

(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
2017 年 3 月 9 日(09.03.2017)



(10) 国際公開番号
WO 2017/038728 A1

- (51) 国際特許分類:
C07D 491/147 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2016/075100
- (22) 国際出願日: 2016 年 8 月 26 日(26.08.2016)
- (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 2015-168514 2015 年 8 月 28 日(28.08.2015) JP
- (71) 出願人: 出光興産株式会社(IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区丸の内三丁目 1 番 1 号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 工藤 裕(KUDO, Yu); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉 1 2 8 0 番地 Chiba (JP). 水木 由美子(MIZUKI, Yumiko); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉 1 2 8 0 番地 Chiba (JP). 河村 昌宏(KAWAMURA, Masahiro); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉 1 2 8 0 番地 Chiba (JP). 加藤 朋希(KATO, Tomoki); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉 1 2 8 0 番地 Chiba (JP). 伊藤 裕勝(ITO, Hirokatsu); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉 1 2 8 0 番地 Chiba (JP). 羽毛田 匡(HAKETA, Tasuku); 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉 1 2 8 0 番地 Chiba (JP). 西前 祐一(NISHIMAE, Yuichi); 4 0 5 8 パーゼル エルレンマツシュトラッセ 2 0 Basel (CH). ヴォレブ アンネマリー(WOLLEB, Annemarie); 4 2 3 2 フェーレン シュタ

インビュールシュトラッセ 1 7 3 Fehren (CH).

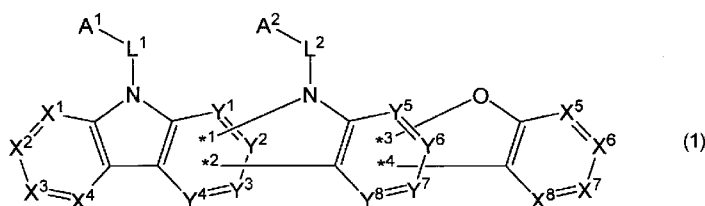
- (74) 代理人: 特許業務法人平和国際特許事務所(HEIWA INTERNATIONAL PATENT OFFICE); 〒1010041 東京都千代田区神田須田町一丁目 2 6 番地 芝信神田ビル 3 階 Tokyo (JP).
- (81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第 21 条(3))

(54) Title: COMPOUND, ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT MATERIAL, ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT, AND ELECTRONIC DEVICE

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



(57) Abstract: A compound represented by formula (1).

(57) 要約: 下記式 (1) で表される化合物。

WO 2017/038728 A1

明 細 書

発明の名称：

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

技術分野

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

背景技術

[0002] 燐光有機EL素子の発光効率の向上、低電圧化、及び長寿命化は普遍的な課題であり、各種の材料が開発されてきた。

芳香族六員環と五員環が交互に繰り返し縮合した縮合環構造を有する化合物が、燐光有機EL素子の発光層のホスト材料として用いられることが知られている（例えば、特許文献1）。

[0003] 特許文献1には、ベンゼン環－含窒素五員環－ベンゼン環－含窒素五員環－ベンゼン環－含硫黄五員環－ベンゼン環の順に縮合した構造を有する化合物（請求項1）（以下、特許文献1に記載の化合物という）が記載されている。

先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献1：WO2014/142467A1

発明の概要

[0005] 燐光有機エレクトロルミネッセンス用のホスト材料について、従来材料は電子に比べて正孔を流しやすいものが多い。そのため電荷のバランス調整が難しく、寿命面に課題があった。

[0006] 本発明の目的は、燐光有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用な、新規な化合物を提供することである。

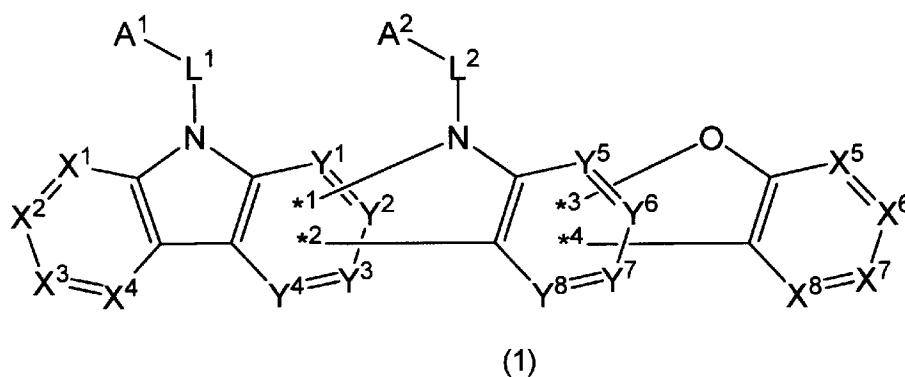
本発明の他の目的は、当該化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス

素子を提供することである。

[0007] 本発明の一態様によれば、以下の化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子、及び電子機器が提供される。

本発明の一態様である化合物は、下記式（１）で表される化合物であることを特徴とする。

[化1]



[式（１）中、

A¹及びA²は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリール基である。

L¹及びL²は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリーレン基である。

X¹～X⁸は、それぞれ独立に、CH、C（R^a）又はNである。

*1～*4は、それぞれ単結合を形成する結合手である。

Y¹～Y⁴のうちの隣接するいずれか2つは、*1及び*2とそれぞれ単結合を形成するCであり、残りの2つは、それぞれ独立に、CH、C（R^a）又はNである。

Y⁵～Y⁸のうちの隣接するいずれか2つは、*3及び*4とそれぞれ単結合を形成するCであり、残りの2つは、それぞれ独立に、CH、C（R^a）又はNである。

R^aは、置換基であり、R^aが複数存在する場合は、それぞれ同一であっても、異なってもよく、複数存在するR^aから選ばれる2つが、互いに結合して環を形成していてもよい。]

[0008] 本発明の一態様である有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は、本発明の一態様である上記式(1)で表される化合物を含むことを特徴とする。

本発明の一態様である有機エレクトロルミネッセンス素子は、陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

前記一層以上の有機薄膜層が発光層を含み、前記一層以上の有機薄膜層の少なくとも1層が本発明の一態様である上記式(1)で表される化合物を含むことを特徴とする。

本発明の一態様である電子機器は、上記本発明の一態様である有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載したことを特徴とする。

[0009] 本発明の一態様によれば、燐光有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用な、新規な化合物を提供することができる。

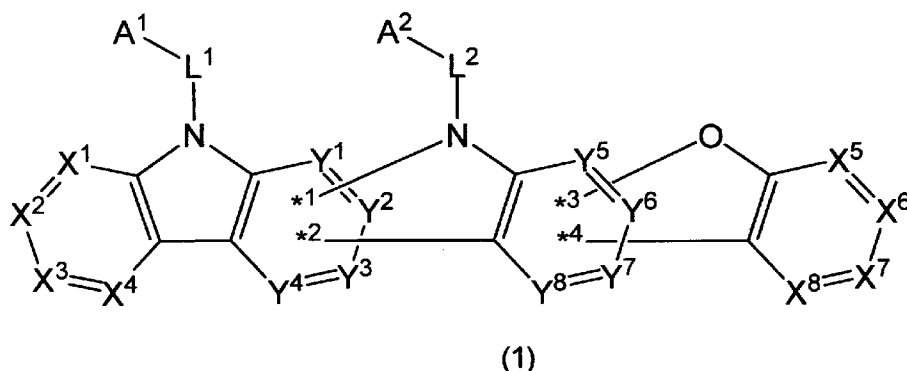
本発明の一態様によれば、当該化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することができる。

発明を実施するための形態

[0010] A. 化合物

本発明の一態様である化合物は、下記式(1)で表される(以下、単に「式(1)で表される化合物」という)。

[0011] [化2]



[0012] [式(1)中、

A¹及びA²は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリール基である。

L¹及びL²は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリーレン基である。

X¹～X⁸は、それぞれ独立に、CH、C(R^a)又はNである。

*1～*4は、それぞれ単結合を形成する結合手である。

Y¹～Y⁴のうちの隣接するいずれか2つは、*1及び*2とそれぞれ単結合を形成するCであり、残りの2つは、それぞれ独立に、CH、C(R^a)又はNである。

Y⁵～Y⁸のうちの隣接するいずれか2つは、*3及び*4とそれぞれ単結合を形成するCであり、残りの2つは、それぞれ独立に、CH、C(R^a)又はNである。

R^aは、置換基であり、R^aが複数存在する場合は、それぞれ同一であっても、異なってもよく、複数存在するR^aから選ばれる2つが、互いに結合して環を形成していてもよい。]

[0013] 特許文献1に記載の化合物を含む従来の燐光有機EL用のホスト材料は、電子に比べて正孔を流しやすいものが多い。そのため素子における電荷のバランス調整が難しく、寿命面に課題があった。

上記式(1)で表される化合物は、芳香族六員環-含窒素五員環-芳香族六員環-含窒素五員環-芳香族六員環-含酸素五員環-芳香族六員環の順に縮合した構造を有している。この構造は、平面性が高く、分子軌道が広がり、正孔をよく運ぶようになる。また、従来の材料とは逆に、正孔に比べて電子を流しやすいという性質を有する。さらには、素子の低電圧化に寄与することができる。

[0014] 上記式(1)で表される化合物は、特許文献1に記載の化合物に比べて、

素子寿命を改善することができる。これは、酸素原子は硫黄原子よりも酸化され難く、劣化し難いためと推察される。

上記式（１）で表される化合物は、特許文献１に記載の化合物や芳香族六員環－含窒素五員環－芳香族六員環－含窒素五員環－芳香族六員環－含窒素五員環－芳香族六員環の順に縮合した構造を有する化合物に比べて最低励起三重項状態（ T_1 ）のエネルギーが高く、より高い発光効率を実現できる。

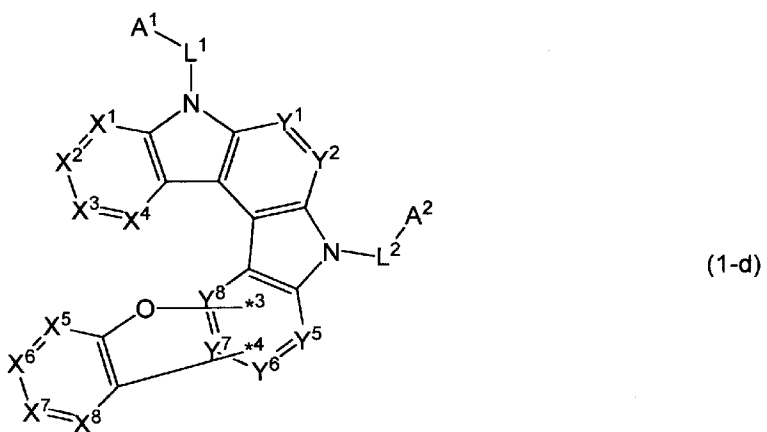
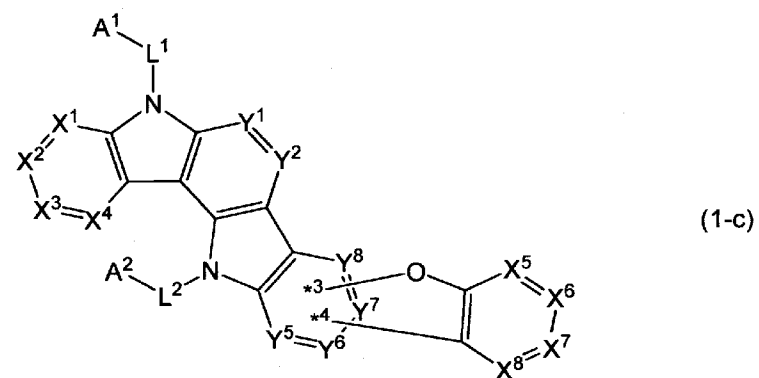
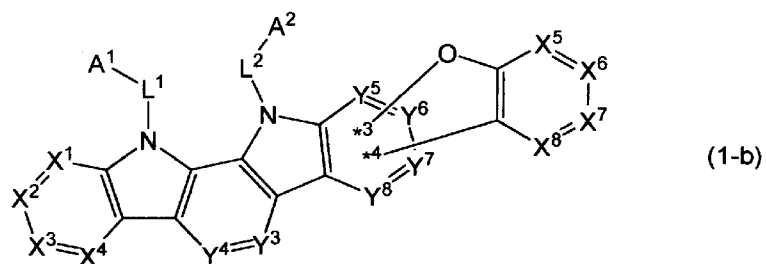
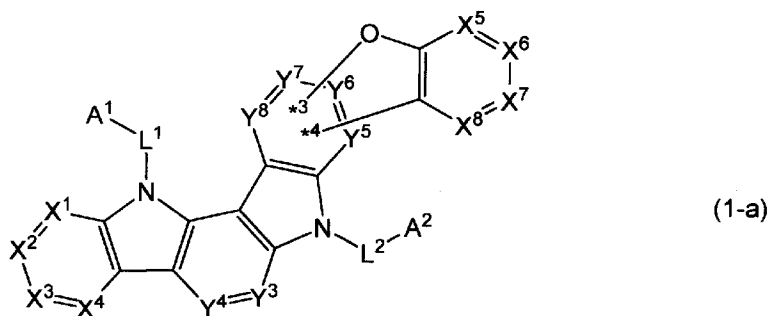
さらに、式（１）で表される化合物は、芳香族六員環－含窒素五員環－芳香族六員環－含窒素五員環－芳香族六員環－含酸素五員環－芳香族六員環の順に縮合した構造がドナーユニットとなり、その窒素原子にアクセプター置換基を有することで、高い発光効率を実現できる。

[0015] 式（１）で表される化合物を用いることで、燐光有機ＥＬ素子の電荷バランス調整が容易になり、素子を高効率化させることができる。また、電荷バランスが整うことで、素子を構成する各種材料の劣化が防止でき、素子寿命を改善することができる。

[0016] 式（１）で表される化合物は、燐光発光層のホスト材料として有用である。また、キャリア輸送性にも優れており、キャリア輸送材料（正孔輸送材料、電子輸送材料等）としても有用である。

[0017] 前記式（１）で表される化合物は、下記式（１－a）～（１－d）で表される化合物から選択されることがさらに好ましい。

[化3]



[0018] [式(1-a)～(1-d)中、

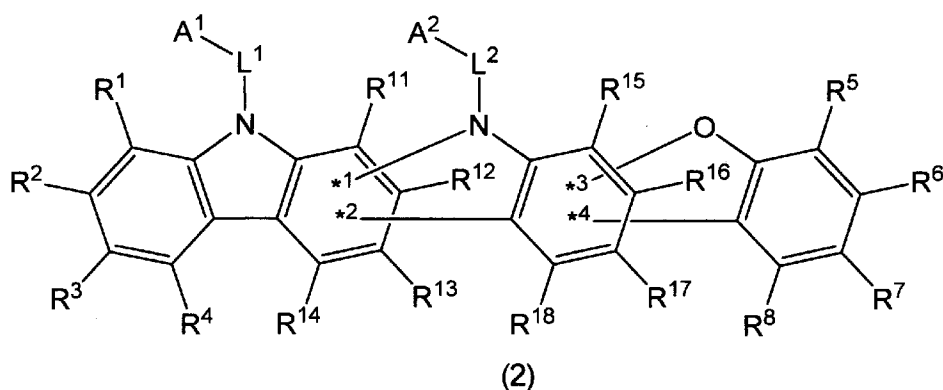
A¹、A²、L¹、L²、X¹～X⁸、Y¹～Y⁸、*3及び*4は、前記式(1

）で定義した通りである。]

式（１）で表される化合物のうち、*１及び*２の結合位置が Y^2 及び Y^3 である化合物に比べ、*１及び*２の結合位置が Y^1 及び Y^2 、又は Y^3 及び Y^4 である化合物は、発光効率がより高く、素子寿命もより長くなる。

[0019] 前記式（１）で表される化合物が、下記式（２）で表される化合物であることが好ましい。

[0020] [化4]



[0021] [式（２）中、

A^1 , A^2 , L^1 , L^2 及び*１～*４は、前記式（１）で定義した通りである。

$R^1 \sim R^8$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^a である。

$R^{11} \sim R^{14}$ のうちの隣接するいずれか２つは、*１及び*２とそれぞれ単結合を形成し、残りの２つは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^a である。

$R^{15} \sim R^{18}$ のうちの隣接するいずれか２つは、*３及び*４とそれぞれ単結合を形成し、残りの２つは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^a である。

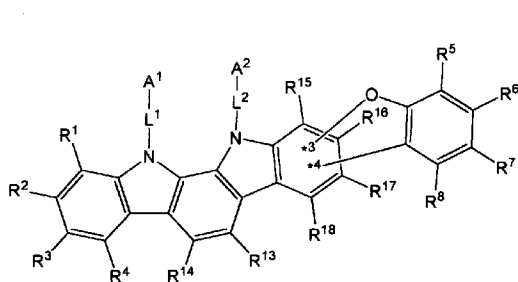
R^a は、前記式（１）で定義した通りである。]

[0022] 式（２）において、 $R^1 \sim R^8$ は、水素原子であることが好ましい。

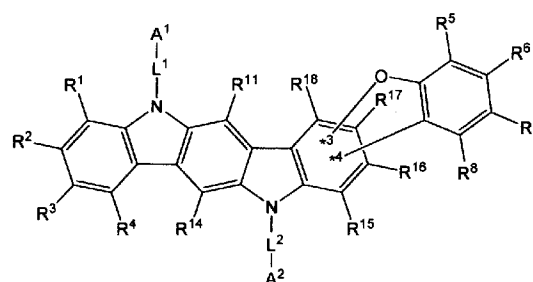
[0023] 前記式（２）で表される化合物が、下記式（３－１）～（３－６）で表される化合物からなる群から選ばれることが好ましく、下記式（３－１）及び（３－４）～（３－６）で表される化合物からなる群から選ばれることがさ

らに好ましい。

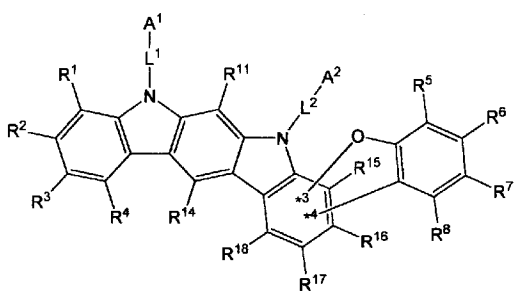
[0024] [化5]



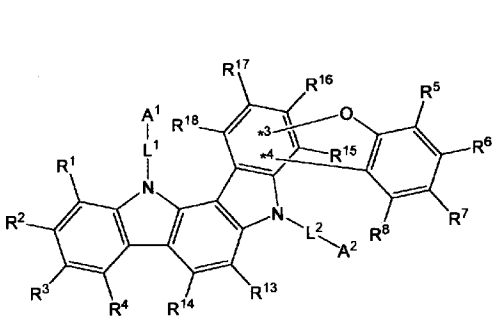
(3-1)



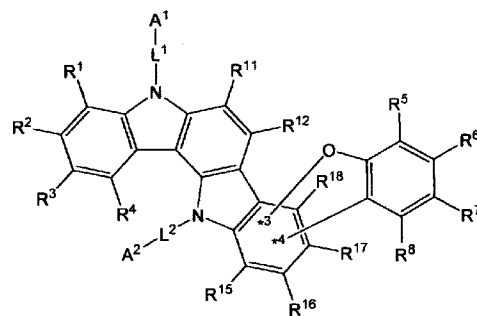
(3-2)



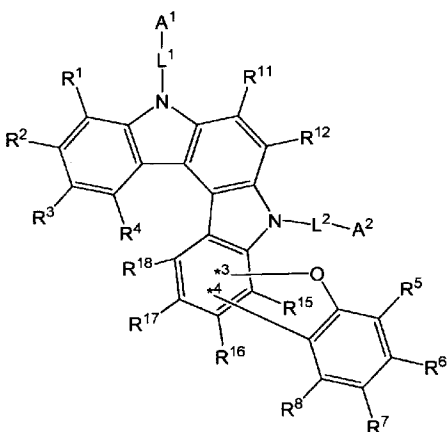
(3-3)



(3-4)



(3-5)



(3-6)

[0025] [式 (3-1) ~ (3-6) 中、

A^1 , A^2 , L^1 , L^2 , $*3$ 及び $*4$ は、前記式 (1) で定義した通りである。

$R^1 \sim R^8$ 及び $R^{11} \sim R^{18}$ は、前記式 (2) で定義した通りである。]

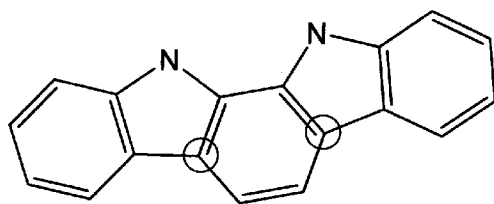
[0026] 式 (3-1) ~ (3-6) は、それぞれ前記式 (2) における $*1$ 及び $*2$ の結合位置を特定したものである。

[0027] 式 (3-1) 及び (3-4) ~ (3-6) において、 $R^1 \sim R^8$ は、水素原子であることが好ましい。

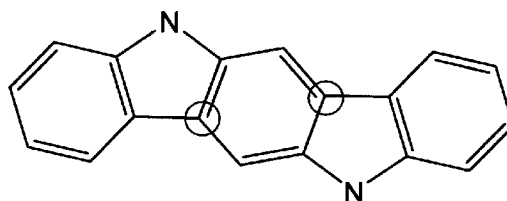
[0028] 本明細書において、式 (1) で表される化合物における各芳香族六員環と各窒素原子又は酸素原子を含む五員環との縮合位置の関係を次のように表す。例えば、インドロカルバゾール骨格で説明すると、2つの含窒素五員環に挟まれて縮合している真ん中のベンゼン環に着目する。当該2つの五員環の窒素原子を介さずにそれぞれ隣のベンゼン環と結合している2つの位置が、2つの五員環に挟まれたベンゼン環においてパラ (p)、メタ (m) 及びオルト (o) のいずれの位置関係になっているかで、パラ縮合 (p縮合)、メタ縮合 (m縮合) 及びオルト縮合 (o縮合) と呼ぶ。これをインドロカルバゾール骨格を用いて具体的に示すと下記の通りである。

[0029]

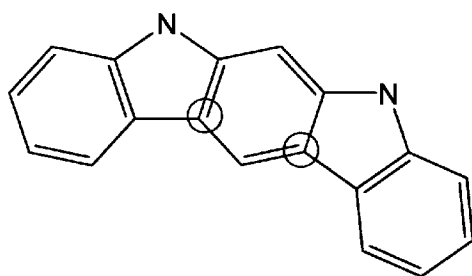
[化6]



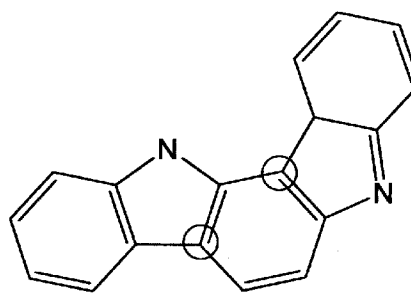
パラ縮合-1



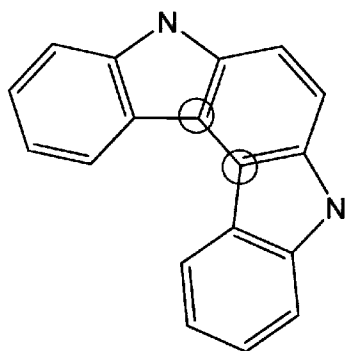
パラ縮合-2



メタ縮合-1



メタ縮合-2

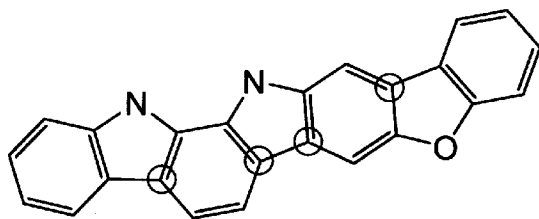


オルト縮合

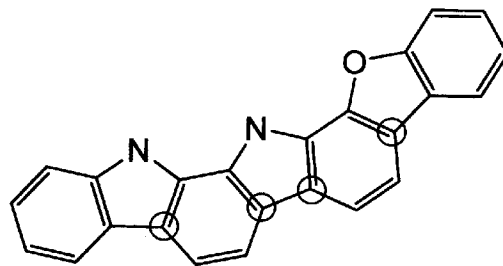
[0030] 式(1)で表される化合物は、上記インドロカルバゾール骨格に、さらにベンゾフロ骨格が縮合している。ベンゾフロ骨格の縮合位置も上記と同様に表す。例えば、上記パラ縮合-1のインドロカルバゾール骨格に、さらにベンゾフロ骨格が縮合した場合、下記の構造が可能である。

[0031]

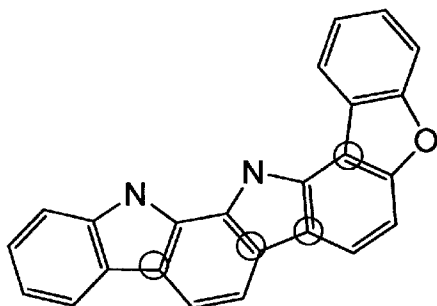
[化7]



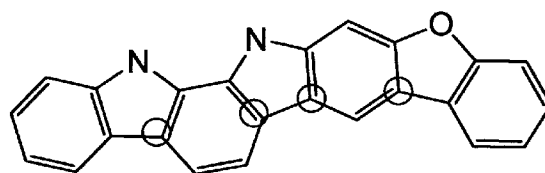
パラ-パラ縮合-1



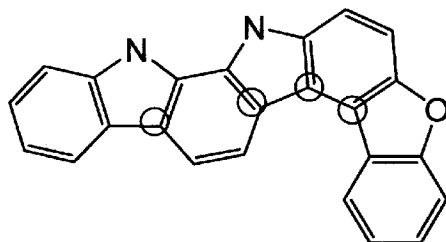
パラ-パラ縮合-2



パラ-メタ縮合-1



パラ-メタ縮合-2



パラ-オルト縮合

[0032] 本明細書においては式(1)で表される化合物の縮合形態を、例えば、パラ-パラ縮合であれば、「p-p縮合」又は「p-p」と略記する。

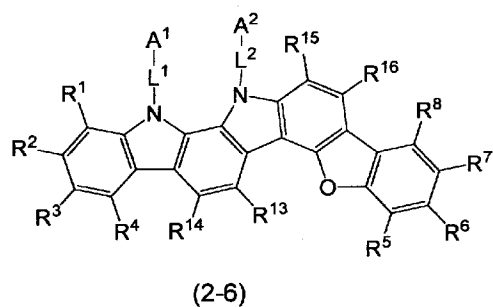
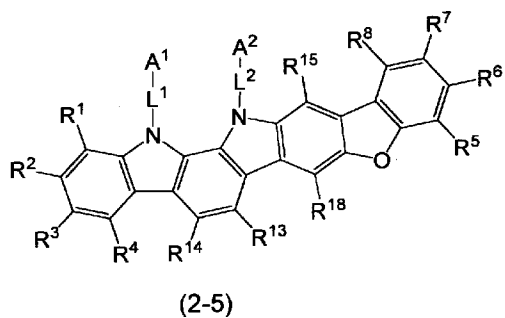
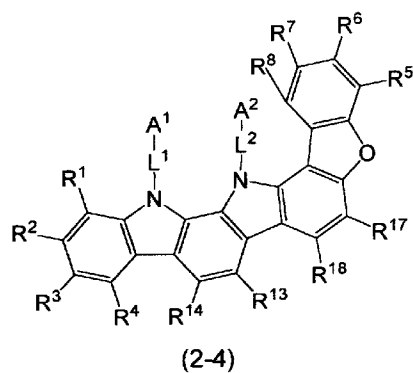
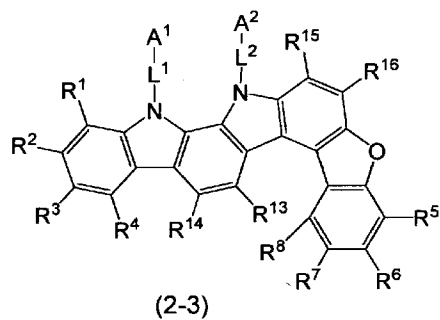
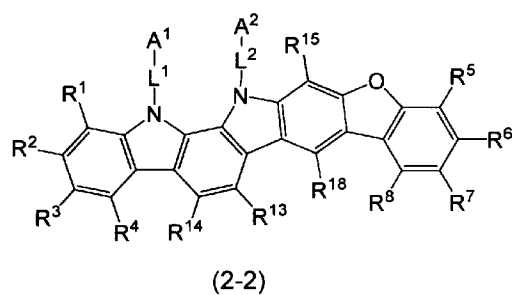
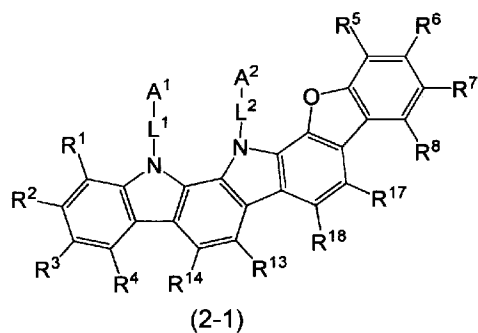
[0033] 式(1)で表される化合物のうち、o-o、o-m、o-p、m-o、m-m、m-p、p-o及びp-mの縮合形態が、最低励起三重項状態(T1)が高く、発光効率が向上するため好ましい。

[0034] 式(1)で表される化合物のうち、m-m、m-p及びp-mの縮合形態が、正孔移動度が高く好ましい。

[0035] 式(3-1)及び(3-2)で表される化合物が、下記式(2-1)～(

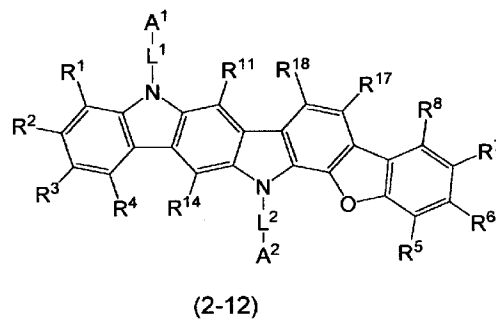
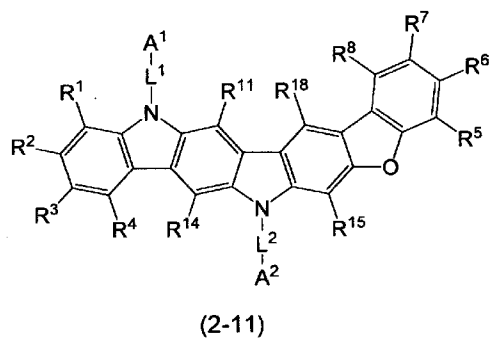
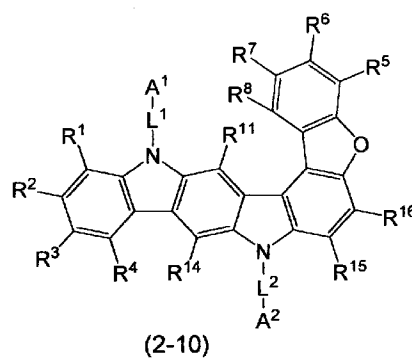
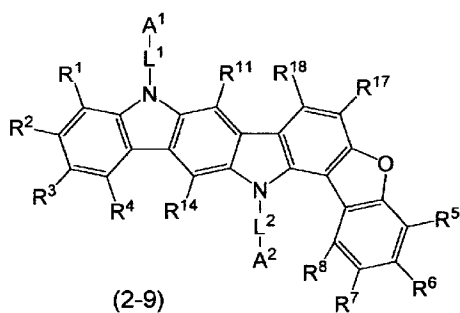
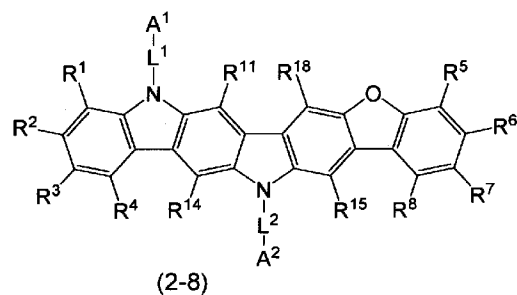
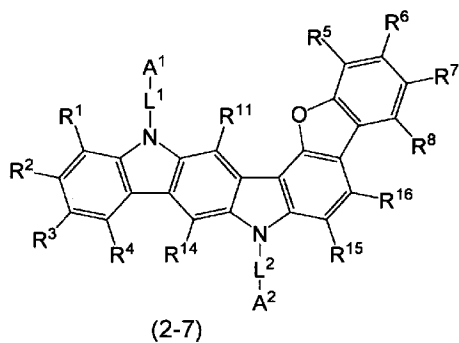
2-12) で表される化合物からなる群から選ばれる。式 (3-1) で表される化合物は、下記式 (2-1) ~ (2-6) で表される化合物からなる群から選ばれる。

[0036] [化8]



[0037]

[化9]



[式(2-1)～(2-12)中、

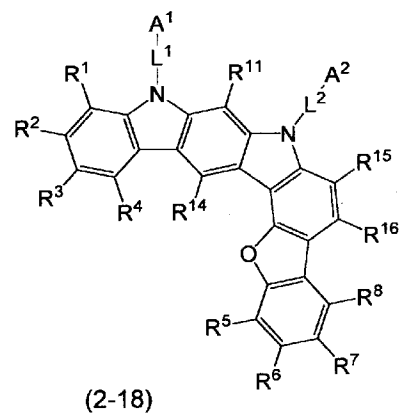
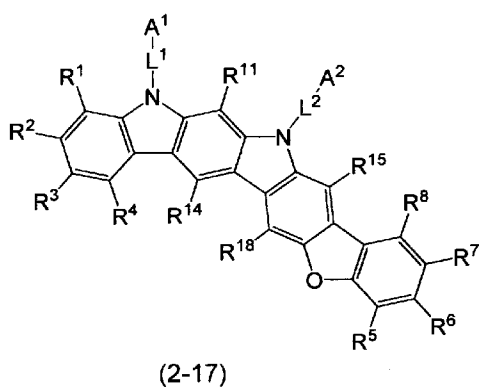
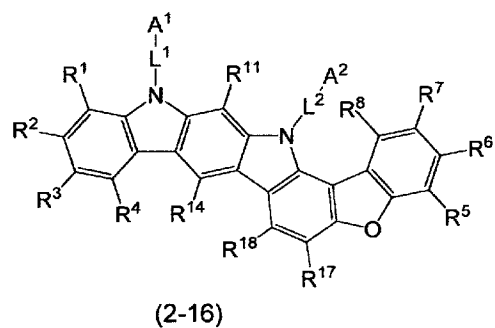
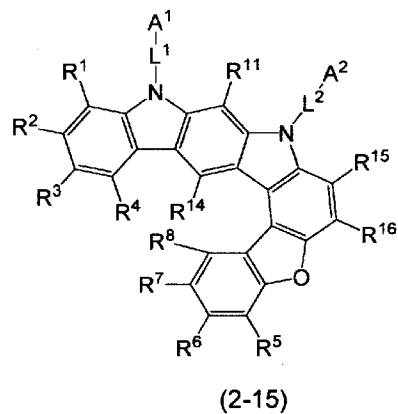
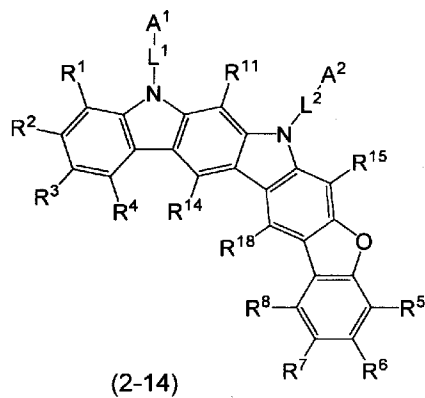
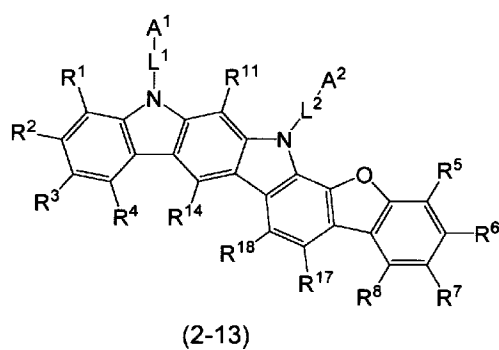
A¹、A²、L¹及びL²は、前記式(1)で定義した通りである。

R¹～R⁸及びR¹¹～R¹⁸は、前記式(2)で定義した通りである。]

[0038] 上記式(2-1)～(2-12)のうち、式(2-1)～(2-6)で表される化合物からなる群から選ばれることが好ましく、式(2-2)～(2-4)、(2-6)、(2-7)及び(2-9)～(2-11)で表される化合物からなる群から選ばれることがより好ましく、式(2-2)～(2-4)及び(2-6)で表される化合物からなる群から選ばれることがさらに好ましい。

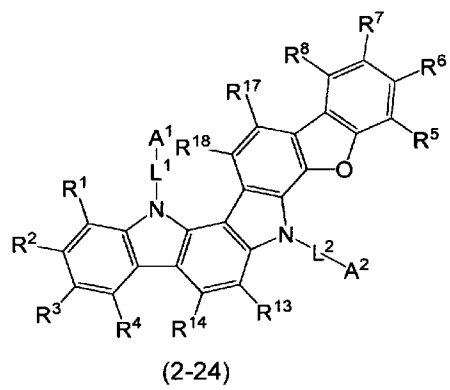
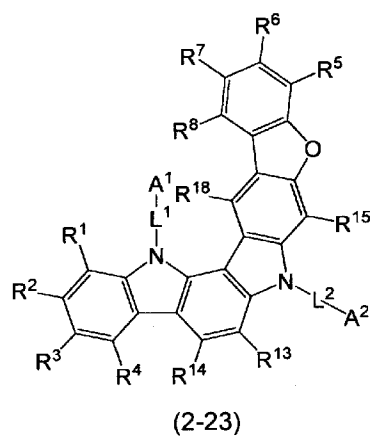
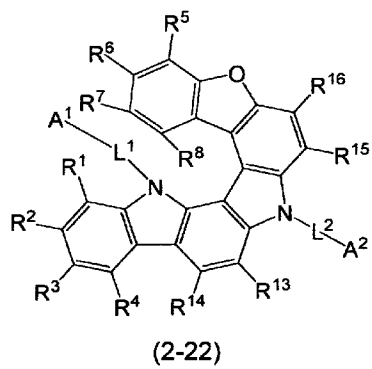
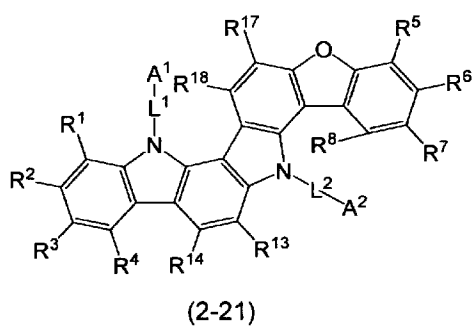
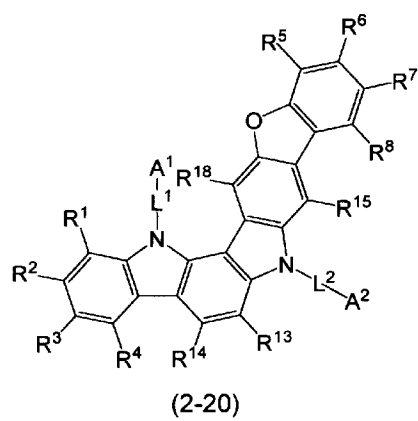
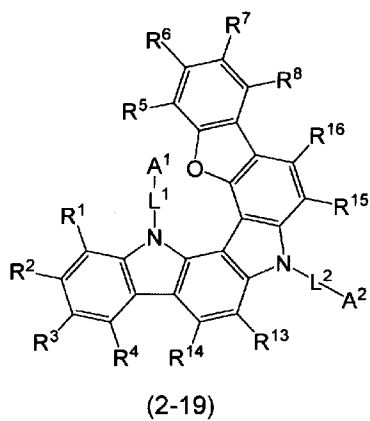
[0039] 式(3-3)～(3-5)で表される化合物は、下記式(2-13)～(2-30)で表される化合物からなる群から選ばれる。式(3-4)又は式(3-5)で表される化合物は、下記式(2-19)～(2-30)で表される化合物からなる群から選ばれる。

[0040] [化10]



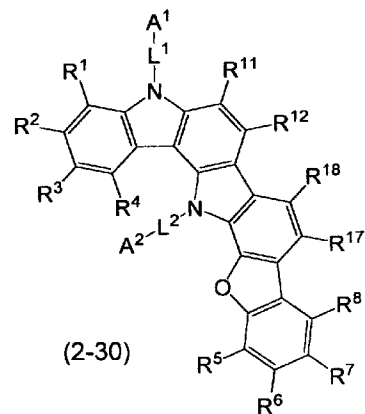
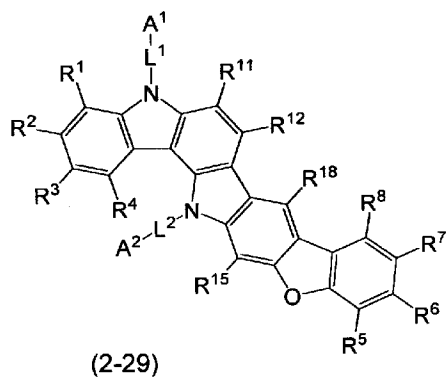
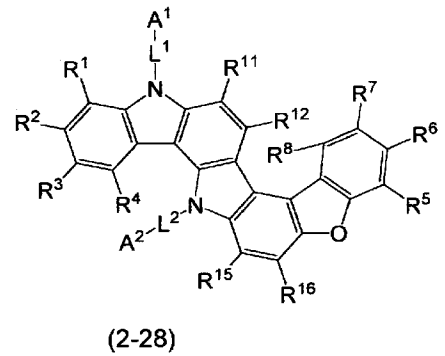
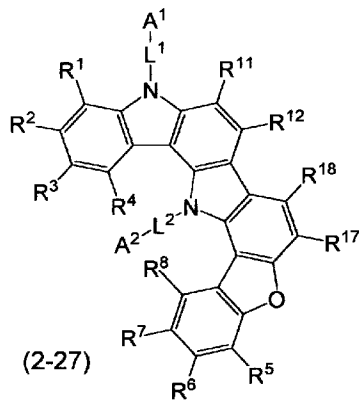
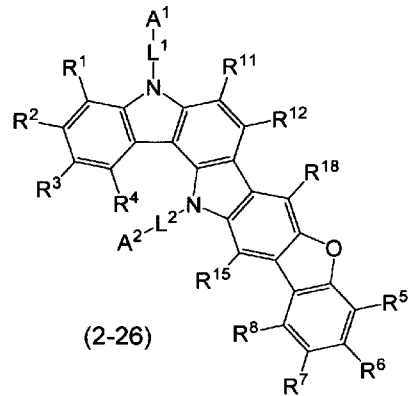
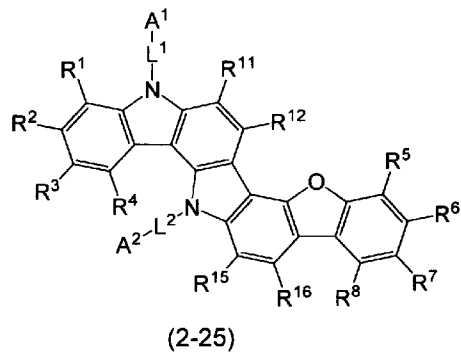
[0041]

[化11]



[0042]

[化12]



[式 (2-13) ~ (2-30) 中、

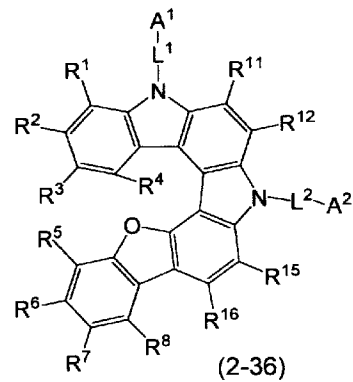
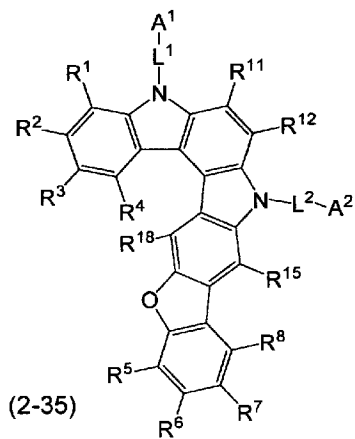
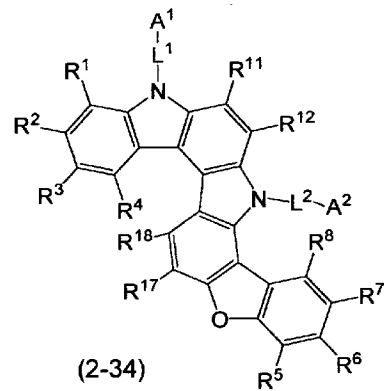
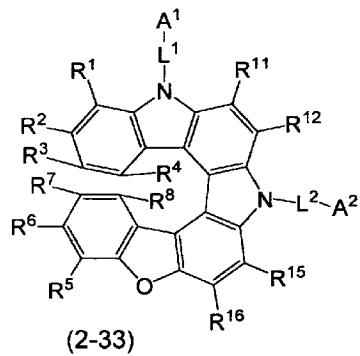
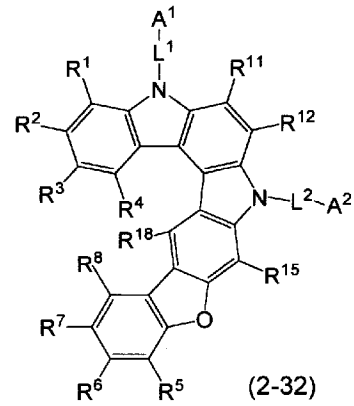
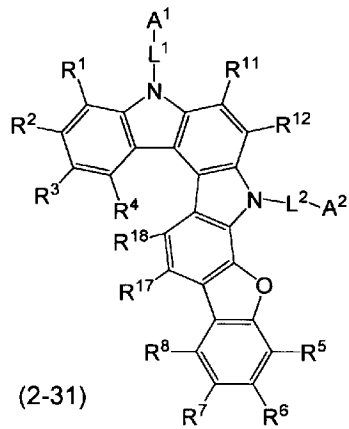
A¹, A², L¹ 及び L² は、前記式 (1) で定義した通りである。

R¹ ~ R⁸ 及び R¹¹ ~ R¹⁸ は、前記式 (2) で定義した通りである。]

[0043] 式 (3-6) で表される化合物が、下記式 (2-31) ~ (2-36) で表される化合物からなる群から選ばれる。

[0044]

[化13]



[式 (2-31) ~ (2-36) 中、

A¹, A², L¹及びL²は、前記式 (1) で定義した通りである。

R¹~R⁸及びR¹¹~R¹⁸は、前記式 (2) で定義した通りである。]

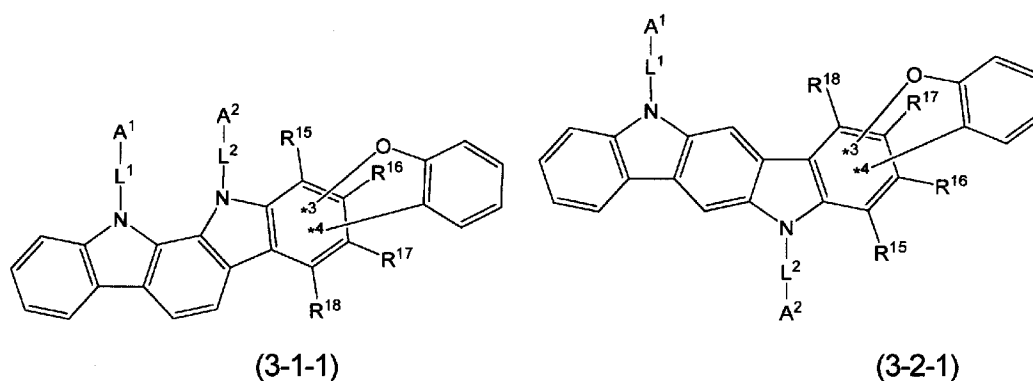
[0045] 式 (2-1) ~ (2-6) 及び (2-19) ~ (2-36) において、R¹ ~ R⁸は、水素原子であることが好ましい。

[0046] 式 (2-1) ~ (2-6)、式 (2-7) ~ (2-12)、式 (2-13

) ～ (2-18)、式(2-19) ～ (2-24)、式(2-25) ～ (2-30) 及び式(2-31) ～ (2-36) は、それぞれ前記式(3-1) ～ (3-6) における*3及び*4の結合位置を特定したものである。

[0047] 前記式(3-1)及び(3-2)で表される化合物が、それぞれ下記式(3-1-1)及び(3-2-1)で表される化合物であることが好ましい。前記式(3-1)で表される化合物が、下記式(3-1-1)で表される化合物であることがより好ましい。

「0048」 「化,14」



[0049] [式(3-1-1)及び(3-2-1)中、

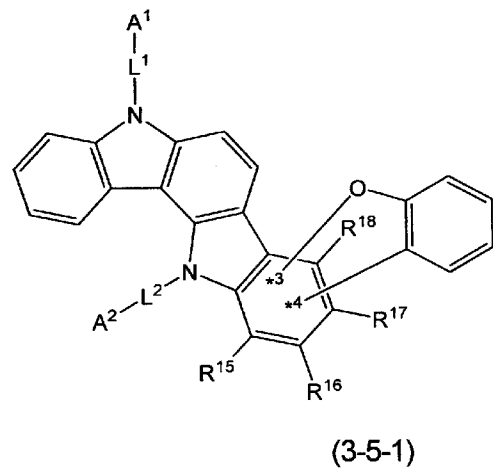
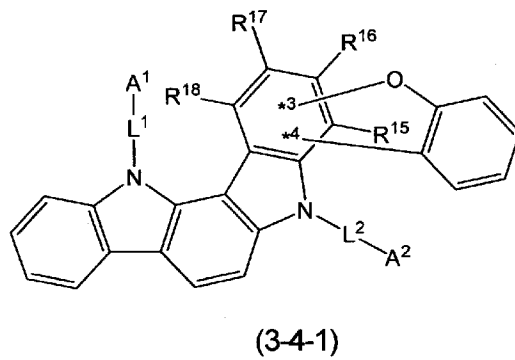
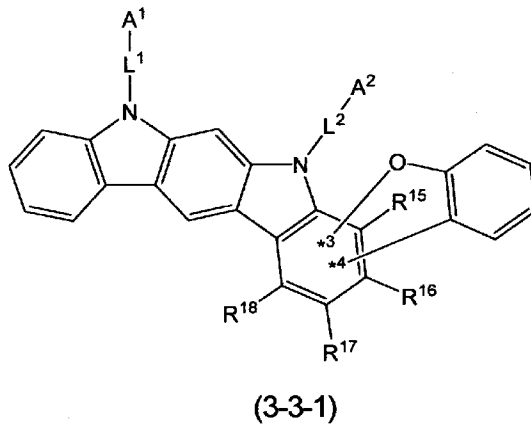
$A^1, A^2, L^1, L^2, *3$ 及び $*4$ は、式 (1) で定義した通りである。

R¹⁵～R¹⁸は、式（２）で定義した通りであり、R¹⁵、R¹⁷及びR¹⁸から選ばれるいずれかが、*４と単結合を形成する。]

[0050] 前記式(3-3)～(3-5)で表される化合物が、それぞれ下記式(3-3-1)～(3-5-1)で表される化合物であることが好ましい。前記式(3-4)及び(3-5)で表される化合物が、それぞれ下記式(3-4-1)及び(3-5-1)で表される化合物であることが好ましい。

[0051]

[化15]



[0052] [式(3-3-1)～(3-5-1)中、

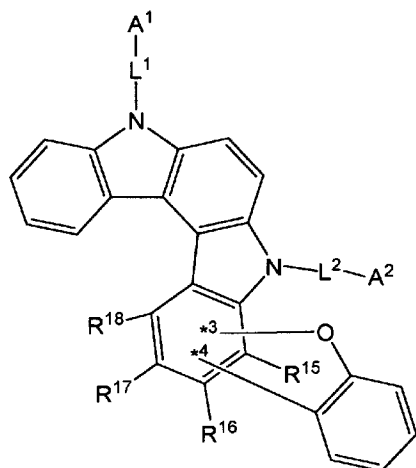
A^1 、 A^2 、 L^1 、 L^2 、*3及び*4は、式(1)で定義した通りである。

$R^{15} \sim R^{18}$ は、式(2)で定義した通りであり、 R^{15} 、 R^{17} 及び R^{18} から選ばれるいずれかが、*4と単結合を形成する。]

[0053] 前記式(3-6)で表される化合物が、下記式(3-6-1)で表される化合物であることが好ましい。

[0054]

[化16]



(3-6-1)

[0055] [式(3-6-1)中、

A^1 、 A^2 、 L^1 、 L^2 、*3及び*4は、式(1)で定義した通りである。

$R^{15} \sim R^{18}$ は、式(2)で定義した通りであり、 R^{15} 、 R^{17} 及び R^{18} から選ばれるいずれかが、*4と単結合を形成する。]

[0056] ここで、 R^{15} 、 R^{17} 及び R^{18} から選ばれるいずれかが、*4と単結合を形成するとは、次のことを意味する。*4が R^{15} と単結合を形成した場合、*3は R^{16} と単結合を形成する。*4が R^{17} と単結合を形成した場合、*3は R^{16} 又は R^{18} のいずれかと単結合を形成する。*4が R^{18} と単結合を形成した場合、*3は R^{17} と単結合を形成する。

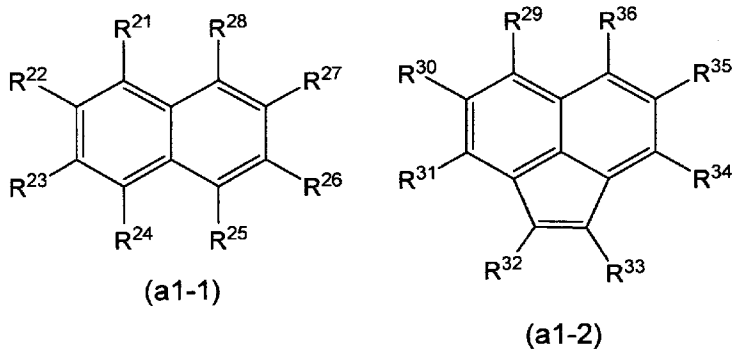
[0057] 前記式(1)における A^1 及び A^2 が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～24であり、該環形成原子として窒素原子、酸素原子及び硫黄原子からなる群から選ばれる1以上の原子を含有するヘテロアリール基であることが好ましい。

[0058] A^1 及び A^2 における前記置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24のアリール基が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～24の縮合アリール基であることが好ましい。

[0059] A^1 及び A^2 における前記置換もしくは無置換の環形成炭素数10～24の

縮合アリール基が、それぞれ独立に、下記式 (a 1 - 1) 又は (a 1 - 2) で表される化合物の 1 価の残基であることが好ましい。

[0060] [化17]



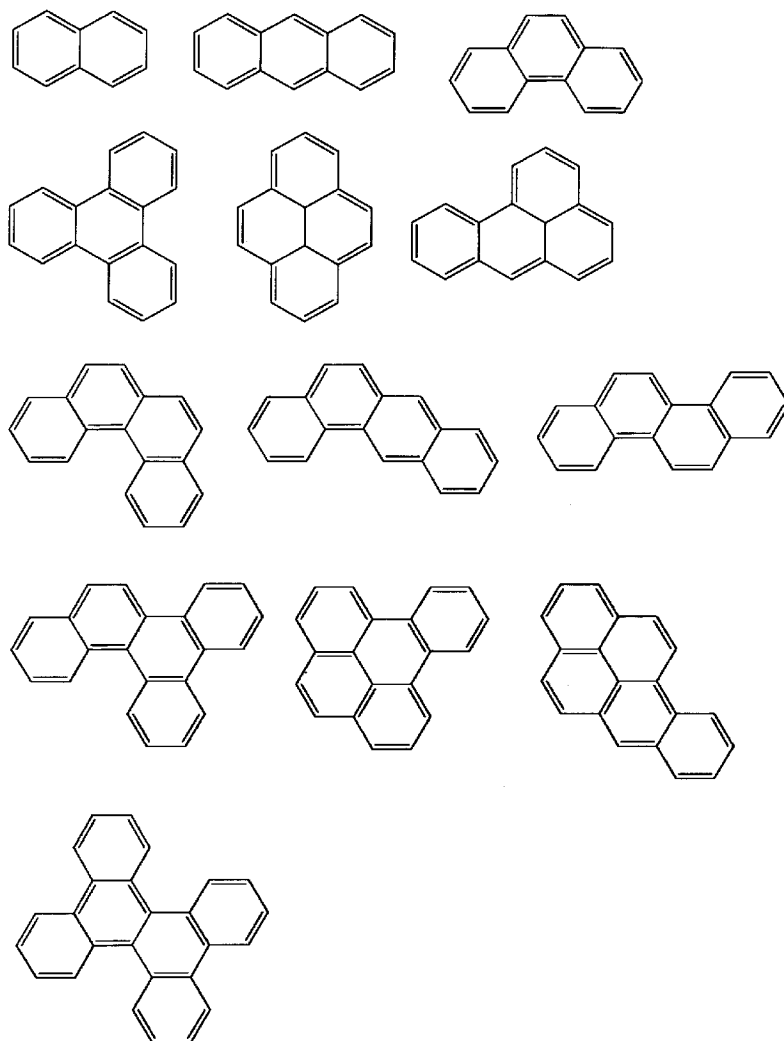
[0061] [式 (a 1 - 1) 及び (a 1 - 2) 中、

R²¹ ~ R³⁶は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^bであって、R^bが複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^bから選ばれる 2 つが、互いに結合して環を形成してもよい。
]

[0062] 式 (a 1 - 1) で表される化合物における置換若しくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 24 の縮合環形成残基としては、例えば、下記の縮合芳香族環が挙げられる。中でも、4 環以上が縮合した縮合芳香族環基が好ましく、具体的にはトリフェニル基等が挙げられる。

[0063]

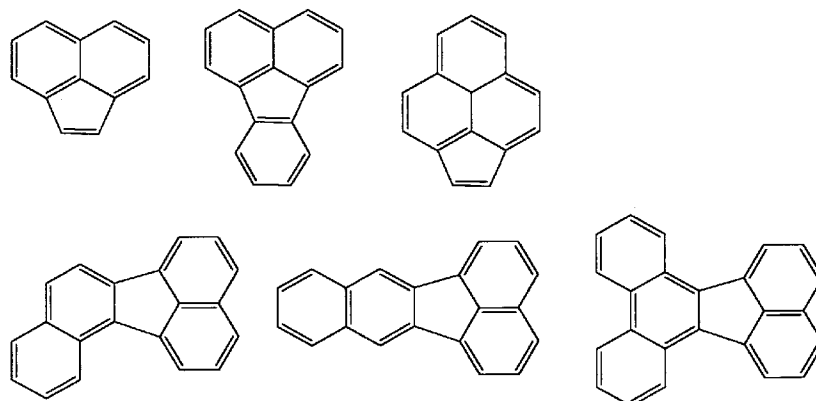
[化18]



[0064] 式(a 1-2)で表される化合物における置換若しくは無置換の環形成炭素数10～24の縮合環形成残基としては、例えば、下記の化合物が挙げられる。4環以上が縮合した縮合環形成基が好ましく、具体的にはフルオランテニル基等が挙げられる。

[0065]

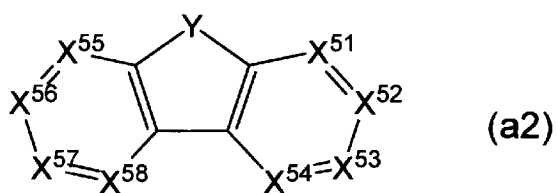
[化19]



[0066] 一実施形態では、 A^1 及び A^2 における前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 10～24 の縮合アリール基が、それぞれ独立に、4 環以上からなる縮合環からなる群から選択されることが好ましい。

[0067] 別の実施形態では、 A^1 及び A^2 における前記置換もしくは無置換の環形成原子数 5～24 であり、該環形成原子として窒素原子、酸素原子及び硫黄原子からなる群から選ばれる 1 以上の原子を含有するヘテロアリール基が、それぞれ独立に、下記式 (a2) で表される化合物の 1 価の残基であることが好ましい。

[0068] [化20]



[0069] [式 (a2) 中、

$X^{51} \sim X^{58}$ は、それぞれ独立に、 CH 、 $C(R^b)$ 又は N である。

R^b は、置換基であって、 R^b が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^b から選ばれる 2 つが、互いに結合して環を形成してもよい。

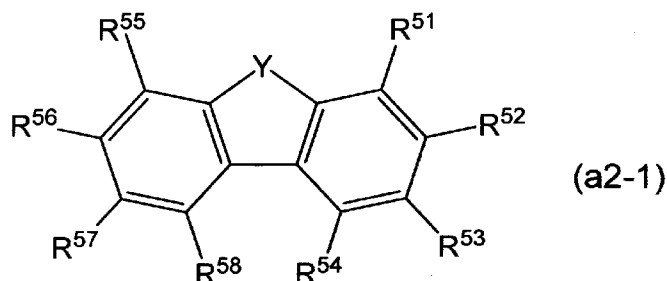
Y は、酸素原子、硫黄原子、 $-NR^d$ 、又は $-C(R^e)(R^f)-$ である。

R^d 、 R^e 及び R^f は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^b であって、 R^e 及び R^f の両方が R^b である場合は、互いに結合して環を形成してもよい。

]

[0070] 前記式 (a 2) で表される化合物の 1 価の残基が、下記式 (a 2-1) で表される化合物の 1 価の残基であることが好ましい。

[0071] [化21]



[0072] [式 (a 2-1) 中、

Y は、前記式 (a 2) で定義した通りである。

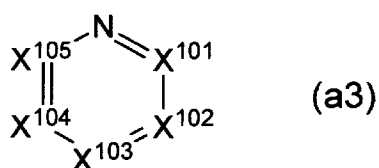
R⁵¹ ~ R⁵⁸ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^b であり、R^b が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^b から選ばれる 2 つが、互いに結合して環を形成してもよい。]

[0073] 式 (a 2-1) で表される化合物において、Y は、例えば、酸素原子、硫黄原子、NH、C(CH₃)₂ が好ましい。

R⁵¹ ~ R⁵⁸ のいずれかが L¹ 又は L² と単結合を形成することが好ましい。

[0074] A¹ 及び A² における前記置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 24 であり、該環形成原子として窒素原子、酸素原子及び硫黄原子からなる群から選ばれる 1 以上の原子を含有するヘテロアリール基が、それぞれ独立に、下記式 (a 3) で表される化合物の 1 価の残基であることが好ましい。

[0075] [化22]



[0076] [式 (a 3) 中、

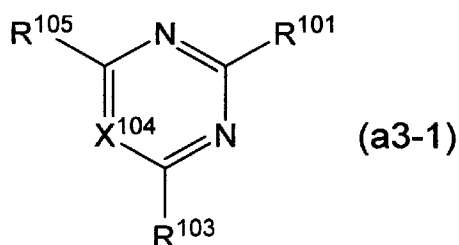
X¹⁰¹ ~ X¹⁰⁵ は、それぞれ独立に、CH、C(R^b) 又は窒素原子を示す。

。

R^bは、置換基であり、R^bが複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在するR^bから選ばれる2つが、互いに結合して、環を形成していてもよい。]

[0077] 前記式(a3)で表される化合物の1価の残基が、下記式(a3-1)で表される化合物の1価の残基であることが好ましい。

[0078] [化23]



[0079] [式(a3-1)中、

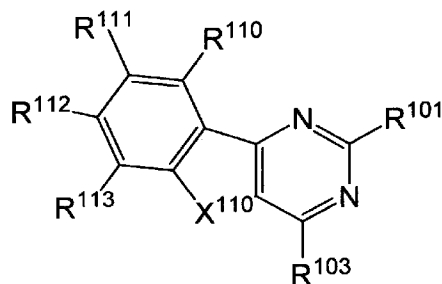
X¹⁰⁴は、前記式(a3)で定義した通りである。

R¹⁰¹、R¹⁰³及びR¹⁰⁵は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基R^bである。]

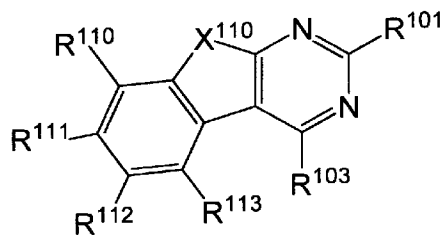
[0080] 一実施形態では、式(a3-1)において、X¹⁰⁴は、CH又は窒素原子であることが好ましい。R¹⁰¹、R¹⁰³及びR¹⁰⁵のいずれかがL¹又はL²と単結合を形成し、残りの2つが、それぞれ独立に置換若しくは無置換の環形成炭素数6~24のアリール基であることが好ましい。

[0081] 別の実施形態では、式(a3-1)において、X¹⁰⁴がC(R^b)であり、その例としては下記式(a3-1-1)及び(a3-1-2)が好ましい。

[化24]



(a3-1-1)



(a3-1-2)

[式 (3 a - 1 - 1) 及び (3 a - 1 - 2) 中、

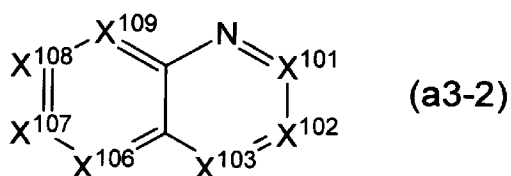
X^{110} は、酸素原子又は硫黄原子である。

$R^{110} \sim R^{113}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^b である。]

この場合、 R^{101} 及び R^{103} のいずれかが L^1 又は L^2 と単結合を形成し、残りの1つが、それぞれ独立に置換若しくは無置換の環形成炭素数6～24のアリール基であることが好ましい。

[0082] 前記式 (a 3) で表される化合物の1価の残基が、下記式 (a 3 - 2) で表される化合物の1価の残基であることが好ましい。

[0083] [化25]



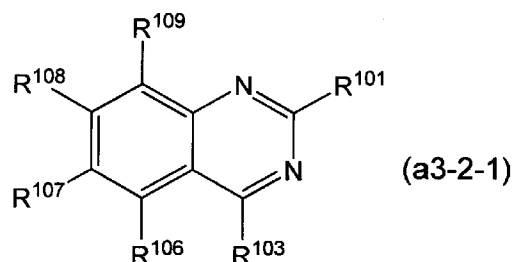
[0084] [式 (a 3 - 2) 中、

$X^{101} \sim X^{103}$ 及び $X^{106} \sim X^{109}$ は、それぞれ独立に、 CH 、 $C(R^b)$ 又は N を示す。

R^b は、置換基であり、 R^b が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^b から選ばれる2つは、互いに結合して、環を形成していてもよい。]

[0085] 前記式 (a 3 - 2) で表される化合物の1価の残基が、下記式 (a 3 - 2 - 1) で表される化合物の1価の残基であることが好ましい。

[化26]



[式 (a 3 - 2 - 1) 中、

R^{101} 、 R^{103} 及び $R^{106} \sim R^{109}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換

基 R^b であり、 R^b が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^b から選ばれる 2 つは、互いに結合して、環を形成していてもよい。]

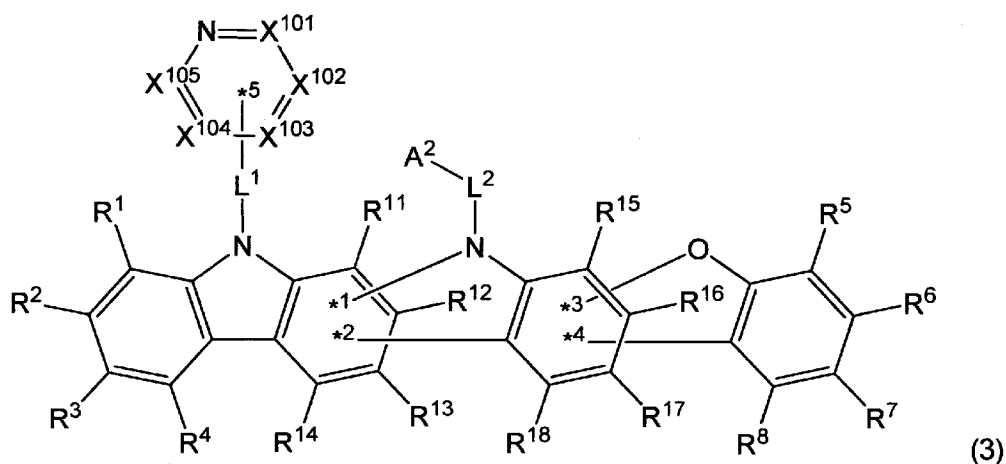
[0086] 式 (a 3-2-1) において、 R^{101} 、 R^{103} 及び $R^{106} \sim R^{109}$ のいずれかが L^1 又は L^2 と単結合を形成し、残りの 5 つは水素原子であることが好ましい。

