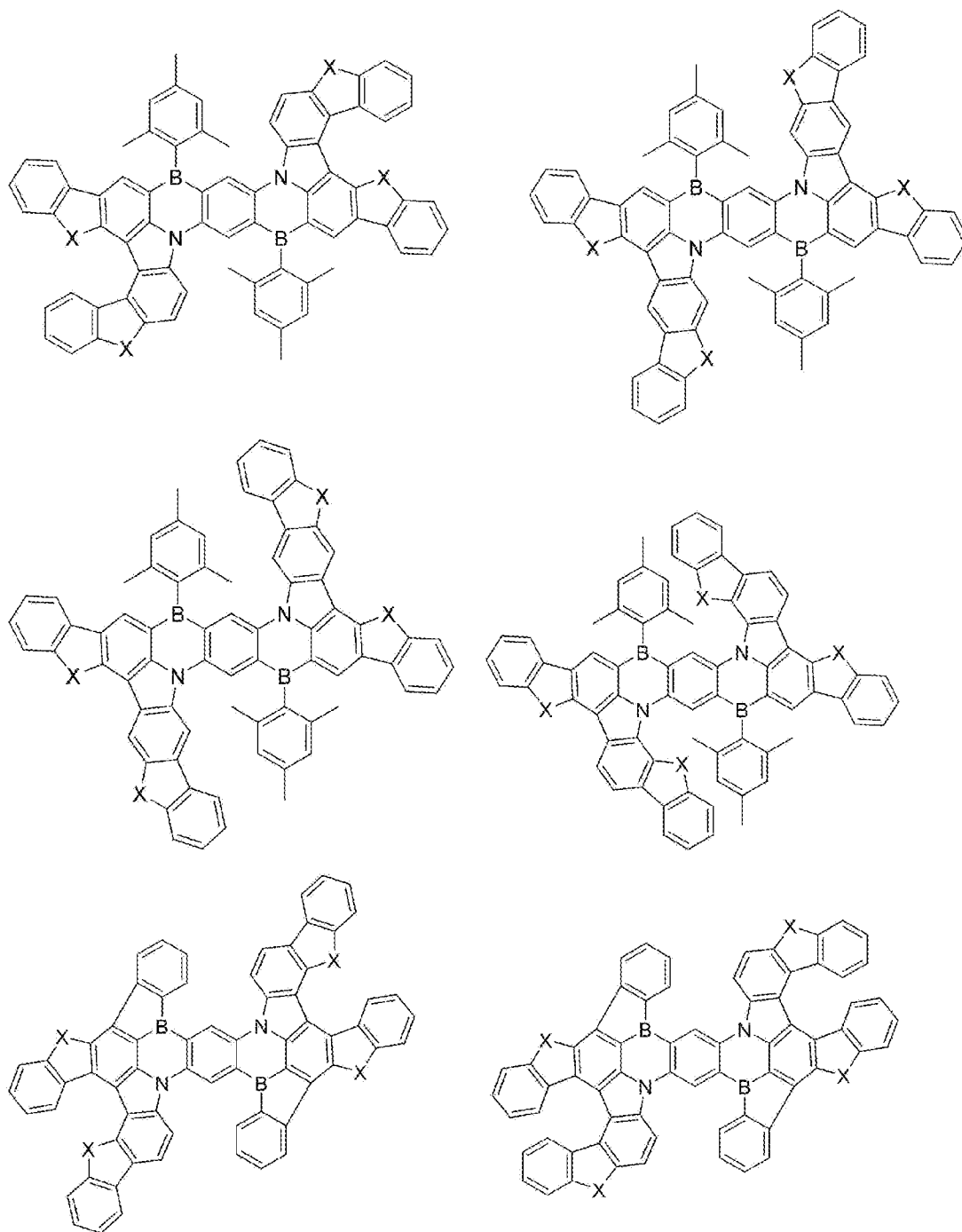
[0066] 一般式（6 a）において、 R^{59} および R^{60} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{59} および m_{60} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^9 および Y^{10} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Z^9 \sim Z^{12}$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^{59} 、 R^{60} 、 m_{59} 、 m_{60} 、 $Z^9 \sim Z^{12}$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式（5 a）の R^{55} 、 R^{56} 、 m_{55} 、 m_{56} 、 A^1 、 A^2 と、骨格（6 a）における $Z^9 \sim Z^{12}$ の記載を参照することができる。

[0067] 以下において、一般式（6 a）で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式（6 a）の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

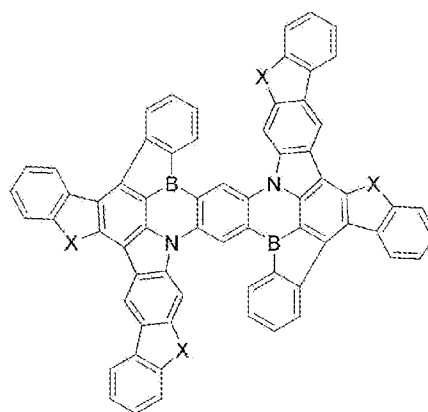
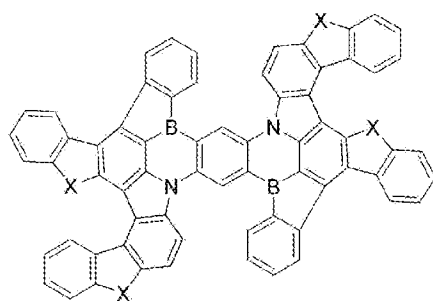
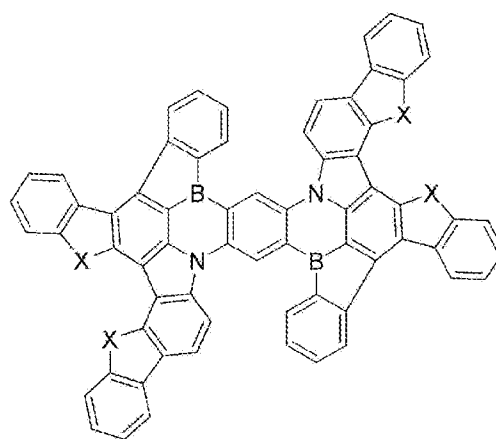
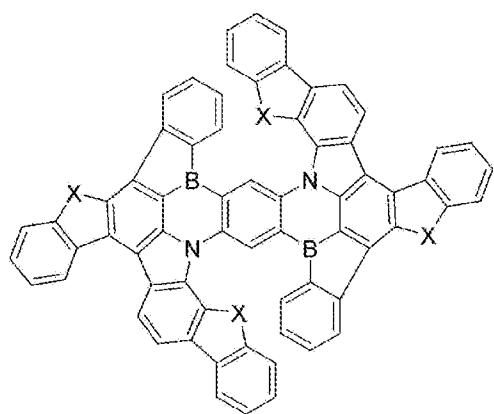
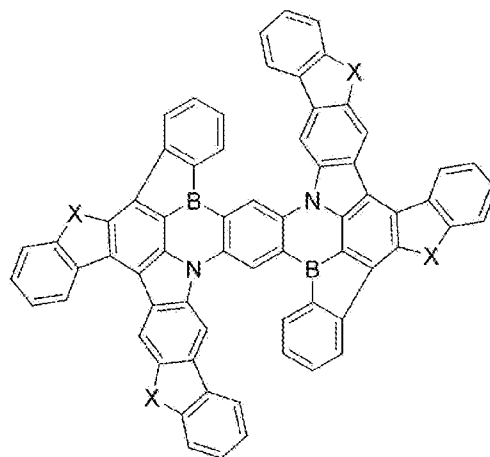
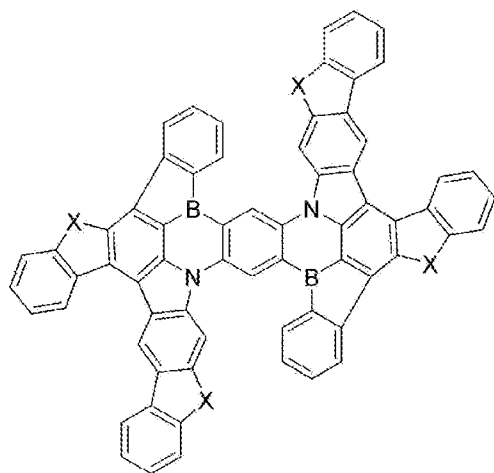
[化41-1]



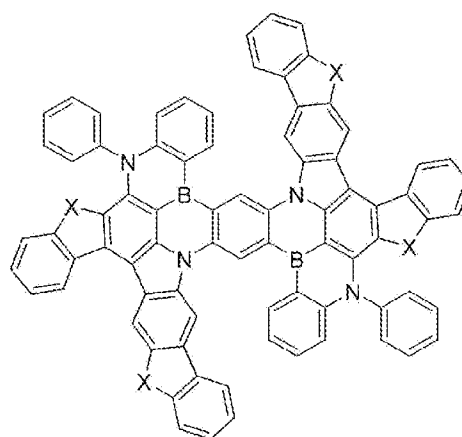
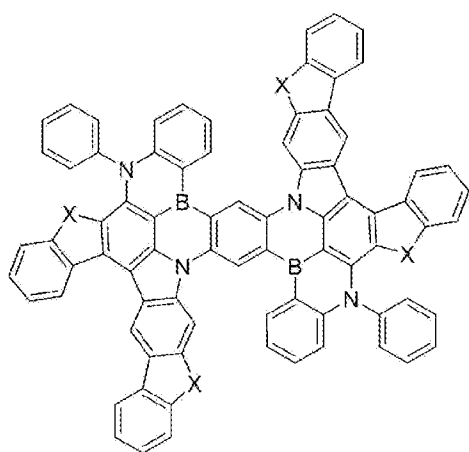
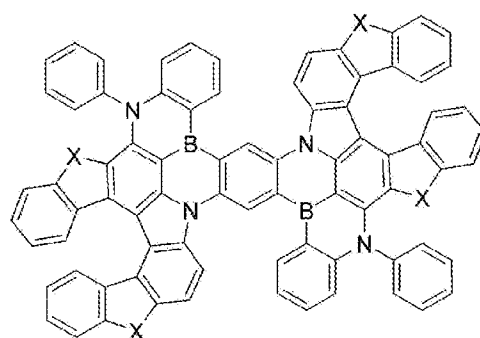
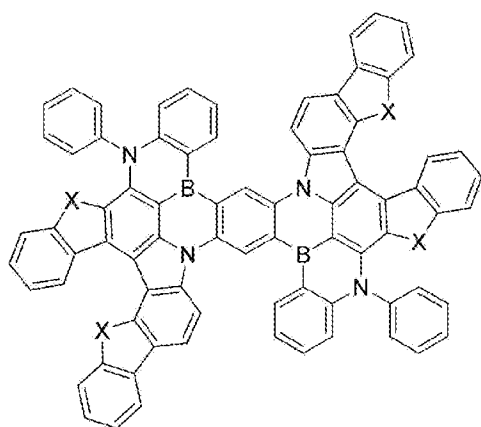
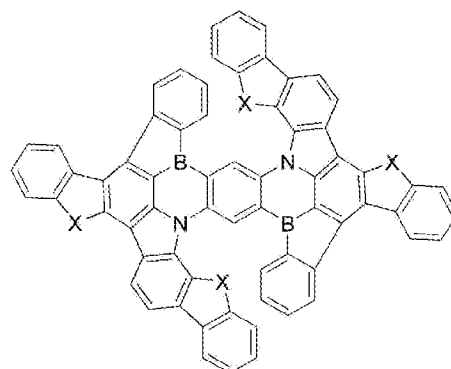
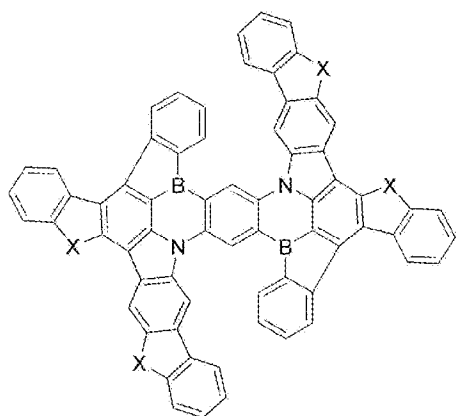
[化41-2]



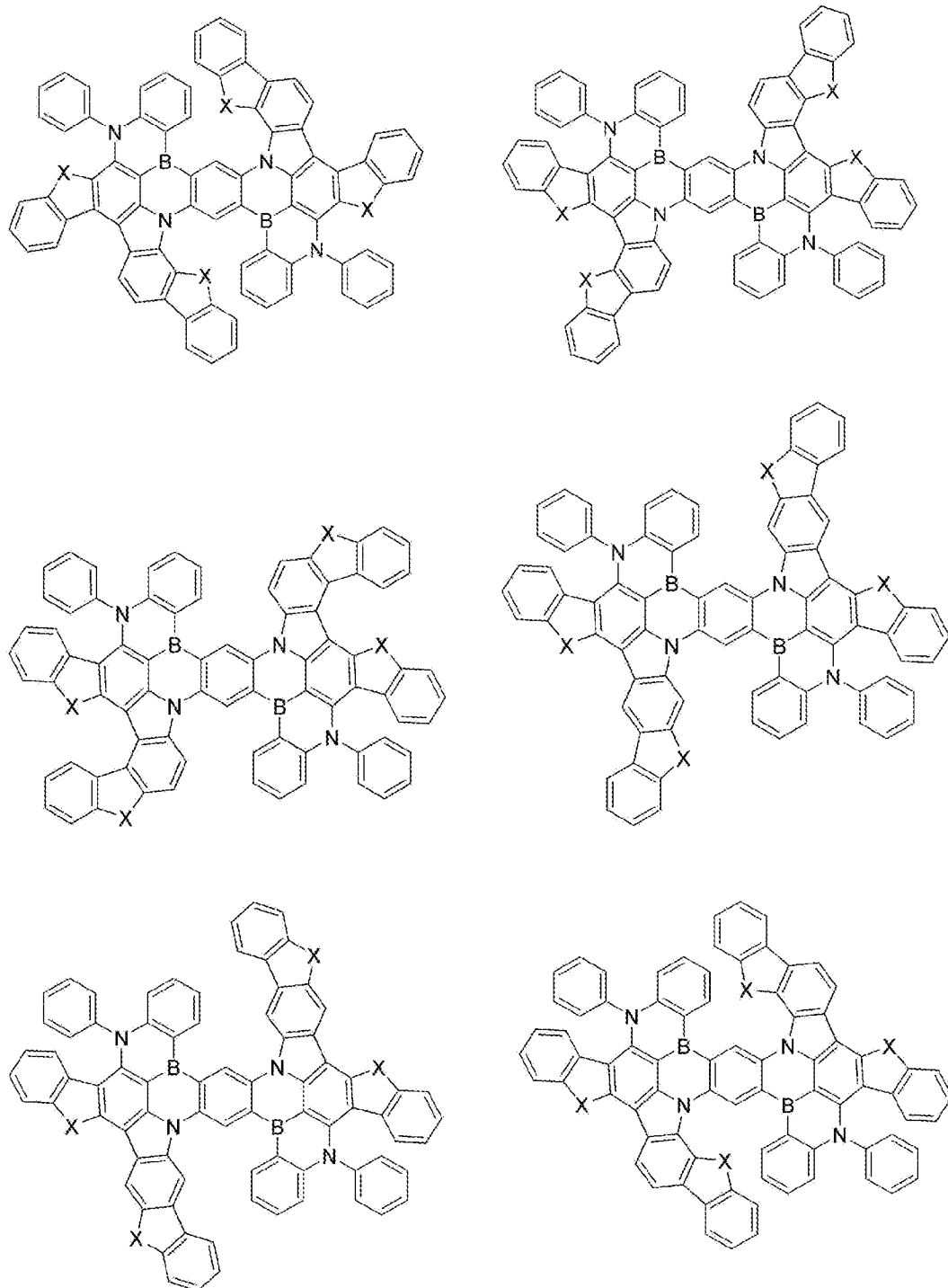
[化41-3]



[化41-4]



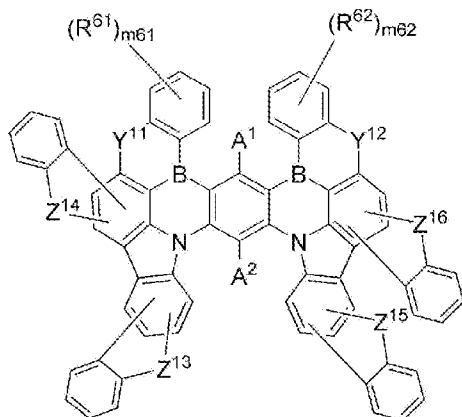
[化41-5]



[0068] 骨格 (6 b) を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式 (6 b) で表される化合物を例示することができる。

一般式 (6 b)

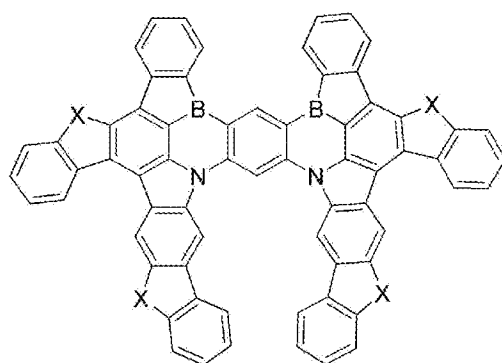
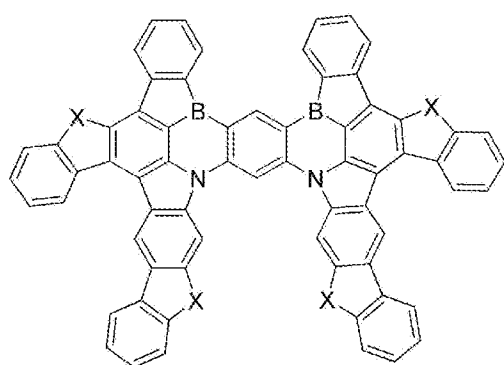
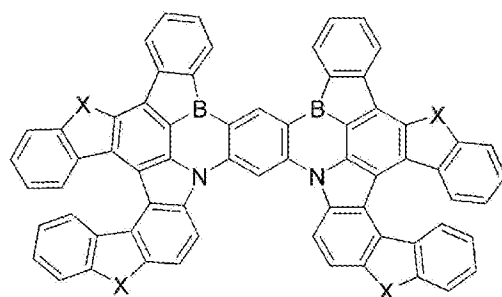
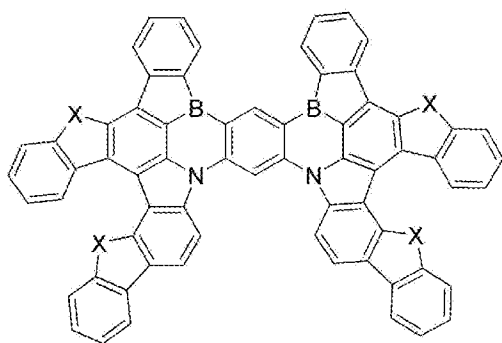
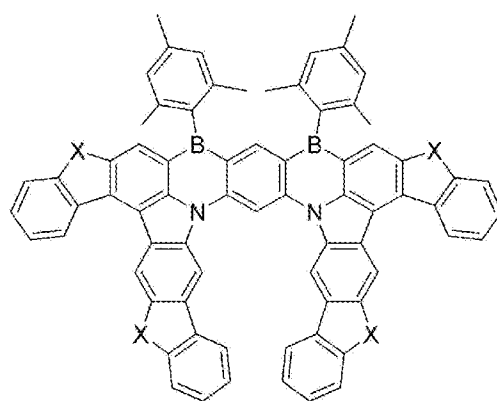
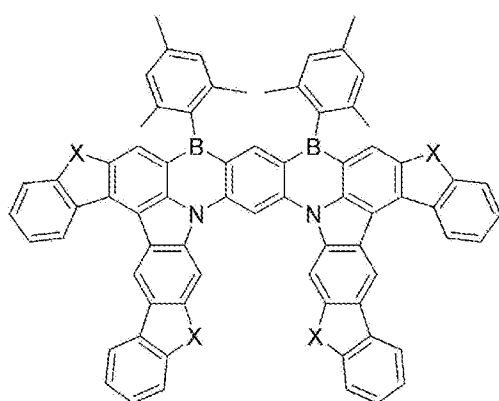
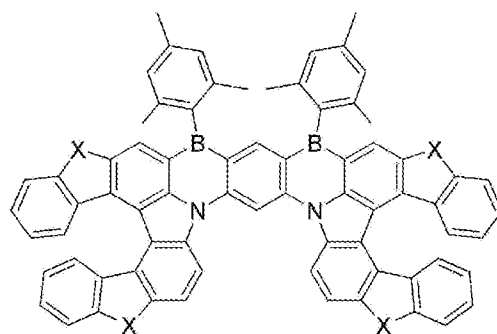
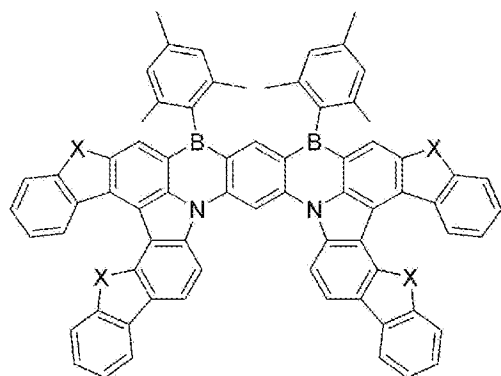
[化42]



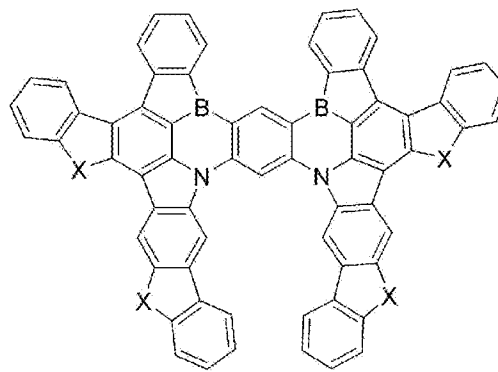
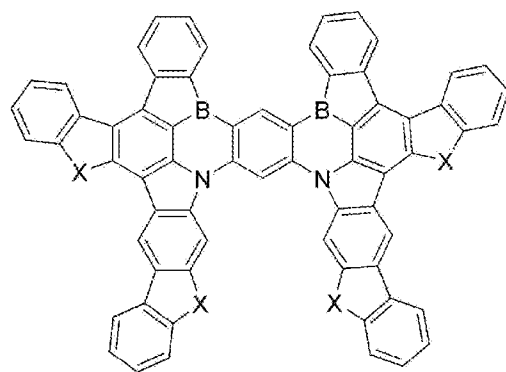
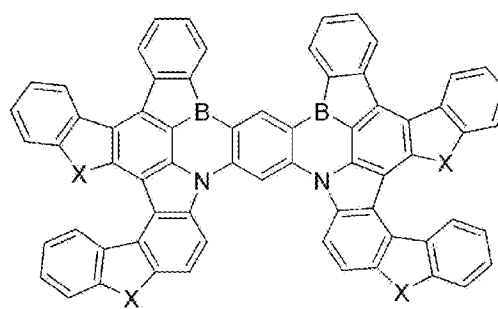
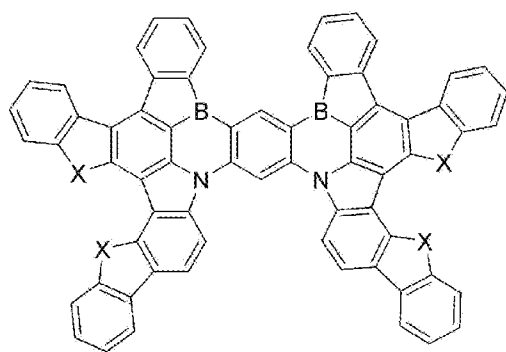
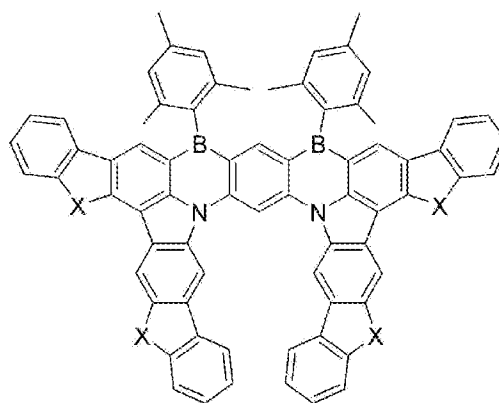
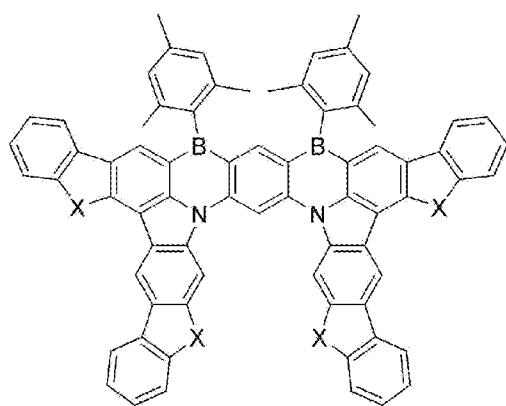
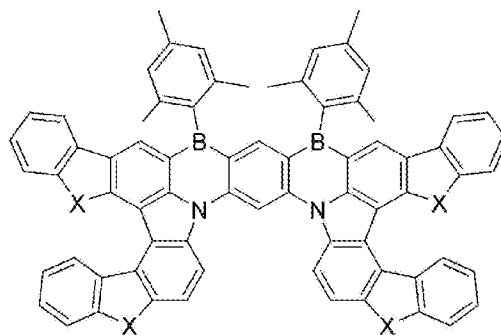
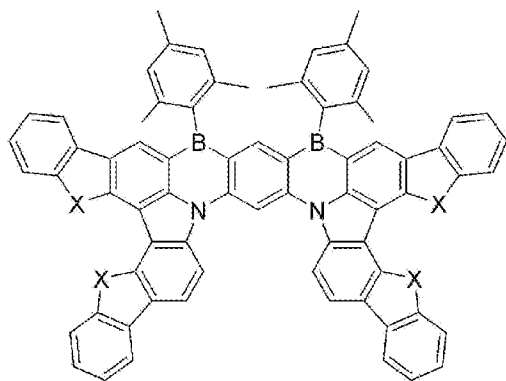
[0069] 一般式(6b)において、 R^{61} および R^{62} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{61} および m_{60} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^{11} および Y^{12} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Z^{13} \sim Z^{16}$ は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^{61} 、 R^{62} 、 m_{61} 、 m_{62} 、 $Z^{13} \sim Z^{16}$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(6a)の R^{59} 、 R^{60} 、 m_{59} 、 m_{60} 、 A^1 、 A^2 と、骨格(6b)における $Z^{13} \sim Z^{16}$ の記載を参照することができる。

[0070] 以下において、一般式(6b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(6b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

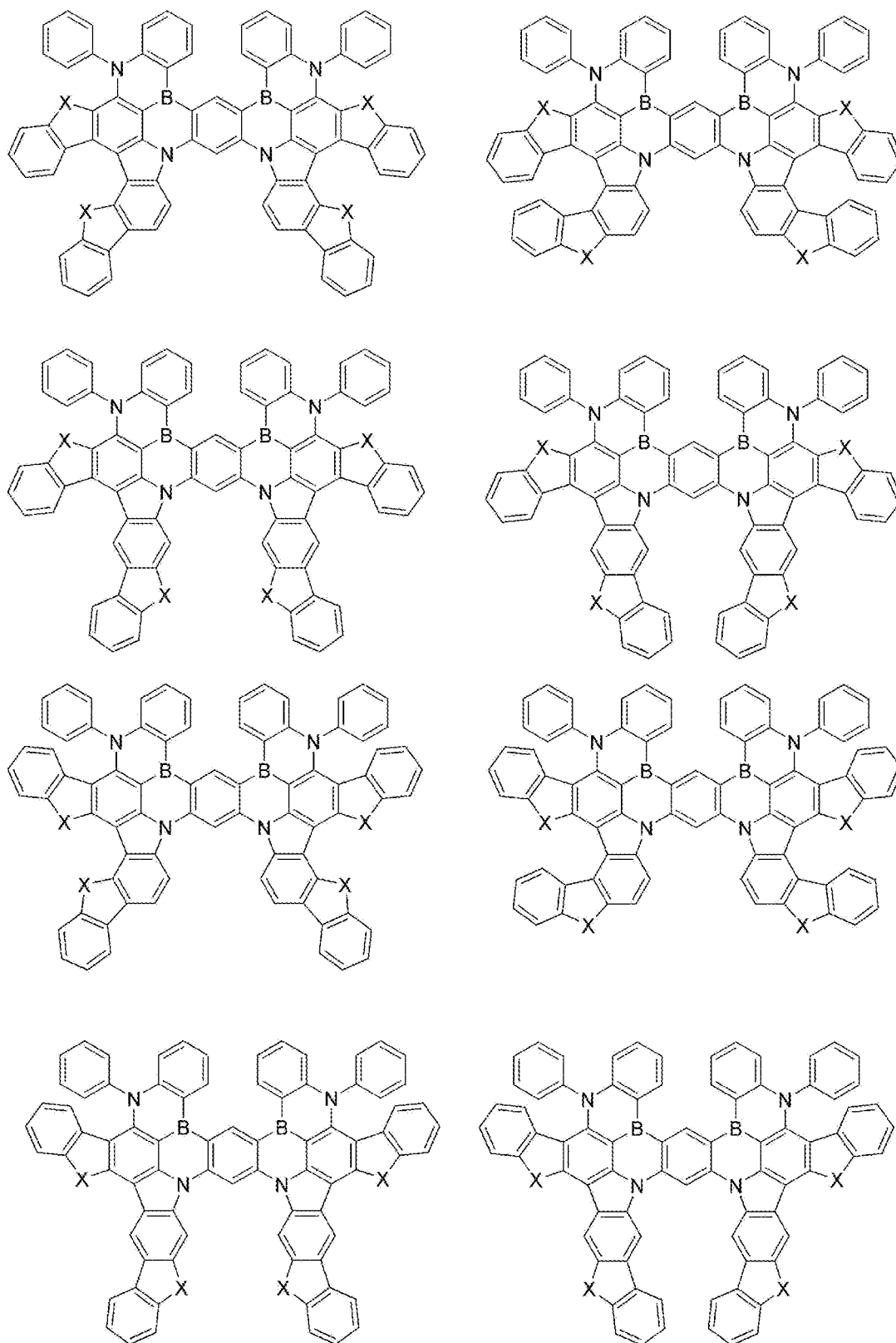
[化43-1]



[化43-2]



[化43-3]

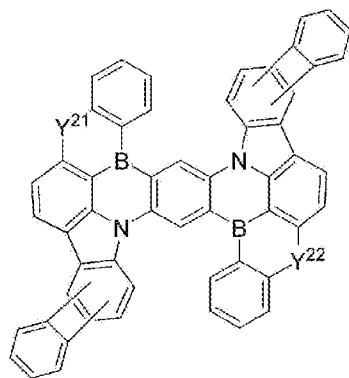


[0071] 一般式(1)に存在するカルバゾール部分構造を構成する2つのベンゼン

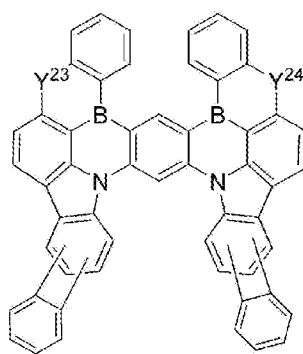
環のうちホウ素原子が直接結合していないベンゼン環に、ベンゼン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。そのような化合物の例として、下記の骨格（7 a）を有する化合物と、下記の骨格（7 b）を有する化合物を例示することができる。

[化44]

骨格（7 a）



骨格（7 b）

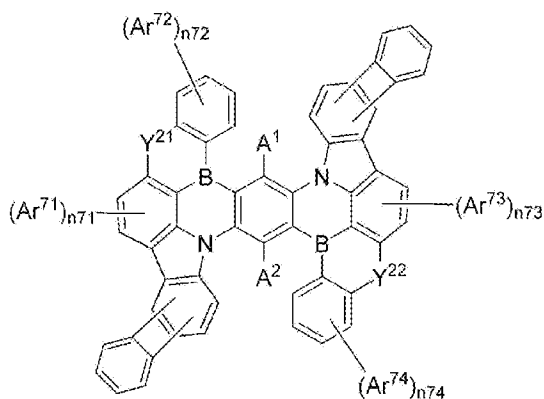


[0072] 骨格（7 a）および（7 b）において、 $Y^{21} \sim Y^{24}$ は、各々独立に水素原子2個、単結合またはN（ R^{27} ）を表す。 $Y^{21} \sim Y^{24}$ の詳細については、骨格（4 a）および（4 b）の $Y^1 \sim Y^4$ の記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格（7 a）および（7 b）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0073] 骨格（7 a）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（7 a）で表される化合物を例示することができる。

一般式（7 a）

[化45]

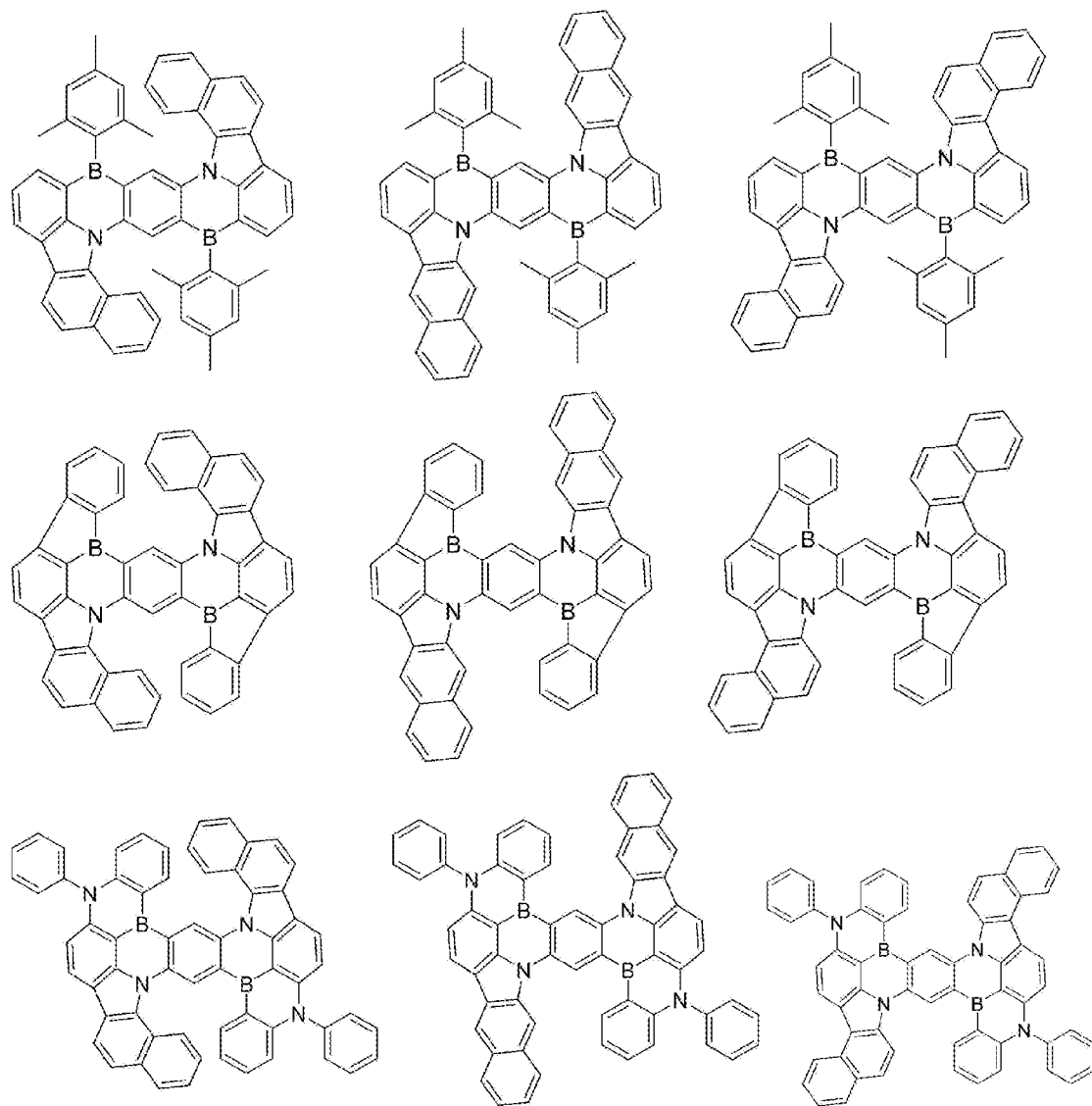


[0074] 一般式 (7 a) において、 $A r^{71} \sim A r^{74}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 n_{71} および n_{73} は各々独立に 0～2 の整数を表す。 n_{72} および n_{74} は各々独立に 0～4 の整数を表す。 Y^{21} および Y^{22} は、各々独立に水素原子 2 個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

本発明の一態様では、 $n_{71} \sim n_{74}$ は 0～2 の整数である。本発明の一態様では、 n_{71} と n_{73} は同じ数であり、 n_{72} と n_{74} は同じ数である。 $n_{71} \sim n_{74}$ が同じ数でもよい。例えば、 $n_{71} \sim n_{74}$ は 0 であってもよい。 $n_{71} \sim n_{74}$ はすべてが 1 であってもよい。また、例えば、 n_{71} と n_{73} は 0 であってもよく、 n_{72} と n_{74} は 1 であってもよい。 $A r^{71} \sim A r^{74}$ 、 A^1 、 A^2 の好ましい基については、一般式 (1 a) の $A r^1 \sim A r^4$ 、 A^1 、 A^2 の対応する記載を参照することができる。

[0075] 以下において、一般式 (7 a) で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式 (7 a) の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

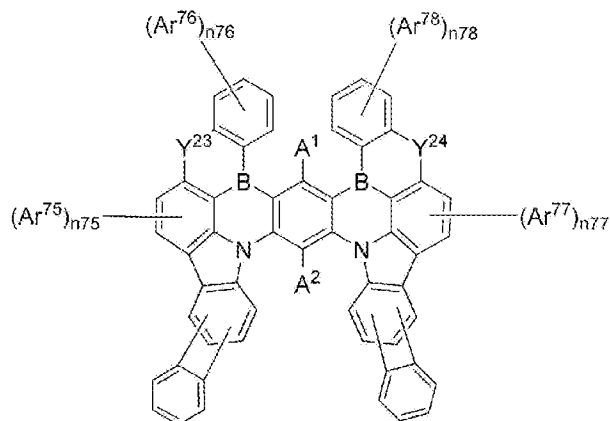
[化46]



[0076] 骨格(7b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(7b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(7b)

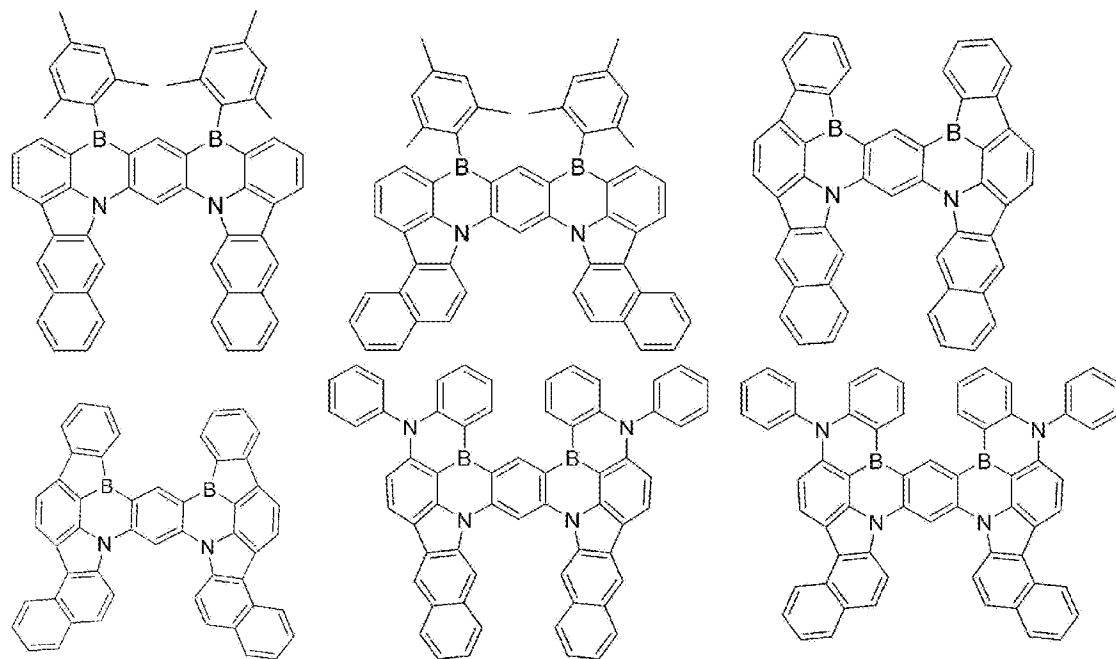
[化47]



[0077] 一般式(7b)において、 $Ar^{75} \sim Ar^{78}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 n_{75} および n_{77} は各々独立に0～2の整数を表す。 n_{76} および n_{78} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^{23} および Y^{24} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $n_{75} \sim n_{78}$ の詳しい説明については、順に、一般式(7a)の $n_{71} \sim n_{74}$ の記載を参照することができる。 $Ar^{75} \sim Ar^{78}$ の好ましい基については、一般式(1a)の $Ar^1 \sim Ar^4$ の対応する記載を参照することができる。

[0078] 以下において、一般式(7b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(7b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

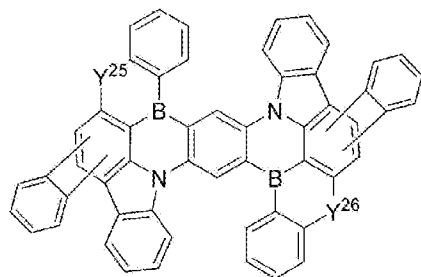
[化48]



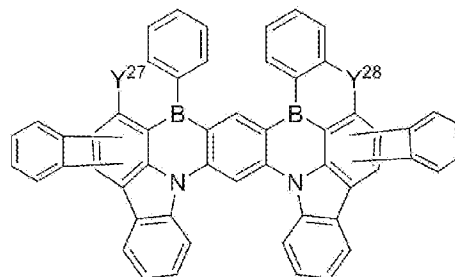
[0079] 一般式（１）に存在するカルバゾール部分構造を構成する２つのベンゼン環のうちホウ素原子が直接結合しているベンゼン環に、ベンゼン環が縮合した化合物を好ましく挙げることができる。そのような化合物の例として、下記の骨格（８ a）を有する化合物と、下記の骨格（８ b）を有する化合物を例示することができる。

[化49]

骨格（８ a）



骨格（８ b）

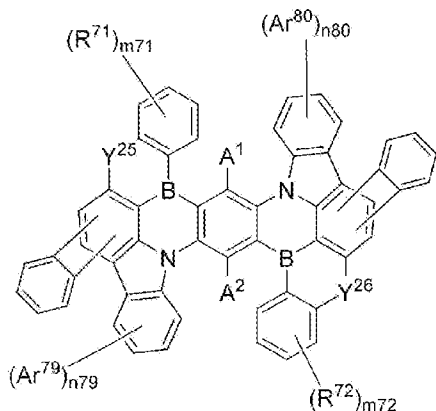


[0080] 骨格（８ a）および（８ b）において、 $Y^{25} \sim Y^{28}$ は、各々独立に水素原子２個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 $Y^{25} \sim Y^{28}$ の詳細については、骨格（４ a）および（４ b）の対応する記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格（８ a）および（８ b）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0081] 骨格(8a)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(8a)で表される化合物を例示することができる。

一般式(8a)

[化50]

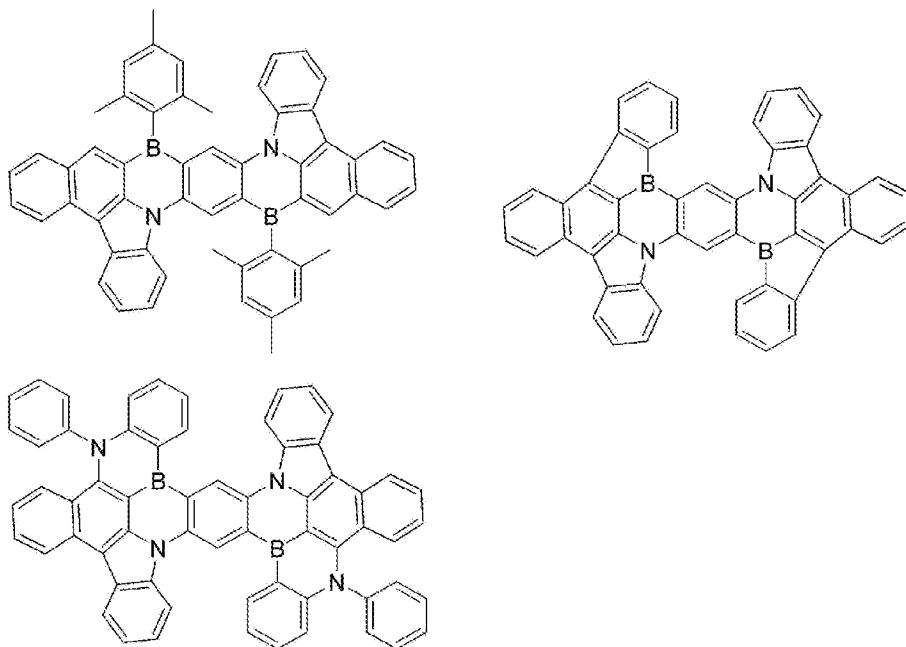


[0082] 一般式(8a)において、 Ar^{79} および Ar^{80} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 R^{71} および R^{72} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{71} および m_{72} は各々独立に0~4の整数を表す。 n_{79} および n_{80} は各々独立に0~4の整数を表す。 Y^{25} および Y^{26} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

本発明の一態様では、 n_{79} および n_{80} は0~2の整数である。本発明の一態様では、 n_{79} と n_{80} は同じ数であり、例えばいずれも0であってもよいし、いずれも1であってもよい。本発明の一態様では、 m_{71} および m_{72} は0~2の整数である。本発明の一態様では、 m_{71} および m_{72} は同じ数であり、例えばいずれも0であってもよいし、いずれも1であってもよい。 Ar^{79} 、 Ar^{80} 、 R^{71} 、 R^{72} 、 A^1 、 A^2 の好ましい基については、一般式(1a)の Ar^1 、 Ar^3 、 R^{41} 、 R^{42} 、 A^1 、 A^2 の対応する記載を参照することができる。

[0083] 以下において、一般式（８ a）で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式（８ a）の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

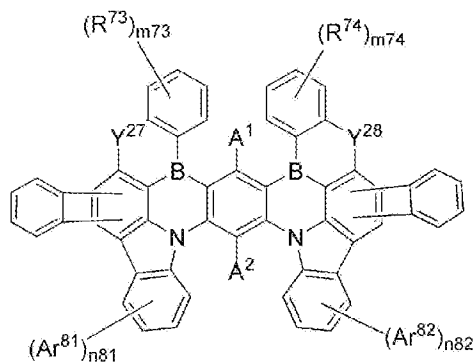
[化51]



[0084] 骨格（８ b）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（８ b）で表される化合物を例示することができる。

一般式（８ b）

[化52]



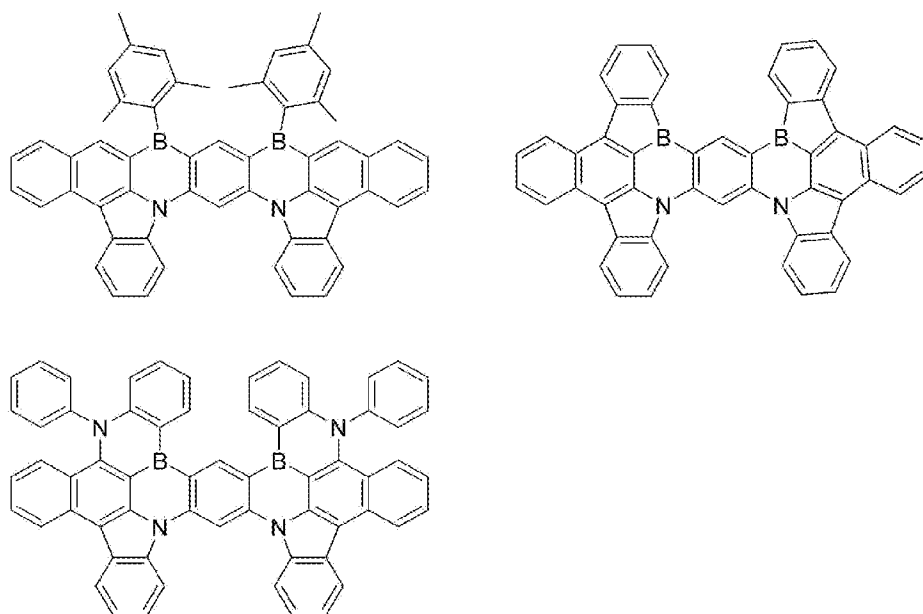
[0085] 一般式（８ b）において、 Ar^{81} および Ar^{82} は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール

基を好ましく選択することができる。 R^{73} および R^{74} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{73} および m_{74} は各々独立に0～4の整数を表す。 n_{81} および n_{82} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^{27} および Y^{28} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

m_{73} 、 m_{74} 、 n_{81} 、 n_{82} の詳しい説明については、一般式(8a)の m_{71} 、 m_{72} 、 n_{79} 、 n_{80} の記載を参照することができる。 Ar^{81} 、 Ar^{82} 、 R^{73} 、 R^{74} 、 A^1 、 A^2 の好ましい基については、一般式(1a)の Ar^1 、 Ar^3 、 R^{41} 、 R^{42} 、 A^1 、 A^2 の対応する記載を参照することができる。

[0086] 以下において、一般式(8b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(8b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

[化53]

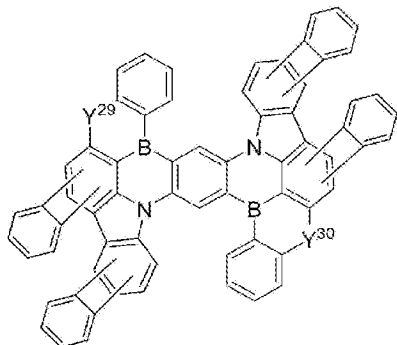


[0087] 一般式(1)に存在するカルバゾール部分構造を構成する2つのベンゼン環の両方に、ベンゼン環が縮合した化合物を好ましく挙げるができる。そのような化合物の例として、下記の骨格(9a)を有する化合物と、下記

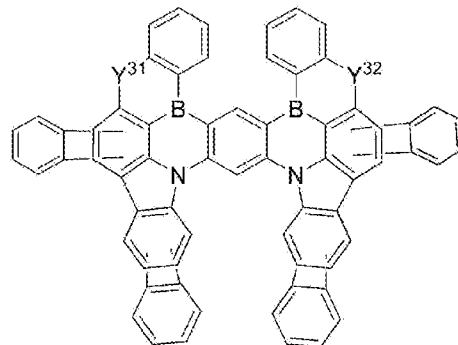
の骨格（9 b）を有する化合物を例示することができる。

[化54]

骨格（9 a）



骨格（9 b）

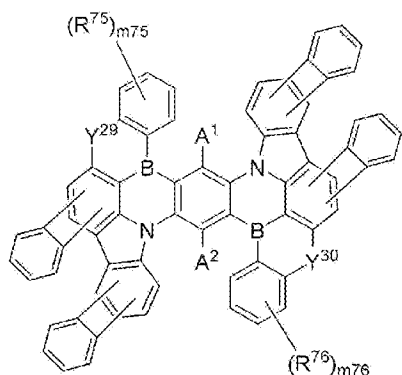


[0088] 骨格（9 a）および（9 b）において、 $Y^{29} \sim Y^{32}$ は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 $Y^{29} \sim Y^{32}$ の詳細については、骨格（4 a）および（4 b）の対応する記載を参照することができる。本発明の一態様では、骨格（9 a）および（9 b）における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0089] 骨格（9 a）を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式（9 a）で表される化合物を例示することができる。

一般式（9 a）

[化55]

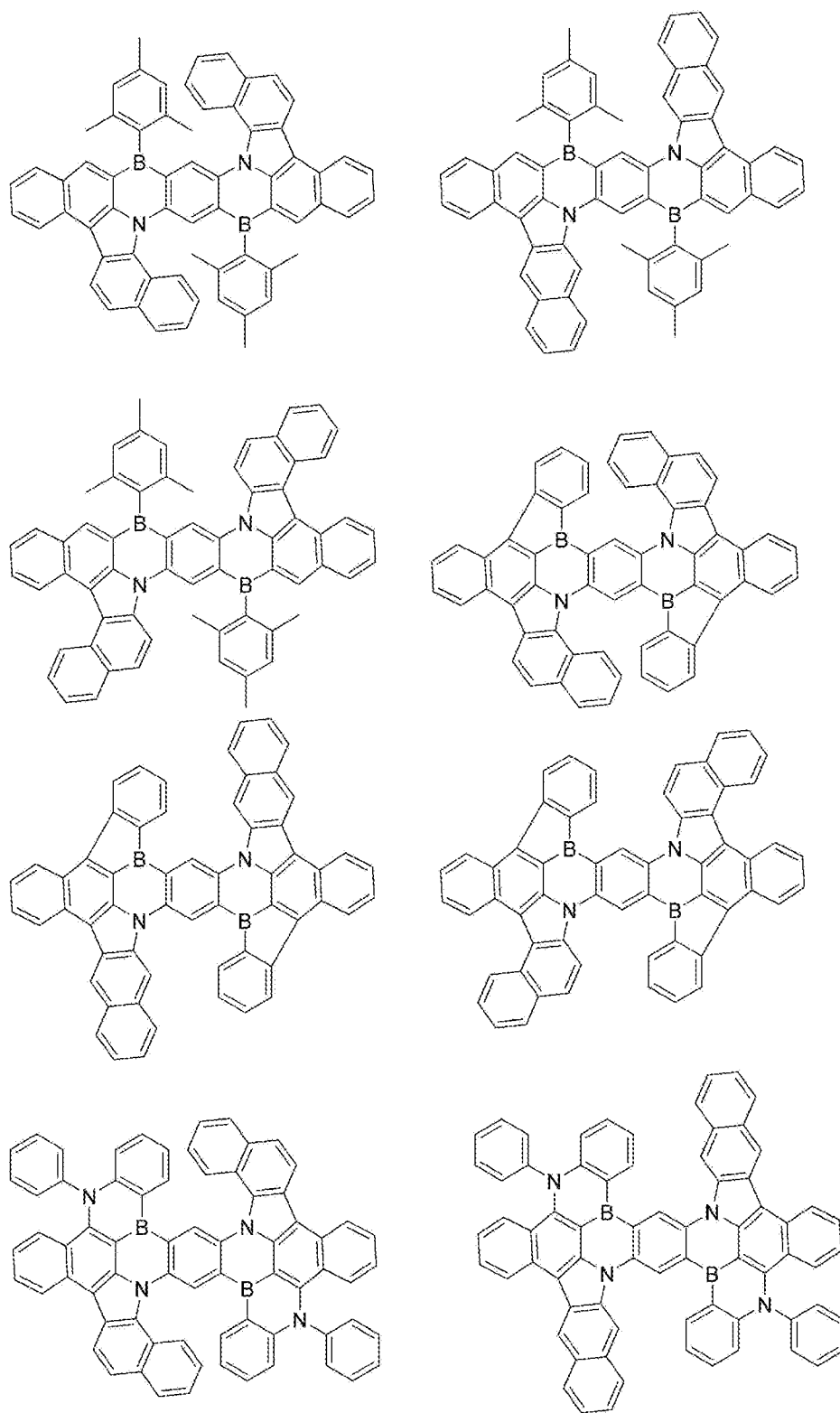


[0090] 一般式（9 a）において、 R^{75} および R^{76} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_{75} および m_{76} は各々独立に0～4の整数を表す。 Y^{29} および Y^{30} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 A^1 、 A^2 は、

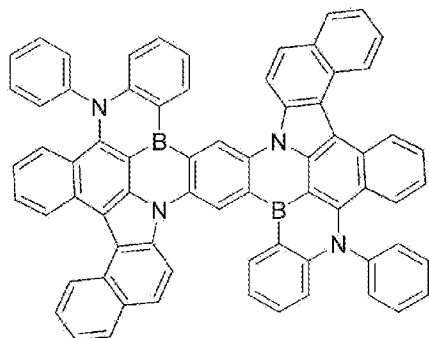
各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^{75} 、 R^{76} 、 m^{75} 、 m^{76} 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(8a)の R^{71} 、 R^{72} 、 m^{71} 、 m^{72} 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

[0091] 以下において、一般式(9a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(9a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

[化56-1]



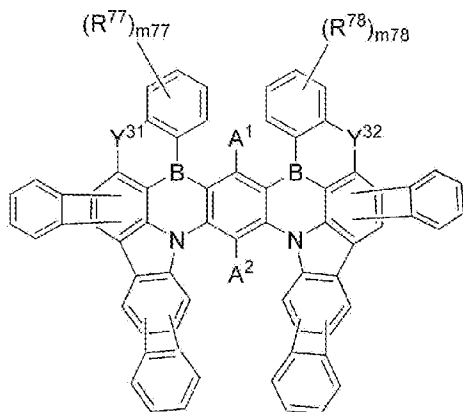
[化56-2]



[0092] 骨格(9b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(9b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(9b)

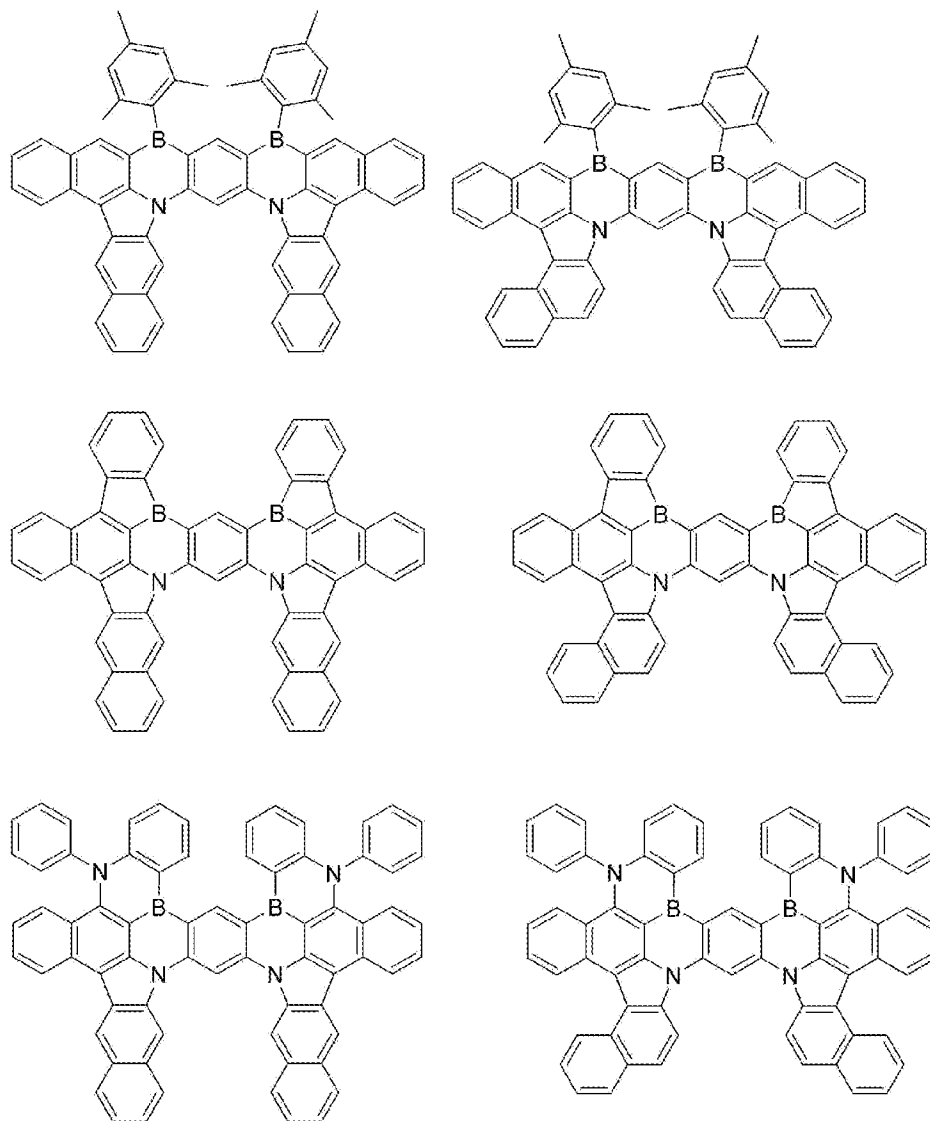
[化57]



