

(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
2024年9月6日(06.09.2024)



(10) 国際公開番号

WO 2024/181526 A1

(51) 国際特許分類:

C07D 403/14 (2006.01) H10K 50/16 (2023.01)
C09K 11/06 (2006.01) H10K 85/60 (2023.01)
H10K 50/11 (2023.01) H10K 101/20 (2023.01)
H10K 50/12 (2023.01) H10K 101/30 (2023.01)
H10K 50/15 (2023.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2024/007515

(22) 国際出願日: 2024年2月29日(29.02.2024)

(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 2023-031074 2023年3月1日(01.03.2023) 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: 山根 侑(YAMANE Yu); 〒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). ジョ ヨンジュ (CHO Yong Joo); 〒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). ▲濱▼▲崎▼太郎(HAMASAKI Taro); 〒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). 嶋村 直美(SHIMAMURA Naomi); 〒8190388 福

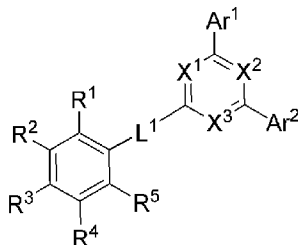
岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 鈴木 善丈 (SUZUKI Yoshitake); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). 金原 幸誠(KANAHARA Kousei); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP). ファン ソンヘ(HWANG Songhye); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 K y u l u x 内 Fukuoka (JP).

(74) 代理人: 弁理士法人特許事務所サイクス(SIKS & CO.); 〒1040031 東京都中央区京橋一丁目8番7号 京橋日殖ビル8階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(54) Title: COMPOUND, LIGHT-EMITTING MATERIAL, AND LIGHT-EMITTING ELEMENT

(54) 発明の名称: 化合物、発光材料および発光素子



(57) Abstract: An organic light-emitting element having excellent properties can be provided by using a compound represented by the general formula shown below. At least one of R¹ to R⁵ represents a cyano group, and at least two of them each independently represent a donating group; X¹ to X³ each independently represent N or C(R); R represents H, D or a substituent; at least one of Ar¹ and Ar² represents a group that is bound through a benzene ring having a donating group bound through a nitrogen atom; and L¹ represents a single bond or a linking group.

(57) 要約: 下記一般式の化合物を用いれば、特性が優れた有機発光素子を提供できる。R¹~R⁵の1個以上はシアノ基、2個以上はドナー性基; X¹~X³はNまたはC(R); RはH、Dまたは置換基; A r¹、A r²の1個以上は窒素原子で結合するドナー性基を有するベンゼン環で結合する基; L¹は単結合または連結基を表す。

[続葉有]



WO 2024/181526 A1

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第21条(3))

明 細 書

発明の名称：化合物、発光材料および発光素子

技術分野

[0001] 本発明は、発光材料として有用な化合物とそれを用いた発光素子に関する。

背景技術

[0002] 有機エレクトロルミネッセンス素子（有機EL素子）などの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。特に、有機エレクトロルミネッセンス素子を構成する電子輸送材料、ホール輸送材料、発光材料などを新たに開発して組み合わせることにより、発光効率を高める工夫が種々なされてきている。その中には、遅延蛍光材料を利用した有機エレクトロルミネッセンス素子に関する研究も見受けられる。

[0003] 遅延蛍光材料は、励起状態において、励起三重項状態から励起一重項状態への逆項間交差を生じた後、その励起一重項状態から基底状態へ戻る際に蛍光を放射する材料である。こうした経路による蛍光は、基底状態から直接生じた励起一重項状態からの蛍光（通常の蛍光）よりも遅れて観測されるため、遅延蛍光と称されている。ここで、例えば、発光性化合物をキャリアの注入により励起した場合、励起一重項状態と励起三重項状態の発生確率は統計的に25%：75%であるため、直接生じた励起一重項状態からの蛍光のみでは、発光効率の向上に限界がある。一方、遅延蛍光材料では、励起一重項状態のみならず、励起三重項状態も上記の逆項間交差を介した経路により蛍光発光に利用することができるため、通常の蛍光材料に比べて高い発光効率を得られることになる。

[0004] このような原理が明らかにされて以降、様々な研究により種々の遅延蛍光材料が発見されるに至っている。その中には、ベンゼン環にドナー性基とアクセプター性基が置換した化合物が多数含まれている。例えば、ベンゼン環にドナー性基であるカルバゾール-9-イル基とアクセプター性基であるシ

アノ基と置換トリアジニル基が置換した骨格を有する化合物が提案されている（特許文献1 参照）。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：WO 2 0 1 9 / 1 9 1 6 6 5 A 1

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] 遅延蛍光を放射する材料であっても、その特性が極めて良好であって、実用面における課題がないものはこれまでに提供されるに至っていない。このため、一段と特性が優れた遅延蛍光材料を提供することができれば、さらに有用である。しかし、遅延蛍光材料の改良は試行錯誤の段階にあり、有用な発光材料の化学構造を一般化することは容易でない。

[0007] このような状況下において本発明者らは、発光素子用の遅延蛍光材料としてより有用な化合物を提供することを目的として研究を重ねた。そして、遅延蛍光材料としてより有用な化合物の一般式を導きだして一般化することを目的として鋭意検討を進めた。

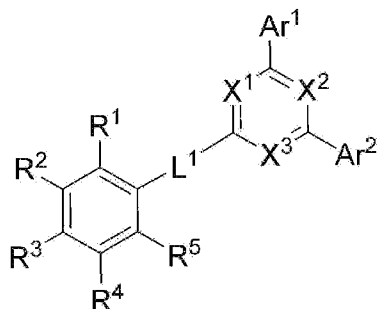
課題を解決するための手段

[0008] 上記の目的を達成するために鋭意検討を進めた結果、本発明者らは、特定の条件を満たす構造を有する化合物が発光材料として有用であることを見いだした。本発明は、こうした知見に基づいて提案されたものであり、具体的に、以下の構成を有する。

[1] 下記一般式（1）で表される化合物。

[化1]

一般式 (1)



[一般式 (1) において、 $R^1 \sim R^5$ は、各々独立に水素原子、重水素原子、シアノ基、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、またはドナー性基を表す。また、 $R^1 \sim R^5$ のうちの1個以上はシアノ基であり、 $R^1 \sim R^5$ のうちの2個以上はドナー性基である。 $X^1 \sim X^3$ は、各々独立にNまたはC (R)を表すが、 $X^1 \sim X^3$ の少なくとも1個はNである。 R は水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Ar^1 および Ar^2 は、各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表すが、 Ar^1 および Ar^2 のうちの少なくとも1個は、窒素原子で結合するドナー性基を有するが、アクセプター性基を有さないベンゼン環で結合する基である。 L^1 は単結合または2価の連結基を表す。]

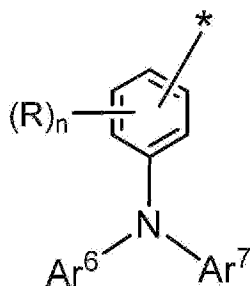
[2] $R^1 \sim R^5$ のうちの1個だけがシアノ基である、[1]に記載の化合物。

[3] R^2 がシアノ基である、[2]に記載の化合物。

[4] Ar^1 が下記一般式 (c) で表される構造を有する基である、[1] ~ [3] のいずれか1つに記載の化合物。

[化2]

一般式 (c)

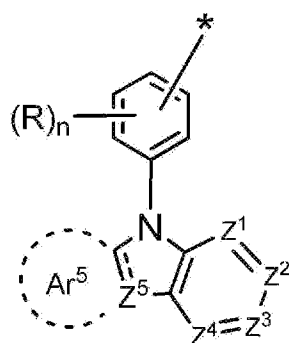


[一般式 (c) において、R は各々独立に重水素原子またはドナー性基を表す。A r⁶ および A r⁷ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。A r⁶ と A r⁷ は互いに結合して環状構造を形成していてもよく、A r⁶ と R は互いに結合して環状構造を形成していてもよく、A r⁷ と R は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。n は 0 ～ 4 のいずれかの整数を表す。＊は結合位置を示す。]

[5] A r¹ が下記一般式 (d) で表される構造を有する基である、[1] ～ [3] のいずれか 1 つに記載の化合物。

[化3]

一般式 (d)

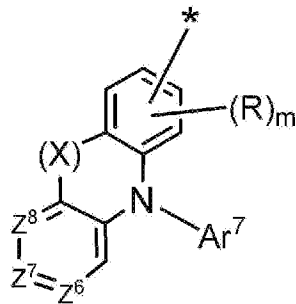


[一般式 (d) において、R は各々独立に重水素原子またはドナー性基を表す。Z¹ は C-R¹⁴ または N を表し、Z² は C-R¹⁵ または N を表し、Z³ は C-R¹⁶ または N を表し、Z⁴ は C-R¹⁷ または N を表す。Z⁵ は C または N を表し、A r⁵ は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表す。R¹⁴ と R¹⁵、R¹⁵ と R¹⁶、R¹⁶ と R¹⁷ は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。n は 0 ～ 4 のいずれかの整数を表す。＊は結合位置を示す。]

[6] A r¹ が下記一般式 (f) で表される構造を有する基である、[1] ～ [3] のいずれか 1 つに記載の化合物。

[化4]

一般式 (f)



[一般式 (f) において、R は各々独立に重水素原子またはドナー性基を表す。Z⁶ は C-R¹⁸ または N を表し、Z⁷ は C-R¹⁹ または N を表し、Z⁸ は C-R²⁰ または N を表し、R¹⁸ と R¹⁹、R¹⁹ と R²⁰ は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。X は存在せずに単結合を表すか、1 または 2 原子の連結鎖を有する連結基を表す。Ar⁷ は、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。m は 0～3 のいずれかの整数を表す。* は結合位置を示す。]

[7] Ar² がドナー性基を有さない置換もしくは無置換のアリール基である、[1]～[6] のいずれか 1 つに記載の化合物。

[8] Ar² が窒素原子で結合するドナー性基である、[1]～[6] のいずれか 1 つに記載の化合物。

[9] Ar² が一般式 (f) で表される構造を有する基である、[1]～[6] のいずれか 1 つに記載の化合物。

[10] R¹～R⁵ のうちの 3 個がドナー性基である、[1]～[8] のいずれか 1 つに記載の化合物。

[11] ドナー性基が置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基である、[1]～[10] のいずれか 1 つに記載の化合物。

[12] X¹～X³ が N である、[1]～[10] のいずれか 1 つに記載の化合物。

[13] L¹ が単結合である、[1]～[12] のいずれか 1 つに記載の化合物。

[14] R^1 が水素原子である、[1]～[13]のいずれか1つに記載の化合物。

[15] 重水素原子を少なくとも1つ有する、[1]～[14]のいずれか1つに記載の化合物。

[16] [1]～[15]のいずれか1つに記載の化合物からなる発光材料。

[17] [1]～[15]のいずれか1つに記載の化合物からなる遅延蛍光体。

[18] [1]～[15]のいずれか1つに記載の化合物を含む膜。

[19] [1]～[15]のいずれか1つに記載の化合物を含む有機半導体素子。

[20] [1]～[15]のいずれか1つに記載の化合物を含む有機発光素子。

[21] 前記素子が前記化合物を含む層を有しており、前記層が宿主材料も含む、[20]に記載の有機発光素子。

[22] 前記化合物を含む層が、前記化合物および前記宿主材料の他に遅延蛍光材料も含み、前記遅延蛍光材料の最低励起一重項エネルギーが前記宿主材料より低く、前記化合物よりも高い、[21]に記載の有機発光素子。

[23] 前記素子が前記化合物を含む層を有しており、前記層が前記化合物とは異なる構造を有する発光材料も含む、[21]または[22]に記載の有機発光素子。

[24] 前記素子に含まれる材料のうち、前記化合物からの発光量が最大である、[21]または[22]に記載の有機発光素子。

[25] 前記発光材料からの発光量が前記化合物からの発光量よりも多い、[23]に記載の有機発光素子。

[26] 有機エレクトロルミネッセンス素子である、[20]～[25]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

〔27〕 遅延蛍光を放射する、〔20〕～〔26〕のいずれか1つに記載の有機発光素子。

発明の効果

[0009] 本発明の化合物は、優れた発光特性を示す。本発明の化合物は有機発光素子の材料として有用である。

発明を実施するための形態

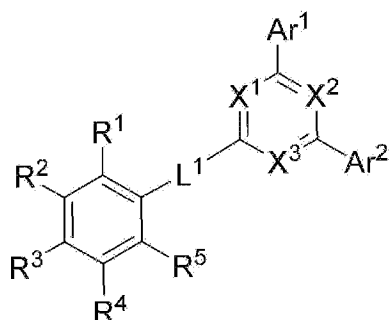
[0010] 以下において、本発明の内容について詳細に説明する。以下に記載する構成要件の説明は、本発明の代表的な実施態様や具体例に基づいてなされることがあるが、本発明はそのような実施態様や具体例に限定されるものではない。なお、本明細書において「～」を用いて表される数値範囲は、「～」の前後に記載される数値を下限値および上限値として含む範囲を意味する。また、本発明に用いられる化合物の分子内に存在する水素原子の一部または全部は重水素原子 (^2H 、デューテリウムD) に置換することができる。本明細書の化学構造式では、水素原子はHと表示しているか、その表示を省略している。例えばベンゼン環の環骨格構成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。

[0011] [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。

[化5]

一般式 (1)



[0012] 一般式 (1) において、R¹～R⁵は、各々独立に水素原子、重水素原子、シアノ基、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、またはドナー性基を表す。また、R¹～R⁵のうちの1個以上はシアノ基であり、R¹～R⁵のうちの2個以上はドナー性基である。X¹～X³は、各々独立にNまたはC(R)を表すが、X¹～X³の少なくとも1個はNである。Rは水素原子、重水素原子または置換基を表す。Ar¹およびAr²は、各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表すが、Ar¹およびAr²のうちの少なくとも1個は、窒素原子で結合するドナー性基を有するが、アクセプター性基を有さないベンゼン環で結合する基である。ここでいう窒素原子で結合するドナー性基を有するとは、ドナー性基を構成する窒素原子でベンゼン環に直結していることを意味する。また、アクセプター性基を有さないとは、アクセプター性基がベンゼン環に直結していないことを意味する。

[0013] R¹～R⁵が採りうるアルキル基は、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

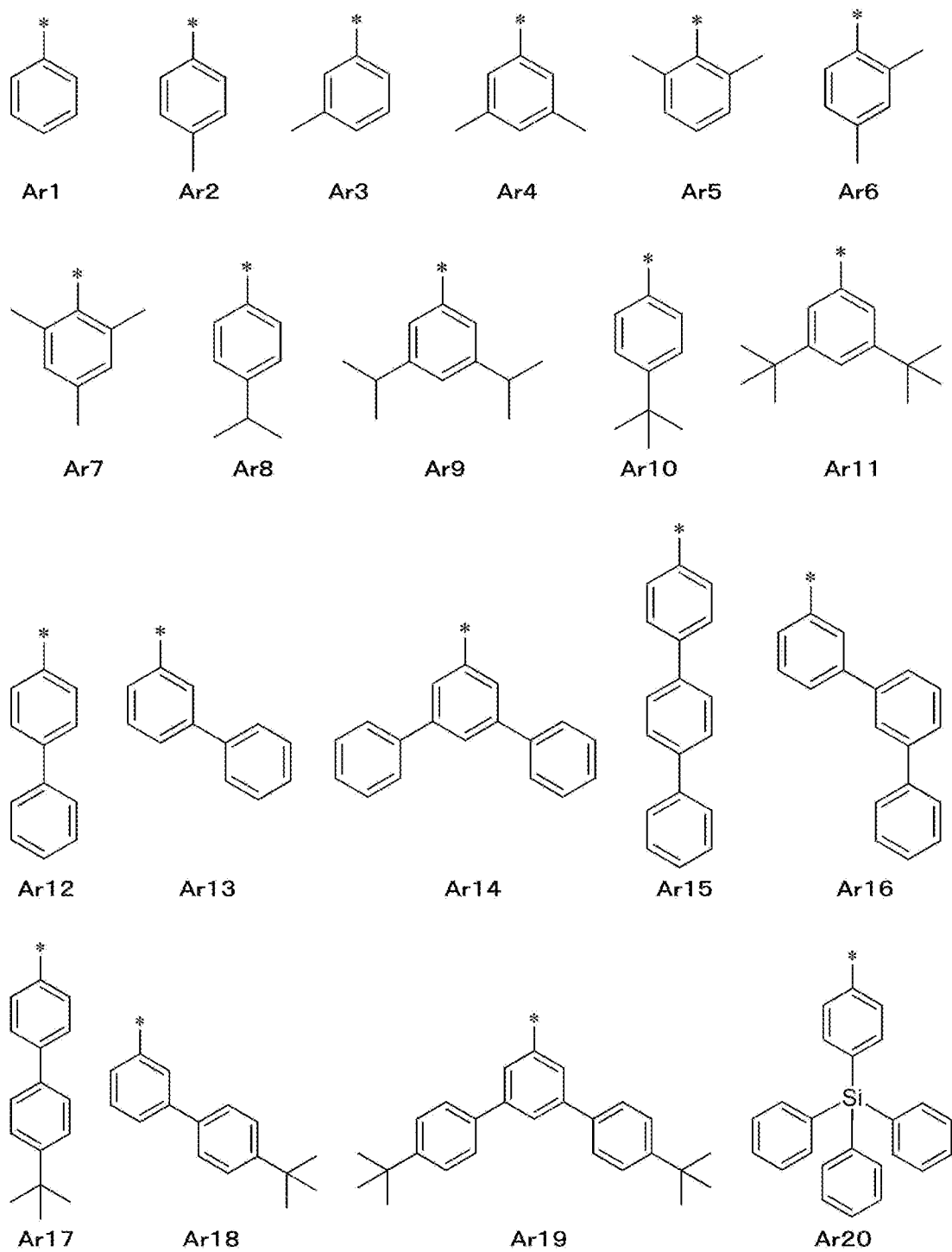
クチル基、イソオクチル基、*n*-ノニル基、イソノニル基、*n*-デカニル基、イソデカニル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基を挙げることができる。置換基たるアルキル基は、さらに例えば重水素原子、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ハロゲン原子で置換されていてもよい。本発明の一態様では、アルキル基の置換基は、アリール基および重水素原子からなる群より選択される1つ以上である。本発明の好ましい一態様では、アルキル基は無置換であり、例えばメチル基、エチル基、イソプロピル基およびtert-ブチル基からなる群より選択することができる。

[0014] $R^1 \sim R^5$ 、 Ar^1 および Ar^2 が採りうるアリール基は、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、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、トリフェニレン環を挙げることができる。本発明の一態様では、アリール基は置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフタレン-1-イル基、または置換もしくは無置換のナフタレン-2-イル基であり、好ましくは置換もしくは無置換のフェニル基である。アリール基の置換基は、例えば置換基群Aから選択してもよいし、置換基群Bから選択してもよいし、置換基群Cから選択してもよいし、置換基群Dから選択してもよいし、置換基群Eから選択してもよい。本発明の一態様では、アリール基の置換基は、アルキル基、アリール基および重水素原子からなる群より選択される1つ以上である。本発明の好ましい一態様では、アリール基は少なくとも1個の重水素原子で置換されている。本発明の一態様では、アリール基は無置換である。

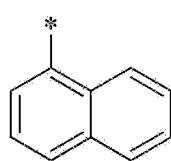
以下において、 $R^1 \sim R^5$ 、 Ar^1 および Ar^2 が採りうる置換もしくは無置換のアリール基の具体例を挙げる。ただし、本発明で採用することができるアリール基は以下の具体例によって限定的に解釈されることはない。以下の具体例において、*は結合位置を示す。また、メチル基は表示を省略してい

る。このため、Ar2～Ar7はメチル基で置換された構造を表している。

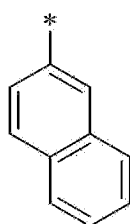
[化6-1]



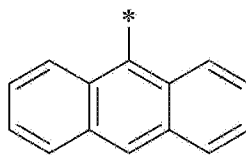
[化6-2]



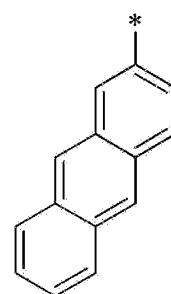
Ar21



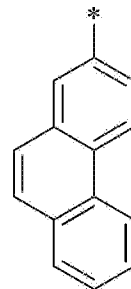
Ar22



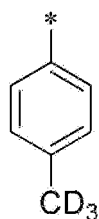
Ar23



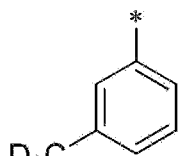
Ar24



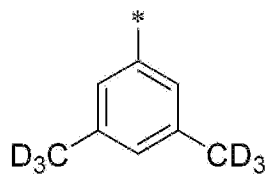
Ar25



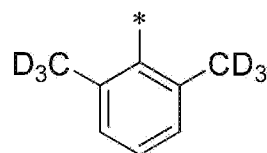
Ar26



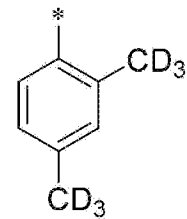
Ar27



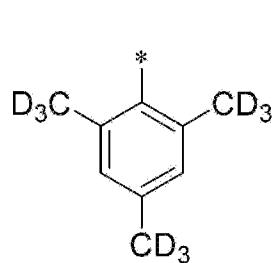
Ar28



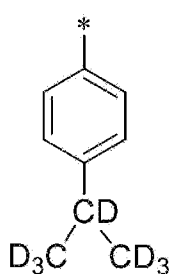
Ar29



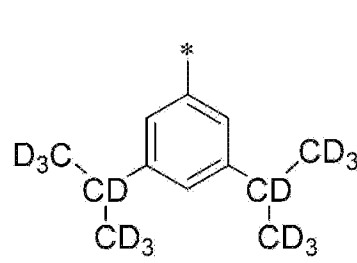
Ar30



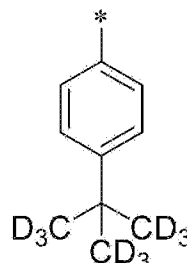
Ar31



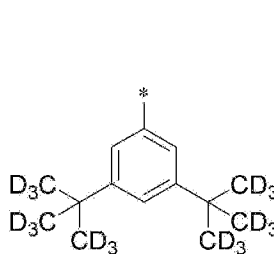
Ar32



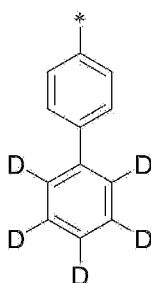
Ar33



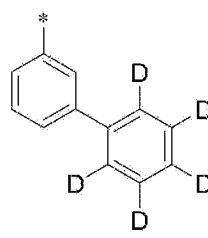
Ar34



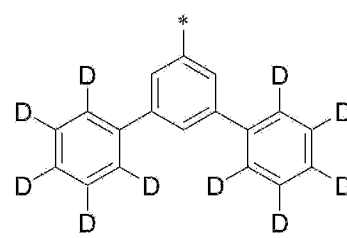
Ar35



Ar36

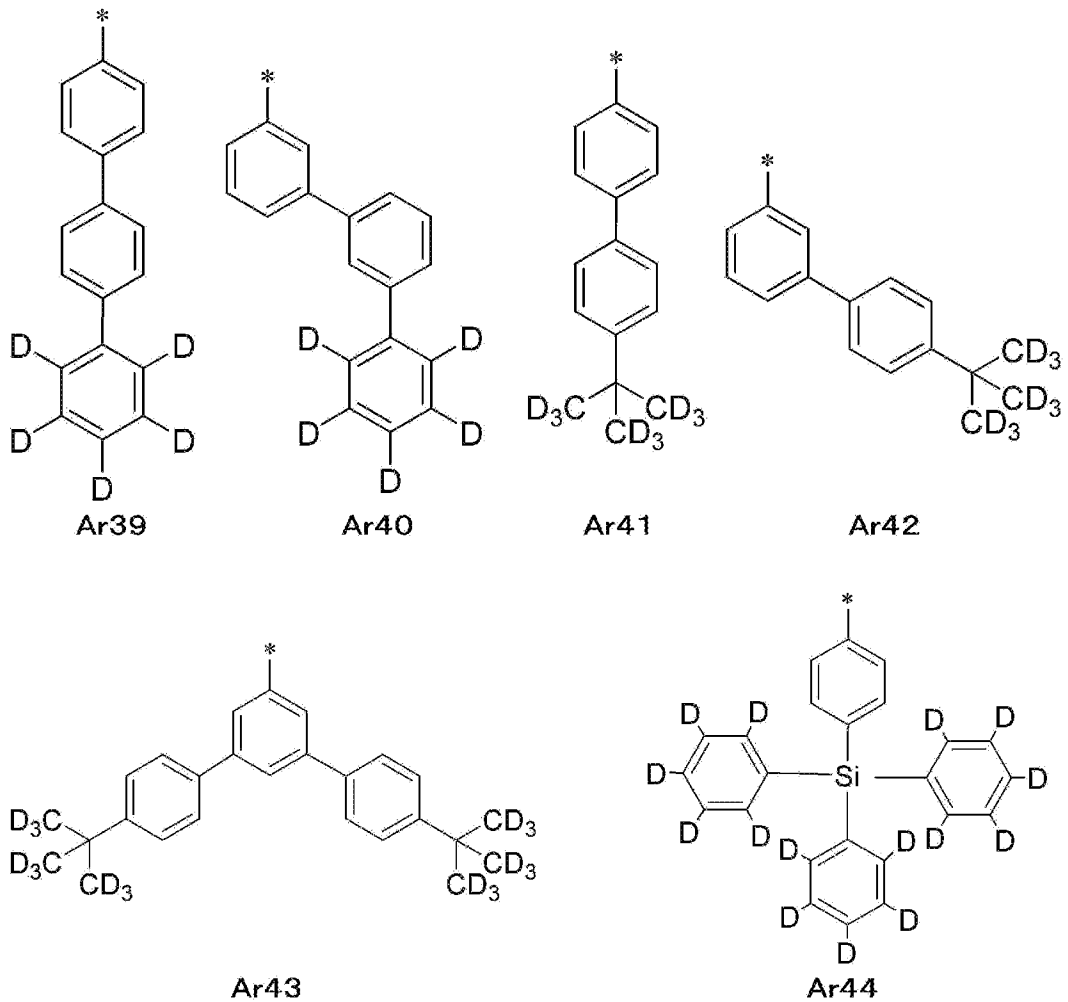


Ar37



Ar38

[化6-3]



[0015] 上記の具体例の他に、Ar1～Ar44に存在するすべての水素原子を重水素原子に置換した基を、順にAr45～Ar88としてここに例示する。

本発明の一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr1～Ar88からなる群より選択される。本発明の一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr1またはAr45である。本発明の一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr2～Ar11、Ar26～Ar35、Ar46～55、Ar70～Ar79からなる群より選択される。本発明の一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr12～Ar19、Ar36～Ar43、Ar56～Ar63、Ar80～Ar87からなる群より選択される。本発明の一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr21～Ar26、Ar65～Ar70からなる群より選択される。本発明の好ましい一態様で

は、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるアリール基は $Ar1$ 、 $Ar12 \sim Ar14$ 、 $Ar23$ 、 $Ar36 \sim Ar38$ 、 $Ar45$ 、 $Ar56 \sim Ar58$ 、 $Ar67$ 、 $Ar80 \sim Ar82$ からなる群より選択される。

本発明の一態様では、 Ar^1 または Ar^2 が採りうるアリール基は $Ar1 \sim Ar88$ からなる群より選択される。本発明の一態様では、 Ar^1 または Ar^2 が採りうるアリール基は $Ar1$ または $Ar45$ である。本発明の一態様では、 Ar^1 または Ar^2 が採りうるアリール基は $Ar2 \sim Ar11$ 、 $Ar26 \sim Ar35$ 、 $Ar46 \sim 55$ 、 $Ar70 \sim Ar79$ からなる群より選択される。本発明の一態様では、 Ar^1 または Ar^2 が採りうるアリール基は $Ar12 \sim Ar19$ 、 $Ar36 \sim Ar43$ 、 $Ar56 \sim Ar63$ 、 $Ar80 \sim Ar87$ からなる群より選択される。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるアリール基は $Ar1$ 、 $Ar12 \sim Ar14$ 、 $Ar36 \sim Ar38$ 、 $Ar45$ 、 $Ar56 \sim Ar58$ 、 $Ar80 \sim Ar82$ からなる群より選択される。

[0016] 一般式(1)の $R^1 \sim R^5$ の少なくとも2個はドナー性基である。 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基には、置換もしくは無置換のアリール基は含まれない。

「ドナー性基」は、ハメットの σ_p 値が負の基の中から選択することができる。「アクセプター性基」は、ハメットの σ_p 値が正の基の中から選択することができる。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。

[0017] $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基は、 σ_p が -0.3 以下であることが好ましく、 -0.5 以下であることがより好ましく、 -0.7 以下であることがさらに好ましい。例えば、 -0.9 以下の範囲から選択したり、 -1.1 以下の範囲から選択したりしてもよい。

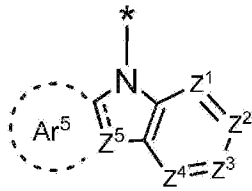
[0018] 本発明におけるドナー性基は、置換アミノ基を含む基であることが好ましい。置換アミノ基であってもよいし、置換アミノ基が結合したアリール基、なかでも置換アミノ基が結合したフェニル基であってもよい。本発明の好ましい一態様では、ドナー性基は置換アミノ基である。

置換アミノ基の窒素原子に結合する置換基は、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ルケニル基、置換もしくは無置換のアリール基、または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、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基であることがより好ましい。置換アミノ基は、特に、置換もしくは無置換のジアリールアミノ基、または置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ基であることが好ましい。ここでいう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く、またジヘテロアリールアミノ基を構成する2つのヘテロアリール基は互いに結合していてもよい。

[0019] $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基は、下記一般式(a)で表される基であることが好ましい。

[化7]

一般式 (a)



[0020] 一般式 (a) において、 Z^1 はC- R^{14} またはNを表し、 Z^2 はC- R^{15} またはNを表し、 Z^3 はC- R^{16} またはNを表し、 Z^4 はC- R^{17} またはNを表す。 Z^5 はCまたはNを表し、 Ar^5 は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表す。 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0021] $Z^1 \sim Z^4$ のうち、Nであるものの数は0～3であることが好ましく、0～2であることが好ましい。本発明の一態様では、 $Z^1 \sim Z^4$ のうち、Nであるものの数は1である。本発明の一態様では、 $Z^1 \sim Z^4$ のうち、Nであるものの数は0である。

$R^{14} \sim R^{17}$ 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。 $R^{14} \sim R^{17}$ の2つ以上が置換基を表すとき、それらの2つ以上の置換基は同一であっても異なってもよい。 $R^{14} \sim R^{17}$ のうちの0～2個は置換基であることが好ましく、例えば1個が置換基であってもよいし、0個が置換基($R^{14} \sim R^{17}$ が水素原子または重水素原子)であってもよい。

R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。環状構造は、芳香環、複素芳香環、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、これらが縮合した環であってもよい。好ましくは芳香環、複素芳香環である。芳香環として置換もしくは無置換のベンゼン環を挙げることができる。ベンゼン環にはさらに他のベンゼン環が縮合していてもよく、ピリジン環のような複素環が縮合していてもよい。

い。複素芳香環は、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、複素芳香環としてフラン環、チオフェン環、ピロール環を採用することができる。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ゾフランのフラン環、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、置換もしくは無置換のインドールのピロール環である。ここでいうベンゾフラン、ベンゾチオフェン、インドールは無置換であってもよく、置換基群Aから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Bから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Cから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Dから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Eから選択される置換基で置換されていてもよい。インドールのピロール環を構成する窒素原子には置換もしくは無置換のアリール基が結合していることが好ましく、その置換基としては例えば置換基群A～Eのいずれかの群から選択される置換基を挙げることができる。環状構造は、置換もしくは無置換のシクロペンタジエン環であってもよい。本発明の一態様では、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} の中の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^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} は、いずれも互いに結合して環状構造を形成していない。

[0022] 一般式(a)において、 Z^5 はCまたはNを表し、 $A r^5$ は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表す。本発明の一態様では、 Z^5 はCであり、 $A r^5$ は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環である。本発明の一態様では、 Z^5 はNであり、 $A r^5$ は置換もしくは無置換の複素芳香環である。

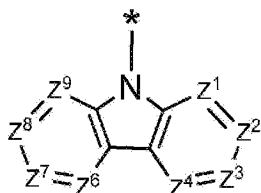
$A r^5$ が採りうる芳香環としてベンゼン環を挙げることができる。ベンゼン環にはさらに他のベンゼン環が縮合していてもよく、ピリジン環のような複素環が縮合していてもよい。 $A r^5$ が採りうる複素芳香環は5～7員環である

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、複素芳香環としてフラン環、チオフェン環、ピロール環、イミダゾール環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環を採用することができる。本発明の一態様では、 Z^5 がCであり、複素芳香環が置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環、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、置換もしくは無置換のキノリンのピリジン環、または置換もしくは無置換のイソキノリンのピリジン環である。本発明の一態様では、 Z^5 がNであり、複素芳香環が置換もしくは無置換のインドールのピロール環、または置換もしくは無置換のベンゾイミダゾールのイミダゾール環である。ここでいうベンゾフラン、ベンゾチオフェン、キノリン、イソキノリン、インドール、ベンゾイミダゾールは無置換であってもよく、置換基群Aから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Bから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Cから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Dから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Eから選択される置換基で置換されていてもよい。

[0023] 一般式 (a) における Z^5 がCであるとき、下記一般式 (b) で表される基であることが好ましい。

[化8]

一般式 (b)



[0024] 一般式 (b) において、 Z^1 はC- R^{14} またはNを表し、 Z^2 はC- R^{15} またはNを表し、 Z^3 はC- R^{16} またはNを表し、 Z^4 はC- R^{17} またはNを表し、 Z^6 はC- R^{18} またはNを表し、 Z^7 はC- R^{19} またはNを表し、 Z^8 はC- R^{20} またはNを表し、 Z^9 はC- R^{21} またはNを表す。 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} は互いに結

合して環状構造を形成していてもよい。

一般式 (b) における $Z^1 \sim Z^4$ 、 $R^{14} \sim R^{17}$ については、一般式 (a) の対応する説明を参照することができる。一般式 (b) における $Z^6 \sim Z^9$ 、 $R^{18} \sim R^{21}$ は、一般式 (a) の $Z^1 \sim Z^4$ 、 $R^{14} \sim R^{17}$ に順に対応しており、これらの内容については一般式 (a) の $Z^1 \sim Z^4$ 、 $R^{14} \sim R^{17}$ の説明を参照することができる。

本発明の一態様では、 $Z^1 \sim Z^4$ 、 $Z^6 \sim Z^9$ のうち、Nであるものの数は0～2であることが好ましく、0または1であることが好ましい。本発明の一態様では、 $Z^1 \sim Z^4$ 、 $Z^6 \sim Z^9$ のうち、Nであるものの数は1である。本発明の好ましい一態様では、 $Z^1 \sim Z^4$ 、 $Z^6 \sim Z^9$ のうち、Nであるものの数は0である。0であるとき、置換もしくは無置換のカルバゾールー9ーイル基を表す。

[0025] $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基は、置換もしくは無置換のカルバゾールー9ーイル基であることが好ましい。ここでいうカルバゾールー9ーイル基は、無置換であってもよく、置換基群Aから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Bから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Cから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Dから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Eから選択される置換基で置換されていてもよい。また、カルバゾールー9ーイル基を構成する2つのベンゼン環には、さらに1個以上の環が縮合していてもよい。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基は、置換基群Eから選択される基で置換されていてもよく、また、1個以上の環が縮合していてもよいカルバゾールー9ーイル基である。環が縮合していないカルバゾールー9ーイル基が置換されている場合、置換位置は特に限定されないが、好ましくは2～7位の少なくとも1個であり、より好ましくは3位か6位の少なくとも1個であり、さらに好ましくは3位および6位である。

[0026] 本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基は、1個以上の環が縮合しているカルバゾールー9ーイル基であり、以下においてこれを「環縮

合カルバゾールー9-イル基」という。R¹～R⁵が採りうる環縮合カルバゾールー9-イル基は、無置換であってもよく、置換基群Aから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Bから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Cから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Dから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Eから選択される置換基で置換されていてもよい。好ましくは無置換であるか、置換基群Eから選択される置換基で置換されている。本発明の一態様では、環縮合カルバゾールー9-イル基は無置換である。本発明の好ましい一態様では、環縮合カルバゾールー9-イル基は、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アリール基で置換されている。

[0027] 環縮合カルバゾールー9-イル基における縮合している環の総数は4以上であり、5以上であることが好ましく、5～9であることがより好ましく、5～7であることがさらに好ましい。本発明の好ましい一態様では、縮合環を構成する環の数は5である。なお、ここでいう環の数には、縮合されるカルバゾールの環の数（すなわち3）を含んでいる。

[0028] 環縮合カルバゾールー9-イル基は、カルバゾールの環骨格を構成する窒素原子で結合する基であり、カルバゾールを構成する2つのベンゼン環の少なくとも一方に環が縮合している構造を有する。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、これらがさらに縮合した環であってもよい。好ましくは芳香族炭化水素環、芳香族複素環である。芳香族炭化水素環として置換もしくは無置換のベンゼン環を挙げることができる。ベンゼン環にはさらに他のベンゼン環が縮合していてもよく、ピリジン環のような複素環が縮合していてもよい。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

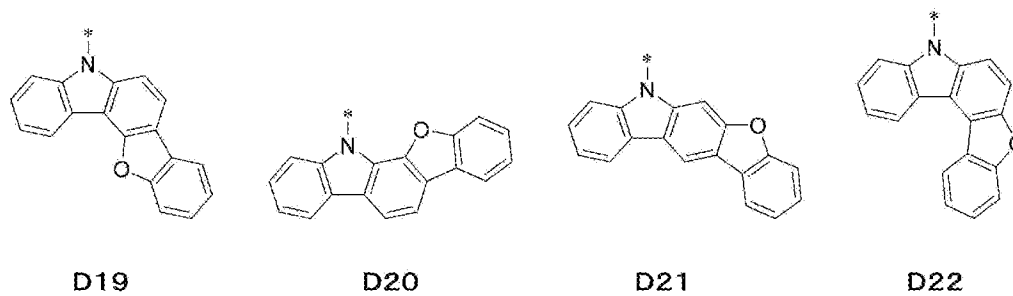
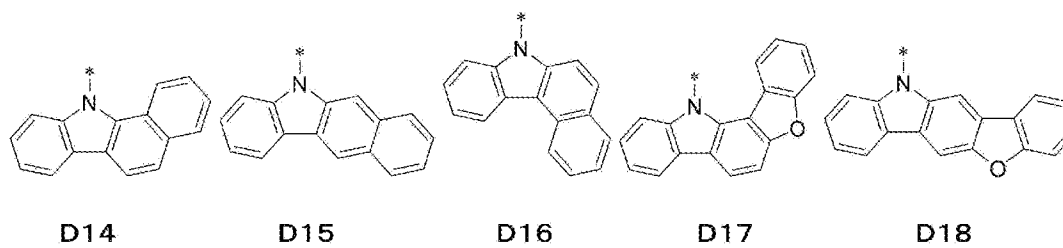
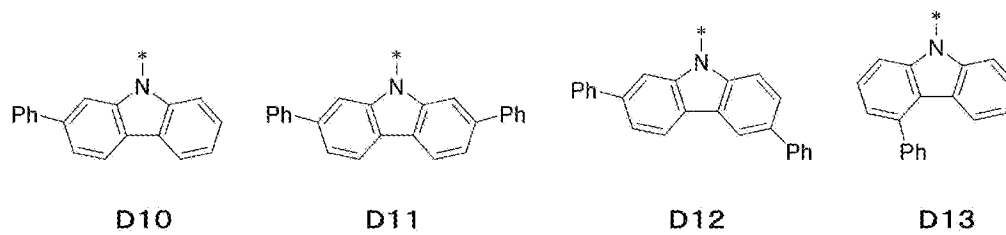
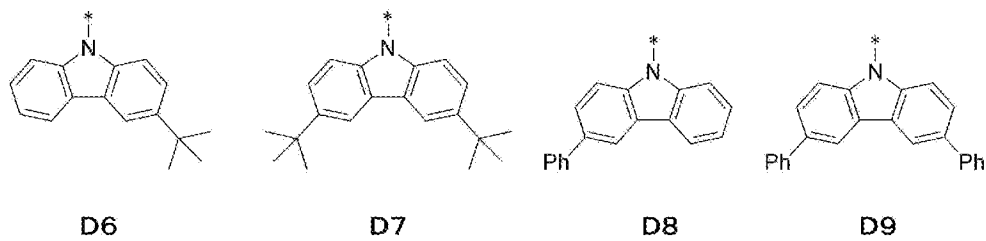
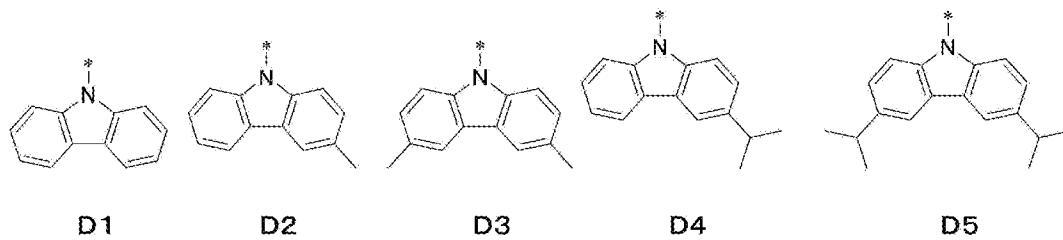
ことができる。本発明の一態様では、縮合している環は、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環、置換もしくは無置換のベンゾチオフェンのチオフェン環、置換もしくは無置換のインドールのピロール環である。なお、ピロール環の窒素原子には、置換基群Eの中から選択した置換基（ただし重水素原子のみである場合は除く）が結合していることが好ましく、アルキル基やアリール基で置換されていてもよいアリール基が結合していることがより好ましい。本発明では、酸素原子、硫黄原子および窒素原子からなる群より選択される1以上の原子を環骨格構成原子とする環が縮合しているカルバゾール-9-イル基を採用することが好ましい。なかでも、ベンゾフロ構造が縮合したカルバゾール-9-イル基、ベンゾチエノ構造が縮合したカルバゾール-9-イル基、インドロ構造が縮合したカルバゾール-9-イル基を好ましく採用することができる。本発明の一態様では、ベンゾフロ構造が縮合したカルバゾール-9-イル基を少なくとも1つ有し、例えば2つ以上有する。本発明の一態様では、ベンゾチエノ構造が縮合したカルバゾール-9-イル基を少なくとも1つ有し、例えば2つ以上有する。

[0029] 環縮合カルバゾール-9-イル基として、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、ベンゾフロ [2, 3-c] カルバゾール-9-イル基、ベンゾフロ [3, 2-c] カルバゾール-9-イル基を採用することができる。また、環縮合カルバゾール-9-イル基として、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-イル基を採用することもできる。また、環縮合カルバゾール-9-イル基として、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

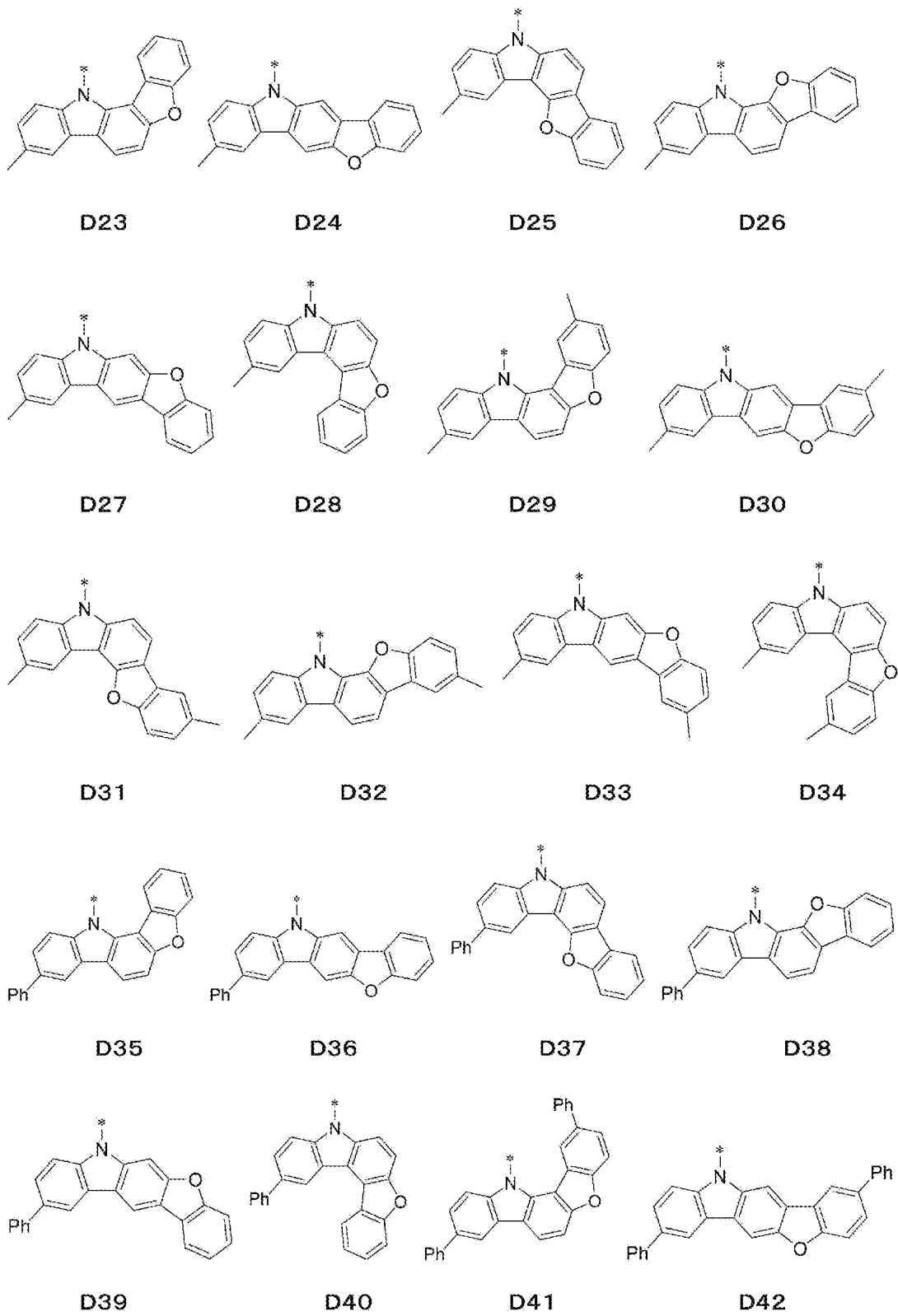
ドロ [2, 3-b] カルバゾール-9-イル基、インドロ [3, 2-b] カルバゾール-9-イル基、インドロ [2, 3-c] カルバゾール-9-イル基、インドロ [3, 2-c] カルバゾール-9-イル基を採用することもできる。

- [0030] 環縮合カルバゾール-9-イル基が置換されているときの置換基の数は、1～10個であることが好ましく、1～6個であることがより好ましく、1～4個であることがさらに好ましく、例えば1個であってもよく、例えば2個であってもよい。本発明の好ましい一態様では、環縮合カルバゾール-9-イル基の3位または6位のいずれかが置換されている。本発明の好ましい一態様では、環縮合カルバゾール-9-イル基に存在するヘテロ原子からみてベンゼン環のパラ位に置換基を少なくとも1つ有する。本発明の好ましい一態様では、環縮合カルバゾール-9-イル基に存在するヘテロ原子からみてベンゼン環のパラ位にだけ置換基を少なくとも1つ有する。本発明の好ましい一態様では、環縮合カルバゾール-9-イル基に存在するヘテロ原子からみてベンゼン環の置換可能なパラ位のすべてに置換基を有する。
- [0031] 以下において、一般式(1)の $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基の具体例を示す。ただし、本発明で採用することができるドナー性基は、以下の具体例によって限定的に解釈されることはない。なお、以下の具体例において、Phはフェニル基(C_6H_5)を示し、*は結合位置を示す。メチル基は表示を省略しているため、例えばD2は1つのメチル基を有している。ただし、重水素化したメチル基は CD_3 と表記している。また、 C_6D_5 は水素原子がすべて重水素化したフェニル基を表している。Dは重水素原子を表す。

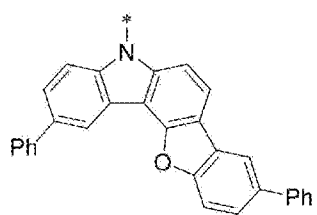
[化9-1]



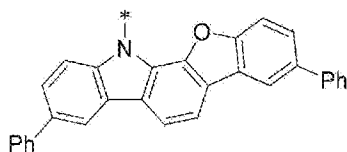
[化9-2]



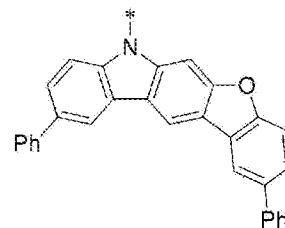
[化9-3]



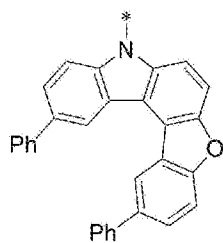
D43



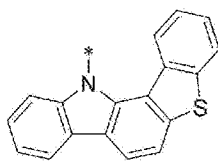
D44



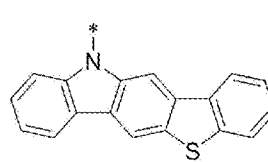
D45



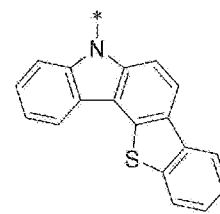
D46



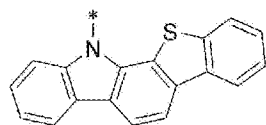
D47



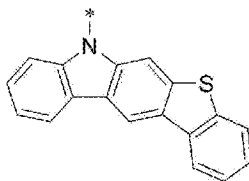
D48



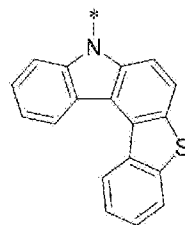
D49



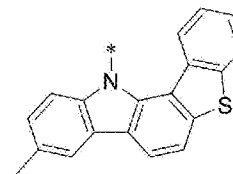
D50



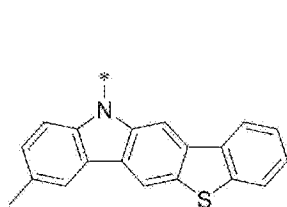
D51



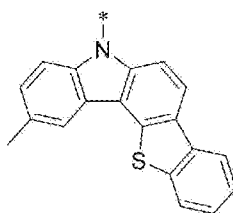
D52



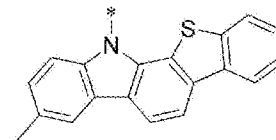
D53



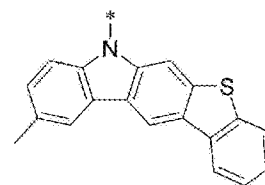
D54



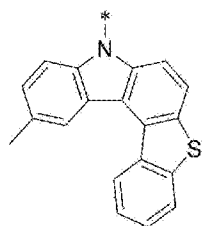
D55



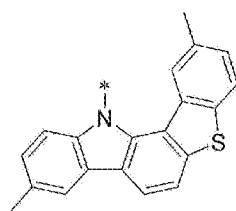
D56



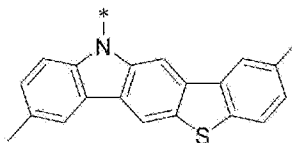
D57



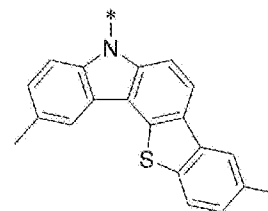
D58



D59

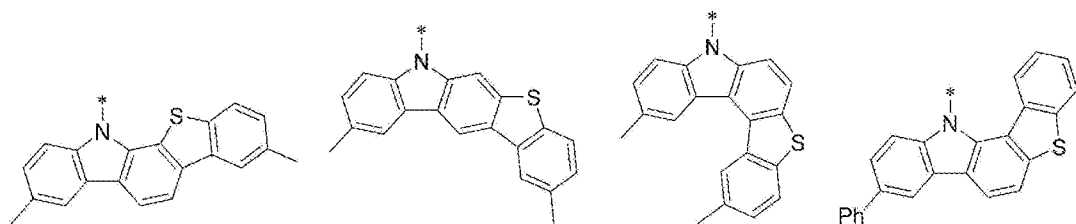


D60



D61

[化9-4]

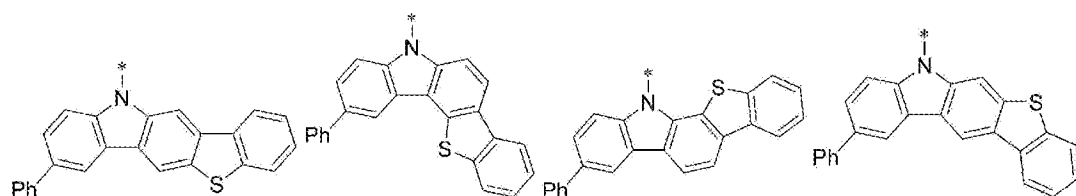


D62

D63

D64

D65

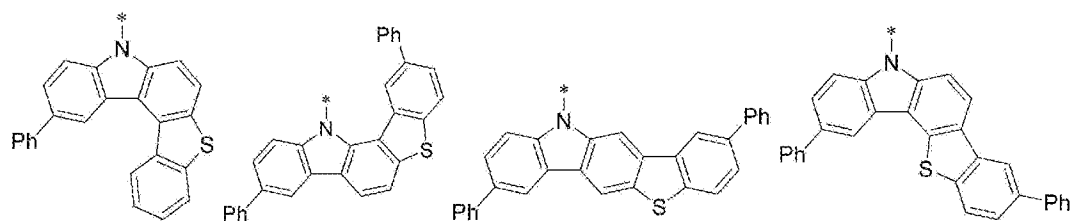


D66

D67

D68

D69

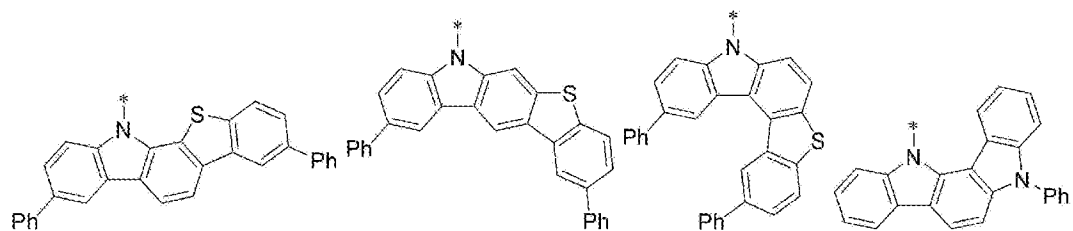


D70

D71

D72

D73

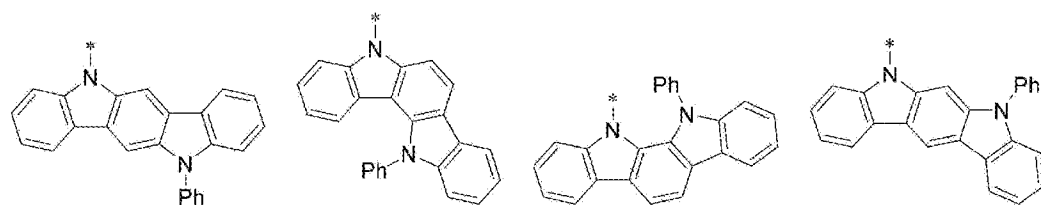


D74

D75

D76

D77



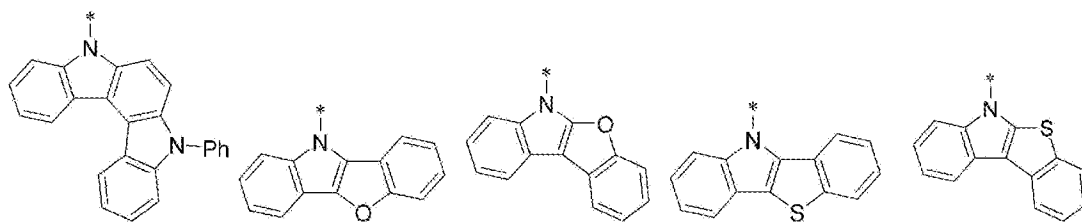
D78

D79

D80

D81

[化9-5]



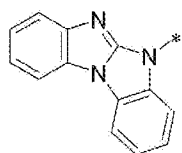
D82

D83

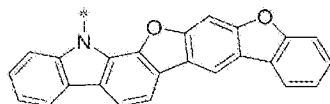
D84

D85

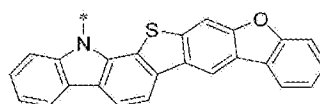
D86



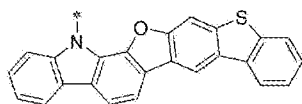
D87



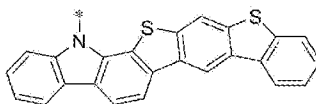
D88



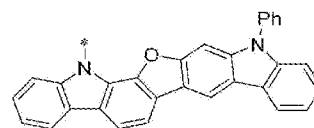
D89



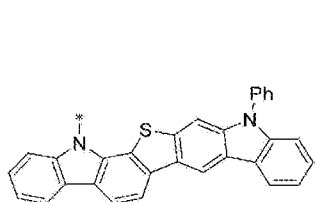
D90



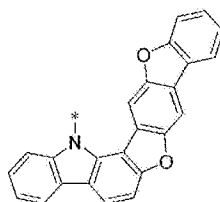
D91



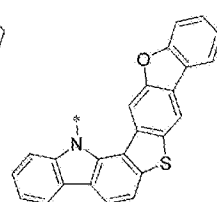
D92



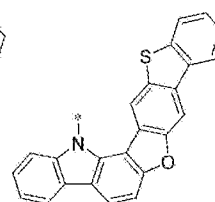
D93



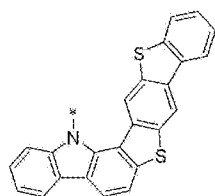
D94



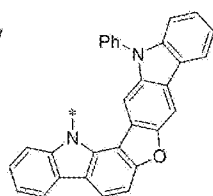
D95



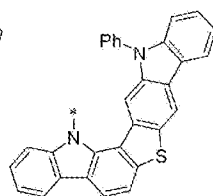
D96



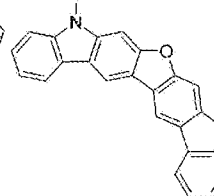
D97



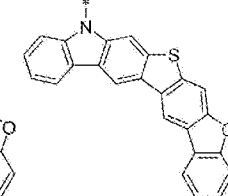
D98



D99

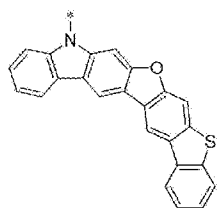


D100

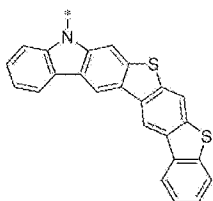


D101

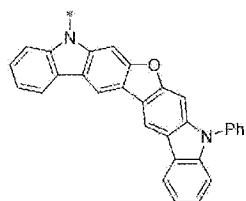
[化9-6]



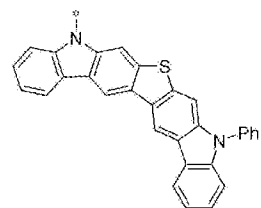
D102



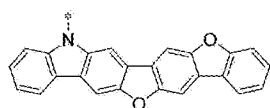
D103



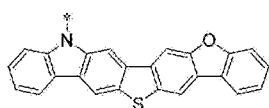
D104



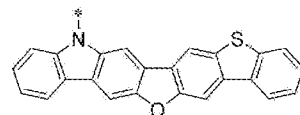
D105



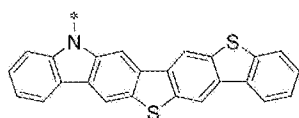
D106



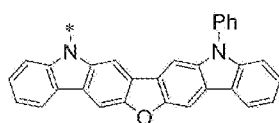
D107



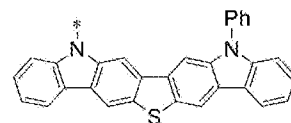
D108



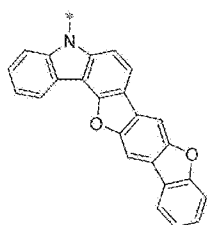
D109



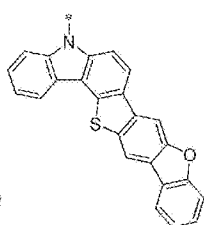
D110



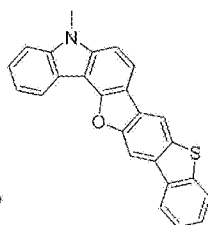
D111



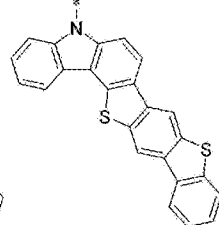
D112



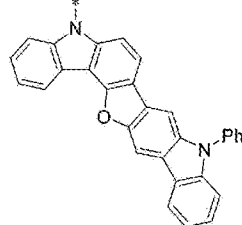
D113



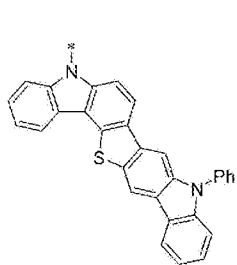
D114



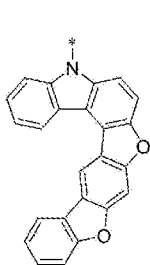
D115



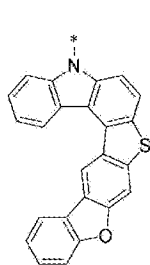
D116



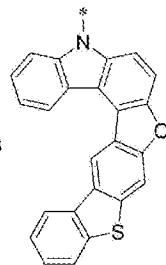
D117



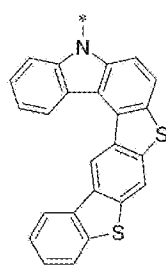
D118



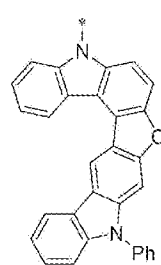
D119



D120

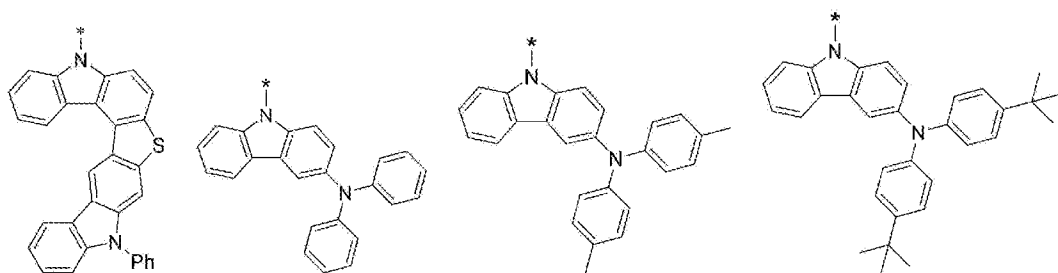


D121



D122

[化9-7]