[0087] 一実施形態では、 A^2 が、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 のヘテロアリール基であることが好ましい。具体的には、 A^2 が、上記式 (a 3)、(a 3-1)、(a 3-2) 又は (a 3-2-1) であることが好ましい。

[0088] A^2 が、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 24 であり、該環形成原子として窒素原子、酸素原子及び硫黄原子からなる群から選ばれる 1 以上の原子を含有するヘテロアリール基であることがより好ましい。

[0089] 前記式 (2) で表される化合物が、下記式 (3) で表される化合物であることが好ましく、下記式 (3-a) ～ (3-d) で表される化合物からなる群から選択されることがより好ましい。

[0090] [化27]



[0091] [式 (3) 中、

A^2 、 L^1 、 L^2 及び *1 ～ *4 は、前記式 (1) で定義した通りである。

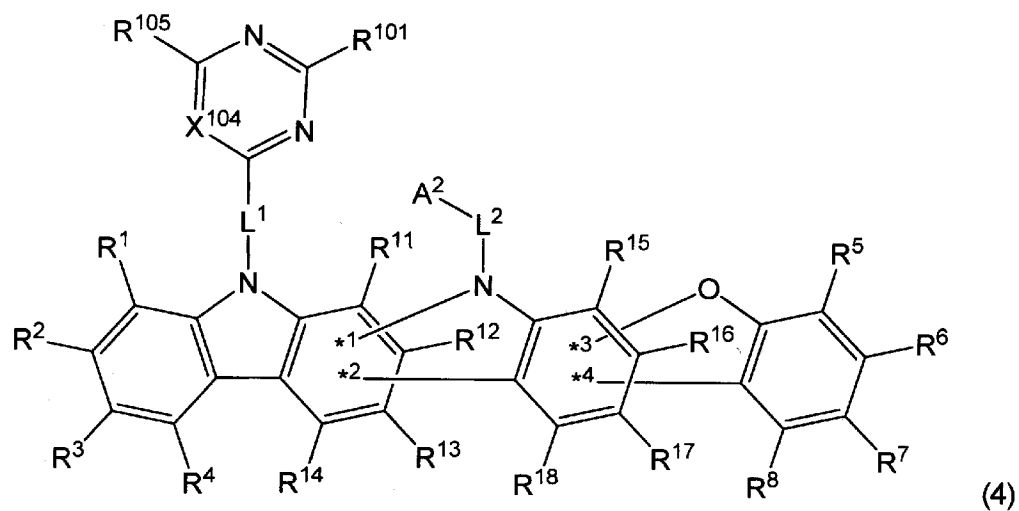
$R^1 \sim R^8$ 及び $R^{11} \sim R^{18}$ は、前記式 (2) で定義した通りである。

$X^{101} \sim X^{105}$ は、前記式 (a 3) で定義した通りである。

* 5 は、 $X^{101} \sim X^{105}$ のいずれかと単結合を形成する結合手である。]

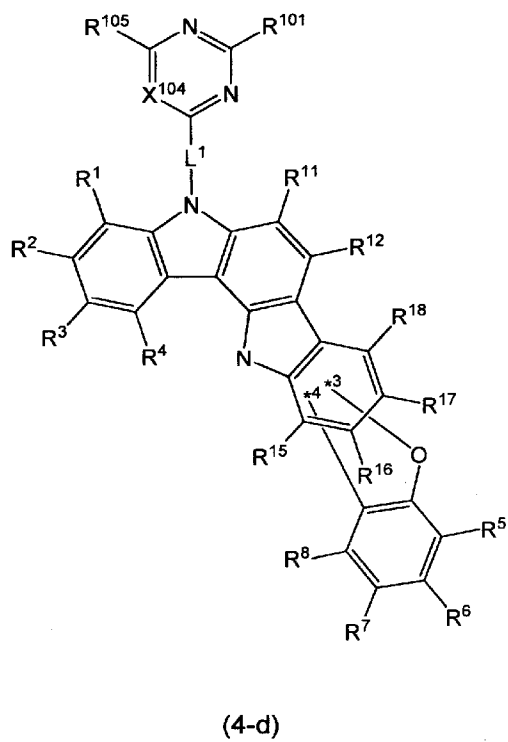
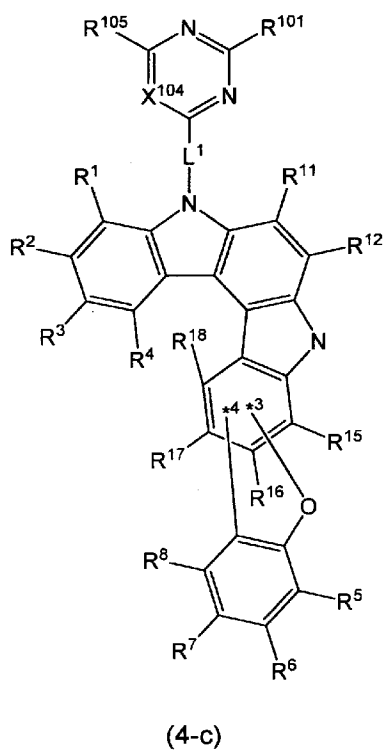
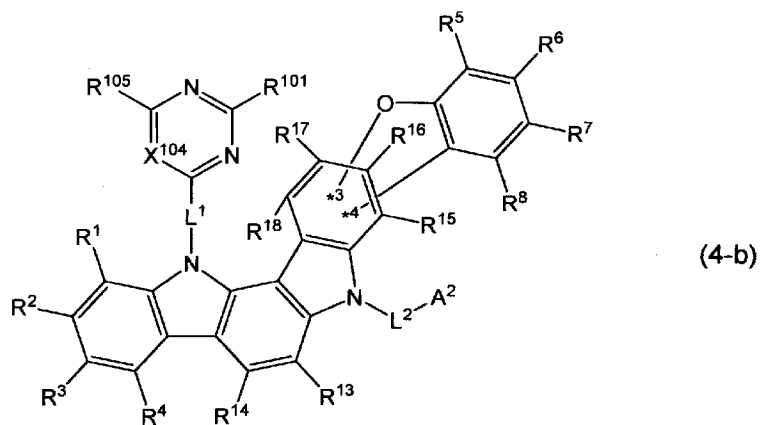
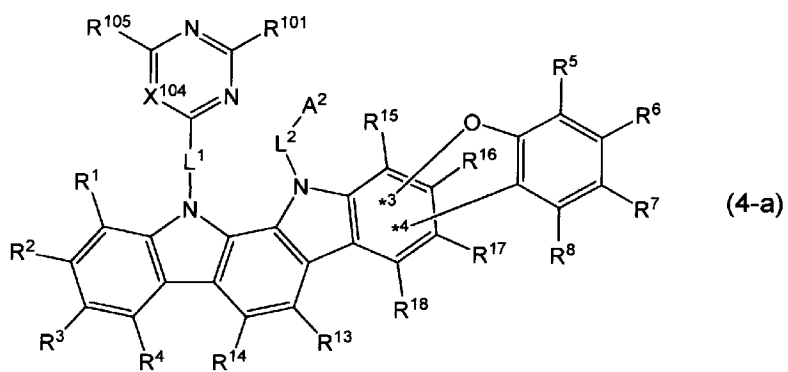
[0092] 前記式 (3) で表される化合物が、下記式 (4) で表される化合物であることが好ましい。前記式 (3-a) ~ (3-d) で表される化合物が、それぞれ下記式 (4-a) ~ (4-d) で表される化合物であることが好ましい。

[0093] [化28]



[0094]

[化29]



[0095] [式(4)及び(4-a)～(4-d)中、

A^2 , L^1 , L^2 及び*1~*4は、前記式(1)で定義した通りである。

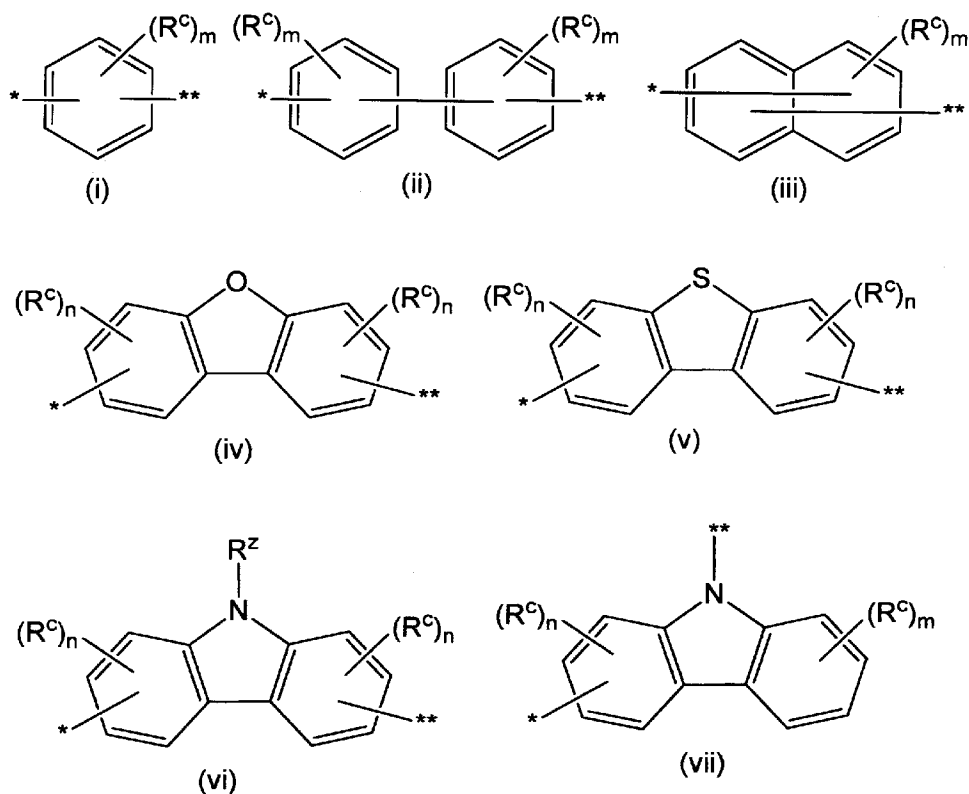
$R^1 \sim R^8$ 及び $R^{11} \sim R^{18}$ は、前記式(2)で定義した通りである。

X^{104} は、前記式(a3)で定義した通りである。

R^{101} 及び R^{105} は、前記式(a3-1)で定義した通りである。]

[0096] 前記式(1)において、 L^1 及び L^2 が、それぞれ独立に、単結合、又は下記式(i)~(vii)で表される基からなる群から選択される基であることが好ましい。

[0097] [化30]



[0098] [式(i)~(vii)中、

*及び**は、それぞれ独立に、前記式(1)中のN及び、 A^1 及び A^2 のいずれか一方とそれぞれ単結合を形成する結合手である。

R° は置換基であり、 R° が複数存在する場合は、それぞれ同一であっても、異なってもよく、複数存在する R° から選ばれる2つが、互いに結合して、環構造を形成してもよい。

R^z は、水素原子又は置換基 R° である。

mは、それぞれ独立に、0～4の整数であり、nは、それぞれ独立に、0～3の整数である。]

[0099] 一実施形態では、L¹が、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリーレン基であることが好ましく、L¹が、前記式(i)～(i i i)で表される群から選択されることがさらに好ましい。

[0100] 前記置換基R^a、R^b及びR^c、並びに、前記「置換もしくは無置換」という記載における置換基が、それぞれ独立に、炭素数1～50のアルキル基、環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、環形成炭素数6～50のアリール基、環形成炭素数6～50のアリール基を有する炭素数7～51のアラルキル基、アミノ基、炭素数1～50のアルキル基及び環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基、炭素数1～50のアルキル基を有するアルコキシ基、環形成炭素数6～50のアリール基を有するアリールオキシ基、環形成原子数5～50のヘテロアリール基を有するヘテロアリールオキシ基、炭素数1～50のアルキル基、炭素数1～50のアルコキシ基及び環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換若しくはトリ置換シリル基、環形成原子数5～50のヘテロアリール基、炭素数1～50のハロアルキル基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、形成炭素数6～50のアリール基を有するアリールチオ基、環形成原子数5～50のヘテロアリール基を有するヘテロアリールチオ基、炭素数1～50のアルキル基及び環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基、炭素数1～50のアルキル基及び環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォルル基、炭素数1～50のアルキル基を有するアルキルスルホニルオキシ基、環形成炭素数6～50のアリール基を有するアリールスルホニルオキシ基、炭素数1～50のアルキル基を有するアルキルカルボニルオキシ基、環形成炭素数6～50のアリール基を有するアリールカルボニルオキシ基、ケイ素含有基、ヒドロキシ基、炭素数1～50のアルキル基及び環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる置換基を有する置換カル

ボニル基、カルボキシ基、ビニル基、（メタ）アクリロイル基、エポキシ基、並びにオキセタニル基からなる群から選ばれる基であることが好ましい。

[0101] R^a が、それぞれ独立に、環形成炭素数6～20のアリール基、環形成原子数5～20のヘテロアリール基、シアノ基、フッ素原子、炭素数1～20の直鎖型、分岐型、環状のアルキル基、炭素数2～20の直鎖型、分岐型、環状のアルケニル含有基、炭素数2～20の直鎖型、分岐型、環状のアルキニル含有基、炭素数1～20のアルコキシ基、環形成炭素数6～20のアリールオキシ基、環形成炭素数6～20のアリールチオ基、環形成原子数5～20のヘテロアリールオキシ基、環形成原子数5～20のヘテロアリールチオ基、炭素数1～10のアルキル基、炭素数1～10のアルコキシ基及び環形成炭素数6～20のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基、及び、環形成炭素数6～20のアリール基または環形成原子数3～20の複素環基がモノ、ジまたはトリ置換された炭素数1～20のアルキル基、環形成炭素数6～20のアリール基及び環形成炭素数3～20の複素環基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基であることが好ましく、炭素数1～10のアルキル基、環形成炭素数6～20のアリール基、環形成炭素数6～20のアリールオキシ基、環形成原子数5～20のヘテロアリール基、フッ素原子、炭素数1～10のアルキル基、炭素数1～10のアルコキシ基及び環形成炭素数6～20のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基、並びに炭素数1～10のアルキル基及び環形成炭素数6～20のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基であることがより好ましい。 R^a が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^a から選ばれる2つが、互いに結合して環を形成してもよい。

[0102] R^b が、それぞれ独立に、環形成炭素数6～20のアリール基、環形成原子数5～20のヘテロアリール基、シアノ基、フッ素原子、炭素数1～20の

直鎖型、分岐型、環状のアルキル基、炭素数 2 ～ 20 の直鎖型、分岐型、環状のアルケニル含有基、炭素数 2 ～ 20 の直鎖型、分岐型、環状のアルキニル含有基、炭素数 1 ～ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 6 ～ 20 のアリーロキシ基、環形成炭素数 6 ～ 20 のアリールチオ基、環形成原子数 5 ～ 20 のヘテロアリーロキシ基、環形成原子数 5 ～ 20 のヘテロアリールチオ基、炭素数 1 ～ 10 のアルキル基、炭素数 1 ～ 10 のアルコキシ基及び環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基、及び、環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基または環形成原子数 3 ～ 20 の複素環基がモノ、ジまたはトリ置換された炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基及び環形成炭素数 3 ～ 20 の複素環基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基であることが好ましい。R^bが複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^bから選ばれる 2 つが、互いに結合して環を形成してもよい。

[0103] R^cが、環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基、環形成原子数 5 ～ 20 のヘテロアリール基、シアノ基、フッ素原子、炭素数 1 ～ 20 の直鎖型、分岐型、環状のアルキル基、炭素数 2 ～ 20 の直鎖型、分岐型、環状のアルケニル含有基、炭素数 2 ～ 20 の直鎖型、分岐型、環状のアルキニル含有基、炭素数 1 ～ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 6 ～ 20 のアリーロキシ基、環形成炭素数 6 ～ 20 のアリールチオ基、環形成原子数 5 ～ 20 のヘテロアリーロキシ基、環形成原子数 5 ～ 20 のヘテロアリールチオ基、炭素数 1 ～ 10 のアルキル基、炭素数 1 ～ 10 のアルコキシ基及び環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基、及び、環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基または環形成原子数 3 ～ 20 の複素環基がモノ、ジまたはトリ置換された炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、環形成炭素数 6 ～ 20 のアリール基及び環形成炭素数 3 ～ 20 の複素環基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基であることが好ましい。R^cが複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、異なってもよく、複数存在する R^cから選ばれる 2 つが、互いに結合して環を形成してもよい。

いてもよく、複数存在するR^oから選ばれる2つが、互いに結合して環を形成してもよい。

[0104] 「置換もしくは無置換」という記載における置換基は、上記R^a、R^b及びR^oで記載した好ましい置換基からなる群から選ばれる基であることが好ましい。

[0105] また、「置換若しくは無置換」という記載における置換基には、上記の置換基によってさらに置換されていてもよい。これらの置換基は複数が互いに結合して環を形成してもよい。また、別の実施形態として、これらの置換基同士が結合せず、従って環を形成しなくてもよい。

[0106] 本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が6であり、ナフタレン環は環形成炭素数が10であり、ピリジニル基は環形成炭素数5であり、フラニル基は環形成炭素数4である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

[0107] 本明細書において、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造（例えば単環、縮合環、環集合）の化合物（例えば単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。以下で記載される「環形成原子数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ピリジン環は環形成原子数は6であり、キナゾリン環は環形成原子数が10であり、フ

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

[0108] 本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の炭素数を表すものであり、置換されている場合の置換基の炭素数は含めない。

[0109] 本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「原子数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の原子数を表すものであり、置換されている場合の置換基の原子数は含めない。

[0110] 「置換もしくは無置換の」という場合における「無置換」とは前記置換基で置換されておらず、水素原子が結合していることを意味する。

[0111] 本明細書において、水素原子とは、中性子数が異なる同位体、即ち、軽水素（protium）、重水素（deuterium）、三重水素（tritium）、を包含する。

[0112] 前記式中の置換基、及び前記「置換もしくは無置換」という記載における置換基の具体例について説明する。

炭素数1～50のアルキル基の例としては、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、 s -ブチル基、イソブチル基、 t -ブチル基、 n -ペンチル基、 n -ヘキシル基、 n -ヘプチル基、 n -オクチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロ- t -ブチル基、

チル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨード-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロイソプロピル基、2, 3-ジニトロ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基等が挙げられる。

炭素数1～20のアルキル基の例としては、上記で挙げた中で炭素数は1～20のものが挙げられる。炭素数1～10のアルキル基の例としては、上記で挙げた中で炭素数は1～10のものが挙げられる。

[0113] アルキル基として好ましくは、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基から選ばれる。

アルキル基の炭素数は、好ましくは1～20であり、より好ましくは1～10であり、さらに好ましくは1～6である。

[0114] 環形成炭素数3～50のシクロアルキル基の例としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、4-メチルシクロヘキシル基、1-アダマンチル基、2-アダマンチル基、1-ノルボルニル基、2-ノルボルニル基等が挙げられる。

シクロアルキル基の環形成炭素数は、3～10が好ましく、3～8がより好ましく、3～6がより好ましい。

[0115] ハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等が挙げられ、好ましくはフッ素原子である。

[0116] 炭素数1～50のハロアルキル基は、前記炭素数1～50のアルキル基及び前記環形成炭素数3～50のシクロアルキル基における1以上の水素原子が上記ハロゲン原子で置換された基である。

[0117] 炭素数1～50のアルキル基を有するアルコキシ基は、 $-OY^{10}$ で表される基であり、 Y^{10} の例としては、前記炭素数1～50のアルキル基及び前記環形成炭素数3～50のシクロアルキル基として挙げたものと同様のものが挙げられる。

炭素数1～20のアルコキシ基は、 $-OY^{10A}$ で表される基であり、 Y^{10A} の例としては、前記炭素数1～50のアルキル基及び前記環形成炭素数3～50のシクロアルキル基として挙げたものの中で、炭素数が1～20のアルキル基又はシクロアルキル基が挙げられる。

炭素数1～10のアルコキシ基は、 $-OY^{10B}$ で表される基であり、 Y^{10B} の例としては、前記炭素数1～50のアルキル基及び前記環形成炭素数3～50のシクロアルキル基として挙げたものの中で、炭素数が1～10のアルキル基又はシクロアルキル基が挙げられる。

[0118] 炭素数1～50のアルキル基を有するアルキルカルボニルオキシ基は、 $-O-(C=O)-Y^{10}$ で表される基であり、 Y^{10} は上記の通りである。

[0119] 環形成炭素数6～50のアリール基の例としては、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントリル基、2-アントリル基、9-アントリル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、6-クリセニル基、1-ベンゾ[c]フェナントリル基、2-ベンゾ[c]フェナントリル基、3-ベンゾ[c]フェナントリル基、4-ベンゾ[c]フェナントリル基、5-ベンゾ[c]フ

エナントリル基、6-ベンゾ [c] フェナントリル基、1-ベンゾ [g] クリセニル基、2-ベンゾ [g] クリセニル基、3-ベンゾ [g] クリセニル基、4-ベンゾ [g] クリセニル基、5-ベンゾ [g] クリセニル基、6-ベンゾ [g] クリセニル基、7-ベンゾ [g] クリセニル基、8-ベンゾ [g] クリセニル基、9-ベンゾ [g] クリセニル基、10-ベンゾ [g] クリセニル基、11-ベンゾ [g] クリセニル基、12-ベンゾ [g] クリセニル基、13-ベンゾ [g] クリセニル基、14-ベンゾ [g] クリセニル基、1-ベンゾ [a] アントリル基、2-ベンゾ [a] アントリル基、3-ベンゾ [a] アントリル基、4-ベンゾ [a] アントリル基、5-ベンゾ [a] アントリル基、6-ベンゾ [a] アントリル基、7-ベンゾ [a] アントリル基、8-ベンゾ [a] アントリル基、9-ベンゾ [a] アントリル基、10-ベンゾ [a] アントリル基、11-ベンゾ [a] アントリル基、12-ベンゾ [a] アントリル基、13-ベンゾ [a] アントリル基、14-ベンゾ [a] アントリル基、1-トリフェニル基、2-トリフェニル基、1-フルオレニル基、2-フルオレニル基、3-フルオレニル基、4-フルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基、2-ビフェニルイル基、3-ビフェニルイル基、4-ビフェニルイル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、等が挙げられる。

環形成炭素数6～24のアリール基の例としては、上記で挙げたもののうち、環形成炭素数が6～24のものが挙げられる。環形成炭素数6～20のアリール基の例としては、上記で挙げたもののうち、環形成炭素数が6～20のものが挙げられる。

アリール基として好ましくは、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-フルオレニル基、

2-フルオレニル基、3-フルオレニル基、4-フルオレニル基、5-ベンゾ[c]フェナントリル基、4-ベンゾ[a]アントリル基、7-ベンゾ[a]アントリル基、1-トリフェニル基、2-トリフェニル基、フルオランテニル基である。

アリール基として好ましくは環形成炭素数は6～24であり、より好ましくは6～20である。

[0120] 環形成炭素数6～50のアリーレン基及び環形成炭素数6～60のアリーレン基は、前記環形成炭素数6～50のアリール基からさらに1つの水素原子又は置換基が除去された残基 Y^{21} である。

[0121] 環形成炭素数6～50のアリール基を有する炭素数7～51のアラルキル基は、 $-Y^{11}-Y^{20}$ と表される。 Y^{11} の例としては、前記炭素数1～50のアルキル基及び前記環形成炭素数3～50のシクロアルキル基として挙げたものからさらに1つの水素原子又は置換基が除去された残基（アルキレン基又はシクロアルキレン基）である。 Y^{20} の例としては、前記環形成炭素数6～50のアリール基が挙げられる。

[0122] 環形成炭素数6～50のアリールオキシ基は、 $-OY^{20}$ と表され、 Y^{20} の例としては前記環形成炭素数6～50のアリール基として挙げたものと同様のものが挙げられる。

環形成炭素数6～20のアリールオキシ基は、 $-OY^{20A}$ と表され、 Y^{20A} の例としては前記環形成炭素数6～20のアリール基として挙げたものと同様のものが挙げられる。

環形成原子数5～50のヘテロアリールオキシ基は、 $-OY^{21}$ と表され、 Y^{21} の例としては前記環形成原子数5～50のヘテロアリール基として挙げたものと同様のものが挙げられる。

環形成原子数5～20のヘテロアリールオキシ基は、 $-OY^{21A}$ と表され、 Y^{21A} の例としては前記環形成原子数5～20のヘテロアリール基として挙げたものと同様のものが挙げられる。

[0123] 環形成炭素数6～50のアリールチオ基は、 $-SY^{22}$ と表され、 Y^{22} の例

としては前記環形成炭素数6～50のアリール基として挙げたものと同様のものが挙げられる。

環形成炭素数6～20のアリールチオ基は、 $-SY^{22A}$ と表され、 Y^{22A} の例としては前記環形成炭素数6～20のアリール基として挙げたものと同様のものが挙げられる。

環形成原子数5～50のヘテロアリールチオ基は、 $-SY^{23}$ と表され、 Y^{23} の例としては前記環形成原子数5～50のヘテロアリール基として挙げたものと同様のものが挙げられる。

環形成原子数5～20のヘテロアリールオチオ基は、 $-SY^{23A}$ と表され、 Y^{23A} の例としては前記環形成原子数5～20のヘテロアリール基として挙げたものと同様のものが挙げられる。

[0124] 環形成炭素数6～50のアリール基を有するアリールカルボニルオキシ基は、 $-O-(C=O)-Y^{20}$ と表され、 Y^{20} は上記の通りである。

[0125] 炭素数1～50のアルキル基及び環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる置換基を有する置換カルボニル基は、 $-(C=O)-Y^{10}$ 又は $-(C=O)-Y^{20}$ と表され、 Y^{10} 及び Y^{20} は上記の通りである。

[0126] 環形成原子数5～50のヘテロアリール基の例としては、1-ピロリル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、1-インドリル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、2-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、1-ジベンゾフラニル基、

ル基、2-ジベンゾフラニル基、3-ジベンゾフラニル基、4-ジベンゾフラニル基、1-ジベンゾチオフェニル基、2-ジベンゾチオフェニル基、3-ジベンゾチオフェニル基、4-ジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基、ベンゾカルバゾリル基、アザジベンゾフラニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾフラニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、ジアザフェナントリル基、2-ベンゾチオフェニル基、3-ベンゾチオフェニル基、4-ベンゾチオフェニル基、5-ベンゾチオフェニル基、6-ベンゾチオフェニル基、7-ベンゾチオフェニル基、キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、6-イソキノリル基、7-イソキノリル基、8-イソキノリル基、2-キノキサリニル基、5-キノキサリニル基、6-キノキサリニル基、2-キナゾリニル基、4-キナゾリニル基、5-キナゾリニル基、6-キナゾリニル基、7-キナゾリニル基、8-キナゾリニル基、1-フェナントリジニル基、2-フェナントリジニル基、3-フェナントリジニル基、4-フェナントリジニル基、6-フェナントリジニル基、7-フェナントリジニル基、8-フェナントリジニル基、9-フェナントリジニル基、10-フェナントリジニル基、1-アクリジニル基、2-アクリジニル基、3-アクリジニル基、4-アクリジニル基、9-アクリジニル基、1,7-フェナントロリン-2-イル基、1,7-フェナントロリン-3-イル基、1,7-フェナントロリン-4-イル基、1,7-フェナントロリン-5-イル基、1,7-フェナントロリン-6-イル基、1,7-フェナントロリン-8-イル基、1,7-フェナントロリン-9-イル基、1,7-フェナントロリン-10-イル基、1,8-フェナントロリン-2-イル基、1,8-フェナントロリン-3-イル基、1,8-フェナントロリン-4-イル基、1,8-フェナントロリン-5-イル基、1,8-フェナントロリン-6-イル基、1,8-フェナントロリン-7-イル基、1,8-フェナントロリン-9-イ

ル基、1, 8-フェナントロリン-10-イル基、1, 9-フェナントロリン-2-イル基、1, 9-フェナントロリン-3-イル基、1, 9-フェナントロリン-4-イル基、1, 9-フェナントロリン-5-イル基、1, 9-フェナントロリン-6-イル基、1, 9-フェナントロリン-7-イル基、1, 9-フェナントロリン-8-イル基、1, 9-フェナントロリン-10-イル基、1, 10-フェナントロリン-2-イル基、1, 10-フェナントロリン-3-イル基、1, 10-フェナントロリン-4-イル基、1, 10-フェナントロリン-5-イル基、2, 9-フェナントロリン-1-イル基、2, 9-フェナントロリン-3-イル基、2, 9-フェナントロリン-4-イル基、2, 9-フェナントロリン-5-イル基、2, 9-フェナントロリン-6-イル基、2, 9-フェナントロリン-7-イル基、2, 9-フェナントロリン-8-イル基、2, 9-フェナントロリン-10-イル基、2, 8-フェナントロリン-1-イル基、2, 8-フェナントロリン-3-イル基、2, 8-フェナントロリン-4-イル基、2, 8-フェナントロリン-5-イル基、2, 8-フェナントロリン-6-イル基、2, 8-フェナントロリン-7-イル基、2, 8-フェナントロリン-9-イル基、2, 8-フェナントロリン-10-イル基、2, 7-フェナントロリン-1-イル基、2, 7-フェナントロリン-3-イル基、2, 7-フェナントロリン-4-イル基、2, 7-フェナントロリン-5-イル基、2, 7-フェナントロリン-6-イル基、2, 7-フェナントロリン-8-イル基、2, 7-フェナントロリン-9-イル基、2, 7-フェナントロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、10-フェノチアジニル基、1-フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、10-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、1-ベンズイミダゾリル基、2-ベ

ンズイミダゾリル基、4-ベンズイミダゾリル基、5-ベンズイミダゾリル基、6-ベンズイミダゾリル基、7-ベンズイミダゾリル基、2-イミダゾ[1, 2-a]ピリジニル基、3-イミダゾ[1, 2-a]ピリジニル基、5-イミダゾ[1, 2-a]ピリジニル基、6-イミダゾ[1, 2-a]ピリジニル基、7-イミダゾ[1, 2-a]ピリジニル基、8-イミダゾ[1, 2-a]ピリジニル基、ベンズイミダゾール-2-オン-1-イル基、ベンズイミダゾール-2-オン-3-イル基、ベンズイミダゾール-2-オン-4-イル基、ベンズイミダゾール-2-オン-5-イル基、ベンズイミダゾール-2-オン-6-イル基、ベンズイミダゾール-2-オン-7-イル基等が挙げられる。

環形成原子数5～24のヘテロアリール基の例としては、上記で挙げたもののうち、環形成原子数が5～24のものが挙げられる。環形成原子数5～20のヘテロアリール基の例としては、上記で挙げたもののうち、環形成原子数が5～20のものが挙げられる。

[0127] ヘテロアリール基として好ましくは、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キナゾリニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基、1-ジベンゾフラニル基、2-ジベンゾフラニル基、3-ジベンゾフラニル基、4-ジベンゾフラニル基、1-ジベンゾチオフェニル基、2-ジベンゾチオフェニル基、3-ジベンゾチオフェニル基、又は4-ジベンゾチオフェニル基である。

[0128] 好ましくはヘテロアリール基の環形成原子数は5～24であり、より好ましくは5～18である。

ヘテロアリール基の環形成原子として、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子からなる群から選ばれる原子を含有することが好ましい。

[0129] 環形成原子数5～50のヘテロアリーレン基は、前記環形成原子数5～50のヘテロアリール基からさらに1つの水素原子又は置換基が除去された基 Y^{31} である。

[0130] 炭素数 1 ～ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換アミノ基は、 $-\text{NH}(\text{Y}^{10})$ 又は $-\text{NH}(\text{Y}^{20})$ で表され、 Y^{10} 及び Y^{20} は上記の通りである。

炭素数 1 ～ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換アミノ基は、 $-\text{N}(\text{Y}^{10})_2$ 、 $-\text{N}(\text{Y}^{20})_2$ 又は $-\text{N}(\text{Y}^{10})(\text{Y}^{20})$ で表され、 Y^{10} 及び Y^{20} は上記の通りである。 Y^{10} 又は Y^{20} が 2 つある場合は、互いに同一であっても、異なってもよい。

[0131] 炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、炭素数 1 ～ 50 のアルコキシ基及び環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換シリル基は、 $-\text{SiH}_2(\text{Y}^{10})$ 、 $-\text{SiH}_2(\text{OY}^{10})$ 又は $-\text{SiH}_2(\text{Y}^{20})$ で表される。

炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、炭素数 1 ～ 50 のアルコキシ基及び環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換シリル基は、 $-\text{SiH}(\text{Y}^{10})_2$ 、 $-\text{SiH}(\text{OY}^{10})_2$ 、 $-\text{SiH}(\text{Y}^{20})_2$ 、 $-\text{SiH}(\text{Y}^{10})(\text{Y}^{20})$ 、 $-\text{SiH}(\text{Y}^{10})(\text{OY}^{10})$ 、 $-\text{SiH}(\text{OY}^{10})(\text{Y}^{20})$ で表される。

炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、炭素数 1 ～ 50 のアルコキシ基及び環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するトリ置換シリル基は、 $-\text{Si}(\text{Y}^{10})_3$ 、 $-\text{Si}(\text{OY}^{10})_3$ 、 $-\text{Si}(\text{Y}^{20})_3$ 、 $-\text{Si}(\text{Y}^{10})_2(\text{OY}^{10})$ 、 $-\text{Si}(\text{OY}^{10})_2(\text{Y}^{10})$ 、 $-\text{Si}(\text{Y}^{10})_2(\text{Y}^{20})$ 、 $-\text{Si}(\text{OY}^{10})_2(\text{Y}^{20})$ 、 $-\text{Si}(\text{Y}^{20})_2(\text{OY}^{10})$ 、 $-\text{Si}(\text{Y}^{10})(\text{Y}^{20})_2$ 又は $-\text{Si}(\text{Y}^{10})(\text{OY}^{10})(\text{Y}^{20})$ で表される。 Y^{10} 及び Y^{20} は前記の通りであり、 Y^{10} 又は Y^{20} がそれぞれ複数存在する場合は、互いに同一であっても、異なってもよい。

[0132] トリ置換シリル基としては、トリアリールシリル基、モノアルキルジアリールシリル基、ジアルキルモノアリールシリル基が挙げられ、具体的には、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリブチルシリル基、トリオク

チルシリル基、トリイソブチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルイソプロピルシリル基、ジメチルプロピルシリル基、ジメチルブチルシリル基、ジメチルターシャリーブチルシリル基、ジエチルイソプロピルシリル基、フェニルジメチルシリル基、ジフェニルメチルシリル基、ジフェニルターシャリーブチル基、トリフェニルシリル基等が挙げられ、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリブチルシリル基が挙げられる。

[0133] 炭素数 1 ～ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基は、 $-S(=O)_2-Y^{10}$ 又は $-S(=O)_2-Y^{20}$ で表され、 Y^{10} 及び Y^{20} は前記の通りである。

[0134] 炭素数 1 ～ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォル基は、 $-O-P(=O)(Y^{10})_2$ 、 $-O-P(=O)(Y^{20})_2$ 又は $-O-P(=O)(Y^{10})(Y^{20})$ で表される。 Y^{10} 及び Y^{20} は前記の通りであり、 Y^{10} 又は Y^{20} がそれぞれ 2 つ存在する場合は、互いに同一であっても、異なってもよい。

[0135] 炭素数 1 ～ 50 のアルキル基を有するアルキルスルホニルオキシ基は、 $-O-S(=O)_2(Y^{10})$ で表され、 Y^{10} は前記の通りである。

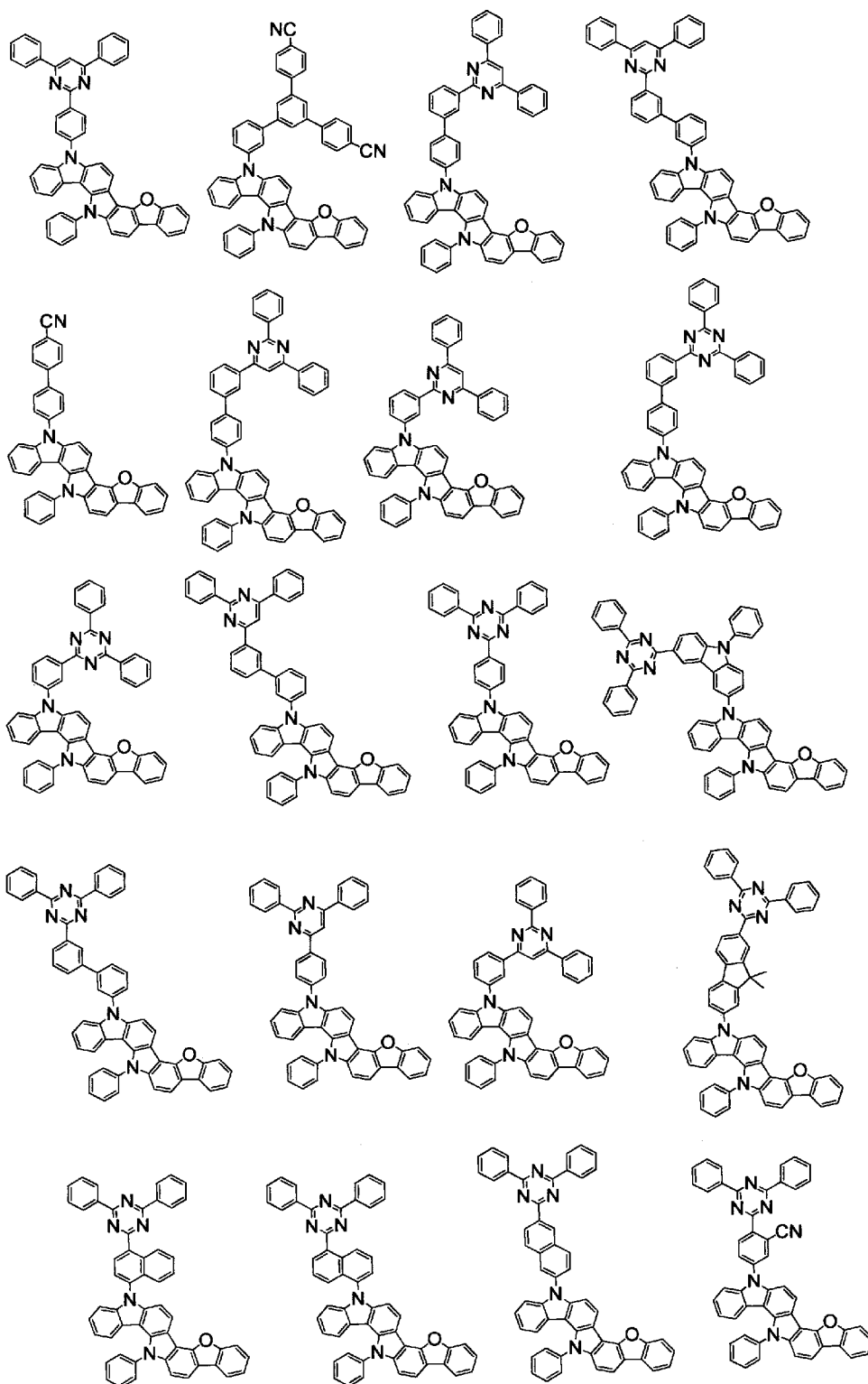
[0136] 環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するアリールスルホニルオキシ基は、 $-O-S(=O)_2(Y^{20})$ で表され、 Y^{20} は前記の通りである。

[0137] (メタ) アクリロイル基は、アクリロイル基及びメタクリロイル基を含む。

[0138] 以下に本発明の一態様である式 (1) で表される化合物の具体例を示す。

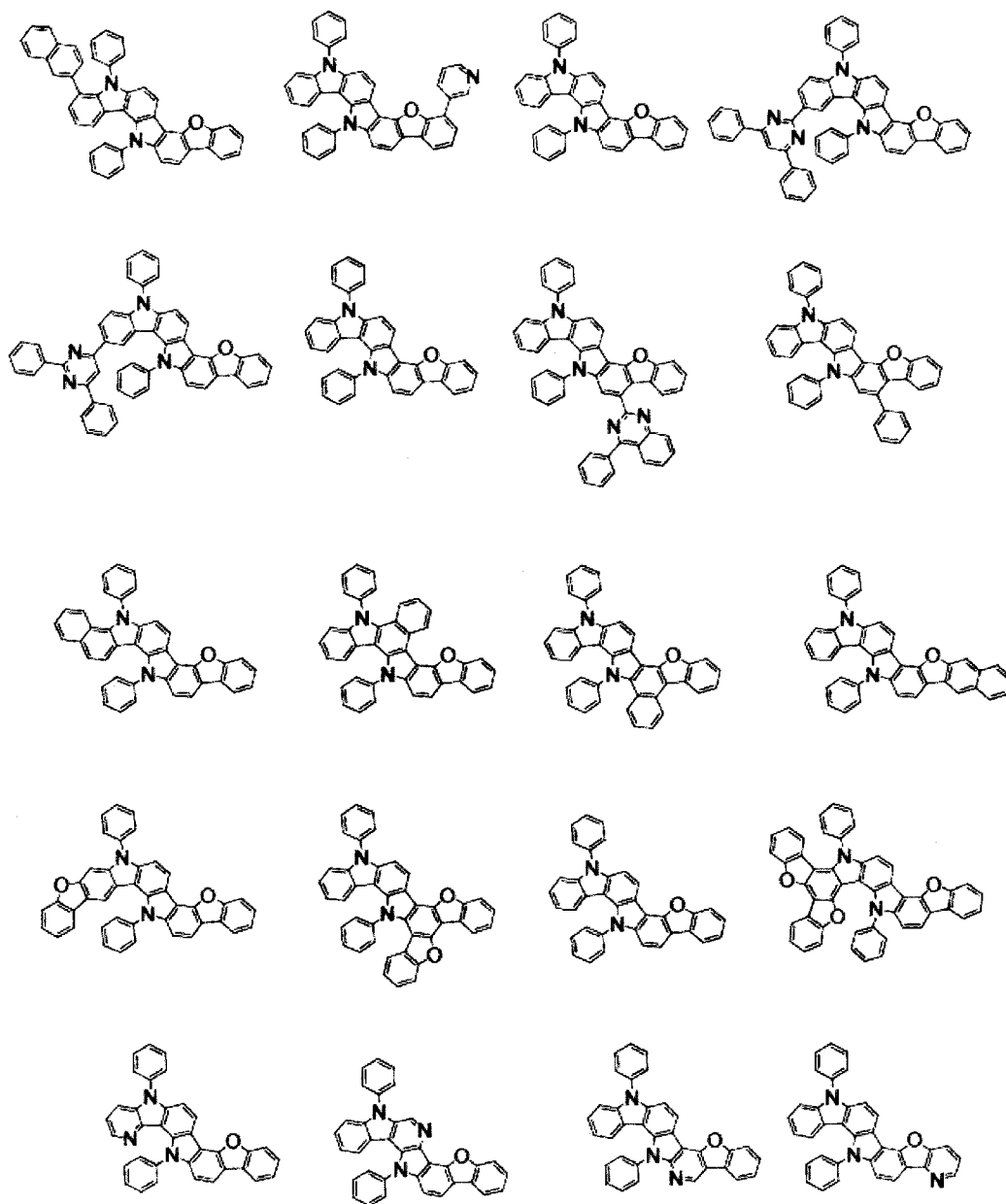
[0139]

[化31]



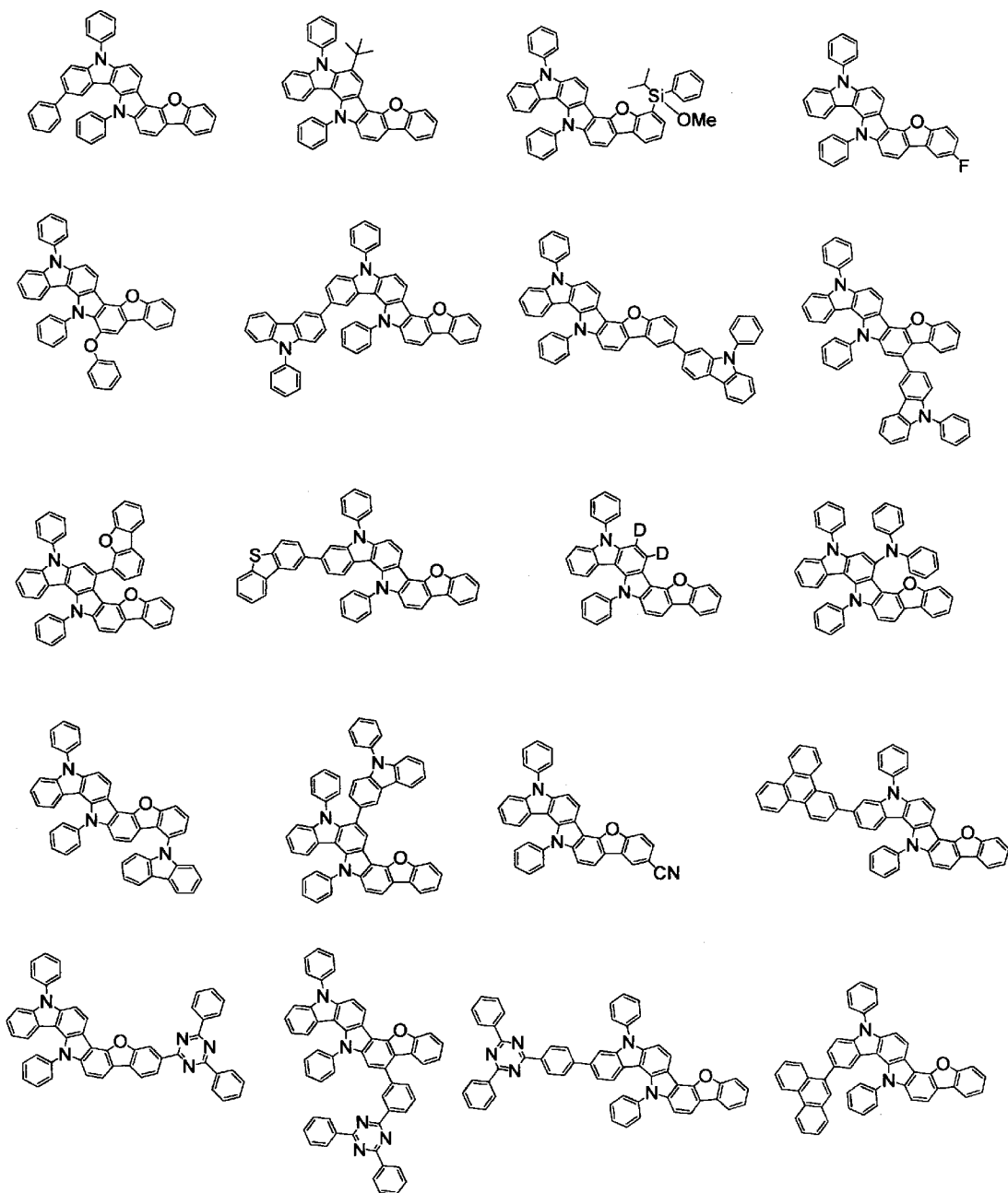
[0140]

[化32]



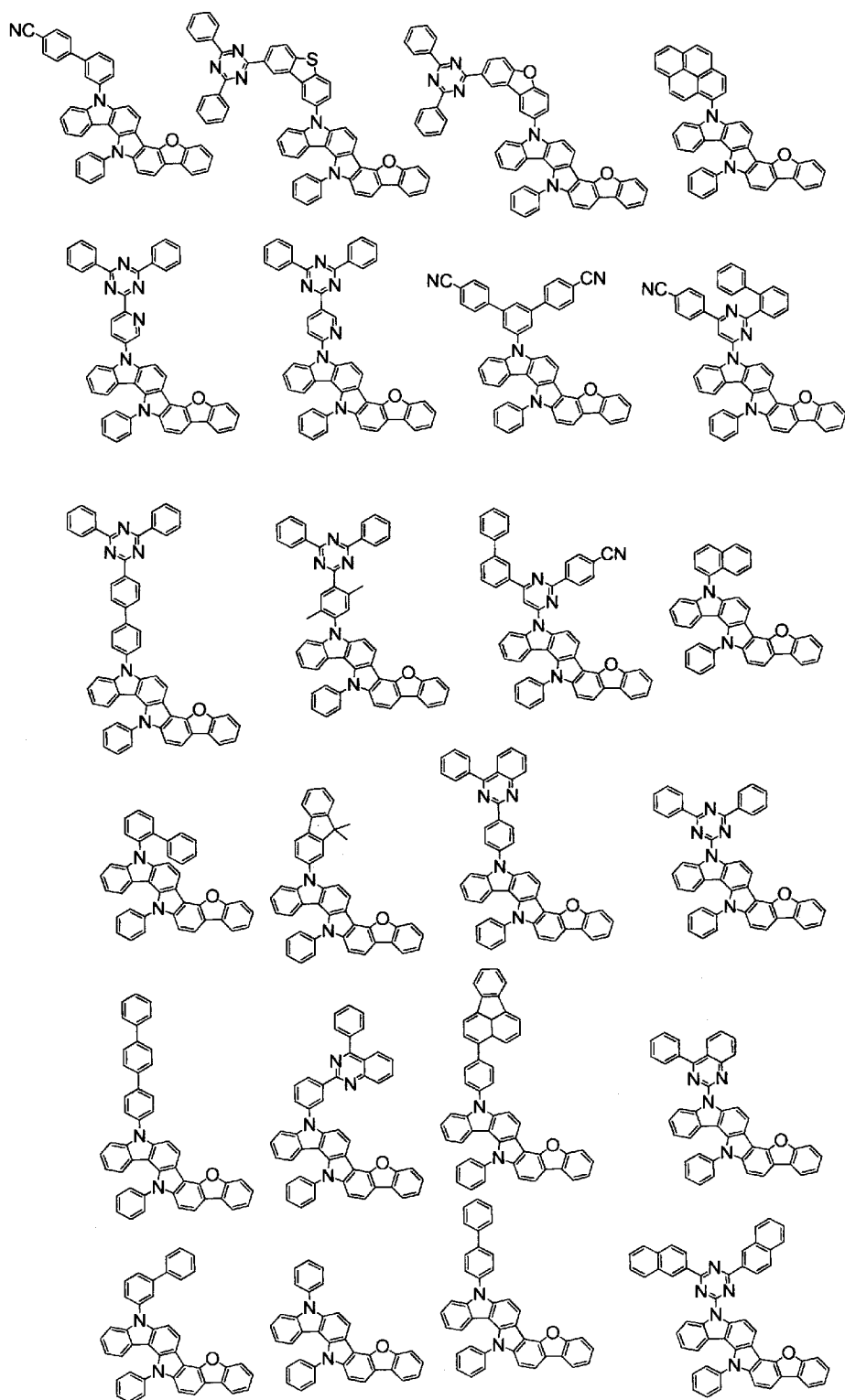
[0141]

[化33]



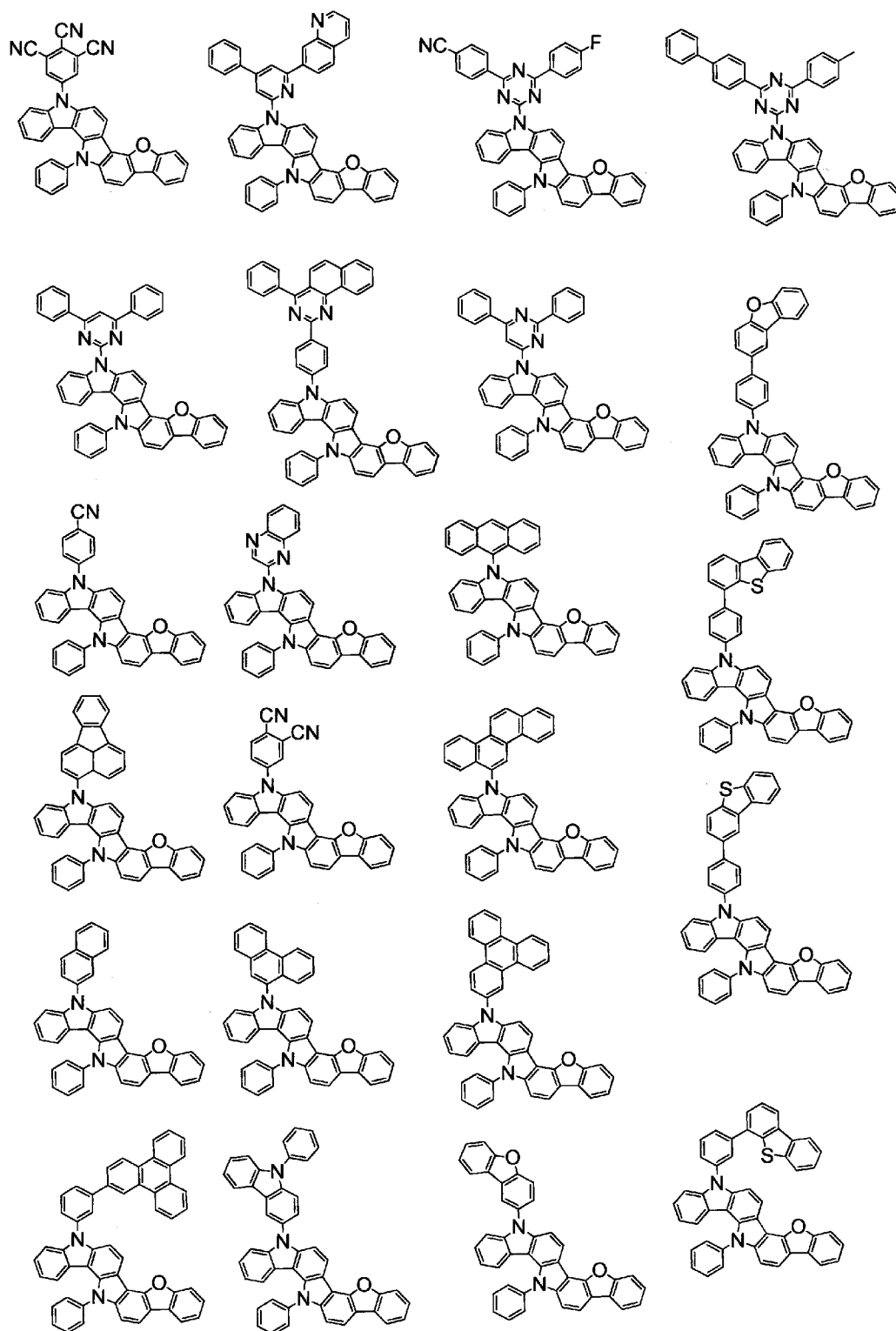
[0142]

[化34]



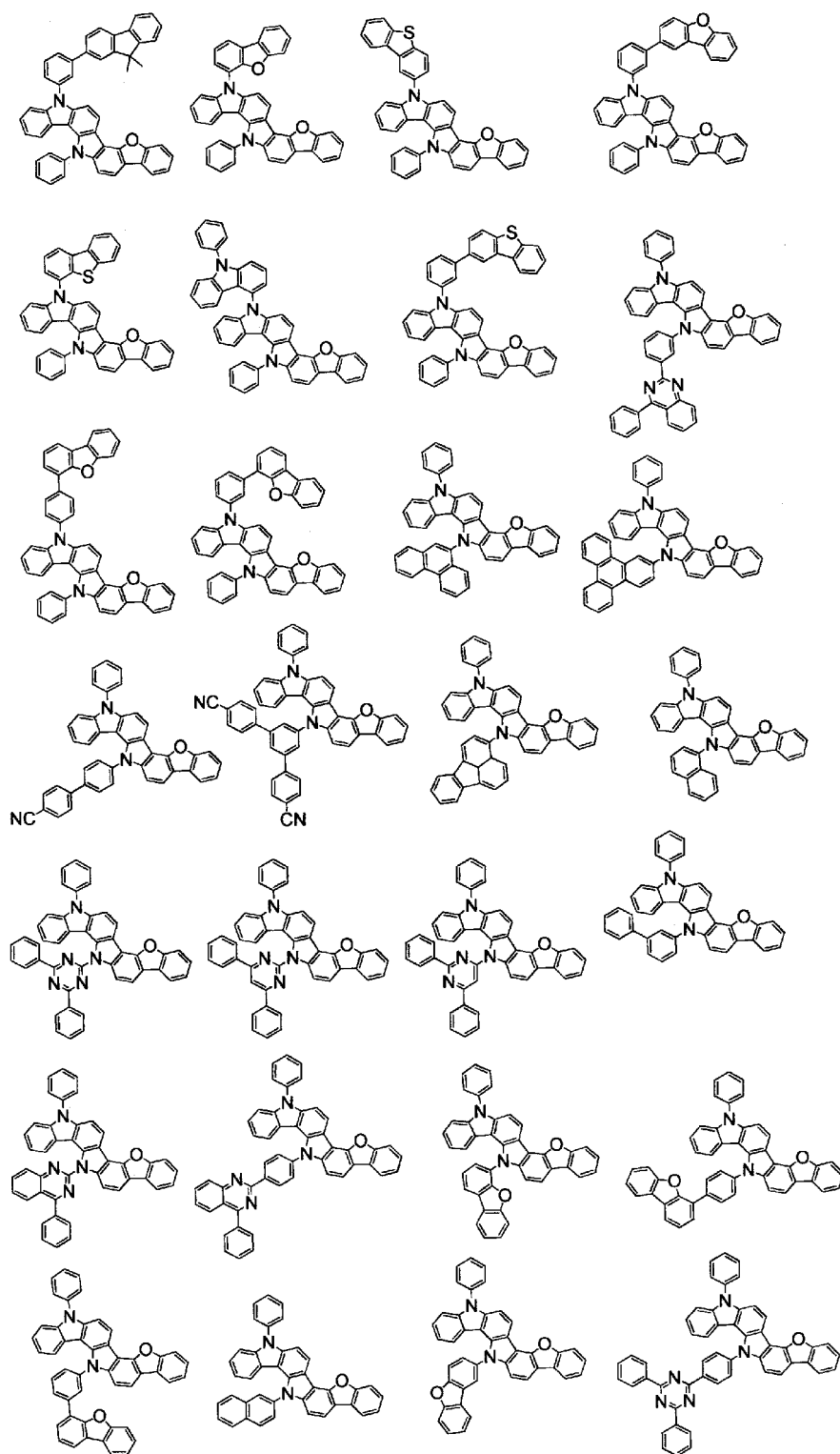
[0143]

[化35]



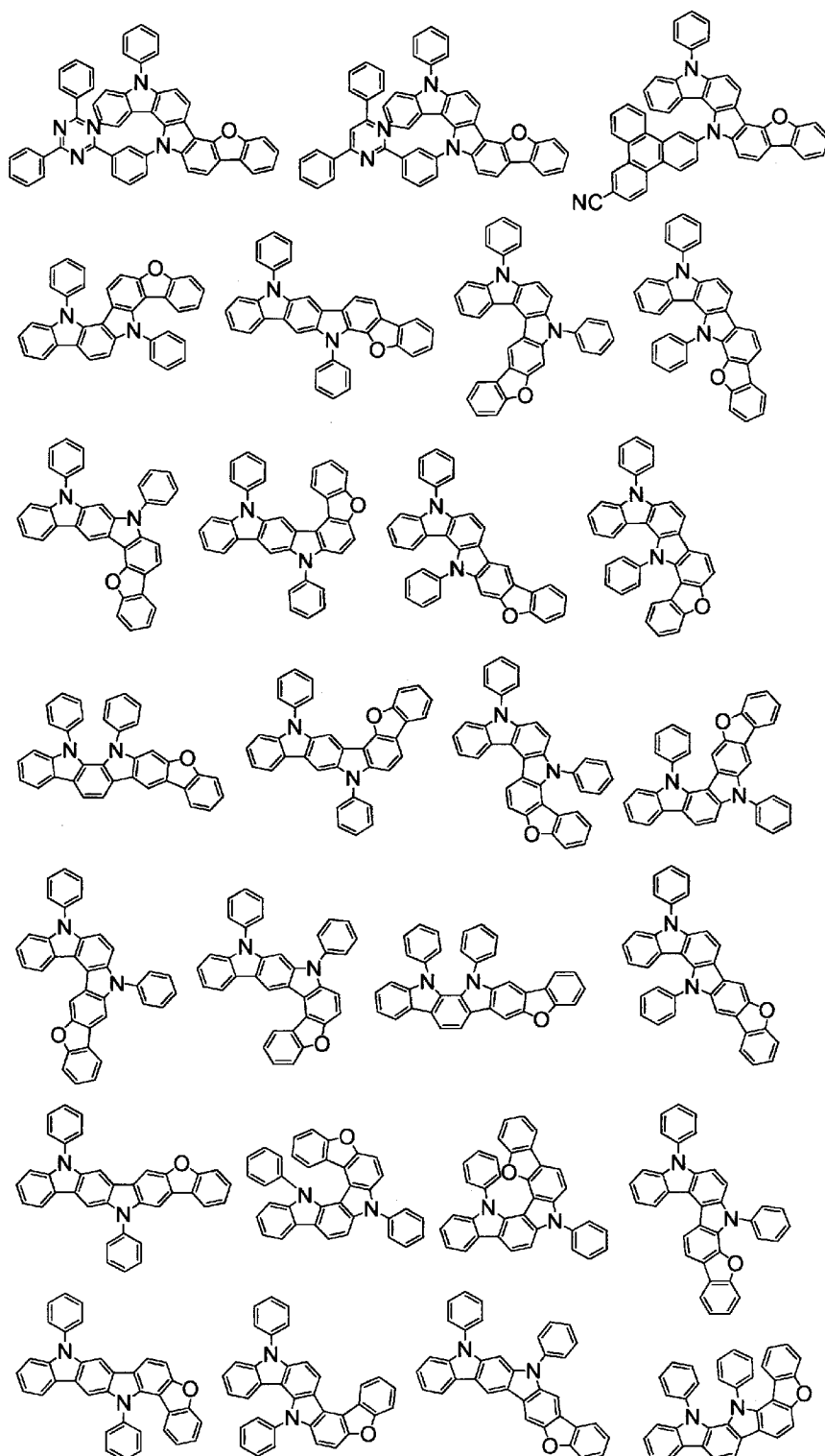
[0144]

[化36]



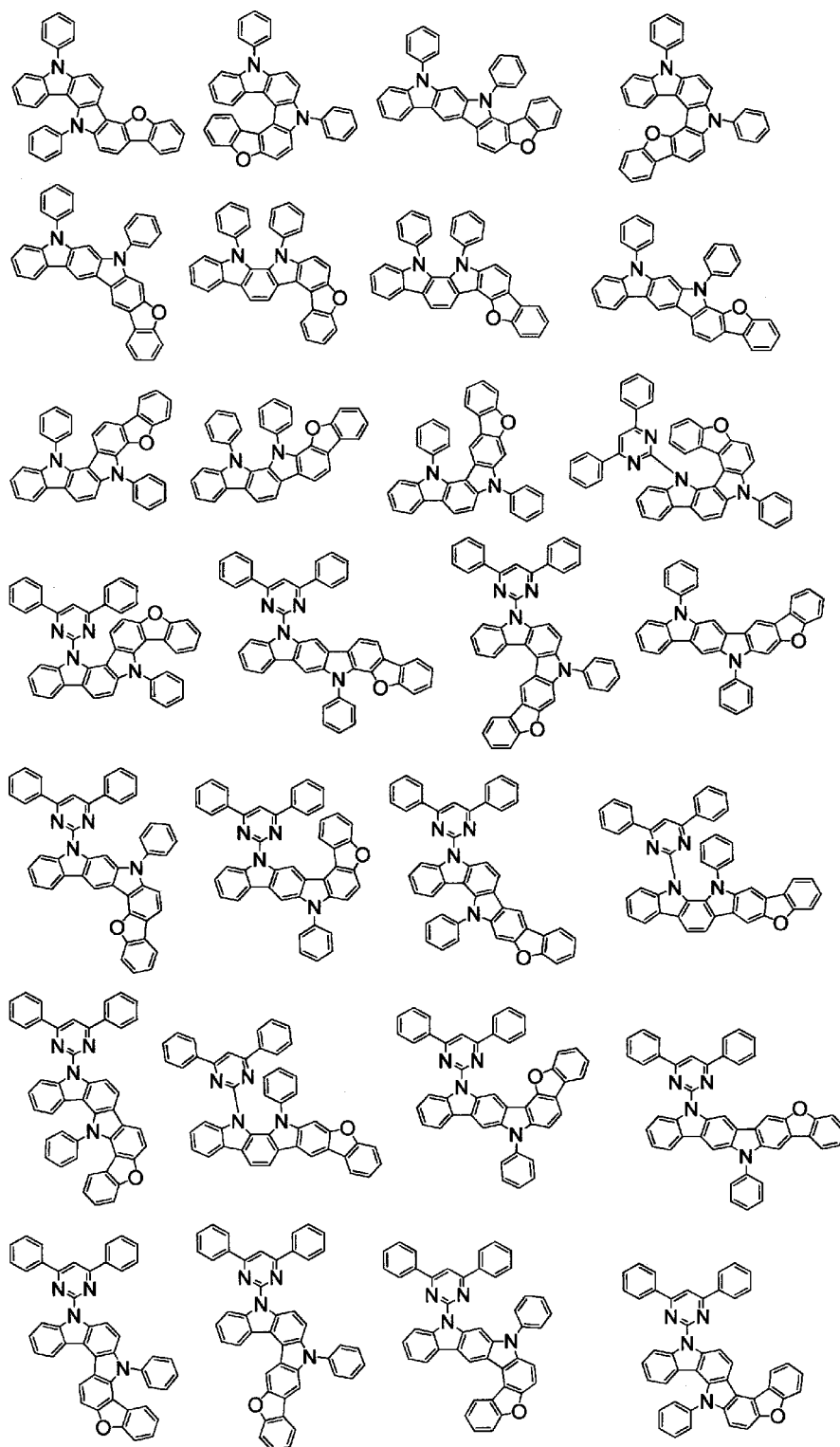
[0145]

[化37]



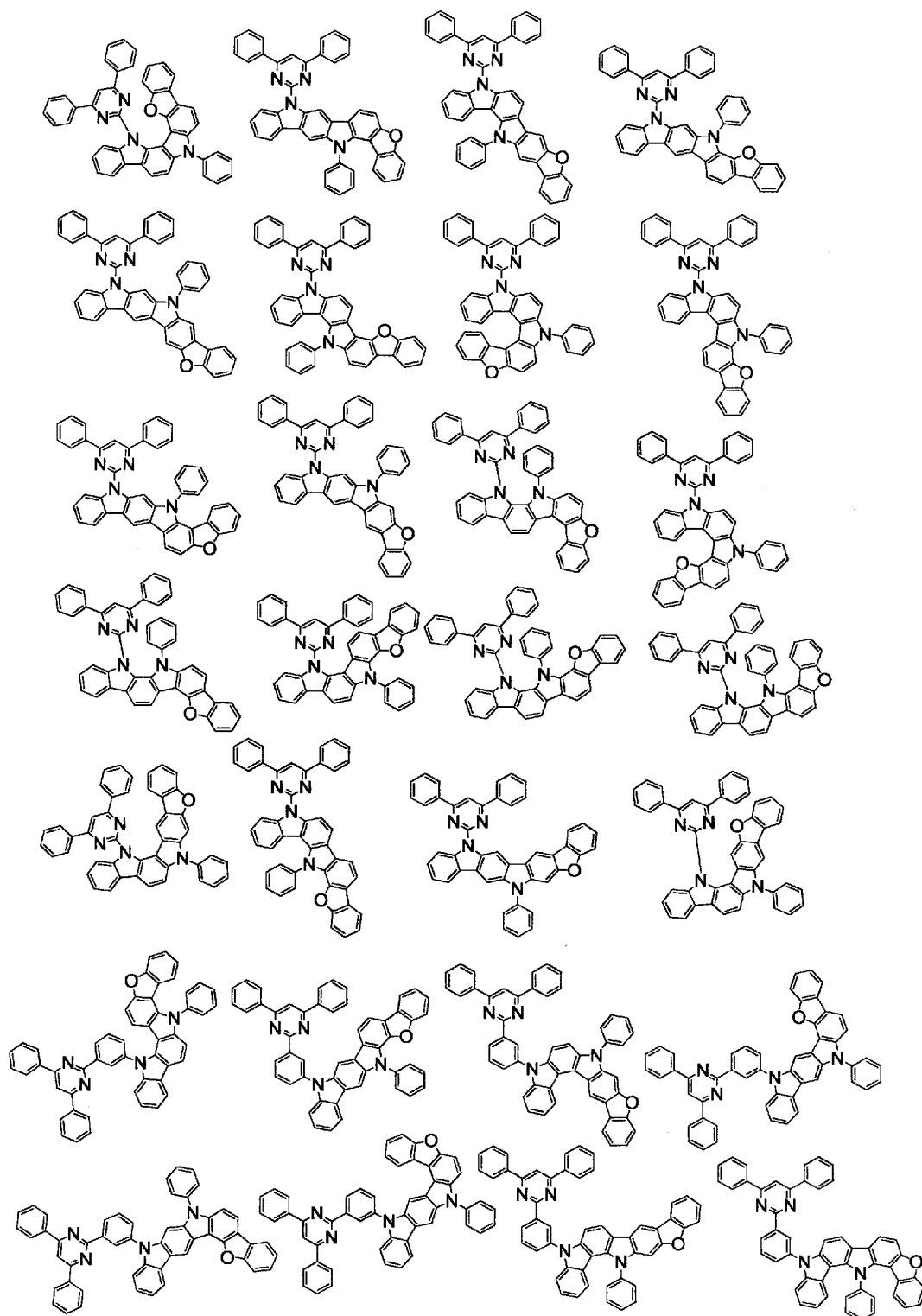
[0146]