[0093] 一般式(9b)において、 R^{77} および R^{78} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 $m77$ および $m78$ は各々独立に0~4の整数を表す。 Y^{31} および Y^{32} は、各々独立に水素原子2個、単結合または $N(R^{27})$ を表す。 R^{27} は、水素原子、重水素原子または置換基を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^{77} 、 R^{78} 、 $m77$ 、 $m78$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式(8a)の R^{71} 、 R^{72} 、 $m71$ 、 $m72$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。

[0094] 以下において、一般式(9b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(9b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

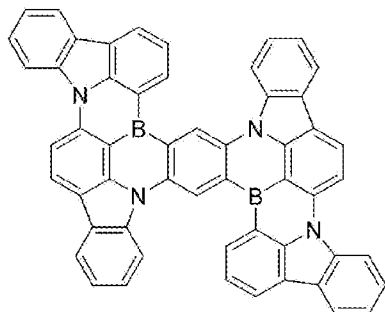
[化58]



[0095] 一般式(1)で表される化合物としては、分子内に4つ以上のカルバゾール部分構造を含む化合物も好ましい。そのような化合物の例として、下記の骨格(10)を有する化合物を例示することができる。

骨格(10)

[化59]

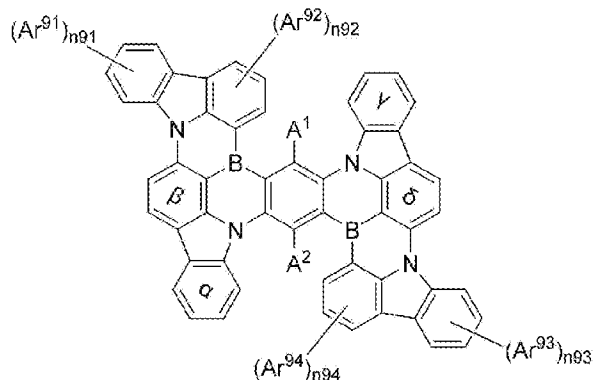


[0096] 骨格(10)における各水素原子は、重水素原子または置換基に置換されていてもよい。また、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していてもよい。詳細については、一般式(1)の対応する $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 の記載を参照することができる。骨格(10)に含まれているカルバゾール部分構造を構成するベンゼン環の少なくとも1つの水素原子は、置換もしくは無置換のアリール基で置換されている。本発明の一態様では、骨格(10)における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0097] 骨格(10)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(10)で表される化合物を例示することができる。

一般式(10)

[化60]



[0098] 一般式(10)において、 $Ar^{91} \sim Ar^{94}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を

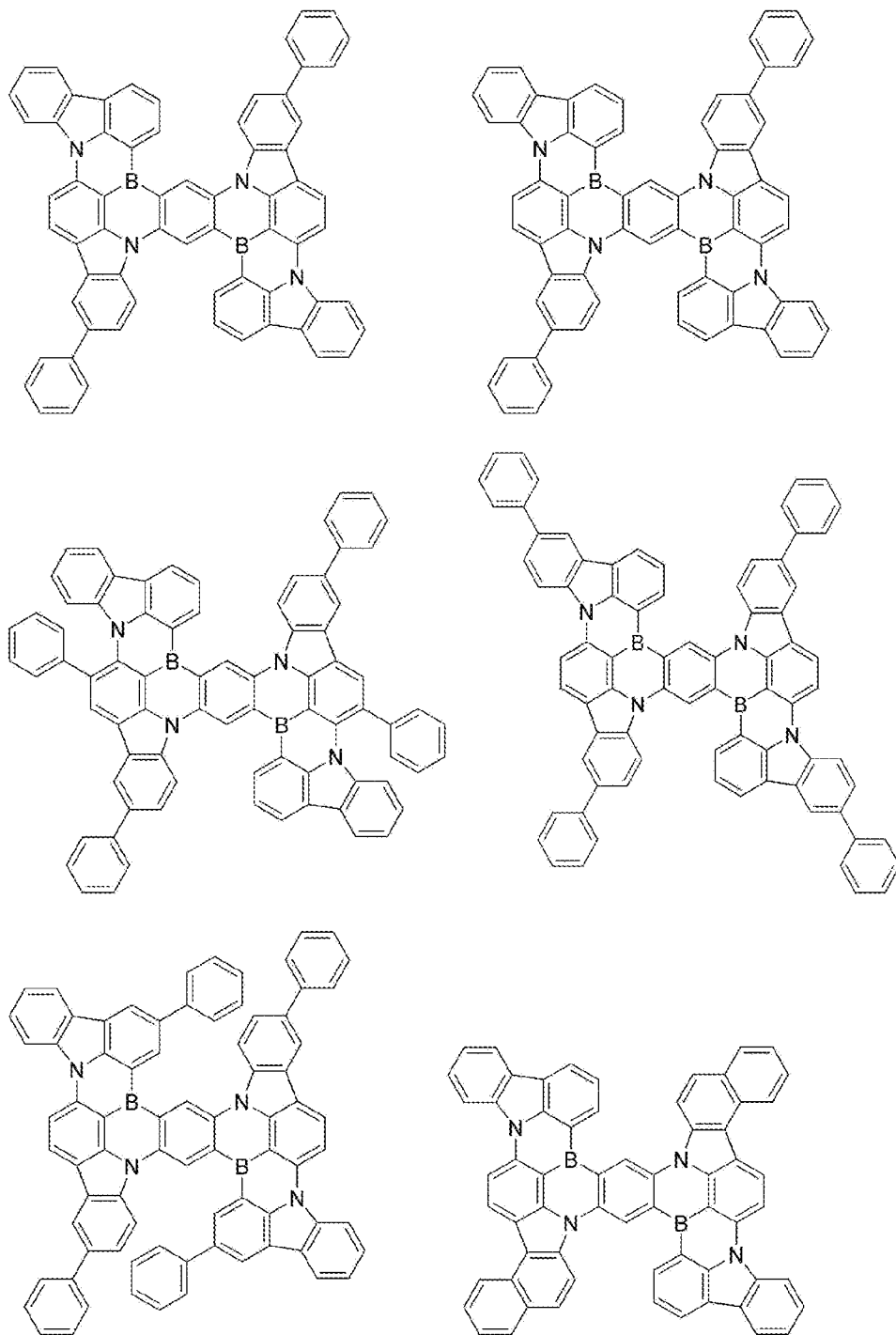
好ましく選択することができる。 n_{91} および n_{93} は各々独立に0～4の整数を表し、 n_{92} および n_{94} は各々独立に0～3の整数を表す。 α 環、 β 環、 γ 環、 δ 環は置換されていてもよく、少なくとも1つの環は、置換もしくは無置換のアリール基で置換されているか、置換されていてもよいベンゼン環が縮合しているか、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環または置換もしくは無置換のチオフェンのチオフェン環が縮合している。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

本発明の一態様では、 $n_{91} \sim n_{94}$ は0～2の整数である。本発明の一態様では、 n_{91} と n_{93} は同じ数であり、 n_{92} と n_{94} は同じ数である。 $n_{91} \sim n_{94}$ はすべてが同じ数であってもよく、例えばいずれも0であってもよいし、いずれも1であってもよい。 $A_{r^{91}} \sim A_{r^{94}}$ の好ましい基については、一般式(1a)の $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ の対応する記載を参照することができる。本発明の一態様では、 α 環と γ 環は同じ置換基を有しているか、同じ縮合構造を有しており、 β 環と δ 環は同じ置換基を有しているか、同じ縮合構造を有している。本発明の一態様では、 β 環と δ 環がともに置換もしくは無置換のアリール基で置換されているか、置換されていてもよいベンゼン環が縮合しているか、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環または置換もしくは無置換のチオフェンのチオフェン環が縮合している。本発明の一態様では、 α 環と γ 環がともに置換もしくは無置換のアリール基で置換されているか、置換されていてもよいベンゼン環が縮合しているか、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環または置換もしくは無置換のチオフェンのチオフェン環が縮合している。本発明の一態様では、 α 環、 β 環、 γ 環、 δ 環のすべてが、置換もしくは無置換のアリール基で置換されているか、置換されていてもよいベンゼン環が縮合しているか、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環または置換もしくは無置換のチオフェンのチオフェン環が縮合している。 A^1 および A^2 の説明と好ましい範囲については、一般式(1)の対応する記載を参照することができる。

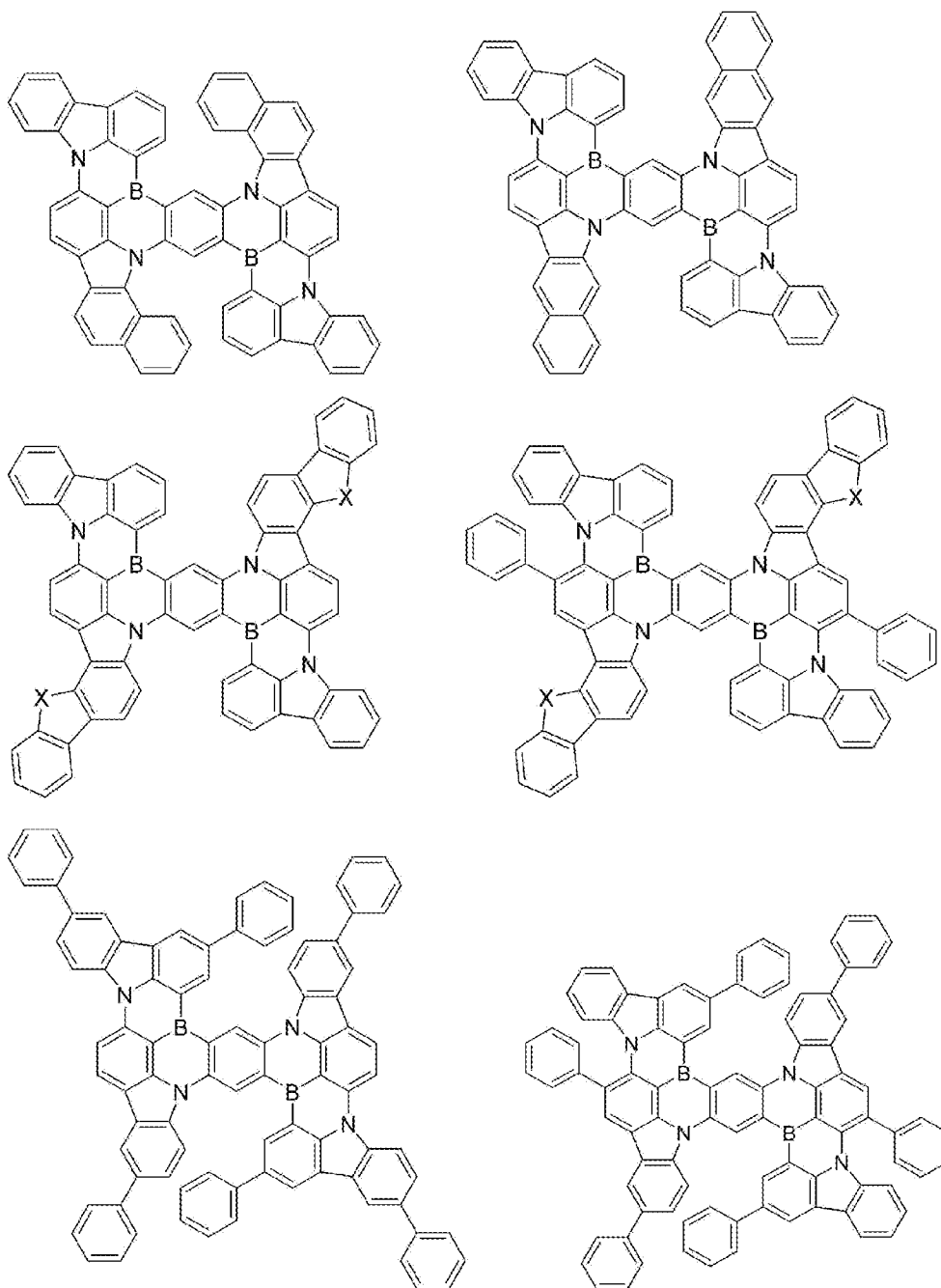
[0099] 以下において、一般式(10)で表される化合物の具体例を挙げる。本発

明で用いることができる一般式（１０）の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

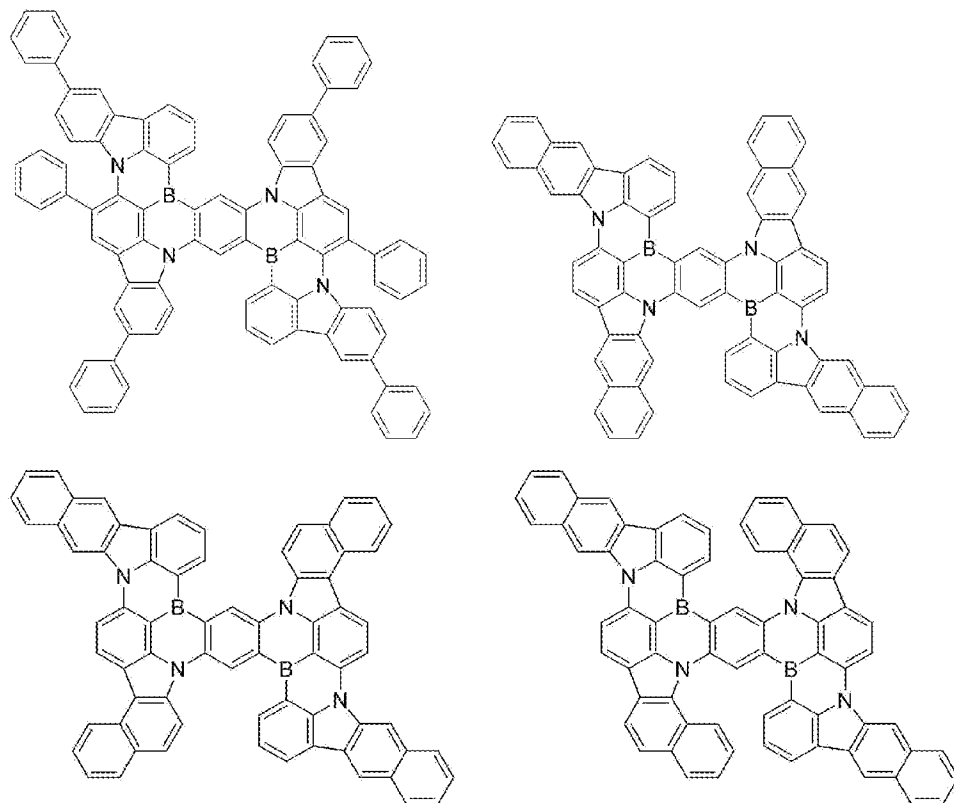
[化61-1]



[化61-2]



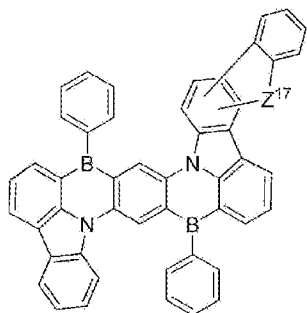
[化61-3]



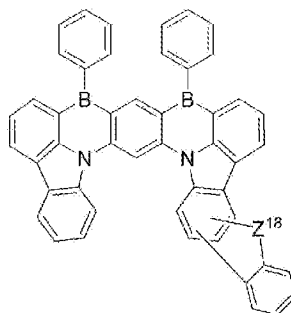
[0100] 一般式(1)で表される化合物は、骨格が対称性を有していないものであってもよい。例えば、下記骨格(11a)や下記骨格(11b)のような非対称骨格を有する化合物であってもよい。

[化62]

骨格(11a)



骨格(11b)

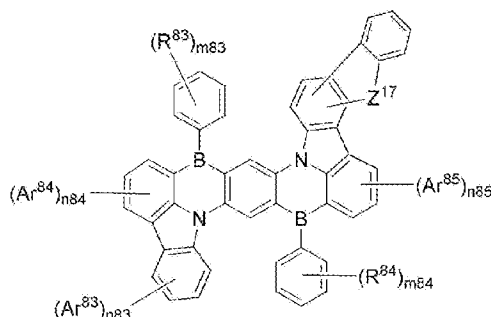


[0101] 骨格(11a)および(11b)において、 Z^{17} および Z^{18} は、各々独立に酸素原子または硫黄原子を表す。本発明の一態様では、骨格(11a)および(11b)における各水素原子は、隣接する水素原子とともに連結基に置換されて環状構造を形成していない。

[0102] 骨格(11a)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(11a)で表される化合物を例示することができる。

一般式(11a)

[化63]

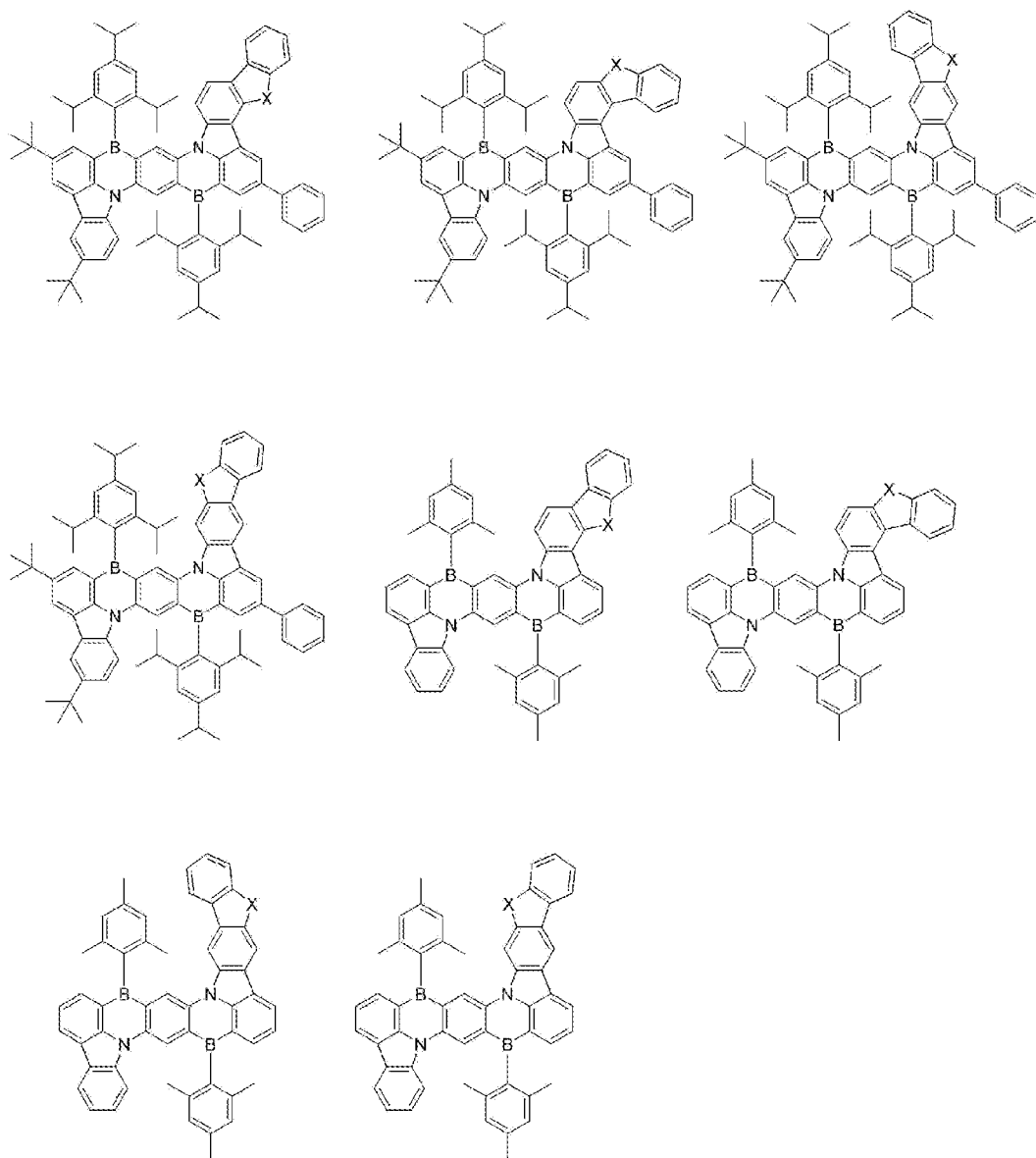


[0103] 一般式(11a)において、 $Ar^{83} \sim Ar^{85}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 R^{83} および R^{84} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 Z^{17} は酸素原子または硫黄原子を表す。 m_{83} および m_{84} は各々独立に0～5の整数を表す。 n_{83} は0～4の整数を表し、 n_{84} および n_{85} は各々独立に0～3の整数を表す。

$Ar^{83} \sim Ar^{85}$ 、 R^{83} 、 R^{84} 、 m_{83} 、 m_{84} 、 $n_{83} \sim n_{85}$ の詳しい説明と好ましい範囲については、一般式(1a)の Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^4 、 R^{41} 、 R^{42} 、 m_1 、 m_2 、 n_1 、 n_2 、 n_4 の記載を参照することができる。

[0104] 以下において、一般式(11a)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(11a)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。以下の具体例においては、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

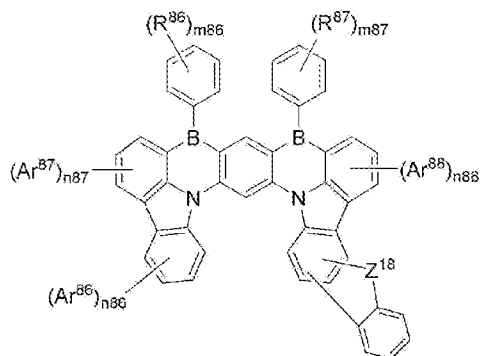
[化64]



[0105] 骨格(11b)を有する化合物の好ましい一群として、下記一般式(11b)で表される化合物を例示することができる。

一般式(11b)

[化65]

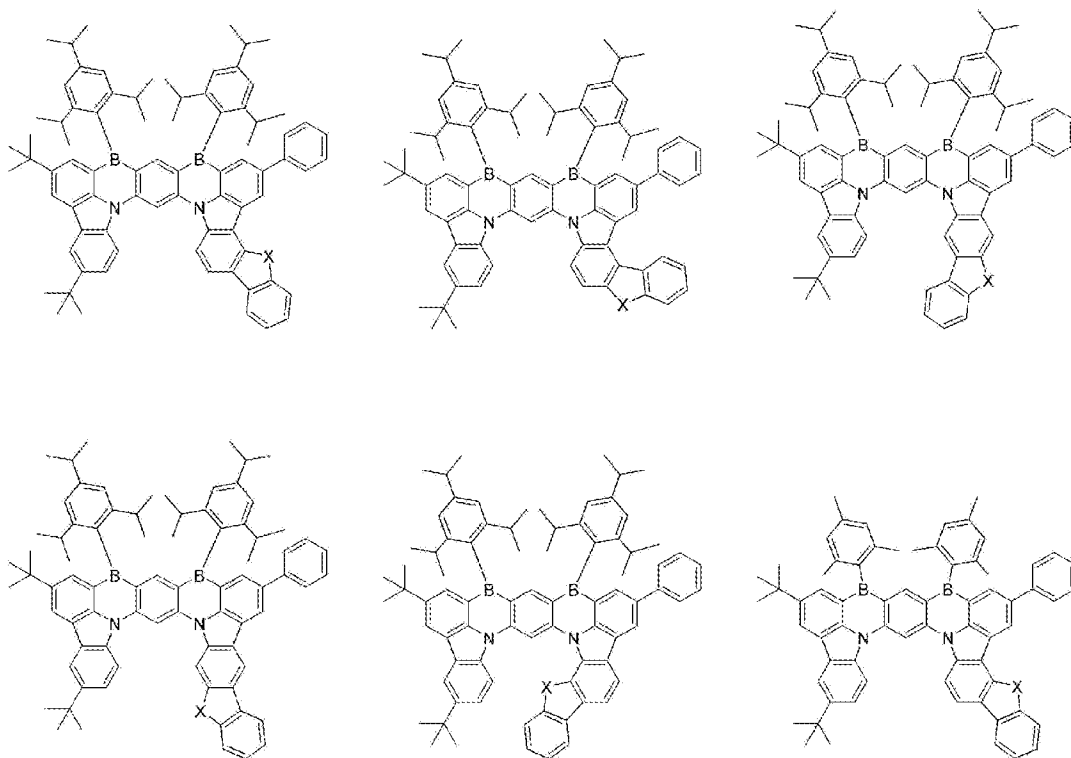


[0106] 一般式(11b)において、 $Ar^{86} \sim Ar^{88}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択することができる。 R^{86} および R^{87} は各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 Z^{18} は酸素原子または硫黄原子を表す。 $m86$ および $m87$ は各々独立に0～5の整数を表す。 $n86$ は0～4の整数を表し、 $n87$ および $n88$ は各々独立に0～3の整数を表す。

$Ar^{86} \sim Ar^{88}$ 、 R^{86} 、 R^{87} 、 $m86$ 、 $m87$ 、 $n86 \sim n88$ の詳しい説明と好ましい範囲については、一般式(1a)の Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^4 、 R^{41} 、 R^{42} 、 $m1$ 、 $m2$ 、 $n1$ 、 $n2$ 、 $n4$ の記載を参照することができる。

[0107] 以下において、一般式(11b)で表される化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる一般式(11b)の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。以下の具体例においては、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

[化66]



[0108] 一般式(1)で表される化合物として、 R^5 がドナー性基である化合物を好ましく採用することができる。 R^5 がドナー性基である化合物は、モル吸光係数が高く、発光効率が高い傾向にある。例えば、 R^3 がドナー性基である化合物に比べて優れた発光特性を示す。本発明の好ましい一態様では、 R^3 はドナー性基ではない。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^7$ の中では R^5 だけがドナー性基であるか、いずれもドナー性基（特に σ_p 値が -0.2 以下のドナー性基）ではない。ドナー性基は、ハメットの σ_p 値が負の基である。 R^5 のドナー性基は、 σ_p 値が -0.2 以下であることが好ましく、例えば -0.4 以下であってもよく、例えば -0.6 以下であってもよい。好ましいドナー性基として、置換アミノ基を挙げることができ、好ましくは置換もしくは無置換のジアリールアミノ基である。アリール基は、単環であってもよいし、2つ以上の環が縮合した縮合環であってもよい。縮合環である場合、縮合した後の環の数は2～6であることが好ましく、例えば2～4の中から選択したり、2としたりすることができる。ジアリールアミノ基を構成する2つのアリール基は同一であっても異なってもよい。また、2つのアリ

ール基は単結合または連結基で連結されていてもよい。置換もしくは無置換のジアリールアミノ基として好ましいのは、置換もしくは無置換のジフェニールアミノ基である。2つのフェニル基が単結合により結合した置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基を採用してもよいし、2つのフェニル基が単結合により結合していない置換もしくは無置換のジフェニールアミノ基を採用してもよい。一般式(1)の $R^1 \sim R^7$ のいずれかが置換アミノ基であるとき、少なくとも R^5 が置換アミノ基であることが好ましく、 R^5 だけが置換アミノ基であることがより好ましい。本発明の一態様では、 R^3 は置換アミノ基ではない。

R^5 がドナー性基であって、 X^1 が窒素原子であるとき、 R^{16} または R^{19} がドナー性基であることが好ましく、 R^{19} がドナー性基であることがより好ましい。このとき、その他の $R^1 \sim R^{26}$ は例えばすべてが水素原子または重水素原子であってもよいし、例えば R^3 、 R^6 、 R^{15} 、 R^{20} の少なくとも一つが置換基（好ましくは置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアリール基）でその他が水素原子または重水素原子であってもよい。

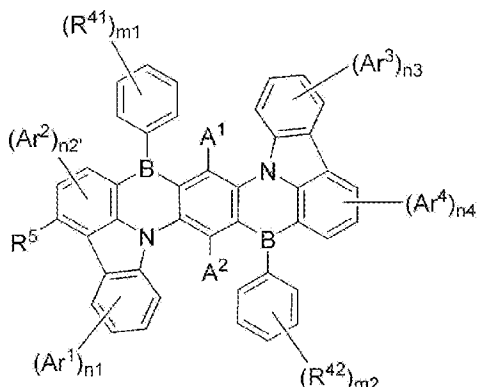
R^5 がドナー性基であって、 X^1 がホウ素原子であるとき、 R^{20} または R^{23} がドナー性基であることが好ましく、 R^{20} がドナー性基であることがより好ましい。このとき、その他の $R^1 \sim R^{26}$ は例えばすべてが水素原子または重水素原子であってもよいし、例えば R^3 、 R^6 、 R^{19} 、 R^{24} の少なくとも一つが置換基（好ましくは置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアリール基）でその他が水素原子または重水素原子であってもよい。

R^5 がドナー性基である化合物の好ましい一群として、下記一般式(12a)で表される化合物と下記一般式(12b)で表される化合物を例示することができる。

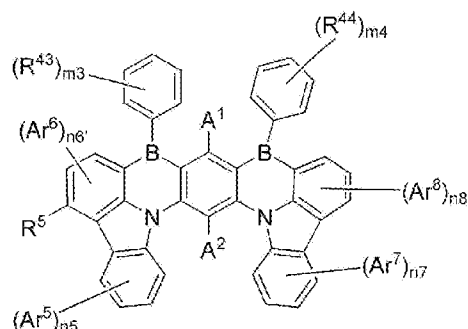
一般式(12a)

[化67]

一般式 (12a)



一般式 (12b)



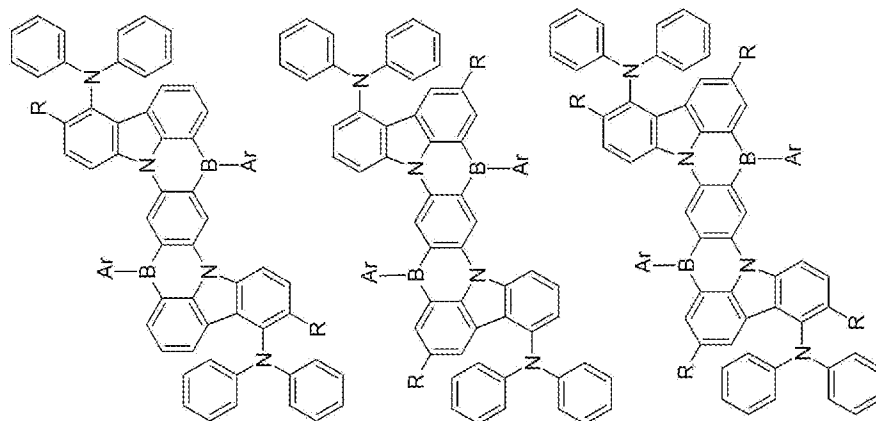
[0109] 一般式 (12a) および一般式 (12b) において、 $Ar^1 \sim Ar^8$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、または置換もしくは無置換のアルキル基を表し、例えば置換もしくは無置換のアルキル基を好ましく選択したり、置換もしくは無置換のアリール基を好ましく選択したりすることができる。 R^5 はドナー性基を表す。 $R^{41} \sim R^{44}$ は、各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 $m1 \sim m4$ は各々独立に 0～5 の整数を表す。 $n1$ 、 $n3$ 、 $n5$ 、 $n7$ は各々独立に 0～4 の整数を表し、 $n4$ および $n8$ は 0～3 の整数を表し、 $n2'$ および $n6'$ は 0～2 の整数を表す。 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 $Ar^1 \sim Ar^8$ 、 $R^{41} \sim R^{44}$ 、 $m1 \sim m4$ 、 $n1$ 、 $n3 \sim n5$ 、 $n7$ 、 $n8$ 、 A^1 、 A^2 の詳細については、一般式 (1a) および一般式 (1b) の対応する記載を参照することができる。ただし、隣り合う炭素原子に結合している Ar^1 どうし、隣り合う炭素原子に結合している Ar^3 どうし、隣り合う炭素原子に結合している Ar^5 どうし、隣り合う炭素原子に結合している Ar^7 どうしは、互いに結合して環状構造を形成していてもよく、好ましくはベンゾフラン（フラン環で縮合）またはベンゾチオフェン（チオフェン環で縮合）を形成していてもよい。

[0110] 以下において、一般式 (12a) および一般式 (12b) で表される化合物の具体例を挙げる。ただし、本発明で用いることができる一般式 (12a) および一般式 (12b) の化合物は、下記の具体例により限定的に解釈さ

れることはない。以下の具体例では、式 F 1 ～ F 5 6 中の R と A_r と X を表の中で特定することにより各化合物の構造を規定している。R は後掲の A ～ Dの中から選択し、A_r は後掲の a ～ dの中から選択し、X は $\alpha \sim \gamma$ の中から選択する。例えば表中の No. 1 の化合物は、式 F 1 において、R が A であり、A_r が a である構造を有する化合物である。

[0111]

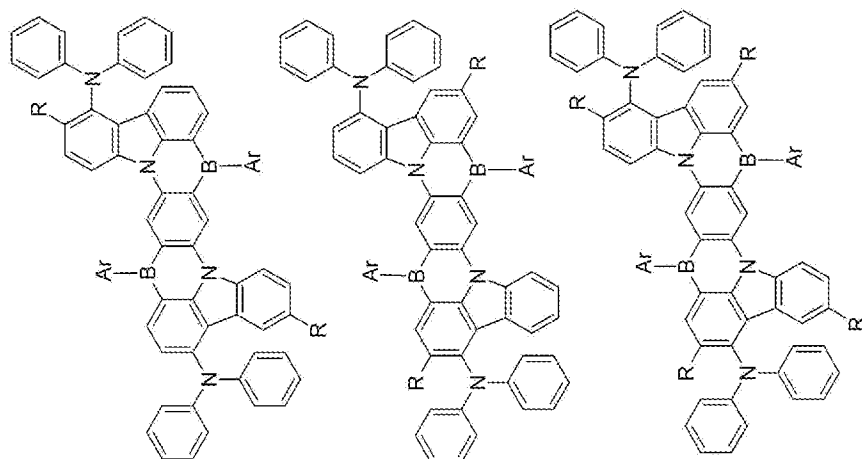
[化68]



F7

F8

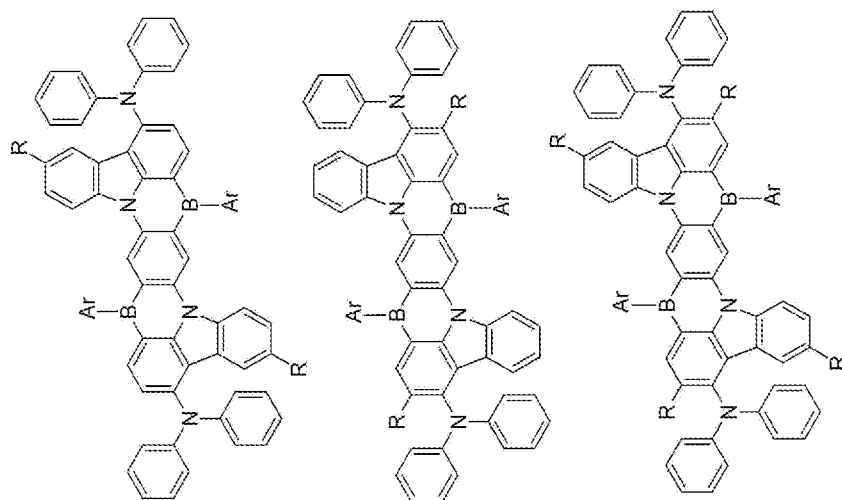
F9



F4

F5

F6

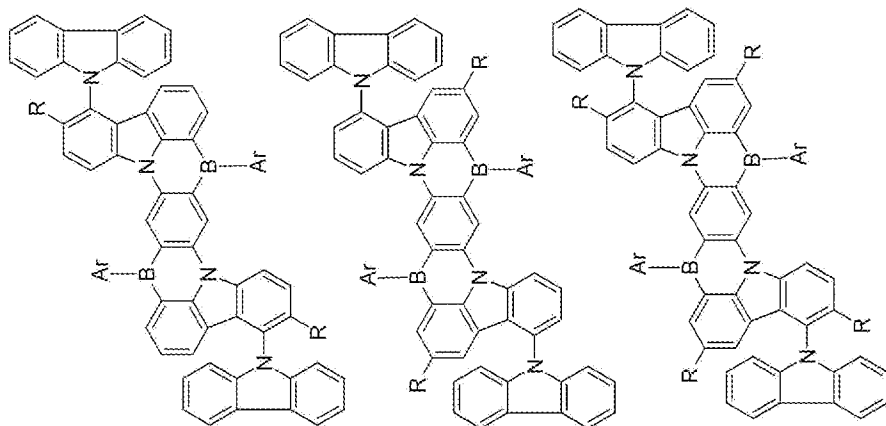


F1

F2

F3

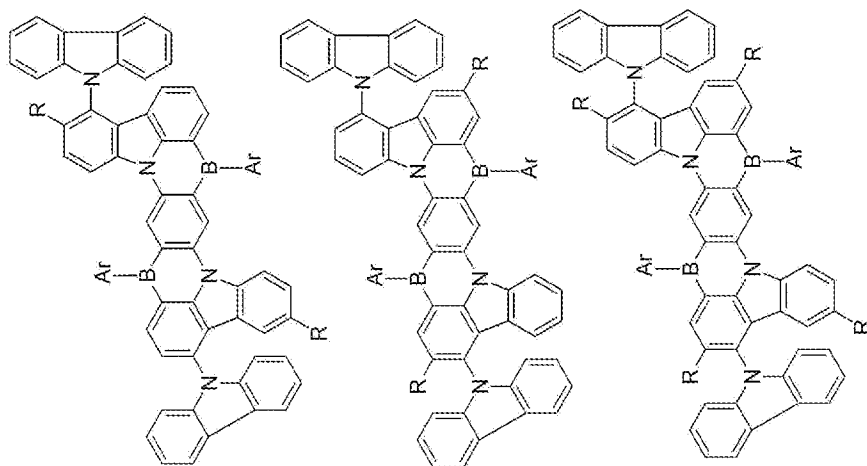
[化69]



F16

F17

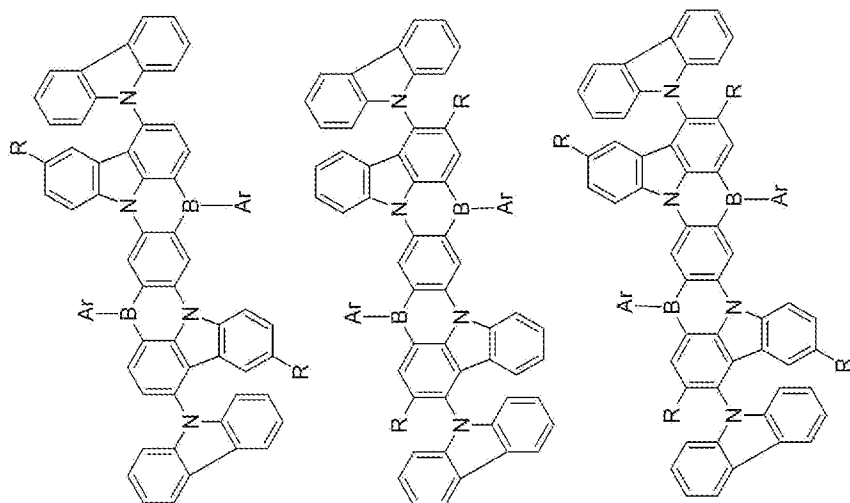
F18



F13

F14

F15

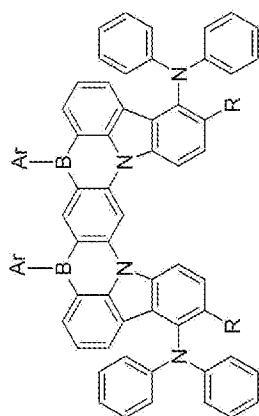


F10

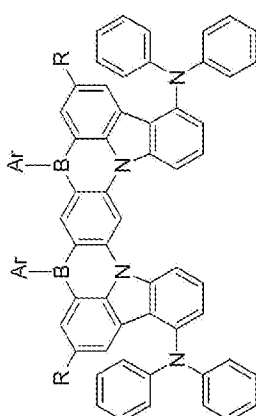
F11

F12

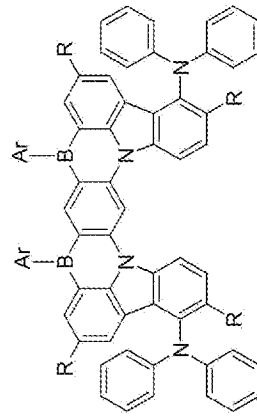
[化70]



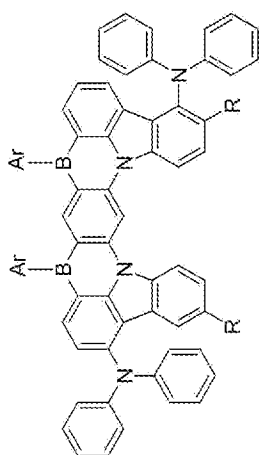
F25



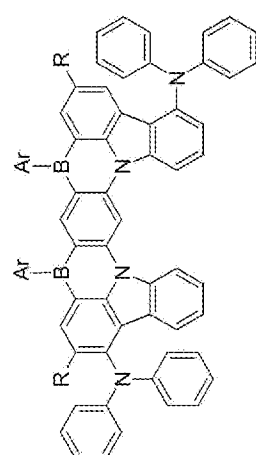
F26



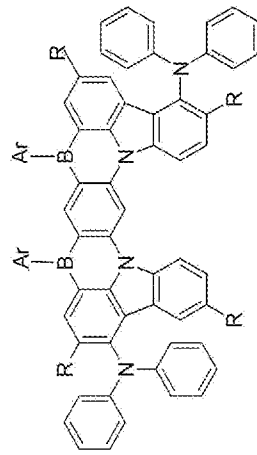
F27



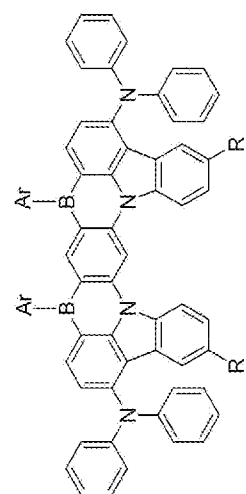
F22



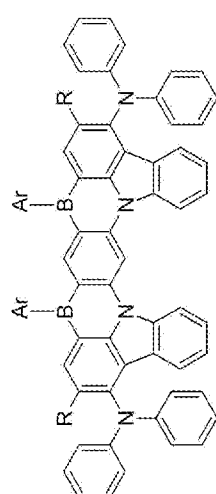
F23



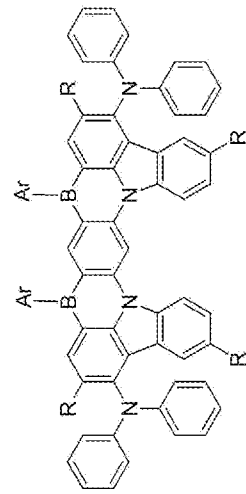
F24



F19

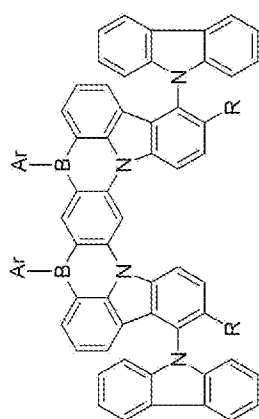


F20

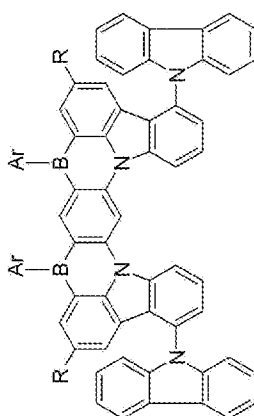


F21

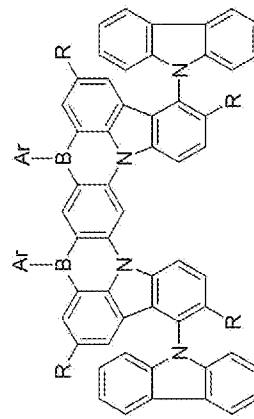
[化71]



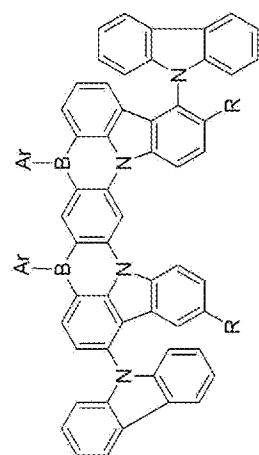
F34



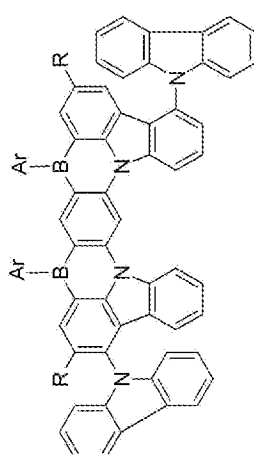
F35



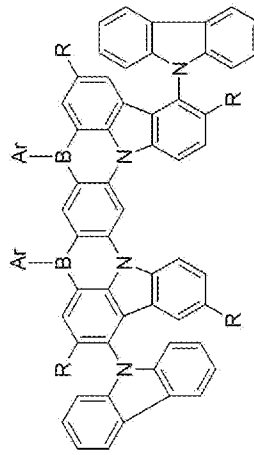
F36



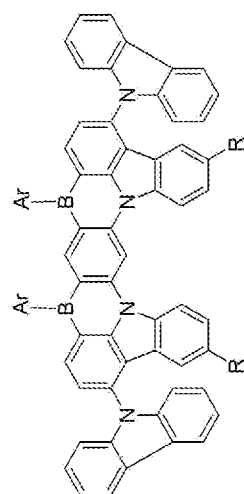
F31



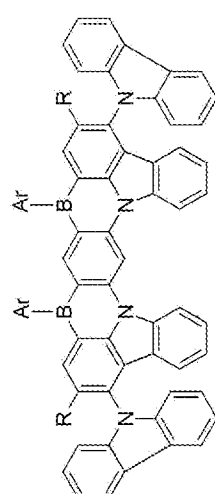
F32



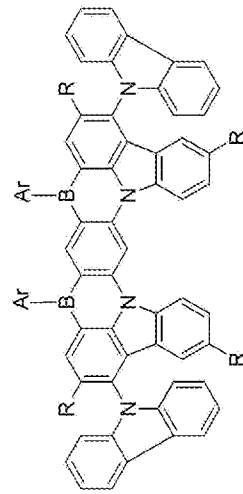
F33



F28

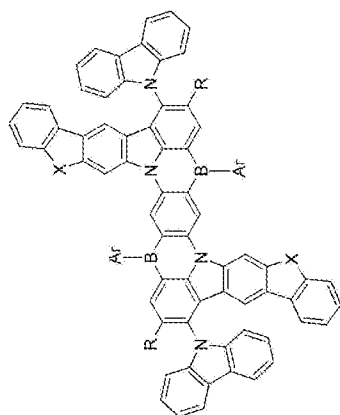


F29

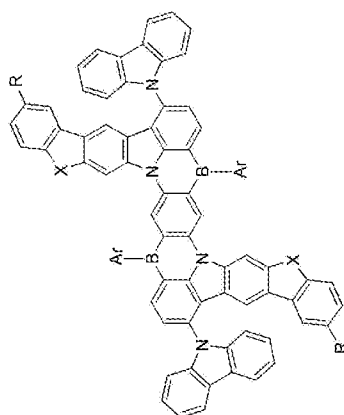


F30

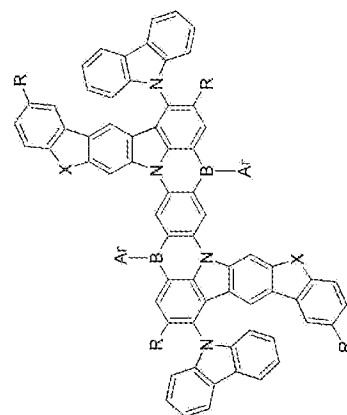
[化72]



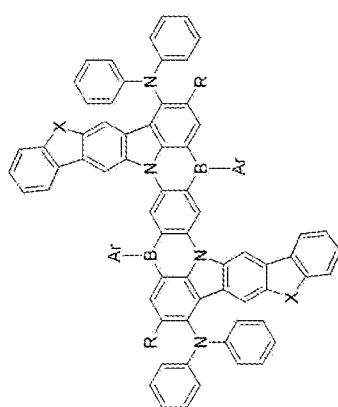
F43



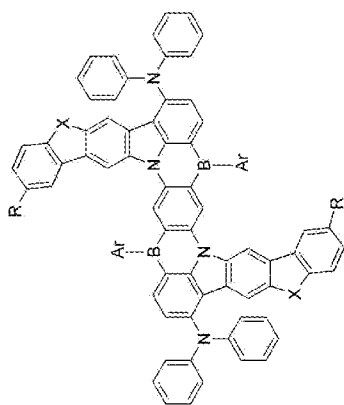
F44



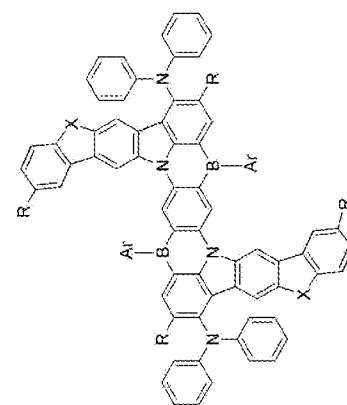
F45



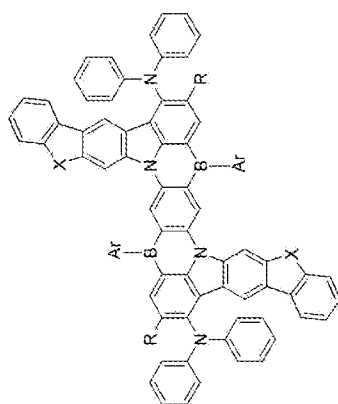
F40



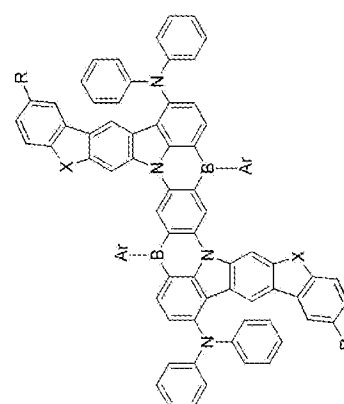
F41



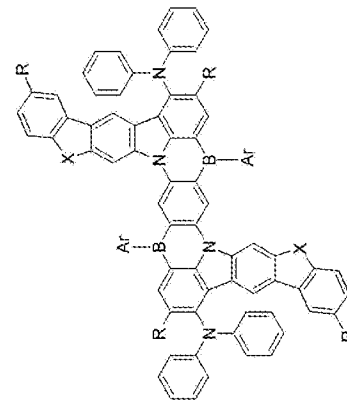
F42



F37

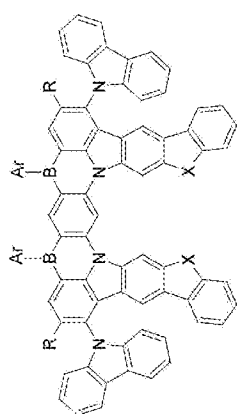


F38

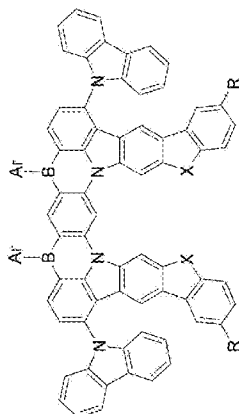


F39

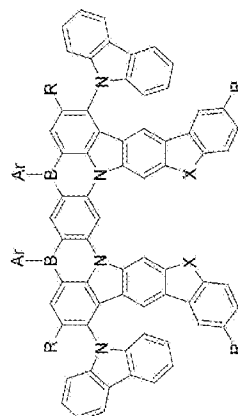
[化73]



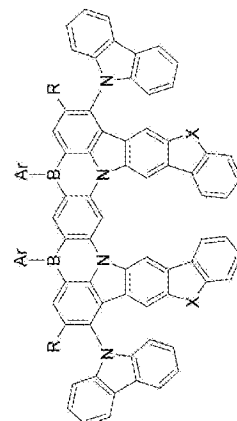
F52



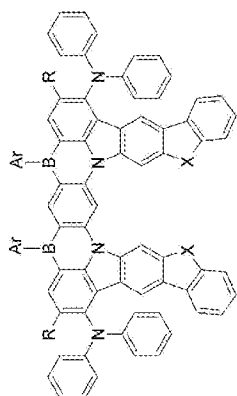
F53



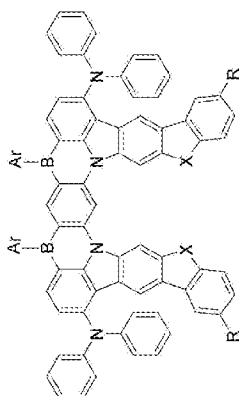
F54



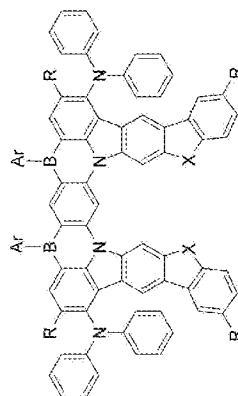
F56



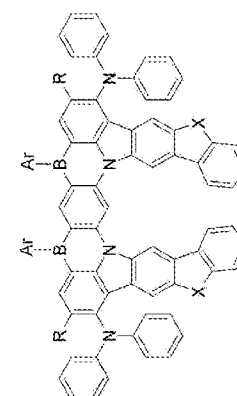
F49



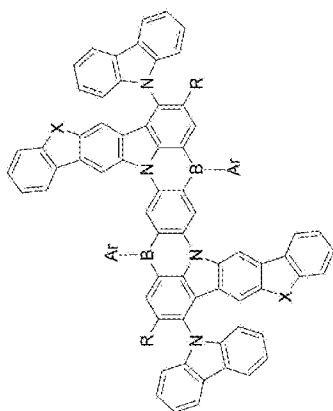
F50



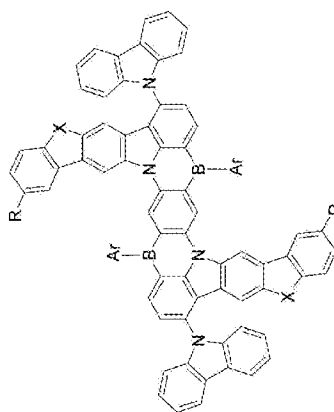
F51



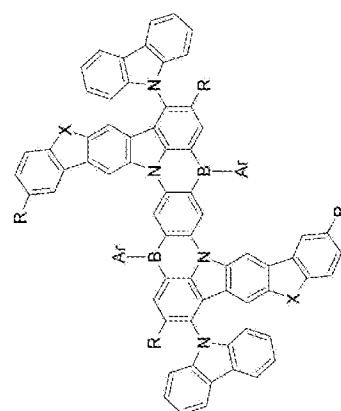
F55



F46



F47



F48

[表1-1]

No.	F	R	Ar
1	F1	A	a
2	F1	A	b
3	F1	A	c
4	F1	A	d
5	F1	B	a
6	F1	B	b
7	F1	B	c
8	F1	B	d
9	F1	C	a
10	F1	C	b
11	F1	C	c
12	F1	C	d
13	F1	D	a
14	F1	D	b
15	F1	D	c
16	F1	D	d
17	F2	A	a
18	F2	A	b
19	F2	A	c
20	F2	A	d
21	F2	B	a
22	F2	B	b
23	F2	B	c
24	F2	B	d
25	F2	C	a
26	F2	C	b
27	F2	C	c
28	F2	C	d
29	F3	A	a
30	F3	A	b
31	F3	A	c
32	F3	A	d
33	F3	B	a
34	F3	B	b
35	F3	B	c
36	F3	B	d
37	F3	C	a
38	F3	C	b
39	F3	C	c
40	F3	C	d

No.	F	R	Ar
41	F4	A	a
42	F4	A	b
43	F4	A	c
44	F4	A	d
45	F4	B	a
46	F4	B	b
47	F4	B	c
48	F4	B	d
49	F4	C	a
50	F4	C	b
51	F4	C	c
52	F4	C	d
53	F4	D	a
54	F4	D	b
55	F4	D	c
56	F4	D	d
57	F5	A	a
58	F5	A	b
59	F5	A	c
60	F5	A	d
61	F5	B	a
62	F5	B	b
63	F5	B	c
64	F5	B	d
65	F5	C	a
66	F5	C	b
67	F5	C	c
68	F5	C	d
69	F6	A	a
70	F6	A	b
71	F6	A	c
72	F6	A	d
73	F6	B	a
74	F6	B	b
75	F6	B	c
76	F6	B	d
77	F6	C	a
78	F6	C	b
79	F6	C	c
80	F6	C	d

No.	F	R	Ar
81	F7	A	a
82	F7	A	b
83	F7	A	c
84	F7	A	d
85	F7	B	a
86	F7	B	b
87	F7	B	c
88	F7	B	d
89	F7	C	a
90	F7	C	b
91	F7	C	c
92	F7	C	d
93	F7	D	a
94	F7	D	b
95	F7	D	c
96	F7	D	d
97	F8	A	a
98	F8	A	b
99	F8	A	c
100	F8	A	d
101	F8	B	a
102	F8	B	b
103	F8	B	c
104	F8	B	d
105	F8	C	a
106	F8	C	b
107	F8	C	c
108	F8	C	d
109	F9	A	a
110	F9	A	b
111	F9	A	c
112	F9	A	d
113	F9	B	a
114	F9	B	b
115	F9	B	c
116	F9	B	d
117	F9	C	a
118	F9	C	b
119	F9	C	c
120	F9	C	d

No.	F	R	Ar
121	F10	A	a
122	F10	A	b
123	F10	A	c
124	F10	A	d
125	F10	B	a
126	F10	B	b
127	F10	B	c
128	F10	B	d
129	F10	C	a
130	F10	C	b
131	F10	C	c
132	F10	C	d
133	F10	D	a
134	F10	D	b
135	F10	D	c
136	F10	D	d
137	F11	A	a
138	F11	A	b
139	F11	A	c
140	F11	A	d
141	F11	B	a
142	F11	B	b
143	F11	B	c
144	F11	B	d
145	F11	C	a
146	F11	C	b
147	F11	C	c
148	F11	C	d
149	F12	A	a
150	F12	A	b
151	F12	A	c
152	F12	A	d
153	F12	B	a
154	F12	B	b
155	F12	B	c
156	F12	B	d
157	F12	C	a
158	F12	C	b
159	F12	C	c
160	F12	C	d