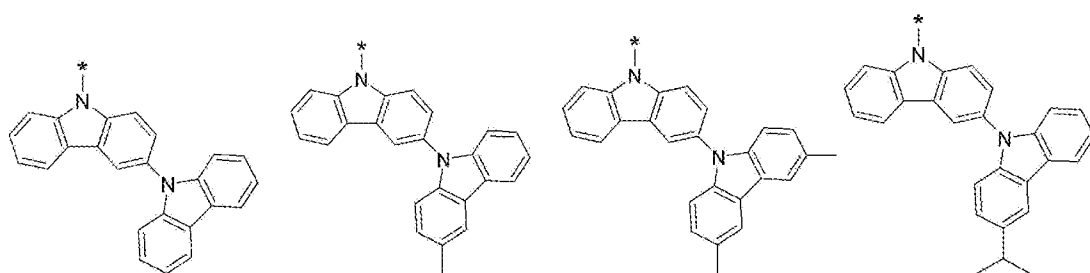


D123

D124

D125

D126

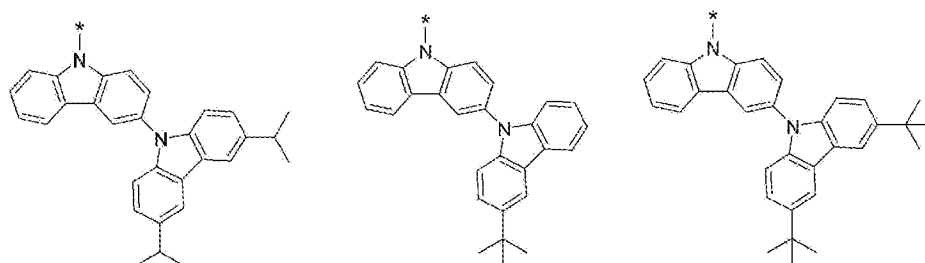


D127

D128

D129

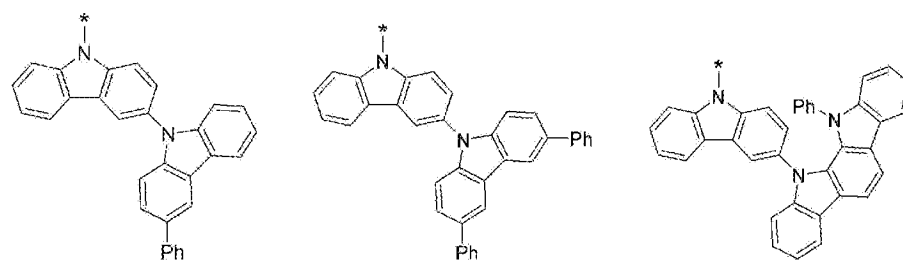
D130



D131

D132

D133

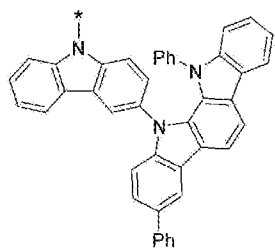


D134

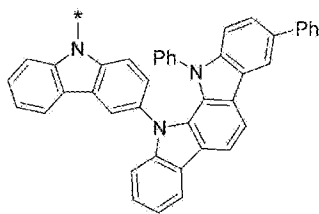
D135

D136

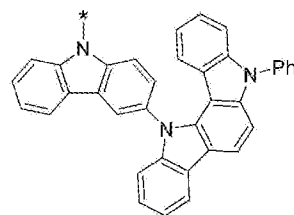
[化9-8]



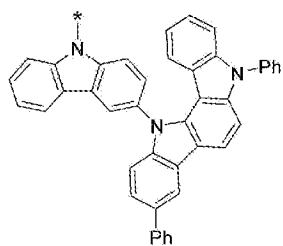
D137



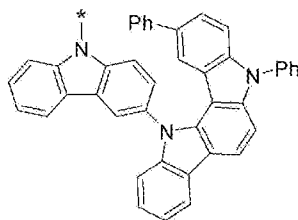
D138



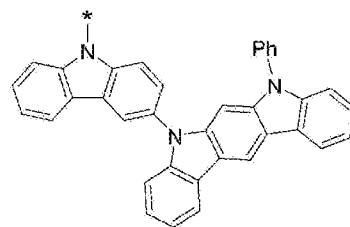
D139



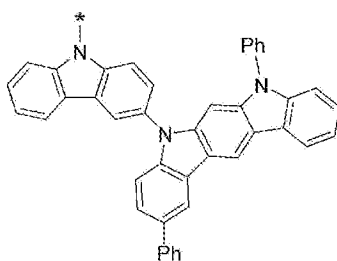
D140



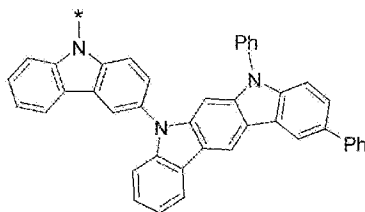
D141



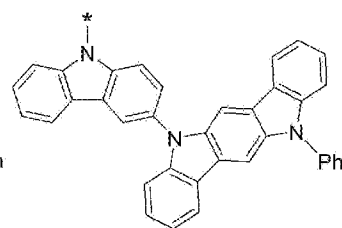
D142



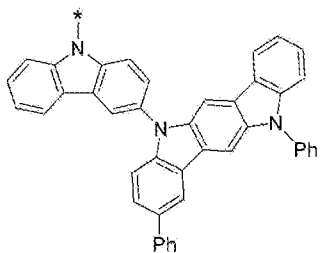
D143



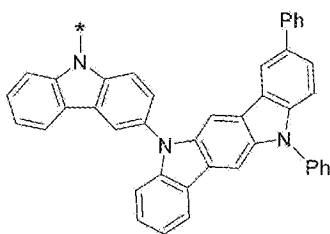
D144



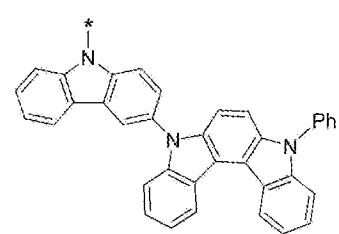
D145



D146

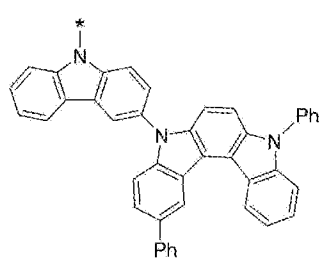


D147

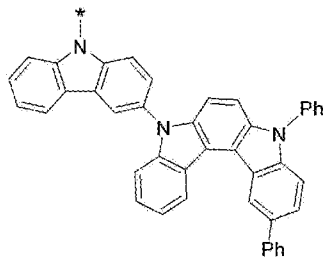


D148

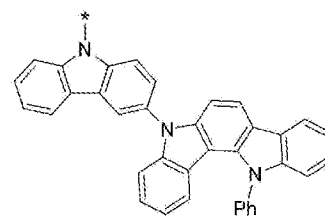
[化9-9]



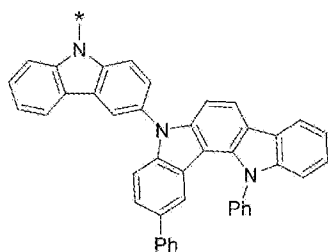
D149



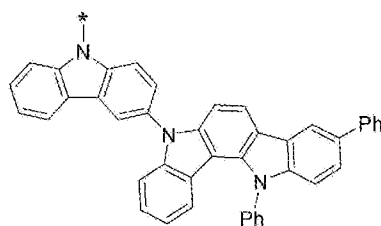
D150



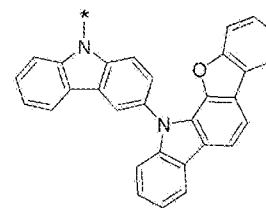
D151



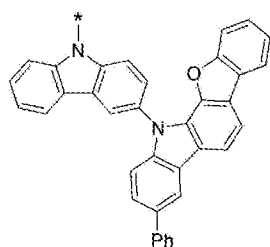
D152



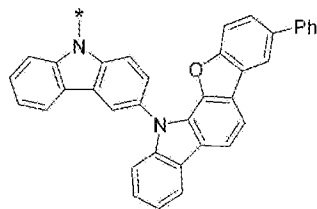
D153



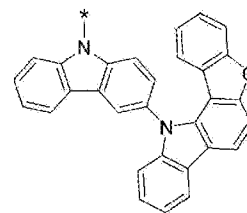
D154



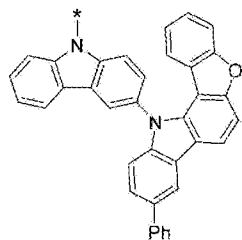
D155



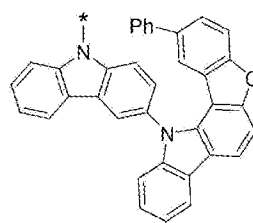
D156



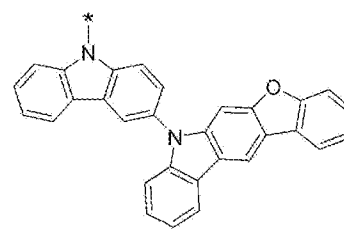
D157



D158

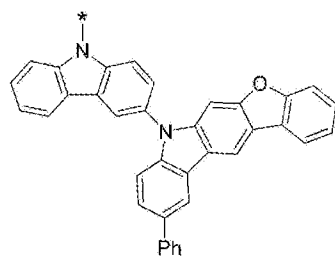


D159

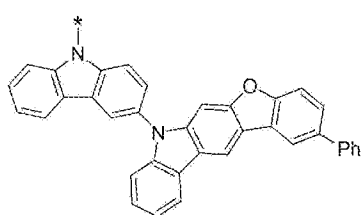


D160

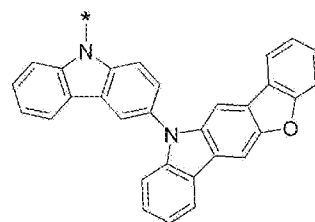
[化9-10]



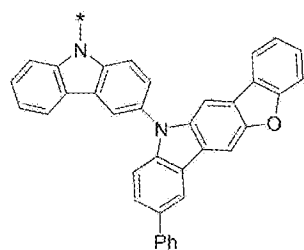
D161



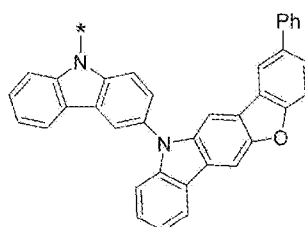
D162



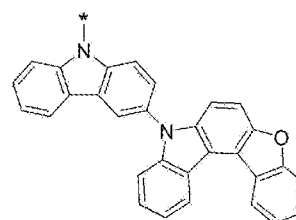
D163



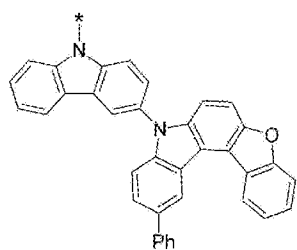
D164



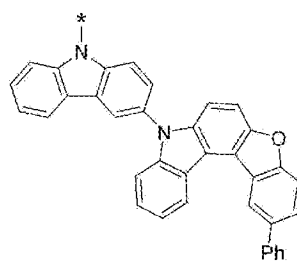
D165



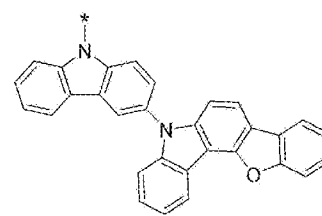
D166



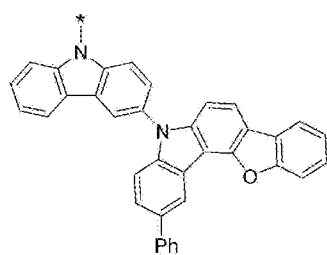
D167



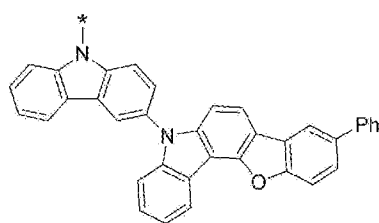
D168



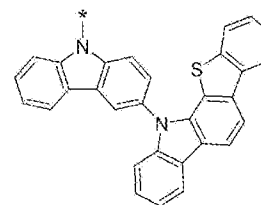
D169



D170

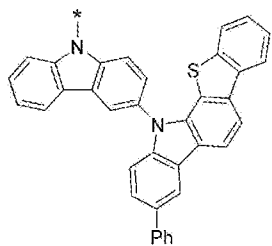


D171

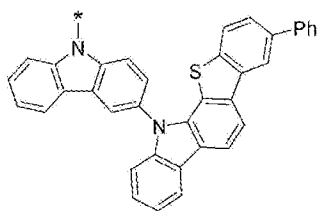


D172

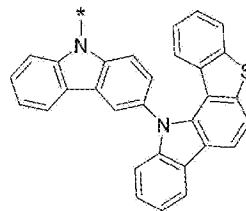
[化9-11]



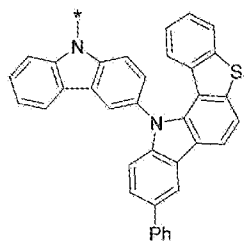
D173



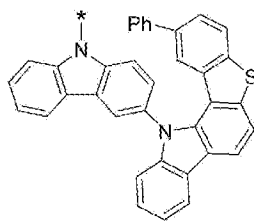
D174



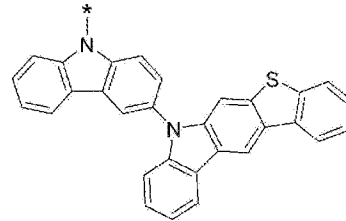
D175



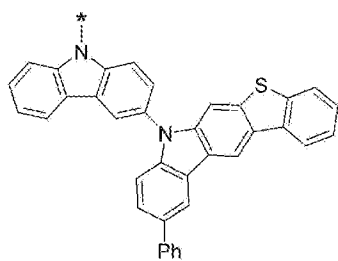
D176



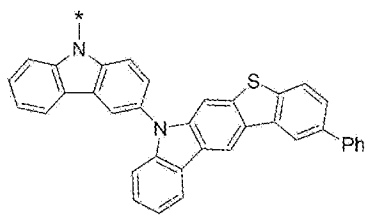
D177



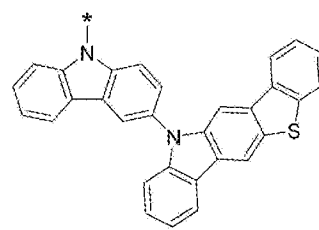
D178



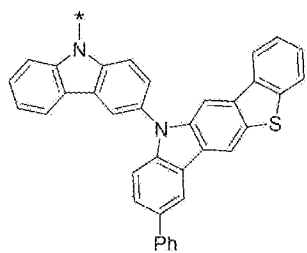
D179



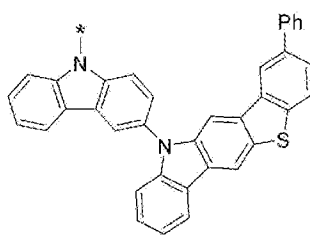
D180



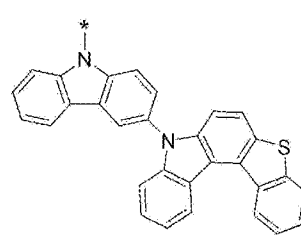
D181



D182

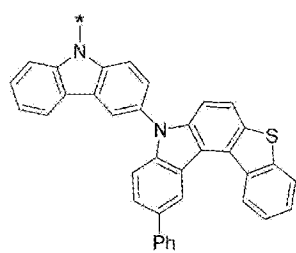


D183

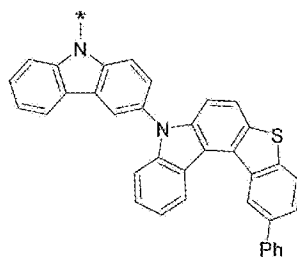


D184

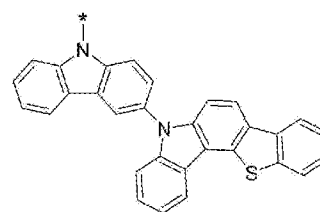
[化9-12]



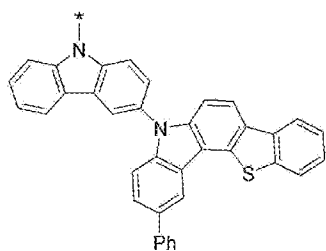
D185



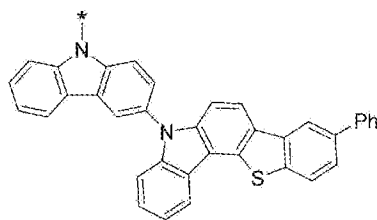
D186



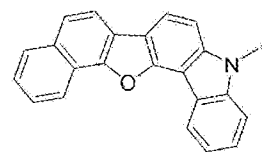
D187



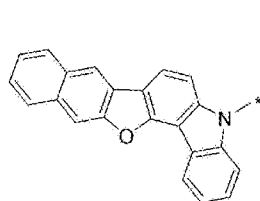
D188



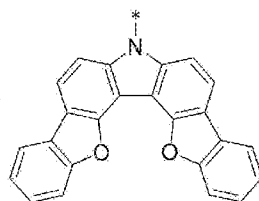
D189



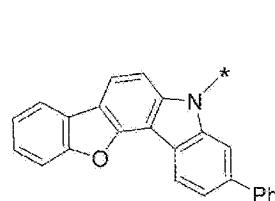
D190



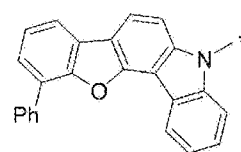
D191



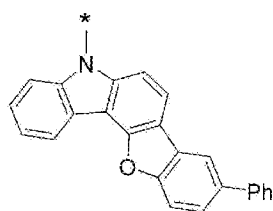
D192



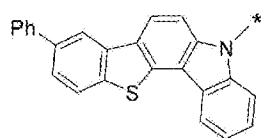
D193



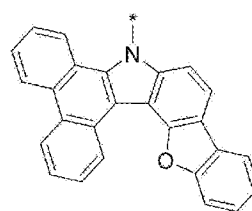
D194



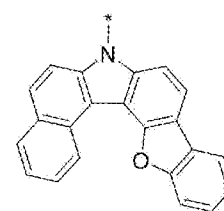
D195



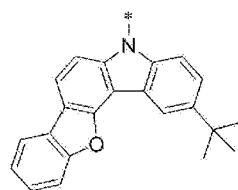
D196



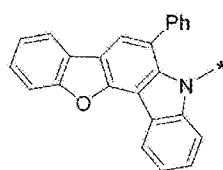
D197



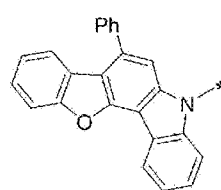
D198



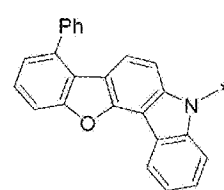
D199



D200

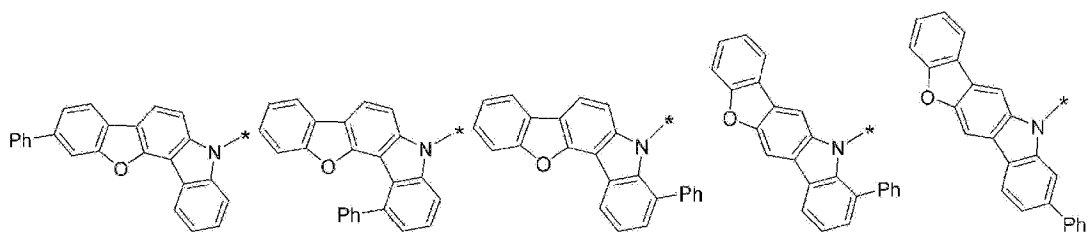


D201



D202

[化9-13]



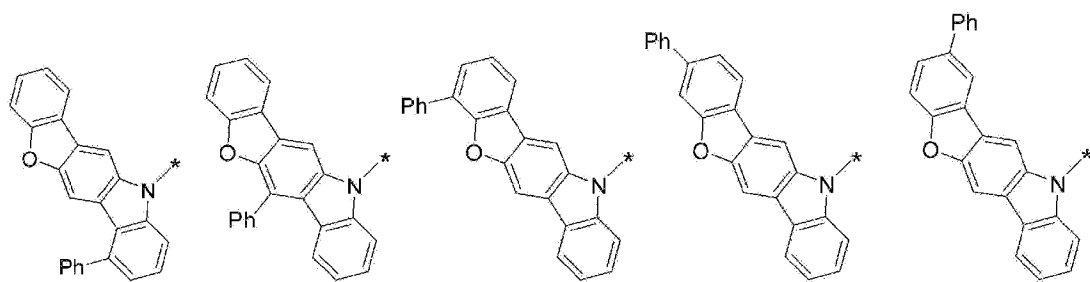
D203

D204

D205

D206

D207



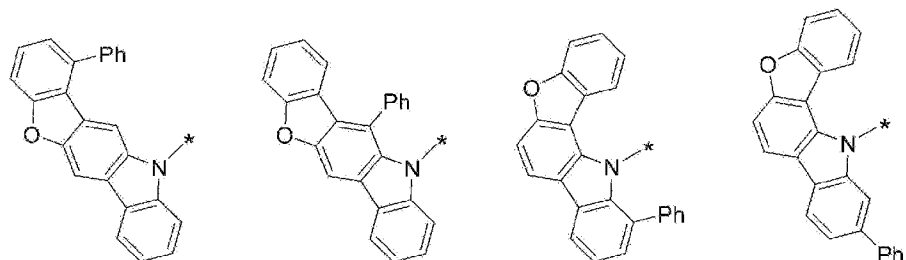
D208

D209

D210

D211

D212

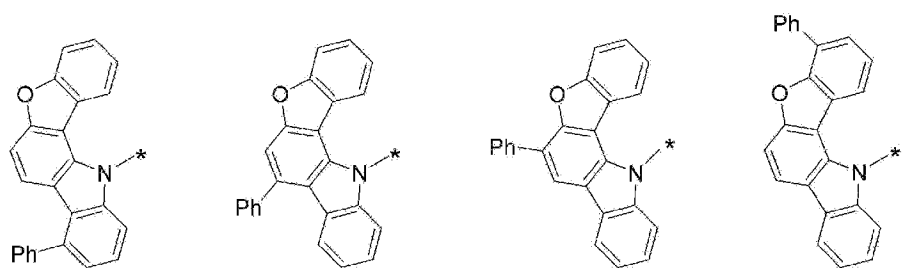


D213

D214

D215

D216



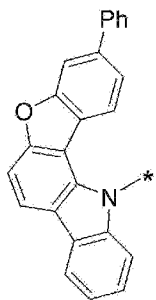
D217

D218

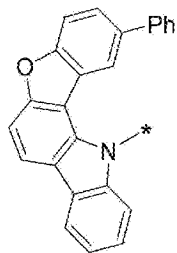
D219

D220

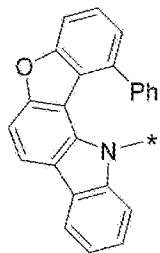
[化9-14]



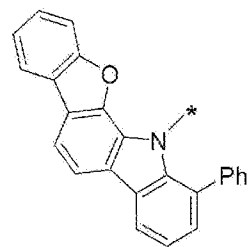
D221



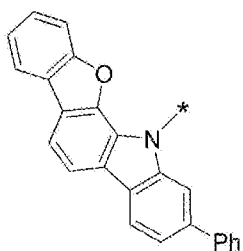
D222



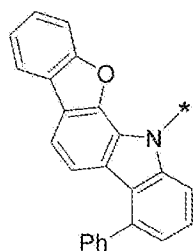
D223



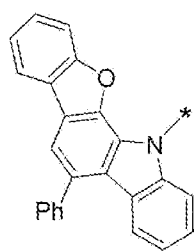
D224



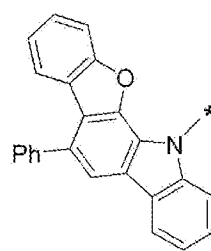
D225



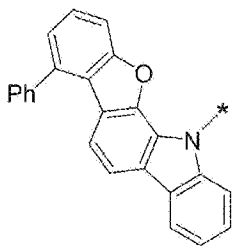
D226



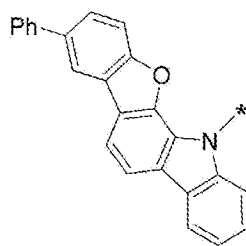
D227



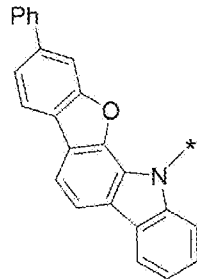
D228



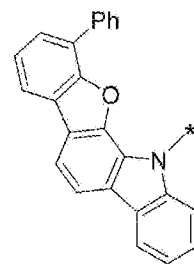
D229



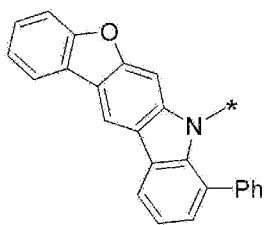
D230



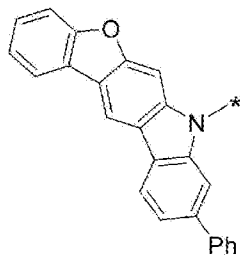
D231



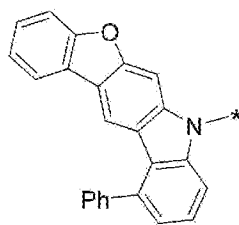
D232



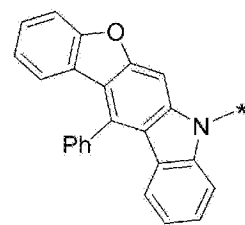
D233



D234

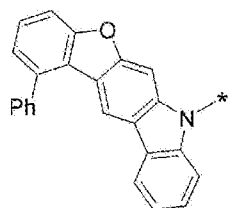


D235

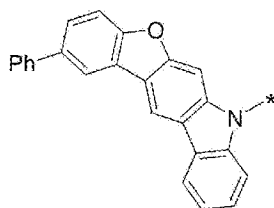


D236

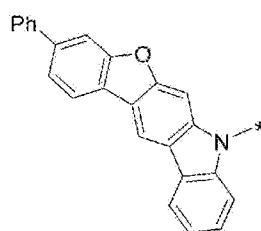
[化9-15]



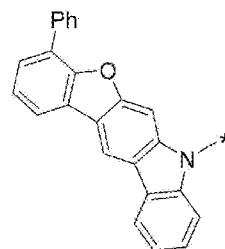
D237



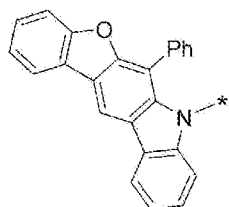
D238



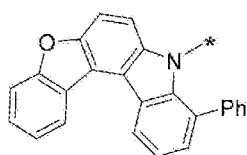
D239



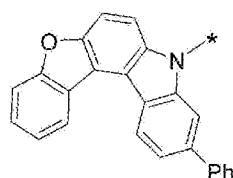
D240



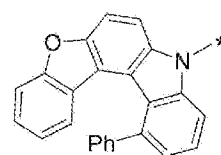
D241



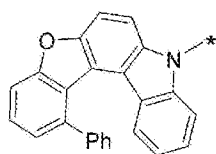
D242



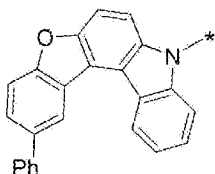
D243



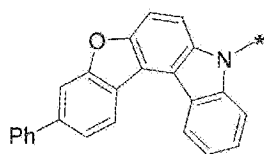
D244



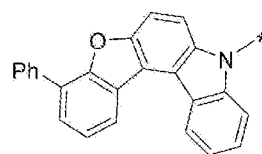
D245



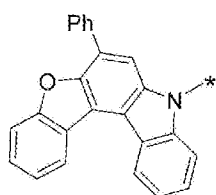
D246



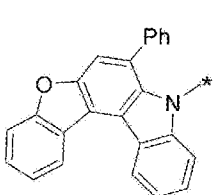
D247



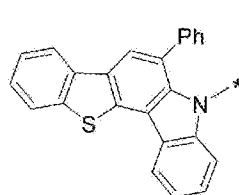
D248



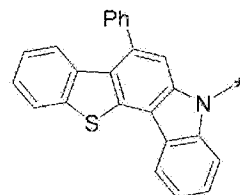
D249



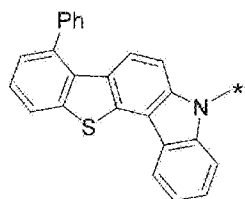
D250



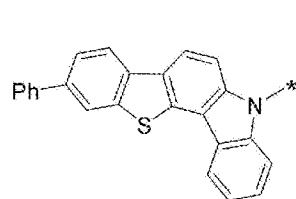
D251



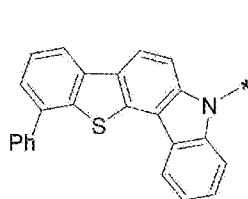
D252



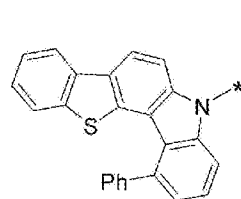
D253



D254

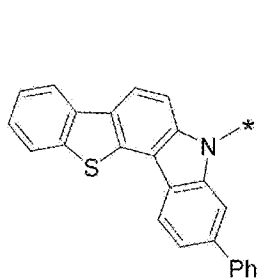


D255

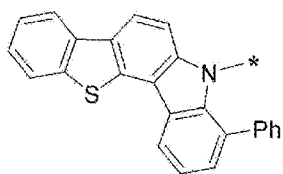


D256

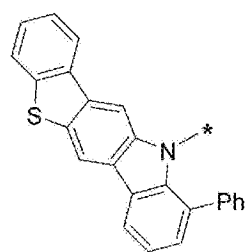
[化9-16]



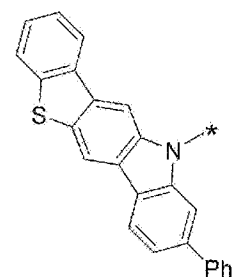
D257



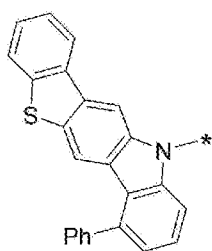
D258



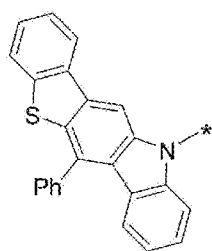
D259



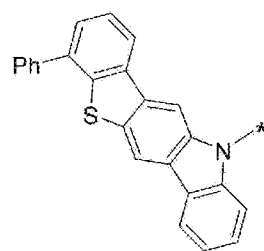
D260



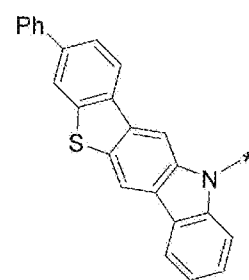
D261



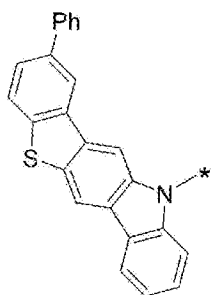
D262



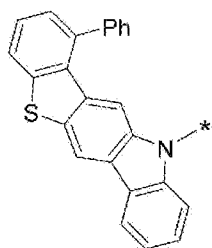
D263



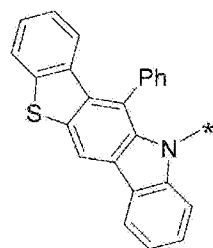
D264



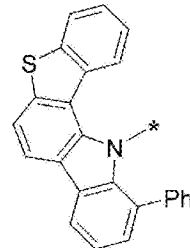
D265



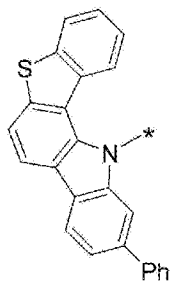
D266



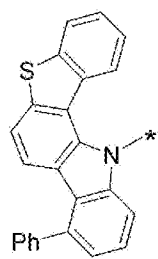
D267



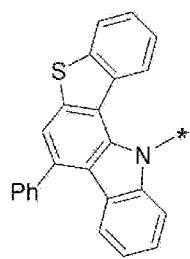
D268



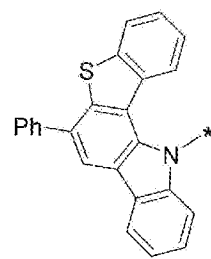
D269



D270

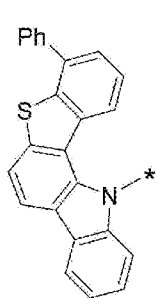


D271

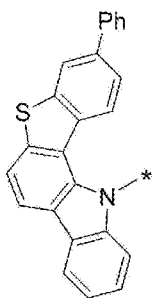


D272

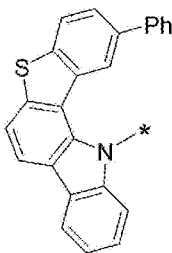
[化9-17]



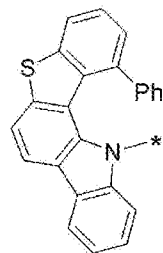
D273



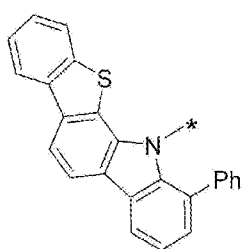
D274



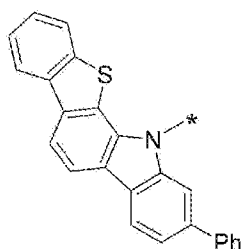
D275



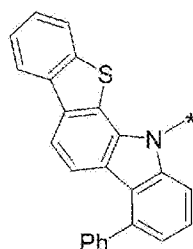
D276



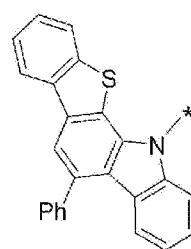
D277



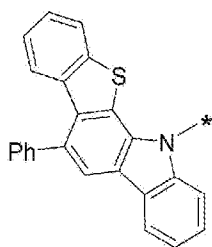
D278



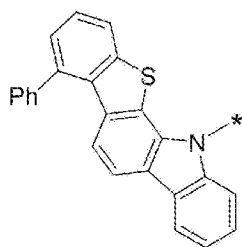
D279



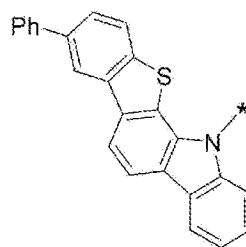
D280



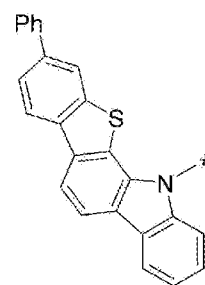
D281



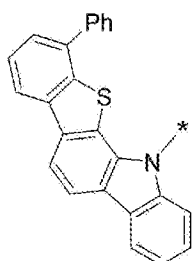
D282



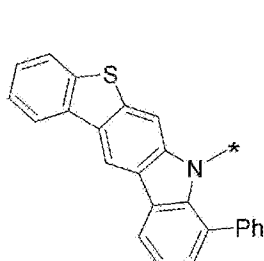
D283



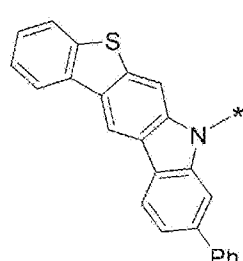
D284



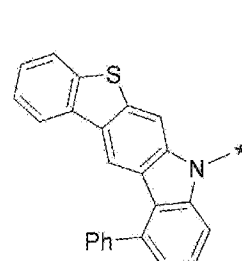
D285



D286

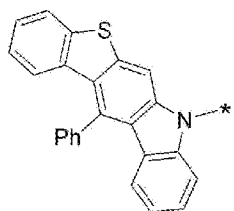


D287

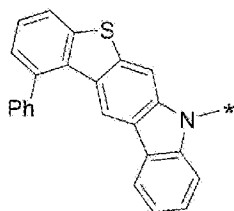


D288

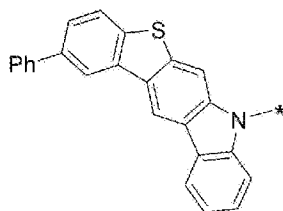
[化9-18]



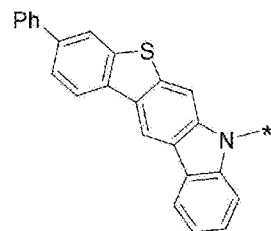
D289



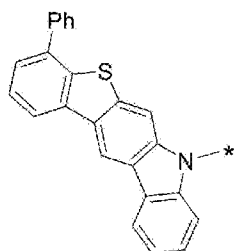
D290



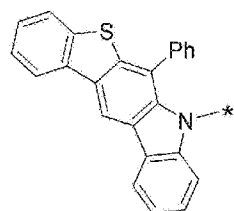
D291



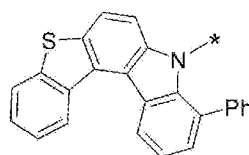
D292



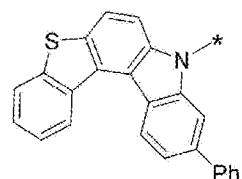
D293



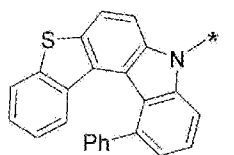
D294



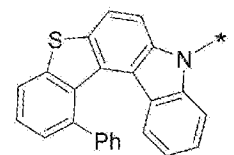
D295



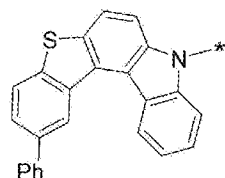
D296



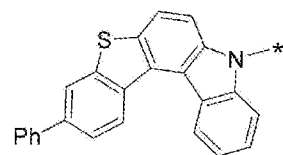
D297



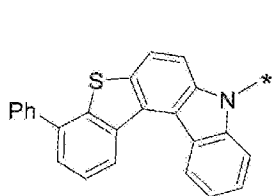
D298



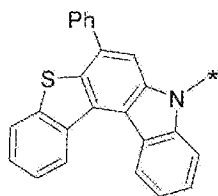
D299



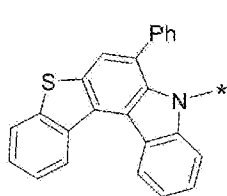
D300



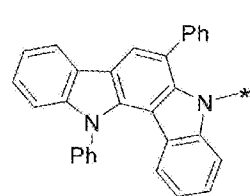
D301



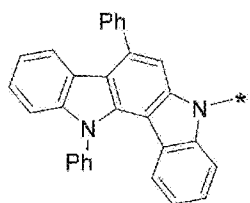
D302



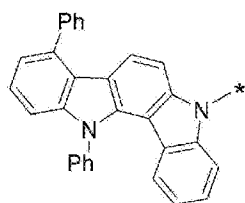
D303



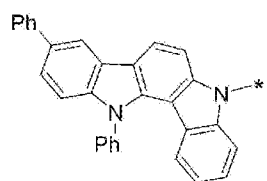
D304



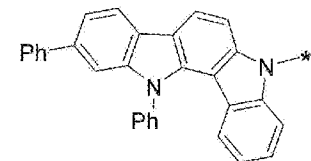
D305



D306

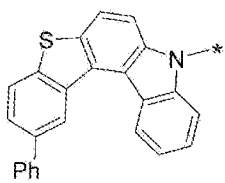


D307

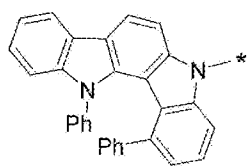


D308

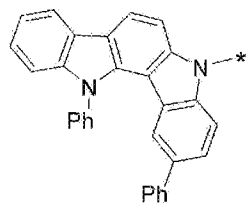
[化9-19]



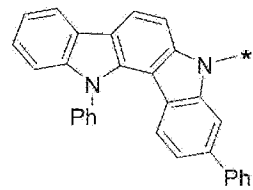
D309



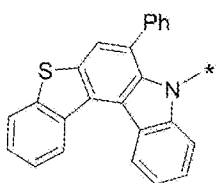
D310



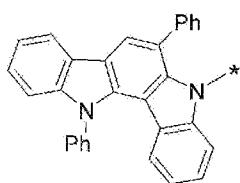
D311



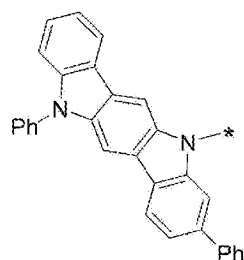
D312



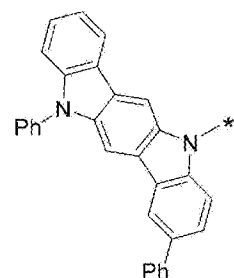
D313



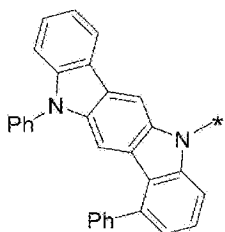
D314



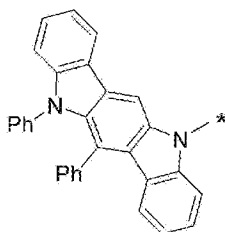
D315



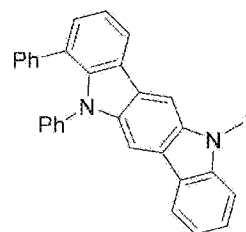
D316



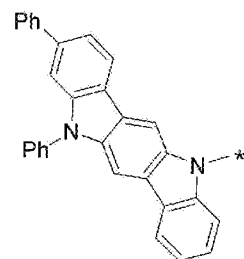
D317



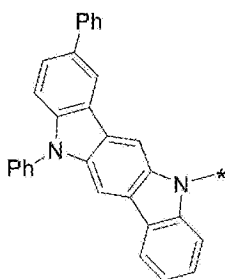
D318



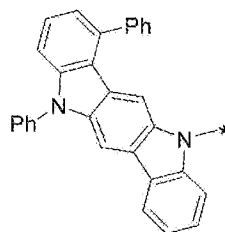
D319



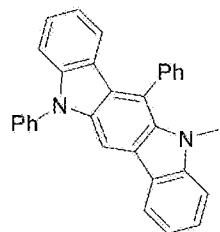
D320



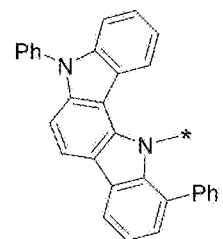
D321



D322

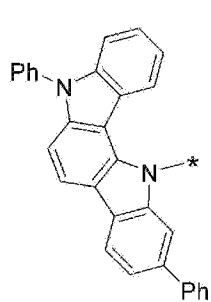


D323

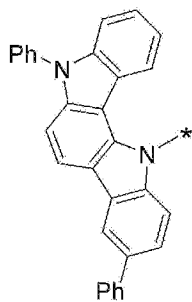


D324

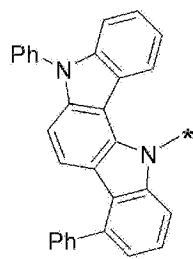
[化9-20]



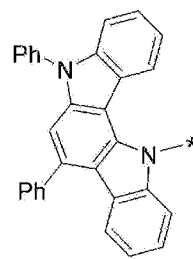
D325



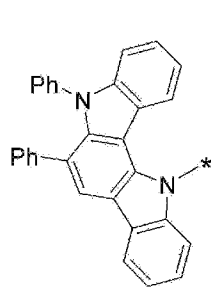
D326



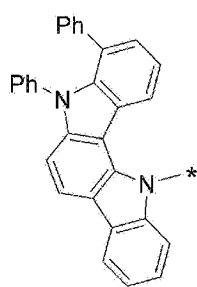
D327



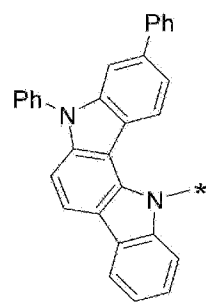
D328



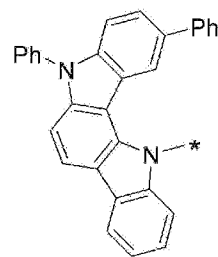
D329



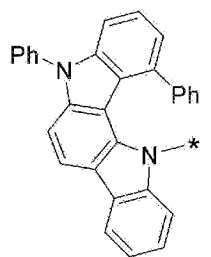
D330



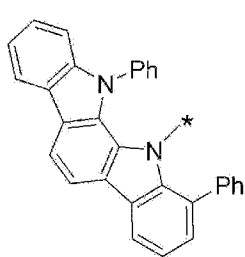
D331



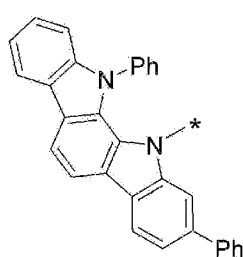
D332



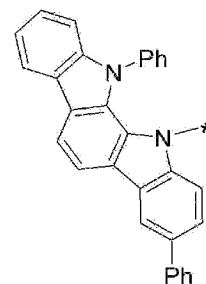
D333



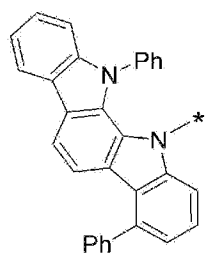
D334



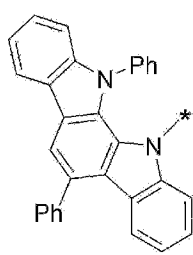
D335



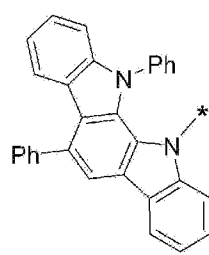
D336



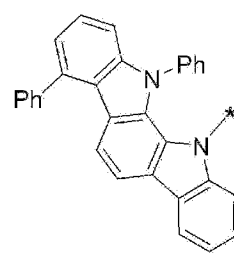
D337



D338

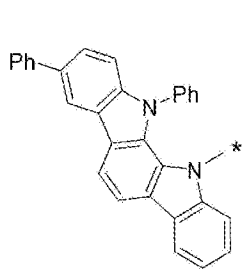


D339

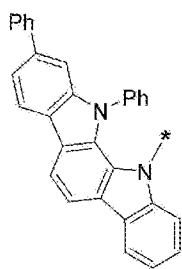


D340

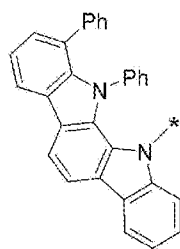
[化9-21]



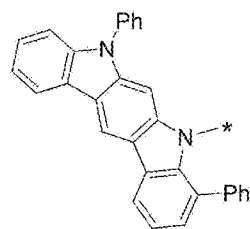
D341



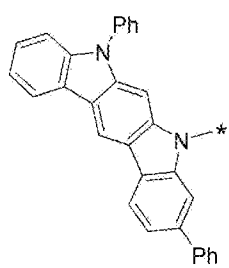
D342



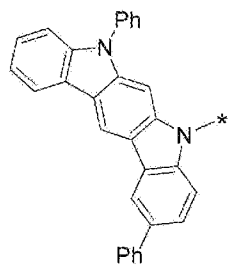
D343



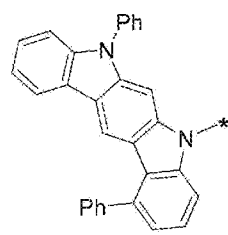
D344



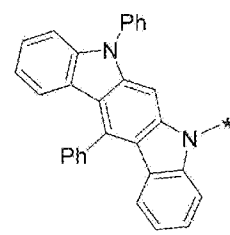
D345



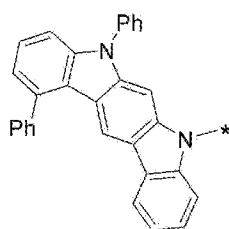
D346



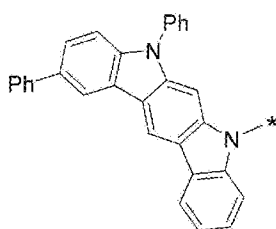
D347



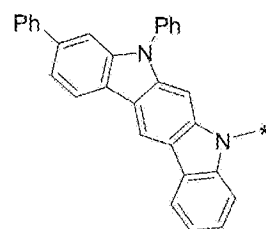
D348



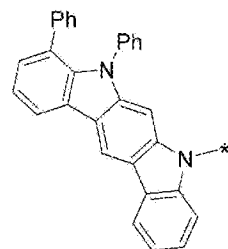
D349



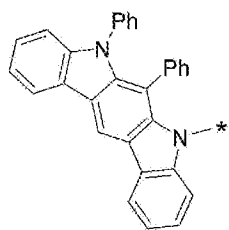
D350



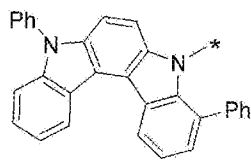
D351



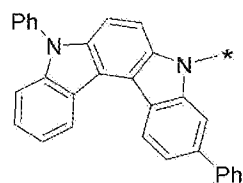
D352



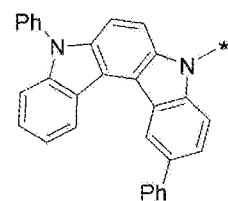
D353



D354

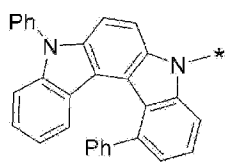


D355

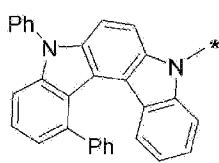


D356

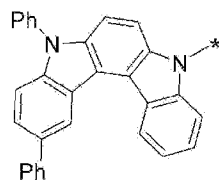
[化9-22]



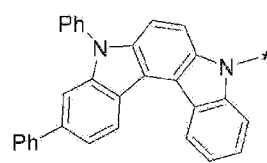
D357



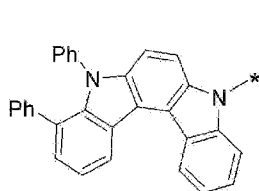
D358



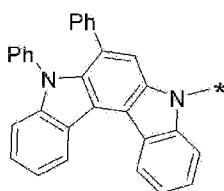
D359



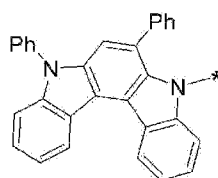
D360



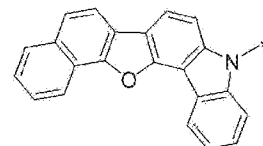
D361



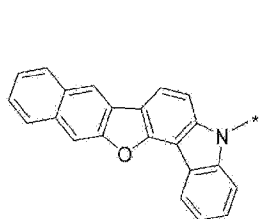
D362



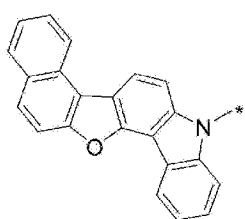
D363



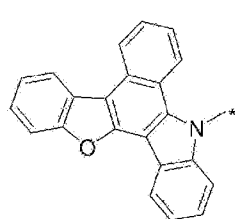
D364



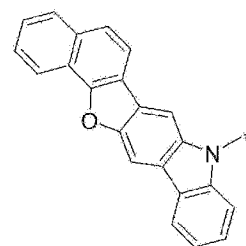
D365



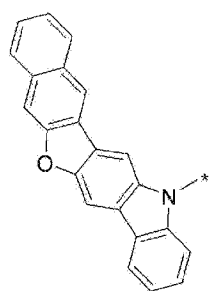
D366



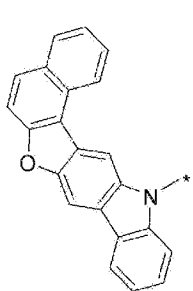
D367



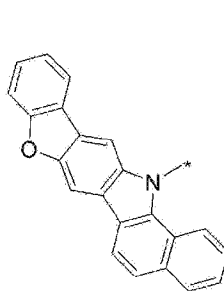
D368



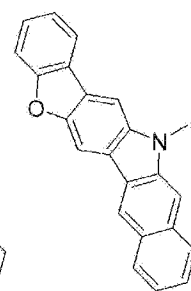
D369



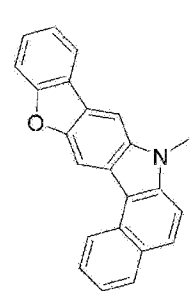
D370



D371

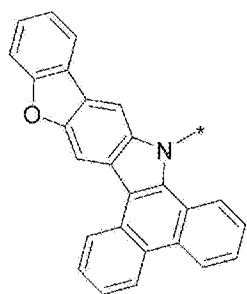


D372

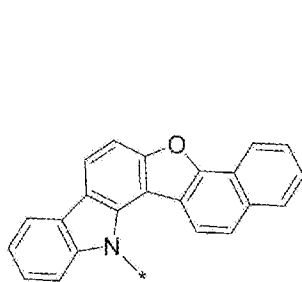


D373

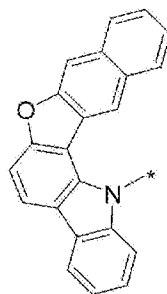
[化9-23]



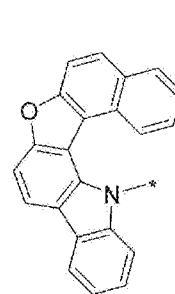
D374



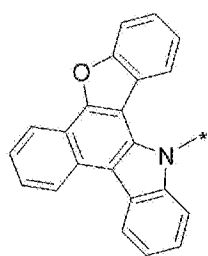
D375



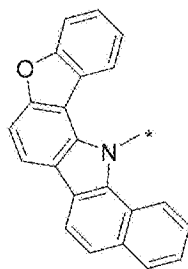
D376



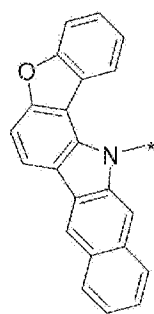
D377



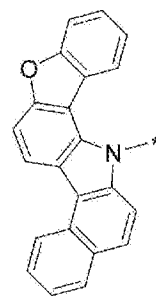
D378



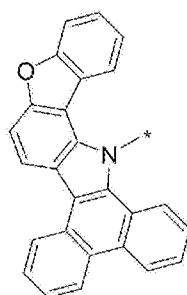
D379



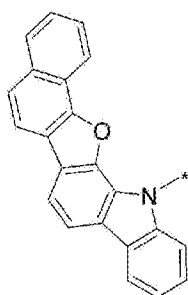
D380



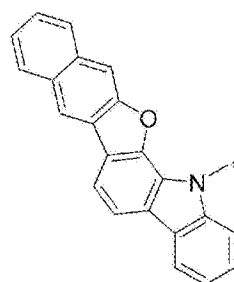
D381



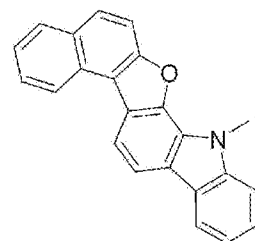
D382



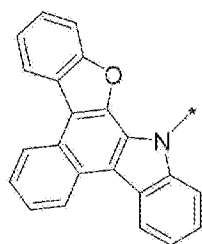
D383



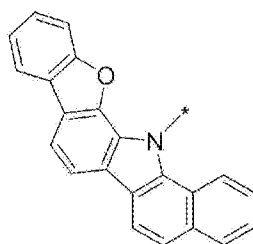
D384



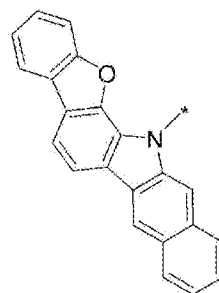
D385



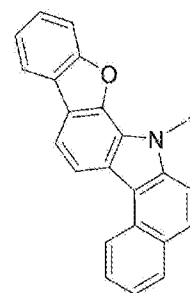
D386



D387

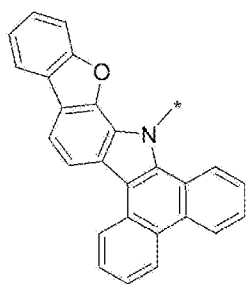


D388

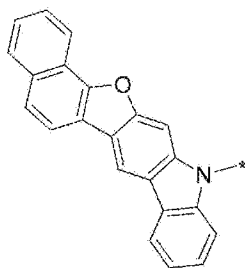


D389

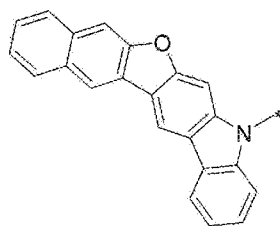
[化9-24]



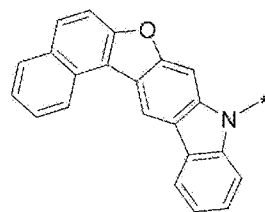
D390



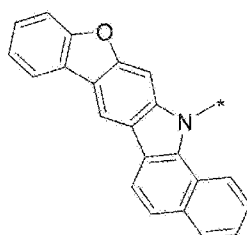
D391



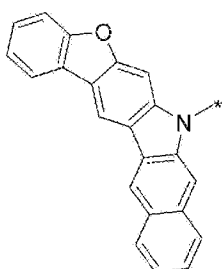
D392



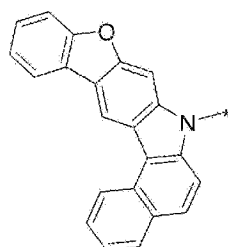
D393



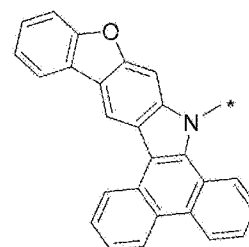
D394



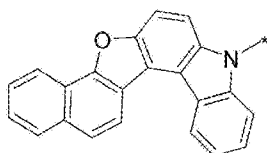
D395



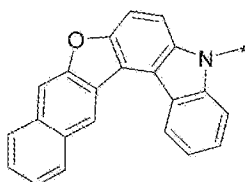
D396



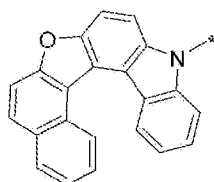
D397



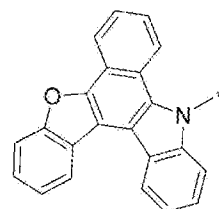
D398



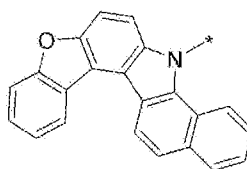
D399



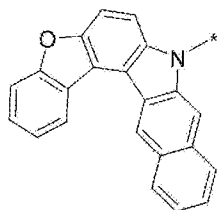
D400



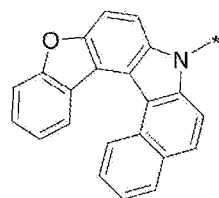
D401



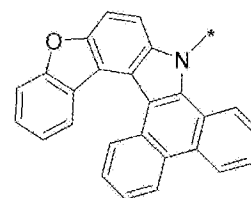
D402



D403

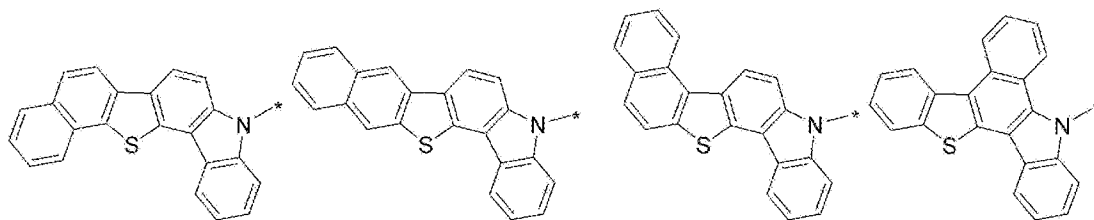


D404



D405

[化9-25]

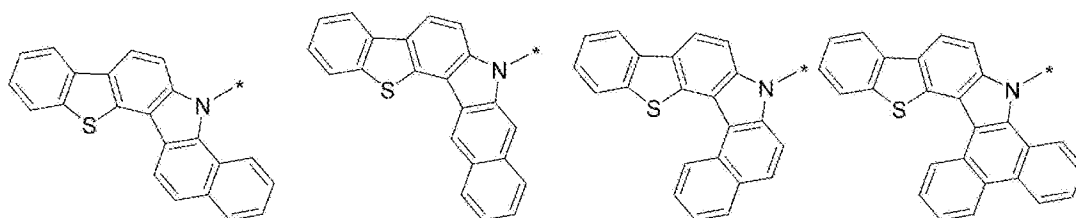


D406

D407

D408

D409

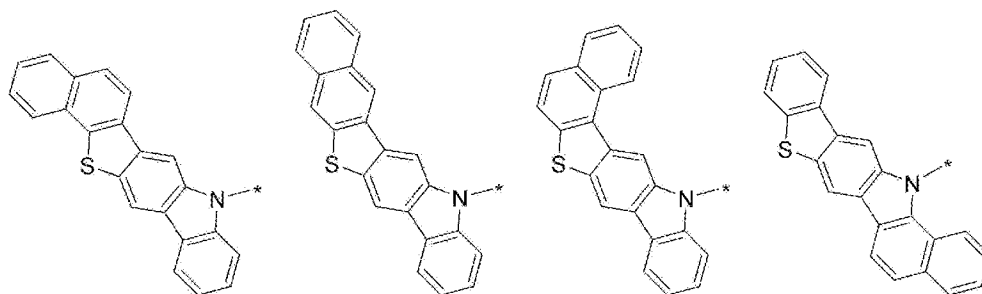


D410

D411

D412

D413

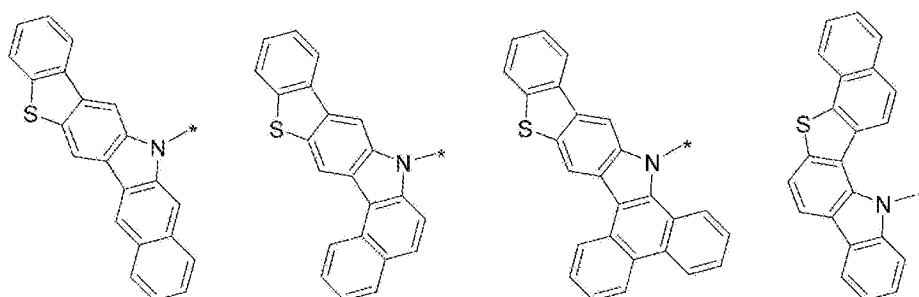


D414

D415

D416

D417



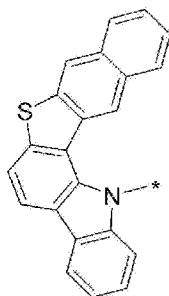
D418

D419

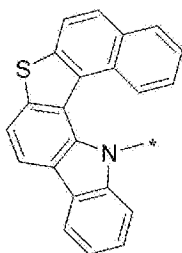
D420

D421

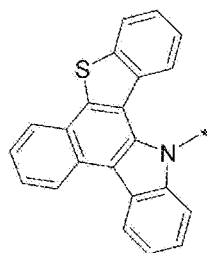
[化9-26]