[化38]



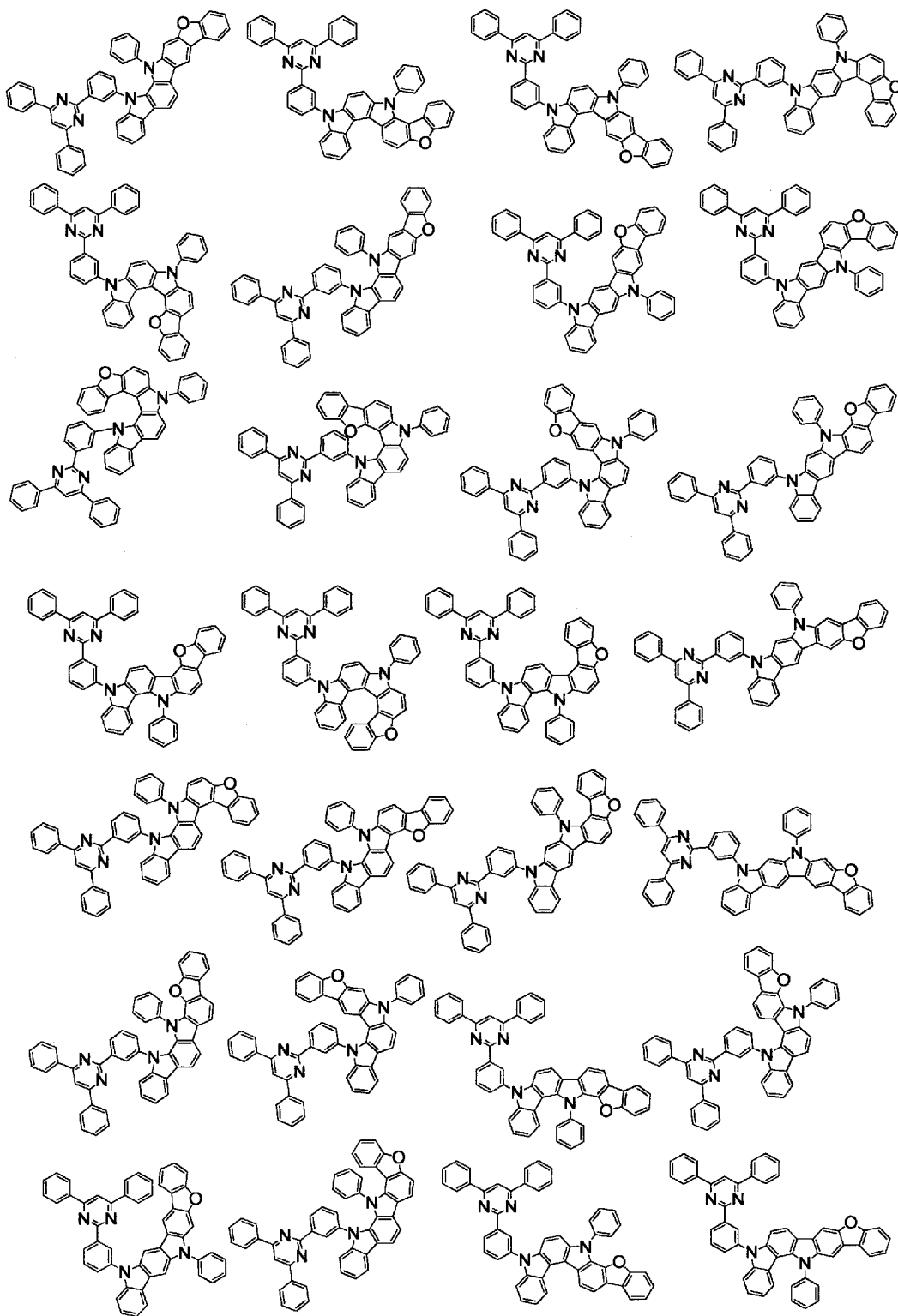
[0147]

[化39]



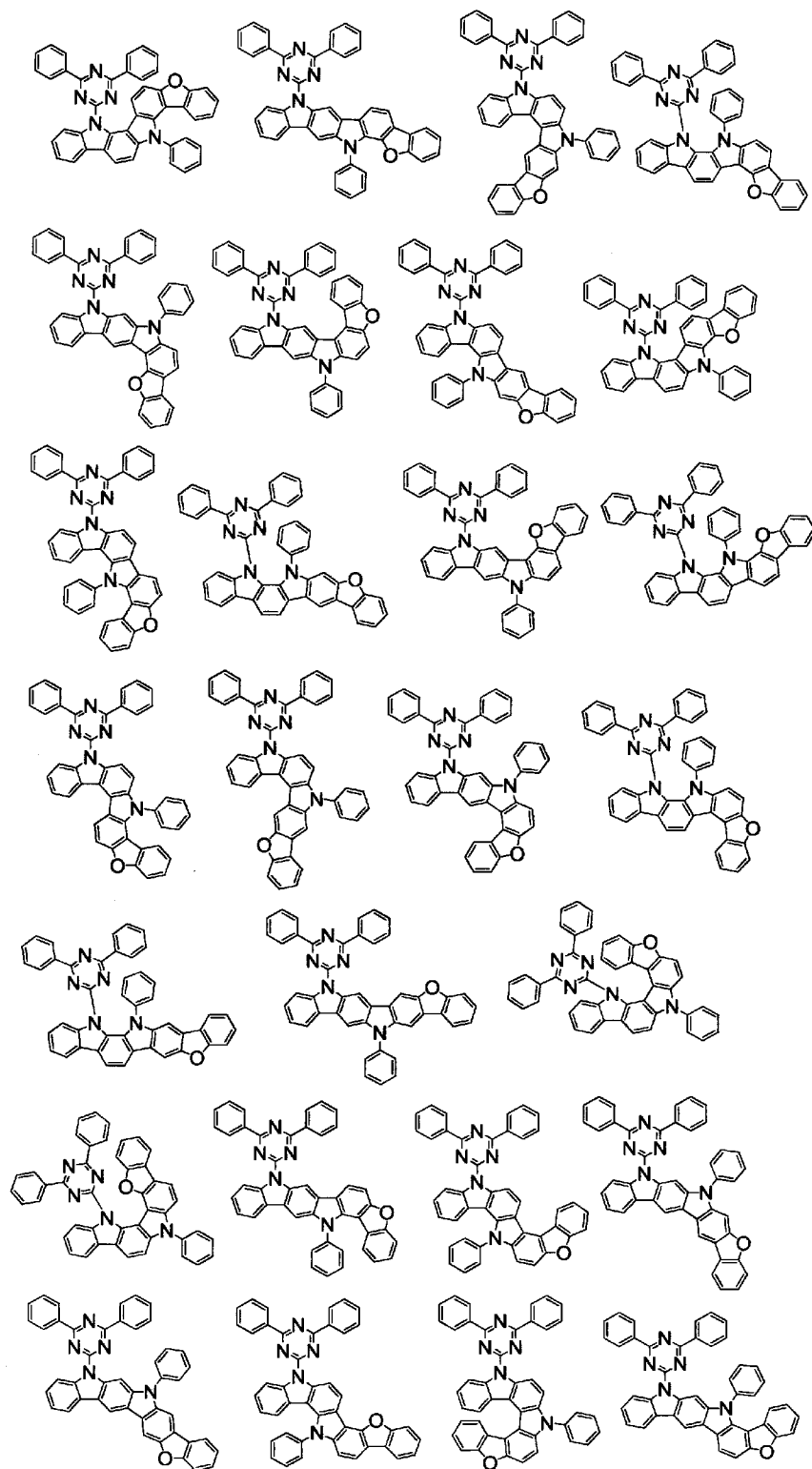
[0148]

[化40]



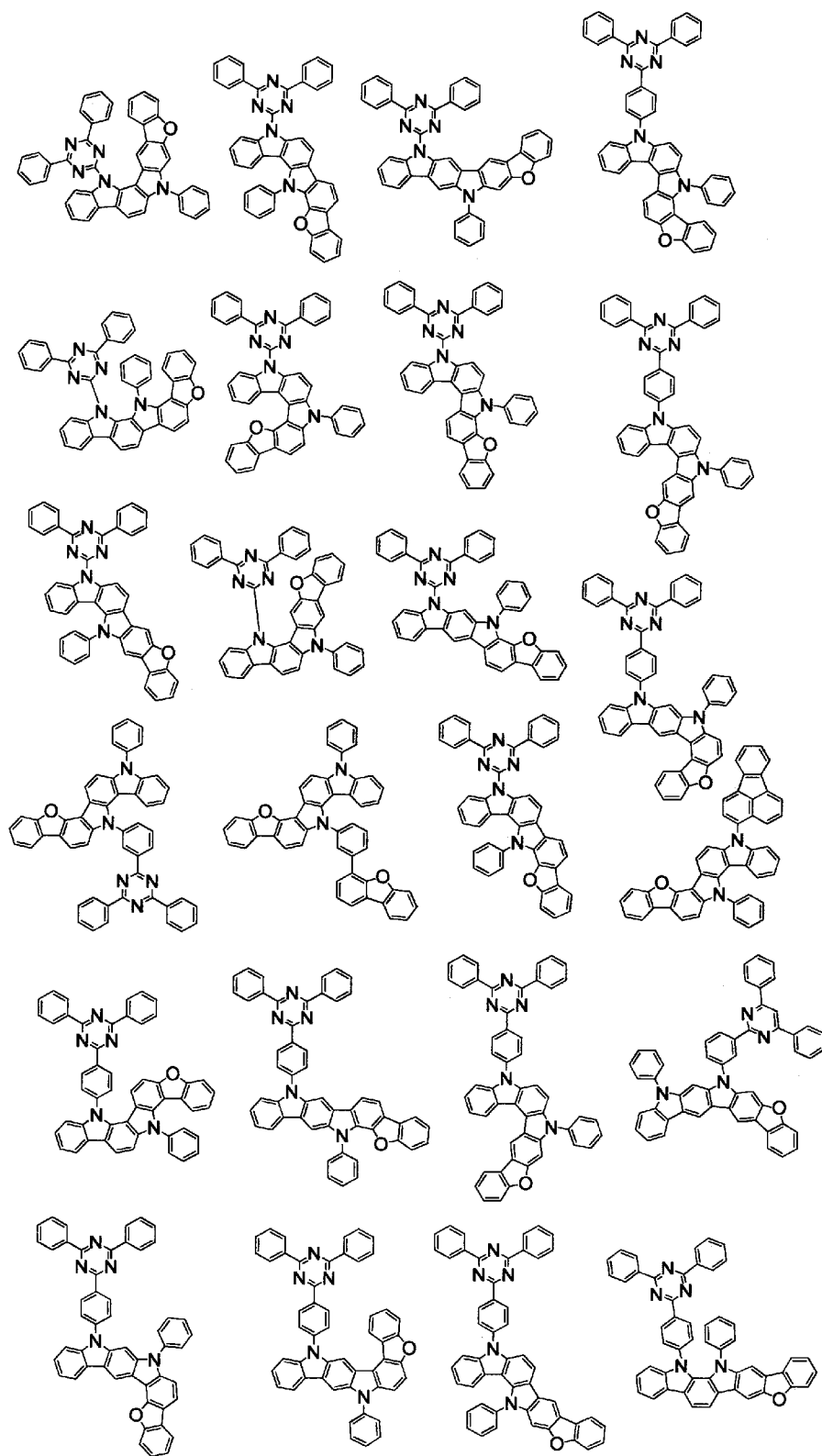
[0149]

[化41]



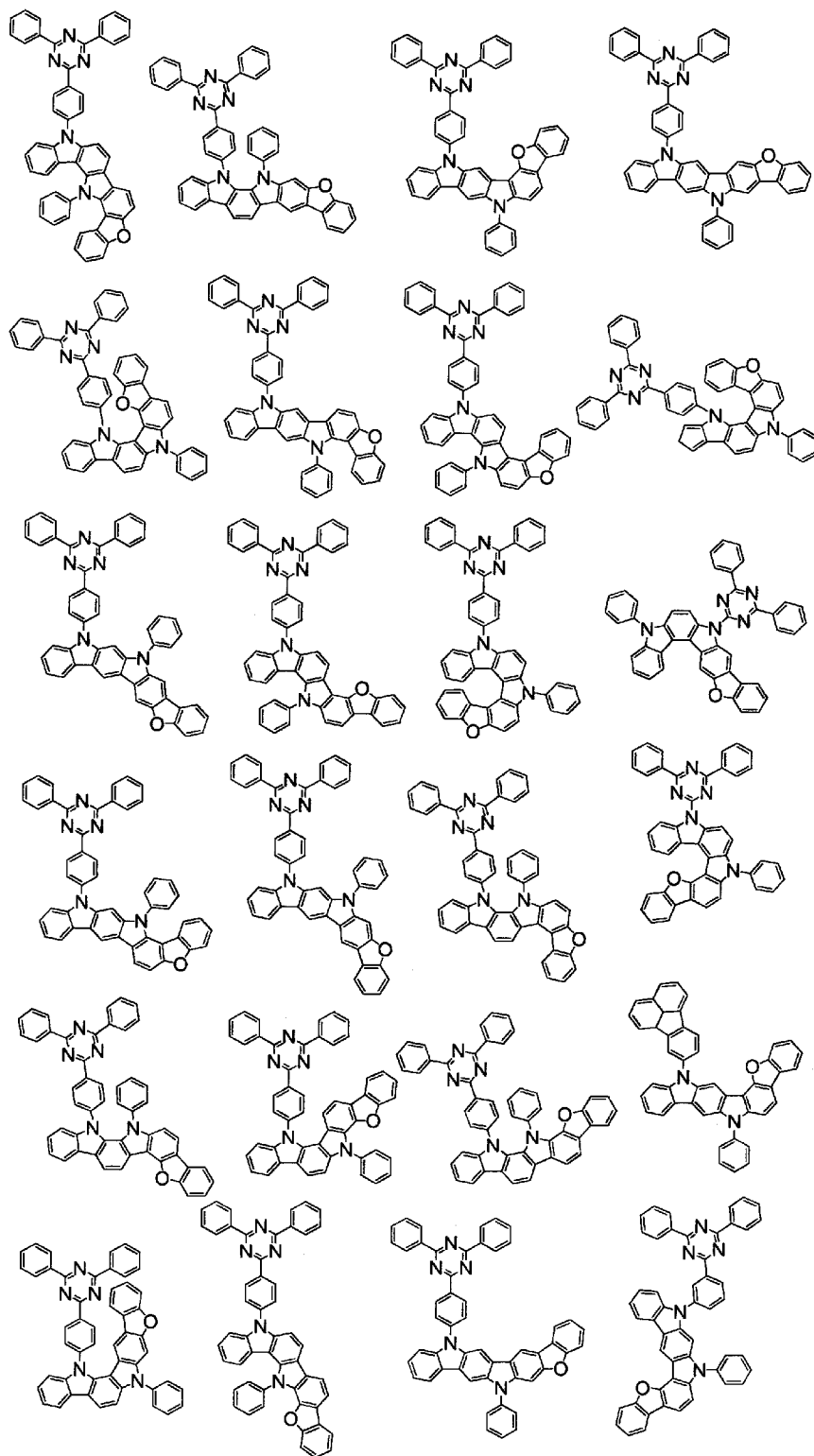
[0150]

[化42]



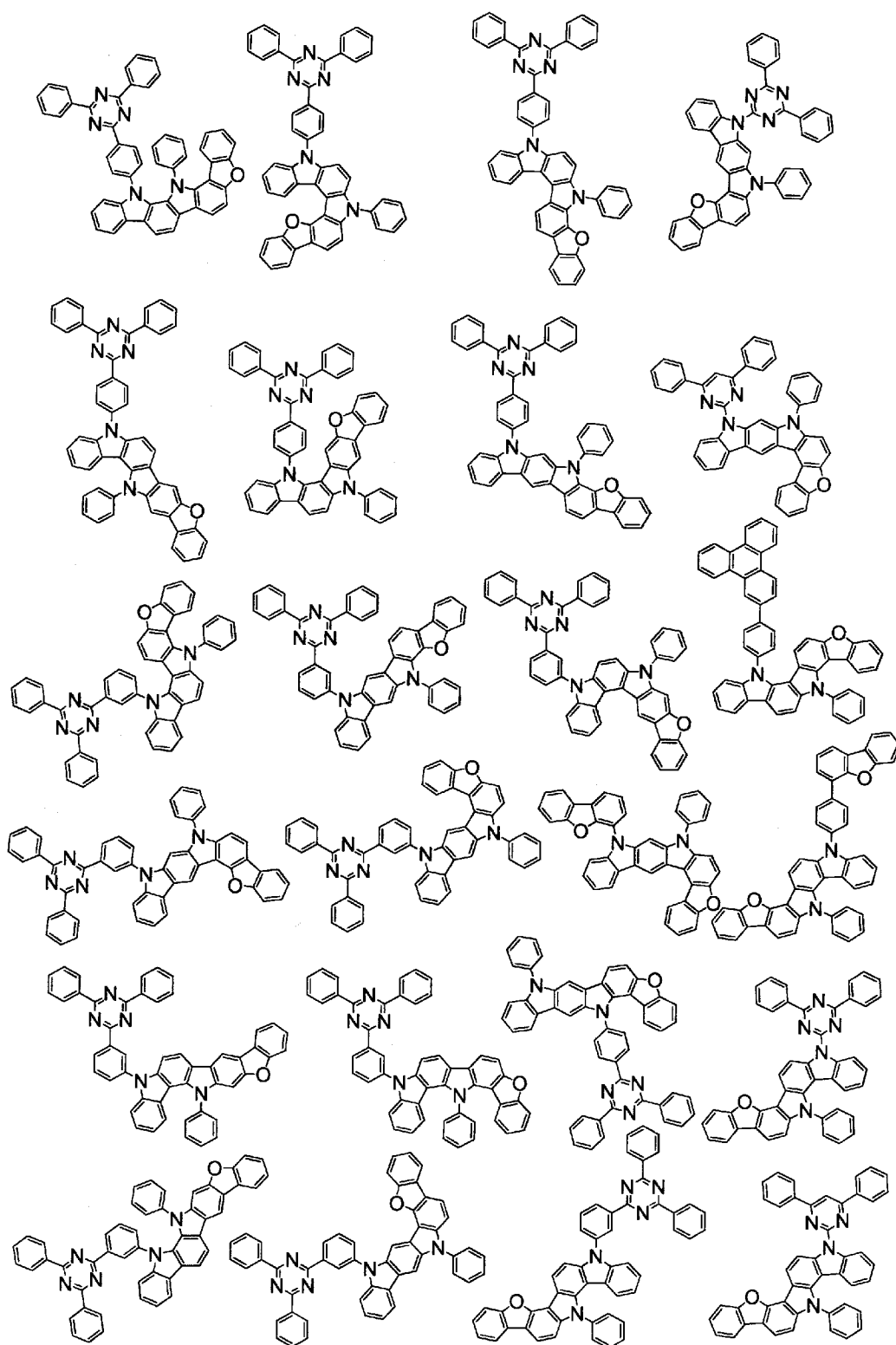
[0151]

[化43]



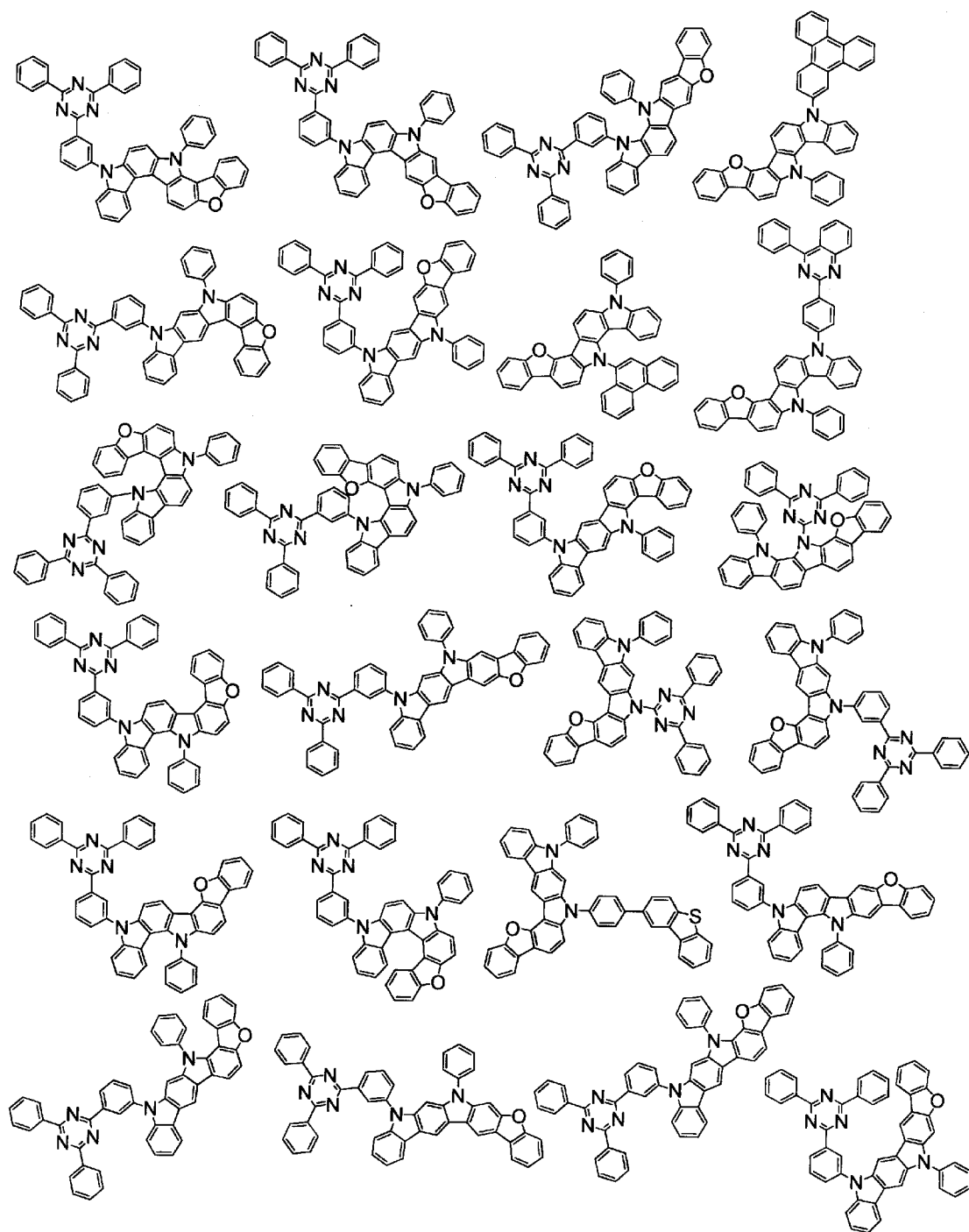
[0152]

[化44]



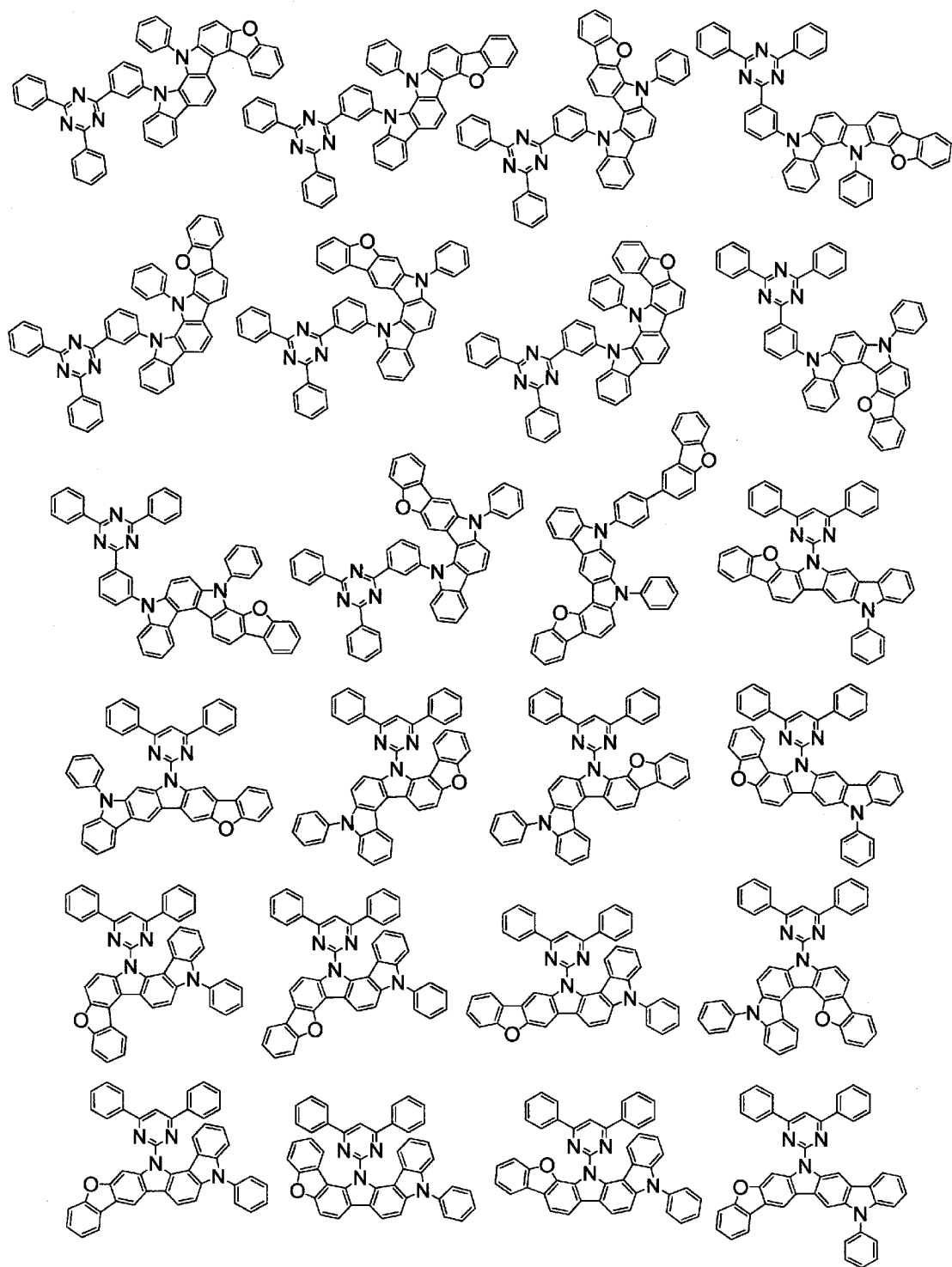
[0153]

[化45]



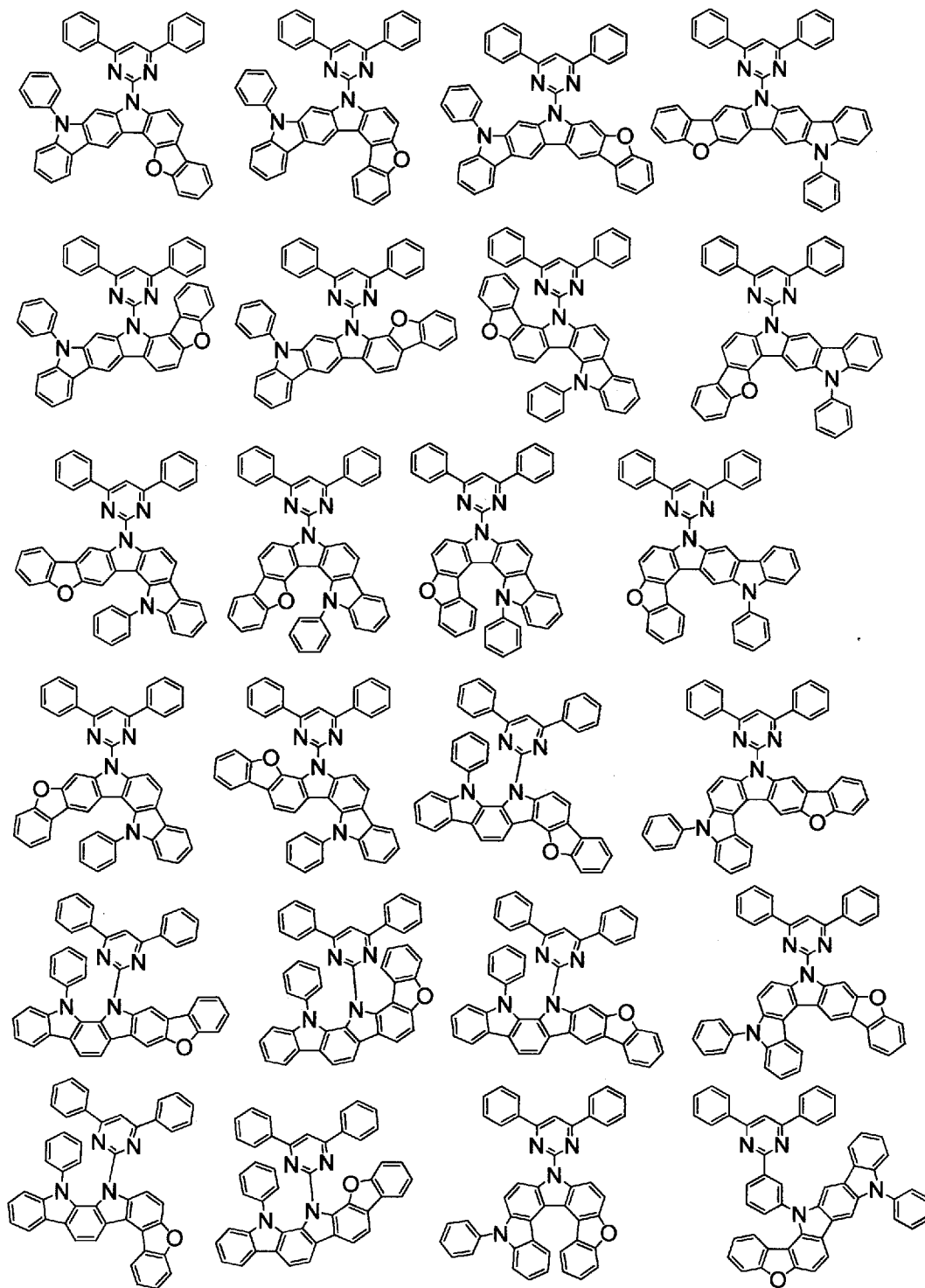
[0154]

[化46]



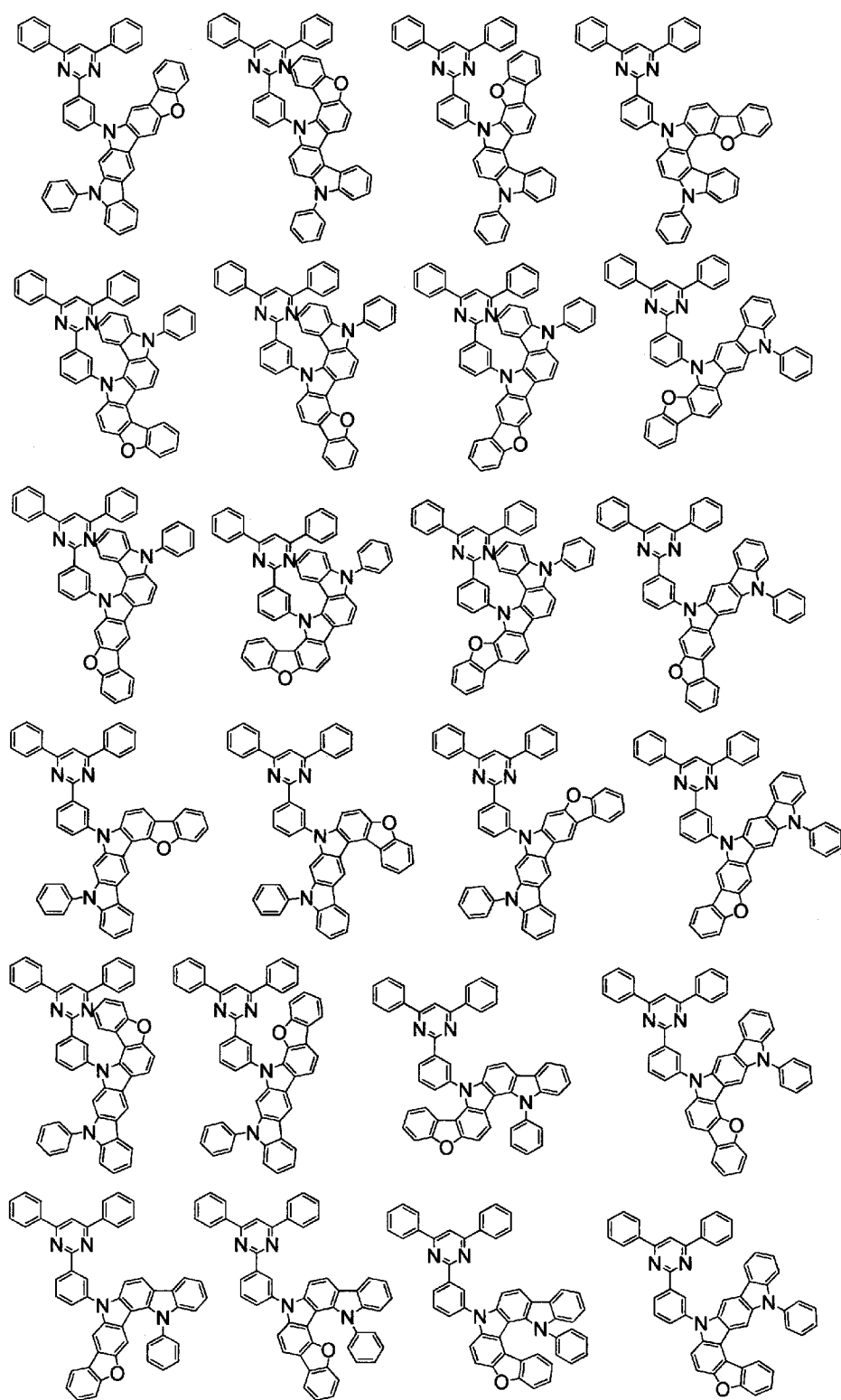
[0155]

[化47]



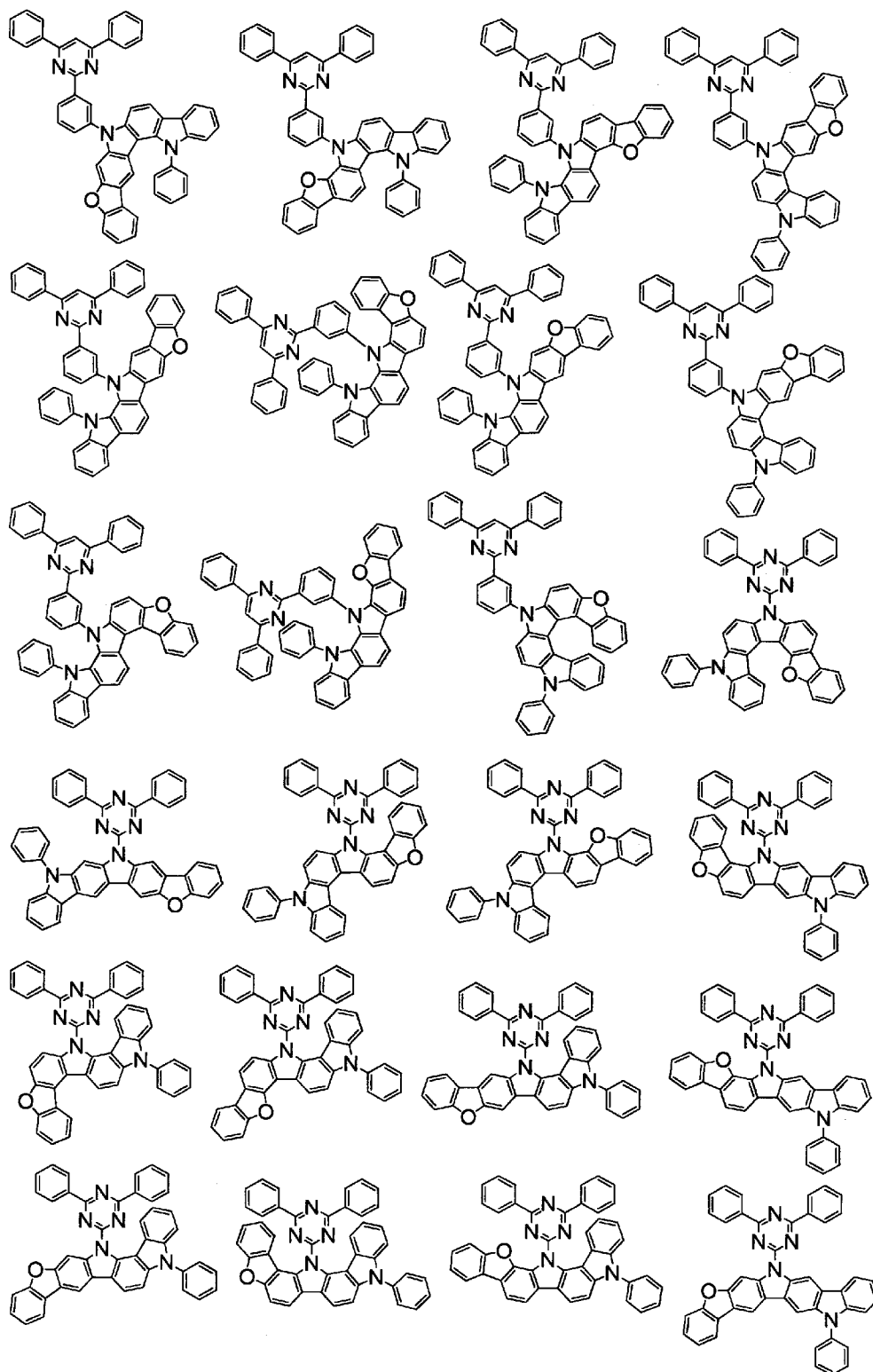
[0156]

[化48]



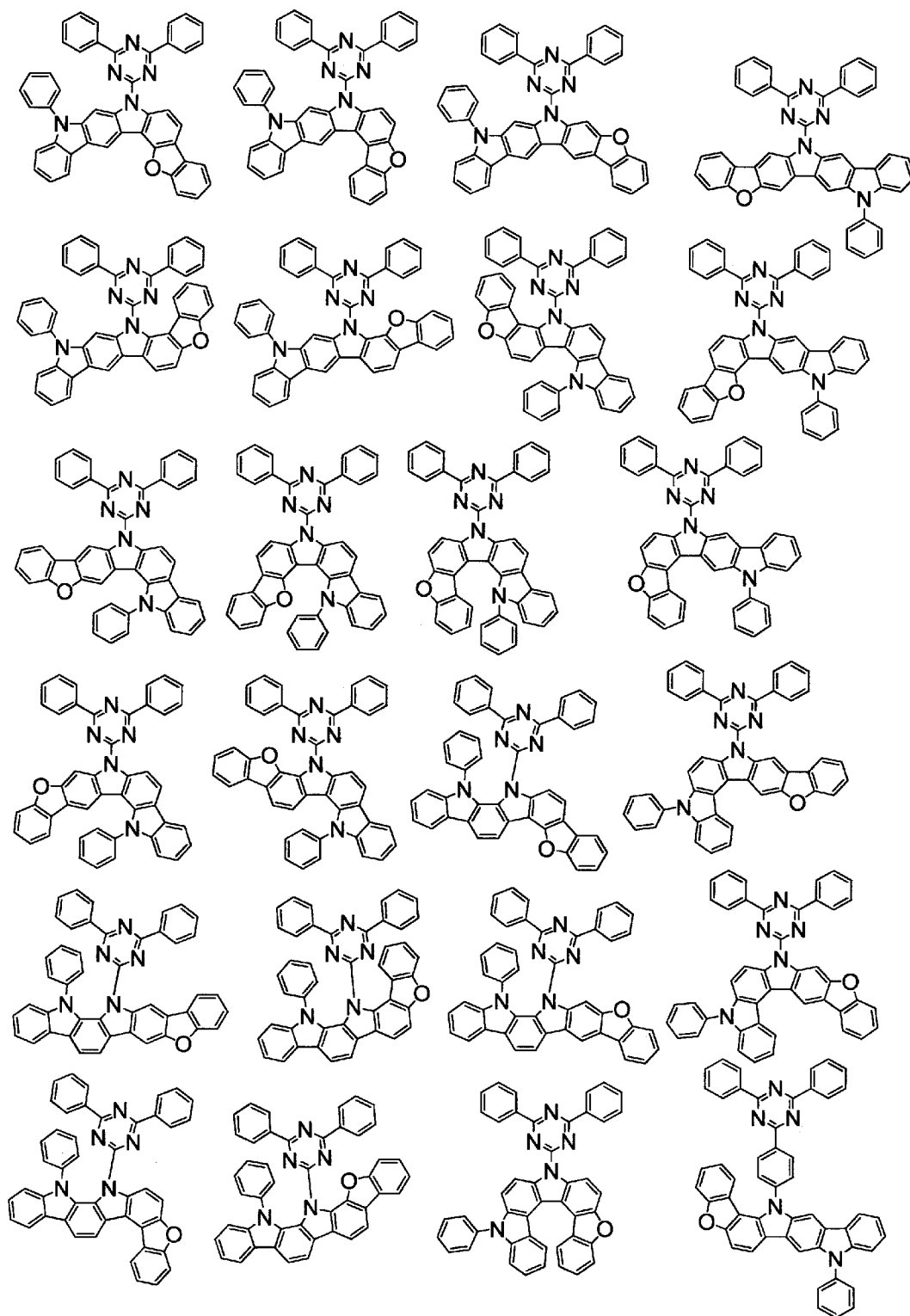
[0157]

[化49]



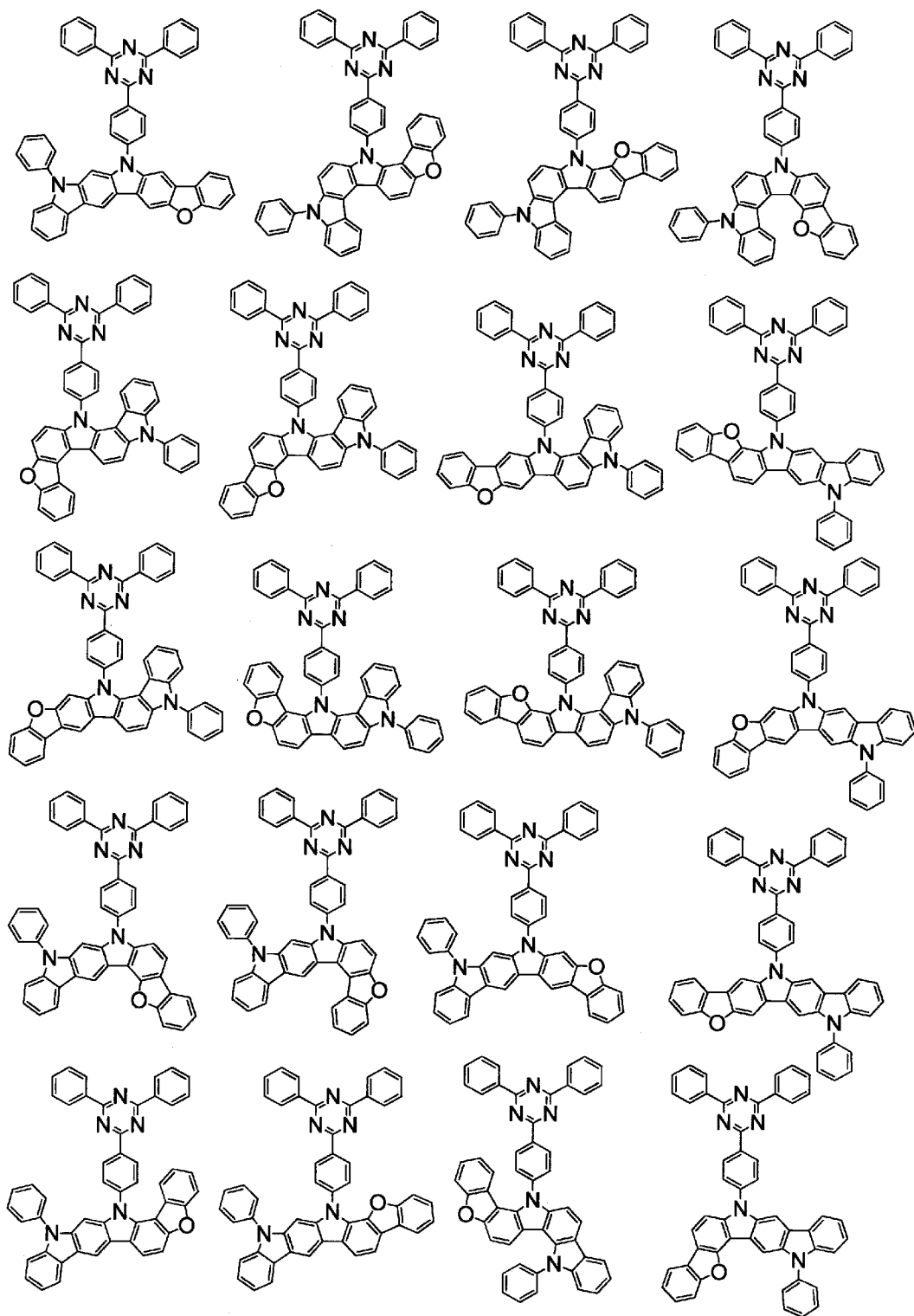
[0158]

[化50]



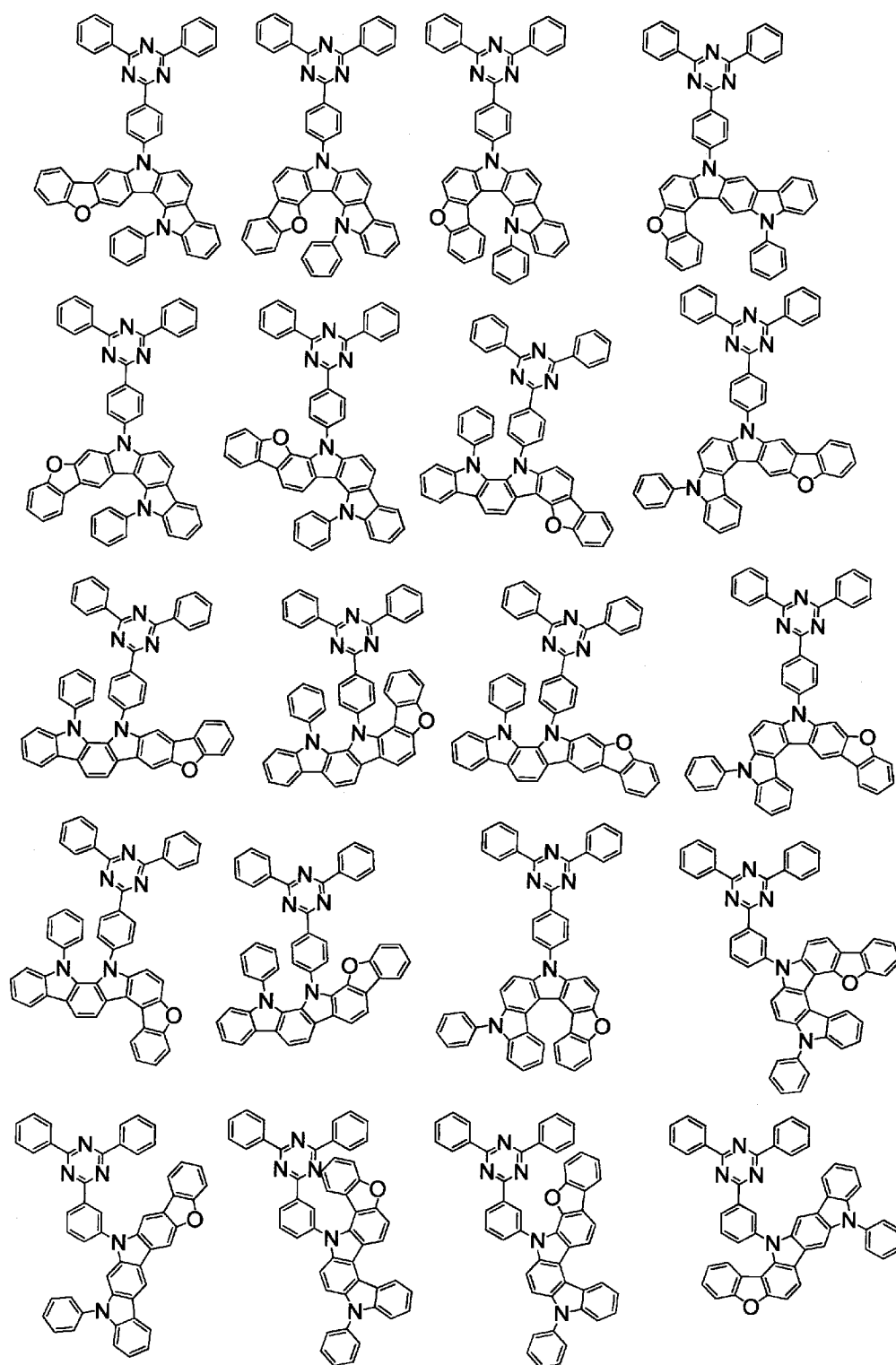
[0159]

[化51]



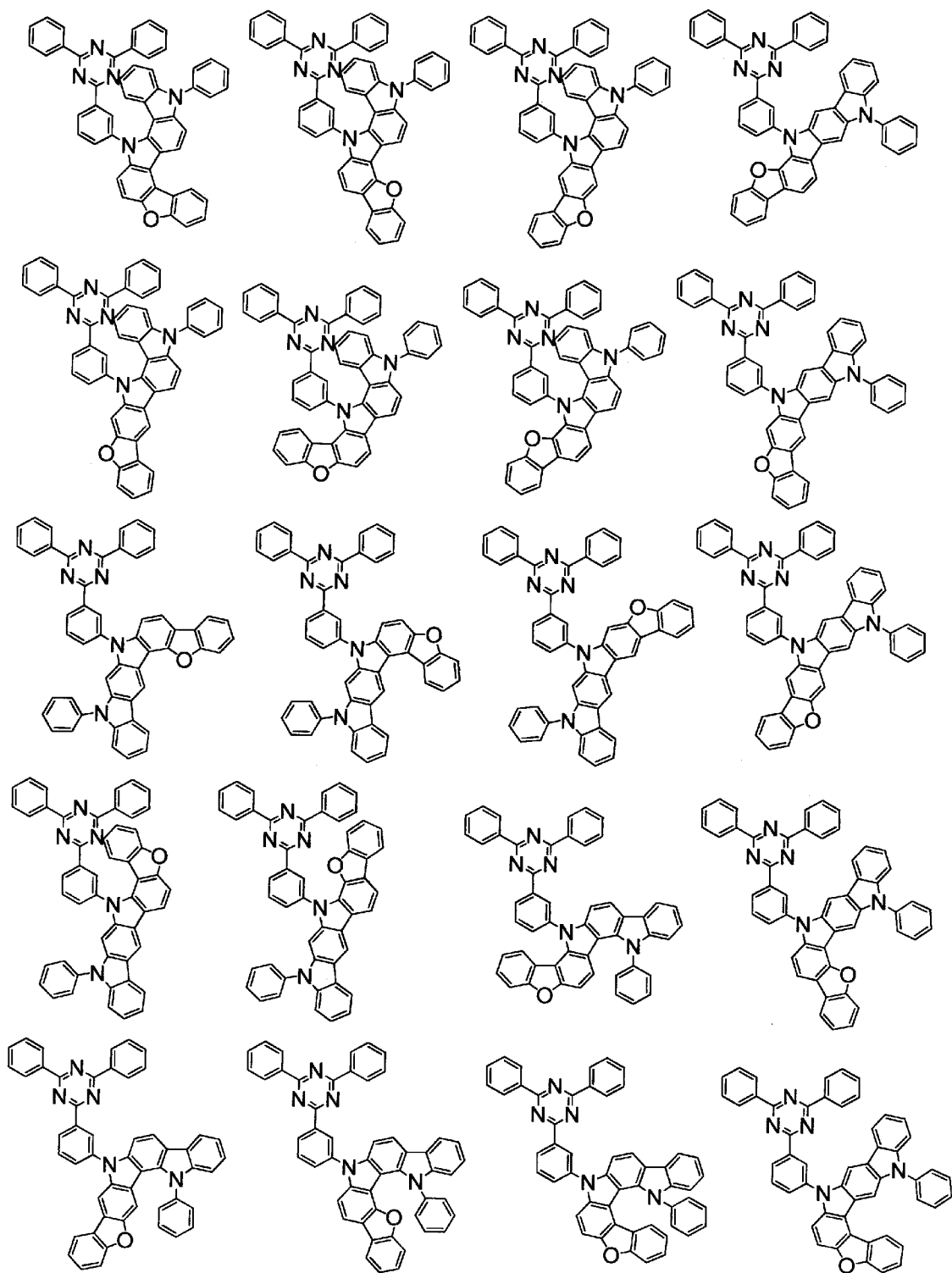
[0160]

[化52]



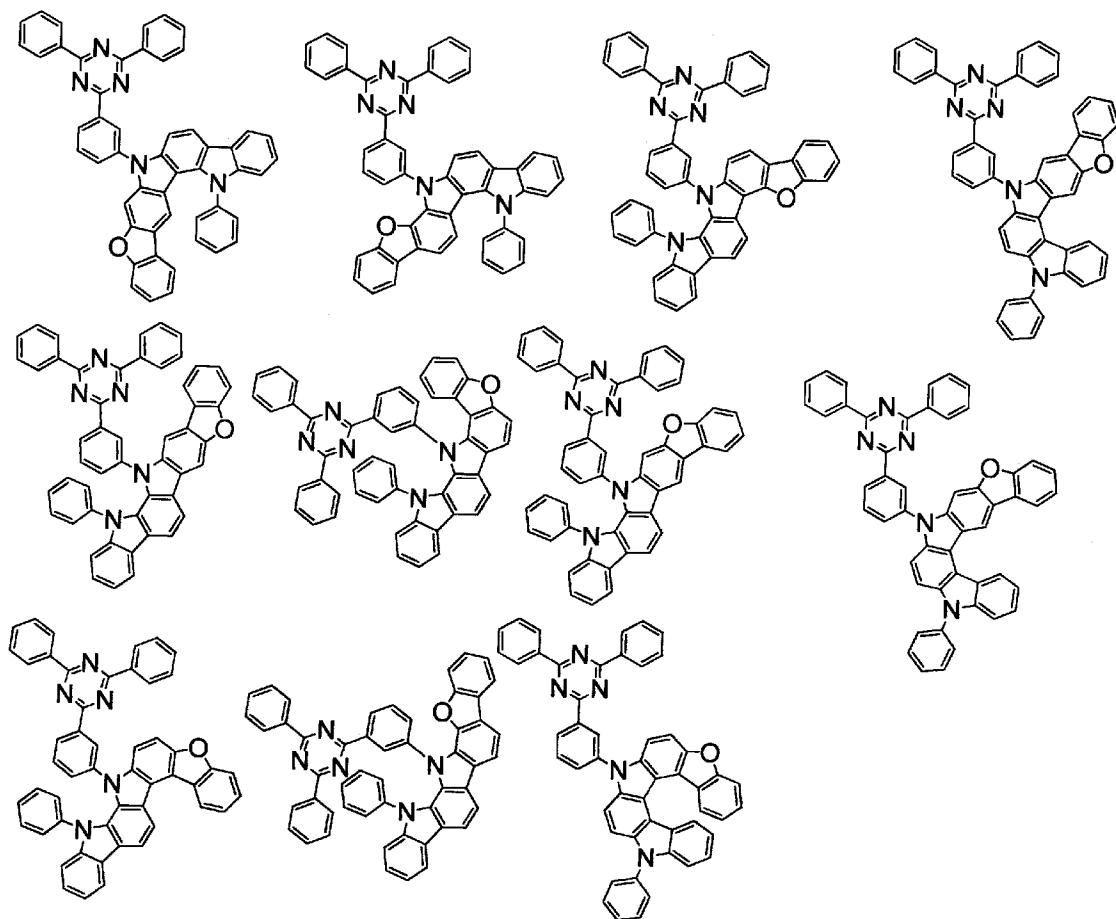
[0161]

[化53]



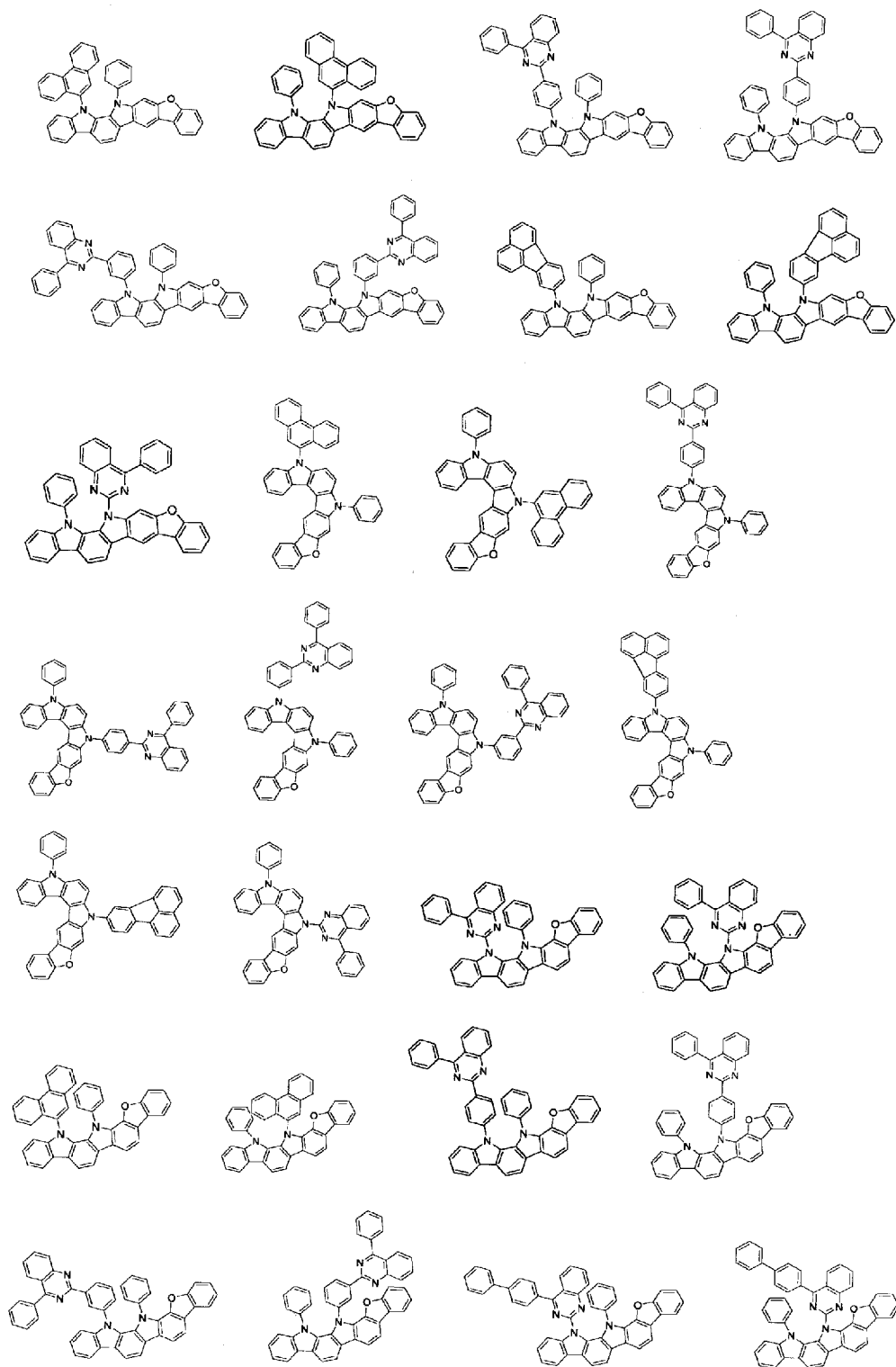
[0162]

[化54]



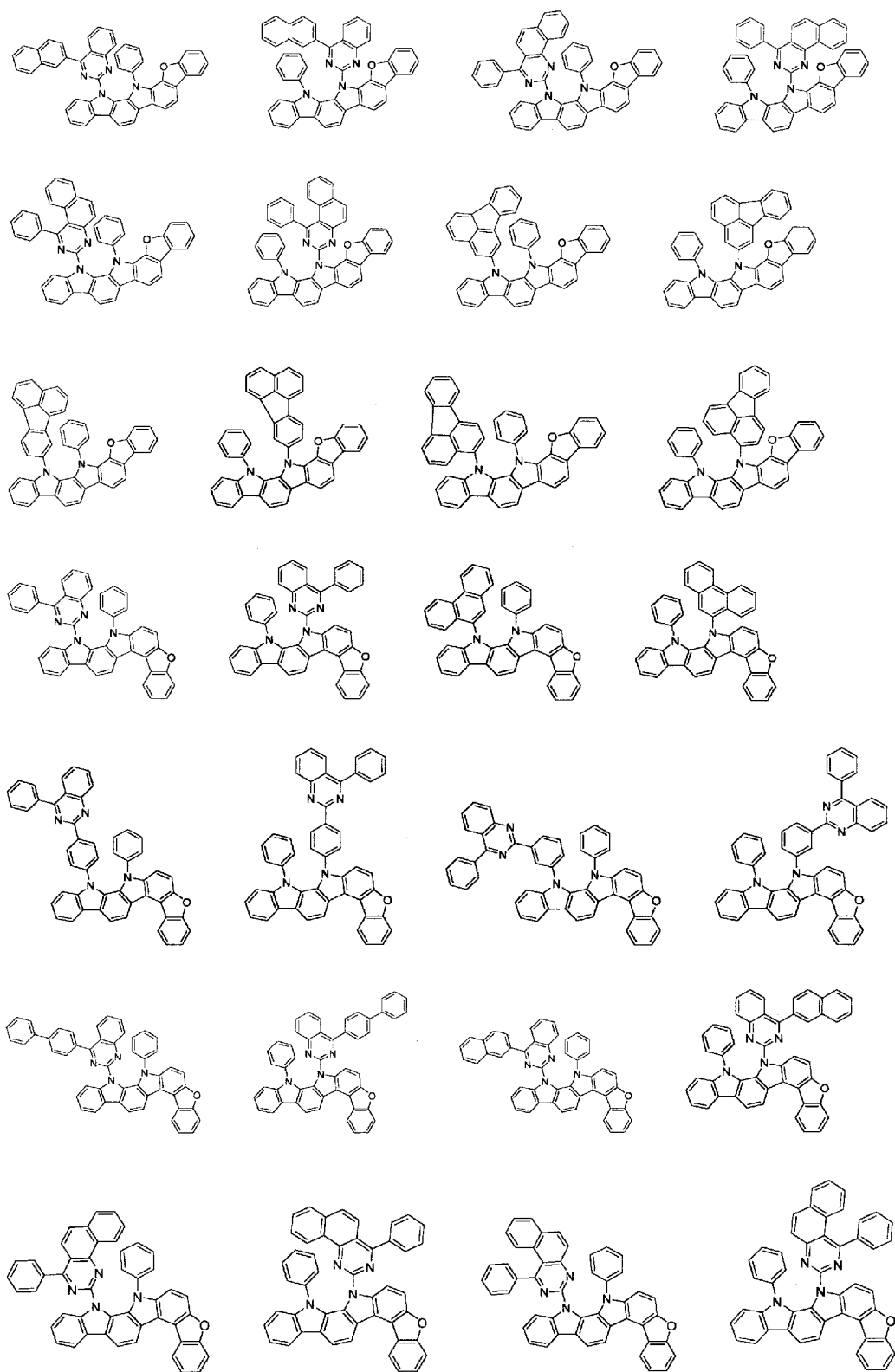
[0163]

[化55]



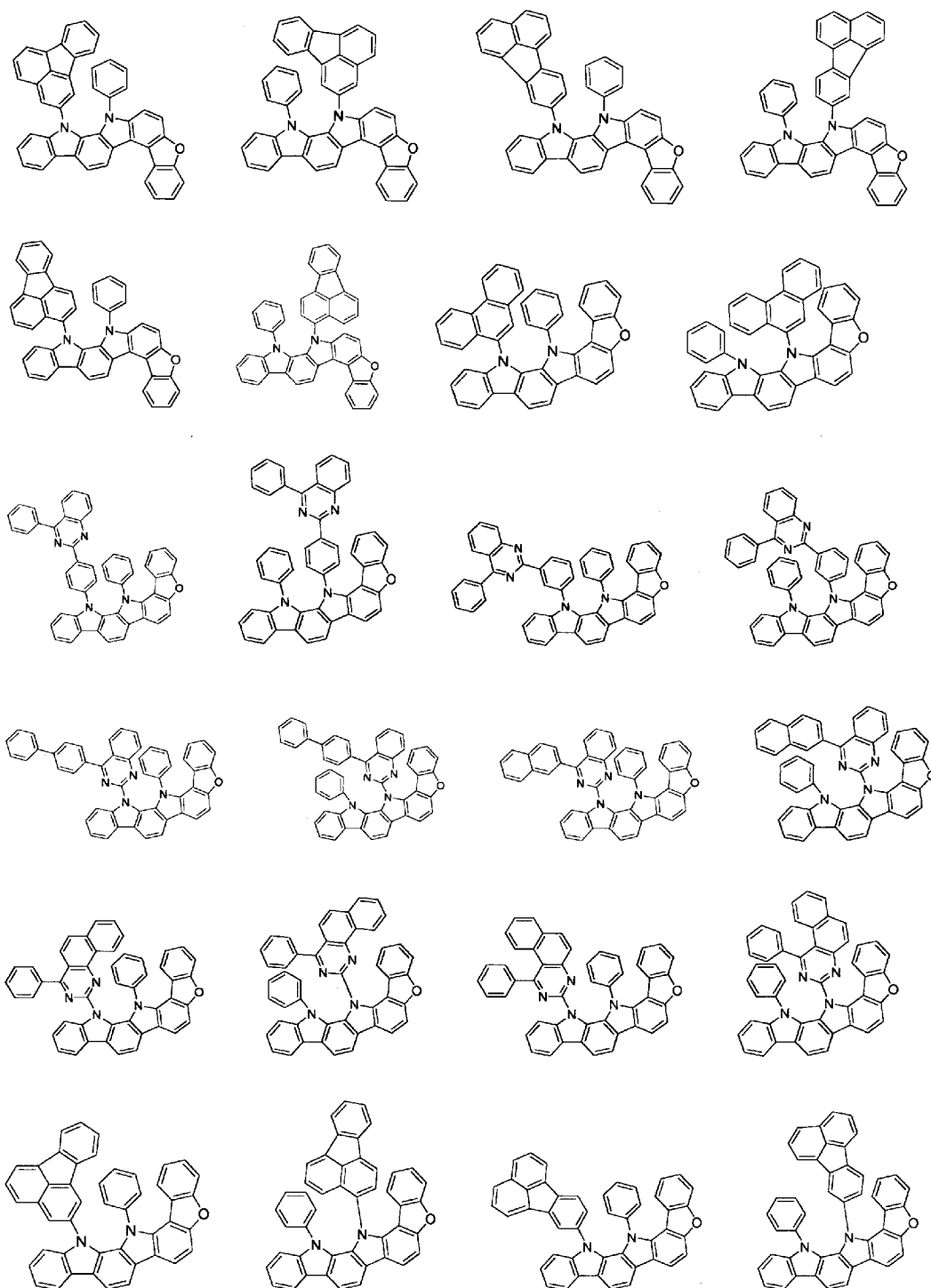
[0164]

[化56]