[表1-2]

No.	F	R	Ar
161	F13	A	a
162	F13	A	b
163	F13	A	c
164	F13	A	d
165	F13	B	a
166	F13	B	b
167	F13	B	c
168	F13	B	d
169	F13	C	a
170	F13	C	b
171	F13	C	c
172	F13	C	d
173	F13	D	a
174	F13	D	b
175	F13	D	c
176	F13	D	d
177	F14	A	a
178	F14	A	b
179	F14	A	c
180	F14	A	d
181	F14	B	a
182	F14	B	b
183	F14	B	c
184	F14	B	d
185	F14	C	a
186	F14	C	b
187	F14	C	c
188	F14	C	d
189	F15	A	a
190	F15	A	b
191	F15	A	c
192	F15	A	d
193	F15	B	a
194	F15	B	b
195	F15	B	c
196	F15	B	d
197	F15	C	a
198	F15	C	b
199	F15	C	c
200	F15	C	d

No.	F	R	Ar
201	F16	A	a
202	F16	A	b
203	F16	A	c
204	F16	A	d
205	F16	B	a
206	F16	B	b
207	F16	B	c
208	F16	B	d
209	F16	C	a
210	F16	C	b
211	F16	C	c
212	F16	C	d
213	F16	D	a
214	F16	D	b
215	F16	D	c
216	F16	D	d
217	F17	A	a
218	F17	A	b
219	F17	A	c
220	F17	A	d
221	F17	B	a
222	F17	B	b
223	F17	B	c
224	F17	B	d
225	F17	C	a
226	F17	C	b
227	F17	C	c
228	F17	C	d
229	F18	A	a
230	F18	A	b
231	F18	A	c
232	F18	A	d
233	F18	B	a
234	F18	B	b
235	F18	B	c
236	F18	B	d
237	F18	C	a
238	F18	C	b
239	F18	C	c
240	F18	C	d

No.	F	R	Ar
241	F19	A	a
242	F19	A	b
243	F19	A	c
244	F19	A	d
245	F19	B	a
246	F19	B	b
247	F19	B	c
248	F19	B	d
249	F19	C	a
250	F19	C	b
251	F19	C	c
252	F19	C	d
253	F19	D	a
254	F19	D	b
255	F19	D	c
256	F19	D	d
257	F20	A	a
258	F20	A	b
259	F20	A	c
260	F20	A	d
261	F20	B	a
262	F20	B	b
263	F20	B	c
264	F20	B	d
265	F20	C	a
266	F20	C	b
267	F20	C	c
268	F20	C	d
269	F21	A	a
270	F21	A	b
271	F21	A	c
272	F21	A	d
273	F21	B	a
274	F21	B	b
275	F21	B	c
276	F21	B	d
277	F21	C	a
278	F21	C	b
279	F21	C	c
280	F21	C	d

No.	F	R	Ar
281	F22	A	a
282	F22	A	b
283	F22	A	c
284	F22	A	d
285	F22	B	a
286	F22	B	b
287	F22	B	c
288	F22	B	d
289	F22	C	a
290	F22	C	b
291	F22	C	c
292	F22	C	d
293	F22	D	a
294	F22	D	b
295	F22	D	c
296	F22	D	d
297	F23	A	a
298	F23	A	b
299	F23	A	c
300	F23	A	d
301	F23	B	a
302	F23	B	b
303	F23	B	c
304	F23	B	d
305	F23	C	a
306	F23	C	b
307	F23	C	c
308	F23	C	d
309	F24	A	a
310	F24	A	b
311	F24	A	c
312	F24	A	d
313	F24	B	a
314	F24	B	b
315	F24	B	c
316	F24	B	d
317	F24	C	a
318	F24	C	b
319	F24	C	c
320	F24	C	d

[表1-3]

No.	F	R	Ar
321	F25	A	a
322	F25	A	b
323	F25	A	c
324	F25	A	d
325	F25	B	a
326	F25	B	b
327	F25	B	c
328	F25	B	d
329	F25	C	a
330	F25	C	b
331	F25	C	c
332	F25	C	d
333	F25	D	a
334	F25	D	b
335	F25	D	c
336	F25	D	d
337	F26	A	a
338	F26	A	b
339	F26	A	c
340	F26	A	d
341	F26	B	a
342	F26	B	b
343	F26	B	c
344	F26	B	d
345	F26	C	a
346	F26	C	b
347	F26	C	c
348	F26	C	d
349	F27	A	a
350	F27	A	b
351	F27	A	c
352	F27	A	d
353	F27	B	a
354	F27	B	b
355	F27	B	c
356	F27	B	d
357	F27	C	a
358	F27	C	b
359	F27	C	c
360	F27	C	d

No.	F	R	Ar
361	F28	A	a
362	F28	A	b
363	F28	A	c
364	F28	A	d
365	F28	B	a
366	F28	B	b
367	F28	B	c
368	F28	B	d
369	F28	C	a
370	F28	C	b
371	F28	C	c
372	F28	C	d
373	F28	D	a
374	F28	D	b
375	F28	D	c
376	F28	D	d
377	F29	A	a
378	F29	A	b
379	F29	A	c
380	F29	A	d
381	F29	B	a
382	F29	B	b
383	F29	B	c
384	F29	B	d
385	F29	C	a
386	F29	C	b
387	F29	C	c
388	F29	C	d
389	F30	A	a
390	F30	A	b
391	F30	A	c
392	F30	A	d
393	F30	B	a
394	F30	B	b
395	F30	B	c
396	F30	B	d
397	F30	C	a
398	F30	C	b
399	F30	C	c
400	F30	C	d

No.	F	R	Ar
401	F31	A	a
402	F31	A	b
403	F31	A	c
404	F31	A	d
405	F31	B	a
406	F31	B	b
407	F31	B	c
408	F31	B	d
409	F31	C	a
410	F31	C	b
411	F31	C	c
412	F31	C	d
413	F31	D	a
414	F31	D	b
415	F31	D	c
416	F31	D	d
417	F32	A	a
418	F32	A	b
419	F32	A	c
420	F32	A	d
421	F32	B	a
422	F32	B	b
423	F32	B	c
424	F32	B	d
425	F32	C	a
426	F32	C	b
427	F32	C	c
428	F32	C	d
429	F33	A	a
430	F33	A	b
431	F33	A	c
432	F33	A	d
433	F33	B	a
434	F33	B	b
435	F33	B	c
436	F33	B	d
437	F33	C	a
438	F33	C	b
439	F33	C	c
440	F33	C	d

No.	F	R	Ar
441	F34	A	a
442	F34	A	b
443	F34	A	c
444	F34	A	d
445	F34	B	a
446	F34	B	b
447	F34	B	c
448	F34	B	d
449	F34	C	a
450	F34	C	b
451	F34	C	c
452	F34	C	d
453	F34	D	a
454	F34	D	b
455	F34	D	c
456	F34	D	d
457	F35	A	a
458	F35	A	b
459	F35	A	c
460	F35	A	d
461	F35	B	a
462	F35	B	b
463	F35	B	c
464	F35	B	d
465	F35	C	a
466	F35	C	b
467	F35	C	c
468	F35	C	d
469	F36	A	a
470	F36	A	b
471	F36	A	c
472	F36	A	d
473	F36	B	a
474	F36	B	b
475	F36	B	c
476	F36	B	d
477	F36	C	a
478	F36	C	b
479	F36	C	c
480	F36	C	d

[表1-4]

No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X
481	F37	A	a	α	521	F37	D	b	β	561	F38	C	c	γ	601	F40	A	a	α
482	F37	A	a	β	522	F37	D	b	γ	562	F38	C	d	α	602	F40	A	a	β
483	F37	A	a	γ	523	F37	D	c	α	563	F38	C	d	β	603	F40	A	a	γ
484	F37	A	b	α	524	F37	D	c	β	564	F38	C	d	γ	604	F40	A	b	α
485	F37	A	b	β	525	F37	D	c	γ	565	F39	A	a	α	605	F40	A	b	β
486	F37	A	b	γ	526	F37	D	d	α	566	F39	A	a	β	606	F40	A	b	γ
487	F37	A	c	α	527	F37	D	d	β	567	F39	A	a	γ	607	F40	A	c	α
488	F37	A	c	β	528	F37	D	d	γ	568	F39	A	b	α	608	F40	A	c	β
489	F37	A	c	γ	529	F38	A	a	α	569	F39	A	b	β	609	F40	A	c	γ
490	F37	A	d	α	530	F38	A	a	β	570	F39	A	b	γ	610	F40	A	d	α
491	F37	A	d	β	531	F38	A	a	γ	571	F39	A	c	α	611	F40	A	d	β
492	F37	A	d	γ	532	F38	A	b	α	572	F39	A	c	β	612	F40	A	d	γ
493	F37	B	a	α	533	F38	A	b	β	573	F39	A	c	γ	613	F40	B	a	α
494	F37	B	a	β	534	F38	A	b	γ	574	F39	A	d	α	614	F40	B	a	β
495	F37	B	a	γ	535	F38	A	c	α	575	F39	A	d	β	615	F40	B	a	γ
496	F37	B	b	α	536	F38	A	c	β	576	F39	A	d	γ	616	F40	B	b	α
497	F37	B	b	β	537	F38	A	c	γ	577	F39	B	a	α	617	F40	B	b	β
498	F37	B	b	γ	538	F38	A	d	α	578	F39	B	a	β	618	F40	B	b	γ
499	F37	B	c	α	539	F38	A	d	β	579	F39	B	a	γ	619	F40	B	c	α
500	F37	B	c	β	540	F38	A	d	γ	580	F39	B	b	α	620	F40	B	c	β
501	F37	B	c	γ	541	F38	B	a	α	581	F39	B	b	β	621	F40	B	c	γ
502	F37	B	d	α	542	F38	B	a	β	582	F39	B	b	γ	622	F40	B	d	α
503	F37	B	d	β	543	F38	B	a	γ	583	F39	B	c	α	623	F40	B	d	β
504	F37	B	d	γ	544	F38	B	b	α	584	F39	B	c	β	624	F40	B	d	γ
505	F37	C	a	α	545	F38	B	b	β	585	F39	B	c	γ	625	F40	C	a	α
506	F37	C	a	β	546	F38	B	b	γ	586	F39	B	d	α	626	F40	C	a	β
507	F37	C	a	γ	547	F38	B	c	α	587	F39	B	d	β	627	F40	C	a	γ
508	F37	C	b	α	548	F38	B	c	β	588	F39	B	d	γ	628	F40	C	b	α
509	F37	C	b	β	549	F38	B	c	γ	589	F39	C	a	α	629	F40	C	b	β
510	F37	C	b	γ	550	F38	B	d	α	590	F39	C	a	β	630	F40	C	b	γ
511	F37	C	c	α	551	F38	B	d	β	591	F39	C	a	γ	631	F40	C	c	α
512	F37	C	c	β	552	F38	B	d	γ	592	F39	C	b	α	632	F40	C	c	β
513	F37	C	c	γ	553	F38	C	a	α	593	F39	C	b	β	633	F40	C	c	γ
514	F37	C	d	α	554	F38	C	a	β	594	F39	C	b	γ	634	F40	C	d	α
515	F37	C	d	β	555	F38	C	a	γ	595	F39	C	c	α	635	F40	C	d	β
516	F37	C	d	γ	556	F38	C	b	α	596	F39	C	c	β	636	F40	C	d	γ
517	F37	D	a	α	557	F38	C	b	β	597	F39	C	c	γ	637	F40	D	a	α
518	F37	D	a	β	558	F38	C	b	γ	598	F39	C	d	α	638	F40	D	a	β
519	F37	D	a	γ	559	F38	C	c	α	599	F39	C	d	β	639	F40	D	a	γ
520	F37	D	b	α	560	F38	C	c	β	600	F39	C	d	γ	640	F40	D	b	α

[表1-5]

No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X
641	F40	D	b	β	681	F41	C	c	γ	721	F43	A	a	α	761	F43	D	b	β
642	F40	D	b	γ	682	F41	C	d	α	722	F43	A	a	β	762	F43	D	b	γ
643	F40	D	c	α	683	F41	C	d	β	723	F43	A	a	γ	763	F43	D	c	α
644	F40	D	c	β	684	F41	C	d	γ	724	F43	A	b	α	764	F43	D	c	β
645	F40	D	c	γ	685	F42	A	a	α	725	F43	A	b	β	765	F43	D	c	γ
646	F40	D	d	α	686	F42	A	a	β	726	F43	A	b	γ	766	F43	D	d	α
647	F40	D	d	β	687	F42	A	a	γ	727	F43	A	c	α	767	F43	D	d	β
648	F40	D	d	γ	688	F42	A	b	α	728	F43	A	c	β	768	F43	D	d	γ
649	F41	A	a	α	689	F42	A	b	β	729	F43	A	c	γ	769	F44	A	a	α
650	F41	A	a	β	690	F42	A	b	γ	730	F43	A	d	α	770	F44	A	a	β
651	F41	A	a	γ	691	F42	A	c	α	731	F43	A	d	β	771	F44	A	a	γ
652	F41	A	b	α	692	F42	A	c	β	732	F43	A	d	γ	772	F44	A	b	α
653	F41	A	b	β	693	F42	A	c	γ	733	F43	B	a	α	773	F44	A	b	β
654	F41	A	b	γ	694	F42	A	d	α	734	F43	B	a	β	774	F44	A	b	γ
655	F41	A	c	α	695	F42	A	d	β	735	F43	B	a	γ	775	F44	A	c	α
656	F41	A	c	β	696	F42	A	d	γ	736	F43	B	b	α	776	F44	A	c	β
657	F41	A	c	γ	697	F42	B	a	α	737	F43	B	b	β	777	F44	A	c	γ
658	F41	A	d	α	698	F42	B	a	β	738	F43	B	b	γ	778	F44	A	d	α
659	F41	A	d	β	699	F42	B	a	γ	739	F43	B	c	α	779	F44	A	d	β
660	F41	A	d	γ	700	F42	B	b	α	740	F43	B	c	β	780	F44	A	d	γ
661	F41	B	a	α	701	F42	B	b	β	741	F43	B	c	γ	781	F44	B	a	α
662	F41	B	a	β	702	F42	B	b	γ	742	F43	B	d	α	782	F44	B	a	β
663	F41	B	a	γ	703	F42	B	c	α	743	F43	B	d	β	783	F44	B	a	γ
664	F41	B	b	α	704	F42	B	c	β	744	F43	B	d	γ	784	F44	B	b	α
665	F41	B	b	β	705	F42	B	c	γ	745	F43	C	a	α	785	F44	B	b	β
666	F41	B	b	γ	706	F42	B	d	α	746	F43	C	a	β	786	F44	B	b	γ
667	F41	B	c	α	707	F42	B	d	β	747	F43	C	a	γ	787	F44	B	c	α
668	F41	B	c	β	708	F42	B	d	γ	748	F43	C	b	α	788	F44	B	c	β
669	F41	B	c	γ	709	F42	C	a	α	749	F43	C	b	β	789	F44	B	c	γ
670	F41	B	d	α	710	F42	C	a	β	750	F43	C	b	γ	790	F44	B	d	α
671	F41	B	d	β	711	F42	C	a	γ	751	F43	C	c	α	791	F44	B	d	β
672	F41	B	d	γ	712	F42	C	b	α	752	F43	C	c	β	792	F44	B	d	γ
673	F41	C	a	α	713	F42	C	b	β	753	F43	C	c	γ	793	F44	C	a	α
674	F41	C	a	β	714	F42	C	b	γ	754	F43	C	d	α	794	F44	C	a	β
675	F41	C	a	γ	715	F42	C	c	α	755	F43	C	d	β	795	F44	C	a	γ
676	F41	C	b	α	716	F42	C	c	β	756	F43	C	d	γ	796	F44	C	b	α
677	F41	C	b	β	717	F42	C	c	γ	757	F43	D	a	α	797	F44	C	b	β
678	F41	C	b	γ	718	F42	C	d	α	758	F43	D	a	β	798	F44	C	b	γ
679	F41	C	c	α	719	F42	C	d	β	759	F43	D	a	γ	799	F44	C	c	α
680	F41	C	c	β	720	F42	C	d	γ	760	F43	D	b	α	800	F44	C	c	β

[表1-6]

No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X
801	F44	C	c	γ	841	F46	A	a	α	881	F46	D	b	β	921	F47	C	c	γ
802	F44	C	d	α	842	F46	A	a	β	882	F46	D	b	γ	922	F47	C	d	α
803	F44	C	d	β	843	F46	A	a	γ	883	F46	D	c	α	923	F47	C	d	β
804	F44	C	d	γ	844	F46	A	b	α	884	F46	D	c	β	924	F47	C	d	γ
805	F45	A	a	α	845	F46	A	b	β	885	F46	D	c	γ	925	F48	A	a	α
806	F45	A	a	β	846	F46	A	b	γ	886	F46	D	d	α	926	F48	A	a	β
807	F45	A	a	γ	847	F46	A	c	α	887	F46	D	d	β	927	F48	A	a	γ
808	F45	A	b	α	848	F46	A	c	β	888	F46	D	d	γ	928	F48	A	b	α
809	F45	A	b	β	849	F46	A	c	γ	889	F47	A	a	α	929	F48	A	b	β
810	F45	A	b	γ	850	F46	A	d	α	890	F47	A	a	β	930	F48	A	b	γ
811	F45	A	c	α	851	F46	A	d	β	891	F47	A	a	γ	931	F48	A	c	α
812	F45	A	c	β	852	F46	A	d	γ	892	F47	A	b	α	932	F48	A	c	β
813	F45	A	c	γ	853	F46	B	a	α	893	F47	A	b	β	933	F48	A	c	γ
814	F45	A	d	α	854	F46	B	a	β	894	F47	A	b	γ	934	F48	A	d	α
815	F45	A	d	β	855	F46	B	a	γ	895	F47	A	c	α	935	F48	A	d	β
816	F45	A	d	γ	856	F46	B	b	α	896	F47	A	c	β	936	F48	A	d	γ
817	F45	B	a	α	857	F46	B	b	β	897	F47	A	c	γ	937	F48	B	a	α
818	F45	B	a	β	858	F46	B	b	γ	898	F47	A	d	α	938	F48	B	a	β
819	F45	B	a	γ	859	F46	B	c	α	899	F47	A	d	β	939	F48	B	a	γ
820	F45	B	b	α	860	F46	B	c	β	900	F47	A	d	γ	940	F48	B	b	α
821	F45	B	b	β	861	F46	B	c	γ	901	F47	B	a	α	941	F48	B	b	β
822	F45	B	b	γ	862	F46	B	d	α	902	F47	B	a	β	942	F48	B	b	γ
823	F45	B	c	α	863	F46	B	d	β	903	F47	B	a	γ	943	F48	B	c	α
824	F45	B	c	β	864	F46	B	d	γ	904	F47	B	b	α	944	F48	B	c	β
825	F45	B	c	γ	865	F46	C	a	α	905	F47	B	b	β	945	F48	B	c	γ
826	F45	B	d	α	866	F46	C	a	β	906	F47	B	b	γ	946	F48	B	d	α
827	F45	B	d	β	867	F46	C	a	γ	907	F47	B	c	α	947	F48	B	d	β
828	F45	B	d	γ	868	F46	C	b	α	908	F47	B	c	β	948	F48	B	d	γ
829	F45	C	a	α	869	F46	C	b	β	909	F47	B	c	γ	949	F48	C	a	α
830	F45	C	a	β	870	F46	C	b	γ	910	F47	B	d	α	950	F48	C	a	β
831	F45	C	a	γ	871	F46	C	c	α	911	F47	B	d	β	951	F48	C	a	γ
832	F45	C	b	α	872	F46	C	c	β	912	F47	B	d	γ	952	F48	C	b	α
833	F45	C	b	β	873	F46	C	c	γ	913	F47	C	a	α	953	F48	C	b	β
834	F45	C	b	γ	874	F46	C	d	α	914	F47	C	a	β	954	F48	C	b	γ
835	F45	C	c	α	875	F46	C	d	β	915	F47	C	a	γ	955	F48	C	c	α
836	F45	C	c	β	876	F46	C	d	γ	916	F47	C	b	α	956	F48	C	c	β
837	F45	C	c	γ	877	F46	D	a	α	917	F47	C	b	β	957	F48	C	c	γ
838	F45	C	d	α	878	F46	D	a	β	918	F47	C	b	γ	958	F48	C	d	α
839	F45	C	d	β	879	F46	D	a	γ	919	F47	C	c	α	959	F48	C	d	β
840	F45	C	d	γ	880	F46	D	b	α	920	F47	C	c	β	960	F48	C	d	γ

[表1-7]

No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X
961	F49	A	a	α	1001	F49	D	b	β	1041	F50	C	c	γ	1081	F52	A	a	α
962	F49	A	a	β	1002	F49	D	b	γ	1042	F50	C	d	α	1082	F52	A	a	β
963	F49	A	a	γ	1003	F49	D	c	α	1043	F50	C	d	β	1083	F52	A	a	γ
964	F49	A	b	α	1004	F49	D	c	β	1044	F50	C	d	γ	1084	F52	A	b	α
965	F49	A	b	β	1005	F49	D	c	γ	1045	F51	A	a	α	1085	F52	A	b	β
966	F49	A	b	γ	1006	F49	D	d	α	1046	F51	A	a	β	1086	F52	A	b	γ
967	F49	A	c	α	1007	F49	D	d	β	1047	F51	A	a	γ	1087	F52	A	c	α
968	F49	A	c	β	1008	F49	D	d	γ	1048	F51	A	b	α	1088	F52	A	c	β
969	F49	A	c	γ	1009	F50	A	a	α	1049	F51	A	b	β	1089	F52	A	c	γ
970	F49	A	d	α	1010	F50	A	a	β	1050	F51	A	b	γ	1090	F52	A	d	α
971	F49	A	d	β	1011	F50	A	a	γ	1051	F51	A	c	α	1091	F52	A	d	β
972	F49	A	d	γ	1012	F50	A	b	α	1052	F51	A	c	β	1092	F52	A	d	γ
973	F49	B	a	α	1013	F50	A	b	β	1053	F51	A	c	γ	1093	F52	B	a	α
974	F49	B	a	β	1014	F50	A	b	γ	1054	F51	A	d	α	1094	F52	B	a	β
975	F49	B	a	γ	1015	F50	A	c	α	1055	F51	A	d	β	1095	F52	B	a	γ
976	F49	B	b	α	1016	F50	A	c	β	1056	F51	A	d	γ	1096	F52	B	b	α
977	F49	B	b	β	1017	F50	A	c	γ	1057	F51	B	a	α	1097	F52	B	b	β
978	F49	B	b	γ	1018	F50	A	d	α	1058	F51	B	a	β	1098	F52	B	b	γ
979	F49	B	c	α	1019	F50	A	d	β	1059	F51	B	a	γ	1099	F52	B	c	α
980	F49	B	c	β	1020	F50	A	d	γ	1060	F51	B	b	α	1100	F52	B	c	β
981	F49	B	c	γ	1021	F50	B	a	α	1061	F51	B	b	β	1101	F52	B	c	γ
982	F49	B	d	α	1022	F50	B	a	β	1062	F51	B	b	γ	1102	F52	B	d	α
983	F49	B	d	β	1023	F50	B	a	γ	1063	F51	B	c	α	1103	F52	B	d	β
984	F49	B	d	γ	1024	F50	B	b	α	1064	F51	B	c	β	1104	F52	B	d	γ
985	F49	C	a	α	1025	F50	B	b	β	1065	F51	B	c	γ	1105	F52	C	a	α
986	F49	C	a	β	1026	F50	B	b	γ	1066	F51	B	d	α	1106	F52	C	a	β
987	F49	C	a	γ	1027	F50	B	c	α	1067	F51	B	d	β	1107	F52	C	a	γ
988	F49	C	b	α	1028	F50	B	c	β	1068	F51	B	d	γ	1108	F52	C	b	α
989	F49	C	b	β	1029	F50	B	c	γ	1069	F51	C	a	α	1109	F52	C	b	β
990	F49	C	b	γ	1030	F50	B	d	α	1070	F51	C	a	β	1110	F52	C	b	γ
991	F49	C	c	α	1031	F50	B	d	β	1071	F51	C	a	γ	1111	F52	C	c	α
992	F49	C	c	β	1032	F50	B	d	γ	1072	F51	C	b	α	1112	F52	C	c	β
993	F49	C	c	γ	1033	F50	C	a	α	1073	F51	C	b	β	1113	F52	C	c	γ
994	F49	C	d	α	1034	F50	C	a	β	1074	F51	C	b	γ	1114	F52	C	d	α
995	F49	C	d	β	1035	F50	C	a	γ	1075	F51	C	c	α	1115	F52	C	d	β
996	F49	C	d	γ	1036	F50	C	b	α	1076	F51	C	c	β	1116	F52	C	d	γ
997	F49	D	a	α	1037	F50	C	b	β	1077	F51	C	c	γ	1117	F52	D	a	α
998	F49	D	a	β	1038	F50	C	b	γ	1078	F51	C	d	α	1118	F52	D	a	β
999	F49	D	a	γ	1039	F50	C	c	α	1079	F51	C	d	β	1119	F52	D	a	γ
1000	F49	D	b	α	1040	F50	C	c	β	1080	F51	C	d	γ	1120	F52	D	b	α

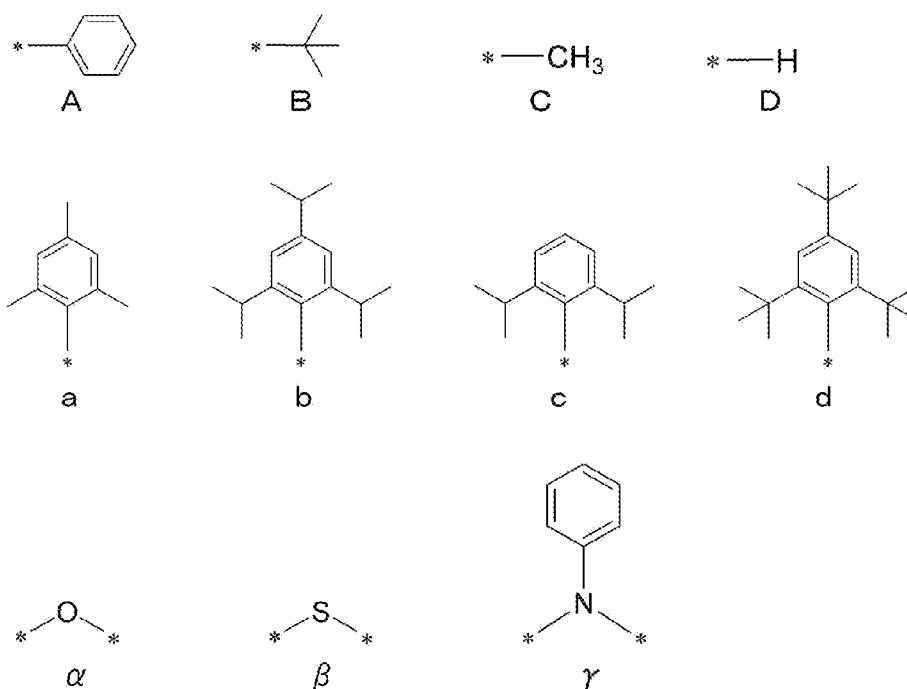
[表1-8]

No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X	No.	F	R	Ar	X
1121	F52	D	b	β	1161	F53	C	c	γ	1201	F55	A	a	α	1241	F55	D	b	β
1122	F52	D	b	γ	1162	F53	C	d	α	1202	F55	A	a	β	1242	F55	D	b	γ
1123	F52	D	c	α	1163	F53	C	d	β	1203	F55	A	a	γ	1243	F55	D	c	α
1124	F52	D	c	β	1164	F53	C	d	γ	1204	F55	A	b	α	1244	F55	D	c	β
1125	F52	D	c	γ	1165	F54	A	a	α	1205	F55	A	b	β	1245	F55	D	c	γ
1126	F52	D	d	α	1166	F54	A	a	β	1206	F55	A	b	γ	1246	F55	D	d	α
1127	F52	D	d	β	1167	F54	A	a	γ	1207	F55	A	c	α	1247	F55	D	d	β
1128	F52	D	d	γ	1168	F54	A	b	α	1208	F55	A	c	β	1248	F55	D	d	γ
1129	F53	A	a	α	1169	F54	A	b	β	1209	F55	A	c	γ	1249	F56	A	a	α
1130	F53	A	a	β	1170	F54	A	b	γ	1210	F55	A	d	α	1250	F56	A	a	β
1131	F53	A	a	γ	1171	F54	A	c	α	1211	F55	A	d	β	1251	F56	A	a	γ
1132	F53	A	b	α	1172	F54	A	c	β	1212	F55	A	d	γ	1252	F56	A	b	α
1133	F53	A	b	β	1173	F54	A	c	γ	1213	F55	B	a	α	1253	F56	A	b	β
1134	F53	A	b	γ	1174	F54	A	d	α	1214	F55	B	a	β	1254	F56	A	b	γ
1135	F53	A	c	α	1175	F54	A	d	β	1215	F55	B	a	γ	1255	F56	A	c	α
1136	F53	A	c	β	1176	F54	A	d	γ	1216	F55	B	b	α	1256	F56	A	c	β
1137	F53	A	c	γ	1177	F54	B	a	α	1217	F55	B	b	β	1257	F56	A	c	γ
1138	F53	A	d	α	1178	F54	B	a	β	1218	F55	B	b	γ	1258	F56	A	d	α
1139	F53	A	d	β	1179	F54	B	a	γ	1219	F55	B	c	α	1259	F56	A	d	β
1140	F53	A	d	γ	1180	F54	B	b	α	1220	F55	B	c	β	1260	F56	A	d	γ
1141	F53	B	a	α	1181	F54	B	b	β	1221	F55	B	c	γ	1261	F56	B	a	α
1142	F53	B	a	β	1182	F54	B	b	γ	1222	F55	B	d	α	1262	F56	B	a	β
1143	F53	B	a	γ	1183	F54	B	c	α	1223	F55	B	d	β	1263	F56	B	a	γ
1144	F53	B	b	α	1184	F54	B	c	β	1224	F55	B	d	γ	1264	F56	B	b	α
1145	F53	B	b	β	1185	F54	B	c	γ	1225	F55	C	a	α	1265	F56	B	b	β
1146	F53	B	b	γ	1186	F54	B	d	α	1226	F55	C	a	β	1266	F56	B	b	γ
1147	F53	B	c	α	1187	F54	B	d	β	1227	F55	C	a	γ	1267	F56	B	c	α
1148	F53	B	c	β	1188	F54	B	d	γ	1228	F55	C	b	α	1268	F56	B	c	β
1149	F53	B	c	γ	1189	F54	C	a	α	1229	F55	C	b	β	1269	F56	B	c	γ
1150	F53	B	d	α	1190	F54	C	a	β	1230	F55	C	b	γ	1270	F56	B	d	α
1151	F53	B	d	β	1191	F54	C	a	γ	1231	F55	C	c	α	1271	F56	B	d	β
1152	F53	B	d	γ	1192	F54	C	b	α	1232	F55	C	c	β	1272	F56	B	d	γ
1153	F53	C	a	α	1193	F54	C	b	β	1233	F55	C	c	γ	1273	F56	C	a	α
1154	F53	C	a	β	1194	F54	C	b	γ	1234	F55	C	d	α	1274	F56	C	a	β
1155	F53	C	a	γ	1195	F54	C	c	α	1235	F55	C	d	β	1275	F56	C	a	γ
1156	F53	C	b	α	1196	F54	C	c	β	1236	F55	C	d	γ	1276	F56	C	b	α
1157	F53	C	b	β	1197	F54	C	c	γ	1237	F55	D	a	α	1277	F56	C	b	β
1158	F53	C	b	γ	1198	F54	C	d	α	1238	F55	D	a	β	1278	F56	C	b	γ
1159	F53	C	c	α	1199	F54	C	d	β	1239	F55	D	a	γ	1279	F56	C	c	α
1160	F53	C	c	β	1200	F54	C	d	γ	1240	F55	D	b	α	1280	F56	C	c	β

[表1-9]

No.	F	R	Ar	X
1281	F56	C	c	γ
1282	F56	C	d	α
1283	F56	C	d	β
1284	F56	C	d	γ
1285	F56	D	a	α
1286	F56	D	a	β
1287	F56	D	a	γ
1288	F56	D	b	α
1289	F56	D	b	β
1290	F56	D	b	γ
1291	F56	D	c	α
1292	F56	D	c	β

[0112] [化74]



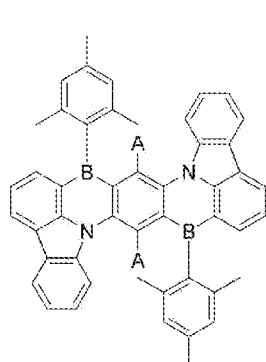
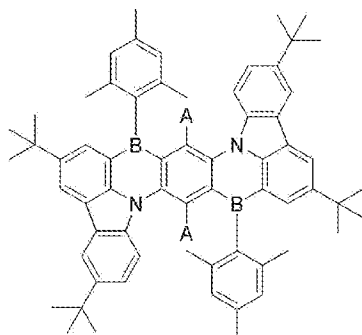
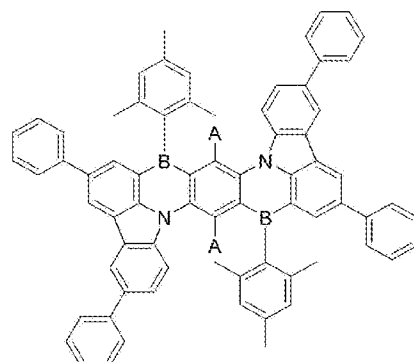
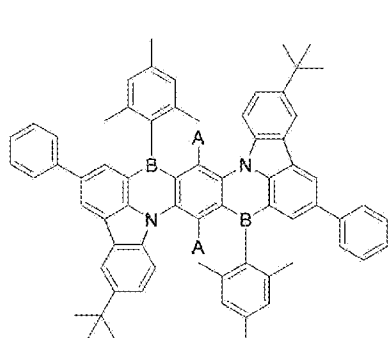
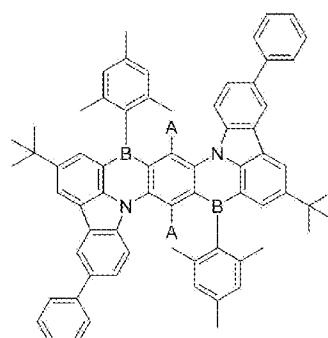
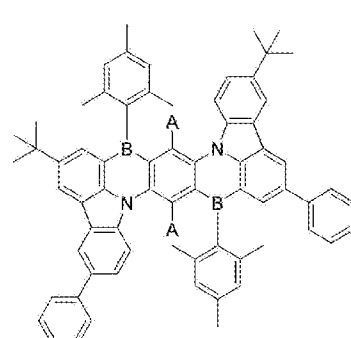
[0113] 本発明の一態様では、上記骨格（1 a）～（1 2 b）は、他の環がさらに縮合していない骨格である。本発明の一態様では、上記骨格（1 a）～（1 2 b）は、他の環がさらに縮合していてもよい骨格である。ここでいう他の環については、上記の R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} が互いに結

合して形成する環状構造の記載を参照することができる。

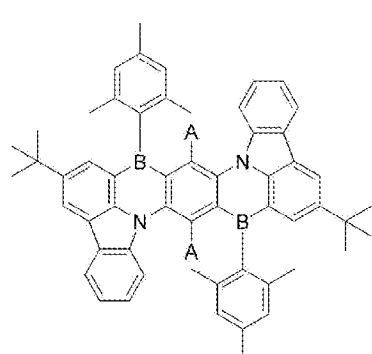
[0114] 本発明の一態様では、一般式(1)の A^1 と A^2 がアクセプター性基である。例えば、 A^1 と A^2 の位置がアクセプター性基であり、骨格(1a)～(12b)のいずれかを有する化合物を挙げることができる。アクセプター性基の説明と具体例については、上記の一般式(1)の A^1 と A^2 のアクセプター性基の説明と具体例を参照することができる。

以下において、 A^1 と A^2 がアクセプター性基である化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる A^1 と A^2 がアクセプター性基である化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。以下の具体例は、 A^1 と A^2 がともに「A」である構造を有しており、その「A」を個別に特定することにより各化合物の構造を特定している。

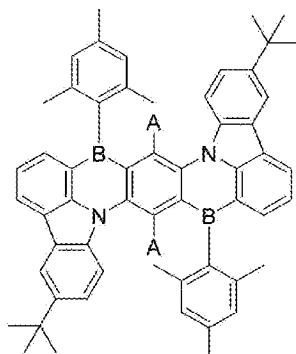
[化75-1]

1 a : A=A 11 b : A=A 21 c : A=A 31 d : A=A 41 e : A=A 71 f : A=A 101 g : A=A 111 h : A=A 161 i : A=A 351 j : A=A 391 k : A=A 401 l : A=A 411 m : A=A 422 a : A=A 12 b : A=A 22 c : A=A 32 d : A=A 42 e : A=A 72 f : A=A 102 g : A=A 112 h : A=A 162 i : A=A 352 j : A=A 392 k : A=A 402 l : A=A 412 m : A=A 423 a : A=A 13 b : A=A 23 c : A=A 33 d : A=A 43 e : A=A 73 f : A=A 103 g : A=A 113 h : A=A 163 i : A=A 353 j : A=A 393 k : A=A 403 l : A=A 413 m : A=A 424 a : A=A 14 b : A=A 24 c : A=A 34 d : A=A 44 e : A=A 74 f : A=A 104 g : A=A 114 h : A=A 164 i : A=A 354 j : A=A 394 k : A=A 404 l : A=A 414 m : A=A 425 a : A=A 15 b : A=A 25 c : A=A 35 d : A=A 45 e : A=A 75 f : A=A 105 g : A=A 115 h : A=A 165 i : A=A 355 j : A=A 395 k : A=A 405 l : A=A 415 m : A=A 426 a : A=A 16 b : A=A 26 c : A=A 36 d : A=A 46 e : A=A 76 f : A=A 106 g : A=A 116 h : A=A 166 i : A=A 356 j : A=A 396 k : A=A 406 l : A=A 416 m : A=A 42

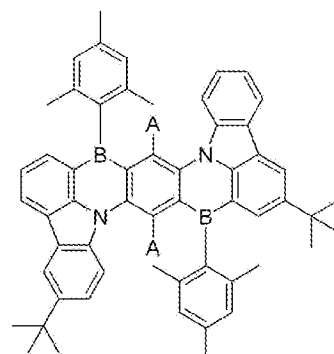
[化75-2]



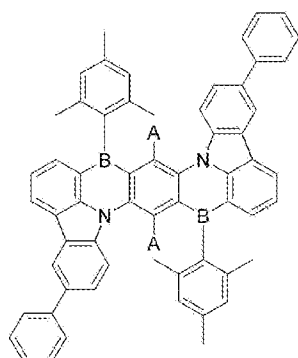
7 a : A=A 1
7 b : A=A 2
7 c : A=A 3
7 d : A=A 4
7 e : A=A 7
7 f : A=A 10
7 g : A=A 11
7 h : A=A 16
7 i : A=A 35
7 j : A=A 39
7 k : A=A 40
7 l : A=A 41
7 m : A=A 42



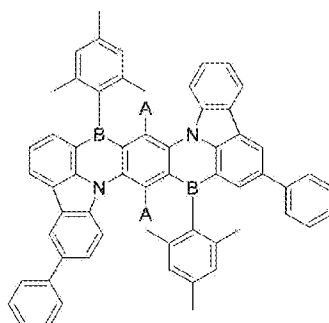
8 a : A=A 1
8 b : A=A 2
8 c : A=A 3
8 d : A=A 4
8 e : A=A 7
8 f : A=A 10
8 g : A=A 11
8 h : A=A 16
8 i : A=A 35
8 j : A=A 39
8 k : A=A 40
8 l : A=A 41
8 m : A=A 42



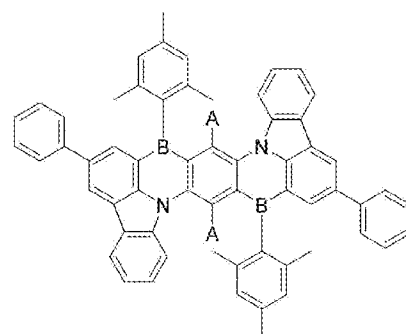
9 a : A=A 1
9 b : A=A 2
9 c : A=A 3
9 d : A=A 4
9 e : A=A 7
9 f : A=A 10
9 g : A=A 11
9 h : A=A 16
9 i : A=A 35
9 j : A=A 39
9 k : A=A 40
9 l : A=A 41
9 m : A=A 42



10 a : A=A 1
10 b : A=A 2
10 c : A=A 3
10 d : A=A 4
10 e : A=A 7
10 f : A=A 10
10 g : A=A 11
10 h : A=A 16
10 i : A=A 35
10 j : A=A 39
10 k : A=A 40
10 l : A=A 41
10 m : A=A 42

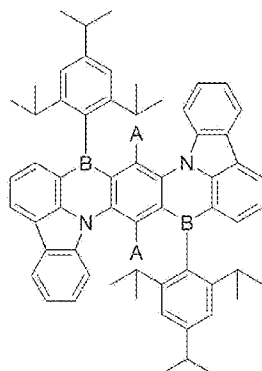


11 a : A=A 1
11 b : A=A 2
11 c : A=A 3
11 d : A=A 4
11 e : A=A 7
11 f : A=A 10
11 g : A=A 11
11 h : A=A 16
11 i : A=A 35
11 j : A=A 39
11 k : A=A 40
11 l : A=A 41
11 m : A=A 42

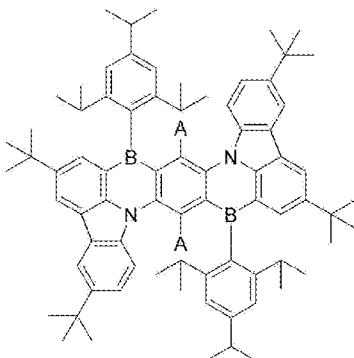


12 a : A=A 1
12 b : A=A 2
12 c : A=A 3
12 d : A=A 4
12 e : A=A 7
12 f : A=A 10
12 g : A=A 11
12 h : A=A 16
12 i : A=A 35
12 j : A=A 39
12 k : A=A 40
12 l : A=A 41
12 m : A=A 42

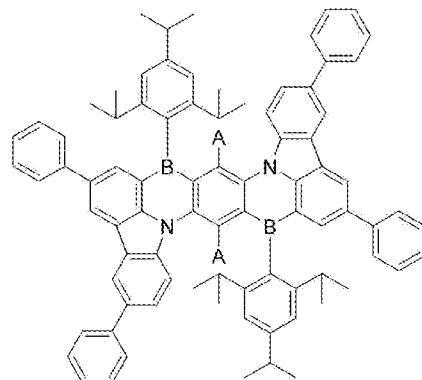
[化75-3]



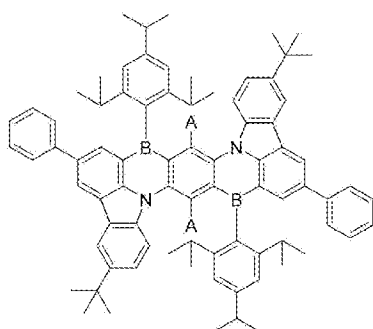
13 a : A=A 1
13 b : A=A 2
13 c : A=A 3
13 d : A=A 4
13 e : A=A 7
13 f : A=A 10
13 g : A=A 11
13 h : A=A 16
13 i : A=A 35
13 j : A=A 39
13 k : A=A 40
13 l : A=A 41
13 m : A=A 42



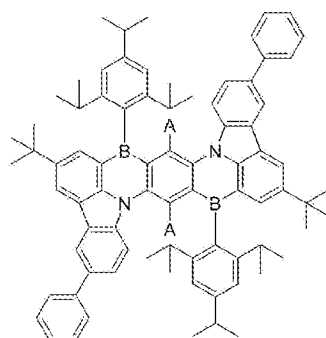
14 a : A=A 1
14 b : A=A 2
14 c : A=A 3
14 d : A=A 4
14 e : A=A 7
14 f : A=A 10
14 g : A=A 11
14 h : A=A 16
14 i : A=A 35
14 j : A=A 39
14 k : A=A 40
14 l : A=A 41
14 m : A=A 42



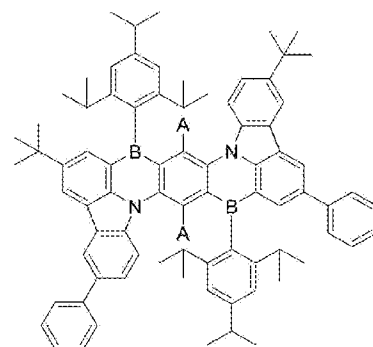
15 a : A=A 1
15 b : A=A 2
15 c : A=A 3
15 d : A=A 4
15 e : A=A 7
15 f : A=A 10
15 g : A=A 11
15 h : A=A 16
15 i : A=A 35
15 j : A=A 39
15 k : A=A 40
15 l : A=A 41
15 m : A=A 42



16 a : A=A 1
16 b : A=A 2
16 c : A=A 3
16 d : A=A 4
16 e : A=A 7
16 f : A=A 10
16 g : A=A 11
16 h : A=A 16
16 i : A=A 35
16 j : A=A 39
16 k : A=A 40
16 l : A=A 41
16 m : A=A 42

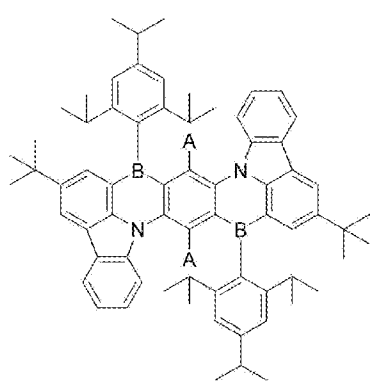


17 a : A=A 1
17 b : A=A 2
17 c : A=A 3
17 d : A=A 4
17 e : A=A 7
17 f : A=A 10
17 g : A=A 11
17 h : A=A 16
17 i : A=A 35
17 j : A=A 39
17 k : A=A 40
17 l : A=A 41
17 m : A=A 42

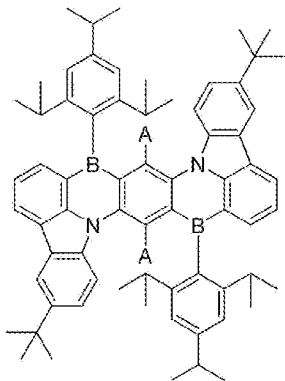


18 a : A=A 1
18 b : A=A 2
18 c : A=A 3
18 d : A=A 4
18 e : A=A 7
18 f : A=A 10
18 g : A=A 11
18 h : A=A 16
18 i : A=A 35
18 j : A=A 39
18 k : A=A 40
18 l : A=A 41
18 m : A=A 42

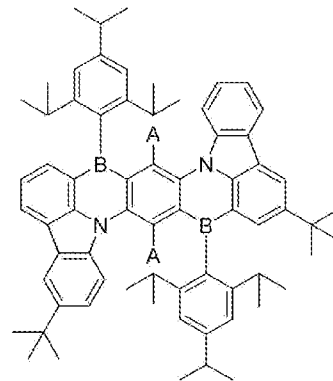
[化75-4]



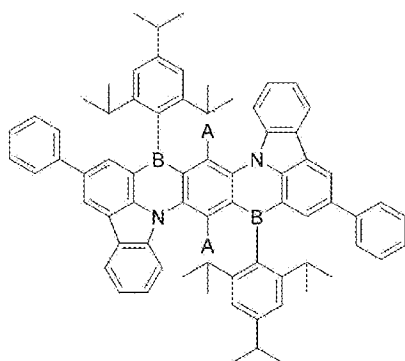
19a : A=A1
19b : A=A2
19c : A=A3
19d : A=A4
19e : A=A7
19f : A=A10
19g : A=A11
19h : A=A16
19i : A=A35
19j : A=A39
19k : A=A40
19l : A=A41
19m : A=A42



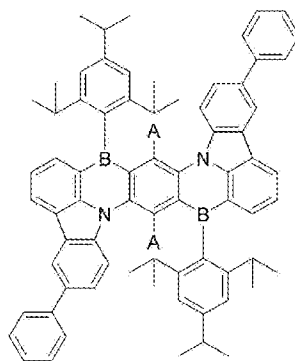
20a : A=A1
20b : A=A2
20c : A=A3
20d : A=A4
20e : A=A7
20f : A=A10
20g : A=A11
20h : A=A16
20i : A=A35
20j : A=A39
20k : A=A40
20l : A=A41
20m : A=A42



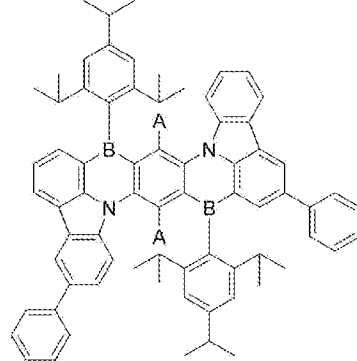
21a : A=A1
21b : A=A2
21c : A=A3
21d : A=A4
21e : A=A7
21f : A=A10
21g : A=A11
21h : A=A16
21i : A=A35
21j : A=A39
21k : A=A40
21l : A=A41
21m : A=A42



22a : A=A1
22b : A=A2
22c : A=A3
22d : A=A4
22e : A=A7
22f : A=A10
22g : A=A11
22h : A=A16
22i : A=A35
22j : A=A39
22k : A=A40
22l : A=A41
22m : A=A42

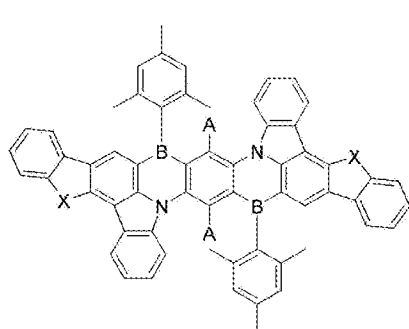


23a : A=A1
23b : A=A2
23c : A=A3
23d : A=A4
23e : A=A7
23f : A=A10
23g : A=A11
23h : A=A16
23i : A=A35
23j : A=A39
23k : A=A40
23l : A=A41
23m : A=A42

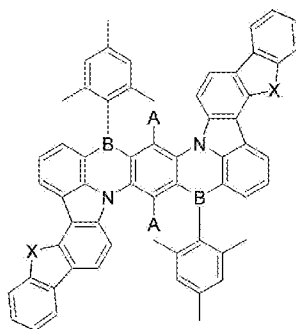


24a : A=A1
24b : A=A2
24c : A=A3
24d : A=A4
24e : A=A7
24f : A=A10
24g : A=A11
24h : A=A16
24i : A=A35
24j : A=A39
24k : A=A40
24l : A=A41
24m : A=A42

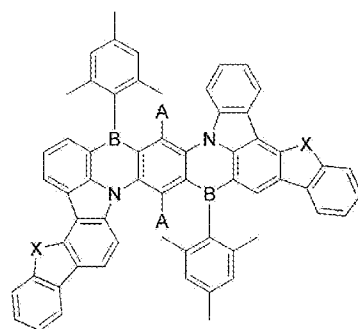
[化75-5]



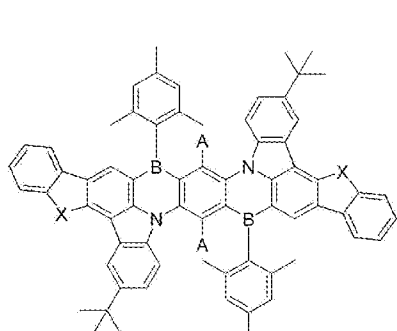
25 a : A=A 1
25 b : A=A 2
25 c : A=A 3
25 d : A=A 4
25 e : A=A 7
25 f : A=A 10
25 g : A=A 11
25 h : A=A 16
25 i : A=A 35
25 j : A=A 39
25 k : A=A 40
25 l : A=A 41
25 m : A=A 42



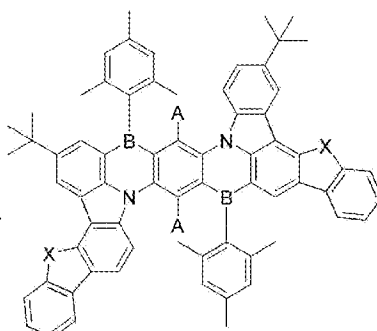
26 a : A=A 1
26 b : A=A 2
26 c : A=A 3
26 d : A=A 4
26 e : A=A 7
26 f : A=A 10
26 g : A=A 11
26 h : A=A 16
26 i : A=A 35
26 j : A=A 39
26 k : A=A 40
26 l : A=A 41
26 m : A=A 42



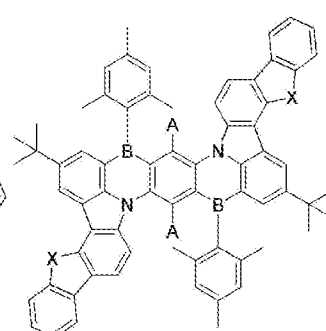
27 a : A=A 1
27 b : A=A 2
27 c : A=A 3
27 d : A=A 4
27 e : A=A 7
27 f : A=A 10
27 g : A=A 11
27 h : A=A 16
27 i : A=A 35
27 j : A=A 39
27 k : A=A 40
27 l : A=A 41
27 m : A=A 42



28 a : A=A 1
28 b : A=A 2
28 c : A=A 3
28 d : A=A 4
28 e : A=A 7
28 f : A=A 10
28 g : A=A 11
28 h : A=A 16
28 i : A=A 35
28 j : A=A 39
28 k : A=A 40
28 l : A=A 41
28 m : A=A 42

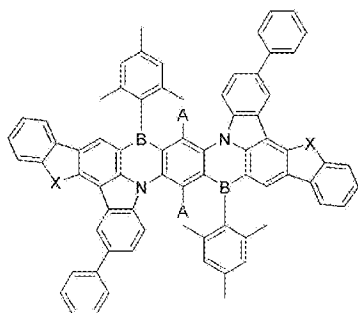


29 a : A=A 1
29 b : A=A 2
29 c : A=A 3
29 d : A=A 4
29 e : A=A 7
29 f : A=A 10
29 g : A=A 11
29 h : A=A 16
29 i : A=A 35
29 j : A=A 39
29 k : A=A 40
29 l : A=A 41
29 m : A=A 42

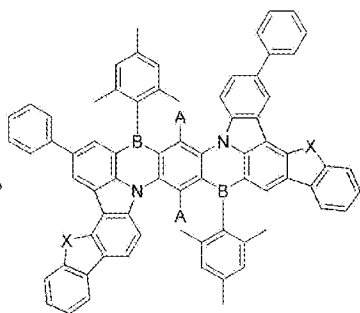


30 a : A=A 1
30 b : A=A 2
30 c : A=A 3
30 d : A=A 4
30 e : A=A 7
30 f : A=A 10
30 g : A=A 11
30 h : A=A 16
30 i : A=A 35
30 j : A=A 39
30 k : A=A 40
30 l : A=A 41
30 m : A=A 42

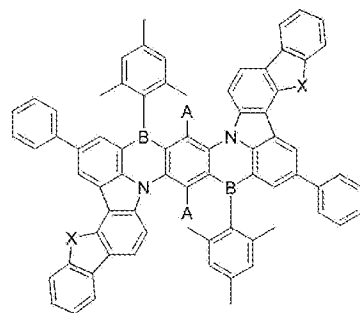
[化75-6]



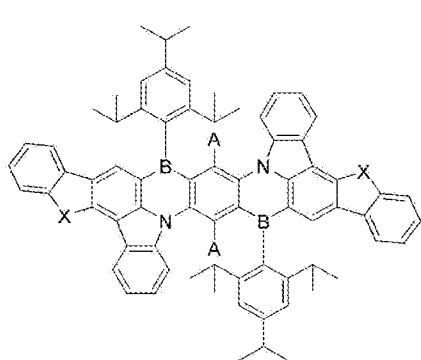
31 a : A=A 1
31 b : A=A 2
31 c : A=A 3
31 d : A=A 4
31 e : A=A 7
31 f : A=A 10
31 g : A=A 11
31 h : A=A 16
31 i : A=A 35
31 j : A=A 39
31 k : A=A 40
31 l : A=A 41
31 m : A=A 42



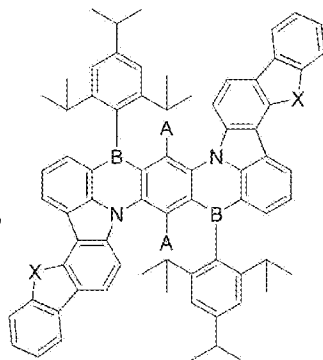
32 a : A=A 1
32 b : A=A 2
32 c : A=A 3
32 d : A=A 4
32 e : A=A 7
32 f : A=A 10
32 g : A=A 11
32 h : A=A 16
32 i : A=A 35
32 j : A=A 39
32 k : A=A 40
32 l : A=A 41
32 m : A=A 42



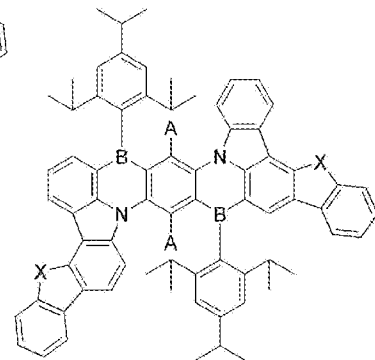
33 a : A=A 1
33 b : A=A 2
33 c : A=A 3
33 d : A=A 4
33 e : A=A 7
33 f : A=A 10
33 g : A=A 11
33 h : A=A 16
33 i : A=A 35
33 j : A=A 39
33 k : A=A 40
33 l : A=A 41
33 m : A=A 42



34 a : A=A 1
34 b : A=A 2
34 c : A=A 3
34 d : A=A 4
34 e : A=A 7
34 f : A=A 10
34 g : A=A 11
34 h : A=A 16
34 i : A=A 35
34 j : A=A 39
34 k : A=A 40
34 l : A=A 41
34 m : A=A 42

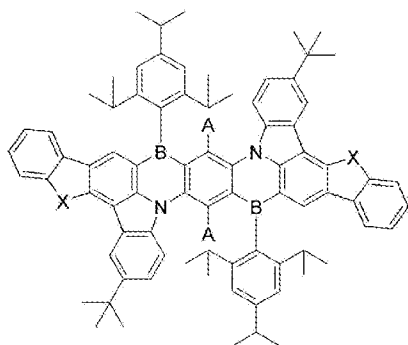


35 a : A=A 1
35 b : A=A 2
35 c : A=A 3
35 d : A=A 4
35 e : A=A 7
35 f : A=A 10
35 g : A=A 11
35 h : A=A 16
35 i : A=A 35
35 j : A=A 39
35 k : A=A 40
35 l : A=A 41
35 m : A=A 42

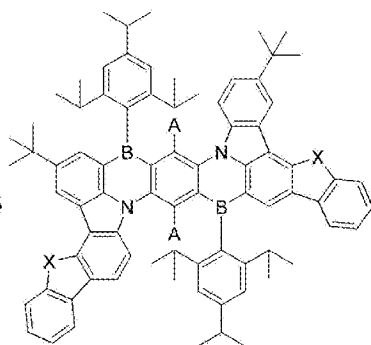


36 a : A=A 1
36 b : A=A 2
36 c : A=A 3
36 d : A=A 4
36 e : A=A 7
36 f : A=A 10
36 g : A=A 11
36 h : A=A 16
36 i : A=A 35
36 j : A=A 39
36 k : A=A 40
36 l : A=A 41
36 m : A=A 42