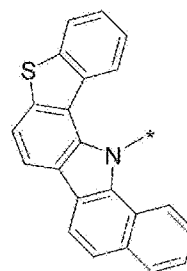
D422



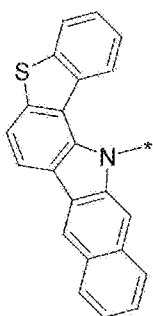
D423



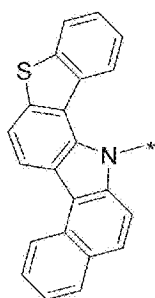
D424



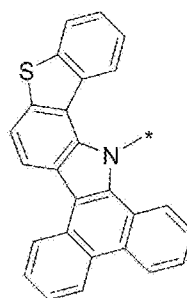
D425



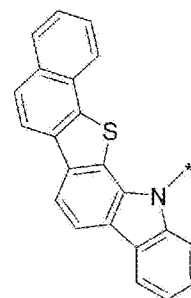
D426



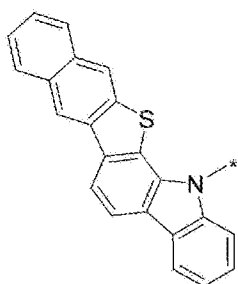
D427



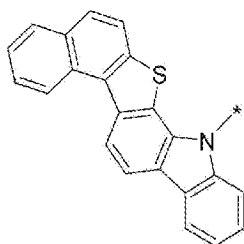
D428



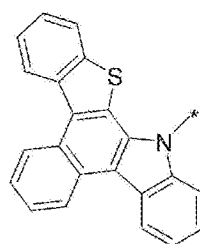
D429



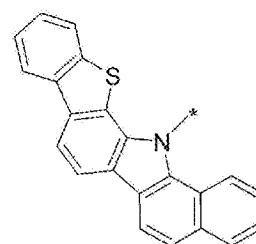
D430



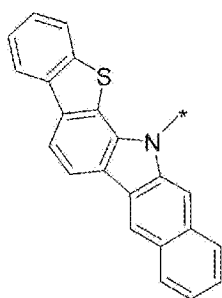
D431



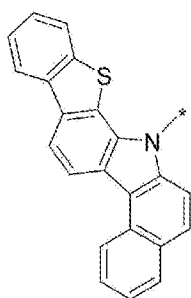
D432



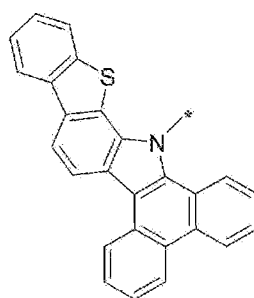
D433



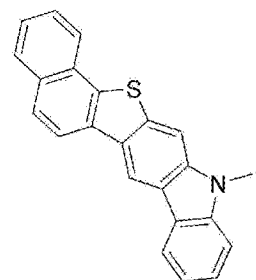
D434



D435

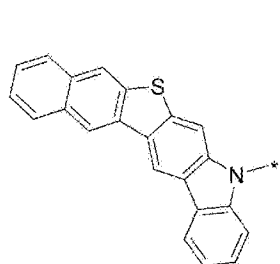


D436

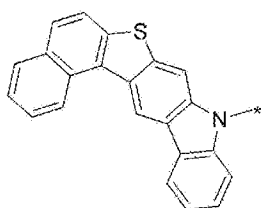


D437

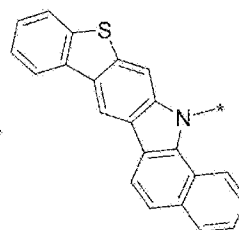
[化9-27]



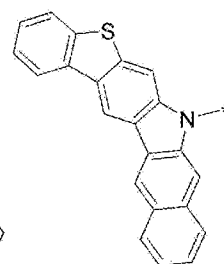
D438



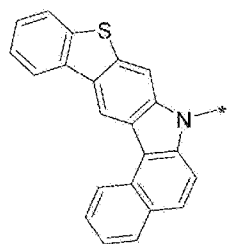
D439



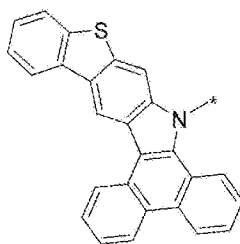
D440



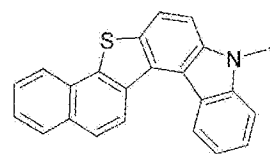
D441



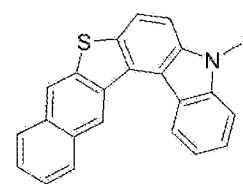
D442



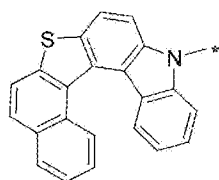
D443



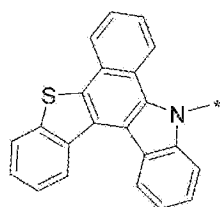
D444



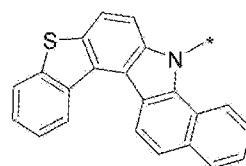
D445



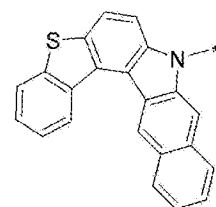
D446



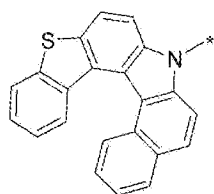
D447



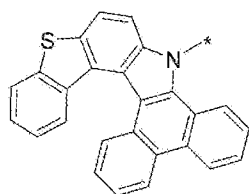
D448



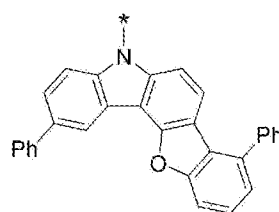
D449



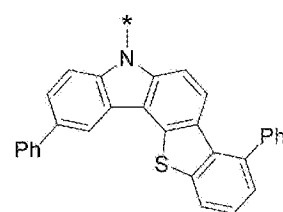
D450



D451

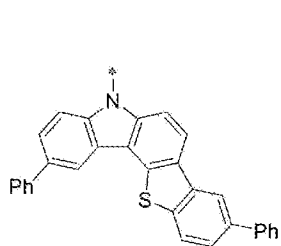


D452

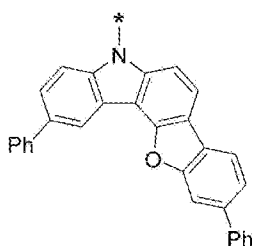


D453

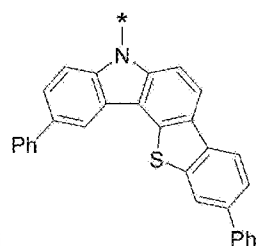
[化9-28]



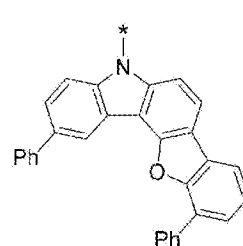
D454



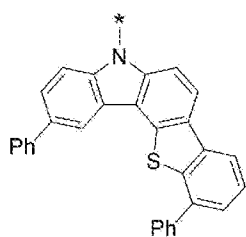
D455



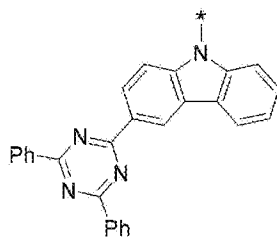
D456



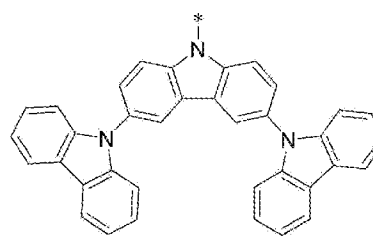
D457



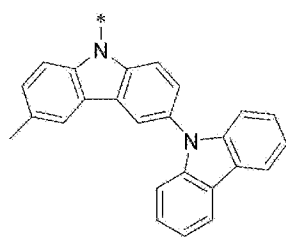
D458



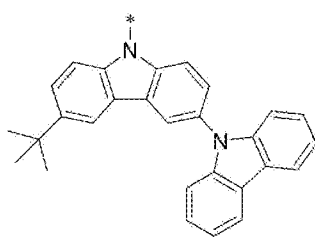
D459



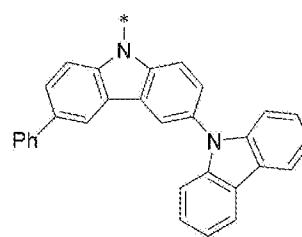
D460



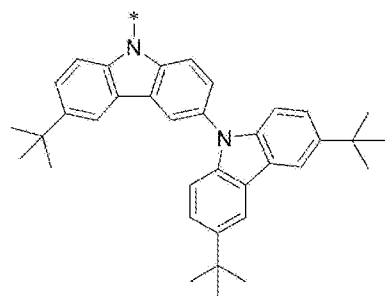
D461



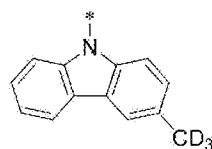
D462



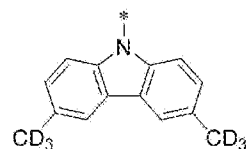
D463



D464

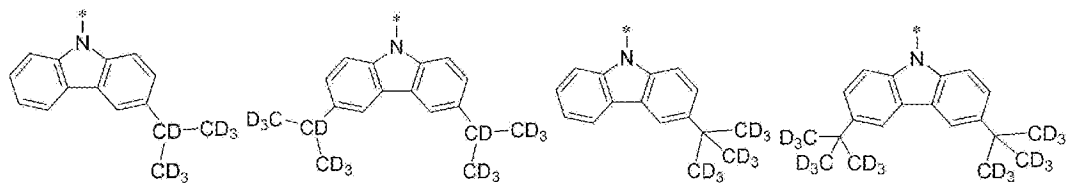


D465



D466

[化9-29]

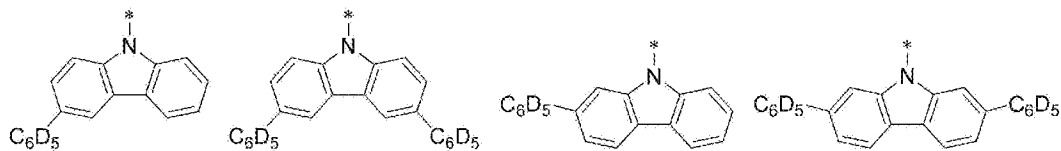


D467

D468

D469

D470

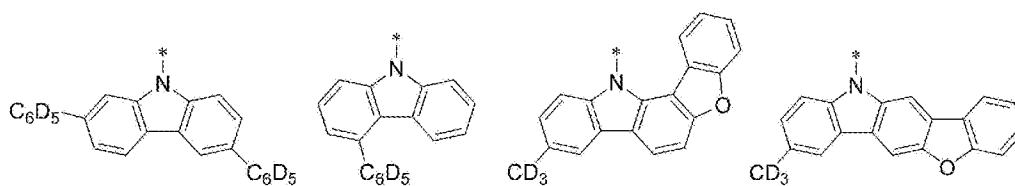


D471

D472

D473

D474

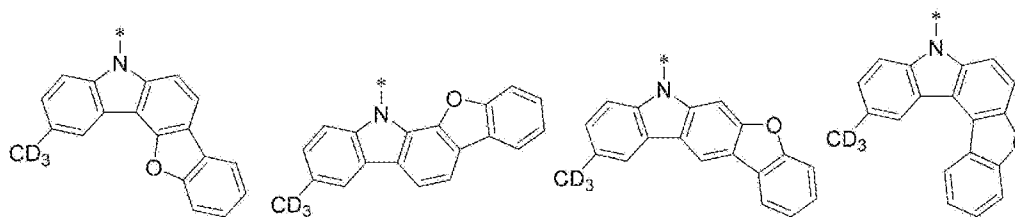


D475

D476

D477

D478

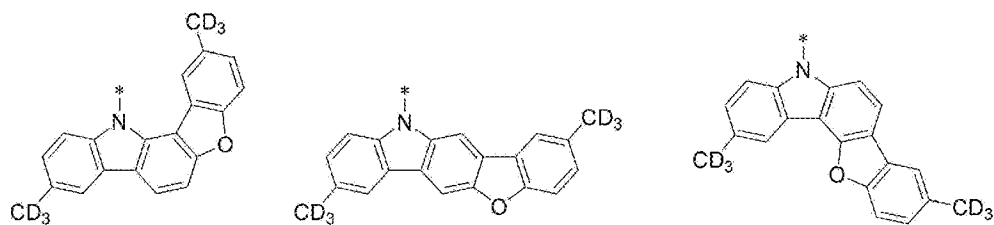


D479

D480

D481

D482

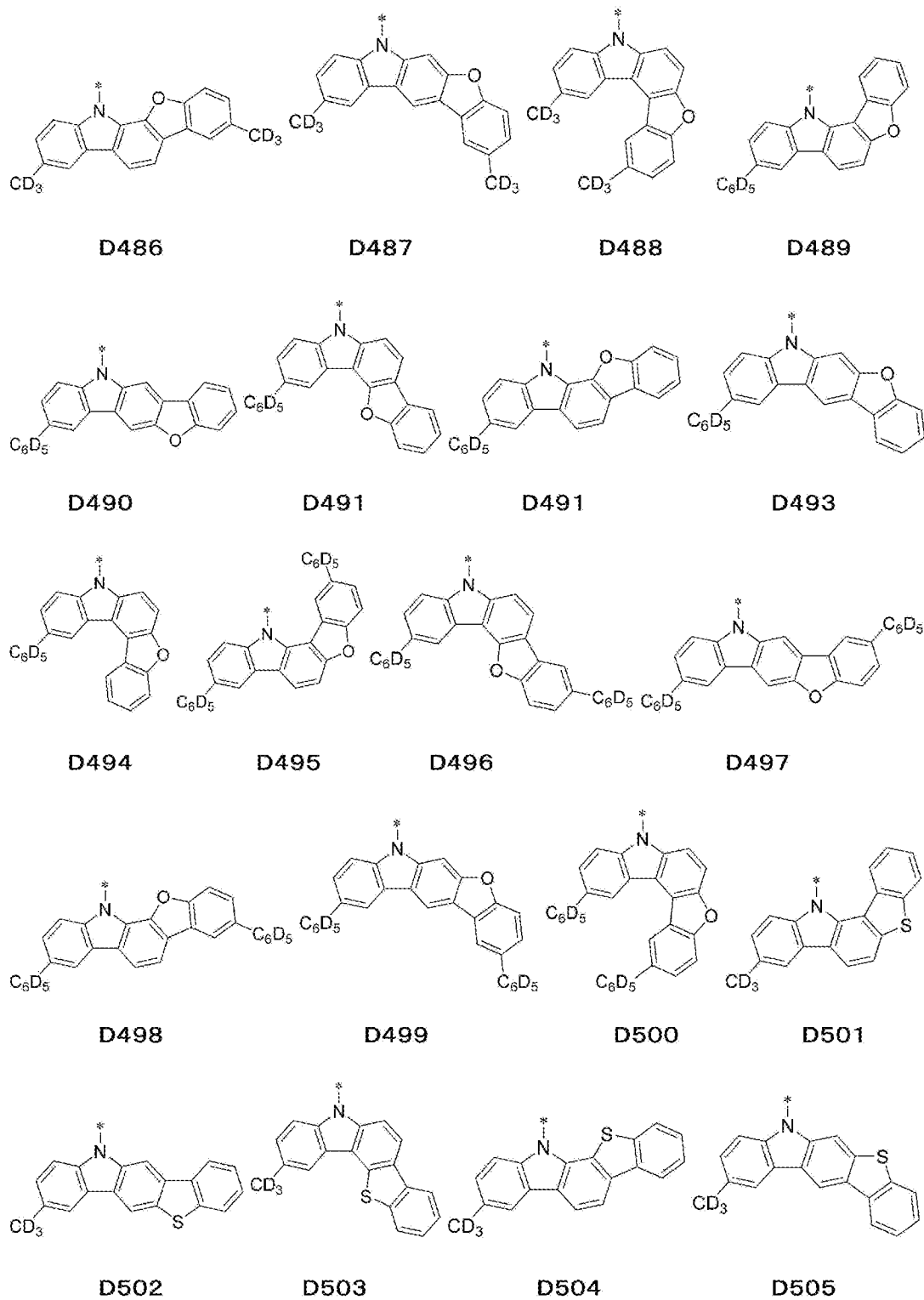


D483

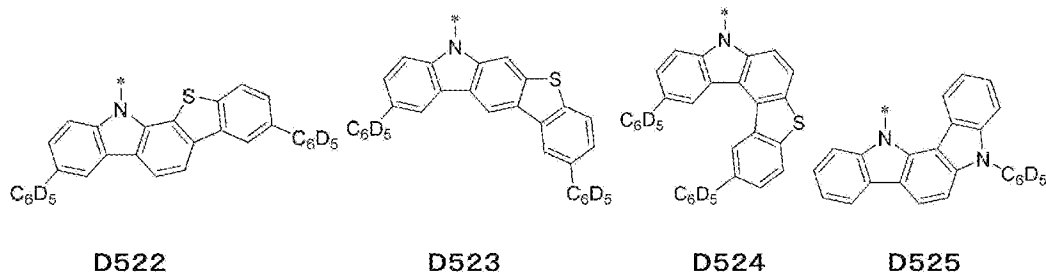
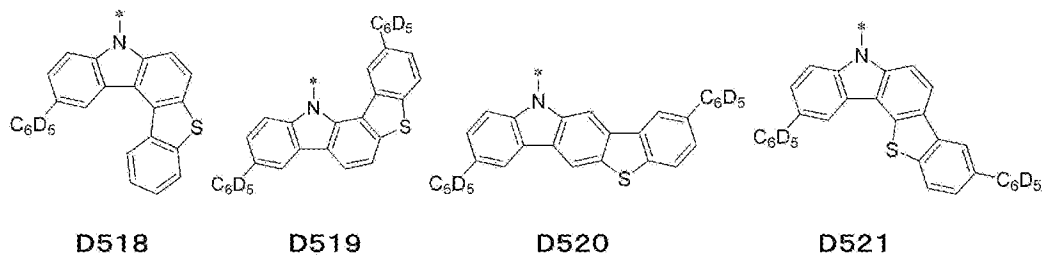
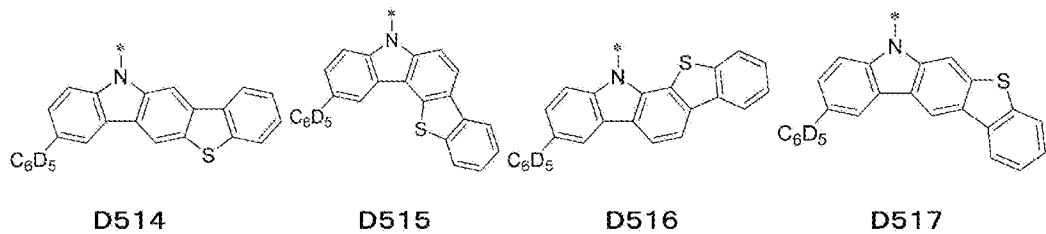
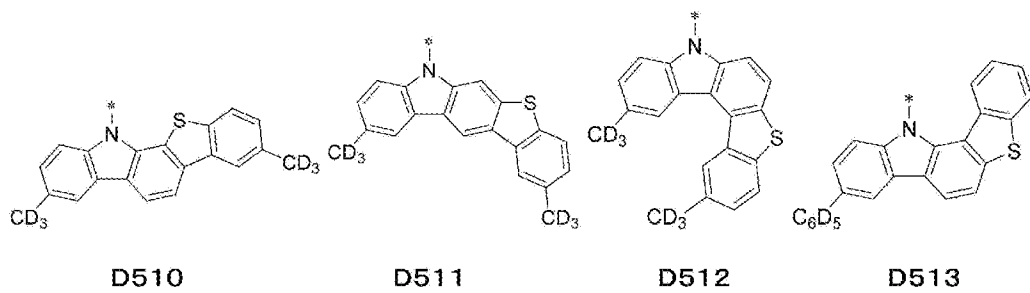
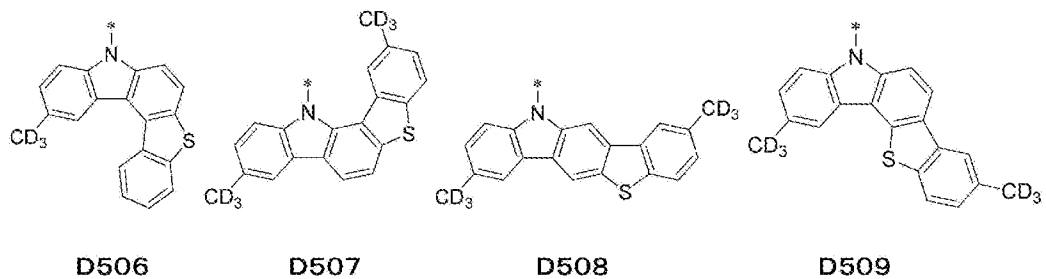
D484

D485

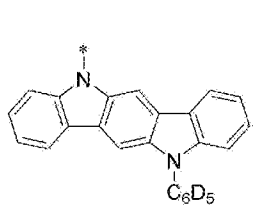
[化9-30]



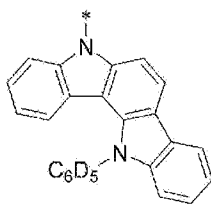
[化9-31]



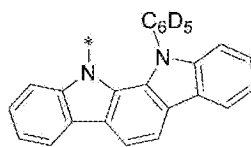
[化9-32]



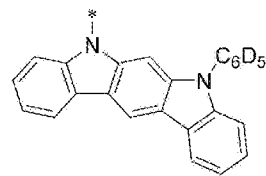
D526



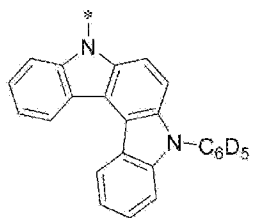
D527



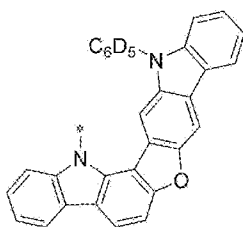
D528



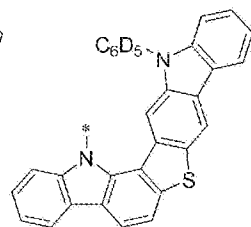
D529



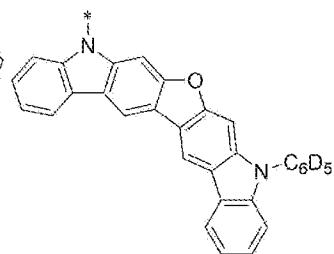
D530



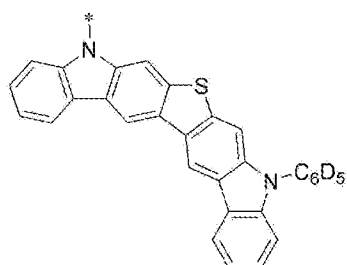
D531



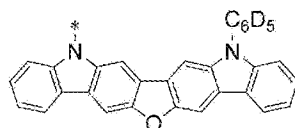
D532



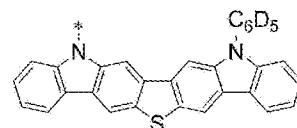
D533



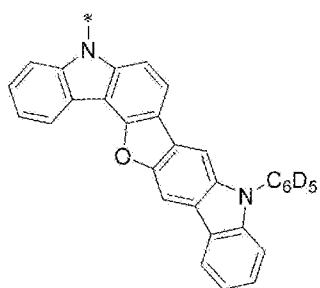
D534



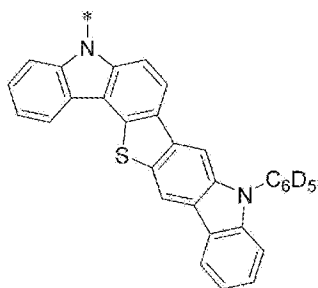
D535



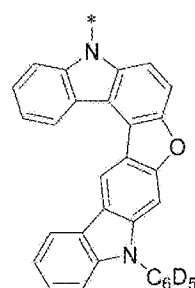
D536



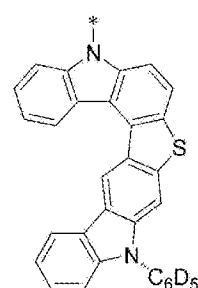
D537



D538

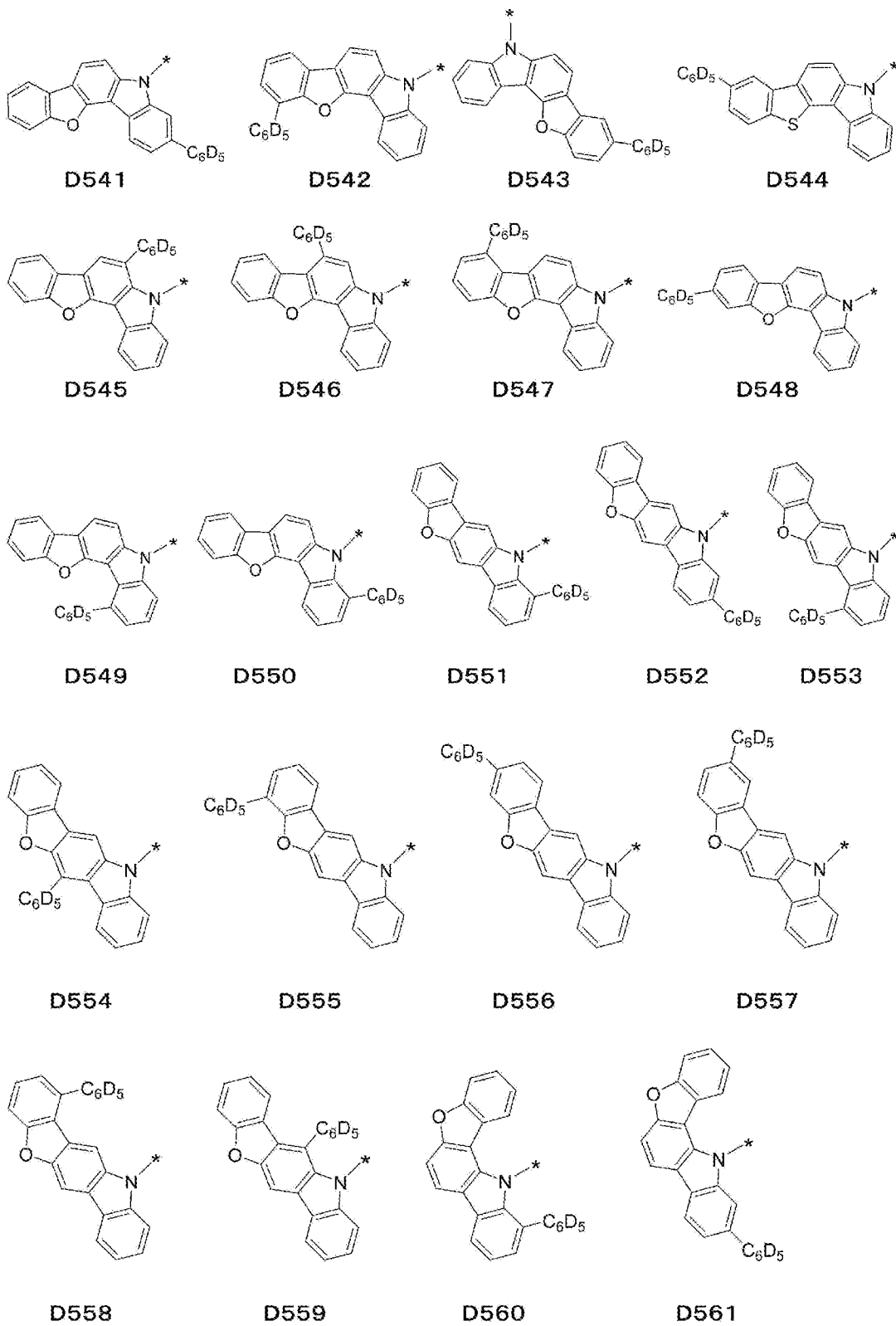


D539

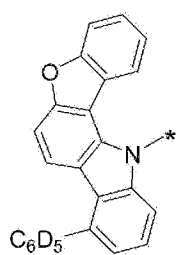


D540

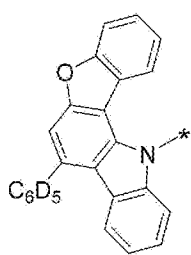
[化9-33]



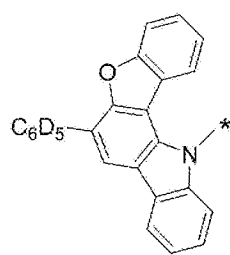
[化9-34]



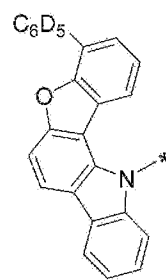
D562



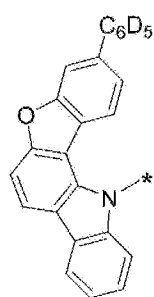
D563



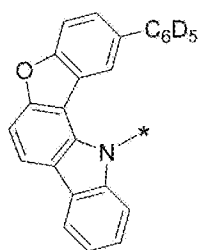
D564



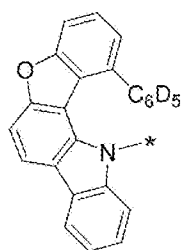
D565



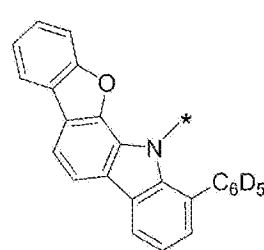
D566



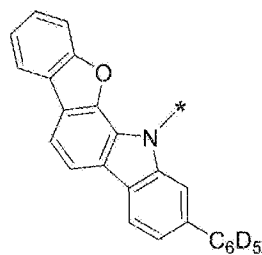
D567



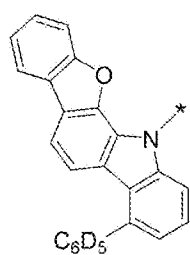
D568



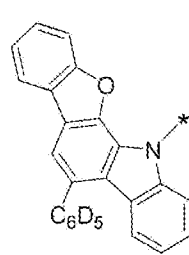
D569



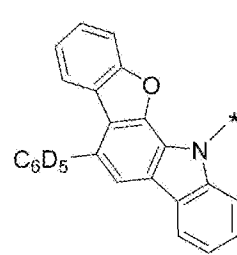
D570



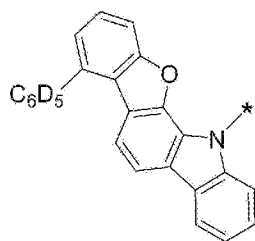
D571



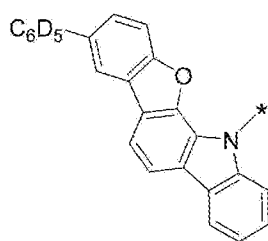
D572



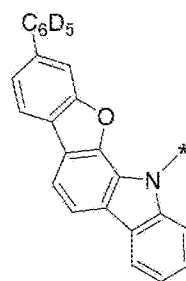
D573



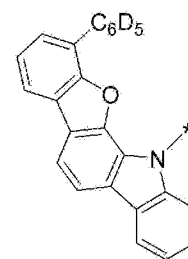
D574



D575

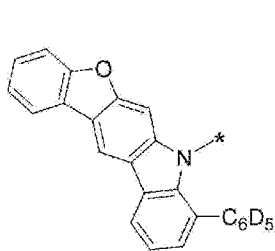


D576

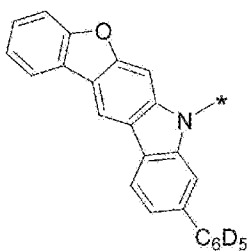


D577

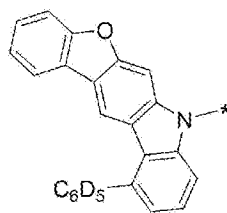
[化9-35]



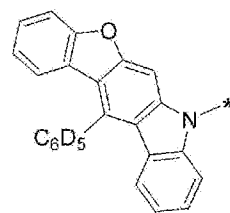
D578



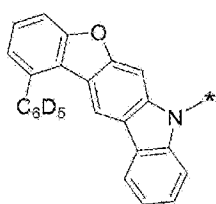
D579



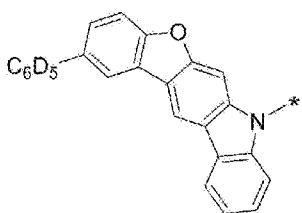
D580



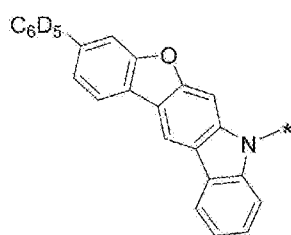
D581



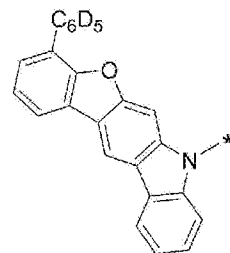
D582



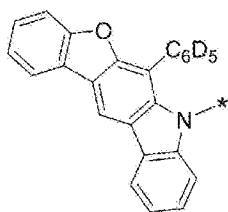
D583



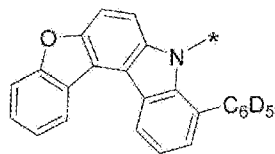
D584



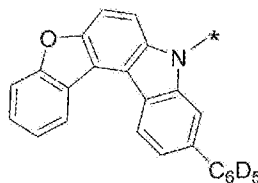
D585



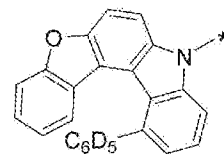
D586



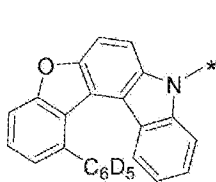
D587



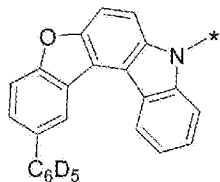
D588



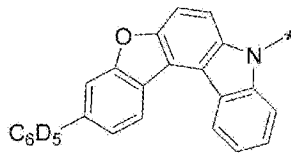
D589



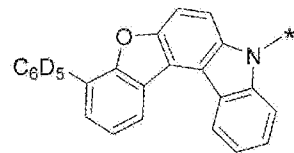
D590



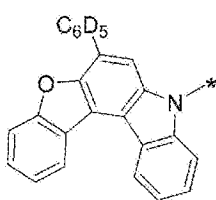
D591



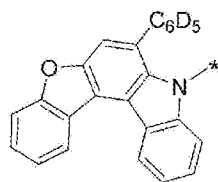
D592



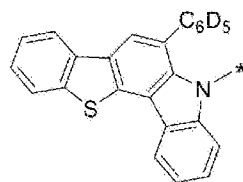
D593



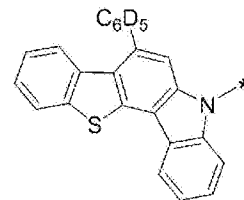
D594



D595

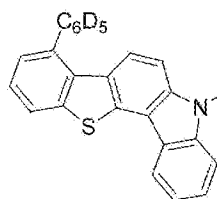


D596

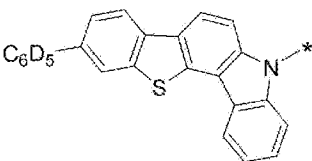


D597

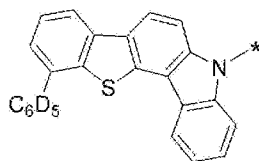
[化9-36]



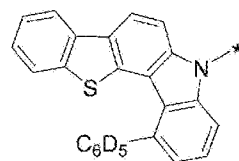
D598



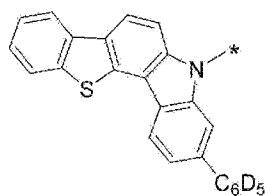
D599



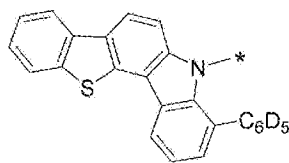
D600



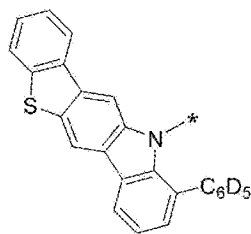
D601



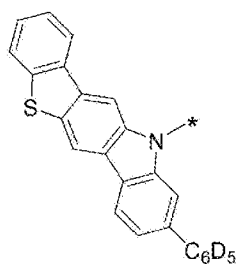
D602



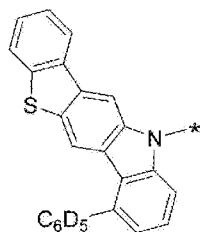
D603



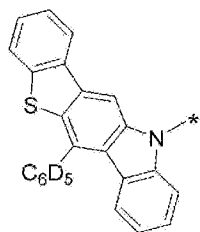
D604



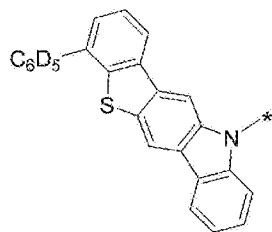
D605



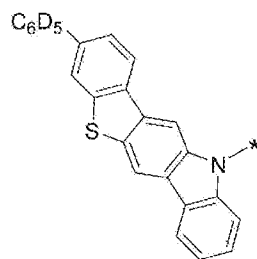
D606



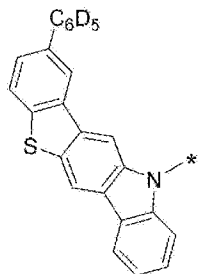
D607



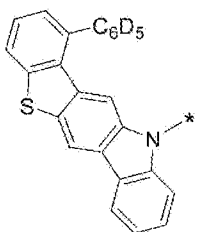
D608



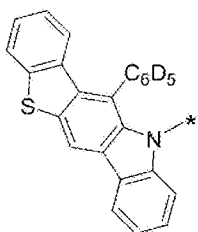
D609



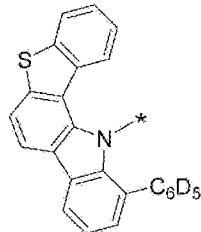
D610



D611

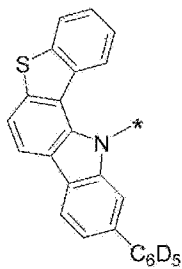


D612

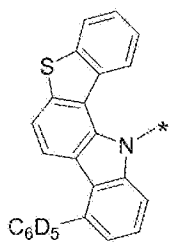


D613

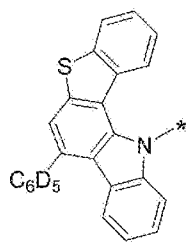
[化9-37]



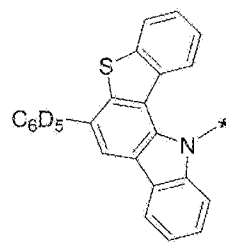
D614



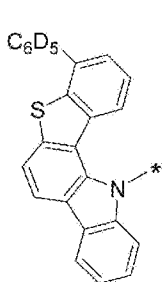
D615



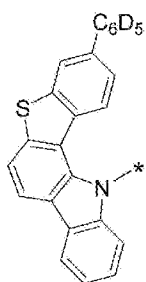
D616



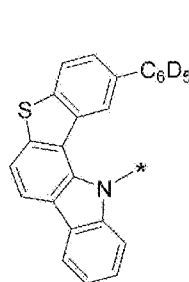
D617



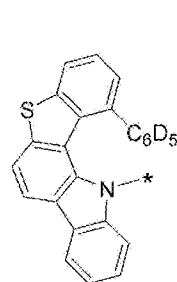
D618



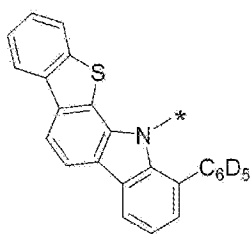
D619



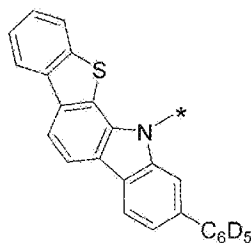
D620



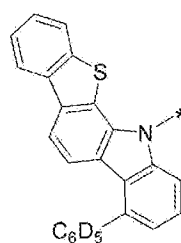
D621



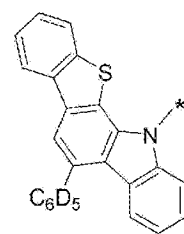
D622



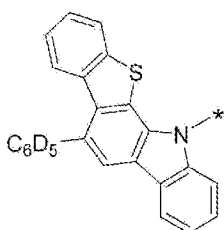
D623



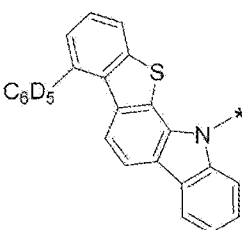
D624



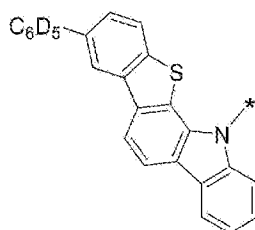
D625



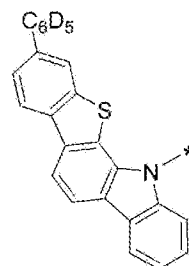
D626



D627

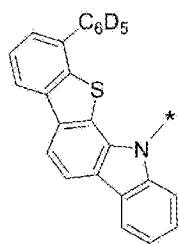


D628

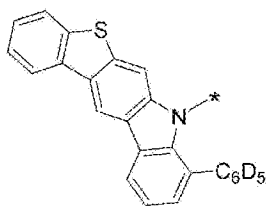


D629

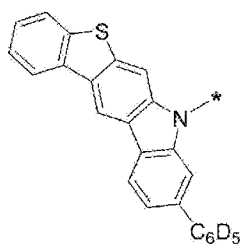
[化9-38]



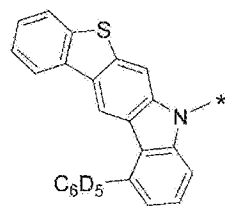
D630



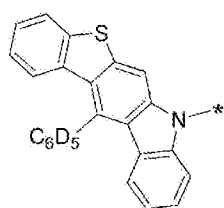
D631



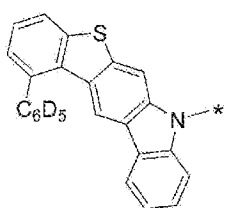
D632



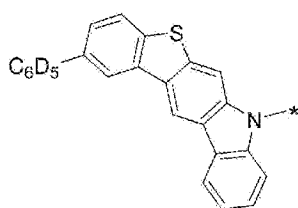
D633



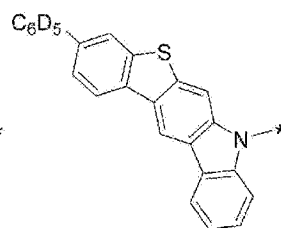
D634



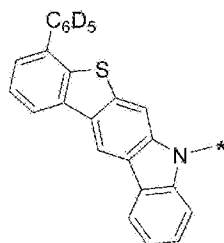
D635



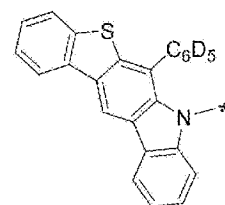
D636



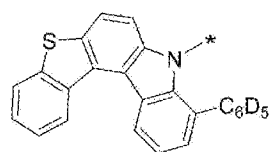
D637



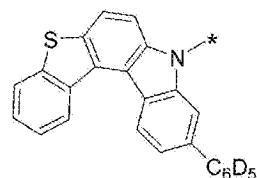
D638



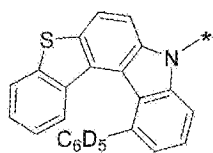
D639



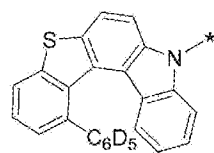
D640



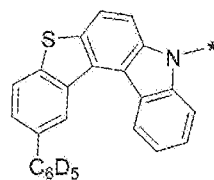
D641



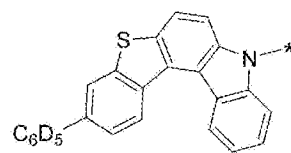
D642



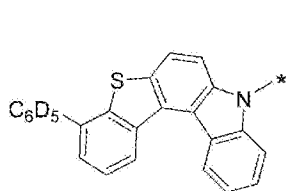
D643



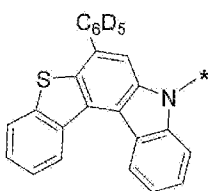
D644



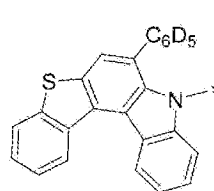
D645



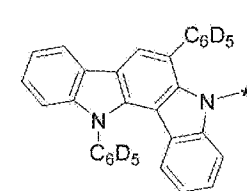
D646



D647

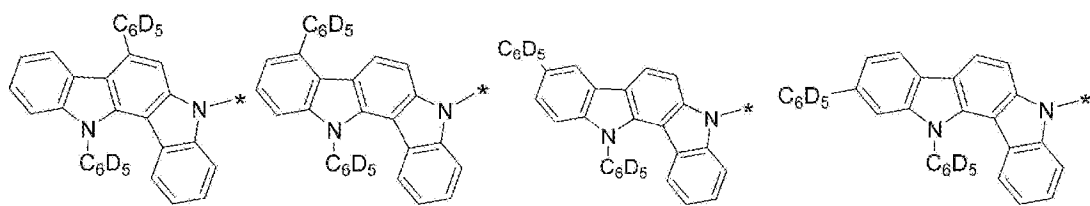


D648



D649

[化9-39]

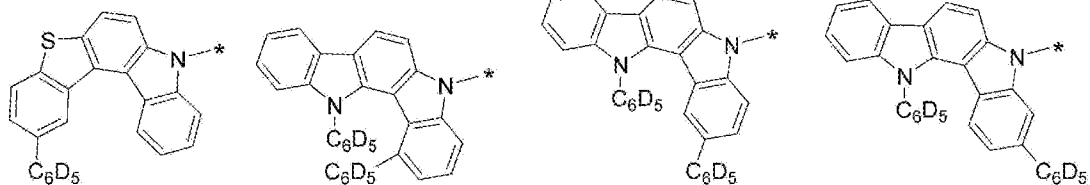


D650

D651

D652

D653

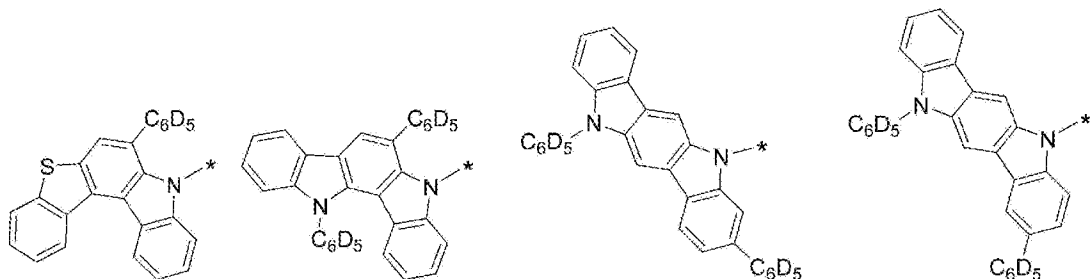


D654

D655

D656

D657

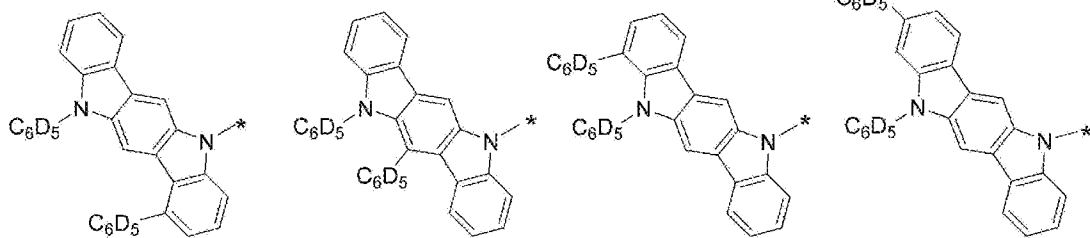


D658

D659

D660

D661



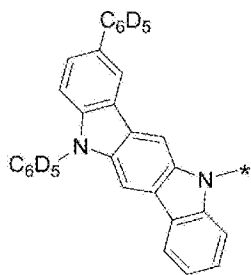
D662

D663

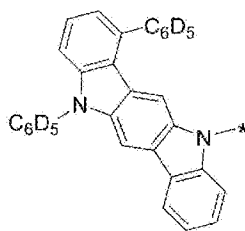
D664

D665

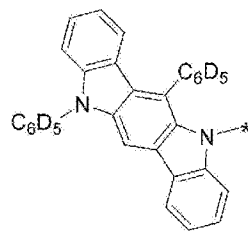
[化9-40]



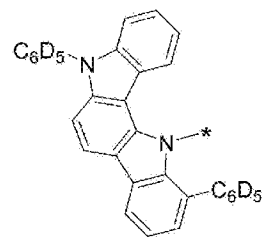
D666



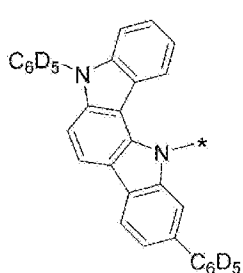
D667



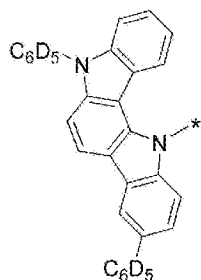
D668



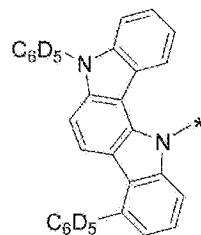
D669



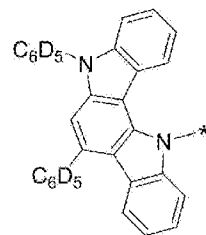
D670



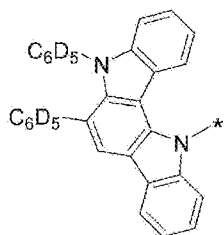
D671



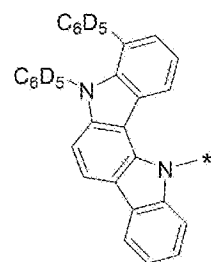
D672



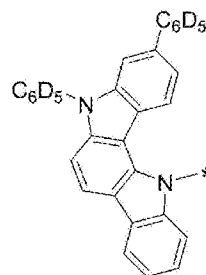
D673



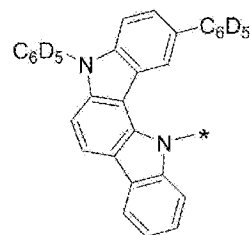
D674



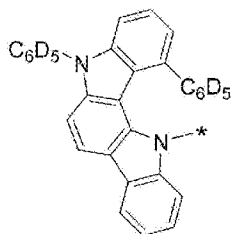
D675



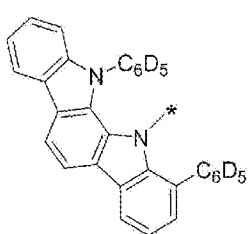
D676



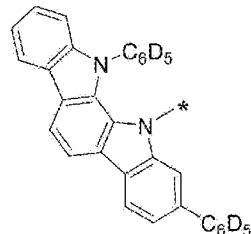
D677



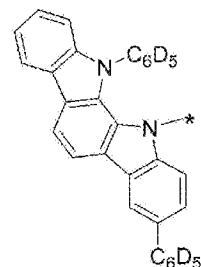
D678



D679

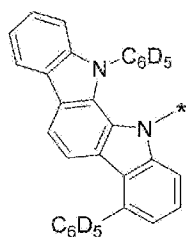


D680

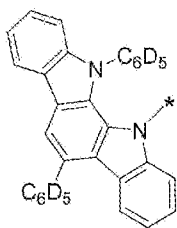


D681

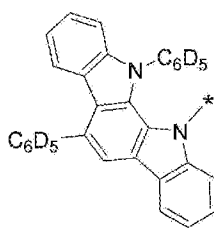
[化9-41]



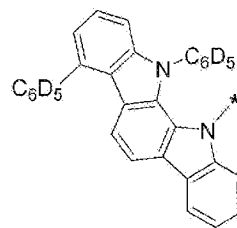
D682



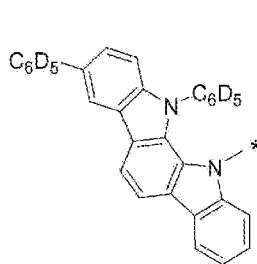
D683



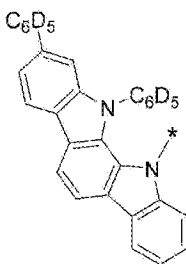
D684



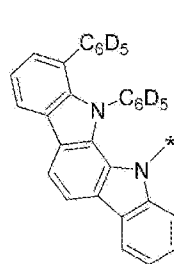
D685



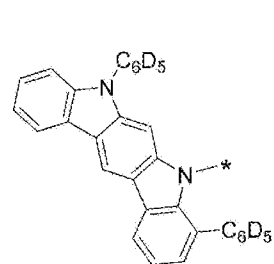
D686



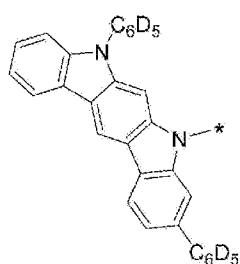
D687



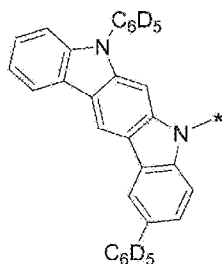
D688



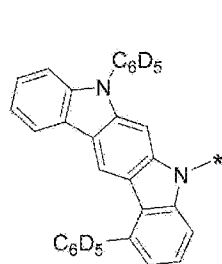
D689



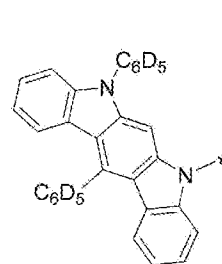
D690



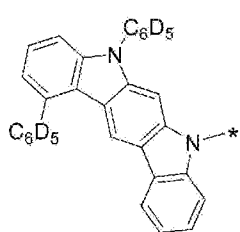
D691



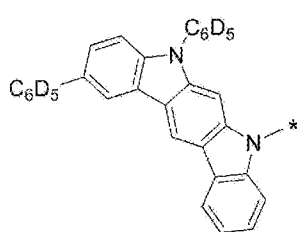
D692



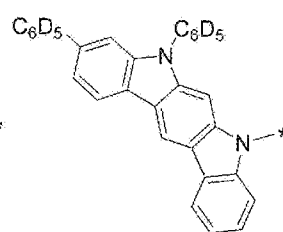
D693



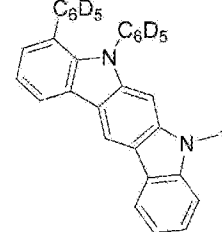
D694



D695

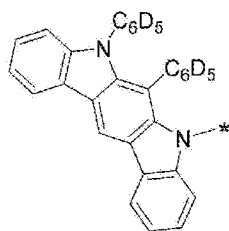


D696

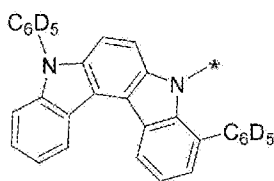


D697

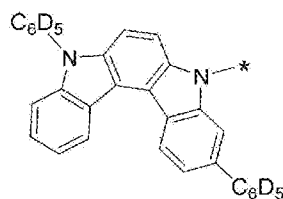
[化9-42]



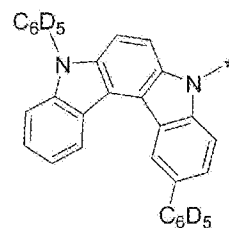
D698



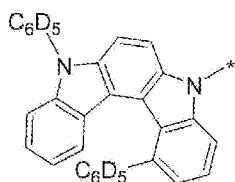
D699



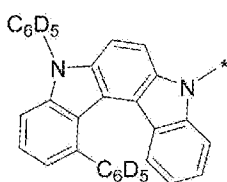
D700



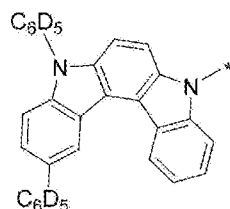
D701



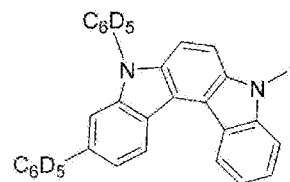
D702



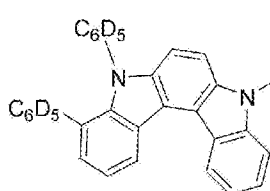
D703



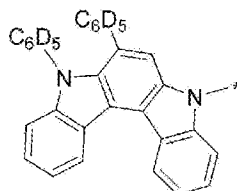
D704



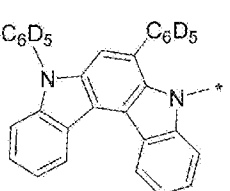
D705



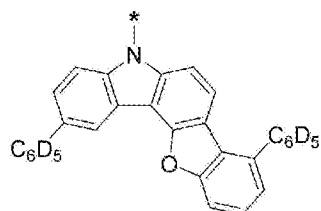
D706



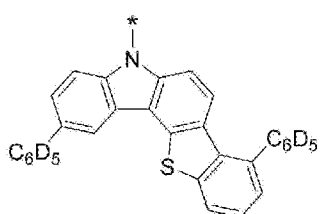
D707



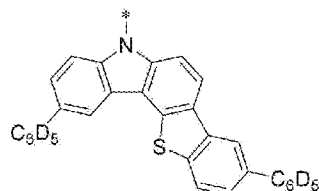
D708



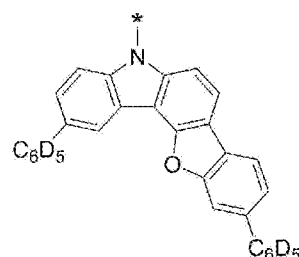
D709



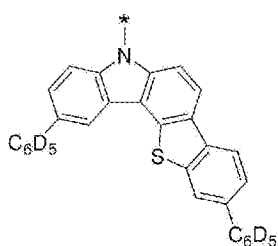
D710



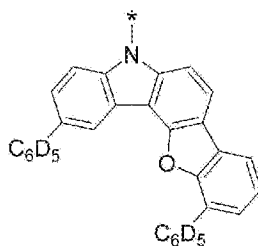
D711



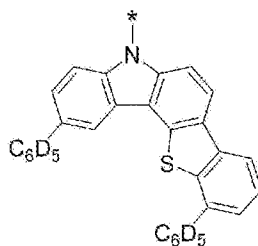
D712



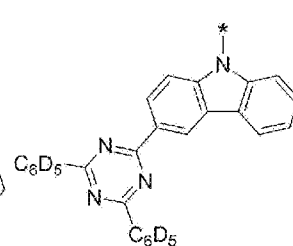
D713



D714

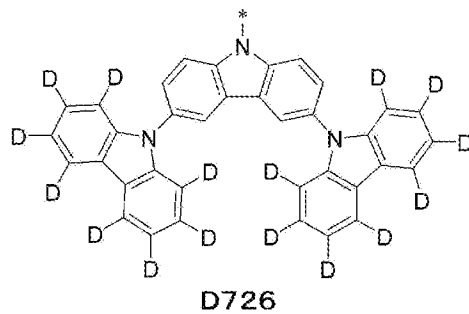
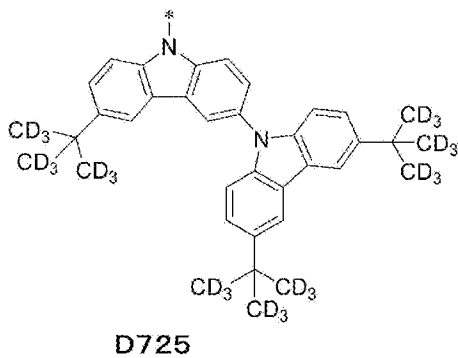
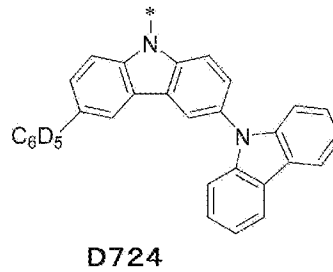
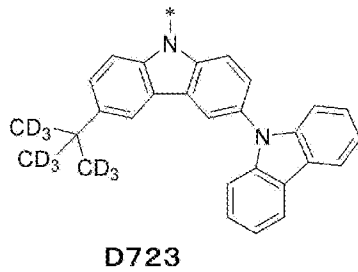
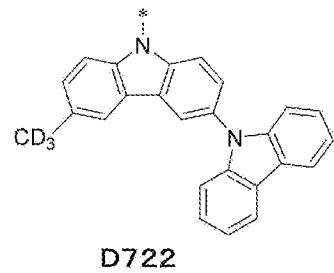
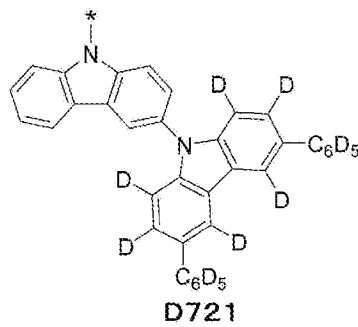
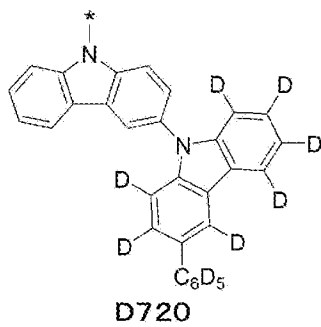
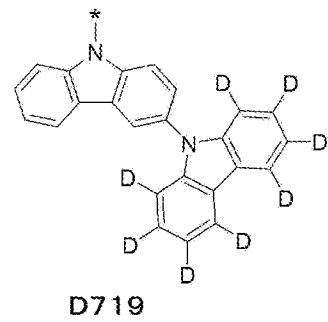
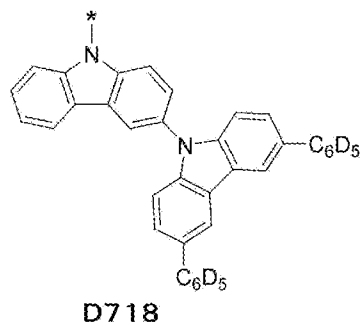
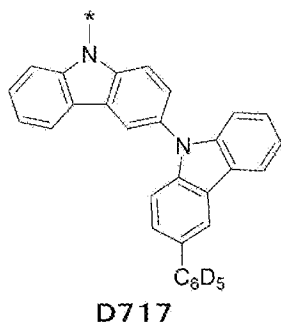


D715



D716

[化9-43]



[0032] 上記D 1～D 4 6 4 内に存在する水素原子をすべて重水素原子に置換したものをD 7 2 7～D 1 1 9 0として開示する。

本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 1～D 1 1 9 0からなる群より選択される。本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 1～D 1 6、D 4 6 5～D 4 7 6からなる群より選択される。本

発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 1 7～D 7 6、D 8 8～D 1 2 3、D 1 9 0～D 3 0 3、D 3 6 4～D 4 5 8、D 4 7 7～D 5 2 4、D 5 3 1～D 6 5 8、D 7 0 9～D 7 1 5からなる群より選択される。本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 7 7～D 8 2、D 1 2 4～D 1 8 9、D 3 0 4～D 3 6 3、D 4 6 0～D 4 6 4、D 5 2 5～D 5 3 0、D 6 5 9～D 7 0 8、D 7 1 7～D 7 2 6からなる群より選択される。

本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 1～D 1 8 9、D 4 5 8～D 6 5 4、D 7 1 7～D 7 2 6からなる群より選択される。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 1～D 2 2、D 3 5～D 3 8、D 4 6～D 5 3、D 7 4～D 8 9、D 1 1 7～D 1 8 7、D 4 5 8、D 4 5 9、D 4 6 5～D 4 7 8、D 5 2 6～D 5 3 3、D 7 1 7～D 7 2 1からなる群より選択される。本発明のより好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 1～D 1 3、D 1 7～D 2 2、D 3 7、D 4 7～D 5 2、D 7 7～D 8 2、D 1 2 4～D 1 3 6、D 1 3 9、D 1 4 2、D 1 4 5、D 1 5 1、D 1 5 4、D 1 5 7、D 1 6 0、D 1 6 3、D 1 6 6、D 1 6 9、D 1 7 2、D 1 7 5、D 1 7 8、D 1 8 1、D 1 8 4、D 1 8 7、D 4 5 9、D 4 6 6～D 4 7 1、D 5 2 1～D 5 2 5、D 7 1 2～D 7 1 6からなる群より選択される。例えば、本発明のより好ましい一態様として、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 1～D 1 3、D 4 6 6～D 4 7 1からなる群より選択される。例えば、本発明のより好ましい一態様として、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 1 7～D 2 2、D 3 7、D 4 7～D 5 2からなる群より選択される。例えば、本発明のより好ましい一態様として、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 7 7～D 8 2、D 5 2 6～D 5 3 0からなる群より選択される。例えば、本発明のより好ましい一態様として、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD 1 2 4～D 1 3 6、D 1 3 9、D 1 4 2、D 1 4 5、D 1 5 1、D 1 5 4、D 1 5 7、D 1 6 0、D 1 6 3、D 1 6 6、D 1 6 9、D 1 7 2、D 1 7 5、D 1 7 8、D 1 8 1、D 1 8 4、D 1 8 7