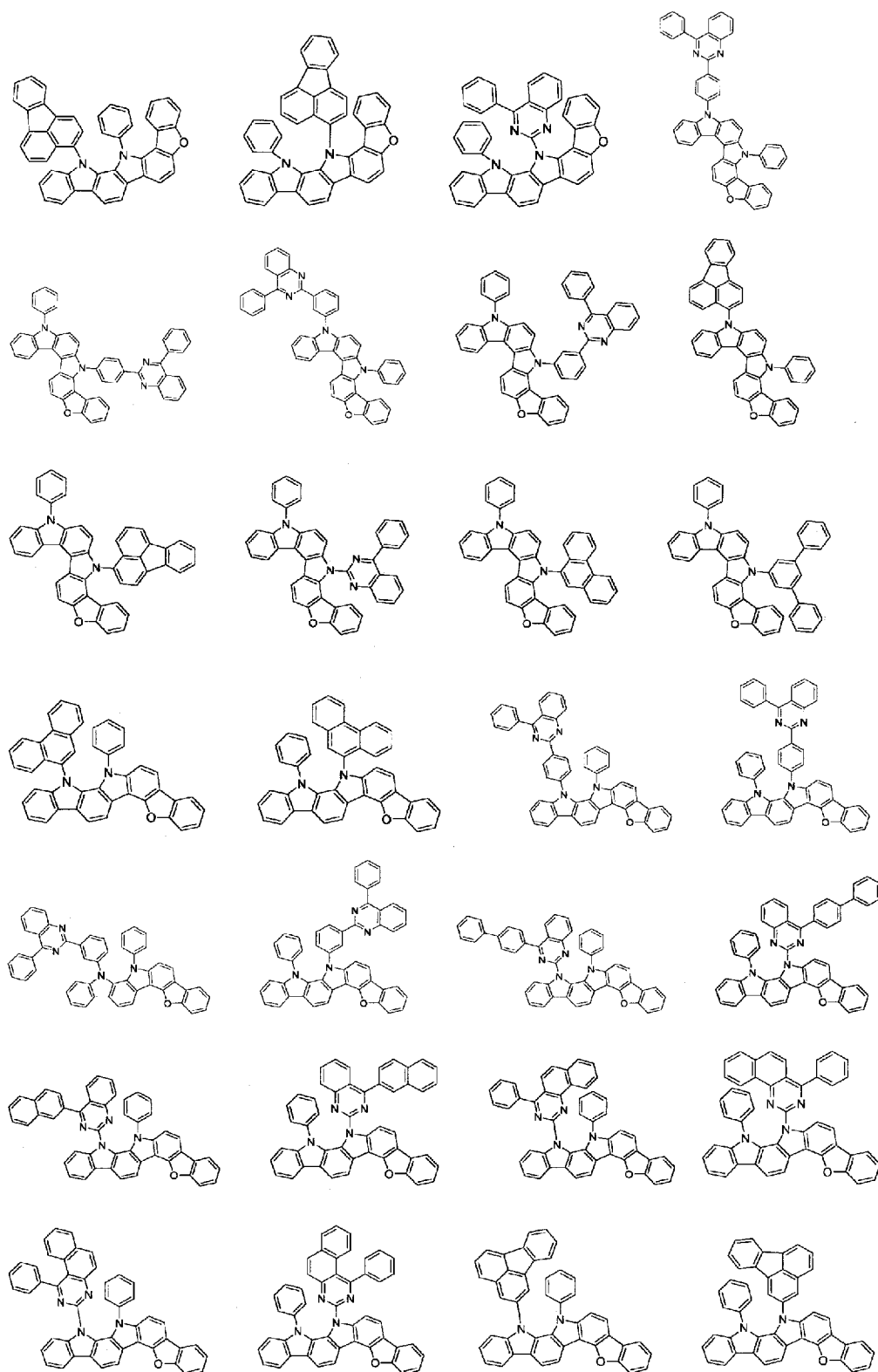
[0165]

[化57]



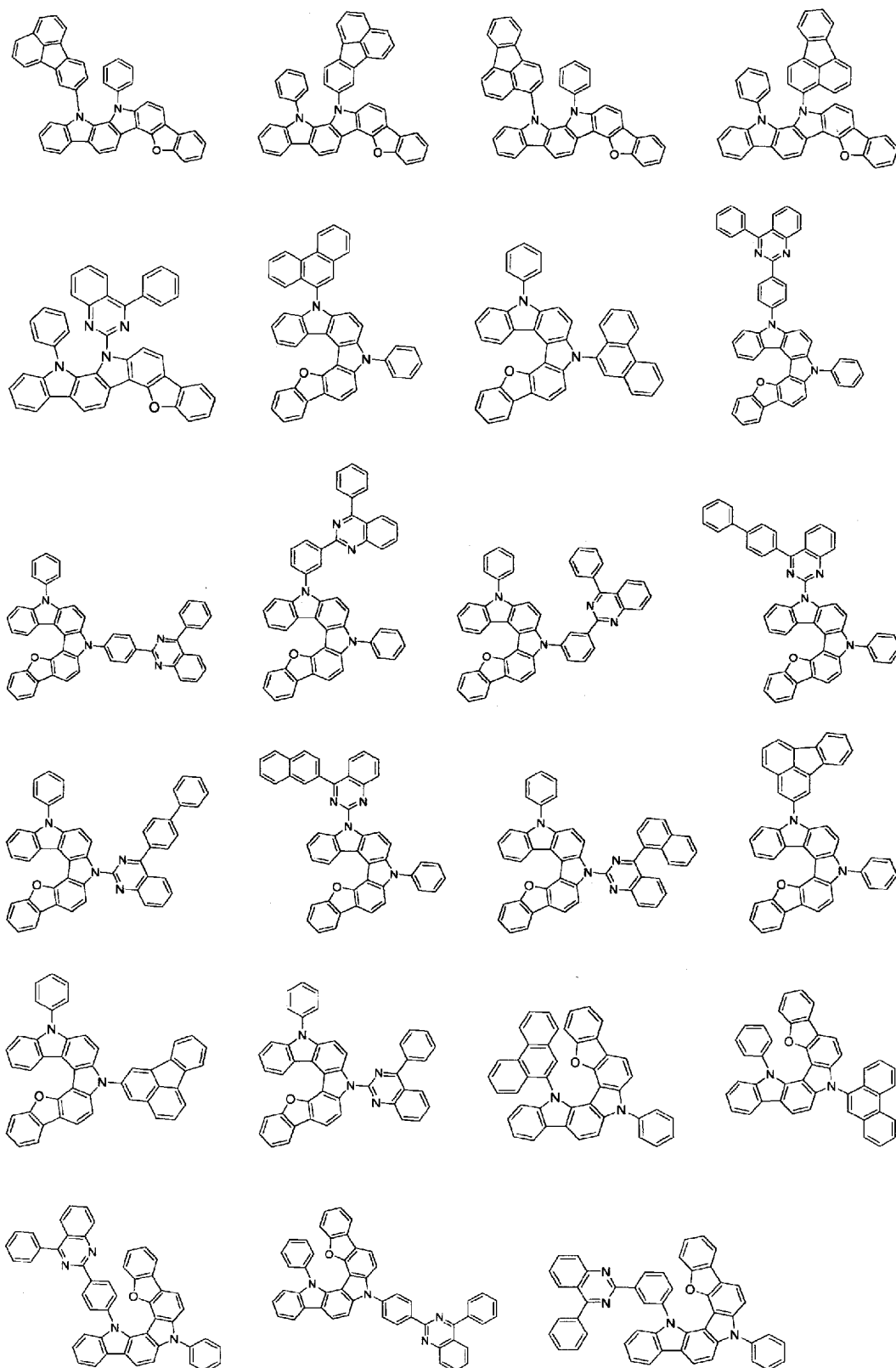
[0166]

[化58]



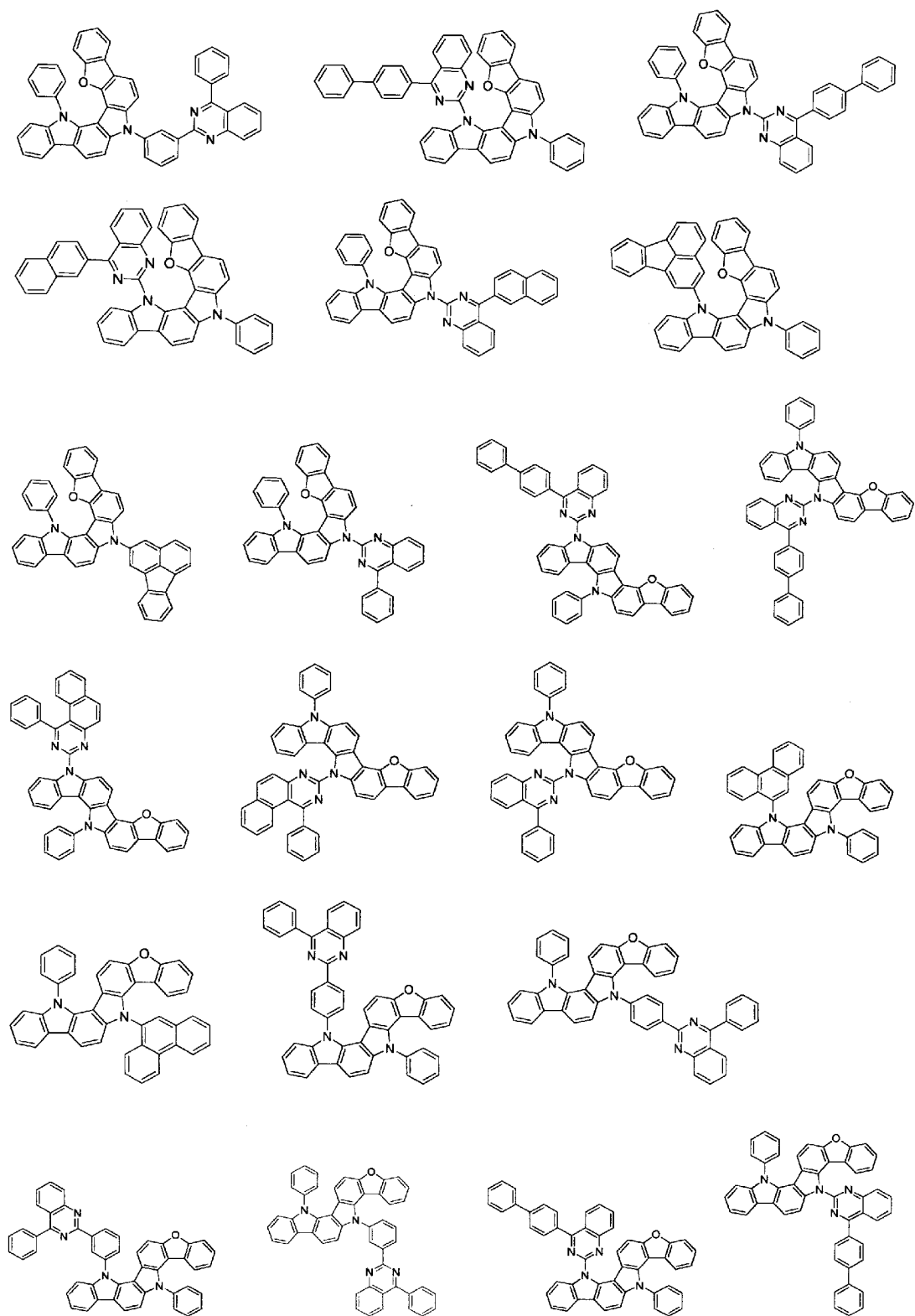
[0167]

[化59]



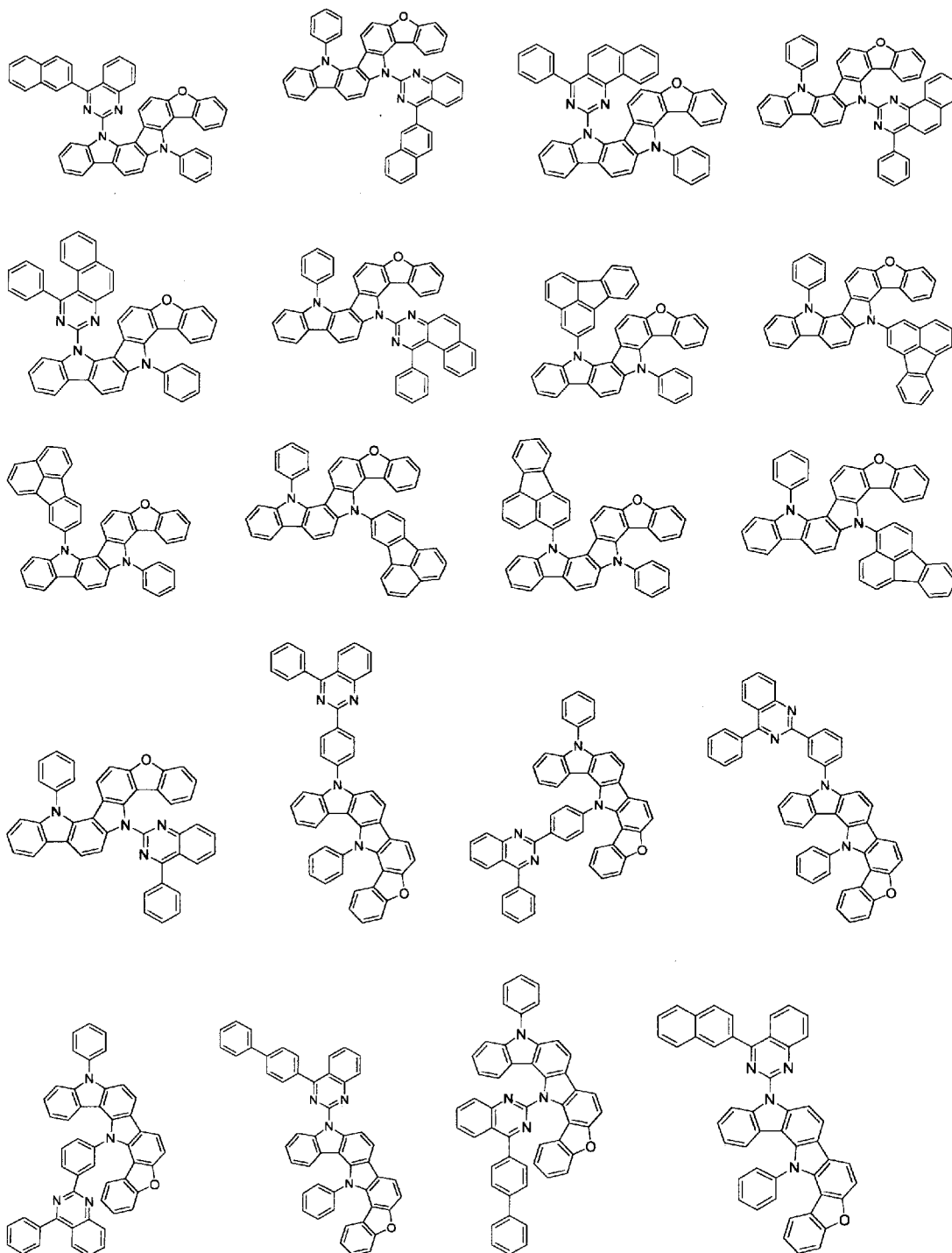
[0168]

[化60]



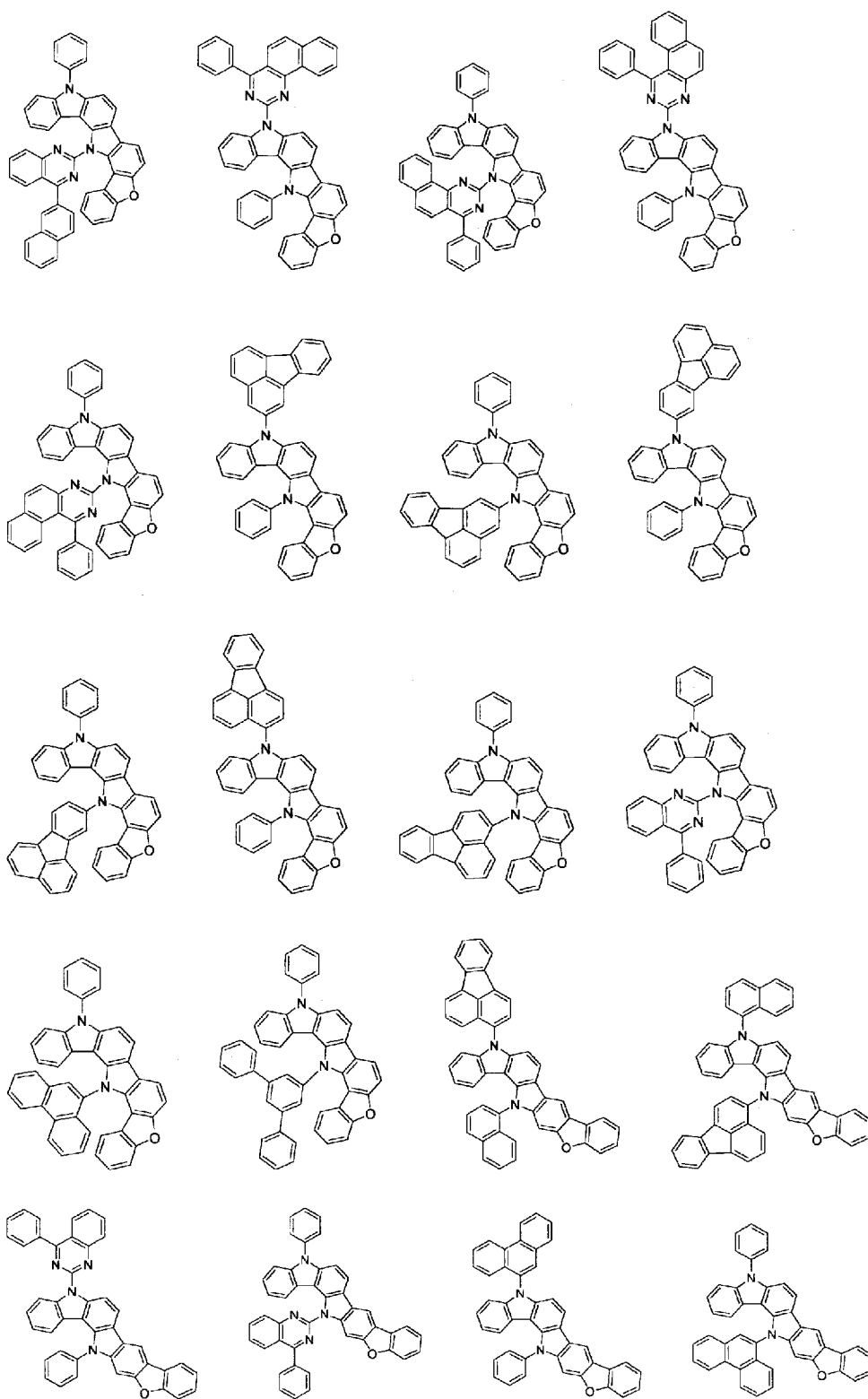
[0169]

[化61]



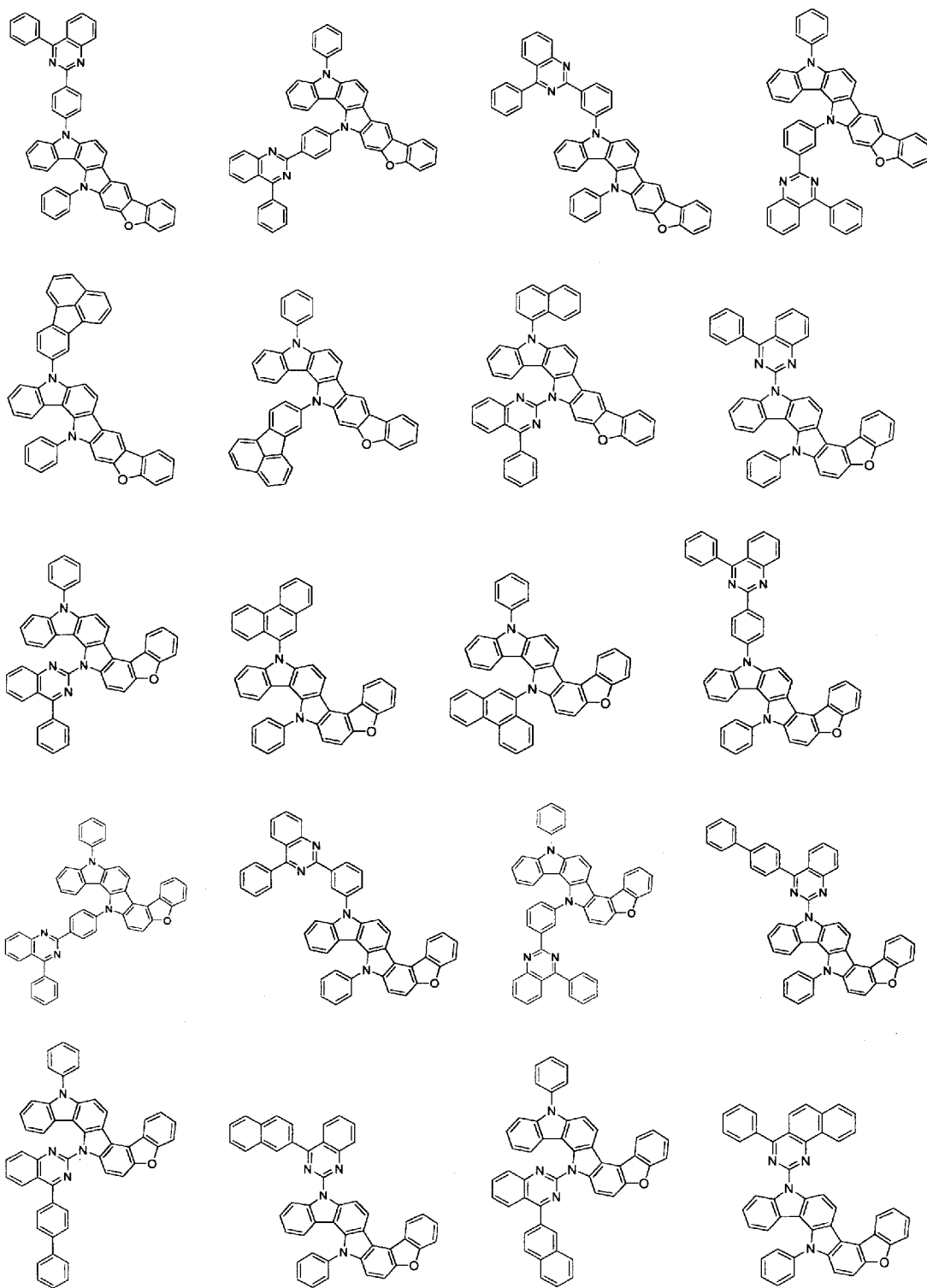
[0170]

[化62]



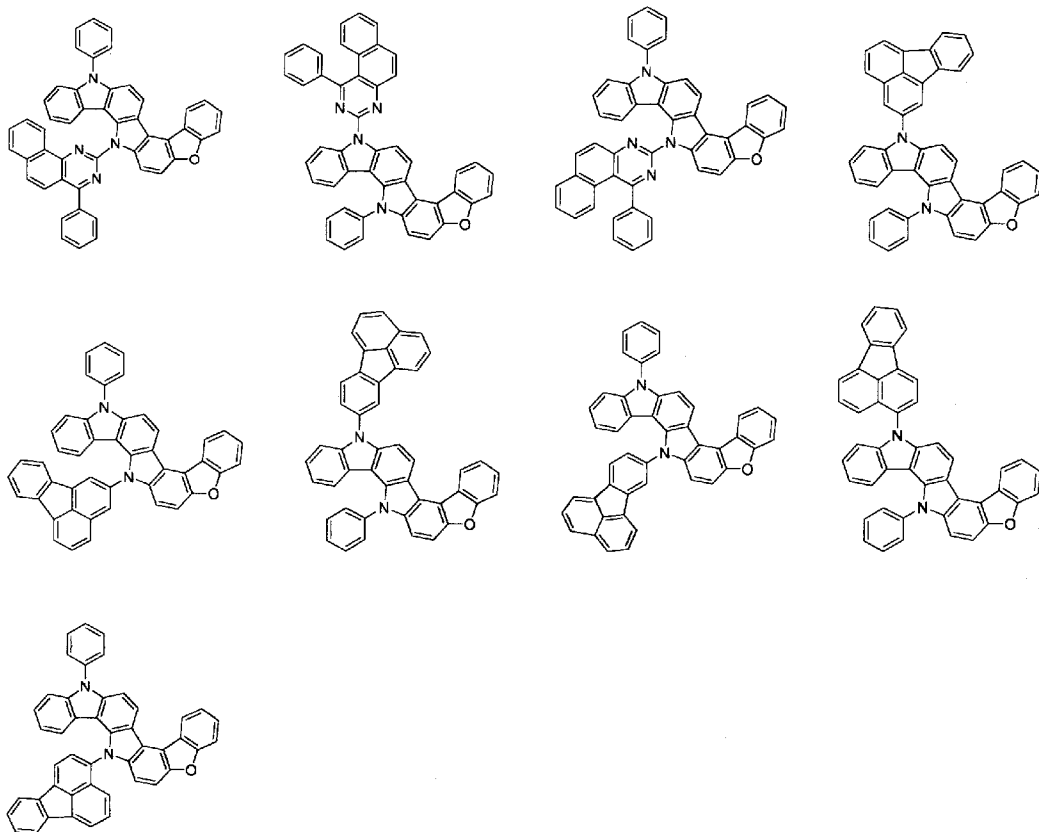
[0171]

[化63]



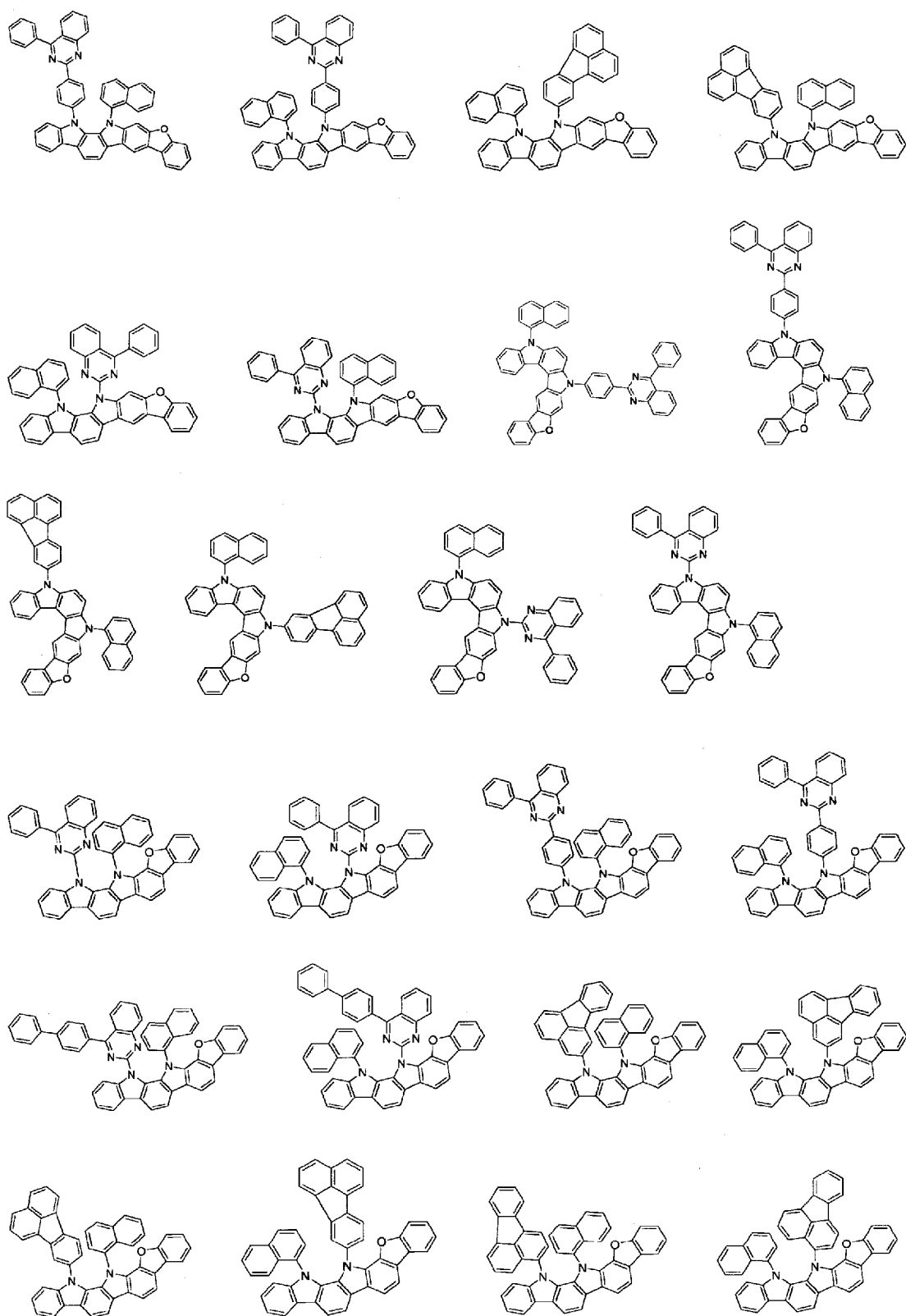
[0172]

[化64]



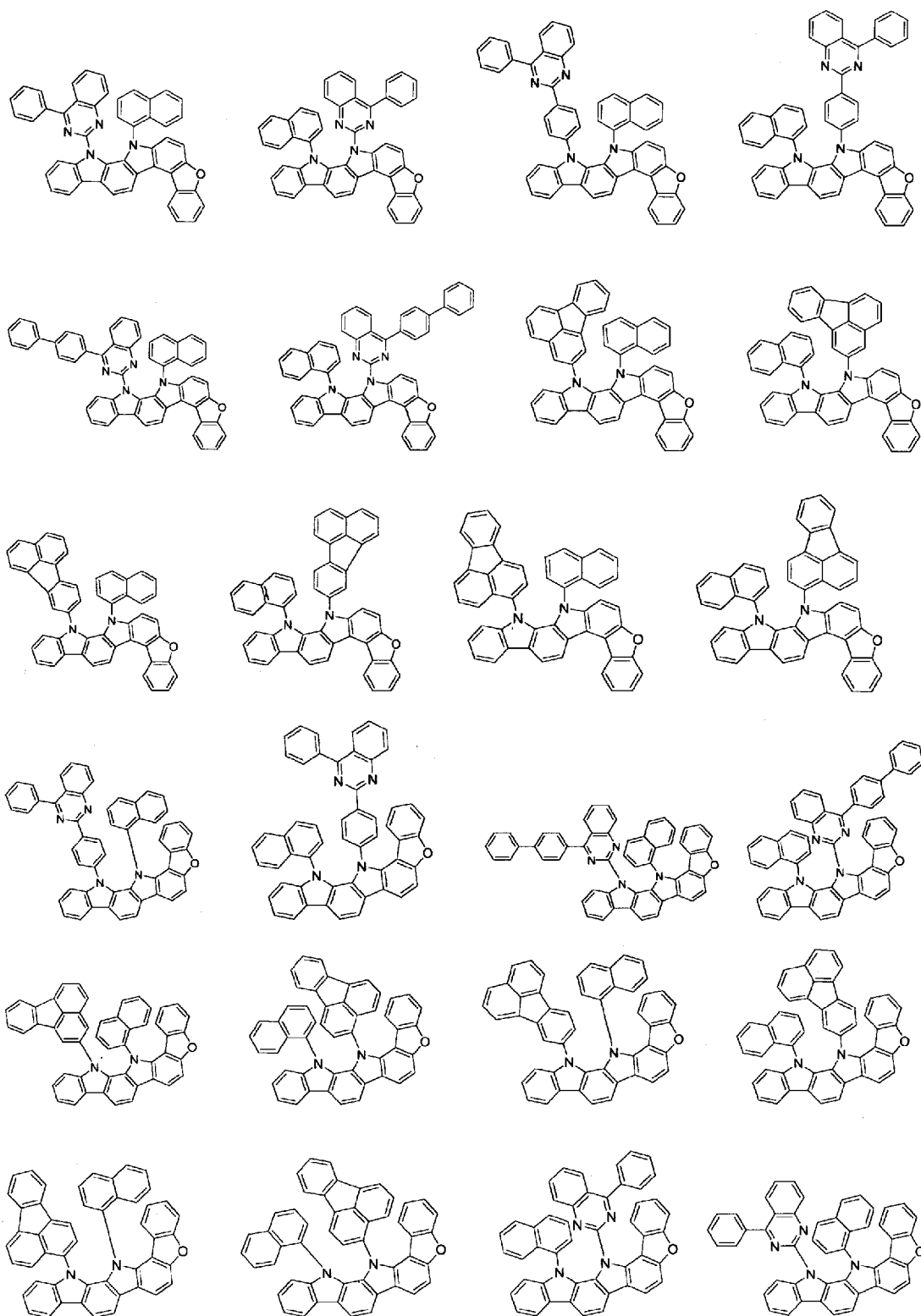
[0173]

[化65]



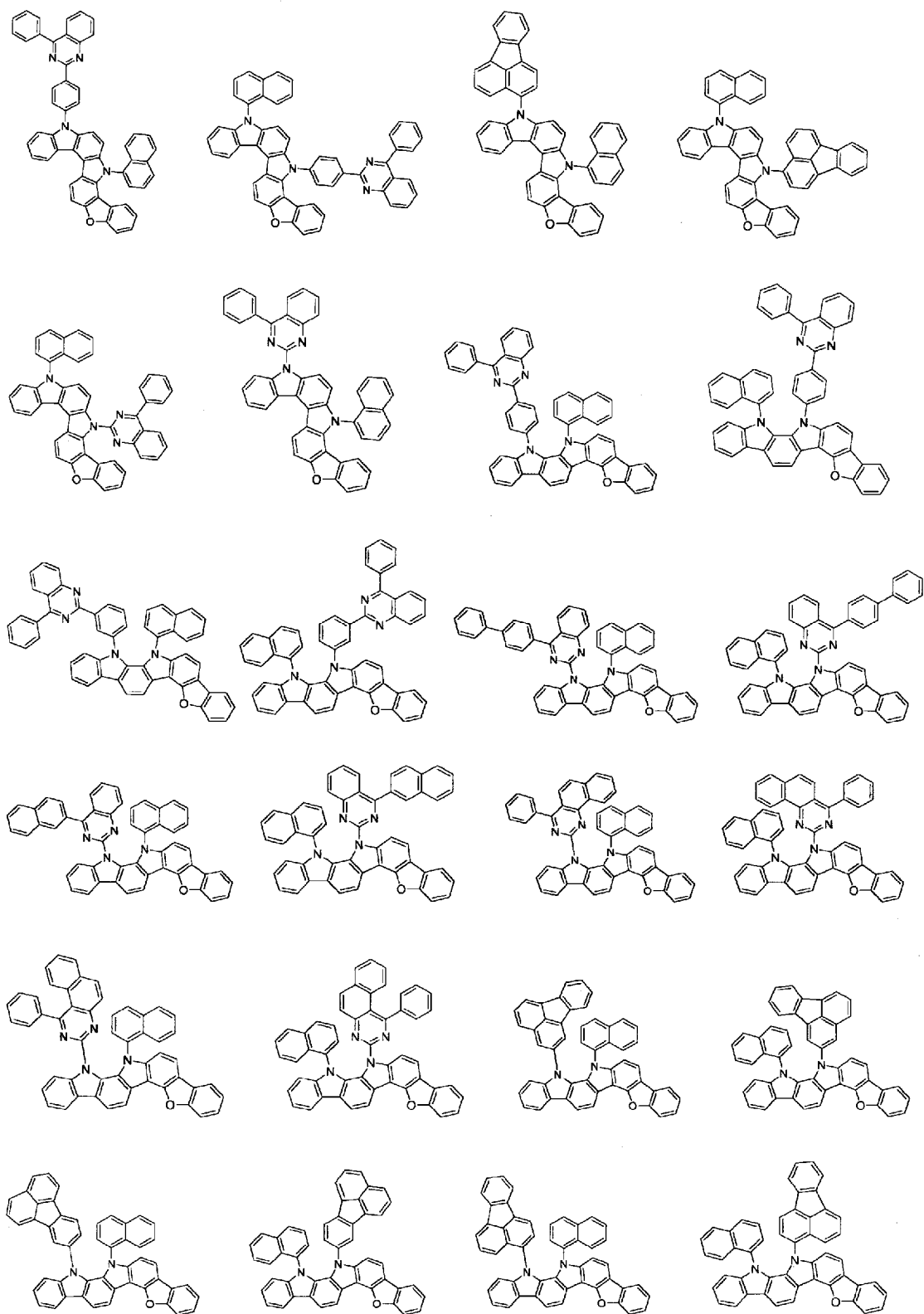
[0174]

[化66]



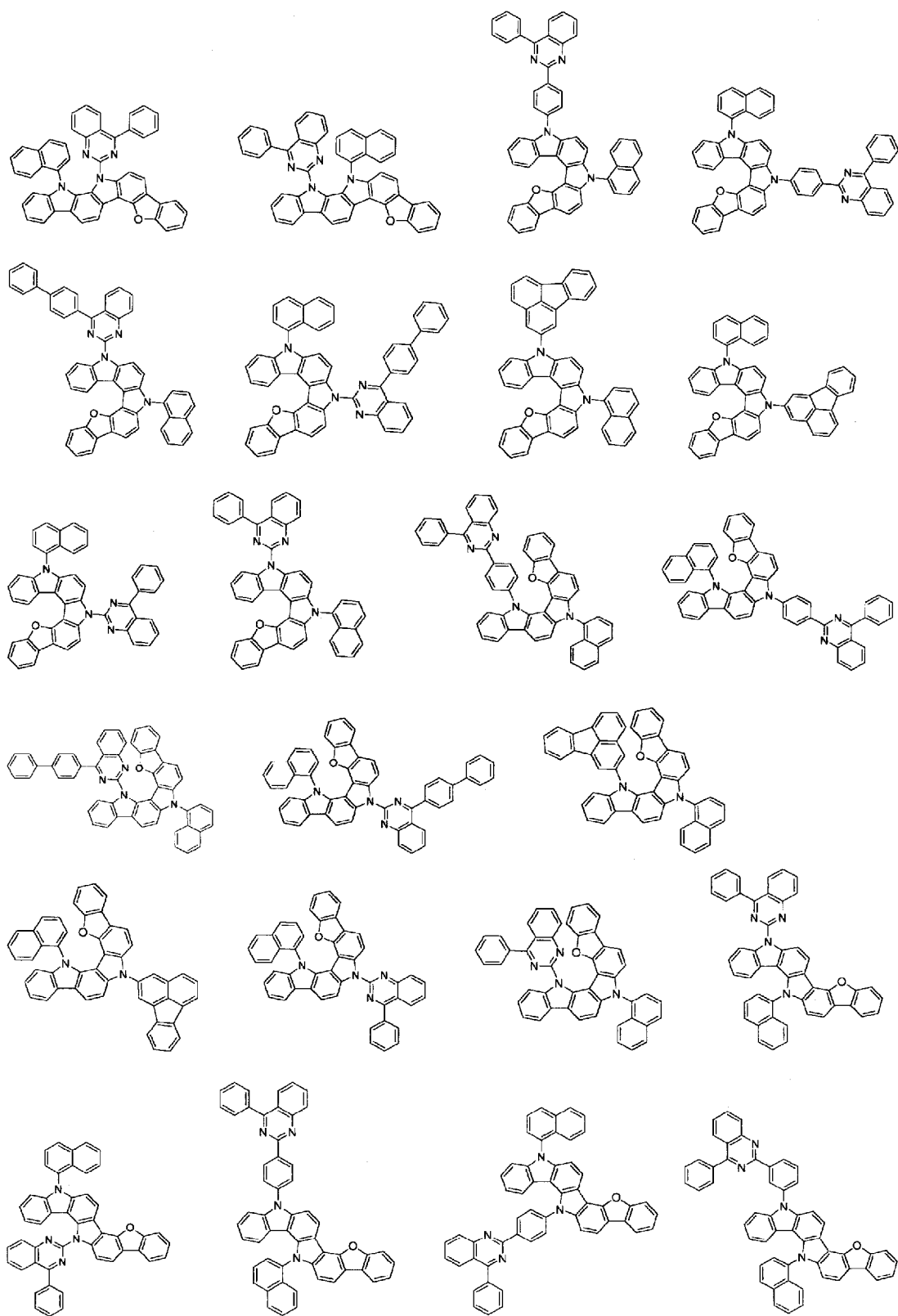
[0175]

[化67]



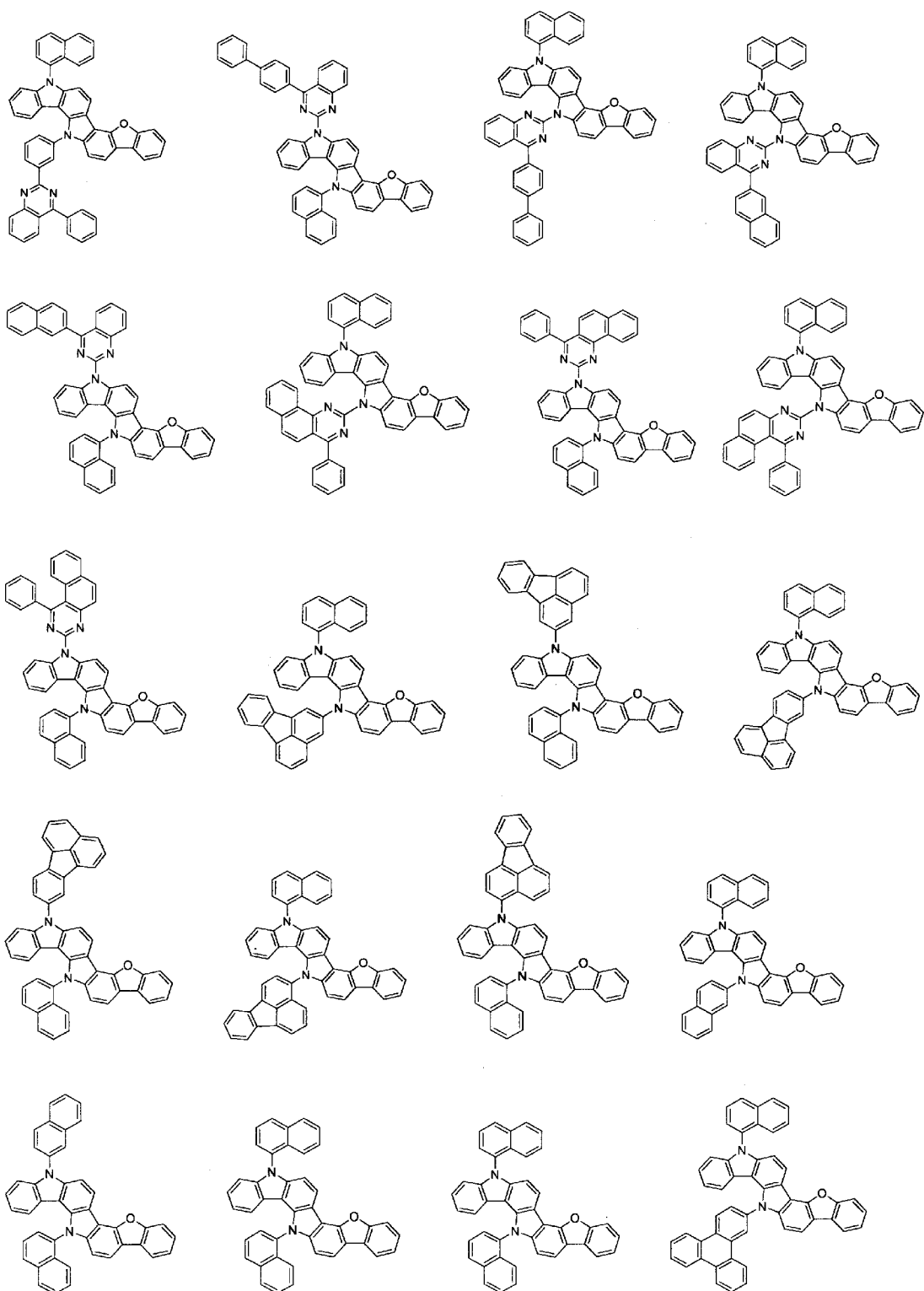
[0176]

[化68]



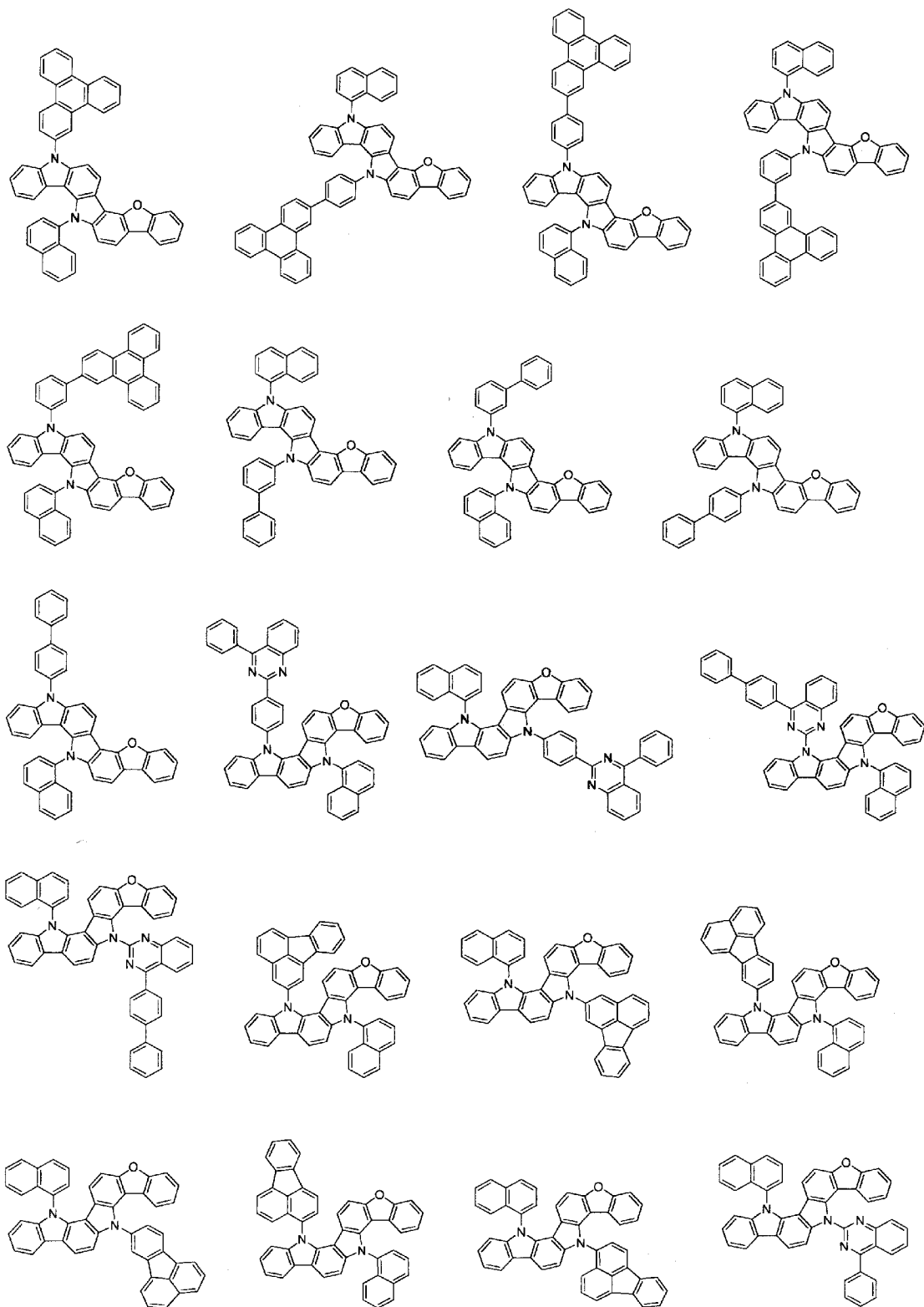
[0177]

[化69]



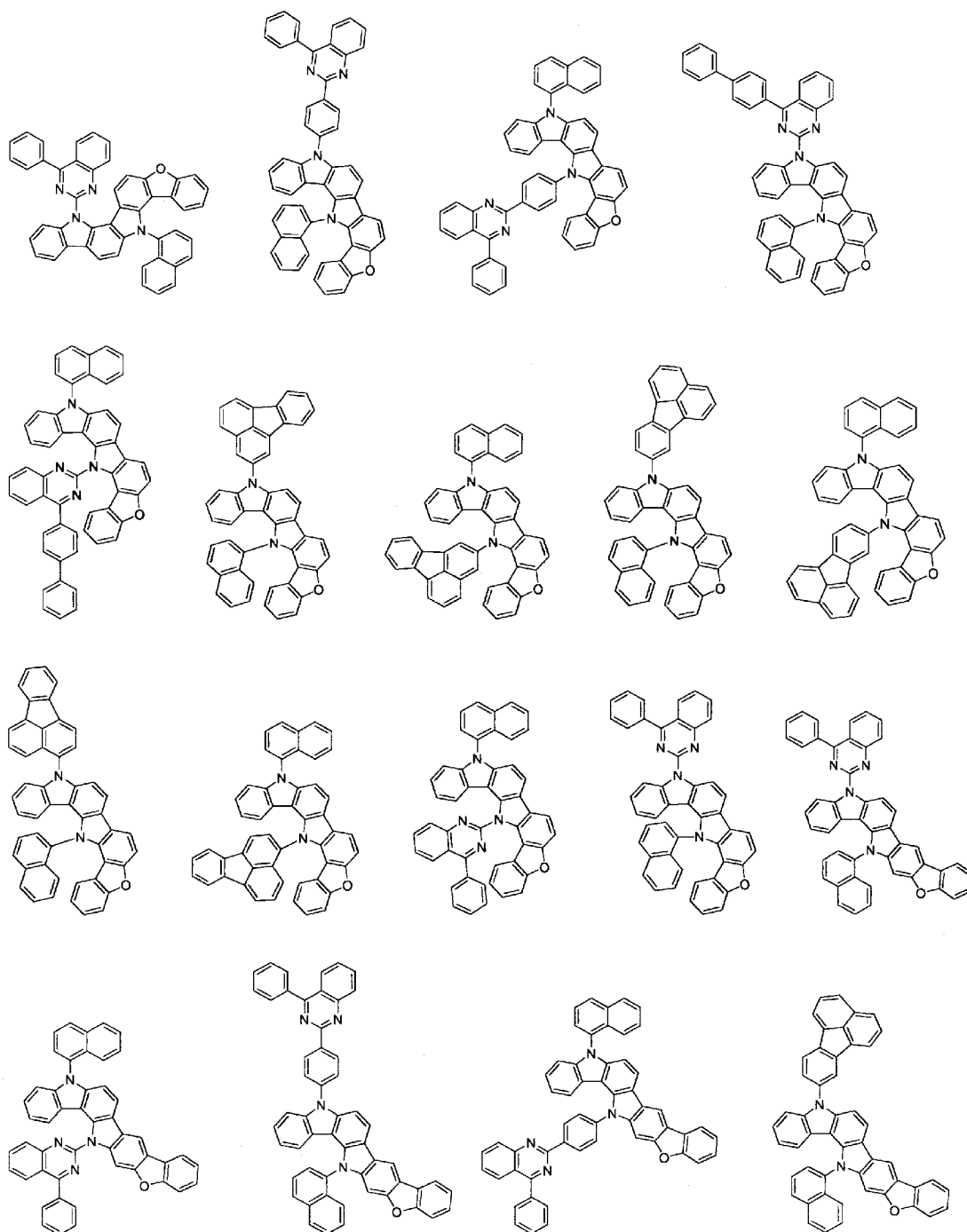
[0178]

[化70]



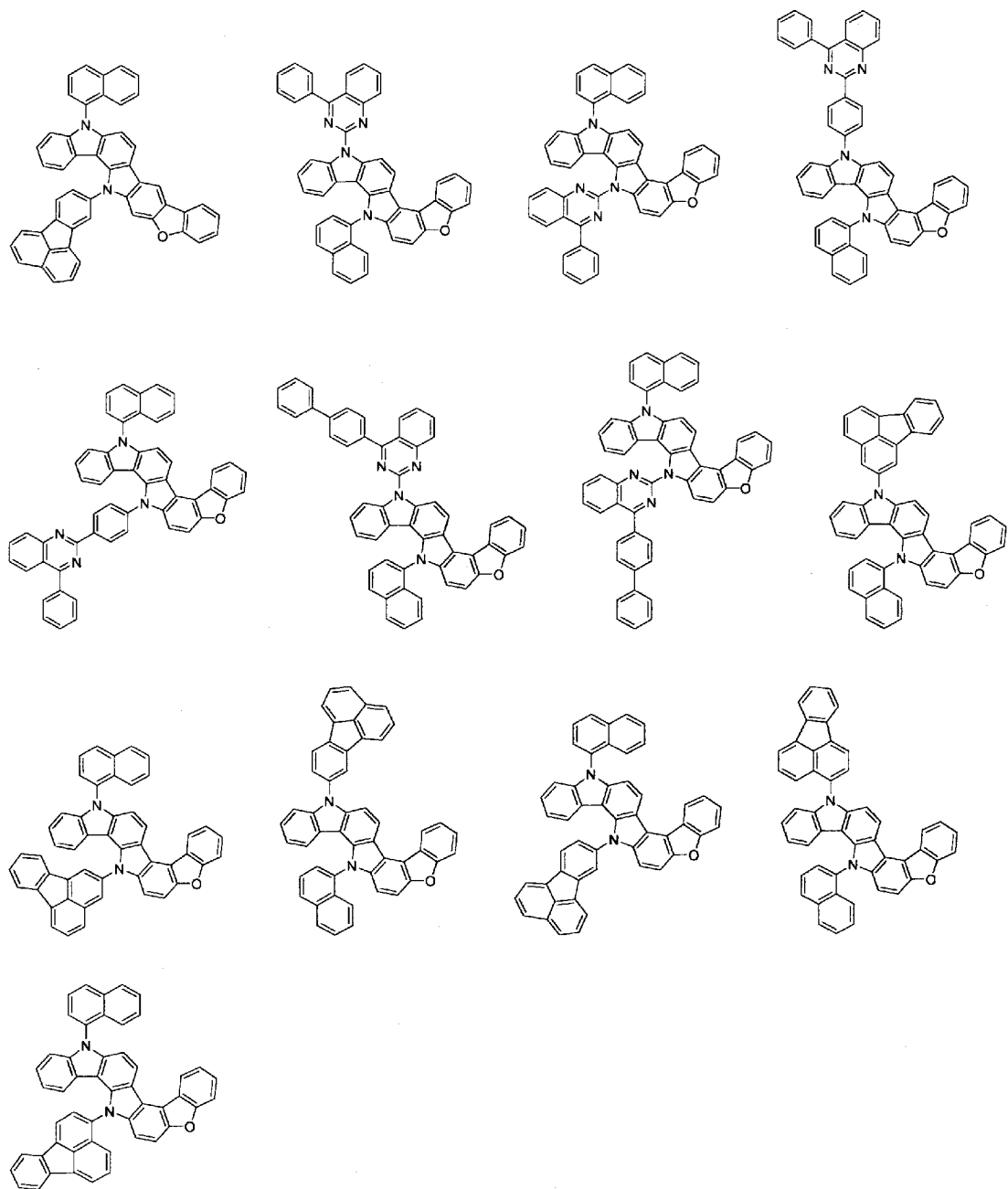
[0179]

[化71]



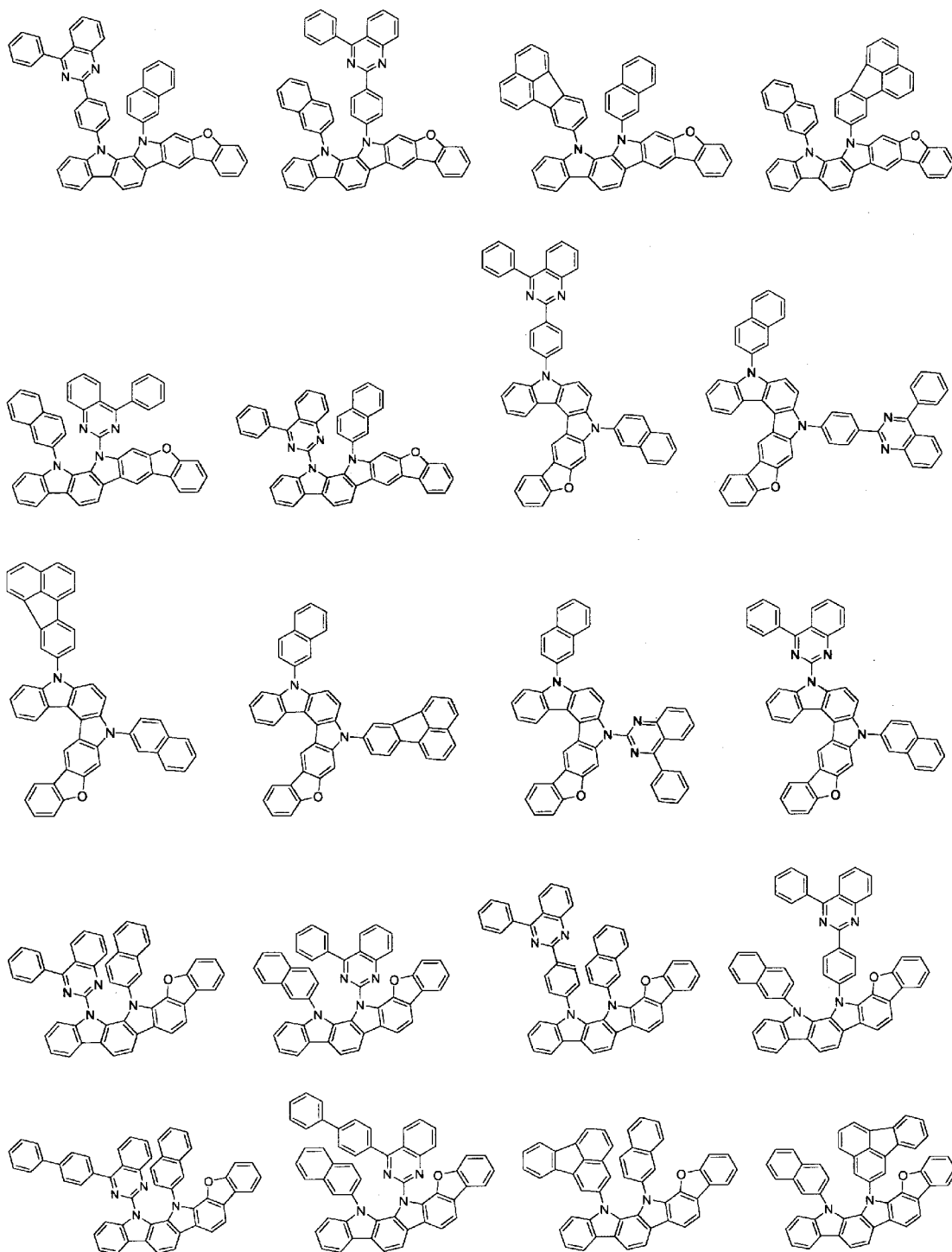
[0180]

[化72]



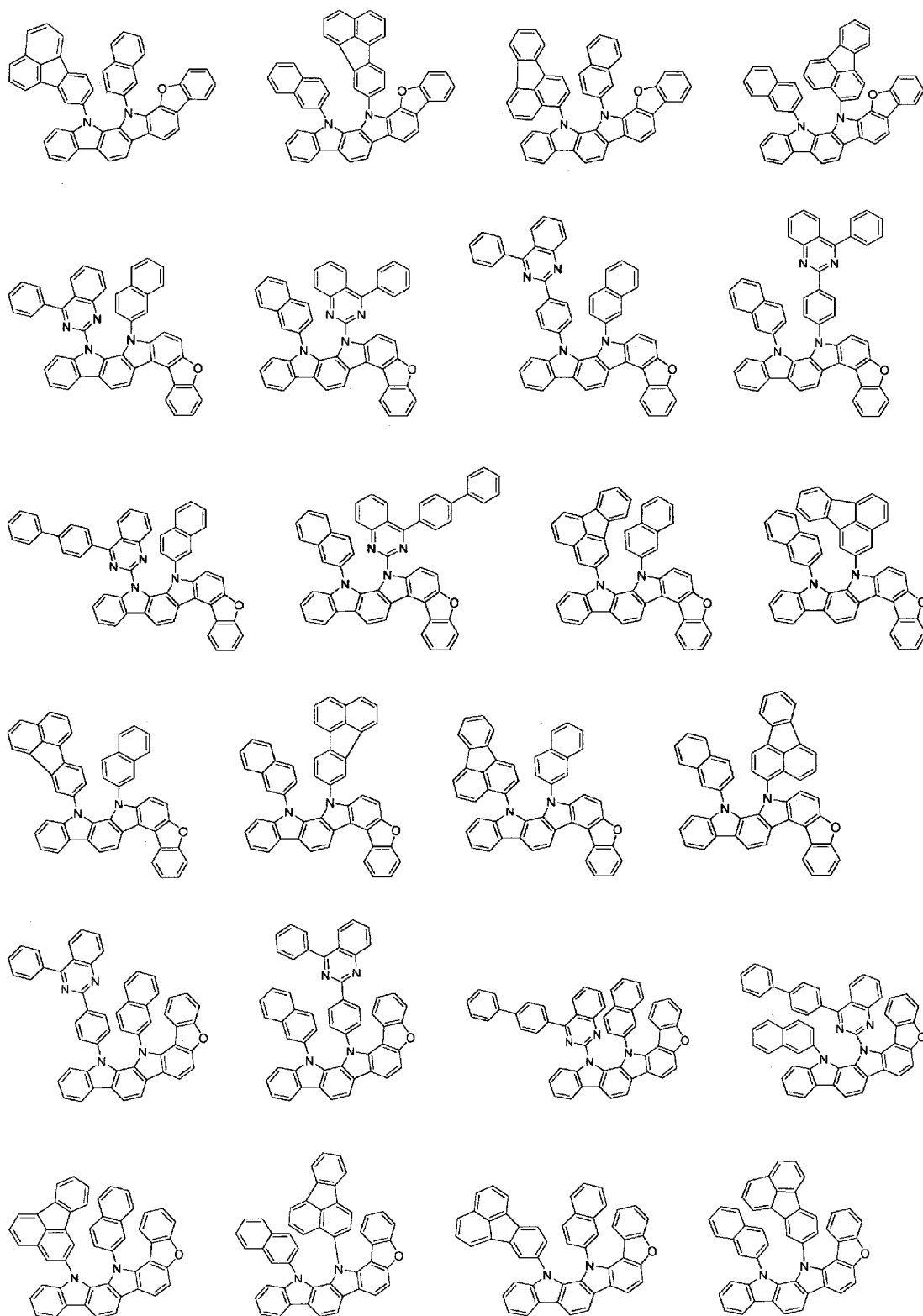
[0181]

[化73]



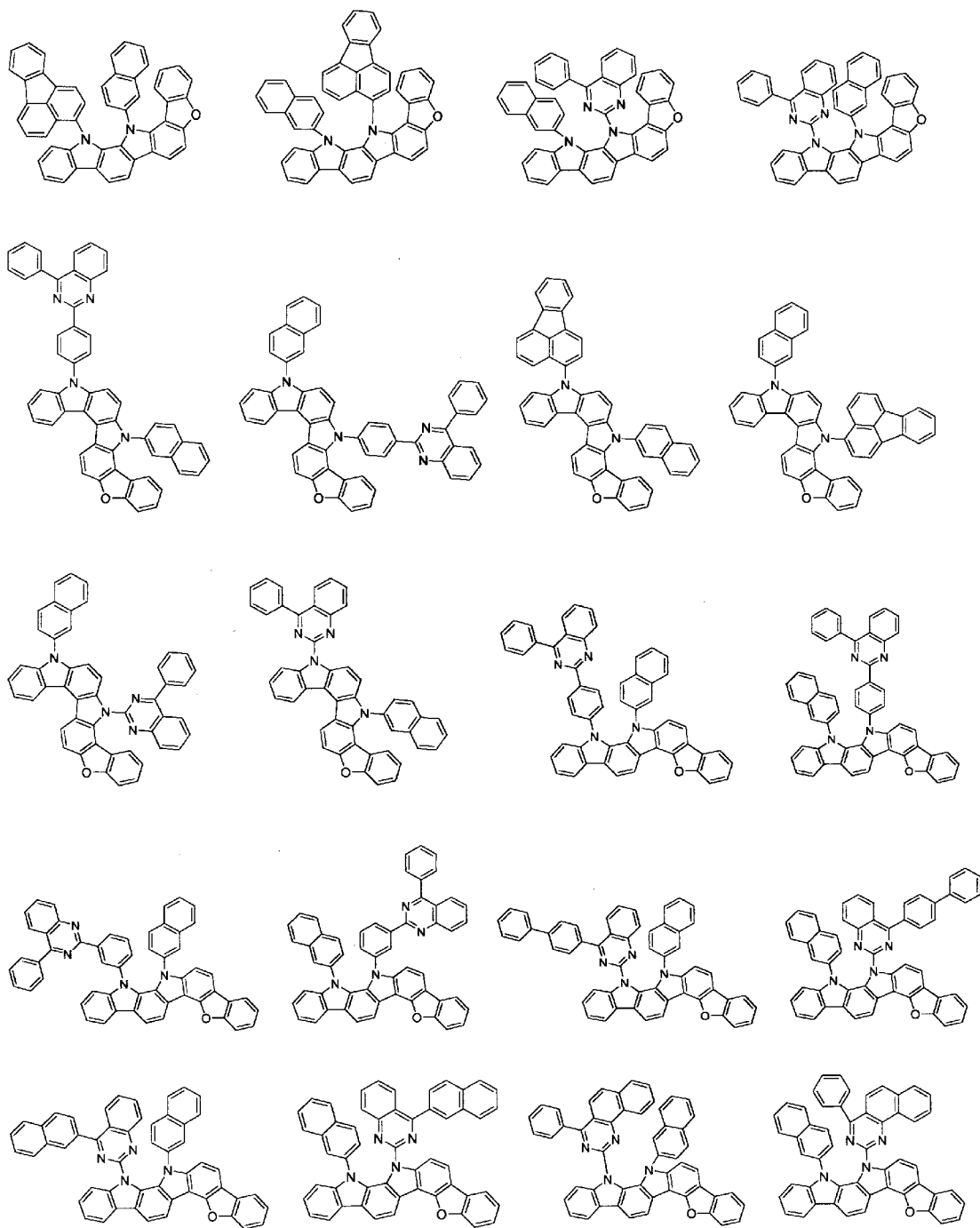
[0182]

[化74]



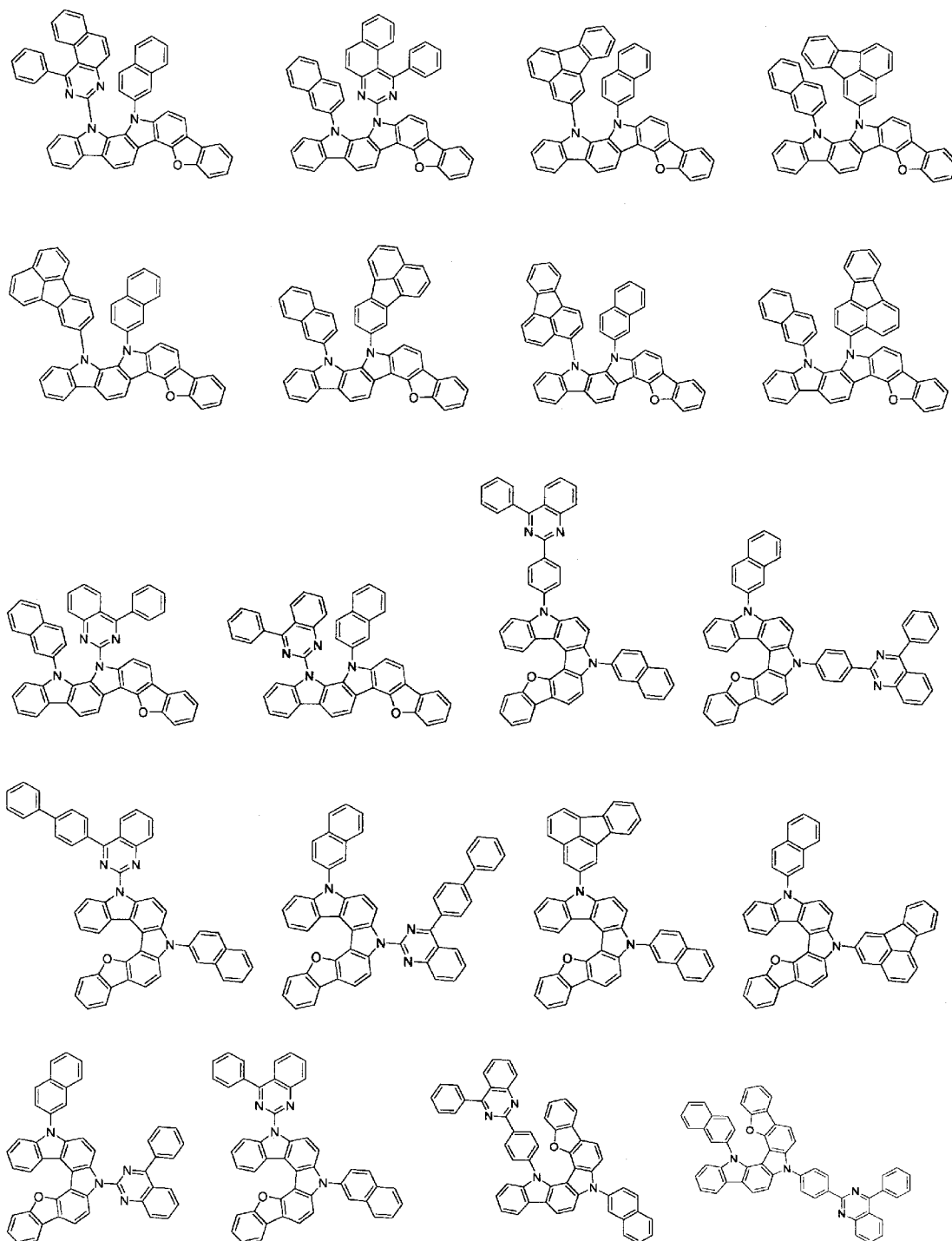
[0183]