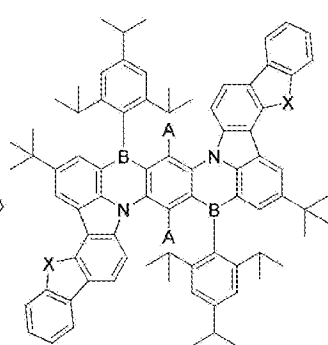
[化75-7]



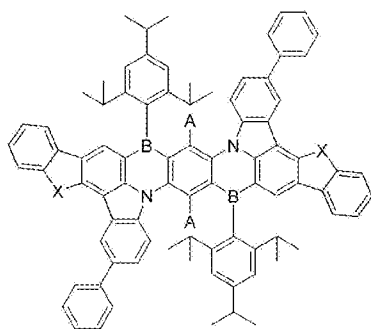
37 a : A=A 1
37 b : A=A 2
37 c : A=A 3
37 d : A=A 4
37 e : A=A 7
37 f : A=A 10
37 g : A=A 11
37 h : A=A 16
37 i : A=A 35
37 j : A=A 39
37 k : A=A 40
37 l : A=A 41
37 m : A=A 42



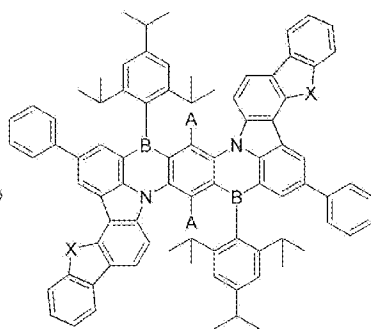
38 a : A=A 1
38 b : A=A 2
38 c : A=A 3
38 d : A=A 4
38 e : A=A 7
38 f : A=A 10
38 g : A=A 11
38 h : A=A 16
38 i : A=A 35
38 j : A=A 39
38 k : A=A 40
38 l : A=A 41
38 m : A=A 42



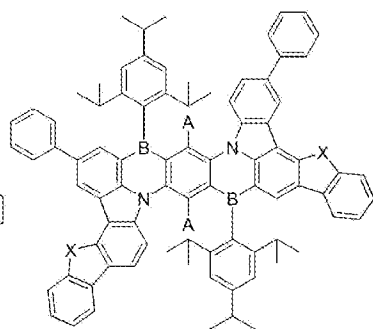
39 a : A=A 1
39 b : A=A 2
39 c : A=A 3
39 d : A=A 4
39 e : A=A 7
39 f : A=A 10
39 g : A=A 11
39 h : A=A 16
39 i : A=A 35
39 j : A=A 39
39 k : A=A 40
39 l : A=A 41
39 m : A=A 42



40 a : A=A 1
40 b : A=A 2
40 c : A=A 3
40 d : A=A 4
40 e : A=A 7
40 f : A=A 10
40 g : A=A 11
40 h : A=A 16
40 i : A=A 35
40 j : A=A 39
40 k : A=A 40
40 l : A=A 41
40 m : A=A 42

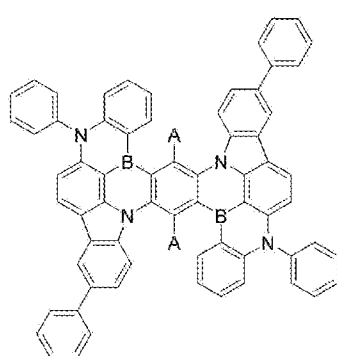


41 a : A=A 1
41 b : A=A 2
41 c : A=A 3
41 d : A=A 4
41 e : A=A 7
41 f : A=A 10
41 g : A=A 11
41 h : A=A 16
41 i : A=A 35
41 j : A=A 39
41 k : A=A 40
41 l : A=A 41
41 m : A=A 42

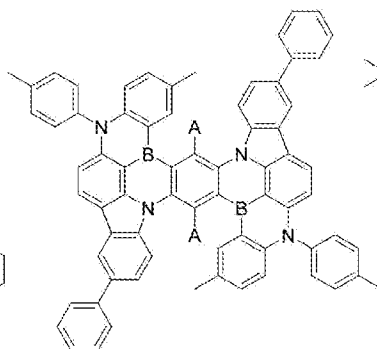


42 a : A=A 1
42 b : A=A 2
42 c : A=A 3
42 d : A=A 4
42 e : A=A 7
42 f : A=A 10
42 g : A=A 11
42 h : A=A 16
42 i : A=A 35
42 j : A=A 39
42 k : A=A 40
42 l : A=A 41
42 m : A=A 42

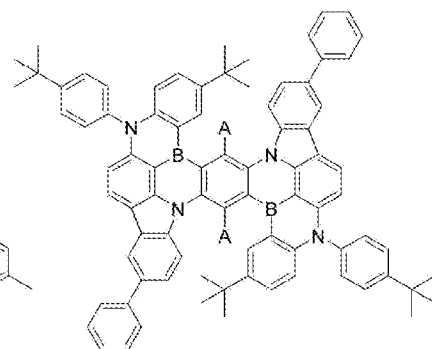
[化75-8]



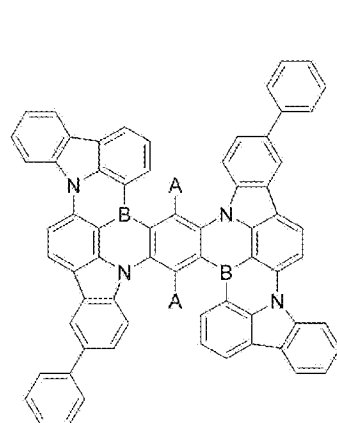
43 a : A=A 1
43 b : A=A 2
43 c : A=A 3
43 d : A=A 4
43 e : A=A 7
43 f : A=A 10
43 g : A=A 11
43 h : A=A 16
43 i : A=A 35
43 j : A=A 39
43 k : A=A 40
43 l : A=A 41
43 m : A=A 42



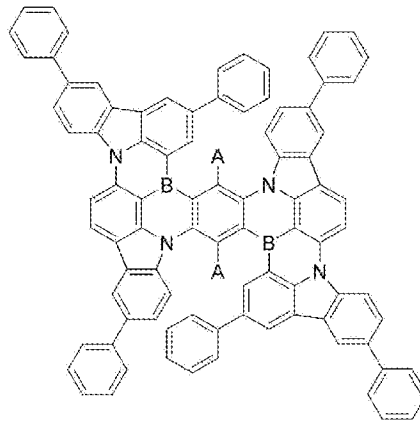
44 a : A=A 1
44 b : A=A 2
44 c : A=A 3
44 d : A=A 4
44 e : A=A 7
44 f : A=A 10
44 g : A=A 11
44 h : A=A 16
44 i : A=A 35
44 j : A=A 39
44 k : A=A 40
44 l : A=A 41
44 m : A=A 42



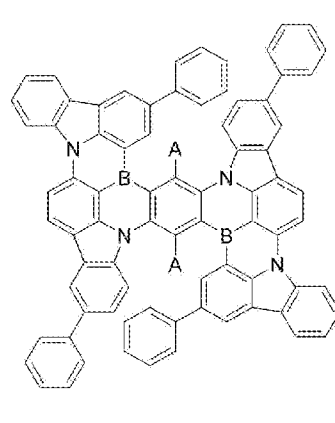
45 a : A=A 1
45 b : A=A 2
45 c : A=A 3
45 d : A=A 4
45 e : A=A 7
45 f : A=A 10
45 g : A=A 11
45 h : A=A 16
45 i : A=A 35
45 j : A=A 39
45 k : A=A 40
45 l : A=A 41
45 m : A=A 42



46 a : A=A 1
46 b : A=A 2
46 c : A=A 3
46 d : A=A 4
46 e : A=A 7
46 f : A=A 10
46 g : A=A 11
46 h : A=A 16
46 i : A=A 35
46 j : A=A 39
46 k : A=A 40
46 l : A=A 41
46 m : A=A 42

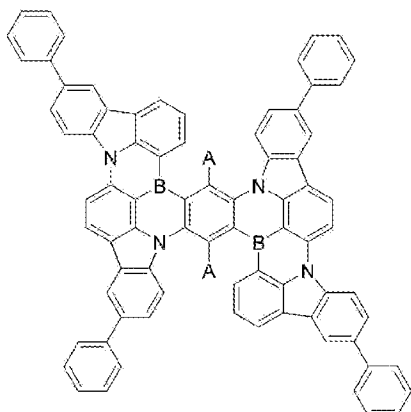


47 a : A=A 1
47 b : A=A 2
47 c : A=A 3
47 d : A=A 4
47 e : A=A 7
47 f : A=A 10
47 g : A=A 11
47 h : A=A 16
47 i : A=A 35
47 j : A=A 39
47 k : A=A 40
47 l : A=A 41
47 m : A=A 42



48 a : A=A 1
48 b : A=A 2
48 c : A=A 3
48 d : A=A 4
48 e : A=A 7
48 f : A=A 10
48 g : A=A 11
48 h : A=A 16
48 i : A=A 35
48 j : A=A 39
48 k : A=A 40
48 l : A=A 41
48 m : A=A 42

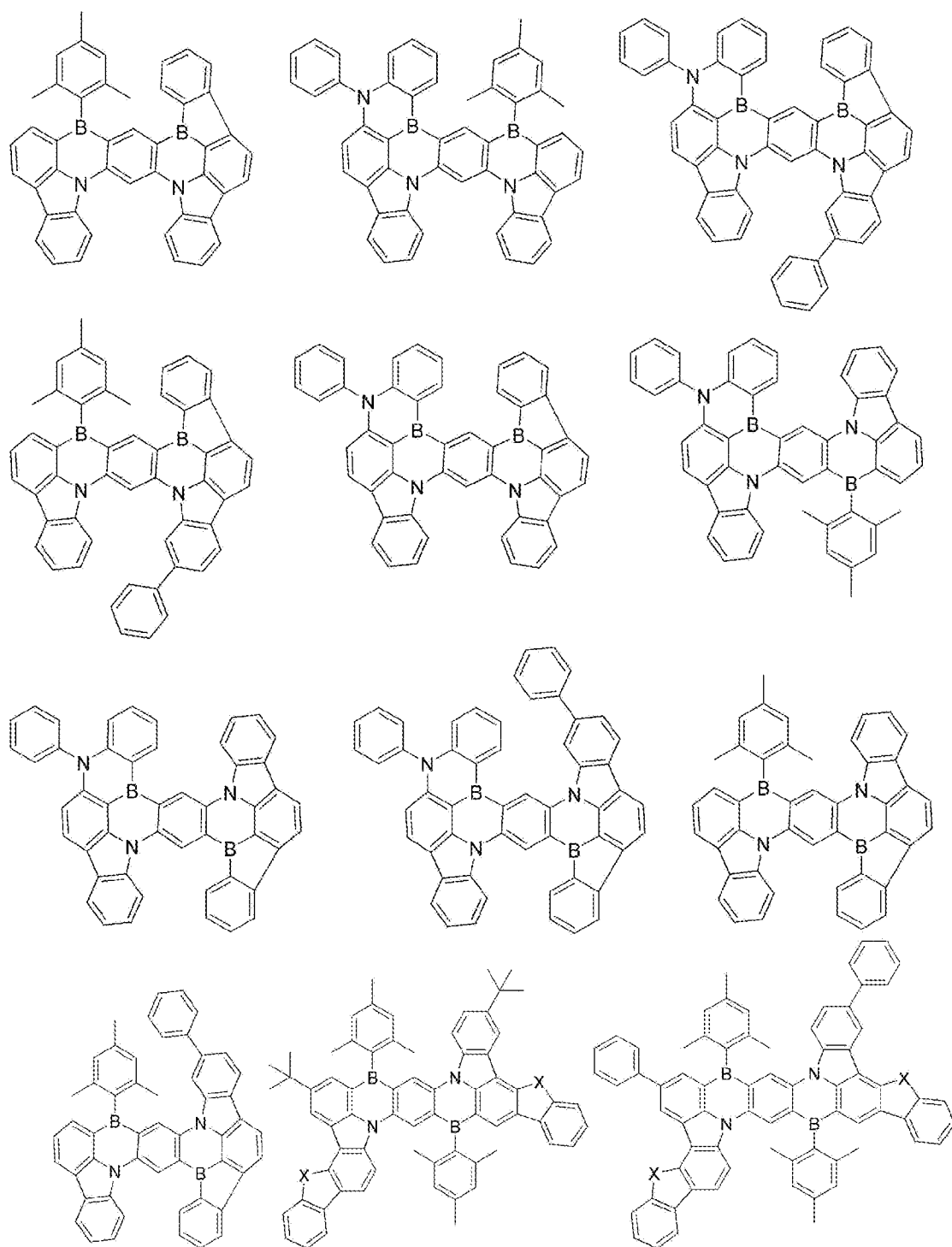
[化75-9]

49 a : A = A 149 b : A = A 249 c : A = A 349 d : A = A 449 e : A = A 749 f : A = A 1049 g : A = A 1149 h : A = A 1649 i : A = A 3549 j : A = A 3949 k : A = A 4049 l : A = A 4149 m : A = A 42

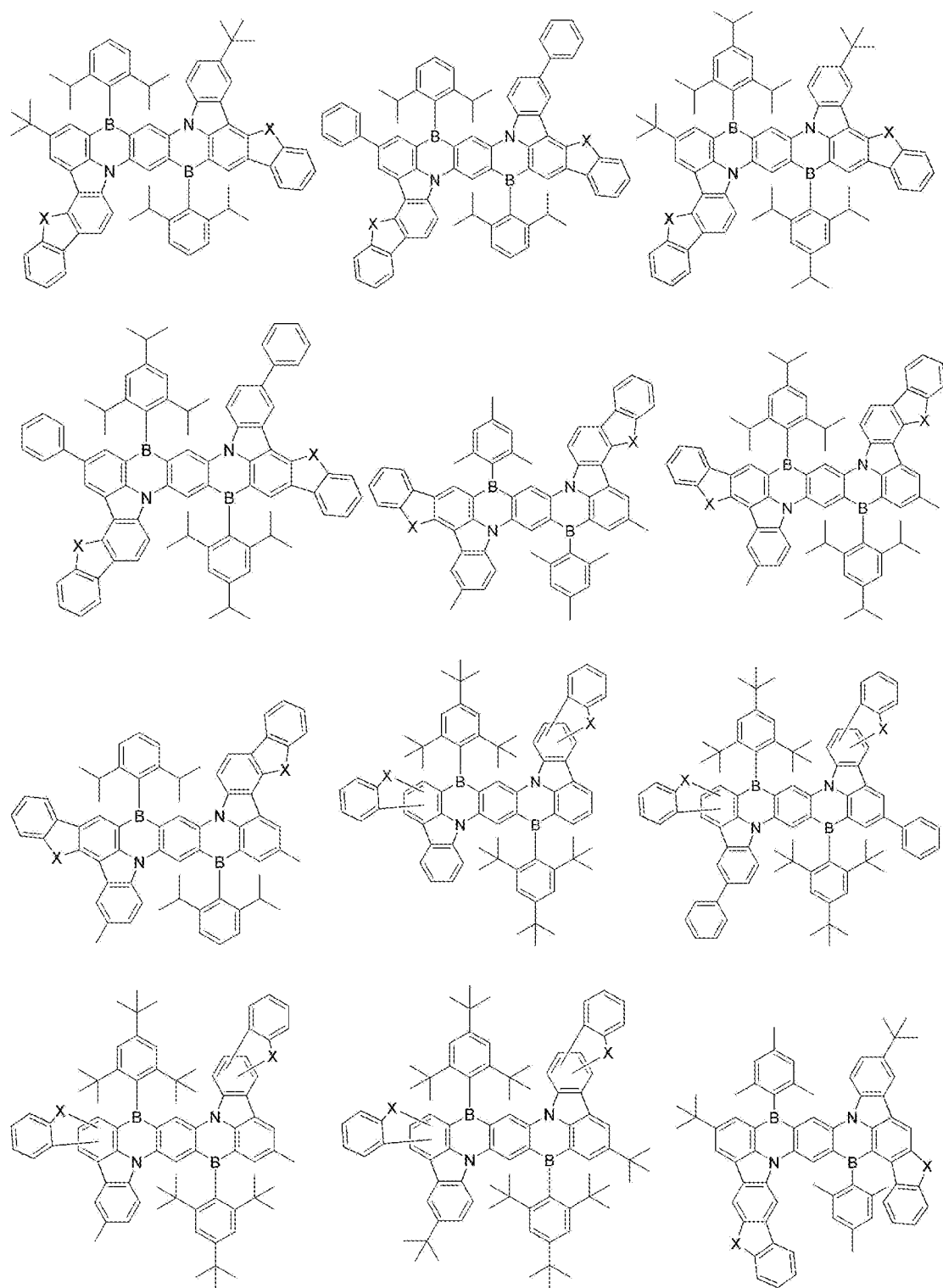
[0115] 本発明の一態様では、一般式（１）で表される化合物として回転対称構造を有する化合物を選択する。本発明の一態様では、一般式（１）で表される化合物として線対称構造を有する化合物を選択する。本発明の一態様では、一般式（１）で表される化合物として非対称構造を有する化合物を選択する。

以下に非対称骨格を有する化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる非対称骨格を有する化合物や非対称構造を有する化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。Xを含む具体例については、分子内のすべてのXが酸素原子である化合物と、分子内のすべてのXが硫黄原子である化合物がそれぞれ開示されているものとする。分子内のXの一部が酸素原子でその他が硫黄原子である化合物も採用することができる。

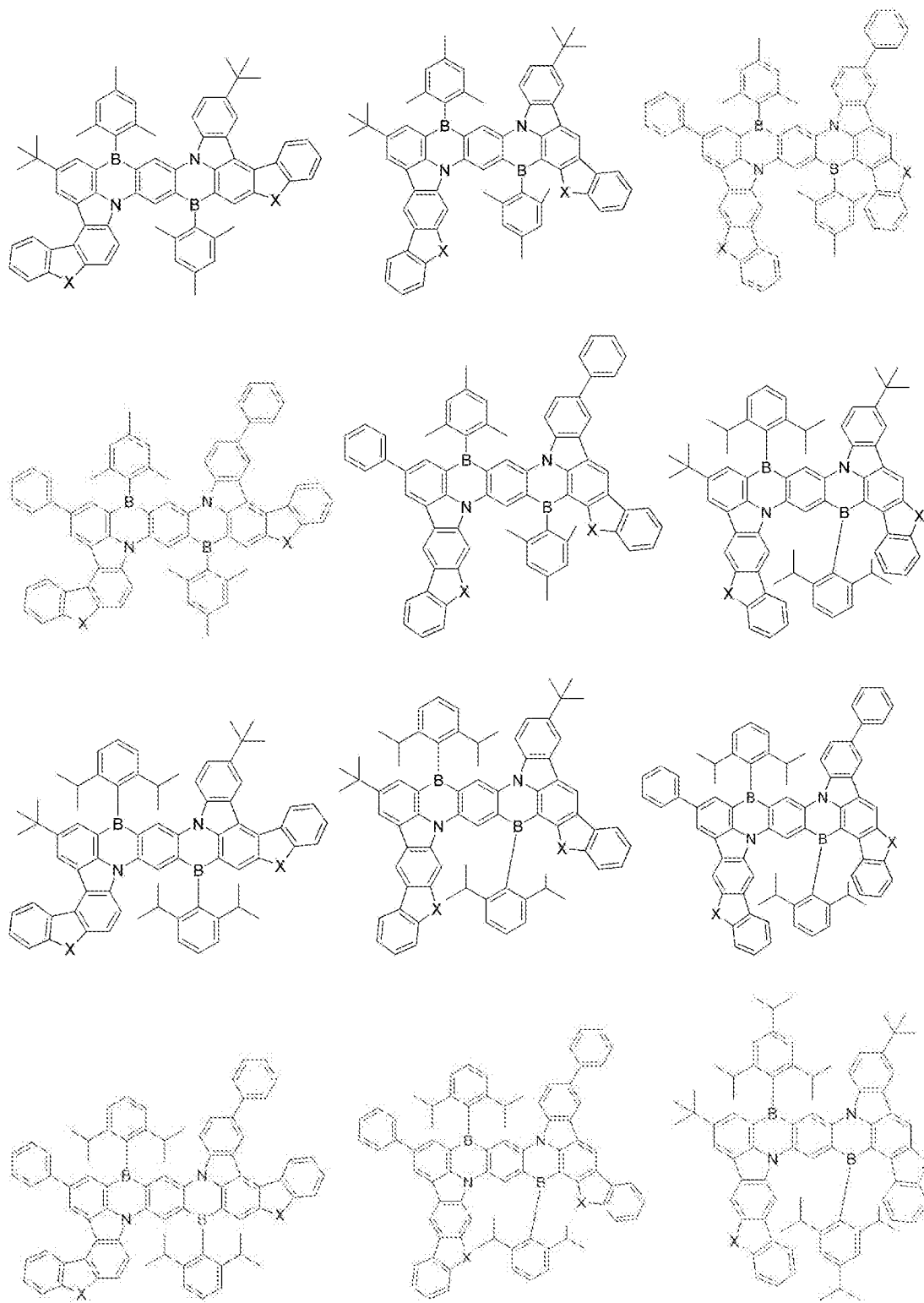
[化76-1]



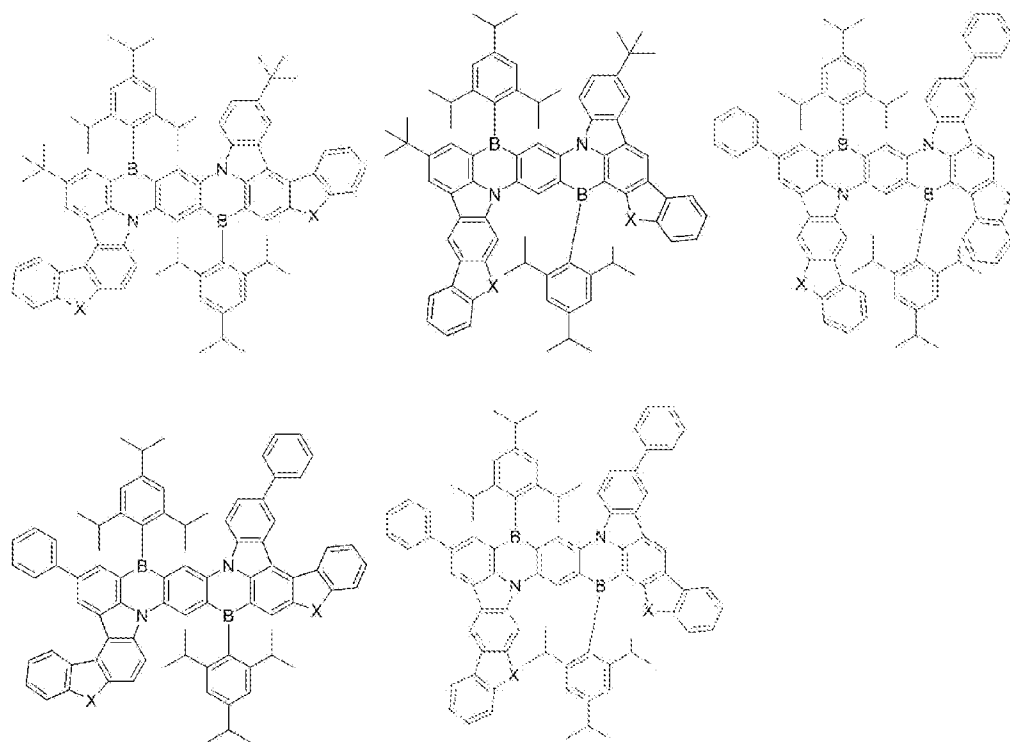
[化76-2]



[化76-3]

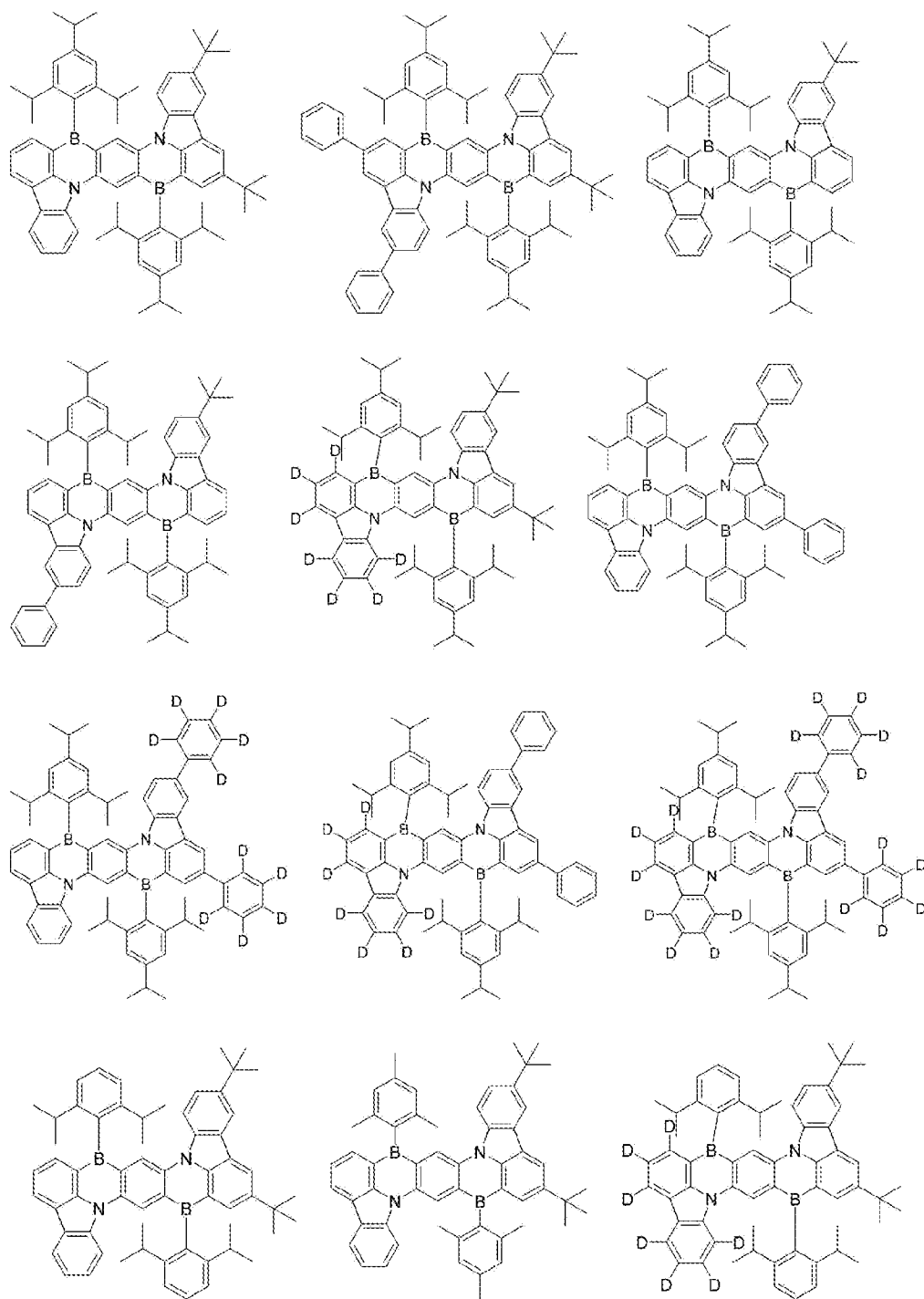


[化76-4]

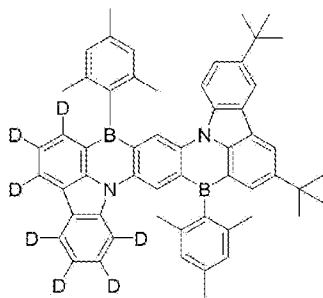


[0116] 以下に、対称骨格を有しているが、置換基が非対称に結合しているために非対称構造を有する化合物の具体例を挙げる。本発明で用いることができる非対称構造を有する化合物は、下記の具体例により限定的に解釈されることはない。

[化77-1]



[化77-2]



[0117] 本発明の一態様では、一般式（１）の R^3 はジアリールアミノ基（ジアリールアミノ基を構成する２つのアリール基は互いに結合していてもよい）ではない。本発明の好ましい一態様では、一般式（１）の R^3 は水素原子、重水素原子またはアクセプター性基である（ドナー性基ではない）。

本発明の一態様では、一般式（１a）の $n_1 \sim n_4$ の少なくとも１つが１以上である。本発明の好ましい一態様では、一般式（１a）の m_1 および m_2 の少なくとも１つが１以上である。本発明さらに好ましい一態様では、一般式（１a）の $n_1 \sim n_4$ の少なくとも１つが１以上であり、なおかつ、一般式（１a）の m_1 および m_2 の少なくとも１つが１以上である。

本発明の一態様では、一般式（１b）の $n_5 \sim n_8$ の少なくとも１つが１以上である。本発明の好ましい一態様では、一般式（１b）の m_3 および m_4 の少なくとも１つが１以上である。本発明のさらに好ましい一態様では、一般式（１b）の $n_5 \sim n_8$ の少なくとも１つが１以上であり、なおかつ、一般式（１a）の m_3 および m_4 の少なくとも１つが１以上である。

上記の m_1 および m_2 の少なくとも１つが１以上であり、 m_3 および m_4 の少なくとも１つが１以上であるとき、 R^{41} と R^{42} の少なくとも１つと R^{43} と R^{44} の少なくとも１つは重水素原子で置換されていてもよいアルキル基であることが好ましく、例えば $R^{41} \sim R^{44}$ のすべてが重水素原子で置換されていてもよいアルキル基である。上記の $n_1 \sim n_4$ の少なくとも１つが１以上であり、 $n_5 \sim n_8$ の少なくとも１つが１以上であるとき、 $Ar^1 \sim Ar^4$ の少なくとも１つと $Ar^5 \sim Ar^8$ の少なくとも１つは重水素原子やアルキル基で置換されていてもよいアリール基であることが好ましく、例えば $Ar^1 \sim$

A_r⁸のすべてが重水素原子やアルキル基で置換されていてもよいアリール基である。

本発明の一態様では、一般式（1）のX¹がホウ素原子でR⁸、R¹⁰、R¹²、R¹³、R¹⁵、R¹⁷がアルキル基（またはメチル基）であるとき、R¹～R⁷、R¹⁸～R²⁰、R²³～R²⁶の少なくとも1つは置換基であり、好ましくは置換基群Eの基であり、例えば重水素原子やアルキル基で置換されていてもよいアリール基である。本発明の一態様では、一般式（1）のX²がホウ素原子でR⁸、R¹⁰、R¹²、R²²、R²⁴、R²⁶がアルキル基（またはメチル基）であるとき、R¹～R⁷、R¹³～R¹⁶、R¹⁹～R²¹の少なくとも1つは置換基であり、好ましくは置換基群Eの基であり、例えば重水素原子やアルキル基で置換されていてもよいアリール基である。

本発明の一態様では、一般式（1）のX¹がホウ素原子で、R⁸とR⁹、R⁹とR¹⁰のいずれか1組と、R¹⁵とR¹⁶、R¹⁶とR¹⁷のいずれか1組が互いに結合して芳香環（またはベンゼン環）を形成しているとき、R¹～R⁷、R¹⁸～R²⁰、R²³～R²⁶の少なくとも1つは置換基であり、好ましくは置換基群Eの基であり、例えば重水素原子やアルキル基で置換されていてもよいアリール基である。本発明の一態様では、一般式（1）のX²がホウ素原子で、R⁸とR⁹、R⁹とR¹⁰のいずれか1組と、R²²とR²³、R²³とR²⁴のいずれか1組が互いに結合して芳香環（またはベンゼン環）を形成しているとき、R¹～R⁷、R¹³～R¹⁶、R¹⁹～R²¹の少なくとも1つは置換基であり、好ましくは置換基群Eの基であり、例えば重水素原子やアルキル基で置換されていてもよいアリール基である。

本発明の一態様では、一般式（1）のR⁹およびR¹¹は、シアノ基でもアルキル基でもない。すなわち、R⁹とR¹¹は、水素原子、重水素原子、または、シアノ基とアルキル基以外の置換基である。本発明の一態様では、一般式（1）のR⁹およびR¹¹は、シアノ基でもtert-ブチル基でもない。

本発明の好ましい一態様では、一般式（1）のR⁸～R¹²の少なくとも1つは置換基である。

本発明の一態様では、一般式（１）の R^3 は、置換アミノ基やアリール基ではない。本発明の一態様では、一般式（１）の R^3 は、置換アミノ基やフェニル基ではない。本発明の一態様では、一般式（１）の R^3 は、ジメチルアミノ基、ジフェニルアミノ基、フェニル基ではない。

本発明の好ましい一態様では、一般式（１）の $R^1 \sim R^{26}$ の少なくとも１つは置換基であり、より好ましくは $R^1 \sim R^{26}$ の少なくとも１つはアルキル基であり、例えば炭素数１～４のアルキル基である。

[0118] 一般式（１）で表される化合物の分子量は、例えば一般式（１）で表される化合物を含む有機層を蒸着法により製膜して利用することを意図する場合には、１５００以下であることが好ましく、１２００以下であることがより好ましく、１０００以下であることがさらに好ましく、９００以下であることがさらに好ましい。分子量の下限値は、一般式（１）で表される化合物群の最小化合物の分子量である。好ましくは６２４以上である。

[0119] 一般式（１）で表される化合物は、金属原子を含まないことが好ましい。ここでいう金属原子にはホウ素原子は含まれない。例えば、一般式（１）で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式（１）で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式（１）で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、硫黄原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式（１）で表される化合物として、炭素原子、水素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。

[0120] 一般式(1)で表される化合物は、既知の反応を組み合わせることによって合成することができる。例えば、閉環反応を利用したり、置換反応を利用したりすることにより合成することができる。

[0121] 本明細書において「アルキル基」は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよい。また、直鎖部分と環状部分と分枝部分のうちの2種以上が混在していてもよい。アルキル基の炭素数は、例えば1以上、2以上、4以上とすることができる。また、炭素数は30以下、20以下、10以下、6以下、4以下とすることができる。アルキル基の具体例として、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*tert*-ブチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、*n*-ヘキシル基、イソヘキシル基、2-エチルヘキシル基、*n*-ヘプチル基、イソヘプチル基、*n*-オクチル基、イソオクチル基、*n*-ノニル基、イソノニル基、*n*-デカニル基、イソデカニル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基を挙げることができる。置換基たるアルキル基は、さらにアリール基で置換されていてもよい。

「アルケニル基」は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよい。また、直鎖部分と環状部分と分枝部分のうちの2種以上が混在していてもよい。アルケニル基の炭素数は、例えば2以上、4以上とすることができる。また、炭素数は30以下、20以下、10以下、6以下、4以下とすることができる。アルケニル基の具体例として、エテニル基、*n*-プロペニル基、イソプロペニル基、*n*-ブテニル基、イソブテニル基、*n*-ペンテニル基、イソペンテニル基、*n*-ヘキセニル基、イソヘキセニル基、2-エチルヘキセニル基を挙げることができる。置換基たるアルケニル基は、さらに置換基で置換されていてもよい。

「アリール基」および「ヘテロアリール基」は、単環であってもよいし、2つ以上の環が縮合した縮合環であってもよい。縮合環である場合、縮合している環の数は2～6であることが好ましく、例えば2～4の中から選択することができる。環の具体例として、ベンゼン環、ピリジン環、ピリミジン

環、トリアジン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、トリフェニレン環、キノリン環、ピラジン環、キノキサリン環、ナフチリジン環を挙げることができ、これらが縮合した環であってもよい。アリール基またはヘテロアリール基の具体例として、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、9-アントラセニル基、2-ピリジル基、3-ピリジル基、4-ピリジル基を挙げることができる。アリール基の環骨格構成原子数は6～40であることが好ましく、6～20であることがより好ましく、6～14の範囲内で選択したり、6～10の範囲内で選択したりしてもよい。ヘテロアリール基の環骨格構成原子数は4～40であることが好ましく、5～20であることがより好ましく、5～14の範囲内で選択したり、5～10の範囲内で選択したりしてもよい。「アリーレン基」および「ヘテロアリール基」は、アリール基およびヘテロアリール基の説明における価数を1から2へ読み替えたものとしてすることができる。

[0122] 本明細書において「置換基群A」とは、ヒドロキシル基、ハロゲン原子（例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子）、アルキル基（例えば炭素数1～40）、アルコキシ基（例えば炭素数1～40）、アルキルチオ基（例えば炭素数1～40）、アリール基（例えば炭素数6～30）、アリールオキシ基（例えば炭素数6～30）、アリールチオ基（例えば炭素数6～30）、ヘテロアリール基（例えば環骨格構成原子数5～30）、ヘテロアリールオキシ基（例えば環骨格構成原子数5～30）、ヘテロアリールチオ基（例えば環骨格構成原子数5～30）、アシル基（例えば炭素数1～40）、アルケニル基（例えば炭素数1～40）、アルキニル基（例えば炭素数1～40）、アルコキシカルボニル基（例えば炭素数1～40）、アリールオキシカルボニル基（例えば炭素数1～40）、ヘテロアリールオキシカルボニル基（例えば炭素数1～40）、シリル基（例えば炭素数1～40のトリアルキルシリル基）およびニトロ基からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせ形成される基を意味する。

本明細書において「置換基群B」とは、アルキル基（例えば炭素数1～40）、アルコキシ基（例えば炭素数1～40）、アリール基（例えば炭素数6～30）、アリールオキシ基（例えば炭素数6～30）、ヘテロアリール基（例えば環骨格構成原子数5～30）、ヘテロアリールオキシ基（例えば環骨格構成原子数5～30）、ジアリールアミノアミノ基（例えば炭素原子数0～20）からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせ形成される基を意味する。

本明細書において「置換基群C」とは、アルキル基（例えば炭素数1～20）、アリール基（例えば炭素数6～22）、ヘテロアリール基（例えば環骨格構成原子数5～20）、ジアリールアミノ基（例えば炭素原子数12～20）からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせ形成される基を意味する。

本明細書において「置換基群D」とは、アルキル基（例えば炭素数1～20）、アリール基（例えば炭素数6～22）およびヘテロアリール基（例えば環骨格構成原子数5～20）からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせ形成される基を意味する。

本明細書において「置換基群E」とは、アルキル基（例えば炭素数1～20）およびアリール基（例えば炭素数6～22）からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせ形成される基を意味する。

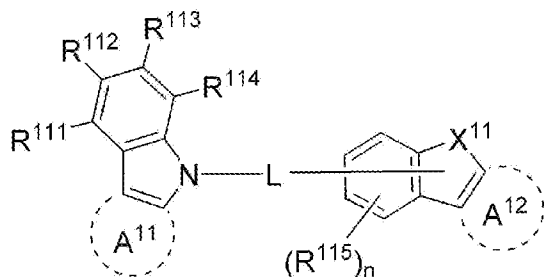
本明細書において「置換基」や「置換もしくは無置換の」と記載されている場合の置換基は、例えば置換基群Aの中から選択してもよいし、置換基群Bの中から選択してもよいし、置換基群Cの中から選択してもよいし、置換基群Dの中から選択してもよいし、置換基群Eの中から選択してもよい。

[0123] [一般式(2)で表される化合物]

次に、下記一般式(2)で表される化合物について説明する。

一般式(2)

[化78]



[0124] 一般式(2)において、X¹¹は、O、S、N(R^A)またはC(R^B)(R^C)を表す。本発明の一態様では、X¹¹はO、SまたはN(R^A)である。本発明の一態様では、X¹¹はOまたはSである。本発明の一態様では、X¹¹はN(R^A)である。本発明の一態様では、X¹¹はOである。本発明の一態様では、X¹¹はSである。X¹¹がO、SまたはC(R^B)(R^C)であるとき、Lは(R¹¹⁵)_nが結合しているベンゼン環に結合する。X¹¹がN(R^A)であるとき、Lは(R¹¹⁵)_nが結合しているベンゼン環か、あるいはX¹¹が表すNに結合する。Lから右方に伸長する結合手は、ここで説明したように、(R¹¹⁵)_nが結合しているベンゼン環に結合するか、あるいはX¹¹がNであるときにX¹¹(すなわちN)に結合することを意味している。

[0125] 一般式(2)において、A¹¹およびA¹²は、各々独立にベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環またはシクロペンタジエン環であって、これらの環にはさらに他の環が縮合していてもよく、また置換されていてもよい。本発明の好ましい一態様では、A¹¹はベンゼン環である。本発明の好ましい一態様では、A¹²はベンゼン環である。本発明のさらに好ましい一態様では、A¹¹およびA¹²はともにベンゼン環である。本発明の一態様では、A¹¹とA¹²の少なくとも一方は、フラン環、チオール環、ピロール環またはシクロペンタジエン環である。本発明の一態様では、A¹¹とA¹²の少なくとも一方はフラン環である。本発明の一態様では、A¹¹とA¹²の少なくとも一方はチオール環である。本発明の一態様では、A¹¹とA¹²の少なくとも一方はピロール環である。本発明の一態様では、A¹¹とA¹²の少なくとも一方はシクロペンタジエン環である。

ここでいうベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環およびシクロペンタジエン環には、さらに別の環が縮合していてもよい。縮合している環は、芳香族炭化水素環、芳香族複素環、脂肪族炭化水素環、脂肪族複素環のいずれであってもよく、また、これらの2個以上が縮合している環であってもよい。好ましくは芳香族炭化水素環、芳香族複素環、またはこれらの2個以上が縮合した環である。芳香族炭化水素環としてベンゼン環を挙げることができる。芳香族複素環は、環骨格構成原子としてヘテロ原子を含む芳香性を示す環を意味し、5～7員環であることが好ましく、例えば5員環であるものや、6員環であるものを採用したりすることができる。本発明の一態様では、芳香族複素環としてフラン環、チオフェン環、ピロール環を採用することができる。脂肪族炭化水素環は、芳香族性を示さない炭化水素環であることが好ましく、5～7員環であることが好ましく、例えば5員環であるものや、6員環であるものを採用したりすることができる。例えばシクロペンタジエン環を採用することができる。脂肪族複素環は、環骨格構成原子としてヘテロ原子を含む、芳香族性を示さない環を意味し、5～7員環であることが好ましく、例えば5員環であるものや、6員環であるものを採用したりすることができる。

本発明の一態様では、 A^{11} がベンゼン環であって、そのベンゼン環にさらにベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環、またはこれらの2個以上が縮合した環が縮合している。本発明の一態様では、 A^{11} がベンゼン環であって、そのベンゼン環にさらにベンゼン環、フラン環、チオール環、またはこれらの2個以上が縮合した環が縮合している。本発明の一態様では、 A^{11} がベンゼン環であって、そのベンゼン環にベンゾフランのフラン環またはベンゾチオフェンのチオフェン環が縮合している。本発明の一態様では、 A^{11} がベンゾフランのフラン環で縮合している。本発明の一態様では、 A^{11} がベンゾチオフェンのチオフェン環で縮合している。本発明の一態様では、 A^{12} がベンゼン環であって、そのベンゼン環にさらにベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環、またはこれらの2個以上が縮合した環が縮合してい

る。本発明の一態様では、 A^{12} がベンゼン環であって、そのベンゼン環にさらにベンゼン環、フラン環、チオール環、またはこれらの2個以上が縮合した環が縮合している。本発明の一態様では、 A^{12} がベンゼン環であって、そのベンゼン環にベンゾフランのフラン環またはベンゾチオフェンのチオフェン環が縮合している。本発明の一態様では、 A^{12} がベンゾフランのフラン環で縮合している。本発明の一態様では、 A^{12} がベンゾチオフェンのチオフェン環で縮合している。

A^{11} や A^{12} を構成する環の水素原子は、重水素原子や置換基で置換されていてもよい。置換基は、置換基群A～Eのいずれかの中から選択することができ、例えば置換基群Eの中から選択する。本発明の一態様では、 A^{11} や A^{12} を構成する環は、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、およびシアノ基からなる群より選択される1個の原子か基または2個以上を組み合わせた基で置換されていてもよい。本発明の一態様では、 A^{11} や A^{12} を構成する環は、重水素原子、アルキル基、アリール基、またはこれらを組み合わせた基で置換されていてもよい。本発明の一態様では、 A^{11} や A^{12} を構成する環は、重水素原子、アルキル基、アリール基、またはこれらを組み合わせた基で少なくとも1個が置換されている。なお、 A^{11} や A^{12} を構成する環としてピロール環が含まれているとき、そのピロール環の環骨格構成窒素原子には、重水素原子、アルキル基またはアリール基で置換されていてもよいアリール基が結合していることが好ましい（後述するインドール環の窒素原子も同じである）。 A^{11} や A^{12} を構成する環の2つ以上の水素原子が置換されているとき、それらは同じ原子や基で置換されていてもよいし、異なる原子や基で置換されていてもよい。

[0126] 一般式(2)において、 $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^B 、 R^C は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはシアノ基を表す。 R^{115} は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリー

ル基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、シアノ基、またはLとの結合（すなわちLへの単結合）を表す。R^Aは、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはLとの結合（すなわちLへの単結合）を表す。アリール基、ヘテロアリール基、アルキル基については、上記の「アリール基」、「ヘテロアリール基」、「アルキル基」の説明を参照することができる。アリール基の炭素数は6～14が好ましく、例えばフェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基を挙げることができる。ヘテロアリール基は5員環または6員環で構成されているものが好ましく、2-ピリジル基、3-ピリジル基、4-ピリジル基、カルバゾール-9-イル基、ジベンゾフリル基、ジベンゾチエニル基を挙げることができる。アルキル基の炭素数は1～6が好ましく、例えばメチル基、エチル基、イソプロピル基、tert-ブチル基を挙げることができる。これらのアリール基、ヘテロアリール基、アルキル基は置換されていてもよく、置換されている場合は、重水素原子、アリール基、ヘテロアリール基、アルキル基、シアノ基からなる群より選択される1つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基で置換されていることが好ましく、重水素原子、アリール基、ヘテロアリール基、アルキル基からなる群より選択される1つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基で置換されていることがより好ましい。本発明の一態様では、R¹¹²が置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはシアノ基である。本発明の一態様では、R¹¹¹～R¹¹⁴は、各々独立に水素原子または重水素原子である。

R¹¹¹とR¹¹²、R¹¹²とR¹¹³、R¹¹³とR¹¹⁴、隣り合う2個のR¹¹⁵、R^BとR^Cは、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ここでいう環状構造については、上記のA¹¹とA¹²の説明欄におけるベンゼン環にさらに縮合する環の記載を参照することができる。本発明の一態様では、R¹¹¹とR¹¹²、R¹¹²とR¹¹³、R¹¹³とR¹¹⁴の1組が互いに結合してベンゾフラン環（フラン環で縮合する）、ベンゾチオフェン環（チオフェン環で縮合する）

またはインドール環（ピロール環で縮合する）を形成している。

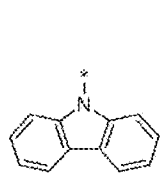
[0127] 本発明の一態様では、一般式（2）においてLに左から結合している基は、置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基である。例えば、重水素原子、アルキル基、アリール基、またはこれらを組み合わせた基で3位か6位の少なくとも一方（好ましくは両方）が置換されているカルバゾール-9-イル基である。また、無置換のカルバゾール-9-イル基であってもよい。本発明の一態様では、一般式（2）においてLに左から結合している基は、ベンゾフロ[2, 3-a]カルバゾール-9-イル基、ベンゾフロ[3, 2-a]カルバゾール-9-イル基、ベンゾフロ[2, 3-b]カルバゾール-9-イル基、ベンゾフロ[3, 2-b]カルバゾール-9-イル基、またはベンゾフロ[2, 3-c]カルバゾール-9-イル基である（これらの基は置換されていてもよいが、例えば無置換である）。本発明の一態様では、一般式（2）においてLに左から結合している基は、ベンゾチエノ[2, 3-a]カルバゾール-9-イル基、ベンゾチエノ[3, 2-a]カルバゾール-9-イル基、ベンゾチエノ[2, 3-b]カルバゾール-9-イル基、ベンゾチエノ[3, 2-b]カルバゾール-9-イル基、ベンゾチエノ[2, 3-c]カルバゾール-9-イル基、ベンゾチエノ[3, 2-c]カルバゾール-9-イル基である（これらの基は置換されていてもよいが、例えば無置換である）。本発明の一態様では、一般式（2）においてLに左から結合している基は、インドロ[2, 3-a]カルバゾール-9-イル基、インドロ[3, 2-a]カルバゾール-9-イル基、インドロ[2, 3-b]カルバゾール-9-イル基、インドロ[3, 2-b]カルバゾール-9-イル基、インドロ[2, 3-c]カルバゾール-9-イル基、インドロ[3, 2-c]カルバゾール-9-イル基である（これらの基は置換されていてもよいが、例えば無置換である）。

本発明の一態様では、一般式（2）においてLに右から結合している基についても、上記のLに左から結合している基として例示した基を採用することができる。ただし、無置換のカルバゾール-9-イル基であることはない。

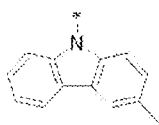
。一般式（2）の X^{11} がNで、LがそのNに結合しているとき、 R^{115} の少なくとも1個か A^{12} が表す環に結合する基の少なくとも1個は置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基またはシアノ基である。すなわち、 X^{11} がNで、LがそのNに結合しているとき、Lに右から結合している基には置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基またはシアノ基が少なくとも1個は存在する。

[0128] 以下において、一般式（2）においてLの左から結合している基として採りうる基の具体例を挙げる。ただし、本発明で採用することができる基は、これらの具体例によって限定的に解釈されることはない。なお、以下の具体例において、メチル基は表示を省略している。このため、例えばD 2やD 3はメチル基で置換されている。＊はLへの結合位置を示す。

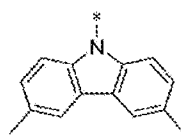
[化79-1]



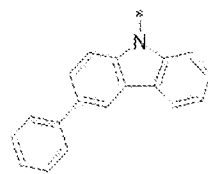
D1



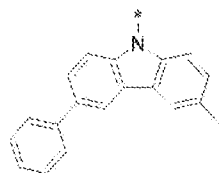
D2



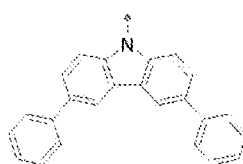
D3



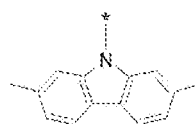
D4



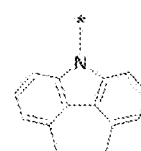
D5



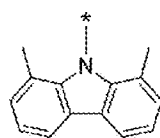
D6



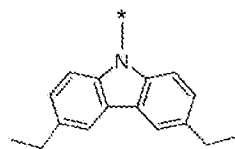
D7



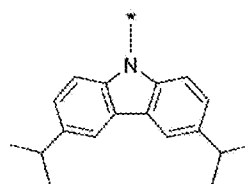
D8



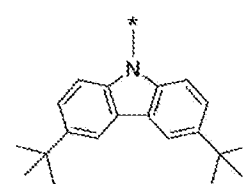
D9



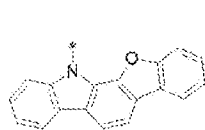
D10



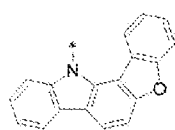
D11



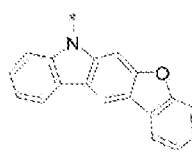
D12



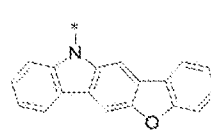
D13



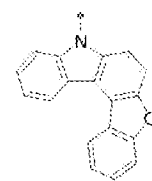
D14



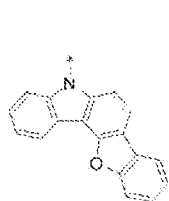
D15



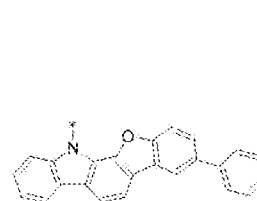
D16



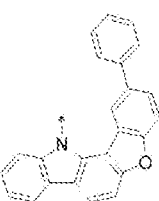
D17



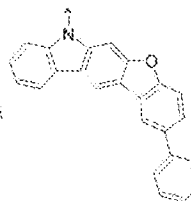
D18



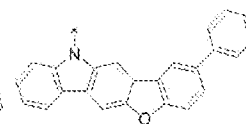
D19



D20

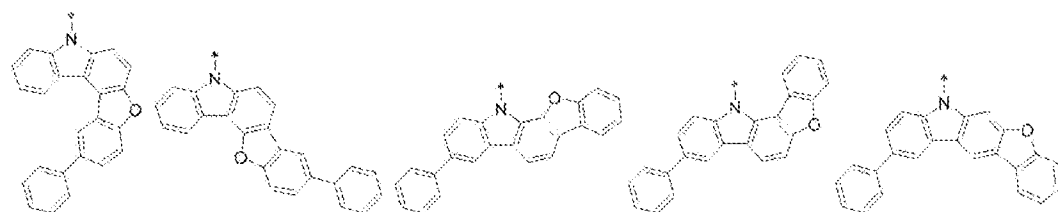


D21



D22

[化79-2]



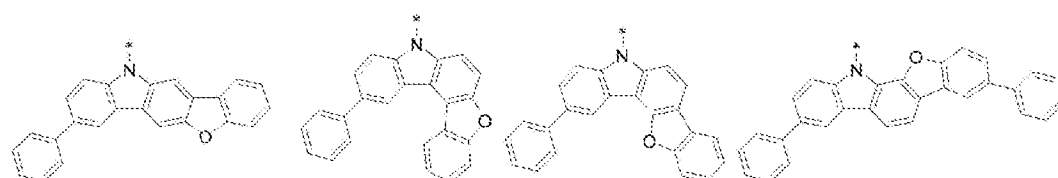
D23

D24

D25

D26

D27

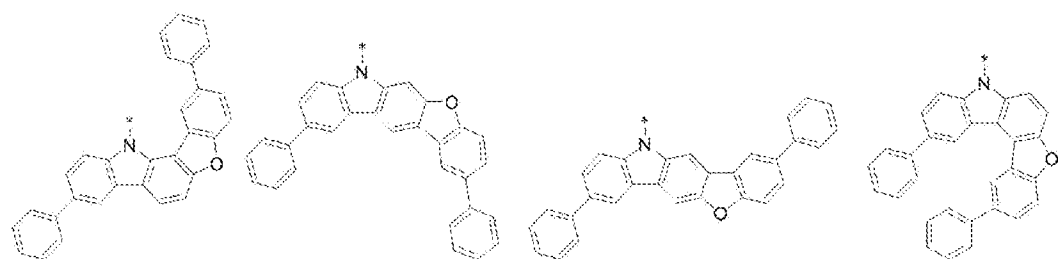


D28

D29

D30

D31

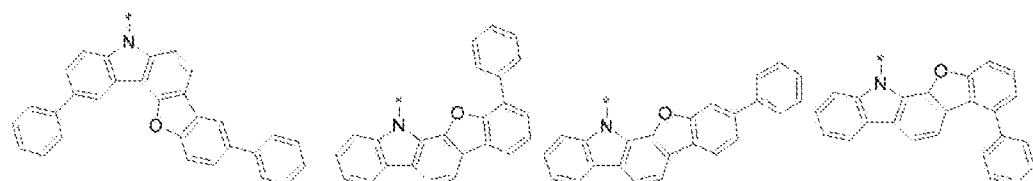


D32

D33

D34

D35

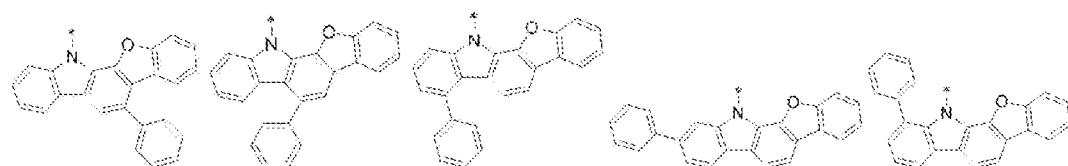


D36

D37

D38

D39



D40

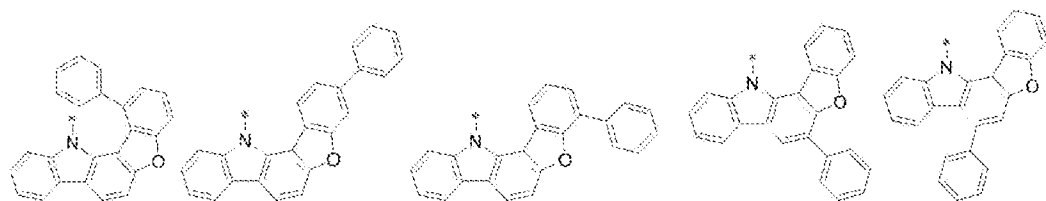
D41

D42

D43

D44

[化79-3]