、D 7 1 2～D 7 1 6からなる群より選択される。

[0033] 一般式(1)の $R^1 \sim R^5$ のうちの1個以上はシアノ基である。本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ の1個または2個がシアノ基である。本発明の好ましい一態様では、少なくとも R^2 がシアノ基である。本発明の一態様では、少なくとも R^1 がシアノ基である。本発明の一態様では、少なくとも R^3 がシアノ基である。本発明の好ましい一態様では、 R^2 だけがシアノ基である。本発明の一態様では、 R^1 だけがシアノ基である。本発明の一態様では、 R^3 だけがシアノ基である。本発明の一態様では、 R^2 と R^4 だけがシアノ基である。本発明の一態様では、 R^2 と R^5 だけがシアノ基である。本発明の一態様では、 R^1 と R^3 だけがシアノ基である。

[0034] 一般式(1)の $R^1 \sim R^5$ のうちの2個以上はドナー性基である。本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ の2個または3個がドナー性基である。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^5$ の2個がドナー性基である。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^5$ の3個がドナー性基である。本発明の一態様では、少なくとも R^3 がドナー性基である。本発明の一態様では、少なくとも R^4 がドナー性基である。本発明の一態様では、少なくとも R^5 がドナー性基である。本発明の一態様では、 R^3 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^4 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^5 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^3 と R^5 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^2 と R^5 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^2 と R^4 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^3 と R^4 と R^5 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^2 と R^4 と R^5 だけがドナー性基である。 $R^1 \sim R^5$ の2個以上がドナー性基であるとき、それらは同一であってもよいし、異なってもよい。

$R^1 \sim R^5$ のうち水素原子または重水素原子であるものの数は0～2個であり、好ましくは0または1個であり、例えば1個であり、例えば0個である。例えば R^1 が水素原子または重水素原子である。 $R^1 \sim R^5$ のうち水素原子または重水素原子であるものの数が3個である化合物よりも優れた発光特性を

示す。R¹～R⁵のうち置換もしくは無置換のアリール基であるものの数は0または1個であり、1個であることが好ましい。R¹～R⁵のうち置換もしくは無置換のアルキル基であるものの数は0～3個であり、0～2個であることが好ましく、1であっても、0であってもよい。

[0035] 本発明の好ましい一態様では、R¹～R⁵のうちの1個がシアノ基であり、2個がドナー性基であり、1個が置換もしくは無置換のアリール基であり、1個が水素原子または重水素原子である。本発明の一態様では、2個のドナー性基は同一である。本発明の一態様では、2個のドナー性基は互いに異なる。本発明の一態様では、R¹が水素原子または重水素原子であり、R²またはR³がシアノ基である。本発明の好ましい一態様では、R¹が水素原子または重水素原子であり、R²がシアノ基であり、R³およびR⁵がドナー性基であり、R⁴が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、R¹が水素原子または重水素原子であり、R²がシアノ基であり、R⁴およびR⁵がドナー性基であり、R³が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、R¹が水素原子または重水素原子であり、R²がシアノ基であり、R³およびR⁴がドナー性基であり、R⁵が置換もしくは無置換のアリール基である。

本発明の好ましい一態様では、R¹～R⁵のうちの1個がシアノ基であり、3個がドナー性基であり、1個が水素原子または重水素原子である。本発明の一態様では、3個のドナー性基は同一である。本発明の一態様では、3個のドナー性基は2個が同一で1個は異なる。本発明の一態様では、R¹が水素原子または重水素原子であり、R²がシアノ基であり、R³～R⁵がドナー性基である。本発明の一態様では、R¹が水素原子または重水素原子であり、R³がシアノ基であり、R²、R⁴およびR⁵がドナー性基である。

本発明の一態様では、R¹～R⁵のうちの1個がシアノ基であり、2個がドナー性基であり、2個が水素原子または重水素原子である。本発明の一態様では、R¹およびR⁴が水素原子または重水素原子であり、R²がシアノ基であり、R³およびR⁵がドナー基である。本発明の一態様では、R¹およびR⁵が

水素原子または重水素原子であり、 R^2 がシアノ基であり、 R^3 および R^4 がドナー基である。本発明の一態様では、 R^1 および R^3 が水素原子または重水素原子であり、 R^2 がシアノ基であり、 R^4 および R^5 がドナー基である。本発明の一態様では、 R^1 および R^4 が水素原子または重水素原子であり、 R^3 がシアノ基であり、 R^2 および R^5 がドナー基である。

[0036] 一般式(1)の A_{r^1} および A_{r^2} が採りうるアリール基については、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるアリール基の説明と好ましい範囲を参照することができる。

一般式(1)の A_{r^1} および A_{r^2} が採りうる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、ピリジン環、ピリミジン環、ピロール環を挙げることができ、これらの環にはさらに別の環が縮合していてもよい。ヘテロアリール基の具体例として、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、カルバゾール-1-イル基、カルバゾール-2-イル基、カルバゾール-3-イル基、カルバゾール-4-イル基を挙げることができる。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、5～16の範囲内で選択したり、5～12の範囲内で選択したりしてもよい。

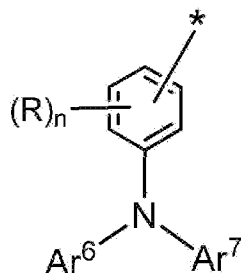
一般式(1)の A_{r^1} および A_{r^2} のうちの少なくとも1個は、窒素原子で結合するドナー性基を有するが、アクセプター性基では置換されていないベンゼン環で結合する基（以下において「炭素原子で結合するドナー性基」という）である。すなわち、 A_{r^1} および A_{r^2} のうちの少なくとも1個は、ベンゼン環の環骨格構成炭素原子で結合する基であって、そのベンゼン環には窒素原子で結合するドナー性基が結合しているが、アクセプター性基は結合していない。ベンゼン環には、水素原子、重水素原子、および窒素原子で結合しないドナー性基がさらに結合していてもよい。

炭素原子で結合するドナー性基は、好ましくは下記一般式(c)で表され

る構造を有する。

[化10]

一般式 (c)

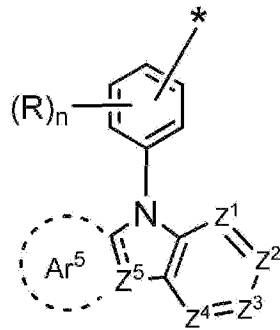


[0037] 一般式 (c) において、 $A r^6$ および $A r^7$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。ヘテロアリール基としては、環骨格構成原子として窒素原子を含むものが好ましく、例えばピリジン環を含むヘテロアリール基を例示することができる。アリール基とヘテロアリール基の詳細については、 $A r^1$ および $A r^2$ が採りうるアリール基とヘテロアリール基の記載を参照することができる。 $A r^6$ および $A r^7$ として好ましくは置換もしくは無置換のアリール基であり、例えば置換もしくは無置換のフェニル基である。 R は各々独立に重水素原子またはドナー性基を表す。 R が採りうるドナー性基は、窒素原子で結合するドナー性基であってもよいし、窒素原子以外の原子（例えば炭素原子）で結合するドナー性基であってもよい。窒素原子で結合するドナー性基は、 $N(A r^6)$ ($A r^7$) と同一であってもよいし、異なってもよい。 $A r^6$ と $A r^7$ は互いに結合して環状構造を形成していてもよく、 $A r^6$ と R は互いに結合して環状構造を形成していてもよく、 $A r^7$ と R は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。本発明の好ましい一態様では、 $A r^6$ と $A r^7$ は互いに結合して環状構造を形成している。本発明の別の好ましい一態様では、 $A r^6$ と R は互いに結合して環状構造を形成している。互いに結合する際には、単結合または連結基を介して結合する。好ましくは単結合または窒素原子（窒素原子にはアルキル基またはアリール基が結合していることが好ましい）を介して結合する場合であり、より好ましくは単結合で結合する場合である。 n は 0 ～ 4 のいずれかの整数を表す。 $*$ は結合位置を示す。

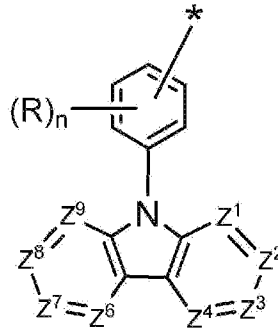
[0038] 本発明の好ましい一態様では、炭素原子で結合するドナー性基は、下記一般式（d）で表される構造を有し、より好ましくは下記一般式（e）で表される構造を有する。

[化11]

一般式（d）



一般式（e）



[0039] 一般式（d）における $Z^1 \sim Z^5$ 、 Ar^5 の定義と説明については、一般式（a）の対応する記載を参照することができる。一般式（e）における $Z^1 \sim Z^4$ 、 $Z^6 \sim Z^9$ の定義と説明については、一般式（b）の対応する記載を参照することができる。一般式（d）と一般式（e）におけるRは各々独立に重水素原子またはドナー性基を表す。Rが採りうるドナー性基は、窒素原子で結合するドナー性基であってもよいし、窒素原子以外の原子（例えば炭素原子）で結合するドナー性基であってもよい。nは0～4のいずれかの整数を表す。＊は結合位置を示す。

nは0であるか、nが4であって、4個のRがいずれも重水素原子であることが好ましい。 $Z^1 \sim Z^4$ 、 $Z^6 \sim Z^9$ のうちの好ましくは0～2個、好ましくは0～1個、さらに好ましくは0個が窒素原子である。

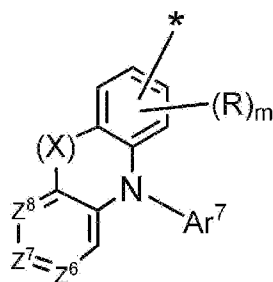
一般式（d）または一般式（e）で表される基の具体例として、上記D1～D1190が3位に結合したフェニル基（すなわち、D1～D1190の＊にメタフェニレン基がさらに結合した基）をD1191～D2380として開示する。上記D1～D1190が4位に結合したフェニル基（すなわち、D1～D1190の＊にパラフェニレン基がさらに結合した基）をD2381～D3570として開示する。上記D1～D1190が3位に結合した過重水素化フェニル基（すなわち、D1～D1190の＊に全水素原子が重

水素化されたメタフェニレン基がさらに結合した基)をD 3 5 7 1～D 4 7 6 0として開示する。上記D 1～D 1 1 9 0が4位に結合した過重水素化フェニル基(すなわち、D 1～D 1 1 9 0の*に全水素原子が重水素化されたパラフェニレン基がさらに結合した基)をD 4 7 6 1～D 5 9 5 0として開示する。

[0040] 本発明の好ましい一態様では、炭素原子で結合するドナー性基は、下記一般式(f)で表される構造を有する。

[化12]

一般式(f)



[0041] 一般式(f)におけるZ⁶～Z⁸の定義と説明については、一般式(a)の対応する記載を参照することができる。一般式(f)におけるAr⁷の定義と説明については、一般式(c)の対応する記載を参照することができる。Xは存在せずに単結合を表すか、1または2原子の連結鎖を有する連結基を表す。2原子の連結鎖を有する連結基としては、置換もしくは無置換のエチレン基を挙げることができる。1原子の連結鎖を有する連結基としては、酸素原子、硫黄原子、またはアリール基もしくはアルキル基が結合した窒素原子を挙げることができる。連結基は、アリール基もしくはアルキル基が結合した窒素原子であることが好ましい。Xは存在せずに単結合を表すことがより好ましい。Rは重水素原子またはドナー性基を表す。Rが採りうるドナー性基は、窒素原子で結合するドナー性基であってもよいし、窒素原子以外の原子(例えば炭素原子)で結合するドナー性基であってもよい。mは0～3のいずれかの整数を表す。*は結合位置を示す。

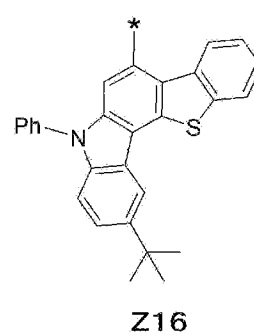
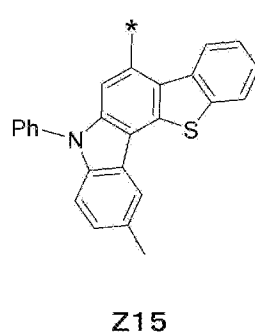
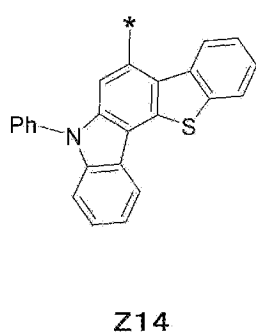
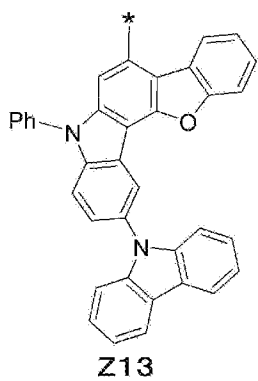
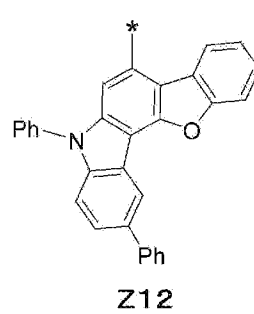
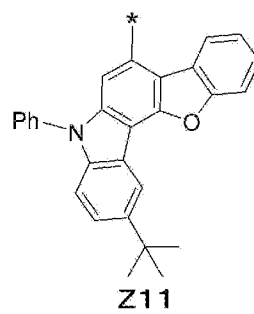
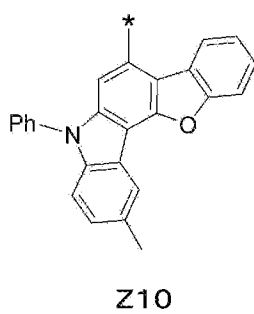
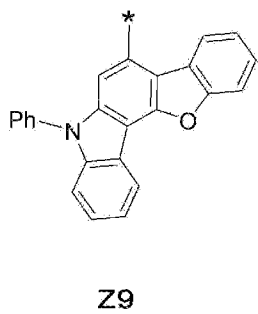
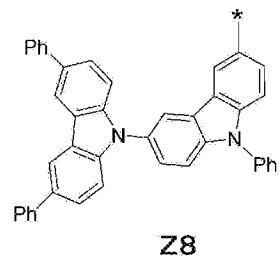
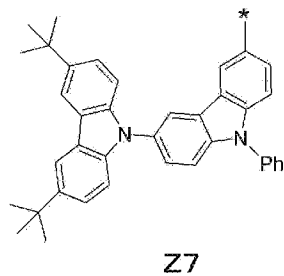
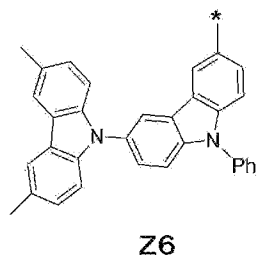
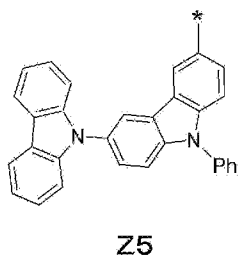
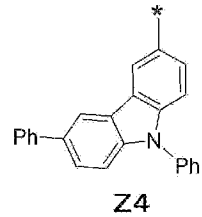
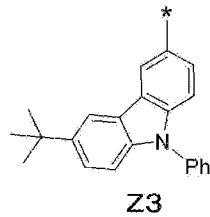
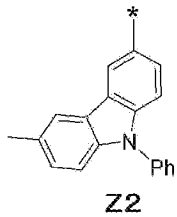
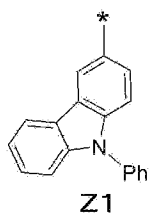
mは0であるか、mが3であって、3個のRがいずれも重水素原子であることが好ましい。Z⁶～Z⁸のうちの好ましくは0～1個、さらに好ましくは

0個が窒素原子である。本発明の好ましい一態様では、Xが単結合であり、 $Z^6 \sim Z^8$ の0個が窒素原子である。本発明の一態様では、置換もしくは無置換のN-アリールカルバゾール-1-イル基である。本発明の一態様では、置換もしくは無置換のN-アリールカルバゾール-2-イル基である。本発明の好ましい一態様では、置換もしくは無置換のN-アリールカルバゾール-3-イル基である。本発明の一態様では、置換もしくは無置換のN-アリールカルバゾール-4-イル基である。

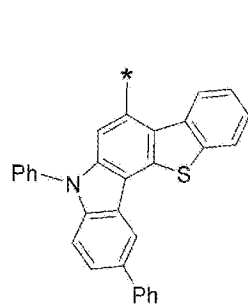
[0042] 以下において、一般式(f)で表されるドナー性基の具体例を示す。ただし、本発明で採用することができるドナー性基は、以下の具体例によって限定的に解釈されることはない。なお、以下の具体例において、Phはフェニル基(C_6H_5)を示し、*は結合位置を示す。メチル基は表示を省略しているため、例えばZ2は1つのメチル基を有している。ただし、重水素化したメチル基は CD_3 と表記している。また、 C_6D_5 は水素原子がすべて重水素化したフェニル基を表している。Dは重水素原子を表す。

[0043]

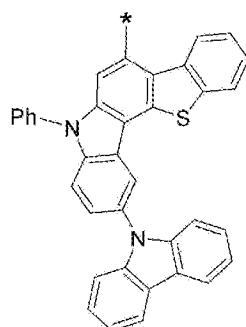
[化13-1]



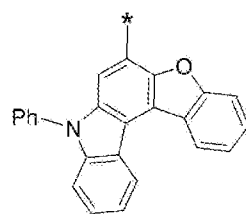
[化13-2]



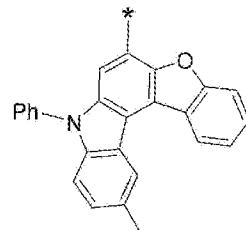
Z17



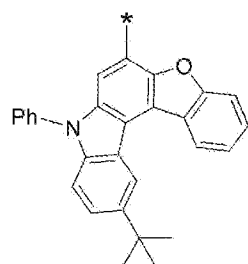
Z18



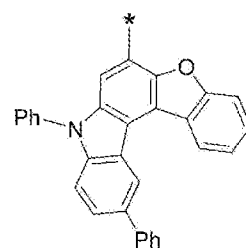
Z19



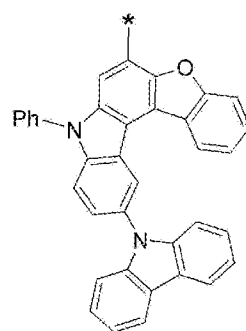
Z20



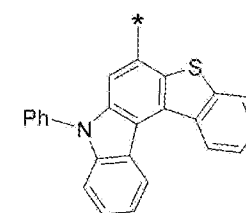
Z21



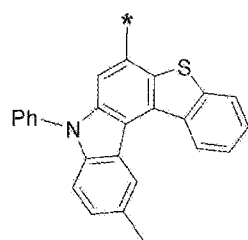
Z22



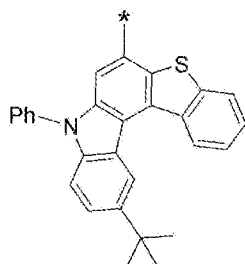
Z23



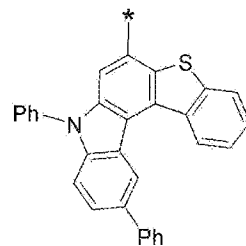
Z24



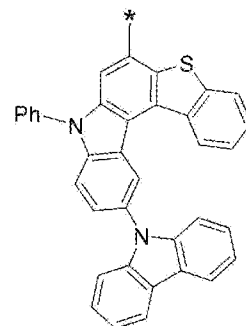
Z25



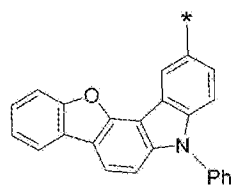
Z26



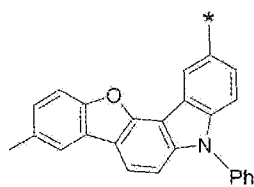
Z27



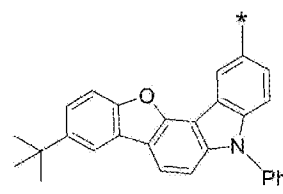
Z28



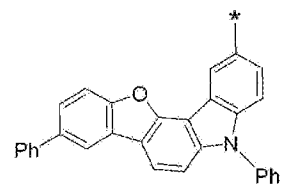
Z29



Z30

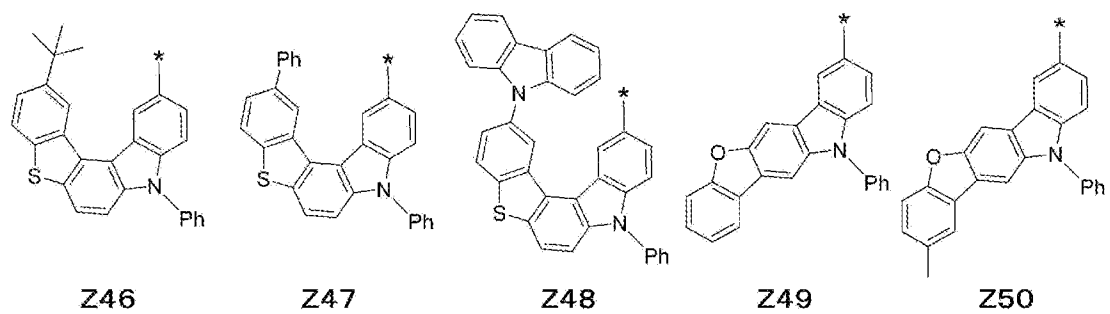
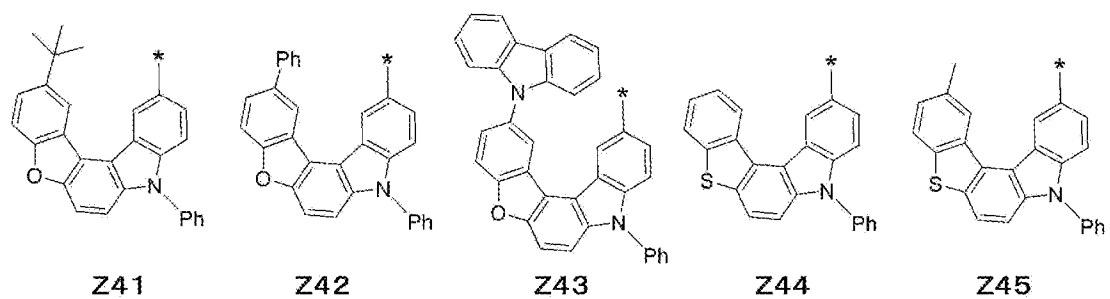
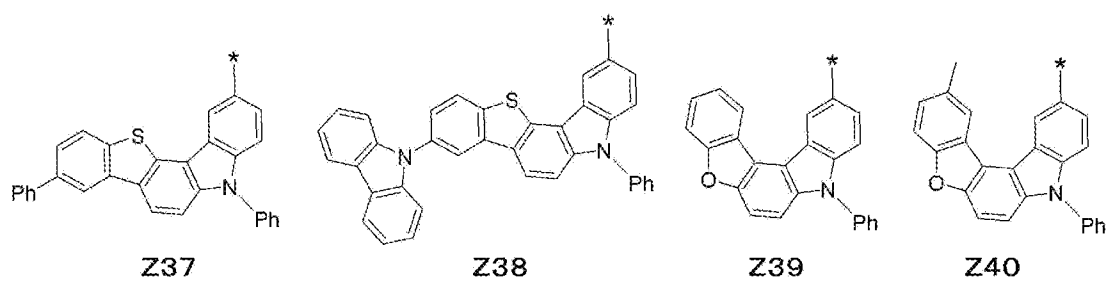
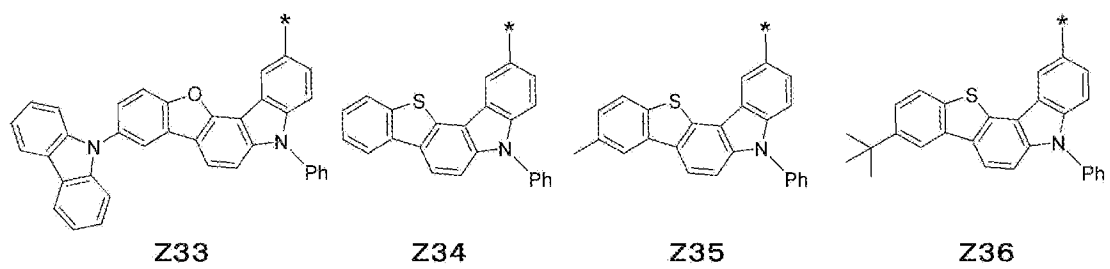


Z31

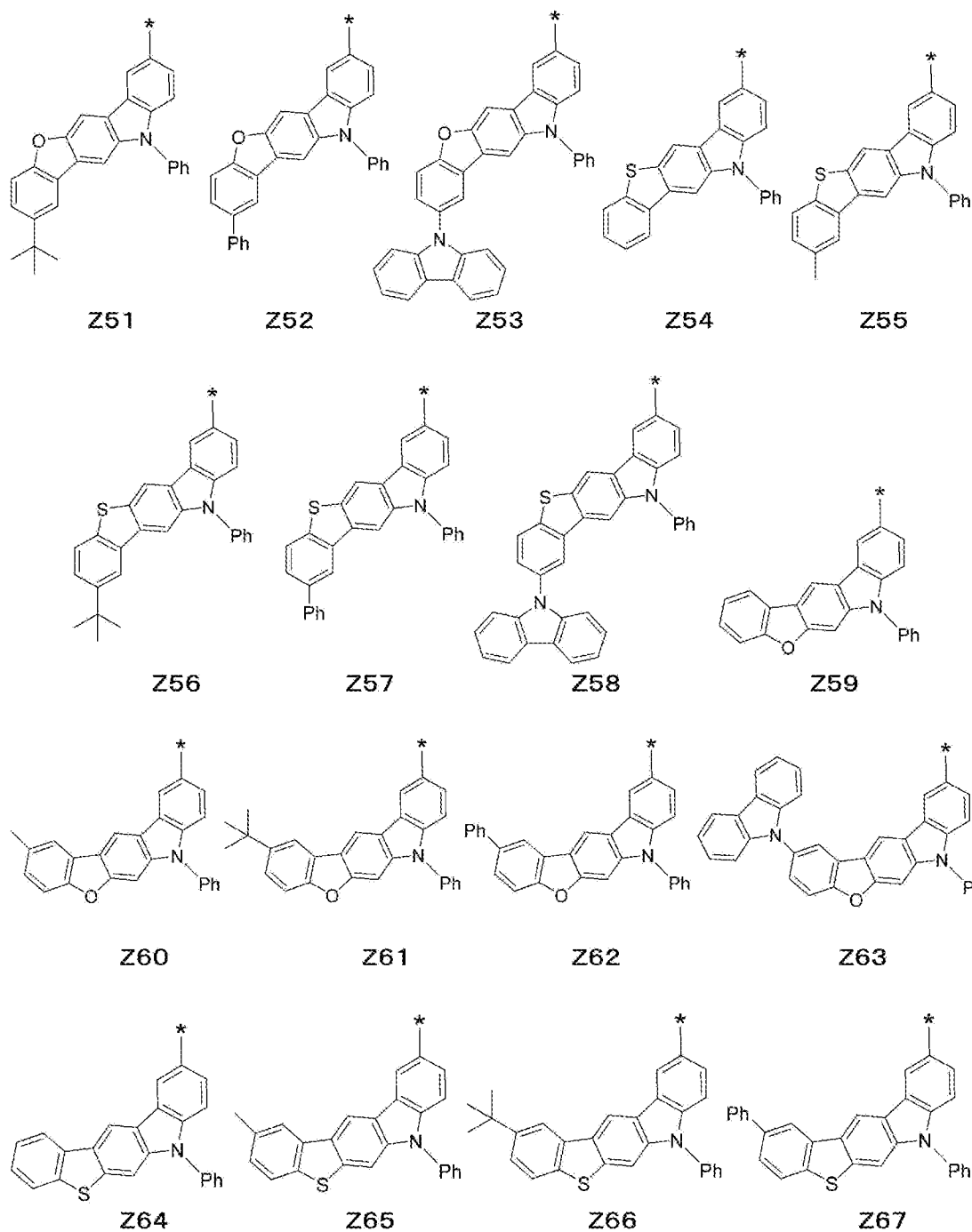


Z32

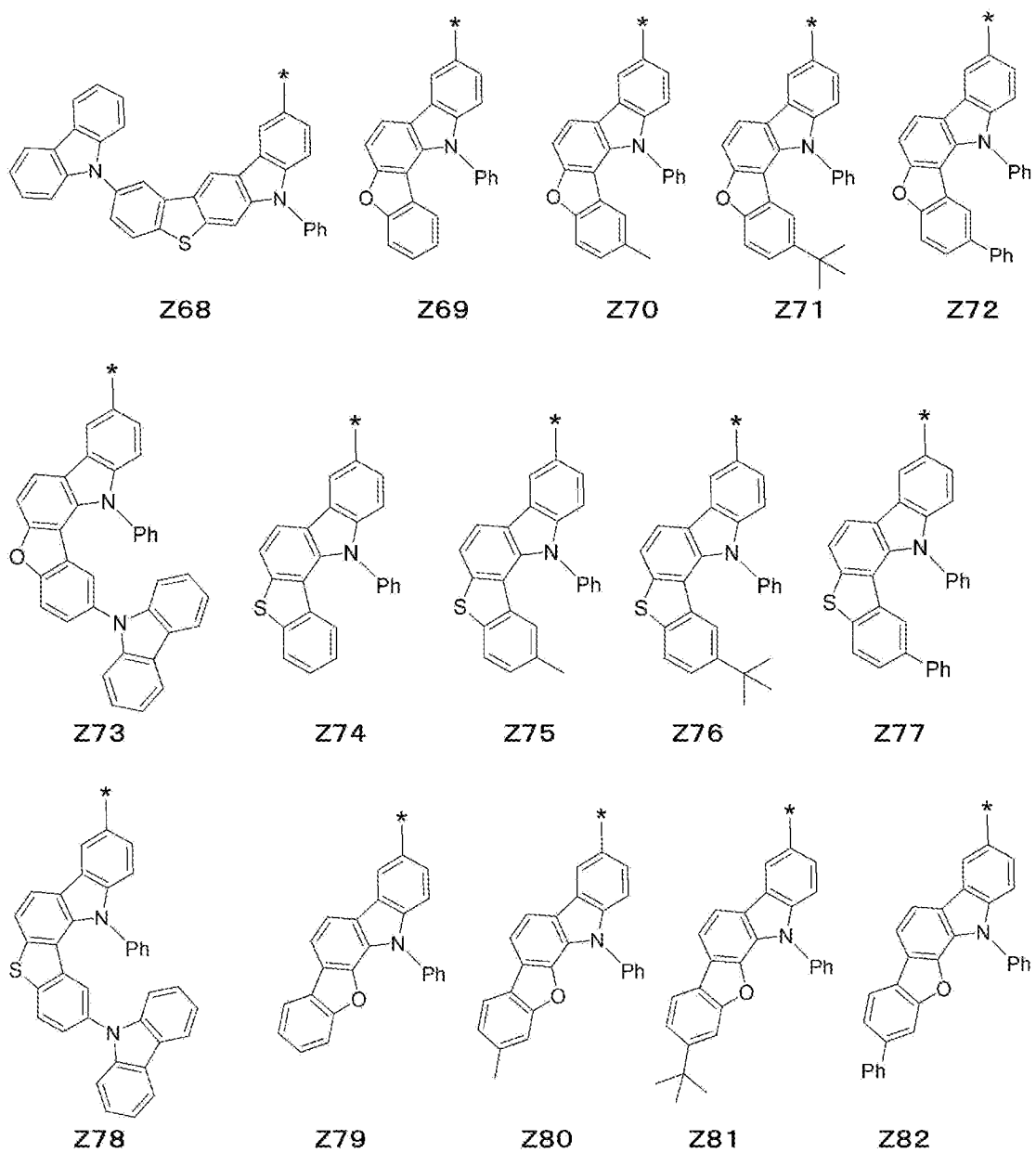
[化13-3]



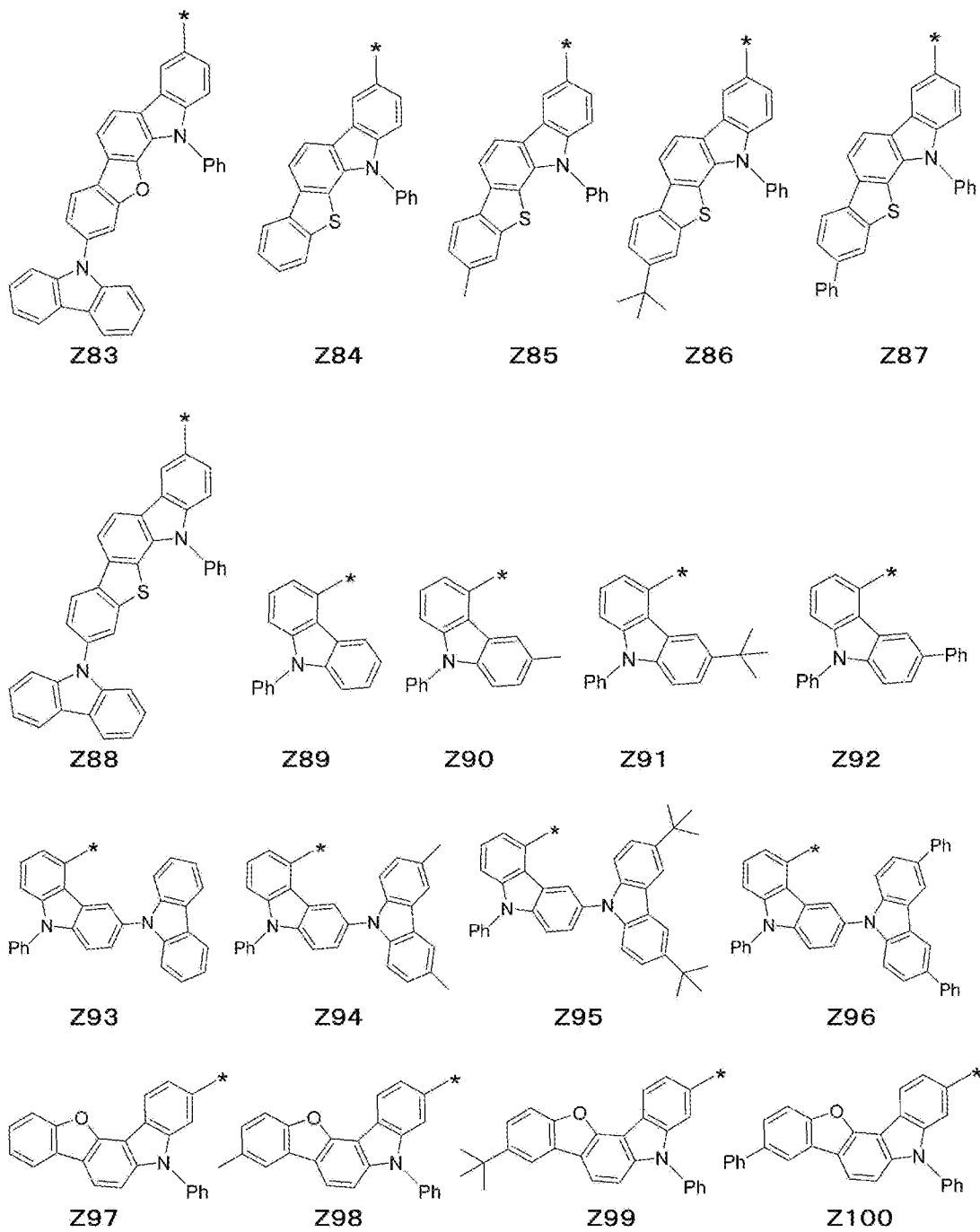
[化13-4]



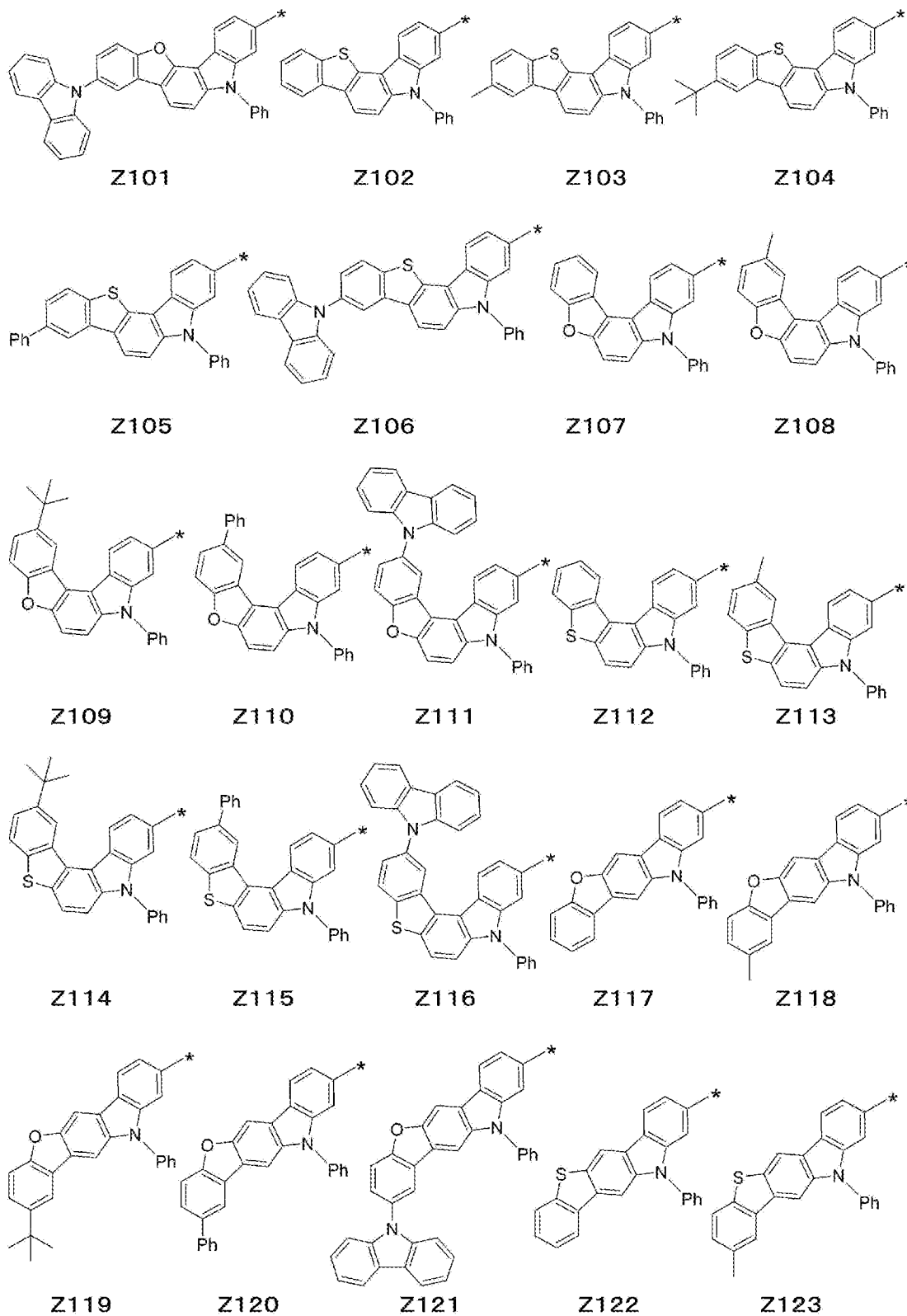
[化13-5]



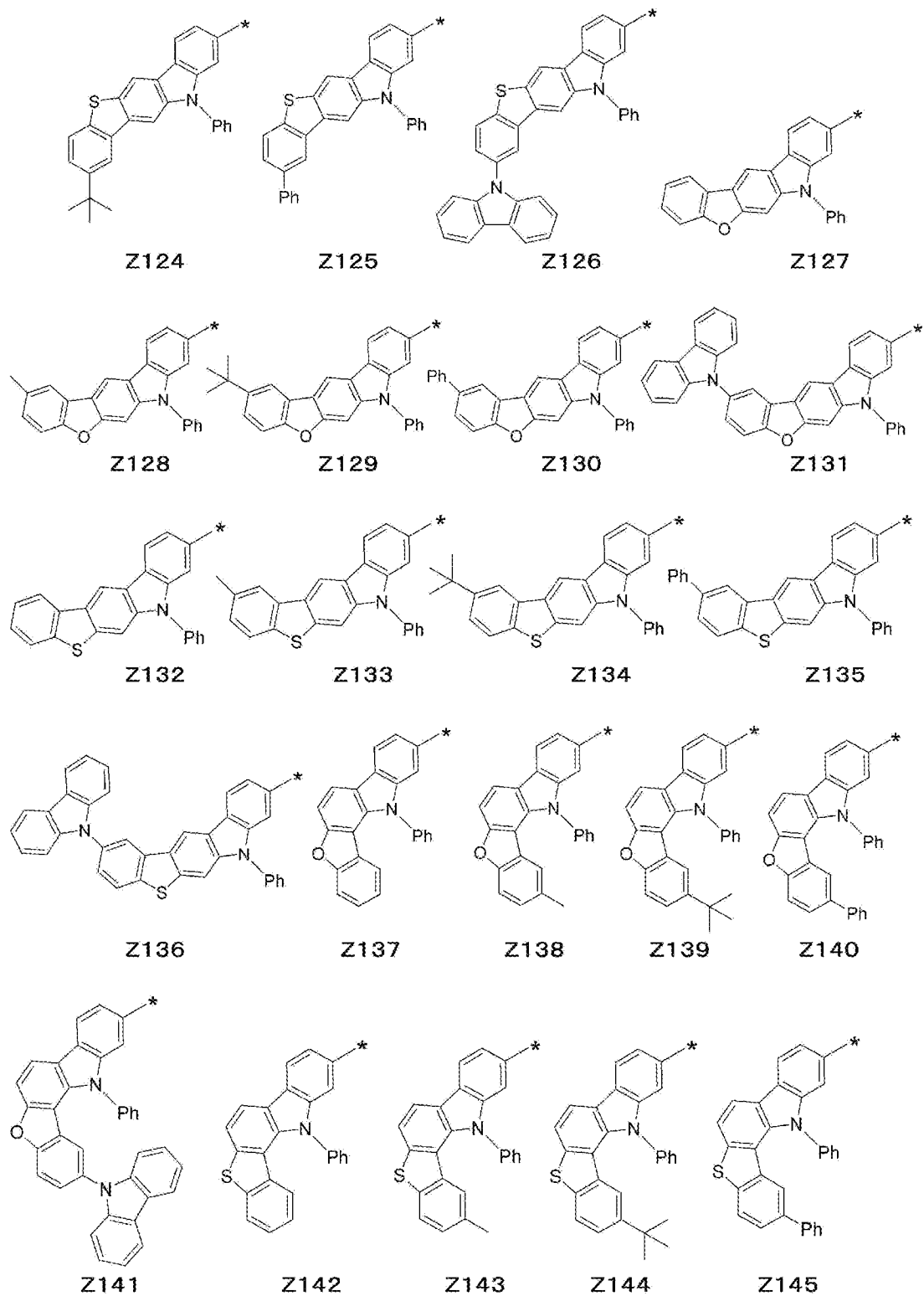
[化13-6]



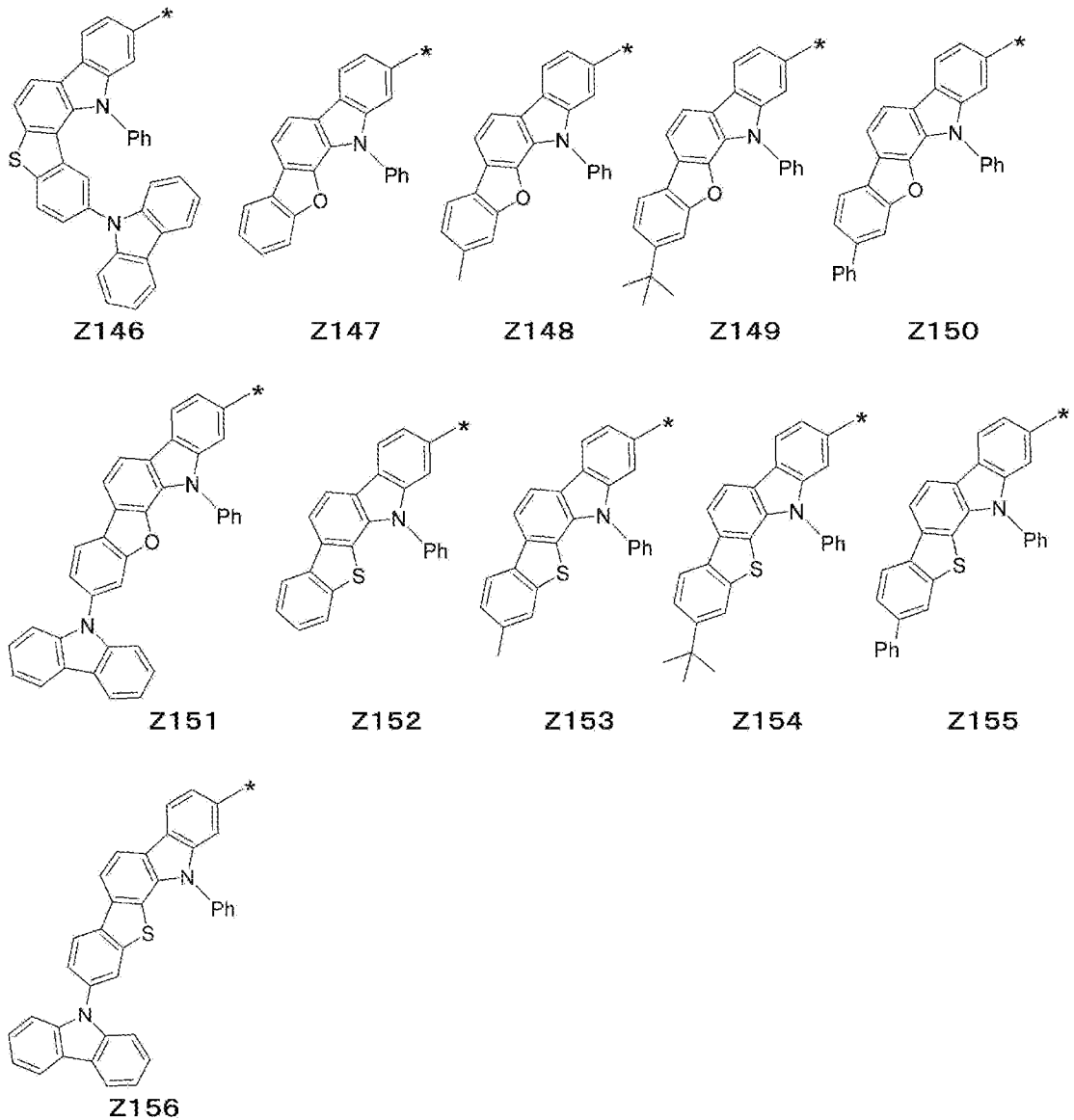
[化13-7]



[化13-8]



[化13-9]



[0044] 上記Z1～Z156内に存在する水素原子をすべて重水素原子に置換したものをZ157～Z312として開示する。上記Z1～Z156に存在するフェニル基とアルキル基（メチル基およびtert-ブチル基）に結合している水素原子を重水素原子に置換したものをZ313～Z468として開示する。

[0045] 本発明の一態様では、一般式（1）のAr¹およびAr²が採りうる炭素原子で結合するドナー性基はZ1～Z468からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はZ1～Z8、Z89～Z

96、Z157～Z164、Z245～Z252、Z313～Z320、Z401～Z408からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はZ9～Z88、Z97～Z156、Z165～Z244、Z253～Z312、Z321～Z400、Z409～Z468からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はZ1～88、Z157～Z244、Z313～Z400からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はZ89～Z156、Z245～Z312、Z401～Z468からなる群より選択される。

[0046] 本発明の一態様では、一般式(1)の $A r^1$ および $A r^2$ が採りうる炭素原子で結合するドナー性基はD1191～D5950からなる群より選択される。本発明の一態様では、 $A r^1$ および $A r^2$ が採りうる炭素原子で結合するドナー性基はD1191～D2380、D3571～D4760からなる群より選択される。本発明の一態様では、 $A r^1$ および $A r^2$ が採りうる炭素原子で結合するドナー性基はD2381～D3570、D4761～D5950からなる群より選択される。

本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はD1191～D1206、D1655～D1666、D3571～D3586、D4035～D4046からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はD2381～D2396、D2845～D2856、D4761～D4776、D5225～D5236からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はD1207～D1266、D1278～D1313、D1380～D1493、D1554～D1648、D1667～D1714、D1721～D1848、D1899～D1905、D3587～D3646、D3658～D3693、D3760～D3873、D3934～D4028、D4047～D4094、D4101～D4228、D4279～D4285からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はD2397～D

2456、D2468～D2503、D2570～D2683、D2744～D2838、D2857～D2904、D2911～D3038、D3089～D3095、D4777～D4836、D4848～D4883、D4950～D5063、D5124～D5218、D5237～D5284、D5291～D5418、D5469～D5475からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はD1267～D1272、D1314～D1379、D1494～D1553、D1650～D1654、D1715～D1720、D1849～D1989、D1907～D1916、D3647～D3652、D3694～D3759、D3874～D3933、D4030～D4034、D4095～D4100、4229～D4278、D4287～D4296からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はD2457～D2462、D2504～D2569、D2684～D2743、D2840～D2844、D2905～D2910、D3039～D3088、D3097～D3106、D4837～D4842、D4884～D4949、D5064～D5123、D5220～D5224、D5285～D5290、D5419～D5468、D5477～D5486からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はD1191～D1379、D1648～D1844、D1907～D1916、D3571～D3759、D4028～D4224、D4287～D4296からなる群より選択される。本発明の一態様では、炭素原子で結合するドナー性基はD2381～D2659、D2838～D3034、D3097～D3106、D4761～D4949、D5218～D5414、D5477～D5486からなる群より選択される。

[0047] 本発明の一態様では、一般式(1)の $A r^1$ および $A r^2$ のうち、 $A r^1$ だけが炭素原子で結合するドナー性基である。本発明の一態様では、一般式(1)の $A r^1$ および $A r^2$ の両方が炭素原子で結合する同一のドナー性基である。本発明の一態様では、一般式(1)の $A r^1$ および $A r^2$ が炭素原子で結合

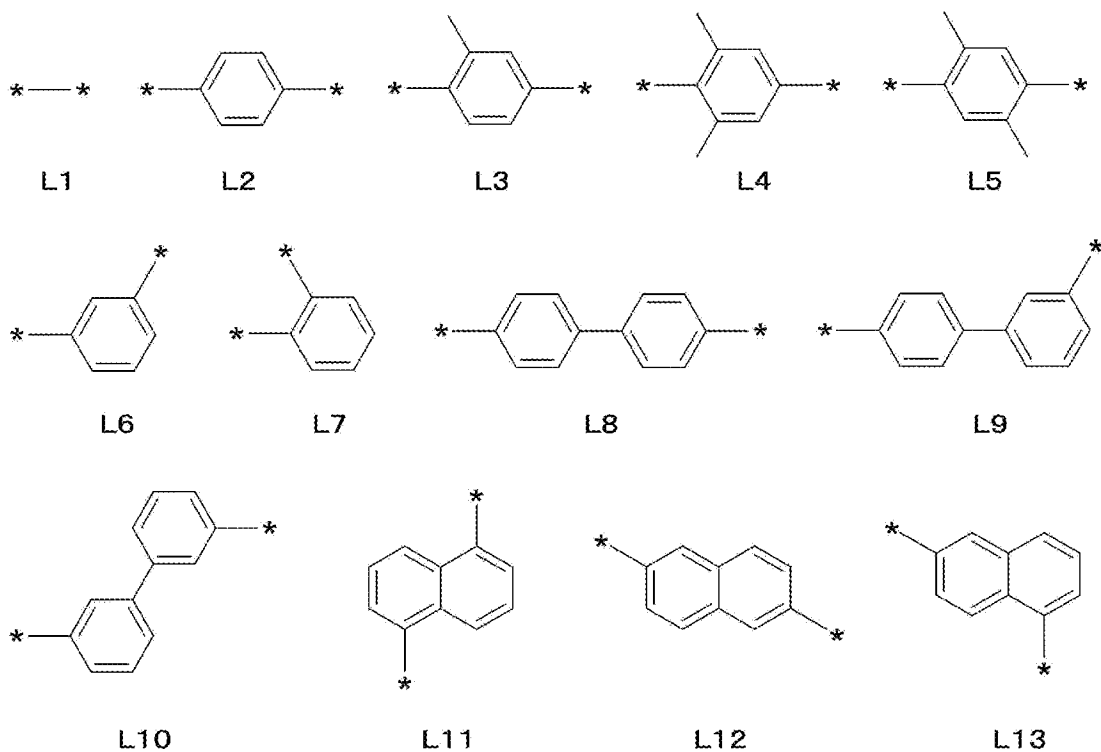
する同一のドナー性基であるが、互いに構造は異なる。本発明の好ましい一態様では、一般式（１）の A_{r1} が炭素原子で結合するドナー性基であり、 A_{r2} が置換もしくは無置換のアリール基（例えば $A_{r1} \sim A_{r88}$ のいずれか）、または窒素原子で結合するドナー性基（例えば $D1 \sim D1190$ のいずれか）である。ここでいう置換もしくは無置換のアリール基の説明と好ましい範囲については一般式（１）の $R^1 \sim R^5$ 、 A_{r1} 、 A_{r2} が採りうる置換もしくは無置換のアリール基の対応する記載を参照することができる。また、ドナー性基の説明と好ましい範囲については、一般式（１）の $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基の対応する記載を参照することができる。

[0048] 一般式（１）における L^1 は単結合または２価の連結基を表す。２価の連結基として、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を挙げることができる。本発明の好ましい一態様では、 L^1 は単結合である。本発明の一態様では、 L^1 は置換もしくは無置換のアリーレン基である。本発明の一態様では、 L^1 は置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基である。アリーレン基を構成するアリール部分については、上記の $R^1 \sim R^5$ の記載欄におけるアリール基の説明と好ましい範囲を参照することができる。ヘテロアリーレン基としては、アリーレン基を構成する環骨格炭素原子の少なくとも１つを窒素原子へ置換した連結基を挙げることができる。

以下において、 L^1 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^1 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 $L3 \sim L5$ 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。

[0049]

[化14]



[0050] 上記L 2～L 1 3内に存在する水素原子をすべて重水素原子に置換したものをL 1 4～L 2 5として開示する。本発明の一態様では、L¹は、L 1～L 2 5からなる群より選択される。本発明の一態様では、L¹は、L 1～L 7、L 1 4～L 1 9からなる群より選択される。本発明の一態様では、L¹は、L 1、L 8～L 1 3、L 2 0～L 2 5からなる群より選択される。本発明の一態様では、L¹は、L 2～L 2 5からなる群より選択される。

[0051] 一般式(1)におけるX¹～X³は、各々独立にNまたはC(R)を表す。ただし、X¹～X³の少なくとも1個はNである。Rは水素原子、重水素原子または置換基を表す。ここでいう置換基は、置換基群Aから選択してもよいし、置換基群Bから選択してもよいし、置換基群Cから選択してもよいし、置換基群Dから選択してもよいし、置換基群Eから選択してもよい。本発明の好ましい一態様では、X¹～X³はNである。本発明の一態様では、X¹およびX³がNであり、X²がC(R)である。本発明の一態様では、X¹およびX²がNであり、X³がC(R)である。本発明の一態様では、X¹がNであり、X²およびX³がC(R)である。本発明の一態様では、X²がNであり、X¹

および X^3 がC(R)である。本発明の一態様では、Rは水素原子または重水素原子である。本発明の一態様では、R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。本発明の一態様では、R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である。

[0052] 本発明の好ましい一態様では、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合であり、 A_{r^1} が一般式(d)で表される基であり、 A_{r^2} が置換もしくは無置換のアリール基（例えばドナー性を有さない置換もしくは無置換のアリール基、例えば一般式(d)で表される基）、または窒素原子で結合するドナー性基であり、 R^2 がシアノ基であり、 R^1 、 $R^3 \sim R^5$ のうち2個がドナー性基（好ましくは置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基）であり、1個が置換もしくは無置換のアリール基であり、1個（好ましくは R^1 ）が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、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合であり、 A_{r^1} が一般式(e)で表される基であり、 A_{r^2} が置換もしくは無置換のアリール基（例えばドナー性を有さない置換もしくは無置換のアリール基、例えば一般式(d)で表される基）、または窒素原子で結合するドナー性基であり、 R^2 がシアノ基であり、 R^1 、 $R^3 \sim R^5$ のうち2個がドナー性基（好ましくは置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基）であり、1個が置換もしくは無置換のアリール基であり、1個（好ましくは R^1 ）が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、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合であり、 A_{r^1} が一般式(d)で表される基であり、 A_{r^2} が置換もしくは無置換のアリール基（例えばドナー性を有さない置換もしくは無置換のアリール基、例えば一般式(d)で表される基）、または窒素原子で結合するドナー性基であり、 R^2 がシアノ基であり、 R^1 、 $R^3 \sim R^5$ のうち3個がドナー性基（好ましくは置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基）であり、1個（好ましくは R^1 ）が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、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合であり、

$A r^1$ が一般式 (e) で表される基であり、 $A r^2$ が置換もしくは無置換のアリール基（例えばドナー性を有さない置換もしくは無置換のアリール基、例えば一般式 (d) で表される基）、または窒素原子で結合するドナー性基であり、 R^2 がシアノ基であり、 R^1 、 $R^3 \sim R^5$ のうち3個がドナー性基（好ましくは置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基）であり、1個（好ましくは R^1 ）が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、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合であり、 $A r^1$ が一般式 (d) で表される基であり、 $A r^2$ が置換もしくは無置換のアリール基（例えばドナー性を有さない置換もしくは無置換のアリール基、例えば一般式 (d) で表される基）、または窒素原子で結合するドナー性基であり、 R^3 がシアノ基であり、 R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^5 のうち2～3個がドナー性基（好ましくは置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基）であり、1～2個（好ましくは少なくとも R^1 ）が水素原子または重水素原子であり、0～1個が置換もしくは無置換のアリール基である。

本発明の好ましい一態様では、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合であり、 $A r^1$ が一般式 (e) で表される基であり、 $A r^2$ が置換もしくは無置換のアリール基（例えばドナー性を有さない置換もしくは無置換のアリール基、例えば一般式 (d) で表される基）、または窒素原子で結合するドナー性基であり、 R^3 がシアノ基であり、 R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^5 のうち2～3個がドナー性基（好ましくは置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基）であり、1～2個（好ましくは少なくとも R^1 ）が水素原子または重水素原子であり、0～1個が置換もしくは無置換のアリール基である。

上記の各好ましい一態様における $A r^2$ は、例えばドナー性を有さない置換もしくは無置換のアリール基である。上記の各好ましい一態様における $A r^2$ は、例えば窒素原子で結合するドナー性基である。上記の各好ましい一態様における $A r^2$ は、例えば一般式 (e) で表される基である。上記の各好ましい一態様における $A r^2$ は、例えば一般式 (f) で表される基である。

[0053] 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く、

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だけで構成される化合物であってもよい。本発明の好ましい一態様では、一般式（１）で表される化合物は、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だけで構成される。また、一般式（１）で表される化合物は、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だけで構成される化合物であってもよい。一般式（１）で表される化合物は、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だけで構成される化合物であってもよい。一般式（１）で表される化合物は、炭素原子、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だけで構成される化合物であってもよい。さらに、一般式（１）で表される化合物は水素原子を含まず、重水素原子を含む化合物であってもよい。

[0054] 本明細書において「置換基群A」とは、重水素原子、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つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基を意味する。

本明細書において「置換基群B」とは、重水素原子、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つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基を意味する。

本明細書において「置換基群C」とは、重水素原子、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つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基を意味する。

本明細書において「置換基群D」とは、重水素原子、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つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基を意味する。

本明細書において「置換基群E」とは、重水素原子、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つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基を意味する。

本明細書において「置換もしくは無置換の」または「置換されていてもよい」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。

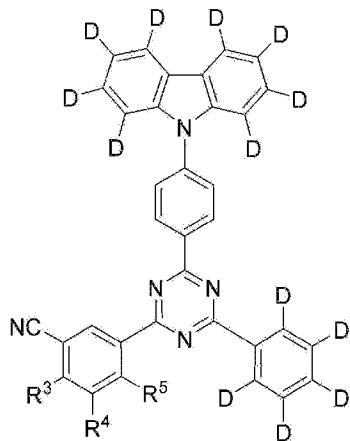
[0055] 以下の表1～4において、一般式(1)で表される化合物の具体例を例示する。ただし、本発明において用いることができる一般式(1)で表される化合物はこれらの具体例によって限定的に解釈されるべきものではない。

表1では、下記一般式(1a)の $R^3 \sim R^5$ を化合物ごとにそれぞれ特定することにより各化合物の構造を個別に示している。すなわち、 Ar^1 が4-(過重水素化カルバゾール-9-イル)フェニル基(D3107)であり、A

r^2 が過重水素化フェニル基（Ar 4 5）であり、 $X^1 \sim X^3$ が窒素原子（N）であり、 L^1 が単結合（L 1）であり、 R^1 が水素原子であり、 R^2 がシアノ基であり、 $R^3 \sim R^5$ が表 1 で特定される基である構造を、化合物 1 ～ 2 4 0 の構造として個別に示している。

[化15]

一般式（1 a）



[表1]