[化75]



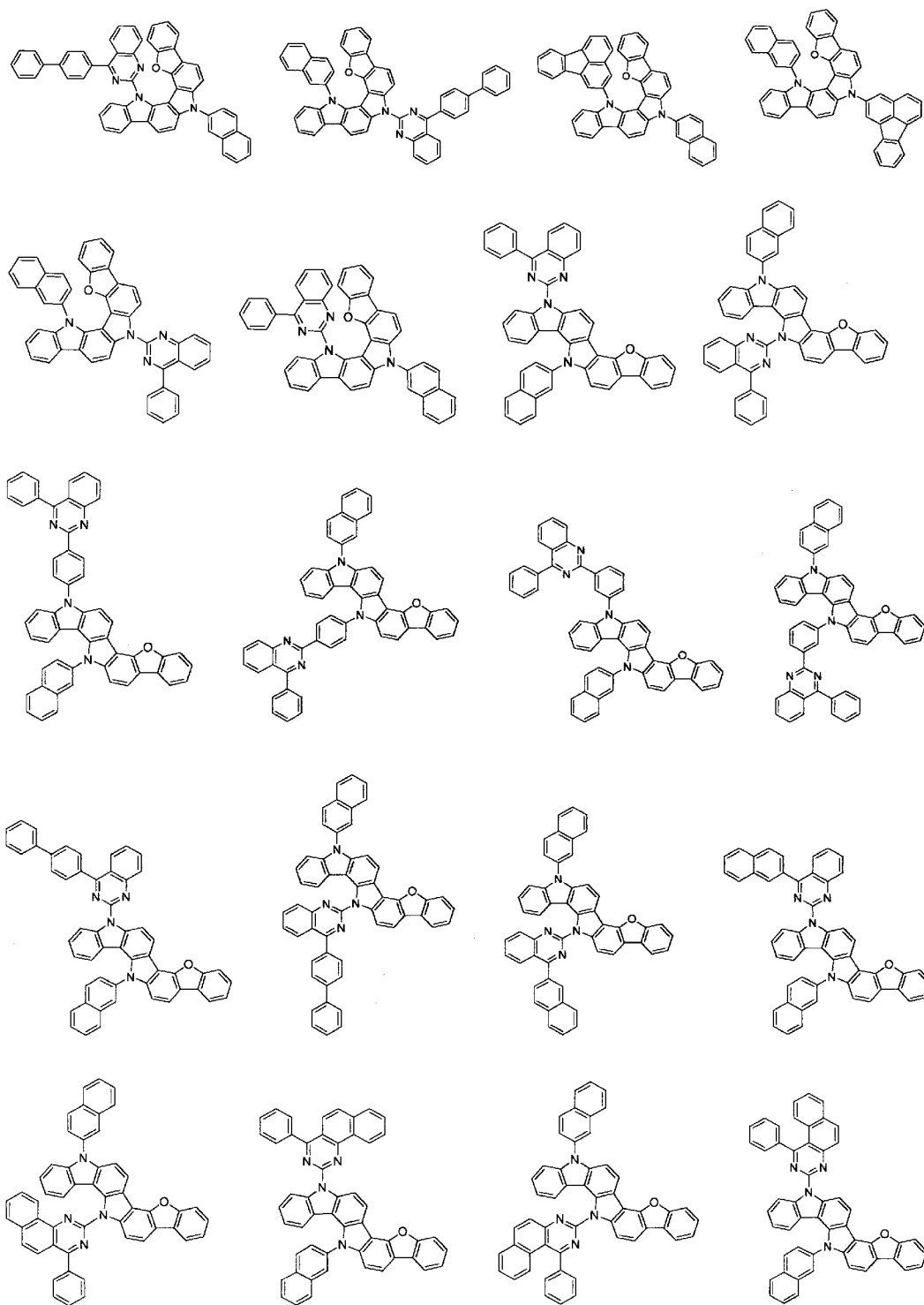
[0184]

[化76]



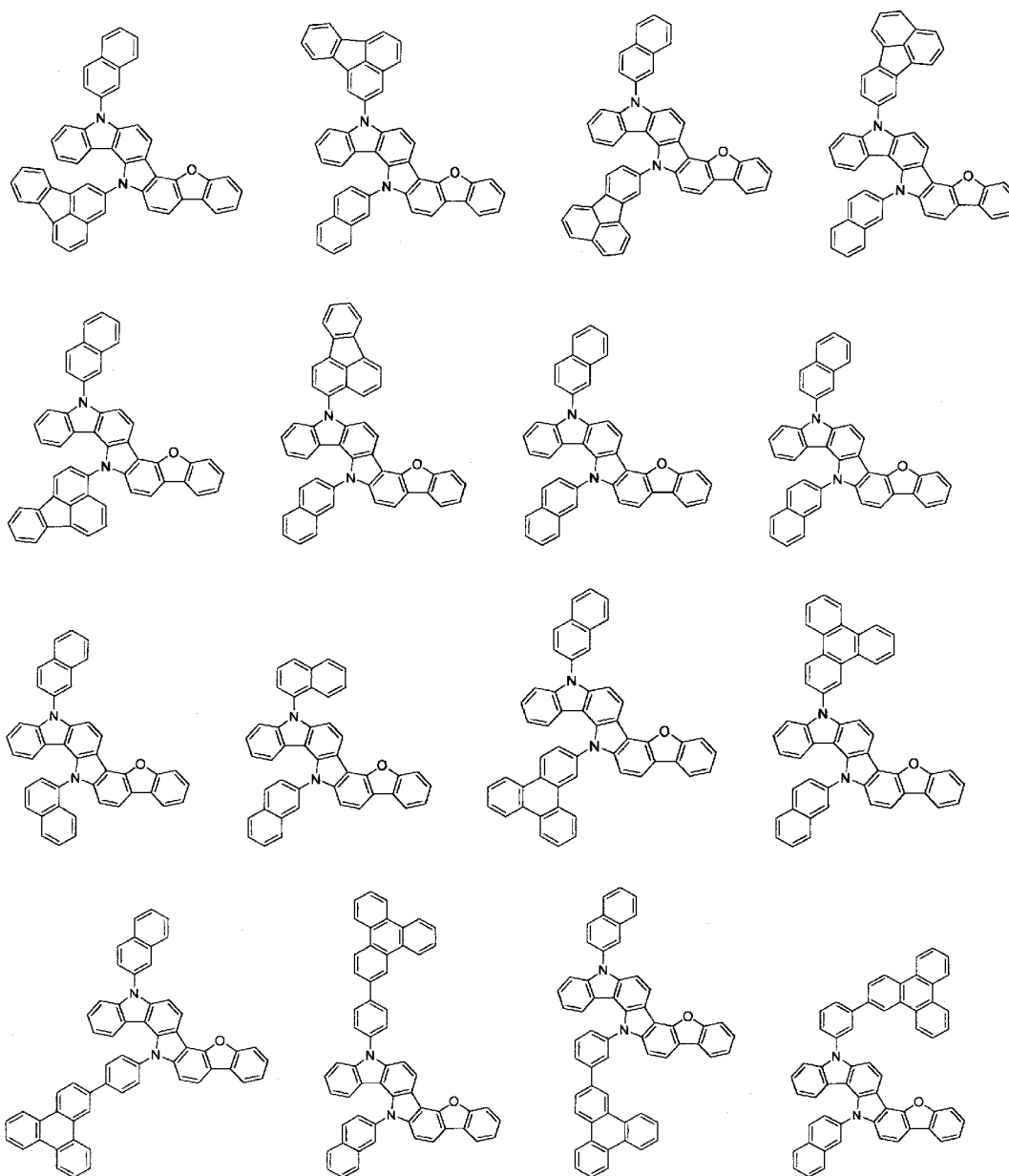
[0185]

[化77]



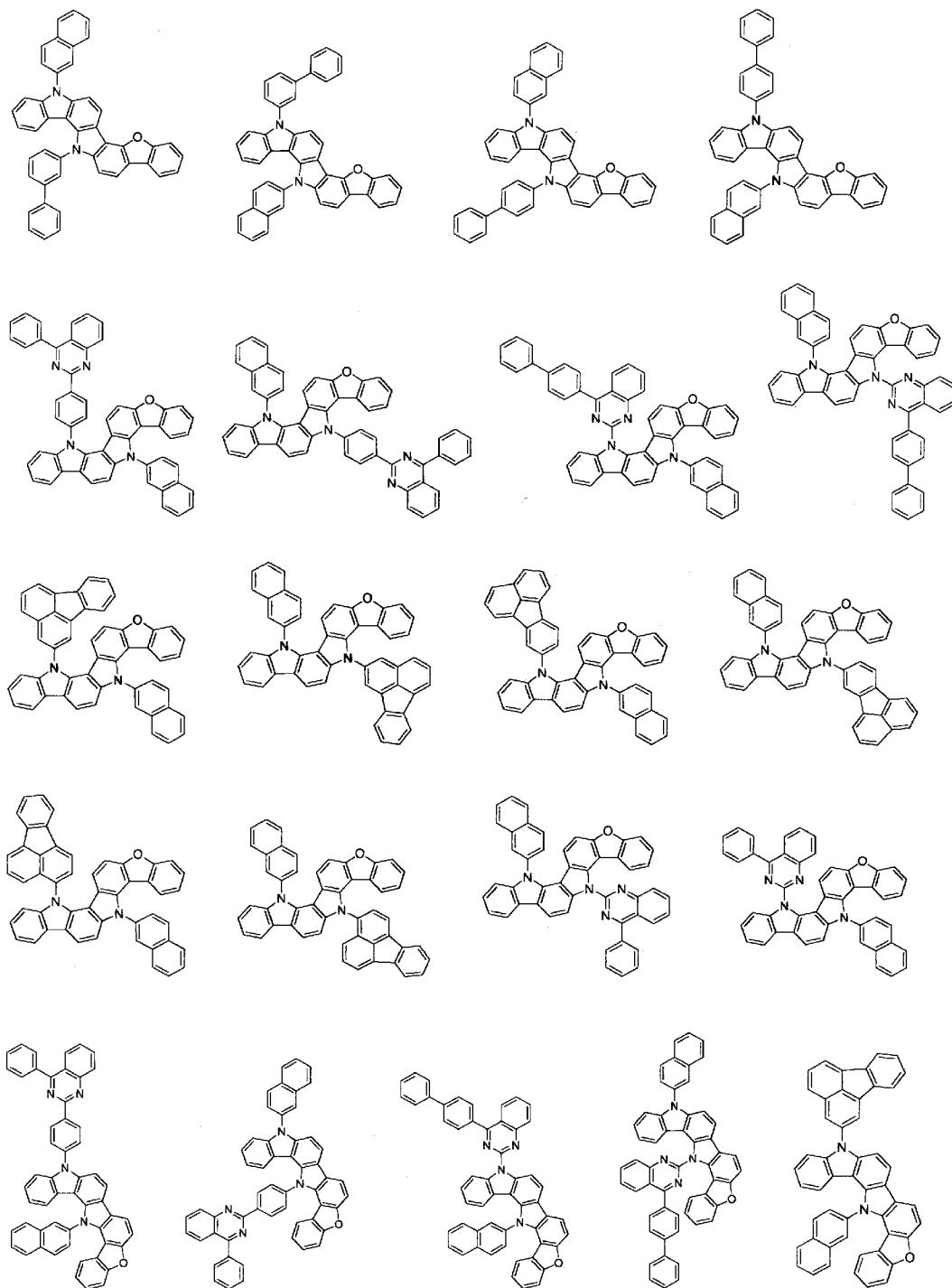
[0186]

[化78]



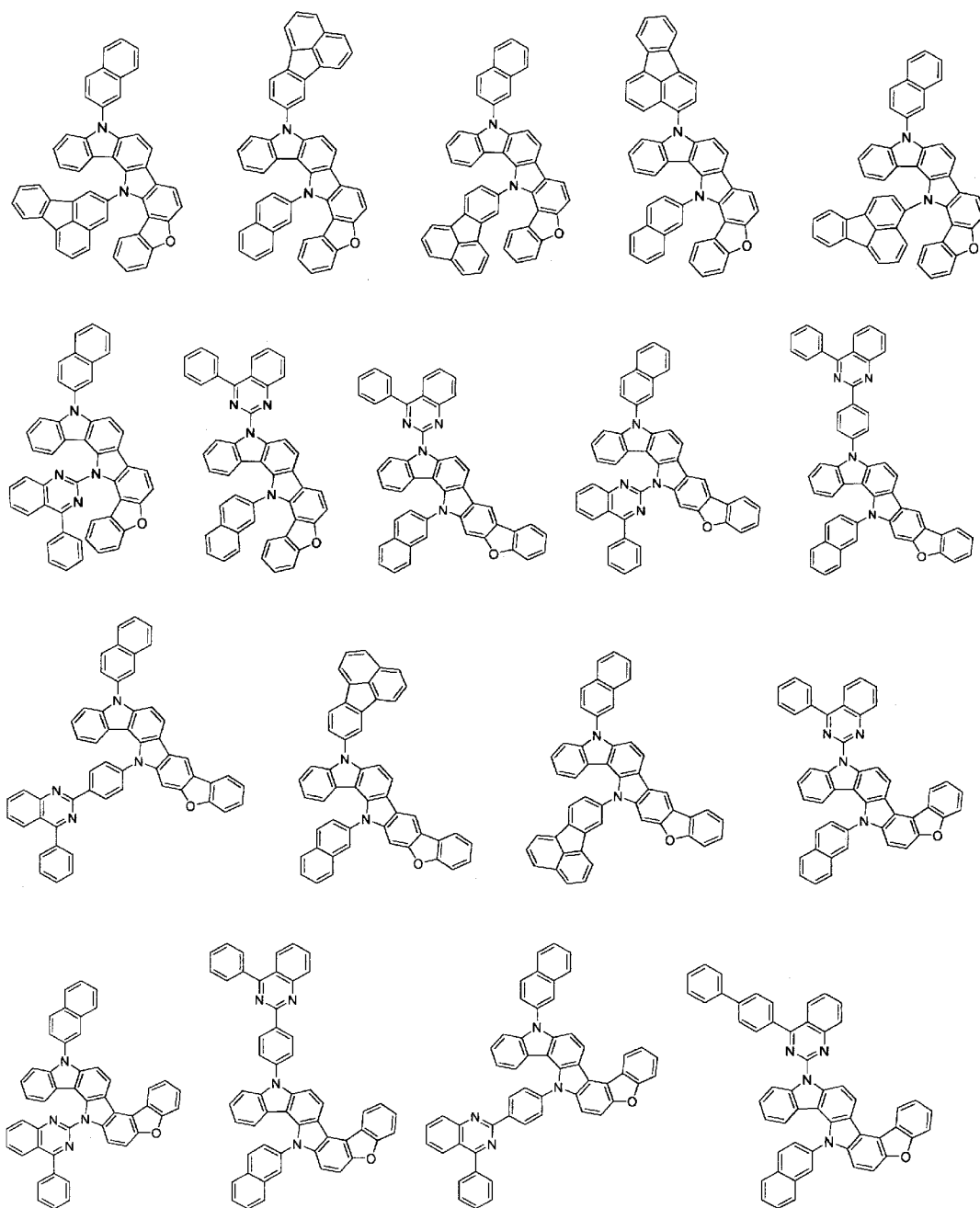
[0187]

[化79]



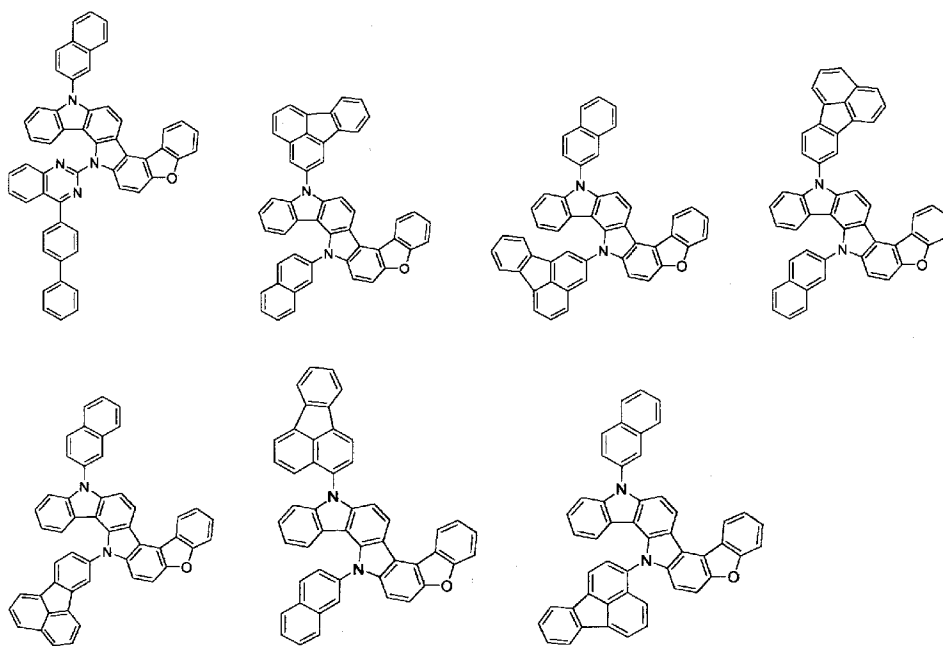
[0188]

[化80]



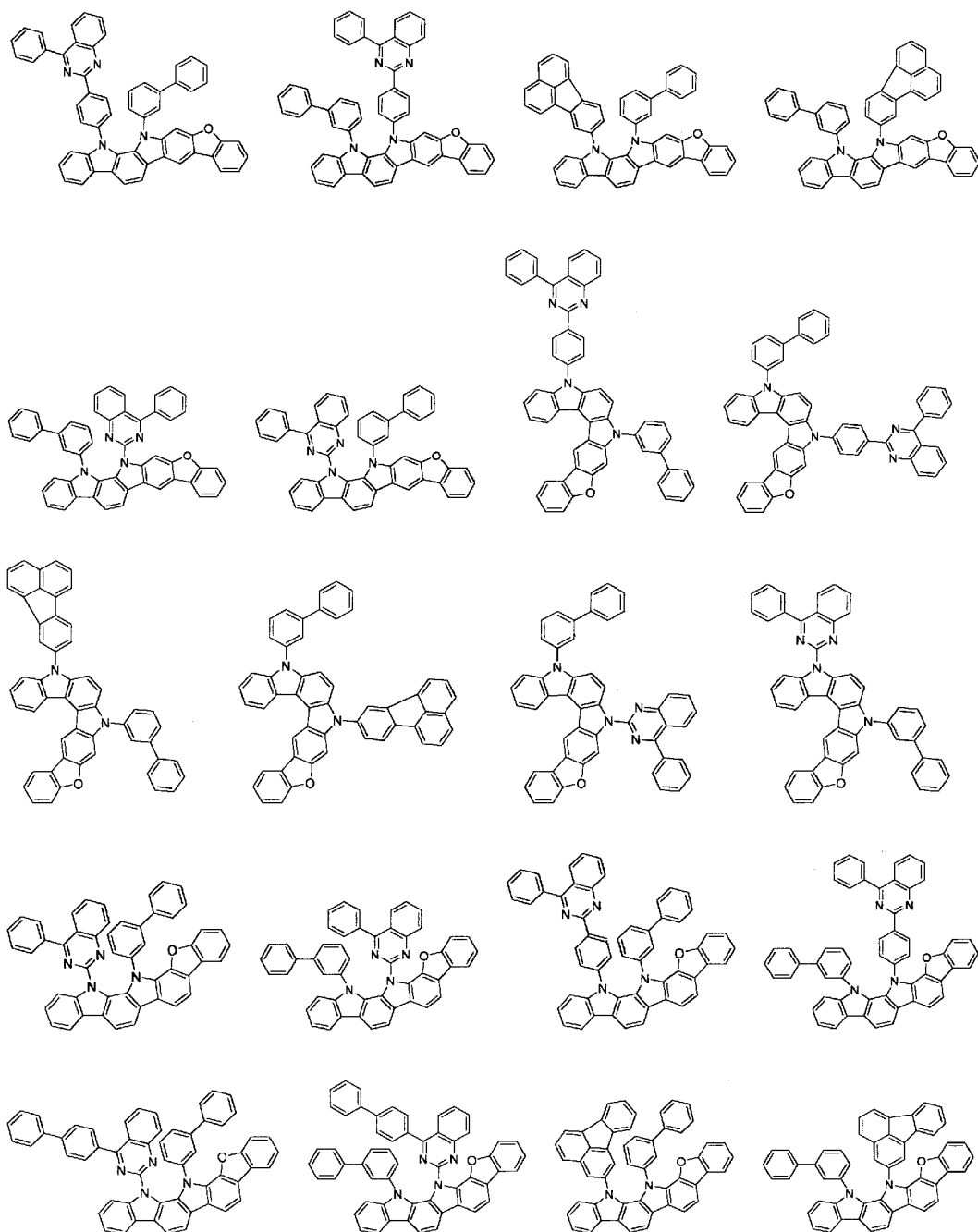
[0189]

[化81]



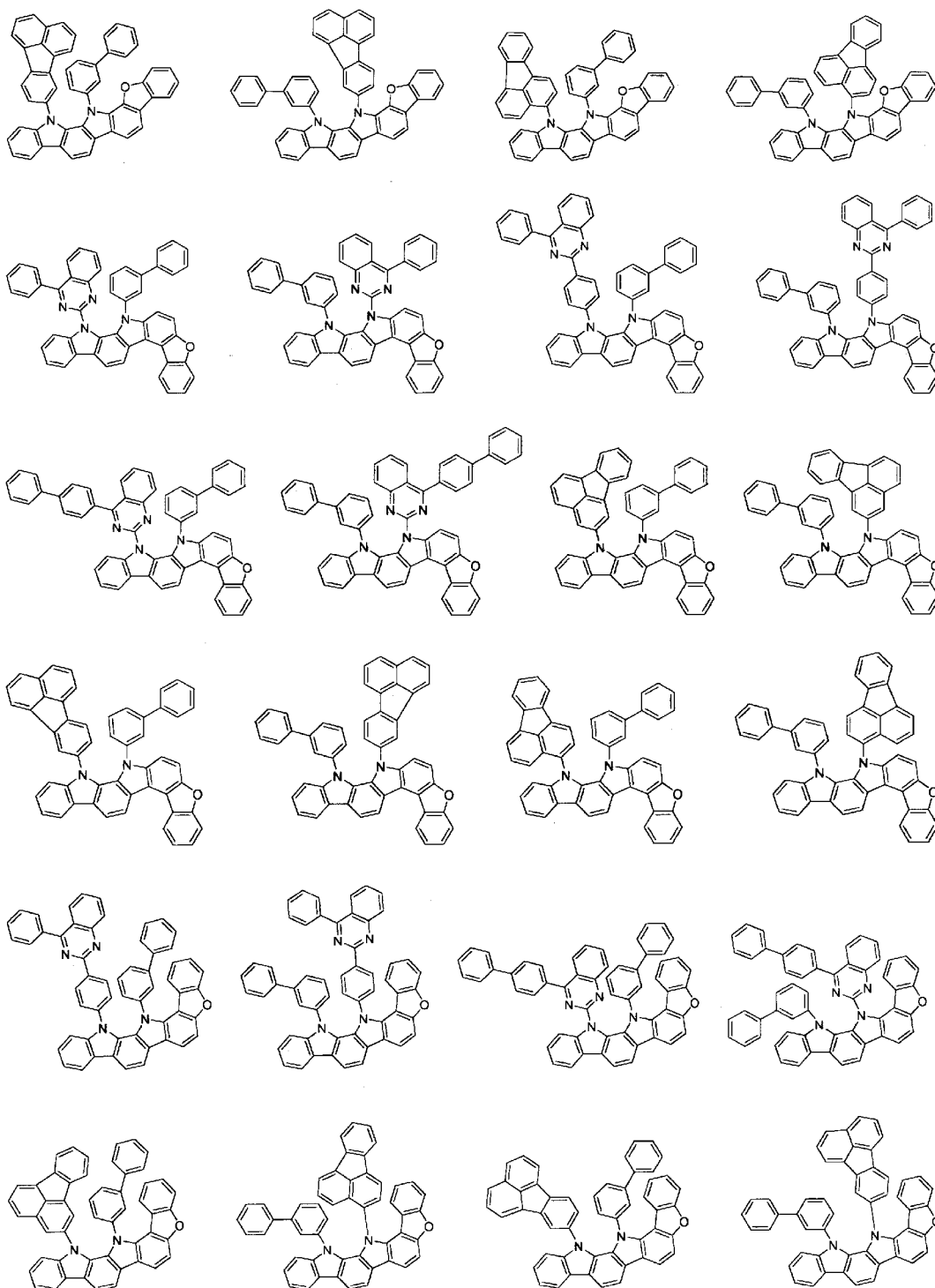
[0190]

[化82]



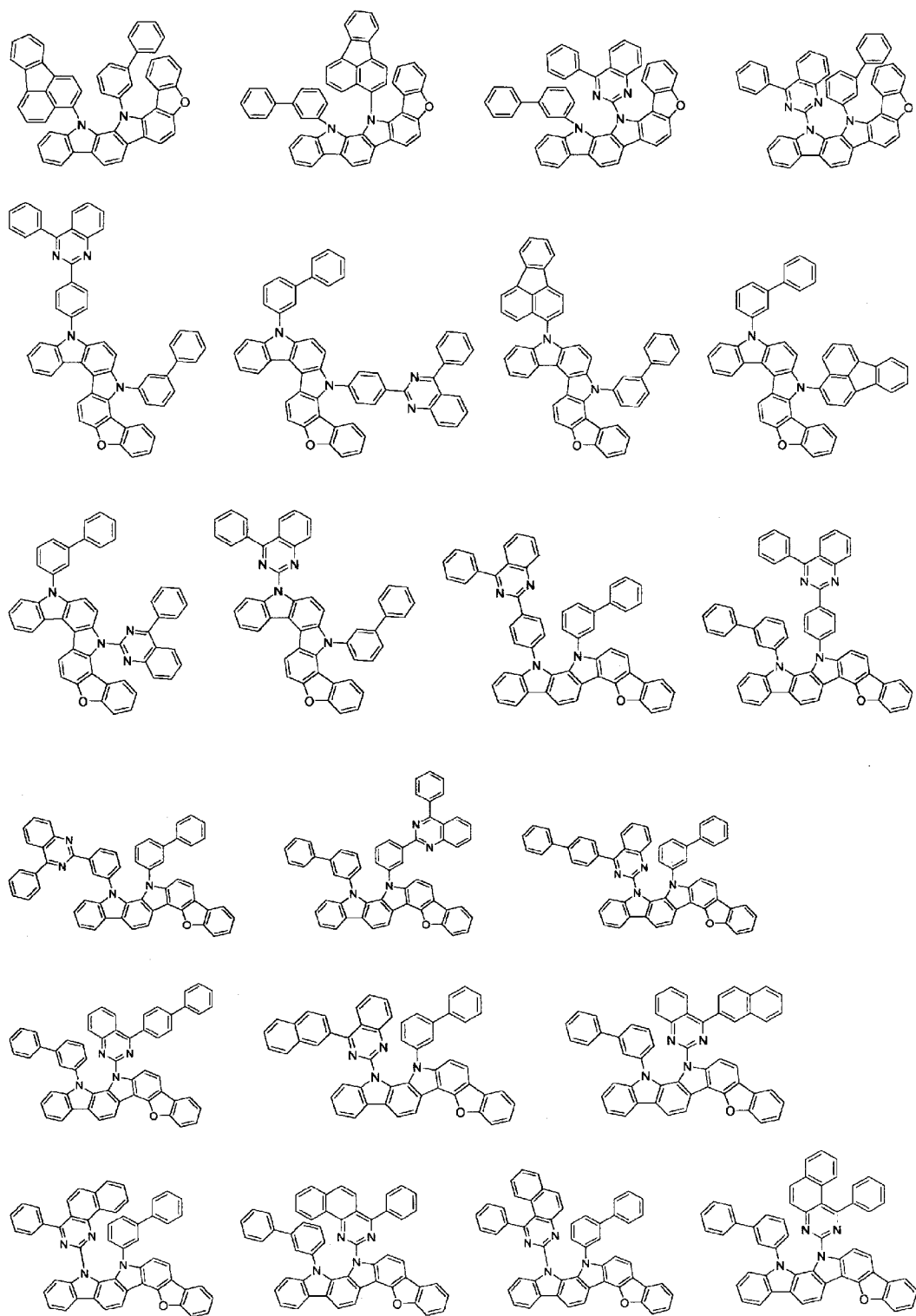
[0191]

[化83]



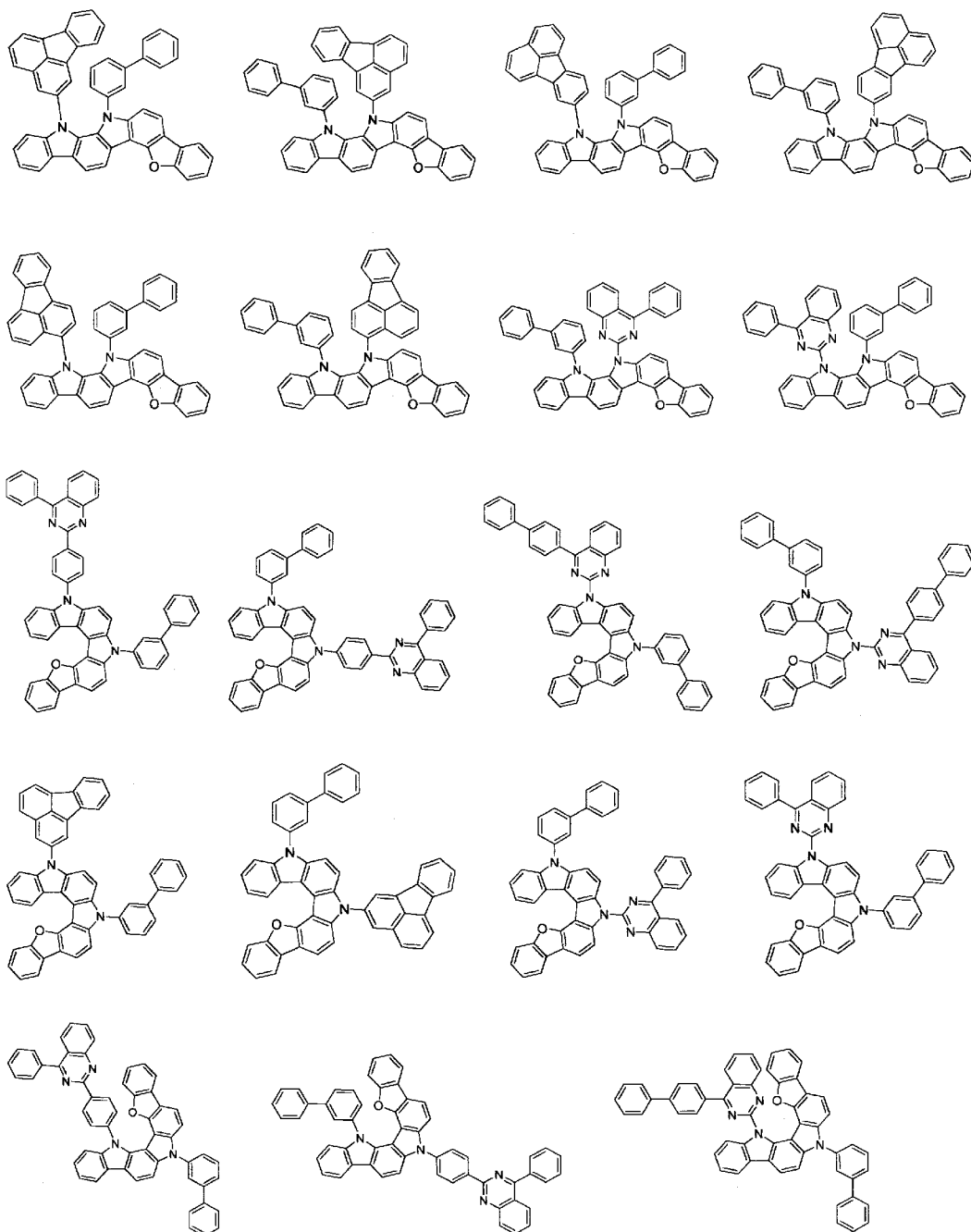
[0192]

[化84]



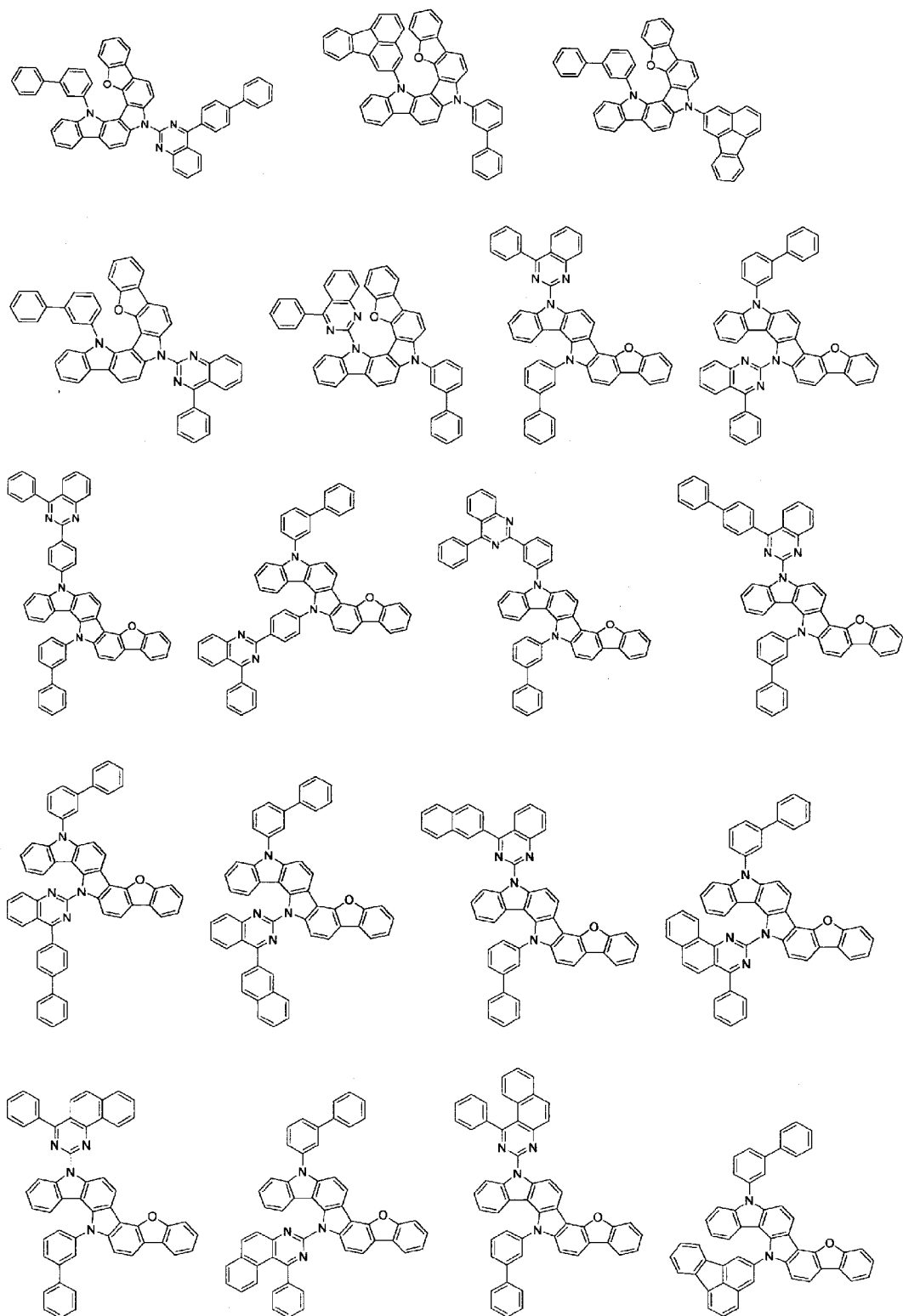
[0193]

[化85]



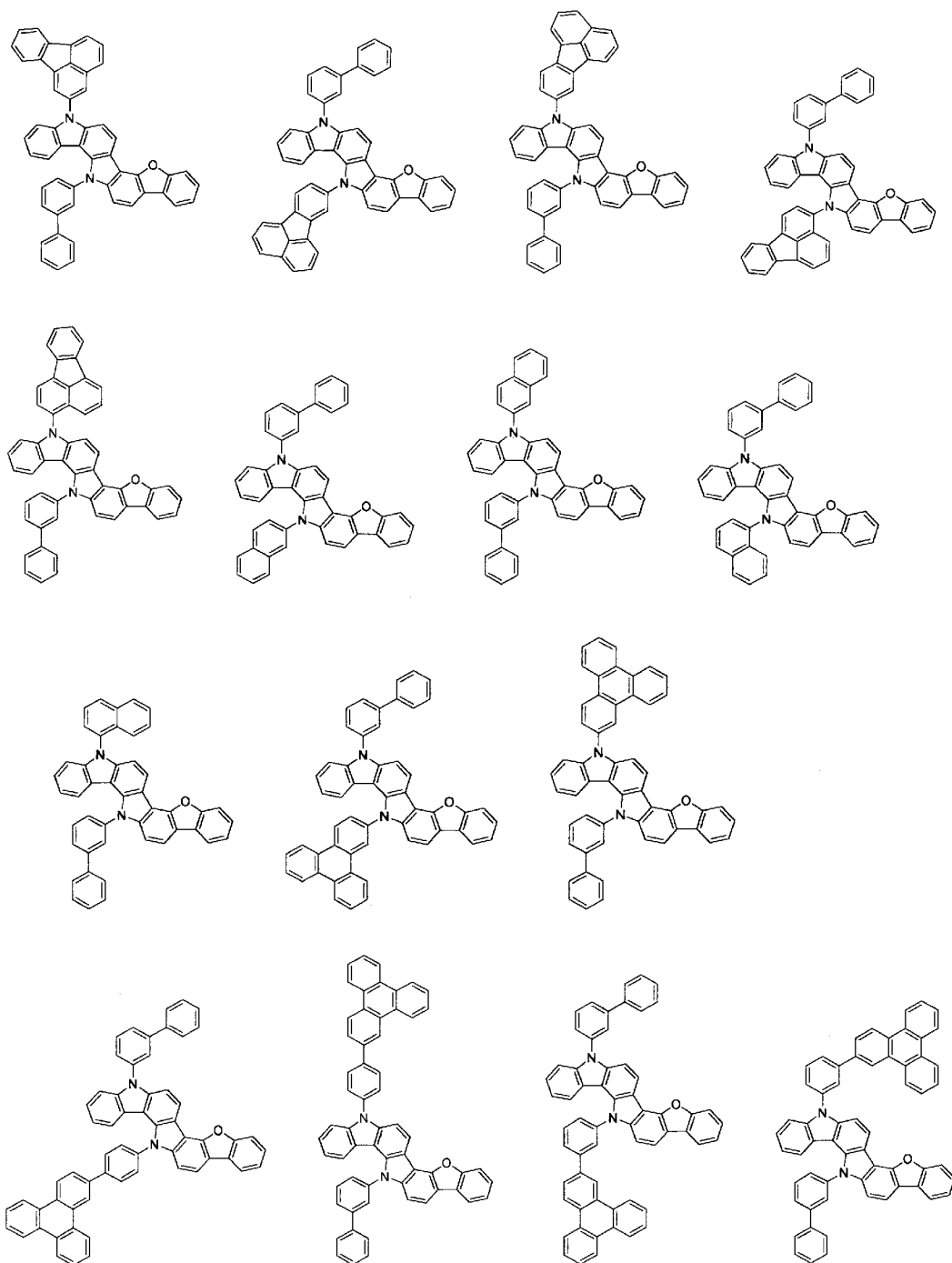
[0194]

[化86]



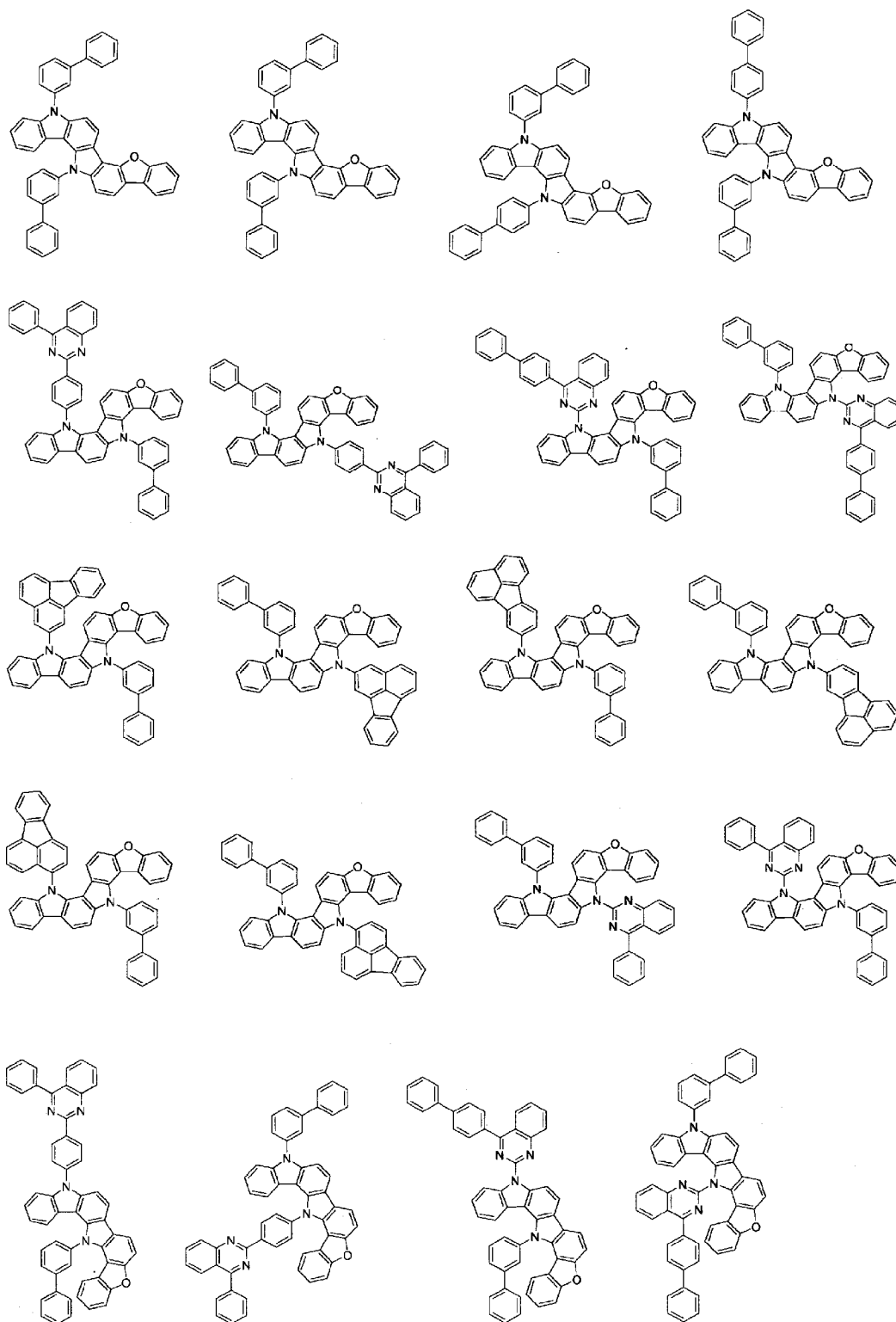
[0195]

[化87]



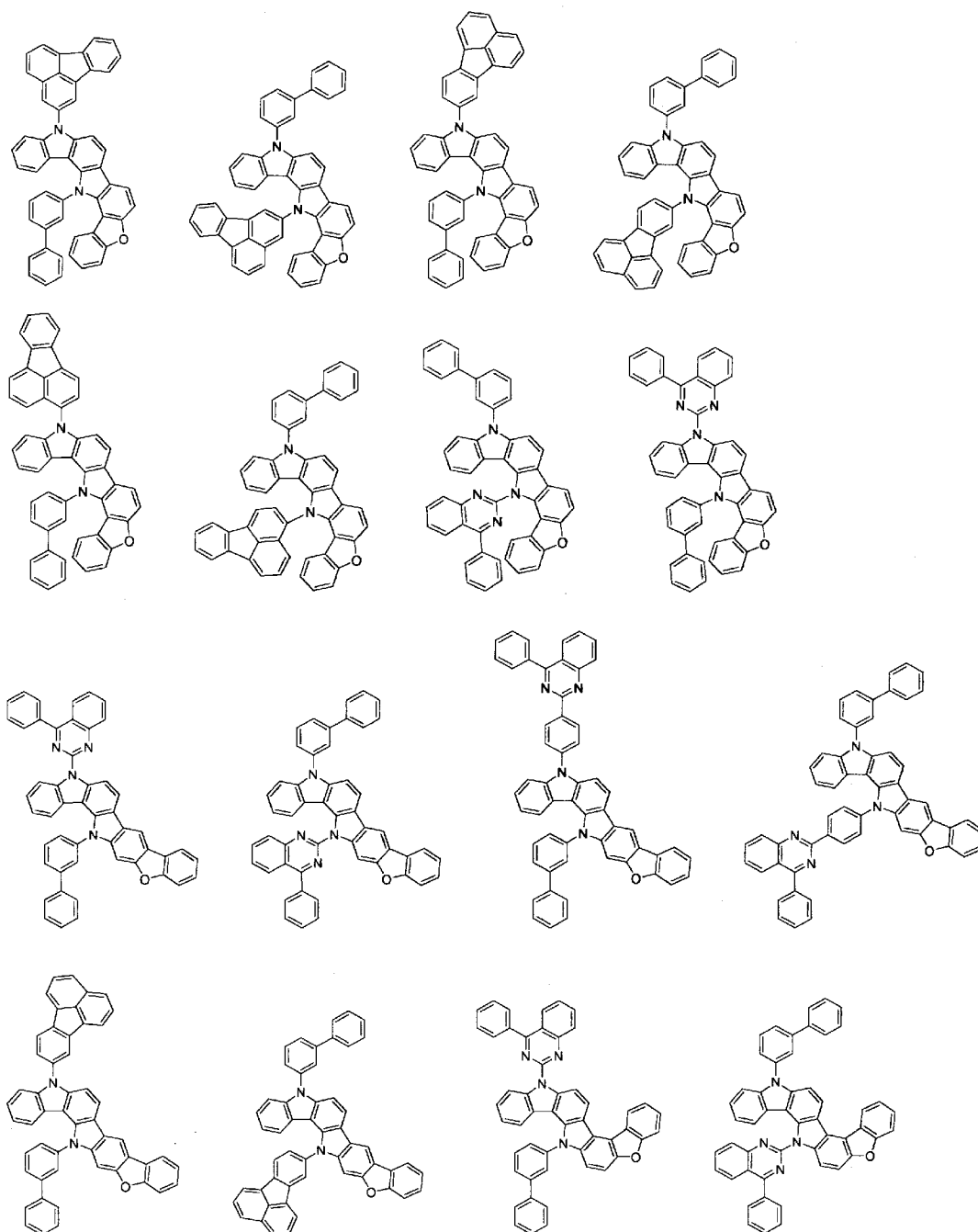
[0196]

[化88]



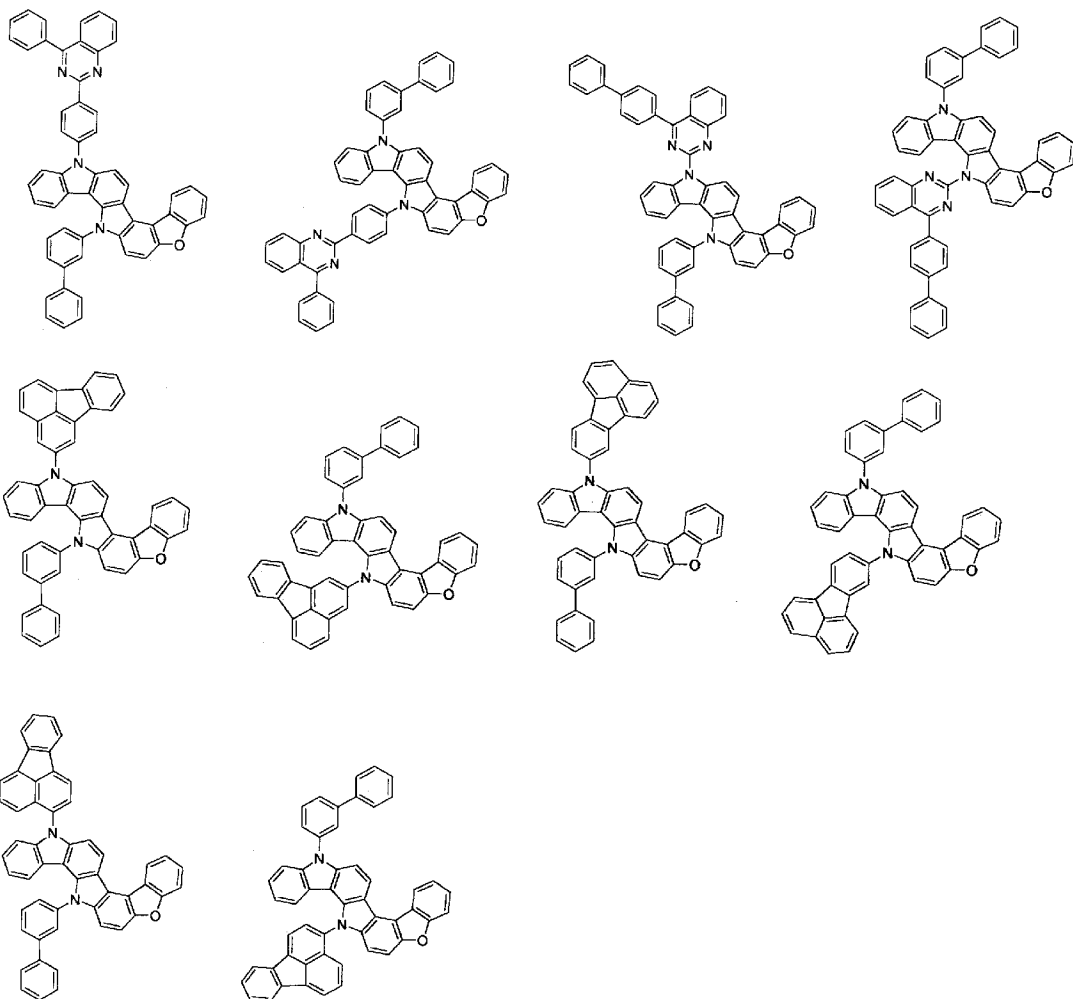
[0197]

[化89]



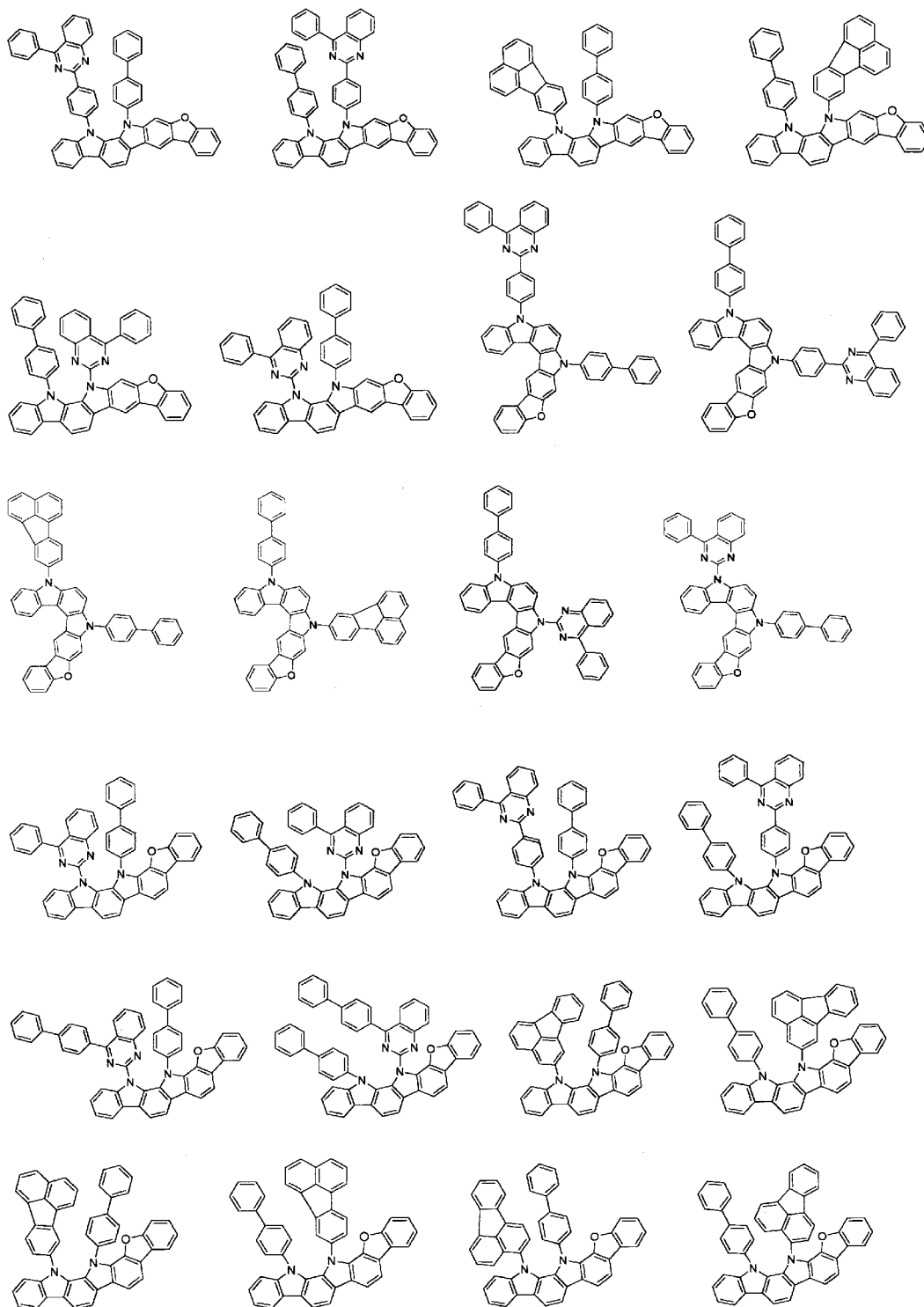
[0198]

[化90]



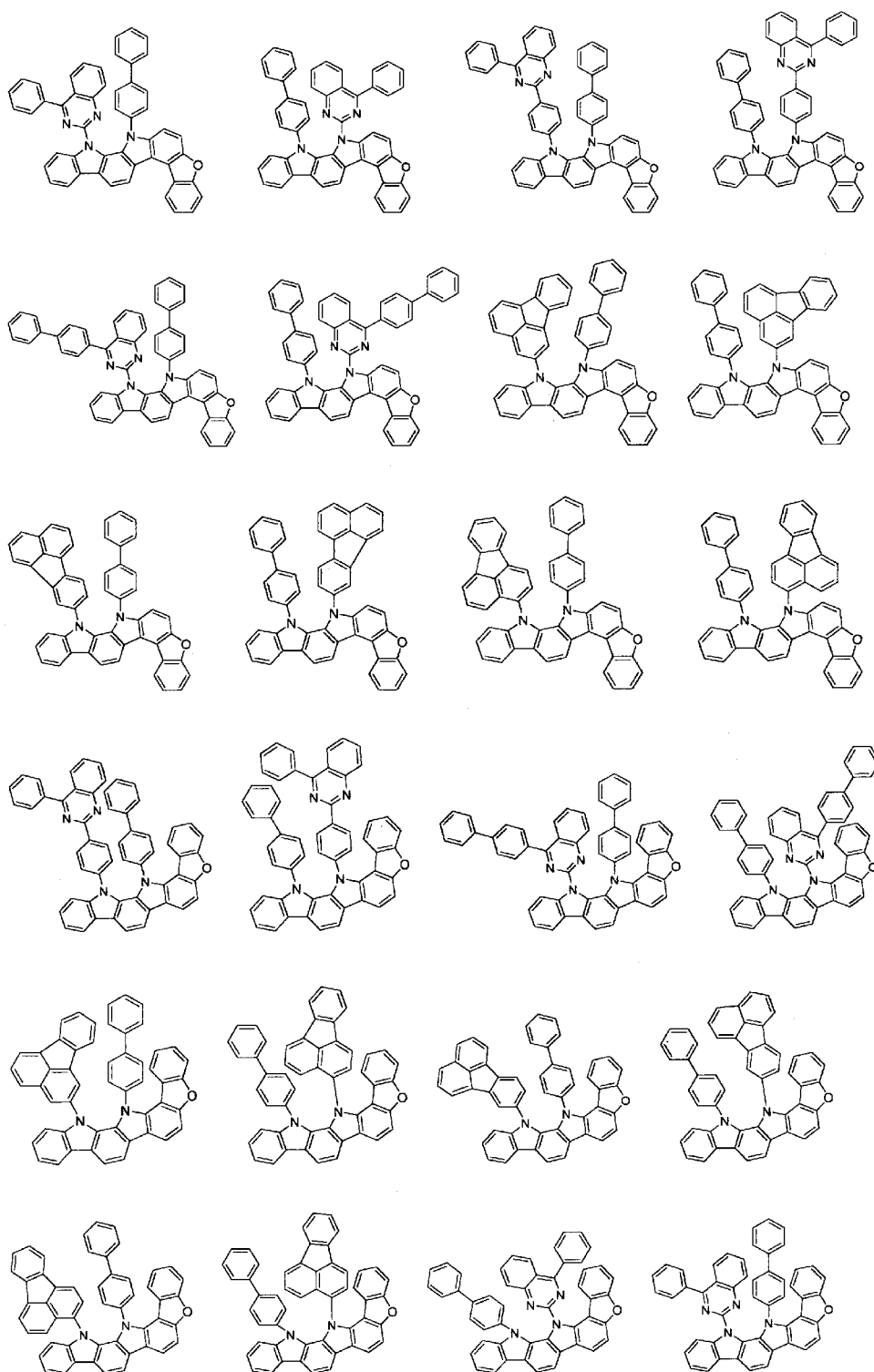
[0199]

[化91]



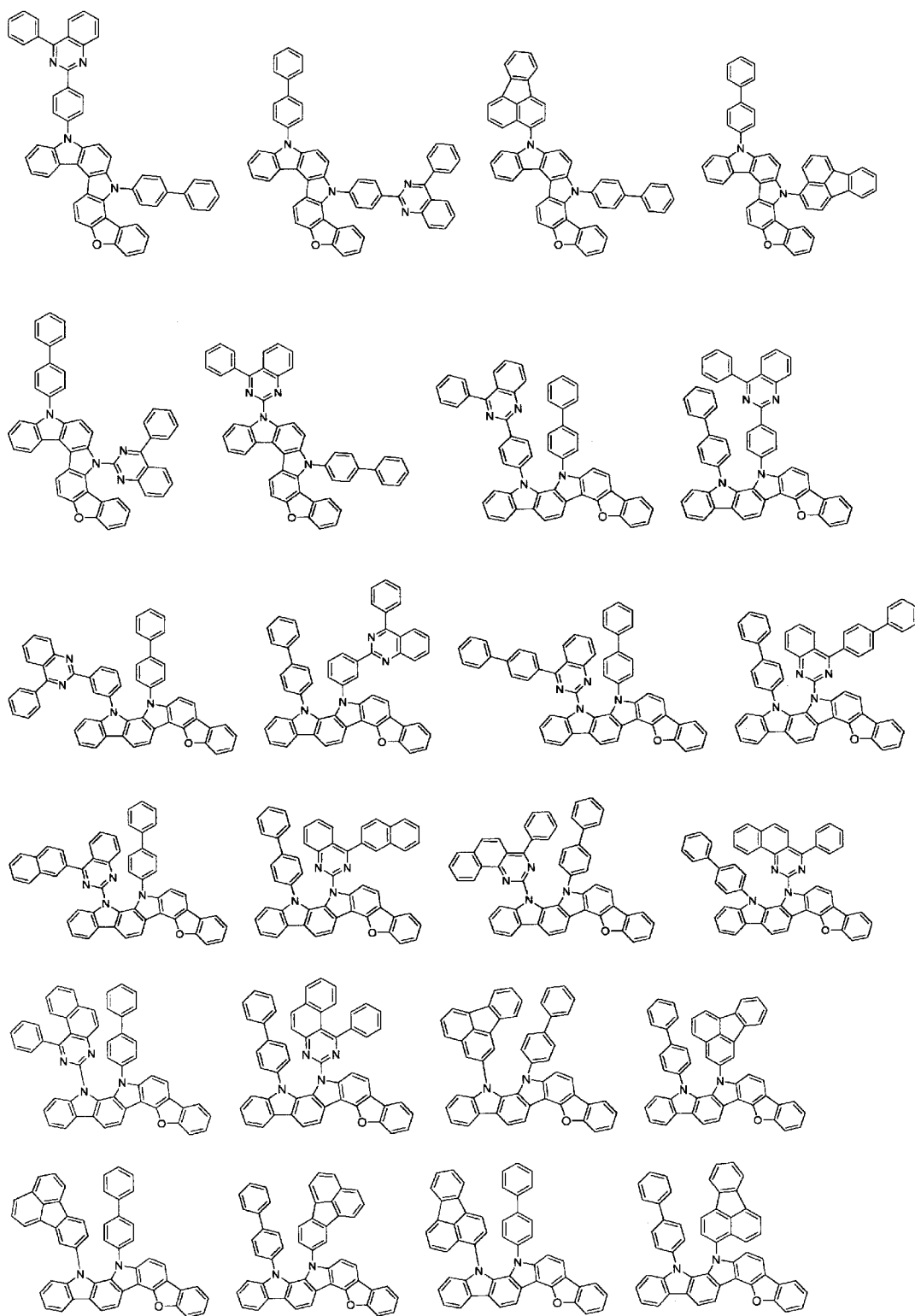
[0200]

[化92]



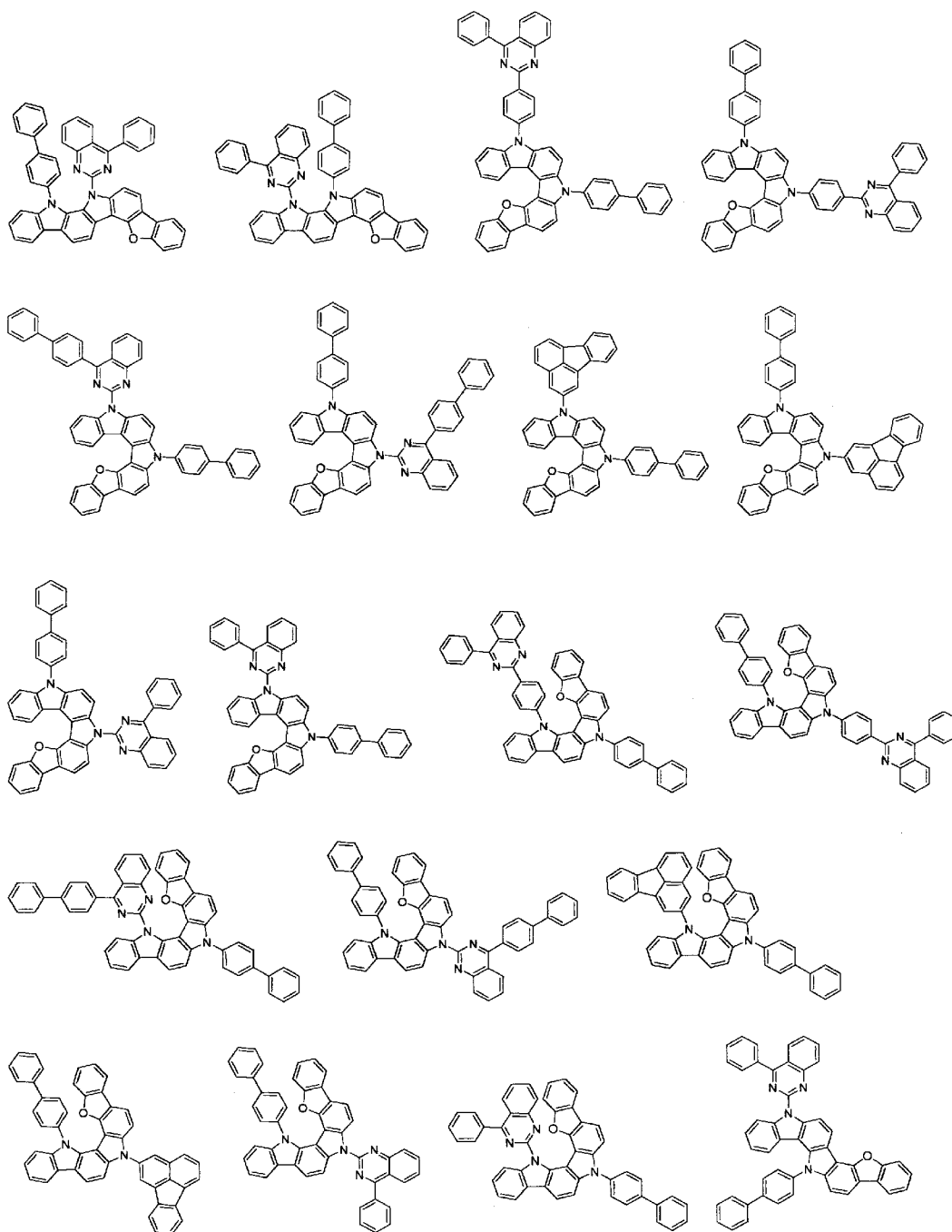
[0201]

[化93]



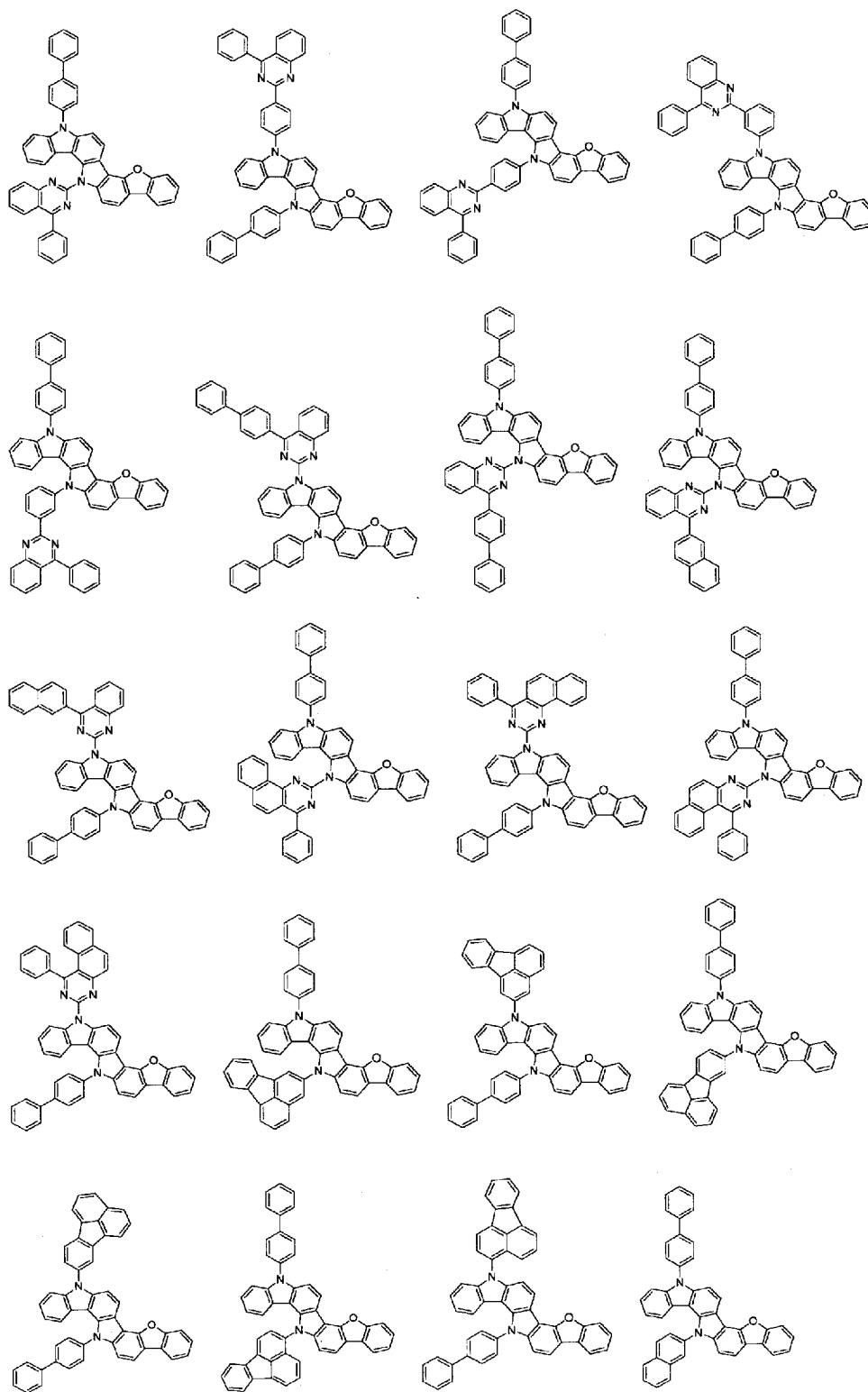
[0202]