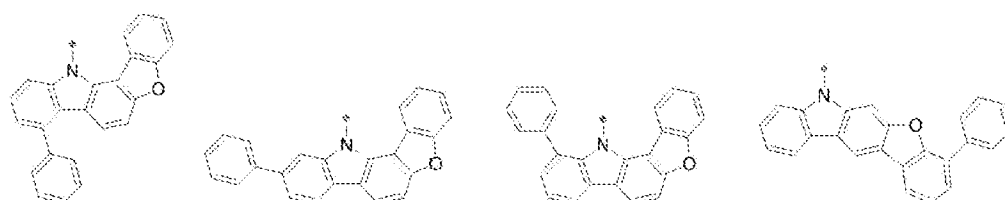
D45

D46

D47

D48

D49

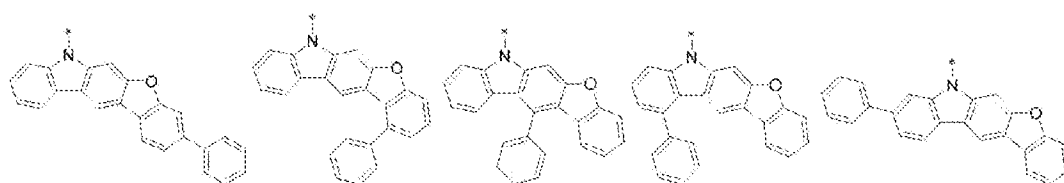


D50

D51

D52

D53



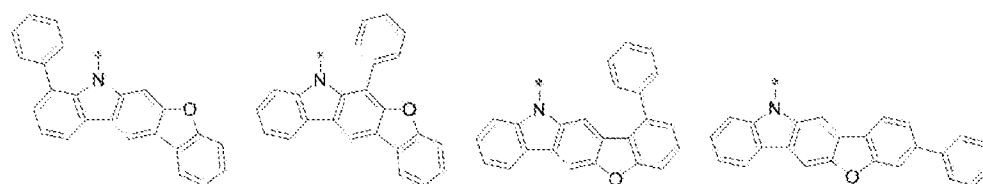
D54

D55

D56

D57

D58

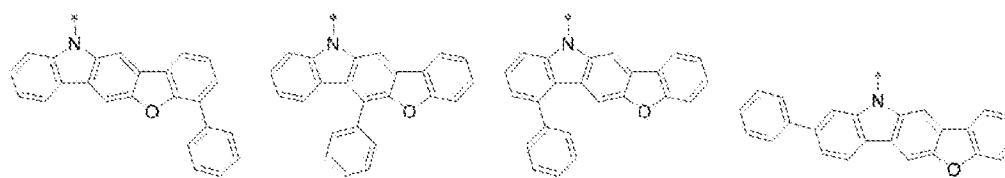


D59

D60

D61

D62



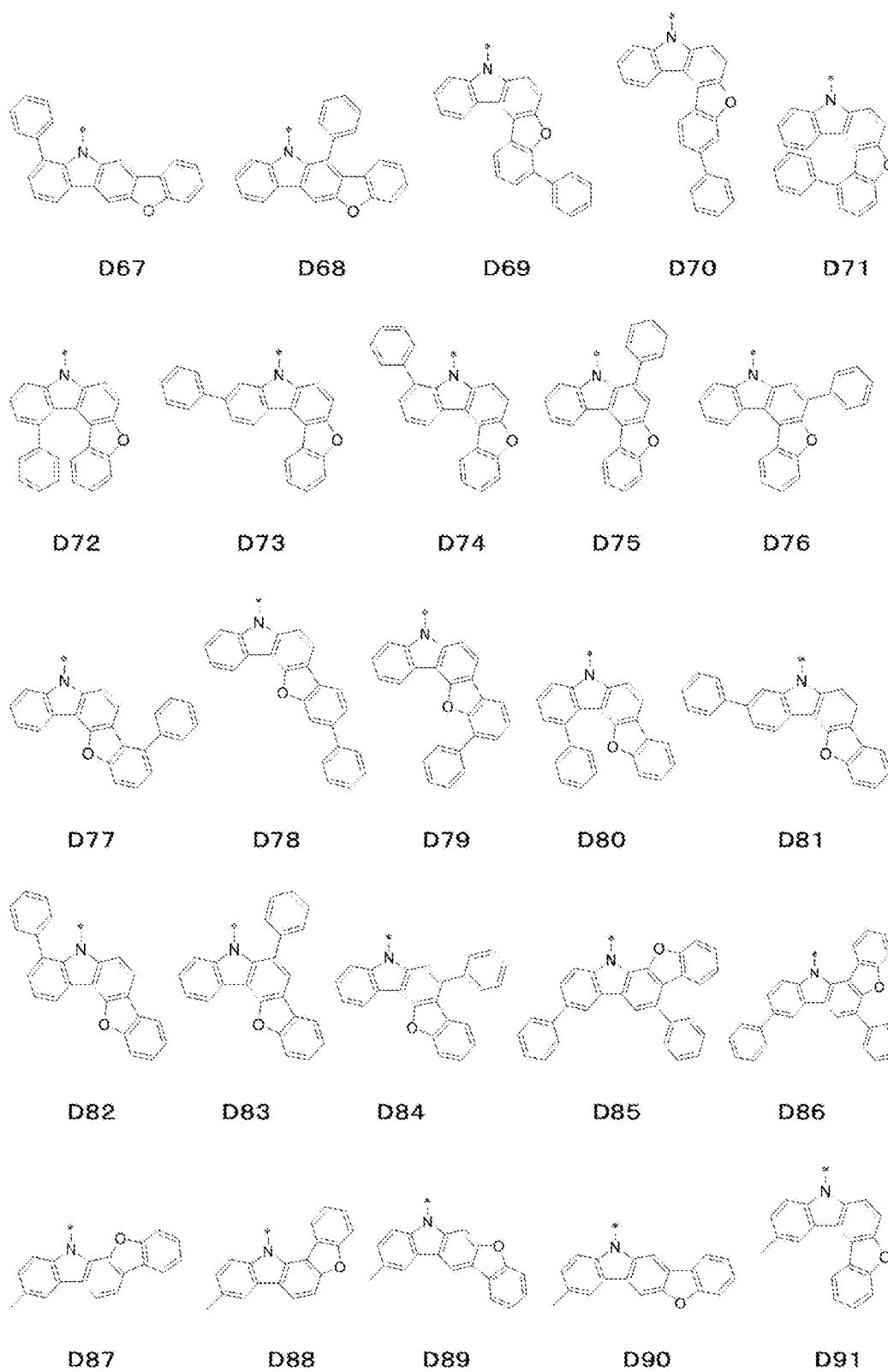
D63

D64

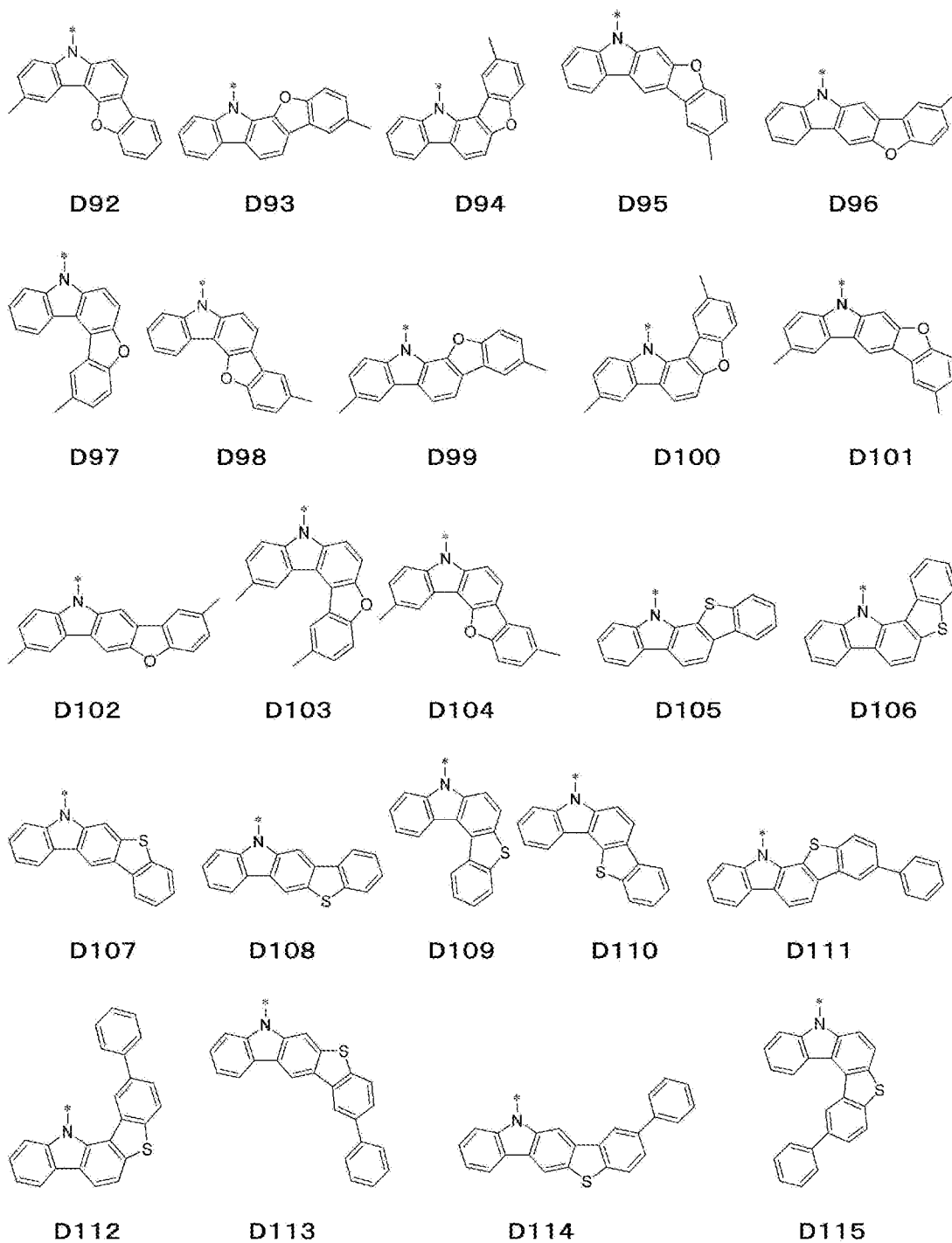
D65

D66

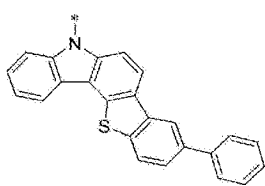
[化79-4]



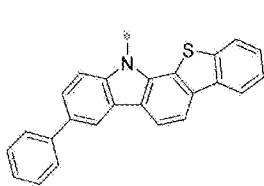
[化79-5]



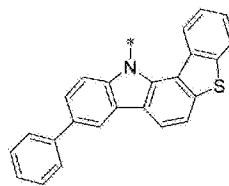
[化79-6]



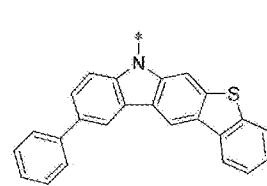
D116



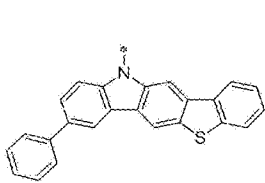
D117



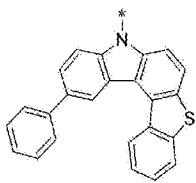
D118



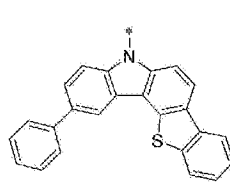
D119



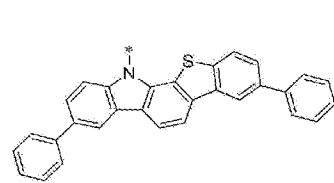
D120



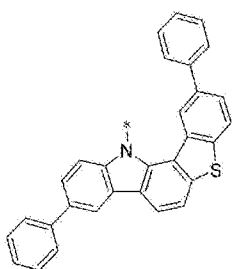
D121



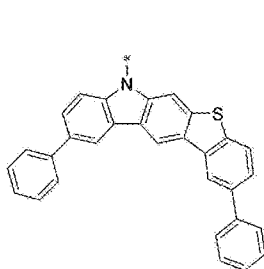
D122



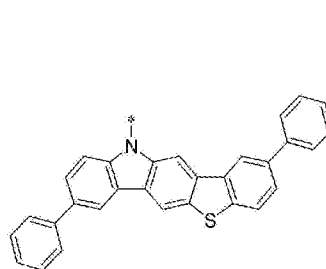
D123



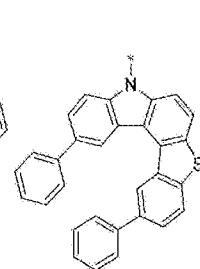
D124



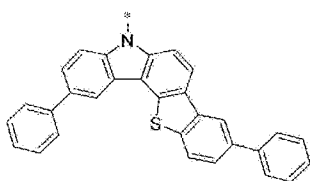
D125



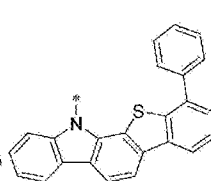
D126



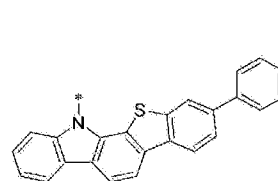
D127



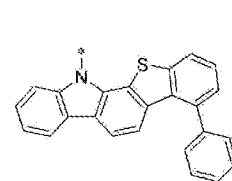
D128



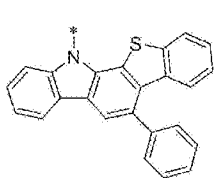
D129



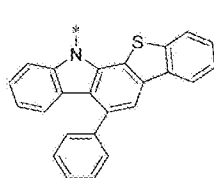
D130



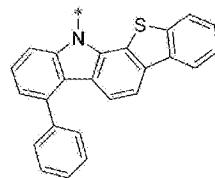
D131



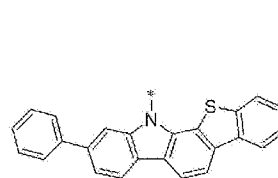
D132



D133

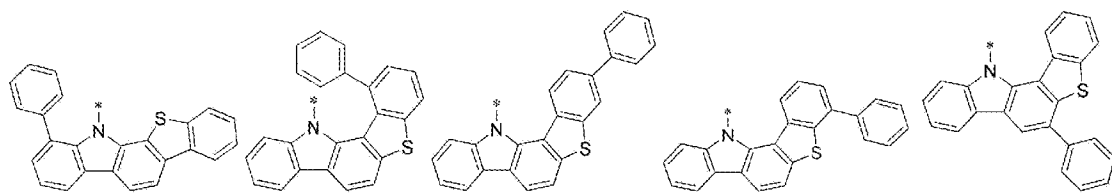


D134



D135

[化79-7]



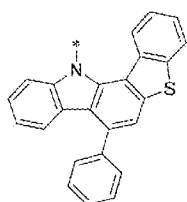
D136

D137

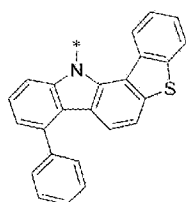
D138

D139

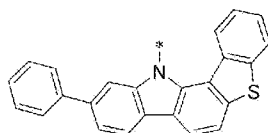
D140



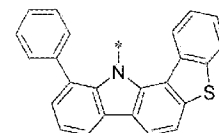
D141



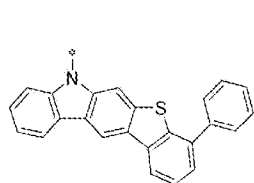
D142



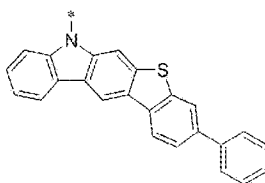
D143



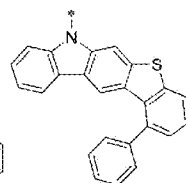
D144



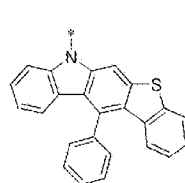
D145



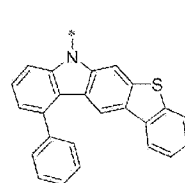
D146



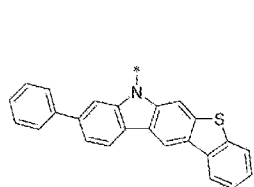
D147



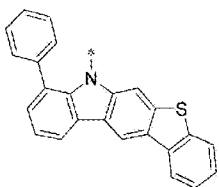
D148



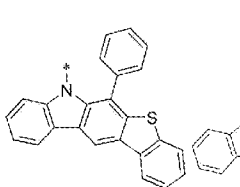
D149



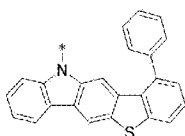
D150



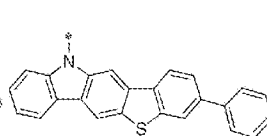
D151



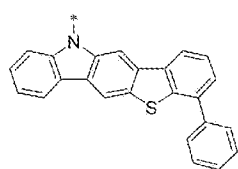
D152



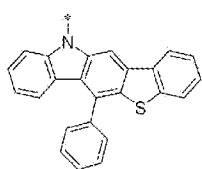
D153



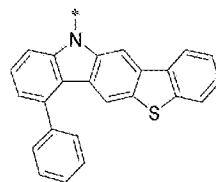
D154



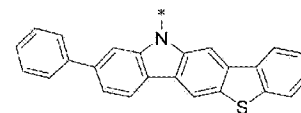
D155



D156

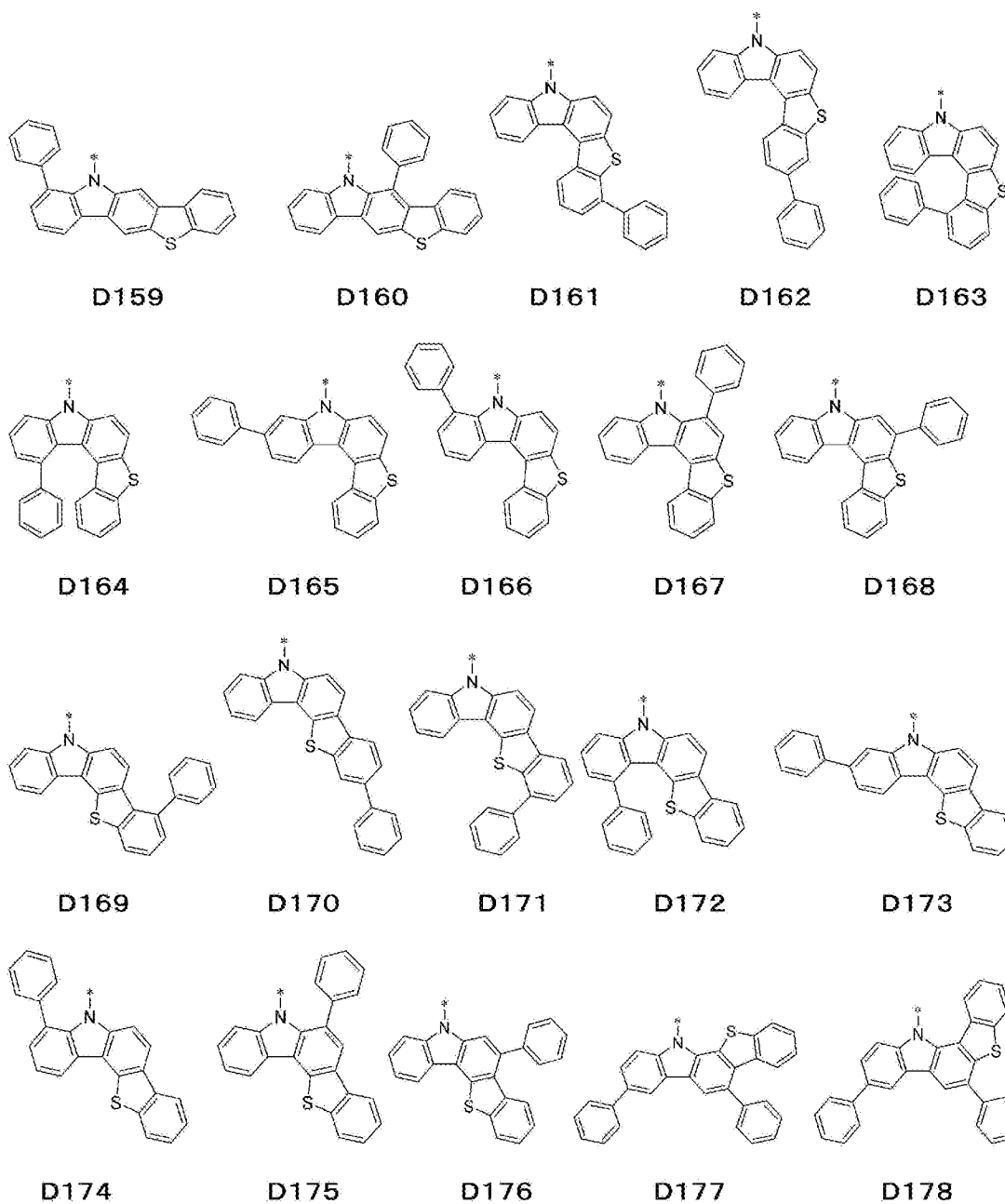


D157

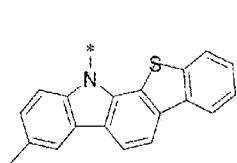


D158

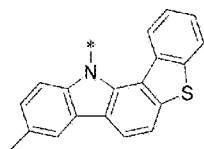
[化79-8]



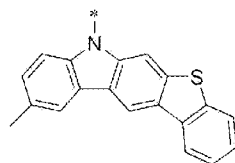
[化79-9]



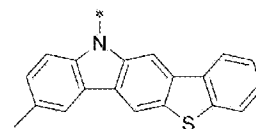
D179



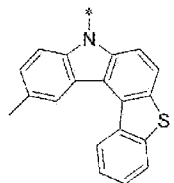
D180



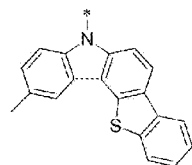
D181



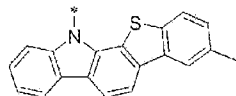
D182



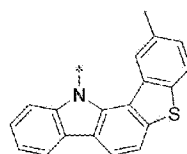
D183



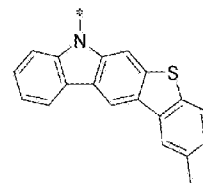
D184



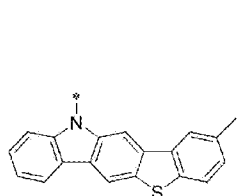
D185



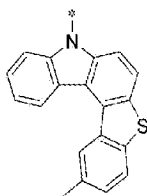
D186



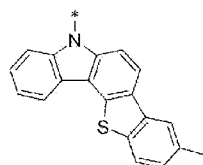
D187



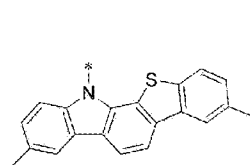
D188



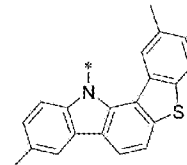
D189



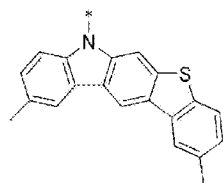
D190



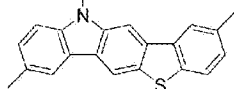
D191



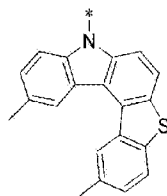
D192



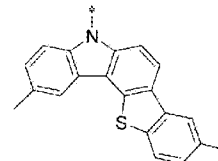
D193



D194



D195



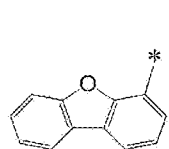
D196

[0129] 上記の具体例の他に、D 2、D 3、D 5、D 7～D 12、D 87～D 104 およびD 179～D 196のアルキル基のすべての水素原子を重水素原子に置換した基を、それぞれD 2 (m)、D 3 (m)、D 5 (m)、D 7 (m)～D 12 (m)、D 87 (m)～D 104 (m)、D 179 (m)～D 196 (m)としてここに例示する。また、D 4～D 6、D 19～D 86およびD 111～D 178のフェニル基(C₆H₅)を、重水素化したC₆D₅で置換した基を、それぞれD 4 (p)～D 6 (p)、D 19 (p)～D 86 (p)、D 111 (p)～D 178 (p)としてここに例示する。さらに、D 1

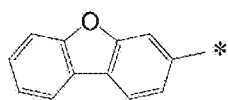
～D 1 9 6のすべての水素原子を重水素化した基を、それぞれD 1 (D) ～ D 1 9 6 (D)としてここに例示する。

[0130] 一般式(2)においてLの右から結合している基として採りうる基の具体例として、上記のD 2 ～D 1 9 6とこれらの重水素原子置換体の他に、以下に示す具体例も挙げることができる。ただし、本発明で採用することができる基は、これらの具体例によって限定的に解釈されることはない。なお、以下の具体例においても、メチル基は表示を省略している。＊はLへの結合位置を示す。

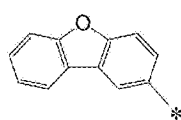
[化80-1]



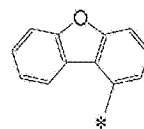
X1



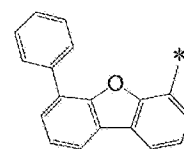
X2



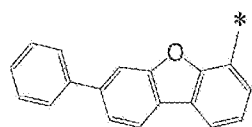
X3



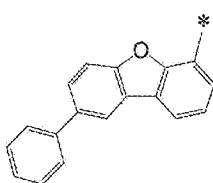
X4



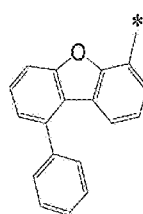
X5



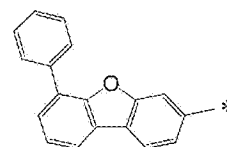
X6



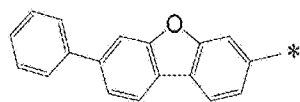
X7



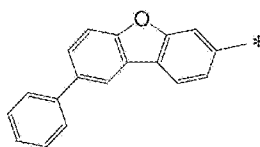
X8



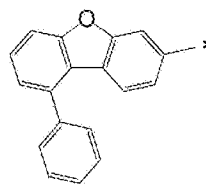
X9



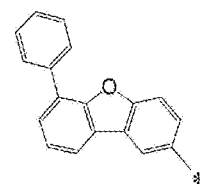
X10



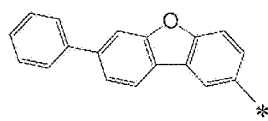
X11



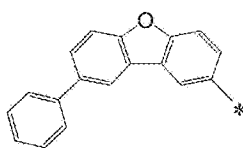
X12



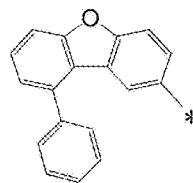
X13



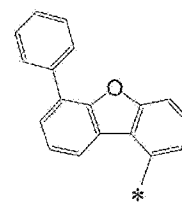
X14



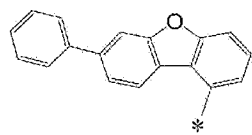
X15



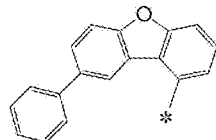
X16



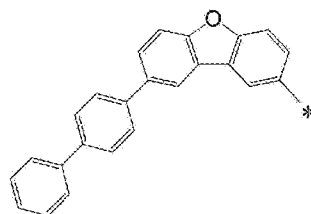
X17



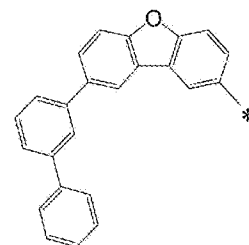
X18



X19

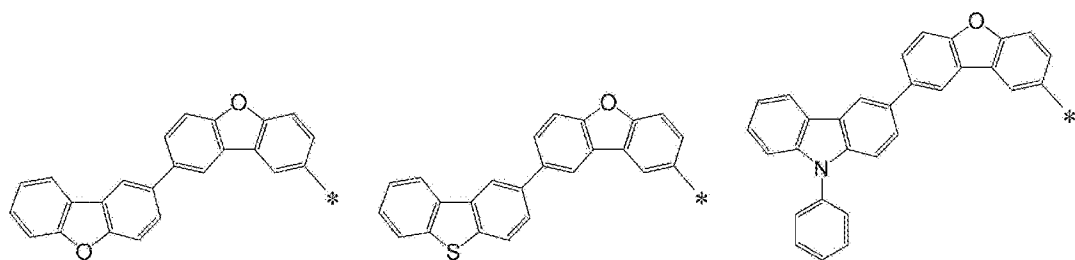


X20



X21

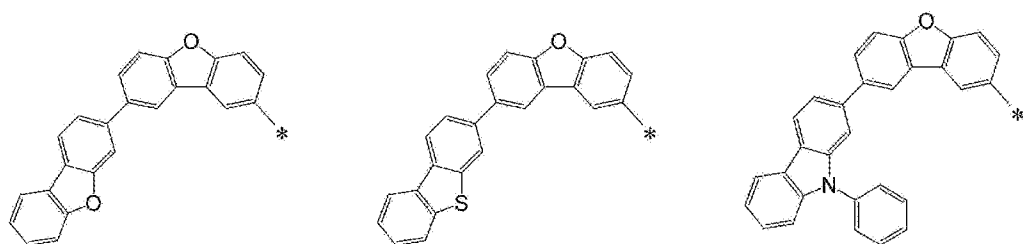
[化80-2]



X22

X23

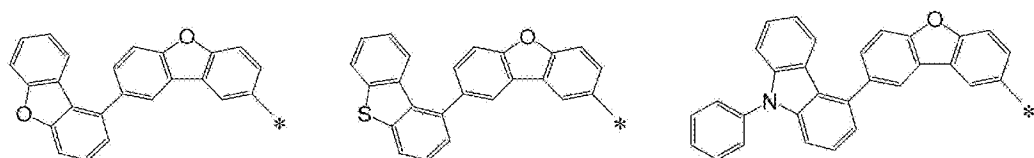
X24



X25

X26

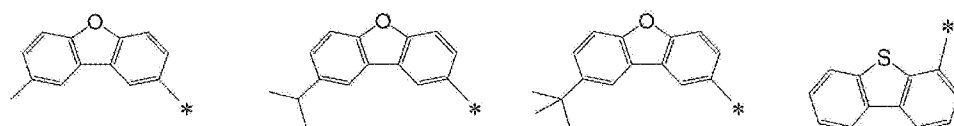
X27



X28

X29

X30

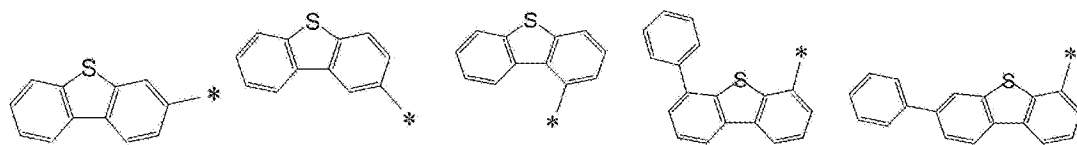


X31

X32

X33

X34



X35

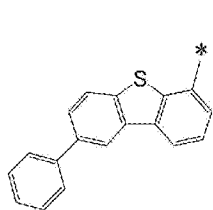
X36

X37

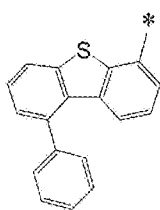
X38

X39

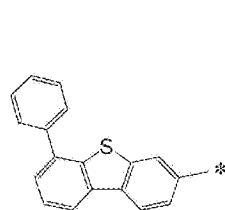
[化80-3]



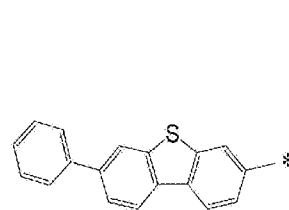
X40



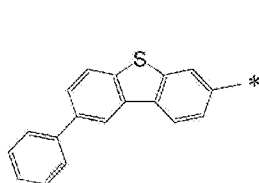
X41



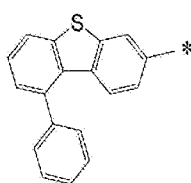
X42



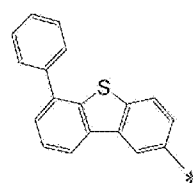
X43



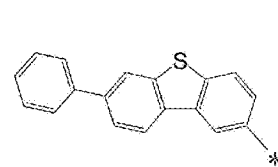
X44



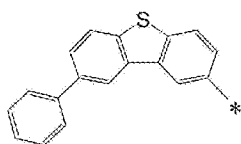
X45



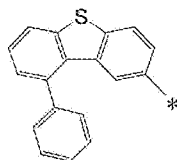
X46



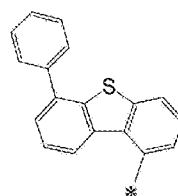
X47



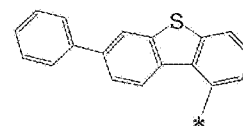
X48



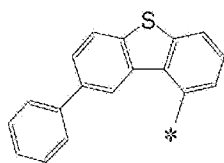
X49



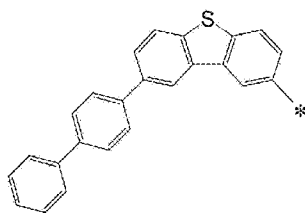
X50



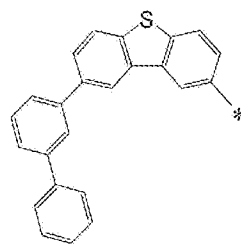
X51



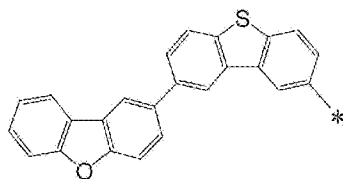
X52



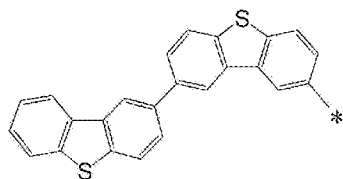
X53



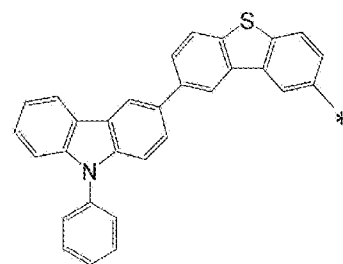
X54



X55

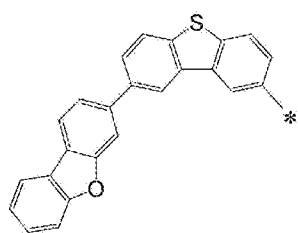


X56

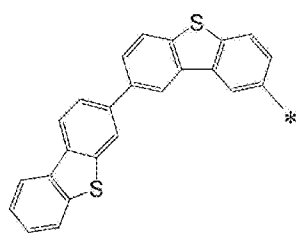


X57

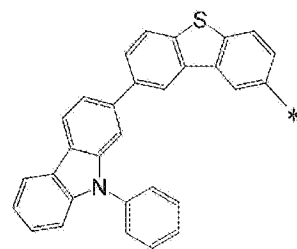
[化80-4]



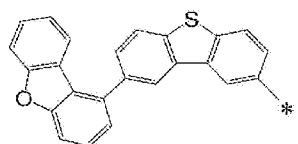
X58



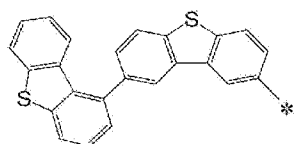
X59



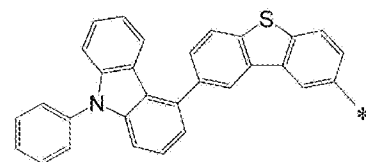
X60



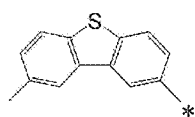
X61



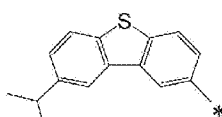
X62



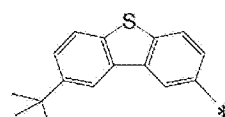
X63



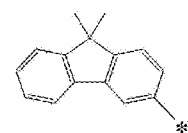
X64



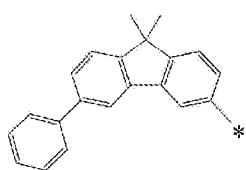
X65



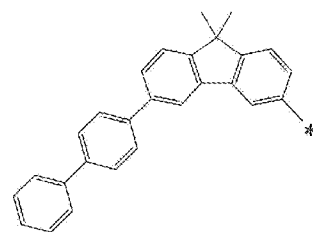
X66



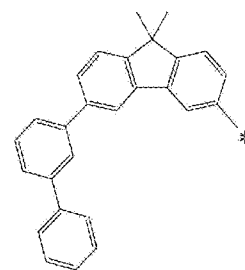
X67



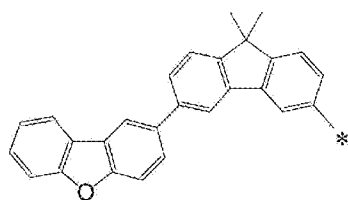
X68



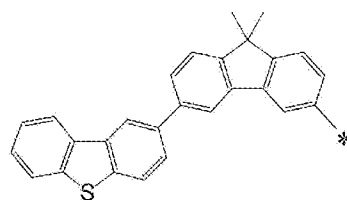
X69



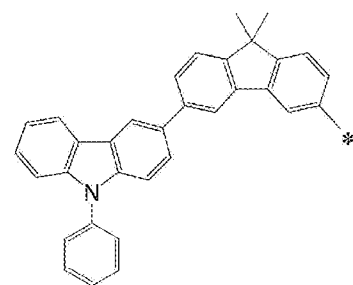
X70



X71

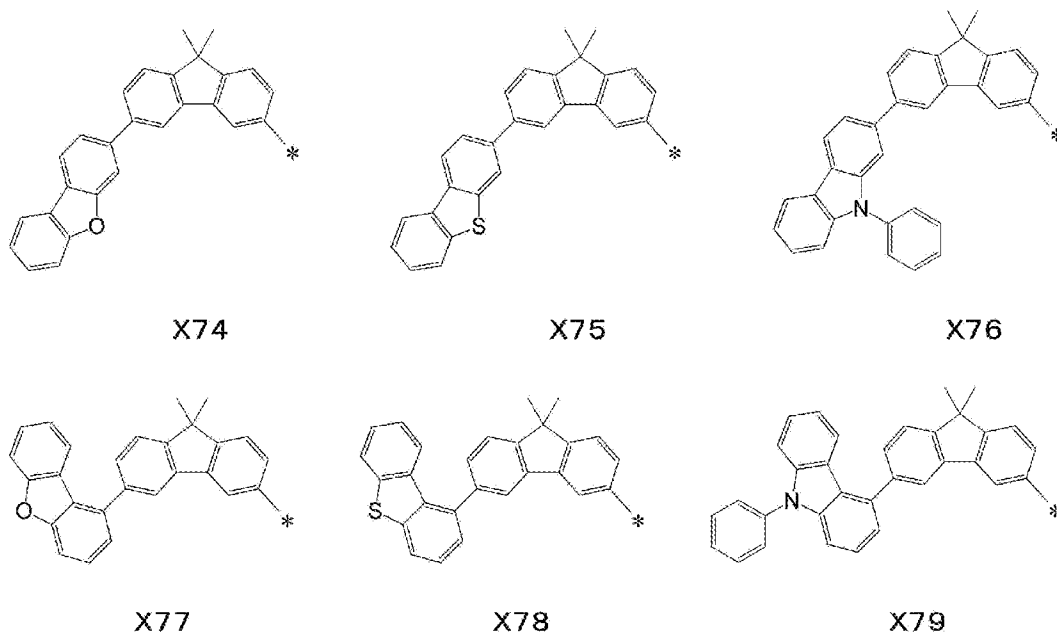


X72



X73

[化80-5]



[0131] 上記の具体例の他に、X31～X33、X64～X79のメチル基(CH_3)を、重水素化した CD_3 で置換した基を、それぞれX31(m)～X33(m)、X64(m)～X79(m)としてここに例示する。また、X5～X21、X38～X54、X68～X70のフェニル基(C_6H_5)を、重水素化した C_6D_5 で置換した基を、それぞれX5(p)～X21(p)、X38(p)～X54(p)、X68(p)～X70(p)としてここに例示する。さらに、X1～X79のすべての水素原子を重水素化した基を、それぞれX1(D)～X79(D)としてここに例示する。

[0132] 一般式(2)のnは3または4の整数を表す。 X^{11} がO、SまたはC(R^{B})(R^{C})であるとき、Lは(R^{115})nが結合しているベンゼン環に結合するためnは3である。 X^{11} がN(R^{A})であって、Lが(R^{115})nが結合しているベンゼン環に結合している場合はnは3であり、また、 X^{11} がN(R^{A})であって、Lが X^{11} が表すNに結合している場合はnは4である。n個の R^{115} は互いに同一であっても異なっても構わない。

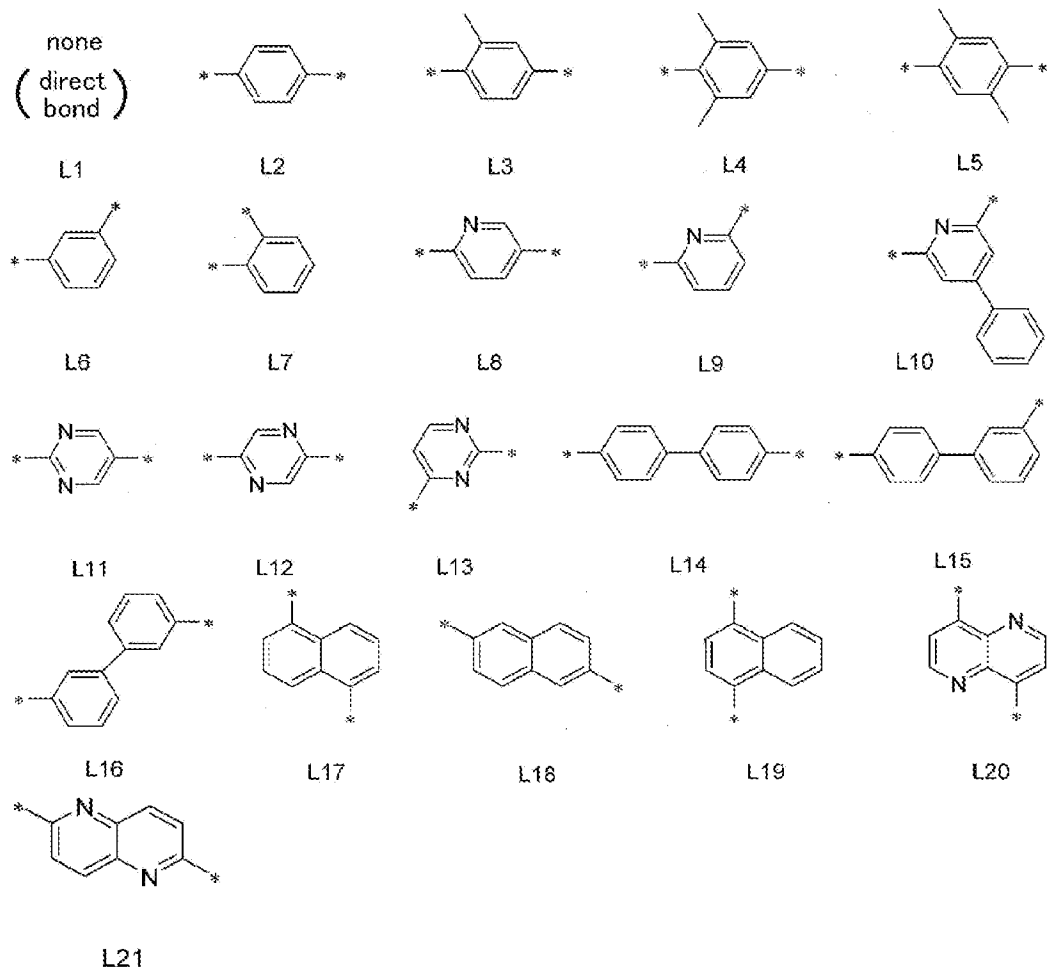
[0133] 一般式(2)のLは単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基、またはこれらの2個以上が結合した連結基を表す。アリーレン基のアリール構造とヘテロアリーレン基のヘテロア

リール構造については、上記の「アリール基」と「ヘテロアリール基」の説明を参照することができる。アリーレン基とヘテロアリーレン基は置換されていてもよく、置換されている場合は、重水素原子、アリール基、ヘテロアリール基、アルキル基、シアノ基からなる群より選択される1つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基で置換されていることが好ましく、重水素原子、アリール基、ヘテロアリール基、アルキル基からなる群より選択される1つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基で置換されていることがより好ましい。置換されている場合は、メチル基、エチル基、イソプロピル基、tert-ブチル基、フェニル基、またはこれらの重水素化体であることが好ましい。本発明の一態様では、Lは無置換のアリーレン基である。

以下において、Lの具体例を挙げる。ただし、本発明で採用することができるLは、これらの具体例によって限定的に解釈されることはない。なお、以下の具体例において、メチル基は表示を省略している。このため、例えばL3～L5はメチル基で置換されている。＊は結合位置を示す。L1は単結合である。

[0134]

[化81]



[0135] 本発明の一態様では、一般式(2)のLの左から結合する基はD1～D196およびその重水素化体の中から選択し、Lの右から結合する基はX1～X79およびその重水素化体の中から選択する(態様1)。本発明の一態様では、Lの左から結合する基はD1～D12およびその重水素化体の中から選択し、Lの右から結合する基はX1～X79およびその重水素化体の中から選択する(態様2)。本発明の一態様では、Lの左から結合する基はD13～D196およびその重水素化体の中から選択し、Lの右から結合する基はX1～X79およびその重水素化体の中から選択する(態様3)。本発明の一態様では、Lの左から結合する基はD1～D196およびその重水素化体の中から選択し、Lの右から結合する基はX1～X66およびその重水素化体の中から選択する(態様4)。本発明の一態様では、Lの左から結合す

る基はD 1 ～D 1 9 6 およびその重水素化体の中から選択し、L の右から結合する基はX 1 ～X 3 3 およびその重水素化体の中から選択する（態様5）。本発明の一態様では、L の左から結合する基はD 1 ～D 1 9 6 およびその重水素化体の中から選択し、L の右から結合する基はX 1 ～X 2 1、X 3 1 ～X 3 3 およびその重水素化体の中から選択する（態様6）。本発明の一態様では、L の左から結合する基はD 1 ～D 1 9 6 およびその重水素化体の中から選択し、L の右から結合する基はX 2 2 ～X 3 0 およびその重水素化体の中から選択する（態様7）。

本発明の一態様では、態様1でLはL 1である。本発明の一態様では、態様2でLはL 1である。本発明の一態様では、態様3でLはL 1である。本発明の一態様では、態様4でLはL 1である。本発明の一態様では、態様5でLはL 1である。本発明の一態様では、態様6でLはL 1である。本発明の一態様では、態様7でLはL 1である。

本発明の一態様では、態様1でLはL 6である。本発明の一態様では、態様2でLはL 6である。本発明の一態様では、態様3でLはL 6である。本発明の一態様では、態様4でLはL 6である。本発明の一態様では、態様5でLはL 6である。本発明の一態様では、態様6でLはL 6である。本発明の一態様では、態様7でLはL 6である。

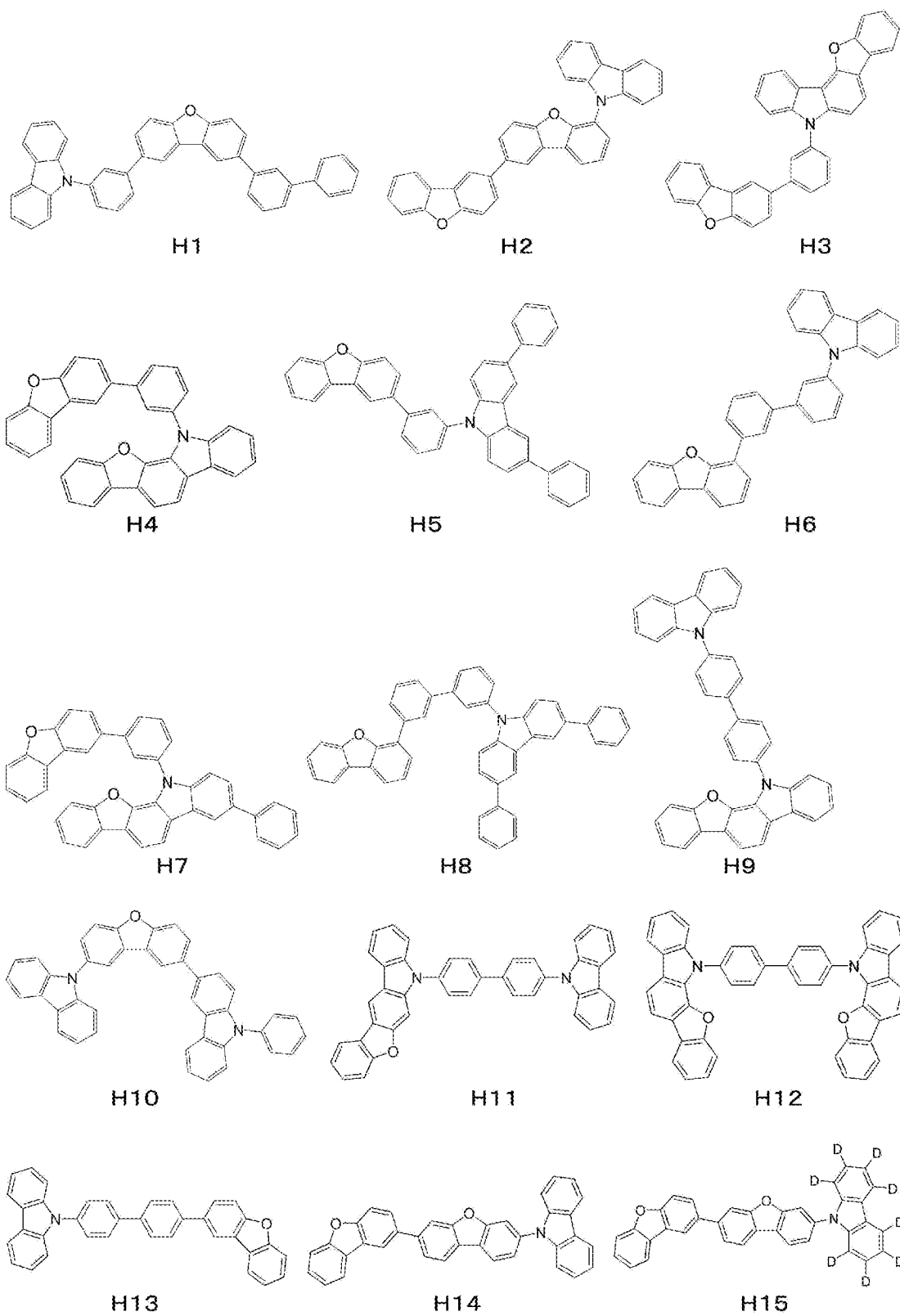
本発明の一態様では、態様1でLはL 1 4である。本発明の一態様では、態様2でLはL 1 4である。本発明の一態様では、態様3でLはL 1 4である。本発明の一態様では、態様4でLはL 1 4である。本発明の一態様では、態様5でLはL 1 4である。本発明の一態様では、態様6でLはL 1 4である。本発明の一態様では、態様7でLはL 1 4である。

本発明の一態様では、態様1でLはL 1 6である。本発明の一態様では、態様2でLはL 1 6である。本発明の一態様では、態様3でLはL 1 6である。本発明の一態様では、態様4でLはL 1 6である。本発明の一態様では、態様5でLはL 1 6である。本発明の一態様では、態様6でLはL 1 6である。本発明の一態様では、態様7でLはL 1 6である。

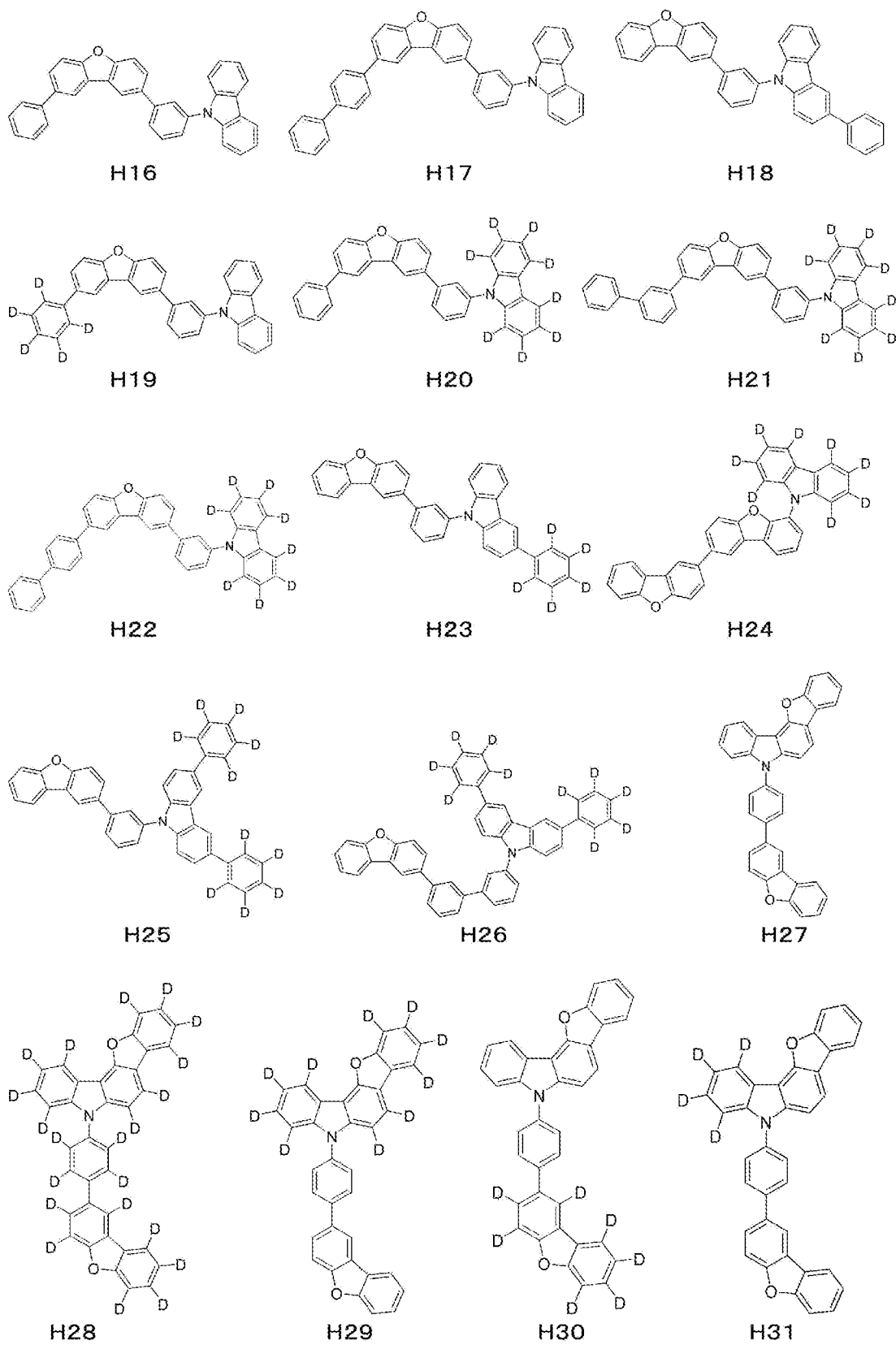
[0136] 以下において、一般式（２）で表される化合物の具体例を示す。ただし、本発明で採用することができる一般式（２）で表される化合物は、以下の具体例によって限定的に解釈されることはない。

[0137]

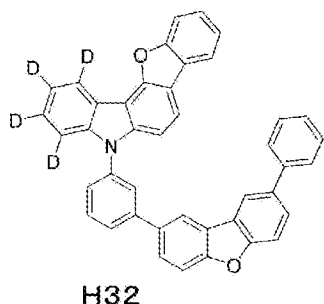
[化82-1]



[化82-2]



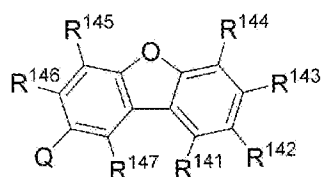
[化82-3]



[0138] 上記の具体例の他に、H 1 ～H 1 3、H 1 8、H 1 9、H 2 3、H 2 5、H 2 6 に存在する置換もしくは無置換のカルバゾールー 9 -イル基に存在するすべての水素原子を重水素原子で置換した化合物を、それぞれ H 1 (d) ～H 1 3 (d)、H 1 8 (d)、H 1 9 (d)、H 2 3 (d)、H 2 5 (d)、H 2 6 (d) としてここに例示する。また、H 1 ～H 2 6 に存在するすべての水素原子を重水素原子で置換した化合物を、それぞれ H 1 (D) ～H 2 6 (D) としてここに例示する。

[0139] 本発明の一態様では、一般式 (2) で表される化合物として、下記一般式で表される化合物を選択する。

[化83]



[0140] 上記一般式において、 $R^{141} \sim R^{147}$ は各々独立に水素原子、重水素原子、または置換基を表し、 $R^{141} \sim R^{147}$ の少なくとも 1 つは置換もしくは無置換のアリール基である。Q は置換もしくは無置換の 1,2-H-ベンゾフロカルバゾールー 1,2-イルフェニル基を表す。

本発明の一態様では、 $R^{141} \sim R^{147}$ は各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアリール基である。本発明の一態様では、 $R^{141} \sim R^{147}$ は各々独立に水素原子、重水素原子、または、重水素原子、アルキル基およびアリール基からなる群より選択される 1 つの原子か基あるいは 2 つ以上を組み合わせ形成される基で置

換されていてもよいアリール基である。本発明の好ましい一態様では、 $R^{141} \sim R^{147}$ の1つだけが重水素原子、アルキル基およびアリール基からなる群より選択される1つの原子か基あるいは2つ以上を組み合わせ形成される基で置換されていてもよいアリール基であり、残りが各々独立に水素原子または重水素原子である。本発明の好ましい一態様では、 $R^{141} \sim R^{147}$ の1つは、後掲のP 1～P 14の中から選択される。

本発明の一態様では、Qは、重水素原子、アルキル基およびアリール基からなる群より選択される1つの原子か基あるいは2つ以上を組み合わせ形成される基で置換されていてもよい1,2-H-ベンゾフロカルバゾール-1,2-イルフェニル基である。本発明の一態様では、Qは無置換の1,2-H-ベンゾフロカルバゾール-1,2-イルフェニル基である。本発明の好ましい一態様では、Qは、後掲のQ 1～Q 18の中から選択される。

以下において、上記一般式で表される化合物の具体例を表形式で示す。表1では、各化合物のQおよび $R^{141} \sim R^{147}$ を示すことにより、化合物の構造を特定している。例えば、化合物141-1-1は、QがQ 1であり、 R^{141} がP 1であり、 $R^{142} \sim R^{147}$ が水素原子である化合物であり、化合物141-1-2は、QがQ 1であり、 R^{141} がP 2であり、 $R^{142} \sim R^{147}$ が水素原子である化合物である。表2の各段では、14種の構造をまとめて1つの段で特定している。例えば、表2の「141-1-1～141-1-14」の段であれば、QがQ 1であり、 R^{141} がP 1～P 14であり、 $R^{142} \sim R^{147}$ が水素原子である化合物を、順に化合物141-1-1～化合物141-1-14としてまとめて特定している。ここにまとめて表示されている化合物141-1-1～化合物141-1-14の構造は、表1で特定される化合物141-1-1～化合物141-1-14の構造に対応している。表2の「141-2-1～141-2-14」の段であれば、QがQ 2であり、 R^{141} がP 1～P 14であり、 $R^{142} \sim R^{147}$ が水素原子である化合物を、順に化合物141-2-1～化合物141-2-14としてまとめて特定している。それ以降の段についても、同じ要領で各化合物の構造を特定している。表

2で特定される各化合物は、個別に本願明細書に開示されているものとする。

[0141] [表2]

No.	Q	R ¹⁴¹	R ¹⁴² , R ¹⁴³ , R ¹⁴⁴ , R ¹⁴⁵ , R ¹⁴⁶ , R ¹⁴⁷
141-1-1	Q1	P1	H
141-1-2	Q1	P2	H
141-1-3	Q1	P3	H
141-1-4	Q1	P4	H
141-1-5	Q1	P5	H
141-1-6	Q1	P6	H
141-1-7	Q1	P7	H
141-1-8	Q1	P8	H
141-1-9	Q1	P9	H
141-1-10	Q1	P10	H
141-1-11	Q1	P11	H
141-1-12	Q1	P12	H
141-1-13	Q1	P13	H
141-1-14	Q1	P14	H
141-2-1	Q2	P1	H
141-2-2	Q2	P2	H
141-2-3	Q2	P3	H
141-2-4	Q2	P4	H
141-2-5	Q2	P5	H
141-2-6	Q2	P6	H
141-2-7	Q2	P7	H
141-2-8	Q2	P8	H
141-2-9	Q2	P9	H
141-2-10	Q2	P10	H
141-2-11	Q2	P11	H
141-2-12	Q2	P12	H
141-2-13	Q2	P13	H
141-2-14	Q2	P14	H
141-3-1	Q3	P1	H
141-3-2	Q3	P2	H
141-3-3	Q3	P3	H
141-3-4	Q3	P4	H
141-3-5	Q3	P5	H
141-3-6	Q3	P6	H
141-3-7	Q3	P7	H
141-3-8	Q3	P8	H
141-3-9	Q3	P9	H
141-3-10	Q3	P10	H
141-3-11	Q3	P11	H
141-3-12	Q3	P12	H
141-3-13	Q3	P13	H
141-3-14	Q3	P14	H