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	No.	R ³	R ⁴	R ⁵	No.	R ³	R ⁴	R ⁵	No.	R ³	R ⁴	R ⁵
1	D1	D1	D1	61	D61	D61	D61	121	D121	D121	D121	181	D181	D181	D181
2	D2	D2	D2	62	D62	D62	D62	122	D122	D122	D122	182	D182	D182	D182
3	D3	D3	D3	63	D63	D63	D63	123	D123	D123	D123	183	D183	D183	D183
4	D4	D4	D4	64	D64	D64	D64	124	D124	D124	D124	184	D184	D184	D184
5	D5	D5	D5	65	D65	D65	D65	125	D125	D125	D125	185	D185	D185	D185
6	D6	D6	D6	66	D66	D66	D66	126	D126	D126	D126	186	D186	D186	D186
7	D7	D7	D7	67	D67	D67	D67	127	D127	D127	D127	187	D187	D187	D187
8	D8	D8	D8	68	D68	D68	D68	128	D128	D128	D128	188	D188	D188	D188
9	D9	D9	D9	69	D69	D69	D69	129	D129	D129	D129	189	D189	D189	D189
10	D10	D10	D10	70	D70	D70	D70	130	D130	D130	D130	190	D190	D190	D190
11	D11	D11	D11	71	D71	D71	D71	131	D131	D131	D131	191	D191	D191	D191
12	D12	D12	D12	72	D72	D72	D72	132	D132	D132	D132	192	D192	D192	D192
13	D13	D13	D13	73	D73	D73	D73	133	D133	D133	D133	193	D193	D193	D193
14	D14	D14	D14	74	D74	D74	D74	134	D134	D134	D134	194	D194	D194	D194
15	D15	D15	D15	75	D75	D75	D75	135	D135	D135	D135	195	D195	D195	D195
16	D16	D16	D16	76	D76	D76	D76	136	D136	D136	D136	196	D196	D196	D196
17	D17	D17	D17	77	D77	D77	D77	137	D137	D137	D137	197	D197	D197	D197
18	D18	D18	D18	78	D78	D78	D78	138	D138	D138	D138	198	D198	D198	D198
19	D19	D19	D19	79	D79	D79	D79	139	D139	D139	D139	199	D199	D199	D199
20	D20	D20	D20	80	D80	D80	D80	140	D140	D140	D140	200	D200	D200	D200
21	D21	D21	D21	81	D81	D81	D81	141	D141	D141	D141	201	D201	D201	D201
22	D22	D22	D22	82	D82	D82	D82	142	D142	D142	D142	202	D202	D202	D202
23	D23	D23	D23	83	D83	D83	D83	143	D143	D143	D143	203	D203	D203	D203
24	D24	D24	D24	84	D84	D84	D84	144	D144	D144	D144	204	D204	D204	D204
25	D25	D25	D25	85	D85	D85	D85	145	D145	D145	D145	205	D205	D205	D205
26	D26	D26	D26	86	D86	D86	D86	146	D146	D146	D146	206	D206	D206	D206
27	D27	D27	D27	87	D87	D87	D87	147	D147	D147	D147	207	D207	D207	D207
28	D28	D28	D28	88	D88	D88	D88	148	D148	D148	D148	208	D208	D208	D208
29	D29	D29	D29	89	D89	D89	D89	149	D149	D149	D149	209	D209	D209	D209
30	D30	D30	D30	90	D90	D90	D90	150	D150	D150	D150	210	D210	D210	D210
31	D31	D31	D31	91	D91	D91	D91	151	D151	D151	D151	211	D211	D211	D211
32	D32	D32	D32	92	D92	D92	D92	152	D152	D152	D152	212	D212	D212	D212
33	D33	D33	D33	93	D93	D93	D93	153	D153	D153	D153	213	D213	D213	D213
34	D34	D34	D34	94	D94	D94	D94	154	D154	D154	D154	214	D214	D214	D214
35	D35	D35	D35	95	D95	D95	D95	155	D155	D155	D155	215	D215	D215	D215
36	D36	D36	D36	96	D96	D96	D96	156	D156	D156	D156	216	D216	D216	D216
37	D37	D37	D37	97	D97	D97	D97	157	D157	D157	D157	217	D217	D217	D217
38	D38	D38	D38	98	D98	D98	D98	158	D158	D158	D158	218	D218	D218	D218
39	D39	D39	D39	99	D99	D99	D99	159	D159	D159	D159	219	D219	D219	D219
40	D40	D40	D40	100	D100	D100	D100	160	D160	D160	D160	220	D220	D220	D220
41	D41	D41	D41	101	D101	D101	D101	161	D161	D161	D161	221	D221	D221	D221
42	D42	D42	D42	102	D102	D102	D102	162	D162	D162	D162	222	D222	D222	D222
43	D43	D43	D43	103	D103	D103	D103	163	D163	D163	D163	223	D223	D223	D223
44	D44	D44	D44	104	D104	D104	D104	164	D164	D164	D164	224	D224	D224	D224
45	D45	D45	D45	105	D105	D105	D105	165	D165	D165	D165	225	D225	D225	D225
46	D46	D46	D46	106	D106	D106	D106	166	D166	D166	D166	226	D226	D226	D226
47	D47	D47	D47	107	D107	D107	D107	167	D167	D167	D167	227	D227	D227	D227
48	D48	D48	D48	108	D108	D108	D108	168	D168	D168	D168	228	D228	D228	D228
49	D49	D49	D49	109	D109	D109	D109	169	D169	D169	D169	229	D229	D229	D229
50	D50	D50	D50	110	D110	D110	D110	170	D170	D170	D170	230	D230	D230	D230
51	D51	D51	D51	111	D111	D111	D111	171	D171	D171	D171	231	D231	D231	D231
52	D52	D52	D52	112	D112	D112	D112	172	D172	D172	D172	232	D232	D232	D232
53	D53	D53	D53	113	D113	D113	D113	173	D173	D173	D173	233	D233	D233	D233
54	D54	D54	D54	114	D114	D114	D114	174	D174	D174	D174	234	D234	D234	D234
55	D55	D55	D55	115	D115	D115	D115	175	D175	D175	D175	235	D235	D235	D235
56	D56	D56	D56	116	D116	D116	D116	176	D176	D176	D176	236	D236	D236	D236
57	D57	D57	D57	117	D117	D117	D117	177	D177	D177	D177	237	D237	D237	D237
58	D58	D58	D58	118	D118	D118	D118	178	D178	D178	D178	238	D238	D238	D238
59	D59	D59	D59	119	D119	D119	D119	179	D179	D179	D179	239	D239	D239	D239
60	D60	D60	D60	120	D120	D120	D120	180	D180	D180	D180	240	D240	D240	D240

[0056] 表2では各段に複数の化合物の $R^3 \sim R^5$ をまとめて表示することにより、化合物1～1594600の構造を示している。例えば、表2の化合物1～240の段であれば、 $R^3 \sim R^5$ が同一であり、D1～D240であるものを、順に化合物1～240としている。すなわち、表2の化合物1～240の段は、表1で特定される化合物1～240をまとめて1段に表示したものである。同様にして、表2の化合物241～5950の段であれば、 $R^3 \sim R^5$ が同一であり、D241～D5950であるものを、順に化合物241～5950としている。表2の化合物5951～11900の段は、 R^4 がH（水素原子）に固定されていて、 R^3 と R^5 が同一でありD1～D5950であるものを、順に化合物5951～11900としている。表2の化合物11901～17850の段は、 R^4 がAr1に固定されていて、 R^3 と R^5 が同一でありD1～D5950であるものを、順に化合物11901～17850としている。同じ要領により、表2の化合物17851～1594600も特定している。

[表2-1]

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
1 ~ 240	D1~D240	D1~D240	D1~D240	R ³ = R ⁴ = R ⁵
241 ~ 5950	D241~D5950	D241~D5950	D241~D5950	
5951 ~ 11900	D1~D5950	H	D1~D5950	
11901 ~ 17850	D1~D5950	Ar1	D1~D5950	
17851 ~ 23800	D1~D5950	Ar2	D1~D5950	
23801 ~ 29750	D1~D5950	Ar3	D1~D5950	
29751 ~ 35700	D1~D5950	Ar4	D1~D5950	
35701 ~ 41650	D1~D5950	Ar5	D1~D5950	
41651 ~ 47600	D1~D5950	Ar6	D1~D5950	
47601 ~ 53550	D1~D5950	Ar7	D1~D5950	
53551 ~ 59500	D1~D5950	Ar8	D1~D5950	
59501 ~ 65450	D1~D5950	Ar9	D1~D5950	
65451 ~ 71400	D1~D5950	Ar10	D1~D5950	
71401 ~ 77350	D1~D5950	Ar11	D1~D5950	
77351 ~ 83300	D1~D5950	Ar12	D1~D5950	
83301 ~ 89250	D1~D5950	Ar13	D1~D5950	
89251 ~ 95200	D1~D5950	Ar14	D1~D5950	
95201 ~ 101150	D1~D5950	Ar15	D1~D5950	
101151 ~ 107100	D1~D5950	Ar16	D1~D5950	
107101 ~ 113050	D1~D5950	Ar17	D1~D5950	
113051 ~ 119000	D1~D5950	Ar18	D1~D5950	R ³ = R ⁵
119001 ~ 124950	D1~D5950	Ar19	D1~D5950	
124951 ~ 130900	D1~D5950	Ar20	D1~D5950	
130901 ~ 136850	D1~D5950	Ar21	D1~D5950	
136851 ~ 142800	D1~D5950	Ar22	D1~D5950	
142801 ~ 148750	D1~D5950	Ar23	D1~D5950	
148751 ~ 154700	D1~D5950	Ar24	D1~D5950	
154701 ~ 160650	D1~D5950	Ar25	D1~D5950	
160651 ~ 166600	D1~D5950	Ar26	D1~D5950	
166601 ~ 172550	D1~D5950	Ar27	D1~D5950	
172551 ~ 178500	D1~D5950	Ar28	D1~D5950	
178501 ~ 184450	D1~D5950	Ar29	D1~D5950	
184451 ~ 190400	D1~D5950	Ar30	D1~D5950	
190401 ~ 196350	D1~D5950	Ar31	D1~D5950	
196351 ~ 202300	D1~D5950	Ar32	D1~D5950	
202301 ~ 208250	D1~D5950	Ar33	D1~D5950	
208251 ~ 214200	D1~D5950	Ar34	D1~D5950	
214201 ~ 220150	D1~D5950	Ar35	D1~D5950	
220151 ~ 226100	D1~D5950	Ar36	D1~D5950	
226101 ~ 232050	D1~D5950	Ar37	D1~D5950	
232051 ~ 238000	D1~D5950	Ar38	D1~D5950	
238001 ~ 243950	D1~D5950	Ar39	D1~D5950	
243951 ~ 249900	D1~D5950	Ar40	D1~D5950	
249901 ~ 255850	D1~D5950	Ar41	D1~D5950	
255851 ~ 261800	D1~D5950	Ar42	D1~D5950	
261801 ~ 267750	D1~D5950	Ar43	D1~D5950	
267751 ~ 273700	D1~D5950	Ar44	D1~D5950	
273701 ~ 279650	D1~D5950	Ar45	D1~D5950	
279651 ~ 285600	D1~D5950	Ar46	D1~D5950	
285601 ~ 291550	D1~D5950	Ar47	D1~D5950	
291551 ~ 297500	D1~D5950	Ar48	D1~D5950	
297501 ~ 303450	D1~D5950	Ar49	D1~D5950	
303451 ~ 309400	D1~D5950	Ar50	D1~D5950	
309401 ~ 315350	D1~D5950	Ar51	D1~D5950	
315351 ~ 321300	D1~D5950	Ar52	D1~D5950	
321301 ~ 327250	D1~D5950	Ar53	D1~D5950	
327251 ~ 333200	D1~D5950	Ar54	D1~D5950	
333201 ~ 339150	D1~D5950	Ar55	D1~D5950	
339151 ~ 345100	D1~D5950	Ar56	D1~D5950	
345101 ~ 351050	D1~D5950	Ar57	D1~D5950	

[表2-2]

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
351051 ~ 357000	D1~D5950	Ar58	D1~D5950	R ³ = R ⁵
357001 ~ 362950	D1~D5950	Ar59	D1~D5950	
362951 ~ 368900	D1~D5950	Ar60	D1~D5950	
368901 ~ 374850	D1~D5950	Ar61	D1~D5950	
374851 ~ 380800	D1~D5950	Ar62	D1~D5950	
380801 ~ 386750	D1~D5950	Ar63	D1~D5950	
386751 ~ 392700	D1~D5950	Ar64	D1~D5950	
392701 ~ 398650	D1~D5950	Ar65	D1~D5950	
398651 ~ 404600	D1~D5950	Ar66	D1~D5950	
404601 ~ 410550	D1~D5950	Ar67	D1~D5950	
410551 ~ 416500	D1~D5950	Ar68	D1~D5950	
416501 ~ 422450	D1~D5950	Ar69	D1~D5950	
422451 ~ 428400	D1~D5950	Ar70	D1~D5950	
428401 ~ 434350	D1~D5950	Ar71	D1~D5950	
434351 ~ 440300	D1~D5950	Ar72	D1~D5950	
440301 ~ 446250	D1~D5950	Ar73	D1~D5950	
446251 ~ 452200	D1~D5950	Ar74	D1~D5950	
452201 ~ 458150	D1~D5950	Ar75	D1~D5950	
458151 ~ 464100	D1~D5950	Ar76	D1~D5950	
464101 ~ 470050	D1~D5950	Ar77	D1~D5950	
470051 ~ 476000	D1~D5950	Ar78	D1~D5950	
476001 ~ 481950	D1~D5950	Ar79	D1~D5950	
481951 ~ 487900	D1~D5950	Ar80	D1~D5950	
487901 ~ 493850	D1~D5950	Ar81	D1~D5950	
493851 ~ 499800	D1~D5950	Ar82	D1~D5950	
499801 ~ 505750	D1~D5950	Ar83	D1~D5950	
505751 ~ 511700	D1~D5950	Ar84	D1~D5950	
511701 ~ 517650	D1~D5950	Ar85	D1~D5950	
517651 ~ 523600	D1~D5950	Ar86	D1~D5950	
523601 ~ 529550	D1~D5950	Ar87	D1~D5950	
529551 ~ 535500	D1~D5950	Ar88	D1~D5950	
535501 ~ 541450	D1~D5950	D1~D5950	H	R ³ = R ⁴
541451 ~ 547400	D1~D5950	D1~D5950	Ar1	
547401 ~ 553350	D1~D5950	D1~D5950	Ar2	
553351 ~ 559300	D1~D5950	D1~D5950	Ar3	
559301 ~ 565250	D1~D5950	D1~D5950	Ar4	
565251 ~ 571200	D1~D5950	D1~D5950	Ar5	
571201 ~ 577150	D1~D5950	D1~D5950	Ar6	
577151 ~ 583100	D1~D5950	D1~D5950	Ar7	
583101 ~ 589050	D1~D5950	D1~D5950	Ar8	
589051 ~ 595000	D1~D5950	D1~D5950	Ar9	
595001 ~ 600950	D1~D5950	D1~D5950	Ar10	
600951 ~ 606900	D1~D5950	D1~D5950	Ar11	
606901 ~ 612850	D1~D5950	D1~D5950	Ar12	
612851 ~ 618800	D1~D5950	D1~D5950	Ar13	
618801 ~ 624750	D1~D5950	D1~D5950	Ar14	
624751 ~ 630700	D1~D5950	D1~D5950	Ar15	
630701 ~ 636650	D1~D5950	D1~D5950	Ar16	
636651 ~ 642600	D1~D5950	D1~D5950	Ar17	
642601 ~ 648550	D1~D5950	D1~D5950	Ar18	
648551 ~ 654500	D1~D5950	D1~D5950	Ar19	
654501 ~ 660450	D1~D5950	D1~D5950	Ar20	
660451 ~ 666400	D1~D5950	D1~D5950	Ar21	
666401 ~ 672350	D1~D5950	D1~D5950	Ar22	
672351 ~ 678300	D1~D5950	D1~D5950	Ar23	
678301 ~ 684250	D1~D5950	D1~D5950	Ar24	
684251 ~ 690200	D1~D5950	D1~D5950	Ar25	
690201 ~ 696150	D1~D5950	D1~D5950	Ar26	
696151 ~ 702100	D1~D5950	D1~D5950	Ar27	
702101 ~ 708050	D1~D5950	D1~D5950	Ar28	

[表2-3]

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
708051 ~ 714000	D1~D5950	D1~D5950	Ar29	R ³ = R ⁴
714001 ~ 719950	D1~D5950	D1~D5950	Ar30	
719951 ~ 725900	D1~D5950	D1~D5950	Ar31	
725901 ~ 731850	D1~D5950	D1~D5950	Ar32	
731851 ~ 737800	D1~D5950	D1~D5950	Ar33	
737801 ~ 743750	D1~D5950	D1~D5950	Ar34	
743751 ~ 749700	D1~D5950	D1~D5950	Ar35	
749701 ~ 755650	D1~D5950	D1~D5950	Ar36	
755651 ~ 761600	D1~D5950	D1~D5950	Ar37	
761601 ~ 767550	D1~D5950	D1~D5950	Ar38	
767551 ~ 773500	D1~D5950	D1~D5950	Ar39	
773501 ~ 779450	D1~D5950	D1~D5950	Ar40	
779451 ~ 785400	D1~D5950	D1~D5950	Ar41	
785401 ~ 791350	D1~D5950	D1~D5950	Ar42	
791351 ~ 797300	D1~D5950	D1~D5950	Ar43	
797301 ~ 803250	D1~D5950	D1~D5950	Ar44	
803251 ~ 809200	D1~D5950	D1~D5950	Ar45	
809201 ~ 815150	D1~D5950	D1~D5950	Ar46	
815151 ~ 821100	D1~D5950	D1~D5950	Ar47	
821101 ~ 827050	D1~D5950	D1~D5950	Ar48	
827051 ~ 833000	D1~D5950	D1~D5950	Ar49	
833001 ~ 838950	D1~D5950	D1~D5950	Ar50	
838951 ~ 844900	D1~D5950	D1~D5950	Ar51	
844901 ~ 850850	D1~D5950	D1~D5950	Ar52	
850851 ~ 856800	D1~D5950	D1~D5950	Ar53	
856801 ~ 862750	D1~D5950	D1~D5950	Ar54	
862751 ~ 868700	D1~D5950	D1~D5950	Ar55	
868701 ~ 874650	D1~D5950	D1~D5950	Ar56	
874651 ~ 880600	D1~D5950	D1~D5950	Ar57	
880601 ~ 886550	D1~D5950	D1~D5950	Ar58	
886551 ~ 892500	D1~D5950	D1~D5950	Ar59	
892501 ~ 898450	D1~D5950	D1~D5950	Ar60	
898451 ~ 904400	D1~D5950	D1~D5950	Ar61	
904401 ~ 910350	D1~D5950	D1~D5950	Ar62	
910351 ~ 916300	D1~D5950	D1~D5950	Ar63	
916301 ~ 922250	D1~D5950	D1~D5950	Ar64	
922251 ~ 928200	D1~D5950	D1~D5950	Ar65	
928201 ~ 934150	D1~D5950	D1~D5950	Ar66	
934151 ~ 940100	D1~D5950	D1~D5950	Ar67	
940101 ~ 946050	D1~D5950	D1~D5950	Ar68	
946051 ~ 952000	D1~D5950	D1~D5950	Ar69	
952001 ~ 957950	D1~D5950	D1~D5950	Ar70	
957951 ~ 963900	D1~D5950	D1~D5950	Ar71	
963901 ~ 969850	D1~D5950	D1~D5950	Ar72	
969851 ~ 975800	D1~D5950	D1~D5950	Ar73	
975801 ~ 981750	D1~D5950	D1~D5950	Ar74	
981751 ~ 987700	D1~D5950	D1~D5950	Ar75	
987701 ~ 993650	D1~D5950	D1~D5950	Ar76	
993651 ~ 999600	D1~D5950	D1~D5950	Ar77	
999601 ~ 1005550	D1~D5950	D1~D5950	Ar78	
1005551 ~ 1011500	D1~D5950	D1~D5950	Ar79	
1011501 ~ 1017450	D1~D5950	D1~D5950	Ar80	
1017451 ~ 1023400	D1~D5950	D1~D5950	Ar81	
1023401 ~ 1029350	D1~D5950	D1~D5950	Ar82	
1029351 ~ 1035300	D1~D5950	D1~D5950	Ar83	
1035301 ~ 1041250	D1~D5950	D1~D5950	Ar84	
1041251 ~ 1047200	D1~D5950	D1~D5950	Ar85	
1047201 ~ 1053150	D1~D5950	D1~D5950	Ar86	
1053151 ~ 1059100	D1~D5950	D1~D5950	Ar87	
1059101 ~ 1065050	D1~D5950	D1~D5950	Ar88	

[表2-4]

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
1065051 ~ 1071000	H	D1~D5950	D1~D5950	R ⁴ = R ⁵
1071001 ~ 1076950	Ar1	D1~D5950	D1~D5950	
1076951 ~ 1082900	Ar2	D1~D5950	D1~D5950	
1082901 ~ 1088850	Ar3	D1~D5950	D1~D5950	
1088851 ~ 1094800	Ar4	D1~D5950	D1~D5950	
1094801 ~ 1100750	Ar5	D1~D5950	D1~D5950	
1100751 ~ 1106700	Ar6	D1~D5950	D1~D5950	
1106701 ~ 1112650	Ar7	D1~D5950	D1~D5950	
1112651 ~ 1118600	Ar8	D1~D5950	D1~D5950	
1118601 ~ 1124550	Ar9	D1~D5950	D1~D5950	
1124551 ~ 1130500	Ar10	D1~D5950	D1~D5950	
1130501 ~ 1136450	Ar11	D1~D5950	D1~D5950	
1136451 ~ 1142400	Ar12	D1~D5950	D1~D5950	
1142401 ~ 1148350	Ar13	D1~D5950	D1~D5950	
1148351 ~ 1154300	Ar14	D1~D5950	D1~D5950	
1154301 ~ 1160250	Ar15	D1~D5950	D1~D5950	
1160251 ~ 1166200	Ar16	D1~D5950	D1~D5950	
1166201 ~ 1172150	Ar17	D1~D5950	D1~D5950	
1172151 ~ 1178100	Ar18	D1~D5950	D1~D5950	
1178101 ~ 1184050	Ar19	D1~D5950	D1~D5950	
1184051 ~ 1190000	Ar20	D1~D5950	D1~D5950	
1190001 ~ 1195950	Ar21	D1~D5950	D1~D5950	
1195951 ~ 1201900	Ar22	D1~D5950	D1~D5950	
1201901 ~ 1207850	Ar23	D1~D5950	D1~D5950	
1207851 ~ 1213800	Ar24	D1~D5950	D1~D5950	
1213801 ~ 1219750	Ar25	D1~D5950	D1~D5950	
1219751 ~ 1225700	Ar26	D1~D5950	D1~D5950	
1225701 ~ 1231650	Ar27	D1~D5950	D1~D5950	
1231651 ~ 1237600	Ar28	D1~D5950	D1~D5950	
1237601 ~ 1243550	Ar29	D1~D5950	D1~D5950	
1243551 ~ 1249500	Ar30	D1~D5950	D1~D5950	
1249501 ~ 1255450	Ar31	D1~D5950	D1~D5950	
1255451 ~ 1261400	Ar32	D1~D5950	D1~D5950	
1261401 ~ 1267350	Ar33	D1~D5950	D1~D5950	
1267351 ~ 1273300	Ar34	D1~D5950	D1~D5950	
1273301 ~ 1279250	Ar35	D1~D5950	D1~D5950	
1279251 ~ 1285200	Ar36	D1~D5950	D1~D5950	
1285201 ~ 1291150	Ar37	D1~D5950	D1~D5950	
1291151 ~ 1297100	Ar38	D1~D5950	D1~D5950	
1297101 ~ 1303050	Ar39	D1~D5950	D1~D5950	
1303051 ~ 1309000	Ar40	D1~D5950	D1~D5950	
1309001 ~ 1314950	Ar41	D1~D5950	D1~D5950	
1314951 ~ 1320900	Ar42	D1~D5950	D1~D5950	
1320901 ~ 1326850	Ar43	D1~D5950	D1~D5950	
1326851 ~ 1332800	Ar44	D1~D5950	D1~D5950	
1332801 ~ 1338750	Ar45	D1~D5950	D1~D5950	
1338751 ~ 1344700	Ar46	D1~D5950	D1~D5950	
1344701 ~ 1350650	Ar47	D1~D5950	D1~D5950	
1350651 ~ 1356600	Ar48	D1~D5950	D1~D5950	
1356601 ~ 1362550	Ar49	D1~D5950	D1~D5950	
1362551 ~ 1368500	Ar50	D1~D5950	D1~D5950	
1368501 ~ 1374450	Ar51	D1~D5950	D1~D5950	
1374451 ~ 1380400	Ar52	D1~D5950	D1~D5950	
1380401 ~ 1386350	Ar53	D1~D5950	D1~D5950	
1386351 ~ 1392300	Ar54	D1~D5950	D1~D5950	
1392301 ~ 1398250	Ar55	D1~D5950	D1~D5950	
1398251 ~ 1404200	Ar56	D1~D5950	D1~D5950	
1404201 ~ 1410150	Ar57	D1~D5950	D1~D5950	
1410151 ~ 1416100	Ar58	D1~D5950	D1~D5950	
1416101 ~ 1422050	Ar59	D1~D5950	D1~D5950	

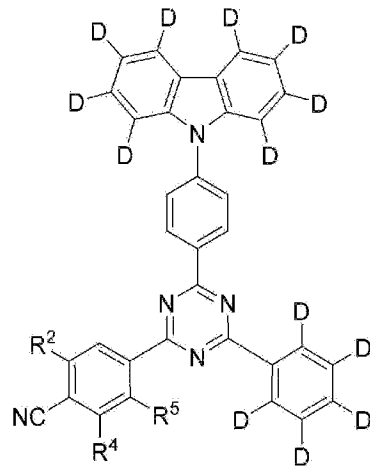
[表2-5]

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
1422051 ~ 1428000	Ar60	D1~D5950	D1~D5950	R ⁴ = R ⁵
1428001 ~ 1433950	Ar61	D1~D5950	D1~D5950	
1433951 ~ 1439900	Ar62	D1~D5950	D1~D5950	
1439901 ~ 1445850	Ar63	D1~D5950	D1~D5950	
1445851 ~ 1451800	Ar64	D1~D5950	D1~D5950	
1451801 ~ 1457750	Ar65	D1~D5950	D1~D5950	
1457751 ~ 1463700	Ar66	D1~D5950	D1~D5950	
1463701 ~ 1469650	Ar67	D1~D5950	D1~D5950	
1469651 ~ 1475600	Ar68	D1~D5950	D1~D5950	
1475601 ~ 1481550	Ar69	D1~D5950	D1~D5950	
1481551 ~ 1487500	Ar70	D1~D5950	D1~D5950	
1487501 ~ 1493450	Ar71	D1~D5950	D1~D5950	
1493451 ~ 1499400	Ar72	D1~D5950	D1~D5950	
1499401 ~ 1505350	Ar73	D1~D5950	D1~D5950	
1505351 ~ 1511300	Ar74	D1~D5950	D1~D5950	
1511301 ~ 1517250	Ar75	D1~D5950	D1~D5950	
1517251 ~ 1523200	Ar76	D1~D5950	D1~D5950	
1523201 ~ 1529150	Ar77	D1~D5950	D1~D5950	
1529151 ~ 1535100	Ar78	D1~D5950	D1~D5950	
1535101 ~ 1541050	Ar79	D1~D5950	D1~D5950	
1541051 ~ 1547000	Ar80	D1~D5950	D1~D5950	
1547001 ~ 1552950	Ar81	D1~D5950	D1~D5950	
1552951 ~ 1558900	Ar82	D1~D5950	D1~D5950	
1558901 ~ 1564850	Ar83	D1~D5950	D1~D5950	
1564851 ~ 1570800	Ar84	D1~D5950	D1~D5950	
1570801 ~ 1576750	Ar85	D1~D5950	D1~D5950	
1576751 ~ 1582700	Ar86	D1~D5950	D1~D5950	
1582701 ~ 1588650	Ar87	D1~D5950	D1~D5950	
1588651 ~ 1594600	Ar88	D1~D5950	D1~D5950	

[0057] 次に下記一般式（1 b）で表される構造を有する化合物の具体例を表3に示す。表3では、表2と同じ要領で各化合物の構造を示している。

[化16]

一般式（1 b）



[表3-1]

No.	R^2	R^4	R^5	=
1594601 ~ 1594840	D1~D240	D1~D240	D1~D240	$R^2 = R^4 = R^5$
1594841 ~ 1600550	D241~D5950	D241~D5950	D241~D5950	
1600551 ~ 1606500	D1~D5950	H	D1~D5950	
1606501 ~ 1612450	D1~D5950	Ar1	D1~D5950	$R^2 = R^5$
1612451 ~ 1618400	D1~D5950	Ar2	D1~D5950	
1618401 ~ 1624350	D1~D5950	Ar3	D1~D5950	
1624351 ~ 1630300	D1~D5950	Ar4	D1~D5950	
1630301 ~ 1636250	D1~D5950	Ar5	D1~D5950	
1636251 ~ 1642200	D1~D5950	Ar6	D1~D5950	
1642201 ~ 1648150	D1~D5950	Ar7	D1~D5950	
1648151 ~ 1654100	D1~D5950	Ar8	D1~D5950	
1654101 ~ 1660050	D1~D5950	Ar9	D1~D5950	
1660051 ~ 1666000	D1~D5950	Ar10	D1~D5950	
1666001 ~ 1671950	D1~D5950	Ar11	D1~D5950	
1671951 ~ 1677900	D1~D5950	Ar12	D1~D5950	
1677901 ~ 1683850	D1~D5950	Ar13	D1~D5950	
1683851 ~ 1689800	D1~D5950	Ar14	D1~D5950	
1689801 ~ 1695750	D1~D5950	Ar15	D1~D5950	
1695751 ~ 1701700	D1~D5950	Ar16	D1~D5950	
1701701 ~ 1707650	D1~D5950	Ar17	D1~D5950	
1707651 ~ 1713600	D1~D5950	Ar18	D1~D5950	
1713601 ~ 1719550	D1~D5950	Ar19	D1~D5950	
1719551 ~ 1725500	D1~D5950	Ar20	D1~D5950	
1725501 ~ 1731450	D1~D5950	Ar21	D1~D5950	
1731451 ~ 1737400	D1~D5950	Ar22	D1~D5950	
1737401 ~ 1743350	D1~D5950	Ar23	D1~D5950	
1743351 ~ 1749300	D1~D5950	Ar24	D1~D5950	
1749301 ~ 1755250	D1~D5950	Ar25	D1~D5950	
1755251 ~ 1761200	D1~D5950	Ar26	D1~D5950	
1761201 ~ 1767150	D1~D5950	Ar27	D1~D5950	
1767151 ~ 1773100	D1~D5950	Ar28	D1~D5950	
1773101 ~ 1779050	D1~D5950	Ar29	D1~D5950	
1779051 ~ 1785000	D1~D5950	Ar30	D1~D5950	
1785001 ~ 1790950	D1~D5950	Ar31	D1~D5950	
1790951 ~ 1796900	D1~D5950	Ar32	D1~D5950	
1796901 ~ 1802850	D1~D5950	Ar33	D1~D5950	
1802851 ~ 1808800	D1~D5950	Ar34	D1~D5950	
1808801 ~ 1814750	D1~D5950	Ar35	D1~D5950	
1814751 ~ 1820700	D1~D5950	Ar36	D1~D5950	
1820701 ~ 1826650	D1~D5950	Ar37	D1~D5950	
1826651 ~ 1832600	D1~D5950	Ar38	D1~D5950	
1832601 ~ 1838550	D1~D5950	Ar39	D1~D5950	
1838551 ~ 1844500	D1~D5950	Ar40	D1~D5950	
1844501 ~ 1850450	D1~D5950	Ar41	D1~D5950	
1850451 ~ 1856400	D1~D5950	Ar42	D1~D5950	
1856401 ~ 1862350	D1~D5950	Ar43	D1~D5950	
1862351 ~ 1868300	D1~D5950	Ar44	D1~D5950	
1868301 ~ 1874250	D1~D5950	Ar45	D1~D5950	
1874251 ~ 1880200	D1~D5950	Ar46	D1~D5950	
1880201 ~ 1886150	D1~D5950	Ar47	D1~D5950	
1886151 ~ 1892100	D1~D5950	Ar48	D1~D5950	
1892101 ~ 1898050	D1~D5950	Ar49	D1~D5950	
1898051 ~ 1904000	D1~D5950	Ar50	D1~D5950	
1904001 ~ 1909950	D1~D5950	Ar51	D1~D5950	
1909951 ~ 1915900	D1~D5950	Ar52	D1~D5950	
1915901 ~ 1921850	D1~D5950	Ar53	D1~D5950	
1921851 ~ 1927800	D1~D5950	Ar54	D1~D5950	
1927801 ~ 1933750	D1~D5950	Ar55	D1~D5950	
1933751 ~ 1939700	D1~D5950	Ar56	D1~D5950	
1939701 ~ 1945650	D1~D5950	Ar57	D1~D5950	

[表3-2]

No.	R ²	R ⁴	R ⁵	≡
1945651 ~ 1951600	D1~D5950	Ar58	D1~D5950	R ² = R ⁵
1951601 ~ 1957550	D1~D5950	Ar59	D1~D5950	
1957551 ~ 1963500	D1~D5950	Ar60	D1~D5950	
1963501 ~ 1969450	D1~D5950	Ar61	D1~D5950	
1969451 ~ 1975400	D1~D5950	Ar62	D1~D5950	
1975401 ~ 1981350	D1~D5950	Ar63	D1~D5950	
1981351 ~ 1987300	D1~D5950	Ar64	D1~D5950	
1987301 ~ 1993250	D1~D5950	Ar65	D1~D5950	
1993251 ~ 1999200	D1~D5950	Ar66	D1~D5950	
1999201 ~ 2005150	D1~D5950	Ar67	D1~D5950	
2005151 ~ 2011100	D1~D5950	Ar68	D1~D5950	
2011101 ~ 2017050	D1~D5950	Ar69	D1~D5950	
2017051 ~ 2023000	D1~D5950	Ar70	D1~D5950	
2023001 ~ 2028950	D1~D5950	Ar71	D1~D5950	
2028951 ~ 2034900	D1~D5950	Ar72	D1~D5950	
2034901 ~ 2040850	D1~D5950	Ar73	D1~D5950	
2040851 ~ 2046800	D1~D5950	Ar74	D1~D5950	
2046801 ~ 2052750	D1~D5950	Ar75	D1~D5950	
2052751 ~ 2058700	D1~D5950	Ar76	D1~D5950	
2058701 ~ 2064650	D1~D5950	Ar77	D1~D5950	
2064651 ~ 2070600	D1~D5950	Ar78	D1~D5950	
2070601 ~ 2076550	D1~D5950	Ar79	D1~D5950	
2076551 ~ 2082500	D1~D5950	Ar80	D1~D5950	
2082501 ~ 2088450	D1~D5950	Ar81	D1~D5950	
2088451 ~ 2094400	D1~D5950	Ar82	D1~D5950	
2094401 ~ 2100350	D1~D5950	Ar83	D1~D5950	
2100351 ~ 2106300	D1~D5950	Ar84	D1~D5950	
2106301 ~ 2112250	D1~D5950	Ar85	D1~D5950	
2112251 ~ 2118200	D1~D5950	Ar86	D1~D5950	
2118201 ~ 2124150	D1~D5950	Ar87	D1~D5950	
2124151 ~ 2130100	D1~D5950	Ar88	D1~D5950	
2130101 ~ 2136050	D1~D5950	D1~D5950	H	R ² = R ⁴
2136051 ~ 2142000	D1~D5950	D1~D5950	Ar1	
2142001 ~ 2147950	D1~D5950	D1~D5950	Ar2	
2147951 ~ 2153900	D1~D5950	D1~D5950	Ar3	
2153901 ~ 2159850	D1~D5950	D1~D5950	Ar4	
2159851 ~ 2165800	D1~D5950	D1~D5950	Ar5	
2165801 ~ 2171750	D1~D5950	D1~D5950	Ar6	
2171751 ~ 2177700	D1~D5950	D1~D5950	Ar7	
2177701 ~ 2183650	D1~D5950	D1~D5950	Ar8	
2183651 ~ 2189600	D1~D5950	D1~D5950	Ar9	
2189601 ~ 2195550	D1~D5950	D1~D5950	Ar10	
2195551 ~ 2201500	D1~D5950	D1~D5950	Ar11	
2201501 ~ 2207450	D1~D5950	D1~D5950	Ar12	
2207451 ~ 2213400	D1~D5950	D1~D5950	Ar13	
2213401 ~ 2219350	D1~D5950	D1~D5950	Ar14	
2219351 ~ 2225300	D1~D5950	D1~D5950	Ar15	
2225301 ~ 2231250	D1~D5950	D1~D5950	Ar16	
2231251 ~ 2237200	D1~D5950	D1~D5950	Ar17	
2237201 ~ 2243150	D1~D5950	D1~D5950	Ar18	
2243151 ~ 2249100	D1~D5950	D1~D5950	Ar19	
2249101 ~ 2255050	D1~D5950	D1~D5950	Ar20	
2255051 ~ 2261000	D1~D5950	D1~D5950	Ar21	
2261001 ~ 2266950	D1~D5950	D1~D5950	Ar22	
2266951 ~ 2272900	D1~D5950	D1~D5950	Ar23	
2272901 ~ 2278850	D1~D5950	D1~D5950	Ar24	
2278851 ~ 2284800	D1~D5950	D1~D5950	Ar25	
2284801 ~ 2290750	D1~D5950	D1~D5950	Ar26	
2290751 ~ 2296700	D1~D5950	D1~D5950	Ar27	
2296701 ~ 2302650	D1~D5950	D1~D5950	Ar28	

[表3-3]

No.	R ²	R ⁴	R ⁵	=
2302651 ~ 2308600	D1~D5950	D1~D5950	Ar29	R ² = R ⁴
2308601 ~ 2314550	D1~D5950	D1~D5950	Ar30	
2314551 ~ 2320500	D1~D5950	D1~D5950	Ar31	
2320501 ~ 2326450	D1~D5950	D1~D5950	Ar32	
2326451 ~ 2332400	D1~D5950	D1~D5950	Ar33	
2332401 ~ 2338350	D1~D5950	D1~D5950	Ar34	
2338351 ~ 2344300	D1~D5950	D1~D5950	Ar35	
2344301 ~ 2350250	D1~D5950	D1~D5950	Ar36	
2350251 ~ 2356200	D1~D5950	D1~D5950	Ar37	
2356201 ~ 2362150	D1~D5950	D1~D5950	Ar38	
2362151 ~ 2368100	D1~D5950	D1~D5950	Ar39	
2368101 ~ 2374050	D1~D5950	D1~D5950	Ar40	
2374051 ~ 2380000	D1~D5950	D1~D5950	Ar41	
2380001 ~ 2385950	D1~D5950	D1~D5950	Ar42	
2385951 ~ 2391900	D1~D5950	D1~D5950	Ar43	
2391901 ~ 2397850	D1~D5950	D1~D5950	Ar44	
2397851 ~ 2403800	D1~D5950	D1~D5950	Ar45	
2403801 ~ 2409750	D1~D5950	D1~D5950	Ar46	
2409751 ~ 2415700	D1~D5950	D1~D5950	Ar47	
2415701 ~ 2421650	D1~D5950	D1~D5950	Ar48	
2421651 ~ 2427600	D1~D5950	D1~D5950	Ar49	
2427601 ~ 2433550	D1~D5950	D1~D5950	Ar50	
2433551 ~ 2439500	D1~D5950	D1~D5950	Ar51	
2439501 ~ 2445450	D1~D5950	D1~D5950	Ar52	
2445451 ~ 2451400	D1~D5950	D1~D5950	Ar53	
2451401 ~ 2457350	D1~D5950	D1~D5950	Ar54	
2457351 ~ 2463300	D1~D5950	D1~D5950	Ar55	
2463301 ~ 2469250	D1~D5950	D1~D5950	Ar56	
2469251 ~ 2475200	D1~D5950	D1~D5950	Ar57	
2475201 ~ 2481150	D1~D5950	D1~D5950	Ar58	
2481151 ~ 2487100	D1~D5950	D1~D5950	Ar59	
2487101 ~ 2493050	D1~D5950	D1~D5950	Ar60	
2493051 ~ 2499000	D1~D5950	D1~D5950	Ar61	
2499001 ~ 2504950	D1~D5950	D1~D5950	Ar62	
2504951 ~ 2510900	D1~D5950	D1~D5950	Ar63	
2510901 ~ 2516850	D1~D5950	D1~D5950	Ar64	
2516851 ~ 2522800	D1~D5950	D1~D5950	Ar65	
2522801 ~ 2528750	D1~D5950	D1~D5950	Ar66	
2528751 ~ 2534700	D1~D5950	D1~D5950	Ar67	
2534701 ~ 2540650	D1~D5950	D1~D5950	Ar68	
2540651 ~ 2546600	D1~D5950	D1~D5950	Ar69	
2546601 ~ 2552550	D1~D5950	D1~D5950	Ar70	
2552551 ~ 2558500	D1~D5950	D1~D5950	Ar71	
2558501 ~ 2564450	D1~D5950	D1~D5950	Ar72	
2564451 ~ 2570400	D1~D5950	D1~D5950	Ar73	
2570401 ~ 2576350	D1~D5950	D1~D5950	Ar74	
2576351 ~ 2582300	D1~D5950	D1~D5950	Ar75	
2582301 ~ 2588250	D1~D5950	D1~D5950	Ar76	
2588251 ~ 2594200	D1~D5950	D1~D5950	Ar77	
2594201 ~ 2600150	D1~D5950	D1~D5950	Ar78	
2600151 ~ 2606100	D1~D5950	D1~D5950	Ar79	
2606101 ~ 2612050	D1~D5950	D1~D5950	Ar80	
2612051 ~ 2618000	D1~D5950	D1~D5950	Ar81	
2618001 ~ 2623950	D1~D5950	D1~D5950	Ar82	
2623951 ~ 2629900	D1~D5950	D1~D5950	Ar83	
2629901 ~ 2635850	D1~D5950	D1~D5950	Ar84	
2635851 ~ 2641800	D1~D5950	D1~D5950	Ar85	
2641801 ~ 2647750	D1~D5950	D1~D5950	Ar86	
2647751 ~ 2653700	D1~D5950	D1~D5950	Ar87	
2653701 ~ 2659650	D1~D5950	D1~D5950	Ar88	

[表3-4]

No.	R^2	R^4	R^5	=
2659651 ~ 2665600	H	D1~D5950	D1~D5950	$R^4 = R^5$
2665601 ~ 2671550	Ar1	D1~D5950	D1~D5950	
2671551 ~ 2677500	Ar2	D1~D5950	D1~D5950	
2677501 ~ 2683450	Ar3	D1~D5950	D1~D5950	
2683451 ~ 2689400	Ar4	D1~D5950	D1~D5950	
2689401 ~ 2695350	Ar5	D1~D5950	D1~D5950	
2695351 ~ 2701300	Ar6	D1~D5950	D1~D5950	
2701301 ~ 2707250	Ar7	D1~D5950	D1~D5950	
2707251 ~ 2713200	Ar8	D1~D5950	D1~D5950	
2713201 ~ 2719150	Ar9	D1~D5950	D1~D5950	
2719151 ~ 2725100	Ar10	D1~D5950	D1~D5950	
2725101 ~ 2731050	Ar11	D1~D5950	D1~D5950	
2731051 ~ 2737000	Ar12	D1~D5950	D1~D5950	
2737001 ~ 2742950	Ar13	D1~D5950	D1~D5950	
2742951 ~ 2748900	Ar14	D1~D5950	D1~D5950	
2748901 ~ 2754850	Ar15	D1~D5950	D1~D5950	
2754851 ~ 2760800	Ar16	D1~D5950	D1~D5950	
2760801 ~ 2766750	Ar17	D1~D5950	D1~D5950	
2766751 ~ 2772700	Ar18	D1~D5950	D1~D5950	
2772701 ~ 2778650	Ar19	D1~D5950	D1~D5950	
2778651 ~ 2784600	Ar20	D1~D5950	D1~D5950	
2784601 ~ 2790550	Ar21	D1~D5950	D1~D5950	
2790551 ~ 2796500	Ar22	D1~D5950	D1~D5950	
2796501 ~ 2802450	Ar23	D1~D5950	D1~D5950	
2802451 ~ 2808400	Ar24	D1~D5950	D1~D5950	
2808401 ~ 2814350	Ar25	D1~D5950	D1~D5950	
2814351 ~ 2820300	Ar26	D1~D5950	D1~D5950	
2820301 ~ 2826250	Ar27	D1~D5950	D1~D5950	
2826251 ~ 2832200	Ar28	D1~D5950	D1~D5950	
2832201 ~ 2838150	Ar29	D1~D5950	D1~D5950	
2838151 ~ 2844100	Ar30	D1~D5950	D1~D5950	
2844101 ~ 2850050	Ar31	D1~D5950	D1~D5950	
2850051 ~ 2856000	Ar32	D1~D5950	D1~D5950	
2856001 ~ 2861950	Ar33	D1~D5950	D1~D5950	
2861951 ~ 2867900	Ar34	D1~D5950	D1~D5950	
2867901 ~ 2873850	Ar35	D1~D5950	D1~D5950	
2873851 ~ 2879800	Ar36	D1~D5950	D1~D5950	
2879801 ~ 2885750	Ar37	D1~D5950	D1~D5950	
2885751 ~ 2891700	Ar38	D1~D5950	D1~D5950	
2891701 ~ 2897650	Ar39	D1~D5950	D1~D5950	
2897651 ~ 2903600	Ar40	D1~D5950	D1~D5950	
2903601 ~ 2909550	Ar41	D1~D5950	D1~D5950	
2909551 ~ 2915500	Ar42	D1~D5950	D1~D5950	
2915501 ~ 2921450	Ar43	D1~D5950	D1~D5950	
2921451 ~ 2927400	Ar44	D1~D5950	D1~D5950	
2927401 ~ 2933350	Ar45	D1~D5950	D1~D5950	
2933351 ~ 2939300	Ar46	D1~D5950	D1~D5950	
2939301 ~ 2945250	Ar47	D1~D5950	D1~D5950	
2945251 ~ 2951200	Ar48	D1~D5950	D1~D5950	
2951201 ~ 2957150	Ar49	D1~D5950	D1~D5950	
2957151 ~ 2963100	Ar50	D1~D5950	D1~D5950	
2963101 ~ 2969050	Ar51	D1~D5950	D1~D5950	
2969051 ~ 2975000	Ar52	D1~D5950	D1~D5950	
2975001 ~ 2980950	Ar53	D1~D5950	D1~D5950	
2980951 ~ 2986900	Ar54	D1~D5950	D1~D5950	
2986901 ~ 2992850	Ar55	D1~D5950	D1~D5950	
2992851 ~ 2998800	Ar56	D1~D5950	D1~D5950	
2998801 ~ 3004750	Ar57	D1~D5950	D1~D5950	
3004751 ~ 3010700	Ar58	D1~D5950	D1~D5950	
3010701 ~ 3016650	Ar59	D1~D5950	D1~D5950	

[表3-5]

No.	R ²	R ⁴	R ⁵	=
3016651 ~ 3022600	Ar60	D1~D5950	D1~D5950	R ⁴ = R ⁵
3022601 ~ 3028550	Ar61	D1~D5950	D1~D5950	
3028551 ~ 3034500	Ar62	D1~D5950	D1~D5950	
3034501 ~ 3040450	Ar63	D1~D5950	D1~D5950	
3040451 ~ 3046400	Ar64	D1~D5950	D1~D5950	
3046401 ~ 3052350	Ar65	D1~D5950	D1~D5950	
3052351 ~ 3058300	Ar66	D1~D5950	D1~D5950	
3058301 ~ 3064250	Ar67	D1~D5950	D1~D5950	
3064251 ~ 3070200	Ar68	D1~D5950	D1~D5950	
3070201 ~ 3076150	Ar69	D1~D5950	D1~D5950	
3076151 ~ 3082100	Ar70	D1~D5950	D1~D5950	
3082101 ~ 3088050	Ar71	D1~D5950	D1~D5950	
3088051 ~ 3094000	Ar72	D1~D5950	D1~D5950	
3094001 ~ 3099950	Ar73	D1~D5950	D1~D5950	
3099951 ~ 3105900	Ar74	D1~D5950	D1~D5950	
3105901 ~ 3111850	Ar75	D1~D5950	D1~D5950	
3111851 ~ 3117800	Ar76	D1~D5950	D1~D5950	
3117801 ~ 3123750	Ar77	D1~D5950	D1~D5950	
3123751 ~ 3129700	Ar78	D1~D5950	D1~D5950	
3129701 ~ 3135650	Ar79	D1~D5950	D1~D5950	
3135651 ~ 3141600	Ar80	D1~D5950	D1~D5950	
3141601 ~ 3147550	Ar81	D1~D5950	D1~D5950	
3147551 ~ 3153500	Ar82	D1~D5950	D1~D5950	
3153501 ~ 3159450	Ar83	D1~D5950	D1~D5950	
3159451 ~ 3165400	Ar84	D1~D5950	D1~D5950	
3165401 ~ 3171350	Ar85	D1~D5950	D1~D5950	
3171351 ~ 3177300	Ar86	D1~D5950	D1~D5950	
3177301 ~ 3183250	Ar87	D1~D5950	D1~D5950	
3183251 ~ 3189200	Ar88	D1~D5950	D1~D5950	

[0058] 表1～3では、一般式(1)のAr¹が4-(過重水素化カルバゾール-9-イル)フェニル基(D3107)であり、Ar²が過重水素化フェニル基(Ar45)である構造を、化合物1～3189200の構造として特定した。表4には、化合物1～3189200のそれぞれについて、Ar¹とAr²を表4に示す通りに変更した化合物を順に表の形式で表示した。表4では、対応関係をわかりやすくするために、化合物1～3189200も1段目に表示している。表4の2段目において、例えば化合物1(1)は、化合物1のAr¹をD1191に置換した構造を有する化合物を示している。また、化合物2(1)は化合物2のAr¹をD1191に置換した構造を有する化合物を示している。化合物3189200(1)は化合物3189200のAr¹をD1191に置換した構造を有する化合物を示している。表4の3段目の

化合物 1 (2) ~ 3 1 8 9 2 0 0 (2) やそれ以降の段の化合物も、同じ要領で特定している。なお、表 4 で特定される化合物の $X^1 \sim X^3$ はいずれも窒素原子 (N) であり、 L^1 は単結合 (L^1) であり、 R^1 は水素原子である。

[表4-1]

No.	Ar ¹	Ar ²	No.	Ar ¹	Ar ²
1 ~ 3189200	D3107	Ar45	1(60) ~ 3189200(60)	Z313	Ar1
1(1) ~ 3189200(1)	D1191	Ar45	1(61) ~ 3189200(61)	Z314	Ar1
1(2) ~ 3189200(2)	D1193	Ar45	1(62) ~ 3189200(62)	Z316	Ar1
1(3) ~ 3189200(3)	D1199	Ar45	1(63) ~ 3189200(63)	Z317	Ar1
1(4) ~ 3189200(4)	D1209	Ar45	1(64) ~ 3189200(64)	D3107	Ar14
1(5) ~ 3189200(5)	D1239	Ar45	1(65) ~ 3189200(65)	D1191	Ar14
1(6) ~ 3189200(6)	D1650	Ar45	1(66) ~ 3189200(66)	D1193	Ar14
1(7) ~ 3189200(7)	D1656	Ar45	1(67) ~ 3189200(67)	D1199	Ar14
1(8) ~ 3189200(8)	D1662	Ar45	1(68) ~ 3189200(68)	D1209	Ar14
1(9) ~ 3189200(9)	D1916	Ar45	1(69) ~ 3189200(69)	D1239	Ar14
1(10) ~ 3189200(10)	D1917	Ar45	1(70) ~ 3189200(70)	D1650	Ar14
1(11) ~ 3189200(11)	D2381	Ar45	1(71) ~ 3189200(71)	D1656	Ar14
1(12) ~ 3189200(12)	D2383	Ar45	1(72) ~ 3189200(72)	D1662	Ar14
1(13) ~ 3189200(13)	D2389	Ar45	1(73) ~ 3189200(73)	D1916	Ar14
1(14) ~ 3189200(14)	D2399	Ar45	1(74) ~ 3189200(74)	D1917	Ar14
1(15) ~ 3189200(15)	D2429	Ar45	1(75) ~ 3189200(75)	D2381	Ar14
1(16) ~ 3189200(16)	D2840	Ar45	1(76) ~ 3189200(76)	D2383	Ar14
1(17) ~ 3189200(17)	D2846	Ar45	1(77) ~ 3189200(77)	D2389	Ar14
1(18) ~ 3189200(18)	D2852	Ar45	1(78) ~ 3189200(78)	D2399	Ar14
1(19) ~ 3189200(19)	D3106	Ar45	1(79) ~ 3189200(79)	D2429	Ar14
1(20) ~ 3189200(20)	Z1	Ar45	1(80) ~ 3189200(80)	D2840	Ar14
1(21) ~ 3189200(21)	Z2	Ar45	1(81) ~ 3189200(81)	D2846	Ar14
1(22) ~ 3189200(22)	Z4	Ar45	1(82) ~ 3189200(82)	D2852	Ar14
1(23) ~ 3189200(23)	Z5	Ar45	1(83) ~ 3189200(83)	D3106	Ar14
1(24) ~ 3189200(24)	Z9	Ar45	1(84) ~ 3189200(84)	Z1	Ar14
1(25) ~ 3189200(25)	Z14	Ar45	1(85) ~ 3189200(85)	Z2	Ar14
1(26) ~ 3189200(26)	Z29	Ar45	1(86) ~ 3189200(86)	Z4	Ar14
1(27) ~ 3189200(27)	Z34	Ar45	1(87) ~ 3189200(87)	Z5	Ar14
1(28) ~ 3189200(28)	Z313	Ar45	1(88) ~ 3189200(88)	Z9	Ar14
1(29) ~ 3189200(29)	Z314	Ar45	1(89) ~ 3189200(89)	Z14	Ar14
1(30) ~ 3189200(30)	Z316	Ar45	1(90) ~ 3189200(90)	Z29	Ar14
1(31) ~ 3189200(31)	Z317	Ar45	1(91) ~ 3189200(91)	Z34	Ar14
1(32) ~ 3189200(32)	D3107	Ar1	1(92) ~ 3189200(92)	Z313	Ar14
1(33) ~ 3189200(33)	D1191	Ar1	1(93) ~ 3189200(93)	Z314	Ar14
1(34) ~ 3189200(34)	D1193	Ar1	1(94) ~ 3189200(94)	Z316	Ar14
1(35) ~ 3189200(35)	D1199	Ar1	1(95) ~ 3189200(95)	Z317	Ar14
1(36) ~ 3189200(36)	D1209	Ar1	1(96) ~ 3189200(96)	D3107	D1
1(37) ~ 3189200(37)	D1239	Ar1	1(97) ~ 3189200(97)	D1191	D1
1(38) ~ 3189200(38)	D1650	Ar1	1(98) ~ 3189200(98)	D1193	D1
1(39) ~ 3189200(39)	D1656	Ar1	1(99) ~ 3189200(99)	D1199	D1
1(40) ~ 3189200(40)	D1662	Ar1	1(100) ~ 3189200(100)	D1209	D1
1(41) ~ 3189200(41)	D1916	Ar1	1(101) ~ 3189200(101)	D1239	D1
1(42) ~ 3189200(42)	D1917	Ar1	1(102) ~ 3189200(102)	D1650	D1
1(43) ~ 3189200(43)	D2381	Ar1	1(103) ~ 3189200(103)	D1656	D1
1(44) ~ 3189200(44)	D2383	Ar1	1(104) ~ 3189200(104)	D1662	D1
1(45) ~ 3189200(45)	D2389	Ar1	1(105) ~ 3189200(105)	D1916	D1
1(46) ~ 3189200(46)	D2399	Ar1	1(106) ~ 3189200(106)	D1917	D1
1(47) ~ 3189200(47)	D2429	Ar1	1(107) ~ 3189200(107)	D2381	D1
1(48) ~ 3189200(48)	D2840	Ar1	1(108) ~ 3189200(108)	D2383	D1
1(49) ~ 3189200(49)	D2846	Ar1	1(109) ~ 3189200(109)	D2389	D1
1(50) ~ 3189200(50)	D2852	Ar1	1(110) ~ 3189200(110)	D2399	D1
1(51) ~ 3189200(51)	D3106	Ar1	1(111) ~ 3189200(111)	D2429	D1
1(52) ~ 3189200(52)	Z1	Ar1	1(112) ~ 3189200(112)	D2840	D1
1(53) ~ 3189200(53)	Z2	Ar1	1(113) ~ 3189200(113)	D2846	D1
1(54) ~ 3189200(54)	Z4	Ar1	1(114) ~ 3189200(114)	D2852	D1
1(55) ~ 3189200(55)	Z5	Ar1	1(115) ~ 3189200(115)	D3106	D1
1(56) ~ 3189200(56)	Z9	Ar1	1(116) ~ 3189200(116)	Z1	D1
1(57) ~ 3189200(57)	Z14	Ar1	1(117) ~ 3189200(117)	Z2	D1
1(58) ~ 3189200(58)	Z29	Ar1	1(118) ~ 3189200(118)	Z4	D1
1(59) ~ 3189200(59)	Z34	Ar1			

[表4-2]

No.	Ar ¹	Ar ²	No.	Ar ¹	Ar ²
1(119) ~ 3189200(119)	Z5	D1	1(178) ~ 3189200(178)	D2852	Ar38
1(120) ~ 3189200(120)	Z9	D1	1(179) ~ 3189200(179)	D3106	Ar38
1(121) ~ 3189200(121)	Z14	D1	1(180) ~ 3189200(180)	Z1	Ar38
1(122) ~ 3189200(122)	Z29	D1	1(181) ~ 3189200(181)	Z2	Ar38
1(123) ~ 3189200(123)	Z34	D1	1(182) ~ 3189200(182)	Z4	Ar38
1(124) ~ 3189200(124)	Z313	D1	1(183) ~ 3189200(183)	Z5	Ar38
1(125) ~ 3189200(125)	Z314	D1	1(184) ~ 3189200(184)	Z9	Ar38
1(126) ~ 3189200(126)	Z316	D1	1(185) ~ 3189200(185)	Z14	Ar38
1(127) ~ 3189200(127)	Z317	D1	1(186) ~ 3189200(186)	Z29	Ar38
1(128) ~ 3189200(128)	D3107	D19	1(187) ~ 3189200(187)	Z34	Ar38
1(129) ~ 3189200(129)	D1191	D19	1(188) ~ 3189200(188)	Z313	Ar38
1(130) ~ 3189200(130)	D1193	D19	1(189) ~ 3189200(189)	Z314	Ar38
1(131) ~ 3189200(131)	D1199	D19	1(190) ~ 3189200(190)	Z316	Ar38
1(132) ~ 3189200(132)	D1209	D19	1(191) ~ 3189200(191)	Z317	Ar38
1(133) ~ 3189200(133)	D1239	D19	1(192) ~ 3189200(192)	D3107	Ar58
1(134) ~ 3189200(134)	D1650	D19	1(193) ~ 3189200(193)	D1191	Ar58
1(135) ~ 3189200(135)	D1656	D19	1(194) ~ 3189200(194)	D1193	Ar58
1(136) ~ 3189200(136)	D1662	D19	1(195) ~ 3189200(195)	D1199	Ar58
1(137) ~ 3189200(137)	D1916	D19	1(196) ~ 3189200(196)	D1209	Ar58
1(138) ~ 3189200(138)	D1917	D19	1(197) ~ 3189200(197)	D1239	Ar58
1(139) ~ 3189200(139)	D2381	D19	1(198) ~ 3189200(198)	D1650	Ar58
1(140) ~ 3189200(140)	D2383	D19	1(199) ~ 3189200(199)	D1656	Ar58
1(141) ~ 3189200(141)	D2389	D19	1(200) ~ 3189200(200)	D1662	Ar58
1(142) ~ 3189200(142)	D2399	D19	1(201) ~ 3189200(201)	D1916	Ar58
1(143) ~ 3189200(143)	D2429	D19	1(202) ~ 3189200(202)	D1917	Ar58
1(144) ~ 3189200(144)	D2840	D19	1(203) ~ 3189200(203)	D2381	Ar58
1(145) ~ 3189200(145)	D2846	D19	1(204) ~ 3189200(204)	D2383	Ar58
1(146) ~ 3189200(146)	D2852	D19	1(205) ~ 3189200(205)	D2389	Ar58
1(147) ~ 3189200(147)	D3106	D19	1(206) ~ 3189200(206)	D2399	Ar58
1(148) ~ 3189200(148)	Z1	D19	1(207) ~ 3189200(207)	D2429	Ar58
1(149) ~ 3189200(149)	Z2	D19	1(208) ~ 3189200(208)	D2840	Ar58
1(150) ~ 3189200(150)	Z4	D19	1(209) ~ 3189200(209)	D2846	Ar58
1(151) ~ 3189200(151)	Z5	D19	1(210) ~ 3189200(210)	D2852	Ar58
1(152) ~ 3189200(152)	Z9	D19	1(211) ~ 3189200(211)	D3106	Ar58
1(153) ~ 3189200(153)	Z14	D19	1(212) ~ 3189200(212)	Z1	Ar58
1(154) ~ 3189200(154)	Z29	D19	1(213) ~ 3189200(213)	Z2	Ar58
1(155) ~ 3189200(155)	Z34	D19	1(214) ~ 3189200(214)	Z4	Ar58
1(156) ~ 3189200(156)	Z313	D19	1(215) ~ 3189200(215)	Z5	Ar58
1(157) ~ 3189200(157)	Z314	D19	1(216) ~ 3189200(216)	Z9	Ar58
1(158) ~ 3189200(158)	Z316	D19	1(217) ~ 3189200(217)	Z14	Ar58
1(159) ~ 3189200(159)	Z317	D19	1(218) ~ 3189200(218)	Z29	Ar58
1(160) ~ 3189200(160)	D3107	Ar38	1(219) ~ 3189200(219)	Z34	Ar58
1(161) ~ 3189200(161)	D1191	Ar38	1(220) ~ 3189200(220)	Z313	Ar58
1(162) ~ 3189200(162)	D1193	Ar38	1(221) ~ 3189200(221)	Z314	Ar58
1(163) ~ 3189200(163)	D1199	Ar38	1(222) ~ 3189200(222)	Z316	Ar58
1(164) ~ 3189200(164)	D1209	Ar38	1(223) ~ 3189200(223)	Z317	Ar58
1(165) ~ 3189200(165)	D1239	Ar38	1(224) ~ 3189200(224)	D3107	D727
1(166) ~ 3189200(166)	D1650	Ar38	1(225) ~ 3189200(225)	D1191	D727
1(167) ~ 3189200(167)	D1656	Ar38	1(226) ~ 3189200(226)	D1193	D727
1(168) ~ 3189200(168)	D1662	Ar38	1(227) ~ 3189200(227)	D1199	D727
1(169) ~ 3189200(169)	D1916	Ar38	1(228) ~ 3189200(228)	D1209	D727
1(170) ~ 3189200(170)	D1917	Ar38	1(229) ~ 3189200(229)	D1239	D727
1(171) ~ 3189200(171)	D2381	Ar38	1(230) ~ 3189200(230)	D1650	D727
1(172) ~ 3189200(172)	D2383	Ar38	1(231) ~ 3189200(231)	D1656	D727
1(173) ~ 3189200(173)	D2389	Ar38	1(232) ~ 3189200(232)	D1662	Ar38
1(174) ~ 3189200(174)	D2399	Ar38	1(233) ~ 3189200(233)	D1916	Ar38
1(175) ~ 3189200(175)	D2429	Ar38	1(234) ~ 3189200(234)	D1917	Ar38
1(176) ~ 3189200(176)	D2840	Ar38	1(235) ~ 3189200(235)	D2381	Ar38
1(177) ~ 3189200(177)	D2846	Ar38	1(236) ~ 3189200(236)	D2383	Ar38

[表4-3]

No.	Ar ¹	Ar ²
1(237) ~ 3189200(237)	D2389	D727
1(238) ~ 3189200(238)	D2399	D727
1(239) ~ 3189200(239)	D2429	D727
1(240) ~ 3189200(240)	D2840	D727
1(241) ~ 3189200(241)	D2846	D727
1(242) ~ 3189200(242)	D2852	D727
1(243) ~ 3189200(243)	D3106	D727
1(244) ~ 3189200(244)	Z1	D727
1(245) ~ 3189200(245)	Z2	D727
1(246) ~ 3189200(246)	Z4	D727
1(247) ~ 3189200(247)	Z5	D727
1(248) ~ 3189200(248)	Z9	D727
1(249) ~ 3189200(249)	Z14	D727
1(250) ~ 3189200(250)	Z29	D727
1(251) ~ 3189200(251)	Z34	D727
1(252) ~ 3189200(252)	Z313	D727
1(253) ~ 3189200(253)	Z314	D727
1(254) ~ 3189200(254)	Z316	D727
1(255) ~ 3189200(255)	Z317	D727