[化94]



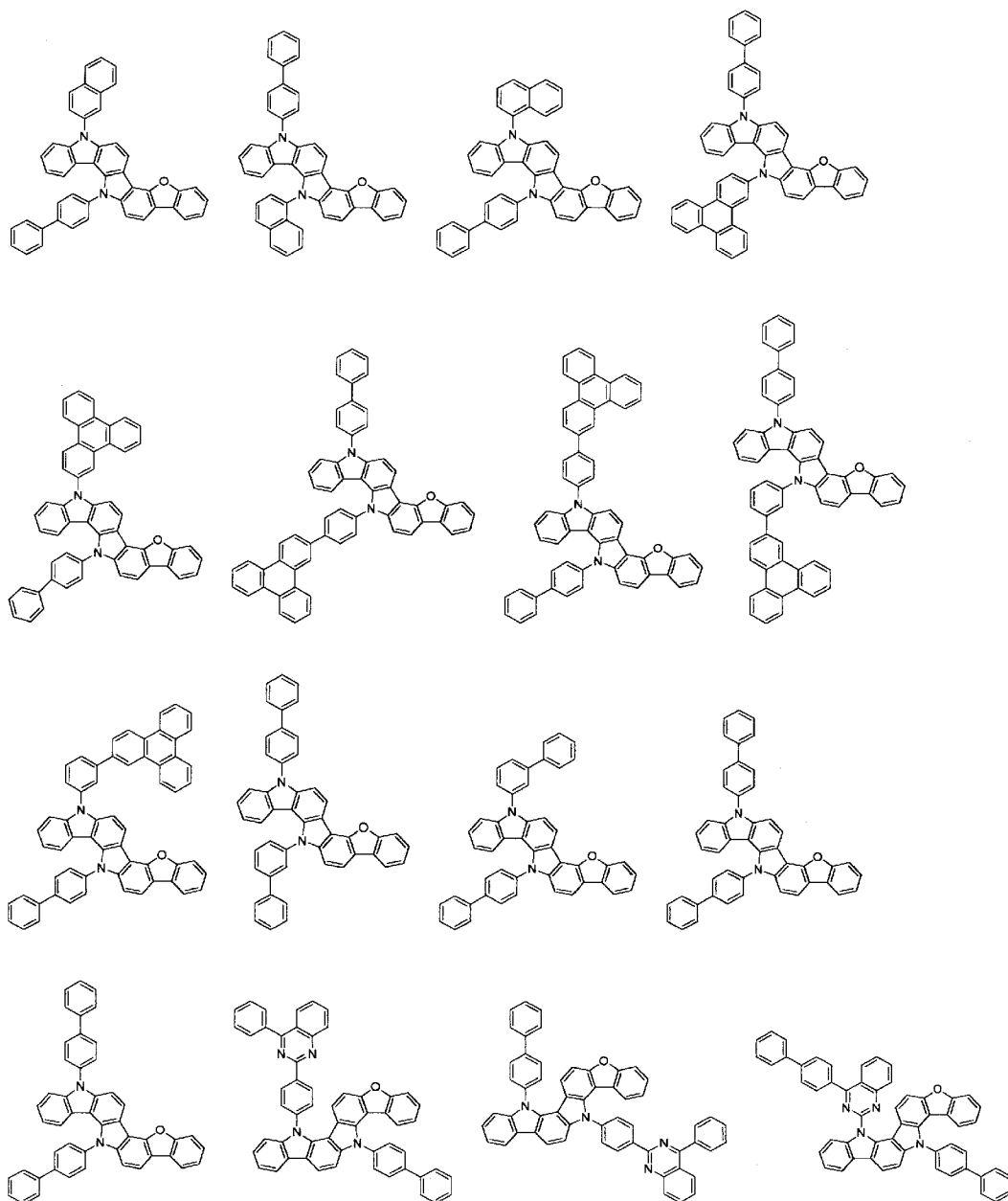
[0203]

[化95]



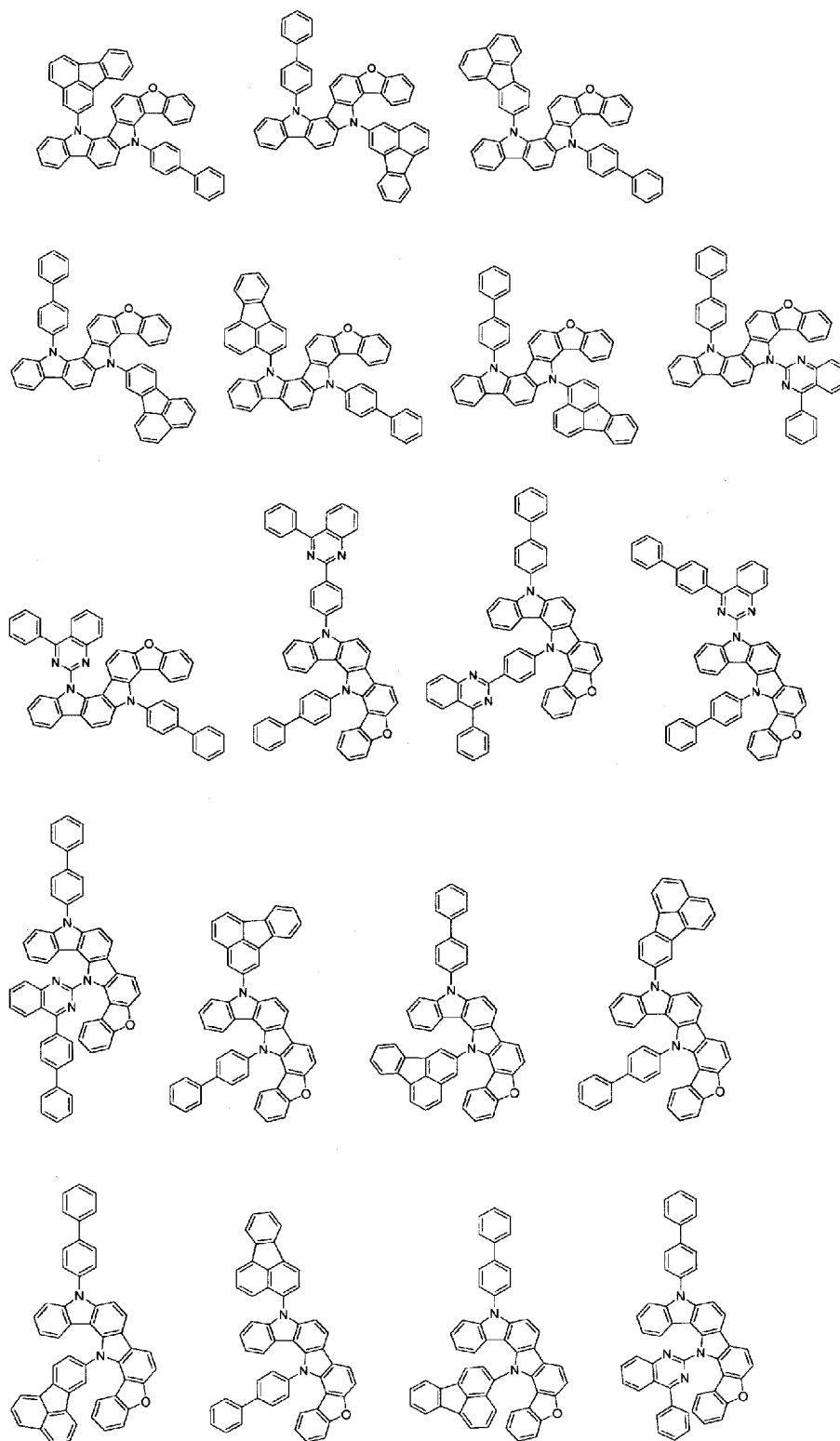
[0204]

[化96]



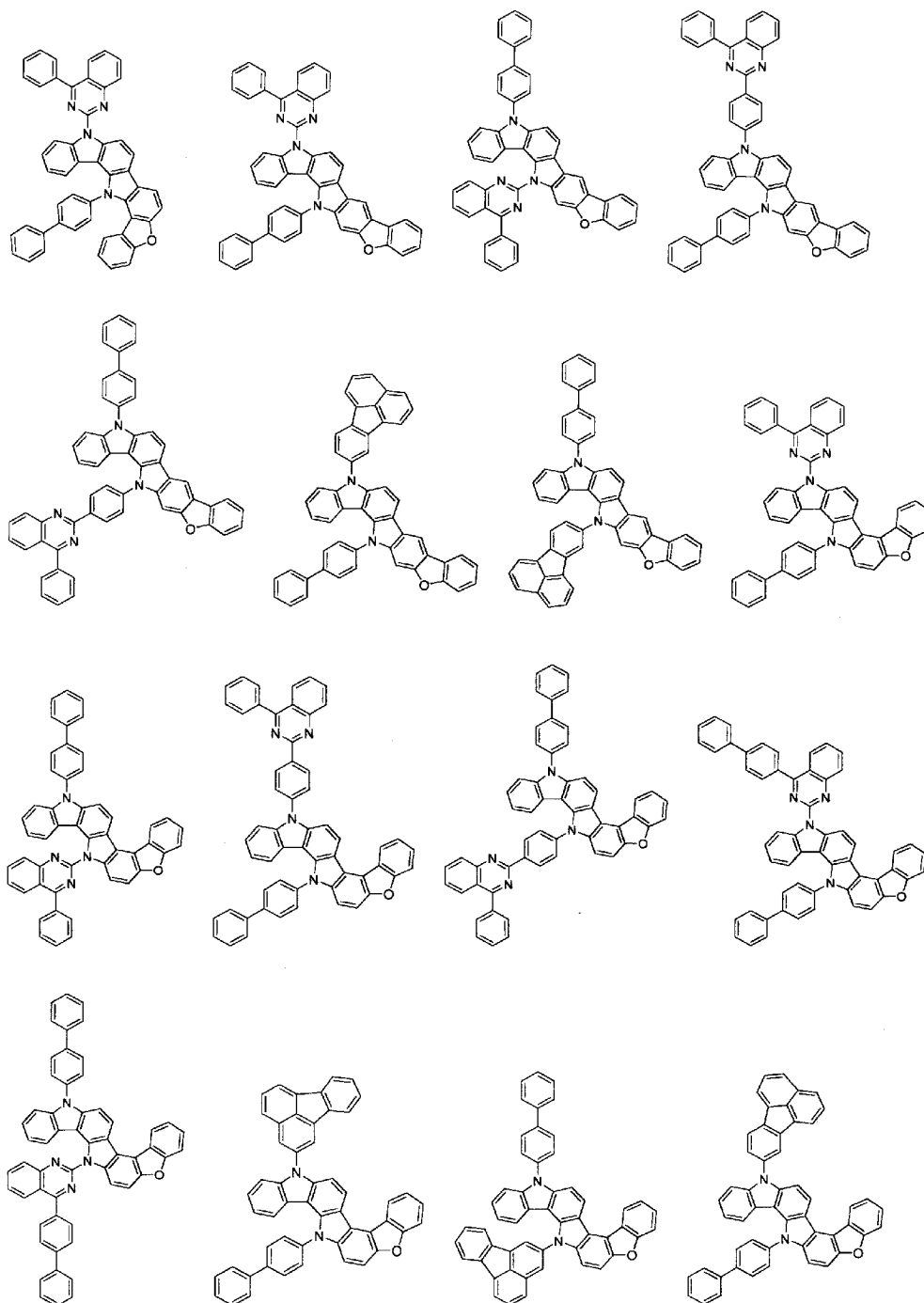
[0205]

[化97]



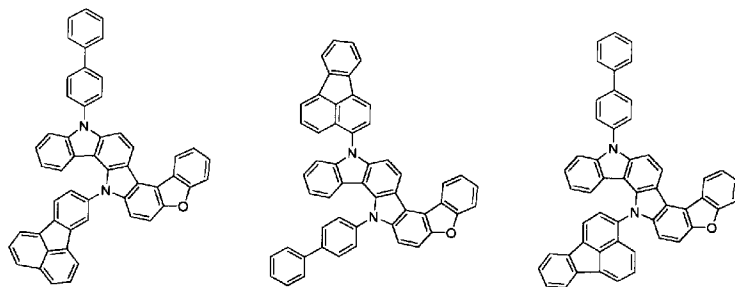
[0206]

[化98]



[0207]

[化99]



[0208] 式（１）で表される化合物は、後記する合成例に示す方法によって、及びそれらの方法において、目的物に合わせた既知の代替反応や原料を用いることで製造することができる。

[0209] B．有機エレクトロルミネッセンス素子用材料

本発明の一態様である有機エレクトロルミネッセンス素子用材料（以下、「本発明の一態様である有機ＥＬ素子用材料」という）は、前記式（１）で表される化合物を含む。

[0210] 本発明の一態様である有機ＥＬ素子用材料は、式（１）で表される化合物のみからなっているてもよいし、その他の化合物を含有しているてもよい。

[0211] 本発明の一態様である有機ＥＬ素子用材料は発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層等の有機薄膜層の形成に用いることができる。

本願発明の一態様である有機ＥＬ素子用材料は、燐光ホスト材料として有用である。

また、本発明の式（１）で表される化合物は、分子平面性が高く電荷輸送性が高いため輸送材料としても有用である。

[0212] C．有機エレクトロルミネッセンス素子

本発明の一態様である有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「本発明の一態様である有機ＥＬ素子」という）は、陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、前記一層以上の有機薄膜層が発光層を含み、前記一層以上の有機薄膜層の少なくとも１層が前記式（１）で表される化合物を含む。

[0213] 前記発光層が、前記式（１）で表される化合物を含むことが好ましい。

前記発光層が、さらに蛍光発光材料及び燐光発光材料から選ばれる１種以上を含有することが好ましい。従って、前記発光層は、燐光発光層であってもいいし、蛍光発光層であってもよいが、燐光発光層であることが好ましい。前記式（１）で表される化合物は、発光層のホスト材料として用いることが好ましく、特に、燐光発光層のホスト材料として用いることが好ましい。

[0214] 前記一層以上の有機薄膜層が、さらに正孔輸送層を含むことが好ましい。

前記一層以上の有機薄膜層が、さらに電子輸送層を含むことが好ましい。

[0215] 本発明の一態様である有機ＥＬ素子の各層の形成は、真空蒸着、スパッタリング、プラズマ、イオンプレーティング等の乾式成膜法やスピンコーティング、ディッピング、フローコーティング等の湿式成膜法のいずれの方法を適用することができる。膜厚は特に限定されるものではないが、適切な膜厚に設定する必要がある。膜厚が厚すぎると、一定の光出力を得るために大きな印加電圧が必要になり効率が悪くなるおそれがある。膜厚が薄すぎるとピンホール等が発生して、電界を印加しても十分な発光輝度が得られないおそれがある。通常、膜厚は５ｎｍ～１０μｍの範囲が適しているが、１０ｎｍ～０．２μｍの範囲がさらに好ましい。

[0216] 以下、有機ＥＬ素子の構成要素の材料等について説明する。

（基板）

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

[0217] （陽極）

基板上に形成される陽極には、仕事関数の大きい（具体的には４．０eV以上）金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物等を用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム－酸化スズ（ITO：I

ndium Tin Oxide)、珪素若しくは酸化珪素を含有した酸化インジウム－酸化スズ、酸化インジウム－酸化亜鉛、酸化タングステン、及び酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。この他、金（Au）、白金（Pt）、又は金属材料の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

[0218] （正孔注入層）

正孔注入層は、正孔注入性の高い物質を含む層である。正孔注入性の高い物質としては、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、マンガン酸化物、芳香族アミン化合物、又は高分子化合物（オリゴマー、デンドリマー、ポリマー等）等も使用できる。

[0219] （正孔輸送層）

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

[0220] （発光層のゲスト材料）

発光層は、発光性の高い物質を含む層であり、種々の材料を用いることができる。例えば、発光性の高い物質としては、蛍光を発光する蛍光性化合物や燐光を発光する燐光性化合物を用いることができる。蛍光性化合物は一重項励起状態から発光可能な化合物であり、燐光性化合物は三重項励起状態から発光可能な化合物である。これらの化合物はドーパント又はドーパント材料と呼ばれることもある。

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

[0221] 発光層に用いることができる緑色系の蛍光発光材料として、芳香族アミン誘導体等を使用できる。具体的には、N - (9, 10-ジフェニル-2-アントリル) -N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: 2PCAPA)、N - [9, 10-ビス (1, 1' -ビフェニル-2-イル) -2-アントリル] -N, 9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン (略称: 2PCABPhA)、N - (9, 10-ジフェニル-2-アントリル) -N, N', N' -トリフェニル-1, 4-フェニレンジアミン (略称: 2DPAPA)、N - [9, 10-ビス (1, 1' -ビフェニル-2-イル) -2-アントリル] -N, N', N' -トリフェニル-1, 4-フェニレンジアミン (略称: 2DPABPhA)、N - [9, 10-ビス (1, 1' -ビフェニル-2-イル)] -N - [4 - (9H-カルバゾール-9-イル) フェニル] -N-フェニルアントラセン-2-アミン (略称: 2YGABPhA)、N, N, 9-トリフェニルアントラセン-9-アミン (略称: DPhAPhA) 等が挙げられる。

[0222] 発光層に用いることができる赤色系の蛍光発光材料として、テトラセン誘導体、ジアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N, N, N', N' -テトラキス (4-メチルフェニル) テトラセン-5, 11-ジアミン (略称: p-mPhTD)、7, 14-ジフェニル-N, N, N', N' -テトラ

キス（４－メチルフェニル）アセナフト〔１，２－*a*〕フルオランテンー３，１０－ジアミン（略称：p-mPhAFD）等が挙げられる。

[0223] 本発明の一態様では、蛍光発光材料が、アントラセン誘導体、フルオランテン誘導体、スチリルアミン誘導体及びアリールアミン誘導体から選択される少なくとも１種を含有することが好ましい。

[0224] 発光層に用いることができる青色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体が使用される。具体的には、ビス〔２－（４′，６′－ジフルオロフェニル）ピリジナト－N，C２′〕イリジウム（Ⅲ）テトラキス（１－ピラゾリル）ボラート（略称：FIr₆）、ビス〔２－（４′，６′－ジフルオロフェニル）ピリジナト－N，C２′〕イリジウム（Ⅲ）ピコリナート（略称：FIrpic）、ビス〔２－（３′，５′-ピストリフルオロメチルフェニル）ピリジナト－N，C２′〕イリジウム（Ⅲ）ピコリナート（略称：Ir(CF₃ppy)₂(pic)）、ビス〔２－（４′，６′－ジフルオロフェニル）ピリジナト－N，C２′〕イリジウム（Ⅲ）アセチルアセトナート（略称：FIracc）等が挙げられる。

[0225] 発光層に用いることができる緑色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体等が使用される。トリス（２－フェニルピリジナト－N，C２′）イリジウム（Ⅲ）（略称：Ir(ppy)₃）、ビス（２－フェニルピリジナト－N，C２′）イリジウム（Ⅲ）アセチルアセトナート（略称：Ir(ppy)₂(acc)）、ビス（１，２－ジフェニル－１H－ベンゾイミダゾラト）イリジウム（Ⅲ）アセチルアセトナート（略称：Ir(pbi)₂(acc)）、ビス（ベンゾ〔h〕キノリナト）イリジウム（Ⅲ）アセチルアセトナート（略称：Ir(bzq)₂(acc)）等が挙げられる。

[0226] 発光層に用いることができる赤色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、白金錯体、テルビウム錯体、ユーロピウム錯体等の金属錯体が使用される。具体的には、ビス〔２－（２′－ベンゾ〔４，５－ α 〕チエニル）ピリ

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

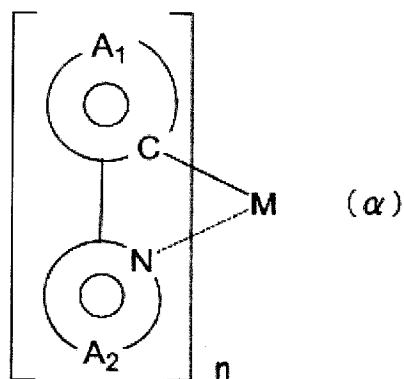
[0227] また、トリス (アセチルアセトナート) (モノフェナントロリン) テルビウム (I I I) (略称 : T b (a c a c)₃ (P h e n)) 、トリス (1 , 3 - ジフェニル - 1 , 3 - プロパンジオナート) (モノフェナントロリン) ユーロピウム (I I I) (略称 : E u (D B M)₃ (P h e n)) 、トリス [1 - (2 - テノイル) - 3 , 3 , 3 - トリフルオロアセトナート] (モノフェナントロリン) ユーロピウム (I I I) (略称 : E u (T T A)₃ (P h e n)) 等の希土類金属錯体は、希土類金属イオンからの発光 (異なる多重度間の電子遷移) であるため、燐光性化合物として用いることができる。

[0228] 本発明の一態様としては、前記燐光発光材料が、イリジウム (I r) 、オスミウム (O s) 及び白金 (p t) から選択される金属原子のオルトメタル化錯体であることが好ましい。

イリジウム (I r) 、オスミウム (O s) 、白金 (P t) から選択される金属原子のオルトメタル化錯体である燐光発光材料は、下記式 (α) で表される錯体であることが好ましい。

[0229]

[化100]



[0230] 式(α)において、Mは、オスミウム、イリジウム及び白金から選ばれる少なくとも一つの金属を示し、nは、該金属の価数を示す。

環A₁は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24のアリール基又は環形成原子数5～30のヘテロアリール基を表わし、環A₂は、窒素をヘテロ環形成原子として含有する置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基を表わす。

[0231] 式(α)の環A₁における環形成炭素数6～24のアリール基としては、前述した式(1)におけるアリール基が挙げられる。

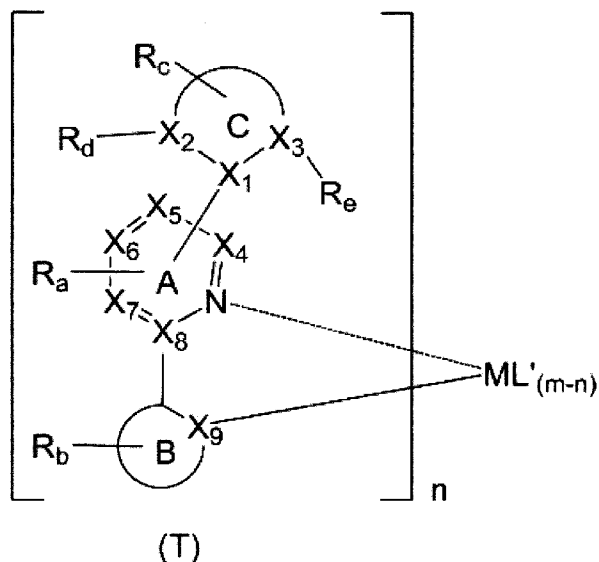
式(α)の環A₁及び環A₂における環形成原子数5～30のヘテロアリール基としては、前述した式(1)におけるアリールが挙げられる。

式(α)の環A₁及び環A₂が有し得る置換基は、前述した式(1)における置換基と同じである。

さらに、式(α)で表される錯体は、下記式(T)又は(U)で表される錯体であることが好ましい。

[0232]

[化101]



[0233] 式 (T) において、Mは金属を表し、環B及び環Cは、各々独立に環形成原子数5若しくは6のアリール基又はヘテロアリール基を表す。

環A－環Bは、アリール基又はヘテロアリール基の結合対を表し、環Aの窒素原子及び環Bの sp^2 混成原子を介して金属Mに配位する。

環A－環Cは、アリール基又はヘテロアリール基の結合対を表す。

R_a 、 R_b 及び R_c は、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数2～25のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～25のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24のアリール基及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基からなる群より選択されるいずれかを表し、各々独立に1つ～4つである。

$X_1 \sim X_9$ は、各々独立に、炭素原子又は窒素原子を表す。

R_d 及び R_e は、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数2～25のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数2～25のアルキニル基、置換も

しくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基からなる群より選択されるいずれかを表し、環 C に結合する R_c 、 R_d 及び R_e の少なくとも 1 つは、水素原子ではない。

m は金属 M の酸化状態を表し、 n は 1 以上である。 L' は、モノアニオン性の二座配位子を表す。

[0234] 式 (T) において、M は、オスミウム、イリジウム、白金等が挙げられ、中でもイリジウムが好ましい。

環 B 及び環 C で表される環形成原子数 5 若しくは 6 のアリール基としては、前述した式 (1) におけるアリール基が挙げられる。

環 B 及び環 C で表される環形成原子数 5 若しくは 6 のヘテロアリール基としては、前述したヘテロアリール基が挙げられる。

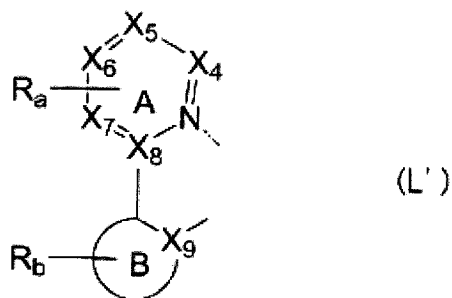
R_1 、 R_2 、 R_a 、 R_b 及び R_c で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール基としては、それぞれ、前述したものと同様の基が挙げられる。

R_1 、 R_2 、 R_a 、 R_b 及び R_c で表される置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルケニル基、及び置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルキニル基としては、それぞれ、前述したものと同様の基が挙げられる。

L' で表されるモノアニオン性の二座配位子としては、下記式 (L') で表わされる配位子が挙げられる。

[0235]

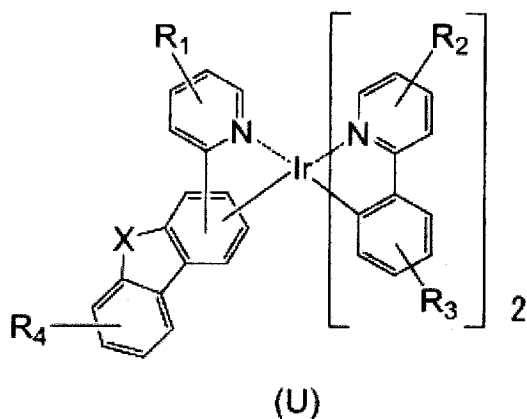
[化102]



[0236] 式 (L') において、 $X_4 \sim X_9$ 、 R_a 、及び R_b は、式 (T) における $X_4 \sim X_9$ 、 R_a 、及び R_b と同義であり、好ましい態様も同様である。

X_9 から環 B より外側に伸びる実線と、環 A の窒素原子から環 A より外側に伸びる破線を介して、式 (L') で表わされる配位子は、式 (T) で表される金属 M に配位する。

[0237] [化103]



[0238] 式 (U) において、X は、NR、酸素原子、硫黄原子、BR、及びセレン原子からなる群より選択されるいずれかを表し、R は、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基である。

R_1 、 R_2 、 R_3 及び R_4 は、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、及び置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群より選択されるいずれかを表し、各々独立に 1 つ ～ 4 つである。

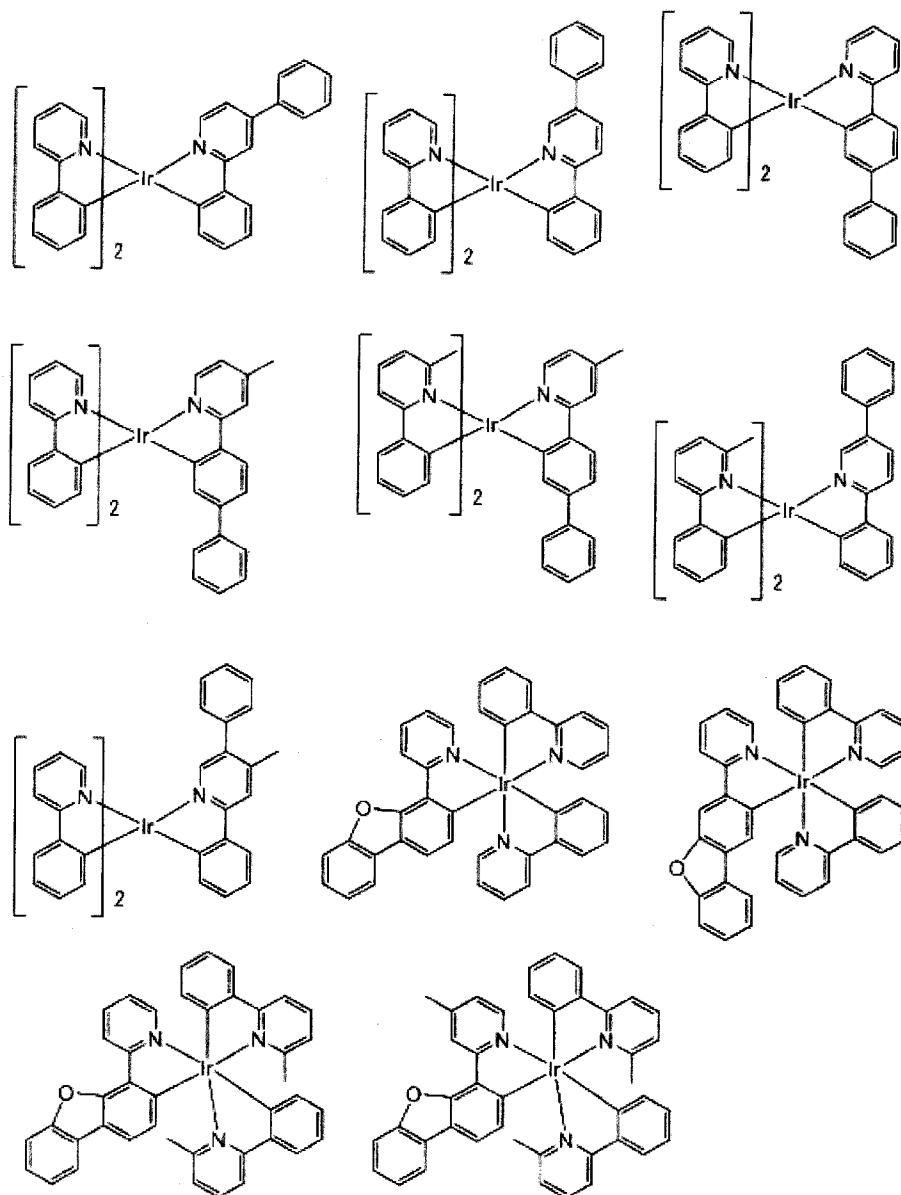
[0239] 式 (U) において、R、 R_1 、 R_2 、 R_3 及び R_4 で表される炭素数 1 ～ 25 のアルキル基としては、前述した基が挙げられ、好ましい態様も同様である。

。

また、 R_1 、 R_2 、 R_3 及び R_4 で表される環形成炭素数6～24のアリール基としては、前述した基が挙げられ、好ましい態様も同様である。

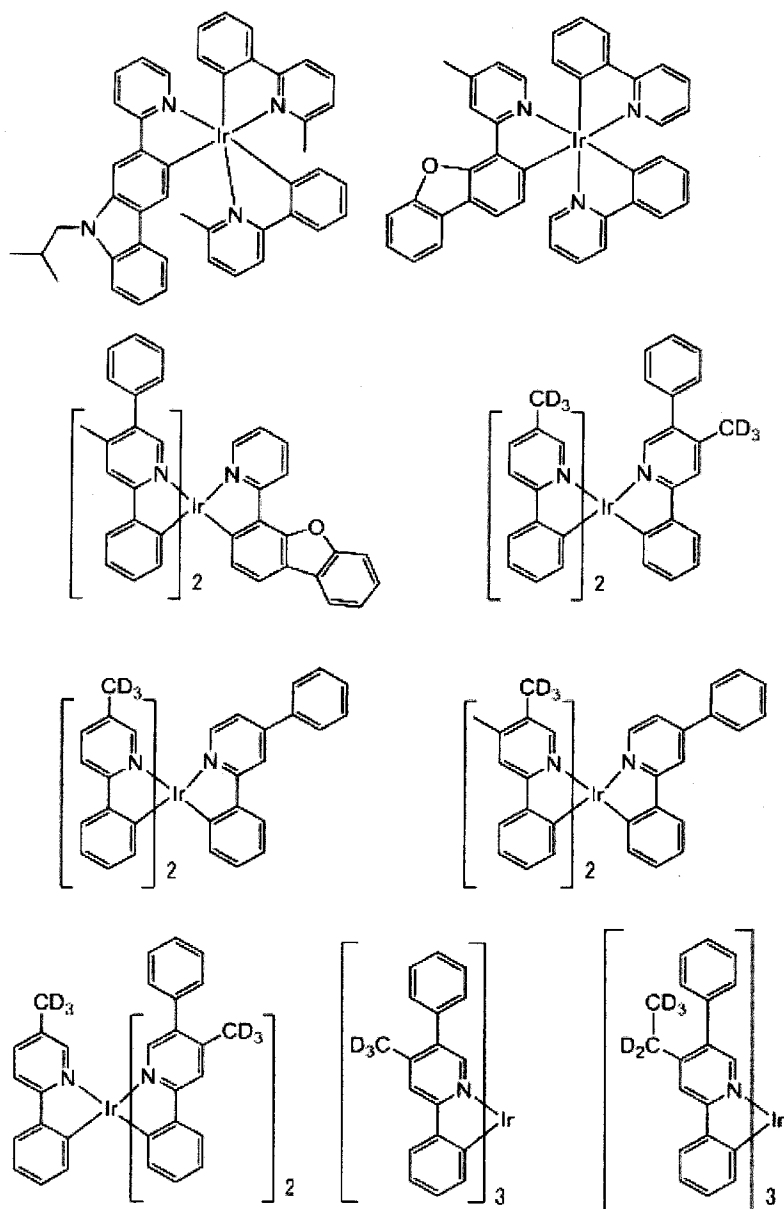
[0240] 式(T)又は(U)で表される錯体としては、以下の化合物が好適であるが、特にこれらに限定されるものではない。

[0241] [化104]



[0242]

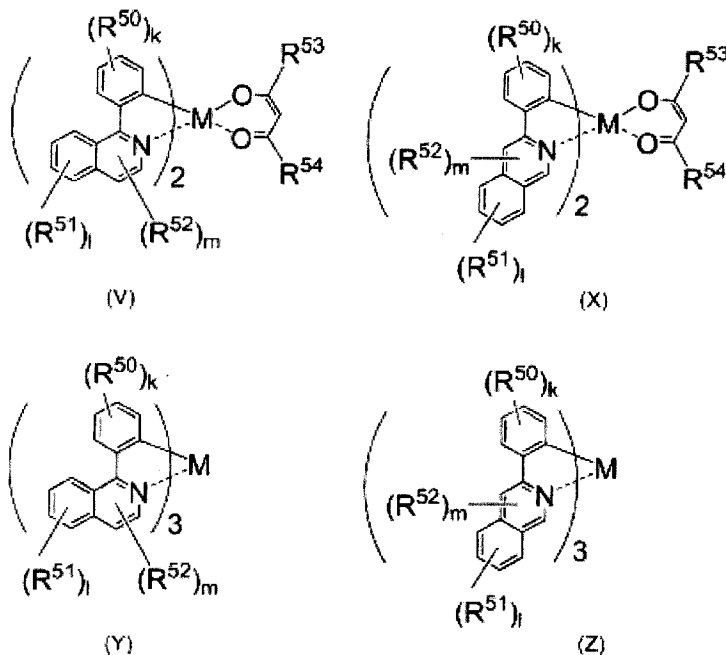
[化105]



[0243] 式(α)で表される錯体として、式(T)又は(U)で表される錯体以外に、下記式(V)、(X)、(Y)又は(Z)で表される錯体を用いることもできる。

[0244]

[化106]

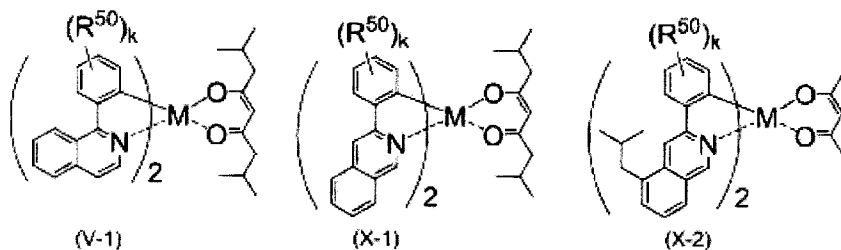


[0245] 式 (V)、(X)、(Y) 又は (Z) において、 $R^{50} \sim R^{54}$ は、水素原子又は置換基、 k は 1～4 の整数であり、 l は 1～4 の整数であり、 m は 1～2 の整数である。 M は、I r、O s、又は P t である。

$R^{50} \sim R^{54}$ の示す置換基としては、前述した置換基と同様のものが挙げられる。

式 (V) は下記式 (V-1) で表されることが好ましく、式 (X) は下記式 (X-1) 又は式 (X-2) で表されることが好ましい。下記式 (V-1)、(X-1)、及び (X-2) において、 R^{50} 、 k 及び M は、上記の、 R^{50} 、 k 及び M と同じである。

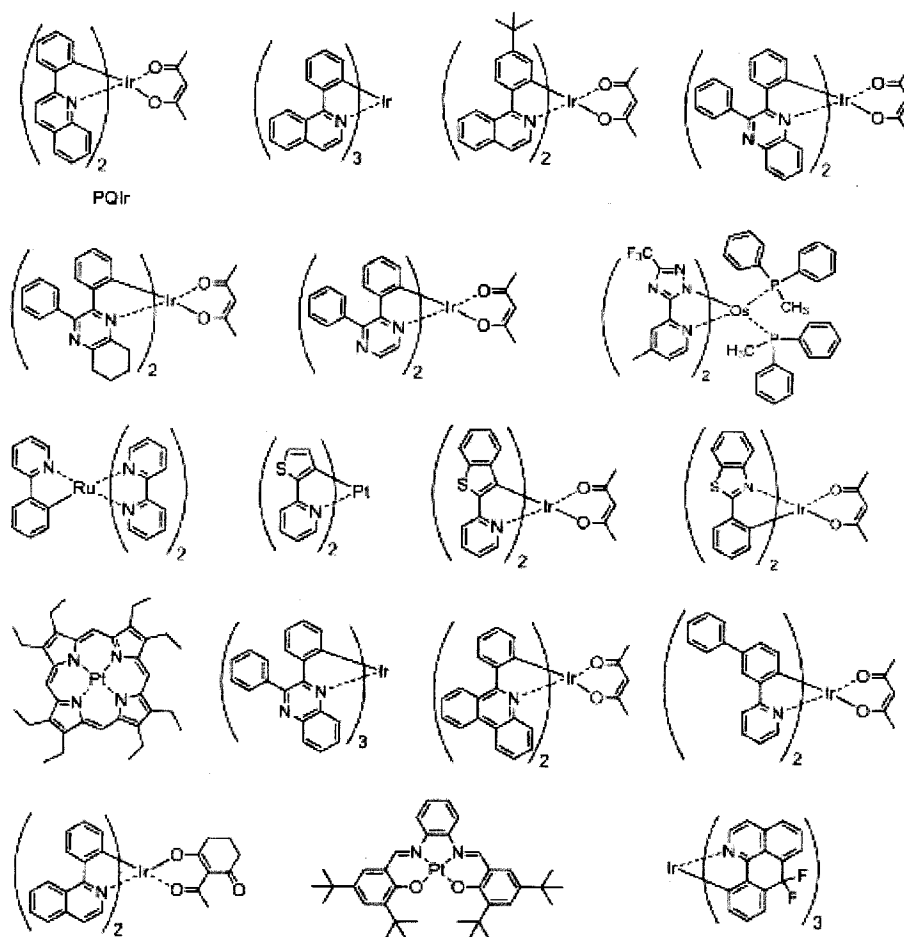
[0246] [化107]



[0247] 式 (V)、(X)、(Y) 又は (Z) で表される錯体の具体例を、以下に

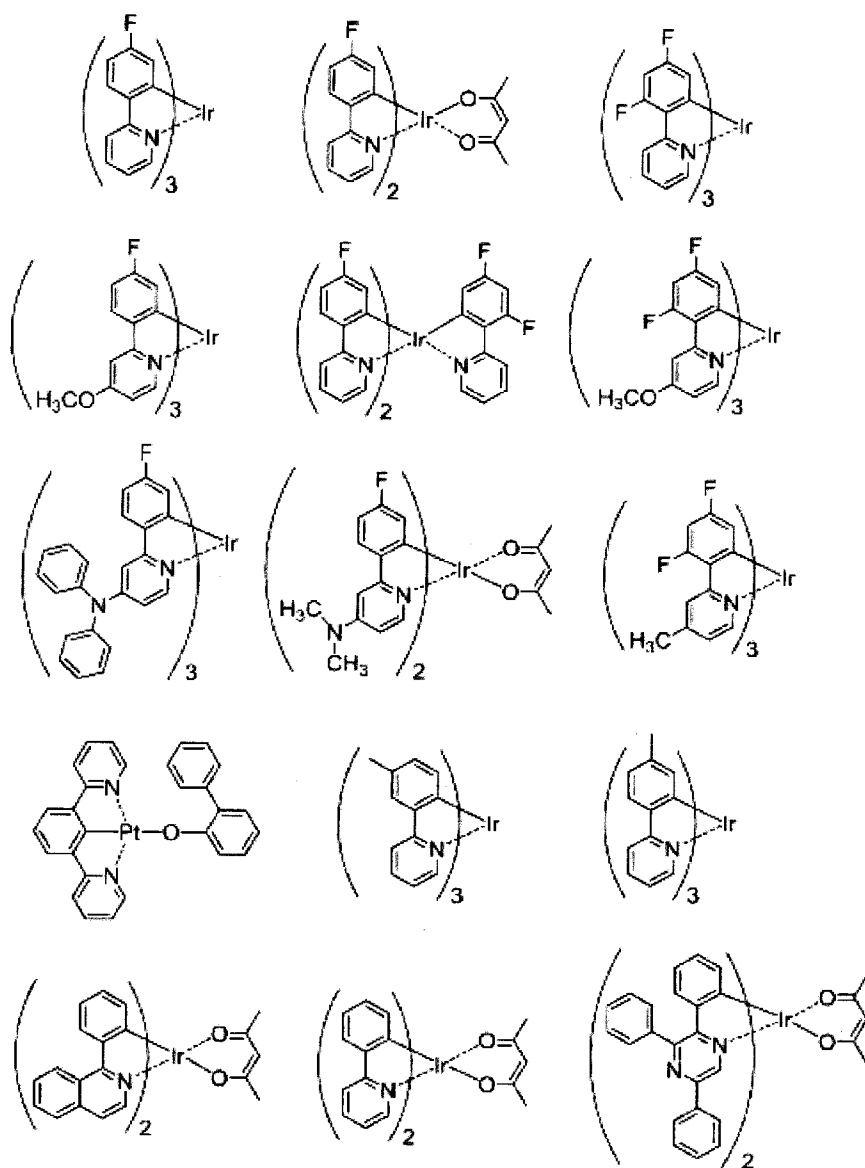
示すが、特にこれらに限定されるものではない。

[0248] [化108]



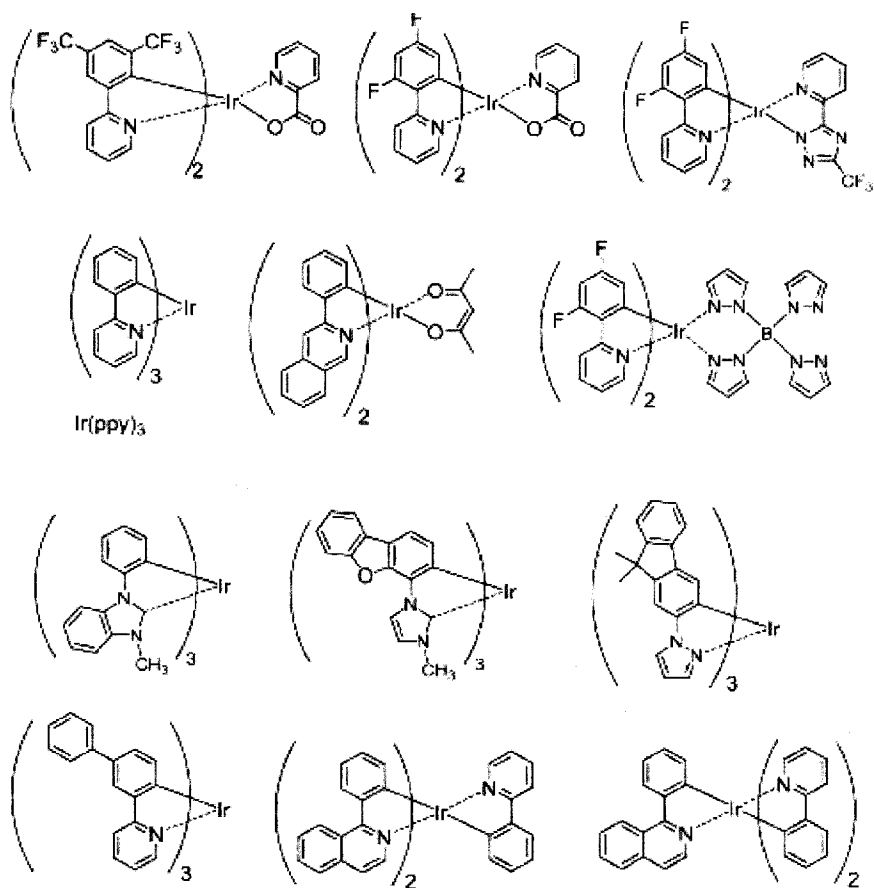
[0249]

[化109]



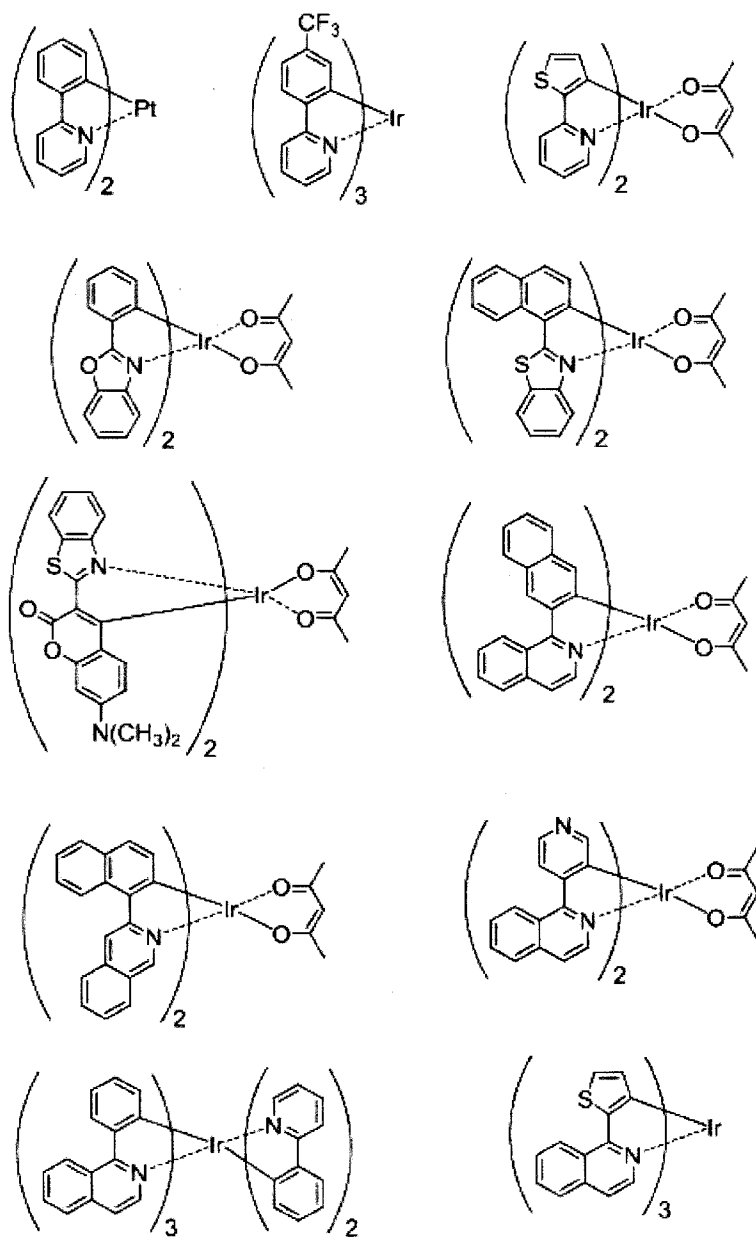
[0250]

[化110]



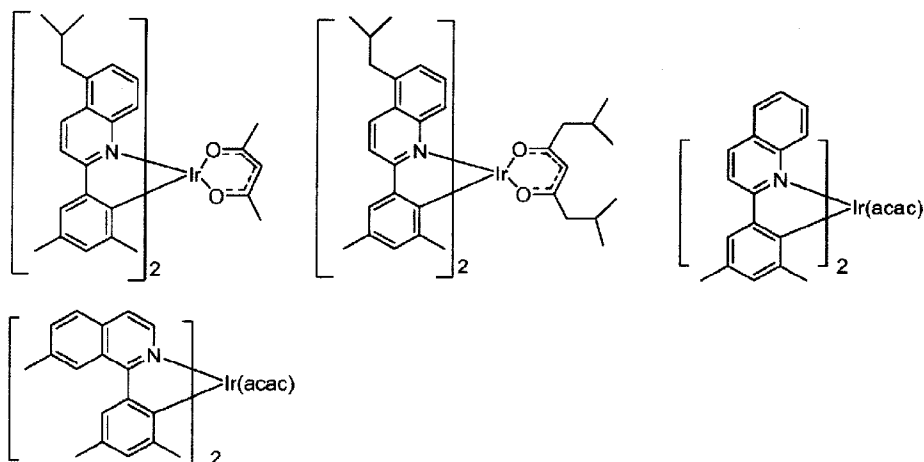
[0251]

[化111]



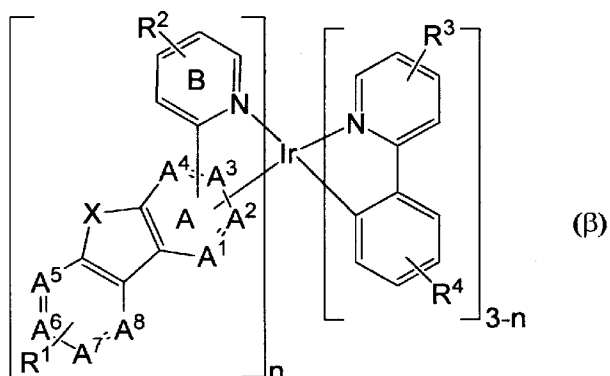
[0252]

[化112]



[0253] また、発光材料として、下記式 (β) で表されるイリジウム錯体も好ましい。

[0254] [化113]



[0255] 式 (β) において、 $A^1 \sim A^8$ は炭素又は窒素を含み、 $A^1 \sim A^8$ の少なくとも1つは窒素であり、環 B は C-C 結合により環 A に結合し、イリジウム (Ir) は Ir-C 結合により環 A に結合する。 $A^1 \sim A^8$ の1つのみが窒素であることが好ましく、 $A^5 \sim A^8$ の1つのみが窒素であることがさらに好ましい。

X は O, S 又は Se であり、O が好ましい。

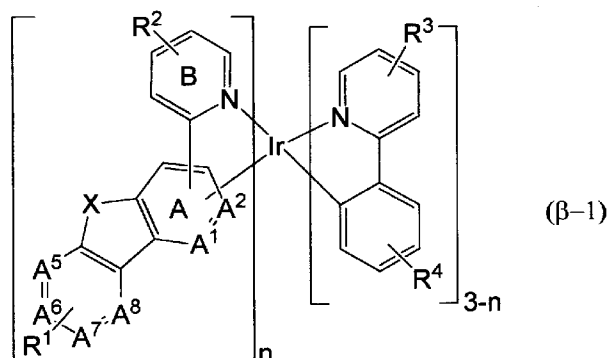
$R^1 \sim R^4$ は独立してモノー、ジー、トリーもしくはテトラー置換、又は無置換であり、隣接する $R^1 \sim R^4$ は互いに結合して環を形成してもよく、 $R^1 \sim R^4$ は独立して、水素、重水素、ハロゲン、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 25 のアルキル、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 25 のシクロアル

キル、置換もしくは無置換の原子数 2 ～ 25 のヘテロアルキル、置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアリールアルキル、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルコキシ、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 24 のアリールオキシ、置換もしくは無置換のアミノ、炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたシリル、置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルケニル、環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルケニル、原子数 3 ～ 25 のヘテロアルケニル、炭素数 2 ～ 25 のアルキニル、環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール、環形成原子数 5 ～ 30 のヘテロアリール、アシル、炭素数 1 ～ 25 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ～ 24 のアリール基からなる群から選択される 1 以上の基で置換されたカルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、及びこれらの組み合わせからなる群から選択される。R¹～R⁴は独立して水素、重水素、炭素数 1 ～ 25 のアルキル及びこれらの組み合わせからなる群から選択することが好ましい。R²及び／又はR³が炭素数 1 ～ 25 のアルキル基であることが好ましく、当該アルキル基が重水素化されているか、もしくは部分的に重水素化されていることがさらに好ましい。

n は 1 ～ 3 の整数であり、1 であることが好ましい。

[0256] 式 (β) で表されるイリジウム錯体としては、下記式 (β-1) で表されるイリジウム錯体であることが好ましい。

[化114]

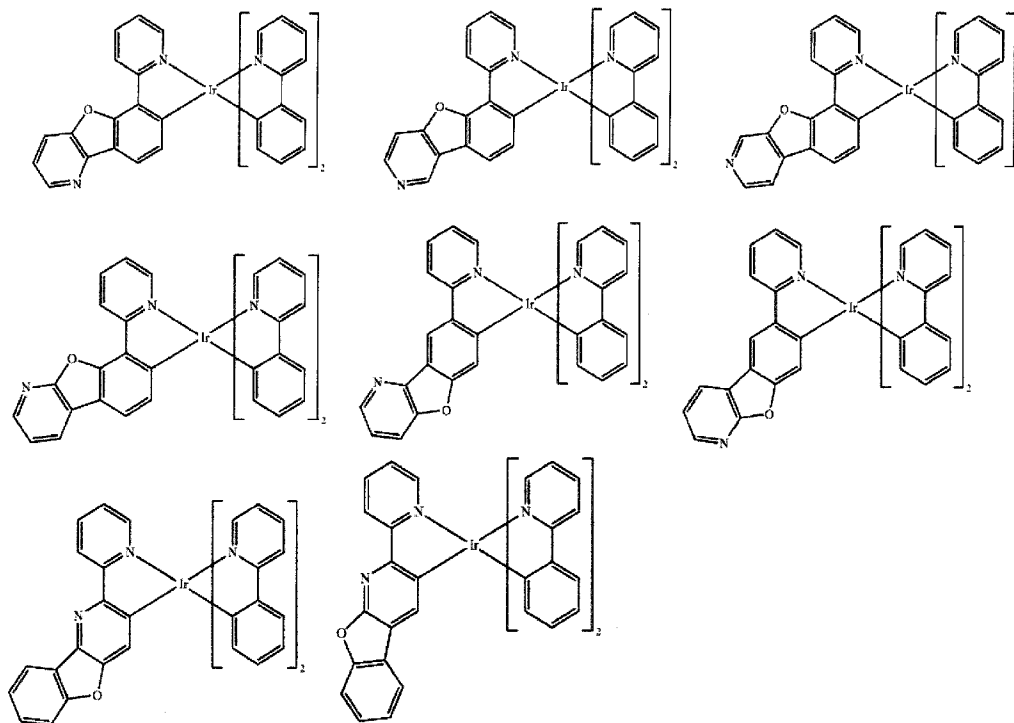


[0257] 式 (β-1) における A¹, A², A⁵～A⁸, X, R¹～R⁴, 及び n は式 (

β)と同様である。

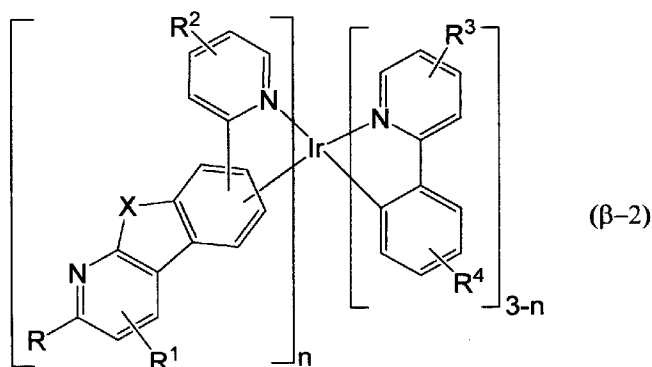
[0258] 式(β)又は式(β-1)で表されるイリジウム錯体の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

[0259] [化115]



[0260] また、式(β)で表されるイリジウム錯体は、下記式(β-2)で表されるイリジウム錯体であることが好ましい。

[0261] [化116]



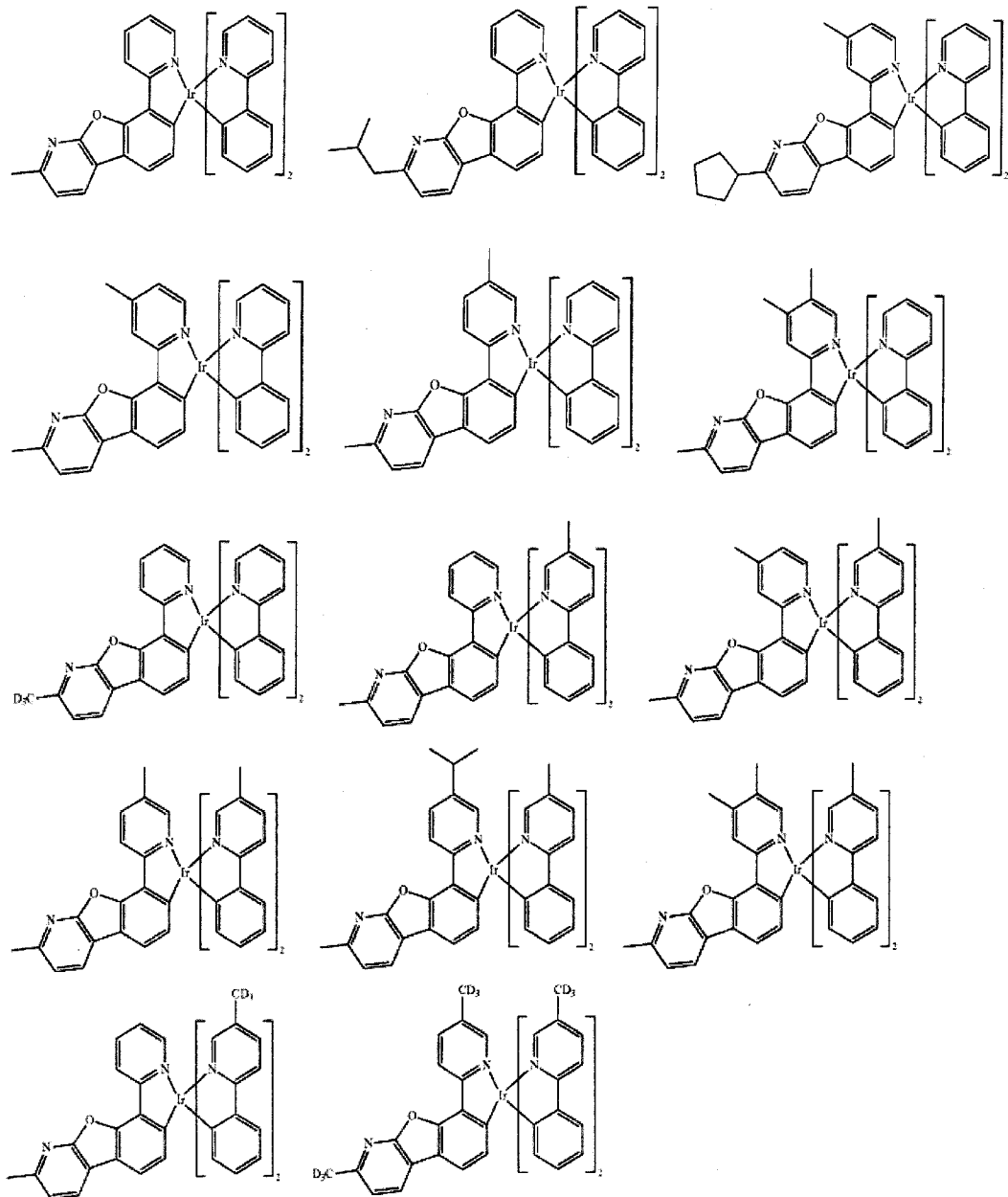
[0262] 式(β-2)において、 $R^1 \sim R^4$ 、 X 及び n は式(β)と同様である。

R は、置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル及びこれらの組み合わせから

なる群から選択される。Rは好ましくは置換もしくは無置換の炭素数1～25のアルキル又は置換もしくは無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキルである。

[0263] 式(β-2)で表されるイリジウム錯体の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

[0264] [化117]



[0265] (発光層のホスト材料)

発光層としては、上述した発光性の高い物質(ゲスト材料)を他の物質(

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

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

[0266] (電子輸送層)

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

[0267] (電子注入層)

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

[0268] (陰極)

陰極には、仕事関数の小さい(具体的には3.8 eV以下)金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物等を用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第1族又は第2族に属する元素、即ちリチウム(Li)やセシウム(Cs)等のアルカリ金属、及びマグ

ネシウム (Mg) 等のアルカリ土類金属、及びこれらを含む合金（例えば、MgAg、AlLi）等の希土類金属及びこれらを含む合金等が挙げられる。

[0269] D. 電子機器

本発明の一態様である電子機器は、前記本発明の一態様である有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載している。

本発明の一態様である有機エレクトロルミネッセンス素子は、様々な電子機器に使用でき、例えば壁掛けテレビのフラットパネルディスプレイ等の平面発光体、複写機、プリンター、液晶ディスプレイのバックライト又は計器類等の光源、表示板、標識灯等に利用できる。また、本発明の化合物は、有機EL素子だけでなく、電子写真感光体、光電変換素子、太陽電池、イメージセンサー等の分野においても利用できる。

実施例

[0270] 次に、実施例及び比較例を挙げて本発明をさらに詳しく説明するが、本発明はこれらの実施例の記載内容になんら制限されるものではない。

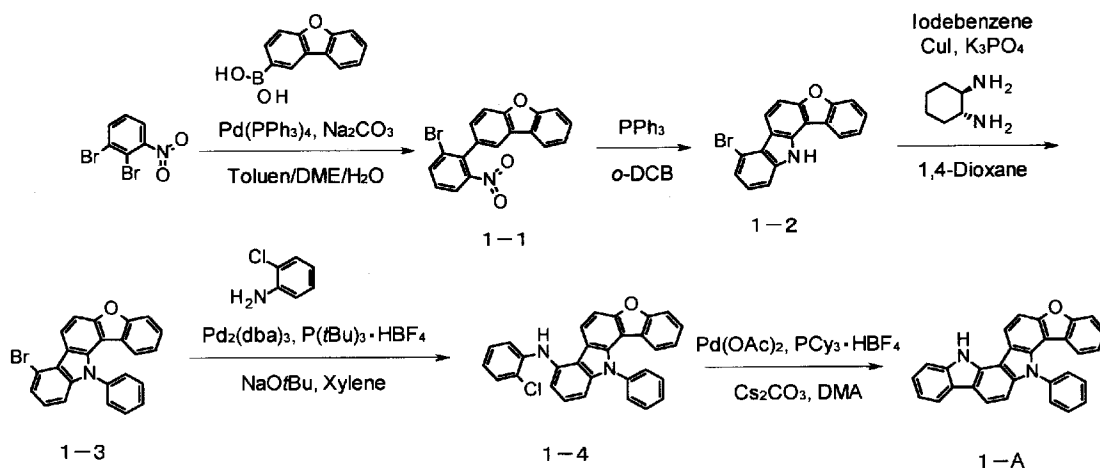
尚、以下の合成反応を参照し、目的物に合わせた公知の代替反応や原料を用いることによって、本願の請求の範囲に記載の化合物を合成することが可能である。

[0271] 中間体合成例 1（中間体 1-A の合成）

中間体 1-A の合成スキームを以下に示す。

[0272]

[化118]



[0273] 中間体 1-1 の合成

アルゴン雰囲気下、1,2-ジブロモ-3-ニトロベンゼン：2.1 g、ジベンゾフラン-2-ボロン酸：1.7 g、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）：165 mg、炭酸ナトリウム：2.3 g、トルエン：25 mL、1,2-ジメトキシエタン：5 mL、水：5 mLをフラスコに仕込み、12時間加熱還流撹拌した。

室温（25℃）まで冷却後、反応溶液を分液ロートに移しトルエンにて抽出した。その後、有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体2.0 g（収率76%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間1-1と同定した。

[0274] 中間体 1-2 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体1-1：2.0 g、トリフェニルホスフィン：3.6 g、1,2-ジクロロベンゼン：50 mLをフラスコに仕込み、12時間加熱撹拌した。

室温（25℃）まで冷却後、反応溶液をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体1.2 g（収率67%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体1-2と同定した。

[0275] 中間体 1-3 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 1-2 : 1.2 g、ヨードベンゼン : 1.5 g、よう化銅 (I) : 35 mg、trans-1,2-シクロヘキサンジアミン : 62.3 mg、リン酸三カリウム : 3.1 g、1,4ジオキサン : 20 mL をフラスコに仕込み、12 時間加熱還流撹拌した。

室温 (25℃) まで冷却後、反応溶液を分液ロートに移し、水を加えトルエンにて抽出した。その後、有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 886 mg (収率 59%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間 1-3 と同定した。

[0276] 中間体 1-4 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 1-3 : 886 mg、2-クロロアニリン : 329 mg、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) : 39 mg、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート : 50 mg、ナトリウム tert-ブトキシド : 480 mg、キシレン : 8 mL をフラスコに仕込み、12 時間加熱還流撹拌した。

室温 (25℃) まで冷却後、反応溶液を濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 808 mg (収率 82%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 1-4 と同定した。

[0277] 中間体 1-A の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 1-4 : 808 mg、酢酸パラジウム (II) : 40 mg、トリシクロヘキシルホスホニウムテトラフルオロボラート : 130 mg、炭酸セシウム : 1.7 g、N,N-ジメチルアセトアミド : 15 mL をフラスコに仕込み、130℃で12 時間加熱撹拌した。

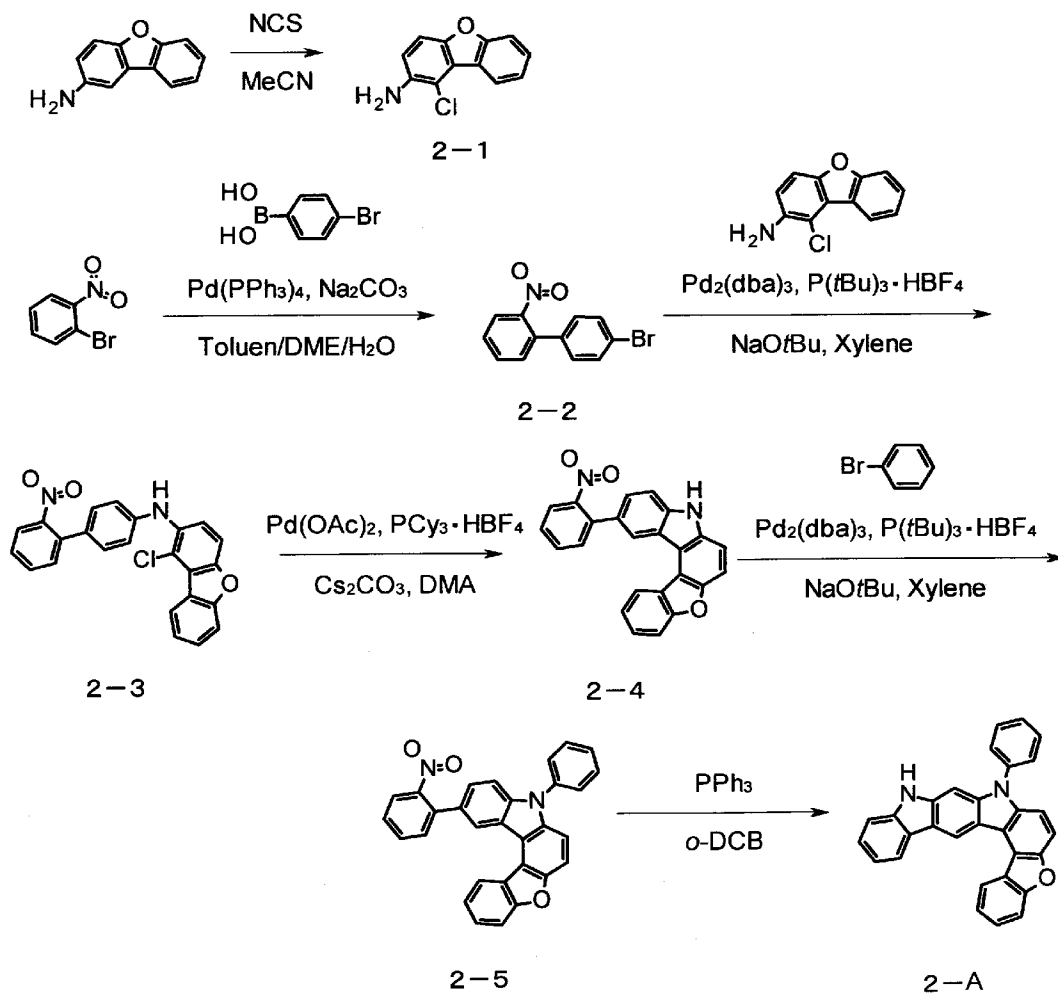
室温 (25℃) まで冷却後、反応溶液を分液ロートに移し水を加えた後、ヘキサン : 酢酸エチル = 3 : 1 の溶液にて抽出した。その後、有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 528 mg (収率 71%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 1-A と同定した。