No.	Q	R ¹⁴²	R ¹⁴¹ , R ¹⁴³ , R ¹⁴⁴ , R ¹⁴⁵ , R ¹⁴⁶ , R ¹⁴⁷
142-1-1	Q1	P1	H
142-1-2	Q1	P2	H
142-1-3	Q1	P3	H
142-1-4	Q1	P4	H
142-1-5	Q1	P5	H
142-1-6	Q1	P6	H
142-1-7	Q1	P7	H
142-1-8	Q1	P8	H
142-1-9	Q1	P9	H
142-1-10	Q1	P10	H
142-1-11	Q1	P11	H
142-1-12	Q1	P12	H
142-1-13	Q1	P13	H
142-1-14	Q1	P14	H
142-2-1	Q2	P1	H
142-2-2	Q2	P2	H
142-2-3	Q2	P3	H
142-2-4	Q2	P4	H
142-2-5	Q2	P5	H
142-2-6	Q2	P6	H
142-2-7	Q2	P7	H
142-2-8	Q2	P8	H
142-2-9	Q2	P9	H
142-2-10	Q2	P10	H
142-2-11	Q2	P11	H
142-2-12	Q2	P12	H
142-2-13	Q2	P13	H
142-2-14	Q2	P14	H
142-3-1	Q3	P1	H
142-3-2	Q3	P2	H
142-3-3	Q3	P3	H
142-3-4	Q3	P4	H
142-3-5	Q3	P5	H
142-3-6	Q3	P6	H
142-3-7	Q3	P7	H
142-3-8	Q3	P8	H
142-3-9	Q3	P9	H
142-3-10	Q3	P10	H
142-3-11	Q3	P11	H
142-3-12	Q3	P12	H
142-3-13	Q3	P13	H
142-3-14	Q3	P14	H

[表3-1]

No.	Q	R^{141}	$R^{142}, R^{143}, R^{144}, R^{145}, R^{146}, R^{147}$
141-1-1 ~ 141-1-14	Q1	P1~P14	H
141-2-1 ~ 141-2-14	Q2	P1~P14	H
141-3-1 ~ 141-3-14	Q3	P1~P14	H
141-4-1 ~ 141-4-14	Q4	P1~P14	H
141-5-1 ~ 141-5-14	Q5	P1~P14	H
141-6-1 ~ 141-6-14	Q6	P1~P14	H
141-7-1 ~ 141-7-14	Q7	P1~P14	H
141-8-1 ~ 141-8-14	Q8	P1~P14	H
141-9-1 ~ 141-9-14	Q9	P1~P14	H
141-10-1 ~ 141-10-14	Q10	P1~P14	H
141-11-1 ~ 141-11-14	Q11	P1~P14	H
141-12-1 ~ 141-12-14	Q12	P1~P14	H
141-13-1 ~ 141-13-14	Q13	P1~P14	H
141-14-1 ~ 141-14-14	Q14	P1~P14	H

No.	Q	R^{142}	$R^{141}, R^{143}, R^{144}, R^{145}, R^{146}, R^{147}$
142-1-1 ~ 142-1-14	Q1	P1~P14	H
142-2-1 ~ 142-2-14	Q2	P1~P14	H
142-3-1 ~ 142-3-14	Q3	P1~P14	H
142-4-1 ~ 142-4-14	Q4	P1~P14	H
142-5-1 ~ 142-5-14	Q5	P1~P14	H
142-6-1 ~ 142-6-14	Q6	P1~P14	H
142-7-1 ~ 142-7-14	Q7	P1~P14	H
142-8-1 ~ 142-8-14	Q8	P1~P14	H
142-9-1 ~ 142-9-14	Q9	P1~P14	H
142-10-1 ~ 142-10-14	Q10	P1~P14	H
142-11-1 ~ 142-11-14	Q11	P1~P14	H
142-12-1 ~ 142-12-14	Q12	P1~P14	H
142-13-1 ~ 142-13-14	Q13	P1~P14	H
142-14-1 ~ 142-14-14	Q14	P1~P14	H

No.	Q	R^{143}	$R^{141}, R^{142}, R^{144}, R^{145}, R^{146}, R^{147}$
143-1-1 ~ 143-1-14	Q1	P1~P14	H
143-2-1 ~ 143-2-14	Q2	P1~P14	H
143-3-1 ~ 143-3-14	Q3	P1~P14	H
143-4-1 ~ 143-4-14	Q4	P1~P14	H
143-5-1 ~ 143-5-14	Q5	P1~P14	H
143-6-1 ~ 143-6-14	Q6	P1~P14	H
143-7-1 ~ 143-7-14	Q7	P1~P14	H
143-8-1 ~ 143-8-14	Q8	P1~P14	H
143-9-1 ~ 143-9-14	Q9	P1~P14	H
143-10-1 ~ 143-10-14	Q10	P1~P14	H
143-11-1 ~ 143-11-14	Q11	P1~P14	H
143-12-1 ~ 143-12-14	Q12	P1~P14	H
143-13-1 ~ 143-13-14	Q13	P1~P14	H
143-14-1 ~ 143-14-14	Q14	P1~P14	H

[表3-2]

No.	Q	R^{144}	$R^{141}, R^{142}, R^{143}, R^{145}, R^{146}, R^{147}$
144-1-1 ~ 144-1-14	Q1	P1~P14	H
144-2-1 ~ 144-2-14	Q2	P1~P14	H
144-3-1 ~ 144-3-14	Q3	P1~P14	H
144-4-1 ~ 144-4-14	Q4	P1~P14	H
144-5-1 ~ 144-5-14	Q5	P1~P14	H
144-6-1 ~ 144-6-14	Q6	P1~P14	H
144-7-1 ~ 144-7-14	Q7	P1~P14	H
144-8-1 ~ 144-8-14	Q8	P1~P14	H
144-9-1 ~ 144-9-14	Q9	P1~P14	H
144-10-1 ~ 144-10-14	Q10	P1~P14	H
144-11-1 ~ 144-11-14	Q11	P1~P14	H
144-12-1 ~ 144-12-14	Q12	P1~P14	H
144-13-1 ~ 144-13-14	Q13	P1~P14	H
144-14-1 ~ 144-14-14	Q14	P1~P14	H

No.	Q	R^{145}	$R^{141}, R^{142}, R^{143}, R^{144}, R^{146}, R^{147}$
145-1-1 ~ 145-1-14	Q1	P1~P14	H
145-2-1 ~ 145-2-14	Q2	P1~P14	H
145-3-1 ~ 145-3-14	Q3	P1~P14	H
145-4-1 ~ 145-4-14	Q4	P1~P14	H
145-5-1 ~ 145-5-14	Q5	P1~P14	H
145-6-1 ~ 145-6-14	Q6	P1~P14	H
145-7-1 ~ 145-7-14	Q7	P1~P14	H
145-8-1 ~ 145-8-14	Q8	P1~P14	H
145-9-1 ~ 145-9-14	Q9	P1~P14	H
145-10-1 ~ 145-10-14	Q10	P1~P14	H
145-11-1 ~ 145-11-14	Q11	P1~P14	H
145-12-1 ~ 145-12-14	Q12	P1~P14	H
145-13-1 ~ 145-13-14	Q13	P1~P14	H
145-14-1 ~ 145-14-14	Q14	P1~P14	H

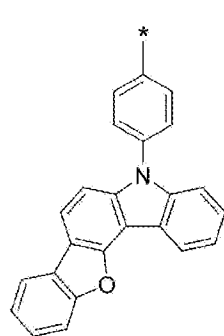
No.	Q	R^{146}	$R^{141}, R^{142}, R^{143}, R^{144}, R^{145}, R^{147}$
146-1-1 ~ 146-1-14	Q1	P1~P14	H
146-2-1 ~ 146-2-14	Q2	P1~P14	H
146-3-1 ~ 146-3-14	Q3	P1~P14	H
146-4-1 ~ 146-4-14	Q4	P1~P14	H
146-5-1 ~ 146-5-14	Q5	P1~P14	H
146-6-1 ~ 146-6-14	Q6	P1~P14	H
146-7-1 ~ 146-7-14	Q7	P1~P14	H
146-8-1 ~ 146-8-14	Q8	P1~P14	H
146-9-1 ~ 146-9-14	Q9	P1~P14	H
146-10-1 ~ 146-10-14	Q10	P1~P14	H
146-11-1 ~ 146-11-14	Q11	P1~P14	H
146-12-1 ~ 146-12-14	Q12	P1~P14	H
146-13-1 ~ 146-13-14	Q13	P1~P14	H
146-14-1 ~ 146-14-14	Q14	P1~P14	H

[表3-3]

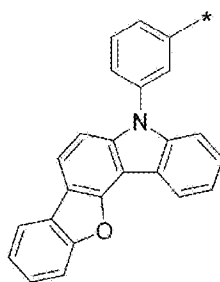
No.	Q	R^{147}	$R^{141}, R^{142}, R^{143}, R^{144}, R^{145}, R^{146}$
147-1-1 ~ 147-1-14	Q1	P1~P14	H
147-2-1 ~ 147-2-14	Q2	P1~P14	H
147-3-1 ~ 147-3-14	Q3	P1~P14	H
147-4-1 ~ 147-4-14	Q4	P1~P14	H
147-5-1 ~ 147-5-14	Q5	P1~P14	H
147-6-1 ~ 147-6-14	Q6	P1~P14	H
147-7-1 ~ 147-7-14	Q7	P1~P14	H
147-8-1 ~ 147-8-14	Q8	P1~P14	H
147-9-1 ~ 147-9-14	Q9	P1~P14	H
147-10-1 ~ 147-10-14	Q10	P1~P14	H
147-11-1 ~ 147-11-14	Q11	P1~P14	H
147-12-1 ~ 147-12-14	Q12	P1~P14	H
147-13-1 ~ 147-13-14	Q13	P1~P14	H
147-14-1 ~ 147-14-14	Q14	P1~P14	H

[0142]

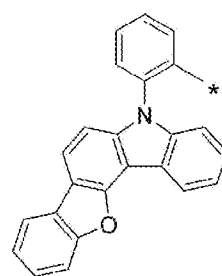
[化84-1]



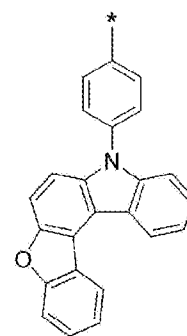
Q1



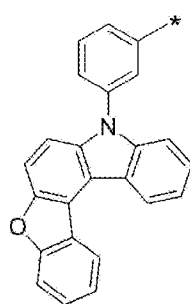
Q2



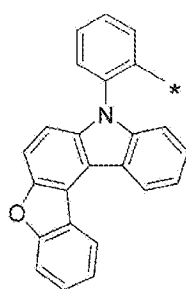
Q3



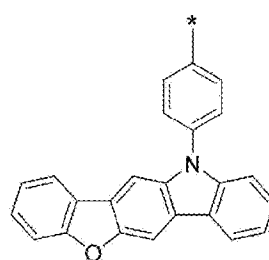
Q4



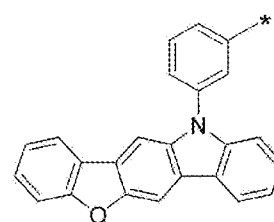
Q5



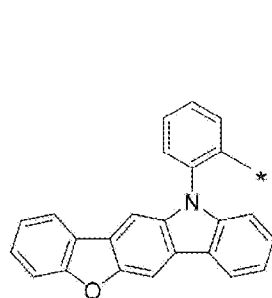
Q6



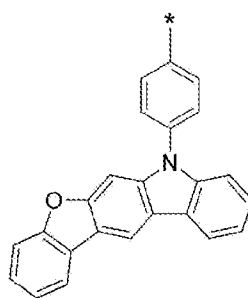
Q7



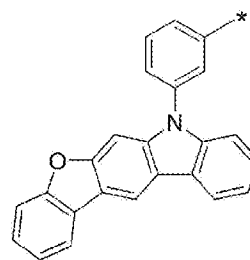
Q8



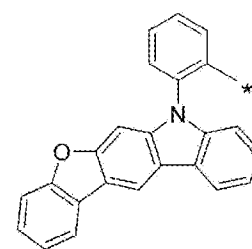
Q9



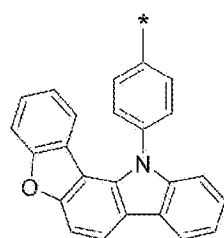
Q10



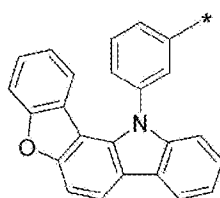
Q11



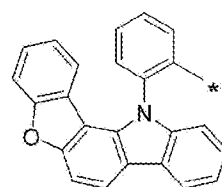
Q12



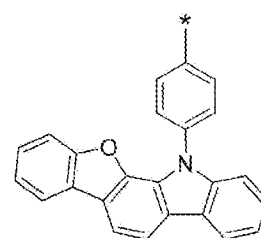
Q13



Q14

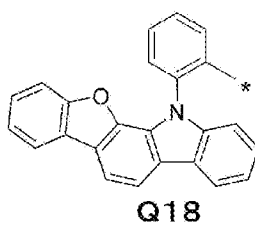
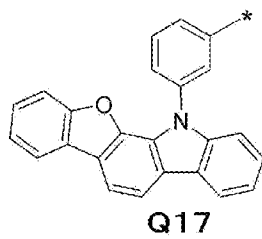


Q15

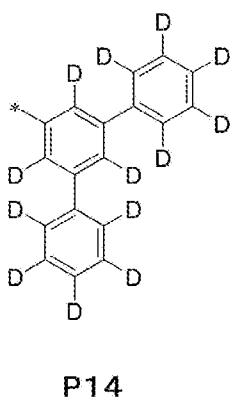
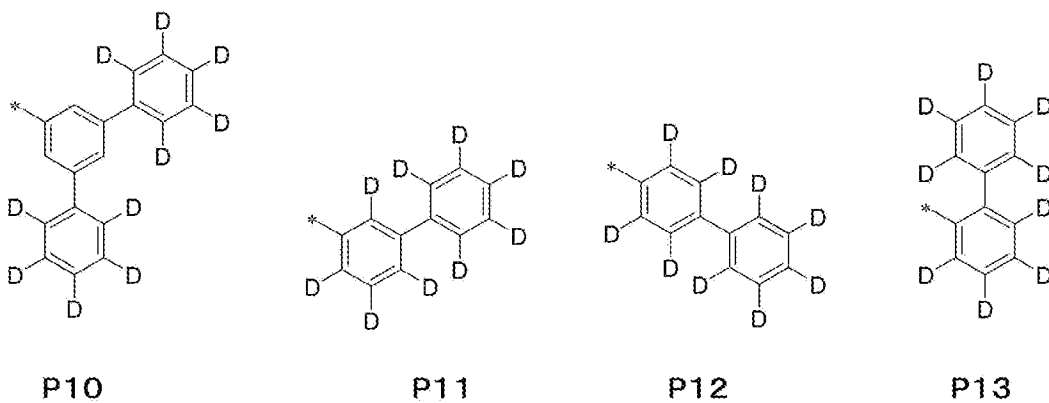
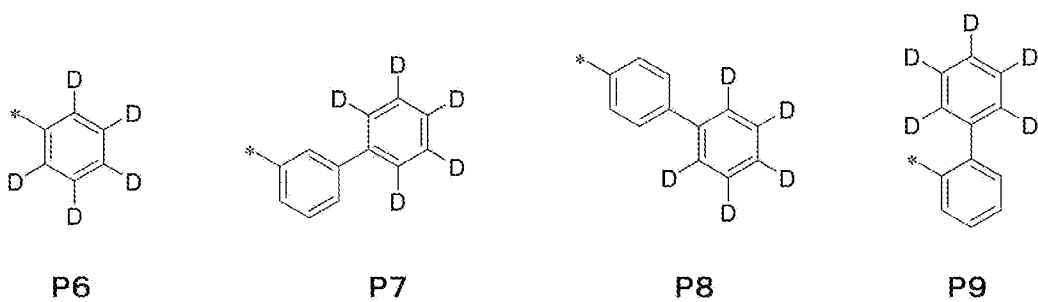
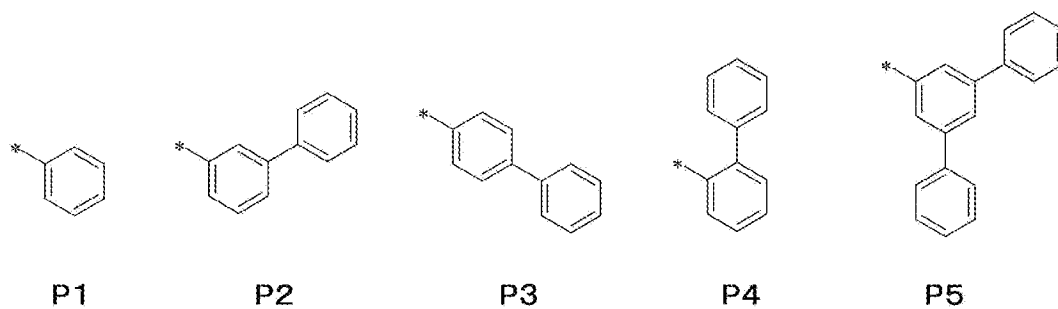


Q16

[化84-2]



[化85]



[0143] 一般式（２）で表される化合物の分子量は、例えば一般式（２）で表される化合物を含む有機層を蒸着法により製膜して利用することを意図する場合には、１５００以下であることが好ましく、１２００以下であることがより

好ましく、1000以下であることがさらに好ましく、800以下であることがさらに好ましく、例えば600以下であってもよい。分子量の下限値は、一般式(2)で表される化合物群の最小化合物の分子量である。

[0144] 一般式(2)で表される化合物は、双極子モーメントが小さい方が膜形成したときの配向性が高くなるため好ましい。特に双極子モーメントが0.9～2.5の領域でこの傾向が顕著である。双極子モーメントは、2.3より小さいことが好ましく、2.0より小さいことがより好ましく、例えば1.7より小さい領域から選択したり、1.4より小さい領域から選択したりしてもよい。また、0.4以上の領域から選択したり、0.9以上の領域から選択したりしてもよい。

[0145] 一般式(2)で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式(2)で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子および酸素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式(2)で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式(2)で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子および窒素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。

[0146] [膜]

本発明の膜は、一般式(1)で表される化合物と一般式(2)で表される化合物を含む膜である。

本発明の膜は、一般式(1)で表される化合物と一般式(2)で表される化合物だけで構成されていてもよいし、その他の材料を含んでいてもよい。本発明の膜には、一般式(1)で表される化合物が2種類以上含まれていてもよい。また、本発明の膜には、一般式(2)で表される化合物が2種類以上含まれていてもよい。本発明の一態様では、本発明の膜には一般式(1)

で表される化合物が1種と一般式(2)で表される化合物が1種含まれている。

本発明の膜には、一般式(2)で表される化合物が一般式(1)で表される化合物よりも多く含まれていることが好ましい。本発明の一態様では、一般式(2)で表される化合物を100重量部としたとき、一般式(1)で表される化合物の含有量は0.01～49重量部であり、好ましくは0.1～30重量部であり、例えば1～20重量部である。

[0147] 本発明の膜が、一般式(1)で表される化合物と一般式(2)で表される化合物以外の材料(以下において「その他の材料」という)を含んでいるとき、その他の材料は、例えば最低励起一重項エネルギーが一般式(1)で表される化合物よりも大きくて、一般式(2)で表される化合物よりも小さい化合物を用いることが好ましい。このような化合物はアシストドーパントとして用いることができる。

本発明の膜がアシストドーパントを含むとき、アシストドーパントは遅延蛍光材料であることが好ましい。アシストドーパントの含有量は、一般式(1)で表される化合物よりも多く、一般式(2)で表される化合物よりも少ないことが好ましい。アシストドーパントと一般式(1)で表される化合物と一般式(2)で表される化合物の合計量を100重量部としたとき、アシストドーパントは0.5～40重量部であることが好ましく、1～35重量部であることがより好ましく、例えば5～30重量部とすることができる。

[0148] 本発明の膜に用いることができる遅延蛍光材料は、最低励起一重項エネルギーと77Kの最低励起三重項エネルギーの差 ΔE_{ST} が0.3eV以下であることが好ましく、0.25eV以下であることがより好ましく、0.2eV以下であることがより好ましく、0.15eV以下であることがより好ましく、0.1eV以下であることがさらに好ましく、0.07eV以下であることがさらにより好ましく、0.05eV以下であることがさらにまた好ましく、0.03eV以下であることがさらになお好ましく、0.01eV以下であることが特に好ましい。

ΔE_{ST} が小さければ、熱エネルギーの吸収によって励起一重項状態から励起三重項状態に逆項間交差しやすいため、熱活性化型の遅延蛍光材料として機能する。熱活性化型の遅延蛍光材料は、デバイスが発する熱を吸収して励起三重項状態から励起一重項へ比較的容易に逆項間交差し、その励起三重項エネルギーを効率よく発光に寄与させることができる。

[0149] 本発明における、化合物の最低励起一重項エネルギー (E_{S1}) と最低励起三重項エネルギー (E_{T1}) は、下記の手順により求めた値である。 ΔE_{ST} は $E_{S1} - E_{T1}$ を計算することにより求めた値である。

(1) 最低励起一重項エネルギー (E_{S1})

測定対象化合物の薄膜もしくはトルエン溶液 (濃度 10^{-5} mol/L) を調製して試料とする。常温 (300 K) でこの試料の蛍光スペクトルを測定する。蛍光スペクトルは、縦軸を発光、横軸を波長とする。この発光スペクトルの短波側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $\lambda_{\text{edge}} [\text{nm}]$ を求める。この波長値を次に示す換算式でエネルギー値に換算した値を E_{S1} とする。

$$\text{換算式: } E_{S1} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

後述の実施例における発光スペクトルの測定は、励起光源にLED光源 (Thorlabs社製、M300L4) を用いて検出器 (浜松ホトニクス社製、PMA-12マルチチャンネル分光器 C10027-01) により行った。

(2) 最低励起三重項エネルギー (E_{T1})

最低励起一重項エネルギー (E_{S1}) の測定で用いたのと同じ試料を、液体窒素によって $77 [\text{K}]$ に冷却し、励起光 (300 nm) を燐光測定用試料に照射し、検出器を用いて燐光を測定する。励起光照射後から 100 ミリ秒以降の発光を燐光スペクトルとする。この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $\lambda_{\text{edge}} [\text{nm}]$ を求める。この波長値を次に示す換算式でエネルギー値に換算した値を E_{T1} とする。

$$\text{換算式: } E_{T1} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

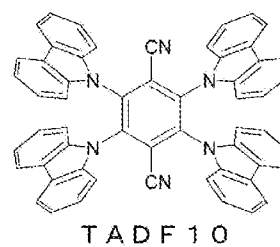
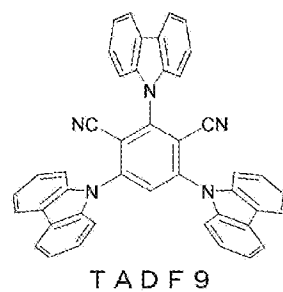
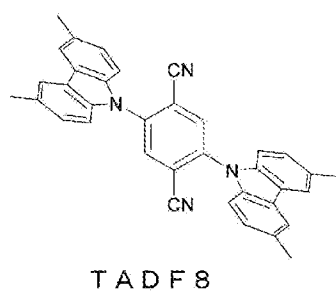
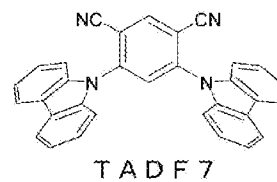
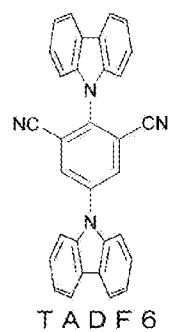
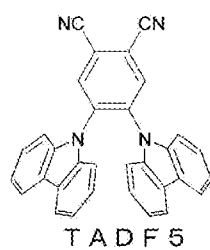
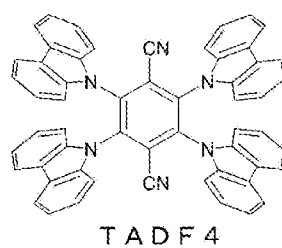
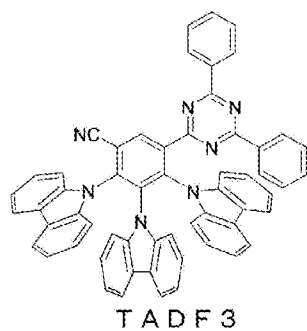
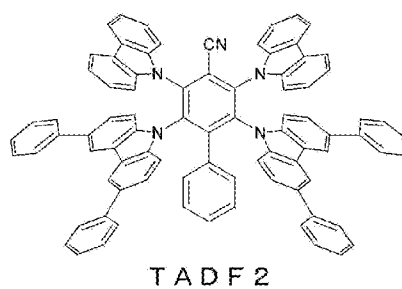
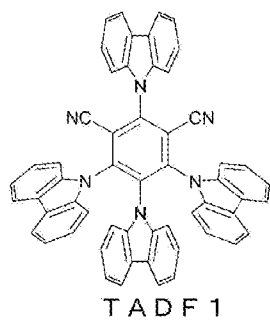
燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ（つまり縦軸が増加するにつれ）、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線を、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

なお、スペクトルの最大ピーク強度の10%以下のピーク強度をもつ極大点は、上述の最も短波長側の極大値には含めず、最も短波長側の極大値に最も近い、傾きの値が極大値をとる点において引いた接線を当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

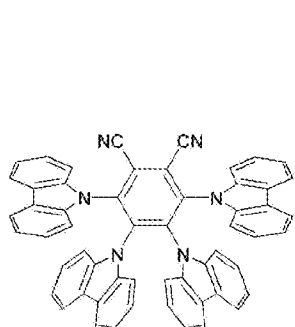
[0150] 本発明の好ましい一態様では、遅延蛍光材料として、ベンゼン環に置換しているシアノ基の数が1つであるシアノベンゼン構造を有する化合物（シアノベンゼン誘導体）を用いる。本発明の別の好ましい一態様では、遅延蛍光材料として、ベンゼン環に置換しているシアノ基の数が2つであるジシアノベンゼン構造を有する化合物（ジシアノベンゼン誘導体）を用いる。本発明の別の好ましい一態様では、遅延蛍光材料として、ベンゼン環の環骨格構成炭素原子の少なくとも1つが窒素原子に置換したアザベンゼン構造を有する化合物（アザベンゼン誘導体）を用いる。本発明の別の好ましい一態様では、遅延蛍光材料として、ベンゼン環にジアリールトリアジニル基が置換した化合物を用いる。

[0151] 以下において、本発明で用いることができる遅延蛍光材料の具体例を示す。ただし、本発明で用いることができる遅延蛍光材料は以下の具体例によって限定的に解釈されることはない。

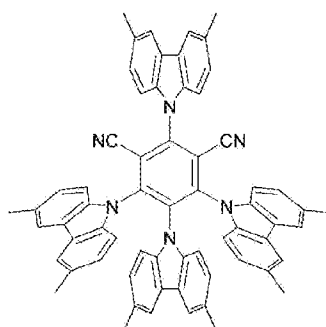
[化86-1]



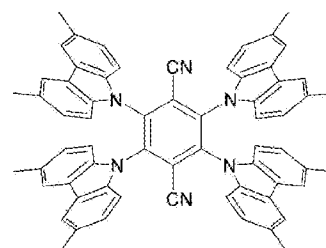
[化86-2]



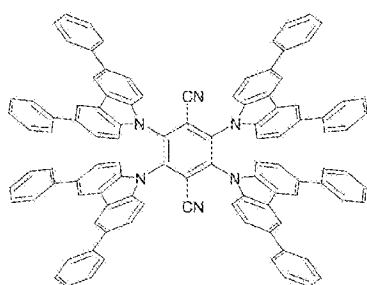
TADF11



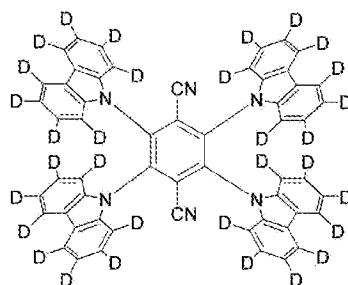
TADF12



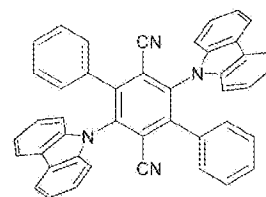
TADF13



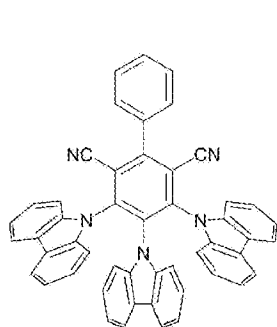
TADF14



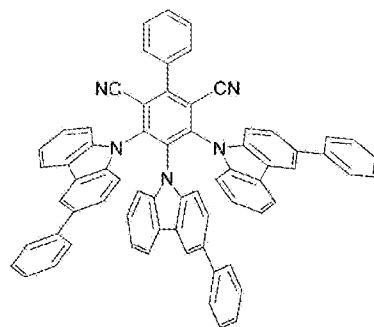
TADF15



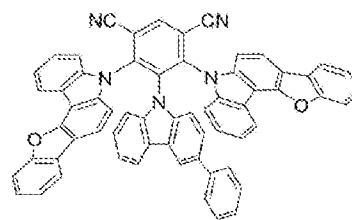
TADF16



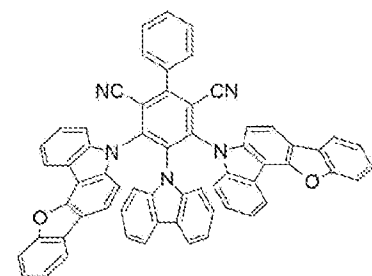
TADF17



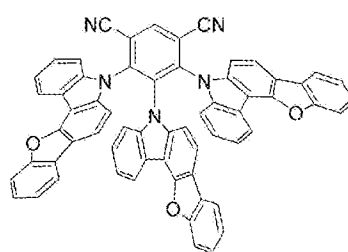
TADF18



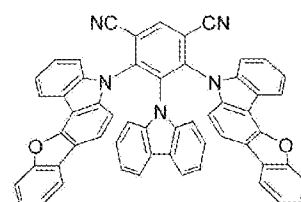
TADF19



TADF20

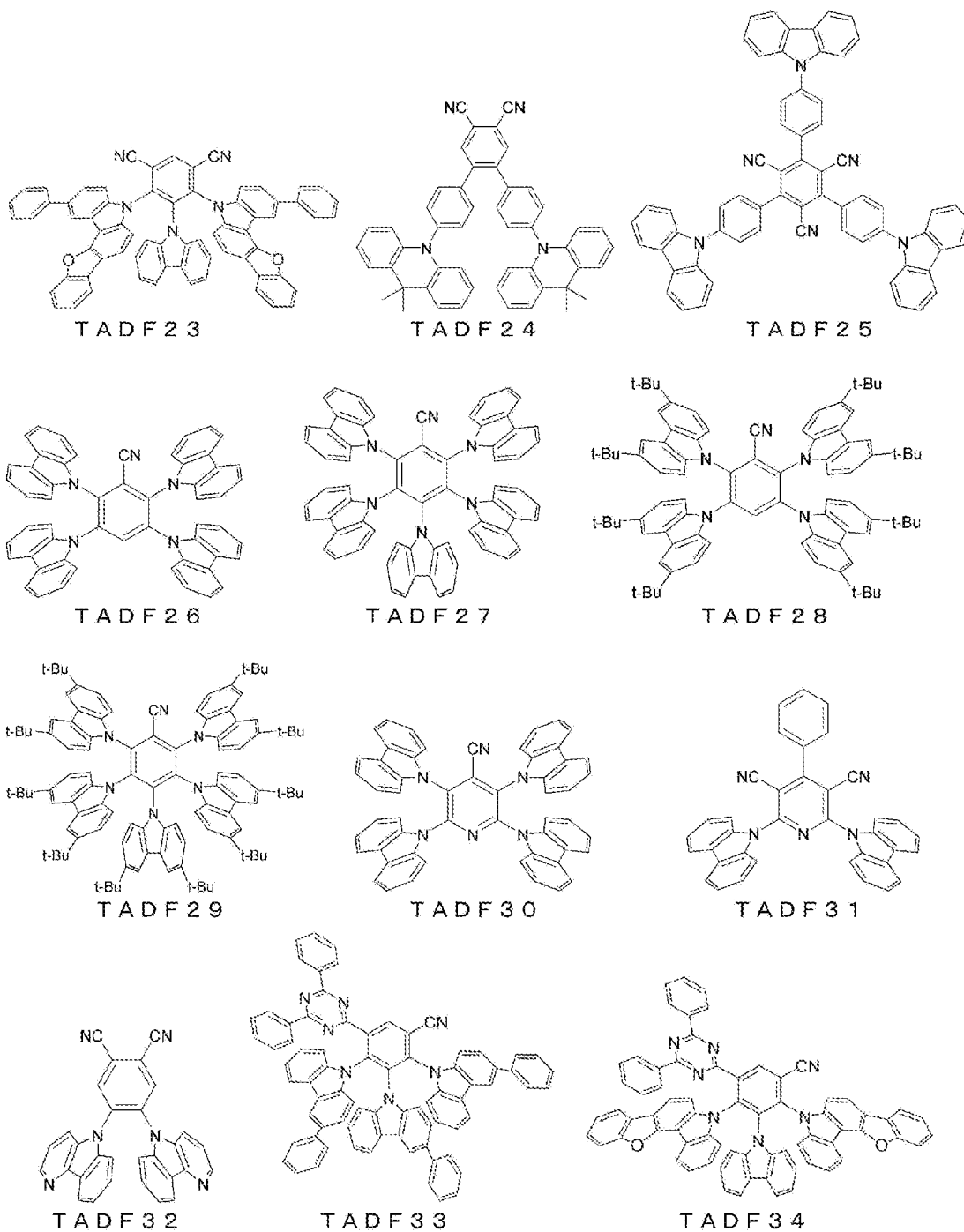


TADF21

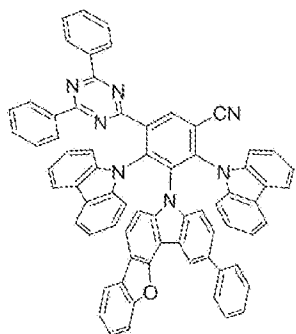


TADF22

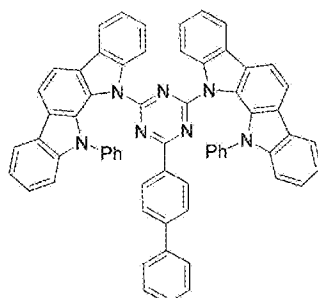
[化86-3]



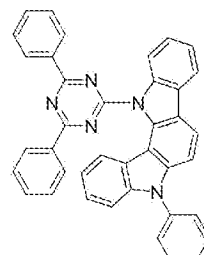
[化86-4]



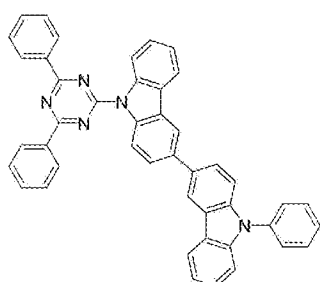
TADF35



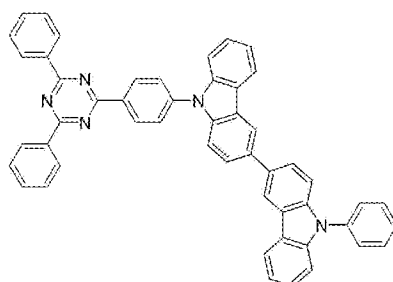
TADF36



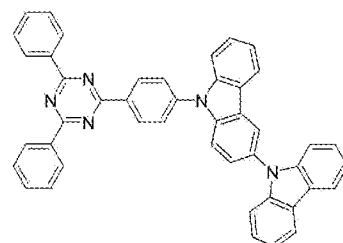
TADF37



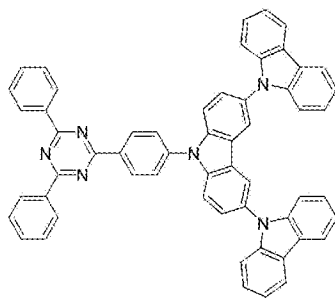
TADF38



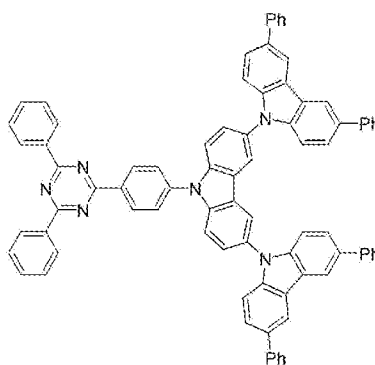
TADF39



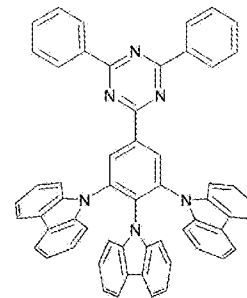
TADF40



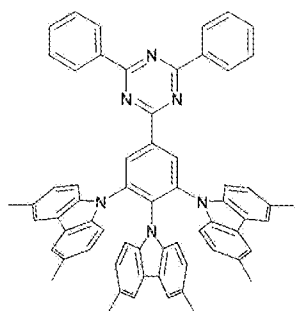
TADF41



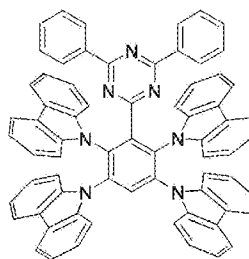
TADF42



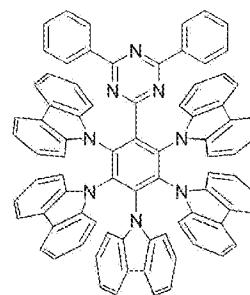
TADF43



TADF44

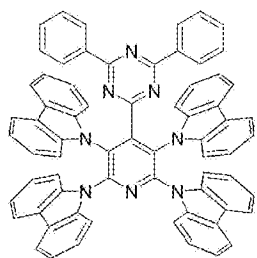


TADF45

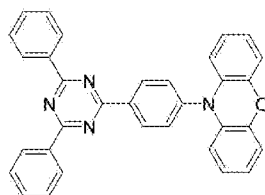


TADF46

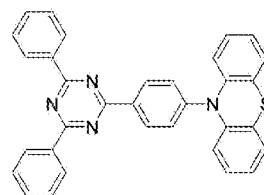
[化86-5]



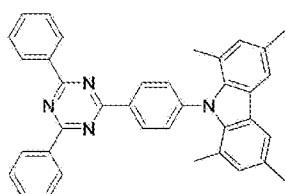
TADF47



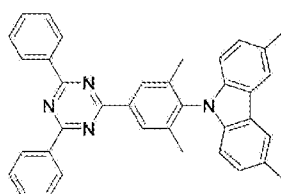
TADF48



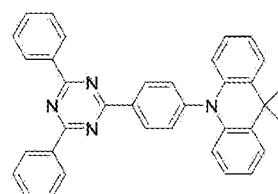
TADF49



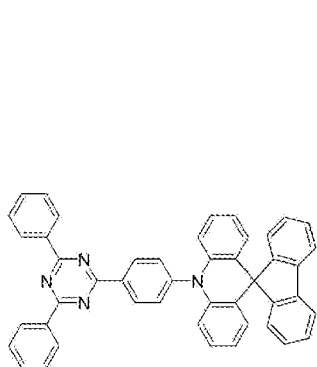
TADF50



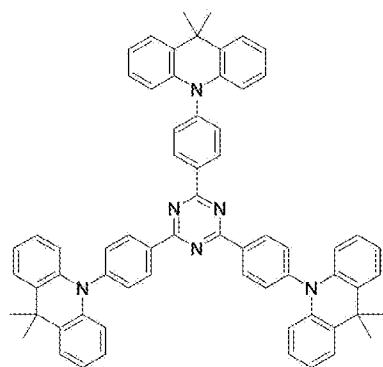
TADF51



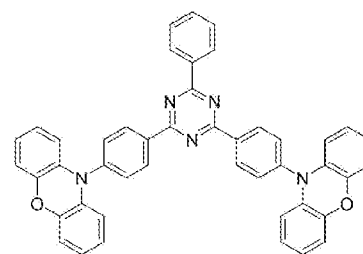
TADF52



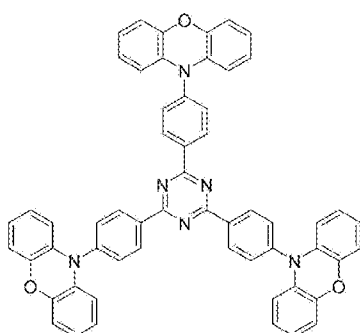
TADF53



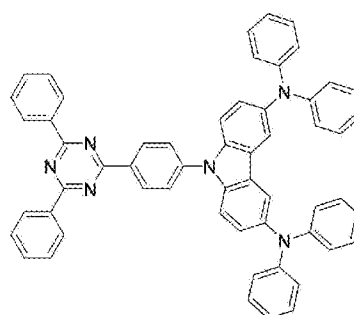
TADF54



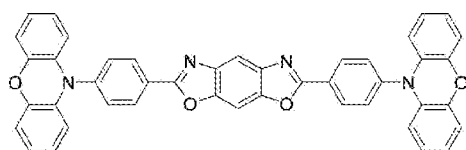
TADF55



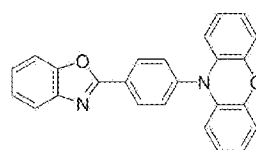
TADF56



TADF57

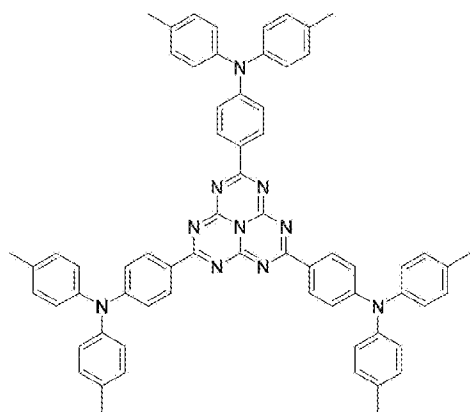


TADF58

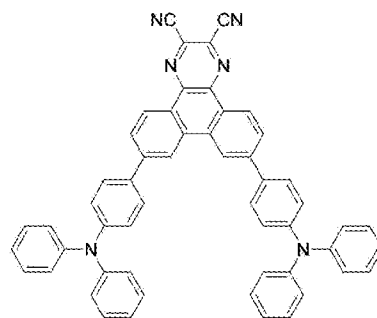


TADF59

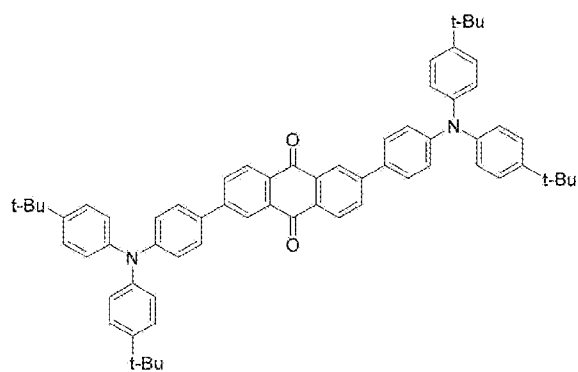
[化86-6]



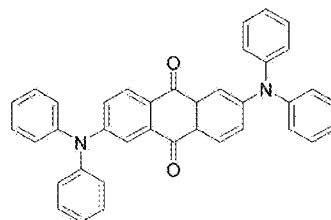
TADF60



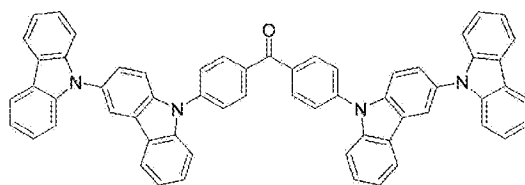
TADF61



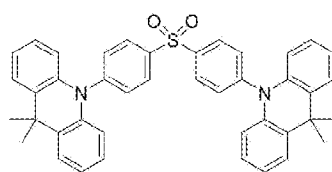
TADF62



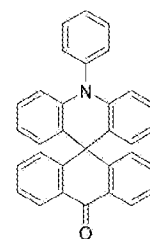
TADF63



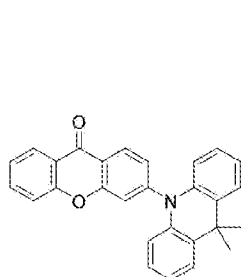
TADF64



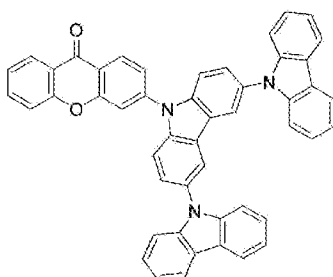
TADF65



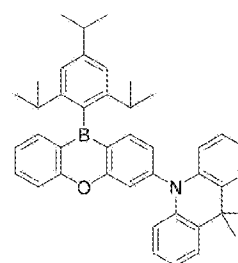
TADF66



TADF67

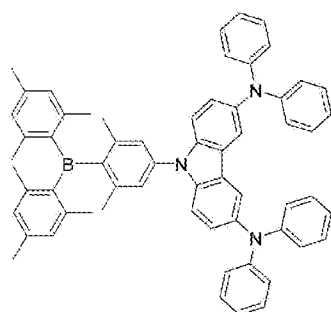


TADF68

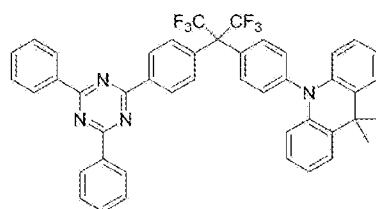


TADF69

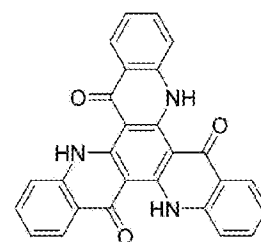
[化86-7]



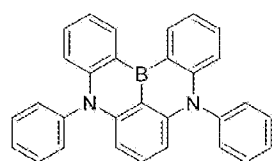
TADF70



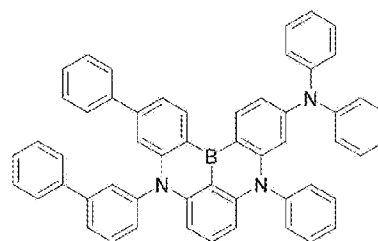
TADF71



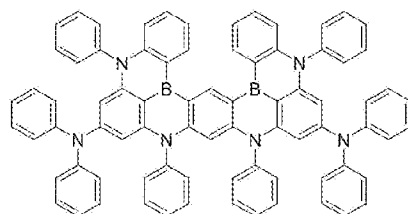
TADF72



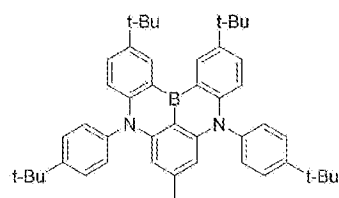
TADF73



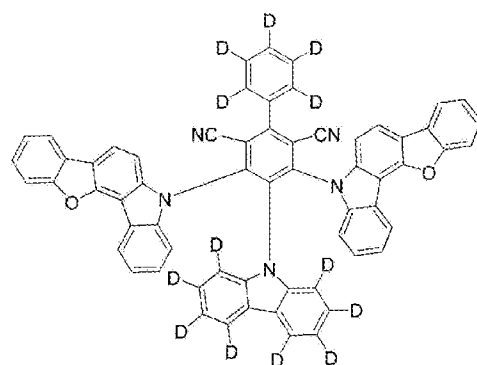
TADF74



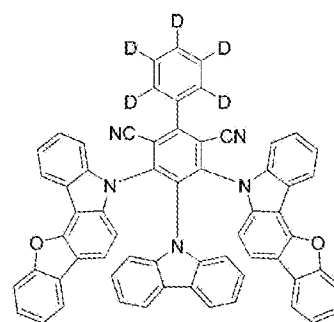
TADF75



TADF76

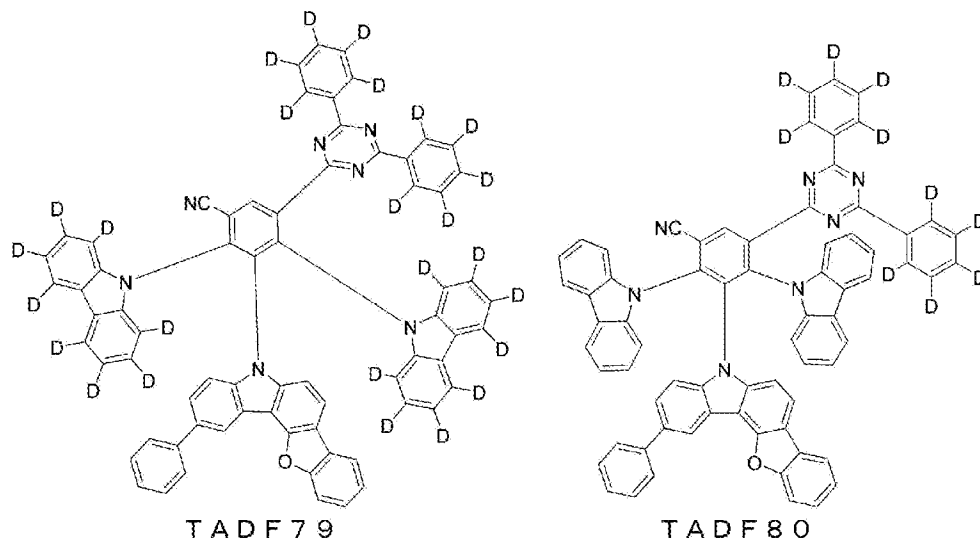


TADF77



TADF78

[化86-8]



[0152] 本発明では、上記以外にも公知の遅延蛍光材料を一般式(1)で表される化合物と適宜組み合わせる用いることができる。また、知られていない遅延蛍光材料であっても、用いることが可能である。

遅延蛍光材料として、WO2013/154064号公報の段落0008～0048および0095～0133、WO2013/011954号公報の段落0007～0047および0073～0085、WO2013/011955号公報の段落0007～0033および0059～0066、WO2013/081088号公報の段落0008～0071および0118～0133、特開2013-256490号公報の段落0009～0046および0093～0134、特開2013-116975号公報の段落0008～0020および0038～0040、WO2013/133359号公報の段落0007～0032および0079～0084、WO2013/161437号公報の段落0008～0054および0101～0121、特開2014-9352号公報の段落0007～0041および0060～0069、特開2014-9224号公報の段落0008～0048および0067～0076、特開2017-119663号公報の段落0013～0025、特開2017-119664号公報の段落0013～0026、特開2017-222623号公報の段落0012～0025、特開2017

－ 2 2 6 8 3 8 号公報の段落 0 0 1 0 ～ 0 0 5 0、特開 2 0 1 8 － 1 0 0 4 1 1 号公報の段落 0 0 1 2 ～ 0 0 4 3、WO 2 0 1 8 / 0 4 7 8 5 3 号公報の段落 0 0 1 6 ～ 0 0 4 4 に記載される一般式に包含される化合物、特に例示化合物であって、遅延蛍光を放射するものを挙げることができる。また、特開 2 0 1 3 － 2 5 3 1 2 1 号公報、WO 2 0 1 3 / 1 3 3 3 5 9 号公報、WO 2 0 1 4 / 0 3 4 5 3 5 号公報、WO 2 0 1 4 / 1 1 5 7 4 3 号公報、WO 2 0 1 4 / 1 2 2 8 9 5 号公報、WO 2 0 1 4 / 1 2 6 2 0 0 号公報、WO 2 0 1 4 / 1 3 6 7 5 8 号公報、WO 2 0 1 4 / 1 3 3 1 2 1 号公報、WO 2 0 1 4 / 1 3 6 8 6 0 号公報、WO 2 0 1 4 / 1 9 6 5 8 5 号公報、WO 2 0 1 4 / 1 8 9 1 2 2 号公報、WO 2 0 1 4 / 1 6 8 1 0 1 号公報、WO 2 0 1 5 / 0 0 8 5 8 0 号公報、WO 2 0 1 4 / 2 0 3 8 4 0 号公報、WO 2 0 1 5 / 0 0 2 2 1 3 号公報、WO 2 0 1 5 / 0 1 6 2 0 0 号公報、WO 2 0 1 5 / 0 1 9 7 2 5 号公報、WO 2 0 1 5 / 0 7 2 4 7 0 号公報、WO 2 0 1 5 / 1 0 8 0 4 9 号公報、WO 2 0 1 5 / 0 8 0 1 8 2 号公報、WO 2 0 1 5 / 0 7 2 5 3 7 号公報、WO 2 0 1 5 / 0 8 0 1 8 3 号公報、特開 2 0 1 5 － 1 2 9 2 4 0 号公報、WO 2 0 1 5 / 1 2 9 7 1 4 号公報、WO 2 0 1 5 / 1 2 9 7 1 5 号公報、WO 2 0 1 5 / 1 3 3 5 0 1 号公報、WO 2 0 1 5 / 1 3 6 8 8 0 号公報、WO 2 0 1 5 / 1 3 7 2 4 4 号公報、WO 2 0 1 5 / 1 3 7 2 0 2 号公報、WO 2 0 1 5 / 1 3 7 1 3 6 号公報、WO 2 0 1 5 / 1 4 6 5 4 1 号公報、WO 2 0 1 5 / 1 5 9 5 4 1 号公報に記載される発光材料であって、遅延蛍光を放射するものを採用することもできる。なお、この段落に記載される上記の公報は、本明細書の一部としてここに引用している。

[0153] 本発明で用いる遅延蛍光材料は金属原子を含まないことが好ましい。例えば、遅延蛍光材料として、炭素原子、水素原子、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、遅延蛍光材料として、炭素原子、水素原子、窒素原子および酸素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することがで

きる。例えば、遅延蛍光材料として、炭素原子、水素原子および窒素原子からなる化合物を選択することができる。

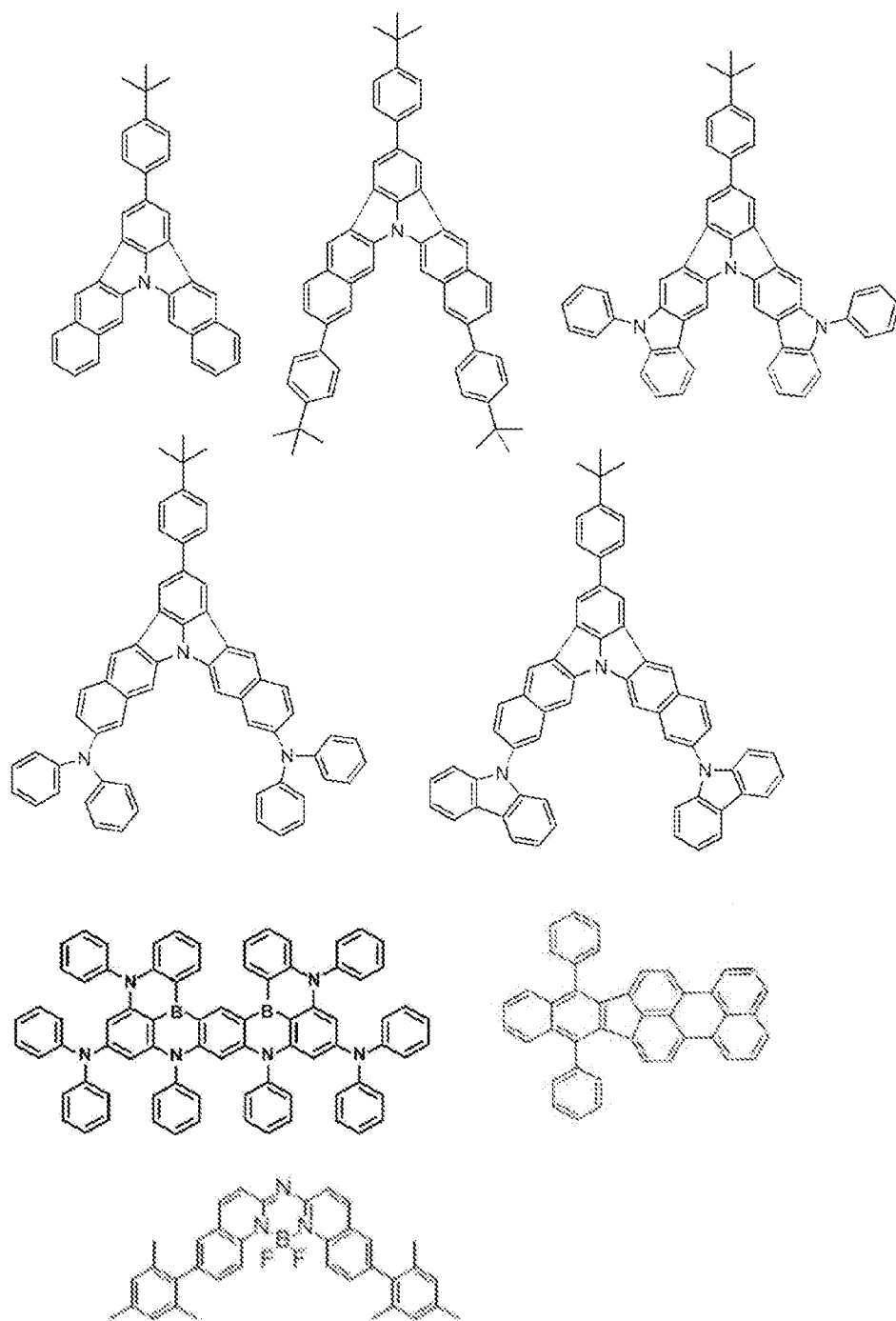
[0154] 本発明の膜には、その他の材料として、励起一重項エネルギーが一般式（１）で表される化合物や一般式（２）で表される化合物よりも低い発光材料を含んでいてもよい。このとき、一般式（１）で表される化合物はアシストドーパントとして機能し、その他の材料である発光材料が主として発光することが好ましい。発光材料としては、遅延蛍光材料を選択してもよい。発光材料の含有量は、一般式（１）で表される化合物や一般式（２）で表される化合物よりも少ないことが好ましい。一般式（１）で表される化合物と一般式（２）で表される化合物と発光材料の合計量を１００重量部としたとき、発光材料の含有量は０．０１～１０重量部であることが好ましく、０．１～５重量部であることがより好ましく、０．３～３重量部であることがさらに好ましい。

発光材料としては、アントラセン誘導体、テトラセン誘導体、ナфтаセン誘導体、ピレン誘導体、ペリレン誘導体、クリセン誘導体、ルブレン誘導体、クマリン誘導体、ピラン誘導体、スチルベン誘導体、フルオレン誘導体、アントリル誘導体、ピロメテン誘導体、ターフェニル誘導体、ターフェニレン誘導体、フルオランテン誘導体、アミン誘導体、キナクリドン誘導体、オキサジアゾール誘導体、マロノニトリル誘導体、ピラン誘導体、カルバゾール誘導体、ジュロリジン誘導体、チアゾール誘導体、金属（Al, Zn）を有する誘導体等を用いることが可能である。これらの例示骨格には置換基を有してもよいし、置換基を有していなくてもよい。また、これらの例示骨格どうしを組み合わせてもよい。