[0059] 化合物1～3189200のAr¹とAr²がともにD1191である化合物を、順に化合物1(1191)～3189200(1191)とする。化合物1～3189200のAr¹とAr²がともにD1192である化合物を、順に化合物1(1192)～3189200(1192)とする。このような要領で、化合物1～3189200のAr¹とAr²がともにD_x(_x=1191～5950)である化合物を、化合物1(_x)～3189200(_x)とする。最後は、化合物1～3189200のAr¹とAr²がともにD5950である化合物が、順に化合物1(5950)～3189200(5950)となる。

化合物1～3189200のAr¹とAr²がともにZ1である化合物を、順に化合物1(Z1)～3189200(Z1)とする。化合物1～3189200のAr¹とAr²がともにZ2である化合物を、順に化合物1(Z2)～3189200(Z2)とする。このような要領で、化合物1～3189200のAr¹とAr²がともにZ_x(_x=1～468)である化合物を、化合物1(_x)～3189200(_x)とする。最後は、化合物1～3189200のAr¹とAr²がともにZ468である化合物が、順に化合物1(

Z 4 6 8) ~ 3 1 8 9 2 0 0 (Z 4 6 8) となる。

以上の番号で特定される化合物は、すべてが個別に開示されているものとする。なお、上記の化合物具体例のうち、回転異性体が存在する場合は、回転異性体の混合物と、分離した各回転異性体も、本明細書に開示されているものとする。

本発明の一態様では、化合物 1 ~ 3 1 8 9 2 0 0 および化合物 1 (n) ~ 3 1 8 9 2 0 0 (n) [ここで n は 1 ~ 2 5 5、1 1 9 1 ~ 5 9 5 0、Z 1 ~ Z 4 6 8] からなる化合物群の中から化合物を選択する。

[0060] 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、1 5 0 0 以下であることが好ましく、1 2 0 0 以下であることがより好ましく、1 0 0 0 以下であることがさらに好ましく、9 0 0 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) で表される最小化合物の分子量である。

一般式 (1) で表される化合物は、分子量にかかわらず塗布法で成膜してもよい。塗布法を用いれば、分子量が比較的大きな化合物であっても成膜することが可能である。一般式 (1) で表される化合物は、有機溶媒に溶解しやすいという利点がある。このため、一般式 (1) で表される化合物は塗布法を適用しやすいうえ、精製して純度を高めやすい。

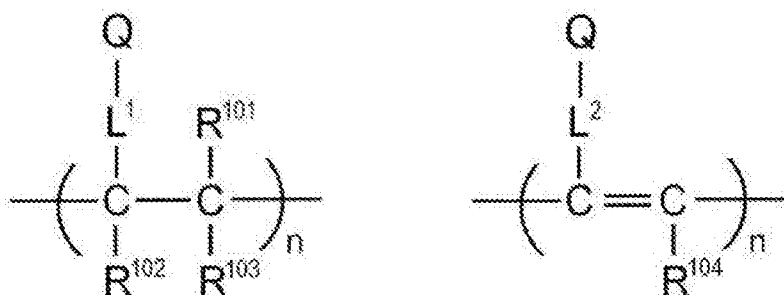
[0061] 本発明を応用して、分子内に一般式 (1) で表される構造を複数個含む化合物を、発光材料として用いることも考えられる。

例えば、一般式 (1) で表される構造中にあらかじめ重合性基を存在させておいて、その重合性基を重合させることによって得られる重合体を、発光材料として用いることが考えられる。例えば、一般式 (1) のいずれかの部位に重合性官能基を含むモノマーを用意して、これを単独で重合させるか、他のモノマーとともに共重合させることにより、繰り返し単位を有する重合体を得て、その重合体を発光材料として用いることが考えられる。あるいは、一般式 (1) で表される構造を有する化合物どうしをカップリングさせる

ことにより、二量体や三量体を得て、それらを発光材料として用いることも考えられる。

[0062] 一般式(1)で表される構造を含む繰り返し単位を有する重合体の例として、下記2つの一般式のいずれかで表される構造を含む重合体を挙げることができる。

[化17]



[0063] 上の一般式において、Qは一般式(1)で表される構造を含む基を表し、 L^1 および L^2 は連結基を表す。連結基の炭素数は、好ましくは0～20であり、より好ましくは1～15であり、さらに好ましくは2～10である。連結基は $-X^{11}-L^{11}-$ で表される構造を有するものであることが好ましい。ここで、 X^{11} は酸素原子または硫黄原子を表し、酸素原子であることが好ましい。 L^{11} は連結基を表し、置換もしくは無置換のアルキレン基、または置換もしくは無置換のアリーレン基であることが好ましく、炭素数1～10の置換もしくは無置換のアルキレン基、または置換もしくは無置換のフェニレン基であることがより好ましい。

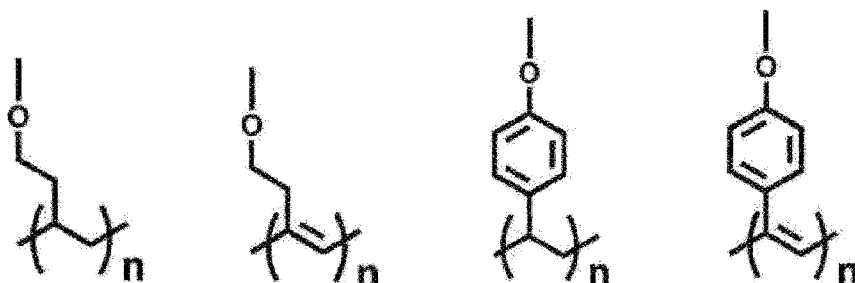
上の一般式において、 R^{101} 、 R^{102} 、 R^{103} および R^{104} は、各々独立に置換基を表す。好ましくは、炭素数1～6の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数1～6の置換もしくは無置換のアルコキシ基、ハロゲン原子であり、より好ましくは炭素数1～3の無置換のアルキル基、炭素数1～3の無置換のアルコキシ基、フッ素原子、塩素原子であり、さらに好ましくは炭素数1～3の無置換のアルキル基、炭素数1～3の無置換のアルコキシ基である。

L^1 および L^2 で表される連結基は、Qを構成する一般式(1)のいずれか

の部位に結合することができる。1つのQに対して連結基が2つ以上連結して架橋構造や網目構造を形成していてもよい。

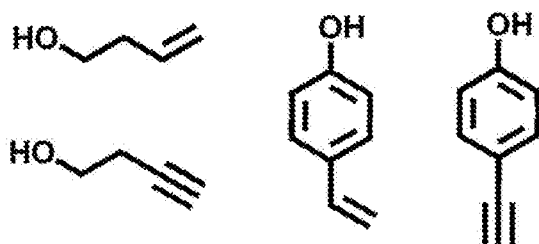
[0064] 繰り返し単位の具体的な構造例として、下記式で表される構造を挙げることができる。

[化18]



[0065] これらの式を含む繰り返し単位を有する重合体は、一般式（1）のいずれかの部位にヒドロキシ基を導入しておき、それをリンカーとして下記化合物を反応させて重合性基を導入し、その重合性基を重合させることにより合成することができる。

[化19]



[0066] 分子内に一般式（1）で表される構造を含む重合体は、一般式（1）で表される構造を有する繰り返し単位のみからなる重合体であってもよいし、それ以外の構造を有する繰り返し単位を含む重合体であってもよい。また、重合体の中に含まれる一般式（1）で表される構造を有する繰り返し単位は、単一種であってもよいし、2種以上であってもよい。一般式（1）で表される構造を有さない繰り返し単位としては、通常の共重合に用いられるモノマーから誘導されるものを挙げることができる。例えば、エチレン、スチレンなどのエチレン性不飽和結合を有するモノマーから誘導される繰り返し単位を挙げることができる。

[0067] ある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は発光材料である。

ある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、遅延蛍光を発することができる化合物である。

本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、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420nm～約500nm、約500nm～約600nmまたは約600nm～約700nm）または近赤外線領域で光を発することができる。

本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、熱的または電子的手段で励起されるとき、可視スペクトルのうち赤色またはオレンジ色領域（例えば約620nm～約780nm、約650nm）で光を発することができる。

本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、熱的または電子的手段で励起されるとき、可視スペクトルのうちオレンジ色または黄色領域（例えば約570nm～約620nm、約590nm、約570nm）で光を発することができる。

本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、熱的または電子的手段で励起されるとき、可視スペクトルのうち緑色領域（例えば約490nm～約575nm、約510nm）で光を発することができる。

本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、熱的または電子的手段で励起されるとき、可視スペクトルのうち青色領域（例えば約400nm～約490nm、約475nm）で光を発することができる。

本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、熱的または電子的手段で励起されるとき、紫外スペクトル領域（例えば280～400nm）で光を発することができる。

本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、熱的または電子的手段で励起されるとき、赤外スペクトル領域（例えば780nm～2μm）で光を発することができる。

本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物を用いた有機半導体素子を作製することができる。ここでいう有機半導体素子は、光が介在する有機光素子であってもよいし、光が介在しない有機素子であってもよい。有機光素子は、素子が光を放射する有機発光素子であってもよいし、光を受け取る有機受光素子であってもよいし、素子内で光によるエネルギー移動を生じる素子であってもよい。本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物を用いて有機エレクトロルミネッセンス素子や固体撮像素子（例えばＣＭＯＳイメージセンサー）などの有機光素子を作製することができる。本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物を用いたＣＭＯＳ（相補型金属酸化膜半導体）などを作製することができる。

[0068] 小分子の化学物質ライブラリの電子的特性は、公知の *ab initio* による量子化学計算を用いて算出することができる。例えば、基底として、6-31G*、およびベッケの3パラメータ、Lee-Yang-Parr ハイブリッド汎関数として知られている関数群を用いた時間依存的な密度汎関数理論を使用してHartree-Fock方程式（TD-DFT/B3LYP/6-31G*）を解析し、特定の閾値以上のHOMOおよび特定の閾値以下のLUMOを有する分子断片（部分）をスクリーニングすることができる。

それにより、例えば-6.5 eV以上のHOMOエネルギー（例えばイオン化ポテンシャル）があるときは、供与体部分（「D」）が選抜できる。また例えば、-0.5 eV以下のLUMOエネルギー（例えば電子親和力）があるときは、受容体部分（「A」）が選抜できる。ブリッジ部分（「B」）は、例えば受容体と供与体部分の特異的な立体構成に厳しく制限できる強い共役系であることにより、供与体および受容体部分の π 共役系間の重複が生じるのを防止する。

ある実施形態では、化合物ライブラリは、以下の特性のうちの1つ以上を用いて選別される。

1. 特定の波長付近における発光

2. 算出された、特定のエネルギー準位より上の三重項状態
3. 特定値より下の ΔE_{ST} 値
4. 特定値より上の量子収率
5. HOMO準位
6. LUMO準位

ある実施形態では、77 Kにおける最低の一重項励起状態と最低の三重項励起状態との差(ΔE_{ST})は、約0.5 eV未満、約0.4 eV未満、約0.3 eV未満、約0.2 eV未満または約0.1 eV未満である。ある実施形態では ΔE_{ST} 値は、約0.09 eV未満、約0.08 eV未満、約0.07 eV未満、約0.06 eV未満、約0.05 eV未満、約0.04 eV未満、約0.03 eV未満、約0.02 eV未満または約0.01 eV未満である。

ある実施形態では、一般式(1)で表される化合物は、25%超の、例えば約30%、約35%、約40%、約45%、約50%、約55%、約60%、約65%、約70%、約75%、約80%、約85%、約90%、約95%またはそれ以上の量子収率を示す。

[0069] [一般式(1)で表される化合物の合成方法]

一般式(1)で表される化合物は、新規化合物を含む。

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。一般式(1)で表される化合物は、 $R^1 \sim R^5$ のうちの2個以上がドナー性基であるが、例えばそのドナー性基の部位がフッ素原子である前駆体に対して置換もしくは無置換のカルバゾールを反応させることによって、置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基がドナー性基である一般式(1)の化合物を合成することができる。反応条件の詳細については、後述の合成例を参考にすることができる。

[0070] [一般式(1)で表される化合物を用いた構成物]

ある実施形態では、一般式(1)で表される化合物と組み合わせ、同化合物を分散させ、同化合物と共有結合し、同化合物をコーティングし、同化合物

物を担持し、あるいは同化合物と会合する1つ以上の材料（例えば小分子、ポリマー、金属、金属錯体等）と共に用い、固体状のフィルムまたは層を形成させる。例えば、一般式（1）で表される化合物を電気活性材料と組み合わせてフィルムを形成することができる。いくつかの場合、一般式（1）で表される化合物を正孔輸送ポリマーと組み合わせてもよい。いくつかの場合、一般式（1）で表される化合物を電子輸送ポリマーと組み合わせてもよい。いくつかの場合、一般式（1）で表される化合物を正孔輸送ポリマーおよび電子輸送ポリマーと組み合わせてもよい。いくつかの場合、一般式（1）で表される化合物を、正孔輸送部と電子輸送部との両方を有するコポリマーと組み合わせてもよい。以上のような実施形態により、固体状のフィルムまたは層内に形成される電子および／または正孔を、一般式（1）で表される化合物と相互作用させることができる。

[0071] [フィルムの形成]

ある実施形態では、一般式（1）で表される化合物を含むフィルムは、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、溶媒の除去後にフィルムを形成する。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、本発明の化合物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。

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フィルムを形成することができる。形成されるフィルム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フィルム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。

[0072] [一般式（１）で表される化合物の使用の例]

一般式（１）で表される化合物は、有機発光素子の材料として有用である。特に有機発光ダイオード等に好ましく用いられる。

有機発光ダイオード：

本発明の一態様は、有機発光素子の発光材料としての、本発明の一般式（１）で表される化合物の使用に関する。ある実施形態では、本発明の一般式（１）で表される化合物は、有機発光素子の発光層における発光材料として効果的に使用できる。ある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、遅延蛍光を発する遅延蛍光（遅延蛍光体）を含む。ある実施形態では、本発明は一般式（１）で表される構造を有する遅延蛍光体を提供する。ある実施形態では、本発明は遅延蛍光体としての一般式（１）で表される化合物の使用に関する。ある実施形態では、本発明は一般式（１）で表される化合物は、ホスト材料として使用することができ、かつ、１つ以上の発光材料と共に使用することができ、発光材料は蛍光材料、燐光材料またはＴＡＤＦでよい。ある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、正孔輸送材料として使用することもできる。ある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、電子輸送材料として使用することができる。ある実施形態では、本発明は一般式（１）で表される化合物から遅延蛍光を生じさせる方法に関する。ある実施形態では、化合物を発光材料として含む有機発光素子は、遅延

蛍光を発し、高い光放射効率を示す。

ある実施形態では、発光層は一般式（１）で表される化合物を含み、一般式（１）で表される化合物は、基材と平行に配向される。ある実施形態では、基材はフィルム形成表面である。ある実施形態では、フィルム形成表面に対する一般式（１）で表される化合物の配向は、整列させる化合物によって発せられる光の伝播方向に影響を与えるか、あるいは、当該方向を決定づける。ある実施形態では、一般式（１）で表される化合物によって発せられる光の伝播方向を整列させることで、発光層からの光抽出効率が改善される。

本発明の一態様は、有機発光素子に関する。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（１）で表される化合物は、発光層に含まれる他の発光材料の光放射を（いわゆるアシストドーパントとして）補助する。ある実施形態では、発光層に含まれる一般式（１）で表される化合物は、その最低の励起一重項エネルギー準位にあり、発光層に含まれるホスト材料の最低励起一重項エネルギー準位と発光層に含まれる他の発光材料の最低励起一重項エネルギー準位との間に含まれる。

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。

[0073] 発光層：

ある実施形態では、発光層は、陽極および陰極からそれぞれ注入された正孔および電子が再結合して励起子を形成する層である。ある実施形態では、層は光を発する。

ある実施形態では、発光材料のみが発光層として用いられる。ある実施形態では、発光層は発光材料とホスト材料とを含む。ある実施形態では、発光材料は、一般式（１）で表される１つ以上の化合物である。ある実施形態では、有機エレクトロルミネッセンス素子および有機光ルミネッセンス素子の光放射効率を向上させるため、発光材料において発生する一重項励起子および三重項励起子を、発光材料内に閉じ込める。ある実施形態では、発光層中に発光材料に加えてホスト材料を用いる。ある実施形態では、ホスト材料は有機化合物である。ある実施形態では、有機化合物は励起一重項エネルギーおよび励起三重項エネルギーを有し、その少なくとも１つは、本発明の発光材料のそれらよりも高い。ある実施形態では、本発明の発光材料中で発生する一重項励起子および三重項励起子は、本発明の発光材料の分子中に閉じ込められる。ある実施形態では、一重項および三重項の励起子は、光放射効率を向上させるために十分に閉じ込められる。ある実施形態では、高い光放射効率が未だ得られるにもかかわらず、一重項励起子および三重項励起子は十分に閉じ込められず、すなわち、高い光放射効率を達成できるホスト材料は、特に限定されることなく本発明で使用されうる。ある実施形態では、本発明の素子の発光層中の発光材料において、光放射が生じる。ある実施形態では、放射光は蛍光および遅延蛍光の両方を含む。ある実施形態では、放射光は、ホスト材料からの放射光を含む。ある実施形態では、放射光は、ホスト材料からの放射光からなる。ある実施形態では、放射光は、一般式（１）で表される化合物からの放射光と、ホスト材料からの放射光とを含む。ある実施形態では、TADF分子とホスト材料とが用いられる。ある実施形態では、TADFはアシストドーパントであり、発光層中のホスト材料よりも励起

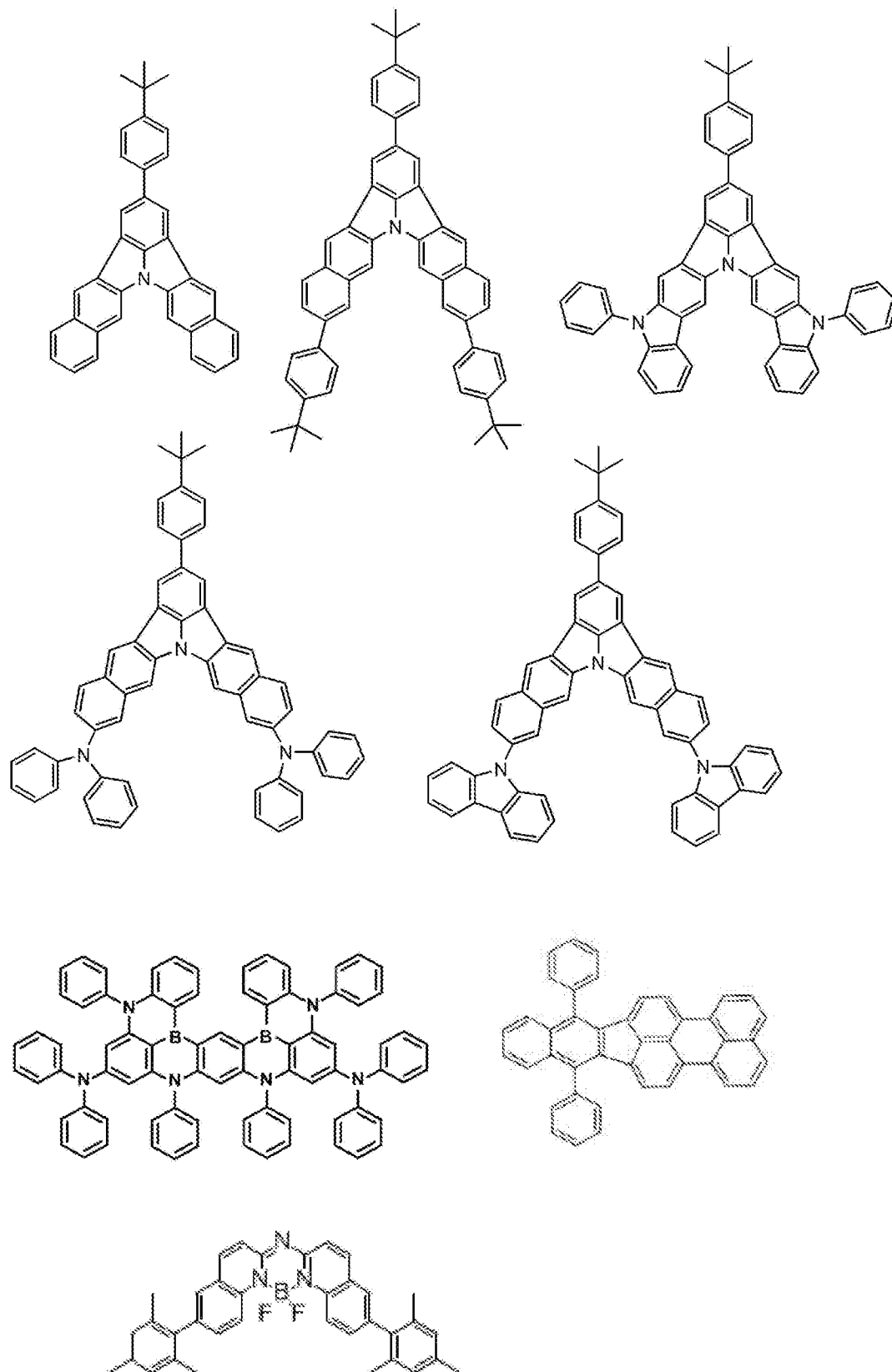
一重項エネルギーが低く、発光層中の発光材料よりも励起一重項エネルギーが高い。

[0074] 一般式(1)で表される化合物がアシストドーパントとして用いられるとき、発光材料(好ましくは蛍光材料)として様々な化合物を採用することが可能である。そのような発光材料としては、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(AI, 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。

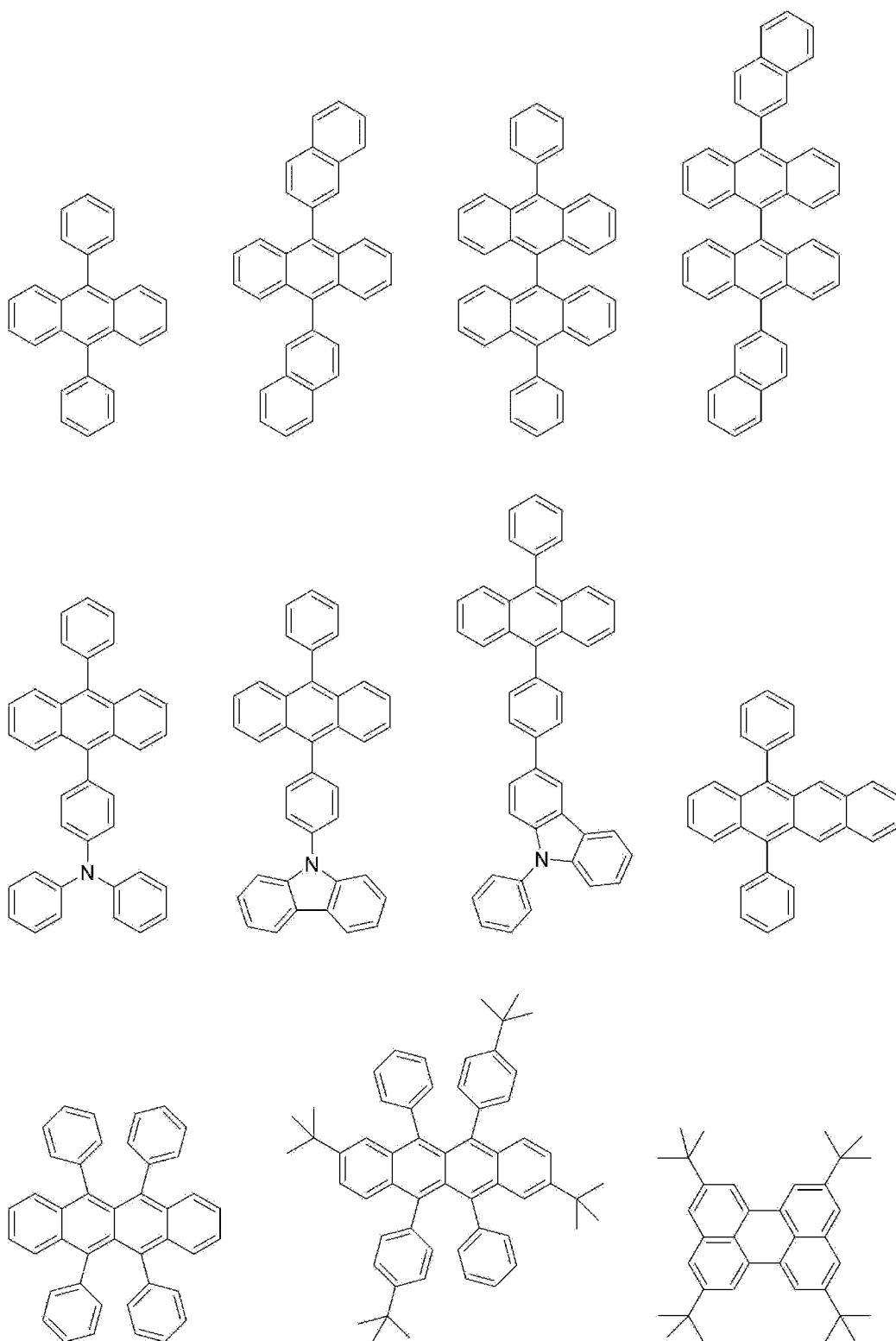
以下において、一般式(1)で表される構造を有するアシストドーパントと組み合わせ用いることができる発光材料を例示する。

[0075]

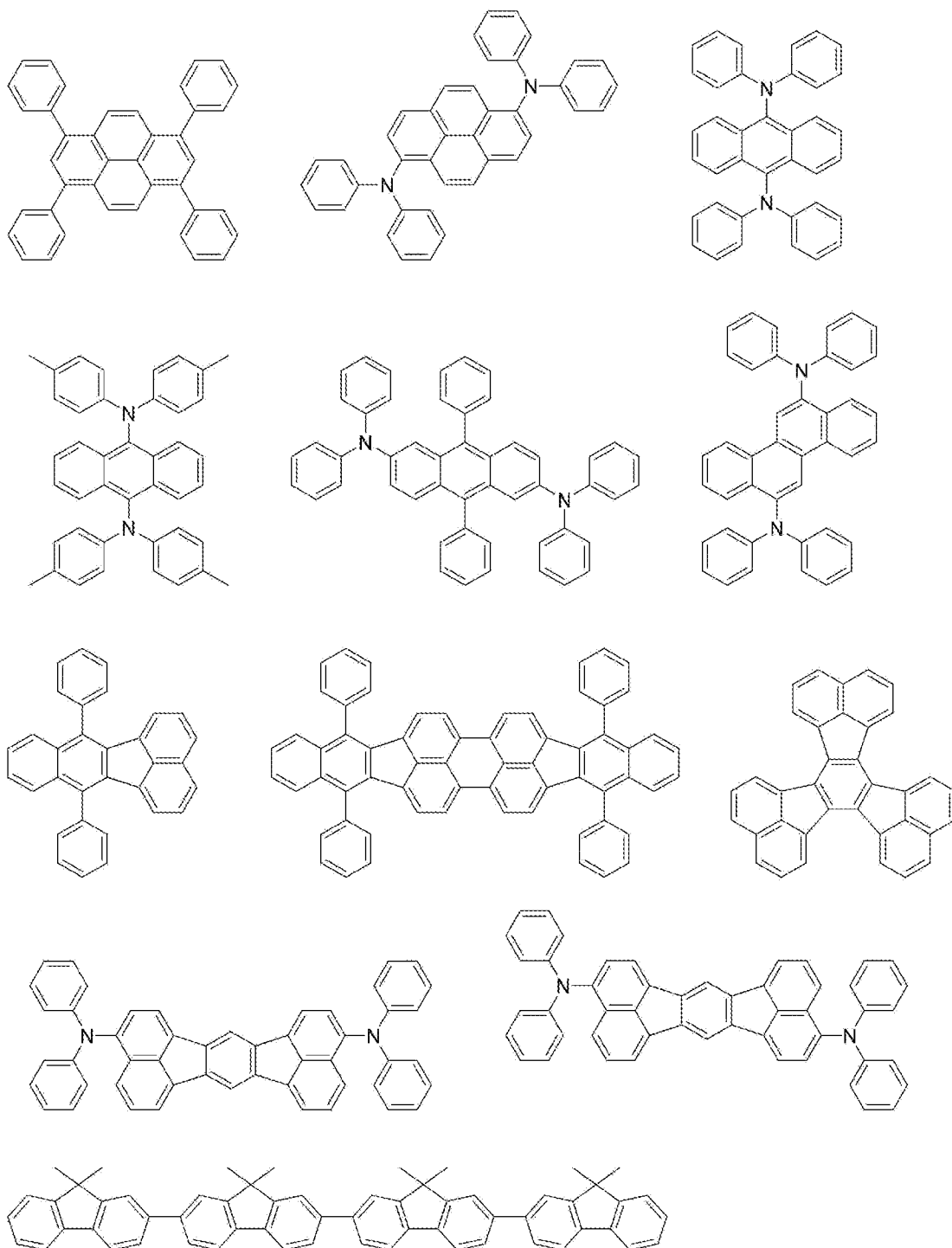
[化20-1]



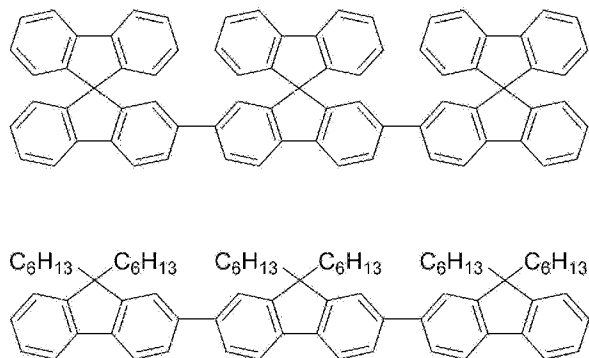
[化20-2]



[化20-3]



[化20-4]

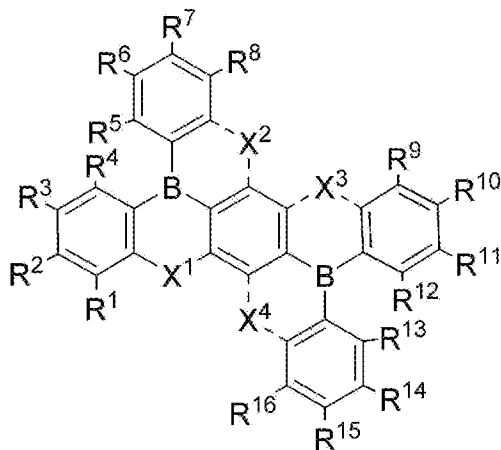


[0076] また、WO 2015 / 022974 号公報の段落 0220～0239 に記載の化合物も、一般式（１）で表される構造を有するアシストドーパントとともに用いる発光材料として、特に好ましく採用することができる。

[0077] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式（２）で表される化合物も挙げることができる。

[化21]

一般式（２）



[0078] 一般式（２）において、 R^1 、 $R^3 \sim R^{16}$ 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^2 はアクセプター性基を表すか、 R^1 と R^2 が互いに結合してアクセプター性基を形成しているか、または R^2 と R^3 が互いに結合してアクセプター性基を形成している。 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^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} は互いに結合して環状構造を形成

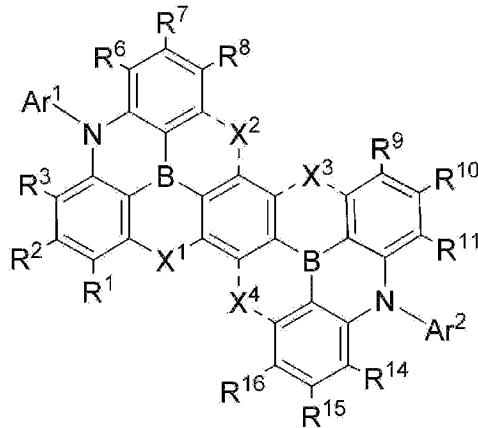
していてもよい。X¹はOまたはNRを表し、Rは置換基を表す。X²～X⁴のうち、X³およびX⁴の少なくとも一方はOまたはNRであり、残りはOまたはNRであっても連結していなくてもよい。連結していないとき、両端はそれぞれ独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。一般式(2)中のC-R¹、C-R³、C-R⁴、C-R⁵、C-R⁶、C-R⁷、C-R⁸、C-R⁹、C-R¹⁰、C-R¹¹、C-R¹²、C-R¹³、C-R¹⁴、C-R¹⁵、C-R¹⁶は、Nに置換されていてもよい。

[0079] 本発明の一態様では、X²がOまたはNRであるとき、R⁷がアクセプター性基であるか、R⁶とR⁷が互いに結合してアクセプター性基を形成しているか、またはR⁷とR⁸が互いに結合してアクセプター性基を形成している。本発明の一態様では、X³がOまたはNRであるとき、R¹⁰がアクセプター性基であるか、R⁹とR¹⁰が互いに結合してアクセプター性基を形成しているか、またはR¹⁰とR¹¹が互いに結合してアクセプター性基を形成している。本発明の一態様では、X⁴がOまたはNRであるとき、R¹⁵がアクセプター性基であるか、R¹⁴とR¹⁵が互いに結合してアクセプター性基を形成しているか、またはR¹⁵とR¹⁶が互いに結合してアクセプター性基を形成している。本発明の一態様では、X²がNRであり、Rが置換もしくは無置換のフェニル基であってR⁸が結合している炭素原子と直接結合することによりカルバゾール環を形成しているとき、前記カルバゾール環の3位および6位の少なくとも一方がアクセプター性基で置換されている。本発明の一態様では、X³がNRであり、Rが置換もしくは無置換のフェニル基であってR⁹が結合している炭素原子と直接結合することによりカルバゾール環を形成しているとき、前記カルバゾール環の3位および6位の少なくとも一方がアクセプター性基で置換されている。本発明の一態様では、X⁴がNRであり、Rが置換もしくは無置換のフェニル基であってR¹⁶が結合している炭素原子と直接結合することによりカルバゾール環を形成しているとき、前記カルバゾール環の3位および6位の少なくとも一方がアクセプター性基で置換されている。本発明の一態様では、X¹がNRであり、Rが置換もしくは無置換のフェニル基であってR

¹が結合している炭素原子と直接結合することによりカルバゾール環を形成しているとき、前記カルバゾール環の3位がアクセプター性基で置換されている（ここで3位は前記フェニル基上に存在する）。本発明の一態様では、下記一般式（2 a）で表される化合物である。

[化22]

一般式（2 a）



[0080] 一般式（2 a）において、 R^1 、 R^3 、 $R^6 \sim R^{11}$ 、 $R^{14} \sim R^{16}$ 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^2 はアクセプター性基を表すか、 R^1 と R^2 が互いに結合してアクセプター性基を形成しているか、または R^2 と R^3 が互いに結合してアクセプター性基を形成している。

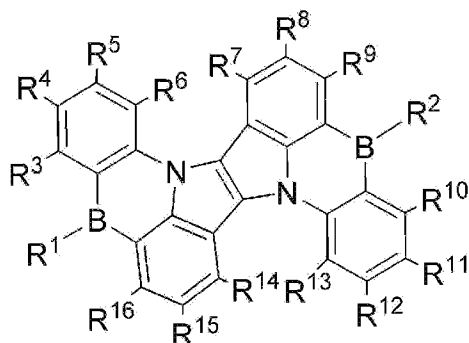
R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。 X^1 はOまたはNRを表し、Rは置換基を表す。 $X^2 \sim X^4$ のうち、 X^3 および X^4 の少なくとも一方はOまたはNRであり、残りはOまたはNRであっても連結していなくてもよい。連結していないとき、両端はそれぞれ独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Ar^1 および Ar^2 は、各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。一般式（2 a）中のC- R^1 、C- R^3 、C- R^6 、C- R^7 、C- R^8 、C- R^9 、C- R^{10} 、C- R^{11} 、C- R^{14} 、C- R^{15} 、C- R^{16} は、Nに置換されていてもよい。

[0081] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式（3）で表される化合物も

挙げることができる。

[化23]

一般式 (3)



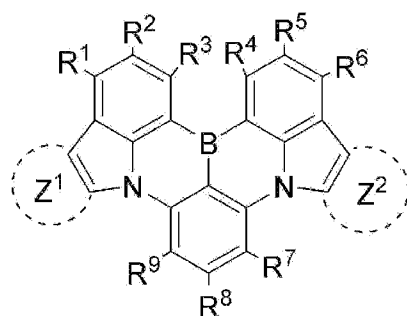
[0082] 一般式 (3) において、 R^1 および R^2 は、各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表し、 $R^3 \sim R^{16}$ は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^1 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^2 、 R^2 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{12} と R^{13} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^1 は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。一般式 (3) 中の $C-R^3$ 、 $C-R^4$ 、 $C-R^5$ 、 $C-R^6$ 、 $C-R^7$ 、 $C-R^8$ 、 $C-R^9$ 、 $C-R^{10}$ 、 $C-R^{11}$ 、 $C-R^{12}$ 、 $C-R^{13}$ 、 $C-R^{14}$ 、 $C-R^{15}$ 、 $C-R^{16}$ は、N で置換されていてもよい。

[0083] 本発明の一態様では、 R^1 および R^2 は、各々独立に他の環が縮合していてもよい置換もしくは無置換のフェニル基である。本発明の一態様では、 R^3 および R^{10} は、各々独立に置換アミノ基である。本発明の一態様では、 R^1 と R^3 、および、 R^2 と R^{10} の少なくとも一方の組み合わせ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、前記環状構造がベンゾアザボリン環を含む。

[0084] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式 (4) で表される化合物も挙げることができる。

[化24]

一般式 (4)



[0085] 一般式 (4) において、 Z^1 および Z^2 は、各々独立に置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、 $R^1 \sim R^9$ 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^7 と R^8 、 R^8 と R^9 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、 Z^1 、 Z^2 、 R^1 と R^2 が互いに結合して形成する環、 R^2 と R^3 が互いに結合して形成する環、 R^4 と R^5 が互いに結合して形成する環、および R^5 と R^6 が互いに結合して形成する環の少なくとも1つは、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環、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、置換もしくは無置換のインドールのピロール環であり、かつ、 $R^1 \sim R^9$ の少なくとも1つが置換もしくは無置換のアリール基、またはアクセプター性基であるか、あるいは、 Z^1 と Z^2 の少なくとも1つが置換基としてアリール基またはアクセプター性基を有する環である。前記ベンゾフラン環、前記ベンゾチオフェン環、前記インドール環を構成するベンゼン環骨格構成炭素原子のうち置換可能な炭素原子は窒素原子で置換されていてもよい。一般式 (4) 中の $C-R^1$ 、 $C-R^2$ 、 $C-R^3$ 、 $C-R^4$ 、 $C-R^5$ 、 $C-R^6$ 、 $C-R^7$ 、 $C-R^8$ 、 $C-R^9$ は、N に置換されていてもよい。

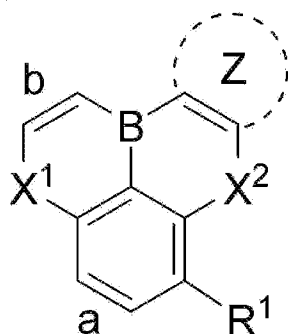
[0086] 本発明の一態様では、 Z^1 および Z^2 が、各々独立に置換もしくは無置換の非縮合ベンゼン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したピロール環である。本発明の一態様では、 $R^1 \sim$

R⁹が、各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、またはアクセプター性基であるか、あるいは、R¹とR²が互いに結合して形成する環、R²とR³が互いに結合して形成する環、R⁴とR⁵が互いに結合して形成する環、およびR⁵とR⁶が互いに結合して形成する環からなる群より選択される1つ以上の環が、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したピロール環である。本発明の一態様では、R⁸が置換もしくは無置換のアリール基、またはアクセプター性基である。本発明の一態様では、ベンゾフラン環、前記ベンゾチオフェン環および前記インドール環からなる群より選択される環を2個以上含む。

[0087] さらに好ましい発光材料として、下記構造αの炭素－炭素結合aに置換もしくは無置換のベンゾフラン環を構成するフラン環、置換もしくは無置換のベンゾチオフェン環を構成するチオフェン環、または置換もしくは無置換のインドール環を構成するピロール環が縮合しているか、あるいは、炭素－炭素結合bに置換もしくは無置換のジベンゾフラン環を構成するベンゼン環、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン環を構成するベンゼン環、置換もしくは無置換のカルバゾール環を構成するベンゼン環、または置換もしくは無置換のジベンゾジオキサン環を構成するベンゼン環が縮合した縮環構造A（構造中の水素原子は重水素原子または置換基で置換されていてもよい）を有する化合物を挙げることができる。

[化25]

構造α



[0088] 構造αにおいて、X¹およびX²は各々独立に置換もしくは無置換のアリー

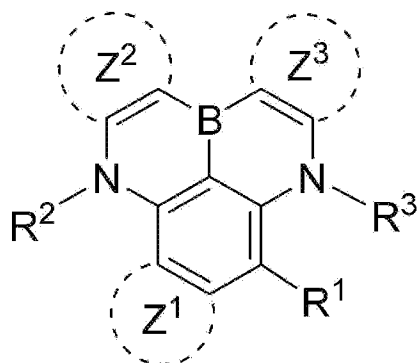
ル基または置換もしくは無置換のアリール基が結合した窒素原子、あるいは酸素原子を表し、Zは置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、R¹は水素原子、重水素原子または置換基を表し、ZとX²は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

縮環構造Aにおいて、bに縮合した構造とX¹、bに縮合した構造とZ、ZとX²は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0089] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(5)で表される化合物も挙げることができる。

[化26]

一般式(5)

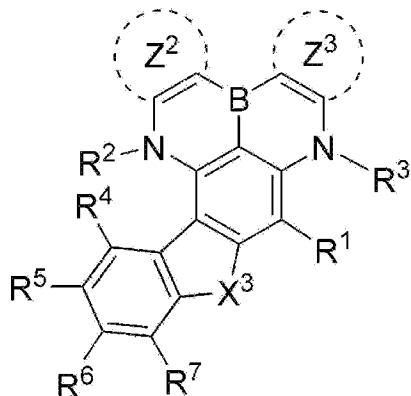


[0090] 一般式(5)において、Z¹は、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したN-置換ピロール環を表し、Z²およびZ³は各々独立に置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、R¹は水素原子、重水素原子または置換基を表し、R²およびR³は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。Z¹とR¹、R²とZ²、Z²とZ³、Z³とR³は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ただし、R²とZ²、Z²とZ³、Z³とR³の少なくとも1組は互いに結合して環状構造を形成している。

[0091] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(6)で表される化合物も挙げることができる。

[化27]

一般式 (6)

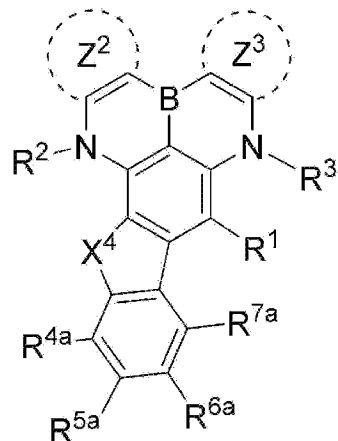


[0092] 一般式 (6) において、 X^3 は酸素原子または硫黄原子を表し、 Z^2 および Z^3 は各々独立に置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、 R^1 および $R^4 \sim R^7$ は水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^2 および R^3 は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^2 と Z^2 、 Z^2 と Z^3 、 Z^3 と R^3 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ただし、 R^2 と Z^2 、 Z^2 と Z^3 、 Z^3 と R^3 の少なくとも1組は互いに結合して環状構造を形成している。

[0093] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式 (7) で表される化合物も挙げることができる。

[化28]

一般式 (7)



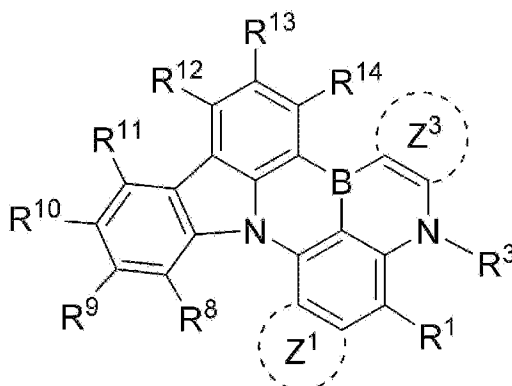
[0094] 一般式 (7) において、 X^4 は酸素原子または硫黄原子を表し、 Z^2 および

Z^3 は各々独立に置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、 R^1 および $R^{4a} \sim R^{7a}$ は水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^2 および R^3 は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^2 と Z^2 、 Z^2 と Z^3 、 Z^3 と R^3 、 R^{4a} と R^{5a} 、 R^{5a} と R^{6a} 、 R^{6a} と R^{7a} 、 R^{7a} と R^1 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、 R^2 と Z^2 、 Z^2 と Z^3 、 Z^3 と R^3 の少なくとも1組は互いに結合して環状構造を形成している。

[0095] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(8)で表される化合物も挙げることができる。

[化29]

一般式(8)

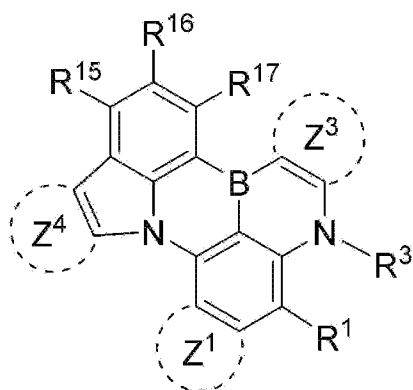


[0096] 一般式(8)において、 Z^1 は置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したN-置換ピロール環を表し、 Z^3 は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、 R^1 および $R^8 \sim R^{14}$ は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^3 は置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 Z^1 と R^1 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{12} と R^{13} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と Z^3 、 Z^3 と R^3 は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0097] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(9)で表される化合物も挙げることができる。

[化30]

一般式 (9)

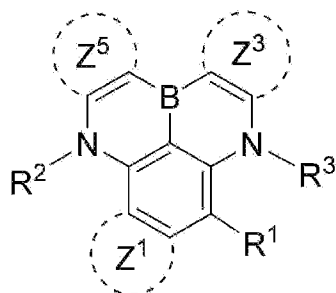


[0098] 一般式 (9) において、 Z^1 および Z^4 は各々独立に置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合した N-置換ピロール環を表し、 Z^3 は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、 R^1 および $R^{15} \sim R^{17}$ は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^3 は置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 Z^1 と R^1 、 Z^4 と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と Z^3 、 Z^3 と R^3 は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0099] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式 (10) で表される化合物も挙げることができる。

[化31]

一般式 (10)



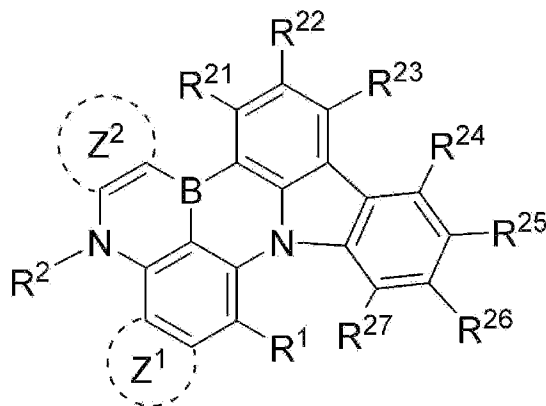
[0100] 一般式 (10) において、 Z^1 および Z^5 は各々独立に置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合

したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したN-置換ピロール環を表し、 Z^3 は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、 R^1 は水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^2 および R^3 は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 Z^1 と R^1 、 R^2 と Z^5 、 Z^5 と Z^3 、 Z^3 と R^3 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、 R^2 と Z^2 、 Z^2 と Z^3 、 Z^3 と R^3 の少なくとも1組は互いに結合して環状構造を形成している。

[0101] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(11)で表される化合物も挙げることができる。

[化32]

一般式(11)



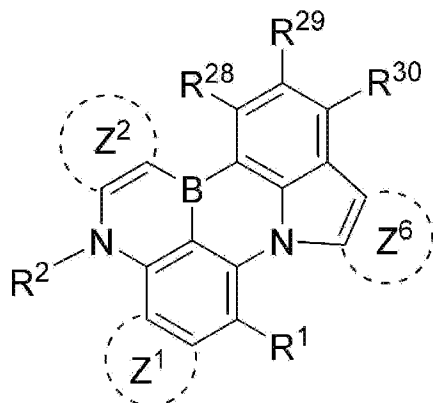
[0102] 一般式(11)において、 Z^1 は置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したN-置換ピロール環を表し、 Z^2 は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、 R^1 および $R^{21} \sim R^{27}$ は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^2 は置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^1 と Z^1 、 R^2 と Z^2 、 Z^2 と R^{21} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} 、 R^{26} と R^{27} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0103] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(12)で表される化合物

も挙げることができる。

[化33]

一般式 (12)

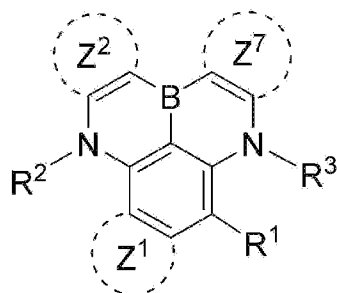


[0104] 一般式 (12) において、 Z^1 および Z^6 は各々独立に置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合した N-置換ピロール環を表し、 Z^2 は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、 R^1 および $R^{28} \sim R^{30}$ は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^2 は置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^1 と Z^1 、 R^2 と Z^2 、 Z^2 と R^{28} 、 R^{28} と R^{29} 、 R^{29} と R^{30} 、 R^{30} と Z^6 は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0105] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式 (13) で表される化合物も挙げることができる。

[化34]

一般式 (13)



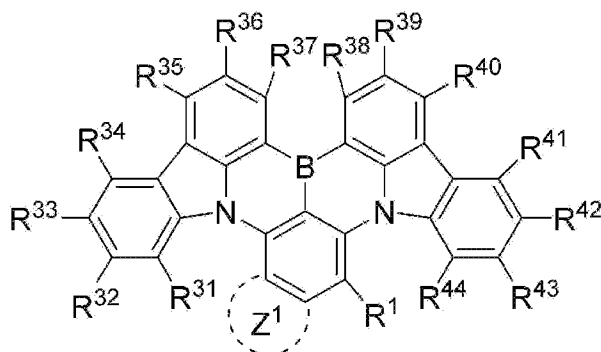
[0106] 一般式 (13) において、 Z^1 および Z^7 は各々独立に置換もしくは無置換

のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したN-置換ピロール環を表し、 Z^2 は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、 R^1 は水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^2 および R^3 は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^1 と Z^1 、 R^2 と Z^2 、 Z^2 と Z^7 、 Z^7 と R^3 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、 R^2 と Z^2 、 Z^2 と Z^7 、 Z^7 と R^3 の少なくとも1組は互いに結合して環状構造を形成している。)

[0107] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(14)で表される化合物も挙げることができる。

[化35]

一般式(14)



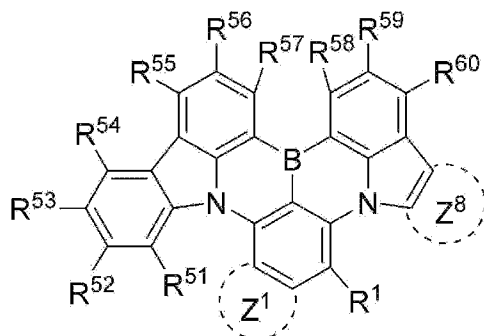
[0108] 一般式(14)において、 Z^1 は置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したN-置換ピロール環を表し、 R^1 および $R^{31} \sim R^{44}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^1 と Z^1 、 R^{31} と R^{32} 、 R^{32} と R^{33} 、 R^{33} と R^{34} 、 R^{34} と R^{35} 、 R^{35} と R^{36} 、 R^{36} と R^{37} 、 R^{37} と R^{38} 、 R^{38} と R^{39} 、 R^{39} と R^{40} 、 R^{40} と R^{41} 、 R^{41} と R^{42} 、 R^{42} と R^{43} 、 R^{43} と R^{44} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。)

[0109] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(15)で表される化合物

も挙げることができる。

[化36]

一般式 (15)

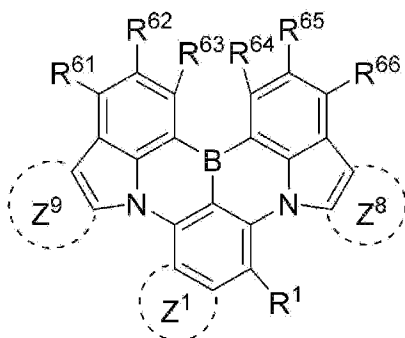


[0110] 一般式 (15) において、 Z^1 および Z^8 は各々独立に置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合した N-置換ピロール環を表し、 R^1 および $R^{51} \sim R^{60}$ は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^1 と Z^1 、 R^{51} と R^{52} 、 R^{52} と R^{53} 、 R^{53} と R^{54} 、 R^{54} と R^{55} 、 R^{55} と R^{56} 、 R^{56} と R^{57} 、 R^{57} と R^{58} 、 R^{58} と R^{59} 、 R^{59} と R^{60} 、 R^{60} と Z^8 は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0111] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式 (16) で表される化合物も挙げることができる。

[化37]

一般式 (16)



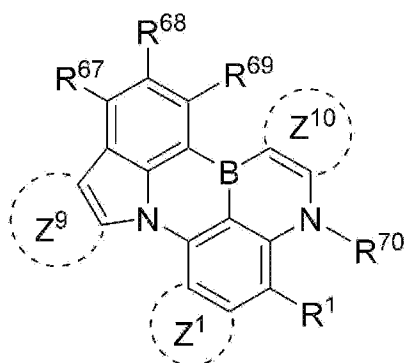
[0112] 一般式 (16) において、 Z^1 、 Z^8 および Z^9 は各々独立に置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合した

N-置換ピロール環を表し、 R^1 および $R^{61} \sim R^{66}$ 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 Z^1 、 Z^9 と R^{61} 、 R^{61} と R^{62} 、 R^{62} と R^{63} 、 R^{63} と R^{64} 、 R^{64} と R^{65} 、 R^{65} と R^{66} 、 R^{66} と Z^8 は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0113] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(17)で表される化合物も挙げることができる。

[化38]

一般式(17)

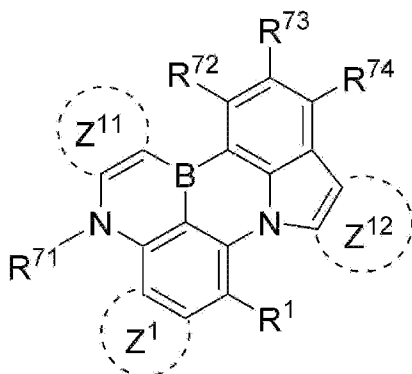


[0114] 一般式(17)において、 Z^1 、 Z^9 および Z^{10} は各々独立に置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したN-置換ピロール環を表し、 R^1 および $R^{67} \sim R^{69}$ は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^{70} は置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^1 と Z^1 、 Z^9 と R^{67} 、 R^{67} と R^{68} 、 R^{68} と R^{69} 、 R^{69} と Z^{10} 、 Z^{10} と R^{70} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0115] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(18)で表される化合物も挙げることができる。

[化39]

一般式 (18)

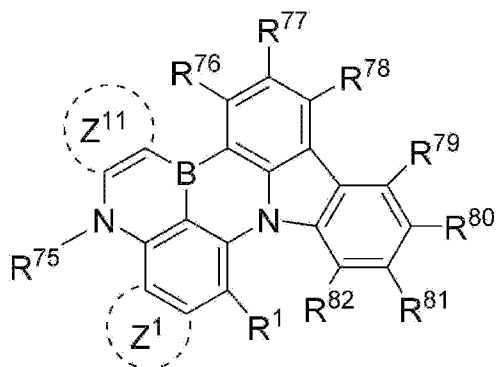


[0116] 一般式 (18) において、 Z^1 、 Z^{11} および Z^{12} は各々独立に置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したN-置換ピロール環を表し、 R^1 および $R^{72} \sim R^{74}$ は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表し、 R^{71} は置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^1 と Z^1 、 R^{71} と Z^{11} 、 Z^{11} と R^{72} 、 R^{72} と R^{73} 、 R^{73} と Z^{12} 、 R^{74} と Z^{12} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0117] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式 (19) で表される化合物も挙げることができる。

[化40]

一般式 (19)



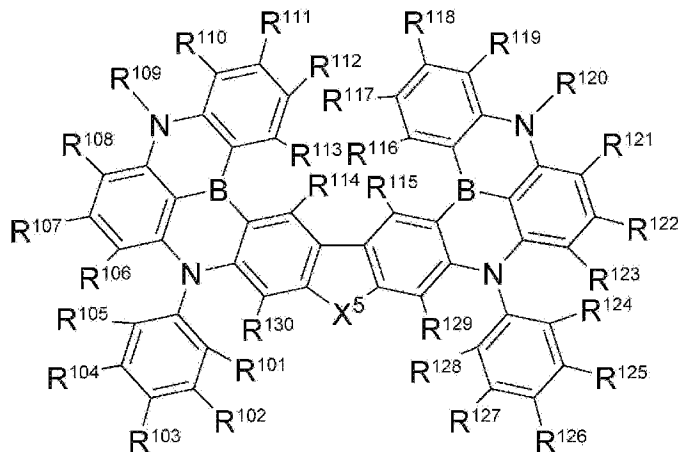
[0118] 一般式 (19) において、 Z^1 および Z^{11} は各々独立に置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合

したチオフェン環、または置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したN-置換ピロール環を表し、 R^1 および $R^{76} \sim R^{82}$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表し、 R^{75} は置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^1 と Z^1 、 R^{75} と Z^{11} 、 Z^{11} と R^{76} 、 R^{76} と R^{77} 、 R^{77} と R^{78} 、 R^{78} と R^{79} 、 R^{79} と R^{80} 、 R^{80} と R^{81} 、 R^{81} と R^{82} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0119] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(20)で表される化合物も挙げることができる。

[化41]

一般式(20)



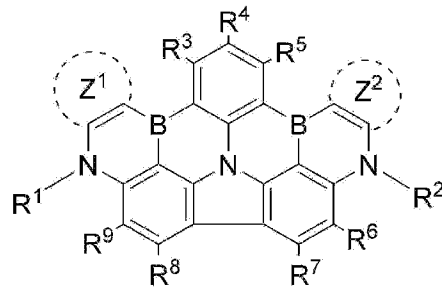
[0120] 一般式(20)において、 X^5 は酸素原子、硫黄原子、あるいは、置換もしくは無置換のアリール基または置換もしくは無置換のヘテロアリール基が結合した窒素原子を表し、 $R^{101} \sim R^{130}$ は各々独立に水素原子、重水素原子、または置換基を表し、 R^{101} と R^{102} 、 R^{102} と R^{103} 、 R^{103} と R^{104} 、 R^{104} と R^{105} 、 R^{105} と R^{106} 、 R^{106} と R^{107} 、 R^{107} と R^{108} 、 R^{108} と R^{109} 、 R^{109} と R^{110} 、 R^{110} と R^{111} 、 R^{111} と R^{112} 、 R^{112} と R^{113} 、 R^{113} と R^{114} 、 R^{114} と R^{115} 、 R^{115} と R^{116} 、 R^{116} と R^{117} 、 R^{117} と R^{118} 、 R^{118} と R^{119} 、 R^{119} と R^{120} 、 R^{120} と R^{121} 、 R^{121} と R^{122} 、 R^{122} と R^{123} 、 R^{123} と R^{124} 、 R^{124} と R^{125} 、 R^{125} と R^{126} 、 R^{126} と R^{127} 、 R^{127} と R^{128} 、 R^{128} と R^{129} 、 R^{129} と R^{130} 、 R^{130} と R^{101} は互いに結合して

環状構造を形成していてもよい。

[0121] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式（21）で表される化合物も挙げることができる。

[化42]

一般式（21）



[0122] 一般式（21）において、 R^1 および R^2 は、各々独立に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、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表し、 Z^1 および Z^2 は、各々独立に置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表し、 $R^3 \sim R^9$ は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。ただし、 R^1 、 R^2 、 Z^1 および Z^2 の少なくとも1つは、置換もしくは無置換のベンゾフラン環、置換もしくは無置換のベンゾチオフェン環、置換もしくは無置換のインドール環を含む。 R^1 と Z^1 、 Z^1 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と Z^2 、 Z^2 と R^2 、 R^2 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^1 は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。前記ベンゾフラン環、前記ベンゾチオフェン環、前記インドール環を構成するベンゼン環骨格構成炭素原子のうち置換可能な炭素原子は窒素原子で置換されていてもよい。一般式（21）中の $C-R^3$ 、 $C-R^4$ 、 $C-R^5$ 、 $C-R^6$ 、 $C-R^7$ 、 $C-R^8$ 、 $C-R^9$ は、Nに置換されていてもよい。

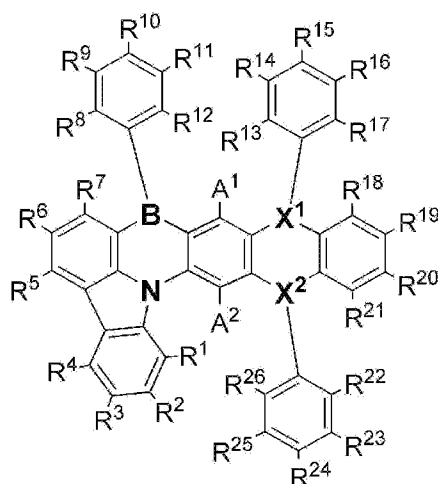
[0123] 本発明の一態様では、 R^1 および R^2 が、各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のフェニル基、または、置換もしくは無置換のベンゾフラン環と置換もしくは無置換のベンゾチオフェン環と置換もしくは無置換のインドール環からなる群より選択される1つ以上の環構造を含

む基である。本発明の一態様では、 Z^1 および Z^2 が、各々独立に置換もしくは無置換の非縮合ベンゼン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したフラン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したチオフェン環、置換もしくは無置換のベンゼン環が縮合したピロール環、置換もしくは無置換のベンゾフラン環が縮合したベンゼン環、置換もしくは無置換のベンゾチオフェン環が縮合したベンゼン環、または、置換もしくは無置換のインドール環が縮合したベンゼン環である。本発明の一態様では、 R^1 と Z^1 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 Z^1 が互いに結合してピロール環を形成している。

[0124] さらに好ましい発光材料として、以下の一般式(22)で表される化合物も挙げることができる。

[化43]

一般式(22)



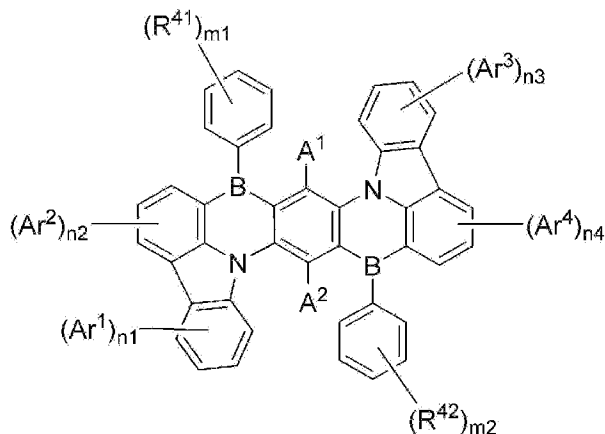
[0125] 一般式(22)において、 X^1 および X^2 は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。 $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} 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る。