[0278] 中間体合成例 2（中間体 2-A の合成）

中間体 2-A の合成スキームを以下に示す。

[0279] [化119]



[0280] 中間体 2-1 の合成

アルゴン雰囲気下、ジベンゾフラン-2-アミン：1.8 g、N-クロロスクシンイミド：1.3 g、アセトニトリル：40 mL をフラスコに仕込み、25℃で8時間攪拌した。

その後反応溶液を分液ロートに移し水を加えてトルエンにて抽出した。その後、有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体1.7 g（収率76%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体 2-1 と同定した。

[0281] 中間体 2-2 の合成

中間体 1-1 の合成において、「1, 2-ジブロモ-3-ニトロベンゼン」、「ジベンゾフラン-2-ボロン酸」の代わりに「2-ブロモニトロベンゼン」、「4-ブロモフェニルボロン酸」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.7 g (収率 61%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 2-2 と同定した

[0282] 中間体 2-3 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン」の代わりに「中間体 2-1」、「中間体 2-2」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.9 g (収率 74%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 2-3 と同定した。

[0283] 中間体 2-4 の合成

中間体 1-A の合成において、「中間体 1-4」の代わりに「中間体 2-3」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 795 mg (収率 46%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 2-4 と同定した。

[0284] 中間体 2-5 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン」の代わりに「中間体 2-4」、「ブロモベンゼン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 754 mg (収率 79%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 2-5 と同定した

[0285] 中間体 2-A の合成

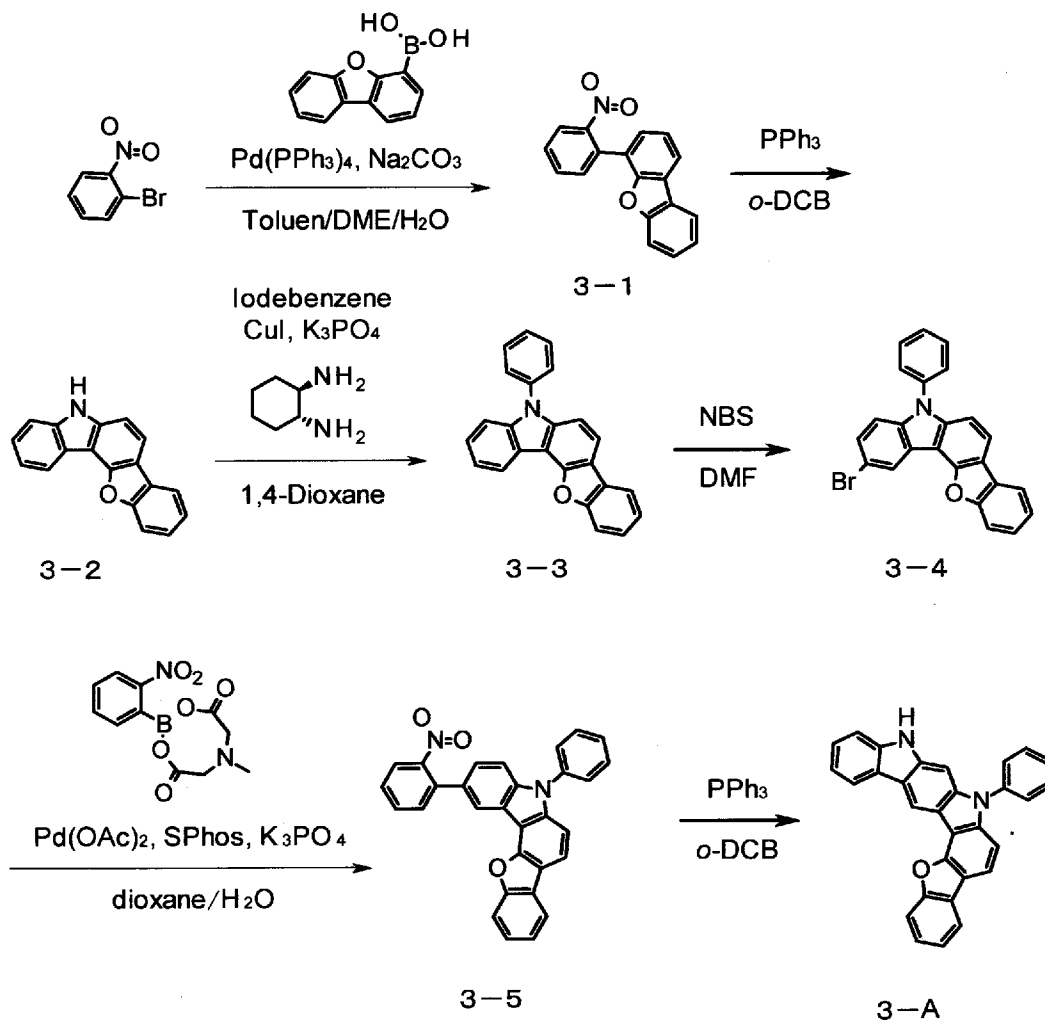
中間体 1-2 の合成において、「中間体 1-1」の代わりに「中間体 2-5」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 363 mg (収率 52%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 2-A と同定した

[0286] 中間体合成例 3 (中間体 3-A の合成)

中間体 1-A の合成スキームを以下に示す。

[0287] [化120]



[0288] 中間体 3-1 の合成

中間体 1-1 の合成において、「1, 2-ジブロモ-3-ニトロベンゼン」、「ジベンゾフラン-2-ボロン酸」の代わりに「2-ブロモニトロベンゼン」、「ジベンゾフラン-4-ボロン酸」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.9 g (収率 82%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 3-1 と同定した

[0289] 中間体 3-2 の合成

中間体 1-2 の合成において、「中間体 1-1」の代わりに「中間体 3-1」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.4 g (収率 76%) を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体3-2と同定した

[0290] 中間体3-3の合成

中間体1-3の合成において、「中間体1-2」の代わりに「中間体3-2」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体1.5g（収率91%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体3-3と同定した。

[0291] 中間体3-4の合成

アルゴン雰囲気下、中間体3-3：1.5g、N-ブロモスクシンイミド：801mg、N,N-ジメチルホルムアミド：20mLをフラスコに仕込み、25℃で8時間攪拌した。

その後反応溶液を分液ロートに移し水を加えて、ヘキサン：酢酸エチル3：1にて抽出した。その後、有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体1.5g（収率82%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体3-4と同定した。

[0292] 中間体3-5の合成

アルゴン雰囲気下、中間体3-4：1.5g、6-メチル-2-（2-ニトロフェニル）-1,3,6,2-ジオキサザボロカン-4,8-ジオン：1.5g、酢酸パラジウム（II）：50mg、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2',6'-ジメトキシビフェニル：182mg、りん酸三カリウム：5.9g、1,4-ジオキサン：45mL、水：9mLをフラスコに仕込み、12時間加熱還流攪拌した。

室温（25℃）まで冷却後、反応溶液を分液ロートに移し、トルエンにて抽出した。その後、有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体1.2g（収率71%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体3-5と同定した。

[0293] 中間体3-Aの合成

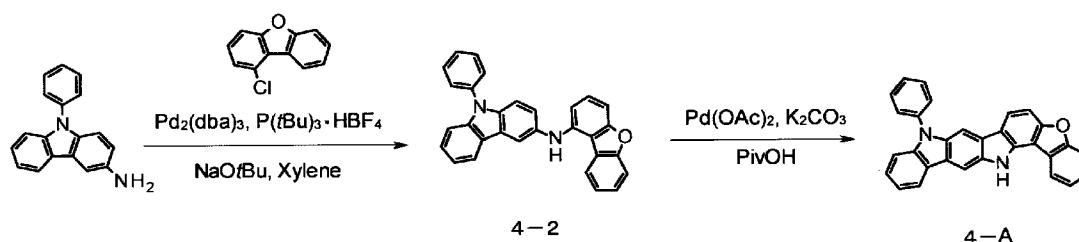
中間体 1-2 の合成において、「中間体 1-1」の代わりに「中間体 3-5」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 596 mg（収率 54%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体3-Aと同定した。

[0294] 中間体合成例 4 (中間体 4-A の合成)

中間体 4-A の合成スキームを以下に示す。

[0295] [化121]



[0296] 中間体4-2の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン」の代わりに「9-フェニルカルバゾール-3-アミン」、「1-クロロジベンゾフラン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 3.1 g (収率 62%) を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体4-2と同定した。

[0297] 中間体 4 - A の合成

空気雰囲気下、中間体4-2 : 3.1 g、酢酸パラジウム (I I) : 1.61 mg、炭酸カリウム : 99 mg、ピバル酸 : 7.1 gをフラスコに仕込み、130℃で12時間加熱攪拌した。

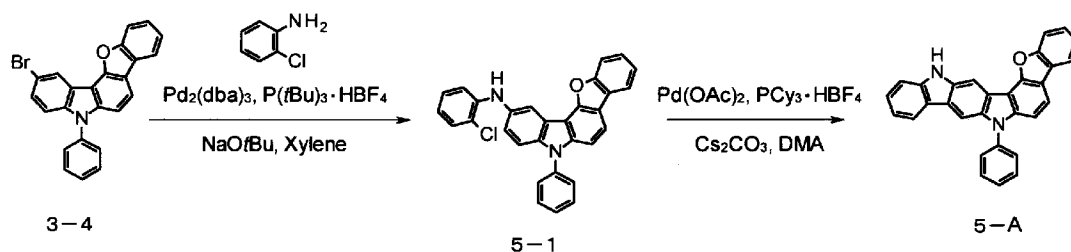
室温（25℃）まで冷却後トルエンを加え、得られた溶液をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体977mg（収率32%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体4-Aと同定した。

[0298] 中間体合成例 5 (中間体 5-A の合成)

中間体 5-A の合成スキームを以下に示す。

[0299] [化122]



[0300] 中間体 5 - 1 の合成

中間体 1 - 4 の合成において、「中間体 1 - 3」の代わりに「中間体 3 - 4」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 2.2 g (収率 88%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 5 - 1 と同定した。

[0301] 中間体 5 - A の合成

中間体 1 - A の合成において、「中間体 1 - 4」の代わりに「中間体 5 - 1」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.2 g (収率 61%) を得た。

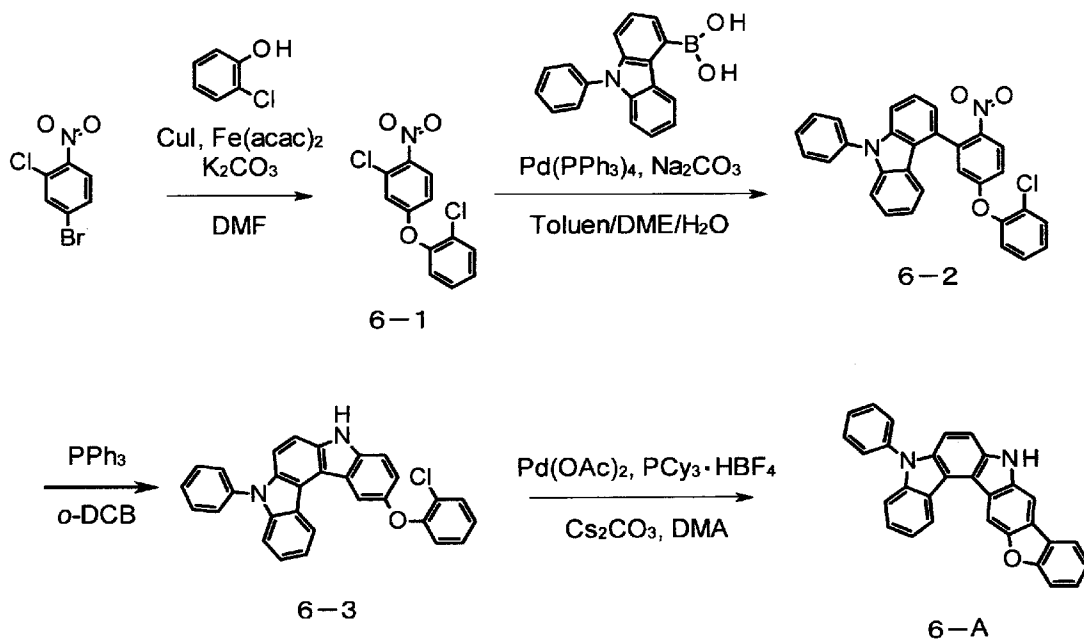
LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 5 - A と同定した。

[0302] 中間体合成例 6 (中間体 6 - A の合成)

中間体 6 - A の合成スキームを以下に示す。

[0303]

[化123]



[0304] 中間体 6-1 の合成

アルゴン雰囲気下、4-ブロモ-2-クロロ-1-ニトロベンゼン：1.91 g、2-クロロフェノール：1.2 ml、ヨウ化銅：154 mg、トリス（2,4-ペンタンジオナト）鉄（III）569 mg、炭酸カリウム：2.2 g、N,N-ジメチルホルムアミド：15 mL をフラスコに仕込み、130℃で12時間加熱攪拌した。

室温（25℃）まで冷却後反応溶液を濾過した後、ろ液を分液ロートに移し水を加え、ヘキサン：酢酸エチル＝3：1の溶液にて抽出した。その後、有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体1.4 g（収率61%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体6-1と同定した。

[0305] 中間体 6-2 の合成

中間体1-1の合成において、「1,2-ジブロモ-3-ニトロベンゼン」、「ジベンゾフラン-2-ボロン酸」の代わりに「中間体6-1」、「4-(9-フェニルカルバゾリル)ボロン酸」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体1.5 g（収率63%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を中間体6-2と同定した。

[0306] 中間体 6-3 の合成

中間体 1-2 の合成において、「中間体 1-1」の代わりに「中間体 6-2」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 812 mg（収率 57%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 6-3 と同定した

[0307] 中間体 6-A の合成

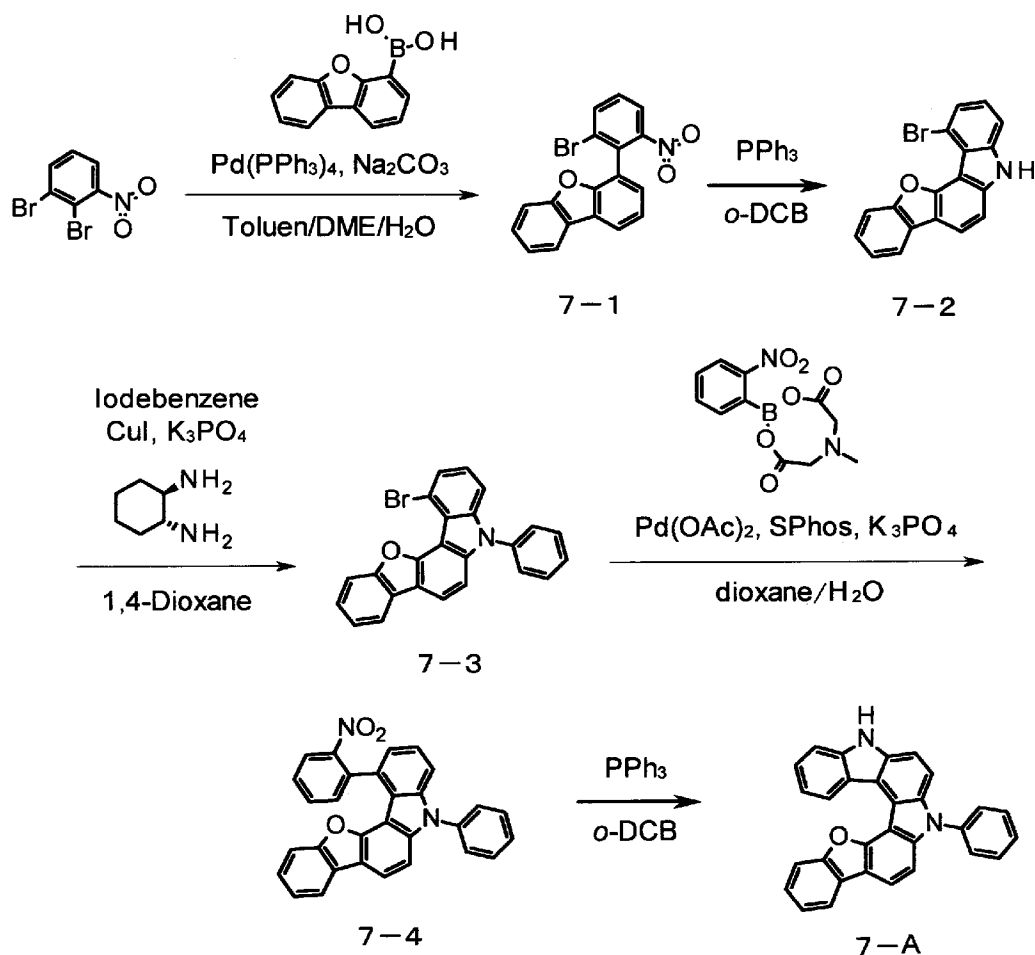
中間体 1-A の合成において、「中間体 1-4」の代わりに「中間体 6-3」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 368 mg（収率 51%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 6-A と同定した。

[0308] 中間体合成例 7（中間体 7-A の合成）

中間体 7-A の合成スキームを以下に示す。

[0309] [化124]



[0310] 中間体 7-1 の合成

中間体 1-1 の合成において、「ジベンゾフラン-2-ボロン酸」の代わりに「ジベンゾフラン-4-ボロン酸」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 2.5 g (収率 84%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 7-1 と同定した。

[0311] 中間体 7-2 の合成

中間体 1-2 の合成において、「中間体 1-1」の代わりに「中間体 7-1」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.2 g (収率 54%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 7-2 と同定した。

[0312] 中間体 7-3 の合成

中間体 1-3 の合成において、「中間体 1-2」の代わりに「中間体 7-2」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.3 g (収率 87%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 7-3 と同定した。

[0313] 中間体 7-4 の合成

中間体 3-5 の合成において、「中間体 3-4」の代わりに「中間体 7-3」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 809 mg (収率 55%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 7-4 と同定した。

[0314] 中間体 7-A の合成

中間体 1-2 の合成において、「中間体 1-1」の代わりに「中間体 7-4」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 503 mg (収率 67%) を得た。

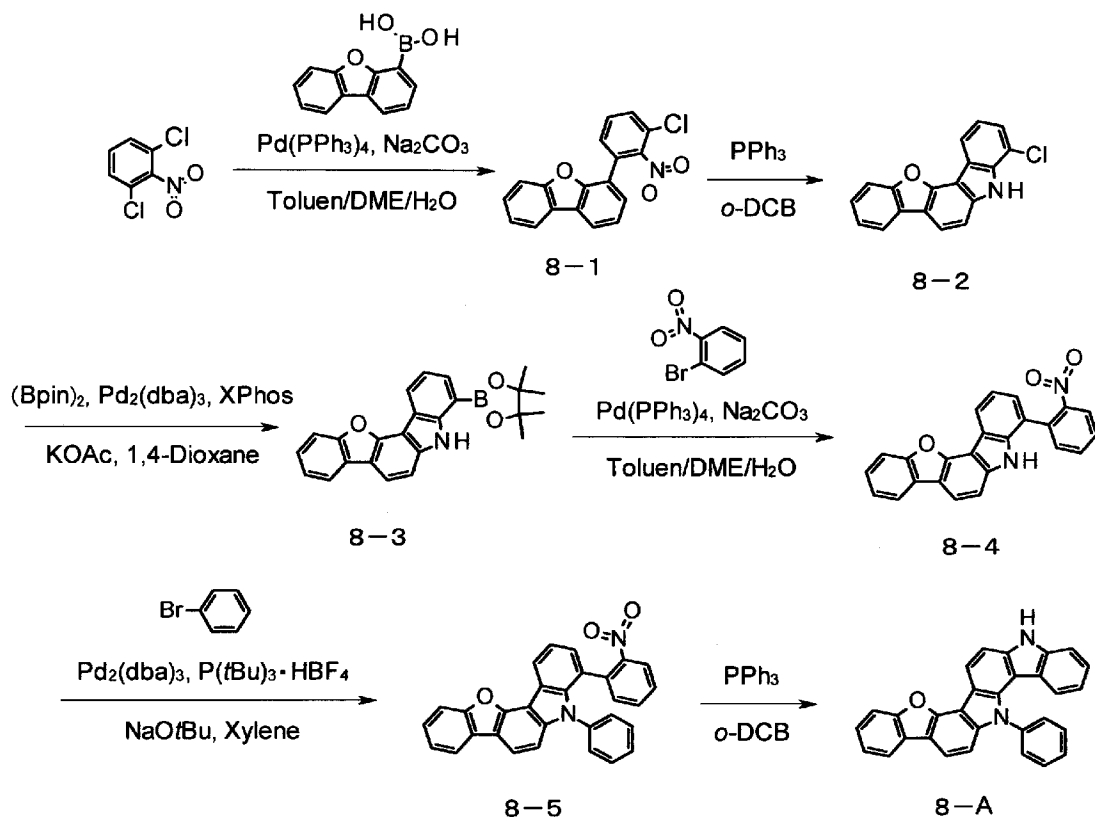
LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 7-A と同定した。

[0315] 中間体合成例 8 (中間体 8-A の合成)

中間体 8-A の合成スキームを以下に示す。

[0316]

[化125]



[0317] 中間体 8-1 の合成

中間体 1-1 の合成において、「1, 2-ジブロモ-3-ニトロベンゼン」、「ジベンゾフラン-2-ボロン酸」の代わりに「1, 3-ジクロロ-2-ニトロベンゼン」、「ジベンゾフラン-4-ボロン酸」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 6.1 g (収率 71%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 8-1 と同定した。

[0318] 中間体 8-2 の合成

中間体 1-2 の合成において、「中間体 1-1」の代わりに「中間体 8-1」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 2.6 g (収率 48%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 8-2 と同定した。

[0319] 中間体 8-3 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 8-2 : 2.6 g、ビス(ピナコラト)ジボロン : 6.8 g、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) : 2

46 mg、2-（ジシクロヘキシルホスフィノ）-2', 4', 6'-トリ
イソプロピル-1, 1'-ビフェニル: g、酢酸カリウム 256 mg、1
, 4-ジオキサン: 45 mL をフラスコに仕込み、12 時間加熱還流撹拌し
た。

室温（25℃）まで冷却後、反応溶液を濃縮し、残渣をシリカゲルカラム
クロマトグラフィで精製し、白色固体 2.5 g（収率 74%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 8-3 と同定した。

[0320] 中間体 8-4 の合成

中間体 1-1 の合成において、「1, 2-ジブロモ-3-ニトロベンゼン」
、「ジベンゾフラン-2-ボロン酸」の代わりに「中間体 8-3」、「2-
ブロモニトロベンゼン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 2
.0 g（収率 81%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 8-4 と同定した。

[0321] 中間体 8-5 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン」
の代わりに「中間体 8-4」、「ブロモベンゼン」を用いた以外は、同様の
方法で合成し、白色固体 1.3 g（収率 54%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 8-5 と同定した。

[0322] 中間体 8-A の合成

中間体 1-2 の合成において、「中間体 1-1」の代わりに「中間体 8-5」
を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 262 mg（収率 62%
）を得た。

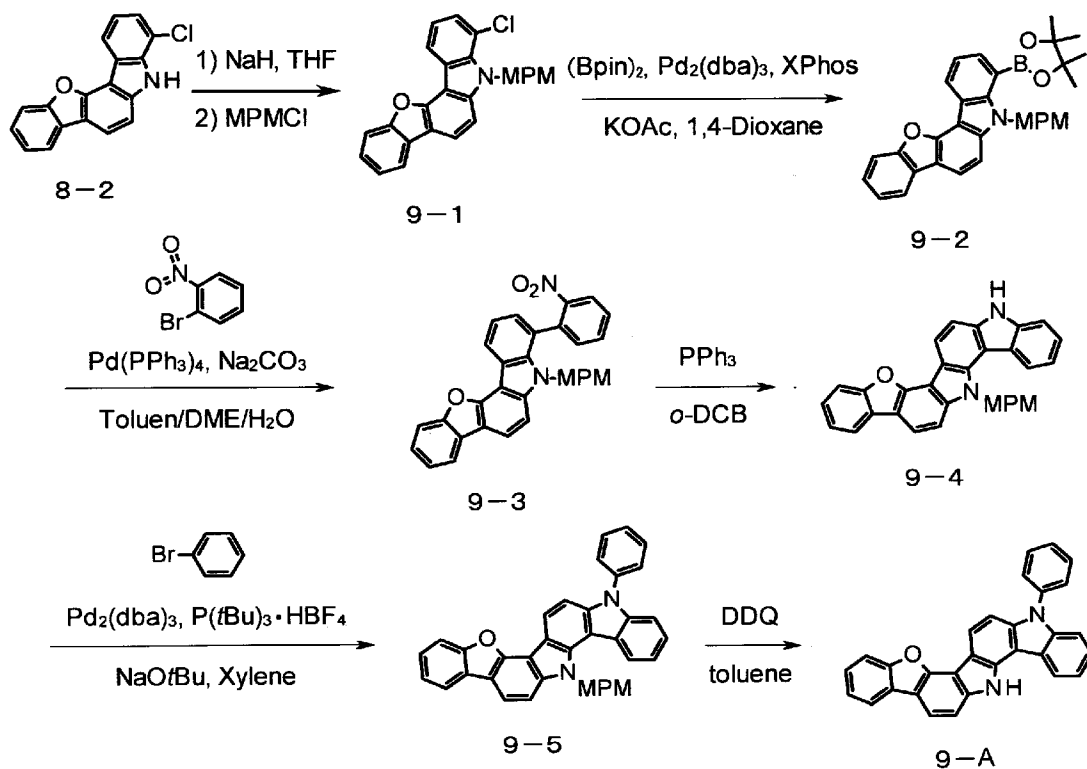
LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 8-A と同定した。

[0323] 中間体合成例 9（中間体 9-A の合成）

中間体 9-A の合成スキームを以下に示す。

[0324]

[化126]



[0325] 中間体 9-1 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 8-2 : 1.6 g、テトラヒドロフラン : 15 mL をフラスコに仕込み、攪拌しながら 0℃ まで冷却した。その後、水素化ナトリウム (60%, 流動パラフィンに分散) : 1.5 g を加え、0℃ のまま 30 分間攪拌した。続いて 4-メトキシベンジルクロリド (MPM-Cl) : 1.3 g を加え、0℃ のまま 30 分間攪拌した。その後室温まで昇温し、6 時間攪拌した。

続いて反応溶液に塩化アンモニウム水溶液を加え、その反応溶液を分液漏斗に移しトルエンにて抽出した。その後、有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 1.9 g (収率 86%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 9-1 と同定した。

[0326] 中間体 9-2 の合成

中間体 8-3 の合成において、「中間体 8-2」の代わりに「中間体 9-

1」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.5 g（収率 66%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 9-2 と同定した

[0327] 中間体 9-3 の合成

中間体 1-1 の合成において、「1, 2-ジブロモ-3-ニトロベンゼン」、「ジベンゾフラン-2-ボロン酸」の代わりに「2-ブロモニトロベンゼン」、「中間体 9-2」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.1 g（収率 69%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 9-3 と同定した。

[0328] 中間体 9-4 の合成

中間体 1-2 の合成において「中間体 1-1」の代わりに「中間体 9-3」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 574 mg（収率 58%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 9-4 と同定した。

[0329] 中間体 9-5 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン」の代わりに「中間体 9-4」、「ブロモベンゼン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 608 mg（収率 91%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 9-5 と同定した

[0330] 中間体 9-A の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 9-5：608 mg、2, 3-ジクロロ-5, 6-ジシアノ-1, 4-ベンゾキノン：776 mg、トルエン：4 mL をフラスコに仕込み、12 時間加熱還流攪拌した。

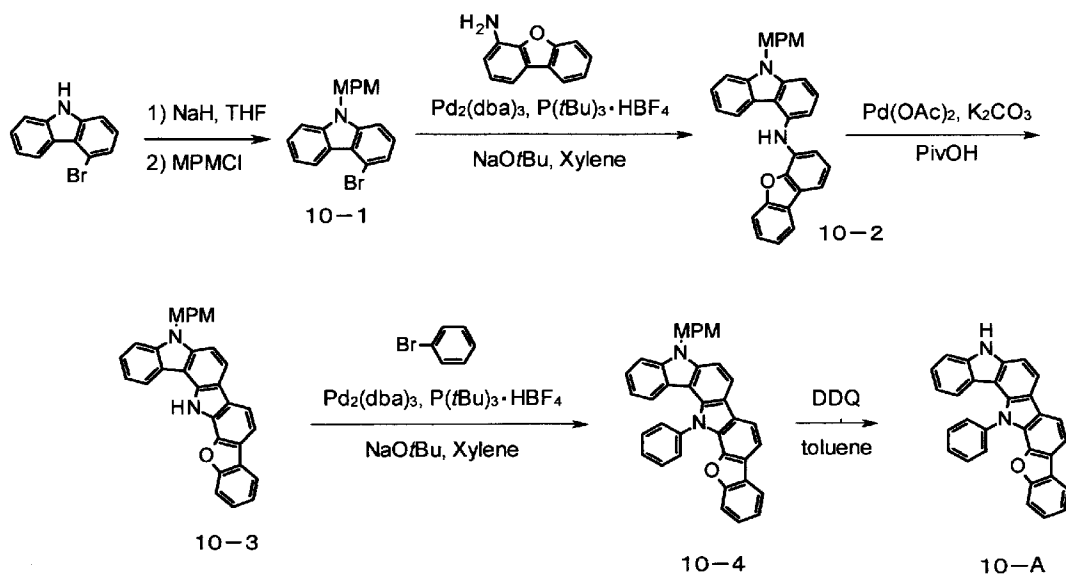
室温（25℃）まで冷却後、反応溶液を濾過し、ろ液を濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製し、白色固体 321 mg（収率 68%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 9-A と同定した。

[0331] 中間体合成例 10（中間体 10-A の合成）

中間体 10-A の合成スキームを以下に示す。

[0332] [化127]



[0333] 中間体 10-1 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 8-2」の代わりに「4-ブロモ-9H-カルバゾール」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 2.0 g (収率 88%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 10-1 と同定した。

[0334] 中間体 10-2 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン」の代わりに「中間体 10-1」、「ジベンゾフラン-4-アミン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 2.1 g (収率 82%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 10-2 と同定した。

[0335] 中間体 10-3 の合成

中間体 4-A の合成において、「中間体 4-2」の代わりに「中間体 10-2」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.3 g (収率 61%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 10-3 と同定した。

[0336] 中間体 10-4 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン

」の代わりに「中間体 10-3」、「ブロモベンゼン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.1 g (収率 74%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 10-4 と同定した。

[0337] 中間体 10-A の合成

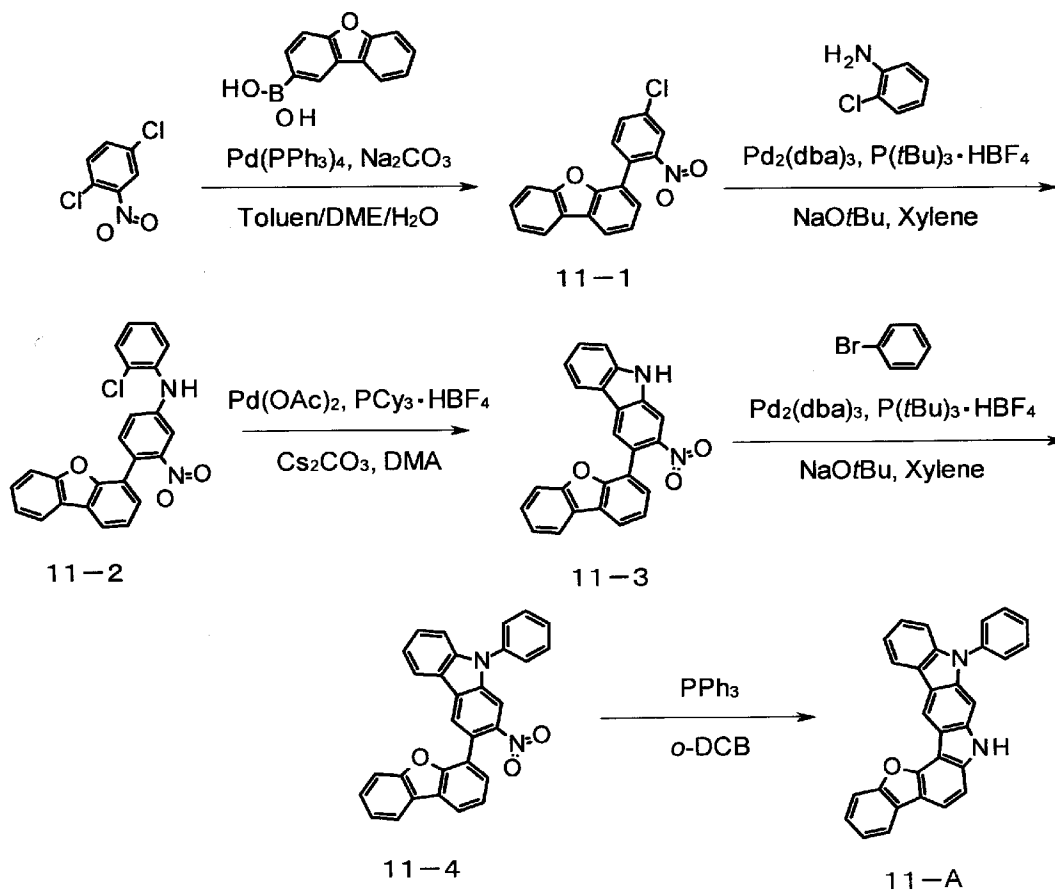
中間体 9-A の合成において、「中間体 9-5」の代わりに「中間体 10-4」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 706 mg (収率 79%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 10-A と同定した

[0338] 中間体合成例 11 (中間体 11-A の合成)

中間体 11-A の合成スキームを以下に示す。

[0339] [化128]



[0340] 中間体 11-1 の合成

中間体 11-1 の合成において、「1,2-ジブロモ-3-ニトロベンゼン」の代わりに「1,4-ジクロロ-2-ニトロベンゼン」を用いた以外は、

同様の方法で合成し、白色固体 2.5 g (収率 83%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 11-1 と同定した。

[0341] 中間体 11-2 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 11-1」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 2.3 g (収率 71%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 11-2 と同定した。

[0342] 中間体 11-3 の合成

中間体 1-A の合成において、「中間体 1-4」の代わりに「中間体 11-2」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.0 g (収率 49%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 11-3 と同定した。

[0343] 中間体 11-4 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン」の代わりに「中間体 11-3」、「ブロモベンゼン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 690 mg (収率 57%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 11-4 と同定した。

[0344] 中間体 11-A の合成

中間体 1-2 の合成において、「中間体 1-1」の代わりに「中間体 11-4」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 334 mg (収率 52%) を得た。

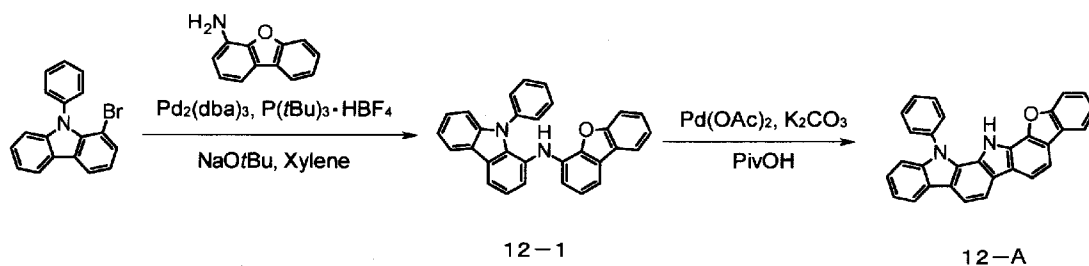
LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 11-A と同定した。

[0345] 中間体合成例 12 (中間体 12-A の合成)

中間体 12-A の合成スキームを以下に示す。

[0346]

[化129]



[0347] 中間体 12-1 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン」の代わりに「1-ブロモ-9-フェニルカルバゾール」、「ジベンゾフラン-4-アミン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 1.9 g（収率 62%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 12-1 と同定した。

[0348] 中間体 12-A の合成

中間体 4-A の合成において、「中間体 4-2」の代わりに「中間体 12-1」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 887 mg（収率 48%）を得た。

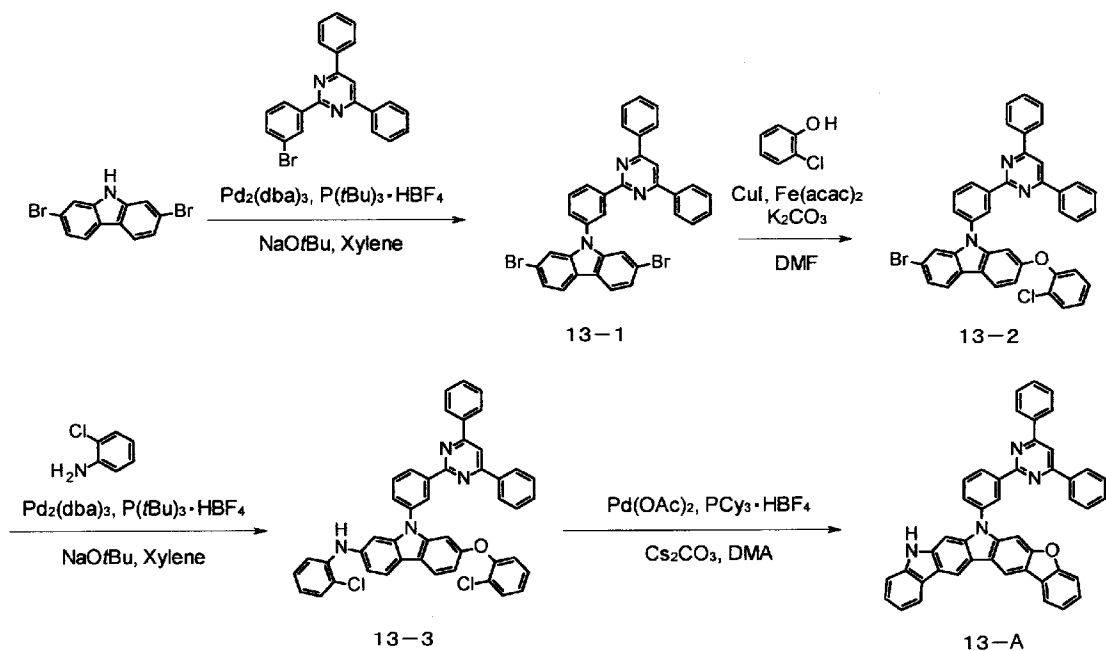
LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 12-A と同定した。

[0349] 中間体合成例 13（中間体 13-A の合成）

中間体 13-A の合成スキームを以下に示す。

[0350]

[化130]



[0351] 中間体 13-1 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン」の代わりに「2-(3-ブロモフェニル)-4,6-ジフェニルピリミジン」、「2,7-ジブロモ-9H-カルバゾール」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 7.13 g (収率 78%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 13-1 と同定した。

[0352] 中間体 13-2 の合成

中間体 6-1 の合成において、「4-ブロモ-2-クロロ-1-ニトロベンゼン」の代わりに「中間体 12-1」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 3.7 g (収率 48%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 13-2 と同定した。

[0353] 中間体 13-3 の合成

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 12-2」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 2.6 g (収率 65%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を中間体 13-3 と同定した。

[0354] 中間体 1 3 - 4 の合成

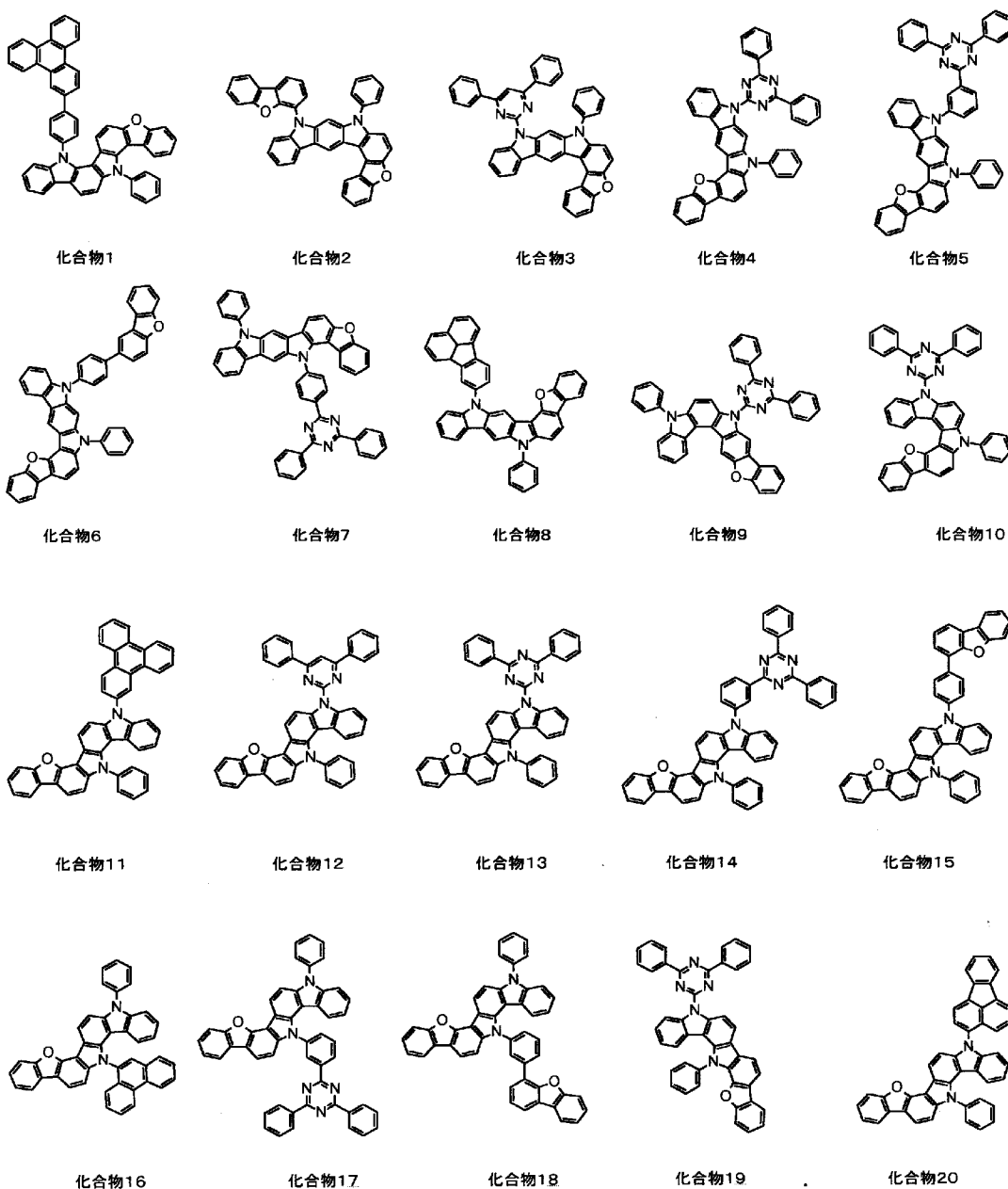
中間体 1 - 2 の合成において、「中間体 1 - 1」の代わりに「中間体 1 2 - 3」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 3 4 9 m g（収率 2 8 %）を得た。

L C - M S 分析により、当該白色個体を中間体 1 3 - A と同定した。

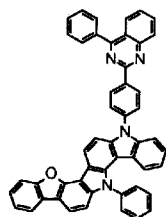
[0355] <本発明の一態様の化合物の合成>

次に下記化合物 1 ~ 3 4 の合成例を示す。

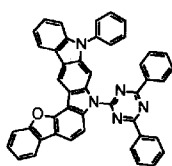
[化131]



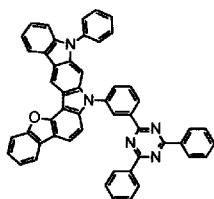
[0356] [化132]



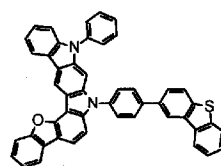
化合物21



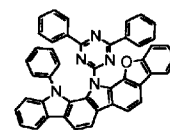
化合物22



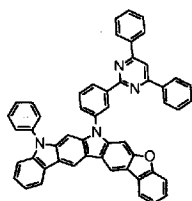
化合物23



化合物24

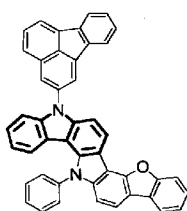


化合物25

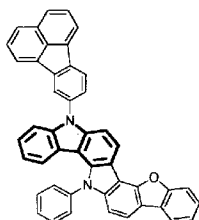


化合物26

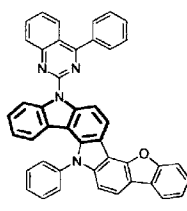
[0357] [化133]



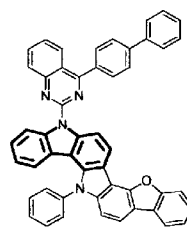
化合物27



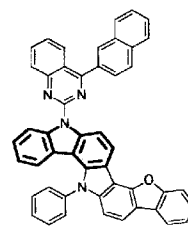
化合物28



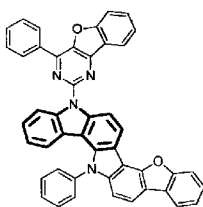
化合物29



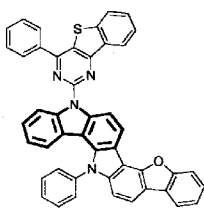
化合物30



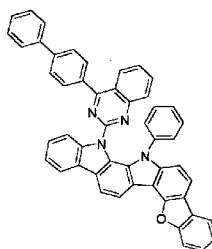
化合物31



化合物32



化合物33



化合物34

[0358] 合成例 1 (化合物 1 の合成)

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 1-A」、「2-(4-ブロモフェニル)トリフェニレン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 549 mg (収率 61%) を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を化合物1と同定した。

[0359] 合成例2（化合物2の合成）

中間体1-4の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体1-3」の代わりに「中間体2-A」、「4-ブロモジベンゾフラン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体644mg（収率73%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を化合物2と同定した。

[0360] 合成例3（化合物3の合成）

中間体1-4の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体1-3」の代わりに「中間体2-A」、「2-クロロ-4,6-ジフェニルピリミジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体389mg（収率64%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を化合物3と同定した。

[0361] 合成例4（化合物4の合成）

中間体1-4の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体1-3」の代わりに「中間体3-A」、「2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体391mg（収率48%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を化合物4と同定した。

[0362] 合成例5（化合物5の合成）

中間体1-4の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体1-3」の代わりに「中間体3-A」、「2-(3-ブロモフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体458mg（収率49%）を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を化合物5と同定した。

[0363] 合成例6（化合物6の合成）

中間体1-4の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体1-3」の代わりに「中間体3-A」、「2-(4-ブロモフェニル)ジベンゾフラン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体719mg（収率6

3%)を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を化合物6と同定した。

[0364] 合成例7 (化合物7の合成)

中間体1-4の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体1-3」の代わりに「中間体4-A」、「2-(4-ブロモフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体X398mg (収率63%)を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を化合物7と同定した。

[0365] 合成例8 (化合物8の合成)

中間体1-4の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体1-3」の代わりに「中間体5-A」、「8-ブロモフルオランテン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体458mg (収率63%)を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を化合物8と同定した。

[0366] 合成例9 (化合物9の合成)

中間体1-4の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体1-3」の代わりに「中間体6-A」、「2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体442mg (収率56%)を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を化合物9と同定した。

[0367] 合成例10 (化合物10の合成)

中間体1-4の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体1-3」の代わりに「中間体7-A」、「2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体299mg (収率44%)を得た。

LC-MS分析により、当該白色個体を化合物10と同定した。

[0368] 合成例11 (化合物11の合成)

中間体1-4の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体1-3」の代わりに「中間体8-A」、「2-ブロモトリフェニレン」を用いた以

外は、同様の方法で合成し、白色固体 336 mg（収率 63%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 11 と同定した。

[0369] 合成例 12（化合物 12 の合成）

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 8-A」、「2-クロロ-4, 6-ジフェニルピリミジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 271 mg（収率 44%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 12 と同定した。

[0370] 合成例 13（化合物 13 の合成）

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 8-A」、「2-クロロ-4, 6-ジフェニル-1, 3, 5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 394 mg（収率 52%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 13 と同定した。

[0371] 合成例 14（化合物 14 の合成）

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 8-A」、「2-(3-ブロモフェニル)-4, 6-ジフェニル-1, 3, 5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 712 mg（収率 82%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 14 と同定した。

[0372] 合成例 15（化合物 15 の合成）

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 8-A」、「4-(4-ブロモフェニル)ジベンゾフラン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 531 mg（収率 64%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 15 と同定した。

[0373] 合成例 16（化合物 16 の合成）

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3

」の代わりに「中間体 9-A」、「9-ブロモフェナントレン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 393 mg（収率 54%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 16 と同定した。

[0374] 合成例 17（化合物 17 の合成）

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 9-A」、「2-（3-ブロモフェニル）-4, 6-ジフェニル-1, 3, 5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 376 mg（収率 75%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 17 と同定した。

[0375] 合成例 18（化合物 18 の合成）

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 9-A」、「4-（3-ブロモフェニル）ジベンゾフラン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 583 mg（収率 62%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 18 と同定した。

[0376] 合成例 19（化合物 19 の合成）

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 10-A」、「2-クロロ-4, 6-ジフェニル-1, 3, 5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 492 mg（収率 53%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 19 と同定した。

[0377] 合成例 20（化合物 20 の合成）

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 8-A」、「3-ブロモフルオランテン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 583 mg（収率 49%）を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 20 と同定した。

[0378] 合成例 21（化合物 21 の合成）

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3

」の代わりに「中間体 8-A」、「2-(4-ブロモフェニル)-4-フェニルキナゾリン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 891 mg (収率 77%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 21 と同定した。

[0379] 合成例 22 (化合物 22 の合成)

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 11-A」、「2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 554 mg (収率 64%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 22 と同定した。

[0380] 合成例 23 (化合物 23 の合成)

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 11-A」、「2-(3-ブロモフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 345 mg (収率 48%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 23 と同定した。

[0381] 合成例 24 (化合物 24 の合成)

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 11-A」、「2-(4-ブロモフェニル)ジベンゾチオフェン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 711 mg (収率 68%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 24 と同定した。

[0382] 合成例 25 (化合物 25 の合成)

中間体 1-4 の合成において、「2-クロロアニリン」、「中間体 1-3」の代わりに「中間体 12-A」、「2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 623 mg (収率 73%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 25 と同定した。

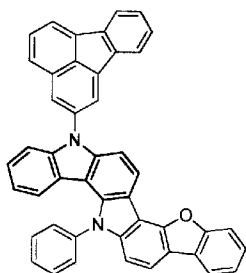
[0383] 合成例 26 (化合物 26 の合成)

中間体 1-4 の合成において、「中間体 1-3」、「2-クロロアニリン」の代わりに「中間体 12-4」、「ブロモベンゼン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 298 mg (収率 63%) を得た。

LC-MS 分析により、当該白色個体を化合物 26 と同定した。

[0384] 合成例 27 (化合物 27 の合成)

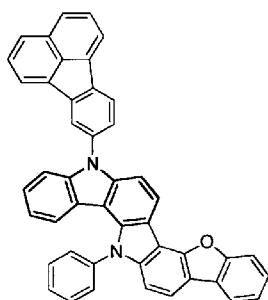
[0385] [化134]



[0386] アルゴン雰囲気下、中間体 8-A : 2.1 g、2-ブロモフルオランテン : 1.54 g、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) : 92 mg、2,4,6-トリイソプロピルピフェニル-2'-ジシクロヘキシルフォスフィン : 191 mg、ナトリウム tert-ブトキシド : 673 mg、トルエン : 60 mL をフラスコに仕込み、終夜加熱還流撹拌した。室温 (25℃) まで冷却後、反応溶液を濃縮し、残差をシリカゲルカラムクロマトグラフィで精製、黄色固体 2.31 g (収率 74%) を得た。LC-MS 分析により、当該黄色固体を化合物 27 と同定した。

[0387] 合成例 28 (化合物 28 の合成)

[0388] [化135]

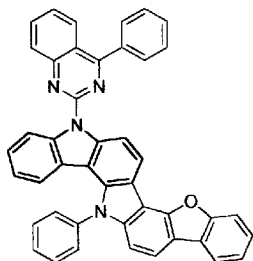


[0389] 化合物 27 の合成において、「2-ブロモフルオランテン」の代わりに「

7-クロロフルオランテン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、黄色固体 2.30 g (収率 78%) を得た。LC-MS 分析により、当該黄色固体を化合物 28 と同定した。

[0390] 合成例 29 (化合物 29 の合成)

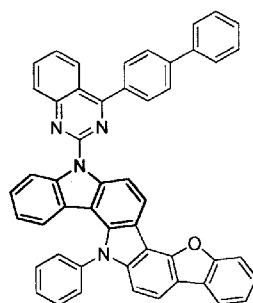
[0391] [化136]



[0392] 化合物 27 の合成において、「2-ブロモフルオランテン」の代わりに「2-クロロ-4-フェニルキナゾリン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、黄色固体 2.45 g (収率 83%) を得た。LC-MS 分析により、当該黄色固体を化合物 29 と同定した。

[0393] 合成例 30 (化合物 30 の合成)

[0394] [化137]

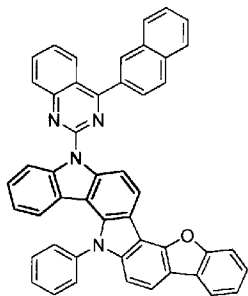


[0395] 化合物 27 の合成において、「2-ブロモフルオランテン」の代わりに、「2-クロロ-4-[1,1'-ビフェニル]-キナゾリン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、黄色固体 2.05 g (収率 72%) を得た。LC-MS 分析により、当該黄色固体を化合物 30 と同定した。

[0396] 合成例 31 (化合物 31 の合成)

[0397]

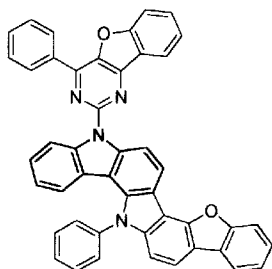
[化138]



[0398] 化合物 27 の合成において、「2-ブロモフルオランテン」の代わりに「中間体 8-A」、「2-クロロ-4-(2-ナフタレニル)-キナゾリン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、黄色固体 2.05 g (収率 72%) を得た。LC-MS 分析により、当該黄色固体を化合物 31 と同定した。

[0399] 合成例 32 (化合物 32 の合成)

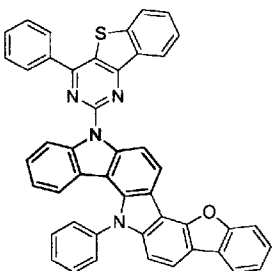
[0400] [化139]



[0401] 化合物 27 の合成において、「2-ブロモフルオランテン」の代わりに「2-クロロ-4-フェニルベンゾフロ[3,2-d]-ピリミジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、黄色固体 2.22 g (収率 65%) を得た。LC-MS 分析により、当該黄色固体を化合物 32 と同定した。

[0402] 合成例 33 (化合物 33 の合成)

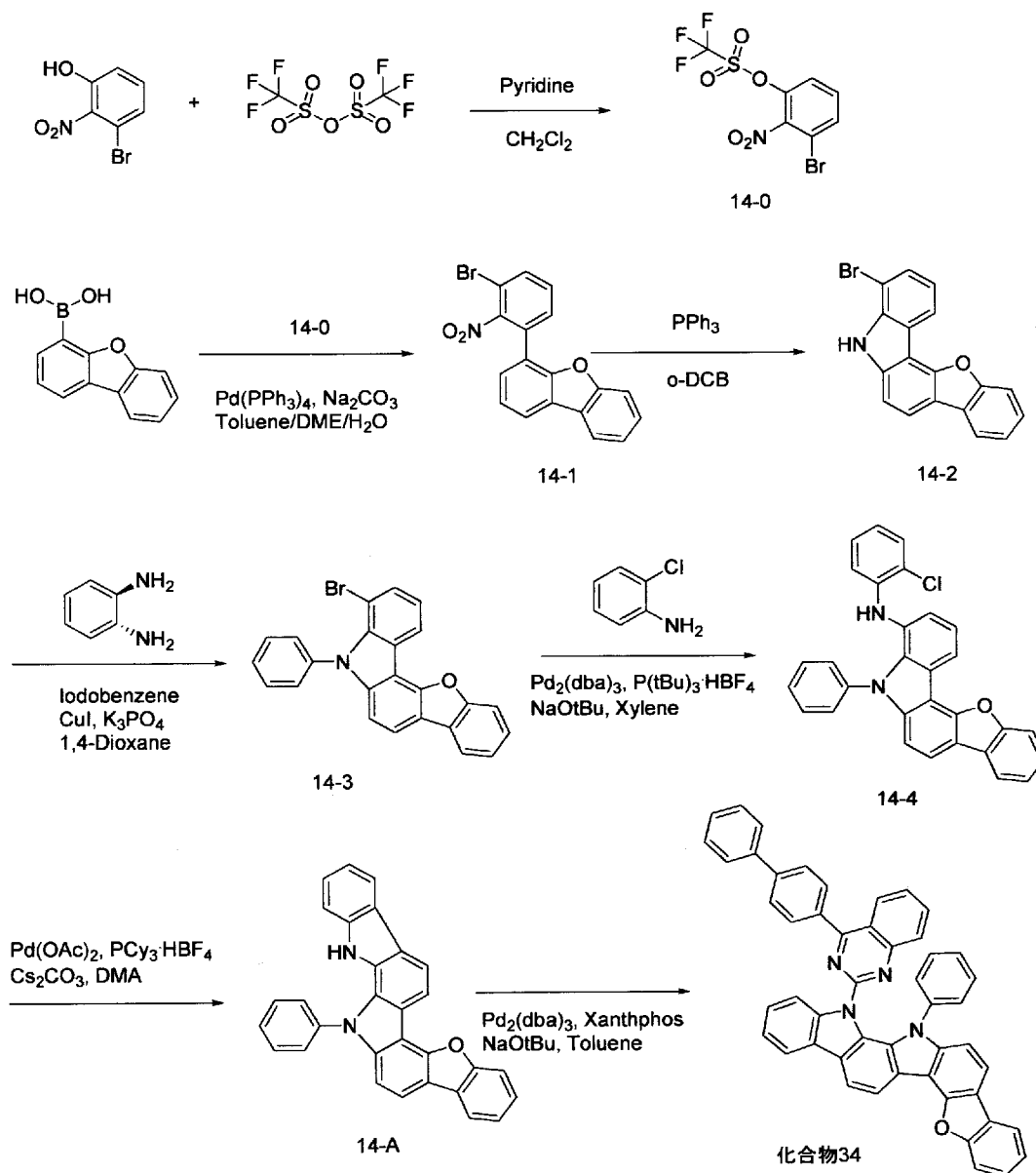
[0403] [化140]



[0404] 化合物 27 の合成において、「2-ブロモフルオランテン」の代わりに「中間体 8-A」、「2-クロロ-4-フェニルベンゾチエノ[3,2-d]-ピリミジン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、黄色固体 1.85 g (収率 60%) を得た。LC-MS 分析により、当該黄色固体を化合物 33 と同定した。

[0405] 合成例 34 (化合物 34 の合成)

[0406] [化141]



[0407] 中間体 14-0 の合成

窒素雰囲気下、3-ブロモ-2-フェノール：5.01 g、無水トリフル

オロメチルスルホン酸：9.73 g、および塩化メチレン：150 mLをフラスコに仕込み、0℃に冷却した。その溶液に、ピリジン：3.7 mLを滴下し、室温で2時間攪拌した。反応溶液を300 mLの氷水に入れ、有機層を塩化メチレンで抽出した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥後、硫酸ナトリウムを除去し、その有機層を濃縮し、黄色固体7.73 gを得た。LC-MS分析により、当該黄色固体を中間体14-0と同定した。

[0408] 中間体14-1の合成

中間体1-1の合成において、「1,2-ジブロモ-3-ニトロベンゼン」、「ジベンゾフラン-2-ボロン酸」の代わりに「中間体14-0」、「ジベンゾフラン-4-ボロン酸」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体3.2 g（収率75%）を得た。LC-MS分析により、当該白色固体を中間体14-1と同定した。

[0409] 中間体14-2の合成

中間体1-2の合成において、「中間体1-1」の代わりに「中間体14-1」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体2.4 g（収率70%）を得た。LC-MS分析により、当該白色固体を中間体14-2と同定した。

[0410] 中間体14-3の合成

中間体1-3の合成において、「中間体1-2」の代わりに「中間体14-2」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体2.5 g（収率80%）を得た。LC-MS分析により、当該白色固体を中間体14-3と同定した。

[0411] 中間体14-4の合成

中間体1-4の合成において、「中間体1-3」の代わりに「中間体14-3」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体2.0 g（収率65%）を得た。LC-MS分析により、当該白色固体を中間体14-4と同定した。

[0412] 中間体14-Aの合成

中間体 1 - A の合成において、「中間体 1 - 4」の代わりに「中間体 1 4 - 4」を用いた以外は、同様の方法で合成し、白色固体 2. 0 g（収率 6 5 %）を得た。LC-MS 分析により、当該白色固体を中間体 1 4 - A と同定した。

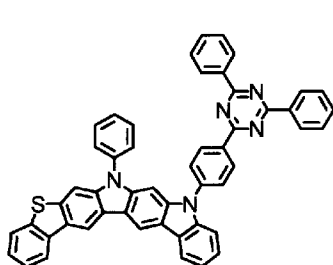
[0413] 化合物 3 4 の合成

化合物 2 7 の合成において、「2-ブロモフルオランテン」の代わりに、「2-クロロ-4-[1, 1' ビフェニル]-キナゾリン」を用いた以外は、同様の方法で合成し、黄色固体 2. 2 5 g（収率 7 0 %）を得た。LC-MS 分析により、当該黄色固体を化合物 3 4 と同定した。

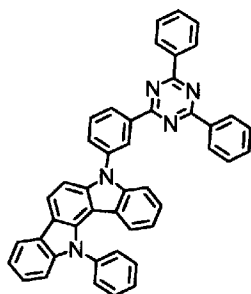
[0414] <比較化合物>

次に下記比較例で用いる比較化合物 1 ~ 7 を示す。

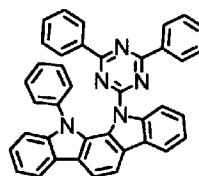
[0415] [化142]



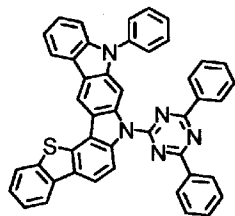
比較化合物1



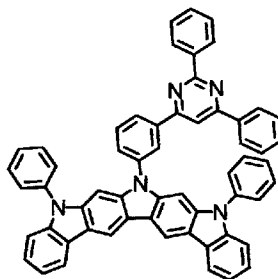
比較化合物2



比較化合物3



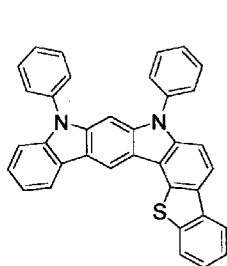
比較化合物4



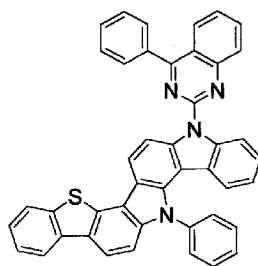
比較化合物5

[0416]

[化143]



比較化合物 6

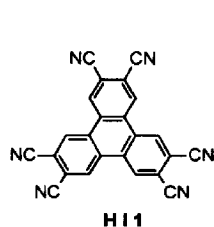


比較化合物 7

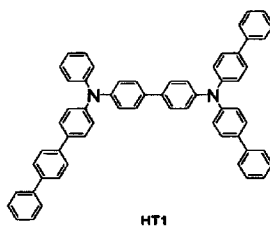
[0417] <本発明の一態様の有機EL素子の作製>

実施例1～29及び比較例1～6の有機EL素子の作製に用いた、本発明の一態様の化合物及び比較化合物以外の材料を以下に示す。

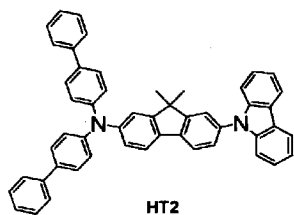
[化144]



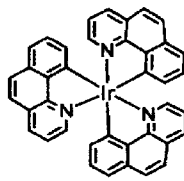
H11



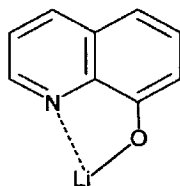
HT1



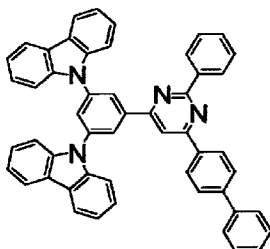
HT2



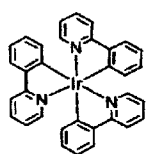
D3



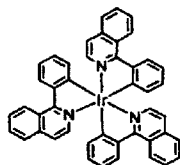
Liq



ET1



D1



D2

[0418] <黄色燐光有機EL素子>

実施例1（化合物25を用いた有機EL素子の作製）

25mm×75mm×1.1mmのITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック社製）を、イソプロピルアルコール中で5分間超音波洗浄し、さらにUVオゾン洗浄を30分間行った。尚、ITOの膜厚は130nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に、前記透明電極を覆うようにして、前記化合物（H11）を蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層を成膜した。

この化合物（H11）からなる正孔注入層上に、前記化合物（HT1）を蒸着し、膜厚40nmの第1正孔輸送層を成膜した。さらに、この化合物（HT1）からなる第1正孔輸送層上に、前記化合物（HT2）を蒸着し、膜厚10nmの第2正孔輸送層を成膜した。

次に、この化合物（HT2）からなる第2正孔輸送層上に、ホスト材料として前記「化合物25」を、及びドーパント材料として前記化合物（D3）を共蒸着し、膜厚20nmの有機層（発光層）を成膜した。尚、当該有機層（発光層）中の前記化合物（D3）の濃度は12質量%とした。

この発光層上に、前記化合物（ET1）及び前記化合物（Li q）を共蒸着し、膜厚45nmの電子輸送層を成膜した。尚、この有機層中のLi q濃度は、50質量%とした。この有機層は、電子輸送層として機能する。

さらに、この電子輸送層上に、下記化合物（Li q）を蒸着して、膜厚1nmのLi q膜を成膜し、このLi q膜上に、金属Alを蒸着して、膜厚80nmの金属陰極を成膜し、有機EL素子を作製した。

本実施例10で作製した有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO（130nm）／H11（5nm）／HT1（40nm）／HT2（10nm）／化合物25+D3（12wt%）（20nm）／ET1+L

i q (50 wt %) (45 nm) / L i q (1 nm) / A l (80 nm)

[0419] 実施例 2 ～ 3 及び比較例 1 ～ 3

実施例 1 において、ホスト材料として用いた「化合物 25」に代えて、化合物 14 及び 17、並びに比較化合物 1 ～ 3 をそれぞれ用いて、有機層（発光層）を形成した以外は、実施例 1 と同様にして、有機 EL 素子を作製した。

[0420] <有機 EL 素子の評価>

実施例 1 ～ 3 及び比較例 1 ～ 3 で作製した有機 EL 素子について、以下の評価を行った。評価結果を表 1 に示す。

(1) 駆動電圧 (V)

電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように ITO 透明電極と金属 Al 陰極との間に通電したときの電圧 (単位: V) を計測した。

[0421] (2) 主ピーク波長 (λ_p)

電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように素子に電圧を印加したときの分光放射輝度スペクトルを、分光放射輝度計「CS-1000」（製品名、コニカミノルタ社製）で計測した。そして、得られた分光放射輝度スペクトルから、主ピーク波長 (λ_p) (単位: nm) を求めた。

[0422] (3) 外部量子効率 (EQE)

電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように素子に電圧を印加したときの分光放射輝度スペクトルを、分光放射輝度計「CS-1000」（製品名、コニカミノルタ社製）で計測した。