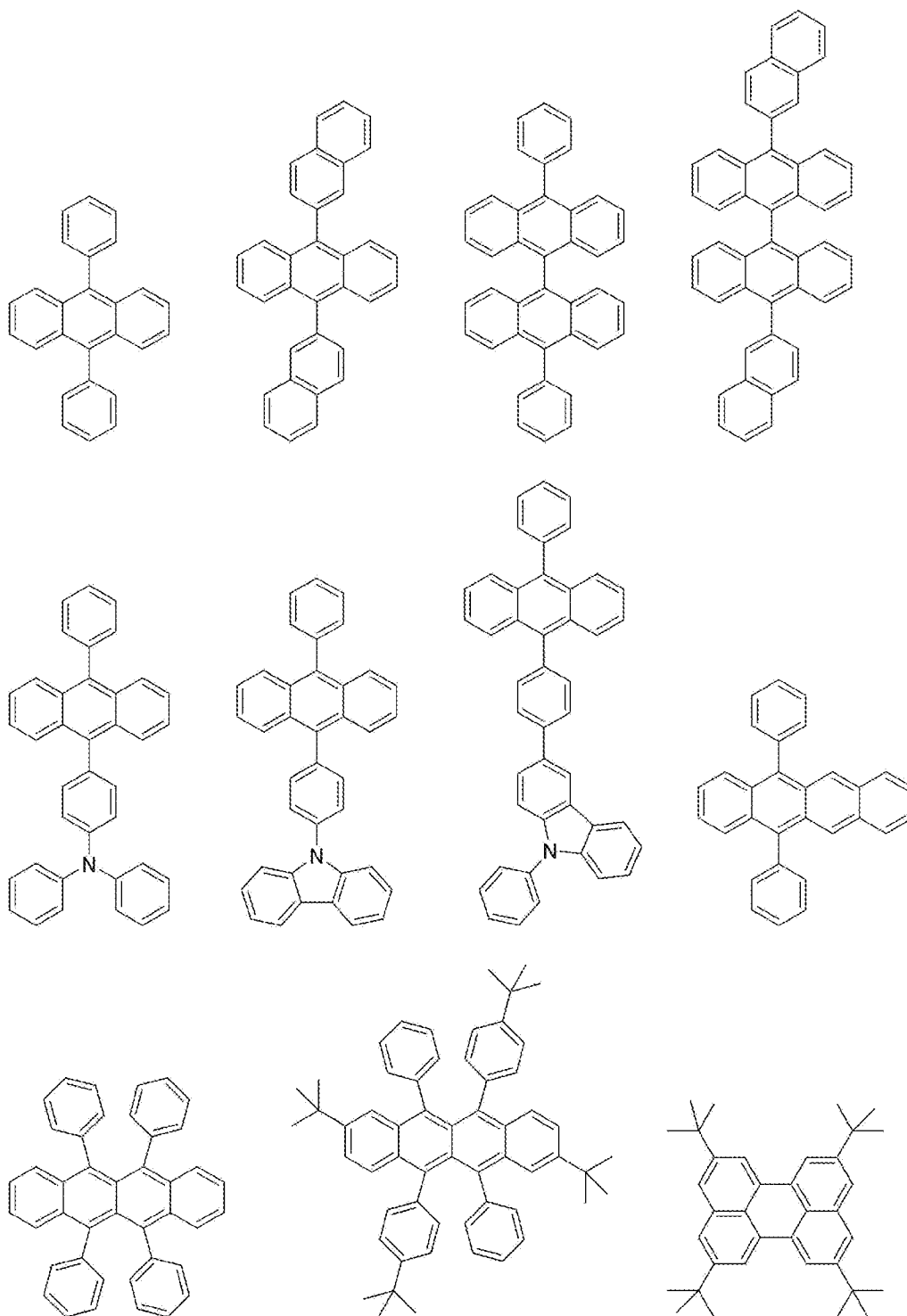
以下において、本発明の膜に用いることができる発光材料を例示する。また、WO 2015/022974号公報の段落0220～0239に記載の化合物も採用することができる。

[0155]

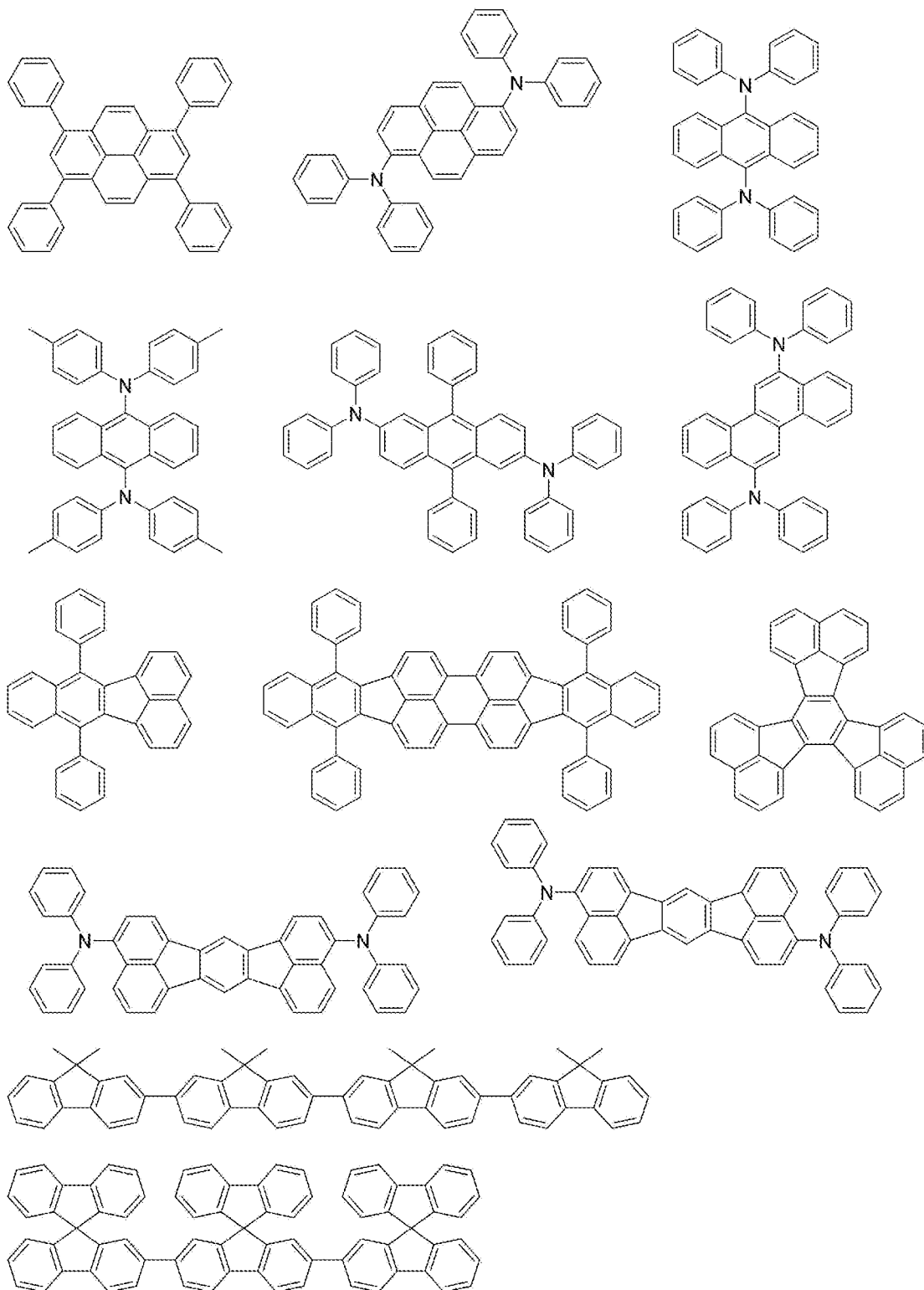
[化87-1]



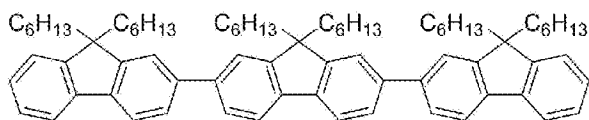
[化87-2]



[化87-3]



[化87-4]



[0156] 本発明の膜の製造方法は特に制限されない。ある実施形態では、本発明の膜は、湿式工程で形成することができる。湿式工程では、本発明の化合物を含む組成物を溶解した溶液を面に塗布し、溶媒の除去後に膜を形成する。湿式工程として、スピコート法、スリットコート法、インクジェット法（スプレー法）、グラビア印刷法、オフセット印刷法、フレキソ印刷法を挙げることができるが、これらに限定されるものではない。湿式工程では、一般式（１）の化合物と一般式（２）の化合物等の膜を構成する材料を含む組成物を溶解することができる適切な有機溶媒を選択して用いる。ある実施形態では、組成物に含まれる化合物に、有機溶媒に対する溶解性を上げる置換基（例えばアルキル基）を導入することができる。また、ある実施形態では、本発明の化合物を含むフィルムは、乾式工程で形成することができる。ある実施形態では、乾式工程として真空蒸着法を採用することができる、これに限定されるものではない。真空蒸着法を採用する場合は、フィルムを構成する化合物を個別の蒸着源から共蒸着させてもよいし、化合物を混合した単一の蒸着源から共蒸着させてもよい。単一の蒸着源を用いる場合は、化合物の粉末を混合した混合粉を用いてもよいし、その混合粉を圧縮した圧縮成形体を用いてもよいし、各化合物を加熱溶融して冷却した混合物を用いてもよい。ある実施形態では、単一の蒸着源に含まれる複数の化合物の蒸着速度（重量減少速度）が一致ないしほぼ一致する条件で共蒸着を行うことにより、蒸着源に含まれる複数の化合物の組成比に対応する組成比の膜を形成することができる。形成される膜の組成比と同じ組成比で複数の化合物を混合して蒸着源とすれば、所望の組成比を有する膜を簡便に形成することができる。ある実施形態では、共蒸着される各化合物が同じ重量減少率になる温度を特定して、その温度を共蒸着時の温度として採用することができる。

本発明の膜の厚さは用途によって適宜決定することができる。例えば、発

光用に用いる場合は、 $0.5 \sim 100 \mu\text{m}$ の範囲内にすることができる。

本発明の膜は、一般式（１）で表される化合物の配向性が高い。このような高い配向性は、一般式（２）で表される化合物と組み合わせて用いることにより達成できる。特に、一般式（２）で表される化合物の中でも双極子モーメントが低い化合物と組み合わせて用いることにより、一段と高い配向性を達成することができる。一般式（１）で表される化合物は膜面に水平配向するため、発光効率が高くなる。配向性は、配向値（Ｓ値）にて評価することができる。負の値が大きいほど（数値が小さいほど）配向性が高いことを意味する。配向値（Ｓ値）は、Scientific Reports 2017, 7, 8405に記載される方法により決定することができる。本発明の膜における一般式（１）で表される化合物の配向値は -0.33 以下であることが好ましく、 -0.38 以下であることがより好ましく、 -0.41 以下であることがさらに好ましい。

ある実施形態では、本発明の膜は遅延蛍光を発する。

本開示のある実施形態では、本発明の膜は、熱的または電子的手段で励起されるとき、UV領域、可視スペクトルのうち青色、緑色、黄色、オレンジ色、赤色領域（例えば約 420 nm ～約 500 nm 、約 500 nm ～約 600 nm または約 600 nm ～約 700 nm ）または近赤外線領域で光を発することができる。

ある実施形態では、本発明の膜は金属元素を含まない。ここでいう金属元素にはホウ素は含まれない。ある実施形態では、本発明の膜は炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子のみから構成される材料で構成することができる。あるいは、本発明の膜は、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子およびホウ素原子からなる群より選択される原子のみから構成される材料で構成することもできる。

[0157] [有機発光素子]

本発明の有機発光素子は、一般式（１）で表される化合物と一般式（２）

で表される化合物を用いた有機発光素子である。

ある実施形態では、有機発光素子は発光層を含む。ある実施形態では、発光層は発光材料として一般式（１）で表される化合物を含む。ある実施形態では、有機発光素子は有機光ルミネッセンス素子（有機PL素子）である。ある実施形態では、有機発光素子は、有機エレクトロルミネッセンス素子（有機EL素子）である。ある実施形態では、一般式（２）で表される化合物は、一般式（１）で表される発光材料の光放射を補助する。ある実施形態では、発光層は上記の本発明の膜である。

ある実施形態では、有機光ルミネッセンス素子は、少なくとも１つの発光層を含む。ある実施形態では、有機エレクトロルミネッセンス素子は、少なくとも陽極、陰極、および前記陽極と前記陰極との間の有機層を含む。ある実施形態では、有機層は、少なくとも発光層を含む。ある実施形態では、有機層は、発光層のみを含む。ある実施形態では、有機層は、発光層に加えて１つ以上の有機層を含む。有機層の例としては、正孔輸送層、正孔注入層、電子障壁層、正孔障壁層、電子注入層、電子輸送層および励起子障壁層が挙げられる。ある実施形態では、正孔輸送層は、正孔注入機能を有する正孔注入輸送層であってもよく、電子輸送層は、電子注入機能を有する電子注入輸送層であってもよい。

[0158] 以下において、有機エレクトロルミネッセンス素子の各部材および発光層以外の各層について説明する。

[0159] 基材：

いくつかの実施形態では、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は基材により保持され、当該基材は特に限定されず、有機エレクトロルミネッセンス素子で一般的に用いられる、例えばガラス、透明プラスチック、クォーツおよびシリコンにより形成されたいずれかの材料を用いればよい。

[0160] 陽極：

いくつかの実施形態では、有機エレクトロルミネッセンス装置の陽極は、金属、合金、導電性化合物またはそれらの組み合わせから製造される。いく

つかの実施形態では、前記の金属、合金または導電性化合物は高い仕事関数（ 4 eV 以上）を有する。いくつかの実施形態では、前記金属はAuである。いくつかの実施形態では、導電性の透明材料は、CuI、酸化インジウム・スズ（ITO）、 SnO_2 およびZnOから選択される。いくつかの実施形態では、 $\text{In}_2\text{O}_3-\text{ZnO}$ などの、透明な導電性フィルムを形成できるアモルファス材料を使用する。いくつかの実施形態では、前記陽極は薄膜である。いくつかの実施形態では、前記薄膜は蒸着またはスパッタリングにより作製される。いくつかの実施形態では、前記フィルムはフォトリソグラフィ方法によりパターン化される。いくつかの実施形態では、パターンが高精度である必要がない（例えば約 $100\text{ }\mu\text{m}$ 以上）場合、当該パターンは、電極材料への蒸着またはスパッタリングに好適な形状のマスクを用いて形成してもよい。いくつかの実施形態では、有機導電性化合物などのコーティング材料を塗布しうるとき、プリント法やコーティング法などの湿式フィルム形成方法が用いられる。いくつかの実施形態では、放射光が陽極を通過するとき、陽極は 10% 超の透過度を有し、当該陽極は、単位面積あたり数百オーム以下のシート抵抗を有する。いくつかの実施形態では、陽極の厚みは $10\sim 1,000\text{ nm}$ である。いくつかの実施形態では、陽極の厚みは $10\sim 200\text{ nm}$ である。いくつかの実施形態では、陽極の厚みは用いる材料に応じて変動する。

[0161] 陰極：

いくつかの実施形態では、前記陰極は、低い仕事関数を有する金属（ 4 eV 以下）（電子注入金属と称される）、合金、導電性化合物またはその組み合わせなどの電極材料で作製される。いくつかの実施形態では、前記電極材料は、ナトリウム、ナトリウム－カリウム合金、マグネシウム、リチウム、マグネシウム－銅混合物、マグネシウム－銀混合物、マグネシウム－アルミニウム混合物、マグネシウム－インジウム混合物、アルミニウム－酸化アルミニウム（ Al_2O_3 ）混合物、インジウム、リチウム－アルミニウム混合物および希土類元素から選択される。いくつかの実施形態では、電子注入金属

と、電子注入金属より高い仕事関数を有する安定な金属である第2の金属との混合物が用いられる。いくつかの実施形態では、前記混合物は、マグネシウム－銀混合物、マグネシウム－アルミニウム混合物、マグネシウム－インジウム混合物、アルミニウム－酸化アルミニウム (Al_2O_3) 混合物、リチウム－アルミニウム混合物およびアルミニウムから選択される。いくつかの実施形態では、前記混合物は電子注入特性および酸化に対する耐性を向上させる。いくつかの実施形態では、陰極は、蒸着またはスパッタリングにより電極材料を薄膜として形成させることによって製造される。いくつかの実施形態では、前記陰極は単位面積当たり数百オーム以下のシート抵抗を有する。いくつかの実施形態では、前記陰極の厚は $10\text{ nm} \sim 5\text{ }\mu\text{ m}$ である。いくつかの実施形態では、前記陰極の厚は $50 \sim 200\text{ nm}$ である。いくつかの実施形態では、放射光を透過させるため、有機エレクトロルミネッセンス素子の陽極および陰極のいずれか1つは透明または半透明である。いくつかの実施形態では、透明または半透明のエレクトロルミネッセンス素子は光放射輝度を向上させる。

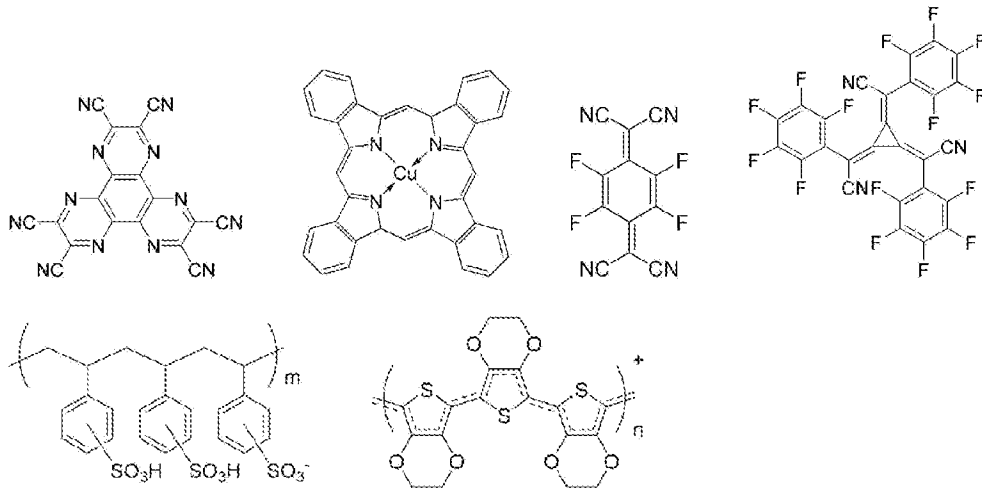
いくつかの実施形態では、前記陰極を、前記陽極に関して前述した導電性の透明な材料で形成されることにより、透明または半透明の陰極が形成される。いくつかの実施形態では、素子は陽極と陰極とを含むが、いずれも透明または半透明である。

[0162] 注入層：

注入層は、電極と有機層との間の層である。いくつかの実施形態では、前記注入層は駆動電圧を減少させ、光放射輝度を増強する。いくつかの実施形態では、前記注入層は、正孔注入層と電子注入層とを含む。前記注入層は、陽極と発光層または正孔輸送層との間、並びに陰極と発光層または電子輸送層との間に配置することがきる。いくつかの実施形態では、注入層が存在する。いくつかの実施形態では、注入層が存在しない。

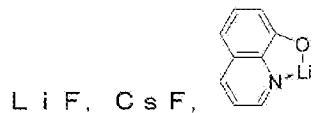
以下に、正孔注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

[0163] [化88]

MoO₃,

[0164] 次に、電子注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

[化89]



[0165] 障壁層：

障壁層は、発光層に存在する電荷（電子または正孔）および／または励起子が、発光層の外側に拡散することを阻止できる層である。いくつかの実施形態では、電子障壁層は、発光層と正孔輸送層との間に存在し、電子が発光層を通過して正孔輸送層へ至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、正孔障壁層は、発光層と電子輸送層との間に存在し、正孔が発光層を通過して電子輸送層へ至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、障壁層は、励起子が発光層の外側に拡散することを阻止する。いくつかの実施形態では、電子障壁層および正孔障壁層は励起子障壁層を構成する。本明細書で用いる用語「電子障壁層」または「励起子障壁層」には、電子障壁層の、および励起子障壁層の機能の両方を有する層が含まれる。

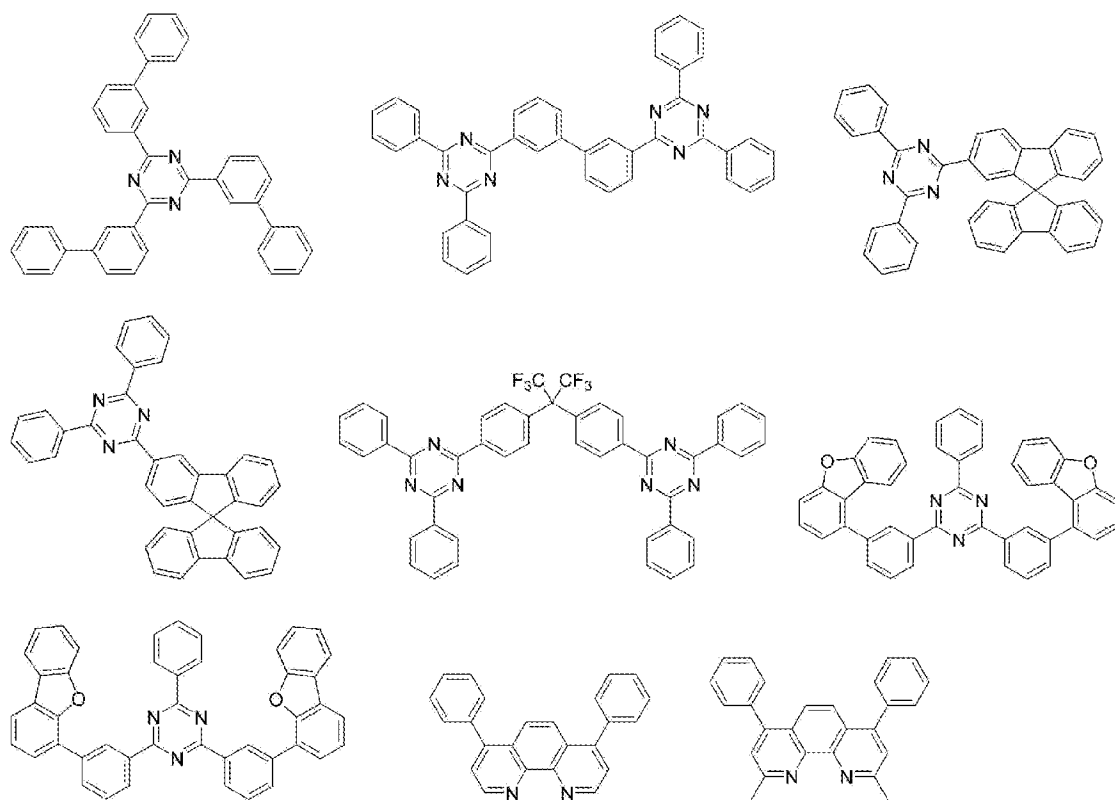
[0166] 正孔障壁層：

正孔障壁層は、電子輸送層として機能する。いくつかの実施形態では、電

子の輸送の間、正孔障壁層は正孔が電子輸送層に至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、正孔障壁層は、発光層における電子と正孔との再結合の確率を高める。正孔障壁層に用いる材料は、電子輸送層について前述したのと同じ材料であってもよい。

以下に、正孔障壁層に用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

[0167] [化90]

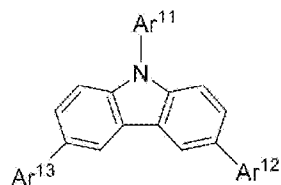


[0168] 電子障壁層：

電子障壁層は、正孔を輸送する。いくつかの実施形態では、正孔の輸送の間、電子障壁層は電子が正孔輸送層に至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、電子障壁層は、発光層における電子と正孔との再結合の確率を高める。電子障壁層に用いる材料は、正孔輸送層について前述したのと同じ材料であってもよい。

電子障壁材料として用いることができる化合物として、下記一般式で表される化合物を例示することができる。

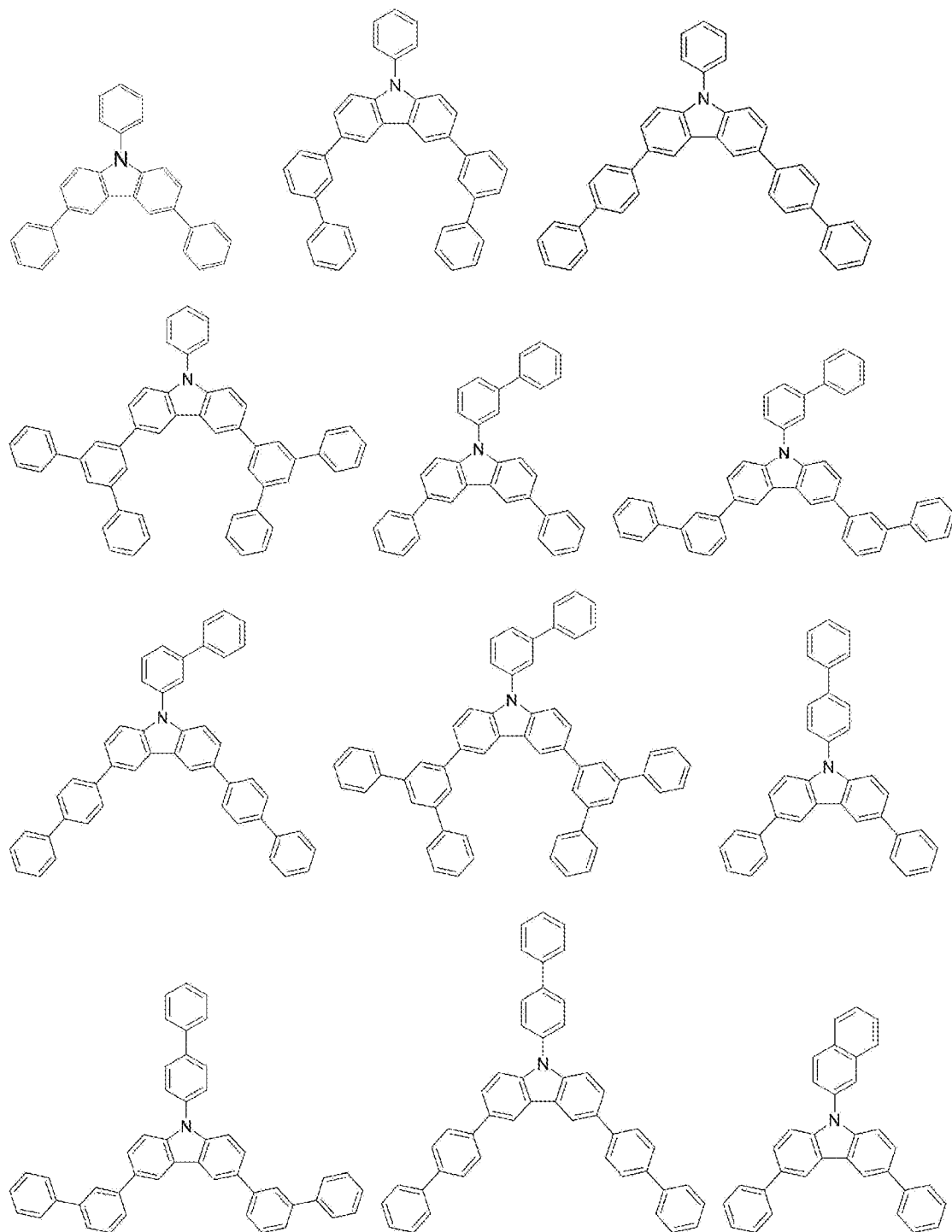
[化91]



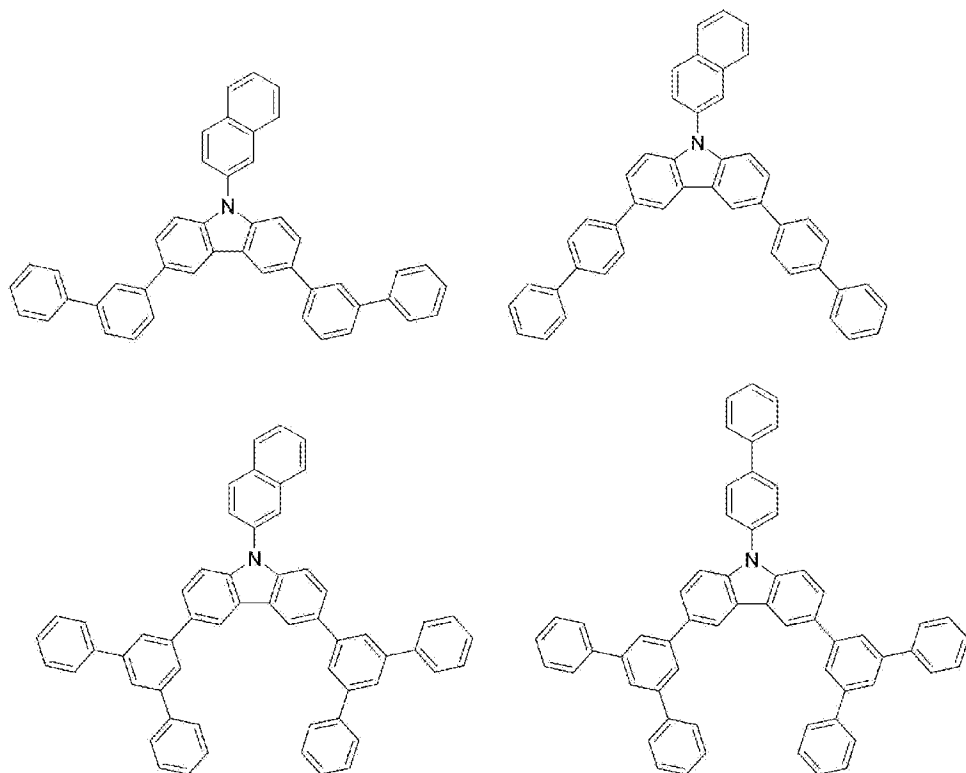
上記一般式において、 $Ar^{11} \sim Ar^{13}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基を表す。例えば、置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフタレン-1-イル基、置換もしくは無置換のナフタレン-2-イル基を例示することができる。アリール基の水素原子の置換基としては、重水素原子、アルキル基およびアリール基からなる群より選択される1つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基を挙げることができる。例えば、置換アリール基として、4-ビフェニルイル基、3-ビフェニルイル基、m-テルフェニル-5'-イル基を挙げることができる。

上記一般式で表される化合物の具体例を以下に例示する。

[化92-1]



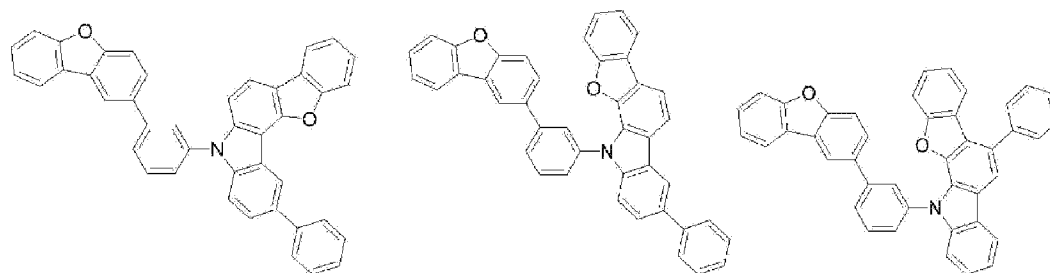
[化92-2]



以下に電子障壁材料として用いることができる好ましい化合物の具体例を挙げる。

[0169]

[化93-2]



[0170] 励起子障壁層：

励起子障壁層は、発光層における正孔と電子との再結合を通じて生じた励起子が電荷輸送層まで拡散することを阻止する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層は、発光層における励起子の有効な閉じ込め（confinement）を可能にする。いくつかの実施形態では、装置の光放射効率が向上する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層は、陽極の側と陰極の側のいずれかで、およびその両側の発光層に隣接する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層が陽極側に存在するとき、当該層は、正孔輸送層と発光層との間に存在し、当該発光層に隣接してもよい。いくつかの実施形態では、励起子障壁層が陰極側に存在するとき、当該層は、発光層と陰極との間に存在し、当該発光層に隣接してもよい。いくつかの実施形態では、正孔注入層、電子障壁層または同様の層は、陽極と、陽極側の発光層に隣接する励起子障壁層との間に存在する。いくつかの実施形態では、正孔注入層、電子障壁層、正孔障壁層または同様の層は、陰極と、陰極側の発光層に隣接する励起子障壁層との間に存在する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層は、励起一重項エネルギーと励起三重項エネルギーを含み、その少なくとも1つが、それぞれ、発光材料の励起一重項エネルギーと励起三重項エネルギーより高い。

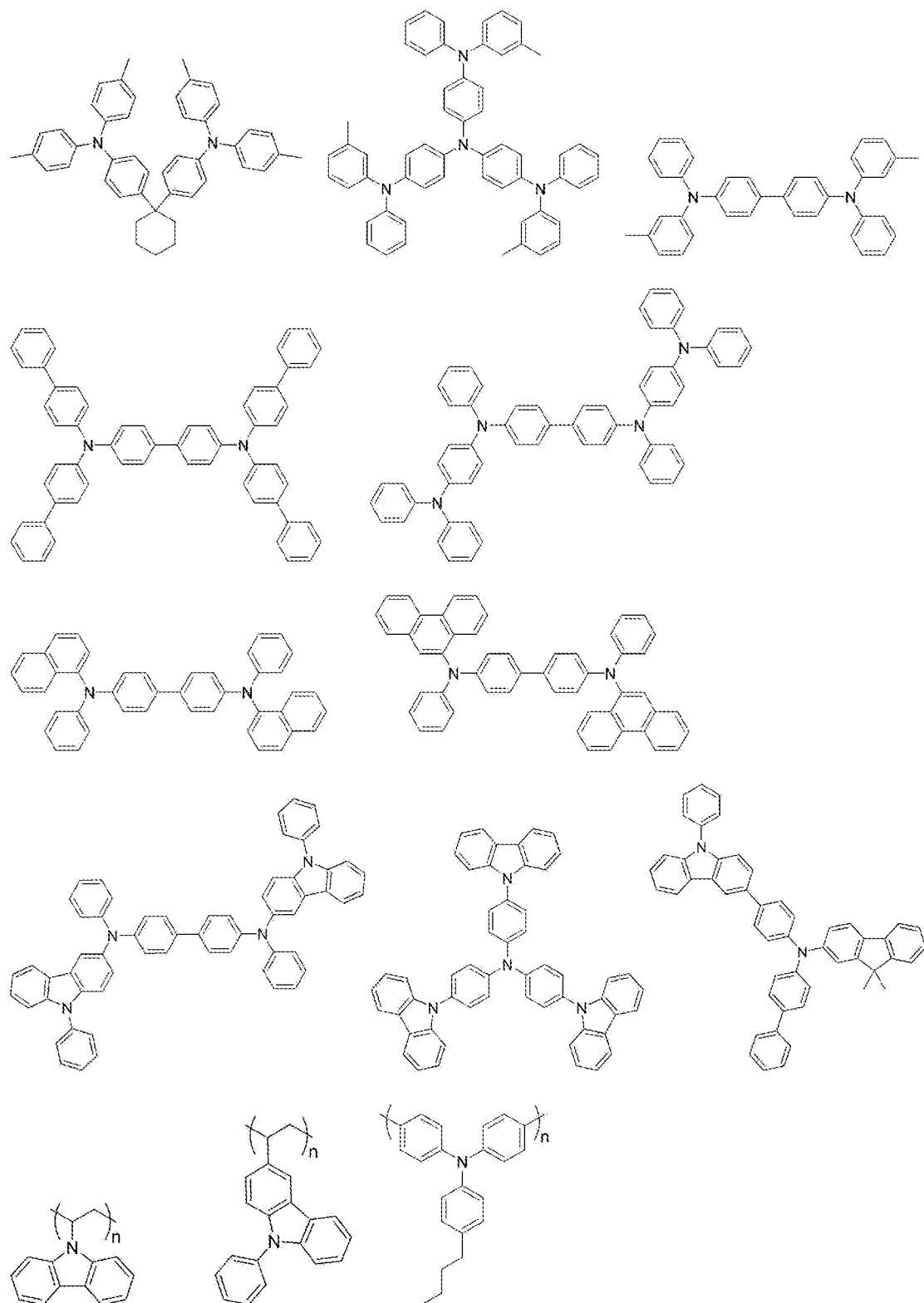
[0171] 正孔輸送層：

正孔輸送層は、正孔輸送材料を含む。いくつかの実施形態では、正孔輸送層は単層である。いくつかの実施形態では、正孔輸送層は複数の層を有する。

いくつかの実施形態では、正孔輸送材料は、正孔の注入または輸送特性および電子の障壁特性のうちの1つの特性を有する。いくつかの実施形態では、正孔輸送材料は有機材料である。いくつかの実施形態では、正孔輸送材料は無機材料である。本発明で利用できる公知の正孔輸送材料の例としては、限定されないが、トリアゾール誘導体、オキサジアゾール誘導剤、イミダゾール誘導体、カルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、ポリアリールアルカン誘導剤、ピラゾリン誘導体、ピラゾロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリルアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、オキサゾール誘導体、スチリルアントラセン誘導剤、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザン誘導体、アニリンコポリマーおよび導電性ポリマーオリゴマー（特にチオフェンオリゴマー）、またはその組合せが挙げられる。いくつかの実施形態では、正孔輸送材料はポルフィリン化合物、芳香族三級アミン化合物およびスチリルアミン化合物から選択される。いくつかの実施形態では、正孔輸送材料は芳香族三級アミン化合物である。以下に正孔輸送材料として用いることができる好ましい化合物の具体例を挙げる。

[0172]

[化94]



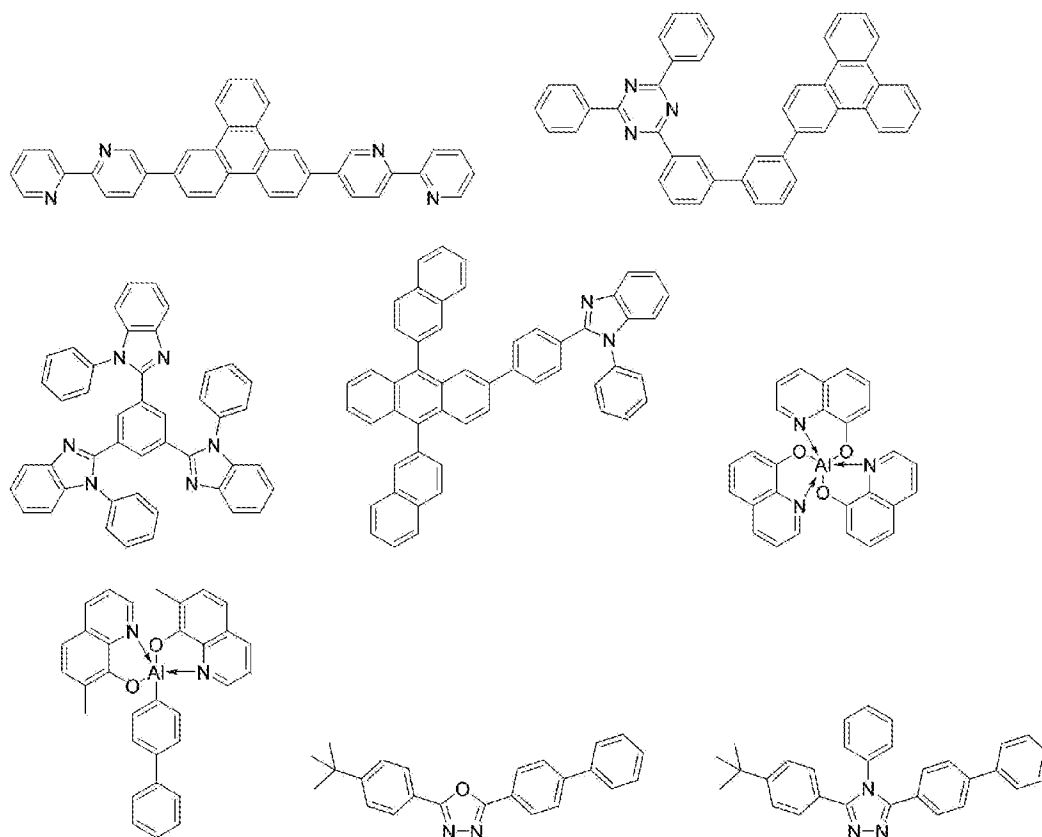
[0173] 電子輸送層：

電子輸送層は、電子輸送材料を含む。いくつかの実施形態では、電子輸送

層は単層である。いくつかの実施形態では、電子輸送層は複数の層を有する。

いくつかの実施形態では、電子輸送材料は、陰極から注入された電子を発光層に輸送する機能さえあればよい。いくつかの実施形態では、電子輸送材料はまた、正孔障壁材料としても機能する。本発明で利用できる電子輸送層の例としては、限定されないが、ニトロ置換フルオレン誘導体、ジフェニルキノン誘導体、チオピランジオキシド誘導体、カルボジイミド、フルオレニリデンメタン誘導体、アントラキノジメタン、アントロン誘導体、オキサジアゾール誘導体、アゾール誘導体、アジン誘導体またはその組合せ、またはそのポリマーが挙げられる。いくつかの実施形態では、電子輸送材料はチアジアゾール誘導剤またはキノキサリン誘導体である。いくつかの実施形態では、電子輸送材料はポリマー材料である。以下に電子輸送材料として用いることができる好ましい化合物の具体例を挙げる。

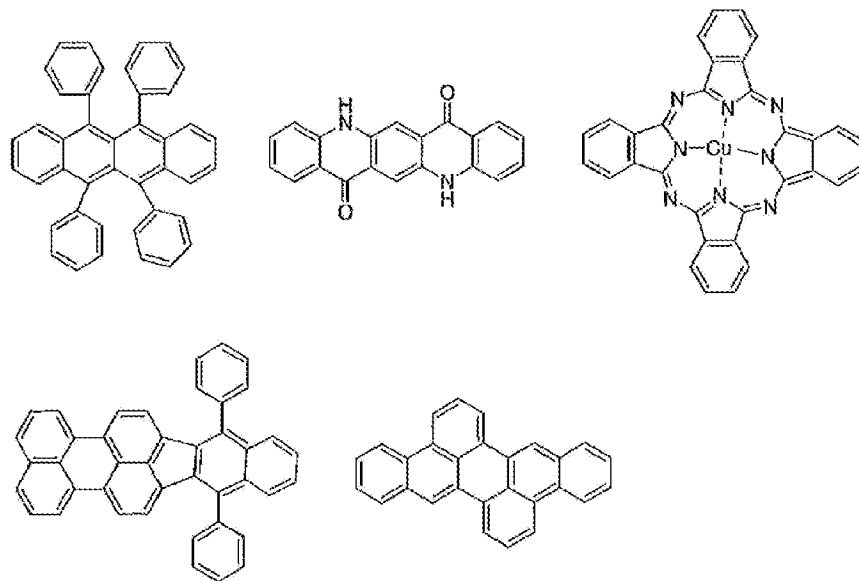
[0174] [化95]



[0175] さらに、各有機層に添加可能な材料として好ましい化合物例を挙げる。例

えば、安定化材料として添加すること等が考えられる。

[0176] [化96]



[0177] 有機エレクトロルミネッセンス素子に用いることができる好ましい材料を具体的に例示したが、本発明において用いることができる材料は、以下の例示化合物によって限定的に解釈されることはない。また、特定の機能を有する材料として例示した化合物であっても、その他の機能を有する材料として転用することも可能である。

[0178] デバイス：

いくつかの実施形態では、発光層はデバイス中に組み込まれる。例えば、デバイスには、OLEDバルブ、OLEDランプ、テレビ用ディスプレイ、コンピューター用モニター、携帯電話およびタブレットが含まれるが、これらに限定されない。

いくつかの実施形態では、電子デバイスは、陽極、陰極、および当該陽極と当該陰極との間の発光層を含む少なくとも1つの有機層を有するOLEDを含む。

いくつかの実施形態では、本願明細書に記載の構成物は、OLEDまたは光電子デバイスなどの、様々な感光性または光活性化デバイスに組み込まれる。いくつかの実施形態では、前記構成物はデバイス内の電荷移動または

エネルギー移動の促進に、および／または正孔輸送材料として有用でありうる。前記デバイスとしては、例えば有機発光ダイオード（O L E D）、有機集積回線（O I C）、有機電界効果トランジスタ（O - F E T）、有機薄膜トランジスタ（O - T F T）、有機発光トランジスタ（O - L E T）、有機太陽電池（O - S C）、有機光学検出装置、有機光受容体、有機磁場クエンチ（f i e l d - q u e n c h）装置（O - F Q D）、発光燃料電池（L E C）または有機レーザダイオード（O - レーザー）が挙げられる。

[0179] バルブまたはランプ：

いくつかの実施形態では、電子デバイスは、陽極、陰極、当該陽極と当該陰極との間の発光層を含む少なくとも1つの有機層を含むO L E Dを含む。

いくつかの実施形態では、デバイスは色彩の異なるO L E Dを含む。いくつかの実施形態では、デバイスはO L E Dの組合せを含むアレイを含む。いくつかの実施形態では、O L E Dの前記組合せは、3色の組合せ（例えばR G B）である。いくつかの実施形態では、O L E Dの前記組合せは、赤色でも緑色でも青色でもない色（例えばオレンジ色および黄緑色）の組合せである。いくつかの実施形態では、O L E Dの前記組合せは、2色、4色またはそれ以上の色の組合せである。

いくつかの実施形態では、デバイスは、

取り付け面を有する第1面とそれと反対の第2面とを有し、少なくとも1つの開口部を画定する回路基板と、

前記取り付け面上の少なくとも1つのO L E Dであって、当該少なくとも1つのO L E Dが、陽極、陰極、および当該陽極と当該陰極との間の発光層を含む少なくとも1つの有機層を含む、発光する構成を有する少なくとも1つのO L E Dと、

回路基板用のハウジングと、

前記ハウジングの端部に配置された少なくとも1つのコネクタであって、前記ハウジングおよび前記コネクタが照明設備への取付けに適するパッケージを画定する、少なくとも1つのコネクタと、を備えるO L E Dライ

トである。

いくつかの実施形態では、前記O L E Dライトは、複数の方向に光が放射されるように回路基板に取り付けられた複数のO L E Dを有する。いくつかの実施形態では、第1方向に発せられた一部の光は偏光されて第2方向に放射される。いくつかの実施形態では、反射器を用いて第1方向に発せられた光を偏光する。

[0180] ディスプレイまたはスクリーン：

いくつかの実施形態では、本発明の発光層はスクリーンまたはディスプレイにおいて使用できる。いくつかの実施形態では、本発明に係る化合物は、限定されないが真空蒸発、堆積、蒸着または化学蒸着（C V D）などの工程を用いて基材上へ堆積させる。いくつかの実施形態では、前記基材は、独特のアスペクト比のピクセルを提供する2面エッチングにおいて有用なフォトリソプレート構造である。前記スクリーン（またマスクとも呼ばれる）は、O L E Dディスプレイの製造工程で用いられる。対応するアートワークパターンの設計により、垂直方向ではピクセルの間の非常に急な狭いタイバーの、並びに水平方向では大きな広範囲の斜角開口部の配置を可能にする。これにより、T F Tバックプレーン上への化学蒸着を最適化しつつ、高解像度ディスプレイに必要とされるピクセルの微細なパターン構成が可能となる。

ピクセルの内部パターンニングにより、水平および垂直方向での様々なアスペクト比の三次元ピクセル開口部を構成することが可能となる。更に、ピクセル領域中の画像化された「ストライプ」またはハーフトーン円の使用は、これらの特定のパターンをアンダーカットし基材から除くまで、特定の領域におけるエッチングが保護される。その時、全てのピクセル領域は同様のエッチング速度で処理されるが、その深さはハーフトーンパターンにより変化する。ハーフトーンパターンのサイズおよび間隔を変更することにより、ピクセル内での保護率が様々な異なるエッチングが可能となり、急な垂直斜角を形成するのに必要な局在化された深いエッチングが可能となる。

蒸着マスク用の好ましい材料はインバーである。インバーは、製鉄所で長

い薄型シート状に冷延された金属合金である。インバーは、ニッケルマスクとしてスピンマンドレル上へ電着することができない。蒸着用マスク内に開口領域を形成するための適切かつ低コストの方法は、湿式化学エッチングによる方法である。

いくつかの実施形態では、スクリーンまたはディスプレイパターンは、基材上のピクセルマトリックスである。いくつかの実施形態では、スクリーンまたはディスプレイパターンは、リソグラフィー（例えばフォトリソグラフィーおよびeビームリソグラフィー）を使用して加工される。いくつかの実施形態では、スクリーンまたはディスプレイパターンは、湿式化学エッチングを使用して加工される。更なる実施形態では、スクリーンまたはディスプレイパターンは、プラズマエッチングを使用して加工される。

[0181] デバイスの製造方法：

OLEDディスプレイは、一般的には、大型のマザーパネルを形成し、次に当該マザーパネルをセルパネル単位で切断することによって製造される。通常は、マザーパネル上の各セルパネルは、ベース基材上に、活性層とソース／ドレイン電極とを有する薄膜トランジスタ（TFT）を形成し、前記TFTに平坦化フィルムを塗布し、ピクセル電極、発光層、対電極およびカプセル化層、を順に経時的に形成し、前記マザーパネルから切断することにより形成される。

OLEDディスプレイは、一般的には、大型のマザーパネルを形成し、次に当該マザーパネルをセルパネル単位で切断することによって製造される。通常は、マザーパネル上の各セルパネルは、ベース基材上に、活性層とソース／ドレイン電極とを有する薄膜トランジスタ（TFT）を形成し、前記TFTに平坦化フィルムを塗布し、ピクセル電極、発光層、対電極およびカプセル化層、を順に経時的に形成し、前記マザーパネルから切断することにより形成される。

[0182] 本発明の他の態様では、有機発光ダイオード（OLED）ディスプレイの製造方法を提供し、当該方法は、

マザーパネルのベース基材上に障壁層を形成する工程と、

前記障壁層上に、セルパネル単位で複数のディスプレイユニットを形成する工程と、

前記セルパネルのディスプレイユニットのそれぞれの上にカプセル化層を形成する工程と、

前記セルパネル間のインタフェース部に有機フィルムを塗布する工程と、を含む。

いくつかの実施形態では、障壁層は、例えば SiN_x で形成された無機フィルムであり、障壁層の端部はポリイミドまたはアクリルで形成された有機フィルムで被覆される。いくつかの実施形態では、有機フィルムは、マザーパネルがセルパネル単位で軟らかく切断されるように補助する。

いくつかの実施形態では、薄膜トランジスタ（TFT）層は、発光層と、ゲート電極と、ソース／ドレイン電極と、を有する。複数のディスプレイユニットの各々は、薄膜トランジスタ（TFT）層と、TFT層上に形成された平坦化フィルムと、平坦化フィルム上に形成された発光ユニットと、を有してもよく、前記インタフェース部に塗布された有機フィルムは、前記平坦化フィルムの材料と同じ材料で形成され、前記平坦化フィルムの形成と同時に形成される。いくつかの実施形態では、前記発光ユニットは、不動態化層と、その間の平坦化フィルムと、発光ユニットを被覆し保護するカプセル化層と、によりTFT層と連結される。前記製造方法のいくつかの実施形態では、前記有機フィルムは、ディスプレイユニットにもカプセル化層にも連結されない。

[0183] 前記有機フィルムと平坦化フィルムの各々は、ポリイミドおよびアクリルのいずれか1つを含んでもよい。いくつかの実施形態では、前記障壁層は無機フィルムであってもよい。いくつかの実施形態では、前記ベース基材はポリイミドで形成されてもよい。前記方法は更に、ポリイミドで形成されたベース基材の1つの表面に障壁層を形成する前に、当該ベース基材のもう1つの表面にガラス材料で形成されたキャリア基材を取り付ける工程と、インタ

フェース部に沿った切断の前に、前記キャリア基材をベース基材から分離する工程と、を含んでもよい。いくつかの実施形態では、前記OLEDディスプレイはフレキシブルなディスプレイである。

いくつかの実施形態では、前記不動態化層は、TFT層の被覆のためにTFT層上に配置された有機フィルムである。いくつかの実施形態では、前記平坦化フィルムは、不動態化層上に形成された有機フィルムである。いくつかの実施形態では、前記平坦化フィルムは、障壁層の端部に形成された有機フィルムと同様、ポリイミドまたはアクリルで形成される。いくつかの実施形態では、OLEDディスプレイの製造の際、前記平坦化フィルムおよび有機フィルムは同時に形成される。いくつかの実施形態では、前記有機フィルムは、障壁層の端部に形成されてもよく、それにより、当該有機フィルムの一部が直接ベース基材と接触し、当該有機フィルムの残りの部分が、障壁層の端部を囲みつつ、障壁層と接触する。

[0184] いくつかの実施形態では、前記発光層は、ピクセル電極と、対電極と、当該ピクセル電極と当該対電極との間に配置された有機発光層と、を有する。いくつかの実施形態では、前記ピクセル電極は、TFT層のソース／ドレイン電極に連結している。

いくつかの実施形態では、TFT層を通じてピクセル電極に電圧が印加されるとき、ピクセル電極と対電極との間に適切な電圧が形成され、それにより有機発光層が光を放射し、それにより画像が形成される。以下、TFT層と発光ユニットとを有する画像形成ユニットを、ディスプレイユニットと称する。

いくつかの実施形態では、ディスプレイユニットを被覆し、外部の水分の浸透を防止するカプセル化層は、有機フィルムと無機フィルムとが交互に積層する薄膜状のカプセル化構造に形成されてもよい。いくつかの実施形態では、前記カプセル化層は、複数の薄膜が積層した薄膜状カプセル化構造を有する。いくつかの実施形態では、インタフェース部に塗布される有機フィルムは、複数のディスプレイユニットの各々と間隔を置いて配置される。いく

つかの実施形態では、前記有機フィルムは、一部の有機フィルムが直接ベース基材と接触し、有機フィルムの残りの部分が障壁層の端部を囲む一方で障壁層と接触する態様で形成される。

[0185] 一実施形態では、OLEDディスプレイはフレキシブルであり、ポリイミドで形成された柔軟なベース基材を使用する。いくつかの実施形態では、前記ベース基材はガラス材料で形成されたキャリア基材上に形成され、次に当該キャリア基材が分離される。

いくつかの実施形態では、障壁層は、キャリア基材の反対側のベース基材の表面に形成される。一実施形態では、前記障壁層は、各セルパネルのサイズに従いパターン化される。例えば、ベース基材がマザーパネルの全ての表面上に形成される一方で、障壁層が各セルパネルのサイズに従い形成され、それにより、セルパネルの障壁層の間のインタフェース部に溝が形成される。各セルパネルは、前記溝に沿って切断できる。

[0186] いくつかの実施形態では、前記の製造方法は、更にインタフェース部に沿って切断する工程を含み、そこでは溝が障壁層に形成され、少なくとも一部の有機フィルムが溝で形成され、当該溝がベース基材に浸透しない。いくつかの実施形態では、各セルパネルのTFT層が形成され、無機フィルムである不動態化層と有機フィルムである平坦化フィルムが、TFT層上に配置され、TFT層を被覆する。例えばポリイミドまたはアクリル製の平坦化フィルムが形成されるのと同時に、インタフェース部の溝は、例えばポリイミドまたはアクリル製の有機フィルムで被覆される。これは、各セルパネルがインタフェース部で溝に沿って切断されるとき、生じた衝撃を有機フィルムに吸収させることによってひびが生じるのを防止する。すなわち、全ての障壁層が有機フィルムなしで完全に露出している場合、各セルパネルがインタフェース部で溝に沿って切断されるとき、生じた衝撃が障壁層に伝達され、それによりひびが生じるリスクが増加する。しかしながら、一実施形態では、障壁層間のインタフェース部の溝が有機フィルムで被覆されて、有機フィルムがなければ障壁層に伝達されうる衝撃を吸収するため、各セルパネルをソ

フトに切断し、障壁層でひびが生じるのを防止してもよい。一実施形態では、インタフェース部の溝を被覆する有機フィルムおよび平坦化フィルムは、互いに間隔を置いて配置される。例えば、有機フィルムおよび平坦化フィルムが1つの層として相互に接続している場合には、平坦化フィルムと有機フィルムが残っている部分とを通じてディスプレイユニットに外部の水分が浸入するおそれがあるため、有機フィルムおよび平坦化フィルムは、有機フィルムがディスプレイユニットから間隔を置いて配置されるように、相互に間隔を置いて配置される。

[0187] いくつかの実施形態では、ディスプレイユニットは、発光ユニットの形成により形成され、カプセル化層は、ディスプレイユニットを被覆するためディスプレイユニット上に配置される。これにより、マザーパネルが完全に製造された後、ベース基材を担持するキャリア基材がベース基材から分離される。いくつかの実施形態では、レーザー光線がキャリア基材へ放射されると、キャリア基材は、キャリア基材とベース基材との間の熱膨張率の相違により、ベース基材から分離される。

いくつかの実施形態では、マザーパネルは、セルパネル単位で切断される。いくつかの実施形態では、マザーパネルは、カッターを用いてセルパネル間のインタフェース部に沿って切断される。いくつかの実施形態では、マザーパネルが沿って切断されるインタフェース部の溝が有機フィルムで被覆されているため、切断の間、当該有機フィルムが衝撃を吸収する。いくつかの実施形態では、切断の間、障壁層でひびが生じるのを防止できる。

いくつかの実施形態では、前記方法は製品の不良率を減少させ、その品質を安定させる。

他の態様は、ベース基材上に形成された障壁層と、障壁層上に形成されたディスプレイユニットと、ディスプレイユニット上に形成されたカプセル化層と、障壁層の端部に塗布された有機フィルムと、を有するOLEDディスプレイである。

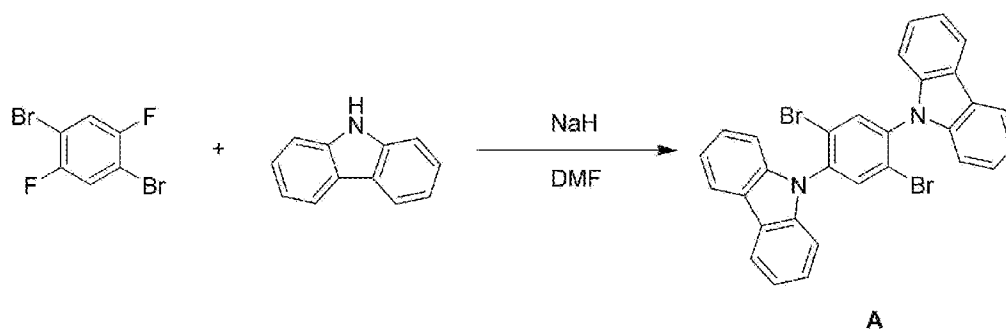
実施例

[0188] 以下に合成例と実施例を挙げて本発明の特徴をさらに具体的に説明する。

以下に示す材料、処理内容、処理手順等は、本発明の趣旨を逸脱しない限り適宜変更することができる。したがって、本発明の範囲は以下に示す具体例により限定的に解釈されるべきものではない。なお、発光特性の評価は、ソースメータ（ケースレー社製：2400シリーズ）、半導体パラメータ・アナライザ（アジレント・テクノロジー社製：E5273A）、光パワーメータ測定装置（ニューポート社製：1930C）、光学分光器（オーシャンオプティクス社製：USB2000）、分光放射計（トプコン社製：SR-3）およびストリークカメラ（浜松ホトニクス（株）製C4334型）を用いて行った。配向値の測定は、（浜松ホトニクス（株）分子配向特性測定装置C14234-01）を用いて行った。

[0189] （合成例1）化合物1の合成

[化97]

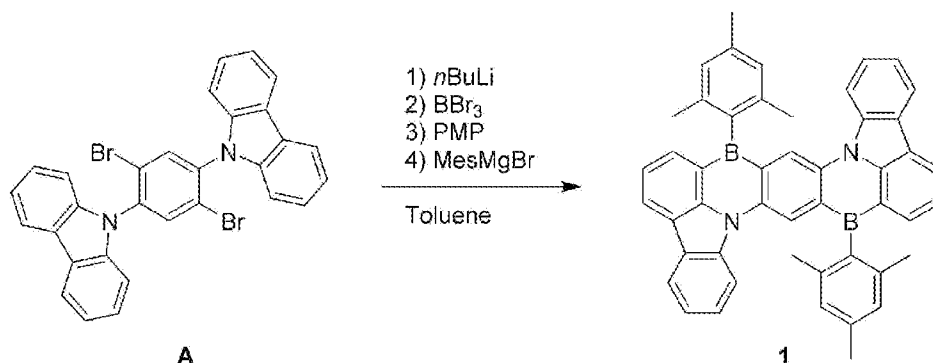


[0190] 窒素気流下、カルバゾール（7.69 g, 46.0 mmol）を水素化ナトリウム（1.16 g, 29.0 mmol）のN,N-ジメチルホルムアミド溶液（160 mL）に加え、室温で30分間攪拌した後、2,5-ジブromo-1,4-ジフルオロベンゼン（5.00 g, 18.4 mmol）を加えて60℃で16時間攪拌した。この混合物を室温に戻し、水を加えて、析出した固体をろ過した。これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（トルエン）で精製し、得られた固体をアセトニトリルにて洗浄することで白色固体の中間体A（5.83 g, 10.3 mmol, 収率56%）を得た。