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。

[0126] 本発明の一態様では、 R^3 および R^6 の少なくとも一方が置換基である。本発明の一態様では、 R^3 および R^6 がともに置換基である。本発明の一態様では、 R^3 および R^6 が表す置換基が、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つの基または2つ以上を組み合わせた基である。本発明の一態様では、 R^8 および R^{12} がともに置換基である。本発明の一態様では、下記一般式(1a)で表される。

[化44]

一般式(22a)



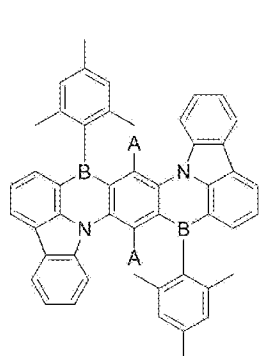
[0127] 一般式(22a)において、 $Ar^1 \sim Ar^4$ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 R^4 および R^{42} は、各々独立に置換もしくは無置換のアルキル基を表す。 m_1 および m_2 は各々独立に0～5の整数を表し、 n_1 および n_3 は各々独立に0～4の整数を表し、 n_2 および n_4 は各々独立に0～3の整数を表す。 A^1 、

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。

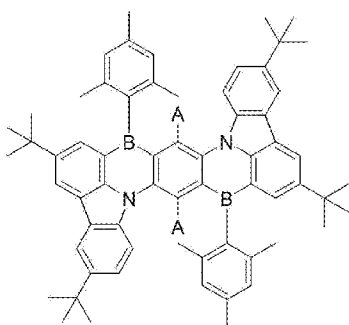
[0128] 本発明の一態様では、 A^1 および A^2 が、各々独立にハメットの σ_p 値が0.2よりも大きい基である。本発明の一態様では、 A^1 および A^2 がともにシアノ基である。本発明の一態様では、 A^1 および A^2 がともにハロゲン原子である。本発明の一態様では、回転対称構造を有する。

[0129] 以下において、上記の縮環構造Aを有する化合物、一般式(5)～(22)のいずれかで表される化合物の好ましい具体例を挙げる。

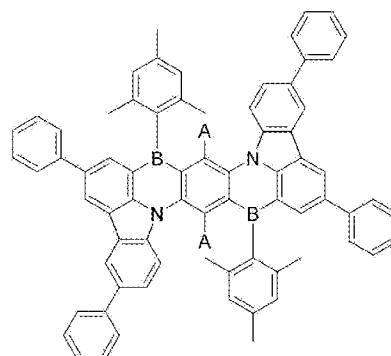
[化45-1]



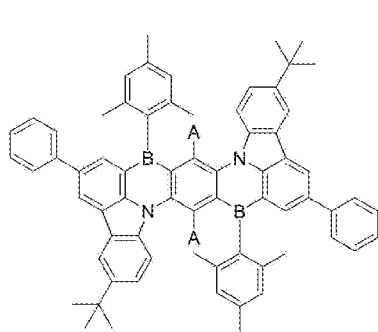
1 a : A=A 1
1 b : A=A 2
1 c : A=A 3
1 d : A=A 4
1 e : A=A 7
1 f : A=A 1 0
1 g : A=A 1 1
1 h : A=A 1 6
1 i : A=A 3 5
1 j : A=A 3 9
1 k : A=A 4 0
1 l : A=A 4 1
1 m : A=A 4 2



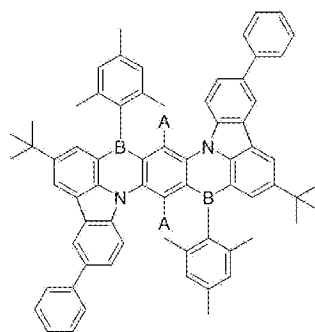
2 a : A=A 1
2 b : A=A 2
2 c : A=A 3
2 d : A=A 4
2 e : A=A 7
2 f : A=A 1 0
2 g : A=A 1 1
2 h : A=A 1 6
2 i : A=A 3 5
2 j : A=A 3 9
2 k : A=A 4 0
2 l : A=A 4 1
2 m : A=A 4 2



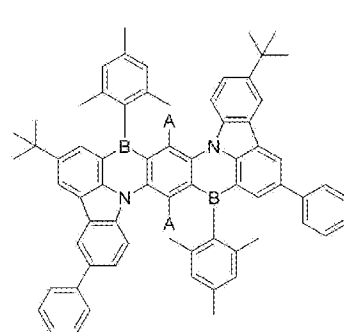
3 a : A=A 1
3 b : A=A 2
3 c : A=A 3
3 d : A=A 4
3 e : A=A 7
3 f : A=A 1 0
3 g : A=A 1 1
3 h : A=A 1 6
3 i : A=A 3 5
3 j : A=A 3 9
3 k : A=A 4 0
3 l : A=A 4 1
3 m : A=A 4 2



4 a : A=A 1
4 b : A=A 2
4 c : A=A 3
4 d : A=A 4
4 e : A=A 7
4 f : A=A 1 0
4 g : A=A 1 1
4 h : A=A 1 6
4 i : A=A 3 5
4 j : A=A 3 9
4 k : A=A 4 0
4 l : A=A 4 1
4 m : A=A 4 2

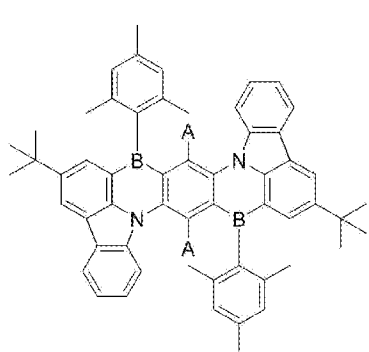


5 a : A=A 1
5 b : A=A 2
5 c : A=A 3
5 d : A=A 4
5 e : A=A 7
5 f : A=A 1 0
5 g : A=A 1 1
5 h : A=A 1 6
5 i : A=A 3 5
5 j : A=A 3 9
5 k : A=A 4 0
5 l : A=A 4 1
5 m : A=A 4 2

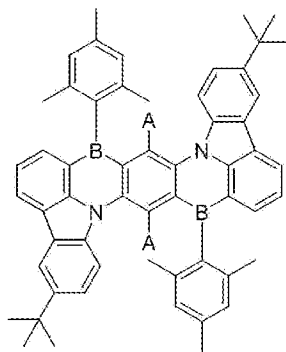


6 a : A=A 1
6 b : A=A 2
6 c : A=A 3
6 d : A=A 4
6 e : A=A 7
6 f : A=A 1 0
6 g : A=A 1 1
6 h : A=A 1 6
6 i : A=A 3 5
6 j : A=A 3 9
6 k : A=A 4 0
6 l : A=A 4 1
6 m : A=A 4 2

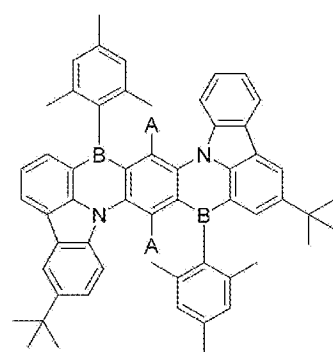
[化45-2]



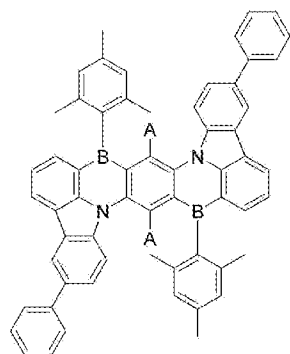
7 a : A=A 1
7 b : A=A 2
7 c : A=A 3
7 d : A=A 4
7 e : A=A 7
7 f : A=A 10
7 g : A=A 11
7 h : A=A 16
7 i : A=A 35
7 j : A=A 39
7 k : A=A 40
7 l : A=A 41
7 m : A=A 42



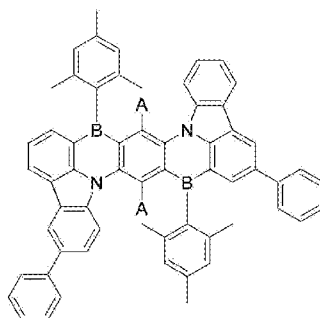
8 a : A=A 1
8 b : A=A 2
8 c : A=A 3
8 d : A=A 4
8 e : A=A 7
8 f : A=A 10
8 g : A=A 11
8 h : A=A 16
8 i : A=A 35
8 j : A=A 39
8 k : A=A 40
8 l : A=A 41
8 m : A=A 42



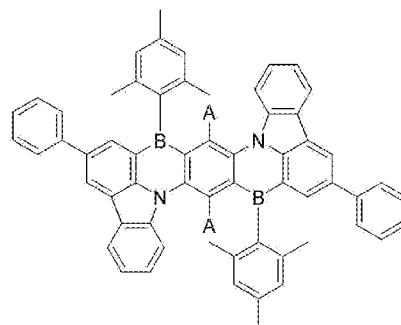
9 a : A=A 1
9 b : A=A 2
9 c : A=A 3
9 d : A=A 4
9 e : A=A 7
9 f : A=A 10
9 g : A=A 11
9 h : A=A 16
9 i : A=A 35
9 j : A=A 39
9 k : A=A 40
9 l : A=A 41
9 m : A=A 42



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

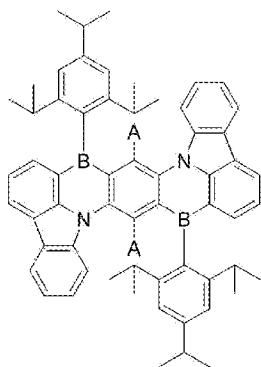


11 a : A=A 1
11 b : A=A 2
11 c : A=A 3
11 d : A=A 4
11 e : A=A 7
11 f : A=A 10
11 g : A=A 11
11 h : A=A 16
11 i : A=A 35
11 j : A=A 39
11 k : A=A 40
11 l : A=A 41
11 m : A=A 42

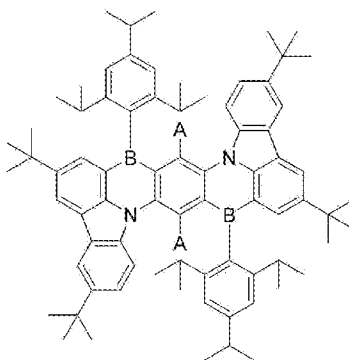


12 a : A=A 1
12 b : A=A 2
12 c : A=A 3
12 d : A=A 4
12 e : A=A 7
12 f : A=A 10
12 g : A=A 11
12 h : A=A 16
12 i : A=A 35
12 j : A=A 39
12 k : A=A 40
12 l : A=A 41
12 m : A=A 42

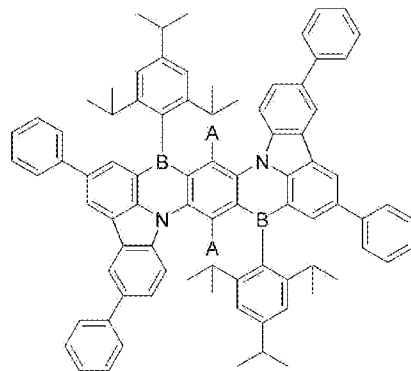
[化45-3]



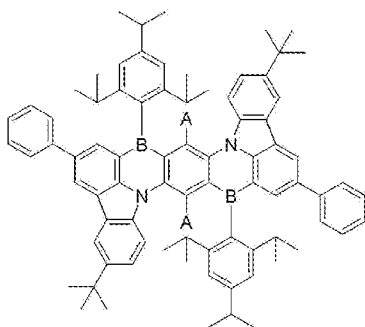
13 a : A=A 1
13 b : A=A 2
13 c : A=A 3
13 d : A=A 4
13 e : A=A 7
13 f : A=A 10
13 g : A=A 11
13 h : A=A 16
13 i : A=A 35
13 j : A=A 39
13 k : A=A 40
13 l : A=A 41
13 m : A=A 42



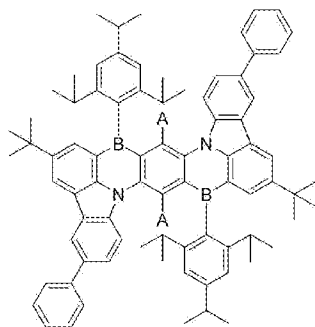
14 a : A=A 1
14 b : A=A 2
14 c : A=A 3
14 d : A=A 4
14 e : A=A 7
14 f : A=A 10
14 g : A=A 11
14 h : A=A 16
14 i : A=A 35
14 j : A=A 39
14 k : A=A 40
14 l : A=A 41
14 m : A=A 42



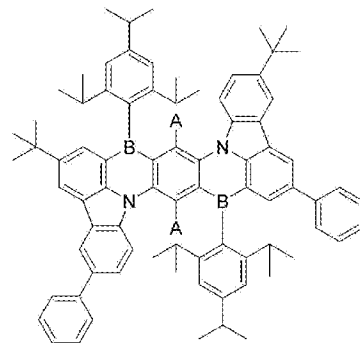
15 a : A=A 1
15 b : A=A 2
15 c : A=A 3
15 d : A=A 4
15 e : A=A 7
15 f : A=A 10
15 g : A=A 11
15 h : A=A 16
15 i : A=A 35
15 j : A=A 39
15 k : A=A 40
15 l : A=A 41
15 m : A=A 42



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

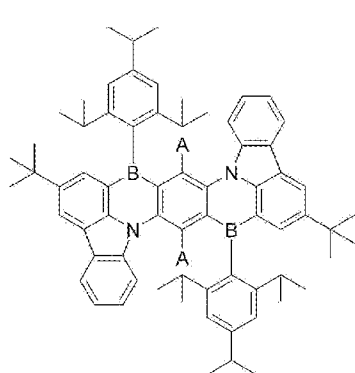


17 a : A=A 1
17 b : A=A 2
17 c : A=A 3
17 d : A=A 4
17 e : A=A 7
17 f : A=A 10
17 g : A=A 11
17 h : A=A 16
17 i : A=A 35
17 j : A=A 39
17 k : A=A 40
17 l : A=A 41
17 m : A=A 42

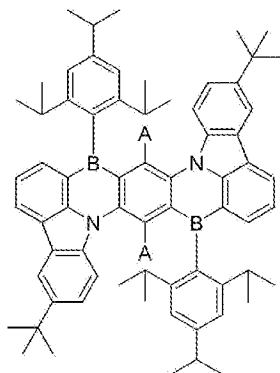


18 a : A=A 1
18 b : A=A 2
18 c : A=A 3
18 d : A=A 4
18 e : A=A 7
18 f : A=A 10
18 g : A=A 11
18 h : A=A 16
18 i : A=A 35
18 j : A=A 39
18 k : A=A 40
18 l : A=A 41
18 m : A=A 42

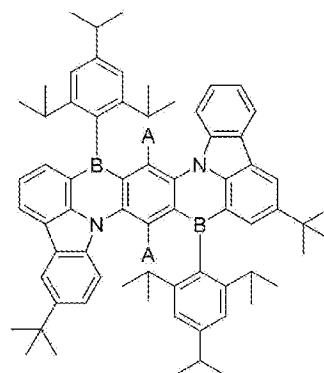
[化45-4]



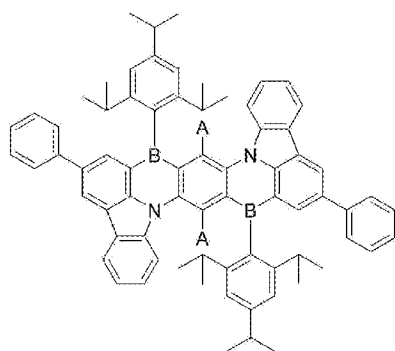
19 a : A=A 1
19 b : A=A 2
19 c : A=A 3
19 d : A=A 4
19 e : A=A 7
19 f : A=A 10
19 g : A=A 11
19 h : A=A 16
19 i : A=A 35
19 j : A=A 39
19 k : A=A 40
19 l : A=A 41
19 m : A=A 42



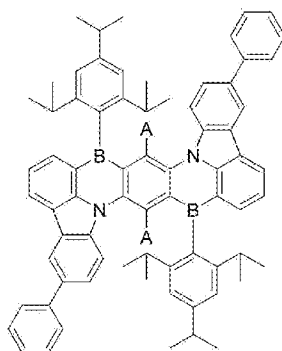
20 a : A=A 1
20 b : A=A 2
20 c : A=A 3
20 d : A=A 4
20 e : A=A 7
20 f : A=A 10
20 g : A=A 11
20 h : A=A 16
20 i : A=A 35
20 j : A=A 39
20 k : A=A 40
20 l : A=A 41
20 m : A=A 42



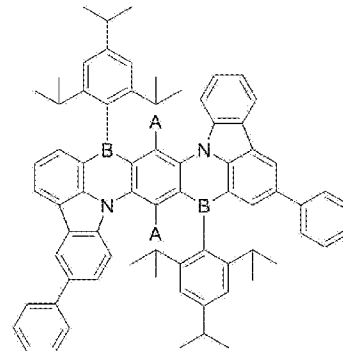
21 a : A=A 1
21 b : A=A 2
21 c : A=A 3
21 d : A=A 4
21 e : A=A 7
21 f : A=A 10
21 g : A=A 11
21 h : A=A 16
21 i : A=A 35
21 j : A=A 39
21 k : A=A 40
21 l : A=A 41
21 m : A=A 42



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

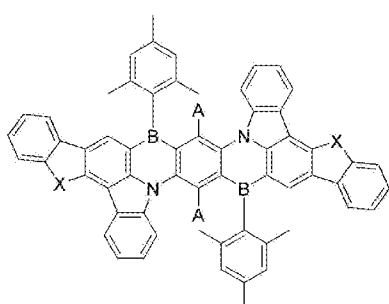


23 a : A=A 1
23 b : A=A 2
23 c : A=A 3
23 d : A=A 4
23 e : A=A 7
23 f : A=A 10
23 g : A=A 11
23 h : A=A 16
23 i : A=A 35
23 j : A=A 39
23 k : A=A 40
23 l : A=A 41
23 m : A=A 42

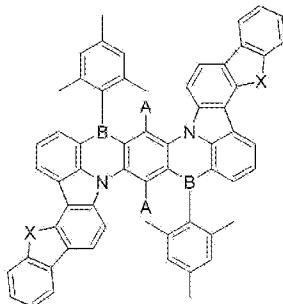


24 a : A=A 1
24 b : A=A 2
24 c : A=A 3
24 d : A=A 4
24 e : A=A 7
24 f : A=A 10
24 g : A=A 11
24 h : A=A 16
24 i : A=A 35
24 j : A=A 39
24 k : A=A 40
24 l : A=A 41
24 m : A=A 42

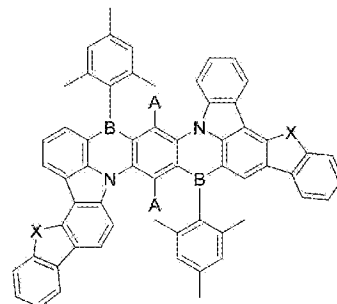
[化45-5]



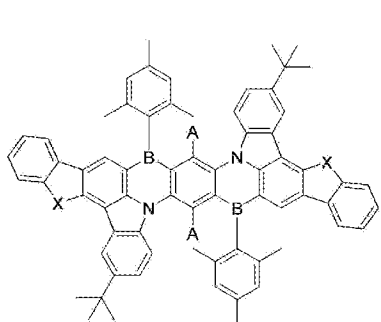
25 a : A=A 1
25 b : A=A 2
25 c : A=A 3
25 d : A=A 4
25 e : A=A 7
25 f : A=A 10
25 g : A=A 11
25 h : A=A 16
25 i : A=A 35
25 j : A=A 39
25 k : A=A 40
25 l : A=A 41
25 m : A=A 42



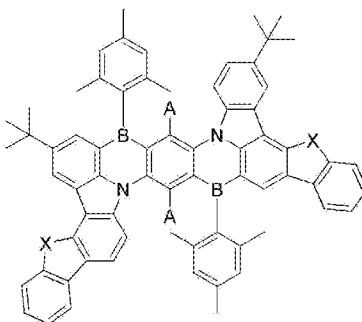
26 a : A=A 1
26 b : A=A 2
26 c : A=A 3
26 d : A=A 4
26 e : A=A 7
26 f : A=A 10
26 g : A=A 11
26 h : A=A 16
26 i : A=A 35
26 j : A=A 39
26 k : A=A 40
26 l : A=A 41
26 m : A=A 42



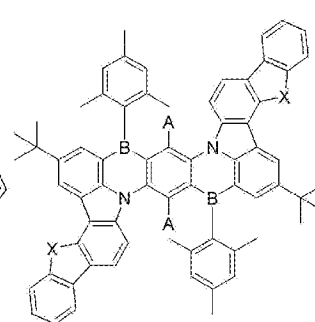
27 a : A=A 1
27 b : A=A 2
27 c : A=A 3
27 d : A=A 4
27 e : A=A 7
27 f : A=A 10
27 g : A=A 11
27 h : A=A 16
27 i : A=A 35
27 j : A=A 39
27 k : A=A 40
27 l : A=A 41
27 m : A=A 42



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

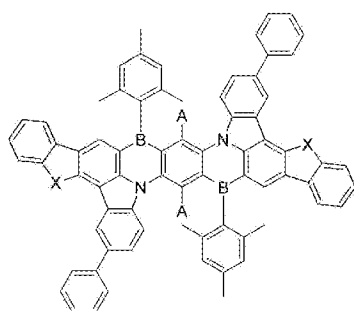


29 a : A=A 1
29 b : A=A 2
29 c : A=A 3
29 d : A=A 4
29 e : A=A 7
29 f : A=A 10
29 g : A=A 11
29 h : A=A 16
29 i : A=A 35
29 j : A=A 39
29 k : A=A 40
29 l : A=A 41
29 m : A=A 42

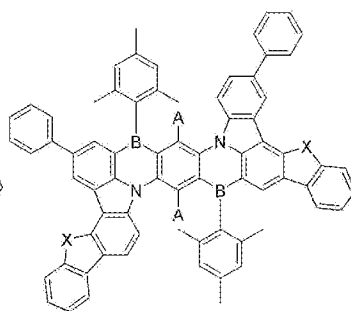


30 a : A=A 1
30 b : A=A 2
30 c : A=A 3
30 d : A=A 4
30 e : A=A 7
30 f : A=A 10
30 g : A=A 11
30 h : A=A 16
30 i : A=A 35
30 j : A=A 39
30 k : A=A 40
30 l : A=A 41
30 m : A=A 42

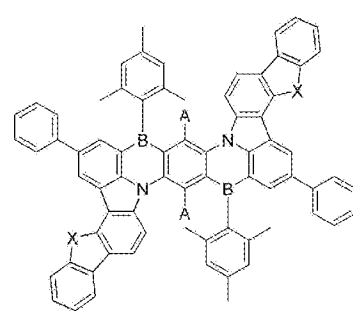
[化45-6]



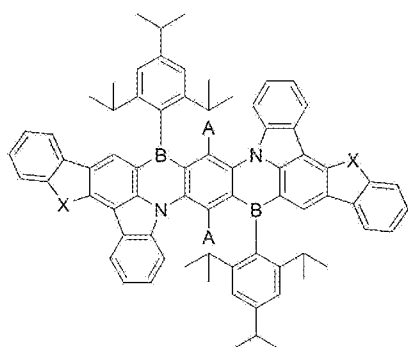
31a : A=A1
31b : A=A2
31c : A=A3
31d : A=A4
31e : A=A7
31f : A=A10
31g : A=A11
31h : A=A16
31i : A=A35
31j : A=A39
31k : A=A40
31l : A=A41
31m : A=A42



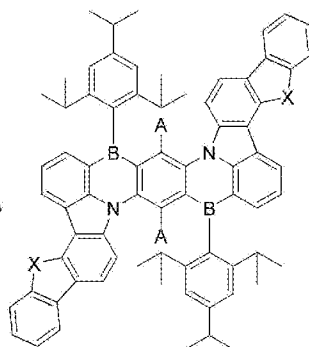
32a : A=A1
32b : A=A2
32c : A=A3
32d : A=A4
32e : A=A7
32f : A=A10
32g : A=A11
32h : A=A16
32i : A=A35
32j : A=A39
32k : A=A40
32l : A=A41
32m : A=A42



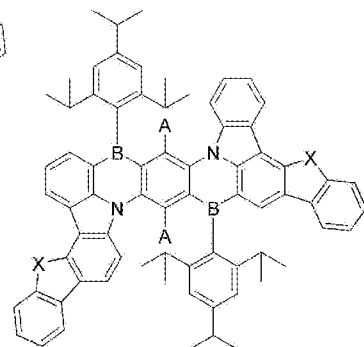
33a : A=A1
33b : A=A2
33c : A=A3
33d : A=A4
33e : A=A7
33f : A=A10
33g : A=A11
33h : A=A16
33i : A=A35
33j : A=A39
33k : A=A40
33l : A=A41
33m : A=A42



34a : A=A1
34b : A=A2
34c : A=A3
34d : A=A4
34e : A=A7
34f : A=A10
34g : A=A11
34h : A=A16
34i : A=A35
34j : A=A39
34k : A=A40
34l : A=A41
34m : A=A42

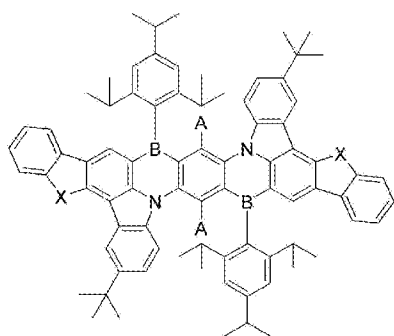


35a : A=A1
35b : A=A2
35c : A=A3
35d : A=A4
35e : A=A7
35f : A=A10
35g : A=A11
35h : A=A16
35i : A=A35
35j : A=A39
35k : A=A40
35l : A=A41
35m : A=A42

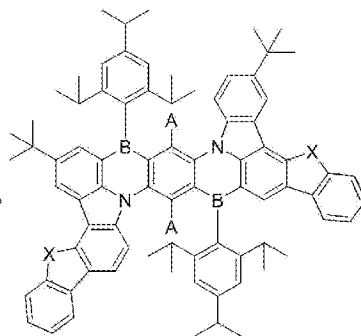


36a : A=A1
36b : A=A2
36c : A=A3
36d : A=A4
36e : A=A7
36f : A=A10
36g : A=A11
36h : A=A16
36i : A=A35
36j : A=A39
36k : A=A40
36l : A=A41
36m : A=A42

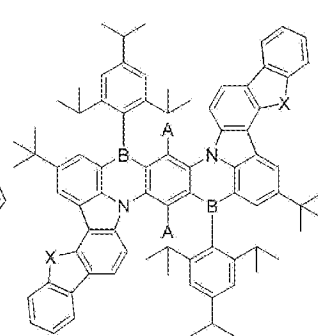
[化45-7]



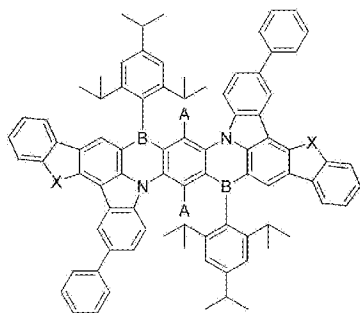
37 a : A=A 1
37 b : A=A 2
37 c : A=A 3
37 d : A=A 4
37 e : A=A 7
37 f : A=A 10
37 g : A=A 11
37 h : A=A 16
37 i : A=A 35
37 j : A=A 39
37 k : A=A 40
37 l : A=A 41
37 m : A=A 42



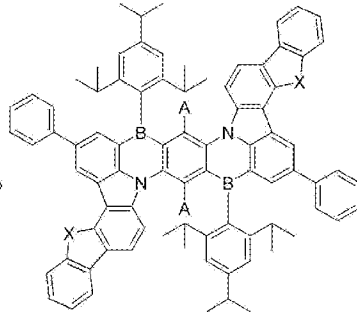
38 a : A=A 1
38 b : A=A 2
38 c : A=A 3
38 d : A=A 4
38 e : A=A 7
38 f : A=A 10
38 g : A=A 11
38 h : A=A 16
38 i : A=A 35
38 j : A=A 39
38 k : A=A 40
38 l : A=A 41
38 m : A=A 42



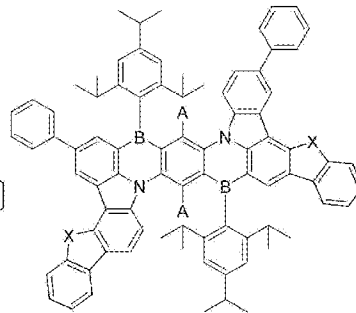
39 a : A=A 1
39 b : A=A 2
39 c : A=A 3
39 d : A=A 4
39 e : A=A 7
39 f : A=A 10
39 g : A=A 11
39 h : A=A 16
39 i : A=A 35
39 j : A=A 39
39 k : A=A 40
39 l : A=A 41
39 m : A=A 42



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

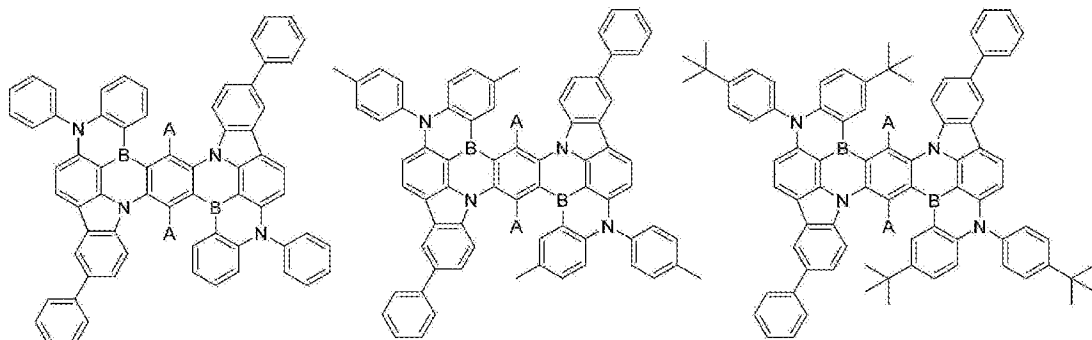


41 a : A=A 1
41 b : A=A 2
41 c : A=A 3
41 d : A=A 4
41 e : A=A 7
41 f : A=A 10
41 g : A=A 11
41 h : A=A 16
41 i : A=A 35
41 j : A=A 39
41 k : A=A 40
41 l : A=A 41
41 m : A=A 42



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

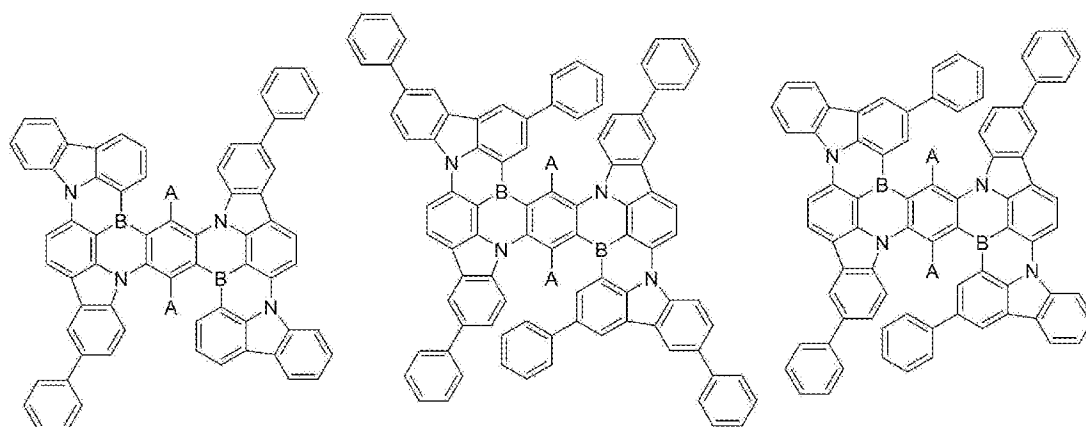
[化45-8]



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

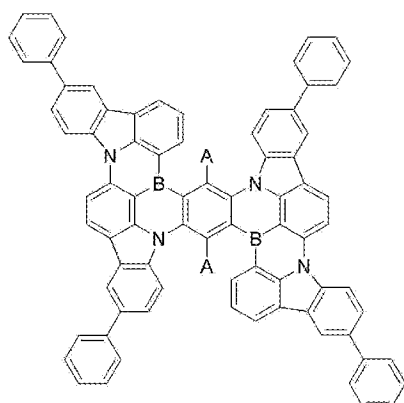


46 a : A=A 1
46 b : A=A 2
46 c : A=A 3
46 d : A=A 4
46 e : A=A 7
46 f : A=A 10
46 g : A=A 11
46 h : A=A 16
46 i : A=A 35
46 j : A=A 39
46 k : A=A 40
46 l : A=A 41
46 m : A=A 42

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

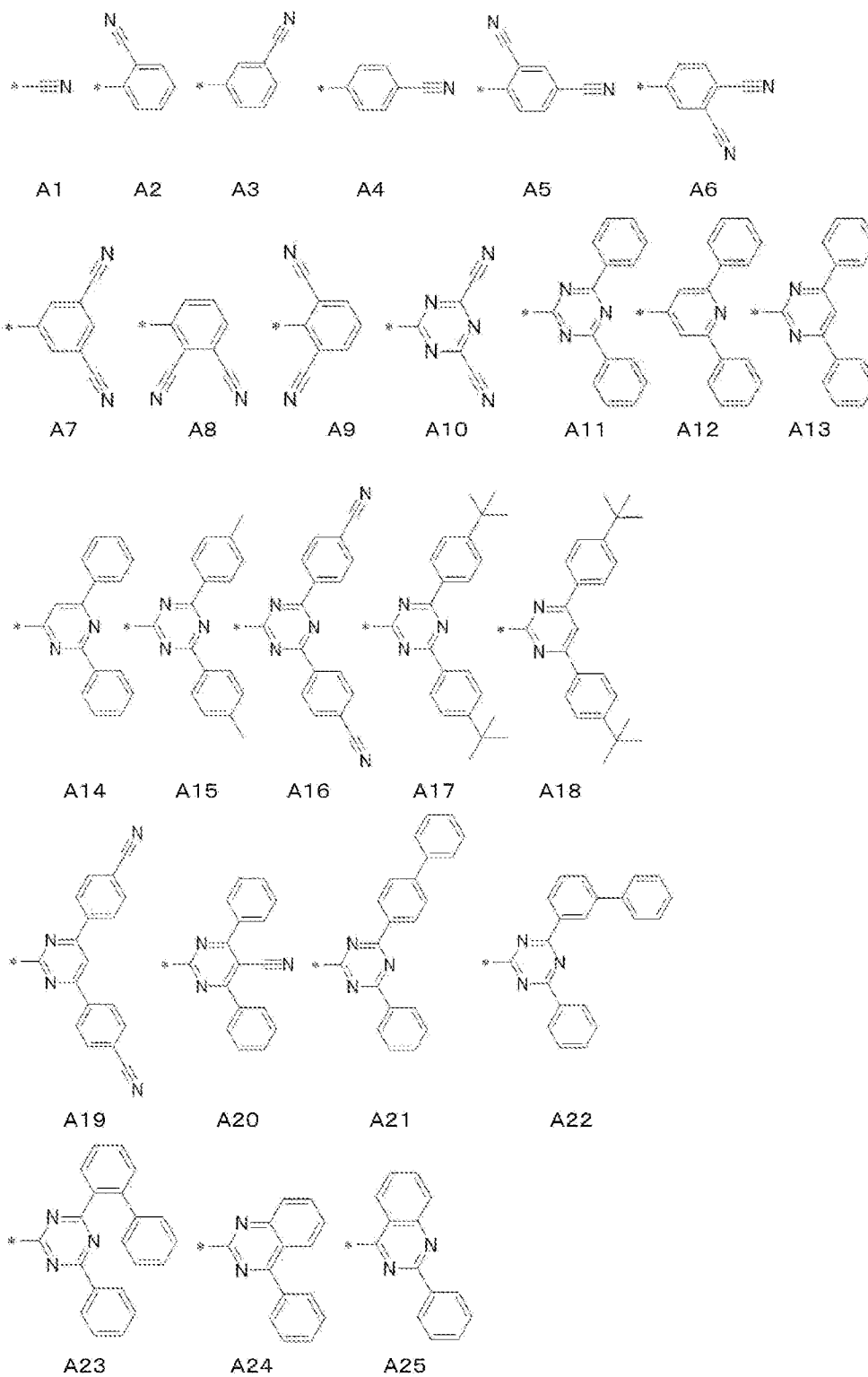
48 a : A=A 1
48 b : A=A 2
48 c : A=A 3
48 d : A=A 4
48 e : A=A 7
48 f : A=A 10
48 g : A=A 11
48 h : A=A 16
48 i : A=A 35
48 j : A=A 39
48 k : A=A 40
48 l : A=A 41
48 m : A=A 42

[化45-9]

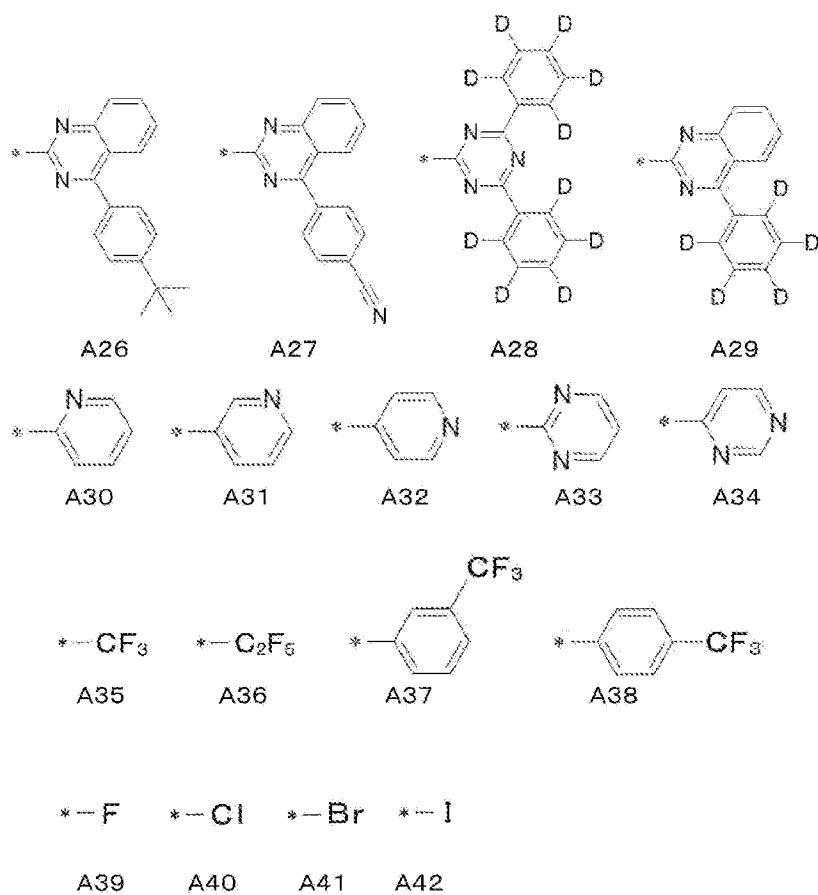


- 49 a : A=A 1
49 b : A=A 2
49 c : A=A 3
49 d : A=A 4
49 e : A=A 7
49 f : A=A 10
49 g : A=A 11
49 h : A=A 16
49 i : A=A 35
49 j : A=A 39
49 k : A=A 40
49 l : A=A 41
49 m : A=A 42

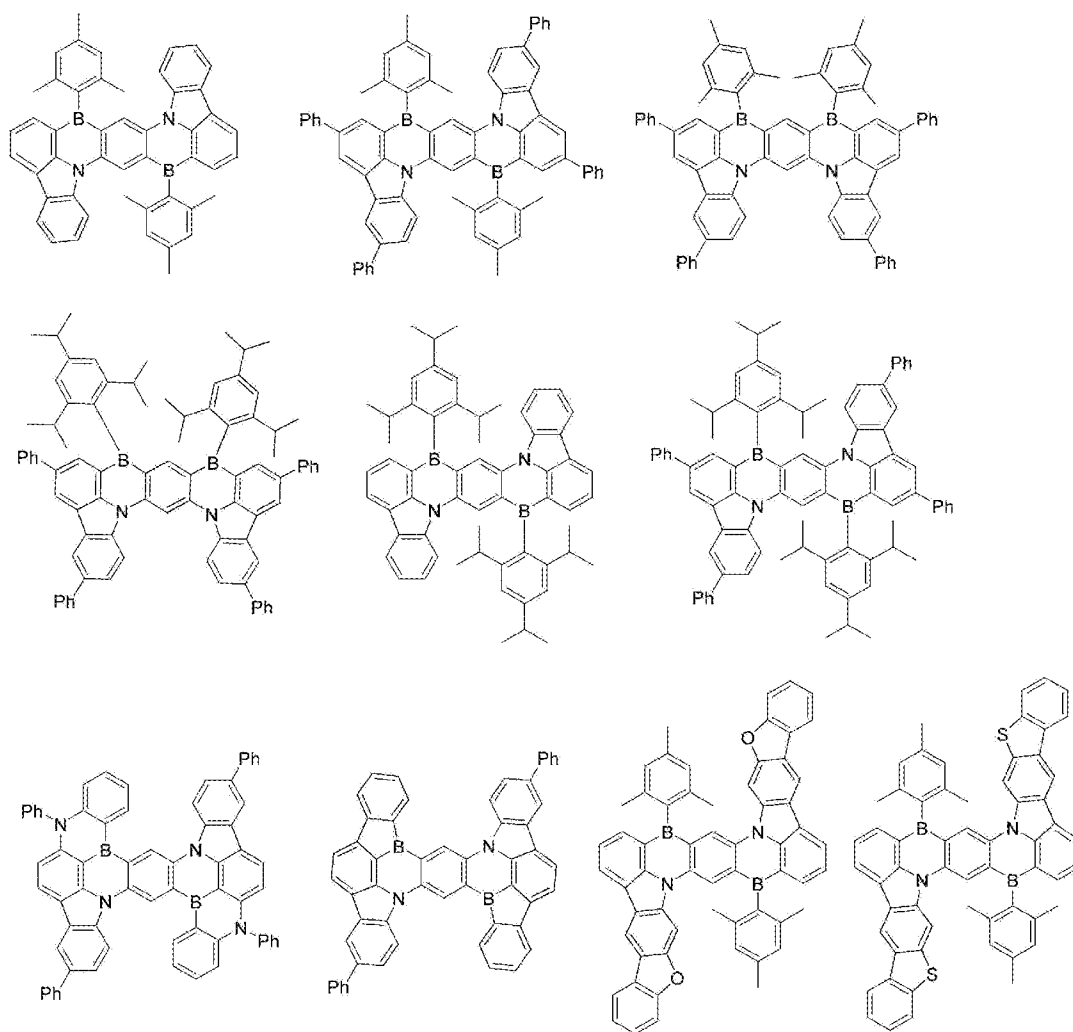
[化46-1]



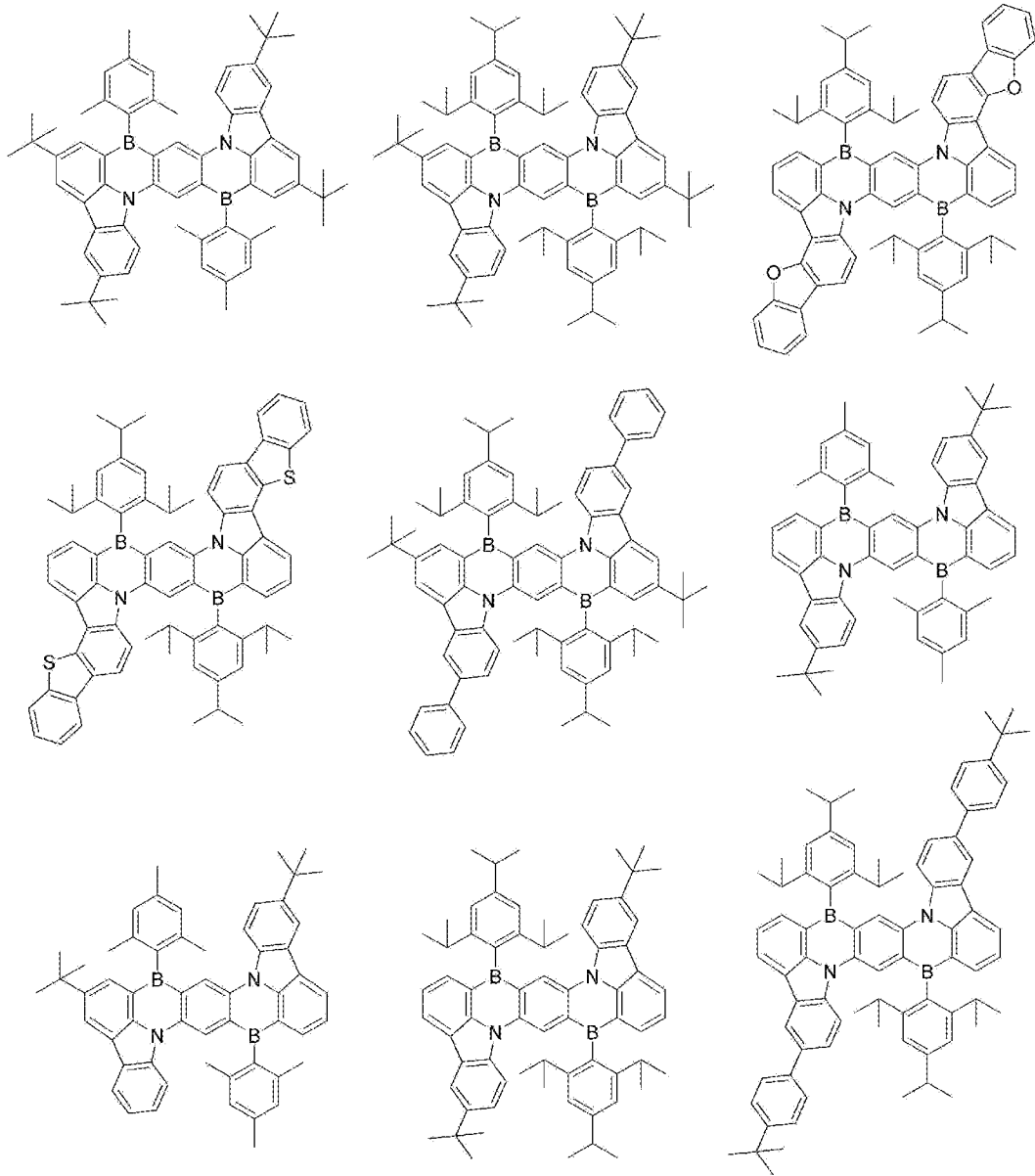
[化46-2]



[化47-1]



[化47-2]



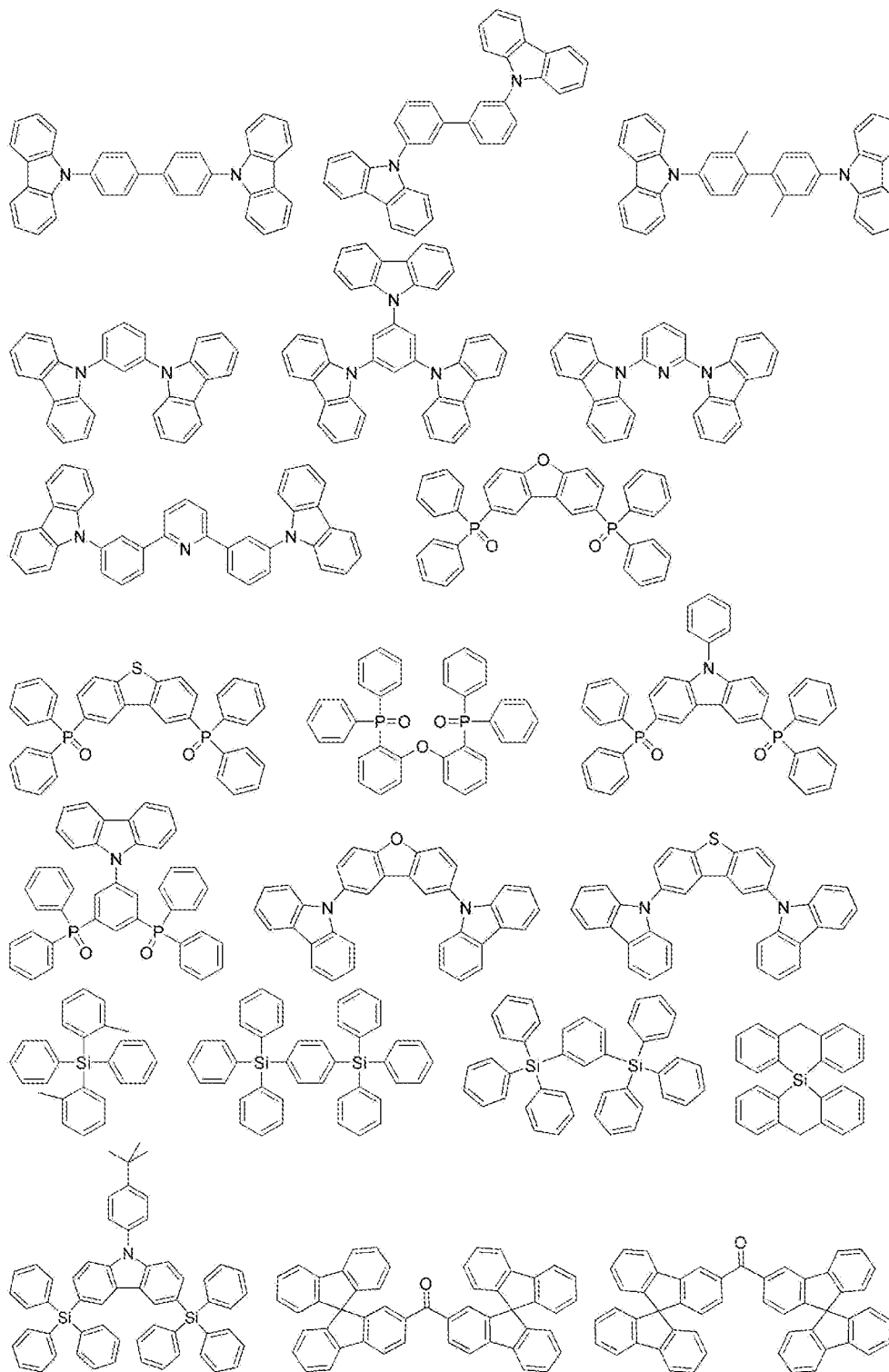
[0130] ある実施形態では、ホスト材料を用いるとき、発光層に含まれる発光材料としての本発明の化合物の量は、0.1重量%以上である。ある実施形態では、ホスト材料を用いるとき、発光層に含まれる発光材料としての本発明の化合物の量は、1重量%以上である。ある実施形態では、ホスト材料を用いるとき、発光層に含まれる発光材料としての本発明の化合物の量は、50重量%以下である。ある実施形態では、ホスト材料を用いるとき、発光層に含まれる発光材料としての本発明の化合物の量は、20重量%以下である。あ

る実施形態では、ホスト材料を用いるとき、発光層に含まれる発光材料としての本発明の化合物の量は、10重量%以下である。

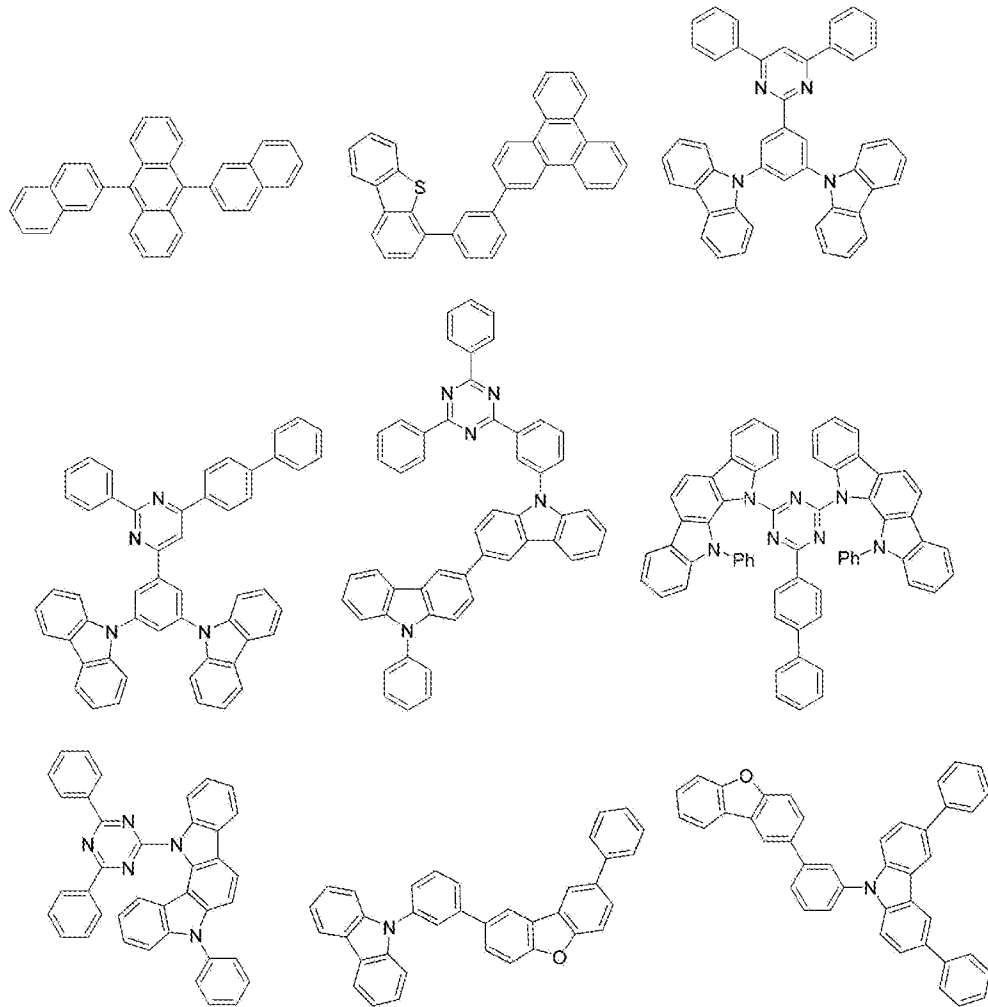
ある実施形態では、発光層のホスト材料は、正孔輸送機能および電子輸送機能を有する有機化合物である。ある実施形態では、発光層のホスト材料は、放射光の波長が増加することを防止する有機化合物である。ある実施形態では、発光層のホスト材料は、高いガラス転移温度を有する有機化合物である。

[0131] いくつかの実施形態では、ホスト材料は以下からなる群から選択される：

[化48-1]



[化48-2]



ある実施形態では、発光層は2種類以上の構造が異なるTADF分子を含む。例えば、励起一重項エネルギー準位がホスト材料、第1TADF分子、第2TADF分子の順に高い、これら3種の材料を含む発光層とすることができる。このとき、第1TADF分子と第2TADF分子は、ともに最低励起一重項エネルギー準位と77Kの最低励起三重項エネルギー準位の差 ΔE_{S_T} 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。発光層における第1

TADF分子の濃度は、第2 TADF分子の濃度よりも大きいことが好ましい。また、発光層におけるホスト材料の濃度は、第2 TADF分子の濃度よりも大きいことが好ましい。発光層における第1 TADF分子の濃度は、ホスト材料の濃度よりも大きくてもよいし、小さくてもよいし、同じであってもよい。ある実施形態では、発光層内の組成を、ホスト材料を10～70重量%、第1 TADF分子を10～80重量%、第2 TADF分子を0.1～30重量%としてもよい。ある実施形態では、発光層内の組成を、ホスト材料を20～45重量%、第1 TADF分子を50～75重量%、第2 TADF分子を5～20重量%としてもよい。ある実施形態では、第1 TADF分子とホスト材料の共蒸着膜（この共蒸着膜における第1 TADF分子の濃度＝A重量%）の光励起による発光量子収率 $\phi_{PL1}(A)$ と、第2 TADF分子とホスト材料の共蒸着膜（この共蒸着膜における第2 TADF分子の濃度＝A重量%）の光励起による発光量子収率 $\phi_{PL2}(A)$ が、 $\phi_{PL1}(A) > \phi_{PL2}(A)$ の関係式を満たす。ある実施形態では、第2 TADF分子とホスト材料の共蒸着膜（この共蒸着膜における第2 TADF分子の濃度＝B重量%）の光励起による発光量子収率 $\phi_{PL2}(B)$ と、第2 TADF分子の単独膜の光励起による発光量子収率 $\phi_{PL2}(100)$ が、 $\phi_{PL2}(B) > \phi_{PL2}(100)$ の関係式を満たす。ある実施形態では、発光層は3種類の構造が異なるTADF分子を含むことができる。本発明の化合物は、発光層に含まれる複数のTADF化合物のいずれであってもよい。

ある実施形態では、発光層は、ホスト材料、アシストドーパント、および発光材料からなる群より選択される材料で構成することができる。ある実施形態では、発光層は金属元素を含まない。ある実施形態では、発光層は炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子および硫黄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、発光層は、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のみから構成される材料で構成することもできる。あるいは、発光層は、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のみから構成される材料で構成することもできる。

発光層が本発明の化合物以外のTADF材料を含むとき、そのTADF材料は公知の遅延蛍光材料であってよい。好ましい遅延蛍光材料として、WO 2013/154064号公報の段落0008~0048および0095~0133、WO 2013/011954号公報の段落0007~0047および0073~0085、WO 2013/011955号公報の段落0007~0033および0059~0066、WO 2013/081088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、WO 2013/133359号公報の段落0007~0032および0079~0084、WO 2013/161437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2017-226838号公報の段落0010~0050、特開2018-100411号公報の段落0012~0043、WO 2018/047853号公報の段落0016~0044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、遅延蛍光を放射しうるものが含まれる。また、ここでは、特開2013-253121号公報、WO 2013/133359号公報、WO 2014/034535号公報、WO 2014/115743号公報、WO 2014/122895号公報、WO 2014/126200号公報、WO 2014/136758号公報、WO 2014/133121号公報、WO 2014/136860号公報、WO 2014/196585号公報、WO 2014/18912

2号公報、WO2014/168101号公報、WO2015/008580号公報、WO2014/203840号公報、WO2015/002213号公報、WO2015/016200号公報、WO2015/019725号公報、WO2015/072470号公報、WO2015/108049号公報、WO2015/080182号公報、WO2015/072537号公報、WO2015/080183号公報、特開2015-129240号公報、WO2015/129714号公報、WO2015/129715号公報、WO2015/133501号公報、WO2015/136880号公報、WO2015/137244号公報、WO2015/137202号公報、WO2015/137136号公報、WO2015/146541号公報、WO2015/159541号公報に記載される発光材料であって、遅延蛍光を放射しうるものを好ましく採用することができる。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する。

[0132] 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。

[0133] 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。

[0134] 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）、SnO₂およびZnOから選択される。いくつかの実施形態では、IDIXO（In₂O₃-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。

[0135] 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 nm～5 μmである。いくつかの実施形態では、前記陰極の厚は50～200 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。

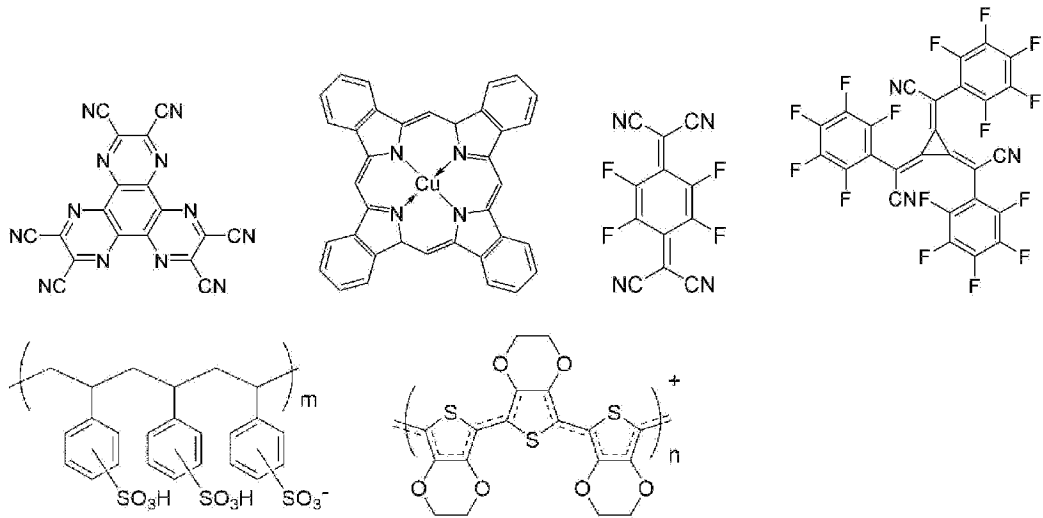
[0136] 注入層：

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できる。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。

[0137]

[化49]

MoO₃,

[0138] 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50]



[0139] 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。

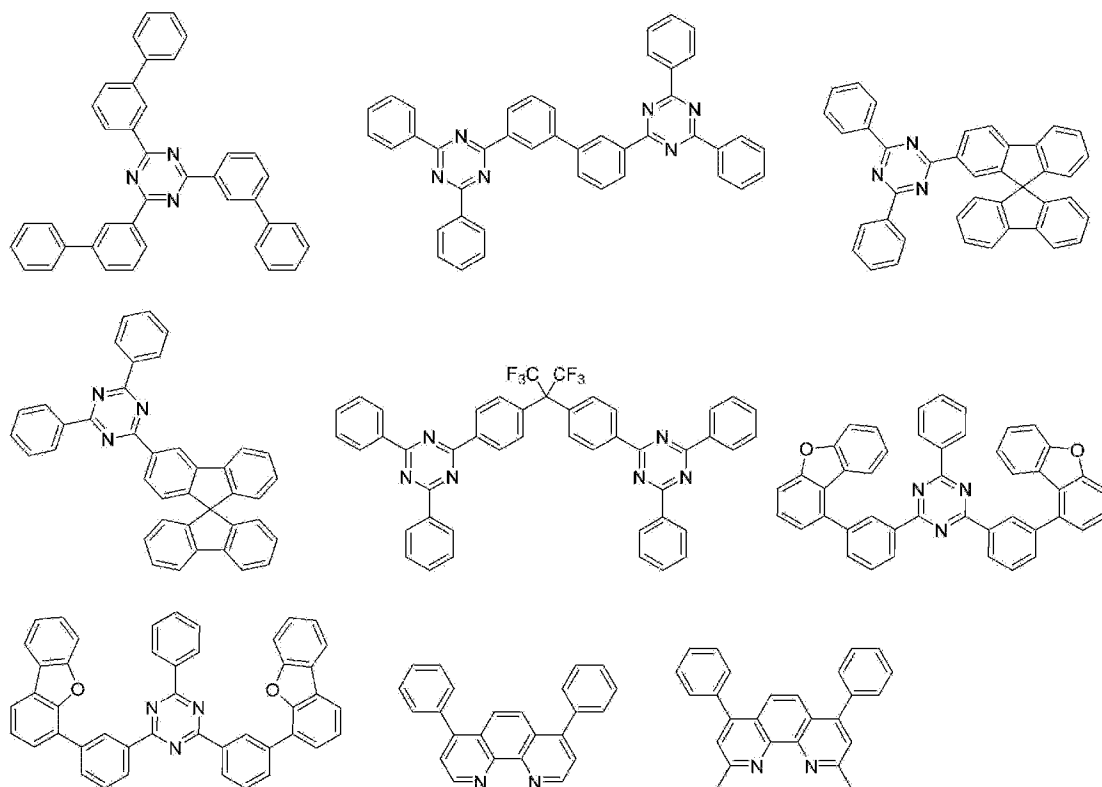
[0140] 正孔障壁層：

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。

[0141] [化51]