得られた上記分光放射輝度スペクトルから、ランバシアン放射を行ったと仮定し、外部量子効率 (EQE) (単位: %) を算出した。

[0423]

[表1]

	ホスト材料	駆動電圧 (V)	主ピーク波長 (nm)	外部量子効率 (%)
実施例 1	化合物 25	4.0	560	19.6
実施例 2	化合物 14	3.9	560	21.7
実施例 3	化合物 17	4.0	561	22.2
比較例 1	比較 化合物 1	4.2	561	17.9
比較例 2	比較 化合物 2	4.3	560	18.5
比較例 3	比較 化合物 3	4.1	561	19.1

[0424] 表 1 の結果から、本発明の一態様の化合物をホスト材料として用いることで、比較化合物を用いた場合と比較して、縮環することで軌道の広がりが大きくなり正孔を効率よく運ぶようになるため、高効率化し、低電圧化したと考えられる。

[0425] <赤燐光有機 EL 素子の作製>

実施例 4（化合物 1 を用いた有機 EL 素子の作製）

25 mm×75 mm×1.1 mm の ITO 透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマティック社製）を、イソプロピルアルコール中で 5 分間超音波洗浄し、さらに UV オゾン洗浄を 30 分間行った。尚、ITO の膜厚は 130 nm とした。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に、前記透明電極を覆うようにして、前記化合物（H11）を蒸着し、膜厚 5 nm の正孔注入層を成膜した。

この化合物（H11）からなる正孔注入層上に、前記化合物（HT1）を蒸着し、膜厚 200 nm の第 1 正孔輸送層を成膜した。さらに、この化合物（HT1）からなる第 1 正孔輸送層上に、前記化合物（HT2）を蒸着し、膜厚 10 nm の第 2 正孔輸送層を成膜した。

次に、この化合物（HT2）からなる第2正孔輸送層上に、ホスト材料として前記「化合物1」及びドーパント材料として前記化合物（D2）を共蒸着し、膜厚40nmの有機層（発光層）を成膜した。尚、当該有機層（発光層）中の前記化合物（D2）の濃度は2質量%とした。

この発光層上に、前記化合物（ET1）及び前記化合物（Li q）を共蒸着し、膜厚30nmの電子輸送層を成膜した。尚、この有機層中のLi q濃度は、50質量%とした。この有機層は、電子輸送層として機能する。

さらに、この電子輸送層上に、前記化合物（Li q）を蒸着して、膜厚1nmのLi q膜を成膜し、このLi q膜上に、金属Alを蒸着して、膜厚80nmの金属陰極を成膜し、有機EL素子を作製した。

本実施例4で作製した有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO（130nm）／HI1（5nm）／HT1（200nm）／HT2（10nm）／化合物1＋D2（2wt%）（40nm）／ET1＋Li q（50wt%）（30nm）／Li q（1nm）／Al（80nm）

[0426] 実施例5～28及び比較例4～5

実施例4において、ホスト材料として用いた「化合物1」に代えて、化合物2～25、並びに比較化合物4及び1をそれぞれ用いて、有機層（発光層）を形成した以外は、実施例4と同様にして、有機EL素子を作製した。

[0427] <有機EL素子の評価>

実施例4～28及び比較例4～5で作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。評価結果を表2-1及び2-2に示す。

（1）主ピーク波長（ λ_p ）

電流密度が10mA/cm²となるように素子に電圧を印加したときの分光放射輝度スペクトルを、分光放射輝度計「CS-1000」（製品名、コニカミノルタ社製）で計測した。そして、得られた分光放射輝度スペクトルから、主ピーク波長（ λ_p ）（単位：nm）を求めた。

[0428] （2）寿命（LT90）

初期電流密度を $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$ に設定して直流の連続通電試験を行い、試験開始時の輝度に対して、輝度が 90% まで減少する時間を測定し、その測定時間を寿命 (LT90) とした。

[0429] [表2-1]

	ホスト材料	主ピーク波長 (nm)	LT90 (hr)
実施例 4	化合物 1	619	374
実施例 5	化合物 2	621	361
実施例 6	化合物 3	619	217
実施例 7	化合物 4	621	238
実施例 8	化合物 5	617	255
実施例 9	化合物 6	621	321
実施例 10	化合物 7	617	211
実施例 11	化合物 8	620	224
実施例 12	化合物 9	619	245
実施例 13	化合物 10	621	237
実施例 14	化合物 11	621	341
実施例 15	化合物 12	617	269
実施例 16	化合物 13	620	193
実施例 17	化合物 14	619	211
実施例 18	化合物 15	621	319
実施例 19	化合物 16	617	411
実施例 20	化合物 17	621	229
実施例 21	化合物 18	617	340
実施例 22	化合物 19	620	216
実施例 23	化合物 20	620	170
実施例 24	化合物 21	619	182
実施例 25	化合物 22	620	184
実施例 26	化合物 23	619	192
実施例 27	化合物 24	620	245
実施例 28	化合物 25	620	160

[0430]

[表2-2]

	ホスト材料	主ピーク波長 (nm)	LT90 (hr)
比較例 4	比較化合物 4	621	159
比較例 5	比較化合物 1	621	122

[0431] 表 2 - 1 及び 2 - 2 の結果から、本発明の一態様の化合物をホスト材料として用いることで、比較化合物を用いた場合と比較して、酸化に対する耐性が向上したために、長寿命化したと考えられる。

[0432] <緑発光有機 EL 素子>

実施例 29（化合物 26 を用いた有機 EL 素子の作製）

25 mm × 75 mm × 1.1 mm の ITO 透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック社製）を、イソプロピルアルコール中で 5 分間超音波洗浄し、さらに UV オゾン洗浄を 30 分間行った。尚、ITO の膜厚は 130 nm とした。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に、前記透明電極を覆うようにして、前記化合物（H11）を蒸着し、膜厚 5 nm の正孔注入層を成膜した。

この化合物（H11）からなる正孔注入層上に、前記化合物（HT1）を蒸着し、膜厚 90 nm の第 1 正孔輸送層を成膜した。さらに、この化合物（HT1）からなる第 1 正孔輸送層上に、前記化合物（HT2）を蒸着し、膜厚 60 nm の第 2 正孔輸送層を成膜した。

次に、この化合物（HT2）からなる第 2 正孔輸送層上に、ホスト材料として前記「化合物 26」及びドーパント材料として前記化合物（D1）を共蒸着し、膜厚 40 nm の有機層（発光層）を成膜した。尚、当該有機層（発光層）中の前記化合物（D1）の濃度は 5 質量%とした。

この発光層上に、前記化合物（ET1）及び前記化合物（Li q）を共蒸着し、膜厚 30 nm の電子輸送層を成膜した。尚、この有機層中の Li q 濃

度は、50質量%とした。この有機層は、電子輸送層として機能する。

さらに、この電子輸送層上に、前記化合物(Liq)を蒸着して、膜厚1nmのLiq膜を成膜し、このLiq膜上に、金属Alを蒸着して、膜厚80nmの金属陰極を成膜し、有機EL素子を作製した。

本実施例4で作製した有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130nm)/H11(5nm)/HT1(90nm)/HT2(60nm)/化合物26+D1(5wt%)(40nm)/ET1+Liq(50wt%)(30nm)/Liq(1nm)/Al(80nm)

[0433] 比較例6

実施例29において、ホスト材料として用いた「化合物26」に代えて、比較化合物5を用いて、有機層(発光層)を形成した以外は、実施例29と同様にして、有機EL素子を作製した。

[0434] <有機EL素子の評価>

実施例及び比較例で作製した有機EL素子について、以下の評価を行った。評価結果を表3に示す。

(1) 主ピーク波長(λ_p)

電流密度が10mA/cm²となるように素子に電圧を印加したときの分光放射輝度スペクトルを、分光放射輝度計「CS-1000」(製品名、コニカミノルタ社製)で計測した。そして、得られた分光放射輝度スペクトルから、主ピーク波長(λ_p)(単位: nm)を求めた。

[0435] (2) 外部量子効率(EQE)

電流密度が10mA/cm²となるように素子に電圧を印加したときの分光放射輝度スペクトルを、分光放射輝度計「CS-1000」(製品名、コニカミノルタ社製)で計測した。

得られた上記分光放射輝度スペクトルから、ランバシアン放射を行ったと仮定し、外部量子効率(EQE)(単位: %)を算出した。

[0436]

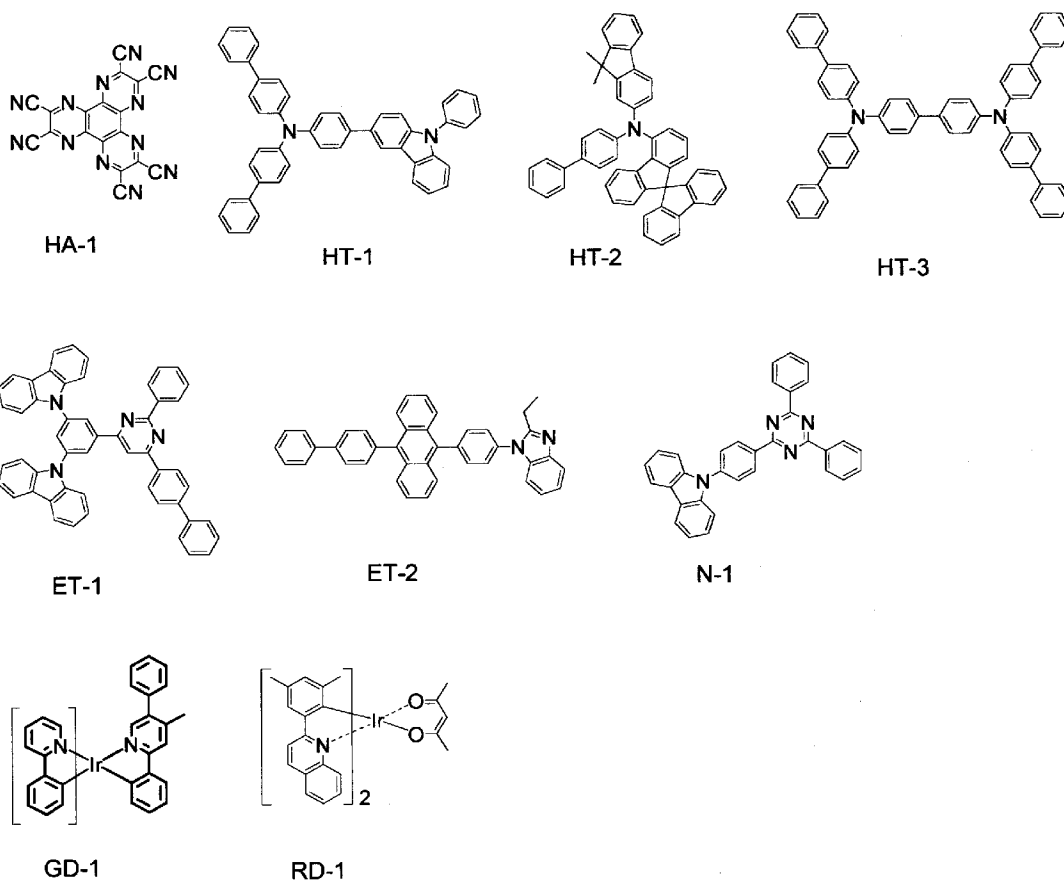
[表3]

	ホスト材料	主ピーク波長 (nm)	外部量子効率 (%)
実施例 29	化合物 26	519	13.6
比較例 6	比較化合物 5	519	11.8

[0437] 表3の結果から、本発明の一態様の化合物をホスト材料として用いることで、比較化合物を用いた場合と比較して、大きなT1を維持することが可能であり、ドープントの発光ロスが少なくなるために高効率化したと考えられる。

[0438] 実施例30～61及び比較例7～10の有機EL素子の作製に用いた、本発明の一態様の化合物及び比較化合物以外の材料を以下に示す。

[0439] [化145]



[0440] <緑色発光有機EL素子>

実施例 30

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

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして化合物HA-1を蒸着して膜厚5 nmのHA-1膜を成膜し、正孔注入層を形成した。

次に、この正孔注入層の上に、化合物HT-1を蒸着して膜厚130 nmのHT-1膜を成膜し、第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層の上に、化合物HT-2を蒸着して膜厚20 nmのHT-2膜を成膜し、第2正孔輸送層を形成した。

次に、この正孔輸送層の上に、第1ホスト（化合物1）及び第2ホスト（N-1）及びGD-1を共蒸着により成膜し、膜厚40 nmの発光層を形成した。発光層に含まれる第1ホストと第2ホストは50質量%：50質量%、GD-1の濃度は、5質量%とした。

この発光層の成膜に続けて、化合物ET-1と8-キノリノラトリウム（Li q）とを50：50の質量比で共蒸着により成膜し、膜厚25 nmの電子輸送層を形成した。

この電子輸送層上にLi qを蒸着して、膜厚1 nmの電子注入層を形成した。

この電子注入層上に金属Alを蒸着して、膜厚80 nmの金属陰極を形成し、有機EL素子を作製した。

本実施例30で作成した有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO（130 nm）／HA-1（5 nm）／HT-1（130 nm）／HT-2（20 nm）／化合物1：N-1：GD-1（47.5 wt%：，

47.5 wt %, 5 wt %) (40 nm) / ET-1 + Liq (50 wt %) (25 nm) / Liq (1 nm) / Al (80 nm)

[0441] 実施例 31～37 及び比較例 7

実施例 30 において、第 1 ホスト材料として用いた「化合物 1」に代えて、下記表 4 に示す化合物をそれぞれ用いて、有機層（発光層）を形成した以外は、実施例 30 と同様にして、有機 EL 素子を作製した。

[0442] <有機 EL 素子の評価>

実施例 30～37 及び比較例 7 で作製した有機 EL 素子について、外部量子効率 (EQE) 及び寿命 (LT95) を評価した。結果を表 4 に示す。

尚、寿命 (LT95) は、初期電流密度を 10 mA/cm^2 に設定して直流の連続通電試験を行い、試験開始時の輝度に対して、輝度が 95 % まで減少する時間を測定し、その測定時間を寿命 (LT95) とした。

[0443] [表 4]

	第 1 ホスト材料	第 2 ホスト材料	外部量子効率 (EQE) (%)	寿命 (LT95@10mA/cm ²)
実施例 30	化合物 1	N-1	18.5	150
実施例 31	化合物 2	N-1	18.1	90
実施例 32	化合物 6	N-1	18.0	90
実施例 33	化合物 11	N-1	18.7	130
実施例 34	化合物 15	N-1	18.4	150
実施例 35	化合物 16	N-1	18.3	140
実施例 36	化合物 18	N-1	18.3	130
実施例 37	化合物 24	N-1	18.0	90
比較例 7	比較化合物 6	N-1	17.0	70

[0444] 表 4 の結果から、第 1 ホスト材料として、複素五員環をピロール (N) - ピロール (N) - チオフェン (S) の順に有する比較化合物 6 に比べて、ピロール (N) - ピロール (N) - フラン (O) の順に有する本願発明の化合物は外部量子効率が高く、素子寿命も長いことがわかる。

また、二つ目のピロール (N) の結合位置が式 (1) の $Y^2 - Y^3$ である化合物 2, 6 及び 24 に比べて、結合位置が $Y^1 - Y^2$ 又は $Y^3 - Y^4$ である化合物 1, 11, 15, 16 及び 18 は、特に素子寿命が向上していることがわ

かる。

[0445] <緑色発光有機EL素子の作製>

実施例38

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

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして化合物HA-1を蒸着して膜厚5nmのHA-1膜を成膜し、正孔注入層を形成した。

次に、この正孔注入層の上に、化合物HT-3を蒸着して膜厚130nmのHT-3膜を成膜し、第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層の上に、化合物HT-2を蒸着して膜厚20nmのHT-2膜を成膜し、第2正孔輸送層を形成した。

次に、この正孔輸送層の上に、第1ホスト（化合物11）及び下記表に示す第2ホスト（化合物3）及びGD-1を共蒸着により成膜し、膜厚40nmの発光層を形成した。発光層に含まれる第1ホストと第2ホストは50質量%：50質量%、GD-1の濃度は、5質量%とした。

この発光層の成膜に続けて、化合物ET-2と8-キノリノラトリウム（Li_q）とを50：50の質量比で共蒸着により成膜し、膜厚25nmの電子輸送層を形成した。

この電子輸送層上にLi_qを蒸着して、膜厚1nmの電子注入層を形成した。

この電子注入層上に金属Alを蒸着して、膜厚80nmの金属陰極を形成し、有機EL素子を作製した。

本実施例38で作成した有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130 nm) / HA-1 (5 nm) / HT-3 (130 nm) / HT-2 (20 nm) / 化合物 11 : 化合物 3 : GD-1 (47.5 wt %, 47.5 wt %, 5 wt %) (40 nm) / ET-2 + Liq (50 wt %) (25 nm) / Liq (1 nm) / Al (80 nm)

[0446] 実施例 39～51 及び比較例 8～9

実施例 38 において、第 2 ホスト材料として用いた「化合物 3」に代えて、下記表 5 に示す化合物をそれぞれ用いて、有機層（発光層）を形成した以外は、実施例 38 と同様にして、有機 EL 素子を作製した。

[0447] <有機 EL 素子の評価>

実施例 38～51 及び比較例 8～9 で作製した有機 EL 素子について、外部量子効率 (EQE) 及び寿命 (LT95) を評価した。結果を表 5 に示す。

尚、寿命 (LT95) は、初期電流密度を 10 mA/cm^2 に設定して直流の連続通電試験を行い、試験開始時の輝度に対して、輝度が 95% まで減少する時間を測定し、その測定時間を寿命 (LT95) とした。

[0448] [表 5]

	第 1 ホスト材料	第 2 ホスト材料	外部量子効率 (EQE) (%)	寿命 (LT95@10mA/cm ²)
実施例 38	化合物 11	化合物 3	18.1	70
実施例 39	化合物 11	化合物 4	18.0	70
実施例 40	化合物 11	化合物 5	18.1	70
実施例 41	化合物 11	化合物 7	18.1	80
実施例 42	化合物 11	化合物 9	18.8	120
実施例 43	化合物 11	化合物 10	18.6	110
実施例 44	化合物 11	化合物 12	18.9	110
実施例 45	化合物 11	化合物 13	18.8	110
実施例 46	化合物 11	化合物 14	18.7	110
実施例 47	化合物 11	化合物 17	18.9	120
実施例 48	化合物 11	化合物 19	18.6	110
実施例 49	化合物 11	化合物 22	18.0	70
実施例 50	化合物 11	化合物 23	18.1	80
実施例 51	化合物 11	化合物 25	18.6	110
比較例 8	化合物 11	比較化合物 1	17.3	50
比較例 9	化合物 11	比較化合物 4	17.2	50

[0449] 表5の結果から、第2ホスト材料として、複素五員環をピロール(N)－ピロール(N)－チオフェン(S)の順に有する比較化合物1及び4に比べて、ピロール(N)－ピロール(N)－フラン(O)の順に有する本願発明の化合物は外部量子効率が高く、素子寿命は同等以上であることがわかる。

また、二つ目のピロール(N)の結合位置が式(1)の Y^2-Y^3 である化合物3、4、5、7、22及び23に比べて、結合位置が Y^1-Y^2 又は Y^3-Y^4 である化合物9、10、12、13、14、17、19及び25は、特に素子寿命が向上していることがわかる。

[0450] <赤色発光有機EL素子の作製>

実施例52

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

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして化合物HA-1を蒸着して膜厚5nmのHA-1膜を成膜し、正孔注入層を形成した。

次に、この正孔注入層の上に、化合物HT-3を蒸着して膜厚210nmのHT-3膜を成膜し、第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層の上に、化合物HT-2を蒸着して膜厚10nmのHT-2膜を成膜し、第2正孔輸送層を形成した。

次に、この正孔輸送層の上に、化合物及びRD-1を共蒸着により成膜し、膜厚40nmの発光層を形成した。発光層に含まれるRD-1の濃度は、2質量%とした。

この発光層の成膜に続けて、化合物ET-2と8-キノリノラトリウム(Liq)とを50:50の質量比で共蒸着により成膜し、膜厚25nmの電子輸送層を形成した。

この電子輸送層上にLiqを蒸着して、膜厚1nmの電子注入層を形成した。

この電子注入層上に金属Alを蒸着して、膜厚80nmの金属陰極を形成し、有機EL素子を作製した。

本実施例52で作成した有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130nm) / HA-1 (5nm) / HT-3 (210nm) / HT-2 (10nm) / 化合物8+RD-1 (2wt%) (40nm) / ET-2+Liq (50wt%) (25nm) / Liq (1nm) / Al (80nm)

[0451] 実施例53～61及び比較例10

実施例52において、ホスト材料として用いた「化合物8」に代えて、下記表6に示す化合物をそれぞれ用いて、有機層（発光層）を形成した以外は、実施例52と同様にして、有機EL素子を作製した。

[0452] <有機EL素子の評価>

実施例52～61及び比較例10で作製した有機EL素子について、外部量子効率（EQE）及び寿命（LT95）を評価した。結果を表6に示す。

尚、寿命（LT95）は、初期電流密度を50mA/cm²に設定して直流の連続通電試験を行い、試験開始時の輝度に対して、輝度が95%まで減少する時間を測定し、その測定時間を寿命（LT95）とした。

[0453]

[表6]

	ホスト材料	外部量子効率 (EQE) (%)	寿命 (LT95@50mA/cm ²)
実施例 52	化合物 8	14.5	300
実施例 53	化合物 20	15.5	360
実施例 54	化合物 21	15.7	340
実施例 55	化合物 27	16.1	350
実施例 56	化合物 28	15.9	350
実施例 57	化合物 29	15.6	380
実施例 58	化合物 30	16.2	400
実施例 59	化合物 31	16.1	400
実施例 60	化合物 32	16.0	360
実施例 61	化合物 33	16.1	370
比較例 10	比較化合物 7	13.5	250

[0454] 表 6 の結果から、複素五員環をピロール (N) - ピロール (N) - チオフェン (S) の順に有する比較化合物 7 に比べて、ピロール (N) - ピロール (N) - フラン (O) の順に有する本願発明の化合物は外部量子効率が高く、素子寿命も長いことがわかる。

また、二つ目のピロール (N) の結合位置が式 (1) の Y² - Y³ である化合物 8 に比べて、結合位置が Y¹ - Y² 又は Y³ - Y⁴ である化合物 20, 21 及び 27 ~ 33 は、外部量子効率がより高く、素子寿命も向上していることがわかる。

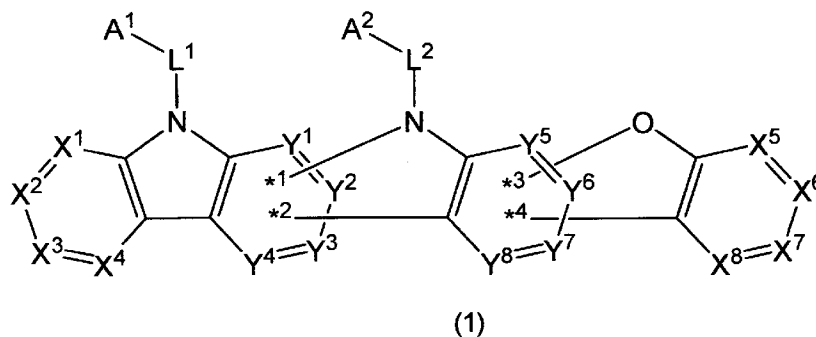
[0455] 上記に本発明の実施形態及び／又は実施例を幾つか詳細に説明したが、当業者は、本発明の新規な教示及び効果から実質的に離れることなく、これら例示である実施形態及び／又は実施例に多くの変更を加えることが容易である。従って、これらの多くの変更は本発明の範囲に含まれる。

本願のパリ優先の基礎となる日本出願明細書の内容を全てここに援用する。

請求の範囲

[請求項1] 下記式（１）で表される化合物。

[化146]



[式（１）中、

A¹及びA²は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリール基である。

L¹及びL²は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリーレン基である。

X¹～X⁸は、それぞれ独立に、CH、C（R^a）又はNである。

*1～*4は、それぞれ単結合を形成する結合手である。

Y¹～Y⁴のうちの隣接するいずれか2つは、*1及び*2とそれぞれ単結合を形成するCであり、残りの2つは、それぞれ独立に、CH、C（R^a）又はNである。

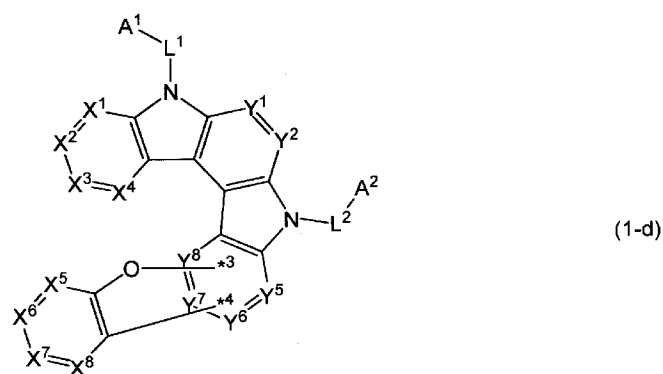
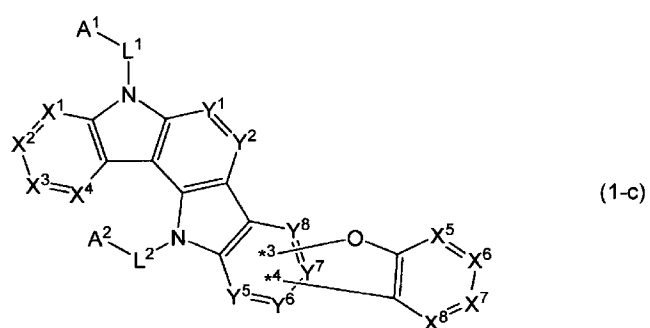
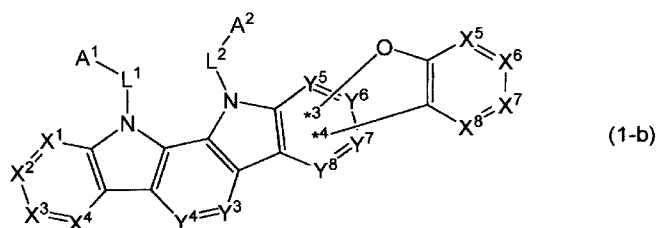
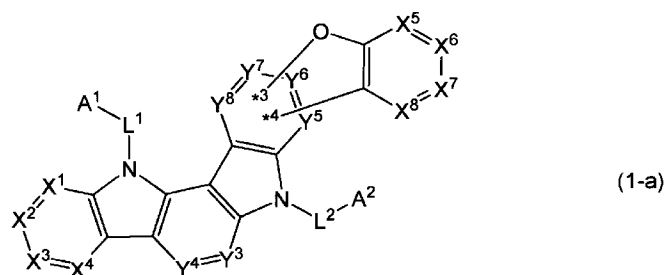
Y⁵～Y⁸のうちの隣接するいずれか2つは、*3及び*4とそれぞれ単結合を形成するCであり、残りの2つは、それぞれ独立に、CH、C（R^a）又はNである。

R^aは、置換基であり、R^aが複数存在する場合は、それぞれ同一であっても、異なってもよく、複数存在するR^aから選ばれる2つが、互いに結合して環を形成していてもよい。]

[請求項2] 前記式（１）で表される化合物が、下記式（１－a）～（１－d）

で表される化合物から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

[化147]



[式 (1-a) ~ (1-d) 中、

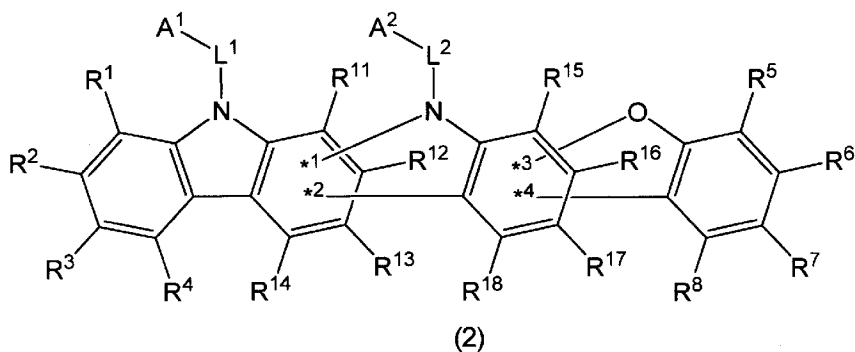
A¹, A², L¹, L², X¹~X⁸, Y¹~Y⁸, *3 及び *4 は、前記式 (1) で定義した通りである。]

[請求項3]

前記式 (1) で表される化合物が、下記式 (2) で表される化合物

である、請求項 1 に記載の化合物。

[化148]



[式 (2) 中、

A^1 , A^2 , L^1 , L^2 及び *1 ~ *4 は、前記式 (1) で定義した通りである。

$R^1 \sim R^8$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^a である。

$R^{11} \sim R^{14}$ のうちの隣接するいずれか 2 つは、*1 及び *2 とそれぞれ単結合を形成し、残りの 2 つは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^a である。

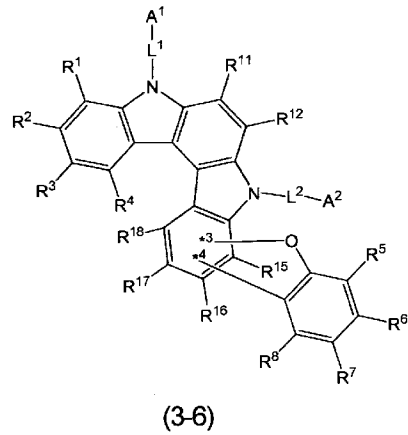
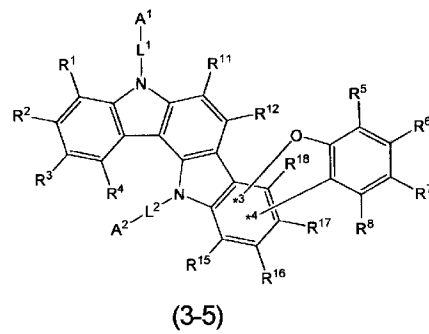
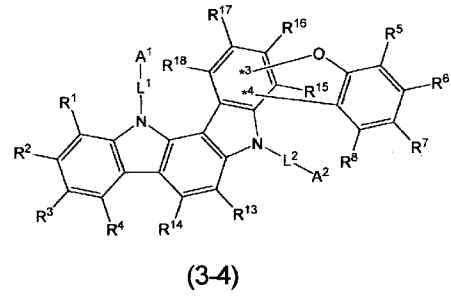
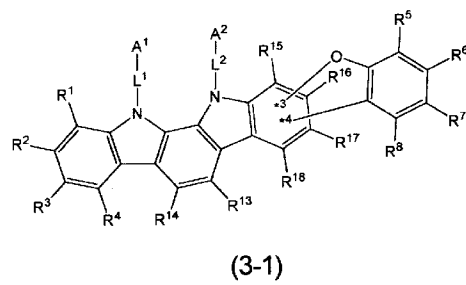
$R^{15} \sim R^{18}$ のうちの隣接するいずれか 2 つは、*3 及び *4 とそれぞれ単結合を形成し、残りの 2 つは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^a である。

R^a は、前記式 (1) で定義した通りである。]

[請求項4]

前記式 (2) で表される化合物が、下記式 (3-1) 及び (3-4) ~ (3-6) で表される化合物からなる群から選ばれる、請求項 3 に記載の化合物。

[化149]



[式(3-1)及び(3-4)～(3-6)中、

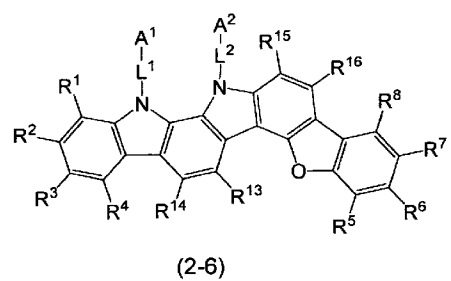
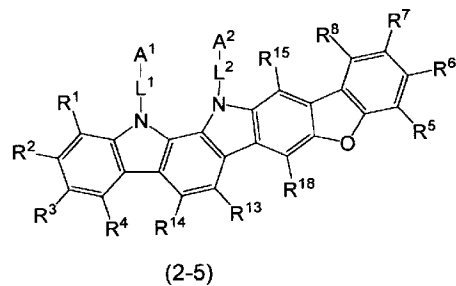
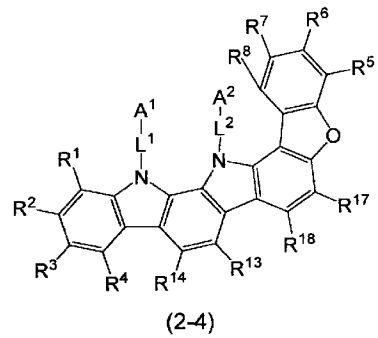
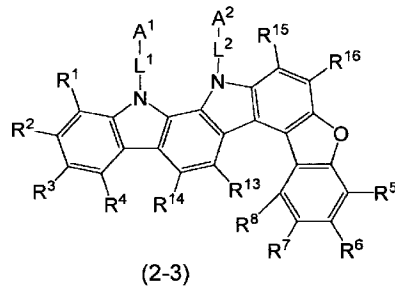
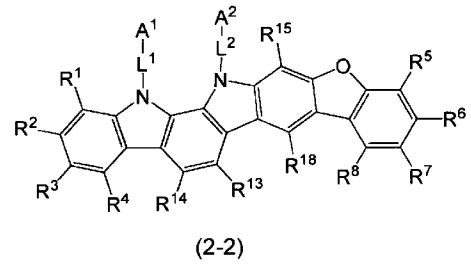
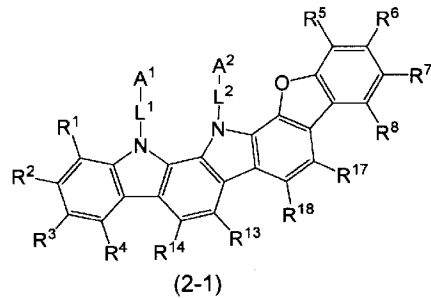
A^1 、 A^2 、 L^1 、 L^2 、*3及び*4は、前記式(1)で定義した通りである。

$R^1 \sim R^8$ 及び $R^{11} \sim R^{18}$ は、前記式(2)で定義した通りである。
。]

[請求項5]

前記式(3-1)で表される化合物が、下記式(2-1)～(2-6)で表される化合物からなる群から選ばれる、請求項4に記載の化合物。

[化150]



[式(2-1)～(2-6)中、

A¹、A²、L¹及びL²は、前記式(1)で定義した通りである。

R¹～R⁸及びR¹¹～R¹⁸は、前記式(2)で定義した通りである。
。]

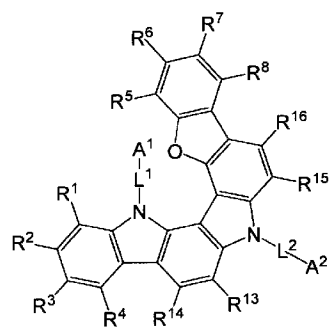
[請求項6]

前記式(3-1)で表される化合物が、前記式(2-2)～(2-4)及び(2-6)で表される化合物からなる群から選ばれる、請求項5に記載の化合物。

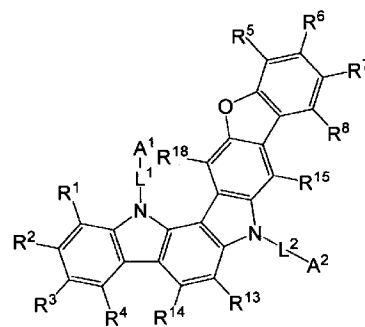
[請求項7]

前記式(3-4)又は式(3-5)で表される化合物が、下記式(2-19)～(2-30)で表される化合物からなる群から選ばれる、請求項4に記載の化合物。

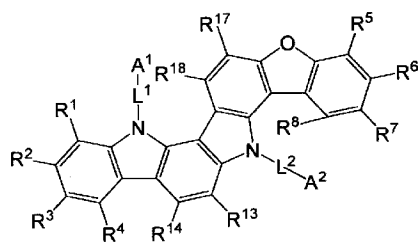
[化151]



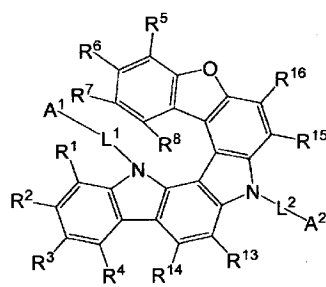
(2-19)



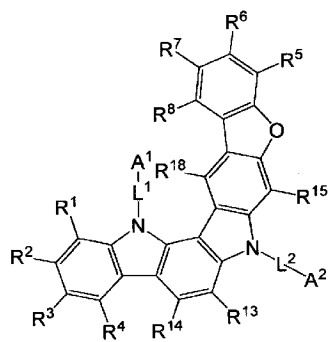
(2-20)



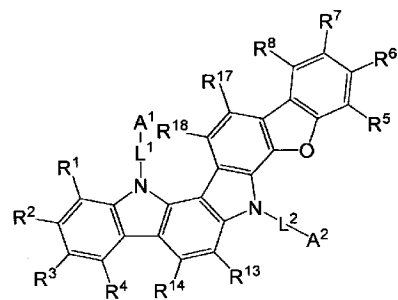
(2-21)



(2-22)

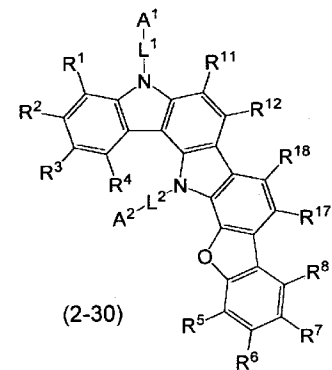
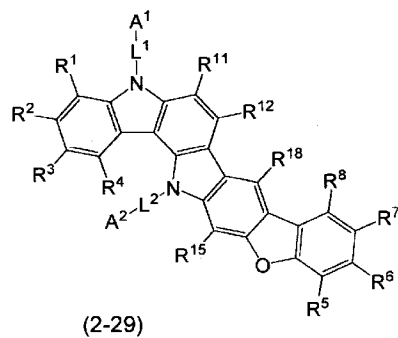
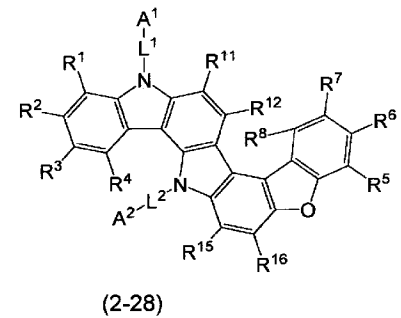
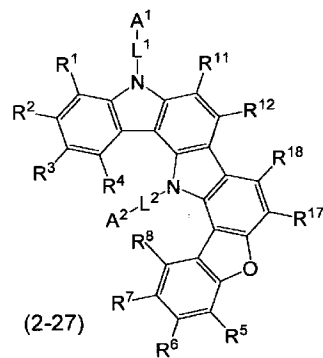
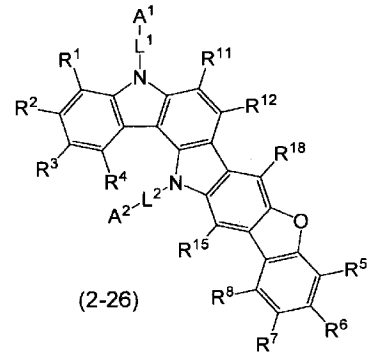
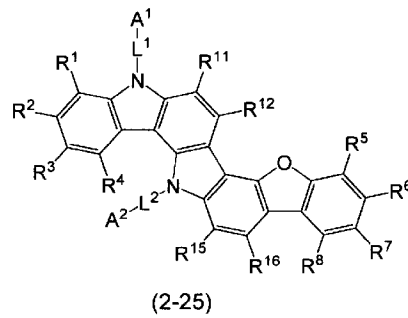


(2-23)



(2-24)

[化152]



[式(2-19)～(2-30)中、

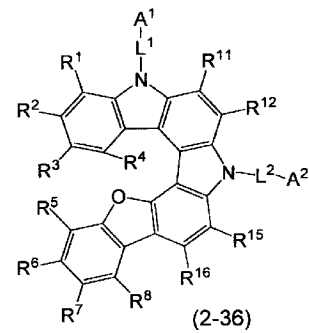
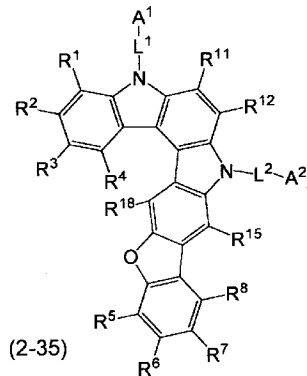
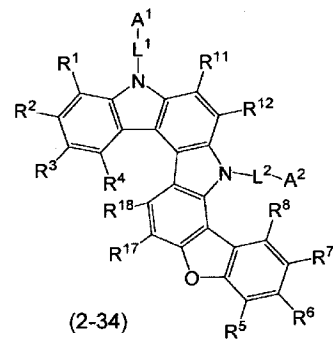
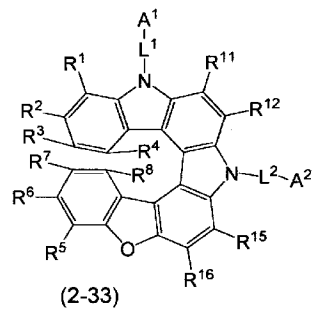
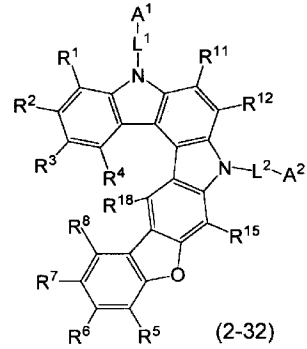
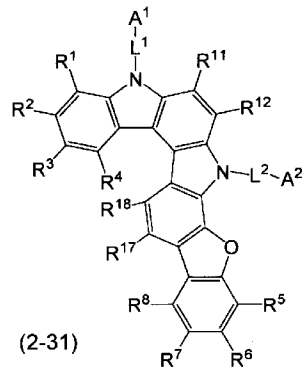
A¹, A², L¹及びL²は、前記式(1)で定義した通りである。R¹～R⁸及びR¹¹～R¹⁸は、前記式(2)で定義した通りである。

。]

[請求項8]

前記式(3-6)で表される化合物が、下記式(2-31)～(2-36)で表される化合物からなる群から選ばれる、請求項4に記載の化合物。

[化153]



[式(2-31)～(2-36)中、

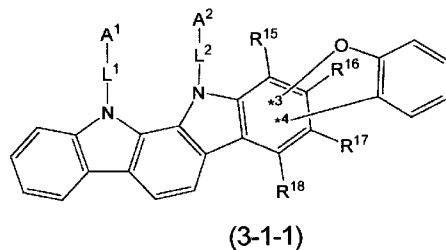
A¹、A²、L¹及びL²は、前記式(1)で定義した通りである。R¹～R⁸及びR¹¹～R¹⁸は、前記式(2)で定義した通りである

。]

[請求項9] R¹～R⁸が、水素原子である、請求項3～8のいずれかに記載の化合物。

[請求項10] 前記式(3-1)で表される化合物が、下記式(3-1-1)で表される化合物である、請求項4に記載の化合物。

[化154]



[式 (3-1-1) 中、

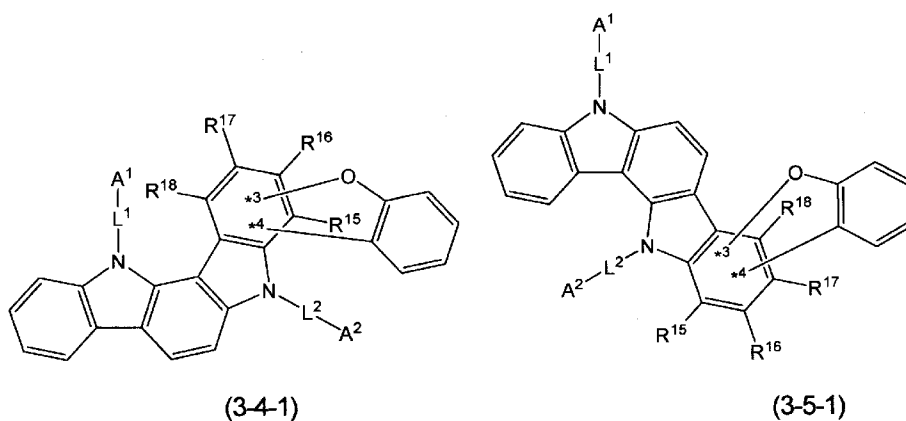
A^1 、 A^2 、 L^1 、 L^2 、*3及び*4は、式(1)で定義した通りである。

$R^{15} \sim R^{18}$ は、式(2)で定義した通りであり、 R^{15} 、 R^{17} 及び R^{18} から選ばれるいずれかが、*4と単結合を形成する。]

[請求項11]

前記式(3-4)及び(3-5)で表される化合物が、それぞれ下記式(3-4-1)及び(3-5-1)で表される化合物である、請求項4に記載の化合物。

[化155]



[式 (3-4-1) 及び (3-5-1) 中、

A^1 、 A^2 、 L^1 、 L^2 、*3及び*4は、式(1)で定義した通りである。

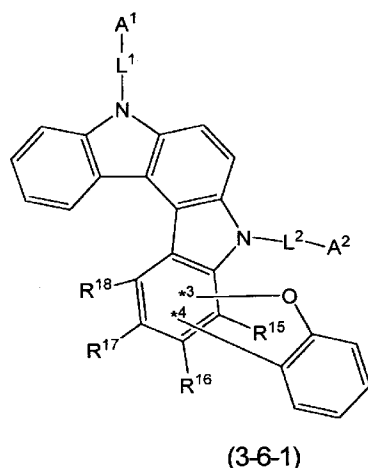
$R^{15} \sim R^{18}$ は、式(2)で定義した通りであり、 R^{15} 、 R^{17} 及び R^{18} から選ばれるいずれかが、*4と単結合を形成する。]

[請求項12]

前記式(3-6)で表される化合物が、下記式(3-6-1)で表

される化合物である、請求項 4 に記載の化合物。

[化156]



[式 (3-6-1) 中、

A^1 、 A^2 、 L^1 、 L^2 、*3 及び *4 は、式 (1) で定義した通りである。

$R^{15} \sim R^{18}$ は、式 (2) で定義した通りであり、 R^{15} 、 R^{17} 及び R^{18} から選ばれるいずれかが、*4 と単結合を形成する。]

[請求項13]

A^1 及び A^2 が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～24 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～24 であり、該環形成原子として窒素原子、酸素原子及び硫黄原子からなる群から選ばれる 1 以上の原子を含有するヘテロアリール基である、請求項 1～12 のいずれかに記載の化合物。

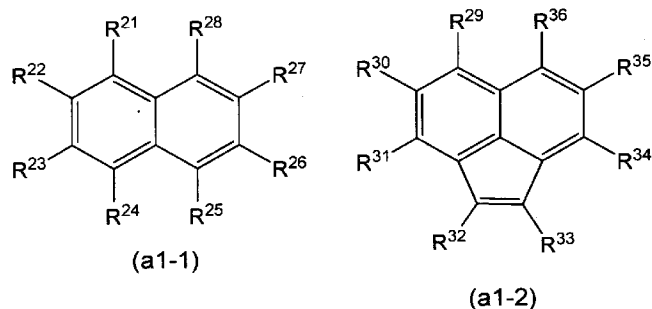
[請求項14]

A^1 及び A^2 における前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～24 のアリール基が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10～24 の縮合アリール基である、請求項 13 に記載の化合物。

[請求項15]

A^1 及び A^2 における前記置換もしくは無置換の環形成炭素数 10～24 の縮合アリール基が、それぞれ独立に、下記式 (a1-1) 又は (a1-2) で表される化合物の 1 価の残基である、請求項 14 に記載の化合物。

[化157]



[式 (a 1 - 1) 及び (a 1 - 2) 中、

$R^{21} \sim R^{36}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^b であって、 R^b が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^b から選ばれる2つが、互いに結合して環を形成してもよい。]

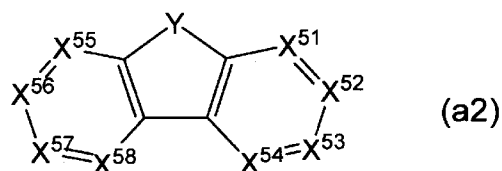
[請求項16]

A^1 及び A^2 における前記置換もしくは無置換の環形成炭素数10～24の縮合アリール基が、それぞれ独立に、4環以上からなる縮合環からなる群から選択される、請求項14に記載の化合物。

[請求項17]

A^1 及び A^2 における前記置換もしくは無置換の環形成原子数5～24であり、該環形成原子として窒素原子、酸素原子及び硫黄原子からなる群から選ばれる1以上の原子を含有するヘテロアリール基が、それぞれ独立に、下記式(a2)で表される化合物の1価の残基である、請求項13～16のいずれかに記載の化合物。

[化158]



[式 (a 2) 中、

$X^{51} \sim X^{58}$ は、それぞれ独立に、 CH 、 $C(R^b)$ 又は N である。

R^b は、置換基であって、 R^b が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^b から選ば

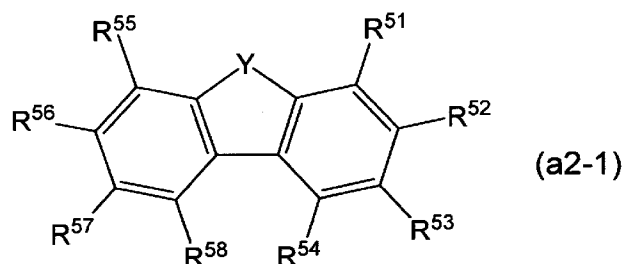
れる２つが、互いに結合して環を形成してもよい。

Yは、酸素原子、硫黄原子、 $-NR^d$ 、又は $-C(R^e)(R^f)-$ である。

R^d 、 R^e 及び R^f は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^b であって、 R^e 及び R^f の両方が R^b である場合は、互いに結合して環を形成してもよい。]

[請求項18] 前記式(a2)で表される化合物の1価の残基が、下記式(a2-1)で表される化合物の1価の残基である、請求項17に記載の化合物。

[化159]



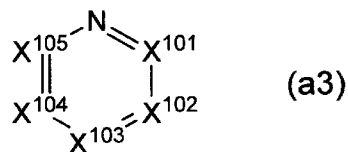
[式(a2-1)中、

Yは、前記式(a2)で定義した通りである。

$R^{51} \sim R^{58}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^b であり、 R^b が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^b から選ばれる２つが、互いに結合して環を形成してもよい。]

[請求項19] A^1 及び A^2 における前記置換もしくは無置換の環形成原子数5～24であり、該環形成原子として窒素原子、酸素原子及び硫黄原子からなる群から選ばれる1以上の原子を含有するヘテロアリール基が、それぞれ独立に、下記式(a3)で表される化合物の1価の残基である、請求項13に記載の化合物。

[化160]



[式 (a 3) 中、

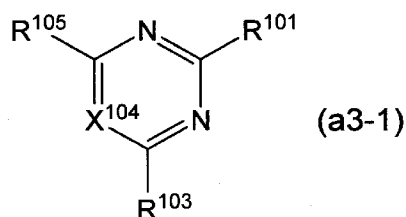
$X^{101} \sim X^{105}$ は、それぞれ独立に、CH、C (R^b) 又は窒素原子を示す。

R^b は、置換基であり、 R^b が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^b から選ばれる2つが、互いに結合して、環を形成していてもよい。]

[請求項20]

前記式 (a 3) で表される化合物の1価の残基が、下記式 (a 3-1) で表される化合物の1価の残基である、請求項19に記載の化合物。

[化161]



[式 (a 3-1) 中、

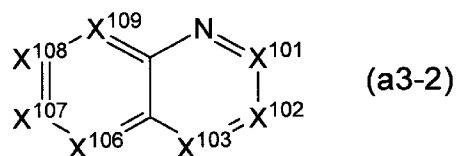
X^{104} は、前記式 (a 3) で定義した通りである。

R^{101} 、 R^{103} 及び R^{105} は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^b である。]

[請求項21]

前記式 (a 3) で表される化合物の1価の残基が、下記式 (a 3-2) で表される化合物の1価の残基である、請求項19に記載の化合物。

[化162]



[式 (a 3 - 2) 中、

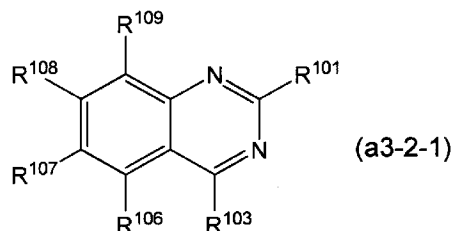
$X^{101} \sim X^{103}$ 及び $X^{106} \sim X^{109}$ は、それぞれ独立に、CH、C (R^b) 又はNを示す。

R^b は、置換基であり、 R^b が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^b から選ばれる2つは、互いに結合して、環を形成していてもよい。]

[請求項22]

前記式 (a 3 - 2) で表される化合物の1価の残基が、下記式 (a 3 - 2 - 1) で表される化合物の1価の残基である、請求項21に記載の化合物。

[化163]



[式 (a 3 - 2 - 1) 中、

R^{101} 、 R^{103} 及び $R^{106} \sim R^{109}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基 R^b であり、 R^b が複数存在する場合は、それぞれ同一であってもよく、異なってもよく、複数存在する R^b から選ばれる2つは、互いに結合して、環を形成していてもよい。]

[請求項23]

A^2 が、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリール基である、請求項1～22のいずれかに記載の化合物。

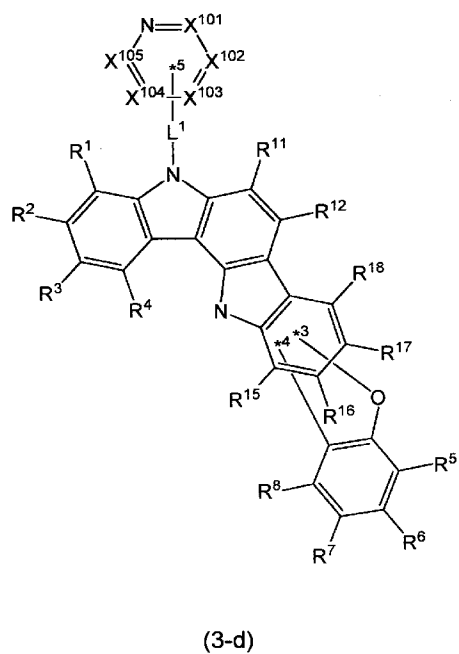
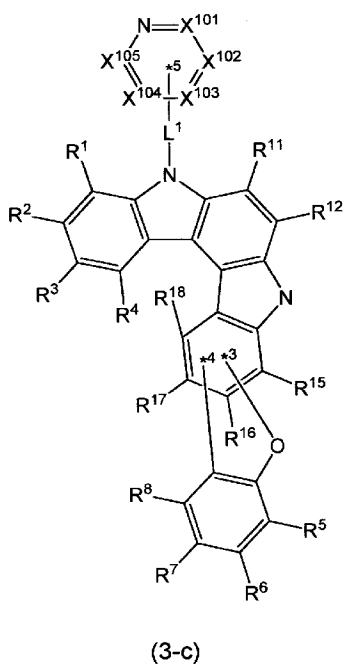
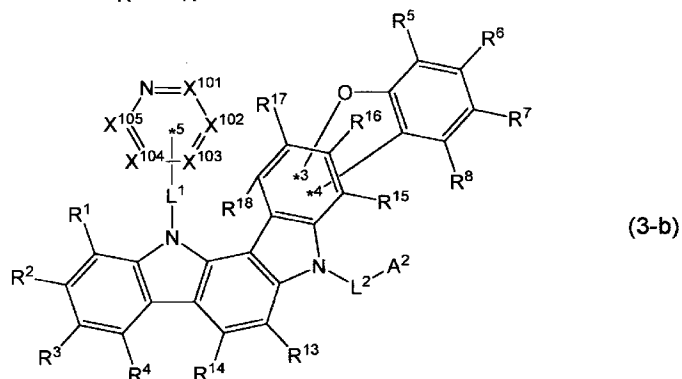
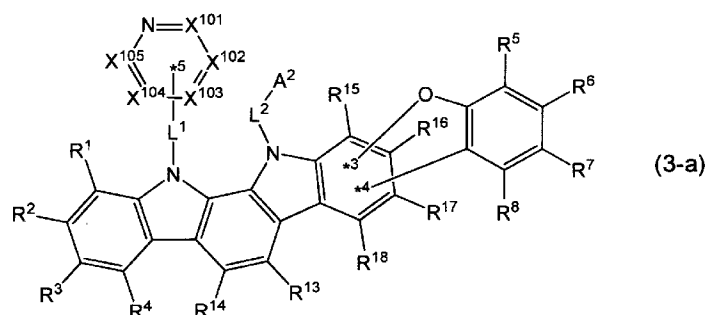
[請求項24]

A^2 が、置換もしくは無置換の環形成原子数5～24であり、該環形成原子として窒素原子、酸素原子及び硫黄原子からなる群から選ば

れる 1 以上の原子を含有するヘテロアリール基である、請求項 2 3 に記載の化合物。

[請求項 25] 前記式 (2) で表される化合物が、下記式 (3-a) ~ (3-d) で表される化合物からなる群から選択される、請求項 3 に記載の化合物。

[化 164]



[式 (3-a) ~ (3-d) 中、

A^2 , L^1 , L^2 及び $*1 \sim *4$ は、前記式 (1) で定義した通りである。

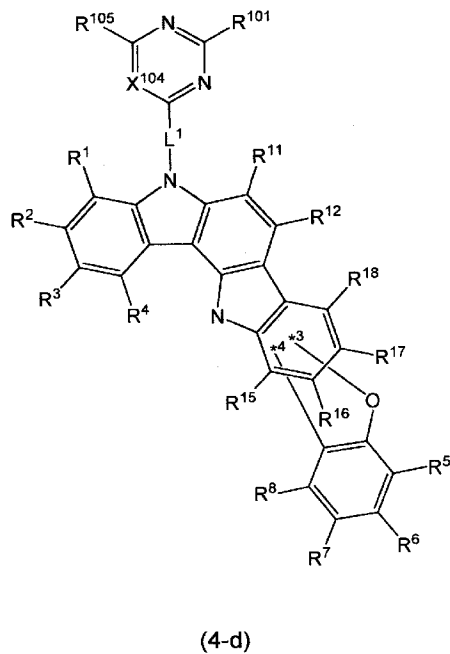
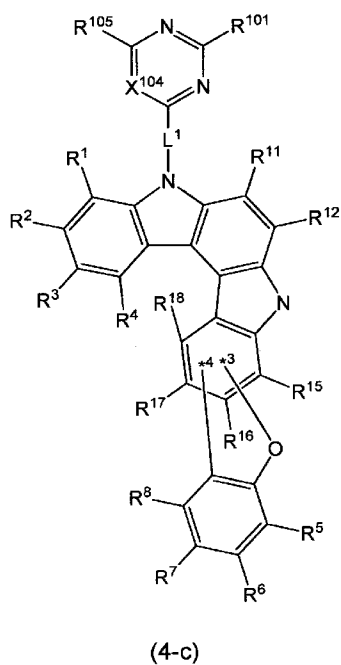
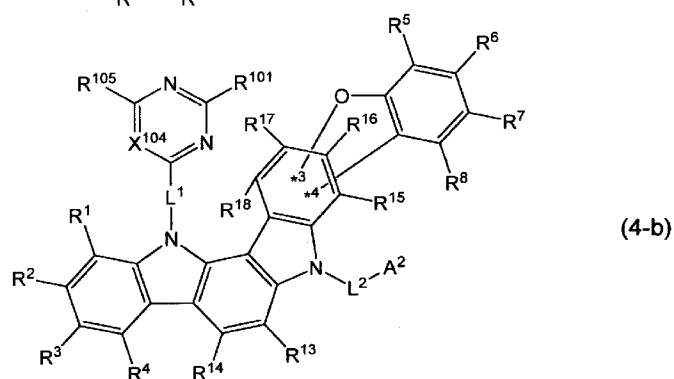
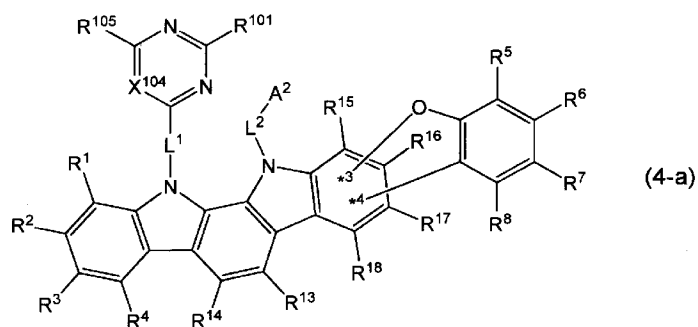
$R^1 \sim R^8$ 及び $R^{11} \sim R^{18}$ は、前記式 (2) で定義した通りである。

$X^{101} \sim X^{105}$ は、前記式 (a 3) で定義した通りである。

$*5$ は、 $X^{101} \sim X^{105}$ のいずれかと単結合を形成する結合手である。]

[請求項26] 前記式 (3-a) ~ (3-d) で表される化合物が、それぞれ下記式 (4-a) ~ (4-d) で表される化合物である、請求項25に記載の化合物。

[化165]



[式(4-a)～(4-d)中、

A^2 , L^1 , L^2 及び*1～*4は、前記式(1)で定義した通りである。

$R^1 \sim R^8$ 及び $R^{11} \sim R^{18}$ は、前記式(2)で定義した通りである

。

X^{104} は、前記式 (a 3) で定義した通りである。

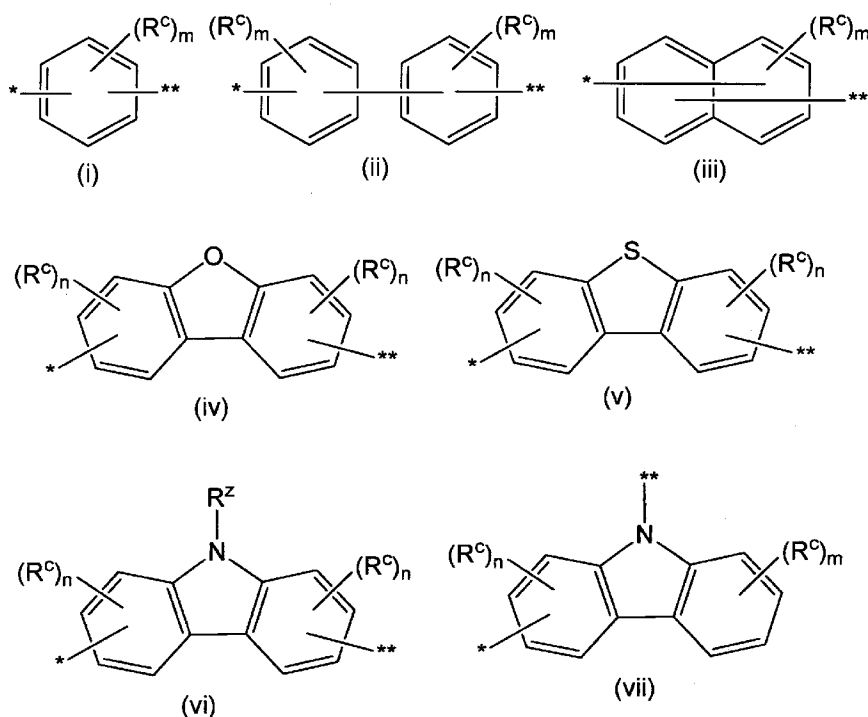
R^{101} 及び R^{105} は、前記式 (a 3-1) で定義した通りである。

]

[請求項27]

L^1 及び L^2 が、それぞれ独立に、単結合、又は下記式 (i) ~ (vii) で表される基からなる群から選択される基である、請求項 1 ~ 26 のいずれかに記載の化合物。

[化166]



[式 (i) ~ (vii) 中、

$*$ 及び $**$ は、それぞれ独立に、前記式 (1) 中の N 及び、 A^1 及び A^2 のいずれか一方とそれぞれ単結合を形成する結合手である。

R^C は置換基であり、 R^C が複数存在する場合は、それぞれ同一であっても、異なってもよく、複数存在する R^C から選ばれる 2 つが、互いに結合して、環構造を形成してもよい。

R^Z は、水素原子又は置換基 R^C である。

m は、それぞれ独立に、0 ~ 4 の整数であり、 n は、それぞれ独立

に、0～3の整数である。]

- [請求項28] L¹が、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリーレン基である、請求項1～26のいずれかに記載の化合物。
- [請求項29] L¹が、前記式(i)～(i i i)で表される群から選択される請求項28に記載の化合物。
- [請求項30] 請求項1～29のいずれかに記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。
- [請求項31] 陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、
前記一層以上の有機薄膜層が発光層を含み、前記一層以上の有機薄膜層の少なくとも1層が請求項1～29のいずれかに記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項32] 前記発光層が、前記化合物を含む、請求項31に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項33] 前記発光層が、さらに蛍光発光材料及び燐光発光材料から選ばれる1種以上を含有する、請求項31又は32に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項34] 前記一層以上の有機薄膜層が、さらに正孔輸送層を含む、請求項31～33のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項35] 前記一層以上の有機薄膜層が、さらに電子輸送層を含む、請求項31～34のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [請求項36] 請求項31～35のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/075100

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D491/147(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D491/147, C09K11/06, H01L51/50

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

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2016
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2016	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2016

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.
P, X	KR 10-2016-0028737 A (SFC LTD.), 14 March 2016 (14.03.2016), claim 5 (Family: none)	1-36
P, X	WO 2016/036171 A1 (ROHM AND HASS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.), 10 March 2016 (10.03.2016), pages 17, 19 & KR 10-2016-0028979 A	1-36
P, X	WO 2015/182994 A1 (ROHM AND HASS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.), 03 December 2015 (03.12.2015), pages 7 to 13 & KR 10-2015-0136452 A	1-36

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
 "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
 "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
 "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
 "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
 "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
 "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
 "&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
09 November 2016 (09.11.16)

Date of mailing of the international search report
22 November 2016 (22.11.16)

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/075100

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2015-151399 A (Samsung Electronics Co., Ltd.), 24 August 2015 (24.08.2015), claim 1; page 34 & US 2015/0228909 A1 claim 1; pages 32 to 34 & EP 2907815 A2 & KR 10-2015-0095186 A & CN 104829626 A	1-36
X	WO 2015/108325 A1 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.), 23 July 2015 (23.07.2015), claim 1; pages 18, 24, 30 & KR 10-2015-0085766 A & KR 10-2016-0010878 A	1-36
A	WO 2014/057684 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 17 April 2014 (17.04.2014), entire text & US 2015/0270496 A1 & CN 104718210 A & KR 10-2015-0064737 A	1-36
A	CN 101220034 A (SHANDONG UNIVERSITY), 16 July 2008 (16.07.2008), entire text (Family: none)	1-36
A	JP 2013-82662 A (Samsung Display Co., Ltd.), 09 May 2013 (09.05.2013), entire text & US 2013/0087768 A1 & EP 2581365 A1 & KR 10-2013-0039355 A & CN 103030585 A & TW 201315794 A	1-36

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. C07D491/147(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. C07D491/147, C09K11/06, H01L51/50

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2016年
日本国実用新案登録公報	1996-2016年
日本国登録実用新案公報	1994-2016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
PX	KR 10-2016-0028737 A (SFC LTD.) 2016.03.14, 請求項5等 (ファミリーなし)	1-36
PX	WO 2016/036171 A1 (ROHM AND HASS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 2016.03.10, 17, 19頁等 & KR 10-2016-0028979 A	1-36
PX	WO 2015/182994 A1 (ROHM AND HASS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 2015.12.03, 7~13頁等	1-36

☑ 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
「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

09.11.2016

国際調査報告の発送日

22.11.2016

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁（ISA/J P）
郵便番号100-8915
東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官（権限のある職員）

早川 裕之

4 P

4500

電話番号 03-3581-1101 内線 3492

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
	& KR 10-2015-0136452 A	
X	JP 2015-151399 A (三星電子株式会社) 2015.08.24, 請求項1 およ び3 4 頁等 & US 2015/0228909 A1 : 請求項1 および3 2 ~ 3 4 頁 & EP 2907815 A2 & KR 10-2015-0095186 A & CN 104829626 A	1-36
X	WO 2015/108325 A1 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 2015.07.23, 請求 項1 および1 8, 2 4, 3 0 頁等 & KR 10-2015-0085766 A & KR 10-2016-0010878 A	1-36
A	WO 2014/057684 A1 (出光興産株式会社) 2014.04.17, 全文 & US 2015/0270496 A1 & CN 104718210 A & KR 10-2015-0064737 A	1-36
A	CN 101220034 A (SHANDONG UNIVERSITY) 2008.07.16, 全文 (ファミリーなし)	1-36
A	JP 2013-82662 A (三星ディスプレイ株式会社) 2013.05.09, 全文 & US 2013/0087768 A1 & EP 2581365 A1 & KR 10-2013-0039355 A & CN 103030585 A & TW 201315794 A	1-36