¹HNMR (400 MHz, CDCl₃, δ): 8.19 (d, J = 8.0 Hz, 4H), 8.01 (s, 2H), 7.58–7.48 (m, 4H), 7.39–7.35 (m, 4H), 7.27–7.24 (m, 4H)

MS (ASAP) : 567.01 ($M+H^+$). Calcd for. $C_{30}H_{18}Br_2N_2$: 565.98

[0191] [化98]



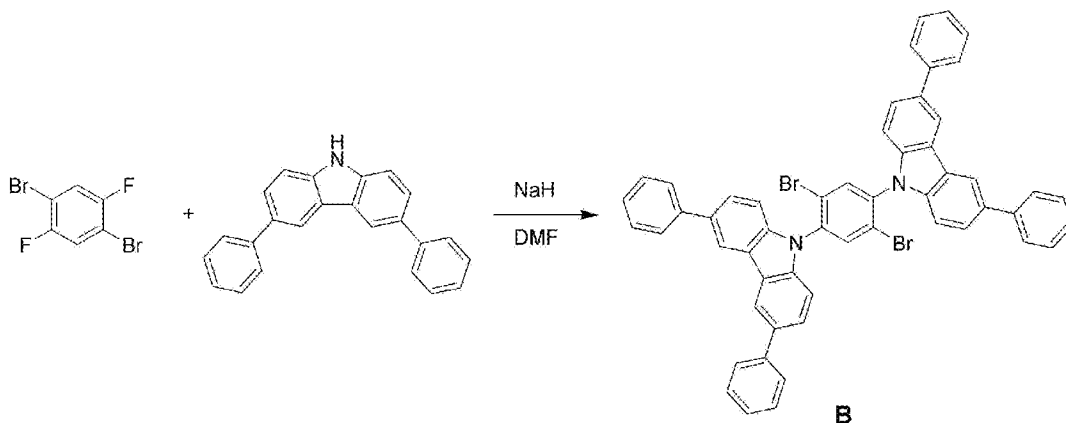
[0192] 窒素気流下、中間体A (1.00 g, 1.80 mmol) のトルエン溶液 (100 mL) に -30°C で n -ブチルリチウム (1.6 mol/Lヘキサン溶液, 4.5 mL, 7.19 mmol) を加えて室温で1時間攪拌した。反応混合物を -30°C に冷却し、三臭化ホウ素 (0.991 g, 3.96 mmol) を加えて室温で30分攪拌した。反応混合物に1, 2, 2, 6, 6-ペンタメチルピペリジン (0.558 g, 3.60 mmol) を加えて 120°C で17時間攪拌した。反応混合物を室温に冷却し、2-メシチルマグネシウムブロミド (1.0 mol/Lテトラヒドロフラン溶液, 5.4 mL, 5.40 mmol) を加えて室温で2.5時間攪拌した。得られた反応混合物の溶媒を留去し、メタノールを加えて沈殿をろ過した。この固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (トルエン:ヘキサン=4:6) で精製し、橙色固体の化合物1 (0.258 g, 0.388 mmol, 収率22%) を得た。

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3 , δ): 9.26 (s, 2H), 8.52 (d, $J = 6.8$ Hz, 2H), 8.28–8.21 (m, 4H), 7.94–7.90 (m, 2H), 7.64–7.60 (m, 2H), 7.45–7.42 (m, 4H), 7.15–7.14 (m, 4H), 2.56 (s, 6H), 2.16 (s, 12H)

MS (ASAP) : 664.23 (M^+). Calcd for. $C_{48}H_{38}B_2N_2$: 664.32

[0193] (合成例2) 化合物2の合成

[化99]

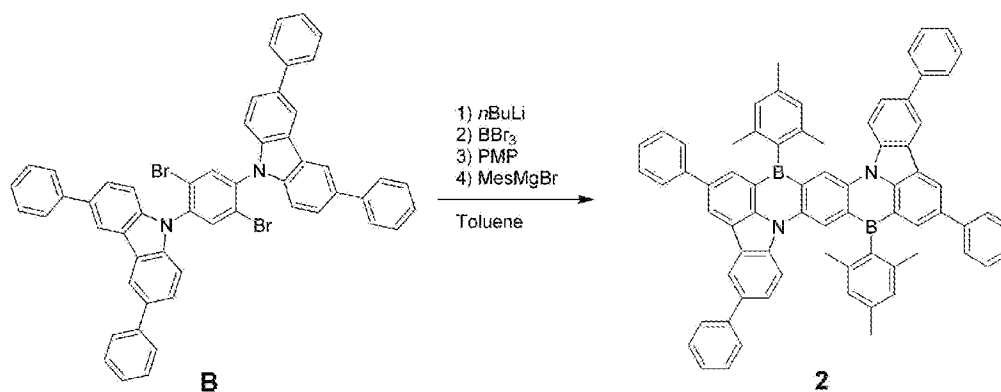


[0194] 窒素気流下、3, 6-ジフェニルカルバゾール (3.00 g, 9.39 mmol) を水素化ナトリウム (0.376 g, 9.39 mmol) のN, N-ジメチルホルムアミド溶液 (70 mL) に加え、室温で30分間攪拌した後、2, 5-ジブromo-1, 4-ジフルオロベンゼン (1.02 g, 3.76 mmol) を加えて60℃で14時間攪拌した。この混合物を室温に戻し、水、メタノールを加えて、析出した固体をろ過した。この固体を熱トルエン中に溶解させ、シリカゲルパッド (トルエン) でろ過し、ろ液の溶媒を留去した。得られた固体をアセトニトリルにて洗浄することで白色固体の中間体B (2.36 g, 2.71 mmol, 収率72%) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3 , δ): 8.46–8.44 (m, 4H), 8.10 (s, 2H), 7.79–7.75 (m, 12H), 7.54–7.49 (m, 8H), 7.41–7.35 (m, 8H)

MS (ASAP) : 870.20 (M^+). Calcd for. $\text{C}_{54}\text{H}_{34}\text{Br}_2\text{N}_2$: 870.11

[0195] [化100]



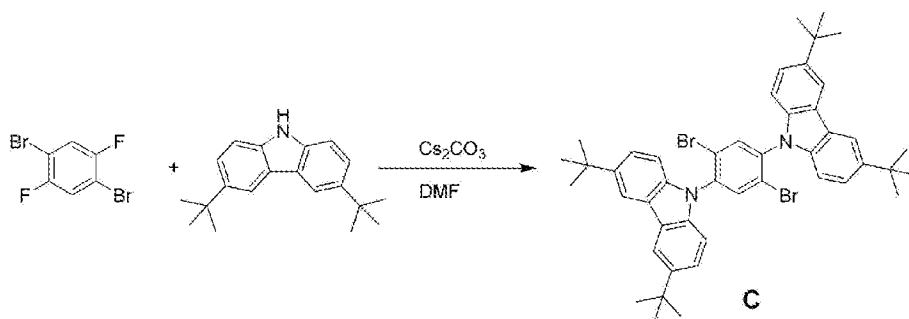
[0196] 窒素気流下、中間体B（1.00g, 1.15mmol）のトルエン溶液（300mL）に−30℃で*n*-ブチリチウム（1.6mol/Lヘキサン溶液, 2.9mL, 4.60mmol）を加えて室温で1時間攪拌した。反応混合物を−30℃に冷却し、三臭化ホウ素（0.633g, 2.53mmol）を加えて室温で30分攪拌した。反応混合物に1, 2, 2, 6, 6-ペンタメチルピペリジン（0.357g, 2.30mmol）を加えて120℃で17時間攪拌した。反応混合物を室温に冷却し、2-メシチルマグネシウムブロミド（1.0mol/Lのテトラヒドロフラン溶液, 3.4mL, 3.40mmol）を加えて室温で4時間攪拌した。得られた反応混合物をシリカパッド（トルエン）にてろ過し、ろ液の溶媒を留去した。得られた粘張体に酢酸エチルを加えて沈殿をろ過することで橙色固体の化合物2（0.0710g, 0.0732mmol, 収率6%）を得た。

¹HNMR (400 MHz, CDCl₃, δ): 9.29 (s, 2H), 8.81–8.79 (m, 2H), 8.53–8.52 (m, 2H), 8.46–8.45 (m, 2H), 7.82–7.78 (m, 8H), 7.59–7.36 (m, 14H), 7.20–7.18 (m, 4H), 2.59 (s, 6H), 2.22 (s, 12H)

MS (ASAP): 968.67 (M⁺). Calcd for. C₇₂H₅₄B₂N₂: 968.45

[0197] (合成例3) 化合物3の合成

[化101]



[0198] 中間体C

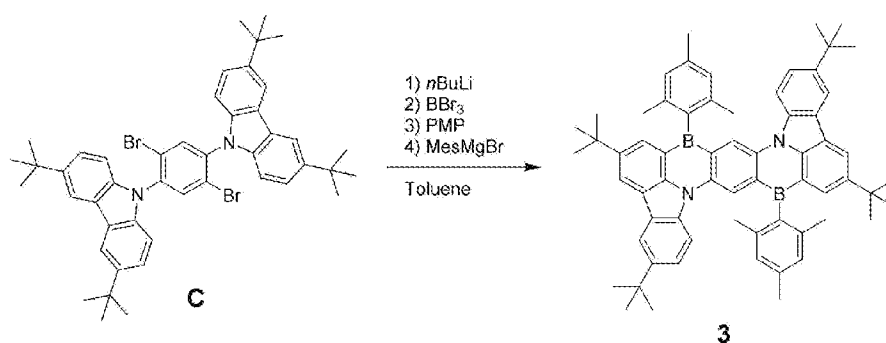
窒素気流下、3, 6-ジtert-ブチル-9H-カルバゾール（29.2g, 105mmol）、炭酸セシウム（61.9g, 190mmol）と、2, 5-ジブromo-1, 4-ジフルオロベンゼン（12.9g, 47.5mmol）のN, N-ジメチルホルムアミド溶液（360mL）を120℃で17

時間攪拌した。この混合物を室温に戻し、水を加えて、析出した固体をろ過した。これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（トルエン）で精製し、得られた固体をトルエン／メタノールにて再結晶することで白色固体の中間体C（17.5 g, 22.1 mmol, 収率47%）を得た。

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3 , δ): 8.2–8.17 (m, 4H), 7.93 (s, 2H), 7.55–7.52 (m, 4H), 7.17 (d, $J = 8.4$ Hz, 4H), 1.49 (s, 36H)

MS (ASAP): 791.47 ($\text{M}+\text{H}^+$). Calcd for. $\text{C}_{46}\text{H}_{50}\text{Br}_2\text{N}_2$: 790.23

[0199] [化102]



[0200] 化合物3

窒素気流下、中間体C（2.00 g, 2.52 mmol）のトルエン溶液（100 mL）に−30℃で $n\text{-BuLi}$ （1.6 mol/Lヘキサン溶液, 4.7 mL, 7.56 mmol）を加えて50℃で30分間攪拌した。反応混合物を−30℃に冷却し、三臭化ホウ素（3.16 g, 12.6 mmol）を加えて室温で30分攪拌した。反応混合物に1, 2, 2, 6, 6-ペンタメチルピペリジン（1.96 g, 12.6 mmol）を加えて130℃で2時間攪拌した。反応混合物に、2-メシチルマグネシウムブロミド（1.0 mol/Lテトラヒドロフラン溶液, 25.2 mL, 25.2 mmol）を加えて室温に戻しながら17時間攪拌した。得られた反応混合物の溶媒を留去し、メタノールを加えて沈殿をろ過した。この固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（トルエン：ヘキサン＝1：9）で精製し、橙色固体の化合物3（0.292 g, 0.328 mmol, 収率13%）を得た。

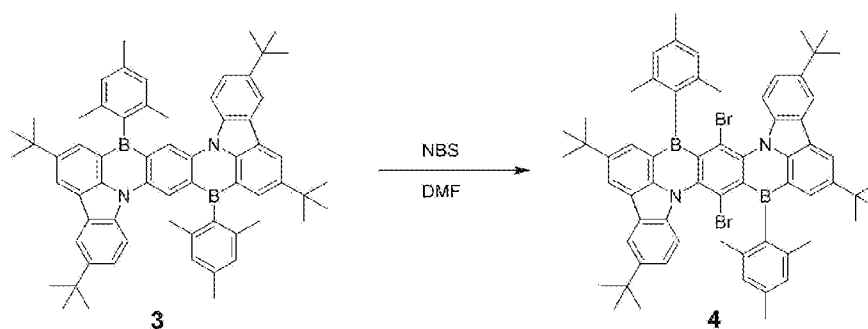
$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3 , δ): 9.11 (s, 2H), 8.58 (d, $J = 2.0$ Hz, 2H), 8.2

5 (d, $J = 2.0$ Hz, 2H), 8.23 (d, $J = 1.6$ Hz, 2H), 7.75 (d, $J = 9.2$ Hz, 2H), 7.44–7.41 (m, 2H), 7.17 (s, 4H), 2.60 (s, 6H), 2.16 (s, 12H), 1.53–1.51 (m, 36H)

MS (ASAP) : 888.85 (M^+). Calcd for. $C_{64}H_{70}B_2N_2$: 888.57

[0201] (合成例4) 化合物4の合成

[化103]

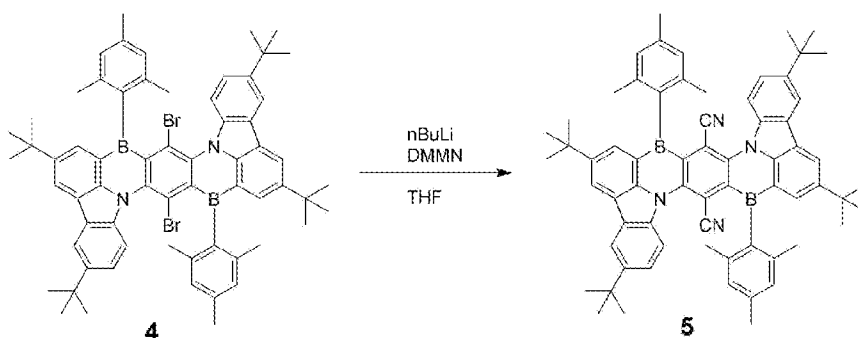


[0202] 化合物4

窒素気流下、化合物3 (250 mg, 0.281 mmol) とN-ブロモスクシンイミド (99.6 mg, 0.562 mmol) のN, N-ジメチルホルムアミド溶液 (20 mL) を室温で16時間攪拌する。この混合物に水を加えて、析出した固体をろ過する。これをシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、橙色固体の化合物4を得る。

[0203] (合成例5) 化合物5の合成

[化104]



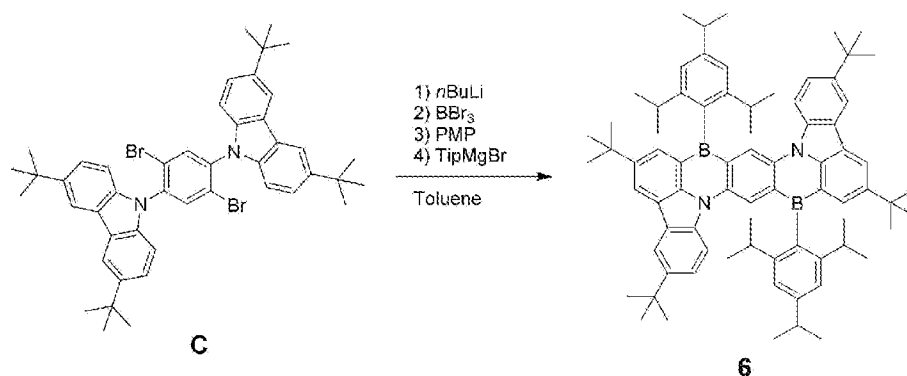
[0204] 化合物5

窒素気流下、化合物4 (100 mg, 0.0955 mmol) のテトラヒドロフラン溶液 (10 mL) に -30°C でn-BuLi (1.6 mol/L

ヘキサン溶液, 0.13 mL, 0.201 mmol) を加えて室温で30分間攪拌する。反応混合物にジメチルマロノニトリル (27.0 mg, 0.287 mmol) を加えて室温で16時間攪拌する。反応混合物の溶媒を留去し、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、赤色固体の化合物5を得る。

[0205] (合成例6) 化合物6の合成

[化105]



[0206] 化合物6

窒素気流下、中間体C (2.00 g, 2.53 mmol) のトルエン溶液 (100 mL) に0℃でn-BuLi (1.6 mol/Lヘキサン溶液, 4.7 mL, 7.56 mmol) を加えて50℃で30分間攪拌した。反応混合物を0℃に冷却し、三臭化ホウ素 (3.16 g, 12.6 mmol) を加えて室温で30分間攪拌した。反応混合物に1, 2, 2, 6, 6-ペンタメチルピペリジン (1.96 g, 12.6 mmol) を加えて135℃で2時間攪拌した。反応混合物に、2, 4, 6-トリイソプロピルマグネシウムブロミド-塩化リチウム錯体 (1.0 mol/Lテトラヒドロフラン溶液, 25.2 mL, 25.2 mmol) を加えて室温に戻しながら17時間攪拌した。得られた反応混合物の溶媒を留去し、メタノールを加えて沈殿をろ過した。この固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (トルエン:ヘキサン = 1:49) で精製し、トルエン/メタノールにて再結晶することで、橙色固体の化合物6 (0.140 g, 0.328 mmol, 収率5%) を得た。

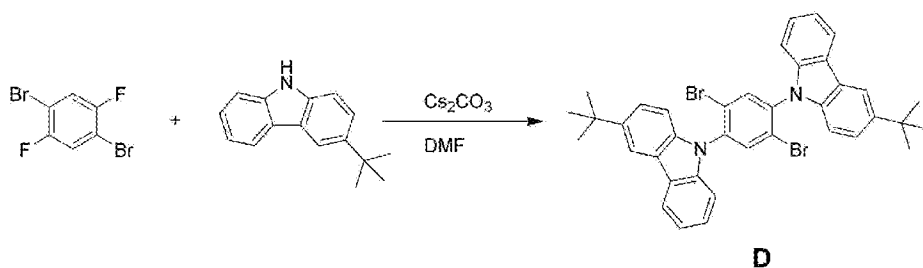
$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3 , δ): 9.10 (s, 2H), 8.53 (d, $J=1.6$ Hz, 2H), 8.27

(d, $J=1.6$ Hz, 2H), 8.21 (d, $J=1.6$ Hz, 2H), 7.64 (d, $J=8.8$ Hz, 2H), 7.36 (dd, $J=8.8, 1.6$ Hz, 2H), 7.27 (s, 4H), 3.17 (sept, $J=6.8$ Hz, 2H), 2.55 (sept, $J=6.8$ Hz, 4H), 1.55 (d, $J=6.8$ Hz, 12H), 1.48 (s, 18H), 1.47 (s, 18H), 1.06 (d, $J=6.8$ Hz, 12H), 1.01 (d, $J=6.8$ Hz, 12H).

MS (MALDI) : 1058.07 (M^+). Calcd for. $C_{76}H_{96}B_2N_2$: 1058.78

[0207] (合成例 7) 化合物 7 および 8 の合成

[化106]



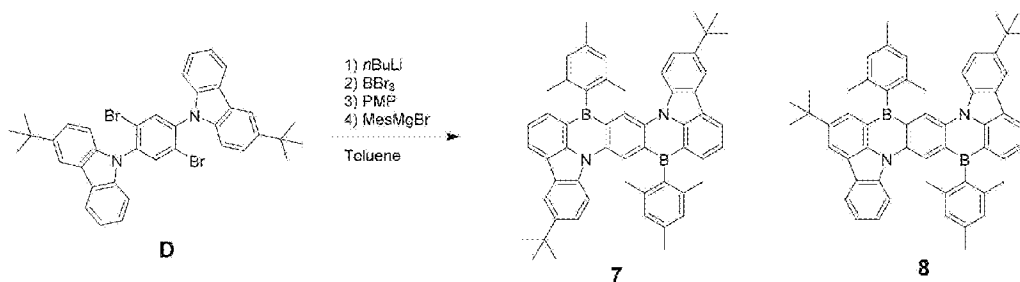
[0208] 中間体 D

窒素気流下、3-tert-ブチル-9H-カルバゾール (1.8 g, 8.06 mmol)、炭酸カリウム (1.78 g, 12.9 mmol) と 2,5-ジブromo-1,4-ジフルオロベンゼン (0.876 g, 3.22 mmol) の N,N-ジメチルホルムアミド溶液 (50 mL) を 120℃ で 17 時間攪拌した。この混合物を室温に戻し、水を加えて、析出した固体をろ過した。これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー (クロロホルム : ヘキサン = 1 : 4) で精製することで、白色固体の中間体 D (0.44 g, 0.650 mmol, 収率 20%) を得た。

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3 , δ): 8.2–8.18 (m, 4H), 7.97 (s, 2H), 7.56 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.48 (t, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.35 (t, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.25–7.18 (m, 6H), 1.49 (s, 18H)

MS (ASAP) : 679.28 ($M+H^+$). Calcd for. $C_{38}H_{34}Br_2N_2$: 678.11

[化107]



[0209] 化合物 7, 8

窒素気流下、中間体 **D** (1.90 g, 2.79 mmol) のトルエン溶液 (100 mL) に -30°C で $n\text{-BuLi}$ (1.6 mol/L ヘキサン溶液, 5.23 mL, 8.37 mmol) を加えて 50°C で 30 分間攪拌した。反応混合物を -30°C に冷却し、三臭化ホウ素 (3.49 g, 14.0 mmol) を加えて室温で 30 分間攪拌した。反応混合物に 1, 2, 2, 6, 6-ペンタメチルピペリジン (2.17 g, 14.0 mmol) を加えて 135°C で 2 時間攪拌した。反応混合物に、2-メシチルマグネシウムブロミド (1.0 mol/L テトラヒドロフラン溶液, 27.9 mL, 27.9 mmol) を加えて室温に戻しながら 17 時間攪拌した。得られた反応混合物の溶媒を留去し、メタノールを加えて沈殿をろ過した。この固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (トルエン : ヘキサン = 1 : 9) で精製し、橙色固体の化合物 **7** (0.243 g, 0.313 mmol, 収率 11%) と化合物 **8** (0.313 g, 0.403 mmol, 収率 14%) を得た。

化合物 7

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3 , δ): 9.21 (s, 2H), 8.52 (dd, $J = 9.5, 2.0$ Hz, 2H), 8.25 (d, $J = 2.0$ Hz, 2H), 8.20 (dd, $J = 9.5, 2.0$ Hz, 2H), 7.81 (d, $J = 11.5$ Hz, 2H), 7.60 (t, $J = 9.5$ Hz, 2H), 7.44 (dd, $J = 11.5, 9.0$ Hz, 2H), 7.16 (s, 4H), 2.57 (s, 6H), 2.15 (s, 12H), 1.51 (s, 18H)

MS (MALDI) : 776.90 (M^+). Calcd for. $\text{C}_{56}\text{H}_{54}\text{B}_2\text{N}_2$: 776.45

化合物 8

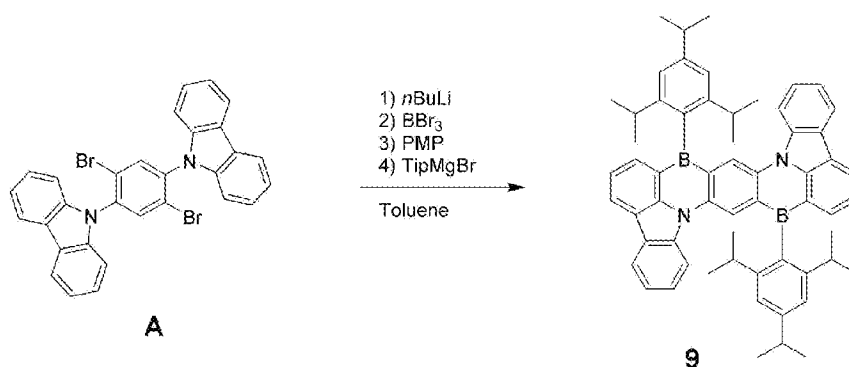
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3 , δ): 9.21 (s, 1H), 9.16 (s, 1H), 8.58 (d, $J =$

2.0 Hz, 1H), 8.52 (d, $J = 7.6$ Hz, 1H), 8.3–8.24 (m, 3H), 8.19 (d, $J = 7.2$ Hz, 1H), 7.92–7.85 (m, 1H), 7.82–7.75 (m, 1H), 7.60 (t, $J = 7.2$ Hz, 1H), 7.47–7.39 (m, 3H), 7.19–7.13 (m, 4H), 2.6–2.55 (m, 6H), 2.17–2.14 (m, 12H), 1.51 (s, 18H)

MS (MALDI) : 776.98 (M^+). Calcd for. $C_{56}H_{54}B_2N_2$: 776.45

[0210] (合成例 8) 化合物 9 の合成

[化108]



[0211] 化合物 9

窒素気流下、中間体 A (1.00 g, 1.77 mmol) のトルエン溶液 (100 mL) に -30°C で $n\text{-BuLi}$ (1.6 mol/L ヘキサン溶液, 3.3 mL, 5.30 mmol) を加えて室温で 30 分間攪拌した。反応混合物を -30°C に冷却し、三臭化ホウ素 (2.21 g, 8.83 mmol) を加えて室温で 30 分間攪拌した。反応混合物に 1, 2, 2, 6, 6-ペンタメチルピペリジン (1.37 g, 8.83 mmol) を加えて 120°C で 15 時間攪拌した。反応混合物を室温に戻し、2, 4, 6-トリイソプロピルマグネシウムブロミド-塩化リチウム錯体 (1.0 mol/L テトラヒドロフラン溶液, 17.7 mL, 17.7 mmol) を加えて 120°C で 4 時間攪拌した。得られた反応混合物をろ過し、ろ液の溶媒を留去した。この残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (トルエン : ヘキサン = 15 : 85) で精製することで、橙色固体の化合物 9 (0.128 g, 0.154 mmol, 収率 9%) を得た。

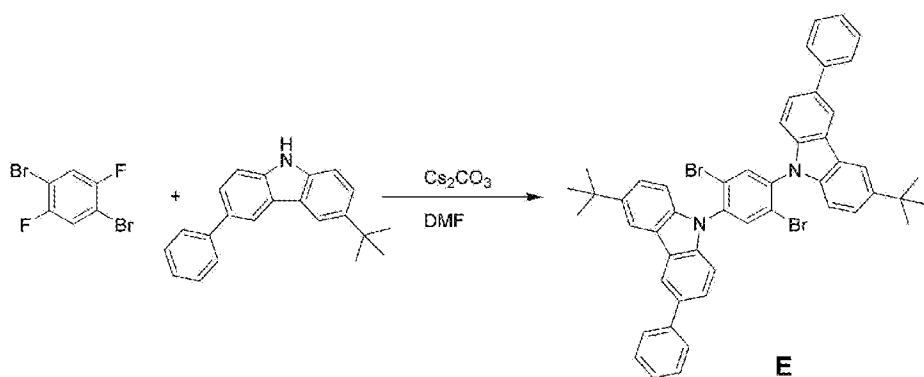
^1H NMR (400 MHz, CDCl_3 , δ): 9.31 (s, 2H), 8.49 (d, $J = 7.2$ Hz, 2H), 8.

28 (d, $J = 7.2$ Hz, 2H), 8.25 (d, $J = 7.6$ Hz, 2H), 7.85 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.61 (t, $J = 7.6$ Hz, 2H), 7.41 (t, $J = 7.6$ Hz, 2H), 7.38–7.33 (m, 2H), 7.28 (s, 4H), 3.16 (sept, $J = 6.8$ Hz, 2H), 2.57 (sept, $J = 6.8$ Hz, 4H), 1.52 (d, $J = 7.2$ Hz, 12H), 1.09 (d, $J = 6.8$ Hz, 12H), 1.04 (d, $J = 6.8$ Hz, 12H)

MS (MALDI) : 832.73 (M^+). Calcd for. $C_{60}H_{62}B_2N_2$: 832.51

[0212] (合成例9) 化合物10の合成

[化109]



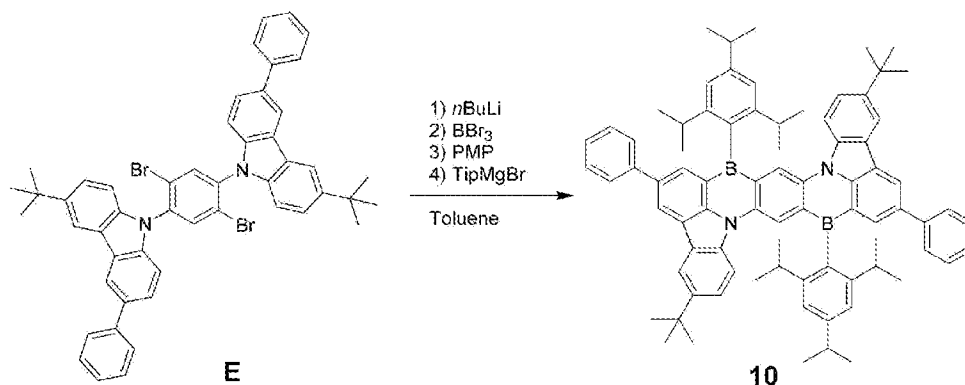
[0213] 中間体E

窒素気流下、3-tert-ブチル-6-フェニル-9H-カルバゾール (2.70 g, 9.02 mmol)、炭酸セシウム (5.34 g, 16.4 mmol) と2,5-ジブロモ-1,4-ジフルオロベンゼン (1.11 g, 4.10 mmol) のN,N-ジメチルホルムアミド溶液 (50 mL) を120℃で15時間攪拌した。この混合物を室温に戻し、水を加えて、析出した固体をろ過した。これをトルエンにて再結晶することで白色固体の中間体E (3.06 g, 3.68 mmol, 収率90%) を得た。

^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$, δ): 8.40 (d, $J = 2.0$ Hz, 2H), 8.23 (d, $J = 1.6$ Hz, 2H), 8.02 (s, 2H), 7.79–7.76 (m, 4H), 7.73 (dd, $J = 8.8, 1.6$ Hz, 2H), 7.59 (dd, $J = 8.4, 1.6$ Hz, 2H), 7.53–7.48 (m, 4H), 7.41–7.35 (m, 2H), 7.31 (d, $J = 7.6$ Hz, 2H), 7.23 (d, $J = 8.8$ Hz, 2H), 1.50 (s, 18H)

MS (ASAP) : 831.43 ($M+H^+$). Calcd for. $C_{50}H_{42}Br_2N_2$: 830.17

[化110]



[0214] 化合物 10

窒素気流下、中間体 E (1.00 g, 1.21 mmol) のトルエン溶液 (100 mL) に -30°C で $n\text{-BuLi}$ (1.6 mol/L ヘキサン溶液, 2.27 mL, 3.63 mmol) を加えて 50°C で 30 分間攪拌した。反応混合物を -30°C に冷却し、三臭化ホウ素 (1.52 g, 6.05 mmol) を加えて室温で 30 分間攪拌した。反応混合物に 1, 2, 2, 6, 6-ペンタメチルピペリジン (0.939 g, 6.05 mmol) を加えて 135°C で 2 時間攪拌した。反応混合物に、2, 4, 6-トリイソプロピルマグネシウムブロミド-塩化リチウム錯体 (1.0 mol/L テトラヒドロフラン溶液, 12.1 mL, 12.1 mmol) を加えて室温に戻しながら 17 時間攪拌した。得られた反応混合物の溶媒を留去し、メタノールを加えて沈殿をろ過した。この固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (トルエン : ヘキサン = 1 : 9) で精製し、トルエン/メタノールにて再結晶することで、橙色固体の化合物 10 (0.364 g, 0.332 mmol, 収率 27%) を得た。

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3 , δ): 9.24–9.19 (m, 2H), 8.62–8.60 (m, 2H), 8.50–8.47 (m, 2H), 8.35–8.32 (m, 2H), 7.85–7.69 (m, 6H), 7.64–7.60 (m, 2H), 7.56–7.46 (m, 4H), 7.45–7.35 (m, 2H), 7.31 (s, 4H), 3.23–3.16 (m, 2H), 2.65–2.56 (m, 4H), 1.60–1.55 (m, 18H), 1.51–1.48 (m, 12H), 1.14–1.02 (m, 24H)

MS (MALDI) : 1098.09 ($\text{M}+\text{H}^+$). Calcd for. $\text{C}_{80}\text{H}_{86}\text{B}_2\text{N}_2$: 1096.70

なお、合成例で合成した化合物は昇華精製してから以下の用途に用いた。

[0215] (実施例1) 薄膜の作製

石英基板上に真空蒸着法にて、真空度 1×10^{-3} Pa 未満の条件にて表3に記載される発光材料と表3に記載されるホスト材料を異なる蒸着源から蒸着し、100 nmの厚さの薄膜を形成した。発光材料の含有量は30質量%とした。

形成した各薄膜の発光材料の配向値Sを測定した結果を各発光材料の双極子モーメントとともに表3に示す。一般式(2)で表されるホスト材料を用いることにより、一般式(1)で表される発光材料の配向性が高まることが確認された。また、双極子モーメントが2.52未満のホスト材料を用いることにより、発光材料の高い配向性を実現しうることも確認された。

[0216] (実施例2) 有機エレクトロルミネッセンス素子の作製と評価

膜厚100 nmのインジウム・スズ酸化物(ITO)からなる陽極が形成されたガラス基材上に、各薄膜を真空蒸着法にて、真空度 1×10^{-5} Paで積層した。まず、ITO上にHATCNを5 nmの厚さに形成し、その上に、NPDを60 nmの厚さに形成し、さらにEBL1を10 nmの厚さに形成した。次に、表3に記載される発光材料と表3に記載されるホスト材料を異なる蒸着源から共蒸着し、35 nmの厚さの発光層を形成した。発光材料の含有量は30質量%とした。次に、SF3-TRZを10 nmの厚さに形成した後、Li qとSF3-TRZを異なる蒸着源から共蒸着し、30 nmの厚さの層を形成した。この層におけるLi qとSF3-TRZの含有量はそれぞれ30質量%と70質量%とした。さらにLi qを2 nmの厚さに形成し、次いでアルミニウム(Al)を100 nmの厚さに蒸着することにより陰極を形成し、有機エレクトロルミネッセンス素子とした。

各有機エレクトロルミネッセンス素子に通電したところ、いずれの素子からも発光が観測された。発光層に含まれる材料のうち、発光材料からの発光量が最大であった。各有機エレクトロルミネッセンス素子の6.3 mA/cm²における外部量子効率(EQE)と駆動電圧(V_{INT})を測定し、結果を

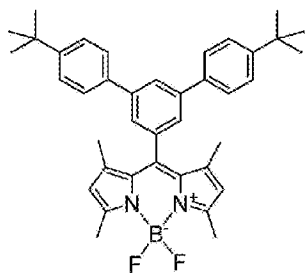
表3に示した。本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子（素子1～9）は、いずれも高いEQEを示し、駆動電圧が低くて優れていた。

[0217] [表4]

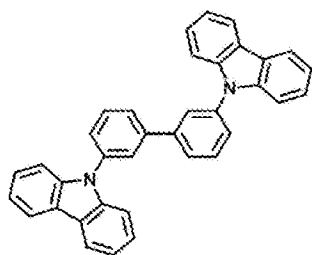
	発光材料	ホスト材料	双極子モーメント	S	EQE (%)	V _{INT} (V)
比較素子1	比較化合物1	mCBP	2.52	0	12.0	4.3
比較素子2	化合物6	mCBP	2.52	-0.32	15.9	4.2
比較素子3	化合物3	mCBP	2.52	-0.32	15.9	4.2
素子1	化合物6	化合物H1	1.16	-0.40	17.8	3.7
素子2	化合物6	化合物H2	2.07	-0.38	17.2	3.5
素子3	化合物6	化合物H3	2.17	-0.35	17.6	3.6
素子4	化合物6	化合物H4	0.63	-0.34	16.5	3.3
素子5	化合物6	化合物H5	1.84	-0.39	17.7	3.7
素子6	化合物6	化合物H6	1.61	-0.39	17.7	3.7
素子7	化合物6	化合物H7	0.97	-0.39	17.6	3.7
素子8	化合物6	化合物H8	1.94	-0.38	17.4	3.6
素子9	化合物6	化合物H9	0.73	-0.33	16.3	3.7

[0218]

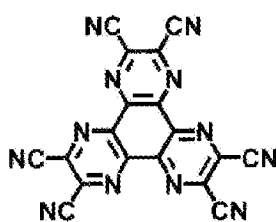
[化111]



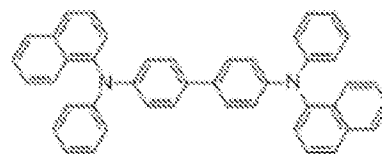
比較化合物 1



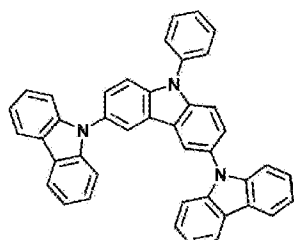
mCBP



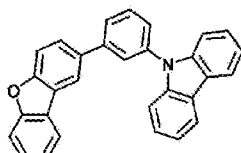
HATCN



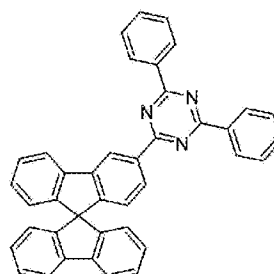
NPD



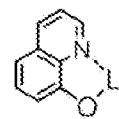
EBL1



Host1



SF3TRZ



Liq

産業上の利用可能性

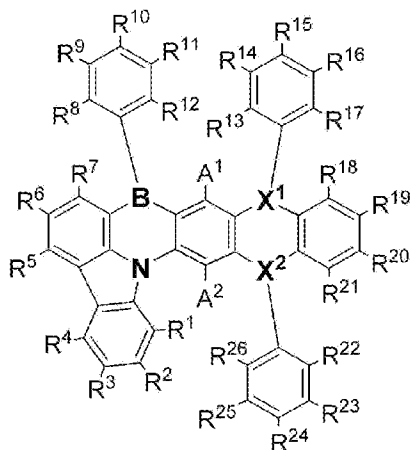
[0219] 本発明の膜は、発光材料が優れた配向性を示しており、有機発光素子に好適に用いることができる。また、本発明の有機発光素子は、駆動電圧が低く、発光効率が高いことから、産業上の利用可能性が高い。

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（１）で表される化合物および下記一般式（２）で表される化合物を含む有機発光素子。

一般式（１）

[化1]

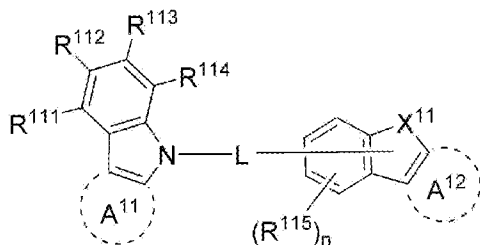


[一般式（１）において、 X^1 および X^2 は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。 $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ただし、 X^1 が窒素原子であるとき、 R^{17} と R^{18} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成し、 X^2 が窒素原子であるとき、 R^{21} と R^{22} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。ただし、 X^1 が窒素原子であって、 R^7 と R^8 および R^{21} と R^{22} が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して単結合を形成しているとき、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換もしくは無置換のアリール基であるか、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と

R⁵、R⁵とR⁶のいずれかが互いに結合して芳香環または複素芳香環を形成している。]

一般式（2）

[化2]



[一般式（2）において、X¹¹は、O、S、N（R^A）またはC（R^B）（R^C）を表す。A¹¹およびA¹²は、各々独立にベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環またはシクロペンタジエン環であって、これらの環にはさらに他の環が縮合していてもよく、また置換されていてもよい。R¹¹¹～R¹¹⁴、R^B、R^Cは、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはシアノ基を表す。R¹¹⁵は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、シアノ基、またはLとの結合を表す。R^Aは、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはLとの結合を表す。R¹¹¹とR¹¹²、R¹¹²とR¹¹³、R¹¹³とR¹¹⁴、隣り合う2個のR¹¹⁵、R^BとR^Cは、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。nは3または4のいずれかの整数を表す。Lは単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基、またはこれらの2個以上が結合した連結基を表す。ただし、X¹¹がNで、LがそのNに結合しているとき、R¹¹⁵の少なくとも1個かA¹²が表す環に結合する基の少なくとも1個は置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基

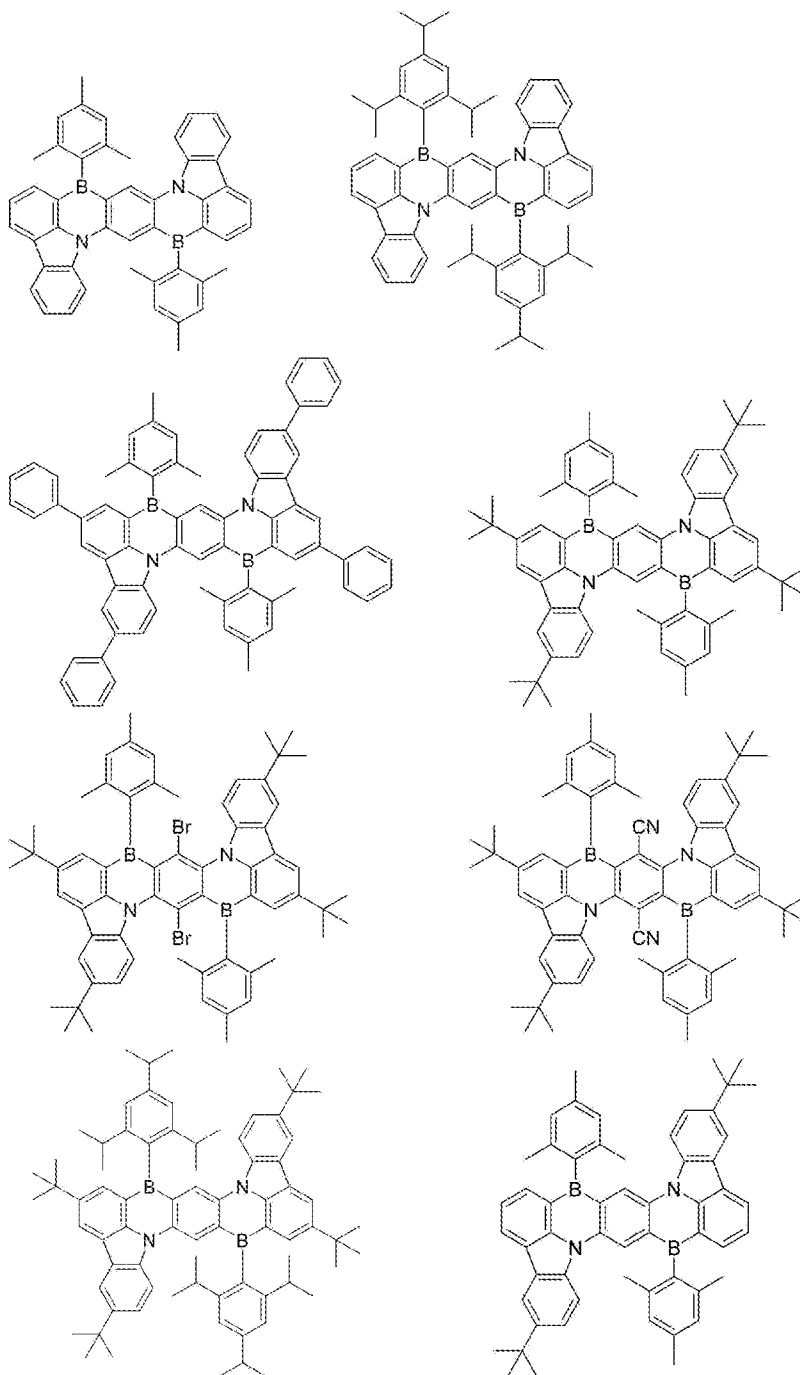
、置換もしくは無置換のアルキル基またはシアノ基である。]

- [請求項2] 一般式(1)の R^3 および R^6 がともに置換基である、請求項1に記載の有機発光素子。
- [請求項3] 一般式(1)の R^8 および R^{12} がともに置換基である、請求項1または2に記載の有機発光素子。
- [請求項4] 一般式(1)の X^1 が窒素原子であり、 X^2 がホウ素原子である、請求項1～3のいずれか1項に記載の有機発光素子。
- [請求項5] 一般式(1)の R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して $-B(R^3)^2-$ を形成しており、 R^3 は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す、請求項1～4のいずれか1項に記載の有機発光素子。
- [請求項6] 一般式(1)の R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して $-CO-$ を形成している、請求項1～4のいずれか1項に記載の有機発光素子。
- [請求項7] 一般式(1)の R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して $-CS-$ を形成している、請求項1～4のいずれか1項に記載の有機発光素子。
- [請求項8] 一般式(1)の R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して $-N(R^2)^7-$ を形成しており、 R^2 は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す、請求項1～4のいずれか1項に記載の有機発光素子。
- [請求項9] 一般式(1)の R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} のうちの1～6組が、互いに結合してベンゾフラン環またはベンゾチオフェン環を形成している、請求項1～8のいずれか1項に記載の有機発光素子。

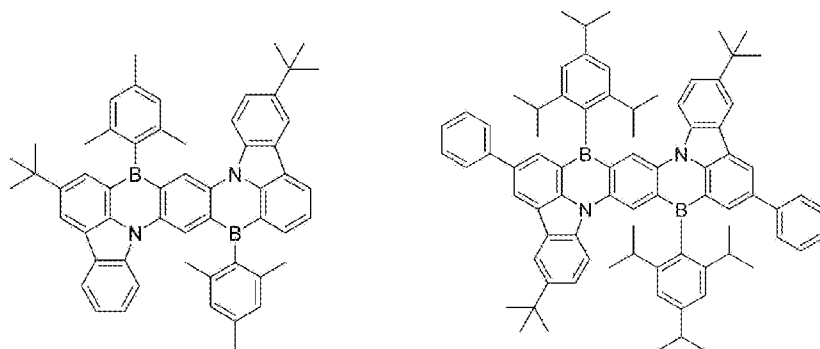
[請求項10] 一般式(1)で表される化合物が回転対称構造を有する、請求項1～9のいずれか1項に記載の有機発光素子。

[請求項11] 一般式(1)で表される化合物が下記のいずれかの構造を有する、請求項1に記載の有機発光素子。

[化3-1]



[化3-1]



[請求項12] 一般式(2)のLの右側に結合する基がジベンゾフラン構造を含む、請求項1～11のいずれか1項に記載の有機発光素子。

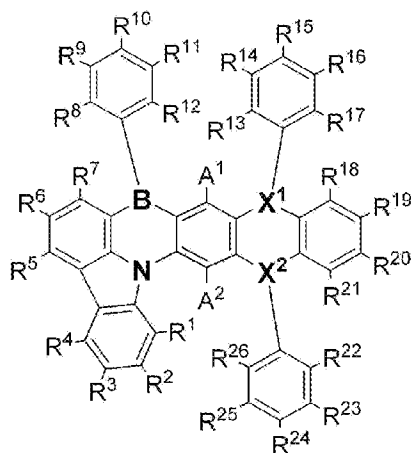
[請求項13] 一般式(2)のLがメタフェニレン基である、請求項1～12のいずれか1項に記載の有機発光素子。

[請求項14] 一般式(2)で表される化合物の双極子モーメントが2.52未満である、請求項1～13のいずれか1項に記載の有機発光素子。

[請求項15] 下記一般式(1)で表される化合物および下記一般式(2)で表される化合物を含む膜。

一般式(1)

[化4]

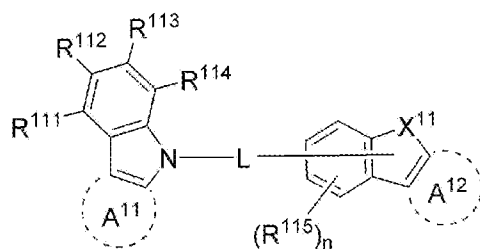


[一般式(1)において、X¹およびX²は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。R¹～R²⁶、A¹、A²は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。R¹とR²、R²とR³、R³

と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ただし、 X^1 が窒素原子であるとき、 R^{17} と R^{18} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成し、 X^2 が窒素原子であるとき、 R^{21} と R^{22} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。ただし、 X^1 が窒素原子であって、 R^7 と R^8 および R^{21} と R^{22} が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して単結合を形成しているとき、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換もしくは無置換のアリール基であるか、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 のいずれかが互いに結合して芳香環または複素芳香環を形成している。]

一般式(2)

[化5]



[一般式(2)において、 X^{11} は、O、S、N(R^A)またはC(R^B)(R^C)を表す。 A^{11} および A^{12} は、各々独立にベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環またはシクロペンタジエン環であって、これらの環にはさらに他の環が縮合していてもよく、また置換されていてもよい。 $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^B 、 R^C は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはシアノ基を表す。 R^{115} は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換も

しくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、シアノ基、またはLとの結合を表す。 R^A は、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはLとの結合を表す。 R^{111} と R^{112} 、 R^{112} と R^{113} 、 R^{113} と R^{114} 、隣り合う2個の R^{115} 、 R^B と R^C は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。 n は3または4のいずれかの整数を表す。Lは単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基、またはこれらの2個以上が結合した連結基を表す。ただし、 X^{11} がNで、LがそのNに結合しているとき、 R^{115} の少なくとも1個か A^{12} が表す環に結合する基の少なくとも1個は置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基またはシアノ基である。]

[請求項16] 前記一般式(1)で表される化合物の含有量が前記一般式(2)で表される化合物よりも少ない、請求項15に記載の膜。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/025197

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>H01L 51/50</i> (2006.01)i; <i>C07D 209/86</i> (2006.01)i; <i>C07D 405/04</i> (2006.01)i; <i>C07D 405/10</i> (2006.01)i; <i>C07D 405/14</i> (2006.01)i; <i>C07F 5/02</i> (2006.01)i; <i>C09K 11/06</i> (2006.01)i FI: H05B33/14 B; C07D405/10 CSP; C09K11/06 690; C09K11/06 660; C07D405/04 CSP; C07D405/14; C07D209/86; H05B33/22 D; C07F5/02 A CSP; C09K11/06 645; C09K11/06 635 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) H01L51/50; C07D209/86; C07D405/04; C07D405/10; C07D405/14; C07F5/02; C09K11/06 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022 Registered utility model specifications of Japan 1996-2022 Published registered utility model applications of Japan 1994-2022 Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)																													
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT <table border="1"> <thead> <tr> <th>Category*</th> <th>Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages</th> <th>Relevant to claim No.</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>X</td> <td>JP 2020-132636 A (UNIV KWANSEI GAKUIN) 31 August 2020 (2020-08-31) claims, paragraphs [0254]-[0255], [0289]-[0375], [0615]-[0619], example 4 (constitution D)</td> <td>1-3, 8, 10, 12-16</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td></td> <td>12</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td></td> <td>4-7, 9, 11</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>CN 110872316 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 10 March 2020 (2020-03-10) claims (in particular, claim 8), examples 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16</td> <td>1-3, 10, 13-16</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td></td> <td>12</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td></td> <td>4-9, 11</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>CN 110407858 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 05 November 2019 (2019-11-05) claims (in particular, claim 4), examples</td> <td>1-16</td> </tr> <tr> <td>P, A</td> <td>WO 2021/245221 A1 (CYNORA GMBH) 09 December 2021 (2021-12-09) entire text (in particular, pp. 49-51)</td> <td>1-16</td> </tr> </tbody> </table>			Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.	X	JP 2020-132636 A (UNIV KWANSEI GAKUIN) 31 August 2020 (2020-08-31) claims, paragraphs [0254]-[0255], [0289]-[0375], [0615]-[0619], example 4 (constitution D)	1-3, 8, 10, 12-16	Y		12	A		4-7, 9, 11	X	CN 110872316 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 10 March 2020 (2020-03-10) claims (in particular, claim 8), examples 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16	1-3, 10, 13-16	Y		12	A		4-9, 11	A	CN 110407858 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 05 November 2019 (2019-11-05) claims (in particular, claim 4), examples	1-16	P, A	WO 2021/245221 A1 (CYNORA GMBH) 09 December 2021 (2021-12-09) entire text (in particular, pp. 49-51)	1-16
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.																											
X	JP 2020-132636 A (UNIV KWANSEI GAKUIN) 31 August 2020 (2020-08-31) claims, paragraphs [0254]-[0255], [0289]-[0375], [0615]-[0619], example 4 (constitution D)	1-3, 8, 10, 12-16																											
Y		12																											
A		4-7, 9, 11																											
X	CN 110872316 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 10 March 2020 (2020-03-10) claims (in particular, claim 8), examples 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16	1-3, 10, 13-16																											
Y		12																											
A		4-9, 11																											
A	CN 110407858 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 05 November 2019 (2019-11-05) claims (in particular, claim 4), examples	1-16																											
P, A	WO 2021/245221 A1 (CYNORA GMBH) 09 December 2021 (2021-12-09) entire text (in particular, pp. 49-51)	1-16																											
☒ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.																													
* Special categories of cited documents: “A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed “T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention “X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone “Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art “&” document member of the same patent family																													
Date of the actual completion of the international search 01 August 2022		Date of mailing of the international search report 16 August 2022																											
Name and mailing address of the ISA/JP Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan		Authorized officer Telephone No.																											

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/025197**C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT**

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
P, A	CN 113402537 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 17 September 2021 (2021-09-17) claims (in particular, claim 8), examples	1-16
P, A	US 2022/0123228 A1 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 21 April 2022 (2022-04-21) entire text, all drawings	1-16

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2022/025197

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP	2020-132636	A	31 August 2020	KR 10-2020-0099107	A
				CN 111560031	A
CN	110872316	A	10 March 2020	WO 2021/008374	A1
				claims (in particular, claim 8), examples 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16	
CN	110407858	A	05 November 2019	WO 2021/008374	A1
				claims (in particular, claim 4), examples	
WO	2021/245221	A1	09 December 2021	(Family: none)	
CN	113402537	A	17 September 2021	(Family: none)	
US	2022/0123228	A1	21 April 2022	(Family: none)	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） H01L 51/50(2006.01)i; C07D 209/86(2006.01)i; C07D 405/04(2006.01)i; C07D 405/10(2006.01)i; C07D 405/14(2006.01)i; C07F 5/02(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i FI: H05B33/14 B; C07D405/10 CSP; C09K11/06 690; C09K11/06 660; C07D405/04 CSP; C07D405/14; C07D209/86; H05B33/22 D; C07F5/02 A CSP; C09K11/06 645; C09K11/06 635																																
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）） H01L51/50; C07D209/86; C07D405/04; C07D405/10; C07D405/14; C07F5/02; C09K11/06 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2022年</td> </tr> </table> 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)			日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2022年	日本国実用新案登録公報	1996-2022年	日本国登録実用新案公報	1994-2022年																						
日本国実用新案公報	1922-1996年																															
日本国公開実用新案公報	1971-2022年																															
日本国実用新案登録公報	1996-2022年																															
日本国登録実用新案公報	1994-2022年																															
C. 関連すると認められる文献 <table border="1"> <thead> <tr> <th>引用文献の カテゴリー*</th> <th>引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示</th> <th>関連する 請求項の番号</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>X</td> <td>JP 2020-132636 A (学校法人関西学院) 31.08.2020 (2020 - 08 - 31) 特許請求の範囲, [0254]-[0255], [0289]-[0375], [0615]-[0619]実施例4(構成D)</td> <td>1-3, 8, 10, 12-16</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td></td> <td>12</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td></td> <td>4-7, 9, 11</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>CN 110872316 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 10.03.2020 (2020 - 03 - 10) 請求の範囲(特に請求項8), 実施例2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16</td> <td>1-3, 10, 13-16</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td></td> <td>12</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td></td> <td>4-9, 11</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>CN 110407858 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 05.11.2019 (2019 - 11 - 05) 請求の範囲(特に請求項4), 実施例</td> <td>1-16</td> </tr> <tr> <td>P, A</td> <td>WO 2021/245221 A1 (CYNORA GMBH) 09.12.2021 (2021 - 12 - 09) 全文(特に第49-51頁)</td> <td>1-16</td> </tr> <tr> <td>P, A</td> <td>CN 113402537 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 17.09.2021 (2021 - 09 - 17) 請求の範囲(特に請求項8), 実施例</td> <td>1-16</td> </tr> </tbody> </table>			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 2020-132636 A (学校法人関西学院) 31.08.2020 (2020 - 08 - 31) 特許請求の範囲, [0254]-[0255], [0289]-[0375], [0615]-[0619]実施例4(構成D)	1-3, 8, 10, 12-16	Y		12	A		4-7, 9, 11	X	CN 110872316 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 10.03.2020 (2020 - 03 - 10) 請求の範囲(特に請求項8), 実施例2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16	1-3, 10, 13-16	Y		12	A		4-9, 11	A	CN 110407858 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 05.11.2019 (2019 - 11 - 05) 請求の範囲(特に請求項4), 実施例	1-16	P, A	WO 2021/245221 A1 (CYNORA GMBH) 09.12.2021 (2021 - 12 - 09) 全文(特に第49-51頁)	1-16	P, A	CN 113402537 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 17.09.2021 (2021 - 09 - 17) 請求の範囲(特に請求項8), 実施例	1-16
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 2020-132636 A (学校法人関西学院) 31.08.2020 (2020 - 08 - 31) 特許請求の範囲, [0254]-[0255], [0289]-[0375], [0615]-[0619]実施例4(構成D)	1-3, 8, 10, 12-16																														
Y		12																														
A		4-7, 9, 11																														
X	CN 110872316 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 10.03.2020 (2020 - 03 - 10) 請求の範囲(特に請求項8), 実施例2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16	1-3, 10, 13-16																														
Y		12																														
A		4-9, 11																														
A	CN 110407858 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 05.11.2019 (2019 - 11 - 05) 請求の範囲(特に請求項4), 実施例	1-16																														
P, A	WO 2021/245221 A1 (CYNORA GMBH) 09.12.2021 (2021 - 12 - 09) 全文(特に第49-51頁)	1-16																														
P, A	CN 113402537 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 17.09.2021 (2021 - 09 - 17) 請求の範囲(特に請求項8), 実施例	1-16																														
☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。																																
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献																																
国際調査を完了した日 01.08.2022		国際調査報告の発送日 16.08.2022																														
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		権限のある職員（特許庁審査官） 岩井 好子 20 4160 電話番号 03-3581-1101 内線 3271																														

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
P, A	US 2022/0123228 A1 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 21.04.2022 (2022 - 04 - 21) 全文全図	1-16

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2022/025197

引用文献			公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP	2020-132636	A	31.08.2020	KR 10-2020-0099107 A	
				CN 111560031 A	
CN	110872316	A	10.03.2020	WO 2021/008374 A1	請求の範囲(特に請求項8), 実施例2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16
CN	110407858	A	05.11.2019	WO 2021/008374 A1	請求の範囲(特に請求項4), 実施例
WO	2021/245221	A1	09.12.2021	(ファミリーなし)	
CN	113402537	A	17.09.2021	(ファミリーなし)	
US	2022/0123228	A1	21.04.2022	(ファミリーなし)	