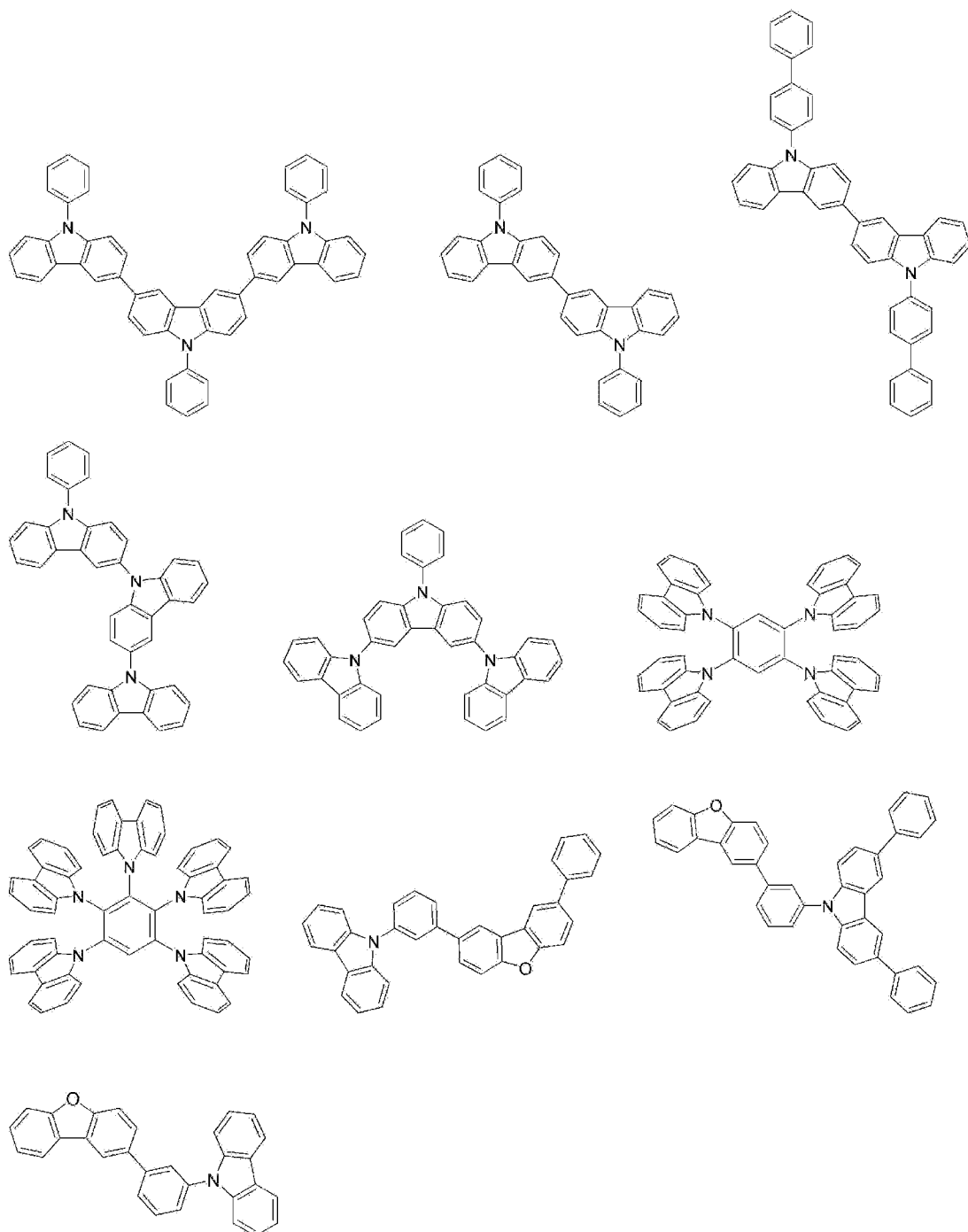
[0142] 電子障壁層：

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。

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。

[0143]

[化52]



[0144] 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。

[0145] 正孔輸送層：

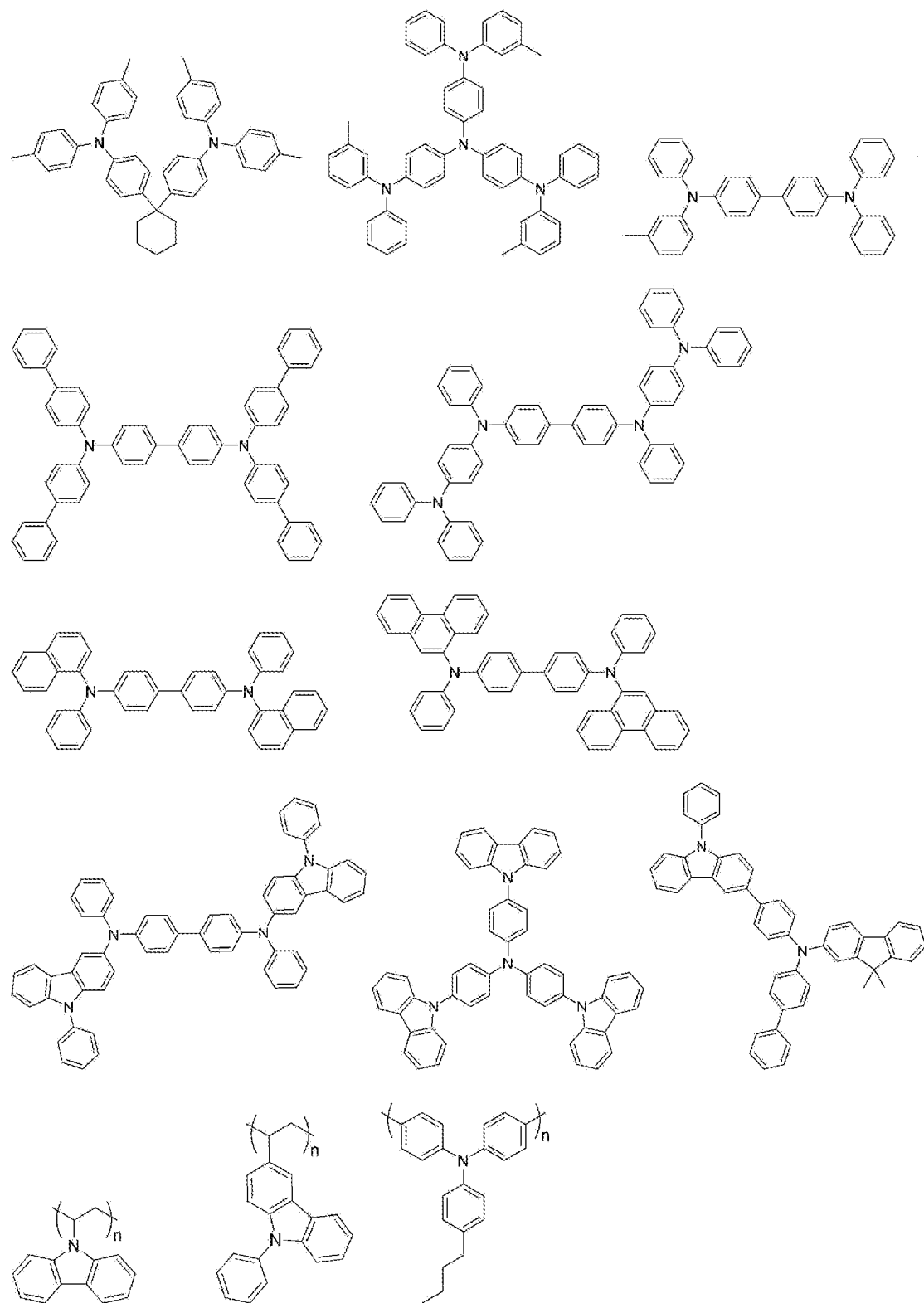
正孔輸送層は、正孔輸送材料を含む。いくつかの実施形態では、正孔輸送層は単層である。いくつかの実施形態では、正孔輸送層は複数の層を有する。

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体、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体、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体、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。

[0146]

[化53]



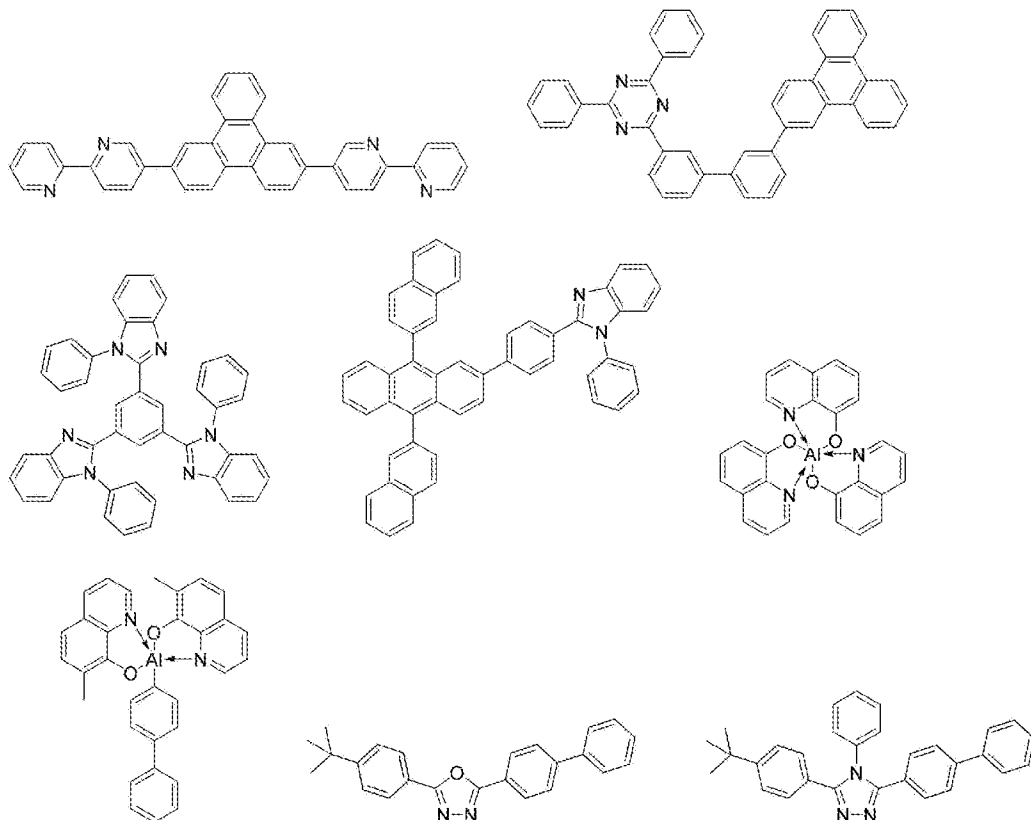
[0147] 電子輸送層：

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。

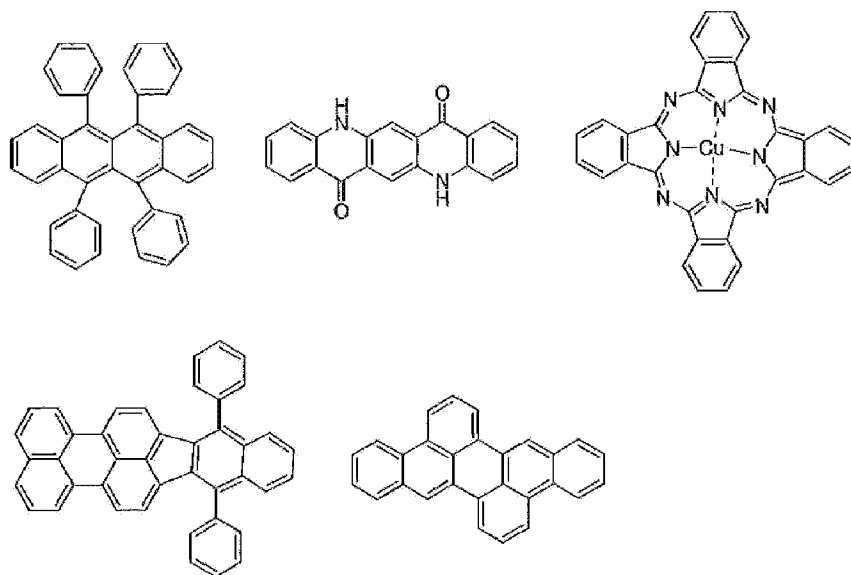
[0148] [化54]



[0149] 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。

[0150] [化55]



[0151] 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。

[0152] 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。

[0153] 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。

[0154] 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。

[0155] 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。

[0156] 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。

[0157] 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。

[0158] 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。

[0159] 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。

[0160] 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。

[0161] 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

[0162] 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。

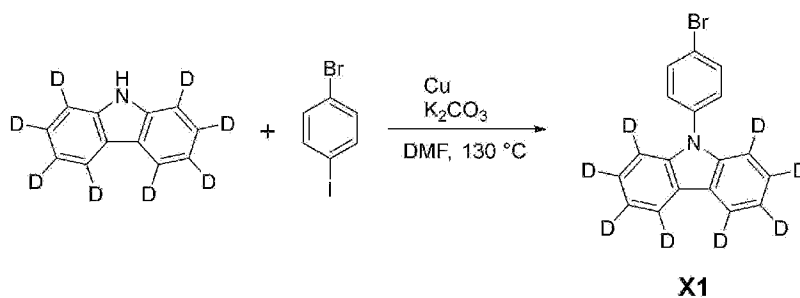
以下に示す材料、処理内容、処理手順等は、本発明の趣旨を逸脱しない限り適宜変更することができる。したがって、本発明の範囲は以下に示す具体例により限定的に解釈されるべきものではない。なお、発光特性の評価は、ソースメータ（ケースレー社製：2400シリーズ）、半導体パラメータ・アナライザ（アジレント・テクノロジー社製：E5273A）、光パワーメータ測定装置（ニューポート社製：1930C）、光学分光器（オーシャンオ

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。また、HOMOとLUMOのエネルギーの測定は大気中光電子分光法（理研計器社製AC-3等）により行った。

以下の合成例において、一般式（1）に含まれる化合物を合成した。

[0163]（合成例1）化合物727の合成

[化56]



[0164] 化合物X1

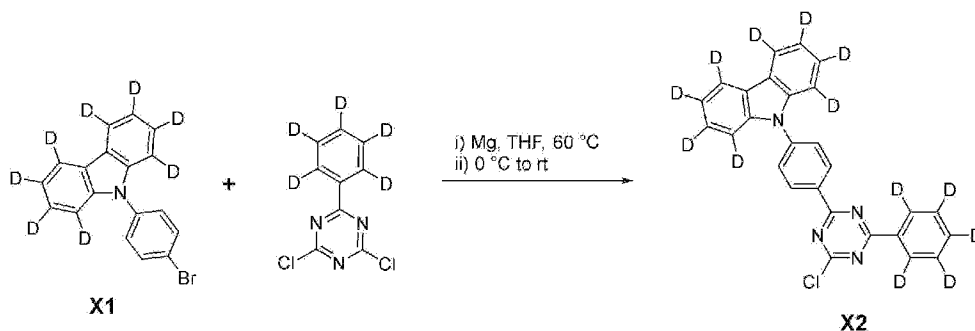
カルバゾール-1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d₈（3.3 g, 18.8 mmol）、p-ブロモヨードベンゼン（7.9 g, 27.9 mmol）、炭酸カリウム（10.2 g, 73.8 mmol）、銅粉末（2.4 g, 37.7 mmol）をN,N-ジメチルホルムアミド（DMF：50 mL）中で、窒素雰囲気下、130℃で加熱した。室温に冷却したのち、セライトろ過し、酢酸エチルで洗浄した。ろ液を濃縮したのち、シリカゲルクロマトグラフィー（ヘキサン）で精製し、白色固体の化合物X1を5.7 g（17.2 mmol，収率92%）得た。

¹H NMR（400 MHz, CDCl₃）：δ 7.73（dt, J = 9.2, 2.0 Hz, 2H）7.46（dt, J = 8.8, 2.8 Hz, 2H）.

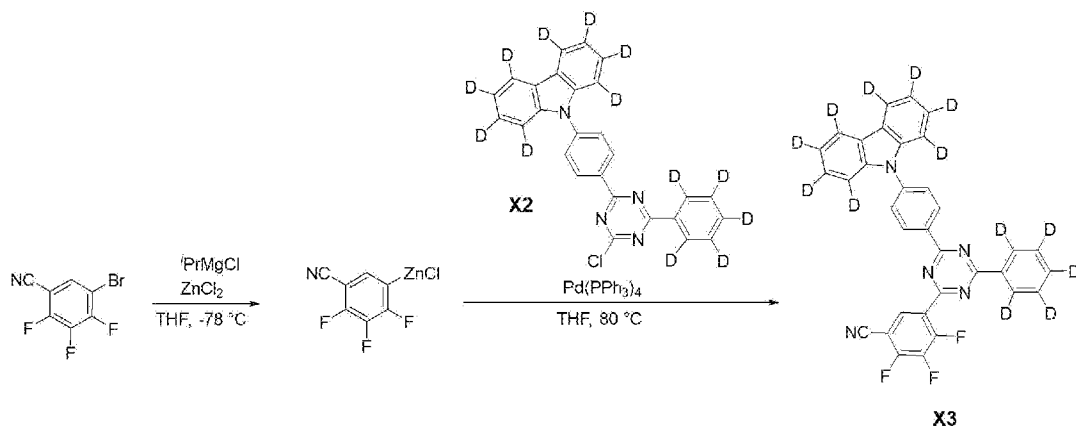
ASAP MSスペクトル分析：C₁₈H₄D₈BrN：理論値329.07，観測値330.12 [M+H⁺]

[0165]

[化57]



[化58]



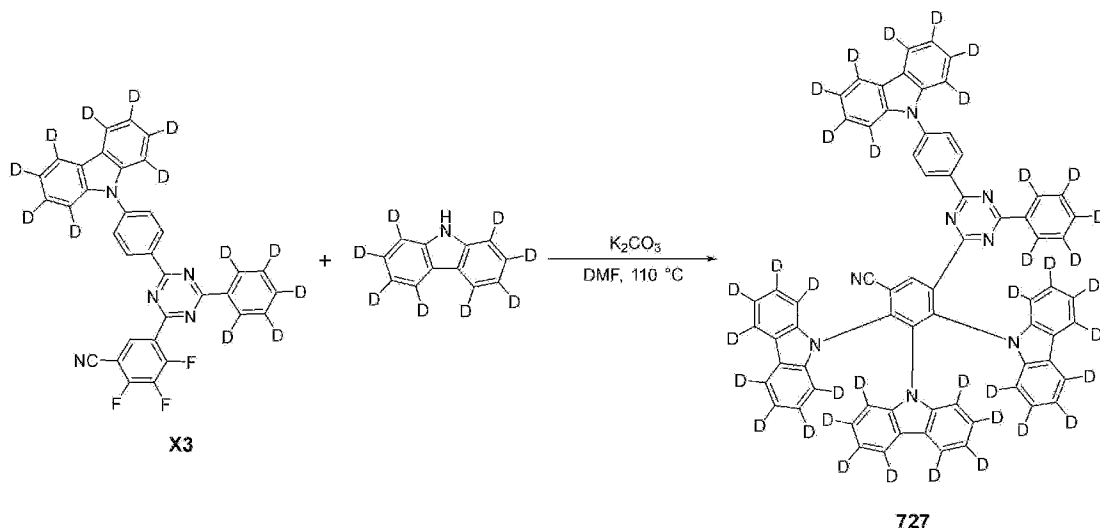
[0168] 化合物X3

窒素気流下、 -78°C にて5-ブromo-2,3,4-トリフルオロベンゾニトリル (0.47 g, 2.0 mmol) のTHF (8 mL) 溶液に2.0 MのイソプロピルマグネシウムクロリドのTHF溶液 (1.2 mL, 2.4 mmol) をゆっくりと滴下した。1時間攪拌したのちに、1 Mの塩化亜鉛のTHF溶液 (6 mL, 6 mmol) を加え、さらに30分攪拌した。室温に昇温し、化合物X2 (0.60 g, 1.3 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (0.79 g, 0.068 mmol)、THF (5 mL) を加えた。その後 80°C に昇温し、17時間攪拌した。室温まで冷却し、得られた固体をイオン交換水、メタノール、酢酸エチル、ヘキサンで洗浄し、黄色固体の化合物X3を0.623 g (1.09 mmol, 収率81%) 得た。

ASAP MSスペクトル分析: $\text{C}_{34}\text{H}_5\text{D}_{13}\text{F}_3\text{N}_5$: 理論値566.23, 観測値567.39 $[\text{M}+\text{H}^+]$

[0169]

[化59]

[0170] 化合物 7 2 7

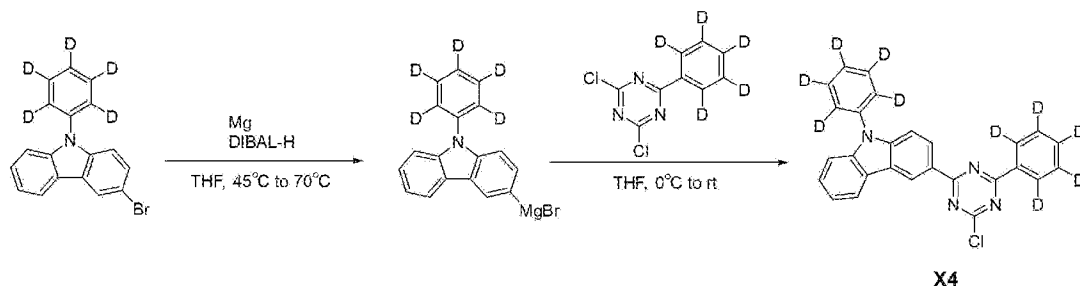
化合物 X 3 (1.00 g, 1.76 mmol)、カルバゾール-1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d 8 (1.08 g, 6.17 mmol) の DMF (29 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.980 g, 7.06 mmol) を加え、窒素雰囲気下、110 °C で 20 時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、飽和塩化アンモニウム水溶液を加え、塩化メチレンで抽出後、有機層をイオン交換水、飽和食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。得られた固体をシリカゲルクロマトグラフィー (ヘキサン/塩化メチレン=1:1) で精製した。得られた固体をメタノールで洗浄した後、塩化メチレン/メタノールで再沈殿を行い、黄色固体の化合物 7 2 7 を 1.08 g (1.05 mmol, 収率 59%) で得た

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ 9.08 (s, 1H), 8.08 (d, $J = 8.8$ Hz, 2H), 7.51 (d, $J = 8.8$ Hz, 2H).

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{70}\text{H}_5\text{D}_{37}\text{N}_8$: 理論値 1031.59, 観測値 1032.82 $[\text{M}+\text{H}^+]$

[0171] (合成例 2) 化合物 7 2 7 (2 8) の合成

[化60]



[0172] 化合物X4

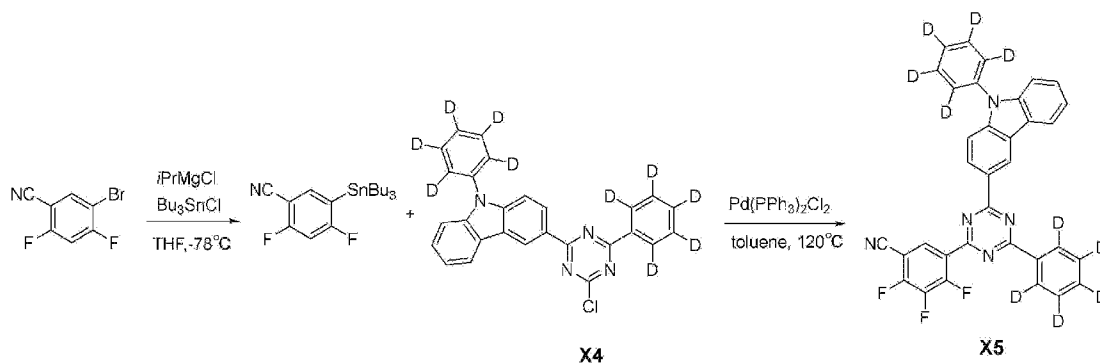
窒素気流下、Mg (1.53 g, 63 mmol) と THF (20 mL) の混合物に 1.0 M の水素化ジイソブチルアルミニウムのトルエン溶液 (DIBAL-H トルエン溶液: 0.60 mL, 0.60 mmol) を加えた後に、1.0 M の 3-ブromo-9-(フェニル-2,3,4,5,6-d5)-9H-カルバゾール (20.3 g, 62 mmol) の THF 溶液 (80 mL) を 45°C にてゆっくりと滴下した。滴下終了後 70°C に昇温し、さらに 2 時間攪拌を行った。得られた褐色溶液を室温まで冷却し、0°C にて 2,4-ジクロロ-6-(フェニル-2,3,4,5,6-d5)-1,3,5-トリアジンの THF 溶液 (120 mL) にゆっくりと滴下した。滴下終了後に室温に戻し 18 時間攪拌した。反応容器を 0°C に冷却し飽和塩化アンモニウム水溶液 (100 mL) を加え、有機相と水相を分離した。有機相を濃縮し得られた固体を THF、ヘキサンで洗浄した。固体を熱トルエンに溶解後、シリカパッドに通し、ろ液を濃縮した。得られた淡黄色固体を THF とヘキサンにて洗浄し淡黄色の化合物 X4 を 13.0 g (29.3 mmol, 収率 47%) 得た。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, DMSO- d_6): δ 9.49 (d, $J=1.6$ Hz, 1H), 8.65 (dd, $J=8.8, 1.6$ Hz, 1H), 8.55 (d, $J=12$ Hz, 1H), 7.51–7.54 (m, 2H), 7.388–7.424 (m, 2H).

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{27}\text{H}_7\text{D}_{10}\text{ClN}_4$: 理論値 442.18, 観測値 443.39 [$\text{M}+\text{H}^+$]

[0173]

[化61]



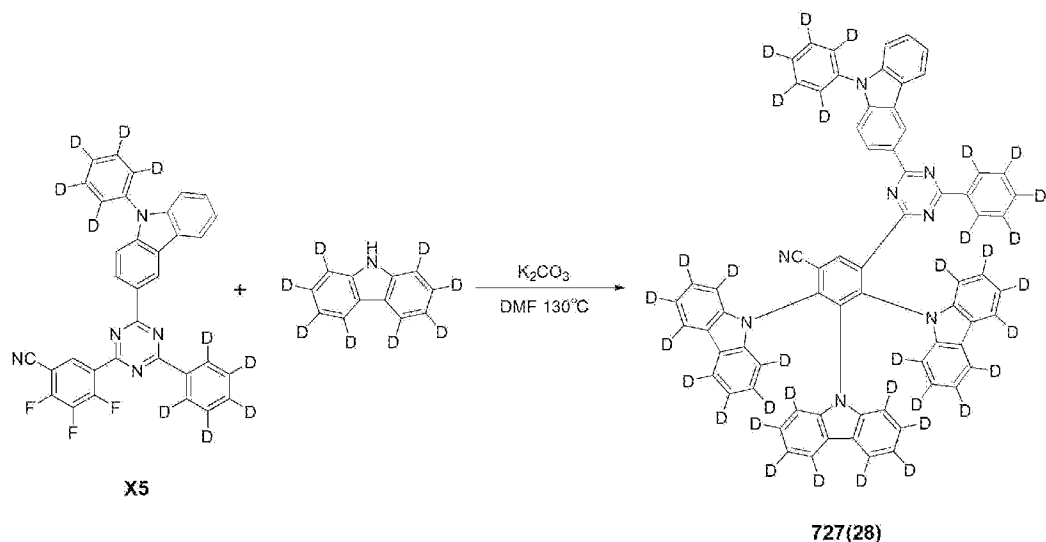
[0174] 化合物X5

窒素気流下、 -78°C にて5-ブロモ-2,4-ジフルオロベンゾニトリル (2.36 g, 10.0 mmol) のTHF (100 mL) 溶液に2.0 MのイソプロピルマグネシウムクロリドのTHF溶液 (5.3 mL, 10.6 mmol) をゆっくりと滴下した。1時間攪拌したのちに、塩化トリブチルスズ (3.96 g, 12.1 mmol) を加え、10分間攪拌したのちに、室温に昇温し、さらに3時間攪拌した。反応容器を 0°C に冷却し、飽和塩化アンモニウム溶液を加えた。得られた反応溶液をトルエンで抽出し、有機層を飽和食塩水で洗浄後、無水マグネシウムを用いて乾燥した。溶媒を除去し、得られた黄色液体を脱水トルエン (100 mL) に溶解させ、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド (0.71 g, 1.0 mmol) と化合物X4 (4.43 g, 10.0 mmol) を加え、 120°C で15時間攪拌した。反応容器を室温に戻し、得られた灰色固体をトルエン、ヘキサンにて洗浄した。固体を熱トルエンに溶解させたのちにシリカパッドに通し、ろ液を濃縮した。得られた淡黄色固体を酢酸エチルとヘキサンの混合溶液で洗浄し、淡橙色固体の化合物X5を2.41 g (4.28 mmol, 収率43%) 得た。

ASAP MSスペクトル分析: $\text{C}_{34}\text{H}_8\text{D}_{10}\text{F}_3\text{N}_5$: 理論値563.21, 観測値 564.39 $[\text{M}+\text{H}^+]$

[0175]

[化62]

[0176] 化合物 7 2 7 (2 8)

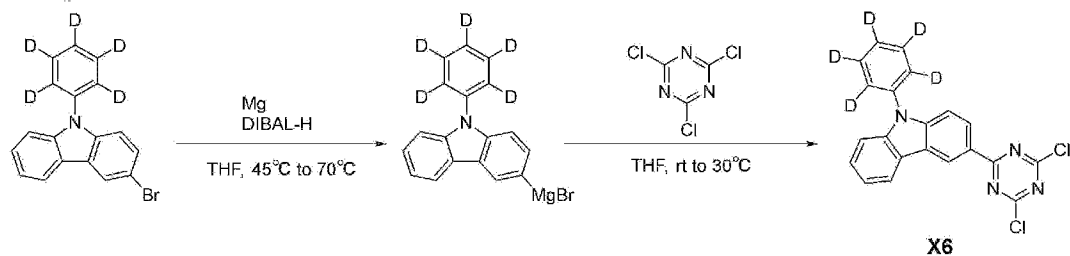
化合物X5 (1.41 g, 2.50 mmol)、カルバゾール-1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d8 (1.49 g, 8.50 mmol) のDMF (50 mL) 溶液に炭酸カリウム (1.42 g, 10.3 mmol) を加え、130℃で5時間撹拌した。反応溶液を室温に冷却し、酢酸エチルを加え希釈した。溶液を飽和食塩水で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥後、ろ過を行った。ろ液を濃縮し、得られた固体を酢酸エチル／ヘキサンにて再沈殿を行い、固体を濾別しヘキサンとメタノールで洗浄した。粗生成物をカラムクロマトグラフィー (トルエン／ヘキサン=4 : 1) にて精製し、得られた固体を酢酸エチル／ヘキサンで再沈殿し、淡緑色の化合物727(28)を1.83 g (1.78 mmol, 収率71%) 得た。

¹H-NMR (400 MHz, DMSO-d₆): δ 9.36 (s, 1H), 9.05 (brs, 1H), 8.31 (d, J=8.4 Hz, 1H), 8.08 (d, J=8.4 Hz, 1H), 7.48–7.52 (m, 2H), 7.37–7.40 (m, 1H), 7.28 (d, J=8.4 Hz, 1H).

ASAP MSスペクトル分析: C₇₀H₈D₃₄N₈: 理論値1028.56, 観測値1029.88 [M+H⁺]

[0177] (合成例3) 化合物727(252)の合成

[化63]



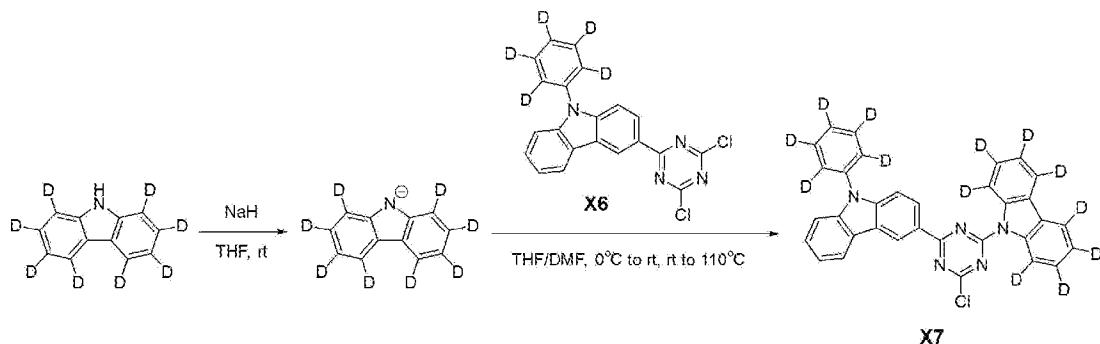
[0178] 化合物 X 6

窒素気流下、Mg (0.54 g, 22.23 mmol) と THF (21 mL) の混合物に 1.0 M の DIBAL-H トルエン溶液 (0.21 mL, 0.21 mmol) を加えた後に、3.0 M の 3-ブromo-9-(フェニル-2,3,4,5,6-d5)-9H-カルバゾール (7.2 g, 21.1 mmol) の THF 溶液 (7 mL) を 45°C にてゆっくりと滴下した。滴下終了後 70°C に昇温し、さらに 2 時間攪拌を行った。得られた褐色溶液を室温まで冷却後、室温にて 2,4,6-トリクロロ-1,3,5-トリアジンの THF 溶液 (33.6 mL) にゆっくりと滴下した。滴下終了後に 30°C で 15 時間攪拌した。飽和塩化アンモニウム水溶液 (30 mL) を加え、15 時間攪拌した。反応混合物を濾別し、得られた固体をヘキサンで洗浄し、淡黄色固体の化合物 X 6 を 3.3 g (8.3 mmol, 収率 40%) 得た。

¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 9.33 (d, J=1.6 Hz, 1H), 8.55 (dd, J=2.0, 1.6 Hz, 1H), 8.27 (d, J=7.6 Hz, 1H), 7.37–7.51 (m, 4H).

ASAP MS スペクトル分析: C₂₁H₇D₅Cl₂N₄: 理論値 395.08, 観測値 396.11 [M+H⁺]

[0179] [化64]



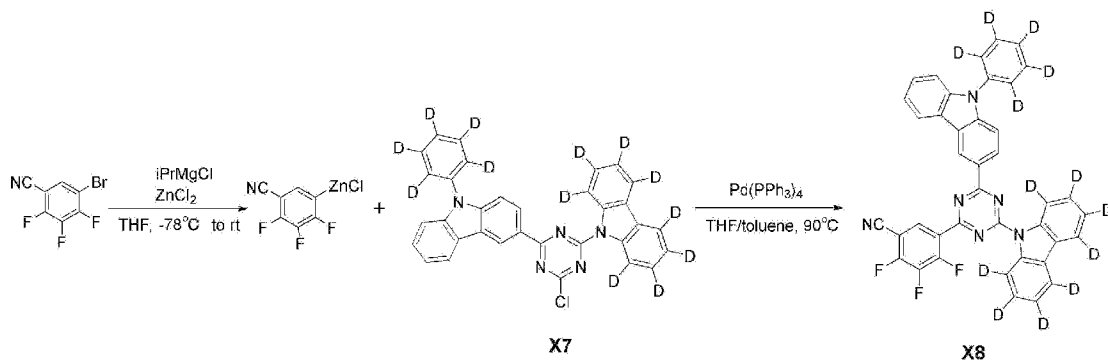
[0180] 化合物 X 7

窒素気流下、カルバゾール 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d₈ (0.63 g, 3.60 mmol) と 60 wt % 水素化ナトリウム (0.14 g, 3.60 mmol) の混合物に THF (10 mL) を加え、室温にて 1 時間攪拌した。得られた反応混合物を、化合物 X 6 (1.7 g, 4.28 mmol) の THF 溶液 (150 mL) に 0°C にてゆっくりと滴下した。滴下終了後に室温で 1 時間攪拌した。その後 DMF (250 mL) を加え、100°C で 13 時間攪拌し、さらに 110°C で 4 時間攪拌した。反応溶液を室温に戻し、飽和塩化アンモニウム水溶液とメタノールを加え、得られた固体を濾別し、ヘキサンにて洗浄し淡黄色固体の化合物 X 7 を 1.97 g (3.68 mmol, 収率 86%) 得た。

¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 9.44 (d, J=1.6 Hz, 1H), 8.68 (dd, J=2.0, 1.6 Hz, 1H), 8.30 (d, J=3.6 Hz, 1H), 7.37–7.55 (m, 4H).

ASAP MS スペクトル分析: C₃₃H₇D₁₃ClN₅: 理論値 534.22, 観測値 535.33 [M+H⁺]

[0181] [化65]

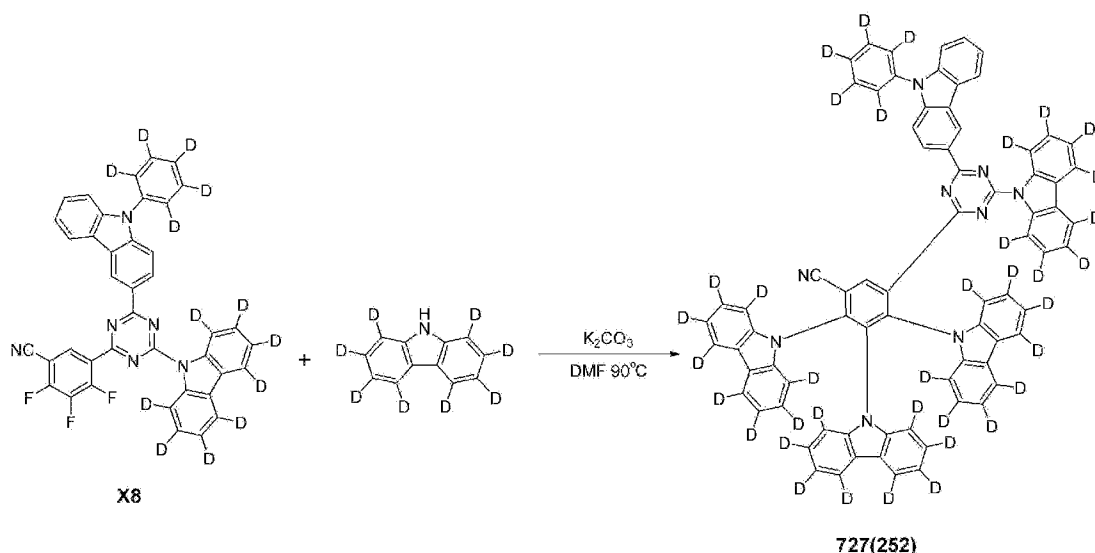
[0182] 化合物 X 8

窒素気流下、-78°C にて 5-ブromo-2, 3, 4-トリフルオロベンゾニトリル (0.9 g, 3.81 mmol) の THF (15 mL) 溶液に 1.0 M のイソプロピルマグネシウムクロリドの THF 溶液 (4.2 mL, 4.2 mmol) をゆっくりと滴下した。30 分攪拌したのちに、1.0 M の塩化亜鉛の THF 溶液 (11.4 mL, 11.4 mmol) を加え、30 分間攪拌した。さらに室温に昇温し 1 時間攪拌した。化合物 X 7 (1.43 g

, 2.67 mmol)、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム(0)(0.22 g, 0.19 mmol)と脱水トルエン(38 mL)を加え、90℃で14時間攪拌した。反応容器を室温に戻し、飽和塩化アンモニウム水溶液とメタノールを加え、得られた固体を濾別しヘキサンで洗浄し、淡黄色固体の化合物X8を0.64 g(0.97 mmol, 収率37%)得た。

ASAP MSスペクトル分析: $C_{40}H_8D_{13}F_3N_6$: 理論値655.26, 観測値 656.34 $[M+H]^+$

[0183] [化66]



, 2H), 7.21-7.43 (m, 4H).

ASAP MSスペクトル分析: $C_{76}H_8D_{37}N_9$: 理論値1120.61, 観測値1121.88 [M+H⁺]

[0185] (実施例1) 薄膜の作製と評価

石英基板上に真空蒸着法にて、真空度 1×10^{-3} Pa 未満の条件にて化合物727を蒸着し、化合物727のニート薄膜を100nmの厚さで形成した。

これとは別に、石英基板上に真空蒸着法にて、真空度 1×10^{-3} Pa 未満の条件にて化合物727と下記構造のH1とを異なる蒸着源から蒸着し、化合物727の濃度が30重量%であるドーブ薄膜を100nmの厚さで形成した。

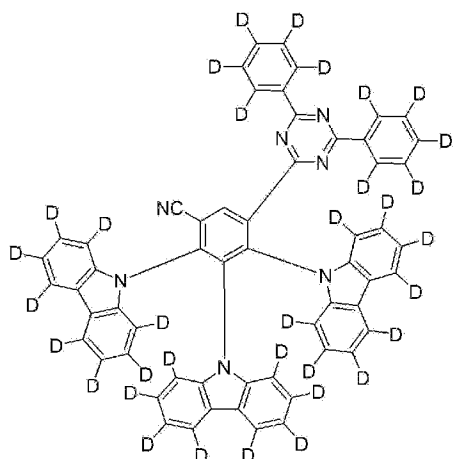
化合物727の代わりに化合物727(28)、比較化合物Aをそれぞれ用いて、同様にしてニート薄膜とドーブ薄膜を形成した。

形成した各ドーブ薄膜に300nmの励起光を照射したときのフォトルミネッセンスを分析して、遅延蛍光成分の割合および遅延蛍光成分の寿命(τ_2)を測定した。また、形成した各ニート薄膜を用いてHOMOのエネルギーとLUMOのエネルギーも測定した。結果を以下の表に示す。

[表5]

	遅延蛍光成分 の割合 (%)	τ_2 (ナノ秒)	HOMO (eV)	LUMO (eV)
化合物727	80	2550	6.07	3.34
化合物727(28)	81	2687	6.02	3.53
比較化合物A	78	2726	6.01	3.49

[化67]



比較化合物A

[0186] (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

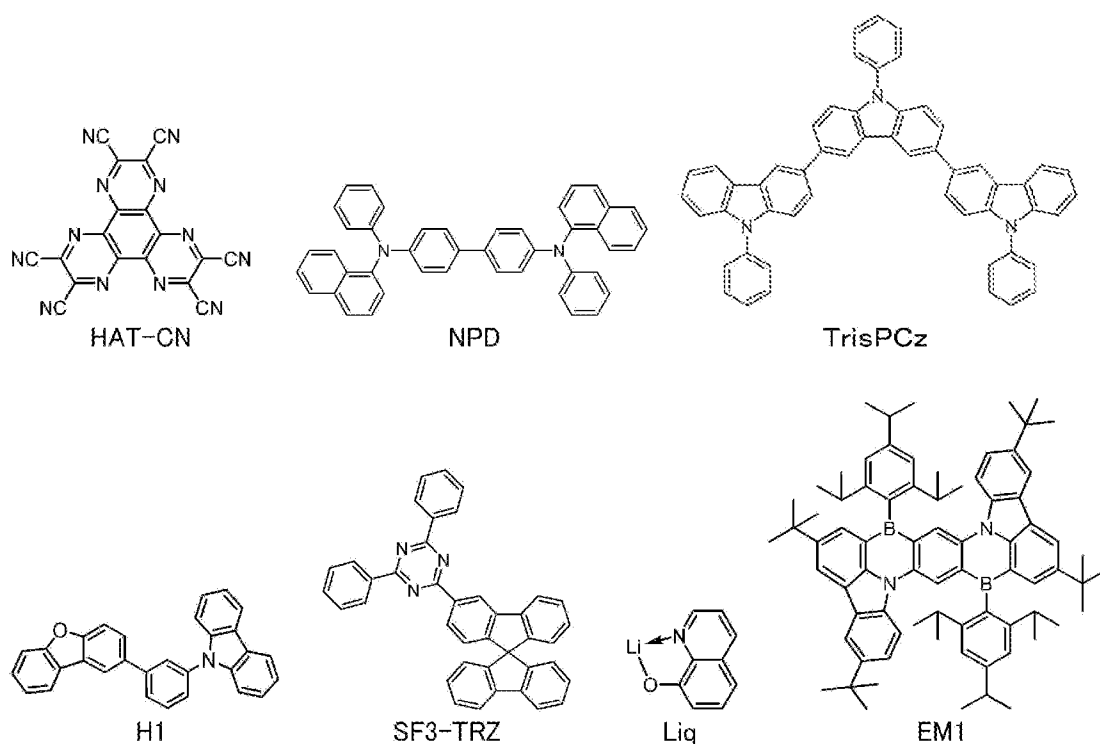
膜厚50nmのインジウム・スズ酸化物(ITO)からなる陽極が形成されたガラス基板上に、各薄膜を真空蒸着法にて、真空度 5.0×10^{-5} Paで積層した。まず、ITO上にHAT-CNを10nmの厚さに形成し、その上にNPDを30nmの厚さに形成し、さらにその上にTrisPCzを10nmの厚さに形成し、その上にH1を5nmの厚さに形成した。次に、H1と化合物727とドーパントEM1を異なる蒸着源から共蒸着し、40nmの厚さの層を形成して発光層とした。発光層におけるH1の濃度は34.2質量%、化合物727の濃度は65質量%、EM1の濃度は0.8質量%とした。次に、SF3-TRZを10nmの厚さに形成した後、Li qとSF3-TRZを異なる蒸着源から共蒸着し、30nmの厚さの層を形成した。この層におけるLi qとSF3-TRZの濃度はそれぞれ30質量%と70質量%である。さらにLi qを2nmの厚さに形成し、次いでアルミニウム(Al)を100nm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。

化合物727の代わりに化合物727(28)を用いて、同様の手順により各有機エレクトロルミネッセンス素子を作製した。

各有機エレクトロルミネッセンス素子の外部量子効率(EQE)を測定した

ところ、いずれも20%を超える高い値を示し、一般式(1)で表される化合物が有用であることが確認された。

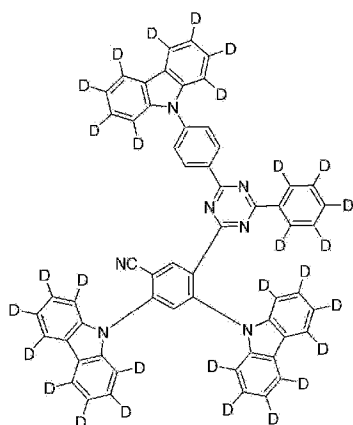
[0187] [化68]



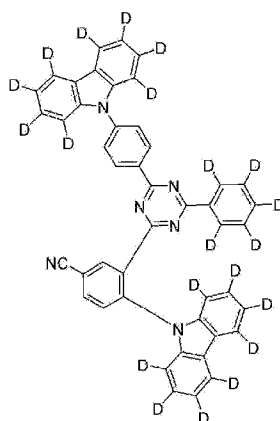
[0188] (実施例3) ΔE_{ST} の評価

合成例1で合成した化合物727、化合物6677、下記の構造を有する比較化合物Bおよび比較化合物Cのそれぞれについて、B3LYP-631Gによる量子化学計算を行った。最低励起三重項状態(T1)で構造最適化した値を採用して、最低励起一重項状態(S1)と最低励起三重項状態(T1)のエネルギー差(ΔE_{ST})を求めた。結果を以下の表に示す。

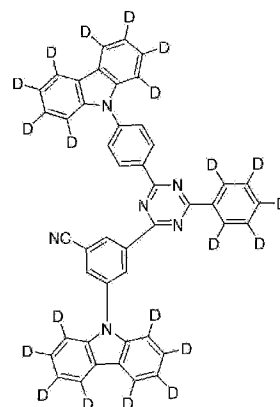
[化69]



化合物 6 6 7 7



比較化合物 B



比較化合物 C

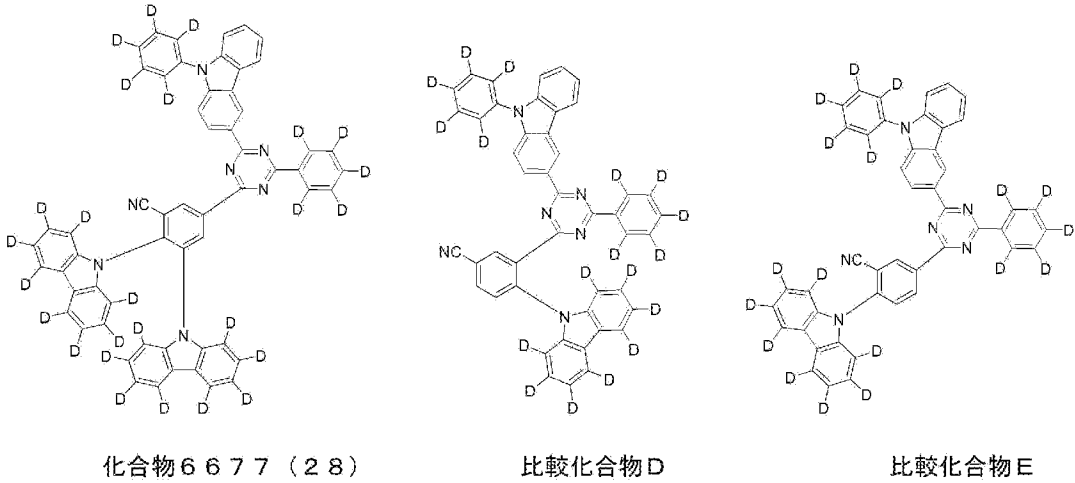
[表6]

	ΔE_{ST}
化合物 7 2 7	0. 0 4 3 e V
化合物 6 6 7 7	0. 2 4 9 e V
比較化合物 B	0. 4 8 9 e V
比較化合物 C	0. 5 5 6 e V

[0189] (実施例 4) ΔE_{ST} の評価

合成例 2 で合成した化合物 7 2 7 (28)、化合物 6 6 7 7 (28)、下記の構造を有する比較化合物 D および比較化合物 E のそれぞれについて、実施例 3 と同様にして量子化学計算を行って ΔE_{ST} を求めた。結果を以下の表に示す。

[化70]



[表7]

	ΔE_{ST}
化合物 7 2 7 (2 8)	0. 0 7 1 e V
化合物 6 6 7 7 (2 8)	0. 2 9 9 e V
比較化合物 D	0. 4 0 1 e V
比較化合物 E	0. 5 0 0 e V

[0190] 表 6 と表 7 の結果は、一般式 (1) で表される化合物の ΔE_{ST} が比較化合物と比べて小さいことから、遅延蛍光材料として有用であることを示している。

産業上の利用可能性

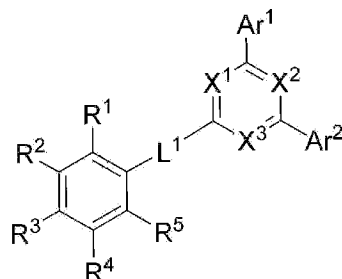
[0191] 一般式 (1) で表される化合物を用いることにより、発光特性が良好な有機発光素子を提供できる。このため、本発明は産業上の利用可能性が高い。

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（１）で表される化合物。

[化1]

一般式（１）



[一般式（１）において、 $R^1 \sim R^5$ は、各々独立に水素原子、重水素原子、シアノ基、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、またはドナー性基を表す。また、 $R^1 \sim R^5$ のうちの１個以上はシアノ基であり、 $R^1 \sim R^5$ のうちの２個以上はドナー性基である。 $X^1 \sim X^3$ は、各々独立にNまたはC（R）を表すが、 $X^1 \sim X^3$ の少なくとも１個はNである。Rは水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Ar^1 および Ar^2 は、各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表すが、 Ar^1 および Ar^2 のうちの少なくとも１個は、窒素原子で結合するドナー性基を有するが、アクセプター性基を有さないベンゼン環で結合する基である。 L^1 は単結合または２価の連結基を表す。]

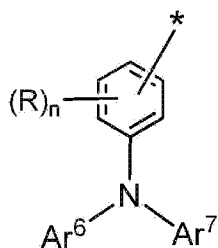
[請求項2] $R^1 \sim R^5$ のうちの１個だけがシアノ基である、請求項１に記載の化合物。

[請求項3] R^2 がシアノ基である、請求項２に記載の化合物。

[請求項4] Ar^1 が下２記一般式（c）で表される構造を有する基である、請求項１に記載の化合物。

[化2]

一般式 (c)



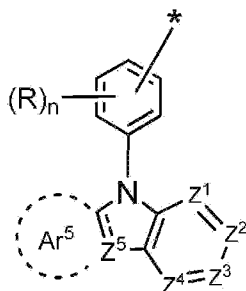
[一般式 (c) において、R は各々独立に重水素原子またはドナー性基を表す。Ar⁶ および Ar⁷ は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。Ar⁶ と Ar⁷ は互いに結合して環状構造を形成していてもよく、Ar⁶ と R は互いに結合して環状構造を形成していてもよく、Ar⁷ と R は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。n は 0～4 のいずれかの整数を表す。＊は結合位置を示す。]

[請求項5]

Ar¹ が下記一般式 (d) で表される構造を有する基である、請求項 1 に記載の化合物。

[化3]

一般式 (d)



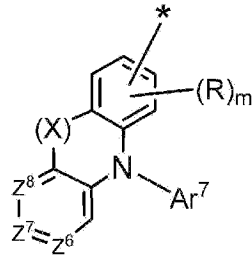
[一般式 (d) において、R は各々独立に重水素原子またはドナー性基を表す。Z¹ は C-R¹⁴ または N を表し、Z² は C-R¹⁵ または N を表し、Z³ は C-R¹⁶ または N を表し、Z⁴ は C-R¹⁷ または N を表す。Z⁵ は C または N を表し、Ar⁵ は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表す。R¹⁴ と R¹⁵、R¹⁵ と R¹⁶、R¹⁶ と R¹⁷ は互いに結合して環状構造を形成して

もよい。nは0～4のいずれかの整数を表す。＊は結合位置を示す。
]

[請求項6] $A r^1$ が下記一般式（f）で表される構造を有する基である、請求項1に記載の化合物。

[化4]

一般式（f）



[一般式（f）において、Rは各々独立に重水素原子またはドナー性基を表す。Z⁶はC-R¹⁸またはNを表し、Z⁷はC-R¹⁹またはNを表し、Z⁸はC-R²⁰またはNを表し、R¹⁸とR¹⁹、R¹⁹とR²⁰、R²⁰とR²¹は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。Xは存在せずに単結合を表すか、1または2原子の連結鎖を有する連結基を表す。Ar⁷は、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。mは0～3のいずれかの整数を表す。＊は結合位置を示す。]

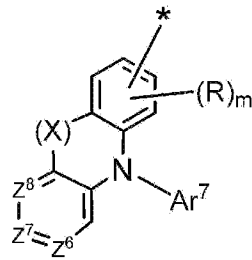
[請求項7] $A r^2$ がドナー性基を有さない置換もしくは無置換のアリール基である、請求項1に記載の化合物。

[請求項8] $A r^2$ が窒素原子で結合するドナー性基である、請求項1に記載の化合物。

[請求項9] $A r^2$ が下記一般式（f）で表される構造を有する基である、請求項1に記載の化合物。

[化5]

一般式 (f)



[一般式 (f) において、R は各々独立に重水素原子またはドナー性基を表す。Z⁶はC-R¹⁸またはNを表し、Z⁷はC-R¹⁹またはNを表し、Z⁸はC-R²⁰またはNを表し、R¹⁸とR¹⁹、R¹⁹とR²⁰、R²⁰とR²¹は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。X は存在せずに単結合を表すか、1 または 2 原子の連結鎖を有する連結基を表す。Ar⁷は、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。m は 0～3 のいずれかの整数を表す。＊は結合位置を示す。]

[請求項10] R¹～R⁵のうちの3個がドナー性基である、請求項1に記載の化合物。

[請求項11] ドナー性基が置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基である、請求項1に記載の化合物。

[請求項12] X¹～X³がNである、請求項1に記載の化合物。

[請求項13] L¹が単結合である、請求項1に記載の化合物。

[請求項14] R¹が水素原子である、請求項1に記載の化合物。

[請求項15] 重水素原子を少なくとも1つ有する、請求項1に記載の化合物。

[請求項16] 請求項1～15のいずれか1項に記載の化合物からなる発光材料。

[請求項17] 請求項1～15のいずれか1項に記載の化合物からなる遅延蛍光体。

[請求項18] 請求項1～15のいずれか1項に記載の化合物を含む膜。

[請求項19] 請求項1～15のいずれか1項に記載の化合物を含む有機半導体素子。

- [請求項20] 請求項1～15のいずれか1項に記載の化合物を含む有機発光素子。
。
- [請求項21] 前記素子が前記化合物を含む層を有しており、前記層がホスト材料も含む、請求項20に記載の有機発光素子。
- [請求項22] 前記化合物を含む層が、前記化合物および前記ホスト材料の他に遅延蛍光材料も含み、前記遅延蛍光材料の最低励起一重項エネルギーが前記ホスト材料より低く、前記化合物よりも高い、請求項21に記載の有機発光素子。
- [請求項23] 前記素子が前記化合物を含む層を有しており、前記層が前記化合物とは異なる構造を有する発光材料も含む、請求項21に記載の有機発光素子。
- [請求項24] 前記素子に含まれる材料のうち、前記化合物からの発光量が最大である、請求項21に記載の有機発光素子。
- [請求項25] 前記発光材料からの発光量が前記化合物からの発光量よりも多い、請求項23に記載の有機発光素子。
- [請求項26] 有機エレクトロルミネッセンス素子である、請求項20に記載の有機発光素子。
- [請求項27] 遅延蛍光を放射する、請求項20に記載の有機発光素子。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/007515

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>C07D 403/14</i> (2006.01)i; <i>C09K 11/06</i> (2006.01)i; <i>H10K 50/11</i> (2023.01)i; <i>H10K 50/12</i> (2023.01)i; <i>H10K 50/15</i> (2023.01)i; <i>H10K 50/16</i> (2023.01)i; <i>H10K 85/60</i> (2023.01)i; <i>H10K 101/20</i> (2023.01)n; <i>H10K 101/30</i> (2023.01)n FI: C07D403/14 CSP; H10K50/11; H10K50/12; H10K85/60; C09K11/06 690; H10K50/15; H10K50/16; H10K101:30; H10K101:20 According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07D403/14; C09K11/06; H10K50/11; H10K50/12; H10K50/15; H10K50/16; H10K85/60; H10K101/20; H10K101/30 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 1971-2024 Registered utility model specifications of Japan 1996-2024 Published registered utility model applications of Japan 1994-2024 Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	CN 114276337 A (JIANGSU MARCH SCIENCE AND TECHNOLOGY CO., LTD.) 05 April 2022 (2022-04-05) claims, paragraphs [0001]-[0065], examples	1-5, 7, 10-27
A		6, 8-9
X	CN 114805318 A (JIANGSU SUNERA TECHNOLOGY CO., LTD.) 29 July 2022 (2022-07-29) claims, paragraphs [0001]-[0107], examples	1-2, 6, 11-27
A		3-5, 7-10
A	JP 2021-519765 A (KYULUX, INC.) 12 August 2021 (2021-08-12) entire text, all drawings	1-27
A	WO 2019/190223 A1 (LG CHEM, LTD.) 03 October 2019 (2019-10-03) entire text, all drawings	1-27
☒ 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 “D” document cited by the applicant in the international application “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 13 May 2024		Date of mailing of the international search report 21 May 2024
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/JP2024/007515

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	EP 3670508 A1 (CYNORA GMBH) 24 June 2020 (2020-06-24) entire text, all drawings	1-27
A	HANSCH, Corwin et al., A survey of Hammett substituent constants and resonance and field parameters, Chem. Rev., 1991, 91(2), 165-195, DOI: 10.1021/cr00002a004 tables	1-27
P, A	WO 2023/090154 A1 (KYULUX INC.) 25 May 2023 (2023-05-25) entire text, all drawings	1-27
P, A	WO 2023/090288 A1 (KYULUX INC.) 25 May 2023 (2023-05-25) entire text, all drawings	1-27

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2024/007515

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
CN	114276337	A	05 April 2022	(Family: none)	
CN	114805318	A	29 July 2022	(Family: none)	
JP	2021-519765	A	12 August 2021	WO 2019/191665	A1
				KR 10-2020-0139715	A
				CN 112272695	A
				EP 3775100	A1
				US 2021/0135119	A1
WO	2019/190223	A1	03 October 2019	CN 111247140	A
				KR 10-2019-0113661	A
EP	3670508	A1	24 June 2020	(Family: none)	
WO	2023/090154	A1	25 May 2023	(Family: none)	
WO	2023/090288	A1	25 May 2023	(Family: none)	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））

C07D 403/14(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; H10K 50/11(2023.01)i; H10K 50/12(2023.01)i; H10K 50/15(2023.01)i; H10K 50/16(2023.01)i; H10K 85/60(2023.01)i; H10K 101/20(2023.01)n; H10K 101/30(2023.01)n
FI: C07D403/14 CSP; H10K50/11; H10K50/12; H10K85/60; C09K11/06 690; H10K50/15; H10K50/16; H10K101:30; H10K101:20

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））

C07D403/14; C09K11/06; H10K50/11; H10K50/12; H10K50/15; H10K50/16; H10K85/60; H10K101/20; H10K101/30

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報1922-1996年
日本国公開実用新案公報1971-2024年
日本国実用新案登録公報1996-2024年
日本国登録実用新案公報1994-2024年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

CAPLUS/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	CN 114276337 A (JIANGSU MARCH SCIENCE AND TECHNOLOGY CO., LTD.) 05.04.2022 (2022 - 04 - 05) 請求の範囲,段落[0001]-[0065],実施例	1-5, 7, 10-27
A		6, 8-9
X	CN 114805318 A (JIANGSU SUNERA TECHNOLOGY CO., LTD.) 29.07.2022 (2022 - 07 - 29) 請求の範囲,段落[0001]-[0107],実施例	1-2, 6, 11-27
A		3-5, 7-10
A	JP 2021-519765 A (株式会社K y u l u x) 12.08.2021 (2021 - 08 - 12) 全文,全図	1-27
A	WO 2019/190223 A1 (LG CHEM, LTD.) 03.10.2019 (2019 - 10 - 03) 全文,全図	1-27

☒ 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、一般的技術水準を示すもの
“D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献
“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
“I” 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
13.05.2024

国際調査報告の発送日
21.05.2024

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）

宮田 透 4P 4863

電話番号 03-3581-1101 内線 3492

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
A	EP 3670508 A1 (CYNORA GMBH) 24.06.2020 (2020 - 06 - 24) 全文, 全図	1-27
A	HANSCH, Corwin et al., A survey of Hammett substituent constants and resonance and field parameters, Chem. Rev., 1991, 91(2), 165-195, DOI: 10.1021/cr00002a004 Tables	1-27
P, A	WO 2023/090154 A1 (株式会社K y u l u x) 25.05.2023 (2023 - 05 - 25) 全文, 全図	1-27
P, A	WO 2023/090288 A1 (株式会社K y u l u x) 25.05.2023 (2023 - 05 - 25) 全文, 全図	1-27

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2024/007515

引用文献			公表日	パテントファミリー文献	公表日
CN	114276337	A	05.04.2022	(ファミリーなし)	
CN	114805318	A	29.07.2022	(ファミリーなし)	
JP	2021-519765	A	12.08.2021	WO 2019/191665	A1
				KR 10-2020-0139715	A
				CN 112272695	A
				EP 3775100	A1
				US 2021/0135119	A1
WO	2019/190223	A1	03.10.2019	CN 111247140	A
				KR 10-2019-0113661	A
EP	3670508	A1	24.06.2020	(ファミリーなし)	
WO	2023/090154	A1	25.05.2023	(ファミリーなし)	
WO	2023/090288	A1	25.05.2023	(ファミリーなし)	